



SciFinder-Anleitung

Stand: 15. September 2025



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

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

Inhaltsverzeichnis

1.	Welche Informationen finde ich in SciFinder?	6
2.	Erste Schritte mit SciFinder	7
2.1	Wie erfolgt die Registrierung für die Datenbank?	7
2.2	Wie melde ich mich bei SciFinder für die Suche an?	8
2.3	Was mache ich, wenn ich Benutzernamen oder Passwort vergessen habe?.....	9
2.4	Wo finde ich Hilfen und Videotutorials zur Suche?	10
2.4.1	Direkthilfe in SciFinder	10
2.4.2	SciFinder-Training	11
2.4.3	SciFinder-Training im Detail	11
2.4.4	Poster von CAS.....	12
2.4.5	An wen kann ich mich bei Fragen wenden?.....	14
3.	Grundlagen der Recherchen in SciFinder	15
3.1	Allgemeines	15
3.1.1	Die neue Generation von SciFinder mit Unterstützung von künstlicher Intelligenz (AI support).....	15
3.1.2	Gespeicherte und vergangene Suchen; Projekte	16
3.1.3	Einstellungen	17
3.2	Welche Suchmöglichkeiten habe ich?.....	19
3.3	Was ist wichtig zu wissen?	19
3.4	Automatismen bei der Wortsuche in SciFinder	20
3.5	Recherchestrategien in SciFinder.....	21
3.5.1	Generelles zur Suchstrategie	21
3.5.2	Suche mit Präpositionen und Verwendung des „ <i>CAS Lexicon</i> “	21
4.	Suche mit Suchmodus „All“	23
5.	Thematische Suchen.....	25
5.1	Einfache Textsuche.....	25
5.2	Gleichzeitige Suche von Text und chemischer Struktur	28
5.3	Phrasensuche und Maskierung	30
5.4	Suche mit logischen Operatoren.....	32
5.5	Wie finde ich Publikationen eines bestimmten Autors?.....	33
5.6	„For You“ – Registerkarte	34
6.	Wie kann ich meine Treffermenge sortieren?	37

7.	Wie kann ich meine Treffermenge eingrenzen?	38
7.1	Wie schränke ich meine Suche mit neuen Wörtern ein?.....	38
7.2	Wie schränke ich meine Suche zeitlich ein?.....	39
7.3	Eingrenzen/Filtern der Treffer mit „ <i>Concepts</i> “	40
7.4	Eingrenzen/Filtern der Treffer mit „ <i>Substance Roles</i> “	41
8.	Wie kann ich mit den Treffern weiter verfahren? Combine, Speichern, Export, Zugang zum Volltext.....	43
8.1	„ <i>Combine</i> “	43
8.1.1	„ <i>Combine</i> “ direkt nach einer Recherche	44
8.1.2	„ <i>Combine</i> “ von gespeicherten Antworten.....	44
8.2	Exportieren und Speichern und von Ergebnissen, Erstellen von Alerts.....	45
8.3	Import von Ergebnissen aus SciFinder in EndNote	46
8.4	Wie komme ich zum Volltext?.....	47
9.	„ <i>Citation Map</i> “.....	48
10.	„ <i>History</i> “	49
11.	Suche nach Substanzen	51
11.1	Wie suche ich nach Substanzen im Startbildschirm?.....	52
11.2	Wie suche ich nach Substanzen über die „ <i>Advanced Search</i> “?	55
11.2.1	Wie suche ich Substanzen mit ihrem Namen über die „ <i>Advanced Search</i> “?.	56
11.2.2	Wie suche ich Substanzen mit der Chemical Abstracts Registry Number (CAS-RN)	58
11.2.3	Wie suche ich Substanzen mit der Summenformel?.....	59
11.3	Wie suche ich nach Substanzen über die Struktur?.....	61
11.4	Hinweise für das Zeichnen von chemischen Strukturen	62
11.5	Wie kann ich große Treffermengen bei der Substanzsuche über die Struktur einschränken?.....	66
11.6	Wie sieht die Trefferliste bei der Substanzsuche aus?	68
11.7	Was sieht man in der Substanz-Detailanzeige?	71
11.8	Wie finde ich Chemikalien-Lieferanten?	73
12.	Wie suche ich nach chemischen Reaktionen?.....	75
12.1.	Wie beginne ich die Suche im Modus „ <i>Reactions</i> “?	75
12.2.	Welche Ansichten kann ich für die Trefferliste der Reaktionssuche einstellen?.....	77
12.3.	Wie bekomme ich Reaktionsdetails angezeigt?.....	79
12.4.	Wie kann ich große Treffermengen bei der Reaktionssuche einschränken?	81

13.	Wie finde ich alle Synthesen einer Substanz?	82
13.1.	Vollständige Substanzsuche	82
13.2.	Ausgabe von vollständigen Synthesevorschriften über „ <i>Reactions</i> “	84
13.3.	Ausgabe der Nachweise zu Synthesen über „ <i>References</i> “	87
14.	Wie hilft SciFinder bei der Retrosyntheseplanung?	89
14.1.	Wie kann ich die Retrosyntheseplanung beginnen?	90
14.2.	Kann ich alternative Schritte in die Synthese einbauen?	93
14.3.	Kann ich bestimmte Schritte des Retrosyntheseplanes ausschließen?	95
14.4.	Welche Optionen kann ich bei der Retrosyntheseplanung einstellen?	96
15.	Wie kann ich mit BLAST Protein- bzw. Nukleotid-Sequenzen suchen?	98
15.1.	Einfache Suche	98
15.2.	Erweiterte Suche nach Biosequenzen	101
15.3.	Hilfreiche Videos zur Sequenzsuche	102
16.	Patente in SciFinder und PatentPak	103
16.1.	Wie finde ich allgemein Patente in SciFinder?	104
16.2.	Wie finde ich ein spezielles Patent?	105
16.3.	Wie kann ich nach dem Stand der Technik suchen?	106
16.4.	Wie finde ich generische/hypothetische chemische Substanzen in Patenten (Markush-Struktursuchen)	108
16.4.1.	Was sind Markush-Strukturen?	108
16.4.2.	Wie gehe ich bei einer Markush-Struktursuche vor?	110
16.5.	Welche Informationen zu einem Patent finde ich in der detaillierten Einzeltrefferansicht?	112
16.6.	Wie erhalte ich mit PatentPak® Zugang zu den Patentvolltexten?	113
16.7.	PatentPak Viewer	115
16.8.	Welche Informationen liefert das Deckblatt eines Patentes?	117
17.	“ <i>CAS Analytical Methods</i> ”	118
17.1.	Wie komme ich zu den „ <i>CAS Analytical Methods</i> “?	118
17.2.	Wie suche ich in “ <i>CAS Analytical Methods</i> ”?	119
17.3.	Wie vergleicht man Methoden miteinander?	121
17.4.	Erweiterte Suche in „ <i>CAS Analytical Methods</i> “	122
17.5.	„ <i>Explore Methods</i> “ in „ <i>CAS Analytical Methods</i> “	123
17.6.	Navigation zwischen SciFinder und „ <i>CAS Analytical Methods</i> “	124

18. „CAS Formulus“	125
18.1 Wie komme ich zu „CAS Formulus“?.....	125
18.2 Was finde ich in „CAS Formulus“?.....	126
18.3 Wie suche ich in “CAS Formulus” nach Formulierungen?	126
18.4 Wie suche ich nach Inhaltsstoffen und welche Informationen sind vorhanden? ...	129
18.5 „Formulation Designer“.....	130
18.6 Navigation zwischen SciFinder und „CAS Formulus“	132

1. Welche Informationen finde ich in SciFinder?

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

Als weltweit größte Datenbank mit chemierelevanten Inhalten enthält sie Informationen zu

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

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

SciFinder enthält die Informationen folgender CAS-Datenbanken:

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

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

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

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

Cplus enthält außerdem alle chemierelevanten Patente von [Patentämtern weltweit](#).

Für viele dieser Patente erhält man mit [PatentPak](#)® ([s. auch Pkt. 16.6](#)) den sofortigen Zugriff auf die darin sonst schwer zu findenden chemischen Substanzen.

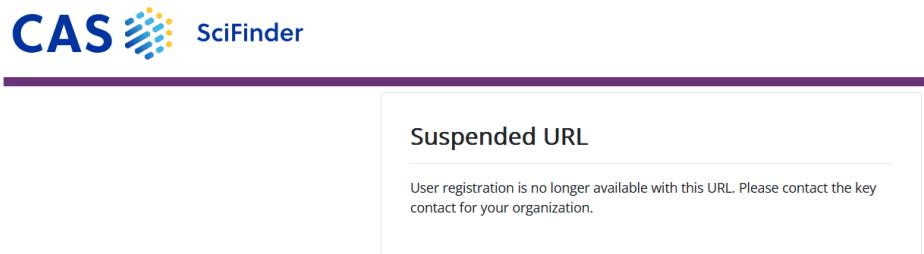
2. Erste Schritte mit SciFinder

2.1 Wie erfolgt die Registrierung für die Datenbank?

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

Für die Registrierung gibt es ab 2025 einen neuen Link!

Wer noch einen alten Link benutzt, der bekommt diese Info:



Auf der Seite der ThULB findet man bei DEBIS den Link zur erstmaligen Registrierung und auch den Zugang zu SciFinder:

<https://dbis.ur.de/THULB/resources/103013>

Der Zugangslink für die erstmalige Registrierung lautet:

<https://sso.cas.org/sp/startSSO.ping?PartnerIdpId=https%3A%2F%2Fidp.uni-jena.de%2Fidp%2Fshibboleth&TargetResource=https%3A%2F%2Fscifinder-n.cas.org%2F>

Die Nutzung erfolgt im Uninetz.

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

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

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

Zugang mit Shibboleth/SSO

Mit Single Sign-on, abgekürzt mit SSO, somit können alle zugreifen, die vom Identity Provider der Universität die Rechte dazu erhalten haben. Das sind alle Mitarbeiter der jeweiligen Einrichtung. Der Zugang erfolgt mit Login und Passwort der Universität.

Die Anmeldedaten können gespeichert werden. Das empfiehlt sich aber (wenn überhaupt!) nur auf persönlichen Endgeräten (eigener PC, Notebook oder Smartphone).

Nach der ersten Anmeldung wird bekannt gegeben, welche Daten an CAS übertragen werden.

Die oben aufgeführten Informationen werden an den Dienst weitergegeben, falls Sie fortfahren. Sind Sie einverstanden, dass diese Informationen bei jedem Zugriff auf diesen Dienst an ihn weitergegeben werden?

Wählen Sie die Dauer, für die Ihre Entscheidung zur Informationsweitergabe gültig sein soll:

- Bei nächster Anmeldung erneut fragen.
- Ich bin einverstanden, meine Informationen dieses Mal zu senden.

- Erneut fragen, wenn sich die Informationen ändern, welche diesem Dienst weitergegeben werden.

Ich bin einverstanden, dass dieselben Informationen in Zukunft automatisch an diesen Dienst weitergegeben werden.

Akzeptieren

Ablehnen

Diese Einstellung kann jederzeit mit der Checkbox auf der Anmeldeseite widerrufen werden.

Job Role	
Area of Expertise	
Phone Number (Optional)	
By clicking below I have read and agree to the Privacy Policy.	
Next	

Bei „Job Role“ und „Area of Expertise“ müssen Angaben aus der Auswahlliste gemacht werden.

The screenshot shows two parts of the CAS SciFinder login process. On the left, a 'Welcome' screen displays the CAS logo and a message about confirming identity and verifying institutional information. A blue 'Next' button is at the bottom. On the right, the 'Log in to SciFinder®' screen features the SciFinder logo and a 'Log in with your CAS ID.' button. It also includes links for 'Create an account.' and 'Can't log in?'

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

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

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

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

Forgot Username or Password

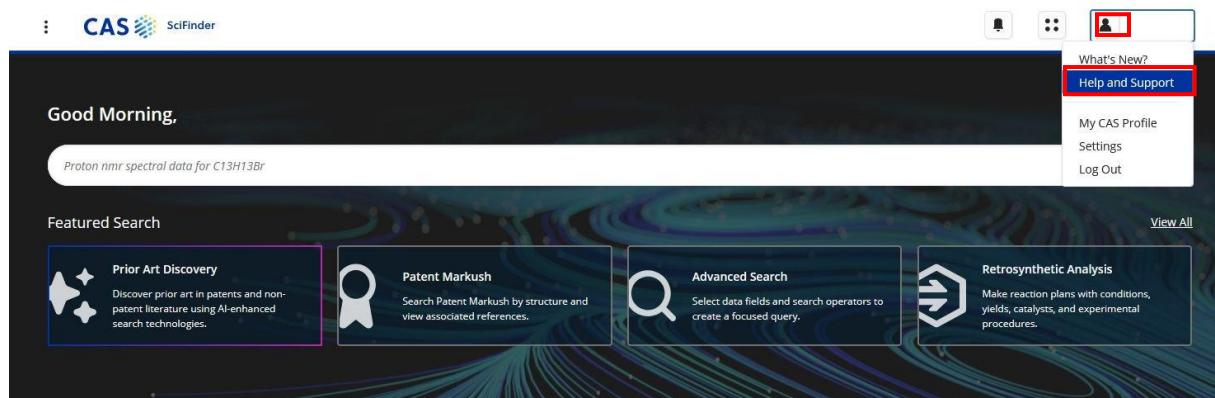
Enter your username or email address. We'll email you a verification code to recover your information.

Enter Username or Email Address

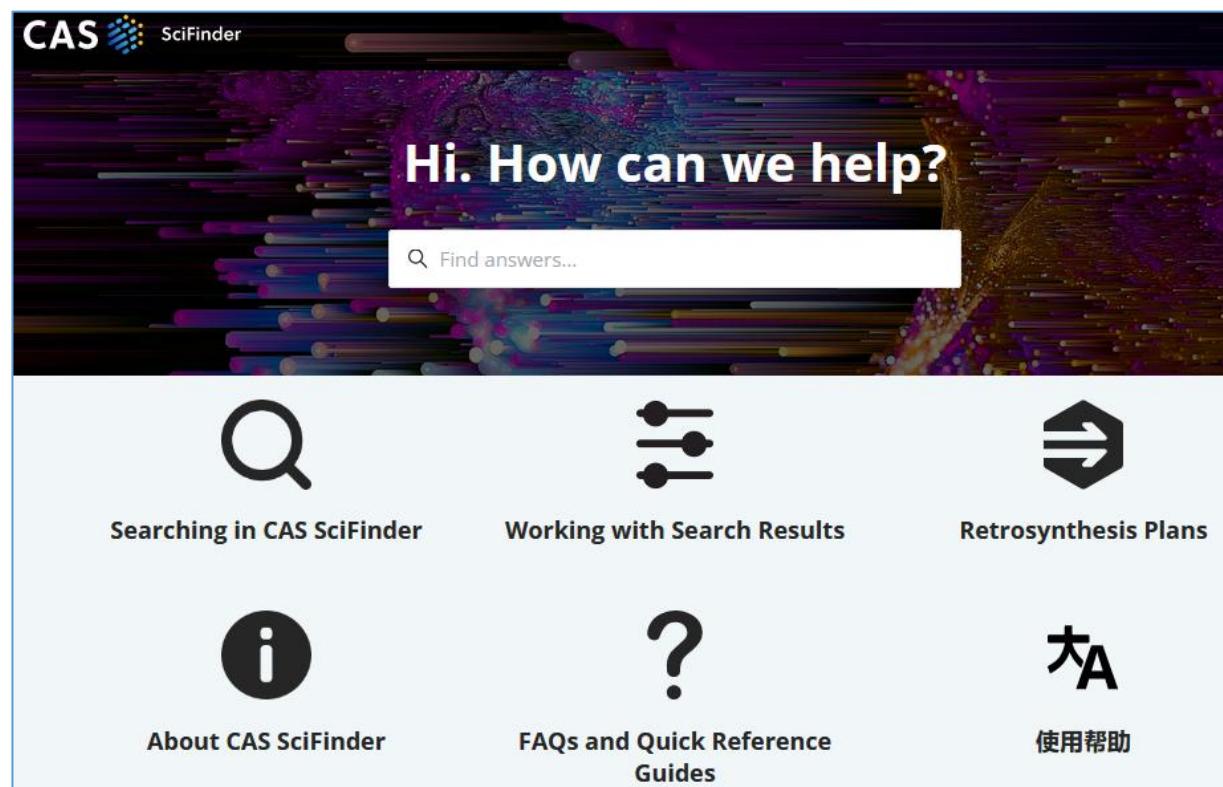
Next

2.4 Wo finde ich Hilfen und Videotutorials zur Suche?

2.4.1 Direkthilfe in SciFinder



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

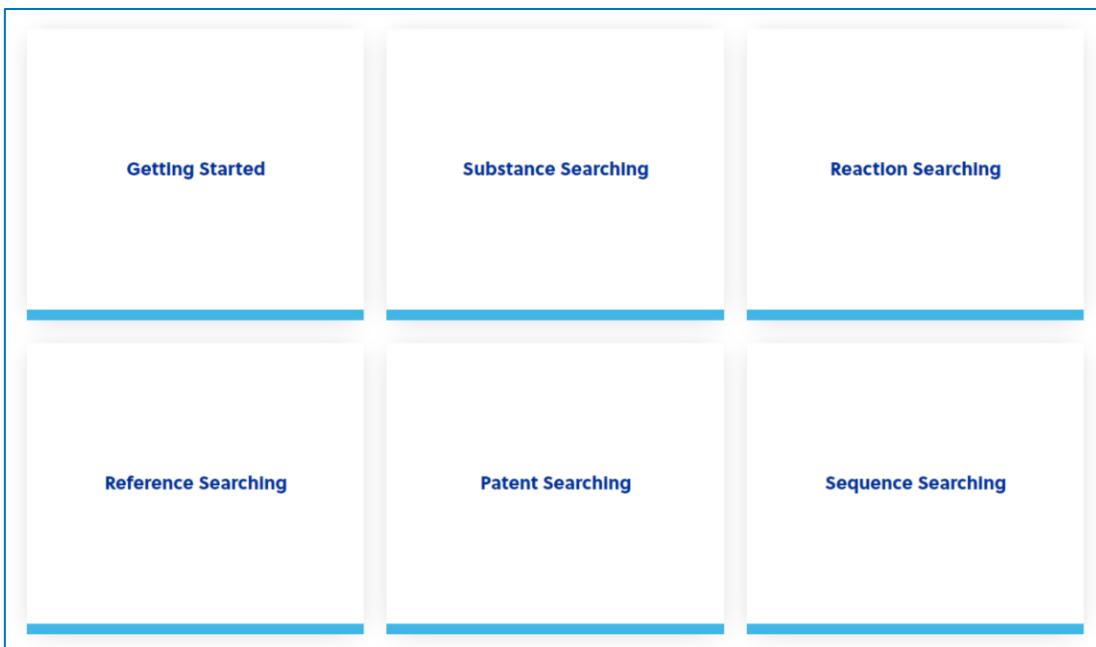


Eine Anmerkung: Auf der Startseite werden die Nutzer mit ihren Vornamen angesprochen und je nach Tageszeit steht dann dort „Good Morning, ...“ oder „Good Afternoon, ...“ In der Anleitung wird die Anrede nicht mit im Screenshot erscheinen.

2.4.2 SciFinder-Training

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

Hier findet man sehr ausführliche Informationen zu vielen verschiedenen Themen:



2.4.3 SciFinder-Training im Detail

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

- **Reference Searching**

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

- **Patent searching**

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

- **Sequence Searching**

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

2.4.4 Poster von CAS

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

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

CAS SciFinder – Essential Features for Students

Substances Search

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

Search examples

Print CAS Registry Number
2748-91 Finds a Registry record using CAS Registry Number® as identifier

Substance ID
Names of names that start with the same substance

WC00123456789 Finds all indexed substances for this patent

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

Substances search result
Substances search results are displayed in an intuitive interface where you will see the most relevant results for your search. Click on substances, reactions or publications of interest to learn more.

Reaction Searching

(1) **Text search**
Search → Refine with reaction role in the next step to limit to the correct context, e.g. product or reactant. See the [Reaction searching guide](#) for more details.

(2) **Draw reaction diagram**. Draw a reaction diagram in the drawing editor or from a reaction in a search. [Search](#) → [Reaction search example](#)

Reaction search results

Retrosynthetic Planner
There are two primary ways to launch the Retrosynthetic Analysis in CAS SciFinder:
(1) Draw or Import a structure into the retrosynthetic analysis window by clicking on the Retrosynthetic Analysis option on the landing page. The drawn substance can be novel.
(2) Click on the Start Retrosynthetic Analysis option found on the substance flyout window.

Interface and References Search

Search interface
CAS SciFinder features a streamlined search interface.

References search result
The References search interface provides you with access to a full result set in an easy-to-use interface.
- References are default sorted by relevance with customizable sorting options.
- You can focus your answers not further using filters.
- You can save searches, send a link of the results, set up alerts, or add results to a project.
- You can quickly access full details for any of the references displayed.

Boolean operators
You can use logical operators to create precise text queries.
Ex: **method AND (dead OR "cheating gun")**
AND: Both terms are present within the document.
OR: Either one or both terms are present (comes with synsets with OR).
NOT: Excludes documents from the set containing the word(s) after NOT.
Wildcard: allows for more comprehensive results. Instead of right-hand truncation is possible.
- Hopkins is to many characters. **Co_ncurren_t** **deat_h**
- Hopkins - produces double quotes ("") will be assumed to be precise quotes. A search for "dead" deaths probably only finds results that exactly match: **dead** deaths.

Advanced search

Sequence search

Suppliers **CAS Roles** **Spectra** **Properties**
Print full guide

Citations **Bioactivity data**

Analytical Methods

Request training

Please send an email to Dr. Karin Fisher at kfisher@cas.org.

Reactions Search and Retrosynthesis Planner

Reaction Searching

(1) **Text search**
Search → Refine with reaction role in the next step to limit to the correct context, e.g. product or reactant. See the [Reaction searching guide](#) for more details.

(2) **Draw reaction diagram**. Draw a reaction diagram in the drawing editor or from a reaction in a search. [Search](#) → [Reaction search example](#)

Reaction search results

Retrosynthetic Planner
There are two primary ways to launch the Retrosynthetic Analysis in CAS SciFinder:
(1) Draw or Import a structure into the retrosynthetic analysis window by clicking on the Retrosynthetic Analysis option on the landing page. The drawn substance can be novel.
(2) Click on the Start Retrosynthetic Analysis option found on the substance flyout window.

Selecting plan options

Opening the plan

Save, Alerts, Download, Share, Projects

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

Share has two options:
(1) **Share results** allows to share with a SciFinder user identified by the email address. A message can be added.

Copy Search to Clipboard saves the URL of the search in the clipboard. This URL can be shared with any SciFinder user.

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

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

Project collaboration and their roles can be defined.

2.4.5 An wen kann ich mich bei Fragen wenden?

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

Dr. Karin Färber
Senior Customer Success Manager
ACSI representing CAS
Tel: +49 2104 831525
Fax:+49 2104 831524
E-Mail: kfaerber@acs-i.org

- Bei Problemen mit Login und Passwort:

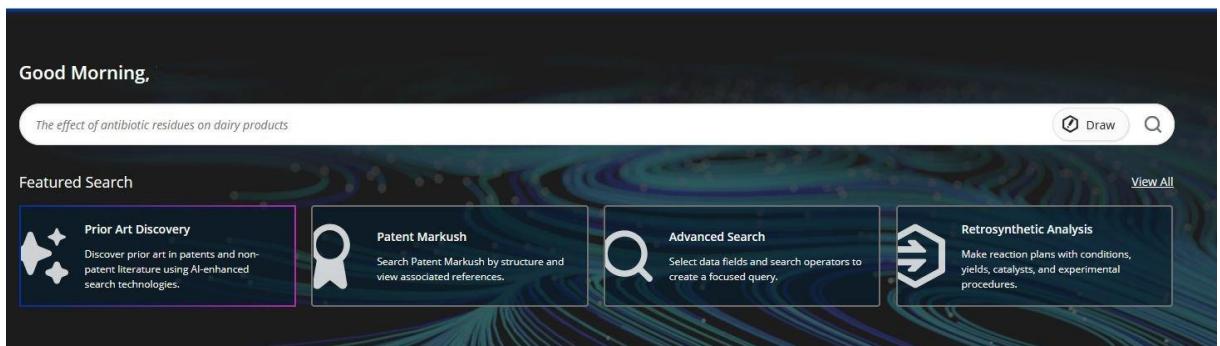
CAS Customer Center E- Mail: help@cas.org

3. Grundlagen der Recherchen in SciFinder

3.1 Allgemeines

3.1.1 Die neue Generation von SciFinder mit Unterstützung von künstlicher Intelligenz (AI support)

Am 2. September 2025 hat CAS SciFinder auf SciFinder next Generation mit AI support umgestellt. CAS SciFinder sieht nun etwas anders aus:



Es gibt nur noch ein Eingabefeld zur Eingabe mit „natural language“. AI interpretiert hier die Sucheingabe und erklärt auch bei References unter Query Interpretation, was genau gesucht wurde.

The screenshot shows the SciFinder search interface. At the top, there's a search bar with the query "the effect of antibiotic residues on dairy products". Below the search bar, there are four main search categories: "Prior Art Discovery", "Patent Markush", "Advanced Search", and "Retrosynthetic Analysis". The "References" tab is currently selected. On the right side of the screen, there's a "Query Interpretation" panel with a red border. This panel contains a box labeled "Interpretation" with the text "antibiotic and residues and dairy". Below this, there's a "Search Original Query" button and some additional text about using Advanced Search for boolean queries. The main search results area shows a list of 805 results, with the first result being a journal article about tetracycline antibiotics transfer from contaminated milk to dairy products.

Die Hilfe dazu ist hier zu finden: <https://cas-product-help.zendesk.com/hc/en-us/articles/39193559572877-What-s-New-September-2-2025>

Man kann bei Settings die Suche auf den bisherigen Modus umstellen. Es lohnt sich allerdings nicht, weil dies nur eine begrenzte Zeit möglich sein wird.

Die Anleitung wird nach und nach auf die neue Generation von SciFinder angepasst. Bitte haben Sie Verständnis, das dies einige Zeit in Anspruch nehmen wird!

3.1.2 Gespeicherte und vergangene Suchen; Projekte

The screenshot shows the SciFinder interface with a search for "aspirin". The top navigation bar includes the CAS logo, a search bar with "aspirin", and various icons. Below the search bar, there are tabs for "Substances", "Reactions", "Citing", and "Knowledge Graph". On the right side, there are buttons for "Projects", "Saved", "History", and "Downloads". A red box highlights the three-dot menu icon in the top right corner. Below the main search area, there are links for "Alerts (5)", "Saved (551)" (which is underlined), "History (11778)", "Projects (7)", and "Downloads (15)".

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

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

This screenshot shows the "Your Saved Items" filter interface. It includes a sidebar with "Filter by" dropdowns for "Result Type", "Alerts", and "Tags". Under "Tags", several items are listed with checkboxes: "ex" (4), "natural product" (4), "Hadlington" (3) which is highlighted in blue, "fh aachen" (2), and "1778655-51-8" (1). There is also a "View All" link.

Verschiedene Filter

This screenshot shows the "Your Search History" filter interface. It includes a sidebar with "Filter by" dropdowns for "Result Type" and "Date". The date range is set from "mm/dd/yyyy" to "mm/dd/yyyy" with "June 2024" selected. Below the date range is a calendar for June 2024, with specific dates like 26, 27, 28, 29, 30, 31, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15 highlighted.

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

The screenshot shows the "Projects" tab selected. On the left, there is a button to "Start New Project" with a plus sign. In the center, there is a card for a project titled "HMF derived biofuels" with the subtitle "Overview, most important publications". At the bottom of the card, it says "Updated January 16, 2024" and has three dots for more options. Below the card, there are links for "Alerts (5)", "Saved (551)", "History (11778)", "Projects (7)" (which is underlined), and "Downloads (15)".

[← Return to Projects](#)

HMF derived biofuels :

Project Description	Edit	References (5)	Substances (2)
Overview, most important publications		Efficient production of 5-hydroxymethylfurfural from fructose using acidic ion-functionalized porous carbon solid acid By: Wang, Xudong; Deng, Qingbo; Zhang, Yi; Ren, Zhilin; He, Ping <i>Research on Chemical Intermediates</i> (2023), 49(4), 1369-1386 DOI: 10.1007/s11594-023-05935-2 Efficient production of 5-hydroxymethylfurfural (5-HMF) from fructose using acidic ion-functionalized porous carbon solid acid. The article discusses the use of trifluoromethanesulfonic groups for catalyzing fructose conversion. Parameters include solvent, catalyst amount, reaction temperature, and time. The full conversion of fructose with the highest 5-HMF yield of 95% was achieved.	
Collaborators	Edit		

Project Collaborators

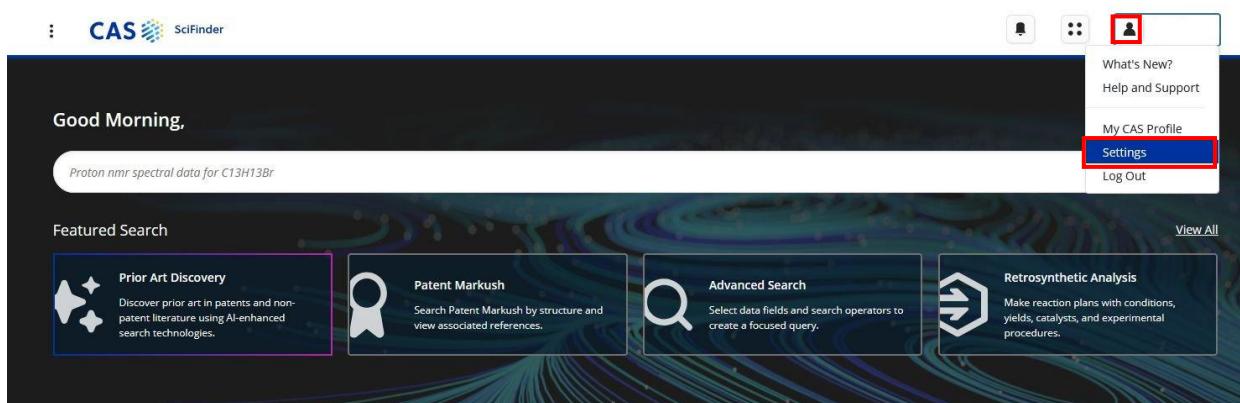
Add project collaborators using an email address... [Add](#)

People with access (2)

(You)	Administrator
(Colleague)	Viewer Editor Viewer <input checked="" type="checkbox"/> Remove Access

3.1.3 Einstellungen

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



The screenshot shows the SciFinder homepage with a dark theme. At the top right, there is a user menu with options like "What's New?", "Help and Support", "My CAS Profile", and a red-highlighted "Settings" button. Below the menu, there is a "Good Morning" greeting and a search bar with the text "Proton nmr spectral data for C13H13Br". The main area features four "Featured Search" boxes: "Prior Art Discovery" (with a purple background), "Patent Markush", "Advanced Search", and "Retrosynthetic Analysis".

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

Apply Filters

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

The screenshot shows the 'Settings' page with several sections:

- Filter Preferences:** Contains a toggle switch for 'Manually Apply Filters' (OFF). A note below says: "Turning on manual filters will disable automatically applying selected filters."
- Date and Time Preferences:** Shows the date as March 21, 2017, 1:00 PM. Includes 'Date Format' (Month, Day, Year) and 'Time Format' (24-Hour Time) settings.
- Structure Preferences:** Includes 'Display CAS Index Name' (OFF) and 'Show Structures on Reference Detail' (ON).
- Alert Preferences:** Includes 'Receive e-mail notification for newly published Alert results' (ON) and 'Update E-mail Address'.

A callout box titled 'Customize Reference Filters' is overlaid on the page. It contains the following text: "Drag and drop filter options to add, remove, or customize your preference on a Reference result set. You can also [reset references filter order](#)".

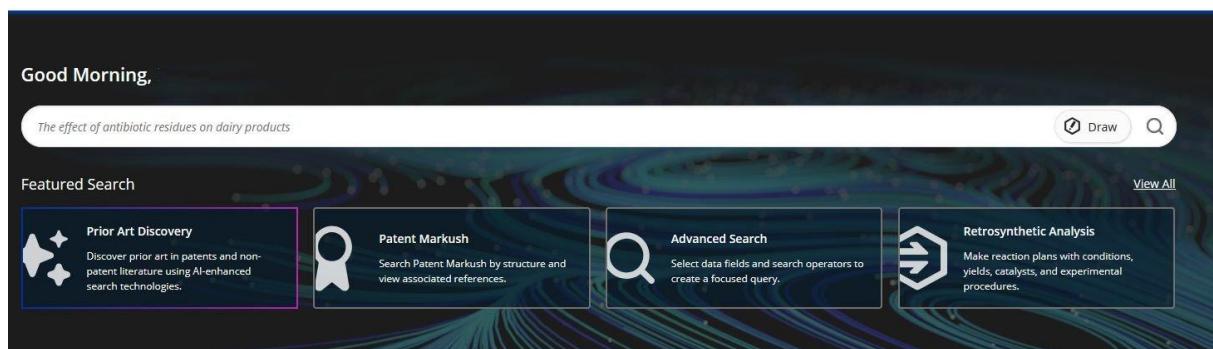
The 'Included Filters' list includes: Concept, Document Type, Substance Role, Language, Publication Year, Author, Organization, Publication Name, and CAS Solutions. The 'Unused and Available Filters' list includes: Available at My Institution and CA Section.

Buttons for 'Save' and 'Cancel' are at the bottom of the callout box.

3.2 Welche Suchmöglichkeiten habe ich?

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

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



Auf der Startseite gibt es ein Eingabefeld. Es wird automatisch erkannt, worum es sich bei der Anfrage handelt.

Beispiel: eine natürlichsprachige Eingabe (the effect of antibiotic residues on dairy products) oder eine Substanz (caffeine)

3.3 Was ist wichtig zu wissen?

- Man kann gleichzeitig auch mit Strukturformeln suchen.
- Mit logischen Operatoren (AND, OR, NOT) braucht man nicht zu arbeiten, man kann sie aber nach wie vor verwenden.
- Die Ergebnisse werden nach der Relevanz sortiert. Alle Antworten sind mit einem Ranking versehen. Die erste Antwort ist somit die beste Antwort. Ein Kriterium für das Ranking ist die Anzahl der Zitierungen. Publikationen, die häufiger zitiert wurden, stehen weiter oben in der Trefferliste.

Das Ranking ergibt sich auch noch aus weiteren Faktoren, z.B. wie oft kommen die Suchterme im Record vor, wo findet man die Suchterme im Nachweis (vor allem in den Concepts), usw..

References search for "the effect of antibiotic residues on dairy products"

Query Interpretation ?

All Substances Reactions References Suppliers Patent Markush

3.4 Automatismen bei der Wortsuche in SciFinder

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

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

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

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

child OR infant OR baby OR newborn

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

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

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

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

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

3.5 Recherchestrategien in SciFinder

3.5.1 Generelles zur Suchstrategie

Recent Search History

View All Search History

February 1, 2024

<input checked="" type="checkbox"/> References 8:08 AM	"natural products" and aconitum (11K Results)	Rerun Search	Edit Search
<input checked="" type="checkbox"/> References 8:08 AM	"natural products" with aconitum (11K Results)	Rerun Search	Edit Search

- Bei Phrasensuche („ „) werden die Begriffe im Titel (TI), in der Zusammenfassung (AB), im kontrollierten Vokabular (CT) und den chemischen Namen (CN) gesucht.
- Beispiel:**
- Die Referenzsuche "*Mycobacterium marinum*" and "*putrescine aminotransferase*" findet auch solche Treffer, bei denen diese Transferase ausschließlich als Substanzname vorkommt, aber nicht in TI, AB oder CT gefunden wird.
- Begriffe, die bei „**Search within results**“ eingegeben werden sind eine UND-Verknüpfung. Bei „**Search within results**“ lassen sich auch mehrere Begriffe eingeben, die mit OR oder NOT verbunden werden können.

3.5.2 Suche mit Präpositionen und Verwendung des „CAS Lexicon“

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

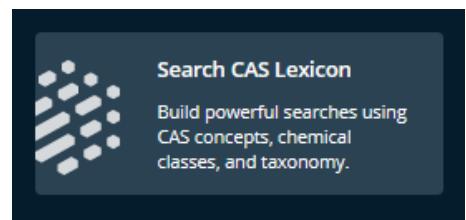
Zur Suche mit Präpositionen:

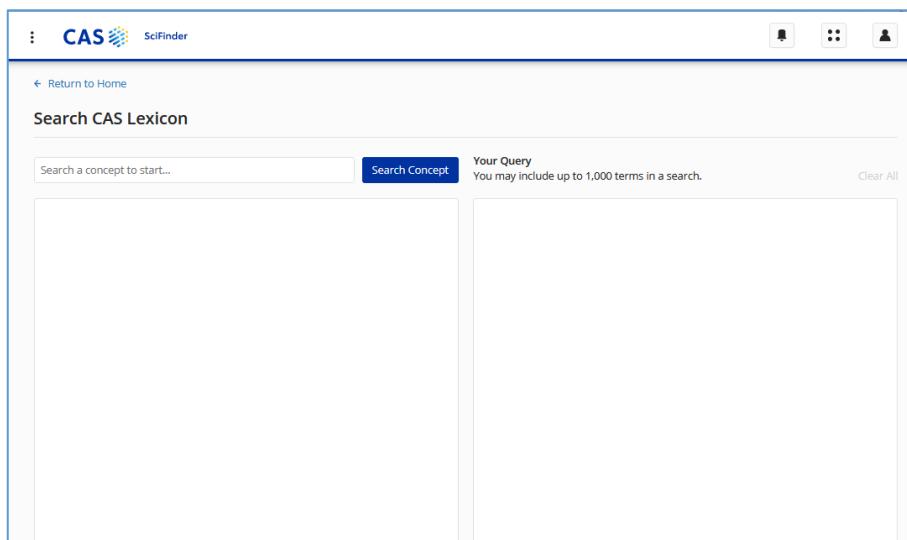
- Die Suche mit Präpositionen führt nicht nur zum konkreten Ziel, sondern auch zu einer sehr großen Antwortmenge, die im unteren Teil auch Dokumente enthält, die nur einen Begriff der Suche beinhalten.
- Im oberen Teil der Antwortmenge sind alle Begriffe der Suche enthalten, wenn nach Relevanz sortiert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

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

Ein Button mit dem Link zum Lexikon befindet sich auf der Startseite unter den Eingabezeilen:
oder direkt: <https://scifinder-n.cas.org/lexicon/search>

Hilfe zur Benutzung des CAS-Lexikons unter:
[Find-References-Using-CAS-Lexicon-Builder](#)





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

A screenshot of the CAS Lexicon search interface. The search bar at the top contains the text "Heart disease". The "Preferred Term" section is expanded, showing a checked checkbox next to "Heart disease". Below this, under "View more synonyms", there is a link. Other sections like "Broader Terms", "Narrower Terms", and "Related Terms" are also visible. To the right, a "Your Query" section shows the search terms "Red wine", "AND", and "Heart disease". At the bottom, there is a "Select a boolean operator" dropdown set to "AND", an "Add Term(s)" button, and a search icon.

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

A screenshot of the CAS Lexicon search interface focusing on the "Preferred Term" section for "Heart disease". The section is expanded, showing a checked checkbox next to "Heart disease". Below this, a detailed list of synonyms is provided, including "Acquired heart disease", "Cardiac asthenia", "Cardiac disease", "Cardiac disorder", "Cardiac dysfunction", "Cardiopathy", "Cardiopulmonary disease", "Disease", "Ontology ID: 114", "DOID:114", "Heart diseases", "Heart dysfunction", "Heart muscle disease", "MeSH ID: D006331", and "Myocardial disease". There is also a link to "View fewer synonyms".

4. Suche mit Suchmodus „All“

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

The screenshot shows the SciFinder interface with the following elements:

- Greeting:** Good Morning, Ina
- Search Bar:** Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI.
- Search Mode:** All (highlighted)
- Featured Search Sections:**
 - Prior Art Discovery: Discover prior art in patents and non-patent literature using AI-enhanced search technologies.
 - Patent Markush: Search Patent Markush by structure and view associated references.
 - Retrosynthetic Analysis: Make reaction plans with conditions, yields, catalysts, and experimental procedures.
 - Search CAS Lexicon: Build powerful searches using CAS concepts, chemical classes, and taxonomy.
- View All:** A link to view all search results.

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

The screenshot shows the SciFinder interface displaying search results for "aspirin".

Search Bar: aspirin

Results for "aspirin"

Substance Card (50-78-2):

- Chemical Structure:** COC(=O)c1ccccc1C(=O)O
- Properties:** C₉H₈O₄, Aspirin
- Physical Properties:**
 - Molecular Weight: 180.16
 - Melting Point: 135 °C
 - Boiling Point: 197-200 °C
 - Press: 7 Torr
 - Density: 1.40 g/cm³
 - pKa (Predicted): 3.48±0.10
 - Most Acidic Temp: 25 °C
- Spectra:** View Spectra

Reactions for "aspirin":

View All (2,164)

Reaction Scheme: Acetone + Salicylic acid → Aspirin

References for "aspirin":

View All (165,796)

Article Preview: The mechanism of action of aspirin

By: Vane, J. R.; Botting, R. M.
Thrombosis Research (2003), 110(5-6), 255-258 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE

Related Substances: More Substances for "aspirin" (View All (6))

Other Article Preview: Long-term effect of aspirin on colorectal cancer incidence and mortality: 20-year follow-up of five randomised trials

By: Rothwell, Peter M.; Wilson, Michelle; Elwin, Carl-Eric; Norrving, Bo; Algra, Ale; Warlow, Charles P.; Meade, Tom W.
Lancet (2010), 376(9754), 1741-1750 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE

Article Preview: A clinical trial comparing three antithrombotic-drug regimens after coronary-artery stenting

By: Leon, Martin B.; Baim, Donald S.; Popma, Jeffrey J.; Gordon, Paul C.; Cutlip, Donald E.; Ho, Kalon K. L.; Giambartolomei, Alex; Diver, Daniel J.; Lasorda, David M.; Williams, David O.; et al
New England Journal of Medicine (1998), 339(23), 1665-1671 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE

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

Results for "benzene" + drawn structure

Reactions for "benzene" + drawn structure
View All (17,979)

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

References for "benzene" + drawn structure
View All (29,270)

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

Full Text ▾ 3 0 70

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

Full Text ▾ 3 0 883

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

5. Thematische Suchen

5.1 Einfache Textsuche

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

Beispiel: 111-46-6 and wine

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

Trefferliste

Beispiel: red wine and (heart disease or coronary disease or cardio-vascular disease)

Trefferliste

Detailanzeige eines Treffers

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

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

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

The screenshot shows a search interface. On the left, there is a sidebar with a tree view of concepts:

- ✓ CAS Concepts
- ✓ MEDLINE® Medical Subject Headings
- ✓ Supplementary Concepts
- ✓ Substances
- ✗ Analytical Methods

At the top right of the sidebar are "Expand All" and "Collapse All" buttons. Below the sidebar is a table with two columns:

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

Below the table, there is another section labeled "Formulations".

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

5.2 Gleichzeitige Suche von Text und chemischer Struktur

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

The screenshot shows the SciFinder interface with the search bar containing the query "„Danaus plexippus“". Below the search bar are several search options: "Prior Art Discovery" (with a gear icon), "Patent Markush" (with a shield icon), "Advanced Search" (with a magnifying glass icon), and a section for drawing a structure (with a hexagon icon). A drawn structure fragment of cardenolides is shown in the drawing area.

Trefferliste der kombinierten Text- und Struktursuche

- Da die Suche ein Strukturfragment enthält, wird zunächst der Reiter „Substances“ angezeigt (keine Treffer)

The screenshot shows the "Substances search" results page for the query "„Danaus plexippus“ + drawn structure". The "Substances" tab is highlighted with a red box. The results panel displays the message "No substance results found" and "We couldn't find any results. Please update your search query and try again."

- Nach Anklicken von „References“ erscheint eine Liste von Treffern, die neben dem Suchbegriff „*Danaus plexippus*“ im Titel, Abstract bzw. in den Schlagworten auch auch chemische Substanzen enthalten, die dem gezeichneten Strukturfragment entsprechen. Die Substanzen sind im Einzeltreffer (nächste Seite) sichtbar.

The screenshot shows the "References search" results page for the query "„Danaus plexippus“ + drawn structure". The "References" tab is highlighted with a red box. The results panel shows 57 results. One specific reference is highlighted: "Secondary Defense Chemicals in Milkweed Reduce Parasite Infection in Monarch Butterflies, Danaus plexippus" by Gowler, Camden D.; Leon, Kristoffer E.; Hunter, Mark D.; de Roode, Jacobus C. from Journal of Chemical Ecology (2015), 41(6), 520-523. The "Analyze Results" panel on the right shows a bar chart with "Journal" as the top document type.

Einzeltreffer der kombinierten Text- und Struktursuche

Milkweeds, monarch butterflies and the ecological significance of cardenolides

1 36 Citation Map

In this Reference By: Malcolm, Stephen B.
 • CAS Concepts DOI: 10.1007/bf01240595
 • Substances

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

Keywords: review milkweed **Danaus** interaction cardenolide

View Source Full Text ▾

Publication Information Journal View Less

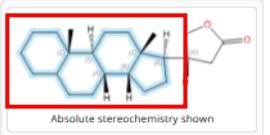
Source	Database Information	Company/Organization	Publisher	Language
Chemoecology	AN: 1996:433952	Department of Biological Sciences	Birkhaeuser	English
Volume: 5/6	CAN: 125:81784	Western Michigan University		
Issue: 3/4	Cplus	Kalamazoo, Michigan 49008		
Pages: 101-117		United States		
Journal; General Review				
1995				
DOI:				
10.1007/bf01240595				

~ CAS Concepts

Asclepias **Danaus plexippus**

~ Substances

29565-36-4



Absolute stereochemistry shown

C₂₃H₃₄O₂
Cardenolide

Role: Biological Study, Unclassified, Biological Study

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

5.3 Phrasensuche und Maskierung

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

Phrasensuche

- **Sucht man Begriffe als Phrase, dann werden diese im Titel, in der Zusammen-**

The screenshot shows a search interface with a search bar containing the query '\"red wine\" and \"heart disease\"'. Below the search bar are four cards:

- Prior Art Discovery: Discover prior art in patents and non-patent literature using AI-enhanced search technologies.
- Patent Markush: Search Patent Markush by structure and view associated references.
- Advanced Search: Select data fields and search operators to create a focused query.
- Retrosynthetic Analysis: Make reaction plans with conditions, yields, catalysts, and experimental procedures.

fassung, im kontrollierten Vokabular (Concepts) und in den Substanznamen gesucht.

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

The screenshot shows a detailed search results page for the query '\"red wine\" and \"heart disease\"'. The results are filtered to show only References. The main results table displays a single result:

The red wine phenolics trans-resveratrol and quercetin block human platelet aggregation and eicosanoid synthesis: Implications for protection against coronary heart disease
 By: Pace-Aciak, Cecilia; Hahn, Susan; Diamandis, Eleftherios P.; Soleas, George; Goldberg, David M.
Clinica Chimica Acta (1995), 235(2), 207-19 | Language: English; Database: Caphus and MEDLINE

The results table includes a detailed abstract of the study, mentioning the effects of red wine phenolics on platelet aggregation and eicosanoid synthesis.

The sidebar on the left allows filtering by document type (Journal, Patent, Review, Clinical Trial, Conference) and flags (Has DOI, Has Claims).

The right side features an 'Analyze Results' chart showing the distribution of document types: Journal (purple), Review (green), Conference (orange), Patent (cyan), and Clinical Trial (blue).

Maskierung (auch als Trunkierung bzw. Wildcard bezeichnet)

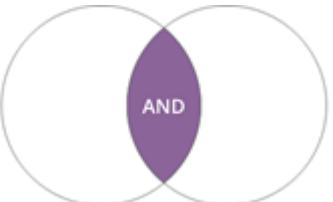
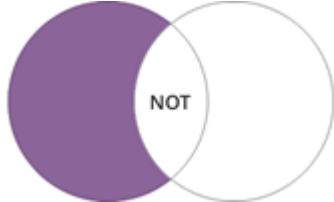
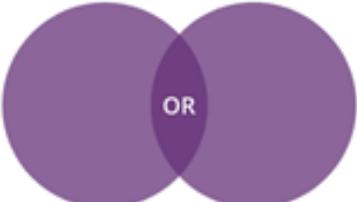
- Beispiel einer **Wortende-Maskierung**: **fungicid*** sucht sowohl im Text bei den Referenzen als auch bei den Substanzen und Reaktionen nach dem Wortstamm mit beliebigen Endungen ((fungicide, fungicides, fungicidal))

Sowohl Paper/Patente (References) als auch Substanzen mit dem gesuchten Wortstamm werden gelistet.

Hier die Liste der gefundenen Referenzen.

5.4 Suche mit logischen Operatoren

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

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

5.5 Wie finde ich Publikationen eines bestimmten Autors?

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

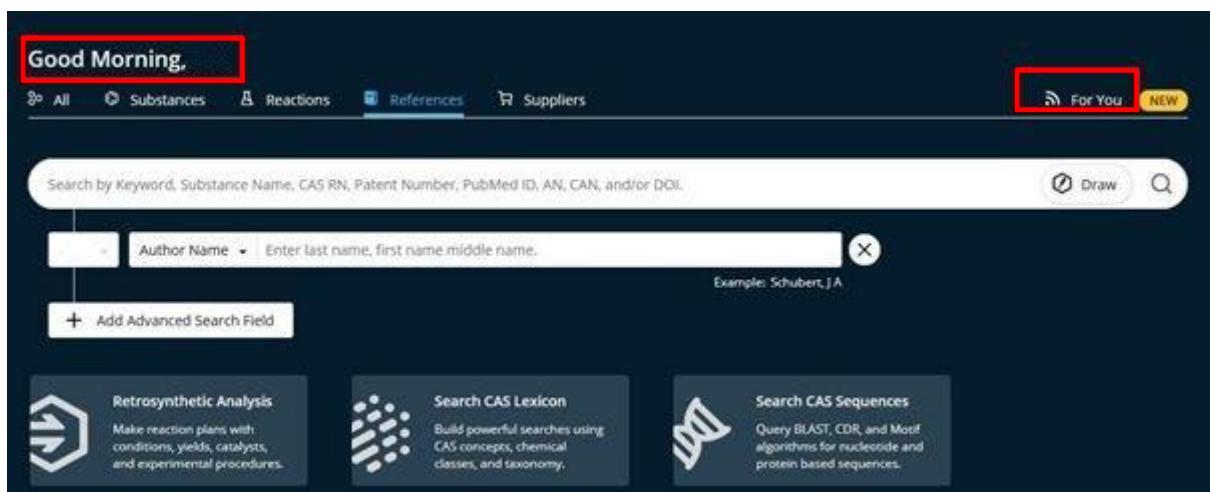
The screenshot shows the CAS References search interface. At the top, there are tabs for All, Substances, Reactions, References (which is highlighted with a red box), and Suppliers. Below the tabs is a search bar with the placeholder "Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI." A "Draw" button and a magnifying glass icon are also present. The main search area has a dropdown menu set to "Author Name" (also highlighted with a red box). The search term "kothe, e" is entered. Below the search bar, a list of suggestions appears: "Kothe, Erika" (selected), "+ Add Advanced Search Field", "Kothe, E", and "Kothe, Emily J".

- Die Suche nach der Namensvariante mit dem vollständigen Vornamen enthält auch die Publikationen, die mit dem abgekürzten Vornamen gelistet sind.
 - Sucht man mit „*Kothe, Erika*“ findet man neben „*Kothe, Erika M.*“ und „*Kothe E*“ auch „*Kothe, E J*“.
 - Daher muss sich noch eine Filterung der Treffer nach der richtigen „*Kothe, E.*“ anschließen.
 - Das Vorgehen dazu wird im [Punkt 7.](#) erklärt.
- KOTHE, E (1)
 - Kothe, E (5)
 - Kothe, E. (16)
 - Köthe, E (7)
 - Kothe, E J (4)
 - Kothe, Erika (194)
 - Kothe, Erika M. (1)
-
- Es ist auch möglich, die Suche schon bei der Eingabe mit einer weiteren Zeile zu ergänzen und z.B. mit Adressangaben einzuschränken: Jena oder Schiller - reicht als Angabe zur Friedrich-Schiller-Universität.
 - Diese neue Zeile erscheint beim Klicken auf **+ Add Advanced Search Field** unter der letzten Suchzeile.

The screenshot shows the CAS References search interface with the "Advanced Search Edit" dialog open. The search term "Kothe, Erika" is entered. The search criteria are set to "AND" and "Organization". Two organizations are selected: "Schiller" and "Jena". A red box highlights the "Organization" dropdown in the search interface, and a red arrow points from it to the "Organization" dropdown in the "Advanced Search Edit" dialog. Another red box highlights the "Organization" dropdown in the "Advanced Search Edit" dialog, which is currently set to "Schiller".

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

5.6 „For You“ – Registerkarte



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

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

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

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

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

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

Beispiel:

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

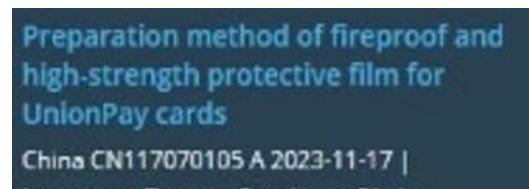
The screenshot shows the CAS SciFinder interface with a search query "uv protection film" entered in the search bar. The results page displays a list of 39,088 patent documents. A specific patent document is highlighted, titled "Fully anti-ultraviolet protection film and preparation method thereof". The document details a multi-layer film structure with an anti-scratch layer, heat insulation layer, and UV400 layer. A note on the right indicates "Downloading file 'UV-tagged_100'. This may take a moment".

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

The screenshot shows the "For You" section of the CAS SciFinder homepage, displaying curated reference recommendations. One recommendation is highlighted with a red box, titled "Preparation method of fireproof and high-strength protective film for UnionPay cards". A context menu is open over this card, showing options like "Add to Project", "Save", and "View All".

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

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



This screenshot displays a detailed view of a patent entry. At the top, it shows the title 'Preparation method of fireproof and high-strength protective film for UnionPay cards'. Below the title are document statistics (6 pages, 0 reactions, 0 citations) and download links. The abstract discusses the composition of the protective film, mentioning polymer, fireproof strength, protective film, coating, and unionpay card. The patent is attributed to Wang, Yuanzhen; Ye, Qing; Wu, Lei; Wu, Sai. The keywords listed are polymer, fireproof strength, protective film, coating, unionpay card. At the bottom, there are buttons for 'PatentPak Viewer', 'Get Prior Art Analysis', and 'Full Text'.

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

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

This screenshot shows a search results page with a 'For You' recommendation at the top. The recommendation is for 'Reference results for you from 20 Februar 2024' and includes options to 'Add to Project', 'Save', and 'View All'. Below the recommendation, there are two patent entries. The first entry is for 'Production of composite materials with polymer films and IR-reflective coatings' by HeiQ RAS AG, published on 2024-01-18. The second entry is for 'Production of composite materials with polymer films and IR-reflective coatings' by World Intellectual Property Organization, published on 2024-01-18. Both entries include abstracts and diagrams. The left sidebar features a filter panel with sections for 'Substances', 'Reactions', 'Citing', and 'Knowledge Graph', along with a 'Filter Behavior' section for 'Filter by' and 'Exclude'. There are also filters for 'Search Within Results', 'Document Type' (Journal, Patent), 'Language' (Chinese, English, Korean, German, Japanese), and 'Publication Year' (2014 to 2024).

- Weitere Details zu „For You“-Empfehlungen:

<https://cas-product-help.zendesk.com/hc/en-us/articles/20537850176013-For-You-Recommendations>

6. Wie kann ich meine Treffermenge sortieren?

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

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



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

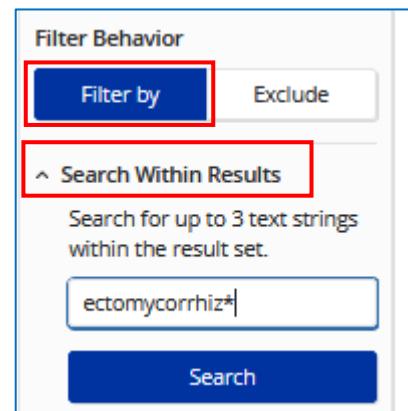
The screenshot displays two sets of search results from SciFinder. The top set is for a 'Special issue: Pathogenic microorganisms' and is sorted by 'Publication Date: Newest'. The bottom set is for 'Genome sequence of the model mushroom Schizophyllum commune' and is sorted by 'Times Cited'. Both sets show a list of publications with their titles, authors, and brief descriptions. Each publication entry includes a checkbox, a 'View Abstract' link, and buttons for 'Substances', 'Reactions', 'Citing', and 'Citation Map'. On the left side of each set, there is a sidebar with 'Filter Behavior' buttons ('Filter by' and 'Exclude'), search filters for 'Search Within Results' (Document Type: Journal, Review, Book, Editorial; Language: English, German; Publication Year: histogram from 1993 to 2024), and a 'View' dropdown set to 'No Abstract'.

7. Wie kann ich meine Treffermenge eingrenzen?

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

7.1 Wie schränke ich meine Suche mit neuen Wörtern ein?

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



- Neue, auf 24 Treffer verkürzte Antwortliste:

The screenshot displays a search results page with the following details:

- Filtering:** Search Within Results: ectomycorrhiz* (highlighted with a red box)
- Results Count:** 24 Results (highlighted with a red box)
- Sort:** Publication Date: Newest
- View:** No Abstract
- Result 1:** Pre-symbiotic response of the compatible host spruce and low-compatibility host pine to the ectomycorrhizal fungus *Tricholoma vaccinum*.
By: Ezediokpu, Marycolette Ndidi; Halitschke, Rayko; Krause, Katrin; Boland, Wilhelm; **Kothe, Erika**
Frontiers in microbiology (2023), 14, 1280485 | Language: English, Database: MEDLINE
[View Abstract](#)
- Result 2:** Ectomycorrhizal Community Shifts at a Former Uranium Mining Site
By: Bogdanova, Olga; **Kothe, Erika**; Krause, Katrin
Journal of Fungi (2023), 9(4), 483 | Language: English, Database: CPlus and MEDLINE
[View Abstract](#)

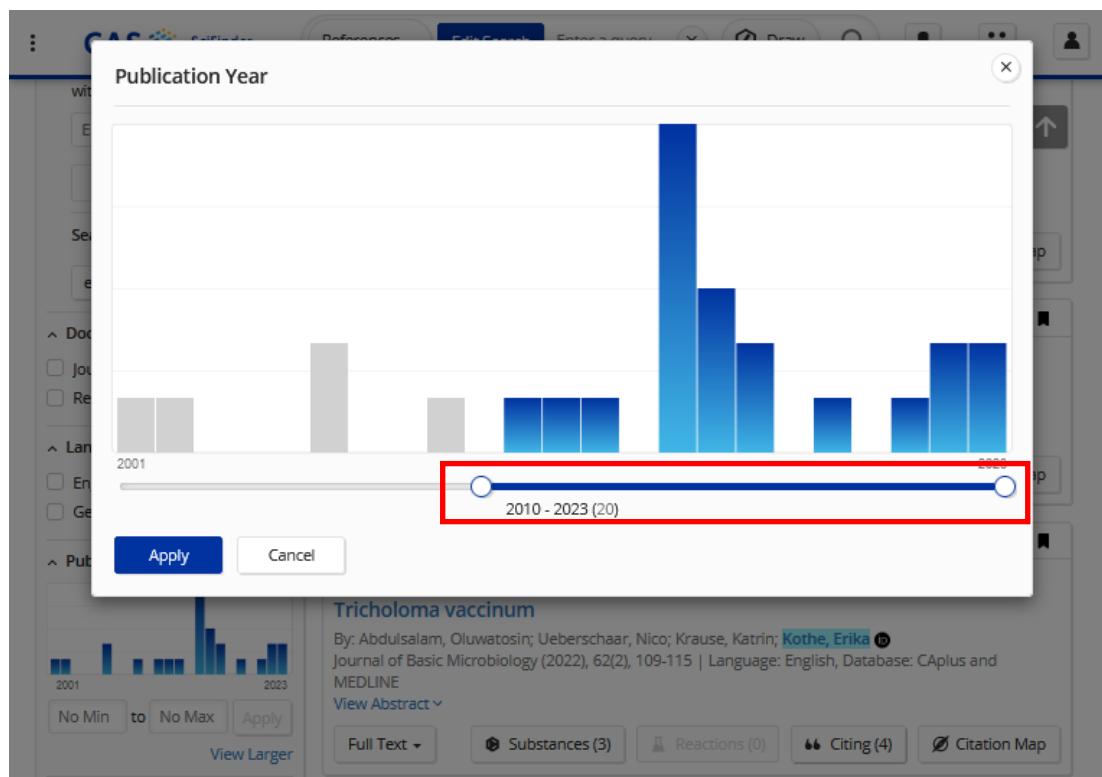
Each result row includes buttons for Full Text, Substances, Reactions, Citing, and Citation Map.

7.2 Wie schränke ich meine Suche zeitlich ein?

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



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



7.3 Eingrenzen/Filtern der Treffer mit „Concepts“

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

A screenshot of a sidebar titled "Concept". It lists several categories with their counts: Food contamination (3,848), Mycotoxins (3,704), Ochratoxins (3,371), Animals (1,509), and Aflatoxins (1,150). At the bottom right, there is a button labeled "View All" which is highlighted with a red box.

A screenshot of a modal window titled "Concept". At the top, there are three tabs: "Top Count" (which is selected and highlighted with a red box), "Alphanumeric", and "Search". Below the tabs, it says "2 Selected". The list contains various concepts with their counts, such as Red wine (1.022), Dietary supplements (141), and Vascular endothelium (81). Two concepts are checked: "Dietary supplements" and "Alcoholic beverages". At the bottom are "Apply" and "Cancel" buttons.

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

A screenshot of a modal window titled "Concept". At the top, there are three tabs: "Top Count", "Alphanumeric", and "Search" (which is highlighted with a red box). Below the tabs, there is a search input field containing "wine" and a "Search" button. Underneath, there is a section titled "Concept Name wine" with a checkbox "Select All on Page". The main area shows a list of concepts related to "wine", such as Apple wine, Chardonnay wine, Fortified wine, Port-Wine Stain, Red wine, Red wine, Cabernet Sauvignon, Red wine, Merlot, Red wine, Pinot noir, Red wine, port, Rice wine, Riesling wine, Rose wine, Sparkling wine, and White wine. At the bottom are "Apply" and "Cancel" buttons.

7.4 Eingrenzen/Filtern der Treffer mit „Substance Roles“

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

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

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

The screenshot shows the SciFinder interface with the following details:

- Top Bar:** CAS SciFinder, References, Enter a query..., Draw, Search, Notifications, More, User Profile.
- Left Sidebar (Filter Behavior):**
 - Substances, Reactions, Citing, Knowledge Graph.
 - Filtering: Search Within Results: 2 Selected.
 - Search Within Results: 93 Results.
 - Searching for...: red wine, liquid chromatography.
 - Document Type: Substance Role (highlighted with a red box), Occurrence (59), Analytical Study (58), Biological Study (32), Preparation (1), Uses (1).
 - View All.
- Main Content Area:**
 - Filtering: Search Within Results: 2 Selected.
 - Results: 93 Results, Sort: Relevance, View: Full Abstract.
 - Article Preview: Assay of Ochratoxin A in Wine and Beer by High-Pressure Liquid Chromatography Photodiode Array and Gas Chromatography Mass Selective Detection. By: Soleas, George J.; Yan, Joseph; Goldberg, David M. Journal of Agricultural and Food Chemistry (2001), 49(6), 2733-2740 | Language: English, Database: Caplus and MEDLINE | Analytical Methods.
 - Description: To routinely assay the concentrations of ochratoxin A (OTA) in wines and beers, two new methods were developed and evaluated. The first utilized solid-phase extraction on a C₁₈ cartridge to achieve a 100-fold sample concentration followed by high-performance liquid chromatography on a C₁₈ column with gradient elution and quantitation at 333 nm by means of a photodiode array detector. Positive confirmation can be carried out by purity and match-factor anal. as well as peak shift following esterification with BF₃. Total run time is 28 min. The limits of detection (LOD) and quantitation (LOQ) are 0.05 and 0.10 µg/L, resp. Recovery and imprecision ranged from 83 to 94% and from 4.0 to 8.9%, resp. With a throughput of 35 assays per working day, this method is ideal for routine OTA anal. It was used to survey the concentrations of OTA in 942 wines (2 of which gave values between 0.1 and 0.2 µg/L) and 107 beers (2 of which gave values between 0.05 and 0.1 µg/L). OTA was detected more frequently in red than white wines, with the highest incidence in red wines from Spain and Argentina. There was no association between OTA and country of origin or beverage type among the beers analyzed. The second method utilized gas chromatography, with mass selective detection monitoring eight specific ions, preceded by extraction in dichloromethane and derivatization with bis(trimethylsilyl)trifluoroacetamide. LOD and LOQ were 0.1 and 2 µg/L, resp.; recovery and imprecision were 69-75 and 9.0-11.1%, resp. The method is not suitable for routine quantitation but is potentially useful as a confirmatory tool for samples with OTA ≥ 0.1 µg/L.
 - Buttons: Full Text, Substance (1), Reactions (0), Citing (172), Citation Map.
 - Page Number: 2.

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

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

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

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

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

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

ANST Analytical Study

ANT	Analyte
AMX	Analytical Matrix
ARG	Analytical Reagent Use
ARU	Analytical Role, Unclassified

BIOL Biological Study

ADV	Adverse Effect, Including Toxicity
AGR	Agricultural Use
BAC	Biological Activity or Effector, Except Adverse (2)
BCP	Biochemical Process (3)
BMF	Bioindustrial Manufacture
BPN	Biosynthetic Preparation
BSU	Biological Study, Unclassified
BUU	Biological Use, Unclassified
COS	Cosmetic Use (3)
DGN	Diagnostic Use (3)
FFD	Food or Feed Use
NPO	Natural Product Occurrence (3)
PAC	Pharmacological Activity (3)
PKT	Pharmacokinetics (3)
THU	Therapeutic Use

CMBI Combinatorial Study (3)

FORM Formation, Nonpreparative

FMU	Formation, Unclassified
GFM	Geological or Astronomical Formation

NANO Nanomaterial (4)

OCCU Occurrence

GOC	Geological or Astronomical Occurrence
NPO	Natural Product Occurrence (3)
OCU	Occurrence, Unclassified
POL	Pollutant

PREP Preparation (5)

BMF	Bioindustrial Manufacture
BPN	Biosynthetic Preparation
BYP	Byproduct
IMF	Industrial Manufacture
PUR	Purification or Recovery
SPN	Synthetic Preparation

PROC Process

BCP	Biochemical Process (3)
GPR	Geological or Astronomical Process
PEP	Physical, Engineering, or Chemical Process
REM	Removal or Disposal

PRPH Prophetic Substance (7)

RACT	Reactant or Reagent (3,6)
RCT	Reactant (6)
RGT	Reagent (3)

USES Uses

AGR	Agricultural Use
ARG	Analytical Reagent Use
BUU	Biological Use, Unclassified
CAT	Catalyst Use
COS	Cosmetic Use (3)
DGN	Diagnostic Use (3)
FFD	Food or Feed Use
MOA	Modifier or Additive Use
NUU	Other Use, Unclassified (8)
POF	Polymer in Formulation
TEM	Technical or Engineered Material Use
THU	Therapeutic Use

Specific roles that are not associated with any super roles:

MSC	Miscellaneous
PRP	Properties

- (1) Super roles have 4-letter codes. Specific roles have 3-letter codes. Under each super role are listed the specific roles that are retrieved when you search that super role.
- (2) Used from CA Vol. 66 (1967) to Vol. 135 (2001).
- (3) Used starting with CA Vol. 136 (2002).
- (4) Used starting with CA Vol. 116 (1992).
- (5) The PREP super role has been added to records back to 1907.
- (6) Searching the RCT role retrieves references from CA Vol. 66 (1967) to the present. Searching the RACT super role retrieves references with RCT or RGT references starting with CA Vol. 136 (2002).
- (7) Used starting with records from 2003 to the present.
- (8) Starting in 2002, the searchable text for the NUU role changed from NONBIOLOGICAL USE, UNCLASSIFIED/RL to OTHER USE, UNCLASSIFIED/RL. Search NUU/RL to retrieve records from CA Vol. 66 (1967) to the present.

Note: The roles CPN, CPS, CRG, CRT, CST, CUS, DEV, DMA, EPR, MFM and PYP are no longer in use, but have been mapped to current roles. The roles BOC, BPR and PNU have been eliminated and are no longer searchable, but have been replaced by broader roles when appropriate.

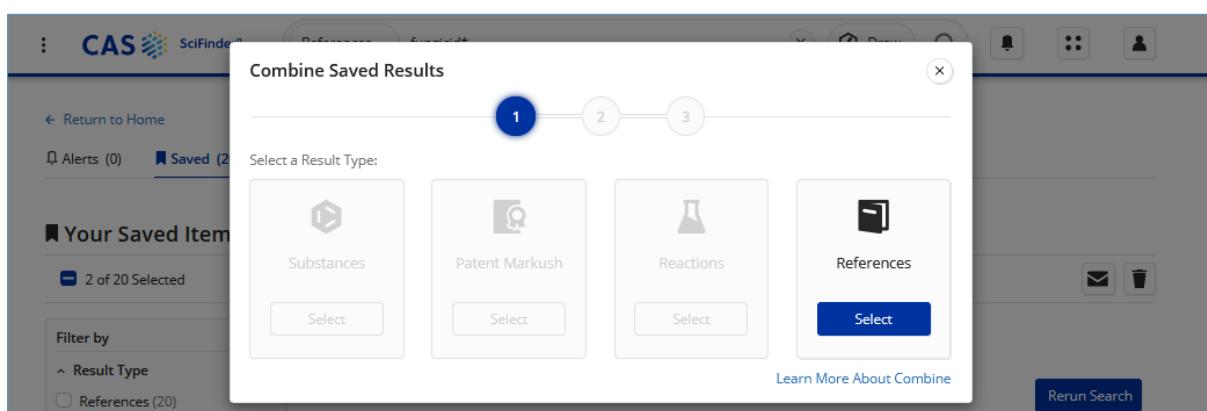
In der SciFinder Hilfe kann die exakte Definition jeder einzelnen Rolle nachgesehen werden:
<https://cas-product-help.zendesk.com/hc/en-us/articles/9946743065101-Advanced-Role-Descriptions>

8. Wie kann ich mit den Treffern weiter verfahren?

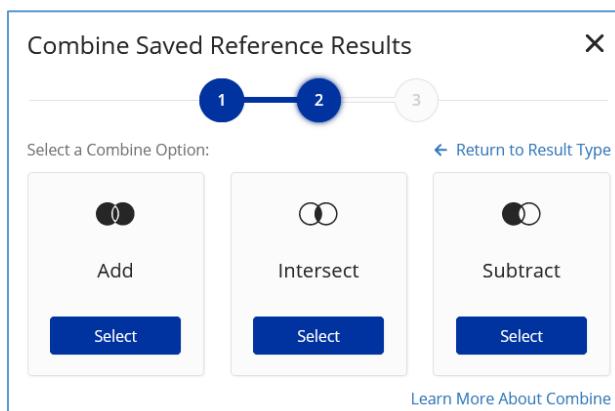
Combine, Speichern, Export, Zugang zum Volltext

8.1 „Combine“

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



- Es gibt **drei Kombinationsmöglichkeiten**:



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

8.1.1 „Combine“ direkt nach einer Recherche

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

The screenshot shows a search interface titled "References search for 4 Advanced Fields". At the top right, there is a "Combine" button (two overlapping circles icon) which is highlighted with a red box. Below the search bar, it says "112 Results". At the bottom, there are sorting options: "Sort: Publication Date: Newest" and "View: Full Abstract".

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

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



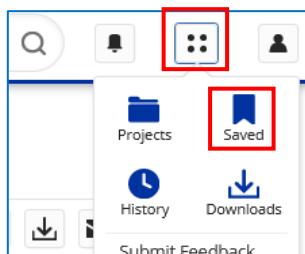
Beispiel „Intersect“:

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

The dialog box is titled "Combine Reference Results: Intersect". It says "Select Up to 4 Saved Items:" and shows two items: "Test Thalidomide" (unchecked) and "Merten Jena" (checked). It also shows "839 Saved Results" and "June 12, 2024" for the first item, and "Query" and "May 2, 2024" for the second item. A "View Results" button is at the bottom right.

„**View Results**“ öffnet dann die kombinierte Trefferliste.

8.1.2 „Combine“ von gespeicherten Antworten



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

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

The dialog box is titled "Combine Saved Reference Results: Add". It says "Select Up to 5 Saved Items:" and shows a list of saved items with checkboxes. Some items are checked: "snowy owl ohne Maskierung", "bubo scandiacus", "nyctea scandiaca", "snowy owl", and "OPE". It also shows "7 Saved Results" and "February 18, 2019". At the bottom are "View Results" and "Cancel" buttons.

The list is titled "Your Saved Items". It shows a filter section with "2 of 7 Selected" and "analog" checked. It lists items: "analog" (checked, "References | February 20, 2024, 3:31 PM analog") and "analogue" (unchecked, "References | February 20, 2024, 3:31 PM analogue"). At the bottom is a "Combine" button highlighted with a red box.

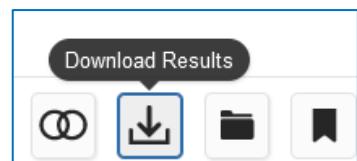
Beispiel: ADD

(mit OR verknüpfte Ergebnisse)

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

8.2 Exportieren und Speichern und von Ergebnissen, Erstellen von Alerts

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



Download Reference Results

File Type: PDF
Display: Result Summary
Select Quantity: All Results
File Name: Reference_20240611_2138
Include: Task History, Abstract
Download

Download Substance Results

File Type: PDF
Display: Result Summary
Select Quantity: All Results
File Name: Substance_20240611_2134
Include: Task History
Download

- Bei größeren Treffermengen werden bei „**Result Summary**“ die ersten 500 Dokumente heruntergeladen und im Detailformat („**Result Detail**“) die ersten 100.
- Mit „**Save**“ kann man Suchfragen bzw. deren Trefferlisten unter einem selbstgewählten Namen speichern (nötig für ein „**Combine**“ mehrerer Antworten, [s. Pkt. 8.1](#)).
- Beim Speichern der Treffer kann gleichzeitig ein „**Alert**“ initiiert werden.
- Man kann dabei auswählen, wann man benachrichtigt werden will: sofort, wenn es neue Treffer gibt („**As Available**“) oder lieber wöchentlich bzw. monatlich.
- Man bekommt dann zum gewünschten Zeitpunkt eine E-Mail und kann sich die Ergebnisse in SciFinder ansehen.
- Zum Initiiieren des Alerts muss der Button aktiviert werden. Voreingestellt ist „**No Alerts**“.

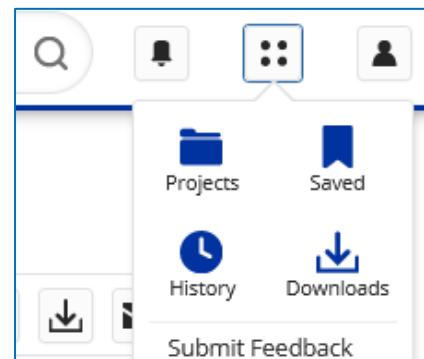
Save Options

Save and Alert

Save Results

Name: Glycol
Search Options: Selected Answers
Add Existing Tags (Optional): No tags defined
New Tag (Optional): glycol, Tag Color: Light Blue
Alerts: Frequency: As Available

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



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

<input type="checkbox"/>	File Name	Result Type	File Type	File Size	Expiration Date
<input type="checkbox"/>	Reference_20240611_Glycol.pdf	References	PDF	676 KB	July 11, 2024

8.3 Import von Ergebnissen aus SciFinder in EndNote

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

8.4 Wie komme ich zum Volltext?

- Dazu einfach den Button „**Full Text**“ anklicken.

[Raising a glass of red wine against cancer, or not?](#)

By: Frampton, Adam E; Stebbing, Justin
The Lancet. Oncology (2012), 13(7), 669-70 | Language: English, Database: MEDLINE

There is no abstract available for this document.

Full Text ▼ Substances (0) Reactions (0) Citing (1) Citation Map

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

[Home](#) [Journals](#) [Specialties](#) [The Lancet Clinic](#) [Global Health](#) [Multimedia](#) [Campaigns](#) [More](#) [Information for](#) [Submit a Paper](#)

THE LANCET
Oncology

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

All Content Advanced Search

Access provided by Jena University Friedrich Schiller

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

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 common between beer and wine are likely to vary. Similarly, or perhaps with pleasure, most doctors will defend the view that moderate wine is part of a healthy diet approach. Over the past decade, researchers have attempted to show the health benefits of drinking wine, particularly its effects on antioxidant and cardioprotective properties. So, what is the reality about red wine? Sir Alexander Fleming once proclaimed, "Wine cures, but wine makes people happy". Is this the entire of red wine's therapeutic repertoire?

The mystical properties of wine have inspired legends since the Neolithic period (5500-4500 BC). Archaeological expeditions unearthed

evidence for large-scale wine production in regions of the Caucasus Mountains, and subsequently in the northern Zagros mountains of Iran. In the 6th century BC, the Greeks were the first to fully domesticate the Eurasian grapevine (*Vitis vinifera* var. *vinifera*) and were the first to produce wine. By this day, wine was a valuable trade commodity and the universal drug of the ancient world. Wine was a source of energy and was noted to be a social lubricant with psychotropic effects. Around 3100 BC, ancient Egyptians used wine to treat eye diseases and exotic, especially when dissolved in an alcohol solution such as Absinthe (absinthe). Many scholars believe that wine was the primary impetus for the development of western civilisation, because healthy individuals (even those who had lived in the wild) found that the increased human interaction led to enhanced mental function. As a result, culture can be traced linguistically: the word wine is derived from the Latin *vitis*, the Greek *vitos*, the Arabic *wāriq*, and the Hebrew *yayin*. The word wine comes from the name of Dionysus, the Greek god of wine, Dionysus (known as Bacchus in Roman mythology), who supposedly provided the ancient Greeks with the secret of

Article Options

PDF (95 KB)

Email Article

Add to My Reading List

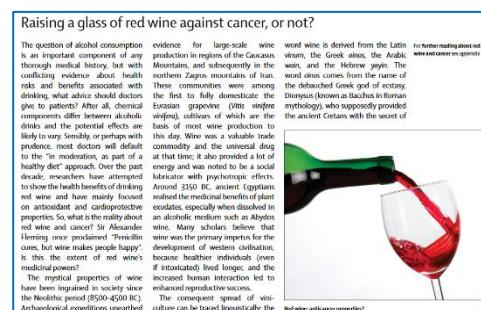
Export Citation

Create Citation Alert

Cited by in Scopus (1)

Request Permissions

Order Reprints
(100 minimum order)



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

CAS SciFinder

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

By: Frampton, Adam E; Stebbing, Justin
The Lancet. Oncology (2012), 13(7), 669-70 | Language: English, Database: MEDLINE

In-house Resources

ThULB-LINKING
Elektronische Zeitschriftenbibliothek Regensburg (EZB)

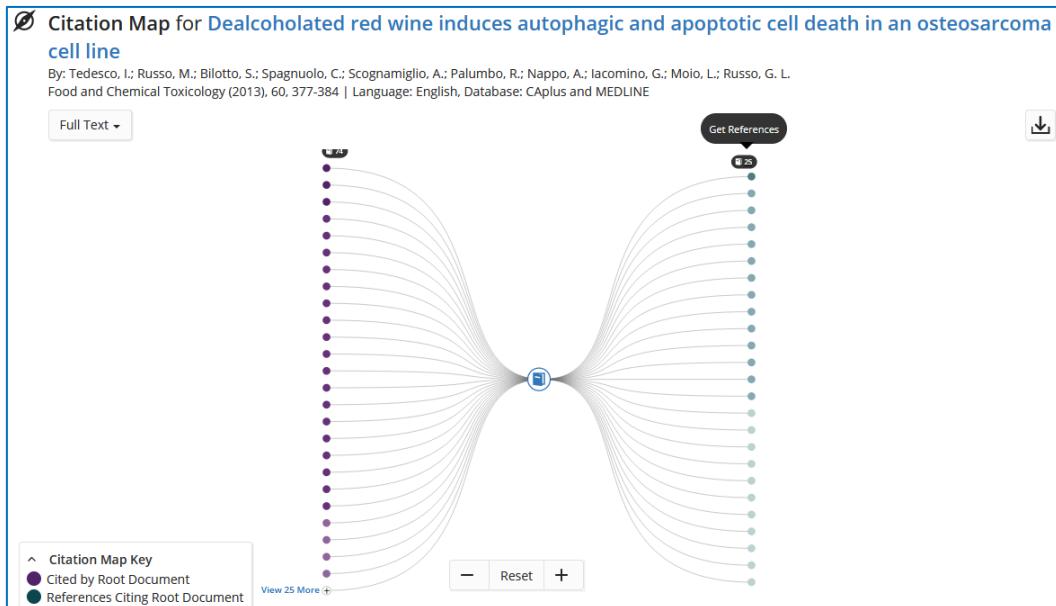
DOI

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

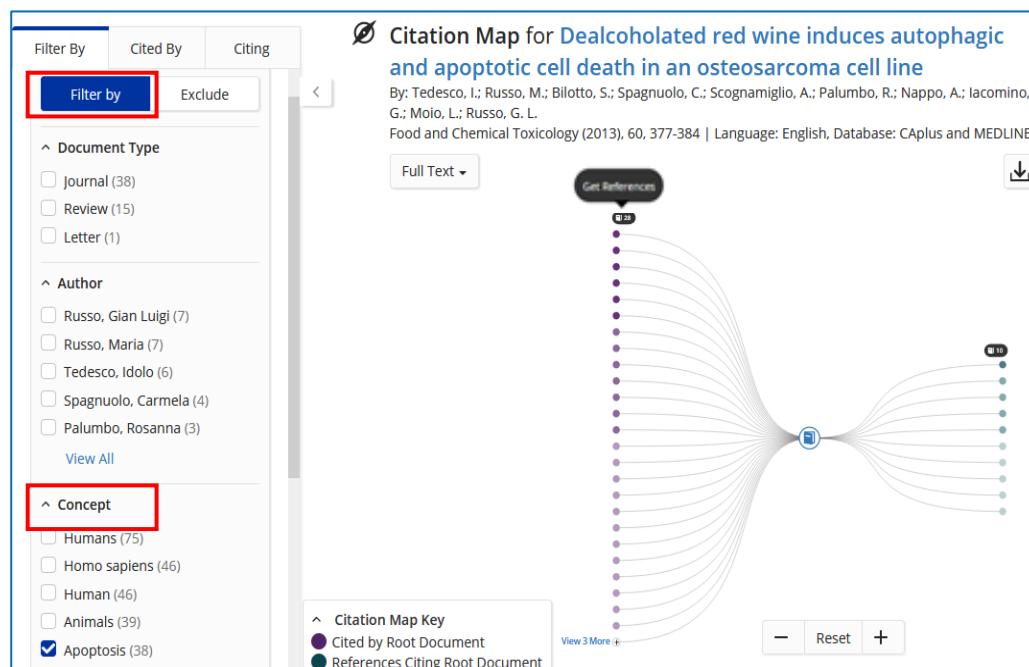
9. „Citation Map“

- Die „**Citation Map**“ ist eine übersichtliche Anzeige derjenigen Publikationen, die die aktuell betrachtete Publikation zitieren bzw. die in dieser Publikation zitiert werden.

Hinweis: In der „**Citation Map**“ erscheinen nur die in SciFinder verfügbaren Publikationen, d.h. hier verlinkte Datenbankrecords.



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



10. „History“

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

The screenshot shows the SciFinder search interface. At the top, there are tabs for All, Substances, Reactions, References (which is selected), and Suppliers. Below the tabs is a search bar with the placeholder "Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI." An "Author Name" dropdown is set to "Author Name" with the input "Enter last name, first name middle name." A search example "Example: Schubert, J A" is shown. Below the search bar is a button "+ Add Advanced Search Field".

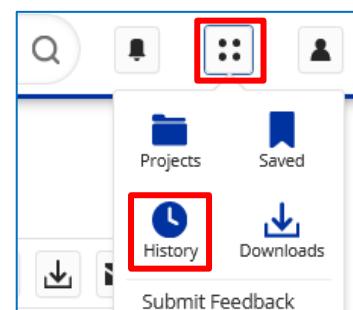
Underneath the search bar are four featured search modules: "Prior Art Discovery" (discovery platform for patents and non-patent literature using advanced search technologies), "Patent Markush" (search Patent Markush by structure and view associated references), "Biotransformation Analysis" (analyze reaction plans with conditions, yields, catalysts, and experimental procedures), and "Search CAS Lexicon" (find powerful searches using CAS nomenclature, chemical elements, and taxonomy). A "View All" link is also present.

The main area is titled "Recent Search History" and shows search entries from June 11, 2024:

- References at 11:13 PM: "raising a glass of red wine" cancer (1 Result). This entry has a "Rerun Search" and "Edit Search" button, both highlighted with a red box.
- Substances at 8:57 PM: Diethylene glycol (179 Results). This entry has a "Rerun Search" and "Edit Search" button.
- References at 8:16 PM: Author Name: koth, e (271 Results). This entry has a "Rerun Search" and "Edit Search" button.

A "View All Search History" link is located at the bottom right of the history section.

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



- Die Such-Historie kann man herunterladen oder löschen.

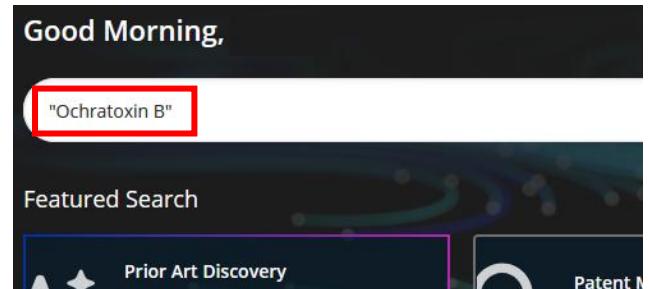
Die exportierte History ist eine gute Grundlage für die Erstellung eines Recherche-protokolls.

The screenshot shows a search history interface with a red box highlighting the title "Your Search History". On the left, there's a sidebar with "Filter by" options like "Result Type" (All, Sequences, Patent Markush, etc.) and "Date" (calendar from January 2024). The main area lists two entries:

- January 26, 2024**:
Type: References
Time: 10:50 AM
Search ID: 2017:112799 (1 Result)
Keywords: CAS Lexicon (20 Results), Red wine, AND Heart disease
Buttons: Rerun Search, Edit Search
- January 25, 2024**:
Type: Reactions
Time: 2:30 PM
Search ID: As Drawn (18K) Substructure (1.7M)
Chemical Structure: A benzene ring fused with another benzene ring, labeled 'Q' at the bottom right.
Buttons: Rerun Search, Edit Search

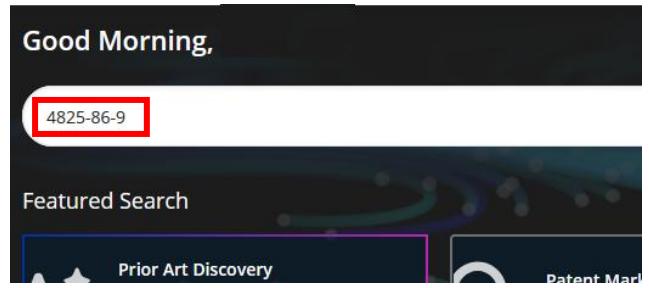
11. Suche nach Substanzen

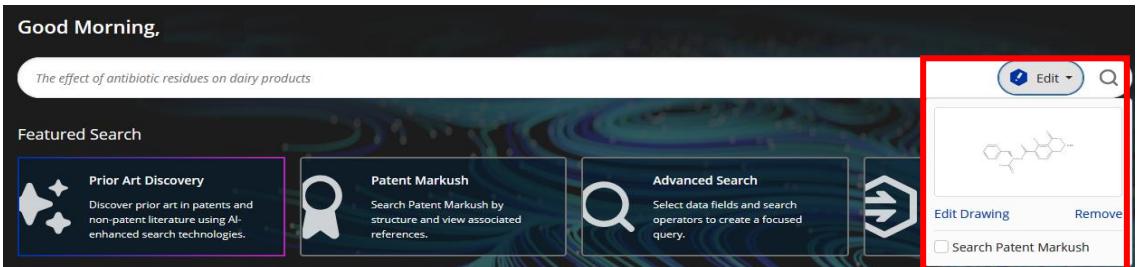
- Eine Suche nach chemischen Verbindungen kann direkt vom Startbildschirm aus begonnen werden. ([s. auch Pkt. 11.1](#))
- Die Verbindungen können dabei entweder über eine
 - **Textsuche mit dem Substanznamen**



bzw. mit der

- CAS-Registry-Nummer
- oder auch über eine **Struktursuche** ([s. auch Pkt. 11.3](#)) gefunden werden.





- Eine Identifizierung chemischer Substanzen über bestimmte Eigenschaften, wie z.B. Schmelz- und Siedepunkte, Dichte oder auch über Spektren ist mit der „**Advanced Search**“ möglich ([s. auch Pkt. 11.4](#)).

11.1 Wie suche ich nach Substanzen im Startbildschirm?

- Wird im Suchfeld des Startbildschirms ein Substanzname oder eine CAS-Registry-Nummer eingegeben bzw. über „*Draw*“ eine Verbindung gezeichnet, wird parallel
 - in der Substanzdatenbank,
 - bei den Reaktionen,
 - bei den Lieferanten und
 - nach Publikationen zu dieser Substanz gesucht.
- Substanzen, deren Name aus mehr als einem Wort besteht, sucht man dabei als Phrase mit Anführungszeichen, z.B. „Ochratoxin B“.

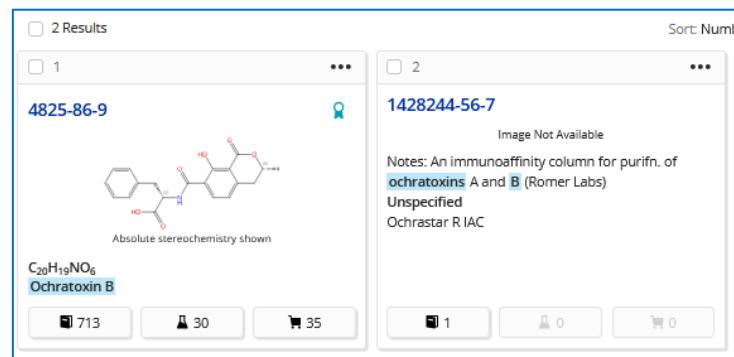
- Werden sowohl Text- als auch Strukturfragmente für die Suche eingegeben, wird der Textteil bei der Suche nach Reaktionen bzw. Lieferanten dieser chemischen Verbindung ignoriert.

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

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

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

Dann werden alle bei dieser Suche gefundenen chemischen Verbindungen angezeigt.



- Eine **Reaktion** und einige **Textstellen** zu Ochratoxin B werden im Ergebnisbildschirm ebenfalls angezeigt.

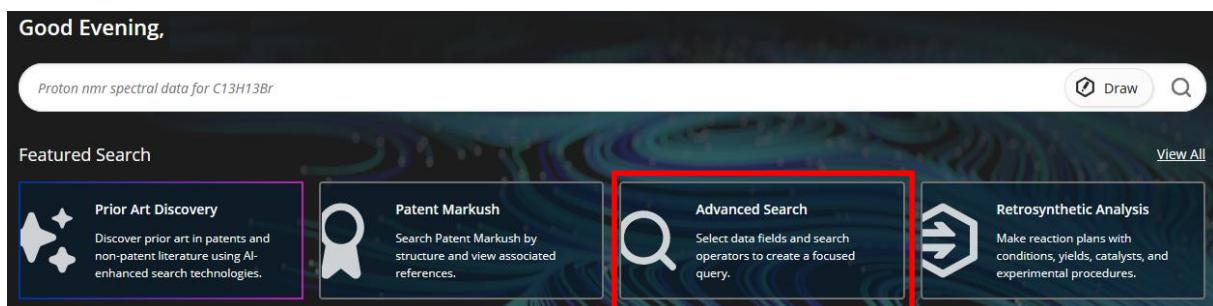
Möchte man sich alle Reaktionen, an denen Ochratoxin B als Reaktant bzw. als Produkt beteiligt ist, ansehen, klickt man auf „**View All Reactions**“.

Das gilt auch für die gefundenen Textstellen-nachweise bzw. Patente, in denen Ochratoxin B vorkommt („**View All References**“).

- Die Lieferanten von Ochratoxin B werden beim Klick auf „**Suppliers**“ im Trefferbildschirm angezeigt. (s. auch Pkt. 11.8)

11.2 Wie suche ich nach Substanzen über die „Advanced Search“?

- Um zur „Advanced Search“ zu gelangen, wird der entsprechende Button auf dem Startbildschirm angeklickt.



- Die erweiterte Suche ermöglicht es, Fragestellungen in spezifischen Feldern zu recherchieren, z.B. Suche nach bestimmten Autoren, Suche nur im Titelfeld bzw. bei den Schlagworten. ([s. auch Pkt. 5.5.](#))
- Bei der erweiterten Substanzrecherche kann neben der Suche mit dem chemischen **Namen**, der **CAS-Registry-Nummer** oder der **Summenformel** eine explizite Suche nach chemischen Verbindungen mit speziellen **physikochemischen Eigenschaften** oder auch das Finden von Substanzen über ihre **NMR-Spektren** erfolgen.
- Für die Verbindungssuche wird dazu auf der Startseite der „Advanced Search“ → „Substances“ angeklickt.
- Dann können Felder und bestimmte Eigenschaften für die Suche ausgewählt werden. Bei Einträgen mit einem Pfeil öffnet sich ein Untermenü, hier ein Beispiel für **Chemical Properties**.

The screenshot shows the "Advanced Search" interface for "Substances". A red box highlights the "Advanced Search" header. Below it, a blue box highlights the "Substances" tab. On the left, a sidebar titled "Chemical Properties" lists various properties with dropdown menus: Molecular Formula, CAS Registry Number, Chemical Identifier, Document Identifier, Patent Identifier, Experimental Spectra, Life Science Data, Biological, and a plus sign for adding more. A red box highlights the "Chemical Properties" tab. The main search area shows fields for "Molecular Formula" (with examples like C6H6, (C8H8)x, C22H26CuN2O5.C2H3N), "CAS Registry Number" (with examples like 57-88-5, 101600), "Chemical Identifier" (with examples like 120-12-7, 71432), and "Experimental Spectra" (with examples like 2-(2,6-Dioxo-3-piperidinyl)-1H-isindole-1,3(2H)-dione, Polypropylene). At the bottom right, a blue box contains the text "Einige mögliche Eigenschaften bei der Suche nach Substanzen".

11.2.1 Wie suche ich Substanzen mit ihrem Namen über die „Advanced Search“?

- Wenn mit dem Namen gesucht werden soll, ist es hilfreich, möglichst viele verschiedene **Namensvarianten** auszuprobieren (z.B. Trivial- und Handelsnamen), denn spezifische Substanzen werden nur gefunden, wenn der Name genauso, wie er eingegeben wird, in der Datenbank enthalten ist. Die verschiedenen Namen trennt man bei der Eingabe mit Leerzeichen, Komma oder Semikolon.

The screenshot shows the 'Substances' tab selected in the header. The search bar contains the query 'Rhovanil Vanillaldehyde "Vanillic aldehyde"'. Below the search bar, there are two main search modes: 'OR' and 'AND'. Under 'OR', the fields 'Chemical Name' and 'Vanillin' are filled. Under 'AND', there are fields for 'Molecular Formula', 'CAS Registry Number', and 'Chemical Identifier', each with a 'Chemical Name' button next to it. A red box highlights the search bar and the 'Chemical Name' field under 'OR'.

- Bestehen die Substanznamen aus mehreren Teilen, muss die gesamte **Phrase in Anführungszeichen** gesetzt werden, z.B. "Ochratoxin B" bzw. "Vanillic aldehyde"
- Eine Namenssuche ist auch mit **Wortende-Maskierung** mittels * möglich. Das * dient hier zur Maskierung des Wortendes, d.h. es ist egal, welche Schriftzeichen nach **Vanillin** noch kommen → mit dem Suchterm **Vanillin*** werden alle chemischen Verbindungen gefunden, deren Name mit Vanillin... beginnt (422 Treffer).

Treffermenge:

Außer dem Substanzeintrag des eigentlichen Vanillins werden auch Verbindungen gefunden, die Vanillin im Namen enthalten.

Substances search for "vanillin*"

All **Substances** Reactions References Suppliers Patent Markush

View Related Results

Filter Results

Behavior

Filter by Exclude

Search Within Results

Reaction Role

- Product (185)
- Reactant (108)
- Reagent (9)
- Catalyst (8)
- Solvent (2)

Reference Role

- Preparation (333)

422 Results

Result ID	CAS Registry Number	Chemical Structure	Chemical Name	Count	Views	Downloads
1	121-33-5		C ₈ H ₈ O ₃ Vanillin	50K	21K	150
2	120-14-9		C ₉ H ₁₀ O ₃ Vanillin methyl ether	18K	21K	
4	498-00-0					
5	2426-87-1					

11.2.2 Wie suche ich Substanzen mit der Chemical Abstracts Registry Number (CAS-RN)

- Was ist die CAS-Registry-Nummer?

- Internationaler Bezeichnungsstandard für chemische Substanzen.
 - Registrierungsnummer, die jede Chemikalie bei Aufnahme in die CAS-Substanzdatenbank erhält.
 - Ermöglicht eine eindeutige Identifizierung, da jede Nummer nur für die entsprechende Substanz gilt.
 - CAS-RN werden in vielen Zusammenhängen genutzt, auch in Chemikalienkatalogen oder bei Wikipedia.
 - Unterschiedliche Varianten einer Substanz, z.B. Salze, Isotope, Enantiomere, Radikale haben je eine eigene CAS-RN.
 - Wenn widersprüchliche Auflistungen zu Fragen nach der korrekten CAS-RN führen, ist SciFinder bzw. Chemical Abstract Service CAS als Quelle immer vorzuziehen.
- CAS ist die Organisation, die die CAS-RN vergibt und u.a. die SciFinder-Datenbank produziert.

- Beispiel:

Suche nach Vanillin mit der CAS-Registry-Nummer

Advanced Search

Select a search type, and then add multiple search fields to build a query. [?](#)

Substances References [Clear All](#)

121-33-5

- Das Ergebnis enthält nur einen Eintrag, das Vanillin. Es ist somit eindeutiger als die Ergebnismenge bei der Suche mit dem chemischen Namen als Suchterm.

Substances search for "121-33-5"

All **Substances** Reactions References Suppliers Patent Markush

[View Related Results](#)

Filter Results

Behavior

Filter by Exclude

Search Within Results

Reaction Role

Product (1) Reactant (1) Reagent (1) Catalyst (1) Calorant (1)

1 Result

121-33-5

C₈H₈O₃
Vanillin

50K 21K 150

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

- Kennen Sie die CAS-Registry-Nummer der gesuchten Verbindung nicht und wird der eingegebene Name nicht gefunden, so kann unter Umständen eine Suche mit der Summenformel versucht werden (s. nächste Seite). Führt auch das nicht zum Erfolg muss

die Substanz über das Zeichnen der Struktur gesucht werden ([s. Pkt. 11.3](#)).

11.2.3 Wie suche ich Substanzen mit der Summenformel?

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

The screenshot shows the 'Advanced Search' interface. The 'Substances' tab is highlighted with a red box. Below it, there's a search bar with 'Molecular Formula' dropdown set to 'C9H8O4'. A red box also highlights this input field.

- Bei rein organischen Substanzen ist eine Suche mit der Summenformel alleine aufgrund der Vielzahl der möglichen Isomeren meist wenig sinnvoll.

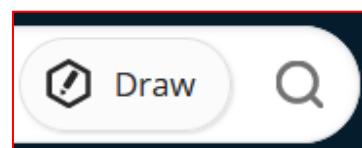
The screenshot shows the results of a search for 'C9H8O4'. It displays two entries: '50-78-2' (Aspirin) and '331-39-5' (Caffeic acid). A red box highlights the total result count '1,121 Results'.

- Erfolgversprechender wäre in dem Fall eine kombinierte Suche mit Namensteilen oder mit Strukturfragmenten, die die Treffermenge drastisch reduziert: von 1121 auf 7

The screenshot shows the results of a combined search for 'C9H8O4 AND pury*'. It displays two entries: '156-39-8' (Pyruvic acid, (p-hydroxyphenyl)-) and '4607-41-4' (Pyruvic acid, (m-l)). A red box highlights the result count '7 Results'.

11.3 Wie suche ich nach Substanzen über die Struktur?

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



The screenshot shows the CAS Draw software interface with several features highlighted:

- Upload von gespeicherten Strukturen, auch Download von gezeichneten Verbindungen** (highlighted in purple) points to the "Import" and "Export" buttons in the toolbar.
- Wahl des Zeichenprogramms: CAS DRAW bzw. ChemDoodle** (highlighted in green) points to the "CAS Draw" dropdown menu.
- Eingabe von InChi, CAS-Nummer bzw. Smiles, um die Struktur zu erstellen** (highlighted in red) points to the input field labeled "Enter a CAS Registry Number, SMILES, or InChI".
- Tastaturkürzel zum schnelleren Zeichnen** (highlighted in blue) points to the keyboard icon in the toolbar.
- Wichtige Atome** (highlighted in blue) points to the periodic table on the right side of the interface.
- Bindungstypen auswählen** (highlighted in blue) points to the bond type selection area.
- Ringe zeichnen, auch mit variabler Größe** (highlighted in blue) points to the ring drawing tools.

- Hinweis: Dieses Tutorial erläutert nur das Zeichnen mit „CAS Draw“. Informationen zur Nutzung von „ChemDoodle“ findet man unter <https://www.chemdoodle.com>.

11.4 Hinweise für das Zeichnen von chemischen Strukturen

- Beim **Shortcut-Button (Et)** finden Sie COOH, NH₂ ...).

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



gängige Gruppen (OMe, Ph,

Shortcuts	
CH	CH ₂
Me	OMe
Et	OEt
Pr-n	Pr-i
OPr-n	OPr-i
Bu-n	Bu-i
Bu-s	Bu-t
Bu-U	OBu-U
OBu-I	OBu-s
OBu-t	
Ph	OPh
c-C ₆ H ₅	m-C ₆ H ₅
p-C ₆ H ₅	CF ₃
CCl ₃	CCl ₂
ClBr	ClI
CHO	CN
ClO ₂ CH ₃	COH
COOH	COSH
COSH	CS ₂
CS ₂	CSHH
NH	NH ₂
NH ₂	NH ₃
NO ₂	OH
OPO ₃ H ₂	OSO ₃ H ₂
PO ₃ H ₂	SH
SO ₃ H ₂	SO ₂ H ₂
Bn	BOC
Bz	Cbz
DMT	Fmoc
Lev	MMT
MMT	Ms
Ms	
Pfp	Piv
PMB	TBDMS
TBDMS	Tf
Tf	TMS
TMS	Tos
Tos	Trityl

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

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



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

R-Group Definitions

R1:

Atoms

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

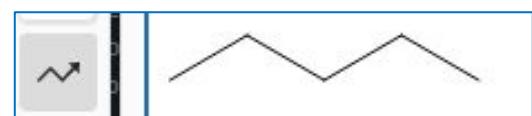
*Lanthanides: La Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu
**Actinides: Ac Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No Lr
Isotopes: D T

Variables

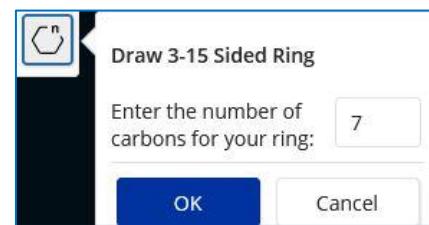


Sollen an einer Stelle Ihrer Struktur mehrere Elemente oder Gruppen möglich sein, z.B. C, N, P bzw. S, dann definieren Sie **R-Gruppen** mit dem **R-Button**. Es erscheint ein Fenster, in dem Sie Atome, Shortcuts und/oder Variable auswählen können. Es ist auch möglich, eigene Fragmente zu zeichnen und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

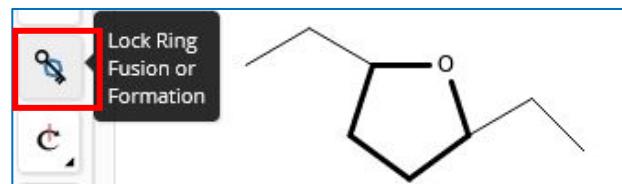
- Wird eine (längere) **C-Kette** gebraucht, so geht das hervorragend mit dem **Ketten-Tool**. Klicken Sie auf die Stelle, an der die Kette beginnen soll, halten Sie dabei die linke Maustaste gedrückt und ziehen nach rechts bis die gewünschte Kettenlänge als Zahl neben dem Cursor erscheint.



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

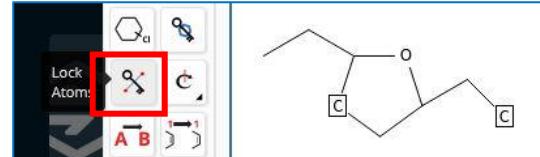


- Wollen Sie bei einer Struktursuche eine Ringbildung an einer gezeichneten „Kette“ von Atomen bzw. die Vergrößerung eines Ringsystems durch Annellierung von weiteren Ringen verhindern, benutzen Sie den **“Lock Rings”-Schlüssel**. Die für die Ringbildung gesperrte Bindung erscheint dabei fett.



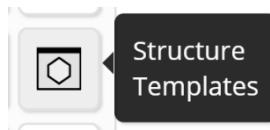
Suchstruktur				
Für Ringschluss bzw. Annellierung gesperrtes Fragment	keines	Methoxy-phenyl-gruppe	Tetra-Halogen-4-methylpentan-Fragment	beide Fragmente
Trefferzahl „Substructure“	2169	2107	164	142

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



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

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

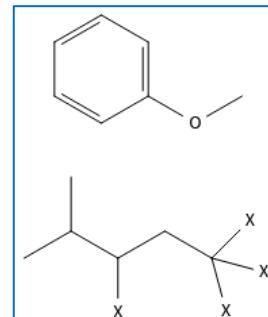


Templates

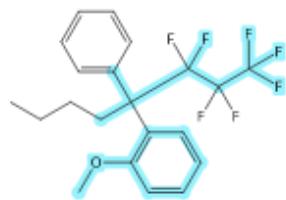
Search for a structure...

- > Amino Acid (25)
- > Bicarbocyclic (8)
- > Carbohydrate (7)
- > Coordination (14)
- > Cycloalkane (13)
- > Miscellaneous (6)
- > Monocarbocyclic (19)
- > N-containing (19)
- > NOS-containing (10)

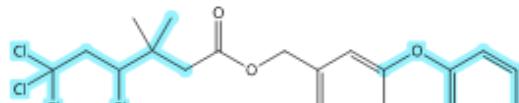
- Es ist möglich, in einer Struktursuche nach Verbindungen zu recherchieren, die **zwei oder mehr spezielle Fragmente** enthalten. Zeichnen Sie die Strukturfragmente, die das Molekül enthalten soll, einfach nebeneinander. Es werden alle Verbindungen gefunden, die diese Fragmente gleichzeitig ohne Überlappung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



1192046-88-0



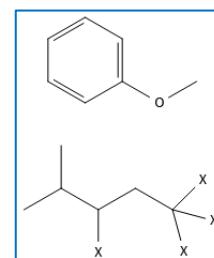
60066-52-6



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

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

- Mit den Filtermöglichkeiten auf der linken Seite der Trefferliste kann man große Treffermengen effektiv einengen.
Die fast 2200 Treffer nebenstehender Substanz-Struktursuche lassen sich nach vielen Kriterien einschränken.
- Bei der Substanzsuche mit einer **gezeichneten Struktur** werden u.a. automatisch **Stereoisomere, Tautomere** (incl. Keto-Enol), **geladene Verbindungen, Radikale, Isotopenverbindungen, (Homo-)Polymere** sowie **Metallverbindungen** (Salze bzw. Metallkomplexe) gefunden.



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

The screenshot shows the 'Structure Match' interface. It includes a main menu with 'As Drawn (0)', 'Substructure (2.193)', and 'Similarity (2.362)'. Below these is a button 'Analyze Structure Precision' which is highlighted with a red box. To the right, there is a panel titled 'Structure Precision' containing two items: 'Conventional Results (2.183)' and 'Tautomers and Zwitterions (10)'. An arrow points from the 'Analyze Structure Precision' button to the 'Structure Precision' panel.

- Weiterhin kann nach der Struktursuche gezielt ausgewählt werden,
 - aus welchen **Substanz-/Polymerklassen** die Treffer sein sollen,
 - ob **Stereoverbindungen**,
 - Mehrkomponenten-Verbindungen** (z.B. **Polymere, Gemische, Salze**),
 - Isotopenverbindungen** oder auch **Metallverbindungen**
 - bestimmte chemische **Elemente, funktionelle Gruppen** oder auch **aromatische Ringe** dabei sein sollen.
 - Weiterhin können die Treffer dahingehend eingeschränkt werden, ob **bestimmte physikalische, biologische, pharmazeutische Eigenschaften** bzw. auch **Spektren** experimentell bestimmt wurden.

The screenshot shows the 'Behavior' filter interface. It includes a 'Filter by' tab and a 'Search Within Results' section. The right side lists various filtering categories: Functional Group, Aromatic Rings, Substance Class, Polymer Class, Isotopes, Metals, Experimental Property, Experimental Spectrum, Bioactivity Indicator, Target Indicator, and Reference Availability.

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

Alle Hinweise zum Zeichnen, die im Abschnitt 11.6 beschrieben wurden, gelten auch bei der Einschränkung eines Treffersatzes mittels „**Search within Results**“.

The screenshot shows the 'Search Within Results' interface. It includes a description: 'Search for up to 3 structures within the result set.' and a 'Draw' button with a pencil icon.

11.6 Wie sieht die Trefferliste bei der Substanzsuche aus?

- Zur besseren Beurteilung der Treffer werden bei den gefundenen Substanzen die in der Suchfrage **gezeichneten Fragmente blau hervorgehoben**.
- Bei der Ansicht „View“ kann zwischen „**Partial**“ und „**Full**“ gewählt werden.
- Der „**Partial View**“ ist der voreingestellte Ansichtsmodus. Er ist kompakter und ermöglicht einen schnellen Überblick über eine größere Antwortmenge.
- Zu den ausführlichen Eigenschaftsinformationen jeder chemischen Verbindung der Trefferliste gelangt man nach Klick auf die jeweilige **CAS-RN-Nummer**.

Substances search for drawn structure

All Substances Reactions References Suppliers Patent Markush

View Related Results

Sort: Relevance View: Partial

Partial View

1 1192046-49-3
C₁₃H₁₃F₇O
Benzene, 1-(2,2,3,3,4,4-heptafluoro-1,1-dimethylbutyl)-4-methoxy-

2 158873-88-2
C₁₃H₇F₁₃O
[[3,3,4,4,5,5-Heptafluoro-2,2-bis(trifluoromethyl)pentyl]oxy]benzene

3 1810030-33-1
C₂₁H₂₁F₉O
Benzene, [4,4,5,5,6,6-heptafluoro-3-(3-phenoxypropyl)hexyl]-

4 130018-96-1

5 1192046-83-5

6 3026130-31-1

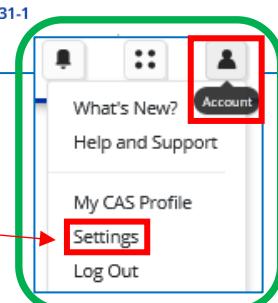
CAS-RN-Nummer

Partial View

Sort: Relevance View: Partial

Partial
Full

- Beim „**Full View**“ werden bis zu sechs ausgewählte Eigenschaften in der Ergebnisübersicht aufgelistet, z.B. Siede- bzw. Schmelzpunkt, Dichte u.a.. Die Auswahl der angezeigten Eigenschaften kann in den Einstellungen des eigenen Accounts unter „**Settings**“ erfolgen.
- Mit einem Klick auf eine Eigenschaft gelangt man zu deren experimentell bestimmten Werten inkl. Quellenangaben.



All Substances Reactions References Suppliers Patent Markush

View Related Results

Sort: Relevance View: Full

Full

1 1192046-49-3
C₁₃H₁₃F₇O
Benzene, 1-(2,2,3,3,4,4-heptafluoro-1,1-dimethylbutyl)-4-methoxy-

Properties	Value	Condition
Molecular Weight	318.23	-
Boiling Point (Predicted)	237.386±40.00 °C	Press: 760.00 Torr
Density (Predicted)	1.266±0.06 g/cm ³	Temp: 25 °C; Press: 760 Torr

Spectra

2 158873-88-2
C₁₃H₇F₁₃O
[[3,3,4,4,5,5-Heptafluoro-2,2-bis(trifluoromethyl)pentyl]oxy]benzene

Properties	Value	Condition
Molecular Weight	474.17	-

CAS-RN-Nummer

Sort: Relevance View: Full

Partial
Full

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

Weitere Möglichkeiten in der Gesamtliste der gefundenen Substanzen

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

Substances search for drawn structure

Displaydetails einstellen

Strukturmatch auswählen

Anklicken für Details

Sortierung ändern

Filter Results

Structure Match

As Drawn (0)

Substructure (2.193)

Similarity (2.362)

Analyze Structure Precision

Behavior

Filter by Exclude

Search Within Results

Reaction Role

Reference Role

Life Science Data

Commercial Availability

Number of Components

Molecular Weight

2,193 Results

1192046-49-3

C₁₃H₁₃F₇O

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

158873-88-2

C₁₃H₇F₁₃O

[[3,3,4,5,5,5-Heptafluoro-2,2-bis(trifluoromethyl)pentyl]oxy]benzene

1810030-33-1

C₂₁H₂₁F₇O

Benzene, [4,4,5,5,6,6,6-heptafluoro-3-(3-phenoxypro

130018-96-1

C₁₄H₉F₁₃O

1-[3,3,4,5,5,5-Heptafluoro-2,2-bis(trifluoromethyl)pentyl]-2-methoxybenzene

1192046

C₂₁H₂₁F₇O

1-[3,3,4,5,5,5-Heptafluoro-2,2-bis(trifluoromethyl)pentyl]-2-methoxybenzene

Get Substance Details

Start Life Science Data

Get Reactions (2)

Synthesize (2)

Start Retrosynthetic Analysis

Get References (2)

Get Suppliers (1)

View in CAS BioFinder

Edit Structure

Reset

Download

Auf Struktur klicken, um dieses Menü zu erhalten

Struktur im Editor öffnen

Download der Struktur

- Die Liste der gefundenen chemischen Substanzen kann vollständig oder in ausgewählten Teilen in verschiedenen Dateiformaten heruntergeladen werden. (s. auch [Pkt. 8.2](#)) Diese Dateien enthalten jeweils Links zu den Datensätzen im SciFinder.

Substances search for drawn structure

View Related Results

Sort: Relevance View: Full

Download Substance Results

File Type

PDF

Excel (.xlsx)

PDF

Rich Text (.rtf)

SDFile (.sdf)

2,193 Results

1192046-49-3

C₁₃H₁₃F₇O

Benzene, 1-(2,2,3,3,4,4,4-heptafluoro-1,1-dime

Properties	Value
Molecular Weight	318.23
Boiling Point (Predicted)	237.386±40.0
Density (Predicted)	1.266±0.06 g/

Spectra

11.7 Was sieht man in der Substanz-Detailanzeige?

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

CAS Registry Number: 90357-06-5

4.704 245 110 Links zu Referenzen, Reaktionen, Lieferanten

Molekularformel in Hill-Schreibweise: C₁₈H₁₄F₄N₂O₄S

Propanamide, N-[4-cyano-3-(trifluoromethyl)phenyl]-3-[(4-fluorophenyl)sulfonyl]-2-hydroxy-2-methyl- (9CI, ACI)

Gefährdungspotential

Properties	Value	Condition
Molecular Weight	430.38	-
Melting Point (Experimental)	191.88 °C (form II) (polymorph)	-
Boiling Point (Predicted)	650.308±55.00 °C	Press: 760.00 Torr
Density (Predicted)	1.522±0.10 g/cm ³	Temp: 25 °C; Press: 760 Torr
Refractive Index (Experimental)	1.577	-

Experiment Properties | Spectra

Experimentell bestimmte Eigenschaften und Spektren

Patents Claimed: Die (drei) neuesten Patente zu dieser Verbindung

Preparation of triazolo[4,5-b]pyrimidine derivatives as Werner Syndrome RecQ helicase (WRN) inhibitors
Role: Therapeutic Use
Patent Number: WO2025172934
Publication Date: 2025-08-21

Combined use of antibody-drug conjugate and androgen receptor antagonist
Role: Therapeutic Use
Patent Number: WO2025167929
Publication Date: 2025-08-14

Minoxidil-containing suspension, preparation method therefor, and use thereof
Systematischer Name
Publication Date: 2025-08-14

Zugang zu allen Patenten

View All Patents

Wesentliche Eigenschaften

Klappt alle verfügbaren Informationen aus

Expand All | Collapse All

Other Names and Identifiers

Experimental Properties

Experimental Spectra

Pharmacological Data

ADME

Toxicity

Predicted Properties

Predicted Spectra

Bioactivity Indicators

Target Indicators

Regulatory Information

GHS Hazard Statements

Additional Details

Other Names and Identifiers

Canonical SMILES: N#CC1=CC=C(C=C1C(F)(F)NC(=O)C(O)C)CS(=O)(=O)C2=CC=C(F)C=C2

InChI: InChI=1S/C18H14F4N2O4S/c1-17(26,10-29(27,28)14-6-3-12(19)4-7-14)16(25)24-13-5-2-11(9-23)15(8-13)18(20,21)22/h2-8,26H,10H2,1H3,(H,24,25)

InChI Key: LKjPYSCKBVHEWIU-UHFFFAOYSA-N

9 Other Names for this Substance

N-[4-Cyano-3-(trifluoromethyl)phenyl]-3-[(4-fluorophenyl)sulfonyl]-2-hydroxy-2-methylpropanamide (ACI)
Propanamide, N-[4-cyano-3-(trifluoromethyl)phenyl]-3-[(4-fluorophenyl)sulfonyl]-2-hydroxy-2-methyl-, (z)- (ZCI)
(z)-4'-Cyano-a,a-trifluoro-3-[(p-fluorophenyl)sulfonyl]-2-methyl-l-m-lactolamide
Bicalutamide
Casode
Casodex
Cosudex
ICI 176334
ZD 176334

Die aufgelisteten Namen beinhalten systematische Namen, Trivialbezeichnungen, Handelsnamen, InChI-Codes und SMILES. Die Synonyme werden jeweils aus den indexierten Publikationen entnommen.

Experimental Properties

Biological	Chemical	Lipinski	Optical and Scattering	Thermal
Property				
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion) - 3 Sources			Value	Condition
Half-Life (Biological) - 1 Source			See Full Text	(1-3) CAS
Toxic Equivalence Factors - 1 Source			See Full Text	(4) CAS
Sources			See Full Text	(5) CAS
(1) Cockshot, Ian D.; Clinical Pharmacokinetics, (2004), 43(13), 855-878, CAplus				
(2) Reiter, Edward O.; Journal of Pediatric Endocrinology & Metabolism, (2010), 23(10), 999-1009, CAplus				
(3) Foster, William R.; Prostate (Hoboken, NJ, United States), (2011), 71(5), 480-488, CAplus				
(4) Cockshot, Ian D.; Clinical Pharmacokinetics, (2004), 43(13), 855-878, CAplus				
(5) Sanseverino, John; Toxicological Sciences, (2009), 107(1), 122-134, CAplus				

Eigenschaften sind im verlinkten Volltext einsehbar oder werden direkt mit den gemessenen Werten angegeben.

Biological	Chemical	Lipinski	Optical and Scattering	Thermal
Property				
Glass Transition Temperature	54.9 °C			Condition
Glass Transition Temperature	54.9 °C			Source
Glass Transition Temperature	54.9 °C			-
Heat Capacity	1.70 J/g·K (liquid)			(1) CAS
Heat Capacity	1.70 J/g·K (liquid)			(2) CAS
Heat Capacity	1.23 J/g·K			(2) CAS
Heat Capacity	1.20 J/g·K (crystalline)			(2) CAS

Experimental Spectra

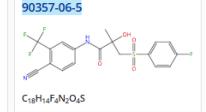
¹ H NMR	¹³ C NMR	Hetero NMR	IR	Mass	Raman	UV and Visible
View Fluorine-19 NMR Spectrum (Image Available)	View Fluorine-19 NMR Spectrum (Image Available)	View Fluorine-19 NMR Spectrum	View Fluorine-19 NMR Spectrum	NMR Spectrum - 1 Source	Solvent	Source
					Chloroform-d	(1) ACD
					Chloroform-d	(2) ACD
					DMSO-d ₆	(3) CAS
					Chloroform-d	(4) CAS
					-	(5) CAS

Sources

(1) Spectral data were obtained from Advanced Chem...
 (2) James, Kenneth D.; Synthesis, (2002)(7), 850-852, CA...
 (3) Lo, Pui Kin Tony; ACS Catalysis, (2019), 9(12), 10668-...
 (4) Bassetto, Marcella; European Journal of Medicinal C...
 (5) Ekwuribe, Nnochiri N.; US20020165406, A1, 2002, C...

[Fluorine-19 NMR Spectrum for 90357-06-5](#)

90357-06-5



C₂₁H₂₄F₄N₂O₅

CAS Name
Bicalutamide

Conditions

Working Frequency
282 MHz

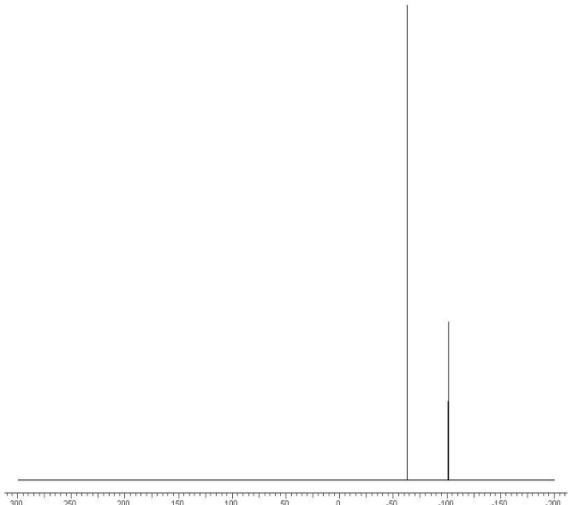
Solvent
Chloroform-d (865-49-6)

Spectrum Summary

Spectrum ID
12F_5_32.F

Peak Data
-62.7 (3P), -101.6 ppm

Source
Spectral data were obtained from Advanced Chemistry Development, Inc.



Auch Spektren sind im verlinkten Volltext einsehbar. Sie werden häufig auch direkt angezeigt (Image Available).

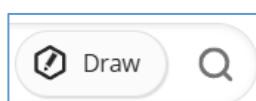
11.8 Wie finde ich Chemikalien-Lieferanten?

- Um nicht zeitaufwendig viele einzelne Internetseiten von Lieferanten im Netz durchsuchen zu müssen, kann die Anbietersuche direkt im SciFinder erfolgen.
- Hier werden weltweiten Chemikalienkataloge mit Millionen von Produkten globaler Lieferanten gebündelt und umfassende Produktdetails – von chemischen und Handelsnamen über CAS-Nummern und Strukturen bis hin zu Reinheit, Mengen, Preisen und Kontakten geliefert.
- Suchen Sie zunächst die benötigte chemische Verbindung, entweder
 - direkt vom **Startbildschirm** aus mit dem Namen oder der CAS-Registry-Nummer (s. Pkt. [11.1](#))

- oder mit der „**Advanced Search**“ im Modus „**Substances**“ ebenfalls mit dem Namen (s. Pkt. [11.2.1](#)) oder der CAS-Registry-Nummer (s. Pkt. [11.2.2](#))

- In der Trefferanzeige wird dann in der oberen Navigationsleiste auf „**Suppliers**“ geklickt bzw. auf das **Warenkorb-Icon** unterhalb der Strukturformel der Substanz. Es öffnet sich eine Liste, die diese chemische Verbindung zum Kauf anbieten (s. nächste Seite).

- Ist weder der exakte Name noch die CAS-RN für die Verbindung nicht bekannt, muss die Substanz gezeichnet werden (Hilfe (s. Pkt. [11.3](#))).



Dazu im Startbildschirm „**Draw**“ anklicken, im Zeichenbrett dann „**Suppliers**“ auswählen, die Verbindung zeichnen und suchen.

- Auch bei den **Detailanzeige** von Verbindungen kommt man über das **Warenkorb-Icon** zu den Anbietern der jeweiligen Substanz, sollte diese kommerziell verfügbar sein ([s. Pkt. 11.7](#)).
- Hier:** Lieferantenliste für Ochratoxin A, das über die CAS-Registry-Nummer 303-47-9 gesucht wurde: Man findet wurden **60 Angebote**.

Suppliers search for "303-47-9"

All Substances Reactions References Suppliers Patent Markush

Filter Results Behavior

60 Results

Cayman Chemical Catalog

Substance	Purity	Quantity Information	Availability	Ordering
303-47-9 Ochratoxin A	95-98%	1 mg, USD 65.00 5 mg, USD 260.00 10 mg, USD 488.00 Screening	Maintained in stock Ships within 1 week United States	Order From Supplier Order Number

Sort: Relevance

Relevance
Price: Low to High
Price: High to Low
Supplier: A to Z
Supplier: Z to A
Ships Within
Purity

abcr GmbH Product List

Substance	Purity	Quantity Information	Availability	Ordering
303-47-9 Ochratoxin A	≥99%	Product Information 5 mg, EUR 577.70	Typically in stock Ships within 1 week Germany United States	Order Number: AB181183

abcr GmbH Product List

abcr GmbH Product List

Supplier Contact Information

Web	https://www.abcr.de
Order	Product Information
Email	info@abcr.de
Phone	++49-(0)721-95061-0
Fax	++49-(0)721-95061-80

Address

abcr GmbH
Im Schleiert 10
Karlsruhe, D-76187
Germany

Products abcr Syntheses Services Cooperation About us

AB181183 | CAS 303-47-9
Ochratoxin A, 99%.

Article ID / CAS / Formula / Description / MDL

Structure Search

Chemical Structure:

Ein Klick auf den Firmennamen öffnet den detaillierten Eintrag des Lieferanten. Kontaktinfos und ein direkter Link zur Bestellseite („Order“) ermöglichen einen

303-47-9 Ochratoxin A

- Hat man zu viele Anbieter gefunden, kann die Menge über „**Filter by/Exclude**“ vielfältig eingeschränkt werden:

Filter Results Behavior

Filter by Exclude

Preferred Suppliers

No Preference (44)

Supplier

LGC USA Product List (11)
LGC Product List (10)
KANTO CHEMICAL (6)
Ambinter Building Blocks Library (2)
FUJIFILM Wako Chemicals Europe GmbH Product List (2)

View All

Purity

≥99% (1)
95-98% (10)
90-94% (3)

Quantity

Milligrams (11)
Grams (3)
Kilograms or greater (2)
Bulk (2)
Screening (1)

Stock Status

Maintained in stock (13)
Typically in stock (13)
Intermittently available (4)
Synthesis on demand (3)

Order From Supplier

Link Available (16)

Country/Region

United States (22)
Japan (14)
United Kingdom (10)
Germany (9)
France (3)

View All

12. Wie suche ich nach chemischen Reaktionen?

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

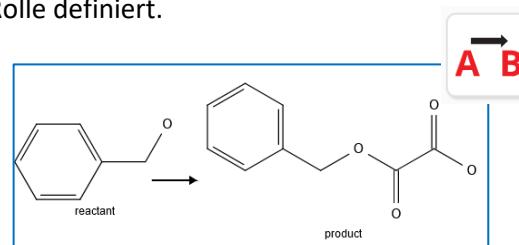
Im SciFinder-Startbildschirm wird „**Reactions**“ als Suchmodus ausgewählt:

The screenshot shows the SciFinder search interface. At the top, there are tabs for 'All', 'Substances', and 'Reactions'. The 'Reactions' tab is highlighted with a red box. Below the tabs is a search bar containing the placeholder text 'Search by CAS Reaction Number, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI.' To the right of the search bar are three buttons: 'Draw', 'Search', and a magnifying glass icon.

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

The first screenshot shows the search bar with the text "Ochratoxin A" entered. The second screenshot shows the search bar with the text "161337-67-3" entered. Both screenshots show the 'Reactions' tab selected at the top.

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



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

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

The screenshot shows the Reaxys search interface. The search bar at the top contains the query "synthesis of 35448-14-7 from 'Benzyl alcohol'". Below the search bar, the results are displayed under the heading "Reactions search for 'synthesis of 35448-14-7 from 'benzyl alcohol'''". The results table has two columns: "Rolle" (Role) and "Präposition / Begleitworte" (Preposition / Companion words). The results are grouped by scheme, with Scheme 1 showing one reaction step: benzyl alcohol reacting with chloroacetyl chloride to form 1-(chloromethyl)-2-hydroxypropan-1-ol.

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

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

The screenshot shows the Reaxys search interface. The search bar at the top contains the query "synthesis of aldehydes catalyzed by palladium in alcohols". Below the search bar, the results are displayed under the heading "Reactions search for 'synthesis of aldehydes catalyzed by palladium in alcohols'". The results table has two columns: "Rolle" (Role) and "Präposition / Begleitworte" (Preposition / Companion words).

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

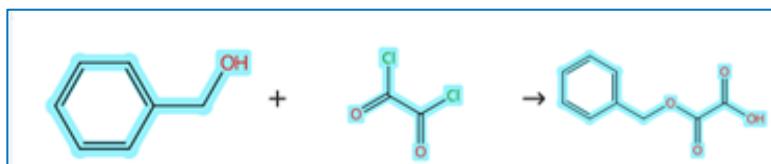
- Es ist möglich Namensreaktionen oder spezifische Transformationen in eine Textsuche zu integrieren.

The screenshot shows the Reaxys search interface. The search bar at the top contains the query "suzuki coupling reaction of p-Bromoacetophenone". Below the search bar, the results are displayed under the heading "Reactions search for 'suzuki coupling reaction of p-bromoacetophenone'". The results table has two columns: "Rolle" (Role) and "Präposition / Begleitworte" (Preposition / Companion words). The results are grouped by transformation, with the first result being the "Coupling of Aryl Compounds with Arylboronic Acid Derivatives/ Suzuki Coupling".

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

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

- Beispielsuche mit 137 Treffern (Substruktur)
- Oben in der Trefferliste werden Möglichkeiten zur Gruppierung und Sortierung der Ergebnisse angeboten.



Search bar: Structure Match, As Drawn (3), Substructure (137). Results: 137 Results, Scheme 1 (2 Reactions). Group: By Scheme, Sort: Number of Steps: Ascending, View: Collapsed. Steps: 1 Yield: 82-93%.

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

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

Group: By Scheme, Sort: Number of Steps: Ascending, View: Collapsed. Options: Relevance, Publication Date: Newest, Publication Date: Oldest, Yield, Number of Steps: Ascending, Number of Steps: Descending. A green box highlights the 'View' dropdown set to 'Collapsed'. An arrow points from the 'View' dropdown to the 'Expanded' option in the list below.

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

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

Scheme 1 (2 Reactions): 4-hydroxyacetophenone + malonoyl chloride → product. Suppliers: (150), (74), (20). Step: 1 Yield: 82-93%. Details: 31-354-CAS-3495377, 1.1 Solvents: Chloroform- δ , 0.5 h, rt; 1.2 Reagents: Water, 16 h, rt. Catalytic Phosphorus(V)-Mediated Nucleophilic Addition-Elimination Reactions: Development of a Catalytic Reaction. By: Denton, Ross M.; et al. Journal of Organic Chemistry (2011), 76(16), 6352-6358. Experimental Protocols: Full Text.

Scheme 6 (1 Reaction): 4-hydroxyacetophenone + malonoyl chloride → product. Suppliers: (85), (74). Step: 1 Yield: 80%. Details: 31-354-CAS-19362385, 1.1 Solvents: Diethyl ether, 0 °C; 0 °C → rt; 5 h, rt; rt → 0 °C; 1.2 Solvents: Water, 1 h, rt. Total Synthesis of Emmyguacyins A and B, Potent Inhibitors of Influenza Virus. By: Jana, Santanu; et al. Organic Letters (2018), 20(21), 6938-6942. Experimental Protocols: Full Text.

Scheme 7 (2 Reactions): 4-hydroxyacetophenone + malonoyl chloride → product. Suppliers: (150), (74), (47). Step: 1 Yield: 79%.

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

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

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

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

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

Group: By Document Sort: Number of Steps: Ascending

Catalytic Phosphorus(V)-Mediated Nucleophilic Substitution Reactions: Development of a Catalytic Appel Reaction

By: Denton, Ross M.; An, Jie; Adeniran, Beatrice; Blake, Alexander J.; Lewis, William; et al
Journal of Organic Chemistry (2011), 76(16), 6749-6767 | Language: English. Database: Cplus and MEDLINE

Relevance
Publication Date: Newest
Publication Date: Oldest
Yield
Number of Steps: Ascending
Number of Steps: Descending

137 Results Group: By Document Sort: Relevance View: Collapsed

Catalytic Phosphorus(V)-Mediated Nucleophilic Substitution Reactions: Development of a Catalytic Appel Reaction

By: Denton, Ross M.; An, Jie; Adeniran, Beatrice; Blake, Alexander J.; Lewis, William; et al
Journal of Organic Chemistry (2011), 76(16), 6749-6767 | Language: English. Database: Cplus and MEDLINE

Full Text **View 4 Related Reactions**

c1ccccc1CC(O) + CC(Cl)(Cl)C(=O)C(=O) >> c1ccccc1CC(O)C(=O)C(Cl)(Cl)C(=O)O

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

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

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

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

Group: By Transformation Sort: Reaction Count: Descending

Acyl Halides and Analogs Reactions

Reaction Count: Descending
Reaction Count: Ascending
Transformation Name: A to Z
Transformation Name: Z to A

137 Results Group: By Transformation Sort: Reaction Count: Descending

Alcoholysis of Acyl Halides and Analogs
View 57 Related Reactions

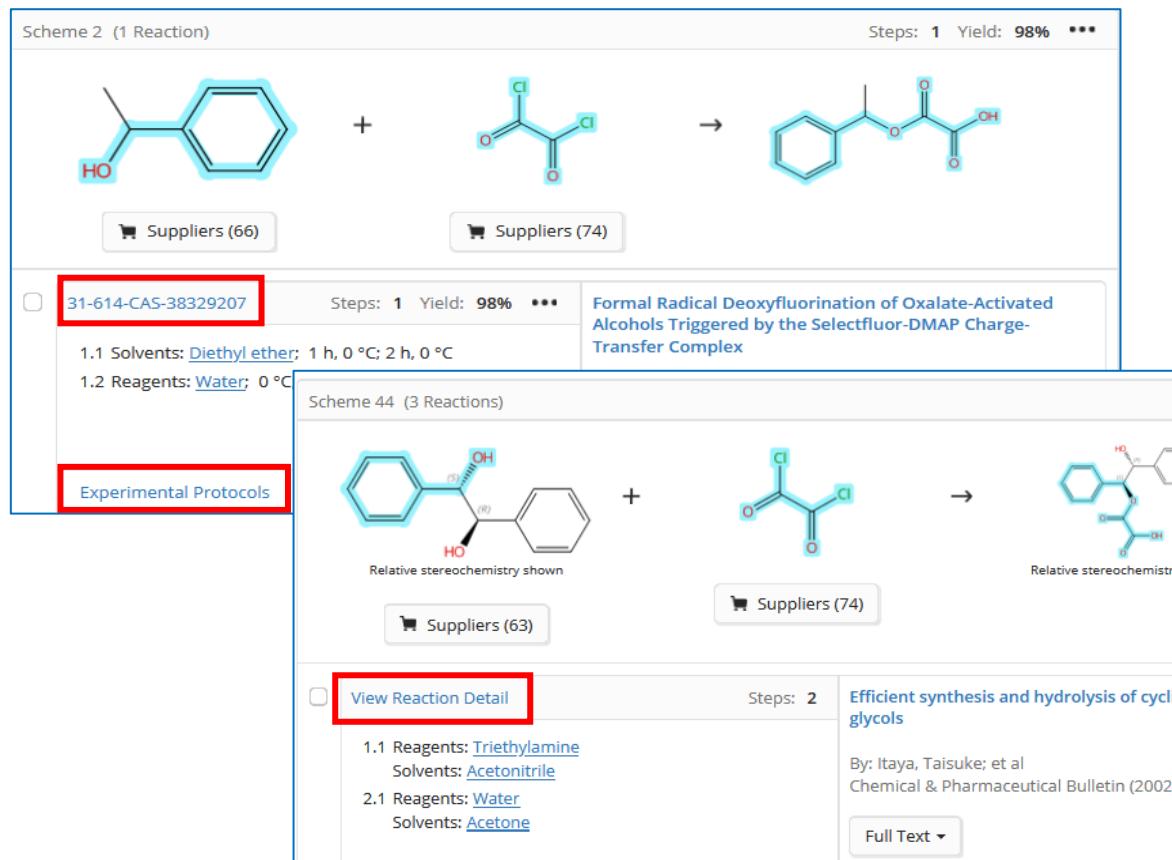
$\text{R}-\overset{\text{Y}}{\underset{\text{X}}{\text{C}}}- + \text{R}^1-\text{OH} \longrightarrow \text{R}-\overset{\text{Y}}{\underset{\text{OR}^1}{\text{C}}}-$
 $\text{Y} = \text{O}, \text{S}$

Hydrolysis of Acyl Halides
View 12 Related Reactions

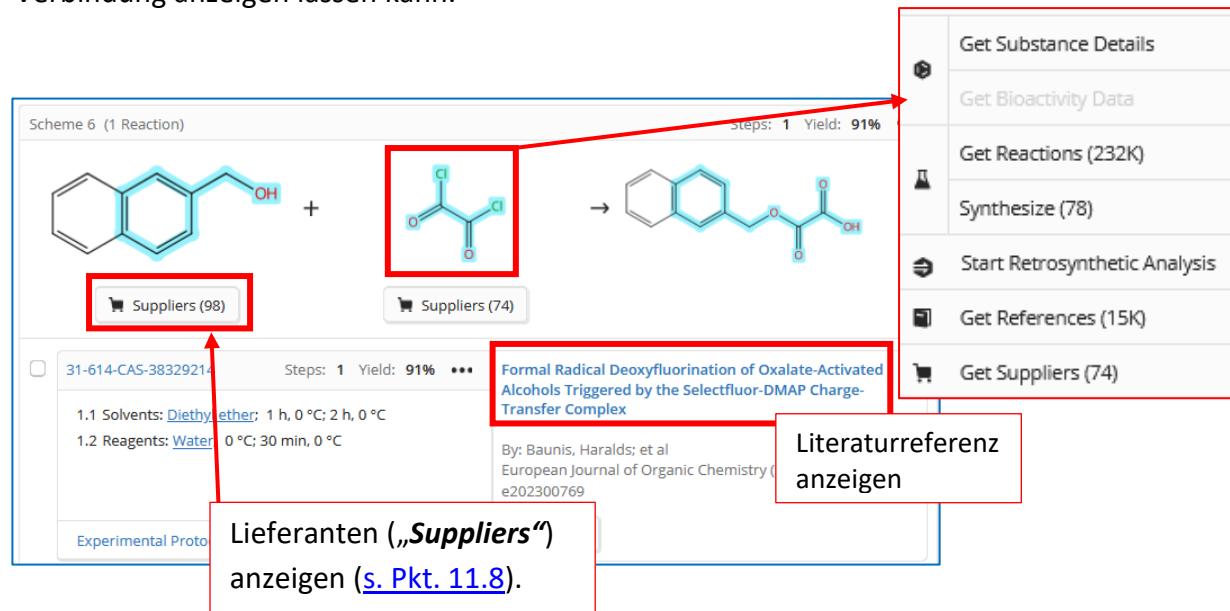
$\text{R}-\overset{\text{O}}{\underset{\text{X}}{\text{C}}}- + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{R}-\overset{\text{O}}{\underset{\text{OH}}{\text{C}}}-$

12.3. Wie bekomme ich Reaktionsdetails angezeigt?

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



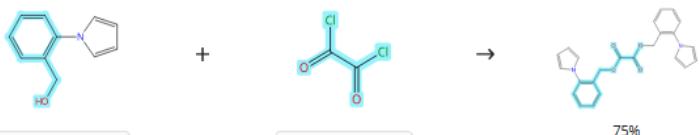
- Mit Klick auf einen Substanznamen bzw. auf eine Strukturformel in der Reaktionsanzeige öffnet sich ein Fenster, über das man sich weitere Informationen zu dieser chemischen Verbindung anzeigen lassen kann.



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

CAS Reaction Number: 31-354-CAS-5908619

[Get Similar Reactions](#) [Save](#)



[Suppliers \(63\)](#) [Suppliers \(74\)](#)

Reaction Overview
Steps: 1 Yield: 75%

JOURNAL
Reactions of 2(pyrrol-1-yl)benzyl radicals and related species under flash vacuum pyrolysis conditions
By: Cadogan, J. I. G.; et al
[View All](#) [View PDF](#) [Full Text](#)

Step 1

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

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

Synthetic Methods

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

Informationen zu Lösungsmittel, Katalysatoren, Reagenzien

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

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

Procedure

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

Transformation Alcoholysis of Acyl Halides and Analogs

Scale gram

Characterization Data

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

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

Daten zur Charakterisierung der Reaktionsprodukte

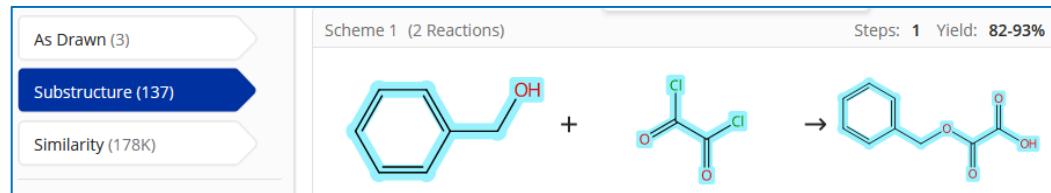
CAS Method Number 3-354-CAS-5908619

Transformations

1. Alcoholysis of Acyl Halides and Analogs

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

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



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

Filter by
Exclude

Search Within Results

Search for up to 3 structures within the result set.

Draw

Yield

- 90-100% (7)
- 80-89% (7)
- 70-79% (7)
- 50-69% (15)
- 30-49% (7)

[View All](#)

Number of Steps

- 1 (58)
- 2 (32)
- 3 (13)
- 4 (9)
- 5 (6)
- 6-10 (19)

Non-Participating Functional Groups

- Carboxylic ester (8)
- Ether (8)
- Halide (5)
- Alcohol (4)
- Alkene (4)

[View All](#)

Reaction Scale

- Milligram (63)
- Gram (52)
- No Scale Provided (63)

Experimental Protocols

- Synthetic Methods (74)
- Experimental Procedure (15)

Reaction Type

Stereochemistry

Reagent

- Water (59)
- Triethylamine (58)
- Lithium aluminum hydride (34)
- Ammonium chloride (32)
- Sodium hydroxide (32)

[View All](#)

Catalyst

- 4-(Dimethylamino)pyridine (25)
- Iridium(1+), [4,4'-bis(1,1-dimethylethyl)-2,2'-bipyridine- κ^N, κ^N']bis[3,5-difluoro-2-[5-(trifluoromethyl)-2-pyridinyl- κ^N]phenyl- κ^C], (OC-6-33), hexafluorophosphate(1-) (1:1) (18)
- Benzyltrimethylammonium hydroxide (1)
- Potassium carbonate (1)
- Pyridinium p-toluenesulfonate (1)
- Triphenylphosphine oxide (1)

Solvent

- Diethyl ether (85)
- Dichloromethane (70)
- Tetrahydrofuran (61)
- Water (57)
- Ethyl acetate (32)

[View All](#)

Commercial Availability

Reaction Notes

- Stereoselective (49)
- Photochemical (18)
- Green Chemistry (1)
- Prophetic Reaction (1)

Source Reference

Document Type

- Journal (124)
- Patent (12)
- Preprint (1)

Language

Publication Year

Organization

Publication Name

CA Section

13. Wie finde ich alle Synthesen einer Substanz?

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

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

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

13.1. Vollständige Substanzsuche

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

The screenshot shows the Reaxys search interface. The top navigation bar has tabs for 'All', 'Reactions', 'References', and 'Suppliers'. The 'Substances' tab is highlighted and has a blue background. Below the search bar, the query 'cis-whisk' is entered. The search results list four entries under the heading '(s)-cis-Whiskey lactone': '(s)-cis-Whiskey lactone', '(-)-cis-Whiskey lactone', '(+)-cis-Whiskey lactone', and '(R)-cis-Whiskey lactone'. The first entry is highlighted with a red box.

This screenshot shows the detailed view for the substance with CAS RN 55013-32-6, named 'cis-Whiskey lactone'. The page includes a list of 448 references, 87 reactions, and 1 supplier. A red arrow points from the 'Edit Structure' button on the left to the chemical structure shown on the right. The structure is a cyclopentanone derivative with two methyl groups and two chiral centers labeled '(R)'.

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

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

This screenshot shows the 'Edit Structure' dialog box. It contains a chemical drawing area with a cyclopentanone structure. A red box highlights the 'Edit Structure' button at the bottom-left of the dialog. Another red box highlights the search icon (magnifying glass) at the bottom-right. A third red box highlights the 'OK' button at the bottom-right of the dialog. To the left of the dialog, a sidebar shows substance details for CAS RN 55013-32-6, including a list of actions like 'Get Substance Details', 'Get Bioactivity Data', etc., and a 'Get Structure' button.

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

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

(Stand 14.06.24).

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

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

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

Jetzt können auf zwei verschiedenen Wegen die Präparationsvorschriften gesucht werden:

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

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

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

13.2. Ausgabe von vollständigen Synthesevorschriften über „Reactions“

Es werden die vier gewünschten Substanzen mit Häkchen ausgewählt.

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

Substances search for drawn structure

References ▾ Reactions ▾ Suppliers ▾

Structure Match Filtering: Stereochemistry: 4 Selected X

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

Filter Behavior

Filter by Exclude

Search Within Results

Substance Role

Product (286)

Reactant (21)

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

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

Tatsächlich sind diese 286 Reaktionen in 67 Publikationen veröffentlicht worden.

Reactions from

References ▾

All Results Selected Results

References from Reactions

Substances ▾ Reactions ▾ Citing ▾ Knowledge Graph

Filter Behavior 67 Results

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

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

The screenshot shows the 'Experimental Protocols' section of the SciFinder filter interface. It includes checkboxes for 'Synthetic Methods (68)' and 'Experimental Procedure (50)'. The entire 'Experimental Protocols' section is highlighted with a red box.

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

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

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

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

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

Experimental Protocols

The screenshot shows the reaction search results page. On the left, the filter sidebar has 'Experimental Protocols' selected. In the main area, a reaction scheme is shown with two chemical structures. Below the scheme, there is a table with reaction details. At the bottom of the table, the 'Experimental Protocols' link is highlighted with a red box.

<input type="checkbox"/> 31-454-CAS-13747196	Steps: 1 Yield: 95%	Applications of 1-Alkenyl-1,1-Heterobimetallics in the Stereoselective Synthesis of Cyclopropylboronate Esters, Trisubstituted Cyclopropanols and 2,3-Disubstituted Cyclobutanones By: Hussain, Mahmud M.; et al Journal of the American Chemical Society (2009), 131(18), 6516-6524

Experimental Protocols

Synthetic Methods	Experimental Procedure
Products	cis-Whiskey lactone , Yield: 95%
Reactants	rel-(2R,3R)-2-Butyl-3-methylcyclobutanone
Reagents	Sodium bicarbonate m-Chloroperbenzoic acid
Solvents	Dichloromethane
Procedure	<ol style="list-style-type: none"> 1. Add NaHCO₃ (0.33 mmol) to a solution of <i>cis</i>-2-butyl-3-methylcyclobutanone (0.25 mmol) in 1.5 ml of CH₂Cl₂ at 0°C. 2. Add a solution of <i>m</i>-CPBA (77%) in 1 ml of CH₂Cl₂ dropwise to the reaction mixture. 3. Stir the reaction mixture at 0 °C for 45 minutes until monitor the completion of reaction by TLC. 4. Pour the solution into a mixture of 1.6 ml of saturated aqueous sodium bicarbonate and 0.4 ml of saturated sodium sulfite. 5. Extract the reaction mixture with diethyl ether (3 x 5 ml). 6. Wash the combined diethyl ether phase with brine. 7. Dry the combined diethyl ether phase with anhydrous Na₂SO₄. 8. Remove the solvent under reduced pressure. 9. Purify the crude product by flash column chromatography on silica gel (pentane:diethyl ether = 90:10).
Transformation	Baeyer-Villiger Rearrangement
Scale	milligram
Characterization Data	
^ cis-Whiskey lactone	
Proton NMR Spectrum	CDCl ₃ , 360 MHz of the mixture is provided in Supporting Information Part 2.
Carbon-13 NMR	CDCl ₃ , 90 MHz of the major <i>trans</i> product δ 14.1, 17.7, 22.7, 28.0, 33.9, 36.3, 37.3, 87.7, 176.7.
IR Absorption Spectrum	Neat 2960, 2934, 2874, 1780, 1461, 1212, 1172 cm ⁻¹ .

CAS Method Number 3-454-CAS-13747196

Experimental Protocols

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

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

13.3. Ausgabe der Nachweise zu Synthesen über „References“

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

Über „References“

→ **Selected Results** kommt man zu allen Literaturstellen und Patenten dieser vier Verbindungen.

Über „Filter by Substance Roles“ → **Preparation**

können die insgesamt 827 Treffer auf die 95 Literurnachweise und Patente zu Synthesen der cis-Whisky-Lactone eingeschränkt werden.

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

Save and Alert

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

Select Up to 5 Saved Items:

- Prep über Substanz-References Query
- Prep über Substance- Reactions-References Query

96 Results

Study on color, aroma, and innovative manufacturing

By: Li, Yuchuan; Luo, Qianqian; Qin, Dejiang
Food Chemistry (2024), 438, 13806

This study used samples processed tea (LYT) in color, aroma, and taste pile-yellowing (FP) and over-fired

Synthesis of (\pm)-*cis*-whisky lactone

[Substances \(12\)](#) [Reactions \(14\)](#) [Citing \(2\)](#) [Save](#)

JOURNAL

Source
Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry
Volume: 57
Issue: 3
Pages: 515-16
Journal
1993
DOI:
[10.1271/bbb.57.515](https://doi.org/10.1271/bbb.57.515)

CODEN: BBBIEJ
ISSN: 0916-8451

Database Information
AN: 1993495210
CAN: 119:95210
CAplus

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

Publisher
Unknown

Language
English

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

[View PDF](#) [Full Text](#)

Similar References [NEW](#) [Get Similar References](#)

Synthesis of 5-tert-butylbenzo[b]thiophene-2-carboxylic acid
Synthetic Communications (1989), 19(15), 2731-6 | Language: English; Database: CAplus

Synthesis of cis-6-alken-4-olides
Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas (1975), 94(2), 43-4 | Language: English; Database: CAplus

Total synthesis of (+)-hanegokedai
Tetrahedron Letters (1983), 24(18), 1867-70 | Language: English; Database: CAplus

[Expand All](#) [Collapse All](#)

Substances

[Substances \(12\)](#)

55013-32-6 Relative stereochemistry shown

150552-39-9 Relative stereochemistry shown

150552-38-8 Relative stereochemistry shown

Das ist ein Beispieldtreffer.

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

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

Note

Synthesis of (\pm)-*cis*-Whisky Lactone

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

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

Whisky lactone (3-methyloctan-4-olide) has been identified as a key aroma component of aged alcoholic beverages such as whisky, brandy and wine.¹¹ Two isomeric compounds (*cis* and *trans*) are present in nature. These two compounds are original components of oak, which is used for barrels to age such alcoholic beverages, and are considered to be extracted slowly from oak barrels into alcoholic beverages during maturing. The absolute configurations of natural *trans*- and *cis*-whisky lactones has been confirmed to be (3S,4R) and (3S,4S), respectively.² Very recent investigations have shown that these new compounds had insect repellent activity,³ which raised our interest in their synthesis.⁴ This paper describes a simple stereoselective synthesis of (\pm)-*cis*-whisky lactone I starting from 1,4-cyclohexadiene (2).

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

In summary, we prepared (\pm)-*cis*-whisky lactone (I) stereo starting from 1,4-cyclohexadiene (2). The overall yield was 10 steps from 2.

over MgSO₄ and concentrated under atmospheric pressure. The residue was distilled to give 15.2 g (80.8%) of 4a, bp 104–107°C/82 mmHg; n_D^{25} 1.4779; IR ν_{max} cm⁻¹: 3342 (s), 3030 (m), 2956 (m), 2904 (s), 2838 (m), 1046 (s); ¹H-NMR ($CDCl_3$) δ: 1.03 (3H, d, J =6.3 Hz, Me), 1.65–1.84 (3H, m, H-2, H-6, OH), 1.95–2.07 (1H, m, H-3), 2.18–2.29 (1H, m, H-3), 2.34–2.45 (1H, m, H-6), 3.53 (1H, dt, J =5.3 and 11.8 Hz, H-1), 5.52–5.64 (2H, m, H-4, H-5). MS (m/z): Found, 111.0815 (M⁺–1); calcd. for C₁₁H₁₆O, 111.0820.

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

47 ml) was added to a biphasic solution of 4b (12.5 g, 57.8 mmol) in CCl_4 (173 ml), MeCN (173 ml) and water (260 ml), before RuO₂ (250 mg, 1.91 mmol) was added to the mixture. This was stirred vigorously for 3 h at room temperature. The reaction mixture was filtered to remove the insoluble material, and the filtrate was extracted with chloroform. The organic layer was dried over MgSO₄ and concentrated under reduced pressure to give 50 ml residual solution. This was chromatographed over Florisil. Elution with ethyl acetate-formic acid (1000:1) gave 5 as crystals. These were recrystallized from *n*-heptane-chloroform to give pure 5 (13.4 g, 82.7%), mp 125–127°C; IR ν_{max} cm⁻¹: 3000 (br), 1723 (s), 1711 (s), 1296 (s), 1274 (s), 1112 (s), 717 (s); ¹H-NMR ($CDCl_3$) δ: 1.00 (3H, d, J =6.7 Hz, Me), 2.12 (1H, dd, J =7.2 and 14.5 Hz, H-5), 2.28–2.43 (2H, m, H-4, H-5), 2.58–2.75 (2H, m, H-2), 5.38–5.45 (1H, m, H-3), 7.45–7.73 (3H, m, aromatic H), 7.88–8.05 (2H, m, aromatic H), 12.28 (2H, br, COOH). Anal. Found: C, 60.24; H, 5.68%. Calcd. for C₁₄H₁₆O₆: C, 59.99; H, 5.75%.

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

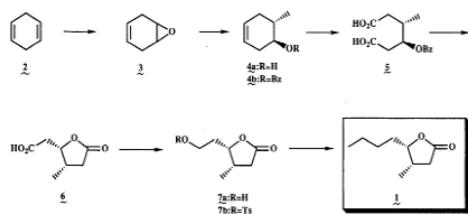
Experimental

All boiling point (bp) and melting point (mp) values are uncorrected.

IR spectra were measured with a Jasco FT/IR 5000 spectrometer.

¹H-NMR spectra were recorded at 300 MHz and ¹³C-NMR at 75 MHz, with TMS as an internal standard on a Bruker AC-300P spectrometer. MS (EI) spectra were recorded on a JMS DX-303 spectrometer at 70 eV.

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



14. Wie hilft SciFinder bei der Retrosyntheseplanung?

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

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

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

Experimentelle Beispiele:

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

Vorhersagen („Predicted Steps“)

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

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

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

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

Hilfreiche Videos zur Retrosynthese

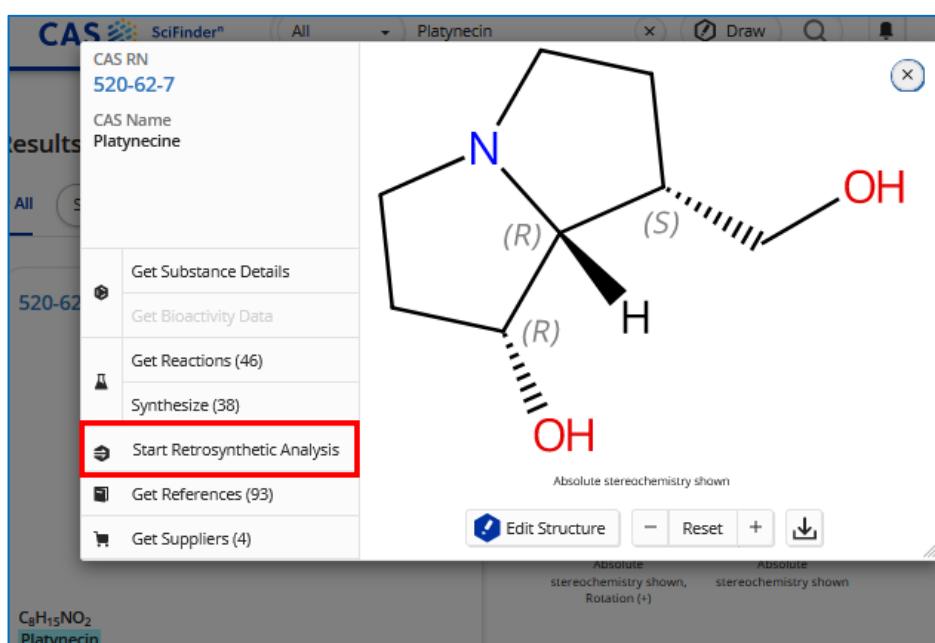
- [How to perform a retrosynthetic analysis using CAS SciFinder \(2024\)](https://www.cas.org/how-perform-retrosynthetic-analysis-using-cas-scifindern)
(<https://www.cas.org/how-perform-retrosynthetic-analysis-using-cas-scifindern>)
- [Predictive Retrosynthesis in SciFinder-n, incl. Background Information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

14.1. Wie kann ich die Retrosyntheseplanung beginnen?

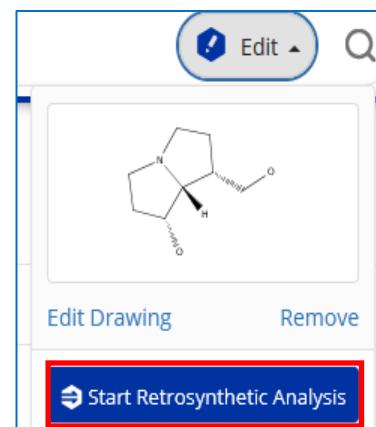
Beginnen kann man die Syntheseplanung an verschiedenen Stellen in SciFinder:

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

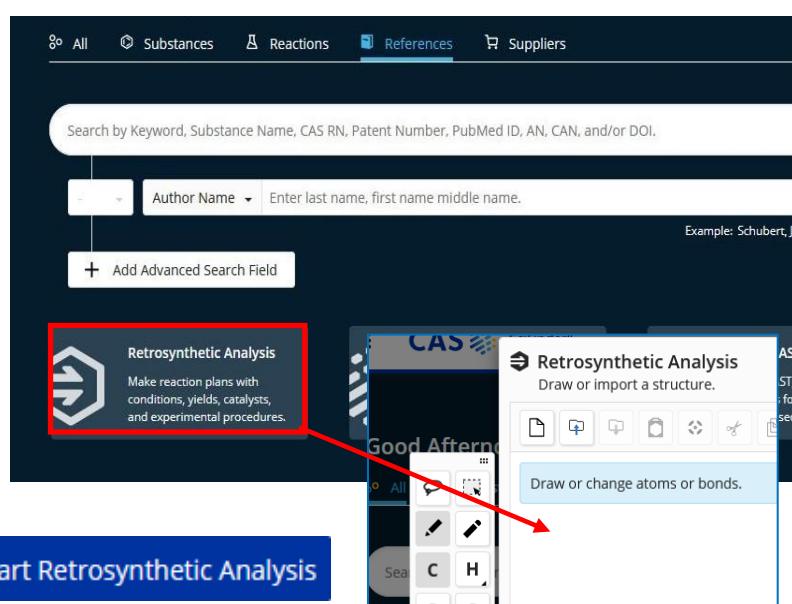
Trefferliste:



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



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



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

Retrosynthesis Plan Options for drawn structure Powered by **ChemPlanner®**

Select Synthetic Depth [Learn more.](#)

1
 2
 3
 4

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

Break Bond Protect Bond Clear All Bond Selections

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

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

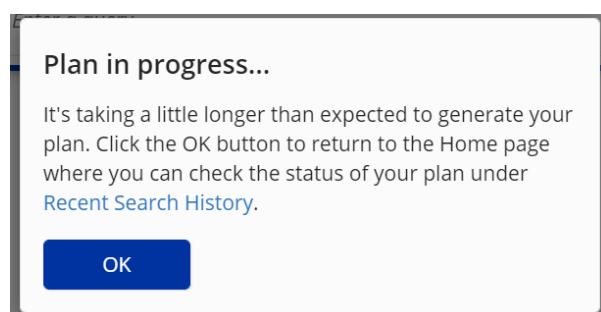
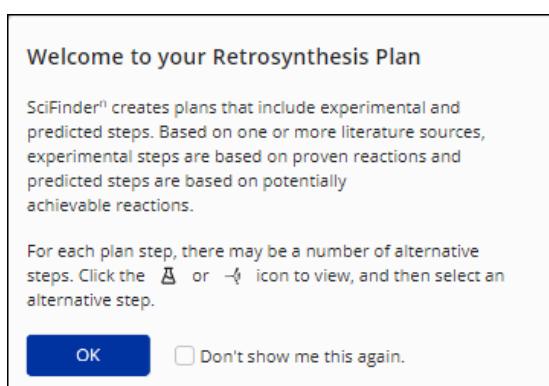
Set Starting Materials Cost Limit [Learn more.](#)

1000 [USD/mol](#)

Email me when my plan is complete

Create Retrosynthesis Plan

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



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

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

So sieht der fertige Plan aus:

Prognostizierte Schritte an- und ausschalten

Retrosynthesis Plan for drawn structure

Powered by ChemPlanner®

Ändern der Voreinstellungen

Speichern oder Download des Plans

Nächere Informationen zu den Reaktionsschritten und zu alternativen

Plan Information

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

Scoring Profiles

- Complexity Reduction
- Convergence
- Evidence
- Cost
- Yield

Step Evidence

Step	Evidence
A \Rightarrow B	1.1 Reagents: Hydrogen Catalysts: Nickel Solvents: Ethanol; 1 bar, 50 °C
B \Rightarrow C	1.1 Reagents: Diisobutylaluminum hydride Solvents: Dichloromethane Experimental Protocols
C \Rightarrow D + E	1.1 Reagents: Silver fluoride Solvents: Acetonitrile Experimental Protocols

14.2. Kann ich alternative Schritte in die Synthese einbauen?

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

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

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

B \Rightarrow C

Maximum Yield: 95%
Evidence (2)
Alternative steps (38)

1.1 Reagents:

Diisobutylaluminum hydride
Solvents: Dichloromethane
[Experimental Protocols](#)

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

1 of 24

Selected

▼ View 1 similar Alternative

Maximum yield:
95%

Experimental Step

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

View evidence (2)

2 of 24

Select

Maximum yield:
100%

Predicted Step

1 of 20

Select

Average yield:
76%

View evidence (12,288)

2 of 20

Select

Average yield:
56%

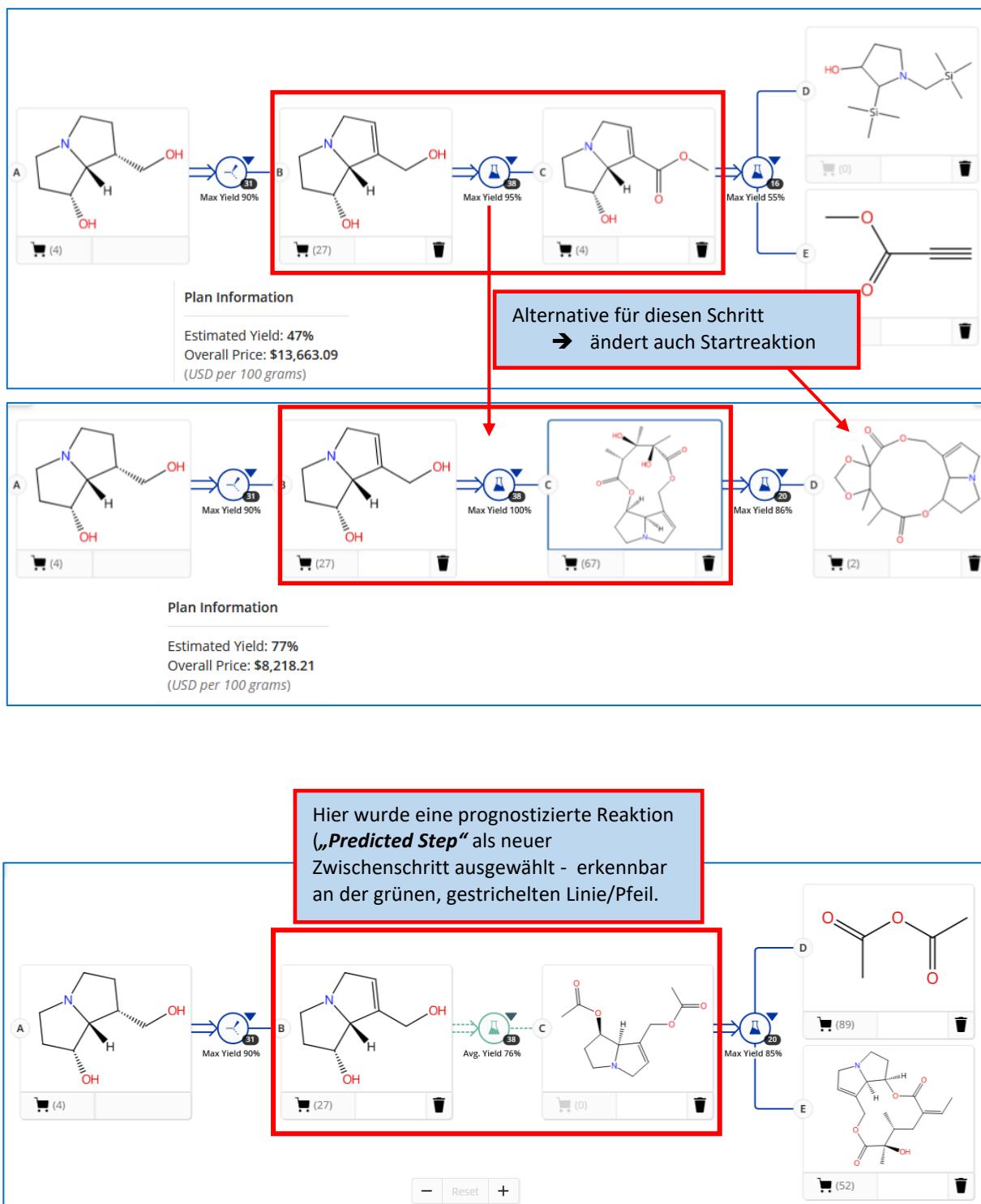
▼ View 2 similar Alternatives

Predicted Step

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

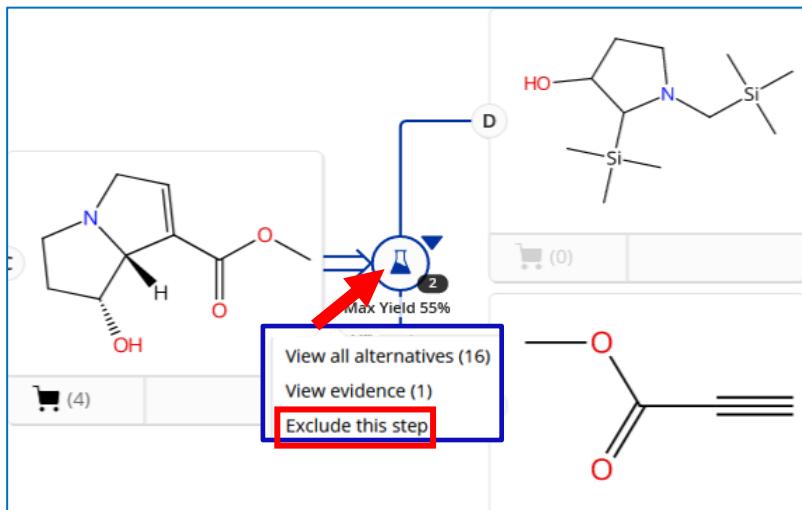
View evidence (3,831)

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



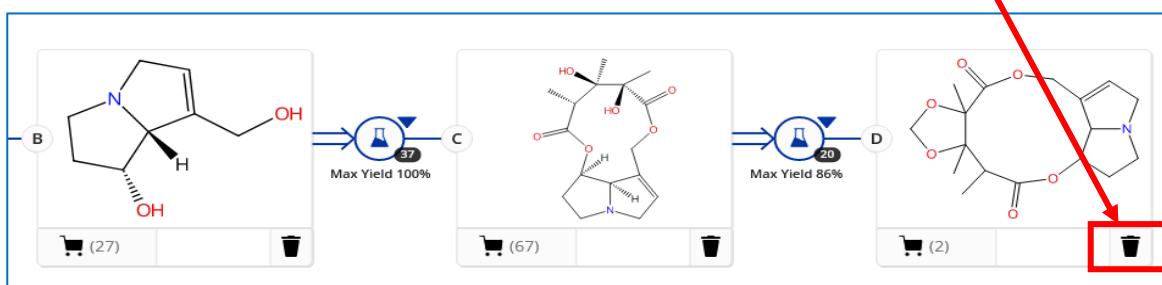
14.3. Kann ich bestimmte Schritte des Retrosyntheseplanes ausschließen?

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



Alternativ kann auch einfach das Mülltonnensymbol angeklickt werden, um nicht gewünschte Zwischenprodukte zu entfernen.

- Nach dem Ausschluss wird ein alternativer Zwischenschritt angezeigt:



- Der Ausschluss von Reaktionsstufen ist reversibel:

The screenshot shows the "Excluded Options for this Plan" panel. It contains two entries, each with a reaction scheme and a "Recover" button. The top entry shows a retrosynthetic arrow from a molecule with a hydroxyl group to a molecule with a carbonyl group. The bottom entry shows a retrosynthetic arrow from a complex polycyclic intermediate to a final product. A green button at the top right of the panel is labeled "View Excluded Options".

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

14.4. Welche Optionen kann ich bei der Retrosyntheseplanung einstellen?

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

Retrosynthesis Plan Options

Select Synthetic Depth [Learn more.](#)

1
 2
 3
 4



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

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

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

1000 [USD/mol](#)

- **Synthetic Depth** - beschränkt die Anzahl der synthetischen Schritte, die zulässig sind, d.h. die Zahl der Bindungsspaltungen (Disconnections). Standardmäßig sind drei Schritte eingestellt. Ein Plan kann eine von den eingestellten Option abweichende Anzahl an Schritten aufweisen, wenn bereits nach weniger Schritten die Ausgangsstoffe zum angegebenen Preis erhältlich sind (Starting Material Cost Limit).

- **Rules Supporting Predicted Reactions**
 - Zu den Common Rules gehören häufig für Synthesen verwendete Reaktionstypen, die durch viele Literaturbeispiele gestützt werden.
 - Zu Uncommon oder Rare Rules gibt es weniger Beispiele in der Literatur, jedoch können sie möglicherweise mehr neuartige synthetische Ansätze aufzeigen.
Achtung: Die Suchdauer kann sich verlängern, wenn diese ausgewählt werden.
 - Wird bei der Suche mittels Common Rules kein Ergebnis gefunden, erweitert das Tool das Regelset selbstständig auf eine größere Anzahl. Die manuelle Einstellung der Uncommon oder Rare Rules ist in der Praxis sehr selten notwendig.

• **Starting Material Cost Limit**

Für jeden Schritt des Plans werden bei der retrosynthetischen Suche die Ausgangsstoffe mit kommerziell erhältlichen Verbindungen abgeglichen. Der Plan ist fertig, wenn er entweder die festgelegte Kostengrenze eines Edukts oder die synthetische Tiefengrenze erreicht.

Das voreingestellte Standardlimit liegt bei 1.000 USD/mol oder 10 USD/g.

Achtung: Das festgelegte Kostenlimit, mit dem ein Plan erstellt wird, bleibt solange für die weitere Plangenerierung bestehen, bis es wieder geändert wird.

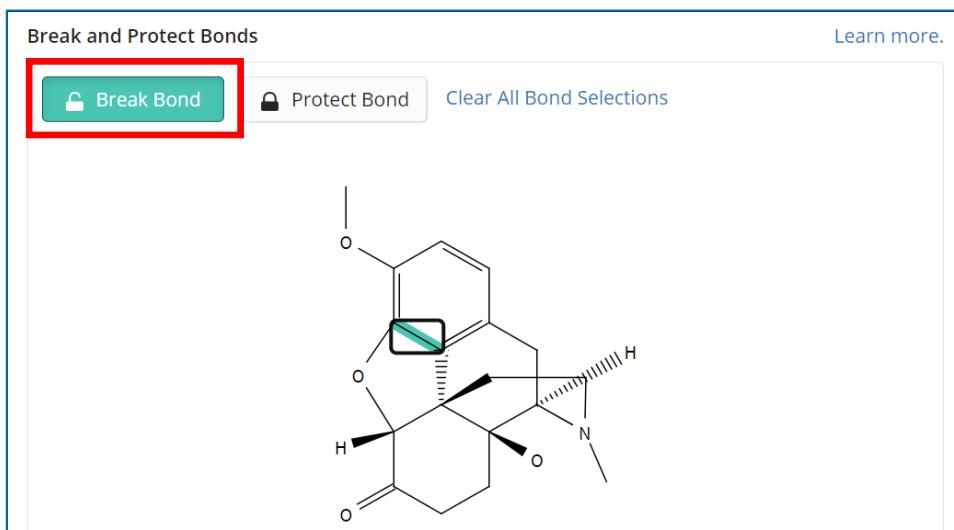
- **Break and Protect Bonds**

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

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

Diese Bindung wird nun **grün** hervorgehoben.

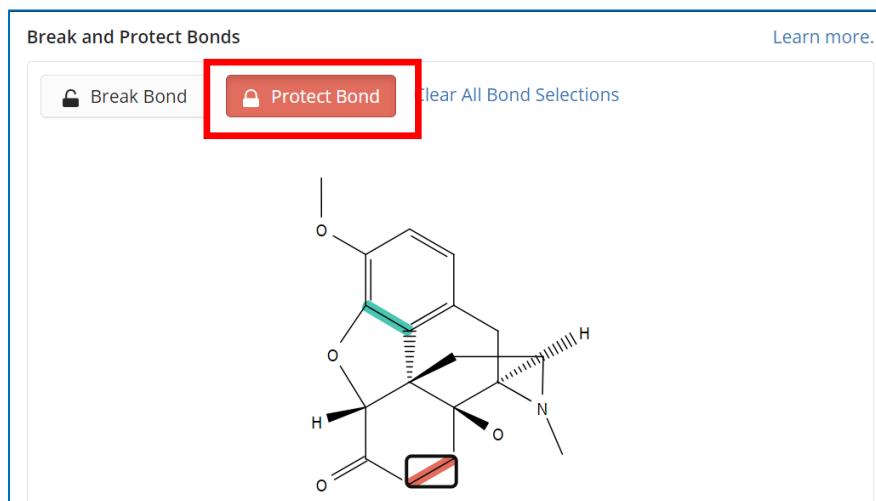
Dieser Bindungsbruch bezieht sich auf die erste Bindungsspaltung der Retrosynthetischen Analyse.



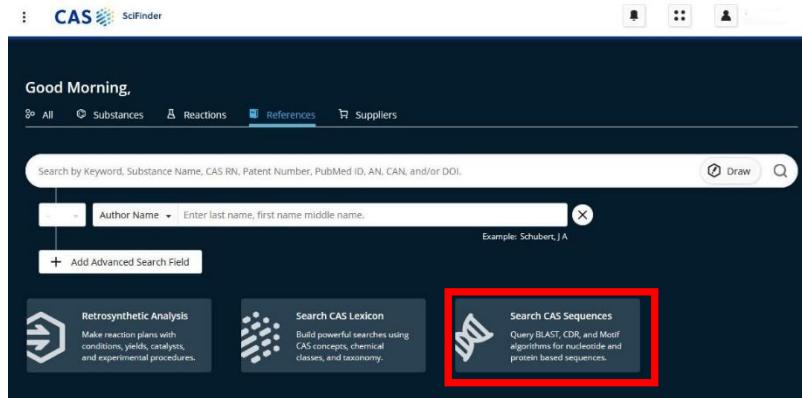
Um bestimmte Bindungen zu schützen, klickt man auf die Schaltfläche „**Protect Bond**“ und dann auf die ausgewählte(n) Bindung(en) in der Struktur.

Diese Bindung wird nun **rot** hervorgehoben.

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



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



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

15.1. Einfache Suche

The screenshot shows the 'Search CAS Sequences' page. At the top, there's a header with the CAS logo and 'CAS LIFE SCIENCES'. Below it, a sub-header says 'Search CAS Sequences'. A text input field asks 'Enter a protein or nucleotide string, or upload a .txt or .fasta file.' Below the input field are three tabs: 'BLAST' (selected), 'CDR', and 'Motif'. To the right of the input field are 'Clear Search' and 'Upload Sequence (.fasta or .txt)' buttons. Underneath the input field is a 'Sequence Type' section with 'Nucleotide' and 'Protein' options, where 'Nucleotide' is selected. Below that is a 'Search Within' section with radio buttons for 'Nucleotides' (selected) and 'Proteins', and a checkbox for 'Include NCBI Sequences'. At the bottom right is a large blue 'Search Sequences' button. A red box highlights the 'Search Within' section.

Ablauf der Suche

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

Beispiel:

The screenshot shows the CAS SciFinder interface for searching sequences. At the top, there's a header with the CAS logo and 'SciFinder'. Below it is a search bar with the placeholder 'Enter a protein or nucleotide string, or upload a .txt or .fasta file. Learn more about CAS Sequences.' A sequence 'AGGAGTCGATAATACATATAAGAGAT' is entered. There are tabs for 'BLAST', 'CDR', and 'Motif', with 'BLAST' being active. To the right are buttons for 'Clear Search', 'Upload Sequence (.fasta or .txt)', 'Sequence Type: Nucleotide / Protein' (with 'Nucleotide' selected), 'Search Within: Nucleotides / Proteins' (with 'Nucleotides' selected), and a checkbox for 'Include NCBI Sequences'. A large blue button at the bottom right says 'Search Sequences'.

The screenshot shows the 'Recent Search History' page. It lists a search entry from 'November 29, 2023' for 'Sequences' at 9:40 AM. The details include: Sequence Type: Nucleotide, Search Within: Nucleotides, NCBI Included: No, BLAST Algorithm: BLASTn, Alignment Identity: 80%, Query Coverage: 90%. The sequence 'AGGAGTCGATAATACATATAAGAGAT' is shown. To the right are buttons for 'View Results' (highlighted in red), 'Edit Options' (disabled), and a status message 'Searching'. Below the search entry, it says 'Results will expire on Dec 29, 2023.'

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

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

This screenshot is similar to the previous one, showing the 'Recent Search History' for the same search entry. The 'View Results' button is highlighted with a red box. Additionally, a red box highlights the 'Edit Search' button, which is located below the 'View Results' button and contains the word 'Complete'.

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

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

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

Sequences search for your query

BLAST Search Details

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

Bioscape Analysis

Visually explore sequence similarity with a new tool.
Learn more about Bioscape.

Create Bioscape Analysis

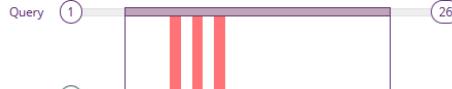
Filter by

- E-Value**: 0 to 10^6
- Query Coverage %**: 0 to 100
- Subject Coverage %**: 0 to 100

Query Details: AGGAGTCGATAATACATAAAGAGAT [View Less](#)

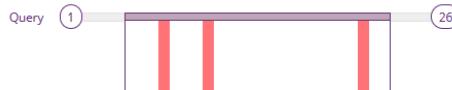
4 Results Sort: Alignment Identity ▾ View: Expanded ▾

1 Alignment Identity: 87.5%

Query (1)  Subject (1) 

Matches: 21 Mismatches: 3

2 Alignment Identity: 87.5%

Query (1)  Subject (1) 

Matches: 21 Mismatches: 3

3 Alignment Identity: 87.5%

Query (1)  Subject (1) 

Matches: 21 Mismatches: 3

Ergebnisse mit Details:

Sequences search for your query

BLAST Search Details

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

Bioscape Analysis

Visually explore sequence similarity with a new tool.
Learn more about Bioscape.

Create Bioscape Analysis

Filter by

- E-Value**: 0 to 10^6
- Query Coverage %**: 0 to 100
- Subject Coverage %**: 0 to 100

Query Details: AGGAGTCGATAATACATAAAGAGAT [View More](#)

4 Results Sort: Alignment Identity ▾ View: Expanded ▾

1 Alignment Identity: 87.5%

Query (1)  Subject (1) 

Matches: 21 Mismatches: 3

View Less References

Alignment **Subject**

Alignment Data
BLAST Score: 33
E-Value: 5.07029

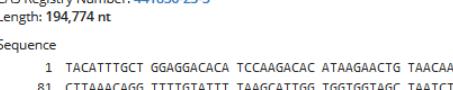
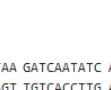
Q	3 GAGTCGATAA TACATATAAG AGAT 26
S	2389 GAGTGGCTGA TACATATAAG AGAT 2412

2 Alignment Identity: 87.5%

Query (1)  Subject (1) 

Matches: 21 Mismatches: 3

3 Alignment Identity: 87.5%

Query (1)  Subject (1) 

Matches: 21 Mismatches: 3

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

Sequence

```

1 TACATTGCT GGAGGACACA TCCAAGACAC ATAAGAACGT TAACAAATTAA GATCAATATC AAGTTGGTGA GAGCACAAGG
81 CTTAACAGG TTTTGATTT TAAGCATTGG TGTTGGTAGC TAATCTTAGT TGTCACCTTG ATTGCATCTG GGATCAAATG
161 GAGCTAACG TGCTGAGAG TCAGGTGAGG AACTTTTGA TTAGACAAATT TTAAGCACGA GTATCCAGAA ATCTGAGTGG
241 CATCTCTGG TGGCATCCA GACAAACAGA CATGGAGAG GGAACCTTTG CTCTCCCTCC TGATGGACAG TCCATCTTC
321 TGCTGCTGTG GCAACTCTT CCTAACTACT AGAACCTCT TGCTGTTGAT TCCAATGTAG GCGGAAAGCT AGAACGCCCTC
401 TGGAAATTCC TCAAGGTTCT AGCACTAGAT TGAGACTGAA GAAACGTCGA GATTACAGGA GTCTCAGCTT TTCTGTGCT
481 GGACAGGCC AC TGTTGGACTA CCCAGAATAT GTCTGTTGA TGAGTCTAAT AAGTAGATAA ATTCCTTATA CATAAAATGA
561 ATACATTGAT AGTATTGTA TCAATATTAT ACATACATTA GATAATGAAT TTATATATAT ATATATATAT ATATATATAT
641 ATATATATAT ATATTGAGTC AGTTATGTC CTTCAAAAAA TCTCTGACAG TACACATTGG ATATCAAAG TCTCTGTAAA
721 TATCAAAGT ATACTGGTC TCTTAAACCA CCAATGTCAT ACAAAATTTAA GCTGCGAGAG ATAGGCCACAT AAAGGCCACCA

```

15.2. Erweiterte Suche nach Biosequenzen

The screenshot shows the 'Search CAS Sequences' interface. At the top, there are tabs for 'BLAST', 'CDR', and 'Motif'. Below the tabs, a sequence 'AGGAGTCGATAATACATATAAGAGAT' is entered. To the right, there are buttons for 'Clear Search', 'Upload Sequence (.fasta or .txt)', 'Sequence Type: Nucleotide / Protein' (with 'Nucleotide' selected), 'Search Within: Nucleotides / Proteins' (with 'Nucleotides' selected), and a checkbox for 'Include NCBI Sequences'. A large red box highlights the 'Advanced Sequence Search' section. This section contains fields for 'Alignment Identity %' (80), 'Match with Gaps?' (No), 'Gap Costs' (Existence 5 Extension 2), 'Query Coverage %' (90), 'Word Size' (11), 'Reward for Match, Penalty for Mismatch' (2, -3), 'BLAST Algorithm' (set to 'BLASTn'), 'E-Value' (10), and 'Exclude Low Complexity Regions' (No). There is also a dropdown menu for 'MegaBLAST', 'BLASTn', and 'BLASTn-short'.

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

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

15.3. Hilfreiche Videos zur Sequenzsuche

- [Performing a BLAST Sequence Search with CAS SciFinder](#)

- How to perform a BLAST sequence search using CAS SciFinder
- Accessing NCBI source information directly from CAS SciFinder
- Filtering capabilities to effectively target relevant sequences
- Finding relevant resources containing target sequences

- [Performing a CDR Sequence Search with CAS SciFinder](#)

- How to perform a CDR search among highly relevant sequences using CAS SciFinder
- Refining a CDR search to identify targeted sequences and related indexed documents, including patents

- [Performing a Motif Sequence Search with CAS SciFinder](#)

- How to perform a Motif search using CAS SciFinder
- Combining results in a Motif search

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

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

16. Patente in SciFinder und PatentPak

SciFinder enthält Patente [aus der ganzen Welt](#) mit chemischen Inhalten (ab 1808).

Neben Stoff- und Verfahrenspatenten sind auch Anwendungspatente (allgemeine Anwendungen, Diagnostika, Pharmazeutika usw.) suchbar.

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

16.1. Wie finde ich allgemein Patente in SciFinder?

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

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

The screenshot shows the SciFinder interface for 'Reactions'. At the top, there's a search bar with the text 'References'. Below it, a button labeled 'Get References for Reactions' is highlighted with a red box. There are also 'All Results' and 'Selected Results' buttons.

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

The screenshot shows the SciFinder interface for 'Substances'. It has a similar layout to the reactions interface, with a 'References' button highlighted by a red box. Buttons for 'All Results' and 'Selected Results' are also present.

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

- Beispiel: Einschränkung der Treffer einer Referenzsuche auf Patentdokumente

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

(Stand: 12.06.2024)
→ 424 Nachweise
→ 39 Patente

The screenshot shows the SciFinder search results page. The search query is "thalidomide compounds" OR "thalidomide analogs". The results are filtered by 'Patent' (39). The main area displays the first result, which is a patent by Teubert, Uwe; Zwingenberger, Kai; Wnendt, Stephan; Eger, Kurt from Archiv der Pharmazie (Weinheim, Germany) (1998), 33(1), 7-12. The abstract describes the synthesis of 5'-substituted thalidomide analogs as modulators of TNF-α. Two chemical structures are shown: I (5'-substituted thalidomide) and II (5'-substituted thalidomide derivative). The bottom of the screen shows navigation links for 'Substances (22)', 'Reactions (18)', 'Citing (30)', and 'Citation Map'.

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

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

16.2. Wie finde ich ein spezielles Patent?

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

Treffer bei Suche in „References“

Link zur vollständigen Patentschrift sowie zur gesamten Espacenet

Link zur vollständigen Patentschrift über Espacenet

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

- Über das nach der Suche in der Trefferliste angezeigte Abstract des Patentes kann man sich alle in Patent enthaltenen **Substanzen** oder **Reaktionen** durch Klick auf den entsprechenden Button **anzeigen** lassen.
- Der Zugang zur vollständigen Patentschrift im Original erfolgt am besten über „**PatentPak**“ ([s. Pkt. 16.5](#)). Dort hat man u.a. direkten Zugriff auf im Patent gelistete chemischen Verbindungen.
- Auch im Suchmodus „**All**“, „**Substances**“ bzw. „**Reactions**“ kann mit Hilfe der Patentnummer nach speziellen Patenten gesucht werden.

PatentPak - Full Text - Substances (10)

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

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

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

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

Achtung: Diese Schaltfläche gibt es nur bei Patenten.

The screenshot shows a patent search result for "Acyloxymethyl-substituted thalidomides and their hydrochlorides as water-solution thalidomide derivatives for use in the treatment of diseases requiring modulation of TNF-α". The patent is by Zhang, Hesheng, with a publication date of 2010-09-23 and an application number of US2010-12793972. The abstract discusses water-soluble thalidomide derivatives useful in diseases requiring TNF-α modulation. A chemical structure of the compound is shown. Below the abstract, there are buttons for "PatentPak Viewer", "Get Prior Art Analysis" (which is highlighted with a red box), and "Full Text".

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

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

The SciFinder interface shows a search history for February 14, 2024. One entry is a "Prior Art Analysis" for "Acyloxymethyl-substituted thalidomides and their hydrochlorides as water-solution thalidomide derivatives for use in the treatment of diseases requiring modulation of TNF-α". Another entry is a "Prior Art Analysis (183)" for "Preparation of isotopes-enriched pomalidomide derivatives for use as antitumor agents". A modal dialog titled "Prior Art Analysis" is open, asking for an "Email Address" (heike.goebel@uni-jena.de) and has a "Submit" button highlighted with a blue box. A red arrow points from the "Submit" button to the "Email Address" field. To the right, a sidebar shows the status of the analysis: "Searching..." (highlighted with a green box) for the first entry and "Complete" for the second. A red arrow points from the "Complete" status to the "History" icon in the sidebar. The sidebar also includes icons for "Projects" and "History".

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

SciFinder-n Prior Art Analysis Complete

Datum: Heute, 15:44:03 CET
Von: SciFinder-n Prior Art Analysis Results
An: heike.goebel@uni-jena.de

CAS
SciFinder®

Your Prior Art Analysis is Complete

This analysis is based on the reference:

Acyloxyethyl-substituted thalidomides and their hydrochlorides as water-solution thalidomide derivatives for use in the treatment of diseases requiring modulation of TNF- α
By: Zhang, Hesheng
United States | English | US20100240651

Here are the top similar documents based on your request. You can view all references in SciFinder®.

Synthesis and immunological activity of water-soluble thalidomide prodrugs
By: Hess, S.; Akermann, M. A.; Wnendt, S.; Zwingenberger, K.; Eger, K.
Bioorganic & Medicinal Chemistry (2001) | English

Acylated N-hydroxymethylthalidomide prodrugs with immunomodulator action
Synthesis and immunological activity of water-soluble thalidomide prodrugs
By: Hess, S.; Akermann, M. A.; Wnendt, S.; Zwingenberger, K.; Eger, K.
Bioorganic & Medicinal Chemistry (2001) | English

Acylated N-hydroxymethylthalidomide prodrugs with immunomodulator action

SciFinder.

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

References from Prior Art Analysis for "Acyloxyethyl-substituted thalidomides and their hydrochloride.."

Substances **Reactions** **Citing** **Knowledge Graph**

Filter Behavior **Filter by** **Exclude**

189 Results

Sort: Relevance **View: No Abstract**

1

Synthesis and immunological activity of water-soluble thalidomide prodrugs
By: Hess, S.; Akermann, M. A.; Wnendt, S.; Zwingenberger, K.; Eger, K.
Bioorganic & Medicinal Chemistry (2001), 9(5), 1279-1291 | Language: English, Database: CPlus and MEDLINE
View Abstract

Full Text **Substances (35)** **Reactions (20)** **Citing (45)** **Citation Map**

2

Acylated N-hydroxymethylthalidomide prodrugs with immunomodulator action
Assignees: Grunenthal G.m.b.H.; Schneider, Johannes; Winter, Werner; Wnendt, Stephan; Zwingenberger, Kai; Eger, Kurt; Akermann, Michaela
World Intellectual Property Organization, WO9737988 A1 1997-10-16 | Language: German, Database: CPlus
View Abstract

PatentPak **Full Text** **Substances (16)** **Reactions (9)** **Citing (9)** **Citation Map**

3

TNF α as therapeutic target: New drugs, more applications
By: Reimold, A. M.
Current Drug Targets- Inflammation & Allergy (2002), 1(4), 377-392 | Language: English, Database: CPlus

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

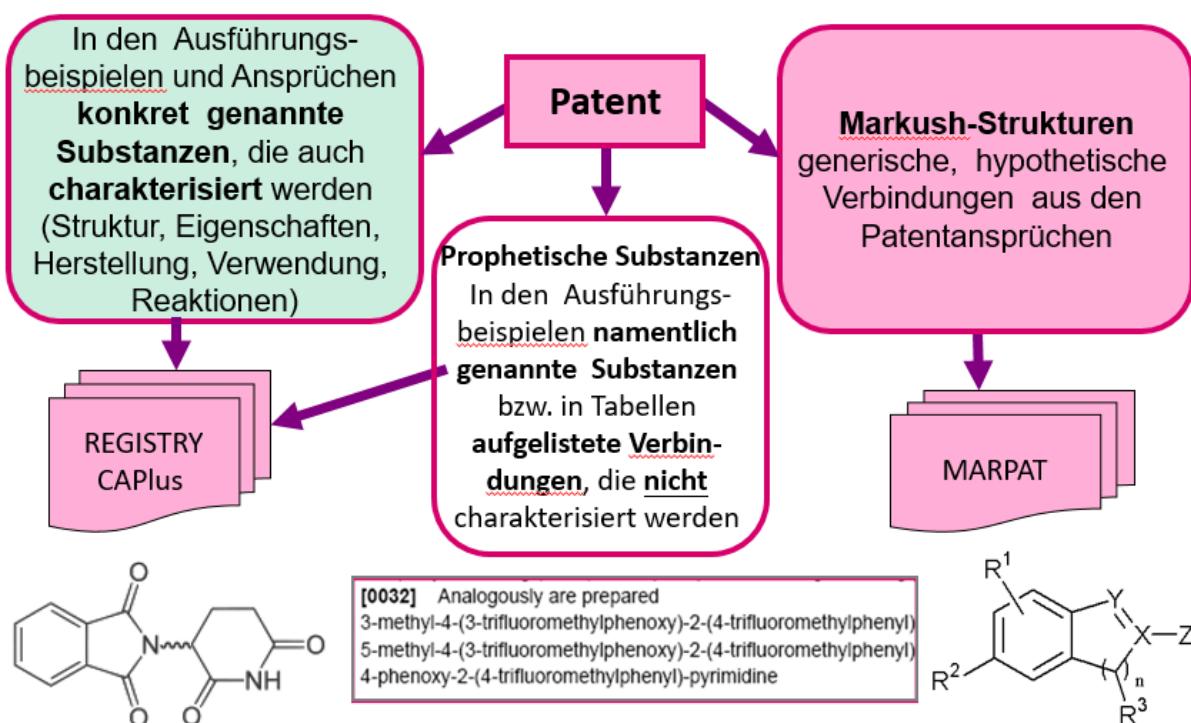
Hinweis: Die automatisierte „Prior Art Analysis“ ersetzt keine sorgfältig durchdachte und durchgeführte manuelle Recherche. Sie ist eine gute Ergänzung oder kann den Start erleichtern!

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

16.4.1. Was sind Markush-Strukturen?

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

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



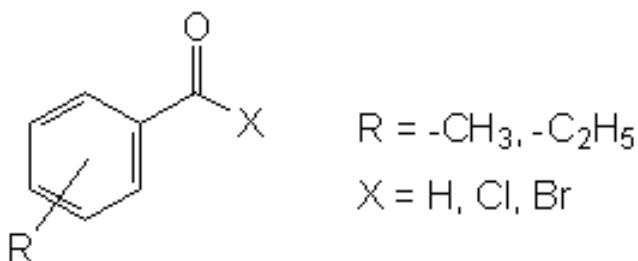
- Hypothetische Verbindungen, die generisch beschrieben sind, sogenannte Markush-Strukturen.
Diese Stoffe haben keine CAS-Registry-Nummer, sie sind nicht über eine normale Struktursuche auffindbar, sondern **nur mit einer Markush-Struktursuche**.

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

Claims:

- 95
- The process for the manufacture of dyes which comprises coupling with a halogen-substituted pyrazolone, a diazotized un-sulphonated material selected from the group consisting of aniline, homologues of aniline and halogen substitution products of aniline.
 - The process for the manufacture of dyes which comprises coupling with a halogen-substituted pyrazolone, a diazotized un-sulphonated material selected from the group consisting of aniline, homologues of aniline and halogen substitution products of aniline. 105

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

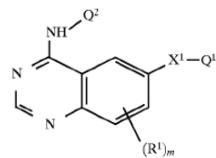


Eine Markush-Formel repräsentiert sehr **viele** potentielle chemische Substanzen (Beschreibung einer ganzen Verbindungsklasse). Dadurch kann in **einer** Patentschrift eine **große Zahl** verschiedener, einander ähnlicher Verbindungen abgedeckt werden.

Typisches Beispiel für Markush-Strukturen in den Ansprüchen des Patentes US 5866572**„Quinazoline derivatives“**

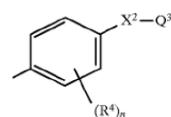
What we claim is:

1. A quinazoline derivative of the formula I



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

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



wherein X^2 is a group of the formula CO , $\text{C}(\text{R}_3)_2$, $\text{CH}(\text{OR}^3)$, $\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{C}(\text{R}^3)_2$, $\text{C}(\text{R}^3)=\text{C}(\text{R}^3)$, $\text{C}\equiv\text{C}$, $\text{CH}(\text{CN})$, O , S , SO_2 , $\text{N}(\text{R}^3)$, $\text{CON}(\text{R}^3)$, $\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^3)$, $\text{N}(\text{R}^3)\text{CO}$, $\text{N}(\text{R}^3)\text{SO}_2$, $\text{OC}(\text{R}^3)_2$, $\text{SC}(\text{R}^3)_2$, $\text{C}(\text{R}^3)_2\text{O}$ or $\text{C}(\text{R}^3)_2\text{S}$ wherein each R^3 is independently hydrogen or (1-4C)alkyl, Q^3 is phenyl or naphthyl or a 5- or 6-membered heteroaryl moiety containing up to 3 heteroatoms selected from oxygen, nitrogen and sulphur, which heteroaryl moiety is a single ring or is fused to a benzo ring, and wherein said phenyl or naphthyl group or heteroaryl moiety optionally bears up to 3 substituents selected from halogeno, trifluoromethyl, cyano, hydroxy, amino, nitro, carboxy, carbamoyl, (1-4C)aloxycarbonyl, (1-4C)alkyl, (1-4C)alkoxy, (1-4C)alkylamino, di-[(1-4C) alkyl]amino, (2-4C)alkanoylamino, N-(1-4C) alkylcarbamoyl and N,N-di-[(1-4C)alkyl]carbamoyl, n is 1.

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

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



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

Beispiel: Suche nach Substanzen mit Thalidomid-Grundstruktur

Ergebnis der Markush-Struktursuche: Patent Markush Match

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

Die gefundenen Patente lassen sich nach den ausstellenden Patentämtern filtern.

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

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

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

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

82 von 125

What is claimed is:

A compound of formula (I), a stereoisomer or a mixture of stereoisomers, a pharmaceutically acceptable salt, or hydrate thereof:

Formula (I)

wherein:

R^1 is selected from H, C_1-C_6 acyl or C_1-C_6 alkyl, each of which is substituted with 0, 1, 2, or 3 R^6 ;

R^2 and R^3 are each independently selected from H, C_1-C_3 alkyl, or C_1-C_3 haloalkyl, each of which is substituted with 0, 1, 2, or 3 R^6 ;

each R^4 is independently selected from H, hydroxyl, C_1-C_4 alkyl, C_1-C_4 alkoxy, or C_1-C_4 haloalkyl, each of

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

Beispiel:

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



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

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

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

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

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

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

Erfinder

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

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

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

Patentnummer

Publication Information - Patent

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

Assignee
Grünenthal G.m.b.H.,
Germany

Source
Germany
CODEN: GWXXBX

Database Information
AN: 2001394098
CAN: 135408
Cplus

Language
German

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

Patentanmelder, -inhaber

Patent Family

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
DE19957342	German	A1	PDF	2001-05-31	DE1999-19957342	1999-11-29
WO2001039758	Undetermined	A2			WO2000-EP111179	2000-11-11
AU200113938	English	A			AU2001-13938	2000-11-11
WO2001039758	Undetermined	A3			WO2000-EP111179	2000-11-11
US20030021763	Undetermined	A1			US2002-156771	2002-06-29

Zur Patentfamilie gehörende Äquivalenz-Patente

Priority Application

Priority Application Number	Application Date
DE1999-19957342	1999-11-29
WO2000-EP111179	2000-11-11

Patentfamilie

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

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

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

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

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

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

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

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

PatentPak-Optionen zur Ansicht des Originalpatentes:

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

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

Nach Anklicken von „PDF+“ öffnet sich das Patentdokument als reine PDF Datei.
Im Anschluss an den eigentlichen Patenttext findet man ab Seite 102 die Tabelle mit allen im Patent aufgeführten chemischen Verbindungen.

PatentPak - Full Text - Substances (257)

Patent Language Kind Code PatentPak Options

US20100239576 English A1 PDF PDF+ Viewer

PATENTPAK A CAS SOLUTION Substance table begins on page 102

US 20100239576A1

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

(54) AMINO ESTER DERIVATIVES, SALT(S) THEREOF AND METHODS OF USE
(76) Inventor: Ning Xi, Thousand Oaks, CA (US)
Correspondence Address:
Ning Xi
565 Timberwood Ave.
Thousand Oaks, CA 91360 (US)
(21) Appl. No.: 12/728,153
(22) Filed: Mar. 19, 2010
(52) U.S. Cl. 424/133.1; 546/153; 514/312;

A6IK 31/704 (2006.01)
A6IK 31/708 (2006.01)
A6IK 31/661 (2006.01)
A6IK 31/573 (2006.01)
A6IP 35/04 (2006.01)
A6IP 37/06 (2006.01)
A6IP 35/02 (2006.01)
A6IP 1/04 (2006.01)
C12N 5/02 (2006.01)
C12N 9/12 (2006.01)
C12N 9/99 (2006.01)

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

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-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-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, (2 <i>E</i>)-2-butenedioate (1:2)	

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

4 von 119

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

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

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

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

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

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

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

16.7. PatentPak Viewer

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

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

Weitere Möglichkeiten im „*PatentPak Viewer*“

CAS Registry Number: 1245931-31-0

Key Substances in Patent

CAS RN
1245931-31-0

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

Analyst Markup Locations (1)
Page 63

Key Physical Properties

Value	Condition
733.74	-

Other Names and Identifiers

- ✓ Predicted Properties
- ✓ Bioactivity Indicators
- ✓ Target Indicators

Klickt man auf die

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

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

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

PAGE 63 /101 ZOOM DOWNLOAD PDF PDF+

Key Substances in Patent

CAS RN
1245931-31-0

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

Analyst Markup Locations (1)
Page 63

1245931-32-1

1245931-34-3

US 2010/0239576 A1 Sep. 23, 2010

Components: 2

CAS RN
1245931-31-0

CAS Name
Glycine, *N*-methyl-, (1*R*)-2-[4-[[[3-fluoro-4-[(7-methoxy-4-quinolinyloxy)phenyl]...]

Components: 2

Get Substance Details (highlighted in yellow)

Get Bioactivity Data

Get Reactions (3) (highlighted in blue)

Synthesize (3) (highlighted in orange)

Start Retrosynthetic Analysis (highlighted in green)

Get References (2) (highlighted in purple)

Get Suppliers (0)

Edit Structure - Reset +

16.8. Welche Informationen liefert das Deckblatt eines Patentes?

<p></p> <p>BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND</p> <p>DEUTSCHES PATENT- UND MARKENAMT</p>	<p>Offenlegungsschrift</p> <p>DE 199 57 342 A 1</p> <p>Int. Cl.⁷: A 61 K 38/19 A 61 K 31/4025 A 61 P 29/00 A 61 P 5/48</p>
<p>(11) Anmelder: Grünenthal GmbH, 52078 Aachen, DE</p> <p>(21) Aktenzeichen: 199 57 342.5 (22) Anmeldetag: 29. 11. 1999 (30) Offenlegungstag: 31. 5. 2001</p>	
<p>(21) Anmelder: Grünenthal GmbH, 52078 Aachen, DE</p> <p>(22) Erfinder: Frosch, Stefanie, Dipl.-Biol. Dr., 52078 Aachen, DE; Germann, Tieno, Dr., 52134 Herzogenrath, DE</p> <p>(30) Für die Beurteilung der Patentfähigkeit in Betracht zu ziehende Druckschriften:</p> <p>WO 97 41 844 A1 WO 40 269 A2 WO 10 552 A2</p> <p>GALLILY,R.,et.al.: Mycoplasma fermentans - Induced inflammatory response of astrocytes: Selective modulation by aminoguanidine, thalidomide, pentoxyfylline and IL-10. Inflammation, 1996, 23/6, S.495-505; PISCITELLI,S.C.: Use of immunomodulation for the treatment of HIV infection. ASHP Annual Meeting, 1998, Vol.55, June, S.35;</p>	
<p>Die folgenden Angaben sind den vom Anmelder eingereichten Unterlagen entnommen</p> <p>(54) Verfahren zur Behandlung und/oder Prophylaxe von IL-12-bedingten Erkrankungen</p> <p>(55) Es wird eine Kombinationstherapie zur Behandlung von Erkrankungen, die durch die Bildung des entzündungsfördernden Zytokins IL-12 hervorgerufen werden, beschrieben, wobei gleichzeitig eine Thalidomidverbindung und ein antiinflammatorisches Zytokin appliziert werden.</p>	

Nummern zur Identifikation bibliografischer Daten

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

17. „*CAS Analytical Methods*“

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

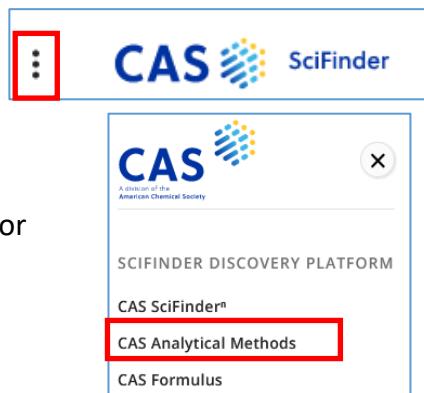
„*CAS Analytical Methods*“ bietet Schritt-für-Schritt-Anleitungen/Vorschriften zu analytischen Verfahren, u.a. in Bereichen wie der Pharmakologie, Lebensmittelanalyse, Wasseranalyse, Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) und Isolierung von Naturstoffen.

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

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

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

- Die bekannten Login-Daten für SciFinder erlauben auch den Zugriff auf „*CAS Analytical Methods*“.
- Der Zugang erfolgt entweder direkt über <https://methods.cas.org> oder - wenn man bereits in SciFinder eingeloggt ist - einfach mit Klick auf die drei Punkte vor dem CAS-Logo und Auswahl von „*CAS Analytical Methods*“.
- Wurden bereits Suchen in „*CAS Analytical Methods*“ durchgeführt, dann werden diese auf der Startseite bei „*Recent Searches*“ angezeigt.



17.2. Wie suche ich in “CAS Analytical Methods”?

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

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

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

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

Analysis of Caffeic acid in Red wine by Solid phase extraction

CAS MN: 1-124-CAS-10426

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

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

Source

An amperometric biosensor for polyphenolic compounds in **red wine**
Gomes, S. A. S. S.; Nogueira, J. M. F.; Rebelo, M. J. F.
Biosensors & Bioelectronics (2004), 20 (6), 1211-1216. Elsevier B.V.
CODEN: BBIOE4 ISSN : 09565663 DOI : 10.1016/j.bios.2004.05.013

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

Equipment Used

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

Conditions

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

Instructions

Reagent Preparation

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

Solid phase extraction (SPE)

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

HPLC analysis

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

17.3. Wie vergleicht man Methoden miteinander?

- Bis zu drei Verfahren lassen sich tabellarisch miteinander vergleichen.
- Dazu wählt man bis zu drei Methoden aus, indem man auf den „**Add to Compare**“-Button klickt und den Vergleich dann mit einem Button oben rechts auf der Seite aufruft.
- Man erhält eine Tabelle mit den ausgewählten Methoden angezeigt, die sich auch als PDF- oder XLS-Datei exportieren und herunterladen lässt.

Comparing your 3 selected Methods

Expand All Collapse All

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

17.4. Erweiterte Suche in „CAS Analytical Methods“

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

The screenshot shows the 'Advanced Search' page. In the 'Keyword' field, 'vitamin e' is entered. Below it, under 'Method Category', 'food analysis' is selected. Under 'Technique', 'hplc' is selected. The search results list includes 'vitamin e phosphate', 'vitamin e succinate', and 'vitamin e, butanedioate'.

This screenshot shows the same search setup as above, but with more detailed criteria. The 'Method Category' is explicitly set to 'food analysis' and the 'Technique' is explicitly set to 'hplc'. The search results remain the same.

- Das Ergebnis dieser Suche sieht so aus:

The screenshot displays the search results for a custom query. The search bar at the top contains 'vitamin e'. The results table shows two entries:

Rank	Title	Details
1	Analysis of (+)-α-Tocopherol in Sea buckthorn glyceridic oil by Solvent extraction	By: Aksoz, Elif; Korkut, Oguzhan; Aksit, Dilek; Gokbulut, Cengiz Vitamin E (α , β + γ and δ -tocopherol) levels in plant oils Flavour and Fragrance Journal (2020), 35 (5), 504-510. John Wiley & Sons Ltd. Analyte: (+)- α -Tocopherol; β -Tocopherol; δ -Tocopherol; (+)- γ -Tocopherol; Tocopherols Matrix: Apricot kernel oil; Sunflower oil; Safflower oil; Corn oil; Castor oil; Hemp oil; Fats and Glyceridic oils, pumpkin seed; Hazelnut oil; Sea buckthorn glyceridic oil Other Materials: Material: Nucleosil C18 analytic column (Zorbax Rx, 3 μ , 150 \times 4.6 mm) Method Category: Food Analysis Technique: Fluorescence spectroscopy; HPLC; Solvent extraction Equipment Used: HPLC system; Fluorescence detector
2	Analysis of β-Tocopherol in Oryza sativa by Soxhlet extractor	By: Karladee, Dunnern; Boonsit, Panita; Suriyong, Sangtiwa; Sringsarm, Korawan Antioxidant capacities of vitamin E (tocopherols) in purple rice (<i>Oryza sativa L. Indica</i>), perilla (<i>Perilla frutescens L.</i>) and sesame (<i>Sesamum indicum</i>) Agricultural Technology (2013), 9 (1), 177-191. Association of Agricultural Technology in Southeast Asia (AATSEA) Analyte: DL- γ -Tocopherol; β -Tocopherol; (+)- α -Tocopherol Matrix: <i>Oryza sativa</i> ; <i>Sesamum indicum</i> ; <i>Perilla frutescens</i> ; Bran Reagent: Dichloromethane Material: Thimble; Injector; Pinnacle DB silica column (5 μ , 250 \times 46 mm); Guard column (5 cm \times 4.6 mm I.d. with 40 μ m silica)

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

- „Blättermodus“ für eine schnelle Durchsicht thematisch vorsortierter Analysemethoden

The screenshot shows the main landing page of the CAS Analytical Methods website. At the top right, there is a red box highlighting the "Explore Methods" button, which features a binocular icon. Below the header, there is a search bar and two main navigation options: "Advanced Search" (with a magnifying glass icon) and "Explore Methods". The "Explore Methods" section is described as "Search methods using criteria like method categories and subcategories."

- Auswahl der Analysemethoden nach Fachgebietskategorien und -unterkategorien.

Diese können mit zusätzlichen Suchworten spezifiziert werden.

This screenshot shows the "Explore Methods" search interface. On the left, there are two columns of method categories: "Method Category" (Agricultural Applications / Analysis, Bioassays, Biomolecule Isolation, Environmental Analysis, Food Analysis, Fuels / Geology / Biofuels, Historical Analysis / Dating, Miscellaneous, Organic Compound Analysis, Organometallics / Inorganics, Pharmacology / Toxicology, Polymer Analysis, Water Analysis) and "Method Subcategory" (Antioxidant Assay, Fatty Acid Analysis, Fatty Acid Ester Analysis, Food Analysis, Pesticide Residue Analysis, Protein Analysis). A third column on the right contains a search bar for "Include Keywords" with the term "mass spectrometry" entered, and a "Search Methods" button at the bottom right.

- Die gefundenen Treffer können wie bei einer gezielten Suche mittels der Filter eingegrenzt werden:
 - Analyt
 - Analyse-Matrix
 - Methodenkategorie
 - Technik
 - Publikationsjahr

This screenshot displays the search results for "Pesticide Residue Analysis +1 Keyword". The results are filtered by "Analyte" (Chlorantraniliprole), "Matrix" (Solanum tuberosum), and "Technique" (HPLC-tandem mass spectrometry). The results list includes the title of the first result: "Analysis of Chlorantraniliprole in Solanum tuberosum by Solid phase extraction" by Grant, Joann; Rodgers, Carol A.; Chickering, Clark D.; Hill, Sidney J.; Stry, James J., published in Journal of AOAC International (2010, 93 (4), 1293-1301). The interface includes a sidebar for filtering by analyte, matrix, other materials, method category, technique, equipment used, and year, along with buttons for "View Abstract", "Full Text", and "View in CAS SciFinder".

17.6. Navigation zwischen SciFinder und „CAS Analytical Methods“

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

Source
JOURNAL
An amperometric biosensor for polyphenolic compounds in red wine
Gomes, S. A. S. S.; Nogueira, J. M. F.; Rebelo, M. J. F.
Biosensors & Bioelectronics (2004), 20 (6), 1211 - 1216, Elsevier B.V.
CODEN : BBIOE4 | ISSN : 09565663 | DOI : 10.1016/j.bios.2004.05.013
View Abstract | Full Text | View in CAS SciFinder

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

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

CAS Concepts	
MEDLINE® Medical Subject Headings	
Substances	
Analytical Methods	
Title	CAS Method Number
Analysis of Caffeic acid in Red wine by Solid phase extraction	1-124-CAS-10426
Analysis of Caffeic acid in Red wine by Solid phase extraction	1-124-CAS-13394

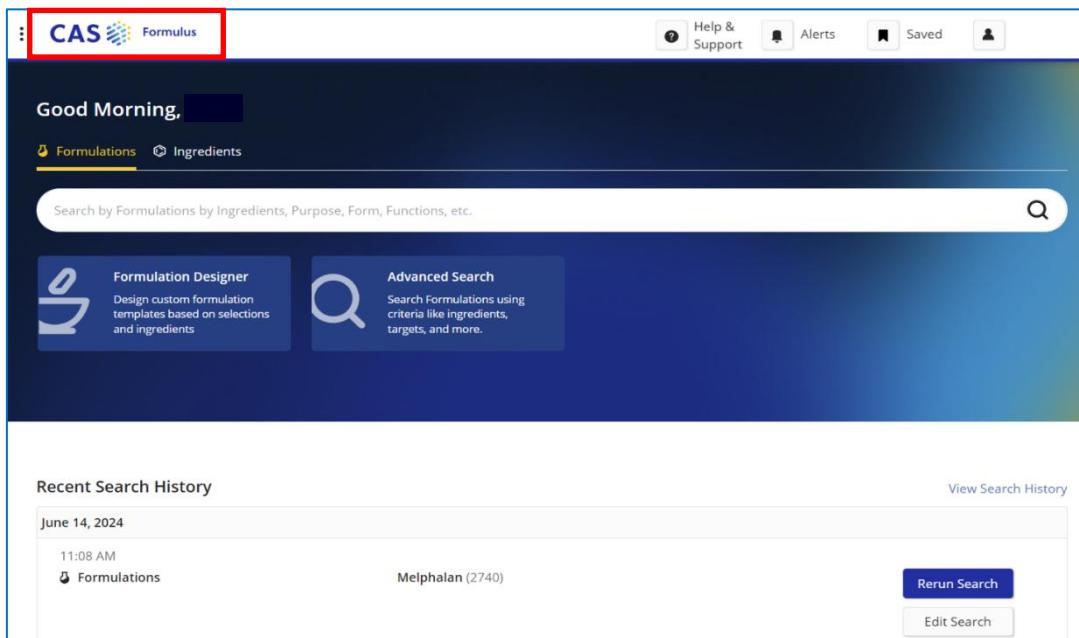
Aus einer Referenzliste lassen sich in SciFinder leicht die Publikationen ermitteln, die einen solchen Eintrag beinhalten. Dafür wird im Filter *CAS Solutions* die Option *Analytical Methods* ausgewählt.

References | "red wine"
CA Section
CAS Solutions
Analytical Methods (1,780)
Formulus (249)

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

18. „CAS Formulus“

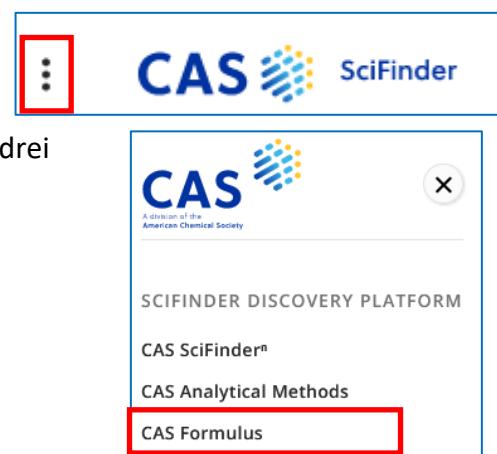
Hinweis (gilt nicht für die Uni Jena!): Falls Sie nicht auf „CAS Formulus“ zugreifen können, dann fragen Sie bitte in der örtlichen Bibliothek nach, ob es in Ihrer Einrichtung lizenziert ist. Dieser Teil ist nicht in jeder Organisation Teil der SciFinder-Lizenz.



18.1 Wie komme ich zu „CAS Formulus“?

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

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

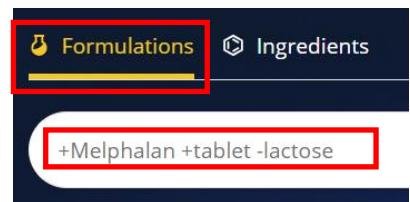


18.2 Was finde ich in „CAS Formulus“?

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

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

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



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

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

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

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

Advanced Formulations Search ?

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

Search For Operator Enter one term
Ingredient Required Melphalan
Ex: caffeine, sodium, 50-00-0

Search For Operator Enter one term
All Fields Required tablet
General search of all fields

Search For Operator Enter one term
Ingredient Excluded lactose
Ex: caffeine, sodium, 50-00-0

Add Another Term

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

Search (button highlighted with a red box)

Clear All

- Trefferliste dieser „Advanced Search“

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

Get Additional References

1,697 Results

Sort: Relevance ▾ Group: By Family ▾

Component	Function	Amount Reported
Group: chlorambucil or melphalan	Formulation active agents	-
Melphalan	Antitumor agents ^①	1-5 % by weight
Chlorambucil	Antitumor agents ^①	1-5 % by weight
Cellulose	-	20-95 % by weight

^① Predicted value

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

Add to Compare

PATENT
Pharmaceutical compositions containing chlorambucil or melphalan
US20040034099
Language: English

Patent PDF View in CAS SciFinder®

View Formulation Detail

40,486 Similar Formulations - View All

Pharmaceutical Composition

Einzeltreffer der „Advanced Search“

[Save](#)

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

Formulation Ingredients

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

More Formulations like this...

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

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

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

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

Process

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

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

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

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

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

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

Stage 1 conditions: 20 to 40 min

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

Experimental Activity

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

Source Patent

Pharmaceutical compositions containing chlorambucil or melphalan
US20040034099
Language: English
Location: Example 1, 3

[Patent PDF](#) [View in CAS SciFinder](#)

Copyright © 2024 American Chemical Society. All Rights Reserved.

[Help](#) [Contact Us](#) [Legal](#)

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

The screenshot shows the top navigation bar of the CAS Formulus software. There are two main tabs: 'Formulations' and 'Ingredients'. The 'Ingredients' tab is highlighted with a yellow background and a red rectangular box drawn around it. Below the tabs, there is a search bar containing the text 'Melphalan'.

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

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

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

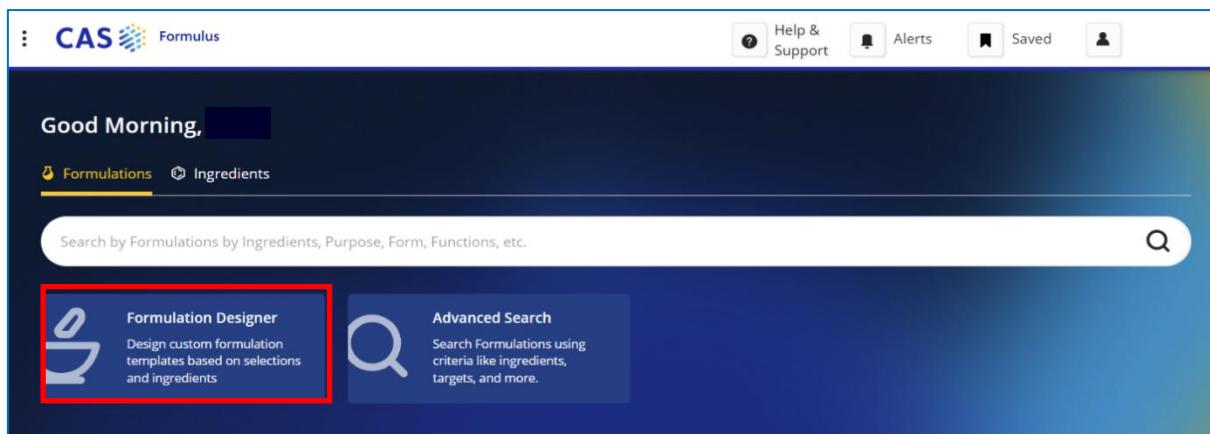
This screenshot shows the detailed information page for Melphalan in the CAS Formulus system. At the top, it displays the CAS RN: 148-82-3 and the chemical structure of Melphalan. The structure is a substituted amine derivative with a central carbon atom bonded to a hydroxyl group (HO), an amino group (NH₂), a phenyl ring, and a chloromethyl group (-CH₂Cl). Below the structure, its chemical formula is given as C₁₃H₁₈Cl₂N₂O₂.

Melphalan	Key Physical Properties	Value	Condition
	Molecular Weight	305.20	-
	Melting Point (Experimental)	182-183 °C (decomp)	-
Commonly Used As: Antitumor agents; Alkylating agents; Antiproliferative agents; Cytotoxic agents; Topoisomerase inhibitors...			
Similar Ingredients with Regulatory Information			
3223-07-2	Melphalan hydrochloride		
View Details			

At the bottom of the page, there are several navigation links and buttons:

- [View in CAS SciFinder](#)
- [Get Formulations](#)
- [Suppliers](#)
- [Add to Formulation Designer](#)
- [Commonly Used As](#)
- [Commonly Formulated With](#)
- [Similar Ingredients with Regulatory Information](#)
- [Regulatory Information](#)
- [Experimental Properties](#)
- [Other Names](#)

18.5 „Formulation Designer“



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

The screenshot shows the 'Formulation Designer' interface. On the left, there are dropdown menus for 'Industry' (selected: 'Cleaning & Surfactant Products') and 'Purpose' (selected: 'Oral hygiene products'). The 'Physical Form' dropdown is set to 'Tablets'. In the center, there's a section titled 'Add up to 5 Ingredients' with a text input field containing 'xylitol'. Below it is a placeholder 'Enter a query...'. A '+ Add Another Ingredient' button is available. At the bottom right of the interface, a blue button labeled 'Create Template' is highlighted with a red box.

Formulation Designer ?

Clear All Selections

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

Edit Selections Save Download

Your Template

Unit Size mg Go Clear

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

18.6 Navigation zwischen SciFinder und „CAS Formulus“

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

PATENT

Pharmaceutical compositions containing chlorambucil or melphalan

US20040034099
Language: English

[Patent PDF](#) [View in CAS SciFinder](#)

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

Pharmaceutical Composition

[View CAS Formulus® Detail](#)

Location: Example 2, 4
Purpose: Drugs

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

Additional Components Reported in Full Text

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

The screenshot shows the SciFinder interface with the following elements:

- The top navigation bar includes the CAS SciFinder logo and a "References" dropdown menu set to "red wine".
- The left sidebar has a tree view of search filters:
 - CA Section (selected)
 - CAS Solutions (expanded, showing Formulus)
 - Analytical Methods (1,780)
 - Formulus (249) (highlighted with a red box)
- The main search results area displays a partial text snippet about the aroma of red wine.



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