

**CAS STNext**®

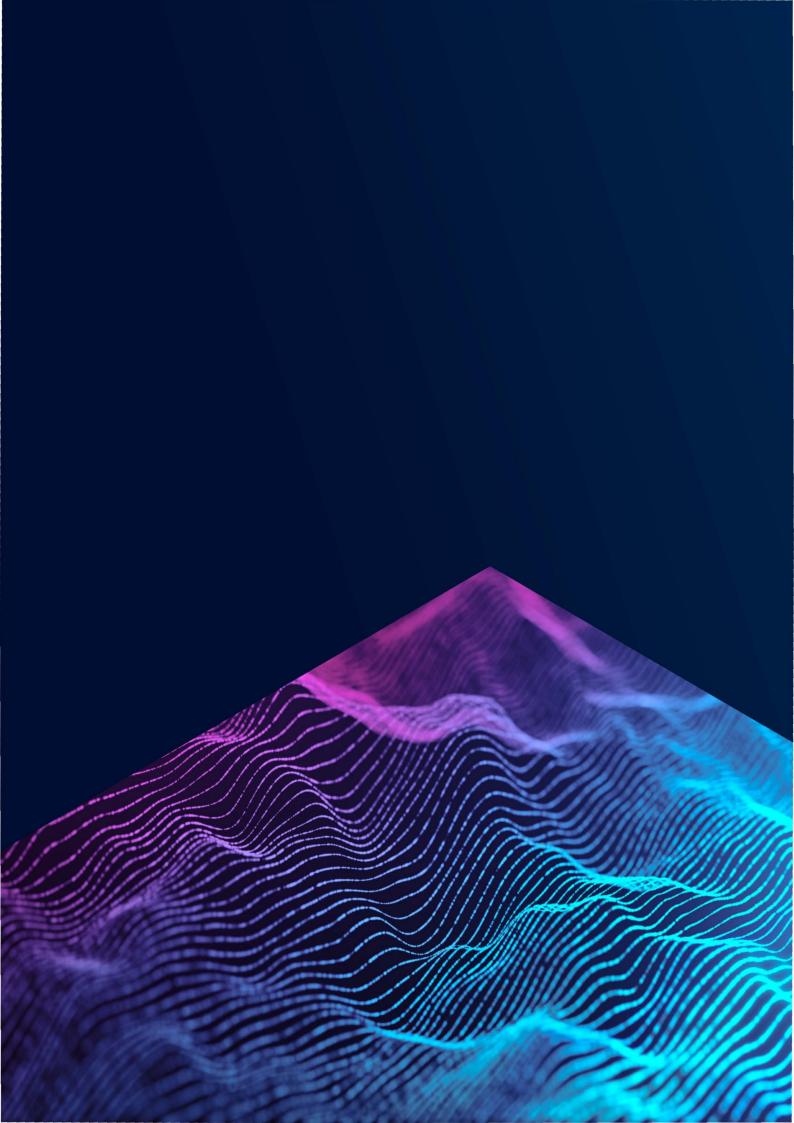
# サマリーガイド

2025年10月

https://www.stn.org/



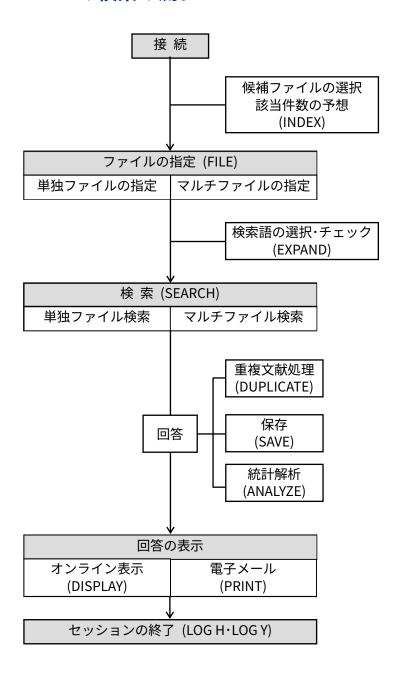




### 目次

1.	CAS STNext® の検索の流れ	1
2.	よく使うコマンドと演算子	2
3.	CAS STNext のコマンド一覧	3
4.	システム制限値	9
5.	CAS STNext 構造検索コマンド	10
6.	CAplus ファイル	13
7.	CAS REGISTRY ファイル	25
8.	CASREACT ファイル	31
9.	MARPAT ファイル	34
10.	CASFORMULTNS ファイル	37
11.	CHEMLIST ファイル	43
12.	CHEMCATS ファイル	49

#### 1. CAS STNext® の検索の流れ



#### 端末の使い方

- 入力文字のキャンセル … \$ 記号より前の文字を無効とする。
  - => S DIOXIN\$S CANCER? … S CANCER? のみ有効になる。
- コマンドスタッキング … 複数のコマンドをセミコロン (;) で区切り、続けて入力できる。
  - => FILE CAPLUS;S ACID RAIN;D 1-5 BIB;SAVE TEMP L1 RAIN/A

#### 2. よく使うコマンドと演算子

#### **主なコマンド**

T01()					
コマンド	CAplus ファイル	CAS REGISTRY ファイル			
FILE	=> FILE CAPLUS	=> FILE REGISTRY			
ファイル指定	=> FILE CAP	=> FILE REG			
SEARCH 検索	=> S ANTIOXIDANT? => S L2 AND ANALYSIS => S SHALE (A) OIL	=> S BENZOIC ACID/CN => S C6H12O6 AND 2/NC => S 1-6/FE AND 8/C			
EXPAND 検索語の列挙	=> E SWEET => E JP2024000003/PN => E BARTON J/AU 25	=> E ACETIC ACID/CN => E C6H12O6/MF => E PMS/CI			
DISPLAY オンライン回答表示	=> D L5 1- BIB HITSTR => D SCAN => D 2015:2106753 ALL	=> D L2 1-10 => D SCAN => D 7777-77-7 STR			
LOGOFF セッションの終了	=> LOG Y (セッションの終了) => LOG H (セッションの中断)				

- 前方一致、文字マスク

- ? 前方一致、何文字でもよい => S ALC?

- # 1 文字または無し- ! 1 文字(単語の途中でも使用可能)-> S ELECTR#####-> S SULF!!YL

- 後方一致、中間一致 (特定ファイルの特定フィールドでのみ使用可能)

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

- ブール演算子

AND 論理積 OR 論理和 NOT 論理差

- 主な近接演算子

- (W) 入力した順序で隣り合う。

- (nW) 入力した順序で、その間に含まれる単語の数が n 個以内である (n:整数)。

- (A) 順序を考慮することなく隣り合う。

- (nA) 順字を考慮することなく、その間に含まれる単語の数が n 個以内である (n:整数)。

- (XA) 同一サブフィールドあるいは同一情報単位内で順序を考慮することなく、

その間に含まれる単語の数は特定されない。

- (T) 同一ターム中に存在する。

- (S) 同一センテンス/セクション中に存在する。\*

- (P) 同一パラグラフ中に存在する。\*

- (L) 同一情報単位中に存在する。\*

(NOTW)

(NOTA)

- (NOTT) トトラス 各演算子の前の語を含むレコードから、後の語が指定された関係

- (NOTS) ((W), (A), (T), (S), (P), (L)) にあるものを除く。

- (NOTP)

(NOTL)

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

#### 3. CAS STNext コマンド一覧

#### ファイルの指定

ファイル指定 FILE

=> FILE CAPLUS CAplus ファイルの指定 => FILE CAPLUS BIOSIS 複数ファイルの指定 ファイルクラスターの指定 => FILE TOXICOLOGY

=> FILE HITS STNindex でヒットしたファイルの指定

=> FILE REG COS=JONES コストセンター (JONES) の指定

**INDEX** 

STNindex のファイル指定 => IND CAPLUS MEDLINE 複数ファイルの指定 ファイルクラスターの指定 => IND MEDICINE

=> IND BIOSCIENCE -CIN クラスターから不要ファイルを除外

検索

**SEARCH** 検索

=> S SEMICOND? 前方一致の利用 => S TONEGAWA S?/AU 検索フィールドの指定

E 番号の使用 => S E3 OR E7-12 => S STEP IR AND NMR ブール演算子の使用

=> S SHALE (A) OIL 近接演算子の使用 => S 2020-2022/PY 数值検索 (範囲指定検索)

=> S VIDEO RAN=(2020,) RANGE 検索

L1 から L4 までを OR 演算する => S L1-4

検索語の列挙

**EXPAND** 検索語の列挙

=> E SWEET SWEET の前後の検索語のリスト表示

=> E 継続して表示 (E999 まで)

=> E BARTON J/AU 25 数字は表示行 (5-25、デフォルトは 12) 複数フィールドを同時に EXPAND => E CANCER/TI,AB => E BACK LIQUID 5 逆アルファベット順の EXPAND

=> E LEFT CONDUCTOR 後方一致用 EXPAND

回答出力

**DISPLAY** オンライン回答表示

=> D デフォルト形式で表示 (直前の L 番号、1番目の回答) => D 1-3 5 BIB

1-3 番目と 5 番目の回答を BIB 表示形式で表示

=> D L3 TOTAL BIB HITSTR BIB HITSTR 表示形式で全件表示

=> D 188:78306 ALL CA 抄録番号から文献表示

=> D 3023546-82-6 STR CAS 登録番号 (CAS RN®) から構造表示

=> D 1-3 FROM EACH マルチファイルの回答を各ファイルから 3 件ずつ表示

回答と共に特許のカレント情報も表示 => D L2 CUR

=> D L5 WITH "JP" L5 (統計解析結果) から JP の文字列を含むものを表示

=> D L5 ALP ANS L5 (統計解析結果) をアルファベット順に回答番号付きで表示 PRINT オフラインプリントの注文 (電子メールでの回答表示)

=> PRI デフォルト形式でプリント注文

=> PRI ALL 1-9 NOQ 質問式を表示しない

=> PRI L5 BIB CUR 特許のカレント情報も併せて表示

#### 各種項目の表示

=> D BAN FUL ファイルの各種情報の更新状況を含む詳細表示

DISPLAY COST 料金表示

=> D COS 使用料金の表示

=> D COS BRIEF 接続ファイルの詳しい料金の表示 => D COS FULL 全ファイルの詳しい料金の表示

DISPLAY CURRENCY 収録特許の最新情報の表示

=> D BIB CUR 書誌情報と収録特許の最新情報の表示

DISPLAY EXPAND または DISPLAY SELECT E 番号の表示

=> D EXP EXPAND したすべての E 番号の表示 => D SEL SELECT したすべての E 番号の表示

=> D SEL E1-E5 特定の E 番号 (E1-5) の表示

DISPLAY HISTORY 検索経過の表示

=> D HISセッション接続以降の検索経過の表示=> D HIS L2-L8L2 から L8 までの検索経過の表示

=> D HIS 3 三つ前までの L 番号の表示

=> D HIS NOFILE セッション接続以降の全コマンドの表示

=> D HIS FULL セッション接続以降の全コマンドとファイルの各種情報の表示

DISPLAY PRINT オフラインプリントの注文状況表示(同一セッション中のみ有効)

=> D PRI プリント注文状況の表示

DISPLAY QUERY 質問式の表示

=> D QUE L8 L8 の質問式の表示

DISPLAY SAVED 保存項目の表示

=> D SAVEDすべての保存回答と質問式の表示=> D SAV/Qすべての保存質問式の表示=> D SAV/Aすべての保存回答セットの表示=> D SAV/Lすべての保存 L 番号リストの表示=> D SAVED/S登録したアラートの一覧表示

=> D ACID/S アラート (ACID/S) 登録内容の確認 (質問式は表示されない) => D CANCER/S FUL アラート (CANCER/S) 登録内容の確認 (質問式も表示される)

DISPLAY SET SET オプションの表示

#### 各種項目の消去

DELETE 各種項目の消去

=> DEL E123001C オフラインプリント注文の取消 (同一セッション中のみ)

=> DEL HIS すべての L 番号の消去 => DEL L1-L5 ー部の L 番号の消去

=> DEL L3 RENUM L 番号を消去して、番号を再付与

=> DEL BORICA/A 保存回答セットの消去 => DEL BIOSIS/S アラート検索式の消去 => DEL SAV/Q 全保存質問式の消去 => DEL SAV/A 全保存回答セットの消去 => DEL SELECT SELECT Lた E 番号の消去

#### 回答セット、質問式の保存と呼び出し

SAVE 回答セット、質問式の保存

=> SAV L4 PROTEIN/A 回答セットの保存 => SAV L1 PEPTIDE/Q 質問式の保存

=> SAV ALL MAP/L 同一セッション中の全質問式の保存

=> SAV TEMP L5 ACID/A 一時的(一週間)に保存

ACTIVATE 保存回答セット、質問式の呼び出し

=> ACT NATURAL/A 回答セットの呼び出し => ACT TERPEN/Q 質問式の呼び出し

=> ACT ACID/S アラート検索式の呼び出し

#### その他のコマンド

ANALYZE 統計解析

=> ANA L5 1- PA PY.B PA と PY.B を統計解析

=> ANA L5 1- IPC LEN 4 IPC の先頭から 4 文字 (サブクラス) を統計解析

=> ANA PN WITH "JP" JP の文字列を含む特許番号を統計解析

DUPLICATE 重複文献処理

=> DUP REM L2 重複文献除去 => DUP IDE L6 L5 L7 重複文献の識別

=> DUP ONL L4 L5 重複文献のみをまとめる

EDIT タームまたは質問式の編集

=> EDI E1-E5 TI BI タームの修正

=> EDI COM 3 4 統計解析結果のタームの統合 => EDIT TIT LIQUID タイトル (LIQUID) の付与 => EDIT QUE L1 質問式 L1 を編集する

=> EDI E1-E5 /TI /BI E 番号の検索フィールドの編集

FOCUS 回答を適合度の順に並べ替え

=> FOCUS L2 1-20 L2 の 1-20 番目の回答を適合順に並べ替え

FSEARCH 関連特許をもれなく検索

=> FSE EP322140/PN EP322140 の関連特許を検索

=> FSE L3 L3 の関連特許を検索

 FSORT
 回答を特許ファミリーごとにソート

 => FSO L3
 L3 を特許ファミリーごとにソート

HELP または? ヘルプメッセージの表示

=> HELP DIRECTORY 各ファイルで利用できるヘルプメッセージの一覧の表示

=> HELP COST 各ファイルの料金情報の表示 => HELP SFIELD 利用できる検索フィールドの表示

=>?SET コマンドのヘルプメッセージ一覧の表示

NEWS ニュースの表示

=> NEW 12 12 番のニュースの表示

=> NEWS FILE 各ファイルのニュースの表示 (各ファイルに入ってから指定)

OUERY 質問式の作成

=> QUE PINE OR ASPEN キーワードを使用した質問式の作成 => QUE (L1 OR L2) AND P/DT L 番号を使用した質問式の作成

SDI アラートの登録と編集

=> SDI L5 BIOSIS/S 質問式 L5 を BIOSIS/S として登録 => SDI MFILE マルチファイルアラートの登録 => SDI TOC アラートの回答を一括受領 CAplus の目次サービスの登録

=> SDI XFILE SMARTracker (クロスオーバーアラート) の登録

=> SDI EDIT ACID/S ACID/S の編集

SELECT 回答からタームを抽出

 => SEL L1 1- CHEM
 CAS RN® と化学物質名を抽出

 => SEL L1 1-20 CIT
 引用文献調査用の検索式を抽出

 => SEL L2 HIT RN
 ヒットした CAS RN® を抽出

SMART クロスオーバーアラートの登録

=> SMART SMARTracker (クロスオーバーアラート) の登録

SORT 回答順序の並べ替え

=> SOR PY デフォルト設定で並べ替え(直前の L 番号、すべての回答、昇順)

=> SOR L2 1-100 PD PD の昇順で並べ替え

TABULATE 統計解析結果を表形式で表示

=> TAB 統計解析結果を表示

=> TABULATE DELIM 統計解析結果をデリミタ形式で表示

TRANSFER 特定フィールドを抽出して検索

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

検索の終了

LOGOFF 検索終了

=> LOG Y オンラインセッションの終了

=> LOG H オンラインセッションの中断 (120 分間以内に再接続すると、検索

の続きを実行できる)

#### SET コマンド\*

青文字は略語でも可能。 (例:SET ABBREVIATION ON は SET ABB ON でも良い)

使用例	デフォルト	説明
SET ABBREVIATION ON (OFF)	OFF	CA/WPI ファイルで標準略語を自動的に検索
SET ACCOUNT <コストセンター>	NONE	コストセンターを指定
SET ACCOUNT BACK <コストセンター>	NONE	コストセンターをセッションの最初に遡って
SET ACCOUNT BACK SAMES	NONE	指定
SET ACCOUNT PROMPT		コストセンター指定を促すプロンプトを常に
		表示
SET AUDIT ON (OFF)	OFF	TRANSFER でヒットしなかったターム集合の
		作成
SET AUHELP ON (OFF, NONE)	ON	ヘルプメッセージを自動的に表示
SET AUTOSEARCH ON (OFF)	OFF	SEARCH コマンドを自動的に実行
SET BANNER ON (OFF, BRIEF, FULL)	ON	各ファイルに入ったときにバナー (ファイル
, , , , ,		情報) を表示 (しない、詳細表示)
SET CLUSTER		ファイルクラスターをカスタマイズ
SET COST ON (OFF, BRIEF, FULL)	ON	料金表示する (しない、詳細表示)
SET DCLUSTER TOXICOLOGY	NONE	デフォルトのクラスターの設定
SET DETAIL ON (OFF)	OFF	詳細なデータの表示
SET DFORMAT BIB		デフォルト表示形式の設定
SET DUPORDER DEFAULT (FILE)	DEF	重複文献処理後の回答順序をファイルごとに
		まとめない (まとめる)
SET ECLEVEL LIMITED (UNLIMITED)	LIM	EC レベルが質問式と正確に一致
		(元素数の限定なし)
SET EXPAND CONTINUOUS	REN	E 番号を連続付与 (E1 から付与)
(RENUMBER)		
SET EXTEND ON (OFF)	OFF	フルファイル構造検索の際、候補化合物の
		集合を作成
SET FIELD .MYSEA TI AB		デフォルトの検索フィールドをカスタマイズ
SET FORMAT .BIB TI SO ST		デフォルトの表示形式をカスタマイズ
SET GRAPHICS ON	ON	回答の構造図を表示
(OFF, PLOT10, TEXT)		(表示しない、PLOT10 形式、テキストで表示)
SET GTEXT ON (OFF)	ON	MARPAT ファイルで G グループの定義を
CET LUCIU ICUTING ON (OFF 50)	DEE	詳細に表示
SET HIGHLIGHTING ON (OFF, RN)	DEF	ヒットタームをハイライトさせる
SET ICFORMAT ON (OFF)	OFF	国際特許分類を第 8 版形式で表示
SET INTERPRET ON (OFF)	ON	検索時に実際に実行された質問式の表示
SET KWIC=20	20	ヒットタームの前後 20(0-50) 語の表示
SET LCOST ON (OFF, BRIEF, FULL)	ON	ログオフ時に料金を表示
CET LUCTODY ON (OFF)	OFF	(しない、詳細表示、全ファイルの詳細表示)
SET LINE ENGTH 70	OFF	セッション終了時に検索履歴を表示する設定
SET LOCAN of 7° No. No.	80	1 行あたりの文字数 (20-250) を指定
SET LOGIN <オプション>		SET オプションを LOGIN 時のデフォルトに 再設定
SET MAILID		STNmail 用電子メール ID の設定
SET MARHIGHLIGHT ON (OFF)	ON	MARPAT ファイルでヒットした構造を
		ハイライト

使用例	デフォルト	説明
SET MLEVEL ATOM (CLASS)	АТОМ	デフォルトのマッチレベルを ATOM (CLASS) に設定
SET MPTASSEMBLY ON (OFF, BOTH)	ON	QHIT 表示形式で表示する際に、ヒットした 部分を組み立てた構造を表示する (しない、併用する)
SET MSTEPS ON (OFF)	OFF	マルチファイル検索時に各ファイルの 回答セットに L 番号を付与
SET NAMELIST <名称>		STNmail 用送付先リストの設定
SET NOTICE DISPLAY <料金>	11,800	表示料金の警告表示額の設定
SET NOTICE SEARCH <料金>	118,000	検索料金の警告表示額の設定
SET PASSWORD		パスワードの変更
SET PATENT STN (DERWENT)	STN	特許の DISPLAY, PRINT, SELECT 時の形式を STN 形式 (ダウエント形式) に設定
SET PLURALS ON (OFF)	OFF	複数形を自動的に含めて検索
SET POSTINGS ON (FULL, OFF)	ON	各検索語のヒット数を表示   (表示する、しない)
SET PROXIMITY (S)	NONE	スペースで代用できる近接演算子を設定
SET RANGE=(1980,)	ALL	検索範囲の指定
SET REG1STRY ON (OFF)	ON	REG1stRY 機能を利用
SET RELATION ON (DEFAULT, OFF)	DEF	シソーラスのあるファイルで階層の上下関係 を含む (含まない)
SET RENUMBER ON (OFF)	OFF	途中の L 番号を削除した場合、自動的に L 番号を付与し直す (付与し直さない)
SET ROLES TEXT (CODES, OFF)	TEXT	ロールのコードとテキストを表示 (コードのみ表示、表示しない)
SET ROUND FILE (ON, OFF)	FILE	四捨五入機能をデフォルトに設定 * FILE: ファイルごとに決まった デフォルト値 (ON または OFF) に戻す
SET SELECT CONTINUOUS (RENUMBER)	CON	SELECT コマンドにより生成される E 番号 を連続して (常に E1 から) 付与
SET SELORDER OCC (ALP, DOC, PER (%))	OCC	SELECT コマンドにより生成される L 番号のターム順序をタームの出現数順 (アルファベット順、レコード数順、レコード割合順) に設定
SET SFIELD TI AB	BI	基本索引をカスタマイズ
SET SMARTSELECT OFF (ON)	OFF	SELECT コマンドで抽出したタームに E#(L#) を付与
SET SPELLINGS ON (OFF)	OFF	英米綴り違いなどを自動的に含めて検索
SET STATUS ON (OFF)	ON	構造検索での検索経過の表示
SET STEPS ON (OFF)	OFF	検索時の各検索語に L 番号を付与
SET SUBSET=L3	NONE	サブセットの指定
SET TERMSET E# (L#)	E#	SELECT コマンドで抽出したタームに
,		E# (L#) を付与
SET TOLERANCE MP= 5		トレランス (誤差) の設定
SET UNIT BP= F		単位の設定
* CET ココンドン同じ行に DEDM たっ		

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

### 4. システム制限値

#### システム制限値一覧

ンステム刑限他一寛	
項目	制限值
1 回の検索で入力できる文字数	292 文字*
1 回の検索で検索できる文字数	20,000 文字
1 つの質問式に使用できる L 番号	390
1 ファイルあたりのヒット数	100,000,000 件
(マルチファイルの合計は考慮されない)	100,000,000
1 セッションあたりの L 番号および E 番号	999
1 ログイン ID ごとの保存できる回答セット数	500 セット
1 ログイン ID ごとの保存できる質問式	1,000 セット
1 ログイン ID ごとの保存 (SAVE) できる総回答数	TEMP (一時保存) 200 万件
	PERMANENT (恒久保存) 160 万件
1 回のソートで処理できる回答数	50,000 件
1 回で重複文献処理できる回答数	50,000 件
1 回の FOCUS で処理できる回答数	50,000 件
1 回で SELECT できる回答数 (ターム数)	50,000 件 (999 ターム)
1 回で解析 (ANALYZE) できる回答数 (ターム数)	50,000 件 (50,000 ターム)
* アラート登録時は 180 文字程度をお勧めする。	

<sup>\*</sup> アラート登録時は 180 文字程度をお勧めする。

#### クロスオーバー検索のシステム制限値

プロスカーバー 大衆のアステム的政権	
項目	制限值
BIOSIS, CAplus, CA, CASFORMULTNS, EMBASE, MEDLINE, USPAT2, USPATFULL ファイルヘクロスオーバー可能な REGISTRY ファイルの回答件数 (CAS RN®)	500,000 件
上記以外のファイルヘクロスオーバー可能な REGISTRY ファイルの回答件数 (CAS RN®)	300,000 件
CAplus, CA ファイルヘクロスオーバー可能な CASREACT ファイルの回答件数 (CA 抄録番号)	30,000 件
CASREACT ファイルヘクロスオーバー可能な CA ファイルの回答件数 (CA 抄録番号)	10,000 件
MARPAT ファイルと CAplus, CA ファイル間におけるクロスオーバー可能な 回答件数 (CA 抄録番号)	100,000 件
1 回の TRANSFER でクロスオーバーできるターム数	50,000 ターム

#### 5. CAS STNext 構造検索コマンド

#### SEARCH コマンド

SEARCH オンライン構造検索

=> S L1 部分構造検索、サンプル検索

ファミリー検索、フルファイル検索 => S L4 FAM FUL

=> S L2 RAN=(76081-80-6,) RANGE 検索

サブセット検索、フルファイル検索 => S L4 SUB=L3 FUL

構造質問式 L1, L2 の演算 => S L1 AND L2

=> S L3/COM L3 (構造検索の回答) をイタレーションが完全な回答に限定 L3 (構造検索の回答) をイタレーションが不完全な回答に限定 => S L3/INC

#### BATCH コマンド

バッチ構造検索 **BATCH** 

=> BAT L7 BISRING/B (SSS) (FUL) バッチ構造検索(部分構造検索、フルファイル検索) => BAT L5 STEEL/B FAM RAN=(94061-24-2,) ファミリー検索、94061-24-2 より前の CAS RN® の

範囲指定検索

#### 構造検索のタイプと範囲

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

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

#### サンプル検索結果

重要

SAMPLE SEARCH INITIATED 21:32:14

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -3311 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 3311 ITERATIONS 50 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*

> BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED ITERATIONS: 62769 TO 69671

PROJECTED ANSWERS: 5309 TO 7451

50 SEA SSS SAM L1

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

- (2)
- (3)
  - (4)
- (5)
- **(6**) (7)
- (8)
- (9)

#### スクリーン作成コマンド

SCREEN スクリーン作成

=> SCR 1938 OR 1985

~ スクリーンコマンドでは、OR,AND のみ使用可

=> SCR 2067 AND 2127

## - Graph Modifier スクリーン

番号	内容				頻度
[構造上の特徴]	-	ンズの日本体			0.97 %
2039 2045		異常質量 - すべての同位体 重水素			
2046	ェ小系 三重水素およびそれ以上の水素同位体 (4H, 5H など)				0.49 % 0.06 %
2047		三重小系のよびでれば上の小系向位体(4月,5月など) 結合位置の不明な同位体			
2041	異常結合価	,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,			0.05 % 32.34 %
2040	すべての電荷				12.50 %
2042	非局在化して	いる (delocalize	ed) 電荷		0.10 %
2076	互変異性体 (Ta	utomer)			39.88 %
[多成分物質]					
2127	2 成分以上				18.61 %
2077	3 成分以上				7.24 %
2078	4 成分以上				4.55 %
2079	single atom frag	gment (SAF)			6.69 %
「クラス識別子	コード] (一物質が	複数のコードを	持つこともある	3)	
2050	合金			,	3.22 %
2049	配位化合物				8.16 %
2048	定義のあいまい	な (Incomplete	ly defined) 化	学物質	1.43 %
2071	構造不明 (分	子式のみ)			0.21 %
2072	結合位置不明				0.99 %
2073	エステル化位				0.14 %
2074	水素化位置不	明			0.10 %
2053	手作業登録				_
2052	鉱物		» <del>-</del> \		0.05 %
2051	混合物 (名称中)		`ある)		0.29 %
2043	ポリマー (一般)		\	1	4.18 %
2067		・コポリマー [(A			3.20 %
2068	•	peating units (S	•	るボリマー	1.48 %
2069		る SRU [X-(-Y-)n	_		0.52 %
2070		い SRU [-(-Y-)n-]			1.00 %
2054	ラジカルイオン				0.23 %
[その他]					
2082	CASREACT に収	は録されている物	質		14.04%
[最小環の数]					
1838	1 環以上	86.17 %	1843	6 環以上	10.11 %
1839	2 環以上	72.82 %	1844	7 環以上	6.54 %
1840	3 環以上	53.05 %	1845	8 環以上	5.01 %
1841	4 環以上	33.05 %	1846	10 環以上	3.12 %
1842	5 環以上	17.59 %	1847	15 環以上	1.13 %

#### - Generic Element Count スクリーン

番号内容頻度1918金属14.84 %

#### - Element Count スクリーン

元素数 (以上)	С	元素数 (以上)	N	0	S	ハロゲン
1	2110*1	1	1992*1	2004*1,2	2021*1,2	1929*3
4	1942	2	1993	2005	2022	1976
6	1943	3	1994	2006	2023	1977
8	1944	4	1995	2007	2024	1978
10	1945	5		2008	2025	1979
12	1946	6	1996	2009		1980
14	1947	7		2010		
16	1948	8	1997	2011		1981
18	1949	10	1998	2012		1982
20	1950	12		2013		
25	1951	14	1999			
30	1952	15		2014		
35	1953	18				
40	1954				•	

<sup>\*1</sup> Single Atom Fragment (SAF) を含む。

#### 構造検索のシステム制限値と回答数に対する制限値

ファイル名	検索	<b>東範囲</b>	ITERATION 数 または VERIFICATION 数	検索時間 (分)	回答数
	オンライン検索	サンプル検索 フルファイル検索	1,000,000 100,000,000		50 100,000,000
REGISTRY	サブセット検索	RANGE 検索	100,000,000		100,000,000
	バッチ検索	フルファイル検索	100,000,000		100,000,000
	ハクカ保系	RANGE 検索	100,000,000		100,000,000
	オンライン検索 サブセット検索	サンプル検索	5,000		50
		フルファイル検索	100,000,000		100,000,000
CASREACT		RANGE 検索	100,000,000		100,000,000
	バッチ検索	フルファイル検索	100,000,000		100,000,000
		RANGE 検索	100,000,000		100,000,000
	オンライン検索サブセット検索	サンプル検索	2,000	5	50
		フルファイル検索	100,000,000	30	100,000,000
MARPAT	リフセット快系	RANGE 検索	100,000,000	30	100,000,000
	ブルファイル検索 RANGE 検索	フルファイル検索	100,000,000	360	100,000,000
		100,000,000	360	100,000,000	

<sup>\*2</sup> O,S を同時に表わすスクリーンは 2003。

<sup>\*3</sup> アスタチン (At) を含む。

### 6. CAplus ファイル

#### CAplus ファイルの収録情報

- 世界 180 以上の国の約 10,000 種の定期刊行物 (科学技術分野の雑誌) の他、107 特許発行機関 の特許、2 技術公開誌、学会会議録、技術レポート、学位論文、単行本を収録。収録源の言語は 約 50 種類。
- 化学および化学工学全分野におよぶ広範囲な科学技術関連の文献を収録。主題によって 80 のセ クションに分類。

#### CAplus ファイルの雑誌論文レコード例 (BIB ABS 表示形式)

- 2023:239870 CAPLUS Full-text 1) ΑN
- 2) DN 181:415719
  - Photoinduced Decarboxylative C3-H alkylation of Quinoxalin-2(1H)-ones ΤI
- Bisoyi, Akash; Tripathy, Alisha Rani; Yedase, Girish Suresh; P, Shifana 4) ΑU Sinu; Choudhury, Udita; Yatham, Veera Reddy
- 5) School of Chemistry, Indian Institute of Science Education and Research, Thiruvananthapuram, 695551, India
- Journal of Organic Chemistry (2023), 88(4), 2631-2641 6) S0 CODEN: JOCEAH; ISSN: 0022-3263
- 7) DOI 10.1021/acs.joc.2c02823
- American Chemical Society 8)
- DT Journal; (online computer file) 9)
- 10) LA English
- CASREACT 181:415719 11) 0S
- 12) GΙ

3)

$$R = \begin{bmatrix} N \\ N \\ N \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R^2 \\ R^1 \end{bmatrix}$$

- An efficient, catalyst and additive-free visible-light-driven radical C3-H 13) alkylation of quinoxalin-2(1H)-one derivs. have been developed. This reaction utilizes alkyl-NHP-esters as an alkyl radical donor and quinoxalin-2(1H)-one deriv. as an alkyl radical acceptor. The operationally simple protocol works under mild reaction conditions and tolerates a variety of functional groups. Furthermore, the synthetic utility of the methodol. was successfully implemented for synthesizing biol. relevant 3-alkyl substituted quinoxalin-2(1H)-one derivs. I [R = H, 6-F, 6-MeO, etc.; R1 = Me, CH2CH=CH2, etc.; R2 = Et, cyclopropyl, cyclohexyl, etc.].
- THERE ARE 10 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (10 CITINGS) 14) OSC.G 10
- THERE ARE 49 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD 15) RE.CNT 49 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT
  - 1) レコード番号
- 2) CA 抄録番号
- 3) 標題

4) 著者名

- 5) 所属機関名
- 6) 収録源
- 7) デジタルオブジェクト識別子
- 8) 発行者

- 9) 資料種類
- 10) 言語
- 11) その他の収録源
- 12) 構造図

- 13) 抄録
- 14) 被引用文献数
- 15) 引用文献数

#### CAplus ファイルの特許レコード例 (ALL CLM 表示形式)

```
PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive
         2021:103568 CAPLUS Full-text
1)
    ΑN
2)
    DN
        174:310168
3)
    ED
       Entered STN: 14 Jan 2021
4)
       Preparation of tricyclic AKR1C3 dependent KARS inhibitors
5)
    IN Adair, Chris; Chen, Tracy; Ding, Jian; Fryer, Christy; Isome, Yuko;
         Larraufie, Marie-Helene; Nakajima, Katsumasa; Savage, Nik; Twomey, Ariel
         Sterling
6)
    PΑ
        Novartis AG, Switz.
    U0
        NOVARTIS AG
7)
    UOS Novartis
8)
    SO PCT Int. Appl., 245pp.
9)
         CODEN: PIXXD2
    DT Patent
10)
11)
    LA English
    CLMN 5
12)
         27-17 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))
13)
         Section cross-reference(s): 1, 63
14)
    FAN.CNT 1
    PPPI
15)
                         KIND DATE
         PATENT NO.
                                        LANGUAGE PatentPak
                               -----
                          ____
         WO 2021005586
                         A1
                                20210114 English
                                                  PDF | PDF+ | Interactive
         CA 3139940
                          A1
                               20210114 English
                                                  PDF
    PΙ
16)
                         KIND DATE
         PATENT NO.
                                         APPLICATION NO.
                                                               DATE
         WO 2021005586
                          A1
                                20210114 WO 2020-IB57285
                                                                20200731
                               20211222 AR 2020-102046
         AR 119450
                           Α1
                                                               20200721
           :
    PRAI US 2019-62881619 P
                                20190801
17)
         US 2020-63009513 P
                               20200414
18)
    PSPI
                         KIND STATUS
         PATENT NO.
                                              STATUS DATE
                          ----
                               -----
                                              -----
         WO 2021005586
                           Α1
                                Dead
                                              20240404
                           Α1
         AR 119450
                               Alive
                                              20220407
19)
    CLASS
     PATENT NO. CLASS PATENT FAMILY CLASSIFICATION CODES
                   IPCI
                         A61P0035-00 [I]; A61K0031-4747 [I]; C07D0487-10 [I]
     WO 2021005586
                   IPCR
                         A61P0035-00 [I]; A61K0031-4747 [I]; C07D0487-10 [I]
                   CPCI
                         C07D0471-10 [I]; C07F0009-6561 [I]; A61P0035-00 [I];
                         A61P0035-02 [I]; C07D0487-10 [I]; A61K0031-4747;
                         A61K0045-06 [I]; A61K2300-00; A61K0031-4747 [I],
     FTERM 4C065/AA16; 4C065/AA18; 4C065/BB09; 4C065/CC09;
    0S
       CASREACT 174:310168; MARPAT 174:310168
20)
```

```
21)
     GΙ
22)
          The present invention relates to novel tricyclic compds. I [Z = OH or O;
     AB
          R1 = (independently) halo, alkyl, alkoxy, etc.; R2a and R2b =
          (independently) H, alkyl, halo; each R3 = (independently) H, halo; R4 =
23)
     ST
          tricyclic spiro compd spiropiperidinequinolinecarboxamide prepn AKR1C3
          dependent KARS inhibitor
24)
     IT
          Gene expression
             (AKR1C3 gene expression; prepn. of tricyclic AKR1C3 dependent KARS
             inhibitors)
     ΙT
          Gene
     IT
          9031-26-9, KARS
                          1428220-01-2, AKR1C3
          RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)
             (prepn. of tricyclic AKR1C3 dependent KARS inhibitors)
25)
     PPAK
          2579082-37-2P, 6'-Fluoro-N-((5-methylfuran-yl)-methyl)-4'-oxo-3',4'-
          dihydro-1'H-spiro[piperidine-4,2'-quinoline]-1-carboxamide, Pg 221 Claim
          2579082-38-3P, 6'-Fluoro-N-(4-fluoro-2-methoxybenzyl)-1'-methyl-4'-oxo-
          3',4'-dihydro-1'H-spiro[piperidine-4,2'-quinoline]-1-carboxamide, Pg 221 Claim
                   THERE ARE 2 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (2 CITINGS)
26)
     OSC.G
27)
     UPOS.G Date last citing reference entered STN: 26 Feb 2024
28)
            CAPLUS 2024:234905; 2023:1943674
29)
     RE.CNT 4
                   THERE ARE 4 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
30)
     RE
          CITED REFERENCES
     (1) Acquaviva, J; Molecular Cancer Therapeutics, 10.1158/1535-7163.MCT-12-0615
         2012, V11(12), P2633 CAPLUS
     (2) Anon; KOUZNETSOV VLADIMIR V ET AL: "3',4'-Dihydrospiro[piperidine-4,2'-
31)
     CLM What is claimed is:
          1. A compound of formula (I):
          2. The compound of claim 1, wherein R4 is phenyl optionally substituted
          with one or more R6. 3. The compound of claim 1, wherein R4 is 5 to
 1) レコード番号
                   2) CA 抄録番号
                                             3) 入力日
                                                                    4) 標題
```

5) 発明者 6) 特許出願人 7) 最終権利者 8) 標準化した最終権利者 9) 収録源 10) 資料種類 11) 言語 12) クレームの数 13) CA セクション 14) 関連特許ファミリー数 15) 物質情報付き明細書 16) 特許情報 17) 優先権出願情報 18) 特許ステータス 19) 特許分類 20) その他の収録源 21) 構造図 23) 補遺語 22) 抄録 24) 索引語 25) 索引物質の記載ページ 26) 被引用文献数 27) 最新の被引用文献の更新日 28) 被引用文献の CAplus のレコード番号 29) 引用文献数 30) 引用文献 31) クレーム

CAplus ファイルの主な検索フィールドおよびスーパー検索フィールド

CAp		検索フィールドおよびスーパ		
	コード	内容	索引単位	入力例
	無し (/BI)*1	基本索引 (標題、抄録、	単語	S 100-97-0 (S) ANAL?
		補足語、索引語)		S ELECTRODE (W) ?EFFECT?
	/AB*1	抄録	単語	S LD50#/AB
+	/CT*2	統制語 (フレーズ)	句	S LAMBDA POINT/CT
Ţ	/CW	統制語 (単語)	単語	S LAMBDA/CW
ワー	/IT* <sup>1</sup>	索引語	単語	S 50-00-0 (S) EFFECT#/IT
Ë	/OBI	標題、補足語、索引語	単語	S FUEL CELL#/OBI
	/RL*2	ロール	句	S L1/SPN
	/ST	補足語	単語	S STEREOSELECT?/ST
	/TI* <sup>1</sup>	標題	単語	S (SOLAR (W) CELL)/TI
	/AN	レコード番号	句	S 2024:1083861/AN
	/AU	著者名	句	S YANOV E?/AU
	/CO*2	-	句	S DOW CHEMICAL CO/CO
	/CS	所属機関名	単語·句	S "DU PONT"?/CS
	/CYA	著者所属国	句	S JAPAN/CYA
	/DN	CA 抄録番号	句	S 187:313859/DN
	/DT	資料種類	句	S JOURNAL/DT
	751	(コードとテキスト)		3 3 3 3 3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
	/DOI (/FTDOI)	デジタルオブジェクト識別子	句	S 10.1016/j.tiv.2024.105921 /DOI
	/IS	号数	数值	S 19/IS
-	/ISN	CODEN, ISSN, ISBN	句	S JBCHA3/ISN
書誌情報	/JT	資料名	句	S J BIOL CHEM/JT
情	/JTW	雑誌名キーワード	単語	S NANO/JTW
報	/LA	言語 (コードとテキスト)	句	S JAPAN/LA
	/OREF	CA カラム番号	句	S 100:5997A/OREF
	/OS	その他の収録源	句	S CASREACT/OS
	/PB	出版社	単語·句	S ELSEVIER/PB
	/PD	発行日	数值	S PD>20220901
	/PY	発行年	数值	S 2022-2023/PY
	/PUI	発行者識別コード	句	S "S 0007-1145(24)"?/PUI
	/SO	収録源	単語	S (BIOL AND CHEM)/SO
	/URL	収録源の Web アドレス	単語	SHTTP://WWW.BIOSCIENCE.ORG/URL
	/VI	CA の巻数および号数	句	S 100-11/VI
	/VL	出版物の巻数	数值	S 269/VL
1.	/CC*2	CA セクション番号	句・	S 80-6/CC
セクション、	700	/セクション名	単語	S ORGANIC/CC
5	/CCN	CA セクション名	単語・句	S MAMMALIAN HORMONES/CCN
3	/SX	関連セクション番号	一句	S 17/SX
ン、	75/	/関連セクション名	単語	S TEXTILES/SX
λ	/FA	フィールドの存在	句	S ABS/FA, S PPAK/FA
分	/FS	ファイルセグメント	句	S BIO/FS
日	/ED	入力日	数值	S ED>=20230101
入力日など	/UP	更新日	数值	S 20240401/UP
_	/UPI	更新日、CA 抄録番号およ	数值	S 20240901/UPI
	7011	び索引	妖胆	3 20270301/01 1
	/UPIT	ひ系ュー   更新日、特定の化学物質に	数值	S 20210101= <upit< td=""></upit<>
	/0711	関する索引情報の追加	女	2 20210101-/0511
	/UPP	特許ファミリーの更新日	数値	S UPP>=20231123
	/UPM	付計ファミリーの更新ロ UP+UPP+UPIT	数値	
*1 %		│UP + UPP + UPII 給索可能。 *2 シソーラス料		S UPM>20231201

<sup>\*1</sup> 後方一致、中間一致検索可能。 \*2 シソーラス機能あり。

注).B 付きのフィールドはベーシック特許に限定した検索フィールド。

	コード	中容	声引出位	2 九例
	ļ	内容	索引単位	入力例 S IKEMOTO T?/IN
	/IN (/AU)	発明者	句	=
	/PA (/CS)	特許出願人	単語·句	S "DU PONT"?/PA
	/UO	最終権利者	単語·句	S ARTIENCE/UO
	/UOS	標準化した最終権利者	単語·句	S "FORMOSA PLASTIC"?/UOS
	/FAN	関連特許ファミリーのレコード番号	句	S 2024:1878806/FAN
	/FAN.CNT	関連特許ファミリーのレコード数	数值	S 2<=FAN.CNT
	/CYC	特許国数	数值	S 2-10/CYC
	/PNC	特許番号数	数值	S 2<=PNC
	/DS (/DS.B)	指定国	句	S FR/DS AND EP/PC
	/PC (/PC.B)	特許発行国	句	S WO/PC
	/PD (/PD.B)	特許発行日	数值	S PD>20240201
	/PK (/PK.B)	特許種別コード	句	S DEA1/PK
	/PN (/PN.B)	特許番号	句	S DE102024202932/PN
	/PNK (/PNK.B)	種別付き特許番号	句	S DE102024202932A#/PNK
	/PY (/PY.B)	特許発行年	数值	S 2022-2024/PY
	/AC (/AC.B)	特許出願国	句	S DE/AC
特	/AD (/AD.B)	特許出願日		S AD>20231001
特 許 情 報	/AP (/AP.B)	特許出願番号	句	S DE2023-102023108231/AP
情	/AY (/AY.B)	特許出願年	数值	S 2022-2023/AY
<b>羊</b> 区	/PRC (/PRC.B)	優先権主張国	句	S US/PRC
	/PRD (/PRD.B)	優先権主張日	数值	S PRD>20240509
	/PRN (/PRN.B)	優元権主張口   優先権出願番号	句	S JP2023-59463/PRN
	' " ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' ' '			•
	/PRY (/PRY.B)	優先権主張年 国際特許公籍	数值	S 2021-2023/PRY
	/IPC*2	国際特許分類、全IPC	句	S A61K0031-473/IPC
	/IPCI	国際特許分類、発行時の分類	句	S H01L0023-29/IPCI
	/IPCR	国際特許分類、再分類	句	S C08L0061-00/IPCR
	/CPC*2	共通特許分類	句	S A21B0001-10/CPC
	/FTERM* <sup>2</sup>	日本特許分類 (F ターム)	句	S 4C077/AA05/FTERM
	/STED	特許ステータスの日	数值	S 20240912/STED
	/STEY	特許ステータスの年	数值	S 2021/STEY
	/STI (/PSPI)	特許ステータス	単語	S A/STI
	(/STI.B)			S ALIVE/STI
	/STUP	特許ステータスの更新日	数值	S L1 AND STUP>=20221122
	/CLM (/BIEX)	クレーム	単語・句	S COBALT (L) SALT#/CLM
	/CLMN	クレーム数	数值	S 3/CLMN
	/FILE.CIT	引用文献の存在	句	S L1 AND CAPLUS/FILE.CIT
	/RAN.CAPLUS	引用文献の CAplus レコード番号	句	S 2021:2524720/RAN.CAPLUS
	/RAN.MED	引用文献の MEDLINE レコード番号	句	S 96177981/RAN.MED
	/RAU	引用文献著者名	句	S O REILLY/RAU
21	/RE (/CIT)	引用文献情報	句	S BLONDELLE S, 1999?/RE
引用文献情報	/RE.CNT (/REC)	引用文献数	数值	S 1-20/RE.CNT
文	/RIS	引用文献号数	句	S (2 OR 3)/RIS
献	/RPC	引用特許発行国	句	S DE/RPC
情	/RPG	引用文献の開始ページ番号	句	S 200/RPG
<b>羊</b> 区	/RPK	引用特許種別コード	句	S DEA1/RPK
	/RPN	引用特許番号	句	S US6635622/RPN
	/RPY	引用文献発行年	数值	S 2020-2022/RPY
	/RVL	引用文献巻数	句	S (3 OR 4)/RVL
	/RWK	引用情報名 (雑誌名)	句	S CANCER RES/RWK
جاب	/OS.G	被用文献のCAplus レコード番号	句	S 2023:375431 /OS.G
被献	/OSC.G	被引用文献数	数值	S L1 AND 2-5/OSC.G
被引用文献情報	/UPOS.G	被引用文献の更新日	数值	S L1 AND 2022214<=UPOS.G
用報	70103.0		ᄊᄩ	5 LI / 110 2022217 01 03.0

- スーパー検索フィールド

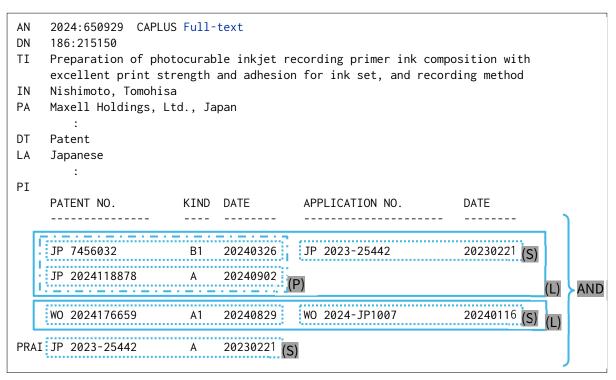
コード	内容	入力例
/APPS	出願番号グループ (AP, PRN)	S 2023CN-11170624/APPS
/APPS.B	出願番号グループ : ベーシック特許 (AP.B, PRN.B)	S GB2023-9598/APPS.B
/PATS	特許番号グループ (PN)	S GB2619527/PATS
/PATS.B	特許番号グループ : ベーシック特許 (PN.B)	S EP 4438706/PATS.B
/PCS	特許発行国の包括的検索 (PC, DS)	S ES/PCS
/PCS.B	特許発行国の包括的検索 : ベーシック特許 (PC.B, DS.B)	S SPAIN/PCS.B

#### 近接演算子

- 基本索引における (S), (P), (L) 演算子の機能

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

- 特許情報フィールドにおける (S),(P),(L) 演算子の機能



- \* (S) 演算子 : 同一公報内、あるいは同一出願情報内を演算。
  - ただし、特許発行国と特許発行年 (日) をリンクする場合は (P) 演算子を使用する。
- \* (L) 演算子 : 同一の出願番号を持つ公報番号、出願番号、指定国などを演算。
- 注) ベーシック特許情報に関するフィールド同士 (/PC.B, /PY.B など) を演算する際は (S) 演算子を使用できないので、(P) または (L) を使用する。

#### 主な略語

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

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

#### 合成 (/P)、非特定誘導体 (/D) に関する文献

1 1/20 (/ 1 / 7 FT)		
使用例*1	内容	得られる回答
S L1	すべての文献の検索	50-00-0, 50-00-0P,
		50-00-0D, 50-00-0DP
S L1/P	合成文献の検索	50-00-0P
		50-00-0DP
S L1/D	非特定誘導体*2 の文献検索	50-00-0D
		50-00-0DP
S L1/RN	非特定誘導体*2 のみ索引された文献を除く検索	50-00-0
		50-00-0P

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

#### CAS ロール (化合物や化合物クラスの文献中での役割の特定)

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

内容	入力例		
	S L1/THU		
	S L1/THU OR L1/ADV*		
特定化学物質 (CAS RN®)	S L1 (L) ANST/RL		
	S L1 (L) (THU OR ADV)/RL*		
	S 50-00-0 (L) ANST/RL		
ル <b>ク</b> 畑 クニュ 田語	S PHENOLS/POL		
化合物クラス用語	S CARBOXYLIC ACIDS/CAT,RCT		
(IT フィールドの見出し語 - 統制語)	S FULLERENES/CT (L) (USES OR PROC)/RL		

<sup>\*=&</sup>gt;SL1/THU,ADV では検索できない。

<sup>\*2</sup> 構造や分子式を特定できない誘導体。

#### CAS ロール一覧 (/RL) (備考なしは 1967 年-)\*1

<u>v 見 (/RL) (佣ちなしは 130</u>				
定義	備考	コード	定義	備考
分析に関する研究		PREP*2,3	製造	1907-
分析対象		BMF	生化学的工業生産	
分析マトリックス		BPN	生化学的合成	
分析試薬用途		BYP	副生成物	
上記以外の分析に関する研究		IMF	化学的工業生産	
生物学的研究		PUR	精製	
副作用 (毒性を含む)		SPN	化学合成	
農業関連用途		PROC*2	プロセス	
生化学的プロセス	2002-	BCP	生化学的プロセス	2002-
生化学的工業生産		GPR	地質学的、天文学的プロセス	
生化学的合成		PEP	物理的、工学的、または	
化粧品用途	2002-		化学的プロセス	
診断用途	2002-	REM	除去または処分	
食品または飼料用途		PRPH*2	Prophetic 物質	1993-
天然物の起源・分布	2002-	RACT*2	反応物または試薬	
薬理活性	2002-	RCT	反応物	
薬物動態	2002-	RGT	試薬	2002-
医薬用途		USES*2	用途	
上記以外の生物学的研究		AGR	農業関連用途	
上記以外の生物関連用途		ARG	分析試薬用途	
生理活性またはエフェクター	-2001		触媒用途	
(副作用を除く)			化粧品用途	2002-
	2002-		診断用途	2002-
トリーに関する研究				
生成 (意図的合成ではない)				
地質学的、天文学的生成				
上記以外の生成				
ナノ材料	1992-			
. —				
地質学的、天文学的起源·分布	2002-			
上記以外の起源・分布		SCLM*2	クレームに記載された物質	*4
	大大学 一定 一定 一定 一定 一定 一定 一定 一定 一定 一定	分析対象 分析が対象 分析が対象 リル途 上生物に関する研究 生物作業学ので、 会社ので、 を主生化化性、 一型を を生生化化性、 一型を 一型を 一型を 一型を 一型を 一型を 一型を 一型を 一型を 一型を	定義備考コード分析に関する研究 分析対象 分析可求 上記以外の分析に関する研究 生物学的研究 副作用(毒性を含む) 農業関連用途 生化学的合成 化粧品用途 診断用途 食品または飼料用途 天然物の起源・分布 と理活性またはエフェクター (副作用を除く) コンビナトリアル・ケミストリーに関する研究 生成(意図的合成ではない) 地質学的、天文学的起源・分布 大然物の起源・分布 大然物の起源・分布 大然物の起源・分布 大然物の起源・分布 大人材料 地質学的、天文学的起源・分布 大然物の起源・分布 大然物の起源・分布 大然物の起源・分布 大然物の起源・分布 大然物の起源・分布 大然物の起源・分布 大然物の起源・分布 大然物の超源・分布 大別の生 大別の生 大別の生活 大別の 	定義備考コード定義分析に関する研究 分析対象BMF 生化学的工業生産 生化学的合成 副生成物 日本の

<sup>\*1</sup> 各ロールの詳細については、=> HELP ROLE あるいはオンラインシソーラス (例:=> E COS/RL) でも確認できる。

- \*2 4 文字コードはスーパーロール。
- \*3 CAS RN® に対するロール PREP は接尾辞 P と同じ。
- \*4 SCLM の付与対象国・年代 (2025 年 10 月現在)

- CN (中国) 2012 年~ - EP (EPO) 1998 年~ - JP (日本) 2012 年~ - KR (韓国) 2012 年~ - US (米国) 1976 年~ - WO (PCT 出願) 1978 年~

#### 資料種類 (/DT)

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

注) NONPATENT/DT ですべての非特許文献をまとめて検索できる。

#### ファイルセグメント (/FS)

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

#### CA Lexicon で利用できる主な関係コード

関係コード	内容
MAX	すべての関係語
ALL	LT を除くすべての関係語
NEW	新統制語 (旧統制語から変更された語)
USE	優先語
KT	キーワードターム (キーワードを含む語)
NT	下位語
PFT	優先語と非優先語 (SELF, OLD, NEW, USE, UF)

#### - 使用例

```
=> FILE CAPLUS
=> E SEMICONDUCTOR/CT
E#
    FREQUENCY
                 ΑT
                        TERM
                  2
                        SEMICONDUCTIVE X-RAY RADIATION DETECTORS/CT
E1
            a
E2
            0
                 2
                        SEMICONDUCTIVITY/CT
E3
                 2 --> SEMICONDUCTOR/CT
                        SEMICONDUCTOR P-RAY DETECTORS/CT
E4
            0
                  2
=> E E3+MAX
E1
                --> Semiconductor/CT
            a
                                                         BT
                                                                 上位語
E2
                  USE Semiconductor materials/CT
        325792
                                                         HNTE
                                                                 ヒストリーノート
****** END ******
                                                                 旧統制語
                                                         OLD
                                                         UF
                                                                 非優先語
=> E E2+MAX
                                                                  下位語
                                                         NT
                                                                 関連語
                                                         RT
E1
        47666
                BT3 Materials/CT
                                                         RTCS
                                                                 関連化学物質名
E2
         2838
                  BT2 Electrical materials/CT
                                                                 リンク語
                                                         LT
E3
                    BT1 Electric conductors/CT
       166109
E4
        325792
                      --> Semiconductor materials/CT
                        HNTE Valid heading during volume 76 (1972) to present.
E5
                        OLD Conductors, electric (L) semi-/CT
E25
                             Semiconductor compound materials/CT
E26
                        UF
                             Semiconductor material/CT
E27
                        UF
                             Semiconductor substances/CT
                        NT1 Amorphous semiconductors/CT
E28
         5247
E29
         5195
                          NT2 Chalcogenide glasses/CT
E30
         3358
                            NT3 Selenide glasses/CT
E53
         32093
                        RT
                             Atomic layer deposition/CT
E54
         1064
                        RT
                             Metal oxide semiconductor sensors/CT
E55
         2830
                             Metal-semiconductor transition/CT
E60
                        RTCS Copper gallium sulfide (CuGaS2)/CT
                        RTCS Gallium arsenide/CT
E61
                        RTCS Silicon/CT
E62
E63
                        RTCS Silicon alloy, Si,Ge/CT
                             Semiconductor materials (L) cubic/CT
E64
                        LT
E65
                             Semiconductor materials (L) direct-gap/CT
                        LT
****** END ******
```

CA 1	セクシ	/ョン (/CC)
FS	No	セクション名
	1	薬理学
	2	哺乳動物ホルモン
	3	生化学的遺伝学
	4	毒物学
	5	農芸化学的生物調節剤
	6	生化学一般
生	7	酵素
化	8	放射線生化学
学	9	生化学の方法
_	10	微生物生化学
В	11	植物生化学
1	12	非哺乳類生化学
0	13	哺乳類生化学
	14	哺乳類病理生化学
	15	免疫化学
	16	発酵、工業生物化学
	17	食品、飼料化学
	18	動物栄養学
	19	肥料、土壌、植物栄養学
	20	歴史、教育、ドキュメンテーション 有機化学一般
	21 22	有機化字一版   物理有機化学
	23	物理有機化子   脂肪族化合物
	23	脂奶族に5物    脂環式化合物
有	25	│ 加塚式にロが │ ベンゼン、ベンゼン誘導体、
機	23	縮合ベンゼノイド化合物
化	26	生体分子、合成類似体
学	27	複素環化合物 (ヘテロ原子 1 個)
_	28	複素環化合物 (ヘテロ原子 2 個以上)
0	29	有機金属、有機メタロイド化合物
R	30	テルペン、テルペノイド
G	31	アルカロイド
	32	ステロイド
	33	炭水化物
	34	
	35	
		合成高分子の物理的性質
高	37	
分	38	プラスチックの成形、用途
子	39	合成エラストマー、天然ゴム
化	40	織物、繊維
学	41	染料、有機顔料、蛍光増白剤、
		写真用増感剤
М	42	塗料、インク、関連製品
Α	43	セルロース、リグニン、紙、
С	11	その他木材製品
	44 45	7.500 5 5 1 2 115
	45 46	工業有機化子製品、皮里、脂肪、クラ   関高活性剤 - 洗浄剤

FS	No	セクション名
	47	装置、工場設備
	48	単位操作、プロセス
	49	工業無機化学製品
応	50	推進薬、爆薬
用	51	化石燃料、誘導製品、関連製品
化	52	電気化学的、放射および
学		熱エネルギー工学
•	53	鉱物、地質化学
化	54	抽出冶金学
学	55	鉄、鉄合金
エ	56	非鉄合金、合金
学	57	セラミックス
	58	セメント、コンクリート、関連建設材料
Α	59	大気汚染、産業衛生
Р	60	廃棄物処理、処分
Р	61	水
	62	精油、化粧品
	63	薬剤
	64	薬剤分析
物	65	物理化学一般
理	66	界面化学、コロイド
化	67	触媒化学、反応速度論、   無機
学	68	無機反応機構 相平衡、化学平衡、溶液
•	69	柏十寅、化子十寅、 <i>冷/</i> 改   熱力学、熱化学、熱的性質
無	70	「熱力子、熱化子、熱的性質  原子核現象
機	70	- 原子核境象 - 原子力工学
化	72	「思うガエチ」 「電気化学
学	73	光、電子、質量分光学、その他の関連
•	13	する性質
分	74	放射線化学、光化学、写真、その他の
析	• •	複写プロセス
化	75	結晶学、液晶
学	76	電気的現象
_	77	磁気的現象
P	78	無機化学物質、反応
I	79	無機分析化学
Α	80	有機分析化学

<sup>| 46 |</sup> 界面活性剤、洗浄剤 \*CA セクションには年代変遷がある。上記は 2024 年 11 月現在のセクション。

#### CAplus ファイルの主な回答表示形式

CAplus ファイルの主	な凹合表示形式
表示形式	表示内容
CAN	CA 抄録番号 (DN)
BIB (デフォルト)*1	AN、書誌情報 (指定国を除く対応特許情報を含む)、RE.CNT
CBIB	BIB の圧縮型 (ベーシック特許情報のみ)(RE.CNT を除く)
IBIB *1,2	BIB のインデント形式
FAM	特許情報と関連特許ファミリー情報
FBIB*1	BIB、FAM
STD*1	BIB、CLASS
ISTD*1,2	STD のインデント形式
ABS	抄録中の構造図、抄録
IND	索引情報 (特許分類、CA セクション、補遺語、索引語)
ALL*1	STD、ABS、IND、全引用情報、OS.G (最大 50 まで)、OSC.G、UPOS.G
IALL*1,2	ALL のインデント形式
DALL*3	ALL のデリミタ形式
MAX*1	ALL、FAM、指定国
IMAX*1	MAX のインデント形式
DMAX*3	MAX のデリミタ形式
CLASS	特許分類
IPC.TAB	国際特許分類の詳細情報 (表形式)
IPC.HIT	ヒットした IPC
IPC.UNIQ	ベーシックおよび対応特許に付与された重複のない IPC
PSPI (STI)	特許ステータス
CLM	クレーム
CLMN	クレーム数
LSUS	米国譲渡特許情報
RE	全引用情報
RETABLE	全引用情報 (表形式)
OSG	被引用情報 (OSC.G, UPOS.G, OS.G (最大 50 個までのレコード番号))
OSG.MAX	被引用情報 (OSC.G, UPOS.G, OS.G (最大 1,020 個までのレコード番号)
OS.GMAX	被引用情報 (OS.G (最大 1,020 個までのレコード番号))
PAGE	冊子体 CA のページイメージ (1907-1998)
SAM	標題、索引情報
SCAN	SAM と同じ (回答番号指定不可)
HIT	ヒットした検索語を含むフィールド、または IT 項目
HITIND	IPC、CA セクション、ヒットした検索語を含む IT 項目
HITPPAK	ヒットした CAS RN® の明細書中の記載ページおよび PatentPak 関連リンク
HITRN	ヒットした CAS RN®、そのロールとテキスト説明句
HITSTR	HITRN、CA 索引名、構造図
FHITSTR	ヒットした最初の CAS RN® の HITSTR
HITSEQ	HITSTR、SEQ (配列の 1 文字コード)
FHITSEQ	ヒットした最初の CAS RN® の HITSEQ
KWIC	ヒットした検索語の前後 20 語を表示
OCC	ヒットタームの出現頻度をフィールドごとに表示
	は、PPPI、PPAK、および PatentPak 関連のリンクも表示される。

- \*1 PatentPak 契約者は、PPPI、PPAK、および PatentPak 関連のリンクも表示される。
- \*2 インデント形式とは、完全なフィールド名が表示される形式。
- \*3 ダウンロードしたデータの処理を容易にするために、各フィールドおよびサブフィールドのデータ間に記号 | を付与した表示形式。
- 注)表示形式の複数指定および各フィールドコードも指定可能。

#### 7. CAS REGISTRY ファイル

#### REGISTRY ファイルの収録情報

CAS RN® を付与されたすべての物質情報を収録。

- CAplus/CA ファイルに索引されているすべての特定化学物質\*
  - \* 2009 年以降は実施例中の hard data のない物質 (Prophetic 物質) も、主要国特許がベーシック特許であった場合に限り収録している。1993-2008 年は一部収録。
- 米国 (TSCA)、カナダ (DSL, NDSL)、EU (EINECS) 等の化学物質規制法に基づく既存化学物質 リストに収載された物質
- 公的機関や企業からの依頼により CAS RN®を付与した物質 (CAS 登録番号サービス)
- 登録システム開始時に各種ハンドブック類から収載された化学物質
- 化合物ライブラリ (CHEMCATS ファイル) から登録された物質
- NCI (米国 National Cancer Institute) 由来の物質
- CASREACT ファイルに収録されている反応中の反応関与物質
- GenBank 由来の核酸・タンパク質・ペプチド配列
- 他のデータベース (ChemBank, UPCMLD Library, ChemSpider など)

#### REGISTRY ファイルのレコード例 (IDE 表示形式)

- 1) RN 2867545-79-5 REGISTRY
- 2) ED Entered STN: 12 Dec 2022
- 3) CN 1H-Pyrazole-4-carboxamide, 3-propyl-1-[[4-[5-(trifluoromethyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]methyl]- (CA INDEX NAME)
- 4) OTHER CA INDEX NAMES:
  - CN 3-Propyl-1-[[4-[5-(trifluoromethyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]methyl]-1H-pyrazole-4-carboxamide
- 5) OTHER NAMES:
  - CN Propyl-1-[[4-[5-(trifluoromethyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]phenyl]methyl]pyrazole-4-carboxamide
- 6) MF C17 H16 F3 N5 O2
- 7) INCH InChI=1S/C17H16F3N502/c1-2-3-13-12(14(21)26)9-25(23-13)8-10-4-6-11(7-5-10)15-22-16(27-24-15)17(18,19)20/h4-7,9H,2-3,8H2,1H3,(H2,21,26)
- 8) INKY PCMBHMIVVGGODO-UHFFFAOYSA-N
- 9) CI COM
- 10) SR CA
- 11) LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER

12)

\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

- 3 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
- 14) 2 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
- 15) 3 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
  - 1) CAS RN®
- 2) 入力日
- 3) CA 索引名
- 4) 他の CA 索引名

- 5) 同義名
- 6) 分子式
- 7) InChl
- 8) InChIKey 12) 化学構造図

- 9) クラス識別子
- 10) 収録源
- 11) CAS RN® 所在
- 15) CAplus の文献数

- 13) CA の文献数
- 14) CA の非特定誘導体の文献数

#### REGISTRY ファイルの主な検索フィールド

REG	REGISTRY ファイルの主な検索フィールド					
	コード	内容	索引 単位	入力例		
	無し (/BI)	基本索引(名称フラグメント、成分 分子式、InChIKey、CAS RN®、累積 索引コード)	単語	S CHOLEST? S C10H12O2		
基本索引など	/CCI /CI /CRN /DEF /DT.CA /ED /ENTE*1 /FA /FS /INKY /LC /PCT /PCT.CNT /RN /REF.CAPLUS /RL /RLD /RLS /SR /UP	成分クラス識別子 クラス識別子 成分 CAS RN® 物質の定義 CAplus ファイルの資料種類 入力日 索引者情報 フィールドの存在 ファイルセグメント InChIKey CAS RN® 所在 ポリマー分類用語 ポリマー分類用語の数 CAS RN® CAplus ファイルの文献数 RL*2 (特定物質として索引) RL*2 (非特定誘導体として索引) RL+RLD*2 収録源 更新日	句句句語句值語句語句句句值句值句句句句值	S PMS/CCI S PMS/CI S 79-10-7/CRN S ABSOLUTES/DEF S PATENT/DT.CA S 20240801/ED S PEROXIDE/ENTE S RSD/FA, S NO RSD/FA S PROTEIN/FS S AAOMVBNPPKGQPO/INKY S TSCA/LC S POLYESTER/PCT S L1 AND 4/PCT.CNT S 3023546-82-6/RN S 50= <ref.caplus S PREP/RL S PREP/RLD S PREP/RLS S CA/SR S UP&gt;=20240401</ref.caplus 		
化学物質名	/CN /CNS*1 /HP /INS.HP /INS.NHP	化学物質完全名称 化学物質名称自然セグメント 見出し語母核 CA 索引名セグメント - 見出し語母核 CA 索引名セグメント - 非見出し語母核	句語 単句語 単語	S BENZOIC ACID/CN S ?CYCLIN?/CNS S BENZENE/HP S ACID/INS.HP S PHENOL/INS.NHP		
分子式	/ONS /ATC /ELC /ELC.SUB /ELF /ELR.xx /ELS /ELS.MCF /FW /MF /NC /PG /元素記号 /MAC	他の名称セグメント 原子数 元素数 元素数 (物質全体) 元素式 元素比.xx (xx = CH, CN, CO, HC, HN, HO, NC, NH, NO, OC, OH, ON) 元素種 元素種 (物質全体) 分子式 成分数 周期律グループ 特定知成 相対組成	単数数数 数 句句値句値句値・値句値値値値値値値値値値	S ANILINE/ONS S 5/ATC S 7-9/ELC S ELC.SUB>=8 S C H F O/ELF S 1-2/ELR.CN  S B/ELS (P) H/ELS S (N (XA) P)/ELS.MCF S 420-460/FW S C7H3BR2F02/MF S F/ELS NOT NC>=2 S B6/PG S 7/SI S (95 (P) PT)/MAC S 1-5 ND/MAC S FE.CR.NI/RC		
環データ	/EA /EAS /ES /ESS /NRS /CNRS	元素式 (環系) 元素式 (最小環) 元素配列 (環系) 元素配列 (最小環) 環系の数 (物質全体) 環系の数 (成分内)	句句句句值值	S C4N-C5N/EA S C4N/EAS S NCOC2-C6/ES S NCOC2/ESS S 7/NRS S 3/CNRS		

<sup>\*1</sup> 後方一致、中間一致検索可能。 \*2 CAplus ファイルに索引された際に付与されるスーパーロール。

	ı			
	コード	内容	索引   単位	入力例
	/ND			C 10/ND
	/NR	最小環の数 (物質全体)	数值	S 10/NR
	/CNR	最小環の数 (成分内)	数值	S CNR>=12
	/NRRS	環系内の環の数	数值	S 5-6/NRRS
	/RATC	環系の原子数	数值	S 4/RATC
瑨	/REL	環系の構成元素種	数值	S 3 N/REL
環 デ	7	(および環系内の REL の存在数)		
ĺ	/RELC	環系内の元素種の数	数值	S 2/RELC
タ	/RELF	環系の構成元素式	句	S C N O P/RELF
				•
	/RF	環系の式	句	S C12NS/RF
	/RID	環系識別子	句	S 1938.20.2/RID
	/SZ	環系の環の大きさ	句	S 3-4-8/SZ
	/SZS	最小環の環の大きさ	数值	S 8/SZS
	/CALC	Lipinski Rule にマッチする物質に限定	句	S L1 AND LIP/CALC
	/FA	フィールドの存在	句	S PKA/FA
	/FNA	存在しないフィールド	句	S LOGP/FNA
	/EPROPS	物性データの種類 (/ETAG, /FA)	句	S TENSILE STRENGTH/EPROPS
	/ETAG(/TAGS)	参照文献タグ	句	S MASS SPECTRA/ETAG
	/PNT	物性の注釈	句	S MP<=30(P)DECOMP/PNT
	/PSO	物性の収録源	句	S ACD/PSO AND L1
	/PTYP	物性のタイプ	句	S CALCULATED/PTYP
	/RAN.CA	物性の出典の CA レコード番号	句	S 160:561391/RAN.CA
	/SPEC	スペクトルデータ	句	S IR/SPEC
	/BCF	生物濃縮係数	数值	S 4000-5000/BCF
	/BP	沸点 (deg C)	数值	S 150-155/BP
	/DEN	密度 (g/cm**3)	数值	S DEN>=1.002
	/ECON	コンダクタンス (Siemens)	数值	S 0.5/ECON
	/ECND	電気伝導率 (S/cm)	数值	S 1400-1900/ECND
	/ERES	電気抵執手(S)cm) 電気抵抗 (ohm)	数值	S 30-70/ERES
			数值	S EREST>=6600
	/EREST	比電気抵抗 (ohm*cm)		
	/HVAP	蒸発エンタルピー (kJ/mol)	数值	S 100-110/HVAP
	/FP	引火点 (deg C)	数值	S 100-110/FP
44	/FRB	回転可能な結合数	数值	S 1-2/FRB
物 性 デ	/HAC	水素受容基数	数值	S 10-15/HAC
生	/HD	水素供与基数	数值	S 2>HD
7	/HDAS	水素供与基/水素受容基総数	数值	S 12/HDAS
タ	/KOC	有機炭素吸着係数 Koc	数值	S 100-200/KOC
,	/LD50	50% 致死量 (mg/kg)	数值	S 741-745/LD50
	/LOGD	オクタノール/水分配係数の対数値	数值	S 2.21/LOGD
	72005	(pH 考慮)		3 2.21, 23 33
	/LOGP	オクタノール/水分配係数の対数値	数值	S 1>=LOGP
	·	•	数值	S MM<=0.98
	/MM	磁気モーメント (muB)		
	/MVOL	ーモル体積 (cm**3/mol)	数值	S 31.1/MVOL
	/MP	融点	数值	S MP<=30
	/MW	分子量	数值	S 500 <mw< td=""></mw<>
	/ORP	旋光度 (deg)	数值	S 70-80/ORP
	/PKA	酸塩基解離定数 (pKa)	数值	S 1-5/PKA
	/PSA	極性表面積 (A**2)	数值	S 3.24/PSA
	/RI	屈折率	数值	S 1.427/RI
	/SLB.MASS	質量溶解度 (g/L)	数值	S SLB.MASS>=1
	/SLB.MOL	モル溶解度 (mol/L)	数值	S SLB.MOL>=1
	/ISLB.MASS	古有質量溶解度 (g/L)	数值	S 1.3/ISLB.MASS
				*
	/ISLB.MOL	固有モル溶解度 (mol/L)  ガラス転移点 (dog.C)	数值	S 1.6E-14/ISLB.MOL
	/TG	ガラス転移点 (deg C)	数值	S 400-430/TG
	/TS	引張強度 (Mpa)	数值	S 42/TS
	/UR	数值幅	数值	S BP=200(P)UR<=10
	/VP	蒸気圧 (Torr)	数值	S .00010002/VP

#### 近接演算子

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

#### クラス識別子 (/CI、/CCI)

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

<sup>\*1</sup> COM/CCI は検索できない。

#### ファイルセグメント (/FS)

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

#### POLYLINK コマンド (ポリマー検索に有効なコマンド)

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

<sup>\*2</sup> CAplus ファイルで該当する CAS RN® を用いた検索ができない物質。

ポリマー分類用語 (/PCT)

ホリマー分類用語 (/PCI)	— I»	to the	— I»
名称	コード	名称	コード
AMINO RESIN	AR		
CHLOROPOLYMER	CLPO		
DOUBLE STRAND	DBLSTR		
EPOXY RESIN	EP		
FLUOROPOLYMER	FLPO		
MANUAL COMPONENT	MANC		
MANUAL REGISTRATION	MANR		
PHENOLIC RESIN	PR		
POLYACETYLENE	PACT		
POLYACRYLIC	PACR		
POLYAMIC ACID	PAMA	POLYAMIC ACID FORMED	PAMA F
POLYAMIDE	PA	POLYAMIDE FORMED	PA F
POLYAMINE	PM	POLYAMINE FORMED	PM F
POLYANHYDRIDE	PANH	POLYANHYDRIDE FORMED	PANH F
POLYAZOMETHINE	PAZM	POLYAZOMETHINE FORMED	PAZM F
POLYBENZIMIDAZOLE	PBI	POLYBENZIMIDAZOLE FORMED	PBI F
POLYBENZOXAZOLE	PBO	POLYBENZOXAZOLE FORMED	PBO F
POLYCARBODIIMIDE	PCD	POLYCARBODIIMIDE FORMED	PCD F
POLYCARBONATE	PC	POLYCARBONATE FORMED	PC F
POLYCYANURATE	PCY	POLYCYANURATE FORMED	PCY F
POLYESTER	PES	POLYESTER FORMED	PES F
POLYETHER	PETH	POLYETHER FORMED	PETH F
POLYHYDRAZIDE	PHZ	POLYHYDRAZIDE FORMED	PHZ F
POLYIMIDE	PI	POLYIMIDE FORMED	PIF
POLYIONENE	PION	POLYIONENE FORMED	PION F
POLYISOCYANURATE	PIR	POLYISOCYANURATE FORMED	PIR F
POLYKETONE	PK	POLYKETONE FORMED	PK F
POLYNUCLEOTIDE	PNUC		
POLYOLEFIN	POLF		
POLYOTHER	OTHER		
POLYOTHER ONLY	OTHERO		
POLYPHENYL	PPH	POLYPHENYL FORMED	PPH F
POLYPHOSPHAZENE	PPSZ	POLYPHOSPHAZENE FORMED	PPSZ F
POLYQUINOXALINE	PQ	POLYQUINOXALINE FORMED	PQ F
POLYSTYRENE	PSTY		
POLYSULFIDE	PSF	POLYSULFIDE FORMED	PSF F
POLYSULFONAMIDE	PSA	POLYSULFONAMIDE FORMED	PSA F
POLYSULFONE	PSU	POLYSULFONE FORMED	PSU F
POLYTHIOESTER	PTES	POLYTHIOESTER FORMED	PTES F
POLYTHIOETHER	PTETH	POLYTHIOETHER FORMED	PTETH F
POLYUREA	PUA	POLYUREA FORMED	PUA F
POLYURETHANE	PUR	POLYURETHANE FORMED	PUR F
POLYVINYL	PVIN	. SEIGHEIT MILLIONNED	· OK I
		//wah sas arg/markating/adf/advma	l

<sup>\*</sup> ポリマー分類用語の詳細については https://web.cas.org/marketing/pdf/polymerclass.pdf 参照。

#### REGISTRY ファイルの主な回答表示形式

REGIST	RY ファイルの王ない まっかー	
	表示形式	表示内容
	IDE (デフォルト)	FIDE 表示形式から環系データ (RSD) および物性データを除いた物質情報、ただし 50 名称まで
	IDERL	IDE と CAplus におけるロールおよび資料種類
	ALL, MAX*1	スペクトル情報を除くすべてのフィールドと、CA ファイルの
定	,	最新 10 件分の文献情報
型	IALL*2	ALL のインデント形式
表	FIDE	タンパク質・核酸の配列データ、スペクトル情報を除くすべての物質情報
定型表示形式	REG	CAS RN® (DR, PR, AR, RR があればそれらも表示)
式	SAM	CA 索引名、分子式、InChl、InChlKey、クラス識別子、構造図、
20	JAM	配列長
	SCAN	CA 索引名、分子式、クラス識別子、構造図、配列長 (回答番号指定不可)
	HIT	ヒットした検索語を含むすべてのフィールド
	KWIC	ヒットした検索語の前後 20 語
	NVVIC	こットした快系品の削後 20 品
ュ <i>(</i> タ		
正 ン	SQD	CAS RN®、タンパク質・核酸配列データ
表が	SQD3	CAS RN®、タンパク質(3 文字コード)・核酸配列データ
示質	SQN	CAS RN®、タンパク質・核酸名称
定型表示形式(タンパク質・核酸関連)	SQIDE	IDE、タンパク質・核酸配列データ
九修酸	SQIDE3	IDE、タンパク質・核酸配列ナータ   IDE、タンパク質 (3 文字コード)・核酸配列データ
関	SQIDES	IDE、タンハグ貝 (3 文子コード) 「核酸配列」   一タ
連		
	IN	CA 索引名
名 称	CN	化学物質名 (50 名称まで)
称	FCN	すべての化学物質名
	CCN	すべての化学物質名 (圧縮型)
構	STR	  構造図 (デスクリプタ付き立体化学表示)
構 造 な ど	STF	構造図(アカノダクス内で立体化子及外)  構造図(平面)
など	COMP	俄尼因(十回)   成分
۲	COMP	1,3%, )
瑨		
環 デ	RSD	環系データ
	SRSD	簡略型環系データ
タ		
	PRFA	物性データの存在
	PROP	すべての物性データ (EPROP, ETAG, PPROP)
物	EPROP	実測物性値
性	PPROP (CALC)	予想物性値 (計算物性値)
物 性 デ ー	QRD	IDE とヒットした物性データ
タ	ETAG	参照文献タグ (各物性につき 1 文献ずつ)
÷,	ETAGFULL	参照文献タグ (すべての文献情報)
	SPEC	スペクトル情報
*1 是大		文献情報を CA ファイルの表示形式で表示可。ただし、文献情報のみの

- \*1 最大 10 件分までの最新文献情報を CA ファイルの表示形式で表示可。ただし、文献情報のみの表示は不可。
- \*2 インデント形式とは、完全なフィールド名が表示される形式。
- 注)表示形式の複数指定可、定型表示形式の他、各フィールドコードも指定可。ただし、定型表示形式とカスタム表示形式の併用は不可。

#### 8. CASREACT ファイル

#### CASREACT ファイルの収録情報

雑誌および特許に由来する有機化学反応情報を収録。

- CA 由来の反応情報 (主に 1985 年以降)
- CA 以外の収録源由来の反応情報
  - Biotransformation (1971~1997 年)
  - InfoChem (1974~1999 年)
  - INPI (1840~1985 年)
  - SORD (1961~2011 年)
  - Wiley (1921~2015年)

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

1) 187:199794 Lewis Acid Sites in (110) Facet-Exposed BiOBr Promote C-H Activation and Selective Photocatalytic Toluene Oxidation. Zhou, Gaofeng; Lei, Ben; Dong, Fan (Research Center for Carbon-Neutral Environmental & Energy Technology, Institute of Fundamental and Frontier Sciences, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu, 611731, Peop. Rep. China). ACS Catalysis, 14(7), 4791-4798 (English) 2024. CODEN: ACCACS. ISSN: 2155-5435. Publisher: American Chemical Society.

2) 3 A ===> B + C + DRX(1) OF 1

3) 3 A С n

4) RX(1) RCT A 108-88-3 RGT E 7782-44-7 02

PRO B 100-52-7, C 100-51-6, D 65-85-0

CAT 7787-57-7 Bismuthine, bromooxo-

SOL 75-05-8 MeCN

CON 2 hours, room temperature, 1 atm

NTE catalyst prepared and used, Xenon lamp used, photochemical

文献情報 1) 書誌情報 (CA ファイル由来の情報)

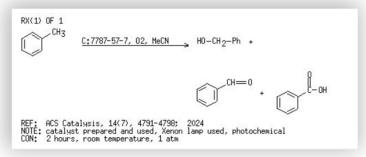
反応情報

- 2) 反応マップ (反応物と生成物の一般記号)
- 3) 構造図 (反応物と生成物の構造図)
- 4) 反応要約(反応に関与するすべての物質の CAS 登録番号)

RCT: 反応物 RGT: 試薬 PRO: 生成物 CAT: 触媒

SOL:溶媒 CON: 反応条件 NTE: 注記

#### FCRDREF 表示形式 (デフォルト表示形式)



#### CASREACT ファイルの主な検索フィールド

CAS	CASREACT ファイルの主な検索フィールド				
	コード	内容	索引単位	入力例	
	無し (/BI)*1	基本索引	単語	S 50-00-0	
		(反応要約中の CAS RN®、		S L1 (L) L2	
		標題、抄録、補遺語、		S FAILED (W) REACT?	
		索引語*2、		S STEREOSELECT?	
		反応情報中の単語)			
	/CAT*3	触媒	句	S 100-52-7/CAT	
				S ANY/CAT	
	/NPRO	生成物以外の物質	句	S 10025-91-9/NPRO	
	,			S L5/NPRO	
	/NS	反応ステップ数	数值	S 109-99-9 (L) 71-43-2 (L) 1/NS	
	/NTE*1	注記	単語	S ?HYDROGEN?/NTE	
	/PRO	生成物	句	S 74-82-8/RCT (L) 74-85-1/PRO	
	,			S L1/RCT (L) L2/PRO	
	/RCT	反応物	句	S 2555-28-4/RCT	
反	/RGT	試薬	句	S 107263-95-6/RGT	
底	/RRT	反応物または試薬	句	S 50-00-0/RRT	
反応情報	/SOL*3	溶媒	句	S L1/PRO (L) 680-31-9/SOL	
112	/YD	収率	数值	S 502-49-8/PRO (A) 94-100/YD	
	NONE/YDT	収率データなし	句	S 502-49-8/PRO (A)	
	,			(94-100/YD OR NONE/YDT)	
	/FG	官能基一般	句	S EPOXIDE/FG	
	,	(/FG.PRO, /FG.RGT,		·	
		/FG.RCT)			
	/FG.FORM	生成した官能基	句	S 1,3-C3N2/FG.FORM	
	/FG.NON	反応しない官能基	句	S ACYCLIC ALKENE/FG.NON	
	/FG.PRO	生成物中の官能基	句	S NITRO/FG.PRO	
	/FG.RCT	反応物中の官能基	句	S PRIMARY AMINE/FG.RCT	
	/FG.RGT	試薬中の官能基	句	S CARBOXYLIC/FG.RGT	
	/FG.RXN	反応した官能基	句	S EPOXIDE/FG.RXN	
	/FG.YD	官能基 - 収率	数值	S NITRO/FG.PRO (A) 80 <fg.yd< td=""></fg.yd<>	
	NONE/FG.YDT	官能基 - 収率情報なし	句	S L1 (A) (90 <fg.yd fg.ydt)<="" none="" or="" td=""></fg.yd>	
<b>*</b>	/AN	レコード番号	句	S 188:89405/AN	
書誌情報	/FS	ファイルセグメント	句	S INFOCHEM/FS	
情	/ED	入力日	数值	S 20240709/ED	
報	/UP	更新日	数值	S 20240401>UP	

CAplus/CA ファイルの検索フィールドを使用できる (ただし、対応特許情報、CAS RN®、CAS ロール、引用情報、被引用情報、特許分類は除く)。

#### 構造検索

「5. CAS STNext 構造検索コマンド」参照

<sup>\*1</sup> 後方一致、中間一致検索可能。

<sup>\*2</sup> 索引中の CAS RN® は含まない。

<sup>\*3</sup> CA 由来ではないレコードは触媒と溶媒の CAS RN® を含まない場合がある。

#### - 官能基検索

- 官能基用語:=> HELP FGA で一覧できる。

- 官能基クラス用語:

ALCOHOLS ALKENES ALKYNES **AMINES** CARBONATE DERIVATIVES CARBOXY DERIVATIVES HALIDES

HETEROCYCLES KETONES ORGANOMETALLICS

- 各官能基クラス用語に含まれる官能基は、=> HELP FGC で確認できる。

#### 近接演算子 (CASREACT ファイル)

处按供异丁 (CASKEAC	1 2 5 1 10)
近接演算子	内容 [検索例]
(A)	生成物 (PRO, FG.PRO) と収率 (YD, FG.YD)
	S 67-64-1/PRO (A) 80-100/YD
	S THIOPHENOL/FG.PRO (A) 90 <fg.yd< th=""></fg.yd<>
(S)	官能基検索: 反応物 (FG.RCT, FG.RXN) と生成物 (FG.PRO, FG.FORM) の
	官能基中の 1 以上の原子をマッピングする場合
	S KETONES/FG.RCT (S) ALCOHOLS/FG.PRO
	S CYCLIC ALKENE/FG.RXN (S) EPOXIDE/FG.FORM
(L)	同一反応 (一段階、多段階) 中に限定する場合
	S 50-00-0/RCT (L) 19031-70-0/PRO
	S L5 (L) 60-29-7/SOL

#### CASREACT ファイルの主な回答表示形式

CASKLACT 7 7 17003	2.6日日长57023
表示形式	表示内容
PATH	ヒットした反応を含む最長の反応経路の反応マップ、構造図
FPATH	PATH、反応要約
SPATH	ヒットした反応を含む最短の反応経路マップ、構造図
FSPATH	SPATH、反応要約
FCRD	ヒットした最初の反応のコンパクト表示
FCRDREF (デフォルト)	FCRD、原資料 (SO, PY)
CRD	ヒットしたすべての反応のコンパクト表示
CRD(n)	反応 n のコンパクト表示
CRDREF	CRD、原資料 (SO, PY)
CRDREF(n)	反応 n のコンパクト表示、原資料 (SO, PY)
RX	ヒットしたすべての反応の反応マップ、構造図、反応要約
RX(n)	反応 n の反応マップ、構造図、反応要約
RXG	ヒットしたすべての反応の反応マップ、構造図
RXG(n)	反応 n の反応マップ、構造図
RXS	ヒットしたすべての反応の反応マップ、反応要約
RXS(n)	反応 n の反応マップ、反応要約
SCAN	FCRD、標題 (回答番号指定不可)
FHIT	ヒットした最初の反応の反応マップ、構造図、反応要約
HIT	ヒットしたすべての反応の反応マップ、構造図、反応要約、およびヒット
	タームを含むフィールド
OCC	ヒットタームの出現頻度をフィールドごとに表示

- \* ALL, DALL, IALL, MAX では文献情報とすべての一段階反応情報が表示される。
- \* CRD, RX, ALL, DALL, IALL, MAX は情報量が非常に多い場合があるので注意する。
- \* CA ファイルの表示形式で文献情報を表示できる。
- \*表示形式の複数指定可能。定型表示形式の他、各フィールドコードも指定可能。

# 9. MARPAT ファイル

### MARPAT ファイルの収録情報

- CA ファイルに収録された特許のうち、特許請求範囲または発明の詳細な説明にマルクーシュ構造を含んでいるすべての特許中のマルクーシュ構造情報。
- INPI (Institute National de la Propriete Industrielle) から入手した特許中のマルクーシュ構造情報(1961~1987年)。

### マルクーシュ構造の選択 (CA ファイル由来の特許から収録する場合)

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

### MAPRAT ファイルのレコード例 (BIB QHITEXG 表示形式)

PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive 1) 184:145048 MARPAT Full-text ΤI Preparation of indazole-6-carboxylic acid hydroxamide derivatives as PΙ PATENT NO. KIND DATE APPLICATION NO. DATE -----\_\_\_\_ \_\_\_\_\_ -----WO 2023177249 A1 20230921 WO 2023-KR3560 20230317 2) MSTR 1 Assembled Ġ5 417,423,424,426: opt. substd. by G3 Additional displayed G-groups: G1 = (1-3) CH2= alkyl <containing 1-10 C> / alkoxy <containing 1-10 C> / halo / 19 / OH G3 / CN / NO2 / Ph / OCH2Ph / OPh / (Specifically claimed: OMe / Me / F / Cl / Br / 389 / Pr-i) G4 = H / F = H / F / Cl / Br Patent location: 3) Note: or pharmaceutically acceptable salts substitution is restricted Note:

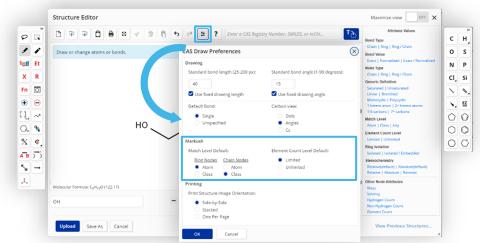
1) 書誌情報 (CA ファイル由来の情報) 2) マルクーシュ構造情報 3) 特許記載位置 4) 注記

### **構造検索 (MARPAT ファイル)**

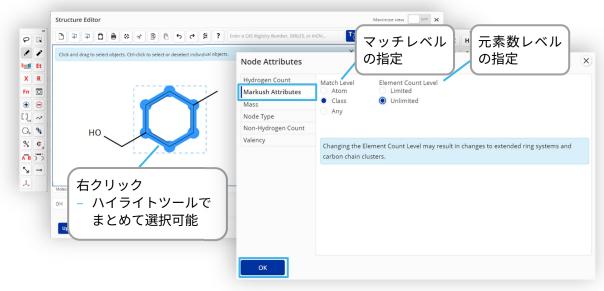
- マッチレベルの種類

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

- \*1 マッチレベル ANY を指定するノードは、元素数レベルを UNLIMITED(非限定)にする。
- 元素数レベルの種類
  - LIMITED (限定) : 指定した元素の種類と数が該当するものに限定
  - UNLIMITED (非限定) :元素の数が明記されていないものも含める
- マッチレベル、元素数レベルの指定
  - デフォルトの値は作図画面の Preferences > Markush で確認・変更することができる。デフォルト:環のマッチレベルは Atom、鎖のマッチレベルは Class、元素数レベルは Limited



– デフォルト以外の設定に変更したい場合は、ノードを右クリックした後に 「Markush Attributes」の画面でマッチレベルと元素数レベルを選択し、OK をクリックする。



- MARPAT ファイルでは、実行できない検索
  - ブール演算子を含む構造検索
  - スクリーンを使った検索
  - EXACT, FAMILY 検索
  - 結合属性:環/鎖の指定

### MARPAT ファイルの検索フィールド

コード	名称	索引単位	検索例
無し (/BI)	基本索引	単語	S SALT#
	(NTE (一般的注記)、DER (誘導体情報)、		
	MPL (特許中のマルクーシュ構造式の記載箇所)、		
	STE (立体化学) の単語)		
/AN	レコード番号	句	S 111:136145/AN
/ED	入力日	数值	S 20240509/ED
/UP	更新日	数值	S 20240701/UP

## MARPAT ファイルの主な回答表示形式

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

- \* デフォルトの表示形式は BIB。
- \* ALL, DALL, IALL, MAX 表示形式では文献情報とすべてのマルクーシュ構造が表示される。
- \* CA ファイルの表示形式で文献情報を表示できる。
- \*表示形式の複数指定可能。定型表示形式の他、各フィールドコードも指定可能。

# 10. CASFORMULTNS ファイル

## CASFORMULTNS ファイルの収録情報

製剤・配合情報を収録。

- CAplus 由来の特許
  - 英語 1996 年以降
  - 日本語、中国語、韓国語、仏語、独語 2000 年以降 (言語による)
- CAplus 由来の英語の雑誌論文 (2014 年以降)
- NLM の DailyMed® データベース由来の添付文書

# CASFORMULTNS ファイルのレコード例 (ALL 表示形式)

1)	AN	2023:51673 CASFOR	RMULTNS			書誌情報 (BIB)
2)	CPAN	2023:1520218				百心月秋 (DID)
3)	DN	184:73071				
4)	ED	14 Dec 2023				
5)	UP	6 Jun 2024				
6)	TI	Preparation proces	ss of pe	eppermint oi	l with sustained-releas	se and
-		long-lasting bacte	ericidal	effect		
7)	AU	Zhang, Tao; Qiu, S	Song; Wa	ang, He		
8)	JT	Faming Zhuanli She				
9)	PA	Anhui Hengda Pharr	naceutio	al Co., Ltd		
10)	DT	Patent				
•						
11)	PΙ					
		PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
		CN 116473943	Α	20230725	CN 2023-10211518	20230307
10\	-N	<b>.</b> .				
12)	FN	Form 2	ul. 61	D.1	. Astinu Charilination	
13)	FD	Peppermint Oil wit	tu STOM-	release Lon	g-Acting Sterilization	ETTECT:
		_			erilization Effect, Com	
1.4\	CDDC	Drug Delivery Syst				
14)		Drug Delivery Syst				
15)	GRPC	Drug Delivery Syst G1-G11 11				
15) 16)	GRPC CMPC	Drug Delivery Syst G1-G11 11				
15) 16) 17)	GRPC CMPC TGTC	Drug Delivery Syst G1-G11 11 13	tems	ng-Acting St	erilization Effect, Co	ntrolled-Release
15) 16)	GRPC CMPC	Drug Delivery Syst G1-G11 11 13 2 The prepn. process	tems s of pep	ng-Acting St	erilization Effect, Con	e and
15) 16) 17)	GRPC CMPC TGTC	Drug Delivery Syst G1-G11 11 13 2 The prepn. process long-lasting bacte	tems s of pep ericidal	ng-Acting St opermint oil effect com	erilization Effect, Con with sustained-release prises the following s	e and teps: (1)
15) 16) 17)	GRPC CMPC TGTC	Drug Delivery Syst G1-G11 11 13 2 The prepn. process long-lasting bactedissolving sodium	s of pepericidal	opermint oil effect com	with sustained-release prises the following so	e and teps: (1) um alginate a
15) 16) 17)	GRPC CMPC TGTC	Drug Delivery Syst G1-G11 11 13 2 The prepn. process long-lasting bactedissolving sodium	s of pepericidal	opermint oil effect com	erilization Effect, Con with sustained-release prises the following s	e and teps: (1) um alginate a
15) 16) 17) 18)	GRPC CMPC TGTC AB	Drug Delivery Syst G1-G11 11 13 2 The prepn. process long-lasting bactedissolving sodium soln., adding emul	s of pepericidal	opermint oil effect com	with sustained-release prises the following so	e and teps: (1) um alginate a
15) 16) 17) 18)	GRPC CMPC TGTC AB	Drug Delivery Syst G1-G11 11 13 2 The prepn. process long-lasting bacte dissolving sodium soln., adding emul : Example	s of pepericidal	opermint oil effect com	with sustained-release prises the following so	e and teps: (1) um alginate a (ABS) tirring to
15) 16) 17) 18)	GRPC CMPC TGTC AB	Drug Delivery Syst G1-G11 11 13 2 The prepn. process long-lasting bacte dissolving sodium soln., adding emul : Example	s of pepericidal	opermint oil effect com	with sustained-release prises the following so	e and teps: (1) um alginate a (ABS) tirring to
15) 16) 17) 18) 19) 20)	GRPC CMPC TGTC AB	Drug Delivery Syst G1-G11 11 13 2 The prepn. process long-lasting bacte dissolving sodium soln., adding emul : Example Example 1	s of pepericidal	opermint oil effect com	with sustained-release prises the following so	e and teps: (1) um alginate a (ABS) tirring to
15) 16) 17) 18) 19) 20)	GRPC CMPC TGTC AB	Drug Delivery Syst G1-G11 11 13 2 The prepn. process long-lasting bacte dissolving sodium soln., adding emul : Example Example Example 1	s of pep ericidal alginat lsifier	opermint oil effect com e into dist and soybean	with sustained-release prises the following so	e and teps: (1) um alginate a (ABS) tirring to
15) 16) 17) 18) 19) 20) 21) 22)	GRPC CMPC TGTC AB	Drug Delivery Syst G1-G11 11 13 2 The prepn. process long-lasting bacte dissolving sodium soln., adding emul : Example Example Example The prepn. process Long-lasting bacte Description 10 11 12 13 14 15 15 16 17 17 18 18 18 18 18 18 18 18 18 18 18 18 18	s of pepericidal alginat	opermint oil effect com e into dist and soybean	with sustained-release prises the following st d. water to prep. sodiu oil into beaker and st	e and teps: (1) um alginate a (ABS) tirring to
15) 16) 17) 18) 19) 20) 21) 22) 23)	GRPC CMPC TGTC AB LCC LCD GROU GDS GFR	Drug Delivery Systems of 1-G11 11 13 2 The prepn. process long-lasting bacted dissolving sodium soln., adding emulations of the section of th	s of pepericidal alginat	opermint oil effect com e into dist and soybean	with sustained-release prises the following st d. water to prep. sodiu oil into beaker and st	e and teps: (1) um alginate a (ABS) tirring to
15) 16) 17) 18) 19) 20) 21) 22) 23) 24)	GRPC CMPC TGTC AB  LCC LCD GROU GDS GFR CMPS	Drug Delivery Systems of 1-G11 11 13 22 The prepn. process long-lasting bacted dissolving sodium soln., adding emulations of the sodium alginate according to the sodium according to the sodium alginate according to the sodium alginate according to the sodium accordin	s of pepericidal alginat	opermint oil effect com e into dist and soybean	with sustained-release prises the following st d. water to prep. sodiu oil into beaker and st	e and teps: (1) um alginate a (ABS) tirring to
15) 16) 17) 18) 19) 20) 21) 22) 23) 24) 25)	GRPC CMPC TGTC AB LCC LCD GROU GDS GFR CMPS GOP	Drug Delivery Systems G1-G11 11 13 2 The prepn. process long-lasting bacted dissolving sodium soln., adding emulations and the second second solutions of the second secon	s of pepericidal alginatelsifier	opermint oil effect com e into dist and soybean	with sustained-release prises the following si d. water to prep. sodi oil into beaker and si	e and teps: (1) um alginate a (ABS) tirring to 構成成分情報 (CHEM)
15) 16) 17) 18) 19) 20) 21) 22) 23) 24)	GRPC CMPC TGTC AB  LCC LCD GROU GDS GFR CMPS	Drug Delivery Systems G1-G11 11 13 2 The prepn. process long-lasting bacted dissolving sodium soln., adding emulations and the solution of the sodium alginate at Desc: Pharmaceutic C1-C2 Mandatory Pharmaceutical aquests	s of pepericidal alginatelsifier	opermint oil effect com e into dist and soybean	with sustained-release prises the following st d. water to prep. sodiu oil into beaker and st	e and teps: (1) um alginate a (ABS) tirring to 構成成分情報 (CHEM)
15) 16) 17) 18) 19) 20) 21) 22) 23) 24) 25)	GRPC CMPC TGTC AB LCC LCD GROU GDS GFR CMPS GOP GVO	Drug Delivery Systems G1-G11 11 13 2 The prepn. process long-lasting bacted dissolving sodium soln., adding emulations and the second second solutions of the second secon	s of pepericidal alginatelsifier	opermint oil effect com e into dist and soybean	with sustained-release prises the following si d. water to prep. sodi oil into beaker and si	e and teps: (1) um alginate a (ABS) tirring to 構成成分情報 (CHEM)

```
28)
    COMPONENT C1
29)
    RN
         9005-38-3
30)
    CNM sodium alginate
    CVO Disintegrants; Disintegrant; Disintegrating agents; Excipients,
31)
32)
    CCN Alginic acid, sodium salt (8CI, 9CI, ACI)
    CAM 15 g
33)
    COP Mandatory
34)
    COMPONENT C2
    RN 7732-18-5
    CNM water
    CVO Solvents; Absorbents, solvents; Solvency; Solvent; Solvent system;
    CCN Water (8CI, 9CI, ACI)
          :
    CAM 1000 g
    CNO distilled water
35)
    COP Mandatory
                                                           レコード構成
                                                         【書誌情報 (BIB)】
    GROUP G2
                                                  レコード番号
    GDS emulsifying agent
    GFU emulsifier
                                                  標題
36)
    CMPS C3-C4
    GOP Mandatory
                                                           【抄録 (ABS)】
    GVO Emulsifying agents; Emulsification agents;
                                                  抄録
    GAM 800 g
                                                      【構成成分情報 (CHEM)】
    COMPONENT C3
                                                    グループ G1
    RN 1338-43-8
                                                     成分 C1
    CNM Span 80
                                                     成分 C2
    CCN Sorbitan, mono-(9Z)-9-octadecenoate (9CI,
                                                    グループ G2
37)
    CFU emulsifier
                                                     成分 C3
    COP Mandatory
                                                     成分 C4
    COMPONENT C4
    RN 9005-65-6
    CNM tween 80
                                                    グループ G3
            :
                                                    成分 C5
    COP Mandatory
    GROUP G3
    GDS Additional ingredients
                                                      【製品情報 (PRODUCT)】
    CMPS C5
                                                  目的
    GOP Mandatory
                                                  ターゲット
                                                   (実験・行程)
    COMPONENT C5
    RN 8001-22-7
    CNM soybean oil
    CCN Soybean oil
    CAM 860 g
    COP Mandatory
```

```
GROUP G11
    GDS Additional ingredients
    CMPS C13
    GOP Mandatory
    COMPONENT C13
    RN
        64-19-7
    CNM acetic acid
    CVO Solutions; Soln. condition; Solns.; Soln. state; Solution; Solution state;
    CAM 900 g
    CFR Desc: solution
    COP Mandatory
38)
    PNC author
                                                                   製品情報
39)
    PNV peppermint oil with slow-release long-acting sterilization effect
                                                                  (PRODUCT)
40)
    PRODUCT PA1
    PUP antibacterial agents
41)
42)
    FEA controlled-release drug delivery systems
         long-acting sterilization effect
43)
    PVO Controlled-release drug delivery systems; Controlled-release
         pharmaceutical; Controlled-release pharmaceuticals; Controlled-release
         drugs; Pharmaceutical controlled release systems; Controlled-release DDS;
         Controlled-released pharmaceuticals; Controlled-release dosage forms;
44)
    TGR treats
45)
    TGT human
    TVO Homo sapiens; Human; Humans; Homo cro-magnonensis; Humanity; Homo sapiens
46)
         cro-magnonensis; Patient; Patients; MeSH ID: D010361
    TGR kills
47)
    TGD on the skin
    TGT bacteria
    TVO Bacteria; Coccus (bacterium); Microorganism, bacteria; Schizomycetes;
         Bacterium (common name); Bacterium; Bacteria, cocci; Eubacterium; Eubiotic
         bacteria; Bacterias; Bacteriae; Bacterial cells; MeSH ID: D001419
48)
    PNTE the preparation process of the peppermint oil with the slow-release
         long-acting sterilization effect comprises the following steps of: s1,
                      2) CAplus レコード番号
                                            3) CA 抄録番号
1) レコード番号
                                                                  4) 入力日
5) 更新日
                                            7) 著者名、発明者名
                                                                  8) 資料名
                      6) 標題
                                                                  12) 処方番号
9) 特許出願人
                      10) 資料種類
                                            11) 特許情報
13) 製剤・配合ディスクリプション
                                            14) グループリスト
                                                                 15) グループ数
16) 成分数
                      17) ターゲット数
                                            18) 抄録
19) 記載位置: カテゴリー 20) 記載位置: ディスクリプション
21) グループ G1
                      22) グループ:ディスクリプション
23) グループ:形状
                                           25) グループ: 選択性
                      24) 成分リスト
26) グループ:キーワード 27) グループ:量
                                            28) 成分 C1
                                                                 29) CAS RN®
30) 成分名
                      31) 成分: キーワード
                                           32) 成分: 化学物質名
                                                                  33) 成分:量
                      35) 成分: ノート
                                           36) グループ:機能
                                                                 37) 成分:機能
34) 成分: 選択性
38) 製品名: コード
                     39) 製品名、概要
                                            40) 製品 PA1
                                                                 41) 製品:目的
                      43) 製品:キーワード
                                           44) ターゲット: 関連性
42) 製品の特徴
45) ターゲット:種類
                     46) ターゲット:キーワード
                                                                  47) ターゲット
48) 製品プロセスノート
```

# CASFORMULTNS ファイルの主な検索フィールド

コード	NS ファイルの主な検索フィールド 内容	索引単位	入力例
無し (/BI)*1		※51年位 単語	S HERBICIDE
無し (/bl) <sup>-</sup>		半市	S FLUOROCARBON?
	•		
	製剤・配合ディスクリプション、		S THICKENER(W)MATERIALS
	グループ:ノート、成分:ノート、		S TOPICAL ANESTHETIC/BI
	活性試験:ノート、製品:プロセ		S 1071-83-6
	ス・活性ノート、グループ : キーワード、成分 : キーワード、製品 : キ		
	ーワード、ターゲット:キーワード、		
/AB*1	溶剤:キーワード、CAS RN®)   抄録	出≕	S HICH TEMP2/AP
•		単語	S HIGH TEMP?/AB
/AD	特許出願日	数值	S 20230102/AD
/AN	レコード番号	句	S 2024:59803/AN
/AP	特許出願番号	句	S US2018-16229471/AP
/ATTR *2	添付文書の出典	単語	S DAILYMED/ATTR
/AU (/IN)	著者名、発明者名	句***	S O NEILL?/AU, S ANON/AU
/AY	特許出願年	数值	S 2022/AY
/CFR	成分:形状	単語・句	S POWDER/CFR
/CFU	成分:機能	句	S ACTIVE AGENT/CFU
/CMD	成分:マルクーシュディスクリプション	単語・句	S EXAMPLE/CMD
/CMPC	成分数	数值	S 1/CMPC
/CMPRN	成分 CAS RN®	句	S 1071-83-6/CMPRN
/CN	化学物質名	句	S PROPYLENE GLYCOL/CN
/CNM	成分名	句	S STEAMIC QOS?/CNM
/CNO*1	成分:ノート	単語	S APPLE VINEGAR/CNO
/CNS*1	化学物質名称自然セグメント	単語	S METHYLACETALDEHYDE/CNS
/COMP	成分情報	句	S SUCROSE/COMP
/COP	成分:選択性	句	S MANDATORY/COP
/CPAN	CAplus レコード番号	句	S 2024:136054/CPAN
/CVO	成分:キーワード	句	S METHYLGLYCOSIDES/CVO
/DN	CA 抄録番号	句	S 181:337999/DN
/DR	投与経路	単語・句	S INTRAOCULARLY/DR
/DT	資料種類	句	S INSERT/DT
/EAD	活性試験:ディスクリプション	単語・句	S ENZYME ACTIVITY/EAD
/EAN*1	活性試験 : ノート	単語	S FUNGICIDE/EAN
/ED	入力日	数值	S 20231214/ED
/FA	フィールドの存在	句	S CAM/FA
/FD*1	製剤・配合ディスクリプション	単語	S FERTILIZE?/FD
/FEA	製品の特徴	単語・句	S POWDER?/FEA
/FN	処方番号	単語・句	S 1000/FN
/GDS	グループ : ディスクリプション	単語・句	S MONOMER/GDS
/GFR	グループ:形状	単語・句	S ABRASIVE MATERIAL/GFR
/GFU	グループ:機能	句	S ACTIVE AGENT/GFU
/GMD	グループ:	単語・句	S CLAIM/GMD
/CNO*1	マルクーシュディスクリプション	₩-±	C ETINU (CNO
/GNO*1 *1 谷士—孙	グループ: ノート 中間一般検索可能	単語	S ETHYL/GNO

<sup>\*1</sup> 後方一致、中間一致検索可能。 \*2 医薬品添付文書のみ。

— IX	中南	±11 \( \tau \)	3 ±/51
コード	内容	索引単位	入力例 SMANDATORY/GOD
/GOP	グループ:選択性	句	S MANDATORY/GOP
/GRN	グループ内の CAS RN®	句	S 1071-83-6/GRN
/GRP	グループ情報	単語・句	S OVALBUMIN/GRP
/GRPRN	グループ CAS RN®	句	S 1071-83-6/GRPRN
/GVO	グループ: キーワード	句	S AVENA SATIVA/GVO
/GRPC	グループ数	数值	S 4/GRPC
/JT	資料名	句	S MUCOSAL IMMUNOLOGY/JT
/LCC	記載位置:カテゴリー	句	S CLAIM/LCC
/LCD	記載位置:ディスクリプション	句	S EXAMPLE 1/LCD
/LCP	記載位置:ページ	句	S 3/LCP
/NDC	National Drug Codes	句	S 10019-115-01/NDC
/NOTE*1	製品 : プロセス・活性ノート	単語	S TORREYA/NOTE
/PA	特許出願人	単語・句	S ALNYLAM/PA
/PC	特許発行国	句	S US/PC
/PD	特許発行日	数值	S 20220101/PD
/PF	製品の剤形・形状	句	S OVAL TABLETS/PF
/PN	特許番号	句	S WO2019001567/PN
/PNC	製品名:コード	句	S GENERIC/PNC
	(AUTHOR, BRAND, GENERIC)		
/PNK	種別付き特許番号	句	S US20220194874A1/PNK
/PNV	製品名、概要	単語・句	S RIVAROXABAN/PNV
/PUP	製品:目的	句	S ANTI-TUSSIVE/PUP
/PVO	製品:キーワード	句	S DRUG DELIVERY SYSTEMS/PVO
/PY*3	発行年	数值	S 2021/PY
/RN	CAS RN®	句	S 1071-83-6/RN
/SOLRN	溶媒 CAS RN®	句	S 7722-84-1/SOLRN
/SVO	溶剤:キーワード	句	S BENZOLINE/SVO
/ /TGD	ターゲット	単語・句	S "COUGH AND COLD"/TGD
/TGR	ターゲット: 関連性	単語・句	S HALLUCINATIONS/TGR
/TGT	ターゲット:種類	句	S PREVENTS/TGT
/TGTC	ターゲット数	数值	S 1/TGTC
/TI*1	標題	単語	S INFLUENZA/TI
/TVO	ターゲット:キーワード	句	S KABUKI SYNDROME/TVO
/UP	更新日	数值	S 20210510/UP
/01 *1		ᄊᄩ	3 20210310/01

<sup>\*1</sup> 後方一致、中間一致検索可能。

<sup>\*3</sup> 医薬品添付文書には発行年は収録されていない。

## 選択性 (/GOP, /COP)

~ x x x x x x x x x x x x x x x x x x x	
コード (名称)	内容
EXCLUDE	除外成分
MANDATORY	必須成分
MUTUALLY EXCLUSIVE ALTERNATIVES	相互排他的な成分
NON-PREFERRED	好ましくない成分
ONE OR MORE	一つ以上含まれている成分
OPTIONAL	任意の成分
PREFERRED	好ましい成分
SPECIFIED	広いカテゴリー中の単一の非限定的な成分
UNDEFINED	未定義

### 記載位置カテゴリー (/LCC)

记载还是为了 <b>二</b>	
コード (名称)	内容
ARTICLE	記事
CLAIM	クレーム
COMPARATIVE EXAMPLE	比較例
EXAMPLE	実施例
FIGURE	図
PRODUCT INSERT	添付文書
SI (SUPPLEMENTAL INFORMATION)	補足資料
TABLE	表

## CASFORMULTNS ファイルの主な回答表示形式

表示形式	表示内容
BIB (デフォルト)	書誌情報
IBIB	BIB のインデント形式
ALL	レコードの全情報
IALL	ALL のインデント形式
CHEM	記載位置、グループ、成分情報
ICHEM	CHEM のインデント形式
LCHEM	記載位置、グループ、成分情報 (GVO,CVO を含む)
GROUP	グループ情報
COMPONENT	成分情報
CCC	成分情報のコンパクト表示
LOC	記載位置
PRODUCT	製品、溶剤、ターゲット情報
IPRODUCT	PRODUCT のインデント形式
SOLVENT	溶剤情報
TARGET	ターゲット情報
CHPR	記載位置、グループ、成分、製品、溶剤情報
ICHPR	CHPR のインデント形式
HIT	ヒットした検索語を含むフィールド
KWIC	ヒットした検索語の前後 20 語

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

# 11. CHEMLIST ファイル

# CHEMLIST ファイルに収録されている主な既存化学物質リスト

CHEMISI JY11	ルに収録されている主な成仔化子物貝リスト
国名	既存化学物質リスト
日本	ENCS (Existing and New Chemical Substances List、化審法)
米国	TSCA (Toxic Substances Control Act Chemical Substance Inventory)
カナダ	DSL (Canada Domestic Substances List)
	NDSL (Canada Non-Domestic Substances List)
メキシコ	INSQ (National Inventory of Chemical Substances in Mexico)
欧州連合 (EU)	REACH (List of Registered Substances
	List of Pre-Registered Substances)
	EINECS
	(Annex to Official Journal of the European Communities, 15 June 1990)
	ELINCS (European List of Notified Chemical Substances)
	NLP (No-Longer Polymers List)
中国	IECSC (Inventory of Existing Chemical Substances in China)
韓国	AREC (Korean Act on Registration and Evaluation of Chemicals)
台湾	TCSI (Taiwan Chemical Substance Inventory)
フィリピン	PICCS (Philippines Inventory of Chemicals and Chemical Substances)
ベトナム	VNECI (Vietnam Draft National Chemical Inventory)
タイ	TDCA (Thailand Draft Chemical Act)
オーストラリア	AIIC (Australian Inventory of Industrial Chemicals)
ニュージーランド	NZIoC (New Zealand Inventory of Chemicals)

# CHEMLIST ファイルに収録されている主な規制リスト

	<b>「ルに収録されている主な規制リスト</b>
国名	規制リスト
日本	Law for PRTR and Promotion of Chemical Management (Kakan-Ho)
	List of Priority Assessment Chemicals (PACs)
	Industrial Safety and Health Law (ISHL)
中国	List of Toxic Chemicals Severely Restricted for Import and Export
	List of Restricted Toxic Chemicals for Import and Export
	List of Toxic Chemicals Prohibited from Import and Export
	List of Toxic Chemicals Prohibited or Strictly Controlled
韓国	AREC Phase-in Substances Subject to Registration List, 2018
	AREC Toxic Substances List
	AREC Prohibited Substances List
	AREC Restricted Substances List
	AREC Substances Requiring Preparation for Accidents List, 2016
	AREC Substances Subject to Intensive Control
台湾	Taiwan Toxic Chemical Substances List
香港	Hazardous Chemicals Control Ordinance, Cap. 595
フィリピン	Priority Chemicals List
インド	List of Hazardous Chemicals
パキスタン	List of Prescribed Hazardous Chemicals
シンガポール	Singapore List of Controlled Hazardous Substances
ベトナム	Law on Chemicals, Decree 113/2017/ND-CP
タイ	Thailand Hazardous Substance List
インドネシア	Government Regulation of the Republic of Indonesia Number 74 Year 2001
	regarding Hazardous and Toxic Materials Management
マレーシア	Environmentally Hazardous Substance Notification and Registration Scheme (EHSNR)
カナダ	List of Toxic Substances
	Canada National Pollutant Release Inventory
	Prohibited Toxic Substances List, Schedule 1, Prohibition of Toxic Substances
	Regulation, 2005
	Export Control List
メキシコ	Registry of Industrial Pollution and Transfer (RETC)
	Registry of Emissions and Transfers of Contaminants
欧州連合 (EU)	REACH: Dangerous Substances and Preparations, Annex XVII, EC 1907/2006
	REACH: Restricted Substances and Preparations, Annex XVII, Oct 2018
	REACH: Candidate List of Substances of Very High Concern for Authorisation
	(SVHC)
	REACH: Substances Subject to Authorisation by inheritance, Annex XIV
	Pollutant Release and Transfer Register (PRTR)
イギリス	UK REACH Candidate List of substances of very high concern (SVHCs) for authorisation
	UK REACH Authorisation List (Annex 14)
トルコ	List of Priority Chemicals
イスラエル	Proposed Israel Hazardous Substances List
エジプト	Hazardous Substances List: Banned Chemicals (List A)
	Hazardous Substances List: Hazardous Substances Subject to Permitting Procedure (List B)
ロッテルダム	Annex III Chemical, Subject to Prior Informed Consent (PIC) procedure
条約加盟国	rames in enterinedig eduject to rinor informed consent (rio) procedure

上記のほか、米国内の州法に基づくリストなども収録しており、詳細については => HELP LIST で確認できる。

### CHEMLIST ファイルのレコード例 (IDE 表示形式)

```
1)
           2255 CHEMLIST
     ΑN
2)
           107-13-1
     RN
3)
           2-Propenenitrile (TSCA, DSL, AIIC, PICCS, NZIoC, INSQ, AREC)
     CN
           Vinyl cyanide (IECSC)
4)
           AUSTRALIA: AIIC; CANADA: DSL; CHINA: IECSC; EEC: EINECS; EU: CLP,
     FS
           REACH; Harmonized Tariff Code: HTC; JAPAN: ENCS; KOREA: AREC; MEXICO:
           INSQ; NEW ZEALAND: NZIoC; PHILIPPINES: PICCS; Restricted Chemical
           Lists: RSTR; TAIWAN: TCSI; THAILAND: TDCA; USA: ACGIH, CAA, CERCLA,
           CWA, DOT, FDA, NIOSH, NTP, OSHA, RCRA, SARA, STATE, TSCA; VIETNAM:
           VNECI; WHO: IARC
5)
     CBI
           Public
6)
           6 CFR Part 27; 29 CFR Part 1910; 40 CFR Part 60; 40 CFR Part 63; 40 CFR
     CFR
           Part 68; 40 CFR Part 117; 40 CFR Part 261; 40 CFR Part 268; 40 CFR Part
           302; 40 CFR Part 355; 40 CFR Part 372; 40 CFR Part 401; 40 CFR Part 423;
           49 CFR Part 172
7)
     SC
           29 CFR 1910.1000; 29 CFR 1910.1045; 40 CFR 117.3; 40 CFR 268.40; 40 CFR
           268.48; 40 CFR 302.4; 40 CFR 401.15
8)
     RLN
           EC No.:
                        203-466-5
           EINECS No.:
                            203-466-5
           ENCS No.:
                          2-1513
           AREC Serial No.:
                                 KE-29393
9)
           Harmonized Tariff Code: 292610
     HTC
           EU Customs Code CN: 29261000
10)
     INV
           On TSCA Inventory
             May 2024 TSCA Inventory
             Commercial Status: Active.
               EPA Flags:
                 TP Subject to proposed Section 4 test rule
           On IECSC
             Inventory of Existing Chemical Substances in China.
             Listed Name(s): Vinyl cyanide; Acrylonitrile; 2-Propenenitrile;
             Cyanoethylene
           On DSL
             Canada Domestic Substances List (DSL).
           On REACH
             List of Registered Substances
             https://echa.europa.eu/substance-information/-
             /substanceinfo/100.003.152.
           On EINECS
             Annex to Official Journal of the European Communities, 15 June 1990.
             Japanese Gazette.
             This is a Type II Monitoring Chemical Substance; Serial No. 1057.
             Contained within class: Low Molecular Chain-like Organic Compounds.
             Australian Inventory of Industrial Chemicals
             https://industrialchemicals.gov.au.
             Philippines Inventory of Chemicals and Chemical Substances.
           On TCSI
             Taiwan Chemical Substance Inventory.
             Listed Name(s): acrylonitrile
```

11) RSTR SOUTH KOREA: AREC Substances Subject to Intensive Control INDONESIA: Government Regulation of the Republic of Indonesia Number 74 Year 2001 regarding Hazardous and Toxic Materials Management Listed Name(s): Acrylonitrile Category: Usable hazardous and toxic materials VIETNAM: Law on Chemicals, Decree 113/2017/ND-CP, List of Chemcials Subject to Compulsory Declaration Listed Name(s): Acrylo nitrile JAPAN: Japan Law for PRTR and Promotion of Chemical Management (PRTR-SDS). This is valid through March 2023 Listed Name(s): Acrylonitrile Classification: I Cabinet Order Number: 1-9 EU REACH: Dangerous Substances and Preparations, Annex XVII, EC 1907/2006 EGYPT: Hazardous Substances List: Banned Chemicals (List A), 2002 Ministry of Commerce is responsible for granting licenses for this substance. PAKISTAN: List of Prescribed Hazardous Chemicals, 2003 CANADA: List of Toxic Substances: Schedule 1 CEPA INDIA: List of Hazardous Chemicals, 2000 TAIWAN: Taiwan Toxic Chemical Substances List, 2013 This is a Class I and II toxic chemical. Regulated threshold quantity is 50 Kg. Minimum control level is 50 w/w%. 12) FΑ RN CAS Registry Number RLN Regulatory List Number INV Inventory Status HTC Harmonized Tariff Code Restricted Chemical Lists RSTR Interagency Testing Committee ITC

1) レコード番号

2) CAS RN®

3) 化学物質名

4) ファイルセグメント

5) 機密性

6) CFR 標題

7) CFR セクション

8) 規制リスト番号

9) Harmonized Tariff Code

10) 既存化学物質リスト上の状況

11) 制限されている化学品リスト 12) フィールドの存在

### CHEMLIST ファイルの主な回答表示形式

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

# CHEMLIST ファイルの主な検索フィールド

	イルの主な検索フィールド	<b>+11</b>	3 ± /p)
コード	内容	索引単位	入力例
無し (/BI)*	基本索引 (CAS RN®、規制リスト番号、	単語	S ?BROMO? AND INHAL?
	規制情報、化学物質名)		S 77-47-4
			S ECOTOXIC?
/4A (/TES)	TSCA 第 4 条 a 項 - 試験規則	単語	S FINAL RULE/4A
/4E (/ITC)	省庁間試験委員会	単語	S CARCIN?/4E
/5A1 (/PMN)	製造前届出	単語	S (AMES TEST)/PMN
/5A1N (/PMNN)	製造前届出番号	句	S Y 89-75/PMNN
/5A2 (/RSNU)	重要新規利用規則	単語	S CHLORINATED/RSNU
/5H (/EXM)	製造前届出免除	単語	S INK?/5H
/8A (/REP)	数量、暴露などの報告	単語	S CAIR/8A
/AAQS	米国国家環境大気質基準	単語	S AEROSOL/AAQS
/AN	レコード番号	句	S 100025/AN
/CANL	カナダの法律に関与する化学物質	単語	S IMPORT?/CANL
/CBI	機密性	句	S PUBLIC/CBI
/CERHS	CERCLA 有害物質	単語	S RQ/CERHS
/CFR	CFR 標題	句	S 6 CFR Part 27/CFR
/CHP	化学品危害要因情報プロファイル	単語	S CARCIN?/CHP
/CLP (/EECDS)	CLP による危険物質の分類、梱包、表示	単語	S ASBESTOS/EECDS
/CN	化学物質名	句	S M-CRESOL/CN
/CWA	水質浄化法セクション 301,307,311	単語	S RQ/CWA
/DEA	米国麻薬取締局規定の主要化学物質	単語	S DESOMORPHINE/DEA
/DEF	N国M架収押局였足の主安化子物員 UVCB 物質の定義	単語	S FATTY ACID#/DEF
•	入力日 入力日	数值	S ED>=19910100
/ED	CA   CA   CA   CA   CA   CA   CA   CA		
/EECL		単語	S EXPOSURE/EECL
/EHS	SALA タイトル III 極めて危険有害な物質	単語	S EMERGENCY PLAN?/EHS
/EPN	EPA 番号	句	S P 92-49/EPN
/FA	フィールドの存在	句	S 4A/FA
/FDA	米国食品医薬品局 (FDA) 関連情報	単語	S ALCOHOL/FDA
/FGRAS	FDA で安全性が認められた食用物質	単語	S RUE/FGRAS
/FS	ファイルセグメント	句	S TSCA/FS
/HAP	米国大気清浄法 1990 年改正法に	単語	S ACETALDEHYDE/HAP
	よる危険性のある大気汚染物質	<del></del>	
/HAZT	DOT 危険物質表	単語	S FORBIDDEN/HAZT
/HHAZ	健康被害	単語	S INHALATION RISK/HHAZ
/HHC	OSHA 高度危険物質	単語	S STORAGE/HHC
/HOC	資源保護回収法:ハロゲン化有機化合物	単語	S PCBS/HOC
/HTC	Harmonized Tariff Code	句	S 292610/HTC
/HTU	危険性、毒性、および用途の情報	単語	S MUTATION/HTU
/IARC	国際がん研究機関	単語	S GROUP 1/IARC
/IER	輸入 - 輸出規制	単語	S TEST RULE/IER
/INV	既存化学物質リスト上の状況	単語	S (YES AND TSCA)/INV
/INVT	既存化学物質リスト上の状況テキスト	単語	S CANADA GAZETTE/INV
/IUR	インベントリー更新規則	単語	S 1998/IUR
/JDATA	化審法に関する補足データ	単語	S BIODEGRADABLE/JDATA
/LDR	RCRA 地中投棄制限	単語	S STANDARD/LDR
/MASS	マサチューセッツ州有害物質リスト	単語	S CAMPHOR OIL/MASS
/MCL	安全飲料水法:汚染物質の最大レベル	単語	S L1 AND MAXIMUM/MCL
/MISC	その他の規制	単語	S DIOXIN#/MISC
* 终七二数 由胆	—————————————————————————————————————		

<sup>\*</sup> 後方一致、中間一致検索可能。

— I»	<b>-</b>	<b>丰</b> 11 米 仕	7 + /PI
コード	内容	索引単位	入力例
/NREL	NIOSH 勧告暴露限界值	単語	S HEALTH EFFECTS/NREL
/NTPC	米国毒性プログラム発ガン性物質リスト	単語	S PHENYTOIN/NTPC
/ODC	米国大気清浄法によるオゾン層破壊物質	単語	S METHYL BROMIDE/ODC
/PAI	EPA 殺虫剤活性成分	単語	S ACETATE/PAI
/PEL	OSHA 許容暴露レベル	単語	S PHOSGENE/PEL
/PII	EPA 殺虫剤不活性成分	単語	S LARD/PII
/PROP	化学的、物理学的物性	単語	S SOLUBILITY/PROP
/PROP65	カリフォルニア州案 65 リスト	単語	S ACRYLATE/PROP65
/RLN	規制リスト番号	句	S P 92-150/RLN
/RN	CAS RN®	句	S 77-47-4/RN
/RSTR	制限されている化学品リスト	単語・句	S INDIA/RSTR
/S110	SARA 第 110 条	単語	S PRIORITY LIST?/S110
/S313	SARA 第 313 条	単語	S COPPER/S313
/SC	CFR セクション	句	S 29 CFR 1910.119/SC
/SIDS	OECD スクリーニング用データセットプロジェクト	単語	S BASE LEVEL/SIDS
/SLA	ルイジアナ州有害物質リスト	単語	S SARIN/SLA
/SMI	ミシガン州有害物質リスト	単語	S PARATHION/SMI
/SMN	ミネソタ州有害物質リスト	単語	S CYCASIN/SMN
/SNAP	米国 EPA 重要新規代替品プログラム	単語	S LIMITS/SNAP
/SNJ	ニュージャージー州有害物質リスト	単語	S MUTAGEN/SNJ
/SNY	ニューヨーク州有害物質放出およびバルク貯蔵	単語	S CALCIUM/SNY
/SOR	オレゴン州有害物質リスト	単語	S PHTHAL?/SOR
/SPA	ペンシルバニア州有害物質リスト	単語	S GASOLINE/SPA
/SRI	ロードアイランド州有害物質リスト	単語	S CYCLOPROPANE/SRI
/STOR	貯蔵、取り扱い、環境情報	単語	S SPILL? DISPOSAL/STOR
/STY	毒性/暴露の研究	単語	S DAPHN?/STY
/SUP	条約更新日	数值	S SUP>20120508
/SVT	バーモント州有害物質リスト	単語	S BISPHENOL A/SVT
/SWA	ワシントン州有害物質リスト	単語	S HEXACHLOROBENZENE/SWA
/TLV	ACGIH 規制値	単語	S BENZENE/TLV
/TRANS	輸送、包装、ラベル情報	単語	S UNBREAKABLE/TRANS
/UNR	TSCA 第 6 条 - 不当な危険度	単語	S METALWORK?/UNR
/UP	更新日	数值	S UP>=20080808
/UVC	UVC サブセットヘディング	単語	S ALGAE/UVC
/UVCB	UVCB 化学分類	単語	S PHENOLS/UVCB
/VOC	米国大気清浄法セクション 111 に	単語	S EMISSION STANDARDS/VOC
/VOC	よる揮発性有機化合物	丰四	3 LIVISSION STANDARDS/VOC
/WGK	ドイツ水質危険クラス物質リスト	単語	S (HAZARD CLASS?)/WGK
/WSP	RCRA 特定禁止廃棄物	単語	S BIOACCUMULATIVE/WSP
/XRN	相互参照 CAS RN®	句	S 9000-78-6/XRN

# 12. CHEMCATS ファイル

### CHEMCATS ファイルの収録情報

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

### CHEMCATS ファイルのレコード例 (ALL 表示形式)

```
Accession No.
                         (AN): 2099293927 CHEMCATS
1)
```

(CO): BLD-USA Catalog Name 2) (PD): 30 Jul 2024 Publication Date 3) Order Number Cat. 4) (ON): BD64117

Chemical Name (CN): 2,2',4'-Trichloroacetophenone 5)

(CN): Reagent Grade Grade 6) CAS Registry No. (RN): 4252-78-2 7)

Stock Availability (SKAV): Maintained in stock 8) Quantity Category (QCAT): Gram quantities 9)

(SHIP): 1 week Shipping Time 10) 11) Purity Category (PRCT): Very High Bulk Availability (BULK): No 12)

Screening Compound (SCRN): No 13) 14) Purity : 98% Structure 15)

4252-78-2

**PRICES** 16)

: 25 g, Price: USD 18.00 17) Quantity

COMPANY INFORMATION

BLD Pharmatech Co., Limited

10999 Reed Hartman Highway, Suite 304B

Cincinnati, OH, 45242

United States

Contact: Sales Team Phone: +1-330-333-6550

Email: sales-usa@bldpharm.com Web: https://www.bldpharm.com

1) レコード番号

2) カタログ名

3) カタログ発行日

4) 注文番号 8) 在庫状況

5) 化学物質名 9) 取扱い単位

6) 等級

7) CAS RN® 11) 純度カテゴリー

12) バルク取扱い可否

10) 出荷時期

13) スクリーニング用途への対応可否

14) 純度

15) 構造図

16) 価格および包装単位 17) 会社情報

# CHEMCATS ファイルの検索フィールド

CHEMCAIS /	CHEMCAIS ノアイルの検索ノイールト					
コード	名称	索引単位	入力例			
無し (/BI)*1	基本索引	単語	S SODIUM SALT#			
	(カタログ、会社名、所在地、国名、		S SULF? AND TECH			
	化学物質名、商品名、補遺語、		S ?BENZSELENA?			
	CAS RN® など)		S 7773-06-0			
/AN	レコード番号	句	S 0040370177/AN			
/BULK	バルク取扱い可否	句	S YES/BULK			
/CATNAME	カタログ名	句	S ALDRICH/CATNAME			
/CN	化学物質名	句	S MEBENDAZOLE/CN			
/CNS*1	化学物質名称セグメント	単語	S ?NAPHTH?/CNS			
/CA*2	会社所在地	単語·句	S WASHINGTON/CA			
	(State, City, Street を含む)					
/CO*2	会社名 (カタログ名)	単語·句	S ALDRICH/CO			
/CY	国名	句	S (JAPAN OR JP)/CY			
/ED	入力日	数值	S ED>=20231101			
/FA	フィールドの存在	句	S RN/FA			
/ON	注文番号	句	S A-3950/ON			
/PD	発行日	数值	S 20240916/PD			
/PY	発行年	数值	S 2022/PY			
/PRCT	純度カテゴリー	句	S EXTREMELY HIGH/PRCT			
/QCAT	取扱い単位	句	S GRAM QUANTITIES/QCAT			
/RN	CAS RN®	句	S 2567172-98-7/RN			
/SCRN	スクリーニング用途への対応可否	句	S YES/SCRN			
/SHIP	出荷時期	句	S 1 WEEK/SHIP			
/SKAV	在庫状況	句	S SYNTHESIS ON DEMAND/SKAV			
/ST* <sup>2</sup>	補遺語	単語·句	S CHEMICAL LIBRARY/ST			
/UP	更新日	数值	S UP>=20241001			
/ZP	郵便番号または郵便コード	句	S 4410/ZP			

<sup>\*1</sup> 後方一致、中間一致検索可能。

# CHEMCATS ファイルの主な回答表示形式

表示形式	表示内容
IDE (デフォルト)	AN、CO、PD、ON、化学物質同定情報
ALL	すべての表示フィールド
COMP	会社に関する情報 (AN、CO、PD、CA その他テキスト情報)
PRICE	AN、価格および包装単位
PROP	AN、物性情報
HIT	ヒットした検索語を含むフィールド
KWIC	ヒットした検索語の前後 20 語を表示
OCC	ヒットタームの出現頻度をフィールドごとに表示

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

<sup>\*2 (</sup>S) 演算子はスペースで代用可能。

### JAICI について

一般社団法人化学情報協会 (JAICI) は、化学技術情報の流通を図るため 1971年に設立されました。米国 CAS をはじめ世界各国の情報機関などと協力関係を築き、日本の研究者をサポートする情報センターとして、大学・企業などの情報取得・分析から研究・開発までを支援しています。

CAS STNext に関するお問い合わせ先 https://www.jaici.or.jp/inquiry/

#### **About CAS**

CAS connects the world's scientific knowledge to accelerate breakthroughs that improve lives. We empower global innovators to efficiently navigate today's complex data landscape and make confident decisions in each phase of the innovation journey. As a specialist in scientific knowledge management, our team builds the largest authoritative collection of human-curated scientific data in the world and provides essential information solutions, services, and expertise. Scientists, patent professionals, and business leaders across industries rely on CAS to help them uncover opportunities, mitigate risks, and unlock shared knowledge so they can get from inspiration to innovation faster. CAS is a division of the American Chemical Society. Connect with us at **cas.org** 



