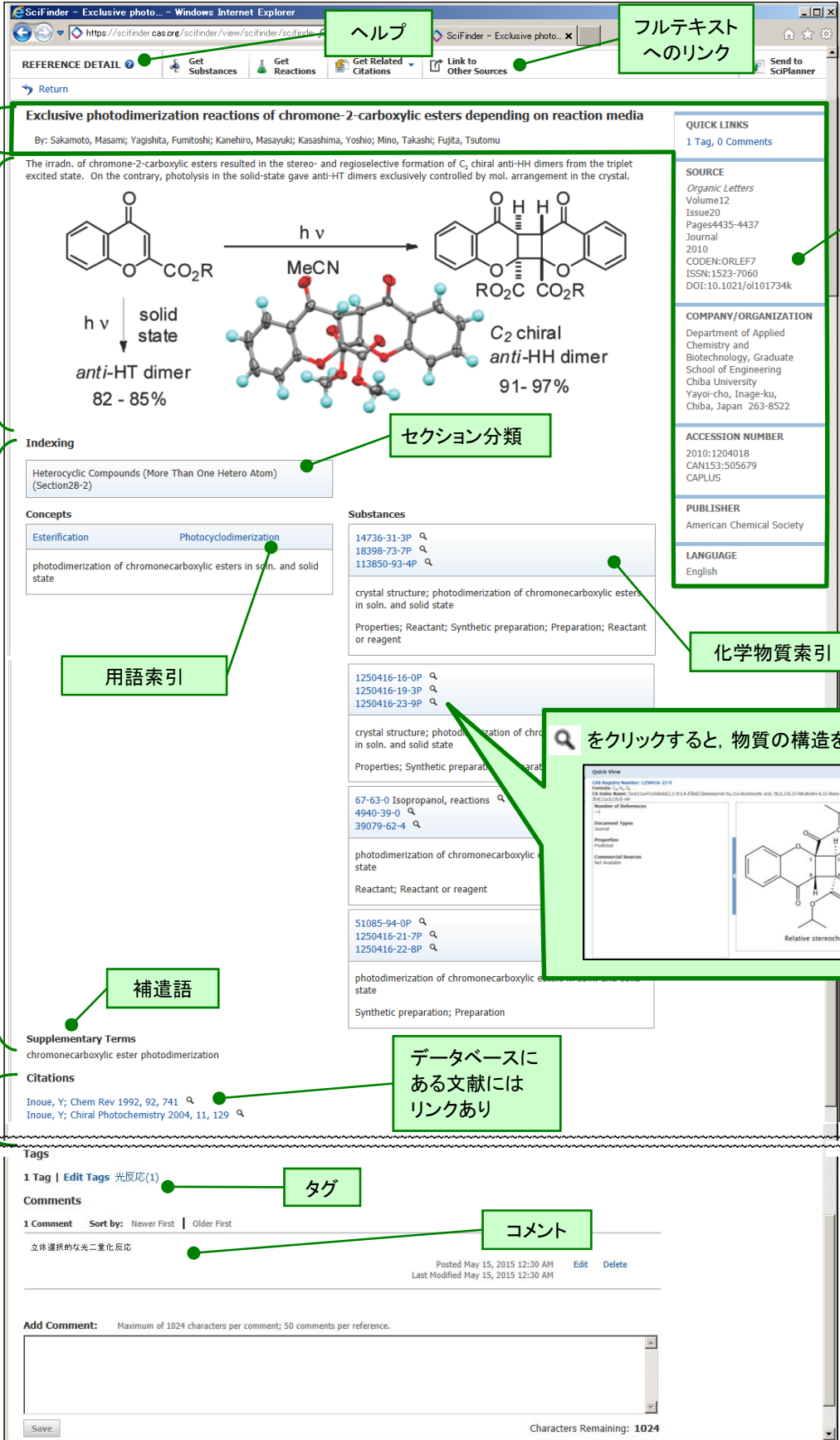


◆ 文献情報 (CAplus ファイル)



**ヘルプ**      **フルテキストへのリンク**

**書誌情報**

**抄録**

**索引**

**用語索引**

**補遺語**

**参考文献**

**タグ**

**コメント**

**データベースにある文献にはリンクあり**

**化学物質索引**

**セクション分類**

**をクリックすると、物質の構造を確認できる**

**・タイトル**  
**・著者名**  
**・雑誌名**  
**・所属機関**

**Quick Links**  
1 Tag, 0 Comments

**SOURCE**  
Organic Letters  
Volume 12  
Issue 20  
Pages 4435-4437  
Journal  
2010  
CODEN: ORLEF7  
ISSN: 1523-7060  
DOI: 10.1021/ol101734k

**COMPANY/ORGANIZATION**  
Department of Applied  
Chemistry and  
Biotechnology, Graduate  
School of Engineering  
Chiba University  
Yayoi-cho, Inage-ku,  
Chiba, Japan 263-8522

**ACCESSION NUMBER**  
2010:1204018  
CAN153:505679  
CAPLUS

**PUBLISHER**  
American Chemical Society

**LANGUAGE**  
English

**Indexing**  
Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom)  
(Section 28-2)

**Concepts**  
Esterification      Photocyclodimerization  
photodimerization of chromonecarboxylic esters in soln. and solid state

**Substances**  
14736-31-3P  
18398-73-7P  
113850-93-4P  
crystal structure; photodimerization of chromonecarboxylic esters in soln. and solid state  
Properties; Reactant; Synthetic preparation; Preparation; Reactant or reagent  
1250416-16-0P  
1250416-19-3P  
1250416-23-9P  
crystal structure; photodimerization of chromonecarboxylic esters in soln. and solid state  
Properties; Synthetic preparation; Preparation; Reactant or reagent  
67-63-0 Isopropanol, reactions  
4940-39-0  
39079-62-4  
photodimerization of chromonecarboxylic esters in soln. and solid state  
Reactant; Reactant or reagent  
51085-94-0P  
1250416-21-7P  
1250416-22-8P  
photodimerization of chromonecarboxylic esters in soln. and solid state  
Synthetic preparation; Preparation

**Supplementary Terms**  
chromonecarboxylic ester photodimerization

**Citations**  
Inoue, Y; Chem Rev 1992, 92, 741  
Inoue, Y; Chiral Photochemistry 2004, 11, 129

**Tags**  
1 Tag | Edit Tags 光反応(1)

**Comments**  
1 Comment    Sort by: Newer First | Older First  
立体選択的な光二重化反応  
Posted May 15, 2015 12:30 AM    Edit    Delete  
Last Modified May 15, 2015 12:30 AM

**Add Comment:** Maximum of 1024 characters per comment; 50 comments per reference.  
Characters Remaining: 1024

➤ 文献情報の詳細・・・上記画面の ? をクリックし、表示されるヘルプページ右上の日本語をクリック

## レコード例

### ◆ 物質情報 (REGISTRY ファイル)

**ヘルプ**

**リンクボタン (次ページ)**

**CAS 登録番号**

**CAS の正式名称**

**代表的な物性値**

**物質名称 (慣用名や商品名なども表示)**

**クリックすると詳細情報表示**

**実験物性値 (下部参照)**

**実験スペクトル**

**予想物性値**

**予想スペクトル**

**既存化学物質リスト情報**

**Bioactivity Indicator**

**Target Indicator**

**文献種別一覧**

**その他の情報**

**種類ごとにタブで表示**

**参考文献タブ**

**数値データ**

**物性値 出典**

**EXPERIMENTAL PROPERTIES**

Biological Properties	Value	Condition	Note
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion)	See full text	1 of 22	(2)CAS
Half-Life (Biological)	See full text	1 of 8	(19)CAS
LC50	See full text	1 of 3	(25)CAS
LD50	See full text		(26)CAS
Median Lethal Dose(LD50)	355 mg/kg		(30)APC
Median Lethal Dose(LD50)	265 mg/kg	Organism: rat Route: subcutaneous	(31)CAS
Median Lethal Dose(LD50)	246 mg/kg	Organism: rabbit Route: oral	(30)APC
Median Lethal Dose(LD50)	230 mg/kg	Organism: hamster Route: oral	(30)APC
Median Lethal Dose(LD50)	220 mg/kg	cutaneous	(31)CAS
Median Lethal Dose(LD50)	200 mg/kg	Organism: rat Route: oral	(32)CAS
Median Lethal Dose(LD50)	155 mg/kg	Organism: rat Route: subcutaneous	(31)CAS
Median Lethal Dose(LD50)	127 mg/kg	Organism: mouse Route: oral	(30)APC
NOAEL/LOAEL	See full text		(53)CAS

**Notes**

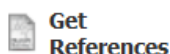
(2) Poulin, Patrick; Journal of Pharmaceutical Sciences 2009, V98(12), P4941-4961 CAPLUS

(19) Haller, Christine A.; Clinical Pharmacology & Therapeutics (St. Louis, MO, United States) 2004, V75(4), P259-273 CAPLUS

➤ 物質情報の詳細・・・上記画面の ? をクリックし、表示されるヘルプページ右上の日本語をクリック

## レコード例

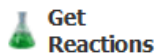
### 【リンクボタン】



Get  
References

#### 文献へのリンクボタン

その物質が索引されている文献を検索することができます。



Get  
Reactions

#### 反応へのリンクボタン

その物質が関与する反応を検索することができます。



Get Commercial  
Sources

#### カタログ情報へのリンクボタン

カタログ情報（供給業者，価格，包装単位）を見ることができます。

### 【既存化学物質リスト・規制化学物質リスト情報】

日本の化審法，米国の TSCA，EU の REACH など，各国や地域の既存化学物質リストの情報や規制化学物質リスト情報を見ることができます。

※CAS 登録番号の付与された化学物質に限定されるので，総称名物質の多い日本や韓国のリスト上の記載の有無をこれのみで判断することはできません。

### 【スペクトル表示】

スペクトル情報中の“See spectrum”をクリックすると，スペクトルが表示されます。

〈現在表示可能なスペクトル値〉

- $^1\text{H}$ -NMR
- $^{17}\text{O}$ -NMR
- IR
- $^{11}\text{B}$ -NMR
- $^{19}\text{F}$ -NMR
- MASS
- $^{13}\text{C}$ -NMR
- $^{29}\text{Si}$ -NMR
- ラマン
- $^{15}\text{N}$ -NMR
- $^{31}\text{P}$ -NMR

The screenshot displays the 'EXPERIMENTAL SPECTRA' section of a software interface. On the left, a table lists 'Carbon-13 NMR Spectrum' entries with a 'See spectrum' link highlighted in red. A red arrow points from this link to the main spectrum plot. The plot shows 'Carbon-13 NMR Spectrum' with 'arbitrary intensity' on the y-axis (0 to 1) and 'ppm' on the x-axis (200 to -20). Below the plot is the chemical structure of caffeine: CN1C=NC2=C1C(=O)N(C(=O)N2C)C. On the right, a metadata panel provides details: SPECTRUM ID (NC\_12214), CAS REGISTRY NUMBER (58-08-2), FORMULA (C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>), CAS INDEX NAME (1-#Purine-2,6-dione, 3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl-), SPECTROMETER (VARIAN CFT-20), SOLVENT (Chloroform-d (865-49-6)), STANDARD (tetramethylsilane (75-76-3)), NUCLEUS (13C), and SOURCE (Copyright Bio-Rad Laboratories. All Rights Reserved.). A green box at the bottom right contains the text 'スペクトル情報の出典' (Source of spectral information) with a green dot pointing to the SOURCE field in the metadata panel.

## レコード例

### ◆ 化学反応情報 (CASREACT ファイル)

**8. Single Step** Hover over any structure for more options.

**ヘルプ**

**SOURCE**  
Aqueous-phase Suzuki-Miyaura cross-coupling reactions of free halopurine bases  
Capek, Petr; Vrabel, Milan; Hasnik, Zbynek; Pohl, Radek; Hocek, Michal  
Synthesis  
Issue 20  
Pages 3515-3526  
Journal  
2006

**COMPANY/ORGANIZATION**  
Gilead & IOCB Research Center, Institute of Organic Chemistry and Biochemistry Academy of Sciences of the Czech Republic  
Prague, Czech Rep.  
16610/6

**Yield**  
92%

**Experimental Procedure**  
**SYNTHESIS**  
General/Typical Procedure: Cross-Coupling Reactions: General Procedure A mixture of H<sub>2</sub>O-MeCN (2:1, 5 mL) was added through a septum to an argon-purged vial containing halopurine (0.8 mmol), boronic acid (1 mmol), Pd(OAc)<sub>2</sub> (9 mg, 0.04 mmol), (3-NaO<sub>2</sub>SC<sub>2</sub>H<sub>3</sub>3P (114 mg, 0.2 mmol), and Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (782 mg, 2.4 mmol). The mixture was stirred under microwave irradiation heating at 150 °C for 5 min. The product crystallized directly from the mixture after cooling to 4 °C or it was isolated from the crude mixture by HPLC (C18 column, linear gradient of 0.3% AcOH-H<sub>2</sub>O to 0.3% AcOH-MeOH). An analytical sample of the products was recrystallized (H<sub>2</sub>O-MeOH or EtOH mixtures). **2,6-Diphenyl-9H-purine (12a)** Prepared from 2,6-dichloro-9H-purine (**10**) and boronic acid **2a** (3 equiv). Isolated by crystallization from the reaction mixture to give **12a** (200 mg, 92%). mp 280-294 °C. IR (KBr): 3437, 3062, 2995, 2830, 1611, 1587, 1561, 1413, 1372, 1249, 1126, 879, 763, 690, 631 cm<sup>-1</sup>. <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>): δ = 7.49-7.67 (m, 6 H, H-3', H-4', H-5', H-3'', H-4'', H-5''), 8.57 (m, 2 H, H-2'', H-6''), 8.65 (s, 1 H, H-8), 8.96 (m, 2 H, H-2', H-6'), 13.65 (br s, 1 H, NH). <sup>13</sup>C NMR (100.6 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>): δ = 127.90 (CH-2', CH-6'), 128.83 (C-5), 128.83 and 128.87 (CH-3', CH-5', CH-3'', CH-5''), 129.53 (CH-2'', CH-6''), 130.22 (CH-4''), 131.12 (CH-4'), 136.07 (C-1''), 138.24 (C-1'), 145.61 (CH-8), 152.04 (C-6), 155.07 (C-4), 157.31 (C-2). MS (FAB): *m/z* = 273 [M + H]<sup>+</sup>. HRMS (FAB): *m/z* calcd for C<sub>21</sub>H<sub>13</sub>N<sub>5</sub>: 273.1140; found: 273.1145. Anal. Calcd for C<sub>21</sub>H<sub>13</sub>N<sub>5</sub> (272.3): C, 74.98; H, 4.44; N, 20.58. Found: C, 74.42; H, 4.22; N, 20.52.

**カタログ情報へのリンク**

**出典**

**実験項情報**

- 反応情報の詳細・・・上記画面の ? をクリックし、表示されるヘルプページ右上の日本語をクリック

### 【反応情報の実験項収録状況 (2016 年 1 月現在)】

#### ◇ 雑誌論文

出版社	雑誌	収録年
ACS	全誌	1998 年～
Taylor & Francis	Synthetic Communications	1998 年～
	Journal of Coordination Chemistry Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements	
Springer	化学系 165 誌	1985 年～
上海有機化学研究所	Youji Huaxue, Huaxue Xuebao	1998 年～
Thieme	SYNLETT	1989 ～ 2013 年
	SYNTHESIS	1980 ～ 2013 年

#### ◇ 特許

公報言語	発行国	収録年
英語	US (アメリカ), EP (ヨーロッパ), WIPO (世界知的所有権機関), CA (カナダ), GB (イギリス)	2000 年～
日本語	JP (日本), WIPO (世界知的所有権機関)	2008 年～
ドイツ語	DE (ドイツ), EP (ヨーロッパ), WIPO (世界知的所有権機関)	

#### ◇ その他

Selected Organic Reactions Database (SORD) 由来の反応情報  
\* 学位論文由来の反応を収録したデータベース

1961 年～ 2011 年

## レコード例

### ◆ カタログ情報 (CHEMCATS ファイル)

Explore | Saved Searches | SciPlanner | Print | **Export**

Chemical Structure substructure > substances (14739) > refine "exact" (64) > commercial sources (357) > 4C Pharma Scientific Product L...

COMMERICAL SOURCES **ヘルプ**

Analyze by: Country

Commercial Source	Substance	Purity	Quantity	Purchasing Details	Stock Status	Ships Within
1. <b>4C Pharma Scientific Product List</b> Canada	608-07-1 2-(5-Methoxy-1H-indol-3-yl)ethanamine	95-98%	Grams	Order from Source 100g, USD 215.00	Intermittently available	4 weeks
2. A Chemtek Product List United States	66-83-1 5-Methoxytryptamine hydrochloride	95-98%	Grams	1g 5g	Intermittently available	
3. A Chemtek Product List United States	608-07-1 5-Methoxytryptamine	95-98%	Grams	1g 5g	Intermittently available	
4. A&A Life Science Product Listing United States	66-83-1 5-Methoxytryptamine hydrochloride	>=99%	Grams	Order from Source 1g, USD 45 10g, USD 170 Bulk Screening	Maintained in stock	1 week

日本に所在する業者および代理店のみの表示も可能

試薬購入ページへの直接リンク

### 【詳細情報の表示】

1. **4C Pharma Scientific Product List** Preferred

**カタログ名**

**よく利用する業者**

**注文番号**

**価格・包装単位**

**Excel フォーマットでの出力も可能**

**\* 複数物質の一括出力も可能です**

Commercial Source Information

Chemical Name: 2-(5-Methoxy-1H-indol-3-yl)ethanamine  
 Order Number: 4CH-018103  
 Purity: 95+%  
 Grade: ACS Reagent Grade  
 Quantity: 100g, Price: USD 215.00  
 Stock Status: Intermittently available  
 Ships Within: 4 weeks  
 Purity Category: 95-98%  
 Quantity Category: Grams  
 Pricing Information Last Updated: 18 Nov 2015

Substance Information

CAS Registry Number: 608-07-1  
 CAS Index Name: 1H-Indole-3-ethanamine, 5-methoxy-

Order from Source

Order Number	Chemical Name	CAS Index Name	Quantity	Price	Purity	Grade	Commercial Source
4CH-018103	2-(5-Methoxy-1H-indol-3-yl)ethanamine	1H-Indole-3-ethanamine, 5-methoxy-	100g	USD 215.00	95+%	ACS Reagent Grade	4C Pharma Scientific Product List
031-3408	5-Methoxytryptamine	1H-Indole-3-ethanamine, 5-methoxy-	1g 5g		95%		A Chemtek Product List
29530	5-Methoxytryptamine	1H-Indole-3-ethanamine, 5-methoxy-					ABA Life Science Product Listing
29530	5-Methoxytryptamine	1H-Indole-3-ethanamine, 5-methoxy-					ABA Life Science Product Listing
AB13501	2-(5-Methoxy-1H-indol-3-yl)ethanamine	1H-Indole-3-ethanamine, 5-methoxy-			95+%		AB Chem Product List
AB1005875	5-Methoxytryptamine	1H-Indole-3-ethanamine, 5-methoxy-	1g 5g	\$90 \$260	97%		Abela Chemicals Product List

カタログ情報のデータ搭載に関して  
 ご興味ございましたら、化学情報協会  
 CHEMCATS 担当 (TEL:03-5978-3606) まで、  
 お問い合わせください。

<http://www.jaici.or.jp/chemcats/chemcats.htm>

- カタログ情報の詳細・・・上記画面の ? をクリックし、表示されるヘルプページ右上の日本語をクリック

## レコード例

### ◆ 既存化学物質リスト情報 (CHEMLIST ファイル)

**SUBSTANCE DETAIL** [Get References](#) [Get Reactions](#) [Get Commercial Sources](#)

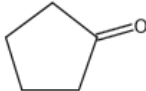
[Return](#)

**CAS Registry Number** 120-92-3

~13,788 ~126

**C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O**  
Cyclopentanone

**Molecular Weight**  
84.12



---

**REGULATORY INFORMATION** クリックすると詳細情報表示

Regulatory Synonyms

Cyclopentanone (English, French) (TSCA, IECSC, DSL, REACH, EINECS, ENCS, AICS, ECL, SWISS, PICCS, NZIoC, INSQ)  
Cyclopentanon (German) (EINECS, SWISS)  
ciclopentanona (Spanish) (EINECS, INSQ) 各既存化学物質リストの収載名称, 同義名  
Adipic ketone  
Adipin keton

---

Regulatory Overview by Country クリック

**Confidentiality Status**  
Public

- Australia
- Canada
- China
- European Union
- Japan** クリック
  - Inventory Status**  
On ENCS Japanese Gazette. Contained within class: Compounds of Unknown Structure.
  - Regulatory List Number**  
ENCS No.: 9-2108 ENCS No : 化審法番号
- Korea

---

各国の規制情報

- U.S. Department of Transportation (DOT) Regulations
- Canadian Regulations
- European Community Regulations
- Miscellaneous Regulations
- U.S. State Regulations
- File Segment

**File Segment**

AUSTRALIA: AICS  
CANADA: DSL, WHMIS  
CHINA: IECSC  
EEC: EINECS  
EU: CLP, REACH  
Harmonized Tariff Code: HTC  
JAPAN: ENCS  
KOREA: ECL  
MEXICO: INSQ  
NEW ZEALAND: NZIoC  
PHILIPPINES: PICCS  
SWITZERLAND: SWISS  
USA: DOT, STATE, TSCA

CAS 登録番号

化学物質名

既存化学物質  
リスト情報  
(国別に表示)

各国の  
規制情報

## レコード例

### ◆ 文献情報 (MEDLINE ファイル\*)

ヘルプ

REFERENCE DETAIL [Get Substances](#) [Get Related Citations](#) [Link to Other Sources](#) [Send to SciPlanner](#)

[Return](#)

**Up-regulated miR155 reverses the epithelial-mesenchymal transition induced by EGF and increases chemo-sensitivity to cisplatin in human Caski cervical cancer cells**

Lei Cui; Wang Yanlin; Huang Yurong; Yu Han; Huang Yiling; Wu Litong; Huang Liming

The epithelial-mesenchymal transition (EMT) induced by EGF promotes cervical cancer progression; however, the mechanisms underlying the EGF-induced EMT remain unclear. In this study, we reported that miR155 overexpression suppressed EGF-induced EMT, decreased migration/invasion capacities, inhibited cell proliferation and increased the chemo-sensitivity to DDP in human Caski cervical cancer cells. Further, the overexpression of miR155 increased TP53 expression but reduced SMAD2, and CCND1 expression levels. These data suggest that miR155 negatively regulates EGF-induced EMT. We conclude that miR155 does not act as an oncogene but as a tumour suppressor in Caski cells.

**Indexing**

**Concepts**

Check Tags: Female

Blotting, Western	Cell Line, Tumor
Cell Movement: GE, genetics	Cell Movement: PH, physiology
Cell Proliferation: DE, drug effects	<b>Cisplatin: PD, pharmacology</b>
<b>Epidermal Growth Factor: PD, pharmacology</b>	<b>Epithelial-Mesenchymal Transition: DE, drug effects</b>
Epithelial-Mesenchymal Transition: GE, genetics	Fluorescent Antibody Technique
<b>MicroRNAs: GE, genetics</b>	Humans
	<b>Uterine Cervical Neoplasms: GE, genetics</b>

**Substances**

Registry Numbers

- 62229-50-9 (Epidermal Growth Factor) 🔍
- 15663-27-1 (Cisplatin) 🔍

Chemical Names

MicroRNAs

**QUICK LINKS**  
0 Tags, 0 Comments

**SOURCE**  
*PLoS one*  
Volume7  
Issue12  
Pagese52310  
Journal; Article; (JOURNAL ARTICLE); (RESEARCH SUPPORT, NON-U.S. GOV'T)  
2012  
E-ISSN:1932-6203  
Journal Code:101285081  
United States

**COMPANY/ORGANIZATION**  
Department of Oncology, Zhongnan Hospital, Wuhan University, Wuhan, People's Republic of China

**ACCESSION NUMBER**  
2013263659  
PubMed ID:[23284982](#)  
MEDLINE

**LANGUAGE**  
English

**Indexing**

**Concepts**

Check Tags: Female

Blotting, Western  
Cell Movement: GE, genetics  
Cell Proliferation: DE, drug effects  
**Epidermal Growth Factor: PD, pharmacology**  
Epithelial-Mesenchymal Transition: GE, genetics  
**MicroRNAs: GE, genetics**

Cell Line, Tumor  
Cell Movement: PH, physiology  
**Cisplatin: PD, pharmacology**  
**Epithelial-Mesenchymal Transition: DE, drug effects**  
Fluorescent Antibody Technique  
Humans  
**Uterine Cervical Neoplasms: GE, genetics**

**Substances**

Registry Numbers

- 62229-50-9 (Epidermal Growth Factor) 🔍
- 15663-27-1 (Cisplatin) 🔍

Chemical Names

MicroRNAs

**索引語(MeSH ターム)**

**参考文献**

Ackland, Margaret L; Lab Invest 2003, 83, 435 🔍  
Ahmad, Aamir; Cancer Res 2011, 71, 3400 🔍  
Bracken, Cameron P; Cancer Res 2008, 68, 7846 🔍  
Castilla, Maria Angeles; J Pathol 2011, 223, 72 🔍  
Gironella, Meritxell; Proc Natl Acad Sci U S A 2007, 104, 16170 🔍

・タイトル  
・著者名  
・雑誌名  
・所属機関

\* PubMed の検索対象であるデータです。