

# REGISTRY 検索テクニック 2013

**STN INTERNATIONAL**

リフレッシュセミナー

**JAICI**  
化学情報協会



## \* 目 次 \*

### A. 結合の属性 - ノーマライズド結合

結合属性 .....	1
結合属性の確認 .....	3
エグザクト結合とノーマライズド結合 .....	5
ノーマライズド結合の定義 .....	6
結合次数とヒットする物質 .....	10
作図のポイント .....	13
検索例 .....	15
参考 : STRUCTURE コマンド .....	20

### B. 特有の検索手法が必要な物質の検索

REGISTRY ファイルの収録物質 .....	21
表形式無機物質 (TIS) .....	23
定義の不完全な物質 (IDS) .....	32
組成不明, 組成不定, 複雑な反応生成物および生体物質 (UVCB) .....	51
概念語登録 (CTS) .....	52
一般式登録 (GRS) .....	56

### C. よくあるご質問

内容一覧 .....	61
よくあるご質問 1 .....	62
よくあるご質問 2 .....	64
よくあるご質問 3 .....	66
よくあるご質問 4 .....	68



## A 結合属性 - ノーマライズド結合

この章では、構造検索の時に必要な結合属性のノーマライズド結合についてご説明します。

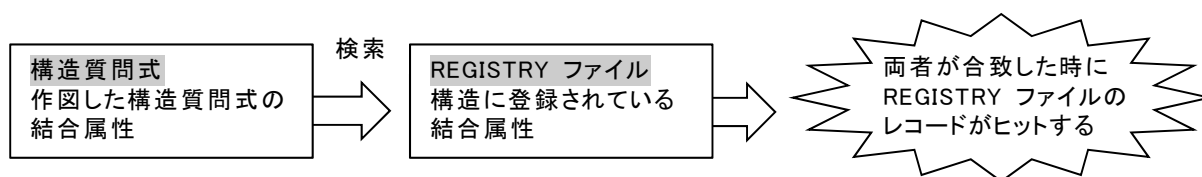


## 結合属性 - ノーマライズド結合

### 結合属性

#### ■ 結合属性

- ・ STN Express/STN on the Web で構造を作図すると、「結合属性」が指定される。
  - 「結合属性」の中でも「結合次数（エグザクト結合/ノーマライズド結合）」は、自動的に最適な指定になるため、通常は気にする必要はない。
  - しかし、これらの仕組みを理解しておく、構造を作図する時に注意すべき点が変わり、また、なぜ物質がヒットしたのか、ヒットしなかったのかを判断できるようになる。



#### ■ A 章の構成

- ・ 結合属性 (p.2)
- ・ 結合属性の確認 (p.3)
- ・ エグザクト結合とノーマライズド結合 (p.5)
- ・ ノーマライズド結合 (p.5~)
  - ノーマライズド結合の定義
    - ① 単結合と二重結合の交互結合 (p.6~7)
    - ② 互変異性結合 (p.8~9)
  - 結合次数とヒットする物質 (p.10~12)
  - 作図のポイント (p.13~14)
  - 検索例 (p.15~19)
- ・ 参考 : STRUCTURE コマンド (p.20)

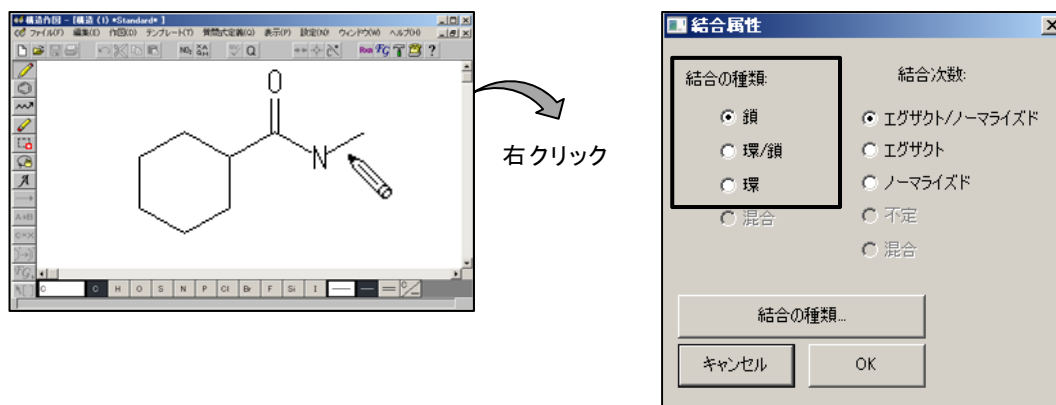


## 結合属性- ノーマライズド結合

### 結合属性

#### ■ 結合属性

- ・ **結合の種類** : デフォルトは、環上の結合が「環」、鎖上の結合が「鎖」である。
  - 作図した鎖結合が環の一部でもよい場合は、結合の種類を「環/鎖」に指定する。



- ・ **結合次数** : 「エグザクト結合」、「ノーマライズド結合」、「エグザクト/ノーマライズド結合」
  - STN Express/STN on the Web の構造作図ツールは、構造質問式からあらゆる可能性を考慮して、自動的に「結合次数」を指定する（結合属性画面で変更可能）。

結合次数	内容
エグザクト結合	描いた通りの結合 (p.5) (例) 単結合で描いた結合は単結合
ノーマライズド結合	詳細は後述 (p.5~)



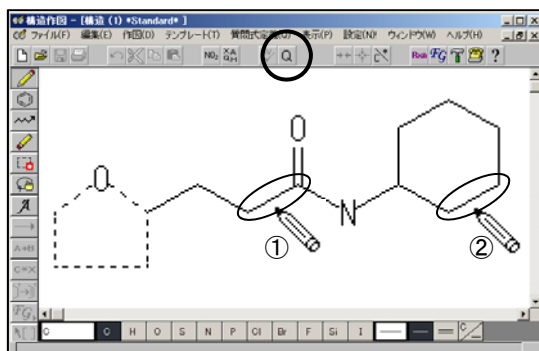


## 結合属性 - ノーマライズド結合

### 結合属性の確認

#### ■ 結合属性の確認（構造作図画面）

- ・ 作図画面上にある **Q** アイコンをクリックし、結合上にポインタを置くと、結合属性を確認できる。



環は非孤立/孤立

#### ■ 結合属性の確認（構造質問式の保存時）

- ・ 構造質問式を保存する時に、「構造質問式のチェック」にチェックをつけると、構造質問式のチェック画面が表示され、属性の詳細を確認できる。

## 結合属性 - ノーマライズド結合

### 結合属性の確認

#### ■ 結合属性の確認 (オンライン)

- ・ アップロードした構造質問式を D QUE コマンドで表示すると、構造図と属性が表示される。

- STN Express の場合は、「コマンドで修正可能な形式でアップロード」にチェックを入れ構造質問式をアップロードすると、属性が表示される。



- STN on the Web の場合は、自動的に属性が表示される。

=> FILE REGISTRY

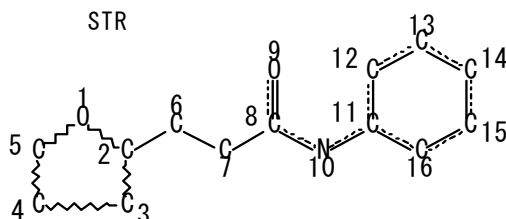
=>

Uploading C:\Users\%xxxxx%\Documents\STN Express 8.5\Queries\str1.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE

L1 STR



実線 : エグザクト結合 (—)  
点線 : ノーマライズド結合 (-----)  
波線 : 不定結合 (~~~~)

NODE ATTRIBUTES:

```

NSPEC IS R AT 1
NSPEC IS R AT 2
NSPEC IS R AT 3
NSPEC IS R AT 4
NSPEC IS R AT 5
NSPEC IS C AT 6
NSPEC IS C AT 7
NSPEC IS C AT 8
NSPEC IS C AT 9
NSPEC IS C AT 10
NSPEC IS R AT 11
NSPEC IS R AT 12
NSPEC IS R AT 13
NSPEC IS R AT 14
NSPEC IS R AT 15
NSPEC IS R AT 16
DEFAULT MLEVEL IS ATOM
MLEVEL IS CLASS AT 6 7 8 9 10
DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED
    
```

GRAPH ATTRIBUTES:

```

RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED
NUMBER OF NODES IS 16
    
```

STEREO ATTRIBUTES: NONE

表示	結合次数
A—A	単結合 (SE)
A=A	二重結合 (DE)
A≡A	三重結合 (T)
A~~~~A	不定結合 (U)
A-----A	単結合またはノーマライズド結合 (S)
A=A-----A	二重結合またはノーマライズド結合 (D)
A-----A	ノーマライズド結合 (N)
表示	結合の種類
A—A	鎖結合
A⊕A	環結合 (鎖結合を環結合に変更した場合)
A✳A	環または鎖結合 (鎖結合を環または鎖結合に変更した場合)

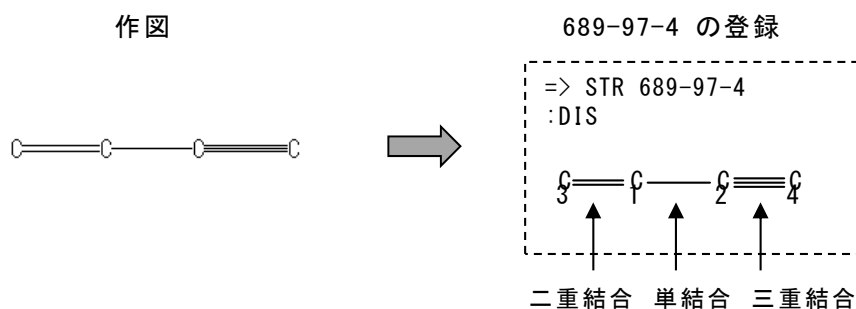
## 結合属性 - ノーマライズド結合

### エグザクト結合とノーマライズド結合

#### ■ エグザクト結合

- エグザクト結合とは、結合次数が正確に表現できる結合である。

- ① 単結合
- ② 二重結合
- ③ 三重結合



#### ■ ノーマライズド結合

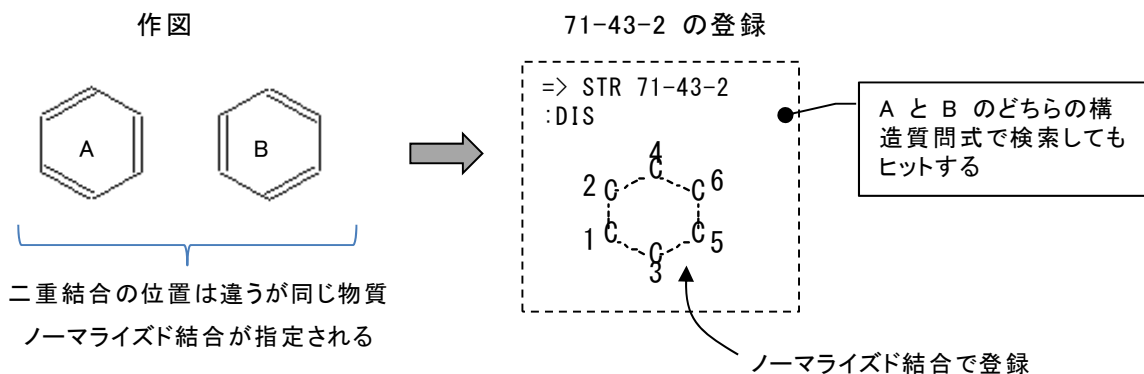
- ノーマライズド結合とは、① または ② の定義を満たす STN 独自の結合である。



- ① 偶数員環中の単結合と二重結合の交互結合 (p.6)
- ② 互変異性結合 (p.8)

- 化学的に等価な物質が複数の構造式で表現されるような場合に、その結合が「ノーマライズド結合」で登録される。

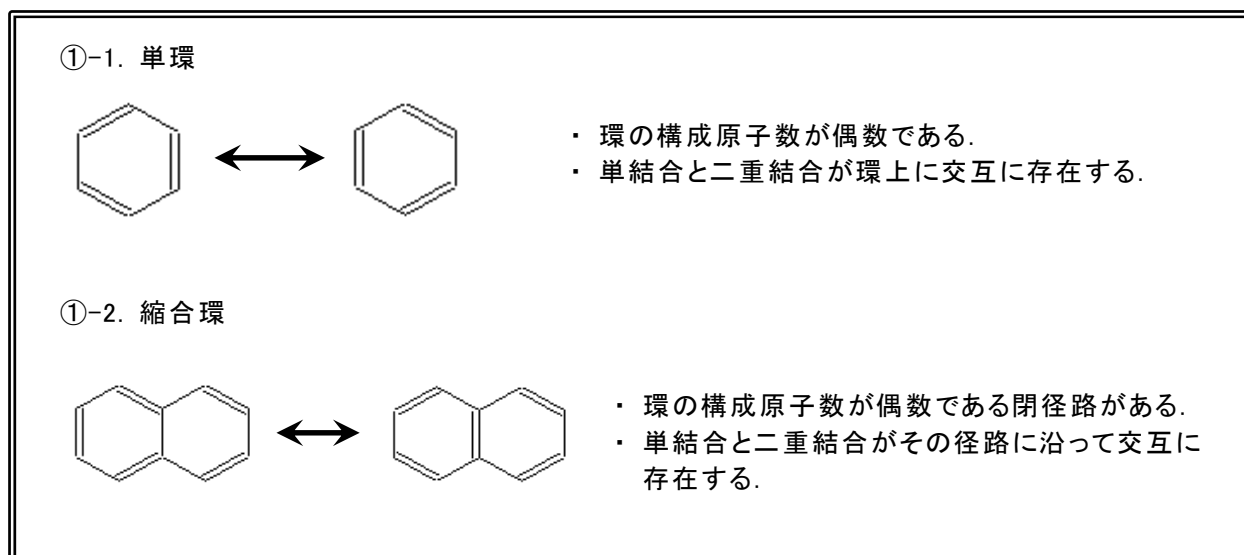
(例) 構造作図ツールでベンゼン環を描くと、自動的に「ノーマライズド結合」が指定される。



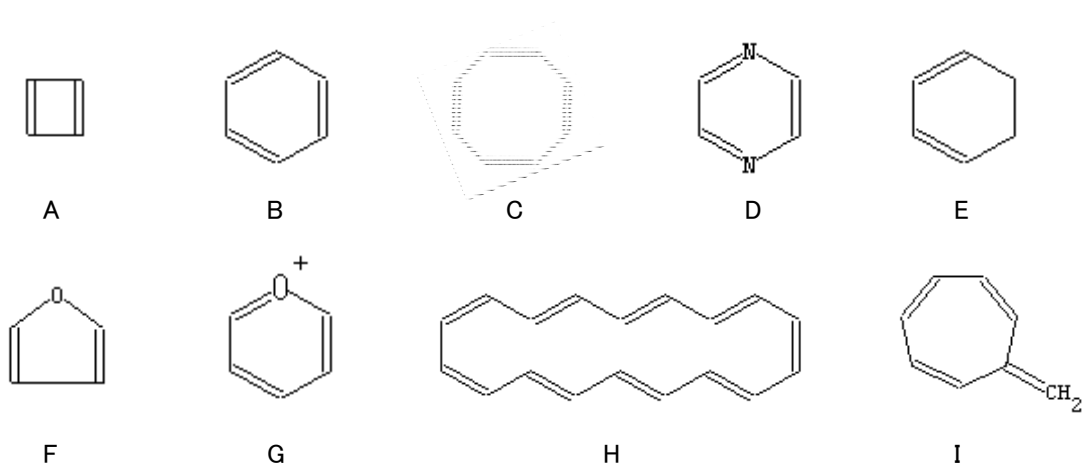
結合属性 - ノーマライズド結合

ノーマライズド結合の定義

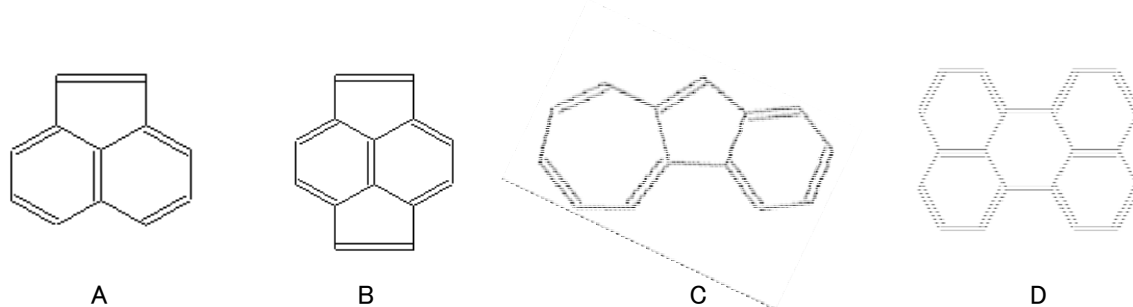
■ ノーマライズド結合の定義 ① - 偶数員環中の単結合と二重結合の交互結合



【問 1】 ノーマライズド結合の定義を満たすのは A~I のどれか？ (回答は次ページ)



【問 2】 すべての結合がノーマライズド結合の定義を満たすのは A~D のどれか？ (回答は次ページ)



## 結合属性 - ノーマライズド結合



### ノーマライズド結合の定義



【答 1】 A, B, C, D, G, H


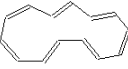
E は偶数員環だが交互結合でない。



F, I は偶数員環でない。

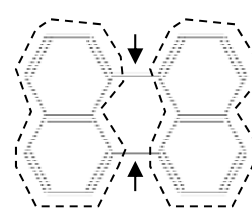
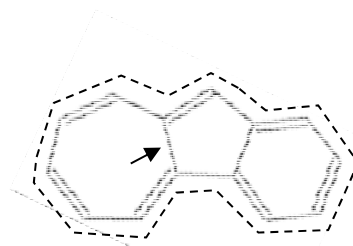
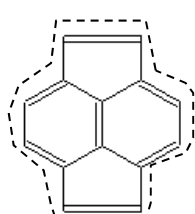
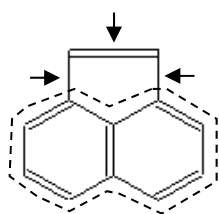
【答 2】 B

A.  部分の閉経路は、偶数（10）なので、ノーマライズド結合。  部分の閉経路は、構成原子数が 11 で偶数でない。

B.  部分はノーマライズド結合。  部分の閉経路は、構成原子数が偶数（12）で、単結合と二重結合が交互に存在する。 B はすべての結合がノーマライズド結合の定義を満たす。

C.  部分はノーマライズド結合。  部分の閉経路は、構成原子数が偶数（14）で、単結合と二重結合が交互に存在するのでノーマライズド結合。

D.  部分はノーマライズド結合。  部分の閉経路の構成原子数が 18 で偶数だが、単結合と二重結合が交互に存在していない。

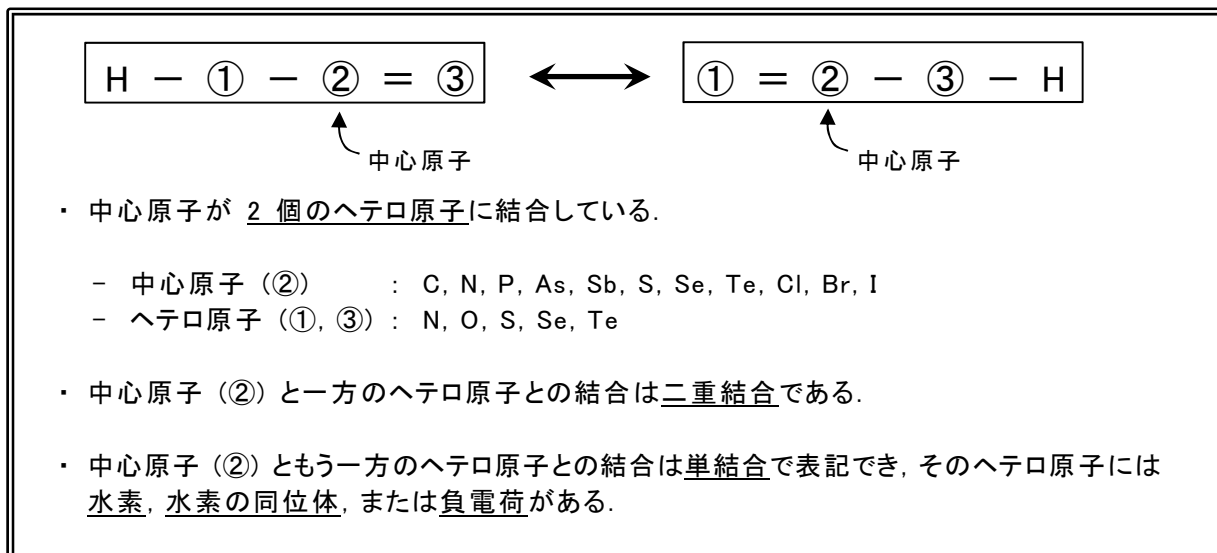


矢印部分は、エグザクト結合で登録されている

結合属性 - ノーマライズド結合

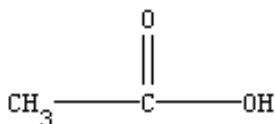
ノーマライズド結合の定義

■ ノーマライズド結合の定義 ② - 互変異性結合

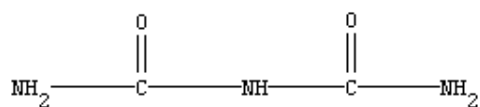


【問】 ノーマライズド結合の定義を満たすのは A~F のどの部分か？ (回答は次ページ)

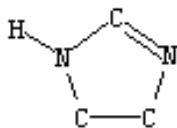
A



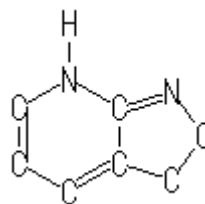
B



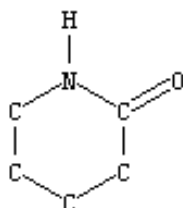
C



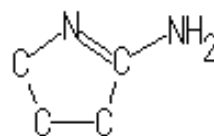
D



E



F

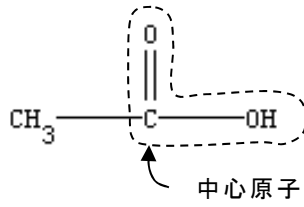


結合属性 - ノーマライズド結合

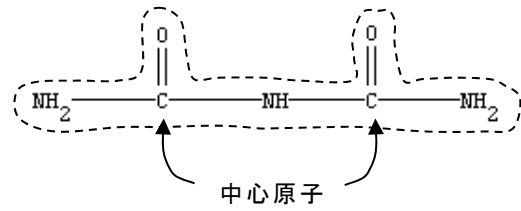
ノーマライズド結合の定義

【答】

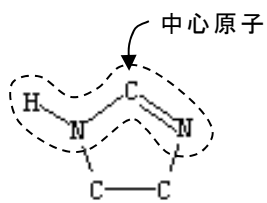
A



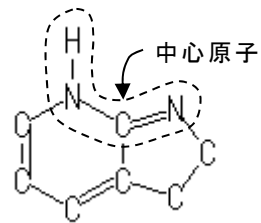
B



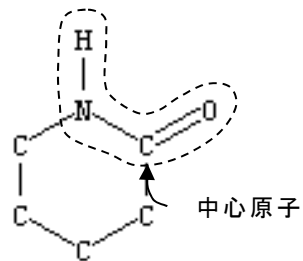
C



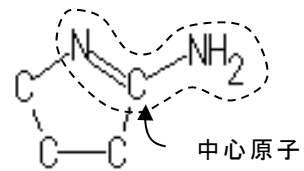
D



E



F



## 結合属性 - ノーマライズド結合

### 結合次数とヒットする物質

#### ■ 結合次数とヒットする物質

- STN Express/STN on the Web の構造作図ツールは、構造質問式からあらゆる可能性を考慮して、自動的に「結合次数」を指定する。

#### A. シクロヘキサン環



質問式属性	
結合の種類:	環
結合次数:	エグザクト/ノーマライズド

自動的に指定された結合次数

#### B. ベンゼン環



質問式属性	
結合の種類:	環
結合次数:	ノーマライズド

自動的に指定された結合次数

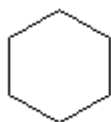


結合属性 - ノーマライズド結合

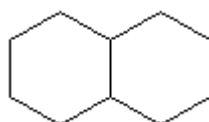
結合次数とヒットする物質

【問】 A, B の構造質問式でヒットする物質は ①~⑧ のどれか？ (回答は次ページ)

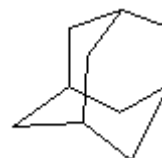
①



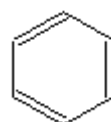
②



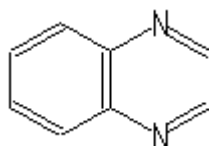
③



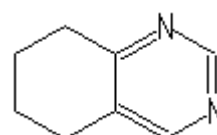
④



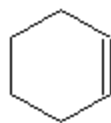
⑤



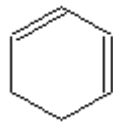
⑥



⑦



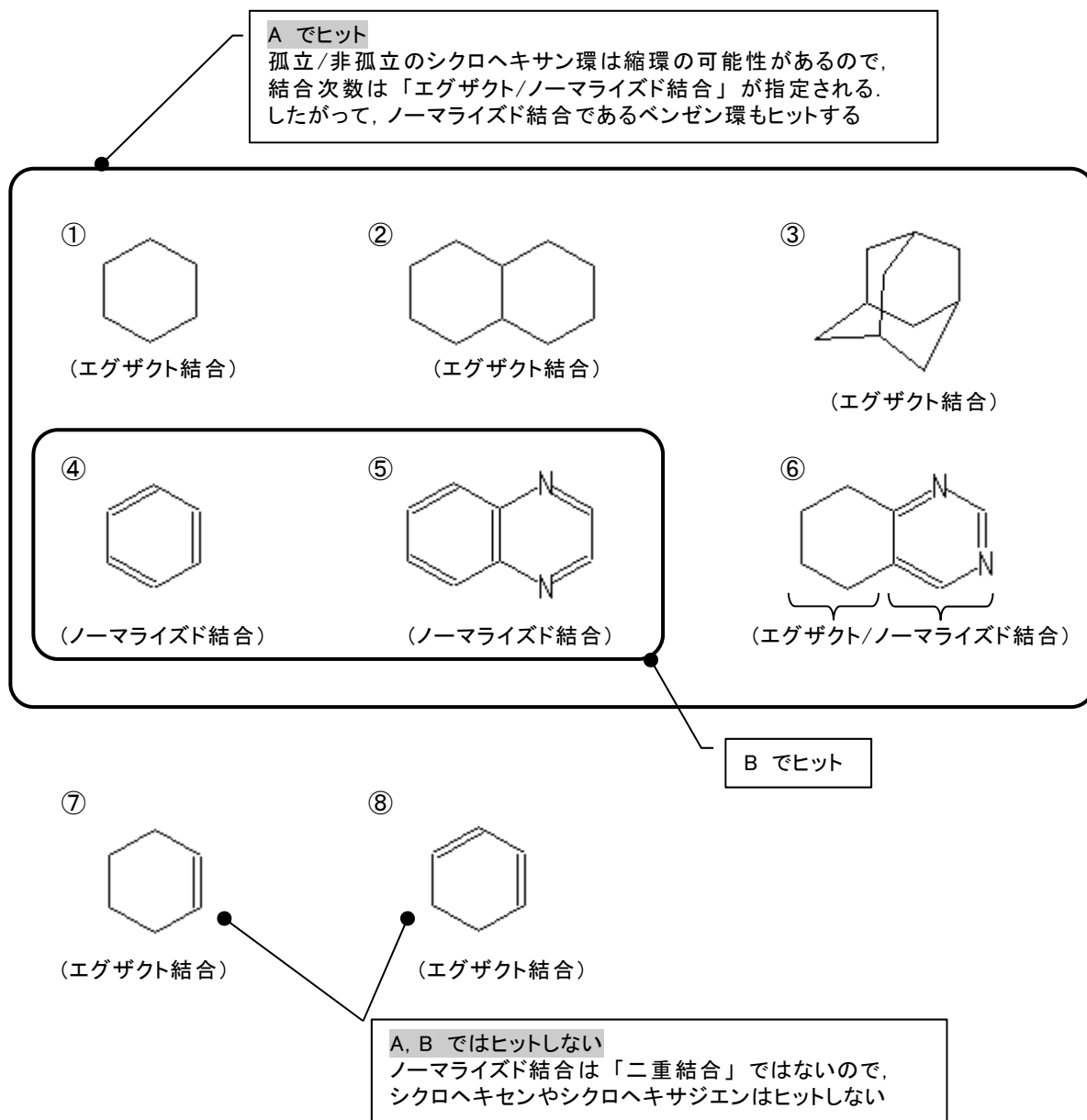
⑧



結合属性 - ノーマライズド結合

結合次数とヒットする物質

【答】



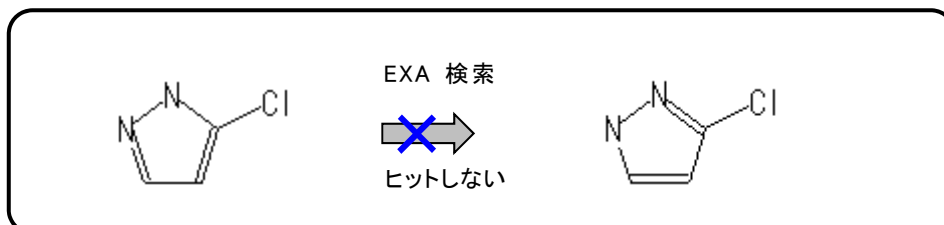
( ) 内は REGISTRY ファイルで登録された結合次数

## 結合属性 - ノーマライズド結合

### 作図のポイント

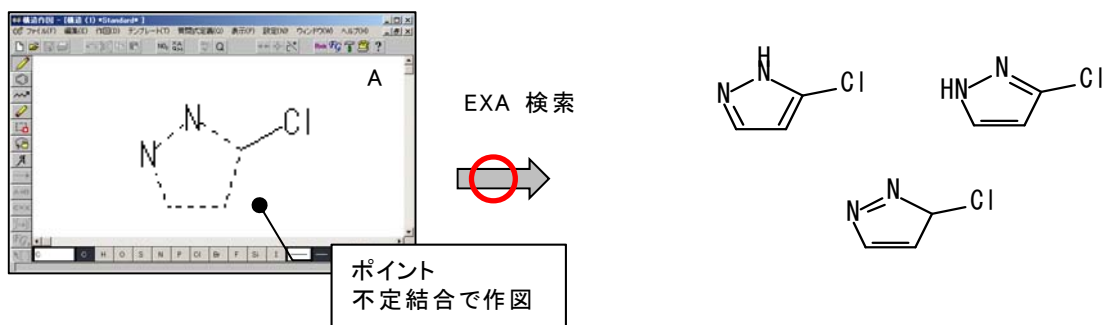
#### ■ 作図のポイント 1 : ヘテロ原子や二重結合を含む環

- ・ ノーマライズド結合の定義を満たしていない結合は、エグザクト結合で登録される。

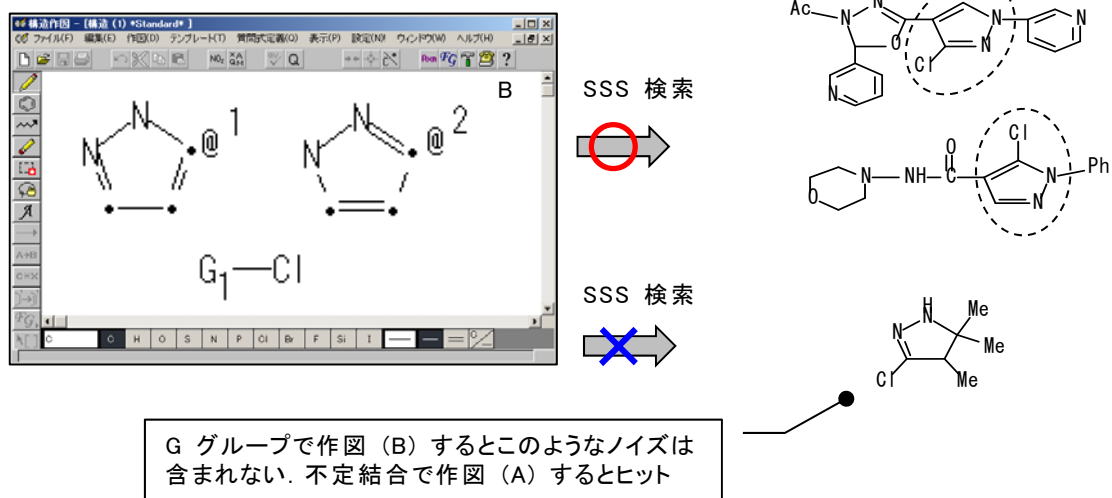


- ・ ノーマライズド結合の定義を満たしていない環を一度に検索したい場合は、両方の構造がヒットするような構造を作図する。
- ・ 単結合・二重結合のどちらの可能性もある箇所は、不定結合を指定する。または、G グループで作図する (CSS, SSS 検索のみ)。

#### - 完全一致検索 (EXA 検索)



#### - 部分構造検索 (SSS 検索)

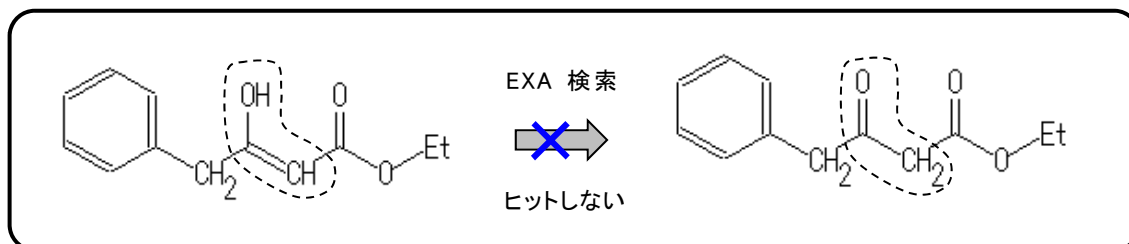


## 結合属性 - ノーマライズド結合

### 作図のポイント

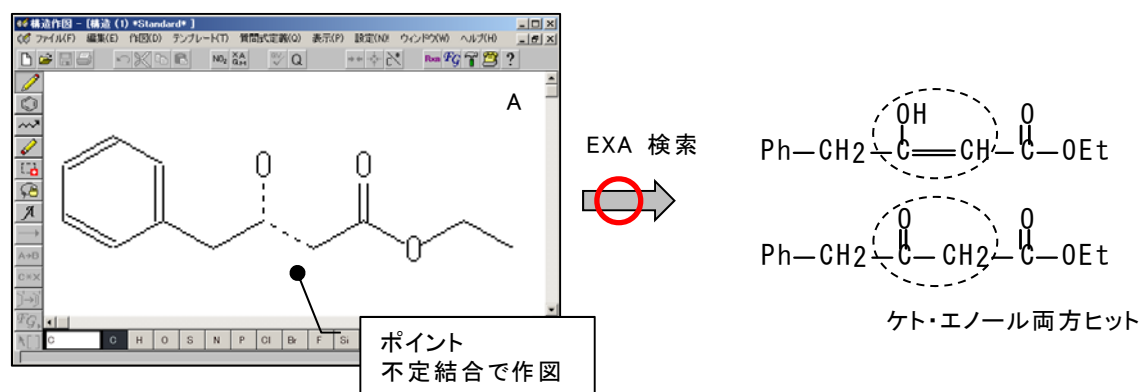
#### ■ 作図のポイント 2 : ケト-エノール互変異性体

- 下図のようなケト-エノール互変異性体は、ノーマライズド結合の定義を満たしていない。エグザクト結合で登録される。

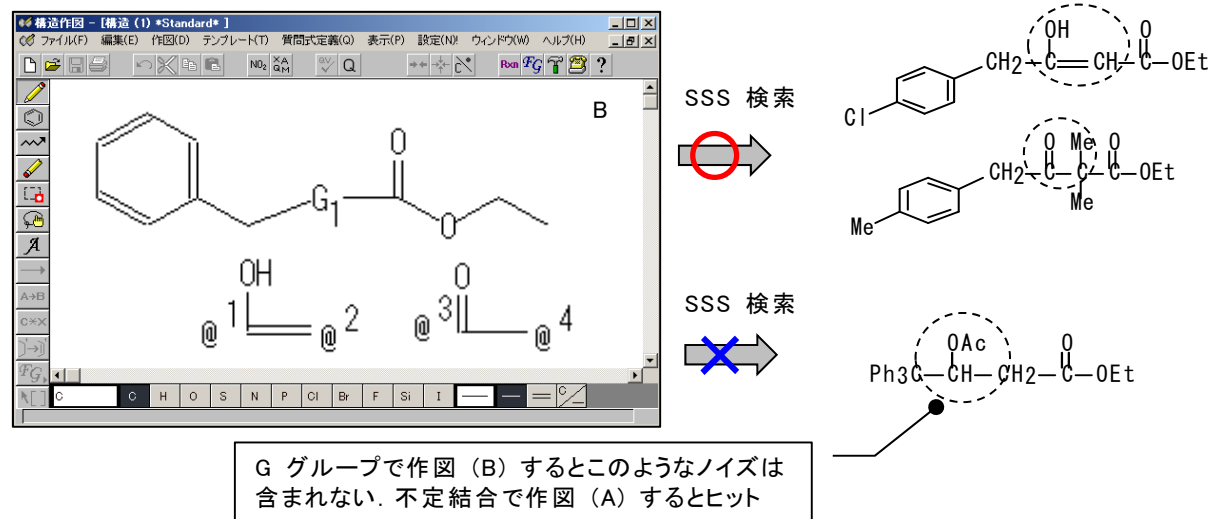


- ノーマライズド結合の定義を満たしていない互変異性体は、両方の構造がヒットするような構造を作図する。
- 単結合・二重結合のどちらの可能性もある箇所は、不定結合を指定する。または、G グループで作図する (CSS, SSS 検索のみ)。

#### - 完全一致検索 (EXA 検索)



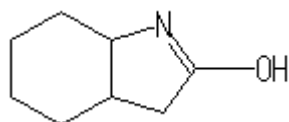
#### - 部分構造検索 (SSS 検索)



## 結合属性 - ノーマライズド結合

### 検索例

- 検索例 : 下記の構造を含む物質を検索する.

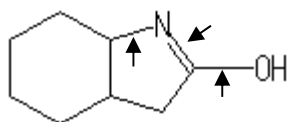


環系は孤立

#### ◆ 検索の流れ ◆

##### 1. 「デフォルトの構造質問式」で部分構造検索する

作図ツールはあらゆる可能性を考慮して、以下の結合次数を指定する。まず、デフォルトの構造質問式で検索し、どのような回答が得られるか確認する。

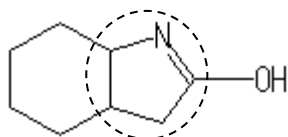


矢印のついた結合 : 「エグザクト/ノーマライズド結合」  
その他の結合 : 「エグザクト結合」

環系は孤立

##### 2. 「エグザクト結合の構造質問式」でサブセット検索する

波線の環の結合を「エグザクト結合」に変更した構造質問式で、サブセット検索する。結合次数を変更することで、どのような回答がヒットするのか確認する。



結合属性 - ノーマライズド結合

検索例

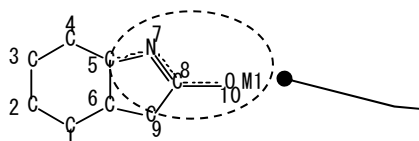
1. 「デフォルト構造質問式」で部分構造検索する

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=>  
Uploading C:\Documents and Settings\xxxxxx\My Documents\STN Express 8.5\Queries\1.str  
L1 STRUCTURE UPLOADED ← 構造質問式をアップロードする

=> D QUE ← アップロードした構造質問式を確認する

L1 STR



結合は、エグザクト結合/ノーマライズド結合

NODE ATTRIBUTES:

```

HCOUNT IS M1 AT 10
NSPEC IS R AT 1
NSPEC IS R AT 2
NSPEC IS R AT 3
NSPEC IS R AT 4
NSPEC IS R AT 5
NSPEC IS R AT 6
NSPEC IS R AT 7
NSPEC IS R AT 8
NSPEC IS R AT 9
NSPEC IS C AT 10
DEFAULT MLEVEL IS ATOM
MLEVEL IS CLASS AT 10
DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED
    
```

表示	結合次数
A — A	単結合 (SE)
A = A	二重結合 (DE)
A ≡ A	三重結合 (T)
A ~~~ A	不定結合 (U)
A ..... A	単結合またはノーマライズド結合 (S)
A ===== A	二重結合またはノーマライズド結合 (D)
A ..... A	ノーマライズド結合 (N)

GRAPH ATTRIBUTES:

```

RSPec I ← 環系は孤立
NUMBER OF NODES IS 10
    
```

STEREO ATTRIBUTES: NONE

=> S L1 ← 部分構造検索のサンプルファイル検索 (無料)

SAMPLE SEARCH INITIATED 14:28:26 FILE 'REGISTRY'  
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 1607 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 1607 ITERATIONS 15 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED ITERATIONS: 29736 TO 34544  
PROJECTED ANSWERS: 68 TO 532

L2 15 SEA SSS SAM L1

結合属性 - ノーマライズド結合

検索例

=> S L1 FUL ← 部分構造検索のフルファイル検索

FULL SEARCH INITIATED 14:28:29 FILE 'REGISTRY'  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 31064 TO ITERATE

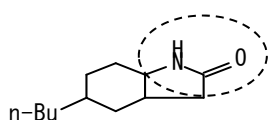
100.0% PROCESSED 31064 ITERATIONS  
SEARCH TIME: 00.00.01

263 ANSWERS

L3 263 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で表示 (無料)

L3 263 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
IN 2H-Indol-2-one, 5-butyl-  
MF C12 H21 N O

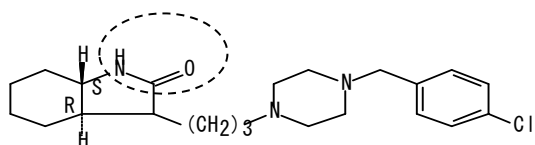


\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):50

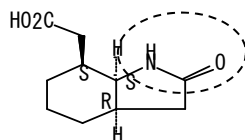
L3 263 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
IN 2H-Indol-2-one, 3-[3-[4-[(4-chlorophenyl)methyl]-1-piperazinyl]propyl]octahydro-, (3aR, 7aS)-rel-  
MF C22 H32 Cl N3 O

Relative stereochemistry.

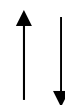
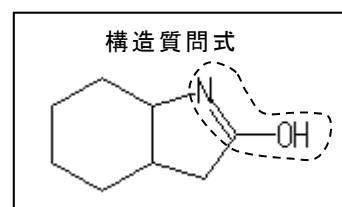


L3 263 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
IN 1H-Indole-7-acetic acid, octahydro-2-oxo-, (3aα, 7β, 7aα)-  
(9CI)  
MF C10 H15 N O3

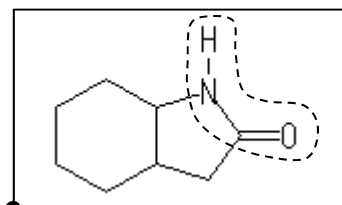
Relative stereochemistry.



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END



波線部分は  
ノーマライズド結合



構造質問式と構造が違うが,  
ノーマライズド結合であるため  
ヒットした物質

## 結合属性 - ノーマライズド結合

### 検索例

#### 2. 「エグザクト結合の構造質問式」でサブセット検索する

=>

Uploading C:\Documents and Settings\xxxxxx\My Documents\STN Express 8.5\Queries\2.str

L4 STRUCTURE UPLOADED

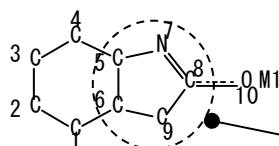
← 構造質問式をアップロードする

=> D QUE

← アップロードした構造質問式を確認する

L4

STR



環の結合次数を「エグザクト結合」に変更

NODE ATTRIBUTES:

```

HCOUNT IS M1 AT 10
NSPEC IS R AT 1
NSPEC IS R AT 2
NSPEC IS R AT 3
NSPEC IS R AT 4
NSPEC IS R AT 5
NSPEC IS R AT 6
NSPEC IS R AT 7
NSPEC IS R AT 8
NSPEC IS R AT 9
NSPEC IS C AT 10
DEFAULT MLEVEL IS ATOM
MLEVEL IS CLASS AT 10
DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED
    
```

GRAPH ATTRIBUTES:

```

RSPEC I ← 環系は孤立
NUMBER OF NODES IS 10
    
```

STEREO ATTRIBUTES: NONE

=> S L4 SUB=L3 SAM

← サブセット検索のサンプル検索 (無料)

SAMPLE SUBSET SEARCH INITIATED 14:29:04 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 0 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 0 ITERATIONS

0 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.01

PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):

ONLINE \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED ITERATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):

0 TO 0

PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):

0 TO 0

L5

0 SEA SUB=L3 SSS SAM L4



## 結合属性 - ノーマライズド結合

### 検索例

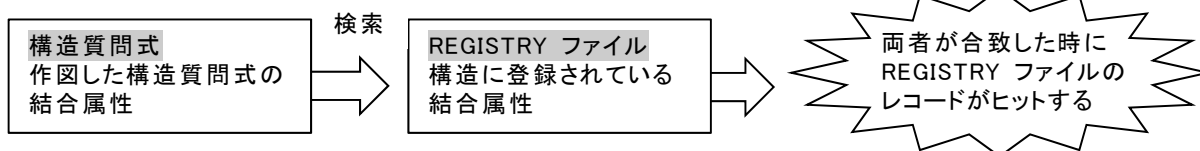
=> \$ L4 SUB=L3 FUL ← サブセット検索のフルファイル検索  
FULL SUBSET SEARCH INITIATED 14:29:07 FILE 'REGISTRY'  
FULL SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 1 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 1 ITERATIONS 0 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

L6 0 SEA SUB=L3 SSS FUL L4 ●

結合次数を「エグザクト結合」に変更  
すると回答が得られない

- ・ 見た目上は同じ単結合や二重結合だが、エグザクト結合とノーマライズド結合がある。
- ・ STN Express/STN on the Web の構造作図ツールは、構造質問式からあらゆる可能性を考慮して自動的に結合次数を指定する。
  - 結合次数の変更は可能だが、設定を間違えると、必要な回答が得られなくなるので注意する。
  - ノーマライズド結合の定義を満たしていない互変異性体は、両方の構造がヒットするような構造を作図する。



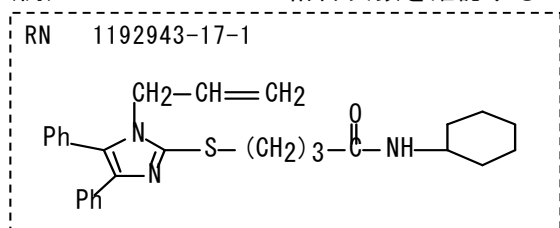
結合属性 - ノーマライズド結合

参考 : STRUCTURE コマンド

■ STRUCTURE コマンド

- STRUCTURE コマンドで物質の構造を呼び出し、結合次数を確認できる。構造質問式を作成する時の参考にするとい。

(例) 1192943-17-1 の結合次数を確認する。



=> FILE ZREGISTRY

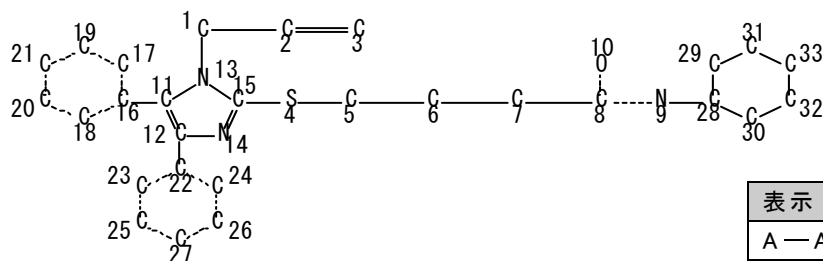
← 接続料無料の ZREGISTRY ファイルに入る

=> STR 1192943-17-1

← STR コマンドに続けて CAS 登録番号を入力する

:DIS

← DIS と入力する



表示	結合次数
A—A	単結合 (SE)
A=A	二重結合 (DE)
A≡A	三重結合 (T)
A—A	ノーマライズド結合 (N)

:END

← END で終了する

L1 STRUCTURE CREATED

← 検索式が作成される

- 二つ以上の成分を含む CAS 登録番号を指定すると、各成分の CAS 登録番号と分子式が表示され、再度プロンプトが表示される。いずれかの CAS 登録番号を選択し、表示する。
  - 単原子フラグメントとの多成分物質の場合は、単原子フラグメント以外の構造が表示される。
- 構造が収録されていない場合や定義の不完全な物質 (p.32) は表示できない。

=> STR 68609-03-0

68609-03-0 MAY NOT BE USED AS A MODEL

Structures which were created via the STRUCTURE command or are in the Fragment File may be used as models in the STRUCTURE command. Most, but not all, substance Accession Numbers can also be used.

ENTER NAME OF STRUCTURE TO BE RECALLED (NONE):END

← END で終了する

## ***B 特有の検索手法が必要な物質の検索***

この章では、構造情報が収録されないため、特有の検索手法が必要な物質の検索についてご説明します。



## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### REGISTRY ファイルの収録物質

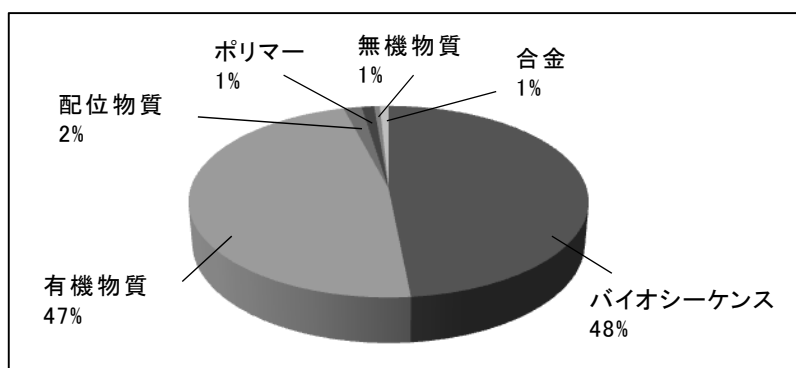
■ REGISTRY ファイルには CAS 登録番号が付与された様々な化学物質が収録されている。

・ 収録レコード数 : 約 137,813,000 件 (2013 年 8 月現在)

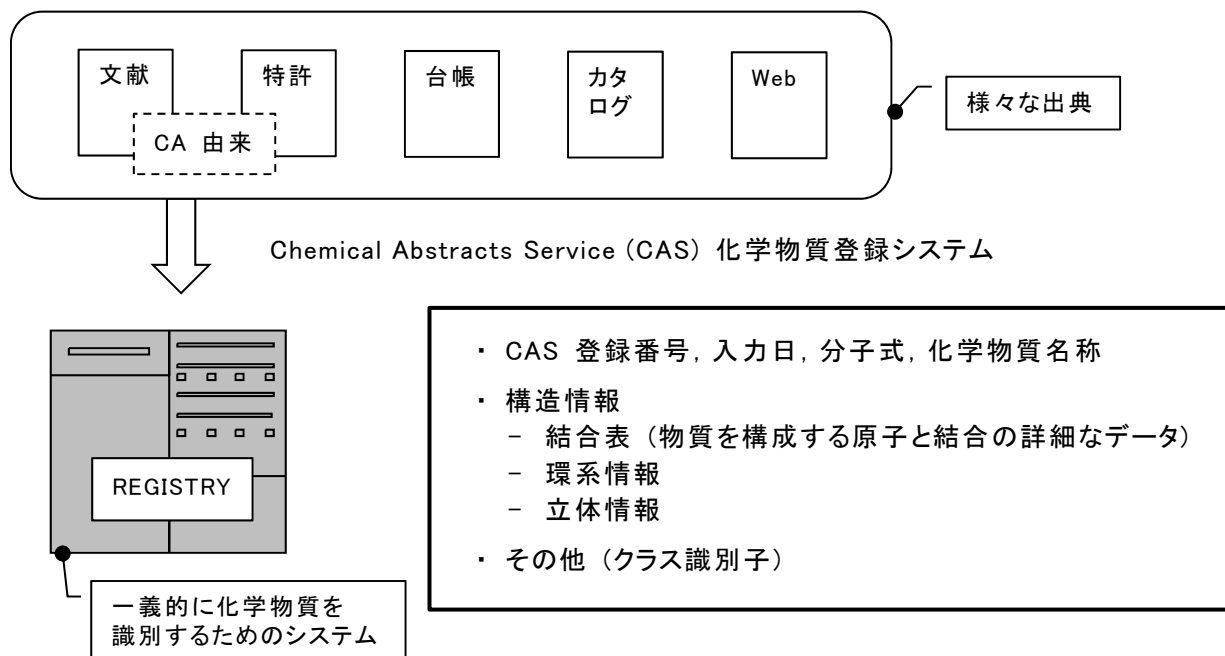
・ 更新 : 毎日

・ REGISTRY ファイルに収録されている化学物質の種類

- 有機物質
- 無機物質
- タンパク質, 核酸
- ポリマー
- 配位物質
- 有機金属物質
- 金属
- 合金
- 鉱物
- 元素



■ REGISTRY ファイルの物質収録の流れ



## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### REGISTRY ファイルの収録物質

#### ■ 構造情報が収録されない物質

- ・ 構造は明確だが、システム制限を超えた物質
  - 水素以外の構成元素が 253 以上の物質は、構造情報が収録されない。
- ・ 部分的に構造が不明な物質
  - 定義の不完全な物質 (IDS)
- ・ 構造が不明な物質
  - 構造が明らかにされていない天然物や、商品名だけ知られている場合など。

#### ■ クラス識別子 (Class Identifier)

- ・ クラス識別子は、物質の広いクラス (分類) を示すコードである。
  - クラス識別子は、/CI フィールドで検索できる (ただし COM を除く)。
- ・ クラス識別子の種類
  - 星印付き (☆★) のクラス識別子は、構造情報が収録されないため、特有の検索手法が必要な物質である (★ は、このテキストで扱う項目)。

	クラス識別子	定義	ページ
☆	AYS	合金	
	CCS	配位物質	
	COM*1	多成分物質成分	
★	CTS	概念語登録	p.52
★	GRS	一般式登録	p.56
★	IDS	定義の不完全な物質	p.32
☆	MAN	手作業登録	
☆	MNS	鉱物	
	MXS	混合物	
	PMS	ポリマー	
	RIS	ラジカルイオン	
	RPS	環母核	
★	TIS	表形式無機物質	p.23
★	UVCB	組成不明, 組成不定, 複雑な反応生成物, 生体物質 (CTS + GRS)	p.51

\*1 COM/CI は検索できない

## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 表形式無機物質 (TIS)

#### ■ REGISTRY ファイルに収録される無機物質

- ・ 化学量論的な組成を持つ物質
- ・ 化学量論的な組成を持たない物質
  - 表形式無機物質      クラス識別子 (TIS)
  - 合金                      クラス識別子 (AYS)
  - 鉱物                      クラス識別子 (MNS)

#### ■ 表形式無機物質 (TIS)

- ・ 表形式無機物質とは、構造が確定していないために、結合表がない (= 構造情報が収録されない) 無機化学物質を示す。

=> FILE REGISTRY

=> E TIS/CI

```
E1 194160 RPS/CI
E2 685978 TABULAR INORGANIC/CI
E3 685978 --> TIS/CI
E4 52945 UNKNOWN OR VARIABLE COMPOSITION OR BIOLOGICAL SUBSTANCE/CI
E5 52945 UVCB/CI
**** END OF FIELD ****
```

表形無機物質の  
クラス識別子は TIS

- ・ 主に下記の理由で結合表を作れない。
  - ① 構造が不明である
  - ② 独立した分子を持たない物質
  - ③ 3次元格子構造を持つ物質
  - ④ 非化学量論的な成分を含む物質 (不定比物質)  
(組成比が非整数ないしある範囲で表される物質)

特有の検索手法が必要な物質の検索

表形式無機物質 (TIS)

■ レコード例

```

RN 12030-85-2 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Niobium potassium oxide (NbK03) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Niobate (NbO31-), potassium
CN Niobium potassium oxide (KNb03) (8CI)
CN Potassium niobate(V) (KNb03) (6CI)
OTHER NAMES:
CN Potassium metaniobate (KNb03)
:
MF K . Nb . O
AF K Nb O3
CI COM, TIS
LC STN Files: ANABSTR, CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCA
IFIPAT, IFIUDB, MEDLINE, MSDS-OHS, RTECS*, TOXCE
USPATOLD
(*File contains numerically searchable property data)
Other Sources: EINECS**, NDSL**, TSCA**
(**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
    
```

CA 索引名に組成比を収録

完全分子式 (MF)  
各成分がピリオドで区切られ収録される

非優先分子式 (AF) は、組成を含めた分子式  
  
表形式無機物質には、非優先分子式フィールドがある場合が多く、組成比を含む分子式が収録されている

Component	Ratio	Component Registry Number
O	3	17778-80-2
K	1	7440-09-7
Nb	1	7440-03-1

表部分に、元素記号、組成比、成分 CAS 登録番号を収録

\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

3423 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
207 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
3431 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

```

RN 127673-04-5 REGISTRY
ED Entered STN: 15 Jun 1990
CN Niobium potassium oxide (NbK0-0.102.95-3) (CA INDEX NAME)
MF K . Nb . O
AF K0-0.1 Nb 02.95-3
CI TIS
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS
    
```

組成比が範囲で登録されたレコードもある

Component	Ratio	Component Registry Number
O	2.95 - 3	17778-80-2
K	0 - 0.1	7440-09-7
Nb	1	7440-03-1

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



特有の検索手法が必要な物質の検索

表形式無機物質 (TIS)

RN 54413-02-4 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Niobium potassium oxide (CA INDEX NAME)  
 OTHER NAMES:  
 CN Potassium niobium oxide  
 DR 51434-36-7  
 MF K . Nb . O  
 CI **TIS**  
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CHEMCATS, CHEMLIST, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL  
 Other Sources: EINECS\*\*  
 (\*\*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

この物質は組成比が不明であるため  
 各元素の組成比 (Ratio) は x で  
 表示される

Component	Ratio	Component Registry Number
O	x	17778-80-2
K	x	7440-09-7
Nb	x	7440-03-1

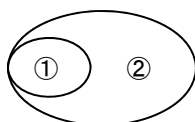
43 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 1 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 44 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 表形式無機物質 (TIS)

#### ■ 検索のポイント

- ・ 網羅的な検索には /ELC.SUB (物質中の異なる元素の数) と /ELS (元素種) フィールドを利用する.



#### ① 完全分子式の検索

=> S 分子式/MF

(例) => S GAS2/MF

#### ② 網羅的な検索

=> S (元素 AND 元素)/ELS AND 物質中の異なる元素の数/ELC.SUB

(例) => S (GA AND S)/ELS AND 2/ELC.SUB

- /NC (成分数) は利用しない.

```

RN 127673-04-5 REGISTRY
ED Entered STN: 15 Jun 1990
CN Niobium potassium oxide (NbK0-0.102.95-3)
MF K . Nb . 0
AF K0-0.1 Nb 02.95-3
    
```

表形式無機物質には、非優先分子式 (AF) フィールドがある場合が多く、組成比を含む分子式が収録されている

このようなレコードでは、3/NC (MF 由来) でも、1/NC (AF 由来) でもヒットするため /NC よりも、/ELC.SUB で検索する

#### ■ 分子式関連検索フィールド

検索フィールド	定義	登録単位	入力例
完全分子式 /MF	物質全体の完全な分子式	物質	=> S C5H12/MF => S C4H11NO2.C3F6/MF => S "(C8H8)X"/MF
成分分子式 /BI または なし	単成分物質の完全な分子式 (/MF) と多成分物質の成分分子式	成分	=> S C4H11NO2 => S C3F6
元素種*1 /ELS	成分中の特定元素またはグループ元素 (X,M) の存在	成分	=> S N/ELS => S X/ELS
特定元素数*1,2 /元素記号	各成分の特定元素の数	成分	=> S 1/N => S 1-2/N
成分数*2 /NC	物質全体の成分数 (分子式中のピリオドの数 + 1)	物質	=> S 2/NC => S 4>=NC
元素式 /ELF	各成分の構成元素 (分子式から数を除いたデータ)	成分	=> S C H O/ELF => S C F/ELF
元素数*2 /ELC	各成分の異なる元素の数	成分	=> S 4/ELC => S 2/ELC
物質の元素数*2 /ELC.SUB	物質中の異なる元素の数	物質	=> S 5/ELC.SUB

\*1 X (ハロゲン), M (金属) の一般元素が利用できる.

X (ハロゲン): F Cl Br I At, M (金属): Ar As At B Br C Cl F H He I Kr N Ne O P Rn S Se Si Te Xe 以外の元素

\*2 数値検索フィールド

## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 表形式無機物質 (TIS)

#### ■ 検索例 : 硫化ガリウムに関する特許の検索

##### ◆ 検索の流れ ◆

###### 1. REGISTRY ファイルで物質を検索する

同じ元素からなる様々な組成比の物質をまとめて検索したい場合は, /ELS (元素種) と /ELC.SUB (物質中の異なる元素の数) で検索する.

###### 2. 不要な回答を除く

/CI (クラス識別子) で, 不要なクラス識別子の付与された物質を除く.

###### 3. CAplus ファイルで特許を検索する

REGISTRY ファイルで得られた L 番号をクロスオーバーし, P/DT で特許に限定する.

SCAN TI HITIND 表示形式で, 標題とヒットした索引部分を確認する.

#### 1. REGISTRY ファイルで物質を検索する

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> S (GA AND S)/ELS AND 2/ELC.SUB

← GA と S を含み 2 元素からなる物質を検索

76838 GA/ELS

24580720 S/ELS

417883 2/ELC.SUB

L1 55 (GA AND S)/ELS AND 2/ELC.SUB

=> D SCAN

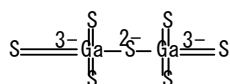
← SCAN 表示形式で出力 (無料)

L1 55 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IN Gallate(8-), μ-thioxohexathiodi-

MF **Ga2 S7**

CI **CCS**, COM



配位物質 (CCS)  
として登録

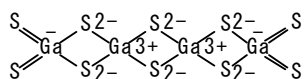
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 55

L1 55 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IN Gallate(8-), hexa-μ-thioxotetrathioxotetra-

MF **Ga4 S10**

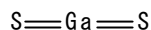
CI **CCS**, COM



特有の検索手法が必要な物質の検索

表形式無機物質 (TIS)

L1 55 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
 IN Gallium sulfide (GaS2) (9CI)  
 MF **Ga S2**  
 CI COM



化学量論的な組成  
を持つ物質

L1 55 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
 IN Gallium sulfide (Ga2S3)  
 MF **Ga . S**  
 CI COM, TIS

Component	Ratio
S	3
Ga	2

表形式無機物質  
(TIS) として登録

L1 55 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
 IN Gallium(1+), pentathioxotri-  
 MF **Ga . S**  
 CI TIS

Component	Ratio
S	5
Ga	3

L1 55 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
 IN Gallium alloy, base, Ga 99-100, S 0-0.9 (9CI)  
 MF **Ga . S**  
 CI **AYS**

Component	Component Percent
Ga	99 - 100
S	0 - 0.9

合金 (AYS)  
として登録

:

2. 不要な回答を除く

=> S L1 NOT (AYS OR CCS)/CI  
 1110293 AYS/CI  
 2314313 CCS/CI  
 L2 40 L1 NOT (AYS OR CCS)/CI

← この例では、合金 (AYS) と配位物質 (CCS) を除く

特有の検索手法が必要な物質の検索

表形式無機物質 (TIS)

3. CAplus ファイルで物質に関する特許を検索し、回答を確認する

- => FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る
- => S L2 ← REGISTRY ファイルで得られた L 番号をクロスオーバーする  
L3 2037 L2 (無料)
- => S L3 AND P/DT ← 特許に限定する  
9045348 P/DT  
L4 411 L3 AND P/DT
- => D SCAN TI HITIND ← SCAN 表示形式に含まれる TI (標題) と HITIND (ヒットした索引部分) を表示 (無料)

L4 411 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
TI Aqueous electrolyte lithium sulfur batteries  
TIJP 水性電解液リチウム硫黄バッテリー [機械翻訳]  
IT 1306-23-6, Cadmium sulfide (CdS), uses 1314-98-3, Zinc sulfide (ZnS),

:  
sulfide 12653-56-4, Cobalt sulfide 12687-82-0, Manganese sulfide  
13494-80-9, Tellurium, uses 37231-03-1, Indium sulfide 39377-56-5,

Lead sulfide 53238-24-7, Gallium sulfide

Tellurium sulfide (TeS3)

RL: PRP (Properties); TEM (Technical or engineering  
(Uses)

(high overpotential material; aqueous electrolyte employing water as electrolyte solvent)

公報の記載 (WO 2013074772)

【CLAIM 59】 The aqueous lithium sulfur cell of claim 57 wherein the high overpotential material is a metal sulfide selected from the group consisting of cobalt sulfide, manganese sulfide... gallium sulfide...

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):50

L4 411 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
TI Lithium sulfide with small particle diameter, its preparation, and manufacture of inorganic solid electrolytes

TIJP 硫化リチウム、その製造方法及び無機固体電解質の製造方法 [原題]

IT 1302-81-4, Aluminum sulfide 1314-80-3, Diphosphorus pentasulfide

12737-58-5, Germanium sulfide 50927-81-6, Silicon

53238-24-7, Gallium sulfide 54511-24-9, Boron

62140-13-0, Phosphorus sulfide

RL: PEP (Physical, engineering or chemical process engineered material use); PROC (Process); USES (preparation of lithium sulfide for manufacture)

公報の記載 (JP 2013075816)

【請求項 8】 請求項 1~7 いずれか 1 項記載の硫化リチウムの製造方法により、硫化リチウムを得、次いで、得られた硫化リチウムと、硫化リン、硫化ケイ素、硫化ゲルマニウム、硫化ホウ素、硫化アルミニウム及び硫化ガリウムの群から選ばれる...

表形式無機物質 (組成比不明の硫化ガリウム) の CAS 登録番号で索引されている

RN 53238-24-7

CN Gallium sulfide (CA INDEX NAME)

MF Ga . S

CI TIS

Component	Ratio	Component Registry Number
S	x	7704-34-9
Ga	x	7440-55-3

366 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

20 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

367 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

特有の検索手法が必要な物質の検索

表形式無機物質 (TIS)

L4 411 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
 TI Sequentially laminated, rare earth, permanent magnets with dielectric layers reinforced by transition and/or diffusion reaction layers  
 TIJP 連続してラミネートされて、まれな地球、誘電体層がトランジションによって補強されている永久磁石、そして/または、拡散性化学反応膜 [機械翻訳]  
 IT 1302-81-4, Aluminum sulfide (Al<sub>2</sub>S<sub>3</sub>) 1303-33-9, Arsenic sulfide (As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>)  
 :  
 12020-65-4, Europium sulfide (EuS) **12024-22-5**, Gallium sulfide (Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>) 12025-32-0, Germanium sulfide (GeS)  
 :

RL: TEM (Technical or engineered material use) (sequentially laminated, rare earth, permanent magnets with dielectric layers reinforced by transition and/or diffusion reaction layers)

公報の記載 (WO 2013022942)  
 【CLAIM 4】 A sequentially laminated, rare earth, permanent magnet according to Claim 3, wherein said sulfide layers are comprised of sulfides selected from the group consisting of: Al<sub>2</sub>S<sub>3</sub>, Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub>... **Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>** ...

表形式無機物質 (組成比の明確な硫化ガリウム) の CAS 登録番号で索引されている

RN 12024-22-5 REGISTRY  
 CN Gallium sulfide (Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>) (CA INDEX NAME)  
 MF Ga . S  
 AF Ga2 S3

Component	Ratio	Component Registry Number
S	3	7704-34-9
Ga	2	7440-55-3

1002 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 34 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 1003 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

L4 411 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
 TI Phosphors of rare earth and transition metal doped Ca<sub>1+x</sub>Sr<sub>1-x</sub>Ga<sub>y</sub>In<sub>2-y</sub>SzSe<sub>3-z</sub>F<sub>2</sub>, methods of manufacturing and applications  
 TIJP 希土類の蛍光体と遷移金属のドーブ Ca<sub>1+x</sub>Sr<sub>1-x</sub>Ga<sub>y</sub>In<sub>2-y</sub>SzSe<sub>3-z</sub>F<sub>2</sub>. 製造と応用の方法. [機械翻訳]  
 IT 1314-96-1, Strontium sulfide 1315-07-7, Strontium selenide (SrSe) 7789-75-5, Calcium fluoride (CaF<sub>2</sub>), processes 10025-76-0, Europium chloride (EuCl<sub>3</sub>) **12024-10-1**, Gallium sulfide (GaS)  
 12024-11-2, Gallium selenide (GaSe) 20548-54-3, Calcium sulfide (CaS)

RL: PEP (Physical, engineering or chemical precursor; phosphors of rare earth and transition metal doped Ca<sub>1+x</sub>Sr<sub>1-x</sub>Ga<sub>y</sub>In<sub>2-y</sub>SzSe<sub>3-z</sub>F<sub>2</sub>, methods of manufacturing and applications)

公報の記載 (WO2013070676)  
 【Example 1】 ...One mole fraction of each compound (SrSe, GaSe, **GaS**, CaF<sub>2</sub>) is used...

化学量論的組成を持つ硫化ガリウムの CAS 登録番号で索引されている

RN 12024-10-1 REGISTRY  
 CN Gallium sulfide (GaS) (CA INDEX NAME)  
 MF Ga S  
 Ga=S

728 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 102 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 730 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 表形式無機物質 (TIS)

#### ■ 分子式の検索でヒットしないレコード

- 物質によっては、化学物質名称検索が必要な場合がある。

(例) 「酸化モリブデン」とだけ原報中に記載されていた場合、三酸化モリブデンか二酸化モリブデンか不明であるため、手作業登録 (MAN) の酸化モリブデンのレコードが REGISTRY ファイルに登録される。

- レコード例 : 手作業登録 (MAN) の酸化モリブデンのレコード

```
RN 11098-99-0 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Molybdenum oxide (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN Molybdenum anhydride
DR 1313732-50-1, 1418536-07-8, 39432-76-3
MF Unspecified
CI COM, MAN
LC STN Files: ANABSTR, BIOSIS, CA, CAPLUS, CASREACT, CBNB, CHEMLIST, CIN,
  EMBASE, ENCOMPLIT, ENCOMPLIT2, ENCOMPPAT, ENCOMPPAT2, IFIALL, PIRA,
  TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL, USPATOLD
Other Sources: EINECS**
(**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
```

完全分子式は不明

手作業登録 (MAN)

\*\*\* STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE \*\*\*

\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

6504 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
86 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
6514 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- このような物質は、分子式関連検索フィールドで検索できないため、名称で検索する。

## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 定義の不完全な物質 (IDS)

#### ■ 定義の不完全な物質 (IDS : Incompletely-Defined Substance)

- ・ 定義の不完全な物質 (IDS) とは、分子式は確定しているが、完全な構造が不明な物質である。

=> FILE REGISTRY

=> E IDS/CI

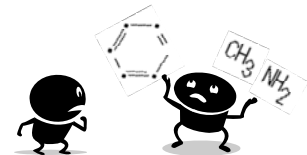
E1	20066	GENERIC REGISTRATION/CI
E2	20066	GRS/CI
E3	294386	--> IDS/CI
E4	294386	INCOMPLETELY DEFINED SUBSTANCE/CI
E5	65176623	MAN/CI
	:	

定義の不完全な物質の  
クラス識別子は IDS

- ・ 下記のタイプが存在する。

- ① 置換基の位置が不明な物質
- ② 飽和または不飽和結合の位置が不明な物質
- ③ 枝分かれの構造が不明なアルキル鎖を含む物質
- ④ 環構造が不明な糖基を含む物質
- ⑤ 縮合反応生成物で、正確な構造が不明な物質

- ・ 定義の不完全な物質のレコードは、構造図だけでなく、分子式や CA 索引名から構造を判断するのが重要である。





特有の検索手法が必要な物質の検索

定義の不完全な物質 (IDS)

■ レコード例

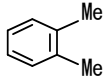
① 置換基の位置が不明な物質

RN 1330-20-7 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Benzene, dimethyl- (CA INDEX NAME)  
 OTHER CA INDEX NAMES:  
 CN Xylene (8CI)

MF C8 H10  
 CI IDS, COM  
 SR CA  
 LC STN Files: ADISNEWS, ANABSTR, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CABA, CAPLUS,

CH<sub>3</sub> 基の置換位置が明確な物質

RN 95-47-6 REGISTRY  
 CN Benzene, 1,2-dimethyl-  
 MF C8 H10




2 (D1-Me)

置換基の位置が不明

分子式  
 成分数は 1 (1/NC)

基本骨格 (置換前の構造)

置換基  
 D はダミーノードと呼ばれ、「置換位置が不明な置換基」を表す際に用いられる。同じ置換基は係数をつけて一つにまとめられる。このレコードは 2 個の CH<sub>3</sub> 基がベンゼン環のどこかに置換することを表している

\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

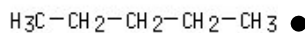
35187 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 818 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 35399 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

RN 25513-59-1 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Pentane, dibromo- (CA INDEX NAME)  
 OTHER NAMES:  
 CN Dibromopentane  
 MF C5 H10 Br2  
 CI IDS, COM  
 SR CA  
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, TOXCENTER, US

Br 基の置換位置が明確な物質

RN 62127-60-0 REGISTRY  
 CN Butane, 2,2-dibromo-3-methyl-  
 MF C5 H10 Br2

i-Pr-CBr<sub>2</sub>-Me



2 (D1-Br)

基本骨格 (置換前の構造)

置換基  
 このレコードは 2 個の Br 基が炭素鎖のどこかに置換することを表している

\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

29 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 2 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 29 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

特有の検索手法が必要な物質の検索

定義の不完全な物質 (IDS)

② 飽和または不飽和結合の位置が不明な物質

・ 不飽和結合の位置が不明な物質

RN 25167-67-3 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Butene (CA INDEX NAME)  
 OTHER NAMES:  
 CN Butylene  
 MF C4 H8  
 CI IDS, COM  
 LC STN Files: ANABSTR, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAPLUS, CASREACT, CBNB,

不飽和結合の位置が不明

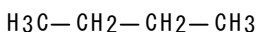
C4H8 は、不飽和結合を含んだ分子式

不飽和結合の位置が不明なため、成分の分子式 (CMF) の水素の数が、分子式 (MF) の水素の数より 2 個多い

CM 1  
 CRN 106-97-8  
 CMF C4 H10

単成分物質のレコードだが CM1 (成分 1) で収録される

飽和体の構造



不飽和結合の位置が明確な物質

RN 107-01-7 REGISTRY  
 CN 2-Butene  
 MF C4 H8  
 $\text{H3C}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3$

\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

9229 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 603 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN  
 9262 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

・ 飽和結合の位置が不明な物質

RN 53219-21-9 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN 7-Octen-2-ol, 2-methyl-6-methylene-, dihydro deriv. (CA INDEX NAME)  
 OTHER CA INDEX NAMES:  
 CN Myrcenol, dihydro- (6CI)  
 OTHER NAMES:  
 CN Dihydromyrcenol  
 MF C10 H20 O  
 CI IDS, COM  
 SR CA  
 LC STN Files: BIOSIS, CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, CIN,

水素化を意味する名称

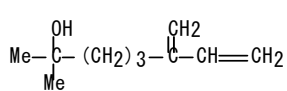
C10H20O は、飽和結合を含む分子式

飽和結合の位置が不明なため、成分の分子式 (CMF) の水素の数が、分子式 (MF) の水素の数より 2 個少ない

CM 1  
 CRN 543-39-5  
 CMF C10 H18 O

単成分物質のレコードだが CM1 (成分 1) で収録される

二重結合が 1 箇所多い構造



飽和結合の位置が明確な物質

RN 18479-59-9 REGISTRY  
 CN 2-Octanol, 2-methyl-6-methylene-  
 MF C10 H20 O

$$\begin{array}{c} \text{OH} \quad \text{CH}_2 \\ | \quad | \\ \text{Me}-\text{C}-(\text{CH}_2)_3-\text{C}-\text{Et} \\ | \\ \text{Me} \end{array}$$

\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

265 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 6 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN  
 266 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

特有の検索手法が必要な物質の検索

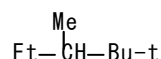
定義の不完全な物質 (IDS)

③ 枝分かれの構造が不明なアルキル鎖を含む物質

RN 26635-64-3 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Isooctane (CA INDEX NAME)  
 DR 11070-05-6, 1281-99-8  
 MF C8 H18  
 CI IDS, COM  
 LC STN Files: BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAPLUS, CASRE  
 CIN, EMBASE, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, IPA, MSDS  
 USPAT2, USPATFULL, USPATOLD  
 Other Sources: EINECS\*\*, NDSL\*\*, TSCA\*\*  
 (\*\*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

構造が明確なアルキル鎖を含む物質

RN 564-02-3 REGISTRY  
 CN Pentane, 2,2,3-trimethyl-  
 MF C8 H18



枝分かれの構造が不明なため、  
結合表が収録されていない

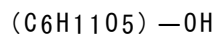
\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

1363 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 6 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 1363 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

④ 環構造が不明な糖基を含む物質

RN 158111-75-2 REGISTRY  
 ED Entered STN: 06 Oct 1994  
 CN  $\alpha$ -L-Galactose (9CI) (CA INDEX NAME)  
 MF C6 H12 O6  
 CI IDS  
 SR CA  
 LC STN Files: ANABSTR, BIOSIS, CA, CAPLUS, USPATFULL

アノマー位の立体が明記 ( $\alpha$ ) されているため  
環状であることは明確だが、ピラノース型 (6 員  
環) かフラノース型 (5 員環) が不明



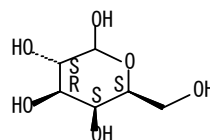
6 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 6 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

環構造が不明なため、  
結合表が収録されていない

環構造が明確な糖基を含む物質

RN 39392-65-9 REGISTRY  
 CN L-Galactopyranose  
 MF C6 H12 O6

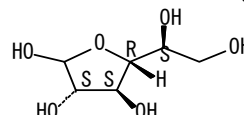
Absolute stereochemistry



ピラノース型

RN 41846-90-6 REGISTRY  
 CN L-Galactofuranose  
 MF C6 H12 O6

Absolute stereochemistry



フラノース型

特有の検索手法が必要な物質の検索

定義の不完全な物質 (IDS)

⑤ 縮合反応生成物で、正確な構造が不明な物質

- ・ エステル化の位置が不明な物質

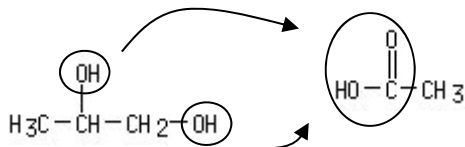
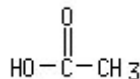
RN 1331-12-0 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN 1,2-Propanediol, monoacetate (CA INDEX NAME)  
 OTHER NAMES:  
 CN 1,2-Propylene glycol monoacetate  
 CN Propylene glycol monoacetate  
 DR 25395-54-4  
 MF C5 H10 O3  
 CI IDS, COM  
 SR CA  
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, RTECS\*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL, USPATOLD  
 (\*File contains numerically searchable property data)  
 Other Sources: DSL\*\*, EINECS\*\*, TSCA\*\*  
 (\*\*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

モノアセテート

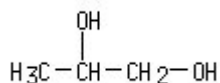
縮合後の分子式  
成分数は 1 (1/NC)

CM 1  
 CRN 64-19-7  
 CMF C2 H4 O2

縮合前の物質の分子式  
単成分物質のレコードだが CM1 と CM2 で収録される



CM 2  
 CRN 57-55-6  
 CMF C3 H8 O2



122 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO  
 8 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERI  
 122 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907

縮合後の正確な構造が明確な物質

RN 627-69-0  
 CN 1,2-Propanediol, 1-acetate  
 MF C5 H10 O3

$$\begin{array}{c} \text{OH} \\ | \\ \text{Me}-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{OAc} \end{array}$$

RN 6214-01-3  
 CN 1,2-Propanediol, 2-acetate  
 MF C5 H10 O3

$$\begin{array}{c} \text{OAc} \\ | \\ \text{Me}-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{OH} \end{array}$$

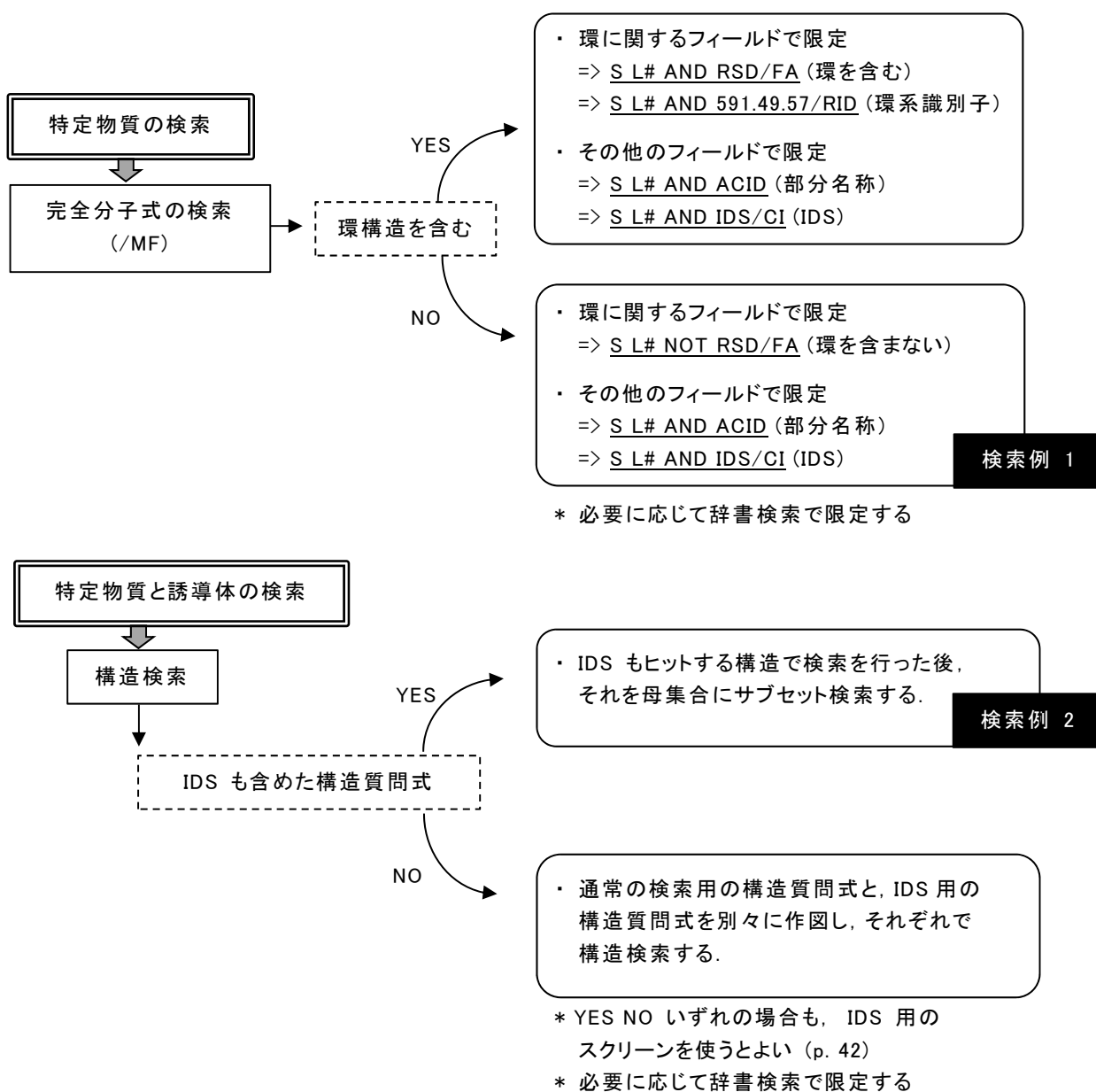
## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 定義の不完全な物質 (IDS)

#### ■ 検索のポイント

- ・ 特定物質を検索する場合は、分子式関連フィールドで検索する。
- ・ 誘導体も含めて IDS を検索する場合は、構造検索する。ノイズが入る可能性が高いため、サブセット検索やスクリーンを利用する。

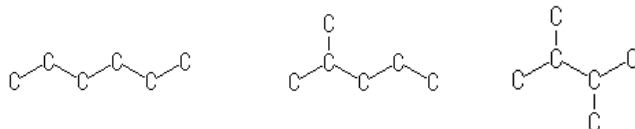
#### ■ IDS を考慮した検索の流れ



## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 定義の不完全な物質 (IDS)

- 検索例 1 : 構造異性体 (イソヘキサン) や IDS も含めたヘキサンの検索.



#### ◆ 検索の流れ ◆

##### 1. 完全分子式 (/MF) で検索する

特定物質は, まず完全分子式で検索する.

##### 2. 不要な回答を除く

構造異性体や標識物質が多く含まれていたなら, 分子式関連フィールドや部分名称で不要な回答を除く.

##### 3. IDS を確認する

IDS/CI で, IDS に限定する.

#### 1. 完全分子式 (/MF) で検索する

```
=> FILE REGISTRY          ← REGISTRY ファイルに入る
=> E C6H14/MF             ← 完全分子式 (/MF) で EXPAND する
E1          1          C6H13ZN/MF
E2          1          C6H13ZN. BRMG/MF
E3         163 --> C6H14/MF
E4          1          C6H14. (C2H4)X. C2H3CL3/MF
E5          1          C6H14. 1/2C6H7N/MF
:

=> S E3                  ← 調べたい物質やその IDS , 構造異性体を含む集合
L1          163 C6H14/MF

=> D SCAN                ← SCAN 表示形式で表示 (無料)

L1  163 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2013 ACS on STN
IN  Butane-2-d, 2,3-dimethyl- (9CI)
MF  C6 H13 D

      D
      |
Me-C-Pr-i
      |
      Me

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):50

L1  163 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2013 ACS on STN
IN  Hexane, labeled with carbon-11 (9CI)
MF  C6 H14

      Me-(CH2)4-Me
:

```

## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 定義の不完全な物質 (IDS)

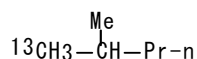
#### 2. 不要な回答を除く

=> S L1 NOT ((D OR T)/ELS OR LABELED)  
L2 50 L1 NOT ((D OR T)/ELS OR LABELED)

← 標識物質を除く

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で表示 (無料)

L2 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
IN Pentane-1-13C, 2-methyl-  
MF **C6 H14**



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 49  
:

この例では、(D OR T)/ELS で、水素の同位体 (D, T) を除いた。また、標識物質の名称に使われることが多い LABELED を部分名称として含むレコードを除いた

13C や 14C といった名称のみが登録された標識物質は L2 の式で除けない (除く場合は 1!C? を NOT 演算する)

#### 3. IDS を確認する

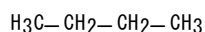
=> S L2 AND IDS/CI  
L3 4 L2 AND IDS/CI

← IDS に限定する

=> D SCAN

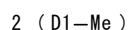
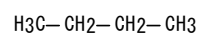
← SCAN 表示形式で表示 (無料)

L3 4 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
IN Butane, ethyl- (9CI)  
MF **C6 H14**  
CI **IDS, COM**

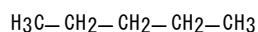


HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 3

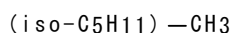
L3 4 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
IN Butane, 2,2(or 2,3)-dimethyl-  
MF **C6 H14**  
CI **IDS, COM**



L3 4 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
IN Pentane, methyl-  
MF **C6 H14**  
CI **IDS, COM**



L3 4 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
IN Isohexane (9CI)  
MF **C6 H14**  
CI **IDS**



ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

Et の置換位置不明

2 つの Me の置換位置不明

Me の置換位置不明

C5H11 の構造不明

置換基の位置が不明な物質

枝分かれの構造が不明なアルキル鎖を含む物質

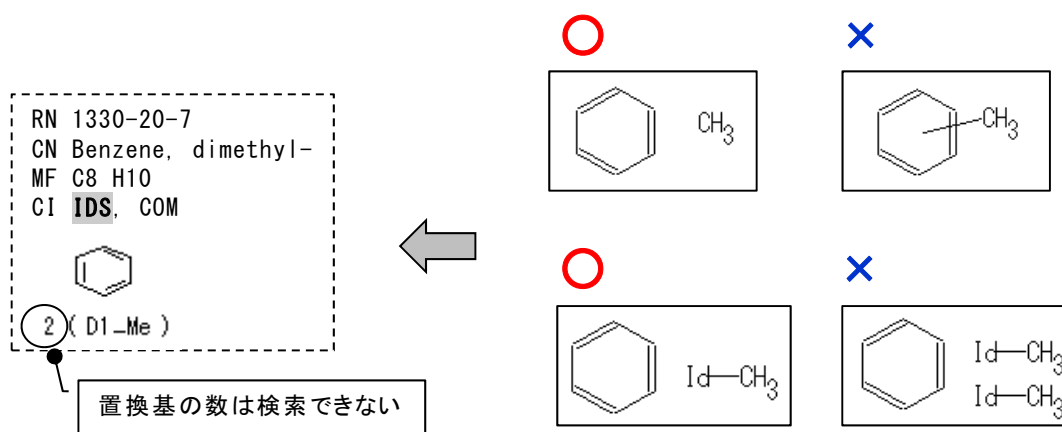
## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 定義の不完全な物質 (IDS)

#### ■ IDS のタイプ別構造作図のポイント

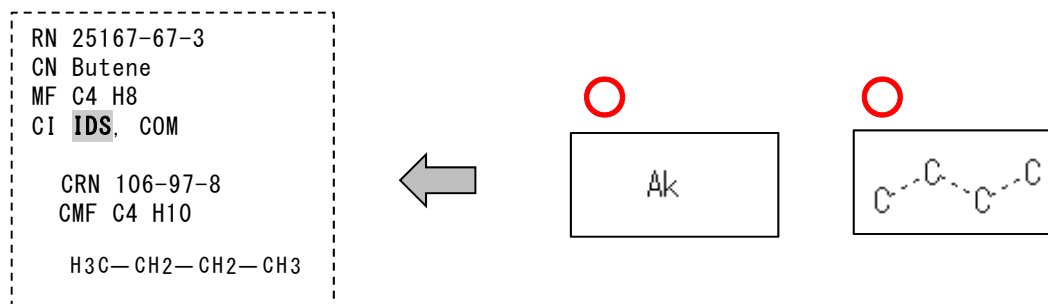
##### ① 置換基の位置が不明な物質

- 基本骨格と置換基を、同一画面上に離して作図する。
- 同じ置換基が二つ以上存在する場合でも、置換基は一つだけ作図する。
- 「D-置換基」部分を作図する場合は、ダミーノード Id\* を用いる。



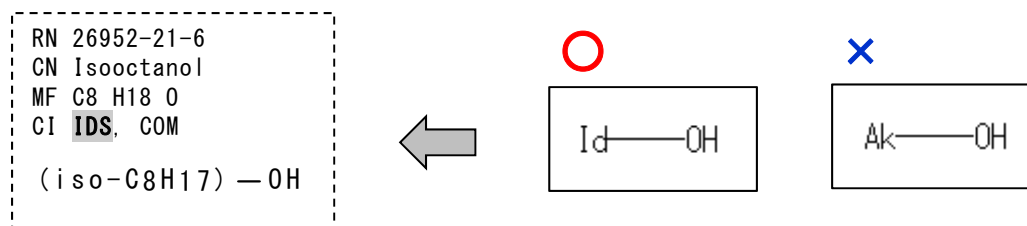
##### ② 飽和または不飽和結合の位置が不明な物質

- 「飽和または不飽和結合の位置が不明」な部分は、不定結合で作図する。



##### ③ 枝分かれの構造が不明なアルキル鎖を含む物質

- 「枝分かれの構造が不明なアルキル鎖」を、ダミーノード Id\* で作図する。
- 「枝分かれの構造が不明なアルキル鎖」を、Ak で作図しない。



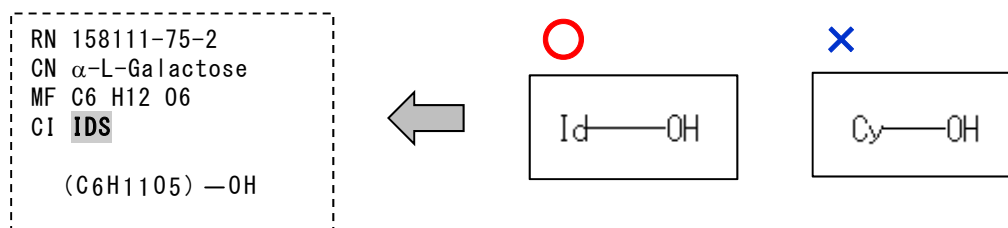


## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 定義の不完全な物質 (IDS)

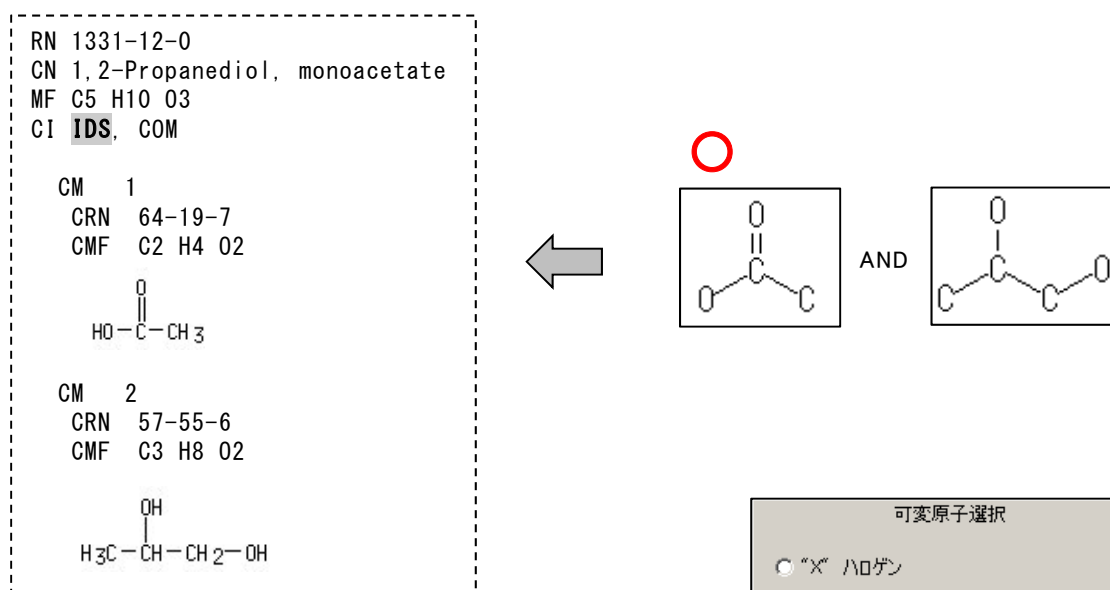
#### ④ 環構造が不明な糖基を含む物質


- 「環構造が不明な糖基」を、ダミーノード Id\* で作図する.
- 「環構造が不明な糖基」を、Cy で作図しない.



#### ⑤ 縮合反応生成物で、正確な構造が不明な物質

- 縮合反応前の物質を別々に作図し、各構造質問式を AND 演算する.



\* ダミーノードは、作図画面の可変原子のアイコン  をクリックし、可変原子選択一覧から選択する.

可変原子選択

- "X" ハロゲン
- "A" H 以外の元素
- "Q" C,H 以外の元素
- "M" 金属
- "Cb" 炭素環系
- "Cy" 環系
- "Hy" ヘテロ環系
- "Id" 'ダミー' ノード (ポリマー)
- "Ak" 炭素鎖

除く
 

1回使用

キャンセル

複数回使用

## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 定義の不完全な物質 (IDS)

#### ■ IDS のスクリーン

- ・ スクリーンを利用して IDS に限定した構造検索が可能.

番号	内容	p.40-41 タイプ
2048	定義の不完全な物質 (IDS)	①~⑤
2071	部分的な構造が不明な物質 - 枝分かれの構造が不明なアルキル鎖を含む物質 - 環構造が不明な糖基を含む物質	③ ④
2072	置換基の位置が不明な物質	①
2073	縮合反応生成物で、正確な構造が不明な物質	⑤
2074	飽和または不飽和結合の位置が不明な物質	②

- ・ SCREEN コマンドの入力と検索式

=> SCR スクリーン番号

← スクリーン番号を指定する (L#)

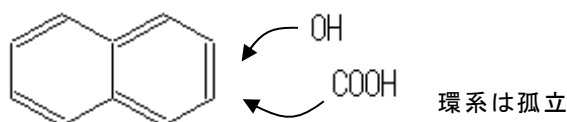
=> S L\$ AND L#

← 構造質問式 (L\$) とスクリーン番号の L 番号 (L#) を  
AND 演算する

## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 定義の不完全な物質 (IDS)

- 検索例 2 : ナフタレン環に少なくとも水酸基とカルボキシ基が一つずつ置換している物質を、誘導体も含めて検索する. IDS で登録されたレコードも検索する.



#### ◆ 検索の流れ ◆

##### 1. 部分構造検索し, 母集合を作る

IDS も検索できる構造質問式で, 部分構造検索する.

##### 2. サブセット検索 - 特定物質

置換基の位置が明確な物質を検索する. 「可変置換位置」で作図する.

##### 3. サブセット検索 - IDS

IDS を検索する. 「可変原子 Id (ダミーノード)」で置換基を作図する.

#### 1. 部分構造検索し, 母集合を作る

=> FILE REGISTRY

← *REGISTRY* ファイルに入る

=>

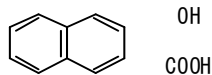
Uploading C:\Documents and Settings\%xxx%\My Documents\STN Express 8.5\Queries\s\_1.str  
L1 STRUCTURE UPLOADED

← 構造質問式をアップロードする

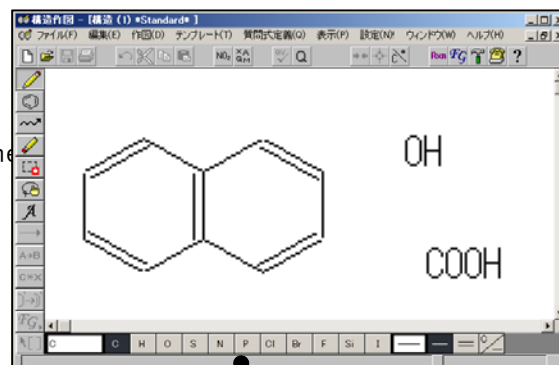
=> D QUE

← アップロードした構造質問式を確認する

L1 STR



Structure attributes must be viewed using the



母核や置換基を離して  
作図するのがポイント

## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 定義の不完全な物質 (IDS)

=> S L1 ← 部分構造検索のサンプル検索 (無料)  
SAMPLE SEARCH INITIATED 09:54:37 FILE 'REGISTRY'  
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 8228 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 8228 ITERATIONS 50 ANSWERS  
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)  
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 159121 TO 169999  
PROJECTED ANSWERS: 82966 TO 90874

FULL FILE PROJECTIONS が  
ONLINE COMPLETE であることを  
確認する

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL ← 部分構造検索のフルファイル検索  
FULL SEARCH INITIATED 09:54:43 FILE 'REGISTRY'  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 165532 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 165532 ITERATIONS 86505 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

L3 86505 SEA SSS FUL L1

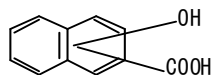
L3 を母集合に, 次から  
サブセット検索する

## 2. サブセット検索 - 特定物質

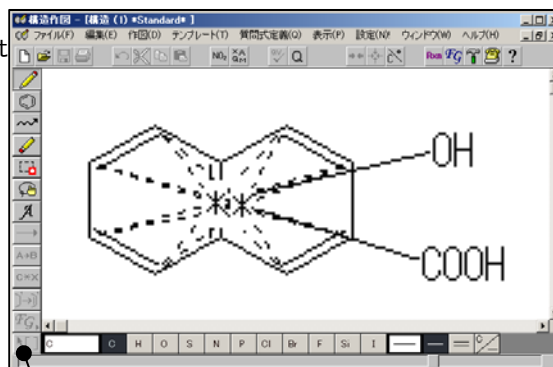
=>  
Uploading C:\Documents and Settings\%xxx%\My Documents\STN Express 8.5\Queries\s\_2.str  
L4 STRUCTURE UPLOADED ← 構造質問式をアップロードする

=> D QUE ← アップロードした構造質問式を確認する

L4 STR



Structure attributes must be viewed using the St



作図ツール「可変置換位置」を使うと,  
置換基が環系の指定した位置に置換した  
構造をまとめて検索できるので便利

特有の検索手法が必要な物質の検索

定義の不完全な物質 (IDS)

=> S L4 SUB=L3 SAM ← サブセット検索のサンプル検索 (無料)

L5 50 SEA SUB=L3 SSS SAM L4

=> S L4 SUB=L3 FUL ← サブセット検索のフルファイル検索

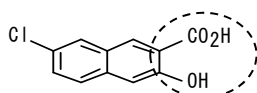
L6 6184 SEA SUB=L3 SSS FUL L4

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で表示 (無料)

L6 6184 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
IN 2-Naphthalenecarboxylic acid, 7-chloro-3-hydroxy-  
MF C11 H7 Cl O3

サブセット検索の入力  
=> S L# 検索のタイプ SUB=Ln 検索の範囲

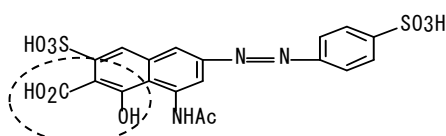
Ln は検索対象範囲 (母集合 L3)  
検索のタイプ (デフォルト : 部分構造検索)  
検索の範囲 (SAM : サンプル検索,  
FUL : フルファイル検索)



\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):50

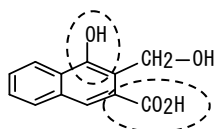
L6 6184 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
IN 2-Naphthalenecarboxylic acid, 8-(acetylamino)-1-hydroxy-3-sulfo-6-[2-(4-sulfo-phenyl)diazenyl]-  
MF C19 H15 N3 O10 S2  
CI COM



OH 基と COOH 基がそれぞれ一つずつ  
ナフタレン環に置換した物質

\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

L6 6184 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
IN 2-Naphthalenecarboxylic acid, 4-hydroxy-3-(hydroxymethyl)-  
MF C12 H10 O4



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

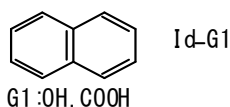
特有の検索手法が必要な物質の検索

定義の不完全な物質 (IDS)

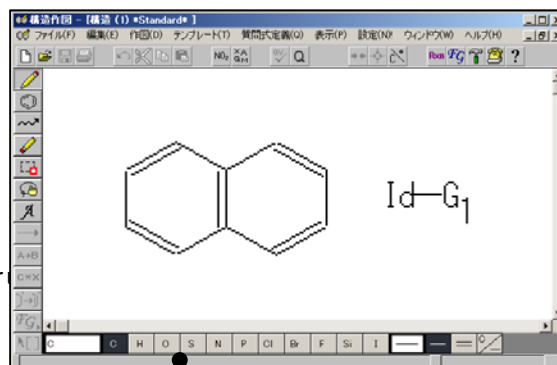
3. サブセット検索 - IDS

=> Uploading C:\Documents and Settings\%xxxx%\My Documents\STN Express 8.5\Queries\s\_3.str  
 L7 STRUCTURE UPLOADED ← 構造質問式をアップロードする

=> D QUE ← アップロードした構造質問式を確認する  
 L7 STR



Structure attributes must be viewed using the Str



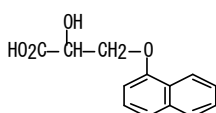
作図ツール「G グループ」に  
 OH と COOH を含め、ダミー  
 ノード Id と結合させる

=> S L7 SUB=L3 SAM ← サブセット検索の  
 サンプル検索 (無料)  
 L8 : 5 SEA SUB=L3 SSS SAM L7

=> S L7 SUB=L3 FUL ← サブセット検索の  
 フルファイル検索  
 L9 : 201 SEA SUB=L3 SSS FUL L7

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で表示 (無料)

L9 201 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
 IN Propanoic acid, 2-hydroxy-3-[(hydroxymethoxy-1-naphthalenyl)oxy]- (9CI)  
 MF C14 H14 O6  
 CI IDS



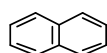
← ノイズ

D1-O-Me

D1-OH

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):50

L9 201 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
 IN Naphthalenecarboxylic acid, dioctylsulfo- (9CI)  
 MF C27 H40 O5 S  
 CI IDS, COM



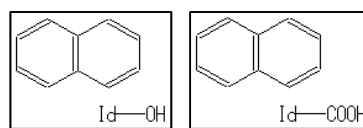
D1-SO3H

← ノイズ

D1-CO2H

2 [ Me- (CH2)7-D1 ]

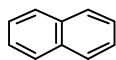
一方の置換基だけダミーノードで  
 作図しているので、ノイズが含まれる



特有の検索手法が必要な物質の検索

定義の不完全な物質 (IDS)

L9 201 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
 IN Naphthalenecarboxylic acid, dihydroxy-  
 MF C11 H8 O4  
 CI IDS, COM

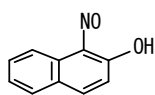


OH 基と COOH 基の  
置換位置不明

2 (D1-OH)

D1-CO2H

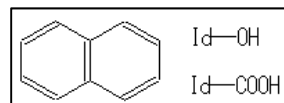
L9 201 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
 IN Naphthalenecarboxylic acid, 2-hydroxy-1-nitroso- (9CI)  
 MF C11 H7 N O4  
 CI IDS



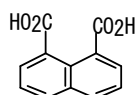
OH 基の置換位置は明確だが、  
COOH 基の置換位置不明

D1-CO2H

一方の置換基の置換位置が  
確定した構造は、下の作図で  
ヒットしないので注意



L9 201 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
 IN 1,8-Naphthalenedicarboxylic acid, hydroxy- (9CI)  
 MF C12 H8 O5  
 CI IDS, COM



COOH 基の置換位置は明確だが、  
OH 基の置換位置不明

D1-OH

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S L9 AND (ACID (L) HYDROXY?)

← 部分名称の検索でノイズを減らす

L10 160 L9 AND (ACID (L) HYDROXY?)

(L) 演算子で、複数のタームを同一名称内に限定する

この例では、目的の物質に含まれている ACID と  
HYDROXY? を (L) 演算子で同一名称中に限定した

左ページの 2 番目のノイズは除かれるが、1 番目の  
ノイズは含まれる

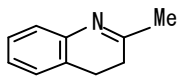
## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 定義の不完全な物質 (IDS)

#### ■ 定義の不完全な物質の名称

- 定義の不完全な物質の CA 索引名は、構造を判断するのに重要である。どこまで特定されているかによって、様々な登録がある。

RN 65040-76-8  
IN Quinoline, 3(or 4)-(1,1-dimethylethyl)-3,4-dihydro-2-methyl- (9CI)  
MF C14 H19 N  
CI IDS



D1-Bu-t

t-Bu 基が、3 位か 4 位に置換する

RN 35655-34-6 REGISTRY  
CN Benzenemethanol, ar-amino- (CA INDEX NAME)  
MF C7 H9 N O  
CI IDS

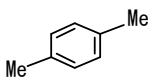


D1-NH<sub>2</sub>

D1-CH<sub>2</sub>-OH

NH<sub>2</sub> 基が、芳香環 (ar = aromatic ring) のどこかに置換する

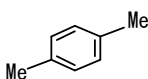
RN 53906-59-5 REGISTRY  
CN Benzene, dichloro-1,4-dimethyl- (CA INDEX NAME)  
MF C8 H8 Cl<sub>2</sub>  
CI IDS, COM



2 (D1-Cl)

2 つの Cl 基が、ベンゼン環のどこかに置換する

RN 29988-74-7 REGISTRY  
CN Benzene, 1,4-dimethyl-, dichloro deriv. (CA INDEX NAME)  
MF C8 H8 Cl<sub>2</sub>  
CI IDS, COM



2 (D1-Cl)

2 つの Cl 基が、どこかに置換する (メチル基に結合する可能性もある)

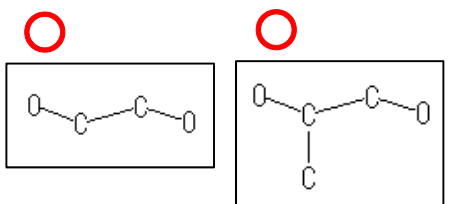
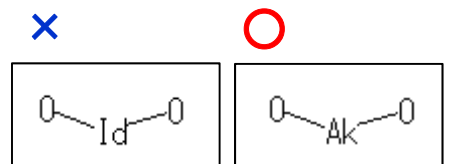
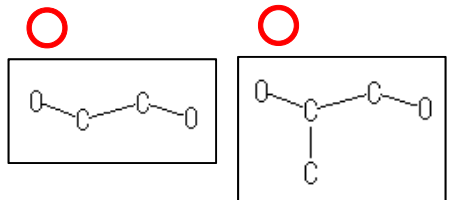
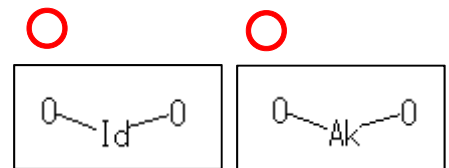
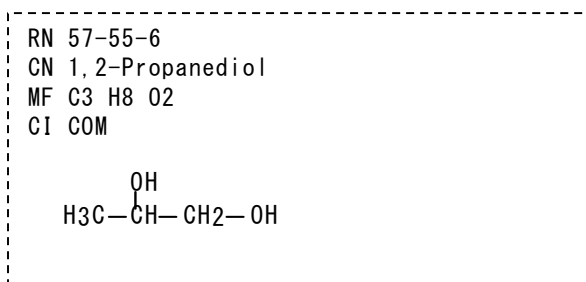
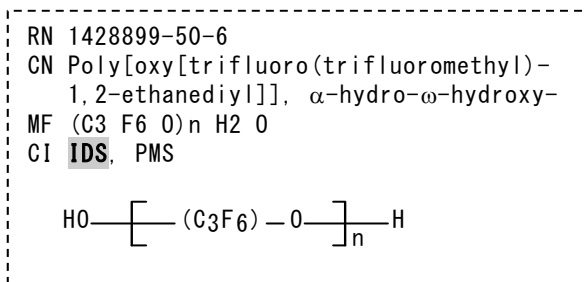
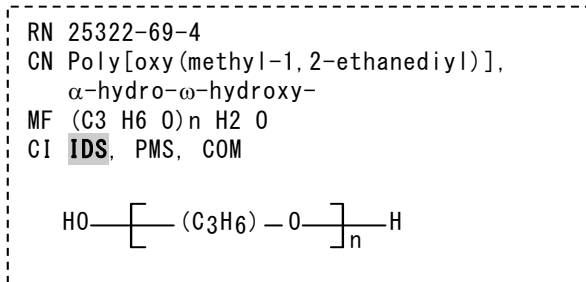


特有の検索手法が必要な物質の検索

定義の不完全な物質 (IDS)

■ ポリプロピレングリコール構造の検索

- 以前、ポリプロピレングリコール構造 (C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 構造) は、ダミーノード Id で作図する必要があったが、現在は、可変原子 (Ak) や C-C を作図するとヒットするように強化されたため、Id で作図する必要がなくなった。



## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 定義の不完全な物質 (IDS)

#### ■ 定義の不完全な物質のスクリーン 2048 とクラス識別子 IDS/CI の違い

- ・ 定義の不完全な物質のスクリーン 2048 では「成分のクラス識別子 (CCI) のみに IDS が付与されているレコード」もヒットするが、クラス識別子 IDS/CI ではヒットしない。
- ・ レコード例

```
RN 91549-22-3 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 1,3-Butanediol, polymer with 1,6-diisocyanatotrimethylhexane; (9CI) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Hexane, 1,6-diisocyanatotrimethyl-, polymer with 1,3-butanediol (9CI)
MF (C11 H18 N2 O2 . C4 H10 O2)x
```

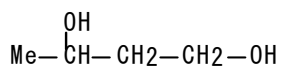
```
CI PMS
PCT Polyurethane, Polyurethane formed
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS
```

```
CM 1
CRN 28679-16-5
GMF C11 H18 N2 O2
CCI IDS
OCN- (CH2)6-NCO
3 (D1-Me)
```

91549-22-3 のクラス識別子 (CI) は PMS (ポリマー) で、成分のクラス識別子 (CCI) のみに IDS が付与されている。

このようなレコードは、スクリーン 2048 でヒットするが、IDS/CI ではヒットしない

```
CM 2
GRN 107-88-0
GMF C4 H10 O2
```



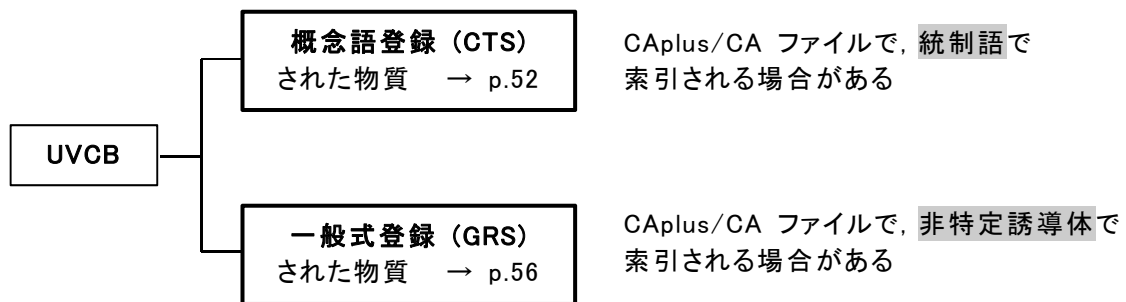
1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 組成不明, 組成不定, 複雑な反応生成物および生体物質 (UVCB)

#### ■ 組成不明, 組成不定, 複雑な反応生成物および生体物質 (UVCB)

- ・ 構造や組成が不定の化学物質には原則として CAS 登録番号は付与されないが, 例外的\*に REGISTRY ファイルに登録される場合がある (\* 既存化学物質リストへの登録など).
- ・ このような物質を, 組成不明, 組成不定, 複雑な反応生成物および生体物質 (UVCB: Unknown or Variable Composition, Complex Reaction Products and Biological Material) という.
  - UVCB の CAS 登録番号 (RN) には \* (アスタリスク) が付与される.
  - アスタリスク付きの CAS 登録番号は, CA の索引に用いられていないため, 通常のクロスオーバー検索では文献を見つけることができない.
- ・ UVCB は, クラス識別子 CTS か GRS のいずれかで登録される



## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 概念語登録 (CTS)

#### ■ 概念語登録 (CTS)

- ・ 概念語登録 (CTS) は, CAplus/CA ファイルの見出し語 (統制語) となるような物質が例外的に REGISTRY ファイルに登録された物質である.
  - 概念語登録 (CTS) の CAS 登録番号には \* が付与されている.
- ・ レコード例

```
RN 299184-75-1 REGISTRY *
* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may
  result in incomplete search results. For additional information, enter HELP
  RN* at an online arrow prompt (=>).
ED Entered STN: 25 Oct 2000
CN Oils, Argania spinosa (CA INDEX NAME)
DEF Extractives and their physically modified derivatives. It consists
  primarily of the glycerides of the fatty acids oleic, linoleic, palmitic,
  and stearic. (Argania spinosa, Sapotaceae).
MF Unspecified
CI MAN, CTS
SR CAS Client Services
LC STN Files: CHEMLIST
```

CAS 登録番号にアスタリスクが付与される。  
通常のコスオーバー検索では、結果が  
不十分であるとの注意

物質の定義 (DEF) フィールドは、物質同定  
のため付随的な情報や定義を与える。

CTS のうち約 2 割のレコードに物質の定義  
(DEF) が収録されている

概念語登録のクラス  
識別子は CTS

#### ■ CA ファイルの索引

- ・ CA ファイルでこのような物質を索引する場合、一般概念の見出し語 (統制語) で索引する。
- ・ 通常のコスオーバー検索では文献を見つけることができない。

## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 概念語登録 (CTS)

#### ■ 検索例 : 以下の物質 (水素化されたアマニ油) に関する文献検索

```
RN 91053-54-2 REGISTRY *
* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may
  result in incomplete search results. For additional information, enter HELP
  RN* at an online arrow prompt (=>).
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Linseed oil, hydrogenated (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN Hydrogenated linseed oil
CN Hydrogenated vegetable oils, linseed oil
MF Unspecified
CI MAN, CTS
SR European Union (EU)
LC STN Files: CHEMLIST
  Other Sources: EINECS**
  (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
```

#### ◆ 検索の流れ ◆

##### 1. CAplus ファイルで統制語を調べる

CA 索引名を参考に, CAplus/CA ファイルで統制語を調べる.

##### 2. 統制語やキーワードで検索する

統制語で検索すると, 主題に限定した検索ができる. 網羅的にしたい場合は基本索引で検索する.

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> S 91053-54-2

← CAS 登録番号を検索 (無料)

L1 1 91053-54-2  
(91053-54-2/RN)

=> FILE CAPLUS

← CAplus ファイルに入る

=> S L1

← クロスオーバー検索 (無料)

L2 0 L1

念のためアスタリスク付き CAS 登録番号で検索した L 番号をクロスオーバー検索したが回答は得られなかった

特有の検索手法が必要な物質の検索

概念語登録 (CTS)

1. CAplus ファイルで統制語を調べる

=> E HYDROGENATED LINSEED OIL/CT ← 化学物質名称を統制語 (/CT) フィールドで EXPAND する

E#	FREQUENCY	AT	TERM
E1	1		HYDROGENASES, STEROID 11A-/CTJP
E2	1		HYDROGENASES, STEROID 11B-/CTJP
E3	0	2	HYDROGENATED LINSEED OIL/CTJP
E4	0	2	HYDROGENATED MALEATED SBR RUBBER/CTJP
E5	0	2	HYDROGENATED MATERIALS/CTJP

=> E E3+ALL ← E3 に関係コード +ALL をつけて展開する

E1	0	-->	Hydrogenated linseed oil/CTJP
E2	0		USE Linseed oil (L) hydrogenated/CTJP

\*\*\*\*\* END \*\*\*\*\*

=> E E2+ALL ← E2 に関係コード +ALL をつけて展開する

E1	14951	BT5	Chemical compounds/CTJP
E2	14223	BT4	Macromolecular compounds/CTJP
E3		JP	高分子物質/CTJP
E4	14951	BT5	Chemical compounds/CTJP
E19	21524	BT5	Fluids/CTJP
E20		JP	流体/CTJP
E21	29576	BT4	Liquids/CTJP
E22		JP	液体/CTJP
E23	83966	BT3	Oils/CTJP
E24		JP	油/CTJP
E25	133624	BT2	Fats and Glyceridic oils/CTJP
E26		JP	脂肪及びグリセリド油/CTJP
E27	15589	BT1	Linseed oil/CTJP
E28		JP	アマニ油/CTJP
E29	0	-->	Linseed oil (L) hydrogenated/CTJP
E30		UF	Hydrogenated linseed oil/CTJP

\*\*\*\*\* END \*\*\*\*\*

リンク語

リンク語とは、統制語と修飾語が (L) 演算子で組み合わされた質問式のこと。0 件と表示されるが、検索すると回答が得られる

2. 統制語やキーワードで検索する

=> S E29 ← E29 を検索する

L3 78 "LINSEED OIL (L) HYDROGENATED"/CTJP

=> D SCAN TI HITIND ← SCAN 表示形式に含まれる TI (標題) と HITIND (ヒットした索引部分) を表示 (無料)

L3 78 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
 TI Base oil  
 TIJP 基油 [機械翻訳]  
 IT **Linseed oil**

RL: NUU (Other use, unclassified); PEP (Physical, engineering or chemical process); PROC (Process); USES (Uses)  
 (hydrolyzed and pre-hydrogenated, stearic acid fraction from, ketonization-hydrogenation-isomerization of; base oil production)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):50

特有の検索手法が必要な物質の検索

概念語登録 (CTS)

L3 78 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
TI The healthfulness of hydrogenated fats for food purposes. Experiments with  
cottonseed, peanut, linseed and sesame oils  
IT Cottonseed oil  
**Linseed oil**  
Peanut oil  
(**hydrogenated**, in foods)

L3 78 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
TI Use of vegetable oils and animal fats in polyols for flexible foams  
TIJP 軟質発泡体のためのポリオールにおける植物油と獣脂の用途 [機械翻訳]  
IT Coconut oil  
**Linseed oil**  
:  
RL: IMF (Industrial manufacture); TEM (Technical or engineered material  
use); PREP (Preparation); USES (Uses)  
(reaction products, **hydrogenated** and esterified, polymers  
with isocyanates, polyurethane foams; flexible polyurethane foams  
obtained from **hydrogenated** and transesterified vegetable oils  
and animal fats)  
:

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S LINSEED OIL/CT (L) HYDROGEN? ← 語尾変化を考慮する  
L4 222 LINSEED OIL/CT (L) HYDROGEN?

=> S L4 NOT L3  
L5 144 L4 NOT L3

=> D SCAN TI HITIND ← SCAN 表示形式に含まれる TI (標題) と HITIND (ヒット  
した索引部分) を表示 (無料)

L5 144 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
TI Formation of cyclic fatty acids at the hydrogenation of linseed oil  
IT **Linseed oil**  
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
(**hydrogenation** of, fatty acids cyclization during)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):50

L5 144 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
TI Characteristics of deodorized-polymerized oils  
IT **Linseed oil**  
(deodorized-polymerized, and its **hydrogenation**)

L5 144 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN ← ノイズ  
TI Free radical addition of hydrogen sulfide and thiols to linseed oil and  
methyl oleate  
IT **Linseed oil**  
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
(addition reaction of, with **hydrogen** sulfide and thiols by uv  
irradiation)  
:

## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 一般式登録 (GRS)

#### ■ 一般式登録 (GRS)

- ・ 一般式登録 (GRS) は、一般的な誘導体が例外的に REGISTRY ファイルに登録された物質である。

- 一般式登録 (GRS) の CAS 登録番号には \* が付与されている。

#### ・ レコード例

```
RN 100208-99-9 REGISTRY *
* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may
  result in incomplete search results. For additional information, enter HELP
  RN* at an online arrow prompt (=>).
ED Entered STN: 15 Feb 1986
CN 9-Octadecenoic acid (9Z)-, 1,2,3-propanetriyl ester, oxidized, sulfated,
  sulfonated (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN 9-Octadecenoic acid (Z)-, 1,2,3-propanetriyl ester, oxidized, sulfated,
  sulfonated
MF Unspecified
CI MAN, GRS
SR European Union (EU)
LC STN Files: CHEMLIST
  Other Sources: EINECS**
  (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
```

\*\*\* STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE \*\*\*

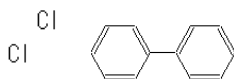
CAS 登録番号にアスタリスクが付与される。通常のクロスオーバー検索では、結果が不十分であるとの注意

一般式登録のクラス識別子は GRS

#### ■ CA ファイルの索引

- ・ CA ファイルでこのような物質を索引する場合、完全に定義されている基本骨格部分に相当する物質を CAS 登録番号で索引し、修飾部分はテキスト説明句によって記述する。

(例) 塩素化ビフェニル (一般的誘導体)



ビフェニルの CAS 登録番号 D + テキスト説明句  
IT 92-52-4D, chloro derivs

- ・ 通常のクロスオーバー検索では文献を見つけることができない。



## 特有の検索手法が必要な物質の検索

### 一般式登録 (GRS)

#### ■ 検索例 : 以下の物質 (メタクリル酸と C10-18 のアルキルエステル) に関する文献検索

```
RN 90530-47-5 REGISTRY *
* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may
  result in incomplete search results. For additional information, enter HELP
  RN* at an online arrow prompt (=>).
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, C10-18-alkyl esters (CA INDEX NAME)
MF Unspecified
CI MAN, GRS
SR European Union (EU)
LC STN Files: CHEMLIST
  Other Sources: EINECS**
  (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
```

#### ◆ 検索の流れ ◆

##### 1. REGISTRY ファイルで基本骨格を検索する

CAplus/CA ファイルで非特定誘導体として索引される場合が多いため、基本骨格となる物質を REGISTRY ファイルで検索する。

##### 2. (H) CAplus ファイルで非特定誘導体を検索する

CAS 登録番号/D とキーワードで検索する。1976 年以前も検索する場合は CA 索引名を含めた検索をする。検索語が多い場合は HCAplus/HCA ファイルを利用する。

① 1977 年以降の収録 :

=> S REGISTRY ファイルの L 番号/D (L) キーワード

② 1976 年以前の収録 :

=> S (REGISTRY ファイルの L 番号 OR CA 索引名) (L) キーワード RAN=(,1976)

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> S 90530-47-5

← CAS 登録番号を検索 (無料)

L1 1 90530-47-5  
(90530-47-5/RN)

=> FILE CAPLUS

← CAplus ファイルに入る

=> S L1

← クロスオーバー検索 (無料)

L2 0 L1

念のためアスタリスク付き CAS 登録番号で検索した L 番号をクロスオーバー検索した  
が回答は得られなかった

特有の検索手法が必要な物質の検索

一般式登録 (GRS)

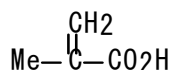
1. 基本骨格となる物質を REGISTRY ファイルで検索する

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> E 2-Propenoic acid, 2-methyl-/CN ← 基本骨格となる物質を CA 索引名を参考に EXPAND  
 E1 1 2-PROPENOIC ACID, 2-METHYL, POLYMER WITH C, C'-(2-ETHYL-1, 3-P  
 ROPANEDIYL) BIS(N-(3-ISOCYANATO-4-METHYLPHENYL)CARBAMATE)/CN する  
 E2 1 2-PROPENOIC ACID, 2-METHYL, POLYMER WITH HEXADECYL 2-METHYL-  
 2-PROPENOATE/CN  
 E3 1 --> 2-PROPENOIC ACID, 2-METHYL-/CN  
 E4 1 2-PROPENOIC ACID, 2-METHYL-, ((((((1-METHYL-2-((2-METHYL-1-  
 :  
 => S E3 ← E3 を検索  
 L3 1 "2-PROPENOIC ACID, 2-METHYL-"/CN

=> D ← IDE 表示形式 (デフォルト) で表示

L3 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
 RN 79-41-4 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN **2-Propenoic acid, 2-methyl-** (CA INDEX NAME)  
 OTHER CA INDEX NAMES:  
 CN Methacrylic acid (8CI)  
 OTHER NAMES:  
 CN α-Methacrylic acid  
 CN α-Methylacrylic acid  
 CN 2-Methyl-2-propenoate  
 CN 2-Methyl-2-propenoic acid  
 CN 2-Methylacrylic acid  
 CN Acryester MAA  
 CN GE 100  
 CN GE 110  
 CN Isobutenic acid  
 CN Light Ester A  
 :  
 CN NSC 7393  
 DR 1338439-16-9, 463311-95-7, 562836-84-4  
 MF C4 H6 O2  
 CI COM  
 SR CA  
 LC STN Files: ADISNEWS, ANABSTR, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAPLUS, CASREACT,  
 CBNB, CHEMCATS, CHEMINFORMRX, CHEMLIST, CHEMSAFE, CIN, CSNB, DDFU,  
 :  
 (\*File contains numerically searchable property data)  
 Other Sources: DSL\*\*, EINECS\*\*, TSCA\*\*  
 (\*\*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)



\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

42378 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 25478 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 42459 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

特有の検索手法が必要な物質の検索

一般式登録 (GRS)

2. (H) CPlus ファイルで非特定誘導体を検索 - ① 1977 年以降

=> FILE HCAPLUS

← HCAPLUS ファイルに入る

=> SET PLU ON; SET ABB ON; SET SPE ON  
SET COMMAND COMPLETED

← 複数形, 略語, 英米での綴り違いなどを自動的に含めて検索する設定

=> S L3/D (L) (C## (2A) ALKYL ESTER)  
L4 451 L3/D (L) (C## (2A) ALKYL ESTER)

① 1977 年以降の収録 :

=> S REGISTRY ファイルの L 番号/D (L) キーワード

=> D SCAN TI HITIND

← SCAN 表示形式に含まれる TI (標題) と HITIND (ヒットした索引部分) を表示 (無料)

L4 451 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
TI Slip resistant polyolefin pallets, crates, boxes, etc  
IT 74-85-1D, polymers with C1-4 alkyl (meth)acrylates and vinyl acetate  
79-10-7D, C1-4 alkyl esters, polymers with ethylene and vinyl acetate  
**79-41-4D, C1-4 alkyl esters,** ← ノイズ  
polymers with ethylene and vinyl acetate 108-05-4D, polymers with C1-4  
alkyl (meth)acrylates and ethylene  
RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)  
(cellular, slip-resistant pads for polyolefin containers)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):50

L4 451 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
TI High SPF sunscreen compositions  
TIJP 高い SPF 日焼け止め組成物 [機械翻訳]  
IT 65-85-0D, Benzoic acid, C12-15 alkyl esters 79-10-7D, 2-Propenoic acid,  
esters, polymers **79-41-4D, MethAcrylic acid, C12-22**  
**alkyl** esters, polymers 118-60-5 128-37-0, biological  
studies 131-57-7 134-09-8 294-40-6, Cyclopentasiloxane 541-02-6,  
Dow Corning 245 1314-13-2, Zinc oxide (ZnO), biological studies  
5466-77-3 6197-30-4 6938-94-9, Diisopropyl adipate 10124-68-2D,  
:  
RL: COS (Cosmetic use); BIOL (Biological study); USES (Uses)  
(high SPF sunscreen compns.)  
:

L4 451 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
TI Sulfonic acid group-containing inorganic oxides as esterification  
catalysts for synthesis of .alpha..beta.-unsaturated esters  
TIJP  $\alpha$ ,  $\beta$ -不飽和エステルの合成のためのエステル化触媒としてのスルホン酸基含有無  
機酸化物 [機械翻訳]  
IT **79-41-4DP, Methacrylic acid, C12-13-alkyl**  
**esters** 142-90-5P, Lauryl methacrylate 2495-27-4P, Cetyl  
methacrylate 2549-53-3P, Myristyl methacrylate 13402-02-3P, Cetyl  
acrylate 32360-05-7P, Stearyl methacrylate 50815-42-4P  
RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
(synthesis and purity verification of; sulfonic acid group-containing  
inorg. oxides as esterification catalysts for synthesis of  
.alpha..beta.-unsatd. esters)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

特有の検索手法が必要な物質の検索

一般式登録 (GRS)

2. (H) CAplus ファイルで非特定誘導体を検索 - ② 1976 年以前

=> S (L3 OR 2-PROPENOIC ACID, 2-METHYL- OR METHACRYLIC ACID) (L) (C## (2A)ALKYL ESTER) RAN=(, 1976)  
L5 37 (L3 OR 2-PROPENOIC ACID, 2-METHYL- OR METHACRYLIC ACID) (L) (C## (2A)ALKYL ESTER)

② 1976 年以前の収録 :

=> S (REGISTRY ファイルの L 番号 OR CA 索引名) (L) キーワード RAN=(,1976)  
\* CA 索引名は p.58 のレコードを参照

=> D L5 HIT 1-3

← HIT 表示形式で表示

L5 ANSWER 1 OF 37 HCAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
AB The strength and processing properties of nonpolar rubber vulcanizates were improved by the use of 3-20 phr C7-18 alkyl esters of acrylic acid [79-10-7] or methacrylic acid [79-41-4] and 0.5-5 phr ethylmethyl siloxanes.

L5 ANSWER 2 OF 37 HCAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
IT 79-41-4D, 2-Propenoic acid, 2-methyl-, C7-12 alkyl esters, polymers with methylvinylpyridine 7440-47-3D, Chromium, salts of naphthenic acids 25638-00-0D, Pyridine, ethenylmethyl-, polymers with alkyl methacrylates  
RL: USES (Uses)  
(antistatic additives, for hydrocarbon fuels)

1976 年以前も D 付きの索引が存在する

L5 ANSWER 3 OF 37 HCAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
AB Methacrylic acid C<sub>≥</sub>11 alkyl ester polymers were tack preventives for films, coatings, and textile finishes. For example, 100 parts 40% poly(Me methacrylate) [9011-14-7] solution in toluene was mixed with 2 parts 40% poly(stearyl methacrylate) [25639-21-8] solution in toluene, and the mixed solution (15 parts) was mixed with 20 parts glass powder and 80 parts Zn powder to give a paste (for electronics circuit) drying to tack-free film.

## C よくあるご質問

この章では、REGISTRY ファイルに関してよくお問い合わせいただくご質問についてご紹介します。



## よくあるご質問

### 内容一覧

#### ■ REGISTRY ファイルに関連してよくあるご質問

- Q1> REGISTRY ファイルの L 番号を他のファイルへクロスオーバーしたところ、エラーメッセージが表示されました。
- Q2> REGISTRY ファイルの L 番号を CAplus ファイルへクロスオーバーしましたが、回答が 0 件となり、文献が見つかりませんでした。
- Q3> 部分構造検索のサンプル検索を行ったところ、FULL FILE PROJECTIONS が INCOMPLETE になってしまいました。
- Q4> REGISTRY ファイルのレコードに CAS CLIENT SERVICES と記載してあるのは、どのような物質ですか？

## よくあるご質問

### よくあるご質問 1

Q1> REGISTRY ファイルの L 番号を他のファイルへクロスオーバーしたところ、エラーメッセージが表示されました。

=> S L1 ← REGISTRY ファイルの L1 をクロスオーバー検索  
TOO MANY TERMS FOR FILE CROSSOVER IN L1  
There are limits on the size of an answer set being crossed over from one file to another. Enter HELP CROSSOVER at an arrow prompt (=>) for specific information.

A1> システム制限を超えないよう回答を限定し、クロスオーバーしてください。

#### ■ 原因

- ・ クロスオーバー可能な REGISTRY ファイルの回答件数にはシステム制限があり、それを超えたため。

制限値	項目
500,000 件	BIOSIS, CAplus, CA, EMBASE, MEDLINE, USPATFULL, USPAT2
300,000 件	その他のファイル

#### ■ 対処法

- ・ クロスオーバーする前に回答を限定する。

(例) REGISTRY ファイル → CAplus/CA ファイル

- CAplus ファイルの文献数で限定 : => S L# AND 3<=REF.CAPLUS
- CAplus ファイルの資料種類を特許に限定 : => S L# AND P/DT,CA
- 回答 (L#) を CAS 登録番号前後で分割 (RANGE 検索) :  
=> S L# AND L# RAN=,1274384-50-7  
=> S L# AND L# RAN=1274384-50-7,

CAS FILES (CASREACT ファイルを除く) へのクロスオーバーは無料。CASREACT ファイルへのクロスオーバーは 1 回答セットあたり 4,050 円 (2013 年 8 月現在)

(例) REGISTRY ファイル → CAS FILES 以外のファイル

- CAS 登録番号所在でファイル名を限定 : => S L# AND MEDLINE/LC


CAS FILES 以外のファイルへのクロスオーバーは、回答 1 件あたり 2 円。クロスオーバー可能な件数であっても、件数が多い場合は高額になるので注意  
=> S ファイル名/LC は 719 円。REGISTRY ファイルの回答が 360 件を超える場合は、=> S ファイル名/LC で限定したほうがよい (2013 年 8 月現在)



## よくあるご質問

### よくあるご質問 1

#### ■ 例 1 : REGISTRY ファイル → CAplus/CA ファイル

- => FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る
- => S C5-C6/EA ← 5 員環と 6 員環が縮環した骨格 (  ) を有する物質を検索  
L1 693450 C5-C6/EA
- => FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る
- => S L1 ← L1 をクロスオーバーする  
TOO MANY TERMS FOR FILE CROSSOVER IN L1  
There are limits on the size of an answer set being crossed over from one file to another. Enter HELP CROSSOVER at an arrow prompt (=>) for specific information.
- => FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る
- => S L1 AND 1<=REF. CAPLUS ← 文献数が 1 以上の物質に限定  
L2 572099 L1 AND 1<=REF. CAPLUS
- => S L2 AND P/DT. CA ← CA の資料種類が特許である物質に限定  
L3 473357 L2 AND P/DT. CA
- => FILE CAPLUS ← CAPLUS ファイルに入る
- => S L3 ← L3 は 50 万件以下であるため, CAplus ファイルへクロスオーバー可能  
L4 102659 L3

エラー

#### ■ 例 2 : REGISTRY ファイル → CAS FILES 以外のファイル

- => FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る
- => S PT/ELS ← 白金を含む物質を検索  
L1 186657 PT/ELS
- => SET NOT SEA 1 ← 1 円を超える検索に料金の警告を出す設定  
NOTICE SET TO 1 JAPANESE YEN FOR SEARCH COMMAND  
SET COMMAND COMPLETED
- => FILE RTECS ← RTECS ファイルに入る
- => S L1  
THE ESTIMATED SEARCH COST FOR FILE 'RTECS' IS 373,778 JAPANESE YEN  
DO YOU WANT TO CONTINUE WITH THIS REQUEST? (Y)/N or END: N
- => FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る
- => S L1 AND RTECS/LC ← CAS 登録番号所在が RTECS ファイルであるものに限定  
L2 302 L1 AND RTECS/LC
- => FILE RTECS ← RTECS ファイルに入る
- => S L2 ← 事前に回答を限定すると  
L3 302 L2  
クロスオーバー料金は 604 円 (2 円 × 302)

システム制限内でも  
クロスオーバー料金  
に注意

## よくあるご質問

### よくあるご質問 2

Q2> REGISTRY ファイルの L 番号を CAplus ファイルへクロスオーバーしましたが、回答が 0 件となり、文献が見つかりませんでした。

=> FILE CAPLUS

=> S L1

L2 0 L1

← REGISTRY ファイルの L1 をクロスオーバー検索

A2> 様々な原因が考えられます。まずは、収録源情報 (SR) フィールドとクラス識別子 (CI) に注目してください。

#### ■ 原因

- REGISTRY ファイルは、CAplus/CA ファイル由来の情報だけでなく、さまざまな情報源から物質を収録しているため、CAplus/CA ファイルにクロスオーバーしても文献が得られないことがある。

#### ■ 対処法

- 収録源情報 (SR) フィールドに CA, クラス識別子 (CI) に COM (多成分物質成分) の記載があるか確認する。
- 記載があれば CAS 登録番号を /CRN (成分 CAS 登録番号) で検索した L 番号を CAplus/CA ファイルにクロスオーバーすると文献が得られる。

#### ■ 例

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> S 1416848-22-0

← CAS 登録番号で検索する (無料)

L1 1 1416848-22-0  
(1416848-22-0/RN)

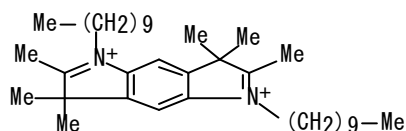
=> D

← IDE 表示形式で表示する

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
RN **1416848-22-0** REGISTRY  
ED Entered STN: 17 Jan 2013  
CN Benzo[1,2-b:4,5-b']dipyrrolium, 1,5-didecyl-3,7-dihydro-2,3,3,6,7,7-hexamethyl- (CA INDEX NAME)  
MF C36 H62 N2  
CI **COM**  
SR **CA**

← クラス識別子が COM (多成分物質成分)

← 収録源情報が CA



1985 年半ば以降に登録されたレコードについて、その物質が最初に登録された際の情報源を SR フィールドに収録している

文献数の表示なし

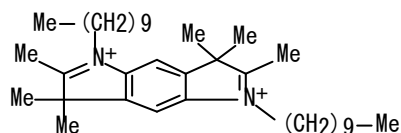
よくあるご質問

よくあるご質問 2

=> S 1416848-22-0/CRN ← 成分 CAS 登録番号 (/CRN) を検索する (無料)  
L2 1 1416848-22-0/CRN

=> D ← IDE 表示形式で表示する

L2 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
RN 1416802-31-7 REGISTRY  
ED Entered STN: 16 Jan 2013  
CN Benzo[1,2-b:4,5-b']dipyrrolium, 1,5-didecyl-3,7-dihydro-2,3,3,6,7,7-hexamethyl-, iodide (1:2) (CA INDEX NAME)  
MF C36 H62 N2 . 2 I  
SR CA  
LC STN Files: CA, CAPLUS  
CRN (1416848-22-0)



多成分物質  
1416848-22-0 は、多成分物質の一つの成分  
この物質を成分として含む多成分物質を検索し、  
多成分物質の CAS 登録番号を使って文献を探  
ることができる

● 2 I-

文献数

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

=> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る

=> S L2 ← L2 をクロスオーバー  
L3 2 L2

=> D SCAN TI HITRN ← SCAN 表示形式に含まれる TI (標題) と HITRN (ヒットした CAS 登録番号) を表示 (無料)

L3 2 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
TI Photoelectric converter and a photoelectrochemical cell  
TIJP 光電変換素子及び光電気化学電池 [原題]  
IT **1416802-31-7P**  
RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT  
(Reactant or reagent)  
(photoelec. converter and a photoelectrochem. cell)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 1

L3 2 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
TI Photoelectric conversion components, photoelectrochemical cells, and dyes  
for components and cells thereof  
TIJP 光電変換構成, 光電気化学電池, 構成のための染料, およびそのセル  
[機械翻訳]  
IT **1416802-31-7P**  
RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT  
(Reactant or reagent)  
(photoelec. conversion components  
for components and cells thereof)

その他の収録源についての詳細は  
REGISTRY ファイル - 検索テクニック 2 (B 章) 参照  
<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-registry2.pdf>

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

## よくあるご質問

### よくあるご質問 3

Q3> 部分構造検索のサンプル検索を行ったところ、FULL FILE PROJECTIONS が INCOMPLETE になってしまいました。

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*INCOMPLETE\*\*  
BATCH \*\*INCOMPLETE\*\*

A3> 構造質問式の修正，サブセット検索，スクリーン検索を検討します。どれも利用できない場合は RANGE 検索で複数回構造検索すれば，検索が完了します。

#### ■ 原因

- ・ イタレーション数（候補物質数）にはシステム制限があり，それを超えたため。

	オンライン検索		BATCH 検索*
	サンプル検索	フルファイル検索	フルファイル検索
イタレーション数	1,000,000 件	6,000,000 件	8,000,000 件
回答数	50 件	6,000,000 件	8,000,000 件

\* BATCH 検索とは，構造質問式をシステムに登録しておき，データベースの利用が少ない時間に一括して検索させる方法である。オンライン検索に比較してシステム制限が緩和される。

#### ■ 対処法

- ・ 構造質問式を修正できない場合は，RANGE 検索で複数回構造検索する。
- ・ RANGE 検索の入力の仕方

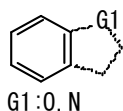
- RAN= に続けて，CAS 登録番号と，(カンマ) を使い範囲を入力する。
    - => S L# RAN=,RN1                      RN1 より前の CAS 登録番号を対象に検索
    - => S L# RAN=RN1,                      RN1 より後の CAS 登録番号を対象に検索
    - => S L# RAN=RN1,RN2                      RN1 から RN2 の CAS 登録番号範囲を検索
- \* RANGE 検索にサンプル検索はない

#### ■ 例：フルファイル検索を 2 回行い，構造検索が完了したケース

=> FILE REGISTRY                                      ← REGISTRY ファイルに入る

=> Uploading C:\Documents and Settings\¥xxxx¥My Documents¥STN Express 8.5¥Queries¥s1.str  
L1                      STRUCTURE UPLOADED                      ← 構造質問式をアップロードする

=> D QUE    ← アップロードした構造質問式を確認する  
L1                      STR



Structure attributes must be viewed using the Structure Drawing program.

よくあるご質問

よくあるご質問 3

構造検索一回目

=> S L1 ← 部分構造検索のサンプル検索 (無料)  
SAMPLE SEARCH INITIATED 11:35:58 FILE 'REGISTRY'  
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 471509 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 471509 ITERATIONS 50 ANSWERS  
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)  
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **\*\*INCOMPLETE\*\*** ← ONLINE, BATCH とともに INCOMPLETE  
BATCH **\*\*INCOMPLETE\*\***

PROJECTED ITERATIONS: 9390409 TO 9469951  
PROJECTED ANSWERS: 3376026 TO 3424894

フルファイル検索のイタレーション数の制限は 600 万件なので、2 回程度フルファイル検索が必要と予想できる

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL ← 部分構造検索のフルファイル検索

FULL SEARCH INITIATED 11:36:06 FILE 'REGISTRY'  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 9423411 TO ITERATE

63.7% PROCESSED 6000000 ITERATIONS ( 1 INCOMPLETE) 2117782 ANSWERS  
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)  
SEARCH TIME: 00.00.08

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **\*\*INCOMPLETE\*\***  
BATCH **\*\*INCOMPLETE\*\***

PROJECTED ITERATIONS: 9423411 TO 9423411  
PROJECTED ANSWERS: 3320716 TO 3331526

システム制限値以降の候補物質を検索することなく終わってしまうため、不完全な検索となる。

この例では、イタレーションの制限 600 万件に達した時点 (63.7%) で終了している

L3 2117782 SEA SSS FUL L1

=> D 2117782 RN ← 最後にヒットした物質の CAS 登録番号を表示

L3 ANSWER 2117782 OF 2117782 REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN  
RN 882106-06-1 REGISTRY

構造検索は新規に登録された物質から検索されるので、この CAS 登録番号より前の物質\* (より古い物質) を対象にして、もう一度検索する

構造検索二回目

=> S L1 RAN=,882106-06-1  
RANGE MORE THAN 100,000. WILL BE BILLED AS A FULL FILE SEARCH.  
INITIATE SEARCH? Y/(N):Y  
RANGE SEARCH INITIATED 11:36:50 FILE 'REGISTRY'  
RANGE SCREEN SEARCH COMPLETED - 3423412 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 3423412 ITERATIONS ( 1 INCOMPLETE) 1277038 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.06

イタレーションが 100% に到達し、構造検索が完了した

L4 1277038 SEA RAN=(,882106-06-1) SSS L1

=> S L3-L4 ← 2 回分の検索結果をまとめる

L5 3394819 (L3 OR L4)

\* 検索対象が 10 万物質未満の場合は、範囲指定検索料金は 6,040 円。この例では、10 万物質以上が検索対象であったため、RANGE 検索でフルファイル検索の料金が課金される (2013 年 8 月現在)

## よくあるご質問

### よくあるご質問 4

Q4> REGISTRY ファイルのレコードに CAS CLIENT SERVICES と記載してあるのは、どのような物質ですか？

A4> CAS 登録番号サービスにより、CAS 登録番号が付与された物質です。

#### ■ CAS 登録番号サービス

- ・ CAS 登録番号サービスは、外部からの依頼により CA 索引名 や CAS 登録番号を付与するサービス。CAS 登録番号が付与されると、REGISTRY ファイルに登録される。

RN 162568-13-0 REGISTRY \*

\* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may result in incomplete search results. For additional information, enter HELP RN\* at an online arrow prompt (=>).

ED Entered STN: 28 Apr 1995

CN 2-Oxepanone, homopolymer, decyl ester, reaction products with 2-(2-aminoethoxy)ethanol, polyethylene-polypropylene glycol and TDI (CA INDEX NAME)

MF Unspecified

CI PMS, MAN, GRS

PCT Manual registration

SR CAS Client Services

CAS 登録番号サービスで登録された物質の収録源情報 (SR) に CAS Client Services と表示される

\*\*\* STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE \*\*\*

- 依頼者の所属に関する情報は一切外部には公表されないため、レコード上でも確認できない。
- 企業などが CAS 登録番号サービスを利用して CAS 登録番号を付与した物質の場合、追加情報を得ることは難しい。

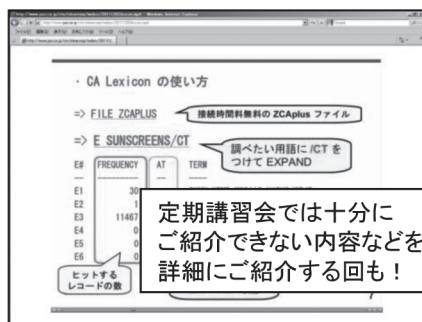
#### ■ CA 索引名及び CAS 登録番号取得の代行サービス

- ・ CA 索引名及び CAS 登録番号取得の代行サービス窓口
  - 化学情報協会 情報技術部 TEL:03-5978-3606 FAX:03-5978-4095
  - CAS 登録番号取得の代行サービスについて  
[http://www.jaici.or.jp/casrn/cass\\_reg.htm](http://www.jaici.or.jp/casrn/cass_reg.htm)
  - よくあるご質問  
[http://www.jaici.or.jp/casrn/cass\\_faq.htm](http://www.jaici.or.jp/casrn/cass_faq.htm)

# STN<sup>®</sup> インターネットセミナー

## ■ インターネットセミナーとは？

インターネット経由で視聴していただく、WebEx を利用したオンライン形式のセミナーです。講習会当日は、講師の PC 画面をインターネット経由でご覧いただきながら、音声で解説をお聞きいただけます。ご質問は、チャット形式で受け付けます。



定期講習会では十分に  
ご紹介できない内容などを  
詳細にご紹介する回も！



講師による検索  
デモンストレーションも  
ご覧いただけます！



今後も、初心者向けの入門セミナーや、上級者向けのテーマ別セミナーなど様々な内容で開催致します！過去のセミナーの録画セッションや今後の開催予定を掲載しておりますので、ぜひ弊協会ホームページをご覧ください！ (<http://www.jaici.or.jp/webex/e-seminar.html>)

# STN<sup>®</sup> e-ラーニング

## ■ e-ラーニングとは？

STN の検索方法をお手元の PC で学ぶことができる、ビデオ形式/ブラウザ形式の教材です。定期講習会に参加できない方の自習ツールとして、また社内教育などにぜひご活用ください。

<p><b>ビデオ形式教材</b></p> <p>形式および mp4 形式のセッションもご覧いただけます。</p> <p>■ STN 基本操作</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>STN コマンド検索の基本 (約 10 分, 5.59 MB WMV)</li> <li>キーワード検索のポイント (約 9 分, 4.10 MB WMV)</li> <li>演算子の利用 (約 11 分, 5.25 MB WMV)</li> <li>検索フィールドを指定した検索 (約 8 分, 3.71 MB)</li> <li>回答の表示 (約 8 分, 4.58 MB WMV)</li> <li>料金・検索経過の確認 (約 12 分, 6.35 MB WMV)</li> <li>回答の保存と呼び出し (約 10 分, 4.64 MB WMV)</li> </ul>	<p><b>ブラウザ形式教材 - 1</b></p> <p>から進めるタイプの教材です。</p> <p>■ コマンド・その他</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>STN Express での接続とセッション記録の保存 (約 5 分)</li> <li>STN コマンド入門 (約 10 分)</li> <li>STN の演算子とトランケーション記号 (約 15 分)</li> <li>回答セット、質問式の保存 (約 10 分)</li> </ul> <p>■ 文献検索</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>複数の検索語を用いた文献検索 (約 15 分)</li> <li>網羅的あるいは適合性の高い検索 (約 15 分)</li> <li>著者名の検索 (約 15 分)</li> <li>所属機関・特許出願人の検索 (約 10 分)</li> </ul>	<p><b>ブラウザ形式教材 - 2</b></p> <p>■ 物質検索</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>CAS 登録番号検索 (約 10 分)</li> <li>化学物質名称検索 (約 10 分)</li> <li>化学物質名称検索 (上級) (約 10 分)</li> <li>完全一致検索とファミリー検索 (約 15 分)</li> <li>部分構造検索 (約 10 分)</li> <li>構造作図入門 (約 5 分)</li> <li>原子と結合の作図 (約 5 分)</li> <li>環の作図 (約 5 分)</li> <li>可変原子の作図 (約 5 分)</li> <li>繰り返しグループの作図 (約 2 分)</li> <li>可変置換位置 (VPA) の作図 (約 2 分)</li> <li>G グループの作図 (約 5 分) New</li> <li>複数の結合位置がある G グループの作図 (約 5 分) New</li> </ul>
---	---	--

今後も定期的に教材を追加していく予定です！ぜひご活用ください！ (<http://www.jaici.or.jp/stn/elearning/index.html>)

**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  
TEL: 0120-003-462  
E-mail: support@jaici.or.jp