김미리
신원데이터넷
Miri@shinwon.co.kr

SciFinder® 이용교육

SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

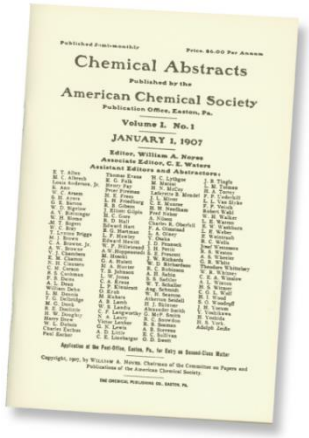
목차

- PowerPoint Presentation
  - ✓ CAS 및 SciFinder 소개
  - ✓ 사용방법
    - Reference Searching
    - Substance Searching
    - Reactions Searching
    - Other
- Demonstration
- Q&A

SciFinder® A CAS SOLUTION

CAS (Chemical Abstract Service)

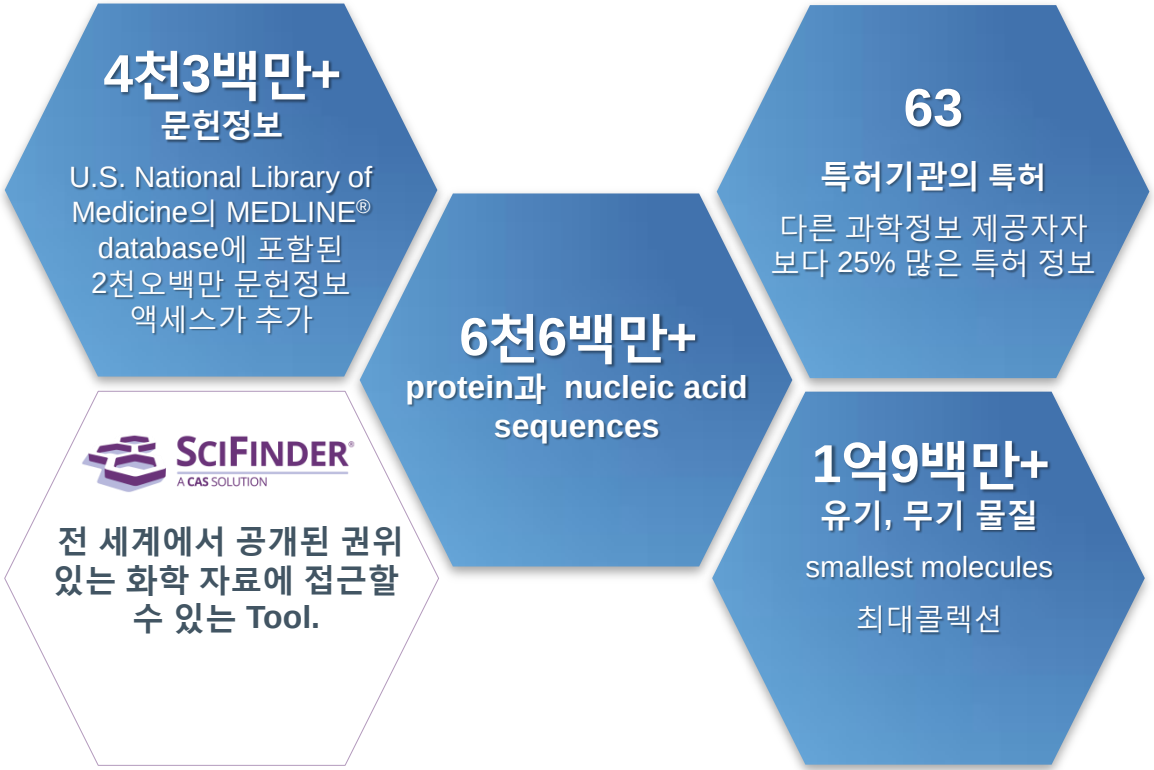
- 과학자료와 특허 검색 속 화학정보를 이끌어나가는 CAS
- 1907년 설립되어, 전세계 화학관련 문헌 수집, 분석
- ***Chemical Abstracts*™** 출판 시작


Chemical Abstracts
Published by the
American Chemical Society
Publication Office, Easton, Pa.
Volume I. No. 1
JANUARY 1, 1907

- 50여 개의 다양한 언어 사용 가능한
  수백 명의 과학자 포함한 약 1,400명의 직원 근무
- **10,000종 이상의 과학 저널**과 **63개 특허기관의 특허 색인 및 분석**
- **고객:** 전세계 2,300개 대학교, 상위 500개 포춘 기업, 주요 특허청

SciFinder®
A CAS SOLUTION

SciFinder 구축을 위해 전 세계에 공개된 연구자료를 분석



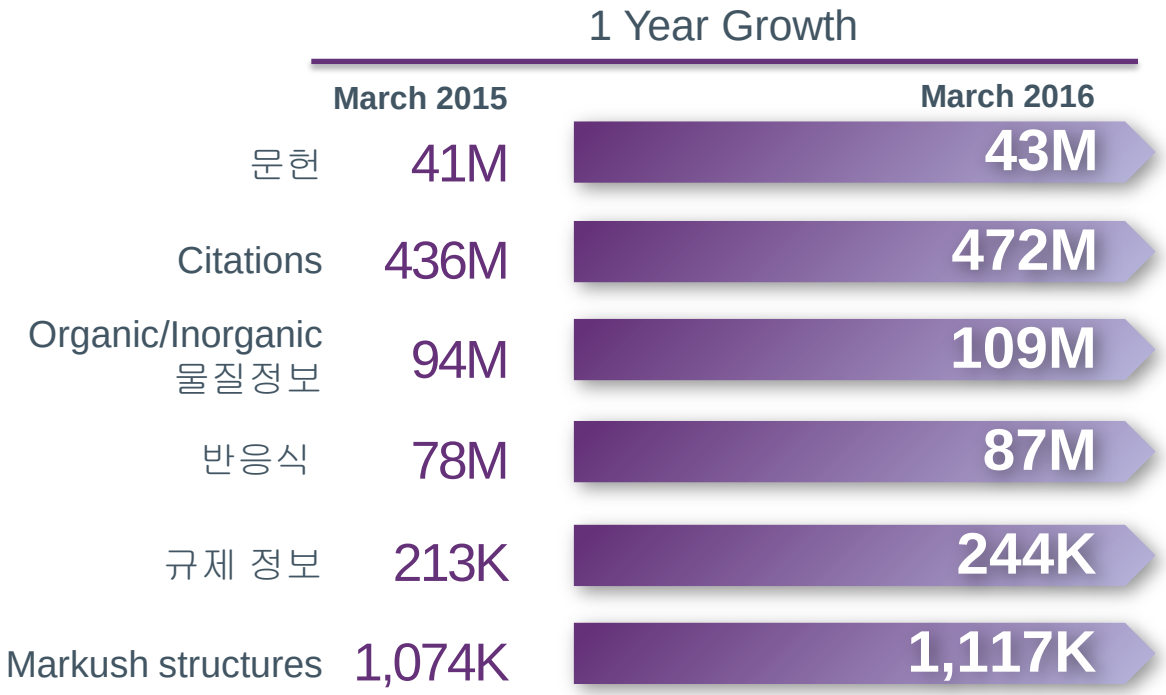
Data as of March 2016

SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

매년 수 백만 건 이상의 콘텐트 추가

SciFinder® A CAS SOLUTION

Content



SciFinder® A CAS SOLUTION

SciFinder 를 통한 시간 절약

Data as of March 2016

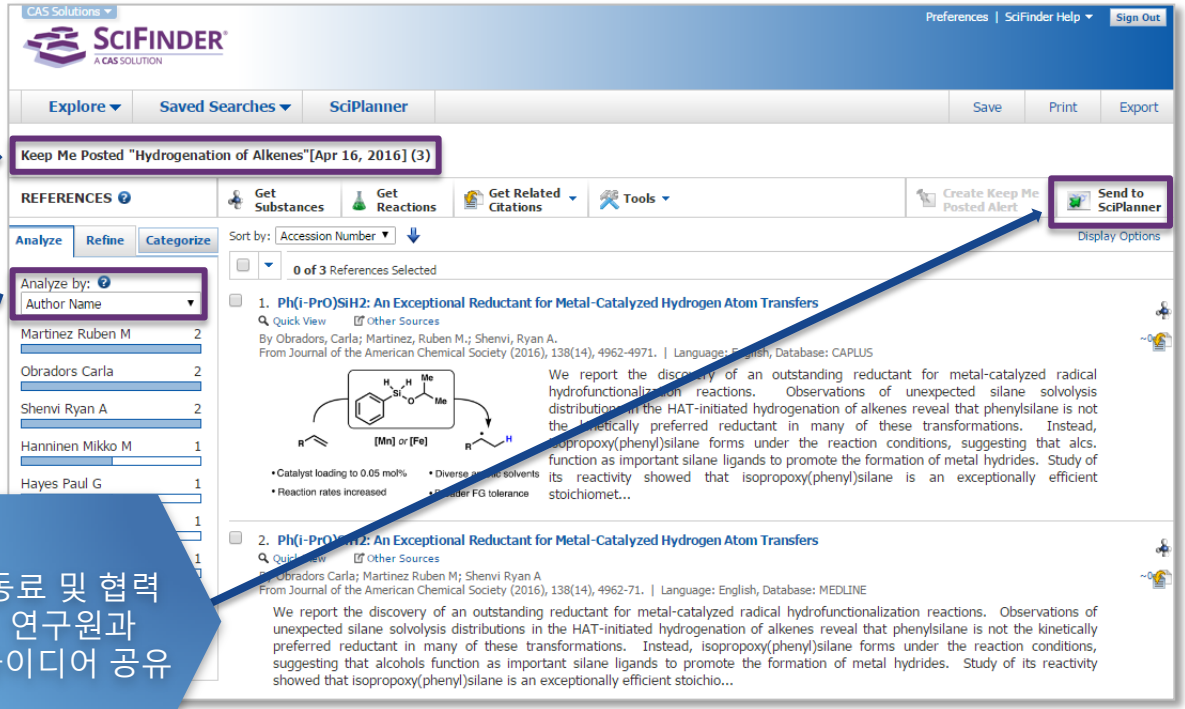
SciFinder®
A CAS SOLUTION

효율적인 일의 분담 SciFinder

최신분야
검색 및
경쟁사 확인

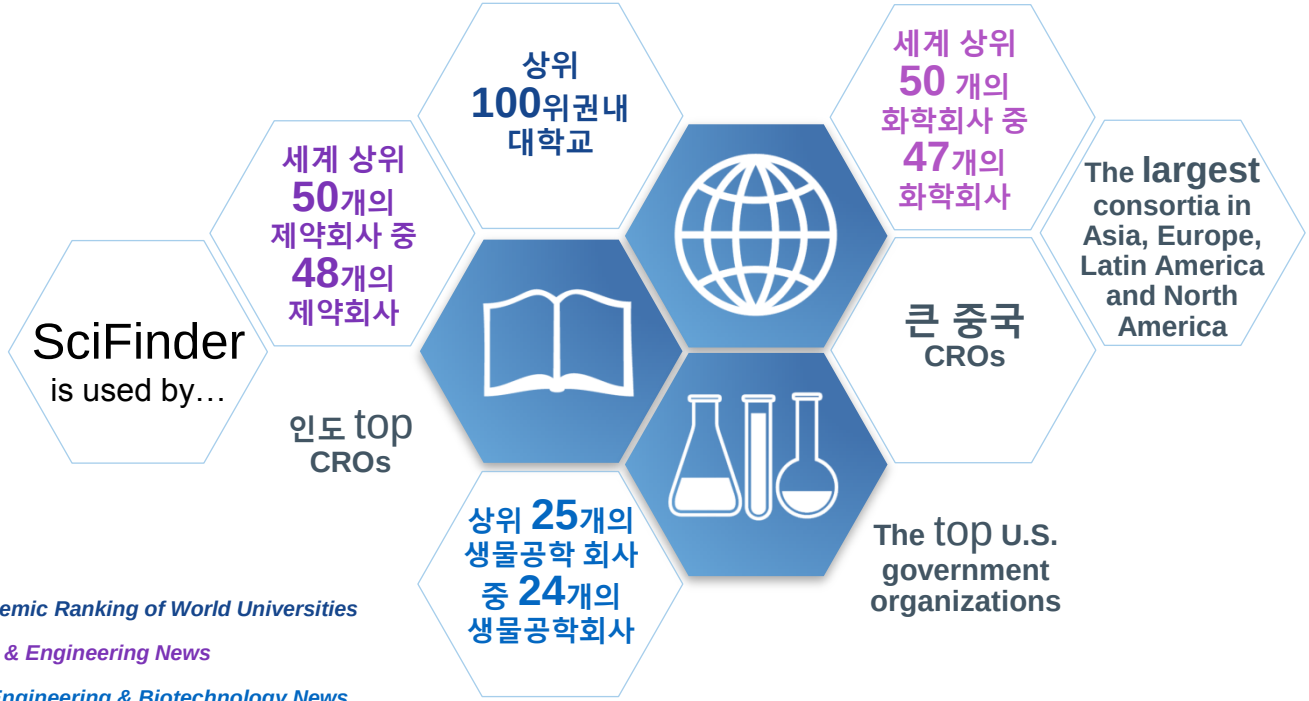
빠른 검색 및
문서 분석
(research topic,
structure,
reaction)

동료 및 협력
연구원과
아이디어 공유



SciFinder®
A CAS SOLUTION

전 세계적을 SciFinder를 사용하는 기업 및 학교



Sources:

- *The Academic Ranking of World Universities*
- *Chemical & Engineering News*
- *Genetic Engineering & Biotechnology News*
- *PharmaExec.com*

SciFinder® A CAS SOLUTION

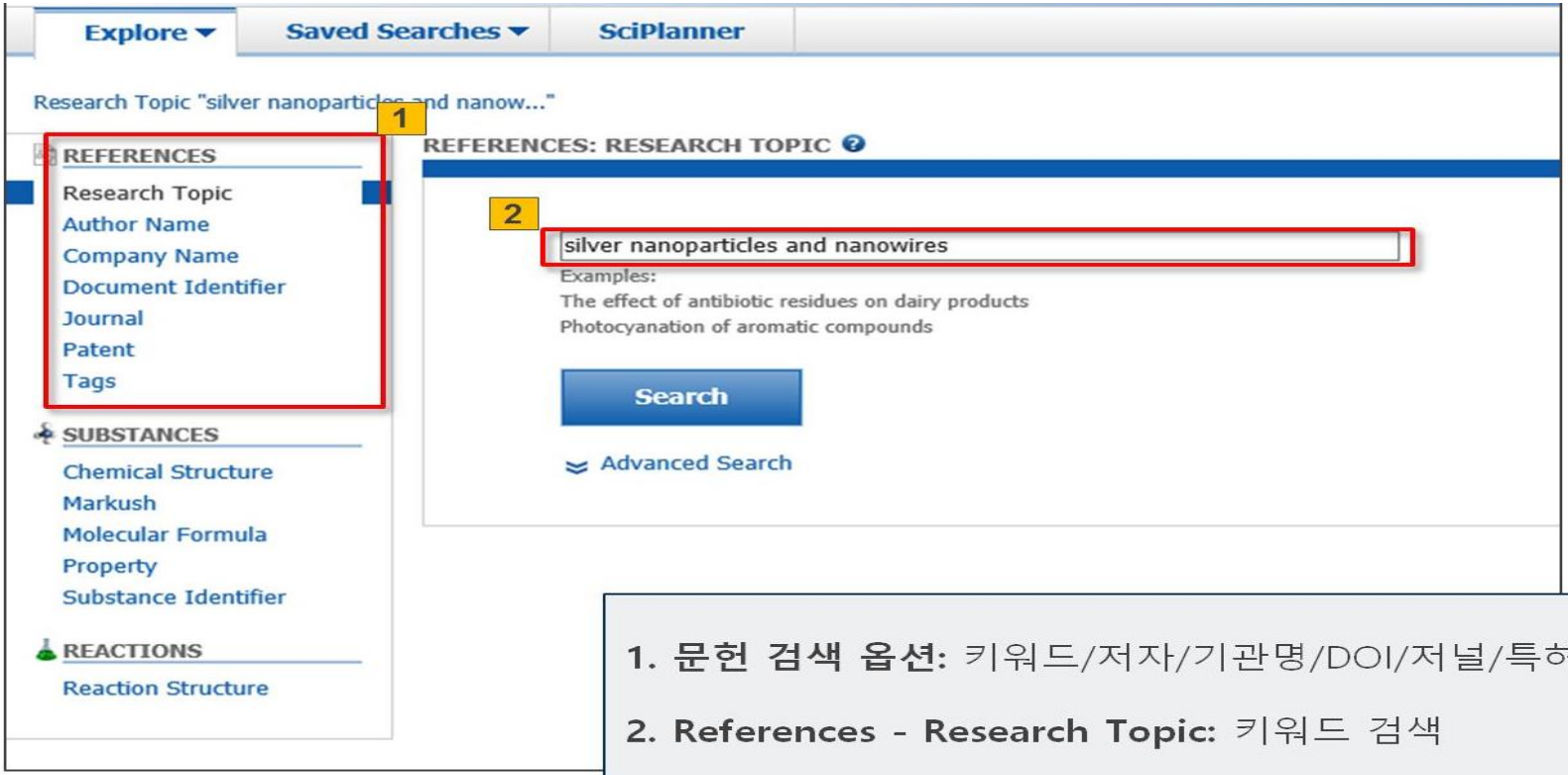
사용 방법

SciFinder®
A CAS SOLUTION

Reference Search

SciFinder®
A CAS SOLUTION

문헌 검색 첫 화면

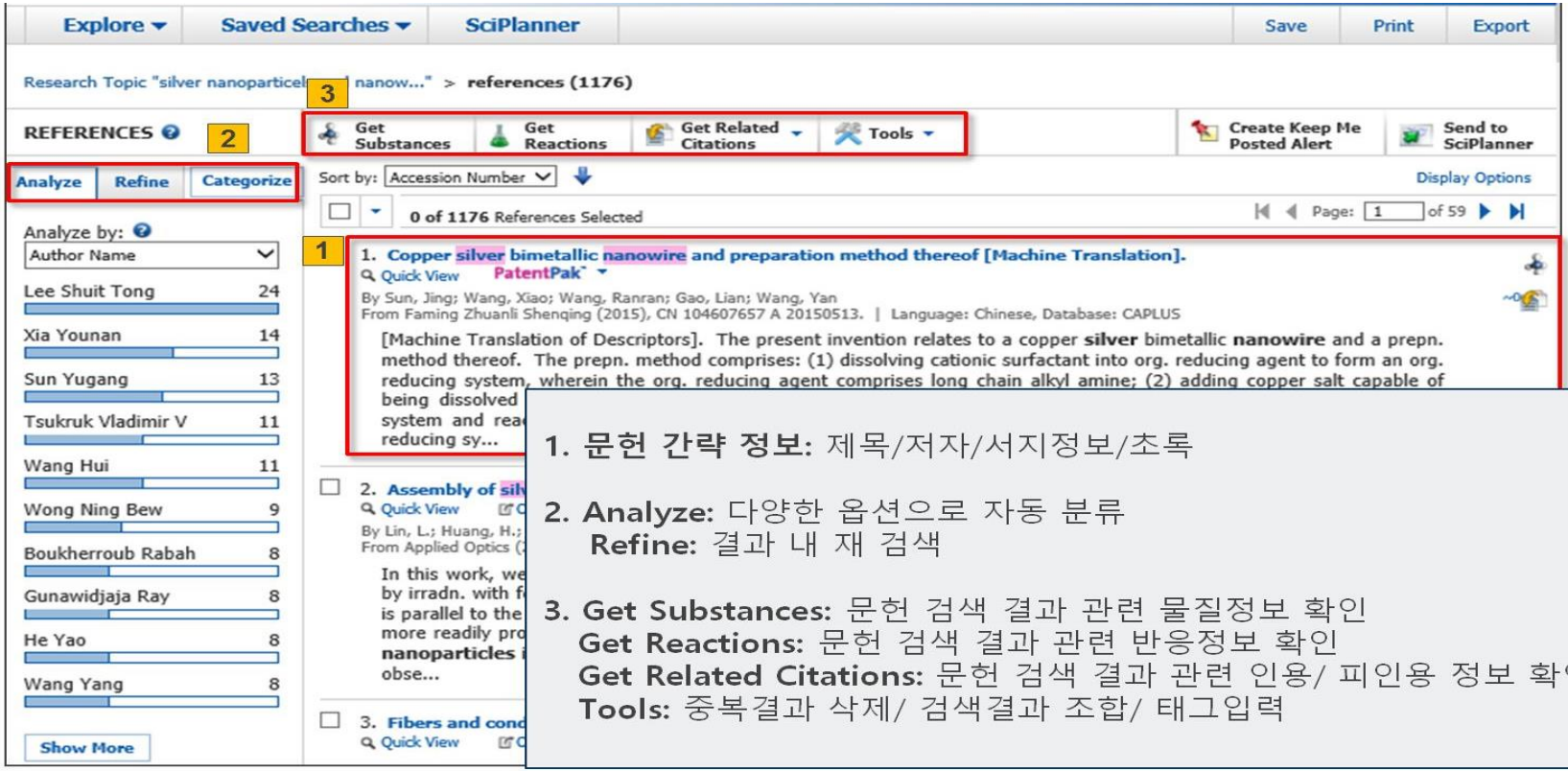


1. **문헌 검색 옵션:** 키워드/저자/기관명/DOI/저널/특허

2. **References - Research Topic:** 키워드 검색

SciFinder® A CAS SOLUTION

문헌 검색결과 화면



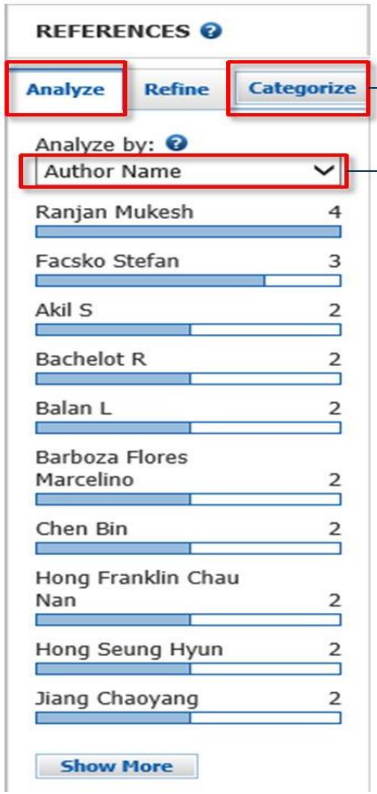
1. **문헌 간략 정보:** 제목/저자/서지정보/초록

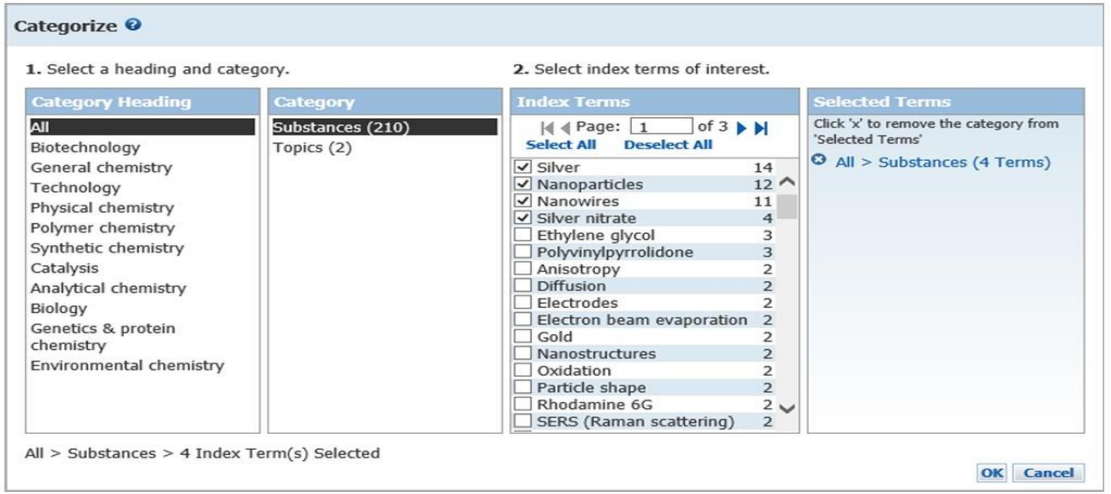
2. **Analyze:** 다양한 옵션으로 자동 분류
   Refine: 결과 내 재 검색

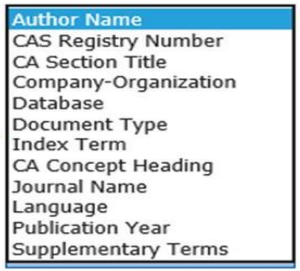
3. **Get Substances:** 문헌 검색 결과 관련 물질정보 확인
   Get Reactions: 문헌 검색 결과 관련 반응정보 확인
   Get Related Citations: 문헌 검색 결과 관련 인용/ 피인용 정보 확인
   Tools: 중복결과 삭제/ 검색결과 조합/ 태그입력

SciFinder® A CAS SOLUTION

검색 결과 분석







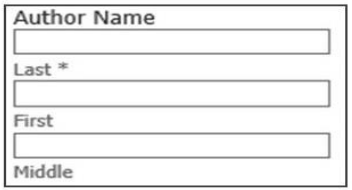
1. **Categorize:** 관심분야를 제한하여 결과 추출

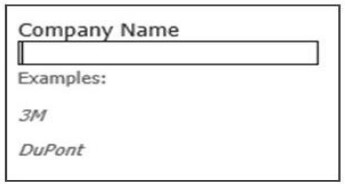
2. **Analyze:** 검색결과 분류
(저자명, 색인, 문서종류, 언어, 출판연도, 관련 키워드 별)

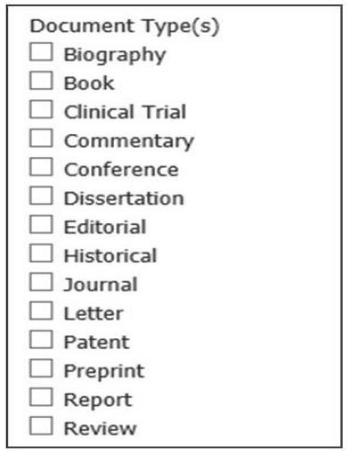
SciFinder® A CAS SOLUTION

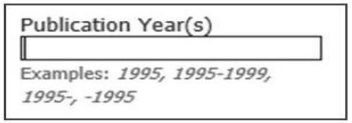
결과 내 재 검색

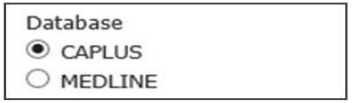
1. **Refine:** 결과 내 재검색
(주제어, 저자명, 기관명, 문서종류, 출판연도, 언어)





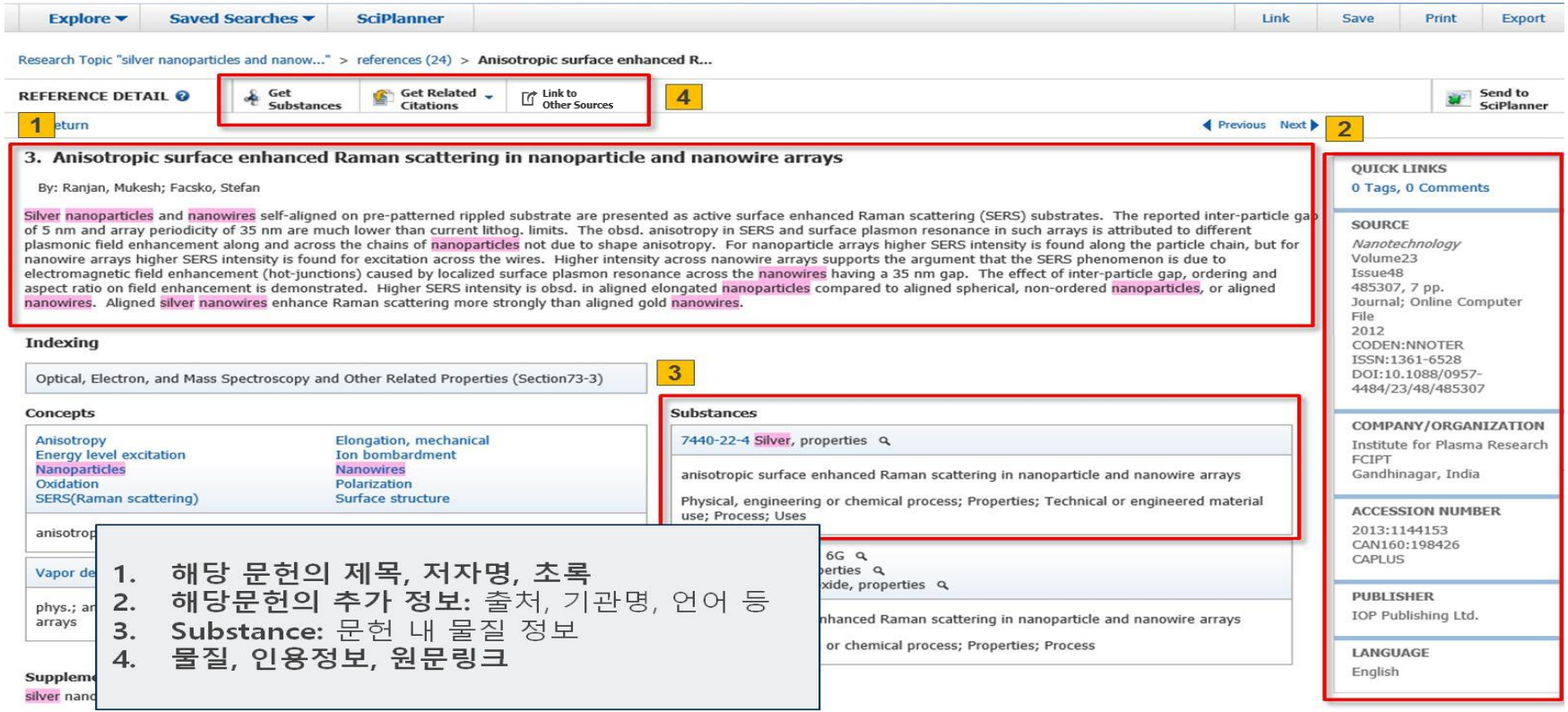






SciFinder® A CAS SOLUTION

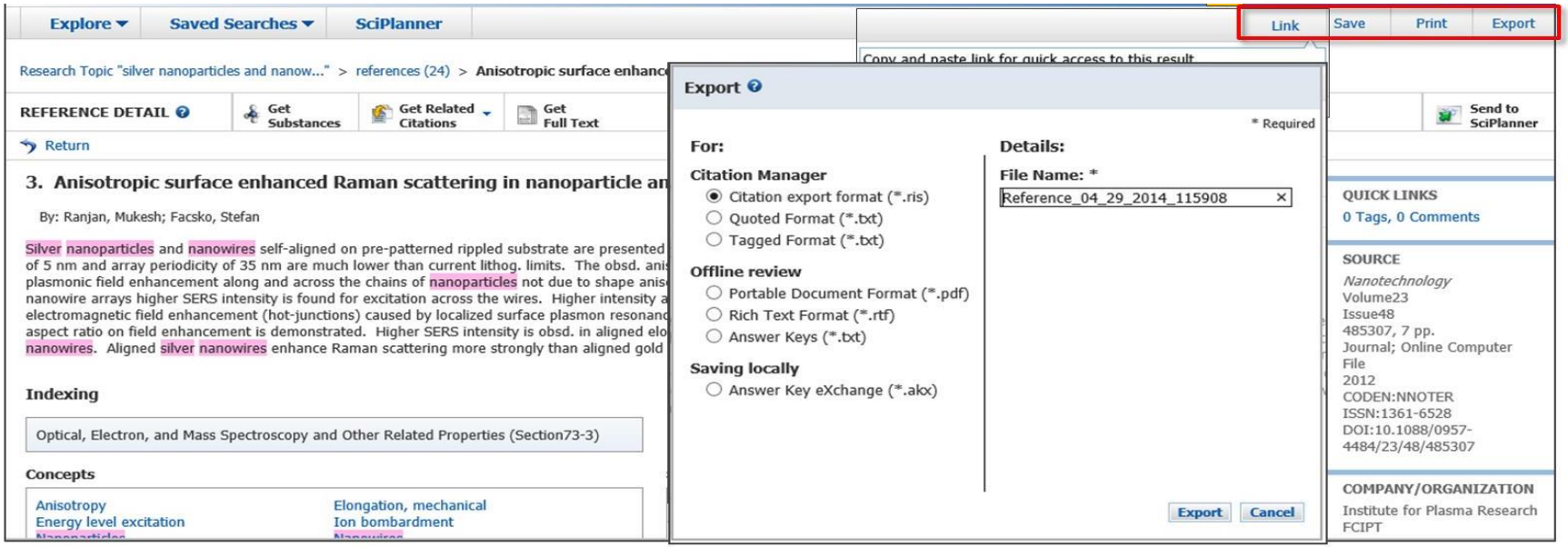
상세정보



1. 해당 문헌의 제목, 저자명, 초록
2. 해당문헌의 추가 정보: 출처, 기관명, 언어 등
3. Substance: 문헌 내 물질 정보
4. 물질, 인용정보, 원문링크

SciFinder® A CAS SOLUTION

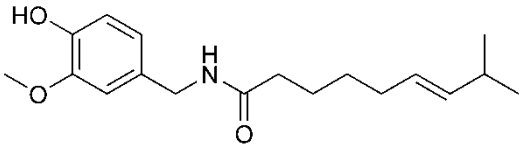
Link, Save, Print or Exprot

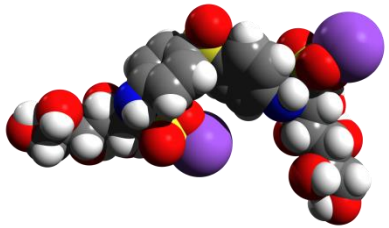


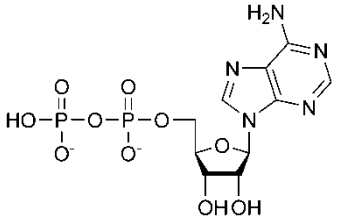
1. 해당화면 링크생성, 저장, 인쇄, 다운로드

SciFinder® A CAS SOLUTION

Substance Search

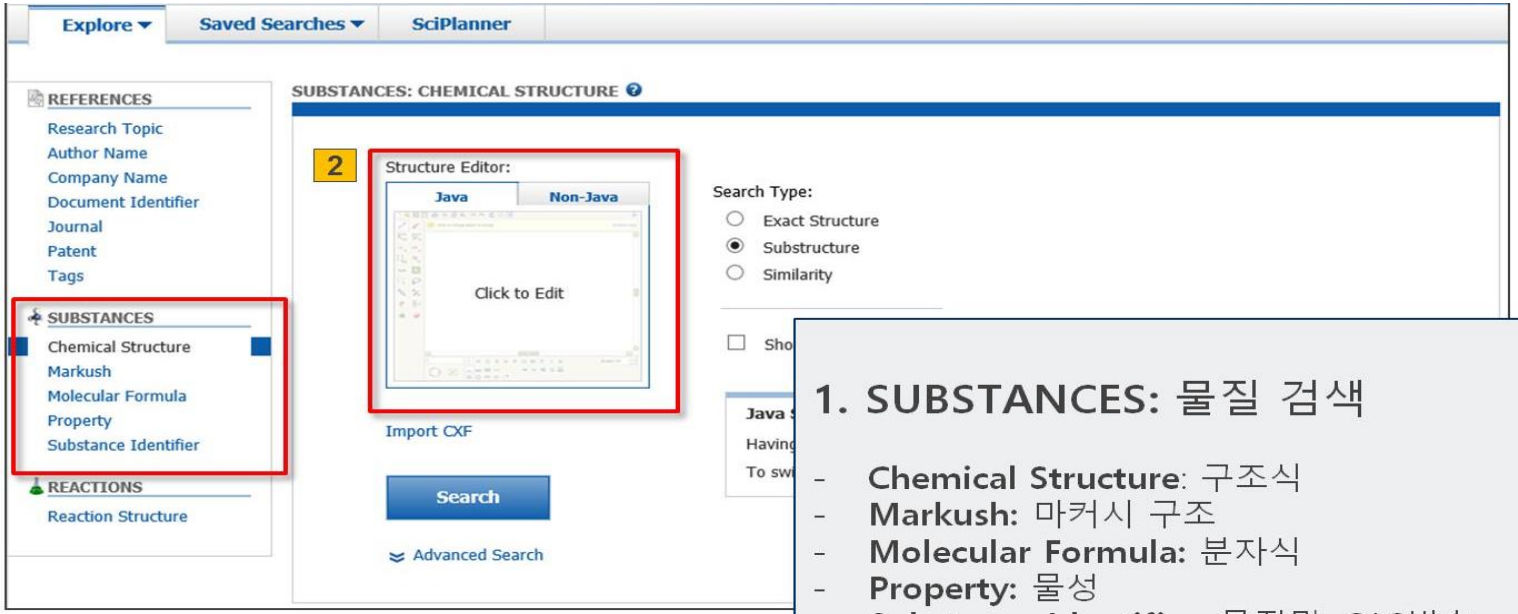






SciFinder®
A CAS SOLUTION

물질 검색



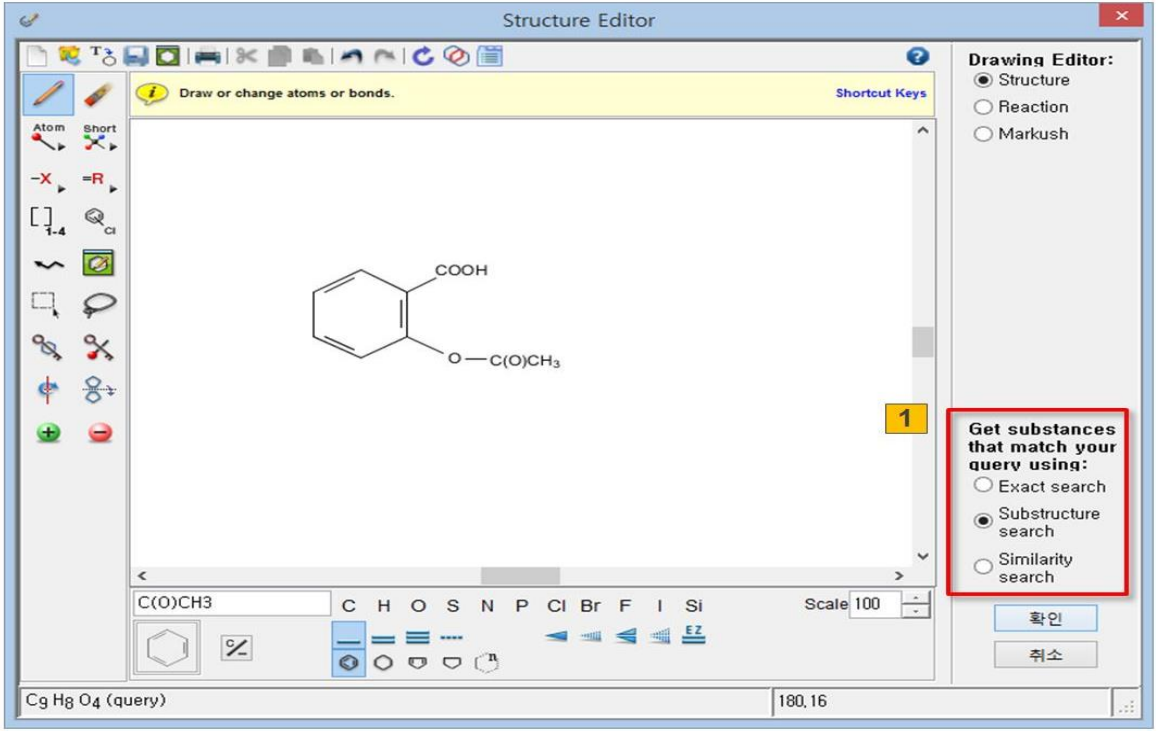
1. **SUBSTANCES**: 물질 검색

- **Chemical Structure**: 구조식
- **Markush**: 마커시 구조
- **Molecular Formula**: 분자식
- **Property**: 물성
- **Substance Identifier**: 물질명, CAS번호

2. **Structure Editor**: Drawing Editor

SciFinder®
A CAS SOLUTION

구조식 검색: Structure Editor

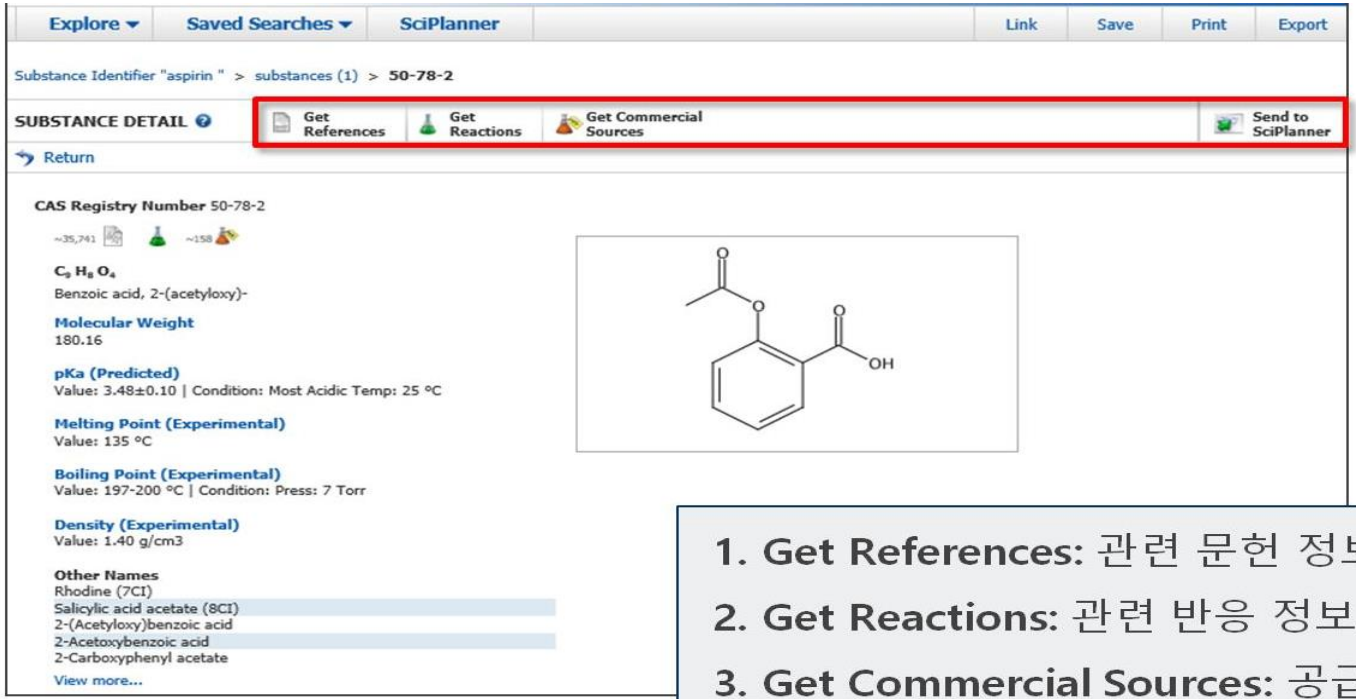


1. 검색 옵션

- **Exact search:** 똑같은 구조
- **Substructure search:** 하부 구조
- **Similarity search:** 유사 구조

SciFinder® A CAS SOLUTION

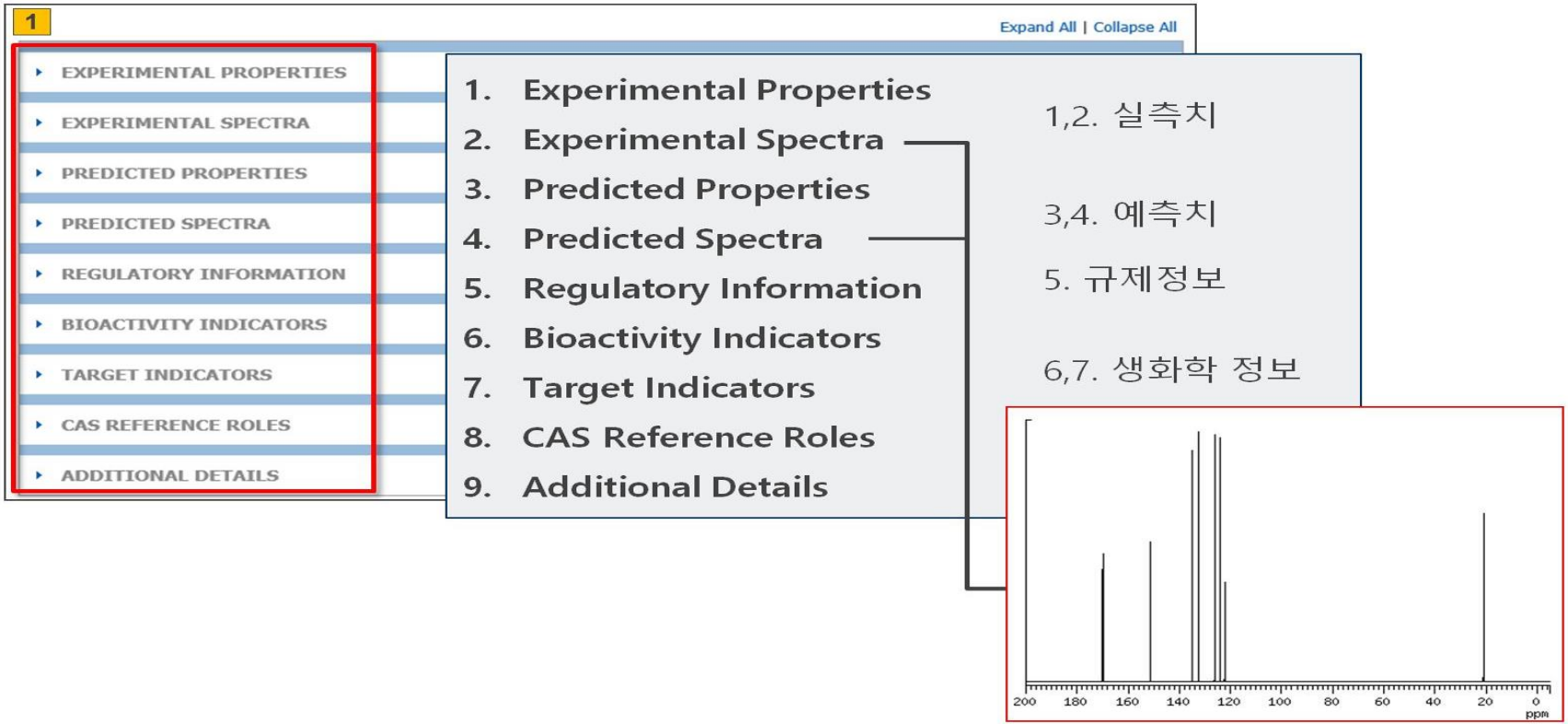
물질 상세 정보



1. **Get References:** 관련 문헌 정보
2. **Get Reactions:** 관련 반응 정보
3. **Get Commercial Sources:** 공급업체 정보 보기
4. **Send to SciPlanner:** SciPlanner 로 보내기

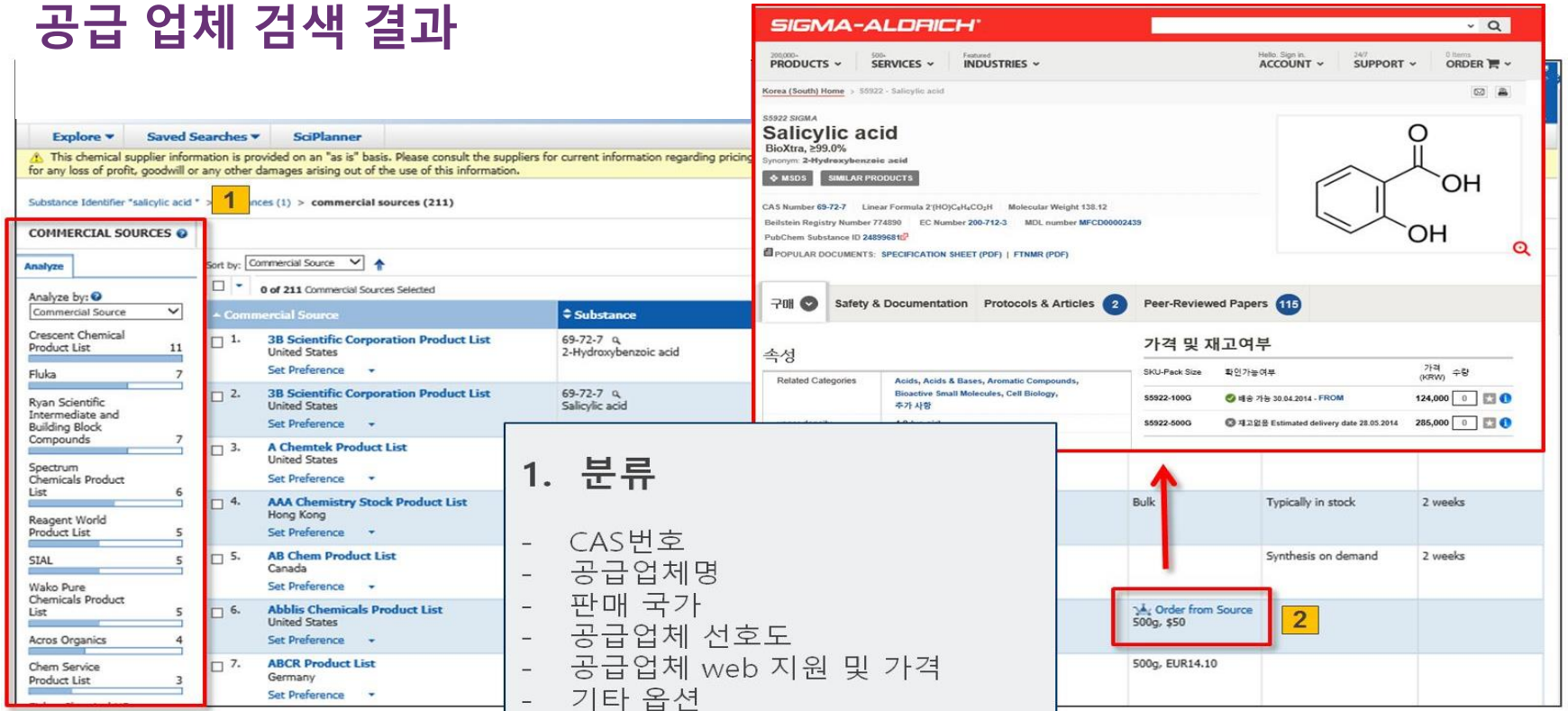
SciFinder® A CAS SOLUTION

물질 상세 정보



SciFinder® A CAS SOLUTION

공급 업체 검색 결과



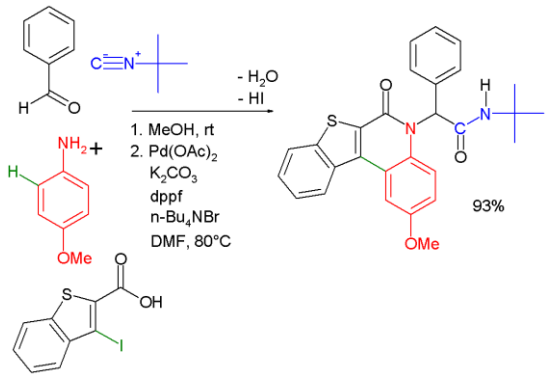
1. 분류

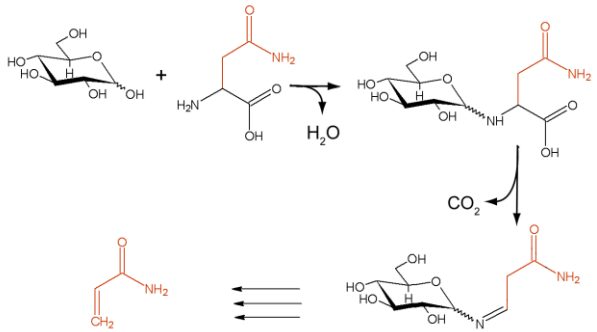
- CAS번호
- 공급업체명
- 판매 국가
- 공급업체 선호도
- 공급업체 web 지원 및 가격
- 기타 옵션

2. 공급업체 웹페이지 지원

A CAS SOLUTION

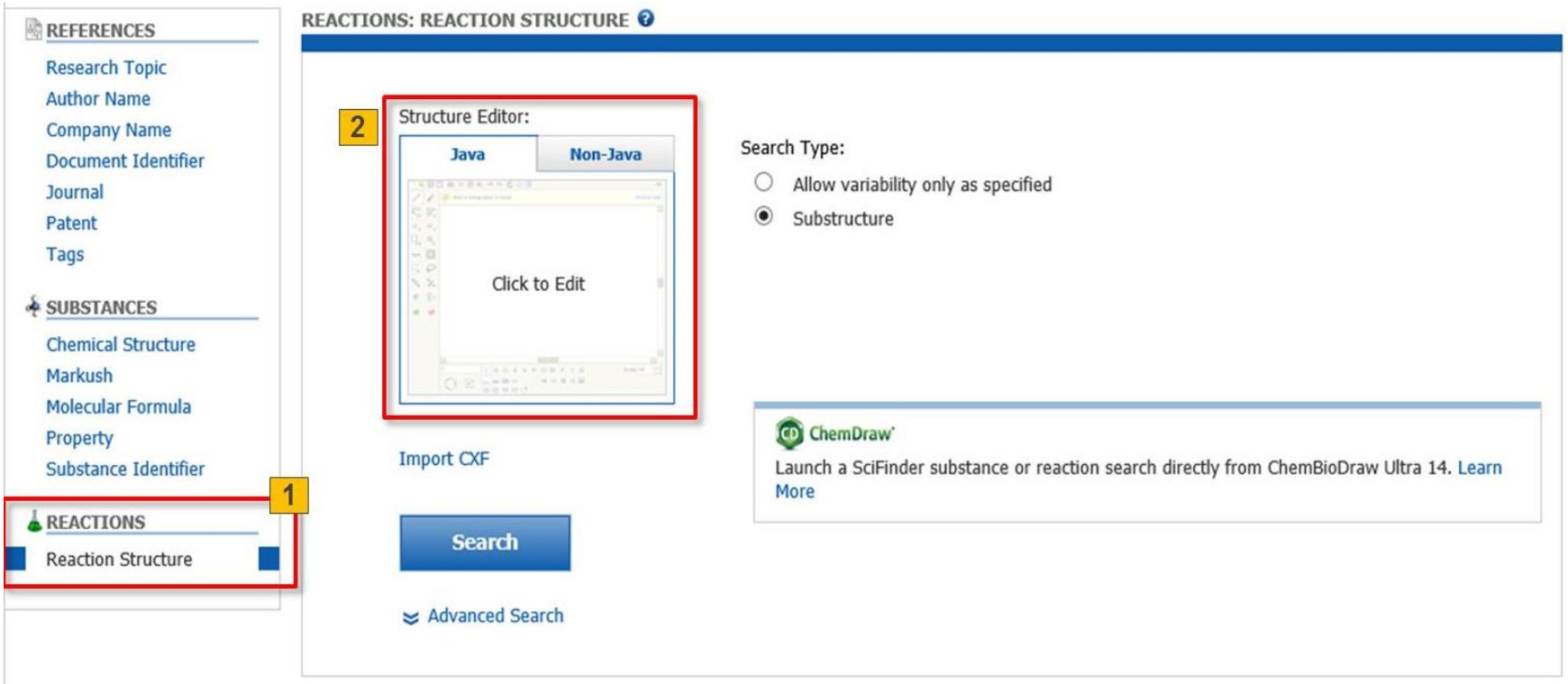
Reaction Search





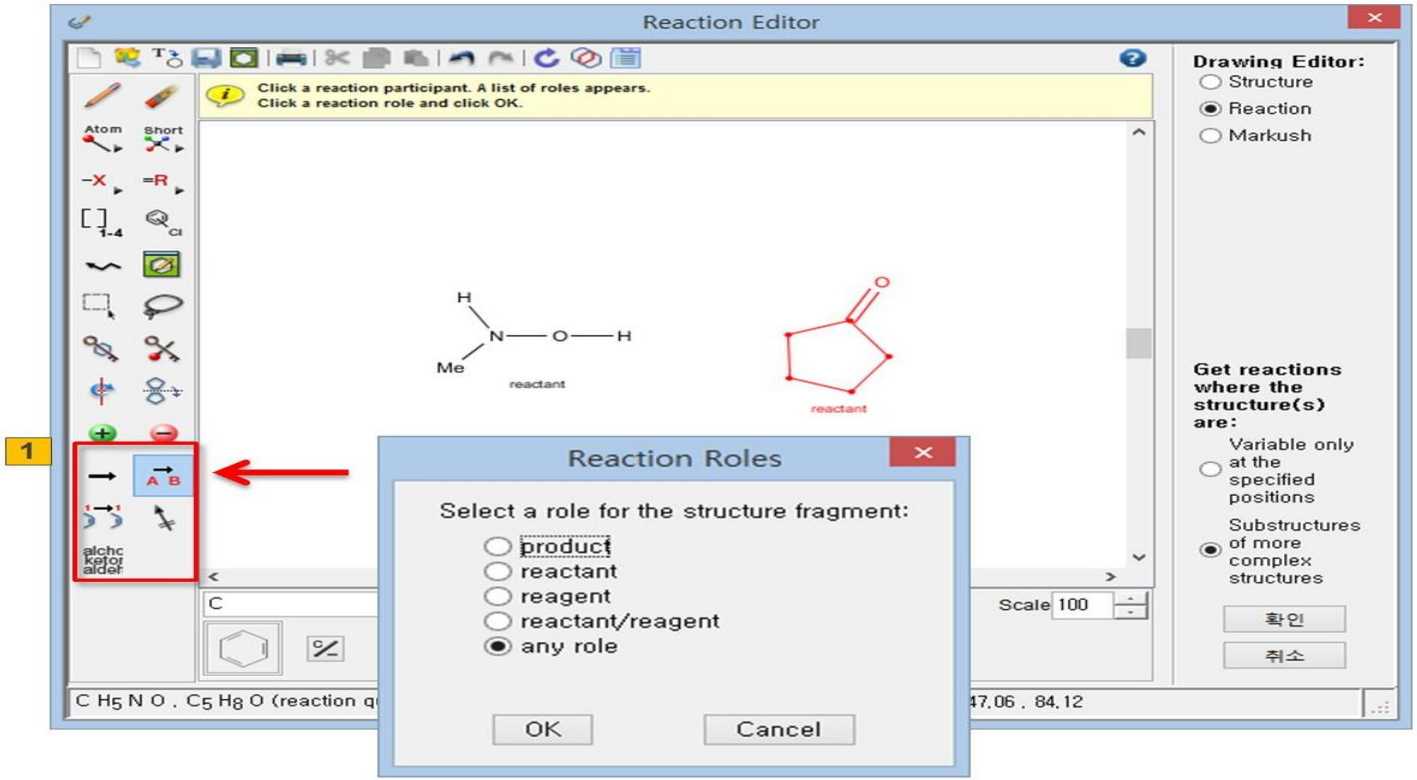
SciFinder® A CAS SOLUTION

반응식 검색



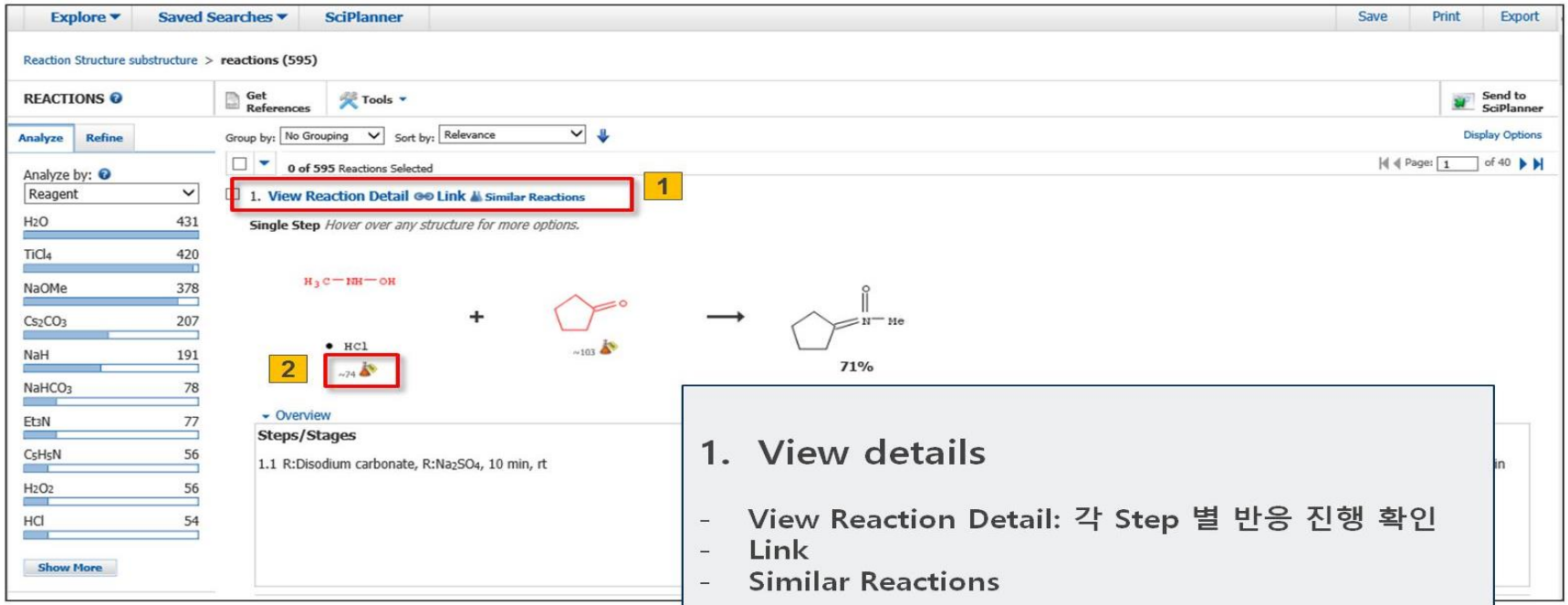
SCIFINDER® A CAS SOLUTION

반응식 검색: Reaction Editor



SCIFINDER® A CAS SOLUTION

반응식 검색 결과



1. View details

- View Reaction Detail: 각 Step 별 반응 진행 확인
- Link
- Similar Reactions

2. 공급업체 정보

SciFinder® A CAS SOLUTION

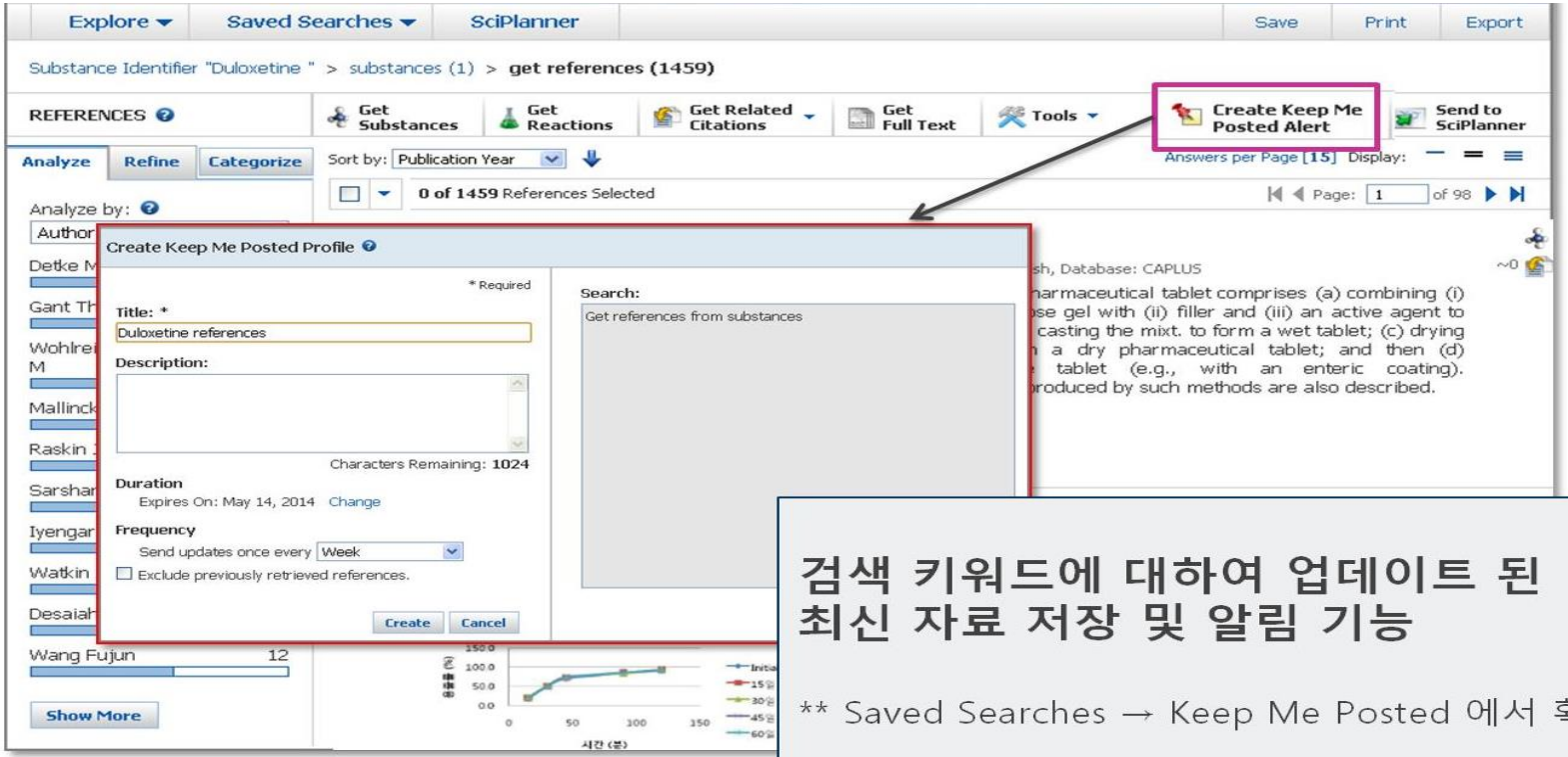
Other

Keep Me Posted

SciPlanner

SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

알림기능: Keep Me Posted Alerts

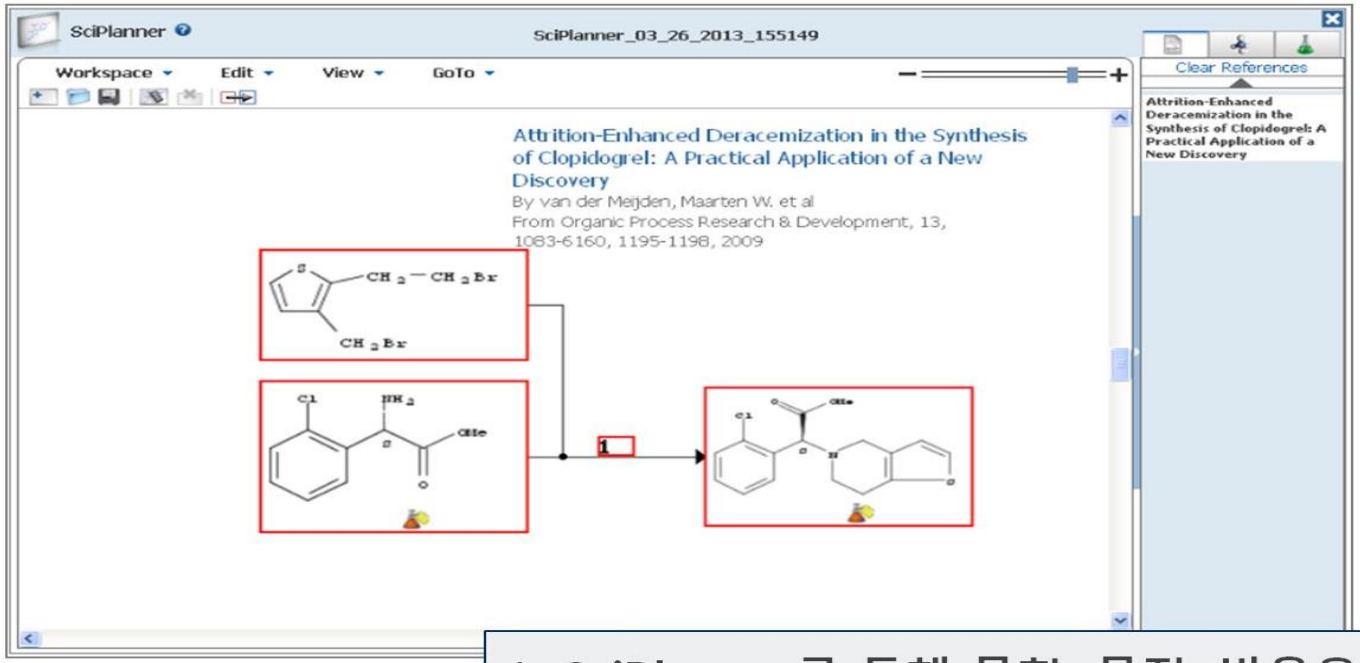


검색 키워드에 대하여 업데이트 된 최신 자료 저장 및 알림 기능

** Saved Searches → Keep Me Posted 에서 확인

SciFinder®
A CAS SOLUTION

나만의 연구실 구현: SciPlanner



1. SciPlanner를 통해 문헌, 물질, 반응을 편리하게 관리
2. Retro-Synthesis 및 세부 검색 가능

SciFinder® A CAS SOLUTION

PatentPak

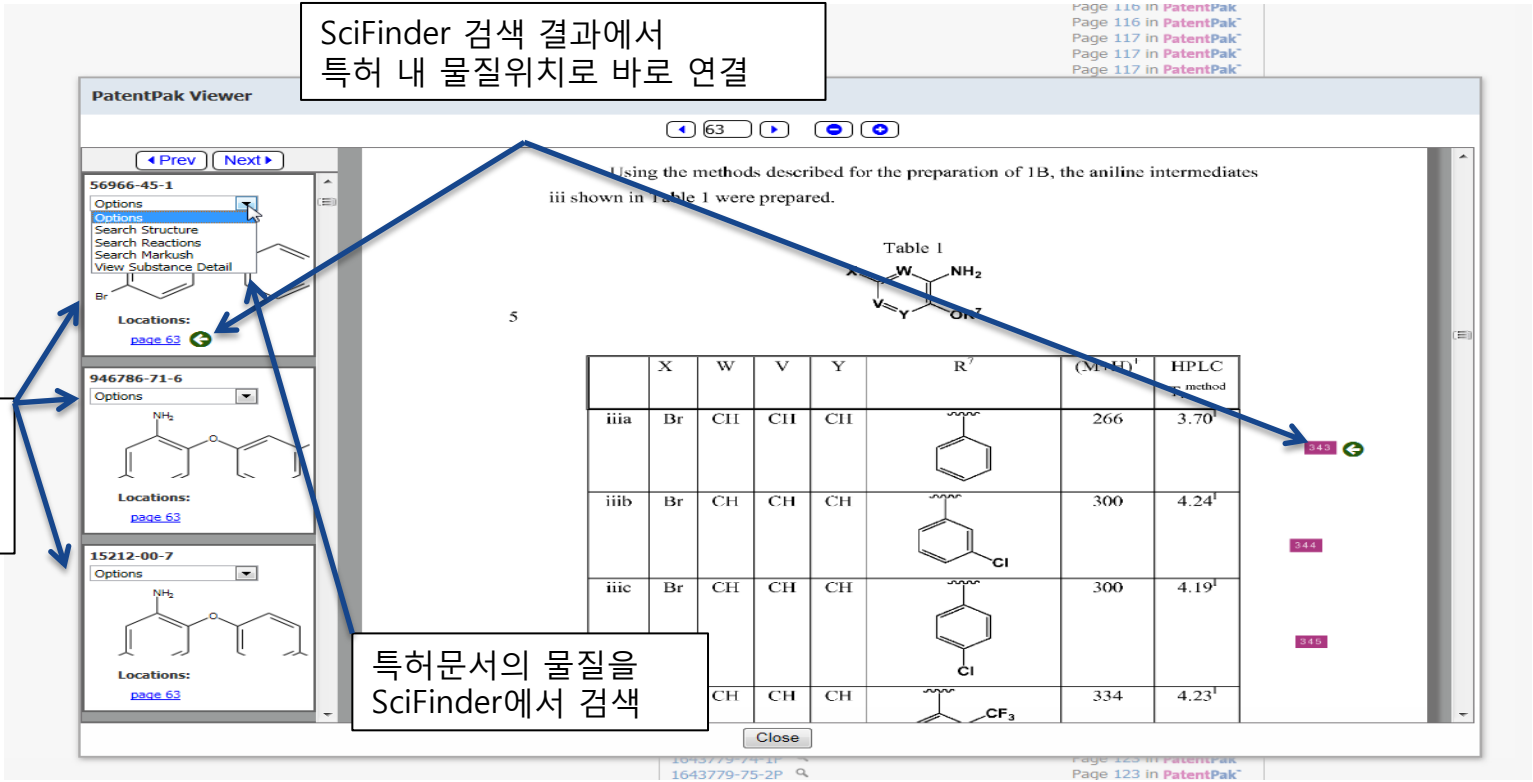
- 전세계 주요 특허기관의 **특허원문을 바로 다운로드** 가능
- 특허 **PDF 파일 내에서 내용 검색**이 가능
- **여러 언어의 패밀리특허**를 포함
- 특허 내, **물질이 명시된 페이지**를 쉽게 검색
- 신뢰도 높은 특허검색
- **매일 업데이트**됩니다.
- SciFinder의 검색기능과 호환되는 **특허 뷰어** 제공

새로운 검색 도구, PatentPak Viewer

SciFinder 검색 결과에서
특허 내 물질위치로 바로 연결

특허 내
화학정보
검색

특허문서의 물질을
SciFinder에서 검색

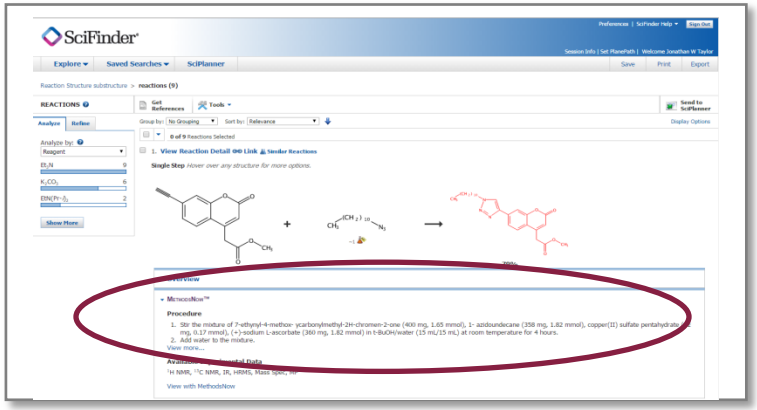


SciFinder® A CAS SOLUTION

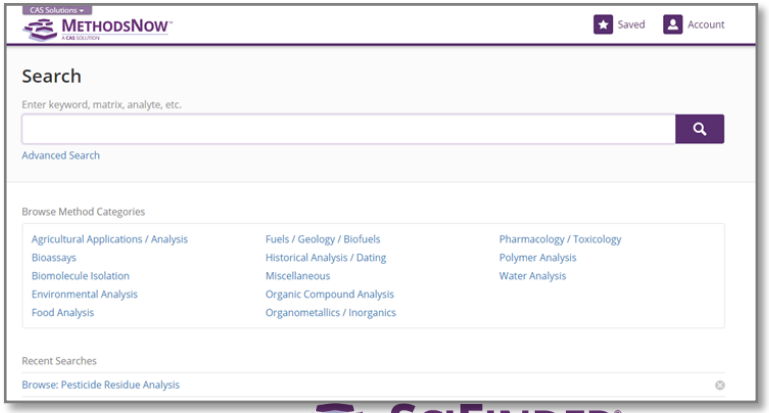
MethodsNow란?

- 백만이 넘는 합성 및 분석 방법의 컬렉션– with more to come!
  - 집중된 인덱스 및 단계별 실험 절차
  - 분석 연구에 대한 세부 사항 (예- matrix, analyte, instrumentation and comparison capabilities)
- 인터페이스 옵션 권리!!
  - 합성 연구원은 관련 콘텐트(실험절차 및 정리 표)를 SciFinder 내에서 바로 찾기 가능
  - 분석 연구원들은 자신의 검색에 맞게 새롭게 디자인 된 인터페이스를 통해 관련 콘텐트를 찾기 가능

Synthetic chemist looking for great methods?
They are in SciFinder.



Analytical scientist just looking for great methods?
A new, easy to use interface just for you.



SCIFINDER® A CAS SOLUTION

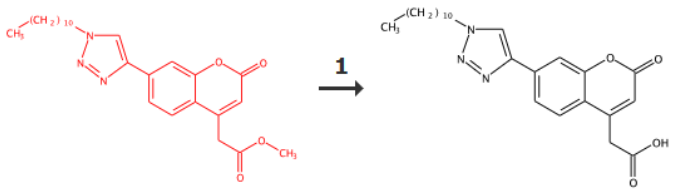
MethodsNow

MethodsNow

7-Triazolylcoumarin-based fluorescent tag system for stepwise, comparative assessment of small molecule microarrays

By Jeon, Moon-Kook; Kang, Myoung-Ku; Park, Koon Ha
From Tetrahedron, 68(30), 6038-6053; 2012
Published by Elsevier Ltd.

Reaction Steps 1 2 3 4



Products	2*H*-1-Benzopyran-4-acetic acid, 2-oxo-7-(1-undecyl-1*H*-1,2,3-triazol-4-yl)-, 7 1384966-77-1
Reactants	2*H*-1-Benzopyran-4-acetic acid, 2-oxo-7-(1-undecyl-1*H*-1,2,3-triazol-4-yl)-, r 1384966-75-9
Reagents	Hydrochloric acid, CAS RN: 7647-01-0 Lithium hydroxide, CAS RN: 1310-65-2
Solvents	Water, CAS RN: 7732-18-5 Tetrahydrofuran, CAS RN: 109-99-9

MethodsNow

Procedure	1. Add lithium hydroxide monohydrate(327 mg, 7.80 mmol) to 4-methoxycarbonylmethyl-7-(1-undecyl-1H- 1,2,3-triazol-4-yl)-2H-chromen-2-one (343 mg, 0.780 mmol) in THF/water(25 mL/25 mL) at room temperature. 2. Stir the reaction mixture for 3 hours at room temperature. 3. Adjust pH 3-4 to the reaction mixture by adding 1 N hydrochloric acid. 4. Partition the reaction mixture between ethyl acetate and water. 5. Extract the aqueous layer with ethyl acetate. 6. Dry the combined organic layer over magnesium sulfate.
Scale	milligram
^{1}H NMR	^{1}H NMR (300 MHz, acetone- d_6): δ = 7.83 (s, 1H), 8.58 (s, 1H), 7.92 (d, *J* = 8.1 Hz, 1H), 7.84 (d, *J* = 8.1 Hz, 1H), 6.47 (s, 1H), 4.50 (t, *J* = 7.2 Hz, 2H), 3.99 (s, 2H), 2.00 (quintet, *J* = 7.2 Hz, 2H), 1.32-1.43 (m, 4H), 1.22-1.32 (m, 12H), 0.87 ppm (t, *J* = 6.8 Hz, 3H).
^{13}C NMR	^{13}C NMR (125 MHz, DMF-d_7, 60 °C): δ = 161.0, 155.1, 154.2, 146.5, 136.0, 127.2, 123.7, 122.1, 120.4, 115.3, 113.5, 51.1, 32.8, 29.9, 27.3, 23.5, 18.7, 14.7 ppm (decarboxylation occurred to give the corresponding 4-methyl derivative).
IR	IR (ATR, neat): ν = 3423, 2922, 2851, 1702 (2C=O, overlapped), 1619, 1561, 1375, 1154, 936, 852, 809 cm^{-1}.
HRMS	HRMS (EI): m/z calculated for $C_{24}H_{31}N_3O_4$: 425.2315 [M$^+$]; found: 425.2315.
Mass Spec	MS (ESI): m/z: 426 [M+H$^+$].
MP	235.5±0.8 °C.
CAS Method Number	3-352-CAS-78415

Print/Export Close

SCIFINDER® A CAS SOLUTION

CAS SciFinder 인허 계약

- 나는 고유한 로그인 ID 및 비밀번호를 다른 사람과 공유하지 않겠습니다.

  *MACid (Media Access Control identifier): 컴퓨터의 물리적 주소

- 나는 최대 5 천 개의 기록만 저장하겠습니다.

- 나는 타 기관의 연구를 위해 검색 결과를 제공하거나,
  대신하여 연구를 수행하지는 않을 것입니다.

- CAS 정보 사용 정책 더 보기
  (http://www.cas.org/legal/infopolicy.html)

SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

Miri Kim

Product Manager
miri@shinwon.co.kr

Connect with SciFinder

SciFinder®
A CAS SOLUTION