

STN INTERNATIONAL

リフレッシュセミナー

REGISTRY ファイル - 検索テクニック 2

目次

A 塩の検索方法

主な塩	1
金属分離型の塩	2
参考: 価数	6
検索例 1	9
検索例 2	12
金属結合型の塩	17
検索例 3	19
有機窒素塩基の塩	22
検索例 4	27
Ge, Sn, Pb, Sb, Bi の水素化物の塩	31

B 化学物質からの文献検索のポイント

REGISTRY ファイルの収録源	33
REGISTRY ファイルの出典情報	34
CAplus/CA ファイルに文献がない理由	37
検索例 1	39
検索例 2	43
参考: SR フィールドについて	50
参考: UVCB 物質の検索	51
検索例 3	52
検索例 4	55

C 結合非水素数

結合非水素数とは	59
結合非水素数の指定 - 環/鎖結合の指定	60
結合非水素数の指定 - 環結合の指定	63
結合非水素数の指定 - 鎖結合の指定	66
結合非水素数の指定 - まとめ	69
結合非水素数 - CSS 検索	70
検索例 1	70
結合非水素数 - SSS 検索	72
検索例 2	72
参考: 「環の孤立化」と「結合非水素数」について	75
検索例 3	76
参考: 一般式属性	78

APPENDIX

クラス識別子の定義	79
-----------------	----

A 塩の検索方法

REGISTRY ファイルに収録されている塩には様々な登録形式があります。
A 章では主な塩の登録形式と、その検索方法をご紹介します。

A 塩の検索方法

主な塩

塩には、金属塩、アミン類の塩、オニウム化合物の塩、その他の塩があり、それぞれ分子形の登録形式が異なる。そのため、塩を検索するには登録形式の規則を理解する必要がある。

よくある金属塩

- ・ 金属分離型 (多成分物質として索引される塩)

ヘテロ原子 (O, S, Se, Te, N, P, As) に結合している水素が無置換の金属で置換されて生成した塩

カルボアニオンの塩

- ・ 金属結合型 (単成分として索引される)

環状構造をとる塩

2 種類以上の有機成分を含む化合物と可変原子価金属との塩

- ・ 配位化合物 *

- 原文献によって、配位化合物または塩で索引される。

有機窒素塩基の塩

- ・ アミン類の塩

- ・ オニウム化合物

その他の塩

- ・ Ge, Sn, Pb, Sb, Bi の水素化物の塩

金属分離型で登録される。(多成分物質として索引される塩)

別の金属が存在する場合, Ge, Sn, Pb, Sb, Bi は非金属として扱われる。

四価の Ge, Sn, Pb, および三価の Sb, Bi とアミン, リン化水素, ヒ化水素との塩は金属結合型になる。

* 配位化合物の検索方法については、リフレッシュセミナー「化学物質検索 III」のテキスト (<http://www.jaici.or.jp/stn/ref-substance.pdf>) を参照

A 塩の検索方法

金属分離型の塩

金属分離型 (多成分物質として索引される塩)

ヘテロ原子 (O, S, Se, Te, N, P, As) に結合している水素が無置換の金属で置換されて生成した塩

例 : カルボン酸, 硝酸, 硫酸, 燐酸, アルコール類, フェノール類 など

- 分子式 (MF) は各成分をピリオドで分離する.

水素も含めた酸の分子式 . 金属元素

- 分子式の入力に関する注意点

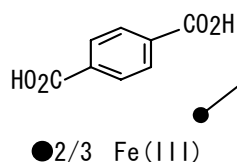
例 1:

IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, iron(3+) salt (3:2)

MF $C_8 H_6 O_4$. $\frac{2}{3} Fe$

1. 有機化合物の成分の係数を必ず 1 にする

2. 金属の係数は整数または分数で表示する
不定比の場合は, "X" を付与する (例 2 参照)



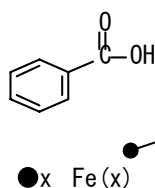
価数は構造中に表示されるが, 分子式中には表示されない

- 常に価数が決まっている金属 (Na^+ , Mg^{2+} など) に対しては価数を表示しない
- 複数の価数を持つ金属に対して価数を表示する
- 価数が不明なときは "X" とする (例 2 参照)

例 2:

IN Benzoic acid, iron salt (1:?)

MF $C_7 H_6 O_2$. $x Fe$



不定比の場合は, "X" を付与する

価数が不明の時は, "X" とする

A 塩の検索方法

金属分離型の塩

- 成分 CAS 登録番号の付与に関する注意点

- 大部分の多成分物質に対しては単原子フラグメント (Single Atom Fragment : SAF) の成分 CAS 登録番号は収録されていない.*

- ・ 単原子フラグメントとは、任意の数の水素原子と 1 個または 0 個の非水素原子のみからなる成分のことである。

SAF の例 : H, Cl, HCl, Na, H₂O など

それ以外の成分は多原子フラグメント (Multi Atom Fragment : MAF) になる。

- 多原子フラグメント (MAF) の成分 CAS 登録番号は CRN フィールドに括弧で囲まれて表示される。

➤ レコード例

RN 88147-58-4 REGISTRY

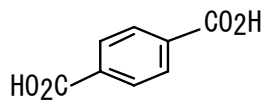
ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, iron(3+) salt (3:2) (CA INDEX NAME)

MF C8 H6 O4 . 2/3 Fe

LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER

CRN (100-21-0)



● 2/3 Fe(III)

1,4-Benzenedicarboxylic acid の CAS 登録番号 100-21-0 が CRN フィールドに表示される

単原子フラグメントである Fe の CAS 登録番号は表示されない

2 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

2 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

➤ 検索時の注意点

多成分物質で登録されている塩を検索する場合には、単原子フラグメントの成分 CAS 登録番号からは検索できないが、多原子フラグメントの成分 CAS 登録番号からは検索できる。

=> S 100-21-0/CRN ← 多原子フラグメントの成分 CAS 登録番号検索
L1 26646 100-21-0/CRN

=> S L1 AND 88147-58-4
L2 1 L1 AND 88147-58-4

* 例外 : 合金と表形式無機化合物については、合金や無機化合物を構成する各元素の成分 CAS 登録番号が収録されている。

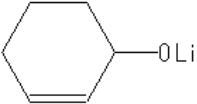
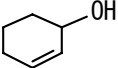
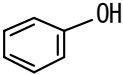
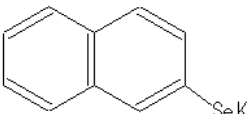
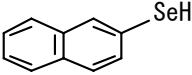
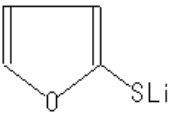
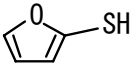
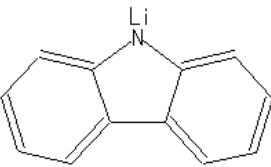
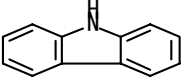
A 塩の検索方法

金属分離型の塩

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
CH_3COONa	IN Acetic acid, sodium salt (1:1) MF C2 H4 O2 . Na CI COM $\text{HO}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}_3$ ●Na
$\begin{array}{c} \text{OEt} \\ \\ \text{EtO}-\text{Ti}-\text{OEt} \\ \\ \text{OEt} \end{array}$	IN Ethanol, titanium(4+) salt (4:1) MF C2 H6 O . 1/4 Ti CI COM $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{OH}$ ●1/4 Ti(IV)
CaNCN	IN Cyanamide, calcium salt (1:1) MF C H2 N2 . Ca CI COM $\text{H}_2\text{N}-\text{C}=\text{N}$ ●Ca
Ph_2PLi	IN Phosphine, diphenyl-, lithium salt (1:1) MF C12 H11 P . Li CI COM $\text{Ph}-\text{PH}-\text{Ph}$ ●Li
Li_2AsPh	IN Arsine, phenyl-, dilithium salt (9CI) MF C6 H7 As . 2 Li $\text{C}_6\text{H}_5-\text{AsH}_2$ ●2 Li
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \quad \text{CH}_3 \\ \quad \\ \text{KO}-\text{Si}-\text{O}-\text{Si}-\text{OK} \\ \quad \\ \text{CH}_3 \quad \text{CH}_3 \end{array}$	IN 1,3-Disiloxanediol, 1,1,3,3-tetramethyl-, dipotassium salt (8CI, 9CI) MF C4 H14 O3 Si2 . 2 K CI COM $\begin{array}{c} \text{Me} \quad \text{OH} \\ \quad \\ \text{Me}-\text{Si}-\text{O}-\text{Si}-\text{Me} \\ \quad \\ \text{OH} \quad \text{Me} \end{array}$ ●2 K

A 塩の検索方法

金属分離型の塩

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
	IN 2-Cyclohexen-1-ol, lithium salt (9Cl) MF C6 H10 O . Li  ● Li
PhONa	IN Phenol, sodium salt (1:1) MF C6 H6 O . Na Cl COM  ● Na
	IN 2-Naphthaleneselenol, potassium salt (9Cl) MF C10 H8 Se . K  ● K
	IN 2-Furanthiol, lithium salt (8Cl, 9Cl) MF C4 H4 O S . Li  ● Li
	IN 9H-Carbazole, lithium salt (1:1) MF C12 H9 N . Li  ● Li

* 可変原子価金属以外の金属（アルカリ金属，アルカリ土類金属，Al，Ga など）のフリーラジカル塩類は有機成分の中のヘテロ原子に直接結合している。

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
Me-O-Ca·	IN Calcium, methoxy- (9Cl) MF C H3 Ca O H3C—O—Ca

A 塩の検索方法

参考 : 価数

下記の表は金属元素を示す. (* が付与された金属は一つの価数のみ存在する)

名称	元素記号	名称	元素記号
Actinium	Ac	Molybdenum	Mo
* Aluminum	Al	Neodymium	Nd
Americium	Am	Neptunium	Np
Antimony	Sb	Nickel	Ni
* Barium	Ba	Niobium	Nb
Berkelium	Bk	Nobelium	No
* Beryllium	Be	Osmium	Os
Bismuth	Bi	Palladium	Pd
* Cadmium	Cd	Platinum	Pt
* Calcium	Ca	Plutonium	Pu
Californium	Cf	Polonium	Po
Cerium	Ce	* Potassium	K
* Cesium	Cs	Praseodymium	Pr
Chromium	Cr	Promethium	Pm
Cobalt	Co	Protactinium	Pa
Copper	Cu	* Radium	Ra
Curium	Cm	Rhenium	Re
Dysprosium	Dy	Rhodium	Rh
Einsteinium	Es	* Rubidium	Rb
Erbium	Er	Ruthenium	Ru
Europium	Eu	Samarium	Sm
Fermium	Fm	Scandium	Sc
* Francium	Fr	Silver	Ag
Gadolinium	Gd	* Sodium	Na
* Gallium	Ga	* Strontium	Sr
Germanium	Ge	Tantalum	Ta
Gold	Au	Technetium	Tc
Hafnium	Hf	Terbium	Tb
Holmium	Ho	Thallium	Tl
Indium	In	Thorium	Th
Iridium	Ir	Thulium	Tm
Iron	Fe	Tin	Sn
Lanthanum	La	Titanium	Ti
Lawrencium	Lr	Tungsten	W
Lead	Pb	Uranium	U
* Lithium	Li	Vanadium	V
Lutetium	Lu	Ytterbium	Yb
* Magnesium	Mg	Yttrium	Y
Manganese	Mn	* Zinc	Zn
Mendelevium	Md	Zirconium	Zr
Mercury	Hg		

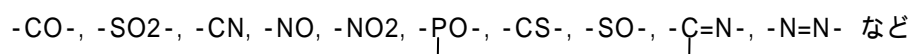
A 塩の検索方法

金属分離型の塩

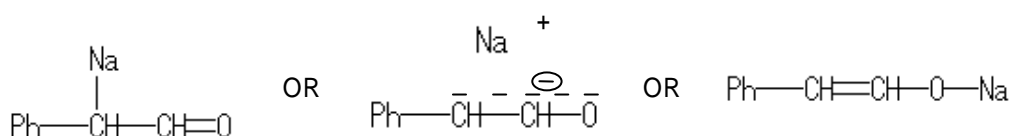
カルボアニオンの塩

- ・カルボアニオンとは負電荷を持つ炭素であり、負電荷炭素を安定化させるグループと結合すると安定になる。

- 安定化させるグループとは、



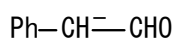
- ・カルボアニオンの金属塩は原報によって、以下のように異なる構造で記載されることがある。



構造の書き方は違ったとしても同じ物質である。そこで REGISTRY ファイルでは一つの構造として収録される。

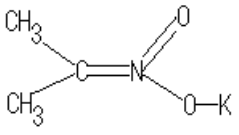
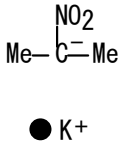
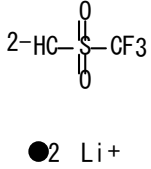
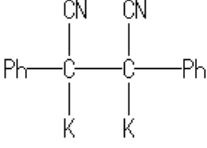
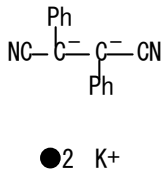
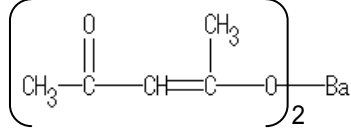
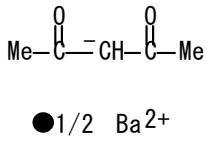
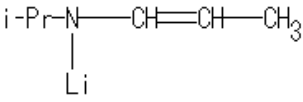
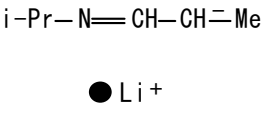
カルボアニオンの塩は、炭素上に電荷が局在化しているカルボアニオンに、安定化グループ (-CO-, -SO₂-, -CN など) で二重結合が存在する構造を持つ) が結合した成分とカチオンの金属の多成分物質として収録される。

IN Benzeneacetaldehyde, ion(1-), sodium (9Cl)
MF C8 H7 O . Na



A 塩の検索方法

金属分離型の塩

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
	<p>IN Propane, 2-nitro-, ion(1-), potassium (1:1) MF C3 H6 N O2 . K</p>  <p>● K⁺</p>
<p>Li₂CHSO₂CF₃</p>	<p>IN Methane, trifluoro(methylsulfonyl)-, ion(2-), dilithium (9Cl) MF C2 H F3 O2 S . 2 Li</p>  <p>●2 Li⁺</p>
	<p>IN Butanedinitrile, 2,3-diphenyl-, ion(2-), dipotassium (9Cl) MF C16 H10 N2 . 2 K</p>  <p>●2 K⁺</p>
	<p>IN 2,4-Pentanedione, ion(1-), barium (2:1) MF C5 H7 O2 . 1/2 Ba Cl COM</p>  <p>●1/2 Ba²⁺</p>
	<p>IN 2-Propanamine, N-propylidene-, ion(1-), lithium (9Cl) MF C6 H12 N . Li</p>  <p>● Li⁺</p>

A 塩の検索方法

検索例 1 特定化学物質の金属塩

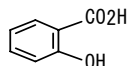
検索例 1: サリチル酸の金属塩を検索する.

```
=> FILE REGISTRY                                ← REGISTRY ファイルに入る
=> E SALICYLIC ACID/CN 5                          ← 名称 (/CN) を EXPAND で確認
E1          1 SALICYLHYDROXAMIC ACID/CN
E2          1 SALICYLHYDROXAMIC ACID, SODIUM SALT/CN
E3          1 --> SALICYLIC ACID/CN
E4          1 SALICYLIC ACID (2,6-DICHLOROBENZYLIDENE)HYDRAZIDE/CN
E5          1 SALICYLIC ACID B-GLUCOSIDASE/CN

=> S E3                                           ← E3 を検索
L1          1 "SALICYLIC ACID"/CN

=> D SCAN                                         ← SCAN 表示形式で確認 (無料)
```

```
L1 1 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Benzoic acid, 2-hydroxy-
MF C7 H6 O3
CI COM
```

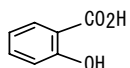


PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

```
=> D
L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY  COPYRIGHT 2008 ACS on STN
RN 69-72-7 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Benzoic acid, 2-hydroxy- (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Salicylic acid (6CI, 8CI)
OTHER NAMES:
CN 171
CN 2-Carboxyphenol
CN 2-Hydroxybenzenecarboxylic acid
:
DR 7681-06-3, 8052-31-1
MF C7 H6 O3
CI COM
LC STN Files: ADISNEWS, AGRICOLA, ANABSTR, AQUIRE, BEILSTEIN*, BIOSIS,
:
Other Sources: DSL**, EINECS**, TSCA**
(**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
```

参考として表示
(IDE 表示形式)



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

```
29549 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
3595 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
29640 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
7 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)
```

A 塩の検索方法

検索例 1 - 特定化学物質の金属塩

=> SEL RN
E1 THROUGH E1 ASSIGNED

SEL RN は L 番号 1 件あたり課金される
(2008 年 8 月現在 12 円)

* CAS 登録番号を既に表示した場合は, SEL RN を行わず
直接 =>S CAS 登録番号/CRN で検索を実行しても良い

=> D SEL E1
E1 1 69-72-7/BI

=> S E1/CRN
L2 2331 69-72-7/CRN

← 成分 CAS 登録番号を利用してサリチル酸の
多成分物質を検索する

=> S L2 AND M/ELS
4411123 M/ELS
L3 385 L2 AND M/ELS

← 金属を含む物質に限定する

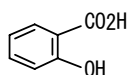
=> S L3 AND 2/NC
3398023 2/NC
L4 70 L3 AND 2/NC

← 2 成分に限定する

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認する (無料)

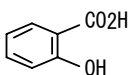
L4 70 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Salicylic acid, dimer, potassium salt (6Cl)
MF C7 H6 O3 . 1/2 K



●1/2 K

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 69

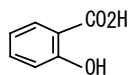
L4 70 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Benzoic acid, 2-hydroxy-, bismuth(3+) salt (3:1)
MF C7 H6 O3 . 1/3 Bi



●1/3 Bi(III)

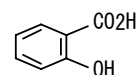
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

L4 70 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Benzoic acid, 2-hydroxy-, lithium-6Li salt (1:1)
MF C7 H6 O3 . Li



●6Li

L4 70 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Benzoic acid, 2-hydroxy-, thorium(4+) salt (2:1)
MF C7 H6 O3 . 1/2 Th



●1/2 Th(IV)

:

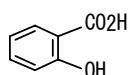
A 塩の検索方法

検索例 1 - 特定化学物質の金属塩

=> S L4 AND LI/ELS ← *Li* の金属塩に限定する
121200 LI/ELS
L5 4 L4 AND LI/ELS

=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式で確認 (無料)

L5 4 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Benzoic acid, 2-hydroxy-, lithium salt (1:1)
MF C7 H6 O3 . Li

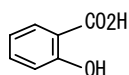


●Li

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

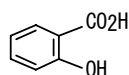
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):3

L5 4 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Benzoic acid, 2-hydroxy-, lithium salt (9C1)
MF C7 H6 O3 . x Li



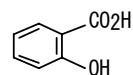
●x Li

L5 4 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Benzoic acid, 2-hydroxy-, lithium salt (1:2)
MF C7 H6 O3 . 2 Li



●2 Li

L5 4 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Benzoic acid, 2-hydroxy-, lithium-6Li salt (1:1)
MF C7 H6 O3 . Li



●6Li

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

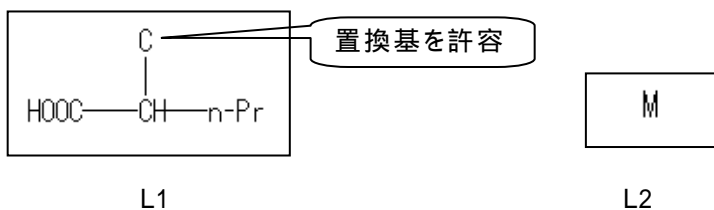
A 塩の検索方法

検索例 2 酸の誘導体の金属塩

検索例 2 : 2-メチル吉草酸および誘導体の金属塩を検索する .

- ・ 酸やアミンの誘導体を検索する場合は , 部分構造を利用する .
- 二つの構造フラグメントを別々の構造質問式として作図する .

構造質問式



=> S L1 AND L2

- 回答には二つの構造が同一成分中に存在するもの , および別々の成分中存在するものが検索される .

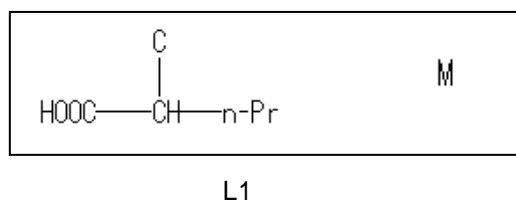


目的とする酸の金属塩が検索できる .

- 複数の構造質問式を AND 検索した場合は , 追加の構造検索語料は課金されない .

参考 : 二つの構造フラグメントを一つの構造質問式として作図した場合

構造質問式



=> S L1

- 回答には , 二つの構造が同一成分中に存在する化合物のみが検索される .



酸の金属塩は検索されない

A 塩の検索方法

検索例 2 酸の誘導体の金属塩

=> FILE REGISTRY

← *REGISTRY* ファイルに入る

=>

Uploading C:\Documents and Settings\STN User\My Documents\STN Express 8.3\Queries
¥PR2 ACID.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=>

Uploading C:\Documents and Settings\STN User\My Documents\STN Express 8.3\Queries
¥PR2 M.str

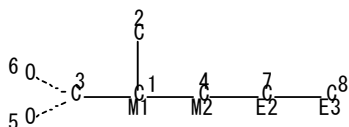
L2 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L1

← *D QUE L#* と入力するとアップロードした
構造質問式を確認できる (無料)

L1

STR



NODE ATTRIBUTES:

HCOUNT IS M1 AT 1
 HCOUNT IS M2 AT 4
 HCOUNT IS E2 AT 7
 HCOUNT IS E3 AT 8
 NSPEC IS C AT 1
 :
 NSPEC IS C AT 8
 DEFAULT MLEVEL IS ATOM
 MLEVEL IS CLASS AT 1 2 3 4 5 6 7 8
 DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:

RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED
 NUMBER OF NODES IS 8

STEREO ATTRIBUTES: NONE

=> D QUE L2

L2

STR

M 1

NODE ATTRIBUTES:

NSPEC IS C AT 1
 DEFAULT MLEVEL IS ATOM
 MLEVEL IS CLASS AT 1
 DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:

RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED
 NUMBER OF NODES IS 1

STEREO ATTRIBUTES: NONE

NUMBER OF NODES IS 8

STEREO ATTRIBUTES: NONE

A 塩の検索方法

検索例 2 酸の誘導体の金属塩

=> S L1 AND L2 ← サンプル検索 (無料)
SAMPLE SEARCH INITIATED 15:48:35 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 48014 TO ITERATE

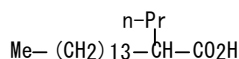
4.2% PROCESSED 2000 ITERATIONS 1 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 947198 TO 973362
PROJECTED ANSWERS: 187 TO 773

L3 1 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認 (無料)

L3 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Hexadecanoic acid, 2-propyl-, sodium salt (1:1)
MF C19 H38 O2 . Na



● Na

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> S L1 AND L2 FULL ← フルファイル検索を実行
FULL SEARCH INITIATED 15:48:58 FILE 'REGISTRY'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 959909 TO ITERATE

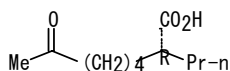
100.0% PROCESSED 959909 ITERATIONS 143 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.07

L4 143 SEA SSS FUL L1 AND L2

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認 (無料)

L4 143 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Octanoic acid, 7-oxo-2-propyl-, sodium salt (1:1), (2R)-
MF C11 H20 O3 . Na

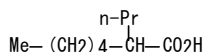
Absolute stereochemistry.



● Na

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 142

L4 143 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Heptanoic acid, 2-propyl-, cadmium salt (2:1)
MF C10 H20 O2 . 1/2 Cd

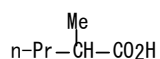


● 1/2 Cd

A 塩の検索方法

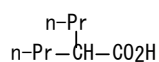
検索例 2 酸の誘導体の金属塩

L4 143 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Valeric acid, 2-methyl-, potassium salt (8Cl)
MF C6 H12 O2 . K



● K

L4 143 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Pentanoic acid, 2-propyl-, iron(2+) salt (9Cl)
MF C8 H16 O2 . 1/2 Fe



● 1/2 Fe(II)

:

=> S L4 AND K/ELS

← K/ELS でカリウム塩に限定する

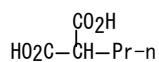
124083 K/ELS

L5 5 L4 AND K/ELS

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認 (無料)

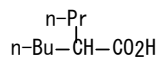
L5 5 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Propanedioic acid, propyl-, dipotassium salt (9Cl)
MF C6 H10 O4 . 2 K



● 2 K

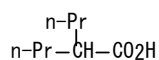
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 4

L5 5 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Hexanoic acid, 2-propyl-, potassium salt (9Cl)
MF C9 H18 O2 . K



● K

L5 5 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Pentanoic acid, 2-propyl-, potassium salt (9Cl)
MF C8 H16 O2 . K

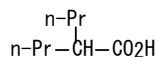


● K

A 塩の検索方法

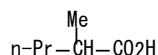
検索例 2 酸の誘導体の金属塩

L5 5 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Pentanoic acid, 2-propyl-, potassium salt (4:1)
MF C8 H16 O2 . 1/4 K



●1/4 K

L5 5 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Valeric acid, 2-methyl-, potassium salt (8C1)
MF C6 H12 O2 . K



●K

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

参考：スクリーンを利用した構造検索

- ・スクリーン番号 1918 は 1 以上の金属原子 (M) の存在を意味する。
検索例 2 で使用した金属の構造質問式の代わりに、スクリーン番号 1918 を利用することもできる。

=> FILE REGISTRY

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 1918

← スクリーンコマンドでスクリーンセットを作成

L2 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2

← 構造質問式とスクリーンを組み合わせてサンプル検索を実行

SAMPLE SEARCH INITIATED 16:06:04 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -

=> S [構造 L 番号] AND [SCREEN L 番号]

100.0% PROCESSED 802 ITERATIONS

SEARCH TIME: 00.00.01

* AND 演算子での演算は、スクリーンの構造的特徴を持つ回答に限定できる

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**

BATCH **COMPLETE**

PROJECTED ITERATIONS: 14341 TO 17739

PROJECTED ANSWERS: 22 TO 418

L3 11 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> S L1 AND L2 FULL

← フルファイル検索を実行

FULL SEARCH INITIATED 16:06:12 FILE 'REGISTRY'

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 16374 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 16374 ITERATIONS

143 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.11

L4 143 SEA SSS FUL L1 AND L2

* 詳細は「化学物質検索 III」(<http://www.jaici.or.jp/stn/ref-substance.pdf>) を参照

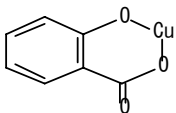
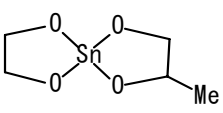
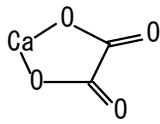
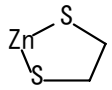
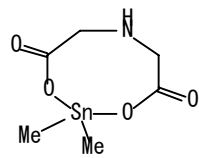
A 塩の検索方法

金属結合型の塩

金属結合型 (単成分物質として索引される塩)

環状構造をとる塩

- 水素が多価金属に置換されて環を形成する.
- ・ ヘテロ原子に金属が直接結合し, 環状構造になる場合は 5 員環または 6 員環である. ただし金属 Ge, Sn, Pb, Sb, Bi の場合は環のサイズの制限はない.

IN MF CI	Copper, [2-(hydroxy-kO)benzoato(2-)-kO]- C7 H4 Cu O3 COM	
IN MF	1,4,6,9-Tetraoxa-5-stannaspiro[4.4]nonane, 2-methyl- C5 H10 O4 Sn	
IN MF CI	Calcium, [ethanedioato(2-)-0,0']-, labeled with deuterium (9CI) C2 Ca O4 COM	
IN MF	Zinc, [1,2-ethanedithiolato(2-)-kS, kS']- (9CI) C2 H4 S2 Zn	
IN MF	4H-1,3,6,2-Dioxazastannocine-4,8(5H)-dione, dihydro-2,2-dimethyl- C6 H11 N O4 Sn	

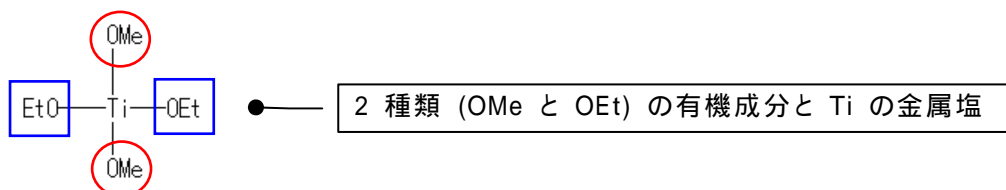
A 塩の検索方法

金属結合型の塩

2 種類以上の有機成分を含む化合物と可変原子価金属との塩

- 2 種類以上の有機成分と金属の塩の場合は、金属と有機成分のヘテロ原子が結合し、金属結合型になる。

例：



文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
$\begin{array}{c} \text{OMe} \\ \\ \text{EtO}-\text{Ti}-\text{OEt} \\ \\ \text{OMe} \end{array}$	IN Titanium, diethoxydimethoxy-, (T-4)- (9Cl) MF C6 H16 O4 Ti $\begin{array}{c} \text{OMe} \\ \\ \text{EtO}-\text{Ti}-\text{OEt} \\ \\ \text{OMe} \end{array}$
$\begin{array}{c} \text{OAc} \\ \\ \text{n-BuO}-\text{Sn}-\text{OBu-n} \\ \\ \text{OBu-n} \end{array}$	IN Stannane, (acetyloxy)tributoxy- (9Cl) MF C14 H30 O5 Sn $\begin{array}{c} \text{OAc} \\ \\ \text{n-BuO}-\text{Sn}-\text{OBu-n} \\ \\ \text{OBu-n} \end{array}$
$\text{AcO}-\text{Ba}-\text{O}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}_2-\text{NH}_2$	IN Barium, (acetato-0)(glycinato-0)- (9Cl) MF C4 H7 Ba N O4 $\text{AcO}-\text{Ba}-\text{O}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}_2-\text{NH}_2$

- ・ 注意) 1 種類の有機成分と金属の塩の場合は金属分離型 (P.2) として収録される。

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
$\begin{array}{c} \text{OEt} \\ \\ \text{EtO}-\text{Ti}-\text{OEt} \\ \\ \text{OEt} \end{array}$	IN Ethanol, titanium(4+) salt (4:1) MF C2 H6 O . 1/4 Ti Cl COM $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{OH}$ ●1/4 Ti(IV)

A 塩の検索方法

検索例 3 - 環状構造をとる塩

検索例 3 : マロン酸 ($\text{CH}_2(\text{COOH})_2$) のカルシウム塩を検索する

=> FILE REGISTRY

← *REGISTRY* ファイルに入る

=> E C3H4O4. CA/MF 5

← 分子式 (/MF) を *EXPAND* で確認する

E1	2	C3H4O4. C2H8N2/MF
E2	1	C3H4O4. C2H8N6/MF
E3	0 -->	C3H4O4. CA/MF
E4	1	C3H4O4. CA. 2H2O/MF
E5	1	C3H4O4. CA. H2O/MF
E6	1	C3H4O4. CD. 2H2O/MF
E7	1	C3H4O4. CH2O2. 3TL/MF
E8	1	C3H4O4. CH4N2O/MF
E9	1	C3H4O4. CH4O3S/MF
E10	1	C3H4O4. CH5N/MF
E11	1	C3H4O4. CH5N3/MF
E12	1	C3H4O4. CH6N2/MF

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

しかし、マロン酸のカルシウム塩のように水素が可変原子金属に置換し環を形成する場合はこの規則を適用すると 0 件となる。

=> E C3H2CAO4/MF 5

環状構造をとる金属塩の場合は、単一成分として本来の組成である $\text{C}_3\text{H}_2\text{CAO}_4$ が分子式となる

E1	1	C3H2BRT/MF
E2	1	C3H2CA7NA3O23P3/MF
E3	1 -->	C3H2CAO4/MF
E4	1	C3H2CAO4. 2H2O/MF
E5	1	C3H2CDCLNOS/MF

=> S E3

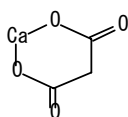
← *E3* を検索する

L1 1 C3H2CAO4/MF

=> D

← *IDE* 表示形式で表示する

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
 RN 19455-76-6 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Calcium, [propanedioato(2-)-κO1, κO3]- (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Calcium, [propanedioato(2-)-O, O']-
 CN Malonic acid, calcium salt (1:1) (8CI)
 CN Propanedioic acid, calcium complex
 OTHER NAMES:
 CN Cal-Med
 CN Calcium malonate
 MF **C3 H2 Ca O4**
 CI COM
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, CSCHEM, DETHERM*,
 IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, PROMT, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL, USPATOLD
 (*File contains numerically searchable property data)
 Other Sources: EINECS**, NDSL**, TSCA**
 (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)



49 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 50 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

A 塩の検索方法

検索例 3 - 環状構造をとる塩

マロン酸カルシウムは環状構造をとるが、原資料の記載によっては多成分物質として登録されることもある。そのため、可能性のある分子式を EXPAND して確認することを推奨する。

=> E C3H4O4.1/2CA/MF 5 ← (HOOCCH₂COO)₂Ca の分子式を
 E1 1 C3H4O4.1/2BA/MF EXPAND で確認する
 E2 1 C3H4O4.1/2C2H8N2.1/2H2O/MF
E3 1 --> C3H4O4.1/2CA/MF
 E4 1 C3H4O4.1/2CD/MF
 E5 1 C3H4O4.1/2CE.3/2H2O/MF

=> S E3 ← E3 を検索する
 L2 1 C3H4O4.1/2CA/MF

=> D ← IDE 表示形式で表示する

L2 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
 RN 819-78-3 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Propanedioic acid, calcium salt (2:1) (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Calciate(2-), bis[propanedioato(2--0,0')-], dihydrogen, (T-4)-
 MF C3 H4 O4 . 1/2 Ca
 LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER
 CRN (141-82-2)

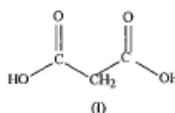
HO2C-CH₂-CO2H

●1/2 Ca

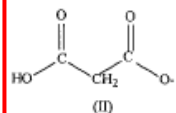
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

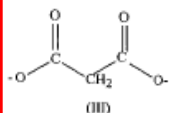
The neutral acid structure I dominates at pH < 1.9, the monoanion structure II [malonate(-1)] dominates at pH 4 and the dianion structure III [malonate(-2)] dominates at pH > 7. The total concentration of malonate has been reported to be as high as 2540 ppm in natural water,² although values less than a few hundred parts per million are more commonly found.³



(I)



(II)



(III)

819-78-3 が索引されている原報を確認 (J. Phys. Chem. A 2001, 105, 1876-1881 より抜粋)

and sodium malonate(-1), respectively. The variable x determined the concentration of each species

$$k_{\text{obs}} = k_1(a - x) + k_2(x) \quad (2)$$

Malonate(-1) decarboxylates more slowly than malonic acid, which has been interpreted to result from resonance stabilization

TABLE 4: Pseudo-First-Order Rate Constants for the Decarboxylation of Group 1 and 2 Malonate(-1) Salts under 275 bar

	k ($s^{-1} \times 10^3$)					
	$T = 140\text{ }^\circ\text{C}$	$T = 150\text{ }^\circ\text{C}$	$T = 160\text{ }^\circ\text{C}$	$T = 170\text{ }^\circ\text{C}$	$T = 180\text{ }^\circ\text{C}$	$T = 190\text{ }^\circ\text{C}$
Li	1.75 ± 0.42	4.26 ± 0.81	9.26 ± 1.83	18.25 ± 2.78	34.45 ± 4.48	61.94 ± 5.17
Na	1.87 ± 0.34	4.52 ± 0.79	10.03 ± 1.54	19.98 ± 2.94	41.28 ± 5.07	93.86 ± 45.2
K	1.90 ± 0.33	4.61 ± 0.78	10.15 ± 1.73	20.67 ± 2.48	41.69 ± 3.04	74.41 ± 6.72
Rb	2.49 ± 0.17	5.88 ± 0.38	12.94 ± 0.79	26.59 ± 3.06	51.27 ± 5.24	96.36 ± 21.4
Cs	2.41 ± 0.21	5.70 ± 0.61	12.36 ± 1.43	24.80 ± 2.95	48.16 ± 7.88	95.29 ± 11.6
Mg	1.62 ± 0.05	4.10 ± 0.30	8.75 ± 0.57	15.86 ± 1.91	30.98 ± 4.25	
Ca	0.99 ± 0.05	2.40 ± 0.098	5.43 ± 0.18	11.31 ± 0.50	21.83 ± 0.86	
Sr	1.40	3.28				

or the decarboxylation process: the magnitude and sign of ΔS^\ddagger are consistent with the existence of an associative transition state. The mechanism proposed above implies an entropy loss in the order malonate(-2) > malonate(-1) > malonic acid. This trend is consistent with the fact that (i) the cyclic intermediate (and

error despite the use of real-time detection or the inversely rate-absorbing asymmetric stretching mode of CO₂. Group 1 cations Li⁺, Na⁺, K⁺, Rb⁺, Cs⁺ and Group 2 cations Mg²⁺, Ca²⁺, and Sr²⁺ in stoichiometric 0.25 m malonate(-1) salt solutions were successfully characterized at 140–190 °C and 275 bar, although

A 塩の検索方法

検索例 3 - 環状構造をとる塩

=> E C3H4O4.XCA/MF 5 ← マロン酸とカルシウムが不定比の場合を考慮した分子式を確認
E1 1 C3H4O4.XC2H7N/MF
E2 1 C3H4O4.XC2H7NO/MF
E3 1 --> C3H4O4.XCA/MF
E4 1 C3H4O4.XCH4N2O/MF
E5 1 C3H4O4.XCH4O/MF

=> S E3 ← E3 を検索
L3 1 C3H4O4.XCA/MF

=> D ← IDE 表示形式で表示する

L3 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
RN 74220-18-1 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Propanedioic acid, calcium salt (1:?) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Malonic acid, calcium salt (7C1)
CN Propanedioic acid, calcium salt (9C1)
DR 857210-18-5
MF **C3 H4 O4 . x Ca**
SR CAS EARLY REGISTRATIONS
LC STN Files: BEILSTEIN*, CA, CAPLUS, GMELIN*
(*File contains numerically searchable property data)
CRN (141-82-2)

HO2C-CH2-CO2H

●x Ca

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



74220-18-1 が索引されている原報を確認
(WO 2007/066083 の 特許請求範囲からの抜粋)

17. An image article according to claim 16 wherein the organic acid is selected from citric acid, malic acid, maleic acid, formic acid, succinic acid, **malonic acid,** salicylic acid, propionic acid, acetic acid, bitanetetracarboxylic acid, bitanetricarboxylic acid and any hydroxyl acid, or any mixtures thereof.

18. An image article according to claim 16 or claim 17 wherein the salt of an organic salt is selected from alkali metal, alkaline metal and ammonium salts of any of the above mentioned organic acids, more preferably sodium, potassium, **calcium,** magnesium or ammonium salts.

A 塩の検索方法

有機窒素塩基の塩

アミン類の塩

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

第一,二,三級アミンの塩

- ・ 少なくとも一つ以上の水素を持つアミン類の塩の分子式は中性の塩基と中性の酸からなる多成分物質として収録される。

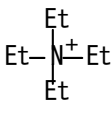

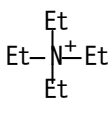

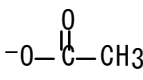
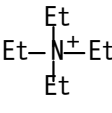
文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
$\text{EtNH}_3^+ \text{Cl}^-$	IN Ethanamine, hydrochloride (1:1) MF C2 H7 N . Cl H CI COM $\text{H3C}-\text{CH}_2-\text{NH}_2$ ● HCl
$\text{EtNH}_3^+ \text{CH}_3\text{COO}^-$	IN Ethanamine, acetate (1:1) MF C2 H7 N . C2 H4 O2 CI COM CM 1 $\text{H3C}-\text{CH}_2-\text{NH}_2$ CM 2 $\text{HO}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}_3$
$\text{Et}_2\text{NH}_2^+ \text{Cl}^-$	IN Ethanamine, N-ethyl-, hydrochloride (1:1) MF C4 H11 N . Cl H CI COM $\text{H3C}-\text{CH}_2-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ ● HCl
$\text{Et}_3\text{NH}^+ \text{Cl}^-$	IN Ethanamine, N,N-diethyl-, hydrochloride (1:1) MF C6 H15 N . Cl H CI COM $\begin{array}{c} \text{Et} \\ \\ \text{Et}-\text{N}-\text{Et} \end{array}$ ● HCl

A 塩の検索方法

有機窒素塩基の塩

第四級アンモニウム塩

- ・ 水素を含まない四級化したアミンの塩の分子式は電荷を帯びた塩基成分と酸成分からなる多成分物質として収録される。
- ・ 第四級アンモニウム塩はオニウム化合物の塩の一種である。(P.25 参照)

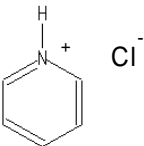

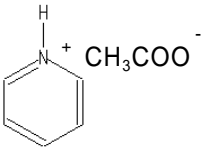

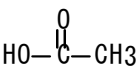
文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
$\text{Et}_4\text{N}^+ \text{Cl}^-$	IN Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, chloride (1:1) MF C8 H20 N . Cl CI COM <div style="text-align: center;">  </div> <div style="text-align: center;">  </div>
$\text{Et}_4\text{N}^+ \text{OH}^-$	IN Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, hydroxide (1:1) MF C8 H20 N . H O CI COM <div style="text-align: center;">  </div> <div style="text-align: center;">  </div>
$\text{Et}_4\text{N}^+ \text{CH}_3\text{COO}^-$	IN Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, acetate (1:1) MF C8 H20 N . C2 H3 O2 CI COM CM 1 <div style="text-align: center;">  </div> CM 2 <div style="text-align: center;">  </div>

A 塩の検索方法

有機窒素塩基の塩

ピリジンの塩

- ・ 第一級, 二級, 三級アミンの塩と同様

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
	IN Pyridine, hydrochloride (1:1) MF C5 H5 N . Cl H CI COM  ● HCl
	IN Acetic acid, compd. with pyridine (1:1) MF C5 H5 N . C2 H4 O2 CI COM CM 1  CM 2 

塩化アンモニウム

- ・ 単一成分として表記

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
NH_4Cl	IN Ammonium chloride ((NH4)Cl) MF Cl H4 N CI COM $\text{Cl}-\text{NH}_4$

A 塩の検索方法

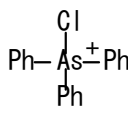
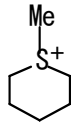
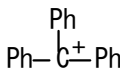
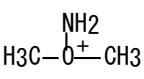
有機窒素塩基の塩

オニウム化合物

- ・ オニウムとは通常、有機陽イオンを含む化合物を意味しているが、陽イオンのすべての置換基が水素原子以外の場合にオニウム化合物として登録される。

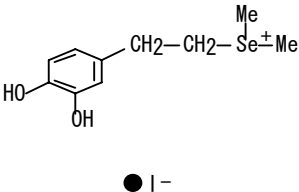
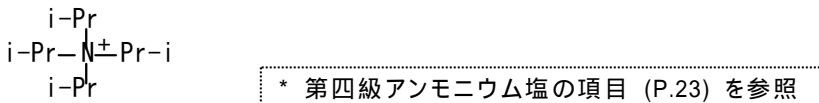
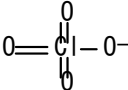
例：ジアゾニウム、オキシニウム、カルボニウム、スルホニウム、アルソニウム、セレノニウム、アンモニウム等

- アニオンが独立成分として登録されるので多成分物質として収録される。

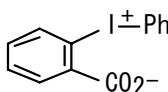
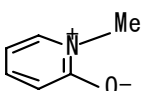
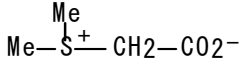
REGISTRY ファイルの登録	
IN	Arsonium, chlorotriphenyl-, chloride (8Cl, 9Cl)
MF	C18 H15 As Cl . Cl
	
● Cl ⁻	
IN	2H-Thiopyranium, tetrahydro-1-methyl-, bromide (9Cl)
MF	C6 H13 S . Br
	
● Br ⁻	
IN	Methylium, triphenyl-, chloride (1:1)
MF	C19 H15 . Cl
	
● Cl ⁻	
IN	Oxonium, aminodimethyl-, fluoride (9Cl)
MF	C2 H8 N O . F
	
● F ⁻	

A 塩の検索方法

有機窒素塩基の塩

REGISTRY ファイルの登録	
IN	Selenonium, [2-(3,4-dihydroxyphenyl)ethyl]dimethyl-, iodide (9CI)
MF	C10 H15 O2 Se . I
	
IN	2-Propanaminium, N,N,N-tris(1-methylethyl)-, perchlorate (9CI)
MF	C12 H28 N . Cl O4
CM	1
	
CM	2
	

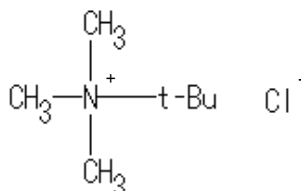
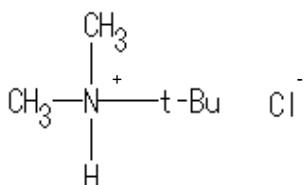
- ただし, 分子内塩 (双性イオン) は単成分として収録される.

REGISTRY ファイルの登録	
IN	Iodonium, (2-carboxyphenyl)phenyl-, inner salt
MF	C13 H9 I O2
CI	COM
	
IN	Pyridinium, 2-hydroxy-1-methyl-, inner salt
MF	C6 H7 N O
	
IN	Sulfonium, (carboxymethyl)dimethyl-, inner salt
MF	C4 H8 O2 S
CI	COM
	

A 塩の検索方法

検索例 4 アミン類の塩

検索例 4 : 下記の 2 つのアミン塩を検索する.



① 第三級アミンの塩

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

```
=> E C6H15N. CLH/MF 5
E1          2      C6H15N. CLCR03. H/MF
E2          2      C6H15N. CLD/MF
E3          59 --> C6H15N. CLH/MF
E4          1      C6H15N. CLH. 1/2H2O/MF
E5          1      C6H15N. CLH. H2O/MF
```

少なくとも一つ以上の水素を持つアミン塩の分子式は中性の塩基と中性の酸からなる多成分物質として収録される

=> S E3

← E3 を検索する

```
L1          59 C6H15N. CLH/MF
```

```
=> S L1 AND METHYL?
22252148 METHYL?
```

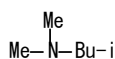
```
L2          40 L1 AND METHYL?
```

部分名称で検索する場合は,なるべく検索漏れをおこさないように, CA 索引名に含まれる部分名を利用する
今回の検索では参考として部分名称で絞り込んだが, L1 59 件を SCAN 表示形式で表示してもよい

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認する (無料)

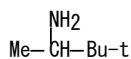
```
L2 40 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN 1-Propanamine, N,N,2-trimethyl-, hydrochloride (9CI)
MF C6 H15 N . Cl H
```



●HCl

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):39

```
L2 40 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN 2-Butanamine, 3,3-dimethyl-, hydrochloride (9CI)
MF C6 H15 N . Cl H
```



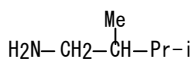
●HCl

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

A 塩の検索方法

検索例 4 アミン類の塩

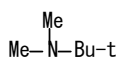
L2 40 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
 IN 1-Butanamine, 2,3-dimethyl-, hydrochloride (9CI)
 MF C6 H15 N . Cl H



● HCl

L2 40 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
 IN **2-Propanamine, N,N,2-trimethyl-, hydrochloride (9CI)**
 MF C6 H15 N . Cl H

← 目的物



● HCl

目的の物質が見つかったら, IN フィールド中の
 名称を /CN フィールドで EXPAND する

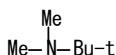
=> E 2-Propanamine, N,N,2-trimethyl-, hydrochloride/CN 5
 E1 1 2-PROPANAMINE, N,N,2-TRIMETHYL-, CONJUGATE ACID (1:1)/CN
 E2 1 2-PROPANAMINE, N,N,2-TRIMETHYL-, CONJUGATE ACID, SALT WITH 2
 2'-(2,5-CYCLOHEXADIENE-1,4-DIYLIDENE)BIS(PROPANEDINITRILE) (1:1)/CN
E3 1 --> 2-PROPANAMINE, N,N,2-TRIMETHYL-, HYDROCHLORIDE/CN
 E4 4 2-PROPANAMINE, N,N,2-TRIMETHYL-, MOLYBDENUM COMPLEX/CN
 E5 1 2-PROPANAMINE, N,N,2-TRIMETHYL-, RADICAL ION(1+)/CN

=> S E3 ← E3 を検索する

L3 1 "2-PROPANAMINE, N,N,2-TRIMETHYL-, HYDROCHLORIDE"/CN

=> D ← IDE 表示形式で表示する

L3 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
 RN 6338-78-9 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN 2-Propanamine, N,N,2-trimethyl-, hydrochloride (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Ethylamine, N,N,1,1-tetramethyl-, hydrochloride (6CI, 8CI)
 OTHER NAMES:
 CN tert-Butyldimethylamine hydrochloride
 MF C6 H15 N . Cl H
 LC STN Files: BEILSTEIN*, CA, CAOLD, CAPLUS, CASREACT
 (*File contains numerically searchable property data)
 CRN (918-02-5)



● HCl

7 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 7 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
 1 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)

A 塩の検索方法

検索例 4 アミン類の塩

② 第四級アンモニウム塩

=> E C7H18N. CL/MF

E1	1	C7H18N. CHO2/MF
E2	2	C7H18N. CHO3/MF
E3	6 -->	C7H18N. CL/MF
E4	1	C7H18N. CL. CU/MF
E5	1	C7H18N. CL20PS/MF

水素を含まない四級化したアミン塩の分子式は電荷を帯びた塩基成分と酸成分からなる多成分物質として収録される

=> S E3

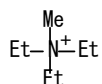
← E3 を検索する

L4 6 C7H18N. CL/MF

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認する (無料)

L4 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
 IN Ethanaminium, N,N-diethyl-N-methyl-, chloride (1:1)
 MF C7 H18 N . Cl

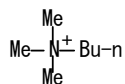


● Cl-

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):5

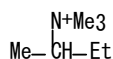
L4 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
 IN 1-Butanaminium, N,N,N-trimethyl-, chloride (1:1)
 MF C7 H18 N . Cl



● Cl-

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

L4 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
 IN 2-Butanaminium, N,N,N-trimethyl-, chloride (9Cl)
 MF C7 H18 N . Cl



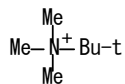
● Cl-

L4 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN

IN tert-Butyltrimethylammonium chloride (7Cl)

MF C7 H18 N . Cl

← 目的物

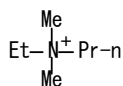


● Cl-

A 塩の検索方法

検索例 4 アミン類の塩

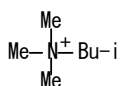
L4 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
 IN 1-Propanaminium, N-ethyl-N,N-dimethyl-, chloride (1:1)
 MF C7 H18 N . Cl



● Cl⁻

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

L4 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
 IN 1-Propanaminium, N,N,N,2-tetramethyl-, chloride (1:1)
 MF C7 H18 N . Cl



● Cl⁻

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

目的の物質の, IN フィールド中の名称を
/CN フィールドで EXPAND する

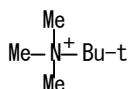
=> E tert-Butyltrimethylammonium chloride/CN 5
 E1 1 TERT-BUTYLTRIMETHOXYGERMANE/CN
 E2 1 TERT-BUTYLTRIMETHOXYSIANE/CN
 E3 1 --> TERT-BUTYLTRIMETHYLAMMONIUM CHLORIDE/CN
 E4 1 TERT-BUTYLTRIMETHYLAMMONIUM COMPLEX WITH 2,5-CYCLOHEXADIENE-
 Δ1, A:4, A'-DIMALONONITRILE/CN
 E5 1 TERT-BUTYLTRIMETHYLAMMONIUM HYDROXIDE/CN

=> S E3 ← E3 を検索する

L5 1 "TERT-BUTYLTRIMETHYLAMMONIUM CHLORIDE"/CN

=> D ← IDE 表示形式で表示する

L5 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
 RN 91772-32-6 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN tert-Butyltrimethylammonium chloride (7Cl) (CA INDEX NAME)
 MF C7 H18 N . Cl
 LC STN Files: CA, CAOLD, CAPLUS
 CRN (25728-37-4)



● Cl⁻

1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
 1 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)

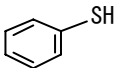
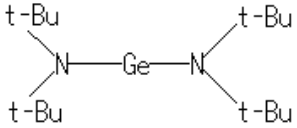
A 塩の検索方法

Ge, Sn, Pb, Sb, Bi の水素化物の塩

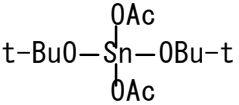
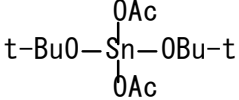
Ge, Sn, Pb, Sb, Bi の水素化物の塩

金属分離型で索引

- 「金属分離型」(P.2) と同様の登録形式で収録される。

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
(PhS) ₃ Bi	IN Benzenethiol, bismuth(3+) salt (3:1) MF C6 H6 S . 1/3 Bi CI COM  ●1/3 Bi(III)
	IN 2-Propanamine, N-(1,1-dimethylethyl)-2-methyl-, germanium(2+) salt (9CI) MF C8 H19 N . 1/2 Ge t-Bu-NH-Bu-t ●1/2 Ge(II)
(EtO) ₄ Sn	IN Ethanol, tin(4+) salt (9CI) MF C2 H6 O . 1/4 Sn H3C-CH2-OH ●1/4 Sn(IV)

- ただし,二種類以上の有機成分と Ge, Sn, Pb, Sb, Bi の塩では,「金属結合型」(P.18)と同様の登録形式で収録される。

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
	IN Stannane, bis(acetyloxy)bis(1,1-dimethylethoxy)-(9CI) MF C12 H24 O6 Sn CI COM 

A 塩の検索方法

Ge, Sn, Pb, Sb, Bi の水素化物の塩

別の金属が存在する場合は, Ge, Sn, Pb, Sb, Bi が非金属原子として扱われる.

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
Ph ₃ Ge-SLi	IN Germane, mercaptotriphenyl-, lithium salt (9Cl) MF C18 H16 Ge S . Li $\begin{array}{c} \text{Ph} \\ \\ \text{Ph}-\text{Ge}-\text{SH} \\ \\ \text{Ph} \\ \\ \bullet \text{Li} \end{array}$

四価の Ge, Sn, Pb, および三価の Sb, Bi とアミン, リン化水素, ヒ化水素との塩は金属結合型 (P.17) になる.

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
(Ph ₂ As) ₄ Sn	IN Arsine, stannanetetrayltetrakis[diphenyl- (7Cl, 8Cl) MF C48 H40 As4 Sn $\begin{array}{c} \text{Ph} \\ \\ \text{As}-\text{Ph} \\ \quad \\ \text{Ph} \quad \text{Ph} \\ \quad \quad \\ \text{Ph}-\text{As}-\text{Sn}-\text{As}-\text{Ph} \\ \quad \\ \text{As}-\text{Ph} \\ \\ \text{Ph} \end{array}$
(CH ₃ CONH) ₃ Bi	IN Acetamide, N, N', N''-bismuthylidynetris- (9Cl) MF C6 H12 Bi N3 O3 $\begin{array}{c} \text{NHAc} \\ \\ \text{AcNH}-\text{Bi}-\text{NHAc} \end{array}$

B 化学物質からの文献検索のポイント

REGISTRY ファイルで得られた物質について関連文献を探す際の
注意点についてご紹介します

B 化学物質からの文献検索のポイント

REGISTRY ファイルの収録源

REGISTRY ファイルは、CAplus/CA ファイル由来の情報だけでなく、さまざまな情報源から物質を収録している。

REGISTRY ファイルに収録されている化学物質の出典

- ・ 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



REGISTRY CAplus ファイルのクロスオーバー検索で、その物質に関する文献情報を得ることができる

- ・ CASREACT ファイルに収録されている反応中の反応関与物質



CASREACT ファイルで文献情報が入手できる
(ただし、REGISTRY CASREACT のクロスオーバー検索は高額なので注意)

- ・ 米国 (TSCA)、カナダ (DSL, NDSL)、EC (EINECS) の化学物質規制法に基づく化学物質台帳に収録された物質
- ・ 化合物ライブラリー (CHEMCATS ファイル) から登録された化学物質
- ・ 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)
- ・ 登録システムの開始時に入力された各種ハンドブックに収録された化学物質
 - Merck Index
 - Color Index
 - Ring Index
 - Lange: Handbook of Chemistry
 - Pesticide Index
 - U.S. Adopted Names
 - SOCMA Handbook
- ・ 他のデータベースに記載されていた化学物質



REGISTRY ファイルに収録されている物質に関する文献が CAplus/CA ファイルで得られない場合がある。

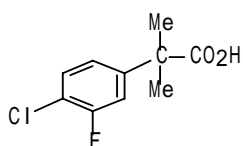
B 化学物質からの文献検索のポイント

REGISTRY ファイルの出典情報

CAplus/CA ファイルに文献がある物質

RN 1035262-91-9 REGISTRY
ED Entered STN: 22 Jul 2008
CN Benzeneacetic acid, 4-chloro-3-fluoro-.alpha.,.alpha.-dimethyl- (CA INDEX NAME)
MF C10 H10 Cl F O2
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER

CAS 登録番号所在 (LC) フィールドに
ファイル名がある



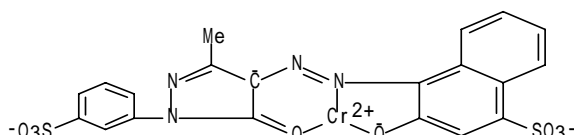
文献数 (REF) フィールドに, CA, CAplus,
CAOLD ファイルの文献数が表示される

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

CAplus/CA ファイルに文献がない物質

RN 85896-45-3 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Chromate(2-), [4-[[4,5-dihydro-3-methyl-5-oxo-1-(3-sulfophenyl)-1H-pyrazol-4-yl]azo]-3-hydroxy-1-naphthalenesulfonato(4-)-], dihydrogen (9CI) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN 1-Naphthalenesulfonic acid, 4-[[4,5-dihydro-3-methyl-5-oxo-1-(3-sulfophenyl)-1H-pyrazol-4-yl]azo]-3-hydroxy-, chromium complex
MF C20 H12 Cr N4 O8 S2 . 2 H
CI CCS
SR European Union (EU)
LC STN Files: CHEMLIST
Other Sources: EINECS**
(*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
CRN (735222-55-6)



● 2 H+



CAplus/CA ファイルに文献がない
場合、その物質の出典に関する情報
について、収録源情報 (SR) フィールドや
CAS 登録番号所在 (LC) フィールド、
クラス識別子 (CI) フィールドを参考にする

B 化学物質からの文献検索のポイント

REGISTRY ファイルの出典情報

収録源情報 (SR) フィールド

- ・ 1985 年半ば以降 (CAS 登録番号 97314-93-7 以降) に登録されたレコードについて、その物質が最初に登録された情報源を SR フィールドに収録している。
- ・ SR フィールドは表示・検索が可能であり、=> SR/FA により SR フィールドを持つレコードに限定することもできる。
- ・ SR フィールドの収録源情報 (2008 年 7 月現在)

=> FILE REGISTRY

=> E A/SR 25

**** START OF FIELD ****

E3	0	--> A/SR
E4	76	AMERICAN SOCIETY OF HOSPITAL PHARMACISTS/SR *1
E5	32011941	CA/SR *2
E6	89257	CA INDEX GUIDE OR RING SYSTEMS HANDBOOK/SR *3
E7	455092	CAOLD/SR *2
E8	112329	CAS CLIENT SERVICES/SR *4
E9	422774	CAS EARLY REGISTRATIONS/SR *5
E10	165660	CHEMICAL CATALOG/SR *6
E11	7915556	CHEMICAL LIBRARY/SR *7
E12	898	ENVIRONMENT CANADA (EC)/SR *1
E13	27647	EUROPEAN UNION (EU)/SR *1
E14	47101682	GENBANK/SR *1
E15	1051093	OTHER SOURCES/SR *8
E16	2998	OTHER STN DATABASES/SR *9
E17	84013	REACTION DATABASE/SR *10
E18	490	US ADOPTED NAMES COUNCIL (USAN)/SR *1
E19	3102	US ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (US EPA)/SR *1
E20	4179	US NATIONAL LIBRARY OF MEDICINE (NLM)/SR *1
E21	207	WORLD HEALTH ORGANIZATION (WHO)/SR *1

**** END OF FIELD ****

- *1 公的機関からの依頼に基づいて登録
- *2 CAplus/CA あるいは CAOLD ファイルの索引時に登録
- *3 新規登録物質中に含まれる環母核 (Ring Parent) が新規である場合に環母核を登録
- *4 *1 以外の機関からの依頼に基づいて登録 (CAS 登録番号サービス)
- *5 CAplus/CA ファイルで 1966 年以前のレコードの遡及索引を行った際追加された物質
- *6 化学物質カタログに由来 (カタログに掲載されており、流通量が多い汎用化合物)
- *7 化学物質カタログに由来 (カタログに掲載されており、流通量が少ない化合物)
および NCI (National Cancer Institute) 由来
- *8 STN ファイル以外のデータベース由来
- *9 その他の STN ファイル由来
- *10 INPI, InfoChem 由来

B 化学物質からの文献検索のポイント

REGISTRY ファイルの出典情報

CAS 登録番号所在 (LC) フィールド

- ・ LC フィールドには、その物質の CAS 登録番号が含まれているレコードが存在するファイル、および規制リストの名称 (TSCA, EINECS, DSL, NDSL) などが収録されている。
- ・ 表示されているファイルにクロスオーバーすれば、その物質に関する文献や物性情報などが入手できる。(物性が収録されているファイルには、後ろに * (アスタリスク) がつく。)
- ・ LC フィールドは、表示・検索が可能。また、EXPAND で収録されているファイルを確認できる。

```
=> FILE REGISTRY
```

```
=> E A/LC 25
```

```
**** START OF FIELD ****
```

```
E3          0  --> A/LC
E4          7896  ADISINSIGHT/LC
E5          7161  ADISNEWS/LC
E6          74632 AGRICOLA/LC
E7          28231 ANABSTR/LC
E8          7455  AQUIRE/LC
E9          4362614 BEILSTEIN/LC
E10         196606 BIOSIS/LC
E11         21302  BIOTECHNO/LC
E12        57618533 CA/LC
:
```

クラス識別子 (CI) フィールド

- ・ クラス識別子は、物質の広いクラス (分類) を示すコードである。
- ・ CI フィールドは表示・検索が可能。
- ・ クラス識別子の種類

クラス識別子	定義 *1
AYS	合金
CCS	配位化合物
COM*2	多成分物質成分
CTS	概念語登録*3
GRS	一般式登録*3
IDS	定義の不完全な物質
MAN	手作業登録
MNS	鉱物
MXS	混合物
PMS	ポリマー
RIS	ラジカルイオン
RPS	環母核
TIS	表形式無機化合物
UVCB	組成不明、組成不定、複雑な反応生成物、生体物質*3

*1 詳細は APPENDIX 参照

*2 COM/CI は検索できない

*3 CAS 登録番号で CPlus/CA ファイルなどの文献中に索引されない物質

B 化学物質からの文献検索のポイント

CAplus/CA ファイルに文献がない理由

REGISTRY ファイルに収録されている物質に関する文献が CAplus/CA ファイルで得られない理由としては、下記のようなケースが挙げられる。

【ケース 1】 その化学物質が記載された文献の索引が未完成の場合

【ケース 2】 多成分物質の成分になっている場合

- ・ 多成分物質の成分（コポリマーにおけるモノマー等）は、その物質自身が文献に記載されていなくても REGISTRY ファイルに登録される。

【ケース 3】 環母核 (Ring Parent) の場合

- ・ 環母核（すべての置換基を削除した単環、縮合環、スピロ環）は、それ自身が文献に記載されていなくても、またそのような化合物が実在しなくても REGISTRY ファイルに登録される。

【ケース 4】 CHEMCATS ファイルから収録された場合

【ケース 5】 公的機関との契約あるいは民間会社からの依頼により、CAS 登録番号が付与された化学物質

【ケース 6】 他のデータベースから採録された場合

【ケース 7】 ハンドブックから採録された場合

- ・ CAS 登録システムの開始時に、ハンドブック類から収録された化学物質がある。



どのケースに該当するのかは、REGISTRY ファイルのレコード中の情報を確認することで判断できる。

B 化学物質からの文献検索のポイント

CAplus/CA ファイルに文献がない理由

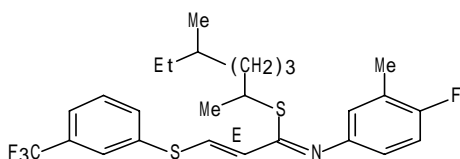
[ケース 1] その化学物質が記載された文献の索引が未完成の場合

- ・ SR フィールドに CA の記載があり, 入力日 (ED) が最近のレコード.
- ・ この場合は, 後日検索をし直せば文献が得られる.
- ・ レコード例

RN 1034166-39-6 REGISTRY
ED **Entered STN: 15 Jul 2008** ● 入力日 (ED) フィールド
CN 2-Propenimidothioic acid, N-(4-fluoro-3-methylphenyl)-3-[[3-(trifluoromethyl)phenyl]thio]-, 1,5-dimethylheptyl ester, (2E)- (CA INDEX NAME)
FS STEREOSEARCH
MF C26 H31 F4 N S2
SR **CA**

7/15 検索

Double bond geometry as described by E or Z.

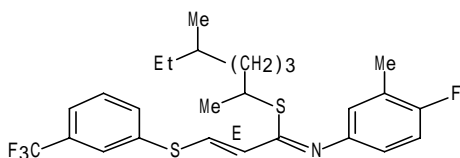


PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

RN 1034166-39-6 REGISTRY
ED Entered STN: 15 Jul 2008
CN 2-Propenimidothioic acid, N-(4-fluoro-3-methylphenyl)-3-[[3-(trifluoromethyl)phenyl]thio]-, 1,5-dimethylheptyl ester, (2E)- (CA INDEX NAME)
FS STEREOSEARCH
MF C26 H31 F4 N S2
SR CA
LC STN Files: **CA, CAPLUS**

8/5 検索

Double bond geometry as described by E or Z.



後日検索し直したところ,
文献情報が追加されていた

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

B 化学物質からの文献検索のポイント

CAplus/CA ファイルに文献がない理由

【ケース 2】多成分物質の成分になっている場合

- ・ CI フィールドに COM (多成分物質成分) の記載があるレコード.
- ・ CA ファイルに多成分物質 (コポリマー, 塩, 混合物, 後処理ポリマーなど) が索引される際, 個々の構成成分は必ずしも索引されるとは限らない.
ただし, REGISTRY ファイルには構成成分の物質レコードも登録される.



このような物質は, REGISTRY ファイル中でその物質を成分として含む多成分物質を検索し, その多成分物質の CAS 登録番号を使って文献を探すことができる.

検索例 1 : 【ケース 2】に該当する物質の関連文献を探す

=> FILE REGISTRY

=> S 775351-71-8

L1 1 775351-71-8
(775351-71-8/RN)

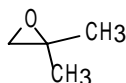
=> D

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
RN 775351-71-8 REGISTRY
ED Entered STN: 05 Nov 2004
CN Oxirane, 2,2-dimethyl-, polymer with methyloxirane, diblock (9CI) (CA INDEX NAME)
MF (C4 H8 O . C3 H6 O)x
CI PMS, **COM**
PCT Polyether, Polyether formed
SR **CA**

CM 1

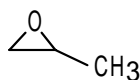
CRN 558-30-5
CMF C4 H8 O

CI フィールドに COM の記載があれば, この物質を成分として含む多成分物質を探す



CM 2

CRN 75-56-9
CMF C3 H6 O



B 化学物質からの文献検索のポイント

CAplus/CA ファイルに文献がない理由

=> S 775351-71-8/CRN

/CRN (成分 CAS 登録番号) で検索

L2 1 775351-71-8 /CRN

上記の物質 (CAS 登録番号 775351-71-8) を成分として含む物質が 1 件ヒットした

=> D

L2 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
RN 775351-72-9 REGISTRY
ED Entered STN: 05 Nov 2004
CN Oxirane, 2,2-dimethyl-, polymer with methyloxirane, **monoisotridecyl ether**,
diblock (9CI) (CA INDEX NAME)
MF C13 H28 O . (C4 H8 O . C3 H6 O)x
PCT Polyether, Polyether formed
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS

CM 1

CRN 27458-92-0

CMF C13 H28 O

CCI IDS

エーテル化剤

(iso-C₁₃H₂₇) -OH

CM 2

CRN **775351-71-8**

CMF (C4 H8 O . C3 H6 O)x

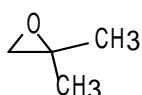
CCI PMS

CM 3

CRN 558-30-5

CMF C4 H8 O

CAS RN775351-71-8 はエーテル化ポリマーの成分になっている

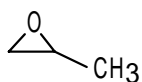


CM 4

CRN 75-56-9

CMF C3 H6 O

後処理でエーテル化されたポリアルキレングリコールあるいは天然物ポリマーは、原則として、エーテル化される前のポリマーとエーテル化剤の多成分物質として登録される



RN775351-72-9 は CAplus/CA ファイルに索引されている

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

B 化学物質からの文献検索のポイント

CAplus/CA ファイルに文献がない理由

- => FILE CAPLUS *CAplus ファイルに入る*
- => S L2 *REGISTRY ファイルの回答 (L2) をクロスオーバーする*
L3 1 L2 *1 件ヒットした*
- => D ALL *ALL 表示形式で表示*

L3 ANSWER 1 OF 1 CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN
AN 2004:841719 CAPLUS [Full-text](#)
DN 141:350824
ED Entered STN: 15 Oct 2004
TI Production of polyether compositions suitable for use as motor fuel and
lubricant additives
TIJP モータ燃料と潤滑添加剤として使用に適切なポリエーテル組成物の製造
[機械翻訳]
IN Rath, Hans Peter; Treuling, Ulrich; Walter, Marc; Lange, Arno; Mach,
Helmut; Langer, Ernst; Grosch, Georg Heinrich
PA BASF AG, Germany
SO Ger. Offen., 20 pp.
CODEN: GWXXBX
DT Patent
LA German
IC ICM C08G0065-28
ICS C10L0001-18; B01F0017-42
CC 37-3 (Plastics Manufacture and Processing)
Section cross-reference(s): 46, 51
FAN.CNT 1

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
-----	----	-----	-----	-----
PI DE 10314562	A1	20041014	DE 2003-10314562	20030331
WO 2004087789	A2	20041014	WO 2004-EP3365	20040330
WO 2004087789	A3	20050303		

: (省略)

IT Polyethers, preparation
RL: IMF (Industrial manufacture); MOA (Modifier or additive use); PREP
(Preparation); USES (Uses)
(production of polyether compns. suitable for use as motor fuel and
lubricant additives)

IT Polymerization
Polymerization catalysts
(ring-opening; production of polyether compositions suitable for use as motor
fuel and lubricant additives)

IT **775351-72-9P** 775351-73-ODP, amino-terminated 775351-77-4P
RL: IMF (Industrial manufacture); MOA (Modifier or additive use); PREP
(Preparation); USES (Uses)
(production of polyether compositions suitable for use as motor fuel and
lubricant additives)

IT 775351-73-OP
RL: IMF (Industrial manufacture); MOA (Modifier or additive use); RCT
(Reactant); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent); USES (Uses)
(production of polyether compns. suitable for use as motor fuel and
lubricant additives)

エーテル化ポリマーが索引されている
文献が得られた

このように、多成分物質が索引されても、
各成分の CAS 登録番号は索引されるとは限らない

* CAplus/CA ファイルの索引方針に関する参考資料

<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/um2008.pdf>

(2008 年ユーザーミーティング資料: CAplus/CA ファイルの化学物質索引)

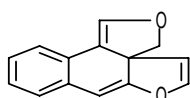
B 化学物質からの文献検索のポイント

CAplus/CA ファイルに文献がない理由

【ケース 3】 環母核 (Ring Parent) の場合

- ・ CI フィールドに RPS (環母核) の記載があるレコード。
- ・ 新規登録物質中に新規の環母核 (すべての置換基を除いた環系) が含まれていた場合、その環母核を REGISTRY ファイルに登録する。
- ・ そのため、環母核として登録された構造は、それ自身が文献に記載されていない場合がある。またその化合物が実在しない場合もある。
- ・ レコード例

RN 1032140-52-5 REGISTRY
ED Entered STN: 01 Jul 2008
CN 3H-Naphtho[3,2-b:1,2-c']difuran (CA INDEX NAME)
MF C14 H10 O2
CI **RPS**
SR **CA Index Guide or Ring Systems Handbook**



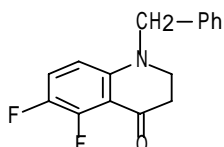
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

【ケース 4】 CHEMCATS から収録された場合

- ・ SR フィールドに、Chemical Library あるいは Chemical Catalog と記載されているレコード。
- ・ レコード例

RN 1029721-38-7 REGISTRY
ED Entered STN: 22 Jun 2008
CN 4(1H)-Quinolinone, 5,6-difluoro-2,3-dihydro-1-(phenylmethyl)- (CA INDEX NAME)
MF C16 H13 F2 N O
SR **Chemical Catalog**
Supplier: Allichem LLC

LC STN Files: **CHEMCATS**



提供業者情報が表示される場合もある

LC フィールドに CHEMCATS ファイルの記載があれば、CHEMCATS ファイルでカタログ情報が入手できる

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

B 化学物質からの文献検索のポイント

CAplus/CA ファイルに文献がない理由

検索例 2 : 【ケース 4】 に該当する物質のカタログ情報を CHEMCATS ファイルで入手する

=> FILE REGISTRY

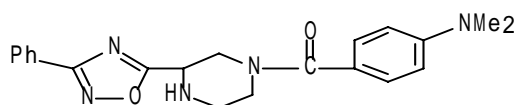
=> S 937394-04-2

L1 1 937394-04-2
(937394-04-2/RN)

=> D

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
RN 937394-04-2 REGISTRY
ED Entered STN: 15 Jun 2007
CN Methanone, [4-(dimethylamino)phenyl][3-(3-phenyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl)-1-piperazinyl]- (CA INDEX NAME)
MF C21 H23 N5 O2
SR **Chemical Catalog**
Supplier: Chemivate Limited
LC STN Files: **CHEMCATS**

LC フィールドに CHEMCATS が記載されていれば、
CHEMCATS ファイルで情報が得られる



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

=> FILE CHEMCATS

CHEMCATS ファイルに入る

=> S L1

REGISTRY ファイルの回答をクロスオーバー検索する

L2 1 L1

=> SEL CY L2

SELECT コマンドで発売国を抽出してみる

E1 THROUGH E4 ASSIGNED

=> D SEL

E1 1 GERMANY/CY
E2 1 JAPAN/CY
E3 1 UNITED KINGDOM/CY
E4 1 USA/CY

日本でも発売されている

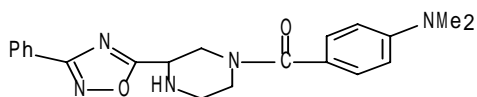
B 化学物質からの文献検索のポイント

CAplus/CA ファイルに文献がない理由

=> D ALL

ALL 表示形式で表示

L2 ANSWER 1 OF 1 CHEMCATS COPYRIGHT 2008 ACS on STN
Accession Number (AN): 2048305456 CHEMCATS レコード番号
Catalog Name (CO): Chemivate Product List カタログ名
Publication Date (PD): 23 Jun 2008 カタログ発行日
Order Number (ON): CH001137 注文番号
Chemical Name (CN): (4-(dimethylamino)phenyl)(3-(3-phenyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl)piperazin-1-yl)methanone 化学物質名称
CAS Registry Number (RN): 937394-04-2 CAS 登録番号
Purity : 99% 純度
Structure :



構造図

PRICES

価格

Quantity : N/A, Price: contact supplier

COMPANY INFORMATION

提供業者情報

Chemivate Limited
Unit 5
Canal Terrace
Worksop, Nottinghamshire, S80 2DF
United Kingdom

Phone: +44 (0) 1909 477677
Fax: +44 (0) 1909 477677
Email: info@chemivate.com
Web: <http://www.chemivate.com>

: (省略)

Shigematsu & Co., Ltd.
2-5 Awajimachi 2-Chome
Chuo-Ku
Osaka, 541-0047
Japan

Phone: +81 (6) 6231-6146
Fax: +81 (6) 6231-6149
Email: info@shigematsu-bio.com
Web: <http://www.shigematsu.co.jp>

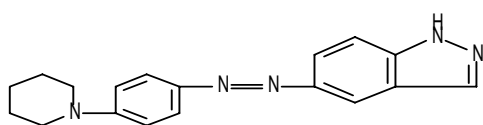
B 化学物質からの文献検索のポイント

CAplus/CA ファイルに文献がない理由

【ケース 5】 公的機関との契約あるいは民間会社からの依頼により、CAS 登録番号が付与された化学物質

- ・ 下記の公的機関については、SR フィールドに各機関の名称が表示される。
 - American Society of Hospital Pharmacists
 - Environmental Canada (EC)
 - European Union (EU)
 - GenBank
 - US Adopted Names Council (USAN)
 - US Environmental Protection Agency (USEPA)
 - US National Library of Medicine (NLM)
 - World Health Organization (WHO)
- ・ その他の機関からの依頼の場合には、SR フィールドに CAS Client Services と記載される。
- ・ LC フィールドが存在すれば、記載されているファイルにクロスオーバーすることで追加情報が得られる。
- ・ レコード例

```
RN 122168-72-3 REGISTRY
ED Entered STN: 11 Aug 1989
CN 1H-Indazole, 5-[[4-(1-piperidinyl)phenyl]azo]- (9CI) (CA INDEX NAME)
MF C18 H19 N5
SR US National Library of Medicine (NLM)
LC STN Files: CHEMCATS, MEDLINE, RTECS*, TOXCENTER
(*File contains numerically searchable property data)
```



CHEMCATS, MEDLINE, RTECS,
TOXCENTER ファイルに関連情報がある

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

B 化学物質からの文献検索のポイント

CAplus/CA ファイルに文献がない理由

・ レコード例 (つづき)

RN 122445-63-0 REGISTRY * ● ————— * (アスタリスク) 付きの CAS 登録番号は
* Use of this CAS Registry Number alone as CA の索引には利用されない
result in incomplete search results. For additional information, enter HELP
RN* at an online arrow prompt (=>).
ED Entered STN: 01 Sep 1989
CN Castor oil, reaction products with 1-[[2-[(2-aminoethyl)amino]ethyl]amino]-
3-phenoxy-2-propanol, bisphenol A diglycidyl ether, 2-hydroxyethyl
methacrylate and pentaethylenehexamine (CA INDEX NAME)
MF Unspecified
CI MAN, CTS
SR **European Union (EU)**
LC STN Files: **CHEMLIST** ● ————— CHEMLIST ファイルに関連情報がある
Other Sources: ● **EINECS****
(*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

米国, カナダ, EU の既存化学物質台帳由来の物質の場合, LC フィールドに台帳名が
表示される.

- 米国 : TSCA (Toxic Substance Control Act Inventory)
- EU : EINECS (European Inventory of Existing Chemical Substances)
- カナダ : DSL (Canadian Domestic Substances List)
NDSL (Canadian Non-domestic Substances List)

RN 162568-13-0 REGISTRY * ● ————— * (アスタリスク) 付きの CAS 登録番号は
* Use of this CAS Registry Number alone as CA の索引には利用されない
result in incomplete search results. For additional information, enter HELP
RN* at an online arrow prompt (=>).
ED Entered STN: 28 Apr 1995
CN 2-Oxepanone, homopolymer, decyl ester, reaction products with
2-(2-aminoethoxy)ethanol, polyethylene-polypropylene glycol and TDI (CA
INDEX NAME)
MF Unspecified
CI PMS, MAN, GRS
PCT Manual registration
SR **CAS Client Services**
企業などが CAS 登録番号サービスを利用して
CAS 登録番号を付与した物質の場合, 追加情報を
得ることは難しい場合が多い

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

<参考> * (アスタリスク) 付きの CAS 登録番号

- ・ 構造や組成が不定の化学物質には原則として CAS 登録番号は付与されない。しかし、既存化学物質台帳 (TSCA 台帳など) のような特別な目的のために、CAS 登録番号が付与される場合がある。
- ・ このような物質は、組成不明、組成不定、複雑な反応生成物および生体物質 (UVCB: Unknown or Variable Composition, Complex Reaction Products and Biological Material) と呼ばれ、CAS 登録番号 (RN) に * (アスタリスク) が付与されている。(p.51 参照)

B 化学物質からの文献検索のポイント

CAplus/CA ファイルに文献がない理由

【ケース 6】 他のデータベースから採録された場合

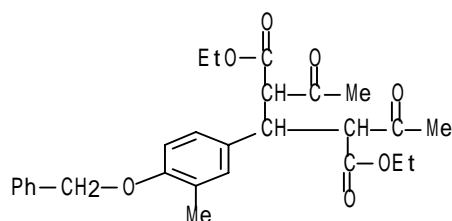
- ・ CAplus/CA/CAOLD ファイル以外の STN データベース由来の場合には, SR フィールドに Other STN Databases と記載される.
- ・ STN で検索可能なデータベース以外のデータベースからも物質を採録している. この場合は, SR フィールドに Other Sources と記載される.

・ 主な収録源データベース名

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

・ レコード例

RN 902259-47-6 REGISTRY
ED Entered STN: 17 Aug 2006
CN Pentanedioic acid, 2,4-diacetyl-3-[3-methyl-4-(phenylmethoxy)phenyl]-, 1,5-diethyl ester (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Pentanedioic acid, 2,4-diacetyl-3-[3-methyl-4-(phenylmethoxy)phenyl]-, diethyl ester (9CI)
MF C27 H32 O7
SR **Other Sources**
Database: NCI 3D (National Cancer Institute)



SR フィールドに収録源のデータベース名が記載されている
データベース名での検索は不可

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

B 化学物質からの文献検索のポイント

CAplus/CA ファイルに文献がない理由

- ・ STN 以外のデータベースには, Web 上のフリーデータベースも含まれる.

CAS では, REGISTRY ファイルがより総合的な化学物質データベースとなるよう収録源を拡大し, Web 上のデータベースからも物質も収録を開始した.

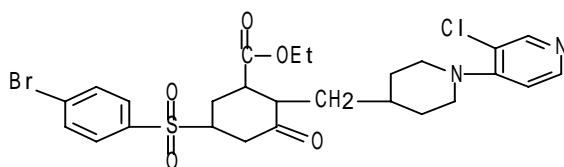
CAS が信頼できると判断したデータベースのみを収録対象としており, さらにそれぞれの物質について提供元や物性の有無などを確かめて選択して収録している.

- ・ 主な収録源データベース名

- ChemSpider (ChemZoo, Inc.)
- ChemDB (University of California Irvine)
- ZINC (Shoichet Laboratory)

- ・ レコード例

RN 1025898-30-9 REGISTRY
ED Entered STN: 05 Jun 2008
CN Cyclohexanecarboxylic acid, 5-[(4-bromophenyl)sulfonyl]-2-[[1-(3-chloro-4-pyridinyl)-4-piperidinyl]methyl]-3-oxo-, ethyl ester (CA INDEX NAME)
MF C26 H30 Br Cl N2 O5 S
SR **Other Sources**
Database: ChemSpider (ChemZoo, Inc.)



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

<参考> 収録源となっているデータベースで検索すれば, 追加情報を入手できる場合もある.

- ・ ChemSpider : <http://www.chemspider.com/>
- ・ ChemDB : <http://cdb.ics.uci.edu/CHEM/Web/>
- ・ ZINC : <http://zinc.docking.org/index.shtml>

B 化学物質からの文献検索のポイント

CAplus/CA ファイルに文献がない理由

【ケース 7】ハンドブックから採録された場合

- ・ REGISTRY ファイルの登録システム開始時に下記のハンドブックに掲載された物質を登録した。

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

- ・ SR, CI フィールドからは判断できない。古い CAS 登録番号を持つ物質の場合、これに該当する可能性がある。

- ・ レコード例

RN **1326-95-0** REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN C.I. Sulphur Yellow 8 (8CI) (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN C.I. 53225
CN Thional Yellow O
MF Unspecified
CI MAN

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

<参考> CAS 登録番号は、数字が小さいほど古い番号である。ただし、CA 索引の遡及付与を行った際に、新たに追加登録された物質が存在するので、新しい CAS 登録番号でも古い文献由来の場合がある。

RN **911649-74-6** REGISTRY
ED Entered STN: 31 Oct 2006
CN Hydrocarbostyryl, 3-(N-methylalanyl-amino)- (4CI) (CA INDEX NAME)
FS STEREOSEARCH
MF C13 H17 N3 O2
CI COM
SR **CAS EARLY REGISTRATIONS** ●—————
LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER
: (省略)

遡及索引を行った際追加された物質

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

REFERENCE 1

AN 33:59797 CA [Full-text](#)
TI Amyostatic poisons. III. Synthesis of peptide-like derivatives of aminohydrocarbostyryl
AU Sasaki, Takaoki; Hasimoto, Tokuzi
SO Proceedings of the Imperial Academy (Tokyo) (**1939**), 15, 233-8
CODEN: PIATA8; ISSN: 0369-9846
: (省略)

B 化学物質からの文献検索のポイント

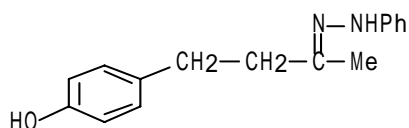
参考 : SR フィールドについて

SR フィールドについて

- ・ 1985 年半ば以降 (CAS 登録番号 97314-93-7 以降) に登録されたレコードについて、その物質が最初に登録された情報源を SR フィールドに収録している。
- ・ SR フィールドは、その物質が REGISTRY ファイルに登録された際の収録源が収録されている。
- ・ REGISTRY ファイルのレコードは毎日更新されているため、登録された際の出典が CPlus/CA ファイルでない物質でも、後に関連文献が CPlus/CA ファイルに追加された場合、その情報が REGISTRY ファイルのレコードにも追加される。

レコード例

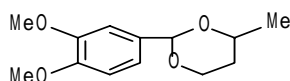
```
RN 902259-11-4 REGISTRY
ED Entered STN: 17 Aug 2006
CN 2-Butanone, 4-(4-hydroxyphenyl)-, 2-phenylhydrazone (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN 2-Butanone, 4-(4-hydroxyphenyl)-, phenylhydrazone (9CI)
MF C16 H18 N2 O
SR Other Sources
   Database: NCI 3D (National Cancer Institute)
```



文献がない例

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

```
RN 902258-77-9 REGISTRY
ED Entered STN: 17 Aug 2006
CN 1,3-Dioxane, 2-(3,4-dimethoxyphenyl)-4-methyl- (CA INDEX NAME)
MF C13 H18 O4
SR Other Sources
   Database: NCI 3D (National Cancer Institute)
LC STN Files: CA, CAPLUS
```



文献情報が追加されている例

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

B 化学物質からの文献検索のポイント

参考 : UVCB 物質の検索


UVCB 物質について


- ・ 構造や組成が不定の化学物質には原則として CAS 登録番号は付与されない。しかし、既存化学物質台帳 (TSCA 台帳など) のような特別な目的のために、CAS 登録番号が付与される場合がある。
- ・ このような物質は、組成不明、組成不定、複雑な反応生成物および生体物質 (UVCB : Unknown or Variable Composition, Complex Reaction Products and Biological Material) と呼ばれ、CAS 登録番号 (RN) に * (アスタリスク) が付与されている。
- ・ CI フィールドには、CTS または GRS と記載されている。UVCB は CTS と GRS の総称である。CTS は概念語登録を表し、CA の General Subject Index (GSI) の見出し語 (統制語) として扱われている物質に付与される。GRS は一般式登録を表し、特定物質の一般的な誘導体に対して付与される。



アスタリスク付きの CAS 登録番号は、原則として、CA ファイルの索引には利用しないため、クロスオーバー検索では、うまく文献を見つけることができない。

レコード例

RN 64742-39-8 REGISTRY * 


* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may result in incomplete search results. For additional information, enter HELP RN* at an online arrow prompt (=>). 

ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN Neutralizing agents (petroleum), spent sodium carbonate (CA INDEX NAME)

OTHER NAMES:

CN Spent sodium carbonate neutralizing agents (petroleum)

DEF A complex combination consisting predominantly of water and containing sodium carbonate and organic and inorganic sodium salts. It is obtained by neutralization of an acidic petroleum stream. 

MF Unspecified

CI MAN, CTS

LC STN Files: CHEMLIST

Other Sources: EINECS**, NDSL**, TSCA**

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

=> HELP RN* と入力すると、詳しい説明を見ることができる

DEF フィールドにこの物質に関する詳細情報が表示される場合がある

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

B 化学物質からの文献検索のポイント

参考 : UVCB 物質の検索

```
=> E ACETYLATED LANOLIN/CT 5
E#  FREQUENCY  AT  TERM
--  -
E1      0      2  ACETYLATED HISTONES H3/CT
E2      0      2  ACETYLATED HISTONES H4/CT
E3      0      2 --> ACETYLATED LANOLIN/CT
E4      0      2  ACETYLATED LDL/CT
E5      0      3  ACETYLATED LDL RECEPTORS/CT
```

化学物質名称 (ACETYLATED LANOLIN) を
統制語 (/CT) フィールドで EXPAND する

```
=> E E3+ALL
E1      0 --> Acetylated lanolin/CT
E2      USE Lanolin (L) acetate/CT
***** END *****
```

統制語があることがわかる
(L) 演算子を含む語はリンク語

```
=> E E2+ALL      E2 をさらに展開する
E1      336      BT3 Secretions (external)/CT
E2     14149      BT3 Waxes/CT
E3      890      BT2 Wool wax/CT
E4     4066      BT1 Lanolin/CT
E5      --> Lanolin (L) acetate/CT
E6      UF      Acelan SP/CT
E7      UF      Acetylated lanolin/CT
E8      UF      Acylan/CT
E9      UF      Chemically improved lanolin/CT
E10     UF      Crodacol CS 50/CT
E11     UF      Fanco! ACEL/CT
E12     UF      Lanacet/CT
E13     UF      Modulan/CT
E14     UF      Modulan (ointment base)/CT
***** END *****
```

UF は非統制語
物質の名称が表示される
(すべてではない)

```
=> SET PLU ON
SET COMMAND COMPLETED
```

```
=> S E5      統制語で検索
          4066 LANOLIN/CT
          325075 ACETATE/IT
          11087 ACETATES/IT
          330810 ACETATE/IT
          ((ACETATE OR ACETATES)/IT)
L3      111 "LANOLIN (L) ACETATE"/CT
```

```
=> D HITIND 2 10
```

```
L3  ANSWER 2 OF 111  HCAPLUS  COPYRIGHT 2008 ACS on STN
CC  62-4 (Essential Oils and Cosmetics)
IT  Lanolin
    RL: COS (Cosmetic use); BIOL (Biological study); USES (Uses)
       (acetate; high gloss gel-based lipstick comprising
       ester-terminated poly(ester-amide) gellant)
```

統制語でヒット

```
L3  ANSWER 10 OF 111  HCAPLUS  COPYRIGHT 2008 ACS on STN
CC  63-6 (Pharmaceuticals)
IT  Lanolin
    RL: THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); USES (Uses)
       (acetate; polypropylene glycol foamable vehicle and
       pharmaceutical compns.)
```

B 化学物質からの文献検索のポイント

参考 : UVCB 物質の検索

=> S E6-E14/BI OR LANOLIN (3A) (ACETATE OR ACETYLAT?) 基本索引で検索

L4 : 303 ("ACELAN SP"/BI OR "ACETYLATED LANOLIN"/BI OR ACYLAN/BI OR "CHEM
ICALLY IMPROVED LANOLIN"/BI OR "ACETYLATED LANOLIN"/BI OR "ACETYLATED
ACEL"/BI OR LANACET/BI OR M
"/BI) OR LANOLIN (S) (ACETA

キーワードを基本索引で検索する
(非統制語で表示された物質の名称も含める)

=> S L3 OR L4
L5 316 L3 OR L4

基本索引で検索した結果も回答に含めると、
より網羅的な検索になる

=> S L4 NOT L3
L6 205 L4 NOT L3

L4 でのみヒットした回答

=> D HIT 1 20 29

L6 ANSWER 1 OF 205 HCAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN
AB The invention provides a make-up cleanser harmless to skin, which is made
from, (by weight parts) magnesium aluminum silicate 1-4, liquid paraffin 25-35,
decanol 2-7, **acetylated lanolin** alc. 1-4, olive oil 1-3, vaseline 2-6,
ethylene glycol 5-12, earth wax 1-3, sorbitol 15-20, glyceryl monostearate
3-6, sorbitan monooleate 1-3, Me parahydroxybenzoate 0.2-1, essence 0.5-1,
and distilled water 35-45. The make-up cleanser has good cleansing effect;
and has no harm and no toxic and adverse side effect to skin.

IT Alcohols, biological studies
RL: COS (Cosmetic use): BIOL (Biological study); USES (Use
(**lanolin, acetylated**; make-up cleansers containing
magnesium aluminum silicate and liquid paraffins)

抄録および索引中のテキスト
説明句でヒット

L6 ANSWER 20 OF 205 HCAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN
AB A cosmetic composition presenting a covering capacity ranging between 1 and 25
and intended to be applied to the skin, lips and/or body s
particles of a composite pigment comprising an inorg. core and a coating.
A lipstick contained polyethylene wax 8.8, microcryst. wax 4, Softisan-100
5, octyldodecanol 17.5, lanolin oil 10.7, **acetylated lanolin** 10.7,
iso-Pr lanolate 10.7, tridecyl trimellitate 11.7, diisostearyl malate
14.6, Ph trimethicone 4.8, and composite pigment (silica/D&C Red) 1.5%.

抄録中のキーワードでヒット

L6 ANSWER 29 OF 205 HCAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN
AB Oxethazaine (I) or its salts is dissolved in .gtoreq.1 carriers selected
from fatty acid triglycerides, glycerin fatty acid esters, sorbitan fatty
acid esters, polyoxyethylene hydrogenated castor oil, polyols, higher
alcs., fatty acid esters, fatty acids, polyglycerin fatty acid est
polyoxyethylene glycerin fatty acid esters, polyoxyethylene sorbit
acid esters, polyethylene glycol fatty acid esters, polyoxvethylene alkyl
ethers, beeswax, crotamiton, tocopherol **acetate, lanolin**, and
tripenoside to give local anesthetic compns. The compns. are useful for
lesions, postoperative wounds, and diseases of anus, vagina, and mouth,
: (省略)

ノイズ

* 統制語 (CA Lexicon) 検索に関する参考資料
<http://www.jaici.or.jp/stn/ref-doc.pdf>
(2006 年リフレッシュセミナー「文献検索 - 応用」)

B 化学物質からの文献検索のポイント

参考 : UVCB 物質の検索

検索例 4 塩素化ポリエチレンに関する文献を探す



クラス識別子が GRS (一般式登録) の物質は, CAplus/CA ファイルで非特定誘導体として索引される場合が多いため, 基本骨格となる物質を REGISTRY ファイルで検索した後に CAplus ファイルで非特定誘導体の文献を検索するとよい。

=> FILE REGISTRY

REGISTRY ファイルに入る

=> E ETHENE, HOMOPOLYMER, CHLORINATED/CN 5

名称で EXPAND する

E1 1 ETHENE, HOMOPOLYMER, CATENA COMPD. WITH CYCLODODECENE/CN
E2 1 ETHENE, HOMOPOLYMER, CATENA COMPD. WITH DIMETHYL TETRACOSANE
DIOATE/CN
E3 1 --> ETHENE, HOMOPOLYMER, CHLORINATED/CN
E4 1 ETHENE, HOMOPOLYMER, CHLORINATED, CHLOROSULFONATED/CN
E5 1 ETHENE, HOMOPOLYMER, CHLORINATED, MALEATED/CN

=> S E3

E 番号で検索する

L1 1 "ETHENE, HOMOPOLYMER, CHLORINATED"/CN

=> D

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN

RN 64754-90-1 REGISTRY *

* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may result in incomplete search results. For additional information, enter HELP RN* at an online arrow prompt (=>).

ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN **Ethene, homopolymer, chlorinated** (CA INDEX NAME)

MF Unspecified

CI PMS, MAN, **GRS** ●

この物質は一般式登録された物質である

PCT Manual registration

LC STN Files: CHEMCATS, CHEMLIST, MSDS-OHS, RTECS*, USPATFULL
(*File contains numerically searchable property data)

Other Sources: DSL**, TSCA**

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

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

=> E ETHENE, HOMOPOLYMER/CN ●

E1 1 ETHENE, HEXAHYDRATE/CN
E2 1 ETHENE, HEXAMER/CN
E3 1 --> ETHENE, HOMOPOLYMER/CN
E4 1 ETHENE, HOMOPOLYMER, (4-HYDROXY-2,2,6,6-TETRAMETHYL-1-PIPERIDINYL)OXY DERIVS./CN
E5 1 ETHENE, HOMOPOLYMER, CATENA COMPD. WITH 1,21-DOCOSADIENE/CN

塩素化前のポリマーを検索する

B 化学物質からの文献検索のポイント

参考 : UVCB 物質の検索

=> S E3

L2 1 "ETHENE, HOMOPOLYMER"/CN

=> D

L2 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
RN 9002-88-4 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN **Ethene, homopolymer** (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
: (省略)
MF (C2 H4)x
CI PMS, COM
PCT Polyolefin
LC STN Files: ADISNEWS, AGRICOLA, ANABSTR, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CABA,
CAPLUS, CASREACT, CBNB, CHEMCATS, CHEMINFORMRX, CHEMLIST, CHEMSAFE, CIN,
CSCHEM, CSNB, DDFU, DETHERM*, DRUGU, EMBASE, ENCOMPLIT, ENCOMPLIT2,
ENCOMPPAT, ENCOMPPAT2, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, IPA, MEDLINE, MRCK*,
MSDS-OHS, PIRA, PROMT, RTECS*, TOXCENTER, TULSA, USPAT2, USPATFULL
(*File contains numerically searchable property data)
Other Sources: DSL**, TSCA**
(**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

CM 1

CRN 74-85-1
CMF C2 H4

H₂C=CH₂

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

200900 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
14508 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
201182 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

=> FILE HCAPLUS

検索語が多い場合には *HCAPLUS* ファイルを利用するとよい

=> S L2/D (S) (CHLORINAT? OR CHLORO) ●

/D で非特定誘導体に限定し、塩素化を表す
キーワードを組み合わせる
(/D は 1977 年以降の文献に利用できる)

L3 4754 L2/D (S) (CHLORINAT? OR CHLORO)

=> D SCAN TI HITIND

L3 4754 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN
TI Vinylidene chloride polymer compositions with good heat stability and
processability
IT **9002-88-4D**, Polyethylene, **chlorinated** 12304-65-3,
Hydrotalcite (Mg₆Al₂(OH)₁₆CO₃·4H₂O) 12363-58-5, Aluminum magnesium
carbonate hydroxide (Al₂Mg₆(CO₃)(OH)₁₆) tetrahydrate
RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)
(vinylidene chloride polymer compns. containing hydrotalcite showing good
heat stability and processability)

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

B 化学物質からの文献検索のポイント

参考 : UVCB 物質の検索

L3 4754 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN
TI Early development of a hazardous chemical protective ensemble
IT **9002-88-4D**, Polyethylene, **chloro** derivs. 9010-79-1D,
fluorinated 9078-96-0, Surlyn
RL: DEV (Device component use); USES (Uses)
(protective wearing apparel from, for use in chemical spill cleanup)

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

=> S (L2 OR ETHENE, HOMOPOLYMER) (S) (CHLORINAT? OR CHLORO) RAN=,1976

L4 1632 (L3 OR ETHENE, HOMOPOLYMER) (S) (CHLORINAT? OR CHLORO)

1976年以前の文献は、塩素化前のCAS登録番号またはCA索引名と、塩素化をあらわすキーワードを組み合わせて検索する

=> D SCAN TI HITIND

L4 1632 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN
TI Surface protective film for plasticized polyvinyl chloride substrates
IT **Ethene, homopolymer, chlorinated**
RL: USES (Uses)
(adhesives containing, for bonding of protective polyolefin films to plasticized PVC)

CA 索引名でヒット

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

L4 1632 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN
TI Chlorinating polyethylene
IT **9002-88-4P**, preparation
RL: PREP (Preparation)
(**chlorinated**, particle size in relation to)

CAS登録番号でヒット

L4 1632 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN
TI Coating of paper with polymeric compositions. Extrusion coating
IT **9002-88-4, Ethylene, homopolymer**
(or their **chloro** derivs., extrusion coating of paper with)

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

=> S L3 OR L4

L5 6386 L3 OR L4

C 結合非水素数

結合非水素数の概要および利用例についてご紹介します

C 結合非水素数

結合非水素数とは

結合非水素数とは、特定のノードに結合する**水素以外のノードの数**である。STN で構造質問式を作図する際、この結合非水素数を指定することができる。

- ・ **質問式中で既に結合しているノードの数、結合の種類を含める。**
- ・ 指定したノードからの**結合の属性 (鎖・環・環/鎖)**を指定できる。
いずれか一種類のみしか指定できず、指定しない場合は不定になる。(環結合を指定したら、鎖結合は不定)
- ・ 結合次数 (単結合, 二重結合など) は問わない。

指定方法

- ・ 結合非水素数

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

- ・ 結合非水素数を指定したノードからの結合の属性

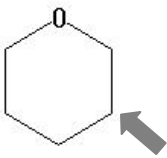
指定範囲	内容
鎖	指定したノードからの鎖結合の数
環	指定したノードからの環結合の数
環/鎖	指定したノードからの鎖または環結合の数

C 結合非水素数

結合非水素数の指定 - 環/鎖結合の指定

結合非水素数の指定条件と得られる構造の例

【例 1】 結合非水素数 : 「ちょうど 3, 環/鎖」を指定した場合



矢印のノードに対して 結合非水素数

特定

ちょうど

最小

最大

混合

個数 (0 から 16):

鎖

環

環/鎖

不定

キャンセル

OK

「ちょうど 3, 環/鎖」を指定

得られる回答



鎖 : 1
 環 : 2
 環/鎖 : 3



鎖 : 0
 環 : 3
 環/鎖 : 3



鎖 : 1
 環 : 2
 環/鎖 : 3

得られない回答



鎖 : 0
 環 : 2
 環/鎖 : 2



鎖 : 2
 環 : 2
 環/鎖 : 4

結合次数は問わない
(二重結合も 1 とカウント)

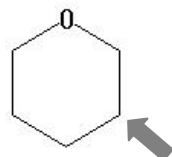
- あるノードに、「ちょうど 3, 環/鎖」と指定すると、指定したノードに対し、水素以外のノードが必ず三つ結合した物質のみヒットする。

結合の種類は問わず、置換の数だけ指定したいときは「環/鎖」で指定する。

C 結合非水素数

結合非水素数の指定 - 環/鎖結合の指定

【例 2】 結合非水素数 : 「最小 3, 環/鎖」を指定した場合



矢印のノードに対して

結合非水素数

特定

ちょうど

最小

最大

混合

個数 (0 から 16):

不定

鎖

環

環/鎖

キャンセル

OK

「最小 3, 環/鎖」を指定

得られる回答

鎖 : 1
 環 : 2
 環 / 鎖 : 3

鎖 : 0
 環 : 3
 環 / 鎖 : 3

鎖 : 1
 環 : 2
 環 / 鎖 : 3

鎖 : 2
 環 : 2
 環 / 鎖 : 4

最小 3 なので、この構造もヒットする

得られない回答

鎖 : 0
 環 : 2
 環 / 鎖 : 2

- あるノードに、「最小 3, 環/鎖」と指定すると、指定したノードに対し、水素以外のノードが三つ以上結合した物質のみヒットする。

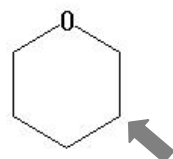


- 特定の数だけでなく、範囲（最大, 最小）での指定もできる。
- 最大数を指定すると、指定した数以下のもの、最小数を指定すると、指定した数以上のものがヒットする。
- 上の例のように、「特定の位置に必ず置換がある」という指定が可能。

C 結合非水素数

結合非水素数の指定 - 環/鎖結合の指定

【例 3】 結合非水素数 : 「最大 3, 環/鎖」を指定した場合



矢印のノードに対して

結合非水素数

特定

ちょうど

最小

最大

混合

個数 (0 から 16):

不定

鎖

環

環/鎖

キャンセル

OK

「最大 3, 環/鎖」を指定

得られる回答

鎖: 1
環: 2
環/鎖: 3

鎖: 0
環: 3
環/鎖: 3

鎖: 1
環: 2
環/鎖: 3

鎖: 0
環: 2
環/鎖: 2

最大 3 なので、この構造もヒットする

得られない回答

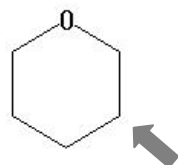
鎖: 2
環: 2
環/鎖: 4

- あるノードに、「最大 3, 環/鎖」と指定すると、指定したノードに対し、水素以外のノードが最大三つ結合した物質のみヒットする。

C 結合非水素数

結合非水素数の指定 - 環結合の指定

【例 4】 結合非水素数 : 「ちょうど 2, 環」を指定した場合



矢印のノードに対して
結合非水素数

特定

ちょうど

最小

最大

混合

個数 (0 から 16):

不定

鎖

環

環/鎖

キャンセル

OK

「ちょうど 2, 環」を指定

得られる回答

鎖結合の数はいくつでも良い

得られない回答

 <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"> 鎖 : 1 環 : 2 環 / 鎖 : 3 </div>	 <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"> 鎖 : 1 環 : 2 環 / 鎖 : 3 </div>	 <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"> 鎖 : 2 環 : 2 環 / 鎖 : 4 </div>	 <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"> 鎖 : 0 環 : 2 環 / 鎖 : 2 </div>	 <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"> 鎖 : 0 環 : 3 環 / 鎖 : 3 </div>
--	--	--	--	--

- あるノードに、「ちょうど 2, 環」と指定すると、指定したノードに対し、水素以外のノードが環結合で必ず二つ結合した物質のみヒットする。

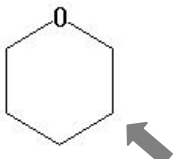


環結合の数を指定すると、上の例のように、鎖結合の置換基を許容し、縮環のみを禁止することが可能。

C 結合非水素数

結合非水素数の指定 - 環結合の指定

【例 5】 結合非水素数 : 「最小 2, 環」を指定した場合



矢印のノードに対して

結合非水素数

特定

ちょうど

最小

最大

混合

個数 (0 から 16):

不定

鎖

環

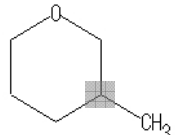
環/鎖

キャンセル

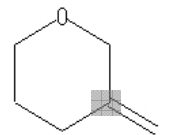
OK

「最小 2, 環」を指定

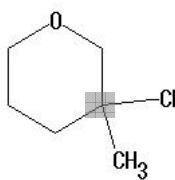
得られる回答



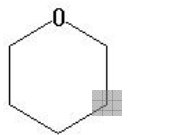
鎖: 1
 環: 2
 環/鎖: 3



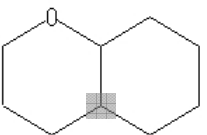
鎖: 1
 環: 2
 環/鎖: 3



鎖: 2
 環: 2
 環/鎖: 4



鎖: 0
 環: 2
 環/鎖: 2



鎖: 0
 環: 3
 環/鎖: 3

鎖結合の数はいくつでも良い

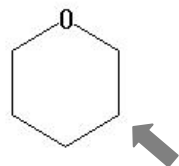
最小 2 なので、この構造もヒットする

- あるノードに、「最小 2, 環」と指定すると、指定したノードに対し、水素以外のノードが環結合で二つ以上結合した物質のみヒットする。

C 結合非水素数

結合非水素数の指定 - 環結合の指定

【例 6】 結合非水素数 : 「最大 2, 環」を指定した場合



矢印のノードに対して
結合非水素数

特定

ちょうど

最小

最大

混合

個数 (0 から 16):

鎖

環

環/鎖

不定

キャンセル
OK

「最大 2, 環」を指定

鎖結合の数はいくつでも良い

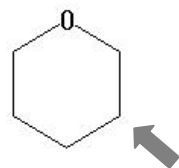
得られる回答				得られない回答
<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"> 鎖 : 1 環 : 2 環 / 鎖 : 3 </div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"> 鎖 : 1 環 : 2 環 / 鎖 : 3 </div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"> 鎖 : 2 環 : 2 環 / 鎖 : 4 </div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"> 鎖 : 0 環 : 2 環 / 鎖 : 2 </div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"> 鎖 : 0 環 : 3 環 / 鎖 : 3 </div>

- あるノードに、「最大 2, 環」と指定すると、指定したノードに対し、水素以外のノードが環結合で最大二つ結合した物質のみヒットする。

C 結合非水素数

結合非水素数の指定 - 鎖結合の指定

【例 7】 結合非水素数 : 「ちょうど 1, 鎖」を指定した場合



矢印のノードに対して

結合非水素数

特定

ちょうど

最小

最大

混合

個数 (0 から 16):

鎖

環

環/鎖

不定

キャンセル

OK

「ちょうど 1, 鎖」を指定

得られる回答	環結合の数はいくつでも良い	得られない回答
<p>鎖: 1 環: 2 環/鎖: 3</p>	<p>鎖: 1 環: 2 環/鎖: 3</p>	<p>鎖: 2 環: 2 環/鎖: 4</p>
		<p>鎖: 0 環: 2 環/鎖: 2</p>
		<p>鎖: 0 環: 3 環/鎖: 3</p>

- あるノードに、「ちょうど 1, 鎖」と指定すると、指定したノードに対し、水素以外のノードが鎖結合で必ず一つ結合した物質のみヒットする。

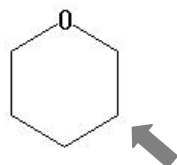


鎖結合の置換基の数を指定することができる。

C 結合非水素数

結合非水素数の指定 - 鎖結合の指定

【例 8】 結合非水素数 : 「最小 1, 鎖」を指定した場合



矢印のノードに対して

結合非水素数

特定

ちょうど

最小

最大

混合

個数 (0 から 16):

鎖

環

環/鎖

不定

キャンセル

OK

「最小 1, 鎖」を指定

得られる回答

環結合の数はいくつでも良い

鎖: 2
環: 2
環/鎖: 4

鎖: 1
環: 2
環/鎖: 3

鎖: 1
環: 2
環/鎖: 3

得られない回答

鎖: 0
環: 2
環/鎖: 2

鎖: 0
環: 3
環/鎖: 3

- あるノードに、「最小 1, 鎖」と指定すると、指定したノードに対し、水素以外のノードが鎖結合で一つ以上結合した物質のみヒットする。

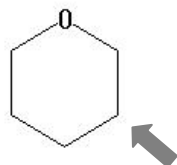


上の例のように、「特定の位置に必ず鎖結合の置換基が存在する」という指定が可能。

C 結合非水素数

結合非水素数の指定 - 鎖結合の指定

【例 9】 結合非水素数 : 「最大 1, 鎖」を指定した場合



矢印のノードに対して
結合非水素数

特定

ちょうど

最小

最大

混合

個数 (0 から 16):

不定

鎖

環

環/鎖

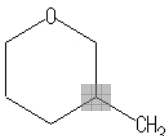
キャンセル

OK

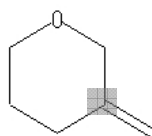
「最大 1, 鎖」を指定

環結合の数はいくつでも良い

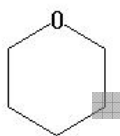
得られる回答



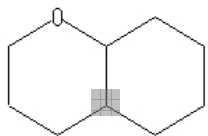
鎖 : 1
 環 : 2
 環/鎖 : 3



鎖 : 1
 環 : 2
 環/鎖 : 3

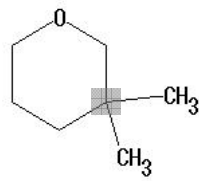


鎖 : 0
 環 : 2
 環/鎖 : 2



鎖 : 0
 環 : 3
 環/鎖 : 3

得られない回答



鎖 : 2
 環 : 2
 環/鎖 : 4

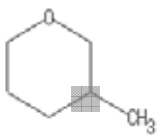
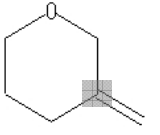
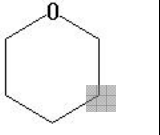
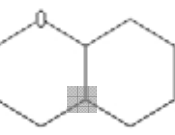
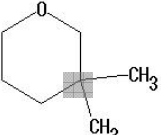
- あるノードに、「最大 1, 鎖」と指定すると、指定したノードに対し、水素以外のノードが鎖結合で最大一つ結合した物質のみヒットする。

68

C 結合非水素数

結合非水素数の指定 - まとめ

結合非水素数の指定条件と得られる構造の例一覧

結合非水素数の指定条件 (矢印のノードに対して)		得られる構造の例				
						
		鎖:1 環:2 環/鎖:3	鎖:1 環:2 環/鎖:3	鎖:0 環:2 環/鎖:2	鎖:0 環:3 環/鎖:3	鎖:2 環:2 環/鎖:4
数	結合属性					
ちょうど 3	環/鎖			×		×
最小 3	環/鎖			×		
最大 3	環/鎖					×
ちょうど 2	環				×	
最小 2	環					
最大 2	環				×	
ちょうど 1	鎖			×	×	×
最小 1	鎖			×	×	
最大 1	鎖					×

C 結合非水素数

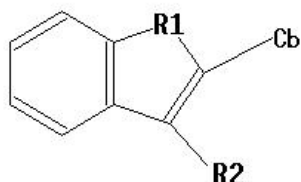
結合非水素数 - CSS 検索

CSS 検索（閉構造部分構造検索）は、何も作図していない部分には水素が置換した構造を検索する検索タイプである。



CSS 検索で結合非水素数を指定すると、特定の位置に縮環や置換基を許容することができる。

検索例 1：下記の構造を検索する



R1 = O, S
R2 = CH₃, NH₂, OH, X
Cb (炭素環) には置換基があってもよい
その他の元素に置換基はない

作図方法

- ・ CSS 検索を行う場合には、置換基のないノードに水素を作図する必要はない。
- ・ 置換基を許容するノード（この場合は Cb）に対して結合非水素数「最小 1」、「環/鎖」を指定する。

結合非水素数
「最小 1」、「環/鎖」を指定する

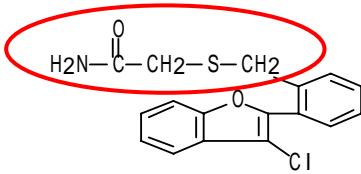
* Cb からの結合は必ず鎖なので、
結合属性は「鎖」を指定しても同じ結果となる

C 結合非水素数

結合非水素数 - CSS 検索

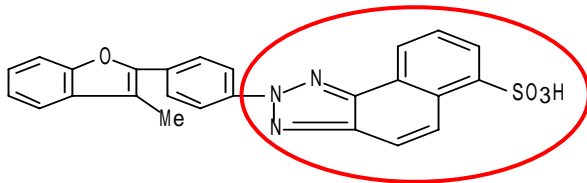
回答例

IN Acetamide, 2-[[[2-(3-chloro-2-benzofuranyl)phenyl]methyl]thio]-
 MF C17 H14 Cl N O2 S

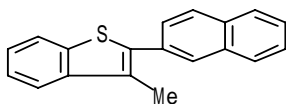


Cb にのみ置換基がついた構造がヒットする

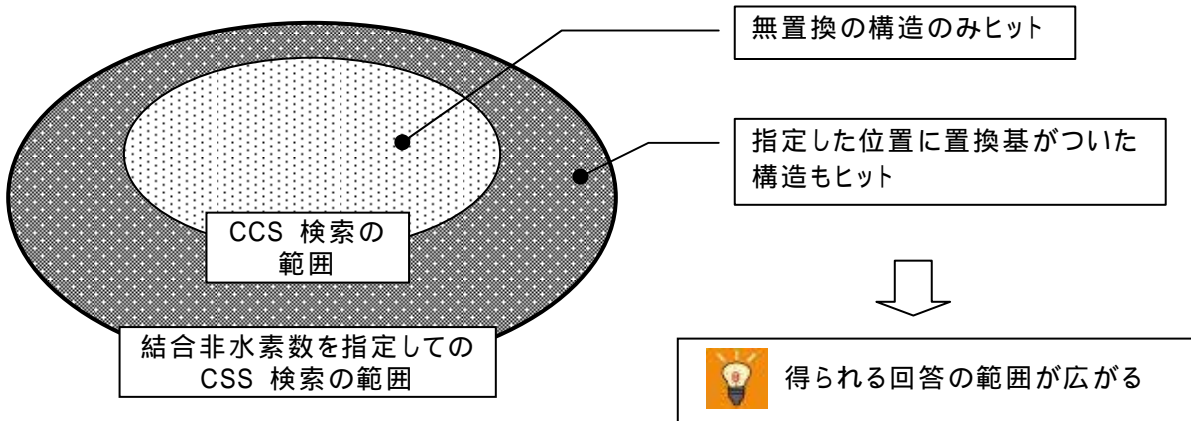
IN 2H-Naphtho[1,2-d]triazole-6-sulfonic acid, 2-[p-(3-methyl-2-benzofuranyl)phenyl]- (8Cl)
 MF C25 H17 N3 O4 S
 Cl COM



IN Benzo[b]thiophene, 3-methyl-2-(2-naphthalenyl)-
 MF C19 H14 S




無置換の構造もヒット



C 結合非水素数

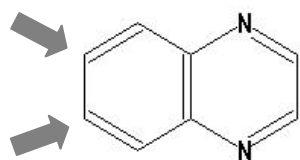
結合非水素数 - SSS 検索

SSS 検索 (部分構造検索) は、何も作図していない部分にはあらゆる置換基が置換した構造を検索する検索タイプである。



SSS 検索で結合非水素数を指定すると、特定の位置の置換基の数や縮環の有無を限定することができる。

検索例 2 : 下記の構造を検索する



矢印の位置が必ず縮環している
(どんな環でもよい)
その他の位置には置換基はついていてもよいが、縮環はしない

作図方法

- 必ず縮環するノードには、結合非水素数「ちょうど 3」、「環」を指定する。

結合非水素数
「ちょうど 3」「環」を指定する

C 結合非水素数

結合非水素数 - SSS 検索

- 縮環しないノード (下図でハイライトしているノード) には, 結合非水素数 「ちょうど 2」, 「環」を指定する.

結合非水素数

特定 不定

ちょうど 鎖

最小 環

最大 環/鎖

混合

個数 (0 から 16):

キャンセル OK

結合非水素数
「ちょうど 2」, 「環」を指定する

注) 縮環の有無について指定する場合には, 必ず「環」結合の数を指定する.

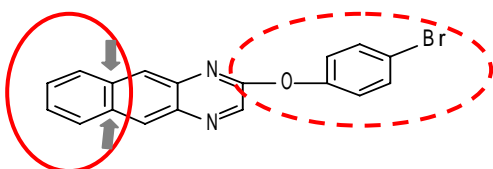
注) 結合非水素数による縮環の限定と「環の孤立化」を同時に指定することは避ける.

C 結合非水素数

結合非水素数 - SSS 検索

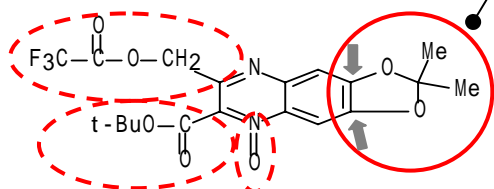
回答例

IN Benzo[g]quinoxaline, 2-(4-bromophenoxy)-
MF C18 H11 Br N2 O



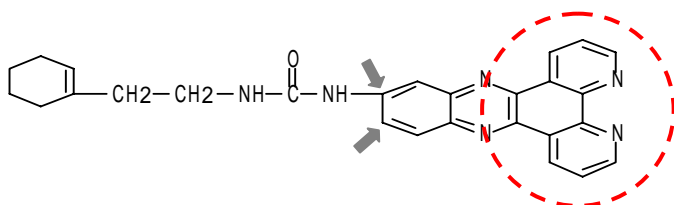
矢印の位置に必ず縮環している構造がヒットする
それ以外の位置に鎖結合の置換基がついた構造もヒットする

IN 1,3-Dioxolo[4,5-g]quinoxaline-6-carboxylic acid, 2,2-dimethyl-7-
[[trifluoroacetyl]oxy]methyl]-, 1,1-dimethylethyl ester, 5-oxide (9CI)
MF C19 H19 F3 N2 O7

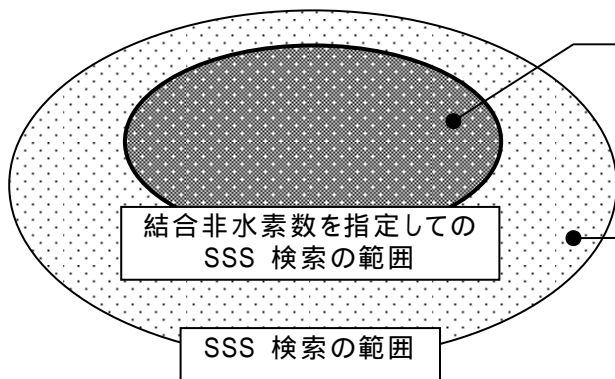


ヒットしない構造

IN Urea, N-[2-(1-cyclohexen-1-yl)ethyl]-N'-quinoxalino[2,3-f][1,10]phenanthroline-11-yl-
MF C27 H24 N6 O



矢印の位置が縮環していない構造や、他の位置に縮環している構造はヒットしない



特定の位置に置換基や縮環がない構造が得られる

あらゆる置換基がついた構造がヒット

SSS 検索の範囲

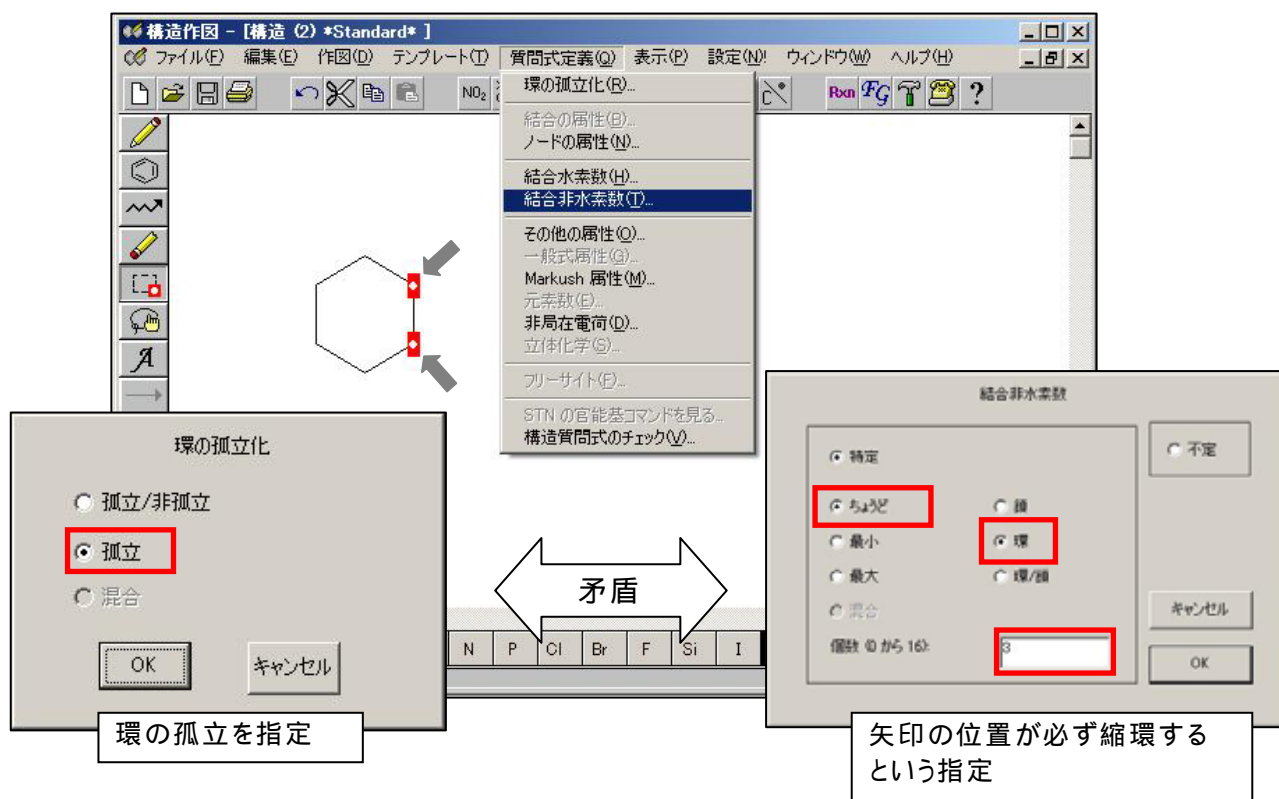


得られる回答の範囲が限定される

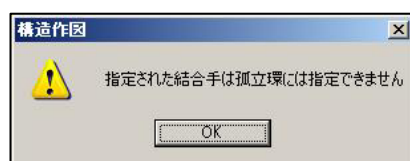
C 結合非水素数

参考：「環の孤立化」と「結合非水素数」について

SSS 検索において、「環の孤立化」と「結合非水素数」を同時に指定する場合は、矛盾が生じないように注意する必要がある。



- 矛盾した指定をしたまま保存しようとする時、警告メッセージが表示される。
(保存はできるが、SSS 検索しても回答は 0 件になる.)

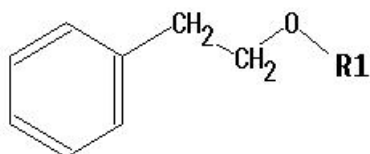


- 上記の構造質問式で、「環/鎖」を指定した場合は、警告メッセージは表示されないが、縮環した構造は回答には含まれない。(環の孤立が優先される.)
- CSS 検索の場合には、環の孤立は指定する必要はない。(元々縮環した構造はヒットしない.)
上記の構造質問式で検索した場合でも、環の孤立の指定は無視され、結合非水素数の指定のみが有効となり、正しく検索できる。

C 結合非水素数

結合非水素数 - SSS 検索

検索例 3 : 下記の構造を検索する



ベンゼン環には何が置換していてもよい
R1 = Ak (炭素鎖) - OH
R1 中の Ak は飽和/不飽和, 直鎖/分岐は問わないが,
OH 基以外の置換基はつかない

作図方法

- OH 基以外の置換基がいない場合, Ak に対して, 結合非水素数「ちょうど 2」, 「環/鎖」を指定する.

The screenshot shows the software interface with the chemical structure $\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-O-Ak-OH}$. A context menu is open over the Ak atom, and the '結合非水素数' dialog box is displayed. In the dialog, the '特定' (Specific) section has 'ちょうど' (Exactly) selected, and the '環/鎖' (Ring/Chain) section has '環/鎖' selected. The '個数' (Count) field is set to 2.

結合非水素数

特定 不定

ちょうど 鎖

最小 環

最大 環/鎖

混合

個数 (0 から 16):

キャンセル OK

結合非水素数
「ちょうど 2」 「環/鎖」を指定する

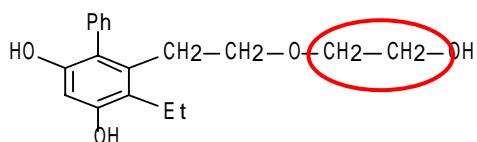
* Ak からの結合は必ず鎖なので,
結合属性は「鎖」を指定しても同じ結果となる

C 結合非水素数

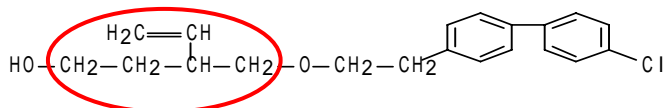
結合非水素数 - SSS 検索

回答例

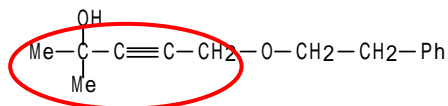
IN [1,1'-Biphenyl]-2,4-diol, 5-ethyl-6-[2-(2-hydroxyethoxy)ethyl]-
MF C18 H22 O4



IN 4-Penten-1-ol, 3-[[2-(4'-chloro[1,1'-biphenyl]-4-yl)ethoxy)methyl]-
MF C20 H23 Cl O2



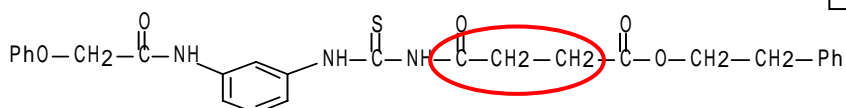
IN 3-Pentyn-2-ol, 2-methyl-5-(2-phenylethoxy)-
MF C14 H18 O2



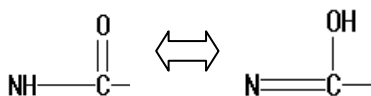
Ak (炭素鎖) に OH 基以外の置換基が
ついていないもののみがヒットする

ヒットしない構造

IN Butanoic acid, 4-oxo-4-[[[3-[(2-phenoxyacetyl)amino]phenyl]amino]thioxome
thyl]amino]-, 2-phenylethyl ester
MF C27 H27 N3 O5 S



ノーマライズド結合による
ノイズを除くことができる



C 結合非水素数

参考：一般式属性

一般式属性の指定

- ・ 検索例 3 でさらに飽和炭素鎖のみに限定したい場合には、「一般式属性」中にある「飽和度」で限定することができる。

Markush 属性 (M)...
 元素数 (E)...
一般式属性 (G)
 結合非水素数 (I)...

一般式定義

飽和度: 不定 混合 飽和
 不飽和

鎖の種類: 不定 混合 直鎖
 分岐

ヘテロ原子の数: 不定 混合
 2 以上 ちよど 1

環系の種類: 不定 混合 多環
 単環

炭素原子数: 不定 混合 7 未満
 7 以上

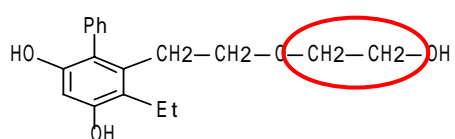
OK
 キャンセル

一般式属性の「飽和」にチェックを入れる (デフォルトは「不定」)

「鎖の種類」で「分岐」、「直鎖」の限定も可能

回答例

IN [1,1'-Biphenyl]-2,4-diol, 5-ethyl-6-[2-(2-hydroxyethoxy)ethyl]-
 MF C18 H22 O4



アルキル鎖のみに限定できる

APPENDIX

APPENDIX

クラス識別子の定義

合金 (AYS : Alloy)

CAS が定義する合金とは、金属と他の金属、非金属、ガス、非金属化合物等との混合物で、溶融状態において混和していたものが、冷却固化後も分離しないものを指す。

・ レコード例

```
RN 39446-73-6 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Iron alloy, base, Fe 54,Ni 29,Co 17,Ce 0.1 (9CI) (CA INDEX NAME)
MF Ce . Co . Fe . Ni
CI AYS
LC STN Files: CA, CAPLUS
```

Component	Component Percent	Component Registry Number
Fe	54	7439-89-6
Ni	29	7440-02-0
Co	17	7440-48-4
Ce	0.1	7440-45-1

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

配位化合物 (CCS : Coordination Compound)

CAS が定義する配位化合物とは中心の原子に他の原子、または原子団（配位子）が結合し、それらと中心原子との間の結合数が、原子価数に等しくない分子、またはイオンを指す。中心原子に対する限定はないが、通常は金属原子である。

多成分物質の成分 (COM : Component)

この物質が REGISTRY ファイル中で多成分物質の一部としても存在することを意味する。多成分物質を登録する際に、その個々の成分が未登録の場合には、それらも併せて登録される。このようにして登録された物質に対して COM が付与される。
なお、このコードは表示のみ可能で検索はできない。

APPENDIX

クラス識別子の定義

概念語登録 (CTS : Registered Concept)

CAplus/CA ファイルで通常は General Subject Index の見出し語として索引される物質が、例外的に REGISTRY ファイルに登録されて CAS 登録番号が付与されたレコードである。概念語登録された物質の多くは TSCA 台帳への登録などの特別な目的のために登録されたものである。一部のものは、以前は CA で特定の化学物質として取り扱われていたが、その後の方針変更によって General Subject Index の見出し語として索引されるようになったものである。REGISTRY ファイル中では CTS の CAS 登録番号には * が付与されている。

・ レコード例

```
RN 64742-39-8 REGISTRY *
* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may
  result in incomplete search results. For additional information, enter HELP
  RN* at an online arrow prompt (=>).
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Neutralizing agents (petroleum), spent sodium carbonate (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN Spent sodium carbonate neutralizing agents (petroleum)
DEF A complex combination consisting predominantly of water and containing
  sodium carbonate and organic and inorganic sodium salts. It is obtained
  by neutralization of an acidic petroleum stream.
MF Unspecified
CI MAN, CTS
LC STN Files: CHEMLIST
  Other Sources: EINECS**, NDSL**, TSCA**
  (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
```

一般式登録 (GRS, Generic Registration)

特定物質の一般的な誘導体に対するコードである。前記の CTS と同様に、CAplus/CA ファイルでは CAS 登録番号によって索引されないが、主に TSCA 台帳への登録などのために CAS 登録番号の付与された一般的誘導体（塩素化ビフェニルなど）を示す。REGISTRY ファイル中では GRS の CAS 登録番号には * が付与されている。CA の索引ではこのような化合物は、完全に定義されている基本骨格部分に相当する化合物（塩素化ビフェニルではビフェニル）を CAS 登録番号で索引し、「塩素化」はテキスト説明句によって記述される。

・ レコード例

```
RN 68609-03-0 REGISTRY *
* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may
  result in incomplete search results. For additional information, enter HELP
  RN* at an online arrow prompt (=>).
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Copper, C6-19-branched carboxylate naphthenate complexes (CA INDEX NAME)
MF Unspecified
CI MAN, GRS
LC STN Files: CHEMLIST
  Other Sources: DSL**, EINECS**, TSCA**
  (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
```

APPENDIX

クラス識別子の定義

定義の不完全な物質 (IDS : Incompletely-Defined Substance)

分子式は確定しているが、完全な構造が分かっていない化合物を示す。これらの完全には定義されていない化合物には、置換基やエステル化の位置が不明なもの、水素化、または不飽和結合の位置が不明のもの、正確な構造の分からない縮合反応生成物、構造不明の枝分かれしたアルキル基を持つ化合物、環の大きさの不明な糖グループを持つ化合物などがある。

・ レコード例 : 置換基の位置が不明

```
RN 1330-20-7 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Benzene, dimethyl- (9CI) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Xylene (8CI)
OTHER NAMES:
CN Dilan
CN Dimethylbenzene
CN Xylol
DR 8026-09-3
MF C8 H10
CI IDS, COM
LC STN Files:  AGRICOLA, ANABSTR, AQUIRE, BIOBUSINESS, BIOSIS, BIOTECHNO,
  CA, CABA, CANCERLIT, CAPLUS, CASREACT, CBNB, CEN, CHEMCATS, CHEMLIST,
  CHEMSAFE, CIN, CSCHM, CSNB, DDFU, DETHERM*, DRUGU, EMBASE, ENCOMPLIT,
  ENCOMPLIT2, ENCOMPAT, ENCOMPAT2, HSDB*, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, IPA,
  MEDLINE, MRCK*, MSDS-OHS, NAPRALERT, NIOSHTIC, PDLCOM*, PIRA, PROMT,
  RTECS*, TOXCENTER, TULSA, ULIDAT, USPAT2, USPATFULL, VETU, VTB
  (*File contains numerically searchable property data)
Other Sources:  DSL**, EINECS**, TSCA**
  (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
```



2 (D1-Me)

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

```
19276 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
  543 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
19301 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

APPENDIX

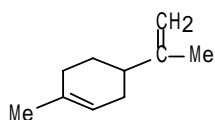
クラス識別子の定義

・ レコード例 : 水素化の位置が不明

RN 693288-36-7 REGISTRY
 ED Entered STN: 15 Jun 2004
 CN Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, dihydro deriv. (9CI)
 (CA INDEX NAME)
 MF C10 H18
 CI **IDS**
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPAT2, USPATFULL

CM 1

CRN 138-86-3
 CMF C10 H16



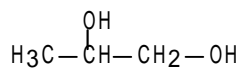
1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

・ レコード例 : エステル化の位置が不明

RN 118573-28-7 REGISTRY
 ED Entered STN: 20 Jan 1989
 CN Propanoic acid, 2-hydroxy-, monoester with 1,2-propanediol (9CI) (CA
 INDEX NAME)
 MF C6 H12 O4
 CI **IDS**
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL

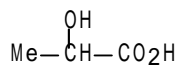
CM 1

CRN 57-55-6
 CMF C3 H8 O2



CM 2

CRN 50-21-5
 CMF C3 H6 O3



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

APPENDIX

クラス識別子の定義

手作業登録 (MAN : Manually-Registered Substance)

構造が確定していないために結合表を作れない化学物質を示す。この中には REGISTRY ファイルの構造の大きさの上限（水素以外の元素数が 252 原子まで）を越える化合物、分子式しか分からない化合物、および名称しか分からない化合物（商品名など）がある。概念語登録と一般式登録はこの中に含まれる。

鉱物 (MNS : Minerals)

CAS が定義する鉱物とは天然に生成する元素物質、または化合物で組成が明確なものである。通常、特別な結晶形を持っている。

混合物 (MXS : Mixture)

CAS の定義する混合物は、化学的に独立した二つ以上の活性成分から成り、特定の目的のためにわざわざ調製されたものをいう。

ポリマー (PMS : Polymer)

CAS が定義するポリマーは、より小さな分子（モノマー）を結合させて得られる天然または人工的に合成した高分子化合物である。

ラジカルイオン (RIS : Radical Ion)

CAS が定義するラジカル・イオンは、不対電子を持ち、かつ正電荷または負電荷を帯びた有機化合物である。形式的には、中性化合物から電子を取り去ったり、あるいは付加することによって生成するものである。

環母核 (RPS : Ring Parent)

冊子体 Ring Systems Handbook または旧版の Ring Parent Handbook に記載された化合物につけられる。環母核とは、置換基のない、単一の環系そのものを指す。

また、新規登録物質中に新規の環母核が含まれていた場合、その環母核を REGISTRY ファイルに登録する。このレコードにも RPS がつけられる。

APPENDIX

クラス識別子の定義

表形式無機化合物 (TIS : Tabular Inorganic Substance)

構造が確定していないために、結合表を作れない無機化学物質を示す。これらの物質には、独立した分子を持たない物質、3次元の格子構造を持つ物質、および非化学量論的な成分を含む物質（不定比化合物）が含まれる。これらの物質は COMP 表示形式により、成分比と成分 CAS 登録番号を表形式で表示することができる。

・ レコード例

```

RN  142587-50-6  REGISTRY
ED  Entered STN:  24 Jul 1992
CN  Cobalt lanthanum nickel oxide (Co0.46LaNi0.54O3) (9CI)  (CA INDEX NAME)
MF  Co . La . Ni . O
AF  Co0.46 La Ni0.54 O3
CI  TIS
SR  CA
LC  STN Files:  CA, CAPLUS
  
```

Component	Ratio	Component Registry Number
O	3	17778-80-2
Co	0.46	7440-48-4
Ni	0.54	7440-02-0
La	1	7439-91-0

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

組成不明、組成不定、複雑な反応生成物、および生物物質 (UVCB : Unknown or Variable Composition, Complex Reaction Products, and Biological Material)

特定の化学物質として登録されない物質であるが、TSCA 台帳への登録などのために REGISTRY ファイルに登録されたものである。したがって、通常 CAplus/CA ファイルの索引には使われない。REGISTRY ファイル中では、UVCB 物質の CAS 登録番号には * が付与されている。

植物からの抽出物などに対しては、各物質に関する説明が物質定義 (DEF) フィールドに入力されている場合がある (検索・表示可能)。

UVCB は前述の CTS と GRS の総称であり、検索に利用することができる (CTS と GRS をまとめて検索できる)。

レコード中には UVCB は表示されない。

APPENDIX

クラス識別子の定義

クラス識別子コードと検索可能データ

コード	内容	検索フィールド				多成分物質で登録	CA ファイルでの検索の可否
		構造環データ	分子式	名称	/MAC/RC		
AYS	合金	X					
CCS	配位化合物				X		
CTS	概念語登録	X	X		X		X
GRS	一般式登録	X	X		X		X
IDS	定義の不完全な物質	*1			X		
MAN	手作業登録	X	*2		X		*4
MNS	鉱物	X			X		
MXS	混合物				X		
PMS	ポリマー				X	*3	
RIS	ラジカルイオン				X		
RPS	環母核				X		*5
TIS	表形式無機化合物	X					
UVCB	組成不明, 組成不定, 複雑な反応生成物, および生体物質	X	X		X		X

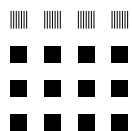
*1 一部の置換位置または構造は不明だが, 分子式は確定している.

*2 構造が大きくて (水素以外の原子数が 253 以上), 分子式のみ記載されているものと, 分子式も不明なものがある.

*3 ホモポリマーと SRU ポリマーは単成分物質.

*4 CTS や GRS の場合は検索不可.

*5 環母核そのものは文献に記載がないこともある.



JAICI 社団法人 化学情報協会

情報事業部

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

サービス全般 TEL: 0120-151-462

E-mail: customer@jaici.or.jp

ヘルプデスク TEL: 0120-003-462

E-mail: support@jaici.or.jp

FAX: 03-5978-3600 URL: www.jaici.or.jp