

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値 (ETAG)

■ 参考文献情報のみ収録されている物性情報 (ETAGFUL 表示形式で表示)

(2009 年 1 月現在)

参照文献タグ名 (= > S タグ名/ETAG で検索可能)	内容
スペクトル (NMR)	
NMR SOLUTION STRUCTURE (COMPLETE)	NMR 構造解析 (完全な)
NMR SPECTRA	NMR スペクトル
TWO-DIMENSIONAL NMR SPECTRA	二次元 NMR スペクトル
BORON-11 NMR SPECTRA	¹¹ B - NMR スペクトル
CARBON-13 NMR SPECTRA	¹³ C - NMR スペクトル
FLUORINE-19 NMR SPECTRA	¹⁹ F - NMR スペクトル
METAL NMR SPECTRA	金属 NMR スペクトル
NITROGEN-15 NMR SPECTRA	¹⁵ N - NMR スペクトル
PHOSPHORUS-31 NMR SPECTRA	³¹ P - NMR スペクトル
PROTON NMR SPECTRA	¹ H - NMR スペクトル
SILICON-29 NMR SPECTRA	²⁹ Si - NMR スペクトル
スペクトル (IR)	
IR ABSORPTION SPECTRA	IR 吸収スペクトル
IR EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	IR 発光スペクトル
IR REFLECTANCE SPECTRA	IR 反射スペクトル
IR SPECTRA	IR スペクトル
スペクトル (UV/Vis)	
UV AND VISIBLE SPECTRA	紫外/可視スペクトル
UV AND VISIBLE ABSORPTION SPECTRA	紫外/可視吸収スペクトル
UV AND VISIBLE EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	紫外/可視発光スペクトル
UV AND VISIBLE REFLECTANCE SPECTRA	紫外/可視反射スペクトル
スペクトル (X 線)	
X-RAY SPECTRA	X 線スペクトル
X-RAY ABSORPTION SPECTRA	X 線吸収スペクトル
X-RAY EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	X 線発光スペクトル
X-RAY REFLECTANCE SPECTRA	X 線反射スペクトル
スペクトル (その他)	
CIRCULAR DICHROISM SPECTRA	円偏光二色性スペクトル
ELECTRON SPECTRA	電子スペクトル
EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	発光スペクトル
ESR SPECTRA	電子スピン共鳴スペクトル (ESR)
GAMMA RAY SPECTRA	γ線スペクトル
MASS SPECTRA	マススペクトル
MICROWAVE SPECTRA	マイクロ波スペクトル
MOSSBAUER SPECTRA	メスバウアースペクトル
PHOTOELECTRON SPECTRA	光電子スペクトル

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値 (ETAG)

RAMAN SPECTRA	ラマンスペクトル
回折・散乱	
NEUTRON DIFFRACTION PATTERN	中性子回折パターン
NEUTRON SCATTERING	中性子散乱
X-RAY DIFFRACTION PATTERN	X線回折パターン
X-RAY SCATTERING	X線散乱
材料 (力学)	
HYDRODYNAMIC RADIUS	流体半径
ADHESIVE STRENGTH	接着強度
BENDING STRENGTH	曲げ強度
DUCTILITY	延性
COMPRESSIBILITY	圧縮率
COMPRESSIVE STRENGTH	圧縮強度
COMPLEX MODULUS	複素弾性率
CONTACT ANGLE	接触角
CREEP RATE	クリープ率
CREEP STRENGTH	クリープ強度
ELONGATION AT BREAK	破断点
ELONGATION AT YIELD	降伏点
FATIGUE STRENGTH	疲労強度
FLEXURAL MODULUS	曲げ弾性率
FRACTURE STRENGTH	破壊応力
FRACTURE TOUGHNESS	破壊靱性
FRICTION COEFFICIENT	摩擦係数
HYDRODYNAMIC RADIUS	流体力学半径
IMPACT STRENGTH	衝撃強度
INTERFACIAL TENSION	界面張力
LOSS MODULUS	損失係数
POISSON RATIO	ポアソン比
P-WAVE VELOCITY	P波速度
RESIDUAL STRESS	残留応力
SHEAR MODULUS	剛性率
SHEAR STRENGTH	せん断強度
STORAGE MODULUS	貯留係数
SURFACE TENSION	表面張力
S-WAVE VELOCITY	S波速度
TEAR STRENGTH	引裂強度
TENSILE STRENGTH	引張強度
THERMAL ANALYSIS	熱分析
THERMAL CONDUCTIVITY	熱伝導性

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値 (ETAG)

THERMAL EXPANSION COEFFICIENT	熱膨張係数
THERMAL FATIGUE	熱疲労
WEAR RATE	摩耗率
材料 (電気)	
BREAKDOWN VOLTAGE	破壊電圧
DIELECTRIC CONSTANT	誘電率
DIELECTRIC LOSS	誘電損失
DIELECTRIC STRENGTH	絶縁耐力
PIEZOELECTRIC COEFFICIENT	圧電係数
材料 (温度・硬度)	
BRITTLE TEMPERATURE	脆化温度
GLASS WORKING TEMPERATURE	ガラス作業温度
HARDNESS	硬度
MELT FLOW INDEX	メルトフローインデックス
MICROHARDNESS	微小硬度
SOFTENING POINT	軟化点
VISCOSITY	粘性率
YOUNG'S MODULUS	ヤング率
材料 (取扱温度)	
FLASH POINT	引火点
IGNITION POINT	発火点
材料 (形状・透過性)	
PERMEABILITY	透過性
PORE SIZE	孔径
POROSITY	多孔性 (ポロシティー)
PARTICLE SIZE	粒子径
SPECIFIC SURFACE AREA	比表面積
材料 (ポリマー)	
MOLECULAR WEIGHT (POLYMERS)	分子量 (ポリマー)
MOLECULAR WEIGHT DISTRIBUTION	分子量分布
REACTIVITY RATIO IN POLYMERIZATION	重合反応率
原子/分子構造	
BAND GAP	バンドギャップ
BOND ANGLE	結合角
BOND LENGTH	結合長
CRYSTAL LATTICE PARAMETERS	結晶格子パラメータ
CRYSTAL STRUCTURE	結晶構造
CRYSTALLIZATION TEMPERATURE	結晶化温度
ELECTRON AFFINITY	電子親和力
ELEMENTARY PARTICLE LIFETIME	素粒子寿命

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値 (ETAG)

ELEMENTARY PARTICLE MASS	素粒子質量
IONIZATION POTENTIAL	イオン化ポテンシャル
MOLECULAR STRUCTURE	分子構造
MOLECULAR ELECTRIC DIPOLE MOMENT	分子電気双極子モーメント
NUCLEAR BINDING ENERGY	核結合エネルギー
NUCLEAR ENERGY LEVEL	核エネルギーレベル
NUCLEAR TRANSITION PROBABILITY	核遷移確率
RADIUS OF GYRATION	回転半径
液体・溶液・化学反応	
ACID NUMBER	酸価
ACID/BASE DISSOCIATION CONSTANT (KA/KB)	酸・塩基解離定数
CRITICAL MICELLE CONCENTRATION	臨界ミセル濃度
CLOUD POINT	曇点
DISSOCIATION CONSTANT	解離定数
LOGD	pH を考慮したオクタノール-水分配係数の対数値
LOGP	オクタノール-水分配係数の対数値
PARTITION COEFFICIENT	分配係数
POTENTIAL OF ELECTRODE REACTION	電極反応の電位
SAPONIFICATION NUMBER	鹼化価
SOLUBILITY	溶解度
VAPOR PRESSURE/VOLATILITY	蒸気圧/揮発性
WATER SORPTION CAPACITY	水収着容量
相変化	
BOILING POINT	沸点
DENSITY	密度
DIFFUSION COEFFICIENT	拡散係数
FREEZING POINT	凝固点
GLASS TRANSITION TEMPERATURE	ガラス転移温度
HEAT CAPACITY	熱容量
LIQUID CRYSTAL TRANSITION TEMPERATURE	液晶転移温度
MELTING POINT	融点
PHASE DIAGRAM	相図
SUBLIMATION TEMPERATURE	昇華点
TRIPLE POINT	三重点
熱力学	
DEBYE TEMPERATURE	デバイ温度
ENTHALPY	エンタルピー
ENTROPY	エントロピー
FORMATION ENTHALPY	生成エンタルピー

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値 (ETAG)

FORMATION ENTROPY	生成エントロピー
FUSION ENTHALPY	融解エンタルピー
FUSION ENTROPY	融解エントロピー
GIBBS FREE ENERGY	ギブス自由エネルギー
HELMHOLTZ FREE ENERGY	ヘルムホルツ自由エネルギー
音・音波	
ACOUSTIC IMPEDANCE	音響インピーダンス
SOUND ATTENUATION COEFFICIENT	音減衰係数
SOUND VELOCITY	音速
電気	
ELECTRIC CONDUCTANCE AND ELECTRIC RESISTANCE	電気伝導性および電気抵抗
ELECTRIC CURRENT-POTENTIAL CURVE	電流電位曲線
SUPERCONDUCTIVITY	超伝導性
磁性	
CURIE TEMPERATURE	キュリー温度
HALL EFFECT COEFFICIENT	ホール効果係数
MAGNETIC ANISOTROPY	磁気異方性
MAGNETIC COERCIVITY	磁気保磁力
MAGNETIC DOMAIN (WALL LENGTH ENERGY ETC.)	磁区 (壁長 エネルギー など)
MAGNETIC MOMENT	磁気モーメント
MAGNETIC SUSCEPTIBILITY	磁化率
MAGNETIZATION	磁化
MAGNETOELASTIC COUPLING COEFFICIENT	磁気弾性結合係数
MAGNETORESISTANCE	磁気抵抗
MAGNETOSTRICTIVE CONSTANT	磁気ひずみ定数
MARTENSITIC TRANSITION TEMPERATURE	マルテンサイト転移温度
REMANENCE	残留磁気
光学	
FARADAY EFFECT	ファラデー効果
HAZE	曇価 (ヘイズ)
KERR EFFECT (MAGNETOOPTICAL)	カー効果 (光磁気)
LIGHT SCATTERING	光散乱
OPTICAL ROTATION	旋光度
OPTICAL ROTATORY POWER	旋光性
REFRACTIVE INDEX	屈折率
BIREFRINGENCE	複屈折
NONLINEAR OPTICAL SUSCEPTIBILITY	非線形光感受性
放射線	
BETA DECAY REACTION ENERGY	ベータ崩壊反応エネルギー
DECAY ENERGY (Q-VALUE)	崩壊エネルギー (Q 値)

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値 (ETAG)

HALF-LIFE (RADIONUCLIDES)	半減期 (放射性)
RADIATION ATTENUATION/TRANSMISSION COEFFICIENT	放射線減衰/伝達係数
生物・毒性	
ADME (ABSORPTION DISTRIBUTION METABOLISM EXCRETION)	ADME (吸収・分布・代謝・排泄)
ALLELE FREQUENCY AND HETEROZYGOSITY	対立遺伝子頻度とヘテロ接合性
BIOCONCENTRATION FACTOR	生物濃縮係数 (BCF)
DISEASE-RELATED MUTATIONS	病気に関連する変異
DRUG TARGETS	医薬品ターゲット
FUNCTIONAL SITES	機能部位
GENETIC MAPPING	遺伝子マップ
GENETIC POLYMORPHISM	遺伝子型多型
HALF-LIFE (BIOLOGICAL)	半減期 (生物的)
HUMAN DISEASE-RELATED MUTATIONS	人の病気に関連した変異
LC50	50% 致死濃度 (LC ₅₀)
LD50	50% 致死量 (LD ₅₀)
MINIMUM INHIBITORY CONCENTRATION	最小発育阻止濃度
NOAEL/LOAEL	NOAEL/LOAEL 値
NON-HUMAN ANIMAL DISEASE-RELATED MUTATIONS	非人間(動物)の病気に関連した変異
PLANT DISEASE-RELATED MUTATIONS	植物の病気に関する変異
POST-TRANSLATIONAL PROTEIN MODIFICATIONS	翻訳後のたんぱく質の修飾
SUBCELLULAR LOCALIZATIONS	細胞内局在性
TOXIC EQUIVALENCE FACTORS	毒性等価係数 (TEF)

詳細は 右記 URL を参照 : <http://www.cas.org/support/stngen/stndoc/properties.html>
(Tagged Experimental Properties in REGISTRY (PDF))

A REGISTRY ファイル

検索例 1

■ 検索例 1: イソブチルビニルエーテルの物性値 (融点, 沸点, 密度) を調査する。



- ・ 無料の表示形式 FA や ETAGFULL で物性の存在を確認してから, 有料の表示形式を用いる
- ・ 個別の物性コードで表示するより, 目的の物性を含む EPROP, PPROP などの定型表示形式で表示するとよい。

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> E ISOBUTYL VINYL ETHER/CN ← 名称を EXPAND する

```
E1      1      ISOBUTYL VANADATE(V)/CN
E2      1      ISOBUTYL VANILLATE/CN
E3      1 --> ISOBUTYL VINYL ETHER/CN
E4      1      ISOBUTYL VINYL ETHER HOMOPOLYMER/CN
E5      1      ISOBUTYL VINYL ETHER HYDROCHLORIDE/CN
:
```

=> S E3 ← E 番号を検索する (680 円)

```
L1      1 "ISOBUTYL VINYL ETHER"/CN
```

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)

```
L1  1 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2009 ACS on STN
IN  Propane, 1-(ethenyloxy)-2-methyl-
MF  C6 H12 O
CI  COM
```

i-BuO-CH=CH₂

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> D FA ETAGFULL ← この物質についてどんな物性情報があるか確認する (無料)

```
L1  ANSWER 1 OF 1  REGISTRY  COPYRIGHT 2009 ACS on STN
```

Available Properties (PRFA)

```
CODE  | PROPERTY
=====+=====
```

Experimental Data

```
BP      Boiling Point
DEN     Density
MP      Melting Point
RI      Refractive Index
SPEC    Carbon-13 NMR Spectra
SPEC    IR Absorption Spectra
SPEC    Mass Spectra
SPEC    Proton NMR Spectra
SPEC    Raman Spectra
ETAG    Experimental Tags
```

FA 表示形式

目的の物性があることがわかった
Experimental Data 中の SPEC, ETAG 以外の
物性コードは, EPROP 表示形式で,
まとめて表示することができる。

A REGISTRY ファイル

検索例 1

Predicted Data

BCF Bioconcentration Factor
 BP Boiling Point
 DEN Density
 FP Flash Point
 FRB Freely Rotatable Bonds
 HAC H acceptors
 HD H donors
 HDAS Hydrogen Donors/Acceptors Sum
 HVAP Enthalpy of Vaporization
 ISLB.MASS Mass Intrinsic Solubility
 ISLB.MOL Molar Intrinsic Solubility
 KOC Koc
 LOGD logD
 LOGP logP
 MVOL Molar Volume
 MW Molecular Weight
 PSA Polar Surface Area
 SLB.MASS Mass Solubility
 SLB.MOL Molar Solubility
 VP Vapor Pressure

Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
Boiling Point	(1) CAS
Enthalpy	(2) CAS
IR Spectra	(1) CAS
Mass Spectra	(3) CAS
NMR Spectra	(4) IC
Potential of Electrode Reaction	(5) CAS
Proton NMR Spectra	(1) CAS
Proton NMR Spectra	(4) IC
Reactivity Ratio In Polymerization	(6) CAS
Refractive Index	(1) CAS

ETAGFULL
表示形式

ETAGFULL 表示形式は、物性データは表示できないが、その物性が収録されている文献がわかる

- (1) Oparina, L. A.; Russian Journal of Organic Chemistry 2005 V41(5) P656-660 CAPLUS
 (2) Pre, P.; Fuel Processing Technology 2002 V77-78, P345-351 CAPLUS
 (3) Meurer, E. C.; International Journal of Mass Spectrometry 2001 V210/211(1-3) P469-482 CAPLUS
 (4) Afonin, A. V.; Zhurnal Organicheskoi Khimii 1991 V27(1) P161-70 CAPLUS
 (5) Yamashita, Toshiaki; Tetrahedron 2006 V63(2) P374-380 CAPLUS
 (6) Sugihara, Shinji; Macromolecules 2004 V37(5) P1711-1719 CAPLUS

See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.

=> D EPROP

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2009 ACS on STN

Experimental Properties (EPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Boiling Point (BP)	83 deg C		(1) CAS

A REGISTRY ファイル

検索例 1

Boiling Point (BP)	83 deg C		(2)	SRC
Boiling Point (BP)	82.98 deg C	Press: 760 Torr	(3)	CAS
Boiling Point (BP)	82.9-83.2 deg C		(4)	CAS
Boiling Point (BP)	82.0-82.5 deg C		(5)	CAS
Boiling Point (BP)	81-82 deg C		(6)	CAS
Boiling Point (BP)	81-82 deg C		(7)	CAS
Boiling Point (BP)	78-83 deg C		(8)	CAS
Boiling Point (BP)	30-32 deg C	Press: 12 Torr	(7)	CAS
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(9)	WSS
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(10)	AIST
Density (DEN)	0.7693 g/cm**3	Temp: 20 deg C	(5)	CAS
Density (DEN)	0.7683 g/cm**3	Temp: 20 deg C	(3)	CAS
Density (DEN)	0.7644 g/cm**3	Temp: 25 deg C	(4)	CAS
IR Absorption Spectra	Spectrum		(10)	AIST
IR Absorption Spectra	Spectrum		(11)	BIORAD
IR Absorption Spectra	Spectrum		(12)	WSS
Mass Spectra	Spectrum		(12)	WSS
Mass Spectra	Spectrum		(10)	AIST
Melting Point (MP)	-112 deg C		(4)	CAS
Melting Point (MP)	-112 deg C		(2)	SRC
Proton NMR Spectra	Spectrum		(10)	AIST
Raman Spectra	Spectrum		(10)	AIST
Refractive Index (RI)	1.40263	Temp: 20 deg C	(3)	CAS
Refractive Index (RI)	1.39656	Temp: 20 deg C	(3)	CAS
		Wavlen: 589.3 nm		
Refractive Index (RI)	1.3960	Temp: 20 deg C	(5)	CAS
		Wavlen: 589.3 nm		
Refractive Index (RI)	1.3941	Temp: 25 deg C	(13)	CAS
		Wavlen: 589.3 nm		
Refractive Index (RI)	1.39398	Temp: 20 deg C	(3)	CAS
Refractive Index (RI)	1.3938	Temp: 25 deg C	(4)	CAS
		Wavlen: 589.3 nm		

- (1) Nakano, Senji; JP 38001490 1963 CAPLUS
- (2) "PhysProp" data were obtained from Syracuse Research Corporation of Syracuse, New York (US)
- (3) Voronkov, M. G.; Zhurnal Obshchei Khimii 1950 V20, P2060-3 CAPLUS
- (4) Schildknecht, C. E.; Journal of Industrial and Engineering Chemistry (Washington, D. C.) 1947 V39, P180-6 CAPLUS
- (5) Shostakovskii, M. F.; Zhurnal Obshchei Khimii 1943 V13, P428-35 CAPLUS
- (6) Favorskii, A. E.; Zhurnal Obshchei Khimii 1943 V13, P1-20; English summary, 19 CAPLUS
- (7) Wittig, Georg; Berichte der Deutschen Chemischen Gesellschaft [Abteilung] B: Abhandlungen 1944 V77B, P306-14 CAPLUS
- (8) Smith, Curtis W.; Journal of the American Chemical Society 1951 V73, P5267-70 CAPLUS
- (9) Kalabin, G. A.; Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Khimicheskaya 1975(3) P576-81 CAPLUS
- (10) "Integrated Spectral Data Base System of Organic Compounds" data were obtained from the National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (Japan)
- (11) Infrared spectral data from the Bio-Rad/Sadtler IR Data Collection was obtained from Bio-Rad Laboratories, Philadelphia, PA (US). Copyright (C) Bio-Rad Laboratories. All Rights Reserved.
- (12) Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)
- (13) Pino, P.; IT 665055 1964 CAPLUS