

# CAS FILES

## CAS FILES ポケット・ガイド

2011.5



CAS®

STN

# CONTENTS

1. CAS FILES .....	1
2. STN の主なコマンド .....	2
3. STN のコマンド一覧 .....	4
4. システム制限値 .....	11
5. STN 構造検索コマンド .....	12
6. CAplus/CA ファイル .....	15
文献データベース	
7. REGISTRY ファイル .....	32
物質データベース	
8. CASREACT ファイル .....	46
反応データベース	
9. MARPAT ファイル .....	49
一般式構造 (マルクーシュ構造) データベース	
10. CASLINK ファイルクラスター .....	51
REGISTRY, MARPAT, CAplus ファイルの自動検索ファイルクラスター	
11. CHEMLIST ファイル .....	52
物質規制情報データベース	
12. CHEMCATS ファイル .....	58
化学品カタログデータベース	

## STN サービス時間

日曜日 15:00 ~ 翌週の日曜日 12:00 までの連続サービス  
(米国で夏時間を適用している期間は、日曜日 14 時 ~ 翌週の日曜日 11 時まで)  
\* 毎月第一日曜日は 6:00~14:00 (夏時間)/7:00~15:00 (冬時間) の間メンテナンスのため  
サービスを停止します

### STN on the Web

<https://stnweb-japan.cas.org>

### STN Easy

<https://stneasy-japan.cas.org>

### CAS ホームページ

<http://www.cas.org>  
<http://www.cas-japan.jp> (日本語)

(社) 化学情報協会 ヘルプデスク  
TEL 0120-003-462 FAX 03-5978-3600  
E-mail [support@jaici.or.jp](mailto:support@jaici.or.jp)  
<http://www.jaici.or.jp/>

# 1. CAS FILES

## 1-1 CAS FILES 一覧

ファイル名	内容	収録年
CAplus *1,2	CA の全情報と CA に収録予定の文献・特許の書誌情報, 対応特許情報, 抄録, 索引, CAS ロール, ページイメージ, 引用情報, 被引用情報, 米国特許譲渡情報, 主要 1,900 誌の全記事 (最新情報を含む)	1808-
CA *1,2	抄録誌 Chemical Abstracts の書誌情報, 対応特許情報, 抄録, 索引, CAS ロール, 引用情報, 被引用情報, ページイメージ, 米国特許譲渡情報	1808-
REGISTRY *2	化学物質の CAS 登録番号, 名称, 分子式, 環データ, 構造, 物性情報, スペクトルデータ, タンパク質・核酸の配列情報	1907-
CASREACT	有機化学反応情報	1840-
MARPAT	CA 収録特許のクレーム中または発明の詳細な説明中のマルクーシュ構造および INPI 由来のマルクーシュ構造	1961-
CHEMLIST *1	日本, 米国, カナダ, EU, スイス, イスラエル, オーストラリア, フィリピン, 韓国, 台湾, ニュージーランドの既存化学物質リストおよび関連規制情報	1979-
CHEMCATS	市販されている化学薬品の CAS 登録番号, 価格, 供給業者情報	カレント
CIN *1	抄録誌 Chemical Industry Notes に対応する化学ビジネス情報	1974-

\*1 接続時間料ベース (検索語料なし) の HCA, HCAplus, HCHEMLIST, HCIN も利用できる。

\*2 検索語料ベース (接続時間料なし) の ZCA, ZCAplus, ZREGISTRY も利用できる。

## 1-2 CAS FILES を使った化学物質関連調査

REGISTRY ファイルは, 化学物質の名称・分子式・構造などの情報から CAS 登録番号を検索できる。CAS FILES では, 化学物質を CAS 登録番号で収録しているので, ある化学物質に関連する情報を検索する際は, REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索をするとよい。

- ① REGISTRY ファイルで化学物質を検索 (L1)
- ② その他の CAS FILES で REGISTRY ファイルで得られた回答セットの L 番号を検索 (=> S L1)

<例> => FILE REGISTRY

=> S ACETIC ACID/CN

L1 1 "ACETIC ACID"/CN

=> FILE CAPLUS ← ファイルを切り替える

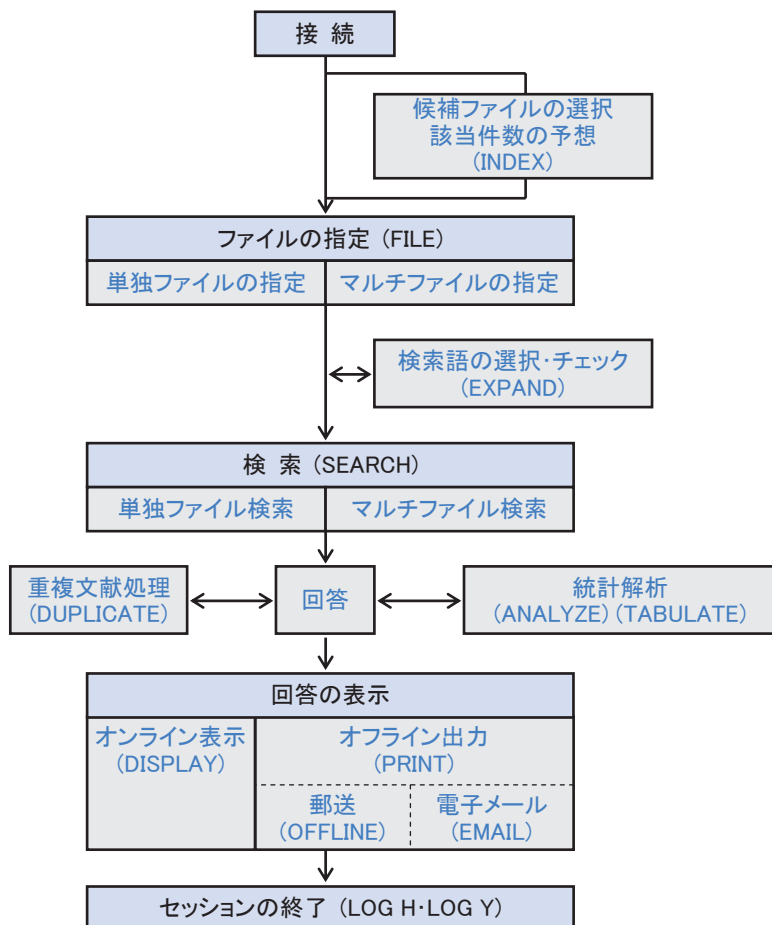
=> S L1 ← REGISTRY ファイルの回答セット (CAS 登録番号) で検索

L2 139031 L1

=> S L1/P ← CAplus/CA ファイルの場合は, /P を付けて検索すると  
L3 14899 L1/P 合成情報の検索になる

## 2. STN の主なコマンド

### 2-1 検索の流れ



#### 端末の使い方

入力文字のキャンセル … \$ 記号より前の文字を無効とする。

=> S DIOXIN\$S CANCER? … S CANCER? のみ有効になる。

実行中の検索やオンライン出力の中止

BREAK キー … STOP キー、ファンクションキーなど（通信ソフトによる）  
… STN Express では 

END の入力 … “COPY AND CLEAR PAGE PLEASE” のところで END と入力する。

コマンドスタック…複数のコマンドをセミコロン (;) で区切り、続けて入力できる。

=> FILE CAPLUS;S ACID RAIN;D 1-5 BIB;SAVE TEMP L1 RAIN/A

## 2-2 主なコマンド

コマンド	CAplus/CA ファイル	REGISTRY ファイル
FILE ファイル指定	=> FILE CAPLUS => FILE CA	=> FILE REGISTRY => FILE REG
SEARCH 検索	=> S ANTIOXIDANT? => S L2 AND ANALYSIS => S SHALE (A) OIL => S L2/P	=> S BENZOIC ACID/CN => S C6H1206 AND 2/NC => S L3 AND CHLORO => S 1-6/FE AND 8/C
EXPAND 検索語の列挙	=> E SWEET => E JP2007509978/PN => E BARTON J/AU 25	=> E ACETIC ACID/CN => E C6H1206/MF => E PMS/CI
DISPLAY オンライン回答表示	=> D L5 1- BIB HITSTR => D SCAN => D 98:128745 ALL	=> D L2 1-10 => D SCAN => D 7777-77-7 STR
LOGOFF セッションの終了	=> LOG Y => LOG H	

### 前方一致, 文字マスク

? 前方一致, 何文字でもよい	=> S ALC?
# 1 文字または無し	=> S ELECTR#####
! 1 文字 (単語の途中でも使用可能)	=> S SULF!?!YL

### 後方一致, 中間一致 (特定ファイルの特定フィールドでのみ使用可能)

? 後方一致, 単語の先頭に使用	=> S ?TERPENE (最低 4 文字必要)
? 中間一致, 単語の先頭と末尾に使用	=> S ?CYCLIN? (最低 4 文字必要)

### ブール演算子

AND 論理積	OR 論理和	NOT 論理差
---------	--------	---------

### 主な近接演算子

(W)	入力した順序で隣り合う。
(nW)	入力した順序で, その間に含まれる単語の数が n 個以内である (n : 整数)。
(XW)	同一サブフィールドあるいは同一情報単位内で, 特定の順序, その間に含まれる単語の数は特定されない。
(A)	順序を考慮することなく隣り合う。
(nA)	順序を考慮することなく, その間に含まれる単語の数が n 個以内である (n : 整数)。
(XA)	同一サブフィールドあるいは同一情報単位内で順序を考慮することなく, その間に含まれる単語の数は特定されない。
(S)	同一センテンス中に存在する.*
(P)	同一パラグラフ中に存在する.*
(L)	同一情報単位中に存在する.*
(NOTW)	各演算子の前の語を含むレコードから, 後の語が指定された関係 (W), (A), (T), (S), (P), (L) にあるものを除く。
(NOTA)	
(NOTT)	
(NOTS)	
(NOTP)	
(NOTL)	

\* センテンス, パラグラフ, 情報単位の定義は各ファイルのフィールドごとに異なる。

## 3. STN のコマンド一覧

### 3-1 ファイルの指定

FILE	ファイル指定
⇒ FILE CAPLUS	CAplus ファイルの指定
⇒ FILE CAPLUS BIOSIS	複数ファイルの指定
⇒ FILE TOXICOLOGY	ファイルクラスターの指定
⇒ FILE HITS	STNindex でヒットしたファイルの指定
⇒ FILE REG COS=JONES	コストセンター (JONES) の指定
INDEX	STNindex のファイル指定
⇒ IND CAPLUS MEDLINE	複数ファイルの指定
⇒ IND MEDICINE	ファイルクラスターの指定
⇒ IND BIOSCIENCE -CIN	クラスターから不要ファイルを除外

### 3-2 検索

SEARCH	検索
⇒ S SEMICOND?	前方一致の利用
⇒ S TONEGAWA S?/AU	検索フィールドの指定
⇒ S E3 OR E7-12	E# の使用
⇒ S SHALE (A) OIL	近接演算子の使用
⇒ S 1993-1995/PY	数値検索 (範囲指定検索)
⇒ S VIDEO RAN=(V100, )	RANGE 検索
⇒ S STEP IR AND NMR	各検索語に L# を付与する
⇒ S L1-4	L1 から L4 までを OR 演算する
⇒ S L3/COM	L3 (構造検索の回答) をイタレーションが完全な回答に限定
⇒ S L3/INC	L3 (構造検索の回答) をイタレーションが不完全な回答に限定

### 3-3 検索語の列挙

EXPAND	検索語の列挙
⇒ E SWEET	SWEET の前後の検索語のリスト表示
⇒ E	継続して表示 (E999 まで)
⇒ E BARTON J/AU 25	数字は表示行 (5-25, デフォルトは 12)
⇒ E CANCER/T1, AB	複数フィールドを同時に EXPAND
⇒ E BACK LIQUID 5	逆アルファベット順の EXPAND
⇒ E LEFT CONDUCTOR	後方一致用 EXPAND

### 3-4 回答出力

DISPLAY	オンライン回答表示
⇒ D	デフォルト形式で表示 (直前の L#, 1 番目の回答)
⇒ D 1-3 5 BIB	1-3 番目と 5 番目の回答を BIB 表示形式で表示
⇒ D L3 TOTAL BIB HITSTR	BIB HITSTR 表示形式で全件表示
⇒ D 98:128745 ALL	CA 抄録番号から文献表示
⇒ D 7777-77-7 STR	CAS 登録番号から構造表示
⇒ D 1-3 FROM EACH	マルチファイルの回答を各ファイルから 3 件ずつ表示
⇒ D L2 CUR	回答と共に特許のカレント情報も表示
⇒ D L5 WITH "JP"	L5 (統計解析結果) から JP の文字列を含むものを表示
⇒ D L5 ALP ANS	L5 (統計解析結果) をアルファベット順に回答番号付きで表示

## 統計解析表示用オプション

表示範囲	TOP n WITH “文字列” NOT “文字列”	上位 n 位までのタームの表示 特定の文字列を含むタームの表示 特定の文字列を含まないタームの表示
表示形式	ANS DEL DET	回答番号を付与して表示 デリミタ形式で表示 検索フィールドを付与して表示
表示順序	OCC DOC ALP %	出現数の多い順に表示 レコード数の多い順に表示 アルファベット順に表示 全体のレコード数に占める割合が多い順に表示

<b>PRINT</b>	オフラインプリントの注文
⇒ PRI	デフォルト形式でプリント注文（直前の L#, 1 番目の回答）
⇒ PRI L5 ALL NOA	郵送による配送（郵送先は変更しない）
⇒ PRI BIB EMAIL	電子メールによる配送
⇒ PRI L5 1-10 SIN	回答を 1 件/頁に設定
⇒ PRI TITLE IALL	標題をつけて注文
⇒ PRI ALL 1-9 NOQ	質問式を表示しない
⇒ PRI L5 FROM EACH	マルチファイル検索結果の各ファイルの回答を表示
⇒ PRI L5 BIB CUR	特許のカレント情報も併せて表示

### 3-5 各種項目の表示

<b>DISPLAY BANNER</b>	各ファイルの諸情報の表示
⇒ D BAN BRIEF	ファイルの更新状況などを表示
⇒ D BAN FUL	ファイルの各種情報を詳細表示
<b>DISPLAY COST</b>	料金表示
⇒ D COS	使用料金の表示
⇒ D COS BRIEF	接続ファイルの詳しい料金の表示
⇒ D COS FULL	全ファイルの詳しい料金の表示
<b>DISPLAY CURRENCY</b>	収録特許の最新情報の表示
⇒ D BIB CUR	書誌情報と収録特許の最新情報の表示
<b>DISPLAY EXPAND</b> または <b>DISPLAY SELECT</b>	E 番号の表示
⇒ D EXP	EXPAND したすべての E# の表示
⇒ D SEL	SELECT したすべての E# の表示
⇒ D SEL E1-E5	特定の E# (E1-5) の表示
<b>DISPLAY HISTORY</b>	検索経過の表示
⇒ D HIS	セッション接続以降の検索経過の表示
⇒ D HIS L2-L8	L2 から L8 までの検索経過の表示
⇒ D HIS 3	三つ前までの L# の表示
⇒ D HIS NOFILE	セッション接続以降の全コマンドの表示
⇒ D HIS FULL	セッション接続以降の全コマンドとファイルの各種情報の表示
<b>DISPLAY PRINT</b>	オフラインプリントの注文状況表示（同一セッション中のみ有効）
<b>DISPLAY QUERY</b>	質問式の表示
⇒ D QUE L8	L8 の質問式の表示

<b>DISPLAY SAVED</b>	保存項目の表示
⇒ D SAVED	すべての保存回答と質問式の表示
⇒ D SAV/Q	すべての保存質問式の表示
⇒ D SAV/A	すべての保存回答セットの表示
⇒ D SAV/L	すべての保存 L 番号リストの表示
⇒ D SAVED/S	登録したアラートの一覧表示
⇒ D ACID/S	アラート (ACID/S) 登録内容の確認 (質問式は表示されない)
⇒ D CANCER/S FUL	アラート (CANCER/S) 登録内容の確認 (質問式も表示される)

<b>DISPLAY SET</b>	SET オプションの表示
⇒ D SET	すべての SET オプションの表示
⇒ D SET COST	特定の SET オプション (COST) の表示

### 3-6 各種項目の消去

<b>DELETE</b>	各種項目の消去
⇒ DEL P123001C	オフラインプリント注文の取消 (同一セッション中のみ)
⇒ DEL HIS	すべての L# の消去
⇒ DEL L1-L5	一部の L# の消去
⇒ DEL L3 RENUM	L# を消去して, 番号を再付与
⇒ DEL BORICA/A	保存回答セットの消去
⇒ DEL BIOSIS/S	アラート検索式の消去
⇒ DEL SAV/Q	全保存質問式の消去
⇒ DEL SAV/A	全保存回答セットの消去
⇒ DEL SELECT	SELECT した E# の消去

### 3-7 回答セット, 質問式の保存と呼び出し

<b>SAVE</b>	回答セット, 質問式の保存
⇒ SAV L4 PROTEIN/A	回答セットの保存
⇒ SAV L1 PEPTIDE/Q	質問式の保存
⇒ SAV ALL MAP/L	同一セッション中の全質問式の保存
⇒ SAV TEMP L5 ACID/A	一時的 (一週間) に無料で保存

<b>ACTIVATE</b>	保存回答セット, 質問式の呼び出し
⇒ ACT NATURAL/A	回答セットの呼び出し
⇒ ACT TERPEN/Q	質問式の呼び出し
⇒ ACT ACID/S	アラート検索式の呼び出し

### 3-8 その他のコマンド

<b>ANALYZE</b>	統計解析
⇒ ANA L5 1- PA PY.B	PA と PY.B を統計解析
⇒ ANA L5 1- IPC LEN 4	IPC を先頭から 4 文字 (サブクラス) までを統計解析
⇒ ANA PN WITH "JP"	JP の文字列を含む特許番号を統計解析

#### 統計解析用オプション

WITH "文字列"	特定の文字列を含むタームの解析
NOT "文字列"	特定の文字列を含まないタームの解析
LEN n	タームの先頭から n 文字までのタームの解析

<b>DUPLICATE</b>	重複文献処理
⇒ DUP REM L2	重複文献除去
⇒ DUP IDE L6 L5 L7	重複文献の識別
⇒ DUP ONL L4 L5	重複文献のみをまとめる
<b>EDIT</b>	タームまたは質問式の編集
⇒ EDI (CHA) E1-E5 TI BI	タームの修正
⇒ EDI COM 3 4	統計解析結果のタームの統合
⇒ EDIT TIT LIQUID	タイトル (LIQUID) の付与
⇒ EDIT QUE L1	質問式 L1 を編集する
<b>FOCUS</b>	回答を適合度の順に並べ替え
⇒ FOCUS L2 1-20	1-20 番目の回答を適合順に並べ替え
<b>FSEARCH</b>	関連特許をもれなく検索
⇒ FSE EP322140/PN	EP322140 の関連特許を検索
⇒ FSE L3	L3 の関連特許を検索
<b>FSORT</b>	回答を特許ファミリーごとにソート
⇒ FSO L3	L3 を特許ファミリーごとにソート
<b>HELP または ?</b>	ヘルプメッセージの表示
⇒ HELP DIRECTORY	各ファイルで利用できるヘルプメッセージの一覧の表示
⇒ HELP COST	各ファイルの料金情報の表示
⇒ HELP SFIELD	利用できる検索フィールドの表示
⇒ ? SET	SET コマンドのヘルプメッセージ一覧の表示
<b>NEWS</b>	ニュースの表示
⇒ NEW 12	12 番のニュースの表示
⇒ NEWS FILE	各ファイルのニュースの表示 (各ファイルに入ってから指定)
<b>QUERY</b>	質問式の作成
⇒ QUE PINE OR ASPEN	キーワードを使用した質問式の作成
⇒ QUE (L1 OR L2) AND P/DT	L 番号を使用した質問式の作成
<b>SDI</b>	アラートの登録と編集
⇒ SDI L5 BIOSIS/S	質問式 L5 を BIOSIS/S として登録
⇒ SDI MFILE	マルチファイルアラートの登録
⇒ SDI MFILE PACKAGE	アラートの回答を月末に一括受領
⇒ SDI TOC	CAplus の目次サービスの登録
⇒ SDI XFILE	SMARTracker (クロスオーバーアラート) の登録
⇒ SDI EDIT ACID/S	ACID/S の編集
<b>SELECT</b>	回答からタームを抽出
⇒ SEL L1 1- CHEM	CAS 登録番号と化学物質名を抽出
⇒ SEL L1 1-20 CIT	引用文献調査用の検索語を抽出
⇒ SEL L2 HIT RN	ヒットした CAS 登録番号を抽出
<b>SMART</b>	クロスオーバーアラートの登録
⇒ SMART	SMARTracker (クロスオーバーアラート) の登録
<b>SORT</b>	回答順序の並べ替え
⇒ SOR PY	デフォルト設定で並べ替え (直前の L#, すべての回答, 昇順)
⇒ SOR L2 1-100 PD	PD の昇順で並べ替え
⇒ SOR PY D TI	PY の降順で並べ替え, 同じ PY では TI の昇順で並べ替え

TABULATE 統計解析結果を表形式で表示  
 => TAB 統計解析結果を表示  
 => TABULATE DELIM 統計解析結果をデリミタ形式で表示

=> ANA L5 1- PA PY.B

L6 ANALYZE L5 1- PA PY.B : 935 TERMS

=> TABULATE

ENTER ANALYZE OR SELECT L# (L6):L6  
 DISPLAY AS GRID FORMAT (N), Y, OR ?:Y  
 ENTER PRIMARY DISPLAY CODE OR (?):PA  
 ENTER SECONDARY DISPLAY CODE OR (?):PY.B  
 DISPLAY PRIMARY (TOP 10), ENTIRE OR ?:TOP 5  
 PRIMARY SORT ORDER (CURRENT), DOC, ALPHA, OR ?:DOC  
 PRIMARY SORT DIRECTION (DEFAULT), A, D, OR ?:D  
 SECONDARY SORT ORDER (CURRENT), DOC, ALPHA, OR ?:ALPHA  
 SECONDARY SORT DIRECTION (DEFAULT), A, D, OR ?:D  
 A FEE WILL BE CHARGED. PROCEED? (Y), N, OR ?:Y

L6 ANALYZE L5 1- PA PY.B : 935 TERMS

PA	PY.B								
	2011	2010	2009	2008	2007	2006	2005	2004	2003
L OREAL FR	2	3	3	3	0	13	10	11	10
GALDERMA RESEARCH	0	12	8	2	0	0	0	1	0
AMOREPACIFIC CORPORATION	0	1	2	1	4	1	4	2	6
COREANA COSMETICS CO LTD	0	2	3	3	4	2	5	1	0
FUJIFILM CORPORATION	0	9	6	2	3	0	0	0	0

REFORMAT USING SAME DISPLAY FIELDS? (N), Y, OR ?:\_

TRANSFER 特定フィールドを抽出して検索  
 => TRA L3 PN L3 の全件から PN を抽出して、現ファイルで検索  
 => TRA L1 1- OS /AN L1 の全件から OS を抽出し、/AN フィールドで検索

### 3-9 検索の終了

LOGOFF 検索終了  
 => LOG Y オンラインセッションの終了  
 => LOG H オンラインセッションの中断 (120 分間以内に再接続すると、検索の続きを実行できる)

## 3-10 SET コマンド\*

使用例	デフォルト	説明
SET <u>ABBREVIATION ON</u> (OFF)	OFF	CA/WPI の略語を自動的に検索
SET <u>ACCOUNT</u> <コストセンター>	NONE	コストセンターを指定
SET <u>ACCOUNT BACK</u> <コストセンター>	NONE	コストセンターをセッションの最初に遡って指定
SET <u>ACCOUNT PROMPT</u>		コストセンター指定を促すプロンプトを常に表示
SET <u>AUDIT ON</u> (OFF)	OFF	TRANSFER でヒットしなかったターム集合作成
SET <u>AUHELP ON</u> (OFF, NONE)	ON	ヘルプメッセージを自動的に表示
SET <u>AUTOSEARCH ON</u> (OFF)	OFF	SEARCH コマンドを自動的に実行
SET <u>BANNER ON</u> (OFF, BRIEF, FULL)	ON	各ファイルに入ったときにバナー (ファイル情報) を表示 (しない, 詳細表示)
SET <u>CLUSTER</u>		ファイルクラスターをカスタマイズ
SET <u>COST ON</u> (OFF, BRIEF, FULL)	ON	料金表示する (しない, 詳細表示)
SET <u>DCLUSTER TOXICOLOGY</u>	NONE	デフォルトのクラスターの設定
SET <u>DETAIL ON</u> (OFF)	OFF	詳細なデータの表示
SET <u>DFORMAT .BIB</u>		デフォルト表示形式の設定
SET <u>DUPORDER DEFAULT</u> (FILE)	DEF	重複文献処理後の回答順序をファイルごとにまとめない (まとめる)
SET <u>ECLEVEL LIMITED</u> (UNLIMITED)	LIM	EC レベルが質問式と正確に一致 (元素数の限定なし)
SET <u>EXPAND CONTINUOUS</u> (RENUMBER)	REN	E 番号を連続付与 (E1 から付与)
SET <u>EXTEND ON</u> (OFF)	OFF	フルファイル構造検索の際, 候補化合物の集合を作成
SET <u>FIELD .MYSEA TI AB</u>		デフォルトの検索フィールドをカスタマイズ
SET <u>FORMAT .BIB TI SO ST</u>		デフォルトの表示形式をカスタマイズ
SET <u>GRAPHICS ON</u> (OFF, PLOT10, TEXT)	ON	回答の構造図を表示 (表示しない, 構造式をグラフィック型, テキストで表示)
SET <u>GTEXT ON</u> (OFF)	ON	MARPAT ファイルで G グループの定義を詳細に表示
SET <u>HEADING ON</u> (OFF)	ON	タイプ 2 端末でページごとに見出しを表示
SET <u>HIGHLIGHTING ON</u> (OFF, RN)	DEF	ヒットタームをハイライトさせる
SET <u>ICFORMAT ON</u> (OFF)	OFF	国際特許分類を第 8 版形式で表示
SET <u>INTERPRET ON</u> (OFF)	ON	検索時に実際に実行された質問式の表示
SET <u>KWIC=20</u>	20	ヒットタームの前後 20 (0-50) 語の表示
SET <u>LCOST ON</u> (OFF, BRIEF, FULL)	ON	ログオフ時に料金を表示 (しない, 詳細表示, 全ファイルの詳細表示)
SET <u>LHISTORY ON</u> (OFF)	OFF	セッション終了時に検索履歴を表示する設定
SET <u>LINELength 70</u>	80	1 行あたりの文字数 (20-250) を指定
SET <u>LOGIN</u> <オプション>		SET オプションを LOGIN 時のデフォルトに再設定
SET <u>MAILID</u>		STNmail 用電子メール ID の設定
SET <u>MARHIGHLIGHT ON</u> (OFF)	ON	MARPAT ファイルでヒットした構造をハイライト

<u>SET MLEVEL</u> <u>ATOM</u> ( <u>CLASS, ANY</u> )	ATOM	デフォルトのマッチレベルを ATOM (CLASS, ANY) に設定
<u>SET MPTASSEMBLY</u> <u>NEW</u> ( <u>OLD, BOTH</u> )	NEW	QHIT 表示形式で表示する際に、ヒットした部分を組み立てた構造を表示する (しない, 併用する)
<u>SET MSTEPS</u> <u>ON</u> ( <u>OFF</u> )	OFF	マルチファイル検索時に各ファイルの回答セットに L 番号を付与
<u>SET NAMELIST</u> <名称>		STNmail 用送付先リストの設定
<u>SET NOTICE</u> <u>DISPLAY</u> <料金>	11, 800	表示料金の警告表示額の設定
<u>SET NOTICE</u> <u>SEARCH</u> <料金>	118, 000	検索料金の警告表示額の設定
<u>SET PADDING</u> <u>20</u>	0	端末の埋め字の数 (0-25) を指定
<u>SET PAGELENGTH</u> <u>24</u> ( <u>SCROLL</u> )		1 画面の行数 (8-99) (自動スクロール) を指定
<u>SET PASSWORD</u>		パスワードの変更
<u>SET PATENT</u> <u>STN</u> ( <u>DERWENT</u> )	STN	特許の DISPLAY, PRINT, SELECT 時の形式を STN 形式 (ダウエント形式) に設定
<u>SET PLURALS</u> <u>ON</u> ( <u>OFF</u> )	OFF	複数形を自動的に含めて検索
<u>SET POSTINGS</u> <u>ON</u> ( <u>FULL, OFF</u> )	ON	各検索語のヒット数を表示 (表示する, しない)
<u>SET PRINT</u> <u>MULTIPLE</u> ( <u>SINGLE</u> )	MULTI	オフラインプリントの出力方法を複数回答/頁 (1 件/頁) に設定
<u>SET PROXIMITY</u> ( <u>S</u> )	NONE	スペースで代用できる近接演算子を設定
<u>SET RANGE</u> =(1980, )	ALL	検索範囲の指定
<u>SET REGISTRY</u> <u>ON</u> ( <u>OFF</u> )	ON	REG1stRY 機能を利用
<u>SET RELATION</u> <u>ON</u> ( <u>DEFAULT, OFF</u> )	DEF	シソーラスのあるファイルで階層の上下関係を含む (含まない)
<u>SET RENUMBER</u> <u>ON</u> ( <u>OFF</u> )	OFF	途中の L# を削除した場合, 自動的に L1 から順に L 番号を付与し直す (付与し直さない)
<u>SET ROLES</u> <u>TEXT</u> ( <u>CODES, OFF</u> )	TEXT	ロールのコードとテキストを表示 (コードのみ表示, 表示しない)
<u>SET ROUND</u> <u>FILE</u> ( <u>ON, OFF</u> )	FILE	四捨五入機能をデフォルトに設定
<u>SET SELECT</u> <u>CONTINUOUS</u> ( <u>RENUMBER</u> )	CON	SELECT コマンドにより生成される E# を連続して (常に E1 から) 付与
<u>SET SELORDER</u> <u>OCC</u> ( <u>ALP, DOC, PER, %</u> )	OCC	SELECT コマンドにより生成される L# のターム順序をタームの出現数順 (アルファベット順, レコード数順, レコード割合順) に設定
<u>SET SFIELD</u> <u>TI</u> <u>AB</u>	BI	基本索引をカスタマイズ
<u>SET SMARTSELECT</u> <u>OFF</u> ( <u>ON</u> )	OFF	SELECT コマンドで抽出したタームにE#(L#)を付与
<u>SET SPELLINGS</u> <u>ON</u> ( <u>OFF</u> )	OFF	英米綴り違いなどを自動的に含めて検索
<u>SET STATUS</u> <u>ON</u> ( <u>OFF</u> )	ON	構造検索での検索経過の表示
<u>SET STEPS</u> <u>ON</u> ( <u>OFF</u> )	OFF	検索時の各検索語に L# を付与
<u>SET SUBSET</u> =L3	NONE	サブセットの指定
<u>SET TERMSET</u> <u>E#</u> ( <u>L#</u> )	E#	SELECT コマンドで抽出したタームにE#(L#)を付与
<u>SET TLANGUAGE</u> < ISO コード >	ALL	多言語シソーラスの設定
<u>SET TOLERANCE</u> <u>MP</u> = 5		トランス (誤差) の設定
<u>SET UNIT</u> <u>BP</u> = F		単位の設定

\* SET コマンドと同じ行に PERM を入力すると恒久的な設定になる。

## 4. システム制限値

### 4-1 システム制限値一覧

項目	制限値
1 回の検索で入力できる文字数	256 文字
1 回の検索で検索できる文字数	20,000 文字
1 つの質問式に使用できる L 番号	390
1 ファイルあたりのヒット数 (マルチファイルの合計は考慮されない)	800 万件
1 セッションあたりの L 番号および E 番号	999
1 回の PRINT コマンドで注文できる回答数	5,000 件
1 セッションあたりのオフラインプリント注文数	40 回
1 ログイン ID ごとの保存できる回答セット数	200 セット
1 ログイン ID ごとの保存できる質問式	800 セット
1 ログイン ID ごとの保存 (SAVE) できる総回答数	TEMP(一時保存) 100 万件 PERMANENT(恒久保存) 80 万件
1 回のソートで処理できる回答数	50,000 件
1 回で重複文献処理できる回答数	50,000 件
1 回の FOCUS で処理できる回答数	50,000 件
1 回で SELECT できる回答数 (ターム数)	50,000 件 (999 ターム)
1 回で解析 (ANALYZE) できる回答数 (ターム数)	50,000 件 (50,000 ターム)

### 4-2 クロスオーバー検索のシステム制限値

項目	制限値
BIOSIS, CAplus, CA, EMBASE, MEDLINE, USPATFULL, USPAT2 ファイルヘクロスオーバー可能な REGISTRY ファイルの回答件数 (CAS 登録番号)	500,000 件
ADISINSIGHT, ADISNEWS, AGRICOLA, CABA, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, CIN, ENCOMPLIT, ENCOMPLIT2, ENCOMPAT, ENCOMPAT2, GenBank, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, IMSPATENTS, IMSRESEARCH, IPA, LCASREACT, LEMBASE, LMEDLINE, MSDS-OHS, MRCK, NAPRALERT, PIRA, RTECS, TOXCENTER, USAN, USPATOLD ファイルヘクロスオーバー可能な REGISTRY ファイルの回答件数 (CAS 登録番号)	300,000 件
上記以外のファイルヘクロスオーバー可能な REGISTRY ファイルの回答件数 (CAS 登録番号)	10,000 件
CAplus, CA ファイルヘクロスオーバー可能な CASREACT ファイルの回答件数, および CASREACT ファイルヘクロスオーバー可能な CA ファイルの回答件数 (CA 抄録番号)	30,000 件
MARPAT ファイルと CAplus, CA ファイル間におけるクロスオーバー可能な回答件数 (CA 抄録番号)	100,000 件
1 回の TRANSFER でクロスオーバーできるターム数	50,000 ターム

## 5. STN 構造検索コマンド

### 5-1 SEARCH コマンド

#### SEARCH オンライン構造検索

⇒ S L1 部分構造検索, サンプル検索  
 ⇒ S L4 FAM FUL ファミリー検索, フルファイル検索  
 ⇒ S L2 RAN=(76081-80-6,) RANGE 検索  
 ⇒ S L4 SUB=L3 FUL サブセット検索, フルファイル検索  
 ⇒ S L1 AND L2 構造質問式 L1, L2 の演算

### 5-2 構造検索のタイプと範囲

#### 構造検索のタイプ

完全一致検索	EXA	構造質問式に完全に一致する物質を検索する。
ファミリー検索	FAM	(EXA の回答に加えて) 他の成分が含まれていてもよい。
閉構造部分構造検索	CSS	(FAM の回答に加えて) 可変構造質問式を使ってもよい。特定の位置に置換基を含めることができる。
部分構造検索	SSS	(CSS の回答に加えて) 追加の置換基が存在してもよい。

#### 構造検索の範囲

サンプル検索	SAM	ファイルの一部をテスト的に検索
フルファイル検索	FUL	ファイルの全体を検索
RANGE 検索	RAN=(RN, RN)	指定した CAS 登録番号の範囲内を検索
サブセット検索	SUB=L <sub>n</sub>	回答セットの L 番号の中を検索

### 5-3 サンプル検索結果

```

SAMPLE SEARCH INITIATED 21:32:14 ①
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 3311 TO ITERATE ②
100.0% PROCESSED 3311 ITERATIONS 50 ANSWERS ③
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01 ④
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE** ⑤
                        BATCH **COMPLETE** ⑥
PROJECTED ITERATIONS: 62769 TO 69671 ⑦
PROJECTED ANSWERS: 5309 TO 7451 ⑧
L2 50 SEA SSS SAM L1 ⑨
    
```

- ① サンプル検索を始めた時間
- ② スクリーン検索を通過した化合物数
- ③ イタレーション検索した化合物数と回答数
- ④ サンプル検索時間
- ⑤ フルファイル検索の予想 (ONLINE)
- ⑥ フルファイル検索の予想 (BATCH)
- ⑦ フルファイル検索のイタレーション検索対象化合物数の予想
- ⑧ フルファイル検索の回答数の予想
- ⑨ サンプル検索の回答数

重要

### 5-4 BATCH コマンド

#### BATCH バッチ構造検索

⇒ BAT L7 BISRING/B (SSS) (FUL) バッチ構造検索  
 ⇒ BAT L5 STEEL/B FAM RAN=(94061-24-2, ) バッチ構造検索, 範囲指定検索

## 5-5 スクリーン作成コマンド

### SCREEN スクリーン作成

=> SCR 1938 OR 1985

スクリーンコマンドでは、OR、AND のみ使用可

=> SCR 2067 AND 2127

### Graph Modifier スクリーン

番号	内容	頻度			
[構造上の特徴]					
2039	異常質量 - すべての同位体	1.36 %			
2045	重水素	0.71 %			
2046	三重水素およびそれ以上の水素同位体 (4H, 5H など)	0.09 %			
2047	結合位置の不明な同位体	0.08 %			
2041	異常結合価	31.40 %			
2040	すべての電荷	13.95 %			
2042	非局在化している (delocalized) 電荷	0.11 %			
2076	互変異性体 (Tautomer)	29.77 %			
[多成分物質]					
2127	2 成分以上	21.07 %			
2077	3 成分以上	4.09 %			
2078	4 成分以上	1.79 %			
2079	single atom fragment (SAF)	10.46 %			
[クラス識別子コード] (一物質が複数のコードを持つこともある)					
2050	合金	2.11 %			
2049	配位化合物	8.97 %			
2048	定義のあいまいな (Incompletely defined) 化学物質	1.80 %			
2071	構造不明 (分子式のみ)	0.21 %			
2072	結合位置不明	1.29 %			
2073	エステル化位置不明	0.16 %			
2074	水素化位置不明	0.13 %			
2053	手作業登録	3.44 %			
2052	鉱物	0.10 %			
2051	混合物 (名称中に mixt. with がある)	0.26 %			
2043	ポリマー (一般)	4.30 %			
2067	ホモポリマー・コポリマー [(A) <sub>x</sub> , (A,B) <sub>x</sub> , etc.]	3.04 %			
2068	structural repeating units (SRU) で表されるポリマー	1.42 %			
2069	末端基のある SRU [X-(Y) <sub>n</sub> -Z]	0.27 %			
2070	末端基のない SRU [-(Y) <sub>n</sub> -]	1.16 %			
2054	ラジカルイオン	0.20 %			
[その他]					
2082	CASREACT に収録されている物質				
[最小環の数]					
1838	1 環以上	81.21 %	1843	6 環以上	6.53 %
1839	2 環以上	62.14 %	1844	7 環以上	3.66 %
1840	3 環以上	39.69 %	1845	8 環以上	2.65 %
1841	4 環以上	23.04 %	1846	10 環以上	1.31 %
1842	5 環以上	11.71 %	1847	15 環以上	0.19 %

Generic Element Count スクリーン

番号 内容  
1918 金属

頻度  
14.51 %

Element Count スクリーン

元素数 (以上)	C	元素数 (以上)	N	O	S	ハロゲン
1	2110 *1	1	1992 *1	2004 *1,2	2021 *1,2	1929 *3
4	1942	2	1993	2005	2022	1976
6	1943	3	1994	2006	2023	1977
8	1944	4	1995	2007	2024	1978
10	1945	5		2008	2025	1979
12	1946	6	1996	2009		1980
14	1947	7		2010		
16	1948	8	1997	2011		1981
18	1949	10	1998	2012		1982
20	1950	12		2013		
25	1951	14	1999			
30	1952	15		2014		
35	1953	18		2015		
40	1954					

\*1 Single Atom Fragment (SAF) を含む。

\*2 O, S を同時に表わすスクリーンは 2003

\*3 アスタチン (At) を含む。

5-6 構造検索のシステム制限値と回答数に対する制限値

ファイル名	検索範囲		ITERATION 数 または VERIFICATION 数	検索 時間 (分)	回答数
REGISTRY	オンライン検索 サブセット検索	サンプル検索	1,000,000		50
		フルファイル検索	6,000,000		6,000,000
		RANGE 検索	6,000,000		6,000,000
	バッチ検索	フルファイル検索	8,000,000		8,000,000
		RANGE 検索	8,000,000		8,000,000
CASREACT	オンライン検索 サブセット検索	サンプル検索	5,000		50
		フルファイル検索	1,000,000		1,000,000
		RANGE 検索	1,000,000		1,000,000
	バッチ検索	フルファイル検索	1,500,000		1,500,000
		RANGE 検索	1,500,000		1,500,000
MARPAT	オンライン検索 サブセット検索	サンプル検索	2,000	5	50
		フルファイル検索	500,000	30	500,000
		RANGE 検索	500,000	30	500,000
	バッチ検索	フルファイル検索	500,000	360	500,000
		RANGE 検索	500,000	360	500,000

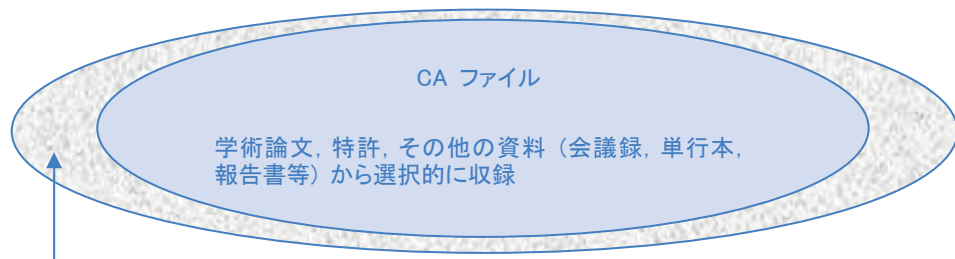
## 6. CAplus/CA ファイル

### 6-1 CAplus/CA ファイルの収録情報

#### CA の収録文献

100 ヶ国以上の約 10,000 種の定期刊行物（科学技術分野の雑誌）の他、世界中の特許、学会会議録、技術レポート、学位論文、単行本を収録。収録源の言語は約 50 種類。

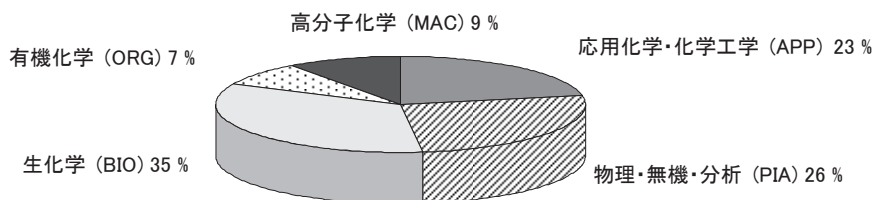
化学および化学工学全分野におよぶ広範囲な科学技術関連の文献を収録。  
主題によって 80 のセクションに分類。



CAplus ファイルの情報：網かけの部分 (A + B)

- A : 主要 1,900 誌の 1994 年 10 月以降の全記事および約 61 の特許発行機関のうち、CA 収録対象外のレコードの書誌情報 (対応特許情報を含む) と英文抄録 (存在する場合) を収録 (索引情報は収録されない)。
- B : CA ファイル収録予定の最新レコードを収録 (索引情報は順次追加され、完成後は CA ファイルにも収録される)。

### 6-2 ファイルセグメント (/FS)



FS	内容
APP BIO MAC ORG PIA	応用化学・化学工学 生化学 高分子化学 有機化学 物理化学・無機化学・分析化学
NONINDEXED *1 NOSECTION *1	CA ファイルに収録されていないレコード CA セクション番号の付与されていないレコード
RLA RLI	CAS ロールをアルゴリズムで付与したレコード CAS ロールを手手で付与したレコード

\*1 CAplus ファイルのみ

- 1) AN 2008:458743 CAPLUS [Full-text](#)  
 2) DN 148:537855  
 3) ED Entered STN: 15 Apr 2008  
 4) TI Diastereoselective Synthesis of Enantiopure Acyclic  
 $\beta, \beta'$ -Disubstituted Vinylsulfoxides  
 TIJP エナンチオ純粋性非環式  $\beta, \beta'$ -二置換-ビニルスルホキシドのジアステレオ  
 選択合成 [機械翻訳]  
 5) AU Brebion, Franck; Goddard, Jean-Philippe; Fensterbank, Louis; Malacria, Max  
 6) CS Laboratoire de Chimie Organique UMR 7611, Institut de Chimie Moleculaire,  
 UPMC- University Paris 06, Paris, 75252, Fr.  
 7) SO Organic Letters (2008), 10(10), 1917-1920  
 CODEN: ORLEF7; ISSN: 1523-7060  
 8) PB American Chemical Society  
 9) DT Journal  
 10) LA English  
 11) CC 25-12 (Benzene, Its Derivatives, and Condensed Benzenoid Compounds)  
 12) OS CASREACT 148:537855  
 13) GI



- 14) AB Thermal elimination of sulfenic acid from enantiopure  $\beta, \beta'$ -disubstituted bis-sulfoxides, e.g. I (R1 = Me2CH, n-Bu, Me3CSiMe2OCH2, Ph, 3-PhOC6H4; R2 = Me, n-Bu; R3 = 4-MeC6H4), allows the stereoselective synthesis of enantiopure acyclic  $\beta, \beta'$ -disubstituted vinylsulfoxides, e.g. II. This mild and stereospecific synthesis provides either (E) or (Z) vinylsulfoxides in high yields and is compatible with acid or base sensitive functional groups.
- 15) ST vinyl sulfoxide acyclic disubstituted stereoselective synthesis; sulfoxide bis stereoselective elimination sulfenic acid
- 16) IT Sulfoxides  
 RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)  
 (chiral; diastereoselective synthesis of acyclic b,b'-disubstituted vinylsulfoxides via elimination of sulfenic acid from
- IT Stereoselective synthesis  
 (diastereoselective synthesis of acyclic b,b'-disubstituted vinylsulfoxides via elimination of sulfenic acid from enantiopure bis(sulfoxide)s)
- IT Elimination reaction  
 (stereoselective; diastereoselective synthesis of acyclic b,b'-disubstituted vinylsulfoxides via elimination of sulfenic acid from enantiopure bis(sulfoxide)s)
- IT Vinyl compounds, preparation  
 RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (sulfoxides; diastereoselective synthesis of acyclic b,b'-disubstituted vinylsulfoxides via elimination of sulfenic acid from enantiopure bis(sulfoxide)s)
- IT Sulfoxides  
 RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (vinyl; diastereoselective synthesis of acyclic b,b'-disubstituted vinylsulfoxides via elimination of sulfenic acid from enantiopure bis(sulfoxide)s)

IT 540-88-5, tert-Butyl acetate 1119-51-3, 5-Bromo-1-pentene 51233-80-8  
59532-34-2 102191-92-4 135510-13-3 443640-85-5 443640-86-6  
443640-88-8 647834-99-9 647835-03-8 647835-04-9 647835-05-0  
647835-09-4 647835-11-8

RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
(diastereoselective synthesis of acyclic b,b'-disubstituted  
vinylsulfoxides via elimination of sulfenic acid from enantiopure  
bis(sulfoxide)s)

IT 647834-94-4P 647835-10-7P 888734-77-8P 1025022-48-3P 1025022-50-7P  
1025022-51-8P 1025022-53-0P 1025022-55-2P 1025022-56-3P  
1025022-57-4P 1025022-62-1P 1025022-64-3P 1025022-74-5P

RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT  
(Reactant or reagent)  
(diastereoselective synthesis of acyclic b,b'-disubstituted  
vinylsulfoxides via elimination of sulfenic acid from enantiopure  
bis(sulfoxide)s)

IT 99930-89-9P 105677-76-7P 1025022-49-4P 1025022-52-9P 1025022-54-1P  
1025022-65-4P 1025022-66-5P 1025022-67-6P 1025022-68-7P  
1025022-69-8P 1025022-70-1P 1025022-71-2P 1025022-72-3P  
1025022-73-4P 1025022-75-6P 1025022-76-7P 1025022-77-8P

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
(diastereoselective synthesis of acyclic b,b'-disubstituted  
vinylsulfoxides via elimination of sulfenic acid from enantiopure  
bis(sulfoxide)s)

- 17) RE.CNT 45 THERE ARE 45 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
18) OSC.G 8 THERE ARE 8 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (8 CITINGS)  
19) UPOS.G Date last citing reference entered STN: 02 Dec 2010  
20) OS.G CAPLUS 2010:1302734; 2010:964724; 2010:964537; 2009:1225535;  
2009:1012107; 2009:247815; 2009:440307; 2008:939328

21) RE

- (1) Alayrac, C; Angew Chem, Int Ed 1997, V36, P371 CAPLUS  
(2) Alonso, I; J Org Chem 2001, V66, P4453 CAPLUS  
(3) Bienayme, H; Tetrahedron Lett 1997, V38, P511 CAPLUS  
(4) Boivin, J; Tetrahedron Lett 1992, V33, P4913 CAPLUS  
(5) Braverman, S; The Chemistry of Sulfones and Sulfoxides, Chapter 14 1988  
(6) Brebion, F; Angew Chem, Int Ed 2003, V42, P5342 CAPLUS  
(7) Brebion, F; Synlett 2006, P713 CAPLUS  
(8) Brebion, F; Synthesis 2005, P2449 CAPLUS  
(9) Brebion, F; Tetrahedron:Asymmetry 2003, V14, P2889 CAPLUS  
(10) Carreno, M; Chem Rev 1995, V95, P1717 CAPLUS  
:  
(39) Trost, B; Chem Rev 1978, V78, P363 CAPLUS  
(40) Trost, B; J Org Chem 1975, V40, P2014 CAPLUS  
(41) Truce, W; J Org Chem 1978, V43, P2252 CAPLUS  
(42) Varghese, J; Org Lett 2000, V2, P2849 CAPLUS  
(43) Xu, Q; Tetrahedron Lett 2004, V45, P2981 CAPLUS  
(44) Xu, Q; Tetrahedron Lett 2004, V45, P5657 CAPLUS  
(45) Zhao, Y; J Am Chem Soc 2005, V127, P14158 CAPLUS

- 1) レコード番号 2) CA 抄録番号 3) 入力日 4) 標題 (TIJP は日本語)  
5) 著者名 6) 所属機関名 7) 収録源 8) 出版社 9) 資料種類  
10) 言語 11) CA セクション, 関連セクション 12) 他の収録源 13) 構造図  
14) 抄録 15) 補足語 16) 索引語 17) 引用文献数 18) 被引用情報数  
19) 被引用文献の更新日 20) 被引用文献の CAplus レコード番号  
21) 引用情報

\* CA ファイルの場合は, 1) の AN に CA 抄録番号が入り, 2) の DN フィールドはない.  
\* TIJP は一部のレコードのみ収録. 日本語が表示できるモードでのアクセスが必須.

1) AN 2008:224479 CAPLUS [Full-text](#)  
 2) DN 148:262770  
 3) ED Entered STN: 22 Feb 2008  
 4) TI Tocopherol modified therapeutic drug compounds  
 TIJP トコフェロール変性治療薬物 [機械翻訳]  
 5) IN Zhang, Yuehua; Gold, Lynn C.  
 6) PA Sonus Pharmaceuticals, Inc., USA  
 7) SO U. S. Pat. Appl. Publ., 67pp., Cont.-in-part of U. S. Ser. Number 450, 795.  
 CODEN: USXXCO

8) DT Patent  
 9) LA English  
 10) CC 30-20 (Terpenes and Terpenoids)  
 Section cross-reference(s): 1, 26, 31, 63

11) FAN. CNT 2

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
12) PI	US 20080045559	A1	20080221	US 2007-843568 US 2003-515364P	20070822 P 20031029
	EP 1682552	A1	20060726	EP 2004-817489	20041029
	R: AT, BE, CH, DE, DK, ES, FR, GB, GR, IT, LI, LU, NL, SE, MC, PT, IE, SI, FI, RO, CY, TR, BG, CZ, EE, HU, PL, SK				
	JP 2007509978	T	20070419	JP 2006-538354 US 2003-515364P	2004102 P 20031029

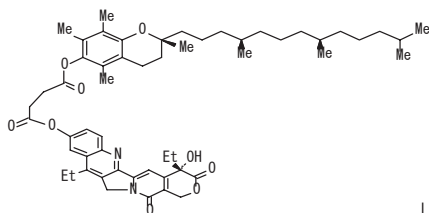
13) PATENT FAMILY INFORMATION:

FAN	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
2005:394830					
PI	US 20050096340 US 7223770	A1 B2	20050505 20070529	US 2004-978222 US 2003-515364P	20041029 P 20031029

14) CLASS

PATENT NO.	CLASS	PATENT FAMILY CLASSIFICATION CODES
US 20080045559	INCL IPCI	514283000; 514458000; 546048000; 549408000 A61K0031-355 [I, A]; A61K0031-437 [I, A]; A61P0035-00 [I, A]; C07D0311-72 [I, A]; C07D0471-22 [I, A]
	NCL	514/283.000; 514/458.000; 546/048.000; 549/408.000
	ECLA	A61K047/48H4M8; A61K009/107D
EP 1682552	IPCI	C07D0491-00 [I, C]; C07D0491-22 [I, A]; A61K0009-107
	IPCR	C07D0491-00 [I, C]; C07D0491-22 [I, A]; A61K0009-107
	ECLA	A61K009/107D; A61K031/337; A61K031/355; A61K031/4745;
JP 2007509978	IPCI	C07D0311-72 [I, A]; C07D0491-22 [I, A]; A61K0031-437
	IPCR	C07D0311-00 [I, C]; C07D0311-72 [I, A]; A61K0009-107
	ECLA	A61K009/107D; A61K031/337; A61K031/355; A61K031/4745;
	FTERM	4C050/AA01; 4C050/AA07; 4C050/BB04; 4C050/CC07; 4C050/DD02; 4C050/EE02; 4C050/FF02; 4C050/GG03;

15) OS CASREACT 148:262770; MARPAT 148:262770  
 16) GI



17) AB Tocopherol-modified therapeutic drug compds., T-O-C(:O)-R-C(:O)-O-D 1 [D = drug, e.g., paclitaxel, docetaxel, camptothecin; R = divalent linker, such as, (un)substituted alkylene, cycloalkylene, arylene; (CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>, CH<sub>2</sub>CHMeCH<sub>2</sub>, C(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>, 1,3-, 1-4-phenylene, 1,2-, 1,3-, 1-4-cycloalkylene; m = 2 - 6];

18) ST tocopherol deriv prepn therapeutic drug formulation

19) IT Pharmaceutical solutions

(aqueous; tocopherol modified therapeutic drug compds.)

IT Drug delivery systems

(lipophilic; tocopherol modified therapeutic drug compds.)

IT 850655-04-8P, d- $\alpha$ -Tocopherol succinyl hexa(ethylene glycol) succinic acid

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

(preparation and coupling of, with camptothecin; tocopherol modified therapeutic drug compds.)

IT 850655-10-6P, d- $\alpha$ -Tocopherol terephthalate camptothecin

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

(preparation and coupling of, with; tocopherol modified therapeutic drug compds.)

20) OSC.G 1 THERE ARE 1 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (1 CITINGS)

21) UPOS.G Date last citing reference entered STN: 23 Jul 2010

22) OS.G CAPLUS 2010:643323

23) ASSIGNMENT HISTORY FOR US 20080045559

LSUS RAD: 20071105

RAUP: 20080221

RAK: ASSIGNMENT OF ASSIGNORS INTEREST (SEE DOCUMENT FOR DETAILS).

PAO: ZHANG, YUEHUA (DATE EXECUTED: 20070917)

GOLD, LYNN C. (DATE EXECUTED: 20070917)

RAC: SONUS PHARMACEUTICALS, INC., 22026 20TH AVENUE SE, BOTHELL, WASHINGTON 98021, UNITED STATES

RAA: GEORGE E. RENZONI, PH. D., CHRISTENSEN O'CONNOR JOHNSON KINDNESS, 1420 FIFTH AVENUE, SUITE 2800, SEATTLE, WA 98101

MRN: 20068 MFN: 875 (3 Page(s))

- |                       |            |                          |                   |
|-----------------------|------------|--------------------------|-------------------|
| 1) レコード番号             | 2) CA 抄録番号 | 3) 入力日                   | 4) 標題 (TIJP は日本語) |
| 5) 発明者名               | 6) 特許出願人名  | 7) 収録源                   | 8) 資料種類           |
| 9) 言語                 |            |                          |                   |
| 10) CA セクション, 関連セクション |            | 11) 関連特許ファミリーレコード数       | 12) 特許ファミリー情報     |
| 13) 関連特許ファミリー情報       |            | 14) 特許分類                 | 15) 他の収録源         |
| 16) 構造図               | 17) 抄録     | 18) 補足語                  | 19) 索引語           |
| 20) 被引用文献の更新日         |            | 21) 被引用文献の CAplus レコード番号 |                   |
| 22) 米国特許譲渡情報          |            |                          |                   |

\* CA ファイルの場合は, 1) の AN に CA 抄録番号が入り, 2) の DN フィールドはない.

\* TIJP は一部のレコードのみ収録. 日本語が表示できるモードでのアクセスが必須.

\* 特許情報の詳細は, 講習会で紹介しています.

コード	名称	索引単位	検索例
<b>キーワード</b>			
無し (/BI) *1	基本索引 (標題, 抄録, 補足語, 索引語)	単語	S 100-97-0 (S) ANAL? S ELECTRODE (W) ?EFFECT?
/AB *1	抄録	単語	S LD50#/AB
/CT *2	統制語 (フレーズ)	句	S LAMBDA POINT/CT
/CW	統制語 (単語)	単語	S LAMBDA/CW
/IT *1	索引語	単語	S 50-00-0 (S) EFFECT#/IT
/OBI	標題, 補足語, 索引語	単語	S FUEL CELL#/OBI
/RL *2	ルール	句	S L1/SPN
/ST	補足語	単語	S STEREOSELECT?/ST
/TI	標題	単語	S (SOLAR (W) CELL)/TI
<b>セクション, 入力日など</b>			
/CC *2	CA セクション番号 - セクション名	句 単語	S 4-13/CC S ORGANIC/CC
/SCN	CA セクション名	単語・句	S MAMMALIAN HORMONES/SCN
/SX	関連セクション番号 - セクション名	句 単語	S 17/SX S TEXTILES/SX
/FA	フィールドの存在	句	S ABS/FA
/FS	ファイルセグメント	句	S B10/FS
/ED	入力日	数値	S ED>=19980326
/UP	更新日	数値	S 19990919/UP
/UPI *5	更新日, CA 抄録番号および索引	数値	S 19990919/UPI
/UPIT	更新日, 特定の化学物質に関する 索引情報の追加	数値	S 20100101=<UPIT
/UPP	特許ファミリーの更新日	数値	S UPP>=20001020
/UPM	UP + UPP + UPIT	数値	S UPM>20090101
<b>書誌情報</b>			
/AN	レコード番号	句	S 1996:100563/AN *3 S 124:184764/AN *4
/AU	著者名	句	S YANOV E?/AU
/CO *2	会社名	句	S DOW CHEMICAL CO/CO
/CS	所属機関名	単語・句	S "DU PONT"?/CS
/CYA	著者所属国	句	S JAPAN/CYA
/DN *5	CA 抄録番号	句	S 102:199347/DN
/DT	資料種類	句	S JOURNAL/DT
/IS	号数	数値	S 19/IS
/ISN	CODEN, ISSN, ISBN	句	S JBCHA3/ISN
/JT	資料名	句	S J BIOL CHEM/JT S CHEMISTRY LETTERS/JT
/LA	言語 (コード, テキスト)	句	S JAPAN/LA
/OREF	CA カラム番号	句	S 57:12300A/OREF
/OS	その他の収録源	句	S CASREACT/OS
/PB	出版社	単語・句	S ELSEVIER/PB
/PD	発行日	数値	S PD>19980901
/PY	発行年	数値	S 1992-1993/PY
/PUI	発行者識別コード	句	S "S 0014-5793 (96) "?/PUI
/SO	収録源 (雑誌, 特許)	単語	S (BIOL AND CHEM)/SO
/VI	CA の巻数および号数	句	S 100-11/VI
/VL	出版物の巻数	数値	S 269/VL

\*1 後方一致, 中間一致検索可能.

\*2 シソーラス機能あり.

\*3 CAplus ファイルのレコード番号.

コード	名称	索引単位	検索例
<b>特許情報</b>			
/IN (/AU)	発明者	句	S IKEMOTO T?/IN
/PA (/CS)	特許出願人	単語・句	S "DU PONT"?/PA
/FAN	関連特許ファミリーのレコード番号	句	S 1998:479561/FAN
/FAN. CNT	関連特許ファミリーのレコード数	数値	S 2<=FAN. CNT
/CYC	特許国数	数値	S 2-10/CYC
/PNC	特許番号数	数値	S 2<=PNC
/DS (/DS. B)	指定国	句	S FR/DS AND EP/PC
/PC (/PC. B)	特許発行国	句	S WO/PC
/PD (/PD. B)	特許発行日	数値	S PD>19940301
/PK (/PK. B)	特許種別コード	句	S DEA1/PK
/PN (/PN. B)	特許番号	句	S DE3327118/PN
/PNK (/PNK. B)	種別付き特許番号	句	S DE3327118#/PNK
/PY (/PY. B)	特許発行年	数値	S 1992-1993/PY
/AC (/AC. B)	特許出願国	句	S DE/AC
/AD (/AD. B)	特許出願日	数値	S AD>19880400
/AP (/AP. B)	特許出願番号	句	S DE1986-3619339/AP
/AY (/AY. B)	特許出願年	数値	S 1987-1988/AY
/PRC (/PRC. B)	優先権主張国	句	S US/PRC
/PRD (/PRD. B)	優先権主張日	数値	S PRD>20010601
/PRN (/PRN. B)	優先権出願番号	句	S JP1985-186513/PRN
/PRY (/PRY. B)	優先権主張年	数値	S 1990-1991/PRY
/IPC	国際特許分類, 全 IPC	句	S A61K0031-473/IPC
/IPC1	国際特許分類, 発行時の分類	句	S H01L0023-29/IPC1
/IPCR	国際特許分類, 再分類	句	S C08L0061-00/IPCR
/ECLA	ヨーロッパ特許分類 (ECLA コード)	句	S A01C001/06/ECLA
/FTERM	日本特許分類 (F ターム)	句	S 4C077/AA05/FTERM
/NCL	米国特許分類	句	S 106001000/NCL
/INCL	発行時の米国特許分類	句	S 433228000/INCL
/NCLR	米国特許分類, 範囲検索用	数値	S 106020000-106040000/NCLR
<b>引用文献情報</b>			
/FILE. CIT	引用文献の存在	句	S L1 AND CAPLUS/FILE. CIT
/RAN. CA	引用文献の CA レコード番号	句	S 102:199347/RAN. CA
/RAN. CAPLUS	引用文献の CAplus レコード番号	句	S 1995:998201/RAN. CAPLUS
/RAN. MED	引用文献の MEDLINE レコード番号	句	S 96233652/RAN. MED
/RAU	引用文献著者名	句	S O REILLY/RAU
/RE	引用文献情報	句	S BLONDELLE S, 1999?/RE
/RE. CNT (/REC)	引用文献数	数値	S 1-20/RE. CNT
/RIS	引用文献号数	句	S (2 OR 3)/RIS
/RPC	引用特許発行国	句	S DE/RPC
/RPG	引用文献の開始ページ番号	句	S 200/RPG
/RPK	引用特許種別コード	句	S DEA1/RPK
/RPN	引用特許番号	句	S US5792845/RPN
/RPY	引用文献発行年	数値	S 1997-1998/RPY
/RVL	引用文献巻数	句	S (3 OR 4)/RVL
/RWK	引用情報名 (雑誌名)	句	S CANCER RES/RWK
<b>被引用文献情報</b>			
/OS. G	被引用文献の CAplus レコード番号	句	S 2008:610804/OS. G
/OSC. G	被引用文献数	数値	S L1 AND 2-5/OSC. G
/UPOS. G	被引用文献の更新日	数値	S L1 AND 20091016<=UPOS. G

\*4 CA ファイルのレコード番号. (CA 抄録番号)

\*5 CAplus ファイルのみ.

注). B 付きのフィールドはベーシック特許に限定した検索フィールド.

## スーパー検索フィールド

コード	内容	検索例
/APPS	出願番号グループ (AP, PRN)	S 1989GB-21964/APPS
/APPS. B	出願番号グループ : ベーシック特許 (AP.B, PRN.B)	S GB1989-21964/APPS. B
/PATS	特許番号グループ (PN)	S GB2223255/PATS
/PATS. B	特許番号グループ : ベーシック特許 (PN.B)	S EP100323/PATS. B
/PCS	特許発行国の包括的検索 (PC, DS)	S ES/PCS
/PCS. B	特許発行国の包括的検索 : ベーシック特許 (PC.B, DS.B)	S SPAIN/PCS. B

(注) .B 付きのフィールドはベーシック特許に限定した検索フィールド

## 6-6 近接演算子 (CAplus/CA ファイル)

基本索引における (S), (P), (L) 演算子の機能

フィールド	演算子	(S) 演算子	(P) 演算子 (L) 演算子
標題 (TI)		全体	全体
抄録 (AB)		同一センテンス	全体
補足語 (ST)		同一補足語	全体
索引語 (IT)		同一索引項目	同一索引項目

特許情報フィールドにおける (S), (P), (L) 演算子の機能

AN 2000:150514 CAPLUS [Full Text](#)

DN 132:195527

TI Photocurable compositions, photocurable adhesive sheets, their manufacture, and adhesion method

IN Fukui, Hiroshi

PA Sekisui Chemical Co. Ltd., Japan

LA Japanese

FAN. CNT 1

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
-----		-----	-----	-----

PI	JP 2000072854	A2	20000307	JP 1998-243215	19980828	(S)
	JP 3739211	B2	20060125			(P)

(L)

WO 2000012585	A1	20000309	WO 1999-JP4254	19990805	(S)
W: AU, CA, CN, ID, IN, KR, MX, NZ, US, ZA					
RW: AT, BE, CH, CY, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE					

(L)

AND

PRAI	JP 1998-243215	A	19980828	(S)
	WO 1999-JP4254	W	19990805	(S)

\*          (S) 演算子 : 同一公報内, あるいは同一出願情報内を演算  
ただし, 特許発行国と特許発行年 (日) をリンクする場合は  
(P) 演算子を使用する。

\*          (P) 演算子 : 同一の出願番号を持つ公報同士を演算

\*          (L) 演算子 : 同一の出願番号を持つ公報番号, 出願番号, 指定国などを演算

(注) ベーシック特許情報に関するフィールド同士 (/PC. B, /PY. B など) を演算する際は (S) 演算子を使用できないので, (P) または (L) を使用する。

## 6-7 主な略語

略語	もとの単語	略語	もとの単語
alc	alcohol, alcoholic	liq	liquid
alk	alkaline	manuf	manufacture
aliph	aliphatic	metab	metabolism
anal	analysis, analytical (ly)	mixt	mixture
arom	aromatic	mol	molecular, molecule
atm	atmosphere, atmospheric	org	organic
chem	chemistry, chemical	oxidn	oxidation
cryst	crystalline	phys	physical (ly)
crystn	crystallization	polymn	polymerization
decompn	decomposition	prepn	preparation
degrdn	degradation	prodn	production
detn	determination	purifn	purification
distn	distillation	redn	reduction
elec	electric, electrical (ly)	sepn	separation
fermn	fermentation	soln	solution
inorg	inorganic	-og	-ography, -ographic(al) (ly)
irradn	irradiation	-ol	-ology, -ological (ly)

\* SET ABBREVIATION ON と指定すれば CA の略語を自動的に検索できる。

## 6-8 合成 (/P), 非特定誘導体 (/D) に関する文献

使用例 *1	内容	得られる回答
S L1	すべての文献の検索	50-00-0, 50-00-0P 50-00-0D, 50-00-0DP
S L1/P	合成文献の検索	50-00-0P 50-00-0DP
S L1/D	非特定誘導体 *2 の文献検索	50-00-0D 50-00-0DP
S L1/RN	非特定誘導体 *2 のみ索引された文献を除く検索	50-00-0 50-00-0P

\*1 L1 は REGISTRY ファイルの回答セットの L 番号. (=> S 50-00-0 の検索結果の L 番号)

\*2 構造や分子式を特定できない誘導体.

## 6-9 CAS ロール (化合物や化合物クラスの文献中での役割の特定)

ロールの指定方法 (L1 は REGISTRY ファイルの回答セットの L 番号)

特定化学物質 (CAS 登録番号)	S L1/THU S L1/THU OR L1/ADV * S L1 (L) ANST/RL S L1 (L) (THU OR ADV)/RL * S 50-00-0 (L) ANST/RL
化合物クラス用語 (IT フィールドの見出し語 - 統制語)	S PHENOLS/POL S CARBOXYLIC ACIDS/CAT, RCT S FULLERENES/CT (L) (USES OR PROC)/RL

\* => S L1/THU,ADV では検索できない.

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

コード	英語名	定義	備考
PREP	Preparation	製造	1907-
BMF	Bioindustrial Manufacture	生化学的工業生産	2002-
BPN	Biosynthetic Preparation	生化学的合成	
BYP	Byproduct	副生成物	
CPN	Combinatorial Preparation	コンビナトリアル・ケミストリーによる合成	
IMF	Industrial Manufacture	化学的工業生産	
PUR	Purification or Recovery	精製	
SPN	Synthetic Preparation	化学合成	
PNU	Preparation, Unclassified	上記以外の製造	-2006
PROC	Process	プロセス	
PEP	Physical, Engineering or Chemical Process	物理的, 工学的, または化学的プロセス	2002-
BCP	Biochemical Process	生化学的プロセス	
GPR	Geological or Astronomical Process	地質学的, 天文学的プロセス	
REM	Removal or Disposal	除去または処分	-2001
BPR	Biological Process	生物学的プロセス	
CPS	Chemical Process (PEP も同時に付与)	化学的プロセス	
EPR	Engineering Process (PEP も同時に付与)	工学的プロセス	
PYP	Physical Process (PEP も同時に付与)	物理的プロセス	
PRPH	Prophetic Substance	Prophetic 物質	1998-
RACT	Reactant or Reagent	反応物または試薬	
RCT	Reactant	反応物	2002-
GRT	Combinatorial Reactant (RCT も同時に付与)	コンビナトリアル・ケミストリーでの反応物	
RGT	Reagent	試薬	2002-
CRG	Combinatorial Reagent (RGT も同時に付与)	コンビナトリアル・ケミストリーでの試薬	2002-
USES	Uses	用途	
AGR	Agricultural Use	農業関連用途	2002- 2002- 2002-
ARG	Analytical Reagent Use	分析試薬用途	
CAT	Catalyst Use	触媒用途	
COS	Cosmetic Use	化粧品用途	
CUS	Combinatorial Use	コンビナトリアル・ケミストリーでの用途	
DGN	Diagnostic Use	診断用途	
FFD	Food or Feed Use	食品または飼料用途	
MOA	Modifier or Additive Use	改良剤または添加物用途	
POF	Polymer in Formulation	ポリマー組成物	
TEM	Technical or Engineered Material Use	工学・工業材料用途	
THU	Therapeutic Use	医薬用途	
BUU	Biological Use, Unclassified	上記以外の生物学的用途	
NUU	Other Use, Unclassified	上記以外の用途	
DEV	Device Component Use	素子や装置の成分としての用途	-2006
PRP	Properties	物性	
MSC	Miscellaneous	その他	

\* 4 文字コード (網がけされているコード) は, スーパーロール.

\* CAS 登録番号に対するロール PREP は接尾辞 P と同じ.

## 6-11 資料種類 (/DT)

ファイル	英語名	内容
CA	BOOK (B)	単行本
	COMPUTER MAGNETIC DISK	コンピュータ磁気ディスク
	COMPUTER OPTICAL DISK	コンピュータ光学ディスク
	CONFERENCE (C)	学会会議録
	DISSERTATION (D)	学位論文
	GENERAL REVIEW (GR, REVIEW)	総説
	JOURNAL (J)	雑誌
	MICROFICHE	マイクロフィッシュ
	MULTIMEDIA	マルチメディア
	ONLINE COMPUTER FILE	オンラインコンピュータファイル
	PATENT (P)	特許
PREPRINT (N)	電子出版	
REPORT (R, T)	技術レポート	
CAplus	BIOGRAPHY (BIO)	人事, 授賞関連ニュース等
	BOOK REVIEW (BR)	書評
	EDITORIAL (ED)	論説
	ERRATA (ER)	訂正記事
	LETTER (LE)	レター
	MEETING ABSTRACT (MTA)	会議抄録集
	MISCELLANEOUS (MI)	その他
	NEWS ANNOUNCEMENT (NA)	ニュース
PRODUCT REVIEW (RP)	製品紹介	

注) NONPATENT/DT で すべての非特許文献をまとめて検索できる。

## 6-12 CA Lexicon で利用できる主な関係コード

関係コード	内容
MAX	すべての関係語
ALL	LT を除くすべての関係語
BT	上位語
EN *	日本語タームに対応する英語
HIE	階層関係語 (すべての上位語と下位語)
HN	ヒストリーノート (HNTE)
JP *	英語タームに対応する日本語
KT	キーワードターム (キーワードを含む語)
LT	リンク語 (索引見出しに対する修飾語)
NEW	新用語 (旧用語から変更された語)
NOTE	注記
NT	下位語
OLD	旧用語 (新用語に変更された語)
PFT	優先語と非優先語 (SELF, OLD, NEW, USE, UF)
RT	関連語 (SELF, RT, RTCS)
RTCS	関連化学物質名
STD	標準用語 (SELF, BT, HN, NOTE, NT, RT, RTCS)
UF	非優先語
USE	優先語

\* CA Lexicon 日本語検索補助機能利用時のみ。

使用例	内容
E RADIOLYSIS+ALL/CT	RADIOLYSIS *1 のリンク語 (LT) 以外のすべての関係語を表示
E RADIOLYSIS+RT/CT	RADIOLYSIS *1 の関連語を表示
E RADIOLYSIS+PFT/CT	RADIOLYSIS *1 の優先語・非優先語を表示 *2
S RADIOLYSIS+PFT, NT/CT	RADIOLYSIS *1 の優先語・非優先語と下位語を含めて検索 *2

\*1 RADIOLYSIS は現在の統制語.

\*2 旧優先語も含む.

## &lt;使用例 : CA Lexicon 日本語検索補助機能&gt;

=&gt; E カイコ/CT 5

E#	FREQUENCY	AT	TERM
E1	0	1	カイアントウガラシ/CTJP
E2	0	1	カイガンショウ (和名)/CTJP
E3	0	1 -->	カイコ/CTJP
E4	0	1	カイコ多核体病ウイルス/CTJP

:

=&gt; E E3+ALL

E1	0	-->	カイコ/CTJP
E2	4672	EN	Bombyx mori/CTJP
E3	4704	EN	Silkworm/CTJP

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

=&gt; E E2+ALL

E1	940	BT8	Organisms/CTJP
E2	7968	BT7	Eukaryota/CTJP
E3		JP	真核生物/CTJP
E4	870	BT6	Metazoa/CTJP
E5		JP	後生動物亜界/CTJP
E6	1061	BT5	Arthropoda/CTJP
E7		JP	節足動物門/CTJP
E8	8826	BT4	Insecta/CTJP
E9		JP	昆虫綱/CTJP
E10	1751	BT3	Lepidoptera/CTJP
E11		JP	チョウ目/CTJP
E12		JP	鱗翅目/CTJP
E13	25	BT2	Bombycidae/CTJP
E14	157	BT1	Bombyx (insect)/CTJP
E15	4672	-->	Bombyx mori/CTJP
E16		JP	カイコ/CTJP
		HNTE	Valid heading during volume 1 (1907) to present.
		NOTE	This heading is used for the insect com monly known as silkworm.
E17	4704	OLD	Silkworm/CTJP
E18		JP	カイコ/CTJP
E19		UF	Bombycis Morii/CTJP
E20		UF	CanSha/CTJP
E21		UF	Sericaria mori/CTJP
E22		UF	Sericulture/CTJP
E23		UF	Silkmoth/CTJP

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

<b>BIOCHEMISTRY (BIO/FS) 生化学</b>	
1. Pharmacology	薬理学
2. Mammalian Hormones	哺乳動物ホルモン
3. Biochemical Genetics	生化学的遺伝学
4. Toxicology	毒物学
5. Agrochemical Bioregulators	農芸化学的生物調節剤
6. General Biochemistry	生化学一般
7. Enzymes	酵素
8. Radiation Biochemistry	放射線生化学
9. Biochemical Methods	生化学の方法
10. Microbial, Algal, and Fungal Biochemistry	微生物生化学
11. Plant Biochemistry	植物生化学
12. Nonmammalian Biochemistry	非哺乳類生化学
13. Mammalian Biochemistry	哺乳類生化学
14. Mammalian Pathological Biochemistry	哺乳類病理生化学
15. Immunochemistry	免疫化学
16. Fermentation and Bioindustrial Biochemistry	発酵, 工業生物化学
17. Food and Feed Chemistry	食品, 飼料化学
18. Animal Nutrition	動物栄養学
19. Fertilizers, Soils, and Plant Nutrition	肥料, 土壌, 植物栄養学
20. History, Education, and Documentation	歴史, 教育, ドキュメンテーション
<b>ORGANIC (ORG/FS) 有機化学</b>	
21. General Organic Chemistry	有機化学一般
22. Physical Organic Chemistry	物理有機化学
23. Aliphatic Compounds	脂肪族化合物
24. Alicyclic Compounds	脂環式化合物
25. Benzene, Its Derivatives, and Condensed Benzenoid Compounds	ベンゼン, ベンゼン誘導体, 縮合ベンゼノイド化合物
26. Biomolecules and Their Synthetic Analogs	生体分子, 合成類似体
27. Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom)	複素環化合物 (ヘテロ原子 1 個)
28. Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom)	複素環化合物 (ヘテロ原子 2 個以上)
29. Organometallic and Organometalloidal Compounds	有機金属, 有機メタロイド化合物
30. Terpenes and Terpenoids	テルペン, テルペノイド
31. Alkaloids	アルカロイド
32. Steroids	ステロイド
33. Carbohydrates	炭水化物
34. Amino Acids, Peptides, and Proteins	アミノ酸, ペプチド, タンパク質
<b>MACROMOLECULAR (MAC/FS) 高分子化学</b>	
35. Chemistry of Synthetic High Polymers	合成高分子の化学
36. Physical Properties of Synthetic High Polymers	合成高分子の物理的性質
37. Plastics Manufacture and Processing	プラスチックの製造, 加工
38. Plastics Fabrication and Uses	プラスチックの成形, 用途
39. Synthetic Elastomers and Natural Rubber	合成エラストマー, 天然ゴム
40. Textiles and Fibers	織物, 繊維
41. Dyes, Organic Pigments, Fluorescent Brighteners, and Photographic Sensitizers	染料, 有機顔料, 蛍光増白剤, 写真用増感剤
42. Coatings, Inks, and Related Products	塗料, インク, 関連製品

43. Cellulose, Lignin, Paper, and Other Wood Products	セルロース, リグニン, 紙, その他木材製品
44. Industrial Carbohydrates	工業炭水化物
45. Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats, and Waxes	工業有機化学製品, 皮革, 脂肪, ろう
46. Surface-Active Agents and Detergents	界面活性剤, 洗淨剤
<b>APPLIED (APP/FS) 応用化学</b>	
47. Apparatus and Plant Equipment	装置, 工場設備
48. Unit Operations and Processes	単位操作, プロセス
49. Industrial Inorganic Chemicals	工業無機化学製品
50. Propellants and Explosives	推進薬, 爆薬
51. Fossil Fuels, Derivatives, and Related Products	化石燃料, 誘導製品, 関連製品
52. Electrochemical, Radiational, and Thermal Energy Technology	電気化学的, 放射および熱エネルギー工学
53. Mineralogical and Geological Chemistry	鉱物, 地質化学
54. Extractive Metallurgy	抽出冶金学
55. Ferrous Metals and Alloys	鉄, 鉄合金
56. Nonferrous Metals and Alloys	非鉄金属, 合金
57. Ceramics	セラミックス
58. Cement, concrete, and Related Building Materials	セメント, コンクリート, 関連建築材料
59. Air Pollution and Industrial Hygiene	大気汚染, 産業衛生
60. Waste Treatment and Disposal	廃棄物処理, 処分
61. Water	水
62. Essential Oils and Cosmetics	精油, 化粧品
63. Pharmaceuticals	薬剤
64. Pharmaceutical Analysis	薬剤分析
<b>PHYSICAL, INORGANIC, AND ANALYTICAL (PIA/FS) 物理, 無機, 分析化学</b>	
65. General Physical Chemistry	物理化学一般
66. Surface Chemistry and Colloids	界面化学, コロイド
67. Catalysis, Reaction Kinetics, and Inorganic Reaction Mechanisms	触媒化学, 反応速度論, 無機反応機構
68. Phase Equilibriums, Chemical Equilibriums, and Solutions	相平衡, 化学平衡, 溶液
69. Thermodynamics, Thermochemistry, and Thermal Properties	熱力学, 熱化学, 熱的性質
70. Nuclear Phenomena	原子核現象
71. Nuclear Technology	原子力工学
72. Electrochemistry	電気化学
73. Optical, Electron, and Mass Spectroscopy and Other Related Properties	光, 電子, 質量分光學, その他の関連する性質
74. Radiation Chemistry, Photochemistry, and Photographic and Other Reprographic Processes	放射線化学, 光化学, 写真, その他の複写プロセス
75. Crystallography and Liquid Crystals	結晶学, 液晶
76. Electric Phenomena	電氣的現象
77. Magnetic Phenomena	磁氣的現象
78. Inorganic Chemicals and Reactions	無機化学物質, 反応
79. Inorganic Analytical Chemistry	無機分析化学
80. Organic Analytical Chemistry	有機分析化学

表示形式	表示内容
CAN	CA 抄録番号 (AN)
BIB (デフォルト)	AN, 書誌情報 (対応特許情報を含む), RE.CNT
CBIB	BIB の圧縮型 (ベーシック特許情報のみ) (RE.CNT を除く)
IBIB <sup>*1</sup>	BIB のインデント形式
FBIB	BIB, FAM
STD	BIB, CLASS
ISTD <sup>*1</sup>	STD のインデント形式
ABS	抄録中の構造図 <sup>*2</sup> , 抄録
IABS <sup>*1</sup>	ABS のインデント形式
IND	索引情報 (IPC, NCL, INCL, CC, ST, IT, RL)
ALL	STD, ABS, IND, 全引用情報, OSC.G, UPOS.G
IALL <sup>*1</sup>	ALL のインデント形式
DALL <sup>*3</sup>	ALL のデリミタ形式
MAX	ALL, FAM
IMAX <sup>*1</sup>	MAX のインデント形式
DMAX <sup>*3</sup>	MAX のデリミタ形式
CLASS	特許分類 (IPC, NCL, ECLA, FTERM)
IPC.TAB	国際特許分類の詳細情報 (表形式)
LSUS	米国譲渡特許情報
RE (無料)	全引用情報
RETABLE (無料)	全引用情報 (表形式)
OSG (無料)	被引用情報 (OSC.G, UPOS.G, OS.G (最大 50 個までのレコード番号))
OSG.MAX (無料)	被引用情報 (OSC.G, UPOS.G, OS.G (最大 1,020 個までのレコード番号))
OS.GMAX (無料)	被引用情報 (OS.G (最大 1,020 個までのレコード番号))
PAGE	冊子体 CA のページイメージ (1907-1998)
SAM	標題, 日本語標題 <sup>*4</sup> , 索引情報
SCAN (無料)	SAM と同じ (回答番号指定不可)
HIT	ヒットした検索語を含むフィールド, または IT 項目
HITIND	IPC, CA セクション, ヒットした検索語を含む IT 項目
HITRN	ヒットした CAS 登録番号, そのロールとテキスト説明句
HITSTR	HITRN, CA 索引名, 構造図
FHITSTR	ヒットした最初の CAS 登録番号の HITSTR
HITSEQ	HITSTR, SEQ (配列の 1 文字コード)
FHITSEQ	ヒットした最初の CAS 登録番号の HITSEQ
KWIC	ヒットした検索語の前後 20 語を表示
OCC (無料)	ヒットタームの出現頻度をフィールドごとに表示

\*1 インデント形式とは、完全なフィールド名が表示される形式。

\*2 グラフィック機能付き通信ソフトを使用時、および STN on the Web でオンライン表示可能。

\*3 ダウンロードしたデータの処理を容易にするために、各フィールドおよびサブフィールドのデータ間に記号 | を付与した表示形式。

\*4 日本語標題 (TIJP) は日本語が表示できるモードでアクセスした時のみ表示可能。

注) 表示形式の複数指定および各フィールドコードも指定可能。

6-16 CAplus/CA ファイルの発行年、巻、累積索引期間の対応表

累積索引期間	巻	年
1DI	V1	1907
	V2	1908
	V3	1909
	V4	1910
	V5	1911
	V6	1912
	V7	1913
	V8	1914
	V9	1915
	V10	1916
2DI	V11	1917
	V12	1918
	V13	1919
	V14	1920
	V15	1921
	V16	1922
	V17	1923
	V18	1924
	V19	1925
	V20	1926
3DI	V21	1927
	V22	1928
	V23	1929
	V24	1930
	V25	1931
	V26	1932
	V27	1933
	V28	1934
	V29	1935
	V30	1936
4DI	V31	1937
	V32	1938
	V33	1939
	V34	1940
	V35	1941
	V36	1942
	V37	1943
	V38	1944
	V39	1945
	V40	1946
5DI	V41	1947
	V42	1948
	V43	1949
	V44	1950
	V45	1951
	V46	1952
	V47	1953
	V48	1954
	V49	1955
	V50	1956

累積索引期間	巻	年
6CI	V51	1957
	V52	1958
	V53	1959
	V54	1960
	V55	1961
7CI	V56, V57	1962
	V58, V59	1963
	V60, V61	1964
	V62, V63	1965
	V64, V65	1966
8CI	V66, V67	1967
	V68, V69	1968
	V70, V71	1969
	V72, V73	1970
	V74, V75	1971
9CI	V76, V77	1972
	V78, V79	1973
	V80, V81	1974
	V82, V83	1975
	V84, V85	1976
10CI	V86, V87	1977
	V88, V89	1978
	V90, V91	1979
	V92, V93	1980
	V94, V95	1981
11CI	V96, V97	1982
	V98, V99	1983
	V100, V101	1984
	V102, V103	1985
	V104, V105	1986
12CI	V106, V107	1987
	V108, V109	1988
	V110, V111	1989
	V112, V113	1990
	V114, V115	1991
13CI	V116, V117	1992
	V118, V119	1993
	V120, V121	1994
	V122, V123	1995
	V124, V125	1996
14CI	V126, V127	1997
	V128, V129	1998
	V130, V131	1999
	V132, V133	2000
	V134, V135	2001
15CI	V136, V137	2002
	V138, V139	2003
	V140, V141	2004
	V142, V143	2005
	V144, V145	2006

巻	年
V146, V147	2007
V148, V149	2008
V150, V151	2009
V152, V153	2010
V154	2011

\* CI = Collective Index  
DI = Decennial Index

\* 2007 年以降は  
CI 区分なし。

## 7. REGISTRY ファイル

### 7-1 REGISTRY ファイルの収録情報

CAS 登録番号を付与されたすべての物質情報を収録。

- Chemical Abstracts (CAplus/CA ファイル) に索引されているすべての特定化学物質 \*

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

- ・ 2009 年 1 月以降の CA, DE, EP, FR, GB, JP, RU, US, WO から発行された特許
- ・ 1998-2008 年の CA, DE, EP, FR, GB, US, WO で発行された英語、仏語、独語の特許
- ・ 2005 年以降の日本語、露語で書かれた特許

(2011 年 5 月現在)

- 米国 (TSCA), カナダ (DSL, NDSL), EU (EINECS) の化学物質規制法に基づく既存化学物質リストに収載された物質
- 公的機関や企業からの依頼により CAS 登録番号を付与した物質 (CAS 登録番号サービス)
- 登録システム開始時に各種ハンドブック類から収載された化学物質
- 化合物ライブラリ (CHEMCASTS ファイル) から登録された物質
- NCI (米国 National Cancer Institute) 由来の物質
- CASREACT ファイルに収録されている反応中の反応関与物質
- GenBank ファイル由来の核酸・タンパク質・ペプチド配列
- 他のデータベース (ChemBank, UPCMLD Library, ChemSpider など)

### 7-2 REGISTRY ファイルのレコード例

低分子有機化合物 (FIDE SPEC 表示形式)

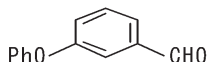
- 1) RN 39515-51-0 REGISTRY
- 2) ED Entered STN: 16 Nov 1984
- 3) CN Benzaldehyde, 3-phenoxy- (CA INDEX NAME)
- 5) OTHER NAMES:  
CN 3-Phenoxybenzaldehyde  
:
- 8) MF C13 H10 O2
- 9) CI COM
- 12) LC STN Files: AGRICOLA, ANABSTR, BIOSIS, CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMINFORMRX, CHEMLIST, CIN, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, IPA, MEDLINE, MSDS-OHS, REAXYSFILE\*, RTECS\*, SPECINFO, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL  
(\*File contains numerically searchable property data)  
Other Sources: EINECS\*\*, NDSL\*\*, TSCA\*\*  
(\*\*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
- 13) DT.CA CAplus document type: Conference; Journal; Patent; Report
- 14) RL.P Roles from patents: ANST (Analytical study); BIOL (Biological study); CMBI (Combinatorial study); FORM (Formation, nonpreparative); PREP (Preparation); PROC (Process); PRPH (Prophetic); RACT (Reactant or reagent); USES (Uses)
- 15) RLD.P Roles for non-specific derivatives from patents: BIOL (Biological study); RACT (Reactant or reagent); USES (Uses)
- 16) RL.NP Roles from non-patents: ANST (Analytical study); BIOL (Biological study); CMBI (Combinatorial study); FORM (Formation, nonpreparative); OCCU (Occurrence); PREP (Preparation); PROC (Process); PRP (Properties);

17) RACT (Reactant or reagent); USES (Uses); NORL (No role in record)  
 RLD.NP Roles for non-specific derivatives from non-patents: FORM (Formation, nonpreparative)

18) Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	2

19)



20) Experimental Properties (EPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Boiling Point (BP)	175-176 deg C	Press: 11 Torr	(1) CAS
Boiling Point (BP)	169 deg C	Press: 11 Torr	(2) CAS
Boiling Point (BP)	140 deg C		(3) SRC
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(4) WSS
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(5) AIST

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

- (1) Tomita, Masao; Yakugaku Zasshi 1955 V75, P1021-3 CAPLUS
- (2) Ditrich, K.; Science of Synthesis 2007 V25, P531-562 CAPLUS
- (3) "PhysProp" data were obtained from Syracuse Research Corporation of Syracuse, New York (US)
- (4) Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)

21) Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
Boiling Point	(1) IC
Carbon-13 NMR Spectra	(2) CAS
IR Absorption Spectra	(1) IC
1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats	
Mass Spectra	(3) CAS
2 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	
NMR Spectra	(1) IC
Proton NMR Spectra	(2) CAS
3 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	
Raman Spectra	(4) CAS

- (1) Inokuchi, Tsutomu; Bulletin of the Chemical Society of Japan 1991 V64(3) P796-800 CAPLUS
- (2) Wang, Xinliang; Chemistry--A European Journal 2008 V14(9) P2679-2685 CAPLUS

## 22) Predicted Properties (PPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	218.17	pH 1 25 deg C	(1)
:			
Boiling Point (BP)	392.4+/-0.0 deg C	760 Torr	(1)
Density (DEN)	1.154+/-0.06 g/cm**3	760 Torr	(1)
Enthalpy of Vap. (HVAP)	64.21+/-3.0 kJ/mol	760 Torr	(1)
Flash Point (FP)	156.1+/-13.9 deg C		(1)
Freely Rotatable Bonds (FRB)	3		(1)
H acceptors (HAC)	2		(1)
H donors (HD)	0		(1)
Hydrogen Donors/Acceptors Sum (HDAS)	2		(1)
:			
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.00012 mol/L	Unbuffered Water pH 7.40 25 deg C	(1)
Molar Volume (MVOL)	171.6+/-3.0 cm**3/mol	20 deg C 760 Torr	(1)
Molecular Weight (MW)	198.22		(1)
Polar Surface Area (PSA)	26.30 A**2		(1)
Vapor Pressure (VP)	2.30E-06 Torr	25 deg C	(1)

(1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02  
(C) 1994-2011 ACD/Labs)

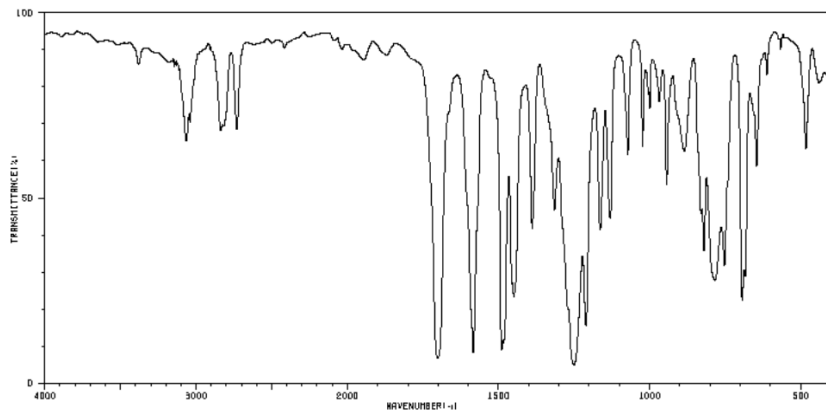
See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.

1219 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

24) 3 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

25) 1225 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

## 26) IR Absorption Spectra



Spectrum ID:

NIDA71899

Spectrometer:

Nicolet 170SX or JASCO FT/IR-410

Source:

"Integrated Spectral Data Base System of Organic Compounds" data were obtained from the National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (Japan)

:

ポリマー (モノマー単位登録レコード, IDE 表示形式)

- 1) RN 161015-03-8 REGISTRY  
 2) ED Entered STN: 22 Feb 1995  
 3) CN 2-Oxepanone, polymer with tetrahydrofuran, block (CA INDEX NAME)  
 4) OTHER CA INDEX NAMES:  
 CN Furan, tetrahydro-, polymer with 2-oxepanone, block (9CI)  
 5) OTHER NAMES:  
 CN e-Caprolactone-poly(tetramethylene glycol) copolymer  
 CN e-Caprolactone-tetrahydrofuran block copolymer  
 CN e-Caprolactone-THF block copolymer  
 CN Capa 7201
- :
- CN Tetrahydrofuran-caprolactone block copolymer  
 6) AR 9051-88-1  
 7) DR 138981-66-5  
 8) MF (C6 H10 O2 . C4 H8 O)x  
 9) CI PMS, COM  
 10) PCT Polyester, Polyester formed, Polyether, Polyether formed  
 11) SR CA  
 12) LC STN Files: CA, CAPLUS, CHEMLIST, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL  
 19) CM 1  
 CRN 502-44-3  
 CMF C6 H10 O2



- CM 2  
 CRN 109-99-9  
 CMF C4 H8 O



- 23) 23 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 24) 2 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 25) 23 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- 1) CAS 登録番号 2) 入力日 3) CA 索引名 4) 他の CA 索引名 5) 同義名  
 6) 非優先 CAS 登録番号 7) 削除された CAS 登録番号 8) 分子式  
 9) クラス識別子コード 10) ポリマー分類用語 11) 収録源  
 12) CAS 登録番号所在 13) CAplus ファイルの資料種類  
 14) 特定物質として索引された特許レコード中のスーパーロール  
 15) 非特定誘導体として索引された特許レコード中のスーパーロール  
 16) 特定物質として索引された非特許レコード中のスーパーロール  
 17) 非特定誘導体として索引された非特許レコード中のスーパーロール  
 18) 環データ 19) 化学構造図 20) 実測物性値 21) 参考文献タグ (物性文献情報)  
 22) 予想物性値 (計算物性値) 23) CA ファイル中の文献数  
 24) CA ファイル中の非特定誘導体の文献数 25) CAplus ファイル中の文献数  
 26) スペクトルデータ (IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR, <sup>19</sup>F-NMR, <sup>31</sup>P-NMR, <sup>29</sup>Si-NMR, MASS, ラマン)

コード	名称	索引 単位	検索例
<b>基本索引など</b>			
無し (/BI)	基本索引 (名称フラグメント, 成分分子式, CAS 登録番号, 累積索引コード)	単語	S CHOLEST? S C10H1202
/CI	クラス識別子	句	S PMS/CI
/CRN	成分 CAS 登録番号	句	S 79-10-7/CRN
/DEF	物質の定義	単語	S ABSOLUTES/DEF
/DT. CA	CAplus ファイルの資料種類	句	S PATENT/DT. CA
/ED	入力日	数値	S 19920105/ED
/ENTE *1	索引者情報	単語	S PEROXIDE/ENTE
/FA	フィールドの存在	句	S RSD/FA S NO RSD/FA
/FS	ファイルセグメント	単語	S PROTEIN/FS
/LC	CAS 登録番号所在	句	S TSCA/LC
/PCT	ポリマー分類用語	句	S POLYESTER/PCT
/PCT. CNT	ポリマー分類用語の数	数値	S L1 AND 4/PCT. CNT
/RN	CAS 登録番号	句	S 97-77-8/RN
/REF. CA	CA ファイルでの文献数	数値	S 100<REF. CA
/REF. CAD	CA ファイルでの非特定誘導体の文献数	数値	S 10-20/REF. CAD
/REF. CAPLUS	CAplus ファイルでの文献数	数値	S 50<REF. CAPLUS
/RL	RL *2 (特定物質として索引)	句	S PREP/RL
/RL. NP	RL *2 (特定物質として索引, 非特許)	句	S PREP/RL. NP
/RL. P	RL *2 (特定物質として索引, 特許)	句	S PREP/RL. P
/RLD	RL *2 (非特定誘導体として索引)	句	S PREP/RLD
/RLD. NP	RL *2 (非特定誘導体として索引, 非特許)	句	S PREP/RLD. NP
/RLD. P	RL *2 (非特定誘導体として索引, 特許)	句	S PREP/RLD. P
/RLS	RL+RLD *2	句	S PREP/RLS
/RLS. NP	RL.NP+RLD.NP *2	句	S PREP/RLS. NP
/RLS. P	RL.P+RLD.P *2	句	S PREP/RLS. P
/SR	収録源	句	S CA/SR
/UP	更新日	数値	S UP>=19920209
<b>化学物質名称</b>			
/CN	化学物質完全名称	句	S BENZOIC ACID/CN
/CNS *1	化学物質名称自然セグメント	単語	S ?CYCLIN?/CNS
/HP	見出し語母核	句	S BENZENE/HP
/INS. HP	CA 索引名セグメント - 見出し語母核	単語	S ACID/INS. HP
/INS. NHP	CA 索引名セグメント - 非見出し語母核	単語	S PHENOL/INS. NHP
/ONS	他の名称セグメント	単語	S ANILINE/ONS
<b>分子式</b>			
/ATC	原子数	数値	S 5/ATC
/ELC	元素数	数値	S 7-9/ELC
/ELC. SUB	元素数 (物質全体)	数値	S ELC. SUB>=8
/ELF	元素式	句	S C H F O/ELF
/ELR. xx	元素比.xx (xx = CH, CN, CO, HC, HN, HO, NC, NH, NO, OC, OH, ON)	数値	S 1-2/ELR. CN
/ELS	元素種	句	S B/ELS (P) H/ELS
/ELS. MCF	元素種 (物質全体)	句	S (N (XA) P)/ELS. MCF
/FW	分子量	数値	S 420-460/FW
/MF	分子式	句	S C7H3BR2F02/MF
/NC	成分数	数値	S F/ELS NOT NC>=2

\*1 後方一致, 中間一致検索可能.

\*2 CAplus ファイルに索引された際に付与されているスーパーロール.



コード	名称	索引 単位	検索例
/HAC	水素受容基数	数値	S 10-15/HAC
/HD	水素供与基数	数値	S 2>HD
/HDAS	水素供与基/水素受容基総数	数値	S 12/HDAS
/KOC	有機炭素吸着係数 Koc	数値	S 100-200/KOC
/KOC. PH	Koc 測定時の pH	数値	S 7/KOC. PH
/KOC. T	Koc 測定時の温度 (deg C)	数値	S 25/KOC. T
/LD50	50% 致死量 (mg/kg)	数値	S 741-745/LD50
/LD50. ORGN	50% 致死量測定時の生物種	句	S MOUSE/LD50. ORGN
/LD50. RTE	50% 致死量測定時の投与経路	句	S ORAL/LD50. RTE
/LOGD	オクタノール/水分分配係数の対数値 (pH 考慮)	数値	S 2. 21/LOGD
/LOGD. PH	LogD 測定時の pH	数値	S 10/LOGD. PH
/LOGD. T	LogD 測定時の温度 (deg C)	数値	S 25/LOGD. T
/LOGP	オクタノール/水分分配係数の対数値	数値	S 1>=LOGP
/LOGP. T	LogP 測定時の温度 (deg C)	数値	S 25/LOGP. T
/MM	磁気モーメント (muB)	数値	S MM<=0. 98
/MM. T	磁気モーメント測定時の温度 (K)	数値	S 10/MM. T
/MVOL	モル体積 (cm**3/mol)	数値	S 31. 1/MVOL
/MVOL. P	モル体積測定時の圧力 (Torr)	数値	S 760/MVOL. P
/MVOL. T	モル体積測定時の温度 (deg C)	数値	S 25/MVOL. T
/MP	融点	数値	S MP<=30
/MP. P	融点測定時の圧力	数値	S 70/MP (P) 2/MP. P
/MP. SOL	融点測定時の溶媒	句	S ACETIC ACID/MP. SOL
/MW	分子量	数値	S 500<MW
/ORP	旋光度 (deg)	数値	S 70-80/ORP
/ORP. C	旋光度測定時の濃度 (g/100mL)	数値	S 0. 12/ORP. C
/ORP. LEN	旋光度測定時の光路長 (dm)	数値	S 1/ORP. LEN
/ORP. SOL	旋光度測定時の溶媒	句	S METHANOL/ORP. SOL
/ORP. T	旋光度測定時の温度 (deg C)	数値	S 20/ORP. T
/ORP. W	旋光度測定時の波長 (nm)	数値	S 546/ORP. W
/PKA	酸塩基解離定数 (pKa)	数値	S 1-5/PKA
/PKA. T	pKa 測定温度 (deg C)	数値	S 25/PKA. T
/PKA. TYP	pKa タイプ	句	S MOST BASIC/PKA. TYP
/PSA	極性表面積 (A**2)	数値	S 3. 24/PSA
/RI	屈折率	数値	S 1. 427/RI
/RI. T	屈折率測定時の温度 (deg C)	数値	S 1. 427/RI (P) 25/RI. T
/RI. W	屈折率測定時の波長 (nm)	数値	S 500-589. 3/RI. W
/SLB. MOL	モル溶解度 (mol/L)	数値	S SLB. MOL>=1
/SLB. PH	モル溶解度測定時の pH	数値	S 7-10/SLB. PH
/SLB. T	モル溶解度測定時の温度 (deg C)	数値	S 25/SLB. T
/SLB. MASS	質量溶解度 (g/L)	数値	S SLB. MASS>=1
/SLB. PH	質量溶解度測定時の pH	数値	S 7-10/SLB. PH
/SLB. T	質量溶解度測定時の温度 (deg C)	数値	S 25/SLB. T
/ISLB. MASS	固有質量溶解度 (g/L)	数値	S 1. 3/ISLB. MASS
/ISLB. T	固有質量溶解度測定時の温度 (deg C)	数値	S 25/ISLB. T
/ISLB. MOL	固有モル溶解度 (mol/L)	数値	S 1. 6E-14/ISLB. MOL
/ISLB. T	固有モル溶解度測定時の温度 (deg C)	数値	S 25/ISLB. T
/TG	ガラス転移点 (deg C)	数値	S 400-430/TG
/TS	引張強度 (Mpa)	数値	S 42/TS
/TS. T	引張強度測定時の温度 (deg C)	数値	S 190/TS. T (P) 300/TS
/UR	数値幅	数値	S BP=200 (P) UR<=10
/VP	蒸気圧 (Torr)	数値	S . 0001-. 0002/VP
/VP. T	蒸気圧測定時の温度 (deg C)	数値	S . 0001/VP (P) 25/VP. T

\* 物性検索の詳細は、化学情報協会ホームページの技術資料、および  
<http://www.cas.org/support/stngen/stdnoc/properties.html> を参照。

## EXPAND コマンドによる物性データ項目の確認

E TENSILE STRENGTH/PPROPS	実測物性値, 予想物性値, および参照文献タグフィールドの EXPAND
E TENSILE STRENGTH/EPROPS	実測物性値, および参照文献タグフィールドの EXPAND
E HARDNESS/ETAG	参照文献タグフィールドの EXPAND
E IR/SPEC	スペクトルデータの EXPAND
E EXPERIMENTAL/PTYP	物性データタイプの EXPAND
E MP/FA	実測物性値, 予想物性値フィールドの EXPAND (物性以外の検索フィールドも含む)

## 7-4 近接演算子 (REGISTRY ファイル)

近接演算子	検索フィールド	検索例
(XW)	指定した順序で同一名称内に限定	S NITRO (XW) METHYL
(XA)	同一名称内に限定	S METHYL (XA) ETHYL
(S)	同一環系内に限定	S C5N/EAS (S) 3 N/REL
(P)	同一成分内 (分子式関連データ, 環データ) に限定 特徴表の同一行に限定 物性値の同一行に限定	S C H N O/ELF (P) 3/N S EOC/NTE (P) HIS/NTE S .0001/VP (P) 25/VP.T
(L)	物質全体 (分子式関連データ, 環データ) に限定 同一名称内に限定 同一鎖内に限定	S C H/ELF (L) NC>=2 S 3/ECL.SUB (L) B/ELS S QUINOLIN? (L) METHYL S (VEALY (L) GIVEQ)/SQEP

## 7-5 クラス識別子 (/CI)

コード (名称)	内容
AYS (ALLOY)	合金
CCS (COORDINATION COMPOUND)	配位化合物
COM (COMPONENT)	多成分物質成分 *1
CTS (CONCEPT)	概念語登録 *2, 3
GRS (GENERIC REGISTRATION)	一般式登録 *2, 3
IDS (INCOMPLETELY DEFINED SUBSTANCE)	定義の不完全な物質
MAN (MANUAL REGISTRATION)	手作業登録 *3
MNS (MINERAL)	鉱物
MXS (MIXTURE)	混合物
PMS (POLYMER)	ポリマー
RIS (RADICAL ION)	ラジカルイオン
RPS (RING PARENT)	環母核
TIS (TABULAR INORGANIC)	表形式無機化合物 *3
UVCB (UNKNOWN OR VARIABLE COMPOSITION OR BIOLOGICAL SUBSTANCE)	組成不明, 組成不定, 複雑な反応生成物, 生体物質 *2, 3

\*1 =&gt; S COM/CI は検索できない。

\*2 CAplus/CA ファイルでは該当する CAS 登録番号を用いた検索はできない。

\*3 構造検索できない。

## 7-6 POLYLINK コマンド (ポリマー検索に有効なコマンド)

項目	説明
機能	モノマー単位ポリマーと繰り返し単位 (SRU) ポリマーを REGISTRY ファイル中でリンクするコマンド。「実質的には同じポリマーでありながら、各々独自の CAS 登録番号を持つもの」を自動的に一つの回答セットにまとめる。
入力方法	特定のポリマーの CAS 登録番号から、関連ポリマーの集合を作る。 => POLYLINK 9012-16-2 ポリマーを含む回答集合から、関連ポリマーの集合を作る。 => POLYLINK L2

\* ポリマー検索の詳細は、講習会で紹介しています。

## 7-7 ポリマー分類用語 (/PCT)

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

\* ポリマー分類用語の詳細は、<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/pct.pdf> 参照。

## 核酸配列 (SQIDE 表示形式)

- 1) RN 823475-68-9 REGISTRY
- 2) CN DNA, d(P-thio) (T-A-T-T-G-C-G-A-G-C-T-C-C) (9CI) (CA INDEX NAME)
- 3) OTHER NAMES:  
CN 81: PN: W02005000202 SEQID: 81 claimed DNA  
CN ISIS 11150
- 4) FS NUCLEIC ACID SEQUENCE
- 5) SQL 14
- 6) NA 2 a 4 c 3 g 5 t
- 7) NTE modified

type	location	description
modified link	t-1 - a-2	P-thio
modified link	a-2 - t-3	P-thio
modified link	t-3 - t-4	P-thio
modified link	t-4 - t-5	P-thio
modified link	t-5 - g-6	P-thio
modified link	g-6 - c-7	P-thio
modified link	c-7 - g-8	P-thio
modified link	g-8 - a-9	P-thio
modified link	a-9 - g-10	P-thio
modified link	g-10 - c-11	P-thio
modified link	c-11 - t-12	P-thio
modified link	t-12 - c-13	P-thio
modified link	c-13 - c-14	P-thio

## 8) PATENT ANNOTATIONS (PNTE) :

Sequence Source	Feature	Description	Patent Reference
Artificial sequence	misc_feature	Synthetic	W02005000202 claimed SEQID 81

## 9) SEQ 1 tatttgcgag ctcc

\*\*RELATED SEQUENCES AVAILABLE WITH SEQLINK\*\*

- 10) MF Unspecified
- 11) CI MAN
- 12) SR CA
- 13) LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER
- 14) DT.CA CAplus document type: Patent
- 15) RL.P Roles from patents: BIOL (Biological study); PRP (Properties); USES (Uses)
- 16) 1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
- 17) 1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- |                                 |                      |             |              |
|---------------------------------|----------------------|-------------|--------------|
| 1) CAS 登録番号                     | 2) CA 索引名            | 3) 同義名      | 4) ファイルセグメント |
| 5) 配列長                          | 6) 核酸タイプと数           | 7) 注記 (特徴表) | 8) 特許情報      |
| 9) 配列                           | 10) 分子式              | 11) クラス識別子  | 12) 収録源      |
| 13) CAS 登録番号所在                  | 14) CAplus ファイルの資料種類 |             |              |
| 15) 特定物質として索引された特許レコード中のスーパーロール |                      |             |              |
| 16) CA ファイル中の文献数                | 17) CAplus ファイル中の文献数 |             |              |

## 7-9 検索フィールドとコード (REGISTRY ファイルの配列検索用)

コード	名称	索引単位	検索例
/NA	核酸タイプ	句	S A/NA
/NA. CNT	核酸数	数値	S 12-42/NA. CNT
/NTE *1	注記	単語	S ?CYCLIC?/NTE
/PC	特許発行国	句	S JP/PC
/PN	特許番号	句	S JP2000004886/PN
/PNTE (/FEAT)	特許情報	単語	S PERTUSSIS/PNTE
/SQL	配列長	数値	S 4-20/SQL
/SQEP	タンパク質完全配列検索 *2	句	S YADAVF/SQEP
/SQEFP	タンパク質完全配列ファミリー検索 *2	句	S ' TYR-GLY-GLY' /SQEFP
/SQSP	タンパク質部分配列検索 *2	句	S LAGLL/SQSP
/SQSFP	タンパク質部分配列ファミリー検索 *2	句	S ATCXAWV/SQSFP
/SQEN	核酸完全配列検索	句	S ATTTTT/SQEN
/SQSN	核酸部分配列検索	句	S AAGGTACTA/SQSN

\*1 後方一致, 中間一致検索可能.

\*2 3 文字コードを用いる場合は, 引用符 ( ' ) で囲む.

### 一般アミノ酸のコード

1 文字コード	3 文字コード	名称	1 文字コード	3 文字コード	名称
A	ALA	Alanine	N	ASN	Asparagine
B	ASX	Aspartic acid or Asparagine	O	PYL	Pyrrrolysine
C	CYS	Cysteine	P	PRO	Proline
D	ASP	Aspartic acid	Q	GLN	Glutamine
E	GLU	Glutamic acid	R	ARG	Arginine
F	PHE	Phenylalanine	S	SER	Serine
G	GLY	Glycine	T	THR	Threonine
H	HIS	Histidine	U	SCY	Selenocysteine
I	ILE	Isoleucine	V	VAL	Valine
J	Xle	Isoleucine or Leucine	W	TRP	Tryptophan
K	LYS	Lysine	X	XXX	Uncommon
L	LEU	Leucine	Y	TYR	Tyrosine
M	MET	Methionine	Z	GLX	Glutamic acid or Glutamine

### アミノ酸の等価表

アミノ酸コード	性質	アミノ酸コード	性質
Q, N, E, D, B, Z	親水性, 酸・アミド	L, I, V, M, J	疎水性
H, K, R	親水性, 塩基	F, Y, W	疎水性, 芳香族
P, A, G, S, T	弱疎水性, 中性	C	橋かけ形状


### 核酸塩基のコード

コード	名称	コード	名称	コード	名称
A	Adenine	G	Guanine	T	Thymine
C	Cytosine	I	Inosine	U	Uracil

## 7-10 BLAST 検索

STN on the Web または STN Express V6.01 以上を使用する。

Program Selection (REGISTRY BLAST 検索タイプ)

質問式		検索タイプ	検索に使われる質問式	検索される物質
塩基配列		BLASTn	塩基配列	核酸
		BLASTx	翻訳されたアミノ酸配列	タンパク質
		tBLASTx	翻訳されたアミノ酸配列	アミノ酸配列に翻訳された核酸
アミノ酸配列		BLASTp	アミノ酸配列	タンパク質
		tBLASTn	翻訳された塩基配列	核酸

\* 配列検索の詳細は、講習会で紹介しています。

## 7-11 SEQLINK EXACT コマンド

項目	説明
機能	同じ配列データを持つレコードを REGISTRY ファイル中でリンクするコマンド。「同じ配列データだが各々独自の CAS 登録番号を持つもの」を自動的に一つの回答セットにまとめる。
入力方法	CAS 登録番号 => SEQLINK EXACT 445115-49-1  CAS 登録番号に相当する E 番号 => SEQLINK EXACT E3  配列レコードを含む回答セットの L 番号 => SEQLINK EXACT L1  ANALYZE コマンドでまとめた CAS 登録番号の L 番号 => SEQLINK EXACT L2

## 7-12 ファイルセグメント (/FS)

内容	検索例
配列データを有する核酸・タンパク質	S SEQUENCE/FS
塩基配列データを有する核酸	S NS/FS (NUCLEIC/FS, ACID/FS)
GenBank に収録されている配列 (核酸)	S GENBANK/FS (ACCESSION/FS, NUMBER/FS)
修正された GenBank 配列 (核酸)	S SECONDARY/FS
削除された GenBank 配列 (核酸)	S WITHDRAWN/FS
アミノ酸配列データを有するタンパク質	S PS/FS (PROTEIN/FS)
立体化学情報の表示および構造検索が可能な物質群	S STEREOSEARCH/FS

表示形式		表示内容	
定型表示形式	IDE (デフォルト)	FIDE 表示形式から環系データ (RSD) および物性データを除いた物質情報, ただし 50 名称まで	
	IDERL	IDE と CAplus におけるロールおよび資料種類	
	ALL, MAX *1	スペクトル情報を除くすべてのフィールドと, CA ファイルの最新 10 件分の文献情報	
	IALL *2	ALL のインデント形式	
	FIDE	タンパク質・核酸の配列データ, スペクトル情報を除くすべての物質情報	
	REG	CAS 登録番号 (DR, PR, AR, RR があればそれらも表示)	
	SAM	CA 索引名, 分子式, クラス識別子, 構造図, 配列長	
	SCAN (無料)	SAM と同じ (回答番号指定不可)	
	タンパク質・核酸	HIT	ヒットした検索語を含むすべてのフィールド
		KWIC	ヒットした検索語の前後 20 語
SQD		CAS 登録番号, タンパク質・核酸配列データ	
SQD3		CAS 登録番号, タンパク質 (3 文字コード)・核酸配列データ	
SQN		CAS 登録番号, タンパク質・核酸名称	
SQIDE		IDE, タンパク質・核酸配列データ	
SQIDE3		IDE, タンパク質 (3 文字コード)・核酸配列データ	
名称	IN	CA 索引名	
	CN	化学物質名 (50 名称まで)	
	FCN	すべての化学物質名	
	CCN	すべての化学物質名 (圧縮型)	
構造	STR	構造図 (デスクリプタ付き立体化学表示)	
	STF	構造図 (平面)	
	COMP	成分	
環系データ	RSD	環系データ	
	SRSD	簡略型環系データ	
物性データ	PRFA (無料)	物性データの存在	
	PROP	すべての物性データ (EPROP, ETAG, PPROP)	
	EPROP	実測物性値	
	PPROP (CALC)	予想物性値 (計算物性値)	
	QRD	IDE とヒットした物性データ	
	ETAG (無料)	参照文献タグ (各物性につき 1 文献ずつ)	
	ETAGFULL (無料)	参照文献タグ (すべての文献情報)	
	SPEC	スペクトル情報	

\*1 最大 10 件分までの最新文献情報を CA ファイルの表示形式で表示可. ただし, 文献情報のみの表示は不可.

\*2 インデント形式とは, 完全なフィールド名が表示される形式.

注) 表示形式の複数指定可, 定型表示形式の他, 各フィールドコードも指定可. ただし, 定型表示形式とカスタム表示形式の併用は不可.

## 7-14 範囲指定のめやす (CAS 登録番号)

年度	その年の最初に付与	その年の最後に付与
1965	.....	3308-70-1
1966	3308-71-2	7312-29-0
1967	7312-30-3	16622-14-3
1968	16622-15-4	19266-83-2
1969	19266-84-3	23777-26-6
1970	23777-27-7	28427-76-1
1971	28427-77-2	33923-67-0
1972	33923-68-1	38053-93-9
1973	38053-94-0	50584-16-2
1974	50584-17-3	53965-71-2
1975	53965-72-3	57866-57-6
1976	57866-58-7	61446-09-1
1977	61446-10-4	65229-05-2
1978	65229-06-3	68936-57-2
1979	68936-58-3	72467-41-5
1980	72467-42-6	76081-79-3
1981	76081-80-6	80386-99-8
1982	80387-00-4	84081-55-0
1983	84081-56-1	88343-57-1
1984	88343-58-2	94160-43-7
1985	94160-44-8	99602-92-3
1986	99602-93-4	106016-48-2
1987	106016-49-3	112087-30-6
1988	112087-31-7	118203-33-1
1989	118203-34-2	124508-12-9
1990	124508-13-0	131232-31-0
1991	131232-32-1	138207-45-1
1992	138207-46-2	145163-45-7
1993	145163-46-8	152057-45-9
1994	152057-46-0	159909-16-7
1995	159909-17-8	172015-76-8
1996	172015-77-9	184695-78-1
1997	184695-79-2	199381-14-1
1998	199381-15-2	216431-12-8
1999	216431-13-9	252063-49-3
2000	252063-50-6	312487-42-6
2001	312487-43-7	380148-71-0
2002	380148-72-1	477930-10-2
2003	477930-11-3	632953-28-7
2004	632953-29-8	806622-48-0
2005	806622-49-1	870967-03-6
2006	870967-04-7	916581-14-1
2007	916581-15-2	959833-36-4
2008	959833-37-5	1092443-42-0
2009	1092443-03-1	1199795-25-9
2010	1199795-26-0	1258253-41-6
2011	1258253-42-7	

## 8. CASREACT ファイル

### 8-1 CASREACT ファイルの収録情報

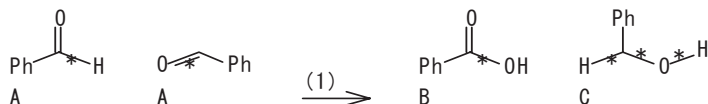
- 1985 年から 1990 年までの主要雑誌約 100 誌から, CA ファイルの有機化学セクション (セクション 21-34) に分類された文献中のすべての反応情報
- 1991 年以降, CA ファイルの主には有機化学セクションに分類されたすべての雑誌論文および特許から, 選択された合成的に意義のある反応情報
- 1968 - 1999 年の InfoChem 由来の反応情報
- 1840 - 2000 年の INPI (Institute National de la Propriete Industrielle) 作成の反応情報
- Wiley 社作成の反応情報 (e-EROS 2001 年版, Organic Syntheses : 1921 - 2006 年, Organic Reactions : 1946 - 2006 年)
- 1971-1998 年の Biotransformations database の酵素反応

### 8-2 CASREACT ファイルのレコード例 (CBIB FHIT 表示形式)

1) 144:432526 Investigation on synthesis of benzoic acid and benzyl alcohol by microwave irradiation. Wei, Jin-zhi; Peng, Li; Zhang, Yan; Xue, Bin-tai; Yu, Ze-hua (School of Chemistry and Environmental Engineering, Harbin University of Science and Technology, Harbin, 150040, Peop. Rep. China). Huaxue Yu Shengwu Gongcheng, 22(5), 31-32 (Chinese) 2005. CODEN: HYSGAF. ISSN: 1672-5425. Publisher: Huaxue Yu Shengwu Gongcheng Bianjibu.

2) RX(1) OF 1 2 A ==> B + C

3)



4) RX(1) RCT A \*\*\*100-52-7\*\*\*  
 RGT D 1310-73-2 NaOH  
 PRO B 65-85-0, C \*\*\*100-51-6\*\*\*  
 SOL 7732-18-5 Water  
 CON SUBSTAGE(1) <100 deg C, 0.35 MPa  
 SUBSTAGE(2) 5 minutes, 170 deg C, 1.01 MPa  
 NTE microwave irradiation, optimization study

文献情報 1) CA ファイルと同じ内容

反応情報 2) 反応マップ (反応物と生成物の一般記号)

3) 構造図 (反応物と生成物の構造図)

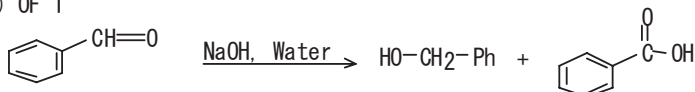
4) 反応要約 (反応に関与するすべての物質の CAS 登録番号)

RCT : 反応物 RGT : 試薬 PRO : 生成物 CAT : 触媒

SOL : 溶媒 CON : 反応条件 NTE : 注記

### FCRDREF 表示形式 (デフォルト表示形式)

RX(1) OF 1



REF: Huaxue Yu Shengwu Gongcheng, 22(5), 31-32; 2005

NOTE: microwave irradiation, optimization study

CON: STAGE(1) <100 deg C, 0.35 MPa; 5 minutes, 170 deg C, 1.01 MPa

## 8-3 CASREACT ファイルの検索フィールド

	コード	名称	索引単位	検索例
反 応 情 報	無し (/BI) *1	基本索引 〔反応要約中の CAS 登録番号, 標題, 抄録, 補遺語, 索引語 *2, 反応情報中の単語〕	単語	S 50-00-0 S L1 (L) L2 S FAILED (W) REACT? S STEREOSELECT?
	/CAT *3	触媒	句	S 100-52-7/CAT S ANY/CAT
	/NPRO	生成物以外の物質	句	S 10025-91-9/NPRO S L5/NPRO
	/NS	反応ステップ数	数値	S 109-99-9 (L) 71-43-2 (L) 1/NS
	/NTE *1	注記	単語	S ?HYDROGEN?/NTE
	/PRO	生成物	句	S 74-82-8/RCT (L) 74-85-1/PRO S L1/RCT (L) L2/PRO
	/RCT	反応物	句	S 2555-28-4/RCT
	/RGT	試薬	句	S 107263-95-6/RGT
	/RRT	反応物または試薬	句	S 50-00-0/RRT
	/SOL *3	溶媒	句	S L1/PRO (L) 680-31-9/SOL
	/YD	収率	数値	S 502-49-8/PRO (A) 94-100/YD
	NONE/YDT	収率データなし	句	S 502-49-8/PRO (A) (94-100/YD OR NONE/YDT)
	/FG	官能基一般 〔/FG.PRO, /FG.RGT, /FG.RCT〕	句	S EPOXIDE/FG
	/FG. FORM	生成した官能基	句	S 1, 3-C3N2/FG. FORM
/FG. NON	反応しない官能基	句	S ACYCLIC ALKENE/FG. NON	
/FG. PRO	生成物中の官能基	句	S NITRO/FG. PRO	
/FG. RCT	反応物中の官能基	句	S PRIMARY AMINE/FG. RCT	
/FG. RGT	試薬中の官能基	句	S CARBOXYLIC/FG. RGT	
/FG. RXN	反応した官能基	句	S EPOXIDE/FG. RXN	
/FG. YD	官能基 - 収率	数値	S NITRO/FG. PRO (A) 80<FG. YD	
NONE/FG. YDT	官能基 - 収率情報なし	句	S L1 (A) (90<FG. YD OR NONE/FG. YDT)	
書 誌 情 報	/AN	レコード番号	句	S 106:15253/AN
	/FS	ファイルセグメント	句	S INFOCHEM/FS
	/ED	入力日	数値	S 19871106/ED
	/UP	更新日	数値	S 19871000>UP

CPlus/CA ファイルの検索フィールドを使用できる (ただし, 対応特許情報, CAS 登録番号, 引用情報, 被引用情報, IPC, ECLA, F タームは除く).

\*1 後方一致, 中間一致検索可能.

\*2 索引語中の CAS 登録番号は含まない.

\*3 InfoChem または INPI 由来のレコードは触媒と溶媒の CAS 登録番号を含まない場合がある.

## 構造検索

「5. STN 構造検索コマンド」を参照.

## 官能基検索

官能基用語	: => HELP FGA で一覧できる。		
官能基クラス用語	:		
ALCOHOLS	ALKENES	ALKYNES	AMINES
CARBONATE DERIVATIVES	CARBOXY DERIVATIVES	HALIDES	HETEROCYCLES
KETONES	ORGANOMETALLICS		
各官能基クラス用語に含まれる官能基は, => HELP FGC で確認できる。			

## 8-4 近接演算子 (CASREACT ファイル)

近接演算子	内容 [検索例]
(A)	生成物 (PRO, FG.PRO) と収率 (YD, FG.YD) [ S 67-64-1/PRO (A) 80-100/YD S THIOPHENOL/FG.PRO (A) 90<FG.YD ]
(S)	官能基検索: 反応物 (FG.RCT, FG.RXN) と生成物 (FG.PRO, FG.FORM) の官能基中の 1 以上の原子をマッピングする場合 [ S KETONES/FG.RCT (S) ALCOHOLS/FG.PRO S CYCLIC ALKENE/FG.RXN (S) EPOXIDE/FG.FORM ]
(L)	同一反応 (一段階, 多段階) 中に限定する場合 [ S 50-00-0/RCT (L) 19031-70-0/PRO S L5 (L) 60-29-7/SOL ]

\* CASREACT ファイルの詳細は, 講習会で紹介しています。

## 8-5 CASREACT ファイルの主な回答表示形式

表示形式	表示内容
PATH	ヒットした反応を含む最長の反応経路の反応マップ, 構造図
FPATH	PATH, 反応要約
SPATH	ヒットした反応を含む最短の反応経路マップ, 構造図
FSPATH	SPATH, 反応要約
FCRD	ヒットした最初の反応のコンパクト表示
FCRDREF (デフォルト)	FCRD, 原資料 (SO, PY)
CRD	ヒットしたすべての反応のコンパクト表示
CRD (n)	反応 n のコンパクト表示
CRDREF	CRD, 原資料 (SO, PY)
CRDREF (n)	反応 n のコンパクト表示, 原資料 (SO, PY)
RX	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 構造図, 反応要約
RX (n)	反応 n の反応マップ, 構造図, 反応要約
RXG	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 構造図
RXG (n)	反応 n の反応マップ, 構造図
RXS	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 反応要約
RXS (n)	反応 n の反応マップ, 反応要約
SCAN (無料)	FCRD, 標題 (回答番号指定不可)
FHIT	ヒットした最初の反応の反応マップ, 構造図, 反応要約
HIT	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 構造図, 反応要約, およびヒットタームを含むフィールド
OCC	ヒットタームの出現頻度をフィールドごとに表示

\* ALL, DALL, IALL, MAX では文献情報 (ALL) とすべての一段階反応情報を表示される。

\* CRD, RX, ALL, DALL, IALL, MAX は情報量が非常に多い場合があるので注意する。

\* CA ファイルの表示形式で文献情報を表示できる。

\* 表示形式の複数指定可能。定型表示形式の他, 各フィールドコードも指定可能。

## 9. MARPAT ファイル

### 9-1 MARPAT ファイルの収録情報

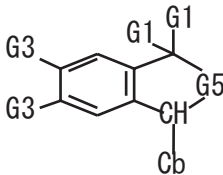
- ・ 1988 年 1 月 1 日以降に発行された特許および Research Disclosure 誌 (CA ファイルに収録された特許で、特許請求範囲 (Claims)、発明の詳細な説明 (Disclosure) の部分にマルクーシュ構造を含んでいるすべての特許 (旧ソ連とロシアを除く))
- ・ 1961 年以降に発行された特許 (INPI (Institute National de la Propriete Industrielle) から入手した情報)

マルクーシュ構造の選択 (CA 由来の特許から収録する場合)

選択される項目	詳細
特許請求の範囲	独立項、および従属項に記載されているマルクーシュ構造
発明の詳細な説明	特許請求範囲中にマルクーシュ構造がない場合、および特許請求範囲より発明の詳細な説明のマルクーシュ構造のほうが広い場合

### 9-2 MAPRAT ファイルのレコード例 (CBIB QHITEXG 表示形式)

- 1) 151:223720 Thermochromic color-memory microcapsule pigments with improved light resistance. Ono, Yoshiaki (Pilot Ink Co., Ltd., Japan). Jpn. Kokai Tokkyo Koho JP 2009173778 A 20090806, 24pp. (Japanese). CODEN: JKXXAF. APPLICATION: JP 2008-14349 20080125.
- 2) Assembled MSTR 1



G5 = (0-1) CH2

Additional displayed G-groups:

G1 = H / alkyl <containing 1-5 C> / (Example: Me)

G3 = H / OH / alkoxy <containing 1-5 C> / (Examples: OEt / Me)

- 3) Patent location: claim 1

- 1) 文献情報 (CA ファイルと同内容)
- 2) マルクーシュ構造情報
- 3) 特許記載位置

### 9-3 構造検索 (MARPAT ファイル)

#### マッチレベルの種類と指定

	マッチする構造	指定したほうがよい部分
ATOM (原子)	特定原子のみ	重要な環, 官能基の根元の炭素, 鎖上のヘテロ原子
CLASS (クラス)	特定原子, グループ原子, 一般式グループ	ハロゲン原子, 金属原子, 炭素鎖の C, 重要でない環
ANY *1 (不定)	マルクーシュ構造中の R	置換基の内容が一般式グループでも表現できないものも 検索する場合 (例 : 電子供与基), アシル基をもれなく 検索する場合

\*1 マッチレベル ANY を指定するノードは, 元素数レベルを UNLIMITED (非限定) にする.

\* MARPAT ファイルの詳細は, 講習会で紹介しています.

#### 元素数レベルの指定

LIMITED (限定)	指定した元素の種類と数が該当するものに限定
UNLIMITED (非限定)	元素の数が明記されていないものも含める

#### SET コマンドによるデフォルトの変更 (コマンド作図の場合に有効)

SET MLE CLASS	マッチレベルのデフォルトをクラスに指定
SET ECL UNLIM	元素数レベルのデフォルトを非限定に指定

#### MARPAT ファイルでは, 実行できない検索

・ ブール演算子を含む構造検索	・ スクリーンを使った検索
・ EXACT, FAMILY 検索	・ BON RC (結合属性 : 環/鎖) の指定

### 9-4 MARPAT ファイルの検索フィールド

コード	名称	索引単位	検索例
無し (/BI)	基本索引 (NTE, DER, MPL, STE の単語)	単語	S SALT#
/AN	レコード番号	句	S 111:136145/AN
/ED	入力日	数値	S 19900131/ED
/UP	更新日	数値	S 19900109/UP

### 9-5 MARPAT ファイルの主な回答表示形式

表示形式	表示内容
MSTR MSTR(n)	すべてのマルクーシュ構造および関連テキスト n 番目のマルクーシュ構造および関連テキスト
SAM SCAN (無料)	TI, IPC, NCL, CC, SX, ST, IT, FQHIT SAM と同じ (回答番号指定不可)
FHIT HIT	最初にヒットした MSTR およびテキスト項目 ヒットした全 MSTR およびテキスト項目
FQHIT	FHIT 形式で表示される構造のヒット部分のみを組み立てた簡易表示
QHIT	HIT 形式で表示される構造のヒット部分のみを組み立てた簡易表示
FQHITEXG	FQHIT + 関連する全 G グループの内容
QHITEXG	QHIT + 関連する全 G グループの内容

\* デフォルトの表示形式は BIB.

\* ALL, DALL, IALL, MAX 表示形式では文献情報とすべてのマルクーシュ構造が表示される.

\* 文献情報は, CA ファイルの表示形式を使用できる.

\* 表示形式の複数指定可能. 定型表示形式の他, 各フィールドコードも指定可能.

# 10. CASLINK ファイルクラスター

## 10-1 CASLINK で自動的に実行される検索（フルファイル検索時）

- ① REGISTRY ファイルの構造検索
- ② MARPAT ファイルの構造検索
- ③ REGISTRY ファイルの回答セットによる CAplus ファイルへのクロスオーバー検索
- ④ MARPAT, CAplus の各ファイル間の重複文献除去

\* サンプル検索では、REGISTRY ファイル、MARPAT ファイルでの構造検索のみが実行される。  
\* 構造作図の段階で MARPAT ファイル用にマッチレベルや元素数レベルの指定をする。

## 10-2 CASLINK ファイルクラスターの検索の流れ

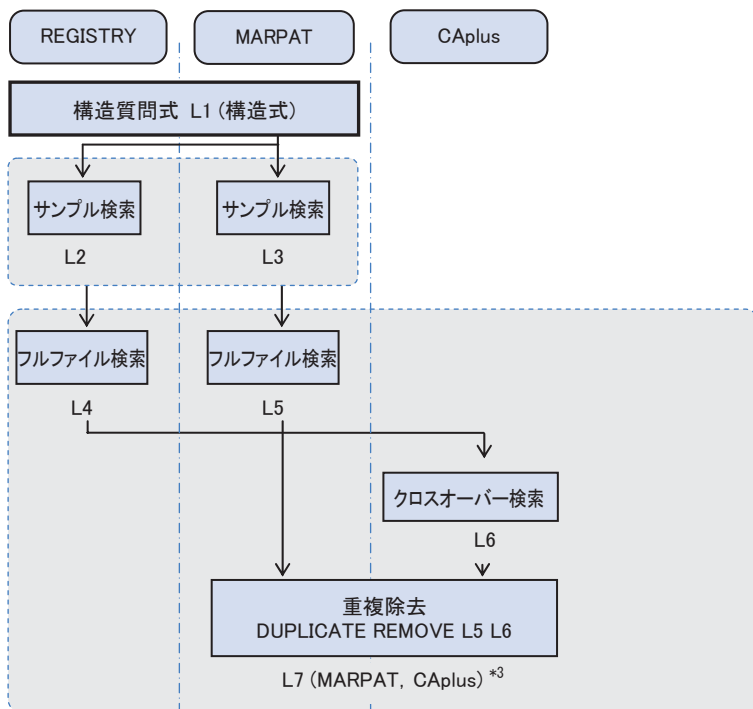
### 検索者による指示

=> FILE CASLINK \*1

構造質問式を  
アップロード \*2

=> S L1

=> S L1 FULL



\*1 Hcaslink ファイルクラスター (REGISTRY, MARPAT, HCAplus ファイル) も利用可能.

\*2 構造質問式は、REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルで共通のものを使用する.

\*3 L7 を利用して引き続きキーワード検索などの演算が可能.

例 : => S L7 AND JP/PC

=> S L7 AND ELECTROLUMINESCEN?

L7 を用いたサブセット検索も可能.

例 : => S L8 SUB=L7 SSS FULL (L8 は構造質問式)

# 11. CHEMLIST ファイル

## 11-1 CHEMLIST ファイルに収録されている主な既存化学物質リスト

日本	ENCS (Existing and New Chemical Substances List, 化審法)
米国	TSCA (Toxic Substances Control Act Chemical Substance Inventory)
カナダ	DSL (Canadian Domestic Substances List) NDSL (Canadian Non-Domestic Substances List)
欧州連合 (EU)	REACH (Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals) EINECS (European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances) ELINCS (European List of Notified Chemical Substances) NLP (No-Longer Polymers List)
スイス	SWISS (Giftliste 1, The Inventory of Notified New Substances in Accordance with the Ordinance on Substances)
韓国	ECL (Korean Existing Chemicals List)
フィリピン	PICCS (Philippines Inventory of Chemicals and Chemical Substances)
オーストラリア	AICS (Australian Inventory of Chemical Substances)
ニュージーランド	NZIoC (New Zealand Inventory of Chemicals)

## 11-2 CHEMLIST ファイルに収録されている規制リスト

欧州連合 (EU)	Dangerous Substances and Preparations, Annex XVII, EC 1907/2006 Exempt from Registration, Annex IV, EC 1907/2006 Candidate List of Substances of Very High Concern for authorisation Substances Subject to authorisation, Annex XIV Pollutant Release and Transfer Register (PRTR)
日本	Law for PRTR and Promotion of Chemical Management (Kakan-Ho)
中国	List of Toxic Chemicals Severely Restricted for Import and Export List of Toxic Chemicals Prohibited from Import and Export List of Toxic Chemicals Prohibited or Strictly Controlled
台湾	Taiwan Toxic Chemical Substances List
香港	Hazardous Chemicals Control Ordinance-Dangerous Goods List Hazardous Chemicals Control Ordinance-Section 8.Prohibited Goods
フィリピン	Priority Chemicals List
インド	List of Hazardous Chemicals
パキスタン	List of Prescribed Hazardous Chemicals
シンガポール	List of Controlled Hazardous Substances
カナダ	List of Toxic Substances: Schedule 1 CEPA National Pollutant Release Inventory Prohibited Toxic Substances List, Schedule 1, Prohibition of Toxic Substances Regulation
オーストラリア	National Pollutant Inventory Priority Existing Chemicals List
イスラエル	Proposed Israel Hazardous Substances List
エジプト	Hazardous Substances List: Banned Chemicals (List A) Hazardous Substances List: Hazardous Substances Subject to Permitting Procedure (List B)
メキシコ	Registry of Industrial Pollution and Transfer (RETC)
米国	RCRA Waste Minimization Program Priority Chemicals List
ロッテルダム 条約加盟国	Annex III chemical, subject to Prior Informed Consent (PIC) procedure

上記のほか、米国内の州法に基づくリストなども収録。

詳細はデータベースサマリーシート参照。

- 1) AN 2255 CHEMLIST  
 2) RN 107-13-1  
 3) CN 2-Propenenitrile (TSCA, DSL, AIGS, ECL, SWISS, PICCS, ASIA-PAC, NZIoC)  
 Acrylonitrile (English, French) (DSL, REACH, EINECS, ENCS, ECL, PICCS)  
 Acrylonitril (German) (EINECS)  
 acrylonitrilo (Spanish) (EINECS)  
 ACRYLNITRIL (German) (SWISS)  
 PROP-2-ENENITRILE (PICCS)  
 9: PN: W02006076009 PAGE: 115 claimed sequence  
 Acrylon  
 :  
 UN 1093  
 UN 1093 (DOT)  
 :
- 4) FS ASIA-PACIFIC: ASIA-PAC; AUSTRALIA: AIGS; CANADA: DSL, WHMIS; EEC:  
 EECDS, EINECS; EU: REACH; JAPAN: ENCS; KOREA: ECL; NEW ZEALAND:  
 NZIoC; PHILIPPINES: PICCS; Restricted Chemical Lists: RSTR;  
 SWITZERLAND: SWISS; USA: ACGIH, CAA, CERCLA, CWA, DOT, NIOSH, NTP, OSHA,  
 RCRA, SARA, STATE, TSCA; WHO: IARC
- 5) CBI Public  
 6) CFR 29 CFR Part 1910; 40 CFR Part 60; 40 CFR Part 63; 40 CFR Part 116; 40 CFR  
 Part 136; 40 CFR Part 261; 40 CFR Part 268; 40 CFR Part 269; 40 CFR Part  
 302; 40 CFR Part 355; 40 CFR Part 372; 40 CFR Part 423; 46 CFR Part 30;  
 46 CFR Part 150; 46 CFR Part 153
- 7) SC 29 CFR 1910.1000; 29 CFR 1910.1045; 40 CFR 261.5; 40 CFR 268.40; 40 CFR  
 268.42; 40 CFR 268.48; 46 CFR 30.25
- 8) RLN EPA No.: HW(RCRA) U009  
 EC No.: 203-466-5; 613-396-0  
 EINECS No.: 203-466-5  
 ENCS No.: 2-1513  
 ECL Serial No.: KE-29393  
 SWISS No.: G-1049  
 CHINA 6  
 HONG KONG 26  
 PAKISTAN 11  
 CANADA 50  
 INDIA 12  
 TAIWAN 51-01
- 9) INV On TSCA Inventory  
 June 2010 TSCA Inventory.  
 EPA Flags:  
 T Subject to Section 4 test rule  
 On DSL  
 Supplement to Canada Gazette, Part I, January 26, 1991.  
 On REACH  
 List of Pre-Registered Substances, March 2009.  
 Registration Date: 30-NOV-2010.  
 On EINECS  
 Annex to Official Journal of the European Communities, 15 June 1990.

- |              |             |                  |
|--------------|-------------|------------------|
| 1) レコード番号    | 2) CAS 登録番号 | 3) 化学物質名         |
| 4) ファイルセグメント | 5) 機密性      | 6) CFR 標題        |
| 7) CFR セクション | 8) 規制リスト番号  | 9) 既存化学物質リスト上の状況 |

On ENCS  
 Japanese Gazette, 01 Apr 2010.  
 This is a Type II Monitoring Chemical Substance; Serial No. 1057.  
 Contained within class: Low Molecular Chain-like Organic Compounds.

On AICS  
 Australian Inventory of Chemical Substances, June 1996 Ed.

On ECL  
 Korean Existing Chemicals List, January 1997.  
 Korean TCCL Designation, September 1997: Toxic Chemical No. 97-1-170.  
 This substance and mixtures containing more than 0.1%.

On SWISS  
 Giftliste 1 (List of Toxic Substances 1), 31 May 1999.  
 Toxic Category 1\*: Acute oral lethal dose up to 5 mg/kg and a possible carcinogen.

On PICCS  
 Philippines Inventory of Chemicals and Chemical Substances, 2000.

On ASIA-PAC

On NZIoC  
 New Zealand Inventory of Chemicals, 2006.  
 This substance has HSNO approval.

- 10) RSTR CHINA: List of Toxic Chemicals Prohibited or Strictly Controlled, 1998  
 RSTR CANADA: National Pollutant Release Inventory, 2010  
 Part 1A Core Substance.
- RSTR HONG KONG: Hazardous Chemicals Control Ordinance-Dangerous Goods List, 2007  
 Category 5; Exempt quantity: 20 L; Label B1 and D.
- RSTR JAPAN: Law for PRTR and Promotion of Chemical Management (Kakan-Ho), 2009  
 Class I Designated Chemical Substance.
- RSTR AUSTRALIA: National Pollutant Inventory, 2007
- RSTR MEXICO: Registry of Industrial Pollution and Transfer (RETC), Aug 2006
- RSTR EGYPT: Hazardous Substances List: Hazardous Substances Subject to Permitting Procedure (List B), 2002  
 Ministry of Industry is responsible for granting licenses for this substance.
- RSTR EU REACH: Dangerous Substances and Preparations, Annex XVII, EC 1907/2006
- RSTR EGYPT: Hazardous Substances List: Banned Chemicals (List A), 2002  
 Ministry of Commerce is responsible for granting licenses for this substance.
- RSTR PAKISTAN: List of Prescribed Hazardous Chemicals, 2003
- RSTR CANADA: List of Toxic Substances: Schedule 1 CEPA, Dec 27, 2006
- RSTR INDIA: List of Hazardous Chemicals, 2000
- RSTR TAIWAN: Taiwan Toxic Chemical Substances List, 2005  
 This is a Class I and II toxic chemical. Regulated threshold quantity is 50 Kg. Minimum control level is 50 w/w%.
- 11) FA RN CAS Registry Number  
 RLN Regulatory List Number  
 INV Inventory Status  
 RSTR Restricted Chemical Lists  
 4A Test Rule - TSCA Section 4a  
 8D Unpublished Report of Health/Safety Studies  
 8E Substantial Risk Report  
 ICC Interagency Testing Committee Candidate  
 ITC Interagency Testing Committee  
 :

10) 制限されている化学品リスト      11) フィールドの存在



コード	名称	索引 単位	検索例
/HTU	危険性、毒性、および用途の情報	単語	S MUTATION/HTU
/IARC	国際がん研究機関	単語	S GROUP 1/IARC
/ICC	省庁間試験委員会勧告	単語	S REVIEW#/ICC
/IER	輸入 - 輸出規制	単語	S TEST RULE/IER
/INV	既存化学物質リスト上の状況	単語	S (YES AND TSCA)/INV
/INVT	既存化学物質リスト上の状況テキスト	単語	S CANADA GAZETTE/INVT
/IUR	インベントリー報告規制関連物質リスト	単語	S 1998/IUR
/JDATA	化審法に関する補足データ	単語	S BIODEGRADABLE/JDATA
/LDR	RCRA 地中投棄制限	単語	S STANDARD/LDR
/MASS	マサチューセッツ州有害物質リスト	単語	S CAMPHOR OIL/MASS
/MCL	安全飲料水法による汚染物質の最大 レベル	単語	S L1 AND MAXIMUM/MCL
/MCLG	安全飲料水法の目標最大許容濃度	単語	S L1 AND MAXIMUM/MCLG
/MISC	その他の規制	単語	S DIOXIN#/MISC
/MTL	TSCA 第 4 条 - 優先試験物質リスト	単語	S (FIRST LISTED 1990)/MTL
/NREL	NIOSH 勧告暴露限界値	単語	S HEALTH EFFECTS/NREL
/NTPC	米国毒性プログラム発ガン性物質リスト	単語	S PHENYTOIN/NTPC
/ODC	米国大気清浄法によるオゾン層破壊物質	単語	S METHYL BROMIDE/ODC
/PAFA	FDA で優先的に評価された食品添加物	単語	S PARSLEY/PAFA
/PAI	EPA 殺虫剤活性成分	単語	S ACETATE/PAI
/PEL	OSHA 許容暴露レベル	単語	S PHOSGENE/PEL
/PET	TSCA 第 21 条 - 市民の請願	単語	S PCB/PET
/PII	EPA 殺虫剤不活性成分	単語	S LARD/PII
/PROP	化学的、物理学的物性	単語	S SOLUBILITY/PROP
/PROP65	カリフォルニア州案 65 リスト	単語	S ACRYLATE/PROP65
/RLN	規制リスト番号	句	S P 92-150/RLN
/RN	CAS 登録番号	句	S 77-47-4/RN
/RSTR	制限されている化学品リスト	単語	S INDIA/RSTR
/S110	SARA 第 110 条	単語	S PRIORITY LIST?/S110
/S313	SARA 第 313 条	単語	S COPPER/S313
/SC	CFR セクション	句	S 29 CFR 1910.119/SC
/SIDS	OECD スクリーニング用情報データ セットプロジェクト	単語	S BASE LEVEL/SIDS
/SIL	イリノイ州有害物質リスト	単語	S TEMEPHOS/SIL
/SLA	ルイジアナ州有害物質リスト	単語	S SARIN/SLA
/SMI	ミシガン州有害物質リスト	単語	S PARATHION/SMI
/SMN	ミネソタ州有害物質リスト	単語	S CYCASIN/SMN
/SNAP	米国 EPA 重要新規代替品プログラム	単語	S LIMITS/SNAP
/SNJ	ニュージャージー州有害物質リスト	単語	S MUTAGEN/SNJ
/SNY	ニューヨーク州有害物質放出および バルク貯蔵	単語	S CALCIUM/SNY
/SPA	ペンシルバニア州有害物質リスト	単語	S GASOLINE/SPA
/SRI	ロードアイランド州有害物質リスト	単語	E CYCLOPROPANE/SRI
/STOR	貯蔵、取り扱い、環境情報	単語	S SPILL? DISPOSAL/STOR
/STY	毒性/暴露の研究	単語	S DAPHN?/STY
/SUP	条文更新日	数値	S SUP>19880800
/TLV	ACGIH 規制値	単語	S BENZENE/TLV
/TRANS	輸送、包装、ラベル情報	単語	S UNBREAKABLE/TRANS
/TRNTP	米国毒性プログラム技術レポートリスト	単語	S PHENOL/TRNTP
/UNR	TSCA 第 6 条 - 不当な危険度	単語	S METALWORK?/UNR
/UP	更新日	数値	S UP>=19881000

コード	名称	索引 単位	検索例
/UVCB	UVCB 化学分類	単語	S PHENOLS/UVCB
/VIO	規制・勧告違反に関する情報	単語	S PREMANUF?/VIO
/VOC	米国大気清浄法セクション 111 による 揮発性有機化合物	単語	S EMISSION STANDARDS/VOC
/WGK	ドイツ水質危険クラス物質リスト	単語	S (HAZARD CLASS?)/WGK
/WHMIS	カナダ WHMIS 原料リスト	単語	S BENZENE/WHMIS
/XRN	相互参照 CAS 登録番号	句	S 9000-78-6/XRN

#### 11-5 CHEMLIST ファイルの主な回答表示形式

表示形式	表示内容
QRD (デフォルト)	IDE, HIT
ALL	すべての表示フィールド
IDE	AN と化合物同定情報 (化学物質名称は 50 名称まで), 既存化学物質リスト情報
FIDE	AN と化合物同定情報 (すべての化学物質名称), 既存化学物質リスト情報
HIT	ヒットした検索語を含むフィールド
KWIC	ヒットした検索語の前後 20 語を表示
OCC (無料)	ヒットタームの出現頻度をフィールドごとに表示

\* 表示形式の複数指定可能. 定型表示形式の他, 各フィールドコードも指定可能.

## 12. CHEMCATS ファイル

### 12-1 CHEMCATS ファイルの収録源

化学品カタログと化合物ライブラリの情報を収録。  
新規もしくは更新情報を追加する際にリロード。

#### 収録されているカタログの一覧表示

=> HELP CT# # のカタログリスト  
(# : アルファベット)

#### 入力例

=> HELP CTA A のカタログリスト  
=> HELP CTB B のカタログリスト  
=> HELP CTC C のカタログリスト

#### 供給会社の一覧表示

=> HELP SP# # の供給業者リスト  
(# : アルファベット)

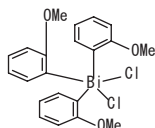
#### 入力例

=> HELP SPA A の供給業者リスト  
=> HELP SPB B の供給業者リスト  
=> HELP SPC C の供給業者リスト

カタログ, 供給会社の一覧 <http://www.cas.org/expertise/cascontent/chemcats/cslist.html>

### 12-2 CHEMCATS ファイルのレコード例 (ALL 表示形式)

- 1) Accession No. (AN): 0040347284 CHEMCATS
- 2) Catalog Name (CO): TCI Fine Chemicals 2010-2011
- 3) Publication Date (PD): 30 Nov 2010
- 4) Order Number (ON): T1956
- 5) Chemical Name (CN): Tris(2-methoxyphenyl)bismuth Dichloride
- 6) Synonym (CN): Dichlorotris(2-methoxyphenyl)bismuth
- 7) CAS Registry No. (RN): 121899-81-8
- 8) Purity :  $\geq 98.0\%$
- 9) Structure :



- 10) PRICES  
Quantity : 1 g, Price: ¥10700  
Quantity : 5 g, Price: ¥34500
- 11) COMPANY INFORMATION  
TOKYO CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD. (TOKYO KASEI KOGYO CO., LTD.)  
(Overseas Sales Office)  
TCI Bldg. 4-10-2, Nihonbashi-Honcho  
Chuo-ku  
Tokyo, 103-0023  
Japan  
Phone: +81-3-5640-8878  
Fax: +81-3-5640-8902  
Email: [globalbusiness@tokyokasei.co.jp](mailto:globalbusiness@tokyokasei.co.jp)  
Web: <http://www.tci-asiapacific.com>TOKYO CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD.  
:

- |           |               |              |         |
|-----------|---------------|--------------|---------|
| 1) レコード番号 | 2) カタログ名      | 3) カタログ発行日   | 4) 注文番号 |
| 5) 化学物質名  | 6) 同義名        | 7) CAS 登録番号  | 8) 純度   |
| 9) 構造図    | 10) 価格および包装単位 | 11) 会社に関する情報 |         |

### 12-3 CHEMCATS ファイルの検索フィールド

コード	名称	索引単位	検索例
無し (/BI) *1	基本索引 〔カタログ, 会社名, 所在地, 国名, 郵便番号または郵便コード, 化学物質 名, 商品名, 等級, 補遺語, テキスト, 製 品同定情報, 製品注記, CAS 登録番号〕	単語	S ZONYL S SODIUM SALT# S SULF? AND TECH S ?BENZSELENA? S 7773-06-0
/AN	レコード番号	句	S 0040347284/AN
/CN	化学物質名	句	S MEBENDAZOLE/CN
/CNS *1	化学物質名称セグメント	単語	S ?NAPHTH?/CNS
/CA *2	会社所在地 (State, City, Street を含む)	単語・句	S WASHINGTON/CA
/CO *2	会社名 (カタログ名)	単語・句	S ALDRICH/CO
/CY	国名	句	S (JAPAN OR JP)/CY
/ED	入力日	数値	S ED>=20000101
/FA	フィールドの存在	句	S RN/FA
/ON	注文番号	句	S A-395/ON
/PD	発行日	数値	S 19950502/PD
/PY	発行年	数値	S 1995/PY
/ST *2	補遺語	単語・句	S INORGANIC/ST
/TN	商品名	句	S CETATS/TN
/UP	更新日	数値	S UP>=19951000
/ZP	郵便番号または郵便コード	句	S 44202/ZP

\*1 後方一致, 中間一致検索可能。

\*2 (S) 演算子はスペースで代用可能。

### 12-4 CHEMCATS ファイルの主な回答表示形式

表示形式	表示内容
IDE (デフォルト)	AN, CO, PD, ON, 化学物質同定情報
ALL	すべての表示フィールド
COMP	会社に関する情報 (AN, CO, PD, CA, ZP, CY, その他テキスト情報)
MISC	AN, 製品に関する各種情報
PINFO	AN, 価格に関するテキスト情報
PRICE	AN, 価格および包装単位
PROD	AN, 製品に関するテキスト情報
PROP	AN, 物性情報
REF	AN, 参照情報
REGS	AN, 規制情報
SAFE	AN, 製品に関する注意事項
SINFO	AN, 安全性に関するテキスト情報
HIT	ヒットした検索語を含むフィールド
KWIC	ヒットした検索語の前後 20 語を表示
OCC (無料)	ヒットタームの出現頻度をフィールドごとに表示

\* 表示形式の複数指定可能。定型表示形式の他, 各フィールドコードも指定可能。

CHEMCATS ファイルへのカタログ情報提供については下記のサイトをご覧ください。  
<http://www.jaici.or.jp/chemcats/chemcats.htm>

## CAS FILES 関連資料

### JAICI (化学情報協会)

---

<http://www.jaici.or.jp/>

- STN 技術資料

[http://www.jaici.or.jp/stn/stn\\_doc.html](http://www.jaici.or.jp/stn/stn_doc.html)

- STN データベースサマリーシート

<http://www.jaici.or.jp/stn/dbsummary/db.html>

- STN 料金表

<http://www.jaici.or.jp/stn/tariff/plindex.html>

- 講習会

<https://www.jaici.or.jp/seminar/index.php>

- イベント

<https://www.jaici.or.jp/seminar/event.php>

- e-ラーニング (自習用教材)

<http://www.jaici.or.jp/stn/elearning/index.html>

### CAS (Chemical Abstracts Service)

---

<http://www.cas.org>

- CAS Databases

<http://www.cas.org/expertise/cascontent/index.html>

- Patent Coverage in Chemical Abstracts

<http://www.cas.org/expertise/cascontent/caplus/patcoverage/index.html>

# **JAICI**

化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

TEL: 0120-003-462

E-mail: [support@jaici.or.jp](mailto:support@jaici.or.jp)

110560