

CAS IP Finder, powered by STN™

# サマリーガイド (コマンドライン)

202604

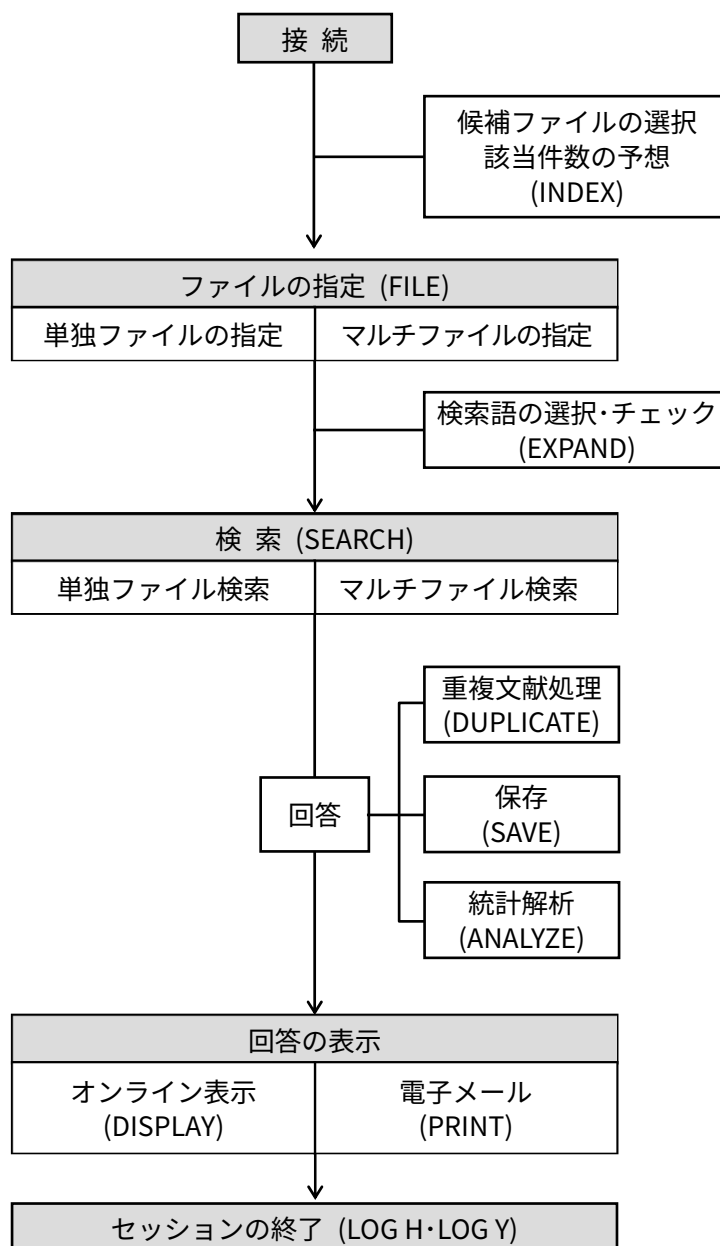
<https://www.stn.org/>



## 目次

1. CAS IP Finder の検索の流れ .....	1
2. よく使うコマンドと演算子 .....	2
3. CAS IP Finder のコマンド一覧 .....	3
4. システム制限値 .....	9
5. CAS IP Finder 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. CAS FORMULATIONS ファイル .....	37
11. CHEMLIST ファイル .....	43
12. CHEMCATS ファイル .....	49

## 1. CAS IP Finder 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

コマンド	CAplus ファイル	CAS REGISTRY ファイル
FILE ファイル指定	=> FILE CAPLUS => FILE CAP	=> FILE REGISTRY => 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 => S ELECTR#####
  - ! 1文字 (単語の途中でも使用可能) => S SULF!YL
- 後方一致、中間一致 (特定ファイルの特定フィールドでのみ使用可能)
  - ? 後方一致、単語の先頭に使用 => S ?TERPENE (最低 4 文字必要)
  - ? 中間一致、単語の先頭と末尾に使用 => S ?CYCLIN? (最低 4 文字必要)
- ブール演算子
 

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

### 主な近接演算子

- (W) 入力した順序で隣り合う。
  - (nW) 入力した順序で、その間に含まれる単語の数が n 個以内である (n: 整数)。
  - (A) 順序を考慮することなく隣り合う。
  - (nA) 順序を考慮することなく、その間に含まれる単語の数が n 個以内である (n: 整数)。
  - (XA) 同一サブフィールドあるいは同一情報単位内で順序を考慮することなく、その間に含まれる単語の数は特定されない。
  - (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。\*
- |  |   |  |
|--|---|--|
| <ul style="list-style-type: none"> <li>- (NOTW)</li> <li>- (NOTA)</li> <li>- (NOTT)</li> <li>- (NOTS)</li> <li>- (NOTP)</li> <li>- (NOTL)</li> </ul> | } | <p>各演算子の前の語を含むレコードから、後の語が指定された関係 ((W)、(A)、(T)、(S)、(P)、(L)) にあるものを除く。</p> |
|--|---|--|

\* 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 IP Finder のコマンド一覧

### ファイルの指定

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

### 検索

SEARCH	検索
=> S SEMICOND?	前方一致の利用
=> S TONEGAWA S?/AU	検索フィールドの指定
=> S E3 OR E7-12	E 番号の使用
=> 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	数値検索 (範囲指定検索)
=> S VIDEO RAN=(2020,)	RANGE 検索
=> S L1-4	L1 から L4 までを OR 演算する

### 検索語の列挙

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

### 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
=> D L2 CUR	回答と共に特許のカレント情報も表示
=> D L5 WITH "JP"	L5 (統計解析結果) から JP の文字列を含むものを表示
=> D L5 ALP ANS	L5 (統計解析結果) をアルファベット順に回答番号付きで表示

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
<b>各種項目の表示</b>	
DISPLAY BANNER	各ファイルの諸情報の表示
=> D BAN BRIEF	ファイルの更新状況などを表示
=> D BAN FUL	ファイルの各種情報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	E 番号の表示
または DISPLAY SELECT	
=> 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-L8	L2 から L8 までの検索経過の表示
=> D HIS 3	三つ前までの L 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
=> D SET	すべての SET オプションの表示
=> D SET PLU	特定の 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	一部の 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 した 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 => FSO L3	回答を特許ファミリーごとにソート L3 を特許ファミリーごとにソート
HELP または ? => HELP DIRECTORY => HELP COST => HELP SFIELD => ? SET	ヘルプメッセージの表示 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 各ファイルの料金情報の表示 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 => NEW 12 => NEWS FILE	ニュースの表示 12 番のニュースの表示 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)
QUERY => QUE PINE OR ASPEN => QUE (L1 OR L2) AND P/DT	質問式の作成 キーワードを使用した質問式の作成 L 番号を使用した質問式の作成
SDI => SDI L5 BIOSIS/S => SDI MFILE => SDI MFILE PACKAGE => SDI TOC => SDI XFILE => SDI EDIT ACID/S	アラートの登録と編集 質問式 L5 を BIOSIS/S として登録 マルチファイルアラートの登録 アラートの回答を一括受領 CAplus の目次サービスの登録 SMARTracker (クロスオーバーアラート) の登録 ACID/S の編集
SELECT => SEL L1 1- CHEM => SEL L1 1-20 CIT => SEL L2 HIT RN	回答からタームを抽出 CAS RN <sup>®</sup> と化学物質名を抽出 引用文献調査用の検索式を抽出 ヒットした CAS RN <sup>®</sup> を抽出
SMART => SMART	クロスオーバーアラートの登録 SMARTracker (クロスオーバーアラート) の登録
SORT => SOR PY => SOR L2 1-100 PD	回答順序の並べ替え 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) PD の昇順で並べ替え
TABULATE => TAB => TABULATE DELIM	統計解析結果を表形式で表示 統計解析結果を表示 統計解析結果をデリミタ形式で表示
TRANSFER => TRA L3 PN => TRA L1 1- OS /AN	特定フィールドを抽出して検索 L3 の全件から PN を抽出して、現ファイルで検索 L1 の全件から OS を抽出し、/AN フィールドで検索
<b>検索の終了</b>	
LOGOFF => LOG Y => LOG H	検索終了 オンラインセッションの終了 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 (RENUMBER)	REN	E 番号を連続付与 (E1 から付与)
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 (OFF, PLOT10, TEXT)	ON	回答の構造図を表示 (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 (しない、詳細表示、全ファイルの詳細表示)
SET LHISTORY ON (OFF)	OFF	セッション終了時に検索履歴を表示する設定
SET LINELENGTH 70	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)	ATOM	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 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

\* 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

項目	制限値
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 (マルチファイルの合計は考慮されない)	100,000,000 件
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。

### クロスオーバー検索のシステム制限値

項目	制限値
BIOSIS、CAplus、CA、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 IP Finder 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
=> S L4 FAM FUL	ファミリー検索、フルファイル検索
=> S L2 RAN=(76081-80-6,)	RANGE 検索
=> S L4 SUB=L3 FUL	サブセット検索、フルファイル検索
=> S L1 AND L2	構造質問式 L1, L2 の演算
=> S L3/COM	L3 (構造検索の回答) をイタレーションが完全な回答に限定
=> S L3/INC	L3 (構造検索の回答) をイタレーションが不完全な回答に限定

### BATCH コマンド

BATCH	バッチ構造検索
=> BAT L7 BISRING/B (SSS) (FUL)	バッチ構造検索 (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		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

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

- ① サンプル検索を開始した時間
- 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

重要

- 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

## スクリーン作成コマンド

SCREEN スクリーン作成

=> SCR 1938 OR 1985

スクリーンコマンドでは、OR, AND のみ使用可

=> SCR 2067 AND 2127

### - Graph Modifier スクリーン

番号	内容	頻度			
[構造上の特徴]					
2039	異常質量 - すべての同位体	0.97 %			
2045	重水素	0.49 %			
2046	三重水素およびそれ以上の水素同位体 (4H, 5H など)	0.06 %			
2047	結合位置の不明な同位体	0.05 %			
2041	異常結合価	32.34 %			
2040	すべての電荷	12.50 %			
2042	非局在化している (delocalized) 電荷	0.10 %			
2076	互変異性体 (Tautomer)	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 fragment (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)					
2050	合金	3.22 %			
2049	配位化合物	8.16 %			
2048	定義のあいまいな (Incompletely 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	エステル化位置不明	0.14 %			
2074	水素化位置不明	0.10 %			
2053	手作業登録	—			
2052	鉱物	0.05 %			
2051	混合物 (名称中に mixt. with がある)	0.29 %			
2043	ポリマー (一般)	4.18 %			
2067	ホモポリマー・コポリマー [(A)x, (A.B)x, etc.]	3.20 %			
2068	structural repeating units (SRU) で表されるポリマー	1.48 %			
2069	末端基のある SRU [X-(Y-)n-Z]	0.52 %			
2070	末端基のない SRU [-(Y-)n-]	1.00 %			
2054	ラジカルイオン	0.23 %			
[その他]					
2082	CASREACT に収録されている物質	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)	C	元素数 (以上)	N	O	S	ハロゲン
1	2110 <sup>*1</sup>	1	1992 <sup>*1</sup>	2004 <sup>*1,2</sup>	2021 <sup>*1,2</sup>	1929 <sup>*3</sup>
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					

\*1 Single Atom Fragment (SAF) を含む。

\*2 O, S を同時に表わすスクリーンは 2003。

\*3 アスタチン (At) を含む。

構造検索のシステム制限値と回答数に対する制限値

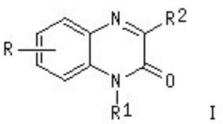
ファイル名	検索範囲		ITERATION 数 または VERIFICATION 数	検索時間 (分)	回答数
REGISTRY	オンライン検索 サブセット検索	サンプル検索	1,000,000		50
		フルファイル検索	400,000,000		100,000,000
		RANGE 検索	400,000,000		100,000,000
	バッチ検索	フルファイル検索	400,000,000		100,000,000
		RANGE 検索	400,000,000	100,000,000	
CASREACT	オンライン検索 サブセット検索	サンプル検索	5,000		50
		フルファイル検索	100,000,000		100,000,000
		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	
MARPAT	オンライン検索 サブセット検索	サンプル検索	2,000	5	50
		フルファイル検索	100,000,000	30	100,000,000
		RANGE 検索	100,000,000	30	100,000,000
	バッチ検索	フルファイル検索	100,000,000	360	100,000,000
		RANGE 検索	100,000,000	360	100,000,000

## 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)

- 1) AN 2023:239870 CAPLUS [Full-text](#)
- 2) DN 181:415719
- 3) TI Photoinduced Decarboxylative C3-H alkylation of Quinoxalin-2(1H)-ones
- 4) AU Bisoyi, Akash; Tripathy, Alisha Rani; Yedase, Girish Suresh; P, Shifana Sinu; Choudhury, Udit; Yatham, Veera Reddy
- 5) CS School of Chemistry, Indian Institute of Science Education and Research, Thiruvananthapuram, 695551, India
- 6) SO Journal of Organic Chemistry (2023), 88(4), 2631-2641  
CODEN: JOCEAH; ISSN: 0022-3263
- 7) DOI 10.1021/acs.joc.2c02823
- 8) PB American Chemical Society
- 9) DT Journal; (online computer file)
- 10) LA English
- 11) OS CASREACT 181:415719
- 12) GI
- 
- 13) AB An efficient, catalyst and additive-free visible-light-driven radical C3-H 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.].
- 14) OSC.G 10 THERE ARE 10 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (10 CITINGS)
- 15) RE.CNT 49 THERE ARE 49 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
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

1) AN 2021:103568 CAPLUS Full-text  
 2) DN 174:310168  
 3) ED Entered STN: 14 Jan 2021  
 4) TI 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) PA Novartis AG, Switz.  
 7) UO NOVARTIS AG  
 8) UOS Novartis  
 9) SO PCT Int. Appl., 245pp.  
 CODEN: PIXXD2  
 10) DT Patent  
 11) LA English  
 12) CLMN 5  
 13) CC 27-17 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))  
 Section cross-reference(s): 1, 63  
 14) FAN.CNT 1  
 15) PPPI

PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
WO 2021005586	A1	20210114	English	<a href="#">PDF</a>   <a href="#">PDF+</a>   <a href="#">Interactive</a>
CA 3139940	A1	20210114	English	<a href="#">PDF</a>

16) PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
WO 2021005586	A1	20210114	WO 2020-IB57285	20200731
AR 119450	A1	20211222	AR 2020-102046	20200721

17) PRAI US 2019-62881619 P 20190801  
 US 2020-63009513 P 20200414

18) PSPI

PATENT NO.	KIND	STATUS	STATUS DATE
WO 2021005586	A1	Dead	20240404
AR 119450	A1	Alive	20220407

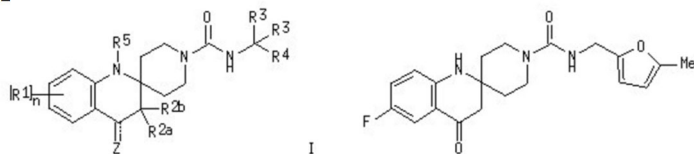
19) CLASS

PATENT NO.	CLASS	PATENT FAMILY CLASSIFICATION CODES
WO 2021005586	IPCI	A61P0035-00 [I]; A61K0031-4747 [I]; C07D0487-10 [I]
	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],
JP 2021527113	IPCI	C07D0471-10 [I]; A61P0035-02 [I]; A61P0043-00 [I];
	FTERM	4C065/AA16; 4C065/AA18; 4C065/BB09; 4C065/CC09;

20) OS CASREACT 174:310168; MARPAT 174:310168

21)

GI



22)

AB The present invention relates to novel tricyclic compds. I [Z = OH or O; R1 = (independently) halo, alkyl, alkoxy, etc.; R2a and R2b = (independently) H, alkyl, halo; each R3 = (independently) H, halo; R4 =

:

23)

ST tricyclic spiro compd spiro piperidinequinolinecarboxamide prepn AKR1C3 dependent KARS inhibitor

24)

IT Gene expression  
(AKR1C3 gene expression; prepn. of tricyclic AKR1C3 dependent KARS inhibitors)

IT 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](#)

:

26)

OSC.G 2 THERE ARE 2 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (2 CITINGS)

27)

UPOS.G Date last citing reference entered STN: 26 Feb 2024

28)

OS.G 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

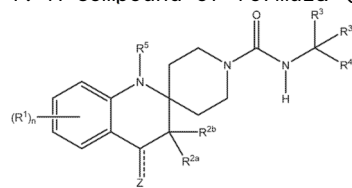
(2) Anon; KOUZNETSOV VLADIMIR V ET AL: "3',4'-Dihydrospiro[piperidine-4,2'-

:

31)

CLM What is claimed is:

1. A compound of formula (I):



(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          | 22) 抄録         | 23) 補遺語                   | 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                  |               |

## CPlus 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

	コード	内容	索引単位	入力例
キーワード	無し (/BI)* <sup>1</sup>	基本索引 (標題、抄録、補足語、索引語)	単語	S 100-97-0 (S) ANAL? S ELECTRODE (W) ?EFFECT?
	/AB* <sup>1</sup>	抄録	単語	S LD50#/AB
	/CT* <sup>2</sup>	統制語 (フレーズ)	句	S LAMBDA POINT/CT
	/CW	統制語 (単語)	単語	S LAMBDA/CW
	/IT* <sup>1</sup>	索引語	単語	S 50-00-0 (S) EFFECT#/IT
	/OBI	標題、補足語、索引語	単語	S FUEL CELL#/OBI
	/RL* <sup>2</sup>	ルール	句	S L1/SPN
	/ST	補足語	単語	S STEREOSELECT?/ST
書誌情報	/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* <sup>2</sup>	会社名	句	S DOW CHEMICAL CO/CO
	/CS	所属機関名	単語・句	S "DU PONT"?/CS
	/CYA	著者所属国	句	S JAPAN/CYA
	/DN	CA 抄録番号	句	S 187:313859/DN
	/DT	資料種類	句	S JOURNAL/DT
		(コードとテキスト)		
	/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	数値	S 19/IS
	/ISN	CODEN、ISSN、ISBN	句	S JBCHA3/ISN
	/JT	資料名	句	S J BIOL CHEM/JT
	/JTW	雑誌名キーワード	単語	S NANO/JTW
	/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	数値	S PD>20220901
	/PY	発行年	数値	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	S HTTP://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	数値	S 269/VL	
セクション、 入力日など	/CC* <sup>2</sup>	CA セクション番号 /セクション名	句・ 単語	S 80-6/CC S ORGANIC/CC
	/CCN	CA セクション名	単語・句	S MAMMALIAN HORMONES/CCN
	/SX	関連セクション番号 /関連セクション名	句 単語	S 17/SX S TEXTILES/SX
	/FA	フィールドの存在	句	S ABS/FA、S PPAK/FA
	/FS	ファイルセグメント	句	S BIO/FS
	/ED	入力日	数値	S ED>=20230101
	/UP	更新日	数値	S 20240401/UP
	/UPI	更新日、CA 抄録番号 および索引	数値	S 20240901/UPI
	/UPIT	更新日、特定の化学物質に 関する索引情報の追加	数値	S 20210101=<UPIT
	/UPP	特許ファミリーの更新日	数値	S UPP>=20231123
/UPM	UP + UPP + UPIT	数値	S UPM>20231201	

\*1 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	内容	索引単位	入力例
特許情報	/IN (/AU)	発明者	句	S IKEMOTO T?/IN
	/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	数値	S 2<=FAN.CNT
	/CYC	特許国数	数値	S 2-10/CYC
	/PNC	特許番号数	数値	S 2<=PNC
	/DS (/DS.B)	指定国	句	S FR/DS AND EP/PC
	/PC (/PC.B)	特許発行国	句	S WO/PC
	/PD (/PD.B)	特許発行日	数値	S PD>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	数値	S 2022-2024/PY
	/AC (/AC.B)	特許出願国	句	S DE/AC
	/AD (/AD.B)	特許出願日	数値	S AD>20231001
	/AP (/AP.B)	特許出願番号	句	S DE2023-102023108231/AP
	/AY (/AY.B)	特許出願年	数値	S 2022-2023/AY
	/PRC (/PRC.B)	優先権主張国	句	S US/PRC
	/PRD (/PRD.B)	優先権主張日	数値	S PRD>20240509
	/PRN (/PRN.B)	優先権出願番号	句	S JP2023-59463/PRN
	/PRY (/PRY.B)	優先権主張年	数値	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*2	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	数値	S 20240912/STED
	/STEY	特許ステータスの年	数値	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	数値	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	数値	S 3/CLMN	
引用文献情報	/FILE.CIT	引用文献の存在	句	S L1 AND CAPLUS/FILE.CIT
	/RAN.CAPLUS	引用文献の CPlus 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
	/RE (/CIT)	引用文献情報	句	S BLONDELLE S, 1999?/RE
	/RE.CNT (/REC)	引用文献数	数値	S 1-20/RE.CNT
	/RIS	引用文献号数	句	S (2 OR 3)/RIS
	/RPC	引用特許発行国	句	S DE/RPC
	/RPG	引用文献の開始ページ番号	句	S 200/RPG
	/RPK	引用特許種別コード	句	S DEA1/RPK
	/RPN	引用特許番号	句	S US6635622/RPN
	/RPY	引用文献発行年	数値	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	
被引用文献情報	/OS.G	被引用文献の CPlus レコード 番号	句	S 2023:375431 /OS.G
	/OSC.G	被引用文献数	数値	S L1 AND 2-5/OSC.G
	/UPOS.G	被引用文献の更新日	数値	S L1 AND 20220214<=UPOS.G

- 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

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

- 特許情報フィールドにおける (S)、(P)、(L) 演算子の機能




```

AN 2024:650929 CAPLUS Full-text
DN 186:215150
TI Preparation of photocurable inkjet recording primer ink composition with
excellent print strength and adhesion for ink set, and recording method
IN Nishimoto, Tomohisa
PA Maxell Holdings, Ltd., Japan
:
DT Patent
LA Japanese
:
PI
PATENT NO.      KIND  DATE      APPLICATION NO.  DATE
-----
JP 7456032      B1   20240326   JP 2023-25442   20230221 (S)
JP 2024118878   A    20240902   (P)
WO 2024176659   A1   20240829   WO 2024-JP1007  20240116 (S)
PRAI JP 2023-25442   A    20230221   (S)
    
```

Diagram illustrating the use of operators (S), (P), and (L) in a patent search query. The query is structured as follows:

- (S) Operator:** Used to search for the same publication or application within the same document. In the example, it is used to search for JP 2023-25442 within the document JP 7456032.
- (P) Operator:** Used to search for the same application number across different documents. In the example, it is used to search for JP 2024118878 across documents JP 7456032 and JP 2023-25442.
- (L) Operator:** Used to search for the same application number across different countries. In the example, it is used to search for WO 2024176659 across documents JP 7456032 and WO 2024-JP1007.

The operators (S), (P), and (L) are used in combination with the AND operator to refine the search results.

- \*  (S) 演算子：同一公報内、あるいは同一出願情報内を演算。  
ただし、特許発行国と特許発行年 (日) をリンクする場合は (P) 演算子を使用する。
- \*  (P) 演算子：同一の出願番号を持つ公報同士を演算。
- \*  (L) 演算子：同一の出願番号を持つ公報番号、出願番号、指定国などを演算。

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

## 主な略語

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

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

## 合成 (/P)、非特定誘導体 (/D) に関する文献

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

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

\*2 構造や分子式を特定できない誘導体。

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

\* => S L1/THU,ADV では検索できない。

CAS ロール一覧 (/RL) (備考なしは 1967 年-)\*1

コード	定義	備考	コード	定義	備考
ANST*2	分析に関する研究		PREP*2,3	製造	1907-
ANT	分析対象		BMF	生化学的工業生産	
AMX	分析マトリックス		BPN	生化学的合成	
ARG	分析試薬用途		BYP	副生成物	
ARU	上記以外の分析に関する研究		IMF	化学的工業生産	
BIOL*2	生物学的研究		PUR	精製	
ADV	副作用 (毒性を含む)		SPN	化学合成	
AGR	農業関連用途		PROC*2	プロセス	
BCP	生化学的プロセス	2002-	BCP	生化学的プロセス	2002-
BMF	生化学的工業生産		GPR	地質学的、天文学的プロセス	
BPN	生化学的合成		PEP	物理的、工学的、または	
COS	化粧品用途	2002-		化学的プロセス	
DGN	診断用途	2002-	REM	除去または処分	
FFD	食品または飼料用途		PRPH*2	Prophetic 物質	1993-
NPO	天然物の起源・分布	2002-	RACT*2	反応物または試薬	
PAC	薬理活性	2002-	RCT	反応物	
PKT	薬物動態	2002-	RGT	試薬	2002-
THU	医薬用途		USES*2	用途	
BSU	上記以外の生物学的研究		AGR	農業関連用途	
BUU	上記以外の生物関連用途		ARG	分析試薬用途	
BAC	生理活性またはエフェクター (副作用を除く)	-2001	CAT	触媒用途	
CMBI*2	コンビナトリアル・ケミストリーに関する研究	2002-	COS	化粧品用途	2002-
FORM*2	生成 (意図的合成ではない)		DGN	診断用途	2002-
GFM	地質学的、天文学的生成		FFD	食品または飼料用途	
FMU	上記以外の生成		MOA	改良剤または添加物用途	
NANO*2	ナノ材料	1992-	POF	ポリマー組成物	
OCCU*2	起源・分布		TEM	工学・工業材料用途	
GOC	地質学的、天文学的起源・分布	2002-	THU	医薬用途	
NPO	天然物の起源・分布		BUU	上記以外の生物関連用途	
POL	汚染物質		NUU	上記以外の用途	
OCU	上記以外の起源・分布		PRP	物性	
			MSC	その他	
			SCLM*2	クレームに記載された物質	*4

\*1 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 (2026 年 4 月現在)

- BR (ブラジル) 2013 年～
- CN (中国) 2012 年～
- DE (ドイツ) 2012 年～
- EP (EPO) 1998 年～
- FR (フランス) 2012 年～
- GB (英国) 1998 年～
- IN (インド) 2002 年～
- JP (日本) 2012 年～
- KR (韓国) 2012 年～
- RU (ロシア) 2013 年～
- US (米国) 1976 年～
- WO (PCT 出願) 1978 年～

## 資料種類 (/DT)

英語名	コード	内容
BOOK	B	単行本
COMPUTER MAGNETIC DISK		コンピュータ磁気ディスク
COMPUTER OPTICAL DISK		コンピュータ光学ディスク
CONFERENCE	C	学会会議録
DISSERTATION	D	学位論文
GENERAL REVIEW	GR	総説
JOURNAL	J	雑誌
MICROFICHE		マイクロフィッシュ
MULTIMEDIA		マルチメディア
ONLINE COMPUTER FILE		オンラインコンピュータファイル
PATENT	P	特許
PREPRINT	N	電子出版
REPORT	R (T)	技術レポート
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)

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   AT   TERM
--   -
E1           0     2   SEMICONDUCTIVE X-RAY RADIATION DETECTORS/CT
E2           0     2   SEMICONDUCTIVITY/CT
E3           0     2 --> SEMICONDUCTOR/CT
E4           0     2   SEMICONDUCTOR T-RAY DETECTORS/CT
```

```
      :
=> E E3+MAX
```

```
E1           0     --> Semiconductor/CT
E2    325792   USE   Semiconductor materials/CT
***** END *****
```

```
=> E E2+MAX
```

```
E1    47666   BT3   Materials/CT
E2    2838    BT2   Electrical materials/CT
E3   166109   BT1   Electric conductors/CT
E4   325792   --> Semiconductor materials/CT
                        HNTE Valid heading during volume 76 (1972) to present.
E5                                     OLD Conductors, electric (L) semi-/CT
```

```
      :
E25                                     UF Semiconductor compound materials/CT
E26                                     UF Semiconductor material/CT
E27                                     UF Semiconductor substances/CT
E28    5247   NT1   Amorphous semiconductors/CT
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    RT    Metal-semiconductor transition/CT
```

```
      :
E60                                     RTCS Copper gallium sulfide (CuGaS2)/CT
E61                                     RTCS Gallium arsenide/CT
E62                                     RTCS Silicon/CT
E63                                     RTCS Silicon alloy, Si,Ge/CT
E64                                     LT Semiconductor materials (L) cubic/CT
E65                                     LT Semiconductor materials (L) direct-gap/CT
```

```
      :
***** END *****
```

BT	上位語
HNTE	ヒストリーノート
OLD	旧統制語
UF	非優先語
NT	下位語
RT	関連語
RTCS	関連化学物質名
LT	リンク語

CA セクション (/CC)

FS	No	セクション名	FS	No	セクション名
生 化 学  B I O	1	薬理学	応 用 化 学 ・ 化 学 工 学  A P P  物 理 化 学 ・ 無 機 化 学 ・ 分 析 化 学  P I A	47	装置、工場設備
	2	哺乳動物ホルモン		48	単位操作、プロセス
	3	生化学的遺伝学		49	工業無機化学製品
	4	毒物学		50	推進薬、爆薬
	5	農芸化学的生物学調節剤		51	化石燃料、誘導製品、関連製品
	6	生化学一般		52	電気化学的、放射および 熱エネルギー工学
	7	酵素		53	鉱物、地質化学
	8	放射線生化学		54	抽出冶金学
	9	生化学の方法		55	鉄、鉄合金
	10	微生物生化学		56	非鉄合金、合金
	11	植物生化学		57	セラミックス
	12	非哺乳類生化学		58	セメント、コンクリート、関連建設材料
	13	哺乳類生化学		59	大気汚染、産業衛生
	14	哺乳類病理生化学		60	廃棄物処理、処分
	15	免疫化学		61	水
	16	発酵、工業生物化学		62	精油、化粧品
	17	食品、飼料化学		63	薬剤
	18	動物栄養学		64	薬剤分析
	19	肥料、土壌、植物栄養学		65	物理化学一般
	20	歴史、教育、ドキュメンテーション		66	界面化学、コロイド
有 機 化 学  O R G	21	有機化学一般	67	触媒化学、反応速度論、 無機反応機構	
	22	物理有機化学	68	相平衡、化学平衡、溶液	
	23	脂肪族化合物	69	熱力学、熱化学、熱的性質	
	24	脂環式化合物	70	原子核現象	
	25	ベンゼン、ベンゼン誘導体、 縮合ベンゼノイド化合物	71	原子力工学	
	26	生体分子、合成類似体	72	電気化学	
	27	複素環化合物 (ヘテロ原子 1 個)	73	光、電子、質量分光学、その他の 関連する性質	
	28	複素環化合物 (ヘテロ原子 2 個以上)	74	放射線化学、光化学、写真、 その他の複写プロセス	
	29	有機金属、有機メタロイド化合物	75	結晶学、液晶	
	30	テルペン、テルペノイド	76	電気的現象	
	31	アルカロイド	77	磁氣的現象	
	32	ステロイド	78	無機化学物質、反応	
	33	炭水化物	79	無機分析化学	
	34	アミノ酸、ペプチド、タンパク質	80	有機分析化学	
高 分 子 化 学  M A C	35	合成高分子の化学			
	36	合成高分子の物理的性質			
	37	プラスチックの製造、加工			
	38	プラスチックの成形、用途			
	39	合成エラストマー、天然ゴム			
	40	織物、繊維			
	41	染料、有機顔料、蛍光増白剤、 写真用増感剤			
	42	塗料、インク、関連製品			
	43	セルロース、リグニン、紙、 その他木材製品			
	44	工業炭水化物			
	45	工業有機化学製品、皮革、脂肪、ろう			
	46	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 2026 年 4 月現在のセクション。

## CAplus ファイルの主な回答表示形式

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

\*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

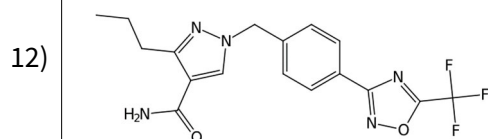
### REGISTRY ファイルの収録情報

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記載された物質
- 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録された化学物質
- 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/C17H16F3N5O2/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
```



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

- ```
13) 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) InChI        | 8) InChIKey  |
| 9) クラス識別子   | 10) 収録源            | 11) CAS RN® 所在  | 12) 化学構造図    |
| 13) CA の文献数 | 14) CA の非特定誘導体の文献数 | 15) CAplus の文献数 |              |

## 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
基本索引など	無し (/BI)	基本索引 (名称フラグメント、成分分子式、InChIKey、CAS RN <sup>®</sup> 、累積索引コード)	単語	S CHOLEST? S C10H12O2
	/CCI	成分クラス識別子	句	S PMS/CCI
	/CI	クラス識別子	句	S PMS/CI
	/CRN	成分 CAS RN <sup>®</sup>	句	S 79-10-7/CRN
	/DEF	物質の定義	単語	S ABSOLUTES/DEF
	/DT.CA	CAplus ファイルの資料種類	句	S PATENT/DT.CA
	/ED	入力日	数値	S 20240801/ED
	/ENTE*1	索引者情報	単語	S PEROXIDE/ENTE
	/FA	フィールドの存在	句	S RSD/FA、S NO RSD/FA
	/FS	ファイルセグメント	単語	S PROTEIN/FS
	/INKY	InChIKey	句	S AAOMVBNPPKGQPO/INKY
	/LC	CAS RN <sup>®</sup> 所在	句	S TSCA/LC
	/PCT	ポリマー分類用語	句	S POLYESTER/PCT
	/PCT.CNT	ポリマー分類用語の数	数値	S L1 AND 4/PCT.CNT
	/RN	CAS RN <sup>®</sup>	句	S 3023546-82-6/RN
	/REF.CAPLUS	CAplus ファイルの文献数	数値	S 50=<REF.CAPLUS
	/RL	RL*2 (特定物質として索引)	句	S PREP/RL
/RLD	RL*2 (非特定誘導体として索引)	句	S PREP/RLD	
/RLS	RL+RLD*2	句	S PREP/RLS	
/SR	収録源	句	S CA/SR	
/UP	更新日	数値	S UP>=20240401	
化学物質名	/CN	化学物質完全名称	句	S BENZOIC ACID/CN
	/CNS*1	化学物質名称自然セグメント	単語	S ?CYCLIN?/CNS
	/HP	見出し語母核	句	S BENZENE/HP
	/INS.HP	CA 索引名セグメント - 見出し語母核	単語	S ACID/INS.HP
	/INS.NHP	CA 索引名セグメント - 非見出し語母核	単語	S PHENOL/INS.NHP
/ONS	他の名称セグメント	単語	S ANILINE/ONS	
分子式	/ATC	原子数	数値	S 5/ATC
	/ELC	元素数	数値	S 7-9/ELC
	/ELC.SUB	元素数 (物質全体)	数値	S ELC.SUB>=8
	/ELF	元素式	句	S C H F O/ELF
	/ELR.xx	元素比.xx (xx = CH, CN, CO, HC, HN, HO, NC, NH, NO, OC, OH, ON)	数値	S 1-2/ELR.CN
	/ELS	元素種	句	S B/ELS (P) H/ELS
	/ELS.MCF	元素種 (物質全体)	句	S (N (XA) P)/ELS.MCF
	/FW	分子式量	数値	S 420-460/FW
	/MF	分子式	句	S C7H3BR2FO2/MF
	/NC	成分数	数値	S F/ELS NOT NC>=2
	/PG	周期律グループ	句	S B6/PG
/元素記号	特定元素数	数値	S 7/SI	
/MAC	物質組成	句・数値	S (95 (P) PT)/MAC S 1-5 ND/MAC	
/RC	相対組成	句	S FE.CR.NI/RC	
環データ	/EA	元素式 (環系)	句	S C4N-C5N/EA
	/EAS	元素式 (最小環)	句	S C4N/EAS
	/ES	元素配列 (環系)	句	S NCOC2-C6/ES
	/ESS	元素配列 (最小環)	句	S NCOC2/ESS
	/NRS	環系の数 (物質全体)	数値	S 7/NRS
/CNRS	環系の数 (成分内)	数値	S 3/CNRS	

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

	コード	内容	索引 単位	入力例	
環 デ ー タ	/NR	最小環の数 (物質全体)	数値	S 10/NR	
	/CNR	最小環の数 (成分内)	数値	S CNR>=12	
	/NRRS	環系内の環の数	数値	S 5-6/NRRS	
	/RATC	環系の原子数	数値	S 4/RATC	
	/REL	環系の構成元素種 (および環系内の REL の存在数)	数値	S 3 N/REL	
	/RELC	環系内の元素種の数	数値	S 2/RELC	
	/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	数値	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)	参考文献タグ	句	S MASS SPECTRA/ETAG	
	物 性 デ ー タ	/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	数値	S 4000-5000/BCF	
/BP		沸点 (deg C)	数値	S 150-155/BP	
/DEN		密度 (g/cm**3)	数値	S DEN>=1.002	
/ECON		コンダクタンス (Siemens)	数値	S 0.5/ECON	
/ECND		電気伝導率 (S/cm)	数値	S 1400-1900/ECND	
/ERES		電気抵抗 (ohm)	数値	S 30-70/ERES	
/EREST		比電気抵抗 (ohm*cm)	数値	S EREST>=6600	
/HVAP		蒸発エンタルピー (kJ/mol)	数値	S 100-110/HVAP	
/FP		引火点 (deg C)	数値	S 100-110/FP	
/FRB		回転可能な結合数	数値	S 1-2/FRB	
/HAC		水素受容基数	数値	S 10-15/HAC	
/HD		水素供与基数	数値	S 2>HD	
/HDAS		水素供与基/水素受容基総数	数値	S 12/HDAS	
/KOC		有機炭素吸着係数 Koc	数値	S 100-200/KOC	
/LD50		50% 致死量 (mg/kg)	数値	S 741-745/LD50	
/LOGD		オクタノール/水分配係数の対数値 (pH 考慮)	数値	S 2.21/LOGD	
/LOGP		オクタノール/水分配係数の対数値	数値	S 1>=LOGP	
/MM		磁気モーメント (muB)	数値	S MM<=0.98	
/MVOL		モル体積 (cm**3/mol)	数値	S 31.1/MVOL	
/MP		融点	数値	S MP<=30	
/MW		分子量	数値	S 500<MW	
/ORP		旋光度 (deg)	数値	S 70-80/ORP	
/PKA		酸塩基解離定数 (pKa)	数値	S 1-5/PKA	
/PSA		極性表面積 (A**2)	数値	S 3.24/PSA	
/RI		屈折率	数値	S 1.427/RI	
/SLB.MASS		質量溶解度 (g/L)	数値	S SLB.MASS>=1	
/SLB.MOL		モル溶解度 (mol/L)	数値	S SLB.MOL>=1	
/ISLB.MASS		固有質量溶解度 (g/L)	数値	S 1.3/ISLB.MASS	
/ISLB.MOL		固有モル溶解度 (mol/L)	数値	S 1.6E-14/ISLB.MOL	
/TG	ガラス転移点 (deg C)	数値	S 400-430/TG		
/TS	引張強度 (Mpa)	数値	S 42/TS		
/UR	数値幅	数値	S BP=200(P)UR<=10		
/VP	蒸気圧 (Torr)	数値	S .0001-.0002/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 同一鎖内に限定	S C H/ELF (L) NC>=2 S 3/ELC.SUB (L) B/ELS S QUINOLIN? (L) METHYL S (VEALY (L) GIVEQ)/SQSP

## クラス識別子 (/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*2 (CONCEPT)	概念語登録
GRS*2 (GENERIC REGISTRATION)	一般式登録
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*2 (UNKNOWN OR VARIABLE COMPOSITION OR BIOLOGICAL SUBSTANCE)	組成不明、組成不定、複雑な反応生成物、生体物質

\*1 COM/CCI は検索できない。

\*2 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。

## 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。
入力方法	特定のポリマーの CAS RN® から、関連ポリマーの集合を作る。 => POLYLINK 9012-16-2 ポリマーを含む回答集合から、関連ポリマーの集合を作る。 => POLYLINK L2

ポリマー分類用語 (/PCT)

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

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

## REGISTRY ファイルの主な回答表示形式

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

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

\*2 インデント形式とは、完全なフィールド名が表示される形式。

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

## 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。

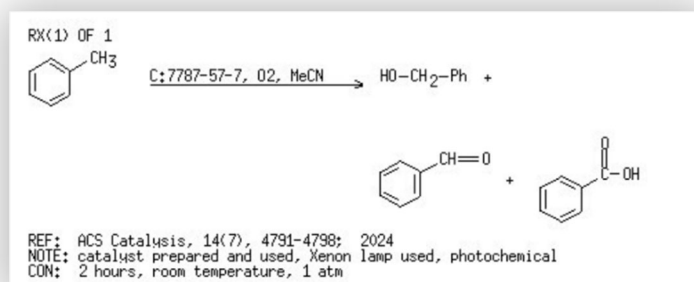
- CA 由来の反応情報 (主に 1985 年以降)
- CA 以外の収録源由来の反応情報
  - Biotransformation (1971~1997 年)
  - InfoChem (1974~1999 年)
  - INPI (1840~1985 年)
  - SORD (1961~2011 年)
  - Wiley (1921~2015 年)

### 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) RX(1) OF 1 3 A ==> B + C + D
- 3)
- 4) RX(1) RCT A 108-88-3  
RGT E 7782-44-7 O2  
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 RN®)  
     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

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

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

\*1 後方一致、中間一致検索可能。

\*2 索引中の CAS RN<sup>®</sup> は含まない。

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

## 構造検索

「5. CAS IP Finder 構造検索コマンド」参照

- 官能基検索

- 官能基用語 : => HELP FGA で一覧できる。

- 官能基クラス用語 :

ALCOHOLS	ALKENES	ALKYNES	AMINES
CARBONATE DERIVATIVES		CARBOXY DERIVATIVES	HALIDES
HETEROCYCLES	KETONES	ORGANOMETALLICS	

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

**近接演算子 (CASREACT ファイル)**

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

**CASREACT ファイルの主な回答表示形式**

表示形式	表示内容
PATH	ヒットした反応を含む最長の反応経路の反応マップ、構造図
FPATH	PATH、反応要約
SPATH	ヒットした反応を含む最短の反応経路マップ、構造図
FSPATH	SPATH、反応要約
FCRD	ヒットした最初の反応のコンパクト表示
FCRDREF (デフォルト)	FCRD、原資料 (SO、PY)
CRD	ヒットしたすべての反応のコンパクト表示
CRD(n)	反応 n のコンパクト表示
CRDREF	CRD、原資料 (SO、PY)
CRDREF(n)	反応 n のコンパクト表示、原資料 (SO、PY)
RX	ヒットしたすべての反応の反応マップ、構造図、反応要約
RX(n)	反応 n の反応マップ、構造図、反応要約
RXG	ヒットしたすべての反応の反応マップ、構造図
RXG(n)	反応 n の反応マップ、構造図
RXS	ヒットしたすべての反応の反応マップ、反応要約
RXS(n)	反応 n の反応マップ、反応要約
SCAN	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)

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に収録されることがある

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

1) [PatentPak PDF](#) | [PatentPak PDF+](#) | [PatentPak Interactive](#)  
 AN 184:145048 MARPAT Full-text  
 TI Preparation of indazole-6-carboxylic acid hydroxamide derivatives as  
 :  
 PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
WO 2023177249	A1	20230921	WO 2023-KR3560	20230317

2) MSTR 1 Assembled

417,423,424,426: opt. substd. by G3

Additional displayed G-groups:  
 G1 = (1-3) CH2  
 G3 = alkyl <containing 1-10 C> / alkoxy <containing 1-10 C> / halo / 19 / OH / CN / NO2 / Ph / OCH2Ph / OPh / (Specifically claimed: OMe / Me / F / Cl / Br / 389 / Pr-i)

G4 = H / F  
 G5 = H / F / Cl / Br

3) Patent location: claim 1  
 4) Note: or pharmaceutically acceptable salts  
 Note: substitution is restricted

- 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

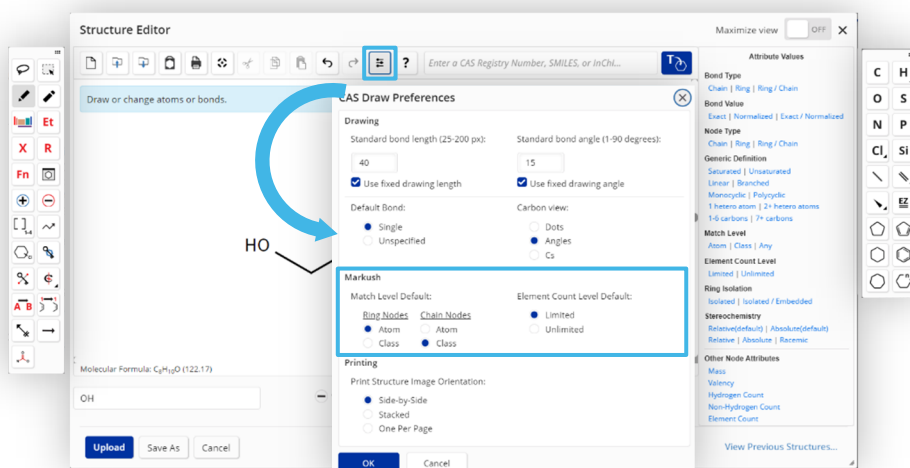
\*1 マッチレベル ANY を指定するノードは、元素数レベルを UNLIMITED (非限定) にする。

### – 元素数レベルの種類

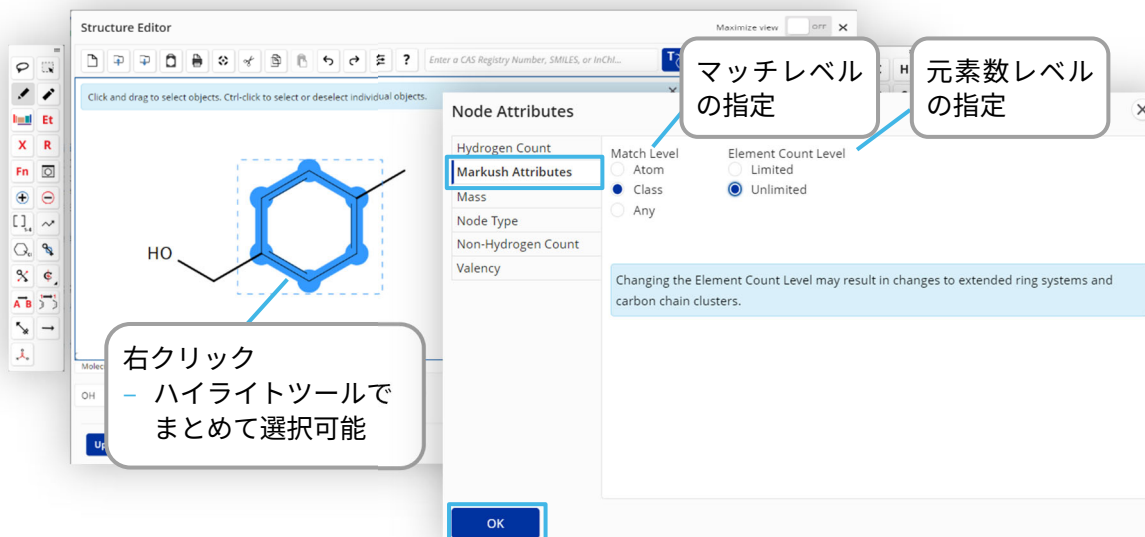
- LIMITED (限定) : 指定した元素の種類と数が該当するものに限定
- UNLIMITED (非限定) : 元素の数が明記されていないものも含める

### – 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 (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)	単語	S SALT#
/AN	レコード番号	句	S 111:136145/AN
/ED	入力日	数値	S 20240509/ED
/UP	更新日	数値	S 20240701/UP

### MARPAT ファイルの主な回答表示形式

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。



- 28) COMPONENT C1  
 29) RN 9005-38-3  
 30) CNM sodium alginate  
 31) CVO Disintegrants; Disintegrant; Disintegrating agents; Excipients,  
 :  
 32) CCN Alginic acid, sodium salt (8CI, 9CI, ACI)  
 :  
 33) CAM 15 g  
 34) COP Mandatory

- COMPONENT C2  
 RN 7732-18-5  
 CNM water  
 CVO Solvents; Absorbents, solvents; Solvency; Solvent; Solvent system;  
 :  
 CCN Water (8CI, 9CI, ACI)  
 :  
 CAM 1000 g  
 35) CNO distilled water  
 COP Mandatory

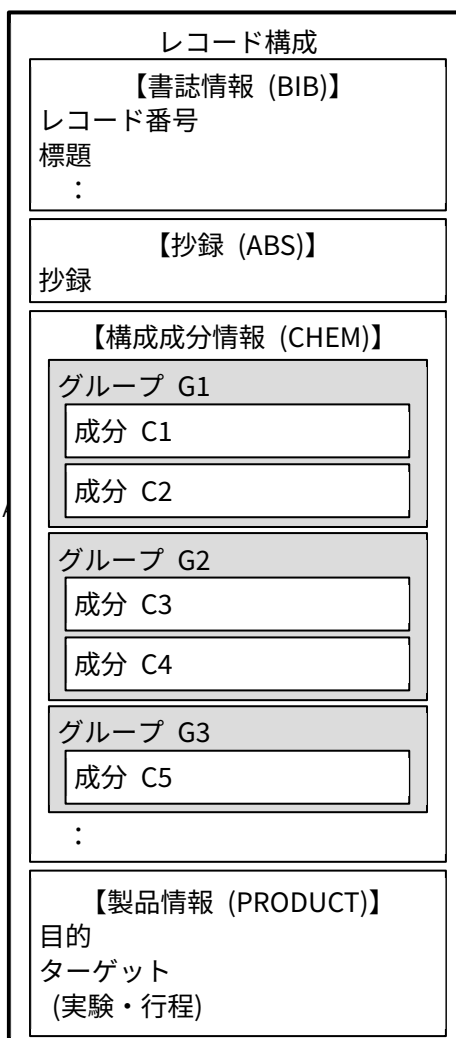
- GROUP G2  
 GDS emulsifying agent  
 36) GFU emulsifier  
 CMPS C3-C4  
 GOP Mandatory  
 GVO Emulsifying agents; Emulsification agents;  
 :  
 GAM 800 g

- COMPONENT C3  
 RN 1338-43-8  
 CNM Span 80  
 :  
 CCN Sorbitan, mono-(9Z)-9-octadecenoate (9CI, A  
 :  
 37) CFU emulsifier  
 COP Mandatory

- COMPONENT C4  
 RN 9005-65-6  
 CNM tween 80  
 :  
 COP Mandatory

- GROUP G3  
 GDS Additional ingredients  
 CMPS C5  
 GOP Mandatory

- 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  
 39) PNV peppermint oil with slow-release long-acting sterilization effect

製品情報  
 (PRODUCT)

- 40) PRODUCT PA1  
 41) PUP antibacterial agents  
 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  
 46) TVO Homo sapiens; Human; Humans; Homo cro-magnonensis; Humanity; Homo sapiens  
 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,  
 :

- |                    |                      |                 |             |
|--------------------|----------------------|-----------------|-------------|
| 1) レコード番号          | 2) CPlus レコード番号      | 3) CA 抄録番号      | 4) 入力日      |
| 5) 更新日             | 6) 標題                | 7) 著者名、発明者名     | 8) 資料名      |
| 9) 特許出願人           | 10) 資料種類             | 11) 特許情報        | 12) 処方番号    |
| 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      | 24) 成分リスト            | 25) グループ : 選択性  |             |
| 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  |
| 34) 成分 : 選択性       | 35) 成分 : ノート         | 36) グループ : 機能   | 37) 成分 : 機能 |
| 38) 製品名 : コード      | 39) 製品名、概要           | 40) 製品 PA1      | 41) 製品 : 目的 |
| 42) 製品の特徴          | 43) 製品 : キーワード       | 44) ターゲット : 関連性 |             |
| 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	内容	索引単位	入力例
無し (/BI)* <sup>1</sup>	基本索引 (標題、抄録、化学物質名、成分名、 製剤・配合ディスクリプション、 グループ：ノート、成分：ノート、 活性試験：ノート、製品：プロセ 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、 溶剤：キーワード、CAS RN <sup>®</sup> )	単語	S HERBICIDE S FLUOROCARBON? S THICKENER(W)MATERIALS S TOPICAL ANESTHETIC/BI S 1071-83-6
/AB* <sup>1</sup>	抄録	単語	S HIGH TEMP?/AB
/AD	特許出願日	数値	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 * <sup>2</sup>	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	数値	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	数値	S 1/CMPC
/CMPRN	成分 CAS RN <sup>®</sup>	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* <sup>1</sup>	成分：ノート	単語	S APPLE VINEGAR/CNO
/CNS* <sup>1</sup>	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* <sup>1</sup>	活性試験：ノート	単語	S FUNGICIDE/EAN
/ED	入力日	数値	S 20231214/ED
/FA	フィールドの存在	句	S CAM/FA
/FD* <sup>1</sup>	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： マルクーシュディスクリプション	単語・句	S CLAIM/GMD
/GNO* <sup>1</sup>	グループ：ノート	単語	S ETHYL/GNO

\*1 後方一致、中間一致検索可能。

\*2 医薬品添付文書のみ。

コード	内容	索引単位	入力例
/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	数値	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	数値	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 (AUTHOR、BRAND、GENERIC)	句	S GENERIC/PNC
/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	数値	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	数値	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	数値	S 20210510/UP

\*1 後方一致、中間一致検索可能。

\*3 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)

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)

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

\* 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

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

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)
中国	Industrial Safety and Health Law (ISHL) 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)
ロッテルダム条約加盟国	Annex III Chemical, Subject to Prior Informed Consent (PIC) procedure

上記のほか、米国内の州法に基づくリストなども収録しており、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) AN 2255 CHEMLIST
2) RN 107-13-1
3) CN 2-Propenenitrile (TSCA, DSL, AIIC, PICCS, NZIoC, INSQ, AREC)
   Vinyl cyanide (IECSC)
   :
4) FS AUSTRALIA: AIIC; CANADA: DSL; CHINA: IECSC; EEC: EINECS; EU: CLP,
   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) CFR 6 CFR Part 27; 29 CFR Part 1910; 40 CFR Part 60; 40 CFR Part 63; 40 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) HTC Harmonized Tariff Code: 292610
   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.
   On ENCS
   Japanese Gazette.
   This is a Type II Monitoring Chemical Substance; Serial No. 1057.
   Contained within class: Low Molecular Chain-like Organic Compounds.
   On AIIC
   Australian Inventory of Industrial Chemicals
   https://industrialchemicals.gov.au.
   On PICCS
   Philippines Inventory of Chemicals and Chemical Substances.
   On TCSI
   Taiwan Chemical Substance Inventory.
   Listed Name(s): acrylonitrile
   :
```



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

\* 後方一致、中間一致検索可能。

コード	内容	索引単位	入力例
/NREL	NIOSH 勧告暴露限界値	単語	S HEALTH EFFECTS/NREL
/NTPC	米国毒性プログラム発ガン性物質リスト	単語	S PHENYTOIN/NTPC
/ODC	米国大気清浄法によるオゾン層破壊物質	単語	S METHYL BROMIDE/ODC
/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 スクリーニング用テストプロジェクト	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	数値	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 許容濃度	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	数値	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 による揮発性有機化合物	単語	S EMISSION STANDARDS/VOC
/WGK	ドイツ水質危険クラス物質リスト	単語	S (HAZARD CLASS?)/WGK
/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

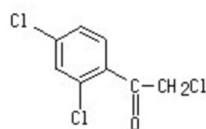
## 12. CHEMCATS ファイル

### 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)

1) Accession No. (AN): 0222402461 CHEMCATS  
2) Catalog Name (CO): BLD-USA  
3) Publication Date (PD): 13 Feb 2026  
4) Order Number Cat. (ON): BD64117  
5) Chemical Name (CN): 2,2',4'-Trichloroacetophenone  
6) Grade (CN): Reagent Grade  
7) CAS Registry No. (RN): 4252-78-2  
8) Stock Availability (SKAV): Maintained in stock  
9) Quantity Category (QCAT): Gram quantities  
10) Shipping Time (SHIP): 1 week  
11) Purity Category (PRCT): Very High  
12) Bulk Availability (BULK): No  
13) Screening Compound (SCRN): No  
14) Purity : 98%  
15) Structure :



4252-78-2

### 16) PRICES

Quantity : 25 g, Price: USD 20.00  
Quantity : 100 g, Price: USD 24.00  
Quantity : 500 g, Price: USD 70.00

### 17) 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](mailto: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 |
| 5) 化学物質名     | 6) 等級               | 7) CAS RN®  | 8) 在庫状況 |
| 9) 取扱い単位     | 10) 出荷時期            | 11) 純度カテゴリー |         |
| 12) バルク取扱い可否 | 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

コード	名称	索引単位	入力例
無し (/BI)* <sup>1</sup>	基本索引 (カタログ、会社名、所在地、国名、 化学物質名、商品名、補遺語、 CAS RN <sup>®</sup> など)	単語	S SODIUM SALT# S SULF? AND TECH S ?BENZSELENA? 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* <sup>1</sup>	化学物質名称セグメント	単語	S ?NAPHTH?/CNS
/CA* <sup>2</sup>	会社所在地 (State、City、Street を含む)	単語・句	S WASHINGTON/CA
/CO* <sup>2</sup>	会社名 (カタログ名)	単語・句	S ALDRICH/CO
/CY	国名	句	S (JAPAN OR JP)/CY
/ED	入力日	数値	S ED>=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	数値	S 20240924/PD
/PY	発行年	数値	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 <sup>®</sup>	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	数値	S UP>=20241001
/ZP	郵便番号または郵便コード	句	S 4410/ZP

\*1 後方一致、中間一致検索可能。

\*2 (S) 演算子はスペースで代用可能。

## 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

\* 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。

## 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 IP Finder, powered by STN™ 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](https://cas.org)