

# CAS SciFinder Discovery Platform™

사용자 가이드

**CAS**

A division of the  
American Chemical Society



# 목 차

## CAS SciFinder Discovery Platform™

### ❖ CAS SciFinder-n

▪ <u>인터페이스</u> .....	2
▪ <u>문헌 검색</u> .....	3
▪ <u>물질명과 구조식 검색</u> .....	6
▪ <u>구조식 그리기</u> .....	8
▪ <u>Advance Search 검색어 지정하기</u> .....	9
▪ <u>CAS Roles</u> .....	10
▪ <u>Biosequence 검색</u> .....	11
▪ <u>반응식 검색</u> .....	13
▪ <u>역합성 플래너 (Retrosynthesis)</u> .....	15
▪ <u>Markush 검색 및 PatentPak (특허솔루션)</u> .....	18
▪ <u>선행 문헌 및 관련 문헌 검색</u> .....	19
▪ <u>판매처 검색 및 ChemDoodle®</u> .....	20

❖ <u>CAS Analytical Methods™</u> .....	21
--	----

❖ <u>CAS Formulus®</u> .....	23
------------------------------	----

❖ <u>로그인, 피드백, 도움말</u> .....	26
------------------------------	----

# 인터페이스, 검색기록 및 세팅



App Switcher: 추가 CAS solutions으로 이동

로고를 클릭하여 홈페이지로 이동

알림

저장한 결과, 검색 기록, 다운로드 등

업데이트 소식, 세팅, 도움 가이드, 프로필 정보 등

## Search Interface SciFinder<sup>®</sup> 은 간결한 검색 인터페이스를 제공합니다.

검색어 입력

검색타입 선택

Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI.

Molecular Formula

Advanced Search 기능  
문헌검색, 물질 검색에서 사용 가능

구조 그리기 툴

검색 실행하기

Advanced Search 필드 추가

Retrosynthetic Analysis  
Make reaction plans with conditions, yields, catalysts, and experimental procedures.

Retrosynthesis 실행

Search CAS Lexicon  
Build powerful searches using CAS concepts, chemical classes, and taxonomy.

CAS의 표준화된 개념을 활용한 검색

Search CAS Sequences  
Query BLAST, CDR, and Motif algorithms for nucleotide and protein based sequences.

CAS Sequences 검색

Recent Search History

이전 검색기록 확인 및 재검색하기

View All Search History

December 15, 2023

## Customize Filters 검색 결과 내 필터를 사용자의 편리에 맞게 조정하실 수 있습니다.

사용자 설정

Settings

필요한 필터 모두 선택 후 Apply 기능 적용

Manually Apply Filters

Turning on manual filters will disable automatically applying selected filters.

ON

Customize Result Filter Order

Substances Edit

Reactions Edit

References Edit

Suppliers Edit

검색결과 별 필터 변경

Structure Preferences

Display CAS Index Name

Show the index name for a structure instead of the CAS preferred name.

OFF

Show Structures on Reference Detail

Display structure images in a grid view on a reference detail.

ON

Alert Preferences

Receive e-mail notification for newly published Alert results.

ON

Update E-mail Address

CAS preferred 이름 대신 Index name 디스플레이

문헌 상세 페이지 내 물질의 구조 디스플레이

새로 업데이트 된 정보의 이메일 알림 받기 기능

Customize Substance Filters

Drag and drop filter options to add, remove, or customize your preference on a Substance result set. You can also reset substances filter order.

Included Filters

LogP

Stereochemistry

Functional Group

Substance Class

Isotopes

Metals

Experimental Property

Experimental Spectrum

Unused and Available Filters

Molecular Weight

Element

Aromatic Rings

필터 상하로 이동 가능

사용하지 않는 필터 오른쪽으로 이동하여 숨기기



**Reference Search** 문헌 결과는 시각화 된 사용 친화적인 레이아웃을 제공합니다.

- 문헌은 검색어와의 관련성에 따라 순위가 매겨지고 정렬됩니다.
- 검색을 저장하거나 링크를 전달하거나 알림을 설정할 수 있습니다.
- 필터를 통해 검색결과를 좁힐 수 있습니다.
- PatentPak은 특허 전문 내 색인 된 물질의 위치를 보여줍니다.

**Boolean Operators** 논리 연산자를 통해 정확한 텍스트 검색어를 정의할 수 있습니다.

동의를 등의 논리적 표현을 그룹화하기 위해 괄호를 사용하세요. 예: (flavor or odor) and menthol

**AND** 문서 내 두 Concept이 모두 있어야 합니다.



**OR** 하나 또는 두 Concept이 있어야 합니다.

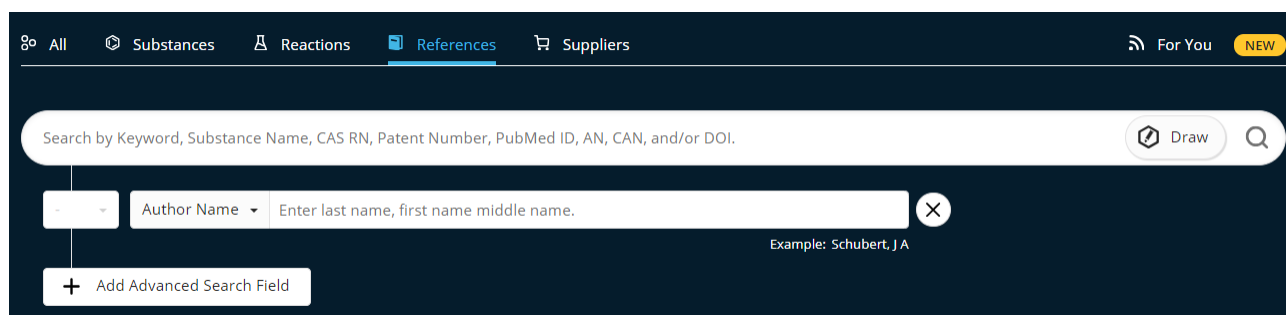


**NOT** NOT 뒤에 포함된 단어를 제외한 문헌을 검색합니다.



**Wildcards** 와일드 카드를 사용하면 보다 포괄적이고 정밀한 검색이 가능합니다. 문헌검색과 물질의 이름 검색에서 사용할 수 있습니다. 단어 중간 또는 오른쪽 잘림 사용이 가능합니다.

- \* 알파벳 0개 또는 무제한을 대신합니다. 예: polymorph\* | immunoglobulin\*conjugate\*
- ? 알파벳 0개 또는 1개를 대신합니다. 예: benzonorbornen?
- “ ” 큰 따옴표 안에 있는 용어는 구문으로 검색됩니다. 예: "Programmed cell death protein"



# 문헌 검색 결과



색인된 물질 확인    색인된 반응식 확인    Knowledge Graph - 검색된 문헌간의 상관관계를 시각화하는 툴

## References search for "menthol and (food or candy or "chewing gum")"

Substances   Reactions   Citing   Knowledge Graph    결과 합치기    다운로드    저장, 알림 설정

Based on your query, we've returned results from the entire database. **잠재적으로 관련된 추가 결과를 볼 수 있습니다.** Learn about result relevance. [Load More Results](#)

3,105 Results    Sort: Relevance    View: Partial Abstract

1    인용 문헌 확인    결과 공유    결과 표시 방식 변경

### Determination of menthol and menthone in food and pharmaceutical products by microextraction - gas chromatography

By: Ligor, Magdalena; Buszewski, Boguslaw  
Journal of Chromatography A (1999), 847(1 + 2), 161-169 | Language: English, Database: CAplus

In the current contribution, the **menthol** and **menthone** were isolated from **food** and pharmaceutical samples by solid-phase microextraction (SPME) with **menthol** for com. (polydimethylsiloxane) and laboratory-made (ethoxypolydimethylsiloxane) coated quartz fibers were compared. The results show, that SPME coupled with GC-flame ionization detection is a reproducible method for isolation and for qual. and quant. determination of **menthol** and menthone at ppm as well as ppb levels. The described procedure can be recommended for routine **food** and pharmaceutical anal...  
[View More](#)

제목 선택하여 문헌 정보 확인    결과 재 정렬

Full Text    저널 전문 액세스    Substances (2)    Reactions (0)    Citing (56)    Citation Map

2    해당 문헌에 관련한 물질, 반응식, 인용 정보 불러오기

### Preparation of (1'R,2'S,5'R)-3-L-menthoxyalkan-1-ols for food or cosmetic formulations which produce a long-lasting cooling sensation

By: Green, Carter B.; Nakatsu, Tetsuo; Ishizaki, Takero; Lupo, Andrew T., Jr.  
European Patent Organization, EP1122233 A1 2001-08-08 | Language: English, Database: CAplus

The title compounds (I; n = 2-6) which are effective in imparting a refreshing and cooling sensation of long duration, useful in **foods** (e.g., hard **candy**) and cosmetic (e.g., shampoo) and mouth (e.g., toothpaste) formulations, are prepared Thus, (1'R,2'S,5'R)-2-[5'-methyl-2'-(isopropyl)cyclohexyloxy]acetic acid was reduced with LiAlH<sub>4</sub>-Et<sub>2</sub>O, producing (1'R,2'S,5'R)-2-[5'-methyl-2'-xy]ethan-1-ol which produced a cooling-taste sensation for 30 min when tasted at a concentration of 150  
[View More](#)

특히 전문 내 물질의 위치 확인    특허전문 옵션에 액세스

PatentPak    Full Text    Substances (23)    Reactions (11)    Citing (21)    Citation Map

3

### Coencapsulation of xylitol and menthol by double emulsion followed by complex coacervation and microcapsule application in chewing gum

By: Santos, Milla G.; Carpinteiro, Debora A.; Thomazini, Marcelo; Rocha-Selmi, Glaucia A.; da Cruz, Adriano G.; Rodrigues, Christiane E. C.; Favaro-Trindade, Carmen S.  
Food Research International (2014), 66, 454-462 | Language: English, Database: CAplus

Coencapsulation of two or more core materials in one system can improve the functionality of individual components and maximize their performance. Xylitol and **menthol** are cooling agents that are widely applied in the **food** industry, and studies have reported that xylitol enhances the cooling effects of mint-flavored products. Thus, xylitol and **menthol** were coencapsulated using the double emulsion method followed by complex coacervation with the aim of intensifying the cooling sensation and to control the release of these components. Two formulations were developed by varying the concentration of

결과 구체화를 위한 필터 선택



## Preparation of (1'R,2'S,5'R)-3-L-menthoxyalkan-1-ols for food or cosmetic formulations which produce a long-lasting cooling sensation

Substances (23) Reactions (11) Citing (21) Citation Map Save

### PATENT

Patent Number  
EP1122233

Publication Date  
2001-08-08

Application Number  
EP2001-400267

Application Date  
2001-02-02

Kind Code  
A1

Assignee  
Takasago International Corp.,  
Japan

Source  
European Patent Organization  
CODEN: EPXXDW

Database Information  
AN: 2001:581484  
CAN: 135:137627  
Cplus

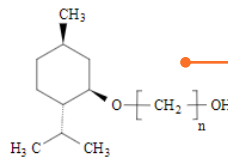
Language  
English

문헌 출처 정보

CAS Formulus®, the comprehensive formulations database and workflow solution, is now available for all SciFinder® users. [View content from CAS Formulus®](#) in this document. [Learn more about Formulus®](#).

By: Green, Carter B.; Nakatsu, Tetsuo; Ishizaki, Takeru; Lupo, Andrew T., Jr.

The title compounds (I; n = 2-6) which are effective in imparting a refreshing and cooling sensation of long duration, useful in foods (e.g., hard candy) and cosmetic (e.g., shampoo) and mouth (e.g., toothpaste) formulations, are prepared. Thus, (1'R,2'S,5'R)-2-[5'-methyl-2'-(isopropyl)cyclohexyloxy]acetic acid was reduced with LiAlH<sub>4</sub>-Et<sub>2</sub>O, producing (1'R,2'S,5'R)-2-[5'-methyl-2'-(methyl)ethyl)cyclohexyloxy]ethan-1-ol which produced a cooling-taste sensation for 30 min when tasted at a concentration of 150 ppm.



대표 그림/그래프/물질구조 표시

Keywords: menthoxyalkanol preparation cooling taste; mouth formulation menthoxyalkanol preparation cooling taste; food formulation menthoxyalkanol preparation of cooling taste flavorant

PatentPak Viewer Get Prior Art An

PDF: 원문 특허 PDF 표시  
PDF+: 원문 특허와 함께 색인된 물질 표 확인  
Viewer: 주석이 달린 원문의 Interactive 버전 확인

### Patent Family

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
EP1122233	English	A1	PDF   PDF+   Viewer	2001-08-08	EP2001-400267	2001-02-02
US6780443	Undetermined	B1		2004-08-24	US2000-09498592	2000-02-04
IN2001CH00078	English	A		2005-03-04	IN2001-00078	2001-02-02
IN204007	English	B		2007-06-20	IN2001-00078	2001-02-02

임시 신청에 대한 우선 순위 세부 정보 확인

Expand All | Collapse All

- IPC Data
- Concepts
- Substances
- Formulations
- Cited Documents

CAS 과학자들에 의해 색인 및 추가된 문헌 내 주제, 포메이션, 물질 및 인용문헌

351420-52-5

Absolute stereochemistry shown

**C<sub>18</sub>H<sub>32</sub>O<sub>2</sub>**  
6-[(1R,2S,5R)-5-Methyl-2-(1-methyl ethyl)cyclohexyloxy]-1-hexanol

Role: Food or Feed Use, Modifier or Additive Use, Properties, Synthetic Preparation, Biological Study, Uses, Preparation

351420-51-4

Absolute stereochemistry shown

**C<sub>17</sub>H<sub>30</sub>O<sub>2</sub>**  
5-[(1R,2S,5R)-5-Methyl-2-(1-methyl ethyl)cyclohexyloxy]-1-pentanol

Role: Food or Feed Use, Modifier or Additive Use, Properties, Synthetic Preparation, Biological Study, Uses, Preparation

351420-50-3

Absolute stereochemistry shown

**C<sub>16</sub>H<sub>28</sub>O<sub>2</sub>**  
4-[(1R,2S,5R)-5-Methyl-2-(1-methyl ethyl)cyclohexyloxy]-1-butanol

PatentPak

Role: Food or Feed Use, Modifier or Additive Use, Properties, Synthetic Preparation, Biological Study, Uses, Preparation

351420-49-0

Absolute stereochemistry shown

**C<sub>12</sub>H<sub>24</sub>O**  
(1S,2R,4R)-2-(3-Buten-1-yloxy)-4-methyl-1-(1-methyl)ethylcyclohexane

PatentPak

Role: Reagent, Synthetic Preparation, Reactant or Reagent, Preparation

351420-48-9

Absolute stereochemistry shown

**C<sub>13</sub>H<sub>26</sub>O<sub>2</sub>**  
3-(1-Menthoxy)-1-propanol

PatentPak

Role: Food or Feed Use, Modifier or Additive Use, Properties, Synthetic Preparation, Biological Study, Uses, Preparation

75443-64-0

Absolute stereochemistry shown

**C<sub>12</sub>H<sub>24</sub>O<sub>2</sub>**  
2-(1-Menthoxy)ethanol

PatentPak

Role: Food or Feed Use, Modifier or Additive Use, Properties, Synthetic Preparation, Biological Study, Uses, Preparation

### Cooling Sensate Composition: Coolants or Mouthwashes, Etc.

View CAS Formulus® Detail

Location: Claim 1, 2, 3, 4, 5

Purpose: Coolants, Cosmetic fragrance products, Deodorants, Mouthwashes, Shampoos, Toothpastes

Component	Function	Amount Reported
Group	(1'R, 2'S, 5'R)-3-l-menthoxyalkan-1-ols	-
Carriers	carriers	-



## Name searches

하나 이상의 물질명 또는 식별자로 검색합니다.

Streptomycin

57-92-1

Streptomycin sulfate

"Streptomycin sulfate" Streptomycin

Sulfoximin\*

WO2019234160

Streptomycin 레코드 검색

CAS Registry number 식별자로 Streptomycin 검색

세가지 검색: Streptomycin, Streptomycin sulfate and Sulfate

두가지 검색: Streptomycin sulfate and Streptomycin

Sulfoximin을 포함한 레코드 검색

특히 내 색인된 모든 물질 검색

## Structure searches

물질 검색은 가장 관련성이 높은 정보, 중요한 물성 정보, 고해상도 구조식 이미지를 표시합니다.

The screenshot shows the CAS SciFinder search interface with several annotations in Korean:

- Search Bar:** "물질명, CAS RN, 특허번호 등 검색어 입력" (Input search terms like name, CAS RN, patent number). "새 구조 그리기" (New structure drawing).
- Advanced Search:** "물질 검색의 Advanced search 활용" (Use advanced search for substance search). "검색 구조를 클릭하여 수정" (Click search structure to edit).
- Substances Search Results:**
  - "정렬 기준 변경" (Change sorting criteria): Sort: Number of References: Descending.
  - "구조 매치 설정" (Structure match settings): As Drawn (1,143), Substructure (102K), Similarity (87K).
  - "구조 정밀도 분석" (Structure precision analysis): Analyze Structure Precision.
  - "Chemscaple 분석 시작하기" (Start Chemscaple analysis).
  - "박스 선택하여 Markush 구조 검색" (Select box for Markush structure search).
  - "표시되는 물질의 세부정보 변경" (Change detailed info of displayed substance): Absolute stereochemistry shown, Rotation (-).
  - "구조를 클릭하여 flyout창 열기" (Click structure to open flyout window).
  - "Registry Number 선택하여 물질 상세정보 확인" (Select Registry Number to check substance details).
  - "구조 편집기 열기" (Open structure editor): Edit Structure, Reset, Download.
  - ".sdf 또는 .mol 파일로 구조 다운로드 및 구조 Smiles 복사" (Download structure as .sdf or .mol file and copy structure Smiles).
- Reference Role:** "문헌 역할 (Reference Role)은 물질에 대해 보고된 새로운 정보를 알려줍니다." (Reference Role provides new information about the substance).



## Substance detail

CAS Registry number를 클릭하여 구조, 분자식, 물성 및 추가 데이터가 포함된 물질 세부정보가 표시됩니다.

**CAS Registry Number: 6493-05-6**

8,001 | 355 | 87

**분자식**  
C<sub>13</sub>H<sub>18</sub>N<sub>4</sub>O<sub>3</sub>  
1H-Purine-2,6-dione, 3,7-dihydro-3,7-dimethyl-1-(5-oxohexyl)- (9CI, ACI)

**물질명**

**GHS 경고표지**

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	278.31	-
Melting Point (Experimental)	105 °C	-
Boiling Point (Predicted)	531.3±56.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Experimental)		
pKa (Predicted)		

Experimental Properties | Spectra

**주요 물성**

**물성을 바로 확인 또는 연결된 문헌 확인 가능**

**Other Names and Identifiers**

다양한 명칭: 문헌에서 추출되며, 개발코드 뿐 아니라 체계적이고 다양한 상표명으로 구성

Canonical SMILES  
O=C1C2=C(N=CN2C)N(C(=O)N1CCCC(=O)O)C  
InChI  
InChI=1S/C13H18N4O3/c1-9(18)6-4-5-7-17-12(19)10-11(14-8-15(10)2)16(3)13(17)20/h8H,4-7H2,1-3H3  
InChI Key  
BYPFZEZUWMEJ-UHFFFAOYSA-N

31 Other Names for this Substance

- 3,7-Dihydro-3,7-dimethyl-1-(5-oxohexyl)-1H-purine-2,6-dione (ACI)
- Theobromine, 1-(5-oxohexyl)- (7CI, 8CI)
- 1-(5-Oxohexyl)-3,7-dimethylxanthine
- 1-(5-Oxohexyl)theobromine
- 3,7-Dimethyl-1-(5-oxo-hexyl)-3,7-dihydro-purine-2,6-dione
- 3,7-Dimethyl-1-(5-oxohexyl)-1H,3H-purin-2,6-dione
- 3,7-Dimethyl-1-(5-oxohexyl)-1H-purine-2,6-dione
- 3,7-Dimethyl-1-(5-oxohexyl)purine-2,6-dione
- 3,7-Dimethyl-1-(5-oxohexyl)xanthine

Life Sciences 정보

- CAS LIFE SCIENCES
- CAS LIFE SCIENCES
- CAS LIFE SCIENCES

Other Names and Identifiers

Experimental Properties

Experimental Spectra

Structure Activity Relationships

Absorption, Distribution, Metabolism, and Excretion Data

Toxicity

Predicted Properties

Predicted Spectra

Bioactivity Indicators

Target Indicators

Regulatory Information

GHS Hazard Statements

Additional Details





## CAS Draw editor

CAS Draw를 통해 구조식과 반응쿼리를 설정할 수 있습니다.

The screenshot shows the CAS Draw editor window. At the top, there is a menu bar with 'CAS Draw' and '구조 업로드/다운로드'. Below it is a toolbar with various icons for drawing and editing. A search bar on the right contains the text '구조그리기 창 키우기'. The main workspace displays a chemical structure of a complex heterocyclic compound. Below the structure, the molecular formula is shown as 'Molecular Formula: C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub> (194.19)'. At the bottom, there is a zoom slider set to 100% and buttons for 'OK' and 'Cancel'.

Annotations in the image include:

- 구조 업로드/다운로드
- 구조그리기 창 키우기
- 키보드 단축기 확인하기 예: 헤테로 원자 쉽게 그리기
- Registry Number, SMILES 또는 InChI를 통해 구조 그리기
- Draw or change atoms or bonds.
- Molecular Formula: C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub> (194.19)
- Zoom: 100%
- OK, Cancel

This section shows a detailed view of the CAS Draw editor toolbar with annotations for various tools:

- 올가미 도구 | 선택 도구
- Atom과 Bond 그리기 | 지우개
- 주기율표에서 원자 선택하기 | Shortcuts
- 구조식에 Variables 선택 | 구조식에 R-Group 생성
- Attachment 설정하기 | Template에 그려진 구조 선택 및 구조 지정하기
- Charge 설정
- 반복단위 설정하기 | Carbon 체인 그리기
- 링 구조의 여러 위치에 치환체 결합 표시 | 반응 내 역할 선택
- 원자 매핑 | Ring fusion 방지 반응 역할 지정  
H atom을 제외한 치환기 차단  
구조식 회전  
구조식 Flip
- 끊어지거나 형성될 본드 지정 | 반응물 및 생성물 지정

This section shows the atom and bond selection panel of the CAS Draw editor with annotations:

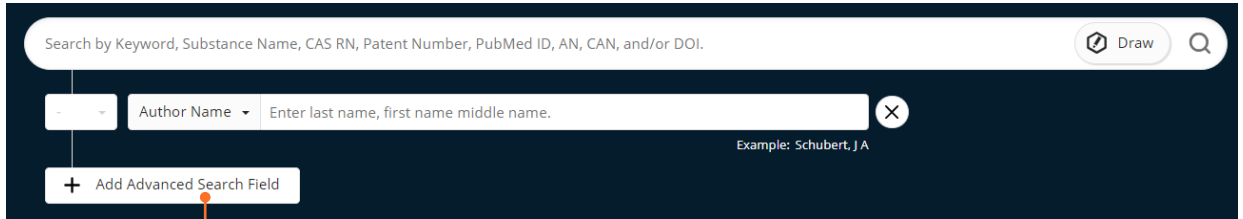
- Hydrogen Deuterium Tritium (pointing to H, D, T buttons)
- 그린 구조식 그대로 E/Z 이중결합 설정 (pointing to E/Z buttons)
- Unspecified 본드 (pointing to the unspecified bond button)
- 3-15-Sided Ring 그리기 (pointing to the ring selection buttons)

# Advanced search 검색어 지정하기

## Advanced Search Query Builder

SciFinder<sup>®</sup> 메인 페이지에서 특정 문헌 및 물질 상세검색 필드를 제공합니다.

- 연산자는 **OR**, **AND**, **NOT** 순서로 처리됩니다.
- 연산자는 단일 Advanced Search에 허용되지 않습니다.
- 와일드카드 사용이 가능합니다. 예: peek\*
- 최대 50개의 상세 검색 필드사용이 가능합니다. (기본 검색을 사용하는 경우 49개)

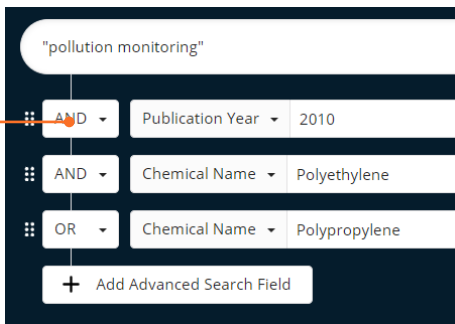


클릭하여 필드 선택 열기

## Examples

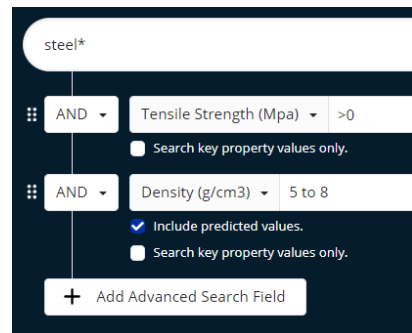
### Reference Search

검색 필드를 합칠 수 있는 연산자 선택

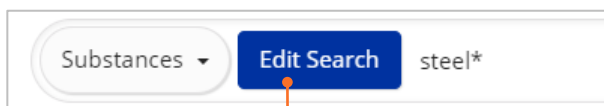


검색어 해석:  
"pollution monitoring" and (polyethylene or polypropylene) and published since 2010

### Substance Search



검색어 해석:  
Steel with tensile strength property and Density information



'Edit Search'를 클릭하여 Advanced Search 검색어 수정 가능

## Advanced Search Fields

아래 상세 검색필드를 사용할 수 있습니다.

### Reference

- Author Name
- Journal Name
- Organization Name
- Title
- Concepts
- Substances
- Publication Year
- Document Identifier
- Patent Identifier

### Substance

- CAS Registry Number
- Chemical Name
- Document Identifier
- Molecular Formula
- Patent Identifier
- Experimental Spectra
- Bioactivity Data
- Biological
- Chemical Properties
- Density
- Electrical
- Lipinski
- Magnetic
- Mechanical
- Optical and Scattering
- Structure Related
- Thermal



## CAS Roles

Roles는 물질에 연결되며 문헌 내 특정 역할과 연관된 문헌을 찾을 수 있습니다.

- Super roles는 광범위한 범주이며, 관련된 모든 특정 역할로 구성됩니다. 예로는 Analytical Study, Preparation, Occurrence 등이 있습니다.
- Specific roles는 상세한 범주이며, 분석연구에서 분석물질 (Analyte)로 사용하거나 천연 추출물 (Natural Product Occurrence)와 같은 내용을 찾아볼 수 있습니다.

## Roles in substance results

물질 검색에서의 Role 필터는 문헌의 물질과 연결된 역할 종류를 나타냅니다.

## Roles in reference results

Role 필터는 검색한 물질이 문헌 내에 색인되어 있는 경우에 나타납니다. 물질명이나 구조 그리기를 통해 검색 후 관련 문헌 리스트를 볼 수 있습니다.

예시: 해양 오염에 관심이 많은데, 폴리프로필렌이 구체적 오염 물질로 기술된 문헌을 어떻게 찾을 수 있을까요?

폴리프로필렌을 검색하면 많은 수의 문헌이 나타납니다. Substance Role 필터에는 폴리프로필렌에 적용되는 모든 역할이 표시됩니다. 그 중 **Pollutant**는 폴리프로필렌을 오염 물질로 표기 및 설명한 1,657개의 문헌이 있음을 나타냅니다.

# Sequences 검색

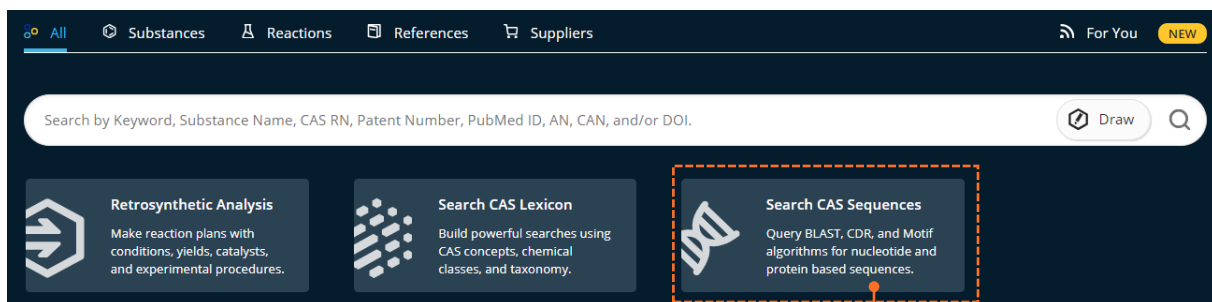


## BLAST similarity search

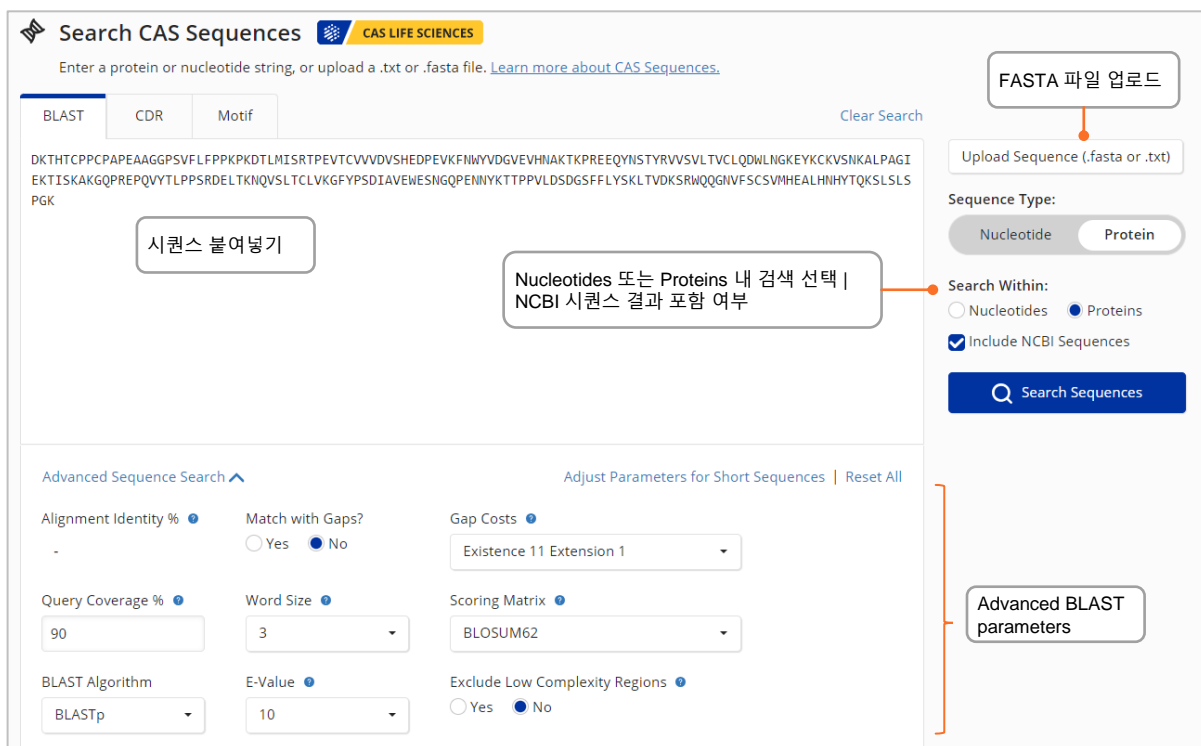
BLAST를 통해 유사한 뉴클리오타이드 및 아미노산 서열을 검색할 수 있습니다. 정렬 결과는 식별 및 적용 범위 백분율에 대한 사용하기 쉬운 정밀 필터링과 함께 직관적인 그래픽 레이아웃으로 표시됩니다. 시퀀스 결과와 관련 문헌 연결이 가능합니다.

### BLAST 검색 수행

- 메인 SciFinder<sup>®</sup> 검색 페이지에서 Search CAS Sequences 모듈을 엽니다.
- 시퀀스 파일 또는 시퀀스를 붙여 넣습니다.
- 지원되는 형식: 단일 문자 코드로 표시되는 잔기를 포함하는 시퀀스 (예: FASTA 포맷), 선행 번호는 지원되지 않습니다.
- 시퀀스 입력에는 header line (>으로 시작)이 포함될 수 있습니다. 시퀀스는 헤더로 구분할 수 있으므로 두 개 이상의 일괄 검색이 가능합니다.
- 원하는 대로 BLAST parameter를 조정하고 검색을 시작합니다.



Search CAS Sequences  
모듈 선택하기



시퀀스 붙여넣기

Nucleotides 또는 Proteins 내 검색 선택 |  
NCBI 시퀀스 결과 포함 여부

Advanced BLAST  
parameters

# BLAST 결과 분석



## Access Results

Biosequence 검색 결과는 최근 검색기록 및 일반 검색기록에 나타납니다. 결과를 분석하려면 'View Results'를 클릭하세요. 브라우저를 새로 고침 하여 기록을 업데이트 하세요.

Sequences  
3:02 PM

Sequence Type: Protein  
Search Within: Proteins  
NCBI Included: Yes  
BLAST Algorithm: BLASTp  
Alignment Identity: -  
Query Coverage: 90%

DKTHTCPPCPAPEAAGGSPVFLFPPKPKDTLMISRTPEVTCVVDVSHEDPEVKFNWYVDGVEVHNAKT  
AKTKPREEQYNSTRVSVLTVCLQDNLNGKEYCKVSNKALPAGIEKTIISKAKGQPREPQVYTLPS  
SRDELTKNQVSLTCLVKGFYPSDIAVEWESNGQPENNYKTPPPVLDSDGSFFLYSKLTVDKSRWQ  
QGNVFSCSVMHEALHNHYTQKSLSLSPGK

[View Results](#)

[Edit Search](#)

Complete

Results will expire on  
Mar 16, 2024.

## View Results

BLAST 서열 유사성 확인하기

- Sequence Identity 별로 정렬됩니다.
- 단순화된 그래픽은 높은 정렬 품질을 보여줍니다.
- 불일치는 빨간색 선으로 표시됩니다.
- 'Alignment' 탭에서 상세 정렬 정보를 확인할 수 있습니다.
- Subject와 특허 미리보기는 별도의 탭에서 사용할 수 있습니다.
- [References](#) 를 클릭하여 관련 특허 정보를 볼 수 있습니다.
- XLSX 결과 다운로드가 가능합니다. [↓](#)

3
Alignment Identity: 97.8%

Query 1 227 검색 서열 길이

Subject 1 227 대조군 길이

Matches: 222  
Mismatches: 5

Alignment 길이:  
222+5=227

정렬 상세 정보

Alignment Subject References

Alignment Data  
BLAST Score: 1209  
E-Value: 4.24024e-155

Q 1 DKTHTCPPCP APEAAGGSPV FLFPPKPKDT LMISRTPEVT CVVDVSHED PEVKFNWYVD GVEVHNAKT 70

S 1 DKTHTCPPCP APELLGGPSV FLFPPKPKDT LMISRTPEVT CVVDVSHED PEVKFNWYVD GVEVHNAKT 70

Q 71 PREEQYNSTY RVVSVLTVCL QDNLNGKEYK CKVSNKALPA:GTEKTIISKAK GQPREPQVYT LPPSRDELTK 140

S 71 PREEQYNSTY RVVSVLTVCL QDNLNGKEYK CKVSNKALPA:GTEKTIISKAK GQPREPQVYT LPPSRDELTK 140

Q 141 NQVSLTCLVK GFYPSDIAVE WESNGQPENN YKTTTPPVLDSDGSFFLYSKL TVDKSRWQQG NVFSCSVWHE 210

S 141 NQVSLTCLVK GFYPSDIAVE WESNGQPENN YKTTTPPVLDSDGSFFLYSKL TVDKSRWQQG NVFSCSVWHE 210

이 시퀀스에 대한 특허 및  
비특허 참조문헌 가져오기

## Filter Results

필터링을 통해 검색 결과를 변경할 수 있습니다.

E-Value

0 to 10<sup>5</sup>

*Expectation Value*

Query Coverage %

0 to 100

$\frac{\text{Alignment Length}}{\text{Query Length}}$

Subject Coverage %

0 to 100

$\frac{\text{Alignment Length}}{\text{Subject Length}}$

Sequence Length

89 to 316828

$\frac{\text{Number of Matches}}{\text{Alignment Length}}$

Organisms

- synthetic construct (64K)
- unidentified (22K)
- Homo sapiens (5,319)
- artificial sequences (496)
- Mus musculus (438)

[View All](#)



## Reaction searches

반응식 검색어로는 물질명, CAS Registry Numbers, 문서 식별자 (DOI) 또는 구조식이 가능합니다.

- 결과는 동일한 반응물 및 생성물을 포함하는 Scheme, Transformation, Document로 그룹화 할 수 있습니다.
- Scheme으로 그룹화 된 경우에 한해서, 정렬 순서는 검색 관련도, 등록일, 수율, 스텝 수 순서로 정렬할 수 있습니다.
- Scheme 내 반응식들은 수율 순서대로 정렬됩니다.

## Results Filters

다양한 필터를 활용하여 관련된 반응식을 빠르게 찾으실 수 있습니다.

- Non-Participating Functional Groups: 반응에 참여하지 않는 치환기
- Commercial Availability: Starting Materials 또는 Products가 구매 가능한 물질인 반응식
- Reaction Notes: 특정 환경에서 진행한 반응정보
- Source References: 반응식 출처
  - Document Type: 문헌 종류
  - Publication Name: 저널사 또는 특허청 등
  - CA Section: 기술 분야



## Reaction Details

용매, 촉매, 반응물, 조건을 포함한 세부정보, 문헌, 그리고 supplement에서 추출한 실험 프로토콜을 나타냅니다.

Relative stereochemistry shown

Suppliers (10)

Suppliers (140)

Suppliers (3)

Suppliers (97)

스텝별 반응 조건 정보

**Reaction Overview**

Steps: 2    Yield: -

**관련 문헌 보기**

**JOURNAL**

Short and efficient process for the synthesis of trans-4-aminocyclohexanecarboxylic acid derivatives

By: Patil, Pankaj S.; et al  
View All

Organic Process Research & Development (2009), 13(6), 1141-1144

[View Source](#)   [Full Text](#)

**Company/Organization**  
API R & D Centre  
Emcure Pharmaceuticals Ltd.  
Pune 411057  
India

Step 1	Step 2										
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>Stage</th> <th>Reagents</th> <th>Catalysts</th> <th>Solvents</th> <th>Conditions</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td><a href="#">Triethylamine</a></td> <td>-</td> <td><a href="#">Methanol</a></td> <td>rt; 25 - 30 °C; 3 - 4 h, 25 - 30 °C</td> </tr> </tbody> </table> <p>CAS Reaction Number: <a href="#">31-366-CAS-6730116</a></p> <p><b>상세 절차를 포함한 실험 프로토콜 보기</b></p> <p><b>대체 반응 조건 보기</b>   <a href="#">Alternative Steps (1)</a></p>	Stage	Reagents	Catalysts	Solvents	Conditions	1	<a href="#">Triethylamine</a>	-	<a href="#">Methanol</a>	rt; 25 - 30 °C; 3 - 4 h, 25 - 30 °C	
Stage	Reagents	Catalysts	Solvents	Conditions							
1	<a href="#">Triethylamine</a>	-	<a href="#">Methanol</a>	rt; 25 - 30 °C; 3 - 4 h, 25 - 30 °C							

**Experimental Protocols**

Synthetic Methods	Experimental Procedure
<b>Products</b>	<a href="#">1-Methylethyl trans-4-[[[1,1-dimethylethoxy]carbonyl]amino]cyclohexanecarboxylate</a> , Yield: 97%
<b>Reactants</b>	<a href="#">Di-tert-butyl dicarbonate</a> <a href="#">1-Methylethyl trans-4-aminocyclohexanecarboxylate</a>
<b>Reagents</b>	<a href="#">Triethylamine</a>
<b>Solvents</b>	<a href="#">Methanol</a>
<b>Procedure</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>Dissolve isopropyl trans-4-aminocyclohexanecarboxylate (5.40 mol) in methanol (80 L) at ambient temperature.</li> <li>Add triethylamine (7 kg, 7.02 mol) dropwise to the reaction mixture at 25-30 °C under stirring.</li> <li>Add BOC anhydride (11.78 kg, 5.40 mol) to the reaction mixture in methanol (20 L) at 25-30 °C, under stirring at 25-30 °C.</li> <li>Stir the reaction mass for 3-4 hours.</li> <li>After completion of the reaction (monitored by TLC), remove methanol under vacuum completely.</li> <li>Add dM water (40 L) to the reaction mixture.</li> <li>Extract the reaction mixture with dichloromethane (2 x 25 L).</li> <li>Dry the combined dichloromethane layer over sodium sulfate.</li> <li>Concentrate the combined dichloromethane layer under reduced pressure at 40-45°C.</li> <li>Purify the sample by column chromatography.</li> </ol>
<b>Transformation</b>	Acylation of Nitrogen Nucleophiles by Anhydrides or Dicarbonates
<b>Scale</b>	milligram

**원문에서의 실험방법 확인하기**

**반응 결과 분석 데이터**

1-Methylethyl trans-4-[[[1,1-dimethylethoxy]carbonyl]amino]cyclohexanecarboxylate	
<b>Proton NMR Spectrum</b>	400 MHz, CDCl <sub>3</sub> δ = 1.13-1.14 (d, 6H), 1.36 (s, 9H), 1.76-1.82 (m, 4H), 2.12 (m, 1H), 3.16 (m, 1H), 4.82-4.88 (sep, 1H), 6.76 (d, 1H).
<b>Carbon-13 NMR</b>	100 MHz, CDCl <sub>3</sub> δ = 21.65, 27.27, 27.65, 28.29, 32.38, 42.49, 48.84, 67.25, 78.95, 155.05, 174.84.
<b>Elemental Analysis</b>	For C <sub>15</sub> H <sub>27</sub> NO <sub>4</sub> : Calcd C, 63.13; H, 9.54; N, 4.91. Found C, 63.01; H, 9.51; N, 4.90.
<b>Mass Spectrum</b>	MS CI calcd for C <sub>15</sub> H <sub>27</sub> NO <sub>4</sub> (M + H) 286.39, found (M + H): 286.39. White solid, mp: 86-87 °C.
<b>State</b>	white solid.

CAS Method Number [3-366-CAS-6730116](#)

**주요 반응식 명칭**

**Transformations**

- Acylation of Nitrogen Nucleophiles by Anhydrides or Dicarbonates

# 역합성 플래너 (Retrosynthesis)



## Launch Plan Generation SciFinder<sup>®</sup> Retrosynthesis Planner를 시작하는 두가지 방법

### 1 Retrosynthesis 탭을 클릭하여 시작

Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or

Author Name Enter last name, first name middle name.

+ Add Advanced Search Field

**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.

### 2 물질 구조의 플라이아웃 창을 열고 생성 시작

CAS RN 2269470-35-9

CAS Name 2,4-Difluoro-N-[5-[4-[[1-(2-hydroxyethyl)-1H-pyrazol-4-yl]amino]-6-quinazoliny]]...

Get Substance Details  
Get Bioactivity Data  
Get Reactions (8)  
Synthesize (8)  
**Start Retrosynthetic Analysis**  
Get References (4)  
Get Suppliers (1)

Edit Structure - Reset + Download

## Plan Options

플랜 옵션을 선택하여 아래와 같은 사항을 설정할 수 있습니다.

- 합성 길이/깊이 조절
- Protect bonds를 통한 전체 합성 경로 설정
- 첫번째 Disconnection 설정
- Starting material의 비용 한도 설정
- 유의미한 대안으로 플랜 설정  
예: poly- or heterocyclic molecules

플랜의 disconnection 수 설정하기

첫 disconnection 결합 설정하기

보호할 결합 설정하기

전체 선택 삭제

반응을 예측하는데 적용된 규칙을 세 단계로 선택가능

Strating material의 비용 한도

플랜 만들기

보호된 결합

끊어지는 첫번째 결합

Retrosynthesis Plan Options for drawn structure

Powered by ChemPlanner<sup>®</sup>

Select Synthetic Depth: 1, 2, 3 (selected), 4

Break and Protect Bonds: Break Bond, Protect Bond, Clear All Bond Selections

Set Rules Supporting Predicted Reactions: Common (selected), Uncommon, Rare

Set Starting Materials Cost Limit: 250 USD/mol

Create Retrosynthesis Plan

## Predicted Reaction Rules 예측의 기반이 되는 검증된 규칙

3300만개의 반응식으로부터 생성된 150,000개의 규칙으로 예측합니다. 이때, 반응식이 많이 존재하는 규칙 일 수록 Common으로 분류되며, 적을 수록 Uncommon, Rare 순으로 나뉘지게 됩니다.



# 역합성 플랜 및 대체 스텝



## Open Plan

Experimental Plan은 몇 초 안에 사용할 수 있으며, Predictive Retrosynthesis Plan (예측 역합성 플랜)은 조금 더 오래 걸릴 수 있습니다.

## Alternative Steps

다른 대안을 선택하여 플랜을 재구성 할 수 있습니다.

- 모든 실험 및 예측된 disconnection에 대한 개요를 제공하며, 증거로 사용된 반응식은 반응식 결과세트로 표시됩니다.
- 증거로 사용된 반응식은, ① Plan Scheme 또는 ② Step Overview, ③ Alternative reaction scheme에서 찾아보실 수 있습니다.

Step	Evidence
Maximum Yield: 86%	Catalysts: Palladium Solvents: Ethanol; 12 h, 60 °C
Evidence (1)	
Alternative steps (37)	
C ⇒ F + G	1.1 Reagents: Pyridine; 0 °C; overnight
Maximum Yield: 66%	
Evidence (7)	
Alternative steps (24)	
D ⇒ H	1.1 Reagents: N-Bromosuccinimide Solvents: Dimethylformamide; 0 °C
Average Yield: 72%	
Evidence (3,517)	
Alternative steps (6)	



## Scoring Options

예측 단계를 포함한 플랜의 경우, 계획/대안 단계에 표시되는 내용을 결정하는 프로필의 점수를 높이거나 낮출 수 있습니다.

- 각 점수 프로필은 끄기, 낮음, 중간 또는 높음 중 설정할 수 있습니다.
- 각 프로필의 기본 설정은 아래와 같이 “중간”입니다.
- 슬라이더를 왼쪽 끝으로 이동하면 해당 프로필의 점수가 “끄기”로 설정되어 스텝 선택이나 대체의 순위에 중요 요소로 작용하지 않습니다.

**Plan Information**

Estimated Yield: 21%  
Overall Price: \$51.35  
(USD per 100 grams)

**Scoring Profiles**

Complexity Reduction ●

Convergence ●

Evidence ●

Cost ●

Yield ●

Atom Efficiency ●

[Apply](#) [Reset Scoring](#)

**Complexity Reduction**

Reduces the complexity of a step's reactants compared to its product.

**In retrosynthesis plans, you typically want high complexity reduction.**

**Convergence**

Determines how “branched” the plan is; **you typically want the plan to be as branched as possible (high convergence), rather than linear.**

For a given step, the more precursors there are, and the closer their relative sizes are, the more it's considered convergent.

**Increasing Convergence displays steps/alternatives with more reactants.**

**Evidence**

Ranks plan steps/alternatives based on the number of evidence examples supporting the particular reaction type.

**More evidence examples for a step means that the reaction type has more applications and is more versatile in terms of conditions and substrates, and hence predictions made based on it are probably more reliable.**

**Increasing Evidence displays steps/alternatives with more supporting examples.**

**Cost**

Weighs the expenses of the reactions by ranking starting materials based on the lowest price found amongst catalogs.

**Yield**

Applies to the yield of each step in the plan, which contributes to the yield of the target molecule.

**Increasing the Yield displays a higher yield target molecule and steps/alternatives.**

**Atom Efficiency**

Reduces reactant parts not included in a plan step's product.

**Increasing Atom Efficiency displays steps/alternatives with the least amount of reactant atoms that do not map to the product.**

Clicking the **Apply** button redraws the retrosynthesis plan with the revised scoring profiles; clicking **Reset Scoring** restores the “Medium” default.



## Markush searching

Markush 구조 검색은 Substance 검색 모드에서 “Search Patent Markush” 기능을 사용하여 수행할 수 있습니다.

## PatentPak

특허 PDF를 보기 위한 세가지 옵션:

- **PDF:** 특허 전문 PDF; 문서 내 텍스트 검색 가능
- **PDF+:** 주요 물질이 마크업 된 특허 전문 PDF. 문서 내 텍스트 검색 가능
- **PatentPak Viewer:** 주요 물질의 마크업이 연결된 특허 PDF. 아래 참조:

# 선행 문헌 또는 관련 문헌 찾기



## Prior Art Analysis

특허 상세보기 페이지에서 선행기술 조사를 실행할 수 있습니다. 결과는 History에서 찾아보실 수 있습니다.

- AI 기반 연관성 예측
- 단일 특허 문헌을 기반으로 분석 시작
- CAS Concepts, 인덱싱한 물질, IPC 코드 및 추가적인 텍스트를 종합적으로 분석
- 특허 및 비특허 문헌을 포함하여 해당 특허보다 이전에 알려진 문서를 관련도 순으로 생성

PatentPak Viewer   Get Prior Art Analysis   Full Text ▾

Patent Family

Patent	Language	IPC Class	PatPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
WO2004011464	English	A2	PDF   PDF+   Viewer	2004-02-05	WO2003-FR2354	2003-07-25
FR2842809	French	A1	PDF	2004-01-30	FR2002-9519	2002-07-26
CA2493402	Undetermined	A1		2004-02-05	CA2003-2493402	2003-07-25

문헌 상세보기에서 선행기술 조사 실행

References   10:44 AM   Prior Art Analysis (154)   View Results   Complete

Novel substituted pyrazolo[1,5-a]-1,3,5-triazine derivatives and their analogs, pharmaceutical compositions containing them, their use as drugs, particularly as neurotrophic factor production enhancers, and methods for their preparation

Search History에서 View Results 클릭

## Get Similar References

문헌 상세보기에서 유사한 문헌을 추천하여 제공합니다.

새로운 검색을 하지 않고도 관심있는 주제의 문헌을 최대 500개 까지 찾아볼 수 있습니다.

Keywords: review polyester **biodegradable plastics** environment; **biodegradable plastics**; biodegradation; micro-organisms; polyesters; soil microclimate

View PDF   Full Text ▾

Similar References **NEW**   Get Similar References

유사 문헌 모두 보기

유사 문헌 빠르게 넘겨보기

**Towards a Sustainable Future: Advancing an Integrated Approach for the Recycling and Valorization of Agricultural...**  
Polymers (Basel, Switzerland) (2023), 15(23), 4529 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE

**Toward a circular economy: Investigating the effectiveness of different plastic waste management strategies: A...**  
Journal of Environmental Chemical Engineering (2023), 11(5), 110993 | Language: English, Database: CAplus

**Plastics waste management and its sustainable approaches - an overview**  
International Journal of Environmental Technology and Management (2022), 25(6), 501-518 | Language: English, Database: CAplus

References similar to AN 2020:999547   선택한 문헌의 유사 문헌 리스트

Substances ▾   Reactions ▾   Citing ▾   Knowledge Graph   Save

Filter Behavior   Filter by   Exclude

Search Within Results

Document Type   Language   Publication Year

31 Results   Sort: Relevance   View: Partial Abstract ▾

1   **Towards a Sustainable Future: Advancing an Integrated Approach for the Recycling and Valorization of Agricultural Plastics**  
By: Filipe, Susana; Mourao, Paulo Mira; Couto, Nazare; Tranchida, Davide  
Polymers (Basel, Switzerland) (2023), 15(23), 4529 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE  
Plastic pollution has become a pressing environmental issue. The agricultural sector, in particular, is a significant contributor to this problem, given the widespread use of plastics in farming practices and a lack of and/or use of inefficient approaches for the recycling and valorization of agricultural plastic waste. This has resulted in the accumulation of these residues in landfills and/or their improper disposal, which has exacerbated their environmental impact, leading to neg. consequences on soil, water, and ecosystems. This work provides an overview on the current methodologies availa...  
View More ▾

Full Text ▾   Substances (0)   Reactions (0)   Citing (0)   Citation Map

2   **Toward a circular economy: Investigating the effectiveness of different plastic waste management strategies: A comprehensive review**  
By: Elgarahy, Ahmed M.; Priya, A. K.; Mostafa, Hamida Y.; Zaki, E. G.; Elsaheed, S. M.; Muruganandam, M.; Elwakeel, Khalid Z.  
Journal of Environmental Chemical Engineering (2023), 11(5), 110993 | Language: English, Database: CAplus



## Suppliers Searching

물질명, 화학 구조식 또는 기타 식별자를 통해 판매처 검색을 하여 카탈로그에 직접 연결이 가능합니다.

정렬 방식

Sort: Relevance

Relevance

Price: Low to High

Price: High to Low

Supplier: A to Z

Supplier: Z to A

Ships Within

Purity

번호/비번호 판매처 설정

7722-84-1  
Hydrogen Peroxide (35% in Water)

상세정보 이동

연락처 정보

카탈로그 세부정보

주문 링크

ChemDoodle®

## ChemDoodle®

CASdraw editor 외에도 ChemDoodle을 사용하여 원하는 구조식을 그릴 수 있습니다. 특히 ChemDoodle은 태블릿 및 모바일 기기로 검색할 때 유용합니다.

실행 취소 | 다시 실행 | 줌 인/아웃 | 열기 | 저장

구조 선택 | 센터

CAS Registry Number로 구조 불러오기

전체 지우기 | 지우개 | 뒤집기 | 자르기 | 복사 | 붙여넣기 | 템플릿 불러오기/저장하기 | Draw 창 확대

Labeling

본드 그리기

링 그리기

Charge 그리기

체인 그리기

반복 그룹 표시

링 구조의 여러 위치에 치환체 결합 표시

Atoms/Chains/rRngs 막기

R 그룹 설정

반응식 설정

반응식 매핑

본드 break/form 설정

ChemDoodle®

OK Cancel



## CAS Analytical Methods

CAS Analytical Methods™를 사용하시려면, <https://methods.cas.org/> 에서 로그인 하거나, CAS SciFinder<sup>®</sup>내 App switcher를 통해 이동할 수 있습니다.

- 실험실에 바로 가져갈 수 있는 단계별 스킴을 제공합니다.
- 집중 영역에는 약리학, HPLC, 식품 분석, 천연 제품 분리 분석 및 수질 분석이 포함됩니다.

CAS SciFinder<sup>®</sup> 내 App Switcher

키워드, Matrix, Analyte로 검색

Advanced Search  
Search methods using criteria like keywords, analytes, matrices and more.

Explore Methods  
Search methods using criteria like method categories and subcategories.

Advanced Search 기능

분석 카테고리 선택

## Advanced Search

키워드, Analyte, Matrix, Method Category, Technique, CAS Method Number, Publication name 중 선택 후 검색

AND, OR, NOT 중 불연산자 선택

Advance 검색 필터 추가

Results for Custom query

827 Results

Sort: Relevance Group: By Method

Filter By

- Analyte
  - Caffeine (827)
  - Epicatechin (172)
  - Epigallocatechin gallate (162)
  - Theobromine (160)
  - Epigallocatechin (150)
- Matrix
  - Green tea beverages (90)
  - Camellia sinensis (63)
  - Tea beverages (54)
  - Pharmaceutical tablets (50)
  - Wastewater (43)
- Method Category
- Technique
- Year

결과 구체화를 위한 필터 선택

상세정보로 이동

세가지 분석법을 테이블로 비교 정리

CAS SciFinder-n 내 문헌 상세 페이지로 이동

문헌전문 옵션에 액세스

1  
**Analysis of Caffeine in Pharmaceutical tablets by HPLC**  
By: Laasonen, Magali; Harmia-Pulkkinen, Tuulikki; Simard, Christine; Raesaenen, Markku; Vuoreta, Heikki  
Development and Validation of a Near-Infrared Method for the Quantitation of Caffeine in Intact Single Tablets  
Analytical Chemistry (2003), 75 (4), 754-760. American Chemical Society

2  
**Analysis of Caffeine in Beverages by Photodiode array detectors**  
By: Trani, Alessandro; Petrucci, Rita; Marrosu, Giancarlo; Zane, Daniela; Curulli, Antonella  
Selective electrochemical determination of caffeine at a gold-chitosan nanocomposite sensor: May little change on nanocomposites synthesis affect selectivity?  
Journal of Electroanalytical Chemistry (2017), 788, 99-106. Elsevier B.V.

**Analytical Methods Details** 기기명부터 샘플링, 분석 방법까지 한눈에 검토하실 수 있습니다.

검색 결과 저장

PDF, XLS  
포맷으로 다운로드



Save

## Analysis of Caffeine in Coffee beverages by HPLC

CAS MN: 1-124-CAS-112381

Method Category: Food Analysis  
Technique: [HPLC](#)

분석에 사용된  
Analyte, materials,  
reagent 등 확인

Materials	Role	Image	CAS RN
<a href="#">Caffeine</a>	analyte	<a href="#">View Structure</a>	58-08-2
Cola beverages	matrix		
Coffee beverages	matrix		
Chromolith SpeedRod (50 mm x 4.6 mm i.d.)	material		
Acetonitrile	reagent	<a href="#">View Structure</a>	75-05-8

문헌 정보  
- 문헌전문 옵션 액세스  
- CAS SciFinder-n이동

### Source

Development and validation of a high-throughput high-performance liquid chromatographic assay for the determination of caffeine in food samples using a monolithic column

Tzanavaras, Paraskevas D.; Themelis, Demetrius G.

Analytica Chimica Acta (2007), 581 (1), 89-94. Elsevier B.V.

CODEN : ACACAM | ISSN : 00032670 | DOI : 10.1016/j.aca.2006.07.081

[View Abstract](#)

[Full Text](#)

[View in CAS SciFinder®](#)

분석에 사용한 기기정보

### Equipment Used

HPLC instrument, HP 1100, Agilent Technologies, Palo Alto, CA, USA

Vacuum filtration system, Schleicher & Schuell, Dassel, Germany

### Instructions

#### Sample Preparation

1. Grind the coffee samples to a fine powder.
2. Disperse an accurately weighed amount of ca. 100 mg in 50 mL of HPLC grade water and sonicate for 30 min until complete dissolution.
3. Filter an adequate volume (ca. 20 mL) of the resulting solution through 0.45 µm syringe filters.
4. Dilute 2 mL of the filtrate to 20.0 mL with HPLC grade water and inject without further pretreatment to the HPLC system.
5. Degas the beverage samples under vacuum followed by sonication until all air is removed.
6. Filter an adequate volume (ca. 20 mL) of the samples through 0.45 µm syringe filters.
7. Inject the filtrate in the monolithic column after 1:10 dilution with HPLC grade water.

#### Standards Preparation

1. Prepare 1000 mg/L of standard stock solutions in HPLC grade water and store under refrigeration and protect from light.
2. Prepare the working solutions in HPLC grade water by appropriate dilutions of the stock.
3. Stable the caffeine standard stock solution for at least 3 weeks.

#### Method or Procedure

1. Inject 20 µL of the samples and standards in the monolithic column via the autosampler of the HPLC instrument.
2. Take the mobile phase consisted of an ACN/water mixture (10:90, v/v).
3. Set the flow rate at 3.0 mL/min (P = 68 ± 1 bar) and the column temperature at 25 °C.
4. Detect caffeine at 274 nm with the samples injection rate at 60 h<sup>-1</sup>.
5. Use the peak are for signals evaluation, while inject each sample or standard in triplicate.

상세 Instruction 및  
Validation 정보 제공

### Validation

Linearity Range	0-200 mg/L
Limit of Detection	0.10 mg/L
Limit of Quantitation	0.33 mg/L
Accuracy	100.8, 97.6, 100.7 and 99.9%, (%recovery found by standard addition for caffeine added at 10, 25, 50 and 100 mg/L) Beverage(cola) 100.5, 99.3, 100.5 and 100.6%, (%recovery found by standard addition for caffeine added at 10, 25, 50 and 100 mg/L) instant coffee
Precision	0.47, 0.14 and 0.08%, (RSD for concentration of 0.5, 10 and 100 mg/L)
Concentration	119.5 mg/L, beverage(cola) 39.5 mg/L, instant coffee



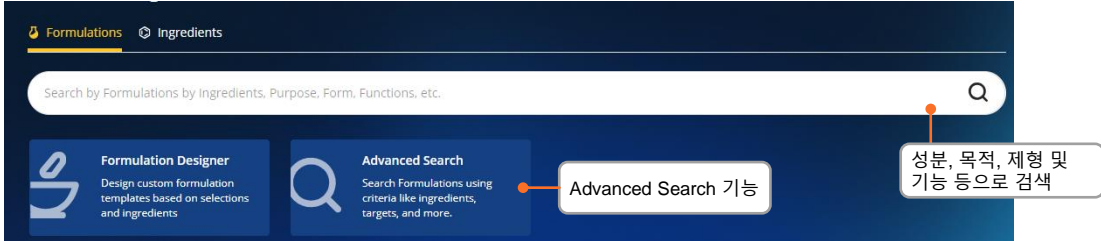
## CAS Formulus®

Formulation 정보를 성분, 공정 및 실험 활동을 포함하여 제제/제형의 세부 사항을 확인할 수 있습니다. CAS Formulus® 를 사용하려면, <https://formulus.cas.org> 에서 로그인 하거나, App switcher를 통해 이동할 수 있습니다.

CAS SciFinder®  
내 App Switcher



**Search Formulation** 제형, 성분, 목적 또는 기능 등의 정보를 입력하여 검색할 수 있습니다.



## Formulation Results

산업 분야, 목적, 제형의 상태 및 이동경로 까지 확인하고 필터로 활용 가능합니다.

Get Additional References    문헌별 결과보기    Compare (1/3)    Save

76,545 Results    Sort: Relevance

**결과 필터하기**

- Industry
  - Cosmetics & Personal Care
  - Pharmaceutical
  - Unclassified
- Purpose
  - Hair dyes (76K)
  - Dyes (22K)
  - Detergents (16K)
  - Cleaning compositions (8,366)
  - Coloring materials (6,845)
- Physical Form
  - Cream preparations (3,817)
  - Solutions (3,364)
  - Gels (3,169)
  - Hair dyes (447)
  - Emulsions (249)
- State of Matter
- Delivery Route
  - Topical drug delivery systems (8,721)
  - Aerosol sprays (11)
  - Aerosols (4)
- Information Included
  - Component Amount (76K)
  - Process (46K)
  - Effective Dose (5,826)
  - Experimental Activity (3,280)
- Document Type
  - Patent (76K)
  - Claim (467)
  - Comparative Example (290)
  - Example (75K)
  - Table (83)
  - Product Insert (1)
- Organization
  - The Procter & Gamble

**1**

**Hair Dyes Composition**  
Location: Example  
Purpose: Hair dyes  
Target: Hair  
Delivery Route: Topical drug delivery systems  
Physical Form: Cosmetic dyes

Component	Function	Amount Reported
Group: coloring cream	bleaching agents	-
Alcohols, C <sub>16-18</sub>	emulsifying agents	12.0 % (w)
Alcohols, C <sub>16-18</sub> , ethoxylated	nonionic emulsifying agents	0.5 % (w)
Alcohols, C <sub>16-18</sub> , ethoxylated	nonionic emulsifying agents	0.5 % (w)
Polyoxyethylene lauryl ether sodium sulfate	surfactants	10.0 % (w)

**Additional group components reported**

Component	Function	Amount Reported
Group: developer emulsion	dyes	-
Alcohols, C <sub>16-18</sub>	emulsifying agents	12.0 % (w)
Alcohols, C <sub>16-18</sub> , ethoxylated	nonionic emulsifying agents	0.5 % (w)
Alcohols, C <sub>16-18</sub> , ethoxylated	nonionic emulsifying agents	0.5 % (w)
Water	carriers	up to 100 % (w)

**Additional group components reported**

**PATENT**  
Use of phthalimidoperoxyacronic acid in compositions for dyeing and bleaching hair  
Assignee: Henkel K.-G.a.A.  
DE102005056158

Patent PDF    View in CAS SciFinder®

**58 Similar Formulations - View All**

**3**

**Cosmetic Composition for Coloring or Bleaching Keratin Fibers: Hair Dyes**  
Location: Claim 1, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11  
Purpose: Hair dyes  
Target: Hair, Homo sapiens  
Delivery Route: Topical drug delivery systems







**Search ingredients** 구성 물질을 검색하여 다양한 formulation을 확인해보세요.

성분명, CAS 등록번호, 또는 기능을 입력하여 검색

Formulation Designer Design custom formulation templates based on selections and ingredients

Advanced Search Search Formulations using criteria like ingredients, targets, and more.

새로운 제형/제제 디자인하기

**Ingredient Results** 성분 물질로부터 새로운 제형/제제의 아이디어를 얻을 수 있습니다.

8,421 Results

물질정보 상세 보기

CAS RN: 9005-65-6 View Details

Polyoxyethylene sorbitan monooleate

Key Physical Properties	Value	Condition
Density (Experimental)	1.06-1.10 g/cm³	-

Commonly Used As: Surfactants; Emulsifying agents; Solubilizers; Wetting agents; Suspending agents...

Commonly Formulated With | Regulatory information | Experimental Properties

함께 사용되는 주요 성분 보기

규제정보 보기

실험 특성 보기

주요 사용되는 예시

구매처

Formulations Suppliers Add to Designer

새로운 제형/제제 디자인하기

물질이 사용된 모든 제형/제제 보기

CAS RN: 151-21-3 View Details

Sodium dodecyl sulfate

Key Physical Properties	Value	Condition
Melting Point (Experimental)	204-207 °C	-
Density (Experimental)	1.00 g/cm³	-

**Formulation Designer** 선택 항목과 성분을 기반으로 맞춤형 제형/제제를 디자인합니다.

Formulation Designer Clear All Selections

Industry: Cleaning & Surfactant Products

Purpose: Bleaching agents

Physical Form: Liquids Solutions

Add up to 5 Ingredients: Sodium hypochlorite

선택한 항목 및 성분

물질정보 상세보기

대체 물질 더보기

Function	Ingredient	Regulatory	Top Alternatives	Amounts
Active or Featured Ingredient:	Sodium hypochlorite	Cosing: Cosmetic Ingredient Inventory; EPA Pesticide Inactive Ingredients; EU Active Substances in Pesticides; FDA Inactive Ingredients Database	-	Amount not available
Buffers:	Silicate	-	Sodium hydroxide; Sodium silicate; Sodium bicarbonate; Carbonate; Sodium carbonate	Approximate Range: 4 - 8%
Solvents:	Diethylene glycol monobutyl ether	Cosing: Cosmetic Ingredient Inventory; EPA Pesticide Inactive Ingredients; EPA Safer Chemical	Dipropylene glycol; Polyethylene glycol; Ethanol; tert-Butanol; Water	Approximate Range: 14 - 17%



## Login Details

- CAS SciFinder-n: <http://scifinder-n.cas.org>
- CAS Analytical Methods: <https://methods.cas.org>
- CAS Formulus: <https://formulus.cas.org>

*기존 CAS SciFinder-n 아이디와 비밀번호로 로그인*

## Feedback Button

CAS에 직접 피드백을 전달할 수 있습니다.



## Learn More

- CAS SciFinder<sup>n</sup> :  
<https://www.cas.org/support/training/scifinder-n>
- CAS Analytical Methods<sup>TM</sup> :  
<https://www.cas.org/support/training/analytical-methods>
- CAS Formulus<sup>®</sup> :  
<https://www.cas.org/support/training/formulus>
- CAS 제품 관련 웨비나:  
<https://www.cas.org/resources/events>

## Contact Customer Support

CAS Customer Center의 도움이 필요하시면 [apachelp@cas.org](mailto:apachelp@cas.org) 로 연락주세요.

## CAS Contacts

CAS Korea Team, [korea@acs-i.org](mailto:korea@acs-i.org)

국내 담당자의 도움이 필요하실 때에는 CAS Korea Team으로 문의 주시기 바랍니다.