



STNext[®]

化学物質検索

JALICI



* 目次 *

A 概要

CAS FILES.....	1
REGISTRY ファイルの収録内容	2
回答表示	10
REGISTRY ファイルの検索機能.....	16

B 辞書検索

辞書検索フィールド.....	17
CAS 登録番号 (CAS RN [®]).....	18
成分 CAS 登録番号 (CAS RN [®]).....	19
化学物質名	20
分子式	26
クラス識別子.....	32

C 構造検索 (基礎編)

構造検索.....	35
構造作図画面	36
検索例	37
参考 : イタレーションが不完全な回答	46
参考 : 構造質問式の自動保存.....	46
参考 : 構造検索のしくみとシステム制限.....	47

D 便利な作図機能

便利な作図機能一覧.....	49
置換の禁止 (Lock Atoms ツール).....	50
環の孤立化 (Lock Ring ツール)	51
可変置換位置.....	52
繰り返しグループ	53
R グループ	54
参考 : R グループ内に水素を指定する場合の注意点	57
ノードの属性 (Node Attributes - Node Type).....	58
結合の属性 (Bond Attributes - Bond Type/Bond Value).....	59
参考 : 鎖結合に対する Lock Ring の指定	60
元素数 (Node Attributes - Element Counts).....	61
一般式属性 (Node Attributes - Generic Definition).....	62
結合非水素数 (Node Attributes - Non-Hydrogen Count).....	64

E クロスオーバー検索

化学物質のクロスオーバー検索	67
参考 : CAS ロール.....	69
検索例	70
参考 : 特許調査を効率化する CAS PatentPak.....	74
参考 : CAplus/CA ファイルから REGISTRY ファイルへのクロスオーバー.....	76

練習問題.....	79
-----------	----

APPENDIX

BATCH 検索	93
サブセット 検索	94
RANGE 検索 (範囲指定検索)	95
ノーマライズド結合	96
削除された CAS RN® (DR).....	98
優先 CAS RN®, 非優先 CAS RN®	99
* (アスタリスク) 付きの CAS RN® と文献検索	100
CAplus/CA ファイルに文献のない場合	101
多成分物質のカウント方法	102
第四級アンモニウム塩と塩化アンモニウム	103
同位体標識化合物	104

A 概要

REGISTRY ファイルで化学物質を検索するためには、その収録内容やレコード構成を理解することが不可欠です。

CAS FILES

- CAS FILES は CAS (Chemical Abstracts Service) が作成するデータベースの総称である。
CAS FILES は、すべて STN で検索できる。

(2022 年 10 月現在)

ファイル名	内容	収録年	収録件数
REGISTRY	化学物質のデータベース CAS 登録番号 (CAS RN®), 名称, 分子式, 構造, 配列, 物性情報, スペクトルデータなどを収録.	1800 初頭-	270,000,000 (化学物質)
CA	化学および周辺分野の文献データベース 書誌情報, 対応特許情報, 抄録, 索引, 引用・被引用 情報, 米国特許の譲渡情報などを収録.	1808-	46,600,000
CAplus	化学および周辺分野の文献データベース CA ファイルの全情報に加え CA 収録予定の 情報や CA 収録対象外の情報も収録.	1808-	59,300,000
CASREACT	有機化学反応情報を含む文献データベース CA 収録対象文献から選択した反応情報を収録.	1840-	2,150,000 (文献) 131,000,000 (反応)
MARPAT	マルクーシュ (Markush) 構造を含む特許データベース CA 収録対象特許のクレーム中または発明の詳細な 説明中からマルクーシュ構造を収録.	1961-	572,000 (特許)
CASFORMULTNS*	製剤・配合情報のデータベース CAplus 収録特許・雑誌および医薬品添付文書 から製剤・配合に関わる構成成分や機能を収録.	1996-	4,700,000
CHEMLIST	化学物質規制情報のデータベース 主要国の既存化学物質リスト情報, 各国の規制化学 物質リスト情報を収録.	1980-	413,000
CHEMCATS	市販化学薬品のカタログ情報のデータベース CAS RN®, 名称, 供給業者名, カタログ名, 価格 などを収録.	最新	随時更新
CIN	化学ビジネス情報のデータベース 化学産業界分野のビジネスニュースの書誌情報, 抄録, 索引, CAS RN®, 名称などを収録.	1974-	1,780,000

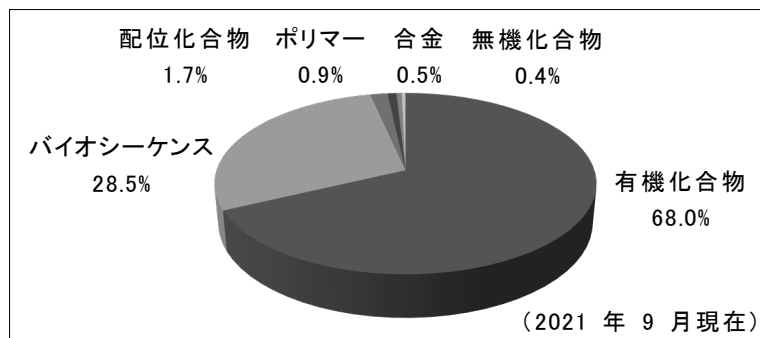
* STNnext のみで利用可能. STN 定額契約ではオプション契約が必要.

REGISTRY ファイルの収録内容

■ REGISTRY ファイルには CAS RN[®] が付与された化学物質が収録されている。

- ・ 収録レコード数 : 2.5 億件以上 (2021 年 9 月現在)。
- ・ 更新は毎日。
- ・ REGISTRY ファイルに収録されている化学物質の種類

- 有機化合物
- 無機化合物
- タンパク質, 核酸
- ポリマー
- 配位化合物
- 有機金属化合物
- 金属
- 合金
- 鉱物
- 元素



- ・ CAS RN[®] とは, CAS が付与している化学物質を特定するためのユニークな番号。
 - 化学物質の同定は細かく区別されており, 一つの化学物質に一つの番号が付与される。

【例 1: 酢酸】

- ・ 酢酸 : 64-19-7
- ・ 酢酸ナトリウム : 127-09-3
- ・ ¹⁴C で標識された酢酸 : 3590-56-5
- ・ 酢酸イオン (CH₃COO⁻) : 71-50-1

【例 2: アラニン】

- ・ L-アラニン : 56-41-7
- ・ D-アラニン : 338-69-2
- ・ DL-アラニン : 302-72-7

【例 3: ベンゼン】

- ・ ベンゼン : 71-43-2
- ・ ベンゼンのラジカルイオン : 34504-50-2

【例 4: 硫酸銅】

- ・ 硫酸銅の無水物 : 7758-98-7
- ・ 硫酸銅の 5 水和物 : 7758-99-8

・ REGISTRY ファイルに収録される化学物質の出典

－ Chemical Abstracts (CAplus/CA ファイル) に索引されている特定化学物質*

* 分子式や構造が明確な単一の化学物質

- ① CA 収録対象の原文献に記載されており科学的・技術的に新しい知見があった化学物質.
- ② 特許実施例中またはクレーム (1981 年以降) に記載されており, 新規性・改良点, 重要な事項に関連する化学物質.
- ③ 実施例由来の場合は何らかの hard data のある物質. (例示物質は索引しない)

ただし, 以下の特許がベーシック特許となった場合には, 実施例中の hard data のない物質 (Prophetic 物質) も索引する.

- － 2009 年 1 月以降の CA, DE, EP, FR, GB, JP, RU, US, WO から発行された特許
- － 1998-2008 年の CA, DE, EP, FR, GB, US, WO で発行された英語, 仏語, 独語の特許 (1993-1997 年は一部収録)
- － 2000-2008 年の日本語で書かれた特許 (一部収録)

Prophetic 物質の定義

1. 特許の実施例に記載されている hard data のない特定の化学物質 (例 : 反応物, 単離された中間体, 生成物) で, クレームには記載されていないもの. 構造式だけでなく, 化学物質名で表現されているものや, 表にまとめられているものも含まれる.
2. 新規の用途が報告されているが, その用途が実証されていない既知物質.

－ CASREACT ファイルに収録されている反応中の反応関与物質

－ 米国 (TSCA), カナダ (DSL, NDSL), EC (EINECS) 等の化学物質規制法に基づく既存化学物質リストに記載された物質

－ 公的機関や企業からの依頼により CAS RN® を付与した物質

－ 登録システムの開始時に各種ハンドブック類から収録された化学物質

- ・ Merck Index
- ・ Lange: Handbook of Chemistry
- ・ U.S. Adopted Names
- ・ Color Index
- ・ Pesticide Index
- ・ SOCMA Handbook
- ・ Ring Index

－ 化合物ライブラリー (CHEMCATS ファイル) から登録された化学物質

－ 他のデータベースからの化学物質情報を収録

主な収録源データベース名

- ・ ChemBank (The Broad Institute)
- ・ Integrated Spectral Data Base System of Organic Compounds
(National Institute of Advanced Industrial Science and Technology in Japan)
- ・ NCI 2D, NCI 3D (National Cancer Institute)
- ・ Roadrunner (New Mexico Molecular Libraries Screening Center)
- ・ Wiley Subscription Services, Inc
- ・ UPCMLD Library
(University of Pittsburgh Center for Chemical Methodologies and Library Development)
- ・ ChemSpider (ChemZoo, Inc.)

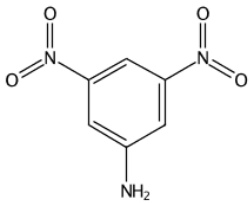
■ REGISTRY ファイルのレコード構成

- ・ 各レコードには物質に関する様々な情報が収録されている。

- CAS 登録番号 (CAS RN®)
- 化学物質の名称
- 分子式
- 構造, 配列
- 物性データ, スペクトルデータ
- CAplus, CA ファイルの文献数

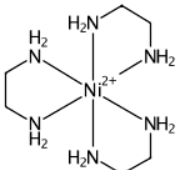
■ 単成分物質のレコード例 (IDE 表示形式)

- ・ 有機化合物

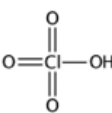
CAS RN®	RN 618-87-1 REGISTRY
*1 レコード作成日	ED Entered STN: 16 Nov 1984
CA 索引名	CN Benzenamine, 3,5-dinitro- (CA INDEX NAME)
旧 CA 索引名	OTHER CA INDEX NAMES: CN 3,5-Dinitrobenzenamine CN Aniline, 3,5-dinitro- (7C1, 8C1)
他の化学物質名	OTHER NAMES: CN (3,5-Dinitrophenyl)amine CN 1-Amino-3,5-dinitrobenzene CN 3,5-Dinitroaniline CN Dinitroaniline CN NSC 284
分子式	MF C6 H5 N3 O4
クラス識別子	CI COM
収録源	SR CA
CAS RN® 所在	LC STN Files: BIOSIS, CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, CIN, IFIALL, MSDS-OHS, REAXYSFILE*, RTECS*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL, USPATOLD (*File contains numerically searchable property data) Other Sources: EINECS** (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
構造図	
物性データの存在	**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
CA の文献数	626 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE) 5 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
CAplus の文献数	636 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

*1 1984 年 11 月以前に登録された物質のレコード作成日はすべて "16 Nov 1984"

・ 配位化合物

CAS RN®	RN 15390-99-5 REGISTRY
レコード作成日	ED Entered STN: 16 Nov 1984
CA 索引名	CN Nickel (2+), tris(1,2-ethanediamine-κN1,κN2)-, (OC-6-11)- (CA INDEX NAME)
旧 CA 索引名	OTHER CA INDEX NAMES: CN (OC-6-11)-Tris(1,2-ethanediamine-κN1,κN2)nickel (2+) CN Nickel (2+), tris(1,2-ethanediamine-κN,κN')-, (OC-6-11)- (9CI) CN Nickel (2+), tris(1,2-ethanediamine-N,N')-, (OC-6-11)- CN Nickel (2+), tris(ethylenediamine)-, ion (8CI)
他の化学物質名	OTHER NAMES: CN Nickel (2+), tris(ethylenediamine)-, (OC-6-11)- CN Tris(ethylenediamine)nickel (2+) CN Tris(ethylenediamino)nickel (2+)
削除された CAS RN®	DR 46138-63-0
分子式	MF C6 H24 N6 Ni
クラス識別子	CI CCS, COM
CAS RN® 所在	LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
構造図	
物性データの存在	**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
CA の文献数	145 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
CAPLUS の文献数	6 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA 145 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

・ 無機化合物

CAS RN®	RN 7601-90-3 REGISTRY
レコード作成日	ED Entered STN: 16 Nov 1984
CA 索引名	CN Perchloric acid (CA INDEX NAME)
他の化学物質名	OTHER NAMES: CN Perchloric acid (HClO4)
非優先 CAS RN®	AR 210584-41-1
削除された CAS RN®	DR 47999-51-9, 90149-16-9, 92785-38-1, 95912-44-0, 95998-58-6, 101200-37-7, 102278-63-7, 106644-01-3, 111341-24-3, 119630-46-5, 139339-89-2, 143171-41-9, 153389-31-2, 200863-18-9, 766444-83-1, 845752-15-0, 957554-95-9, 1246816-77-2, 1794766-48-5, 2102523-83-9, 2184990-61-0
分子式	MF Cl H O4
クラス識別子	CI COM
CAS RN® 所在	LC STN Files: BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, :
構造図	
物性データの存在	**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
CA の文献数	29689 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
CAPLUS の文献数	815 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA 30403 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

A 概要

・ モノマー単位ポリマー (ホモポリマー)

CAS RN®	RN	25067-58-7	REGISTRY
レコード作成日	ED	Entered STN:	16 Nov 1984
CA 索引名	CN	Ethyne, homopolymer	(CA INDEX NAME)
他の化学物質名	OTHER CA INDEX NAMES:		
	CN	Acetylene, polymers	(8CI)
	OTHER NAMES:		
	CN	Acetylene homopolymer	
	:		
分子式	MF	(C2 H2) x	● (モノマーの分子式)x
クラス識別子	CI	PMS, COM	● ポリマー (PMS)
ポリマー分類用語	PCT	Polyacetylene	
CAS RN® 所在	LC	STN Files:	BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT,
	:		
構造図	CM	1	
	CRN	74-86-2	
	CMF	C2 H2	
			● モノマーの構造
物性データの存在	**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**		
CA の文献数	7614 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)		
	367 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA		
CAplus の文献数	7731 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)		

・ SRU (繰り返し単位) ポリマー

CAS RN®	RN	25667-42-9	REGISTRY
レコード作成日	ED	Entered STN:	22 Sep 1989
CA 索引名	CN	Poly(oxy-1,4-phenylenesulfonyl-1,4-phenylene)	(CA INDEX NAME)
他の化学物質名	OTHER NAMES:		
	CN	α-[p-[(p-Hydroxyphenyl)sulfonyl]phenyl]-o-hydroxypoly(oxy-p-	
	:		
削除された CAS RN®	DR	9079-18-9, 38885-52-8, 41209-04-0 , 57125-01-4 , 58450-23-0,	● (繰り返し単位の分子式)n
	:		
分子式	MF	(C12 H8 O3 S)n	●
クラス識別子	CI	PMS, COM	● ポリマー (PMS)
ポリマー分類用語	PCT	Polyether, Polysulfone	
CAS RN® 所在	LC	STN Files:	BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT,
	:		
同一ポリマーの存在	**RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK**		
構造図			● 繰り返し単位の構造
物性データの存在	**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**		
CA の文献数	8270 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)		
	646 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA		
CAplus の文献数	8484 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)		

・ 核酸 (SQIDE 表示形式)

CAS RN®	RN	399060-53-8	REGISTRY
CA 索引名	CN	DNA (human fetal liver clone W00157277-SEQID-14212 gene exon) (9CI) (CA INDEX NAME)	
他の化学物質名	OTHER NAMES:		
ファイルセグメント	CN	1539: PN: W00157277	SEQID: 14212 c ¹ aimed_DNA
配列長	FS	NUCLEIC ACID SEQUENCE	● 核酸
核酸タイプと数	SQL	452	
	NA	134 a	87 c 98 g 133 t
特許情報	PATENT ANNOTATIONS (PNTE):		
	Sequence Source	Feature	Description Patent Reference
	Homo sapiens	misc_feature	MAP TO AL049648.6 W02001057277 claimed SEQID 14212
		misc_feature	EXPRESSED IN FETAL LIVER, SIGNAL = 2.9
		misc_feature	SWISSPROT HIT: P25582, EVALUE 2.00e+00
		misc_feature	EST_HUMAN HIT: AA299985.1, EVALUE 6.60e+00
配列	SEQ	1 atgaaaagtg ctgtccccac agatccgtga agggcgggtg gaggggtggt 51 ttgcatgaga gaggagctct gctaagtgga ctggaaagtg ctgcctgaga 101 cctgttcctt ggaagcacag ctctttttgg ttaaatacat aaactacat 151 aaaaccaca attacagtga ctaccatggt gataatttca atgcactgaa 201 ttatatgaaa aaataaaaaca aacaaaacct gggacacaat tgaacagcac 251 aagaagtagg aatgtggcac agtctgtaat ttatgtttat tgccatgggt 301 ttcgacggac caaatggctc atgcctgcct gcactgtagc tgagtcattg 351 ttgatatttc aaagtggcag taataaaaaat ctttatggct cccatgctat 401 ttcatacct tatttattct gtttttttcc cctgttttta agtcattctt 451 tg	
	RELATED SEQUENCES AVAILABLE WITH SEQLINK		
分子式	MF	Unspecified	
クラス識別子	CI	MAN	
収録源	SR	CA	
CAS RN® 所在	LC	STN Files: CA, CAPLUS	
CAplus ファイルの資料種類	DT.CA	CAplus document type: Patent	
*1 CAS ロール	RL.P	Roles from patents: ANST (Analytical study); BIOL (Biological study); PRP (Properties)	
CA の文献数		1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)	
CAplus の文献数		1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)	

*1 特定物質として索引された特許レコードでのスーパーロール

■ 多成分物質のレコード例 (IDE 表示形式)

・ REGISTRY ファイルでは, 以下のような物質が多成分物質として登録されている.

- 多くの塩
- コポリマー
- 付加化合物
- 合金
- 混合物
- イオン対
- 金属間化合物
- 構造不明の無機化合物
- 元素組成比が非整数, または範囲で示される無機化合物

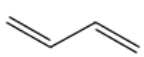
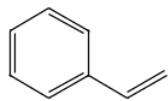
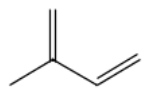
・ 金属塩 ヘテロ原子 (O, S, Se, Te, N, P, As) に結合した水素が金属に置換されて生成した塩は, 遊離の酸と金属との多成分物質として登録される.

CAS RN®	RN	127-09-3	REGISTRY
レコード作成日	ED	Entered STN: 16 Nov 1984	
CA 索引名	CN	Acetic acid, sodium salt (1:1) (CA INDEX NAME)	
		:	
削除された CAS RN®	DR	325477-99-4, 883902-29-2, 1613375-15-7	
分子式	MF	C2 H4 O2 . Na	多成分物質では各成分の分子式がピリオドで区切られている
クラス識別子	CI	COM	
CAS RN® 所在	LC	STN Files: ADISNEWS,	
		:	
成分 CAS RN®	CRN	(64-19-7)	
構造図			
物性データの存在	**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**		
CA の文献数	51251 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)		
	259 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA		
CAplus の文献数	52710 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)		

・ 合金

CAS RN®	RN	109145-92-8	REGISTRY												
レコード作成日	ED	Entered STN: 11 Jul 1987													
CA 索引名	CN	Zinc alloy, base, Zn, Al, La (Galfan) (CA INDEX NAME)													
		:													
分子式	MF	Al . La . Zn	合金 (AYS)												
クラス識別子	CI	AYS													
収録源	SR	CA													
CAS RN® 所在	LC	STN Files: CA, CAPLUS, CIN, PIRA, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL													
成分表	<table border="0" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="text-align: left;">Component</th> <th style="text-align: center;">Component Percent</th> <th style="text-align: center;">Component Registry Number</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Zn</td> <td style="text-align: center;">95</td> <td style="text-align: center;">7440-66-6</td> </tr> <tr> <td>Al</td> <td style="text-align: center;">4.8 - 5.2</td> <td style="text-align: center;">7429-90-5</td> </tr> <tr> <td>La</td> <td style="text-align: center;">0 - 0.1</td> <td style="text-align: center;">7439-91-0</td> </tr> </tbody> </table>			Component	Component Percent	Component Registry Number	Zn	95	7440-66-6	Al	4.8 - 5.2	7429-90-5	La	0 - 0.1	7439-91-0
Component	Component Percent	Component Registry Number													
Zn	95	7440-66-6													
Al	4.8 - 5.2	7429-90-5													
La	0 - 0.1	7439-91-0													
物性データの存在	**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**														
CA の文献数	184 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)														
	2 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA														
CAplus の文献数	185 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)														

・ モノマー単位ポリマー (コポリマー)

CAS RN®	RN 110389-01-0 REGISTRY
レコード作成日	ED Entered STN: 19 Sep 1987
CA 索引名	CN Benzene, ethenyl-, polymer with 1,3-butadiene and 2-methyl-1,3-butadiene, block (CA INDEX NAME)
旧 CA 索引名	OTHER CA INDEX NAMES: CN 1,3-Butadiene, 2-methyl-, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, block (9CI) CN 1,3-Butadiene, polymer with ethenylbenzene and 2-methyl-1,3-butadiene, block (9CI)
他の化学物質名	OTHER NAMES: CN 1,3-Butadiene-2-methyl-1,3-butadiene-styrene block copolymer CN 1,3-Butadiene-isoprene-styrene block copolymer CN Butadiene-isoprene-styrene block copolymer CN Butadiene-styrene-isoprene block copolymer CN Isoprene-1,3-butadiene-styrene block copolymer CN Isoprene-butadiene-styrene block copolymer CN Isoprene-styrene-butadiene block copolymer CN Kraton MD 6460 CN Styrene-1,3- CN Styrene-buta
削除された CAS RN®	DR 159767-41-6
分子式	MF (C8 H8 . C5 H8 . C4 H6)x
クラス識別子	CI PMS
ポリマー分類用語	PCT Polyolefin, Polystyrene
収録源	SR CA
CAS RN® 所在	LC STN Files: CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMLIST, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
構造図	<p>CM 1</p> <p>CRN 106-99-0 CMF C4 H6</p>  <p>成分 1 (モノマー 1)</p> <p>CM 2</p> <p>CRN 100-42-5 CMF C8 H8</p>  <p>成分 2 (モノマー 2)</p> <p>CM 3</p> <p>CRN 78-79-5 CMF C5 H8</p>  <p>成分 3 (モノマー 3)</p>
CA の文献数	688 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
CAplus の文献数	384 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA 688 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

コポリマーは、原料モノマーの多成分物質として登録されている。
各モノマーの分子式がピリオドで区切られる。

ポリマー (PMS)

回答表示

■ 回答表示

=> D L1 1-3 (IDE)
L 番号 回答番号 表示形式

* L 番号, 回答番号, 表示形式を省略すると, デフォルト (直前の L 番号, 1 番目の回答, IDE 表示形式) の内容が自動的に表示される.

- REGISTRY ファイルの各レコードには, CAS RN®, 化学物質名, 分子式, 構造図, 配列, 物性データ, スペクトルデータなどの様々な情報が収録されている.
- 表示したい内容によって適切な表示形式を指定する.

=> D ← 直前の L 番号の 1 番目の回答を IDE 表示形式で表示

=> D L1 1-3 IDE ← L1 の 1~3 番目の回答を IDE 表示形式で表示

=> D L2 SCAN ← L2 の回答を SCAN 表示形式でランダムに表示

=> D L3 1-10 SAM ← L3 の 1~10 番目の回答を SAM 表示形式で表示

=> D L4 5 FIDE ← L4 の 5 番目の回答を FIDE 表示形式で表示

- 代表的な定型表示形式

表示形式	内容
SAM	CA 索引名, 分子式, クラス識別子, 構造図, 配列長
SCAN	SAM と同じ (ただし, 回答番号指定不可:ランダム表示)
IDE (デフォルト)	基本的な物質情報 (化学物質名は 50 まで表示)
IDERL	IDE, CAplus ファイルのスーパーロールと資料種類
FIDE	すべての物質情報 (RSD, スーパーロール, 物性などを含む)
ALL	FIDE, CA ファイル中の最新の 10 文献 (ALL 表示形式)

- 表示形式によって表示されるフィールドが異なる.

表示形式	REGISTRY													CA	
	回答番号	RN	IN	CN	MF	CI	構造	ED	FS	LC	REF	ロール	RSD	物性	文献
SAM	○	-	○	-	○	○	○	-	-	-	-	-	-	-	-
SCAN	-	-	○	-	○	○	○	-	-	-	-	-	-	-	-
IDE (デフォルト)	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	-	-	-	-
IDERL	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	-	-	-
FIDE	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	-
ALL	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○

注: ALL 表示形式を指示すると, CA ファイルのデータ (最新 10 件分) も表示される.

■ 表示例

=> FILE REGISTRY ●

REGISTRY ファイルに入る

=> S PYRIMIDINE AND BROMO AND CHLORO

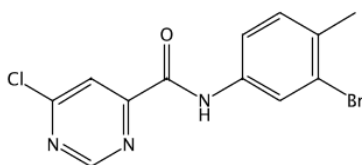
L1 94229 PYRIMIDINE AND BROMO AND CHLORO

=> D L1 SCAN ●

SCAN 表示形式

L1 94229 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 IN 4-Pyrimidinecarboxamide, N-(3-bromo-4-methylphenyl)-6-
 MF C12 H9 Br Cl N3 O

- L 番号のみ指定できる
- 回答番号の指定はできない

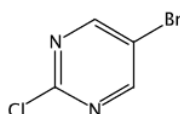


PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

初めはランダムに 1 件表示されるので
追加で表示したい件数を入力する

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

L1 94229 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 IN Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro-
 MF C4 H2 Br Cl N2



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

SCAN 表示を終了する場合は
END または 0 を入力する

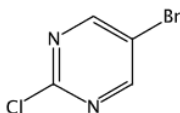
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END ●

=> D L1 94105 SAM ●

SAM 表示形式

L1 ANSWER 94105 OF 94229 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on
 IN Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro-
 MF C4 H2 Br Cl N2

- 回答番号を指定できる



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

参考 : SCAN 表示形式と SAM 表示形式

表示される内容は同じであるが下記の点で異なる.

- SCAN 表示形式 : 回答セット中に含まれるいずれかのレコードがランダムに表示される.
回答番号の指定はできない.
- SAM 表示形式 : 回答番号の指定ができる.

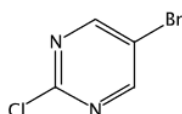
A 概要

=> D L1 94105

L1 ANSWER 94105 OF 94229 REGISTRY CO
 RN 32779-36-5 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro- (CA
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN 5-Bromo-2-chloropyrimidine
 OTHER NAMES:
 CN 2-Chloro-5-bromopyrimidine
 MF C4 H2 Br Cl N2
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, REAXYSFILE*,
 TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
 (*File contains numerically searchable property data)

IDE 表示形式

- デフォルトの表示形式なので、表示形式を指定しない場合は、自動的にこの表示形式で表示される
- CAS RN® も表示される
- 化学物質名は 50 名称まで表示される



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

物性データの存在

1003 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 1011 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

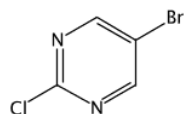
=> D L1 94105 IDERL

L1 ANSWER 94105 OF 94229 REGISTRY COPYRIGHT 2
 RN 32779-36-5 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro- (CA INDEX NAM
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN 5-Bromo-2-chloropyrimidine
 OTHER NAMES:
 CN 2-Chloro-5-bromopyrimidine
 MF C4 H2 Br Cl N2
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, REAXYSFILE*,
 TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
 (*File contains numerically searchable property data)

IDERL 表示形式

- IDE 表示形式で表示される情報に加え、CAplus ファイルのスーパーロールと資料種類が含まれる

DT.CA CAplus document type: Journal; Patent; Preprint
 RL.P Roles from patents: BIOL (Biological study); PREP (Preparation); PRPH (Prophetic); RACT (Reactant or reagent); USES (Uses)
 RL.NP Roles from non-patents: ANST (Analytical study); BIOL (Biological study); FORM (Formation, nonpreparative); PREP (Preparation); PROC (Process); PRP (Properties); RACT (Reactant or reagent)



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

1003 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 1011 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

=> D L1 94105 FIDE

L1 ANSWER 94105 OF 94229 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 RN 32779-36-5 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro- (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN 5-Bromo-2-chloropyrimidine
 OTHER NAMES:
 CN 2-Chloro-5-bromopyrimidine
 MF C4 H2 Br Cl N2
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, REAXYSFILE*,
 TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
 (*File contains numerically searchable property data)
 DT.CA CAPLUS document type: Journal; Patent; Preprint
 RL.P Roles from patents: BIOL (Biological study); PREP (Preparation); PRPH
 (Prophetic); RACT (Reactant or reagent); USES (Uses)
 RL.NP Roles from non-patents: ANST (Analytical study); BIOL (Biological
 study); FORM (Formation, nonpreparative); PREP (Preparation); PROC
 (Process); PRP (Properties); RACT (Reactant or reagent)

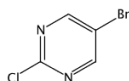
FIDE 表示形式

- IDERL 表示形式で表示される情報に加え、
 環データや物性値を含む「物質に関する
 すべての情報」が表示される

Ring System Data

環データ

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C4N2	INCNC3	6	C4N2	46.195.39	1



Experimental Properties (EPROP)

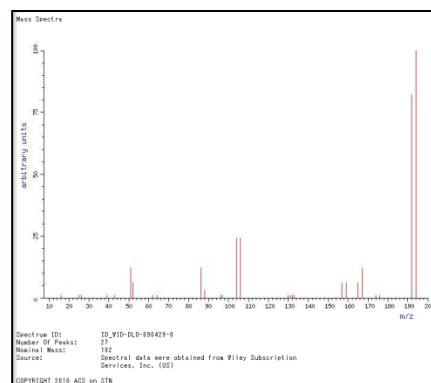
実測物性値

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Boiling Point (BP)	195 deg C	Press: 15 Torr	(1) CAS
Mass Spectra	Spectrum		(2) WSS
Melting Point (MP)	178-79 deg C		(3) CAS
Melting Point (MP)	178-79 deg C		(4) IC
Melting Point (MP)	178-78.6 deg C	Solv: hexane	(5) CAS
		(110-54-3)	
Proton NMR Spectra	Spectrum		(2) WSS

リンクをクリックするとスペクトルデータが表示される
 (リンクはオンライン中のみ有効)

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

- (1) Brown, D. J.; Australian Journal of Chemistry 1964 V17(7) P794-802
 CAPLUS
 (2) Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)



Experimental Property Tags (ETAG)

参考文献タグ

PROPERTY	NOTE
Carbon-13 NMR Spectra	(1) CAS
1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats	
IR Spectra	(2) CAS
Mass Spectra	(2) CAS
1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats	
Melting Point	(2) CAS
Proton NMR Spectra	(1) CAS
2 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	

- (1) Hug, Stephan; Chemistry of Materials 2015 V27(23) P8001-8010 CAPLUS
 (2) Sharma, Sanjay; Liquid Crystals 2003 V30(4) P451-461 CAPLUS

Predicted Properties (PPROP)

予想物性値

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 2 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 3 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 4 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 5 25 deg C	(1)

- (1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02
 ((C) 1994-2019 ACD/Labs)

See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.
 1003 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 1011 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

A 概要

=> D L1 94105 ALL

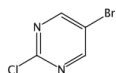
ALL 表示形式

- FIDE 表示形式の情報に加え、CA ファイルの最新 10 件の文献情報が表示される

```
L1 ANSWER 94105 OF 94229 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
RN 32779-36-5 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro- (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN 5-Bromo-2-chloropyrimidine
OTHER NAMES:
CN 2-Chloro-5-bromopyrimidine
MF C4 H2 Br Cl N2
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, REAXYSFILE*,
TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
(*File contains numerically searchable property data)
DT.CA CAplus document type: Journal: Patent: Preprint
RL.P Roles from patents: BIOL (Biological study): PREP (Preparation): PRPH
(Prophetic): RACT (Reactant or reagent): USES (Uses)
RL.NP Roles from non-patents: ANST (Analytical study): BIOL (Biological
study): FORM (Formation, nonpreparative): PREP (Preparation): PROC
(Process): PRP (Properties): RACT (Reactant or reagent)
```

Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C4N2	NCNC3	6	C4N2	46.195.39	1



Experimental Properties (EPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Boiling Point (BP)	195 deg C	Press: 15 Torr	(1) CAS
Mass Spectra	Spectrum		(2) WSS
Melting Point (MP)	178-79 deg C		(3) CAS
Melting Point (MP)	178-79 deg C		(4) IC
Melting Point (MP)	178-78.6 deg C	Solv: hexane	(5) CAS
		(110-54-3)	
Proton NMR Spectra	Spectrum		(2) WSS

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

- (1) Brown, D. J.: Australian Journal of Chemistry 1964 V17(7) P794-802 [CAPLUS](#)
- (2) Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)

Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
Carbon-13 NMR Spectra	(1) CAS
1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats	
IR Spectra	(2) CAS
Mass Spectra	(2) CAS
1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats	
Melting Point	(2) CAS
Proton NMR Spectra	(1) CAS
2 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	

- (1) Hug, Stephan: Chemistry of Materials 2015 V27(23) P8001-8010 [CAPLUS](#)
- (2) Sharma, Sanjay: Liquid Crystals 2003 V30(4) P451-461 [CAPLUS](#)

Predicted Properties (PPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 2 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 3 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 4 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 5 25 deg C	(1)

- (1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02 ((C) 1994-2015 ACD/Labs)

See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.
1003 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
1011 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

FIDE 表示形式と同じ内容

REFERENCE 1

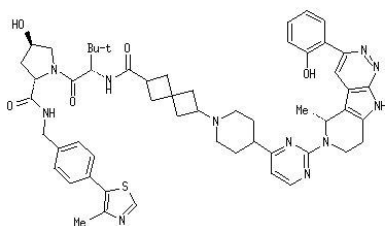
AN 175:342841 CA Full-text
 TI Preparation of bifunctional heterocyclic SMARCA degraders
 IN Zhang, Yi; Fleming, Paul R.; Zhu, Xiao
 PA Kymera Therapeutics, Inc., USA
 SO PCT Int. Appl., 373pp.
 CODEN: PIXXD2
 DT Patent
 LA English
 IPC1 A61P0035-00 [I]; C07D0401-04 [I]; C07D0401-14 [I]
 IPCR A61P0035-00 [I]; C07D0401-04 [I]; C07D0401-14 [I]
 CC 28-17 (Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom))
 Section cross-reference(s): 1, 10, 34, 63

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2021133920	A1	20210701	WO 2020-US66864	20201223
PRA1	US 2019-62952578	P	20191223		
	US 2020-63123176	P	20201209		

GI

SMARCA R—L—DIM I



II

AB The present invention provides compds. of formula I, compns. thereof, and methods of using the same as SMARCA and/or PB1 protein (PB1) degraders useful for treatment of cancer, neurodegenerative diseases, viral diseases, autoimmune disease, and other disorders. Compds. of formula I, [wherein SMARCA = protein binding moiety targeting SMARCA2, SMARCA4, and PB1; L = bivalent moiety that connects SMARCA to DIM; DIM = degrdn. inducing moiety selected from E3 ubiquitin ligase binding moiety (LBM), lysine mimetic, or H] or pharmaceutically acceptable salts thereof, are claimed and exemplified. Example compd. II was prepd. from a multistep procedure (prepn. given). Exemplified I were evaluated for SMARCA2 degrdn. in A549 cells with DC50 values upto >90% degrdn.

ST bifunctional heterocyclic prepn SMARCA degrader cancer autoimmune viral disease

IT Disease, animal
 (SMARCA2-, SMARCA4-, or PB1-mediated; prepn. of bifunctional heterocyclic SMARCA degraders)

IT Transcription factor BRG1
 RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)
 (SMARCA4; prepn. of bifunctional heterocyclic SMARCA degraders)

IT Signal transduction
 (Ubiquitin-proteasome; prepn. of bifunctional heterocyclic SMARCA degraders)

CA ファイル
 最新 10 文献の ALL 表示

REFERENCE 10

AN 175:120522 CA Full-text
 TI Preparation of heterocyclic compounds as delta-5 desaturase inhibitors and methods of use

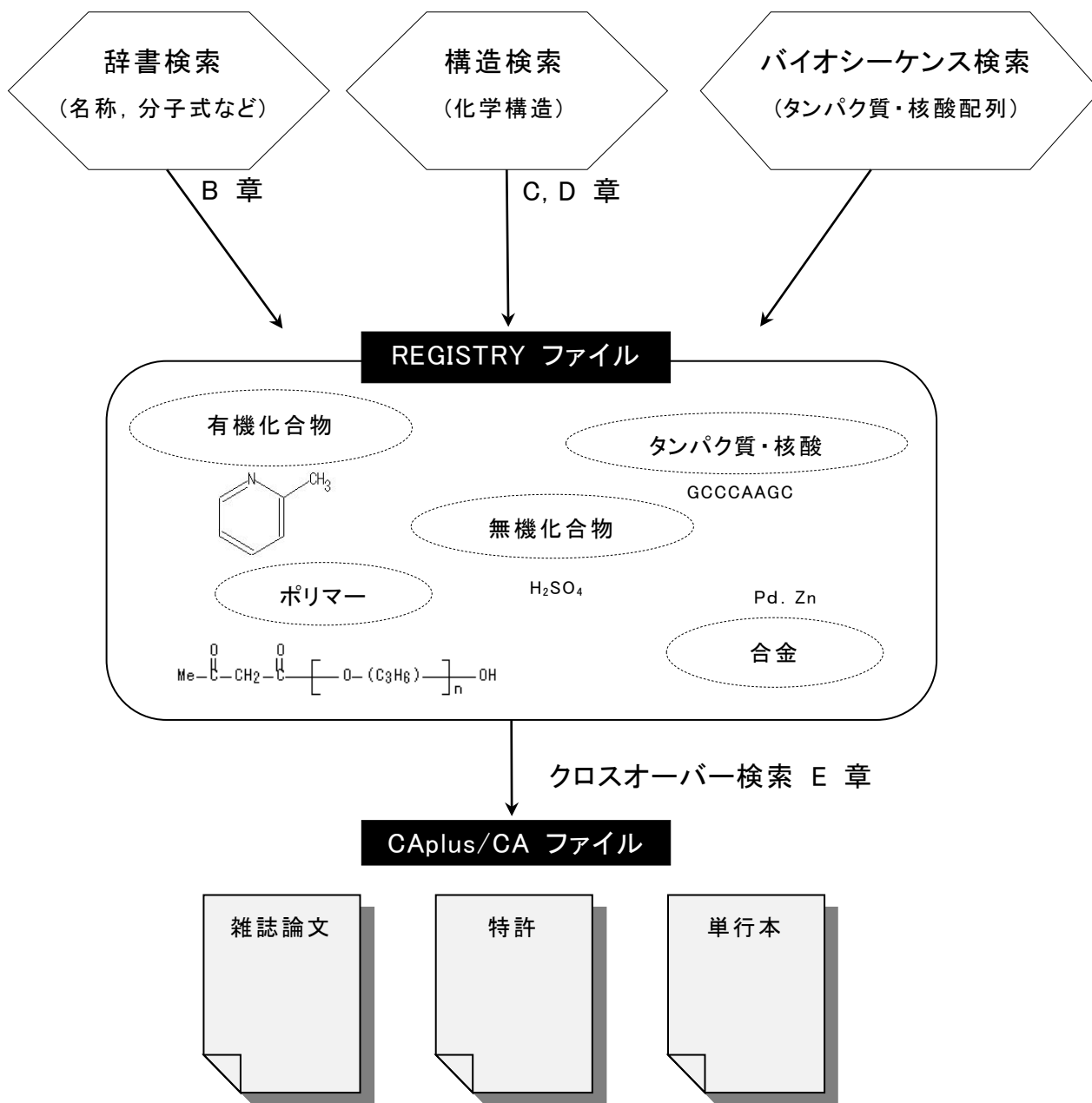
	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2021108404	A1	20210603	WO 2020-US62011	20201124
	US 20210171529	A1	20210610	US 2020-17103350	20201124
PRA1	US 2019-62939819	P	20191125		

AB The disclosure provides compds. of formula I and tautomers thereof, and pharmaceutically acceptable salts of said compd. or said tautomers, useful for the inhibition of delta-5 desaturase (D5D). This disclosure also provides pharmaceutical compns. comprising the compds., uses of the compds., and compns. for treatment of, for example, a metabolic or cardiovascular disorder. Further, the disclosure provides intermediates useful in the synthesis of compds. of formula I. Example compd. II was prepd. by cross-coupling of 3-bromo-8-methoxy-2-(trifluoromethyl)-4H-pyrido[1,2-a]pyrimidin-4-one with 4-(2-cyanoethyl)phenylboronic acid. The invention compds. were evaluated for their Δ 5-desaturase inhibitory activity (some data given).

ST heterocycle prepn delta desaturase inhibitor treatment metabolic cardiovascular

IT Antidiabetic agents

REGISTRY ファイルの検索機能



* バイオシーケンス検索については「核酸・タンパク質配列検索」講習会で説明.



まとめ

- REGISTRY ファイルは世界最大の化学物質データベースで, CAS RN[®] が付与された様々な物質が収録されている.
- 各レコードには, CAS RN[®], 名称, 分子式, 構造, 物性値などが収録されている.

B 辞書検索

この章では、主な辞書検索フィールドを用いた検索を説明します。

辞書検索フィールド

- 辞書検索とは、化学物質名や分子式など、「構造や配列以外の手法」で目的物質を検索する検索手法の総称である。

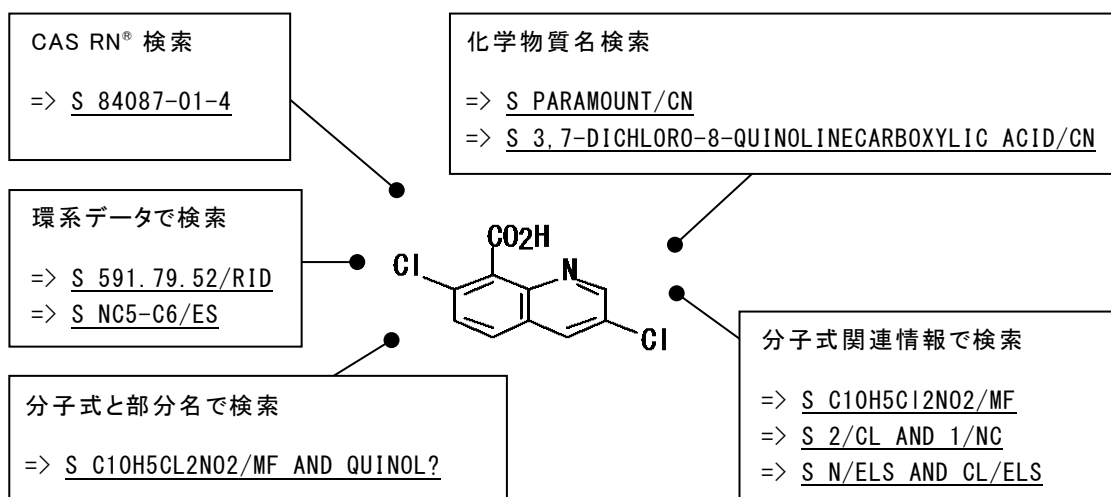
・ 辞書検索のポイント

ポイント 検索フィールドに注意。(基本索引と /MF /CN は検索結果が異なる)

ポイント 入力ミスを防ぐため、EXPAND で確認してから検索する。

ポイント 自分が思っていた通りの名称が入っていなかったり、新規登録されたばかりで名称が未収録の記録もあるため、必要に応じて分子式検索も併用する。

・ 主要な辞書検索フィールド



検索フィールド	内容	入力例
なし (または /BI)	CAS RN® (/RN)	=> <u>S 64-17-5</u>
	部分名 (名称セグメント)	=> <u>S L1 AND METHYL?</u>
	成分分子式	=> <u>S C6H6</u>
/CRN	成分 CAS RN®	=> <u>S 58-08-2/CRN</u>
/CN	完全名	=> <u>S VITAMIN A/CN</u>
/CNS	自然名称セグメント	=> <u>S ?DIOXIN?/CNS</u>
/MF	完全分子式	=> <u>S C2H4O2.NA/MF</u>
/ELS	特定元素の存在	=> <u>S L1 AND FE/ELS</u>
/元素記号	特定元素の存在数	=> <u>S 3-5/FE AND 3/NI</u>
/NC	成分数	=> <u>S C2H4O2 AND PMS/CI AND 4>NC</u>
/CI	クラス識別子コード	=> <u>S L1 AND PMS/CI</u>

CAS 登録番号 (CAS RN®)

■ CAS RN® は化学物質を特定するためのユニークな番号で, CAS が付与している。

- ・ REGISTRY ファイルでは様々な情報から物質を検索できるが, CAS RN® がわかっている場合は CAS RN® から検索を行うのがよい。

- 検索式の入力方法 (下記のいずれの方法でも, 検索結果は同じ)

=> S 84087-01-4 ← 基本索引 (検索フィールドなし)

=> S 84087-01-4/BI ← 基本索引 (/BI)

=> S 84087-01-4/RN ← /RN (CAS RN®)

- 目的の化学物質のレコード 1 件が回答として得られる。

■ 検索例 : 3,7-Dichloro-8-quinolinecarboxylic acid (CAS RN® : 84087-01-4) の検索

=> FILE REGISTRY ●

REGISTRY ファイルに入る

=> E 84087-01-4 ●

入力ミスを防ぐため, 検索前に EXPAND で確認する

E1 1 840869-99-0/RN
E2 1 84087-00-3/RN
E3 1 --> 84087-01-4/RN
E4 1 84087-02-5/RN
E5 1 84087-03-6/RN

=> S E3 ●

L1 1 84087-01-4/RN

=> S 84087-01-4 のように直接番号を検索することもできるが, 入力ミスを防ぐため, EXPAND コマンドで確認してから, E 番号を使用して検索の方がよい

=> D

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN

RN 84087-01-4 REGISTRY ●

ヒットタームは RN フィールド

ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN 8-Quinolinecarboxylic acid, 3,7-dichloro- (CA INDEX NAME)

OTHER CA INDEX NAMES:

CN 3,7-Dichloro-8-quinolinecarboxylic acid

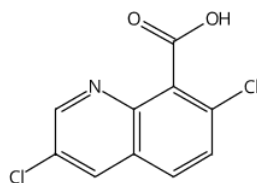
:

MF C10 H5 Cl2 N O2

CI COM

SR CA

LC STN Files: BIOSIS, CA, CABA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS,



成分 CAS 登録番号 (CAS RN®)

■ 成分 CAS RN® (CRN) は、多成分物質およびポリマーの各成分の CAS RN®.

- ・ ある物質 (84087-01-4) を含む多成分物質およびポリマーを検索したい場合の入力方法

=> S 84087-01-4/CRN ← /CRN (成分 CAS RN®)

■ 検索例 : 3,7-Dichloro-8-quinolinecarboxylic acid (CAS RN® : 84087-01-4) と,
84087-01-4 を含む多成分物質の両方をまとめて検索する.

=> FILE REGISTRY

=> S 84087-01-4

L1 1 84087-01-4

=> S 84087-01-4/CRN

L2 1064 84087-01-4/CRN

CAS RN® を /CRN フィールドで検索

- * 特定の化学物質を含む塩やポリマーを検索する時に有効
- * /CRN の検索結果 (L2) に L1 は含まれない

=> D 1063-1064

L2 ANSWER 1063 OF 1064 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN

RN 84087-48-9 REGISTRY

CM 1

CRN 84087-01-4

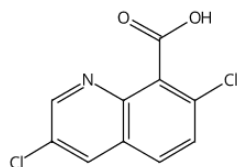
CMF C10 H5 Cl2 N O2

RN フィールド

- * 多成分物質の CAS RN® が収録されている

ヒットタームは CRN フィールド

- * 各成分の CAS RN® が収録されている



CM 2

CRN 124-40-3

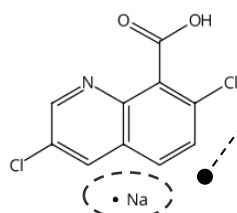
CMF C2 H7 N



L2 ANSWER 1064 OF 1064 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN

RN 84087-47-8 REGISTRY

CRN (84087-01-4)



注意 : ナトリウムの CAS RN® を /CRN で検索しても、
このレコードはヒットしない

CRN フィールドには多成分物質の個々の成分 CAS RN® が収録されるが、単原子フラグメント* の成分 CAS RN® は収録されない。

- * 単原子フラグメントとは、多成分物質を構成する成分のうち、単一の原子のみ、または水素と単一の原子から成る成分のこと。例) Na (単一の原子のみ), HCl (水素と単一の原子)

=> S L1 OR L2

L3 1065 L1 OR L2

L1 と L2 を OR 演算でまとめる

化学物質名

■ 化学物質名は CN (Chemical Name) フィールドに収録される.

- ・ REGISTRY ファイルに収録される化学物質名

CA INDEX NAME (IN)	OTHER CA INDEX NAMES	OTHER NAMES
CA 索引名 (CAS 命名法に基づく名称)	旧 CA 索引名	CA 索引名以外の名称 - 慣用名 (IUPAC 名も含む) - 商品名 - 医薬品の一般名, 治験薬番号 - カラーインデックス - 酵素委員会 (EC) 番号 など * CA 収録文献中などから収録される

■ 化学物質名の主な検索フィールド

検索フィールド	内容	入力例
/CN*	完全名	=> <u>S PARAMOUNT/CN</u> => <u>S 3,7-DICHLORO-8-QUINOLINECARBOXYLIC ACID/CN</u> => <u>S 8-QUINOLINECARBOXYLIC ACID?/CN</u>
基本索引* (/BI または なし)	部分名 (名称セグメント)	=> <u>S QUINOLIN?</u> => <u>S L1 AND CHLORO?</u>

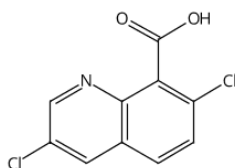
* 前方一致検索が可能. 後方一致, 中間一致検索は不可.

```

RN 84087-01-4 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 8-Quinolinecarboxylic acid, 3,7-dichloro- (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN 3,7-Dichloro-8-quinolinecarboxylic acid
OTHER NAMES:
CN Accord 75DF
CN BAS 514
CN BAS 514H
CN Drive
CN Facet
CN Facet LA
CN Paramount
CN Parmount 75WG
CN Quinclorac
DR 113875-40-4
MF C10 H5 Cl2 N O2
CI COM
LC STN Files: BIOSIS, CA, CABA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS,
:

```

いずれの名称から検索しても, このレコードはヒットする



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

① /CN フィールド - 完全名（記号類やスペースも含め、収録されている通りの名称）の検索

・ 検索式の入力

=> S PARAMOUNT/CN=> S 3,7-DICHLORO-8-QUINOLINECARBOXYLIC ACID/CN=> S 8-QUINOLINECARBOXYLIC ACID?/CN

* 前方一致検索が可能。後方一致，中間一致検索は不可

・ 完全名を対象にした検索フィールド

- 慣用名や商品名など，入力が簡単な名称検索に有効

RN 84087-01-4 REGISTRY

CN 8-Quinolinecarboxylic acid, 3,7-dichloro-

OTHER CA INDEX NAMES:

CN 3,7-Dichloro-8-quinolinecarboxylic acid

OTHER NAMES:

CN Accord 75DF

CN BAS 514

CN BAS 514H

CN Drive

CN Facet

CN Facet LA

CN Paramount

CN Parmount 75WG

CN Quinclorac

DR 113875-40-4

MF C10 H5 C12 N O2

(CA INDEX NAME) の部分は
/CN の検索対象に含まれない

(CA INDEX NAME)

← CA 索引名

← 旧 CA 索引名

← CA 索引名以外

/CN フィールドで検索可能な完全名



検索のポイント・注意点

・ 検索をする前に EXPAND で確認する。

- 検索しようとする名称が REGISTRY ファイルに収録されているとは限らない。
- カンマ，ハイフンなどの記号類やスペースも含め，CN フィールドに収録されている名称とまったく同じ入力をしなければ回答が得られない。

・ 角括弧 [] は丸括弧 () に変更する。

・ 名称中に特別な記号を含む場合は，二重引用符 " " で囲む。

- 例 : 2'-Chloro carboxine => S "2'-CHLORO CARBOXINE"/CN
=> S "2'-CHLORO" CARBOXINE/CN

・ ギリシャ文字はアルファベットに書き下し，前後にピリオドを付ける。

- 例 : β-Alanine => S .BETA.-ALANINE/CN

② 基本索引 (/BI または なし) - 部分名 (単語) の検索

- ・ 検索式の入力

=> S DICHLORO AND QUINOLINE=> S QUINOLIN? AND CHLORO=> S L1 AND 3,7 AND CHLORO

* 前方一致検索が可能. 後方一致, 中間一致検索は不可

- ・ 完全名を自然な位置 (スペース, ハイフン, 句読点など) で切断した部分名や, "TRI", "CYCLO" など「化学的に意味を持つ」用語が対象の検索フィールド
- 完全名の入力が難しい場合でも, 部分名称からヒットできる.

```

RN 84087-01-4 REGISTRY
CN 8-Quinolinedicarboxylic acid, 3,7-dichloro- (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN 3,7-Dichloro-8-quinolinedicarboxylic acid
OTHER NAMES:
CN Accord 75DF
CN BAS 514
CN BAS 514H
CN Drive
CN Facet
CN Facet LA
CN Paramount
CN Parmount 75WG
CN Quinclorac
DR 113875-40-4
MF C10 H5 C12 N O2

```

基本索引で検索可能な部分名

上図では最小単位まで分割した状態を四角枠で表しているが、最小単位を再結合したものを検索してもヒットできる

例) => S QUINOLINE
=> S QUINOLINECARBOXYLIC
=> S CARBOXYLIC ACID



検索のポイント・注意点

- ・ 完全名が不明であっても, 部分名からある程度柔軟に検索することができる. 前方一致検索も可能.
- ・ 多数の回答が得られ, 目的物質に絞り込むのが難しい場合は, 分子式 (/MF) などのフィールドを用いて限定するとよい.
- ・ 特徴的な部分名を利用して検索すると効率的である.

■ 検索例 : 8-Bromo-2,4-quinolinedicarboxylic acid の検索

① 完全名から検索する場合 : /CN を利用



検索前に必ず EXPAND で確認する
検索しようとする名称が REGISTRY ファイルに収録されているとは限らない

=> FILE REGISTRY

```

=> E 8-BROMO-2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID/CN
E1      1      8-BROMO-2,4-DIMETHOXYQUINOLINE/
E2      1      8-BROMO-2,4-DIMETHYLQUINOLINE/
E3      1 --> 8-BROMO-2,4-QUINOLINEDICARBOXYL
E4      1      8-BROMO-2,4-QUINOLINEDIOL/CN
E5      1      8-BROMO-2,5-DIMETHYLINDOLO(3,2-B)PYRIDINE/CN

```

完全名を /CN で EXPAND
* カンマやスペースも収録されている通りに
入力しないと回答が得られない

=> S E3

L1 1 "8-BROMO-2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID /CN

E 番号を用いて検索すると入力ミスをしな

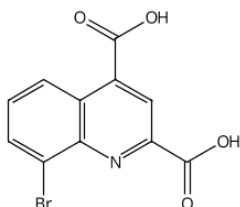
=> D

```

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
RN 216060-06-9 REGISTRY
ED Entered STN: 24 Dec 1998
CN 2,4-Quinolinedicarboxylic acid, 8-bromo- (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN 8-Bromo-2,4-quinolinedicarboxylic acid
MF C11 H6 Br N O4
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL

```

完全名でヒット



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

参考 : 検索フィールドを省略したとき

```

=> E 8-BROMO-2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID
E1      1      8-55-1,2,3,4,3',2'/BI
E2      1      8-73-1/BI
E3      0 --> 8-BROMO-2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID/BI
E4      1      8-D-ARGININE/BI
E5      207    8.0/BI
:

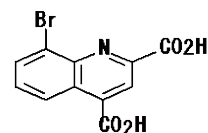
```

EXPAND の際にフィールドを指定しないと
デフォルトの基本索引になる

② 部分名から検索する場合：基本索引 (/BI) を利用



なるべく長い部分名、特徴的な部分名を利用して検索すると効率的である



=> FILE REGISTRY

=> E QUINOLINE

E1 3 QUINOLINDOL/BI
E2 3 QUINOLINDOLE/BI
E3 1806031 --> QUINOLINE/BI
E4 10 QUINOLINE1/BI
E5 1 QUINOLINE4/BI

検索可能な部分名を確認する

=> S QUINOLIN? AND DICARBOXY? AND BROMO?

L1 842 QUINOLIN? AND DICARBOXY? AND BROMO?

化学物質名で検索する場合は、語尾変化を考慮して前方一致検索を利用するとよい

=> D SCAN IN

L1 842 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on ST
IN 1H-Pyrrolo[3,2-c]quinoline-1,4-dicarboxylic acid
8-bromo-2,3,3a,4,5,9b-hexahydro-, 4-methyl 1-(ph
(3aR,4S,9bR)-

SCAN 表示形式の表示内容のうち、CA 索引名 (IN) のみを表示する

【SCAN 表示形式の表示内容】
CA 索引名、分子式、クラス識別子、構造
* CA 索引名以外の名称は含まれない

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

L1 842 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN 2,3-Quinolinedicarboxylic acid, 6-bromo-8-methyl-

L1 842 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN 3,6-Quinolinedicarboxylic acid,
4-(2-bromophenyl)-1,4,5,6,7,8-hexahydro-2,7-dimethyl-5-oxo-,
3-(2-methoxyethyl) 6-methyl ester

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

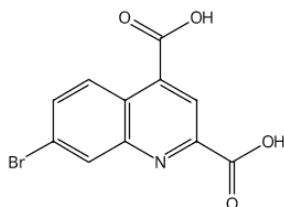
=> S L1 AND 2,4

L2 63 L1 AND 2,4

置換位置を表す数字も検索することができる

=> D SCAN

L2 63 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN 2,4-Quinolinedicarboxylic acid, 7-bromo-
MF C11 H6 Br N O4

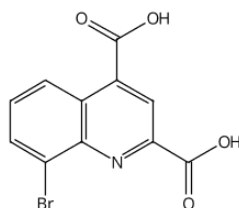


PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):62

残りの回答も表示する

L2 63 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 IN 2,4-Quinolinedicarboxylic acid, 8-bromo-
 MF C11 H6 Br N O4



● 目的の物質

IN フィールドの名称を /CN で EXPAND

- * コピー&ペーストを利用し、下記の点に注意する
- ・ [] は () に直す
 - ・ 記号は " " で囲む
 - ・ 長い名称の場合、改行に伴うスペースは詰める

=> E 2,4-Quinolinedicarboxylic acid, 8-bromo-/CN
 E1 1 2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID, 8-ACETYL-1,2-DIHYDRO-2-METHY
 L-, 2,4-DIMETHYL ESTER/CN
 E2 1 2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID, 8-BENZOYL-1,2-DIHYDRO-2-METH
 YL-, 2,4-DIMETHYL ESTER/CN
 E3 1 --> 2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID, 8-BROMO-/CN
 E4 1 2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID, 8-BROMO-, 2,4-DIMETHYL ESTER/CN
 E5 1 2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID, 8-BROMO-, DIMETHYL ESTER/CN

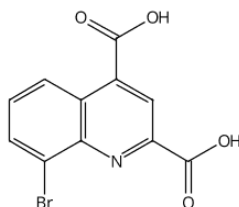
=> S E3

L3 1 "2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID, 8-BROMO-"/CN

● 目的物質のレコード 1 件の回答集合が得られた。

=> D IDE 表示形式 (デフォルト) で表示し、CAS RN® などの詳細情報を確認する

L3 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 RN 216060-06-9 REGISTRY
 ED Entered STN: 24 Dec 1998
 CN 2,4-Quinolinedicarboxylic acid, 8-bromo- (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN 8-Bromo-2,4-quinolinedicarboxylic acid
 MF C11 H6 Br N O4
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, TOXCENTER, USPATFULL



一般に、部分名称検索だけで目的物質に絞り込むのは困難な場合が多いため、部分名検索と分子式検索 (後述) を組み合わせた検索も検討する。

参考 : EXPAND で演算子は使用できない

=> E DICHLORO AND QUINOLINE
 E1 10 DICHLORMID/BI
 E2 2758533 DICHLORO/BI
 E3 0 --> DICHLORO AND QUINOLINE/BI ← 0 件となり、回答は得られない
 E4 1 DICHLORO2/BI

参考 : 括弧を含む名称を直接検索する場合

例 : Ethane, [(azidomethyl)thio]- の検索

=> S "Ethane, ((azidomethyl)thio)-"/CN ← ① 角括弧 [] は 丸括弧 () に直す
 L1 1 "ETHANE, ((AZIDOMETHYL)THIO)-"/CN ← ② 括弧を含む名称の場合は、全体を二重引用符で囲む

分子式

■ 分子式は MF フィールドに収録される。

- ・ 分子式の記述は Hill 方式に従う。
 - 炭素を含む物質 : 炭素, 水素, その他の元素 (アルファベット順) (例: C4H3N11O6)
 - 炭素を含まない物質 : すべての元素をアルファベット順に表記 (例: O2Ti)
 - 元素の存在数は元素記号の後ろにスペースを空けずに入力 (存在数 1 の場合は省略)

■ 分子式検索フィールド

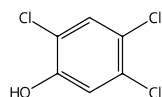
検索フィールド	内容	入力例
/MF	完全分子式 (物質全体の分子式) * レコード中の MF フィールドに収録されている分子式とまったく同じ入力をする必要がある	=> <u>S C5H12/MF</u> => <u>S C4H11N02.C3F6/MF</u> => <u>S "(C8H8)X"/MF</u>
基本索引 /BI または なし	下記の両方が検索対象 - 単成分物質の完全分子式 (/MF) - 多成分物質の各成分の成分分子式	=> <u>S C4H11N02</u> => <u>S C3F6</u>

■ 分子式検索のポイント

- ・ 物質全体の分子式が明確な場合は, /MF フィールドを利用する。
- ・ 基本索引 (/BI) で検索すると, 入力した分子式と完全に一致する物質と, 入力した分子式を成分に含む多成分物質もしくはホモポリマーが回答として得られる。
- ・ 括弧を含む分子式を直接検索する際は必ず二重引用符 "" で全体を囲む。(ポリマーなど)
 - EXPAND の際は, 二重引用符は不要。

■ 単成分物質の分子式

RN 95-95-4 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Phenol, 2,4,5-trichloro- (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN 2,4,5-Trichlorophenol
 MF C6 H3 Cl3 O
 CI COM



分子式は MF フィールドに収録されている
このレコードは, 下記のいずれの検索でも得られる

=> S C6H3CL3O/MF
 => S C6H3CL3O

単成分物質の分子式の例

無機化合物 : CI H O4
 ホモポリマー : (C8 H8)x
 SRU ポリマー : (C16 H14 O)n

■ 多成分物質の分子式

- ・ 各成分の分子式がピリオド (.) で区切られている.
- ・ 各成分の記述優先順序は、以下のように定義されている.
 - 有機物質の場合
 - ① 有機成分と無機成分が存在する場合は、有機成分を優先する.
 - ② 炭素数の多い成分を優先する.
 - ③ 炭素数が同じ場合は、水素数の多い成分を優先する.
 - ④ 炭素および水素数が同じならば、他の元素のアルファベット順で決定する.
 - 無機物質の場合
 - ① 元素のアルファベット順
 - ② ①で決まらなければ、原子数が多い方を優先する.
- ・ 各成分の存在比（係数）は、先頭の成分を 1 として表記される.（例：C₂H₄O₂. 1/2Ca）
- ・ レコード例

RN 5153-63-9 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Acetic acid, compd. with pyridine (1:1) (CA INDEX NAME)

MF C5 H5 N . C2 H4 O2

CM 1

CRN 110-86-1
 CMF C5 H5 N



CM 2

CRN 64-19-7
 CMF C2 H4 O2



**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE

各成分の分子式がピリオドで区切られている
 このレコードは、下記のいずれの検索でも得られる

=> S C5H5N.C2H4O2/MF
 => S C5H5N
 => S C2H4O2

多成分物質の分子式の例


付加化合物	: C12 H4 N4 . C6 H6
混合物	: C9 H8 O4 . C8 H10 N4 O2 . C8 H9 N O2
酸の金属塩	: C2 H4 O2 . Na
アミン類の塩	: C8 H20 N . Cl
コポリマー	: (C8 H8 . C2 H4) _x
合金	: Al . Cu . Mg . Ti

参考：ポリマーの分子式

原料モノマー単位で登録されているポリマーの場合、『(モノマーの分子式)_x』という形式で登録されている。
 SRU (Structural Repeating Unit) ポリマーの場合、『(繰り返し部分の分子式)_n』という形式で登録されている。
 (ポリマーの検索方法については、「ポリマー検索」講習会で説明)

■ 検索例 : 2,4,5-Trichlorophenol (分子式 C₆H₂Cl₃OH) の検索

- 物質全体の分子式から検索する場合 : 完全分子式 (/MF) を利用

 検索を行う前に EXPAND で確認する。
 その際、分子式は Hill 方式に直して入力する (C₆H₂Cl₃OH → C6H3CL3O)

=> FILE REGISTRY

=> E C6H3CL3O/MF

```
E1      1      C6H3CL3N05P/MF
E2      1      C6H3CL3N06P/MF
E3     35 --> C6H3CL3O/MF
E4      1      C6H3CL3O.(C3H6O.C2H
```

/MF フィールドで EXPAND する
 - O (酸素) と 0 (ゼロ) を間違えないように入力する
 - ピリオド付きの分子式は多成分物質

=> S E3

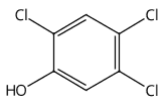
L1 35 C6H3CL3O/MF

E 番号を用いて検索する

=> D SCAN

* 同じ分子式を持つ物質が多数存在する場合は、
部分名などを用いて更に限定する

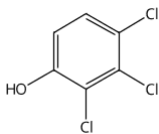
```
L1 35 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN Phenol, 2,4,5-trichloro-, labeled with chlorine-36 (9Cl)
MF C6 H3 Cl3 O
```



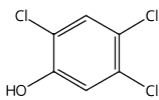
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 34

追加で表示したい件数を入力

```
L1 35 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN Phenol, 2,3,4-trichloro-, labeled with carbon-14 (9Cl)
MF C6 H3 Cl3 O
```



```
L1 35 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN Phenol, 2,4,5-trichloro-
MF C6 H3 Cl3 O
CI COM
```



目的の物質

目的物質レコード中の IN フィールドの名称を
コピー&ペーストし、/CN で EXPAND

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORM T
 ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> E Phenol, 2,4,5-trichloro-/CN

```
E1      1      PHENOL, 2,4,5-TRIBROMO-6-NITRO-3-((3,7,11-TRIMETHYL-2,6,10-
ODECATRIEN-1-YL) OXY)-/CN
E2      1      PHENOL, 2,4,5-TRIBROMO-6-NITRO-3-(2-PROPEN-1-YLOXY)-/CN
E3      1 --> PHENOL, 2,4,5-TRICHLORO-/CN
E4      1      PHENOL, 2,4,5-TRICHLORO-, (2,3,6-TRICHLOROPHENYL) ACETATE/CN
```

=> S E3

L2 1 "PHENOL, 2,4,5-TRICHLORO-"/CN

目的物質のレコード 1 件の回答集合が得られた

■ 検索例：硫酸カリウム（分子式 K_2SO_4 ）の検索

- 物質全体の分子式から検索する場合：完全分子式（/MF）を利用



① ヘテロ原子（O, S, Se, Te, N, P, As）に結合した水素が金属に置換されて生成した塩は、遊離の酸と金属元素との多成分物質として登録される。

（硫酸カリウム $K_2SO_4 \rightarrow$ 硫酸とカリウムとの多成分物質 $H_2SO_4.2K$ ）

② Hill 方式に従って並び替える（ $H_2O_4S.2K$ ）

=> FILE REGISTRY

=> E K2S04/MF

E1	1	K2SN5/MF	
E2	1	K2SNTE3/MF	
E3	0	--> K2S04/MF ●	=> S K2S04/MF では回答が得られない
E4	1	K2TE/MF	

:

=> E H204S.2K/MF ●

金属塩の収録方針に沿った分子式で再度 EXPAND

E1	1	H204S.2HG/MF
E2	1	H204S.2IN/MF
E3	5	--> H204S.2K/MF
E4	1	H204S.2K.UNSPECIFIED/MF

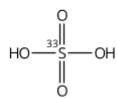
:

=> S E3

L1 5 H204S.2K/MF

=> D 1-5 SAM

L1 ANSWER 1 OF 5 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN Sulfuric-33S acid, potassium salt (1:2)
MF H2 04 S . 2 K

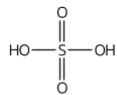


• 2 K

● ----- 同位体標識化合物

:

L1 ANSWER 4 OF 5 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN Arcanite ($K_2(SO_4)$) (9CI)
MF **H2 04 S . 2 K**
CI MNS

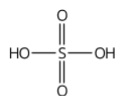


• 2 K

● ----- 鉱物

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

L1 ANSWER 5 OF 5 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN Sulfuric acid potassium salt (1:2)
MF **H2 04 S . 2 K**
CI COM



• 2 K

● ----- 目的の物質

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

■ その他の分子式関連検索フィールド

検索フィールド	内容	登録単位	入力例	備考
/ELS	元素種 各成分の特定元素, 一般元素 (X, M)	成分	=> <u>S N/ELS</u> => <u>S X/ELS</u>	①
/元素記号	特定元素数 各成分の特定元素, 一般元素の数	成分	=> <u>S 1/N</u> => <u>S 1-2/N</u>	①, ②
/NC	成分数 物質全体の成分数 (分子式中のピリオドの数+1)	物質	=> <u>S 2/NC</u> => <u>S 4>=NC</u>	②
/ELF	元素式 各成分の構成元素 (分子式から数を除いたデータ)	成分	=> <u>S C H O/ELF</u> => <u>S C F/ELF</u>	-
/ELC	元素数 各成分の異なる元素の種類数	成分	=> <u>S 4/ELC</u> => <u>S 2/ELC</u>	②
/ELC.SUB	物質に対する元素数 物質全体の異なる元素の種類数	物質	=> <u>S 5/ELC.SUB</u>	②



各「成分」単位のデータと「物質全体」単位のデータがあるので、その違いに留意し、カウント方法を間違えないようにする。

① /ELS, /元素記号では、一般元素 (X, M) が利用できる。

X : ハロゲン (F Cl Br I At)

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

入力例 : => S X/ELS
=> S M/ELS
=> S 1-3/X
=> S 2/M

* 同位体標識化合物の検索方法については APPENDIX 参照

② 数値検索フィールド

/元素記号, /NC, /ELC, /ELC.SUB は数値検索フィールドである。

入力例 : => S 1<=N
=> S 1-3/NC
=> S 4<=ELC<=6

炭素, 水素, 酸素, 窒素はゼロも検索できる (=> S 0/C)

* ただし, 合金などを除く。

- 検索例 : 1 成分はピクリン酸 (CAS RN® : 88-89-1) で, もう 1 成分に金属を含む
2 成分物質を検索する. 回答が多い場合は, 金属をナトリウムに限定する.



特定元素や一般元素の存在を指定したい場合は /ELS を利用する.
物質全体の成分数を限定する場合は /NC を利用する.

=> FILE REGISTRY

=> S 88-89-1/CRN
L1 57068 88-89-1/CRN

ピクリン酸を 1 成分として含む多成分物質を検索するときは /CRN を指定する

=> S L1 AND M/ELS AND 2/NC
L2 208 L1 AND M/ELS AND 2/NC

金属を含む物質に限定, 2 成分物質に限定

=> S L2 AND NA/ELS
L3 12 L2 AND NA/ELS

件数が多いので, ナトリウムを含む物質に限定

=> D SAM 1-12

L3 ANSWER 1 OF 12 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN Sodium hydroxide (Na(OH)), compd. with 2,4,6-trinitrophenol (1:1) (9CI)
MF C6 H3 N3 O7 . H Na O

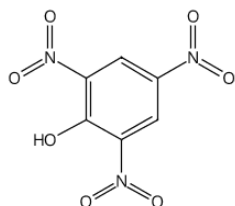
2 成分物質

CM 1

Na—OH

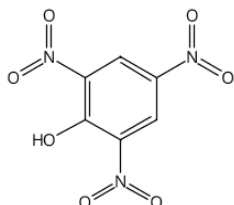
ナトリウムが含まれている

CM 2



ピクリン酸

L3 ANSWER 12 OF 12 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN Phenol, 2,4,6-trinitro-, sodium salt (1:1)
MF C6 H3 N3 O7 . Na
CI COM



• Na

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

クラス識別子

■ クラス識別子は、物質の広いクラス（分類）を示すコードである。

・ クラス識別子の種類

クラス識別子	定義
AYS	合金
CCS	配位化合物
COM	多成分物質成分
CTS	概念語登録
GRS	一般式登録
IDS	定義の不完全な物質
MAN	手作業登録
MNS	鉱物
MXS	混合物
PMS	ポリマー
RIS	ラジカルイオン
RPS	環母核
TIS	表形式無機化合物
UVCB	組成不明, 組成不定, 複雑な反応生成物, 生体物質

■ クラス識別子検索フィールド

検索フィールド	内容	入力例
/CI	クラス識別子	=> <u>S L1 AND CCS/CI,CCI</u>
/CCI	成分クラス識別子 (多成分物質の成分のクラス識別子が対象)	

■ レコード例

RN 9004-67-5 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Cellulose, methyl ether (CA INDEX NAME)

MF C H4 O . x Unspecified

CI COM

PCI Manual registration, Polyether, Polyether only

CM 1

CRN 9004-34-6

CMF Unspecified

CCI PMS, MAN

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

CM 2

CRN 67-56-1

CMF C H4 O

—OH

:

クラス識別子 (/CI)

成分クラス識別子 (/CCI)

クラス識別子を用いる際、網羅的に検索するには
/CI と /CCI を併用するとよい

■ 検索例 : ϵ -カプロラクタム (105-60-2) をモノマーとしたポリマーを検索する.

=> FILE REGISTRY

=> S 105-60-2/CRN AND PMS/CI, CCI

L1 5821 105-60-2/CRN AND PMS/CI, CCI

PMS/CI,CCI を用いるとポリマーに限定できる

=> D SCAN

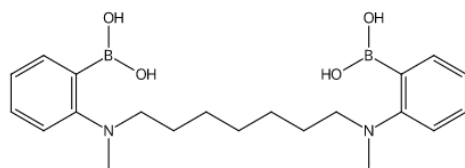
L1 5821 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN

IN Boronic acid, B,B'-[1,7-heptanediylbis[(methylimino)-2,1-phenylene]]bis-,
polymer with hexahydro-2H-azepin-2-one (CA INDEX NAME)

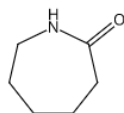
MF (C21 H32 B2 N2 O4 . C6 H11 N O)x

CI **PMS**

CM 1



CM 2



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

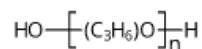
L1 5821 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN

IN 2H-Azepin-2-one, hexahydro-, polymer with 2,2-dimethyl-1,3-propanediol and
 α -hydro- ω -hydroxypoly[oxy(methyl-1,2-ethanediyl)], block (CA
INDEX NAME)

MF (C6 H11 N O . C5 H12 O2 . (C3 H6 O)n H2 O)x

CI **PMS**

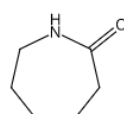
CM 1



CM 2



CM 3



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



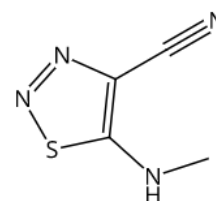
まとめ

- ・ 辞書検索は、化学物質名称や分子式などから目的物質を検索する手法である。
 - 検索の際は検索フィールドに注意する。
 - 入力ミスを防ぐため EXPAND で確認するとよい。
 - 分子式は Hill 方式に従って入力する。
 - 多成分物質の分子式は各成分の分子式がピリオド (.) で区切られている。



練習問題

- 1 : 右図の物質を分子式や部分名を使って検索する。
回答は FIDE 表示形式で表示する。



- [ヒント] ・ 分子式は Hill 方式に従って入力し /MF で検索する。
・ 分子式の検索結果の回答が多い場合は部分名で限定する。
 - 化学物質の部分名は基本索引で検索する。
 - 部分名の例 : THIADIAZOLE, METHYLAMIN, CARBONITRILE, NITRILE, AMIN 等

回答は p. 80

- 2 : メタクリル酸エチル (CAS RN[®] 97-63-2) を含む 2 種類のモノマーからなるポリマーを検索する。

- [ヒント] ・ メタクリル酸エチルの CAS RN[®] を /CRN で検索する。
 - ・ クラス識別子 (/CI), 成分クラス識別子 (/CCI) を利用してポリマーに限定する。
 - ・ 成分数 (/NC) で限定する。

回答は p.83

C 構造検索 (基礎編)

この章では STN の構造検索可能なすべてのファイルで応用できる基本的な作図と検索の流れを紹介します。

構造検索

■ 構造検索とは、検索語の一つとして構造質問式 (L#) を使った検索である。

- ・ 構造検索可能な物質は、水素以外の構成元素の原子数が 252 以下で構造が確定している物質。
- ・ 構造検索コマンド (L# は構造質問式の L 番号)

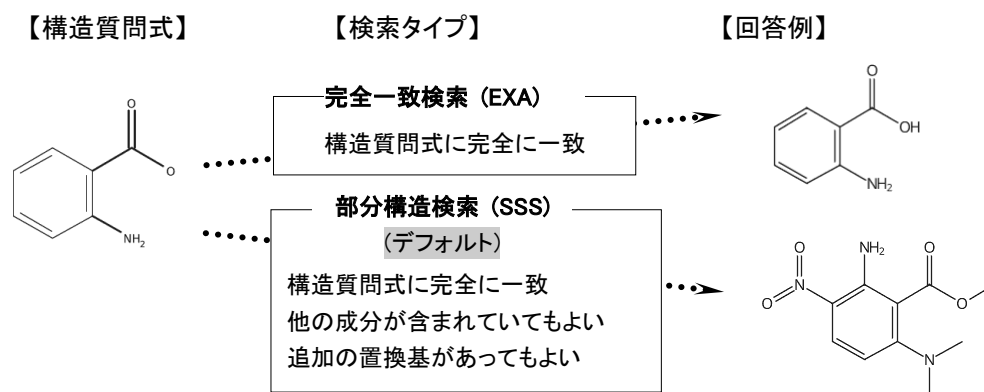
=> **S L# 検索タイプ 検索範囲**

* デフォルト

- 検索タイプ : 部分構造検索 (SSS)
- 検索範囲 : サンプル検索 (SAM)

- 構造検索の検索タイプ

構造検索を実行する際に検索タイプを指定することで、「作図した構造と完全に一致する」「作図した部分構造を含む化学物質」などの条件を指定することができる。



検索タイプ		内容	入力例
EXA	完全一致検索	構造質問式に完全に一致する物質を検索	=> <u>S L1 EXA</u> => <u>S L1 EXA FUL</u>
FAM	ファミリー検索	(EXA の回答に加えて) 他の成分が含まれていてもよい	=> <u>S L1 FAM</u> => <u>S L1 FAM FUL</u>
CSS	閉構造部分構造検索	(FAM の回答に加えて) 可変構造質問式を使用できる 特定の位置に置換基を含めることができる	=> <u>S L1 CSS</u> => <u>S L1 CSS FUL</u>
SSS	部分構造検索 (デフォルト)	(CSS の回答に加えて) 追加の置換基が存在してもよい	=> <u>S L1</u> => <u>S L1 FUL</u>

- 構造検索の検索範囲

検索範囲		内容	入力例
SAM	サンプル検索 (デフォルト)	ファイルの一部 (5%)*1 をテスト的に検索	=> <u>S L1</u> => <u>S L1 EXA</u>
FUL	フルファイル検索	ファイルのすべて (100%) を検索	=> <u>S L1 FUL</u> => <u>S L1 EXA FUL</u>

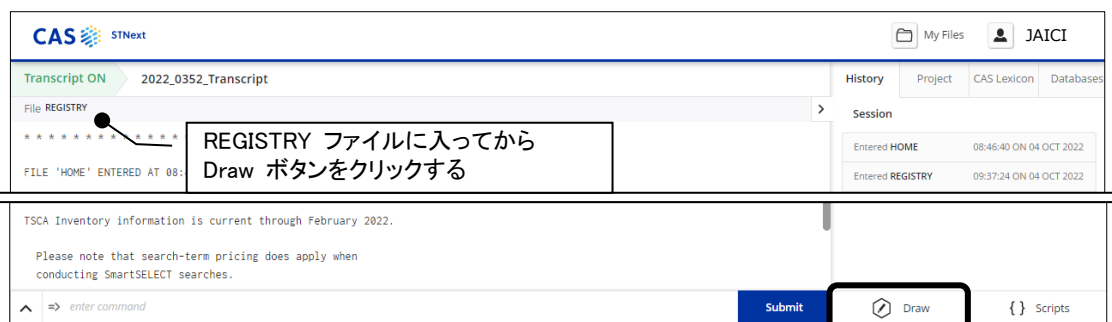
*1 ファイルによりサンプル検索の範囲 (%) は異なる。

構造作図画面

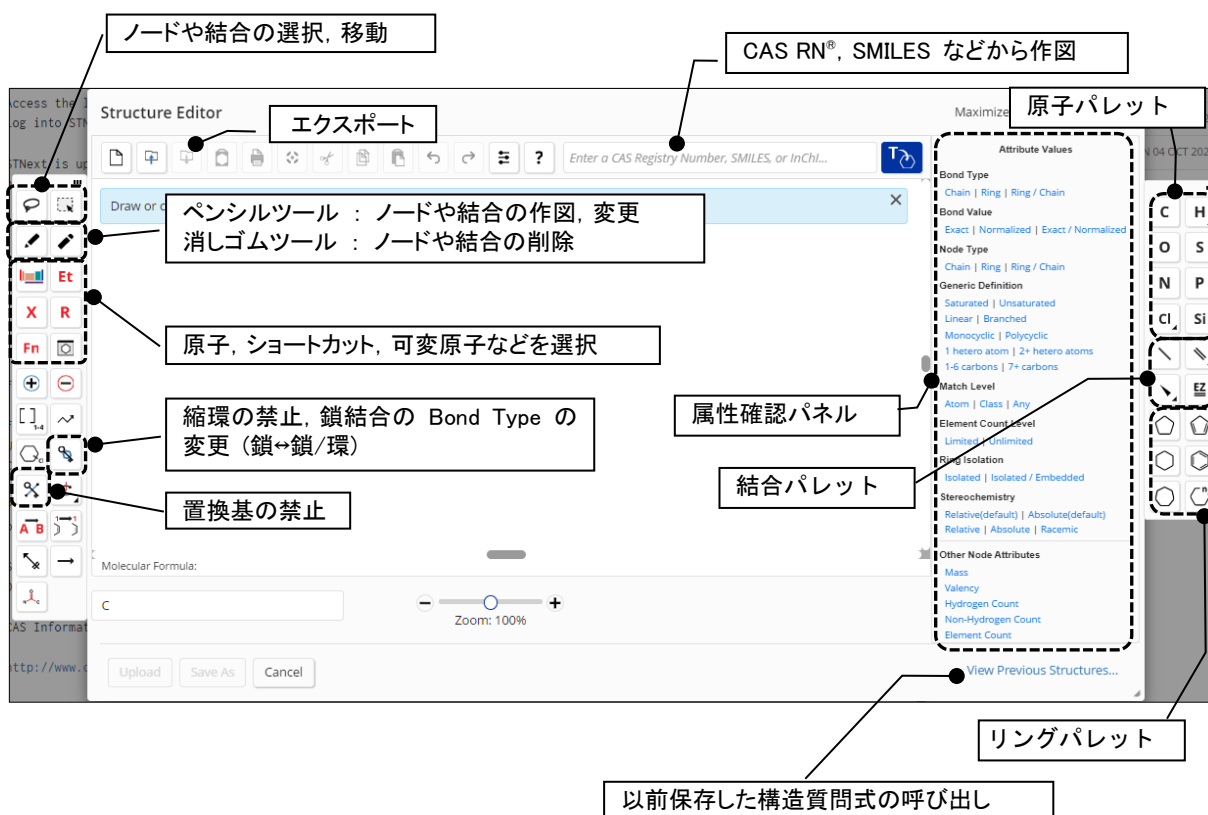
■ STNext での作図

・ 構造作図画面の起動

- STN へ接続し、構造検索を行うファイルに入ってから、画面右下のボタンをクリックする。

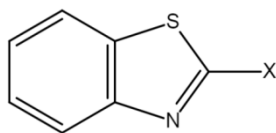


・ 構造作図画面



検索例

- 下図のような部分構造を含む物質をすべて検索する




〔条件 1〕 X の部分はハロゲンであれば何でもよい

〔条件 2〕 置換基が付いたり, さらに追加の環が縮合してもよい



デフォルトの構造検索タイプである部分構造検索 (SSS) を実行する場合は、何が結合してもよい部分に特別な指定をする必要はない。







The screenshot shows the Structure Editor interface with the target benzothiazole structure in the center. The search criteria are entered in the input field: X. The zoom level is set to 160%. On the right, the Attribute Values panel is visible, showing various search options like Bond Type, Bond Value, Node Type, etc.

デフォルトの元素は炭素 (C) なので特に元素記号が表示されていない。炭素の表示を変えて確認したい場合は  をクリックして設定を変更する。

STEP 1 構造作図

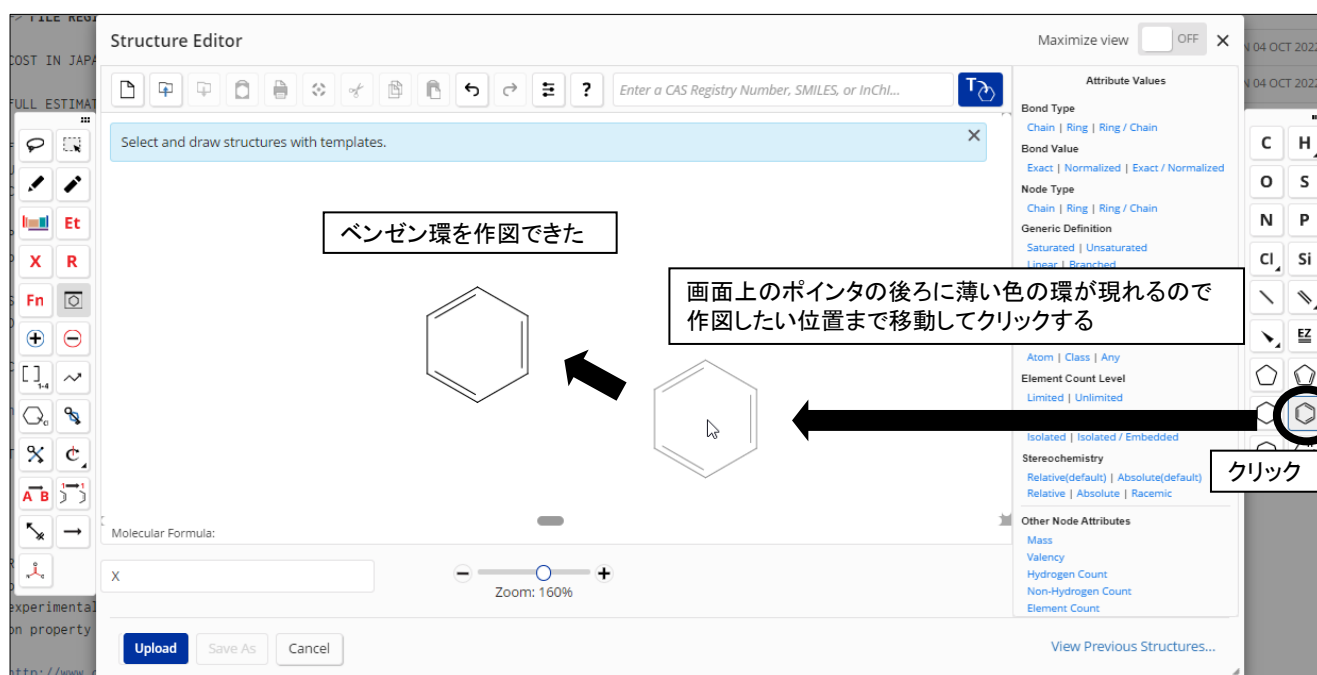
- 構造作図画面を起動した直後の状態では、炭素、単結合がデフォルトになっている。

ここでは、デフォルトの状態の基本骨格を作図した後に、元素や結合を変更する順序で作図する方法を紹介する。

- | | | | |
|----------------|---|---|---------------------|
| ① 環を描く | - |  | リングパレット |
| ② 鎖を描く | - |   | ペンシルツール または チェーンツール |
| ③ 元素を指定する | - |  | ペンシルツール |
| ④ 結合を指定する | - |  | ペンシルツール |
| ⑤ 保存, アップロードする | - |  | Upload ボタン |

① 環を描く

- ・ リングパレットから作図したい環のショートカットをクリックする。



Structure Editor

Select and draw structures with templates.

ベンゼン環を作図できた

画面上のポインタの後ろに薄い色の環が現れるので作図したい位置まで移動してクリックする

クリック

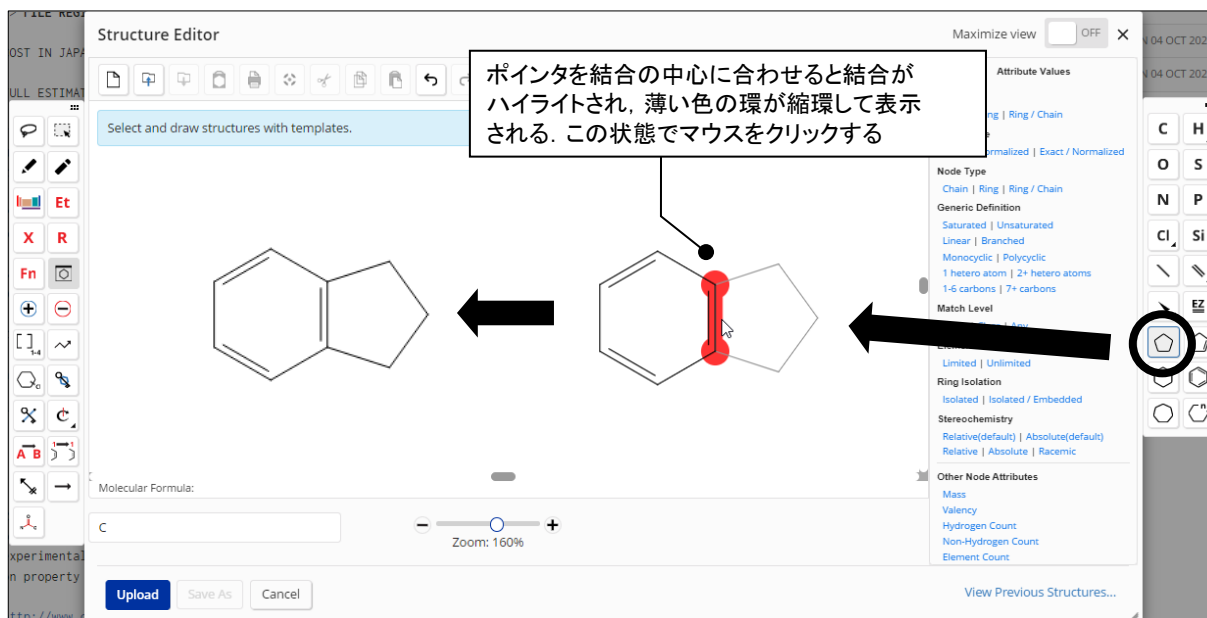
Molecular Formula: X

Zoom: 160%

Upload Save As Cancel

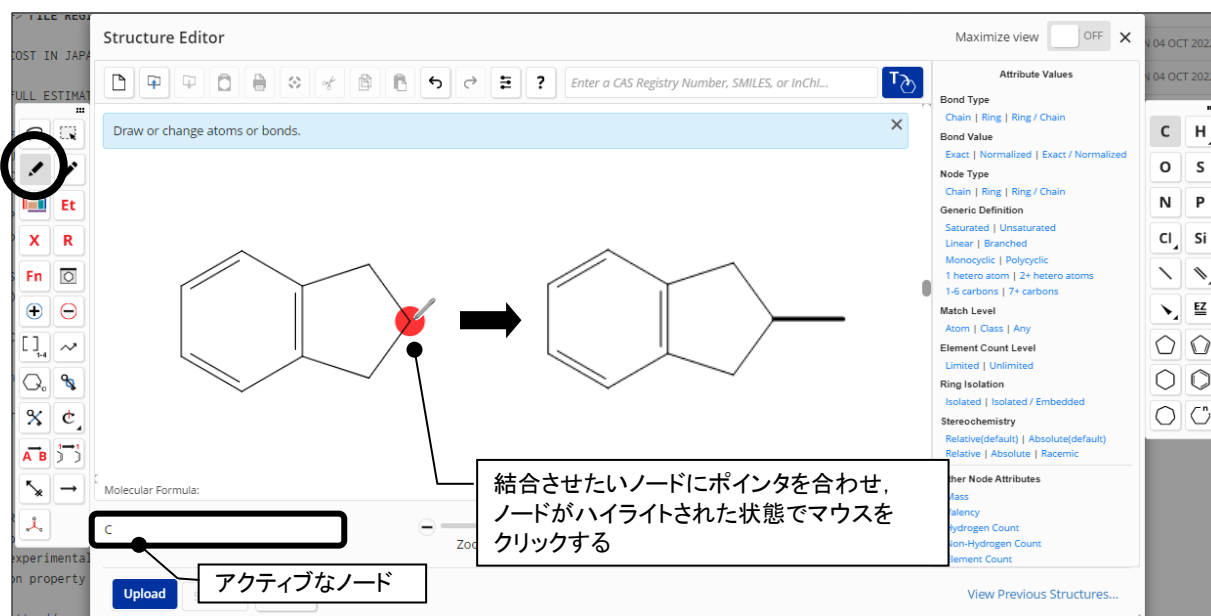
View Previous Structures...

- ・ 違う環を作図する場合は再度リングパレットから作図したい環または n 員環 (環のサイズを数字で指定) をクリックして選択する。
- ・ 縮合環を作図する場合はポインタの中心を既存の環結合の中心に合わせ、結合がハイライトされている状態でクリックする。



② 鎖を描く

- ・ ペンシルツールを選択し、アクティブなノードが炭素であることを確認する。ポインタの先端を鎖を伸ばしたいノードに合わせてハイライトさせクリックすると、長さ 1 の炭素鎖が作図される。



③ 元素を指定する

- ペンシルツールで作図したい元素やショートカット記号 (次ページ参照) を選択し、作図/変更したいところにポインタを合わせ、クリックする。

変更したいノードにポインタを合わせるとノードがハイライトされる。この状態でマウスをクリックする

パレットから変更したい元素を選択する。
- パレットにない元素を選択する場合は、原子メニュー から選択する

- X メニュー (可変原子選択) から X (ハロゲン) を指定する。

変更したいノードにポインタを合わせ、ノードがハイライトされた状態でクリックする

原子メニュー

Atoms

H He

Li Be B C N O F Ne

Na Mg Al Si P S Cl Ar

K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr

Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe

Cs Ba * Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg Tl Pb Bi Po At Rn

Fr Ra **

*Lanthanides La Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu

**Actinides Ac Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No Lr

Isotopes D T

ショートカットを用いると特定の置換基を簡単に作図できるが、元素の種類と数を限定することになる。

したがって、例えばベンゼン環に置換基がついた物質を検索したい場合は、ショートカット Ph (C₆H₅) は利用せず、ベンゼン環を作図する。

Et ショートカット

Shortcuts

CH CH₂ Me OMe Et OEt Pr-n Pr-i OPr-n OPr-i

Bu-n Bu-i Bu-s Bu-t OBU-n OBU-i OBU-s OBU-t

Ph o-C₆H₄ m-C₆H₄ p-C₆H₄ CF₂ CF₃ CCl₂ CCl₃ CBr₂ CBr₃ Cl₂ Cl₃

CHO CN C(O)CH₃ CO₂H COOH COSH CS₂H CSSH NH NH₂ NH₃

NO₂ OH OPO₃H₂ OSO₃H PO₃H₂ SH SO₂ SO₃H

Structure Editor

Draw or change atoms or bonds.

Molecular Formula: Formula is not available

Zoom: 160%

Upload Save As Cancel

X メニュー

Derwent 系データベースで利用できるスーパーアトム

Variables

Variable nodes Derwent (DWPIM/DCR) generic nodes

ハロゲン	X Any halogen	M Any metal	金属
H 以外の元素	A Any atom except H	Q Any atom except C or H	C, H 以外の元素
炭素鎖	Ak Any carbon chain	Cy Any cycle	環系
炭素環系	Cb Any carbocycle	Hy Any heterocycle	ヘテロ環系
ダミーノード	Id ID generic node		

(Double bond) を展開し結合の次数、立体結合を選択する



— どんな結合でもよい場合は、(Unspecified bond : 不定) を指定する

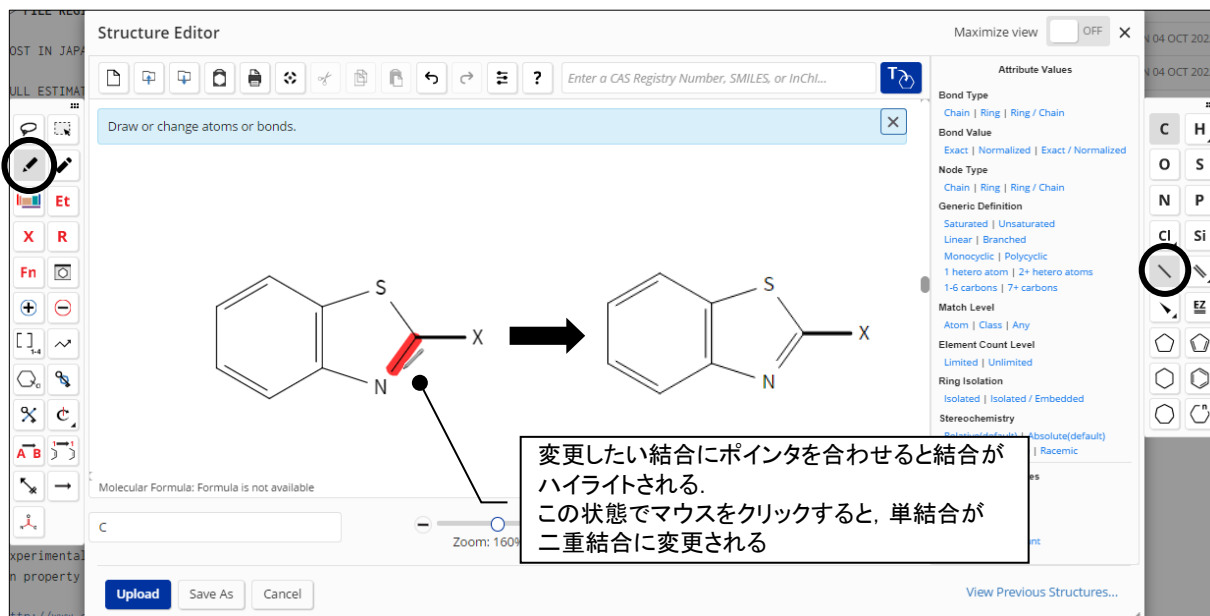
例 : ケト-エノール互変異性

注 : 可変原子 M (金属) は, Ar As At B Br C Cl F H He I Kr N Ne O P Rn S Se Si Te Xe 以外のすべての元素


注 : 通常は立体結合を使用しない。(構造中に立体情報が含まれていないレコードも存在する。また、フラットな構造質問式で検索すれば立体情報の異なる物質を一度に検索できる)


④ 結合次数を指定する

- 結合パレットで単結合  を選択した状態で、すでに作図した結合をペンシルツールでクリックすると、結合の次数が 単結合 → 二重結合 → 三重結合 → 単結合 の順に変更される。
- または、二重結合  を展開して作図したい結合を選択し、変更したいところにポインタを合わせ、結合がハイライトされている状態でクリックする。

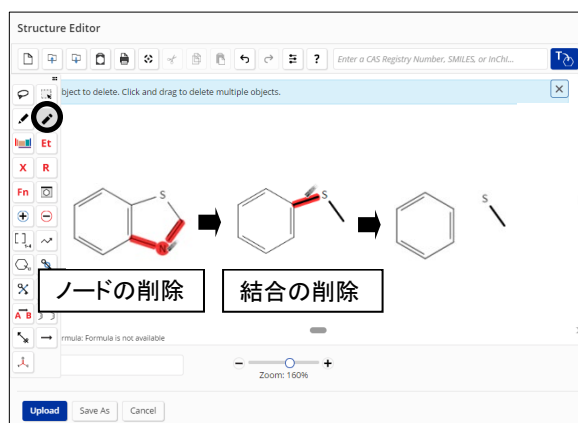


変更したい結合にポインタを合わせると結合がハイライトされる。
この状態でマウスをクリックすると、単結合が二重結合に変更される

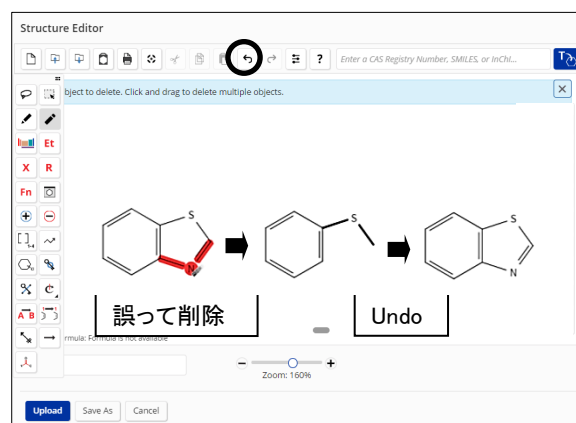
 構造質問式の修正

特定部位の削除 - 消しゴムツール 

直前に行った操作を取り消す - Undo 



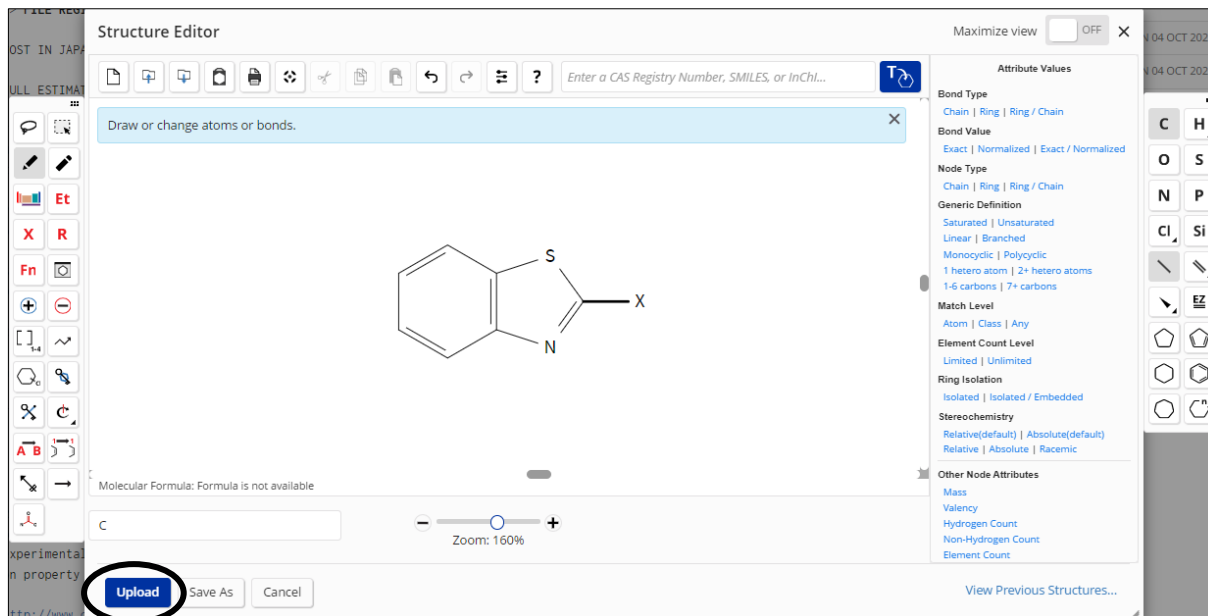
ノードの削除 結合の削除



誤って削除 Undo

STEP 2 構造質問式の保存とアップロード

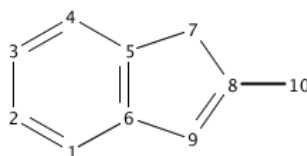
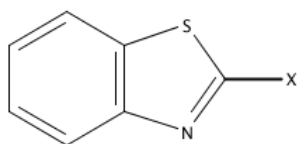
- 作図が完了したら、画面左下の **Upload** をクリックする。



- 構造質問式がアップロードされ、L 番号が付与される。

=>

Uploading structure file: 2021_0063_Structure



Node Attributes

Ring Nodes : 1 2 3 4 5 6 7 8 9

Chain Nodes : 10

Bond Attributes

Ring Bonds : 1-2 2-3 3-4 4-5 5-6 5-7 6-1 7-8 8-9 9-6

Chain Bonds : 8-10

Exact Bonds : 8-10

Normalized Bonds : 1-2 2-3 3-4 4-5 5-6 6-1

Exact/Normalized Bonds : 5-7 7-8 8-9 9-6

Markush Attributes

Match Level (ATOM) : 1 2 3 4 5 6 7 8 9

Match Level (CLASS) : 10

Element Count Level (LIMITED) : 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

L1 STRUCTURE UPLOADED

アップロードした構造質問式の構造と属性が自動的に表示される

STEP 3 サンプル検索

- サンプル検索 (ファイル全体の 5% の「試し検索」) を行い、以下の内容を確認する。

【ポイント 1】 FULL FILE PROJECTIONS (フルファイル検索の予想) が COMPLETE か？

- ・ INCOMPLETE (フルファイル検索が完了しない予想) と表示された場合は、構造質問式や検索条件を変更する。

【ポイント 2】 サンプル検索の結果として得られた回答にノイズが含まれていないか？

- ・ ノイズが多く含まれていた場合は、構造質問式を修正する。

=> S L1

SAMPLE SEARCH INITIATED 11:30:43 FILE
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -

サンプル検索を実行する

(構造検索のタイプはデフォルトの SSS: 部分構造検索)
455 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 455 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

50 ANSWERS

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 7821 TO 10379
PROJECTED ANSWERS: 5382 TO 7538

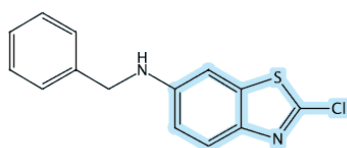
【ポイント 1】 COMPLETE となっているか

「INCOMPLETE」の場合、フルファイル検索を行っても不完全な検索となる。

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> D SCAN

L2 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN 6-Benzothiazolamine, 2-chloro-N-(phenylmethyl)-
MF C14 H11 Cl N2 S



【ポイント 2】

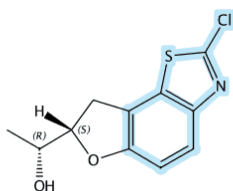
SCAN 表示形式で、構造質問式の適合性をチェックする

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

表示したい件数を入力する

L2 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN Furo[2,3-g]benzothiazole-7-methanol, 2-chloro-7,8-dihydro- α -methyl-, (α R, 7S)-
MF C11 H10 Cl N O2 S



Absolute stereochemistry shown

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

END または 0 を入力すると終了する

STEP 4 フルファイル検索

- サンプル検索の結果「FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE ****COMPLETE****」であったら、フルファイル検索（ファイル全体を対象とした検索）を実行する。

- ・ 検索範囲として FUL または FULL を指定する。

=> S L1 FULL ● フルファイル検索を実行する
 FULL SEARCH INITIATED 11:31:08 FILE 'REGISTRY'
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 9551 TO ITERATE

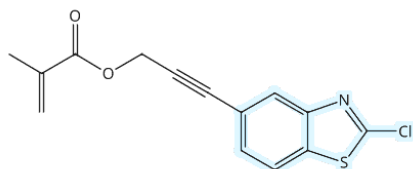
100.0% PROCESSED 9551 ITERATIONS 6848 ANSWERS
 SEARCH TIME: 00.00.01

L3 6848 SEA SSS FUL L1

このフルファイル検索の結果 (L3) は
E 章で利用する

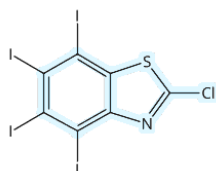
=> D 1 45

L3 ANSWER 1 OF 6848 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 RN 2649436-77-9 REGISTRY
 ED Entered STN: 02 Jul 2021
 CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, 3-(2-chloro-5-benzothiazolyl)-2-propyn-1-yl
 ester (CA INDEX NAME)
 MF C14 H10 Cl N O2 S
 SR Chemical Catalog
 Supplier: Aurora Fine Chemicals LLC
 LC STN Files: CHEMCATS



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

L3 ANSWER 45 OF 6848 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 RN 2639741-33-4 REGISTRY
 ED Entered STN: 04 May 2021
 CN Benzothiazole, 2-chloro-4,5,6,7-tetraiodo- (CA INDEX NAME)
 MF C7 Cl I4 N S
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

参考 : イタレーションが不完全な回答

構造検索結果にイタレーションが不完全に終わった回答が含まれた場合は、=> S L#/COM を実行すると、イタレーションが完全に終わった回答に限定できる。

=> S L1 FUL

```
FULL SEARCH INITIATED 08:53:40
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 4286555 TO ITERATE
100.0% PROCESSED 4286555 ITERATIONS ( 42 INCOMPLETE) 53 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.09
```

イタレーションが不完全な回答がある時は、カッコ内に件数が表示される

L3 53 SEA SSS FUL L1

=> S L3/COM ← イタレーションが完全 (COMPLETE) に終わった回答に限定

L4 11 L3/COM

=> S L3/INC ← イタレーションが不完全 (INCOMPLETE) な回答に限定

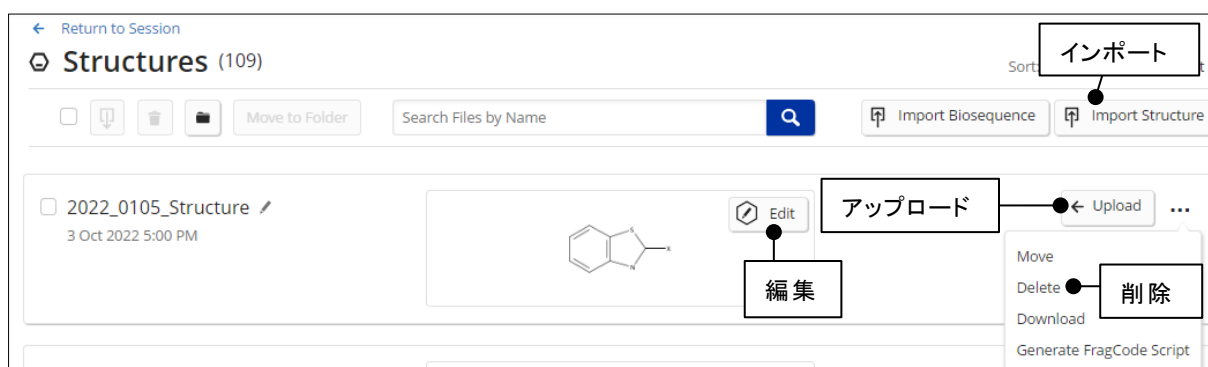
L5 42 L3/INC

参考 : 構造質問式の自動保存

アップロードした構造質問式は My Files > Structures に自動的に保存され、過去に作成した構造質問式の再検索や編集を簡単に行うことができる。

保存済みの構造質問式を編集して再利用する際に、

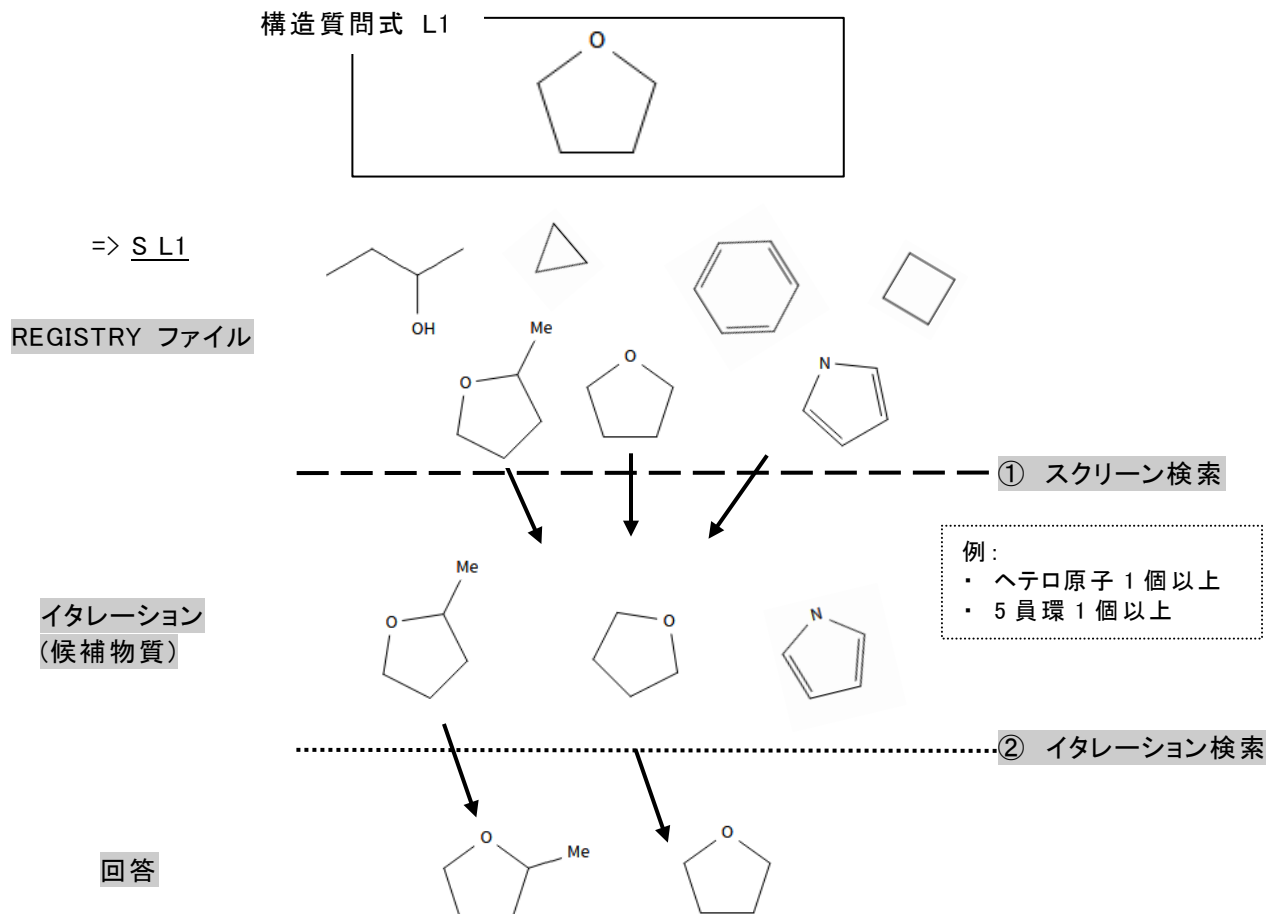
- Save As をせずに Upload ボタンをクリックすると、構造質問式が上書き保存される。
- Save As から別の名前を付けてからアップロードすると、新しい構造質問式が保存される。(上書き保存されない)



参考：構造検索のしくみとシステム制限

■ 構造検索は、二つのステップを経て実行されている。

- ① スクリーン検索 : 作図した構造と大まかな特徴が一致する化学物質の集合を作成する
- ② イタレーション検索 : スクリーン検索を通過した物質について、作図した構造と適合するかを詳細にチェックする



- ・ REGISTRY ファイルの構造検索におけるシステム制限値 (STNext)

	オンライン検索		BATCH 検索 *
	サンプル検索	フルファイル検索	フルファイル検索
イタレーション数	100 万件	1 億件	1 億件
回答数	50 件	1 億件	1 億件

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



REGISTRY ファイルでは PROJECTED ITERATIONS (予想候補物質) の数がシステム制限値を超える場合に、FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **INCOMPLETE** となる。そのままフルファイル検索を実行すると、システム制限値以降の候補物質を検索することなく終わってしまうため、不完全な検索となる。



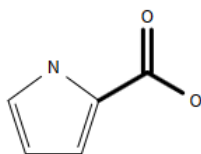
まとめ

- ・ 構造検索は、作図した構造質問式を用いて目的物質を検索する手法である。
 - － 検索の際には、検索のタイプ、検索範囲を指定する。
- ・ サンプル検索を実行し、FULL FILE PROJECTIONS が COMPLETE であることを確認する。
 - － 必要に応じて構造質問式を修正し、再度検索を行う。



練習問題

3. 下図の部分構造を含む物質の検索



(条件) 作図した以外の環が縮合しても、しなくてもよい。

[ヒント] 置換基や縮環を許容する場合は、特別な指定はせずに部分構造検索を実行する。

回答は p.84

D 便利な作図機能

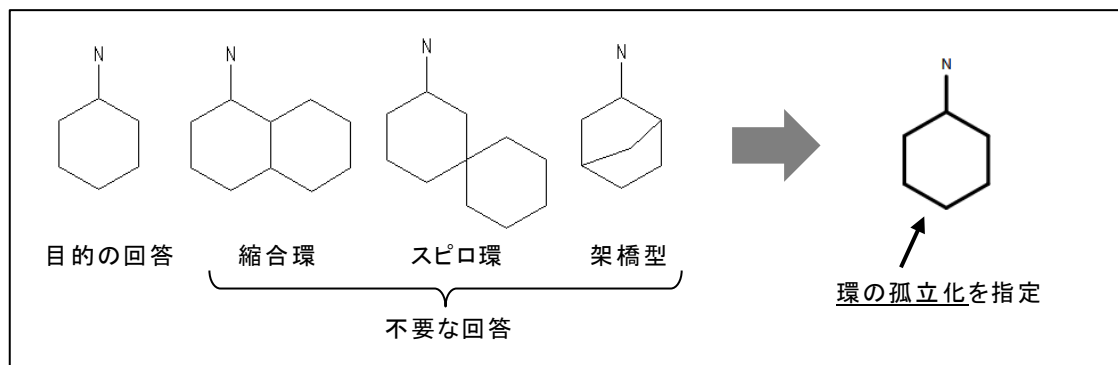
誘導体検索に欠かせない便利な作図機能をご紹介します。
繰り返しグループや可変置換位置、R グループなどの作図機能や、
ノードや結合などの属性（アトリビュート）を指定すると、幅広い
誘導体検索が可能です。

便利な作図機能一覧

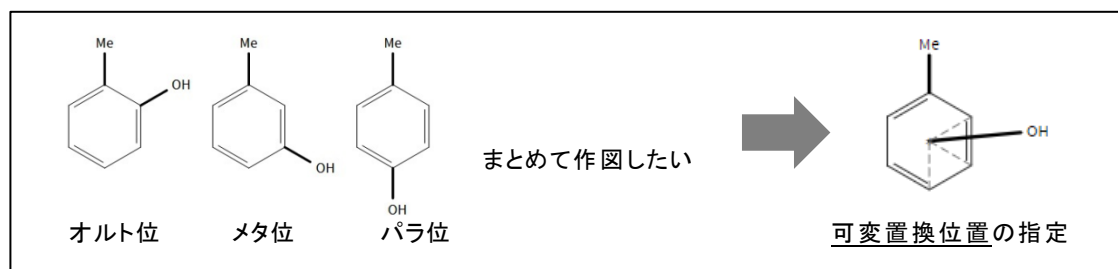
- REGISTRY ファイルの部分構造検索 (SSS) または閉構造部分構造検索 (CSS) では、誘導体検索に便利な様々な作図機能を利用することができる。

- 便利な作図機能の例

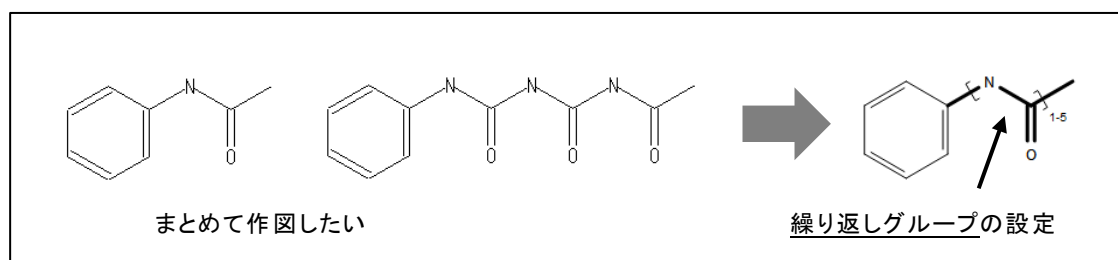
- ・ 環の孤立化 : 作図した以外の環の縮合やスピロ型結合は除く



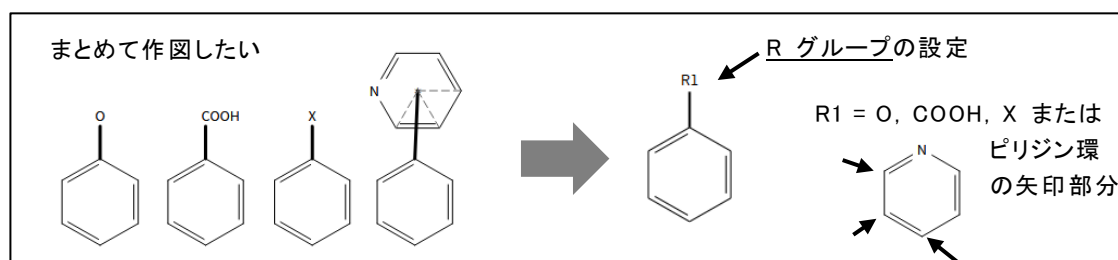
- ・ 可変置換位置 : 環上の置換位置が可変である場合の作図



- ・ 繰り返しグループ : 繰り返し単位を含む構造をまとめて作図

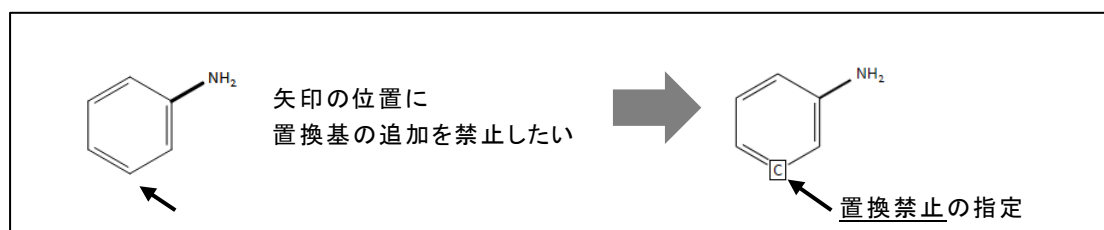


- ・ R グループ : 一つのノードが複数の原子や部分構造となる可能性がある場合の作図




置換の禁止 (Lock Atoms ツール)

- 特定のノードへの置換基の追加を禁止する際に使用する。

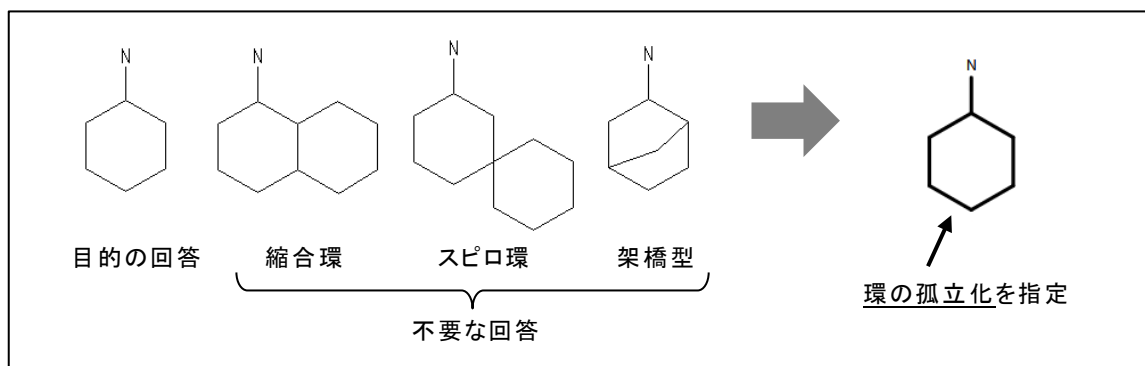


- 作図方法


- ①  をクリックする。
- ② 置換基の追加を禁止したいノードにカーソルを合わせ、クリックする。
 - 置換禁止を指定すると、ノードが四角枠で囲まれる。

環の孤立化 (Lock Ring ツール)

- 作図した環系を孤立させる、つまり他の環が縮合またはスピロ型結合しないことを指定する属性である。

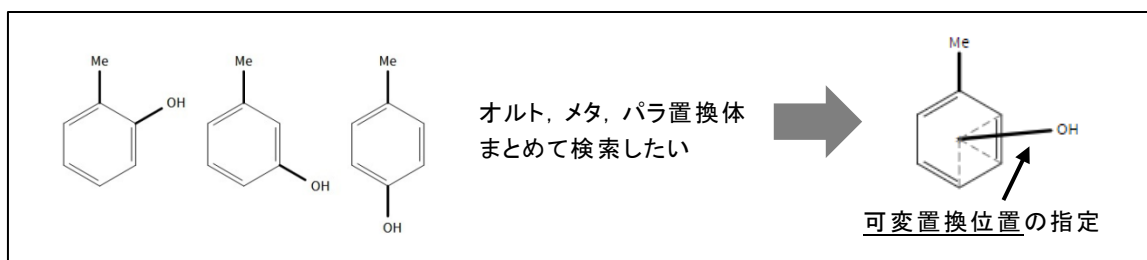


■ 作図方法


- ①  をクリックする。
- ② 孤立を指定したい環にカーソルを合わせてクリックする。
 - 環の孤立を指定すると、環結合が太線になる。

可変置換位置

- 環または一つの環系に対して、置換基の可変な結合位置を指定する際に使用する。



- 作図方法

- ① 基本骨格と置換基を離して作図する。
- ②  をクリックし、置換基をクリックして結合位置までドラッグする。
- ③ ② の操作を繰り返し、結合位置を複数 (2 箇所以上) 指定する。

Click and drag from the substituent position to each ring position where attachment may occur.

オルト位の指定 → メタ位の指定 → パラ位の指定

Molecular Formula: C

Zoom: 100%

Attribute Values

Bond Type
Chain | Ring | Ring / Chain

Bond Value
Exact | Normalized | Exact / Normalized

Node Type
Chain | Ring | Ring / Chain

Generic Definition
Saturated | Unsaturated
Linear | Branched
Monocyclic | Polycyclic
1-6 carbons | 2+ hetero atoms
1-6 carbons | 7+ carbons

Match Level
Atom | Class | Any

Element Count Level
Limited | Unlimited

Ring Isolation
Isolated | Isolated / Embedded

Stereochemistry
Relative(default) | Absolute(default)
Relative | Absolute | Racemic

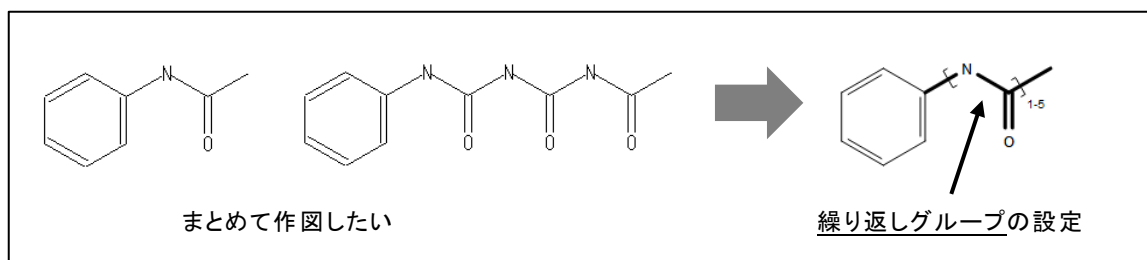
Other Node Attributes
Mass
Valency
Hydrogen Count
Non-Hydrogen Count
Element Count

- 注意点


- ・ 各置換基の結合先は 20 箇所まで指定できる。
- ・ 置換基の結合先として指定できるのは、一つの環系上のノードのみ。鎖上のノードや、複数の環系上のノードには指定できない。
- ・ 置換基の結合先として指定できるのは、非金属原子、X (ハロゲン原子)、Q (C, H 以外の原子)、A (H 以外の原子)。
 - ショートカット、金属原子、M, Ak, Cb, Cy, Hy, 繰り返しグループ内のノードは指定できない。
- ・ 二つ以上の置換基が結合する場合は、置換基を必要な数だけ作図して、それぞれに可変置換位置を指定する。

繰り返しグループ

- 繰り返しグループを利用すると、繰り返しを含む構造をまとめて作図できる。

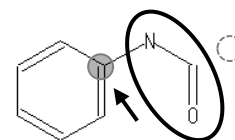


■ 作図方法

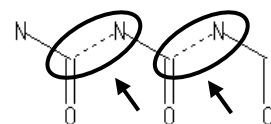
- ① 繰り返し部分を含めて基本骨格を作図する。
- ②  をクリックし、繰り返し部分をドラッグする。
- ③ 作図画面上部のボックスに繰り返し数を入力して「Apply」をクリックする。

■ 注意点

- ・ 繰り返しの範囲は 0~20.
- ・ 繰り返しグループには結合点が二つ必要.
- ・ 繰り返し単位間の結合の次数は指定できない.
「不定結合」として検索される.
- ・ Ak のみを 2 回以上繰り返す指定はできない.



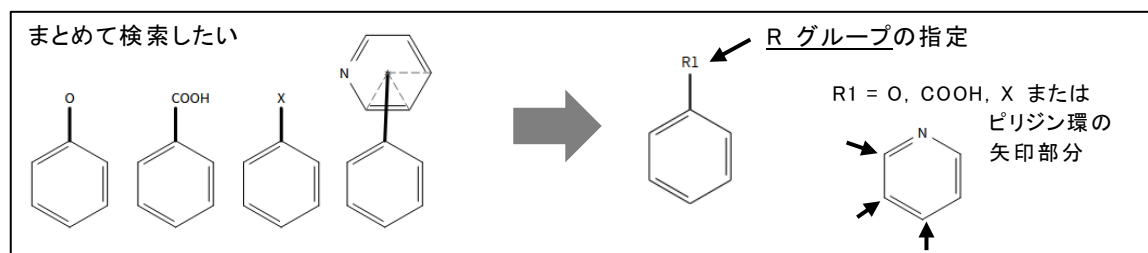
結合点が一つしかないため
繰り返しの指定はできない



繰り返し単位間の結合は
不定として検索される

R グループ

- 一つのノードに複数の原子やショートカット、可変原子、フラグメントを指定する際に使用する。



■ 作図方法

- ① 基本骨格を作図する。
- ② **R** をクリックし R グループメニューを表示する。
- ③ R1 をクリックし、原子、可変原子、ショートカットから目的のものを選択する。
 - 選択すると自動的にボックスに入力される。

Structure Editor

Maximize view OFF X 04 OCT 2022

Attribute Values 04 OCT 2022

Bond Type

Draw or change atoms or bonds.

Molecular Formula:

R1

Zoom: 100%

Upload Save As Cancel

R-Group Definitions

R1 R2 R3 R4 R5 R6 R7 R8 R9 R10 R11 R12 >

R1

原子

H He
Li Be B C N O F Ne
Na Mg Al Si P S Cl Ar
K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr
Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe
Cs Ba * Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg Tl Pb Bi Po At Rn
Fr Ra **

*Lanthanides La Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu
**Actinides Ac Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No Lr
Isotopes D T

R-Group Definitions

R1 R2 R3 R4 R5 R6 R7 R8 R9 R10 R11 R12 >

R1: O, X

> Atoms

> Variables

Variable nodes Derwent (DWPIM/DCR) generic nodes

X Any halogen M Any metal
A Any atom except H Q Any atom except C or H
Ak Any carbon chain Cy Any cycle
Cb Any carbocycle Hy Any heterocycle
Id ID generic node

可変原子

R-Group Definitions

R1 R2 R3 R4 R5 R6 R7 R8 R9 R10 R11 R12 >

R1: O, X, COOH

> Atoms

> Variables

> Shortcuts

CH CH2 Me OMe Et OEt Pr-n Pr-i OPr-n OPr-i
Bu-n Bu-i Bu-s Bu-t OBU-n OPr-i OBU-s OBU-t
Ph o-CeH4 m-CeH4 p-CeH4 C CF3 CCl2 CCl3 CB2r CB3r Cl2 Cl3
CHO CN C(O)CH3 CO2H COSH CS2H CSSH NH NH2 NH3
NO2 OH OPO3H2 OSO3H PO3H2 SH SO2 SO3H

> No Fragments Available

ショートカット

- ④ R グループに含めたいフラグメント（部分構造）を離して作図する。
- 原子、ショートカット、可変原子にない構造でも、自分で作図して R グループに指定することができる。
- ⑤ **Fn** をクリックし、基本骨格とフラグメントの結合点を選択して F 番号を付与する。
- F 番号が付与された構造は R グループのフラグメントとして認識される。
- ⑥ **R** をクリックし R1 を選択し、Fragments から目的のフラグメントを選択する。
- 選択すると、フラグメントに付与された F 番号がボックスに入力される。

- ⑦ 基本骨格に R1 を作図する。
- 作図した R グループにカーソルをかざすと、R グループに指定した内容を確認できる。

■ 注意点

- 最大 20 個の R グループ (R1-R20) を指定できる。
- 各 R グループに最大 20 項目 (原子, 可変原子, ショートカット, フラグメントの結合点) を指定できる。
- 同一フラグメントに最大 20 個の結合点を指定できる。
- 可変置換位置を指定したフラグメントを指定することはできない。

The first screenshot shows an error message: "A fragment with a variable attachment point cannot be used within an R-group definition." It points to a fragment with a variable attachment point (X) in a benzene ring. A text box explains: "可変置換位置を指定したフラグメントに F 番号を指定しようとするとエラーメッセージが表示される。"

The second screenshot shows the same structure with three separate fragments, each with a fixed attachment point (F1, F2, F3). A text box explains: "全パターンを別々のフラグメントとして作図する。"

- R グループにショートカットの Ph を指定した場合, 無置換ベンゼンの指定となる。ベンゼン環の置換基を許容したい場合は, フラグメントとしてベンゼン環を作図する。
- 使用しないフラグメントは必ず削除する。一度 R グループに指定したフラグメントを削除するときには, R グループの定義から除いてから削除する。

The screenshot shows an error message: "A node that has an Attachment Point cannot be removed from a fragment assigned to an R-group." It points to a fragment with an attachment point (R1) in a pyridine ring. A text box explains: "R グループに指定したフラグメントを削除しようとすると, エラーメッセージが表示され, 削除できない。"

The R-Group Definitions panel shows R1 defined as F1, F2. A text box explains: "削除したいフラグメントを R グループの定義から除いてから, フラグメントを削除する。"

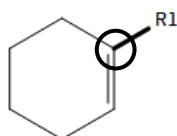
- Current value based on structure (Exact) の結合を含む構造に R グループを付与すると Bond Value は自動的に Current value based on structure (Exact/Normalized) に変更される。
- R グループに H (水素) を含めると, ノイズを生じる場合がある。

参考：R グループ内に水素を指定する場合の注意点

- R グループ内に水素を指定するとノイズを生じることがある。ただし、目的の化合物が検索からもれることはない。

- ・ ノイズを生じない場合

R グループに結合するノードが他に水素と結合しない

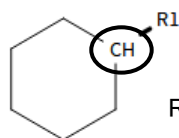


R1 = H, Cl, CH3

- ・ ノイズを生じる場合

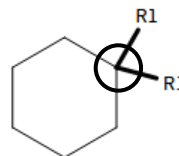
R グループに結合するノードが …

- ① 水素に結合している、または水素を含むショートカット記号の場合



R1 = H, Cl, CH3

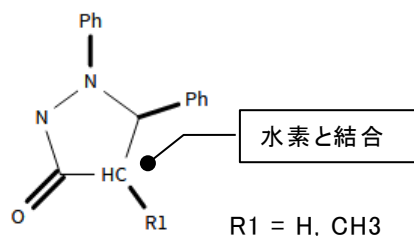
- ② 水素を含む複数の R グループと結合する場合



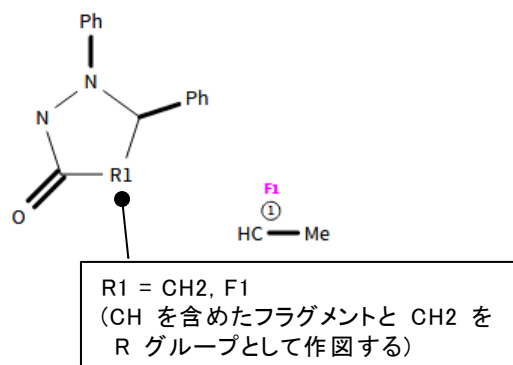
R1 = H, Cl, CH3

■ 作図例と検索結果の比較

- ・ ノイズを生じる作図例 (L1)



- ・ 好ましい作図例 (L2)



=> FILE REGISTRY

=> S L1

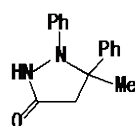
=> S L1 FUL

L4 81 SEA SSS FUL L1

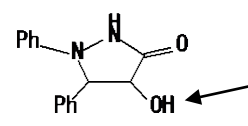
=> S L2

=> S L2 FUL

L6 72 SEA SSS FUL L2



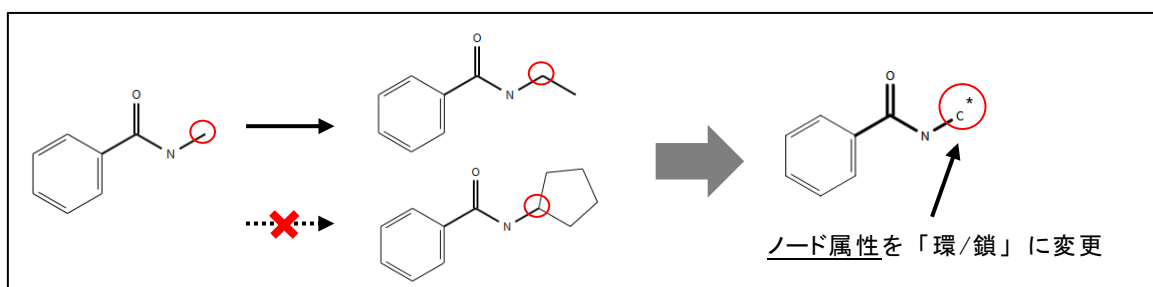
[正しい回答]



[L4 に含まれるノイズ]

ノードの属性 (Node Attributes - Node Type)

- ノードが「環上」、「鎖上」、「環または鎖上」にあることを指定する属性である。



- ・ 作図したままのデフォルトでは、鎖上のノードの属性は「鎖」に指定されている。属性を変更しない限り、このノードが環の一部となるような物質は検索されない。環の一部になってもよい場合は「ノードの属性」を「環/鎖」に変更する。

■ 作図方法

① 属性を変更したいノード（原子）にカーソルを合わせて右クリックする。

② 「Node Type」を選択し、属性を指定して「OK」をクリックする。

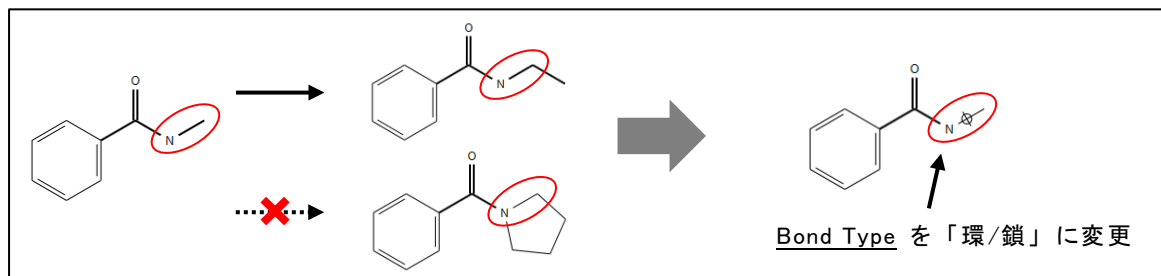
- ノードの属性を変更すると * が付与される。
- ノードにカーソルを合わせると、属性パネルの該当部分が黄色くハイライトされる。

■ 注意点

- ・ ノード属性を変更しても、そのノードに係わる Bond Type は変更されない。
- ・ R グループに属性を指定する場合は、R グループの内容となる原子や可変原子 (X, M, A, Q) をフラグメントとして作図し、そのフラグメントに属性を指定する。

結合の属性 (Bond Attributes – Bond Type/Bond Value)


- Bond Type は結合の種類 (環, 鎖, 環または鎖) を, Bond Value はノーマライズド結合*の可能性を指定する属性である (* ノーマライズド結合については Appendix を参照)。



- ・ 作図したままのデフォルトでは, 環外の Bond Type は「鎖」に指定されている. 属性を変更しない限り, この結合が環の一部となる物質は検索されない.
- ・ 作図した鎖結合が環の一部になってもよい場合は「Bond Type」を「環/鎖」に変更する.

■ 作図方法

- ① 属性を変更したい結合にカーソルを合わせて右クリックする.
- ② 「Bond Type」を選択し, 属性を指定して「OK」をクリックする.

- Bond Type を変更すると結合の線が変化する (環/鎖の場合は )
- 結合にカーソルを合わせると, 属性パネルの該当部分が黄色くハイライトされる.

Structure Editor

Draw or change atoms or bonds.

Bond Attributes

Bond Type: Ring/Chain

Bond Value: Ring, Chain

OK

Attribute Values

Bond Type: Chain | Ring | Ring/Chain

Bond Value: Exact | Normalized | Exact/Normalized

N-C の Bond Type

Monocyclic | Polycyclic

Hetero atom | 2+ hetero atoms

1-5 carbons | 7+ carbons

Match Level: Atom | Class | Any

Element Count Level: Limited | Unlimited

Ring Isolation: Isolated | Isolated / Embedded

Stereochemistry: Relative(default) | Absolute(default) | Relative | Absolute | Racemic

Other Node Attributes: Mass, Valency, Hydrogen Count, Non-Hydrogen Count, Element Count

View Previous Structures...

■ 注意点


- ・ Bond Type を変更すると, その結合の両端のノードの属性も自動的に変更される.

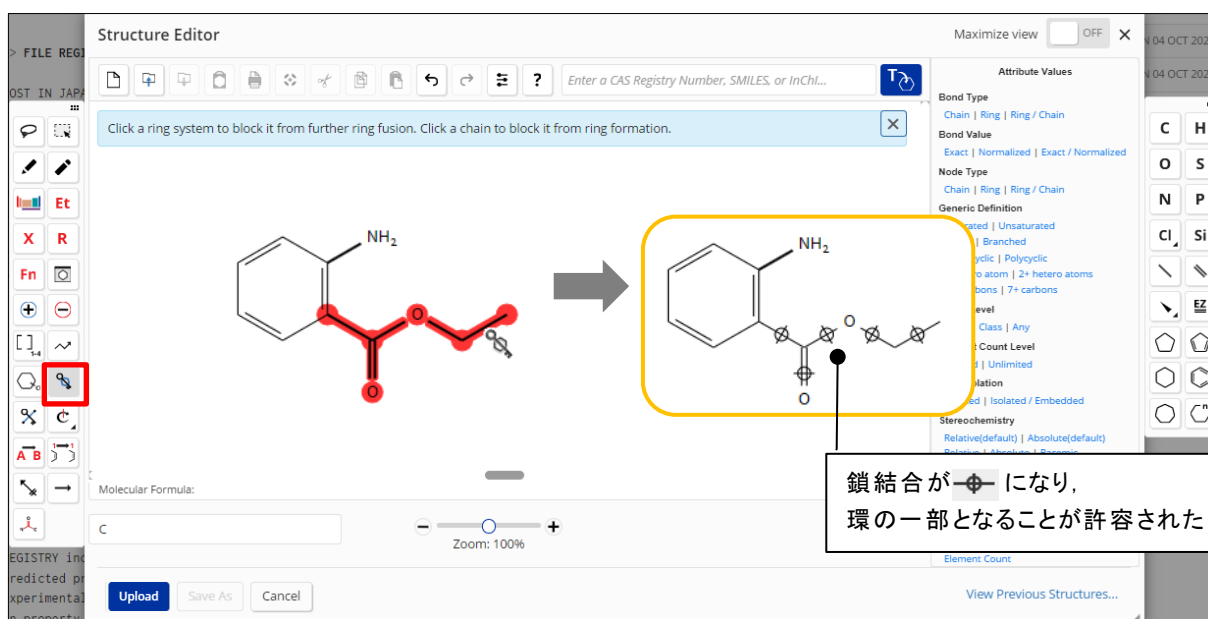
参考：鎖結合に対する Lock Ring の指定

■ 環の孤立化を指定する Lock Ring ツールを鎖結合に適用すると、鎖結合の Bond Type を「環/鎖」へ簡単に変更することができる。

- ・ Lock Ring ツールを適用すると、鎖結合全体の Bond Type が変化する。鎖結合の一部の Bond Type を変更する場合は、Bond Attribute で Bond Type を変更する。

■ 作図方法

- ①  をクリックする。
- ② 環の一部になることを許容したい鎖結合をクリックする。



Structure Editor

Click a ring system to block it from further ring fusion. Click a chain to block it from ring formation.

Molecular Formula: C

Zoom: 100%

Attribute Values

Bond Type
Chain | Ring | Ring / Chain

Bond Value
Exact | Normalized | Exact / Normalized


Node Type
Chain | Ring | Ring / Chain

Generic Definition
Unsaturated
Branched
Cyclic | Polycyclic
Atom | 2+ hetero atoms
Bonds | 7+ carbons
Level
Class | Any
Count Level
Unlimited
Mutation
Isolated / Embedded

Stereochemistry
Relative(default) | Absolute(default)
Relative | Absolute | Random

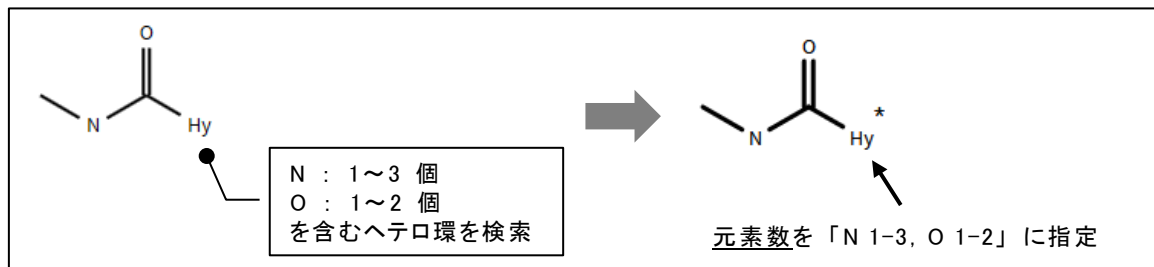
Element Count

View Previous Structures...

鎖結合が  になり、
環の一部となることが許容された

元素数 (Node Attributes – Element Counts)

- 「元素数」を指定すると、一般式グループ (Hy, Cb, Cy, Ak) について、元素の種類と数を限定することができる。



- ・ Ak (鎖式炭素) および Cb (炭素環) に対して指定できる元素は C (炭素) のみ。
また, C (炭素) の数として 0 (ゼロ) は指定できない。

■ 作図方法

- ① 一般式グループ (Hy, Cb, Cy, Ak) にカーソルを合わせて右クリックする。
- ② 「Node Attributes」から「Element Counts」を選択する。
「Specific」を選択し、元素種と存在数を指定して「Add」をクリックする。
- ③ 右のボックスに②の指定が反映されたことを確認し、「OK」をクリックする。

- 元素数を指定すると * が付与される。

指定した元素種と存在数が反映される。
異なる元素を数種類指定する場合は、元素ごとに②の作業を繰り返す。
* 複数の元素を指定した際は、すべての指定を満たす物質のみが得られる。

①

②

③

元素種の指定

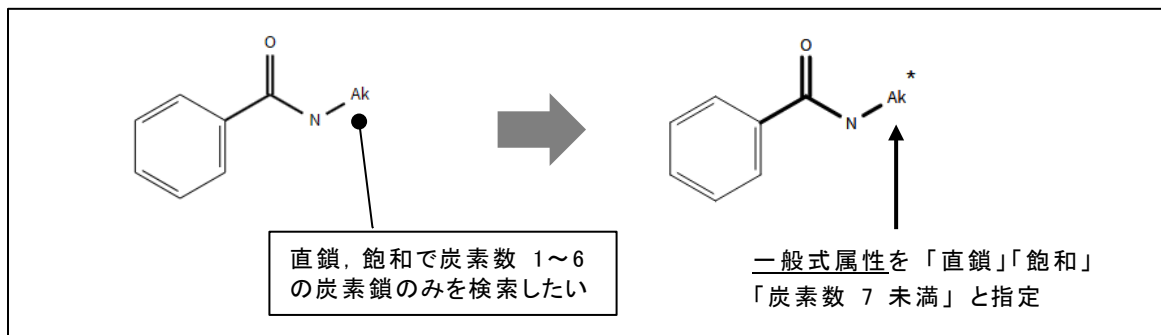
存在数の指定

OK

OK

一般式属性 (Node Attributes – Generic Definition)

- 一般式グループ記号 (Hy, Cb, Cy, Ak) について「飽和度」、「鎖の種類」、「ヘテロ原子の数」、「環系の種類」、「炭素原子数」を指定する際に使用する。

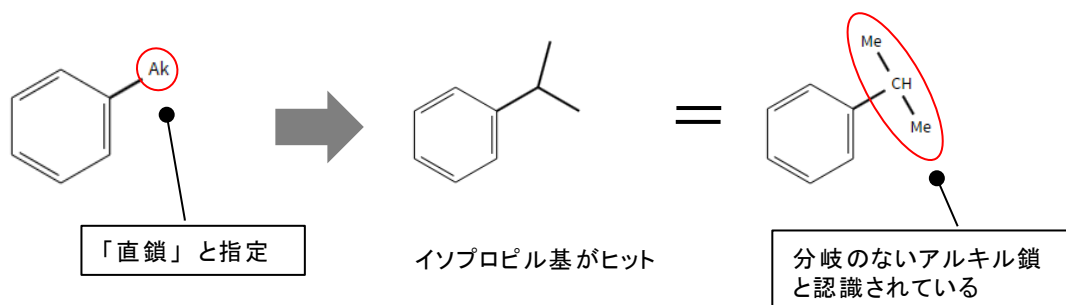


- ・ 一般式グループ記号として、次の 4 種類を使用できる。

一般式記号	Hy	Cb	Cy	Ak*
内容	ヘテロ環	炭素環	任意の環	鎖式炭素
検索される構造	少なくとも一つの非炭素原子を含む環	炭素のみからなる環	環なら何でもよい	全鎖式炭素 直鎖 分岐 飽和 不飽和
	環とは縮合環, スピロ環を含む			
作図可能な置換基の数	16 個まで置換基の指定が可能			

- Ak の「直鎖/分岐」に関する注意点

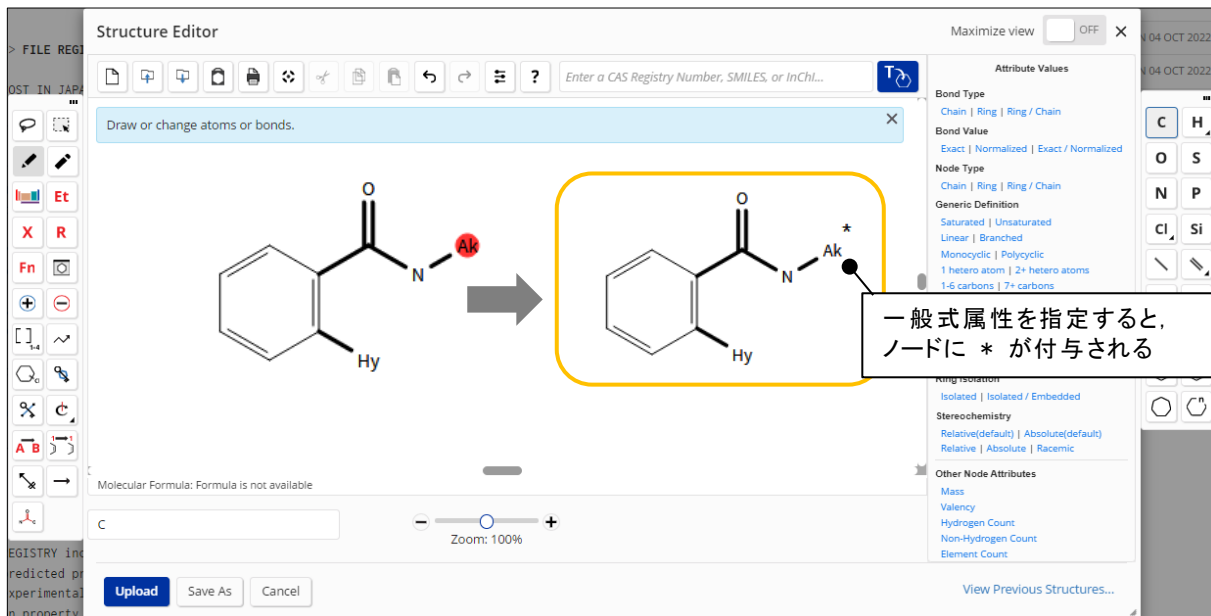
- ・ イソプロピル基, *sec*-ブチル基などはシステム上, 直鎖のアルキル鎖として認識されている。



- ・ Ak ノードに分岐を指定すると, イソプロピル基や *sec*-ブチル基などは除かれてしまう。

■ 作図方法

- ① 一般式属性を指定したいノード (Hy, Cb, Cy, Ak) にカーソルを合わせて右クリックする。
- ② 「Node Attributes」 のボックスから「Generic Definition」 を選択する。
目的の属性を指定して「OK」 をクリックする。一般式属性を指定すると * が付与される。



Node Attributes

Element Counts

Generic Definition: Carbon Chains

Markush Attributes

Non-Hydrogen Count

Saturation: 飽和度

Any ← 不定

Unsaturated ← 不飽和

Saturated ← 飽和

Type of Chain: 鎖の種類

Any ← 不定

Branched ← 分岐

Linear ← 直鎖

Number of Carbon Atoms: 炭素原子数

Any ← 不定

Less than 7 ← 7 未満

7 or more ← 7 以上

OK

■ Hy (ヘテロ環), Cb (任意の環), Cy (炭素環) の一般式属性の指定

- ・ 環の種類 (単環/多環) を指定できる。

Node Attributes

Element Counts

Generic Definition: Heterocycles

Markush Attributes

Non-Hydrogen Count

Saturation: 飽和度

Any ← 不定

Unsaturated ← 不飽和

Saturated ← 飽和

Type of Ring System: 環の種類

Any ← 不定

Monocyclic ← 単環

Polycyclic ← 多環

Number of Hetero Atoms: ヘテロ原子数

Any ← 不定

Exactly 1 ← ちょうど 1

2 or more ← 2 以上

Number of Carbon Atoms: 炭素原子数

Any ← 不定

Less than 7 ← 7 未満

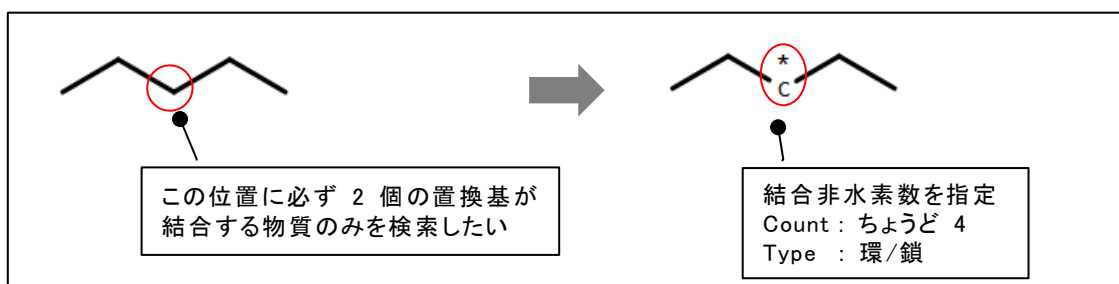
7 or more ← 7 以上

特定のヘテロ原子数および炭素数を指定するには「元素数」を利用する。

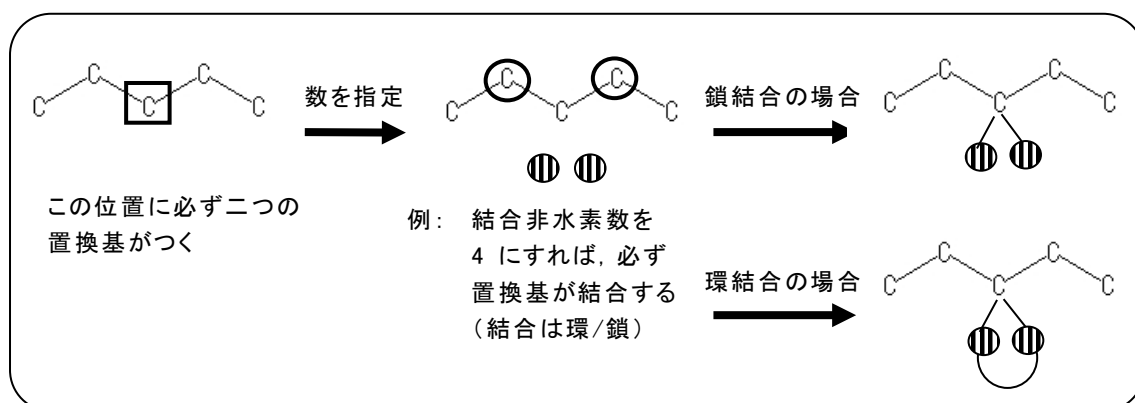
OK

結合非水素数 (Node Attributes - Non-Hydrogen Count)

- 結合非水素数を指定すると、特定のノードに結合する水素以外のノードの数を限定できる。



- ・ 特定のノードに結合する水素以外のノードの数だけでなく、Bond Type (環, 鎖, 環/鎖) も指定できる。
 - 結合次数 (単結合, 二重結合など) は指定できない。
 - 既に作図している構造中のノードの数, Bond Type も含める。



■ 指定内容

- ・ 非水素ノードの数

結合非水素数の指定	指定範囲	内容
Any (不定) (デフォルト)		結合する非水素ノードの数は問わない
Specific (特定)	Exact (正確な数の指定)	結合する非水素ノードの数はちょうど n 個
	Minimum (最小値の指定)	結合する非水素ノードは n 個以上
	Maximum (最大値の指定)	結合する非水素ノードは n 個以下

- ・ 結合非水素数を指定したノードからの Bond Type

指定範囲	内容
Chain (鎖)	指定したノードからの鎖結合の数
Ring (環)	指定したノードからの環結合の数
Ring/Chain (環/鎖)	指定したノードからの鎖または環結合の数

■ 作図方法



- ① 結合非水素数を指定したいノードにカーソルを合わせて右クリックし、「Node Attributes」ボックスから「Non-Hydrogen Count」を選択する。
- ② 「Specific」を選択し、「Type : 環/鎖, Count : ちょうど 3」を指定し、「OK」をクリックする。
 - 結合非水素数を指定すると * が付与される。

ヒットする構造			ヒットしない構造	
鎖 : 1	鎖 : 0	鎖 : 1*	鎖 : 0	鎖 : 2
環 : 2	環 : 3	環 : 2	環 : 2	環 : 2
環/鎖 : 3	環/鎖 : 3	環/鎖 : 3*	環/鎖 : 2	環/鎖 : 4

* 結合次数は問わないため、二重結合も単結合と同じように 1 とカウントする。

- あるノードに「ちょうど 3, 環/鎖」と指定すると指定したノードに対し、水素以外のノードが必ず三つ結合した物質のみヒットする。
- Bond Type は問わず、置換の数だけ指定したいときは「環/鎖」で指定する。



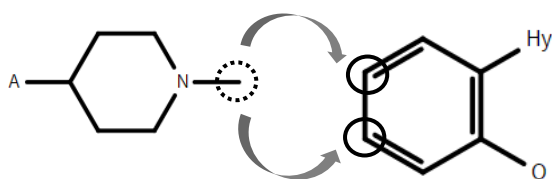
まとめ

- ・ 便利な作図機能を活用することで、一つの構造質問式でさまざまな誘導体を効率よく検索することができる。



練習問題

4. 点線枠で囲った炭素が、ベンゼン環の実線枠で囲った 2 箇所のいずれかの炭素に結合する構造を検索する。



(条件)

- ・ 環はこれ以上縮合しない。
- ・ Hy はヘテロ環, A は水素以外の原子

- [ヒント] ・ 可変置換位置を利用して 1 つの構造質問式を作図する。
- ・ 環を縮合させないためには環の孤立化を行う。
 - ・ Hy, A は X メニュー (可変原子選択) から選択する

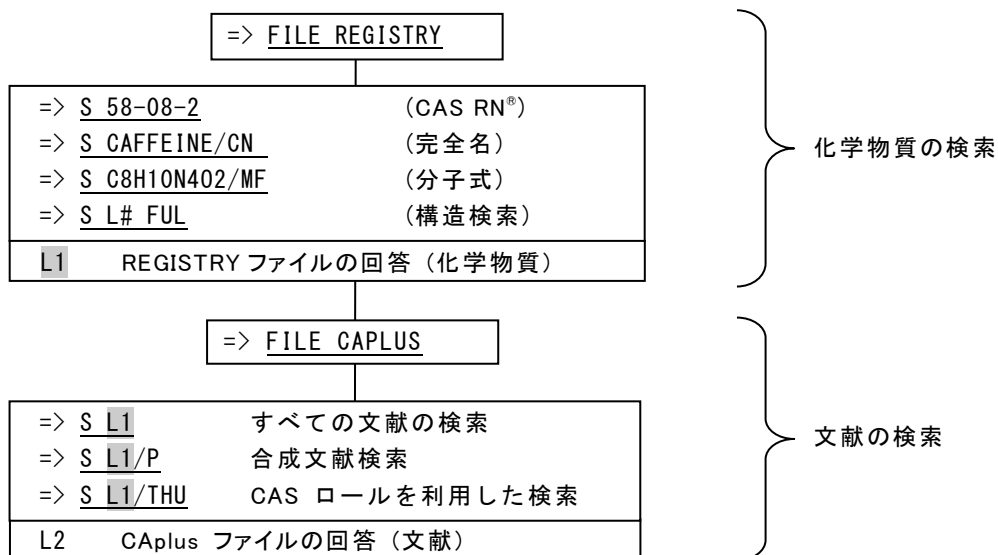
→ 回答は P.86

E クロスオーバー検索

REGISTRY ファイルの L 番号を用いたクロスオーバー検索をすると、その化学物質に関する様々な情報（文献情報、特許情報、毒性・規制情報など）を入手することができます。REGISTRY ファイルと CAplus ファイルなどの文献データベースとの関係も正確に把握しておきましょう。

■ REGISTRY ファイルで検索した回答セットの L 番号を用いてクロスオーバー検索を行うと、その化学物質に関連する文献や物性などの様々な情報を簡単に入手することができる。

- ・ 特に CAS FILES では、化学物質に関する情報を CAS RN[®] で索引しているため、L 番号のクロスオーバー検索をすると網羅性の高い検索ができる。
- ・ REGISTRY ファイルから CAplus ファイルへのクロスオーバー検索の流れ



* CAS ロールを用いた検索は、CAS ロールの付与年代に自動的に限定される。(右ページ参照)

* CAplus/CA ファイルに文献がない場合については APPENDIX 参照。

- ・ クロスオーバー制限値
 - 下記の 7 ファイルでは REGISTRY ファイルからのクロスオーバー制限値は 50 万件
BIOSIS, CAplus/CA, EMBASE, MEDLINE, USPATFULL, USPAT2
 - それ以外の多くのファイルでは 30 万件。

参考 : CAS ロール

■ CAS ロールは、文献中でのその化学物質の役割（ロール）をコード化したもの。
CAplus ファイルで、特定の化学物質（CAS RN[®]）や化合物クラス用語（統制語）と共に
CAS ロールが索引されている。

- ・ ロールの定義は <https://www.jaici.or.jp/stn/pdf/casrole.pdf> を参照。

コード	英語名	定義	備考*1
ANST*2	Analytical Study	分析に関する研究	
ANT	Analyte	分析対象	
AMX	Analytical Matrix	分析マトリックス	
ARG	Analytical Reagent Use	分析試薬用途	
ARU	Analytical Role, Unclassified	上記以外の分析に関する研究	
BIOL*2	Biological Study	生物学的研究	
ADV	Adverse Effect, Including Toxicology	副作用（毒性を含む）	
AGR	Agricultural Use	農業関連用途	
BCP	Biochemical Process	生化学のプロセス	2002-
BMF	Bioindustrial Manufacture	生化学的工業生産	
BPN	Biosynthetic Preparation	生化学的合成	
COS	Cosmetic Use	化粧品用途	2002-
DGN	Diagnostic Use	診断用途	2002-
FFD	Food or Feed Use	食品または飼料用途	
NPO	Natural Product Occurrence	天然物の起源・分布	2002-
PAC	Pharmacological Activity	薬理活性	2002-
PKT	Pharmacokinetics	薬物動態	2002-
THU	Therapeutic Use	医薬用途	
BUU	Biological Use, Unclassified	上記以外の生物関連用途	
BSU	Biological Study, Unclassified	上記以外の生物学的研究	
BAC	Biological Activity or Effector, Except Adverse	生理活性またはエフェクター（副作用を除く）	-2001
CMBI*2	Combinatorial Study	コンビナトリアル・ケミストリーに関する研究	2002-
FORM*2	Formation, Nonpreparative	生成（意図的合成ではない）	
GFM	Geological or Astronomical Formation	地質学的、天文学的生成	
FMU	Formation, Unclassified	上記以外の生成	
NANO*2	Nanomaterial	ナノ材料	1992-
OCCU*2	Occurrence	起源・分布	
GOC	Geological or Astronomical Occurrence	地質学的、天文学的起源・分布	
NPO	Natural Product Occurrence	天然物の起源・分布	2002-
POL	Pollutant	汚染物質	
OCU	Occurrence, Unclassified	上記以外の起源・分布	

コード	英語名	定義	備考*1
PREP*2,3	Preparation	製造	1907-
BMF	Bioindustrial Manufacture	生化学的工業生産	
BPN	Biosynthetic Preparation	生化学的合成	
BYP	Byproduct	副生成物	
IMF	Industrial Manufacture	化学的工業生産	
PUR	Purification or Recovery	精製	
SPN	Synthetic Preparation	化学合成	
PROC*2	Process	プロセス	
PEP	Physical, Engineering or Chemical Process	物理的、工学的、または化学的プロセス	
BCP	Biochemical Process	生化学のプロセス	2002-
GPR	Geological or Astronomical Process	地質学的、天文学的プロセス	
REM	Removal or Disposal	除去または処分	
PRPH*2,4	Prophetic	Prophetic 物質	1993-
RACT*2	Reactant or Reagent	反応物または試薬	
RCT	Reactant	反応物	
RGT	Reagent	試薬	2002-
USES*2	Uses	用途	
AGR	Agricultural Use	農業関連用途	
ARG	Analytical Reagent Use	分析試薬用途	
CAT	Catalyst Use	触媒用途	
COS	Cosmetic Use	化粧品用途	2002-
DGN	Diagnostic Use	診断用途	2002-
FFD	Food or Feed Use	食品または飼料用途	
MOA	Modifier or Additive Use	改良剤または添加物用途	
POF	Polymer in Formulation	ポリマー組成物	
TEM	Technical or Engineered Material Use	工学・工業材料用途	
THU	Therapeutic Use	医薬用途	
BUU	Biological Use, Unclassified	上記以外の生物学的用途	
NUU	Other Use, Unclassified	上記以外の用途	
PRP	Properties	物性	
MSC	Miscellaneous	その他	

*1 表中の備考欄が空欄の CAS ロールの付与年代は、1967 年以降

*2 4 文字コード（網がけのコード）はスーパーロール

*3 PREP のロールは CAS RN[®] 索引に付加されている接尾辞 P と対応

*4 Prophetic 物質の詳細は p.3 参照

検索例

- 検索例：クラリスロマイシン (Clarithromycin : 分子式 $C_{38}H_{69}NO_{13}$) の文献を検索する

=> FILE REGISTRY

=> S 81103-11-9 (CAS RN[®])

=> S CLARITHROMYCIN/CN (完全名)

=> S C38H69NO13/MF (分子式)

=> S L# EXA FUL (構造検索)

L1 REGISTRY ファイルの回答

=> FILE CAPLUS

=> S L1 すべての文献の検索

=> S L1/P 合成文献検索

=> S L1/THU 医薬用途の文献検索

L2 CAplus ファイルの回答

=> FILE REGISTRY

=> E CLARITHROMYCIN/CN

E1	1	CLARITH/CN
E2	1	CLARITHRO/CN
E3	1 -->	CLARITHROMYCIN/CN
E4	1	CLARITHROMYCIN 9-OXIME/CN
E5	1	CLARITHROMYCIN ACETATE/CN
E6	1	CLARITHROMYCIN F/CN
E7	1	CLARITHROMYCIN HYDRAZONE/CN
E8	1	CLARITHROMYCIN IMINE/CN

:

=> S E3

L1 1 CLARITHROMYCIN/CN

=> FILE CAPLUS

=> S L1 ● すべての文献

L2 13055 L1

=> S L1/P ● 合成文献

L3 174 L1/P

=> S L1/THU ● 医薬用途の文献

L4 8459 L1/THU
(L1 (L) THU/RL)

=> S L4 AND PYLORI ● キーワードとの組み合わせ

L5 2208 L4 AND PYLORI

- CAplus ファイル (文献・特許) の主な定型表示形式

		表示形式	内容
書誌情報	非特許文献	BIB ¹⁾ (デフォルト)	書誌情報
	特許	FBIB ¹⁾	書誌情報 (BIB), 関連特許ファミリー情報
		STD ¹⁾	書誌情報 (BIB), すべての特許分類
抄録	ABS	抄録, グラフィック情報 (抄録を説明するための図)	
索引	IND	索引情報 ベーシック特許の特許分類, CC, ST, IT, RL	
全情報	ALL ¹⁾	レコードの全情報 (STD, ABS, IND, 引用・被引用情報)	
	MAX ¹⁾	ALL, 関連特許ファミリー情報	
回答確認用	SCAN	TI, IND (回答番号の指定はできない)	
ヒットターム	HIT	ヒットタームを含むフィールド	
	HITIND	ヒットタームを含む ST・IT・RL, ベーシック特許の IPC・NCL, CC	
	HITPPAK ²⁾	ヒットした CAS RN [®] の PPAK (索引物質の記載ページ)	
	HITRN	ヒットした CAS RN [®] , その CAS ロールとテキスト説明句	
	HITSTR	ヒットした CAS RN [®] , その CAS ロールとテキスト説明句, CA 索引名および構造図	

1) CAS PatentPak 契約者は, さらに CAS PatentPak 関連フィールドが表示される

2) CAS PatentPak 契約者のみ表示可能

=> D L2 SCAN TI HITRN

L2 13055 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 TI Chloramphenicol compositions for treating an MRSA-resistant infection
 IT ● **81103-11-9**
 RL: PAC (Pharmacological activity); THU (Therapeutic use); BIOL
 (Biological study); USES (Uses)
 (chloramphenicol and analogs thereof)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END=> D L3 SCAN TI HITRN

L3 174 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 TI Deprotective reaction in the synthesis of clarithromycin
 IT ● **81103-11-9P**, Clarithromycin
 RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
 (deprotective reaction in synthesis of clarithromycin)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END=> D L4 SCAN TI HITRN

L4 8459 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 TI Drug Effects Viewed from a Signal Transduction Network Perspective
 IT ● **81103-11-9**, Clarithromycin
 RL: PAC (Pharmacological activity); **THU (Therapeutic use)**; BIOL
 (Biological study); USES (Uses)
 (drug effects viewed from a signal transduction network perspective)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END=> D L5 SCAN TI HITRN

L5 2208 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 TI A novel gene associated with clarithromycin resistance of Helicobacter
 ● **pylori**
 IT **81103-11-9**, Clarithromycin
 RL: BSU (Biological study) (**キーワード**); **THU (Therapeutic use)**;
 BIOL (Biological study);
 (resistance to; a novel gene associated with clarithromycin resistance of
 Helicobacter **pylori**)

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

L5 2208 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 TI Preparation of mucoadhesive microspheres containing antimicrobial agents
 for eradication of H. **pylori**

IT **81103-11-9**, Clarithromycin
 RL: PRP (Properties); **THU (Therapeutic use)**; BIOL (Biological
 study); USES (Uses)
 (preparation of mucoadhesive microspheres containing antimicrobial agents for
 eradication of H. **pylori**)

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

CAS RN® とキーワードを同一索引中に
 限定したい場合は (L) 演算子を利用する

■ 検索例 : P.45 でフルファイル検索の結果として得られた L3 の合成文献を検索する

=> FILE REGISTRY

:

=> S L1 FUL

L3 6848 SEA SSS FUL L1

C 章参照

=> FILE CAPLUS=> S L3/P

L4 796 L3/P

REGISTRY ファイルで得られた L 番号に/P を付けると
合成文献検索ができる=> D 1-50 BIB ABS HITSTR HITPPAK

* HITPPAK 表示形式は CAS PatentPak 契約者のみ表示可能

L4 ANSWER 42 OF 796 CAPLUS COPYRIGHT 2021 ACS on STN

[PatentPak PDF](#) | [PatentPak PDF+](#) | [PatentPak Interactive](#)

AN 2020:1258448 CAPLUS Full-text

DN 173:457231

TI Fused heterocyclic aromatic hydrocarbon derivative, its preparation and
application as cover material of optical device

IN Wang, Lei; Guo, Runda; Zhuang, Shaoqing

PA Huazhong University of Science and Technolo

SO Faming Zhuanli Shenqing, 28pp.

CODEN: CNXXEV

DT Patent

LA Chinese

FAN CNT 1

CAS PatentPak 契約者は、
BIB 表示形式に物質情報付き明細書
や明細書 PDF のリンクが含まれる

PPPI

PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
CN 111349090	A	20200630	Chinese	PDF PDF+ Interactive

PI

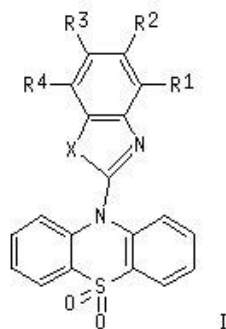
PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
CN 111349090	A	20200630	CN 2020-10021574	20200109
PRAI CN 2020-10021574		20200109		

PSPI

PATENT NO.	KIND	STATUS	STATUS DATE
CN 111349090	A	Alive	20201121

OS CASREACT 173:457231; MARPAT 173:457231

GI



AB One fused heterocyclic arom. hydrocarbon deriv. I is prepd. (wherein X is selected from O, S or O:S:O; R1, R2, R3, and R4 are each independently selected from an alkyl group, an aryl group with 6-30 ring carbon nos. which is substituted or unsubstituted by a substituent, a heteroaryl group with 3-30 ring carbon nos. which is substituted or unsubstituted by a

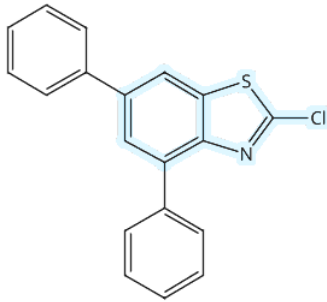
IT **2479518-23-3P** **2479518-26-6P** **2479518-29-9P**
2479518-32-4P **2479518-35-7P** **2479518-38-0P**
2479518-40-4P **2479518-42-6P**

RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT
 (Reactant or reagent)

(prepn. and application of fused heterocyclic arom. hydrocarbon deriv.
 as cover material of optical device)

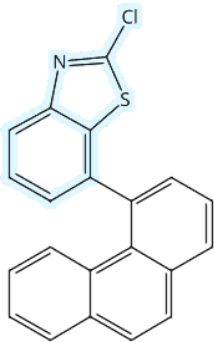
RN 2479518-23-3 CAPLUS

CN Benzothiazole, 2-chloro-4,6-diphenyl- (CA INDEX NAME)



RN 2479518-26-6 CAPLUS

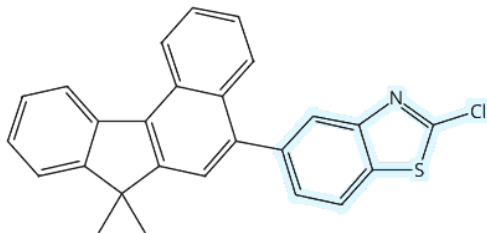
CN Benzothiazole, 2-chloro-7-(4-phenanthrenyl)- (CA INDEX NAME)



HITSTR 表示形式で表示すると、
 ヒットした物質の CA 索引名と構造を確認できる

CN Benzothiazole, 2-chloro-5-(7,7-dimethyl-7H-benzo[c]fluoren-5-yl)- (CA
 INDEX NAME)

RN 2479518-29-9 CAPLUS



PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive

PPAK

2479518-23-3P, Pg 15
 2479518-26-6P, Pg 15
 2479518-29-9P, Pg 16
 2479518-32-4P, Pg 17
 2479518-35-7P, Pg 17
 2479518-38-0P, Pg 18
 2479518-40-4P, Pg 19
 2479518-42-6P, Pg 19

CAS PatentPak 契約者は、HITPPAK 表示形式
 で表示すると、ヒットした物質の明細書中での記載
 ページが確認できる

参考 : 特許調査を効率化する CAS PatentPak

■ CAS PatentPak は、特許調査を効率化するオプション機能である。CAPLUS ファイルのレコードに索引された重要な物質が、明細書のどこに記載されているのかすぐに確認できる。

- ・ CAS PatentPak 契約者が、以下の定型表示形式を使うと、通常が表示に加え、CAS PatentPak 関連フィールドが表示される。

内容	表示形式	内容
書誌情報	BIB (デフォルト)	書誌情報 レコード番号の上に CAS PatentPak 関連リンク, PPPI
	STD	書誌情報, すべての特許分類 レコード番号の上に CAS PatentPak 関連リンク, PPPI, PPAK
全情報	ALL	レコードの全情報 レコード番号の上に CAS PatentPak 関連リンク, PPPI, PPAK
	MAX	ALL, 関連特許ファミリー情報 レコード番号の上に CAS PatentPak 関連リンク, PPPI, PPAK
ヒットターム	HITPPAK	ヒットした CAS RN® の PPAK

- ・ レコード例 (ALL 表示形式)

特許明細書
(ベーシック特許)

化学物質リスト付き明細書
(ベーシック特許)

物質情報付き明細書
(Interactive)

PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive

```

AN 2013:764953 CAPLUS Full-text
DN 158:711339
ED Entered STN: 16 May 2013
TI Substituted pyrazo
:
PPPI
PATENT NO.      KIND  DATE      LANGUAGE  PatentPak
-----
WO 2013068467   A1    20130516  English   PDF | PDF+ | Interactive
KR 2014091042   A     20140718  Korean    PDF
JP 2014532746   T     20141208  Japanese  PDF
:
PI
PATENT NO.      KIND  DATE      APPLICATION NO.      DATE
-----
WO 2013068467   A1    20130516   WO 2012-EP72146     20121108
:
IT 1255040-62-0P 1255040-65-3P 1255041-18-9P 1402582-01-7P
1402582-02-8P 1402582-03-9P 1402582-04-0P 1402582-05-1P
:
RL: PAC (Pharmacological activity); SPN (Synthetic preparation); THU
(Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)
:
PPAK
1402582-06-2P, Pg 89
1255040-62-0P, Pg 86
1255040-65-3P, Pg 88
1255041-18-9P, Pg 87
:
1402586-52-0P, Pg 65
1435477-47-6P, Pg 53

```

特許明細書
(ベーシック特許)

化学物質リスト付き明細書
(ベーシック特許)

物質情報付き明細書
(Interactive)

対応特許の明細書

索引物質が記載されたページへのリンク
(Interactive)

■ 物質情報付き明細書 (Interactive)

- レコード上の [PatentPak Interactive](#) リンクまたは PPPI フィールド中の [Interactive](#) リンクをクリックすると、特許中の索引物質のリストと特許明細書が同一画面で表示される Interactive Viewer が開く。

PPPI

PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
WO 2013068467	A1	20130516	English	PDF PDF+ Interactive

The screenshot shows the PatentPak interface for patent WO 2013/068467. The main content is a chemical reaction scheme for the preparation of methyl phenyl (3-tert-butyl-1-(3-chlorophenyl)-1H-pyrazol-5-yl)methylcarbamate. A box labeled '物質情報' (Material Information) points to the reactant structure, and another box labeled '明細書' (Specification) points to the reaction text. The text describes step a: To a solution of (3-tert-butyl-1-(3-chlorophenyl)-1H-pyrazol-5-yl)methanamine (5 g, 18 mmol) in dimethylformamide (25 mL), potassium carbonate (9.16 g, 66 mmol, 3.5 eq) was added and cooled the contents to 0 °C. Then phenyl chloroformate (3.28 g (2.65 mL), 20 mmol, 1.1 equivalents) was added dropwise for 15 minutes and the overall reaction mixture was stirred for another 15 minutes at 0 °C. Progress of the reaction was monitored by TLC (20% ethyl acetate on hexane). On completion of the reaction, reaction contents were filtered.



明細書中のマークをクリックすると、該当する化学物質が左側の物質情報に表示される。
明細書に構造情報がない場合でも、左側の物質情報で構造を確認しながら明細書を読むことができる

- PPAK フィールド中の記載ページのリンクをクリックすると、明細書の索引化合物記載ページをダイレクトに確認できる。

PPAK

1402582-06-2P,	Pg 89
1255040-62-0P,	Pg 86
1255040-65-3P,	Pg 88
1255041-18-9P,	Pg 87
:	
1402586-52-0P,	Pg 65
1435477-47-6P,	Pg 53

The screenshot shows the PatentPak interface for patent WO 2013/068467. The main content is a list of key substances in the patent. A box labeled '物質の記載ページ' (Material's Page) points to the list of substances. The list includes:

- E53 4-[[1-[[5-tert-Butyl-2-(3-chlorophenyl)-2-fluoro-N-thiazol-2-yl-ethyl]-2-chloro-4-[[[2-(3-chlorophenyl)carbamoyl]amino]-benzoic acid;
- E54 4-[[[5-tert-Butyl-2-(3-chlorophenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-methyl-carbamoyl]amino]-2-methoxy-benzoic acid;
- E55 4-[[[5-tert-Butyl-2-(3-chlorophenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-methyl-carbamoyl]amino]-2-methoxy-benzoic acid;
- E56 4-[[[5-tert-Butyl-2-(3-chlorophenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-methyl-carbamoyl]amino]-2-methoxy-benzoic acid methyl ester;
- E57 4-[[[2-(3-Chlorophenyl)-5-(trifluoromethyl)-2H-pyrazol-3-yl]-methyl-carbamoyl]amino]-2-methoxy-benzoic acid methyl ester;
- E58 2-Chloro-4-[[[2-(3-chlorophenyl)-5-(trifluoromethyl)-2H-pyrazol-3-yl]-methyl-carbamoyl]amino]-benzoic acid methyl ester;
- E60 4-[[[5-tert-Butyl-2-(3-chlorophenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-methyl-carbamoyl]amino]-2-chloro-benzoic acid methyl ester; and

参考 : CAplus/CA ファイルから REGISTRY ファイルへのクロスオーバー

- CAplus ファイルでは、特定化学物質は CAS RN® で索引されている。
索引物質の名称や構造を知りたい場合は REGISTRY ファイルで検索する。
- ・ 確認したい物質 (CAS RN®) が少ない場合は REGISTRY ファイルで直接 1 件ずつ検索してもよいが、件数が多い場合は SELECT コマンドを利用するとよい。
- ・ SELECT コマンドを利用すると、CAplus ファイルで索引されている全物質 (CAS RN®) を抽出し、REGISTRY ファイルでまとめて検索できる。

=> FILE CAPLUS

:

=> D ALL

L1 ANSWER 1 OF 1 CAPLUS COPYRIGHT 2021 ACS on STN

PatentPak PDF

AN 2006:593923 CAPLUS Full-text

DN 145:188859

ED Entered STN: 21 Jun 2006

TI Preparation of naphthothiazole derivatives as anticancer agents

IN Qian, Xuhong; Li, Zhigang; Yang, Qing; Xu, Yufang; Ding, Jian; Lin, Liping Institute

PA East China University of Science and Technology, Peop. Rep. China;

Shanghai Institute of Materia Medica, Chinese Academy of Sciences; Dalian University of Technology

SO Faming Zhuanli Shenqing Gongkai Shuomingshu, 18 pp.

CODEN: CNXXEV

DT Patent

:

IT Antitumor agents

Cytotoxic agents

Human

Neoplasm

(prepn. of naphthothiazole derivs. as ant

IT Disease, animal

(proliferative, genetic mutation; prepn.

anticancer agents)

IT 851673-88-6P 902780-18-1P 902780-19-2P

RL: PAC (Pharmacological activity); RCT (Reactant); SPN (Synthetic

preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP

(Preparation); RACT (Reactant or reagent); USES (Uses)

(drug candidate; prepn. of naphthothiazole derivs. as anticancer agents)

IT 851673-86-4P 851673-87-5P 851673-89-7P 861389-55-1P 861389-56-2P

861389-57-3P 861389-58-4P 862135-87-3P 862135-88-4P 862135-89-5P

862135-90-8P 902780-17-0P 902780-20-5P 902780-21-6P

RL: PAC (Pharmacological activity); SPN (Synthetic preparation); THU

(Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)

(drug candidate; prepn. of naphthothiazole derivs. as anticancer agents)

IT 167541-85-7P 851673-90-0P 851673-91-1P 862135-86-2P

RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT

(Reactant or reagent)

(intermediate; prepn. of naphthothiazole derivs. as anticancer agents)

IT 100-36-7, N,N-Diethyl-1,2-ethanediamine 108-00-9, N,N-Dimethyl-1,2-

ethanediamine 109-55-7, N,N-Dimethyl-1,3-propanediamine 140-31-8,

1-Piperazineethanamine 23204-38-8 52821-19-9 99634-43-2

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

(prepn. of naphthothiazole derivs. as anticancer agents)

CAplus/CA ファイルでは化学物質が
CAS RN® で索引されている。
化学物質の構造や名前は表示されない

REGISTRY ファイルで確認する

=> SEL L1 1 RN ● L1 の 1 番目の回答から CAS RN® を抽出する
 E1 THROUGH E28 ASSIGNED

抽出したタームには E 番号が付与される

=> D SEL ● 抽出したタームを表示して確認する

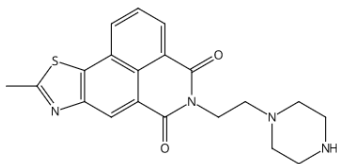
E1 1 100-36-7/BI
 E2 1 108-00-9/BI
 E3 1 109-55-7/BI
 :
 E28 1 99634-43-2/BI

=> FILE REGISTRY } REGISTRY ファイルに入り, E 番号を検索する

=> S E1-28
 L2 28 (100-36-7/BI OR 108-00-9/BI OR 109-55-7/BI OR 140-31-8/BI OR ...)

=> D SCAN

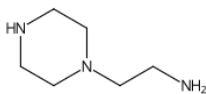
L2 28 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 IN 4H-Benzo[de]thiazolo[5,4-g]isoquinoline-4,6(5H)-dione,
 9-methyl-5-[2-(1-piperazinyl)ethyl]-
 MF C20 H20 N4 O2 S



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

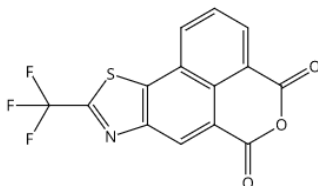
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):27

L2 28 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 IN 1-Piperazineethanamine
 MF C6 H15 N3
 CI COM



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

L2 28 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 IN 4H,6H-[2]Benzopyrano[4,5-fg]benzothiazole-4,6-dione, 9-(trifluoromethyl)-
 MF C14 H4 F3 N O3 S



:

CAplus ファイルのレコード中に
索引されていた物質



まとめ

- ・ 化学物質に関する文献を検索する場合は、REGISTRY ファイルの検索結果として得られた L 番号を用いて、CAplus ファイルで検索する（クロスオーバー検索）。
- 接尾辞や CAS ロールを利用すると、物質の文献中での役割を限定した検索を簡単に行うことができる。
- CAplus ファイルで CAS RN[®] と CAS ロールおよびキーワードを掛け合わせるときは、(L) 演算子を用いる。



練習問題

5. 練習問題 4 で得た物質について CAplus ファイルで特許情報を得る。回答は、ALL HITSTR HITPPAK 表示形式で出力する。

〔ヒント〕 化学物質に関する文献を検索するには、REGISTRY ファイルの L 番号を CAplus ファイルで検索する。

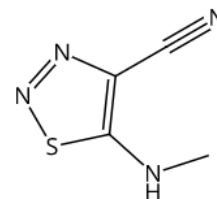
回答は p.88

練習問題



練習問題

- 練習問題 1 : 右図の物質を分子式や部分名を使って検索する。
回答は FIDE 表示形式で表示する。

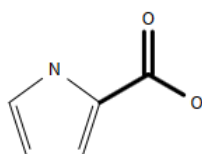


- [ヒント] ・ 分子式は Hill 方式に従って入力し /MF で検索する。
 ・ 分子式の検索結果の回答が多い場合は部分名で限定する。
 - 化学物質の部分名は基本索引で検索する。
 - 部分名の例 : THIADIAZOLE, METHYLAMIN, CARBONITRILE, NITRILE, AMIN 等

- 練習問題 2 : メタクリル酸エチル (CAS RN® 97-63-2) を含む 2 種類のモノマーからなるポリマーを検索する。

- [ヒント] ・ メタクリル酸エチルの CAS RN® を /GRN で検索する。
 ・ クラス識別子 (/CI), 成分クラス識別子 (/CCI) を利用してポリマーに限定する。
 ・ 成分数 (/NC) で限定する。

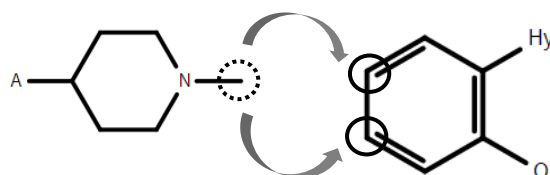
- 練習問題 3 : 下図の部分構造を含む物質を検索する。



(条件) 作図した以外の環が縮合しても、しなくてもよい。

- [ヒント] 置換基や縮環を許容する場合は、特別な指定はせずに部分構造検索を実行する。

- 練習問題 4 : 点線枠で囲った炭素が、ベンゼン環の実線枠で囲った 2 箇所のいずれかの炭素に結合する構造を検索する。



(条件)

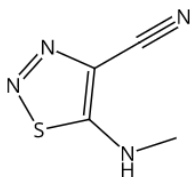
- ・ 環はこれ以上縮合しない。
- ・ Hy はヘテロ環, A は水素以外の原子

- [ヒント] ・ 可変置換位置を利用して 1 つの構造質問式を作図する。
 ・ 環を縮合させないためには環の孤立化を行う。
 ・ Hy, A は X メニュー (可変原子選択) から選択する

- 練習問題 5 : 練習問題 4 で得た物質について CPlus ファイルで特許情報を得る。
回答は, ALL HITSTR HITPPAK 表示形式で出力する。

- [ヒント] 化学物質に関する文献を検索するには, REGISTRY ファイルの L 番号を CPlus ファイルで検索する。

練習問題 1 : 下図の物質の辞書検索



分子式の記述は Hill 方式に従う

- 炭素を含む物質は炭素, 水素, その他の元素のアルファベット順 : C₄H₄N₄S

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> E C4H4N4S/MF

← 完全分子式 (/MF) で EXPAND する

E1 1 C4H4N4PDS4ZN/MF
 E2 1 C4H4N4PTS4/MF
 E3 118 --> C4H4N4S/MF
 E4 2 C4H4N4S.C2HF3O2/MF
 E5 1 C4H4N4S.CH3CLO4/MF
 :

=> S E3

← E 番号を用いて検索する

L1 118 C4H4N4S/MF

=> S L1 AND THIADIAZOLE?

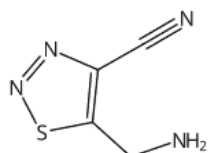
← 部分名で限定する

 397171 THIADIAZOLE?
 L2 17 L1 AND THIADIAZOLE?

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する

L2 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 IN 1,2,3-Thiadiazole-4-carbonitrile, 5-(aminomethyl)-
 MF C4 H4 N4 S



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):16 ← 残りの 16 件も表示する

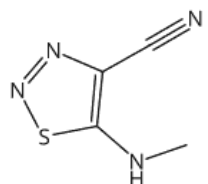
:

L2 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN

IN 1,2,3-Thiadiazole-4-carbonitrile, 5-(methylamino)-

MF C4 H4 N4 S

SCAN 表示形式に含まれていた名称をコピー

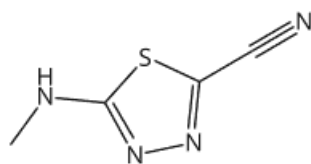


目的物質

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

:

L2 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 IN 1,3,4-Thiadiazole-2-carbonitrile, 5-(methylamino)-
 MF C4 H4 N4 S



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> E 1,2,3-Thiadiazole-4-carbonitrile, 5-(methylamino)-/CN

コピーした名称をペーストし、
完全名 (/CN) で EXPAND
する

E1 1 1,2,3-THIADIAZOLE-4-CARBONITRILE, 5-(MERCAPTOMETHYL)-/CN
 E2 1 1,2,3-THIADIAZOLE-4-CARBONITRILE, 5-(METHOXYMETHYL)-/CN
 E3 1 --> 1,2,3-THIADIAZOLE-4-CARBONITRILE, 5-(METHYLAMINO)-/CN
 E4 1 1,2,3-THIADIAZOLE-4-CARBONITRILE, 5-(METHYLTHIO)-/CN
 E5 1 1,2,3-THIADIAZOLE-4-CARBONITRILE, 5-(PHENOXYMETHYL)-/CN
 :

=> S E3

L3 1 "1,2,3-THIADIAZOLE-4-CARBONITRILE, 5-(METHYLAMINO)-"/CN

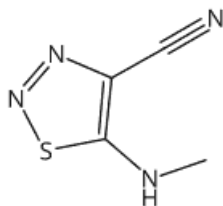
=> D FIDE

← FIDE 表示形式で表示する

L3 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 RN 117971-49-0 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Dec 1988
 CN 1,2,3-Thiadiazole-4-carbonitrile, 5-(methylamino)- (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN 5-(Methylamino)-1,2,3-thiadiazole-4-carbonitrile
 MF C4 H4 N4 S
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, REAXYSFILE*
 (*File contains numerically searchable property data)
 DT.CA CPlus document type: Journal
 RL.NP Roles from non-patents: PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)

Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C2N2S	N2SC2	5	C2N2S	16.308.6	1



練習問題

Experimental Properties (EPROP) ← 実測物性値

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(1) WSR
Mass Spectra	Spectrum		(2) WSS
Melting Point (MP)	138 deg C		(3) IC
Melting Point (MP)	138 deg C	Solv: ethanol (64-17-5), water (7732-18-5)	(4) IC

Spectra may be displayed by clicking the link in the bulk using the SPEC or MAX formats.

- (1) Wolfgang Robien / University of Vienna from Wiley Subscription Services, Inc.
- (2) Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc.
- (3) Bakulev, V. A.; Tetrahedron 1989 V45
- (4) Dankova, E. F.; Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Khimicheskaya 1988(5) P1126-8 CAPLUS

Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
IR Absorption Spectra	(1) IC
Mass Spectra	(1) IC
NMR Spectra	(1) IC
Proton NMR Spectra	(1) IC

- (1) Dankova, E. F.; Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Khimicheskaya 1988(5) P1126-8 CAPLUS

Predicted Properties (PPROP) ← 予想物性値

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	2.60	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	2.60	pH 2 25 deg C	(1)
Density (DEN)	1.40+/-0.1 g/cm**3	20 deg C 760 Torr	(1)
Enthalpy of Vap. (HVP)	58.71+/-3.0 kJ/mol	760 Torr	(1)
Flash Point (FP)	161.4+/-30.7 deg C		(1)
Freely Rotatable Bonds (FRB)	1		(1)
H acceptors (HAC)	4		(1)
logP (LOGP)	0.849+/-0.762	25 deg C	(1)
Mass Intrinsic Solubility (ISLB.MASS)	9.4 g/L	25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	9.4 g/L	pH 1 25 deg C	(1)
Molecular Weight (MW)	140.17		(1)
pKa (PKA)	-3.18+/-0.42	Most Basic 25 deg C	(1)
Polar Surface Area (PSA)	89.84 A**2		(1)
Vapor Pressure (VP)	7.14E-05 Torr	25 deg C	(1)

- (1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02 ((C) 1994-2021 ACD/Labs)

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

3 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

3 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

Spectrum リンクをクリックするとスペクトルデータが表示される

- ・ スペクトルデータは SPEC または MAX 表示形式でも表示可能

Carbon-13 NMR Spectra

Spectrum ID: CNMR_MHK0015268
Source: Wolfgang Robien / University of Vienna (Spectral Data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)).

練習問題 2 : メタクリル酸エチルを含む 2 成分ポリマーの検索

=> FILE REGISTRY

=> S 97-63-2/CRN AND PMS/CI,CCI
L1 8726 97-63-2/CRN AND PMS/CI,CCI

メタクリル酸エチルの CAS RN® を /CRN で検索し、
クラス識別子と成分クラス識別子を用いてポリマーに
限定する

=> S L1 AND 2/NC
L2 901 L1 AND 2/NC

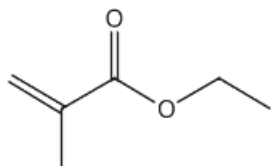
← 2 成分に限定する

=> D SCAN

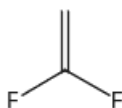
← SCAN 表示形式で表示する

L2 901 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, ethyl ester, polymer with 1,1-difluoroethene, diblock
MF (C6 H10 O2 . C2 H2 F2)x
CI PMS

CM 1

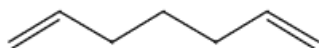


CM 2

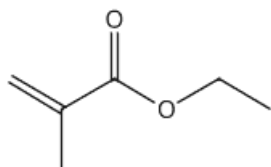
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L2 901 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, ethyl ester, polymer with 1,6-heptadiene
MF (C7 H12 . C6 H10 O2)x
CI PMS

CM 1

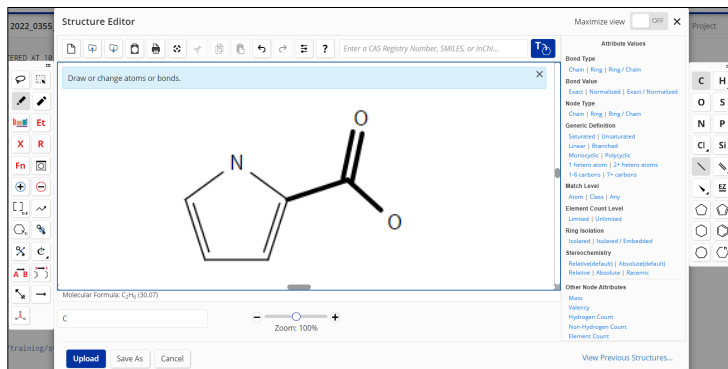


CM 2

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

練習問題 3 : 部分構造検索

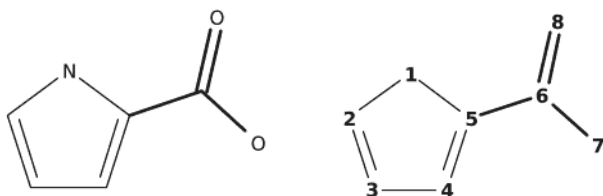
=> FILE REGISTRY



=>

Uploading structure file: 2021_0120_Structure

← 構造質問式をアップロード



Node Attributes

Ring Nodes : 1 2 3 4 5

Chain Nodes : 6 7 8

Bond Attributes

Ring Bonds : 1-2 2-3 3-4 4-5 5-1

Chain Bonds : 5-6 6-7 6-8

Exact Bonds : 5-6

Exact/Normalized Bonds : 1-2 2-3 3-4 4-5 5-1 6-7 6-8

Markush Attributes

Match Level (ATOM) : 1 2 3 4 5

Match Level (CLASS) : 6 7 8

Element Count Level (LIMITED) : 1 2 3 4 5 6 7 8

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

← 部分構造検索 (SSS) のサンプル検索を実行

SAMPLE SEARCH INITIATED 11:36:43

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 161921 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 161921 ITERATIONS

50 ANSWERS

INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)

SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
 BATCH **COMPLETE**
 PROJECTED ITERATIONS: 3214431 TO 3262409
 PROJECTED ANSWERS: 282898 TO 297342

サンプル検索を実行し、
 「ONLINE **COMPLETE**」
 であることを確認する

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

← フルファイル検索を実行

FULL SEARCH INITIATED 11:36:48

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 3239512 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 3239512 ITERATIONS

289314 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.03

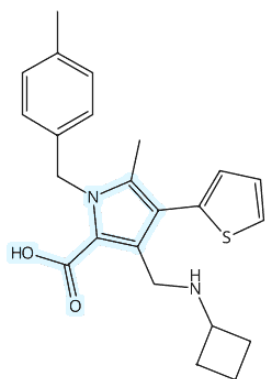
L3 289314 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN

L3 289314 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN

IN 1H-Pyrrole-2-carboxylic acid, 3-[(cyclobutylamino)methyl]-5-methyl-1-[(4-methylphenyl)methyl]-4-(2-thienyl)-

MF C23 H26 N2 O2 S



作図した構造にあらゆる置換基を
許容した物質がヒット

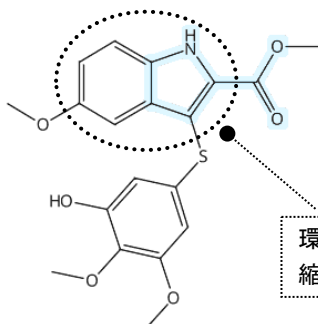
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

L3 289314 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN

IN 1H-Indole-2-carboxylic acid, 3-[(3-hydroxy-4,5-dimethoxyphenyl)thio]-5-methoxy-, methyl ester

MF C19 H19 N O6 S



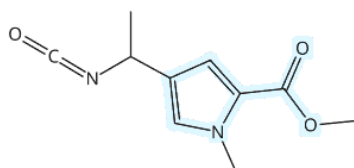
環の孤立化を指定していないため
縮環した物質も得られる

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

L3 289314 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN

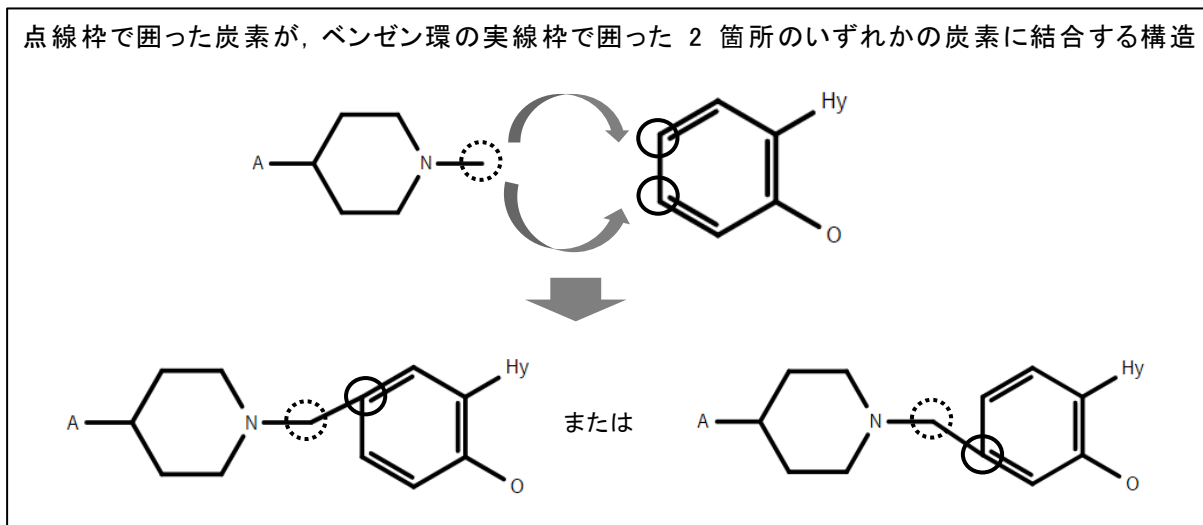
IN 1H-Pyrrole-2-carboxylic acid, 4-(1-isocyanatoethyl)-1-methyl-, methyl ester

MF C10 H12 N2 O3

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

練習問題 4 : 可変置換位置を用いた構造質問式の検索

点線枠で囲った炭素が、ベンゼン環の実線枠で囲った 2 箇所のいずれかの炭素に結合する構造

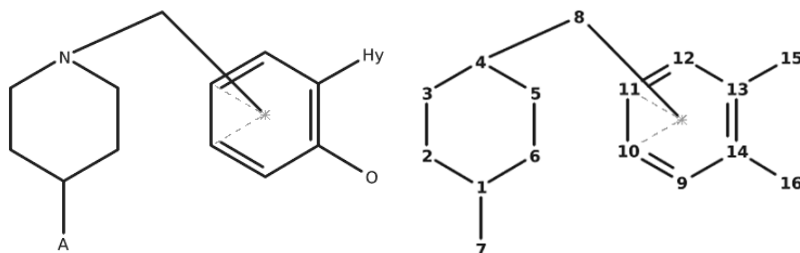


=> FILE REGISTRY

=>

Uploading structure file: 2021_0121_Structure

← 構造質問式をアップロード



Node Attributes

Ring Nodes : 1 2 3 4 5 6 9 10 11 12 13 14

Isolated Ring Nodes : 1 2 3 4 5 6 9 10 11 12 13 14

← 環の孤立

Chain Nodes : 7 8 16

Bond Attributes

Ring Bonds : 1-2 2-3 3-4 4-5 5-6 6-1 9-10 10-11 11-12 12-13 13-14 14-9

Chain Bonds : 1-7 4-8 8-17 13-15 14-16

Normalized Bonds : 9-10 10-11 11-12 12-13 13-14 14-9

Exact/Normalized Bonds : 1-2 1-7 2-3 3-4 4-5 4-8 5-6 6-1 8-17 13-15 14-16

:

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1 ← 部分構造検索 (SSS) のサンプル検索を実行する

SAMPLE SEARCH INITIATED 14:59:45
 SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 251196 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 251196 ITERATIONS 21 ANSWERS
 SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
 BATCH **COMPLETE**
 PROJECTED ITERATIONS: 4994145 TO 5053695
 PROJECTED ANSWERS: 146 TO 694

L2 21 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL ← フルファイル検索を実行する

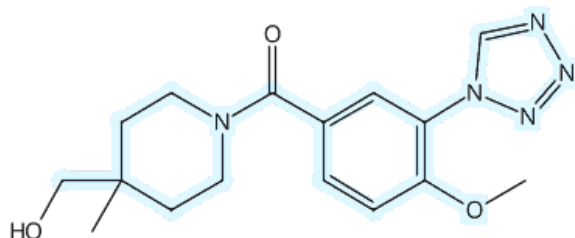
FULL SEARCH INITIATED 15:00:32
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 5031629 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 5031629 ITERATIONS 563 ANSWERS
 SEARCH TIME: 00.00.04

L3 563 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で表示する

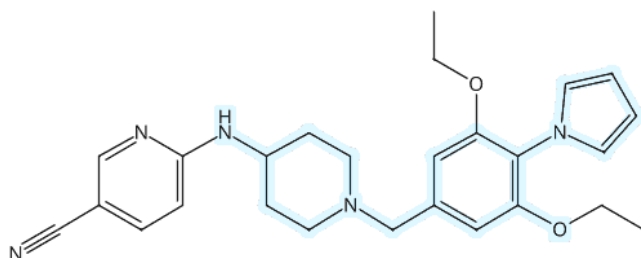
L3 563 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 IN Methanone, [4-(hydroxymethyl)-4-methyl-1-piperidiny][4-methoxy-3-(1H-tetrazol-1-yl)phenyl]-
 MF C16 H21 N5 O3



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

L3 563 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN
 IN 3-Pyridinecarbonitrile, 6-[[1-[[[3,5-diethoxy-4-(1H-pyrrol-1-yl)phenyl]methyl]-4-piperidiny]amino]-
 MF C26 H31 N5 O2



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

練習問題 5 : 練習問題 4 で得た物質の特許調査

=> D HIS

```

FILE 'REGISTRY'
L1          STRUCTURE UPLOADED
L2          21 S L1
L3          563 S L1 FUL

```

=> FILE CAPLUS ← *Caplus* ファイルに入る=> S L3 ← *L3* をクロスオーバー検索する

L4 47 L3

=> S L4 AND P/DI ← 特許に限定する

L5 41 L4 AND P/DI

=> D 1 41 ALL HITSTR HITPPAK ← *ALL HITSTR HITPPAK* 表示形式で出力

```

L5 ANSWER 1 OF 41 CAPLUS COPYRIGHT 2021 ACS on STN
PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive
AN 2021:920120 CAPLUS Full-text
DN 174:876336
ED Entered STN: 22 Apr 2021
TI Bifunctional molecules containing an E3 ubiquitin ligase binding moiety
linked to a BCL6 targeting moiety and their preparation
IN Berlin, Michael; Dong, Hanqing; Sherman, Dan; Snyder, Lawrence; Wang,
Jing; Zhang, Wei
PA Arvinas Operations, Inc., USA
SO PCT Int. Appl., 968pp.
CODEN: PIXXD2
DT Patent
LA English
CLMN 1
CC 28-16 (Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom))
Section cross-reference(s): 1, 63
FAN. CNT 1
PPPI

```

HITPPAK は、ヒットした索引化合物の明細書の記載ページへのリンクであり、一部の特許レコードで有効 (CAS PatentPak 契約者対象)

PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
WO 2021077010	A1	20210422	English	PDF PDF+ Interactive

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
WO 2021077010	A1	20210422	WO 2020-US56145	20201016
PRA1 US 2019-62916588	P	20191017		

PATENT NO.	KIND	STATUS	STATUS DATE
WO 2021077010	A1	Alive	20210506

PATENT NO.	CLASS	PATENT FAMILY CLASSIFICATION CODES
WO 2021077010	IPC1	C07D0401-14 [I]; C07D0405-14 [I]; C07D0413-14 [I]; C07D0417-14 [I]; C07D0471-10 [I]; C07D0487-04 [I]; C07D0487-08 [I]; C07D0487-10 [I]; C07K0005-06 [I]; A61K0031-55 [I]; A61K0031-4704 [I]; A61K0031-506 [I]; A61P0035-00 [I]
	IPCR	C07D0401-14 [I]; A61K0031-4704 [I]; A61K0031-506 [I]; :

- AB Bifunctional compds. of formula I, which find utility as modulators of B-cell lymphoma 6 protein (BCL6; target protein), are described herein. Bifunctional compds. of formula I wherein ULM is a small E3 ubiquitin
 ST bifunctional mol prepn BCL6 protein degrader
 IT Lymphoblastic lymphoma
 IT 2640385-06-2P, 5-(4-(3-(4-(5-Chloro-4-((1-methyl-2-oxo-3-(2-oxopropoxy)-1,2-dihydroquinolin-6-yl)amino)pyrimidin-2-yl)piperazin-1-yl)propyl)piperazin-1-yl)-2-(2,6-dioxopiperidin-3-yl)isoindoline-1,3-dione
 2640386-54-3P 2640386-55-4P 2640386-56-5P 2640386-57-6P
 2640386-58-7P 2640386-59-8P **2640386-60-1P** 2640386-61-2P

PPAK

67-56-1, Methanol, Pg 393

2640386-54-3P, Pg 723

2640386-55-4P, Pg 723

2640386-59-8P, Pg 725

2640386-60-1P, Pg 725

2640386-61-2P, Pg 726

2640389-86-0P, Pg 572

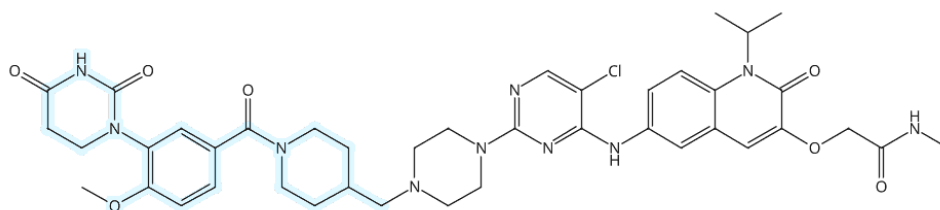
2640389-87-1P, 2-(2,6-Dioxopiperidin-3-yl)-5-[1-[1-(piperidin-4-yl)cyclopropyl]piperidin-4-yl]isoindole-1,3-dione, Pg 573

IT **2640386-54-3P** **2640386-60-1P**

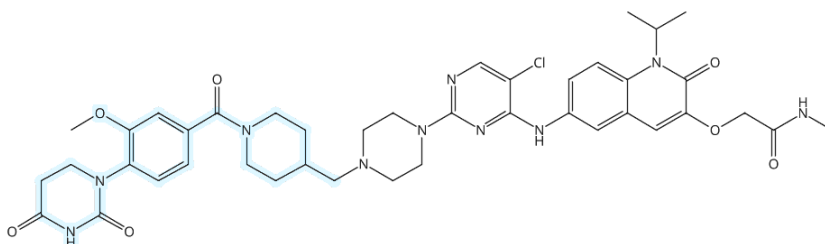
RL: PAC (Pharmacological activity); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses) (prepn. of bifunctional mols. contg. an E3 ubiquitin ligase binding moiety linked to a BCL6 targeting moiety)

RN **2640386-54-3** CAPLUS

CN Acetamide, 2-[[6-[[5-chloro-2-[4-[[1-[4-methoxy-3-(tetrahydro-2,4-dioxo-1(2H)-pyrimidinyl)benzoyl]-4-piperidinyl]methyl]-1-piperazinyl]-4-pyrimidinyl]amino]-1,2-dihydro-1-(1-methylethyl)-2-oxo-3-quinolinyl]oxy]-N-methyl- (CA INDEX NAME)

RN **2640386-60-1** CAPLUS

CN Acetamide, 2-[[6-[[5-chloro-2-[4-[[1-[3-methoxy-4-(tetrahydro-2,4-dioxo-1(2H)-pyrimidinyl)benzoyl]-4-piperidinyl]methyl]-1-piperazinyl]-4-pyrimidinyl]amino]-1,2-dihydro-1-(1-methylethyl)-2-oxo-3-quinolinyl]oxy]-N-methyl- (CA INDEX NAME)



PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive

PPAK

2640386-54-3P, Pg 723

2640386-60-1P, Pg 725

HITSTR

HITPPAK

L5 ANSWER 41 OF 41 CAPLUS COPYRIGHT 2021 ACS on STN

PatentPak PDF

AN 1995:511433 CAPLUS Full-text

DN 123:198624

OREF 123:35453a, 35456a

ED Entered STN: 27 Apr 1995

TI Preparation of N-benzoylpiperidine-4-amines as peripheral vasodilators

IN Fujioka, Takafumi; Teramoto, Shuji; Tanaka, Michinori; Shimizu, Hiroshi;

Tabusa, Fujio; Tominaga, Michiaki

PA Otsuka Pharmaceutical Co., Ltd., Japan

SO PCT Int. Appl., 505 pp.

CODEN: PIXXD2

DT **Patent**

LA English

CLMN 1

CC 27-16 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))

Section cross-reference(s): 1

FAN. CNT 1

PPPI

PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
WO 9422826	A1	19941013	English	<u>PDF</u>

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
WO 9422826	A1	19941013	WO 1994-JP549	19940404
CA 2136999	A1	19941013	CA 1994-2136999	19940404
CA 2136999	C	20040511		
AU 9462928	A	19941024	AU 1994-62928	19940404
AU 674207	B2	19961212		

PRAI

JP 1993-80712	A	19930407
WO 1994-JP549	W	19940404
US 1994-347454	A3	19941206
US 1997-794322	A3	19970203

PSPPI

PATENT NO.	KIND	STATUS	STATUS DATE
WO 9422826	A1	Dead	20201106
CA 2136999	A1	Dead	20201107
CA 2136999	C	Dead	20201106

CLASS

PATENT NO.	CLASS	PATENT FAMILY CLASSIFICATION CODES
WO 9422826	IPC1	C07D0211-58 [ICM, 5]; C07D0401-06 [ICS, 5]; C07D0401-10 [ICS, 5]; C07D0211-76 [ICS, 5]; A61K0031-445 [ICS, 5]; C07D0413-10 [ICS, 5]; C07D0401-14 [ICS, 5]; C07D0401-12

AB Title compds. [I; R = substituted Bz, (un)substituted carbamoyl, etc.; R1 = H, (hydroxy)alkyl; R2 = (un)substituted phenyl(oxy)alkyl; NR1R2 = (un)substituted pyrrolidino, -piperidino, morpholino, -1,2,3,4-tetrahydroisoquinolino] were prepd. Thus, title compd. II gave 24.0mL/min increase in femoral artery blood flow at 10-30 μ L of a 100nM soln. intra-arterially in dogs.

ST benzoylpiperidineamine prepn peripheral vasodilator

IT Vasodilators

(peripheral; N-benzoylpiperidine-4-amines)

IT 167621-24-1P 167621-25-2P 167621-26-3P 167621-28-5P 167621-29-6P

167622-16-4P	167622-17-5P	167622-18-6P
---------------------	---------------------	--------------

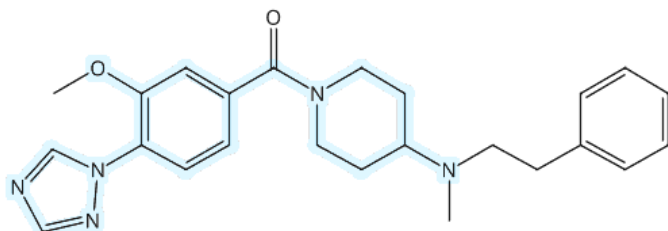
167622-76-6P	167622-77-7P	167622-78-8P	167622-79-9P
--------------	--------------	--------------	---------------------

IT 167622-16-4P 167622-17-5P 167622-79-9P

RL: BAC (Biological activity or effector, except adverse); BSU (Biological study, unclassified); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)
(prepn. of N-benzoylpiperidine-4-amines as peripheral vasodilators)

RN 167622-16-4 CAPLUS

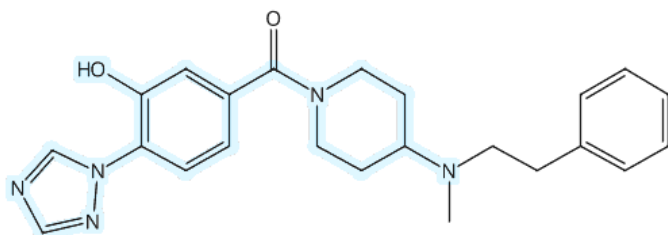
CN Methanone, [3-methoxy-4-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)phenyl][4-[methyl(2-phenylethyl)amino]-1-piperidinyl]-, hydrochloride (1:1) (CA INDEX NAME)



• HCl

RN 167622-17-5 CAPLUS

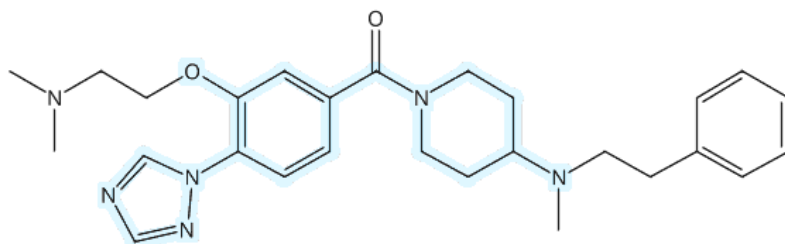
CN Methanone, [3-hydroxy-4-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)phenyl][4-[methyl(2-phenylethyl)amino]-1-piperidinyl]-, hydrochloride (1:1) (CA INDEX NAME)



• HCl

RN 167622-79-9 CAPLUS

CN Methanone, [3-[2-(dimethylamino)ethoxy]-4-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)phenyl][4-[methyl(2-phenylethyl)amino]-1-piperidinyl]- (CA INDEX NAME)



PatentPak PDF

当レコードは物質情報付きの明細書 (Interactive) がないため、索引物質の記載ページが表示されない

HITSTR

HITPPAK

APPENDIX

- BATCH 検索
- サブセット検索
- RANGE 検索 (範囲指定検索)
- ノーマライズド結合
- 削除された CAS RN[®] (DR)
- 優先 CAS RN[®], 非優先 CAS RN[®]
- * (アスタリスク) 付きの CAS RN[®] と文献検索
- CAplus/CA ファイルに文献のない場合
- 多成分物質のカウント方法
- 第四級アンモニウム塩と塩化アンモニウム
- 同位体標識化合物

BATCH 検索

- BATCH 検索を利用すると、構造質問式をシステムに登録することで、コンピュータの利用度の少ない時に一括して構造検索を行わせることができる。

■ BATCH 検索の実行

- ・ BATCH コマンド入力例

```
=> BATCH                                ← 初心者モードでの入力
ENTER QUERY L# FOR BATCH REQUEST OR (END): L1    ← 質問式の L 番号
ENTER BATCH REQUEST NAME OR (END): STR1/B        ← 注文名/B
ENTER TYPE OF SEARCH (SSS), CSS, FAMILY, OR EXACT: _ ← 検索のタイプ
ENTER SCOPE OF SEARCH (FULL) OR RANGE: _        ← 検索の範囲
QUERY L1 HAS BEEN SAVED AS BATCH REQUEST 'STR1/B'
```

```
=> BATCH L1 STR2/B SSS FUL                ← まとめて入力する場合
QUERY L1 HAS BEEN SAVED AS BATCH REQUEST 'STR2/B'
```

- ・ 質問式には、構造質問式、スクリーンセット、両者を結合した質問式、あるいはこれらによって得られた回答の L 番号が使える。
- ・ 検索が実行されるまでは、=> D SAVED/B で質問式が確認できる。BATCH 検索が終了すると /B のついた質問式は削除される。

```
=> D SAVED/B
NAME          CREATED      NOTES/TITLE
-----
STR1/B        14 JAN 2020  BATCH REQUEST FOR FILE REGISTRY
```

■ BATCH 検索の回答表示

- ・ BATCH 検索実行後 (1~2 日後), 回答は BATCH 検索登録の時つけた名前に /A がついた回答セットとして保存されている。

```
=> D SAVED/A
NAME          CREATED      NOTES/TITLE
-----
STR1/A        15 JAN 2020  13984990 ANSWERS IN FILE REGISTRY
```

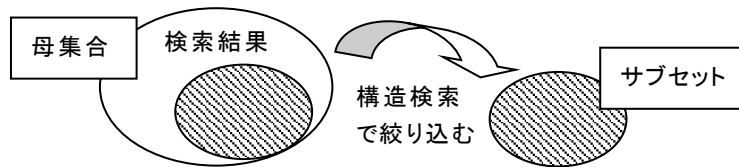
- ・ 保存されている回答セットは ACTIVATE コマンドで呼び出して表示する。

```
=> FILE REGISTRY
:

=> ACT STR1/A
L1          STR
L2          13984990 SEA FILE=REGISTRY SSS FUL L1
```

サブセット検索

- サブセット検索は、回答集合の L 番号の中をさらに構造検索する機能である。



- ・ 母集合は辞書検索の回答と構造検索の回答のどちらでもよい。

- 入力方法

=> S L# 検索のタイプ SUB=L_n 検索の範囲

L# : 構造質問式
 検索のタイプ : EXA, FAM, CSS, SSS
 SUB=L_n : 母集合の L 番号
 検索範囲の指定 : SAM, FUL, RANGE

検索対象範囲 (母集合) を SUB=L_n で指定する

- ・ サブセット検索では検索の範囲 (SAM, FUL, RANGE) を必ず入力する。

- 効果的な利用方法

- ・ 構造検索で得られた回答が多く、さらに構造質問式で限定したい場合
- ・ INCOMPLETE を回避したい場合 (辞書検索の結果を母集合として利用) など

RANGE 検索（範囲指定検索）

■ RANGE 検索とは、データベースの特定の範囲を対象として行う検索である。

- ・ REGISTRY ファイルでは CAS RN[®] を用いて範囲を指定することができる。

=> S L# 検索タイプ RAN=, CAS RN[®]

↑ CAS RN[®] 以前に登録された物質を構造検索する

=> S L# 検索タイプ RAN=CAS RN[®],

↑ CAS RN[®] 以降に登録された物質を構造検索する

- ・ カンマ (,) の位置で、「以前」「以降」を指定する。
- ・ RANGE 検索にはサンプル検索はなく、すべてフルファイル検索になる。
- ・ 入力例

=> S L1 SSS RAN=, 742058-61-3

RANGE MORE THAN 100,000. WILL BE BILLED AS A FULL FILE SEARCH.

INITIATE SEARCH? Y/(N): Y

RANGE SEARCH INITIATED 09:58:39 FILE 'REGIST
RANGE SCREEN SEARCH COMPLETED - 4391519 TO

その CAS RN[®] 以前の物質
= 742058-61-3 より古い物質を
742058-61-3 を含めて検索する。

フルファイル料金が課金される旨のメッセージ。
検索を実行するには Y と入力する。

100.0% PROCESSED 4391519 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.24

L4 2316422 SEA RAN=(, 742058-61-3) SSS L1

- ・ フルファイル検索を複数回行う場合は、必ず事前に PROJECTED ITERATIONS の数を確認して、何回フルファイル検索を行う必要があるのかを予想する。
- ・ 構造検索は、新規に登録された物質から順に遡って実行される。したがって、検索が中断されたレコードまでの検索は完全に行われているため、その物質以前に登録された CAS RN[®] の範囲で RANGE 検索を実行し、ファイル全体の検索を完了させる。

ノーマライズド結合

■ ノーマライズド結合とは、偶数員環中の単結合と二重結合の交互結合、および互変異性結合などに指定される結合の属性 (Bond Value) である。

- ・ 「エグザクト」を指定した場合は、その部分の結合が「エグザクト」で登録されている化合物のみが得られ、その部分の結合が「ノーマライズド」で登録されている化合物は得られない。

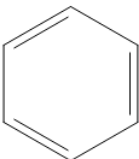
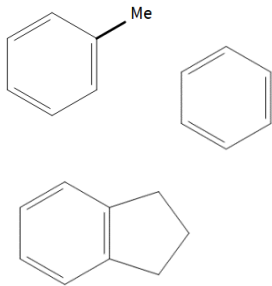
■ STN の構造作図ツールで作図するとノーマライズド結合を認識し、自動的に Bond Value が指定される。

- ・ STN の構造作図ツールではあらゆる可能性を考慮して、自動的にエグザクト/ノーマライズド結合が指定される。

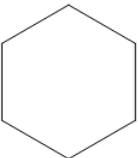
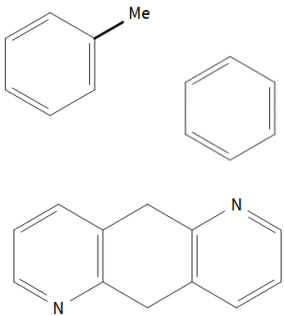
- 自動的に指定された Bond Value を変更したい場合は、Bond Attributes で変更する。

- ・ 自動的に指定される Bond Value の例

[例 1 : ベンゼン環]

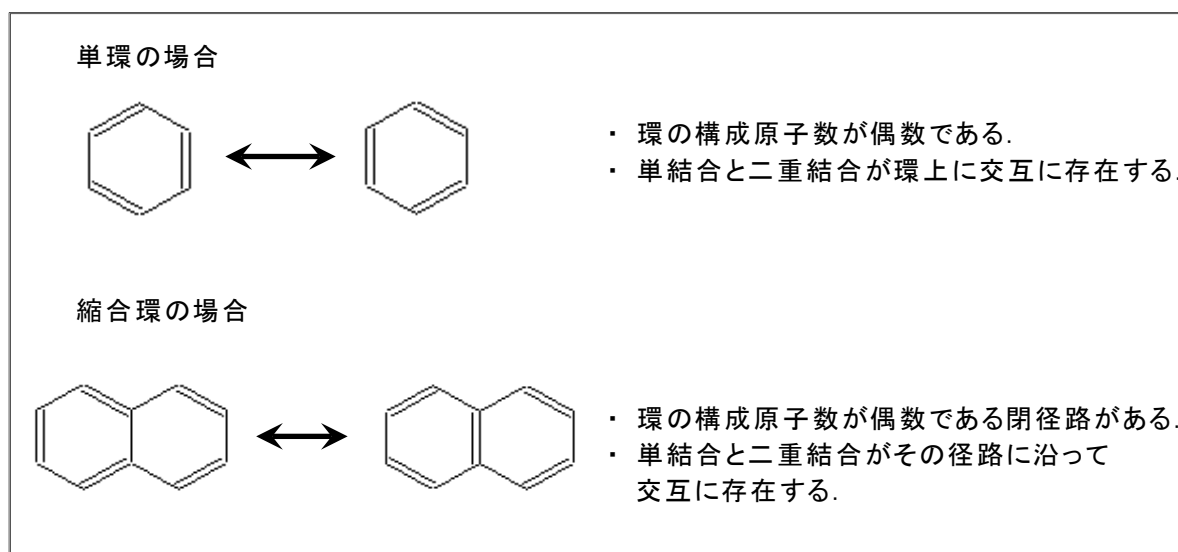
作図した構造図	Bond Value	回答例
	<p>Attribute Values</p> <p>Bond Type</p> <p>Chain</p> <p>Ring</p> <p>Ring / Chain</p> <p>Bond Value</p> <p>Exact</p> <p>Normalized</p> <p>Exact / Normalized</p>	

[例 2 : シクロヘキサン環]

作図した構造図	Bond Value	回答例
	<p>Attribute Values</p> <p>Bond Type</p> <p>Chain</p> <p>Ring</p> <p>Ring / Chain</p> <p>Bond Value</p> <p>Exact</p> <p>Normalized</p> <p>Exact / Normalized</p>	

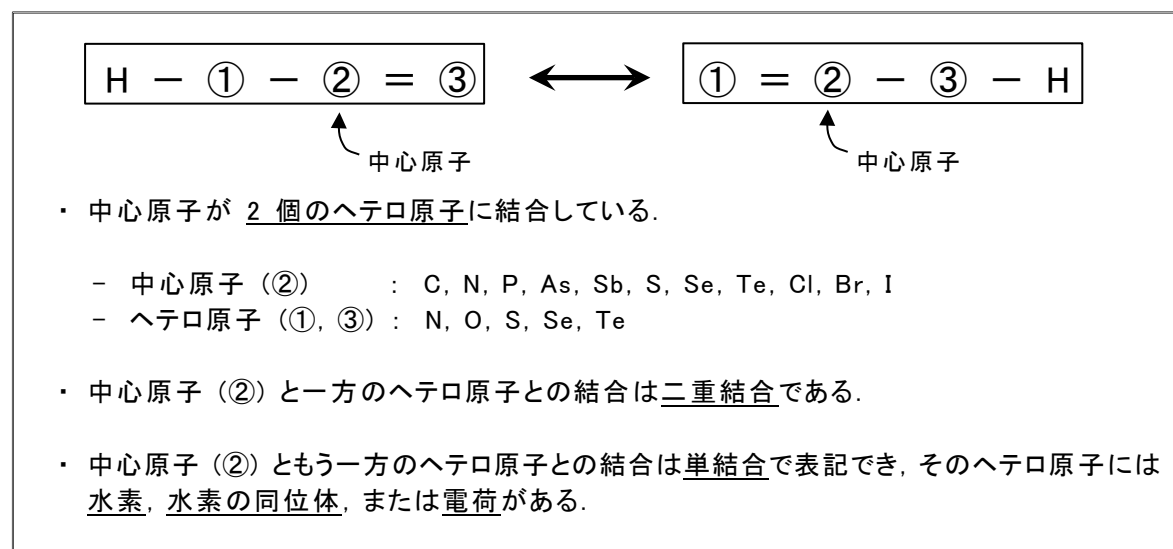
■ ノーマライズド結合の例 - 環

- ・ 次の条件を満たす単環のすべての結合はノーマライズド結合として登録されている。



■ ノーマライズド結合の例 - 互変異性 (Tautomer)

- ・ 次の定義に合致する互変異性結合は、ノーマライズド結合として登録されている。

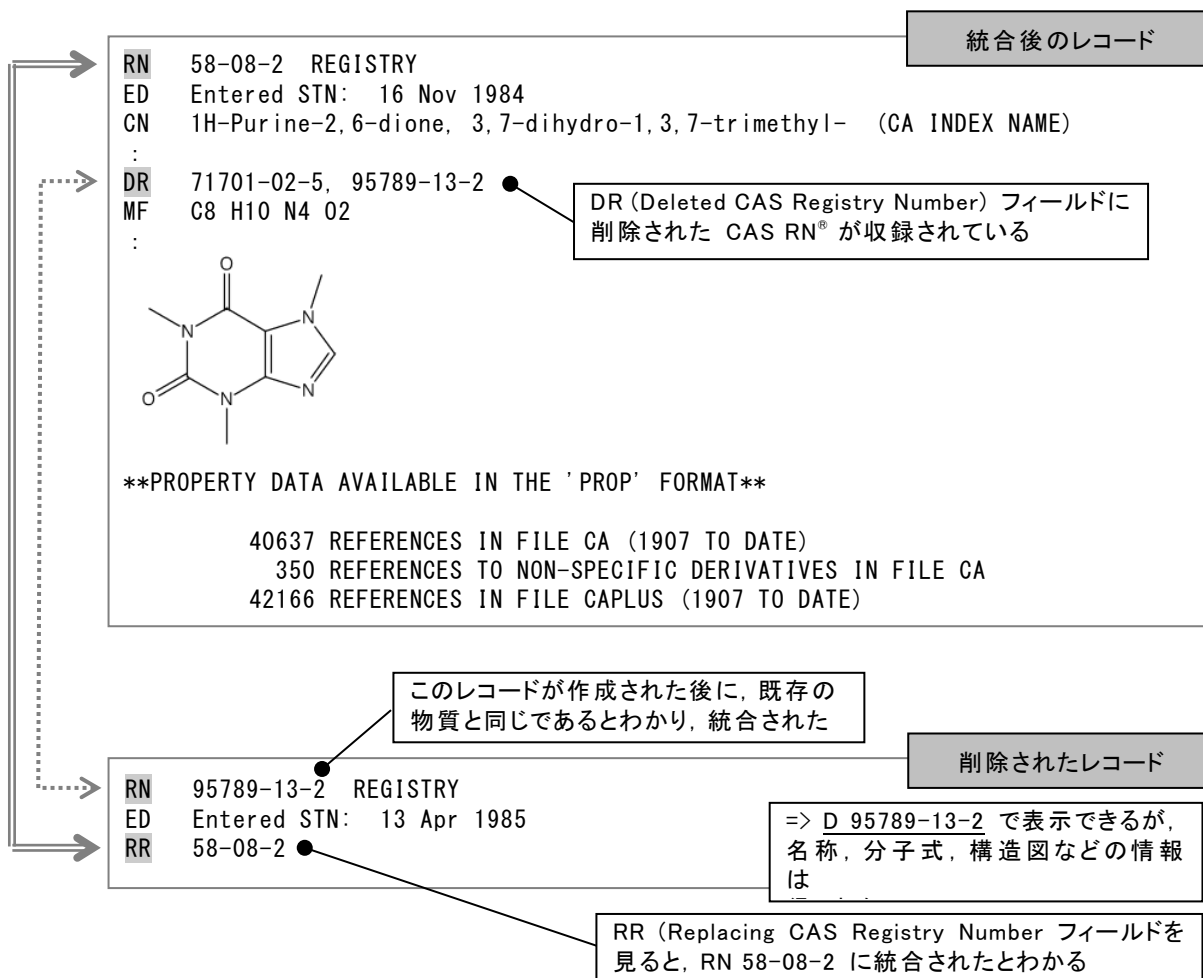


削除された CAS RN® (DR)

■ ある物質が新規物質である（既存の CAS RN® の物質とは一致しない）と判断された場合、新規の CAS RN® が付与され、REGISTRY ファイルで新規レコードが作成される。

- ・ しかし後になって、既存の CAS RN® の物質と同じとわかる場合がある。
(例：登録時に構造情報が不明であった物質（商品名で登録された物質、天然物など）)
 - そのような場合、REGISTRY ファイルではいずれかのレコードに統合される。
(残りの CAS RN® は削除される)
 - 削除された CAS RN® が CAplus/CA ファイルに索引されていた場合、統合後の CAS RN® に置換される。(ただし、抄録など索引以外のフィールドに収録されている CAS RN® は置換されない)

■ レコード例：DR を含むレコード



DR は /DR で検索しないと、統合後のレコード（名称、分子式、構造図などの情報）を得られないのですか？

=> S 95789-13-2 のように基本索引（もしくは /RN）で検索した場合も、RN 58-08-2（統合後）のレコードが 1 件得られます。ヒットタームは 95789-13-2 (DR) となります。

優先 CAS RN®, 非優先 CAS RN®

- 優先 CAS RN® (Preferred CAS REGISTRY Number : PR),
非優先 CAS RN® (Alternate CAS REGISTRY Number : AR)
- ・ 二つ以上の構造の表現法を持つ物質で、より優先される構造に対して付与された CAS RN® を優先 CAS RN® と呼ぶ。(例 : 閉環 (スピロ) 型構造と開環型構造)
 - 優先構造レコード中の AR フィールドに非優先 CAS RN® が表示される.
 - 非優先構造レコード中の PR フィールドに優先 CAS RN® が表示される.

レコード例 : 優先構造のレコード

RN 38598-19-5 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Dibenzo[a, j]phenoxazin-7-ium, 3-sulfeno-, inner salt (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Dibenzo[a, j]phenoxazin-7-ium
 AR 216-47-7 ●
 MF G20 H11 N 02 S

AR フィールドに
非優先 CAS RN® が表示される

? => S 216-47-7 のように AR を基本索引で
検索した場合はどうなる?
RN 38598-19-5 のレコードが 1 件得られる

レコード例 : 非優先構造のレコード (= > D 216-47-7 で表示できる)

RN 216-47-7 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Dibenzo[a, j]phenoxazin-7-ium, 11-sulfeno-, inner salt (9CI) (CA INDEX NAME)
 PR 38598-19-5 ●
 MF G20 H11 N 02 S

PR フィールドに
優先 CAS RN® が表示される

- 文献検索では、REGISTRY ファイルから CAplus ファイルへのクロスオーバー検索を行えばすべての CAS RN® (RN, DR*, AR, PR) がクロスオーバーされる。

* (アスタリスク) 付きの CAS RN[®] と文献検索

- 通常は CAS RN[®] が付与されないタイプの物質であるが、例外的に CAS RN[®] が付与された物質には * (アスタリスク) が付与されている。

- ・ 主に、CAS 登録番号サービスや既存化学物質リストに基づいて登録されているため、* (アスタリスク) が付与された物質の CAS RN[®] を CAplus/CA ファイルで検索しても文献はほとんど得られない。



CAplus/CA ファイルの文献検索ではアスタリスク付きの CAS RN[®] は使用しない。

- ・ * (アスタリスク) が付与されているものは、「UVCB 物質」(Unknown or Variable Composition, Complex reaction Products, and Biological Materials, 組成不明もしくは可変物質, 複雑な反応生成物, 生物物質) と呼ばれており、以下の二種類がある。
 - CTS : CAplus/CA ファイルで、基本的に統制語 (キーワード) で索引されている物質に (概念語登録) 付与された CAS RN[®] (例 : ダンマル樹脂)。
 - CTS の場合には、まれに CAS RN[®] が索引されていることもある。
 - GRS : CAplus/CA ファイルで、基本骨格の CAS RN[®] + キーワードで索引されている (一般式登録) 物質に付与された CAS RN[®] (例 : 塩素化ポリエチレン)。



* (アスタリスク) 付きの CAS RN[®] の場合、CI フィールドを見て GRS か CTS かを判断し、それに基づいた検索を行う。

- レコード例 (ダンマル (ダマール) 樹脂)

```

RN  9000-16-2  REGISTRY *
* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may
  result in incomplete search results.  For additional information, enter HELP
  RN* at an online arrow prompt (=>).
ED  Entered STN:  16 Nov 1984
CN  Dammar resin (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN  Dammar
CN  Dammar resins
OTHER NAMES:
CN  Damar gum
CN  Damar resin
CN  Gum Damar
CN  Gum Dammar
CN  Gums and Mucilages, dammar
CN  Gums, dammar
:
DEF  Extractives and their physically modified derivatives.  It is a product
     which may contain resin acids and their esters, terpenes, and oxidation or
     polymerization products of these terpenes.  (Shorea, Dipterocarpaceae).
MF  Unspecified
CI  COM, MAN, CTS
LC  STN Files:  BIOSIS, CHEMCATS, CHEMLIST, CIN, TOXCENTER
     Other Sources:  DSL**, EINECS**, TSCA**
     (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
  
```

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

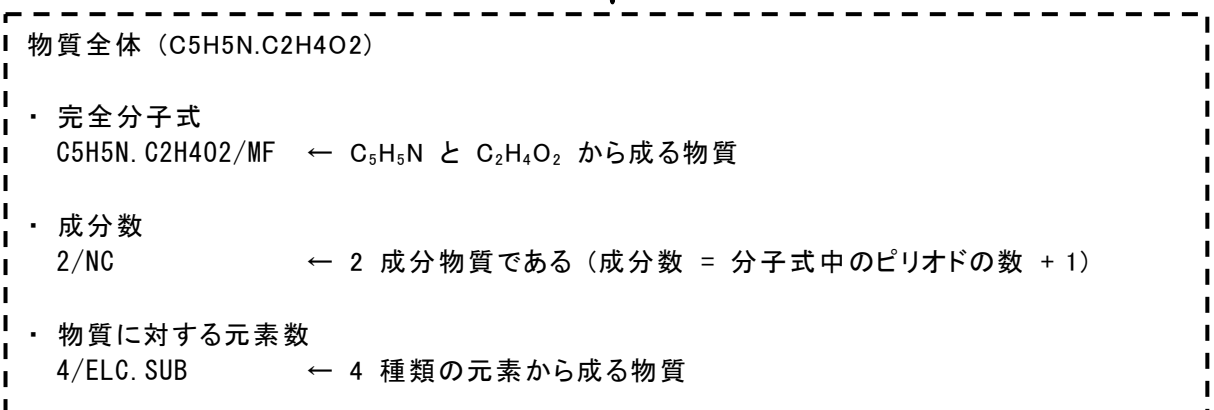
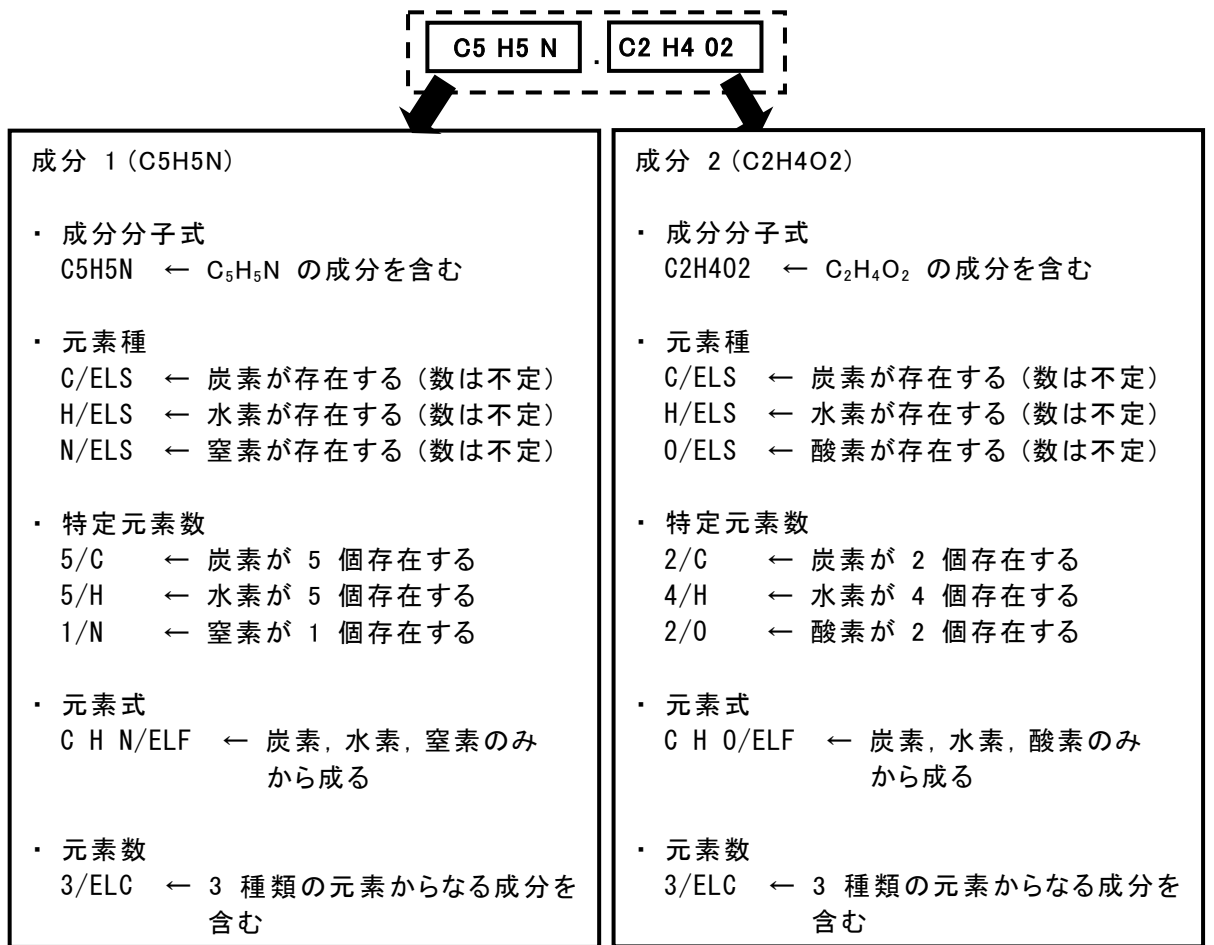
CAplus/CA ファイルに文献のない場合

■ REGISTRY ファイルのある物質 A のレコードを CAplus/CA ファイルにクロスオーバーしても、回答が得られない (0 件になる) 場合がある。その場合、下記のいずれかと考えられる。

- ① 物質 A は CAplus/CA ファイルに索引されていないが、物質 A を含む多成分物質が CAplus/CA ファイルに索引されている。
 - REGISTRY ファイルに多成分物質が登録される場合、その個々の成分もすべて収録される。
 - 物質 A のレコードのクラス識別子 (CI) フィールドに COM と表示されていれば、「物質 A を一成分として含む多成分物質が REGISTRY ファイルに収録されている」とわかる。
- ② CHEMCATS ファイルから収録された物質である。
 - 収録源 (SR) フィールドに Chemical Catalogs あるいは Chemical Library と表記され、提供者情報が表示される。
- ③ その物質が索引された文献が CAplus/CA ファイルにあるが、抄録・索引がまだ完成していない。
 - 登録情報源 (SR) フィールドに CA と表示されており、クラス識別子 (CI) フィールドに COM の表示がない場合は、CAplus/CA ファイルのレコード作成中であり、まだ完成していない。REGISTRY ファイルの入力から日が浅いレコードは、この可能性がある。
- ④ 下記の既存化学物質リスト等から収録された物質である。
 - TSCA (Toxic Substance Control Act Inventory)
 - EINECS (European Inventory of Existing Chemical Substances)
 - DSL (Canadian Domestic Substances List)
 - NDSL (Canadian Non-domestic Substances List)

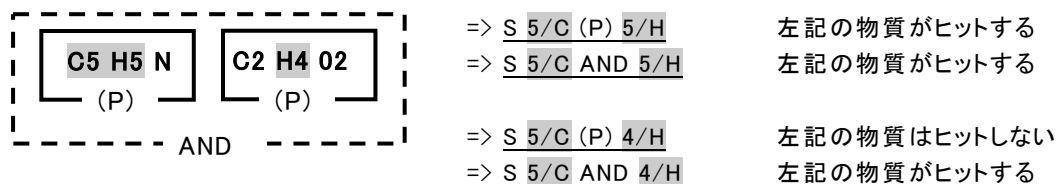
* CAS RN[®] 所在 (LC) フィールドに TSCA, EINECS, DSL または NDSL の表示がある。
- ⑤ ④以外の機関の契約・依頼により、CAS RN[®] が付与された物質である。
 - また、政府機関等への届出の必要から、民間会社からの依頼により CAS RN[®] を付与する場合もある。この場合は、1985 年半ば以降のものについては登録情報源 (SR) フィールドに記載がある。
- ⑥ 環母核 (Ring Parent) として収録された物質である。
 - 環母核 (すべての置換基を削除した単環、縮合環、スピロ環) は、その物質自身が文献に記載されていなくても、またそのような化合物が実在しなくても REGISTRY ファイルに登録される。環母核のレコードのクラス識別子 (CI) フィールドには RPS と表示される。
- ⑦ ハンドブックから採録された物質である。
 - CAS 登録システムがスタートしたときに、ハンドブック類から収録された化学物質がある。
- ⑧ 他のデータベースから採録された物質である。

多成分物質のカウント方法



* 単成分物質の場合は、「物質全体」 = 「成分」となる。

* 多くの分子式関連フィールドでは、(P) 演算子で同一成分中に限定することができる。

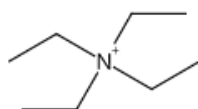


第四級アンモニウム塩と塩化アンモニウム

- アミン類の塩や第四級アンモニウム塩は通常、多成分物質として登録される。
ただし、塩化アンモニウム (NH₄Cl) は単一成分として登録される。

・ 塩化テトラエチルアンモニウム

RN 56-34-8 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, chloride (1:1) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Ammonium, tetraethyl-, chloride (8CI)
CN Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, chloride (9CI)
CN Tetraethylammonium chloride (6CI, 7CI)
:
MF C8 H20 N . Cl
:
CRN (66-40-0)



• Cl⁻

:

● ————— 2 成分物質として収録されている

・ 塩化アンモニウム

RN 12125-02-9 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Ammonium chloride ((NH₄)Cl) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Ammonium chloride (8CI)
:
MF Cl H4 N
:
H₄N—Cl

:

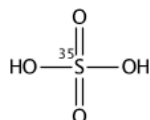
	示性式	REGISTRY ファイルでの分子式
第四級アンモニウム塩	(C ₂ H ₅) ₄ N ⁺ .Cl ⁻	C8H20N.CL
	(C ₂ H ₅) ₄ N ⁺ .OH ⁻	C8H20N.HO
	(C ₂ H ₅) ₄ N ⁺ .CH ₃ CO ₂ ⁻	C8H20N.C2H3O2
第一, 二, 三級アミンの塩	C ₂ H ₅ -NH ₂ .HCl	C2H7N.CLH
	C ₂ H ₅ -NH ₂ .CH ₃ COOH	C2H7N.C2H4O2
	(C ₂ H ₅) ₂ NH.HCl	C4H11N.CLH
	(C ₂ H ₅) ₃ N.HCl	C6H15N.CLH
ピリジンの塩	C ₅ H ₆ N ⁺ .Cl ⁻	C5H5N.CLH
	C ₅ H ₆ N ⁺ .CH ₃ CO ₂ ⁻	C5H5N.C2H4O2
塩化アンモニウム	NH ₄ Cl	CLH4N

同位体標識化合物

- 同位体標識化合物の分子式は、基本的には通常の化合物と同じ分子式で記述される。

- ・ レコード例

RN 23725-97-5 REGISTRY
 CN Sulfuric-35S acid, dipotassium salt (8CI, 9CI) (CA INDEX NAME)
 MF H2 O4 S . 2 K
 CRN (13770-01-9)



• 2 K

- 重水素 (deuterium) と三重水素 (tritium) は、分子式中で D, T で記述される。

- ・ 重水素 (deuterium) と三重水素 (tritium) は、D, T を含む分子式で検索できる。
 D, T を H で置換した分子式でも検索することができる。

検索例 : C₆H₅D は、以下のいずれの検索式でも検索できる。

=> S C6H5D/MF ← 重水素 (deuterium) を一個含む化合物のみヒット
 * C₆H₄D₂ などはヒットしない

=> S C6H6/MF ← ラベル無し (C₆H₆) に加えて、同位体標識化合物もヒット

- 同位体標識化合物の除き方

① 重水素と三重水素で標識された化合物を回答から除く場合

=> S L1 NOT (D OR T)/ELS ← 分子式中の情報を利用 (/ELS で検索)

② 分子式には重水素や三重水素が反映されていない物質 (① では削除できないような物質) も除きたい場合

=> S L1 NOT (DEUTERIUM OR TRITIUM) ← 部分名称で除く

③ 重水素 (deuterium) と三重水素 (tritium) 以外の標識化合物を除きたい場合

=> S L1 NOT (13C? OR CARBON 13) ← 部分名称で除く (¹³C を除きたい場合)

④ 構造検索で標識化合物を除く場合

=> FILE REGISTRY

∴
 L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2039 ← 「異常質量 - すべての同位体」のスクリーンを発生させる

L2 SCREEN CREATED

∴
 => S L1 NOT L2 FUL ← 構造検索を実行する



化学情報協会

情報事業部

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

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

URL: www.jaici.or.jp

E-mail: support@jaici.or.jp