

STN INTERNATIONAL

リフレッシュセミナー

化学物質検索 Ⅲ

目 次

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

REGISTRY ファイルの収録内容	1
レコード例	2
CAS 登録番号の種類	15
検索機能	17

B 有機化合物

検索方法	19
検索例 1: 環構造をもつ化学物質の	20
検索例 2: スクリーンを利用した構造検索	31
検索例 3: サブセット検索 (辞書検索回答セット利用)	34
検索例 4: サブセット検索 (構造検索回答セット利用)	37

C 配位化合物

検索方法	41
CAplus / CA ファイルの索引	42
検索例 1: 配位化合物 (CCS)	44
検索例 2: 配位子と金属の塩	56
検索例 3: 構造不明	58
文献検索のまとめ	60

D 無機化合物

REGISTRY ファイルに収録される無機化合物	61
検索例 1: 化学量論的な組成を持つ物質 (硝酸銀)	62
検索例 2: 化学量論的な組成を持つ物質 (窒化ガリウム)	65
表形式無機化合物	67
検索例 3: 表形式無機化合物 (窒化ガリウム)	69
合金	73
検索例 4: 合金 (チタン, パナジウム, クロム, アルミニウム合金)	77

E 検索のポイント・注意点

検索のポイント・注意点一覧	83
結合非水素数の利用	84
定義の不完全な物質 (IDS) の検索	90
成分 CAS 登録番号検索の注意点	92
登録情報源 (SR)	93
CAplus, CA ファイルに文献のない理由	94
クロスオーバー検索	97

APPENDIX

近接演算子	99
CAS 命名法の概要	100
周期率グループ (/PG)	102
構造フィルター (スクリーン)	103

A *REGISTRY* ファイルの 化学物質収録情報

REGISTRY ファイルにはいろいろな種類の化学物質が収録されています。この章では、レコード例を通して化学物質の収録内容および特徴を理解してください。

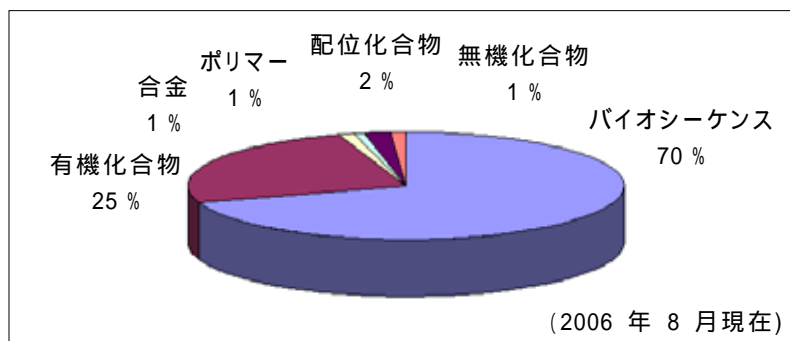
A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

REGISTRY ファイルの収録内容

REGISTRY ファイルには、CAS 登録番号が付与された化学物質が収録されている。

・ REGISTRY ファイルにはすべての化合物種類が収録されている。

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



・ 収録件数 : 86,800,000 件 (2006 年 8 月現在). 更新は毎日.

・ REGISTRY ファイルに収録される化学物質の出典

- Chemical Abstracts (CAplus/CA ファイル) に索引されているすべての特定化学物質
- 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記載された物質
- 公的機関や企業からの依頼により CAS 登録番号を付与した物質 (CAS 登録サービス)
- 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記載された化学物質
- 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
- NCI (National Cancer Institute) 由来の物質
- CASREACT ファイル収録反応中の反応関与物質
- GenBank ファイル由来の核酸・タンパク質・ペプチド配列

・ REGISTRY ファイルに収録する化学物質の同定は非常に細かく区別されている。

- 酢酸 (64-19-7) と酢酸ナトリウム (127-09-3)
- 酢酸 (64-19-7) と ^{14}C で標識された酢酸 (3590-56-5)
- 酢酸 (64-19-7) と酢酸イオン (CH_3COO^-) (71-50-1)
- L-アラニン (56-41-7), D-アラニン (338-69-2), DL-アラニン (302-72-7)
- ジエチルアミン (109-89-7) とその塩酸塩 (660-68-4)

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

レコード例

単成分物質 : IDERL 表示形式

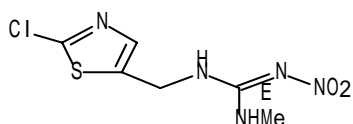
RN 210880-92-5 REGISTRY
 ED Entered STN: 06 Sep 1998
 CN Guanidine, N-[(2-chloro-5-thiazolyl)methyl]-N'-methyl-N''-nitro-, [C(E)]-(9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER NAMES:
 CN Clothianidin
 CN Dantotsu
 CN Fullswing
 CN Poncho
 CN TI 435
 FS STEREOSEARCH
 DR 205510-53-8
 MF C6 H8 Cl N5 O2 S
 CI COM
 SR CA

LC STN Files: ANABSTR, BIOSIS, CA, CAPLUS, CASREACT, CBNB, CHEMCATS, CHEMLIST, CSCHEM, HSDB*, MRCK*, PATDPASPC, RTECS*, TOXCENTER, ULIDAT, USPAT2, USPATFULL
 (*File contains numerically searchable property data)

DT.CA CAplus document type: Conference; Journal; Patent
 RL.P Roles from patents: ANST (Analytical study); BIOL (Biological study); PROC (Process); USES (Uses)
 RLD.P Roles for non-specific derivatives from patents: BIOL (Biological study); PROC (Process); PRP (Properties); USES (Uses)
 RL.NP Roles from non-patents: ANST (Analytical study); BIOL (Biological study); FORM (Formation, nonpreparative); OCCU (Occurrence); PREP (Preparation); PROC (Process); PRP (Properties); USES (Uses)

CI : クラス識別子
 SR : 収録源

Double bond geometry as shown.



DT : 資料の種類
 RL : CAS ロール

PROP 表示形式で物性を表示できる

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

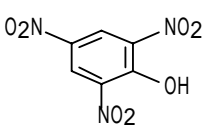
184 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 35 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 185 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

レコード例

多成分物質 (金属塩) : IDE 表示形式

RN 16824-78-5 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Phenol, 2,4,6-trinitro-, calcium salt (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Picric acid, Ca deriv. (6CI)
 CN Picric acid, calcium salt (8CI)
 OTHER NAMES:
 CN Calcium dipicrate
 CN Calcium picrate
 DR 143457-12-9
 MF C6 H3 N3 O7 . 1/2 Ca
 CI COM
 LC STN Files: BEILSTEIN*, CA, CAOLD, CAPLUS, CASREACT, TOXCENTER, USPATFULL
 (*File contains numerically searchable property data)
 CRN (88-89-1)



● 1/2 Ca

多成分物質の分子式は、各成分の分子式が
 ピリオド (.) で区切られている

成分 CAS 登録番号 (ピクリン酸の CAS 登録番号)

構造はピクリン酸とカルシウム (Ca) になる
 (注) カルシウムの CAS 登録番号は成分 CAS
 登録番号として収録されない

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

81 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 2 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 81 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
 1 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)

表示コード

RN CAS 登録番号
 ED レコード作成日 (ただし, 1984 年 11 月以前に登録された物質はすべて " 16 Nov 1984 ")
 CN (IN) 化学物質名 (CA INDEX NAME と記載してある名称は CA 索引名 (IN))
 FS ファイルセグメント
 DR 削除された CAS 登録番号
 MF 分子式
 CI クラス識別子
 SR 収録源 (1985 年半ば以降に登録された物質に付与)
 LC CAS 登録番号所在 (その物質の情報を含む他のファイル名および化学物質台帳コード)
 STR 構造図
 DT.CA CAplus/CA ファイルで索引されたレコードの資料種類
 RL.P 特許レコードで索引された特定化学物質に付与されたスーパーロール
 RLD.P 特許レコードで索引された非特定誘導体に付与されたスーパーロール
 RL.NP 非特許レコードで索引された特定化学物質に付与されたスーパーロール
 RLD.NP 非特許レコードで索引された非特定誘導体に付与されたスーパーロール
 REF CA, CAplus, CAOLD ファイル中の文献数

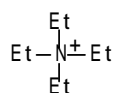
A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

レコード例

多成分物質 (第四級アンモニウム塩) : IDE 表示形式

RN 56-34-8 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, chloride (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Ammonium, tetraethyl-, chloride (8CI)
 CN Tetraethylammonium chloride (6CI, 7CI)
 OTHER NAMES:
 CN Etamon chloride
 CN TEA
 CN TEA chloride
 CN TEAC
 MF C8 H20 N . Cl ●
 CI COM
 LC STN Files: AGRICOLA, AQUIRE, BEILSTEIN*, BIOBUSINESS, BIOSIS, BIOTECHNO,
 CA, CAOLD, CAPLUS, CASREACT, CEN, CHEMCATS, CHEMINFORMRX, CHEMLIST,
 CSCHEM, CSNB, DDFU, DETHERM*, DIOGENES, DRUGU, EMBASE, GMELIN*, IFICDB,
 :
 (*File contains numerically searchable property data)
 Other Sources: DSL**, EINECS**, TSCA**
 (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

各成分の分子式がピリオド (.) で区切られている



● Cl⁻

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

2106 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 19 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 2107 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
 84 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)

アミン類の塩は通常, 多成分物質として登録される. ただし, 塩化アンモニウムは単一成分として登録される.

	示性式	REGISTRY ファイルでの分子式
第四級アンモニウム塩	(C2H5) ₄ N ⁺ .Cl ⁻	C8H20N.CL
	(C2H5) ₄ N ⁺ .OH ⁻	C8H20N.HO
	(C2H5) ₄ N ⁺ .CH3CO2 ⁻	C8H20N.C2H3O2
第一, 二, 三級アミンの塩	C2H5-NH2.HCl	C2H7N.CLH
	C2H5-NH2.CH3COOH	C2H7N.C2H4O2
	(C2H5) ₂ NH.HCl	C4H11N.CLH
	(C2H5) ₃ N.HCl	C6H15N.CLH
ピリジンの塩	C5H6N ⁺ .Cl ⁻	C5H5N.CLH
	C5H6N ⁺ .CH3CO2 ⁻	C5H5N.C2H4O2
塩化アンモニウム	NH4Cl	CLH4N

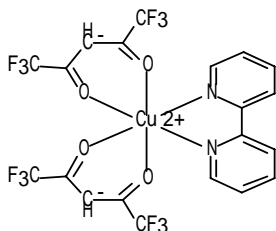
A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

レコード例

配位化合物 (CCS : Coordination Compounds) : IDE 表示形式

RN 29868-71-1 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Copper, (2,2'-bipyridine-κN1,κN1')bis(1,1,1,5,5,5-hexafluoro-2,4-pentanedionato-κO,κO')-, (OC-6-21)- (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Copper, (2,2'-bipyridine)bis(1,1,1,5,5,5-hexafluoro-2,4-pentanedionato)- (8CI)
 CN Copper, (2,2'-bipyridine-N,N')bis(1,1,1,5,5,5-hexafluoro-2,4-pentanedionato-0,0')-, (OC-6-21)-
 OTHER NAMES:
 CN Copper, (2,2'-bipyridine)bis(1,1,1,5,5,5-hexafluoro-2,4-pentanedionato)-
 MF C20 H10 Cu F12 N2 O4
 CI CCS
 LC STN Files: CA, CAPLUS

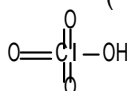
CCS : クラス識別子 (配位化合物)



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

無機化合物 : IDE 表示形式

RN 7601-90-3 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Perchloric acid (8CI, 9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER NAMES:
 CN Perchloric acid (HC1O4)
 DR 845752-15-0, 766444-83-1, 101200-37-7, 102278-63-7, 95912-44-0,
 95998-58-6, 106644-01-3, 119630-46-5, 139339-89-2, 153389-31-2,
 143171-41-9, 92785-38-1, 90149-16-9, 47999-51-9, 111341-24-3, 200863-18-9
 MF Cl H O4
 CI COM
 LC STN Files: AGRICOLA, ANABSTR, AQUIRE, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAOLD,
 CAPLUS, CASREACT, CBNB, CHEMCATS, CHEMINFORMRX, CHEMLIST, CIN, CSCHEM,
 CSNB, DETHERM*, EMBASE, ENCOMPLIT, ENCOMPLIT2, ENCOMPAT, ENCOMPAT2,
 GMELIN*, HSDB*, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, IPA, MEDLINE, MRCK*, MSDS-OHS,
 PIRA, PROMT, RTECS*, TOXCENTER, TULSA, USPAT2, USPATFULL, VTB
 (*File contains numerically searchable property data)
 Other Sources: DSL**, EINECS**, TSCA**
 (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

12888 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 470 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 12916 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
 1 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

レコード例

ポリマ - (PMS : Polymer) (モノマー単位ポリマー) : IDE 表示形式

RN 41008-73-5 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with
 4-methyl-1-pentene (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN 1-Pentene, 4-methyl-, polymer with methyl 2-methyl-2-propenoate (9CI)
 OTHER NAMES:
 CN Methyl methacrylate-4-methyl-1-penten
 CN Methyl methacrylate-4-methyl-1-penten
 MF (C6 H12 . C5 H8 O2)x
 CI PMS
 PCT Polyacrylic, Polyolefin
 LC STN Files: CA, CAPLUS

名称中に polymer with
の記載がある

モノマー単位ポリマーは、モノマーの多成分
物質として登録されている。
分子式は各モノマーの分子式がピリオド (.)
で区切られ、(A.B)x のような表記になる。

PMS : クラス識別子 (ポリマー)

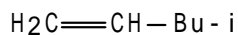
ポリマー分類用語

CM1, CM2 は各モノマーの情報

 CRN : 成分 CAS 登録番号
 CMF : 成分分子式
 各モノマーの構造

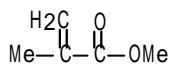
CM 1

CRN 691-37-2
 CMF C6 H12



CM 2

CRN 80-62-6
 CMF C5 H8 O2



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

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

レコード例

ポリマ - (PMS : Polymer) (SRU ポリマー) : IDE 表示形式

RN 24968-12-5 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Poly(oxy-1,4-butanediylloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl) (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER NAMES:
 CN 1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate copolymer, SRU
 CN 1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate polymer, SRU
 CN 1,4-Butanediol-divinyl terephthalate copolymer, SRU
 CN 1,4-Butanediol-monomethyl terephthalate copolymer, SRU
 CN 1,4-Butanediol-terephthalic acid copolymer, SRU
 CN 1,4-Butanediol-terephthalic acid polymer, SRU
 CN 1,4-Butanediol-terephthaloyl chloride copolymer, SRU
 CN 1,4-Butanediol-terephthaloyl chloride polymer, SRU
 CN 1,4-Butylene glycol-terephthalic acid polymer, SRU
 CN 1000F
 CN 100M
 :
 DR 9078-57-3, 9087-65-4, 168317-05-3, 159294-93-6, 54650-84-9, 54650-85-0, 58967-80-9, 57284-97-6, 60617-28-9, 64814-97-7, 97380-75-1, 97794-54-2, 50939-46-3, 51635-90-6, 51848-46-5, 51931-15-8, 61912-84-3, 66369-03-7, 136799-43-4, 67527-19-9, 74239-00-2, 74239-04-6, 145319-68-2, 80450-27-7, 52232-31-2, 52232-90-2, 52705-10-9, 193363-40-5, 202269-59-6, 213128-73-5, 335661-31-9, 437613-30-4
 MF (C12 H12 O4)n
 CI PMS, COM
 PCT Polyester
 LC STN Files: AGRICOLA, ANABSTR, BIOSIS, CA, CAPLUS, CBNB, CHEMLIST, CIN, CSCHEM, CSNB, IFICDB, IFIPAT, ILS-OHS, PIRA, PROMT, TOXCENTER, ULIDAT, USPAT2, USPA

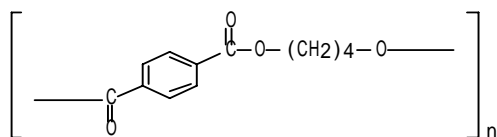
CA 索引名は Poly(...) で始まる

分子式は、繰り返し部分をカッコで囲み ()n のような表記になる。

PMS : クラス識別子 (ポリマー)

ポリマー分類用語

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



構造は繰り返し単位を [] で囲み []n のような表記になる

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

15582 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 239 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 15608 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

レコード例

混合物 (MXS : Mixture) : IDE 表示形式

RN **485805-18-3** REGISTRY
 ED Entered STN: 05 Feb 2003
 CN Pregna-1,4-diene-3,20-dione, 9-fluoro-11-hydroxy-16-methyl-17,21-bis(1-oxopropoxy)-, (11 β ,16 β)-, mixt. with (1 α ,3 β ,5Z,7E,22E,24S)-24-cyclopropyl-9,10-secochola-5,7,10(19),22-tetraene-1,3,24-triol (9CI) (CA INDEX NAME)

OTHER NAMES:
 CN Daivobet
 CN Dovobet
 FS STEREOSEARCH
 MF C28 H37 F 07 . C27 H40 O3
 CI **MXS**
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER

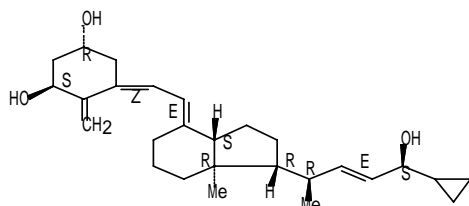
名称中に mixt. with の記載がある

MIX: クラス識別子 (混合物)

CM 1

CRN 112965-21-6
 CMF C27 H40 O3

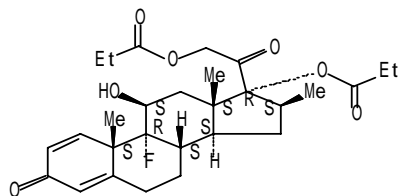
Absolute stereochemistry.
 Double bond geometry as shown.



CM 2

CRN 5593-20-4
 CMF C28 H37 F 07

Absolute stereochemistry.



CM1, CM2 は各成分の情報
 CRN: 成分 CAS 登録番号
 CMF: 成分分子式
 各成分の構造

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

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

レコード例

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

RN 222047-38-3 REGISTRY
 ED Entered STN: 29 Apr 1999
 CN Aluminum calcium silicon nitride oxide (Al5.4Ca1.8Si6.6N14.2O1.8) (9CI)
 (CA INDEX NAME)
 DR 373384-44-2
 MF Al . Ca . N . O . Si
 AF Al5.4 Ca1.8 N14.2 O1.8 Si6.6
 CI TIS
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS

CA 索引名には組成比が反映されている

MF (分子式) : 構成元素がアルファベット順に,
 ピリオド (.) で区切られている
 AF (非優先分子式) : 構成元素と組成比

TIS : クラス識別子 (表形式無機化合物)

Component	Ratio	Component Registry Number
N	14.2	17778-88-0
O	1.8	17778-80-2
Ca	1.8	7440-70-2
Si	6.6	7440-21-3
Al	5.4	7429-90-5

各成分の情報
 元素記号
 組成比
 成分 CAS 登録番号

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

合金 (AYS : Alloy) : IDE 表示形式

RN 319491-86-6 REGISTRY
 ED Entered STN: 02 Feb 2001
 CN Aluminum alloy, base, Al 98-99, Fe 1.2-1.7, Si 0-0.15, Cu 0-0.05 (AA 8021)
 (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER NAMES:
 CN A8021
 CN A98021
 CN AA 8021
 :
 MF Al . Cu . Fe . Si
 CI AYS
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER, USPATFULL

CA 索引名には組成比が反映されている

分子式は, 構成元素がアルファベット順に, ピリオド (.)
 で区切られている

AYS : クラス識別子 (合金)

Component	Component Percent	Component Registry Number
Al	98 - 99	7429-90-5
Fe	1.2 - 1.7	7439-89-6
Si	0 - 0.15	7440-21-3
Cu	0 - 0.05	7440-50-8

各成分の情報
 元素記号
 組成比
 成分 CAS 登録番号

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

レコード例

鉱物 (MNS : Minerals) : IDE 表示形式

RN 450360-26-6 REGISTRY
 ED Entered STN: 13 Sep 2002
 CN Native gold (Au) (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER NAMES:
 CN Native gold
 MF Au
 CI MNS ●————— MNS : クラス識別子 (鉱物)
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER

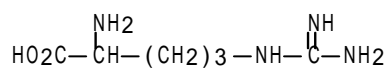
Au

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

104 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 105 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

ラジカルイオン (RIS : Radical Ion) : IDE 表示形式

RN 889109-30-2 REGISTRY
 ED Entered STN: 23 Jun 2006
 CN L-Arginine, radical ion(1+) (9CI) (CA INDEX NAME)
 MF C6 H14 N4 O2
 CI RIS ●————— RIS : クラス識別子 (ラジカルイオン)
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS



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

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

レコード例

タンパク質 : SQIDE 表示形式

RN 169148-63-4 REGISTRY
 CN (1A-21A),(1B-29B)-Insulin (human), 29B-[N6-(1-oxotetradecyl)-L-lysine]-
 (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER NAMES:
 CN Insulin detemir
 CN Levemir
 CN NN 304
 FS PROTEIN SEQUENCE ● ——— タンパク質
 SQL 50,29,21
 NTE multichain
 modified (modifications unspecified)

type	----- location -----	description
bridge	Cys-7 - Cys-7'	disulfide bridge
bridge	Cys-19 - Cys-20'	disulfide bridge
bridge	Cys-6' - Cys-11'	disulfide bridge

SEQ 1 FVNQHLGSH LVEALYLVCG ERGFFYTPK ● ———

タンパク質配列情報
(アミノ酸 1 文字コード)

SEQ 1 GIVEQCCTSI CSLYQLENYC N

RELATED SEQUENCES AVAILABLE WITH SEQLINK ● ———

SEQLINK EXACT コマンドで
関連レコードが検索できる

DR 201305-44-4, 270588-25-5
 MF C267 H402 N64 076 S6
 CI COM, MAN
 SR CA
 LC STN Files: ADISINSIGHT, ADISNEWS, AGRICOLA, BIOSIS, BIOTECHNO, CA,
 CAPLUS, CASREACT, CIN, DDFU, DRUGU, EMBASE, IMSDRUGNEWS, IMSPATENTS,
 IMSRESEARCH, IPA, MRCK*, PATDPASPC, PHAR, PROMT, PROUSDDR, TOXCENTER,
 USAN, USPAT2, USPATFULL
 (*File contains numerically searchable property data)
 DT.CA CAplus document type: Journal; Patent
 RL.P Roles from patents: BIOL (Biological study); PREP (Preparation); PROC
 (Process); PRP (Properties); USES (Uses)
 RLD.P Roles for non-specific derivatives from patents: BIOL (Biological
 study); PREP (Preparation); PROC (Process); USES (Uses)
 RL.NP Roles from non-patents: BIOL (Biological study); PROC (Process); PRP
 (Properties); RACT (Reactant or reagent); USES (Uses)
 99 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 1 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 99 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

レコード例

核酸 : SQIDE 表示形式

RN 399060-53-8 REGISTRY
 CN DNA (human fetal liver clone W00157277-SEQID-14212 gene exon) (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER NAMES:
 CN 1539: PN: W00157277 SEQID: 14212 claimed DNA
 FS NUCLEIC ACID SEQUENCE ●————— 核酸
 SQL 452
 NA 134 a 87 c 98 g 133 t

PATENT ANNOTATIONS (PNTE):

Sequence Source	Feature	Description	Patent Reference
Homo sapiens	misc_feature	MAP TO AL049648.6	W02001057277 claimed SEQID 14212
	misc_feature	EXPRESSED IN FETAL LIVER, SIGNAL = 2.9	
	misc_feature	SWISSPROT HIT: P25582, EVALUE 2.00e+00	
	misc_feature	EST_HUMAN HIT: AA299985.1, EVALUE 6.60e+00	

核酸配列情報 (塩基コード)

SEQ 1 atgaaaagtg ctgtccccc agatccgtga agggcgggtg gaggggtggt
 51 ttgcatgaga gaggagctct gctaagggtga ctggaaagtg ctgcctgaga
 101 cctgttcctt ggaagcacag ctctttttgg ttaaatacat aaactaccat
 151 aaaaaccaca attacagtga ctaccatggt gataatttca atgcactgaa
 201 ttatatgaaa aaataaaaca aacaaaacct gggacacaat tgaacagcac
 251 aagaagtagg aatgtggcac agtctgtaat ttatgtttat tgccatgggt
 301 ttcgacggac caaatggctc atgcctgcct gcactgtagc tgagtcatgt
 351 ttgatatttc aaagtggcag taaaaaaaaat ctttatggct cccatgctat
 401 tttcatacct tattttattct gtttttttcc cctgttttta agtcatcttt
 451 tg

RELATED SEQUENCES AVAILABLE WITH SEQLINK ●—————

MF Unspecified
 CI MAN
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS
 DT.CA Cplus document type: Patent
 RL.P Roles from patents: ANST (Analytical study); BIOL (Biological study);
 PRP (Properties)
 1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

SEQLINK EXACT コマンドで
 関連レコードが検索できる

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

レコード例

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

・ 置換位置が不明の例

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, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CABA,
 CAPLUS, CASREACT, CBNB, CHEMCATS, CHEMLIST, CHEMSAFE, CIN, CSCHEM,
 :
 Other Sources: DSL**, EINECS**, TSCA**
 (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

IDS : クラス識別子 (定義の不完全な物質)



ベンゼン環のどこかに 2 個の Me が置換している

2 (D1-Me)

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

20760 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 571 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 20830 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

・ エステル化の位置が不明の例

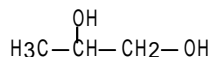
RN 118573-28-7 REGISTRY
 ED Entered STN: 20 Jan 1989
 CN Propanoic acid, 2-hydroxy-, monoester with 1,2-propanediol (9CI) (CA
 INDEX NAME)
 MF C6 H12 O4
 CI **IDS**
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL

IDS : クラス識別子 (定義の不完全な物質)

CM 1

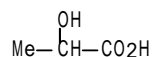
CRN 57-55-6
 CMF C3 H8 O2

エステル化の位置が不明



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)

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

レコード例

組成不明, 組成不定, 複雑な反応生成物および生態物質 (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化学物質で, クラス識別子 CTS (概念語登録) または GRS (一般式登録) が付与されている (UVCB/CI = CTS/CI OR GRS/CI).
- ・ CAS 登録番号 (RN) に * (アスタリスク) が付与されており, CPlus/CA ファイルの索引には使用しない.
- ・ DEF フィールドに, 化学物質に関する情報が収録される.

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 ●————— CTS : クラス識別子 (概念語登録)

LC STN Files: CHEMLIST
Other Sources: EINECS**, NDSL**, TSCA**
(*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

RN 522632-48-0 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: 30 May 2003

CN Cyclododecane, oxidized, by-products from, acidified, oil phase (CA INDEX NAME)

DEF The residue obtained from the phase separation of products from the air oxidation of cyclododecane after removal of cyclododecanol and cyclododecanone and acidification of the aqueous phase. It consists predominantly of monobasic acids, dibasic acids, hydroxy acids and keto acids having carbon numbers in the range of C3 through C12. It decomposes prior to boiling.

MF Unspecified

CI MAN, GRS ●————— GRS : クラス識別子 (一般式登録)

SR CAS Client Services

LC STN Files: CHEMLIST
Other Sources: TSCA**
(*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

CAS 登録番号の種類

CAS 登録番号 (CAS Registry Number : RN) は, 化学物質や配列情報を CAS 化学物質登録システムに登録する際に付与される固有の番号である.

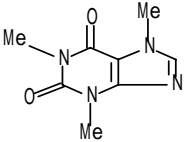
- CAS 登録番号は, RN フィールドに表示される. レコードによっては, DR, RR, PR, AR を含む場合がある. これらの番号は, REGISTRY ファイルの基本索引で検索可能である.

削除された CAS 登録番号 (Deleted CAS Registry Number : DR),
置換 CAS 登録番号 (Replacing CAS Registry Number : RR)

ある物質に割り当てられた CAS 登録番号が, 後に他の登録番号で既に登録されていることが判明した場合は, 各レコードの情報はいずれかの CAS 登録番号に統合される. 例として, 登録時に構造情報が不明であった物質 (商品名を持つ物質あるいは天然物) などがこれに当たる. 統合された CAS 登録番号のレコードに, 削除された CAS 登録番号のレコード情報が追加される.

- 統合後のレコードの DR フィールドに, 削除された CAS 登録番号が表示される.
- 削除された CAS 登録番号のレコードの RR フィールドに, 置換した (すなわち現在使われている統合後の) CAS 登録番号が表示される.
- CAplus (CA) ファイルの索引中の削除された CAS 登録番号は, 現在使われている CAS 登録番号に置換される. (ただし, 抄録などの索引以外のフィールドで収録されている CAS 登録番号は置換されない)

・ レコード例 : DR を含むレコード, RR を含むレコード (IDE 表示形式)

<p>RN 58-08-2 REGISTRY ED Entered STN: 16 Nov 1984 CN 1H-Purine-2,6-dione, 3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl- (9CI) (CA INDEX NAME) : 省略 DR 95789-13-2, 71701-02-5 MF C8 H10 N4 O2 : 省略</p>  <p>**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**</p> <p>20069 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE) 185 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA 20091 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE) 3 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)</p>	<p>統合後のレコード</p> <p>DR フィールドに削除された CAS 登録番号が表示される</p>
<p>RN 95789-13-2 REGISTRY ED Entered STN: 13 Apr 1985 RR 58-08-2</p> <p>1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE) 1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)</p>	<p>削除されたレコード</p> <p>RR フィールドに置換 CAS 登録番号が表示される</p>

・ DR 95789-13-2 は => D 95789-13-2 で表示できる.

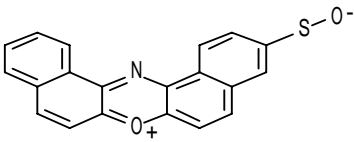
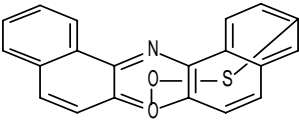
A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

CAS 登録番号の種類

優先 CAS 登録番号 (Preferred CAS Registry Number : PR),
非優先 CAS 登録番号 (Alternate CAS Registry Number : AR)

二つ以上の構造の表現法を持つ物質で、より優先される構造に対して付与されたCAS登録番号を優先 CAS 登録番号とよぶ。優先/非優先構造を持つ物質の例としては、フルオレセイン染料がある。これらの物質は、優先される構造は開環型で、非優先の構造は閉環型である。

- 優先構造レコード中の AR フィールドに非優先 CAS 登録番号が表示される。
 - 非優先構造レコード中の PR フィールドに優先 CAS 登録番号が表示される。
- ・ レコード例 : AR を含むレコード, PR を含むレコード (IDE 表示形式)

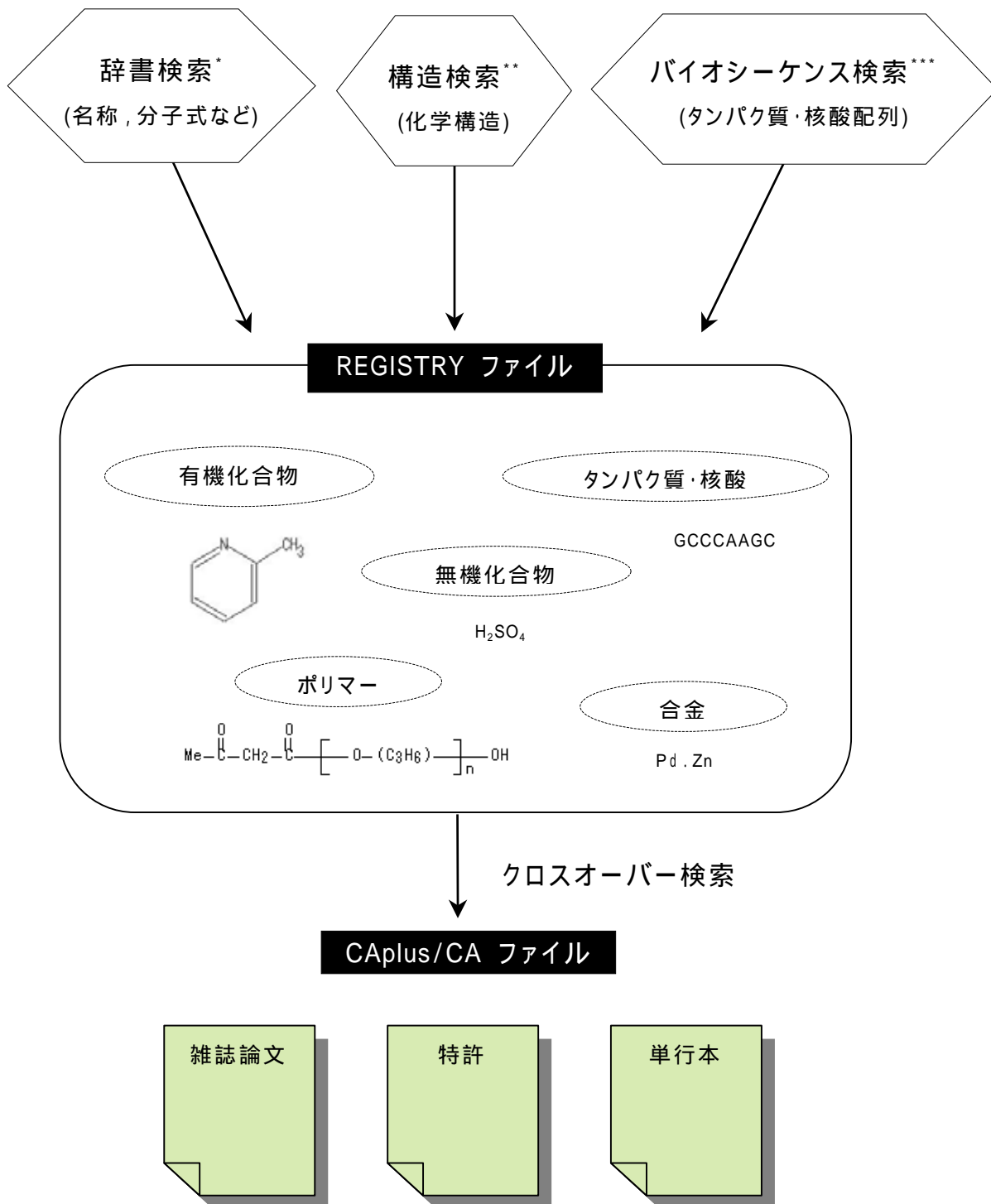
<p>RN 38598-19-5 REGISTRY ED Entered STN: 16 Nov 1984 CN Dibenzo[a,j]phenoxazin-7-ium, 11-sulfeno-, inner salt (9CI) (CA INDEX NAME) AR 216-47-7 FS 3D CONCORD MF C20 H11 N O2 S</p> 	<p>優先構造のレコード</p> <p>AR フィールドに非優先 CAS 登録番号が表示される</p>
<p>RN 216-47-7 REGISTRY ED Entered STN: 16 Nov 1984 CN Dibenzo[a,j]phenoxazin-7-ium, 11-sulfeno-, inner salt (9CI) (CA INDEX NAME) PR 38598-19-5 MF C20 H11 N O2 S</p> 	<p>非優先構造のレコード</p> <p>PR フィールドに優先 CAS 登録番号が表示される</p>

- ・ AR 216-47-7 は => D 216-47-4 で表示できる。

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

A REGISTRY ファイルの化学物質収録情報

検索機能



* 基本的な辞書検索法については「化学物質検索 I」講習会で説明

** 構造検索法については「化学物質検索 I, 」講習会で説明

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

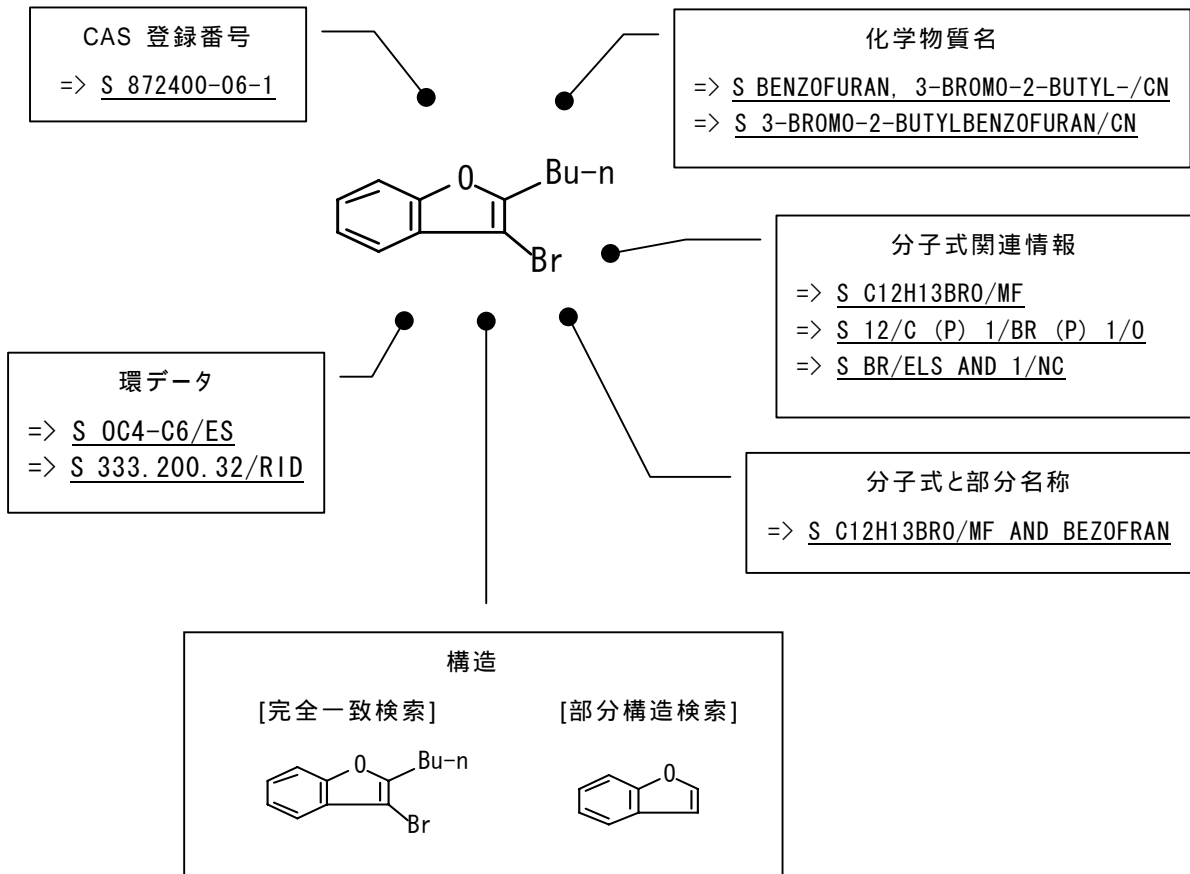
B 有機化合物

この章では、環データを利用した検索を中心に、部分構造検索との違いや絞り込み検索への利用などをご紹介します。また、スクリーンを利用した絞り込み検索についても説明いたします。

B 有機化合物

検索方法

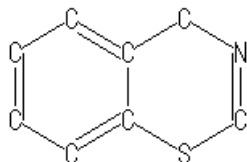
有機化合物は、いろいろな項目から検索が可能である。



B 有機化合物

検索例 1：環構造をもつ化学物質の検索

検索例 1：下記の環構造をもつ化学物質を検索する。



検索方法

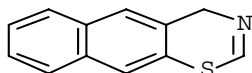
1. 環系データを利用した検索
 - 1- 環系識別子 (RID) を利用
 - 1- 環系の元素配列 (ES) を利用
2. 部分構造検索

・ 環系データ (RSD) の種類

・ 環系データは RSD フィールド (Ring System Data) に表示される。

- EA (Elemental Analysis) : 環系の元素式
- ES (Elemental Sequence) : 環系の元素配列
- SZ (Size of the Rings) : 環系の環の大きさ
- RF (Ring System Formula) : 環系式
- RID (Ring Identifier) : 環系識別子
- RID Occurrence Count : 環系の存在数

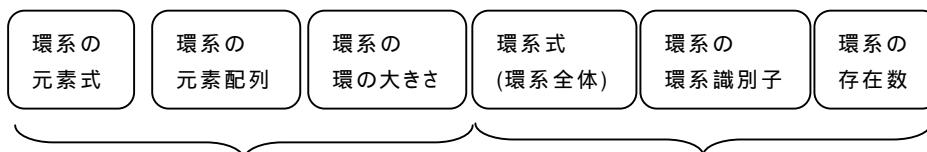
・ 縮合環のレコード例：4H-ナフト[2,3-e]-1,3-チアジン (CAS RN：324-85-6)



環系 : 環全体
最小環 : 環系を構成する個々の環

Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4NS-C6-C6	NCSC3-C6-C6	6-6-6	C12NS	2508.41.1	1



最小環単位をハイフンでつないで記述

縮合環系全体を記述

B 有機化合物

検索例 1: 環構造をもつ化学物質の検索

=> FILE ZREGISTRY

ZREGISTRY ファイルに入る

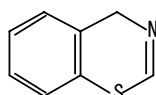
=>

Uploading C:\STNEXP\Queries\RSD.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L1

L1 STR



特定の環骨格の環系データを知りたいときは、ZREGISTRY ファイルで構造検索 (サンプル検索 (無料)) (または LREGISTRY ファイルで構造検索) を行い、回答を RSD 表示形式で表示する。

Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1

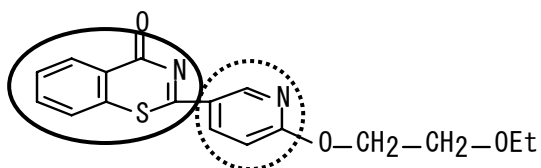
サンプル検索

L2 : 50 SEA SSS SAM L1

=> D 50 RN STR RSD

環系データを RSD 表示形式で表示する
RN STR RSD (27 + 122 + 52 円)

L2 ANSWER 50 OF 50 ZREGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 501375-69-5 ZREGISTRY



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C5N	NC5	6	C5N	46.156.30	1
C4NS-C6	NCSC3-C6	6-6	C8NS	591.266.4	1

の環系データ
の環系データ

目的の環系

B 有機化合物

検索例 1: 環構造をもつ化学物質の検索

1- 環系識別子 (RID) を利用した検索

591.266.4/RID で骨格, 元素 (種類と位置), 結合すべてが一致した環系の化合物を検索する

=> FILE REGISTRY

=> E 591.266.4/RID 5

E1 5 591.266.2/RID
E2 562 591.266.3/RID
E3 945 --> 591.266.4/RID
E4 94 591.266.5/RID
E5 97 591.266.6/RID

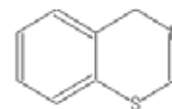
=> S E3

L3 945 591.266.4/RID

=> D 500 945 RN STR RSD

L3 ANSWER 500 OF 945 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 501375-36-6 REGISTRY

環系識別子 (RID)

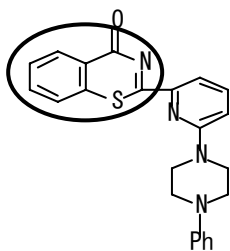


5 9 1 . 2 6 6 . 4
| | |
骨格 元素 結合

**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

環系識別子 (591.266.4/RID) を EXPAND で確認後検索 (617 円/語)

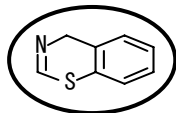
Ring System Data



Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	1
C5N	NC5	6	C5N	46.156.30	1
C4N2	NC2NC2	6	C4N2	46.383.1	1
C4NS-C6	NCSC3-C6	6-6	C8NS	591.266.4	1

ヒットした RID

L3 ANSWER 945 OF 945 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 254-44-4 REGISTRY



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4NS-C6	NCSC3-C6	6-6	C8NS	591.266.4	1

B 有機化合物

検索例 1: 環構造をもつ化学物質の検索

=> E 591.266/RID 5

E1 2 591.265.3/RID
E2 1 591.265.4/RID
E3 1954 --> 591.266/RID
E4 21 591.266.1/RID
E5 1 591.266.11/RID

591.266/RID で骨格, 元素 (種類と位置) までが一致した環系の化合物を検索する (結合は異なってもよい)

=> S E3

L4 1954 591.266/RID

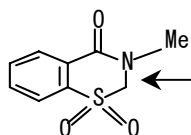
591.266/RID を EXPAND で確認後検索

=> S L4 NOT L3

L5 1009 L4 NOT L3

=> D 1 1009 RN STR RSD

L5 ANSWER 1 OF 1009 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 883811-64-1 REGISTRY



結合次数が異なる化合物もヒットする (C-N の結合が単結合)

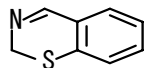
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C4NS-C6	NCSC3-C6	6-6	C8NS	591.266.3	1

ヒットした RID

L5 ANSWER 1009 OF 1009 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 254-45-5 REGISTRY



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C4NS-C6	NCSC3-C6	6-6	C8NS	591.266.5	1

B 有機化合物

検索例 1: 環構造をもつ化学物質の検索

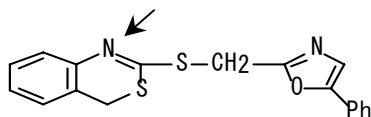
1- 環系の元素配列 (/ES : Elemental Sequence) を利用した検索

```
=> E NCSC3-C6/ES 5
E1      16318  NCSC3/ES
E2        2   NCSC3-C12/ES
E3     3728 --> NCSC3-C6/ES
E4      282   NCSC3-C6-C6/ES
E5       48   NCSC3-C6-C6-C6/ES
```

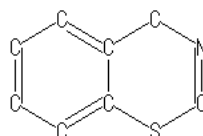
```
=> S E3
L6      3728 NCSC3-C6/ES
```

```
=> D 20 1017 2017 RN STR RSD
```

```
L6 ANSWER 20 OF 3728 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 893901-70-7 REGISTRY
```



元素配列 (ES)



N を起点にヘテロ
原子の方向に元素
の配列を記述

C6 - NCSC3

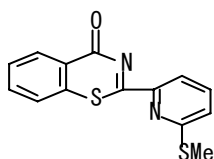
元素配列が一致していればヒットする (元素の
位置や結合次数の異なった化合物もヒットする)

Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C3NO	NCOC2	5	C3NO	16.239.9	1
C6	C6	6	C6	46.150.18	1
C4NS-C6	NCSC3-C6	6-6	C8NS	591.142.7	1

```
L6 ANSWER 1017 OF 3728 RIGHT 2006 ACS on STN
RN 501375-17-3 REGISTRY
```

ヒットした ES



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

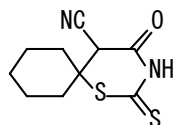
Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C5N	NC5	6	C5N	46.156.30	1
C4NS-C6	NCSC3-C6	6-6	C8NS	591.266.4	1

B 有機低化合物

検索例 1：環構造をもつ化学物質の検索

L6 ANSWER 2017 OF 3728 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 113002-00-9 REGISTRY



スピロ環もヒットする

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

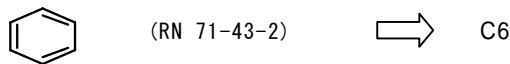
Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4NS-C6	NCSC3-C6	6-6	C9NS	833.121.4	1

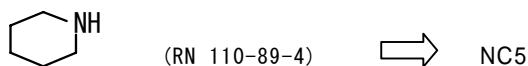
・ 環系の元素配列 (/ES : Elemental Sequence) の表記

- ES は構成する最小環ごとの元素配列をハイフンでつなぎ表記する。
- ES フィールドの表記規則

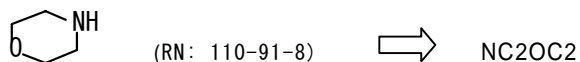
単一元素のみから成る環は元素記号と数字で表記する。



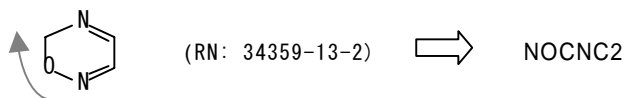
ヘテロ環はヘテロ原子を起点として元素配列を表記する。



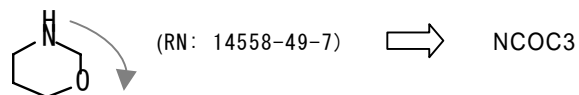
2 種のヘテロ原子がある場合は、起点とすべきヘテロ原子をアルファベット順で決定する。



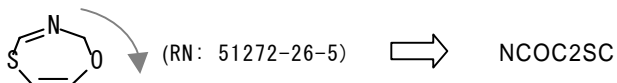
アルファベット順で最も優先度の高いヘテロ原子が二つ以上ある場合には、より近くに他のヘテロ原子の存在する方を起点とする。



回る方向によって元素配列が異なる場合は、起点により近い位置に他のヘテロ原子の存在する方向に回って、元素配列を決定する。



起点とすべきヘテロ原子から同じ位置に 2 種のヘテロ原子がある場合はアルファベット順で回る方向を決定する。



- 最小環の並び順 (EA の順)
少数員環
同じ員数の場合
左側よりアルファベット順,
数値の少ない順
例 : EA C4NS-C6
ES NCSC3-6

B 有機化合物

検索例 1: 環構造をもつ化学物質の検索

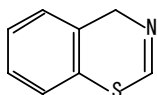
2. 部分構造検索

=> FILE REGISTRY

=> D QUE L1

L1

STR



環系は孤立してもしなくてもよい

Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1

:

L7

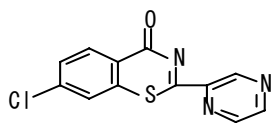
50 SEA SSS SAM L1

構造質問式 (L1) で部分構造検索 (SSS) を実行 (サンプル検索)

=> D SCAN

L7 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN 4H-1,3-Benzothiazin-4-one, 7-chloro-2-pyrazinyl- (9CI)
MF C12 H6 Cl N3 O S

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT



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

=> S L1 FULL

FULL SEARCH INITIATED 18:22

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 33638 TO ITERATE

フルファイル検索

100.0% PROCESSED 33638 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

1306 ANSWERS

L8 1306 SEA SSS FUL L1

B 有機化合物

検索例 1: 環構造をもつ化学物質の検索

=> S L8 NOT L3

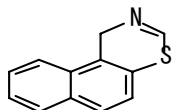
L9 361 L8 NOT L3

L8 (SSS 検索) でヒットし, L3 (591.266.4/RID) ではヒットしなかった回答

=> D L9 200 300 RN STR RSD

L9 ANSWER 200 OF 361 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN

RN 109694-82-8 REGISTRY



さらに環が縮合した化合物

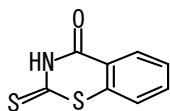
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C4NS-C6-C6	NCSC3-C6-C6	6-6-6	C12NS	2404.696.2	1

L9 ANSWER 300 OF 361 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN

RN 56022-26-5 REGISTRY



結合次数が異なる化合物
(構造質問式にはノーマライズド結合も含まれているため)

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C4NS-C6	NCSC3-C6	6-6	C8NS	591.266.7	1

B 有機化合物

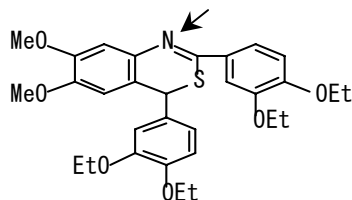
検索例 1: 環構造をもつ化学物質の検索

=> S L6 NOT L8
L10 2581 L6 NOT L8

L6 (NCSC3-C6/ES) ではヒットし, L8 (SSS 検索) ではヒットしなかった回答

=> D 1 1000 RN STR RSD

L10 ANSWER 1 OF 2581 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 898800-04-9 REGISTRY



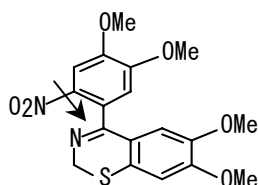
元素の位置が異なった化合物

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	2
C4NS-C6	NCSC3-C6	6-6	C8NS	591.142.7	1

L10 ANSWER 1000 OF 2581 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 146790-56-9 REGISTRY



結合次数が異なった化合物
(C=N 結合はエグザクト)

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	1
C4NS-C6	NCSC3-C6	6-6	C8NS	591.266.5	1

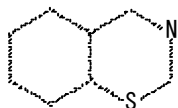
B 有機化合物

検索例 1: 環構造をもつ化学物質の検索

=>
Uploading C:\STNEXP\Queries\RS2.str

L11 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L11
L11 STR



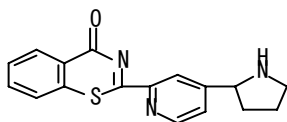
すべての結合を不定 (U) とし、環系を孤立した構造質問式で SSS 検索を実行

Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L11
:
L12 50 SEA SSS SAM L11

=> D SCAN

L12 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN 4H-1,3-Benzothiazin-4-one, 2-[4-(2-pyrrolidinyl)-2-pyridinyl]-,
monohydrochloride (9CI)
MF C17 H15 N3 O S . Cl H



● HCl

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

=> S L11 FULL
FULL SEARCH INITIATED 18:27:07 FILE 'REGISTRY'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 33638 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 33638 ITERATIONS 1954 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

L13 1954 SEA SSS FUL L11

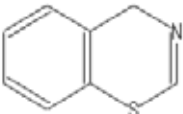

=> S L13 AND L4
L14 1954 L13 AND L4

L4 (591.266/RID) の結果と同じ結果が得られる

B 有機化合物

検索例 1：環構造をもつ化学物質の検索

環系識別子 (RID) / 環系の元素配列 (ES) / 部分構造検索 (SSS) のちがい

検索項目		件数	環系の骨格が完全に一致した化合物	環系のヘテロ原子の位置が異なる化合物 *1	環系にさらに縮合した化合物	環系の結合次数の異なる化合物
RID	591.266.4/RID	945		X	X	X
	591.266/RID	1954		X	X	
ES	NCSC3-C6/ES	3728			X	
SSS 構造 検索		1306		X		*2
	 結合はすべて U 環系は孤立	1954		X	X	

*1 元素の位置が異なる環系やスピロ環 (p.28, p.29 の構造参照)

*2 構造質問式にノーマライズド結合が含まれていれば、表示上結合次数が異なってもヒットする。

- ・ 骨格, 元素 (種類と位置) までを指定した環系識別子 (591.266/RID) とすべての結合を U にし環の孤立をした構造の部分構造検索は同等である。
- ・ 環系を固定して検索する場合, 環系識別子 (RID) が利用できる。結合は, ノーマライズド結合を考慮し, 「骨格・元素」まで (例: 591.266/RID) で検索したほうがよい。
- ・ さらに縮合した化合物も回答に含めたいときは, 構造検索がよい。

B 有機化合物

検索例 2：スクリーンを利用した構造検索

FULL FILE PROJECTION INCOMPLETE を回避するため、スクリーンを利用する。

- ・ スクリーンを利用すると FULL FILE PROJECTION INCOMPLETE を回避したり、必要な条件を予め限定して検索できる。
- ・ スクリーンを含めた構造検索

スクリーンコマンドでスクリーンセットを作成し、構造の L 番号と組み合わせて検索する。

- SCREEN コマンド (スクリーンセット作成)
 - => SCR [スクリーン番号]
 - => SCR [スクリーン番号] AND [スクリーン番号]
 - => SCR [スクリーン番号] OR [スクリーン番号]

(注) SCREEN コマンドの中では NOT は使用できない。
NOT 演算が必要な場合は、個別にスクリーンセットを作成し、SEARCH コマンドの中で NOT する。

- 検索
 - => S [構造 L 番号] AND [SCREEN L 番号] ← 限定
 - => S [構造 L 番号] NOT [SCREEN L 番号] ← 除く
 - => S [構造 L 番号] AND [SCREEN L 番号] NOT [SCREEN L 番号]

(注) 演算子 AND と NOT 両方を使用する場合は、AND を先に指定

STN Express や STN on the Web の構造フィルタを利用する (APPENDIX 参照)

- ・ ここでは、ポリマー、配位化合物、多成分物質、最小環が 5 以上の化合物を除く。

```
=> SCR 2043 OR 2049 OR 2127 OR 1842
L3 SCREEN CREATED

=> S L1 NOT L3
SAMPLE SEARCH INITIATED 09:23:43 FILE 'REGIST'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 23950 TO ITERATE
```

スクリーンコマンドでスクリーンセットを作成

構造 (L1) とスクリーンセット (L3) を NOT 演算する。(SSS サンプル検索)

```
4.8% PROCESSED 2000 ITERATIONS 45 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01
```

```
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
                        BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 469740 TO 488260
PROJECTED ANSWERS: 9385 TO 12169

L4 45 SEA SSS SAM L1 NOT L3
```

COMPLETE になった

スクリーン番号 (ポケットガイド参照)

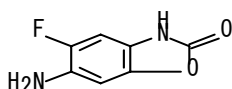
2043 : ポリマー一般
2049 : 配位化合物
2127 : 2 成分以上
1842 : 最小環数 5 以上

B 有機化合物

検索例 2 : スクリーンを利用した構造検索

=> D SCAN

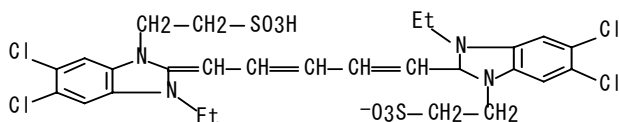
L4 45 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 IN 2(3H)-Benzoxazolone, 6-amino-5-fluoro- (9Cl)
 MF C7 H5 F N2 O2



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

L4 45 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 IN 1H-Benzimidazolium, 5,6-dichloro-2-[5-[5,6-dichloro-1-ethyl-1,3-dihydro-3-(2-sulfoethyl)-2H-benzimidazol-2-ylidene]-1,3-pentadienyl]-1-ethyl-3-(2-sulfoethyl)-, inner salt (9Cl)
 MF C27 H28 Cl4 N4 O6 S2
 CI COM



ONE OR MORE TAUTOMERIC DOUBLE BONDS NOT DISPLAYED IN THE STRUCTURE

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

=> S L1 NOT L3 FULL

フルファイル検索

FULL SEARCH INITIATED 09:24:10 F
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 475546 TO ITERATE

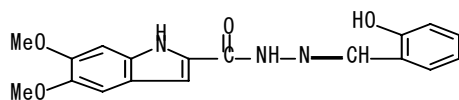
100.0% PROCESSED 475546 ITERATIONS
 SEARCH TIME: 00.00.03

8922 ANSWERS

L5 8922 SEA SSS FUL L1 NOT L3

=> D 100 RN IN STR

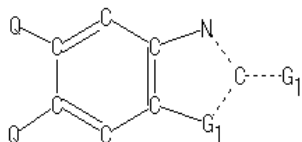
L5 ANSWER 100 OF 8922 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 RN 899411-57-5 REGISTRY
 IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED



B 有機化合物

検索例 3：サブセット検索 (辞書検索回答セット利用)

検索例 3； 検索例 2 と同じ構造質問式を用い, FULL FILE PROJECTION INCOMPLETE を回避するため環データの「最小環の元素配列 (ESS)」を利用する。



Q：炭素, 水素以外なら何でもよい
 G1：炭素, 酸素, チツ素のいずれか
 点線の結合はなんでもよい
 環は孤立
 置換基は何があってもよい

- ・ 先に, 最小環の元素配列を検索する (辞書検索の回答セットを作成する)。
- ・ 辞書検索の回答セットをサブセットにして, 構造 (L1) を SSS 検索する。

FULL FILE PROJECTION INCOMPLETE を回避するため, サブセット検索を利用する。

- ・ サブセット検索を利用すると FULL FILE PROJECTION INCOMPLETE を回避したり, 限定した構造で二次構造検索ができる。
- ・ サブセット検索は, 回答集合の L 番号の中をさらに構造検索する機能である。

- サブセットに指定できる回答セット

構造検索のみの回答セット L 番号

辞書検索のみの回答セット L 番号

構造検索 + 辞書検索の回答セット L 番号

- 入力方法

=> S L 番号 検索タイプ SUB=L 番号 検索範囲

構造質問式	構造検索タイプ SSS, CSS FAM, EXA	サブセットにする 回答セット L 番号	検索範囲 SAM (サンプル検索) FULL (フルファイル検索) RANGE (範囲指定検索)
-------	---------------------------------	------------------------	---



サブセット検索 (フルファイル検索)

構造検索の回答セットのみ：割引適用 (5,110 円/回)

辞書検索の回答セットのみ：割引なし

辞書検索 + 構造検索の回答セット：割引なし

B 有機化合物

検索例 3: サブセット検索 (辞書検索回答セット利用)

```
=> S NC4/ESS OR NCOC2/ESS OR NCNC2/ESS
      3434938 NC4/ESS
      409862 NCOC2/ESS
      1703953 NCNC2/ESS
L6    5251764 NC4/ESS OR NCOC2/ESS OR NCNC2/ESS
```

3 とおりの最小環の元素配列を /ESS
フィールドで検索する (下記参照)

```
=> S L1 SUB=L6
```

回答セット (L6) をサブセットにして構造 (L1) を SSS 検索
(サンプル検索) する。

```
ENTER SUBSET SEARCH SCOPE - SAMPLE, FULL, RANGE, OR (END): SAM
SAMPLE SUBSET SEARCH INITIATED 09:12:44 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 44956 TO ITERATE
```

```
4.4% PROCESSED      2000 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01
```

12 ANSWERS

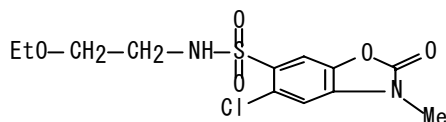
COMPLETE になった

```
PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):      ONLINE **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 886464 TO 911776
PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 4409 TO 6379
```

```
L7          12 SEA SUB=L6 SSS SAM L1
```

```
=> D SCAN
```

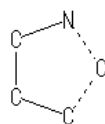
```
L7 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN 7
IN  INDEX NAME NOT YET ASSIGNED
MF  C12 H15 Cl N2 O5 S
```



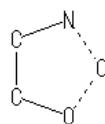
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

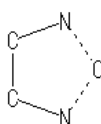
・ 構造 L1 の最小環の構造は, G1 = C, O, N で以下の 3 とおり考えられる



NC4/ESS

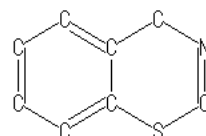


NCOC2/ESS



NCNC2/ESS

最小環の元素配列 (ESS) の例



ES C6 - NCSC3
ESS C6
NCSC3

縮合環の場合
ハイフンをつないだそ
れぞれの環が最小環
(ESS) となる

B 有機化合物

検索例 3: サブセット検索 (辞書検索回答セット利用)

=> S L1 SUB=L6 FULL

FULL SUBSET SEARCH INITIATED 09:13:14 FILE
 FULL SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 895853 TO ITERATE

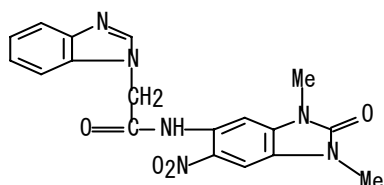
フルファイル検索を実行
 (注) 辞書検索をサブセットにしたフルファイル検索
 は通常の SSS 検索料金が課金される

100.0% PROCESSED 895853 ITERATIONS 13353 ANSWERS
 SEARCH TIME: 00.00.03

L8 13353 SEA SUB=L8 SSS FUL L6

=> D L10 1 100 RN STR RSD

L8 ANSWER 1 OF 13353 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 RN 900591-84-6 REGISTRY

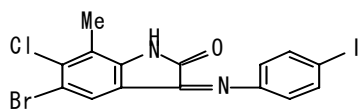


PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C3N2-C6	NCNC2-C6	5-6	C7N2	333.401.34	1
C3N2-C6	NCNC2-C6	5-6	C7N2	333.401.35	1

L8 ANSWER 100 OF 13353 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 RN 899764-26-2 REGISTRY



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

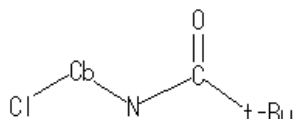
Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	1
C4N-C6	NC4-C6	5-6	C8N	333.151.56	1

B 有機化合物

検索例 4 : サブセット検索 (構造検索回答セット利用)

検索例 4 : 下記の部分構造検索を行い,さらに, Cb がシクロヘキサン環の化合物があるかを確認する



Cb : 炭素環一般

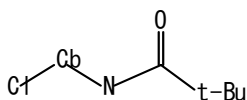
=>

Uploading C:\STNEXP\Queries\SUBSTR.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L1

L1 STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1

●

SAMPLE SEARCH INITIATED 16:05:15 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 1711 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 1711 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

22 ANSWERS

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
 BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 31739 TO 36701
PROJECTED ANSWERS: 159 TO 721

L2 22 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FULL

●

FULL SEARCH INITIATED 16:05:22 FILE 'REGISTRY'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 35447 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 35447 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

514 ANSWERS

L3 514 SEA SSS FUL L1

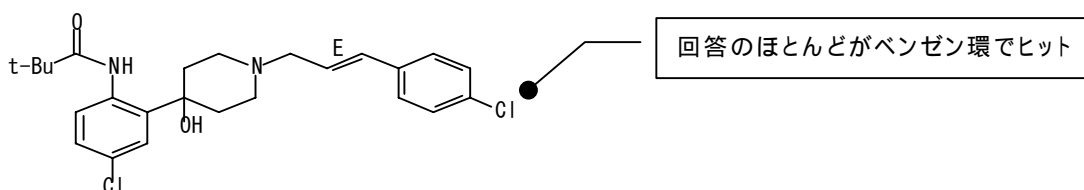
B 有機化合物

検索例 4 : サブセット検索 (構造検索回答セット利用)

=> D_SCAN

L3 514 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Propanamide, N-[4-chloro-2-[1-[(2E)-3-(4-chlorophenyl)-2-propenyl]-4-hydroxy-4-piperidinyl]phenyl]-2,2-dimethyl- (9Cl)
MF C25 H30 Cl2 N2 O2

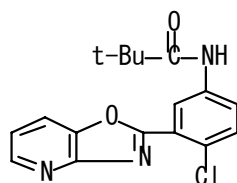
Double bond geometry as shown.



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

L3 514 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Propanamide, N-(4-chloro-3-oxazolo[4,5-b]pyridin-2-ylphenyl)-2,2-dimethyl- (9Cl)
MF C17 H16 Cl N3 O2



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

- 炭素環一般 (CB) をシクロヘキサン環に限定する.
- 別途,シクロヘキサン環の構造質問式を作成し,フルファイル検索結果 (L3) をサブセットに検索する.

B 有機化合物

検索例 4: サブセット検索 (構造検索回答セット利用)

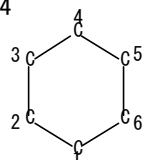
=>

Uploading C:¥STNEXP¥Queries ¥SUBSTRa.str

L4 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L4

L4



STR

環を孤立させる (またはすべての結合をエグザクトにする)
(ノーマライズド結合を含めないようにする)

NODE ATTRIBUTES:

```
NSPEC  IS R    AT  1
NSPEC  IS R    AT  2
NSPEC  IS R    AT  3
NSPEC  IS R    AT  4
NSPEC  IS R    AT  5
NSPEC  IS R    AT  6
```

DEFAULT MLEVEL IS ATOM

DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:

RSPEC 1

NUMBER OF NODES IS 6

STEREO ATTRIBUTES: NONE

構造検索の結果 (L3) をサブセットにし、シクロヘキサン環 (L4) を SSS (サンプル検索) する

=> S L4 SUB=L3 SAM

SAMPLE SUBSET SEARCH INITIATED 16:06:33 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 1 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 1 ITERATIONS

0 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.01

PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):

ONLINE **COMPLETE**

PROJECTED ITERATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):

1 TO 80

PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):



フルファイル検索を実行

構造検索の回答セット (L3) をサブセットにしたフルファイル検索は割引料金が適用される (5,110 円/回)

L5 0 SEA SUB=L3 SSS SAM L4

=> S L4 SUB=L3 FULL

FULL SUBSET SEARCH INITIATED 16:06:48 FILE 'REGISTRY'

100.0% PROCESSED 6 ITERATIONS

4 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.01

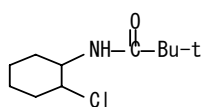
L6 4 SEA SUB=L3 SSS FUL L4

B 有機化合物

検索例 4 : サブセット検索 (構造検索回答セット利用)

=> D 2-3

L6 ANSWER 2 OF 4 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 343772-84-9 REGISTRY
ED Entered STN: 28 Jun 2001
CN Propanamide, N-(2-chlorocyclohexyl)-2,2-dimethyl- (9Cl) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Propionamide, N-(2-chlorocyclohexyl)-2,2-dimethyl- (5Cl)
FS 3D CONCORD
MF C11 H20 Cl N O
SR Reaction Database
LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT

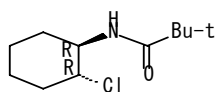


PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

L6 ANSWER 3 OF 4 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 78162-83-1 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Propanamide, N-(2-chlorocyclohexyl)-2,2-dimethyl-, trans- (9Cl) (CA INDEX NAME)
FS STEREOSEARCH
MF C11 H20 Cl N O
LC STN Files: BEILSTEIN*, CA, CAPLUS
(*File contains numerically searchable property data)

Relative stereochemistry.



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

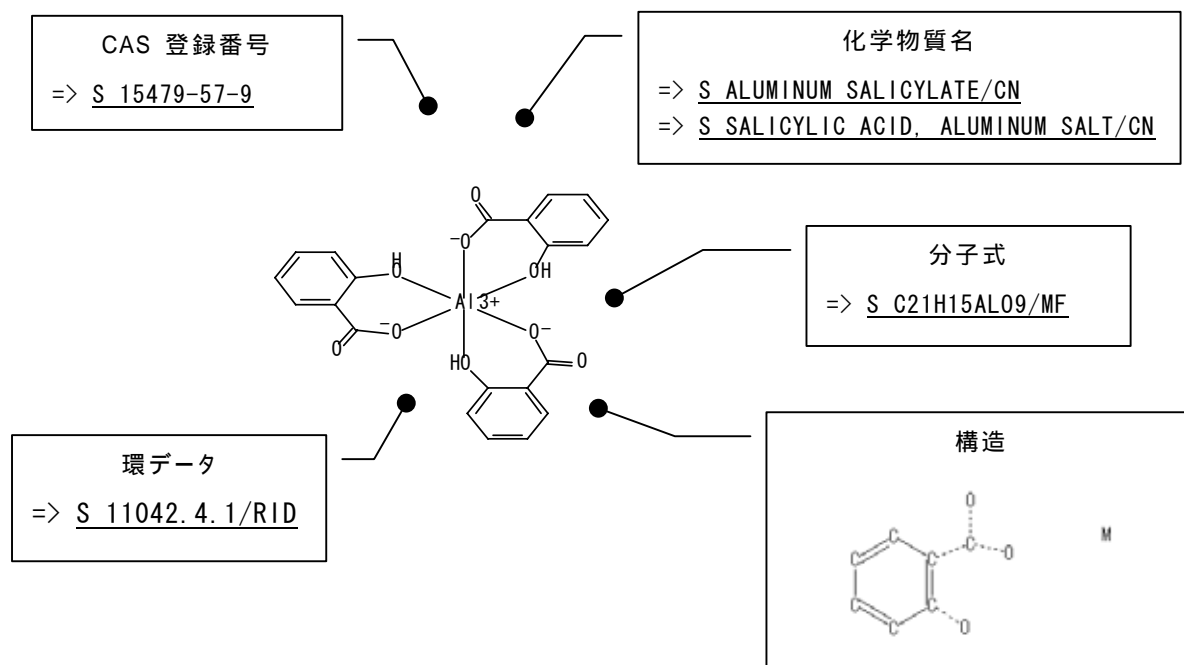
C 配位化合物

この章では、配位化合物の構造検索および環データを利用した検索をご紹介します。また、CAplus ファイルでの配位化合物の索引方針と文献の検索方法についても説明いたします。

C 配位化合物

検索方法

配位化合物 (CCS) は, 分子式, 環データ (環系識別子), 構造などから検索ができる.



配位化合物の文献検索

CAplus ファイルの索引は, ほとんどは, 配位化合物の CAS 登録番号で索引されている. しかし, 配位子と金属の塩の CAS 登録番号で索引されたり, 配位子と金属それぞれの CAS 登録番号の D 付き (構造不特定の誘導体) として索引されている場合もある. 従って, CAplus ファイルの索引の違いも考慮しながら検索する必要がある.

検索の指針

	<u>REGISTRY ファイル</u>	<u>CAplus ファイル</u>
1. 配位化合物 (クラス識別子 CCS)		
分子式	/MF	} REGISTRY ファイルからの クロスオーバー検索
環系識別子	/RID /ELS	
構造	SSS 検索	
2. 配位子と金属の塩	/CRN /ELS	
3. 構造不明	×	配位子, 金属の CAS 登録番号 の D 付き文献として検索

C 配位化合物

CAplus / CA ファイルの索引

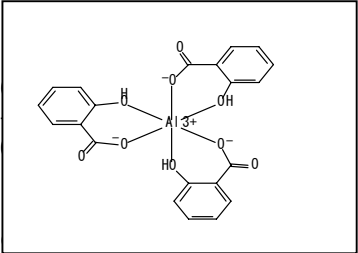
CAplus / CA ファイルの索引 (サルチル酸とアルミニウムの配位化合物の例)

1. 配位化合物 (CCS) の CAS 登録番号で索引されている例

AN 2004:305433 CAPLUS [Full-text](#)
 DN 140:341891
 TI Additive for stabilizing and promoting natural gas hydrate formation rate and preventing bacterial spoilage of water during storage or transporting
 TIJP ガスハイドレートの生成速度促進用兼水の腐敗防止用添加物 [原題]
 IN Kawasaki, Tatsuji; Okui, Tomoharu; Watanabe, Hiroto
 PA Tokyo Gas Co., Ltd., Japan; API Corporation
 SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 20 pp.
 CODEN: JKXXAF
 DT Patent
 LA Japanese
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLI
PI	JP 2004115613	A2	20040415	JP 20
PRAI	JP 2002-279098		20020925	
IT	15479-57-9 , Aluminum salicylate			

RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Use)
 (additive for stabilizing and promoting natural gas hydrate formation rate and preventing bacterial spoilage of water during storage or transporting)



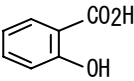
2. 配位子と金属の塩の CAS 登録番号で索引されている例

AN 1998:268384 CAPLUS [Full-text](#)
 DN 129:3855
 TI Adjuvant, in particular as an emulsion, containing a trivalent metal cation and sympathomimetic compound, and vaccine composition containing it
 IN Ganne, Vincent; Aucoeur, Jerome
 PA Societe D'Exploitation de Produits pour les Industries Chimiques SEPPIC, Fr.
 SO PCT Int. Appl., 26 pp.
 CODEN: PIXXD2
 DT Patent
 LA French
 FAN. CNT 3

	PATENT NO.	KIND	DATE
PI	WO 9817311	A1	19980430
IT	207113-11-9		

RL: THU (Therapeutic use); BIOL (Biological)
 (adjuvant emulsion, with trivalent metal cation, sympathomimetic compound, and vaccine composition)

RN **207113-11-9**
 CN Benzoic acid, 2-hydroxy-, aluminum salt (9CI)
 (CA INDEX NAME)
 MF C7 H6 O3 . x Al
 GRN (69-72-7)



●x Al

C 配位化合物

CAplus / CA ファイルの索引

3. 配位子の CAS 登録番号と金属の CAS 登録番号が D 付きで索引されている例

AN 2002:237155 CAPLUS [Full-text](#)
 DN 136:270548
 TI Electrographic or electrophotographic image formation using color toners
 IN Inaba, Junko; Sugawara, Nobuyoshi
 PA Canon Inc., Japan
 SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 22 pp.
 CODEN: JKXXAF
 DT Patent
 LA Japanese
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	JP 2002091081	A2	20020327	JP 2000-281122	20000918
PRAI	JP 2000-281122		20000918		

OS MARPAT 136:270548
 IT **69-72-7D**, Salicylic acid, coordination compound with **aluminum**
 RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
 (electrog. or electrophotog. image formation using color toners)

AN 1997:599297 CAPLUS [Full-text](#)
 DN 127:270445
 TI Magenta toner for electrophotographic developer compositions
 IN Ciccarelli, Roger N.; Pickering, Thomas R.; Bertrand, Jacques C.
 PA Xerox Corp., USA
 SO U.S., 7 pp.
 CODEN: USXXAM
 DT Patent
 LA English
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	US 5663025	A	19970902	US 1994-332313	19941031
PRAI	US 1994-332313		19941031		

IT **7429-90-5D**, Aluminum, **salicylic acid** complexes, uses
 RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
 (magenta electrophotog. toners containing two magenta pigments and)

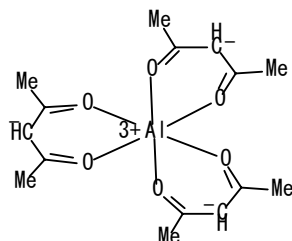
4. 配位子と金属の名称で索引されている例

AN 1960:33051 CAPLUS [Full-text](#)
 DN 54:33051
 OREF 54:6381b-c
 TI Spectrophotometric study of aluminum-salicylic acid complex
 AU Das, Bamdev; Aditya, S.
 CS Ravenshaw Coll., Cuttack
 SO J. Indian Chem. Soc. (1959), 36, 473-8
 DT Journal
 LA Unavailable
 IT Ionization
 (of **aluminum** complexes with **salicylic acid**)
 IT **Aluminum**, compound with **salicylic acid**
 Nickel, compound with mercaptoacetic acid **Salicylic acid, aluminum** complex

C 配位化合物

検索例 1: 配位化合物 (CCS)

検索例 1: 下記の構造の配位化合物を検索する



分子式 (C₁₅H₂₁AlO₆)

1- 分子式検索

=> FILE REGISTRY

=> E C15H21AL06/MF 5

E1 3 C15H21AL04/MF

E2 2 C15H21AL05/MF

E3 8 --> C15H21AL06/MF

E4 1 C15H21AL06.2CH2BR2/MF

E5 1 C15H21AL06.2CH2BRCL/MF

分子式を /MF フィールドで EXPAND し, 検索する.
(Hill 方式: 炭素を含む場合は C, H, 元素のアルファベット順)

=> S E3

L1 8 C15H21AL06/MF

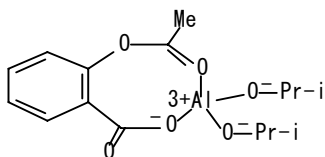
=> D 1-8 IN MF STR REF

CA 索引名から目的の配位化合物を確認するのはむずかしいので .REF (文献数) を参考にする. (IN MF STR REF 表示形式: 122 円 (SAM 表示形式と同じ))

L1 ANSWER 1 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN

IN Aluminum, [2-[(acetyl-κO)oxy]benzoato-κO]bis(2-propanolato)-, (T-4)- (9CI)

MF **C15 H21 Al O6**

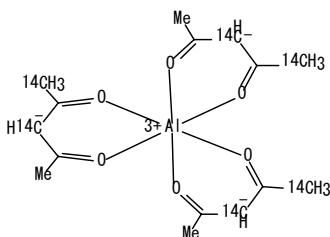


1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

L1 ANSWER 2 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN

IN 2,4-Pentanedione-1,3-¹⁴C1, Al complex (6CI)

MF **C15 H21 Al O6**

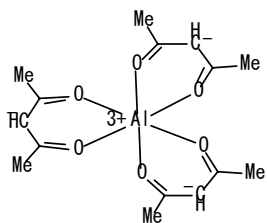


1 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)

C 配位化合物

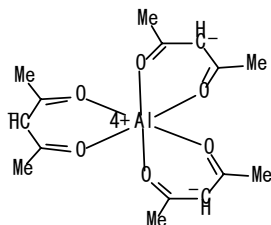
検索例 1: 配位化合物 (CCS)

L1 ANSWER 3 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 IN Aluminum, tris(2,4-pentanedionato-0,0')-, (OC-6-11-Δ)- (9CI)
 MF **C15 H21 Al O6**

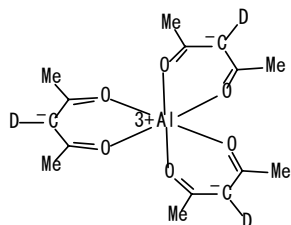


1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

L1 ANSWER 4 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 IN Aluminum(1+), tris(2,4-pentanedionato-0,0')-, (OC-6-11)- (9CI)
 MF **C15 H21 Al O6**

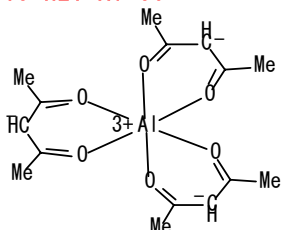


L1 ANSWER 5 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 IN Aluminum, tris(2,4-pentanedion-3-d-ato-0,0')-, (OC-6-11)- (9CI)
 MF **C15 H18 Al D3 O6**



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

L1 ANSWER 6 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 IN Aluminum, tris(2,4-pentanedionato-0,0')-, (OC-6-11-Λ)- (9CI)
 MF **C15 H21 Al O6**

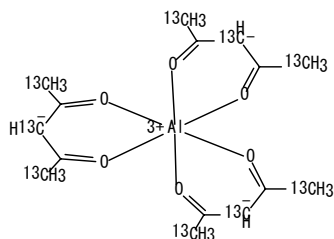


3 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 3 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

C 配位化合物

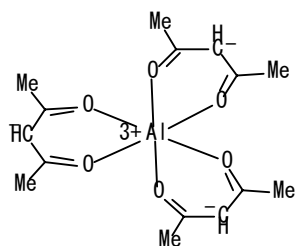
検索例 1: 配位化合物 (CCS)

L1 ANSWER 7 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 IN Aluminum, tris(2,4-pentanedion-1,3,5-¹³C₃-ato)- (8CI)
 MF **C15 H21 Al O6**



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

L1 ANSWER 8 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 IN Aluminum, tris(2,4-pentanedionato-κO,κO')-, (OC-6-11)- (9CI)
 MF **C15 H21 Al O6**



● 目的の化合物

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

2197 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 56 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 2198 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
 46 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967) } 文献数が多い

=> D 8 RN

L1 ANSWER 8 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 RN **13963-57-0** REGISTRY



● CA 索引名を EXPAND (SEARCH) するときのポイント

ダッシュ () は特殊記号なので
 EXPND のときも “ ” で囲む必要がある。

=> E "Aluminum, tris(2,4-pentanedionato-κO,κO')-, (OC-6-11)-"/CN 5

- | | | |
|----|-------|--|
| E1 | 1 | ALUMINUM, TRIS(2,4-PENTANEDIONATO)-, COMPD. WITH THIOUREA (1:3)/CN |
| E2 | 1 | ALUMINUM, TRIS(2,4-PENTANEDIONATO)-, COMPD. WITH UREA (1:3)/CN |
| E3 | 1 --> | ALUMINUM, TRIS(2,4-PENTANEDIONATO-κO,κO')-, (OC-6-11)-/CN |
| E4 | 1 | ALUMINUM, TRIS(2,4-PENTANEDIONATO-κO,κO')-, (OC-6-11)-,
POLYMER WITH (CHLOROMETHYL)OXIRANE, 4,4'-(1-METHYLET HYLIDENE)BIS(PHENOL),
SILICIC ACID (H4SiO4) TETRAETHYL ESTER AND 2,4,6,8-TETRAMETHYL/CN |
| E5 | 1 | ALUMINUM, TRIS(2,4-PENTANEDIONATO-κO,κO')-, (OC-6-11)-,
POLYMER WITH 1-BUTANOL TITANIUM(4+) SALT, SILICIC ACID (H4SiO4) TETRAETHYL
ESTER AND 2,4,6,8-TETRAMETHYL-2-(3-(OXIRANYLMETHOXY)PROPY)/CN |

C 配位化合物

検索例 1: 配位化合物 (CCS)

1- 環系識別子 (RID) 検索

=> D 8 RSD ● 8 番目の回答の環系データを RSD 表示形式で表示

L1 ANSWER 8 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN

Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C3A102- C3A102-C3A102	A10C30- A10C30-A10C30	6-6-6	C9A106	3189.3.4	1

=> E 3189.3.4/RID 5

E1	20	3189.3.1/RID
E2	9	3189.3.2/RID
E3	393 -->	3189.3.4/RID
E4	1	3189.3.5/RID
E5	1	3189.3.6/RID

RID (環系識別子)
3 1 8 9 . 3 . 4
骨格 元素 結合

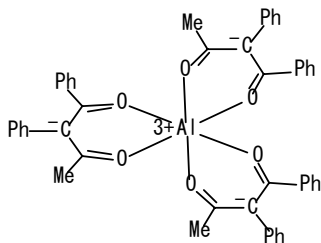
3189.3.4/RID (骨格, 元素, 結合
すべて一致) で検索

=> S E3

L2 393 3189.3.4/RID

=> D 100 393 STR RSD

L2 ANSWER 100 OF 393 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN



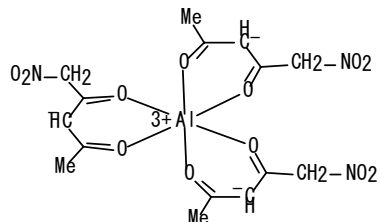
Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	6
C3A102- C3A102-C3A102	A10C30- A10C30-A10C30	6-6-6	C9A106	3189.3.4	1

C 配位化合物

検索例 1: 配位化合物 (CCS)

L2 ANSWER 393 OF 393 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN



Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C3A102-	A10C30-	6-6-6	C9A106	3189.3.4	1
C3A102-C3A102	A10C30-A10C30				

=> E 3189/RID 5

E1 10 31889.2/RID
 E2 10 31889.2.1/RID
 E3 10979 --> 3189/RID
 E4 9 3189.1/RID
 E5 9 3189.1.1/RID

参考

=> S E3

L3 10979 3189/RID

3189/RID (骨格のみ一致) で検索

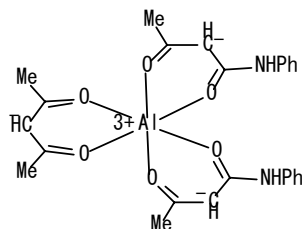
=> S L3 AND AL/ELS

353345 AL/ELS
 L4 528 L3 AND AL/ELS

アルミニウムが存在する化合物に限定 (AL/ELS)

=> D 20 200 400 RN STR RSD

L4 ANSWER 20 OF 528 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 RN 800392-58-9 REGISTRY



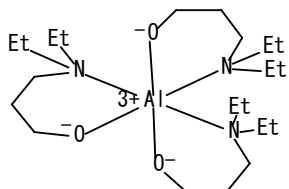
Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	2
C3A102-	A10C30-	6-6-6	C9A106	3189.3.4	1
C3A102-C3A102	A10C30-A10C30				

C 配位化合物

検索例 1: 配位化合物 (CCS)

L4 ANSWER 200 OF 528 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 129241-83-4 REGISTRY

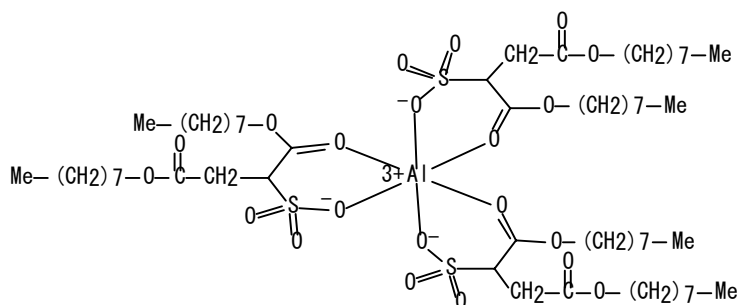


環系の骨格のみ一致した (構成元素が異なる, 結合次数の異なる環系) 化合物がヒットする

Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C3AINO-	AINC3O-	6-6-6	C9AIN3O3	3189. 2. 1	1
C3AINO-C3AINO	AINC3O-AINC3O				

L4 ANSWER 400 OF 528 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 54787-57-4 REGISTRY



Ring System Data

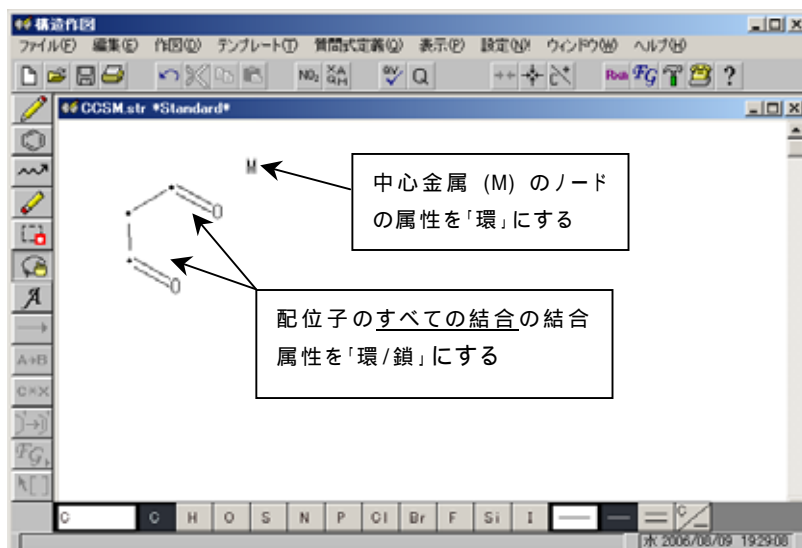
Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C2AIO2S-	AIO2SC2O-	6-6-6	C6AIO6S3	3189. 5. 1	1
C2AIO2S-	AIO2SC2O-				
C2AIO2S	AIO2SC2O				

C 配位化合物

検索例 1: 配位化合物 (CCS)

1- 部分構造検索 (SSS 構造検索)

- ・ 配位子の個数および中心金属を限定せずに検索できる。
- ・ 作図のポイント

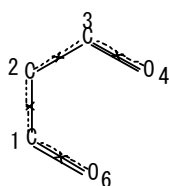


=>
Uploading C:\¥STNEXP¥Queries¥CCSM.str

L5 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L5

L5 STR
M 5



M のノードの属性 (環), 結合の属性 (環/鎖) を確認

NODE ATTRIBUTES:

NSPEC	IS	RC	AT	1	
NSPEC	IS	RC	AT	2	
NSPEC	IS	RC	AT	3	
NSPEC	IS	RC	AT	4	
NSPEC	IS	R	AT	5	← 金属 (M) のノードの属性 (環/鎖)
NSPEC	IS	RC	AT	6	
DEFAULT	MLEVEL	IS	ATOM		
MLEVEL	IS	CLASS	AT	1	2 3 4 5 6
DEFAULT	ECLEVEL	IS	LIMITED		

GRAPH ATTRIBUTES:

RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED
NUMBER OF NODES IS 6

STEREO ATTRIBUTES: NONE

C 配位化合物

検索例 1: 配位化合物 (CCS)

=> SCR 2049
L6 SCREEN CREATED

スクリーン (2049) で配位化合物に限定

=> S L5 AND L6

構造 (L5) とスクリーンセット (L6) を AND 検索 (サンプル検索)

SAMPLE SEARCH INITIATED 11:24:41
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 9479 TO ITERATE

21.1% PROCESSED 2000 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

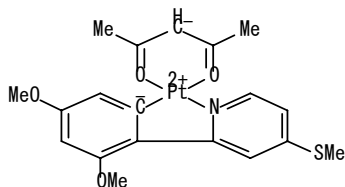
50 ANSWERS

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 183745 TO 195415
PROJECTED ANSWERS: 69550 TO 76804

L7 50 SEA SSS SAM L5 AND L6

=> D SCAN

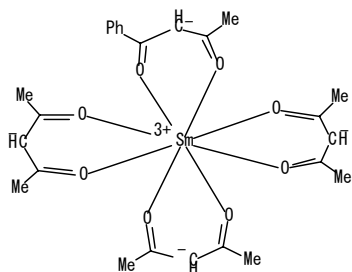
L7 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Platinum, [3,5-dimethoxy-2-[4-(methylthio)-2-pyridinyl-κN]phenyl-κC](2,4-pentanedionato-κO,κO')-, (SP-4-3)- (9Cl)
MF C19 H21 N O4 Pt S
CI CCS



中心金属 (Pt) の 1 配位の化合物

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

L7 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED
MF C25 H30 O8 Sm
CI CCS, COM

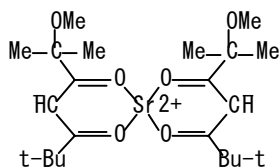


中心金属 (Sm) の 4 配位の化合物

C 配位化合物

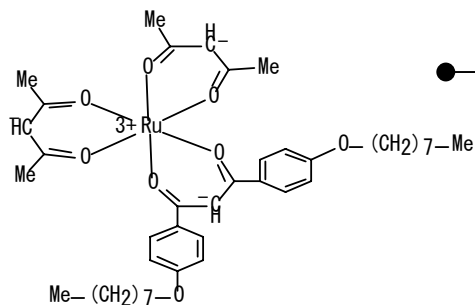
検索例 1: 配位化合物 (CCS)

L7 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 IN Strontium, bis(2-methoxy-2,6,6-trimethyl-3,5-heptanedionato- $\kappa O, \kappa O'$)-, (T-4)- (9CI)
 MF C22 H38 O6 Sr
 CI CCS



● ———— 中心金属 (Sr) の 2 配位の化合物

L7 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 IN Ruthenium, [1,3-bis[4-(octyloxy)phenyl]-1,3-propanedionato- $\kappa O, \kappa O'$]bis(2,4-pentanedionato- $\kappa O, \kappa O'$)-, (OC-6-22- Δ)- (9CI)
 MF C41 H57 O8 Ru
 CI CCS



● ———— 中心金属 (Ru) の 3 配位の化合物

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

=> S L5 AND L6 FULL

● ———— フルファイル検索

FULL SEARCH INITIATED 11:29:42 FILE 'REGISTRY'
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 190680 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 190680 ITERATIONS
 SEARCH TIME: 00.00.01

73766 ANSWERS

L8 73766 SEA SSS FUL L5 AND L6

=> S L8 AND AL/ELS

● ———— アルミニウムが存在する化合物に限定 (AL/ELS)

353345 AL/ELS

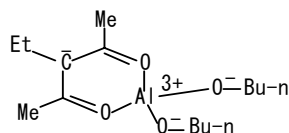
L9 1357 L8 AND AL/ELS

C 配位化合物

検索例 1: 配位化合物 (CCS)

=> D 1 100 1000 RN IN STR RSD

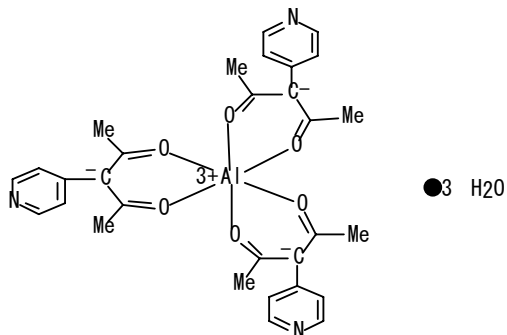
L9 ANSWER 1 OF 1357 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 RN 898560-98-0 REGISTRY
 IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED



Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C3A102	A10C30	6	C3A102	46.29.5	1

L9 ANSWER 100 OF 1357 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 RN 781637-91-0 REGISTRY
 IN Aluminum, tris[3-(4-pyridinyl)-2,4-pentanedionato-κO, κO']-, trihydrate, (OC-6-11)- (9CI)



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

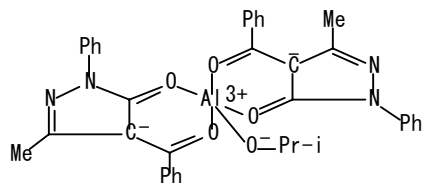
Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C5N	NC5	6	C5N	46.156.30	3
C3A102-	A10C30-	6-6-6	C9A106	3189.3.4	1
C3A102-C3A102	A10C30-A10C30				

C 配位化合物

検索例 1: 配位化合物 (CCS)

L9 ANSWER 1000 OF 1357 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 RN 81492-54-8 REGISTRY
 IN Aluminum, bis(4-benzoyl-2,4-dihydro-5-methyl-2-phenyl-3H-pyrazol-3-onato-0,0') (2-propanolato)- (9CI)



Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	4
C3N2-C3N2-	N2C3-N2C3-	5-5-6-6	C8A1N4O4	4268.172.1	1
C3A1O2-C3A1O2	A1OC3O-A1OC3O				

=> S L2 OR L9
 L10 1357 L2 OR L9

配位化合物 (CCS) (中心金属は Al) の回答セット
(環系識別子, 構造検索で得られた回答)

=> FILE CAPLUS

配位化合物 (CCS) の CAS 登録番号で索引されている文献

=> S L10
 L11 3869 L10

CAplus フルファイルに入り, L10 をクロスオーバー検索する

=> D 10 1100 BIB HITSTR

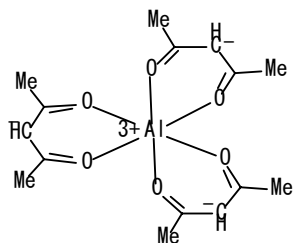
L11 ANSWER 10 OF 3869 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 AN 2006:653040 CAPLUS [Full-text](#)
 DN 145:84804
 TI Polyoxyalkylene glycol-copolymerized polyester compositions, preparation thereof, and antistatic fibers with good dyeability therefrom
 TIJP ポリエステル組成物及びそれからなるポリエステル繊維 [原題]
 IN Takase, Toru; Tsukamoto, Ryoji
 PA Teijin Fibers Ltd., Japan
 SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 17 pp.
 CODEN: JKXXAF
 DT Patent
 LA Japanese
 FAN. CNT 1

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI JP 2006176703	A2	20060706	JP 2004-373038	20041224
PRAI JP 2004-373038		20041224		

C 配位化合物

検索例 1: 配位化合物 (CCS)

IT **13963-57-0**, Aluminum acetylacetonate
 RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)
 (polymerization catalysts; polyoxyalkylene glycol-copolymd. polyester compns.
 for antistatic fibers with good dyeability)
 RN 13963-57-0 CAPLUS
 CN Aluminum, tris(2,4-pentanedionato- κ O, κ O')-, (OC-6-11)- (9CI)
 (CA INDEX NAME)

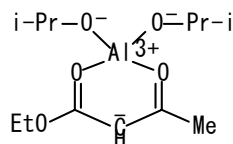


L11 ANSWER 1100 OF 3869 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 AN 2000:232659 CAPLUS [Full-text](#)
 DN 132:266552
 TI Coating compositions and functional titania thin films therefrom
 IN Yoshihara, Toshio; Ohta, Yurie; Takahashi, Nobuko; Kunimine, Noboru
 PA Dai Nippon Printing Co., Ltd., Japan
 SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 6 pp.
 CODEN: JKXXAF

DT Patent
 LA Japanese
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	JP 2000104019	A2	20000411	JP 1998-278276	19980930
PRAI	JP 1998-278276		19980930		

IT **14782-75-3**, ALCH
 RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)
 (Ti alkoxide- and Al chelate-containing storage-stable coatings for thin
 TiO₂ film formation for reflective film preparation)
 RN 14782-75-3 CAPLUS
 CN Aluminum, [ethyl 3-(oxo- κ O)butanoato- κ O']bis(2-propanolato)-,
 (T-4)- (9CI) (CA INDEX NAME)



C 配位化合物

検索例 2 : 配位子と金属の塩

検索例 2 : 配位子と金属の塩の場合

- 配位子と金属の塩の CAS 登録番号を検索する。

=> FILE REGISTRY

REGISTRY フルファイルで配位子とアルミニウムの CAS 登録番号を調べる

=> E 2,4-PENTANEDIONE/CN 5

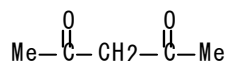
E1 1 2,4-PENTANEDIONATOBIS(ETHYLENE)RHODIUM/CN
E2 1 2,4-PENTANEDIONATOBIS(ETHYLENE)RHODIUM(1)/CN
E3 1 --> 2,4-PENTANEDIONE/CN
E4 1 2,4-PENTANEDIONE ANION/CN
E5 1 2,4-PENTANEDIONE BARIUM SALT/CN

=> S E3

L12 1 "2,4-PENTANEDIONE"/CN

=> D RN IN STR

L12 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 123-54-6 REGISTRY
IN 2,4-Pentanedione (8CI, 9CI)



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

=> E ALUMINUM/CN 5

E1 1 ALUMINOXANES, SILOXANE-, PH/CN
E2 1 ALUMINOZIRCONIUM/CN
E3 1 --> ALUMINUM/CN
E4 1 ALUMINUM ((T-4)-), DIHYDROXY(8-QUINOLINOLATO-N1, O8)-/CN
E5 1 ALUMINUM (0.7), NICKEL (25.8), ZINC (73.5) (ATOMIC)/CN

=> S E3

L13 1 ALUMINUM/CN

=> D RN IN

L13 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 7429-90-5 REGISTRY ← アルミニウムの CAS 登録番号は検索例 3 で使用
IN Aluminum (8CI, 9CI)

C 配位化合物

検索例 2 : 配位子と金属の塩

=> S 123-54-6/CRN AND AL/ELS ●
146 123-54-6/CRN
353345 AL/ELS
L14 3 123-54-6/CRN AND AL/ELS

123-54-6 を 1 成分とする多成分物質 (/CRN) で、
アルミニウムを含む (AL/ELS) 化合物を検索



単原子フラグメントは /CRN 検索はできないため
AL/ELS を利用する。

=> D L14 SCAN IN ●

SCAN (CA 索引名のみ) 表示形式で化合物を確認したが、
目的の塩は見つからなかった。

L14 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN 2,4-Pentanedione, polymer with 2-propanol aluminum salt (9CI)

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

L14 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Aluminum, triethyl-, compd. with 2,4-pentanedione (1:3) (8CI)

L14 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Aluminum, triethyl-, compd. with 2,4-pentanedione (1:1) (9CI)

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

C 配位化合物

検索例 3：構造不明

検索例 3：構造不明の場合

- ・ 配位子と金属それぞれの CAS 登録番号を用い、接尾辞 D 付きで検索する。
- ・ 1976 年以前の文献は、配位子と金属それぞれの CAS 登録を用いて検索する。

- ・ 1977 年以降
=> S 配位子 RN/D (S) 金属キーワード
=> S 金属 RN/D (S) 配位子キーワード
- ・ 1976 年以前
=> S (配位子 RN OR 配位子キーワード)/IT (S) (金属 RN OR 金属キーワード)/IT
RAN=,1976

=> FILE CAPLUS

=> S L12/D (S) (ALUMINUM OR AL)

3112 L12/D
936107 ALUMINUM
976583 AL

L15 149 L12/D (S) (ALUMINUM OR AL)

配位子と金属それぞれの CAS 登録番号に D が
付与された形で索引されている文献

=> S L13/D (S) (PENTANEDION? OR ACETYLACETON?)

12070 L13/D
14729 PENTANEDION?
34781 ACETYLACETON?

L16 38 L13/D (S) (PENTANEDION? OR ACETYLACETON?)

配位子と金属が名称等で索引されている文献

=> S (PENTANEDION? OR ACETYLACETON?)/IT (S) (ALUMINUM OR AL)/IT RAN=,1976

6707 PENTANEDION?/IT
1942 ACETYLACETON?/IT
161623 ALUMINUM/IT
35623 AL/IT

L17 568 (PENTANEDION? OR ACETYLACETON?)/IT (S) (ALUMINUM OR AL)/IT

=> S L15 OR L16 OR L17

L18 627 L15 OR L16 OR L17

● 構造不明の文献の合計

C 配位化合物

検索例 3: 構造不明

=> D L18 11 18 620 BIB HITRN

L18 ANSWER 11 OF 627 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN

AN 2001:886288 CAPLUS [Full-text](#)

DN 136:38921

TI Sprayable coating composition

IN Klinkenberg, Huig; Van Beelen, Jan Cornelis

PA Akzo Nobel N.V., Neth.

SO PCT Int. Appl., 21 pp.

CODEN: PIXXD2

DT Patent

LA English

FAN. CNT 2

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2001092363	A1	20011206	WO 2001-EP5962	20010523
	:				
PRAI	EP 2000-201850	A	20000526		
	WO 2001-EP5962	W	20010523		
	US 2001-865025	A3	20010524		

IT **123-54-6D**, 2,4-Pentanedione, **aluminum** complexes **7429-90-5D**, Aluminum, complexes with 2,4-**pentanedione**

RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)

(catalyst; sprayable coating compns. useful for clear coating, refinishing, and finishing large transportation vehicles)

RE. CNT 3 THERE ARE 3 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD

ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

L18 ANSWER 18 OF 627 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN

AN 1998:115927 CAPLUS [Full-text](#)

DN 128:193443

TI Manufacture of thermoplastic resin foam moldings

IN Tsujimoto, Noritaka

PA Sekisui Chemical Co. Ltd., Japan

SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 5 pp.

CODEN: JKXXAF

DT Patent

LA Japanese

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	JP 10045932	A2	19980217	JP 1996-207063	19960806
	JP 3640471	B2	20050420		
PRAI	JP 1996-207063		19960806		

IT **123-54-6D**, Acetylacetone, **aluminum** chelate

RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)

(blowing accelerators; manufacture of thermoplastic resin foam moldings)

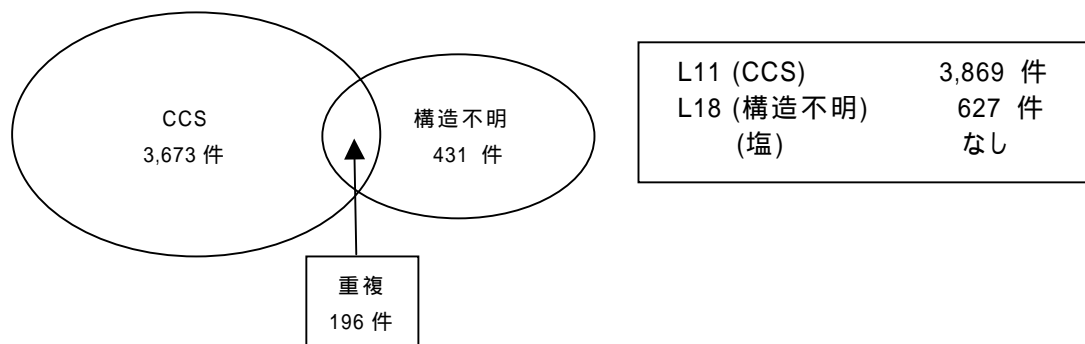
C 配位化合物

文献検索のまとめ

=> D L18 620 BIB KWIC

L18 ANSWER 620 OF 627 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
AN 1948:23141 CAPLUS [Full-text](#)
DN 42:23141
OREF 42:4945i,4946a-b
TI Certain metal derivatives of 2,4-pentanedione
AU Hatch, Lewis F.; Sutherland, Gordon
CS Univ. of Texas, Austin
SO Journal of Organic Chemistry (1948), 13, 249-53
CODEN: JOCEAH; ISSN: 0022-3263
DT Journal
LA Unavailable
IT **Aluminum**, compound with 2,4-**pentanedione**
Beryllium, methyl-, compound with 2,4-pentanedione
Magnesium, compound with 2,4-pentanedione
Sodium, compound with 2,4-pentanedione

文献検索のまとめ



- ・ 配位化合物 (クラス識別子 CCS) の CAS 登録番号で検索 (REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索) が基本である。
- ・ 配位子と金属の塩の CAS 登録番号も考慮する (件数は少ない)。
- ・ 配位子と金属それぞれの CAS 登録番号の D 付き文献を検索する。
- ・ 配位子と金属それぞれの名称等をキーワードで検索する (1976 年以前)。

D 無機化合物

この章では、無機化合物の検索方法についてご紹介します。組成比が不定な無機化合物や合金についても索引方針や特有な検索方法について説明いたします。

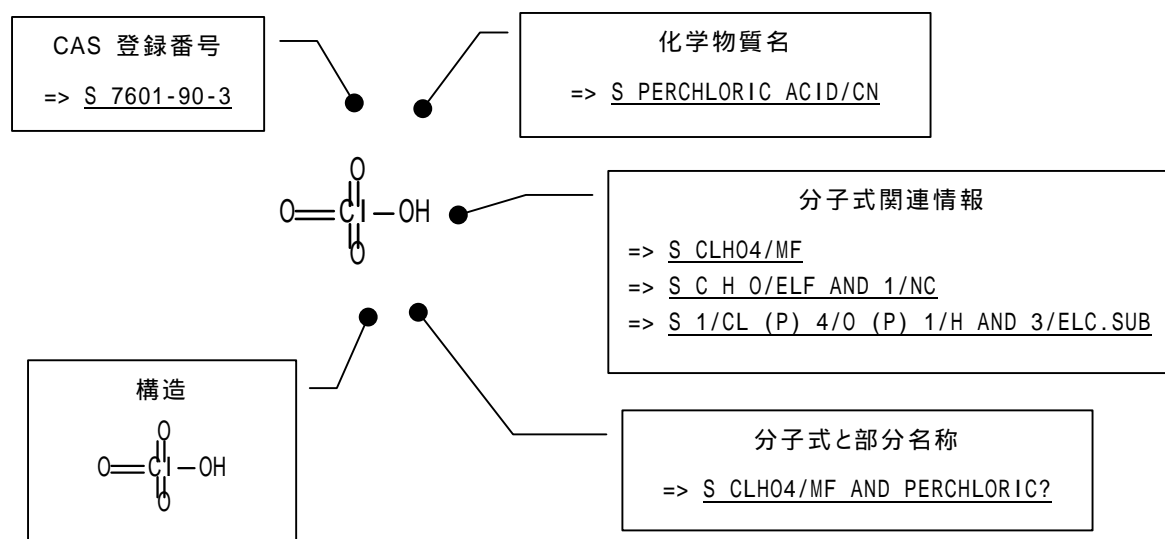
D 無機化合物

REGISTRY ファイルに収録される無機化合物

REGISTRY ファイルに収録される無機化合物

- ・ 化学量論的な組成を持つ物質
- ・ 化学量論的な組成を持たない物質
 - 表形式無機化合物 --- クラス識別子コード (TIS)
 - 合金 --- クラス識別子コード (AYS)
 - 鉱物 --- クラス識別子コード (MNS)

化学量論的な組成を持つ物質の検索方法



D 無機化合物

検索例 1: 化学量論的な組成を持つ物質 (硝酸銀)

検索例 1: 硝酸銀

名称検索

=> FILE REGISTRY

=> E SILVER NITRATE/CN 5

名称を /CN フィールドで EXPAND 後, 検索する

E1 1 SILVER NIOBIUM SELENIDE (AG2NBSE3)/CN
 E2 1 SILVER NIOBIUM TELLURIDE (AG2NBTE3)/CN
 E3 1 --> SILVER NITRATE/CN
 E4 1 SILVER NITRATE (AG(NO3)2)/CN
 E5 1 SILVER NITRATE (AG7O8(NO3))/CN

=> S E3

L1 1 "SILVER NITRATE"/CN

=> D

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 RN 7761-88-8 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Nitric acid silver(1+) salt (8CI, 9CI) (CA INDEX NAME)

OTHER CA INDEX NAMES:

CN **Silver nitrate (7CI)**

OTHER NAMES:

CN Nitric acid silver(I) salt
 CN Nitric acid, silver(1+) salt
 CN Silver (I) nitrate
 CN Silver mononitrate
 CN Silver nitrate (AgNO3)
 CN Silver(1+) nitrate

AR 31457-41-7

DR 8012-12-2, 31890-20-7

MF Ag . H N O3

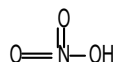
CI COM

LC STN Files: ADISNEWS, AGRICOLA, ANABSTR, ACQUIRE, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CABA, CAOLD, CAPLUS, CASREACT, CBNB, CHEMCATS, CHEMINFORMRX, CHEMLIST, CIN, CSCHEM, CSNB, DDFU, DETHERM*, DRUGU, EMBASE, ENCOMPLIT, ENCOMPLIT2, ENCOMPAT, ENCOMPAT2, GMELIN*, HSDB*, IFICDB, IFIPAT, IFIUIDB, IPA, MEDLINE, MRCK*, MSDS-OHS, PIRA, PROMT, PS, RTECS*, TOXCENTER, TULSA, ULIDAT, USAN, USPAT2, USPATFULL, VETU, VTB (*File contains numerically searchable property data)

Other Sources: DSL**, EINECS**, TSCA**

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

CRN (7697-37-2)



● Ag(I)

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

13563 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 186 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 13602 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
 1 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)

D 無機化合物

検索例 1: 化学量論的な組成を持つ物質 (硝酸銀)

=> FILE REGISTRY

分子式検索

=> E AG.HNO3/MF 5

E1 3 AG.HNO2/MF
E2 1 AG.HNO2S/MF
E3 5 --> AG.HNO3/MF
E4 1 AG.HNO3.HNO3.1/2PD/MF
E5 1 AG.HNO3.HNO3.1/2ZN/MF

分子式を /MF フィールド EXPAND 後, 検索する
AgNO3 ==> AG.HNO3

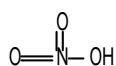
=> S E3

L2 5 AG.HNO3/MF

=> D SCAN

SCAN 表示形式で化合物
をチェック (無料)

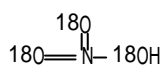
L2 5 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS
IN Nitric acid, silver(1+)-108Ag salt (9Cl)
MF **Ag . H N O3**



●108Ag(I)

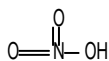
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1)

L2 5 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS
IN Nitric-180 acid, silver(1+) salt (9Cl)
MF **Ag . H N O3**



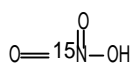
●Ag(I)

L2 5 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Nitric acid, silver(1+)-110Ag salt (8Cl, 9Cl)
MF **Ag . H N O3**



●110Ag(I)

L2 5 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Nitric-15N acid, silver(1+) salt (9Cl)
MF **Ag . H N O3**



●Ag(I)

分子式は Hill 方式を採用

Hill 方式

- 炭素を含む化合物
C, H, 元素のアルファベット順
数字の 1 は省略
例: C4H11NO2
- 炭素を含まない化合物
元素のアルファベット順
数字の 1 は省略
例: CLH

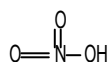
金属塩の注意点

- カルコゲン元素 (O, S, Se, Te) に結合した水素が金属に置換されて生成した塩は, 遊離の酸と金属との多成分物質として登録される.

D 無機化合物

検索例 1: 化学量論的な組成を持つ物質 (硝酸銀)

L2 5 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 IN Nitric acid silver(1+) salt (8C1, 9C1)
 MF **Ag . H N O3**
 CI COM



● 目的の化合物

● Ag(I)

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

● 目的の化合物の CA 索引名 (IN) を /CN フィールド
で検索し直す .SEARCH の前に EXPAND で確認する

=> E Nitric acid silver(1+) salt/CN 5
 'SALT' IS NOT VALID HERE

For an explanation of the EXPAND command, enter "HELP EXPAND" at an
 arrow prompt (=>).

=> E "Nitric acid silver(1+) salt"/CN 5



● プラス (+) は特殊記号なので, EXPAND
のときも “ ” で囲む必要がある

E1	1	NITRIC ACID POTASSIUM SALT, TETR
E2	1	NITRIC ACID RADICAL CATION/CN
E3	1 -->	<u>NITRIC ACID SILVER(1+) SALT/CN</u>
E4	1	NITRIC ACID SILVER(1+) SALT, COMPD. WITH (M-(OXOETHENYLID ENE))DISILVER (1:2)/CN
E5	1	NITRIC ACID SILVER(1+) SALT, COMPD. WITH (1A,3AB, 4A,4AA,7AA,8A,9AB)-3A,4A,7,7A,8 ,9,9A-OCTAHYDRO-1,4,8-METHENO-1H-CYCLOPENT(F)AZULENE (1:1)/C N

=> S E3

L3 1 "NITRIC ACID SILVER(1+) SALT"/CN

=> D RN

L3 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 RN 7761-88-8 REGISTRY

D 無機化合物

検索例 2：化学量論的な組成を持つ物質 (窒化ガリウム)

検索例 2：窒化ガリウム

=> FILE REGISTRY

=> E GAN/MF 5

E1	2	GAM0040W11/MF
E2	1	GAM0040W11.5NA/MF
E3	9	--> GAN/MF
E4	1	GAN.SEZN/MF
E5	1	GAN0-0.01P0.99-1/MF

GAN を /MF フィールドで EXPAND 後, 検索する

=> S E3

L1 9 GAN/MF

=> D SCAN

SCAN 表示形式で化合物をチェック (無料)

L1 9 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Gallium nitride (69Ga) (9Cl)
MF Ga N



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):8

L1 9 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Gallium nitride (71Ga15N) (9Cl)
MF Ga N



: (省略)

L1 9 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Gallium nitride (GaN) (6Cl, 8Cl, 9Cl)
MF Ga N
CI COM

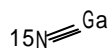


目的の化合物

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

: (省略)

L1 9 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Gallium nitride (Ga15N) (9Cl)
MF Ga N



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

D 無機化合物

検索例 2: 化学量論的な組成を持つ物質 (窒化ガリウム)

=> E Gallium nitride (GaN)/CN 5 ●

目的の化合物の IN を /CN フィールドで検索し直す。
SEARCH の前に EXPAND で確認する

E1 1 GALLIUM NITRIDE (GA8N8)/CN
E2 1 GALLIUM NITRIDE (GA9N9)/CN
E3 1 --> GALLIUM NITRIDE (GAN)/CN
E4 1 GALLIUM NITRIDE (GAN), ALLOY, CU 90,GAN 10/CN
E5 1 GALLIUM NITRIDE (GAN), MIXT. CONTG./CN

=> S E3

L2 1 "GALLIUM NITRIDE (GAN)"/CN

=> D

L2 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 25617-97-4 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN **Gallium nitride (GaN) (6CI, 8CI, 9CI)** (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN Gallium mononitride
CN Gallium mononitride (GaN)
CN Gallium nitride
DR 12024-03-2
MF Ga N
CI COM
LC STN Files: ANABSTR, BIOSIS, CA, CAOLD, CAPLUS, CASREACT, CBNB,
CHEMCATS, CHEMLIST, CIN, CSCHEM, CSNB, DETHERM*, IFICDB, IFIPAT,
IFIUDB, MRCK*, PIRA, PROMT, RTECS*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL, VTB
(*File contains numerically searchable property data)
Other Sources: EINECS**, NDSL**, TSCA**
(**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)



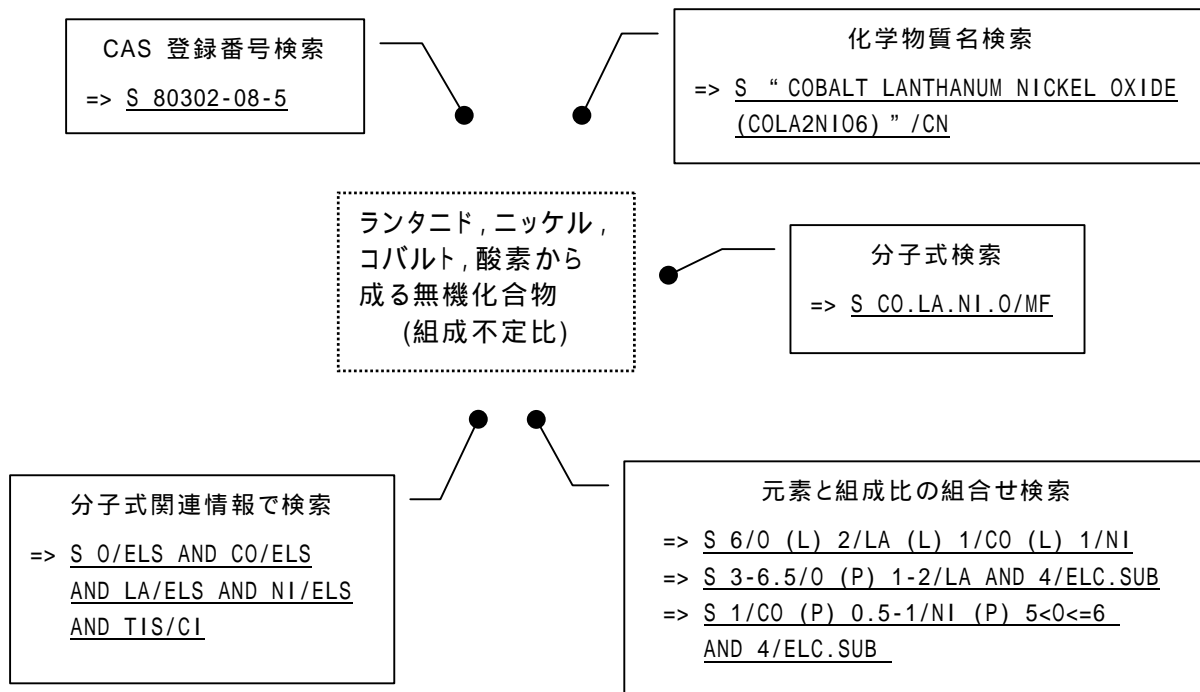
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

28411 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
124 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
28518 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
14 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)

D 無機化合物

表形式無機化合物

検索方法



D 無機化合物

検索例 3 : 表形式無機化合物 (窒化ガリウム)

検索例 3 : 表形式無機化合物 (窒化ガリウム)

=> FILE REGISTRY

=> E GALLIUM NITRIDE/CN 25

```

E1      1      GALLIUM NITRATE OXIDE (GA(NO3)O)/CN
E2      1      GALLIUM NITRATE OXIDE (GA(NO3)O), COMPD. WITH NITROGEN OXIDE
           (N2O5) (2:1)/CN
E3      1 --> GALLIUM NITRIDE/CN
E4      1      GALLIUM NITRIDE (69GA15N)/CN
E5      1      GALLIUM NITRIDE (69GAN)/CN
E6      1      GALLIUM NITRIDE (69GAN2)/CN
E7      1      GALLIUM NITRIDE (71GA15N)/CN
E8      1      GALLIUM NITRIDE (71GAN)/CN
E9      1      GALLIUM NITRIDE (71GAN2)/CN
E10     1      GALLIUM NITRIDE (GA0.45NO.55)/CN
E11     1      GALLIUM NITRIDE (GA0.52NO.48)/CN
E12     1      GALLIUM NITRIDE (GA0.61NO.39)/CN
E13     1      GALLIUM NITRIDE (GA0.62NO.38)/CN
E14     1      GALLIUM NITRIDE (GA0.6NO.4)/CN
E15     1      GALLIUM NITRIDE (GA0.7N)/CN
E16     1      GALLIUM NITRIDE (GA0.7NO.3)/CN
E17     1      GALLIUM NITRIDE (GA0.95N)/CN
E18     1      GALLIUM NITRIDE (GA1.04N)/CN
E19     1      GALLIUM NITRIDE (GA10N10)/CN
E20     1      GALLIUM NITRIDE (GA12N12)/CN
E21     1      GALLIUM NITRIDE (GA15N)/CN
E22     1      GALLIUM NITRIDE (GA2N)/CN
E23     1      GALLIUM NITRIDE (GA2N2)/CN
E24     1      GALLIUM NITRIDE (GA2N2), RADICAL ION(1-)/CN
E25     1      GALLIUM NITRIDE (GA2N3)/CN
    
```

組成比の異なる
窒化ガリウムが
存在している

=> S E22

L3 1 "GALLIUM NITRIDE (GA2N)"/CN ●

たとえば Ga と N の組成比が 2: 1
の窒化ガリウムを検索する

=> D

```

L3 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 51801-07-1 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Gallium nitride (Ga2N) (9CI) (CA INDEX NAME)
MF Ga . N
AF Ga2 N
CI COM, TIS
LC STN Files: CA, CAPLUS
    
```

Component	Ratio	Component Registry Number
N	1	17778-88-0
Ga	2	7440-55-3

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

D 無機化合物

検索例 3: 表形式無機化合物 (窒化ガリウム)

=> S GA/ELS AND N/ELS AND 2/ELC.SUB
54485 GA/ELS
21805187 N/ELS
341437 2/ELC.SUB
L4 114 GA/ELS AND N/ELS AND 2/ELC.SUB

GA と N が存在し, 物質全体の元素種数が
2 種 (GA と N のみ) の化合物を検索

=> S L4 AND TIS/CI
485269 TIS/CI
L5 49 L4 AND TIS/CI

TIS 化合物に限定

=> D SCAN

L5 49 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Gallium nitride (Ga1.04N) (9CI)
MF **Ga . N**
CI **TIS**

Component	Ratio
N	1
Ga	1.04

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

L5 49 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED
MF **Ga . N**
CI **TIS**

Component	Ratio
N	1
Ga	6

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

L5 49 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Gallium nitride (Ga4N3) (9CI)
MF **Ga . N**
CI **TIS**

Component	Ratio
N	3
Ga	4

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

いろいろな組成比の
窒化ガリウムがヒット
している

D 無機化合物

検索例 3: 表形式無機化合物 (窒化ガリウム)

・ CAplus ファイルで文献検索を行う。

=> FILE CAPLUS

=> S L2 OR L5

28546 L2

24 L5

L6 28557 L2 OR L5

CAplus ファイルに入り, L2 (検索例 2 の回答) と L5 を合わせて
クロスオーバー検索する (通常の GaN + TIS の GaN)

=> D L6 1 1714 15422 BIB HITSTR

HITSTR 表示形式で表示すると, ヒットした CAS
登録番号とともに構造や成分表も表示される
HITSTR 表示形式 (307 円/回答)

L6 ANSWER 1 OF 28557 CAPLUS COPYRIGHT 2006

AN 2006:768729 CAPLUS [Full-text](#)

TI Semiconductor light-emitting devices employing a semiconductor layer with a low density of dislocations on Ag electrode to extend lifetime of devices

TIJP 半導体発光装置 [機械翻訳]

IN Suzuki, Jun; Doi, Masato; Biwa, Goshi; Okuyama, Hiroyuki

PA Sony Corp., Japan

SO U.S. Pat. Appl. Publ., 7 pp.

CODEN: USXXCO

DT Patent

LA English

FAN.CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	US 2006170001	A1	20060803	US 2006-331290	20060112
	JP 2006202845	A2	20060803	JP 2005-10617	20050118
PRAI	JP 2005-10617	A	20050118		

IT **25617-97-4**, Gallium nitride (GaN)

RL: DEV (Device component use); USES (Uses)

(cladding, low-dislocation layer; semiconductor light-emitting devices employing semiconductor layer with low d. of dislocations on Ag electrode to extend lifetime of devices)

RN 25617-97-4 CAPLUS

CN Gallium nitride (GaN) (6CI, 8CI, 9CI) (CA INDEX NAME)



L6 ANSWER 1714 OF 28557 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN

AN 2006:136087 CAPLUS [Full-text](#)

DN 144:256536

TI Method for preparing low-dimensional nano-metal nitride

TIJP 低い次元ナノ金属窒化物を調製するための方法 [機械翻訳]

IN Cao, Yong; Zhu, Jian; Dai, Weilin; Fan, Kangnian

PA Fudan University, Peop. Rep. China

SO Faming Zhuanli Shenqing Gongkai Shuomingshu, 8 pp.

CODEN: CNXXEV

DT Patent

LA Chinese

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	CN 1594073	A	20050316	CN 2004-10025736	20040705
PRAI	CN 2004-10025736		20040705		

D 無機化合物

検索例 3: 表形式無機化合物 (窒化ガリウム)

IT **51801-07-1P**, Gallium nitride (Ga₂N)
 RL: IMF (Industrial manufacture); PREP (Preparation)
 (nanomaterial preparation method)
 RN 51801-07-1 CAPLUS
 CN Gallium nitride (Ga₂N) (9CI) (CA INDEX NAME)

Component	Ratio	Component Registry Number
N	1	17778-88-0
Ga	2	7440-55-3

L6 ANSWER 15422 OF 28557 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 AN 2004:1028470 CAPLUS [Full-text](#)
 DN 142:143293
 TI Blue luminescence from amorphous GaN films deposited by pulsed-laser
 ablation at room temperature
 TIJP パルス化レーザーアブレーションで室温で堆積する無定形のGaNフィルムからの青発光
 [機械翻訳]
 AU Shim, Seung Hwan; Shim, Kwang Bo; Yoon, Jong-Won; Shimizu, Yoshiki;
 Sasaki, Takeshi; Koshizaki, Naoto
 CS Ceramic Processing Research Center (CPRC), Department of Ceramic
 Engineering, Hanyang University, Seoul, 133-791, S. Korea
 SO Thin Solid Films (2005), 472(1-2), 11-15
 CODEN: THSFAP; ISSN: 0040-6090
 PB Elsevier B.V.
 DT Journal
 LA English

IT **827326-10-3**, Gallium nitride (GaNO_{0.85}) **827326-11-4**, Gallium nitride (GaNO_{0.95})
 RL: PEP (Physical, engineering or chemical process); PRP (Properties);
 PYP (Physical process); TEM (Technical or engineered material use); PROC
 (Process); USES (Uses)
 (blue luminescence from amorphous GaN films deposited by pulsed-laser
 ablation at room temperature)
 RN 827326-10-3 CAPLUS
 CN Gallium nitride (GaNO_{0.85}) (9CI) (CA INDEX NAME)

Component	Ratio	Component Registry Number
N	0.85	17778-88-0
Ga	1	7440-55-3

RN 827326-11-4 CAPLUS
 CN Gallium nitride (GaNO_{0.95}) (9CI) (CA INDEX NAME)

Component	Ratio	Component Registry Number
N	0.95	17778-88-0
Ga	1	7440-55-3

D 無機化合物

合金

REGISTRY ファイルにおける合金の登録

- 合金は構成成分を 1 成分とする多成分物質として登録されている。
- 重量 % が組成比として収録され、組成比が異なる合金は別の CAS 登録番号をもつ。
- 構成元素、組成比、構成元素の CAS 登録番号は成分表として収録されている。
元素と組成比を組み合わせた検索もできる。

鉄, ニッケル, クロム合金のレコード例

```

RN 8049-16-9 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Iron alloy, base, Fe 74,Cr 18,Ni 8 (9CI) (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN Chromium 18, iron 74, nickel 8 (weight)
DR 12735-74-9, 52860-26-1
MF Cr . Fe . Ni
CI AYS
LC STN Files: CA, IFIPAT, IFIUDB, TOXCENTER,
  USPATFULL
  
```

鉄が主成分の合金

AYS : クラス識別子 (合金)

Component	Component Percent	Component Registry Number
Fe	74	7439-89-6
Cr	18	7440-47-3
Ni	8	7440-02-0

組成比は CA 索引名と成分表に反映されている

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

CN (CA 索引名)	<u>Iron alloy, base, Fe 74,Cr 18,Ni 8</u>	見出し語母核 : 元素名 alloy base : 主成分 元素記号 組成比 (重量 %)												
MF (分子式)	Cr . Fe . Ni	構成元素を元素記号のアルファベット順に, ピリオド (.) で区切って記述												
成分表	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Component</th> <th>Component Percent</th> <th>Component Registry Number</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Fe</td> <td>74</td> <td>7439-89-6</td> </tr> <tr> <td>Cr</td> <td>18</td> <td>7440-47-3</td> </tr> <tr> <td>Ni</td> <td>8</td> <td>7440-02-0</td> </tr> </tbody> </table>	Component	Component Percent	Component Registry Number	Fe	74	7439-89-6	Cr	18	7440-47-3	Ni	8	7440-02-0	構成元素 組成比 構成元素の CAS 登録番号
Component	Component Percent	Component Registry Number												
Fe	74	7439-89-6												
Cr	18	7440-47-3												
Ni	8	7440-02-0												

D 無機化合物

合金

RN 566135-76-0 REGISTRY
 ED Entered STN: 14 Aug 2003
 CN Iron alloy, base, Fe 80-90,Cr 10-14,Ni 0.5-5.5 (9CI) (CA INDEX NAME)
 MF Cr . Fe . Ni
 CI AYS
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS

Component	Component Percent	Component Registry Number
Fe	80 - 90	7439-89-6
Cr	10 - 14	7440-47-3
Ni	0.5 - 5.5	7440-02-0

組成比が範囲の例

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

RN 12619-49-7 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Iron alloy, base, Fe,Cr,Ni (9CI) (CA INDEX NAME)
 DR 12756-51-3
 MF Cr . Fe . Ni
 CI AYS
 LC STN Files: CA, CAPLUS, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, TOXCENTER, USPAT2,
 USPATFULL

Component	Component Registry Number
Fe	7439-89-6
Cr	7440-47-3
Ni	7440-02-0

組成データなしの例

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

D 無機化合物

合金

RN 700830-65-5 REGISTRY ニッケルが主成分の合金
 ED Entered STN: 29 Jun 2004
 CN Nickel alloy, base, Ni 52-72,Cr 18-28,Fe 9.8-20 (9CI) (CA INDEX NAME)
 OTHER NAMES:
 CN Chromium 20-30, iron 10-20, nickel 50-70 (atomic)
 MF Cr . Fe . Ni
 CI AYS
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPAT2, USPATFULL

Component	Component Percent	Component Registry Number
Ni	52 - 72	7440-02-0
Cr	18 - 28	7440-47-3
Fe	9.8 - 20	7439-89-6

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

RN 625857-21-8 REGISTRY クロムが主成分の合金
 ED Entered STN: 12 Dec 2003
 CN Chromium alloy, base, Cr 57,Ni 32,Fe 10 (9CI) (CA INDEX NAME)
 MF Cr . Fe . Ni
 CI AYS
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS

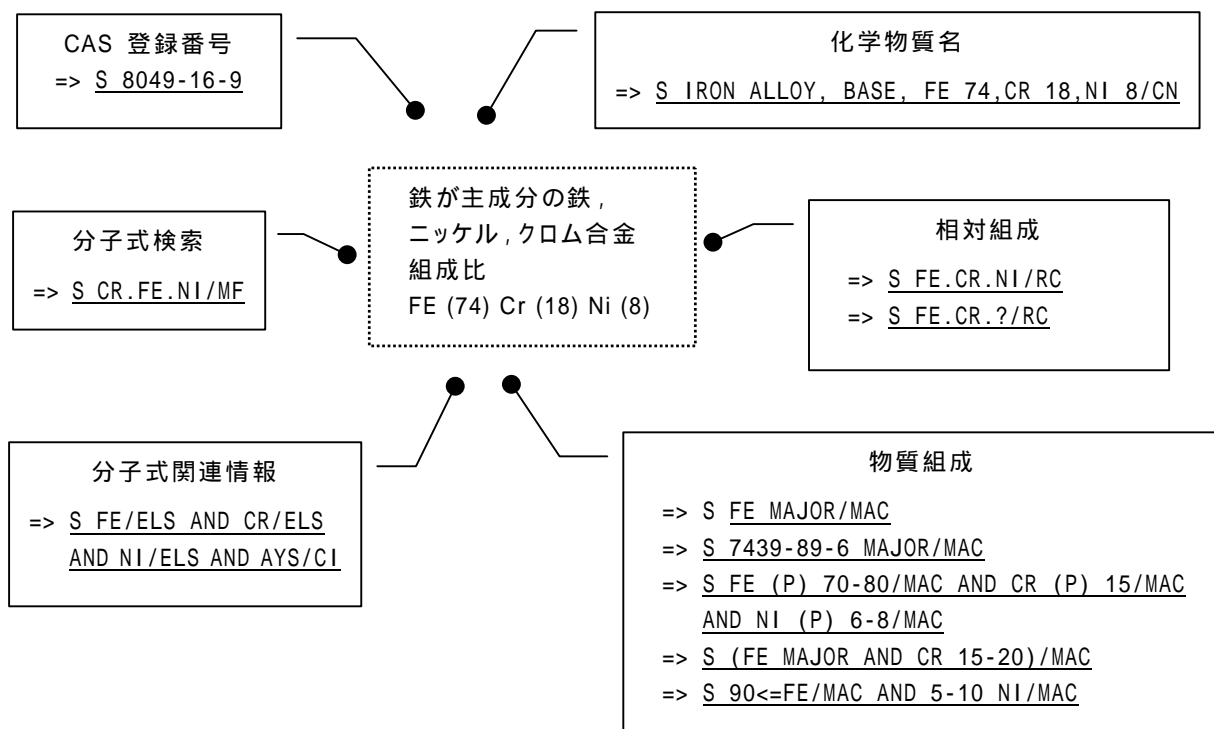
Component	Component Percent	Component Registry Number
Cr	57	7440-47-3
Ni	32	7440-02-0
Fe	10	7439-89-6

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

D 無機化合物

合金

検索方法



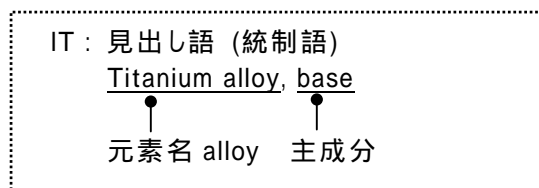
合金の文献検索

- 合金の CAS 登録番号は 1972 年 (9 CI) から登録を開始した。従って, CAS 登録番号からの文献検索は 1972 年以降となる。
- 1971 年以前の文献の検索は統制語を利用する。

- 統制語による合金の索引例

IT Titanium alloys, base (aluminum-vanadium-, composites with chromium bronze, microstructure of interfaces of)

主成分には base が付く



D 無機化合物

検索例 4 : 合金 (チタン, バナジウム, クロム, アルミニウム合金)

検索例 4 : チタンを主成分とする, チタン, バナジウム, クロム, アルミニウム合金
(その他微量成分を含んでもよい)

相対組成フィールド (/RC フィールド) 検索

=> FILE REGISTRY

=> E TI.V.CR.AL./RC 7

```
E1      50      TI.V.CR/RC
E2      55      TI.V.CR.AL/RC
E3      0 -->  TI.V.CR.AL./RC
E4      4       TI.V.CR.AL.B/RC
E5      23      TI.V.CR.AL.C/RC
E6      5       TI.V.CR.AL.CO/RC
E7      2       TI.V.CR.AL.CU/RC
```

組成比が $Ti > V > CR > AL$ の合金を /RC フィールドで EXPAND で確認する。
E2 (TI.V.CR.AL/RC) は TI, V, CR, AL 4 元素に限定した合金

=> S TI.V.CR.AL. ?/RC

L1 183 TI.V.CR.AL. ?/RC

TI.V.CR.AL のうしろにピリオド (.) を入れ前方一致 (?) 検索をすると, その他の元素も含む合金が検索される。

=> D SCAN

SCAN 表示形式で成分表を表示できる

```
L1 183 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Titanium alloy, base, Ti 75,V 15,Al 3.2,Cr 3.2,Sn 3,0 0.2,Fe 0.1 (9CI)
MF Al . Cr . Fe . 0 . Sn . Ti . V
CI  AYS
```

Component	Component Percent
Ti	75
V	15
Al	3.2
Cr	3.2
Sn	3
O	0.2
Fe	0.1

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

=> S L1 AND 6>=ELC.SUB

```
28136966 6>=ELC.SUB
L2      101 L1 AND 6>=ELC.SUB
```

構成元素を 6 以下に限定

相対組成フィールド (/RC)

- ・ 組成比 (重量 %) が多い順に構成元素を指定 (最大 5 個まで)
 - 間にピリオド (.) を入れる。
- ・ 入力例

=> S TI.V.CR/RC

=> S TI.V.CR. ?/RC

D 無機化合物

検索例 4 : 合金 (チタン, バナジウム, クロム, アルミニウム合金)

=> D_SCAN

L2 101 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Titanium alloy, base, Ti 56,V 25,Cr 15,Al 2,Mo 2,C 0.2 (9CI)
MF **C . Al . Cr . Mo . Ti . V**
CI AYS

Component	Component Percent
Ti	56
V	25
Cr	15
Al	2
Mo	2
C	0.2

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

L2 101 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Titanium alloy, base, Ti 71,V 18,Cr 5.1,Al 4.3,Fe 1.2,O 0.1 (9CI)
MF **Al . Cr . Fe . O . Ti . V**
CI AYS

Component	Component Percent
Ti	71
V	18
Cr	5.1
Al	4.3
Fe	1.2
O	0.1

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

物質組成フィールド (MAC)

- ・ 構成元素と組成比 (重量 %) を組み合わせた検索フィールド
- ・ 構成元素は, 元素記号または CAS 登録番号を使う.
- ・ 組成は数値検索で, 範囲指定検索が可能 (整数, 小数点 1 桁まで指定可能)
- ・ 主成分は MAJOR, 組成不明は UNKNOWN で指定できる.
- ・ 入力例

=> S FE MAJOR/MC

=> S 7439-89-6 MAJOR/MAC

=> S FE(P)70-80/MC AND CR(P)15/MAC

=> S (FE MAJOR AND CR 15-20)/MAC

=> S 90<=FE/MAC AND 5-10 NI/MC

D 無機化合物

検索例 4 : 合金 (チタン, バナジウム, クロム, アルミニウム合金)

物質組成フィールド (/MAC フィールド) 検索

=> S (TI(P)MAJOR AND V(P)10-20)/MAC AND CR/ELS AND AL/ELS

128888 TI/MAC
830486 MAJOR/MAC
24773 TI(P)MAJOR
96377 V/MAC
303470 10-20/MAC
6250 V(P)10-20
417029 CR/ELS
353477 AL/ELS

チタンが主成分 (MAJOR)で, バナジウムの組成比が
10-20, クロムとアルミニウムを含む合金を検索

L3 275 (TI(P)MAJOR AND V(P)10-20)/MAC AND CR/ELS AND AL/ELS

=> S L3 AND 6>=ELC.SUB

28136966 6>=ELC.SUB

L4 160 L3 AND 6>=ELC.SUB

=> D SCAN

L4 160 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Titanium alloy, base, Ti 65-87,V 10-20,Al 1-5,Cr 1-5,Sn 1-5 (9CI)
MF **Al . Cr . Sn . Ti . V**
CI AYS

Component	Component Percent
Ti	65 - 87
V	10 - 20
Al	1 - 5
Cr	1 - 5
Sn	1 - 5

指定した範囲の合金がヒットする

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

L4 160 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Titanium alloy, base, Ti 39,Cr 21,Mo 19,Al 11,V 10 (9CI)
MF **Al . Cr . Mo . Ti . V**
CI AYS

Component	Component Percent
Ti	39
Cr	21
Mo	19
Al	11
V	10

指定した範囲の合金がヒットする
(相対組成は TI.CR.MO.AL.V/RC)

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

D 無機化合物

検索例 4 : 合金 (チタン, バナジウム, クロム, アルミニウム合金)

- ・ CAplus ファイルで文献検索を行う。

=> FILE CAPLUS

=> S L4

L5 1073 L4

クロスオーバー検索による回答

- ・ 1971 年以前の文献をキーワード検索する。

=> E TITANIUM ALLOYS, BASE/CT

チタン合金の統制語を /CT フィールドで確認

E# FREQUENCY AT TERM

-- ----- -- ----

E1 1 TITANIUM ALKALI METAL OXIDES/CTJP

E2 3564 TITANIUM ALLOYS/CTJP

E3 1816 --> TITANIUM ALLOYS, BASE/CTJP

E4 0 8 TITANIUM ALUMINIDE (TI3AL)/CTJP

E5 0 8 TITANIUM ALUMINIDE (TIAL)/CTJP

E6 0 9 TITANIUM ALUMINIDE (TIAL3)/CTJP

E7 0 2 TITANIUM ALUMINIDE CAST ALLOYS/CTJP

E8 0 2 TITANIUM BORIDE (TIB)/CTJP

E9 0 2 TITANIUM BORIDE (TIB2)/CTJP

E10 0 2 TITANIUM BORIDE CARBIDE NITRIDE FIBERS/CTJP

E11 0 2 TITANIUM BORIDE CARBIDE NITRIDE FIBERS/CTJP

E12 0 2 TITANIUM BORIDE CARBIDE NITRIDE FIBERS/CTJP

チタン合金とバナジウム, クロム, アルミニウムの名称と元素記号を /IT フィールド (索引語の単語) で検索. 近接演算子は (S) 演算子を使用

=> SET PLU ON

SET COMMAND COMPLETED

=> S (TITANIUM ALLOY (S) (VANADIUM OR V) (S) (CHROMIUM OR CR) (S) (ALUMINUM OR AL))/IT
RAN=, 1971

48930 TITANIUM/IT

1 TITANIUMS/IT

48930 TITANIUM/IT

((TITANIUM OR TITANIUMS)/IT)

:

L6 89 (TITANIUM ALLOY (S) (VANADIUM OR V) (S) (CHROMIUM OR CR) (S) (ALUMINUM OR AL))/IT

=> S L5 OR L6

L7 1162 L5 OR L6

全年代の回答

=> D 2 BIB HITSTR

L7 ANSWER 2 OF 1162 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS or

CAS 登録番号でヒットした回答

AN 2006:465249 CAPLUS [Full-text](#)

DN 144:472664

TI β -titanium alloy having oxidation film with gradient aluminum concentration suitable for cold working

TIJP 冷間加工用 チタン合金及びその製造方法 [原題]

IN Matsukura, Isakazu

PA Kobe Steel, Ltd., Japan

SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 8 pp.

CODEN: JKXXAF

DT Patent

LA Japanese

D 無機化合物

検索例 4 : 合金 (チタン, バナジウム, クロム, アルミニウム合金)

FAN.CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	JP 2006124810	A2	20060518	JP 2004-317670	20041101
PRAI	JP 2004-317670		20041101		
IT	886212-84-6				

RL: PEP (Physical, engineering or chemical process); PRP (Properties); PYP (Physical process); TEM (Technical or engineered material use); PROC (Process); USES (Uses)
 (β-titanium alloy having oxidation film with gradient aluminum concentration suitable for cold working)

RN 886212-84-6 CAPLUS

CN Titanium alloy, base, Ti 76,V 15,Al 3.1,Cr 3,Sn 3 (9CI) (CA INDEX NAME)

Component	Component Percent	Component Registry Number
Ti	76	7440-32-6
V	15	7440-62-2
Al	3.1	7429-90-5
Cr	3	7440-47-3
Sn	3	7440-31-5

=> D L7 1110 1158 BIB HIT

L7 ANSWER 1110 OF 1162 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 AN 1968:421544 CAPLUS [Full-text](#)
 DN 69:21544
 TI Crevice corrosion of titanium in aqueous salt solutions
 AU Griess, John C., Jr.
 CS Oak Ridge Nat. Lab., Oak Ridge, TN, USA
 SO Corrosion (Houston, TX, United States) (1968), 24(4), 96-109
 CODEN: CORRAK; ISSN: 0010-9312
 DT Journal
 LA English
 IT **Titanium alloys**, base
 (**vanadium-chromium-aluminum**-, crevice corrosion of, by sodium chloride solns.)

統制語でヒットした回答

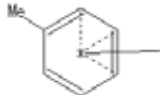
L7 ANSWER 1158 OF 1162 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 AN 1960:96881 CAPLUS
 DN 54:96881
 OREF 54:18293c-d
 TI High-strength titanium .beta.-alloys
 AU Petunina, E. V.
 SO Metallovedenie i Termicheskaya Obrabotka Metallov (1960), (No. 6), 27-30
 CODEN: MTOMAX; ISSN: 0026-0819
 DT Journal
 LA Unavailable
 IT 116166-90-6, **Titanium alloys, aluminum-Cr-V-**
 (from powder metallurgy, heat-treatment of, prepn. of high-strength)

***E* 検索のポイント・注意点**

REGISTRY ファイルおよび CAplus ファイルを検索するときのポイントや注意点についてご紹介いたします。

E 検索のポイント・注意点

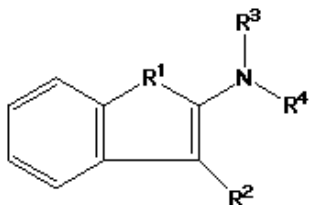
検索のポイント・注意点一覧

	ポイント・注意点	参照
構造 作 図	<ul style="list-style-type: none"> ・ CSS 検索で、結合非水素数 (CONNECT) を利用することにより、特定のノードに置換基を許容することができる。 ・ CSS 検索で、結合非水素数 (CONNECT) を利用することにより、縮合環の特定の位置にのみ、さらに縮合を許容することができる。 ・ 一般式 AK (鎖一般) を結合非水素数 (CONNECT) を利用することにより無置換の AK (C, H のみから成る AK) にすることができる。 ・ ショートカット SH を使用すると SO3 のようなノイズが含まれる。結合非水素数 (CONNECT) を利用することによりノイズを省くことができる。 ・ G グループの注意点 <ul style="list-style-type: none"> - G グループに直接アトリビュートを指定することはできない。 G グループに含める構造を別にフラグメントとして作図し、そのフラグメントにアトリビュートを指定する。 - G グループを含んだ置換基を可変置換位置 (VPA) で指定するとき、制限がある。G グループの先にさらに置換基のあるフラグメントは指定できない。 <div style="text-align: center; margin: 10px 0;">  <ul style="list-style-type: none"> - G1 できる - O - G1 できる - G1-O - Me できない </div> <ul style="list-style-type: none"> ・ 結合を含めた作図をしてしまうと、IDS (定義の不完全な物質) はヒットしないので、場合によっては、IDS を考慮した作図が必要。 	<p>P. 84</p> <p>P. 86</p> <p>P. 87</p> <p>P. 88</p> <p>P. 90</p>
辞書 検 索	<ul style="list-style-type: none"> ・ 単原子フラグメントは成分 CAS 登録番号では検索できない。 成分分子式や /ELS を利用する。 ・ 分子式関連情報を検索するとき、同一成分は (P) 演算子で限定できる。 (AND は物質全体)。 	<p>P. 92</p> <p>P. 99</p>
文 献 検 索	<ul style="list-style-type: none"> ・ /P を利用すると 1967 年以降、/D を利用すると 1977 年以降の文献検索になる。 ・ CAS ロールを利用すると 1967 年以降 (ロールによっては 2002 年以降) の文献検索になる。 ・ REGISTRY ファイルには文献がない化学物質もある。SR (登録情報源) フィールドや CI (クラス識別子) フィールドを参照に「することで手がかりを見い出すことができる。 ・ CPlus/CA ファイル以外の STN ファイルにクロスオーバーするとき、SELECT CHEM や TRANSFER CHEM を利用すると、CAS 登録番号と名称をまとめてクロスオーバーできる。 	<p>P. 93</p> <p>P. 97</p>

E 検索のポイント・注意点

結合非水素数の利用

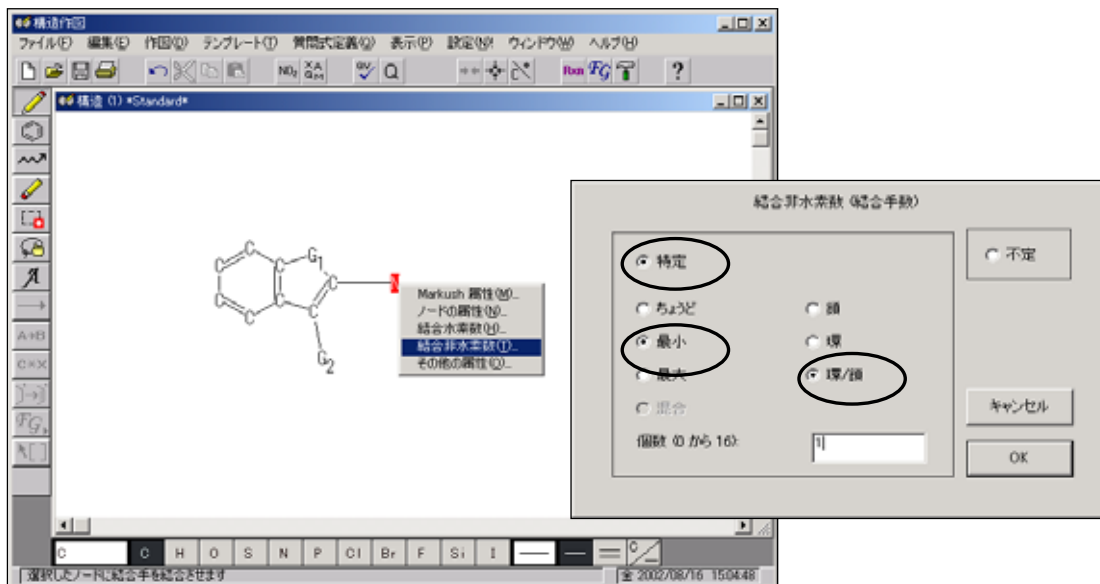
CSS 検索で、ある特定ノードに置換基を許容する (CSS 検索)



$R^1 = O, S$
 $R^2 = Me, NH_2, OH, X$
 $R^3, R^4 = H$ を含む任意の元素
 その他の元素に置換はない
 (-> CSS 検索)

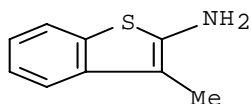
・ 作図方法

R^3, R^4 の置換を許すノード(N) を右クリックし、「結合非水素数」を選択する。
 「結合非水素数 (結合種数)」ダイアログボックスで、「特定」を選択後、「最小 1」「環/鎖」を指定する。

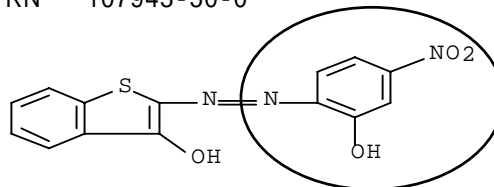


・ 回答例

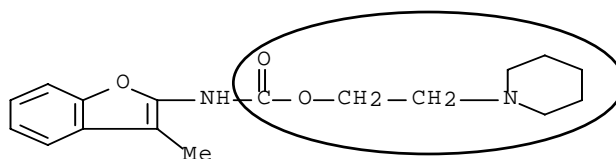
・ RN 13584-55-9



・ RN 107943-50-0



・ RN 66041-87-0



E 検索のポイント・注意点

結合非水素数の利用

[参考]

結合非水素数(結合手数)

- 結合非水素数(結合手数)は、特定のノードについて、結合する水素以外のノードの数を指定する。
 - 質問式中で既に結合しているノードの数も含める。
 - 結合次数(単結合, 二重結合など)は問わない。
 - 指定したノードに関する結合の属性(鎖・環・環/鎖)を指定できる。

指定方法

- 結合非水素数

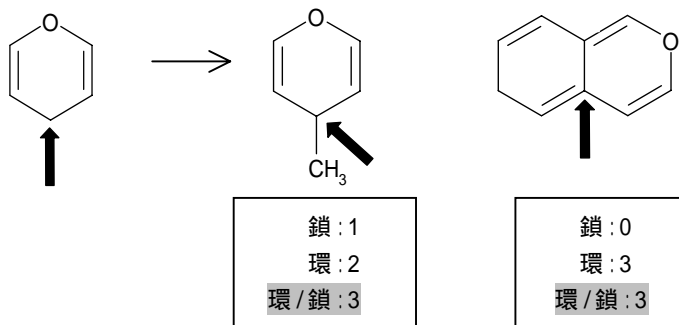
結合非水素数の指定	指定範囲	内容
不定		結合する非水素ノードの数は問わない
特定	正確な数の指定	結合する非水素ノードの数はちょうど n 個
	最小値の指定	結合する非水素ノードは n 個以上
	最大値の指定	結合する非水素ノードは n 個以下

- 結合非水素数を指定したノードからの結合の属性

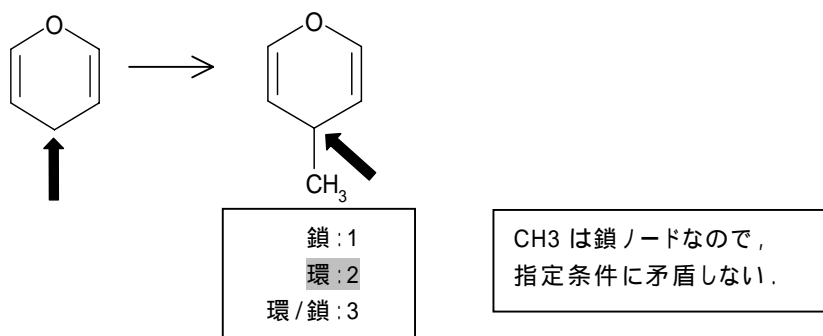
指定範囲	内容
鎖	指定したノードからの鎖結合の数
環	指定したノードからの環結合の数
環/鎖	指定したノードからの鎖または環結合の数

結合非水素数(結合手数)の数え方

- 矢印のノードの結合非水素数を「ちょうど 3, 環/鎖」と指定した場合



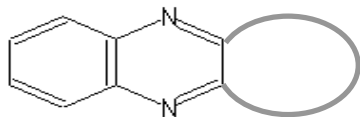
- 矢印のノードの結合非水素数を「ちょうど 2, 環」と指定した場合



E 検索のポイント・注意点

結合非水素数の利用

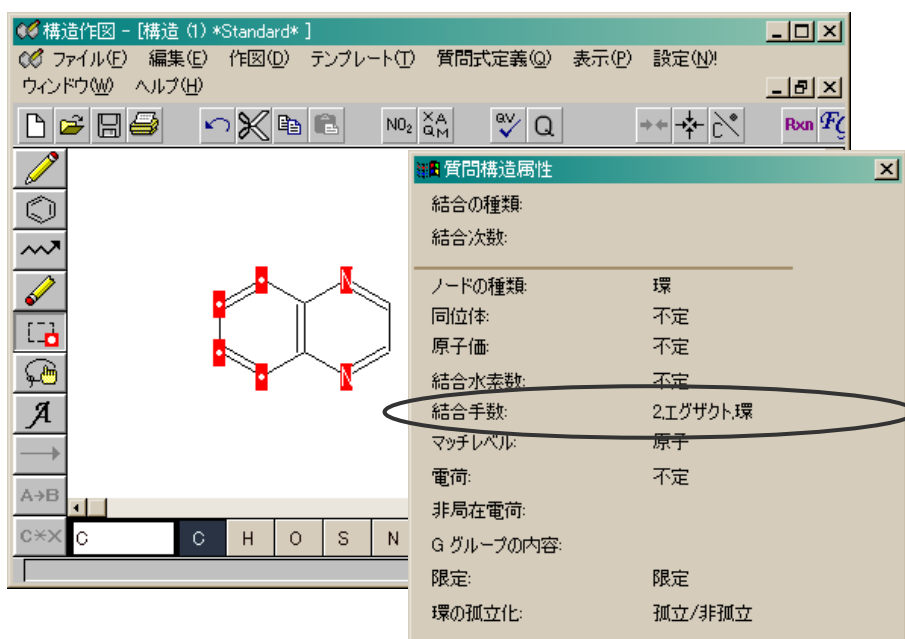
縮合環の特定の位置にのみさらに縮合を許容する。



・ 指定位置のみに環の縮合を許容

・ 指定位置以外のノードの結合非水素数を「ちょうど」「個数 2」「環」に指定

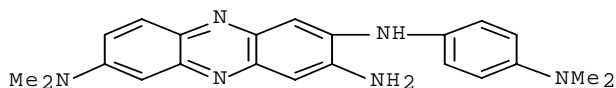
・ 作図方法



質問構造属性	
結合の種類:	
結合次数:	
ノードの種類:	環
同位体:	不定
原子価:	不定
結合水素数:	不定
結合手数:	2, エグザクト環
マッチレベル:	原子
電荷:	不定
非局在電荷:	
G グループの内容:	
限定:	限定
環の孤立化:	孤立/非孤立

・ 回答例

RN 13764-64-2 REGISTRY



SSS 検索の場合には以下の点に注意

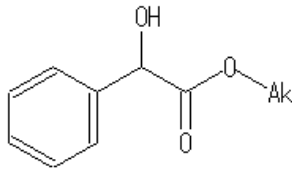
- 「環の孤立化」と「結合非水素数」を同時に指定することは避ける。
- 「環の孤立化」と「結合の属性 (環/鎖)」を同時に指定することは避ける。

(同時に指定する際は、両方の条件が矛盾しないように指定する)

E 検索のポイント・注意点

結合非水素数の利用

炭素鎖一般 (AK) を無置換の AK に指定する.



・ 末端のAkは置換されていない炭素鎖

・ Akの結合非水素数は「ちょうど」「個数1」

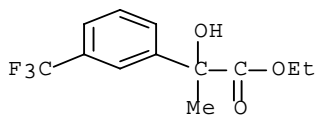
- 「結合非水素数」は Ak グループを単なる炭素鎖でなくアルキル, アルケニル, またはアルキニルに限定したいときに有効である.

・ 作図方法

質問構造属性	
結合の種類	
結合次数	
ノードの種類	鎖
同位体	不定
原子価	不定
結合水素数	不定
結合手数	1.エグザクト環/鎖
マッチレベル	クラス
電荷	
非局在電荷	
G グループの内容	
限定	限定
環の孤立化	

・ 回答例

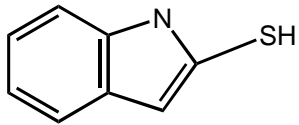
RN 1683-44-9 REGISTRY



E 検索のポイント・注意点

結合非水素数の利用

ショートカット (SH) を利用したときのノイズ (SO3) を省く。



- ・ 環はこれ以上縮合しない
- ・ 矢印の硫黄は -SHあるいは -S- になる



- ・ 硫黄は水素以外に最大 2 つのノードと結合する

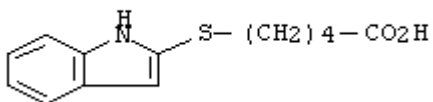
・ 作図方法

質問構造属性

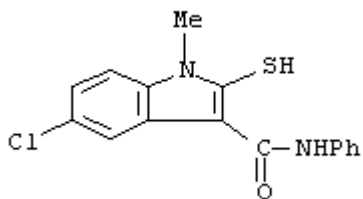
結合の種類:	
結合次数:	
ノードの種類:	鎖
同位体:	不定
原子価:	不定
結合水素数:	不定
結合手数:	2,最大環/鎖
マッチレベル:	クラス
電荷:	不定
非局在電荷:	
G グループの内容:	
限定:	限定
環の孤立化:	

・ 回答例

RN 187030-29-1 REGISTRY



RN 156135-69-2 REGISTRY



E 検索のポイント・注意点

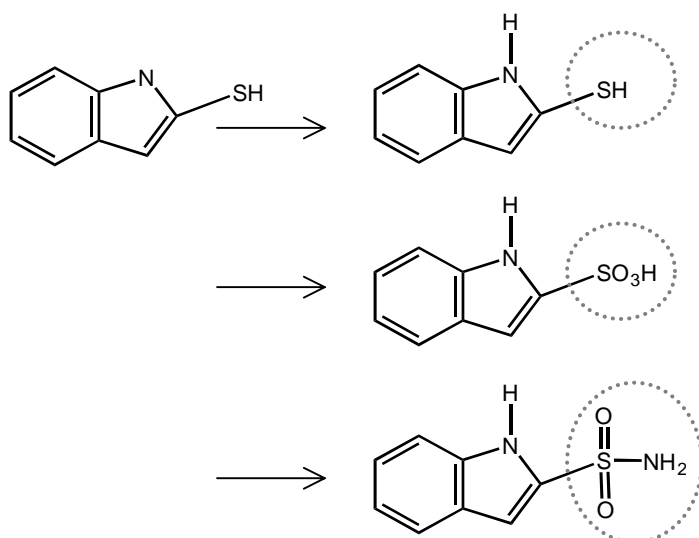
結合非水素数の利用



ショートカット記号 SH 使用上の注意

ショートカット記号「SH」のイオウ原子は価数が2価の化学物質のみならず、4価、6価の化学物質も検索対象となる。また、水素がSに直接結合していないSO₃Hのような置換基も検索される。

例:



- 「SO₃H」のような置換基が検索されてしまうのは、Sがノーマライズド結合上にあるため、水素が自由に移動し、SHの形も存在可能であるからである。
- SHのイオウ原子が2価のみの化学物質を検索する場合は、「結合非水素数」を指定する。

作図方法

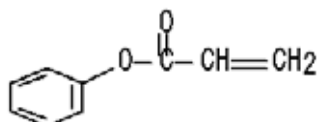
ショートカット記号に結合非水素数を指定することはできないので、イオウ原子(S)を作図して、「結合非水素数 ちょうど1」と指定する。

E 検索のポイント・注意点

定義の不完全な物質 (IDS) の検索

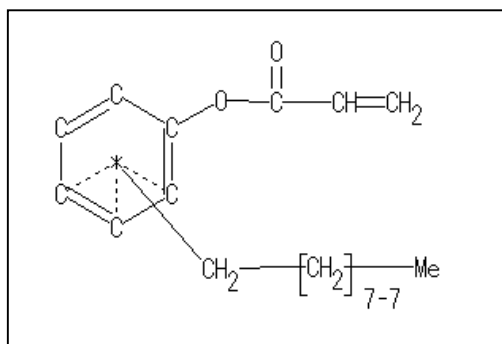
定義の不完全な物質 (クラス識別子 IDS) も回答に含めたいときは、別途作図し、検索する必要がある。

- 検索例 : 下記の構造検索で、置換基位置不明の IDS も回答に含める

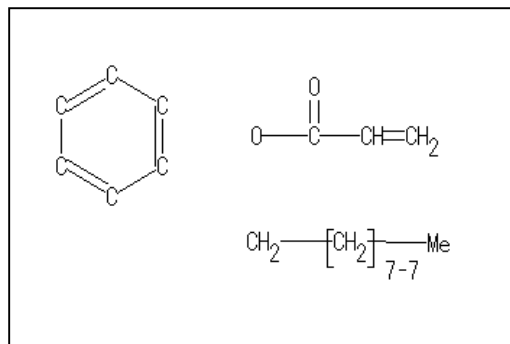


- $(CH_2)_8 - Me$ 基が o-, m-, p- 位いずれかに置換している
置換位置不明の物質も含める

- 作図



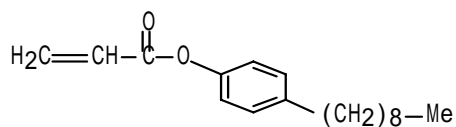
[構造質問式 A]
置換位置が明確な回答用



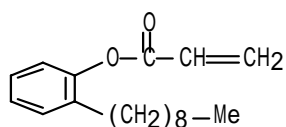
[構造質問式 B]
IDS を含めた回答用

- 回答例

RN 51494-07-6



RN 122908-46-7



RN 97145-30-7



D1- $(CH_2)_8-Me$

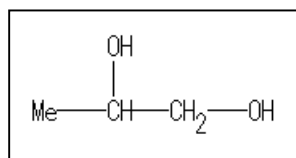
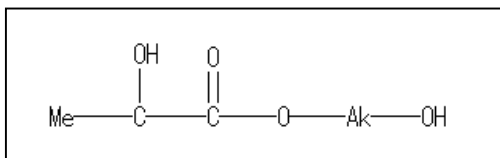
D1- $O-C(=O)-CH=CH_2$

E 検索のポイント・注意点

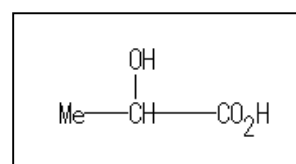
定義の不完全な物質 (IDS) の検索

- 検索例 : 乳酸のプロピレングリコールエステル
エステル化位置不明の IDS も回答に含める

作図



構造 L1



構造 L2

SCR 2073 * スクリーンセット L3
(* IDS 化合物 - エステル化位置不明ののスクリーン)

=> S (L1 AND L2) AND L3

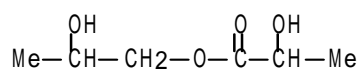
[構造質問式 A]
エステル化位置が明確な回答用

[構造質問式 B]
IDS の回答用

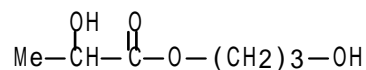


回答例

RN 14396-73-7



RN 79497-13-5



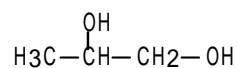
RN 118573-28-7

CN Propanoic acid, 2-hydroxy-, monoester
with 1,2-propanediol (9CI) (CA INDEX NAME)
CI IDS

CM 1

CRN 57-55-6

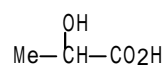
CMF C3 H8 O2



CM 2

CRN 50-21-5

CRN C3 H6 O3



E 検索のポイント・注意点

成分 CAS 登録番号検索の注意点

ある化学物質を一成分とする多成分物質を検索する際は、成分 CAS 登録番号による検索 (/CRN) で検索できる。

しかし、以下の特殊なケースに限っては、成分 CAS 登録番号による検索はできないので注意が必要である。

- ・ 単原子フラグメントは成分 CAS 登録番号では検索はできない。
 - 塩酸の CAS 登録番号で、塩酸塩を検索することはできない。
 - ナトリウムの CAS 登録番号で、ナトリウム塩を検索することはできない。
 - このような場合は、成分分子式による検索（たとえば "S CLH")を行う。
- ・ 構造データ（結合表）の入力されていない物質（手作業登録, Manually Registered Substance）と単原子フラグメントとの2成分物質は、その物質の成分 CAS 登録番号では検索できない。
 - セルロース (9004-34-6) のナトリウム塩は、"=> S 9004-34-6/CRN" で検索できない。
 - ただし、セルロースと単原子フラグメントではない物質との多成分物質（たとえばポリマー）は "=> S 9004-34-6/CRN" で検索できる。

* 単原子フラグメント (SAF : Single Atom Fragment) とは

多成分物質を構成する成分のうち、単一の原子のみから成る成分、または水素と単一の他の原子から成る成分を意味する。成分の前に付加された成分比を示す数字は、この定義には影響しない。

例： - C7 H6 O2 . **NA**
- C21 H29 O8 P . **2NA**
- C4 H6 O4 . **XK**
- C14 H22 N2 O . **CLH**
- C6 H8 N2 . **2CLH**
- C11 H9 O2 .
- C10 H19 N O9 **2H3N**

- ・ 成分 CAS 登録番号 (/CRN) の検索は、その CAS 登録番号を一成分とする多成分物質が検索される。その CAS 登録番号そのものは検索されない。従って、ある医薬品とその塩などを検索したい場合は、両方検索する必要がある。

例：カバサール (81409-90-7) とカバサールを一成分とする多成分物質

=> S 81409-90-7 OR 81409-90-7/CRN

E 検索のポイント・注意点

登録情報源 (SR)

SR フィールド (REGISTRY ファイル)

- ・ 1985 年半ば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。

=> E A/SR 25

**** START OF FIELD ****

E3	0	--> A/SR	
E4	76	AMERICAN SOCIETY OF HOSPITAL PHARMACISTS/SR	*1
E5	27954116	CA/SR	*3
E6	79991	CA INDEX GUIDE OR RING SYSTEMS HANDBOOK/SR	*4
E7	455134	CAOLD/SR	*3
E8	107543	CAS CLIENT SERVICES/SR	*2
E9	399940	CAS EARLY REGISTRATIONS/SR	
E10	36048	CHEMICAL CATALOG/SR	*5
E11	4785503	CHEMICAL LIBRARY/SR	*6
E12	898	ENVIRONMENT CANADA (EC)/SR	*1
E13	27647	EUROPEAN UNION (EU)/SR	*1
E14	45853599	GENBANK/SR	*1
E15	12	OTHER SOURCES/SR	*7
E16	2999	OTHER STN DATABASES/SR	*7
E17	84020	REACTION DATABASE/SR	*8
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 *1 以外の機関からの依頼に基づいて登録 (CAS 登録サービス)

*3 CPlus/CA あるいは CAOLD ファイルの索引時に登録

*4 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

*5 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)

*6 化学物質カタログに由来 (カタログに掲載されているが、流通量が少ない化合物)

および NCI (National Cancer Institute) 由来

*7 その他の STN ファイル由来

*8 INPI, InfoChem由来

E 検索のポイント・注意点

CAplus, CA ファイルに文献のない理由

CAplus/CA で文献数がゼロである理由

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。その物質を成分とする多成分物質が REGISTRY ファイルに存在すれば、クラス識別子 (CI) フィールドに COM と表示される。

CHEMCATS から収録された場合

- レコード登録源が化学物質カタログの場合は、登録情報源 (SR) フィールドに Chemical Catalogs あるいは Chemical Library と表記され、提供業者情報が表示され場合もある。

その化学物質が記載された文献の抄録、索引などがまだできていない場合

- 登録情報源 (SR) フィールドに CA と表示され、クラス識別子 (CI) フィールドに COM の表示はない場合は、近日中に文献情報が CAplus/CA ファイルに収録される。REGISTRY ファイルの入力から日が浅いレコードは、この可能性がある。

EPA (米国環境保護庁) の TSCA 台帳 (Toxic Substance Control Act Inventory), EINECS (ヨーロッパ既存化学物質台帳, European Inventory of Existing Chemical Substances), DSL (カナダ国内品物質台帳, Canadian Domestic Substances List), NDSL (カナダ非国内品物質台帳, Canadian Non-domestic Substances List)に収録された化学物質。

- CAS 登録番号所在 (LC) フィールドに TSCA, EINECS, DSL または NDSL の表示がある。

以外の機関の契約・依頼により、CAS 登録番号が付与された化学物質

- 以外の機関との契約 CAS 登録番号が付与された場合もある。また、政府機関等への届出の必要から、民間会社からの依頼により CAS 登録番号を付与する場合もある。この場合は、1985 年半ば以降のものについては登録情報源 (SR) フィールドに記載がある。

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。環母核はクラス識別子 (CI) フィールドに RPS と表示される。

ハンドブックから採録された場合

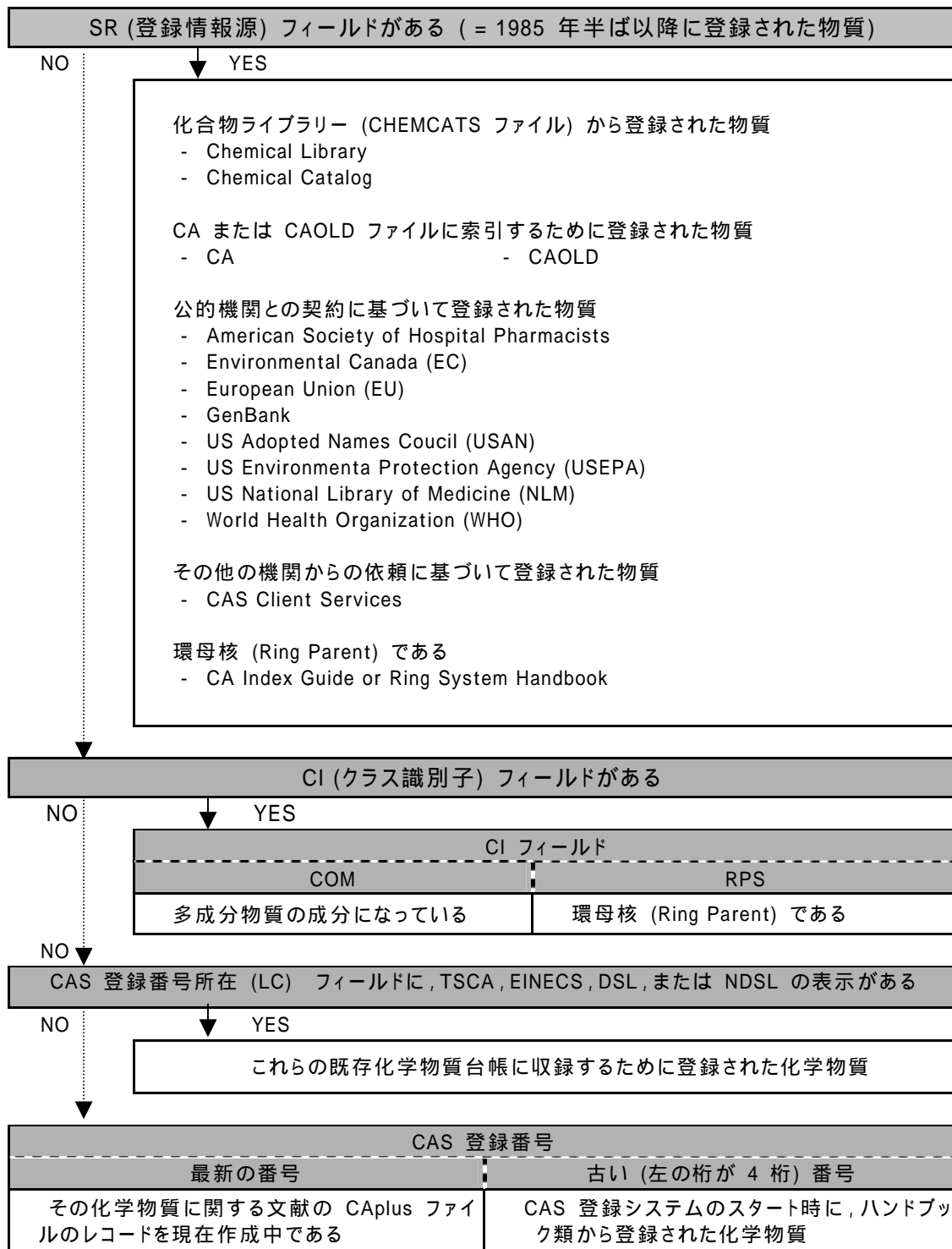
- CAS 登録システムがスタートしたときに、ハンドブック類から化学物質が登録された。それらのハンドブックには次のようなものがある。

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

E 検索のポイント・注意点

CAplus, CA ファイルに文献のない理由

CAplus/CA ファイルに文献がない場合の原因の探し方 (~ の詳細は前頁参照)



E 検索のポイント・注意点

CAplus, CA ファイルに文献のない理由

検索例 : 多成分物質の一成分になっている場合 () の対応

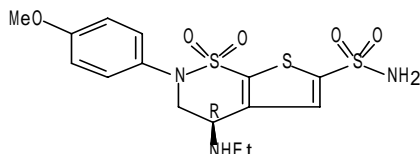
=> FILE REGISTRY

=> D

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 791034-79-2 REGISTRY
ED Entered STN: 30 Nov 2004
CN 2H-Thieno[3,2-e]-1,2-thiazine-6-sulfonamide, 4-(ethylamino)-3,4-dihydro-2-(4-methoxyphenyl)-, 1,1-dioxide, (R)- (9CI) (CA INDEX NAME)
FS STEREOSEARCH
MF C15 H19 N3 O5 S3
CI COM
SR CA

Reference なしでも SR が CA で, CI が COM ならば, 791034-79-2 を一成分とする多成分物質が存在し, 文献があるかもしれない

Absolute stereochemistry.



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

=> S 791034-79-2/CRN

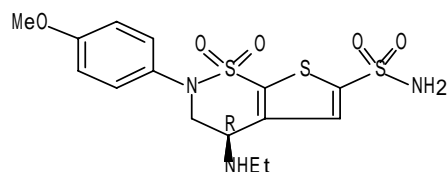
L2 1 791034-79-2/CRN

791034-79-2/CRN で多成分物質を検索

=> D IDERL

L2 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 150937-51-2 REGISTRY
ED Entered STN: 02 Nov 1993
CN 2H-Thieno[3,2-e]-1,2-thiazine-6-sulfonamide, 4-(ethylamino)-3,4-dihydro-2-(4-methoxyphenyl)-, 1,1-dioxide, monohydrochloride, (R)- (9CI) (CA INDEX NAME)
FS STEREOSEARCH
MF C15 H19 N3 O5 S3 . Cl H
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL
DT.CA CAplus document type: Patent
RL.P Roles from patents: BIOL (Biological study)
CRN (791034-79-2)

Absolute stereochemistry.



● HCl

塩酸塩 (150937-51-2) は CAplus/CA ファイル, USPATFULL ファイルに文献が収録されている. クロスオーバー検索すれば, 文献が得られる.

1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

E 検索のポイント・注意点

クロスオーバー検索

REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索方法

- REGISTRY ファイルからクロスオーバー検索する方法は3種類に大別される。回答数やクロスオーバー先のファイルの種類によって、最適な方法は異なる。

手法	クロスオーバーされる情報	料金
A. L 番号	CAS 登録番号 (RN, DR)	CAS FILES へは無料 (CASREACT は 1 回答セット (L 番号) あたり 3,660 円) その他のファイルへは 1 回答 (レコード) あたり 3 円
B. SELECT CHEM	CAS 登録番号 (RN, DR) + 物質完全名称 (CN, IN)	SELECT 料金は 1 レコードあたり 43 円 + クロスオーバー先のファイルの検索語料
C. TRANSFER CHEM	CAS 登録番号 (RN, DR) + 物質完全名称 (CN, IN)	TRANSFER 料金は 1 回答セット (L 番号) あたり 1,400 円 + クロスオーバー先のファイルの検索語料

REGISTRY CAS FILES のクロスオーバー検索 : 「A. L 番号」のクロスオーバー検索」が有効

- CAS FILES では化学物質に関する情報を CAS 登録番号で索引しているため、方法 A で検索すると網羅性が高く、料金面でも経済的である。
- ただし、CASREACT ファイルへのクロスオーバー料金は 3,660 円 (L 番号あたり) である。

REGISTRY CAS FILES 以外のファイルへのクロスオーバー検索

: クロスオーバー先ファイルの CAS 登録番号の付与率と回答数によって方法を選択

- CAS 登録番号の付与率が高いファイルは、「A. L 番号のクロスオーバー検索」が有効。
- CAS 登録番号の付与率が低いファイル
 - REGISTRY ファイルの回答数が少ない場合は、「B. SELECT CHEM SEARCH によるクロスオーバー検索」が有効。
 - REGISTRY ファイルの回答数が多い場合は、「C. TRANSFER CHEM によるクロスオーバー検索」が有効。

E 検索のポイント・注意点

クロスオーバー検索

REGISTRY ファイルから L 番号 (CAS 登録番号) をクロスオーバー検索する際のシステム制限値

内容	システム制限
REGISTRY CAplus/CA	300,000 件
REGISTRY CAOLD, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST	30,000 件
REGISTRY 上記以外のファイル	10,000 件

注) REGISTRY の回答件数がシステム制限値を超える場合は、複数の回答セット (L 番号) に分割してからクロスオーバー検索を行う。

SELECT コマンドのシステム制限値

内容	システム制限
SELECT で抽出可能なターム数	999 ターム*

* 抽出した E 番号の検索は 300 ターム程度を目安に行う

TRANSFER コマンドのシステム制限値

内容	システム制限
TRANSFER でクロスオーバー可能なターム数	50,000 ターム*

* 1 レコードあたり 1000 タームまで

APPENDIX

近接演算子

CAS 命名法の概要

周期律グループ (/PG)

構造フィルタ (STN Expree / STN on the Web)

APPENDIX

近接演算子

■ (L) 演算子

- 利用可能なデータ : 基本索引中の名称セグメントなどの名称関連の検索フィールド
- 機能 : **同一名称内**
- 検索フィールドによっては, システムにより AND に自動変換される.
- (NOTL) 演算子によって, 特定の名称セグメントが存在するものを削除できる.

■ (P) 演算子

- 利用可能なデータ : 環データ, 分子式関連の検索フィールド
- 機能 : **同一成分内**
- 物質全体に対するデータである以下の検索フィールドに対して (P) を使うと, システムによって, 自動的に AND に変換される.

分子式 : /MF, /ELS.SUB, 名称 : /CN, /HP
環データ : /NR, /NRS その他 : /NC

(注) 異なる種類の検索フィールド(環データと分子式関連データ)を (P) で検索すると 0 件になる.

■ (S) 演算子

- 利用可能なデータ : 以下の環データ検索フィールド
- /SZ, /SZS, /EA, /EAS, /ES, /ESS, /RID, /RF, /RELF, /REL,
/RELC, /RATC
- 機能 : **同一環系内**
 - 以下の検索フィールドに対して (S) を使うと, 自動的に AND に変換される.

/NRS, /GNRS, /NR, /GNR, /NRRS, /CN, /HP

(注) 異なる種類の検索フィールド(環データと分子式関連データ)を (S) で検索すると 0 件になる.

APPENDIX

CAS 命名法の概要

■ 主官能基の優先順位 ① > ② > ③ > ④ > ⑤ > ⑥ > ⑦ > ⑧ > ⑨ > ⑩ > ⑪

- | | | |
|-----------|---------|-------------|
| ① オニウム化合物 | ⑤ ニトリル | ⑨ ヒドロパーオキシド |
| ② 酸 | ⑥ アルデヒド | ⑩ アミン |
| ③ 酸ハロゲン化物 | ⑦ ケトン | ⑪ イミン |
| ④ アミド | ⑧ アルコール | |

- 主官能基が複数あり、見出し語母核が決まらないときは、主官能基の数、ヘテロ原子の存在や種類、環と鎖などに対する優先順位によって決定する。

■ 見出し語母核は /HP フィールドで検索できる。

例 : Benzeneacetic acid, 2-amino-3-chloro-
 ↑ ↑
 見出し語母核 置換基

- Benzeneacetic acid を見出し語母核とする化合物は以下のように検索する。

```
=> E BENZENEACETIC ACID/HP 5
E1          1  BENZENEACETAMIDE-N, a, a-D3/HP
E2          2  BENZENEACETAMIDE-N-D/HP
E3      91422 --> BENZENEACETIC ACID/HP
E4          2  BENZENEACETIC ACID-1802/HP
E5          7  BENZENEACETIC ACID-D/HP
```

```
=> S E3
L1          91422 "BENZENEACETIC ACID"/HP
```

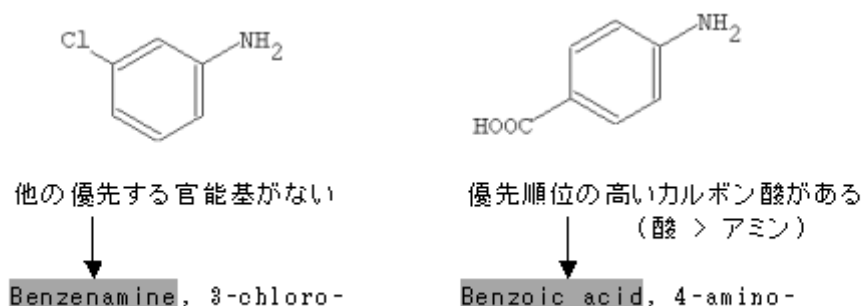
```
=> D SCAN IN
```

```
L1 91422 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2005 ACS on STN
IN Benzeneacetic acid, 4-nitro-, [(5-chloro-8-hydroxy-7-
   quinolinyl)methylene]hydrazide (9CI)
```

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

- (注) 同じ置換基を持つ化合物でも、その他の置換基の種類によって見出し語母核が変化するので、検索の際は考慮する必要がある。

例 : ベンゼン環にアミノ基の置換した化合物の CA 索引名の見出し語母核



APPENDIX

周期律グループ (／PG)

■ 周期律グループは /PG (Periodic Group) フィールドで検索する.

- => S A1/PG ← アルカリ金属を含むすべての物質
- => S A7/PG ← ハロゲンを含むすべての物質

■ 周期律グループ表 (分類には炭素と水素は含まれていない)

												A8							
												He 2							
A1 A2												A3 A4		A5 A6 A7					
Li Be 3 4												B 5		N 7 O 8 F 9		Ne 10			
Na Mg 11 12		B3 B4 B5 B6 B7		← B8 →						B1		Al 13 Si 14		P 15 S 16 Cl 17		Ar 18			
K Ca 19 20		B2											Zn 30 Ga 31		Ge 32 As 33		Se 34 Br 35		Kr 36
Rb Sr 37 38		T1	Sc 21 Ti 22 V 23 Cr 24 Mn 25 Fe 26 Co 27 Ni 28 Cu 29										Cd 48 In 49		Sn 50 Sb 51		Te 52 I 53		Xe 54
Cs Ba 55 56		T2	Y 39 Zr 40 Nb 41 Mo 42 Tc 43 Ru 44 Rh 45 Pd 46 Ag 47										Hg 80 Tl 81		Pb 82 Bi 83		Po 84 At 85		Rn 86
Fr Ra 87 88		T3	La 57 Hf 72 Ta 73 W 74 Re 75 Os 76 Ir 77 Pt 79 Au 79																
			Ac 89																

LNTH	La 57 Ce 58 Pr 59 Nd 60 Pm 61 Sm 62 Eu 63 Gd 64 Tb 65 Dy 66 Ho 67 Er 68 Tm 69 Yb 70 Lu 71													
ACTH	Ac 89 Th 90 Pa 91 U 92 Np 93 Pu 94 Am 95 Cm 96 Bk 97 Cf 98 Es 99 Fm 100 Md 101 No 102 Lr 103													
SHEL	104													

APPENDIX

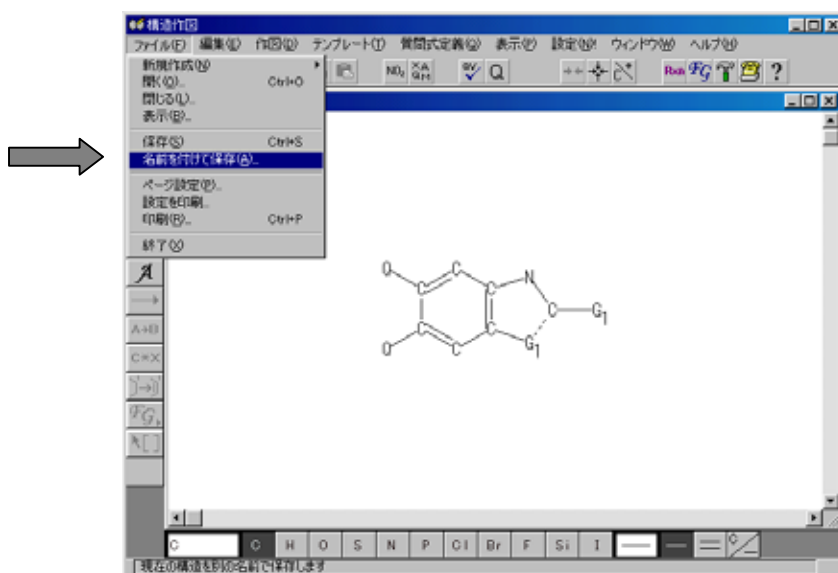
構造フィルター (STN Express / STN on the Web)

■ スクリーンの利用方法

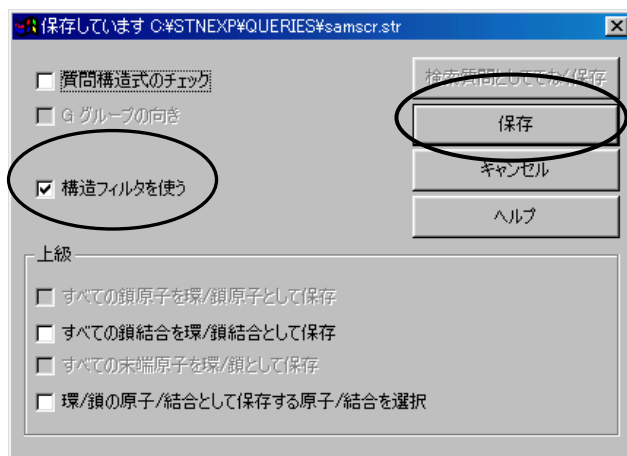
- スクリーン番号を構造質問式に含めて検索する。
(STN Express や STN on the Web の構造フィルタ利用)
- 別途スクリーンコマンド (SCREEN) でスクリーンセットを作成し、構造の L 番号と組み合わせて検索する。

■ STN Express (STN on the Web) の構造フィルタを利用する方法

- ① 作図し、ファイルメニューから「名前を付けて保存」を選ぶ。



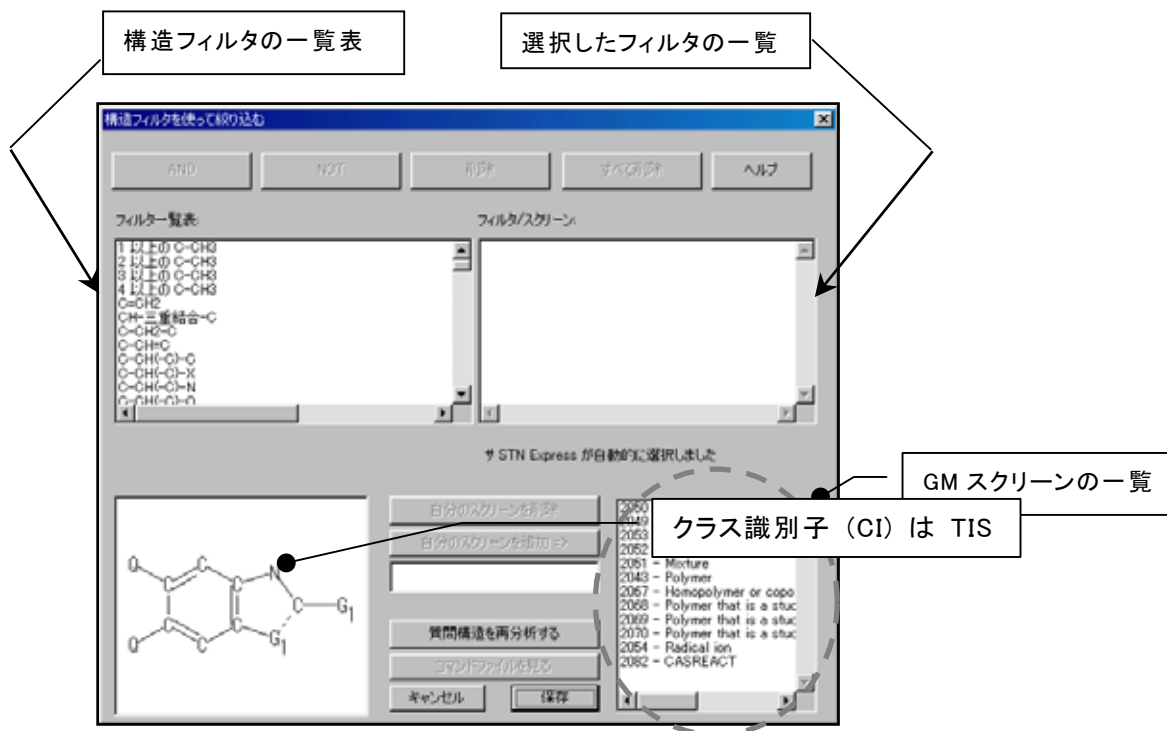
- ② ファイル名をつけて「保存」をクリックすると、「保存しています」ダイアログボックスが表示される。画面中央の「構造フィルタを使う」にチェックを入れ、再度「保存」をクリックする。



APPENDIX

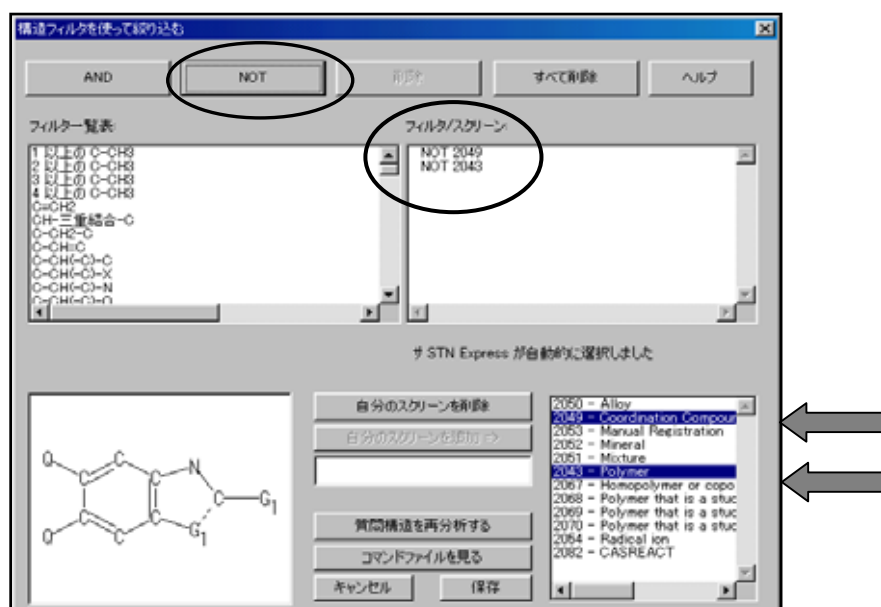
構造フィルター (STN Express / STN on the Web)

- ③ 「構造フィルタを使って絞り込む」ダイアログボックスが表示される。



- ④ スクリーンを選択し、構造に加えたいときは AND、構造から除きたいときは NOT をクリックする。

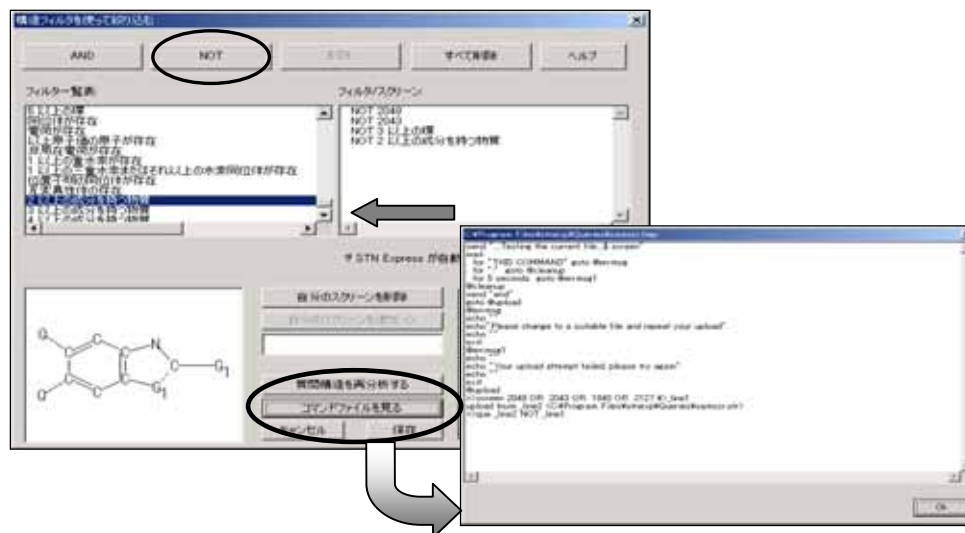
ここでは、「2049 - Coordination Compound」と「2043 - Polymer」を選択し、NOT をクリックする。(コントロールキーを押しながらクリックすると複数を選択することができる。)
 フィルタ/スクリーン:ボックスに、選択したスクリーン番号が表示される。



APPENDIX

構造フィルター (STN Express / STN on the Web)

- ⑤ さらにここでは、「3 以上の環（最小環の数が 3 以上）」と「2 以上の成分を持つ物質」を NOT し、最後に「保存」をクリックする。「保存」をクリックする前に「コマンドファイルを見る」をクリックし質問式を確認することができる。



- ⑥ STN に接続し、REGISTRY ファイルに入る。保存した構造質問式をアップロードする。「構造ファイル」ダイアログボックスで、構造質問式を選択し、「開く」をクリックする。ここで、「フィルタを使う」チェックボックスにチェックが付いていることを必ず確認する。



STN on the Web で構造フィルタを使用する場合

STN on the Web で構造フィルタの GM スクリーン番号を使用するときは、PC 内に filter.flc ファイルが別途必要。

入手方法 : STN Express からコピーする (C:\Program Files\stnexp\Queries\filter.flc)

保存先 : C:\stnweb\Queries

APPENDIX

構造フィルター (STN Express / STN on the Web)

⑦ 自動的に、スクリーンセットと構造がアップロードされ、QUERY (L5) が作成される。

```
=> ....Testing the current file.... screen
ENTER SCREEN EXPRESSION OR (END):end
=> screen 2049 OR 2043 OR 1840 OR 2127
L3 SCREEN CREATED
=>
Uploading C:\STNEXP\Queries\REGIII\samscr.str
L4 STRUCTURE UPLOADED
=> que L4 NOT L3
L5 QUE L4 NOT L3
=> S L5
SAMPLE SEARCH INITIATED 14:36:17 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 2398 TO ITERATE
```

スクリーンと構造式がアップロードされ、QUERY (L5) が自動作成される

L5 でサンプル検索

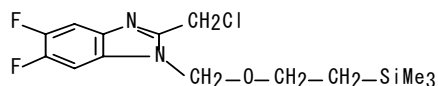
```
83.4% PROCESSED 2000 ITERATIONS 50 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01
```

```
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
                        BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 45023 TO 50897
PROJECTED ANSWERS: 1823 TO 3163
```

L6 50 SEA SSS SAM L4 NOT L3

=> D SCAN

```
L6 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN 1H-Benzimidazole, 2-(chloromethyl)-5,6-difluoro-1-[[2-(trimethylsilyl)ethoxy]methyl]- (9CI)
MF C14 H19 Cl F2 N2 O Si
```



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

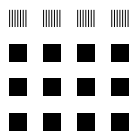
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

```
=> S L5 FULL
FULL SEARCH INITIATED 14:37:02 FILE 'REGISTRY'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 46917 TO ITERATE
```

L5 でフルファイル検索

```
100.0% PROCESSED 46917 ITERATIONS 2558 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01
```

L7 2558 SEA SSS FUL L4 NOT L3



JAICI 社団法人 化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込 6-25-4 中居ビル
ヘルプデスク TEL:0120-003-462 E-mail:helpdesk@jaici.or.jp
サービス全般 TEL:0120-151-462 E-mail:cas-stn@jaici.or.jp
FAX:03-5978-3600 <http://www.jaici.or.jp/>