

# CAS SciFinder Discovery Platform™

사용자 가이드

**CAS**

A division of the  
American Chemical Society



# 목 차

## CAS SciFinder Discovery Platform™

### ❖ CAS SciFinder-n

- 인터페이스 및 문헌 검색 ..... 1
- 물질 검색 및 구조식 그리기 툴 ..... 3
- Advanced Search 검색어 지정하기 ..... 6
- CAS Roles ..... 8
- Biosequence 검색 ..... 9
- 반응식 검색 ..... 11
- 역합성 플래너 (Retrosynthesis) ..... 13
- Markush 검색 및 PatentPak (특허솔루션) ..... 16
- 판매처 검색 및 ChemDoodle® ..... 18

### ❖ CAS Analytical Methods™ ..... 19

### ❖ CAS Formula® ..... 21

### ❖ 로그인, 피드백, 도움말 ..... 23



CAS SciFinder<sup>®</sup> Alerts Saved SeHee Jung

추가 CAS solutions 링크  
(예) Analytical Methods, Formulus, or the STN IP Protection Suite

로고를 클릭하여 홈페이지로 이동

알림

저장한 결과 및 이전 검색 확인

What's New, 세팅, 도움 가이드, 로그아웃

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

Searching for... All Substances Reactions References Suppliers Sequences Retrosynthesis

References 검색어 입력 검색 실행하기

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

Enter a query... Draw

Advanced Search 기능 문헌검색, 물질 검색에서 사용 가능

구조 그리기 툴

Launch CAS Lexicon CAS Lexicon enables you to browse the CAS General Thesaurus to find index substances to build a Reference query with up to 1,000 indexed search terms.

CAS의 표준화된 컨셉을 활용한 검색

## 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.

색인된 물질 확인 색인된 반응식 확인

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

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

2,884 Results 인용 문헌 확인

Sort: Relevance View: Partial Abstract

결과 공유 결과 표시 방식 변경

결과 재 정렬

제목 선택하여 문헌 정보 확인

결과 구조화를 위한 필터 선택

참재적으로 관련된 추가 결과를 볼 수 있습니다.

Load More Results

Filter Behavior Filter by Exclude

Document Type Journal (1,146)

Substance Role Clinical Trial (22) Commentary (1) View All

Biological Study (1,972) Uses (1,490) Analytical Study (195) Process (134) Properties (73) View All

특허 전문 내 물질의 위치 확인

특허전문 옵션에 액세스

해당 문헌에 관련된 물질, 반응식, 인용 정보 불러오기

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

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

In the current contribution, the optimization of menthol and menthone isolated from food and pharmaceutical samples by solid-phase microextraction (SPME) using polydimethylsiloxane (PDMS) for com. (polydimethylsiloxane) and laboratory-made (ethoxypolydimethylsiloxane) sorbents. 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 ng levels. The described procedure can be recommended for routine food and pharmaceutical anal.

View More

Full Text Substances (2) Reactions (0) Clipping (56) Citation Map

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, Takeru; Lupo, Andrew T., Jr. European Patent Organization, EP1122233 A1 2001-08-08 | Language: English, Database: CPlus

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-(2-oxypoxy)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'-hydroxy)hexan-1-yl which produced a cooling-taste sensation for 30 min when tasted at a concentration of 150 ppm.

View More

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



## 문헌 출처 정보

### PATENT

Patent Number  
US20140005234

Publication Date  
2014-01-02

Application Number  
US2013-13919035

Application Date  
2013-06-17

Kind Code  
A1

Assignee  
Unknown

Source  
United States  
CODEN: USXXCO

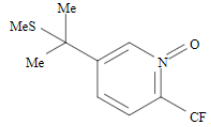
#### Database Information

AN: 2014:3851  
CAN: 160:144583  
CAplus

Language  
English

By: Bland, Douglas C.; Ross, Ronald, Jr.; Johnson, Peter L.; Johnson, Timothy C.

N-substituted sulfilimine and sulfoximine pyridine N-oxides were prepared according to the invention and their use in controlling insects and other invertebrates are provided. Further embodiments, forms, objects, features, advantages, aspects, and benefits shall become apparent from the description.



Keywords: insecticide sulfilimine sulfoximine pyridine oxide

PatentPak Viewer

Get Prior Art Analysis

Full Text

### Patent Family

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
US20140005234	English	A1	PDF   PDF+   Viewer	2014-01-02	US2013-13919035	2013-06-17
CA2876184	English	A1		2014-01-03	CA2013-2876184	2013-06-12
WO2014004086	English					
AU2013281012	English					
IL236477	English					

임시 신청에 대한 우선 순위 세부 정보 확인

CAS과학자들에 의해 색인 및 추가된 문헌 내 주제 및 물질

IPC Data

Concepts

Substances

**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"



## 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

특허 내 색인된 모든 물질 검색

## Structure searches

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

**Searching for...**

- All
- Substances**
- Reactions
- References
- Suppliers
- Sequences
- Retrosynthesis

**Substances**  
Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. [Learn More](#)

Enter a query...

AND Molecular Formula

Example: C6H6 | C6H8N6 | C...

새 구조 그리기

Edit

화학명 검색어 입력

물질 검색의 Advanced search 활용

검색 구조를 클릭하여 수정

물질과 관련된 데이터 확인

박스 선택하여 Markush 구조 검색

**Substances search for drawn structure**

References Reactions Suppliers

구조 매치 설정

As Drawn (1,139)

**Substructure (100K)**

Similarity (85K)

Analyze Structure Precision

구조 정밀도 분석

Chemscaple Analysis

Visually explore structure similarity with a powerful new tool.

Learn more about Chemscaple.

Create Chemscaple Analysis

Filter Behavior

Filter by Exclude

Chemscaple 분석 시작하기

문헌 역할 (Reference Roles) 또는 물질 역할 (Substance role)은 물질에 대해 보고된 새로운 정보를 알려줍니다.

100,926 Results

1

58-08-2

정렬 기준 변경

Sort: Number of References: Descending View: Partial

2

6493-05-6

Registry Number 선택하여 물질 상세정보 확인

3

668270-12-0

표시되는 물질의 세부정보 변경

Absolute stereochemistry

구조를 클릭하여 fly out 창 열기

CAS RN: 6493-05-6

CAS Name: Pentoxifylline

67K References

1,540 Reactions

구조 편집기 열기

.sdf 또는 .mol 파일로 구조 다운로드 및 구조 Smiles 복사



## Substance detail

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

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

References (7,812) Reactions (332) Suppliers (78) Download Email Save

분자식

물질명

**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)

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)	1.3 g/cm <sup>3</sup>	
pKa (Predicted)	0.50±0.70	

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

**OTHER NAMES AND IDENTIFIERS**

Canonical SMILES  
CN1C=NC2=C1C(=O)N(C)C(=O)N2C(=O)CCCC(=O)C

InChI  
CN1C=NC2=C1C(=O)N(C)C(=O)N2C(=O)CCCC(=O)C

InChI Key  
CN1C=NC2=C1C(=O)N(C)C(=O)N2C(=O)CCCC(=O)C

31 Other Names for this Substance

- 3,7-Dihydro-3,7-dimethyl-1-(5-oxohexyl)-1H-purine-2,6-dione
- Theobromine, 1-(5-oxohexyl)-3,7-dimethyl-
- 1-(5-Oxohexyl)-3,7-dimethylxanthine
- 1-(5-Oxohexyl)theobromine
- 3,7-Dimethyl-1-(5-oxohexyl)-3,7-dihydro-purine-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

**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

Additional Details

CAS LIFE SCIENCES

CAS LIFE SCIENCES

CAS LIFE SCIENCES

Life Sciences 정보

Copyright © 2023 American Chemical Society. All Rights Reserved. | 京ICP备13047075号-3 [Help](#) [Contact Us](#) [Legal](#)

물성을 바로 확인 또는 연결된 문헌 확인 가능

개발코드 뿐 아니라 체계적이고 다양한 상표명으로 구성됩니다. 각 이름은 분석된 문헌에서 추출됩니다.

주요 물성



## CAS Draw editor

CAS Draw를 통해 구조식과 반응쿼리를 설정할 수 있습니다.

구조 업로드/다운로드

Enter a CAS Registry Number, SMILES, or InChI...

Draw or change atoms or bonds.

키보드 단축기 확인하기  
예: 헤테로 원자 쉽게 그리기

Registry Number, SMILES 또는 InChI를 통해 구조 그리기

Molecular Formula:  $C_8H_{10}N_4O_2$  (194.19)

Zoom: 100%

OK Cancel

- 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

- Hydrogen Deuterium Tritium
- 그린 구조식 그대로 E/Z 이중결합 설정
- Unspecified 본드
- 3-15-Sided Ring 그리기

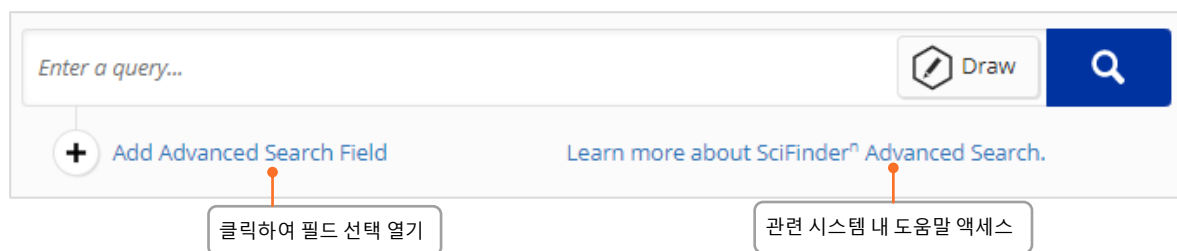


# Advanced search 검색어 지정하기

## Advanced Search Query Builder

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

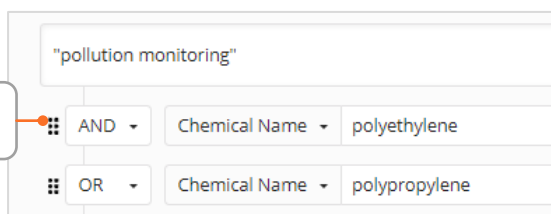
- 연산자는 **OR**, **AND**, **NOT** 순서로 처리됩니다.
- 연산자는 단일 Advanced Search에 허용되지 않습니다.
- 와일드카드 사용이 가능합니다. 예: peek\*
- 최대 50개의 상세 검색 필드사용이 가능합니다. (기본 검색을 사용하는 경우 49개)



## Examples

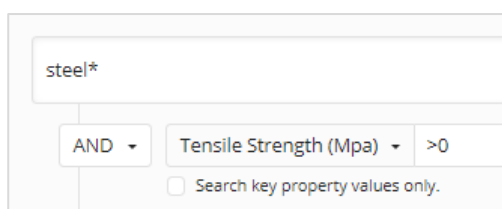
### Reference Search

검색 필드를 합칠 수 있는 연산자 선택

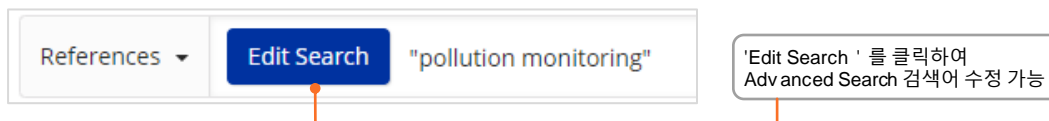


검색어 해석:  
"pollution monitoring" and (polyethylene or polypropylene)

### Substance Search



검색어 해석:  
Steel with tensile strength property information



## 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
- 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.

Reference Role

By Count | Alphanumeric

물질 검색에서의 Reference Role 예

해당 역할에 포함된 물질의 개수

## 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.

Substances ▾ polypropylene

9003-07-0

(C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>)<sub>x</sub>  
**Polypropylene**

309K References | 7,528 Reactions | 23 Suppliers

Filter Behavior

Filter by Exclude

322,652 Results | Sort: Relevance | View: Partial Abstract

1

Microplastics in marine environment review of methods for identification and quantification

By: Hidalgo-Ruz, Valeria; Gutow, Lars; Thompson, Richard C.; Thiel, Martin  
Environmental Science & Technology (2012), 46(6), 3060-3075 | Language: English, Database: CPlus and MEDLINE

This review of 68 studies compares the methodologies used for the identification and quantification of microplastics from the marine environment. Three main sampling strategies were identified: selective, volume-reduced, and bulk sampling. Most sediment samples came from sandy beaches at the high tide line, and most seawater samples were taken at the sea surface using neuston nets. Four steps were distinguished during sample processing: d. separation, filtration, sieving, and visual sorting of microplastics. Visual sorting was one of the most commonly used methods for the identification of mic...

View All 을 클릭한 후 특정 Role 선택 가능

Substance Role

By Count | Alphanumeric

1 Selected

Adverse Effect (364) | Diagnostic Use (149) | Pharmacological Activity (134)

Agricultural Use (892) | Food or Feed Use (4,264) | Physical, Engineering, or Chemical Process (49K)

Analyte (1,084) | Formation, Non-preparative (98) | **Pollutant (2,984)**

Analytical Matrix (368) | Formation, Unclassified (88) | Polymer in Formulation (80K)

Analytical Reagent Use (214)

Filtering: Substance Role: Pollutant

2,984 Results

1

Brevia: Lost at sea: Where is all the plastic?

By: Thompson, Richard C.; Olsen, Ylva; Mitchell, Richard P.; Davis, Ar W. G.; McGonigle, Daniel; Russell, Andrea E.  
Science (Washington, DC, United States) (2004), 304(5672), 838 | Lar MEDLINE

Microscopic plastic fragments and fibers are widespread in the world zone and sedimentary habitats. Fragments appear to have resulted. Plastics of this size are ingested by marine organisms, but environmental contamination are unknown. Due to its resistance to biodegradation...

2,984개의 문헌은 오염 물질과 관련된 폴리프로필렌에 대한 내용을 다룹니다.



## 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 Biosequences 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.

Searching for...

- All
- Substances
- Reactions
- References
- Suppliers
- Sequences**
- Retrosynthesis

### Sequences

Enter a protein or nucleotide string, or upload a .txt or .fasta file. [Learn more about Sequence Search.](#)

BLAST CDR Motif Upload Sequence Clear Search

> miRNA, SQL 97  
cacucugcuguggccuauggcuuuucauuccuaugugauugcugucccaaacucauguaaggcuaaaaagccauggggcuac  
agugagggggcgagcucc

시퀀스 붙여넣기 FASTA 파일을 업로드하거나 붙여넣기

Sequence Type: Nucleotide Protein

Search Within: Nucleotides Proteins

Include NCBI Sequences

Start Sequence Search

Advanced BLAST parameters

Advanced Sequence Search ^ Adjust Parameters for Short Sequences | Reset All

Alignment Identity % 80

Match with Gaps?  Yes  No

Gap Costs Existence 5 Extension 2

Query Coverage % 90

Word Size 11

Reward for Match Penalty for Mismatch 2, -3

BLAST Algorithm BLASTn

E-Value 10

Exclude Low Complexity Regions  Yes  No



## Access Results

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

January 20, 2023

Sequences  
2:05 PM

Sequence Type: Nucleotide  
Search Within: Nucleotides  
NCBI Included: Yes  
BLAST Algorithm: BLASTn  
Alignment Identity: 80%  
Query Coverage: 90%

Results will expire on  
Feb 20, 2023.

> miRNA, SQL 97  
cacucugcugggcuauggcuuuauucuaugugauugcuguc  
ccaaacucauguaggcuaaaaagcuaugggcuaagugaggcgag  
gcucc

[View Results](#)

[Edit Search](#)

Complete

## 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. [↓](#)

46 Alignment Identity: 95.65%

Query ① 97

Subject ① 99

검색 서열 길이

Matches: 88  
Mismatches: 4

Alignment 길이:  
88+4=92

대조군 길이

References

정렬 상세 정보

Alignment Subject References

Alignment Data  
BLAST Score: 164  
E-Value: 7.99229e-35

Q 3 CTCTGCTGTG GCCTATGGCT TTCATTCT ATGTGATTGC TGTCCCAAC TCATGTAGGG CTAAGAAGCCA 72

S 5 CTCTGCTGTG GCCTATGGCT TTCATTCT ATGTGATTGC TGTCCCAAC TCATGTAGGG CTAAGAAGCCA 74

Q GC 94

S GC 96

이 시퀀스에 대한 특허 및  
비특허 참조문헌 가져오기

검색 서열 및 대조군  
시퀀스의 Alignment 시작

Match

Mismatch

## Filter Results

필터링을 통해 검색 결과를 변경할 수 있습니다.

^ E-Value

0 to 10<sup>6</sup>

^ Query Coverage %

0 to 100

^ Subject Coverage %

0 to 100

^ Sequence Length

89 to 316828

*Expectation Value*

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

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

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

## 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.

**Searching for...**

- All
- Substances
- Reactions** (Reactions 선택)
- References
- Suppliers
- Sequences
- Retrosynthesis

**Reactions**

Search by CAS Reaction Number, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. [Learn More](#)

Enter a query... Edit Search

반응식 구조를 선택하여 편집

Edit Drawing Remove

**Structure 매치로 구분하기**

**Structure Match**

- As Drawn (0)
- Substructure (27K)**
- Similarity (2,045)

**Filter Behavior**

Filter by Exclude

**Yield**

- 90-100% (396)
- 80-89% (242)
- 70-79% (264)
- 50-69% (331)
- 30-49% (186)
- [View All](#)

**Number of Steps**

- 1 (2,095)

**Non-Participating Functional Groups**

- Carbamate (1,112)
- Carboxylic ester (882)
- Halide (461)
- Alkene (328)
- Ether (295)
- [View All](#)

**Reaction Mapping**

- Mapping Data Available (2,095)
- No Mapping Data Available (25K)

**반응식 결과 필터하기**

**동일 Scheme의 모든 반응식 살펴보기**

**반응식 결과 그룹화 변경하기**

Filtering: Reaction Mapping: Mapping Data Available Clear All Filters

2,095 Results

Group: By Scheme Sort: Relevance View: Expanded

By Scheme  
By Document  
By Transformation

Steps: 1 Yield: 71%

**반응식의 수율**

**Scheme 1 (1 Reaction)**

**물질 구조 확인**

**반응식 정보 상세보기**

**Suppliers (34)** **판매처 보기**

31-614-CAS-29743330 Steps: 1 Yield: 71% **Base-Mediated Intramolecular Decarboxylative Synthesis of Alkylamines from Alkanoyloxycarbamates**

1.1 Reagents: **Cesium carbonate** **물질 세부정보 확인**

Solvents: Acetonitrile; 5 h, 100 °C

1.2 Reagents: Ethyl acetate

By: Li, Peihe; et al  
Journal of Organic Chemistry (2018), 83(15), 8233-8240

**반응식 문헌 확인하기**

**실험 프로토콜 열람**

Experimental Protocols

**반응식 결과 필터하기**

**Scheme 2 (1 Reaction)**

Steps: 1 Yield: 41%

**Suppliers (14)** **Suppliers (386)** **Suppliers (3)**

31-614-CAS-28249961 Steps: 1 Yield: 41% **Preparation of pyrazolo[1,5-a]pyridine carbonitriles as kinase inhibitors useful for treatment of RET-modulated disorders**

1.1 Reagents: Triethylamine, Diphenylphosphoryl azide

Solvents: Toluene; 2 h, 90 °C; 90 °C → 0 °C

1.2 overnight, 0 °C → 100 °C

By: Li, Qun; et al  
World Intellectual Property Organization, WO2020248972 A1 2020-12-17



## Reaction details

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

Suppliers (63)

Suppliers (5)

Suppliers (5)

Suppliers (5)

Suppliers (386)

**스텝별 반응 조건 정보**

Step	Stage	Reagents	Catalysts	Solvents	Conditions
Step 1	1	Thionyl chloride	-	-	3 h, reflux; cooled
	2	Ammonium hydroxide	-	Water	cooled

CAS Reaction Number: [31-367-CAS-1991719](#)

**상세 절차를 포함한 실험 프로토콜 보기**

Experimental Protocols

- Synthetic Methods
- Experimental Procedure
- 원문에서의 실험방법 확인하기

**대체 반응 조건 보기** Alternative Steps (2)

**분석 정보 살펴보기**

Characterization Data

*rel*-(1*R*,2*S*,4*S*)-Bicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxamide

Proton NMR Spectrum	(500 MHz, DMSO- <i>d</i> <sub>6</sub> ) δ (br s, 1H), 6.71 (br s, 1H), 2.60-2.40 (m, 2H), 2.20-2.08 (m, 1H), 1.56-1.51 (m, 1H), 1.50-1.22 (m, 6H), 1.19-1.10 (m, 1H)
State	white solid

CAS Method Number [3-367-CAS-1991719](#)

**반응식 특이사항**

Reaction Notes: stereoselective

**주요 반응식 명칭**

Transformations: 1. Acylation of Nitrogen Nucleophiles by Carboxylic Acids

**Reaction Overview**

Steps: 2 Yield: -

**관련 문헌 보기**

**JOURNAL**

Hypervalent Iodine Catalyzed Hofmann Rearrangement of Carboxamides Using Oxone as Terminal Oxidant

By: Yoshimura, Akira; et al  
View All

Journal of Organic Chemistry (2012), 77(24), 11399-11404

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

**Company/Organization**

Department of Chemistry and Biochemistry  
University of Minnesota Duluth  
Duluth, Minnesota 55812  
United States



## Launch plan generation

SciFinder<sup>n</sup> Retrosynthesis Planner를 시작하는 두가지 방법

- 1 Retrosynthesis 탭을 클릭하여 시작
- 2 물질 구조의 플라이아웃 창을 열고 생성 시작

## 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
- 유의미한 대안으로 플랜 설정  
예: poly- or heterocyclic molecules

플랜의 disconnection 수 설정하기

첫 disconnection 결합 설정하기

보호할 결합 설정하기

전체 선택 삭제

플랜 만들기



## Open plan

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

**Retrosynthesis Plan for drawn structure** 제외시킨 물질/반응식 확인 다운로드, 공유하기, 저장 ChemPlanner®

Overview **Steps** Predicted Results **ON** Predictive step 온/오프 스위치 View Excluded Options Save

**Plan Information** 플랜 스텝 보기  
 Estimated Yield: 22%  
 Overall Price: \$119.58 (USD per 100 grams)  
 Commercially Available: D, E, F, G, H, I, J, K 플랜 정보

**Plan Options**  
 Synthetic Depth: 3  
 Predicted Rules: Common  
 Break & Protect Bonds: Yes  
 Starting Material Cost Limit: \$1,000.00/mol  
 Edit Plan Options

**Scoring Profiles** 점수 옵션 조정하기

Complexity Reduction

Convergence

Evidence

Cost

**Retrosynthesis Step Key**  
 Hover on the options below to highlight experimental and predicted steps within this plan. View Steps Menu.  
 Experimental Steps  
 Predicted Steps

**대체 disconnection 검토하기**

**녹색 점선은 Predictive step (예측 스텝)을 뜻함**

**보라색 실선은 Experimental step (실험 스텝)을 뜻함. 문헌에 보고된 스텝**

Feedback

## Alternative steps

모든 실험 및 예측된 disconnection에 대한 개요를 제공합니다. 증거로 사용된 반응식은 반응식 결과세트로 표시됩니다.

- 증거로 사용된 반응식은 ① Steps Overview, ② Plan Scheme, ③ Alternative reaction scheme (대체 반응)에서 확인할 수 있습니다.

Overview **Steps** Predicted Results

View step specific evidence and alternate steps below or select the node between steps on the plan.

**A ⇒ B + C**  
 Average Yield: 47%  
 Evidence (15)  
 Alternative Steps

**B ⇒ D + E** 1  
 Average Yield: 59%  
 Evidence (23)  
 Alternative Steps 2

**C ⇒ F + G**

**B ⇒ D + E Alternative Steps (34)**

Filter by:  
 Alternative Step Type  
 Predicted (34)  
 Stereochemistry  
 Non-Selective (34)

1 of 22 3  
 Predicted Step  
 View Evidence (23) Average Yield: 59%

2 of 22  
 Predicted Step  
 View Evidence (73) Average Yield: 69%

3 of 22  
 Predicted Step

**Reactions from Retrosynthesis Plan Evidence**

Filter Behavior  
 Filter by Exclude  
 Yield  
 90-100% (1)  
 80-99% (2)  
 70-79% (2)  
 50-69% (13)  
 30-49% (2)  
 View All  
 Number of Steps  
 1 (23)  
 Non-Participating Functional Groups  
 Ether (7)

23 Results  
 Group: By Scheme Sort: Relevance View: Expanded

Scheme 1 (1 Reaction) Steps: 1 Yield: 88% 대안 선택 - 계획 재구성

31-614-CAS-30317850 Steps: 1 Yield: 88% Process for preparing pyridine derivatives  
 1.1 Reagents: Potassium tert-butoxide Solvents: Tetrahydrofuran  
 1.2 Reagents: Ammonium acetate Solvents: Acetic acid  
 Experimental Protocols  
 PatentPak - Full Text -

CAS SciFinder®





## 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.



### 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

Weights 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:



## 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	Kind Code	PatentPak 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

**References**  
10:44 AM

**Prior Art Analysis (154)**

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

View Results

Complete

Search History에서 View Results 클릭

문헌 상세보기에서 선행기술 조사 실행

Search History에서 View Results 클릭



## Suppliers searching

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

The screenshot shows a search results page for 'Hydrogen Peroxide (35% in Water)'. The interface includes a 'Filter Behavior' sidebar on the left, a main results table, and a detailed product catalog popup for TCI Research Chemicals (KRW). Callouts point to various features:

- 정렬 방식** (Sort): A dropdown menu showing options like Relevance, Supplier: A to Z, Supplier: Z to A, Ships Within, and Purity.
- 번호/비번호 판매처 설정** (Supplier selection): A button to toggle between numbered and non-numbered suppliers.
- 상세정보로 이동** (Move to details): A button to view the detailed product catalog.
- 연락처 정보** (Contact info): Fields for Web, Email, and Phone.
- 카탈로그 세부정보** (Catalog details): Fields for Chemical Name, Order Number, Quantity, Price, Stock Status, Ships Within, Pricing information, and Product Information.
- 주문 링크** (Order link): A button to proceed to the ordering page.

## ChemDoodle®

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

The screenshot shows the ChemDoodle drawing interface with a toolbar and a chemical structure being drawn. Callouts point to various drawing tools and features:

- 전체 지우기 | 지우개** (Erase all | Eraser)
- 구조 선택** (Structure selection)
- 실행 취소 | 다시 실행** (Undo | Redo)
- 줌 인/아웃** (Zoom in/out)
- 열기 | 저장** (Open | Save)
- CAS Registry Number로 구조 불러오기** (Load structure by CAS Registry Number)
- 센터** (Center)
- 뒤집기** (Flip)
- 자르기 | 복사 | 붙여넣기** (Cut | Copy | Paste)
- 템플릿 불러오기/저장하기** (Load/Save template)
- 라벨링** (Labeling)
- 본드 그리기** (Bond drawing)
- 링 그리기** (Ring drawing)
- Charge 그리기** (Charge drawing)
- 체인 그리기** (Chain drawing)
- 반복 그룹 표시** (Show repeat groups)
- Atoms/Chains/rRngs 막기** (Lock Atoms/Chains/rRngs)
- 반응식 매핑** (Reaction mapping)
- 반응식 설정** (Reaction setting)
- 본드 break/form 설정** (Bond break/form setting)



## CAS Analytical Methods

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

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

**CAS SciFinder<sup>n</sup> 내 App Switcher**

**Search**  
Enter keyword, matrix, analyte, etc.

키워드, Matrix, Analyte로 검색

Advanced Search  
Advanced Search 기능

분석 카테고리 선택

Browse Method Categories

- 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

## Advanced Search

**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 필드 추가

결과 구체화를 위한 필터 선택

**Results (1351)** Sort Relevance

Return to Home

^ Analyte

- Amlodipine besylate (642)
- Amlodipine (482)
- Hydrochlorothiazide (199)
- Valsartan (131)
- Atenolol (91)
- View All

^ Matrix

- Pharmaceutical tablets (771)
- Blood plasma (177)
- Tablets (86)
- Urine (52)
- Pharmaceutical capsules (40)
- View All

▼ Method Category

▼ Technique

▼ Year

**Analysis of (-)-Amlodipine in Rattus norvegicus by HPLC**  
CAS MN: 1-101-CAS-123408

View Details & Instructions 상세정보로 이동

Add to Compare

세가지 분석법을 테이블로 비교 정리

Full Text - 문헌전문 옵션에 액세스

View in CAS SciFinder<sup>n</sup> CAS SciFinder-n 내 문헌 상세 페이지로 이동

Abstract

검색 결과 저장

PDF, XLS  
포맷으로 다운로드



## Analysis of **Amlodipine** in Pharmaceutical tablets by Spectrophotometry

CAS MN: 1-101-CAS-211300

Method Category: Active Pharmaceutical Ingredient and Metabolite Analysis  
Technique: Spectrophotometry

구조식 확인

분석에 사용된  
Analyte, materials,  
reagent 등 확인

Materials	Role	Image	CAS RN
Valsartan	analyte	<a href="#">View Structure</a>	137862-53-4
<b>Amlodipine</b>	analyte	<a href="#">View Structure</a>	88150-42-9
Pharmaceutical tablets	matrix		
Methanol	reagent	<a href="#">View Structure</a>	67-56-1

문헌 정보  
- 문헌전문 옵션 액세스  
- CAS SciFinder-n 이동

### Source

Simultaneous determination of **amlodipine** and valsartan  
Mohamed, Nashwah Gadallah  
Analytical Chemistry Insights (2011), 6, 53 - 59. Libertas Academica  
CODEN: ACINCT | ISSN: 11773901 | DOI: 10.4137/acis.7282

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

### Abstract

A spectrophotometric method was developed for simultaneous determination of **amlodipine** (Aml) and valsartan (Val) without previous separation. In this method **amlodipine** in methanolic solution was determined using zero order UV spectrophotometry by measuring its absorbency at 360.5 nm without any interference from valsartan. Valsartan spectrum in zero order is totally overlapped with that of **amlodipine**. First, second and third derivative could not resolve the overlapped peaks. The first derivative of the ratio spectra technique was applied for the measurement of valsartan. The ratio spectrum was obtained by dividing the absorption spectrum of the mixture by that of **amlodipine**, so that the concentration of valsartan could be determined from the first derivative of the ratio spectrum at 290 nm. Quantification limits of **amlodipine** and valsartan were 10-80 µg/mL and 20-180 µg/mL resp. The method was successfully applied for the quant. determination of both drugs in bulk powder and pharmaceutical formulation.

### Equipment Used

Ultraviolet/Visible spectrophotometer, 1601pc, Shimadzu, Japan  
Ultrasonic crest, 575T, Cortland, New York 13045, USA.

### Conditions

Instrument  
Detection wavelength: **amlodipine** - 360.5 nm; valsartan- 290 nm

### Instructions

#### Sample Preparation

1. Prepare tablets working solution by accurately weighing a quantity of powdered exforge tablets sample containing an equivalent of 10 mg **amlodipine** and 160 mg valsartan.
2. Transfer the powder into 100 mL volumetric flask and add 70 mL methanol.
3. Sonicate the mixture for ten minutes.
4. Dilute to the volume with methanol.
5. Filter the solution before use.

#### Standards Preparation

1. Prepare stock methanolic solution of **amlodipine** and valsartan of concentration 100 µg/mL and 200 µg/mL separately by dissolving the appropriate amount of the respective substance in methanol.
2. Prepare working standard solutions freshly before application by mixing suitable aliquots of stock solutions of **amlodipine** and valsartan and dilute with methanol to obtain the required concentration ranges.

#### Spectrophotometry analysis

1. Perform the analysis on a
2. Transfer aliquots (1 - 8 mL)
3. Dilute to the volume with
4. Record the absorbance at
5. Determine the absorbance
6. Divide the UV absorption
7. Obtain the first derivative

### Validation

Linearity Range	10 - 80 µg/mL, <b>Amlodipine</b> 20 - 180 µg/mL, Valsartan
Limits of Detection	5.5 µg/mL, <b>Amlodipine</b> 8 µg/mL, Valsartan
Limits of Quantitation	8.5 µg/mL, <b>Amlodipine</b> 12 µg/mL, Valsartan
Recovery	99.9 ± 1.1%, <b>Amlodipine</b> 100.56 ± 1.1%, Valsartan
Accuracy	100.19 ± 0.70%, <b>Amlodipine</b> 99.91 ± 0.55%, Valsartan
Precision	0.85%, 0.45%, 0.78% and 0.39% (RSD, within the same day, repeatability); 0.72%, 0.67%, 0.66% and 0.84% (RSD, different days, reproducibility) in 30, 50, 65 and 80 µg/mL taken, <b>Amlodipine</b> 0.62%, 0.70%, 0.61% and 0.38% (RSD, within the same day, repeatability); 0.73%, 0.87%, 0.75% and 0.56% (RSD, different days, reproducibility) in 48, 80, 104 and 128 µg/mL taken, Valsartan

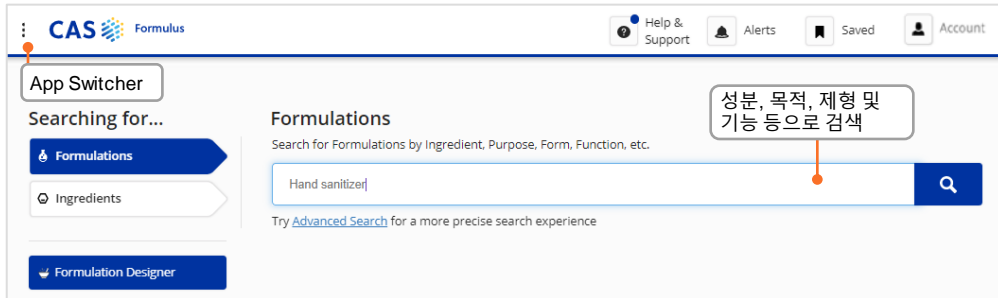
상세 Instruction  
및 Validation  
정보 제공



## 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.

**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.

3 Selected 498,521 Results

Sort: Relevance

1

**Effective Healthcare Personnel Handwash Composition for Maintaining or Improving Skin Hydration: Hand Sanitizers**

Location: Example 47, Table 10, 12  
 Purpose: Hand sanitizers  
 Target: Hand, Homo sapiens, Skin irritation, abnormal desquamation, skin hydration  
 Delivery Route: Topical drug delivery systems

Component	Function	Amount Reported
Group: Hand sanitizers	-	95 g
Water	-	22.95 wt %
1,2-Octanediol	-	0.25 wt %
bio alcohol SDA 3C 190	-	74.10 wt %
Glycerol	-	0.50 wt %
Additional group components reported		
Glycerol	-	5 g

View Formulation Detail

11 Similar Formulations - View All (opens in a new window)

2

**Hand Sanitizer Composition**

Location: Claim 1, 2, 3, 4, 6  
 Purpose: Hand sanitizers  
 Target: Hand, Homo sapiens  
 Delivery Route: Topical drug delivery systems  
 Physical Form: Solutions

**Component 정보**

Component	Function	Amount Reported
Group: acid solutions	hand disinfectants	-
Hydrochloric acid	disinfectants	17 g

PATENT

Hand sanitizers with improved aesthetics and skin-conditioning to encourage compliance with hand hygiene guidelines

Assignee: GOJO Industries Inc.  
 WO2015138926  
 Language: English

View in CAS SciFinder®





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

Searching for...

Formulations

Ingredients

Formulation Designer

**Ingredients**

Search by Ingredient Name, CAS Registry Number, or Function

성분명, CAS 등록번호, 또는 기능을 입력하여 검색

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

Filter by

**Industry**

- Agrochemical
- Cleaning & Surfactant Products
- Cosmetics & Personal Care
- Food & Related
- Pharmaceutical

[View All](#)

**Regulatory Information**

- REACH (3)
- ANMAT (1)
- Cosing: Cosmetic Ingredient Inventory (1)
- Drug Master File List (1)
- FDA Green Book (1)
- FDA Inactive Ingredients Database (1)

[View All](#)

**Experimental Properties**

- Melting Point (2)
- Boiling Point (1)
- Median Lethal Dose (1)

**Commercial Availability**

- Available (3)

3 Results

물질정보 상세 보기

CAS RN: 9067-32-7

[View Details](#)

Image Not Available

Unspecified

Formulations
Suppliers
Add to Designer

**Sodium hyaluronate**

**Hyaluronic acid**

There are no Key Physical Properties to display for this Ingredient

Commonly Used As: Humectants; Skin conditioners; Ophthalmic agents; Thickening agents; Gelation agents...

[Commonly Formulated With](#) | [Regulatory Information](#) | [Experimental Properties](#)

주로 사용되는 예시

2

CAS RN: 498-21-5

[View Details](#)

C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O<sub>4</sub>

Unspecified

Formulations
Suppliers
Add to Designer

**Methylsuccinic acid**

**Acid**

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	132.11	-
Melting Point (Experimental)	117.5 °C	-
Boiling Point (Experimental)	102-106 °C	Press: 12 Torr

Commonly Used As: Hair conditioners; Anesthetics

[Commonly Formulated With](#) | [Regulatory Information](#) | [Experimental Properties](#)

규제정보 보기
실험 특성 보기

함께 사용되는 주요 성분 보기

Ingredient	CAS RN/CAS SCN	As Active Ingredient	As Inactive Ingredient	As Any Role
Water	7732-18-5	<a href="#">View Formulations</a>	<a href="#">View Formulations</a>	<a href="#">View Formulations</a>
ε-Poly-L-lysine	28211-04-3	<a href="#">View Formulations</a>	-	<a href="#">View Formulations</a>
Urea	57-13-6	<a href="#">View Formulations</a>	-	<a href="#">View Formulations</a>
Ammonium dihydrogen phosphate	7722-76-1	<a href="#">View Formulations</a>	-	<a href="#">View Formulations</a>
	1415-93-6	<a href="#">View Formulations</a>	-	<a href="#">View Formulations</a>
	97-65-4	<a href="#">View Formulations</a>	<a href="#">View Formulations</a>	<a href="#">View Formulations</a>
	77-92-9	-	<a href="#">View Formulations</a>	<a href="#">View Formulations</a>
	10043-35-3	<a href="#">View Formulations</a>	-	<a href="#">View Formulations</a>
	308066-67-3	<a href="#">View Formulations</a>	-	<a href="#">View Formulations</a>
	9003-05-8	<a href="#">View Formulations</a>	-	<a href="#">View Formulations</a>
	7778-77-0	<a href="#">View Formulations</a>	-	<a href="#">View Formulations</a>
	584-08-7	<a href="#">View Formulations</a>	-	<a href="#">View Formulations</a>
	7785-87-7	<a href="#">View Formulations</a>	-	<a href="#">View Formulations</a>
	7440-66-6	<a href="#">View Formulations</a>	-	<a href="#">View Formulations</a>

**Formulation Designer**

\* All fields are required

**Industry**

- Select One -

**Purpose**

- Select One -

**Physical Form**

- Select One -

**Active or Featured Ingredient**

Enter one term

Methylsuccinic acid

At least 1 and up to 5 ingredients can be added.

[Add Another Ingredient](#)

[Create!](#)

새로운 제형/제제 디자인하기



## 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 [help@cas.org](mailto:help@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.