

STN おさらいセミナー

物性の調べ方

～ REGISTRY ～

JAICI
化学情報協会

2014年8月

サービス中止になったファイルを除き再編集
しています。件数は開催時のままです。

1

本日の内容

- ・ 概要
- ・ 物性検索
- REGISTRY ファイル

物性情報

- ・ 物性情報とは
 - － 物質の示す物理的・化学的性質の情報



引火点
爆発上限
など



誘電率
絶縁耐力
など



沸点, 融点
溶解度
など



剛性率
体積弾性率
など

STN の物性情報

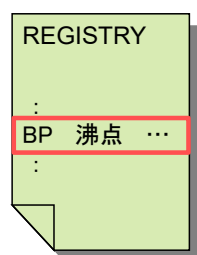
- ・ ファイル, 物性の種類によって,
収録の形式が異なる
 - － 物性の**数値** (ファクトデータ) を収録
 - － 物性値が記載されている**文献情報**を収録

- － 特許全文などの**テキスト**中に記載された**数値データ**を検索できる機能

ファイルの選択 ①

- ・ サマリーシートで目的の物性・毒性に関する検索フィールドが存在するかを確認する

(例)
沸点の検索



REGISTRY
ファイルで
検索できる

日本語サマリーシート

<https://www.jaici.or.jp/stn-ip-protection-suite/cas-stnext/documents/>

サマリーシート (抜粋)

REGISTRY のサマリーシート

■ 物性検索フィールド

SEARCH コード	内容	デフォルト 単位	入力例	DISPLAY コード
/BP	沸点 ⁵⁾	deg C	S 150-155/BP	BP
/BP.P	沸点測定時の圧力 ⁵⁾	Torr	S 166/BP (P) 3/BP.P	BP
/DEN	密度 ⁵⁾	g/cm**3	S DEN>=1.002	DEN
/DEN.T	密度測定時の温度 ⁵⁾	deg C	S 1.01-1.02/DEN (P) 20/DEN.T	DEN
/DEN.P	密度測定時の圧力 ⁵⁾	Torr	S 800/DEN.P	DEN

沸点の
フィールドは
/BP

デフォルト
単位は℃

数値範囲で
検索可能

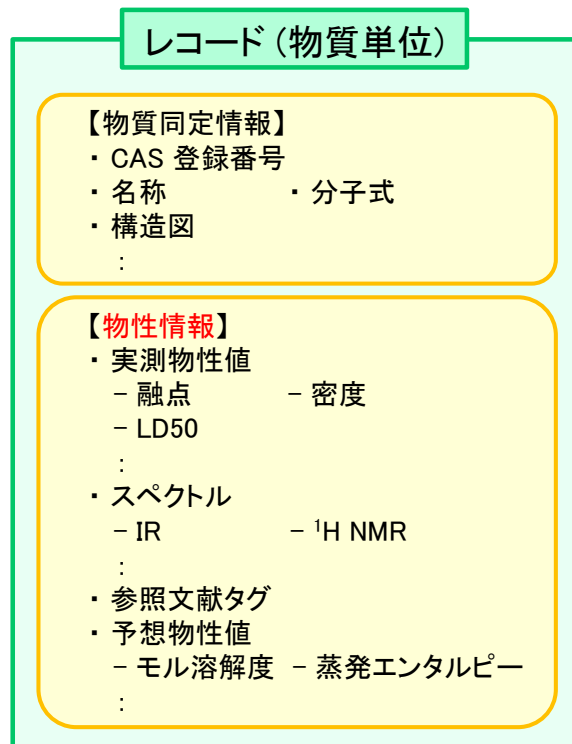
ファイルの選択 ②

- ・ サマリーシートに目的の物性・毒性に関する検索フィールドがないときは…
 - 参照文献情報を検索する (REGISTRY ファイル)

REGISTRY ファイル概要

- ・ 化学物質情報，物性データを収録
 - 物性データ：実測物性値，予想物性値など
- ・ 有機・無機化合物，ポリマー，配列などを収録した世界最大の物質データベース
 - 製作機関：CAS (Chemical Abstracts Service)
 - 収録件数：1 億 5,500 万件以上
 - 収録期間：1800 年初頭～
 - 更新頻度：毎日

レコード構成



- 物質同定情報, 物性情報を収録
- 実測物性値の他に, スペクトルのグラフィック, 予想物性値も収録
- LD50 や生物濃縮係数などの毒性関連情報も収録

REGISTRY ファイルの物性データ

	実際に測定されたデータ			ソフトウェアで計算したデータ
	実測物性値	参照文献タグ	スペクトルデータ	予想物性値
収録形態	数値	文献情報	グラフィック	数値
物性の数	13 種類	約 200 種類 *	11 種類	20 種類
収録物質数	3,000,000	3,740,000	930,000	75,300,000
表示形式	EPROP	ETAG	SPEC	PPROP
	PROP			
収録対象	単成分・多成分物質			単成分物質

* REGISTRY ファイルで EXPAND を実行して確認できる

実測物性値 (13 種類)

物性コード	内容	物性コード	内容
BP *	沸点	MM	磁気モーメント
DEN *	密度	MP	融点
ECON	コンダクタンス	ORP	旋光度
ECND	電気伝導率	RI	屈折率
ERES	電気抵抗	TG	ガラス転移温度
EREST	比電気抵抗	TS	引張強度
LD50	50% 致死量		

* 予想物性値にも収録されている

– CAplus ファイルで索引された物質に関する物性情報を収録

予想物性値 (20 種類)

物性コード	内容	物性コード	内容
BCF	生物濃縮係数	KOC	有機炭素吸着係数
BP *	沸点	LOGD	pH を考慮したオクタノール - 水分配係数の対数値
DEN *	密度	LOGP	オクタノール - 水分配係数の対数値
FP	引火点	MW	分子量
FRB	回転可能な結合数	MVOL	モル体積
HAC	水素受容基数	PKA	酸塩基解離定数 (pKa)
HD	水素供与基数	PSA	極性表面積
HVAP	蒸発エンタルピー	SLB.MASS	質量溶解度
ISLB.MASS	固有質量溶解度	SLB.MOL	モル溶解度
ISLB.MOL	固有モル溶解度	VP	蒸気圧

* 実測物性値にも収録されている

参照文献タグ (約 200 種類)

- 数値データではなく、該当の物性に関連する**文献情報**のみが表示される

Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
Acid/Base Dissociation Constant (Ka/Kb) 8 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(1) CAS
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion)	(2) CAS
Carbon-13 NMR Spectra 8 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(3) CAS
Crystal Structure 2 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(4) CAS

実測物性値, 予想物性値,
スペクトルの物性情報が
参照文献タグにも収録され
ている場合がある

- (1) Sharnin, Valentin A.; Inorganica Chimica Acta 2009 V362(2) P437-442 [CAPLUS](#)
 (2) Reiche, Ines; Nephrology, Dialysis, Transplantation 2011 V26(1) P276-282 [CAPLUS](#)
 (3) Angeles, Norma A.; Journal of the Brazilian Chemical Society 2010 V21(5) P905-908 [CAPLUS](#)

参照文献タグ (約 200 種類)

- 物性の種類は /ETAG で EXPAND して確認できる

=> FILE REGISTRY

=> E A/ETAG

**** START OF FIELD ****

E3	0	--> A/ETAG	
E4	890	ACID NUMBER/ETAG	← 酸価
E5	12253	ACID/BASE DISSOCIATION CONSTANT (KA/KB)/ETAG	← 酸・塩基解離定数
:			
E16	15218	BOILING POINT/ETAG	← 沸点
:			
E191	7112	THERMAL CONDUCTIVITY/ETAG	← 熱伝導率
E192	5959	THERMAL EXPANSION COEFFICIENT/ETAG	← 熱膨張係数
:			
E194	212	TOXIC EQUIVALENCE FACTORS/ETAG	← 毒性等価係数 (TEF)
:			

表示形式

表示形式	内容
IDE	物質同定情報 (デフォルト)
FIDE	物質同定情報と物性情報
PROP	すべての物性値 (スペクトルはリンクのみ)
EPROP	実測物性値
PPROP	予想物性値
ETAG	参照文献タグ
SPEC	スペクトル (グラフィック)
FA	フィールドの存在

物性情報を含む
表示形式

表示のポイント

- ・ **FA** 表示形式でフィールドの存在をあらかじめ確認できる
=> D FA (フィールドの存在を表示)
- ・ すべての物性値をまとめて表示できる
=> D PROP (全物性値を表示)
- ・ 参照文献タグをすべて表示したい場合は **ETAGFULL** 表示形式を使用する
=> D ETAGFULL (参照文献タグをすべて表示)

表示例 (IDE FA 表示形式)

RN 98-92-0 REGISTRY
 :
 CN Nicotinamide (8CI)
 :

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT
 :

Available Properties (PRFA)

CODE | PROPERTY
 =====

Experimental Data

実測物性値

BP Boiling Point
 DEN Density
 LD50 Median Lethal Dose
 :

TS Tensile Strength
 ETAG Experimental Tags

参照文献タグ

Predicted Data

予想物性値

BCF Bioconcentration Factor
 BP Boiling Point
 :

IDE
 物質同定情報

FA
 フィールドの存在

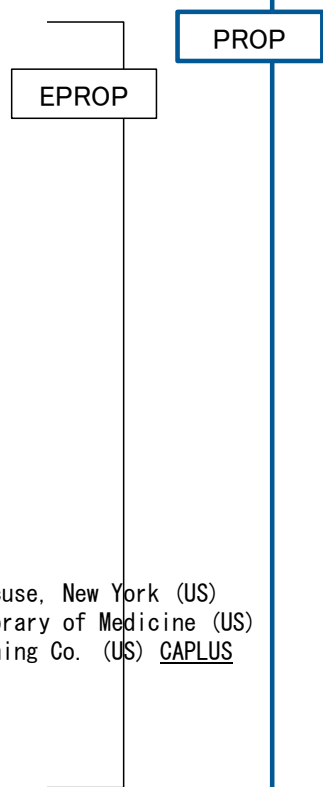
表示例 (PROP 表示形式)

Experimental Properties (EPROP)

実測物性値

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Boiling Point (BP)	157 deg C		(1) SRC
Boiling Point (BP)	157 deg C	Press: 0.0005 Torr	(2) NLM
Boiling Point (BP)	150-160 deg C	Press: 0.0005 Torr	(3) APC
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(4) WSS
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(5) AIST
:			
Median Lethal Dose (LD50)	200 mg/kg	Orgn: mouse Rte: intraperitoneal	(11) CAS
:			
Melting Point (MP)	131-132 deg C		(15) CAS
:			
Nitrogen-15 NMR Spectra	Spectrum		(42) WSR
:			

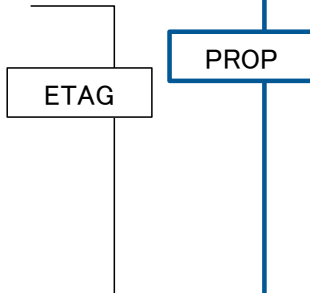
- (1) "PhysProp" data were obtained from Syracuse Research Corporation of Syracuse, New York (US)
- (2) "Hazardous Substances Data Bank" data were obtained from the National Library of Medicine (US)
- (3) "Drugs - Synonyms and Properties" data were obtained from Ashgate Publishing Co. (US) CAPLUS
- (4) Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)



Experimental Property Tags (ETAG)

参照文献タグ

PROPERTY	NOTE
Acid/Base Dissociation Constant (Ka/Kb) 8 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(1) CAS
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion)	(2) CAS
Carbon-13 NMR Spectra 8 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(3) CAS
Crystal Structure 2 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(4) CAS
Dissociation Constant	(5) IC
LC50	
LD50 1 more tag shown in the MAX or	
LOGD	
LOGP 4 more tags shown in the MAX or	
Solubility 4 more tags shown in the MAX or	
Surface Tension	
Thermal Analysis 3 more tags shown in the	
Two-Dimensional NMR Spectra	
(1) Sharnin, Valentin A.; Inorganic Chemistry 2008, 46, 1111-1112	(20) Borba, Ana; Physical Chemistry Chemical Physics 2008 V10(46) P7010-7021 CAPLUS
(2) Reiche, Ines; Nephrology, Dialysis and Transplantation 2008, 23, 1111-1112	(21) Hoekelk, Tuncer; Acta Crystallographica, Section E: Structure Reports Online 2010 V66(9) Pm1135-m1136 CAPLUS
(3) Angeles, Norma A.; Journal of Inorganic Chemistry 2008, 2008, 1111-1112	(22) Zhang, Si-Wei; Journal of the American Chemical Society 2013 V135(50) P18981-18989 CAPLUS
(4) Borba, Ana; Physical Chemistry Chemical Physics 2008 V10(46) P7010-7021 CAPLUS	



PROP (または ETAG) 表示形式では、複数のデータがある場合は一つの収録源のみが表示される。
 すべて表示するには ETAGFULL 表示形式を利用する。

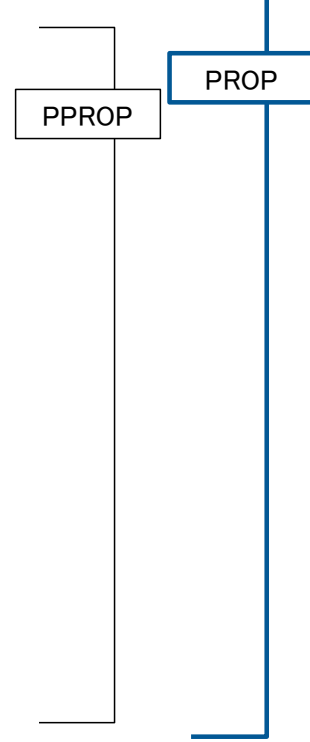
PROPERTY	NOTE
Acid/Base Dissociation Constant (Ka/Kb)	(1) CAS
Crystal Structure	(20) CAS
Crystal Structure	(21) CAS
Crystal Structure	(22) CAS
Dissociation Constant	(23) IC

Experimental Property Tags (ETAG)

Predicted Properties (PPROP)

予想物性値

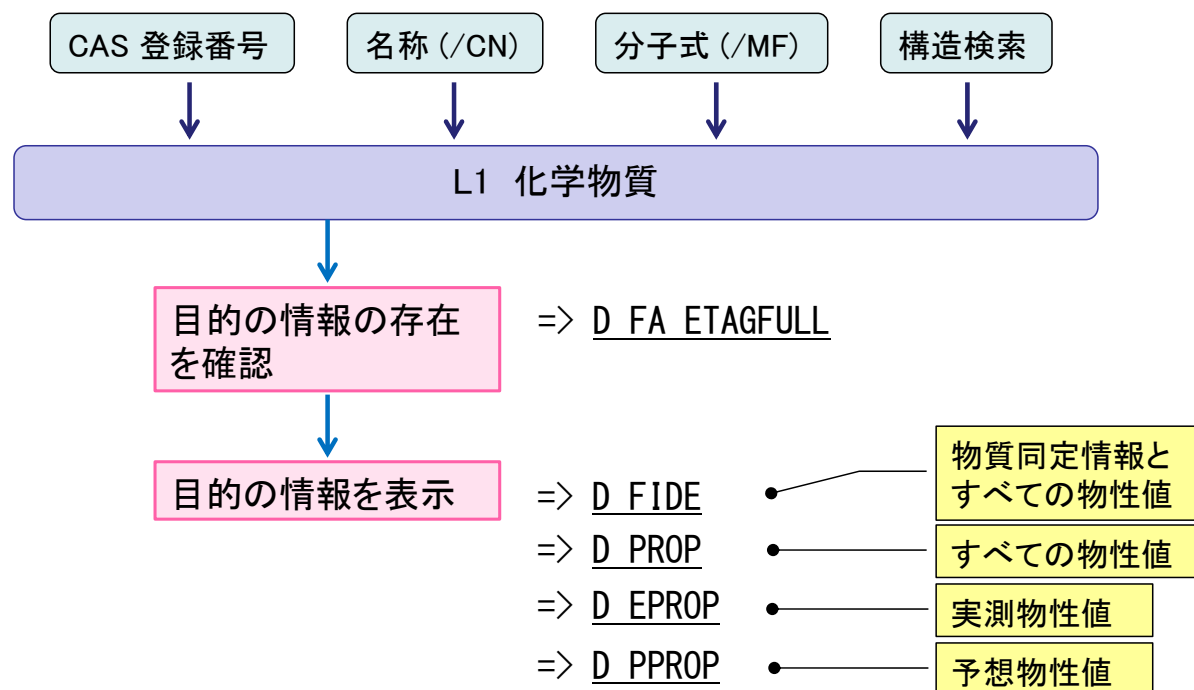
PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 2 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 3 25 deg C	(1)
Boiling Point (BP)	334.4+/-15.0 deg C	760 Torr	(1)
Density (DEN)	1.204+/-0.06 g/cm**3	20 deg C	(1)
Enthalpy of Vap. (HVAP)	57.74+/-3.0 kJ/mol	760 Torr	(1)
Flash Point (FP)	156.0+/-20.4 deg C		(1)
Freely Rotatable Bonds (FRB)	1		(1)
H acceptors (HAC)	3		(1)
H donors (HD)	2		(1)



This substance may exist in multiple tautomeric forms. The predicted property values in this table are calculated based upon the displayed form and may therefore differ from experimental values based on the actual tautomeric ratio at equilibrium.

(1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02 ((C) 1994-2014 ACD/Labs)

検索の流れ - 目的の物質の物性を調査



検索例 1

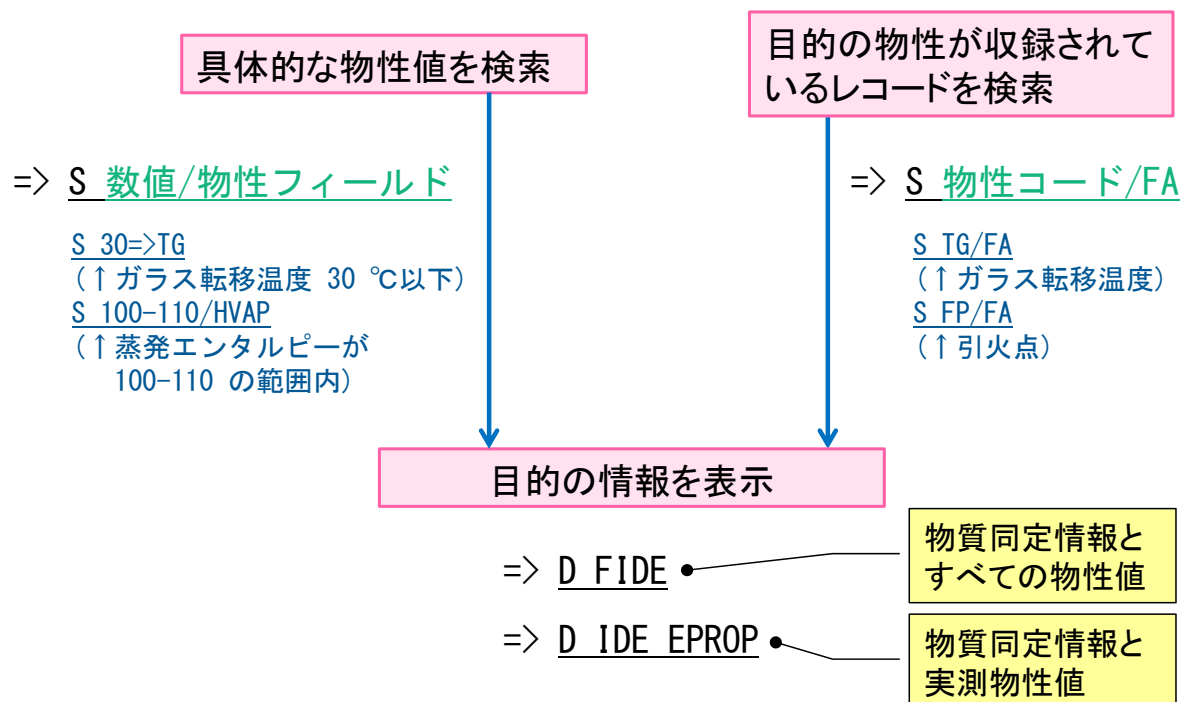
三臭化ホウ素 (BBr₃) の物性データを検索する



検索のポイント

- ・ 名称や分子式などで三臭化ホウ素を検索する
- ・ FA 表示形式でフィールドの存在を確認する
- ・ PROP 表示形式で実測物性値, 予想物性値, 参照文献タグをまとめて表示する

検索の流れ - 物性からの調査



検索例 2

屈折率が 1.6 以上で、主鎖中にエステルおよびチオエーテル構造を持つポリマーを検索する



検索のポイント

- ・ 屈折率は /RI で検索する (数値検索可能)
- ・ ポリマー主鎖中の官能基は、ポリマー分類用語 (/PCT) で検索する
 - POLYESTER/PCT (ポリエステル)
 - POLYTHIOETHER/PCT (ポリチオエーテル)

【検索例 1】 三臭化ホウ素 (BBr₃) の物性データを検索する

=> FILE REGISTRY

← *REGISTRY* ファイルに入る

=> E TRIBROMOBORANE/CN 5

```
E1      1      TRIBROMOBISMUTHINE/CN
E2      1      TRIBROMOBISPHENOL A/CN
E3      1 -->  TRIBROMOBORANE/CN
E4      1      TRIBROMOBORANE COMPD. WITH METHYLPHOSPHINE (1:1)/CN
E5      1      TRIBROMOBORANE COMPD. WITH PHOSPHINE (1:1)/CN
```

=> S E3

← 三臭化ホウ素を化学物質名で検索する

L1 1 TRIBROMOBORANE/CN

=> D FA

← フィールドの存在を表示する

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN

Available Properties (PRFA)

CODE | PROPERTY

Experimental Data ●

実測物性値

```
BP      Boiling Point
DEN     Density
MP      Melting Point
RI      Refractive Index
SPEC    Boron-11 NMR Spectra
ETAG    Experimental Tags ●
```

参考文献タグ

Predicted Data ●

予想物性値

```
BCF     Bioconcentration Factor
BP      Boiling Point
DEN     Density
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
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
```

フィールドの存在

各レコードに収録されている物性を
あらかじめ確認できる

Experimental Properties (EPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Boiling Point (BP)	96-97 deg C		(1) CAS
Boiling Point (BP)	91.3 deg C		(2) CAS
Boiling Point (BP)	91 deg C		(3) NIOSH
Boiling Point (BP)	90.1 deg C	Press: 740 Torr	(4) CAS
Boiling Point (BP)	90 deg C		(5) NLM
Boiling Point (BP)	90 deg C		(6) SRC
Boiling Point (BP)	89.8 deg C	Press: 760 Torr	(7) IC
Boiling Point (BP)	12 deg C	Press: 760 Torr	(8) CAS
Boron-11 NMR Spectra	Spectrum		(9) WSS
Density (DEN)	2.7 g/cm**3		(3) NIOSH
Density (DEN)	2.691 g/cm**3		(10) CAS
Density (DEN)	2.6431 g/cm**3	Temp: 18.4 deg C	(5) NLM
Melting Point (MP)	2507 deg C		(11) CAS
Melting Point (MP)	-46.0 deg C		(5) NLM
Melting Point (MP)	-46 deg C		(3) NIOSH
Melting Point (MP)	-46 deg C		(6) SRC
Refractive Index (RI)	1.5312	Wavlen: 589.3 nm	(10) CAS
Refractive Index (RI)	1.5312	Temp: 16.3 deg C	(5) NLM
		Wavlen: 589.3 nm	

実測物性値

← 沸点

実測の数値が収録されている

← ¹¹B NMR スペクトル

← 密度

← 融点

← 屈折率

Spectra may be displayed by clicking the links in the property table, or in bulk using the SPEC or MAX formats.

- (1) Coleman, Ralph A.; Journal of the American Chemical Society 1954 V76, P4534-8 [CAPLUS](#)
- (2) Gueilleron, Jean; Annali di Chimica Applicata 1944 V19, P459-86 [CAPLUS](#)
- (3) "International Chemical Safety Cards" data were obtained from the National Institute for Occupational Safety and Health.
- (4) Anderson, Thomas F.; Journal of Chemical Physics 1936 V4, P703-7 [CAPLUS](#)
- (5) "Hazardous Substances Data Bank" data were obtained from the National Library of Medicine (US)
- (6) "PhysProp" data were obtained from Syracuse Research Corporation of Syracuse, New York (US)
- (7) Var'gin, V. V.; Vysokochistye Veshchestva 1990(5) P167-71 [CAPLUS](#)
- (8) Druce, P. M.; Chemical Communications (London) 1967(10) P486-7 [CAPLUS](#)
- (9) Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)
- (10) Pohland, E.; Zeitschrift fuer Anorganische und Allgemeine Chemie 1931 V201, P282-8 [CAPLUS](#)
- (11) Vasil'ev, A. M.; Trans. Kirov Inst. Chem. Tech. Kazan 1935(No. 4-5) P93-5 [CAPLUS](#)

Experimental Property Tags (ETAG)

← 参考文献タグ

PROPERTY	NOTE
Bond Angle	(1) CAS
Bond Length	(1) CAS
Boron-11 NMR Spectra	(2) CAS
Mass Spectra	(3) CAS
Photoelectron Spectra	(4) CAS
Potential of Electrode Reaction	(5) CAS
Proton NMR Spectra	(6) CAS
Raman Spectra	(2) CAS
1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats	
UV and Visible Absorption Spectra	(7) CAS
UV and Visible Emission/Luminescence Spectra	(8) CAS

参考文献タグ

参考文献タグは実測物性値が記載された文献の情報が収録されている

- (1) Mercier, Helene P. A.; Journal of Fluorine Chemistry 2004 V125(11) P1563-1578 [CAPLUS](#)
- (2) Mercier, Helene P. A.; Journal of the American Chemical Society 2004 V126(17) P5533-5548 [CAPLUS](#)
- (3) Hales, David A.; Journal of Physical Chemistry A 2007 V111(12) P2266-2275 [CAPLUS](#)
- (4) Mackie, R. A.; Chemical Physics 2003 V288(2-3) P211-240 [CAPLUS](#)
- (5) Celikkan, Hueseyin; Journal of Applied Electrochemistry 2009 V39(9) P1525-1533 [CAPLUS](#)
- (6) Lungwitz, Ralf; ChemPhysChem 2012 V13(7) P1910-1916 [CAPLUS](#)
- (7) Welch, Gregory C.; Journal of the American Chemical Society 2009 V131(31) P10802-10803 [CAPLUS](#)
- (8) Olander, Jenny; Chemical Vapor Deposition 2005 V11(6-7) P330-337 [CAPLUS](#)

Predicted Properties (PPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 2 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 3 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 4 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 5 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 6 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 7 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 8 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 9 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 10 25 deg C	(1)
Boiling Point (BP)	91.3+/-9.0 deg C	760 Torr	(1)
Density (DEN)	2.782+/-0.06 g/cm**3	20 deg C	(1)
		760 Torr	
Enthalpy of Vap. (HVAP)	30.50+/-0.0 kJ/mol	760 Torr	(1)
Freely Rotatable Bonds (FRB)	0		(1)
H acceptors (HAC)	0		(1)
H donors (HD)	0		(1)
Hydrogen Donors/Acceptors Sum (HDAS)	0		(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 1 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 2 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 3 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 4 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 5 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 6 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 7 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 8 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 9 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 10 25 deg C	(1)
LOGP (LOGP)	2.544+/-0.350	25 deg C	(1)
Mass Intrinsic Solubility (ISLB. MASS)	1.4 g/L	25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 1 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 2 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 3 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 4 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 5 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 6 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 7 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 8 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 9 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 10 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	Unbuffered Water	(1)
		pH 7.00	
		25 deg C	
Molar Intrinsic Solubility (ISLB. MOL)	0.0055 mol/L	25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 1 25 deg C	(1)

予想物性値

← 生物濃縮係数
計算値が収録されている

← 生物濃縮係数

← 沸点
← 密度

← 蒸発エンタルピー
← 回転可能な結合数
← 水素受容基数
← 水素供与基数
← 水素受容/供与基数の合計

← pH を考慮したオクタノール - 水分配係数の対数値

← オクタノール - 水分配係数の対数値
← 固有質量溶解度

← 質量溶解度

← 固有モル溶解度

← モル溶解度

Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 2 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 3 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 4 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 5 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 6 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 7 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 8 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 9 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 10 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	Unbuffered Water	(1)	
		pH 7.00		
		25 deg C		
Molar Volume (MVOL)	90.0+/-3.0 cm**3/mol	20 deg C	(1)	← モル体積
		760 Torr		
Molecular Weight (MW)	250.52		(1)	← 分子量
Polar Surface Area (PSA)	0.00 A**2		(1)	← 極性表面積
Vapor Pressure (VP)	6.13E+01 Torr	25 deg C	(1)	← 蒸気圧

(1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02
 ((C) 1994-2014 ACD/Labs)

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

【検索例 2】 屈折率が 1.6 以上で、主鎖中にエステルおよびチオエーテル構造を持つポリマーを検索する

REGISTRY ファイルのサマリーシート

■ 物性検索フィールド (続き)

SEARCH コード	内容	デフォルト 単位	入力例	DISPLAY コード
/RI	屈折率 ⁵⁾	none	S 1.427/RI	RI
/RI.T	屈折率測定時の温度 ⁵⁾	deg C	S 1.427/RI (P) 25/RI.T	RI
/RI.W	屈折率測定時の波長 ⁵⁾	nm	S 500-589.3/RI.W	RI

屈折率 (/RI) は数値検索できる

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> S 1.6<=RI
L1 7238 1.6<=RI

← 屈折率が 1.6 以上である物質を検索する

数値検索フィールドは範囲指定検索が可能

=> S POLYESTER/PCT AND POLYTHIOETHER/PCT
290361 POLYESTER/PCT
15823 POLYTHIOETHER/PCT
L2 4104 POLYESTER/PCT AND POLYTHIOETHER/PCT

← ポリエステルおよびポリチオエーテルのポリマー分類用語が付与されているポリマーを検索する

=> S L1 AND L2
L3 16 L1 AND L2

← L1 と L2 を AND 演算する

=> D 1 IDE EPROP

← 1 件目の物質同定情報、実測物性値を表示する

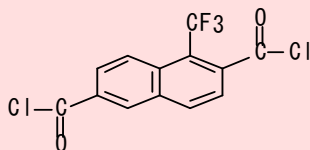
L3 ANSWER 1 OF 16 REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
RN 612090-08-1 REGISTRY
ED Entered STN: 03 Nov 2003
CN 2,6-Naphthalenedicarbonyl dichloride, 1-(trifluoromethyl)-, polymer with 2-fluoro-1,3-benzenedicarbonyl dichloride and 4,4'-thiobis[2-aminophenol] (9CI) (CA INDEX NAME)
MF (C13 H5 C12 F3 O2 . C12 H12 N2 O2 S . C8 H3 C12 F O2)x
CI PMS
PCT Polyamide, Polyamide formed, Polybenzoxazole, Polybenzoxazole formed, Polyester, Polyester formed, Polythioether
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS

CM 1

CRN 438202-09-6
CMF C13 H5 C12 F3 O2

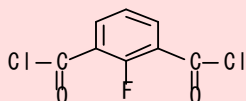
物質同定情報

ポリマー分類用語 (PCT) は、ポリマーの主鎖に存在する結合の種類に基づいて付与されるコード



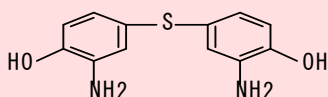
CM 2

CRN 91129-30-5
CMF C8 H3 Cl2 F O2



CM 3

CRN 22445-97-2
CMF C12 H12 N2 O2 S



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

Experimental Properties (EPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	NOTE
Refractive Index (RI)	1.626	(1) CAS

実測物性値

屈折率は 1.626

(1) Fujiwara, Makoto; JP 2003287634 A 2003 CAPLUS

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

■ 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

- そのほかの内容について（契約、住所・担当者変更など）

TEL 0120-151-462

FAX 03-5978-4090

E-mail customer@jaici.or.jp

JAICI
化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

サービス全般 TEL: 0120-151-462

E-mail: customer@jaici.or.jp

ヘルプデスク TEL: 0120-003-462

E-mail: support@jaici.or.jp