

## MRCK

MRCK ファイルは、The Merck Index 第 14 版のオンライン版です。

このファイルは重要な化学物質、医薬品、生物学的製品、農薬、天然物に関するデータを収録しています。レコードには、体系名、慣用名、一般名、商品名およびこれらに関する会社名、CAS 登録番号、分子式、分子量、薬効や用途、構造図、科学文献・特許文献の書誌事項、関連特許、その他の情報源が収録されており、さらに物理的性質および毒性に関する数値情報も含まれます。また、誘導体に関する情報も収録されています。構造図以外のすべての情報が検索可能です。

後方一致は、ベーシックインデックスおよび化学物質名セグメント (/CNS) フィールドで利用可能です。

MRCK は次のファイルクラスターのメンバーです。CASRNS, CHEMDATA, COMPANIES, NUMERIC

## 収録内容

以下の重要化学物質の物質、毒性および特性データ

農薬	動物用医薬品
生物学的製品	天然物
医薬品	有機および無機化合物

## 収録源

重要な化学物質、医薬品、生体物質、農薬、天然物の百科事典である The Merck Index 14 版レコードは、以下の資料を対象に収録しています。

雑誌	政府レポート
単行本	逐次刊行物
特許	シンポジウムおよび会議録

## ファイル内容

19 世紀後半から現在まで

10,500 レコード (2011 年 7 月現在)

更新は半年毎

アラート (自動 SDI 検索) は利用できません

## 検索補助資料

オンラインヘルプ (HELP DIRECTORY で利用できるすべてのヘルプメッセージが表示されます)  
STNGUIDE

## データベース製作者

Merck & Co., Inc.

P. O. Box 2000, RY86-220

Rahway, NJ 07065-0900

U. S. A.

Phone: +1 (732) 594-7143

FAX: +1 (732) 594-1187

e-mail: Merck\_index@merck.com

## ヨーロッパ

## STN カールスルーエ

FIZ Karlsruhe

P.O. Box 2465

76012 Karlsruhe

Germany

Phone: +49-7247-808-555

Fax: +49-7247-808-259

E-mail: helpdesk@fiz-karlsruhe.de

Internet: www.stn-international.de

## 日本

## STN 東京

## 一般社団法人 化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

Phone: 0120-003-462 (Help Desk)

: 0120-151-462 (上記以外)

Fax: 03-5978-4090

E-mail: support@jaici.or.jp (Help Desk)

customer@jaici.or.jp (上記以外)

Internet: www.jaici.or.jp

## 北アメリカ

## STN コロンバス

CAS

P.O. Box 3012

Columbus, Ohio 43210-0012 U.S.A

CAS Customer Care:

Phone: 800-753-4227 (North America)

614-447-3700 (worldwide)

Fax: 614-447-3751

E-mail: help@cas.org

Internet: www.cas.org

## SEARCHおよびDISPLAYフィールド

後方一致検索可能なフィールドにはアスタリスク(\*)が付いています。1レコード中に1個以上の誘導体が含まれる場合、各誘導体が対象となります。

フィールド	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
ベーシックインデックス* 用途 (/APP) MERCK索引名 (/MIN) CA索引名 (/CN) 同義語 (/CN) 商品名 (/CN) 関連会社名 (/CN) 薬物コード (/CN) 薬効コード (/THER) 動物用薬効コード (/VTHER) 毒性試験対象生物 (/TOX) 毒性値 (/TOX) 毒性経路 (/TOX) 毒性テキスト (/TOX) 注記と注意 (/NTE) 参考文献 (/RE) 物性データ 誘導体の関連フィールド (以上からの切出し語) 分子式 分子量 CAS登録番号	なし または/BI	S CARDIOVAS? S 4205-90-7 S CYCLETANIDE S DRUG(L)REHAB? S BMY-28100 S ?AZEPIN? S CRYSTAL# FROM ACETONITRILE	APP, CN, CN.DRV, Dervative, MF, MF.DRV, MIN, MW, MW.DRV, NTE, OCPP, OCPP.DRV, OTHER.DRV, <PROP>, <PROP>.DRV, RE, RE.DRV, RN, RN.DRV, THER, TOX, TOX.DRV, VTHER
レコード番号 (MERCK索引番号) 用途 原子数 <sup>1)</sup> 電荷 <sup>1), 2)</sup> 化学物質名 (見出し物質および誘導体の MERCK索引名、CA索引名、 同義語、薬物コード、商品名) 誘導体の化学物質名 (誘導体の同義語、薬物コード、 商品名) 化学物質名フラグメント* 会社名 <sup>3)</sup> (見出し物質および誘導体の 商品名に関連する会社名) 元素数 <sup>1), 4)</sup> 元素記号 <sup>4)</sup> フィールドの存在 フィールドの非存在	/AN または/MNO /APP /ATC /CHA /CN /CN.DRV /CNS /CO /ELC /ELS /FA /FNA	S 2729/AN S MORDANT/APP S AGRICUL? NEMATOCIDE#/APP S 6-8/ATC AND S<=4 S -2/CHA S DURACEF/CN S VASOTEC/CN.DRV S MJ-13754-1/CN.DRV S RUBROMYCIN/CNS S ?METHYLPHENYL/CNS S BRISTOL-MYERS/CO S UNAC?/CN(S)PFIZER/CO S ACID(L)ELC=4 S ACID(L)ELC=4(L)N/ELS S L6 AND MP/FA S 215-230/MP OR MP/FNA	MNO APP 表示されない 表示されない CN, CN.DRV, MIN CN.DRV CN, CN.DRV CN, CN.DRV 表示されない 表示されない FA 表示されない

(続く)

- 1) 数値演算子あるいは範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。
- 2) 現在、この検索フィールドにはデータは収録されていません。
- 3) このフィールドでは(S)演算子はスペースで代用できます。
- 4) 誘導体を含みます。

## SEARCHおよびDISPLAYフィールド

フィールド	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
示性式	/LSF	S AL P 04/LSF	LSF
誘導体の示性式	/LSF.DRV	S "(C21 H39 N7 O12"?/LSF.DRV	LSF.DRV
元素組成 <sup>3), 4), 5)</sup>	/MAC	S 20-25 AL/MAC	COMP, COMP.DRV
誘導体の元素組成 <sup>5)</sup>	/MAC.DRV	S 30-40 AL/MAC.DRV	COMP.DRV
MERCK索引名	/MIN	S LIPOTROPIC HORMONE/MIN	MIN
分子式 <sup>4)</sup>	/MF	S O12S3SB2/MF	MF, MF.DRV
誘導体の分子式	/MF.DRV	S C7H13NO3.CLH/MF.DRV	MF.DRV
分子量 <sup>1), 4)</sup> (分子式量)	/MW	S SALT AND 90+-10%/MW	MW, MW.DRV
	または/FW		
誘導体の分子量 <sup>1)</sup>	MW.DRV	S MW.DRV<=330	MW.DRV
注記および注意(警告)	/NTE	S CARCINOGEN?/NTE	NTE
	または/WARN	S FED? REG?/NTE	
成分数 <sup>1), 4)</sup>	/NC	S HEXOL/CN AND NC>1	表示されない
その他の収録源	/OS	S CA?/OS AND L2	OS
毒性試験対象生物 <sup>4)</sup>	/ORGN	S MICE/ORGN	TOX, TOX.DRV
誘導体の毒性試験対象生物	/ORGN.DRV	S MICE/ORGN.DRV	TOX.DRV
周期律グループ <sup>4)</sup>	/PG	S B7/PG	表示されない
		S LNTH/PG	
参考特許	/RPN	S BE553621/RPN	RPN
参考文献 <sup>4)</sup>	/RE	S C>=23(L)PREPN/RE	RE, RE.DRV
		S ACE INHIBIT?/RE	
		S A.G.BROWN/RE	
		S J CHROMATOG/RE	
誘導体の参考	/RE.DRV	S L7(L)PREP?/RE.DRV	RE.DRV
毒性試験投与経路 <sup>4)</sup>	/RTE	S ORALLY/RTE	TOX, TOX.DRV
誘導体の毒性試験投与経路	/RTE.DRV	S I.V./RTE.DRV	TOX.DRV
各元素の元素数 <sup>1), 4)</sup>	/元素記号	S 5/NA	表示されない
薬効コード	/THER	S ANTIDEPRESSANT/THER	THER
毒性テキスト	/TOX	S RAT#/TOX	TOX, TOX.DRV
(対象生物、投与経路、用量、 テキスト)			
誘導体の毒性テキスト	/TOX.DRV	S DUCKLING#/TOX.DRV	TOX.DRV
誘導体のタイプ	/TYP.DRV	S CALCIUM SALT?/TYP.DRV	DERIVATIVE
動物用薬効コード <sup>4)</sup>	/VTHER	S ANTICOAGULANT/VTHER	VTHER

1) 数値演算子あるいは範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

2) 現在、この検索フィールドにはデータは収録されていません。

3) このフィールドでは(S)演算子はスペースで代用できます。

4) 誘導体を含みます。

5) 数値フィールドとテキストフィールドがあります。%組成タームは数値であり、数値演算子あるいは範囲により検索します。  
合金の組成タームはテキストタームです。

## 物性および物性パラメータ

1レコード中に1個以上の誘導体が含まれる場合、各誘導体が検索対象となります。

物性データ情報 <sup>1)</sup>

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
沸点 <sup>2)</sup>	deg C	/BP	S NITRILE AND 14+-5%/BP	BP, BP.DRV
誘導体の沸点	deg C	/BP.DRV	S 68-80/BP.DRV	BP.DRV
沸点圧力	mm Hg	/BP.P	S 2-8 PSI/BP.P	BP
誘導体の沸点圧力	mm Hg	/BP.P.DRV	S BP.P.DRV<0.50	BP.DRV
50%致死量 <sup>2)</sup>	—	/LD50	S .35-.50/LD50	TOX, TOX.DRV
誘導体の50%致死量	—	/LD50.DRV	S LD50.DRV>1.4	TOX.DRV
融点 <sup>2)</sup>	deg C	/MP	S RESIN# AND 250-275/MP	MP, MP.DRV
誘導体の融点	deg C	/MP.DRV	S 225+-3% K/MP.DRV	MP.DRV
融点圧力	mm Hg	/MP.P	S MP.P<=5.0	MP
誘導体の融点圧力 <sup>3)</sup>	mm Hg	/MP.P.DRV	S 2 MMHG/MP.P.DRV	MP.DRV
旋光性 <sup>2)</sup>	deg	/ORP	S 75.6+-5%/ORP	ORP, ORP.DRV
誘導体の旋光性	deg	/ORP.DRV	S OIL# AND ORP.DRV= 48+-19	ORP.DRV
旋光性スペクトル線 <sup>2), 4)</sup>	—	/ORP.SL	S 589NM/ORP.SL	ORP, ORP.DRV
誘導体の旋光性スペクトル線 <sup>4)</sup>	—	/ORP.SL.DRV	S 589/ORP.SL	ORP.DRV
旋光性温度 <sup>2)</sup>	deg C	/ORP.T	S 365/ORP.SL.DRV	ORP.DRV
誘導体の旋光性温度	deg C	/ORP.T.DRV	S 15-25/ORP.T	ORP, ORP.DRV
屈折率 <sup>2)</sup>	—	/RI	S 15-25/ORP.T(P)15-25 /ORP.T.DRV	ORP.DRV
誘導体の屈折率	—	/RI.DRV	S 1.37+-5%/RI OR RI/FNA	RI, RI.DRV
屈折率スペクトル線 <sup>2), 4)</sup>	—	/RI.SL	S RI.DRV>1.48(P)	RI.DRV
誘導体の屈折率スペクトル線 <sup>4)</sup>	—	/RI.SL.DRV	RI.T.DRV=20	RI, RI.DRV
屈折率温度 <sup>2)</sup>	deg C	/RI.T	S D/RI.SL	RI.DRV
誘導体の屈折率温度	deg C	/RI.T.DRV	S D/RI.SL.DRV	RI.DRV
比重 <sup>2)</sup>	—	/SPGR	S RI.T=20 AND LIQUID	RI, RI.DRV
誘導体の比重	—	/SPGR.DRV	S 68 F/RI.T.DRV	RI.DRV
比重基準温度 <sup>2)</sup>	deg C	/SPGR.RT	S .82-.92/SPGR	SPGR, SPGR.DRV
誘導体の比重基準温度	deg C	/SPGR.RT.DRV	S SPGR.DRV<=1.854	SPGR.DRV
比重温度 <sup>2)</sup>	deg C	/SPGR.T	S 298.15K/SPGR.RT	SPGR, SPGR.DRV
誘導体の比重温度	deg C	/SPGR.T.DRV	S SPGR.RT.DRV>90	SPGR.DRV
毒性値 <sup>2)</sup>	—	/DOSE	S 57-62/SPGR.T	SPGR, SPGR.DRV
誘導体の毒性値	—	/DOSE.DRV	S 57-62/SPGR.T(P)	SPGR.DRV
紫外および可視スペクトルの ピーク位置 <sup>2)</sup>	nm	/UVS.PP	S SPGR.T.DRV<=60	TOX, TOX.DRV
誘導体の紫外および可視スペ クトルのピーク位置	nm	/UVS.PP.DRV	S 0.5-0.6/DOSE(L) ORAL?/RTE	TOX.DRV
			S 25-30/DOSE.DRV(P)MICE	TOX, UVS.DRV
			S CRYSTAL? AND UVS.PP >=90	UVS.DRV
			S 240+-10/UVS.PP.DRV	UVS.DRV

1) 数値演算子あるいは範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

2) 誘導体を含みます。

3) 現在、この検索フィールドにはデータは収録されていません。

4) 非数値検索フィールドです。

## DISPLAYおよびPRINT形式

回答のディスプレイとオフラインプリントには下記の表示形式を自由に組み合わせることができます。複数のコードは、“D L1 1-5 CN RN”のように、スペースやカンマで区切ってください。フィールドは指定された順序で表示されます。

以下の検索フィールドでハイライト機能が使えます。APP, CN, CN.DRV, COMP, COMP.DRV, LSF, LSF.DRV, MF, MF.DRV, MIN, MNO, NTE, OCPP, OCPP.DRV, OS, OTHER.DRV, RE, RE.DRV, RN, RN.DRV, RPN, THER, TOX, TOX.DRVおよびVTHER。ハイライト機能をご利用にならない場合にはSET HIGHLIGHT OFFと入力してください。システムのデフォルトはONになっています。HIT, KWIC, OCC形式を使うためには、検索時にハイライト機能がONになっている必要があります。

形式	英語名	内容	入力例
APP	Application	用途	D L1 3 APP
BP	Boiling Point of Parent Substance	見出し物質の沸点	D BP 1,3-5
BP.DRV	Boiling Point of Derivative	誘導体の沸点	D BP.DRV 5-10
CN	Chemical Name of Parent Substance (includes MERCK Index Name, CA Index Name, Synonyms, Drug Codes, Trade Names, and associated corporations)	見出し物質の化学物質名 (MERCK索引名、CA索引名、 同義語、薬物コード、商品名、 関連会社名を含む)	D 1-3,7,8 CN
CN.DRV	Chemical Name of Derivative	誘導体の化学物質名	D CN.DRV
COMP	Composition of Parent Substance	見出し物質の元素組成	D COMP
COMP.DRV	Composition of Derivative	誘導体の元素組成	D COMP.DRV 1-5
FA <sup>1)</sup>	Field Availability	フィールドの存在	D L1 FA 3
LSF	Linear Structural Formula of Parent Substance	見出し物質の示性式	D 1,3,6 LSF L5
LSF.DRV	Linear Structural Formula of Derivative	誘導体の示性式	D LSF.DRV
MF	Molecular Formula of Parent Substance	見出し物質の分子式	D 1,4 MF
MF.DRV	Molecular Formula of Derivative	誘導体の分子式	D L1 MF.DRV
MIN <sup>1)</sup>	MERCK Index Name	MERCK索引名	D MIN
MNO (AN)	MERCK Index Number (Accession Number)	MERCK索引番号 (レコード番号)	D L4 1-4 AN
MP	Melting Point of Parent Substance	見出し物質の融点	D MP L1 4
MP.DRV	Melting Point of Derivative	誘導体の融点	D MP.DRV 3,4
MW (FW)	Molecular Weight (Formula Weight) of Parent Substance	見出し物質の分子量 (分子式量)	D MW
MW.DRV (FW.DRV)	Molecular Weight Derivative	誘導体の分子量	D MW.DRV
NTE (WARN)	Notes and Caution	注記および注意	D NTE
OCPP	Other Chemical/Physical Properties of Parent Substance	見出し物質の他の化学的・ 物理的性質	D OCPP 2 L5
OCPP.DRV	Other Chemical/Physical Properties of Derivative	誘導体の他の化学的・物理的 性質	D OCPP.DRV 2
ORP	Optical Rotatory Power of Parent Substance	見出し物質の旋光性	D L3 4 ORP
ORP.DRV	Optical Rotatory Power of Derivative	誘導体の旋光性	D ORP.DRV
OS	Other Source	その他の収録源	D OS
OTHER.DRV	Other Information Regarding Derivatives	誘導体に関するその他の情報	D 5,3 OTHER.DRV
RE	References of Parent Substance	見出し物質の参考	D RE
RE.DRV	References of Derivative	誘導体の参考	D L4 RE.DRV 3
RI	Refractive Index of Parent Substance	見出し物質の屈折率	D L3 2 RI
RI.DRV	Refractive Index of Derivative	誘導体の屈折率	D RI.DRV

(続く)

1) 無料オンライン表示形式です。

## DISPLAYおよびPRINT形式

形式	英語名	内容	入力例
RN	CAS Registry Number of Parent Substance	見出し物質のCAS登録番号	D 1-3,5 RN L3
RN.DRV	CAS Registry Number of Derivative	誘導体のCAS登録番号	D RN.DRV
RPN	Referenced Patent	参考特許	D RPN 1-10
SPGR	Specific Gravity of Parent Substance	見出し物質の比重	D L2 SPGR 3,4-7
SPGR.DRV	Specific Gravity of Derivative	誘導体の比重	D SPGR.DRV
STF	Flat Structure (no stereo indicated)	平面構造図(立体結合情報なし)	D L9 1 3 STF
STR <sup>2)</sup>	Structure Diagram (includes stereo bonds and R/S/E/Z labels when available)	構造図 (もしあれば立体結合情報とR/S/E/Zラベルを表示)	D L4 STR
STS <sup>2)</sup>	Stereo Structure (includes stereo bonds when available)	立体構造図 (もしあれば立体結合情報を表示)	D STS
THER	Therapeutic Codes	薬効コード	D THER
TOX	Toxicity Text	毒性テキスト	D TOX 1-5
TOX.DRV	Toxicity Text Derivative	誘導体の毒性テキスト	D L4 TOX.DRV
TYP.DRV <sup>1)</sup>	Type of Derivative	誘導体のタイプ	D TYP.DRV
UVS	UV and Visible Spectrum of Parent Substance	見出し物質の紫外および可視スペクトル	D UVS 1-4
UVS.DRV	UV and Visible Spectrum Derivative	誘導体の紫外および可視スペクトル	D UVS.DRV 2 L4
VOTHER	Therapeutic Codes - Veterinary	動物用薬効コード	D L7 VOTHER
ALL <sup>2)</sup>	MNO, RN, MIN, CN, MF, LSF, COMP, MW, RE, STR, BP, MP, RI, ORP, SPGR, TOX, UVS, OCPP, TYP.DRV, RN.DRV, CN.DRV, MF.DRV, LSF.DRV, COMP.DRV, MW.DRV, STR.DRV, RE.DRV, BP.DRV, MP.DRV, RI.DRV, ORP.DRV, SPGR.DRV, TOX.DRV, UVS.DRV, OCPP.DRV, OTHER.DRV, NTE, APP, THER, VOTHER, OS, RPN		D 2 ALL L4
DRV	TYP.DRV, RN.DRV, CN.DRV, MF.DRV, LSF.DRV, COMP.DRV, MW.DRV, RE.DRV, STR.DRV, BP.DRV, MP.DRV, RI.DRV, ORP.DRV, SPGR.DRV, TOX.DRV, UVS.DRV, OCPP.DRV, OTHER.DRV		D 1 3 DRV
IDE <sup>2)</sup>	MNO, RN, MIN, CN, MF, LSF, COMP, MW, STR		D 3-5 L2 IDE
IDETAB	一つの表中の一つの回答あるいはいくつかのレコードに対するMNO, MIN, RN, MFを含む表		D L4 IDETAB 1-3
IDE.DRV	一つの回答中の各誘導体に対するTYP.DRV, CN.DRV, RN.DRV, MF.DRVを含む表		D IDE.DRV 6
MONO <sup>2)</sup>	MNO, RN, MIN, CN, MF, LSF, COMP, MW, RE, STR, OCPP, TYP.DRV, RN.DRV, CN.DRV, MF.DRV, LSF.DRV, COMP.DRV, MW.DRV, RE.DRV, STR.DRV, OCPP.DRV, OTHER.DRV, NTE, APP, THER, VOTHER		D MONO
PHYS	BP, MP, RI, ORP, SPGR, TOX, UVS, OCPP		D PHYS
QRD	質問式関連データ (MNO, RN, MINおよびヒットタームを含むすべてのフィールド) (デフォルト)		D QRD L8
SAM <sup>1)</sup>	MNO, RN, MIN, MF, FA		D SAM
SCAN <sup>1), 3)</sup>	CN (MINのみ), RN (回答番号なしのランダム表示)		D SCAN
HIT	ヒットタームを含むフィールド		D HIT 5,3
KWIC	ヒットタームの前後 20語を表示 (KeyWord-In-Context)		D KWIC
OCC <sup>1)</sup>	ヒットタームの出現頻度をフィールドごとに表示		D 1-3,5-6 OCC

1) 無料オンライン表示形式です。

2) 立体構造図はグラフィック端末またはオフラインプリントでのみ表示可能です。テキスト端末で構造を表示させた場合はSTFで表示されます。

3) 無料オンライン表示形式です。SCANはコマンドラインで指定する必要があります。(例) D SCAN または DISPLAY SCAN

## SELECTおよびSORTフィールド

SELECTコマンドは、回答セットの指定したフィールドから抽出した語句にE番号またはL番号を付与します。  
(該当項目はY、該当しないものはNで表示されています。)

SORTコマンドは、指定したフィールドのアルファベット順または数値順に検索結果を並べ替えます。

1レコード中に1個以上の誘導体が含まれる場合、特定のフィールドをもった各誘導体はSELECTまたはSORTに含まれます。

フィールド	フィールドコード	SELECT <sup>1), 2)</sup>	SORT <sup>5)</sup>
レコード番号	AN	N	Y
用途	APP	Y	N
誘導体の沸点	BP.DRV	N	Y
見出し物質の沸点	BP	N	Y
CAS登録番号と見出し物質名	CHEM	Y <sup>3)</sup>	N
誘導体のCAS登録番号	RN.DRV	Y <sup>3)</sup>	N
見出し物質のCAS登録番号	RN	Y <sup>3)</sup>	N
誘導体の化学物質名	CN.DRV	Y	N
見出し物質の化学物質名	CN	Y	N
	NAME	Y <sup>3)</sup>	N
誘導体の分子式量	FW.DRV	N	Y
見出し物質の分子式量	FW	N	Y
誘導体の示性式	LSF.DRV	Y	N
見出し物質の示性式	LSF	Y	N
誘導体の融点	MP.DRV	N	Y
見出し物質の融点	MP	N	Y
MERCK索引名	MIN	Y	Y
MERCK索引番号	MNO	N	Y
誘導体の分子式	MF.DRV	Y	N
見出し物質の分子式	MF	Y (デフォルト)	N
誘導体の分子量	MW.DRV	N	Y
見出し物質の分子量	MW	N	Y
注記および注意	NTE	Y	N
ヒットタームの頻度数	OCC	N	Y
誘導体の旋光性	ORP.DRV	N	Y
見出し物質の旋光性	ORP	N	Y
誘導体の他の化学的・物理的性質	OCCP.DRV	Y <sup>3)</sup>	N
誘導体に関する他の情報	OTHER.DRV	Y <sup>3)</sup>	N
見出し物質の他の化学的・物理的性質	OCCP	Y <sup>3)</sup>	N
その他の収録源	OS	Y	N
誘導体の参考文献	RE.DRV	Y	N
見出し物質の参考文献	RE	Y	N
参考特許	RPN	Y	N
誘導体の屈折率	RI.DRV	N	Y
見出し物質の屈折率	RI	N	Y
誘導体の比重	SPGR.DRV	N	Y
見出し物質の比重	SPGR	N	Y
薬効コード	THER	Y	N
動物用薬効コード	VTHER	Y	N
誘導体のタイプ	TYP.DRV	Y <sup>3), 4)</sup>	N

- HITは抽出されたタームと、回答セットをつくるのに利用した検索式に一致したタームとを限定するために利用します。  
例えば SEL HIT CN。しかし、見出し物質と誘導体の両方を検索するフィールドで検索したときは SEL HIT は対応するフィールドとともに使用しなければなりません。例えば、/CNで化学物質名を検索し、ヒットしたものが誘導体情報の中にあるときは SEL HIT CN はタームを抽出しません。SEL HIT CN.DRVでタームは抽出されます。
- .DRVフィールドでSELECTすると、選択したフィールドでなく、一般の検索フィールドのコードが付与されます。例えば、SEL CN.DRVでは抽出されたタームに/CNが付きます。
- /BIになります。
- SEL HITはこのフィールドでは利用できません。
- 1個以上のデータが存在するフィールドでは、SORTは最初に表示されているデータを対象にします。

## サンプルレコード

## ALL形式での表示

MERCK Number (MNO): 2465  
 CAS Registry No. (RN): 23887-31-2  
 MERCK Index Name (MIN): Clorazepic Acid  
 CA Index Name (CN): 7-Chloro-2,3-dihydro-2-oxo-5-phenyl-1H-1,4-benzodiazepine-3-carboxylic acid  
 Molecular Form. (MF): C16 H11 Cl N2 O3  
 Wgt Composition (COMP): C 61.06%, H 3.52%, Cl 11.26%, N 8.90%, O 15.25%.  
 Molecular Weight (MW): 314.73  
 References (RE): Prepn: Neth. pat. Appl. 6507637; J. Schmitt, U.S. pat. 3516988; reissued as U.S. pat. RE 28315 (1965, 1970, 1975 all to Clin-Byla). Synthesis and activity of the dipotassium salt: J. Schmitt et al., Chim. Ther. 4, 239 (1969). Solution chemistry: R. Raveux, M. Briot, *ibid.* 303. Metabolism: P. Gros, R. Raveux, *ibid.* 312. Toxicity data: M. Brunaud et al., *Arzneimittel-Forsch.* 20, 123 (1970). Series of articles on pharmacology and clinical use: *ibid.*, 123-137. HPLC determn in plasma: P. Colin, G. Sirois, *J. Chromatog.* 273, 367 (1983). Clinical trial in anxiety: W. W. K. Zung, *J. Clin Psychiatry* 48, 13 (1987); in comparison with buspirone, q.v.: K. Rickels et al., *Arch. Gen. Psychiatry* 45, 444 (1988). Comprehensive description: J. A. Raihle, V. E. Papendick, *Anal. Profiles Drug Subs.* 4, 91-112 (1975).

```

      H
O:      C
      : . N . . :
      : C . . C . :C
      . : .
      . : .
      . C . C . :C
HO2C . . . . : .
      . . .C: .
      . C . Cl
      N:.....
      .
      .
      Ph
  
```

== DERIVATIVE == (1): Dipotassium salt  
 CAS Registry No. (RN.DRV): 57109-90-7  
 CA Index Name (CN.DRV): 7-Chloro-2,3-dihydro-2-oxo-5-phenyl-1H-1,4-benzodiazepine-3-carboxylic acid monopotassium salt compd with potassium hydroxide  
 Synonym(s) (CN.DRV): Clorazepate dipotassium  
 Drug Code(s) (CN.DRV): Abbott 35616; CB-4306  
 Trade Name(s) (CN.DRV): Belseren (Bristol-Myers Squibb); Mendon (Dainippon); Tranxilene (Clin-Comar-Byla); Tranxilium (Mack, Illert.); Transene (Clin-Comar-Byla); Tranxene (Abbott)  
 Molecular Form. (MF.DRV): C16 H10 Cl K N2 O3 . H K O  
 CM 1

## ALL形式での表示 (続き)

```

      H
    O       C
      :     . N .     :
      : C.     .C.     :C
      .       :       .
      .       :       .
      . C     C.     :C.
HO2C .     .     . . : .
      .     .     .C: .
      N     C.     Cl
      .:.:.:.:
      .
      .
      Ph
      @     K

```

CM 2

K ....OH

## Toxicity (TOX.DRV):

LD50 in mice (mg/kg): 700 orally; 290 i.p. LD50 orally in rats: >1000 mg/kg (Brunaud).

## UV Spectrum (UVS.DRV):

Part 1 of 2	Deriv. Number	Derivative Type
1	1	Dipotassium salt
2		
3		

## UV Spectrum (UVS.DRV):

Part 2 of 2	Maximum Peak Pos.  UVS.PP.DRV  nm	Note
1	231	(anhydrous product in water) (.epsilon. 33500,
2		2450)
3	311	

## Other Properties (OCPP.DRV):

White powder, freely sol in water. Very poorly sol in ethanol. Practically insol in ether, chloroform. Aq solns are alkaline to phenolphthalein. uv max (anhydrous product in water): 231 , 311 nm (.epsilon. 33500, 2450) . LD50 in mice ( mg/kg ): 700 orally ; 290 i.p . LD50 orally in rats: >1000 mg/kg (Brunaud) .

```

== DERIVATIVE ==          (2): Monopotassium salt
CAS Registry No. (RN.DRV): 5991-71-9
Drug Code(s)     (CN.DRV): CB-4311
Trade Name(s)    (CN.DRV): Azene (Endo)
Molecular Form. (MF.DRV): C16 H10 Cl K N2 O4

```

## ALL形式での表示 (続き)

```

      H
      |
O      |      C
      |      |
      :      . N .      :
      : C.      .C.      :C
      .      :      .
      .      :      .
      . C      C.      :C.
HO2C .      .      . :      .
      .      .      .C:      .
      N      C.      Cl
      .:~::~~.
      .
      .
      Ph
      @      K

```

## Notes (NTE):

Note: This is a controlled substance (depressant): 21 CFR, 1308.14.

## Therapeutic Codes (THER):

Anxiolytic.

## Referenced Patent (RPN):

NL6507637; US3516988; US28315

## IDETAB形式での表示

ANS	MNO	MIN (Merck Index Name)	RN	MF
1	9755	Trichloroacetaldehyde	75-87-6	C2 H C13 O
2	7246	Pentaerythritol Chloral	78-12-6	C13 H16 Cl12 O8
3	2482	Cloxotestosterone	53608-96-1	C21 H29 Cl3 O3

## SAM形式での表示

MERCK Number (MNO): \*\*\*6295\*\*\*  
 CAS Registry No. (RN): 61337-67-5  
 MERCK Index Name (MIN): Mirtazapine  
 Molecular Form. (MF): C17 H19 N3

## Available Display Fields (FA):

Code	Field Name
RN	CAS Registry Number
CN	Chemical Name
CN	Chemical Name (Drug Code)
CN	Chemical Name (CAS Index Name)
CN	Chemical Name (Synonym)
CN	Chemical Name (Trade Name)
COMP	Elemental Composition (by weight)
MP	Melting Point
MF	Molecular Formula
MW	Molecular Weight
OCPP	Other Chemical and Physical Properties
RPN	Referenced Patent Number
THER	Therapeutic Category

## SCAN形式での表示

CN Mirtazapine  
 RN 61337-67-5