

STN INTERNATIONAL

リフレッシュセミナー

ポリマー検索 応用

* 目次 *

A ポリマー索引と検索方法

CAplus/CA - ポリマー索引の基本	1
CAplus/CA - 付加重合系ポリマーの索引	3
CAplus/CA - 縮合系ポリマーの索引	4
CAplus/CA - モノマーの索引	8
REGISTRY - ポリマーの調査方法	9

B 後処理ポリマー（エステル化，エーテル化）

後処理ポリマー	25
エステル化	26
エステル化されたポリマーの文献調査	45
エーテル化	54
エーテル化されたポリマーの文献調査	61

C よくあるお問い合わせ

内容一覧	69
ポリマーの定義	70
成分数の検索	75
多段階重合ポリマー	78
グラフト共重合体	81
PMS/CI とスクリーン 2043	84
ポリマー分類用語	89

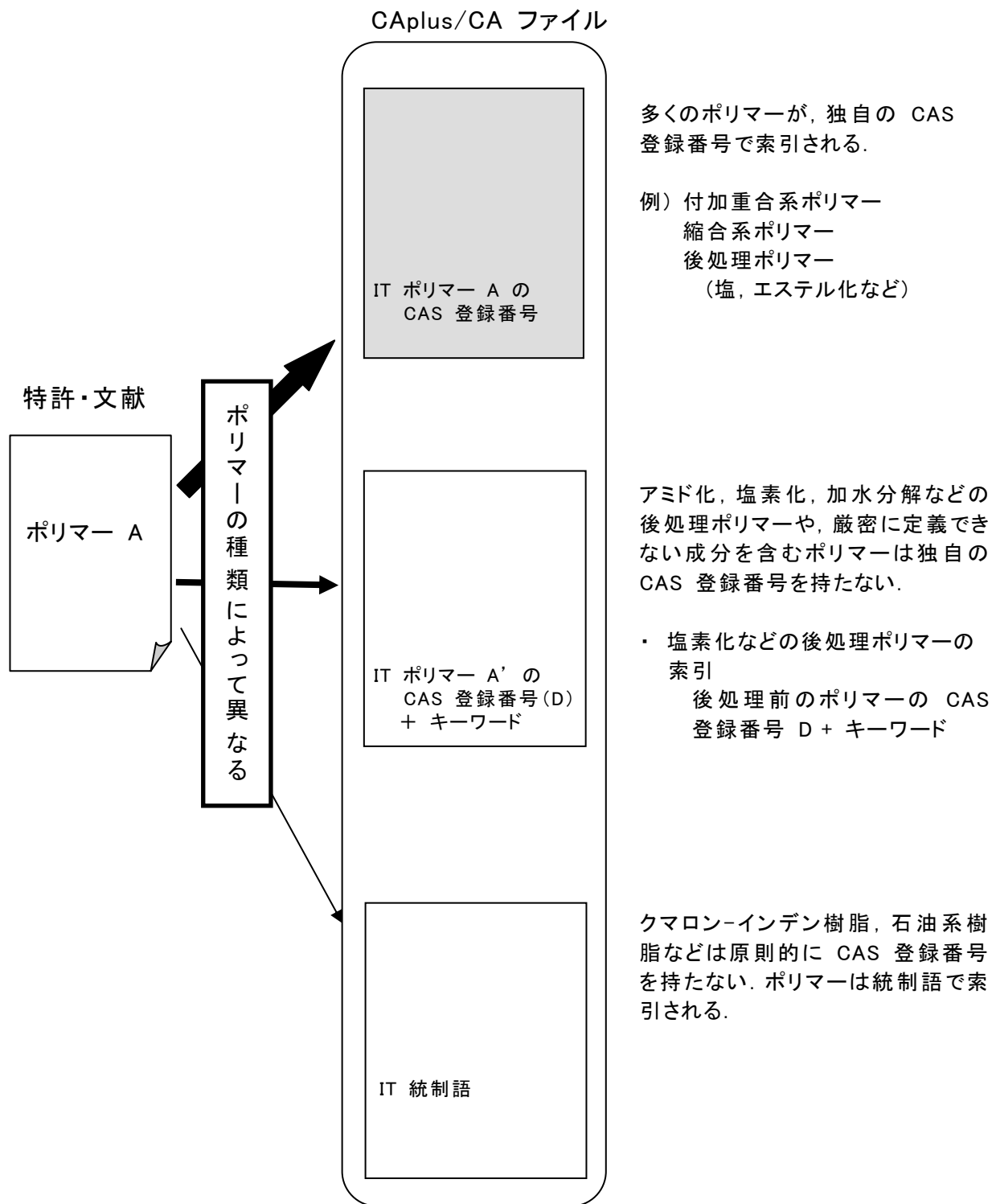
A ポリマー索引と検索方法

この章では CAplus/CA ファイルでポリマーを索引する際の基本的な索引方針および REGISTRY ファイルでのポリマー検索法を紹介します。

A ポリマー索引と検索方法

CAplus/CA - ポリマー索引の基本

- CAplus/CA ファイルでは、文献に記載されているポリマーは CAS 登録番号で索引されるほかに、統制語で索引される場合もある。



A ポリマー索引と検索方法

CAplus/CA -ポリマー索引の基本

- CAS 登録番号で索引されるポリマーのタイプを分類すると大きく 2 種類に分類される。

IT ポリマー A の
CAS 登録番号

- ・ 付加重合系ポリマー
 - 主として二重結合や三重結合の付加重合によって形成される炭素鎖主体のポリマー
例) ビニルポリマー, ポリオレフィン, アクリル樹脂, ポリアセチレン, ジエンポリマーなど
- ・ 縮合系ポリマー
 - 主に重縮合, 重付加, 開環重合, 付加縮合などによって形成されるヘテロ鎖ポリマー (ヘテロ原子を主鎖に含むポリマー)
例) ポリエステル, ポリアミド, ポリウレタン, ポリエーテル, フェノール樹脂など

- 付加重合系ポリマーおよび縮合系ポリマーの索引

- ・ ポリマーの種類により索引は異なる。

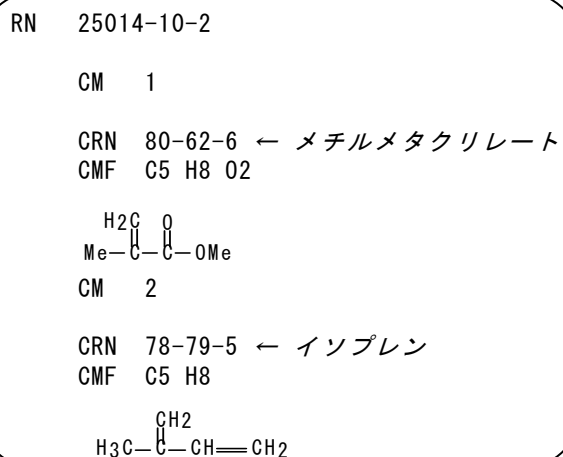
	CAplus/CA ファイルの索引		
	モノマー単位ポリマーの CAS 登録番号	SRU* ポリマーの CAS 登録番号	索引されるポリマーの主鎖に関連する統制語
付加重合系ポリマー	○	-	△
縮合系ポリマー	○	○	○

* SRU : Structural Repeating Unit (繰り返し単位)

- モノマー単位ポリマーと SRU ポリマー

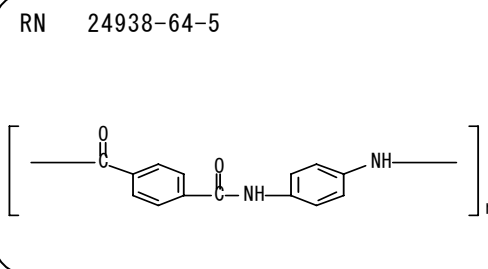
【モノマー単位ポリマー】

例) イソプレン-メチルメタクリレート共重合体



【SRU ポリマー】

例) ポリ(1,4-フェニレンテレフタルアミド)



A ポリマー索引と検索方法

CAplus/CA - 付加重合系ポリマーの索引

■ 付加重合系ポリマーの索引方法

- ・ 通常はモノマー単位ポリマーの CAS 登録番号が索引される。

	CAplus/CA ファイルの索引		
	モノマー単位ポリマーの CAS 登録番号	SRU ポリマーの CAS 登録番号	索引されるポリマーの主鎖に関連する統制語
付加重合系ポリマー	○	-	△

■ 付加重合系ポリマーの例 : 日本公開特許 2011-57852

標題 : ポリプロピレン系樹脂組成物およびそのフィルム

実施例

【0065】
 <ポリプロピレン系樹脂(A)>
 [PP-A(1)]
 Ti-Mg系触媒系のチーグラ-ナッタ型触媒を用いて気相中でプロピレンとエチレンとの共重合体を重合した。得られた樹脂の溶融押出を行ってペレット化したところ、ペレットの分子量分布Aw/Anは4.2であり、MFRは1.3g/10分であった。

IT Polymerization catalysts
 (Ziegler-Natta; propylene polymer compns. for films with good transparency and reduced fisheyes)

IT Plastic films
 (propylene polymer compns. for films with good transparency and reduced fisheyes)

IT 9010-79-1P, Ethylene-propylene copolymer
 RL: IMF (Industrial manufacture); POF (Polymer in formulation); PRP (Properties); TEM (Technical or engineered material use); PREP (Preparation); USES (Uses)
 (Ziegler-Natta type; propylene polymer compns. for films with good transparency and reduced fisheyes)

IT 25895-47-0, 1-Butene-ethylene-propylene copolymer
 RL: POF (Polymer in formulation); PRP (Preparation); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
 (Ziegler-Natta type; propylene polymer compns. for films with good transparency and reduced fisheyes)

IT 78-10-4, Tetraethoxysilane 84-69-5, Diisobutylaluminum, uses 142-96-1, Butylmagnesium ether 693-04-9, Butylmagnesium chloride 7550-45-0, Titanium tetrachloride, uses Cyclohexylethyldimethoxysilane
 RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)
 (polymerization catalyst containing; propylene polymer compns. for films with good transparency and reduced fisheyes)

IT 9002-88-4, HDPE
 RL: POF (Polymer in formulation); PRP (Preparation); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
 (propylene polymer compns. for films with good transparency and reduced fisheyes)

エチレン-プロピレン共重合体は付加重合系ポリマーである。そのため、モノマー単位ポリマーの CAS 登録番号が索引される

```

RN  9010-79-1  REGISTRY
CN  1-Propene, polymer with ethene
      (CA INDEX NAME)

CM  1

CRN 115-07-1
CMF C3 H6

      H3C—CH=CH2

CM  2

CRN 74-85-1
CMF C2 H4

      H2C=CH2
            
```

A ポリマー索引と検索方法

CAplus/CA - 縮合系ポリマーの索引

■ 縮合系ポリマーの索引方法

- 縮合系ポリマーは、下記の 3 種類の索引が付与される。

	CAplus/CA ファイルの索引		
	モノマー単位ポリマーの CAS 登録番号	SRU ポリマーの CAS 登録番号	索引されるポリマーの主鎖に関連する統制語
縮合系ポリマー	○	○	○

- モノマー単位ポリマーの CAS 登録番号での索引

- 実際に合成に使用したモノマーに基づいたポリマー索引を行う。
- 実際の原料モノマーが不明で、繰り返し単位 (SRU) が記載されている場合は、SRU ポリマーからモノマーを推定して、そのモノマーに基づくポリマー索引を行う。(*1)

*1. SRU ポリマーからモノマーを推定して索引できるポリマーとできないポリマーがある。推定できるポリマーとモノマーの種類は下記の通りである。

SRU ポリマー	推定したモノマー
ポリアミド	1. ジカルボン酸とジアミン 2. アミノ酸
ポリエステル	1. ジカルボン酸とジオール 2. ヒドロキシカルボン酸
ポリウレタン	ジイソシアネートとジオール

- SRU ポリマーで索引されるポリマーは下記の条件を満たす必要がある。

- 縮合重合である。
- 一つの繰り返し単位で表される。
 - 1 種類のモノマーからなる場合と 2 種類のモノマーからなる場合がある。ただし、2 種類のモノマーからなる場合は、各モノマーは対称構造である。

上記 1-2 の条件を満たせば、文献中に SRU やポリマーの種類が記載されていなくても推定して SRU ポリマーを索引する場合がある。(*2)

*2. モノマーから SRU を推定できる例。

モノマー	推定される SRU ポリマー
1. ジカルボン酸* とジアミン 2. アミノ酸* 3. ラクタム	ポリアミド
1. ジカルボン酸* とジオール 2. ヒドロキシカルボン酸 3. ラクトン	ポリエステル
ジイソシアネートとジオール	ポリウレタン

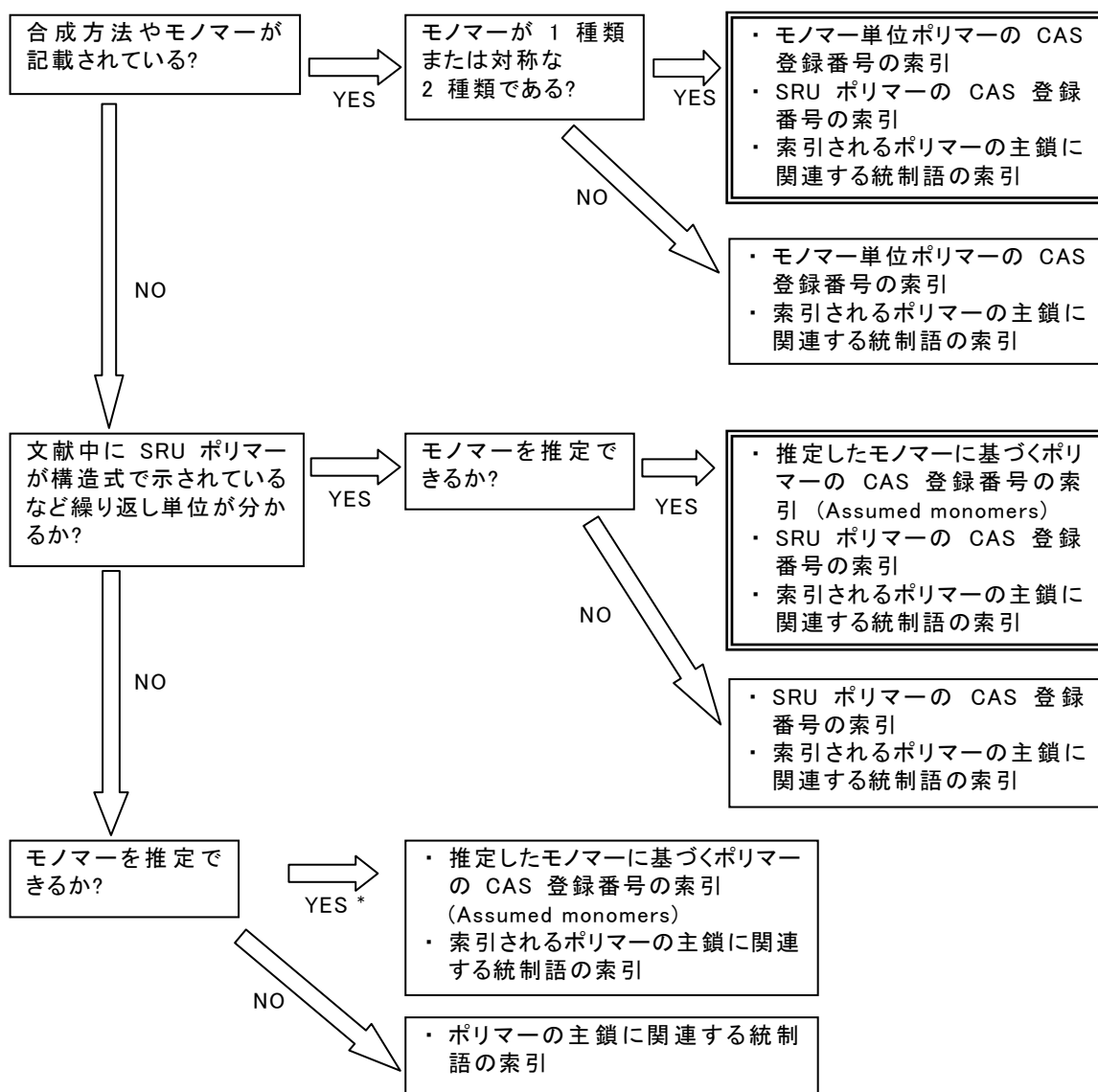
* カルボキシル基 (-COOH) は酸ハロゲン化物 (-COX) でもエステル (-COOR') などでも良い

A ポリマー索引と検索方法

CAplus/CA - 縮合系ポリマーの索引

- 統制語による索引

- ・ 主鎖に存在する結合に基づいて分類された統制語が索引されることが多い。
例) Polyamides, Polyethers, Polyesters など
 - ・ REGISTRY ファイルのポリマー分類用語 (PCT) とは一致しない場合もある。
- ・ 縮合系ポリマーは文献中の記載方法により, 3 種類すべてが索引されるかどうか異なる。



* 例) 文献中に合成法も繰り返し単位も記載されていないが, ポリエチレンイソフタレートアジペートと記載されている。この例では, 実際に使用した原料モノマーは分からないが, モノマーを推定することができる。(エチレングリコール + アジピン酸 + イソフタル酸)

- 上記のフローチャートは縮合系ポリマーの基本的な索引方針の一部を示しており, すべての縮合系ポリマーの索引方針をカバーするものではない。

A ポリマー索引と検索方法

CAplus/CA - 縮合系ポリマーの索引

- 縮合系ポリマーの例 1：日本公開特許 2009-160775
 標題：熱収縮性ポリエステル系フィルム

実施例

【0051】
 (合成例 A：ポリエステルの合成)
 攪拌機、温度計、及び部分環流式冷却器を備えたステンレス鋼製オートクレーブに、ジカルボン酸成分であるジメチルテレフタレート (DMT) と、多価アルコール成分であるエチレングリコール (EG) とをモル比 EG/DMT=2.2 となるように仕込んだ。その EG の仕込みの際には、無機滑剤をエチレングリコールに分散させた。また、エ

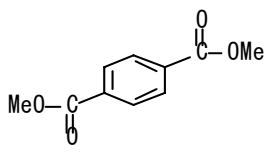
【0052】
 (合成例 B～D：ポリエステルの合成)
 ジカルボン酸成分として DMT を使用し、多価アルコール成分として EG、EG とネオペンチルグリコール、1,4-ブタンジオール、または、エチレングリコールと 1,4-シクロヘキサジメタノールを使用し、合成例 A と同様の方法 (但し、無機滑剤を使用せず) により、表 1 に示す組成のポリエステル B～D のチップを得た。

ST heat shrinkable polyester film lable bottl
 IT Heat-shrinkable film (heat-shrinkable bottles)
 IT Polyesters
 RL: IMF (Industrial manufacture); POF (Properties); TEM (Technical or engineering); USES (Uses)
 (Preparation)
 (heat-shrinkable film usefu
 IT Polymer blends
 RL: PRP (Properties); TEM (Technical or engineering); USES (Uses)
 (heat-shrinkable film usefu
 IT Labels
 (heat-shrinkable film usefu
 bottles)
 IT Heat-shrinkable film (labels; heat-shrinkable polyester film usefu
 IT 24968-12-5P 25038-59-9P, uses 25640
 30965-26-5P
 RL: IMF (Industrial manufacture); POF (Properties); TEM (Technical or engineering); USES (Uses)
 (Preparation); USES (Uses)
 (heat-shrinkable polyester film usefu

DMT と 1,4-ブタンジオールから得られるポリマーの主鎖に存在する結合はエステル結合である。そのため、Polyesters の統制語が索引される

実施例中にモノマーが記載されていたので、モノマー単位ポリマーの CAS 登録番号が索引される

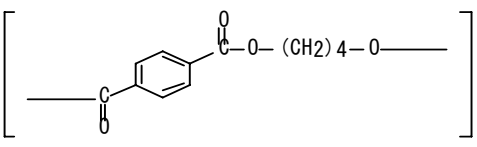
RN 30965-26-5 REGISTRY
 CN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, 1,4-dimethyl ester, polymer with 1,4-butanediol (CA INDEX NAME)
 CM 1
 CRN 120-61-6
 CMF C10 H10 04



CM 2
 CRN 110-63-4
 CMF C4 H10 02
 HO-(CH2)4-OH

特許公報中には SRU ポリマーの構造は記載されていない。しかし、実施例中に記載されていたモノマーが対称な 2 種類であり、生成されるポリマーが SRU ポリマーの条件を満たしている。またモノマーから SRU ポリマーが推測できるので SRU に基づくポリマーも一緒に索引される

RN 24968-12-5 REGISTRY
 CN Poly(oxy-1,4-butanediylloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl) (CA INDEX NAME)



A ポリマー索引と検索方法

CAplus/CA - 縮合系ポリマーの索引

■ 縮合系ポリマーの例 2 : 日本公開特許 2010-248030

標題 : ガラスロービング, ガラスロービングの製造方法及びガラス繊維強化複合樹脂材

【0044】 実施例

このようにガラスフィラメント表面にガラス繊維用集束剤が塗布されたガラスフィラメントは集束器（ギャザリングシューとも呼ぶ）によって4000本を束ねて1本のガラスストランドとし、さらに紙管に巻き取ってケーキ（回巻体とも呼ぶ）とした。次にこのケーキを加熱して乾燥した後に、紙管から回巻状態のガラスストランドだけを抜き取って、その内層の数百グラムを除去してDWRを得た。このようにして作製されたDWRのガラスストランドを内層より引き出し、ポリブチレンテレフタレート樹脂（東レ株式会社製、トレコン1401-X-06）中に導入し、260℃に加熱して含浸させて、ペレタイザーにより10mmにカットした後、ペレットを得た。ちなみにペレット化の際の引き取り速度は50m/minとした。

ST glass roving binder epoxy resin lubricant polybutylene terephthalate roving glass fiber

IT Reinforced plastics

RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)

(glass fiber-reinforced; manufacture of properties by coating with binders (or lubricants for glass fiber-reinforced thermoplastics)

IT Molded products

RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)

(glass fiber-reinforced, assumed monomers; manufacture of glass roving with good opening properties (or sizes) containing epoxy resins and lubricants for glass fiber-reinforced thermoplastics)

IT 26062-94-2, Poly(butylene terephthalate)

RL: POF (Polymer in formulation); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)

(glass fiber-reinforced, assumed monomers; manufacture of glass roving with good opening properties (or sizes) containing epoxy resins and lubricants for glass fiber-reinforced thermoplastics)

IT 24968-12-5, Toraycon 1401X06

RL: POF (Polymer in formulation); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)

(glass fiber-reinforced; manufacture of properties by coating with binders (or lubricants for glass fiber-reinforced thermoplastics)

RN 26062-94-2 REGISTRY

CN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-butanediol (CA INDEX NAME)

CM 1

CRN 110-63-4

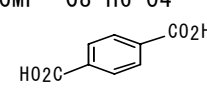
CMF C4 H10 O2

HO-(CH2)4-OH

CM 2

CRN 100-21-0

CMF C8 H6 O4

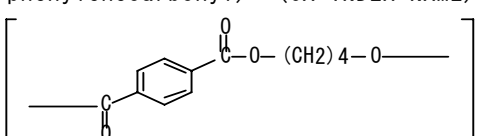


特許中にモノマーは記載されていないが、SRU ポリマーからモノマーを推定（ジカルボン酸とジオール）できる。その結果、モノマー単位ポリマーのCAS登録番号も索引される

推定したモノマーに基づくポリマーを索引する際には、2003年4月頃より、テキスト説明句に assumed monomers と記載される。
(高分子化学分野 (MAC/FS) 以外の分野では記載されていないこともある)

RN 24968-12-5 REGISTRY

CN Poly(oxy-1,4-butanediylloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl) (CA INDEX NAME)



特許中に記載されている名称からSRUポリマーであることが判断できたので、SRUポリマーのCAS登録番号が索引される

A ポリマー索引と検索方法

CAplus/CA - モノマーの索引

■ モノマーの索引

- ・ 通常はポリマーを索引し、モノマーは索引しない。
- ・ しかし、下記の条件下ではモノマーを索引する。
 1. モノマーを合成している。
 2. 重合反応に関する研究
 - 動力学, 重合熱, 活性化エネルギー, 反応機構, モノマーの反応性, 数学的モデル研究など。
 3. 特許のクレームにモノマーが記載されている。
 - 2007 年 12 月より, クレーム中のすべてのモノマーを索引している。
- ・ 雑誌論文と特許のモノマーに関する索引
 - 雑誌論文では, 上記の 1. 2. の場合にモノマーを索引する。
 - 特許では, 上記 2. のような重合反応の研究に関する特許が少ないために, 上記 1. 3. の場合にモノマーを索引していることが多い。

■ モノマーの索引例 : WO2009/155409

標題 : Polyester and polytrimethylene ether diol based coating composition

8. The coating composition of claim 6, wherein said branched polyesters have a weight average molecular weight of 1,000 to 50,000 and are polymerized from monomers selected from the group consisting of caprolactone, dimethylol propionic acid, pentaerythritol, add more monomer from spec and a combination thereof. クレーム

IT Coating Primers (polymers) :
IT 85-44-90 :
polymers 121-91-5D, Isophthalic acid, polymers 124-04-00, Adipic acid, polymers 126-30-7D, Neopentyl glycol, polymers 502-44-3D, ε-Caprolactone, polymers 4767-03-7D, Dimethylolpropionic acid, polymers
RL: POF (Polymer in formulation); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
(polyester and polytrimethylene ether diol-based coating composition)
composition)

ポリマーがクレーム中に記載され、そのポリマーの成分としてモノマーもクレーム中に記載されている場合は、モノマーはモノマーの CAS 登録番号 D + polymers などのキーワードで索引される

RN 502-44-3 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 2-Oxepanone (CA INDEX NAME)

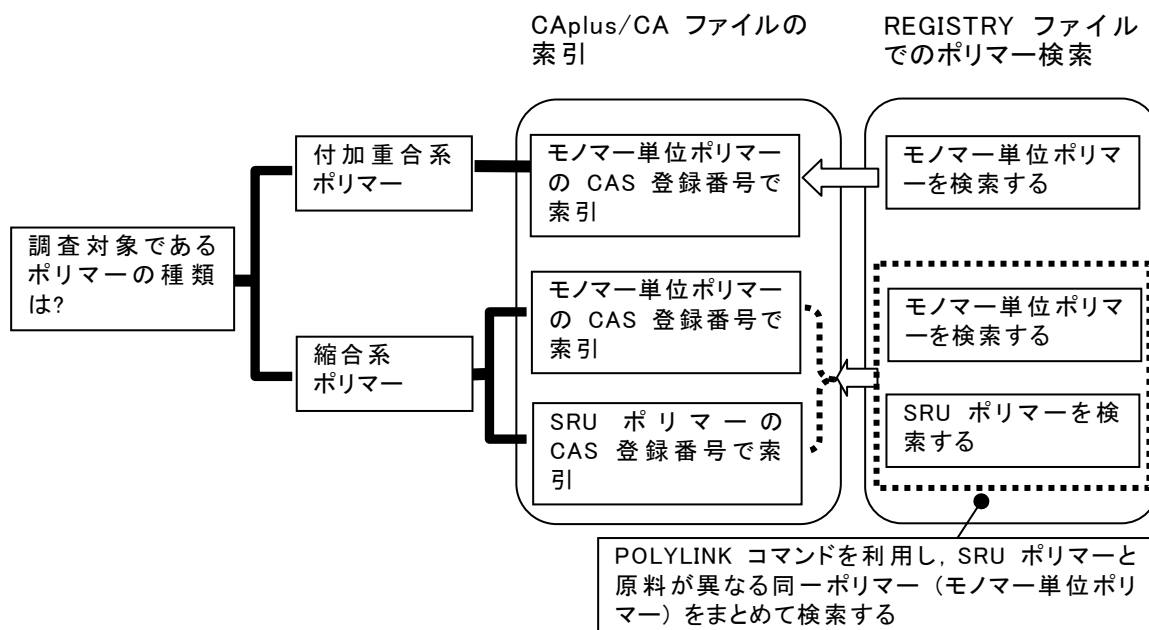


A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

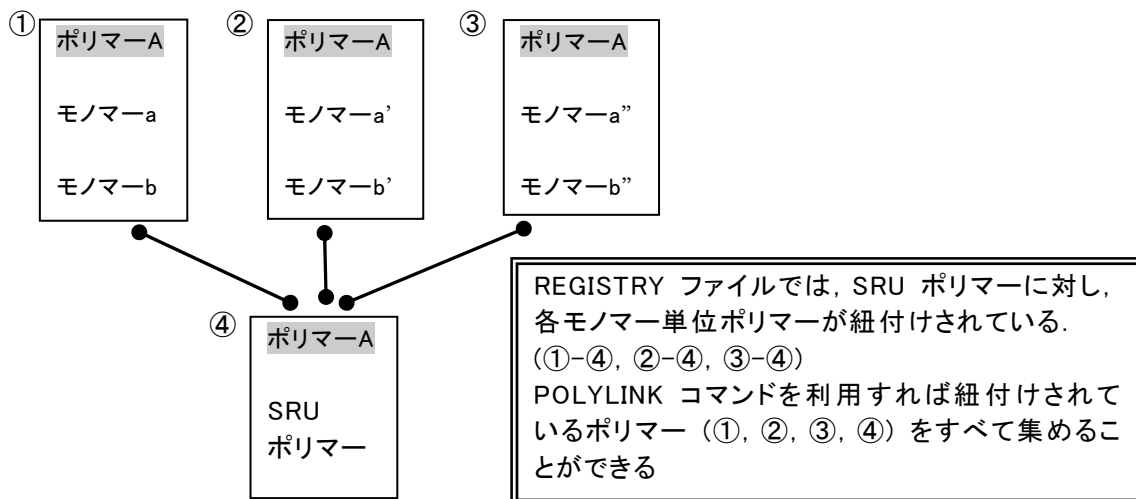
■ REGISTRY ファイルでのポリマー検索

- 調査対象となるポリマーの種類によって、CAplus/CA ファイルに索引されるポリマーのタイプが異なる。そのため、REGISTRY ファイルでのポリマーの検索方法も異なる。



■ POLYLINK コマンド

- REGISTRY ファイルに登録されている大部分のポリマーは、モノマー単位ポリマーである。
 - 重合後のポリマーが同じでも、原料モノマーが違えば独自のCAS登録番号が付与される。
- POLYLINK コマンドは、「実質的には同じポリマーでありながら、各々独自のCAS登録番号を持つ縮合系ポリマー」を自動的に一つの回答セットにまとめる機能である。



* 注意

各モノマー単位ポリマー間(①-②, ①-③, ②-③)は紐付けされていない。
つまり、SRU ポリマーが存在しないと POLYLINK コマンドは利用できない。

A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

■ ポリマーの種類により POLYLINK コマンドの適応の有無が異なる.

・ 付加重合系ポリマー

- CAplus/CA ファイルでは, 付加重合系ポリマーはモノマー単位ポリマーで索引される.



REGISTRY ファイルには, モノマー単位ポリマーが登録され SRU ポリマーは登録されない.



POLYLINK コマンドは適応できない

・ 縮合系ポリマー

- CAplus/CA ファイルでは, 縮合系ポリマーはモノマー単位ポリマーと, SRU ポリマーで索引される.

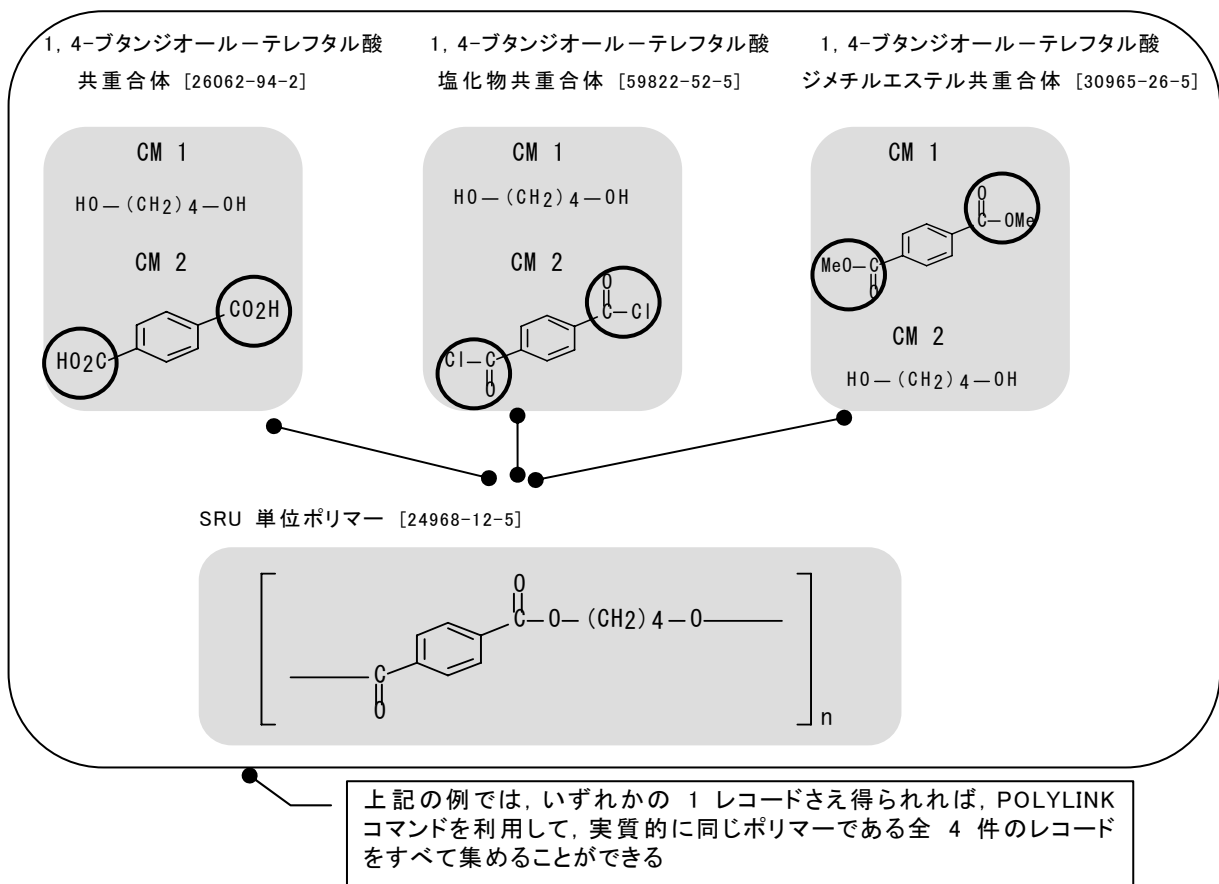


REGISTRY ファイルには, モノマー単位ポリマーと SRU ポリマーが登録される.



POLYLINK コマンドが適応できる

- 例 : ポリブチレンテレフタレート



A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

■ REGISTRY ファイルのポリマーの登録形式のまとめ

ポリマーの種類		登録形式	
		モノマー単位 ポリマー	SRU ポリマー
付加重合系ポリマー		○	×
縮合系ポリマー	縮合ホモポリマー	○	○
	対称な構造の二種のモノマー から成る縮合系ポリマー	○	○
	5 種の汎用ポリマー		
	Nylon 6	△	○
	Nylon 66	△	○
	Poly (ethylene terephthalate)	△	○
	Polyethylene glycol (PEG)	×	○
	Polypropylene glycol (PPG)	×	○
上記以外の縮合系ポリマー (非対称 2 種のモノマーからの 縮合系ポリマーなど)	○	×	

POLYLINK
コマンドで
同一ポリマー
を集めること
ができる

△ : Nylon 6, Nylon 66, Poly (ethylene terephthalate) は通常は SRU ポリマーの CAS 登録番号で索引される。

しかし、下記のような例外もある。

- 古いレコードではモノマー単位ポリマーの CAS 登録番号のみが索引されていた場合がある。
- Nylon 6, Nylon 66, Poly(ethylene terephthalate) では通常利用するモノマー以外のモノマーを使用している場合には、SRU ポリマーの CAS 登録番号に加え、モノマー単位ポリマーの CAS 登録番号も索引される。しかし、このような例外的なレコードでは、SRU ポリマーの CAS 登録番号が索引されていない場合もある。



Nylon 6, Nylon 66, Poly (ethylene terephthalate) を網羅的に調査したい場合は、POLYLINK コマンドを利用して SRU ポリマーおよびモノマー単位ポリマーをまとめるとよい

A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

- 検索例 1 : 1,3-ブタジエン, アクリロニトリル, メタクリル酸メチルを含むポリマーが生物学的研究に利用されている文献を調査する.

ポイント

- ・ 付加重合系ポリマーは, 各モノマーの成分 CAS 登録番号検索 (/CRN) を実行する.
- ・ CPlus/CA ファイルで生物学的研究の文献に限定するには, CAS ロール BIOL を使用する.

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> E 1,3-BUTADIENE/CN

← 化学物質名を EXPAND で確認する (無料)

```
E1          1      1,3-BUTADIENAMINE/CN
E2          1      1,3-BUTADIENAMINE, 1,2,3-TRICHLORO-N,1-DIMERCAPTO-N-SULFINYL-/CN
E3          1 --> 1,3-BUTADIENE/CN
E4          1      1,3-BUTADIENE 1,4-DIISOCYANATE/CN
E5          1      1,3-BUTADIENE CATION RADICAL/CN
:
```

=> S E3

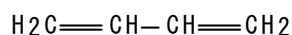
← 1,3-ブタジエンを検索する (702円)

L1 1 "1,3-BUTADIENE"/CN

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する (無料)

```
L1  1 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN  1,3-Butadiene
MF  C4 H6
CI  COM
```



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> E ACRYLONITRILE/CN 5

```
E1          1      ACRYLONITRILE-BUTADIENE COPOLYMER/CN
E2          1      ACRYLONITRIL-N-HYDROXYMETHYLACRYLAMIDE-N-TERT-BUTYLACRYLAMIDE
                  COPOLYMER/CN
E3          1 --> ACRYLONITRILE/CN
E4          1      ACRYLONITRILE ANION RADICAL/CN
E5          1      ACRYLONITRILE BUTYL ACRYLATE-ISOBORNYL METHACRYLATE-ITACONIC
                  ACID-N-METHYLOL ACRYLAMIDE-SODIUM 2-SULFOETHYL METHACRYLATE
                  -SODIUM VINYL SULFONATE POLYMER/CN
```

A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

=> S E3 ← アクリロニトリルを検索する (702 円)
 L2 1 ACRYLONITRILE/CN

=> D SCAN

L2 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 IN 2-Propenenitrile
 MF C3 H3 N
 CI COM

$$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{C}\equiv\text{N}$$

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> E METHYL METHACRYLATE/CN 5

E1 1 METHYL METAPHOSPHIMATE/CN
 E2 1 METHYL METAPHOSPHIMATE, TETRAMER/CN
 E3 1 --> METHYL METHACRYLATE/CN
 E4 1 METHYL METHACRYLATE BUTADIENE STYRENE TERPOLYMER/CN
 E5 1 METHYL METHACRYLATE COMPOUND WITH METHYL LINOLATE (1:1)/CN

=> S E3 ← メタクリル酸メチルを検索する (702 円)
 L3 1 "METHYL METHACRYLATE"/CN

=> D SCAN

L3 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester
 MF C5 H8 O2
 CI COM

$$\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C} \quad \text{O} \\ | \quad \quad | \\ \text{Me}-\text{C}-\text{C}-\text{OMe} \end{array}$$

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> SEL L1 RN ← 1,3-ブタジエンの CAS 登録番号を抽出する (12 円/件)
 E1 THROUGH E1 ASSIGNED

=> SEL L2 RN ← アクリロニトリルの CAS 登録番号を抽出する (12 円/件)
 E2 THROUGH E2 ASSIGNED

=> SEL L3 RN ← メタクリル酸メチルの CAS 登録番号を抽出する (12 円/件)
 E3 THROUGH E3 ASSIGNED

=> D SEL E1- ← 抽出したタームを表示する (無料)

E1 1 106-99-0/BI
 E2 1 107-13-1/BI
 E3 1 80-62-6/BI

=> S E1/CRN AND E2/CRN AND E3/CRN AND PMS/CI ← 成分 CAS 登録番号検索を行い、ポリマーに
 限定する (成分 CAS 登録番号検索は無料、
 PMS/CI は 702 円)

11388 106-99-0/CRN
 21445 107-13-1/CRN
 90112 80-62-6/CRN
 1413615 PMS/CI
 L4 923 106-99-0/CRN AND 107-13-1/CRN AND 80-62-6/CRN AND PMS/CI

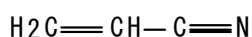
A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

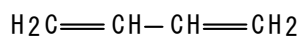
=> D SCAN

L4 923 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 1,3-butadiene,
ethenylbenzene, 2-propenenitrile and 2-propenoic acid, block, graft
MF (C8 H8 . C5 H8 O2 . C4 H6 . C3 H4 O2 . C3 H3 N)x ← 5成分からなるポリマー
CI **PMS**, COM

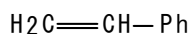
CM 1



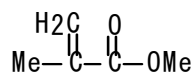
CM 2



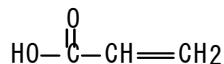
CM 3



CM 4



CM 5



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

=> FILE CAPLUS ← CAPLUS ファイルに入る

=> S L4/BIOL ← 生物学的研究に限定する (291 円)

2301 L4

8949121 BIOL/RL

L5 27 L4/BIOL
(L4 (L) BIOL/RL)

=> D SCAN TI HITIND ← SCAN 表示形式で標題とヒットした索引を確認する
(無料)

L5 27 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN
TI Method of reducing the adhesion of bubbles in medical equipment by polymer
grafting to surface
IT 100-42-5D, Styrene, polymers 106-99-0D, Butadiene, polymers 107-13-1D,
Acrylonitrile, polymers 9003-07-0, Polypropylene **9010-94-0**,
Cyro XT 735 25101-28-4, RSA 3G
RL: **BIOL (Biological study)**
(hydroxylated monomer grafting to, on surface of medical equipment
contacting parenteral liqs., bubble adherence in relation to)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):26

A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

L5 27 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 TI Burdock packaged by high-nitrile polymer containers
 IT **113149-93-2**, Acrylonitrile-butadiene-methyl methacrylate graft copolymer
 RL: **BIOL (Biological study)**
 (pretreated burdock and preservatives packaged by)

:
 ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> D L5 1 BIB ABS HITSTR

← 1 番目の回答を BIB ABS HITSTR 表示形式で表示する (734 円/件)

L5 ANSWER 1 OF 27 CAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 AN 2011:775832 CAPLUS [Full-text](#)
 DN 155:51782

TI Thermoplastic deformable film for production of occlusal splint for dental examinations, use of special copolymer for production of thermoplastic deformable film for occlusal splint

TIJP 歯科検査のための咬合性副子の生成, 咬合性副子のための熱可塑性の変形できるフィルムの使用のための熱可塑性の変形できるフィルム

HITSTR 表示形式 (340 円/件)
 ヒットした CAS 登録番号, その CAS ロールとテキスト説明句, CA 索引名, 構造図を表示する

IN Ommerborn, Michelle Alicia; Giraki, Maria; Christine; Gotter, Andreas

PA Heinrich-Heine-Universitaet, Germany

SO Ger. Offen., 10pp.

CODEN: GWXXBX

DT Patent

LA German

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	DE 102009044826	A1	20110622	DE 2009-102009044826	20091209
PRAI	DE 2009-102009044826		20091209		

AB Thermoplastic deformable film for the production of a occlusal splint for dental examns., whereby the film contains at least two layers of various color and whereby at least two of the layers are made of one or more Me methacrylate acrylonitrile butadiene styrene polymer(s), preferably Terluxe 2802 HD.

IT **9010-94-0**, Methyl methacrylate acrylonitrile butadiene styrene copolymer **107592-06-3**, Terluxe 2802 HD

RL: TEM (Technical or engineered material use); THU (Therapeutic use);

BIOL (Biological study); USES (Uses)

(thermoplastic deformable film for production of occlusal splint for dental examns., and use of special copolymer for production of thermoplastic deformable film for occlusal splint)

RN **9010-94-0** CAPLUS

CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 1,3-butadiene, ethenylbenzene and 2-propenenitrile (CA INDEX NAME)

CM 1

CRN 107-13-1

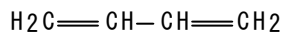
CMF C3 H3 N



CM 2

CRN 106-99-0

CMF C4 H6



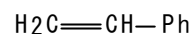
A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

CM 3

CRN 100-42-5

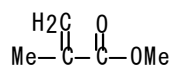
CMF C8 H8



CM 4

CRN 80-62-6

CMF C5 H8 O2



RN 107592-06-3 CAPLUS

CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 1,3-butadiene, ethenylbenzene and 2-propenenitrile, graft (CA INDEX NAME)

CM 1

CRN 107-13-1

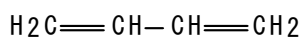
CMF C3 H3 N



CM 2

CRN 106-99-0

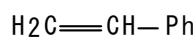
CMF C4 H6



CM 3

CRN 100-42-5

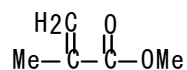
CMF C8 H8



CM 4

CRN 80-62-6

CMF C5 H8 O2

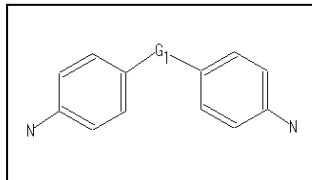
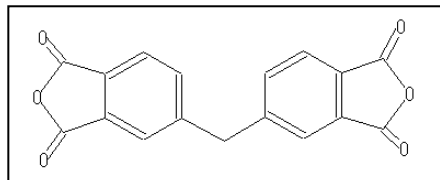


RE. CNT 4 THERE ARE 4 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

- 検索例 2 : 下記の骨格を有するモノマーを含むポリマーに関する特許を調査する.



すべての環は孤立
G1 = O/S

ポイント

- ・ 縮合系ポリマーは POLYLINK コマンドを使用して、モノマー単位ポリマーと SRU ポリマーをまとめることができる.

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=>

Uploading C:\Documents and Settings\My Documents\STN Express 8.4\Queries\EX1-1.str

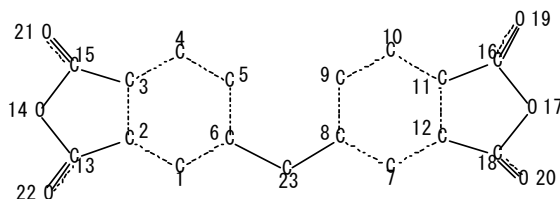
L1 STRUCTURE UPLOADED

← 構造をアップロードする

=> D L1 QUE

← アップロードした構造質問式を確認する

L1 STR



NODE ATTRIBUTES:

```

NSPEC  IS R      AT  1
NSPEC  IS R      AT  2
NSPEC  IS R      AT  3
:
NSPEC  IS R      AT 13
NSPEC  IS R      AT 14
NSPEC  IS R      AT 15
:
NSPEC  IS C      AT 19
NSPEC  IS C      AT 20
NSPEC  IS C      AT 21
NSPEC  IS C      AT 22
NSPEC  IS C      AT 23
DEFAULT MLEVEL IS ATOM
MLEVEL  IS CLASS AT 19 20 21 22 23
DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED
    
```

GRAPH ATTRIBUTES:

```

RSPEC  I
NUMBER OF NODES IS 23
    
```

← 環の孤立化

STEREO ATTRIBUTES: NONE

A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

=>

Uploading C:\Documents and Settings\My Documents\STN Express 8.4\Queries\EX1-2.str

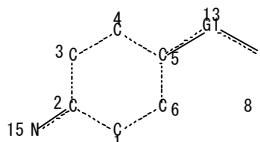
L2 STRUCTURE UPLOADED

← 構造をアップロードする

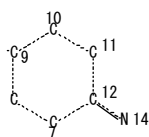
=> D L2 QUE

L2 STR

0 16 S 17



Page 1-A



Page 1-B

VAR G1=16/17

NODE ATTRIBUTES:

NSPEC IS R AT 1

NSPEC IS R AT 2

:

NSPEC IS R AT 6

NSPEC IS R AT 7

:

NSPEC IS R AT 12

NSPEC IS C AT 13

NSPEC IS C AT 14

NSPEC IS C AT 15

DEFAULT MLEVEL IS ATOM

MLEVEL IS CLASS AT 14 15 16 17

DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:

RSPEC I

← 環の孤立化

NUMBER OF NODES IS 17

STEREO ATTRIBUTES: NONE

=> SCR 2043

← ポリマー 一般のスクリーン

L3 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2 AND L3

← サンプル検索を実行する (無料)

SAMPLE SEARCH INITIATED 11:53:36 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 310 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 310 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

50 ANSWERS

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

PROJECTED ITERATIONS: 5144 TO 7256

PROJECTED ANSWERS: 1147 TO 2253

L4 50 SEA SSS SAM L1 AND L2 AND L3

A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

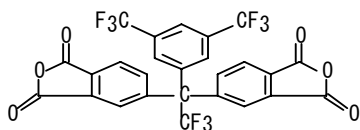
=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する (無料)

L4 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 IN 1,3-Isobenzofurandione, 5,5'-[1-[3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl]-2,2,2-trifluoroethylidene]bis-, polymer with 4,4'-sulfonylbis[benzenamine] (9CI)
 MF (C26 H9 F9 O6 . C12 H12 N2 O2 S)x ← 2 成分からなるポリマー
 CI PMS

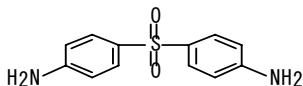
****RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK****

CM 1



対応する SRU ポリマーが存在しており、POLYLINK コマンドを使用すると実質的に同じポリマーを集めることができる

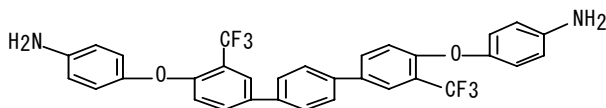
CM 2



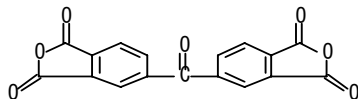
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 1

L4 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 IN 1,3-Isobenzofurandione, 5,5'-carbonylbis-, polymer with 4,4'-[[[3,3''-bis(trifluoromethyl)[1,1':4',1''-terphenyl]-4,4''-diyl]bis(oxy)]bis[benzenamine] and 4,4'-oxybis[benzenamine] (9CI)
 MF (C32 H22 F6 N2 O2 . C17 H6 O7 . C12 H12 N2 O)x ← 3 成分からなるポリマー
 CI PMS

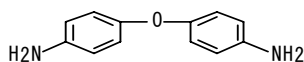
CM 1



CM 2



CM 3



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

A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

=> S L1 AND L2 AND L3 FUL ← フルファイル検索を実行する (24,200 円)
 FULL SEARCH INITIATED 11:54:35 FILE 'REGISTRY'
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 6175 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 6175 ITERATIONS 1779 ANSWERS
 SEARCH TIME: 00.00.01

L5 1779 SEA SSS FUL L1 AND L2 AND L3

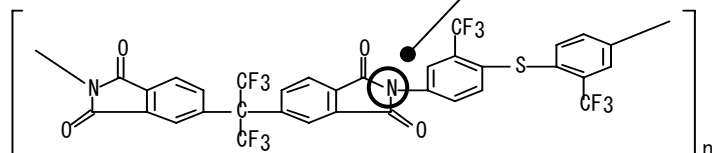
=> POLYLINK L5 ← POLYLINK コマンドを実行する (3,880 円)
 L6 2011 POLYLINK L5

=> S L6 NOT L5 ← POLYLINK コマンドを実行した結果, 増えた回答を
 L7 232 L6 NOT L5 確認する

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)

L7 232 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 IN Poly[(1,3-dihydro-1,3-dioxo-2H-isoindole-2,5-diyl)[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene](1,3-dihydro-1,3-dioxo-2H-isoindole-5,2-diyl)[3-(trifluoromethyl)-1,4-phenylene]thio[2-(trifluoromethyl)-1,4-phenylene]]
 MF (C33 H12 F12 N2 O4 S)n ● ————— SRU ポリマー
 CI PMS

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



使用した構造質問式は, 酸素 (O) を作図していたため, このレコードは構造検索ではヒットしない。

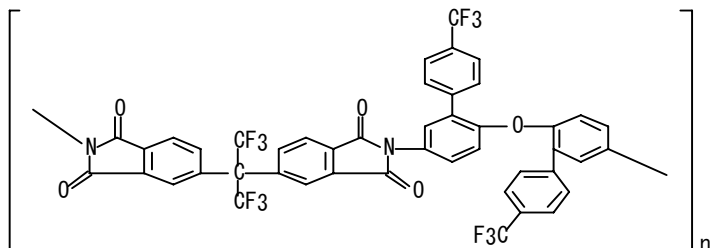
 POLYLINK コマンドを実行したことにより回答に含まれた

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

L7 232 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED
 MF (C45 H20 F12 N2 O5)n
 CI PMS

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



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

A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

=> FILE CAPLUS

← CAPLUS ファイルに入る

=> S L6

L8 3639 L6

=> S L8 AND P/DT

← 特許に限定する (291 円)

7803664 P/DT

L9 2161 L8 AND P/DT

=> D L9 3 72 BIB ABS HITSTR

← 3, 72 番目の回答を BIB ABS HITSTR 表示形式で表示する

L9 ANSWER 3 OF 2161 CAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN

AN 2011:754625 CAPLUS [Full-text](#)

DN 155:42855

TI Positive photosensitive polyimide resin compositions with good sensitivity and resolution

TIJP 良い感応性と分割がある陽性の感光性ポリイミド樹脂組成物 [機械翻訳]

IN Song, In Gak; Jin, Yeong Jun

PA Dongwoo Fine-Chem Co., Ltd., S. Korea

SO Repub. Korean Kongkae Taeho Kongbo, 14pp.

CODEN: KRXXA7

DT **Patent**

LA Korean

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	KR 2011062334	A	20110610	KR 2009-119031	20091203
PRAI	KR 2009-119031		20091203		

AB Title comps. contain (A) an additive containing ≥ 1 phenol compound, (B) an alkali-soluble polyimide, (C) a photosensitizer containing naphthoquinone

IT **1310532-81-0P** ● モノマー単位ポリマー

RL: IMF (Industrial manufacture); POF (Polymer in formulation); TEM (Technical or engineered material use); PREP (Preparation); USES (Uses) (pos. photosensitive polyimide resin comps. containing phenolic compds.)

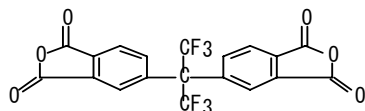
RN **1310532-81-0** CAPLUS

CN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED

CM 1

CRN 1107-00-2

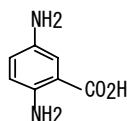
CMF C19 H6 F6 O6



CM 2

CRN 610-74-2

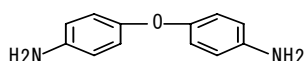
CMF C7 H8 N2 O2



CM 3

CRN 101-80-4

CMF C12 H12 N2 O



A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

L9 ANSWER 72 OF 2161 CAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 AN 2010:657276 CAPLUS [Full-text](#)
 DN 153:14029
 TI Low viscosity polymeric printing solutions and electronic components bearing polyimide based upon the low viscosity polymeric printing solutions
 TIJP ポリイミド低粘度の高分子印刷溶液に基づいている低粘度の高分子印刷水剤と電子部品軸受け [機械翻訳]
 IN Mengel, Manfred; Mahler, Joachim
 PA Infineon Technologies AG, Germany
 SO U.S. Pat. Appl. Publ., 20pp.
 CODEN: USXXCO
 DT **Patent**
 LA English
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	US 20100129552	A1	20100527	US 2008-275458	20081121
	CN 101752325	A	20100623	CN 2009-10178885	20091010
	DE 102009044607	A1	20100602	DE 2009-102009044607	20091120
PRAI	US 2008-275458	A	20081121		

ASSIGNMENT HISTORY FOR US PATENT AVAILABLE IN LSUS DISPLAY FORMAT

AB An elec. component that includes a substrate and a polymeric layer oriented in working relation with the substrate, where the polymeric layer including a low mol. mass polyimide is printed with polyamide (assumed monomers) low viscosity polyamide printing solns. and electronic components bearing polyimide based upon the low viscosity polymeric printing solns.)

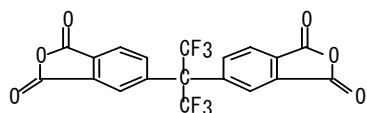
IT **32240-73-6** (assumed monomers) low viscosity polyamide printing solns. and electronic components bearing polyimide based upon the low viscosity polymeric printing solns.)

RL: PEP (Physical, engineering or chemical process); TEM (Technical or engineered material use); PROC (Process); USES (Uses)
 RN **32240-73-6** CAPLUS
 CN 1,3-Isobenzofurandione, 5,5'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bis-, polymer with 4,4'-oxybis[benzenamine] (CA INDEX NAME)

CM 1

CRN 1107-00-2

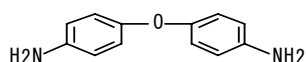
CMF C19 H6 F6 O6



CM 2

CRN 101-80-4

CMF C12 H12 N2 O

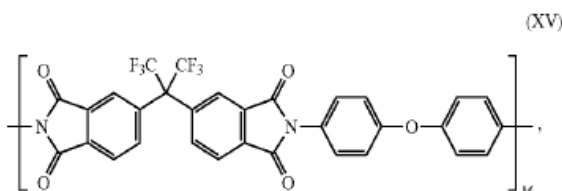


特許明細書中には SRU ポリマーの記載はあるが、モノマーの記載はない。しかし、SRU ポリマーからモノマーを推定（ポリイミド → テトラカルボン酸二無水物 + ジアミン）できるため、モノマー単位ポリマーも索引された

1. An electrical component, the electrical component comprising:

a substrate; and
 a polymeric layer in working relation with the substrate, the polymeric layer comprising a low molecular mass polyimide.

2. The electrical component of claim 1 wherein the low molecular mass polymer has the chemical structure of formula XV, formula XVI, formula XVII, formula XVIII, or an isomer thereof:



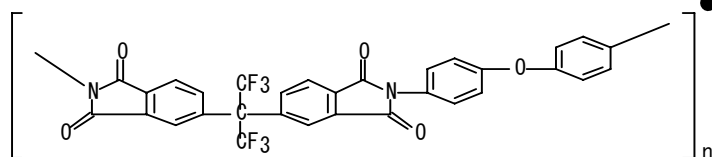
A ポリマー索引と検索方法

REGISTRY - ポリマーの調査方法

IT **39940-16-4** ● SRU ポリマー
 RL: PEP (Physical, engineering or chemical process); TEM (Technical or engineered material use); PROC (Process); USES (Uses)
 (low viscosity polyamide printing solns. and electronic components bearing polyimide based upon the low viscosity polymeric printing solns.)

RN **39940-16-4** CAPLUS

CN Poly[(1,3-dihydro-1,3-dioxo-2H-isoindole-2,5-diyl)[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene](1,3-dihydro-1,3-dioxo-2H-isoindole-5,2-diyl)-1,4-phenyleneoxy-1,4-phenylene] (CA INDEX NAME)



公報に記載されていた
SRU ポリマー
(前ページの公報の
抜粋を参照)

IT **64428-14-4** ●
 RL: RCT (Reactant); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
 (precursor; low viscosity polyamide printing solns. and electronic components bearing polyimide based upon the low viscosity polymeric printing solns.)

64428-14-4 は IDS 化合物の SRU ポリマーであり、構造は登録されていない。そのため、使用した構造質問式ではヒットしない。

POLYLINK コマンドを利用したことにより回答に含まれた

RN **64428-14-4** CAPLUS

CN Poly[oxy-1,4-phenyleneiminocarbonyl(carboxyphenylene)[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene](carboxyphenylene)carbonylimino-1,4-phenylene] (CA INDEX NAME)

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

RN 64428-14-4 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Poly[oxy-1,4-phenyleneiminocarbonyl(carboxyphenylene)[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene](carboxyphenylene)carbonylimino-1,4-phenylene] (CA INDEX NAME)
 MF (C31 H18 F6 N2 O7)n
 CI IDS, PMS, COM, MAN
 PCT Manual registration
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, USPAT2, USPATFULL

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

83 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

9 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

83 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

B 後処理ポリマー

(エステル化, エーテル化)

この章ではポリマーのエステル化物およびエーテル化物に関する
CAplus/CA ファイルの索引方針および文献調査方法を紹介します。

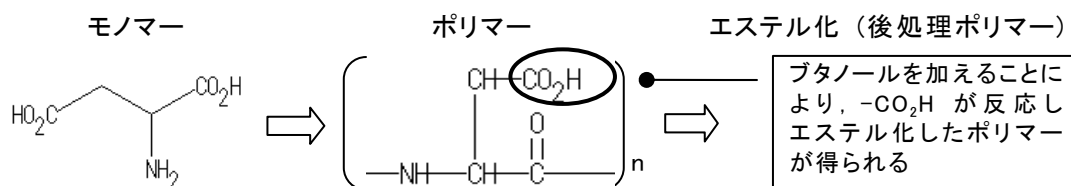
B 後処理ポリマー（エステル化，エーテル化）

後処理ポリマー

■ 後処理ポリマー

- ・ ポリマーが部分的もしくは全体的な修飾を受けて得られるポリマー生成物を後処理ポリマーという。

- 例) ポリアスパラギン酸のブチルエステル化



■ 後処理ポリマーの索引方針

- ・ 後処理の種類により、後処理ポリマーに関する CAplus/CA ファイルの索引方針が異なる。

1. 後処理ポリマーが独自の CAS 登録番号を持つ場合は、その CAS 登録番号で索引される。
2. 後処理ポリマーが独自の CAS 登録番号を持たない場合は、後処理前のポリマーの非特定誘導体 (D 付き) として索引され、キーワードに修飾情報が加えられる。

IT 後処理ポリマーの CAS 登録番号

IT 後処理前のポリマーの CAS 登録番号 (D) + キーワード

- 例) 塩素化物 : [原料ポリマーの CAS 登録番号] D + chlorinated など

- ・ 後処理タイプ別の索引方針

後処理の種類	CAplus/CA ファイルの索引方針 (上記の 1 または 2 で索引される)
エステル化	1
エーテル化	
ポリアルキレングリコールのエーテル化	1
天然物ポリマーのエーテル化	1
上記以外のエーテル化	2
塩, 付加化合物	1
上記以外の後処理ポリマー アミド化, イミド化, ウレタン化, 加水分解, 塩素化, 酸化, アルキル化, 上記の後処理でも構造を確定できないものなど	2

B 後処理ポリマー（エステル化、エーテル化）

エステル化

■ 後処理でエステル化されたポリマーの索引方針

- ・ ポリマーの持つ反応基（カルボキシル基，酸無水物基，エポキシ基，エステル基，ヒドロキシル基など）とエステル化剤で生じたエステル化物（ポリマーエステル）は独自の CAS 登録番号を持ち，CAplus/CA ファイルではその CAS 登録番号で索引される。
- ・ REGISTRY ファイルでエステル化されたポリマーを登録する際のエステル化剤は，実際に利用されている物質に関わらず必ず遊離酸またはアルコールで登録される。
 - 例えば，文献中にエステル化剤として塩化メタクリロイルが記載されていても，REGISTRY ファイルでは遊離酸であるメタクリル酸が登録される。

IT エステル化された
ポリマーの CAS 登録
番号

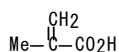
RN 215233-76-4 REGISTRY
 ED Entered STN: 08 Dec 1998
 CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, 2-hydroxyethyl ester, polymer with methyl
 2-methyl-2-propenoate, 2-methyl-2-propenoate (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, 2-methyl-2-propenoate, 2-methyl-2-propenoate
 OTHER NAMES:
 CN 2-Hydroxyethyl methacrylate-methyl methacrylate copolymer ester with
 methacryloyl chloride
 CN 2-Hydroxyethyl methacrylate-methyl methacrylate copolymer methacrylate
 MF (C6 H10 O3 . C5 H8 O2)x . x C4 H6 O2
 CI COM
 PCT Polyacrylic
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL

当レコードに登録されているエステル化剤は遊離酸であるメタクリル酸であるが，文献中で使用されていた実際のエステル化剤（メタクリル酸塩化物）の名前が収録されている場合もある

3 成分から成るポリマー

CM 1
 CRN 79-41-4
 CMF C4 H6 O2

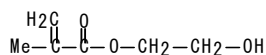
エステル化剤



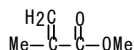
CM 2
 CRN 26355-01-1
 CMF (C6 H10 O3 . C5 H8 O2)x
 CCI PMS

メタクリル酸 2-ヒドロキシエチル (868-77-9) とメタクリル酸メチル (80-62-6) から成るポリマー。このポリマーの CAS 登録番号が 26355-01-1 である

CM 3
 CRN 868-77-9
 CMF C6 H10 O3



CM 4
 CRN 80-62-6
 CMF C5 H8 O2



B 後処理ポリマー（エステル化，エーテル化）

エステル化

- ・ ポリマーをエステル化する位置によって，比を特定しない形式で登録される場合と，比を含めた形式で登録される場合がある。

	エステル化の位置	登録形式	例
①	側鎖	比を特定しない形式	1, 2
②	末端基 (縮合系ポリマーのみ)	比が特定できる場合は，比を含めた形式	3, 4, 5
		比が不明な場合は，比を特定しない形式	

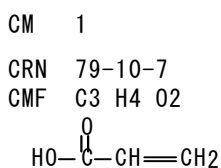
① 側鎖がエステル化されたポリマー

- ・ エステル基の位置やエステル化の比は特定されない。
 - 後処理前のポリマーとエステル化剤からなる多成分物質として登録される。
- ・ 例 1：4-(クロロメチル)スチレンとメタクリル酸メチルからなる共重合体をアクリル酸によってエステル化したポリマー

RN 160274-50-0 REGISTRY
 ED Entered STN: 20 Jan 1995
 CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with
 1-(chloromethyl)-4-ethenylbenzene, 2-propenoate (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Benzene, 1-(chloromethyl)-4-ethenyl-, polymer with methyl
 2-methyl-2-propenoate, 2-propenoate (9CI)
 OTHER NAMES:
 CN 4-(Chloromethyl)styrene-methyl methacrylate copolymer acrylate
 MF (C9 H9 Cl . C5 H8 O2)x . x C3 H4 O2
 PCT Polyacrylic, Polystyrene
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS

付加重合系ポリマー

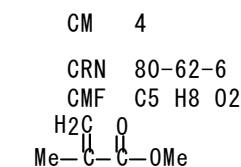
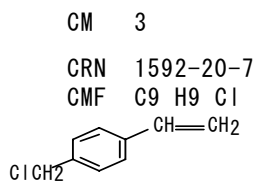
側鎖がエステル化された場合には，エステル化剤の比は特定されないので，比は不明 (x) になる



エステル化剤

CM 2
 CRN 68842-01-3
 CMF (C9 H9 Cl . C5 H8 O2) x
 CCI PMS

付加重合系ポリマーはモノマー単位ポリマーで登録される



B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化

- 例 2 : 3,3'-ジヒドロキシ-4,4'-ジアミノビフェニルと 4,4'-(ヘキサフルオロイソプロピリデン)ジフタル酸無水物からなる共重合体を 2-フランカルボン酸でエステル化したポリマー

RN 244090-71-9 REGISTRY
 ED Entered STN: 12 Oct 1999
 CN 1,3-Isobenzofurandione, 5,5'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bis-, polymer with 4,4'-diamino[1,1'-biphenyl]-3,3'-diol, 2-furancarboxylate (ester) (9CI)
 (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN [1,1'-Biphenyl]-3,3'-diol, 4,4'-diamino-, polymer with 5,5'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bis[1,3-isobenzofurandione], 2-furancarboxylate (ester) (9CI)
 OTHER NAMES:
 CN 3,3'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bis[4,4'-diaminobiphenyl]-4,4'-diphthalic anhydride copolymer ester with furoyl chloride
 MF (C19 H6 F6 O6 . C12 H12 N2 O2) x . x C5 H4 O3
 PCT Polyamic acid, Polyamic acid formed, Polyester, Polyester formed, Polyimide, Polyimide formed
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS

縮合系ポリマー
(モノマー単位ポリマー)

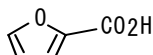
モノマー単位ポリマー

側鎖がエステル化された場合には, エステル化剤の比は特定されないので, 比は不明 (x) になる

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1
 CRN 88-14-2
 CMF C5 H4 O3

エステル化剤



対応する SRU ポリマーが存在し, POLYLINK コマンドが利用可能なことを示している

CM 2
 CRN 165054-78-4
 CMF (C19 H6 F6 O6 . C12 H12 N2 O2) x
 CCI PMS

CM 3
 CRN 2373-98-0
 CMF C12 H12 N2 O2

CM 4
 CRN 1107-00-2
 CMF C19 H6 F6 O6

縮合系ポリマーはモノマー単位ポリマーや SRU ポリマーで登録される。
 p.28 の 165054-78-4 はモノマー単位ポリマーであり, 対応する SRU ポリマーが p.29 の 165054-79-5 である。

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化

RN 244090-72-0 REGISTRY
 ED Entered STN: 12 Oct 1999
 CN Poly[(1,3-dihydro-1,3-dioxo-2H-isoindole-2,5-diyl) [2,2,2-trifluoro-(trifluoromethyl)ethylidene] (1,3-dihydro-1,3-dioxo-2H-isoindole-5,2-diyl) (3,3'-dihydroxy[1,1'-biphenyl]-4,4'-diyl)], 2-furancarboxylate (ester) (9CI) (CA INDEX NAME)

縮合系ポリマー
(SRU ポリマー)

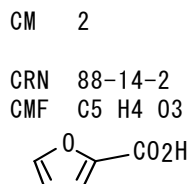
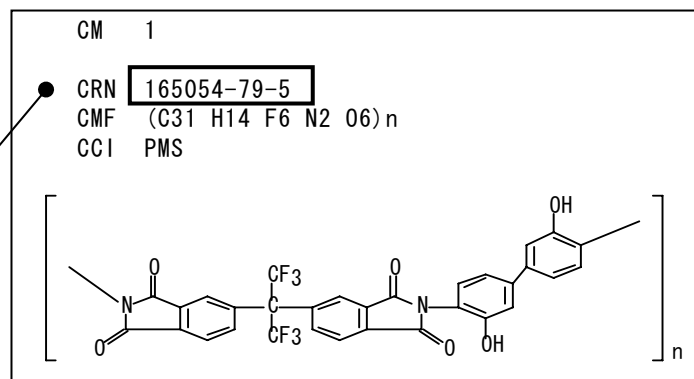
OTHER NAMES:

CN 3,3'-dihydroxy[1,1'-biphenyl]-4,4'-diylidene)diphthalic anhydride copolymer, sru, ester with fuoyl chloride
 MF (C31 H14 F6 N2 O6)_n . x C5 H4 O3
 PCT Polyimide
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS

側鎖がエステル化された場合には、エステル化剤の比は特定されないの、比は不明 (x) になる

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

対応するモノマー単位ポリマーが存在し、POLYLINK コマンドが利用可能なことを示している



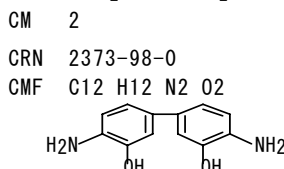
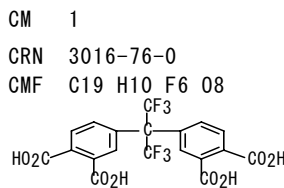
エステル化剤

参考

=> POLYLINK 165054-79-5 を実行すると p.28 の 165054-78-4 以外に下記のモノマー単位ポリマーなども紐付けされている

RN 1201554-81-5
 MF (C19 H10 F6 O8 . C12 H12 N2 O2)_x
 CI PMS, COM

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



B 後処理ポリマー（エステル化、エーテル化）

エステル化

② 末端基がエステル化されたポリマー

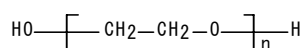
- ・ エステル化の比が特定できる場合は、その比を含めた形式で登録される。
- ・ エステル化の比が不明の場合は、（末端基なし SRU ポリマーを除いて）比の不明な多成分物質として登録される。
 - 後処理前のポリマーとエステル化剤からなる多成分物質として登録される。
- ・ エステル化の位置による登録形式の違い
 - 下記の表は REGISTRY ファイルに登録される分子式（MF）の形式を示している。
 - ・ (モノマー)_x はモノマー単位のホモポリマーおよびコポリマーを示す。
 - ・ (繰り返し単位)_n は SRU ポリマーの繰り返し単位である分子式を示している。また、構造図のイメージとして、[SRU] は SRU ポリマーを、● がエステル化剤を示している。

エステル化の位置	モノマー単位ポリマー	SRU ポリマー		例
		末端基つき SRU *1	末端基なし SRU *2	
片末端	(モノマー) _x . エステル化剤	(繰り返し単位) _n エステル化剤 [SRU]-●		3-1 4-1 5-1
両末端	(モノマー) _x . 2 エステル化剤	(繰り返し単位) _n エステル化剤 ●-[SRU]-●		3-2 4-2 5-2
不明 (原報中に比が書かれていない)	(モノマー) _x . x エステル化剤	(繰り返し単位) _n . x エステル化剤	エステル化剤を含めた独自の CAS 登録番号を持たない *3	3-3 4-3 5-3

*1 末端基つき SRU

末端基がある SRU ポリマー。通常、SRU ポリマーの末端基が修飾されて、モノマー由来でない末端基が導入された場合に、末端基つき SRU が索引される。ポリアルキレングリコールは例外的に末端基に水酸基を持つ末端基つき SRU として登録される。

例) Polyethylene glycol

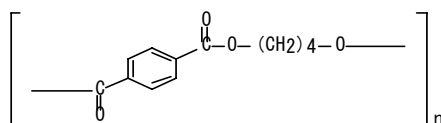


分子式は末端基込みで示される
(C₂H₄O)_nH₂O

*2 末端基なし SRU

末端基がなく、繰り返し単位のみで表される SRU ポリマー

例) Poly(1,4-butylene terephthalate)



分子式は (C₁₂H₁₂O₄)_n で示される

*3 末端基なし SRU ポリマーのエステル化

後処理後のポリマーに対して、独自の CAS 登録番号を持たない。つまり、REGISTRY ファイルには対応する物質が収録されていない。CAplus/CA ファイルの索引は、後処理前のポリマーの CAS 登録番号 D + エステル化を示すキーワードで索引される。

B 後処理ポリマー（エステル化、エーテル化）

エステル化

- 例 3: モノマー単位ポリマー（対応する SRU ポリマーは存在しない）の末端基のエステル化
（エチレンオキサイドとプロピレンオキサイドコポリマーをメタクリル酸でエステル化したポリマー）

- エチレンオキサイド-プロピレンオキサイドコポリマーとメタクリル酸の比によって、登録形式が異なる。

エステル化の位置	モノマー単位ポリマーの分子式 *	対応する CAS 登録番号	例
片末端	$C_4 H_6 O_2 \cdot (C_3 H_6 O \cdot C_2 H_4 O)_x$	58916-75-9	3-1
両末端	$C_4 H_6 O_2 \cdot 1/2 (C_3 H_6 O \cdot C_2 H_4 O)_x$	87003-89-2	3-2
不明	$C_4 H_6 O_2 \cdot x (C_3 H_6 O \cdot C_2 H_4 O)_x$	100359-25-9	3-3

* 各成分の分子式

エチレンオキサイド : C_2H_4O , プロピレンオキサイド : C_3H_6O , メタクリル酸 : $C_4H_6O_2$

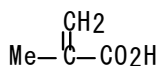
- 例 3-1: 片末端のみエステル化されたレコード : 58916-75-9

```

RN 58916-75-9 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, mono(2-methyl-2-propenoate) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Oxirane, methyl-, polymer with oxirane, mono(2-methyl-2-propenoate) (9CI)
CN Oxirane, polymer with methyloxirane, mono(2-methyl-2-propenoate) (9CI)
OTHER NAMES:
CN Bisoxirane, polymer with oxirane, mono(2-methyl-2-propenoate)
:
CN Ethylene oxide-propylene oxide copolymer monomethacrylate
DR 1091593-56-4, 226707-60-4
MF  $C_4 H_6 O_2 \cdot (C_3 H_6 O \cdot C_2 H_4 O)_x$ 
CI COM
PCT Polyether, Polyether formed
LC STN Files: CA, CAPLUS, CHEMCATS, CHEMLIST
  
```

```

CM 1
CRN 79-41-4
CMF  $C_4 H_6 O_2$ 
  
```

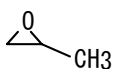


```

CM 2
CRN 9003-11-6
CMF  $(C_3 H_6 O \cdot C_2 H_4 O)_x$ 
CCI PMS
  
```

```

CM 3
CRN 75-56-9
CMF  $C_3 H_6 O$ 
  
```



```

CM 4
CRN 75-21-8
CMF  $C_2 H_4 O$ 
  
```



エステル化剤が片末端にのみ付いているので名称に mono が含まれている

コポリマーとエステル化剤が 1 : 1 であることが分子式で分かる。
分子式の入力は Hill 方式に従うため、当レコードでは、炭素数が多い成分が優先された結果としてエステル化剤が先に入力されている

エステル化剤

縮合系ポリマーはモノマー単位ポリマーや SRU ポリマーで登録されるが、当レコードのモノマーは SRU の条件を満たさないため、エチレンオキサイド-プロピレンオキサイドコポリマーの SRU ポリマーレコードは作成されず、モノマー単位ポリマーのみが収録される

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化

- 例 3-2 : 両末端がエステル化されたレコード : 87003-89-2

RN 87003-89-2 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, bis(2-methyl-2-propenoate) (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Oxirane, methyl-, polymer with oxirane, bis(2-methyl-2-propenoate) (9CI)
 CN Oxirane, polymer with methyloxirane, bis(2-methyl-2-propenoate) (9CI)
 OTHER NAMES:
 CN Aronix M
 CN Ethylene oxide-propylene oxide copolymer dimethacrylate
 CN FA 023M
 CN Polyoxyethylene polyoxypropylene dimethacrylate
 MF C4 H6 O2 . 1/2 (C3 H6 O . C2 H4 O)x
 CI COM
 PCT Polyether, Polyether formed
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPAT2, USPATFU

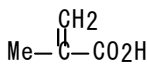
モノマー単位ポリマー

エステル化剤が両末端に付いているので名称に bis が含まれている

コポリマーとエステル化剤が 1 : 2 である。Hill 方式では、各成分の存在比は、先頭に表記される成分を 1 とする決まりがあるので、エステル化剤が 1 である

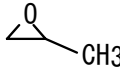
CM 1
 CRN 79-41-4
 CMF C4 H6 O2

エステル化剤




CM 2
 CRN 9003-11-6
 CMF (C3 H6 O . C2 H4 O)x
 CCI PMS

CM 3
 CRN 75-56-9
 CMF C3 H6 O



CM 4
 CRN 75-21-8
 CMF C2 H4 O



コポリマー

p. 31~p. 33 のレコードの CM 1 ~ CM 4 はすべて同じである

56 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 4 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 56 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化

- 例 3-3 : 比が不明なエステル化物のレコード : 100359-25-9

RN 100359-25-9 REGISTRY
 ED Entered STN: 22 Feb 1986
 CN Oxirane, methyl-, polymer with oxirane, 2-methyl-2-propenoate (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Oxirane, polymer with methyloxirane, 2-methyl-2-propenoate (9CI)
 DR 115165-82-7, 151853-47-3
 MF C4 H6 O2 . x (C3 H6 O . C2 H4 O) x
 CI COM
 PCT Polyether, Polyether formed
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL

比が不明であることを示す名称はない

モノマー単位ポリマー

比が不明な場合は x になる

CM 1
 CRN 79-41-4
 CMF C4 H6 O2
 $\begin{array}{c} \text{CH}_2 \\ | \\ \text{Me}-\text{C}-\text{CO}_2\text{H} \end{array}$

エステル化剤

CM 2
 CRN 9003-11-6
 CMF (C3 H6 O . C2 H4 O) x
 CCI PMS
 CM 3
 CRN 75-56-9
 CMF C3 H6 O
 $\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{CH}_3 \end{array}$
 CM 4
 CRN 75-21-8
 CMF C2 H4 O
 $\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \quad \diagdown \end{array}$

コポリマー

p. 31~p. 33 のレコードの
 CM 1~ CM 4 はすべて同じ
 である

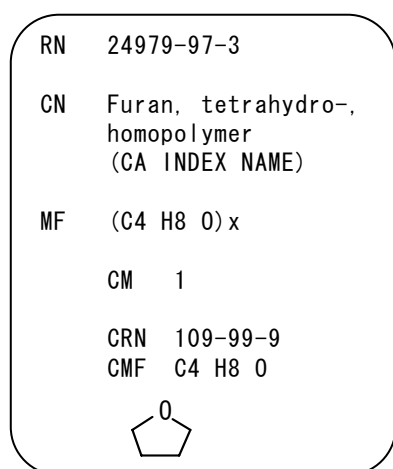
6 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 3 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 6 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

B 後処理ポリマー（エステル化、エーテル化）

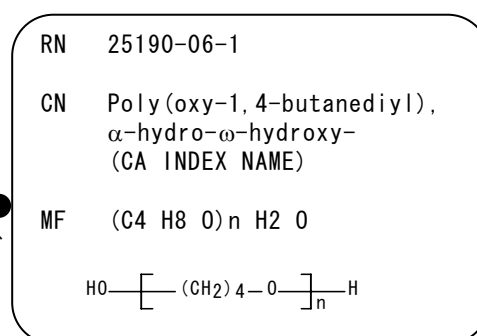
エステル化

- 例 4：モノマー単位ポリマーと末端基つき SRU ポリマーが両方あるポリマーのエステル化物（ポリテトラヒドロフランを酢酸でエステル化したポリマー）
 - ポリテトラヒドロフランにはモノマー単位ポリマーと末端基つき SRU ポリマーが存在する。2 つのポリマーは実質的に同じポリマーであるために、POLYLINK コマンドでまとめることができる。

THF のモノマー単位ポリマー



THF の末端基つき SRU ポリマー



POLYLINK コマンド

- エステル化する前のポリマーに上記のようにモノマー単位ポリマーと SRU ポリマーが存在する場合には、エステル化後のポリマーも 2 種類（モノマー単位ポリマーと SRU ポリマー）存在する可能性がある。
- ポリテトラヒドロフランの酢酸エステルは、ポリテトラヒドロフランと酢酸の比により、登録形式が異なる。

エステル化の位置	モノマー単位ポリマーの分子式 * (対応する CAS 登録番号)	末端基つき SRU ポリマーの分子式 * (対応する CAS 登録番号)	例
片末端	(C4 H8 O) _x . C2 H4 O2 (414866-37-8)	(C4 H8 O) _n C2 H4 O2 (76246-18-9)	4-1
両末端	(C4 H8 O) _x . 2 C2 H4 O2 (71714-39-1)	(C4 H8 O) _n C4 H6 O3 (26248-69-1)	4-2
不明	(C4 H8 O) _x . x C2 H4 O2 (147012-81-5)	(C4 H8 O) _n H2 O . x C2 H4 O2 (100359-35-1)	4-3

* 各成分の分子式

THF: C4H8O, 酢酸 : C2H4O2

B 後処理ポリマー（エステル化，エーテル化）

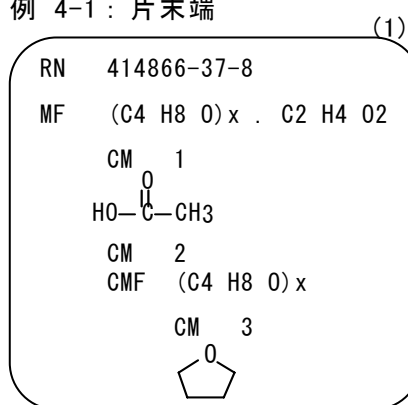
エステル化

- 各ポリマーと POLYLINK コマンドの関係

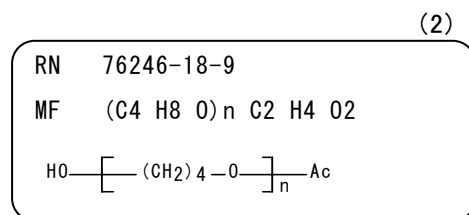
モノマー単位ポリマー

SRU ポリマー

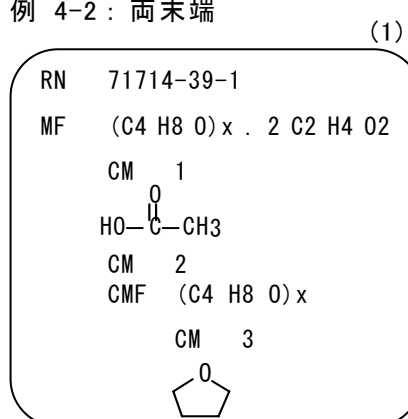
例 4-1：片末端



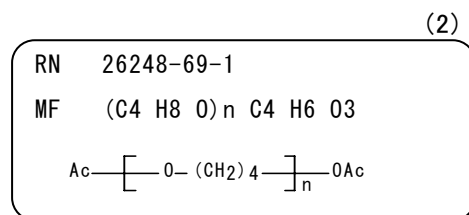
POLYLINK コマンド



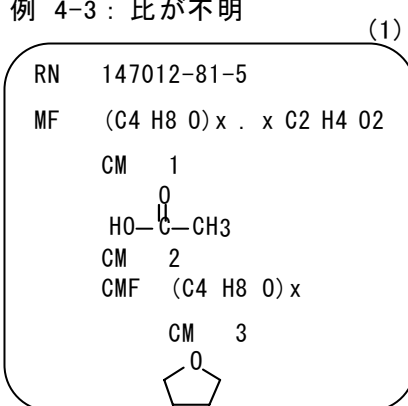
例 4-2：両末端



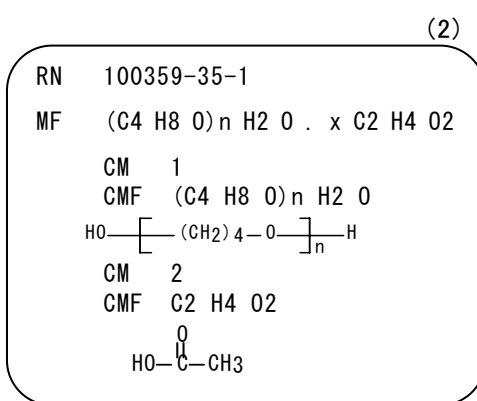
POLYLINK コマンド



例 4-3：比が不明



POLYLINK コマンド



上記の例では 4-1, 4-2 と 4-3 のグループ間の紐付けは存在しないので、あるグループ（例えば 4-1）のレコードから残りのグループ（例えば、4-2 または 4-3）のレコードを POLYLINK コマンドで集めることはできない。

参考

上記の例ではエステル化の比が不明なモノマー単位ポリマー（4-3-(1)）と、SRU ポリマー（4-3-(2)）が紐付けされているが、エステル化の比が特定の SRU ポリマー（例 4-1-(2) や 4-2-(2)）が紐付けされている場合もある。

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化

- 例 4-1-(1): 片末端のみエステル化されたレコード - モノマー単位ポリマー : 414866-37-8

RN 414866-37-8 REGISTRY
 ED Entered STN: 13 May 2002
 CN Furan, tetrahydro-, homopolymer, monoacetate (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER NAMES:
 CN Polytetrahydrofuran monoacetate
 CN Tetrahydrofuran homopolymer monoacetate
 MF (C4 H8 O)_x . C2 H4 O2
 PCT Polyether, Polyether formed
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPAT2, USPATFULL

モノマー単位ポリマー

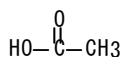
エステル化剤が片末端にのみ付いているので名称に mono が含まれている

エステル化前のポリマーとエステル化剤 (酢酸) が 1:1 であることが分子式からも分かる

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

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

エステル化剤



CM 2
 GRN 24979-97-3
 CMF (C4 H8 O)_x
 CCI PMS
 CM 3
 GRN 109-99-9
 CMF C4 H8 O



ポリテトラヒドロフランはモノマー単位ポリマー (24979-97-3) に紐付けされた SRU ポリマーが存在する。そして、エステル化後も 2 種類のポリマー (モノマー単位ポリマー (当レコード) と SRU ポリマー) が存在していることが、RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK から分かる

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

POLYLINK コマンドでまとめられる

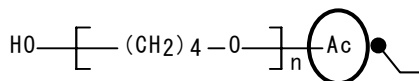
- 例 4-1-(2): 片末端のみエステル化されたレコード - SRU ポリマー : 76246-18-9

RN 76246-18-9 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Poly(oxy-1,4-butanediyl), α-acetyl-ω-hydroxy- (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER NAMES:
 CN Polytetramethylene glycol monoacetate
 MF (C4 H8 O)_n C2 H4 O2
 CI PMS, COM
 PCT Polyether
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL

末端基つき SRU ポリマーの CA INDEX NAME は Poly(…), α-…, ω-… である

SRU ポリマー

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



エステル化前のポリマーとエステル化剤 (酢酸) の比は 1:1 である。そのため、酢酸が片末端に付いた

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

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化

- 例 4-2-(1): 両末端がエステル化されたレコード - モノマー単位ポリマー : 71714-39-1

```

RN 71714-39-1 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Furan, tetrahydro-, homopolymer, diacetate (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN Tetrahydrofuran homopolymer diacetate
CN THF homopolymer
DR 72270-49
MF (C4 H8 O)x . 2 C2 H4 O2
PCT Polyether, Polyether formed
LC STN Files: CA, CAPLUS, CHEMLIST, IFIC

```

モノマー単位ポリマー

エステル化剤が両末端に付いているので
エステル剤の名称の前に di が含まれて
いる

エステル化前のポリマーとエステル化剤が
1:2 であることが分子式からも分かる

****RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK****

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

エステル化剤

CC(=O)O

CM 2	GRN 24979-97-3	CMF (C4 H8 O)x	CCI PMS
CM 3	GRN 109-99-9	CMF C4 H8 O	

p.36-p.38 の 4-1-(1), 4-2-(1),
4-3-(1) は CM 1~CM 3 が
すべて同じである

37 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

POLYLINK コマンドで
まとめられる

- 例 4-2-(2): 両末端がエステル化されたレコード - SRU ポリマー : 26248-69-1

```

RN 26248-69-1 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Poly(oxy-1,4-butanediyl), α-acetyl-ω-(acetyloxy)- (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Glycols, poly diacetate (8Cl)
MF (C4 H8 O)n C4 H6 O3
CI PMS, COM
PCT Polyether
LC STN Files: CA, CAPLUS

```

SRU ポリマー

末端つき SRU ポリマーの分子式は、繰り返し単位の
組成と、両末端の合計の分子式である
C4H6O3 は Ac- と -OAc の合計の分子式である

****RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK****

CC(=O)OCCOC(CCO)CCOC(=O)C

エステル化前のポリマーとエステル化剤 (酢酸) の
比は 1:2 であるため、酢酸が両末端に付いている

****PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PF' FILE****

123 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

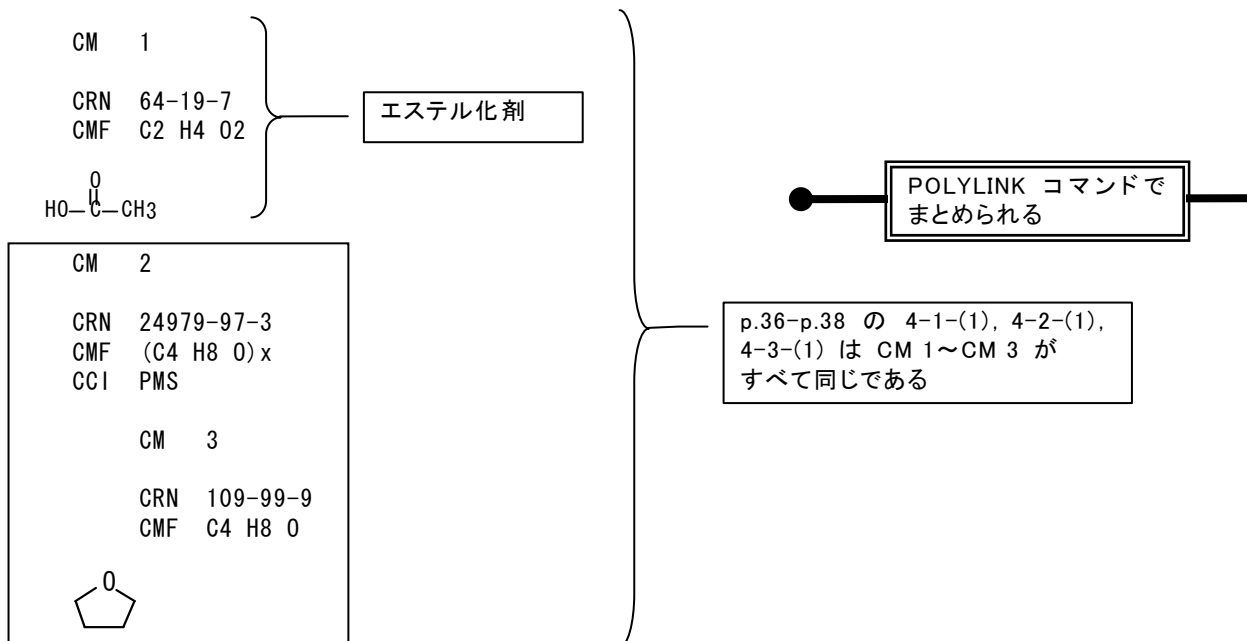
B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化

- 例 4-3-(1): 比が不明なエステル化物のレコード - モノマー単位ポリマー : 147012-81-5

RN 147012-81-5 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Apr 1993
 CN Furan, tetrahydro-, homopolymer, acetate (CA INDEX NAME)
 OTHER NAMES:
 CN Poly(tetrahydrofuran) acetate
 CN Tetrahydrofuran モノマー単位ポリマー te
 CN THF homopolymer acetate
 MF (C4 H8 O)_x . x C2 H4 O2
 PCT Polyether, Polyether formed エステル化前のポリマーとエステル化剤の
比が不明な場合は, x が付く
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPAT

****RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK****



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

参考

モノマー単位ポリマーの比が不明なエステル化物 (例 4-3-(1)) は, 比が特定なエステル化の SRU ポリマー (例 4-1-(2) や 4-2-(2)) とともに紐付けされている場合もある。

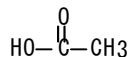
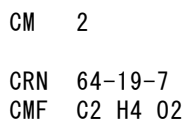
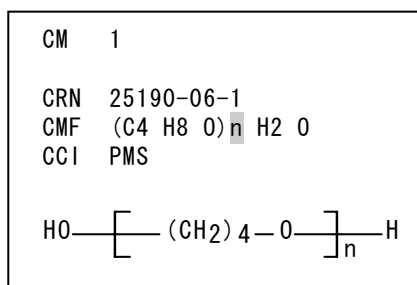
B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化

- 例 4-3-(2): 比が不明なエステル化物のレコード - SRU ポリマー : 100359-35-1

RN 100359-35-1 REGISTRY
 ED Entered STN: 22 Feb 1986
 CN Poly(oxy-1,4-butanediyl), α -hydro- ω -hydroxy-, acetate (CA INDEX NAME)
 OTHER NAMES:
 CN Poly(tetrahydroxybutane) ポリテトラヒドロフランポリマーの SRU ポリマーは
 CN Polytetramethylene glycol もともと末端基つきで収録されている
 CN Polytetramethylene glycol acetate, SRU
 MF (C4 H8 O)_n H2 O . x C2 H4 O2
 PCT Polyether
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS エステル化前の SRU ポリマーとエステル化剤の比が不明な場合は x が付く

****RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK****



エステル化剤

末端基つき SRU ポリマーとエステル化剤の比が不明な場合は, エステル化前のポリマーとエステル化剤との多成分物質として登録される

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

B 後処理ポリマー（エステル化、エーテル化）

エステル化

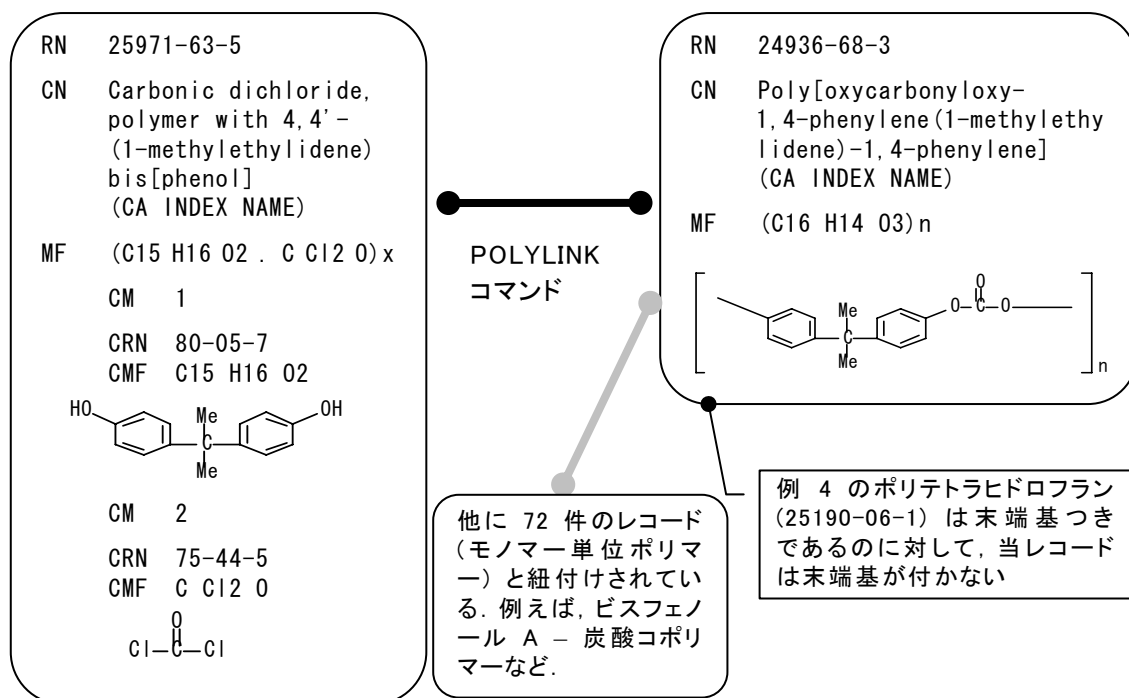
- 例 5：モノマー単位ポリマーと末端基なし SRU ポリマーが両方あるポリマーのエステル化物
（ビスフェノール A - ホスゲンコポリマーを 4-*t*-ブチルフェノールでエステル化したポリマー）

- ビスフェノール A - ホスゲンコポリマーにはモノマー単位ポリマーと末端基なし SRU ポリマーが存在する。2 つのポリマーは実質的に同じポリマーであるために、POLYLINK コマンドでまとめることができる。

ビスフェノール A とホスゲンから成るポリマー

モノマー単位ポリマー

末端基なし SRU ポリマー



- 上記のようにモノマー単位ポリマーと SRU ポリマーが存在する場合には、エステル化後のポリマーも 2 種類存在する場合がある。
- ビスフェノール A - ホスゲンコポリマーの 4-*t*-ブチルフェノールによるエステル化物は、コポリマーと 4-*t*-ブチルフェノールの比により、登録形式が異なる。

エステル化の位置	モノマー単位ポリマーの分子式* (対応する CAS 登録番号)	末端基なし SRU ポリマーの分子式* (対応する CAS 登録番号)	例
片末端	現在は収録されていない 〔収録された場合の分子式は、 (C15 H16 O2 . C Cl2 O)x . C10 H14 O〕	(C16 H14 O3)n C10 H14 O (304853-19-8)	5-1
両末端	(C15 H16 O2 . C Cl2 O)x . 2 C10 H14 O (104625-71-0)	(C16 H14 O3)n C21 H26 O3 (86155-47-7)	5-2
不明	(C15 H16 O2 . C Cl2 O)x . x C10 H14 O (103598-77-2)	独自の CAS 登録番号を持たない	5-3

* 各成分の分子式

ビスフェノール A : C15H16O2, ホスゲン : CCl2O, 4-*t*-ブチルフェノール : C10H14O

B 後処理ポリマー（エステル化、エーテル化）

エステル化

- 各ポリマーと POLYLINK コマンドの関係

モノマー単位ポリマー

SRU ポリマー

例 5-1：片末端

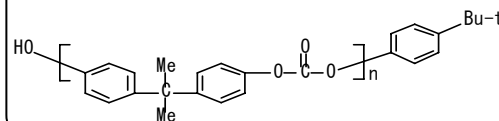
(1)

ビスフェノール A - ホスゲンコポリマーの 4-t-ブチルフェノールによる片末端のエステル化物は現在収録されていない

ビスフェノール A - 炭酸コポリマーは実質的にビスフェノール A - ホスゲンコポリマーと同じである。
現在、ビスフェノール A - 炭酸コポリマーの 4-t-ブチルフェノールによる末端基のエステル化物は収録されていて、分子式は $(C_{15}H_{16}O_2 \cdot CH_2O_3)_x \cdot C_{10}H_{14}O$ である。
このポリマーと SRU ポリマーが紐付けされている

(2)

RN 304853-19-8
MF $(C_{16}H_{14}O_3)_n C_{10}H_{14}O$

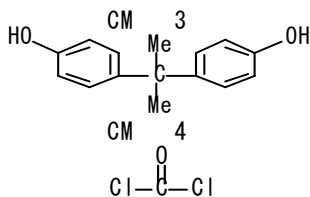
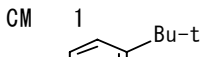


POLYLINK
コマンド

例 5-2 両末端

(1)

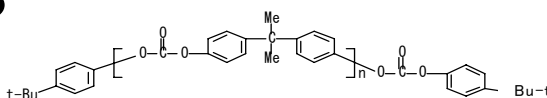
RN 104625-71-0
MF $(C_{15}H_{16}O_2 \cdot CC_{12}O)_x \cdot 2C_{10}H_{14}O$



POLYLINK
コマンド

(2)

RN 86155-47-7
MF $(C_{16}H_{14}O_3)_n C_{21}H_{26}O_3$

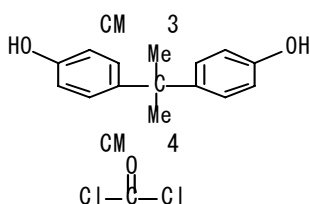
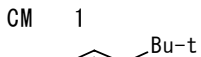


他のモノマー単位ポリマーとも紐付けされている
例えば、ビスフェノール A - 炭酸コポリマーの 4-t-ブチルフェノールのエステル化物（両末端、比が不明を含む）など。

例 5-3 比が不明

(1)

RN 103598-77-2
MF $(C_{15}H_{16}O_2 \cdot CC_{12}O)_x \cdot xC_{10}H_{14}O$



(2)

末端基なしの SRU ポリマーとエステル化剤の比が不明な場合は、エステル化物は登録されない

参考

この例のようにエステル化の比が不明な SRU ポリマーが登録されない場合には、エステル化の比が不明なモノマー単位ポリマー（例 5-3-(1)）はエステル化の比が特定の SRU ポリマー（例 5-1-(2) や 5-2-(2)）と紐付けされる。

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

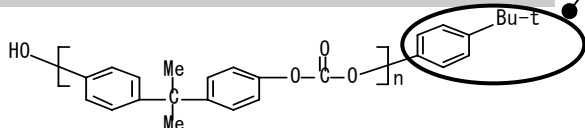
エステル化

- 例 5-1-(1): 片末端のみエステル化されたレコード - モノマー単位ポリマー
現在は収録されていない。
- 例 5-1-(2): 片末端のみエステル化されたレコード - SRU ポリマー : 304853-19-8

RN 304853-19-8 REGISTRY
 ED Entered STN: 29 Nov 2000
 CN Poly[oxy-carbonyloxy-1,4-phenylene(1-methylethylidene)-1,4-phenylene],
 α-[4-(1,1-dimethylethyl)phenyl]-ω-hydroxy- (CA INDEX NAME)
 :
 MF (C16 H14 O3)_n C10 H14 O
 CI PMS, COM
 PCT Polycarbonate
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPAT2, USPATFULL

SRU ポリマー

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



エステル化前のポリマーとエステル化剤の比は 1:1 である。そのため、エステル化剤が片末端のみに付いている

参考: 上記の SRU ポリマーと紐付けされているモノマー単位ポリマー

RN 305321-96-4 REGISTRY
 ED Entered STN: 30 Nov 2000
 CN Carbonic acid, polymer with 4,4'-(1-methylethylidene)bis[phenol],
 mono[4-(1,1-dimethylethyl)phenyl] ester (CA INDEX NAME)
 :
 MF (C15 H16 O2 . C H2 O3)_x . C10 H14 O
 PCT Polycarbonate, Polycarbonate formed
 SR モノマー単位ポリマー
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPAT2, USPATFULL

POLYLINK コマンドでまとめられる

エステル化前のコポリマーとエステル化剤が 1:1 である

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1
 CRN 98-54-4
 CMF C10 H14 O

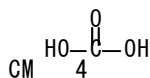
 CM 2

エステル化剤

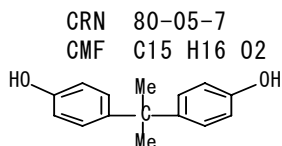
CRN 25037-45-0
 CMF (C15 H16 O2 . C H2 O3)_x
 CCI PMS

CM 3

CRN 463-79-6
 CMF C H2 O3



ビスフェノール A - 炭酸コポリマー



B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化

- 例 5-2-(1): 両末端がエステル化されたレコード - モノマー単位ポリマー : 104625-71-0

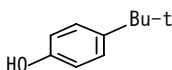
RN 104625-71-0 REGISTRY
 ED Entered STN: 11 Oct 1986
 CN Carbonic dichloride, polymer with 4,4'-(1-methylethylidene)bis[phenol], bis[4-(1,1-dimethylethyl)phenyl] ester (CA INDEX NAME)
 MF (C15 H16 O2 . C C12 O)x . 2 C10 H14 O
 PCT Polycarbonate, Polycarbonate formed
 SR モノマー単位ポリマー
 LC US, USPATFULL

エステル化剤が両末端に付くので、名称に bis が含まれている

エステル化前のコポリマーとエステル化剤が 1:2 であることが分子式からも分かる

****RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK****

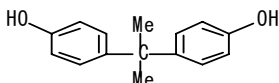
CM 1
 CRN 98-54-4
 CMF C10 H14 O



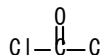
エステル化剤

CM 2
 CRN 25971-63-5
 CMF (C15 H16 O2 . C C12 O)x
 CCI PMS

CM 3
 CRN 80-05-7
 CMF C15 H16 O2



CM 4
 CRN 75-44-5
 CMF C C12 O



p.43-p.44 の 5-2-(1), 5-3-(1) は CM 1~CM 4 がすべて同じである

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

POLYLINK コマンドでまとめられる

- 例 5-2-(2): 両末端がエステル化されたレコード - SRU ポリマー : 86155-47-7

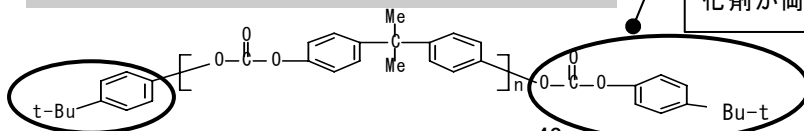
RN 86155-47-7 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Poly[oxy-carbonyloxy-1,4-phenylene(1-methylethylidene)-1,4-phenylene], α -[4-(1,1-dimethylethyl)phenyl]- ω -[[[4-(1,1-dimethylethyl)phenoxy]carbonyl]oxy]- (CA INDEX NAME)

MF (C16 H14 O3)_n C21 H26 O3
 CI PMS
 PCT Polycarbonate
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, USPAT2, U

末端基つき SRU ポリマーの分子式は、繰り返し単位の組成と、両末端の合計の分子式である

SRU ポリマー

エステル化前のポリマーとエステル化剤の比が 1:2 であるため、エステル化剤が両末端に付いている



B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化

- 例 5-3-(1): 比が不明なエステル化物のレコード - モノマー単位ポリマー : 103598-77-2

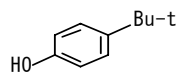
RN 103598-77-2 REGISTRY
 ED Entered STN: 09 Aug 1986
 CN Carbonic dichloride, polymer with 4,4'-(1-methylethylidene)bis[phenol],
 4-(1,1-dimethylethyl)phenyl ester (CA INDEX NAME)
 MF (C15 H16 O2 . C Cl2 O) x . x C10 H14 O
 CI COM
 PCT Polycarbonate, Polycarbonate fo
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CHEMCATS, CHEMLIST, MSDS-OHS, TOXCENTER, USPAT2,

エステル化前のコポリマーとエステル化剤の比が不明な場合は, x が付く

モノマー単位ポリマー

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1
 CRN 98-54-4
 CMF C10 H14 O

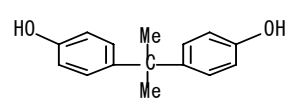


エステル化剤

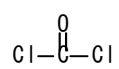
末端基なしの SRU ポリマーのエステル化物は独自の CAS 登録番号を持たない (下記の例 5-3-(2) を参照)
 このポリマーは p.43 のポリマーとエステル化剤が 1:2 で登録されている 5-2-(2) の SRU ポリマーに紐付けされている

CM 2
 CRN 25971-63-5
 CMF (C15 H16 O2 . C Cl2 O) x
 CCI PMS

CM 3
 CRN 80-05-7
 CMF C15 H16 O2



CM 4
 CRN 75-44-5
 CMF C Cl2 O



p.43-p.44 の 5-2-(1), 5-3-(1) は CM 1~CM 4 がすべて同じである

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

- 例 5-3-(2): 比が不明なエステル化物のレコード - 末端基なし SRU ポリマー

- ・ 末端基なし SRU ポリマーのエステル化物は独自の CAS 登録番号を持たない.
- ・ CAplus/CA ファイルで末端基なし SRU ポリマーのエステル化物を索引する場合には, エステル化する前の末端基なし SRU ポリマーの CAS 登録番号 + D, エステル化に関するキーワードで索引する.

B 後処理ポリマー（エステル化、エーテル化）

エステル化されたポリマーの文献調査

■ 後処理でエステル化されたポリマーの登録形式のまとめ

- ・ 下記の表は REGISTRY ファイルに登録される分子式 (MF) の形式を示している。
 - (モノマー)_x はモノマー単位のホモポリマーまたはコポリマーを示し、(繰り返し単位)_n は SRU ポリマーの繰り返し単位である分子式を示している。また構造図のイメージとして、[SRU] は SRU ポリマーを、● がエステル化剤を示している。

エステル化の位置	モノマー単位ポリマー	SRU ポリマー	
		末端基つき SRU	末端基なし SRU
側鎖	(モノマー) _x . x エステル化剤	(繰り返し単位) _n . x エステル化剤	
末端基			
片末端	(モノマー) _x . エステル化剤	(繰り返し単位) _n エステル化剤 [SRU]-●	
両末端	(モノマー) _x . 2 エステル化剤	(繰り返し単位) _n エステル化剤 ●-[SRU]-●	
不明 (原報中に比が書かれていない)	(モノマー) _x . x エステル化剤	(繰り返し単位) _n . x エステル化剤	エステル化剤を含めた独自の CAS 登録番号を持たない ●

①

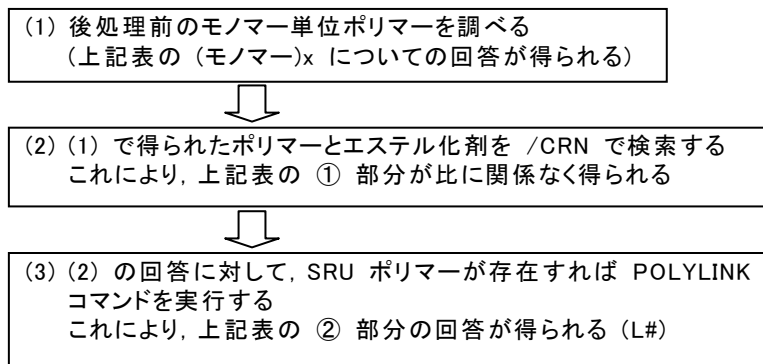
②

③

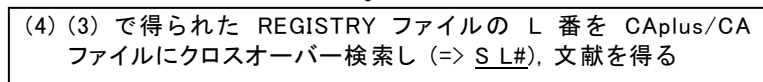
■ おすすめの検索方法

- ・ まずなるべく多くの、考えられるモノマー単位ポリマーの集合（上記表の ① 部分）を作成してから、POLYLINK コマンドを利用して、SRU ポリマーを回答に含める（上記表の ② 部分）手法をとるとよい。
- ・ 基本的な検索の流れ

REGISTRY ファイル



CAplus/CA ファイル



左記に加えて、より網羅的に検索するには ③ も検索する

末端なし SRU
ポリマーを検索
する (L##)

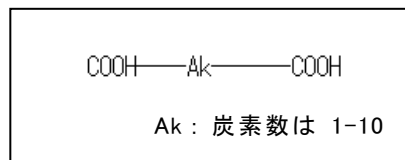
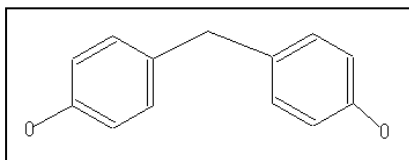
=> S L##/D (L) エステル化
のキーワードで検索する *

* CAS 登録番号 + D は 1977 年以降のレコードに付与されている。1976 年以前の文献が必要な場合は p.65 を参照

B 後処理ポリマー（エステル化、エーテル化）

エステル化されたポリマーの文献調査

- 検索例 1: 下記の 2 つの骨格を有するモノマーから成るポリマーをメタクリル酸でエステル化したポリマーの文献を調査する。



ポイント

- ・ エステル化する前のポリマーを特定した後に、エステル化物を調査する。また、対応する SRU ポリマーが存在する場合には POLYLINK コマンドを実行する。

=> FILE REGISTRY

← *REGISTRY* ファイルに入る

=>

Uploading C:\Documents and Settings\My Documents\STN Express 8.4\Queries\EX3 MONOMER1.str

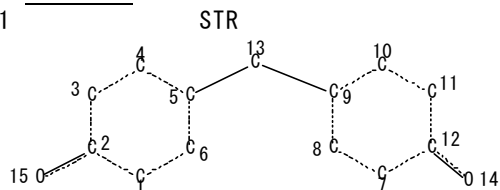
L1 STRUCTURE UPLOADED

← 構造質問式をアップロードする

=> D L1 QUE

← アップロードした構造質問式を確認する
(無料)

L1



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 R AT 6
NSPEC IS R AT 7
NSPEC IS R AT 8
NSPEC IS R AT 9
NSPEC IS R AT 10
NSPEC IS R AT 11
NSPEC IS R AT 12
NSPEC IS C AT 13
NSPEC IS C AT 14
NSPEC IS C AT 15
DEFAULT MLEVEL IS ATOM
MLEVEL IS CLASS AT 13 14 15
DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED
    
```

GRAPH ATTRIBUTES:

```

RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED
NUMBER OF NODES IS 15
    
```

← 環は孤立/非孤立

STEREO ATTRIBUTES: NONE

B 後処理ポリマー（エステル化, エーテル化）

エステル化されたポリマーの文献調査

=>

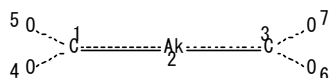
Uploading C:\Documents and Settings\My Documents\STN Express 8.4\Queries\EX3 MONOMER2.str

L2 STRUCTURE UPLOADED

← 構造質問式をアップロードする

=> D L2 QUE

L2 STR



NODE ATTRIBUTES:

NSPEC IS C AT 1
NSPEC IS C AT 2
NSPEC IS C AT 3
NSPEC IS C AT 4
NSPEC IS C AT 5
NSPEC IS C AT 6
NSPEC IS C AT 7

DEFAULT MLEVEL IS ATOM

MLEVEL IS CLASS AT 1 2 3 4 5 6 7

DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED

ECOUNT IS M1-X10 C AT 2

← Ak の炭素数は 1-10

GRAPH ATTRIBUTES:

RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED

NUMBER OF NODES IS 7

STEREO ATTRIBUTES: NONE

=> SCR 2043

L3 SCREEN CREATED

← ポリマー 一般のスクリーン

=> SCR 2077

L4 SCREEN CREATED

← 3 成分以上のスクリーン

=> S L1 AND L2 AND L3 NOT L4

SAMPLE SEARCH INITIATED 14:26:40 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 150 TO ITERATE

← サンプル検索を実行する (無料)

100.0% PROCESSED 150 ITERATIONS

11 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**

BATCH **COMPLETE**

PROJECTED ITERATIONS: 2266 TO 3734

PROJECTED ANSWERS: 20 TO 418

L5 11 SEA SSS SAM L1 AND L2 AND L3 NOT L4

スクリーンを利用して 3 成分以上の
ポリマーを除いた。
その結果として L5 の回答は成分数
1-2 のポリマーが得られている

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化されたポリマーの文献調査

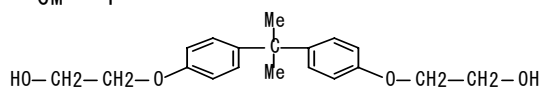
=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する (無料)

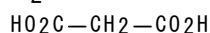
L5 11 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN Propanedioic acid, polymer with 2,2'-[(1-methylethylidene)bis(4,1-phenyleneoxy)]bis[ethanol] (9C1)
MF (C19 H24 O4 . C3 H4 O4)x
CI PMS, COM

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1



CM 2



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

=> S L1 AND L2 AND L3 NOT L4 FUL

← フルファイル検索を実行する (24,200 円)

FULL SEARCH INITIATED 14:27:15 FILE 'REGISTRY'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 3045 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 3045 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

222 ANSWERS

L6 222 SEA SSS FUL L1 AND L2 AND L3 NOT L4

=> TRA L6 RN /CRN

L7 TRANSFER L6 1- RN : 222 TERMS
L8 110 L7/CRN

L6 で得られたポリマーのエステル化物を調べるには、得られたポリマーが一つの成分として登録されているレコードを調査する必要がある。そのため、TRANSFER コマンドを利用してポリマーの CAS 登録番号を抽出し、/CRN で検索する (2,300 円)

=> E METHACRYLIC ACID/CN

E1 1 METHACRYLESTER C 13, POLYMER WITH BUTYL 2-METHYL-2-PROPENOAT
E, ETHENYLBENZENE, METHYL 2-METHYL-2-PROPENOATE, 1,2-PROPANE
DIOL MONO(2-METHYL-2-PROPENOATE) AND 2-PROPENOIC ACID/CN
E2 1 METHACRYLESTER C 13, POLYMER WITH N,N-DIMETHYL-N-2-PROPENYL-
2-PROPEN-1-AMINIUM CHLORIDE/CN
E3 1 --> METHACRYLIC ACID/CN
E4 1 METHACRYLIC ACID B-CHLOROETHYL ESTER/CN

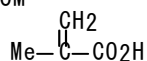
=> S E3

L9 1 "METHACRYLIC ACID"/CN

← エステル化剤であるメタクリル酸を検索する (702 円)

=> D SCAN

L9 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-
MF C4 H6 O2
CI COM



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化されたポリマーの文献調査

=> SEL RN
E1 THROUGH E1 ASSIGNED

← メタクリル酸の CAS 登録番号を抽出する (12 円/件)

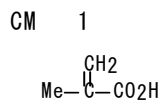
=> S E1/CRN AND L8

61261 79-41-4/CRN
L10 46 79-41-4/CRN AND L8

L6 で得られたポリマーとエステル化剤である
メタクリル酸が含まれる物質を調べる

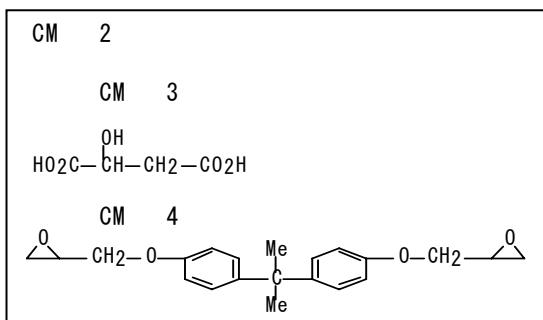
=> D SCAN

L10 46 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN Butanedioic acid, hydroxy-, polymer with
2, 2'-[(1-methylethylidene)bis(4, 1-phenyleneoxymethylene)]bis[oxirane],
2-methyl-2-propenoate (9CI)
MF (C21 H24 O4 . C4 H6 O5)x . x C4 H6 O2



コポリマー : メタクリル酸 (エステル剤) = 比が不明

エステル化剤



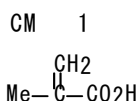
CM2 は CM3 と CM4 からなるコポリマー

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1) : 2

L10 46 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN Octanedioic acid, polymer with 2, 2'-[(1-methylethylidene)bis(4, 1-phenyleneoxy)]bis[ethanol], bis(2-methyl-2-propenoate) (9CI)
MF (C19 H24 O4 . C8 H14 O4)x . 2 C4 H6 O2
CI COM

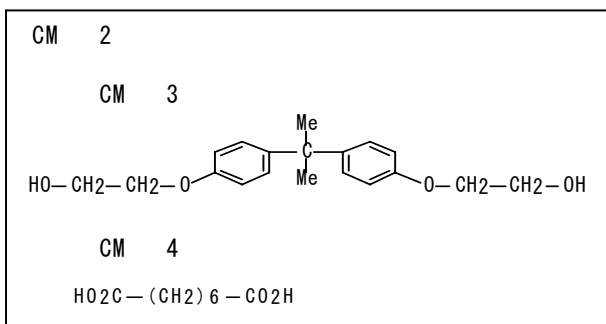
コポリマー : メタクリル酸 (エステル剤) = 1 : 2

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



対応する SRU ポリマーが存在する

エステル化剤

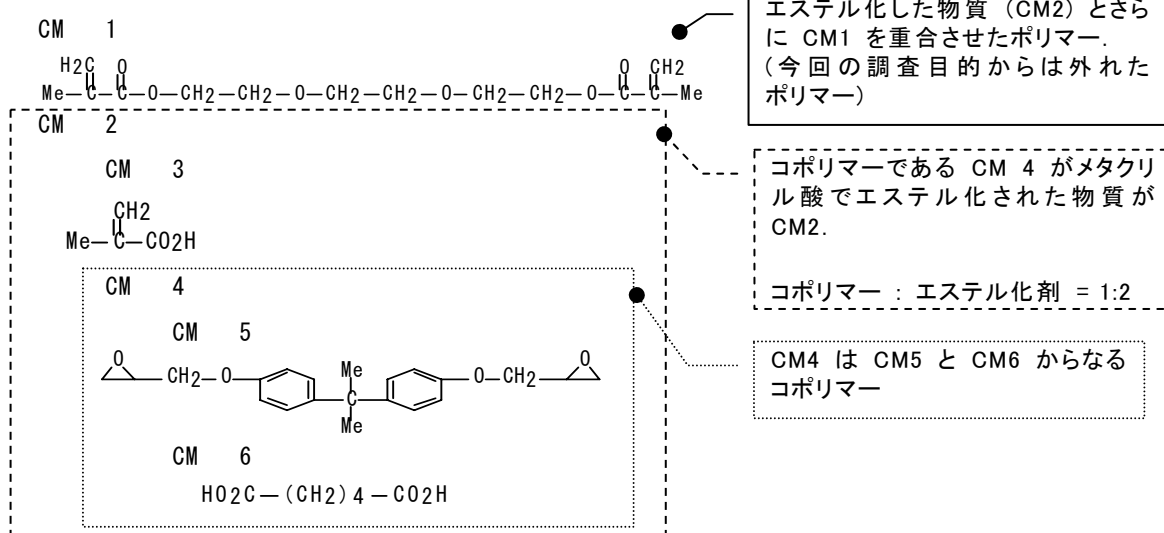


CM2 は CM3 と CM4 からなるコポリマー

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化されたポリマーの文献調査

L10 46 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 IN Hexanedioic acid, polymer with 2,2'-[(1-methylethylidene)bis(4,1-phenyleneoxymethylene)]bis[oxirane], bis(2-methyl-2-propenoate), polymer with 1,2-ethanediylobis(oxy-2,1-ethanediylobis(2-methyl-2-propenoate) (9C1)
 MF ((C21 H24 O4 . C6 H10 O4)x . C14 H22 O6 . 2 C4 H6 O2)x
 CI PMS



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

=> S L10 AND 3=>NC
 123225081 3=>NC

← 上記レコードのような物質を除くために成分数を限定する (702 円)

L11 14 L10 AND 3=>NC

成分数の限定には注意が必要である。
 詳細は C 章の Q 4 を参照

=> POLYLINK L11

← POLYLINK コマンドを実行する (3,880 円)

L12 20 POLYLINK L11

=> S L12 NOT L11

← POLYLINK コマンドを実行した結果, 増えた回答を確認する

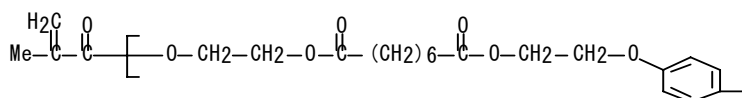
L13 6 L12 NOT L11

=> D SCAN

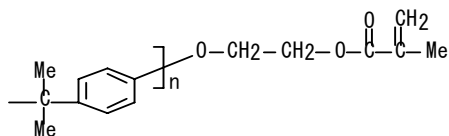
L13 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 IN Poly[oxy-1,2-ethanediyloxy(1,8-dioxo-1,8-octanediyloxy-1,2-ethanediyloxy-1,4-phenylene(1-methylethylidene)-1,4-phenylene], α-(2-methyl-1-oxo-2-propenyl)-ω-[2-[(2-methyl-1-oxo-2-propenyl)oxy]ethoxy]- (9C1)
 MF (C27 H34 O6)n C10 H14 O4
 CI PMS

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

PAGE 1-A



PAGE 1-B



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

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化されたポリマーの文献調査

=> FILE CAPLUS

← *CAplus* ファイルに入る

=> S L12

← *L* 番号をクロスオーバーして文献を検索する (無料)

L14 7 L12

=> D SCAN TI HITRN

L14 7 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 TI 1H-NMR studies of some aliphatic-aromatic α, ω -dihydroxy polyesters and their dimethacrylates
 TIJP いくつかの脂肪族芳香族の α, ω -ジヒドロキシポリエステルとそれらのジメタクリレートの 1H-NMR 研究 [機械翻訳]
 IT **737006-49-4P** **737006-54-1P** **737006-58-5P**
737006-64-3P **737006-69-8P** **737006-74-5P**
737812-08-7P **737812-13-4P** **737812-16-7P**
737812-21-4P **737812-34-9P** **737812-36-1P**
 RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation) (preparation and NMR anal. of)

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

L14 7 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 TI Low shrinking polymerizable dental material
 IT **180184-37-6P**
 RL: IMF (Industrial manufacture); PEP (Physical, engineering or chemical process); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); PROC (Process); USES (Uses) (low volume-shrinking polymerizable dental material which stiffens under shear stress and/or pressure)

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

=> D L14 1 BIB ABS HITSTR

← *BIB ABS HITSTR* 表示形式で表示する (734 円/件)

L14 ANSWER 1 OF 7 CAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 AN 2004:120899 CAPLUS [Full-text](#)
 DN 140:147081
 TI Polycarboxylic acid resins as photosensitive materials, their compositions and their cured articles
 TIJP 感光材料, それらの組成物, およびそれらの硬化した物品としてのポリカルボキシル酸樹脂 [機械翻訳]
 IN Guo, Shu; Kikawa, Takuya; Yada, Mitsuhiro; Hosoda, Yoshikazu
 PA Showa Highpolymer Co., Ltd., Japan
 SO PCT Int. Appl., 31 pp.
 CODEN: PIXXD2
 DT Patent
 LA Japanese
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2004013202	A1	20040212	WO 2003-JP7575	20030613
	W: AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, BZ, CA, CH, CN,				
	US 20080108726	A1	20080508	US 2007-876016	20071022
PRAI	JP 2002-227511	A	20020805		
	WO 2003-JP7575	W	20030613		
	US 2005-522979	A3	20050202		

ASSIGNMENT HISTORY FOR US PATENT AVAILABLE IN LSUS DISPLAY FORMAT

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化されたポリマーの文献調査

AB The polycarboxylic acid resin is prepared by reacting a linear addition polymer obtained from (a) an epoxy resin having two glycidyl groups (e.g., bisphenol A epoxy resin) with (b) a C4-10 dicarboxylic acid (e.g., itaconic acid) and (c) an ethylenically unsatd. monocarboxylic acid (e.g., acrylic acid), with a polybasic acid anhydride (tetrahydrophthalic anhydride). The polycarboxylic acid resin is easily dried in preliminary drying with heating and have improved tack-free properties, good photocurability and developability with aqueous alkali solns. The cured article has good phys. properties including elec. properties, mech. properties, heat resistance, solvent resistance, adhesion, and flexibility.

IT **652974-94-2P**, Araldite AER 260-malic acid copolymer methacrylate
652975-02-5P, Araldite AER 260-itaconic acid copolymer methacrylate
 RL: IMF (Industrial manufacture); RCT (Reactant); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)
 (photocurable epoxy resin-polyester-acrylic polymers as photosensitive materials)

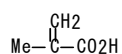
RN **652974-94-2** CAPLUS

CN Butanedioic acid, hydroxy-, polymer with
 2,2'-[(1-methylethylidene)bis(4,1-phenyleneoxymethylene)]bis[oxirane],
 2-methyl-2-propenoate (9CI) (CA INDEX NAME)

CM 1

CRN 79-41-4

CMF C4 H6 O2



CM 2

CRN 210580-87-3

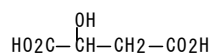
CMF (C21 H24 O4 . C4 H6 O5) x

CCI PMS

CM 3

CRN 6915-15-7

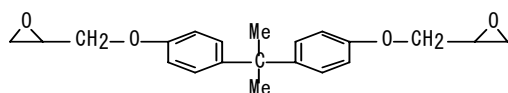
CMF C4 H6 O5



CM 4

CRN 1675-54-3

CMF C21 H24 O4



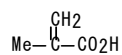
B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エステル化されたポリマーの文献調査

RN 652975-02-5 CAPLUS
 CN Butanedioic acid, methylene-, polymer with
 2, 2' -[(1-methylethylidene)bis(4, 1-phenyleneoxymethylene)]bis[oxirane],
 2-methyl-2-propenoate (9CI) (CA INDEX NAME)

CM 1

CRN 79-41-4
 CMF C4 H6 O2

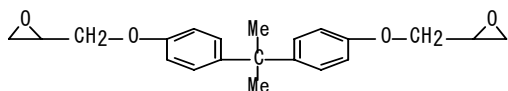


CM 2

CRN 57816-60-1
 CMF (C21 H24 O4 . C5 H6 O4) x
 CCI PMS

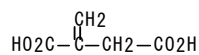
CM 3

CRN 1675-54-3
 CMF C21 H24 O4



CM 4

CRN 97-65-4
 CMF C5 H6 O4



OSC. G 1 THERE ARE 1 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (4 CITINGS)
 RE. CNT 4 THERE ARE 4 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

B 後処理ポリマー（エステル化、エーテル化）

エーテル化

■ 後処理でエーテル化されたポリマーの索引方針

- 後処理でエーテル化されたポリマーの索引は、後処理前のポリマーの種類により CAplus/CA ファイルの索引方針が異なる。

	エーテル化前のポリマーの種類	CAplus/CA ファイルの索引方針	例
①	ポリアルキレングリコール	エーテル化物は独自の CAS 登録番号を持ち、その CAS 登録番号で索引される	6, 7
②	天然物ポリマー (主に多糖類)	同上	p.60 参照
③	上記以外のポリマー	原則として、エーテル化物の独自の CAS 登録番号を持たない。 索引は後処理前のポリマー D + エーテル化のキーワードが付与される	p.63 参照

IT エーテル化されたポリマーの CAS 登録番号

IT 後処理前のポリマーの CAS 登録番号 D + エーテル化のキーワード

参考：ポリアルキレングリコール

- ポリアルキレングリコールとは、環状のアルキレンオキシド（エチレンオキシド、プロピレンオキシド、THF など）が開環重合して生成したポリマーである。
- ポリアルキレングリコールの種類によって索引方針が異なる。

種類	モノマー単位ポリマーで索引	SRU ポリマーで索引
PEG (ポリエチレングリコール) PPG (ポリプロピレングリコール)	×	○
PEG, PPG 以外のポリアルキレングリコール (ホモポリマー)	○	○
共重合体のポリアルキレングリコール (コポリマー)	○	×

モノマー単位ポリマーと SRU ポリマーの両方が存在する場合には、紐付けされているために、POLYLINK コマンドを利用すれば両方のポリマーを集めることができる。

レコード例：テトラヒドロフランホモポリマー

モノマー単位ポリマー

RN 24979-97-3 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Furan, tetrahydro-, homopolymer
(CA INDEX NAME)

**RELATED POLYMERS AVAILABLE
WITH POLYLINK**

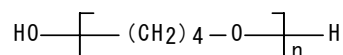
CM 1
GRN 109-99-9
CMF C4 H8 O



SRU ポリマー

RN 25190-06-1 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Poly(oxy-1,4-butanediyl),
α-hydro-ω-hydroxy-
(CA INDEX NAME)

**RELATED POLYMERS AVAILABLE
WITH POLYLINK**



B 後処理ポリマー（エステル化，エーテル化）

エーテル化

① ポリアルキレングリコールエーテル

- ・ ポリアルキレングリコールの種類によってエーテル化物の登録は異なる。
 - エーテル化されたポリアルキレングリコールはエーテル化剤を含めた独自の CAS 登録番号を持つ。
 - ・ 後処理前のポリマーとエーテル化剤との比が分かっている場合は，その比を含めて登録される
 - ・ 比が不明な場合は，不明なものとして登録される。
 - ・ エーテル化剤としてはアルコールが登録される。
 - 下記の表は REGISTRY ファイルに登録される分子式（MF）の形式を示している。
 - ・ (モノマー)_x はモノマー単位のホモポリマーおよびコポリマーを示す。
 - ・ (繰り返し単位)_n は SRU ポリマーの繰り返し単位である分子式を示している。また，構造図のイメージとして，[SRU] は SRU ポリマーを，◎ がエーテル化剤を示している。

種類	モノマー単位ポリマーで索引	SRU ポリマーで索引	例
PEG のエーテル化物 PPG のエーテル化物	x	比が明確の場合 (繰り返し単位) _n エーテル化剤 [SRU]-◎ (繰り返し単位) _n エーテル化剤 ◎-[SRU]-◎ 比が不明な場合 (繰り返し単位) _n . x エーテル化剤	6
PEG, PPG 以外のポリアルキレングリコール（ホモポリマー）のエーテル化物	比が明確な場合 (モノマー) _x . エーテル化剤 (モノマー) _x . 2 エーテル化剤 など 比が不明な場合 (モノマー) _x . x エーテル化剤	比が明確の場合 (繰り返し単位) _n エーテル化剤 [SRU]-◎ (繰り返し単位) _n エーテル化剤 ◎-[SRU]-◎ 比が不明な場合 (繰り返し単位) _n . x エーテル化剤	7
共重合体のポリアルキレングリコール（コポリマー）のエーテル化物	比が明確な場合 (モノマー) _x . エーテル化剤 (モノマー) _x . 2 エーテル化剤 など 比が不明な場合 (モノマー) _x . x エーテル化剤	x	*

* の例に関してはエステル化の索引方針が同じため p.31 の例 3（エチレンオキシド - プロピレンオキシド共重合体のエステル化）を参照。

- この索引方針は，ポリアルキレングリコールのエステル化にも適応される。

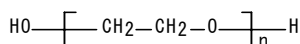
B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エーテル化

例 6: メチルエーテル化したポリエチレングリコール (PEG)

- PEG は汎用ポリマーであり, 末端基つき SRU ポリマーでのみ登録される.

RN 25322-68-3 REGISTRY
 CN Poly(oxy-1,2-ethanediyl), α -hydro- ω -hydroxy- (CA INDEX NAME)
 MF (C2 H4 O)_n H2 O

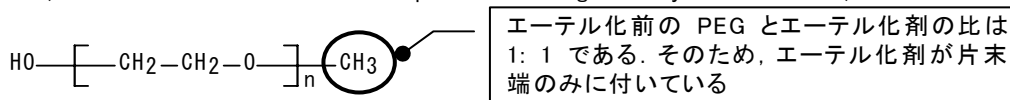


- PEG のエーテル化物は, 比が明確な場合は末端基が置換されたポリマーとして登録される.
 一方, 比が不明な場合は PEG とエーテル化剤の多成分物質として登録される.

	エーテル化後の分子式	対応する CAS 登録番号	例
比が明確な 場合	片末端がメチルエーテル化 (C2 H4 O) _n C H4 O	9004-74-4	6-1
	両末端がメチルエーテル化 (C2 H4 O) _n C2 H6 O	24991-55-7	6-2
比が不明な 場合	(C2 H4 O) _n H2 O . x C H4 O	129837-97-4	6-3

例 6-1: 比が明確な場合 - 片末端のエーテル化 (9004-74-4)

RN 9004-74-4 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Poly(oxy-1,2-ethanediyl), α -methyl- ω -hydroxy- (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Glycols, polyethylene, monomethyl ether (8CI)
 OTHER NAMES:
 CN α -Methoxy-polye SRU ポリマー
 CN α -Methyl- ω -hydr SRU ポリマー-ethanediyl)
 :
 MF (C2 H4 O)_n C H4 O
 CI PMS, COM
 PCT Polyether
 LC STN Files: ADISNEWS, AGRICOLA, ANABSTR, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAPLUS,
 GASREACT, CHEMCATS, CHEMINFORMRX, CHEMLIST, CIN, DETHERM*, EMBASE,
 IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, IPA, MEDLINE, MSDS-OHS, PIRA, REAXYSFILE*,
 RTECS*, TOXCENTER, USAN, USPAT2, USPATFULL, USPATOLD
 (*File contains numerically searchable property data)
 Other Sources: DSL**, TSCA**
 (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

6485 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 2005 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 6528 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

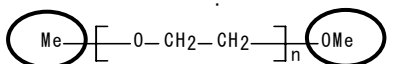
B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エーテル化

- 例 6-2: 比が明確な場合 - 両末端のエーテル化 (24991-55-7)

RN 24991-55-7 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Poly(oxy-1,2-ethanediyl), α -methyl- ω -methoxy- (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Glycols, polyethylene, dimethyl ether (8CI)
 OTHER NAMES:
 CN α, ω -Methoxypoly(ethylene oxide)
 CN α -Methyl- ω -methoxy-ethylene

MF (C2 H4 O)_n C2 H6 O
 CI PMS, COM
 PCT Polyether
 LC STN Files: AGRICOLA, CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, CIN,



末端基つき SRU ポリマーの分子式は、繰り返し単位の組成と、両末端の合計の分子式である

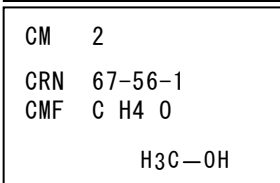
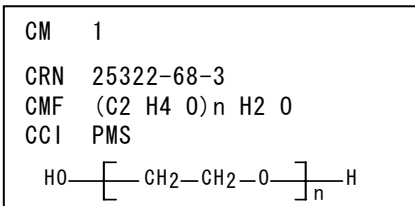
エーテル化前の PEG とエーテル化剤の比が 1: 2 であるため、エーテル化剤が両末端に付いている

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

1457 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 77 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 1460 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- 例 6-3: 比が不明な場合 - 多成分物質として登録 (129837-97-4)

RN 129837-97-4 REGISTRY
 ED Entered STN: 12 Oct 1990
 CN Poly(oxy-1,2-ethanediyl), α -hydro- ω -hydroxy-, methyl ether (CA INDEX NAME)
 MF (C2 H4 O)_n H2 O . x C H4 O
 CI COM
 PCT Polyether
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL



エーテル化剤
 エーテル化剤はアルコールで登録される

エーテル化前の SRU ポリマーとエーテル化剤の比が不明な場合は x が付く

PEG は末端基つき SRU ポリマーである

末端基つき SRU ポリマーである PEG とエーテル化剤との比が不明な場合は、エーテル化前のポリマー (PEG) とエーテル化剤との多成分物質として登録される

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

ポリエチレングリコール (PEG) とポリプロピレングリコール (PPG) は、SRU ポリマーでのみ登録される。そのため、これらのエーテル化物も SRU ポリマーでのみ登録される。

SRU ポリマー間には紐付けは存在しないので、上記の 6-1, 6-2, 6-3 を POLYLINK コマンドで集めることはできない。

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エーテル化

例 7: ポリテトラヒドロフランのアリルアルコールによるエーテル化物

- ポリテトラヒドロフランにはモノマー単位ポリマーと末端基つき SRU ポリマーの両方が存在する。(詳細は p.34 を参照)
- PEG, PPG 以外のポリアルキレングリコール (ホモポリマー) のエーテル化物はモノマー単位ポリマーと SRU ポリマーの両方が登録される。

	モノマー単位ポリマーの分子式 * (対応する CAS 登録番号)	SRU ポリマーの分子式 * (対応する CAS 登録番号)	例
比が明確な 場合	片末端のエーテル化物		7-1
	$(C_4H_8O)_x \cdot C_3H_6O$ 166583-40-0	$(C_4H_8O)_n C_3H_6O$ 132613-74-2	
比が不明な 場合	両末端のエーテル化物		7-2
	$(C_4H_8O)_x \cdot 2 C_3H_6O$ 186047-87-0	$(C_4H_8O)_n C_6H_{10}O$ 124355-68-6	
比が不明な 場合	現状では収録されていない (収録された場合の分子式は, $(C_4H_8O)_x \cdot x C_3H_6O$)	現状では収録されていない (収録された場合の分子式は, $(C_4H_8O)_n H_2O \cdot x C_3H_6O$)	

* 各成分の分子式 ... THF: C4H8O, アリルアルコール : C3H6O

例 7-1: 比が明確な場合 - 片末端のエーテル化

```

RN 166583-40-0 REGISTRY
ED Entered STN: 22 Aug 1995
CN Furan, tetrahydro-, homopolymer,
   mono-2-propen-1-yl ether
   (CA INDEX NAME)
MF (C4 H8 O)x . C3 H6 O
PCT Polyether
SR CA
LC STN Files:

```

```

RN 132613-74-2 REGISTRY
ED Entered STN: 15 Mar 1991
CN Poly(oxy-1,4-butanediyl),
   α-2-propen-1-yl-ω-hydroxy-
   (CA INDEX NAME)
MF (C4 H8 O)n C3 H6 O
CI PMS, COM
PCT Polyether
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, USPAT2,

```

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

```

CM 1
CRN 107-18-6
CMF C3 H6 O
H2C=CH-CH2-OH

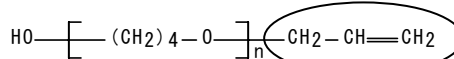
```

```

CM 2
CRN 24979-97-3
CMF (C4 H8 O)x
CCI PMS
CM 3
CRN 109-99-9
CMF C4 H8 O

```

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



POLYLINK コマンドで
まとめられる

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エーテル化

- 例 7-2 : 比が明確な場合 - 両末端のエーテル化

RN 186047-87-0 REGISTRY
 ED Entered STN: 13 Feb 1997
 CN Furan, tetrahydro-, homopolymer,
 di-2-propen-1-yl ether
 (CA INDEX NAME)

モノマー単位ポリマー

MF (C4 H8 O)_x . 2 C3 H6 O
 PCT Polyether, Polyether formed
 SR CA
 LC STN Files: CA, が 1:2

ポリマーとエーテル化剤
 が 1:2

RN 124355-68-6 REGISTRY
 ED Entered STN: 22 Dec 1989
 CN Poly(oxy-1,4-butanediyl),
 α-2-propen-1-yl-ω-
 (2-propen-1-yloxy)-
 (CA INDEX NAME)

SRU ポリマー

MF (C4 H8 O)_n C6 H10 O
 CI PMS, COM
 PCT Polyether
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1
 CRN 107-18-6
 CMF C3 H6 O
 H2C=CH-CH2-OH

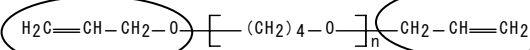
エーテル化剤

CM 2
 CRN 24979-97-3
 CMF (C4 H8 O)_x
 CCI PMS
 CM 3
 CRN 109-99-9
 CMF C4 H8 O

ポリテトラ
 ヒドロフラン

POLYLINK コマンドで
 まとめられる

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



B 後処理ポリマー（エステル化，エーテル化）

エーテル化

② 天然物ポリマー（主に多糖類）をエーテル化したポリマー

- 天然物ポリマーはエーテル化剤を含めた形式で登録される。
 - エーテル化剤としてはアルコールが登録される。
 - 下記の表は REGISTRY ファイルに登録される分子式（MF）の形式を示している。

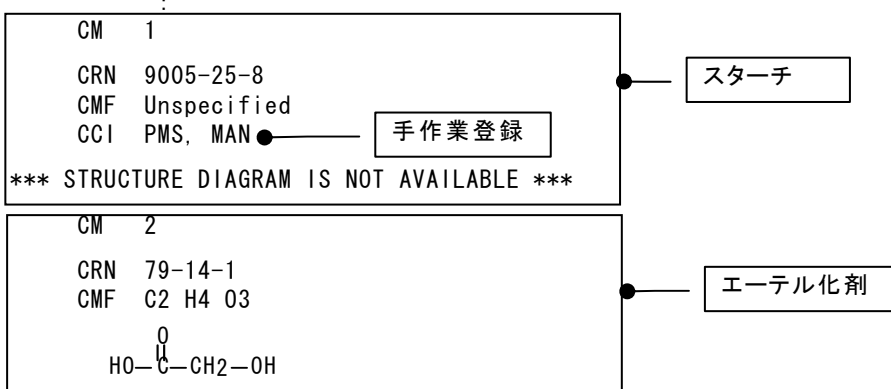
モノマー単位ポリマー	SRU ポリマー
天然物ポリマー. x エーテル化剤	x

- スターチのグリコール酸によるエーテル化物

```

RN  9057-06-1  REGISTRY
ED  Entered STN:  16 Nov 1984
CN  Starch, carboxymethyl ether  (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN  69HH68
CN  Akucell
:
MF  C2 H4 O3 . x Unspecified
CI  COM
PCT Manual registration, Polyother, Polyother only
LC  STN Files:  AGRICOLA, ANABSTR, BIOSIS, CA, CAPLUS, CHEMCATS, CHEMLIST,
:

```



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

1781 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 132 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 1786 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

③ 上記以外のポリマーのエーテル化物

- 独自の CAS 登録番号を持たない。
- CAplus/CA ファイルで索引する場合には、エーテル化する前のポリマーの CAS 登録番号 + D, エーテル化に関するキーワードで索引する。
 (p.63 の検索例 2 を参照)

B 後処理ポリマー（エステル化，エーテル化）

エーテル化されたポリマーの文献調査

■ 後処理でエーテル化されたポリマーの登録形式のまとめ

- ・ 下記の表は REGISTRY ファイルに登録される分子式（MF）の形式を示している。
 - (モノマー)_x はモノマー単位のホモポリマーおよびコポリマーを示し、(繰り返し単位)_n は SRU ポリマーの繰り返し単位である分子式を示している。

種類	モノマー単位ポリマーで索引*1	SRU ポリマーで索引
ポリアルキレングリコール		
PEG, PPG	×	比が明確の場合 (繰り返し単位) _n エーテル化剤
		比が不明な場合 (繰り返し単位) _n . x エーテル化剤
PEG, PPG 以外のポリアルキレングリコール (ホモポリマー)	比が明確な場合 (モノマー) _x . #エーテル化剤	比が明確の場合 (繰り返し単位) _n エーテル化剤
	比が不明な場合 (モノマー) _x . x エーテル化剤	比が不明な場合 (繰り返し単位) _n . x エーテル化剤
共重合体のポリアルキレングリコール (コポリマー)	比が明確な場合 (モノマー) _x . #エーテル化剤	×
	比が不明な場合 (モノマー) _x . x エーテル化剤	
天然物ポリマー	天然物ポリマー . x エーテル化剤	×
上記以外のポリマー*2	×	×

*1 #エーテル化剤の # には比を示す数字が入力される

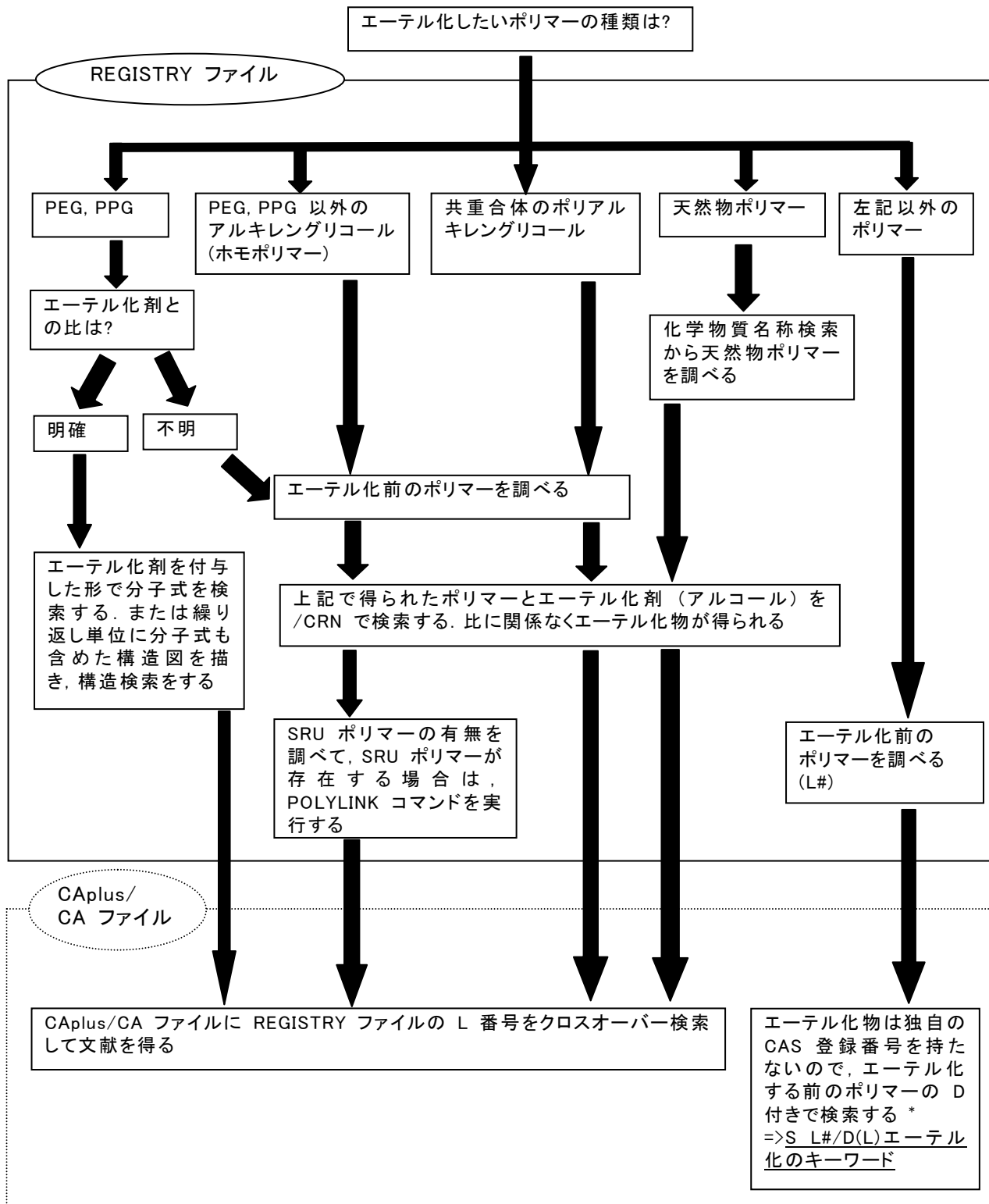
*2 CAplus/CA ファイルで索引する場合には、エーテル化する前のポリマーの CAS 登録番号 D、エーテル化に関するキーワードで索引する

- ・ ポリマーのエーテル化物はエーテル化される前のポリマーの種類により、モノマー単位ポリマーで登録されるか、SRU ポリマーで登録されるか、独自の CAS 登録番号を持たないかが決まる。またポリマーとエーテル化物の比によっても CAS 登録番号が異なる。そのため、ポリマーのエーテル化物の文献調査には、まずエーテル化前のポリマーの種類を調査することが重要なポイントになる。

B 後処理ポリマー（エステル化、エーテル化）

エーテル化されたポリマーの文献調査

■ 検索方法（基本的な検索の流れ）



* CAS 登録番号 + D は 1977 年以降のレコードに付与されている。1976 年以前の文献が必要な場合は p.65 を参照。

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エーテル化されたポリマーの文献調査

- 検索例 2 : ホルムアルデヒド - フェノールコポリマーのエーテル化物に関する 2008 年以降の日本特許を調査する.

ポイント

- ・ 検索例 2 でエーテル化したいポリマーの種類は, p.62 の「左記以外のポリマー」に相当する. そのため, まずエーテル化前のポリマーを REGISTRY ファイルで検索する. 次に, CPlus/CA ファイルで下記の検索を実行して, エーテル化物の文献調査をする.

=> S エーテル化前の CAS 登録番号/D (S) エーテル化のキーワード

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> E FORMALDEHYDE/CN 5

E1	1	FORMALDAZINE/CN
E2	1	FORMALDAZINE, TETRAFLUORO-/CN
E3	1 -->	FORMALDEHYDE/CN
E4	1	FORMALDEHYDE (1-PHENYLETHYL)HYDRAZONE/CN
E5	1	FORMALDEHYDE (3-PHENYLPROPYL)HYDRAZONE/CN

=> S E3

← ホルムアルデヒドを検索する (702 円)

L1 1 FORMALDEHYDE/CN

=> D SCAN

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN **Formaldehyde**
MF C H2 O
CI COM
H2C=O

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> E PHENOL/CN 5

E1	1	PHENOXYDINAPHTHOFUCHSONEDICARBOXYLIC ACID/CN
E2	1	PHENOKOLL/CN
E3	1 -->	PHENOL/CN
E4	1	PHENOL (COMPD. WITH IMINOBIS(PHENYLMERCURY) (1:1))/CN
E5	1	PHENOL B-D-GLUCURONIDE/CN

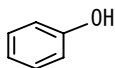
=> S E3

← フェノールを検索する (702 円)

L2 1 PHENOL/CN

=> D SCAN

L2 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN **Phenol**
MF C6 H6 O
CI COM



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エーテル化されたポリマーの文献調査

=> SEL L1 RN ← ホルムアルデヒドの CAS 登録番号を抽出する (12 円/件)
E1 THROUGH E1 ASSIGNED

=> SEL L2 RN ← フェノールの CAS 登録番号を抽出する (12 円/件)
E2 THROUGH E2 ASSIGNED

=> S E1/CRN AND E2/CRN AND 2/NC AND PMS/CI ← 2 成分かつポリマーに限定する
30634 50-00-0/CRN (/CRN は無料, 702 × 2 = 1,404 円)

L3 20 50-00-0/CRN AND 108-95-2/CRN AND 2/NC AND PMS/CI

=> D SCAN IN ← SCAN IN 表示形式で CA 索引名のみ
確認する (無料)

L3 20 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN Formaldehyde, polymers with sulfonated trichlorobenzylated phenol sodium ← ノイズ
salts

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):19

L3 20 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN Phenol, polymer with formaldehyde ← 目的のポリマー
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT

L3 20 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN Phenol, polymer with formaldehyde, Bu ether ← ノイズ

参考: 分子式や構造からでは正確な物質を表現できないレコード

RN 129870-78-6 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: 12 Oct 1990
CN Phenol, polymer with formaldehyde, Bu ether (CA INDEX NAME)

MF (C6 H6 O . C H2 O)x

AF Unspecified

CI PMS, MAN, GRS

PCT Manual registration

SR Environment Canada (EC)

LC STN Files: CHEMLIST

Other Sources: DSL**,

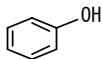
(**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

THE COMPLETE SUBSTANCE MAY NOT BE REPRESENTED BY THESE COMPONENTS.
CHECK THE CN OR IN FIELD FOR THE COMPLETE SUBSTANCE DESCRIPTION.

CM 1

CRN 108-95-2

CMF C6 H6 O



CM 2

CRN 50-00-0

CMF C H2 O

H2C=O

構造図にもブチル基は
含まれていない

化学物質名からはホルムアルデヒド - フェノール
コポリマーのブチルエーテル化質であることが分
かり, 3 成分であると考えられる

実際の分子式は 2 成分で登録されている

分子式や構造が正確に定義できない物質にも CAS
登録番号が付与されている場合がある。
このような物質を UVCB 物質と呼んでいる。詳細は
REGISTRY ファイル - 検索テクニック 2
(<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-registry2.pdf>) の
B 章参考を参照

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エーテル化されたポリマーの文献調査

=> E Phenol, polymer with formaldehyde/CN 5

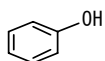
E1 1 PHENOL, POLYMER WITH FLUORANTHENE AND FORMALDEHYDE/CN
E2 1 PHENOL, POLYMER WITH FLUORANTHENE, FORMALDEHYDE AND PYRENE/CN
E3 1 --> PHENOL, POLYMER WITH FORMALDEHYDE/CN
E4 1 PHENOL, POLYMER WITH FORMALDEHYDE AND (((1-((1-(OXIRANYLMETH OXY)((OXIRANYLMETHOXY)METHYL)NAPHTHALENYL)METHYL)-2-NAPHTHAL ENYL)OXY)METHYL)OXIRANE/CN
E5 1 PHENOL, POLYMER WITH FORMALDEHYDE AND (((1-((1-(OXIRANYLMETH OXY)NAPHTHALENYL)METHYL)-2-NAPHTHALENYL)OXY)METHYL)OXIRANE/CN

=> S E3 ← ホルムアルデヒド - フェノールコポリマーを検索する (702 円)
L4 1 "PHENOL, POLYMER WITH FORMALDEHYDE"/CN

=> D SCAN

L4 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN Phenol, polymer with formaldehyde
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT
MF (C6 H6 O . C H2 O)x
CI PMS, COM

CM 1



CM 2

H2C=O

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> FILE HCAPLUS

← HCAplus ファイルに入る

=> S L4/D(S)ETHER?

2590 L4/D

707561 ETHER?

L5 614 L4/D(S)ETHER?

検索語を多数使用する場合に検索語料が無料の HCAplus ファイルを利用すると経済的である

エーテル化する前のホルムアルデヒド-フェノールコポリマーの CAS 登録番号の D 付き + エーテル化のキーワードで検索する

=> S L5 AND JP/PC(P)PY=>2008

3562402 JP/PC

5921555 PY=>2008

897263 JP/PC(P)PY=>2008

L6 84 L5 AND JP/PC(P)PY=>2008

← 2008 年発行以降の日本特許が収録されている レコードに限定する

参考 : 1976 年以前の文献も含めて調査する場合

CAS 登録番号 + D は 1977 年以降のレコードに付与されている。

1976 年以前の文献が必要な場合は、後処理前のポリマーの CA 索引名と CAS 登録番号を利用して検索する。

=> S (L4 OR PHENOL, POLYMER(1W)FORMALDEHYDE)(S)ETHER? RAN=,1976

L8 ← 上記の検索結果を L8 とする

=> S L5 OR L8 ← これにより全年代を検索したことになる

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エーテル化されたポリマーの文献調査

=> D SCAN TI HITIND

← SCAN TI HITIND 表示形式で標題とヒットした索引項目を確認する (無料)

L6 84 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 TI Two-component phenolic resin compositions
 TIJP 2液型フェノール樹脂組成物 [原題]
 IT 67-56-1DP, Methanol reaction products with formaldehyde-phenol copolymer
9003-35-4DP, Formaldehyde-phenol copolymer, Methyl ether
 RL: IMF (Industrial manufacture); POF (Polymer in Formulation); PREP (Preparation); USES (Uses)
 (two-component phenolic resin compns. containing phenolic resins having methyl-etherified methylol groups)

調査目的の文献
 ホルムアルデヒド-フェノールコポリマーのメチルエーテル化物

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):83

L6 84 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 TI Epoxy resin compositions showing good fire and moldability, and semiconductor devices packaged with
 TIJP エポキシ樹脂組成物とそれを用いた半導体装置 [原題]
 IT **9003-35-4D, Formaldehyde-phenol copolymer, glycidyl ether**
 25053-96-7D, o-Cresol-formaldehyde copolymer, glycidyl ether
 RL: DEV (Device component use); POF (Polymer in formulation); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
 (epoxy resin compns. showing good fire and moisture resistance, and moldability for electronic packaging semiconductor devices)

調査目的の文献
 ホルムアルデヒド-フェノールコポリマーのグリシジルエーテル化物

L6 84 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 TI Thermosetting liquid-crystal sealing compositions and liquid crystal display sealed with the compositions
 TIJP 液晶シール剤およびそれを用いた液晶表示セル [原題]
 IT 1675-54-3DP, Bisphenol A diglycidyl ether, polymers with polybenzyls and phenol and formaldehyde **9003-35-4DP, PN 152, polymers with polybenzyls and bisphenol A diglycidyl ether**
 RL: IMF (Industrial manufacture); POF (Polymer in formulation); TEM (Technical or engineered material use)
 (thermosetting sealing compositions, liquid crystal displays, and crosslinking fillers, and crosslinking agents)

ノイズ

後処理に関するキーワード (今回の例では ETHER?) によっては、ノイズが含まれる場合があるので、SCAN 表示形式で確認することが必要である

=> S Two-component phenolic resin compositions/TI
 372376 TWO/TI
 98288 COMPONENT/TI

← 標題を検索する

L7 1 TWO-COMPONENT PHENOLIC RESIN COMPOSITIONS/TI
 ((TWO (W) COMPONENT (W) PHENOLIC (W) RESIN (W) COMPOSITIONS)/TI)

B 後処理ポリマー (エステル化, エーテル化)

エーテル化されたポリマーの文献調査

=> D L7 ALL

← ALL 表示形式で表示する (443 円)

L7 ANSWER 1 OF 1 HCAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 AN 2008:444979 HCAPLUS [Full-text](#)
 DN 148:404126
 ED Entered STN: 10 Apr 2008
 TI **Two-component phenolic resin compositions**
 TIJP 2液型フェノール樹脂組成物 [原題]
 IN Asami, Masakatsu
 PA Sumitomo Bakelite Co., Ltd., Japan
 SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 13pp.
 CODEN: JKXXAF
 DT Patent
 LA Japanese
 CC 37-6 (Plastics Manufacture and Processing)
 FAN. CNT 1

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI JP 2008081706	A	20080410	JP 2006-266726	20060929
PRAI JP 2006-266726		20060929		

CLASS

PATENT NO.	CLASS	PATENT FAMILY CLASSIFICATION CODES
JP 2008081706	IPC1 IPC FTE	C08L0061-14 [I, A]; C08K0003-00 [I, A]; C08K0005-00 [I, A]

AB	The compns. comp of methylol grou compds. The c temperature, an	【実施例】 【0024】 以下、本発明を実施例により詳細に説明する。ここで記載されている「部」は「重量部」、「%」は「重量%」を示す。 【0025】 1. レゾール型フェノール樹脂溶液の調製 <製造例1> 攪拌装置及び温度計を備えた5Lの三口フラスコ中に、 <u>フェノール1000部、37%ホルムアルデヒド水溶液1725部</u> （フェノール類1モルに対して2.0モルに相当）、 <u>水酸化バリウム100部</u> を添加して、70℃で1時間反応させ、 <u>レゾール型フェノール樹脂を合成した。</u>
ST	phenolic resin methanol etheri	次いで、25%硫酸水溶液を用いて反応系の中和を行い、pH=4.5に調整した。その後、反応系を5000Paまで減圧し、70℃まで昇温して減圧蒸留を行い、反応系中の水分量が2.0%になるまで脱水を行った後、メタノール1021部（フェノール類1モルに対して3.0モルに相当）を添加して、 <u>レゾール型フェノール樹脂溶液A2760部</u> を得た。
IT	Crosslinking ca (bases; two- having methy	
IT	Bases, uses RL: CAT (Cataly (crosslinkin phenolic res	【0029】 2. アルキルエーテル化フェノール樹脂の製造 <製造例5> 攪拌装置を備えた1Lのオートクレーブ装置に、 <u>製造例1で得られたレゾール型フェノール樹脂溶液A2760部とメタノール306部</u> （メタノール量：フェノール類1モルに対して12.0モルに相当）とを入れ、昇温を行い、150℃で1時間反応させた後、冷却した。 得られた樹脂を取り出し、攪拌装置及び温度計を備えた1Lの三口フラスコ中に入れた。その後、5000Paの減圧度で減圧蒸留を行い、粘度を105mPa・sに調整して、 <u>アルキルエーテル化フェノール樹脂E179部</u> を得た。
IT	121-44-8, Triethylamine, uses (crossli (この特許ではメタノール)	エーテル化剤もD付きで索引される場合がある USES (Uses) compns. containing
IT	67-56-1DP, Methanol, reaction products with formaldehyde-phenol copolymer 9003-35-4DP, Formaldehyde-phenol copolymer, Me ether RL: IMF (Industrial manufacture); POF (Polymer in formulation); PREP (Preparation); USES (Uses) (two-component phenolic resin compns. containing phenolic resins having methyl-etherified methylol groups)	

C よくあるお問い合わせ

ポリマー検索に関するよくあるご質問についてご紹介します。

C よくあるお問い合わせ

内容一覧

■ ポリマー検索に関してよくあるご質問

- Q1> CAS ではどのぐらいの重合度のものをポリマーと定義しているのか？
- Q2> 重合開始剤や触媒はポリマー登録の際に考慮されているか？
- Q3> 組成比（原料モノマー比）が異なるコポリマーは、それぞれ別のポリマーとして登録されるのか？
- Q4> あるポリマーの CAS 登録番号が既知であり、そのポリマーのエステル化物を調査するために、=> S ポリマーの CAS 登録番号/CRN AND エステル化剤の CAS 登録番号/CRN AND 2/NC で検索したが、物質は登録されているはずなのにヒットしなかった。なぜヒットしなかったのか？
- Q5> あるポリマーにさらにモノマーを重合させたようなポリマーを検索する場合、ポリマーの CAS 登録番号と加えたモノマーの CAS 登録番号を /CRN で検索すればよいのか？
- Q6> ある文献では、アクリル酸ブチルマクロモノマーとメタクリル酸メチルのグラフト共重合体が合成されており、別の文献では、メタクリル酸メチルマクロモノマーとアクリル酸ブチルのグラフト共重合体が合成されていた。これら 2 つの文献を CAplus ファイルで表示したところ、同じ CAS 登録番号が索引されていた。これはなぜか？
- Q7> 構造検索でポリマーを検索する際に、ポリマーの限定方法として PMS/CI とスクリーン 2043 があるが、検索結果に違いはあるのか？
- Q8> あるモノマーを含むポリアミドを網羅的に検索できるか？

C よくあるお問い合わせ

ポリマーの定義

Q1> CAS ではどのぐらいの重合度のものをポリマーと定義しているのか？

A1> 重合度が 11 以上、あるいは重合度が不明な物質をポリマーと定義している。
また、重合度が 10 以下のオリゴマーでもポリマーとみなされる場合がある。

■ 下記の 1~4 のいずれかの場合に、ポリマーとして REGISTRY ファイルに登録される。

1. 重合度が 11 以上の物質
2. 重合度が不明な物質
3. 下記のいずれかの条件に当てはまる重合度が 10 以下のオリゴマー

3-1 構造が明確でなく分子式でのみ表されている、あるいは単一の 2 量体、3 量体などと表されている場合は、重合度別に CAS 登録番号が付与される。

例) シクロペンタジエンの 2 量体、3 量体

ポリマー

RN 7313-32-8 REGISTRY
CN 1,3-Cyclopentadiene, dimer
(CA INDEX NAME)
MF (C5 H6)₂ → 2 量体
CI PMS, COM → ポリマー
CM 1
GRN 542-92-7
CMF C5 H6



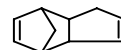
RN 26779-34-0 REGISTRY
CN 1,3-Cyclopentadiene,
trimer (CA INDEX NAME)
MF (C5 H6)₃ → 3 量体
CI PMS, COM → ポリマー
CM 1
GRN 542-92-7
CMF C5 H6



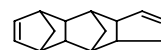
参考：低分子化合物

重合度が単一で重合後の構造が明確なオリゴマーは通常の低分子化合物として扱われる

RN 77-73-6 REGISTRY
CN 4,7-Methano-1H-indene,
3a,4,7,7a-tetrahydro-
(CA INDEX NAME)
MF C₁₀H₁₂ → 2 量体
CI COM



RN 7158-25-0 REGISTRY
CN 4,9:5,8-Dimethano-1H-
benz[f]indene, 3a,4,4a,5,
8,8a,9,9a-octahydro-
(CA INDEX NAME)
MF C₁₅H₁₈ → 3 量体
CI COM



C よくあるお問い合わせ

ポリマーの定義

例) 日本公開特許 2008-214416

標題 : 5-メチル-5-フェニル-ビシクロ[2.2.1]ヘプト-2-エン組成物

【0026】
 (実施例1)
 (モノマー合成)
 α-メチルスチレン/シクロペンタジエンのモル比が6/1の混合液1,000部が、攪拌機付き耐圧反応器に、窒素雰囲気下において仕込まれ、当該混合液が200℃に加温された。α-メチルスチレン/シクロペンタジエンのモル比が6/1の混合液が、滞留時間が1時間となるように、連続的に反応器に導入されながら、反応溶液が抜き出され、反応が3時間行なわれた。
 得られた反応溶液の、シクロペンタジエン基準での5-メチル-5-フェニルビシクロ[2.2.1]ヘプト-2-エンへの反応転化率が70%、5-メチル-5-フェニルビシクロ[2.2.1]ヘプト-2-エンに対するシクロペンタジエンの3量体の割合は4%であった。
 さらに蒸留精製が行なわれ、800ppmのシクロペンタジエンの3量体を含む5-メチル-5-フェニルビシクロ[2.2.1]ヘプト-2-エン組成物340部が得られた(以下、「単量体(A)」ということがある)。α-メチルスチレンは当該組成物中に検出されなかった。

ST low impurity methylphenylbicycloheptene cyclopentadiene methylstyrene; methylphenylbicycloheptene cyclopentadiene trimer ring opening polymn optical material

IT Optical instruments
 (5-methyl-5-phenylbicyclo[2.2.1]hept-2-ene compns. with low impurity content for ring-opening polymers for optical materials)

IT **26779-34-0P**, Cyclopentadiene trimer
 RL: BYP (Byproduct); REM (Removal or disposal); PREP (Preparation); PROC (Process)
 (5-methyl-5-phenylbicyclo[2.2.1]hept-2-ene compns. with low impurity content for ring-opening polymers for optical materials)

IT 46243-13-4P, 5-Methyl-5-phenylbicyclo[2.2.1]hept-2-ene
 RL: IMF (Industrial manufact (Reactant); PREP (Preparation); U (5-methyl-5-phenylbicyclo content for ring-opening
 シクロペンタジエンの3量体について、公報では明確な構造は示されておらず、名称のみ記載されていたので、CAplus/CA ファイルでは3量体(ポリマー)として索引される。

IT 46243-13-4DP, 5-Methyl-5-phenylbicyclo[2.2.1]hept-2-ene
 1057400-35-7P, 5-Methyl-5-phenylbicyclo[2.2.1]hept-2-ene
 1058722-41-0P
 RL: IMF (Industrial manufacture); PREP (Preparation); U (5-methyl-5-phenylbicyclo content for ring-opening
 RN 26779-34-0 REGISTRY
 CN 1,3-Cyclopentadiene, trimer (CA INDEX NAME)
 MF (C5 H6)₃ → 3量体
 CI PMS, COM → ポリマー
 CM 1
 CRN 542-92-7
 CMF C5 H6



IT 542-92-7, Cyclopentadiene,
 RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
 (5-methyl-5-phenylbicyclo[2.2.1]hept-2-ene compns. with low impurity content for ring-opening polymers for optical materials)

IT 98-83-9, α-Methylstyrene, r
 RL: RCT (Reactant); REM (Removal or disposal)
 (5-methyl-5-phenylbicyclo[2.2.1]hept-2-ene compns. with low impurity content for ring-opening polymers for optical materials)

C よくあるお問い合わせ

ポリマーの定義

3-2 重合度が整数でないオリゴマー

例) $(\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3)_{7.5}$ のように記載されていた場合には、ポリマーである 1-Hexene, homopolymer が索引される。

4. ポリアルキレングリコールの場合は、重合度が 3 より大きい場合は重合度が 10 以下であっても、重合度の値が特定の整数値であることを示すデータがなければ、重合度は平均値とみなしポリマーとして登録される。

例) $\text{HO}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_4\text{H}$ は原報の記載により、低分子化合物として登録される場合も、ポリマーとして登録される場合もある。

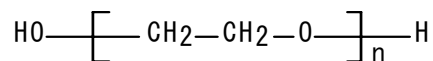
- (i) 「テトラエチレングリコール」と記載がある場合は低分子化合物として索引される。
- (ii) $\text{HO}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_4\text{H}$ と書いてあり、重合度の「4」が（平均値でない）単一の整数値であることが沸点や融点などのデータで示されている場合や、4 量体が単離されている場合は低分子化合物として索引される。（上記 (i) と同じ物質が索引される。）
- (iii) $\text{HO}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_4\text{H}$ と書いてあり、重合度 4 が特定の整数値であることを示すデータがなければ平均値とみなし、ポリマーとして索引される。

(i), (ii) で索引される低分子化合物

RN 112-60-7 REGISTRY
CN Ethanol, 2, 2'-[oxybis(2, 1-ethanedioxy)]bis- (CA INDEX NAME)
MF C8 H18 O5
CI COM
 $\text{HO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH}$

(iii) で索引されるポリマー

RN 25322-68-3 REGISTRY
CN Poly(oxy-1, 2-ethanediyl), α -hydro- ω -hydroxy- (CA INDEX NAME)
MF $(\text{C}_2 \text{H}_4 \text{O})_n \text{H}_2 \text{O}$
CI PMS, COM
PCT Polyether



C よくあるお問い合わせ

ポリマーの定義

Q2> 重合開始剤や触媒はポリマー登録の際に考慮されているのか？

A2> 原則として、重合開始剤や触媒は登録する際に除外される。

■ 大部分のポリマーはポリマーの主鎖を構成する原料モノマーに基づいている。そのため、下記のような物質が登録の際には除外される。

- ・ 重合開始剤, 重合停止剤
- ・ 分子量調整剤
- ・ 触媒
- ・ 安定剤

- 例) ポリスチレンの合成

触媒は違っていても同じ原料（スチレン）からポリスチレンを合成している場合は、触媒の種類に関わらず同じ CAS 登録番号（ポリスチレンの CAS 登録番号：9003-53-6）が CAplus/CA ファイルで索引される

JP2006299074

【実施例1】
【0099】
<Bis[N-(3-tert-butylsalicylidene)anilinato]titanium (IV) Dichlorideを用いたスチレンの重合>
十分に窒素置換した内容積500mlのガラス製反応器に精製したスチレンを100ml、続いてトルエンを6.7ml装入し、窒素雰囲気下、攪拌しながら80℃に加熱した。ついで、DMAOのトルエン溶液(1.15 mol/l)と、ドライメチルアルミノキサン：メチルアルミノキサンを乾固し、トルエンにウム原子換算で12.5mmol)と、Bis[titanium (IV) Dichlorideのトルエン溶液(4として混合しながら10分間反応させておいた全トルエン量3.0ml)、窒素雰囲気下、常圧少量の触媒が異なる*を添加することを大量のメタノールに投入してポリマーを全ターで濾過した。ポリマーをメタノールで充分洗浄後、150℃、10時間減圧乾燥し、ポリスチレンを3.29g得た。続いて得られたポリスチレンにメチルエチルケトン(10

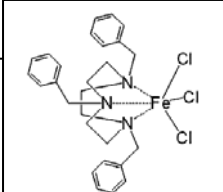
参考：触媒の索引について

- ・ 新規性と関わりのない汎用の触媒は索引されない。
- ・ 触媒に関する特別な研究であれば索引される。

* 今回、2つの特許で示した触媒は、重合上で重要な触媒であるため、各触媒のCAS登録番号が別途索引される。

WO2009113148

[0074] (実施例13)
アルゴン雰囲気下で、スリ付き試験管に攪拌子、鉄錯体3(56mg, 0.1mmol)、アゾビスシクロヘキサンカルボニトリル(12.2mg, 0.05mmol)を入れ、スチレンモノマー(2.08g, 20mmol)を加えた。容器を密閉して120℃で14時間攪拌した。転化率は98%であり、反応混合物をTHF7mLで希釈し、攪拌したメタノール140mL中に滴下した。濾過により重合物を分離し、減圧乾燥を行った(収量:1.98g)。得られたPSはMn=23800、Mw/Mn=1.45であった。



C よくあるお問い合わせ

ポリマーの定義

Q3> 組成比（原料モノマー比）が異なるコポリマーは、それぞれ別のポリマーとして登録されるのか？

A3> 組成比は考慮されないため、組成比が異なっても同じ CAS 登録番号である。

■ 下記の条件については区別せず、同じポリマーとして登録される。

- ・ 組成比（原料モノマー比）が異なるコポリマー
- ・ 重合条件（温度，圧力，触媒の有無や種類など）が異なるポリマー
- ・ 分子量や分子量分布が異なるポリマー
- ・ 分岐の有無や分岐の程度が異なるポリマー
- ・ 重合開始剤が異なるポリマー

- 例) エチレン-プロピレンコポリマー

JP2005139282

【表3】

	プロピレン・エチレンブロック共重合体	固体触媒成分(a)	第1段目重合 結晶性ポリプロピレン成分[成分(A)]				第2段目重合 エチレン・プロピレンランダム共重合体成分[成分(B)]			
			重合温度	平均滞留時間	エチレン/プロピレン	水素/プロピレン	重合温度	平均滞留時間	水素/プロピレン	エチレン/プロピレン
			(°C)	(分)	(モル比)	(モル比)	(°C)	(分)	(モル比)	(モル比)
実施例1	PP-1	合成品I	65	150	0.027	0.050	90	180	1.21	3.05
実施例2	PP-2	合成品I	65	150	0.020	0.043	90	180	1.15	3.00
実施例3	PP-3	合成品I	65	180	0.020	0.021	100	180	1.34	5.79
実施例4	PP-4	合成品I	65	150	0.021	0.045	100	180	1.87	6.65
実施例5	PP-5	合成品I	70	60	0	0.042	90	150	1.20	2.99
実施例6	PP-6	合成品I	70	60	0.015	0.138	100	100	1.00	2.97
実施例7	PP-7	合成品I	70	60	0.015	0.126	100	100	3.06	6.63
比較例1	PP-8	合成品I	65	150	0.021	0.034	-	-	-	-
比較例2	PP-9	合成品I	-	-	-	-	-	-	-	1.38
比較例3	PP-10	合成品I	-	-	-	-	-	-	-	2.95
比較例4	PP-11	合成品II	-	-	-	-	-	-	-	2.98
比較例5	PP-12	市販品	-	-	-	-	-	-	-	3.00

当特許では実施例 1-7 でモル比，温度などの条件を変更しているが，索引ではこれらの条件は区別されないため，実施例 1-7 の生成物に対して，1-Propene, polymer with ethene, block (106565-43-9) が索引される

C よくあるお問い合わせ

成分数の検索

Q4> あるポリマーの CAS 登録番号が既知であり、そのポリマーのエステル化物を調査するために、=> S ポリマーの CAS 登録番号/CRN AND エステル化剤の CAS 登録番号/CRN AND 2/NC で検索したが、物質は登録されているはずなのにヒットしなかった。なぜヒットしなかったのか？

A4> 2 成分に限定したためにヒットしなかった。成分数の限定には注意が必要である。

■ Q4 の例：米国特許 5858608 に記載されていた butyl ester of poly (ethylene/maleic anhydride) copolymer の CAS 登録番号を調査したい。

既に、エチレン-無水マレイン酸コポリマーの CAS 登録番号 (9006-26-2) およびブタノールの CAS 登録番号 (71-36-3) が分かっていたので、下記の検索式を実行したが、ヒットしなかったのはなぜか？

=> S 9006-26-2/CRN AND 71-36-3/CRN AND 2/NC

Q4 の例の回答：butyl ester of poly (ethylene/maleic anhydride) copolymer は 3 成分として登録されているため、2/NC の検索でヒットしなかった。

■ 成分数検索の注意点

- ・ 成分数 (/NC) 検索は物質全体の成分数を限定する。
 - 成分の数は、分子式がベースである。
- ・ Q4 の例では、エチレン-無水マレイン酸コポリマーを誤って 1 成分と認識している。
 - REGISTRY ファイルでは大部分のポリマーは原料モノマーに基づいて登録されている。そのため、ポリ～、～ポリマー、～コポリマーなどと記載されているポリマーについては、元々幾つのモノマーからなるポリマーなのかを考慮し、成分数を考える必要がある。
 - Q4 の例では、エチレン-無水マレイン酸コポリマーはエチレンと無水マレイン酸からなるコポリマーであるため、9006-26-2 の成分数は 2 である。



ブタノールでエステル化された物質の全体の成分数は 3 であり、下記の式で検索できる。

=> S 9006-26-2/CRN AND 71-36-3/CRN AND 3/NC

C よくあるお問い合わせ

成分数の検索

・ 検索例

=> FILE REGISTRY

← *REGISTRY* ファイルに入る

=> E 9006-26-2 5

← 既知の *CAS* 登録番号でも、成分数などの確認のために、検索して表示するとよい

E1 1 9006-24-0/RN
E2 1 9006-25-1/RN
E3 1 --> 9006-26-2/RN
E4 1 9006-27-3/RN
E5 1 9006-28-4/RN

=> S E3

← エチレン-無水マレイン酸コポリマーを検索する (*CAS* 登録番号検索は無料)

L1 1 9006-26-2/RN

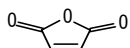
=> D SCAN

← *SCAN* 表示形式で確認する (無料)

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN 2,5-Furandione, polymer with ethene
MF (C4 H2 O3 . C2 H4)x
CI PMS, COM

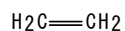
エチレン-無水マレイン酸コポリマーは
2 成分からなるポリマー

CM 1



← 無水マレイン酸

CM 2



← エチレン

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> E 71-36-3 5

E1 1 71-30-7/RN
E2 1 71-33-0/RN
E3 1 --> 71-36-3/RN
E4 1 71-41-0/RN
E5 1 71-43-2/RN

=> S E3

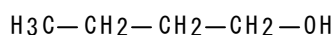
← ブタノールを検索する (無料)

L2 1 71-36-3/RN

=> D SCAN

L2 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN 1-Butanol
MF C4 H10 O
CI COM

ブタノールは 1 成分



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

C よくあるお問い合わせ

成分数の検索

=> S 9006-26-2/CRN AND 71-36-3/CRN AND 3/NC
 96 9006-26-2/CRN
 3321 71-36-3/CRN
 914398 3/NC
 L3 1 9006-26-2/CRN AND 71-36-3/CRN AND 3/NC

← エチレン-無水マレイン酸コポリマーの
 ブタノールによるエステル化物を調べる
 (702 円)

目的の物質の成分数は 3 である

=> D ← IDE 表示形式 (デフォルト) で表示する (265 円/件)

L3 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 RN 37320-89-1 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN 2,5-Furandione, polymer with ethene, butyl ester (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Ethene, polymer with 2,5-furandione, butyl ester (9CI)
 OTHER NAMES:
 CN EMA 1103BE
 CN EMA 1325
 CN Ethylene-maleic anhydride copolymer butyl ester
 CN Maleic anhydride-ethylene polymer half butyl ester
 DR 53986-30-4, 54578-77-7, 75026-02-7, 75497-60-8
 MF C4 H10 O . x (C4 H2 O3 . C2 H4)x ● 3 成分
 CI COM
 PCT Polyolefin, Polyvinyl
 LC STN Files: CA, CAPLUS, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, TOXCENTER, USPAT2,
 USPATFULL, USPATOLD

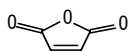
CM 1
 CRN 71-36-3
 CMF C4 H10 O
 H3C-CH2-CH2-CH2-OH

CM 1 はエステル化剤 (ブタノール)

CM 2
 CRN 9006-26-2
 CMF (C4 H2 O3 . C2 H4)x
 CCI PMS

CM 2 (エチレン-無水マレイン酸コポリマー) は
 CM 3 (無水マレイン酸) と CM 4 (エチレン)
 からなるポリマーである

CM 3
 CRN 108-31-6
 CMF C4 H2 O3



CM 4

CRN 74-85-1
 CMF C2 H4



CM の数 (CM 1,2,3...) は成分数ではない

成分数は分子式 (MF) フィールドに収録されている
 各成分の数である

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

参考

上記のレコードは各モノマーの CAS 登録番号から検索してもヒットする
 => S 108-31-6/CRN AND 74-85-1/CRN AND 71-36-3/CRN AND 3/NC

C よくあるお問い合わせ

多段階重合ポリマー

Q5> あるポリマーにさらにモノマーを重合させたようなポリマーを検索する場合、ポリマーの CAS 登録番号と加えたモノマーの CAS 登録番号を /CRN で検索すればよいのか？

A5> モノマーに戻して登録する場合と、ポリマー + モノマーで登録する場合がある。ポリマーの種類によって、検索方法が異なる。

■ モノマーに戻して登録する場合

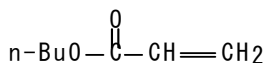
例 1) アクリル酸エチル-メタクリル酸コポリマーに、さらにアクリル酸ブチルを加えて得られるポリマー（最終生成物はアンモニウム塩）

RN 827029-51-6 REGISTRY
 CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl 2-propenoate, block, ammonium salt (9CI) (CA INDEX NAME)
 MF (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x . x H3 N
 CM 1

CRN 827029-50-5
 CMF (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x
 CCI PMS

CM 2

CRN 141-32-2
 CMF C7 H12 O2



CM 3

CRN 140-88-5
 CMF C5 H8 O2

$$\text{EtO}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}=\text{CH}_2$$

CM 4

CRN 79-41-4
 CMF C4 H6 O2

$$\text{Me}-\overset{\text{CH}_2}{\parallel}{\text{C}}-\text{CO}_2\text{H}$$

* アクリル酸エチル-メタクリル酸コポリマー

CRN 25212-88-8
 MF (C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x
 CM 1

CRN 140-88-5
 CMF C5 H8 O2

$$\text{EtO}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}=\text{CH}_2$$

CM 2

CRN 79-41-4
 CMF C4 H6 O2

$$\text{Me}-\overset{\text{CH}_2}{\parallel}{\text{C}}-\text{CO}_2\text{H}$$

ポリマーとしては登録されない

↓

アクリル酸エチル-メタクリル酸コポリマーはモノマー単位ポリマーである。このようなモノマー単位ポリマーに、さらにモノマーを重合させている場合は、重合前のポリマーをモノマーに戻して登録する

上記のポリマーを検索する場合は、それぞれのモノマーの CAS 登録番号を /CRN で検索し、成分数 (/NC) で限定する。

=> S 141-32-2/CRN AND 140-88-5/CRN AND 79-41-4/CRN AND 4/NC

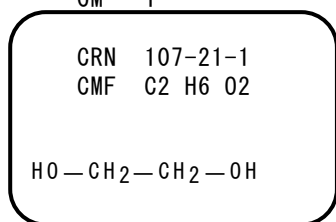
注) アクリル酸エチル-メタクリル酸コポリマーの CAS 登録番号 (RN25212-88-8) を /CRN で検索してもヒットしない。

C よくあるお問い合わせ

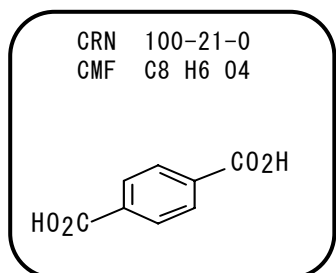
多段階重合ポリマー

例 2) ポリエチレンテレフタレートと 4-ヒドロキシ安息香酸とからなるポリマー

RN 25822-54-2 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,2-ethanediol and
 4-hydroxybenzoic acid (CA INDEX NAME)
 MF (C8 H6 O4 . C7 H6 O3 . C2 H6 O2) x
 CI PMS, COM
 CM 1

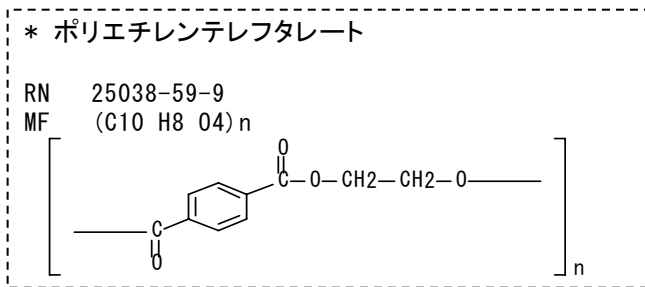
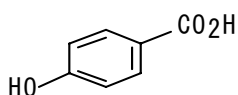


CM 2



CM 3

CRN 99-96-7
 CMF C7 H6 O3



ポリエチレンテレフタレートは末端基なし SRU ポリマーである。このような末端基なしの SRU ポリマーに、さらにモノマーを重合させた場合は、末端基なしの SRU ポリマーをモノマーに戻して登録する。

この例では、ポリエチレンテレフタレートをエチレングリコールとテレフタル酸のモノマーで登録している。

* モノマーが記載されていなかった場合は、モノマーを推定して登録している。

上記のポリマーを検索する場合は、それぞれのモノマーの CAS 登録番号を /CRN で検索し、成分数 (/NC) で限定する。

=> S 107-21-1/CRN AND 100-21-0/CRN AND 99-96-7/CRN AND 3/NC

C よくあるお問い合わせ

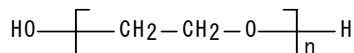
多段階重合ポリマー

■ ポリマー + モノマーで登録する場合

例 3) ポリエチレングリコールとテレフタル酸からなるポリエステル

RN 9057-77-6 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with
 α -hydro- ω -hydroxypoly(oxy-1,2-ethanediyl) (CA INDEX NAME)
MF (C8 H6 O4 . (C2 H4 O)n H2 O)x
C1 PMS, COM
CM 1

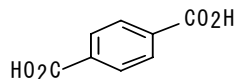
CRN 25322-68-3
CMF (C2 H4 O)n H2 O
CC1 PMS



エステル化する前のポリマーであるポリエチレングリコールは末端基つき SRU ポリマーである。末端基つき SRU ポリマーが、さらに別のモノマー（この例ではテレフタル酸）と重合する場合には、通常はモノマー単位に戻さず、末端基つき SRU ポリマーをモノマー扱いとし、ポリマーの一成分として登録する

CM 2

CRN 100-21-0
CMF C8 H6 O4



上記のポリマーを検索する場合は、末端基つき SRU ポリマーと追加したモノマーの CAS 登録番号を /CRN で検索し、成分数 (/NC) で限定する。

=> S 25322-68-3/CRN AND 100-21-0/CRN AND 2/NC

C よくあるお問い合わせ

グラフト共重合体

Q6> ある文献では、アクリル酸ブチルマクロモノマーとメタクリル酸メチルのグラフト共重合体が合成されており、別の文献では、メタクリル酸メチルマクロモノマーとアクリル酸ブチルのグラフト共重合体が合成されていた。これら 2 つの文献を CAplus ファイルで表示したところ、同じ CAS 登録番号が索引されていた。これはなぜか？

A6> グラフト共重合体を REGISTRY ファイルに登録する際、どのモノマーが主鎖に属するかグラフト鎖に属するかという区別はされない。そのため、全体の構成モノマーが同じであれば、同じ CAS 登録番号になる。

- REGISTRY ファイルでは、ブロック、グラフト、交互などの構造的特徴のあるコポリマーは、それぞれ異なる CAS 登録番号が付与され、区別されている。
しかし、あるモノマーが主鎖中にあるか、グラフト鎖中にあるかの区別はない。

・ 例) メタクリル酸メチル-アクリル酸ブチルグラフト共重合体

RN 111768-67-3 REGISTRY
CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with butyl 2-propenoate, graft
(CA INDEX NAME)

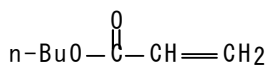
グラフト共重合体であることが名称から判断できる

MF (C7 H12 O2 . C5 H8 O2)x

CI PMS, COM

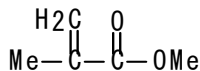
CM 1

CRN 141-32-2
CMF C7 H12 O2



CM 2

CRN 80-62-6
CMF C5 H8 O2



分子式や構造図は全く同じである

* ランダム共重合体の CAS 登録番号は別に存在する

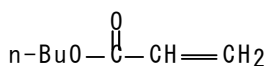
RN 25852-37-3 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with butyl 2-propenoate
(CA INDEX NAME)

MF (C7 H12 O2 . C5 H8 O2)x

CI PMS, COM

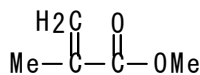
CM 1

CRN 141-32-2
CMF C7 H12 O2



CM 2

CRN 80-62-6
CMF C5 H8 O2



C よくあるお問い合わせ

グラフト共重合体

例) 日本公開特許 2005-307097

標題 : マクロモノマー

MMA (メタクリル酸メチル)

(実施例16) PMMA-PBAグラフト共重合体の製造
 攪拌機、温度計、窒素ガス導入管付還流冷却管、滴下漏斗を備えた200mL反応器に、単量体としてMMA 57.8g、溶媒としてトルエン50mL、重合開始剤として2,2'-アゾビス(イソブチロニトリル) 0.45gを入れ、窒素ガスをバブリングしながら減圧して反応器内を窒素置換し、60℃で加熱攪拌した。また別の容器に実施例8で得られたPBAマクロモノマー10.1gを秤取し、溶媒としてトルエン15mLを加えて溶解させた後、窒素ガスをバブリングして窒素置換した。この溶液を滴下漏斗に入れ、MMA反応溶液の加熱開始1時間後からゆっくり滴下した。滴下に1時間かけ、滴下終了後さらに反応溶液を60℃で2時間、80℃で3時間加熱した。反応溶液をメタノール700mLに注いで、得られた沈殿を減圧乾燥することにより、PMMA-PBAグラフト共重合体を得た。この共重合体からエタノール加温抽出によりPBA単独重合体を除去しようとしたが抽出分はほとんど観察されず、定量的にグラフト共重合体となっていることが確認された。

マクロモノマーの成分が
 BA (アクリル酸ブチル)

- IT Acrylic polymers, preparation
 RL: IMF (Industrial manufacture); PREP (Preparation)
 (block, star; macromonomers with narrow mol. weight distribution manufactured by RAFT polymn for graft or star-block polymers)
- IT Acrylic polymers, preparation
 RL: IMF (Industrial manufacture); RCT (Reactant); PREP (Preparation); RACT
 (Reactant or reagent)
 (graft; macromonomers with narrow mol. weight distribution manufactured by RAFT polymn for graft or star-block polymers)
- IT Macromonomers
 RL: IMF (Industrial manufacture); RCT (Reactant); PREP (Preparation); RACT
 (Reactant or reagent)
 (macromonomers with narrow mol. weight distribution manufactured by RAFT polymn for graft or star-block polymers)
- IT Amines, reactions
 RL: RGT (Reagent); RACT (Reactant or reagent)
 (primary, treatment agents; macromonomers with narrow mol. weight distribution manufactured by RAFT polymn for graft or star-block polymers)
- IT Antioxidants
 Hydrolysis catalysts
 Reducing agents
 (treatment agents; macromonomers with narrow mol. weight distribution manufactured by RAFT polymn for graft or star-block polymers)
- IT 106-92-3DP, Allyl glycidyl ether, reaction products with thiol-terminated macromers 108450-72-2P, Styrene-vinyl acetate graft copolymer 111768-67-3P, Butyl acrylate-methyl methacrylate graft copolymer 125192-67-8DP, Methyl methacrylate-vinyl acetate graft copolymer, hydrolyzed 254983-77-2DP, tert-Butyl acrylate-styrene graft copolymer, hydrolyzed 785793-57-9DP, thiol derivs., reaction products with glycidyl acrylate 868365-07-5DP, thiol derivs., reaction products with allyl glycidyl ether
 RL: IMF (Industrial manufacture); PREP (Preparation)
 (macromonomers with narrow mol. weight distribution manufactured by RAFT polymn for graft or star-block polymers)
 : (省略)

グラフト共重合体

例) 日本公開特許 平 6-239945

標題 : グラフト共重合体の製造方法

<p>【0018】参考例1 片末端にビニルフェニル基を有するMMAマクロモノマーの合成 乾燥アルゴン下で 200mlの無水THF中にビニルフェニルケテンメチルトリメチルシリルアセタール (VPKTS A) 1.2g (5.0mmol) とトリスジメチルアミノスルファートリメチルシリルピフルオライド (TAS⁺(CH₃)₃SiF₂⁻) 0.03g (0.11mmol) と乾燥MMA 100g (1.0mol) を加え、0℃で3時間重合させた。次いでこの重合物を5%メタノール入りヘキサン液に加え、沈殿物を50℃で12h 真空乾燥し、M_n=22000、M_w/M_n=1.20の片末端にビニルフェニル基を有するMMAのマクロモノマー (A1) 90g を得た (収率90%)。NMRによりビニルフェニル基の導入率を測定したところ100%であった。</p>	<p>:(省略) 【0021】実施例3 BA/MMAグラフト共重合体の合成 BA 60g、参考例1にて合成したMMAマクロモノマー (A1) 5gをクロロホルム 180mlに溶解し、十分に窒素置換した後、60℃でCN 0.5gを加えて重合を開始した。重合開始後直ちにMMAマクロモノマー (A1) 35gをクロロホルム180mlに溶解したものを8ml/minの速度で添加し、添加終了後3時間反応させた。この反応物をヘキサンで再沈した後真空乾燥し、BA/MMAグラフト共重合体 (BA/MMA=60/40) 82gを得た (収率82%)。得られたグラフト共重合体の収率、全光線透過率、引張強伸度及び耐候性を表1に示した。</p>
	<p>マクロモノマーの成分が MMA (メタクリル酸メチル)</p>
	<p>BA (アクリル酸ブチル)</p>

IT Monomers

RL: IMF (Industrial manufacture); RCT (Reactant); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)

(macro-, preparation of methacrylate graft copolymers via vinylphenyl-terminated macromonomers)

IT 80-62-6, Methyl methacrylate 102802-55-1, (Vinylphenyl)ketene methyl trimethylsilyl acetal

RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)

(macromonomer materials; preparation of methacrylate graft copolymers via vinylphenyl-terminated macromonomers)

IT 59218-87-0

RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)

(preparation of methacrylate graft copolymers via vinylphenyl-terminated macromonomers)

IT 111768-67-3P, Butyl acrylate-methyl methacrylate graft copolymer

113547-51-6P, Ethyl acrylate-methyl methacrylate graft copolymer

138232-63-0P

RL: IMF (Industrial manufacture); PREP (Preparation)

(preparation of methacrylate graft copolymers via vinylphenyl-terminated macromonomers)

どちらも同じ CAS 登録番号で索引されている

RN	111768-67-3	REGISTRY
CN	2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with butyl 2-propenoate, graft (CA INDEX NAME)	
MF	(C7 H12 O2 . C5 H8 O2)x	
CM	1	<chem>CCCC(=O)C=C</chem>
CM	2	<chem>CC(=O)C(=O)OC</chem>

C よくあるお問い合わせ

PMS/CI とスクリーン 2043

Q7> 構造検索でポリマーを検索する際に、ポリマーの限定方法として PMS/CI とスクリーン 2043 があるが、検索結果に違いはあるのか？

A7> 検索結果に違いがでる場合がある。構造検索を行う場合は、スクリーンを使ったほうが良い。

■ REGISTRY ファイルでは、二つの方法で、ポリマーに限定することができる。

・ => S L# AND PMS/CI

- クラス識別子 (CI) は物質の広いクラス (分類) を示すコードで、PMS はポリマーを示す。

・ => SCR 2043 で作成した L 番号を、構造質問式の L 番号と AND 演算する。

- 構造検索時に、スクリーン 2043 (ポリマー (一般)) を使うと、ポリマーに限定することができる。

■ ポリマーの識別

	PMS/CI	スクリーン 2043
CI (クラス識別子) の PMS	○	○
CCI (成分クラス識別子) の PMS	-	○
MF (分子式) フィールドの ()x または ()n	○	-

■ CI (クラス識別子) フィールドに PMS が付与されている場合

PMS/CI スクリーン 2043

```

RN 892391-65-0 REGISTRY
ED Entered STN: 13 Jul 2006
CN 1H-Indole-1,3(2H)-dione, 2-[2-[(3-ethyl-3-oxetanyl)methoxy]ethyl]-,
homopolymer (9CI) (CA INDEX NAME)
MF (C16 H19 N O4)x
CI PMS
PCT Polyether, Polyether formed
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS

CM 1

CRN 892391-64-9
CMF C16 H19 N O4
    
```

CI (クラス識別子) に PMS が付与されている

↓

PMS/CI でもスクリーン 2043 でもヒット

C よくあるお問い合わせ

PMS/CI とスクリーン 2043

■ CI に PMS が付与されていないが、CCI (成分クラス識別子) に PMS が付与されている場合

- 例 1: MF フィールドにポリマーを示す ()_x や ()_n が含まれているレコード

○ PMS/CI
○ スクリーン 2043

RN 1256338-53-0 REGISTRY
ED Entered STN: 13 Dec 2010
CN Poly(oxy-1,2-ethanediyl), α-[(3-ethyl-3-oxetanyl)methyl]-ω-hydroxy-,
homopolymer, mono[2-[(2-methyl-1-oxo-2-propen-1-yl)oxy]ethyl] ether
(CA INDEX NAME)
DR 1256092-34-8
MF C6 H10 O3 . ((C2 H4 O)_n C6 H12 O2)_x
CI COM
PCT Polyether, Polyether formed
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS

CM 1
CRN 868-77-9
CMF C6 H10 O3

$$\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C} \quad \text{O} \\ | \quad || \\ \text{Me}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH} \end{array}$$

CM 2
CRN 1204652-88-9
CMF ((C2 H4 O)_n C6 H12 O2)_x
CCI PMS

CM 3
CRN 76996-65-1
CMF (C2 H4 O)_n C6 H12 O2
CCI PMS

$$\text{HO}-\left[\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O} \right]_n-\text{CH}_2-\begin{array}{c} \text{Et} \\ | \\ \text{C} \\ | \\ \text{O} \end{array}$$

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

分子式にポリマー (()_x) が含まれている

↓

PMS/CI でヒット

この物質自体は、ポリマーではないため、
CI (クラス識別子) はあるが、PMS が
付与されていない

CCI (成分クラス識別子) に PMS が付与されている

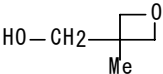
↓


スクリーン 2043 でヒット

C よくあるお問い合わせ

PMS/CI とスクリーン 2043

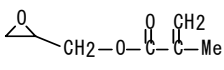
- 例 2 : MF フィールドにポリマーを示す情報 (()x や ()n) がないレコード

<pre> RN 1160286-09-8 REGISTRY ED Entered STN: 29 Jun 2009 CN Chitosan, (3-methyl-3-oxetanyl)methyl ether (CA INDEX NAME) MF C5 H10 O2 . x Unspecified CI COM PCT Manual regis SR CA CM 1 CRN 9012-76-4 CMF Unspecified CCI PMS, MAN *** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE *** CM 2 CRN 3143-02-0 CMF C5 H10 O2 HO-CH2-</pre>	<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block; margin-bottom: 10px;">x PMS/CI</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block; margin-bottom: 10px;">○ スクリーン 2043</div> <p>分子式中にポリマーを示す情報がない</p> <p>CI に PMS が付与されていない</p> <p>CCI (成分クラス識別子) に PMS が付与されている</p> <p>スクリーン 2043 でヒット</p> <p>MAN (手作業登録) とは、構造が確定していないために結合表がない化学物質。この中には REGISTRY ファイルの構造の大きさの上限を超える物質、分子式しかわからない化合物、名称しかわからない化合物 (商品名など) がある</p>
---	---



手作業登録 (MAN) で分子式が不明 (Unspecified) のポリマー (多くの場合は天然物) が、一成分となり、かつ他の成分もポリマーではない場合は、PMS/CI ではヒットしない。

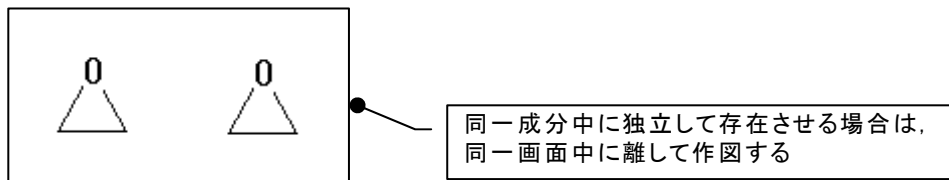
参考 : 上記レコードと同じくキトサンが一成分であるが、PMS/CI でヒットするレコード

<pre> RN 90744-19-7 REGISTRY CN Chitosan, compd. with 2-propenoic acid homopolymer (CA INDEX NAME) MF (C3 H4 O2)x . x Unspecified CM 1 CRN 9012-76-4 CMF Unspecified CCI PMS, MAN *** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE *** CM 2 CRN 9003-01-4 CMF (C3 H4 O2)x CCI PMS CM 3 CRN 79-10-7 CMF C3 H4 O2 HO-C(=O)-CH=CH2</pre>	<pre> RN 1197360-28-3 REGISTRY CN Chitosan, polymer with 2-oxiranylmethyl-2-methyl- 2-propenoate (CA INDEX NAME) MF (C7 H10 O3 . Unspecified)x CI PMS CM 1 CRN 9012-76-4 CMF Unspecified CCI PMS, MAN *** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE *** CM 2 CRN 106-91-2 CMF C7 H10 O3 </pre>
---	--

C よくあるお問い合わせ

PMS/CI とスクリーン 2043

- 検索例 : エポキシ基を同一成分中に二つ持つモノマーを原料とするポリマーを検索する.



=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

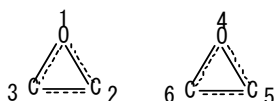
=>

Uploading C:\¥Documents and Settings¥xxxx¥My Documents¥STN Express 8.5¥Queries¥test.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE

L1 STR



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 R AT 6

DEFAULT MLEVEL IS ATOM
 DEFAULT ELEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:

RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED
 NUMBER OF NODES IS 6

STEREO ATTRIBUTES: NONE

=> S L1

← 部分構造検索のサンプル検索 (無料)

L2 50 SEA SSS SAM L1

PMS/CI

=> S L1 FUL

← 部分構造検索のフルファイル検索 (24,200 円)

L3 59611 SEA SSS FUL L1

=> S L3 AND PMS/CI

← 部分構造検索の結果を PMS/CI でポリマーに限定 (702 円)

L4 40796 L3 AND PMS/CI

=> SCR 2043

← ポリマー (一般) のスクリーン

L5 SCREEN CREATED

スクリーン 2043

=> S L1 AND L5

← ポリマー (一般) のスクリーンを AND 演算して
 部分構造検索のサンプル検索 (無料)

L6 50 SEA SSS SAM L1 AND L5

=> S L1 AND L5 FUL

← ポリマー (一般) のスクリーンを AND 演算して
 部分構造検索のフルファイル検索 (24,200 円)

L7 40803 SEA SSS FUL L1 AND L5

C よくあるお問い合わせ

PMS/CI とスクリーン 2043

PMS/CI スクリーン 2043

=> S L7 NOT L4 ← PMS/CI でヒットしなかった回答
L8 7 L7 NOT L4

=> D 1 ← IDE 表示形式で表示 (265 円)

L8 ANSWER 1 OF 7 REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
RN 204634-98-0 REGISTRY
ED Entered STN: 27 Apr 1998
CN Agarose, compd. with 2,2'-[1,4-butanediylbis(oxymethylene)]bis[oxirane]
(9CI) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Oxirane, 2,2'-[1,4-butanediylbis(oxymethylene)]bis[oxirane]
MF C10 H18 O4 . x Unspecified
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER, USPATFULL

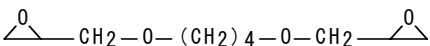
CM 1

CRN 9012-36-6
CMF Unspecified
CCI PMS, MAN

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

CM 2

CRN 2425-79-8
CMF C10 H18 O4



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

Annotations:
● CI がないレコードで、かつ分子式中にポリマーを示す情報がない
↓
したがって PMS/CI でヒットしない
● CCI (成分クラス識別子) に PMS が付与されている
↓
スクリーン 2043 でヒットした

構造検索でポリマーに限定する場合には、PMS/CI よりスクリーン 2043 を利用したほうが網羅的な結果が得られる。

C よくあるお問い合わせ

ポリマー分類用語

Q8> あるモノマーを含むポリアミドを網羅的に検索できるか？

A8> POLYAMIDE/PCT で検索すると、構造にもともと存在するアミド結合だけでなく、重合によって生成する（と推定される）結合に基づくポリマーの両方を検索できる。

■ REGISTRY ファイルでは、ポリマーに対してポリマー分類用語 (PCT; Polymer Class Terms) が付与されている。

・ ポリマー分類用語とは

- 各ポリマーの構造をコンピュータ・アルゴリズムによって解析し、結合の種類に基づいて付与されるコード. ポリマー分類用語は /PCT で検索する.

```

RN 24980-40-3 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Phthalic anhydride, 4-acetamido-, polymers (8CI) (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN Poly(4-acetamidophthalic anhydride)
MF (C10 H7 N O4)x
CI PMS
PCT Polyamic acid, Polyamic acid formed, Polyamide, Polyamide formed,
  Poly(anhydride), Poly(anhydride) formed, Polyimide, Polyimide formed
LC STN Files: CA, CAPLUS, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, TOXCENTER, USPATOLD

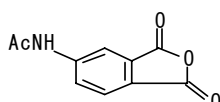
```

ポリマー分類用語

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1

CRN 22235-04-7
 CMF C10 H7 N O4



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

- ・ 43 種のポリマー分類用語があり、一覧は下記の URL で確認できる。
<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/pct.pdf>

POLYAMIDE	PA	<ul style="list-style-type: none"> ・ 主鎖中にアミド結合 -CO-NH-、またはその硫黄同族体を持つポリマー。 <li style="padding-left: 20px;">IN Decanedioic acid, polymer with N,N'-dimethyl-1,6-hexanediamine (9CI) <div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: flex-start;"> <div style="text-align: center;"> <p>CM 1</p> <p>MeNH-(CH₂)₆-NHMe</p> </div> <div style="text-align: center;"> <p>CM 2</p> <p>HO₂C-(CH₂)₈-CO₂H</p> </div> </div> [例外] 不飽和アミド（たとえば、CH₃-CH=CH-CO-NH₂）の付加重合によって生成した、側鎖にアミド基を持つポリマーは該当しない。
-----------	----	--

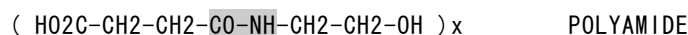
C よくあるお問い合わせ

ポリマー分類用語

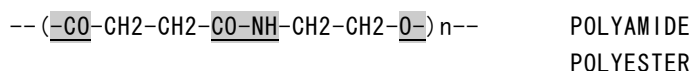
■ ポリマー分類用語で検索できる結合（2種類）

① 構造に元々存在する結合 - FORMED なしのポリマー分類用語のみ収録

- モノマー単位ポリマー :

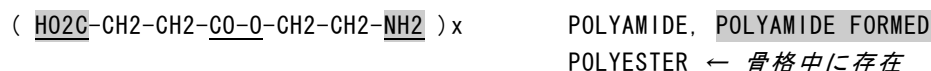
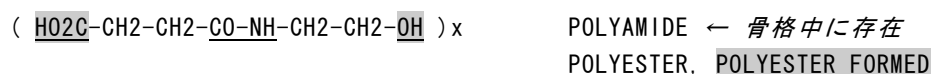
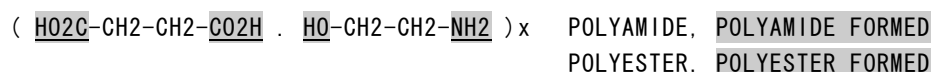


- SRU ポリマー :

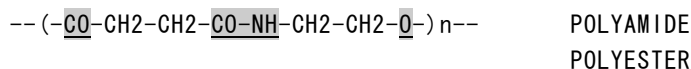


② 重合によって生成する（と推定し得る）結合 - FORMED なしの用語とともに, FORMED 付きのポリマー分類用語も収録

- モノマー単位ポリマー :

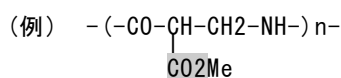


- SRU ポリマー : SRU ポリマー中の官能基は必ず骨格中に存在するので, FORMED 付きのポリマー分類用語は付かない.



■ 注意点

- ・ ポリマー分類用語は, その主鎖 (backbone) 中に存在する結合に基づいて付与される.
 - 例えば下図のポリマーには, エステル結合が存在するが, 主鎖ではなく側鎖であるのでポリマー分類用語の POLYESTER は付かない.



- ・ コンピュータ・アルゴリズムによって解析しているため, 精度に問題がある場合もある. したがって必ずしも網羅的な検索にはならないが, 大まかに絞り込む場合に, ポリマー分類用語を使うとよい.

C よくあるお問い合わせ

ポリマー分類用語

■ 検索例 : モノマーの一つにイソフタル酸を含むポリアミドの製造に関する文献検索

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=> E ISOPHTHALIC ACID/CN 5 ← 名称を *EXPAND* する

E1	1	ISOPHTHALDOXIME-N, N'-M-PHENYLENEBISMALEIMIDE POLYMER/CN
E2	1	ISOPHTHALDOXIME-N, N'-M-PHENYLENEBISMALEIMIDE POLYMER, SRU/CN
E3	1 -->	ISOPHTHALIC ACID/CN
E4	1	ISOPHTHALIC ACID 4-(2-CARBOXYETHYL)-/CN
E5	1	ISOPHTHALIC ACID AMIDRAZONE-2, 2, 4-TRIMETHYLHEXAMETHYLENEDIISOCYANATE-2, 4, 4-TRIMETHYLHEXAMETHYLENEDIISOCYANATE POLYMER/CN

=> S E3 ← *E* 番号で検索する (702 円)

L1 1 "ISOPHTHALIC ACID"/CN

=> SEL RN ← *CAS* 登録番号を抽出する (12 円/1 件)

E1 THROUGH E1 ASSIGNED

=> D SEL ← 抽出した *CAS* 登録番号を表示して確認する (無料)

E1 1 121-91-5/B1

=> S E1/CRN ← 抽出した *CAS* 登録番号検索を行う (無料)

L2 25714 121-91-5/CRN

=> E POLYAMIDE/PCT 5 ← ポリマー分類用語を *EXPAND* する

E1	44396	POLYAMIC ACID/PCT
E2	44177	POLYAMIC ACID FORMED/PCT
E3	100409 -->	POLYAMIDE/PCT
E4	75779	POLYAMIDE FORMED/PCT
E5	55459	POLYAMINE/PCT

=> S E3 ← *E* 番号で検索する (998 円)

L3 100409 POLYAMIDE/PCT

=> S L2 AND L3 ← ポリマー分類用語を使ってイソフタル酸をモノマーとするポリアミドに限定する

L4 4624 L2 AND L3

=> POLYLINK L4 ← *POLYLINK* コマンドを実行する (3,880 円)

L5 5609 POLYLINK L4

=> FILE CAPLUS ← *CAPLUS* ファイルに入る

=> S L5/P ← 合成文献に限定する (無料)

L6 3715 L5/P

C よくあるお問い合わせ

ポリマー分類用語

=> D L6 BIB HITSTR 2 15 ← 書誌情報, ヒットした CAS 登録番号, 構造を表示 (506 円× 2 件)

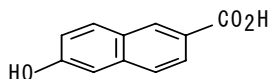
L6 ANSWER 2 OF 3715 CAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 AN 2011:876621 CAPLUS
 TI Method for manufacturing liquid crystalline polyester-coated semiconductor substrates
 TIJP 液晶ポリエステル被覆半導体基板の製造方法 [原題]
 IN Ito, Toyomasa; Okamoto, Satoshi
 PA Sumitomo Chemical Co., Ltd., Japan
 SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 10pp.
 CODEN: JKXXAF
 DT Patent
 LA Japanese
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	JP 2011136266	A	20110714	JP 2009-296829	20091228
PRAI	JP 2009-296829		20091228		

IT **774577-41-2P**, p-Aminophenol-2-hydroxy-6-naphthoic acid-isophthalic acid copolymer
 RL: IMF (Industrial manufacture); PEP (Physical, engineering or chemical process); TEM (Technical or engineered material use); PREP (Preparation); PROC (Process); USES (Uses)
 (manufacture of liquid crystalline polyester-coated semiconductor substrates by spin coating method)
 RN 774577-41-2 CAPLUS
 CN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 4-aminophenol and 6-hydroxy-2-naphthalenecarboxylic acid (CA INDEX NAME)

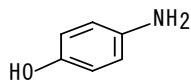
CM 1

CRN 16712-64-4
 CMF C11 H8 O3



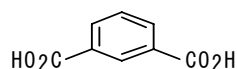
CM 2

CRN 123-30-8
 CMF C6 H7 N O



CM 3

CRN 121-91-5
 CMF C8 H6 O4



774577-41-2 のポリマー分類用語は
 Polyamide, Polyamide formed,
 Polyester, Polyester formed
 各モノマーにはアミド結合が含まれていないが
 ポリマー分類用語による検索でヒット

C よくあるお問い合わせ

ポリマー分類用語

L6 ANSWER 15 OF 3715 CAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 AN 2011:791478 CAPLUS
 DN 155:139412
 TI Polarizer and liquid crystal display comprising the same
 TIJP それを包括する偏光子と液晶ディスプレイ [機械翻訳]
 IN Lazarev, Pavel I.
 PA Crysoptix KK, Japan
 SO U.S. Pat. Appl. Publ., 18pp.
 CODEN: USXXCO
 DT Patent
 LA English
 FAN. CNT 1

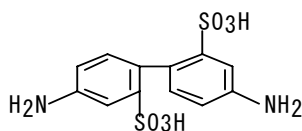
	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	US 20110149206	A1	20110623	US 2010-952041	20101122
PRAI	US 2009-267159P	P	20091207		

ASSIGNMENT HISTORY FOR US PATENT AVAILABLE IN LSUS DISPLAY FORMAT

IT **123375-20-2P** **123375-25-7P**
 RL: IMF (Industrial manufacture); TEM (Technical or engineered material use); PREP (Preparation); USES (Uses)
 (Polarizer and liq. crystal display comprising the same)
 RN 123375-20-2 CAPLUS
 CN [1,1'-Biphenyl]-2,2'-disulfonic acid, 4,4'-diamino-, polymer with 1,3-benzenedicarbonyl dichloride (CA INDEX NAME)

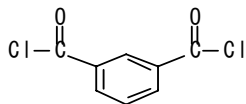
CM 1

CRN 117-61-3
 CMF C12 H12 N2 O6 S2

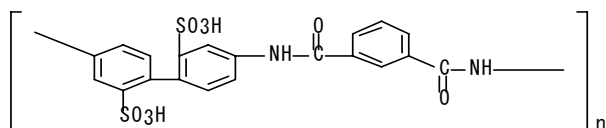


CM 2

CRN 99-63-8
 CMF C8 H4 Cl2 O2



RN 123375-25-7 CAPLUS
 CN Poly[iminocarbonyl-1,3-phenylenecarbonyli 4,4'-diyl] (CA INDEX NAME)



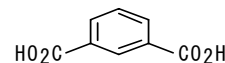
イソフタル酸は含まないが, POLYLINK L4 を実行したことで得られた回答 (181293-75-4 と実質的に同じポリマー)

RN 181293-75-4 REGISTRY
 ED Entered STN: 26 Sep 1996
 CN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 4,4'-diamino[1,1'-biphenyl]-2,2'-disulfonic acid (CA INDEX NAME)
 :
 MF (C12 H12 N2 O6 S2 . C8 H6 O4)x
 CI PMS, COM
 PCT Polyamide, Polyamide formed, Polysulfonamide, Polysulfonamide formed
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

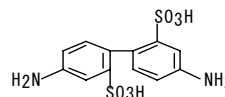
CM 1

CRN 121-91-5
 CMF C8 H6 O4



CM 2

CRN 117-61-3
 CMF C12 H12 N2 O6 S2



C よくあるお問い合わせ

ポリマー分類用語

参考：ポリマー分類用語 POLYOTHER について

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> S L2 NOT L5

← ポリマー分類用語 POLYAMIDE で検索できなかった集合作成

L7 21090 L2 NOT L5

=> S L7 AND POLYOTHER/PCT AND N/ELS AND 2/NC

← 窒素が含まれ、POLYOTHER が付与されている 2 成分の物質に限定する (3,880 円 + 702 円 × 2)

L8 22 L7 AND POLYOTHER/PCT AND N/ELS AND 2/NC

=> D 11

← IDE 表示形式 (デフォルト) で表示 (265 円)

L8 ANSWER 11 OF 22 REGISTRY COPYRIGHT 2011 AGS on STN

RN 120008-31-3 REGISTRY

ED Entered STN: 07 Apr 1989

CN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, polymer with
N,N'-(oxydiphenylene)bis[N-(3-aminophenyl)-1,4-benzenedicarboxamide]
(9CI) (CA INDEX NAME)

OTHER CA INDEX NAMES:

CN 1,4-Benzenedicarboxamide, N,N'-(oxydiphenylene)bis[N-(3-aminophenyl)-,
polymer with 1,3-benzenedicarboxylic acid (9CI)

MF (C40 H32 N6 O5 . C8 H6 O4) x

CI PMS

PCT Polyother, Polyother only

SR CA

LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL

POLYOTHER はコンピュータ・アルゴリズムによるポリマー分類ができないポリマー

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1

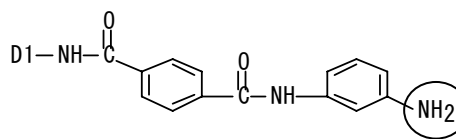
CRN 120008-30-2

CMF C40 H32 N6 O5

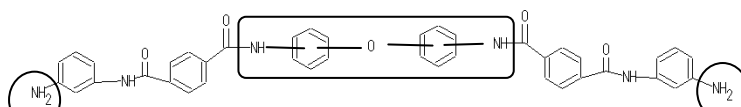
CCI IDS



1/2 (D1-O-D1)



CM 1 の構造は下記の構造を示しているが、四角で囲った箇所の結合位置が不明のため、IDS 化合物として登録されている

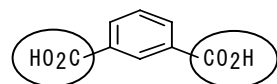


CM1 と CM2 からなるポリマーは NH2 と CO2H が反応するポリアミドであるが、登録されている CM 1 は IDS 化合物であり、構造図には NH2 が一箇所しか存在しない。そのためポリアミドでなく、Polyother が付与された

CM 2

CRN 121-91-5

CMF C8 H6 O4



1 REFERENCES IN
1 REFERENCES IN

当レコードのように実際は、ポリアミドだが Polyother が付与されている場合もあるので、ポリマー分類用語を利用して網羅的な検索をする場合には、上記のように Polyother の集合を別途作成し、確認すると良い。

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