



CAS STNnext®

# ポリマー検索



**JALICI**  
化学情報協会

**CAS**  
A division of the  
American Chemical Society





## \* 目次 \*

### A 概要

CAS STNext のポリマー関連ファイル.....	1
ポリマーの定義 (REGISTRY ファイル).....	2
ポリマーの登録方針.....	3
ポリマーの登録形式.....	6

### B ポリマー検索

ポリマーを検索する際のポイント (REGISTRY ファイル).....	9
ポリマーの検索フィールド.....	10
モノマー単位ポリマーの検索.....	11
SRU ポリマーの検索.....	19
参考: PMS/CI とスクリーン 2043 の違い.....	25
POLYLINK.....	26

### C ポリマー分類用語

ポリマー分類用語とは.....	31
ポリマー分類用語の付与.....	32
ポリマー分類用語を用いた検索.....	33

### D 各論

ポリマーの種類と CAplus/CA ファイルでの索引方針.....	39
ポリマーの登録の流れと検索方法.....	40
縮合系ポリマー.....	42
ビニル系ポリマー.....	44
参考: 重合形態を区別したポリマーの文献検索.....	46
汎用ポリマー.....	47
ポリアルキレングリコール.....	48
ポリエーテルポリオール.....	50
多段階重合ポリマー.....	51
架橋ポリマー (多段階重合ポリマー).....	54
後処理ポリマー.....	58
後処理ポリマー - 塩, 付加化合物.....	59
参考: 例外的な塩の検索.....	61
後処理ポリマー - エステル化.....	62
後処理ポリマー - エーテル化.....	66
後処理ポリマー - その他の化学的処理 (塩素化など).....	70
参考: 一義的に定義できない成分を含むポリマーの検索.....	74

## D 各論 (続き)

シリコーン .....	78
ポリビニルアルコール .....	82
アセタール樹脂 .....	83
ポリマーブレンド, ポリマーアロイ .....	85
デンドリマー, スターポリマー, ハイパーブランチポリマー .....	86
テロマー .....	87
クマロン-インデン樹脂, 石油系樹脂 .....	88
合成繊維 .....	89
合成ゴム .....	90
参考: * (アスタリスク) つきの CAS RN® と文献検索 .....	92
参考: 重合条件, 触媒を限定したポリマーの文献検索 .....	94
参考: モノマーの索引 .....	95
練習問題 .....	99

## A 概要

ポリマーを検索するためには、その定義や登録内容を正しく理解することが不可欠です。この章では REGISTRY ファイルにおける代表的なポリマーのレコード例を参考にその登録形式を説明します。



## CAS STNext のポリマー関連ファイル

## ■ ポリマー情報を収録している CAS STNext の主なファイル

(2023 年 12 月現在)

ファイル名	内容	収録年	レコード数
REGISTRY	化学物質の CAS RN®, 名称, 構造, 分子式, 物性情報, スペクトルデータ, タンパク質・核酸の配列	1800 初頭-	288,089,700
APOLLIT	プラスチック, ゴム, 繊維の製造, 処理工程, 応用, 技術的性質およびポリマーの物理的/化学的性質の文献情報	1973- 2005	436,200
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, クレーム, 特許ステータス, 索引, 引用・被引用情報, 米国特許の譲渡情報などを収録	1808-	48,523,100
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, CA 収録対象外の情報も収録	1808-	62,400,400
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	1980fi-	406,300
CHEMCATS	市販化学薬品の CAS RN®, 価格, 供給業者情報	最新	273,742,600
DCR	WPI ファイルの特許レコードで索引された化学物質のデータベース DCR レコード番号, 名称, 構造分子式等を収録	1981-	5,216,400
RAPRA	ゴム, プラスチック, 接着剤, 高分子化合物に関する文献および企業ディレクトリ情報	1972-	1,505,900
ReaxysFile	有機化合物, 無機化合物, 有機金属化合物の物性と合成・反応情報 ポリマーの収録は 2000 年以降	1771- 2011	19,404,300
ReaxysfileSub	化学物質の名称や分子式, 構造などの情報を収録	1771-	56,604,800
ReaxysfileBib	ReaxysfileSub ファイルで得られた物質の出典情報を調査するためのデータベース	1771-	50,849,900
WPINDEX/ WPIDS/WPIX	世界の主要 59 特許発行機関および 2 技術公開誌の特許情報, 対応特許情報, 抄録, 図面, DCR レコード番号, ポリマー等に関する各種索引	1963-	61,022,300
POLYMERS	ポリマー科学クラスター APOLLIT, CAplus, CBNB, CIN, COMPENDEX, IFIALL, NTIS, PQSciTech, RAPRA, ReaxysfileBib, SciSearch, USPATFULL, USPATOLD, USPAT2, WPINDEX/WPIDS/WPIX, WSCA		

## ポリマーの定義 (REGISTRY ファイル)

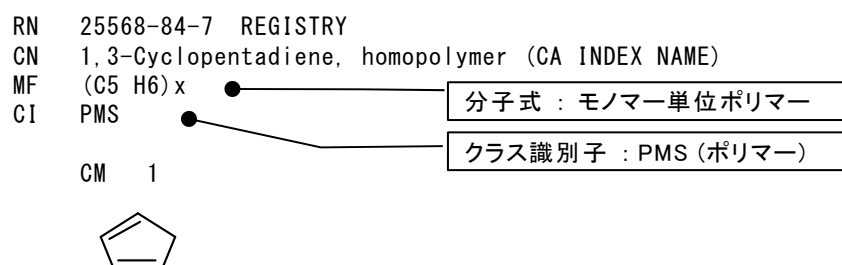
■ CAS 化学物質登録システムでは、ポリマーとみなす物質については、厳密に定義している。

- ・ ポリマーと定義された物質については、CI フィールドに PMS を付与。

### ■ ポリマーの定義

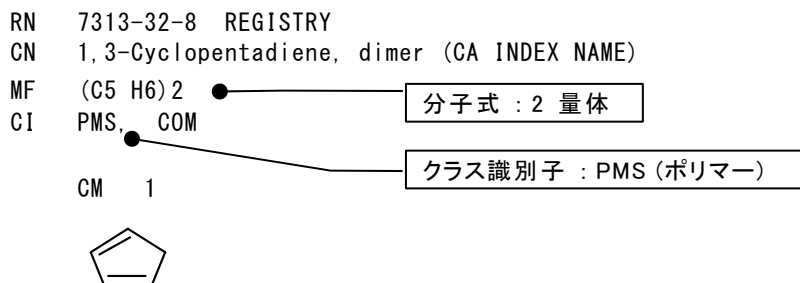
- ・ 重合度が 11 以上の物質、あるいは重合度不明の物質は、ポリマーとみなされる。

レコード例 : 1,3 シクロペンタジエンホモポリマー

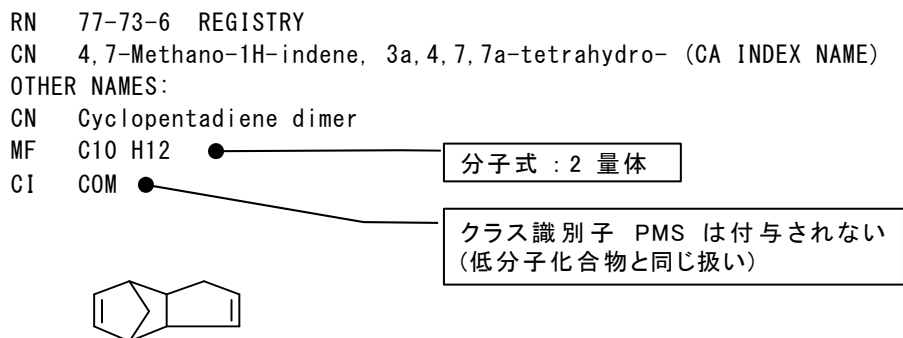


- ・ 重合度が 10 以下であっても、重合後の構造が不明なオリゴマーもポリマーとみなされる。

- 重合度毎に CAS RN<sup>®</sup> が付与される (2 量体, 3 量体...).



- ・ 重合度が単一で重合後の構造が明確なオリゴマーは、通常の低分子化合物と同じ扱いになる。





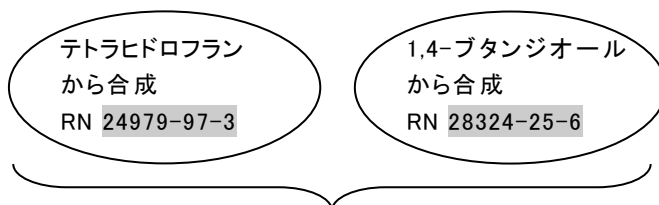
## ポリマーの登録方針

### ルール 1

大部分のポリマーは、ポリマーの主鎖 (backbone) を構成する「原料モノマー」に基づいて登録される。

- 原料が異なれば、同じポリマーであっても異なる CAS RN<sup>®</sup> が付与される。

例：ポリブチレンオキサイド



同じポリマーでも、異なる CAS RN<sup>®</sup> を持つ

- 原則として、ポリマーの主鎖 (backbone) を構成する原料モノマーに基づくので、下記のような物質は登録する際に除外されている。

- 重合開始剤、重合停止剤
- 分子量調整剤
- 触媒
- 安定剤

例：同じ原料から合成し触媒だけが異なるポリマーには、同じ CAS RN<sup>®</sup> を付与。  
(=触媒については無視し、同じ原料モノマーからなるポリマーとして登録)

- 下記の条件等についても区別せず、同じポリマーとして登録。
  - 重合条件（温度、圧力、触媒の有無や種類など）が異なるポリマー
  - 組成比（原料モノマー比）が異なるコポリマー
  - 分子量や分子量分布が異なるポリマー
  - 分岐の有無や分岐の程度が異なるポリマー
  - 重合開始剤が異なるポリマー

例：同じ原料から合成し重合度が異なる場合でも、同じ CAS RN<sup>®</sup> を付与。  
(重合度については無視し、同じ原料モノマーからなるポリマーとして登録)

## ルール 2

同じ原料モノマーからであっても、異なるポリマーとしてみなされる場合がある。

- ・ 下記のポリマーについては、同じ原料でも異なる CAS RN<sup>®</sup> が付与されている。

- 立体規則性（タクチシチー : Tacticity）の異なるポリマー
- 重合形態（ブロック, グラフト, 交互, ランダム）の異なるコポリマー

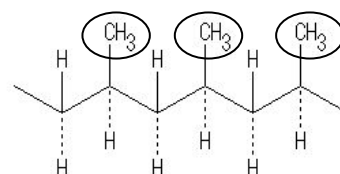
## ① 立体規則性（タクチシチー : Tacticity）の異なるポリマー

- ・ 立体規則性は、「イソタクチック」「シンジオタクチック」「アタクチック」を区別して登録。重合方法に基づくその他の構造の違いは区別されず、同一ポリマーとみなされる。
- ・ 立体規則性が不明な場合は、アタクチックの CAS RN<sup>®</sup> が付与される。

- イソタクチック : 主鎖に沿って隣の単位が常に同じ立体配置をとる (DD または LL)。

例 : イソタクチック (Isotactic) ポリプロピレン

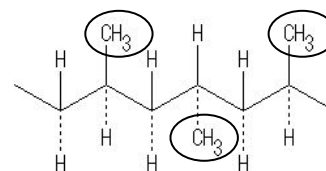
RN 25085-53-4 REGISTRY  
IN 1-Propene, homopolymer, isotactic



- シンジオタクチック : 主鎖に沿って隣の単位が常に反対の立体配置をとる (DL または LD)。

例 : シンジオタクチック (Syndiotactic) ポリプロピレン

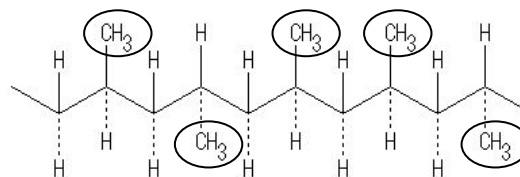
RN 26063-22-9 REGISTRY  
IN 1-Propene, homopolymer, syndiotactic



- アタクチック : ランダムな立体配置をとる (DD, LL, DL, LD が等確率)。

例 : アタクチック (Atactic) ポリプロピレン

RN 9003-07-0 REGISTRY  
IN 1-Propene, homopolymer  
CN Atactic polypropylene



- ステレオブロック : ホモポリマーにタクチシチーの異なるブロックが存在。

例 : ステレオブロック (Stereoblock) ポリプロピレン (イソタクチックブロックとアタクチックブロックからなるポリプロピレン)

RN 779327-97-8 REGISTRY  
CN 1-Propene, homopolymer, stereoblock

## ② 重合形態（ブロック, グラフト, 交互, ランダム）の異なるコポリマー

- ・ ブロック, グラフト, 交互などの構造的特徴のあるコポリマーは, 異なる CAS RN<sup>®</sup> が付与され, 区別されている.
- ・ 構造的特徴が不明なコポリマーは, 構造的特徴のないコポリマー, すなわちランダム共重合体の CAS RN<sup>®</sup> を付与.

## - ブロック共重合体 (Block Copolymer)

構成単位 A (○)
構成単位 B (●)

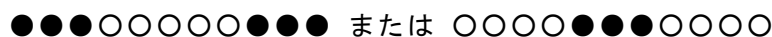


- ・ ブロック共重合体のうち, diblock, triblock, tetrablock, pentablock は, さらに区別して登録される.

## ジブロック共重合体 (Diblock Copolymer)



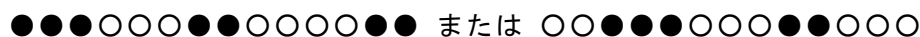
## トリブロック共重合体 (Triblock Copolymer)



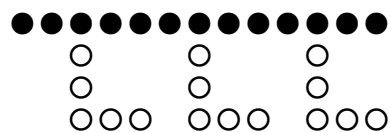
## テトラブロック共重合体 (Tetrablock Copolymer)



## ペンタブロック共重合体 (Pentablock Copolymer)



## - グラフト共重合体 (Graft Copolymer)



## - 交互共重合体 (Alternating Copolymer)



## - ランダム共重合体 (Random Copolymer)



- ・ ブロック, グラフトなどが組み合わさったポリマーについても, 組み合わせごとに, 個別の CAS RN<sup>®</sup> を付与.

## ポリマーの登録形式

■ REGISTRY ファイルのポリマーのレコードは、以下の 4 種類の形式である。

- ・ モノマー単位ポリマー : 原料モノマーを成分とした登録.
- ・ SRU (Structural Repeating Unit) ポリマー : 規則的な構造の繰り返し単位で登録.
- ・ 商品名ポリマー : 構造が不明で商品名そのものを CA 索引名として登録.
- ・ \* (アスタリスク) つきのポリマー

■ レコード例 : モノマー単位ポリマー (原料モノマーを成分とした登録)

```

RN 26062-94-2 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-butanediol (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN 1,4-Butanediol, polyester with terephthalic acid (8CI)
CN 1,4-Butanediol, polymer with 1,4-benzenedicarboxylic acid (9CI)
CN Terephthalic acid, polyester with 1,4-butanediol (8CI)
OTHER NAMES:
CN 1,4-Benzenedicarboxylic acid-1,4-butanediol copolymer
CN 1,4-Butanediol-terephthalate copolymer
CN 1,4-Butanediol-terephthalic acid copolymer
:
DR 1027097-35-3
MF (C8 H6 O4 . C4 H10 O2)x
CI PMS, COM
PCT Polyester, Polyester formed
LC STN Files: BIOSIS, CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, CIN,
ENCOMPLIT, ENCOMPLIT2, ENCOMPPAT, PCT: ポリマー分類用語 (C章), NE,
MSDS-OHS, PIRA, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL, USPATOLD
Other Sources: DSL**, TSCA**
(**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

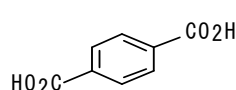
```

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

```

CM 1
GRN 110-63-4
CMF C4 H10 O2
HO-(CH2)4-OH
CM 2
GRN 100-21-0
CMF C8 H6 O4

```



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

```

30488 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
571 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
30588 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

```

■ レコード例 : SRU (Structural Repeating Unit) ポリマー (規則的な構造の繰り返し単位で登録)

RN 24968-12-5 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Polyoxy-1,4-butanediylloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl (CA INDEX NAME)  
 OTHER NAMES: SRU ポリマーの名称  
 CN 1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate copolymer, SRU  
 CN 1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate polymer, SRU  
 CN 1,4-Butanediol-divinyl terephthalate copolymer, SRU  
 CN 1,4-Butanediol-monomethyl terephthalate copolymer, SRU  
 CN 1,4-Butanediol-terephthalic acid copolymer, SRU  
 CN 1,4-Butanediol-terephthalic acid polymer, SRU  
 CN 1,4-Butanediol-terephthaloyl chloride copolymer, SRU  
 CN 1,4-Butanediol-terephthaloyl chloride polymer, SRU  
 CN 1,4-Butylene glycol-terephthalic acid polymer, SRU  
 CN 1000F  
 CN 100M  
 CN 100M (polyester)

ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT - Use FCN, FIDE, or ALL for DISPLAY

DR 9078-57-3, 9087-65-4, 50939-46-3, 51635-90-6, 51848-46-5, 51931-15-8,  
 52231-97-7, 52232-31-2, 52232-99-2, 52705-10-9, 54650-84-9, 54650-85-0,  
 57284-97-6, 58967-80-9, 60617-28-9, 61912-84-3, 64814-97-7, 66369-03-7,  
 67527-19-9, 74239-00-2, 74239-01-3, 74239-02-4, 74239-03-5, 74239-04-6,  
 80450-27-7, 83381-95-7, 92880-67-6, 97380-75-1, 97794-54-2, 136799-43-4,  
 145319-68-2, 159294-93-6, 168317-05-3, 176179-88-7, 193363-39-2,  
 193363-40-5, 202289-59-6, 213128-73-5, 335661-31-9, 437613-30-4,  
 639483-01-5, 910537-56-3, 940968-24-1, 1137293-40-3, 1802176-06-2,  
 639483-01-5, 910537-56-3, 940968-24-1, 1137293-40-3, 1802176-06-2,  
 1897365-26-2, 2084810-27-3, 224776 (繰り返し単位 (SRU) の分子式) n

MF (C12 H12 O4)n

CI PMS

PMS は、ポリマーを表すクラス識別子コード

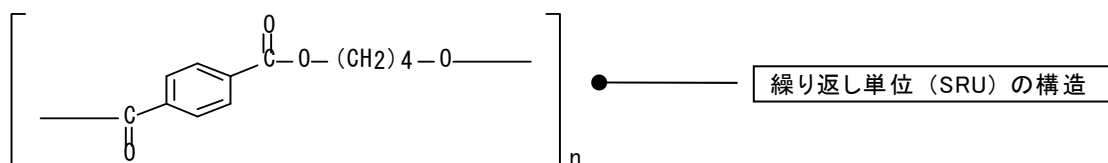
PCT Polyester

PCT : ポリマー分類用語 (C 章) MLIST,

LC STN Files: ANABSTR, BIOSIS, CA, CIN, IFIALL, MEDLINE, MSDS-OHS, PIRA, RTECS\*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL, USPATOLD

(\*File contains numerically searchable property data)

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



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

34321 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 637 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 34456 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- ・ 原則、一部のホモポリマーや対称な構造の2種のモノマーからなるポリマーに存在する。
- ・ 上記のポリマーと左ページのポリマーは実質的に同じポリマーであるが、異なる CAS RN® を持つ。
- ・ 汎用ポリマーについては、SRU ポリマーしか存在しないものもある。

■ レコード例：商品名ポリマー（構造が不明で商品名そのものを CA 索引名として登録）

- 論文や特許に商品名でのみ記載されたポリマーがあり、そのポリマーの詳細（原料モノマー、繰り返し単位など）が不明な場合は、商品名を CA 索引名として REGISTRY ファイルに登録する。

- その後、既登録ポリマーと同一であることが判明すると、その CAS RN® は削除された CAS RN® (DR: Deleted CAS Registry Number) になる。

```

RN 718635-98-4 REGISTRY
ED Entered STN: 29 Jul 2004
CN Diaformer Z 632 (CA INDEX NAME)
ENTE An N,N-dimethyl-N-(2-methacryloyloxyethyl)amine N-oxide-alkyl methacrylate
  copolymer (Mitsubishi Chemical)
MF Unspecified
CI PMS, MAN
PCT Manual registration
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREAC

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
      8 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
      8 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

```

索引者情報

分子式は不明

PMS は、ポリマーを表すクラス識別子コード

PCT : ポリマー分類用語 (C 章)  
(構造不明のため手作業登録)

■ レコード例：\* (アスタリスク) つきのポリマー

- 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® が付与されたポリマー。

```

RN 64742-16-1 REGISTRY *
* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may
  result in incomplete search results. For additional information, enter HELP
  RN* at an online arrow prompt (=>).
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Petroleum resins (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN 18X0103
CN 700E
CN 700E (petroleum resin)
:
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT - Use FCN, FIDE, or ALL for
  DISPLAY
DEF A complex combination of organic compounds, predominantly hydrocarbons,
  obtained as a fraction of the extract from solvent extraction of residuum.
  It consists predominantly of high molecular weight compounds with high
  carbon-to-hydrogen ratios.
DR 9077-49-0, 9085-73-8, 11098-41-2, 37199-53-4, 37263-39-1, 37291-70-6,
  37336-60-0, 37336-61-1, 37349-08-9, 39279-47-5, 39279-49-7, 39290-04-5,
  :
MF Unspecified
CI COM, MAN, CTS
PCT Manual registration
LC STN Files: BIOSIS, CHEMCATS, HS, PIRA,
  RTECS*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
  (*File contains numerically searchable property data)
Other Sources: DSL**, EINECS**, TSCA**
  (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

```

CAS STNnext のほかのファイルでこの CAS RN® を用いた検索を行うと、不完全な結果になる可能性があるという警告

分子式は不明

PCT : ポリマー分類用語 (C 章)  
(構造不明のため手作業登録)

## B ポリマー検索

この章では REGISTRY ファイルにおける基本的なポリマー検索の手法についてご紹介します。





## ポリマーを検索する際のポイント (REGISTRY ファイル)

### ポイント 1

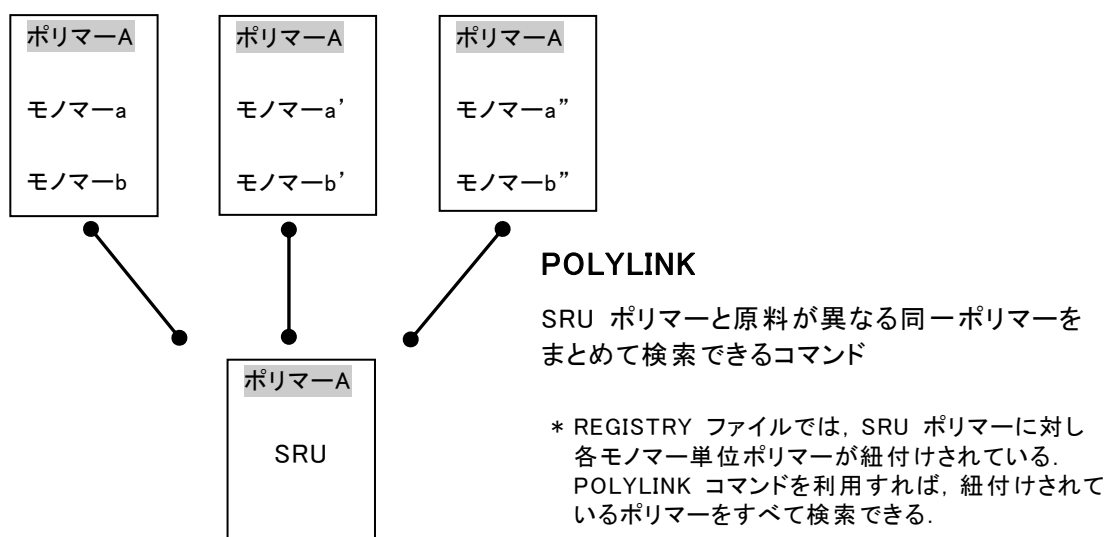
大部分のポリマーはモノマー単位ポリマーとして登録されているので、原料モノマーから検索する。

- 原料が異なる場合、異なる CAS RN<sup>®</sup> が付与されているので、特定のポリマーの文献を検索するときには、原料のバリエーションを考えて検索する必要がある。
  - POLYLINK コマンド (後述) を利用すると、原料が異なる同じポリマーをまとめて検索することができる。(ただし、一部適用できないポリマーも存在する)
- 原料から検索すれば、P.4 の ① 立体規則性が異なるポリマーや、② 重合形態が異なるポリマーもまとめて検索できる。

### ポイント 2

特定のポリマー (縮合系ポリマーなど) には、SRU ポリマーも存在するので、それも含めて検索する。

- POLYLINK コマンドを用いると、SRU ポリマーおよび同じポリマーでも原料が異なるポリマーをまとめて検索できる (POLYLINK (P.26) 参照)。



- SRU ポリマーを介して紐付けされているので、SRU ポリマーが存在しないと POLYLINK コマンドは利用できない。
  - 基本的に、一部のホモポリマーや対称な構造の 2 種のモノマーからなるポリマーに対して SRU ポリマーが存在する。

## ポリマーの検索フィールド

■ ポリマー検索用の主な検索フィールド（灰色の検索フィールドは、よく使用する検索フィールド）

検索フィールドなど		登録形式	
		モノマー単位	SRU
CAS RN <sup>®</sup>	/RN /BI	ポリマーの CAS RN <sup>®</sup>	
成分 CAS RN <sup>®</sup>	/CRN	各モノマーの CAS RN <sup>®</sup>	不可
CA 索引名	/BI /CN /CNS	モノマーの名称を基本とする ホモポリマー : …, homopolymer 共重合体 : …, polymer with …	繰り返し単位に対する名称 末端基なし : Poly(…) 末端基あり : Poly(…), α-…-ω-…
慣用名		慣用名－慣用名 POLYMER 慣用名－慣用名 COPOLYMER	慣用名－慣用名 POLYMER, SRU 慣用名－慣用名 COPOLYMER, SRU
分子式	/MF	モノマーの分子式を基本とする ホモポリマー : (C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> ) <sub>x</sub> 共重合体 : (C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> .C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> ) <sub>x</sub>	繰り返し単位の組成 (末端基はカッコ外にまとめる) 末端基なし : (C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O) <sub>n</sub> 末端基あり : (C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O) <sub>n</sub> H <sub>2</sub> O
成分分子式	/BI	各モノマーの成分分子式	繰り返し単位の分子式
成分数	/NC	物質全体の成分数	
クラス識別子	/CI	PMS/CI でポリマーに限定できる	
成分クラス識別子	/CCI	PMS/CCI で成分中にポリマーを含む物質に限定できる	
ポリマー分類用語	/PCT	- POLYACETYLENE - POLYACRYLIC - POLYOLEFIN - POLYSTYRENE - POLYVINYL	- POLYAMIDE - POLYCARBONATE - POLYESTER - POLYETHER - POLYKETONE ほか
		(FORMED 付き用語) - POLYESTER FORMED - POLYIMIDE FORMED ほか	なし
構造		モノマーの構造 共重合体は複数の構造	繰り返し単位に対する単一の構造
		スクリーン* 2043 : ポリマー (一般) 2067 : モノマー単位ポリマー (ホモポリマー, コポリマー) 2068 : SRU ポリマー 2069 : 末端基のある SRU ポリマー 2070 : 末端基のない SRU ポリマー  2127 : 2 成分以上 2077 : 3 成分以上 2078 : 4 成分以上	

\* スクリーンは構造検索時に検索対象物を制限するための機能。

## モノマー単位ポリマーの検索

- 原料モノマー単位で登録されているポリマーは、慣用名、成分 CAS RN®, 分子式などで効率的に検索することができる。

- レコード例 : モノマー単位ポリマー (イソプレン-メチルメタクリレート共重合体)

RN 25014-10-2 REGISTRY ● CAS RN®  
=> S 25014-10-2  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with  
 2-methyl-1,3-butadiene (CA INDEX NAME) polymer with  
 OTHER CA INDEX NAMES: モノマー単位ポリマーの名称  
 CN 1,3-Butadiene, 2-methyl-, polymer with methyl 2-methyl-2-propenoate (9CI)  
 CN Isoprene, polymer with methyl methacrylate (8CI)  
 CN Methacrylic acid methyl ester 名称 => S ISOPRENE-METHYL METHACRYLATE COPOLYMER/CN ①  
 OTHER NAMES:  
 CN Isoprene-methyl methacrylate copolymer  
 CN Isoprene-methyl methacrylate polymer  
 CN Methyl methacrylate-isoprene copolymer  
 CN Methyl methacrylate-isoprene polymer 分子式  
=> S "(C5H8O2.C5H8)X"/MF ③  
 MF (C5 H8 O2 . C5 H8)x  
 CI PMS ● ポリマーを表すクラス識別子コード (PMS)  
 PCT Polyacrylic, Polyolefin ●  
 LC STN Files: CA, CAPLUS, GASREACT, CHEMLIST, IFIALL, TO) ポリマー分類用語  
=> S POLYACRYLIC/PCT  
 USPATFULL, USPATOLD  
 Other Sources: NDSL\*\*, TSCA\*\*  
 (\*\*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

CM 1  
 CRN 80-62-6 ● 成分 CAS RN®  
=> S 80-62-6/CRN AND 78-79-5/CRN ②  
 CMF C5 H8 O2

$$\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C} \\ | \\ \text{Me}-\text{C}-\text{C}-\text{OMe} \\ || \quad | \\ \text{O} \quad \text{O} \end{array}$$
モノマーの構造 ④

CM 2  
 CRN 78-79-5  
 CMF C5 H8 ● 成分分子式と成分数, クラス識別子コード  
=> S C5H8 AND 2/NC AND PMS/CI

$$\begin{array}{c} \text{CH}_2 \\ | \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{CH}=\text{CH}_2 \end{array}$$

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

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



共重合体の分子式は次の表記規則に従う。

- i) 炭素を含む有機成分を優先
- ii) 炭素数の多い成分を優先
- iii) 炭素数が同じ場合には水素数の多い成分を優先
- iv) 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

■ 検索例 : モノマー単位ポリマー (アクリロニトリル・ブタジエン・スチレン共重合体) の検索

① 慣用名による検索 (/CN)

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> E ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE COPOLYMER/CN

完全物質名称フィールド (/CN) で EXPAND する

E1 1 ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE BLOCK GRAFT COPOLYMER/CN  
 E2 1 ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE BLOCK GRAFT COPOLYMER/CN  
 E3 1 --> ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE COPOLYMER/CN  
 E4 1 ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE COPOLYMER RESINS/CN  
 E5 1 ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE COPOLYMER TRIBLOCK/CN  
 :

=> S E3

← E 番号で検索する

L1 1 "ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE COPOLYMER"/CN

=> D

← デフォルトの IDE 表示形式で表示する

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 RN 9003-56-9 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene (CA INDEX NAME)  
 OTHER CA INDEX NAMES:  
 CN 1,3-Butadiene polymer, with acrylonitrile and styrene (6CI)  
 CN 1,3-Butadiene, polymer with ethenylbenzene and 2-propenenitrile (9CI)  
 OTHER NAMES:  
 CN 0215A  
 :  
 CN **Acrylonitrile-butadiene-styrene copolymer**  
 ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT - Use FCN, FIDE, or ALL for  
 DISPLAY  
 DR 37229-19-9, 37331-48-9, 39291-19-5, 39306-83-7, 52433-83-7, 52434-26-1,  
 :  
 MF (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x  
 CI PMS, COM  
 PCT Polyacrylic, Polyolefin, Polystyrene  
 LC STN Files: ADISNEWS, ANABSTR, BIOSIS, CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS,  
 :  
 CM 1  
 :  
 CRN 107-13-1  
 CMF C3 H3 N  
 :  
 H2C=CH-C≡N  
 CM 2  
 :  
 CRN 106-99-0  
 CMF C4 H6  
 :  
 H2C=CH-CH=CH2  
 CM 3  
 :  
 CRN 100-42-5  
 CMF C8 H8  
 :  
 H2C=CH-Ph

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

47094 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 1332 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 47094 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

## ② 成分 CAS RN® による検索 (/CRN)

## ポイント

- ・モノマーの CAS RN® を知っている場合は、成分 CAS RN® 検索を行うとよい。
  - アクリロニトリル (107-13-1), ブタジエン (106-99-0), スチレン (100-42-5)
- ・ /NC (成分数) フィールドでモノマーの数を限定できる。

=&gt; FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

モノマーの CAS RN® と成分数を AND 演算

=&gt; S 107-13-1/CRN AND 106-99-0/CRN AND 100-42-5/CRN AND 3/NC

L1 7 107-13-1/CRN AND 106-99-0/CRN AND 100-42-5/CRN AND 3/NC

=&gt; D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する

L1 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, graft

ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT

MF (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x

CI PMS, COM

CM 1

H2C=CH-C#N

CM 2

H2C=CH-CH=CH2

CM 3

H2C=CH-Ph

物質全体の成分数は成分数 (/NC) フィールドで検索する。分子式が検索対象のため、MF フィールドがハイライトされる

慣用名検索とは異なり、モノマーから検索すると、立体規則性や重合形態の異なるポリマーもヒットする

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

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):6

L1 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, triblock

MF (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x

CI PMS

CM 1

H2C=CH-C#N

CM 2

H2C=CH-CH=CH2

CM 3

H2C=CH-Ph

L1 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene

ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT

MF (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x

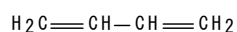
CI PMS, COM

CM 1

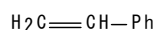
H2C=CH-C#N

B ポリマー検索

CM 2



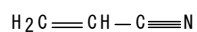
CM 3



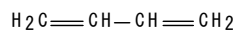
\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

L1 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, block  
MF (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x  
CI PMS

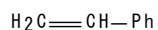
CM 1



CM 2



CM 3

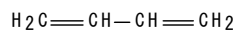


L1 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, graft, triblock  
MF (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x  
CI PMS

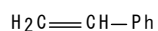
CM 1



CM 2

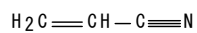


CM 3

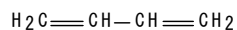


L1 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, block, graft  
MF (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x  
CI PMS

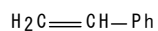
CM 1



CM 2



CM 3



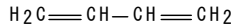
\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

L1 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, diblock  
 MF (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x  
 CI PMS

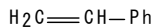
CM 1



CM 2



CM 3



ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

参考：構成モノマーを一部特定しない場合

分かっている成分 CAS RN® のみで検索する。

例：アクリロニトリル（107-13-1）とブタジエン（106-99-0）を含む 3 成分からなるポリマーの検索

=> FILE REGISTRY

=> S 107-13-1/CRN AND 106-99-0/CRN AND 3/NC AND PMS/CI,CCI



モノマーの CAS RN® が分からない場合には、下記のように調査すると良い。

=> FILE REGISTRY

=> S ACRYLONITRILE/CN

L1 1 ACRYLONITRILE/CN

← モノマーの化学物質名称で検索する

=> S 1,3-BUTADIENE/CN

L2 1 1,3-BUTADIENE/CN

← モノマーの化学物質名称で検索する

=> S STYRENE/CN

L3 1 STYRENE/CN

← モノマーの化学物質名称で検索する

=> SEL L1 1 RN

E1 THROUGH E1 ASSIGNED

← CAS RN® を抽出する

抽出した CAS RN® に E1 が付与された

=> SEL L2 1 RN

E2 THROUGH E2 ASSIGNED

← CAS RN® を抽出する

=> SEL L3 1 RN

E3 THROUGH E3 ASSIGNED

← CAS RN® を抽出する

=> D SEL

E1 1 107-13-1/BI (アクリロニトリル)

E2 1 106-99-0/BI (1,3-ブタジエン)

E3 1 100-42-5/BI (スチレン)

← 抽出したタームを表示する

抽出した CAS RN® には /BI が付与されているので、/CRN へ変更する。  
 (注：L#/CRN は検索できない)

=> S E1/CRN AND E2/CRN AND E3/CRN AND 3/NC

L4 7 107-13-1/CRN AND 106-99-0/CRN AND 100-42-5/CRN AND 3/NC

← 成分 CAS RN® と成分数検索

## ③ 分子式による検索 (/MF)

- モノマーの分子式はそれぞれアクリロニトリル (C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>N), ブタジエン (C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>), スチレン (C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>) なので, 共重合体の分子式は (C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>.C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>.C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>N)<sub>x</sub> である.

=&gt; FILE REGISTRY

=> E (C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>.C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>.C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>N)X/MF ← 共重合体の分子式で EXPAND

```

E1      1      (C8H8.C4H6.C3F6.C2H2F2.C2F4)X/MF
E2      1      (C8H8.C4H6.C3H3CLO)X/MF
E3      7 --> (C8H8.C4H6.C3H3N)X/MF
E4      1      (C8H8.C4H6.C3H3N)X.H3N/MF
E5      1      (C8H8.C4H6.C3H3N.(C2H4O)NC10H13F7O3)X/MF
:
```

=&gt; S E3 ← E 番号で検索する

L1 7 "(C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>.C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>.C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>N)X"/MF

=&gt; D SCAN ← SCAN 表示形式で表示する

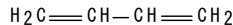
```

L1 7 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2019 ACS on STN
IN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, graft, triblock
MF (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x
CI PMS
```

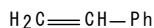
CM 1



CM 2



CM 3



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):6

:

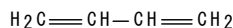
```

L1 7 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2019 ACS on STN
IN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, triblock
MF (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x
CI PMS
```

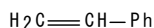
CM 1



CM 2



CM 3



ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

参考 : 分子式検索のポイント

- 各モノマー成分を Hill 方式で記述する.
  - 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: C<sub>4</sub>H<sub>3</sub>N<sub>1</sub>O<sub>6</sub>)
  - 炭素を含まない物質 : すべての元素をアルファベット順  
(例: O<sub>2</sub>Ti)
- 下記の表記規則にしたがって各モノマー成分を並べ替える.
  - 炭素を含む有機成分を優先
  - 炭素数の多い成分を優先
  - 炭素数が同じ場合には水素数の多い成分を優先
  - 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.



分子式検索では, 構造異性体 (同じ分子式を持つが構造が異なるもの) が含まれる.



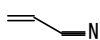
## ④ 構造による検索（誘導体を含む検索）

- 原料モノマーから検索する場合、モノマーごとに 1 構造質問式を作図する。
  - 共重合体の場合は、各原料モノマーの構造を別々に作図して AND 演算で検索する。
- 構造検索の際は、スクリーンを利用すると効率よくポリマーを検索することができる。（スクリーンは構造検索時に検索対象を制限するための機能。4 桁数字のコードで指定）（詳細は、<https://www.cas.org/sites/default/files/documents/screendict.pdf> 参照）
  - ポリマーのスクリーン（ポリマー一般：2043 など）を組み合わせる。
  - 場合によっては成分数のスクリーンを組み合わせる。

=&gt; FILE REGISTRY

=&gt;

Uploading structure file: 2019\_0002\_Structure



● — アクリロニトリル

L1 STRUCTURE UPLOADED

=&gt;

Uploading structure file: 2019\_0003\_Structure

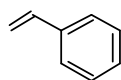


● — ブタジエン

L2 STRUCTURE UPLOADED

=&gt;

Uploading structure file: 2019\_0004\_Structure



● — スチレン（環は孤立）

L3 STRUCTURE UPLOADED

モノマーごとに個別の構造  
質問式をアップロードする

=&gt; SCR 2043

L4 SCREEN CREATED

● — ポリマー一般のスクリーン  
(モノマー単位ポリマーのスクリーン (2067) でもよい)

=&gt; S L1 AND L2 AND L3 AND L4

← サンプル検索

L5 50 SEA SSS SAM L1 AND L2 AND L3 AND L4

=&gt; S L1 AND L2 AND L3 AND L4 FUL

← フルファイル検索

L6 2480 SEA SSS FUL L1 AND L2 AND L3 AND L4

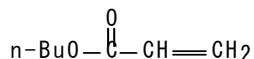
B ポリマー検索

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する

L6 2480 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, butyl ester, polymer with 1,3-butadiene, ethenylbenzene  
 and 2-propenenitrile, block  
 MF (C8 H8 . C7 H12 O2 . C4 H6 . C3 H3 N)x  
 CI PMS

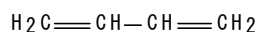
CM 1



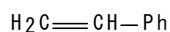
CM 2



CM 3



CM 4



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

=> S L6 AND 3/NC

← 3 成分に限定する

L7 115 L6 AND 3/NC

=> D SCAN

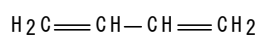
← SCAN 表示形式で回答を確認する

L7 115 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and (1-methylethenyl)benzene  
 MF (C9 H10 . C4 H6 . C3 H3 N)x  
 CI PMS

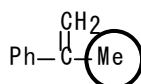
CM 1



CM 2



CM 3



検索タイプと得られる回答の違い

- ・ 完全一致検索 (EXA) では, 作図したとおりのポリマー
- ・ ファミリー検索 (FAM) では, EXA の回答 + 他の成分も含んだポリマー
- ・ 部分構造検索 (SSS) では, FAM の回答 + 作図した母核に対してあらゆる置換基をもつポリマー (デフォルト)

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

## SRU ポリマーの検索

■ SRU で登録されているポリマーは、名称、分子式、構造などから検索できる。

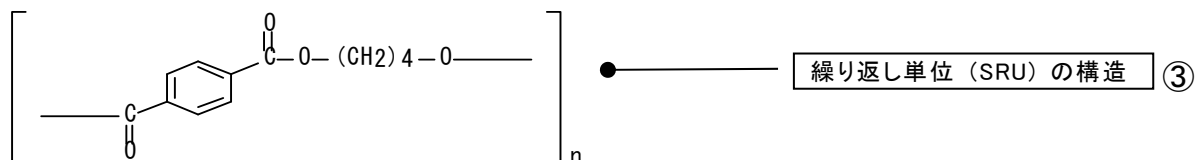
■ レコード例 : SRU ポリマー (ポリブチレンテレフタレート)

```

RN 24968-12-5 REGISTRY ●----- CAS RN® => S 24968-12-5
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Poly(oxy-1,4-butanediylloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl) (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN 1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate copolymer, SRU
CN 1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate polymer, SRU
CN 1,4-Butanediol-divinyl terephthalate copolymer, SRU
CN 1,4-Butanediol-monomethyl terephthalate copolymer, SRU
CN 1,4-Butanediol-terephthalic acid copolymer, SRU
CN 1,4-Butanediol-terephthalic acid polymer, SRU
CN 1,4-Butanediol-terephthaloyl chloride copolymer, SRU
CN 1,4-Butanediol-terephthaloyl chloride polymer, SRU
CN 1,4-Butylene
CN 1000F
CN 100M
CN 100M (polyes
CN 101GX54
CN 1097A
CN 1100-211M
CN 1100A
CN 1100M
CN 1100S
CN 1100SS
CN
CN 500FP
CN 5010AS
IDE 表示形式では、化学物質名は 50 個まで表示さ
れる。全物質名を表示するには、FCN や FIDE 表示
形式を使用する。
=> D FCN
CN Poly(oxy-1,4-butanediylloxycarbonyl-
1,4-phenylenecarbonyl) (CA INDEX NAME)
:
CN V-PTS Createc B 3NM800/25
CN Valox ●----- 名称 => S VALOX/CN ①
:
CN XW 321
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT - Use FCN, FIDE, or ALL for
DISPLAY
DR 9078-57-3, 9087-65-4, 50939-46-3, 51635-90-6, 51848-46-5, 51931-15-8,
52231-97-7, 52232-31-2, 52232-99-2, 52705-10-9, 54650-84-9, 54650-85-0,
:
MF (C12 H12 O4)n ●----- 分子式
CI PMS => S "(C12H12O4)N"/MF ②
PCT Polyester ●-----
LC STN Files: ANABSTR, BIOSIS, CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMC
CIN, IFIALL, MEDLINE, MSDS-OHS, PIRA, RTECS*, TOXCENTER,
USPATZ,
USPATFULL, USPATOLD
(*File contains numerically searchable property data)

```

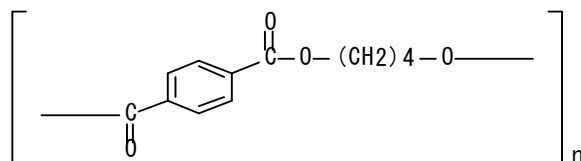
\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*



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

34258 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 635 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 34403 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

■ ポリブチレンテレフタレートの検索



① 商品名 (Valox) による検索 (/CN)

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> E VALOX/CN

← 化学物質名を /CN で EXPAND する

```
E1      1      VALOTRAT/CN
E2      1      VALOUR/CN
E3      1 --> VALOX/CN
E4      1      VALOX 175/CN
E5      1      VALOX 195/CN
:
```

=> S E3

← E 番号で検索する

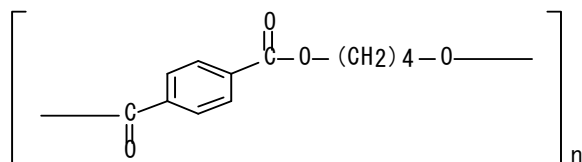
L1 1 VALOX/CN

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する

```
L1  1 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2019 ACS on STM
IN  Poly(oxy-1,4-butanediylloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT
MF  (C12 H12 O4)n
CI  PMS
```

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



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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

② 分子式による検索 (/MF) **ポイント**

- SRU ポリマーは、繰り返し単位の組成を分子式として入力する。

```

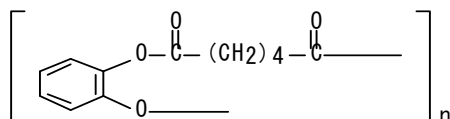
=> FILE REGISTRY          ← REGISTRY ファイルに入る
=> E (C12H12O4)N/MF ●    => E (繰り返し単位)N/MF を入力
E1      1      (C12H12O3SI)X/MF
E2      1      (C12H12O3SI, C12H12O2SI, C6H8O3SI, C3H8O2SI)X/MF
E3      50 --> (C12H12O4)N/MF
E4      1      (C12H12O4)N(C10H10O3)N(C9H8O2)NC26H26O6/MF
:
=> S E3                  ← E 番号で検索する
L1      50 "(C12H12O4)N"/MF

=> D SCAN                ← SCAN 表示形式で表示する

L1  50 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2019 ACS on STN
IN  Poly[oxy-1,2-phenyleneoxy(1,6-dioxo-1,6-hexanediyl)] (9CI)
MF  (C12 H12 O4)n
CI  PMS

```

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



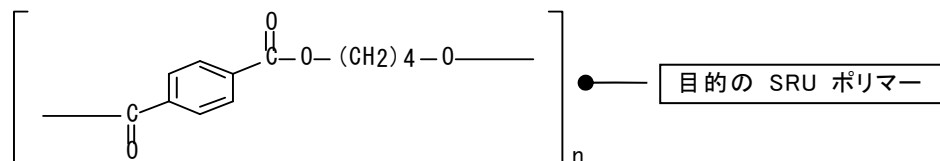
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):49

```

L1  50 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2019 ACS on STN
IN  Poly(oxy-1,4-butanediylloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT
MF  (C12 H12 O4)n
CI  PMS

```

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



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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

目的の SRU ポリマーのみの L# を作成する場合は  
SCAN 表示形式で確認した CA 索引名 (IN) を用い  
て検索する

```

=> E Poly(oxy-1,4-butanediylloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)/CN
E1      1      POLY(OXY-1,4-BUTANEDIYLOXYCARBONYL-1,4-PHENYLENE-1,3-BUTADIY
NE-1,4-DIYL-1,4-PHENYLENECARBONYL)/CN
E2      1      POLY(OXY-1,4-BUTANEDIYLOXYCARBONYL-1,4-PHENYLENEAZO-1,4-PHEN
YLENEOXY-1,6-HEXANEDIYLOXY-1,4-PHENYLENEAZO-1,4-PHENYLENECAR
BONYL)/CN
E3      1 --> POLY(OXY-1,4-BUTANEDIYLOXYCARBONYL-1,4-PHENYLENECARBONYL)/CN
E4      1      POLY(OXY-1,4-BUTANEDIYLOXYCARBONYL-1,4-PHENYLENECARBONYL), .
:
=> S E3                  ← E 番号で検索する
L2      1 "POLY(OXY-1,4-BUTANEDIYLOXYCARBONYL-1,4-PHENYLENECARBONYL)/CN

```

③ 構造による検索

- SRU ポリマーの場合は繰り返し単位を構造質問式として作図して検索する.

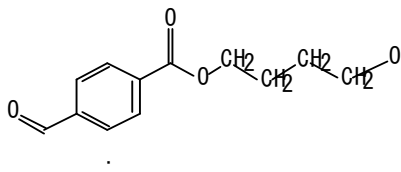
- スクリーン (ポリマー一般 2043, SRU ポリマー 2068, 末端基付き SRU ポリマー 2069, 末端基なし SRU ポリマー 2070) を組み合わせて検索する.

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=>

Uploading structure file: 2019\_0005\_Structure



● 繰り返し単位を構造質問式として作成する

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2070

L2 SCREEN CREATED

● 末端基なし SRU ポリマーのスクリーン (2070)

=> S L1 AND L2

L3 3 SEA SSS SAM L1 AND L2

← サンプル検索

=> S L1 AND L2 FUL

L4 33 SEA SSS FUL L1 AND L2

← フルファイル検索

● 誘導体が不要な場合は、分子式検索または完全一致検索 (EXA) を行う

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する

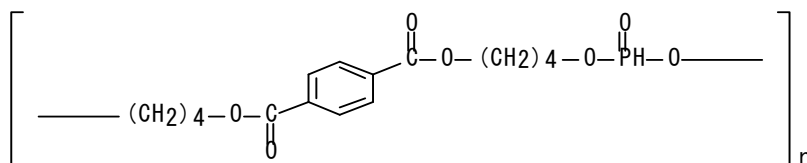
L4 33 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Poly(oxyphosphinylideneoxy-1,4-butanediyl oxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyloxy-1,4-butanediyl) (9CI)

MF (C16 H21 O7 P)n

CI PMS

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



● ノイズ  
主鎖を限定した  
検索はできない

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1) : 32

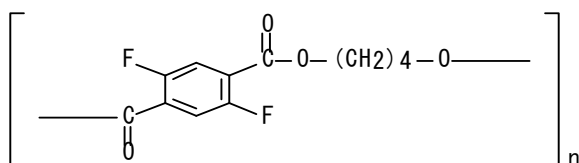
L4 33 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Poly[oxy-1,4-butanediyl oxycarbonyl (2,5-difluoro-1,4-phenylene) carbonyl] (9CI)

MF (C12 H10 F2 O4)n

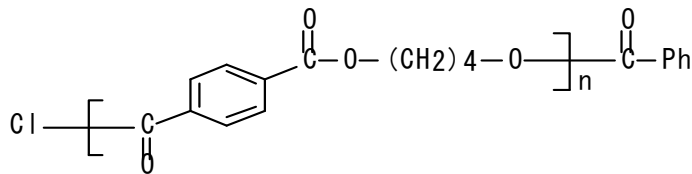
CI PMS

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



● 置換したポリマー

■ ポリブチレンテレフタレートに下記のような末端基が付いたポリエステルを検索



② 分子式による検索 (/MF) **ポイント**

- 末端基付き SRU ポリマーは、繰り返し単位の組成と、左右の末端の合計の分子式を入力する。

=> FILE REGISTRY

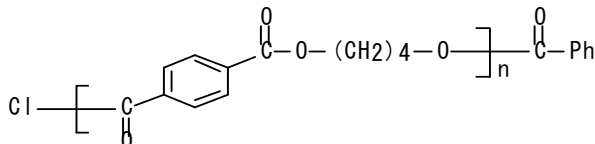
=> E (C12H12O4)NC7H5ClO/MF ● ⇒ E(繰り返し単位)N 両末端の分子式の合計/MF を  
 E1 2 (C12H12O4)NC5H11  
 E2 2 (C12H12O4)NC7H14O2/MF  
 E3 1 --> (C12H12O4)NC7H5ClO/MF  
 :

=> S E3 ← E 番号で検索する  
 L1 1 "(C12H12O4)NC7H5ClO"/MF

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で表示する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Poly(oxy-1,4-butanediylcarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl),  
 α-benzoyl-ω-chloro- (9CI)  
 MF (C12 H12 O4)n C7 H5 Cl O  
 CI PMS

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

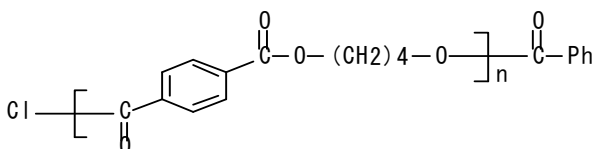


ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> D ← IDE 表示形式で表示する

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 RN 187990-93-8 REGISTRY  
 ED Entered STN: 04 Apr 1997  
 CN Poly(oxy-1,4-butanediylcarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl),  
 α-benzoyl-ω-chloro- (9CI) (CA INDEX NAME)  
 MF (C12 H12 O4)n C7 H5 Cl O  
 CI PMS  
 PCT Polyester  
 SR CA  
 LC STN Files: CA, CAPLUS

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



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

③ 構造による検索

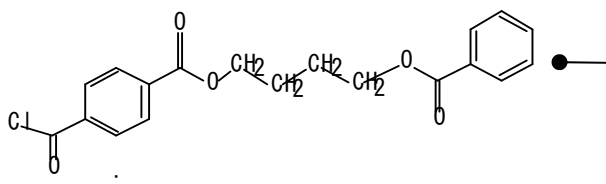
- ・ 末端基付き SRU ポリマーに限定したい場合は、繰り返し単位を構造質問式として作図し、末端基付き SRU ポリマーのスクリーン (2069) を組み合わせて検索する。

=> FILE REGISTRY

← *REGISTRY* ファイルに入る

=>

Uploading structure file: 2019\_0006\_Structure



繰り返し単位を構造質問式として作成する。末端基の構造も指定する場合は、繰り返し単位と末端基とを結合させて作図する

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2069

L2 SCREEN CREATED

末端基付き SRU ポリマーのスクリーン (2069)

=> S L1 AND L2

L3 1 SEA SSS SAM L1 AND L2

← サンプル検索

=> S L1 AND L2 FUL

L4 4 SEA SSS FUL L1 AND L2

← フルファイル検索

誘導体が不要な場合は、分子式検索または完全一致検索 (EXA) を行う

=> S L4 AND 1/NC

L5 2 L4 AND 1/NC

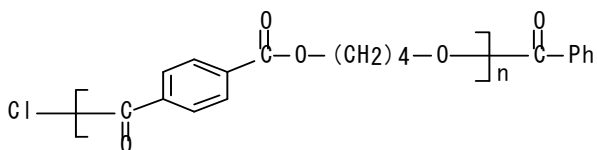
← 1 成分に限定する

=> D SCAN

← *SCAN* 表示形式で表示する

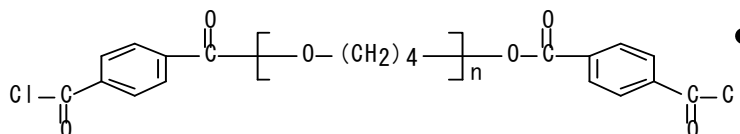
L5 2 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Poly(oxy-1,4-butanediylcarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl),  
 α-benzoyl-ω-chloro- (9Cl)  
 MF (C12 H12 O4)<sub>n</sub> C7 H5 Cl 0  
 CI PMS

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



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

L5 2 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Poly(oxy-1,4-butanediyl), α-[4-(chlorocarbonyl)benzoyl]-ω-[[4-(chlorocarbonyl)benzoyl]oxy]- (9Cl)  
 MF (C4 H8 O)<sub>n</sub> C16 H8 Cl2 O5  
 CI PMS, COM



ノイズ  
構造検索では、主鎖に  
限定した検索はできない

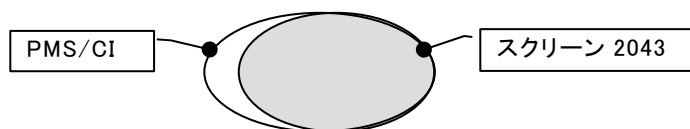
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED



### 参考：PMS/CI とスクリーン 2043 の違い

- ポリマーに限定する方法として、クラス識別子とスクリーンがあるが、ポリマーを認識する仕組みが異なる。

- ・ PMS/CI とスクリーン 2043 の検索イメージ



### ■ ポリマーの識別

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

### ■ レコード例

○ PMS/CI    ○ PMS/CCI    ○ スクリーン

```

RN 1160286-09-8 REGISTRY
ED Entered STN: 29 Jun 2009
CN Chitosan, (3-methyl-3-oxetanyl)methyl ether (CA INDEX NAME)
MF C5 H10 O2 . x Unspecified
CI COM
PCT Manual registration, Polyether only
SR CA
  CM 1
  CRN 9012-76-4
  CMF Unspecified
  CCI PMS, MAN
*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
  CM 2
  CRN 3143-02-0
  CMF C5 H10 O2
  HO-CH2-

```

分子式中にポリマーを示す情報が無い

CI に PMS が付与されていない

CCI (成分クラス識別子) に PMS が付与されている

PMS/CI でヒット    スクリーン 2043 でヒット

MAN (手作業登録) とは、構造が確定していないために結合表がない化学物質。この中には REGISTRY ファイルの構造の大きさの上限を超える物質、分子式しかわからない化合物、名称しかわからない化合物 (商品名など) がある

○ PMS/CI    × PMS/CCI    × スクリーン

```

RN 9016-13-1 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Sapperite ((C6H10O5)x) (9CI) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Sapperite (8CI)
MF (C6 H10 O5)x
CI MNS, MAN
PCT Manual registration
LC STN Files: CA, CAPLUS
*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

```

分子式にポリマー (( )x) が含まれている → PMS/CI でヒット

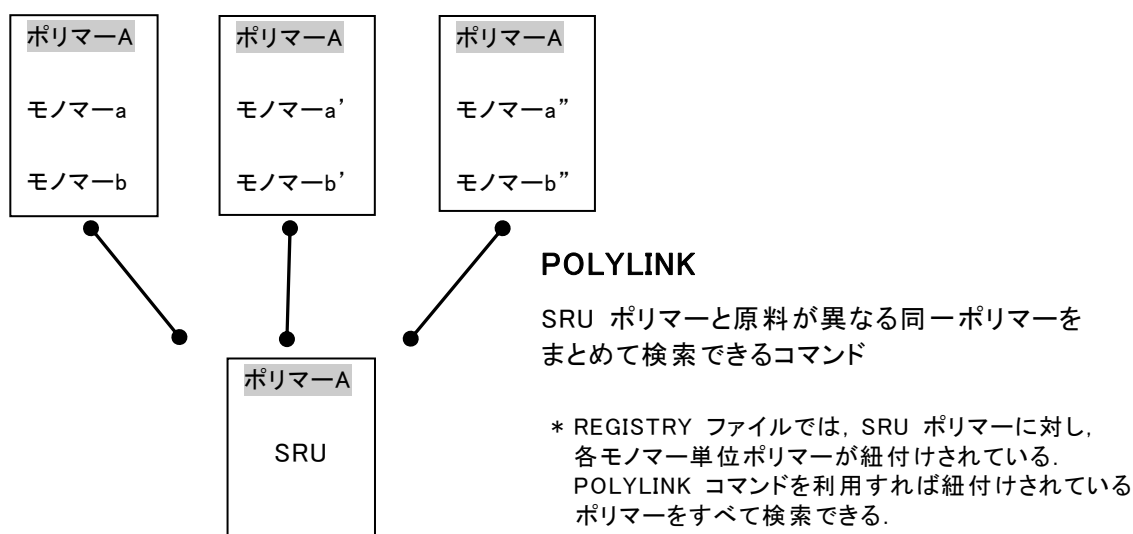
CI に PMS が付与されていない → スクリーン 2043 ではヒットしない

## POLYLINK

- REGISTRY ファイルに登録されている大部分のポリマーは、原料モノマーに基づいて記述される「モノマー単位ポリマー」である。

- ・ 重合後のポリマーが同じでも、原料モノマーが違えば異なる CAS RN<sup>®</sup> が付与される。

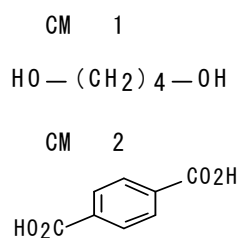
- POLYLINK コマンドは、「実質的には同じポリマーでありながら、各々独自の CAS RN<sup>®</sup> を持つポリマー」を自動的に一つの回答セットにまとめる機能である。



- ・ 対応する SRU ポリマーとモノマー単位ポリマーを、CAS 索引者がリンク付けている。
  - POLYLINK コマンドは、SRU ポリマーが存在するときのみ有効である。
  - リンク付けされた SRU ポリマーとモノマー単位ポリマーのレコードには、「**\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\***」が記される。
  - ・ SCAN 表示形式で簡単に確認することができる。

```
IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-butanediol
MF (C8 H6 O4 . C4 H10 O2)x
CI PMS, COM
```

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



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

## ■ 入力方法

=> **POLYLINK CAS RN<sup>®</sup> (または L# または E#)**

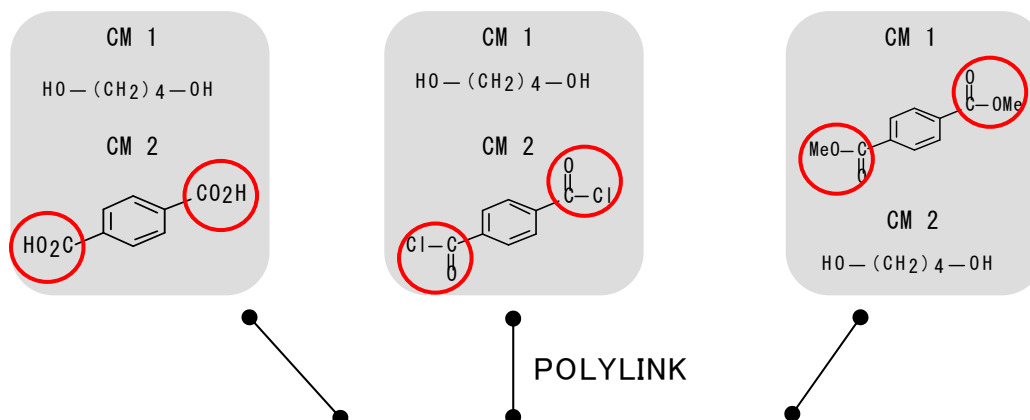
\* L#, E# : CAS RN<sup>®</sup> を含む L 番号または E 番号.

## ■ 同一ポリマーだが、複数の CAS RN<sup>®</sup> を持つポリマーの例 : ポリブチレンテレフタレート

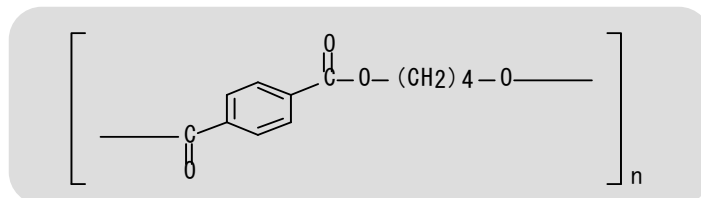
1, 4-ブタンジオール-テレフタル酸  
共重合体 [26062-94-2]

1, 4-ブタンジオール-テレフタル酸  
塩化物共重合体 [59822-52-5]

1, 4-ブタンジオール-テレフタル酸  
ジメチルエステル共重合体 [30965-26-5]



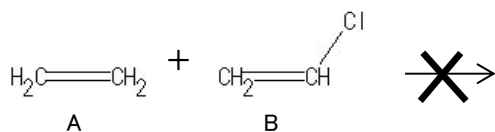
上記各原料より生成するポリマーの SRU 単位ポリマー [24968-12-5]



POLYLINK コマンドを使えば、原料違いの同じポリマーを簡単に得ることができる.

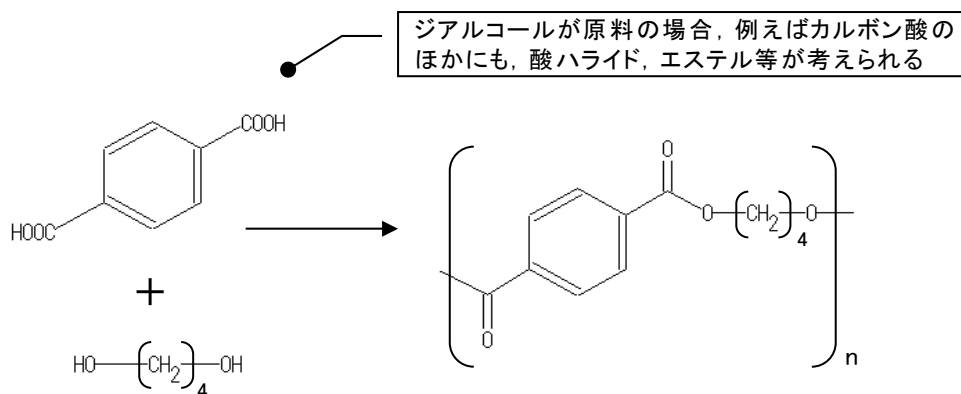
■ POLYLINK コマンドが適用できるポリマー、適用できないポリマー例

- ・ ビニル系ポリマーは SRU として登録しないので、POLYLINK コマンドを利用する必要がない。



一義的に繰り返し構造で定義できない。  
(-A-B-A-B- や -A-A-B-B- など一つ以上の繰り返し構造が考えられる)

- ・ 縮合系ポリマーは、モノマー単位ポリマーと SRU ポリマーで登録される場合がある。そのため、POLYLINK コマンドが適用できる。
  - 同一ポリマーであっても、さまざまな原料から作られることが多い。POLYLINK コマンドが使用可能なときは、必ず POLYLINK コマンドを利用して、実質的に同じポリマーを集める。



■ ビニル系ポリマーと縮合系ポリマー

ポリマーの種類		登録形式	
		モノマー単位	SRU
ビニル系ポリマー		○	×
縮合系ポリマー	・ 縮合ホモポリマー ・ 対称な構造の二種のモノマーから成る縮合ポリマー	○*3	○*3
	5 種の汎用ポリマー*1	△*3	○*3
	上記以外の縮合ポリマー*2	○	×

\*1 5 種の汎用ポリマー

Nylon 6, Nylon 66, Polyethylene glycol (PEG), Polypropylene glycol (PPG)  
Poly(ethylene terephthalate)

\*2 非対称 2 種のモノマーからの縮合ポリマーなど

\*3 POLYLINK コマンドで、同一ポリマーを集めることができる

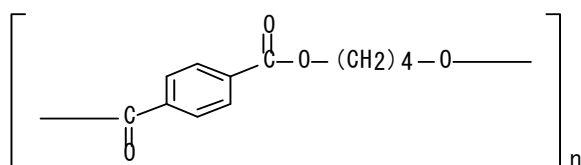
## ■ POLYLINK コマンド使用例

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る=> S VALOX/CN ← 化学物質名称から検索  
L1 1 VALOX/CN=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式で表示する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Poly(oxy-1,4-butanediylloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)  
 ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT  
 MF (C12 H12 O4)<sub>n</sub>  
 CI PMS

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

● ..... 関連するポリマーが存在する



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

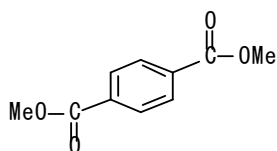
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> POLYLINK L1 ● ..... POLYLINK コマンドを実行する  
L2 22 POLYLINK L1=> S L2 NOT L1 ● ..... POLYLINK コマンドを実行した結果, 増えた回答を確認する  
L3 21 L2 NOT L1=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式で表示する

L3 21 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-butanediol and  
 1,4-dimethyl 1,4-benzenedicarboxylate  
 MF (C10 H10 O4 . C8 H6 O4 . C4 H10 O2)<sub>x</sub>  
 CI PMS

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

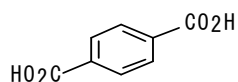
CM 1



CM 2

HO-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-OH

CM 3

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



### まとめ

- ・ 大部分のポリマーはモノマー単位ポリマーとして登録されているので、原料モノマーから検索する.
- ・ 特定のポリマー（縮合系ポリマーなど）には、SRU ポリマーも存在するので、それも含めて検索する.
  - POLYLINK コマンドを用いると、SRU ポリマーや同じポリマーでも原料が異なるポリマーをまとめて検索できる.



### 練習問題

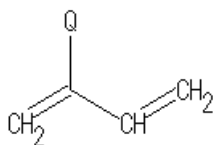
1. イソプレン（ISOPRENE）とメチルメタクリレート（METHYL METHACRYLATE）の共重合体を検索する.

（ヒント）

- ・ モノマーの CAS RN<sup>®</sup> から検索する.

回答は P.100

2. 下記のように炭素以外の元素で置換されたブタジエンをモノマーとする 2 成分系ポリマーを検索する（Q : C, H 以外）.



（ヒント）

- ・ ポリマーの誘導体を検索するときは、構造検索を用いる.
- ・ スクリーンを組み合わせて検索する.
  - モノマー単位ポリマーのスクリーン 2067
- ・ 成分数は (/NC) で限定する

回答は P.102

## C ポリマー分類用語

REGISTRY ファイルのポリマーにはポリマー分類用語が付与されています。ポリマー分類用語は、構造に元々存在する結合だけでなく、重合によって生成する結合も検索することができる非常にユニークなフィールドです。





## ポリマー分類用語とは

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

- ・ REGISTRY ファイルのポリマーに対して、43 種のポリマー分類用語 (PCT; Polymer Class Terms) が付与されている。

```

RN  27056-66-2  REGISTRY
ED  Entered STN:  16 Nov 1984
CN  1,3-Benzenedicarbonyl dichloride, polymer with
    4,4'-diamino[1,1'-biphenyl]-3,3'-diol  (CA INDEX NAME)
:
MF  (C12 H12 N2 O2 . C8 H4 C12 O2)x
CI  PMS, COM
PCT  Polyamide, Polyamide formed, Polybenzoxazole, Polybenzoxazole formed,
    Polyester, Polyester formed
LC  STN Files:  CA, CAPLUS, USPATFULL

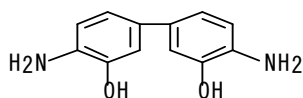
```

ポリマー分類用語

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

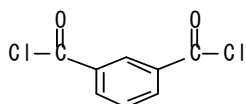
CM 1

CRN 2373-98-0  
CMF C12 H12 N2 O2



CM 2

CRN 99-63-8  
CMF C8 H4 C12 O2



46 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
11 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
47 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- ・ ポリマー分類用語は、下記の 2 種類の結合を解析して付与される。

- ① 主鎖に存在する結合
- ② 重合反応によって生成する (と推定し得る) 結合 (FORMED 付き用語)



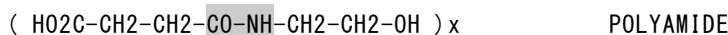
ポリマー分類用語を用いると、ポリマーの種類に基づいた検索ができる。  
例：ポリエステルの検索

## ポリマー分類用語の付与

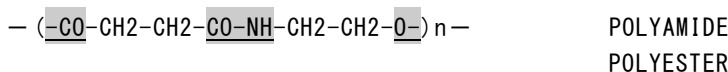
- ポリマー分類用語は、構造に元々存在する結合だけでなく、重合反応によって生成しうる結合に対しても付与される。

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

- モノマー単位ポリマー

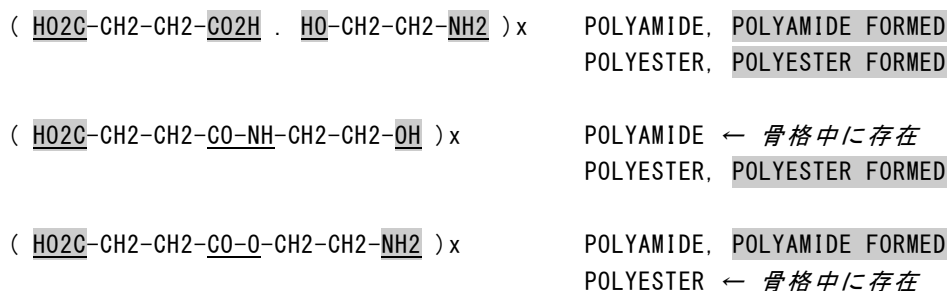


- SRU ポリマー



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

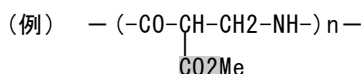
- モノマー単位ポリマー



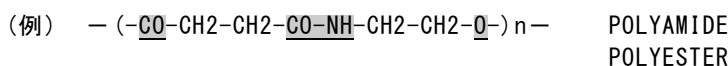
\* SRU ポリマーに FORMED 付きのポリマー分類用語は付与されない。

注：ポリマー分類用語は、その主鎖（backbone）中に存在する結合に基づいて付与される。

- 例えば下図のポリマーは、エステル結合が存在するが、主鎖ではなく側鎖であるのでポリマー分類用語の POLYESTER は付かない。



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



## ポリマー分類用語を用いた検索

■ ポリマー分類用語は /PCT フィールドで検索する。

- ・ 分類名とコードのいずれでも検索できる。
  - 入力ミスを避けるためにできるだけ EXPAND を利用する。
  - => S POLYESTER/PCT と検索すると、構造にもともと存在する結合だけでなく、重合によって生成する（と推定される）結合に基づくポリマーの両方が回答として得られる。
- ・ ポリマー分類用語と検索用コード一覧

ポリマー分類用語 ①	コード	FORMED 付きポリマー分類用語 ②	コード
AMINO RESIN CHLOROPOLYMER DOUBLE STRAND EPOXY RESIN FLUOROPOLYMER MANUAL COMPONENT MANUAL REGISTRATION PHENOLIC RESIN POLYACETYLENE POLYACRYLIC	AR CLPO DBLSTR EP FLPO MANC MANR PR PACT PACR		
POLYAMIC ACID POLYAMIDE POLYAMINE POLYANHYDRIDE POLYAZOMETHINE POLYBENZIMIDAZOLE POLYBENZOXAZOLE POLYCARBODIIMIDE POLYCARBONATE POLYCYANURATE POLYESTER POLYETHER POLYHYDRAZIDE POLYIMIDE POLYIONENE POLYISOCYANURATE POLYKETONE	PAMA PA PM PANH PAZM PBI PBO PCD PC PCY PES PETH PHZ PI PION PIR PK	POLYAMIC ACID FORMED POLYAMIDE FORMED POLYAMINE FORMED POLYANHYDRIDE FORMED POLYAZOMETHINE FORMED POLYBENZIMIDAZOLE FORMED POLYBENZOXAZOLE FORMED POLYCARBODIIMIDE FORMED POLYCARBONATE FORMED POLYCYANURATE FORMED POLYESTER FORMED POLYETHER FORMED POLYHYDRAZIDE FORMED POLYIMIDE FORMED POLYIONENE FORMED POLYISOCYANURATE FORMED POLYKETONE FORMED	PAMA F PA F PM F PANH F PAZM F PBI F PBO F PCD F PC F PCY F PES F PETH F PHZ F PI F PION F PIR F PK F
POLYNUCLEOTIDE POLYOLEFIN POLYOTHER POLYOTHER ONLY	PNUC POLF OTHER OTHERO		
POLYPHENYL POLYPHOSPHAZENE POLYQUINOXALINE POLYSTYRENE	PPH PPSZ PQ PSTY	POLYPHENYL FORMED POLYPHOSPHAZENE FORMED POLYQUINOXALINE FORMED	PPH F PPSZ F PQ F
POLYSULFIDE POLYSULFONAMIDE POLYSULFONE POLYTHIOESTER POLYTHIOETHER POLYUREA POLYURETHANE POLYVINYL	PSF PSA PSU PTES PTETH PUA PUR PVIN	POLYSULFIDE FORMED POLYSULFONAMIDE FORMED POLYSULFONE FORMED POLYTHIOESTER FORMED POLYTHIOETHER FORMED POLYUREA FORMED POLYURETHANE FORMED	PSF F PSA F PSU F PTES F PTETH F PUA F PUR F

- \* 詳細な定義については (<https://www.cas.org/sites/default/files/documents/polymerclass.pdf>) 参照。
- \* 一般の核酸に対して分類用語の“POLYNUCLEOTIDE”は付与されない。
- \* 一般のタンパク質、ペプチドに対して分類用語の“POLYAMIDE”は付与されない。
- \* 重合度の確定しているオリゴマー（2量体、3量体など）には、ポリマー分類用語は付与されない。

■ 検索例 : グアニジンをもノマーとするアミノ樹脂の検索

```

=> FILE REGISTRY                               ← REGISTRY ファイルに入る
=> E GUANIDINE/CN                             ← 名称を EXPAND する
E1      1   GUANIDAN/CN
E2      1   GUANIDIN/CN
E3      1 --> GUANIDINE/CN
E4      1   GUANIDINE ((CH7N3)2W04), TUNGSTATE(VI)/CN
:

=> S E3                                         ← E 番号で検索する
L1      1   GUANIDINE/CN

=> SEL L1 1 RN                                 ← CAS RN® を抽出する
E1 THROUGH E1 ASSIGNED

=> D SEL                                       ← 抽出した CAS RN® を表示して確認する
E1      1   113-00-8/BI

=> S E1/CRN                                    ← 成分 CAS RN® 検索を行う
L2      3935 113-00-8/CRN
        ● グアニジンを成分とする多成分物質の検索

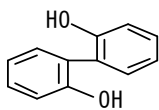
=> E AMINO RESIN/PCT                          ← ポリマー分類用語を EXPAND する
**** START OF FIELD ****
E3      19269 --> AMINO RESIN/PCT
E4      19269   AR/PCT
E5      9409   CHLOROPOLYMER/PCT
:

=> S E3 AND L2                                ● ポリマー分類用語を使ってグアニジンを成分とするアミノ樹脂に限定する
L3      97 "AMINO RESIN"/PCT AND L2

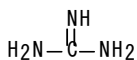
=> D SCAN                                     ← SCAN 表示形式で表示する
L3      97 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2019 ACS on STN
IN      Guanidine, polymer with [1,1'-biphenyl]-2,2'-diol and formaldehyde
MF      (C12 H10 O2 . C H5 N3 . C H2 O)x
CI      PMS

```

CM 1



CM 2



CM 3

H<sub>2</sub>C=O

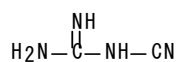
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L3 97 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Guanidine, cyano-, polymer with ammonium chloride ((NH<sub>4</sub>)Cl), formaldehyde  
 and guanidine (9Cl)  
 MF (C<sub>2</sub> H<sub>4</sub> N<sub>4</sub> . C H<sub>5</sub> N<sub>3</sub> . C H<sub>2</sub> O . Cl H<sub>4</sub> N)<sub>x</sub>  
 CI PMS

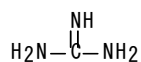
CM 1

Cl-NH<sub>4</sub>

CM 2



CM 3



CM 4

H<sub>2</sub>C=O

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

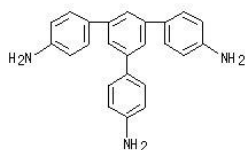
=> D L3 1

L3 ANSWER 1 OF 97 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 RN 2302087-56-3 REGISTRY  
 ED Entered STN: 07 Apr 2019  
 CN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED  
 MF (C<sub>24</sub> H<sub>21</sub> N<sub>3</sub> . C<sub>9</sub> H<sub>6</sub> O<sub>3</sub> . C H<sub>5</sub> N<sub>3</sub> . Cl H)<sub>x</sub>  
 CI PMS  
 PCT **Amino resin**, Polyazomethine, Polyazomethine formed  
 SR CA  
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT

CM 1

CRN 118727-34-7

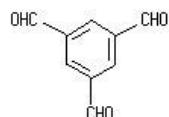
CMF C<sub>24</sub> H<sub>21</sub> N<sub>3</sub>



CM 2

CRN 3163-76-6

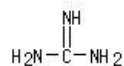
CMF C<sub>9</sub> H<sub>6</sub> O<sub>3</sub>



CM 3

CRN 50-01-1 (113-00-8)

CMF C H<sub>5</sub> N<sub>3</sub> . Cl H



• HCl

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

■ 検索例 : エステル重合によって得られる 1 または 2 元系ポリエステルを検索する。  
ただし、モノマー中にエーテル結合が存在する。

- ・ エステル重合によって得られるポリエステル → POLYESTER FORMED
- ・ モノマー中にエーテル結合が存在 → POLYETHER
- ・ 重合によって生成するエーテル結合を除く → POLYETHER FORMED を除く

=> FILE REGISTRY

=> S (POLYESTER FORMED AND POLYETHER NOT POLYETHER FORMED)/PCT  
L1 81836 (POLYESTER FORMED AND POLYETHER NOT POLYETHER FORMED)/PCT

ポリマー分類用語で検索

=> S L1 AND 3>NC  
L2 10031 L1 AND 3>NC

1 または 2 成分に限定

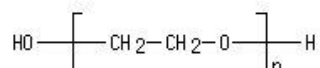
=> D L2 1 687 10031

← 1, 687, 10031 番目の回答を IDE 表示形式で表示する

L2 ANSWER 1 OF 10031 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
RN 2346549-19-5 REGISTRY  
ED Entered STN: 26 Jun 2019  
CN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED  
FS STEREOSEARCH  
MF (C6 H10 O4 Se2 . (C2 H4 O)n H2 O)x  
CI PMS  
PCT Polyester, Polyester formed, Polyether  
SR CA  
LC STN Files: CAPLUS

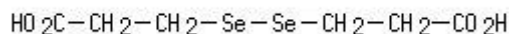
CM 1

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



CM 2

CRN 7370-58-3  
CMF C6 H10 O4 Se2



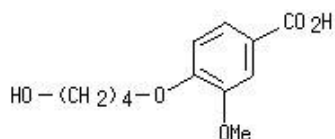
1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

L2 ANSWER 687 OF 10031 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 RN 2041570-30-1 REGISTRY  
 ED Entered STN: 30 Nov 2016  
 CN Benzoic acid, 4-(4-hydroxybutoxy)-3-methoxy-, homopolymer (CA INDEX NAME)  
 MF (C12 H16 O5)x  
 CI PMS  
 PCT Polyester, Polyester formed, Polyether  
 SR CA  
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL

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

CM 1

CRN 1284953-62-3  
 CMF C12 H16 O5



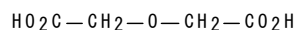
2 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 2 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

L2 ANSWER 10031 OF 10031 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 RN 9010-83-7 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Acetic acid, 2,2'-oxybis-, polymer with 1,2-propanediol (9CI) (CA INDEX NAME)  
 OTHER CA INDEX NAMES:  
 CN 1,2-Propanediol, polymer with 2,2'-oxybis[acetic acid] (9CI)  
 CN Acetic acid, oxydi-, polyester with 1,2-propanediol (8CI)  
 OTHER NAMES:  
 CN Diglycolic acid-1,2-propanediol copolymer  
 CN Diglycolic acid-1,2-propanediol polymer  
 MF (C4 H6 O5 . C3 H8 O2)x  
 CI PMS  
 PCT Polyester, Polyester formed, Polyether  
 SR CA  
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CHEMCATS, IFIALL, MSDS-OHS, USPATFULL, USPATOLD

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

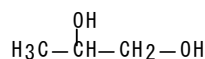
CM 1

CRN 110-99-6  
 CMF C4 H6 O5



CM 2

CRN 57-55-6  
 CMF C3 H8 O2



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



### まとめ

- ・ ポリマー分類用語は、構造に元々存在する結合および重合によって生成する結合に対して付与される。
- ・ ポリマー分類用語を用いると、ポリマーの種類に基づいた検索ができる。



### 練習問題

3. 4,4'-ビフェニルジカルボン酸 (787-70-2) をモノマーとするポリマーを網羅的に検索する。件数が多い場合はポリアミド系ポリマーに限定する。

(ヒント)

- ・ 実質的に同じポリマーを網羅的に検索するには POLYLINK コマンドを適用する。
- ・ ポリマーの種類で検索する場合はポリマー分類用語を用いる。

回答は P.103



## D 各論

ポリマーの物質検索や文献検索はポリマーの種類によって大きく異なります。この章では、ポリマーの種類ごとの検索方法をご紹介します。



## ポリマーの種類と CAplus/CA ファイルでの索引方針

■ ポリマーの種類により，CAplus/CA ファイルでの索引方針が異なる。

ポリマーの種類		索引方針	参照
縮合系ポリマー		○	42
ビニル系ポリマー		○	44
参考：重合形態を区別したポリマーの文献検索		○△	46
汎用ポリマー		○	47
ポリアルキレングリコール		○	48
ポリエーテルポリオール		○	50
多段階重合ポリマー		○	51
架橋ポリマー（多段階重合ポリマー）		○	54
後 処 理 ポ リ マ ー	塩，付加化合物	○	59
	エステル化	○	62
	エーテル化	○	66
	その他の化学的処理（塩素化など）	△	70
参考：一義的に定義できない成分を含むポリマーの検索		△	74
シリコーン		□	78
ポリビニルアルコール		○△	82
アセタール樹脂		□	83
ポリマーブレンド，ポリマーアロイ		△	85
デンドリマー，スターポリマー，ハイパーブランチポリマー		△	86
テロマー		○	87
クマロンーインデン樹脂，石油系樹脂		×	88
合成繊維		□	89
合成ゴム		□	90
参考：*（アスタリスク）付きの CAS RN <sup>®</sup> と文献検索		△□	92
参考：重合条件，触媒を限定したポリマーの文献検索		—	94
参考：モノマーの索引		—	95

○ 原則として CAS RN<sup>®</sup> で索引されるポリマー

△ 原則として基本骨格の CAS RN<sup>®</sup> + キーワードで索引されるポリマー

□ 原則として CAS RN<sup>®</sup> と統制語で索引されるポリマー

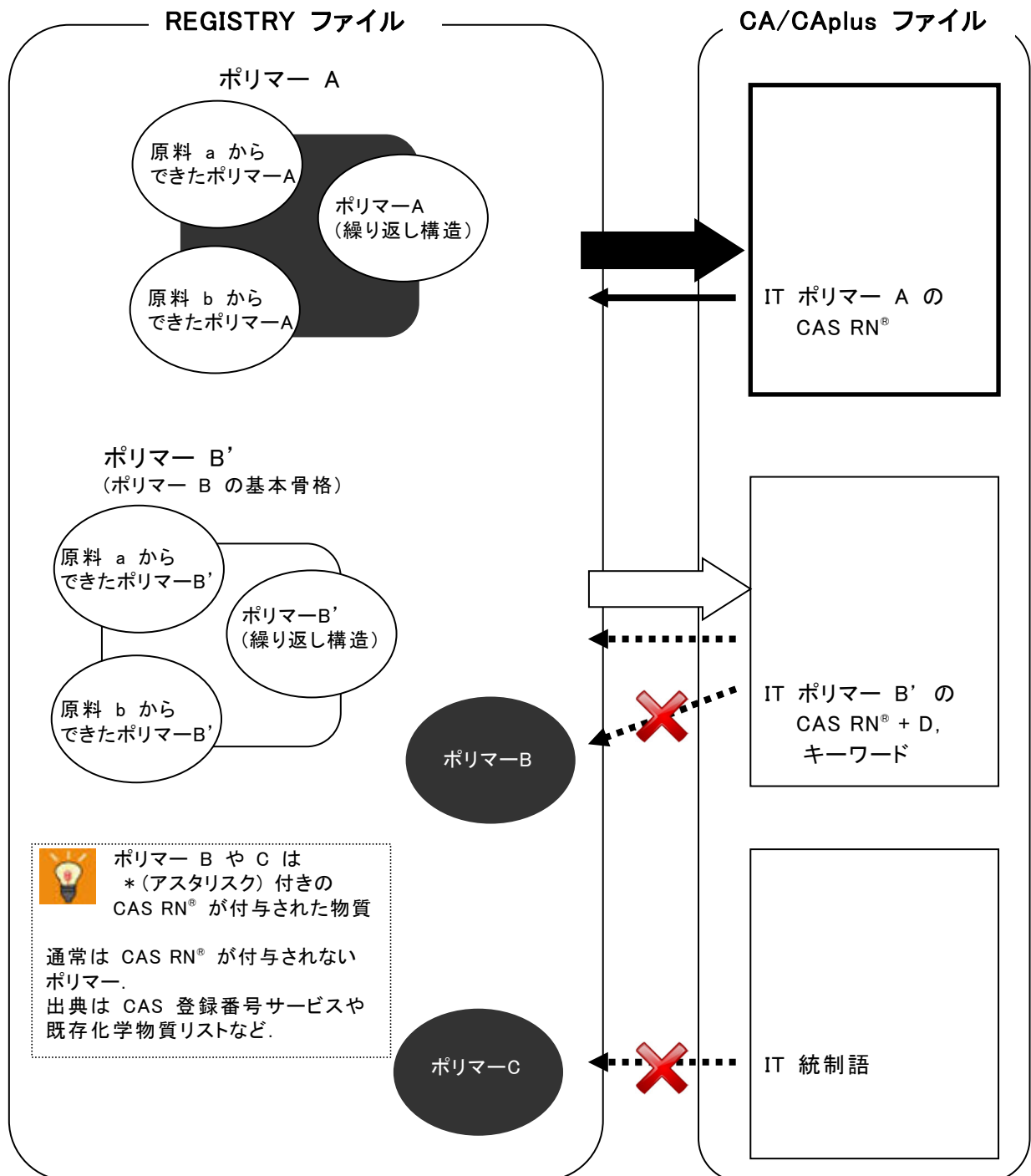
× 原則として統制語で索引されるポリマー

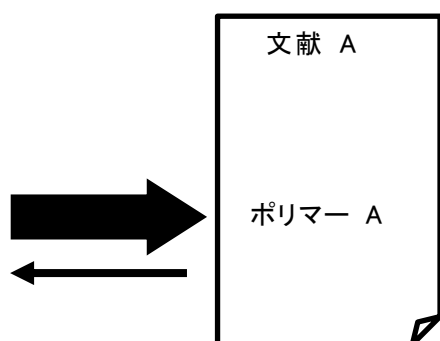
## ポリマーの登録の流れと検索方法

■ ポリマーの「CAS RN® 調査」や「物質調査」の場合には REGISTRY ファイルを用いる。

- ・ 同じポリマーでも、複数の CAS RN® を持つことがある。

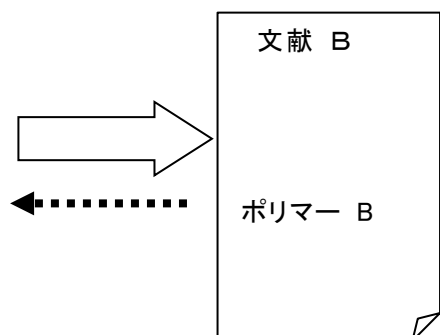
■ ポリマーの「文献調査」の場合には、ポリマーの種類によって検索方法が異なる。





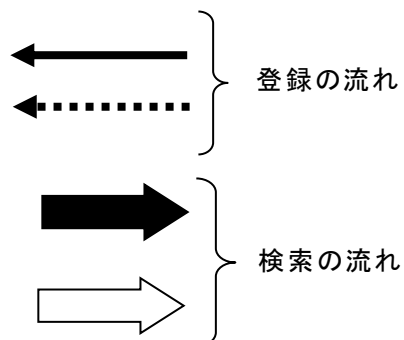
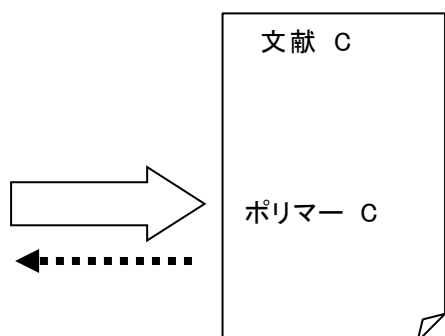
一般的にポリマーの文献検索は、ポリマーA の検索方法になる。

- ・ REGISTRY ファイルで、できる限り同じポリマーを検索し、(例 : POLYLINK を用いる等) クロスオーバーを行う。



ポリマーの種類によって、ポリマー独自の CAS RN<sup>®</sup> ではなく “CAS RN<sup>®</sup> + D” や “統制語” で CAplus/CA ファイルに索引されているものもある。

- ・ これらのポリマーは、索引方式にあった方法で検索する。



## 縮合系ポリマー

■ ポリエステル, ポリアミドなどの縮合系ポリマーは, 同じポリマーでも原料が異なることが多い.

- ・ POLYLINK コマンドが適用可能な場合は, 必ず POLYLINK コマンドを使用する.
- ・ 非対称なモノマーからなるポリマーは POLYLINK コマンドが適用できない. 各モノマーのバリエーションを考えて検索する (モノマーからの構造検索が有効).

■ 検索例 : *p*-フェニレンジアミンとテレフタル酸からなるポリマーの検索

CAS RN®  
& 物質調査

```

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

=> E P-PHENYLENEDIAMINE/CN ← 名称で EXPAND する
E1          1 P-PHENYLENEDIALDEHYDE-M-PHENYLENEDIAMINE COPOLYMER/CN
E2          1 P-PHENYLENEDIALDEHYDE-M-PHENYLENEDIAMINE COPOLYMER, SRU/CN
E3          1 --> P-PHENYLENEDIAMINE/CN
:

=> S E3                  ← E 番号で検索する
L1          1 P-PHENYLENEDIAMINE/CN

=> SEL L1 1 RN          ← CAS RN® を抽出する
E1 THROUGH E1 ASSIGNED

=> S E1/CRN             ← 成分 CAS RN® 検索を行う
L2          9159 106-50-3/CRN

=> E TEREPHTHALIC ACID/CN ← 名称で EXPAND する
E1          1 TEREPHTHALHYDROXIMOYL CHLORIDE/CN
E2          1 TEREPHTHALHYDROXYAMOYL CHLORIDE-4, 4' -THIODIBENZENETHIOL POLYMER/CN
E3          1 --> TEREPHTHALIC ACID/CN
:

=> S E3                  ← E 番号で検索する
L3          1 "TEREPHTHALIC ACID"/CN

=> SEL L3 1 RN          ← CAS RN® を抽出する
E1 THROUGH E1 ASSIGNED

=> S E1/CRN             ← 成分 CAS RN® 検索を行う
L4          40586 100-21-0/CRN

=> S L2 AND L4 AND 2/NC ← 各成分を含む 2 成分物質を検索
L5          3 L2 AND L4 AND 2/NC

=> S L5 AND PMS/CI      ← ポリマーに限定する
L6          2 L5 AND PMS/CI

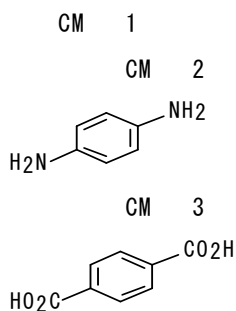
=> D SCAN                ← SCAN 表示形式で確認する

L6  2 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2019 ACS on STN
IN  1,4-Benzenedicarboxylic acid, compd. with 1,4-benzenediamine (1:1), homopolymer (9CI)
MF  (C8 H6 O4 . C6 H8 N2)x
CI  PMS

```

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

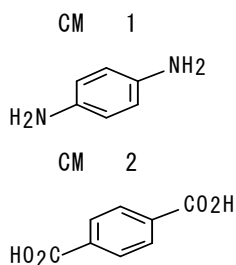
●————— 関連ポリマーが存在する



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

L6 2 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-benzenediamine  
 MF (C8 H6 O4 . C6 H8 N2)x  
 CI PMS, COM

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



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

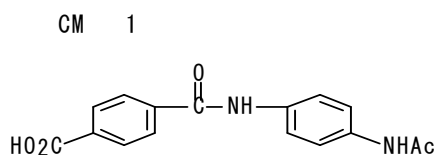
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> POLYLINK L6  POLYLINK コマンドで関連するポリマーを集める  
 L7 20 POLYLINK L6

=> D\_SCAN ← SCAN 表示形式で確認する

L7 20 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Benzoic acid, 4-[[[4-(acetylamino)phenyl]amino]carbonyl]-, homopolymer (9C1)  
 MF (C16 H14 N2 O4)x  
 CI PMS


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



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

■ 縮合系ポリマーの文献検索は、REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする。

=> FILE CAPLUS ← Caplus ファイルに入る

=> S L7  文献を検索するときは、L 番号を CAplus/CA  
 L8 6689 L7 ファイルにクロスオーバーする

文献  
調査

## ビニル系ポリマー

■ ビニル系ポリマーを検索するときは、モノマーから検索すると幅広く検索できる。

■ 検索例：スチレン（100-42-5）とイソプレン（78-79-5）共重合体を調査する。

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S 100-42-5/CRN AND 78-79-5/CRN AND PMS/CI AND 2/NC

L1 27 100-42-5/CRN AND 78-79-5/CRN AND PMS/CI AND 2/NC

↑ スチレンとイソプレンからなる 2 成分ポリマーを検索

CAS RN®  
& 物質調査

=> D 1-27 IN

← 1-25 番目の回答の CA 索引名を表示する

L1 ANSWER 1 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, alternating

L1 ANSWER 2 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic, pentablock

L1 ANSWER 3 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, isotactic

L1 ANSWER 4 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic, triblock

L1 ANSWER 5 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic, diblock

L1 ANSWER 6 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, isotactic, diblock

L1 ANSWER 7 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic

L1 ANSWER 8 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic, graft, triblock (9CI)

L1 ANSWER 9 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic, diblock, graft (9CI)

L1 ANSWER 10 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic, graft, triblock (9CI)

重合形態ごとに、異なる CAS RN® が付与されている

L1 ANSWER 11 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, isotactic, triblock (9CI)

L1 ANSWER 12 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, diblock, graft

L1 ANSWER 13 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, pentablock

L1 ANSWER 14 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, tetrablock

L1 ANSWER 15 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, triblock



L1 ANSWER 16 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, **diblock**

L1 ANSWER 17 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, **isotactic, block** (9CI)

L1 ANSWER 18 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, **isotactic, graft** (9CI)

L1 ANSWER 19 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, **syndiotactic, graft** (9CI)

L1 ANSWER 20 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, **block, graft**

L1 ANSWER 21 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, **syndiotactic, block**

L1 ANSWER 22 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, **graft**

L1 ANSWER 23 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, **block**

L1 ANSWER 24 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, hydrogenated

L1 ANSWER 25 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, epoxidized

L1 ANSWER 26 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene dimer (9CI)

L1 ANSWER 27 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene



原料モノマーから検索すると、さまざまな重合形態のポリマーを検索できる。

- ビニル系ポリマーの文献検索は、REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする。

=> FILE CAPLUS

← *CAplus* ファイルに入る

=> S L1  
 L2 18793 L1

文献を検索するときは、L 番号を CAplus/CA  
 ファイルにクロスオーバーする

文献  
 調査

## 参考：重合形態を区別したポリマーの文献検索

### ■ CAplus/CA ファイルにおける重合形態の違いにおける索引の変遷

年代	CAplus/CA ファイルの索引方針
1976 年以前	重合形態に関わらず、ランダム共重合体の CAS RN <sup>®</sup> を索引し、構造的特徴(block, graft, alternating など)はテキスト説明句で区別。
1977 年以降	ブロック (diblock, triblock, tetrablock, pentablock, stereoblock), ランダム共重合体は、固有の CAS RN <sup>®</sup> を索引。その他の類似の構造的特徴 (グラフト, 交互, ladder など)は テキスト説明句で区別。
1987 年以降	グラフト, 交互共重合体についても固有の CAS RN <sup>®</sup> で索引。



重合形態を指定した文献検索の際は、目的の重合形態に対応する CAS RN<sup>®</sup> を利用する。固有の CAS RN<sup>®</sup> で索引されていない文献を入手する場合は、ランダム共重合体などの CAS RN<sup>®</sup> と重合形態のキーワードを組み合わせて検索する。

### ■ 検索例：スチレン (100-42-5) とイソプレン (78-79-5) のブロック共重合体に関する文献検索

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S 100-42-5/CRN AND 78-79-5/CRN AND PMS/CI AND 2/NC  
 L1 27 100-42-5/CRN AND 78-79-5/CRN AND PMS/CI AND 2/NC  
 ↑ スチレンとイソプレンからなる 2 成分ポリマーを検索

=> D 1-27 IN ← 1-27 番目の回答の CA 索引名を表示する  
 :

=> SEL L1 2 4-6 8-17 20-21 23 RN ● ———— ブロック共重合体の CAS RN<sup>®</sup> を抽出する  
 E1 THROUGH E17 ASSIGNED

=> S E1-E17 ← E 番号で検索する  
 L2 17 (1011463-57-2/BI OR 1011463-59-4/BI OR 105729-79-1/BI OR 154801-  
 :

=> SEL L1 27 RN ● ———— ランダム共重合体の CAS RN<sup>®</sup> を抽出する  
 E18 THROUGH E18 ASSIGNED

=> S E18 ← E 番号で検索する  
 L3 1 25038-32-8/BI  
 (25038-32-8/RN)

=> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る

=> S L2 ● ———— ブロック共重合体の CAS RN<sup>®</sup> を使って索引していた文献 (1977 年以降の文献調査)  
 L4 15368 L2

=> S L3 (L) ?BLOCK? RAN=, 1976  
 L5 317 L3 (L) ?BLOCK? ● ———— 1976 年以前は、ブロック共重合体でも、ランダム共重合体の CAS RN<sup>®</sup> を使って索引していたので、1976 年以前に限定して検索 (1976 年以前の文献調査)

=> S L4 OR L5  
 L6 15677 L4 OR L5

文献調査

応用

## 汎用ポリマー

- 5 種の汎用ポリマー（ナイロン 6, ナイロン 66, ポリエチレングリコール, ポリプロピレングリコール, ポリエチレンテレフタレート）については, SRU ポリマーの CAS RN<sup>®</sup> を主に用いる.

ポリマー名	SRU 登録ポリマーの CAS RN <sup>®</sup>	POLYLINK
Nylon 6	[25038-54-4]	○
Nylon 66	[32131-17-2]	○
Polyethylene glycol (PEG)	[25322-68-3]	○
Polypropylene glycol (PPG)	[25322-69-4]	×
Poly(ethylene terephthalate)	[25038-59-9]	○

- ・ POLYLINK コマンドの項に○が付与されているポリマーには, モノマー単位ポリマーも存在する.



汎用ポリマーであってもポリマーの文献を網羅的に検索するには, POLYLINK コマンドの併用が必要な場合がある.

- 検索例 : ポリエチレンテレフタレートの検索

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

CAS RN<sup>®</sup>  
& 物質調査

=> S POLYETHYLENE TEREPHTHALATE/CN

← 名称で検索する

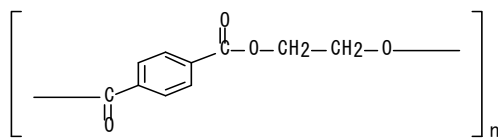
L1 1 POLYETHYLENE TEREPHTHALATE/CN

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Poly(oxy-1,2-ethanedioxydicarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)  
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT  
MF (C10 H8 O4)<sub>n</sub>  
CI PMS, COM

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\* ← 関連ポリマーが存在する



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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> POLYLINK L1

← POLYLINK コマンドを実行する

L2 45 POLYLINK L1

- 汎用ポリマーの文献は REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする.

=> FILE CAPLUS

← Caplus ファイルに入る

=> S L2

← L 番号をクロスオーバーする

L3 206572 L2

文献  
調査

## ポリアルキレングリコール

- ポリアルキレングリコールは、環状のアルキレンオキシド（エチレンオキシド、テトラヒドロフランなど）の開環重合によって生成するポリマーである。

一般式 :  $H-[-O-(CR_2)_m-]_n-OH$  (R=H, m=2 の場合:  $H-[-O-CH_2-CH_2-]_n-OH$ )

- ポリアルキレングリコールは、種類によって REGISTRY ファイルの登録形式が異なる。

種類	モノマー単位	SRU	汎用ポリマー
PPG (ポリプロピレングリコール, ポリプロピレンオキシド)	×	○	汎用ポリマー
その他のポリアルキレングリコール (ホモポリマー)	○	○	
共重合体 (コポリマー)	○	×	



モノマー単位, SRU の両方の登録形式が存在する場合は POLYLINK コマンドを実行する。

- 検索例 : ポリプロピレングリコール (PPG) の検索

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> E POLYPROPYLENE GLYCOL/CN

← 名称を EXPAND する

```
E1      1      POLYPROPYLENE FIBERS, ISOTACTIC/CN
E2      1      POLYPROPYLENE FIBERS, WOVEN/CN
E3      1 --> POLYPROPYLENE GLYCOL/CN
E4      1      POLYPROPYLENE GLYCOL (1-AZIRIDINYL)PROPYLENE ETHER/CN
:
```

CAS RN®  
& 物質調査

=> S E3

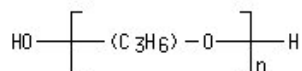
← E 番号で検索する

```
L1      1 "POLYPROPYLENE GLYCOL"/CN
```

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認する

```
L1  1 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2019 ACS on STN
IN  Poly[oxy(methyl-1,2-ethanediyl)], α-hydro-ω-hydroxy-
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT
MF  (C3 H6 O)n H2 O
CI  IDS, PMS, COM
```



● ———— ポリプロピレングリコールは SRU ポリマーのみ

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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

- ポリアルキレングリコールの文献検索は、REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする。

=> FILE CAPLUS

← Caplus ファイルに入る

=> S L1

← L 番号をクロスオーバーする

```
L2      39913 L1
```

文献  
調査

■ モノマー単位と SRU 登録が存在する場合

- ・ レコード例 : テトラヒドロフランホモポリマー

モノマー単位登録

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

:  
\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

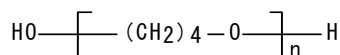
CM 1  
CRN 109-99-9  
CMF C4 H8 O



SRU 登録

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

:  
\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*



■ 検索例 : テトラヒドロフランホモポリマーの検索

CAS RN®  
& 物質調査

- => FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る
- => S 109-99-9/CRN ← テトラヒドロフランを成分とする物質を検索する  
L1 16232 109-99-9/CRN
- => S L1 AND PMS/CI AND 1/NC ← ホモポリマーに限定する  
L2 1 L1 AND PMS/CI AND 1/NC
- => D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する
- L2 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Furan, tetrahydro-, homopolymer  
:  
\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*  
CM 1  
  
:  
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED
- => POLYLINK L2 ← POLYLINK コマンドで関連ポリマーを検索する  
L3 4 POLYLINK L2

■ ポリアルキレングリコールの文献検索は、REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする。

- => FILE CAPLUS ← Caplus ファイルに入る
- => S L3 ← L 番号をクロスオーバーする  
L4 15739 L3

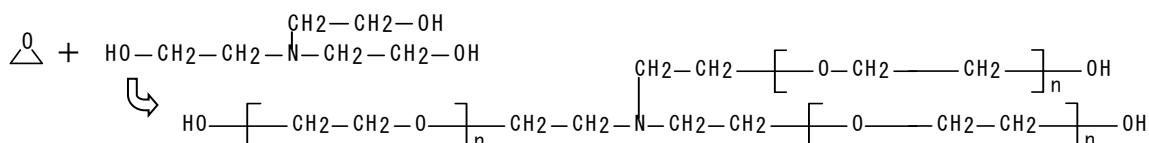
文献  
調査

## ポリエーテルポリオール

■ ポリエーテルポリオールは、活性水素を有する多価アルコール（またはアミン）と、アルキレンオキソドを酸またはアルカリ存在下で反応させて得られるポリマーである。

- ・ 多価アルコール，またはアミンとしてエチレングリコール，グリセリン，エチレンジアミン，トリエタノールアミンなどが使われる。

■ 検索例：オキシランをトリエタノールアミンの存在下で重合させたポリエーテルポリオールの検索



- ・ この種のポリマーは構造や分子式で検索可能である。化合物の全体の構造が明確な場合は、分子式の検索が有効である。部分構造のみを指定する場合は、構造検索を利用する。

－ 分子式の作成方法

- ①  $[\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}]_n$  をまとめる。   ... (C2H4O)N(C2H4O)N(C2H4O)N  
 ② その他の分子式をまとめる。   ... C6H15N03  
 ③ ① を最初に，② を次に入力する。    ... (C2H4O)N(C2H4O)N(C2H4O)NC6H15N03

=> **FILE REGISTRY**

← REGISTRY ファイルに入る

=> **E (C2H4O)N(C2H4O)N(C2H4O)NC6H15N03/MF** ←分子式で EXPAND する

```
E1      1      (C2H4O)N(C2H4O)N(C2H4O)NC6H15N012S3/MF
E2      1      (C2H4O)N(C2H4O)N(C2H4O)NC6H15N012S3.3NA/MF
E3      1  --> (C2H4O)N(C2H4O)N(C2H4O)NC6H15N03/MF
```

CAS RN®  
& 物質調査

=> **S E3**

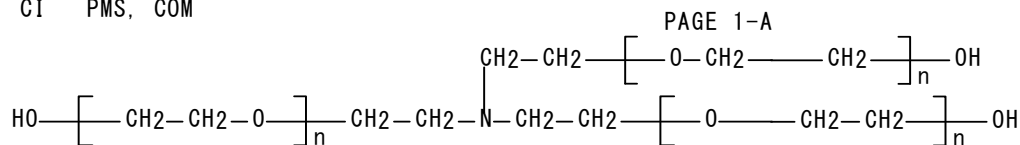
← E 番号で検索する

```
L1      1  "(C2H4O)N(C2H4O)N(C2H4O)NC6H15N03"/MF
```

=> **D SCAN**

← SCAN 表示形式で確認する

```
L1      1 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2019 AGS on STN
IN      Poly(oxy-1,2-ethanediy), α, α', α'-(nitritotri-2,1-ethanediy)tris[ω-hydroxy-
MF      (C2 H4 O)n (C2 H4 O)n (C2 H4 O)n C6 H15 N 03
CI      PMS, COM
```



ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

■ ポリエーテルポリオールの文献は，REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする。

=> **FILE CAPLUS**

← Caplus ファイルに入る

=> **S L1**

← L 番号をクロスオーバーする

```
L2      154 L1
```

文献  
調査

## 多段階重合ポリマー

■ 多段階重合ポリマーは、ポリマーの種類により、最終生成物のポリマーがモノマーに戻して登録されている場合と、ポリマー + モノマーで登録されている場合がある。

■ モノマーに戻して登録されている場合

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

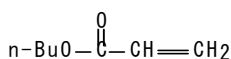
RN 827029-51-6 REGISTRY  
 ED Entered STN: 07 Feb 2005  
 CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl 2-propenoate, block, ammonium salt (9C1) (CA INDEX NAME)  
 OTHER NAMES:  
 CN Butyl acrylate-ethyl acrylate-methacrylic acid block copolymer ammonium salt  
 MF (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x . x H3 N  
 PCT Polyacrylic  
 SR CA  
 LC STN Files: CA, CAPLUS

CM 1

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

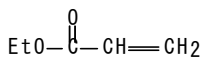
CM 2

CRN 141-32-2  
 CMF C7 H12 O2



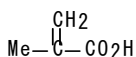
CM 3

CRN 140-88-5  
 CMF C5 H8 O2



CM 4

CRN 79-41-4  
 CMF C4 H6 O2



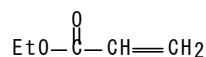
1 REFERENCES IN FILE CA  
 1 REFERENCES IN FILE CAPLUS

アクリル酸エチル-メタクリル酸コポリマーはモノマー単位ポリマーであり、さらにモノマーを重合させた場合は、重合前のポリマーをモノマーに戻して登録する



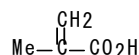
アクリル酸エチル-メタクリル酸コポリマーの CAS RN® は、左記のレコードには登録されていない。

RN 25212-88-8  
 MF (C5H8O2.C4H6O2)x  
 CM 1  
 CRN 140-88-5  
 CMF C5 H8 O2



CM 2

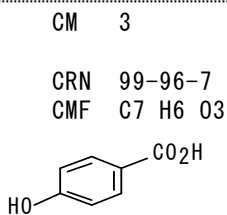
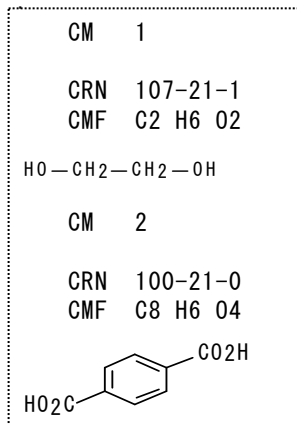
CRN 79-41-4  
 CMF C4 H6 O2



よって左記のレコードは => S 25212-88-8/CRN  
 検索ではヒットしない

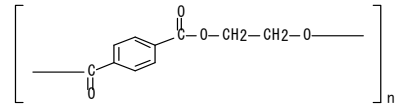
- 例 2) ポリエチレンテレフタレートと 4-ヒドロキシ安息香酸からなるポリマー

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



ポリエチレンテレフタレートは汎用ポリマーであり、末端基なしの SRU ポリマーの CAS RN<sup>®</sup> が主に用いられる。

RN 25038-59-9  
 MF (C10H8O4)<sub>N</sub>



末端基なしの SRU ポリマーに、さらにモノマーを重合させた場合は、モノマーに戻して登録する。

\* モノマーが記載されていなかった場合は、モノマーを推定して登録している。

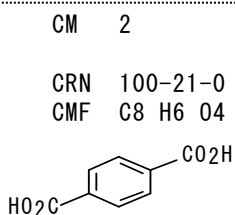
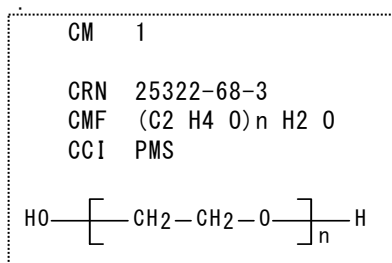


左記のレコードは => S 25038-59-9/CRN  
 検索ではヒットしない

## ■ ポリマー + モノマーで登録されている場合

- 例 3) ポリエチレングリコールとテレフタル酸からなるポリエステル

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



ポリエチレングリコールは汎用ポリマーであり、末端基つき SRU ポリマーの CAS RN<sup>®</sup> が用いられる。

末端基つき SRU ポリマーが、さらに別のモノマーと重合する場合は、通常はモノマー単位に戻さず、ポリマーの成分として登録される



■ 検索例：アクリル酸エチル-メタクリル酸コポリマーに、さらにアクリル酸ブチルを加えて得られるポリマーの検索

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S 140-88-5/CRN AND 79-41-4/CRN AND 141-32-2/CRN ●  
L1 2482 140-88-5/CRN AND 79-41-4/CRN AND 141-32-2/CRN

各成分モノマーから検索する

=> S L1 AND 3/NC ← 3 成分に限定する  
L2 4 L1 AND 4/NC

CAS RN®  
& 物質調査

=> D 1-4 IN MF ← CA 索引名と分子式を表示する

L2 ANSWER 1 OF 4 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl  
2-propenoate, block (9CI)  
MF (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x ● ブロック

L2 ANSWER 2 OF 4 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl  
2-propenoate, triblock  
MF (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x ● トリブロック

L2 ANSWER 3 OF 4 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl  
2-propenoate, graft (9CI)  
MF (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x ● グラフト

L2 ANSWER 4 OF 4 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl  
2-propenoate  
MF (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x

=> S L1 AND 4/NC AND H3N  
L3 2 L1 AND 4/NC AND H3N

P.51 のアンモニウム塩を検索するには 3 成分ではなく、4 成分 (4/NC) で限定する。また、NH<sub>3</sub> は単原子フラグメント (P.61 参照) であり、成分 CAS RN® が収録されていないので、成分分子式 (H3N) を利用して検索する

=> D L3 1-2 IN MF

L3 ANSWER 1 OF 2 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl  
2-propenoate, block, ammonium salt (9CI)  
MF (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x . x H3 N

L3 ANSWER 2 OF 2 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl  
2-propenoate, ammonium salt  
MF (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x . x H3 N

■ 多段階重合ポリマーの文献検索は、REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする。

=> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る

=> S L2 ●  
L3 131 L2

文献を検索するときは、L 番号を CAplus/CA  
ファイルにクロスオーバーする

文献  
調査

## 架橋ポリマー（多段階重合ポリマー）

■ 架橋ポリマーは各ポリマー成分とともに、架橋剤も含めて登録されている。

- ・ ただし、触媒（光，放射線，加硫，過酸化物）による架橋の場合は，基本的に架橋剤を含めない形で登録される。

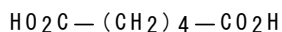
■ レコード例

- ・ 例 1) アジピン酸-エチレングリコール-無水マレイン酸から得られる不飽和ポリエステルのスチレン架橋ポリマー

RN 35381-60-3 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Hexanedioic acid, polymer with 1,2-ethanediol, ethenylbenzene and 2,5-furandione (9CI) (CA INDEX NAME)  
 :  
 MF (C8 H8 . C6 H10 O4 . C4 H2 O3 . C2 H6 O2) x  
 CI PMS  
 PCT Polyester, Polyester formed, Polystyrene, Polyvinyl  
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT

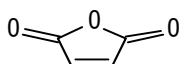
CM 1

CRN 124-04-9  
 CMF C6 H10 O4



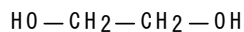
CM 2

CRN 108-31-6  
 CMF C4 H2 O3



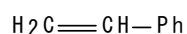
CM 3

CRN 107-21-1  
 CMF C2 H6 O2



CM 4

CRN 100-42-5  
 CMF C8 H8



架橋剤 (100-42-5) も成分として登録される

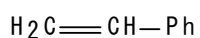
4 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 4 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- ・ 例 2) ビスフェノール A - エピクロロヒドリン共重合体のアクリル酸エステルへのスチレン架橋ポリマー

RN 95932-78-8 REGISTRY  
 ED Entered STN: 21 Apr 1985  
 CN Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with  
 2-(chloromethyl)oxirane, 2-propenoate, polymer with ethenylbenzene (CA INDEX NAME)

:  
 MF ((C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . C8 H8 . x C3 H4 O2)x  
 CI PMS  
 PCT Epoxy resin, Polyacrylic, Polystyrene  
 SR CA  
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL

CM 1  
 CRN 100-42-5  
 CMF C8 H8

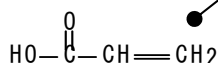


架橋剤 (100-42-5) も成分として登録される

CM 2  
 CRN 55818-57-0  
 CMF (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . x C3 H4 O2

ビスフェノール A-エピクロロヒドリン共重合体の  
 アクリル酸エステル (55818-57-0)

CM 3  
 CRN 79-10-7  
 CMF C3 H4 O2

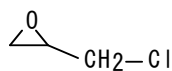


エステル化剤 (79-10-7)  
 (P.62 参照)

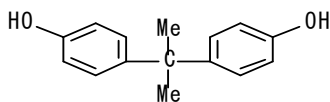
CM 4  
 CRN 25068-38-6  
 CMF (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x  
 CCI PMS

ビスフェノール A-エピクロロヒドリン共重合体  
 (25068-38-6)

CM 5  
 CRN 106-89-8  
 CMF C3 H5 Cl O



CM 6  
 CRN 80-05-7  
 CMF C15 H16 O2



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

- 検索例 : アジピン酸 (124-04-9), エチレングリコール (107-21-1), 無水マレイン酸 (108-31-6) から得られる不飽和ポリエステルのスチレン架橋ポリマーの文献検索

=> FILE REGISTRY← *REGISTRY* ファイルに入るCAS RN®  
& 物質調査=> S 124-04-9/CRN AND 107-21-1/CRN AND 108-31-6/CRN AND 100-42-5/CRN AND 4/NC

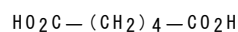
L1 1 124-04-9/CRN AND 107-21-1/CRN AND 108-31-6/CRN AND 100-42-5/CRN AND 4/NC

スチレンをモノマーの一つとする 4 元共重合体を検索する

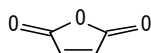
=> D SCAN← *SCAN* 表示形式で確認する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Hexanedioic acid, polymer with 1,2-ethanediol, ethenylbenzene and 2,5-furandione  
 MF (C8 H8 . C6 H10 O4 . C4 H2 O3 . C2 H6 O2)x  
 CI PMS

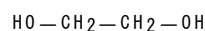
CM 1



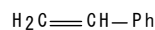
CM 2



CM 3



CM 4



ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

- 架橋ポリマーの文献検索は, 原則 *REGISTRY* ファイルの L 番号をクロスオーバーすればよい.

=> FILE CAPLUS← *Caplus* ファイルに入る文献  
調査=> S L1← *REGISTRY* ファイルの L 番号をクロスオーバーする

L2 4 L1

=> D SCAN TI HITRN← *SCAN* 表示形式 (*TI*, *HITRN* のみ表示) で確認する

L2 4 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 TI Mechanical properties and curing characteristics of unsaturated polyesters synthesized for large casting  
 IT **35381-60-3P**, Adipic acid-ethylene glycol-maleic anhydride-styrene copolymer  
 RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (mech. properties and curing characteristics of unsatd. polyesters synthesized for large castings)

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

■ ただし、下記のように架橋剤がモノマーとして扱われていない場合もあるので、架橋剤を除いたポリマーも含めて検索すると網羅的な回答が得られる。

- ・ 1986 年以前は、架橋剤と明記されたものについてはモノマーの扱いをしていなかった。また、索引方針が曖昧な時期もある。
- ・ 架橋剤が特殊である場合ならびに架橋剤が研究・発明の主眼である場合には、架橋剤をモノマーとしないポリマーの CAS RN® で索引し、別途架橋剤の CAS RN® も索引する。

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=> S 124-04-9/CRN AND 107-21-1/CRN AND 108-31-6/CRN AND 3/NC  
L1 1 124-04-9/CRN AND 107-21-1/CRN AND 108-31-6/CRN AND 3/NC

スチレンを除く 3 元重合体を検索する

=> S 100-42-5  
L2 1 100-42-5

スチレンを検索する

=> FILE CAPLUS

3 元重合体ポリマーと架橋や硬化などのキーワードを掛け合わせる。  
また、スチレンも同時に含む文献を調査する

=> S L1 (L) (CROSSLINK? OR CUR? OR HARD?) AND L2  
L3 5 L1 (L) (CROSSLINK? OR CUR? OR HARD?) AND L2

=> D SCAN TI HITIND ← *SCAN* 表示形式 (*TI*, *HITIND* のみ表示) で確認する

L3 5 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
TI Radiation copolymerization of ethylene maleate-adipate oligomer with various monomers  
IT **29060-29-5**  
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
(crosslinking of, by  $\gamma$ -irradiation)  
IT **100-42-5**, uses and miscellaneous 101-37-1 108-05-4, uses and miscellaneous 1025-15-6  
RL: USES (Uses)  
(polyesters from adipic acid and ethylene glycol and maleic anhydride crosslinked by)

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

L3 5 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
TI Effect of maleic anhydride and styrene content on the thermal stability of unsaturated polyester resins  
IT **100-42-5**, reactions  
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
(crosslinking by, of unsatd. polyesters, phys. properties in relation to)  
IT **29060-29-5** 29403-67-6  
RL: USES (Uses)  
(styrene-crosslinked, heat resistance of)

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

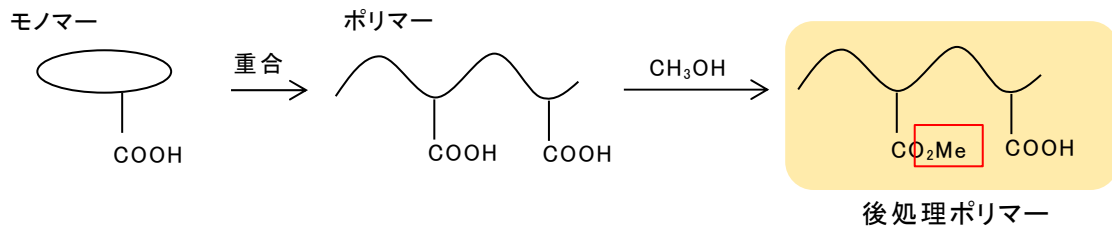
文献  
調査

応用

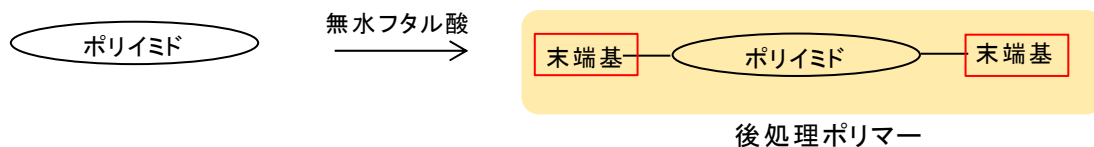
## 後処理ポリマー

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

〈例 1〉 重合後にポリマー側鎖のカルボニル基をメタノールでエステル化したポリマー



〈例 2〉 ポリイミドの末端封止剤として無水フタル酸を使用したポリマー（末端のイミド化）



- 後処理ポリマーの索引方針

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

1. 後処理ポリマー独自の CAS RN<sup>®</sup> が付与され、その CAS RN<sup>®</sup> で索引される。
2. 後処理前のポリマーの非特定誘導体 (D 付き) が後処理に関するキーワードとともに索引される。後処理ポリマーには独自の CAS RN<sup>®</sup> は付与されない。

IT 後処理ポリマーの  
CAS RN<sup>®</sup>

IT 後処理前のポリマーの  
CAS RN<sup>®</sup> + D  
+ キーワード

例) 塩素化物 : [原料ポリマーの CAS RN<sup>®</sup>] D + chlorinated など

- ・ 後処理タイプ別の索引方針

後処理の種類	CAplus/CA ファイルの索引方針
塩、付加化合物	独自の CAS RN <sup>®</sup> で索引
エステル化	
エーテル化 (ポリアルキレングリコール、天然物ポリマーのみ)	
エーテル化 (上記以外)	後処理前のポリマーの CAS RN <sup>®</sup> + D + キーワード
上記以外の後処理ポリマー アミド化、イミド化、ウレタン化、加水分解、塩素化、酸化、アルキル化、上記の後処理でも構造を確定できないものなど	

後処理ポリマー自身には CAS RN<sup>®</sup> が付与されない場合もある

## 後処理ポリマー - 塩, 付加化合物

- ポリマーを後処理した金属塩, 塩酸塩, 四級アンモニウム塩, 付加化合物は, 後処理に関する成分を別成分として REGISTRY ファイルに登録される。

- レコード例 : ポリアクリル酸のナトリウム塩 (後処理ポリマー, 金属塩)

RN 9003-04-7 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN 2-Propenoic acid, homopolymer, sodium salt (CA INDEX NAME)

:  
 MF (C3 H4 O2)x . x Na ● ————— ポリアクリル酸とナトリウムの多成分登録  
 CI COM  
 PCT Polyacrylic

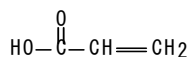
:  
 CM 1

CRN 9003-01-4 ● ————— ポリアクリル酸の CAS RN® (9003-01-4)  
 CMF (C3 H4 O2)x

CCI PMS

CM 2

CRN 79-10-7 ● ————— アクリル酸の CAS RN® (79-10-7)  
 CMF C3 H4 O2



ナトリウムの CAS RN® はレコード中ではない

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



金属原子 (ナトリウム等) は単原子フラグメント\* のため, 上記のレコードにはナトリウムの成分 CAS RN® は収録されていない。このような場合に金属元素を用いて限定するには, 成分分子式 (/BI またはなし) あるいは元素種 (/ELS) などを利用する。

\* 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。

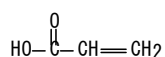
### 参考 : アクリル酸ナトリウムのホモポリマー

- ・ 下記レコードのようにアクリル酸ナトリウムをモノマーとするホモポリマーの登録も存在する (後処理ポリマーではない)。ビニル系ポリマーは POLYLINK は利用できないため, 下記のレコードも得たい場合は, 別途検索する必要がある。

RN 25549-84-2 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN 2-Propenoic acid, sodium salt (1:1), homopolymer (CA INDEX NAME)

:  
 MF (C3 H4 O2 . Na)x  
 CI PMS, COM  
 PCT Polyacrylic

:  
 CM 1  
 CRN 7446-81-3 (79-10-7)  
 CMF C3 H4 O2 . Na



● Na

=> S 79-10-7/CRN AND NA/ELS AND PMS/CI AND 2/NC  
 で、9003-04-7、25549-84-2 どちらもヒットする

- 検索例 : 2-(ジメチルアミノ)エチルメタクリレートホモポリマー (25154-86-3) と 1,8-ジヨード-3,6-ジオキサオクタン (36839-55-1) の付加化合物の検索

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

CAS RN®  
& 物質調査

=> S 36839-55-1/CRN AND 25154-86-3/CRN AND 2/NC ← 各成分を含む 2 成分物質を検索  
L1 1 36839-55-1/CRN AND 25154-86-3/CRN AND 2/NC

=> D ← デフォルトの表示形式 (*IDE* 表示形式) で表示する

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2016 ACS on STN  
RN 1040924-95-5 REGISTRY  
ED Entered STN: 14 Aug 2008  
CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, 2-(dimethylamino)ethyl ester, homopolymer,  
compd. with 1,2-bis(2-iodoethoxy)ethane (CA INDEX NAME)  
MF (C8 H15 N O2)x . x C6 H12 I2 O2

:

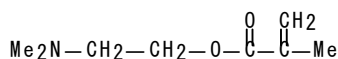
CM 1  
CRN 36839-55-1  
CMF C6 H12 I2 O2

I CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>I

CM 2  
CRN 25154-86-3  
CMF (C8 H15 N O2)x  
CCI PMS

2-(ジメチルアミノ)エチル  
メタクリレートホモポリマー  
(25154-86-3)

CM 3  
CRN 2867-47-2  
CMF C8 H15 N O2



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

- 塩や付加化合物の後処理ポリマーの文献検索は, *REGISTRY* ファイルで後処理後のポリマーを検索し, その L 番号をクロスオーバーする.

=> FILE CAPLUS ← *CAplus* ファイルに入る

文献  
調査

=> S L1 ← L 番号をクロスオーバー検索する  
L2 1 L1

=> D SCAN TI HITIND ← *SCAN* 表示形式で確認する (無料)

L2 1 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2016 ACS on STN  
TI Synthesis of Well-Defined Branched Copolymers by Quaternization of  
Near-Monodisperse Homopolymers  
IT 1040924-95-5P  
RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
(synthesis of well-defined branched copolymers by quaternization of  
near-monodisperse homopolymers)

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

注) ポリマーの塩には例外的な登録がされているものも存在する (P.61 参照)



### 参考：例外的な塩の検索

■ 手作業登録のポリマー (MAN/CI) の一部の塩は、各成分に関する情報は収録されない。

- ・ 単原子フラグメントと手作業成分ポリマーのみからなるポリマーの金属塩が対象。
  - 単原子フラグメントとは、任意の数の水素原子と一つまたは 0 の非水素原子のみからなる成分。

例：Na, Ag, HCl, NH<sub>3</sub>

- 手作業登録とは構造が確定していないために結合表が作られない化学物質である。

- ・ この中には REGISTRY ファイルの構造の大きさの上限（水素以外の元素数が 253 原子まで）を超える物質、分子式しかわからない化合物、および名称しかわからない化合物（商品名など）がある。

例：セルロース

■ レコード例（セルロースのナトリウム塩）

```

RN  9069-34-5  REGISTRY
ED  Entered STN:  16 Nov 1984
CN  Cellulose, sodium salt  (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN  Sodium cellulosate
CN  Sodium cellulose
DR  9065-40-1
MF  Unspecified
CI  PMS, COM, MAN
PCT Manual registration
LC  STN Files:  CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMLIST, IFIALL, PIRA, TOXCENTER,
      USPAT2, USPATFULL, USPATOLD
      Other Sources:  NDSL**, TSCA**
      (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

```

```

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
      560 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
      25 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
      566 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

```



セルロース、ナトリウムに関する各成分情報は収録されていない



これらの塩は、成分 CAS RN® (/CRN) で検索してもヒットしない。



検索する場合は、部分名称検索 (/BI またはなし)、自然セグメント (/CNS) やクラス識別子 (PMS/CI, MAN/CI) などを利用する。

## 後処理ポリマー – エステル化

■ 後処理でエステル化されたポリマーは、後処理過程を含めた形で REGISTRY ファイルに登録される。

- ・ モノマー単位ポリマーは、エステル化される前のポリマーとエステル化剤を各成分として登録。
  - エステル化剤は、カルボン酸などの酸、あるいはアルコールが登録されている。
 

例：アセテートの場合、エステル化剤として酢酸を登録する。塩化アセチル等は登録されない。
- ・ SRU ポリマーは末端が置換されたポリマーとして登録。

■ レコード例：ビスフェノール A - エピクロロヒドリンからなるエポキシ樹脂のアクリル酸エステル化

```
RN 55818-57-0 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with 2-(chloromethyl)oxirane,
2-propenoate (CA INDEX NAME)
```

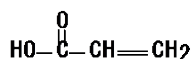
```
:
MF (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . x C3 H4 O2
CI COM
PCT Epoxy resin
:
```

```
CM 1
```

エステル化剤

```
CRN 79-10-7
CMF C3 H4 O2
```

成分数は分子式の . (ピリオド) の数 + 1  
=> このポリマーは 3 成分物質



```
CM 2
```

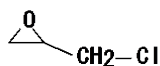
```
CRN 25068-38-6
CMF (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x
CGI PMS
```

ビスフェノール A - エピクロロヒドリン共重合体  
(25068-38-6)

ポリマーのクラス識別子コード

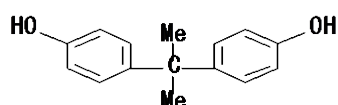
```
CM 3
```

```
CRN 106-89-8
CMF C3 H5 Cl O
```



```
CM 4
```

```
CRN 80-05-7
CMF C15 H16 O2
```



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



エステル化された後処理ポリマーを検索する場合は、モノマーやポリマーとエステル化剤を /CRN で検索し、成分数で絞り込む。

■ 検索例 : ビスフェノール A - エピクロロヒドリンからなるエポキシ樹脂 (25068-38-6) のアクリル酸エステル化物の文献検索

=> FILE REGISTRY

CAS RN®  
& 物質調査

=> S 25068-38-6/CRN AND 79-10-7/CRN AND 3/NC  
L1 8 25068-38-6/CRN AND 79-10-7/CRN AND 3/NC

原料モノマーから検索することもできる.

=> S 106-89-8/CRN AND 80-05-7/CRN AND 79-10-7/CRN AND 3/NC

=> D 1-8 IN MF ← CA 索引名と分子式を表示する

L1 ANSWER 1 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

MF (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . x C14 H14 O6

ノイズ

L1 ANSWER 2 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

MF (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . x C15 H12 Cl6 O6

ノイズ

L1 ANSWER 3 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

MF (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . x C10 H14 O6

ノイズ

L1 ANSWER 4 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

MF ((C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . 2 C3 H4 O2)x

ノイズ

L1 ANSWER 5 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with  
2-(chloromethyl)oxirane, mono-2-propenoate

MF (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . C3 H4 O2

L1 ANSWER 6 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with  
2-(chloromethyl)oxirane, 2-propenoate, homopolymer

MF ((C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . x C3 H4 O2)x

ノイズ

L1 ANSWER 7 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with  
2-(chloromethyl)oxirane, 2-propenoate

MF (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . x C3 H4 O2

L1 ANSWER 8 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with  
2-(chloromethyl)oxirane, di-2-propenoate

MF (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . 2 C3 H4 O2

=> SEL 5 7 8 RN ← 5, 7, 8 番目の CAS RN® を抽出する  
E1 THROUGH E3 ASSIGNED

=> S E1-E3 ← E 番号で検索する  
L2 3 (53814-24-7/BI OR 55818-57-0/BI OR 98913-50-9/BI)

■ エステル化された後処理ポリマーの文献検索は, REGISTRY ファイルで後処理後のポリマーを検索し, その L 番号をクロスオーバーする.

=> FILE CAPLUS ← CPlus ファイルに入る

文献  
調査

=> S L2 ← L 番号をクロスオーバー検索する  
L3 1477 L2

- 後処理前のポリマーにモノマー単位ポリマーと SRU ポリマーがある場合は、エステル化後も 2 種類のポリマーが存在する可能性がある。

- レコード例 : ポリブチレンオキサイドのモノアセテート化物 (原料モノマー単位, SRU)

- ・ ポリブチレンオキサイドのモノアセテート (モノマー単位ポリマーの多成分登録)

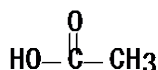
```
RN 414866-37-8 REGISTRY
ED Entered STN: 13 May 2002
CN Furan, tetrahydro-, homopolymer, monoacetate (CA INDEX NAME)
:
MF (C4 H8 O)x . C2 H4 O2
PCT Polyether, Polyether formed
:
```

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

POLYLINK コマンドが適用可能  
(下記のレコードも得られる)

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

エステル化剤



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

ポリブチレンオキサイド  
(24979-97-3)

```
CM 3
CRN 109-99-9
CMF C4 H8 O
```

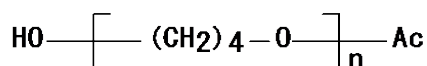


- ・ ポリブチレンオキサイドのモノアセテート (末端基付き SRU ポリマー)

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

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

POLYLINK コマンドが適用可能  
(上記のレコードも得られる)



末端がエステル化されている



SRU ポリマーとモノマー単位ポリマーの両方が存在する場合は、POLYLINK コマンドを利用する。

- ただし、ビニル系ポリマーは、POLYLINK コマンドが適用できない。そのため下記 2 つのポリマーが必要な場合は、それぞれを検索する必要がある。

- ・ アクリル酸ホモポリマーのメチルエステル化物
- ・ アクリル酸メチルエステルのホモポリマー

■ 検索例 : ポリブチレンオキサイドのアセテートを網羅的に検索する.

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

CAS RN®  
& 物質調査

=> S 24979-97-3/CRN AND 64-19-7/CRN AND 2/NC

L1 3 24979-97-3/CRN AND 64-19-7/CRN AND 2/NC

↑ ポリブチレンオキサイドと酢酸を含む二成分物質を検索する

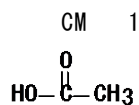
=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式で確認する

L1 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Furan, tetrahydro-, homopolymer, diacetate  
MF (C4 H8 O)x . 2 C2 H4 O2

← ジアセテート

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\* ●

関連ポリマーが存在する



CM 2



モノマー単位ポリマー

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

L1 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Furan, tetrahydro-, homopolymer, acetate  
MF (C4 H8 O)x . x C2 H4 O2

← アセテート

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

L1 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Furan, tetrahydro-, homopolymer, monoacetate  
MF (C4 H8 O)x . C2 H4 O2

← モノアセテート

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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

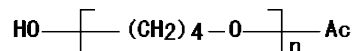
=> POLYLINK L1 ← *POLYLINK* コマンドを実行する

L2 6 POLYLINK L1

=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式で確認する

L2 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Poly(oxy-1,4-butanediyl), α-acetyl-ω-hydroxy-  
:

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



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

■ エステル化されたポリマーを検索するときには, L 番号をクロスオーバーすればよい.

=> FILE CAPLUS ← *CAplus* ファイルへ入る

=> S L2

L3 181 L2

← L 番号をクロスオーバー検索する

文献  
調査

## 後処理ポリマー - エーテル化

■ 後処理でエーテル化されたポリアルキレングリコールあるいは天然物ポリマーは、後処理過程を含めた形で REGISTRY ファイルに登録されている。

- ・ 天然物ポリマーは、エーテル化前のポリマーとエーテル化剤を各成分として登録。
- ・ ポリアルキレングリコールは、種類によって REGISTRY ファイルの登録形式が異なる。

種類	モノマー単位	SRU
PPG (ポリプロピレングリコール, ポリプロピレンオキサイド)	×	○
その他のポリアルキレングリコール (ホモポリマー)	○	○
共重合体のポリアルキレングリコール (コポリマー)	○	×

汎用ポリマー

- モノマー単位ポリマーは、エーテル化前のポリマーとエーテル化剤（一般的にアルコール）を各成分として登録。
- SRU ポリマーは、末端が置換されたポリマーとして登録。

■ 上述以外のポリマーのエーテル化物は、原則として後処理ポリマー独自の CAS RN® を持たない。

■ レコード例 : メチルエーテル化したセルロース

```

RN 9004-67-5 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Cellulose, methyl ether (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN Adulsin
:
MF C H4 O . x Unspecified
CI COM
PCT Manual registration, Polyother, Polyother only
:

```

```

CM 1
セルロース (9004-34-6)
CRN 9004-34-6
CMF Unspecified
CCI PMS, MAN ●————— 手作業登録 (MAN)
*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
CM 2
CRN 67-56-1
CMF C H4 O
H3C-OH ●————— エーテル化剤
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
:

```

■ レコード例 : ポリブチレンオキサイドのモノメチルエーテル化物

- ・ ポリブチレンオキサイドのモノメチルエーテル (モノマー単位ポリマーの多成分登録)

RN 178033-63-1 REGISTRY  
 ED Entered STN: 04 Jul 1996  
 CN Furan, tetrahydro-, homopolymer, monomethyl ether (CA INDEX NAME)  
 OTHER NAMES:  
 CN Tetrahydrofuran homopolymer methyl ether  
 CN Tetrahydrofuran homopolymer monomethyl ether  
 MF (C4 H8 O)<sub>x</sub> . C H4 O  
 PCT Polyether, Polyether formed

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

POLYLINK コマンドが適用可能  
(下記のレコードも得られる)

CM 1

CRN 67-56-1  
 CMF C H4 O

H3C-OH

エーテル化剤

CM 2

CRN 24979-97-3  
 CMF (C4 H8 O)<sub>x</sub>  
 CCI PMS

ポリブチレンオキサイド  
(モノマー単位ポリマー)  
(24979-97-3)

CM 3

CRN 109-99-9  
 CMF C4 H8 O



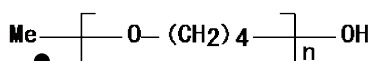
7 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 1 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 7 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- ・ ポリブチレンオキサイドのモノメチルエーテル (末端基付き SRU ポリマー)

RN 39420-53-6 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Poly(oxy-1,4-butanediyl), α-methyl-ω-hydroxy- (CA INDEX NAME)  
 OTHER NAMES:  
 CN Polybutylene glycol monomethyl ether  
 CN Polymeg 1000M  
 :  
 DR 80371-35-3  
 MF (C4 H8 O)<sub>n</sub> C H4 O  
 CI PMS, COM  
 PCT Polyether

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

POLYLINK コマンドが適用可能  
(上記のレコードも得られる)



末端がエーテル化されている



SRU ポリマーとモノマー単位ポリマーの両方が存在する場合は、両方を含めて検索すると網羅的に検索できる。(例 : POLYLINK コマンドを利用する)。

■ 検索例 : エチレンオキサイド - プロピレンオキサイド共重合体のメチルエーテル化物の検索

- ・ ポリアルキレングリコールの共重合体は、モノマー単位登録されているので、エーテル化される前のポリマーと、エーテル化剤が成分として登録されている。

- エーテル化される前のポリマー : エチレンオキサイド (EO) (75-21-8) と  
プロピレンオキサイド (PO) (75-56-9) の共重合体
- エーテル化剤 (アルコール) : メタノール (67-56-1)

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=> S 75-21-8/CRN AND 75-56-9/CRN AND 67-56-1/CRN AND 3/NC

L1 7 75-21-8/CRN AND 75-56-9/CRN AND 67-56-1/CRN AND 3/NC

↑ エチレンオキサイド-プロピレンオキサイドとメタノールを成分とする物質を検索

CAS RN®  
& 物質調査

=> D 1-7 RN IN MF ← *CAS RN*® と *CA* 索引名, 分子式を表示

L1 ANSWER 1 OF 7 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
RN 777932-69-1 REGISTRY ↓ *EO-PO* トリブロック共重合体のジメチルエーテル  
IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, dimethyl ether, triblock  
MF **(C3 H6 O . C2 H4 O)x . 2 C H4 O**

L1 ANSWER 2 OF 7 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
RN 749875-37-4 REGISTRY ↓ *EO-PO* ジブロック共重合体のモノメチルエーテル  
IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, monomethyl ether, diblock  
MF **(C3 H6 O . C2 H4 O)x . C H4 O**

L1 ANSWER 3 OF 7 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
RN 704871-65-8 REGISTRY ↓ *EO-PO* トリブロック共重合体のモノメチルエーテル  
IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, monomethyl ether, triblock  
MF **(C3 H6 O . C2 H4 O)x . C H4 O**

L1 ANSWER 4 OF 7 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
RN 132894-01-0 REGISTRY ↓ *EO-PO* ブロック共重合体のジメチルエーテル  
IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, dimethyl ether, block  
MF **(C3 H6 O . C2 H4 O)x . 2 C H4 O**

L1 ANSWER 5 OF 7 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
RN 106494-51-3 REGISTRY ↓ *EO-PO* ブロック共重合体のモノメチルエーテル  
IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, monomethyl ether, block  
MF **(C3 H6 O . C2 H4 O)x . C H4 O**

L1 ANSWER 6 OF 7 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
RN 61419-46-3 REGISTRY ↓ *EO-PO* 共重合体のジメチルエーテル  
IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, dimethyl ether  
MF **(C3 H6 O . C2 H4 O)x . 2 C H4 O**

L1 ANSWER 7 OF 7 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
RN 9063-06-3 REGISTRY ↓ *EO-PO* 共重合体のモノメチルエーテル  
IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, monomethyl ether  
MF **(C3 H6 O . C2 H4 O)x . C H4 O**

=> D 7 ← デフォルトの表示形式で表示

L1 ANSWER 7 OF 7 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
RN 9063-06-3 REGISTRY  
ED Entered STN: 16 Nov 1984  
CN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, monomethyl ether (CA INDEX NAME)  
OTHER CA INDEX NAMES:  
CN Oxirane, methyl-, polymer with oxirane, monomethyl ether (9CI)  
:  
MF **(C3 H6 O . C2 H4 O)x . C H4 O**



CM 1

CRN 67-56-1

CMF C H4 O

H<sub>3</sub>C—OH ● ————— エーテル化剤

CM 2

CRN 9003-11-6

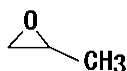
CMF (C3 H6 O . C2 H4 O) x

CCI PMS

CM 3

CRN 75-56-9

CMF C3 H6 O



CM 4

CRN 75-21-8

CMF C2 H4 O

エチレンオキサイド - プロピレンオキサイド  
共重合体 (9003-11-6)

- ポリアルキレングリコールのエーテル化物や、天然物ポリマーのエーテル化物の文献を検索する場合には、L 番号をクロスオーバー検索すればよい。

=> FILE CAPLUS← *Caplus* ファイルに入る=> S L1

← L 番号をクロスオーバー検索する

L2 765 L1

=> D SCAN TI HITIND← *SCAN* 表示形式 (*TI* と *HITIND* のみ) で表示する

L2 765 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN

TI Cement admixtures containing polycarboxylic acid copolymers

IT 26915-72-0P, Methoxypolyethylene glycol methacrylate

**704871-65-8P**, Ethylene oxide-propylene oxide triblock copolymer

monomethyl ether 1096080-92-0P

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

:

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

L2 765 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN

TI Oil-in-water nanoemulsions containing polyalkylene glycol dineopentanoates with excellent stability and skin application properties and their manufacture

IT 9004-73-3, Polymethylsiloxane 49718-23-2D, Methylsilanediol homopolymer,

trimethylsilyl-terminated **61419-46-3**, Ethylene oxide-propylene

oxide copolymer dimethyl ether 72484-69-6,

:



上述以外のポリマーのエーテル化物の文献検索は、エーテル化前のポリマーの CAS RN<sup>®</sup> を用いる。

文献  
調査

## 後処理ポリマー – その他の化学的処理（塩素化など）

- 塩素化、アルキル化、アミド化、イミド化、ウレタン化、加水分解、スルホン化などの後処理を加えたポリマーには、原則として独自の CAS RN<sup>®</sup> は付与されない。

- ・ しかし、CAS 登録番号サービスで依頼された場合や各国の既存化学物質リストから登録した場合には、独自の CAS RN<sup>®</sup> を付与する。

### ■ レコード例：塩素化ポリエチレン

```

RN 64754-90-1 REGISTRY*
* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may
  result in incomplete search results. For additional information, enter HELP
  RN* at an online arrow prompt(=>).
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Ethene, homopolymer, chlorinated (CA INDEX NAME)
MF Unspecified
CI PMS, MAN, GRS
PCT Manual registration
LC STN Files: CHEMCATS, CHEMLIST, MSDS-OHS, RTECS*, USPAT2, USPATFULL
  (*File contains numerically searchable property data)
  Other Sources: DSL**, TSC GRS が付与されている
  (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
  
```

\*(アスタリスク) が付いている場合、本来は CAS RN<sup>®</sup> を付与しない物質

STN の他のファイルでこの CAS RN<sup>®</sup> を用いた検索をすると不完全な結果になる可能性があるという警告

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



その他の化学的処理を加えたポリマーを REGISTRY ファイルで検索するときには、CA 索引名を用いた部分名称検索と、GRS/CI (GRS: 一般式登録) を掛け合わせて検索する。

### ■ 検索例：塩素化ポリエチレンの CAS RN<sup>®</sup> を検索する。

```

=> FILE REGISTRY          ← REGISTRY ファイルに入る
=> E POLYETHYLENE/CN     ← 母核の名称を EXPAND する
E1      1 POLYETHYL A/CN
E2      1 POLYETHYL LL-UE 320, POLYMER WITH ETHENYLTRIMETHOXYSILANE/CN
E3      1 --> POLYETHYLENE/CN
E4      1 POLYETHYLENE ACETATE/CN
E5      1 POLYETHYLENE AS/CN
:
=> S E3                  ← E 番号で検索する
L1      1 POLYETHYLENE/CN
=> D SCAN                ← SCAN 表示形式で確認する

L1 1 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2019 ACS on STN
IN Ethene, homopolymer
ADDITIONAL NAMES - UNAVAILABLE AT THIS TIME
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT
MF (C2 H4)x
CI PMS, COM
  CM 1
H2C=CH2

**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED
  
```

CAS RN<sup>®</sup>  
& 物質調査

ポリエチレンの CA 索引名を確認

=> S ETHENE (L) HOMOPOLYMER (L) CHLOR? ● ————— ポリエチレンの CA 索引名と塩素に関する  
 L2 198 ETHENE (L) HOMOPOLYMER (L) CHLOR? 部分名称検索

=> S L2 AND GRS/CI ● ————— GRS/CI で限定する  
 L3 7 L2 AND GRS/CI

=> D SCAN IN ← SCAN 表示形式 (IN のみ表示) で確認する

L3 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Acetic acid ethenyl ester, polymer with chloroethene, ethene and  
 ethene homopolymer, chlorinated

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):6

L3 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Ethene, homopolymer, chlorinated, chlorosulfonated

L3 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Ethene, chlorotrifluoro-, homopolymer, pyrolyzed

L3 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Ethene, chloro-, homopolymer, chlorinated

L3 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Ethene, homopolymer, chlorinated, maleated

L3 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Ethene, homopolymer, chlorinated, oxidized

L3 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Ethene, homopolymer, chlorinated ● ————— 目的のポリマー (64754-90-1)

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> E Ethene, homopolymer, chlorinated/CN ← 名称をコピー&ペーストして EXPAND する  
 E1 1 ETHENE, HOMOPOLYMER, CATENA COMPD. WITH CYCLODODECENE/CN  
 E2 1 ETHENE, HOMOPOLYMER, CATENA COMPD. WITH DIMETHYL TETRACOSANEDIOATE/CN  
 E3 1 --> ETHENE, HOMOPOLYMER, CHLORINATED/CN  
 :

=> S E3 ← E 番号で検索する  
 L4 1 "ETHENE, HOMOPOLYMER, CHLORINATED"/CN

- 塩素化, アルキル化, アミド化, イミド化, ウレタン化, 加水分解, スルホン化などの後処理を加えたポリマーの文献検索は, 年代によって検索手法が異なる.

年代	CAplus/CA ファイルでの検索	CAplus/CA ファイルでの検索例
10CI 以降 (1977年 -)	後処理前のポリマーの CAS RN® + D* <sup>1</sup>	=> FILE REGISTRY => S 9002-88-4 ... (L1) => FILE CAPLUS => S L1/D (L) 後処理に関するキーワード
9CI 以前 (- 1976年)	後処理前のポリマーの CA 索引名と CAS RN®	=> FILE REGISTRY => S 9002-88-4 ... (L1) => FILE CAPLUS => S (L1 OR ETHENE HOMOPOLYMER) (L) 後処理に関するキーワード RAN=, 1976

\*1 CAS RN® + 接尾辞 D : CAS RN® の物質の非特定誘導体 (処理後の構造を特定できないような誘導体) を表す. 原則として 1977 年以降のレコードで付与される. 1976 年以前のレコードにも一部 D 付きの CAS RN® が存在する.

- ・ 例外 : ポリビニルアルコールについては, P.82 参照.



各年代とも, 後処理「前」のポリマーに関する情報 + 後処理のキーワードを用いて検索する.

### ■ 主な後処理のキーワード

後処理	キーワード
塩素化	CHLORINAT? OR CHLORO
アルキル化	ALKYLAT? OR ALKYL
アミド化	AMIDAT? OR AMIDE#
イミド化	IMIDAT? OR IMIDE# OR IMIDIZ?
ウレタン化	URETHAN? OR CARBAMOY?
加水分解	HYDROL? OR SAPON?
スルホン化	SULFONAT? OR SULFONE#
エーテル化	ETHER# OR METHOXYLAT?*      * エーテル化の種類によって異なる

### ■ 検索例 : 塩素化ポリブタジエンに関する文献 (ポリブタジエンの CAS RN® : 9003-17-2)

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

=> S 9003-17-2      ← CAS RN® 検索を行う  
L1                    1 9003-17-2  
                              (9003-17-2/RN)

=> D                    ← デフォルトの IDE 表示形式で確認する

文献  
調査

```
L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN
RN 9003-17-2 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 1,3-Butadiene, homopolymer (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN 1,3-Butadiene, polymers (8CI)
OTHER NAMES:
CN 1,3-Butadiene oligomers
:
MF (C4 H6)x
```

旧索引名も含めて CA 索引名を確認する

CM 1

CRN 106-99-0

CMF C4 H6



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

=&gt; FILE CAPLUS

← CAplus ファイルに入る

=&gt; S L1/D (L) (CHLORINAT? OR CHLORO)

L2 193 L1/D (L) (CHLORINAT? OR CHLORO)

ポリブタジエンの CAS RN® に D 付きで索引されているレコードの検索

=&gt; S (L1 OR 1,3-BUTADIENE (W) (HOMOPOLYMER# OR POLYMER#)) (L) (CHLORINAT? OR CHLORO) RAN=,1976

L3 210 (L1 OR 3-BUTADIENE (W) (HOMOPOLYMER# OR POLYMER#)) (L) (CHLORINAT? OR CHLORO)

ポリブタジエンの CA 索引名または D の付かない CAS RN® で索引されているレコードの検索 (ノイズを減らすために、年代限定をする)

=&gt; S L2 OR L3

L4 403 L2 OR L3

=&gt; D 43 244 325 BIB HITIND

← 43, 244, 325 番目の回答を BIB HITIND 表示形式で表示する

L4 ANSWER 43 OF 403 CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN

AN 2013:1801616 CAPLUS Full-text

TI Halogenated diene rubber composition, tire and pro

1977 年以降の文献

:

PATENT NO. KIND DATE APPLICATION

ポリブタジエンの CAS RN®+D および塩素化に関するキーワードで索引

PI WO 2013173473

A1

20131121

WO 2013-US41177

20130515

:

IT **9003-17-2DP, chlorinated**

RL: IMF (Industrial manufacture); POF (Polymer in formulation); PRP (Properties);

TEM (Technical or engineered material use); PREP (Preparation); USES (Uses)

(butadiene rubber; halogenated diene rubber composition, tire and production method)

L4 ANSWER 244 OF 403 CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN

AN 1972:489757 CAPLUS Full-text

TI Chlorinated polybutadiene

1976 年以前の文献 - 1

:

PATENT NO. KIND DATE APPLICATION NO. DATE

PI CS 142156

19710815

CS 1967-760

ポリブタジエンの CA 索引名 + 塩素化に関するキーワードで索引

:

IT **1,3-Butadiene, homopolymer, chlorinated**

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

(manufacture of)

L4 ANSWER 325 OF 403 CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN

AN 1966:105767 CAPLUS Full-text

TI Binders for electrical insulation materials

1976 年以前の文献 - 2

:

PATENT NO. KIND DATE APPLICATION NO. DATE

PI DD 42859

19660105

DD

PRAI DD

19630705

ポリブタジエンの CAS RN® + 塩素化に関するキーワードで索引

:

IT **9003-17-2, 1,3-Butadiene, homopolymer**

(chlorinated, coatings from phenolic resins and, on elec. insulators)

## 参考：一義的に定義できない成分を含むポリマーの検索

- 原則，モノマーや後処理成分が一義的に定義できないポリマーの場合，独自の CAS RN<sup>®</sup> を CAS は付与しない。

・ 例：ポリアクリル酸の「C18-C22 アルキル」エステルなど

- しかし，CAS 登録番号サービスで依頼された場合や各国の規制化学物質リストから登録した場合には，独自の CAS RN<sup>®</sup> を付与する。

```

RN 1189754-09-3 REGISTRY*
* Use of this CAS Registry Number alone result in incomplete search results. For additional information, enter HELP
RN* at an online arrow prompt (=>).
ED Entered STN: 23 Oct 2009
CN 2-Propenoic acid, homopolymer, C18-22-alkyl esters (CA INDEX NAME)
MF Unspecified
CI PMS, MAN, GRS
PCT Manual registration
SR CAS Client Services
  
```

\* (アスタリスク) が付いている場合，本来は CAS RN<sup>®</sup> を付与しない物質

CAS 登録番号サービス由来

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



一義的に定義できないポリマーの CAS RN<sup>®</sup> を調査する場合は，CA 索引名で検索する。

- 検索例：ポリアクリル酸のアルキルエステルの調査

```

=> FILE REGISTRY          ← REGISTRY ファイルに入る
=> E POLY(ACRYLIC ACID)/CN ← 母核の名称を EXPAND する
E1      1 POLY(ACRYLIC ACID TRIETHANOLAMINE SALT)/CN
E2      1 POLY(ACRYLIC ACID VINYL ALCOHOL)/CN
E3      1 --> POLY(ACRYLIC ACID)/CN
:
=> S E3                  ← E 番号を検索する
L1      1 "POLY(ACRYLIC ACID)"/CN

=> D SCAN IN            ← SCAN 表示形式 (IN のみ表示) で確認する
L1      1 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2019 ACS on STN
IN      2-Propenoic acid, homopolymer
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> S 2-PROPENOIC ACID HOMOPOLYMER (L) ALKYL ← 名称で検索する
L2      8 2-PROPENOIC ACID HOMOPOLYMER (L) ALKYL

=> D SCAN IN            ← SCAN 表示形式 (IN のみ表示) で確認する
L2      8 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2019 ACS on STN
IN      2-Propenoic acid, homopolymer, C16-18-alkyl esters

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

応用  
CAS RN<sup>®</sup> & 物質調査

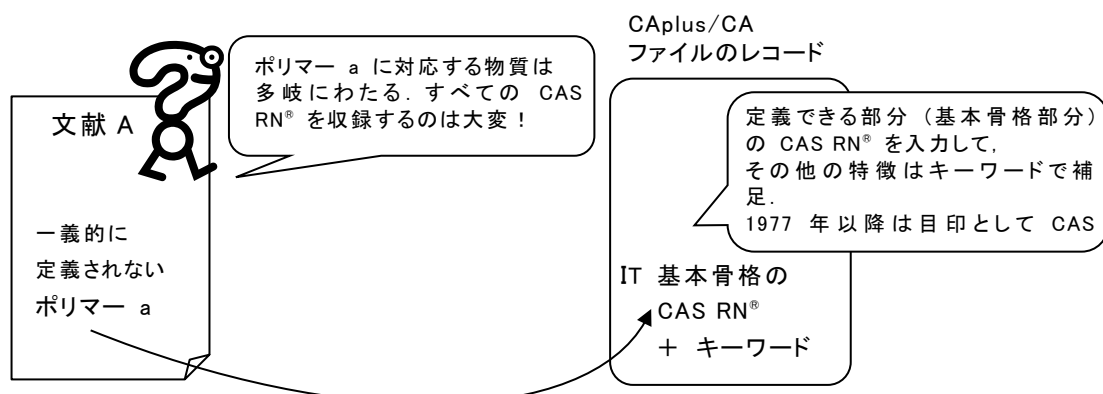
CA 索引名を確認する

■ ポリマー自身の成分や後処理成分が一義的に定義されていない文献の調査方法。

文献  
調査

応用

例：文献中で「アルキル」エステル化されたポリアクリル酸  
ポリエチレングリコールと「イソシアナート化合物」からなるポリウレタンなど



- ・ 一義的に定義されていない成分を含むポリマーの場合、ポリマー自身の CAS RN® では索引されず、定義できる部分（基本骨格部分）の CAS RN® が索引される。

- D が付与された CAS RN® の索引は「非特定誘導体」と呼ばれている。

- ・ 例：ポリアクリル酸の「アルキル」エステル

IT 9003-01-4D, Polyacrylic acid, alkyl esters  
134590-50-4, Maleic anhydride, octadecyl acrylate copolymer  
RL: MOA (Modifier or additive)  
(pour-point depressant for lubricants)

ポリアクリル酸の CAS RN® (9003-01-4) + D  
+ アルキルエステルに関するキーワード

(参考) アクリル酸アルキルエステルのポリマー

IT 79-10-7D, Acrylic acid, alkyl esters, polymers  
9005-64-5, Sorbon T 20●34406-66-1, Poem J 0021 324760-61-4, Jurymer FC 80  
RL: TEM (Technical or engineering)  
(biaxially stretched poly(l  
resins containing nonionic  
resistance)

アクリル酸の CAS RN® (79-10-7) + D  
+ アルキルエステルとポリマーに関するキーワード



一義的に定義できない成分を含む文献検索の場合、一義的に定義できる基本骨格部分（特定化学物質）の CAS RN® を用いて検索する。

■ 文献検索の時には下記のように検索する（1977 年以降）

=> FILE CAPLUS

=> S 基本骨格（特定化学物質）の CAS RN®/D (L) 特徴に関するキーワード

- ・ /D を用いた検索で得られる回答は原則として 1977 年以降のレコードに限定される。全年代を網羅的に検索したい場合は P.73 の検索例を参照。

■ 検索例：ポリアクリル酸のアルキルエステルの文献検索（1977 年以降）

- ・ エステル化の場合，一般的には CAS RN<sup>®</sup> で索引されるポリマーだが，「アルキル」エステルと一義的に特定できない成分を含んでいるため，独自の CAS RN<sup>®</sup> で索引されない。



ポリアクリル酸の CAS RN<sup>®</sup> + アルキルエステルに関するキーワードを用いて検索する。

=> FILE REGISTRY

=> E POLY(ACRYLIC ACID)/CN

E1 1 POLY(ACRYLIC ACID TRIETHANOLAMINE SALT)/CN  
E2 1 POLY(ACRYLIC ACID VINYL ALCOHOL)/CN  
E3 1 --> POLY(ACRYLIC ACID)/CN  
:

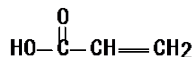
=> S E3

L1 1 "POLY(ACRYLIC ACID)"/CN

=> D SCAN

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN 2-Propenoic acid, homopolymer  
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT  
MF (C3 H4 O2)x  
CI PMS, COM

CM 1



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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> FILE CAPLUS

=> S L1/D (L) ALKYL (XW) ESTER?

L2 73 L1/D (L) ALKYL (XW) ESTER

基本骨格の CAS RN<sup>®</sup>/D に，後処理に関するキーワードを組み合わせて検索

=> D SCAN TI HITRN

L2 73 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
TI Lubricant for plastic working of metal parts and its use in surface treatment  
IT **9003-01-4D**, Polyacrylic acid, **alkyl esters**  
RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)  
(lubricant for plastic working of metal parts and its use in surface treatment)

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

L2 73 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
TI Sustained-release agricultural chemicals with polymer coating  
IT **9003-01-4D**, C1-18 **alkyl esters**  
RL: BIOL (Biological study)  
(agrochem. coating by, sustained-release)

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

文献  
調査  
応用



■ 検索例：ポリエチレングリコール (25322-68-3) とイソシアネート化合物のみからなるポリウレタンの文献検索 (1977 年以降)

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S 25322-68-3/CRN AND POLYURETHANE/PCT AND 2/NC

L1 150 25322-68-3/CRN AND POLYURETHANE/PCT AND 2/NC

↑ 成分 CAS RN®, ポリマー分類用語, 成分数で検索する

=> S 25322-68-3

L2 1 25322-68-3

← ポリエチレングリコールを検索する

=> FILE CAPLUS

← CAPLUS ファイルに入る

=> S L1

L3 2181 L1

← L 番号をクロスオーバーする

=> S L2/D (L) (POLYURETHANE? OR ?ISOCYANAT?)

L4 4105 L2/D (L) (POLYURETHANE? OR ?ISOCYANAT?)

● 非特定誘導体の検索

=> S L3 OR L4

L5 6115 L3 OR L4

=> D 1273 2314 HITSTR

← 1273, 2314 番目の回答を HITSTR 表示形式で表示する

L5 ANSWER 1273 OF 6115 CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IT 25322-68-3DP, Polyethylene glycol, block polyurethanes

RL: IMF (Industrial manufacture); POF (Polymer in formulation); TEM

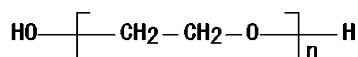
(Technical or engineered material use); USES (Uses)

(epoxy resin-based sizing agents for fiber reinforced plastics)

● ポリエチレングリコールの非特定誘導体でヒット

RN 25322-68-3 CAPLUS

CN Poly(oxy-1,2-ethanediyl),  $\alpha$ -hydro- $\omega$ -hydroxy- (CA INDEX NAME)



L5 ANSWER 2314 OF 6115 CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IT 37278-61-8, Methylene diphenyldiisocyanate-polyethylene glycol copolymer

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

(solder ball, ball grid array CAS RN® を持つポリウレタンでヒット), and

method for enhancing thermal management)

RN 37278-61-8 CAPLUS

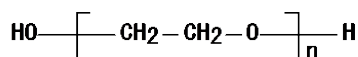
CN Poly(oxy-1,2-ethanediyl),  $\alpha$ -hydro- $\omega$ -hydroxy-, polymer with 1,1'-methylenebis[4-isocyanatobenzene] (CA INDEX NAME)

CM 1

CRN 25322-68-3

CMF (C2 H4 O)<sub>n</sub> H2 O

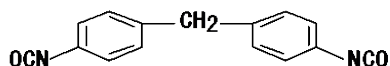
CCI PMS



CM 2

CRN 101-68-8

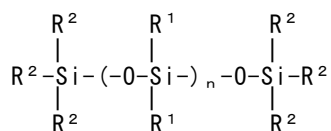
CMF C15 H10 N2 O2



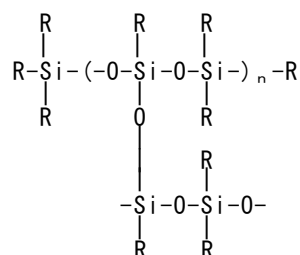
## シリコーン

■ シリコーン（ポリシロキサン）は、 $-O-Si-O-Si-$  を主鎖とするポリマーである。

・ シリコーンの代表的な構造



$R^1, R^2: CH_3, Ph, H \text{ etc.}$



$R: CH_3, Ph \text{ etc.}$

・ 下記のシリコーンについては CAS RN® を持つ。

1. アルコキシシランを加水分解重合したシリコーン
2. ハロシランを加水分解重合したシリコーン
3. 一つの繰り返し単位で表現されるシリコーン
4. 複数の繰り返し単位で表現されるシリコーン
5. アルコキシまたはクロロシランを加水分解重合したシルセスキオキサン
6. トリアルコキシ末端の有機ポリマーを含んだアルコキシシランとテトラアルコキシシランを加水分解重合によって生成したセラマー
7. シロキサン SRU の末端グループ
8. シロキサン成分を含むコポリマー
9. シロキサンとシルセスキオキサンの商品名
10. シリコーンゴム



POLYLINK コマンドが利用できる。

■ 検索例：ジエチルシロキサンの検索

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> E DIETHYLSILOXANE/CN ← 名称で EXPAND する

E1 1 DIETHYLSILANOL/CN

E2 1 DIETHYLSILICATE/CN

E3 1 --> DIETHYLSILOXANE/CN

:

=> S E3 ← E 番号で検索する

L1 1 DIETHYLSILOXANE/CN

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する

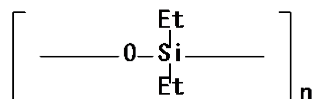
L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Poly[oxy(diethylsilylene)]

:

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

POLYLINK コマンドが実行できる



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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

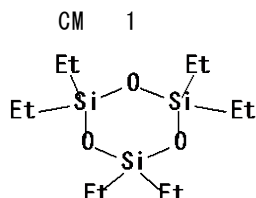
CAS RN®  
& 物質調査

=> POLYLINK L1 ← *POLYLINK* コマンドを実行する  
L2 12 POLYLINK L1

=> D SCAN IN MF STR ← *SCAN* 表示形式 (*IN*, *MF*, *STR* のみ表示) で確認

L2 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Cyclotrisiloxane, 2,2,4,4,6,6-hexaethyl-, homopolymer  
MF (C12 H30 O3 Si3)x

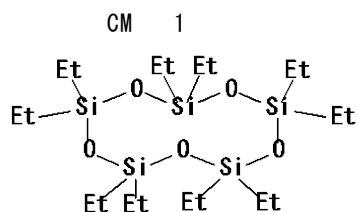
\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):10

L2 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Cyclopentasiloxane, decaethyl-, homopolymer (9CI)  
MF (C20 H50 O5 Si5)x

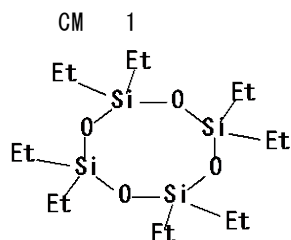
\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*



環状のジエチルシロキサンの  
モノマー単位ポリマー

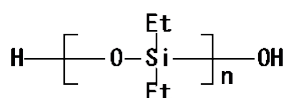
L2 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Cyclotetrasiloxane, 2,2,4,4,6,6,8,8-octaethyl-, homopolymer  
MF (C16 H40 O4 Si4)x

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



L2 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Poly[oxy(diethylsilylene)],  $\alpha$ -hydro- $\omega$ -hydroxy-  
MF (C4 H10 O Si)n H2 O

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

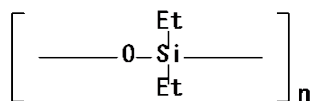


● ————— ジエチルシロキサンの末端基付き SRU ポリマー

D 各論

L2 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Poly[oxy(diethylsilylene)]  
 MF (C4 H10 O Si)n

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

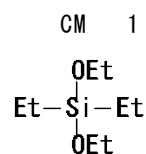


ジエチルシロキサンの SRU ポリマー

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

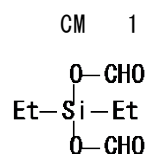
L2 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Silane, diethoxydiethyl-, homopolymer  
 MF (C8 H20 O2 Si)x

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



L2 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Silanediol, diethyl-, diformate, homopolymer (9CI)  
 MF (C6 H12 O4 Si)x  
 CI PMS

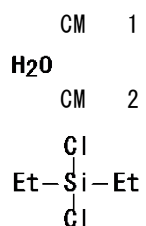
\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*



L2 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Silane, dichlorodiethyl-, homopolymer, hydrolytic  
 MF (C4 H10 Cl2 Si . H2 O)x

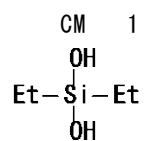
ジエチルシロキサンの  
モノマー単位ポリマー

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



L2 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Silanediol, 1,1-diethyl-, homopolymer  
 MF (C4 H12 O2 Si)x

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



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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

## ■ シリコーンの文献検索

- 基本的にはシリコーンは統制語で索引されている。

統制語とは、同じ概念を持つ複数の言葉がある場合、統一した表記で表現された言葉である。CAplus/CA ファイルでは、IT フィールドに入力されている。

例：ジエチルシロキサン

```
IT Polysiloxanes
RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
    (di-Et; environmentally friendly aluminum alloy
    mold release agent with high performance)
```

- シリコーンの CA 統制語

- "Polysiloxanes" (以前は "Siloxanes and Silicones" または "Siloxanes", "Silicones")
- "Silicone rubber" (以前は "Rubber, silicone")

- ただし、CAS RN<sup>®</sup> を持つシリコーンは 1995 年以降 CAS RN<sup>®</sup> で索引している。

- シリコーンの索引変更に関する詳細

<https://www.cas.org/support/training/stn/siloxanes-indexing>



シリコーンの文献検索では、統制語検索と CAS RN<sup>®</sup> 検索を併用する。

=> FILE CAPLUS

← CAplus ファイルに入る

文献  
調査

=> S L2

L3 432 L2

CAplus ファイルに CAS RN<sup>®</sup> で索引されているジエチルシロキサンの文献検索

=> S (POLYSILOXANE# OR SILOXANE# OR SILICONE#)/CW (L) (DIETHYL OR DI ET)

L4 630 (POLYSILOXANE# OR SILOXANE# OR SILICONE#)/CW(L) (DIETHYL OR DI ET)

CAplus ファイルに CAS RN<sup>®</sup> で索引されていないジエチルシロキサンの文献検索 (/CW:統制語(単語))

=> S L3 OR L4

L5 1016 L3 OR L4

=> D SCAN HITIND

← SCAN 表示形式 (TI, HITRN のみ表示) で確認

L5 1016 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IT **56267-41-5**, Silanediol, diethyl-, homopolymer

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

L5 1016 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IT **Polysiloxanes**, properties

RL: PRP (Properties)

(di-Et; pressure-temperature phase transitions and disordering during melting

L5 1016 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IT **Siloxanes** and **Silicones**, uses

RL: USES (Uses)

(di-Et, oligomeric, coatings, for prevention of freezing together of mined ores)

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



"Siloxanes and Silicones" という統制語を「句」として検索する場合は /CT,

"Siloxane" や "Silicons" のように「単語」で検索する場合は /CW を用いる。

## ポリビニルアルコール

■ ポリビニルアルコール (PVA) は、ポリ酢酸ビニル (PVAc) を加水分解して得られるポリマーである。通常の加水分解処理ポリマーは独自の CAS RN<sup>®</sup> を持たないが、PVA は例外的に独自の CAS RN<sup>®</sup> (9002-89-5) を持つ。ただし、CAplus/CA ファイルでは、原報の表現の仕方によって以下の 3 通りの方式で索引される。

- ・ 網羅的な検索をするためには、これらをすべて考慮して検索する。
- ・ どの方式で索引されるかは、加水分解の程度とは関係なく、原報での表記のみに依存する。

索引方式		CAplus/CA ファイルでの検索
1	Poly(vinyl alcohol) で索引 [CAS RN <sup>®</sup> : 9002-89-5]	=> <u>FILE REGISTRY</u> => <u>S 9002-89-5</u> ... (L1) => <u>FILE CAPLUS</u> => <u>S L1</u>
2	Vinyl alcohol と Vinyl acetate の共重合体で索引 [CAS RN <sup>®</sup> : 25213-24-5]	=> <u>FILE REGISTRY</u> => <u>S 25213-24-5</u> ... (L1) => <u>FILE CAPLUS</u> => <u>S L1</u>
3	Poly(vinyl acetate) の非特定誘導体 (D 付き) で索引 [CAS RN <sup>®</sup> : 9003-20-7]	=> <u>FILE REGISTRY</u> => <u>S 9003-20-7</u> ... (L1) => <u>FILE CAPLUS</u> => <u>S L1/D (L) (HYDROL? OR SAPON?)</u>

### ■ 検索例 : ポリビニルアルコールに関する文献検索

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=> S 9002-89-5 OR 25213-24-5 ●  
L1 2 9002-89-5 OR 25213-24-5

=> S 9003-20-7 ●  
L2 1 9003-20-7

=> FILE CAPLUS ← *CAplus* ファイルに入る

=> S L1 ← *PVA, PVA-PVAc* の L 番号をクロスオーバーする  
L3 198294 L1

=> S L2/D (L) (HYDROL? OR SAPON?) ●  
L4 3652 L2/D (L) (HYDROL? OR SAPON?)

=> S L3 OR L4  
L5 200703 L3 OR L4

=> D SCAN TI HITIND ← *SCAN* 表示形式 (*TI, HITIND* のみ表示) で確認する

L5 200703 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
TI Ink-jet printing paper with no feathering nor blotting and good scratch resistance of printed inks  
IT **9002-89-5**, Polyvinyl alcohol **9003-20-7D**, Poly(vinyl acetate), **saponified**  
122463-72-3, PVA 205  
:

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

文献調査

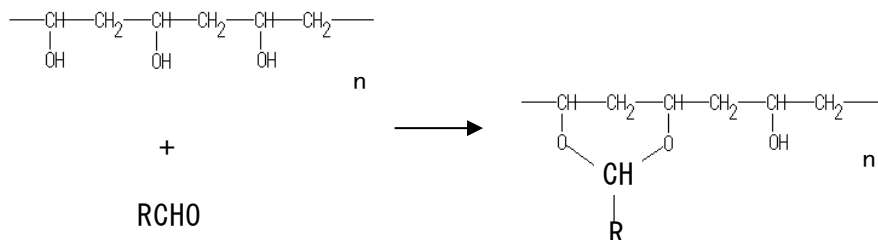
PVA, PVA-PVAc の CAS RN<sup>®</sup> を検索

PVAc の CAS RN<sup>®</sup> で検索

PVAc の L 番号に加水分解に関するキーワードを掛け合わせて検索する

## アセタール樹脂

- アセタール樹脂は、ポリビニルアルコールやビニルアセテート-ビニルアルコール共重合体に対し、アルデヒドを反応させた後処理ポリマーである。



- これまでアセタール樹脂は、原則、固有の CAS RN<sup>®</sup> を持たなかったが、2006 年 11 月以降は固有の CAS RN<sup>®</sup> を持つようになった。

- ・ アセタール化剤も成分として登録される。

- 検索例：ポリビニルブチラールの検索 (*n*-ブチルアルデヒドの CAS RN<sup>®</sup> : 123-72-8)

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=> S 9002-89-5/CRN AND 123-72-8/CRN AND 2/NC  
L1 1 9002-89-5/CRN AND 123-72-8/CRN AND 2/NC

=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式で確認する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Ethanol, homopolymer, cyclic acetal with butanal  
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT  
MF **C4 H8 O . x (C2 H4 O) x**  
CI COM

CM 1

**H3C-CH2-CH2-CH=O**

CM 2

CM 3

**H2C=CH-OH**

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> S 25213-24-5/CRN AND 123-72-8/CRN AND 3/NC  
L2 1 25213-24-5/CRN AND 123-72-8/CRN AND 3/NC

=> D SCAN

L2 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Acetic acid ethenyl ester, polymer with ethanol, cyclic acetal with butanal  
MF **C4 H8 O . x (C4 H6 O2 . C2 H4 O) x**

CM 1

**H3C-CH2-CH2-CH=O**

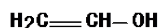
CAS RN<sup>®</sup>  
& 物質調査

PVA とアセタール化剤を成分として  
含む 2 成分物質を検索

PVA-PVAc とアセタール化剤を成分とする  
3 成分物質を検索

CM 2

CM 3



CM 4



ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

## ■ アセタール樹脂の文献検索

- ・ CAplus/CA ファイルでのアセタール樹脂に関する索引方針

年代	索引方針	
- 2006 年 10 月	統制語で索引 (右側 : 旧統制語)	
	POLYVINYL ACETALS POLYVINYL BUTYRALS その他のアセタール樹脂 POLYVINYL ACETALS (L) キーワード 例: POLYVINYL ACETALS (L) FORMAL#	VINYL ACETAL POLYMERS VINYL ACETAL POLYMERS (L) BUTYRAL# VINYL ACETAL POLYMERS (L) キーワード 例: VINYL ACETAL POLYMERS (L) FORMAL#
2006 年 11 月 -	個々の CAS RN <sup>®</sup> で索引 * 統制語でも索引 POLYVINYL ACETALS POLYVINYL BUTYRALS その他のアセタール樹脂 : POLYVINYL ACETALS (L) キーワード	

\* 原報中で、ポリビニルアルコールを「加水分解されたポリビニルアセテート」と記載してある場合は、固有の CAS RN<sup>®</sup> で索引されず、ポリビニルアセテートの非特定誘導体 D + 加水分解 (HYDRO?) と アセタール化剤の名称を索引。

=> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る

=> S L1-L2 ← REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする  
 L3 10264 (L1 OR L2)

=> S POLYVINYL BUTYRALS/CT OR VINYL ACETAL POLYMERS/CT (L) BUTYRAL#  
 L4 26304 POLYVINYL BUTYRALS/CT OR VINYL ACETAL POLYMERS/CT (L) BUTYRAL#

アセタール樹脂の統制語を利用した検索

=> S L3 OR L4  
 L5 28769 (L3 OR L4)

=> D SCAN HITIND

L5 28769 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IT **Polyvinyl butyrals**

RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)  
 (insulation film binder; flexible printed circuit boards having thick  
 TFT connection parts manufacture by screen printing for electrophoretic displays)

IT **915977-69-4**, Polyvinyl butyral

RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)  
 (insulation film binder; flexible printed circuit boards having thick  
 TFT connection parts manufacture by screen printing for electrophoretic displays)

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

文献  
調査



## ポリマーブレンド, ポリマーアロイ

### ■ ポリマーブレンドやポリマーアロイに対しては原則固有の CAS RN® は付与されない。

- ・ CAplus/CA ファイルでは, 主要な樹脂成分とその他の成分 (特許では新規性に関与している成分) が索引される。
- ポリマーブレンドやポリマーアロイの文献検索の際は, 各成分ポリマーの CAS RN® とキーワードや, ポリマー組成物に関するロール (POF や MOA) を組み合わせて検索。

### ■ ポリメチルビニルエーテルのポリマーブレンドに関する文献検索

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=> S "(C3H6O)X"/MF AND (VINYL OR ETHENE) ● — ポリメチルビニルエーテルを検索  
L1 11 "(C3H6O)X"/MF AND (VINYL OR ETHENE)

文献  
調査

=> D 1-11 IN ← *CA* 索引名を表示

L1 ANSWER 1 OF 11 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN **Ethene-14C2, methoxy-, homopolymer (9CI)**

L1 ANSWER 2 OF 11 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN **Ethene, methoxy-14C-, homopolymer (9CI)**

L1 ANSWER 7 OF 11 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN **Ether, methyl vinyl-1,2-d2, (Z)-, polymers (8CI)**

L1 ANSWER 8 OF 11 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN **Ether, methyl vinyl-1,2-d2, (E)-, polymers (8CI)**

L1 ANSWER 9 OF 11 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN 1-Propen-1-ol, homopolymer ● ノイズ

L1 ANSWER 10 OF 11 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN **Ethene, methoxy-, homopolymer, isotactic (9CI)**

L1 ANSWER 11 OF 11 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN **Ethene, methoxy-, homopolymer**

=> SEL RN 9 ← *CAS RN®* を抽出  
E1 THROUGH E1 ASSIGNED

=> S L1 NOT E1 ● — ノイズを除いた L# を作成する  
L2 10 L1 NOT 28388-89-8/BI

=> FILE CAPLUS ← *CAplus* ファイルに入る

キーワードやポリマー組成物の  
ロールを組み合わせて検索する

=> S L2 (L) (BLEND# OR MIXT# OR ALLOY# OR COMPOSITE# OR (POF OR MOA)/RL)  
L3 1394 L2 (L) (BLEND# OR MIXT# OR ALLOY# OR COMPOSITE# OR (POF OR MOA)/RL)

=> D SCAN HITRN ← *SCAN* 表示形式 (*HITRN* のみ表示) で確認

L3 1394 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IT **9003-09-2, Poly(vinyl methyl ether)**  
RL: **POF (Polymer in formulation)**; PRP (Properties); USES (Uses)  
(**blends** with polystyrene; consistent modeling of

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

## デンドリマー，スターポリマー，ハイパーブランチポリマー

- デンドリマー，スターポリマー，ハイパーブランチポリマーに対しては原則固有の CAS RN® は付与されない。

- ・ CAplus/CA ファイルでは，構造的特徴を含まないポリマーの CAS RN® で索引される。

- 構造的特徴（デンドリマー，スターポリマー，ハイパーブランチポリマー）についてはキーワードを組み合わせて検索。

- デンドリチックポリ L-リジンに関する文献検索

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=> E POLY(L-LYSINE)/CN

E1 1 POLY(L-LYSINE MONOHYDROBROMIDE), SRU/CN

E2 1 POLY(L-LYSINE PHTHALAMIDE)/CN

E3 1 --> POLY(L-LYSINE)/CN

:

=> S E3

L1 1 "POLY(L-LYSINE)"/CN

ポリ L-リジンを検索

=> D SCAN

← *SCAN* 表示形式で確認

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN L-Lysine, homopolymer

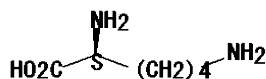
:

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

POLYLINK コマンドが実行できる

CM 1

Absolute stereochemistry.



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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> POLYLINK L1

L2 7 POLYLINK L1

POLYLINK を実行する

=> FILE CAPLUS

← *CAplus* ファイルに入る

=> S L2 (L) DENDRI?

L3 356 L2 (L) DENDRI?

デンドリマーに関するキーワードで限定する

=> D SCAN TI HITIND

← *SCAN* 表示形式 (*TI HITIND* のみ表示) で確認

L3 356 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN

TI Methods for the synthesis of functionalizable poly(ethylene oxide) star macromolecules and functionalization with biologically active molecules

IT 25104-18-1, Polylysine

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

(**dendritic**, starting material; preparation of functionalizable poly(oxyethylene) star block **dendrimers** and their functionalization with biol. active mols.)

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

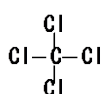
## テロマー

- テロマー (Telomer) は, テロゲンの存在下で, ビニル系モノマー (タキソゲン) を重合して得られるビニル系オリゴマーである。テロゲンとして, ハロゲン化炭素, メルカプタン, アルコールなどが使われ, テロゲンはオリゴマーの両末端基に導入される。

RN 51877-03-3 REGISTRY  
ED Entered STN: 16 Nov 1984  
CN 1-Propene, telomer with tetrachloromethane and tetrafluoroethene (9CI) (CA INDEX NAME)

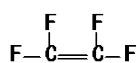
MF (C3 H6 . C2 F4)x . C Cl4

CM 1  
CRN 56-23-5  
CMF C Cl4

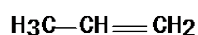


CM 2  
CRN 27029-05-6  
CMF (C3 H6 . C2 F4)x  
CCI PMS

CM 3  
CRN 116-14-3  
CMF C2 F4

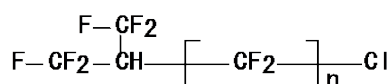


CM 4  
CRN 115-07-1  
CMF C3 H6



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

RN 27322-01-6 REGISTRY  
ED Entered STN: 16 Nov 1984  
CN Poly(difluoromethylene),  $\alpha$ -chloro- $\omega$ -[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethyl]- (8CI, 9CI) (CA INDEX NAME)  
MF (C F2)n C3 H Cl F6  
CI PMS  
PCT Polyether, Polyether only  
SR CA  
LC STN Files: CA, CAPLUS, IFIALL, USPATOLD



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

重合度不明, または重合度 11 以上の  
テロマーは, ポリマーとして登録される  
(モノマー単位レコードの例)

重合度不明, または重合度 11 以上の  
テロマーは, ポリマーとして登録される  
(SRU の例)



テロマーの文献検索は, REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーすると良い。

## クマロン-インデン樹脂, 石油系樹脂

- CAplus/CA ファイルにおいて, 石油系樹脂, クマロン-インデン樹脂は原則的に全年代を通じて CAS RN<sup>®</sup> は索引していない. 文献検索の際は, 該当する統制語を利用する.

ポリマー名	統制語
クマロン-インデン樹脂	COUMARONE-INDENE RESINS
石油系樹脂	PETROLEUM RESINS (1977 年以降) PETROLEUM (L) RESINS (1976 年以前) RESINS (L) PETROLEUM (1976 年以前)

- 検索例 : クマロン-インデン樹脂, 石油系樹脂の文献検索

=> FILE CAPLUS ← *CAplus* ファイルに入る

=> S COUMARONE-INDENE RESIN# ← 統制語で検索  
L1 3585 COUMARONE-INDENE RESIN#

=> D SCAN TI HITIND ← *SCAN* 表示形式 (*TI*, *HITIND* のみ表示) で確認

L1 3585 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
TI High-performance environmental-friendly two-component polyurethane  
waterproof coatings and their manufacture  
IT Castor oil  
**Coumarone-indene resins**  
Petroleum resins  
Polyoxyalkylenes, uses  
RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)  
:  
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S PETROLEUM RESIN# ← 統制語で検索 -1  
L2 18764 PETROLEUM RESIN#

=> S PETROLEUM/CT (L) RESIN# OR RESINS/CT (L) PETROLEUM ← 統制語で検索 -2  
L3 1750 PETROLEUM/CT (L) RESIN# OR RESINS/CT (L) PETROLEUM

=> S L2 OR L3  
L4 19724 L2 OR L3

=> D SCAN TI HITIND ← *SCAN* 表示形式 (*TI*, *HITIND* のみ表示) で確認

L4 19724 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
TI Colored asphalt adhesive for improving construction performance  
IT Asphalt  
**Petroleum resins**  
Styrene-butadiene rubber, uses  
RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)  
:  
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L4 19724 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
TI Purification of mineral oils and crude petroleum  
IT **Resins**  
(**petroleum**)  
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

文献  
調査

## 合成繊維

- CAplus/CA ファイルで合成繊維の文献を検索する際は、ポリマーの CAS RN<sup>®</sup> と繊維 (FIBER 等) のキーワードを併用する。

- ・ 汎用繊維とその統制語および CAS RN<sup>®</sup> の例

ポリマー	CAS RN <sup>®</sup>	主な統制語
ナイロン6 Polycaprolactam 6-Aminohexanoic acid homopolymer Nylon 6 ε-Caprolactam polymer	25038-54-4	Polyamide fibers
ナイロン66 Nylon 66 Adipic acid-1,6-hexanediamine polymer Poly(hexamethylene adipamide)	32131-17-2	
PET Poly(ethylene terephthalate) Terephthalic acid polyethylene ester	25038-59-9	Polyester fibers
PP Polypropylene	25085-53-4	Polypropene fibers Fiber, propene polymer
PAN Polyacrylonitrile	25014-41-9	Acrylic fibers
セルロースアセテート Cellulose acetate	9004-35-7	Acetate fibers
再生セルロース Cellulose (regenerated)	(9004-34-6)*	Rayon
PVA Poly(vinyl alcohol)	9002-89-5	Vinal fibers
PVC Poly(vinyl chloride)	9002-86-2	Vinyon fibers Fiber, vinyon
グラファイト繊維 Graphite	7782-42-5	Carbon fibers
炭素繊維 Carbon	7440-44-0	Carbon fibers

\* 再生セルロース由来の繊維の場合は、例外的に CAS RN<sup>®</sup> (9004-34-6) は索引されない。

\* 上記以外の合成繊維については、Polyimide fibers, Polyolefin fibers, Spandex fibers, Polyurethane fibers, Synthetic polymeric fibers という統制語が付与されている。

- 検索例 : ポリアクリロニトリル合成繊維に関する文献検索

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=> S POLYACRYLONITRILE/CN ← 名称で検索する  
L1 1 POLYACRYLONITRILE/CN

=> FILE CAPLUS ← *CAplus* ファイルに入る

=> S ((L1 OR POLYACRYLONITRILE OR PAN) (L) FIB?) OR (ACRYLIC (A) FIBER#)/CW  
L2 53912 ((L1 OR POLYACRYLONITRILE OR PAN) (L) FIB?) OR (ACRYLIC (A) FIBER#)/CW

=> D SCAN HITIND

CAS RN<sup>®</sup> とキーワード、および統制語も含めて検索する

L2 53912 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IT **25014-41-9, Polyacrylonitrile**

RL: NUU (Other use, unclassified); USES (Uses)  
(**fibers**: manuf. of carbon-carbon composite)

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

文献  
調査

## 合成ゴム

- CPlus/CA ファイルで合成ゴムの文献を検索する際は、ポリマーの CAS RN<sup>®</sup> とゴム (RUBBER, ELASTOMER 等) のキーワードを併用する。

- ・ 汎用ゴムとその統制語および CAS RN<sup>®</sup> の例

ポリマー	CAS RN <sup>®</sup>	主な統制語
BR (ブタジエンゴム) 1,3-Butadiene polymer	9003-17-2	Butadiene rubber Rubber, butadiene
NBR (ニトリルゴム) Acrylonitrile-1,3-butadiene copolymer	9003-18-3	Nitrile rubber Rubber, nitrile
IR (イソプレングム) Isoprene polymer	9003-31-0	Isoprene rubber Rubber, isoprene
SBR (スチレンブタジエンゴム) 1,3-Butadiene-styrene copolymer	9003-55-8*2	Styrene-butadiene rubber Rubber, butadiene-styrene
EPM (エチレンプロピレングム) Ethylene-propylene copolymer	9010-79-1	Ethylene-propylene rubber Rubber, ethylene-propene
IIR (ブチルゴム) Isobutylene-isoprene copolymer	9010-85-9*3	Butyl rubber Rubber, butyl
CR (クロロプレングム) 2-Chloro-1,3-butadiene homopolymer または Polychloroprene	9010-98-4	Neoprene rubber Rubber, neoprene
チオコールゴム Polymers containing S (n>1) linkages in the main chain (通称 Thiokol)		Polysulfide rubber Rubber, polysulfide
ポリシロキサン (シリコーン) Siloxanes		Silicone rubber Rubber, silicone
ポリウレタンゴム Urethane polymers*1		Urethane rubber Rubber, urethane
アクリルゴム		Acrylic rubber
フッ素ゴム		Fluoro Rubber
ポリエステルゴム		Polyester rubber Rubber, synthetic(L)polyester
ポリオレフィンゴム		Polyolefin rubber

\*1 組成の明確なポリマーは CAS RN<sup>®</sup> も索引される。

\*2 ブロック共重合体 (106107-54-4), トリブロック共重合体 (694491-73-1), グラフト共重合体 (106974-54-3) など存在する。

\*3 ブロック共重合体 (106974-57-6), グラフト共重合体 (106930-78-3), 交互共重合体 (106974-56-5) など存在する。

- ・ 加硫ゴムは加硫前のポリマーの CAS RN<sup>®</sup> で索引される。
- ・ ゴムが接着剤かタイヤの材料として利用されている場合は、1991 年以前は例外的にゴムの統制語ではなく、「Adhesives」または「Tires」の統制語が索引されていた。

IT Adhesives

(nitrile rubber, phenolic resin blends, with improved heat resistance)

ゴムの名称はテキスト説明句に記載される

## ■ ブタジエンゴム (9003-17-2) の文献検索

文献  
調査=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る=> S 9003-17-2 ← ブタジエンゴムの *CAS RN* で検索する  
L1 1 9003-17-2  
(9003-17-2/RN)=> FILE CAPLUS ← *CAplus* ファイルに入る=> S L1 (L) (RUBBER? OR ELASTOMER?) ● ———— ブタジエンゴムの L 番号にゴムのキーワードを  
L2 46088 L1 (L) (RUBBER? OR ELASTOMER?) 組み合わせて検索する=> S BUTADIENE (A) (RUBBER? OR ELASTOMER?) ● ———— 統制語を考慮して検索する\*  
L3 137653 BUTADIENE (A) (RUBBER? OR ELASTOMER?)=> S L2 OR L3  
L4 138891 L2 OR L3=> D SCAN HITIND ← *SCAN* 表示形式 (*HITIND* のみ表示) で確認する

L4 138891 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IT Styrene-butadiene rubber, properties  
 RL: POF (Polymer in formulation); PRP (Properties); USES (Uses)  
 (linear and star-branched structure-property relationships for  
**elastomeric butadiene** polymers)  
 IT **9003-17-2P**, Polybutadiene  
 RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (elastomeric; linear and star-branched structure-property relationships  
 for **elastomeric butadiene** polymers)  
 IT 9003-55-8  
 RL: POF (Polymer in formulation); PRP (Properties); USES (Uses)  
 (styrene-butadiene rubber; linear and star-branched structure-property  
 relationships for **elastomeric butadiene** polymers)

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

L4 138891 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IT **Butadiene rubber**, preparation  
 RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (anionic polymerization of butadiene with)

L4 138891 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IT **9003-17-2**  
 RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)  
 (of 1,2-configuration; ethylene-propylene **rubber** compns. with good  
 resistance to Freon coolants for refrigerator seals)

L4 138891 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IT **Rubber, butadiene**  
 RL: USES (Uses)  
 (of cis-1,4-configuration, golf ball core compns., contg. zinc diacrylate)

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

\* ただし、この検索の結果には "styrene-butadiene rubber" などの回答も含まれる。

### 参考：\* (アスタリスク) つきの CAS RN<sup>®</sup> と文献検索

■ 通常は CAS RN<sup>®</sup> が付与されないタイプの物質であるが、例外的に CAS RN<sup>®</sup> が付与された物質に \* (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<sup>®</sup> 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つきの CAS RN<sup>®</sup> 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<sup>®</sup> (例 : ダンマル樹脂)。

CTS の場合には、まれに CAS RN<sup>®</sup> 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<sup>®</sup> + 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<sup>®</sup> (例 : 塩素化ポリエチレン)。



\* (アスタリスク) つきの CAS RN<sup>®</sup> 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。

■ CTS の検索例 : 天然物ポリマー (ダンマル (ダマール) 樹脂) の検索

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る  
=> S DAMMAR RESIN/CN ← 名称で検索する  
L1 1 DAMMAR RESIN/CN  
=> D ← デフォルトの表示形式 (IDE 表示形式) で表示する

```
L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2023 ACS on STN
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
:
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 ●————— CTS なので、文献を検索する場合は、統制語検索を行う
:
*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
```



=&gt; FILE CAPLUS

← CAPLUS ファイルに入る

=&gt; S L1

L2

0 L1

REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバー  
検索してもヒットしない

=&gt; E DAMMAR RESIN/CT

← ダンマル樹脂の統制語を展開する

E#	FREQUENCY	AT	TERM
E1	0	2	DAMMAR GUM BATU/CT
E2	0	2	DAMMAR PINE/CT
E3	671	19	DAMMAR RESIN/CT
:			

AT が 2 以上であることを確認したら、  
その E 番号を +ALL で EXPAND する

=&gt; E E3+ALL

E1	46149	BT6	Materials/CT	
E2	33055	BT5	Mixtures/CT	
E3	26636	BT4	Disperse systems/CT	
E4	70479	BT3	Colloids/CT	
E5	5660	BT2	Hydrocolloids/CT	
E6	16058	BT1	Gums and Mucilages/CT	
E7	46149	BT2	Materials/CT	
E8	117083	BT1	Natural products/CT	
E9	671	-->	Dammar resin/CT	← 統制語
			HNTE Valid heading during volume 146 (2007) to present.	
			NOTE Hard resins from several species of trees of the family Dipterocarpaceae originating in the East Indies.	
E10	332	OLD	Dammar/C	← 旧統制語
E11	36	OLD	Dammar resins/CT	
E12		UF	Damar gum/CT	} 非統制語 (統制語の同義名)
E13		UF	Damar resin/CT	
E14		UF	Gum Damar/CT	
E15		UF	Gum Dammar/CT	
E16		UF	Resin Damar/CT	
E17		UF	Valdamar/CT	
E18	20	RT	Batu gum/CT	← 関連語
E19	211	RT	Dipterocarpaceae/CT	

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

=&gt; S DAMMAR OR DAMAR

L3

2049 DAMMAR OR DAMAR

統制語だけでなく、同義名 (非統制語 (UF)) も  
含めてできるだけ網羅的に検索

### 参考：重合条件，触媒を限定したポリマーの文献検索

■ 重合条件，触媒などの情報は CAPLUS/CA ファイルでキーワードを用いて絞り込む。

- ・ 重合反応に主眼を置いた研究は，モノマーの CAS RN® のみ索引される場合もあるので，ポリマーおよびモノマー双方の CAS RN® を検索したほうがよい。

■ 検索例：ポリスチレンの重合触媒としてゼオライトを用いている文献検索

- ・ ポリスチレンの合成文献と併せて，モノマーであるスチレン（100-42-5）の重合反応文献も検索する。

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S 100-42-5/CRN AND 1/NC ← スチレンを成分として含む多成分物質を検索  
L1 17 100-42-5/CRN AND 1/NC

=> D SCAN IN ← SCAN 表示形式 (IN のみ表示) で確認する

L1 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Benzene, ethenyl-, trimer

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

L1 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Benzene, ethenyl-, homopolymer, syndiotactic

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

=> S L1 AND HOMOPOLYMER ← ホモポリマーに限定  
L2 5 L1 AND HOMOPOLYMER

=> S 100-42-5 ← スチレンを検索  
L3 1 100-42-5

=> FILE CAPLUS ← CAPLUS ファイルに入る

=> S L2/P OR (L3/RACT (L) POLYM?) ● ———— ポリスチレンの合成文献およびスチレンの重合に関する文献を検索する  
L4 42017 L2/P OR (L3/RACT (L) POLYM?)

=> S ZEOLIT? (L) (CAT/RL OR CATAL?) ● ———— 触媒としてゼオライトを用いている文献を検索する  
L5 109095 ZEOLIT? (L) (CAT/RL OR CATAL?)

=> S L4 AND L5  
L6 93 L4 AND L5

=> D SCAN HITIND ← SCAN 表示形式 (HITIND のみ表示) で確認する

L6 93 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IT Polymerization **catalysts**  
(peroxide- or hydroperoxide-**zeolite**, radical stabilization in relation to)  
IT 80-62-6 **100-42-5**, reactions  
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
(**polymerization** of, in presence of peroxide-**zeolite**- **catalysts**, rate of)

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

L6 93 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IT **9003-53-6P**, Polystyrene  
RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
(preparation of, **zeolites** as **catalysts** for, heat treatment effect on)

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

## 参考：モノマーの索引

- ポリマーが主題である場合は、ポリマーの CAS RN<sup>®</sup> が索引されるが、以下の場合は、モノマーの CAS RN<sup>®</sup> が索引される。
  1. モノマーを合成している場合
  2. 重合反応に関する研究をしている場合
  3. 特許の請求項で、ポリマーがモノマーの組み合わせとして表現されている場合 (2007年12月以降)
  4. 特許の実施例で、モノマーを重合させてポリマーを得た場合、原料モノマーの CAS RN<sup>®</sup> も索引 (2015年9月以降)

- 上記3の索引例：特開 2008-001731

### 【特許請求の範囲】

#### 【請求項1】

主たる繰返し単位がエチレンテレフタレートからなり、下記一般式群 (I) ~ (III) から選ばれる少なくとも1種以上のジオール成分を、得られる共重合ポリエステル質量に対して1~20質量%共重合した固有粘度が0.5 dL/g以上の共重合ポリエステルであって、数平均分子量10000以上100000以下のポリオキシエチレングリコールを得られるポリエステル組成物の質量に対して0.2~10質量%、アルキルスルホン酸金属塩及び/又はアルキルベンゼンスルホン酸金属塩を得られるポリエステル組成物の質量に対して0.1~5質量%含有することを特徴とする、制電性共重合ポリエステル組成物。

#### 【式1】



[上記式中、官能基Rは炭素数2~12のアルキレン基であり、Rが炭素数2のときn=2~15、Rが炭素数3以上のときn=1~15を表す。]



[上記式中、官能基Xはアレーン基を表す。]



[上記式中、官能基Yはシクロアルキル基、又はアレーン基を表す。]

#### 【請求項2】

一般式群 (I) ~ (III) で表される共重合成分が、<sup>①</sup>ジエチレングリコール、<sup>②</sup>1,3-プロパンジオール、<sup>③</sup>1,4-ブタンジオール、<sup>④</sup>1,6-ヘキサジオール、<sup>⑤</sup>数平均分子量650以下のポリエチレングリコール、<sup>⑥</sup>2,2-ビス[4-(2-ヒドロキシエトキシ)フェニル]プロパン、<sup>⑦</sup>1,3-ビス(2-ヒドロキシエトキシ)ベンゼン、<sup>⑧</sup>1,4-シクロヘキサジメタノールからなる群から選ばれる少なくとも1成分である、請求項1記載の制電性共重合ポリエステル組成物。

#### 【請求項3】

アルキルスルホン酸金属塩及び/又はアルキルベンゼンスルホン酸金属塩がアルキルスルホン酸ナトリウム及び/又はアルキルベンゼンスルホン酸ナトリウムである、請求項1~2のいずれか1項に記載の制電性共重合ポリエステル組成物。

## ■ 前ページの特許に該当するレコードの索引例

AN 2008:38355 CAPLUS  
 DN 148:123241  
 ED Entered STN: 10 Jan 2008  
 TI Antistatic copolyester compositions and fiber products therefrom  
 IN Togasaki, Junichi; Tsukamoto, Ryoji  
 PA Teijin Fibers Ltd., Japan  
 SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 12pp.  
 CODEN: JKXXAF  
 DT Patent  
 LA Japanese  
 CC 40-2 (Textiles and Fibers)  
 FAN. CNT 1  
 PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
JP 2008001731	A	20080110	JP 2006-169812	20060620
PRAI JP 2006-169812		20060620		

AB Title compns. comprise ethylene terephthalate unit-based polyesters copolymd. with 1-20% of .gtoreq.1 diols selected from H(OR)nH (R = C2-12 alkylene; n = 2-15 when R = C2; n = 2-15 when R = C.gtoreq.3), X(OCH2CH2OH)2 (X = arene), and Y(CH2OH)2 (Y = cycloalkyl group, arene) and having intrinsic viscosity .gtoreq.0.5 dL/g, 0.2-10% polyethylene glycol

ST antistatic polyether polyester fiber polyethylene glycol sulfonate blend

IT Antistatic materials  
 (antistatic copolyester compns. for fiber products)

IT Polyoxyalkylenes  
 RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)  
 (antistatic copolyester compns. for fiber products)

IT 6994-45-2 25155-30-0, Sodium dodecylbenzenesulfonate 25322-68-3,  
 Polyethylene glycol  
 RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)  
 (antistatic agent; antistatic copolyester compns. for fiber products)

IT ⑦102-40-9D, 1,3-Bis(2-hydroxyethoxy)benzene, polymers ⑧105-08-8D,  
 1,4-Cyclohexanedimethanol, polymers ③110-63-4D, 1,4-Butanediol, polymers  
 ①111-46-6D, Diethylene glycol, polymers ②504-63-2D, 1,3-Propanediol,  
 polymers ④629-11-8D, 1,6-Hexanediol, polymers ⑥901-44-0D,  
 2,2-Bis[4-(2-hydroxyethoxy)phenyl]propane, polymers ⑤25322-68-3D,  
 Polyethylene glycol, polymers

RL: POF (Polymer in formulation); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)  
 (antistatic copolyester compns. for fiber products)

IT 25640-14-6P, 1,4-Cyclohexanedimethanol-dimethyl terephthalate-ethylene glycol copolymer 29154-49-2P, Dimethyl terephthalate-dimethyl

terephthalate-ethylene glycol 35829-05-1P, Dimethyl terephthalate-ethylene glycol copolymer 36863-62-4P, 2,2-Bis[4-(2-hydroxyethoxy)phenyl]propane-dimethyl terephthalate-ethylene glycol copolymer 87366-02-7P,  
 1,3-Bis(2-hydroxyethoxy)benzene-dimethyl terephthalate-ethylene glycol copolymer 106343-12-8P, Dimethyl terephthalate-ethylene glycol-polyethylene glycol block copolymer

RL: IMF (Industrial manufacture); POF (Polymer in formulation); PRP (Properties); TEM (Technical or engineered material use); PREP (Preparation); USES (Uses)  
 (fiber; antistatic copolyester compns. for fiber products)

クレーム中のモノマーの CAS RN® の後ろに「D」を付与し、かつ POLYMERS という言葉も索引する



## まとめ

- ・ ポリマーの種類によって CAplus/CA ファイルの索引方針が異なり、検索方法が決まる。



## 練習問題

4. 1,6-ヘキサンジオール (1,6-HEXANEDIOL) とイソフタル酸 (ISOPHTHALIC ACID) からなるポリマーの製造に関する 1977 年以降の文献を検索する。

- (ヒント) ・ /NC (成分数) フィールドを用いて 2 成分に限定する。  
 ・ 実質的に同じポリマーを網羅的に検索するには POLYLINK コマンドを適用する。

回答は P.104

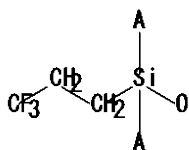
5. スルホン化ポリエチレン (SULFONATED POLYETHYLENE) の文献を検索する。(1977 年以降)

- (ヒント) ・ スルホン化で後処理をしたポリマーは、原則として独自の CAS RN<sup>®</sup> を持たず、1977 年以降、CAplus/CA ファイルでは、後処理前のポリマーの CAS RN<sup>®</sup> + D とスルホン化のキーワードで索引されている。

回答は P.106

6. 3,3,3-トリフルオロプロピル基が置換しているシリコーンに関する文献を検索する。

- (ヒント) ・ シリコーンは基本的に統制語で索引されているが、CAS RN<sup>®</sup> を持つシリコーンは 1995 年以降 CAS RN<sup>®</sup> も索引されているため、統制語検索と REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索の両方を行う。  
 ・ 環状シロキサンの可能性も考慮して、Si-O, Si-A の結合属性を環/鎖に指定する。(A は H 以外の元素)



回答は P.108



## 練習問題



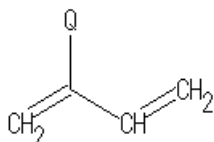


## 練習問題

- 練習問題 1: イソプレン (ISOPRENE) とメチルメタクリレート (METHYL METHACRYLATE) の共重合体を検索する。

(ヒント) ・ モノマーの CAS RN<sup>®</sup> から検索する。

- 練習問題 2: 下記のように炭素以外の元素で置換されたブタジエンをモノマーとする 2 成分系ポリマーを検索する (Q : C, H 以外)



(ヒント) ・ ポリマーの誘導体を検索するときは、構造検索を用いる。  
 ・ スクリーンを組み合わせて検索する。  
 - モノマー単位ポリマーのスクリーン 2067  
 ・ 成分数は (/NC) で限定する

- 練習問題 3: 4,4'-ビフェニルジカルボン酸 (787-70-2) をモノマーとするポリマーを網羅的に検索する。件数が多い場合はポリアミド系ポリマーに限定する。

(ヒント) ・ 実質的に同じポリマーを網羅的に検索するには POLYLINK コマンドを適用する。  
 ・ ポリマーの種類で検索する場合はポリマー分類用語を用いる。

- 練習問題 4: 1,6-ヘキサンジオール (1,6-HEXANEDIOL) とイソフタル酸 (ISOPHTHALIC ACID) からなるポリマーの製造に関する 1907 年以降の文献を検索する。

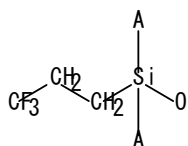
(ヒント) ・ /NC (成分数) フィールドを用いて 2 成分に限定する。  
 ・ 実質的に同じポリマーを網羅的に検索するには POLYLINK コマンドを適用する。

- 練習問題 5: スルホン化ポリエチレン (SULFONATED POLYETHYLENE) の文献を検索する。(1977 年以降)

(ヒント) ・ スルホン化で後処理をしたポリマーは、原則として独自の CAS RN<sup>®</sup> を持たず、1977 年以降、CAplus/CA ファイルでは、後処理前のポリマーの CAS RN<sup>®</sup> + D およびスルホン化のキーワードで索引されている。

- 練習問題 6: 3,3,3-トリフルオロプロピル基が置換しているシリコーンに関する文献を検索する。

(ヒント) ・ シリコーンは基本的に統制語で索引されているが、CAS RN<sup>®</sup> を持つシリコーンは 1995 年以降 CAS RN<sup>®</sup> も索引されているため、統制語検索と REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索の両方を行う。  
 ・ 環状シロキサンの可能性も考慮して、Si-O, Si-A の結合属性を環/鎖に指定する。(A は H 以外の元素)



## 練習問題 1

=&gt; FILE REGISTRY

=&gt; E ISOPRENE/CN

E1 1 ISOPRENALINE TETRAACETATE/CN  
 E2 1 ISOPRENALONE HYDROGEN SULFATE/CN  
 E3 1 --> ISOPRENE/CN  
 E4 1 ISOPRENE BIOSYNTHESIS RELATED REDUCTASE PROTEIN (BACTEROIDES FRAGILIS STRAIN ATCC25285)/CN  
 E5 1 ISOPRENE BROMOHYDRIN/CN  
 :

=&gt; S E3

← イソプレンを検索する

L1 1 ISOPRENE/CN

=&gt; E METHYL METHACRYLATE/CN

E1 1 METHYL METAPHOSPHIMATE, TETRAMER/CN  
 E2 1 METHYL METHACRYLATE-BUTYL ACRYLATE-ETHYLENE GLYCOL DIMETHACRYLATE-AE 3280-PAM 100 GRAFT COPOLYMER/CN  
 E3 1 --> METHYL METHACRYLATE/CN  
 E4 1 METHYL METHACRYLATE - 2-ETHYLHEXYL ACRYLATE - BENZYL METHACRYLATE COPOLYMER/CN  
 E5 1 METHYL METHACRYLATE - BUTYL ACRYLATE - ACRYLONITRILE - STYRENE COPOLYMER/CN  
 :

=&gt; S E3

← メチルメタクリレートを検索する

L2 1 "METHYL METHACRYLATE"/CN

=&gt; SEL L1 RN

E1 THROUGH E1 ASSIGNED

=&gt; SEL L2 RN

E2 THROUGH E2 ASSIGNED

イソプレンとメチルメタクリレートの CAS RN® を抽出する

=&gt; S E1/CRN AND E2/CRN AND 2/NC

L3 8 78-79-5/CRN AND 80-62-6/CRN AND 2/NC

各モノマーの CAS RN® が成分 CAS RN® として収録されている 2 成分物質を検索

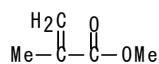
=&gt; D SCAN

L3 8 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, block  
 MF (C5 H8 O2 . C5 H8) x  
 C1 PMS

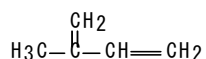
成分 CAS RN® を用いて検索した場合、分子式がヒットタームになる

ブロック共重合体

CM 1



CM 2



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

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 7

L3 8 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, graft  
 MF (C5 H8 O2 . C5 H8)x  
 CI PMS  
 :

グラフト共重合体

L3 8 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene,  
 alternating (9CI)  
 MF (C5 H8 O2 . C5 H8)x  
 CI PMS  
 :

交互共重合体

L3 8 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with  
 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic, block (9CI)  
 MF (C5 H8 O2 . C5 H8)x  
 CI PMS  
 :

シンジオタクチック、ブロック共重合体

L3 8 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, diblock  
 MF (C5 H8 O2 . C5 H8)x  
 CI PMS  
 :

ジブロック共重合体

L3 8 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, triblock  
 MF (C5 H8 O2 . C5 H8)x  
 CI PMS  
 :

トリブロック共重合体

L3 8 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene  
 MF (C5 H8 O2 . C5 H8)x  
 CI PMS  
 :

立体規則性、重合形態を指定されていない共重合体

L3 8 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymers with polyisoprene of  
 cis-1,4-configuration  
 MF (C5 H8 O2 . C5 H8)x  
 CI PMS, MAN, GRS

GRS 物質

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

:

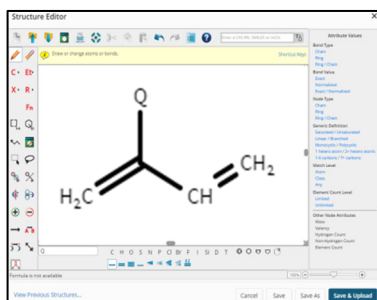
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED



原料モノマーから検索すると、さまざまな重合形態、立体規則性を持つポリマーもまとめて検索できる。

## 練習問題 2

=&gt; FILE REGISTRY



=&gt;

Uploading structure file: 2019\_0001\_Structure  
L1 STRUCTURE UPLOADED

=&gt; SCR 2067

L2 SCREEN CREATED

← モノマー単位ポリマーのスクリーン

=&gt; S L1 AND L2

SAMPLE SEARCH INITIATED 17:23:58  
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 8216 TO ITERATE

← スクリーンを使った構造検索 (サンプル検索)

100.0% PROCESSED 8216 ITERATIONS 48 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 158883 TO 169757  
PROJECTED ANSWERS: 545 TO 1375

L3 48 SEA SSS SAM L1 AND L2

=&gt; S L1 AND L2 FUL

L4 894 SEA SSS FUL L1 AND L2

← スクリーンを使った構造検索 (フルファイル検索)

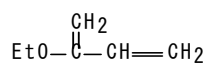
=&gt; S L4 AND 2/NC

L5 323 L4 AND 2/NC=&gt; D SCAN

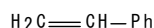
L5 323 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-ethoxy-1,3-butadiene (9CI)  
MF (C8 H8 . C6 H10 O)x

CI PMS

CM 1



CM 2



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

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

## 練習問題 3

=&gt; FILE REGISTRY

=&gt; S 787-70-2/CRN AND PMS/CI, CCI

L1 1047 787-70-2/CRN AND PMS/CI, CCI

=&gt; D SCAN

L1 1047 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN [1,1'-Biphenyl]-4,4'-dicarboxylic acid, polymer with  
4,4'-[(2,2'-dimethyl[1,1'-biphenyl]-4,4'-diyl)bis(oxy)]bis[3-(trifluoromethyl)benzenamine] (9CI)

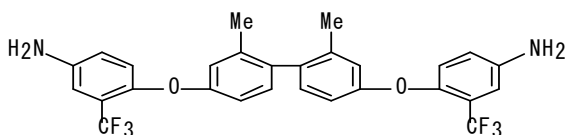
MF (C28 H22 F6 N2 O2 . C14 H10 O4)x

CI PMS

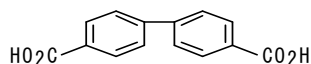
\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

POLYLINK コマンドが適用可能

CM 1



CM 2



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

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

=&gt; POLYLINK L1

← POLYLINK コマンドを実行する

L2 1430 POLYLINK L1

=&gt; S L2 AND POLYAMIDE/PCT

← ポリマー分類用語を用いてポリアミドに限定する

L3 438 L2 AND POLYAMIDE/PCT

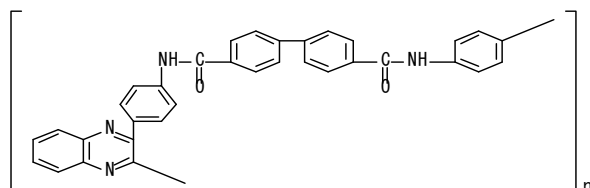
=&gt; D SCAN

L3 438 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN

IN Poly(2,3-quinoxalinediyl-1,4-phenyleneiminocarbonyl[1,1'-biphenyl]-4,4'-  
diylcarbonylimino-1,4-phenylene) (9CI)MF (C34 H22 N4 O2)<sub>n</sub>

CI PMS

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



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

## 練習問題 4

=&gt; FILE REGISTRY

=&gt; E 1,6-HEXANEDIOL/CN

E1 1 1,6-HEXANEDIOIC ACID-NEOPENTYL GLYCOL COPOLYMER/CN  
 E2 1 1,6-HEXANEDIOIC ACID-NEOPENTYL GLYCOL DIGLYCIDYL ETHER COPOLYMER/CN  
 E3 1 --> 1,6-HEXANEDIOL/CN  
 E4 1 1,6-HEXANEDIOL - SUBERIC ACID - STYRENE BLOCK COPOLYMER/CN  
 :

=&gt; S E3

← 1,6-ヘキサジオールを検索する

L1 1 "1,6-HEXANEDIOL"/CN

=&gt; E ISOPHTHALIC ACID/CN

E1 1 ISOPHTHALDOXIME-N,N'-M-PHENYLENEBISMALEIMIDE POLYMER/CN  
 E2 1 ISOPHTHALDOXIME-N,N'-M-PHENYLENEBISMALEIMIDE POLYMER, SRU/CN  
 E3 1 --> ISOPHTHALIC ACID/CN  
 E4 1 ISOPHTHALIC ACID -GLYCERIN-TRIMETHYLOLPROPANE-ETHYLENE GLYCO  
 L-NEOPENTYL GLYCOL COPOLYMER/CN  
 :

=&gt; S E3

← イソフタル酸を検索する

L2 1 "ISOPHTHALIC ACID"/CN

=&gt; SEL L1 RN

E1 THROUGH E1 ASSIGNED

=&gt; SEL L2 RN

E2 THROUGH E2 ASSIGNED

1,6-ヘキサジオールとイソフタル酸の CAS RN® を抽出する

=&gt; S E1/CRN AND E2/CRN AND 2/NC

L3 1 629-11-8/CRN AND 121-91-5/CRN A

各モノマーの CAS RN® が成分 CAS RN® として収録されている 2 成分物質を検索する

=&gt; D SCAN

L3 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,6-hexanediol  
 MF (C8 H6 O4 . C6 H14 O2)x  
 CI PMS, COM

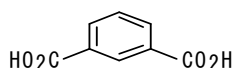
\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

POLYLINK コマンドが適用可能

CM 1

HO-(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-OH

CM 2



ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=&gt; POLYLINK L3

← POLYLINK コマンドを実行する

L4 10 POLYLINK L3

=&gt; D SCAN IN MF

L4 10 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, diethenyl ester, polymer with 1,6-hexanediol (9CI)  
 MF (C12 H10 O4 . C6 H14 O2)x

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):9

L4 10 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED  
 MF (C14 H10 N4 O2 . C6 H14 O2)x

L4 10 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN Poly(oxycarbonyl-1,3-phenylenecarbonyloxy-1,6-hexanediyl)  
 MF (C14 H16 O4)n

L4 10 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, diphenyl ester, polymer with 1,6-hexanediol (9CI)  
 MF (C20 H14 O4 . C6 H14 O2)x

L4 10 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED  
 MF (C12 H8 N6 O2 . C6 H14 O2)x

L4 10 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 1,3-Benzenedicarbonyl dichloride, polymer with 1,6-hexanediol  
 MF (C8 H4 Cl2 O2 . C6 H14 O2)x

L4 10 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, 1,3-dimethyl ester, polymer with 1,6-hexanediol  
 MF (C10 H10 O4 . C6 H14 O2)x

L4 10 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 1-Butanaminium, N,N,N-tributyl-, 1,3-benzenedicarboxylate (2:1), polymer with  
 1,6-dibromohexane (9CI)  
 MF (C16 H36 N . 1/2 C8 H4 O4 . C6 H12 Br2)x

L4 10 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,6-hexanediol  
 MF (C8 H6 O4 . C6 H14 O2)x

L4 10 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, dipotassium salt, polymer with 1,6-dibromohexane (9CI)  
 MF (C8 H6 O4 . C6 H12 Br2 . 2 K)x

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> FILE CAPLUS

← *CAplus* ファイルに入る

=> S L4/P

L5 50 L4/P

合成文献を検索する。 /P を用いた合成文献検索を実行して得られる回答は 1907 年以降のレコードに限定される
--

=> D SCAN TI HITRN

L5 50 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 TI Method for preparing and polymerizing macrocyclic poly(alkylene dicarboxylate)  
 oligomers  
 IT **59199-71-2P 59199-93-8P**  
 RL: PREP (Preparation)  
 (preparation of, macrocyclic oligomers)

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

L5 50 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 TI Scratch-resistant oligoester coatings  
 IT **59199-93-8P 80570-34-9P**, Dimethyl isophthalate-1,6-hexanediol copolymer  
 RL: IMF (Industrial manufacture); RCT (Reactant); PREP (Preparation); RACT  
 (Reactant or reagent)  
 (scratch-resistant oligoester coatings)

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

## 練習問題 5

=&gt; FILE REGISTRY

=&gt; E POLYETHYLENE/CN

E1 1 POLYETHYL A/CN  
 E2 1 POLYETHYL LL-UE 320, POLYMER WITH ETHENYLTRIMETHOXYSILANE/CN  
 E3 1 --> POLYETHYLENE/CN  
 E4 1 POLYETHYLENE ACETATE/CN  
 E5 1 POLYETHYLENE AS/CN  
 :

=&gt; S E3

L1 1 POLYETHYLENE/CN

ポリエチレンを検索する

=&gt; D

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 RN 9002-88-4 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Ethene, homopolymer (CA INDEX NAME)  
 OTHER NAMES:  
 CN 0017ZSK  
 :  
 CN **Polyethylene**  
 :  
 MF (C2 H4)x  
 CI PMS, COM  
 PCT Polyolefin  
 :  
 CM 1  
 :  
 CRN 74-85-1  
 CMF C2 H4  
 :  
 H<sub>2</sub>C=CH<sub>2</sub>

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

382031 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 32557 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 387036 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

=&gt; FILE CAPLUS

← CAplus ファイルに入る

=&gt; S L1/D (L) (SULFONAT? OR SULFONE#)

L2 408 L1/D (L) (SULFONAT? OR SULFONE)

1977 年以降の文献には、CAS RN® の後ろに D が付与され、後処理のキーワードと共に索引されている

=&gt; D SCAN HITIND

L2 408 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IT **9002-88-4D**, Polyethylene, **sulfonated** 9003-07-0D, Polypropylene, sulfonated  
 9003-53-6D, Polystyrene, sulfonated 9052-45-3, Acrylic acid-divinylbenzene copolymer  
 68586-00-5, Divinylbenzene-methyl acrylate-sodium styrenesulfonate copolymer 84686-85-1,  
 Divinylbenzene-sodium styrenesulfonate-styrene copolymer  
 RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)  
 (particles; ammonia-trapping material having anion microparticles with  
 carboxy or sulfo groups on nonwoven fabric for alkaline batteries)

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



L2 408 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IT **9002-88-4D**, Polyethylene, **sulfonated**,  
 (lithium-exchanged) 98846-22-1, Acrylic acid-ethylene graft copolymer  
 125350-34-7, Acrylic acid-ethylene graft copolymer, lithium salt  
 RL: DEV (Device component use); USES (Uses)  
 (separator; nonaq. electrolyte secondary batteries with porous  
 polyolefin separators having cation-exchanging surfaces)

L2 408 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IT **9002-88-4DP**, Polyethylene, fluorinated and **sulfonated**  
 9011-17-ODP, F 26, sulfonated 25684-76-8DP, F 42, sulfonated  
 RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (multiple surface structures and surface properties of polyolefins  
 formed by modification methods)

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

参考 : 1976 年以前の文献も含めて検索する場合

=> S (L1 OR ETHENE HOMOPOLYMER#) (L) (SULFONAT? OR SULFONE#) RAN=, 1976  
 L3 164 (L1 OR ETHENE HOMOPOLYMER#) (L) (SULFONAT? OR SULFONE#) RAN=, 1976

=> D SCAN

1976 年以前の文献については、CAS RN® と CA 索引名に  
 後処理のキーワードを組み合わせて検索する

L3 164 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 INCL 210030000  
 :  
 CC 24 (Water)  
 TI Water softening with fine cation exchange tubes  
 IT Water, purification or conditioning of  
 (softening, by permselective base-exchanging tubes)  
 IT 25068-12-6, Styrene, polymer with ethylene  
 (graft, sulfonated, water softening by tubes of)  
 IT **9002-88-4**, Ethylene polymers  
 (grafted with styrene, **sulfonated**, water softening by tubes of)

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

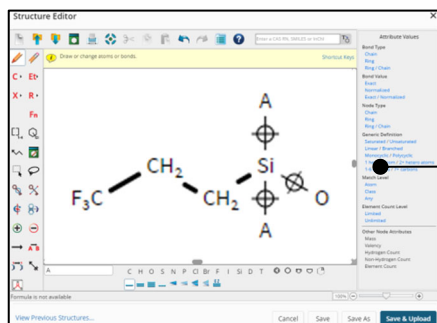
L3 164 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 IPCI C08J0007-16; C08G0065-26  
 IPCR C08F0008-00 [I]; C08F0008-34 [I]; C08G0065-26 [I]; C08J0007-16 [I]  
 CC 36-4 (Plastics Manufacture and Processing)  
 TI Surface treatment of plastics with sulfur trioxide and oxiranes  
 :  
 IT Benzene, ethenyl-, homopolymer, sulfonated, reaction products with  
 ethylene oxide  
**Ethene, homopolymer, sulfonated**, reaction  
 products with ethylene oxide  
 RL: USES (Uses)  
 (gas permeation-resistant and dyeable)  
 IT 75-21-8D, Oxirane, reaction products with sulfonated polyethylene  
 :

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

=> S L2 OR L3  
 L4 572 L2 OR L3

## 練習問題 6

=> FILE REGISTRY



環状シロキサンも検索するために以下の指定をした  
構造質問式を用いて検索する  
Si-O, Si-A の結合属性 : 環/鎖

=>

Uploading structure file: 2019\_0002\_Structure  
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2043  
L2 SCREEN CREATED

← ポリマー一般 (2043) のスクリーン

=> S L1 AND L2

← サンプル検索

:  
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 7616 TO 10144  
PROJECTED ANSWERS: 592 TO 1448

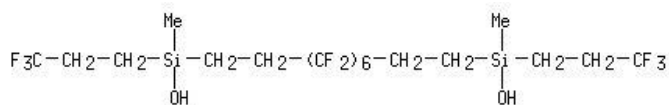
L3 50 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> D\_SCAN

L3 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Silanol, (3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8-dodecafluoro-1,10-decanediyl)bis[methyl(3,3,3-trifluoropropyl)-, homopolymer (9CI)

:  
\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

CM 1

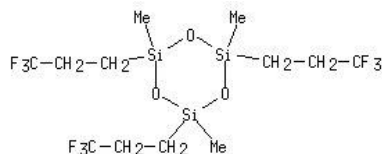


HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 1

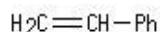
L3 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
IN Cyclotrisiloxane, 2,4,6-trimethyl-2,4,6-tris(3,3,3-trifluoropropyl)-, polymer with ethenylbenzene (9CI)

:

CM 1



CM 2



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

=> S L1 AND L2 FUL ← フルファイル検索  
 L4 1159 SEA SSS FUL L1 AND L2

=> POLYLINK L4 ← POLYLINK コマンドを実行する  
 L5 1173 POLYLINK L4

=> FILE CAPLUS

=> S L5  
 L6 1780 L5

=> S (POLYSILOXANE# OR SILOXANE# OR SILICONE#)/CW (L) TRIFLUOROPROPYL  
 L7 964 (POLYSILOXANE# OR SILOXANE# OR SILICONE#)/CW (L) TRIFLUOROPROPYL

=> S L6 OR L7  
 L8 2587 L6 OR L7

網羅的に文献検索をしたい時は統制語を含めた検索も行う

=> D SCAN TI HITIND

L8 2587 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 TI Lubricating oil composition containing amine and phenol based antioxidants  
 for shock absorber  
 IT **Polysiloxanes**  
 RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)  
 (di-Me, Me 3,3,3-**trifluoropropyl**; lubricating oil compn.  
 contg. amine and phenol based antioxidant for shock absorber)

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

L8 2587 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 TI High-stability weather-resistant conductive silicone rubber compositions  
 IT **Silicone** rubber  
 RL: POF (Polymer in formulation); TEM (Technical or engineered material  
 use); USES (Uses)  
 (fluorine-contg., **trifluoropropyl**; high-stability  
 weather-resistant conductive silicone rubber compns.)

L8 2587 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2019 ACS on STN  
 TI Self-association behavior of amphiphilic molecules based on incompletely  
 condensed cage silsesquioxanes and poly(ethylene glycol)s  
 IT 213453-16-8P 625077-43-2P 656800-07-6P 1808917-89-6P 2188258-71-9P  
 2188258-72-0P **2188258-73-1P**  
 RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (self-assocn. behavior of amphiphilic mols. based on incompletely  
 condensed cage silsesquioxanes and poly(ethylene glycol)s)

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

化学情報協会 CAS STNext ヘルプデスク



TEL 0120-003-462 (9:00-17:00)

E-mail [support@jaici.or.jp](mailto:support@jaici.or.jp)

URL <https://www.jaici.or.jp/>

**JAICI**  
化学情報協会

**CAS**  
A division of the  
American Chemical Society