CAS SciFinder Discovery Platform™

사용자 가이드

CAS
A division of the
American Chemical Society

TABLE OF CONTENTS

CAS
A division of the American Chemical Society

인터페이스 및 설정

Search Interface

CAS SciFinder는 직관적이고 편리한 검색 인터페이스를 제공합니다.

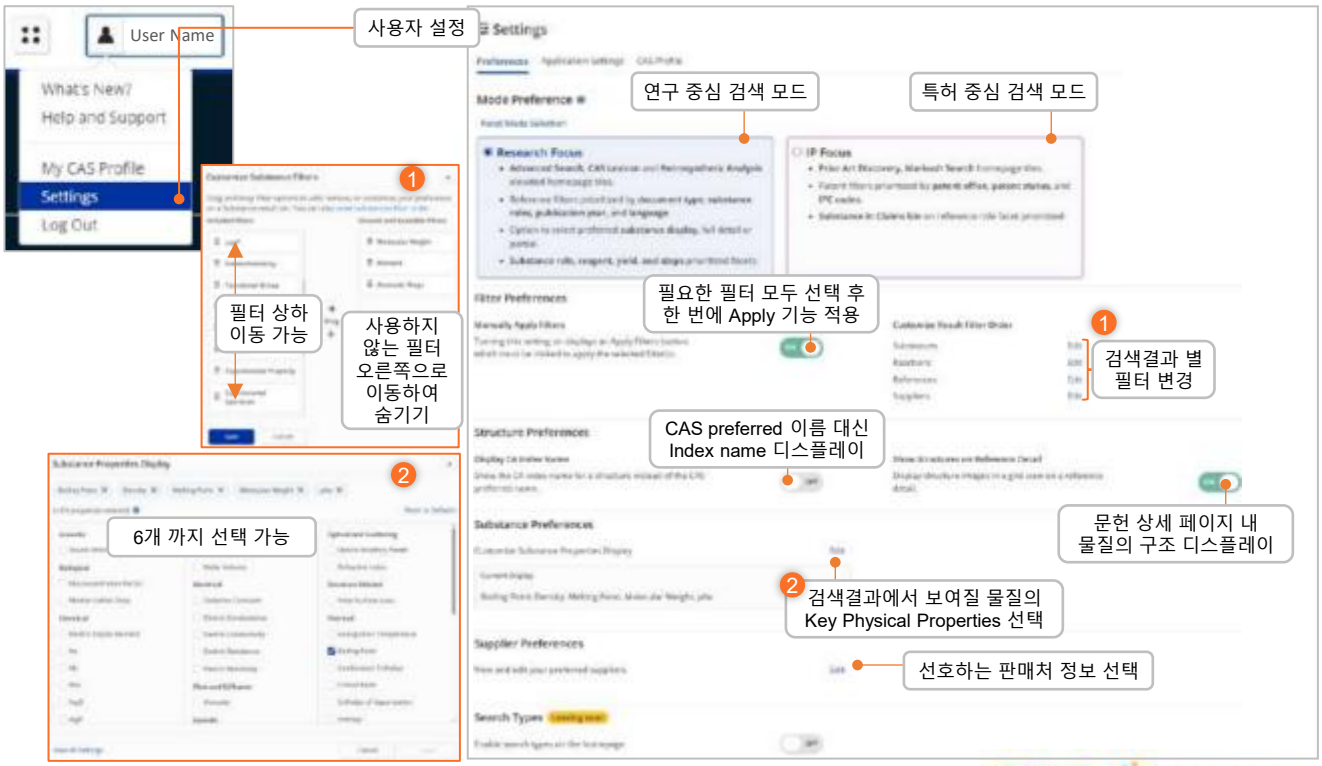
SearchSense

별도의 검색 유형 없이 자연어 표현으로도 필요한 정보를 찾을 수 있습니다.

예: Chromium dichloride catalyzed Nozaki-Hiyama-Kishi reactions
Papers by Albert Einstein
Boiling point of 79-09-4
Where can I find the regulation information on sulfur dioxide

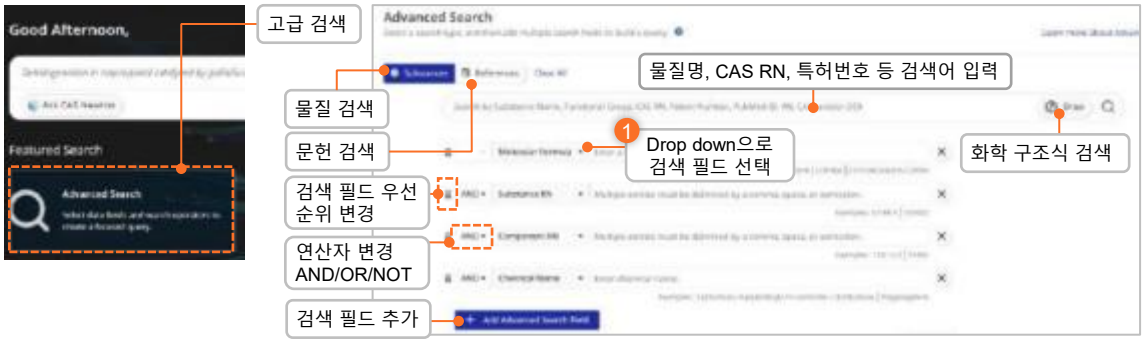
Settings

검색 결과 내 필터를 사용자의 편리에 맞게 조정하실 수 있습니다.



CAS SciFinder

고급 검색



Advanced Search Tips

검색 필드는 50개까지 사용 가능합니다.

논리 연산자(AND, OR, NOT)를 통해 정확한 텍스트 검색어를 정의할 수 있습니다.

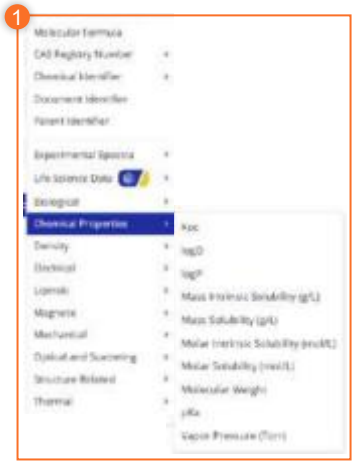
연산자는 **OR**, **AND, NOT** 순서로 처리됩니다.
동의어 등의 논리적 표현을 그룹화하기 위해 괄호를 사용하세요. (예: (flavor or odor) and menthol)

와일드 카드(*, ?)를 사용하면 보다 포괄적이고 정밀한 검색이 가능합니다.

문헌과 물질의 이름 검색에서 사용할 수 있습니다.
*은 알파벳 0개 부터 무제한으로 확장될 수 있으며, ? 는 0개 또는 1개를 대신합니다.
(예:immunoglobulin*conjugate* , benzonorbornen?)

큰 따옴표(“”) 안에 있는 용어는 구문으로 검색됩니다.

Substance Search



물질의 명칭, 동의어, CAS Registry Number, 문헌 식별 번호 등 다양한 표기 방법으로 검색할 수 있습니다.

Streptomycin 레코드 검색
CAS Registry number 식별자로 Streptomycin 검색
세가지 검색: Streptomycin, Streptomycin sulfate, and Sulfate
Sulfoximin을 포함한 레코드 검색
특허 내 색인된 모든 물질 검색 (예: WO2019234160)

물성 정보로 검색하여 물질 후보군을 확인할 수 있습니다.

측정/예측 값을 범위로 검색 (예: 끓는점 80-120 ℃)
Drug likeness 에 해당하는 조건(Lipinski, LogD, LogP, pKa 등)을 선정하여 빠르게 스크리닝

화학 구조를 그려 다른 검색 필드와 함께 검색할 수 있습니다.

Reference Search

키워드, 물질명, 문헌 식별자, 특허 번호/분류, Concept 등을 사용해 문헌을 검색할 수 있습니다.

물질명 또는 치환기가 사용된 문헌 검색
특허의 패밀리 기준 검색 및 확인
DOI, PubMed ID 등 고유 식별자 기반 정확 검색

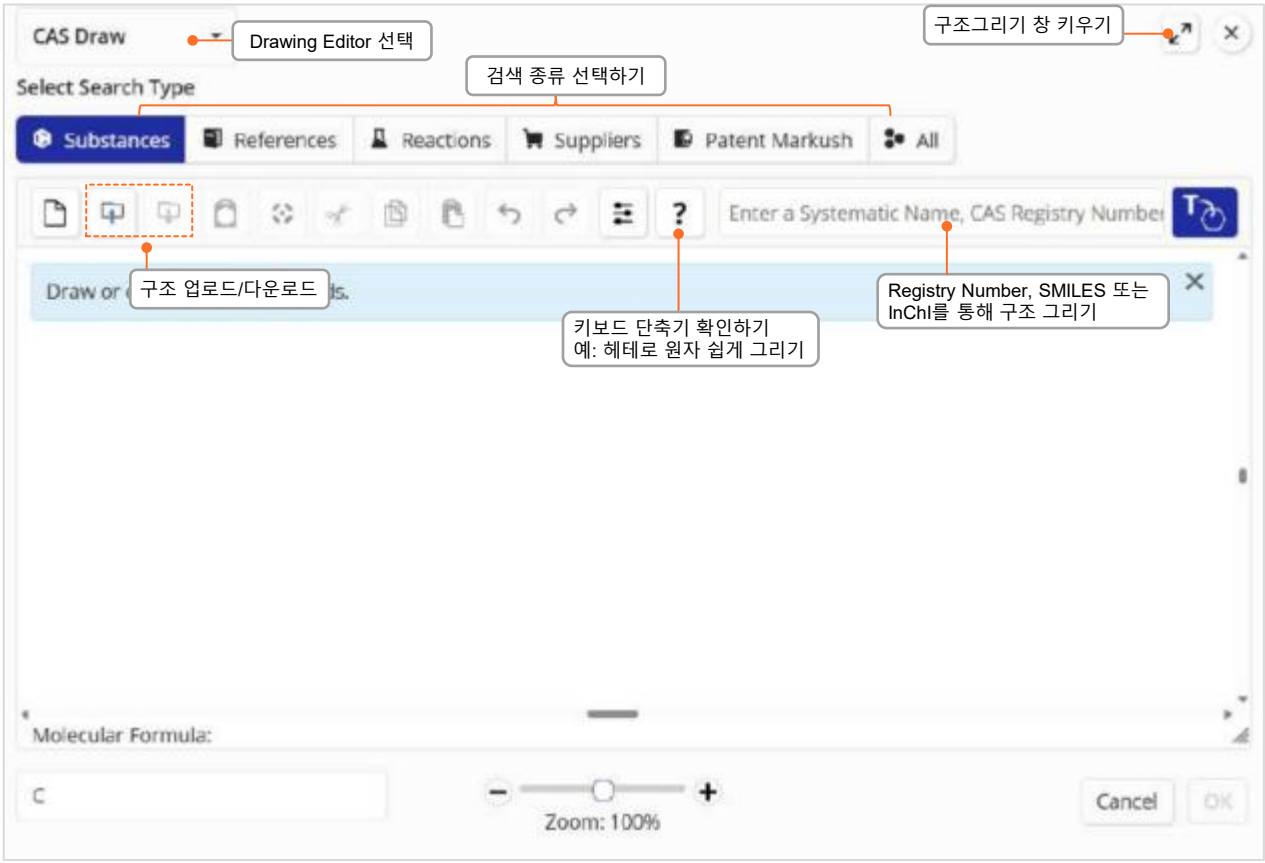
저자, 발명자, 기관명을 기준으로 관련 문헌을 찾을 수 있습니다.

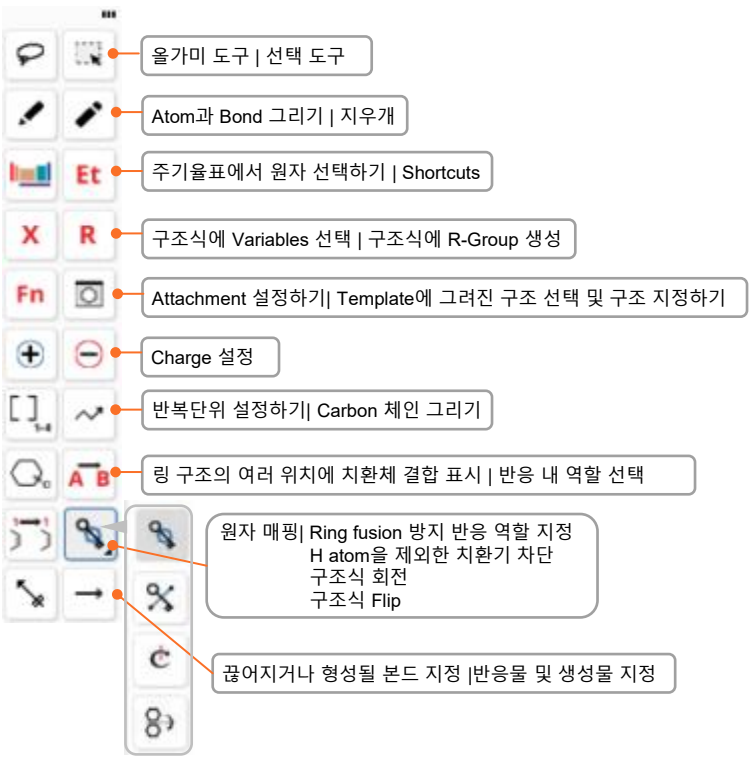
Pharmacology data, ADME, Toxicity, Biomarker등의 생명과학 정보로 검색할 수 있습니다.

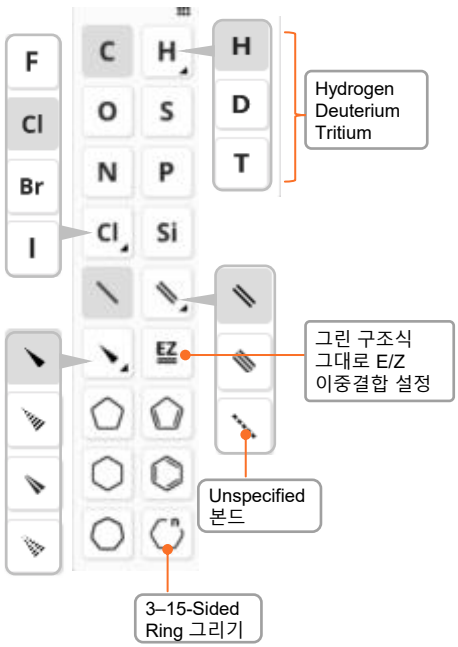
Drawing Editor – CAS Draw

CAS Draw editor

CAS Draw를 통해 구조식과 반응쿼리를 설정할 수 있습니다.



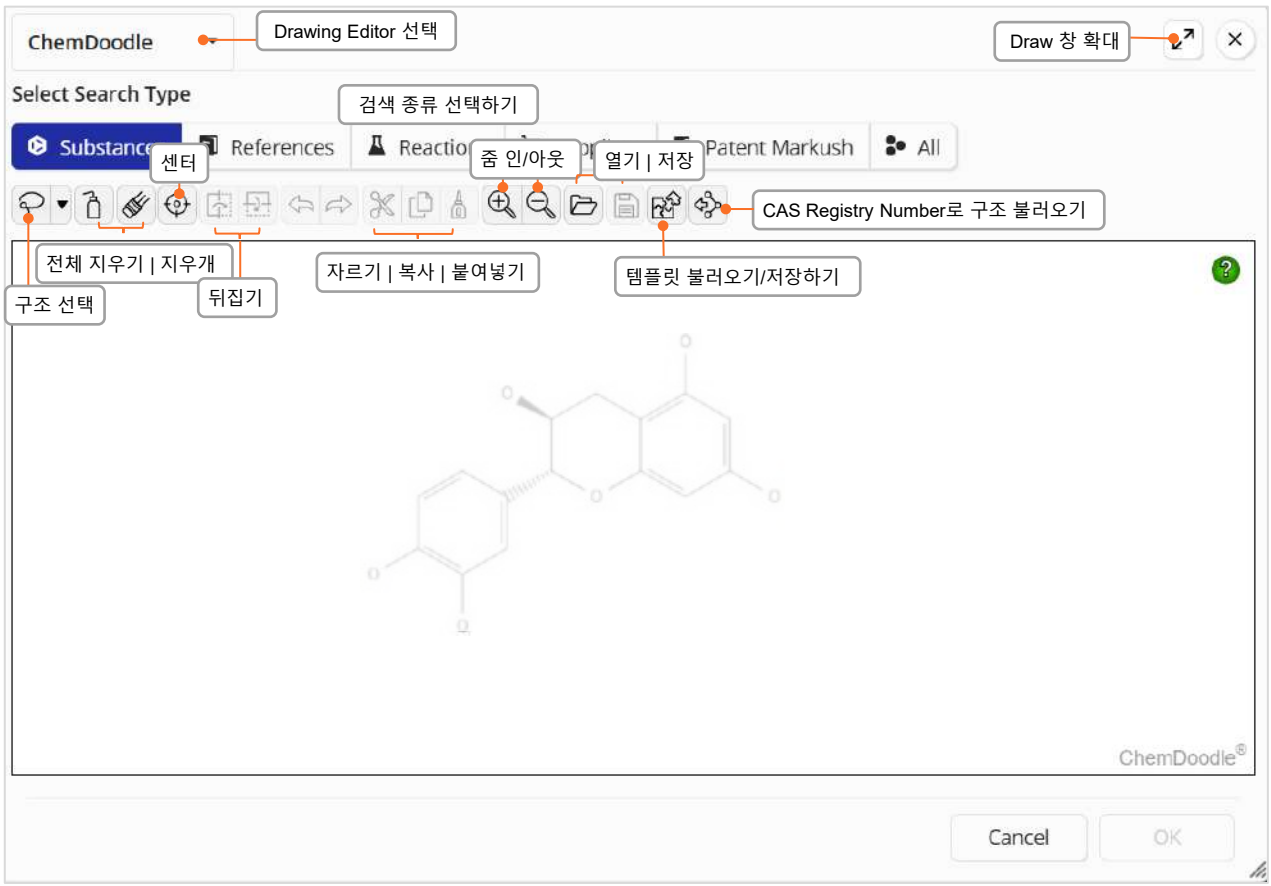


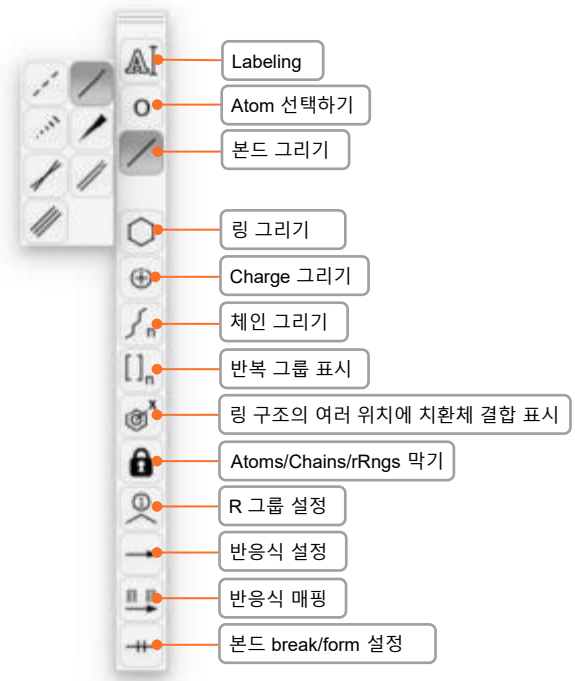


Drawing Editor – ChemDoodle®

ChemDoodle®

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

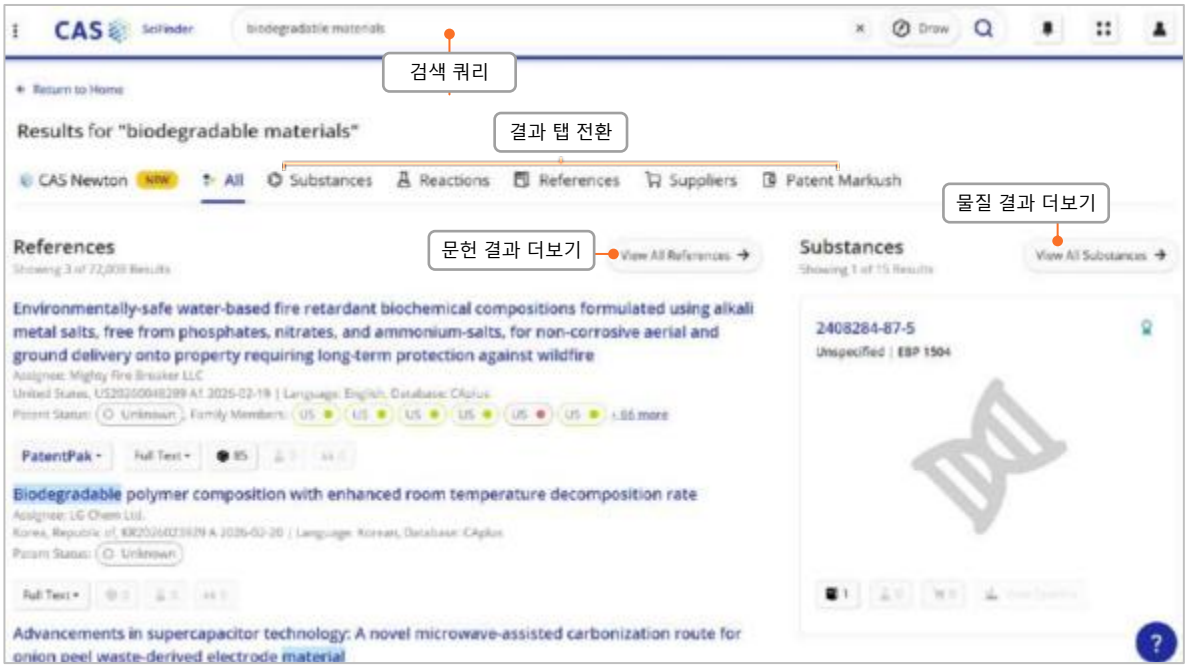




검색 결과 보기

SearchSense

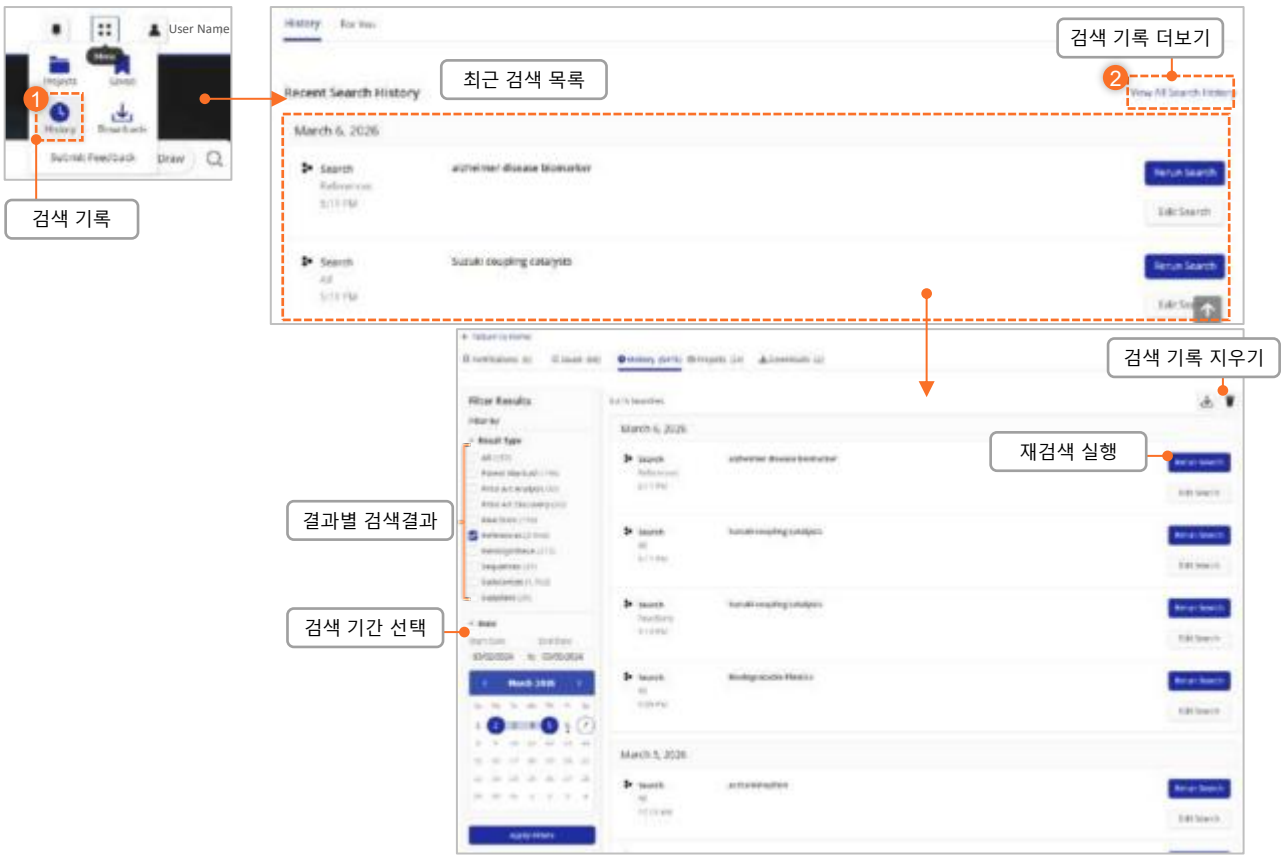
입력한 검색 쿼리를 해석하여 가장 관련성이 높은 결과를 즉시 제공합니다.



Search History

완료된 검색은 Search History 페이지에 자동 기록됩니다.

검색화면 하단에서 Recent Search History나, 상단 Menu 아이콘 → History에서 확인할 수 있습니다.
검색 기록 건수는 제한이 없습니다.



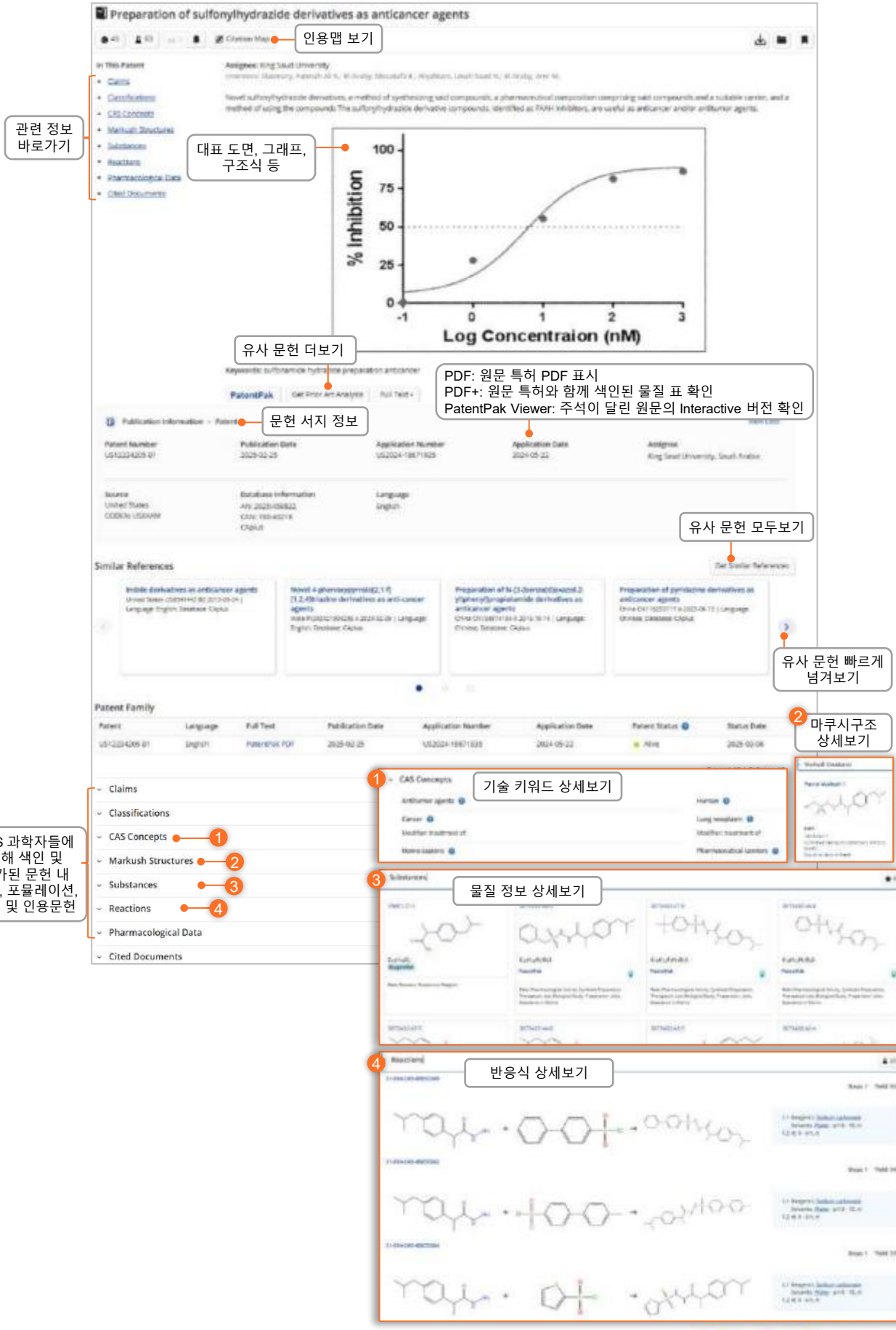
검색 결과 보기 – 문헌

Reference Search Results 문헌-물질-반응까지 연결된 정보의 흐름을 따라 탐색합니다.

시각화된 그래프 및 필터로 연도별 트렌드, Concept,저자, 기관 등의 상세 정보를 빠르고 쉽게 파악할 수 있습니다.

CAS SciFinder

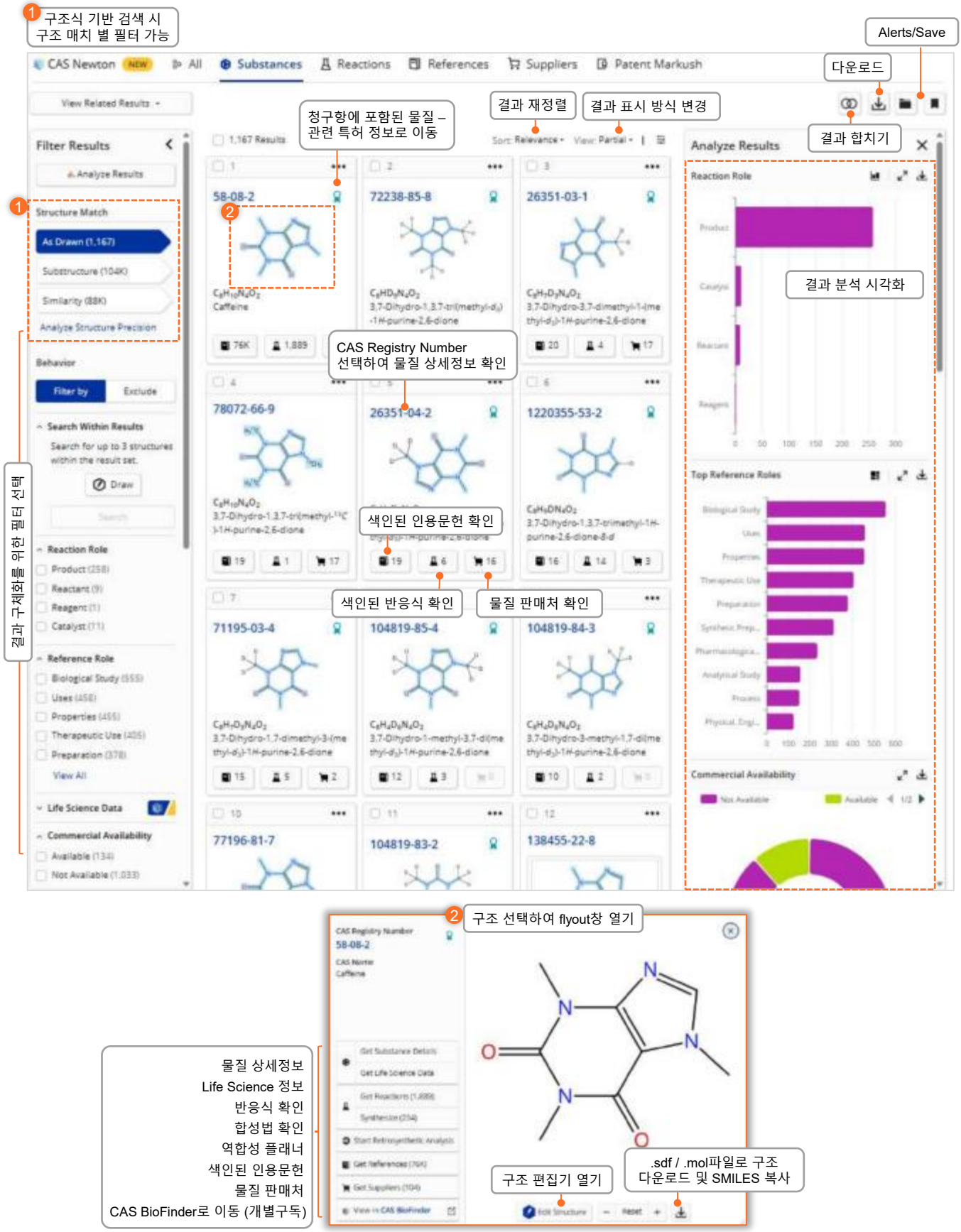
문헌 상세 정보



CAS SciFinder

검색 결과 보기 – 물질

Substance Search Results 물질-반응-판매처까지 연결된 정보의 흐름을 따라 탐색합니다.



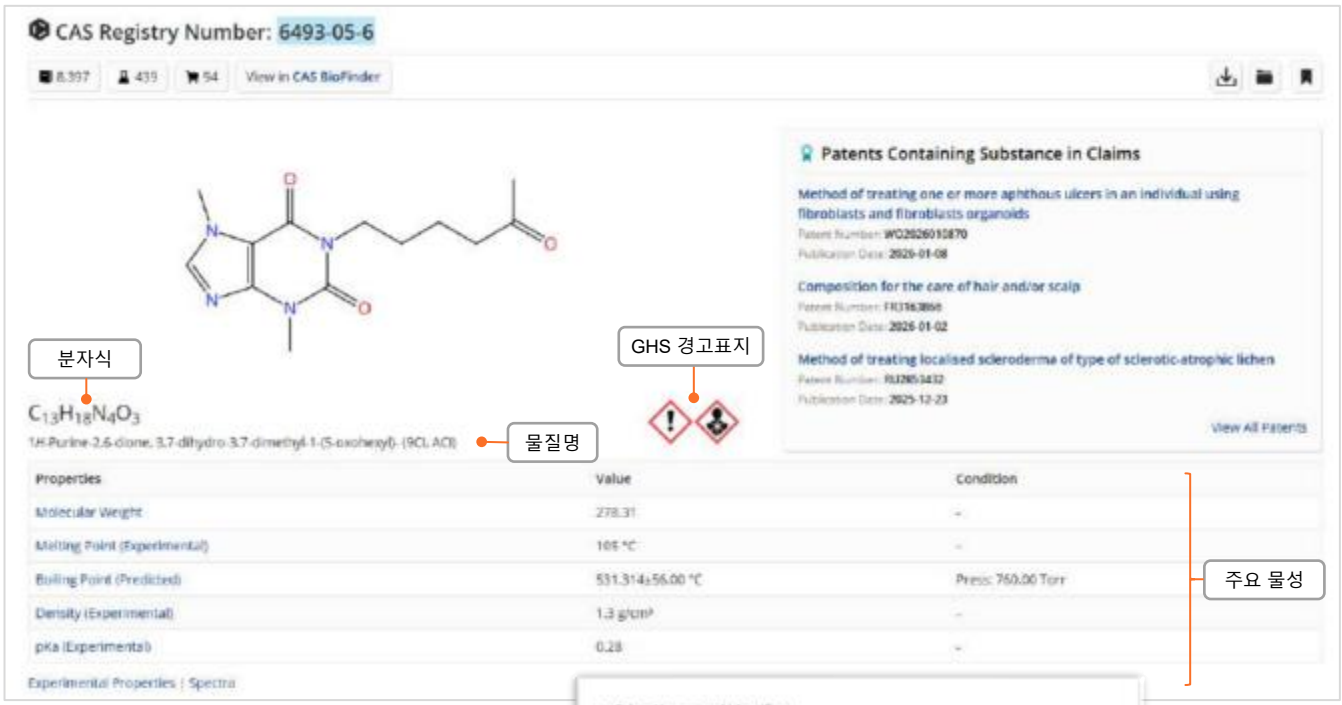
물질 상세정보
Life Science 정보
반응식 확인
합성법 확인
역합성 플래너
색인된 인용문헌
물질 판매처
CAS BioFinder로 이동 (개별구독)

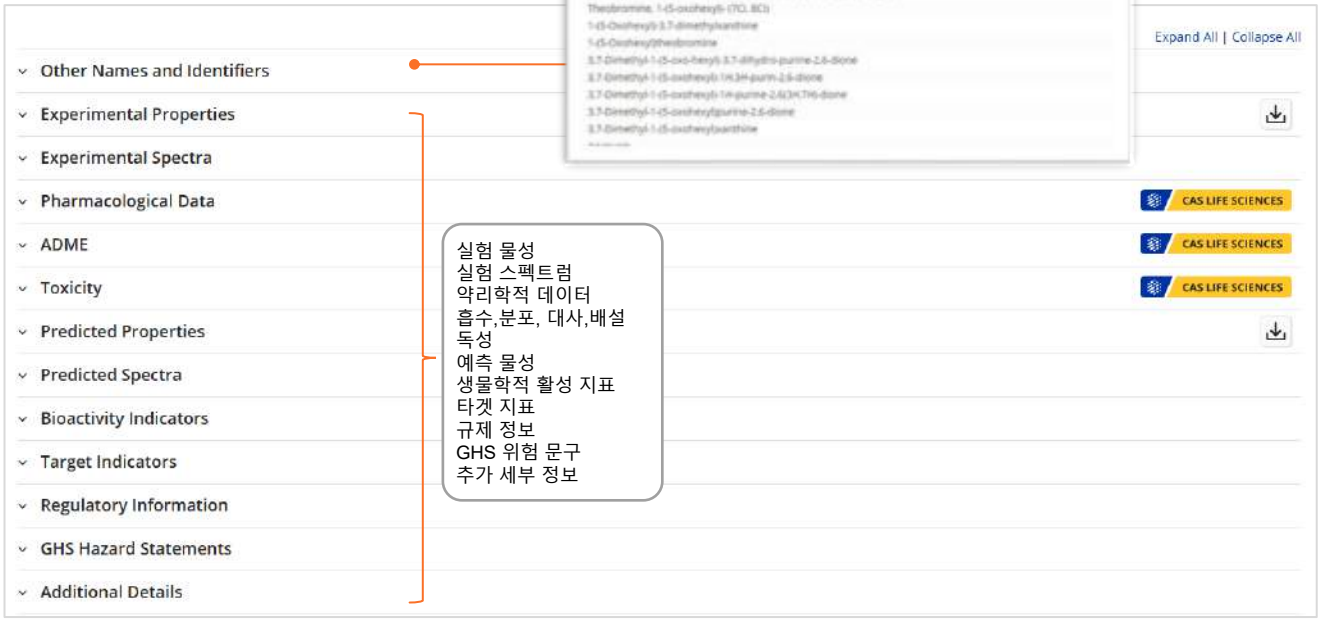
CAS SciFinder

물질 상세 정보

Substance detail

CAS Registry Number를 클릭하여 구조, 분자식, 물성 및 추가 데이터가 포함된 물질 상세 정보가 표시됩니다.





검색 결과보기 – 반응식

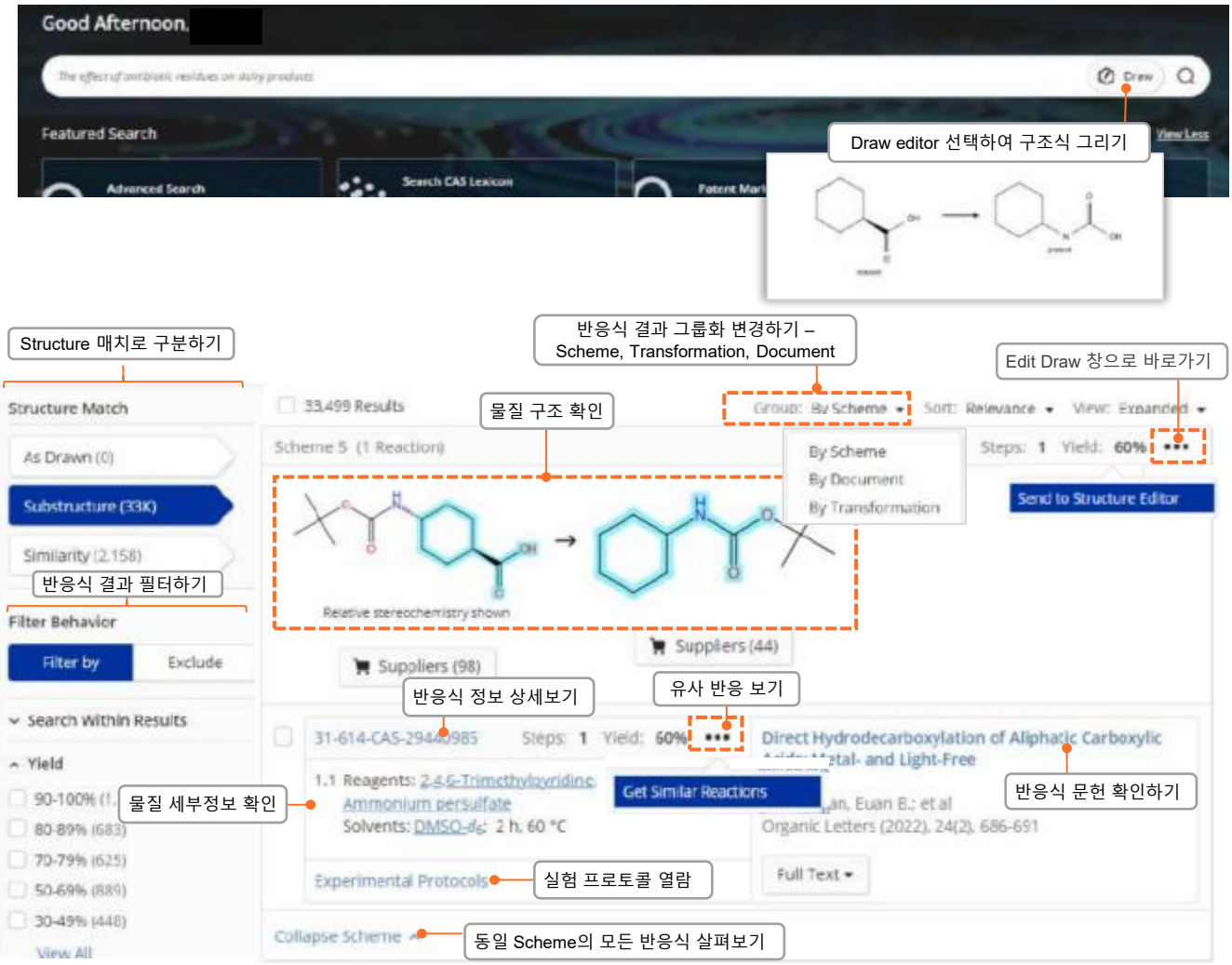
Reaction searches

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

- 지정된 반응물의 역할과 Functional Groups, 두개 이상의 검색어 (불 연산자 포함) 및 반응 관련 문구로 검색 가능합니다.
- Scheme으로 그룹화 된 경우에 한해서, 정렬 순서는 검색 관련도, 등록일, 수율, 스텝 수 순서로 정렬할 수 있습니다.
- Scheme 내 반응식들은 수율 순서대로 정렬됩니다.

검색 예시

- *Camphorsulfonic acid catalyzed conversion of 3,4-Dihydro-2H-pyran to 224315462 in water*
- *Preparation of spirolactone from 13934-61-7*
- 10.1021/acs.orglett.7b03668 and 2170309-48-3



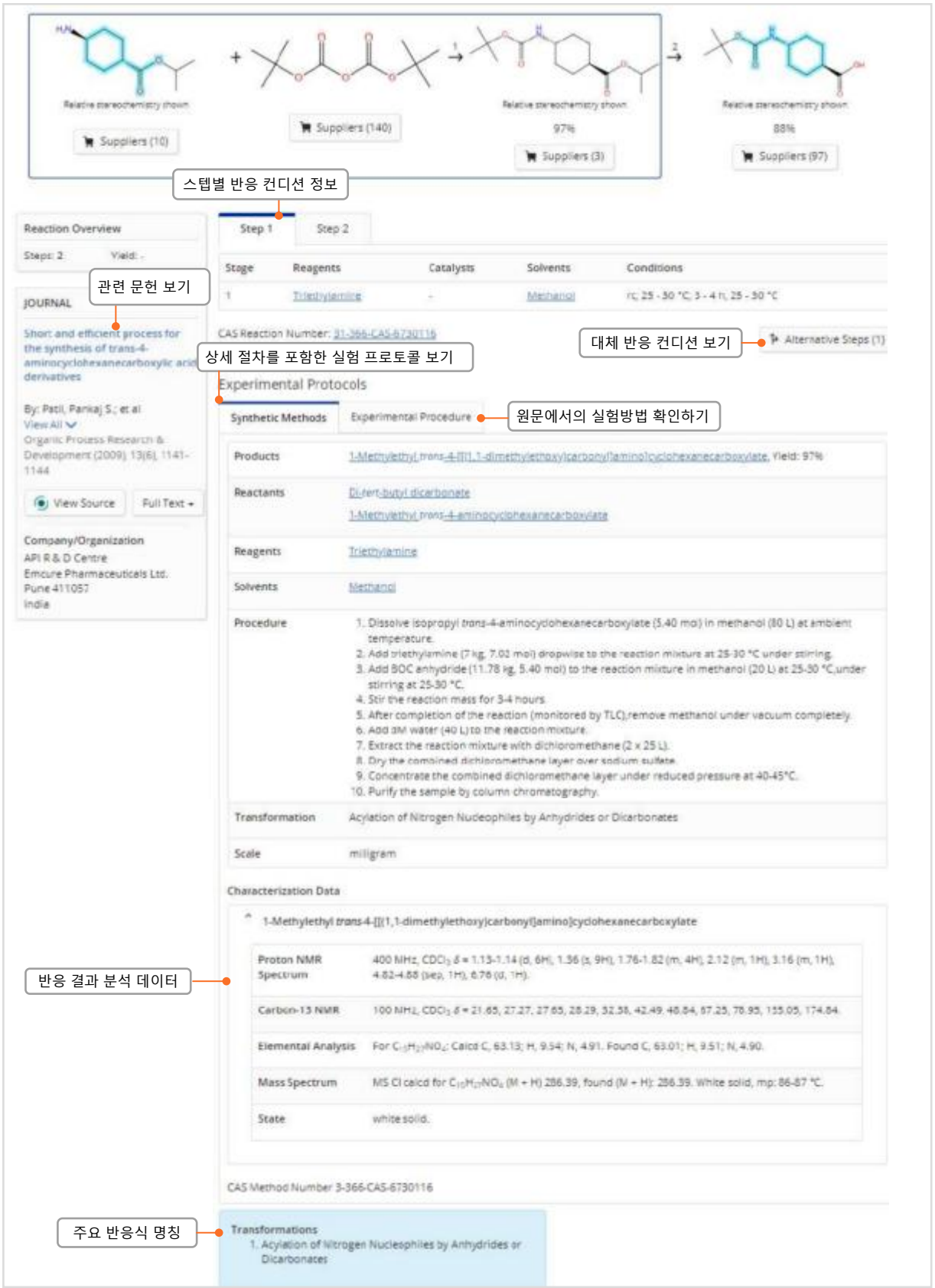
Results Filters

다양한 필터를 활용하여 관련된 반응식을 빠르게 찾으실 수 있습니다.

- Non-Participating Functional Groups: 반응에 참여하지 않는 치환기
- Commercial Availability: Starting Materials또는 Products가 구매 가능한 물질인 반응식
- Reaction Notes: 특정 환경에서 진행한 반응정보
- Source References: 반응식 출처

반응식 상세정보

Reaction Details 용매, 촉매, 반응물, 컨디션을 포함한 세부정보, 문헌, 그리고 Supplement에서 추출한 실험 프로토콜을 나타냅니다.

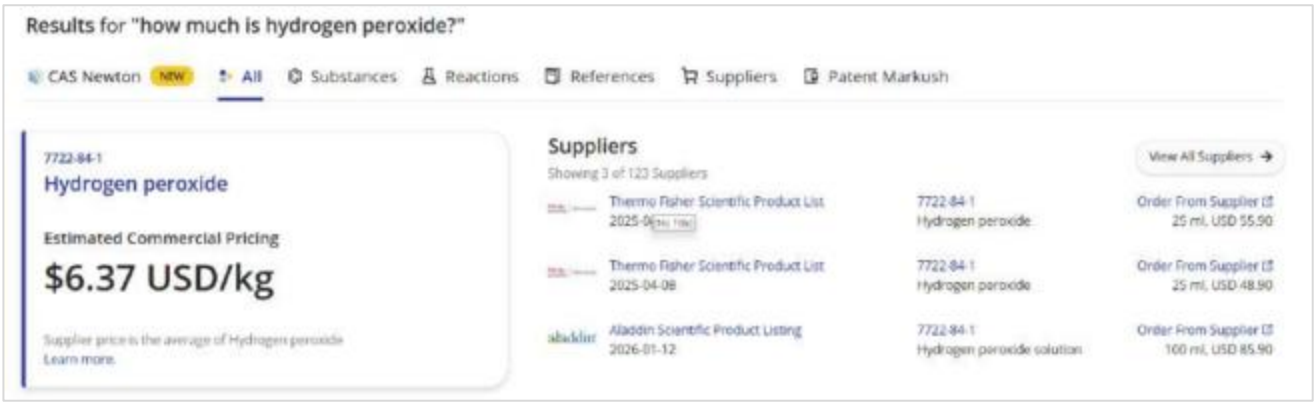


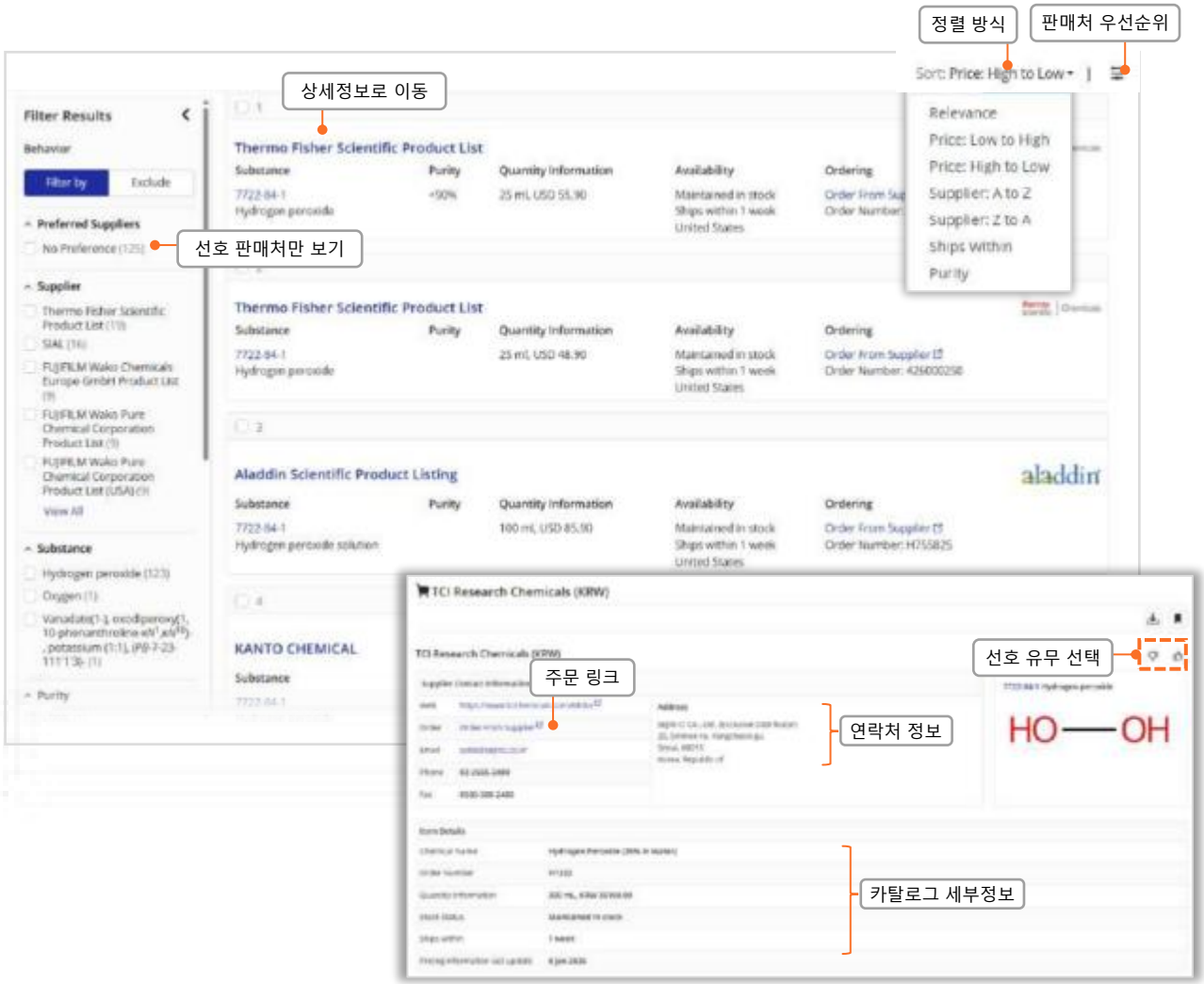
검색 결과보기 – 판매처

Suppliers Searching

물질명, 화학 구조식 또는 기타 식별자를 통해 판매처 검색을 하여 카탈로그에 직접 연결이 가능합니다.
자연어 검색을 통해 판매처와 추정 가격을 확인할 수 있습니다.

Hydrogen Peroxide
58-08-2
How much is hydrogen peroxide?
Who sells caffeine?





CAS SciFinder

CAS Roles

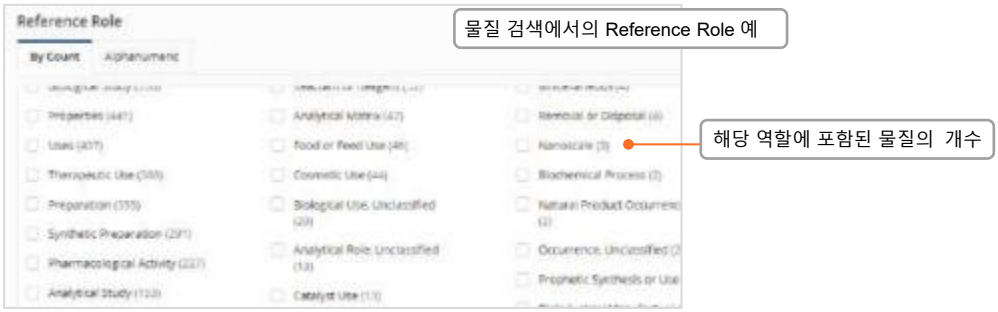
CAS Roles

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.

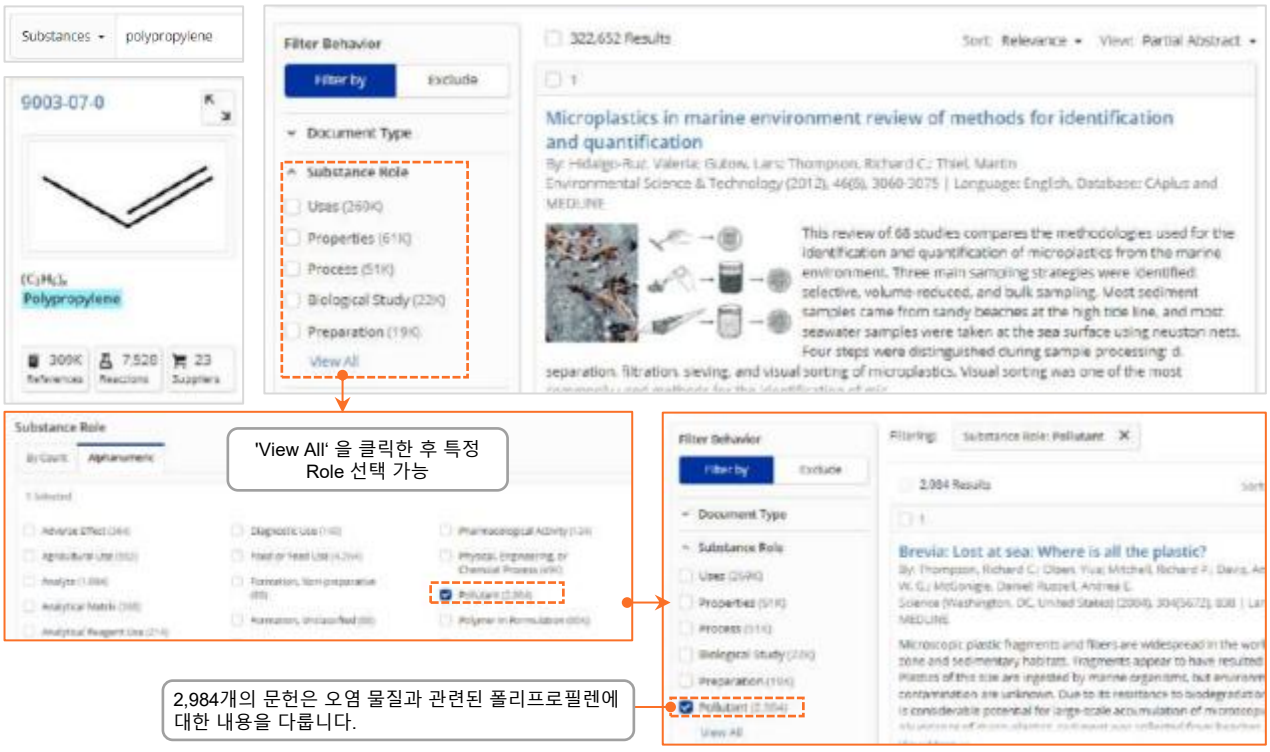


Roles in reference results

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.

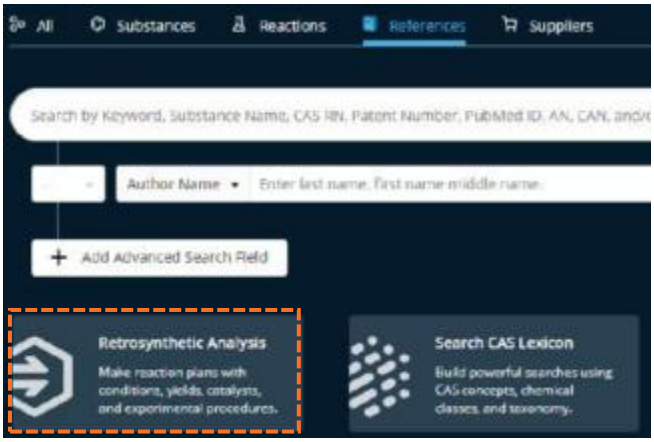


CAS SciFinder

역합성 플래너 (Retrosynthesis)

Launch Plan Generation SciFinder Retrosynthesis Planner를 시작하는 두가지 방법

1 Retrosynthesis 탭을 클릭하여 시작

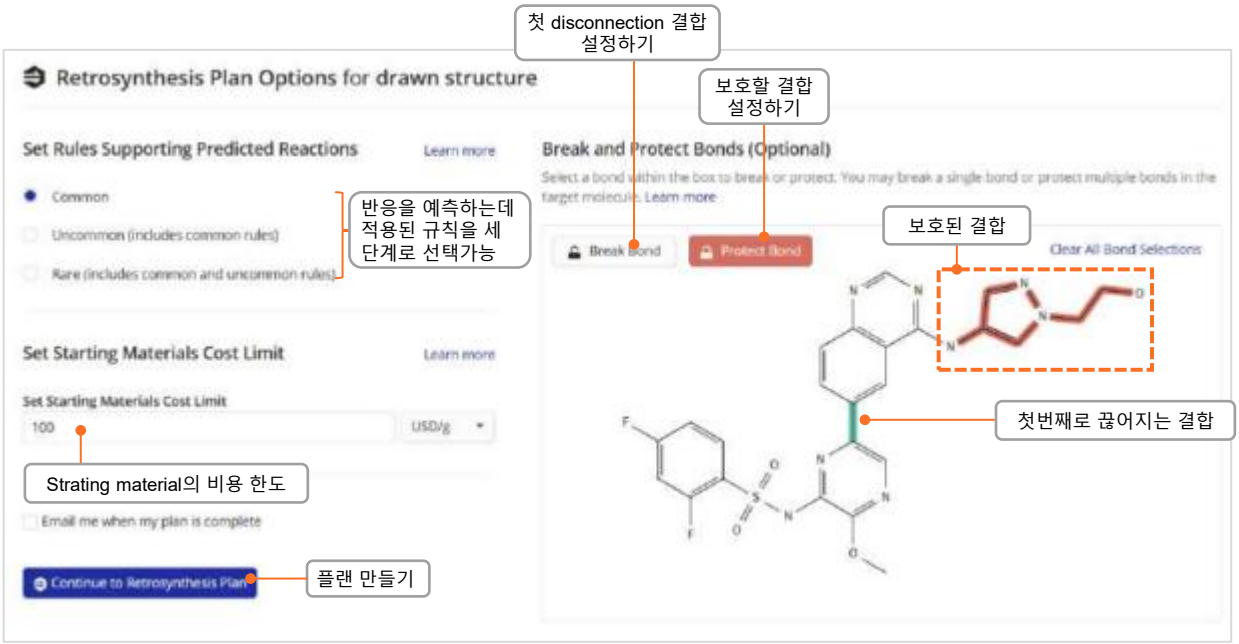


2 물질 구조의 플라이아웃 창을 열고 생성 시작

Plan Options

플랜 옵션을 선택하여 아래와 같은 사항을 설정할 수 있습니다.

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



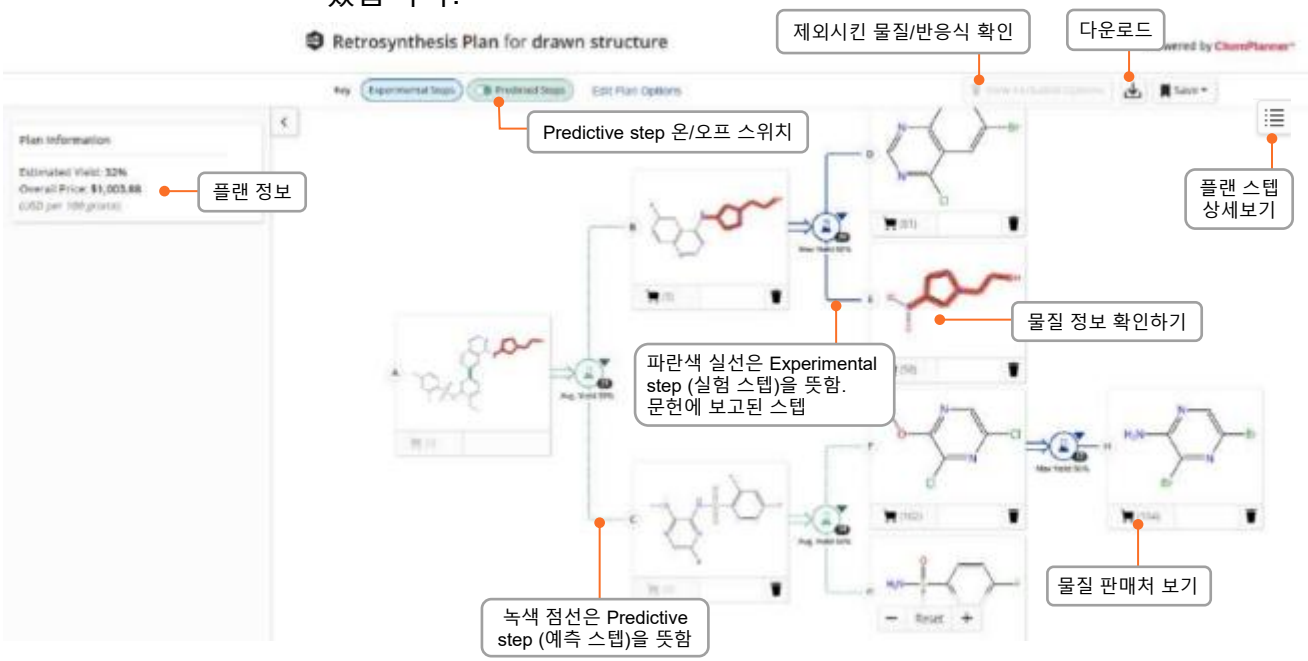
Predicted Reaction Rules 예측의 기반이 되는 검증된 규칙

Common Rule에는 실험실에서 자주 사용되는 반응 유형이 포함되며, 많은 문헌 예제를 포함한 강력한 반응 유형을 볼 수 있습니다.
Uncommon, Rare Rule을 통해서는 잠재적으로 더 새로운 합성법을 도출해낼 수 있습니다.

역합성 플래너 (Retrosynthesis)

Open Plan

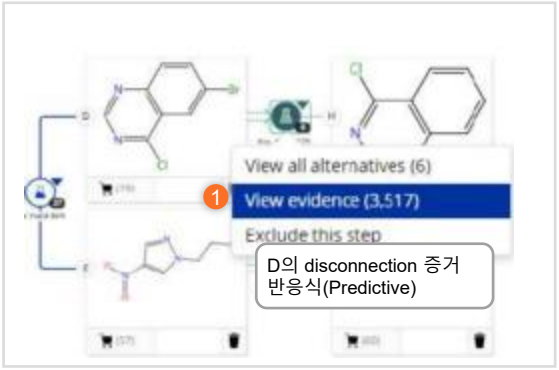
Experimental Plan은 몇 초 안에 사용할 수 있으며, Predictive Retrosynthesis Plan (예측 역합성 플랜)은 조금 더 오래 걸릴 수 있습니다.

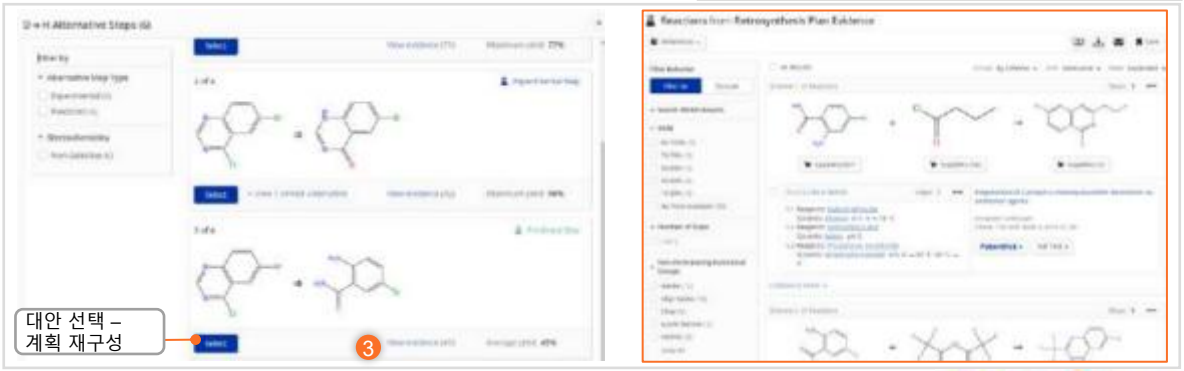


Alternative Steps

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.



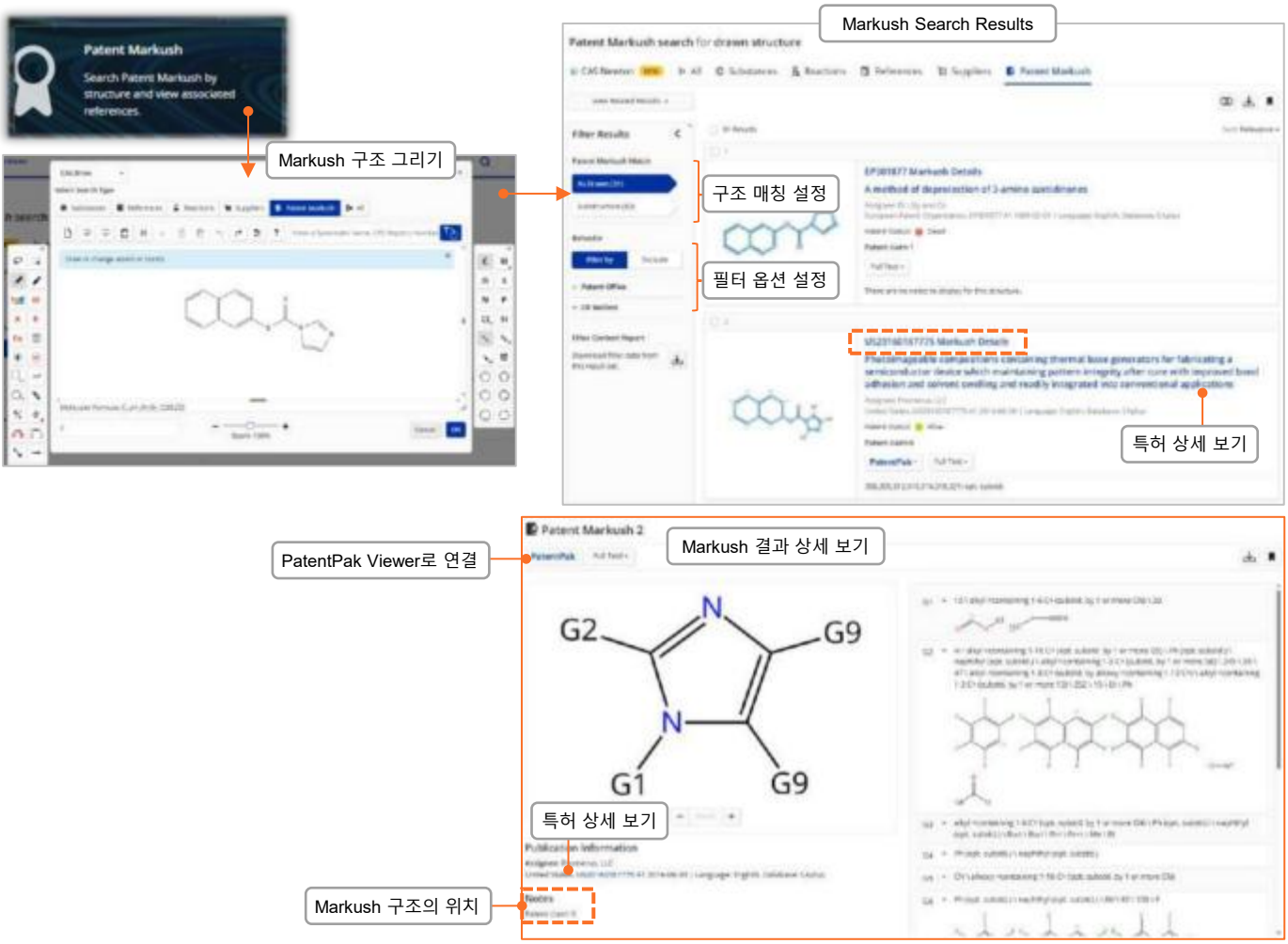


CAS SciFinder

Markush 검색 및 PatentPak

Patent Markush Search

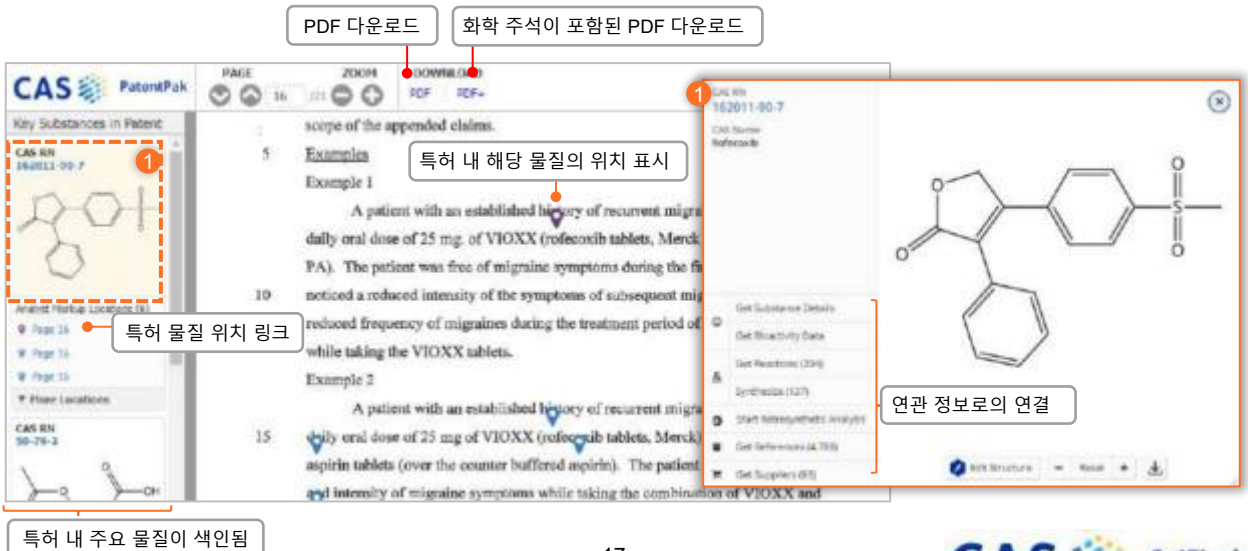
CAS에서 구축한 Markush 구조 전문 데이터베이스인 MARPAT으로 화합물군을 체계적으로 탐색·검증합니다.



PatentPak®

특허 워크플로 솔루션으로, 전체 텍스트 특허를 신속·정확하게 검색하고, 관련 화학물질 파악 시간을 줄일 수 있습니다.

- **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:



CAS SciFinder

특허 선행기술 조사 및 출원전 분석

Prior Art Analysis

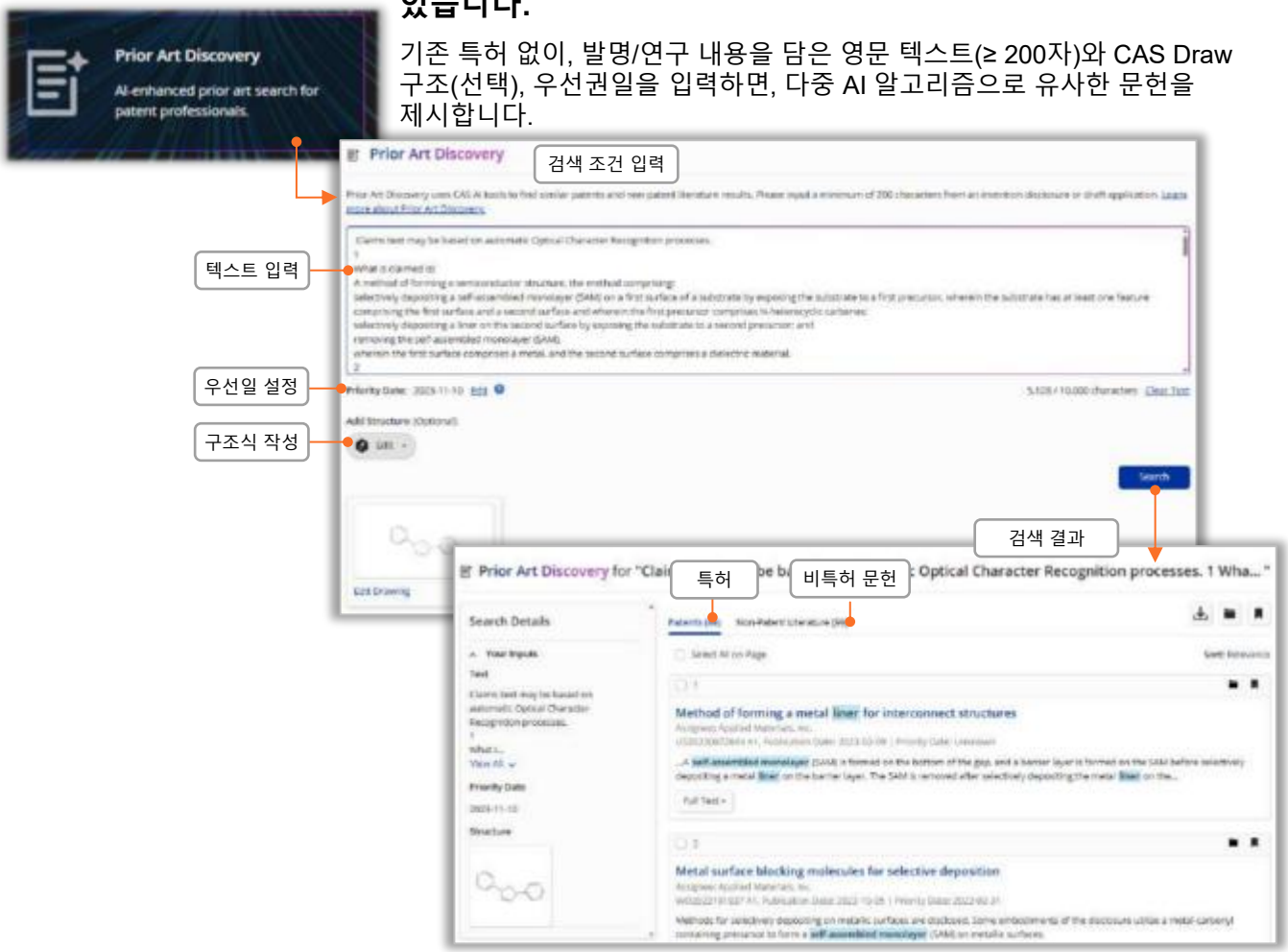
CAS 인덱싱 기술과 AI를 활용하여 해당 특허의 선행 기술을 자동 분석합니다.

- 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

Prior Art Discovery

출원 전 단계에서도 발명/연구 내용만으로 선행 기술을 찾을 수 있습니다.

기존 특허 없이, 발명/연구 내용을 담은 영문 텍스트(≥ 200자)와 CAS Draw 구조(선택), 우선권일을 입력하면, 다중 AI 알고리즘으로 유사한 문헌을 제시합니다.

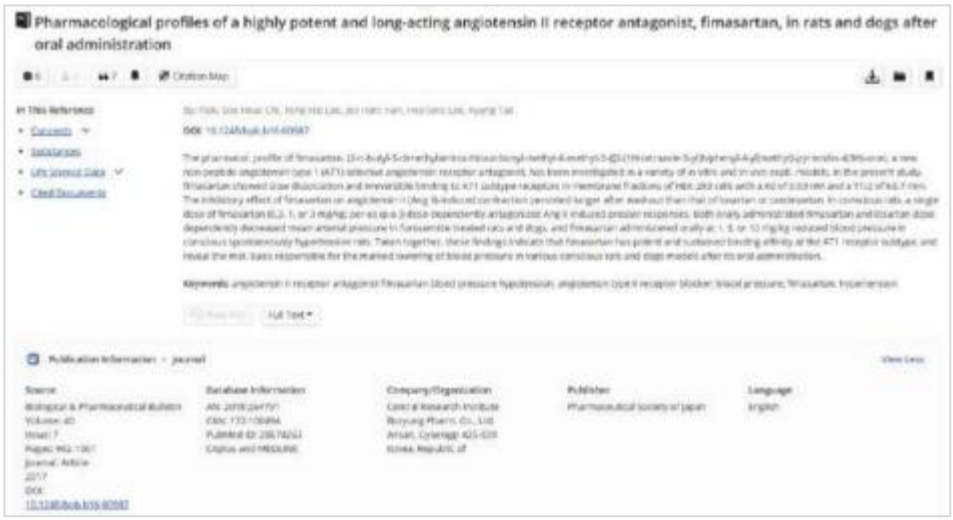


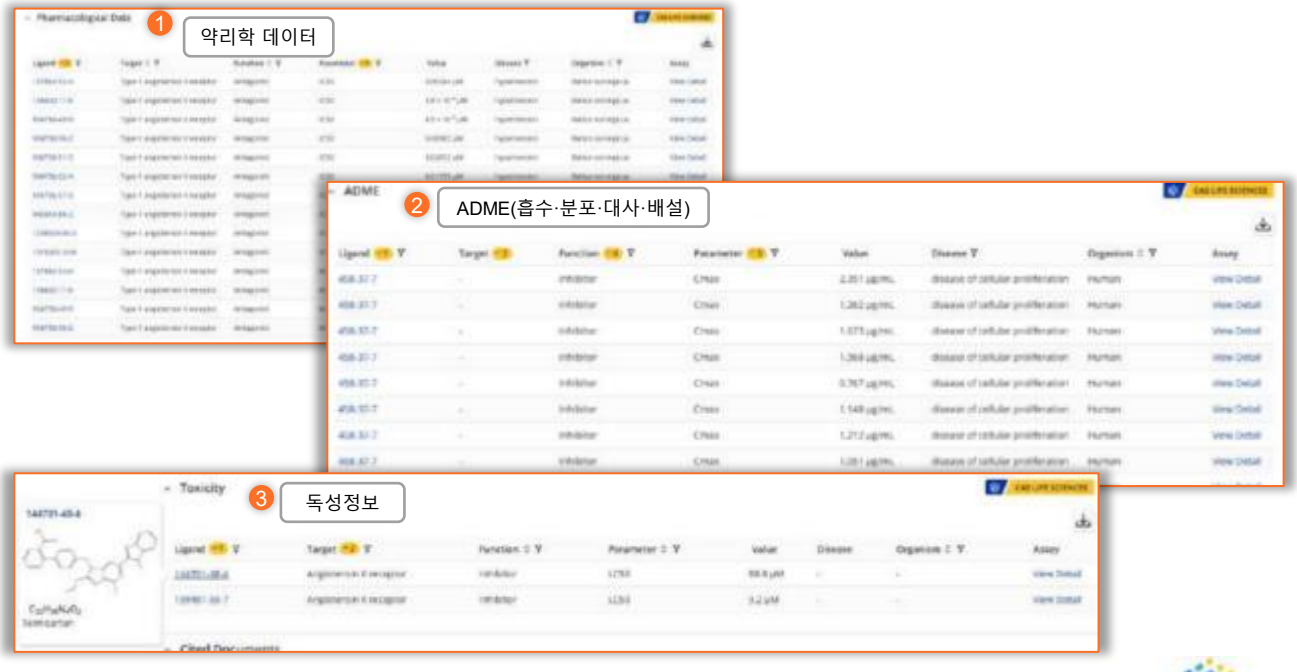
CAS SciFinder

문헌 상세 페이지에서는 약리·ADME·독성 정보를 제공합니다.

- 해당 문헌에 관련 정보가 수록된 경우에 한해 인덱싱되어 표시되므로, 각 문헌의 데이터 특성에 따라 제공되는 범위가 달라질 수 있습니다.

문헌 결과 필터 중 **Life Science Data**로 필터하여 해당 콘텐츠를 포함한 문헌으로 결과를 좁힐 수 있습니다.

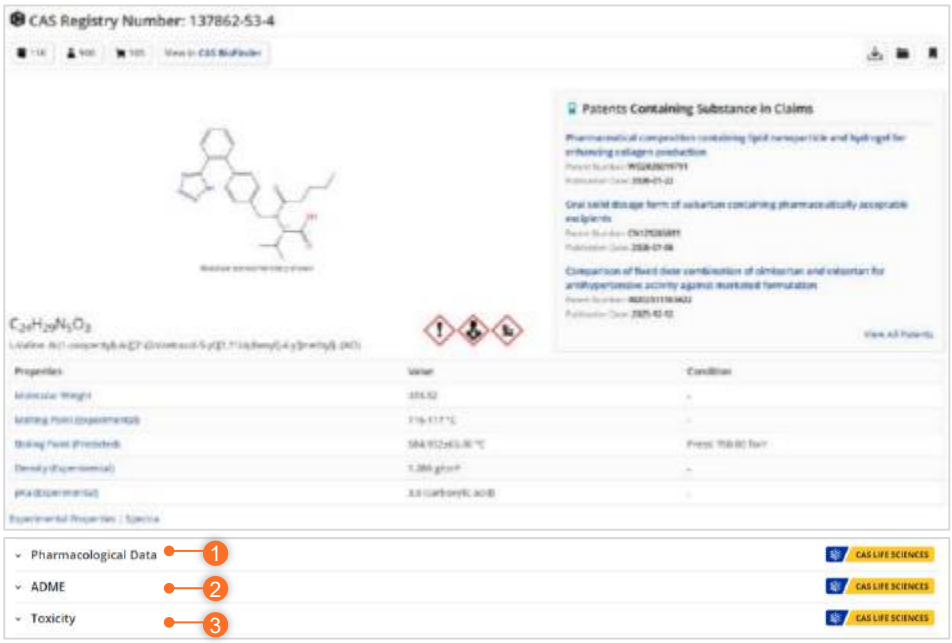




CAS Life Sciences(Academic only)

Life Sciences 관련 정보는 문헌뿐 아니라 물질 상세 페이지를 통해서도 확인할 수 있습니다.

특정 물질과 연관된 Pharmacological Data, ADME, Toxicity 정보를 확인하세요.

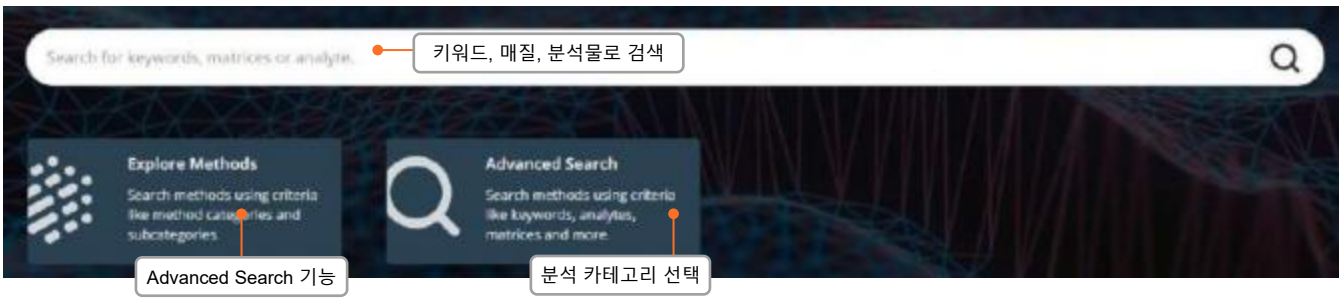


Assay Detail 확인하기

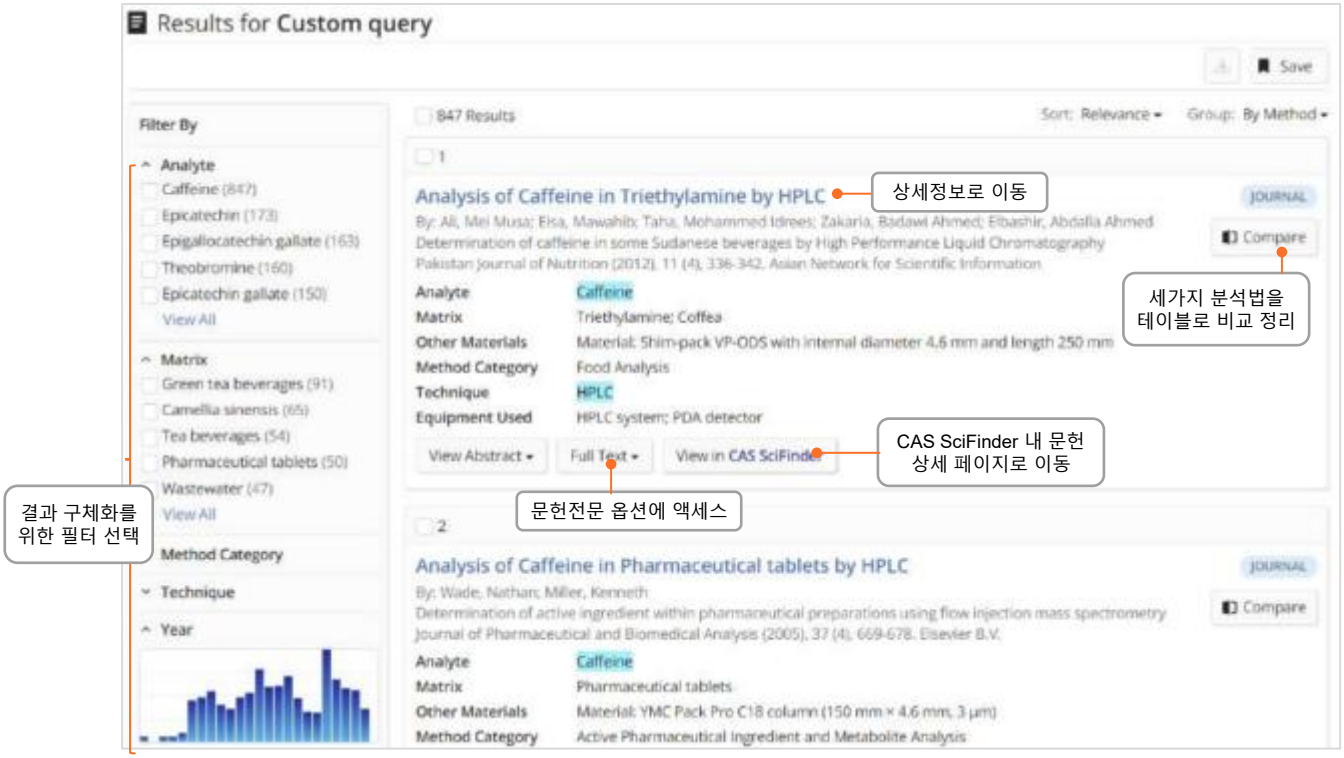
CAS Analytical Methods™

CAS Analytical Methods™를 사용하시려면, https://methods.cas.org/에서 로그인하거나, CAS SciFinder 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.

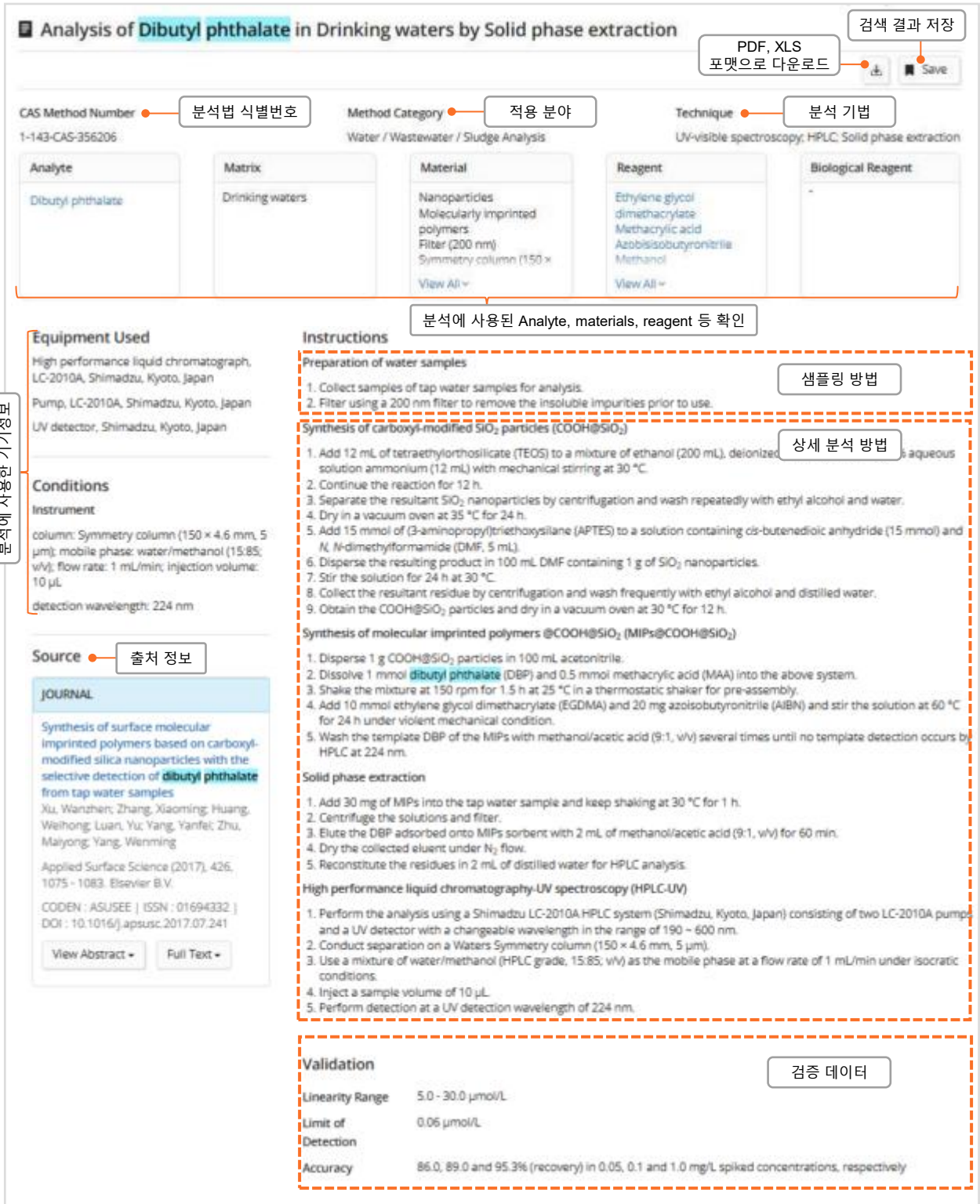


Advanced Search



Analytical Methods Details

기기명부터 샘플링, 분석 방법까지 한눈에 검토하실 수 있습니다.

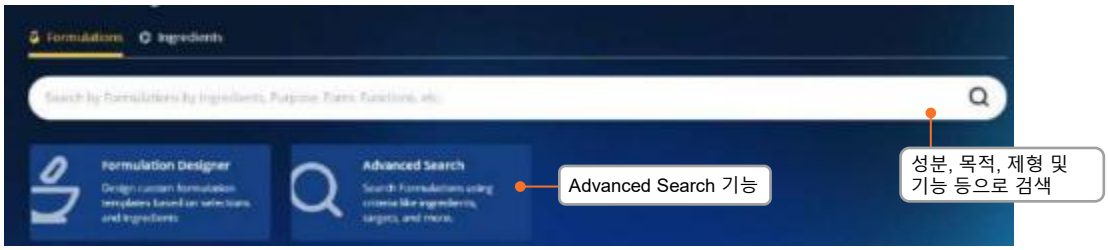


CAS Formulus®

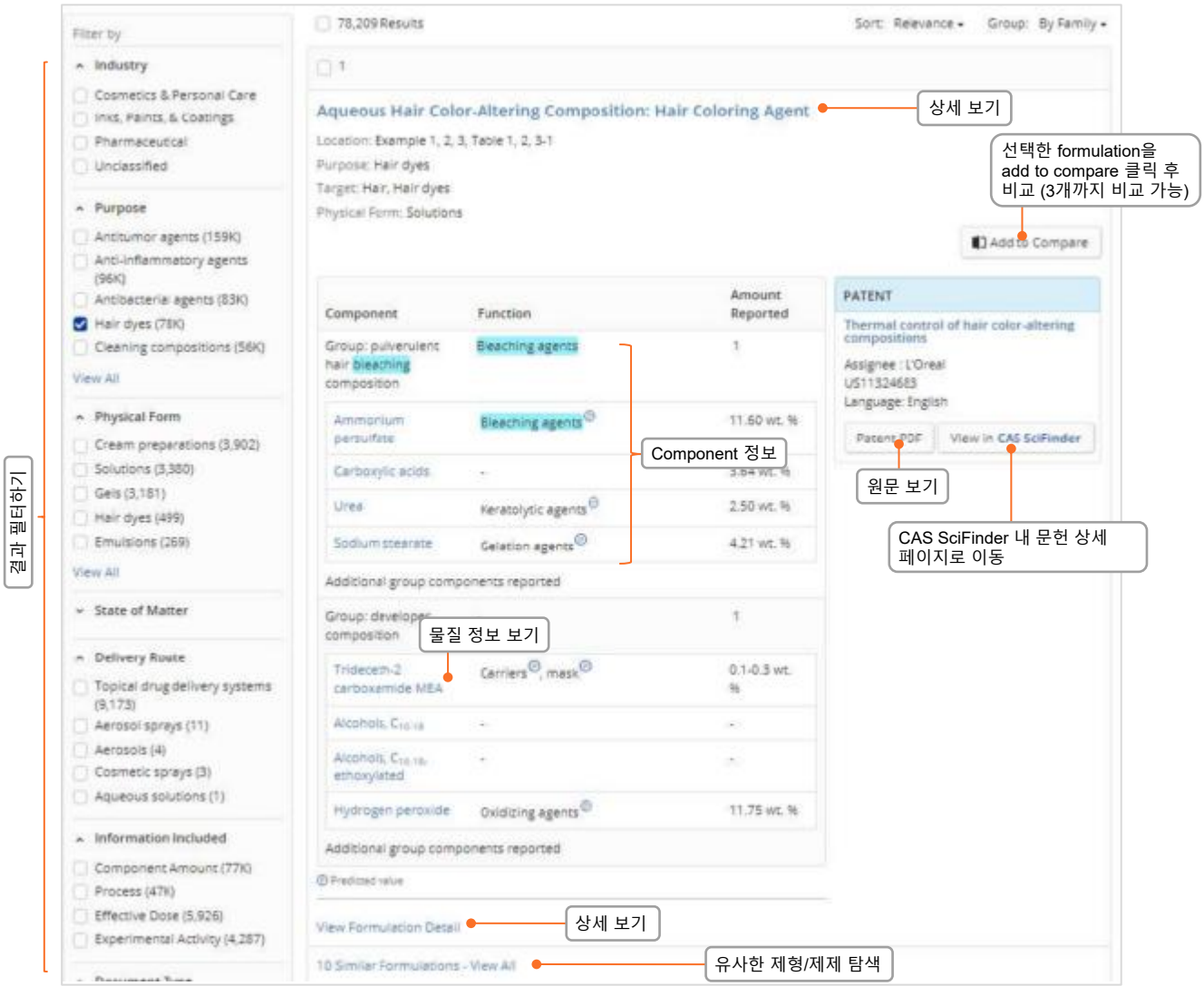
CAS Formulus®

Formulation 정보를 성분, 공정 및 실험 활동을 포함하여 제제/제형의 세부 사항을 확인할 수 있습니다. CAS Formulus® 를 사용하시려면, 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.

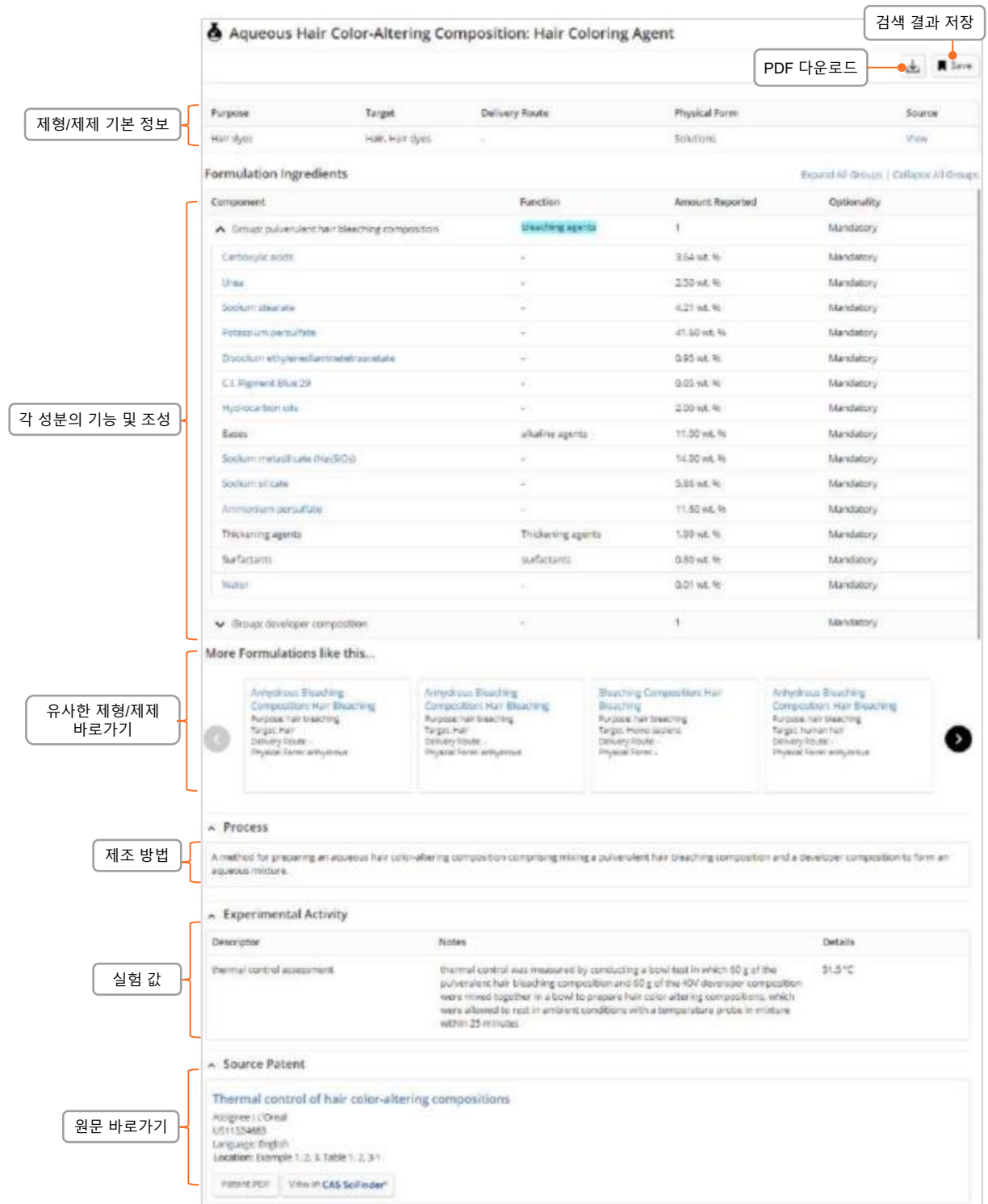


Formulation Results 산업 분야, 목적, 제형의 상태 및 이동경로 까지 확인하고 필터로 활용 가능합니다.



Formulation Details 제형/제제에 관련한 상세한 정보를 빠르게 검토하실 수 있습니다.

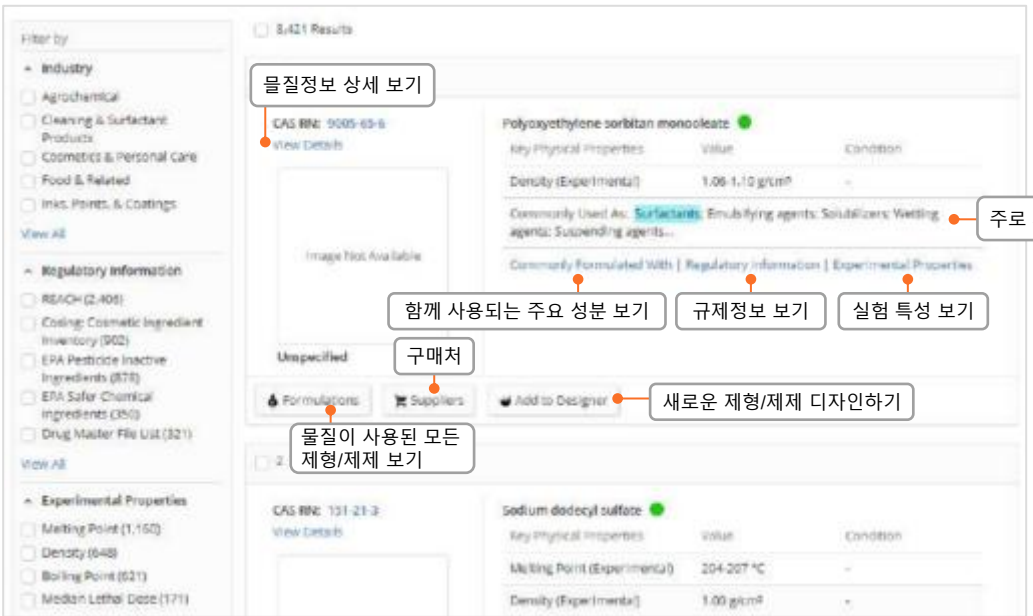
- 조성
- 제조 방법
- 유효 선량
- 실험 값



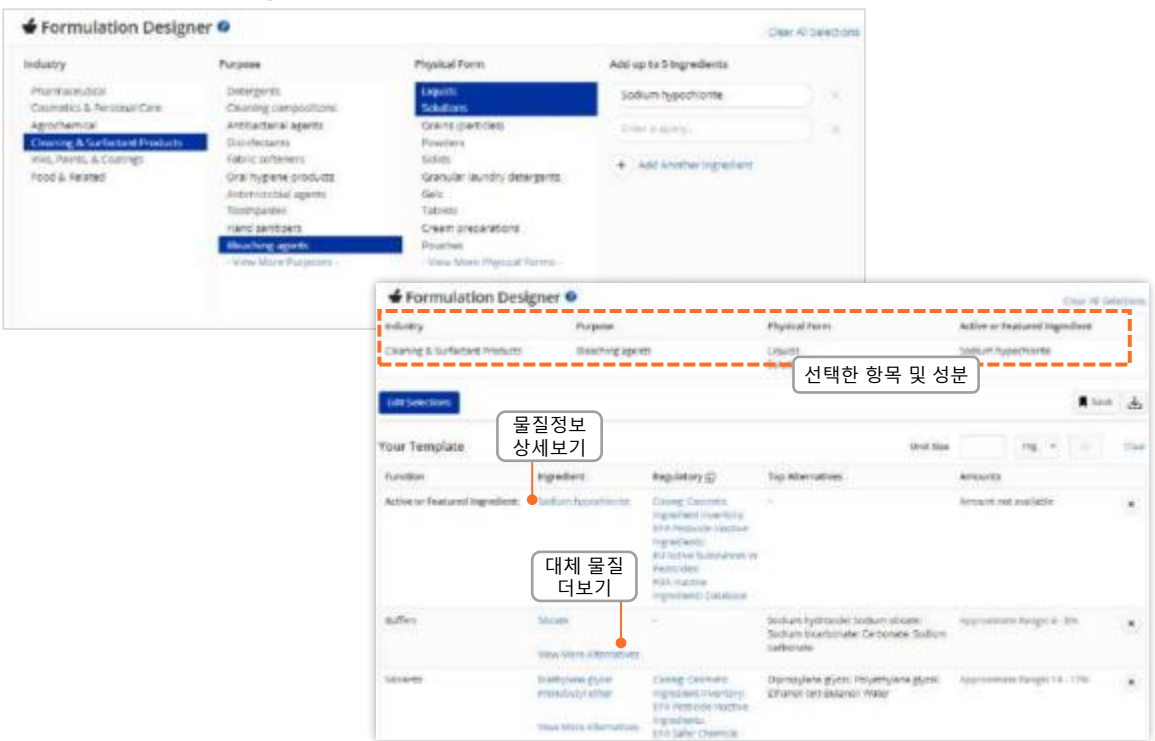
CAS Formulus®

Search ingredients 구성 물질을 검색하여 다양한 formulation을 확인해보세요.

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



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



로그인, 피드백, 도움말

Login Details

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

기존 CAS SciFinder 아이디와 비밀번호로 로그인

Feedback Button

CAS에 직접 피드백을 전달할 수 있습니다.

Learn More

- CAS SciFinder® :
  https://cas-product-help.zendesk.com/hc/en-us
- CAS Analytical Methods ™ :
  https://www.cas.org/support/training/analytical-methods
- CAS Formulus® :
  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 로 연락주세요.

CAS Contacts

CAS Korea Team, korea@acs-i.org

국내 담당자의 도움이 필요하실 때에는 CAS Korea Team 으로 문의 주시기 바랍니다.