

CAS ロール定義一覧

CAS ロール一覧

・備考欄は CAS ロールの付与年代を表している。空欄はすべて 1967 年以降。

(2016 年 2 月)

コード*	英語名	定義	備考
ANST* ¹	Analytical Study	分析に関する研究	
ANT	Analyte	分析対象	
AMX	Analytical Matrix	分析マトリックス	
ARG	Analytical Reagent Use	分析試薬用途	
ARU	Analytical Role, Unclassified	上記以外の分析に関する研究	
BIOL* ¹	Biological Study	生物学的研究	
ADV	Adverse Effect, Including Toxicology	副作用 (毒性を含む)	
AGR	Agricultural Use	農業関連用途	
BCP	Biochemical Process	生化学的プロセス	2002-
BMF	Bioindustrial Manufacture	生化学的工業生産	
BPN	Biosynthetic Preparation	生化学的合成	
COS	Cosmetic Use	化粧品用途	2002-
DGN	Diagnostic Use	診断用途	2002-
FFD	Food or Feed Use	食品または飼料用途	
NPO	Natural Product Occurrence	天然物の起源・分布	2002-
PAC	Pharmacological Activity	薬理活性	2002-
PKT	Pharmacokinetics	薬物動態	2002-
THU	Therapeutic Use	医薬用途	
BUU	Biological Use, Unclassified	上記以外の生物関連用途	
BSU	Biological Study, Unclassified	上記以外の生物学的研究	
BAC	Biological Activity or Effector, Except Adverse	生理活性またはエフェクター (副作用を除く)	-2001
CMBI* ¹	Combinatorial Study	コンビナトリアル・ケミストリーに関する研究	2002-
FORM* ¹	Formation, Nonpreparative	生成 (意図的合成ではない)	
GFM	Geological or Astronomical Formation	地質学的, 天文学的生成	
FMU	Formation, Unclassified	上記以外の生成	
NANO* ¹	Nanomaterial	ナノ材料	1992-
OCCU* ¹	Occurrence	起源・分布	
GOC	Geological or Astronomical Occurrence	地質学的, 天文学的起源・分布	
NPO	Natural Product Occurrence	天然物の起源・分布	2002-
POL	Pollutant	汚染物質	
OCU	Occurrence, Unclassified	上記以外の起源・分布	

コード	英語名	定義	備考
PREP* ^{1,2}	Preparation	製造	1907-
BMF	Bioindustrial Manufacture	生化学的工業生産	
BPN	Biosynthetic Preparation	生化学的合成	
BYP	Byproduct	副生成物	
IMF	Industrial Manufacture	化学的工業生産	
PUR	Purification or Recovery	精製	
SPN	Synthetic Preparation	化学合成	
PROC* ¹	Process	プロセス	
PEP	Physical, Engineering or Chemical Process	物理的, 工学的, または化学的プロセス	
BCP	Biochemical Process	生化学的プロセス	2002-
GPR	Geological or Astronomical Process	地質学的, 天文学的プロセス	
REM	Removal or Disposal	除去または処分	
PRPH* ¹	Prophetic	Prophetic 物質	1993-
RACT* ¹	Reactant or Reagent	反応物または試薬	
RCT	Reactant	反応物	
RGT	Reagent	試薬	2002-
USES* ¹	Uses	用途	
AGR	Agricultural Use	農業関連用途	
ARG	Analytical Reagent Use	分析試薬用途	
CAT	Catalyst Use	触媒用途	
COS	Cosmetic Use	化粧品用途	2002-
DGN	Diagnostic Use	診断用途	2002-
FFD	Food or Feed Use	食品または飼料用途	
MOA	Modifier or Additive Use	改良剤または添加物用途	
POF	Polymer in Formulation	ポリマー組成物	
TEM	Technical or Engineered Material Use	工学・工業材料用途	
THU	Therapeutic Use	医薬用途	
BUU	Biological Use, Unclassified	上記以外の生物学的用途	
NUU	Other Use, Unclassified	上記以外の用途	
PRP	Properties	物性	
MSC	Miscellaneous	その他	

*1 4 文字コードはスーパーロール

*2 スーパーロール PREP は CAS 登録番号索引に付加されている接尾辞 P と対応している

スーパーローラー一覧

(2016年2月)

コード (付与期間)	完全名 (和訳) <下位のロール>
解説	
ANST (1967-)	<p>Analytical Study (分析に関する研究) <AMX, ANT, ARG, ARU></p> <p>材料の成分の検出または同定, 材料の成分の定量, 定性的または定量的バイオアッセイ, 物質の分析プロセスでの使用, 分析のための物質の分離, 未知物質の同定など, 分析に重点を置いた研究に関わる物質に付与される.</p> <p>反応あるいはプロセスを確認したり, 組成情報を得るための日常的手段として用いられるありふれた分析では, このロールは付与されない.</p> <p>例: 分析法の開発または改良, ある分析方法による物質の定性または定量分析, 定量分析における干渉の対策や検出限界の改善, 分析法または分析機器の性能向上のための試薬の開発または改良など</p>
BIOL (1967-)	<p>Biological Study (生物学的研究) <ADV, AGR, BAC, BCP, BMF, BPN, BSU, BUU, COS, DGN, FFD, NPO, PAC, PKT, THU></p> <p>生体分子・生体系 (生物体, 器官, 細胞, 細胞内系を含む) における物質の役割あるいは生体分子・生体系に対する影響の研究に関わる物質に付与される.</p> <p>例: 代謝, 毒性, 分布, 生物学的応用, 組成などの研究</p>
CMBI (2002-)	<p>Combinatorial Study (コンビナトリアル・ケミストリーに関する研究) <なし></p> <p>コンビナトリアル技術によって合成された物質, または研究, 使用された物質に付与される.</p>
FORM (1967-)	<p>Formation, Nonpreparative (生成, 意図的生成ではない) <FMU, GFM></p> <p>製造の意図あるいは関心のない, 自然的偶発的生成に関わる物質に付与される. 2001年以前は代謝的生成研究についてもこのこのロールが付与されていた.</p>
NANO (1992-)	<p>Nanomaterial (ナノ材料) <なし></p> <p>文献中に 0.05-100 nm の範囲でサイズが記述されているか, 具体的なサイズの表記はないがナノスケールまたはナノ形態のように記述されている特定の物質または化合物クラス用語に付与される.</p>
OCCU (1967-)	<p>Occurrence (起源・分布) <GOC, NPO, OCU, POL></p> <p>物質の起源・分布に関する研究の物質に付与される.</p>

スーパーローラー一覧

(2016年2月)

コード (付与期間)	完全名 (和訳) <下位のローラー>
解説	
PREP (1907-)	Preparation (製造) <BMF, BPN, BYP, IMF, PUR, SPN>
	<p>製造の意図があり、化学反応、生化学反応、核反応によって合成された物質に付与される。また、製造の意図があり、回収、精製、分離、その他の方法で生成された物質にも付与される。</p> <p>1907 ~ 1966年の期間はCAS登録番号のみに付与されており、化合物クラス用語には付与されていない。</p> <p>PREPが付与されたCAS登録番号には、同時に接尾辞Pも付与されている。このため特定化学物質(CAS登録番号)の合成文献を検索するには、CASルールPREPの他に接尾辞Pも使用できるが、検索結果は同じになる。</p>
	Process (プロセス) <BCP, GPR, PEP, REM>
PROC (1967-)	物質の複雑な多段階処理、動的変化の研究に関わる物質に付与される。
PRPH (1998-)	Prophetic Substance (Prophetic 物質) <なし>
	<p>特許の実施例に記載されており hard data のない特定化学物質 (例: 反応物, 単離された中間体, 生成物) に付与される。</p> <p>化学名や構造が表中に表示されているが物性データが記述されていない物質にも付与される。新規や今までにない用途が報告されているが、その存在や用途が実証されていない物質にも付与される。</p> <p>Prophetic 物質には、条件さえ合えば他のローラーも付与される。</p>
RACT (1967-)	Reactant or Reagent (反応物または試薬) <RCT, RGT>
	<p>個々の反応中の反応物 (生成物の構造の一部を形成する) または試薬 (反応に関与するが生成物の一部とはならない) に付与される。</p> <p>核反応や生化学物質 (例えば標識化合物など) の意図的な化学修飾に関わる物質や失敗反応の反応物質にも付与される。</p> <p>2001年以前は、同様の物質にRCTが付与されている。</p>
USES (1967-)	USES (用途) <AGR, ARG, BUU, CAT, COS, DGN, FFD, MOA, NUU, POF, TEM, THU>
	<p>新規な用途・応用の研究に関わる物質に付与される。</p> <p>このローラーは、物質の利用が実証、特許請求、または明確に意図された場合に限り付与される。その物質が単に周知の用途を持つだけでは不十分である。</p>

特定ルール一覧

(2016年2月)

コード (付与期間)	完全名 (和訳) <上位のルール>
解説	
ADV (1967-)	<p>Adverse Effect, Including Toxicity (副作用, 毒性を含む) <BIOL></p> <p>生体系に対する, または生体系中での, 物質の好ましくない影響を示す. このルールは医薬品の副作用, 農薬の対象生物以外に対する悪影響などの研究でも付与される. また物質の毒性に関するスクリーニングに対しても, 原報で重点となっていれば結果が否定的でも付与される.</p> <p>例: 医薬品の副作用・毒性, 物質の光毒性・発癌性・催奇形性・変異原性, 疾病の病因と因果関係がある場合 (病理学的状態の誘導に用いられている場合を含む)</p>
AGR (1967-)	<p>Agricultural Use (農業関連用途) <BIOL, USES></p> <p>農業用途が実証, 特許請求, または明らかに意図された物質に付与される. 食品および収穫後の作物に使用される物質には FFD (食品または飼料用途) が付与される.</p> <p>例: 肥料, 土壌改良剤, 作物・家畜用農薬, 家畜の繁殖調節用ホルモン, 植物・動物の収量を増すための成長促進剤・調節剤, あるいはそれらに含まれる物質</p>
AMX (1967-)	<p>Analytical Matrix (分析マトリックス) <ANST></p> <p>分析試料中の同定や定量の対象でない物質に付与される. 分析の目的がその物質自体の同定にあり, 通常のありふれた分析手法でない場合は ANT (分析対象) が付与される.</p> <p>例 (下線部分がマトリックス): 鉄・硫黄クラスター化合物中の硫黄の定量における<u>クラスター化合物</u>, 鉄鉱石または鉄・ニッケル合金中のニッケルの分析における<u>鉱石や合金</u>, 炭酸ストロンチウム中のストロンチウム同位体の存在比の測定における<u>炭酸ストロンチウム</u>, 市販の酵素中の特定酵素成分の分析における<u>市販酵素</u></p>
ANT (1967-)	<p>Analyte (分析対象) <ANST></p> <p>診断を含め, 分析を意図した材料ないし試料に含まれ, 検出, 同定, 定量分析またはバイオアッセイの対象となる物質に付与される. このルールは分析を意図して分離される物質や同定された未知物質にも付与される. 環境試料中の汚染物質が分析される場合は, ANT と共に POL (汚染物質) が付与される. 反応あるいはプロセスの結果を確認したり組成情報を得るため通常行われるありふれた分析のように, 分析自体が関心の対象でない場合には ANT は付与されない.</p>
ARG (1967-)	<p>Analytical Reagent Use (分析試薬用途) <ANST, USES></p> <p>分析において, 試料中の対象物質の検出または定量のために使用する物質に付与される. 対象物質と反応して検出可能な生成物を生ずる分析試薬は, その反応が重点であるか, あるいは新規なものである場合に限って, ARG と共に RCT (反応物) が付与される.</p> <p>例: 指示薬 (KHP 滴定におけるフェノールフタレイン), キレート化剤およびマスキング剤 (金属イオン除去のための EDTA), 抽出剤 (アクチニド抽出のためのリン配位化合物), 酸化・還元剤 (分析対象物質の酸化状態を調整するための KMnO₄), 分析で使用する触媒 (Pt 触媒), エンザイムアッセイ用酵素 (乳酸塩の分析に用いられる乳酸デヒドロゲナーゼ), プローブ (遺伝子ないし遺伝子要素の検出に用いるオリゴヌクレオチド), イムノアッセイで用いる抗体 (抗原またはハプテンの検出または定量に用いられる一次または二次抗体)</p>

特定ロール一覧

(2016年2月)

コード (付与期間)	完全名 (和訳) <上位のロール>
解説	
ARU (1967-)	<p>Analytical Role, Unclassified (ANST の下位の特定ロール: ANT, AMX, ARG 以外の分析に関する研究) <ANST></p> <p>分析妨害物質, 共存物質, 分析における補助媒体・支持体・非反応性溶媒, 標準ないし参照物質または溶液に付与される. このロール以外の ANST (分析に関する研究) の下位の特定ロールは付与されないが, 分析において重要な関与物質とされているものにも付与される.</p> <p>例: イオン交換体 (ランタノイドの定量の一部として Er と Pr を除去するためのリン酸ジルコニウム), 吸着剤 (選択的ガス除去のためのゼオライト), クロマトグラフィーの固定相および移動相 (シロキサンまたはシリカ固定相), センサー成分 (微量化学的水流測定に用いる Si チップ), 緩衝剤 (pH 調整のための炭酸イオン), 標準物質 (米国連邦標準技術局 (NIST) の標準ダイオキシソ), 標準溶液 (原子吸光分析のための NIST 標準金溶液),</p>
BAC (1967-2001)	<p>Biological Activity or Effector, Except Adverse (生理活性またはエフェクター, 副作用を除く) <BIOL></p> <p>生理活性や, 生体分子・生体系に対する (副作用を除く) 生物学的影響が研究されている物質に付与される. 生体分子・生体系に対する物質の作用機構が研究されている場合にも付与される.</p> <p>生理活性の例: 抗腫瘍剤, 酵素, ホルモン, 免疫調節物質, 医薬, 栄養素, 農薬 (対象生物における) エフェクターの例: 活性化剤, 阻害剤, 活性調節因子, 増強剤, メディエーター,</p> <p>このロールは 2002 年以降の付与が中止されている. 2002 年以降は BAC の代わりに PAC (薬理活性), PKT (薬物動態), BSU (その他の生物学的研究) のいずれかのロールが付与される.</p>
BCP (2002-)	<p>Biochemical Process (生化学的プロセス) <BIOL, PROC></p> <p>応用プロセスと反応メカニズムの研究において, 生化学系で作用を受けた, または変換された物質に付与される. このようなプロセスには商業的関心がある場合が多い.</p> <p>例: 発酵基質変換 (ワインの発酵でエタノールに変換される糖類), 地下水の土着細菌によるクロロベンゼン類の分解, プラスチックの生分解, 材料の生物付着</p> <p>物質が生体系中で単に作用を受けたり変換・輸送される場合は, BSU (その他の生物学的研究) が付与される. 生化学的な段階を経た合成反応における反応物には RCT (反応物) が付与される.</p>
BMF (1967-)	<p>Bioindustrial Manufacture (生化学的工業生産) <BIOL, PREP></p> <p>商業規模で生化学的に生産される物質に付与される. 多段階合成では, 生化学的段階が重要または新規であれば, それ以降の化学的段階の生成物に IMF (化学的工業生産) と共に BMF が付与される.</p>

特定ロール一覧

(2016年2月)

コード (付与期間)	完全名 (和訳) <上位のロール>
解説	
BPN (1967-)	<p>Biosynthetic Preparation (生化学的合成) <BIOL, PREP></p> <p>製造を意図して実験室規模で生合成された物質に付与される。 多段階合成では生物学的段階が重要または新規であれば、それ以降の化学的段階の生成物には SPN (化学合成) と BPN が付与される。</p>
BSU (1967-)	<p>Biological Study, Unclassified (BIOL の下位の特定ロール: ADV, AGR, BAC, BCP, BMF, BPN, BUU, COS, DGN, FFD, NPO, PAC, PKT, THU 以外の生物学的研究) <BIOL></p> <p>(1) 物質の生物学的研究であるが BIOL (生物学的研究) の下位のその他の特定ロールが付与されない場合、または (2) それ自体は研究対象でないが、生物学的に研究された他の物質あるいは条件を記述・規定するために索引された物質、に付与される。</p> <p>(1) の例: 生命の起源の研究における前生物学的アミノ酸, 植物アルカロイド免疫調節剤の分子進化の研究におけるアルカロイド, 老人斑における胎児性抗原の存在, 代謝経路における中間体, 物質の生物学的輸送</p> <p>(2) の例: 核酸配列の同定に関する研究でその核酸がコーディングしているタンパク質 (シナプス中のチロシンキナーゼの遺伝子研究におけるチロシンキナーゼ), 物質を同定するために阻害剤や賦活剤として用いる酵素 (好中球の酸化的破壊に作用するリポキシゲナーゼ阻害剤の研究におけるリポキシゲナーゼ), 特定の抗体の研究における抗原 (抗テロドトキシンモノクローナル抗体の研究におけるテロドトキシン), 受容体の研究におけるリガンド (テトラサイクリン受容体の研究におけるテトラサイクリン), 疾病の研究における関連物質 (高コレステロール症の微小血管系血管拡張反応の研究におけるコレステロール),</p> <p>特許中でクレームされておらず新規性にも関与しない配列には BSU と共に PRP (物性) が付与される。他の物質または条件を記述・規定する以外にその物質自体も研究対象となっていれば, BSU と共にほかの適切なロールが付与される。</p>

特定ルール一覧

(2016年2月)

コード (付与期間)	完全名 (和訳) <上位のルール>
解説	
<p>BUU (1967-)</p>	<p>Biological Use, Unclassified (USES の下位の特定ルール: AGR, COS, DGN, FFD, THU 以外の生物関連用途) <BIOL, USES></p> <p>生物学的ツールとして使用された物質, または生物学的ターゲットを持つ物質, または生物学的に研究されているが USES (用途) の下位の他の生物関連の特定ルールが適用できない場合に付与される.</p> <p>例: 塗料や材料に添加される抗菌剤, 船舶用塗料に用いられる徐放性防汚剤, 上水中の微生物を標的とする水処理剤, 建造物周辺の土壌に用いられる殺シロアリ剤などの殺生物剤, 家庭用殺虫スプレー</p> <p>生物学的関連以外での用途に対しては USES (用途) の下位にある非生物学的ルールが付与される.</p> <p>例: 分析を目的としない分離・精製のための溶媒または溶離液 → NUU (その他の用途) 織物におけるセルロース繊維 → TEM (工学・工業材料用途) 製造を目的とする生体合成で用いられる酵素や触媒抗体 → CAT (触媒用途) 分析におけるツールとして使用される酵素 → ARG (分析試薬用途)</p> <p>1967~2001年の期間, BUU は化粧品, または化粧品組成物として使用された物質にも付与されていた. 2002年以降, 化粧品用途の物質には COS (化粧品用途) が付与される.</p>
<p>BYP (1967-)</p>	<p>Byproduct (副生成物) <PREP></p> <p>製造の研究において, 目的とした物質以外に付随的に得られた物質に付与される. このような物質は収率が比較的低いことが多く, また収率が比較的高くても著者が副生成物として示している場合もある.</p>
<p>CAT (1967-)</p>	<p>Catalyst Use (触媒用途) <USES></p> <p>実験室規模または商業規模の何らかの反応またはプロセスにおいて, 促進剤, 開始剤, あるいはこれらと同等の機能を果たすことが実証, 特許請求, または明らかに意図された物質に付与される. 触媒担体, 助触媒, 触媒添加物は触媒系の一部と見なして CAT が付与される. 製造を目的とした生合成に用いられる酵素や, 負触媒その他の反応阻害剤にもこのルールが付与される. 分析で触媒が用いられる場合は, 新規なもの, あるいは特に触媒作用に重点がある場合を除き, ARG (分析試薬用途) が付与される.</p>
<p>COS (2002-)</p>	<p>Cosmetic Use (化粧品用途) <BIOL, USES></p> <p>人体に直接適用することで外見を美化・洗浄・修正するため設計された調合剤中の物質に付与される. 2001年以前の化粧品用途の研究では, 一般に BUU (その他の生物関連用途) が付与されている.</p> <p>例: メーク落とし中のイソパラフィン, 歯磨き剤中のネオテーム, 口紅中のオクチルアリルアミド-アクリルエステル共重合体</p>

特定ローラー一覧

(2016年2月)

コード (付与期間)	完全名 (和訳)	<上位のローラー>
	解説	
DGN (2002-)	Diagnostic Use (診断用途)	<BIOL, USES>
	<p>疾病・病原体・外傷などを同定する目的で、診断のための臨床検査や画像技術などで使用された物質に付与される。</p> <p>例：心筋梗塞を診断するための血清中の乳酸デヒドロゲナーゼアイソザイム LD1 分析， 糖尿病を診断するためブドウ糖負荷試験で同定される血漿グルコース</p> <p>2001 年以前の診断用途に関する研究では、一般に研究のタイプによって THU (医薬用途) または BAC (生理活性またはエフェクター，副作用を除く) が付与されている。</p>	
FFD (1967-)	Food or Feed Use (食品または飼料用途)	<BIOL, USES>
	<p>物質が食品または動物用飼料の製造，加工，改良に使用されていることが実証，特許請求または明らかに意図されている場合に付与される。</p> <p>例：食品または飼料の添加剤ないし強化剤，甘味料，香料，保存剤， 食品または飼料用包装材，食品製造に用いられる酵素などとして用いられる物質， あるいはこれらに含まれる物質</p>	
FMU (1967-)	Formation, Unclassified (FORM の下位の特定ローラー:GFM 以外の生成)	<FORM>
	<p>(1) 製造の意図を持たない人間活動，または放射性崩壊や素粒子の崩壊などの自然現象による物質の生成， または (2) 製造の意図を持たない理論上の反応による物質の生成， または (3) FORM (生成，意図的合成ではない) の下位の他の特定ローラーが付与できない生成， の場合に付与される。</p> <p>例：水の塩素処理後のハロカーボンの生成，バッテリーにおけるガスの発生， ラドン 210 の崩壊によるポロニウム 206 の生成，分光学的研究の過程での物質生成， MO 法の研究における物質の理論的生成 (実際には反応は行われず，また研究の主眼が 製造にない場合)，金属の腐食による表面生成物， 廃棄物または燃料の燃焼による水中汚染物質の生成， 材料の製造または加工における不純物の生成， 中世のステンドグラスの風化によって生じた鉱物</p>	
GFM (1967-)	Geological or Astronomical Formation (地質学的，天文学的生成)	<FORM>
	<p>地質学系または天文学系において自然生成された物質に付与される。</p> <p>例：星間物質系における有機化合物の生成，月面における玄武岩の生成， タングステン鉱床における鉱化</p>	

特定ローラー一覧

(2016年2月)

コード (付与期間)	完全名 (和訳) <上位のローラー>
解説	
GOC (1967-)	<p>Geological or Astronomical Occurrence (地質学的, 天文学的起源・分布) <OCCU></p> <p>地球, 大気, 惑星, その他諸天体などの系における物質の分布あるいは検出に関する研究で, 生成のメカニズムには関心がない場合に付与される. 地質学系・天文学系におけるトレーサー物質・指示物質, 将来の商業生産を予想した天然資源の探査などの研究にもこのローラーが付与される.</p> <p>例: トンガ海溝の間隙水における有機酸の分布, 赤道磁気圏の炭素イオンの検出, 底水層の沈みの地理学的指示物質としてのストロンチウム, ガラスまたは触媒製造の可能性のある粘土鉱床の探査と評価</p>
GPR (1967-)	<p>Geological or Astronomical Process (地質学的, 天文学的プロセス) <PROC></p> <p>地質学・天文学時系において自然変容に関与した物質に付与される.</p> <p>例: マグマの活動, 接触変成作用, 鉱化, 堆積物の続成作用, 花崗岩化作用, 蛇紋岩化作用, 造山運動, アナテクシス, 混合岩化, プレートの沈み込み, 原始太陽系の凝縮, 地球のガス発生, 火山活動, 隕石衝突</p>
IMF (1967-)	<p>Industrial Manufacture (化学的工業生産) <PREP></p> <p>商業規模で化学的方法 (生物学的ではなく) によって製造されている物質に付与される. スケールアップの意図を含むプロセス特許で生成されている物質にも付与される. 反応を伴わずに単に物質を加工していたり物理的形態が変化している場合は PEP (物理的, 工学的, または化学的プロセス) の方が適切である.</p>
MOA (1967-)	<p>Modifier or Additive Use (改良剤または添加物用途) <USES></p> <p>他の物質・材料・組成物の特性・機能を強化するために用いることが特許請求または実証されている物質に付与される. このような物質は意図的に導入される場合もあるし, 天然に存在する場合もある.</p> <p>例: 光学的または半導体用ドーパント, 蛍光体付活剤, セラミックス安定化剤, ポリマー系複合材料強化用ガラス繊維, 塗料中のアルミ箔用分散剤, プラスチックの耐衝撃性向上のために添加された EPDM ゴム, ポリエチレンの退色防止剤に用いるステアリン酸亜鉛</p> <p>2002 年以降, 組み合わせに新規性のない混合物・組成物中の物質には MOA は付与されず TEM (工学・工業材料用途) または NUU (その他の用途) が付与される. 2002 年以降は, 新規性のある添加物だけに MOA が付与されている.</p>
MSC (1967-)	<p>Miscellaneous (その他) <なし></p> <p>(1) 他のローラーが適用できない物質, または (2) 直接研究対象とはなっていないが, 生物学的関連以外で研究された他の物質や条件を記述するために索引された物質, に付与される.</p> <p>(1) の例: アルカロイドの命名法におけるアルカロイド, 鉄化学の教育における鉄 (2) の例: 砂糖製造工場の廃水処理における蔗糖, 製鉄所の廃棄物の有効利用におけるスチール, エラストーゼ阻害剤の結晶構造の決定におけるエラストーゼ</p> <p>直接研究対象とはなっていないが, 生物学的関連で研究された他の物質や条件を記述するために索引された物質には BSU (その他の生物学的研究) が付与される.</p>

特定ロール一覧

(2016年2月)

コード (付与期間)	完全名 (和訳) <上位のロール>
解説	
<p>NPO (2002-)</p>	<p>Natural Product Occurrence (天然物の起源・分布) <BIOL, OCCU></p> <p>植物、動物、微生物のような自然源での存在が研究されている物質に付与される。新しく発見された天然物や、自然源中の天然物の存在に関する新しい発見、天然物の単離と構造解析などの研究が含まれる。</p> <p>例: 海綿の一種である <i>Axinella tenuidigitata</i> から単離されたブロモピロールアルカロイド, <i>Taxus yunnanensis</i> 樹皮から単離・精製されたタキソイド</p> <p>2001年以前の天然物の起源・分布に関する研究では、一般に PRP (物性), PUR (精製) が付与されている。</p>
<p>NUU (1967-)</p>	<p>Nonbiological Use, Unclassified/ Other Use, Unclassified (USES の下位の特定ロール: AGR, ARG, BUU, CAT, COS, DGN, FFD, MOA, POF, TEM, THU 以外の用途) <USES></p> <p>物質の用途が, USES (用途) の下位の他の特定ロールが適用できない場合に付与される。このロールは処理工程に用いられる工業用試薬に付与される。また、反応・プロセスで用いられる工業用物質で反応に関与しないものにも付与される。</p> <p>2002年にこのロールの完全名は NONBIOLOGICAL USE, UNCLASSIFIED/RL から OTHER USE, UNCLASSIFIED/RL に変更されている。このため完全名で検索する場合は両者を OR 演算する必要がある。一方、コード NUU/RL を使用すれば 1967年以降をまとめて検索することができる。</p>
<p>OCCU (1967-)</p>	<p>Occurrence, Unclassified (OCCU の下位の特定ロール: GOC, NPO, POL 以外の起源・分布) <OCCU></p> <p>人間活動により生成する無害な物質の存在や、材料中の好ましくない不純物の存在、考古学発掘品中の微量元素などに関して研究されている場合など、OCCU (起源・分布) の下位のその他の特定ロールが適用できない場合に付与される。</p>
<p>PAC (2002-)</p>	<p>Pharmacological Activity (薬理活性) <BIOL></p> <p>生体系に対する薬理作用が研究されている薬物に付与される。例えば、β アドレナリン作動性受容体と心臓血管系に対するアテノロールの作用に関する研究がこれに当る。</p> <p>2001年以前の薬理活性に関する研究では、一般に BAC (生理活性またはエフェクター、副作用を除く), THU (医薬用途), BSU (その他の生物学的研究) が付与されている。</p>

特定ロール一覧

(2016年2月)

コード (付与期間)	完全名 (和訳) <上位のロール>
解説	
<p>PEP (1967-)</p>	<p>Physical, Engineering or Chemical Process (物理的, 工学的, または化学的プロセス) <PROC></p> <p>物質の物理的変換または化学反応プロセスが研究されている場合に付与される。例えば、プロセスの動的エネルギー、機械的、工学的、動的側面に関する研究に關与している物質に付与される。また、個々の化学反応のメカニズムの研究での反応物に付与される。この他、輸送現象の動的側面、物質が成分として含まれる材料（系、組成物、複合材、混合物など）の変換に関する研究の場合に付与される。</p> <p>物理・物理化学的プロセスの例： 流動、拡散、磁化、導電性の変化、立体配座遷移、分極、スピン緩和、イオン対形成、伝導メカニズム、電荷輸送、キャリアの分散</p> <p>物質を変換する物理化学的・工学的プロセスの例： 鑄造、押し出し、金属加工、焼結、蒸着、電着、物理的ゲル化、浸透、吸着、石油精製、リサイクリング</p> <p>化学反応プロセスの例：電気分解、酸化還元反応、腐食、燃焼</p> <p>物質が個々の化学反応（化学反応式または反応スキームで表される）の反応物であり、かつ反応のメカニズムや反応力学に重点が置かれていない場合は PEP でなくむしろ RCT（反応物）が付与される。一方、化学プロセスにおいて、個々の反応に關心が持たれている場合は、PEP と共に RCT（反応物）が付与される。</p> <p>また、PEP はプロセスに関する他の特定ロールが適用できない複雑なプロセスの關与物質にも付与される。</p>
<p>PKT (2002-)</p>	<p>Pharmacokinetics (薬物動態) <BIOL></p> <p>動物体における物質の吸収、分布、組織中の局在性、生体内変換、バイオアベイラビリティ、代謝、排泄の程度とプロセスが研究されている薬物・物質に付与される。</p> <p>例：臓器移植患者におけるシクロスポリンの腸内吸収と血中濃度、小児患者におけるバンコマイシンの薬物動態プロファイル、エンロフロキサシンの経口吸収とバイオアベイラビリティ</p> <p>2001 年以前の薬物動態に関する研究では、一般に BAC（生理活性またはエフェクター、副作用を除く）、THU（医薬用途）、BSU（その他の生物学的研究）が付与されている。</p>
<p>POF (1967-)</p>	<p>Polymer in Formulation (ポリマー組成物) <USES></p> <p>ポリマーが組成物の有用性を高めることが特許請求または実証され、組成の新規性に重点が置かれている場合にポリマーに付与される。ポリマーブレンドに重点がある研究では、ブレンドのすべての成分ポリマーにこのロールが付与される。</p> <p>例：柔軟性を高めるために可塑剤を配合した PVC 組成物、ブタジエンゴムをブレンドして耐衝撃性を高めたポリスチレン</p> <p>2002 年以降、組成物中の変成剤や添加剤に新規性があるか重点が置かれている場合、一般に MOA（改良剤または添加物用途）が付与されている。</p>

特定ローラー一覧

(2016年2月)

コード (付与期間)	完全名 (和訳) <上位のローラー>
解説	
POL (1967-)	<p>Pollutant (汚染物質) <OCCU></p> <p>物質 (有害物質と見なされているもの) が屋内, 屋外, 大気, 土壌, 水, 建造物, 生物系などの環境中に見出されている場合, その物質に付与される. このローラーは物質が生態系に入ったときの悪影響の可能性に関する研究にも付与される. 環境試料中の汚染物質を分析する研究では, 分析対象となる汚染物質に POL と ANT (分析対象) が付与される.</p>
PRP (1967-)	<p>Properties (物性) <なし></p> <p>(1) 物質の化学的, 物理的, 熱力学的, 速度論的物性の (日常的な測定を超えた) 研究, (2) 物質を成分として含む材料 (系, 混合物, 組成物など) の物性の研究, (3) 物質の反応物性の研究, または (4) 物質が関与するプロセスの物性の研究, における物質に付与される. 反応物性は通常, 数値, 図, グラフで表現されるものである.</p> <p>例: 電気伝導度, 熱拡散率, 粘度, 静電的・磁氣的物性, 流動性, 反射率, 仕事関数, ポリマーの相溶性, 結晶性, 湿潤性, ガラス転移点, チクソ性, 結晶構造, 分子構造, 臨界ミセル濃度, 状態図, 分光学的物性, 生成熱</p> <p>物性値がありふれた物質同定のために報告されている場合は PRP は付与されない.</p> <p>プロセスや反応における物性の例: 活性化パラメータ, 平衡定数 (安定度定数, 電離定数), 反応速度定数, 重合における反応性比, 酸化性または還元性, 反応エンタルピー, 反応の自由エネルギー</p> <p>プロセスの物性に関する研究では, PRP と共に PEP (物理的, 工学的, または化学的プロセス) が付与される. 反応の性質に関する研究では, PRP と共に RCT (反応物) が付与される. 物質がその物性によってツールとして利用されていても, 物性自体に新規性がない場合には, その物質には USES の下位の適切な特定ローラーが付与される. 例えば, 重合を引き起こすためにアルゴンレーザーを用いた場合, アルゴンには NUU (その他の用途) が付与される.</p>
PUR (1967-)	<p>Purification or Recovery (精製) <PREP></p> <p>製造を意図して精製・抽出・回収・分離された物質に付与される. またこのローラーは, 製造を意図して生物から新規物質, または新規生物から既知物質を単離・精製する場合にも付与される. 新規または改良された方法で精製された場合にも付与される.</p> <p>多段階合成の過程で分割されたエナンチオマーに対しては, たとえ分割自体が化学反応に関与してなくとも, PUR と共に PREP (製造) の下位の適切な特定ローラーが付与される. 好ましい生成物の分割で得られるすべてのジアステレオマーや酵素分解で得られる生成物にも PUR が付与される.</p>
RCT (1967-)	<p>Reactant (反応物) <RACT></p> <p>化学反応に関与しており, 生成物の分子に組み込まれる物質に付与される. 生成物が必ずしも同定されていない反応や失敗反応の反応物にも付与される. 核反応のように原子番号や質量数の変化する反応の反応物にも付与される. 文献中で生成され, さらに反応出発物質でもある中間体が索引された場合は, RCT と共に PREP (製造) の下位の適切な特定ローラーが付与される. 1967~2001年の期間は, このローラーは試薬にも付与されていた.</p>

特定ロール一覧

(2016年2月)

コード (付与期間)	完全名 (和訳) <上位のロール>
解説	
REM (1967-)	<p>Removal or Disposal (除去または処分) <PROC></p> <p>効果的に除去するため用いられるプロセスの種類を問わず、製造の意図なく除去される好ましくない物質に付与される。</p> <p>例: 生成物からの不純物の除去, 水処理のプロセスにおける汚染物質の除去, 核廃棄物の処理</p>
RGT (2002-)	<p>Reagent (試薬) <RACT></p> <p>化学反応に関与しているが、生成物の分子に組み込まれない物質に付与される。このロールは、合成研究における試薬に対してのみ付与される。触媒には CAT (触媒用途)、分析で使用する試薬には ARG (分析試薬用途)、プロセスや処理で仕様する試薬には NUU (その他の用途) が付与される。2001 年以前の試薬に関する研究では、一般に RCT (反応物) または NUU (その他の用途) が付与されている。</p>
SPN (1967-)	<p>Synthetic Preparation (化学合成) <PREP></p> <p>実験室規模で製造を意図して (生物学的ではなく) 化学合成または核反応によって合成された物質に付与される。</p> <p>例: 有機・無機合成された生成物, 物性データを利用して単離された物質, 化学蒸着法や原子層エピタキシーその他の化学的方法によって小規模に合成された物質</p> <p>大量合成を意図, あるいは実証された生成物には IMF (化学的工業生産) が付与される。</p>
TEM (1967-)	<p>Technical or Engineered Material Use (工学・工業材料用途) <USES></p> <p>USES (用途) の下位のその他の特定ロール (ARG, CAT, MOA と COS, DGN, FFD, THU) が適用できない場合で、商業的・工学的利用のために開発・設計された物質に付与される。付与される物質は、その材料自体が単成分物質である場合もあり、複合材料や混合物の一成分である場合もある。</p> <p>例: 耐衝撃性ガラス - PMMA 積層材, 鉄筋コンクリート, バリア層樹脂用ポリマーブレンド, 防食用ガラス被覆, 建材用陽極酸化アルミニウム, ポリシロキサン系油圧油, 異方性けい素鋼シート, 可溶性洗剤タブレットの成分</p>

特定ロール一覧

(2016年2月)

コード (付与期間)	完全名 (和訳) <上位のロール>
解説	
THU (1967-)	Therapeutic Use (医薬用途) <BIOL, USES>
	<p>2002年以降の期間: 医学または獣医学における治療・予防への応用が研究されている物質に付与される。潜在的な応用が言及・暗示されている場合も含まれる。診断への応用に関する研究では DGN (診断用途)、薬物動態に関する研究では PKT (薬物動態)、薬理活性に関する研究では PAC (薬理活性) が付与される。</p> <p>例: 医薬品 (として期待されているもの)、製剤中の医薬品以外の成分 (索引されている場合は賦形剤も含む)、栄養補助食品、人工装具・避妊具・その他の治療用器具または材料 (人工股関節、歯科用アマルガム、コンタクトレンズなど) に用いられる物質</p> <p>1967~2001年の期間: 医学または獣医学における治療・予防・診断への応用が、特許請求、実証、または明確に意図されている物質に付与される。</p> <p>例: 医薬品、医薬製剤およびその成分 (索引されている場合は賦形剤も含む)、治療効果や作用メカニズムの評価のための薬理学的研究に用いられた物質、人工装具・避妊具・その他の治療用器具または材料 (人工股関節、歯科用アマルガム、コンタクトレンズなど) に用いられる物質、 内因性指示薬のように医学的状態を知るための診断用物質</p>

■ ヘルプデスク

- ・ 化学情報協会（JAICI）の問い合わせ先
 - ヘルプデスク（STN の技術的な内容について）



TEL 0120-003-462
FAX 03-5978-4090
E-mail support@jaici.or.jp

JAICI

化学情報協会

情報事業部

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

TEL: 0120-003-462 FAX: 03-5978-4090

URL: www.jaici.or.jp

E-mail: support@jaici.or.jp