

CAS SciFinder Discovery Platform™

사용자 가이드

CAS

A division of the
American Chemical Society



목 차

CAS SciFinder Discovery Platform™

❖ CAS SciFinder®

▪ <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>반응식 검색</u>	11
▪ <u>역합성 플래너 (Retrosynthesis)</u>	13
▪ <u>Markush 검색 및 PatentPak (특허솔루션)</u>	16
▪ <u>선행 문헌 및 관련 문헌 검색</u>	17
▪ <u>판매처 검색 및 ChemDoodle®</u>	18

❖ CAS Analytical Methods™ 19

❖ CAS Formulus® 21

❖ 로그인, 피드백, 도움말 24

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 CAS SciFinder는 간결한 검색 인터페이스를 제공합니다.

검색어 입력
검색타입 선택
검색어 입력
검색어 입력
구조 그리기 툴
검색 실행하기
Advanced Search 기능
문헌검색, 물질 검색에서 사용 가능
Examples: C6H6 | (C8H8)x | C22H26CuN2O5.C2H3N
Advanced Search 필드 추가
Retrosynthesis 실행
CAS의 표준화된 개념을 활용한 검색
CAS Sequences 검색
이전 검색기록 확인 및 재검색하기
View All Search History

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

사용자 설정
Settings
필요한 필터 모두 선택 후 Apply 기능 적용
검색결과 별 필터 변경
필터 상하로 이동 가능
사용하지 않는 필터 오른쪽으로 이동하여 숨기기
CAS preferred 이름 대신 Index name 디스플레이
문헌 상세 페이지 내 물질의 구조 디스플레이
새로 업데이트 된 정보의 이메일 알림 받기 기능



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 프로젝트파일/ Save로 저장

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

Substances Reactions Citing Knowledge Graph 결과 합치기 다운로드 결과 표시 방식 변경

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

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

먼저 Filter by 또는 Exclude를 선택한 다음, 필터 범주를 선택

Filter Behavior Filter by Exclude

Search Within Results

Language

Publication Year

1840 2024

No Min to No Max Apply

특히 전문 내 물질의 위치 확인

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 LiAlH₄-Et₂O, 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

특허 전문 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
CAplus

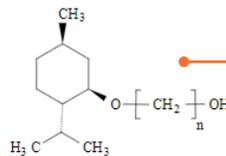
Language
English

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 LiAlH₄-Et₂O, 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

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

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

351420-52-5

Absolute stereochemistry shown

C₁₈H₃₂O₂
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

C₁₈H₃₂O₂
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

C₁₈H₃₂O₂
4-[(1R,2S,5R)-5-Methyl-2-(1-methyl ethyl)cyclohexyloxy]-1-butanol

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

351420-49-0

Absolute stereochemistry shown

C₁₈H₃₂O
(1S,2S,4B)-2-(3-Buten-1-yloxy)-4-methyl-1-(1-methylethyl)cyclohexane

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

351420-48-9

Absolute stereochemistry shown

C₁₁H₂₀O₂
3-(1-Menthoxy)-1-propanol

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

75443-64-0

Absolute stereochemistry shown

C₁₂H₂₂O₂
2-(1-Menthoxy)ethanol

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.

물질명, CAS RN, 특허번호 등 검색어 입력

새 구조 그리기

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

AND - Molecular Formula -

Examples: C6H6 | (C8H8)x | C22H26CuN2O5.C2H3N

+ Add Advanced Search Field

물질 검색의 Advanced search 활용

검색 구조를 클릭하여 수정

Edit Drawing Remove

Retrosynthetic Analysis Search CAS Lexicon Search CAS Sequences Search Patent Markush

Substances search for drawn structure

References - Reactions - Suppliers -

Save and Alert

구조 매치 설정

정렬 기준 변경 Sort: Number of References: Descending View: Partial

표시되는 물질의 세부정보 변경

Registry Number 선택하여 물질 상세정보 확인

구조를 클릭하여 flyout창 열기

Chemscaple Analysis

Visually explore structure similarity with a powerful new tool.

Learn more about Chemscaple.

Create Chemscaple Analysis

Filter Behav

Chemscaple 분석 시작하기

Filter by Exclude

Search Within Results

Reaction Role

Product (27K)

Reactant (4,886)

Reagent (9)

Catalyst (40)

Reference Role

Preparation (31K)

Synthetic Preparation (29K)

Chemical structures and data for Caffeine, Pentoxifylline, and Linagliptin.

Chemical structure of Pentoxifylline: CC(=O)OCCN1C=NC2=C1C(=O)N(C)C2=O

Chemical structure of Diprophylline: CC1=NC2=C(N1)C(=O)N(C)C2=O

Chemical structure of Linagliptin: CC1=NC2=C(N1)C(=O)N(C)C2=O

문헌 역할 (Reference Role)은 물질에 대해 보고된 새로운 정보를 알려줍니다.

구조 편집기 열기

.sd 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

8,001 355 87

↓ Save

분자식 $C_{13}H_{18}N_4O_3$

1H-Purine-2,6-dione, 3,7-dihydro-3,7-dimethyl-1-(5-oxohexyl)- (9CI, ACI)

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

Other Names and Identifiers

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
BYPFZEZEUWMEJ-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

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

물성을 바로 확인 또는 연결된 문헌 확인 가능

- Other Names and Identifiers
- Experimental Properties
- Experimental Spectra
- 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 interface. At the top, there is a menu bar with 'CAS Draw' and '구조 업로드/다운로드'. Below the menu bar is a toolbar with various icons for drawing and editing. A search bar on the right allows entering a CAS Registry Number, SMILES, or InChI. The main workspace displays a chemical structure of a complex heterocyclic compound. Below the structure, the molecular formula is shown as C8H10N4O2 (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 (Structure Upload/Download)
- 구조그리기 창 키우기 (Open Structure Drawing Window)
- 키보드 단축기 확인하기 예: 헥테로 원자 쉽게 그리기 (Check keyboard shortcuts: e.g., drawing hetero atoms easily)
- Registry Number, SMILES 또는 InChI를 통해 구조 그리기 (Draw structure using Registry Number, SMILES, or InChI)

This section provides a detailed view of the left toolbar with the following annotations:

- 올가미 도구 | 선택 도구 (Grab tool | Select tool)
- Atom과 Bond 그리기 | 지우개 (Draw Atom and Bond | Eraser)
- 주기율표에서 원자 선택하기 | Shortcuts (Select atom from periodic table | Shortcuts)
- 구조식에 Variables 선택 | 구조식에 R-Group 생성 (Select Variables in structure | Generate R-Group in structure)
- Attachment 설정하기 | Template에 그려진 구조 선택 및 구조 지정하기 (Set Attachment | Select and specify structure drawn in Template)
- Charge 설정 (Charge setting)
- 반복단위 설정하기 | Carbon 체인 그리기 (Set repeat unit | Draw Carbon chain)
- 링 구조의 여러 위치에 치환체 결합 표시 | 반응 내 역할 선택 (Show substituent attachment at multiple ring positions | Select role in reaction)
- 원자 매핑 | Ring fusion 방지 반응 역할 지정, H atom을 제외한 치환기 차단, 구조식 회전, 구조식 Flip (Atom mapping | Specify reaction role to prevent ring fusion, block substituent without H atom, rotate structure, flip structure)
- 끊어지거나 형성될 본드 지정 | 반응물 및 생성물 지정 (Specify bonds to be broken or formed | Specify reactants and products)

This section provides a detailed view of the right toolbar with the following annotations:

- Hydrogen Deuterium Tritium (H, D, T)
- 그린 구조식 그대로 E/Z 이중결합 설정 (Set E/Z double bond as is in green structure)
- Unspecified 본드 (Unspecified bond)
- 3-15-Sided Ring 그리기 (Draw 3-15-Sided Ring)

Advanced search 검색어 지정하기

Advanced Search Query Builder

SciFinder 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)

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

Author Name Enter last name, first name middle name. Example: Schubert, J A

+ Add Advanced Search Field

클릭하여 필드 선택 열기

Examples

Reference Search

검색 필드를 합칠 수 있는 연산자 선택

"pollution monitoring"

AND Publication Year 2010

AND Chemical Name Polyethylene

OR Chemical Name Polypropylene

+ Add Advanced Search Field

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

Substance Search

steel*

AND Tensile Strength (Mpa) >0

Search key property values only.

AND Density (g/cm3) 5 to 8

Include predicted values.

Search key property values only.

+ Add Advanced Search Field

검색어 해석:
Steel with tensile strength property and Density information

Substances Edit Search steel*

'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.



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.

The screenshot shows the CAS Reactions search interface with several callouts:

- Reactions 선택**: Points to the search bar.
- 반응식 구조를 선택하여 편집**: Points to the Draw button.
- Structure 매치로 구분하기**: Points to the Structure Match filter panel.
- 반응식 결과 그룹화 변경하기**: Points to the Group dropdown menu.
- Edit Draw 창으로 바로가기**: Points to the Edit Draw button.
- 물질 구조 확인**: Points to the chemical structure of the reaction.
- 반응식 정보 상세보기**: Points to the reaction details section.
- 유사 반응 보기**: Points to the Get Similar Reactions button.
- 반응식 문헌 확인하기**: Points to the citation information.
- 실험 프로토콜 열람**: Points to the Experimental Protocols link.
- 동일 Scheme의 모든 반응식 살펴보기**: Points to the Collapse Scheme button.

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)

Relative stereochemistry shown

Suppliers (140)

97%

Suppliers (3)

Relative stereochemistry shown

Suppliers (97)

88%

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

Stage	Reagents	Catalysts	Solvents	Conditions
1	Triethylamine	-	Methanol	rt; 25 - 30 °C; 3 - 4 h, 25 - 30 °C

CAS Reaction Number: [31-366-CAS-6730116](#)

상세 절차를 포함한 실험 프로토콜 보기

대체 반응 조건 보기 Alternative Steps (1)

Experimental Protocols

Synthetic Methods **Experimental Procedure** **원문에서의 실험방법 확인하기**

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

Characterization Data

^ 1-Methylethyl *trans*-4-[[[(1,1-dimethylethoxy)carbonyl]amino]cyclohexanecarboxylate

Proton NMR Spectrum	400 MHz, CDCl ₃ 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).
Carbon-13 NMR	100 MHz, CDCl ₃ δ = 21.65, 27.27, 27.65, 28.29, 32.38, 42.49, 48.84, 67.25, 78.95, 155.05, 174.84.
Elemental Analysis	For C ₁₅ H ₂₇ NO ₄ : Calcd C, 63.13; H, 9.54; N, 4.91. Found C, 63.01; H, 9.51; N, 4.90.
Mass Spectrum	MS CI calcd for C ₁₅ H ₂₇ NO ₄ (M + H) 286.39, found (M + H): 286.39. White solid, mp: 86-87 °C.
State	white solid.

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

반응 결과 분석 데이터

주요 반응식 명칭 **Transformations**
1. Acylation of Nitrogen Nucleophiles by Anhydrides or Dicarbonates

역합성 플래너 (Retrosynthesis)



Launch Plan Generation SciFinder 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

Retrosynthesis Plan Options for drawn structure Powered by ChemPlanner®

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

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

Set Starting Materials Cost Limit: 250 USD/mol

Strating material의 비용 한도

Create Retrosynthesis Plan 플랜 만들기

플랜의 disconnection 수 설정하기

첫 disconnection 결합 설정하기

보호할 결합 설정하기

전체 선택 삭제

반응을 예측하는데 적용된 규칙을 세 단계로 선택가능

호환된 결합

끊어지는 첫번째 결합

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.

대안 선택 - 계획 재구성



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	Patent 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

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

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: CPlus 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: CPlus

Plastics waste management and its sustainable approaches - an overview

International Journal of Environmental Technology and Management (2022), 25(6), 501-518 | Language: English, Database: CPlus

Get Similar References

유사 문헌 모두 보기

유사 문헌 빠르게 넘겨보기

References similar to AN 2020:999547

Substances ▾
Reactions ▾
Citing ▾
Knowledge Graph

선택한 문헌의 유사 문헌 리스트

Save

Filter Behavior

Filter by
Exclude

Search Within Results

Document Type

Journal (30)

Review (20)

Conference (1)

Report (1)

Language

English (30)

German (1)

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: CPlus 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 methodoloies 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: CPlus



Suppliers Searching

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

The screenshot displays the search results for 'Hydrogen Peroxide (35% in Water)'. The interface includes a 'Filter Behavior' sidebar on the left, a main search results table, and a detailed product view for the selected item. Key features are annotated with callouts:

- 정렬 방식 (Sorting Method):** Located at the top right, showing a dropdown menu with options like 'Relevance', 'Price: Low to High', and 'Supplier: A to Z'.
- 번호/비번호 판매처 설정 (Number/Non-number Supplier Setting):** A checkbox in the top left of the results table.
- 상세정보로 이동 (Move to Detailed Information):** A button next to the product name in the table.
- 연락처 정보 (Contact Information):** A section in the product view showing contact details for TCI Research Chemicals (KRW), including website, email, and phone.
- 카탈로그 세부정보 (Catalog Detailed Information):** A section in the product view showing item details like chemical name, order number, quantity, price, and stock status.
- 주문 링크 (Order Link):** A link labeled 'Product Information' in the product view.

ChemDoodle®

CAS Draw 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 list of drawing tools. The toolbar includes options like '구조 선택' (Structure Selection), '실행 취소' (Undo), '다시 실행' (Redo), '줌 인/아웃' (Zoom In/Out), and '열기/저장' (Open/Save). The tool list includes:

- Labeling
- 본드 그리기 (Bond Drawing)
- 링 그리기 (Ring Drawing)
- Charge 그리기 (Charge Drawing)
- 체인 그리기 (Chain Drawing)
- 반복 그룹 표시 (Repeat Group Display)
- 링 구조의 여러 위치에 치환체 결합 표시 (Substituent Bond Display at Multiple Ring Positions)
- Atoms/Chains/rRngs 막기 (Lock Atoms/Chains/rRngs)
- R 그룹 설정 (R Group Setting)
- 반응식 설정 (Reaction Setting)
- 반응식 매핑 (Reaction Mapping)
- 본드 break/form 설정 (Bond Break/Form Setting)



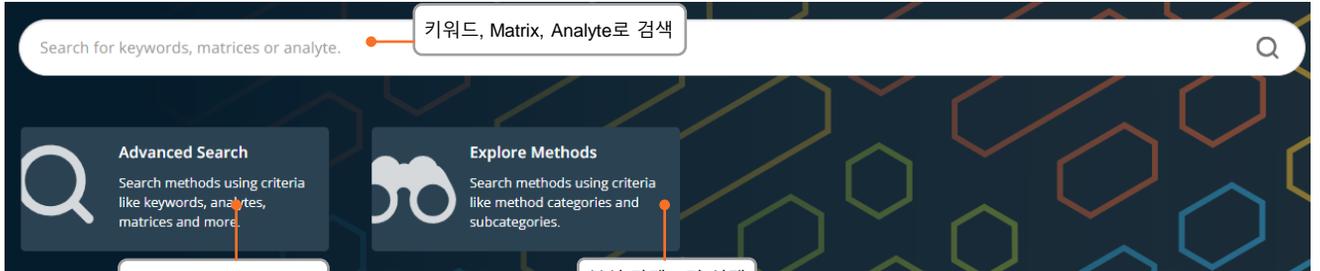
CAS Analytical Methods

CAS Analytical Methods™를 사용하시려면, <https://methods.cas.org/> 에서 로그인 하거나, CAS SciFinder내 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.



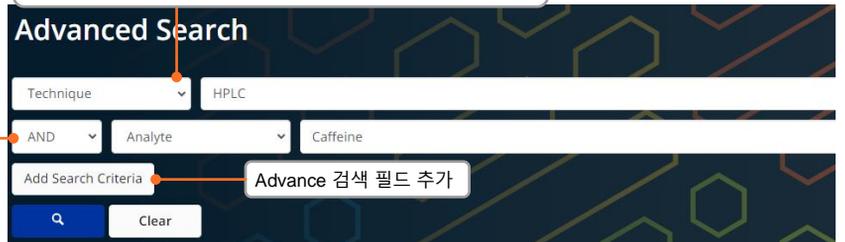
CAS SciFinder
내 App Switcher



Advanced Search

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

AND, OR, NOT
중 불연산자 선택



Results for Custom query

847 Results
Sort: Relevance
Group: By Method

Filter By

Analyte

- Caffeine (847)
- Epicatechin (173)
- Epigallocatechin gallate (163)
- Theobromine (160)
- Epicatechin gallate (150)
- [View All](#)

Matrix

- Green tea beverages (91)
- Camellia sinensis (65)
- Tea beverages (54)
- Pharmaceutical tablets (50)
- [Wastewater \(47\)](#)
- [View All](#)

Method Category

Technique

Year

1

Analysis of Caffeine in Triethylamine by HPLC

By: Ali, Mei Musa; Eisa, Mawahib; Taha, Mohammed Idrees; Zakaria, Badawi Ahmed; Elbassiri, Abdalla Ahmed
Determination of caffeine in some Sudanese beverages by High Performance Liquid Chromatography
Pakistan Journal of Nutrition (2012), 11 (4), 336-342. Asian Network for Scientific Information

Analyte [Caffeine](#)

Matrix Triethylamine; Coffea

Other Materials Material: Shim-pack VP-ODS with internal diameter 4.6 mm and length 250 mm

Method Category Food Analysis

Technique [HPLC](#)

Equipment Used HPLC system; PDA detector

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

2

Analysis of Caffeine in Pharmaceutical tablets by HPLC

By: Wade, Nathan; Miller, Kenneth
Determination of active ingredient within pharmaceutical preparations using flow injection mass spectrometry
Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis (2005), 37 (4), 669-678. Elsevier B.V.

Analyte [Caffeine](#)

Matrix Pharmaceutical tablets

Other Materials Material: YMC Pack Pro C18 column (150 mm × 4.6 mm, 3 μm)

Method Category Active Pharmaceutical Ingredient and Metabolite Analysis

결과 구체화를
위한 필터 선택

상세정보로 이동

세가지 분석법을
테이블로 비교 정리

CAS SciFinder 내 문헌 상세
페이지로 이동

문헌전문 옵션에 액세스

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
Caffeine	analyte	View Structure	58-08-2
Cola beverages	matrix		
Coffee beverages	matrix		
Chromolith SpeedRod (50 mm x 4.6 mm i.d.)	material		
Acetonitrile	reagent	View Structure	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⁻¹.
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



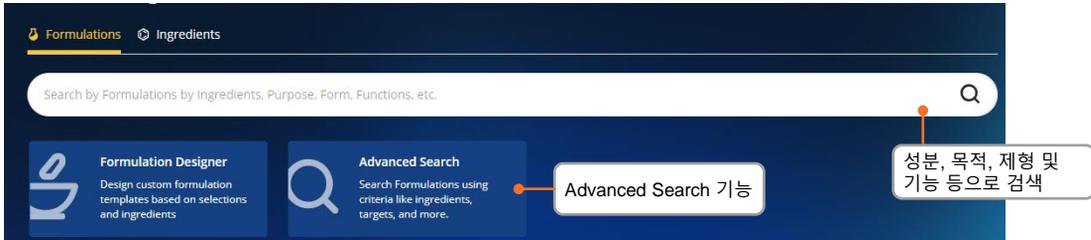
CAS Formulus®

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.



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

- 조성
- 제조 방법
- 유효 선량
- 실험 값

검색 결과 저장

PDF 다운로드



Save

제형/제제 기본 정보

Purpose	Target	Delivery Route	Physical Form	Source
Hair dyes	Hair, Hair dyes	-	Solutions	View

Formulation Ingredients

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

Component	Function	Amount Reported	Optionality	
^ Group: pulverulent hair bleaching composition		bleaching agents	1	Mandatory
Carboxylic acids	-	3.64 wt. %	Mandatory	
Urea	-	2.50 wt. %	Mandatory	
Sodium stearate	-	4.21 wt. %	Mandatory	
Potassium persulfate	-	41.60 wt. %	Mandatory	
Disodium ethylenediaminetetraacetate	-	0.95 wt. %	Mandatory	
C.I. Pigment Blue 29	-	0.05 wt. %	Mandatory	
Hydrocarbon oils	-	2.00 wt. %	Mandatory	
Bases	alkaline agents	11.00 wt. %	Mandatory	
Sodium metasilicate (Na ₂ SiO ₃)	-	14.00 wt. %	Mandatory	
Sodium silicate	-	5.86 wt. %	Mandatory	
Ammonium persulfate	-	11.60 wt. %	Mandatory	
Thickening agents	Thickening agents	1.99 wt. %	Mandatory	
Surfactants	surfactants	0.80 wt. %	Mandatory	
Water	-	0.01 wt. %	Mandatory	
v Group: developer composition		-	1	Mandatory

각 성분의 기능 및 조성

유사한 제형/제제
바로가기

More Formulations like this...

Anhydrous Bleaching Composition: Hair Bleaching
Purpose: hair bleaching
Target: Hair
Delivery Route: -
Physical Form: anhydrous

Anhydrous Bleaching Composition: Hair Bleaching
Purpose: hair bleaching
Target: Hair
Delivery Route: -
Physical Form: anhydrous

Bleaching Composition: Hair Bleaching
Purpose: hair bleaching
Target: Homo sapiens
Delivery Route: -
Physical Form: -

Anhydrous Bleaching Composition: Hair Bleaching
Purpose: hair bleaching
Target: human hair
Delivery Route: -
Physical Form: anhydrous

제조 방법

^ Process

A method for preparing an aqueous hair color-altering composition comprising mixing a pulverulent hair bleaching composition and a developer composition to form an aqueous mixture.

실험 값

^ Experimental Activity

Descriptor	Notes	Details
thermal control assessment	thermal control was measured by conducting a bowl test in which 60 g of the pulverulent hair bleaching composition and 60 g of the 40V developer composition were mixed together in a bowl to prepare hair color-altering compositions, which were allowed to rest in ambient conditions with a temperature probe in mixture within 25 minutes	51.5 °C

원문 바로가기

^ Source Patent

Thermal control of hair color-altering compositions

Assignee : L'Oreal
US11324683
Language: English
Location: Example 1, 2, 3, Table 1, 2, 3-1

Patent PDF

View in [CAS SciFinder®](#)



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

Your Template

Unit Size: mg Go Clear

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%

대체 물질 더보기



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 Team으로 문의 주시기 바랍니다.