



## ポリマーの登録ルールと検索法

**JAICI**  
化学情報協会

1

SciFinder にポリマーは  
どのように登録されているの？



ポリマーの検索方法は？

## 本日の内容

- SciFinder のポリマーの収録
- ポリマーの検索方法
- 検索例
- 文献中のポリマーの登録確認方法

## SciFinder に収録されている物質

収録件数	約 1 億 7,000 万件
収録物質	有機化合物, 無機化合物, <b>ポリマー</b> , 核酸, 素粒子など

ポリマーの収録は  
約 **170 万件!**

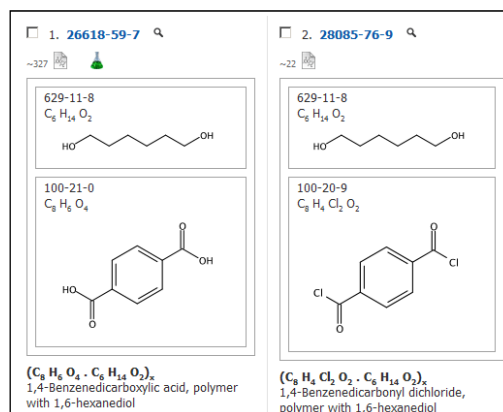
※ 2015 年 11 月現在

- SciFinder でのポリマーの定義
  - 重合度が **11 以上**の物質
  - 重合度不明の物質
  - 重合後の構造が不明なオリゴマー

## ポリマーの登録方針 (1)

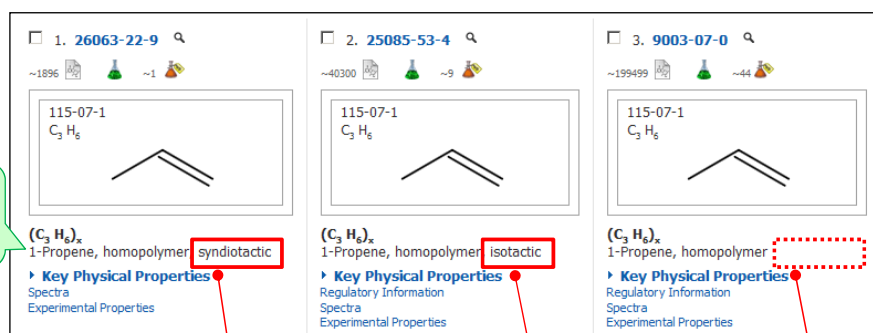
- 大部分のポリマーは、主鎖を構成する「原料モノマー」に基づいて登録

- 原料が異なれば、ポリマーの構造が同じであっても別の登録
- 重合開始剤・停止剤、触媒などは除外
- 重合条件や分子量の違いは考慮しない



## ポリマーの登録方針 (2)

- 同じ原料モノマーでも異なるポリマーとして登録される場合がある
- 立体規則性の異なるポリマー
  - イソタクチック, シンジオタクチック, アタクチックを区別して登録



名称で区別  
できる

シンジオタクチック

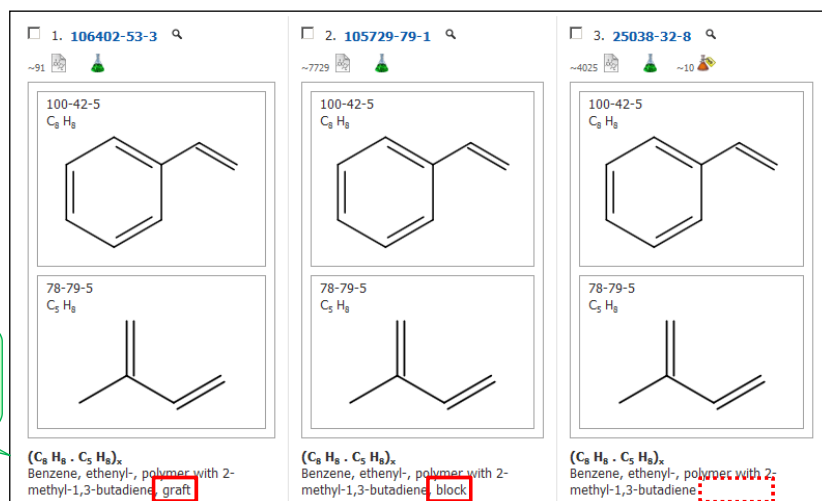
イソタクチック

アタクチック

## ポリマーの登録方針 (2)

### – 重合形態の異なるポリマー –

- ブロック, グラフト, 交互などの構造的特徴のあるポリマーは区別して登録



名称で区別  
できる

**JAICI**  
化学情報協会

グラフト共重合体

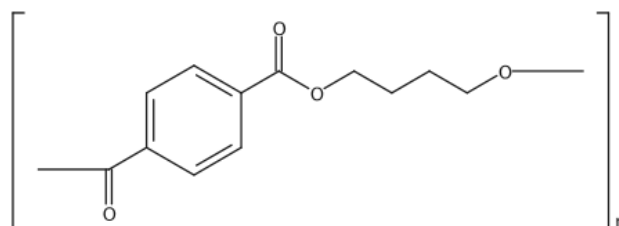
ブロック共重合体

ランダム共重合体

## ポリマーの登録方針 (3)

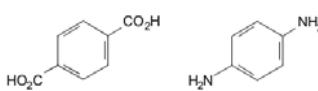
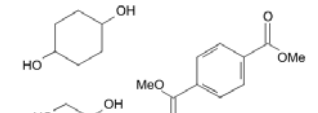
- **SRU (Structural Repeating Unit)**  
ポリマー

- 規則的な構造の繰り返しで表すことができる縮合系ポリマーは、繰り返し単位でも登録される



**JAICI**  
化学情報協会

# ポリマーの種類と登録形式



ポリマーの種類	モノマー単位	SRU	例
付加重合ポリマー	○	×	ポリプロピレン ポリスチレン ブタジエン・スチレンのコポリマー
縮合系ポリマー	・ 縮合ホモポリマー ・ 2種のモノマーから成る縮合ポリマー (2種とも対称)	○	 上記2種から成るポリマー
	・ 5種の汎用ポリマー	△	Nylon 6, Nylon 66 PEG (ポリエチレングリコール) PPG (ポリプロピレングリコール) PET (ポリエチレンテレフタレート)
	・ 2種のモノマーから成る縮合ポリマー (少なくとも1種は非対称) ・ 3種以上のモノマーから成る縮合ポリマー	○	 上記3種から成るポリマー

# ポリマーの例 (付加重合系ポリマー)

## ・ ホモポリマー

ポリマーのCAS登録番号

CAS Registry Number 9011-14-7

~122,911  ~159 

**(C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>)<sub>x</sub>**

2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, homopolymer  
Polymer

**分子式 :  
(モノマーの分子式)<sub>x</sub>**

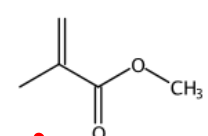
**Polymer Class**  
Polyacrylic  
:

**Other Names**  
Methacrylic acid methyl ester, polymers (8CI)  
Methacrylic acid, Me ester, homopolymer (6CI)

01DH-LE-P  
1000L  
1000L (methacrylic polymer)

[View more...](#)

80-62-6  
C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>



**モノマーの情報**

- ・ CAS登録番号
- ・ 分子式
- ・ 構造図

# ポリマーの例 (付加重合系ポリマー)

## コポリマー

ポリマーのCAS登録番号

CAS Registry Number 9011-87-4

~3,772

$(C_5 H_8 O_2 \cdot C_4 H_6 O_2)_x$

2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with methyl 2-propenoate

Polymer

分子式 :  
(モノマーの分子式・モノマーの分子式) $_x$

Polymer C  
Polyacrylic  
:

Other Names  
Acrylic acid, methyl ester, polymer with Me methacrylate (6CI)  
Methacrylic acid methyl ester, polymer with methyl acrylate (8CI)  
2-Propenoic acid, methyl ester, polymer with methyl 2-methyl-2-propenoate (9CI)  
6N  
80N  
[View more...](#)

96-33-3  
 $C_4 H_6 O_2$

80-62-6  
 $C_5 H_8 O_2$

モノマーの情報  
・CAS登録番号  
・分子式  
・構造図

# ポリマーの例 (縮合系ポリマー)

## 原料モノマーに基づく登録

ポリマーのCAS登録番号

CAS Registry Number 26062-94-2

~24,419

$(C_8 H_6 O_4 \cdot C_4 H_{10} O_2)_x$

1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-butanediol

Polymer

分子式 :  
(モノマーの分子式・モノマーの分子式) $_x$

Polymer  
Polyester

Other Names  
Terephthalic acid, polyester with 1,4-butanediol (8CI)  
1,4-Butanediol, polyester with terephthalic acid (8CI)  
1,4-Butanediol, polymer with 1,4-benzenedicarboxylic acid (9CI)  
1,4-Benzenedicarboxylic acid-1,4-butanediol copolymer  
1,4-Butanediol-terephthalate copolymer  
[View more...](#)

110-63-4  
 $C_4 H_{10} O_2$

100-21-0  
 $C_8 H_6 O_4$

モノマーの情報  
・CAS登録番号  
・分子式  
・構造図

## ポリマーの例 (縮合系ポリマー)

### • 繰り返し単位で登録 (SRU)

ポリマーの CAS 登録番号

CAS Registry Number 24968-12-5

~27,151 ~3

**(C<sub>12</sub>H<sub>12</sub>O<sub>4</sub>)<sub>n</sub>**

Poly(oxy-1,4-butanediolyloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)

Polymer

**Polymer Class Terms**  
Polyester

分子式 :  
(繰り返し単位の分子式)n

**Other Names**  
Poly(oxytetramethyleneoxyterephthaloyl) (8CI)  
1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate copolymer, SRU  
1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate polymer, SRU  
1,4-Butanediol-divinyl terephthalate copolymer, SRU  
1,4-Butanediol-monomethyl terephthalate copolymer, SRU  
View more...

繰り返し単位の構造

SciFinder では SRU ポリマーの構造検索は難しい。  
登録されている通りの繰り返し構造を作図しないとヒットしない

## その他のポリマー

### • 商品名ポリマー

- 構造が不明で商品名そのものを CA 索引名として登録

1. CAS Registry Number 718635-98-4

~5

Unspecified

**Diaformer Z 632**

Polymer, Manual Registration

### • アスタリスク付きポリマー

- 通常は登録されないタイプの物質であるが例外的に登録
- CAS 登録番号に \* が付く

1. CAS Registry Number 64742-16-1 \*

~0 ~8

Unspecified

Petroleum resins

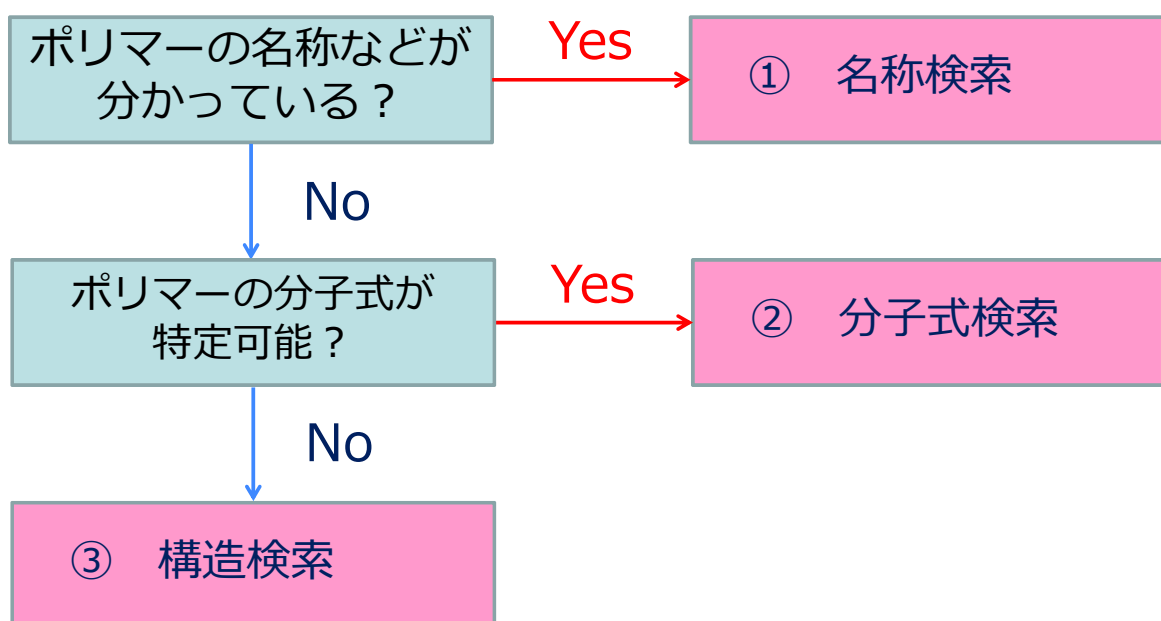
Manual Registration, Concept

**Polymer Class Terms**  
Manual registration

## 本日の内容

- SciFinder のポリマーの収録
- **ポリマーの検索方法**
- 検索例
- 文献中のポリマーの登録確認方法

## ポリマー検索の手順





# 名称検索

名称を入力する  
(CAS 登録番号でも可)

Enter one per line.  
Examples:  
50-00-0  
999815  
Acetaminophen

Search

1. 9003-07-0  
~199413  
115-07-1  
 $C_3H_6$

$(C_3H_6)_x$   
1-Propene, homopolymer

Key Physical Properties  
Regulatory Information  
Spectra  
Experimental Properties

名前よりヒット

# 分子式検索

モノマー単位ポリマーの分子式  
・各モノマーをピリオド(.)で区切る  
・分子式全体をカッコでくくり, Xをつける  
※構成モノマーがすべて特定できる場合に検索可

(C5H8O2.C4H6O2)x

Examples:  
H4SiO4  
(C3H6O.C2H4O)x

Search

Refine by:  
 Chemical Structure  
 Isotope-Containing  
 Metal-Containing  
 Commercial Availability  
 Property Availability  
 Property Value  
 Reference Availability  
 Atom Attachment

Structure Editor:  
Java Non-Java

異性体が多い場合は,  
構造で絞り込む

Sort by: CAS Registry Number

0 of 83 Substances Selected

1. 1417785-78-4  
111-30-8  
 $C_5H_8O_2$

2. 1334338-11-2  
140-88-5  
 $C_5H_8O_2$

96-33-3  
 $C_4H_6O_2$

96-33-3  
 $C_4H_6O_2$

$(C_5H_8O_2 \cdot C_4H_6O_2)_x$   
2-Propenoic acid, methyl ester, polymer with pentanedial

$(C_5H_8O_2 \cdot C_4H_6O_2)_x$   
2-Propenoic acid, ethyl ester, polymer with methyl 2-propenoate, diblock

分子式よりヒット

# 構造検索

複数のモノマーを指定する場合は各モノマーを離して作図する

完全一致検索 (Exact search)  
構造が一致するモノマーのみを検索  
部分構造検索 (Substructure search)  
作図したモノマーの空いている場所に置換基がついたモノマーも検索

Single component にチェックを入れると、作図した成分のみに限定できる。チェックを入れないと別のモノマーも含まれる

ポリマーに限定

# 構造検索

完全一致検索

各モノマーを離して作図

ポリマーに限定

作図していない成分を含むポリマーもヒット

(C, H, O, C, H, O, C, H, C, H, N, C, H, Cl),  
2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with 1,3-butadiene,  
chloroethene and ethyl 2-propenoate, graft

(C, H, O, C, H, O, C, H, C, H, N, C, H, Cl),  
2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with 1,3-butadiene,  
2-propenoate, chloroethene and 2-propenoic ethyle, graft

## 構造検索

Structure Editor: Java Non-Java

Search Type:  Exact Structure  Substructure  Similarity

Show precision analysis

ChemDraw  
Launch a SciFinder substance or reaction search directly from ChemBioDraw Ultra 14. [Learn More](#)

Import CXF

**Search**

Advanced Search  Always Show

Characteristics  Single component  Commercially available  Included in references

Classes  Alloys  Coordination compounds  Incompletely defined  **Polymers**  Mixtures  Organics, and others not listed

作図した成分のみに限定

作図した成分のみを含むポリマーがヒット

9 of 3 Substances Selected

1. 1054476-02-6  
106-99-0  
C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>  
75-01-4  
C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>Cl

2. 108434-31-7  
106-99-0  
C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>  
75-01-4  
C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>Cl

3. 25822-14-4  
106-99-0  
C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>  
75-01-4  
C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>Cl

(C<sub>4</sub>H<sub>6</sub> - C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>Cl), 1,2-Butadiene, polymer with chloroethene, black

(C<sub>4</sub>H<sub>6</sub> - C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>Cl), 1,3-Butadiene, polymer with chloroethene, graft (GCI)

(C<sub>4</sub>H<sub>6</sub> - C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>Cl), 1,2-Butadiene, polymer with chloroethene

## 本日の内容

- SciFinder のポリマーの収録
- ポリマーの検索方法
- 検索例
- 文献中のポリマーの登録確認方法

## 検索例

- スライド 16～20 の検索をデモで紹介します

画面を切り替えますので  
しばらくお待ちください

## 本日の内容

- SciFinder のポリマーの収録
- ポリマーの検索方法
- 検索例
- 文献中のポリマーの登録確認方法

# 論文や特許中に記載されているポリマーが SciFinder にどのように登録されているか調べるには？

→ 文献のレコード中の索引を確認する

WO 2015/093394 23 PCT/JP2014/08262

試料濃度：30% (w/v)  
測定溶媒：DMSO-d6  
積算回数：4000回

[0055] [エポキシアクリレートの合成例]  
合成例1  
攪拌機、温度計及び冷却管を備えた4つ口のフラスコに、液状ビスフェノールA型エポキシ樹脂(DIC株式会社製「エピクロン850、エポキシ当量188g/eq.；以下、「液状BPA型エポキシ樹脂」と略記する。)435、1質量部、アクリル酸163、6質量部、及びメトキノン(重合禁止剤；以下、「MQ」と略記する。)0、1質量部を仕込み、100℃に昇温した後、トリエチルアミン(触媒；以下、「TEA」と略記する。)1、2質量部を加えた。100℃で15時間反応を行い、エポキシ当量が18、

液状ビスフェノール A 型エポキシ樹脂はどのように登録されている？

**Active energy ray-curable offset ink composition and printed article using same**

By: Wakahara, Keisuke; Matsuo, Ikuo; Nanbu, Tomoaki; Yoshizawa, Masakazu; Deguchi, Yoshinobu; Ichinose, Eiju; Yamaguchi, Koichi  
Assignee: DIC Corporation, Japan; DIC Graphics Corporation

An active energy ray-curable printing ink compn. exhibits high curability in addn. to having offset printing capability and excellent emulsification capability. The ink compn. comprises: an epoxy acrylate compd. (A) that is obtained by reacting a bisphenol A epoxy resin with acrylic acid, in which the ratio of *o*-glycol groups to the total no. of terminal structure sites that are caused by or that originate in the glycidyl groups of the bisphenol A epoxy resin is 5 mol% or less according to the results of 13C-NMR measurement, and that constitutes 10-60 mass% of the total amt. of the compn.; and a polymerizable acrylate monomer (B) that has a viscosity in the range of 40-200 millipascal seconds (mPa·s) at 25 °C, that has a mol. wt. of 250-500 per mol. thereof, that comprises two or more acrylic groups, and that constitutes 5-40 mass% of the compn. Thus, an ink compn. contg. 44.9% epoxy acrylate (o glycol terminal group content 1 mol %), prepnd. by reacting 435.1 parts bisphenol A epoxy resin (Epiclon 850) and 163.6 parts acrylic acid, 23% ethoxylated trimethylpropane triacrylate (Miramer M 310; viscosity at 25° 60 mPa·s), 1% polyolefin wax (S 381-N1), 20% pigment, 4% extender pigment, and 7% photopolymer. initiator, was prepnd. (as above).

**Patent Information**

Patent No.	Kind	Language	Date	Application No.	Date
WO 2015093394	PatentPak	AI	Jun 25, 2015	WO 2014-3P8262	Dec 11, 2014

**Priority Application**

JP 2013-262461	A	Dec 19, 2013
----------------	---	--------------

**Indexing**

Coatings, Inks, and Related Products (Section42-12)

**Concepts**

Epoxy resins  
acrylic ink binder; active energy ray-curable offset ink contg. bisphenol A epoxy acrylate and polyfunctional acrylate  
Industrial manufacture; Polymer in formulation; Technical or engineered material use; Preparation; Uses

**Substances**

55816-57-0P Epiclon 850 acrylate Page 24 in PatentPak  
active energy ray-curable offset ink contg. acrylate and polyfunctional acrylate  
Industrial manufacture; Reactant; Preparation

**QUICK LINKS**  
0 Tags, 0 Comments

**PATENT INFORMATION**  
Jun 25, 2015  
WO 2015093394  
AI

**APPLICATION**  
Dec 11, 2014  
WO 2014-3P8262

**PRIORITY**  
Dec 19, 2013  
JP 2013-262461

**SOURCE**  
PCT Int. Appl.  
39pp.  
Patent  
2015  
CODEN:PDODD2

**ACCESSION NUMBER**  
2015:1047792  
CAN163:105607  
CAPLUS

特許番号で検索

目的のポリマーのアクリル酸エステルが索引されていた

CAS Registry Number 55816-57-0

C15H14O2.C3H5ClO2.xC9H8O2  
Phenol, 4,4'-(1-methylethylene)bis-, polymer with 2-(chloromethyl)oxirane, 2-propanoate  
Polymer Class Terms  
Epoxy resin  
Other Names  
Phenol, 4,4'-(1-methylethylene)bis-, polymer with (chloromethyl)oxirane, 2-propanoate (9CI)  
Oxirane, (chloromethyl)-, polymer with 4,4'-(1-methylethylene)bis(phenol), 2-propanoate (9CI)  
2,2-Bis(4-hydroxyphenyl)propane-epichlorohydrin copolymer acrylate  
AED 30  
AED 60  
View more...

79-10-7  
C3H4O2

25068-38-6  
C15H14O2.C3H5ClO2  
106-89-8  
C3H5ClO

80-05-7  
C15H14O2

## まとめ

- SciFinder に収録されているポリマーは原料モノマーに基づいて登録されている
- ポリマーの基本的な検索方法
  - 名称検索
  - 分子式検索
  - 構造検索



## - 次回のインターネットセミナー -

開催日	内容
2016 年 1 月 20 日 (水)	効率的に構造検索！ ～作図ツールを使いこなそう

ご参加お待ちしております！