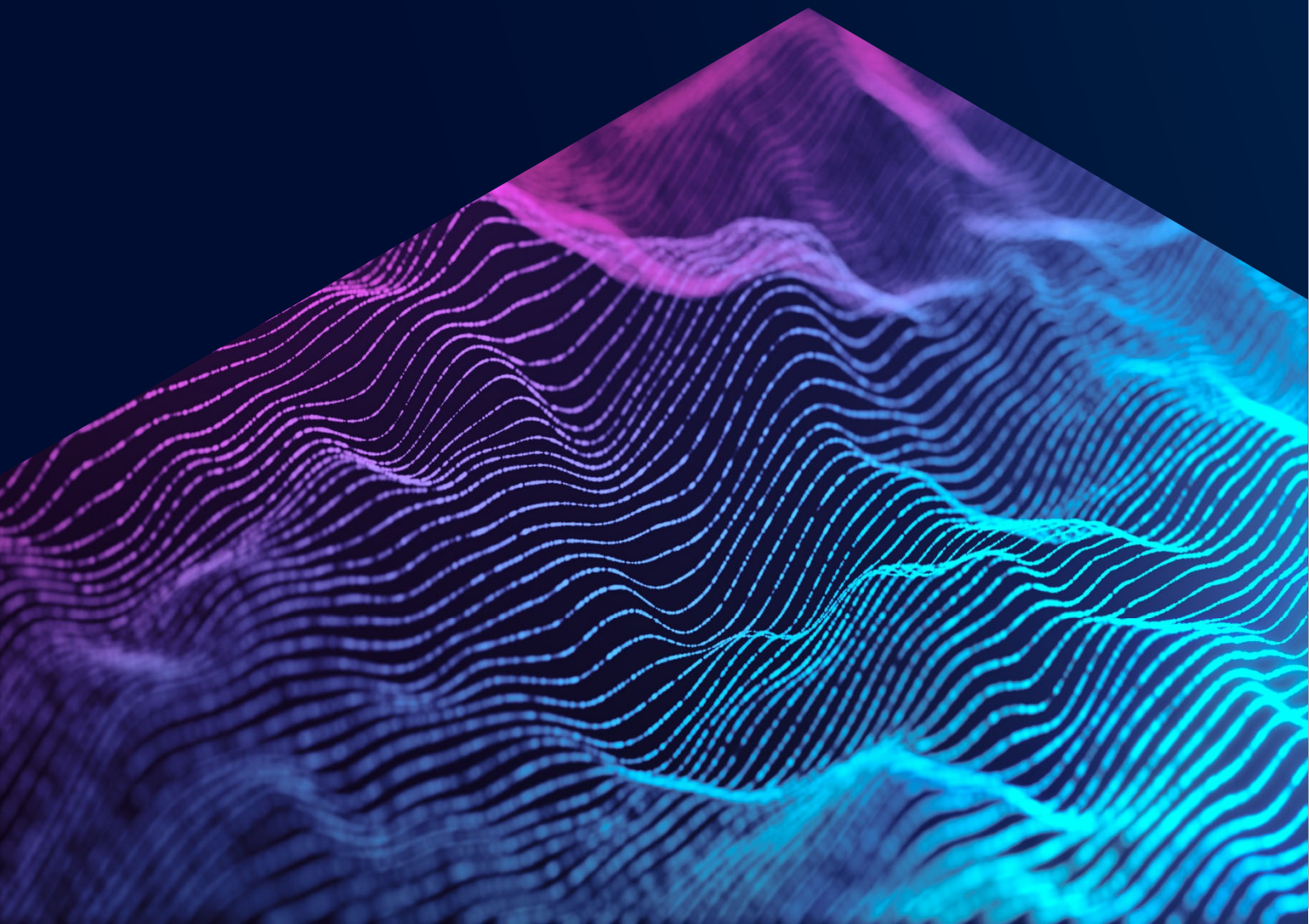


CAS STNext®

化学物質検索

202504

JAICI 化学情報協会 | CAS A division of the American Chemical Society



目次

A 概要

CAS FILES....1

REGISTRY ファイルの収録内容....2

回答表示....10

REGISTRY ファイルの検索機能....18

B 辞書検索

辞書検索フィールド....19

CAS 登録番号 (CAS RN®)....20

成分 CAS 登録番号 (CAS RN®)....21

化学物質名....22

分子式....28

クラス識別子....34

C 構造検索 (基礎編)

構造検索....37

構造作図画面....38

検索例....39

参考： イタレーションが不完全な回答....48

参考： 構造質問式の自動保存....48

参考： 構造検索のしくみとシステム制限....49

D 便利な作図機能

便利な作図機能一覧....51

置換の禁止 (Lock Atoms ツール)....52

環の孤立化 (Lock Ring ツール)....53

可変置換位置....54

繰り返しグループ....55

R グループ....56

参考： R グループ内に水素を指定する場合の注意点....59

ノードの属性 (Node Attributes - Node Type)....60

結合の属性 (Bond Attributes - Bond Type/Bond Value)....61

参考： 鎖結合に対する Lock Ring の指定....62

元素数 (Node Attributes – Element Counts) 63
一般式属性 (Node Attributes – Generic Definition)....64
結合非水素数 (Node Attributes – Non-Hydrogen Count) 66

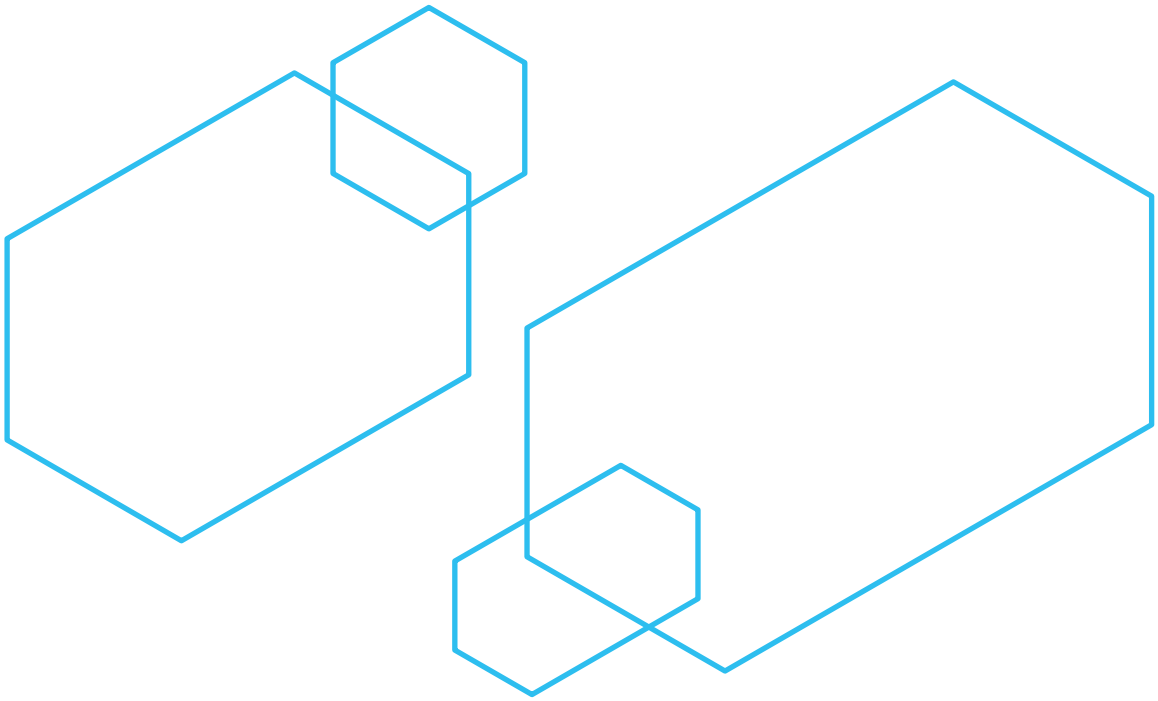
E クロスオーバー検索
化学物質のクロスオーバー検索....69
参考： CAS ロール 70
検索例....72
参考： 特許調査を効率化する CAS PatentPak....76
参考： CAplus/CA ファイルから REGISTRY ファイルへのクロスオーバー 78

練習問題....81

Appendix
複数の構造質問式を利用した構造検索....95
BATCH 検索....96
サブセット検索....97
RANGE 検索 （範囲指定検索） 98
ノーマライズド結合....99
削除された CAS RN® (DR) 101
優先 CAS RN®，非優先 CAS RN®....102
* (アスタリスク) 付きの CAS RN® と文献検索 103
CAplus/CA ファイルに文献のない場合....104
多成分物質のカウント方法....105
第四級アンモニウム塩と塩化アンモニウム....106
同位体標識化合物 107

A 概要

REGISTRY ファイルで化学物質を検索するためには、その収録内容やレコード構成を理解することが不可欠です。



CAS FILES

CAS FILES は CAS が作成するデータベースの総称である。
CAS FILES は、すべて STN で検索できる。

(2025 年 04 月現在)

ファイル名	内容	収録年	収録件数
CAS REGISTRY	化学物質のデータベース CAS 登録番号 (CAS RN®)、名称、分子式、構造、配列、物性情報、スペクトルデータなどを収録。	1800 初頭-	295,000,000 (化学物質)
CA	化学および周辺分野の文献データベース 書誌情報、対応特許情報、抄録、索引、引用・被引用情報、米国特許の譲渡情報などを収録。	1808-	50,500,000
CAplus	化学および周辺分野の文献データベース CA ファイルの全情報に加え CA 収録予定の情報や CA 収録対象外の情報も収録。	1808-	66,000,000
CASREACT	有機化学反応情報を含む文献データベース CA 収録対象文献から選択した反応情報を収録。	1840-	2,440,000 (文献) 150,000,000 (反応)
MARPAT	マルクーシュ (Markush) 構造を含む特許データベース CA 収録対象特許のクレーム中または発明の詳細な説明中からマルクーシュ構造を収録。	1961-	605,000 (特許)
CASFORMULTNS*	製剤・配合情報のデータベース CAplus 収録特許・雑誌および医薬品添付文書から製剤・配合に関わる構成成分や機能を収録。	1996-	5,700,000
CHEMLIST	化学物質規制情報のデータベース 主要国の既存化学物質リスト情報、各国の規制化学物質リスト情報を収録。	1980-	407,000
CHEMCATS	市販化学薬品のカタログ情報のデータベース CAS RN®、名称、供給業者名、カタログ名、価格などを収録。	最新	随時更新
CIN	化学ビジネス情報のデータベース 化学産業界分野のビジネスニュースの書誌情報、抄録、索引、CAS RN®、名称などを収録。	1974-	1,800,000

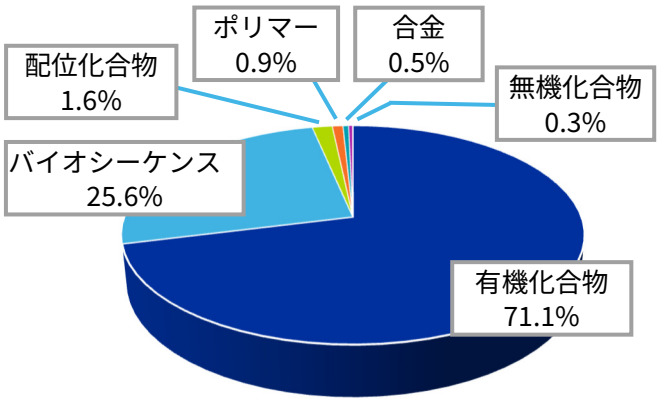
* STN 定額契約ではオプション契約が必要。

REGISTRY ファイルの収録内容

REGISTRY ファイルには CAS RN® が付与された化学物質が収録されている。

- 収録レコード数 :2.95 億件以上 (2025 年 4 月現在)
- 更新は毎日
- REGISTRY ファイルに収録されている化学物質の種類

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



(2025 年 4 月現在)

- CAS RN® とは、CAS が付与している化学物質を特定するためのユニークな番号
  - 化学物質の同定は細かく区別されており、一つの化学物質に一つの番号が付与される。

【例 1：酢酸】
酢酸 : 64-19-7
酢酸ナトリウム : 127-09-3
^{14}C で標識された酢酸 : 3590-56-5
酢酸イオン （CH_3COO^-） : 71-50-1

【例 2：アラニン】
L-アラニン : 56-41-7
D-アラニン : 338-69-2
DL-アラニン : 302-72-7

【例 3：ベンゼン】
ベンゼン : 71-43-2
ベンゼンのラジカルイオン : 34504-50-2

【例 4：硫酸銅】
硫酸銅の無水物 : 7758-98-7
硫酸銅の 5 水和物 : 7758-99-8

- REGISTRY ファイルに収録される化学物質の出典
  - CAplus/CA ファイル に索引されている特定の化学物質*

    * 分子式や構造が明確な単一の化学物質

    ① CA 収録対象の原文献に記載されており科学的・技術的に新しい知見があった化学物質

    ② 特許実施例中またはクレーム (1981 年以降) に記載されており、新規性・改良点、重要な事項に関連する化学物質

    ③ 実施例由来の場合は何らかの hard data のある物質 (例示物質は索引しない)

    ただし、以下の特許がベーシック特許となった場合には、実施例中の hard data のない物質 (Prophetic 物質) も索引する。
    - 2009 年 1 月以降の CA、DE、EP、FR、GB、JP、RU、US、WO から発行された特許
    - 1998-2008 年の CA、DE、EP、FR、GB、US、WO で発行された英語、仏語、独語の特許 (1993-1997 年は一部収録)
    - 2000-2008 年の日本語で書かれた特許 (一部収録)

    Prophetic 物質の定義
    1. 特許の実施例に記載されている hard data のない特定の化学物質 (例 ： 反応物、単離された中間体、生成物) で、クレームには記載されていないもの。構造式だけでなく、化学物質名で表現されているものや、表にまとめられているものも含まれる。
    2. 新規の用途が報告されているが、その用途が実証されていない既知物質
  - CASREACT ファイルに収録されている反応中の反応関与物質
  - 米国 (TSCA) カナダ (DSL、NDSL)、EC (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
  - 登録システムの開始時に各種ハンドブック類から収載された化学物質
    - Merck Index
    - Color Index
    - Ring Index
    - Lange: Handbook of Chemistry
    - Pesticide Index
    - U.S. Adopted Names
    - SOCMA Handbook
  - 化合物ライブラリー (CHEMCATS ファイル) から登録された化学物質
  - 他のデータベースからの化学物質情報を収録

主な収録源データベース名
ChemBank (The Broad Institute)
Integrated Spectral Data Base System of Organic Compounds (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology in Japan)
NCI 2D, NCI 3D (National Cancer Institute)
Roadrunner (New Mexico Molecular Libraries Screening Center)
Wiley Subscription Services, Inc
UPCMLD Library (University of Pittsburgh Center for Chemical Methodologies and Library Development)
ChemSpider (ChemZoo, Inc.)

REGISTRY ファイルのレコード構成

各レコードには物質に関する様々な情報が収録されている。

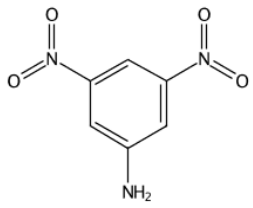
- CAS 登録番号 (CAS RN®)
- 化学物質の名称
- 分子式
- 構造、配列
- 物性データ、スペクトルデータ
- CAplus、CA ファイルの文献数

単成分物質のレコード例 (IDE 表示形式)

- 有機化合物

```
      CAS RN®   RN   618-87-1  REGISTRY
* レコード作成日   ED   Entered STN:  16 Nov 1984
     CA 索引名   CN   Benzenamine, 3,5-dinitro-  (CA INDEX NAME)
   旧 CA 索引名   OTHER CA INDEX NAMES:
                CN   3,5-Dinitrobenzenamine
                CN   Aniline, 3,5-dinitro- (7CI, 8CI)
  他の化学物質名   OTHER NAMES:
                CN   (3,5-Dinitrophenyl)amine
                CN   1-Amino-3,5-dinitrobenzene
                CN   3,5-Dinitroaniline
                CN   Dinitroaniline
                CN   NSC 284
       分子式   MF   C6 H5 N3 O4
   クラス識別子   CI   COM
       収録源   SR   CA
  CAS RN® 所在   LC   STN Files:   BIOSIS, CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS,
                  CHEMLIST, CIN, IFIALL, MSDS-OHS, REAXYSFILE*, RTECS*, TOXCENTER,
                  USPAT2, USPATFULL, USPATOLD
                    (*File contains numerically searchable property data)
                Other Sources:   EINECS**
                    (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
```

構造図




```
物性データの存在   **PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

     CA の文献数          683 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
                            8 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
CAplus の文献数          711 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

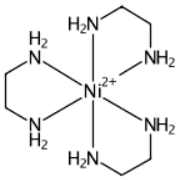
* 1984 年 11 月以前に登録された物質のレコード作成日はすべて "16 Nov 1984"

– 配位化合物

```
CAS RN®                  RN    15390-99-5  REGISTRY
レコード作成日           ED    Entered STN:  16 Nov 1984
CA 索引名                CN    Nickel(2+), tris(1,2-ethanediamine-κN1,κN2)-, (OC-6-11)-  (CA
                               INDEX NAME)
旧 CA 索引名             OTHER CA INDEX NAMES:
                         CN    (OC-6-11)-Tris(1,2-ethanediamine-κN1,κN2)nickel(2+)
                         CN    Nickel(2+), tris(1,2-ethanediamine-κN,κN')-, (OC-6-11)- (9CI)
                         CN    Nickel(2+), tris(1,2-ethanediamine-N,N')-, (OC-6-11)-
                         CN    Nickel(2+), tris(ethylenediamine)-, ion (8CI)
他の化学物質名           OTHER NAMES:
                         CN    Nickel(2+), tris(ethylenediamine)-, (OC-6-11)-
                         CN    Tris(ethylenediamine)nickel(2+)
                         CN    Tris(ethylenediamino)nickel(2+)
削除された CAS RN®       DR    46138-63-0
分子式                   MF    C6 H24 N6 Ni
クラス識別子             CI    CCS, COM
CAS RN® 所在             LC    STN Files:   CA, CAPLUS, CASREACT, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
```

配位化合物 (CCS)

構造図



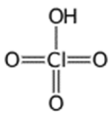
```
物性データの存在         **PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

CA の文献数                        147 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
                                     6 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
CAplus の文献数                    147 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

– 無機化合物

```
CAS RN®                  RN    7601-90-3  REGISTRY
レコード作成日           ED    Entered STN:  16 Nov 1984
CA 索引名                CN    Perchloric acid  (CA INDEX NAME)
他の化学物質名           OTHER NAMES:
                         CN    Perchloric acid (HClO4)
非優先 CAS RN®           AR    210584-41-1
削除された CAS RN®       DR    47999-51-9, 90149-16-9, 92785-38-1, 95912-44-0, 95998-58-6,
                               :
分子式                   MF    Cl H O4
クラス識別子             CI    COM
CAS RN® 所在             LC    STN Files:   BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAPLUS, CASBIOACTIVI, CASFORMULTNS,
                               :
```

構造図



```
物性データの存在         **PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

CA の文献数                      34470 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
                                   868 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
CAplus の文献数                  35655 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

- モノマー単位ポリマー (ホモポリマー)

```
CAS RN®          RN    25067-58-7  REGISTRY
レコード作成日    ED    Entered STN:  16 Nov 1984
CA 索引名        CN    Ethyne, homopolymer  (CA INDEX NAME)
旧 CA 索引名     OTHER CA INDEX NAMES:
                 CN    Acetylene, polymers (8CI)
他の化学物質名    OTHER NAMES:
                 CN    Acetylene homopolymer
                       :
分子式           MF    (C2 H2)x
クラス識別子      CI    PMS, COM
ポリマー分類用語  PCT   Polyacetylene
収録源           SR    CA
CAS RN® 所在     LC    STN Files:   BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAPLUS, CASBIOACTIVI, CASFORMULTNS,
                       :

構造図                 CM   1

                       CRN  74-86-2
                       CMF  C2 H2
                       CM
```

(モノマーの分子式)x

ポリマー (PMS)

モノマーの構造

```
物性データの存在  **PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

CA の文献数              8458 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
                          399 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
CAplus の文献数          8608 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

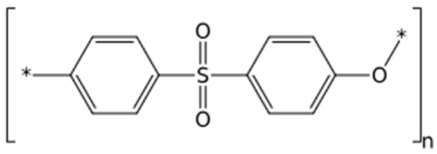
- SRU (繰り返し単位) ポリマー

```
CAS RN®          RN    25667-42-9  REGISTRY
レコード作成日    ED    Entered STN:  22 Sep 1989
CA 索引名        CN    Poly(oxy-1,4-phenylenesulfonyl-1,4-phenylene)  (CA INDEX NAME)
他の化学物質名    OTHER NAMES:
                 CN    α-[p-[(p-Hydroxyphenyl)sulfonyl]phenyl]-o-hydroxypoly(oxy-p-
                       :
削除された CAS RN® DR   9079-18-9, 38885-52-8, 41208-84-8, 57125-91-4, 58450-23-0,
                       :
分子式           MF    (C12 H8 O3 S)n
クラス識別子      CI    PMS, COM
ポリマー分類用語  PCT   Polyether, Polysulfone
CAS RN® 所在     LC    STN Files:   BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT,
                       :
同一ポリマーの存在  **RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK**
```

(繰り返し単位の分子式)n

ポリマー (PMS)

構造図



繰り返し単位の構造

```
物性データの存在  **PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

CA の文献数             11253 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
                          736 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
CAplus の文献数         11755 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

– 核酸 (SQIDE 表示形式)

```
CAS RN®                RN   399060-53-8  REGISTRY
レコード作成日          ED   Entered STN:  07 Mar 2002
CA 索引名              CN   DNA (human fetal liver clone WO0157277-SEQID-14212 gene exon) (9CI)  (CA
                            INDEX NAME)
他の化学物質名          OTHER NAMES:
                       CN   1539: PN: WO0157277 SEQID: 14212 claimed DNA
ファイルセグメント      FS   NUCLEIC ACID SEQUENCE
配列長                 SQL  452
核酸タイプと数          NA   134 a   87 c   98 g   133 t

特許情報               PATENT ANNOTATIONS (PNTE):
                       Sequence    |Feature     |Description                  |Patent
                       Source      |            |                             |Reference
                       ============+============+=============================+=============
                       Homo sapiens|misc_feature|MAP TO AL049648.6            |WO2001057277
                                   |            |                             |claimed SEQID
                                   |            |                             |14212
                       ------------+------------+-----------------------------+-------------
                                   |misc_feature|EXPRESSED IN FETAL LIVER,    |
                                   |            |SIGNAL = 2.9                 |
                       ------------+------------+-----------------------------+-------------
                                   |misc_feature|SWISSPROT HIT: P25582, EVALUE|
                                   |            |2.00e+00                     |
                       ------------+------------+-----------------------------+-------------
                                   |misc_feature|EST_HUMAN HIT: AA299985.1,   |
                                   |            |EVALUE 6.60e+00              |


配列                   SEQ      1 atgaaaagtg ctgtccccac agatccgtga agggcggtgg gaggggtggt
                               51 ttgcatgaga gaggagctct gctaaggtga ctggaaagtg ctgcctgaga
                              101 cctgttccct ggaagcacag ctctttttgg ttaaatacat aaactaccat
                              151 aaaaaccaca attacagtga ctaccatggt gataatttca atgcactgaa
                              201 ttatatgaaa aaataaaaca aacaaaacct gggacacaat tgaacagcac
                              251 aagaagtagg aatgtggcac agtctgtaat ttatgtttat tgccatgggt
                              301 ttcgacggac caaatggctc atgcctgcct gcactgtagc tgagtcatgt
                              351 ttgatatctc aaagtggcag taaaaaaaat ctttatggct cccatgctat
                              401 tttcatacct tatttattct gtttttttcc cctgttttta agtcatcttt
                              451 tg

                       **RELATED SEQUENCES AVAILABLE WITH SEQLINK**
分子式                 MF   Unspecified
クラス識別子           CI   MAN
収録源                 SR   CA
CAS RN® 所在           LC   STN Files:   CA, CAPLUS
CAplus ファイルの資料種類 DT.CA  CAplus document type:  Patent
*1CAS ロール           RL.P   Roles from patents:  ANST (Analytical study); BIOL (Biological study);
                              PRP (Properties)
CA の文献数                        1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
CAplus の文献数                    1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

核酸

*1 特定物質として索引された特許レコードでのスーパーロール

多成分物質のレコード例 (IDE 表示形式)

- REGISTRY ファイルでは、以下のような物質が多成分物質として登録されている。

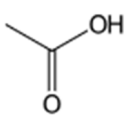
多成分物質として登録される物質			
多くの塩	コポリマー	付加化合物	合金
混合物	イオン対	金属間化合物	構造不明の無機化合物
元素組成比が非整数、または範囲で示される無機化合物			

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

```
     CAS RN®  RN   127-09-3  REGISTRY
レコード作成日  ED   Entered STN:  16 Nov 1984
    CA 索引名  CN   Acetic acid, sodium salt (1:1)  (CA INDEX NAME)
                        :
       分子式  MF   C2 H4 O2 . Na
   クラス識別子 CI   COM
  CAS RN® 所在 LC   STN Files:   ADISNEW
                        :
 成分 CAS RN®  CRN  (64-19-7)
```

多成分物質では各成分の分子式がピリオドで区切られている

構造図



成分 1

• Na

成分 2

```
物性データの存在   **PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

    CA の文献数          63552 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
                           303 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
CAplus の文献数          67335 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

- 合金

```
     CAS RN®  RN   109145-92-8  REGISTRY
レコード作成日  ED   Entered STN:  11 Jul 1987
    CA 索引名  CN   Zinc alloy, base, Zn,Al,La (Galfan)  (CA INDEX NAME)
                        :
       分子式  MF   Al . La . Zn
   クラス識別子 CI   AYS
       収録源  SR   CA
  CAS RN® 所在 LC   STN Files:   CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CIN, PIRA, TOXCENTER, USPAT2,
```

合金 (AYS)

```
      成分表  Component    Component      Component
                           Percent    Registry Number
             =========+=============+===============
                 Zn          95            7440-66-6
                 Al       4.8 -   5.2      7429-90-5
                 La       0   -   0.1      7439-91-0

物性データの存在   **PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

    CA の文献数            208 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
                             2 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
CAplus の文献数            209 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

– モノマー単位ポリマー (コポリマー)

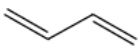
CAS RN® RN 110389-01-0 REGISTRY
レコード作成日 ED Entered STN: 19 Sep 1987
CA 索引名 CN Benzene, ethenyl-, polymer with 1,3-butadiene and 2-methyl-1,3-butadiene, block (CA INDEX NAME)
旧 CA 索引名 OTHER CA INDEX NAMES:
CN 1,3-Butadiene, 2-methyl-, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, block (9CI)
CN 1,3-Butadiene, polymer with ethenylbenzene and 2-methyl-1,3-butadiene, block (9CI)
他の化学物質名 OTHER NAMES:
CN 1,3-Butadiene-2-methyl-1,3-butadiene-styrene block copolymer
CN 1,3-Butadiene-isoprene-styrene block copolymer
CN Butadiene-isoprene-styrene block copolymer
CN Butadiene-styrene-isoprene block copolymer
CN Isoprene-1,
CN Isoprene-bu
:
削除された CAS RN® DR 159767-41-6
分子式 MF (C8 H8 . C5 H8 . C4 H6)x
クラス識別子 CI PMS
ポリマー分類用語 PCT Polyolefin, Polystyrene
収録源 SR CA
CAS RN® 所在 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMLIST, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL

コポリマーは、原料モノマーの多成分物質として登録されている。
各モノマーの分子式がピリオドで区切られる

ポリマー (PMS)

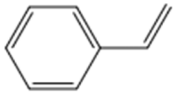
構造図

CM 1
CRN 106-99-0
CMF C4 H6



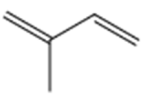
成分 1 (モノマー 1)

CM 2
CRN 100-42-5
CMF C8 H8



成分 2 (モノマー 2)

CM 3
CRN 78-79-5
CMF C5 H8



成分 3 (モノマー 3)

CA の文献数 688 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
384 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
CAplus の文献数 688 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

回答表示

回答表示

```
=> D   L1   1-3  (IDE)
       L 番号  回答番号  表示形式
```

L 番号、回答番号、表示形式を省略すると、デフォルト (直前の L 番号、1 番目の回答、IDE 表示形式) の内容が自動的に表示される。

- REGISTRY ファイルの各レコードには、CAS RN®、化学物質名、分子式、構造図、配列、物性データ、スペクトルデータなどの様々な情報が収録されている。
- 表示したい内容によって適切な表示形式を指定する。

=> D	← 直前の L 番号の 1 番目の回答を IDE 表示形式で表示
=> D L1 1-3 IDE	← L1 の 1～3 番目の回答を IDE 表示形式で表示
=> D L2 SCAN	← L2 の回答を SCAN 表示形式でランダムに表示
=> D L3 1-10 SAM	← L3 の 1～10 番目の回答を SAM 表示形式で表示
=> D L4 5 FIDE	← L4 の 5 番目の回答を FIDE 表示形式で表示

- 代表的な定型表示形式

表示形式	内容
SAM	CA 索引名、分子式、クラス識別子、構造図、配列長
SCAN	SAM と同じ (ただし、回答番号指定不可：ランダム表示)
IDE (デフォルト)	基本的な物質情報 (化学物質名は 50 まで表示)
IDERL	IDE、CAplus ファイルのスーパーロールと資料種類
FIDE	すべての物質情報 (RSD、スーパーロール、物性などを含む)
ALL	FIDE、CA ファイル中の最新の 10 文献 (ALL 表示形式)

- 表示形式によって表示されるフィールドが異なる。

表示形式	REGISTRY														CA
	回答番号	RN	IN	CN	MF	CI	構造	ED	FS	LC	REF	ロール	RSD	物性	文献
SAM	○	-	○	-	○	○	○	-	-	-	-	-	-	-	-
SCAN	-	-	○	-	○	○	○	-	-	-	-	-	-	-	-
IDE (デフォルト)	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	-	-	-	-
IDERL	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	-	-	-
FIDE	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	-
ALL	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○

注： ALL 表示形式を指示すると、CA ファイルのデータ (最新 10 件分) も表示される。

表示例

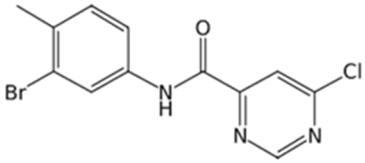
```
=> FILE REGISTRY
```

REGISTRY ファイルに入る

```
=> S PYRIMIDINE AND BROMO AND CHLORO
L1       115138 PYRIMIDINE AND BROMO AND CHLORO

=> D L1 SCAN

L1    115138 ANSWERS   REGISTRY  COPYRI
IN    4-Pyrimidinecarboxamide, N-(3-bro
MF    C12 H9 Br Cl N3 O
```



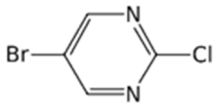
SCAN 表示形式

- L 番号のみ指定できる
- 回答番号の指定はできない

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

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

 L1    115138 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro-
MF    C4 H2 Br Cl N2
```



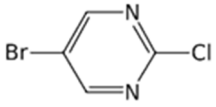
初めはランダムに 1 件表示されるので
追加で表示したい件数を入力する

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

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

=> D L1 115014 SAM

L1    ANSWER 115014 OF 115138  REGISTRY
IN    Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro-
MF    C4 H2 Br Cl N2
```




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

SCAN 表示を終了する場合は
END または 0 を入力する

SAM 表示形式

- 回答番号を指定できる

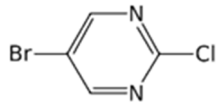
参考 ： SCAN 表示形式と SAM 表示形式

表示される内容は同じであるが下記の点で異なる。

- SCAN 表示形式 ： 回答セット中に含まれるいずれかのレコードがランダムに表示される。
  回答番号の指定はできない。
- SAM 表示形式 ： 回答番号の指定ができる。

```
=> D L1 115014

L1    ANSWER 115014 OF 115138  REG
RN    32779-36-5  REGISTRY
ED    Entered STN:  16 Nov 1984
CN    Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro
OTHER CA INDEX NAMES:
CN    5-Bromo-2-chloropyrimidine
OTHER NAMES:
CN    2-Chloro-5-bromopyrimidine
MF    C4 H2 Br Cl N2
SR    CA
LC    STN Files:   CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, REAXYSFILE*,
        REAXYSFILESU*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
          (*File contains numerically searchable property data)
```

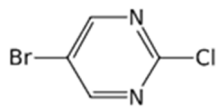



```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

             1241 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
             1257 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

=> D L1 115014 IDERL

L1    ANSWER 115014 OF 115138  REGISTRY
RN    32779-36-5  REGISTRY
ED    Entered STN:  16 Nov 1984
CN    Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro-  (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN    5-Bromo-2-chloropyrimidine
OTHER NAMES:
CN    2-Chloro-5-bromopyrimidine
MF    C4 H2 Br Cl N2
SR    CA
LC    STN Files:   CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, REAXYSFILE*,
        REAXYSFILESU*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
          (*File contains numerically searchable property data)
DT.CA  CAplus document type:  Journal; Patent; Preprint
RL.P   Roles from patents:  BIOL (Biological study); PREP (Preparation); PRPH
       (Prophetic); RACT (Reactant or reagent); SCLM (Substance claimed); USES (Uses)
RL.NP  Roles from non-patents:  ANST (Analytical study); BIOL (Biological
       study); CMBI (Combinatorial study); FORM (Formation, nonpreparative);
       PREP (Preparation); PROC (Process); PRP (Properties); RACT (Reactant or
       reagent)
```




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

             1241 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
             1257 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

IDE 表示形式

- デフォルトの表示形式なので、表示形式を指定しない場合は、自動的にこの表示形式で表示される
- CAS RN® も表示される
- 化学物質名は 50 名称まで表示される

物性データの存在

IDERL 表示形式

- IDE 表示形式で表示される情報に加え、CAplus ファイルのスーパーロールと資料種類が含まれる

FIDE 表示形式

- IDERL 表示形式で表示される情報に加え、環データや物性値を含む 「物質に関するすべての情報」 が表示される

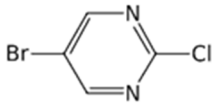
```
=> D L1 115014 FIDE

L1    ANSWER 115014 OF 115138  REG
RN    32779-36-5  REGISTRY
ED    Entered STN:  16 Nov 1984
CN    Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro-  (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN    5-Bromo-2-chloropyrimidine
OTHER NAMES:
CN    2-Chloro-5-bromopyrimidine
MF    C4 H2 Br Cl N2
SR    CA
LC    STN Files:   CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, REAXYSFILE*,
        REAXYSFILESU*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
          (*File contains numerically searchable property data)
DT.CA  CAplus document type:  Journal; Patent;Preprint
RL.P   Roles from patents:  BIOL (Biological study); PREP (Preparation); PRPH
       (Prophetic); RACT (Reactant or reagent); SCLM (Substance claimed); USES (Uses)
RL.NP  Roles from non-patents:  ANST (Analytical study); BIOL (Biological
       study); CMBI (Combinatorial study); FORM (Formation, nonpreparative);
       PREP (Preparation); PROC (Process); PRP (Properties); RACT (Reactant or
       reagent)
```

環データ

```
Ring System Data

Elemental|Elemental| Size of |Ring System|   Ring    |   RID
Analysis |Sequence |the Rings|  Formula   |Identifier|Occurrence
   EA    |   ES    |   SZ    |    RF      |   RID    |  Count
=========+=========+=========+============+==========+==========
C4N2     |NCNC3    |6        |C4N2        |46.195.39 |1
```



実測物性値

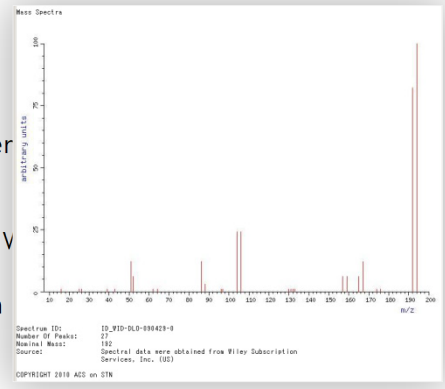
```
Experimental Properties (EPROP)

 PROPERTY (CODE)  |    VALUE     |  CONDITION   |   NOTE
==================+==============+==============+==========
Boiling Point (BP)|95 deg C      |Press: 15
Mass Spectra      |Spectrum      |
Melting Point (MP)|78-79 deg C   |
Melting Point (MP)|78-79 deg C   |              |(4)     IC
Melting Point (MP)|78-78.6 deg C|Solv: hexane  |(5)    CAS
                  |              |(110-54-3)    |
Proton NMR Spectra|Spectrum      |              |(2)    WSS

Spectra may be displayed by clicking the links in the proper
using the SPEC or MAX formats.

(1)     Brown, D. J.; Australian Journal of Chemistry 1964 V
        CAPLUS
(2)     Spectral data were obtained from Wiley Subscription
          :
```

リンクをクリックするとスペクトルデータが表示される
(リンクはオンライン中のみ有効)



Experimental Property Tags (ETAG) — 参照文献タグ

```
                      PROPERTY                         | NOTE
=======================================================+=======
Carbon-13 NMR Spectra                                  |(1) CAS
     1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats
IR Spectra                                             |(2) CAS
Mass Spectra                                           |(2) CAS
     1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats|
Melting Point                                          |(2) CAS
Proton NMR Spectra                                     |(1) CAS
     2 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats|

(1)     Hug, Stephan; Chemistry of Materials 2015 V27(23) P8001-8010 CAPLUS
(2)     Sharma, Sanjay; Liquid Crystals 2003 V30(4) P451-461 CAPLUS
```

Predicted Properties (PPROP) — 予想物性値

```
       PROPERTY (CODE)        |        VALUE        |   CONDITION    |NOTE
==============================+=====================+================+====
Bioconc. Factor (BCF)         |3.24                 |pH 1  25 deg C  |(1)
Bioconc. Factor (BCF)         |3.24                 |pH 2  25 deg C  |(1)
Bioconc. Factor (BCF)         |3.24                 |pH 3  25 deg C  |(1)
Bioconc. Factor (BCF)         |3.24                 |pH 4  25 deg C  |(1)
Bioconc. Factor (BCF)         |3.24                 |pH 5  25 deg C  |(1)
          :

(1)  Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02
     ((C) 1994-2025 ACD/Labs)

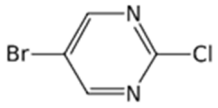
See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.
            1241 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
            1257 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

```
=> D L1 115014 ALL

L1   ANSWER 115014 OF 115138
RN   32779-36-5  REGISTRY
ED   Entered STN:  16 Nov 1984
CN   Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro-  (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN   5-Bromo-2-chloropyrimidine
OTHER NAMES:
CN   2-Chloro-5-bromopyrimidine
MF   C4 H2 Br Cl N2
SR   CA
LC   STN Files:   CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, REAXYSFILE*,
       REAXYSFILESU*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
         (*File contains numerically searchable property data)
DT.CA  CAplus document type:  Journal; Patent; Preprint
RL.P   Roles from patents:  BIOL (Biological study); PREP (Preparation); PRPH
       (Prophetic); RACT (Reactant or reagent); SCLM (Substance claimed); USES (Uses)
RL.NP  Roles from non-patents:  ANST (Analytical study); BIOL (Biological
       study); CMBI (Combinatorial study); FORM (Formation, nonpreparative);
       PREP (Preparation); PROC (Process); PRP (Properties); RACT (Reactant or
       reagent)

Ring System Data

Elemental|Elemental| Size of |Ring System|   Ring    |   RID
Analysis |Sequence |the Rings|  Formula   |Identifier|Occurrence
   EA    |   ES    |   SZ    |    RF      |   RID    |  Count
=========+=========+=========+============+==========+==========
C4N2     |NCNC3    |6        |C4N2        |46.195.39 |1
```




```
Experimental Properties (EPROP)

 PROPERTY (CODE)  |    VALUE    |  CONDITION   |   NOTE
==================+=============+==============+==========
Boiling Point (BP)|95 deg C     |Press: 15 Torr|(1)    CAS
Mass Spectra      |Spectrum     |              |(2)    WSS
Melting Point (MP)|78-79 deg C  |              |(3)    CAS
Melting Point (MP)|78-79 deg C  |              |(4)     IC
Melting Point (MP)|78-78.6 deg C|Solv: hexane  |(5)    CAS
                  |             |(110-54-3)    |
Proton NMR Spectra|Spectrum     |              |(2)    WSS

Spectra may be displayed by clicking the links in the property table, or in
bulk using the SPEC or MAX formats.

(1)     Brown, D. J.; Australian Journal of Chemistry 1964 V17(7) P794-802 CAPLUS
(2)     Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)
          :
```

ALL 表示形式
- FIDE 表示形式の情報に加え，CA ファイルの最新 10 件の文献情報が表示される

FIDE 表示形式と同じ内容

```
Experimental Property Tags (ETAG)

                      PROPERTY                        | NOTE
======================================================+=======
Carbon-13 NMR Spectra                                 |(1) CAS
     1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats|
IR Spectra                                            |(2) CAS
Mass Spectra                                          |(2) CAS
     1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats|
Melting Point                                         |(2) CAS
Proton NMR Spectra                                    |(1) CAS
     2 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats|

(1)     Hug, Stephan; Chemistry of Materials 2015 V27(23) P8001-8010 CAPLUS
(2)     Sharma, Sanjay; Liquid Crystals 2003 V30(4) P451-461 CAPLUS

Predicted Properties (PPROP)

       PROPERTY (CODE)       |        VALUE        |   CONDITION    |NOTE
=============================+=====================+================+====
Bioconc. Factor (BCF)        |3.24                 |pH 1  25 deg C  |(1)
Bioconc. Factor (BCF)        |3.24                 |pH 2  25 deg C  |(1)
Bioconc. Factor (BCF)        |3.24                 |pH 3  25 deg C  |(1)
Bioconc. Factor (BCF)        |3.24                 |pH 4  25 deg C  |(1)
Bioconc. Factor (BCF)        |3.24                 |pH 5  25 deg C  |(1)
          :

(1)  Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02
     ((C) 1994-2025 ACD/Labs)


See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.
            1241 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
            1257 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

FIDE 表示形式と同じ内容

```
REFERENCE  1

AN   1900:54406  CA Full-text
TI   Imidazopyrimidine derivatives as PRC2 inhibitors and their preparation
IN   Friedman, Lori S.; Multani, Pratik Sharad; Maneval, Edna Chow
PA   ORIC Pharmaceuticals, Inc., USA
UO   ORIC PHARMACEUTICALS INC
UOS  ORIC PHARMACEUTICALS INC
SO   PCT Int. Appl., 216pp.
     CODEN: PIXXD2
DT   Patent
LA   English
IPCI A61K0031-519 [I]; A61K0031-17 [I]; A61K0031-198 [I]; A61K0031-443
     A61K0039-395 [I]; A61P0007-00 [I]; A61P0007-06 [I]
IPCR A61K0031-519 [I]; A61K0031-17 [I]; A61K0031-198 [I]; A61K0031-4439 [I];
     A61K0039-395 [I]; A61P0007-00 [I]; A61P0007-06 [I]
CC   28-16 (Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom))
     Section cross-reference(s): 1, 63
FAN.CNT 1
     PATENT NO.          KIND   DATE        APPLICATION NO.        DATE
     ---------------     ----   --------    --------------------   --------
PI   WO 2025043191        A1    20250227    WO 2024-US43672        20240823
PRAI US 2023-63578568     P     20230824
```

CA ファイル
最新 10 文献の ALL 表示

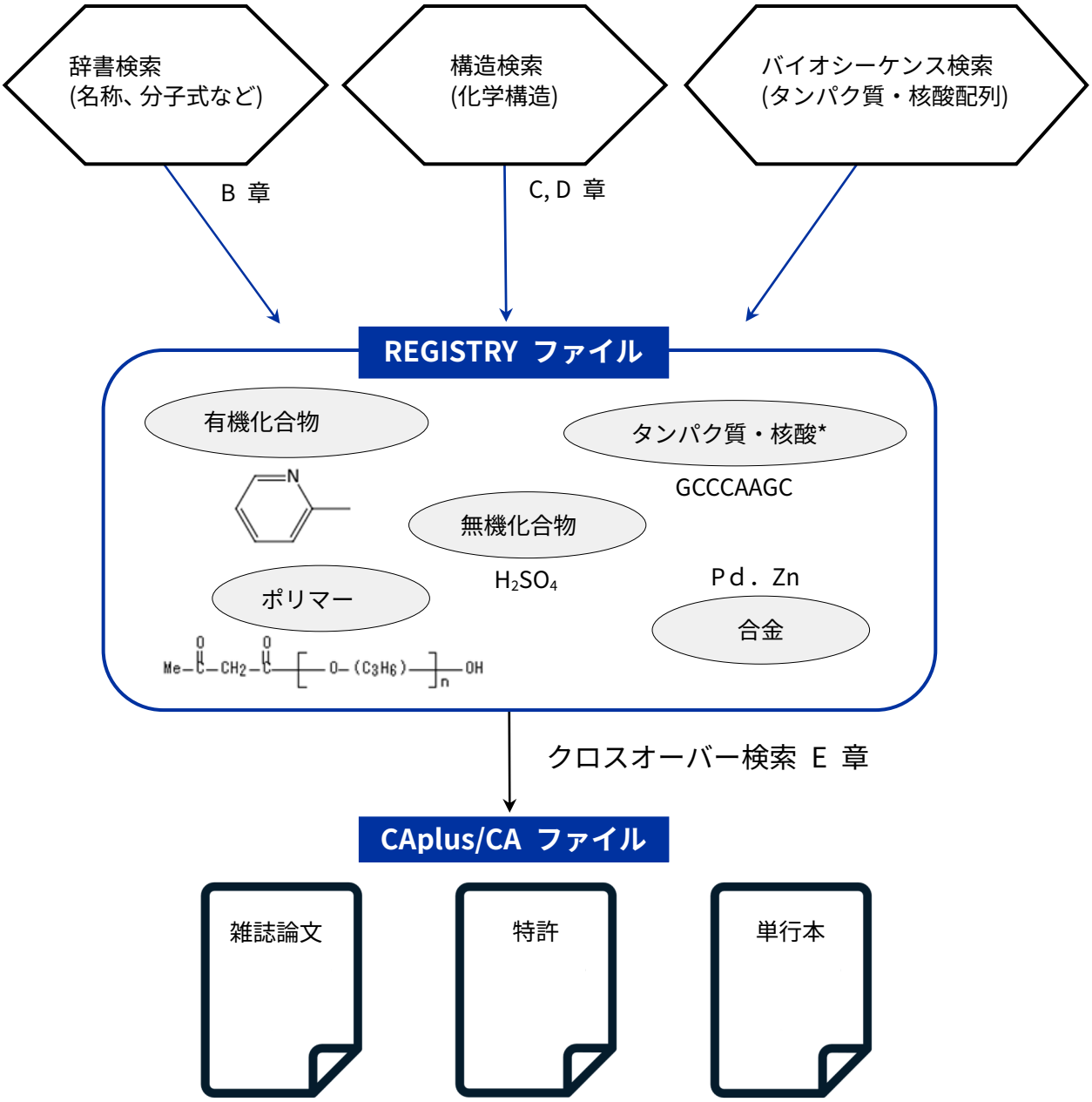
PI WO 2025043191 A1 20250227 WO 2024-US43672 20240823
PRAI US 2023-63578568 P 20230824
AB The present disclosure relates to methods of treating a subject having sickle cell disease, comprising administering to the subject a therapeutically effective amt. of an inhibitor of polycomb repressive complex 2 (PRC2). In certain embodiments of the disclosed methods, prior to the administration to the subject of the inhibitor of polycomb repressive complex 2 (PRC2) the subject has (a) been administered hydroxyurea; and/or (b) been administered a stable dose of one or more of voxelotor, crizanlizumab, and L-glutamine. The invention compds. were prepd. by a multistep procedure and evaluated for their inhibitory activity.
ST imidazopyrimidine prepn PRC2 inhibitor
IT Erectile dysfunction agents
    Hepatoprotective agents
    Homo sapiens
    Human
    Pulmonary antihypertensives
      (prepn. of imidazopyrimidine derivs. as PRC2 inhibitors)
IT Hemoglobins
    Polycomb repressive complex 2
    RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)
      (prepn. of imidazopyrimidine derivs. as PRC2 inhibitors)
IT Vaso-occlusive crisis
      (treatment of,; prepn. of imidazopyrimidine derivs. as PRC2 inhibitors)
    :

REFERENCE 10

AN 189:65704 CA Full-text
TI Microwave-Assisted One-Pot Synthesis of Tetrahydro-β-Carbolines by Fe(II)-Catalyst: Utilizing Methanol as Methylene Synthon
AU Khan, Mursalim A.; Reddyrajula, Rajkumar; Sakla, Akash P.; Sathish, Manda; Shankaraiah, Nagula
CS Department of Medicinal Chemistry, National Institute of Pharmaceutical Education and Research (NIPER), Telangana, 500037, India
SO Asian Journal of Organic Chemistry (2024), 13(12), e202400404
    CODEN: AJOCC7; ISSN: 2193-5807
PB Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA
DT Journal; (online computer file)
LA English
CC 27-11 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))
AB The synthesis of tetrahydro-β-carbolines (THβCs) framework is a fundamental aspect of medicinal chem. due to their significant pharmacol. applications. Herein, we developed a microwave-assisted novel approach for the synthesis of THβC scaffolds utilizing ferrous(II) chloride as an earth abundant metal catalyst and methanol used as valuable methylene source. This methodol. demonstrates excellent functional group tolerance and provides N2-substituted THβCs in good to excellent yields. Overall, this study highlights a sustainable and practical strategy for the synthesis of biol. important THβCs, thereby offering promising prospects in the drug discovery and development.
ST tetrahydrocarboline prepn microwave irradn one pot synthesis bond formation; methanol methylene synthon iron catalyst
IT Bond formation
    Bond formation catalysts
:

CA ファイル
最新 10 文献の ALL 表示

REGISTRY ファイルの検索機能



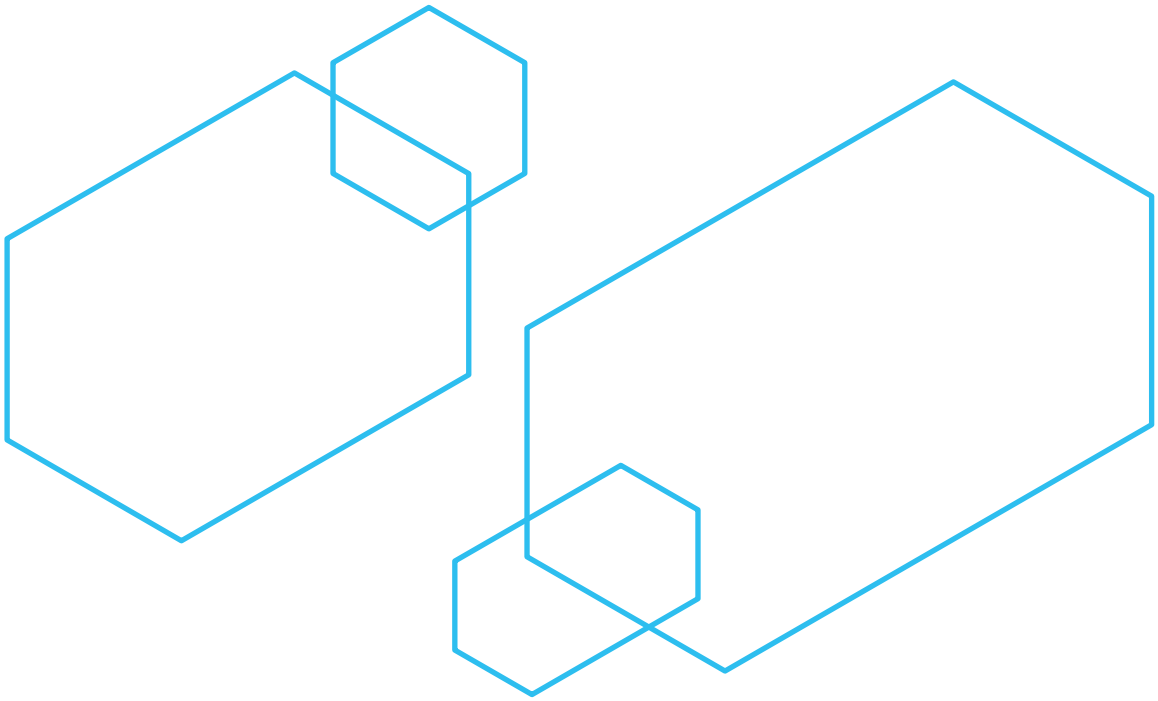
* バイオシーケンス検索については「核酸・タンパク質配列検索」講習会で説明。

まとめ

- REGISTRY ファイルは世界最大の化学物質データベースで、CAS RN® が付与された様々な物質が収録されている。
- 各レコードには、CAS RN®、名称、分子式、構造、物性値などが収録されている。

B 辞書検索

この章では、主な辞書検索フィールドを用いた検索を説明します。



辞書検索フィールド

辞書検索とは、化学物質名や分子式など、「構造や配列以外の手法」で目的物質を検索する検索手法の総称である。

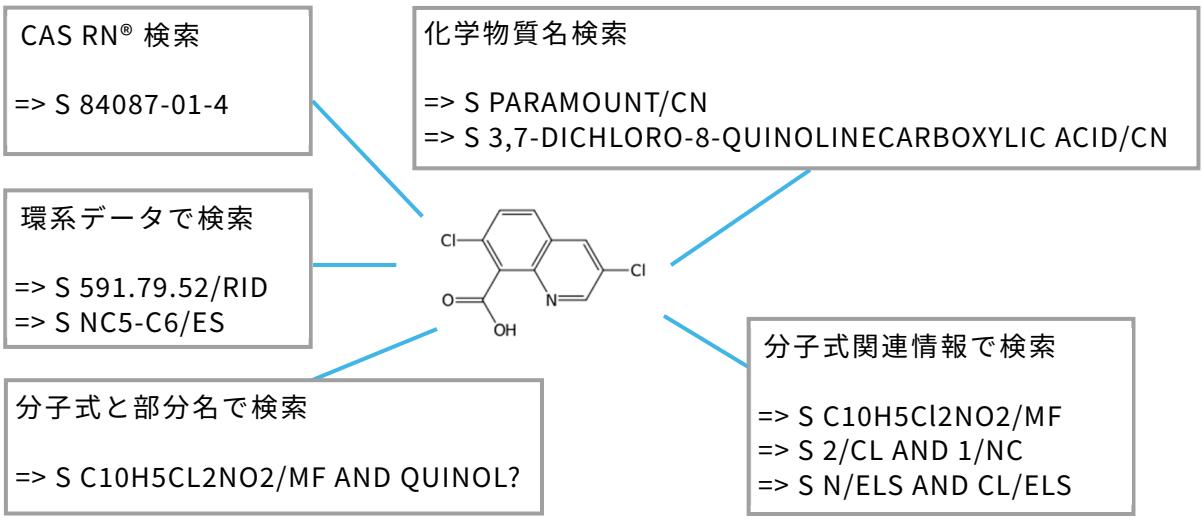
- 辞書検索のポイント

ポイント 検索フィールドに注意（基本索引と /MF /CN は検索結果が異なる）

ポイント 入力ミスを防ぐため、EXPAND で確認してから検索する。

ポイント 自分が思っていた通りの名称が入っていなかったり、新規登録されたばかりで名称が未収録のレコードもあるため、必要に応じて分子式検索も併用する。

- 主要な辞書検索フィールド



検索フィールド	内容	入力例
なし （または /BI）	CAS RN® (/RN)	=> S 64-17-5
	部分名（名称セグメント）	=> S L1 AND METHYL?
	成分分子式	=> S C6H6
/CRN	成分 CAS RN®	=> S 58-08-2/CRN
/CN	完全名	=> S VITAMIN A/CN
/CNS	自然名称セグメント	=> S ?DIOXIN?/CNS
/MF	完全分子式	=> S C2H4O2.NA/MF
/ELS	特定元素の存在	=> S L1 AND FE/ELS
/元素記号	特定元素の存在数	=> S 3-5/FE AND 3/NI
/NC	成分数	=> S C2H4O2 AND PMS/CI AND 4>NC
/CI	クラス識別子コード	=> S L1 AND PMS/CI

CAS 登録番号（CAS RN®）

CAS RN® は化学物質を特定するためのユニークな番号で、CAS が付与している。

- REGISTRY ファイルでは様々な情報から物質を検索できるが、CAS RN® がわかっている場合は CAS RN® から検索を行うのがよい。
  - 検索式の入力方法（下記のいずれの方法でも、検索結果は同じ）

```
=> S 84087-01-4          ← 基本索引（検索フィールドなし）
=> S 84087-01-4/BI       ← 基本索引（/BI）
=> S 84087-01-4/RN       ← /RN (CAS RN®)
```

  - 目的の化学物質のレコード 1 件が回答として得られる。

検索例 ： 3,7-Dichloro-8-quinolinecarboxylic acid (CAS RN® : 84087-01-4) の検索

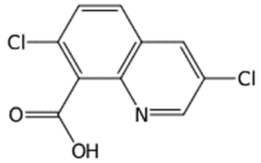
```
=> FILE REGISTRY
```
REGISTRY ファイルに入る

```
=> E 84087-01-4
E1            1     840869-99-0/RN
E2            1     84087-00-3/RN
E3            1 --> 84087-01-4/RN
E4            1     84087-02-5/RN
E5            1     84087-03-6/RN
                        :
```
入力ミスを防ぐため、検索前に EXPAND で確認する

```
=> S E3
L1            1 84087-01-4/RN
```
=> S 84087-01-4 のように直接番号を検索することもできるが、入力ミスを防ぐため、EXPAND コマンドで確認してから、E 番号を使用して検索する方がよい

```
=> D

L1   ANSWER 1 OF 1  REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
RN   84087-01-4  REGISTRY
ED   Entered STN:  16 Nov 1984
CN   8-Quinolinecarboxylic acid, 3,7-dichloro-  (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN   3,7-Dichloro-8-quinolinecarboxylic acid
      :
MF   C10 H5 Cl2 N O2
CI   COM
SR   CA
LC   STN Files:   BIOSIS, CA, CABA, CAPLUS, CASBIOACTIVI, CASFORMULTNS,
                      :
```
ヒットタームは RN フィールド



:

成分 CAS 登録番号 (CAS RN®)

成分 CAS RN® (CRN) は、多成分物質およびポリマーの各成分の CAS RN®

- ある物質 (84087-01-4) を含む多成分物質およびポリマーを検索したい場合の入力方法

=> S 84087-01-4/CRN　　← /CRN (成分 CAS RN®)

検索例 ： 3,7-Dichloro-8-quinolinecarboxylic acid (CAS RN® : 84087-01-4) と、84087-01-4 を含む多成分物質の両方をまとめて検索する。

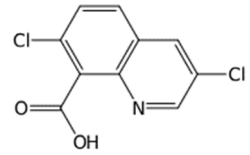
```
=> FILE REGISTRY

=> S 84087-01-4
L1            1 84087-01-4

=> S 84087-01-4/CRN
L2         1088 84087-01-4/CRN

=> D 1087-1088

L2    ANSWER 1087 OF 1088  REGISTF
RN    84087-48-9  REGISTRY
      :
      CM    1
      CRN   84087-01-4
      CMF   C10 H5 Cl2 N O2
```

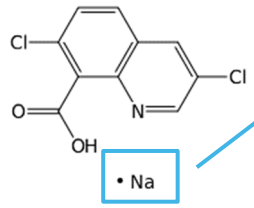


```
      CM    2
      CRN   124-40-3
      CMF   C2 H7 N
```



```
      :

L2    ANSWER 1088 OF 1088  RE
RN    84087-47-8  REGISTRY
      :
CRN   (84087-01-4)
```



```
=> S L1 OR L2
L3         1089 L1 OR L2
```

CAS RN® を /CRN フィールドで検索
- 特定の化学物質を含む塩やポリマーを検索する時に有効
- /CRN の検索結果 (L2) に L1 は含まれない

RN フィールド
- 多成分物質の CAS RN® が収録されている

ヒットタームは CRN フィールド
- 各成分の CAS RN® が収録されている

注意 ： ナトリウムの CAS RN® を /CRN で検索しても、このレコードはヒットしない

CRN フィールドには多成分物質の個々の成分 CAS RN® が収録されるが、単原子フラグメント* の成分 CAS RN® は収録されない。

* 単原子フラグメントとは、多成分物質を構成する成分のうち、単一の原子のみ、または水素と単一の原子から成る成分のこと。
例) Na (単一の原子のみ)、HCl (水素と単一の原子)

L1 と L2 を OR 演算でまとめる

化学物質名

化学物質名は CN (Chemical Name) フィールドに収録される。

- REGISTRY ファイルに収録される化学物質名

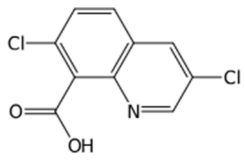
CA INDEX NAME (IN)	OTHER CA INDEX NAMES	OTHER NAMES
CA 索引名 (CAS 命名法に基づく名称)	旧 CA 索引名	CA 索引名以外の名称 - - 慣用名 (IUPAC 名も含む) - - 商品名 - - 医薬品の一般名、治験薬番号 - - カラーインデックス - - 酵素委員会 (EC) 番号 など * CA 収録文献中などから収録される

化学物質名の主な検索フィールド

検索フィールド	内容	入力例
/CN*	完全名	=> S PARAMOUNT/CN => S 3,7-DICHLORO-8-QUINOLINECARBOXYLIC ACID/CN => S 8-QUINOLINECARBOXYLIC ACID?/CN
基本索引* (/BI または なし)	部分名 (名称セグメント)	=> S QUINOLIN? => S L1 AND CHLORO?

* 前方一致検索が可能。後方一致、中間一致検索は不可。

```
RN   84087-01-4  REGISTRY
ED   Entered STN:  16 Nov 1984
CN   8-Quinolinecarboxylic acid, 3,7-dichloro-  (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN   3,7-Dichloro-8-quinolinecarboxylic acid
OTHER NAMES:
CN   Accord 75DF
CN   BAS 514
CN   BAS 514H
CN   Drive
CN   Facet
CN   Facet LA
CN   Paramount
CN   Parmount 75WG
CN   Quinclorac
CN   Quinclorac 75DF
DR   113875-40-4
MF   C10 H5 Cl2 N O2
CI   COM
      :
```




```
      :
```

いずれの名称から検索しても、このレコードはヒットする

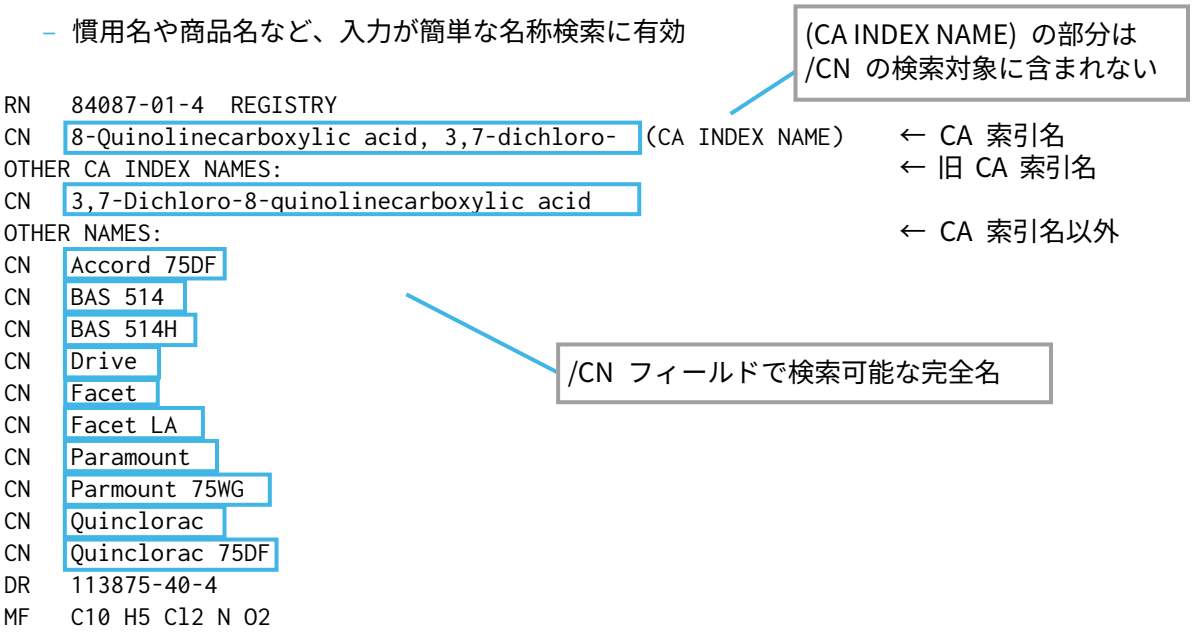
① /CN フィールド - 完全名 (記号類やスペースも含め、収録されている通りの名称) の検索

- 検索式の入力

```
=> S PARAMOUNT/CN
=> S 3,7-DICHLORO-8-QUINOLINECARBOXYLIC ACID/CN
=> S 8-QUINOLINECARBOXYLIC ACID?/CN
```

* 前方一致検索が可能。後方一致、中間一致検索は不可

- 完全名を対象にした検索フィールド
  - 慣用名や商品名など、入力が簡単な名称検索に有効



検索のポイント・注意点

- 検索をする前に EXPAND で確認する。
  - 検索しようとする名称が REGISTRY ファイルに収録されているとは限らない。
  - カンマ、ハイフンなどの記号類やスペースも含め、CN フィールドに収録されている名称とまったく同じ入力をしなければ回答が得られない。

- 角括弧 [ ] は丸括弧 ( ) に変更する。

- 名称中に特別な記号を含む場合は、二重引用符 " " で囲む。

例 : 2'-Chloro carboxine => S "2'-CHLORO CARBOXINE"/CN
=> S "2'-CHLORO" CARBOXINE/CN

- ギリシャ文字はアルファベットに書き下し、前後にピリオドを付ける。

例 : β-Alanine => S .BETA.-ALANINE/CN

② 基本索引 (/BI または なし) - 部分名 (単語) の検索

- 検索式の入力

```
=> S DICHLORO AND QUINOLINE
=> S QUINOLIN? AND CHLORO
=> S L1 AND 3,7 AND CHLORO
```

* 前方一致検索が可能。後方一致、中間一致検索は不可

- 完全名を自然な位置 (スペース、ハイフン、句読点など) で切断した部分名や、"TRI"、"CYCLO" など「化学的に意味を持つ」用語が対象の検索フィールド
  - 完全名の入力が難しい場合でも、部分名称からヒットできる。

```
RN   84087-01-4  REGISTRY
CN   8-Quinolinecarboxylic acid, 3,7-dichloro-  (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN   3,7-Dichloro-8-quinolinecarboxylic acid
OTHER NAMES:
CN   Accord 75DF
CN   BAS 514
CN   BAS 514H
CN   Drive
CN   Facet
CN   Facet LA
CN   Paramount
CN   Parmount 75WG
CN   Quinclorac
CN   Quinclorac 75DF
DR   113875-40-4
MF   C10 H5 Cl2 N O2
```

基本索引で検索可能な部分名

上図では最小単位まで分割した状態を四角枠で表しているが、最小単位を再結合したものを検索してもヒットできる
例) => S QUINOLINE
=> S QUINOLINECARBOXYLIC
=> S CARBOXYLIC ACID

検索のポイント・注意点

- 完全名が不明であっても、部分名からある程度柔軟に検索することができる。前方一致検索も可能。

- 多数の回答が得られ、目的物質に絞り込むのが難しい場合は、分子式 (/MF) などのフィールドを用いて限定するとよい。

- 特徴的な部分名を利用して検索すると効率的である。

検索例 ： 6-Nitro-2,4-quinolinedicarboxylic acid の検索

① 完全名から検索する場合 ： /CN を利用

- 検索前に必ず EXPAND で確認する
- 検索しようとする名称が REGISTRY ファイルに収録されているとは限らない

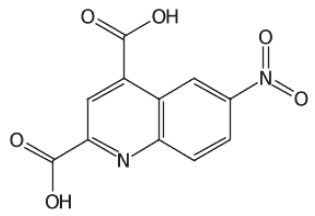
```
=> FILE REGISTRY

=> E 6-NITRO-2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID/CN
E1            1     6-NITRO-2,4-QUINAZOLINEDIOL/CN
E2            1     6-NITRO-2,4-QUINAZOLINEDIONE/CN
E3            1 --> 6-NITRO-2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID/CN
E4            1     6-NITRO-2,4-XYLENEDIAZONIUM HEXAFLUOROPHOSPHATE/CN
                :

=> S E3
L1            1 "6-NITRO-2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID"/CN

=> D

L1   ANSWER 1 OF 1  REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
RN   91634-91-2  REGISTRY
ED   Entered STN:  16 Nov 1984
CN   2,4-Quinolinedicarboxylic acid, 6-nitro-  (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN   6-Nitro-2,4-quinolinedicarboxylic acid
MF   C11 H6 N2 O6
LC   STN Files:   CA, CAPLUS, CHEMCATS, REAXYSFILE*, REAXYSFILESU*
                :
```



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

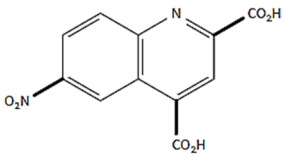
               1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
               1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

参考 ： 検索フィールドを省略したとき

```
=> E 6-NITRO-2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID
E1            2     6-METHYL-3-INDOLYLMETHYL/BI
E2            1     6-METHYLAMINO-9-PHENYLPHENAZONIUM-3,7-DIYL ACETATE/BI
E3            0 --> 6-NITRO-2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID/BI
E4          222     6.0/BI
E5            3     6.0,AL/BI
                :
```

② 部分名から検索する場合 ： 基本索引 (/BI) を利用

– なるべく長い部分名、特徴的な部分名を利用して検索すると効率的である



```
=> FILE REGISTRY

=> E QUINOLINE
E1            3     QUINOLINDOL/BI
E2            3     QUINOLINDOLE/BI
E3      2230118 --> QUINOLINE/BI
E4           12     QUINOLINE1/BI
E5            1     QUINOLINE4/BI
                        :

=> S QUINOLIN? AND DICARBOXY? AND NITRO?
L1          801 QUINOLIN? AND DICARBOXY? AND NITRO?

=> D SCAN IN

L1    801 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    Benzo[f]quinoline-2,3-dicarboxylic acid,
      1,4-dihydro-1-(4-nitrophenyl)-, 2,3-diethyl este

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

IN    1,4(2H)-Quinolinedicarboxylic acid, 3-formyl-2-(2-nitrophenyl)-,
      4-(1-methylethyl) 1-(phenylmethyl) ester

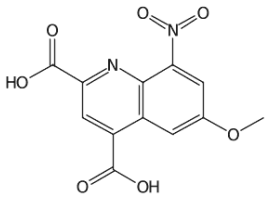
L1    801 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    1,6(2H)-Quinolinedicarboxylic acid, 3,4-dihydro-8-nitro-,
      1-(phenylmethyl) ester

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

=> S L1 AND 2,4
L2          36 L6 AND 2,4

=> D SCAN

L2    36 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    2,4-Quinolinedicarboxylic acid, 6-methoxy-8-nitro-
MF    C12 H8 N2 O7
```



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

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):35
```

検索可能な部分名を確認する

化学物質名で検索する場合は、語尾変化を考慮して前方一致検索を利用するとよい

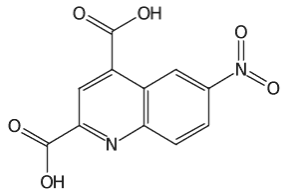
SCAN 表示形式の表示内容のうち、
CA 索引名 (IN) のみを表示する

【SCAN 表示形式の表示内容】
CA 索引名、分子式、クラス識別子、構造
– CA 索引名以外の名称は含まれない

置換位置を表す数字も検索することができる

残りの回答も表示する

```
L2    36 ANSWERS    REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    2,4-Quinolinedicarboxylic acid, 6-nitro-
MF    C11 H6 N2 O6
```



目的の物質

IN フィールドの名称を /CN で EXPAND

- コピー＆ペーストを利用し、下記の点に注意する
  - [] は () に直す
  - 記号は "" で囲む
  - 長い名称の場合、改行に伴うスペースは詰める

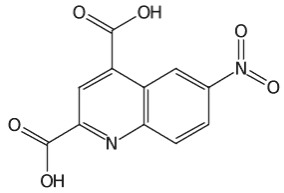
```
=> E 2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID, 6-NITRO-/CN
E1            1     2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID, 6-METHYL-3-PHENYL-, 2,4-
                    DIMETHYL ESTER/CN
E2            1     2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID, 6-METHYL-3-PHENYL-, DIMETHYL ESTER/CN
E3            1 --> 2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID, 6-NITRO-/CN
E4            1     2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID, 6-NITRO-, 2,4-DIETHYL ESTER/CN
                        :

=> S E3
L3            1 "2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID, 6-NITRO-"/CN

=> D
```

目的物質のレコード 1 件の回答集合が得られた。
IDE 表示形式 (デフォルト) で表示し、CAS RN® などの詳細情報を確認する

```
L3   ANSWER 1 OF 1  REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
RN   91634-91-2  REGISTRY
ED   Entered STN:  16 Nov 1984
CN   2,4-Quinolinedicarboxylic acid, 6-nitro-  (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN   6-Nitro-2,4-quinolinedicarboxylic acid
MF   C11 H6 N2 O6
        :
```



一般に、部分名称検索だけで目的物質に絞り込むのは
困難な場合が多いため、部分名検索と分子式検索 (後述)
を組み合わせた検索も検討する

```
        :
```

参考 : EXPAND で演算子は使用できない

```
=> E DICHLORO AND QUINOLINE
E1          20     DICHLORMID/BI
E2     7075257     DICHLORO/BI
E3           0 --> DICHLORO AND QUINOLINE/BI
E4           6     DICHLORO1/BI
:
```

← 0 件となり、回答は得られない

参考 : 括弧を含む名称を直接検索する場合

例 : Ethane, [(azidomethyl)thio]- の検索

```
=> S "Ethane, ((azidomethyl)thio)-"/CN
L1            1 "ETHANE, ((AZIDOMETHYL)THIO)-"/CN
```

← ① 角括弧 [] は 丸括弧 () に直す
② 括弧を含む名称の場合は、全体を二重引用符で囲む

分子式

分子式は MF フィールドに収録される。

- 分子式の記述は Hill 方式に従う。
  - 炭素を含む物質　　：炭素、水素、その他の元素 (アルファベット順) (例：C4H3N11O6)
  - 炭素を含まない物質 ：すべての元素をアルファベット順に表記 (例：O2Ti)
  - 元素の存在数は元素記号の後ろにスペースを空けずに入力 (存在数 1 の場合は省略)

分子式検索フィールド

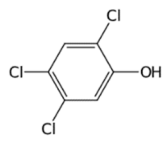
検索フィールド	内容	入力例
/MF	完全分子式 (物質全体の分子式) - レコード中の MF フィールドに収録されている分子式とまったく同じ入力をする必要がある	=> S C5H12/MF => S C4H11NO2.C3F6/MF => S "(C8H8)X"/MF
基本索引 /BI または なし	下記の両方が検索対象 - 単成分物質の完全分子式 (/MF) - 多成分物質の各成分の成分分子式	=> S C4H11NO2 => S C3F6

分子式検索のポイント

- 物質全体の分子式が明確な場合は、/MF フィールドを利用する。
- 基本索引 (/BI) で検索すると、入力した分子式と完全に一致する物質と、入力した分子式を成分に含む多成分物質もしくはホモポリマーが回答として得られる。
- 括弧を含む分子式を直接検索する際は必ず二重引用符 " " で全体を囲む。(ポリマーなど)
  - EXPAND の際は、二重引用符は不要。

単成分物質の分子式

```
RN    95-95-4  REGISTRY
ED    Entered STN:  16 Nov 1984
CN    Phenol, 2,4,5-trichloro-  (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN    2,4,5-Trichlorophenol
          :
MF    C6 H3 Cl3 O
CI    COM
          :
```



分子式は MF フィールドに収録されている
このレコードは、下記のいずれの検索でも得られる

=> S C6H3CL3O/MF
=> S C6H3CL3O

単成分物質の分子式の例

無機化合物　　：Cl H O4
ホモポリマー　　：(C8 H8)x
SRU ポリマー　　：(C16 H14 O)n

多成分物質の分子式

- 各成分の分子式がピリオド (.) で区切られている。
- 各成分の記述優先順序は、以下のように定義されている。
  - 有機物質の場合

    ① 有機成分と無機成分が存在する場合は、有機成分を優先する。
    ② 炭素数の多い成分を優先する。
    ③ 炭素数が同じ場合は、水素数の多い成分を優先する。
    ④ 炭素および水素数が同じならば、他の元素のアルファベット順で決定する。

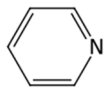
  - 無機物質の場合

    ① 元素のアルファベット順
    ② ①で決まらなければ、原子数が多い方を優先する。
- 各成分の存在比 (係数) は、先頭の成分を 1 として表記される。(例 : C2H4O2．1/2Ca)
- レコード例

```
RN   5153-63-9  REGISTRY
ED   Entered STN:  16 Nov 1984
CN   Acetic acid, compd. with pyridine (1:1) (CA INDEX NAME)
          :
MF   C5 H5 N . C2 H4 O2
          :

     CM   1

     CRN  110-86-1
     CMF  C5 H5 N
```




```
     CM   2

     CRN  64-19-7
     CMF  C2 H4 O2
```




```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
          :
```

各成分の分子式がピリオドで区切られている
このレコードは、下記のいずれの検索でも得られる

=> S C5H5N.C2H4O2/MF
=> S C5H5N
=> S C2H4O2

多成分物質の分子式の例

付加化合物	:	C12 H4 N4 . C6 H6
混合物	:	C9 H8 O4 . C8 H10 N4 O2 . C8 H9 N O2
酸の金属塩	:	C2 H4 O2 . Na
アミン類の塩	:	C8 H20 N . Cl
コポリマー	:	(C8 H8 . C2 H4)x
合金	:	Al . Cu . Mg . Ti

参考 : ポリマーの分子式

原料モノマー単位で登録されているポリマーの場合、(モノマーの分子式) x という形式で登録されている。
SRU (Structural Repeating Unit) ポリマーの場合、(繰り返し部分の分子式) n という形式で登録されている。 (ポリマーの検索方法については、「ポリマー検索」 講習会で説明)

検索例 ： 2,4,5-Trichlorophenol (分子式 $C_6H_2Cl_3OH$) の検索

- 物質全体の分子式から検索する場合 ： 完全分子式 (/MF) を利用
  - 検索を行う前に EXPAND で確認する。
    その際、分子式は Hill 方式に直して入力する (C6H2Cl3OH → C6H3CL3O)

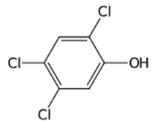
```
=> FILE REGISTRY

=> E C6H3CL3O/MF
E1            1      C6H3CL3NO5P/MF
E2            1      C6H3CL3NO6P/MF
E3           37 --> C6H3CL3O/MF
E4            2      C6H3CL3O.(C3H6O.C2H4O)X/MF
                :

=> S E3
L1           37 C6H3CL3O/MF

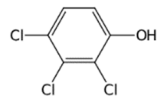
=> D SCAN

L1    37 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    Phenol, 2,4,5-trichloro-, labeled with chlorine-36 (9CI)
MF    C6 H3 Cl3 O
```



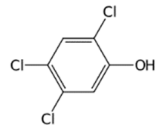
```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):36

L1    37 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    Phenol, 2,3,4-trichloro-, labeled with carbon-14 (9CI)
MF    C6 H3 Cl3 O
```



```
          :

L1    37 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    Phenol, 2,4,5-trichloro-
MF    C6 H3 Cl3 O
CI    COM
```



```
          :

=> E Phenol, 2,4,5-trichloro-/CN
E1            1      PHENOL, 2,4,5-TRIBROMO-6-NITRO-3-((3,7,11-TRIMETHYL-2,6,10-D
                     ODECATRIEN-1-YL)OXY)-/CN
E2            1      PHENOL, 2,4,5-TRIBROMO-6-NITRO-3-(2-PROPEN-1-YLOXY)-/CN
E3            1 --> PHENOL, 2,4,5-TRICHLORO-/CN
            :
=> S E3
L2            1 "PHENOL, 2,4,5-TRICHLORO-"/CN
```

/MF フィールドで EXPAND する

- O (酸素) と 0 (ゼロ) を間違えないように入力する
- ピリオド付きの分子式は多成分物質

E 番号を用いて検索する

同じ分子式を持つ物質が多数存在する場合は、
部分名などを用いて更に限定する

追加で表示したい件数を入力

目的の物質

目的物質レコード中の IN フィールドの名称を
コピー＆ペーストし、/CN で EXPAND

目的物質のレコード 1 件の回答集合が得られた

検索例 ： 硫酸カリウム（分子式 K_2SO_4）の検索

– 物質全体の分子式から検索する場合 ： 完全分子式（/MF）を利用

① ヘテロ原子（O，S，Se，Te，N，P，As）に結合した水素が金属に置換されて生成した塩は、遊離の酸と金属元素との多成分物質として登録される。
(硫酸カリウム K2SO4 → 硫酸とカリウムとの多成分物質 H2SO4.2K)
② Hill 方式に従って並び替える（H2O4S.2K)

```
=> FILE REGISTRY

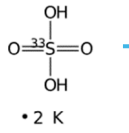
=> E K2SO4/MF
E1            1     K2SNTE3/MF
E2            1     K2SNTE4/MF
E3            0 --> K2SO4/MF
E4            1     K2TE/MF
        :

=> E H2O4S.2K/MF
E1            1     H2O4S.2HG/MF
E2            1     H2O4S.2IN/MF
E3            5 --> H2O4S.2K/MF
E4            1     H2O4S.2K.UNSPECIFIED/MF
        :

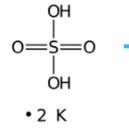
=> S E3
L1            5 H2O4S.2K/MF

=> D 1-5 SAM

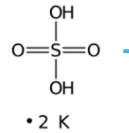
L1   ANSWER 1 OF 5  REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   Sulfuric-33S acid, potassium salt (1:2)
MF   H2 O4 S . 2 K
```



```
    •2 K
      :
ANSWER 4 OF 5  REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   Arcanite (K2(SO4)) (9CI)
MF   H2 O4 S . 2 K
CI   MNS
```



```
    •2 K
      :
L1   ANSWER 5 OF 5  REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   Sulfuric acid potassium salt (1:2)
MF   H2 O4 S . 2 K
CI   COM
```



```
    •2 K

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

=> S K2SO4/MF では回答が得られない

金属塩の収録方針に沿った分子式で再度 EXPAND

同位体標識化合物

鉱物

目的の物質

その他の分子式関連検索フィールド

検索フィールド	内容	登録単位	入力例	備考
/ELS	元素種 各成分の特定元素、一般元素 （X, M）	成分	=> S N/ELS => S X/ELS	①
/元素記号	特定元素数 各成分の特定元素、一般元素の数	成分	=> S 1/N => S 1-2/N	①，②
/NC	成分数 物質全体の成分数 （分子式中のピリオドの数＋1）	物質	=> S 2/NC => S 4>=NC	②
/ELF	元素式 各成分の構成元素 (分子式から数を除いたデータ)	成分	=> S C H O/ELF => S C F/ELF	-
/ELC	元素数 各成分の異なる元素の種類数	成分	=> S 4/ELC => S 2/ELC	②
/ELC.SUB	物質に対する元素数 物質全体の異なる元素の種類数	物質	=> S 5/ELC.SUB	②

- 各「成分」単位のデータと「物質全体」単位のデータがあるので、その違いに留意し、カウント方法を間違えないようにする。

① /ELS、/元素記号では、一般元素 (X、M) が利用できる。

X ： ハロゲン (F Cl Br I At)
M ： 金属 (Ar As At B Br C Cl F H He I Kr N Ne O P Rn S Se Si Te Xe D T 元素記号 104 番目以降の元素 以外の元素)

- 入力例 ： => S X/ELS
  => S M/ELS
  => S 1-3/X
  => S 2/M

- 同位体標識化合物の検索方法については APPENDIX 参照

② 数値検索フィールド

/元素記号、/NC、/ELC、/ELC.SUB は数値検索フィールドである。

- 入力例 ： => S 1<=N
  => S 1-3/NC
  => S 4<=ELC<=6

- 炭素、水素、酸素、窒素はゼロも検索できる (=> S 0/C)。ただし、合金などを除く

検索例 ： 1 成分はピクリン酸 (CAS RN® ： 88-89-1) で、もう 1 成分に金属を含む 2 成分物質を検索する。回答が多い場合は、金属をナトリウムに限定する。

- 特定元素や一般元素の存在を指定したい場合は /ELS を利用する。
- 物質全体の成分数を限定する場合は /NC を利用する。

```
=> FILE REGISTRY

=> S 88-89-1/CRN
L1        57274 88-89-1/CRN

=> S L1 AND M/ELS AND 2/NC
L2          215 L1 AND M/ELS AND 2/NC

=> S L2 AND NA/ELS
L3           12 L2 AND NA/ELS

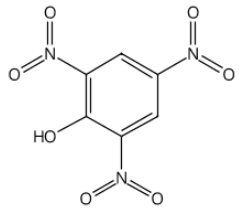
=> D SAM 1-12

L3   ANSWER 1 OF 12  REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   Sodium hydroxide (Na(OH)), compd. with 2,4,6-trinitrophenol (1:1) (9CI)
MF   C6 H3 N3 O7 . H Na O

     CM   1
```

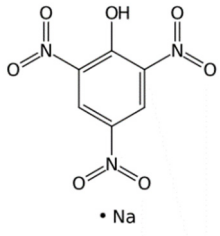
Na—OH

```
     CM   2
```



:

```
L3   ANSWER 12 OF 12  REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   Phenol, 2,4,6-trinitro-, sodium salt (1:1)
MF   C6 H3 N3 O7 . Na
CI   COM
```



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

ピクリン酸を 1 成分として含む多成分物質を検索するときは /CRN を指定する

金属を含む物質に限定，2 成分物質に限定

件数が多いので、ナトリウムを含む物質に限定

2 成分物質

ナトリウムが含まれている

ピクリン酸

クラス識別子

クラス識別子は、物質の広いクラス (分類) を示すコードである。

- クラス識別子の種類

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

クラス識別子検索フィールド

検索フィールド	内容	入力例
/CI	クラス識別子	=> S L1 AND CCS/CI,CCI
/CCI	成分クラス識別子 (多成分物質の成分のクラス識別子が対象)	

レコード例

```
RN   9004-67-5  REGISTRY
ED   Entered STN:  16 Nov 1984
CN   Cellulose, methyl ether  (CA INDEX NAME)
        :
MF   C H4 O . x Unspecified
CI   COM
        :
     CM   1

     CRN  9004-34-6
     CMF  Unspecified
     CCI  PMS, MAN

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

     CM   2

     CRN  67-56-1
     CMF  C H4 O
          ——OH
           :
```

クラス識別子 (/CI)

成分クラス識別子 (/CCI)

クラス識別子を用いる際、網羅的に検索するには /CI と /CCI を併用するとよい

検索例 ：ε-カプロラクタム（105-60-2）をモノマーとしたポリマーを検索する。

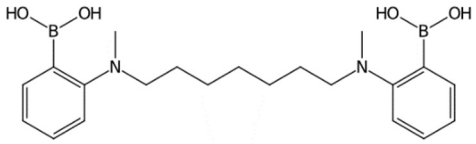
```
=> FILE REGISTRY

=> S 105-60-2/CRN AND PMS/CI,CCI
L1         6334 105-60-2/CRN AND PMS/CI,CCI

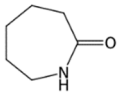
=> D SCAN

L1    6334 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    Boronic acid, B,B'-[1,7-heptanediylbis[(methylimino)-2,1-phenylene]]bis-,
      polymer with hexahydro-2H-azepin-2-one  (CA INDEX NAME)
MF    (C21 H32 B2 N2 O4 . C6 H11 N O)x
CI    PMS

      CM   1
```



```
      CM   2
```

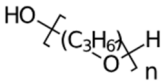


```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

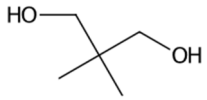
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L1    6334 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    2H-Azepin-2-one, hexahydro-, polymer with 2,2-dimethyl-1,3-propanediol and
      α-hydro-ω-hydroxypoly[oxy(methyl-1,2-ethanediyl)], block  (CA
      INDEX NAME)
MF    (C6 H11 N O . C5 H12 O2 . (C3 H6 O)n H2 O)x
CI    PMS

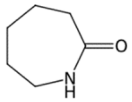
      CM   1
```



```
      CM   2
```



```
      CM   3
```



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

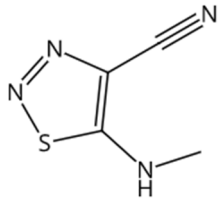
PMS/CI,CCI を用いるとポリマーに限定できる

まとめ

- 辞書検索は、化学物質名称や分子式などから目的物質を検索する手法である。
  - 検索の際は検索フィールドに注意する。
  - 入力ミスを防ぐため EXPAND で確認するとよい。
  - 分子式は Hill 方式に従って入力する。
  - 多成分物質の分子式は各成分の分子式がピリオド (.) で区切られている。

練習問題

1 ：右図の物質を分子式や部分名を使って検索する。
回答は FIDE 表示形式で表示する。



(ヒント)

- 分子式は Hill 方式に従って入力し /MF で検索する。
- 分子式の検索結果の回答が多い場合は部分名で限定する。
  - 化学物質の部分名は基本索引で検索する。
  - 部分名の例 ： THIADIAZOLE，METHYLAMIN，CARBONITRILE，NITRILE，AMIN 等

回答は p.82

2 ：メタクリル酸エチル (CAS RN® 97-63-2) を含む 2 種類のモノマーからなるポリマーを検索する。

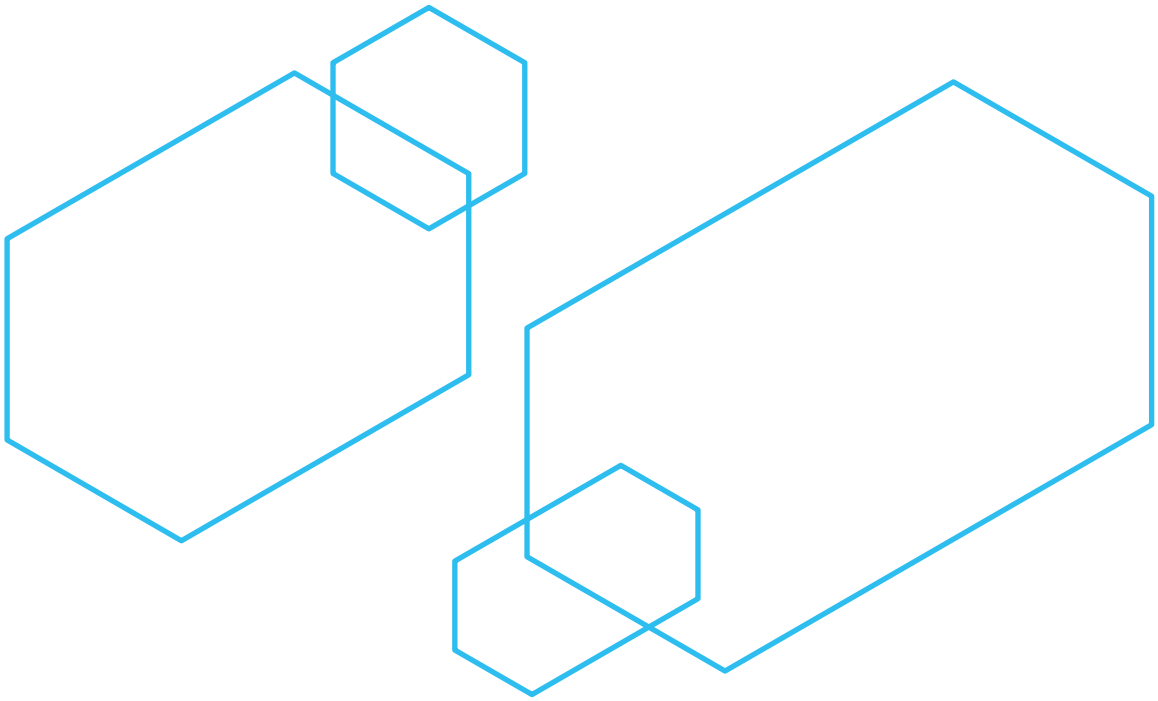
(ヒント)

- メタクリル酸エチルの CAS RN® を /CRN で検索する。
- クラス識別子 (/CI)、成分クラス識別子 (/CCI) を利用してポリマーに限定する。
- 成分数 (/NC) で限定する。

回答は p.85

C 構造検索（基礎編）

この章では STN の構造検索可能なすべてのファイルで応用できる基礎的な作図と検索の流れを紹介します。



構造検索

構造検索とは、検索語の一つとして構造質問式 (L#) を使った検索である。

- 構造検索可能な物質は、水素以外の構成元素の原子数が 252 以下で構造が確定している物質

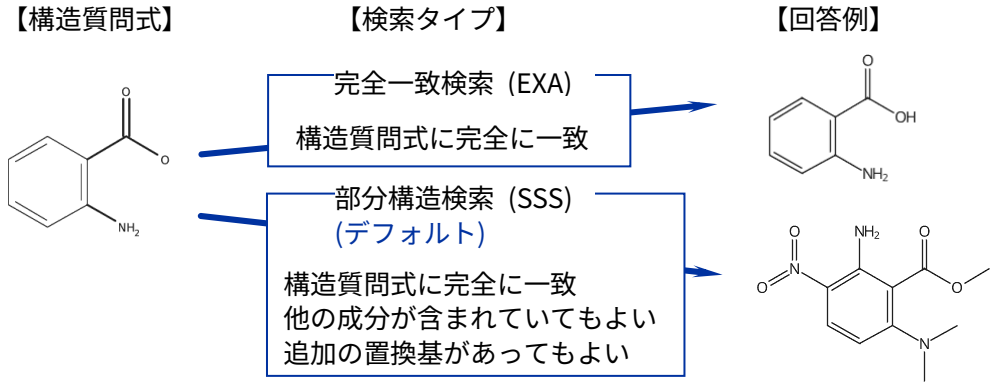
- 構造検索コマンド (L# は構造質問式の L 番号)

```
=> S  L#  検索タイプ  検索範囲
```

* デフォルト
- 検索タイプ ： 部分構造検索 (SSS)
- 検索範囲 ： サンプル検索 (SAM)

- 構造検索の検索タイプ

構造検索を実行する際に検索タイプを指定することで、 「作図した構造と完全に一致する」「作図した部分構造を含む化学物質」 などの条件を指定することができる。



検索タイプ	内容	入力例	
EXA	完全一致検索	構造質問式に完全に一致する物質を検索	=> S L1 EXA => S L1 EXA FUL
FAM	ファミリー検索	（EXA の回答に加えて） 他の成分が含まれていてもよい	=> S L1 FAM => S L1 FAM FUL
CSS	閉構造部分構造検索	（FAM の回答に加えて） 可変構造質問式を使用できる 特定の位置に置換基を含めることができる	=> S L1 CSS => S L1 CSS FUL
SSS	部分構造検索 （デフォルト）	（CSS の回答に加えて） 追加の置換基が存在してもよい	=> S L1 => S L1 FUL

- 構造検索の検索範囲

検索範囲	内容	入力例	
SAM	サンプル検索 （デフォルト）	ファイルの一部 (5%)*1 をテスト的に検索	=> S L1 => S L1 EXA
FUL	フルファイル検索	ファイルのすべて (100%) を検索	=> S L1 FUL => S L1 EXA FUL

*1 ファイルによりサンプル検索の範囲 (%) は異なる。

構造作図画面

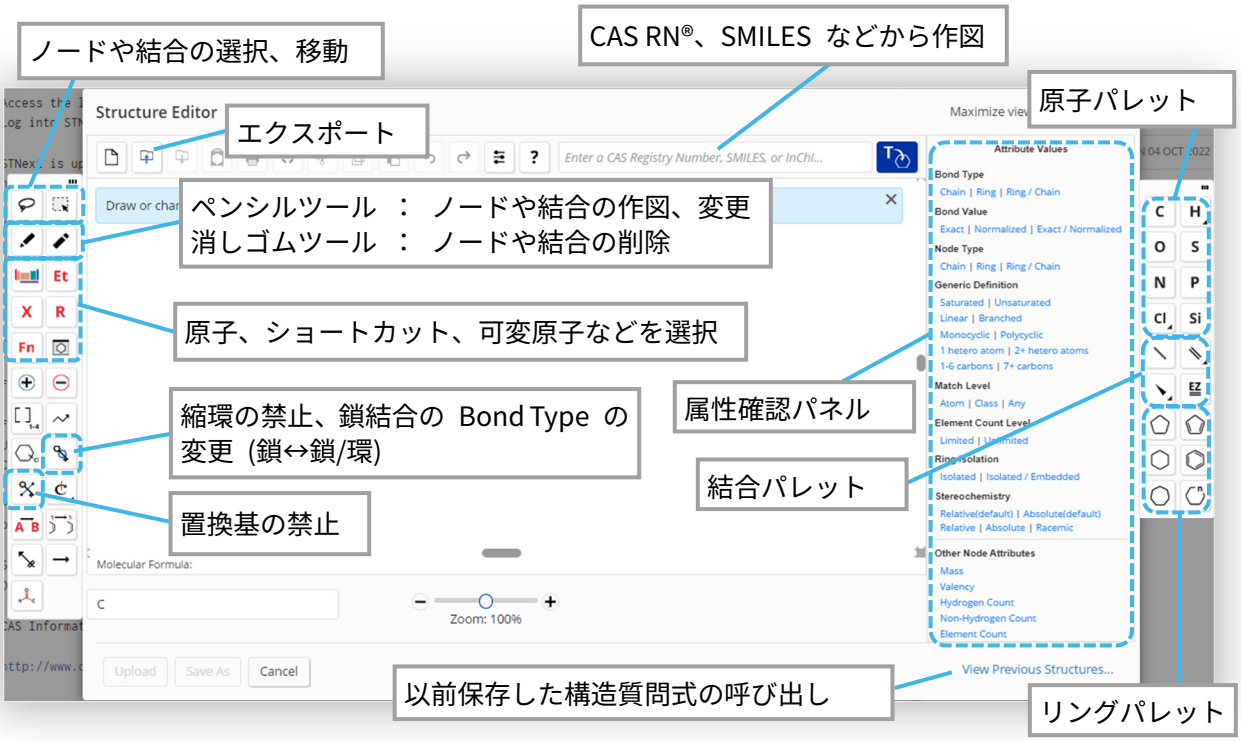
STNext での作図

- 構造作図画面の起動
  - STN へ接続し、構造検索を行うファイルに入ってから、画面右下のボタンをクリックする。





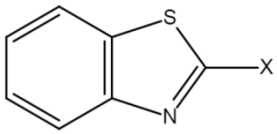
- 構造作図画面



- 設定 (Settings) 画面の Structure Editor Toolbars の項目で、構造作図画面のツールバーの配置を独立して移動できる配置 (Floating) と、メイン画面に組み込まれた配置 (Attached) から選択できる (デフォルトは Floating)。

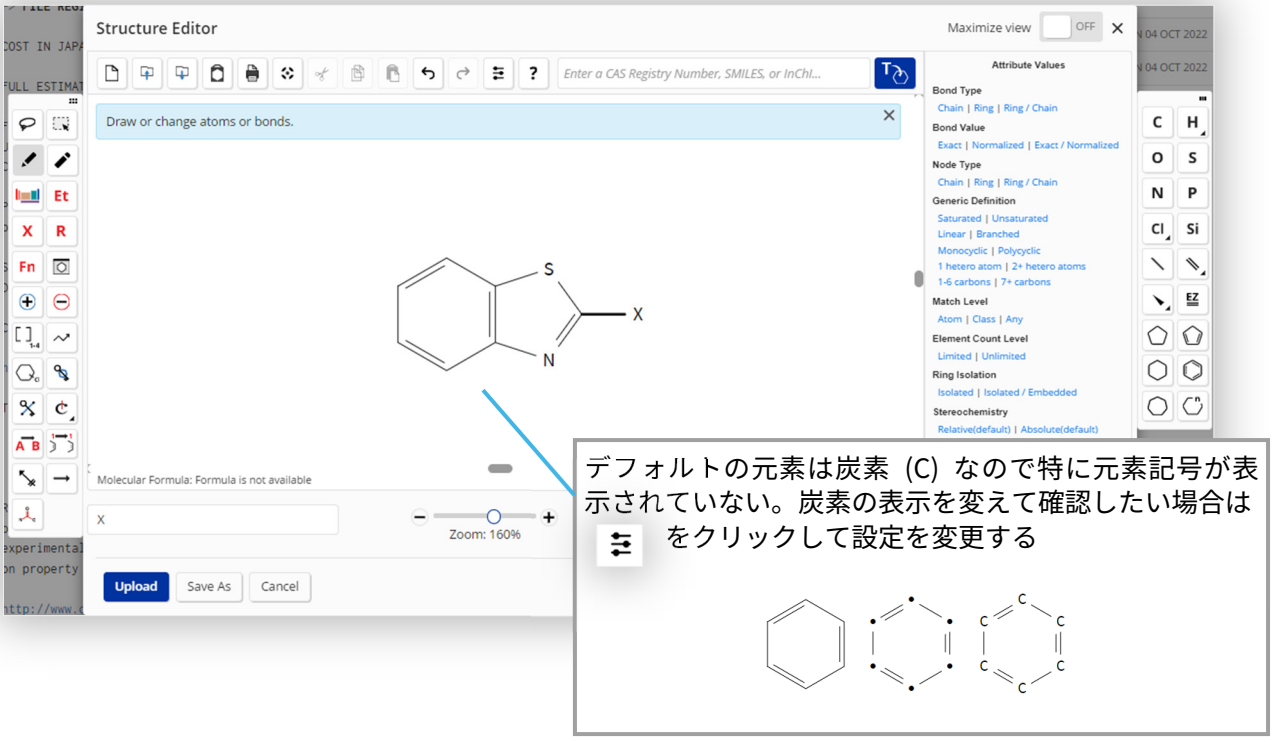
検索例

下図のような部分構造を含む物質をすべて検索する



〔条件 1〕　X の部分はハロゲンであれば何でもよい
〔条件 2〕　置換基が付いたり、さらに追加の環が縮合してもよい

– デフォルトの構造検索タイプである部分構造検索 (SSS) を実行する場合は、
何が結合してもよい部分に特別な指定をする必要はない。



STEP 1 構造作図

構造作図画面を起動した直後の状態では、炭素、単結合がデフォルトになっている。

ここでは、デフォルトの状態で基本骨格を作図した後に、元素や結合を変更する順序で作図する方法を紹介する。

① 環を描く  リングパレット

② 鎖を描く  ペンシルツール または チェーンツール

③ 元素を指定する  ペンシルツール

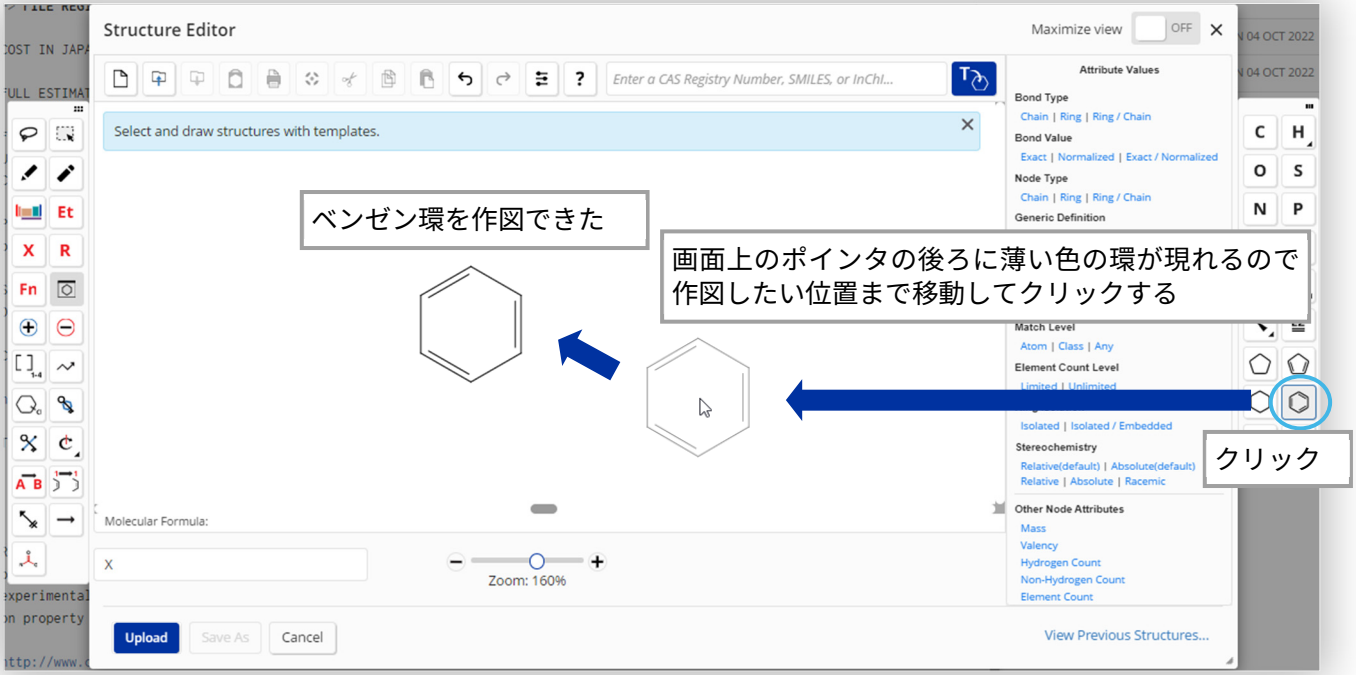
④ 結合を指定する  ペンシルツール

⑤ 保存、アップロードする 

Upload ボタン

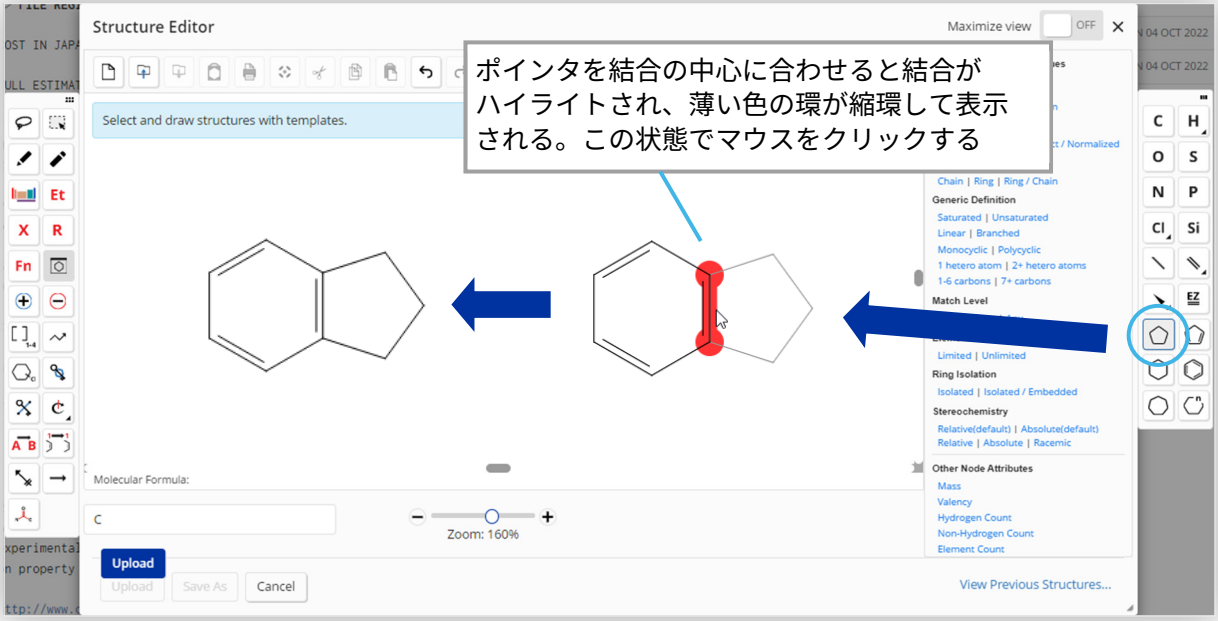
① 環を描く

- リングパレットから作図したい環のショートカットをクリックする。



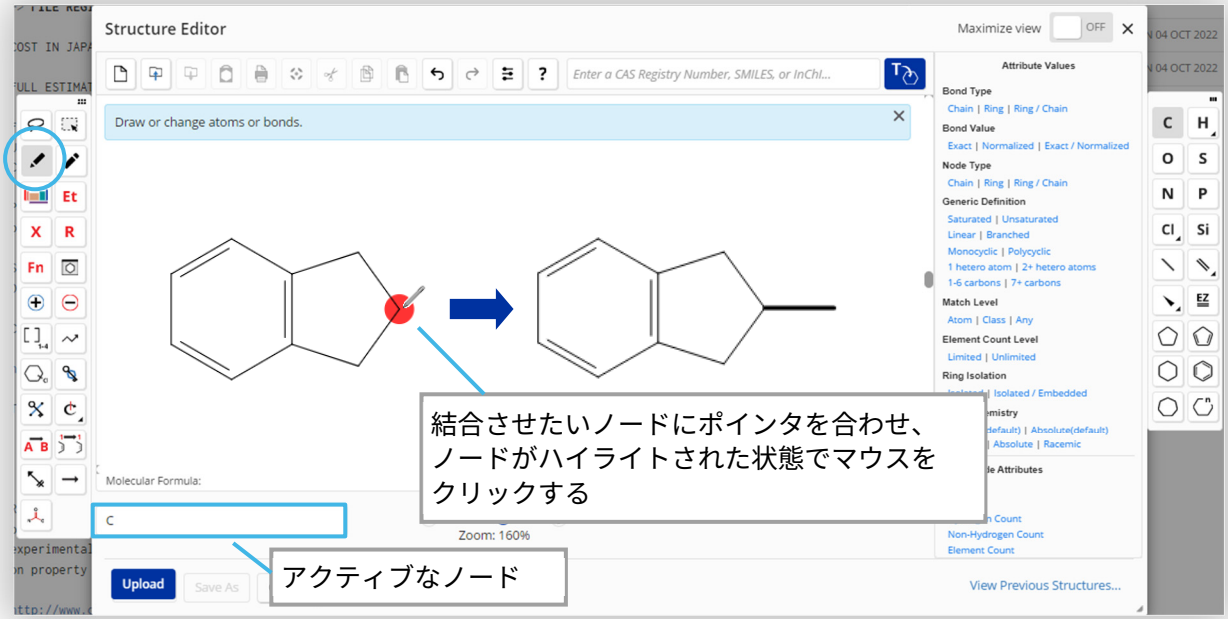
- 違う環を作図する場合は再度リングパレットから作図したい環または n 員環 (環のサイズを数字で指定) をクリックして選択する。

- 縮合環を作図する場合はポインタの中心を既存の環結合の中心に合わせ、結合がハイライトされている状態でクリックする。



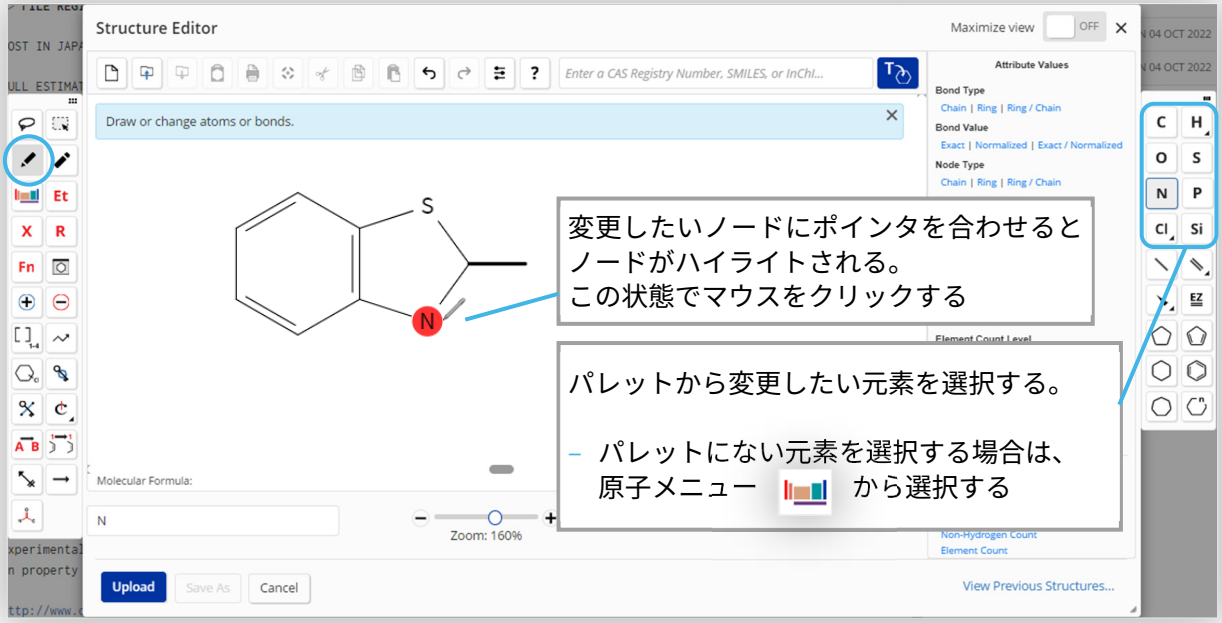
② 鎖を描く

- ペンシルツールを選択し、アクティブなノードが炭素であることを確認する。ポインタの先端を鎖を伸ばしたいノードに合わせてハイライトさせクリックすると、長さ 1 の炭素鎖が作図される。

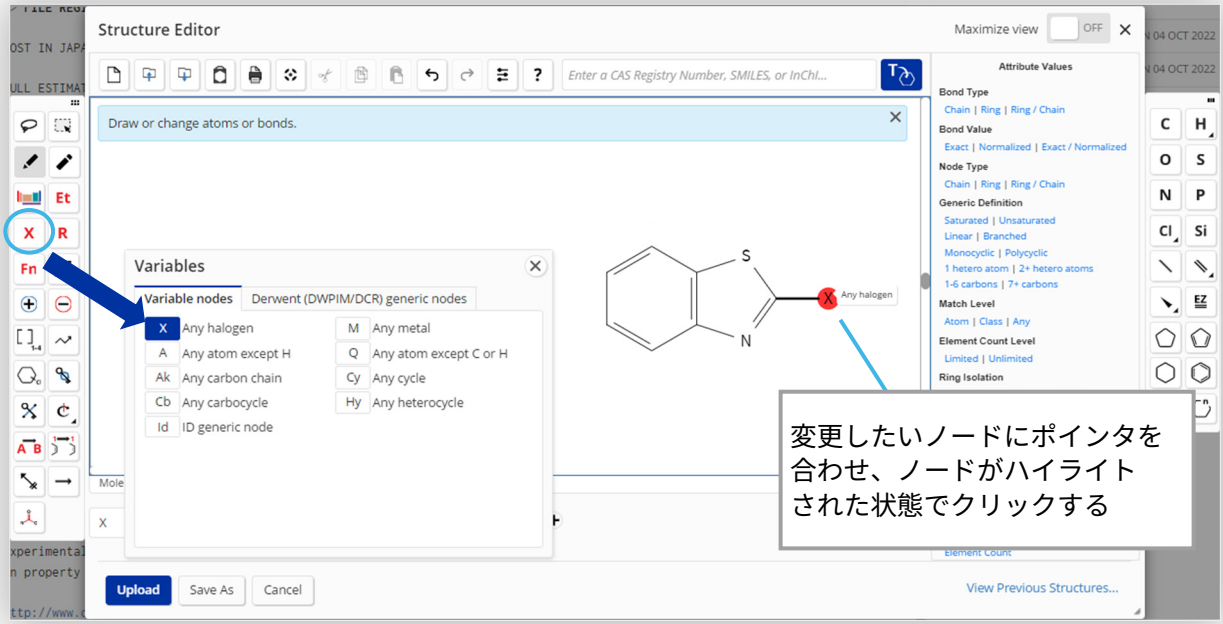


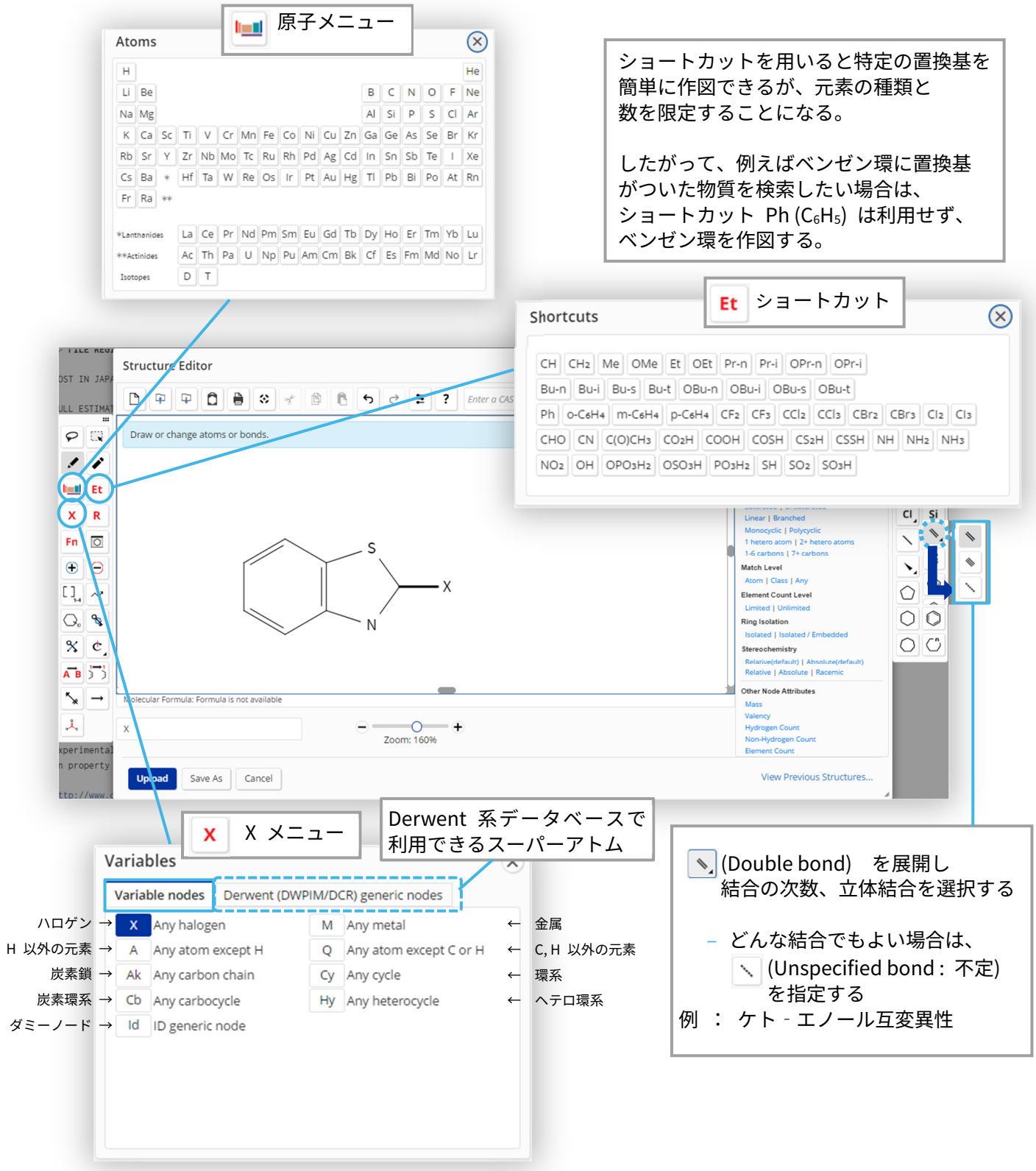
③ 元素を指定する

– ペンシルツールで作図したい元素やショートカット記号（次ページ参照）を選択し、作図/変更したいところにポインタを合わせ、クリックする。



– X メニュー（可変原子選択）から X (ハロゲン) を指定する。



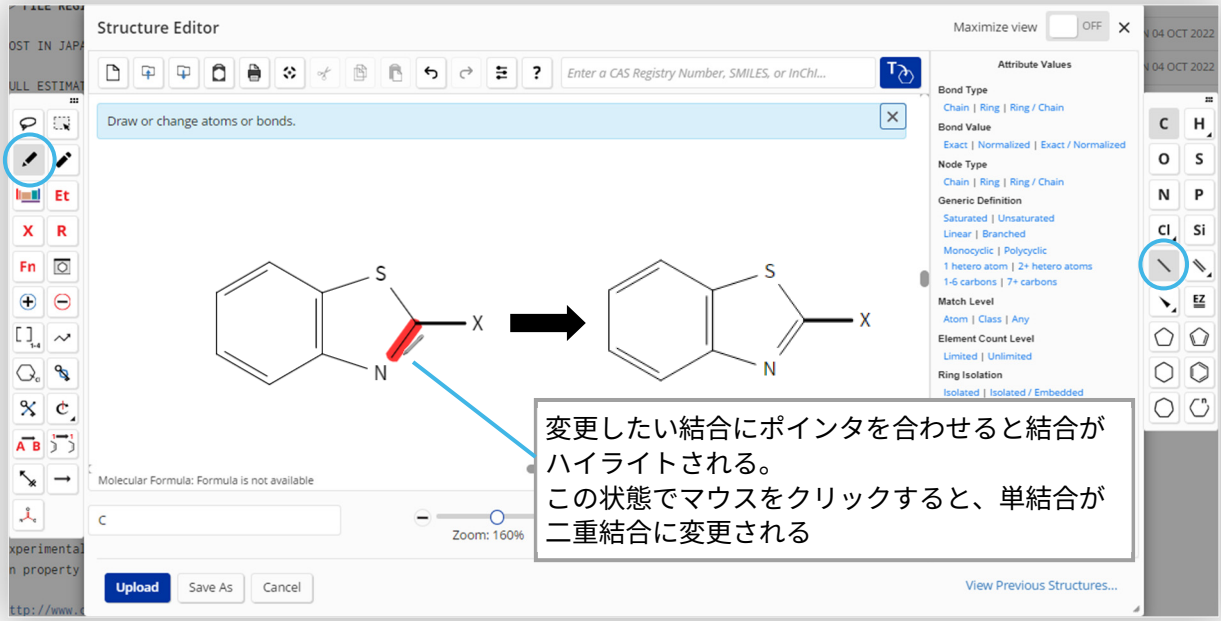


注 ：可変原子 M (金属) は、Ar As At B Br C Cl F H He I Kr N Ne O P Rn S Se Si Te Xe 以外のすべて の元素
注 ：通常は立体結合を使用しない。(構造中に立体情報が含まれていないレコードも存在する。また、フラットな構造質問式で検索すれば立体情報の異なる物質を一度に検索できる)

④ 結合次数を指定する

- 結合パレットで単結合 を選択した状態で、すでに作図した結合をペンシルツールでクリックすると、結合の次数が 単結合→二重結合→三重結合→単結合 の順に変更される。

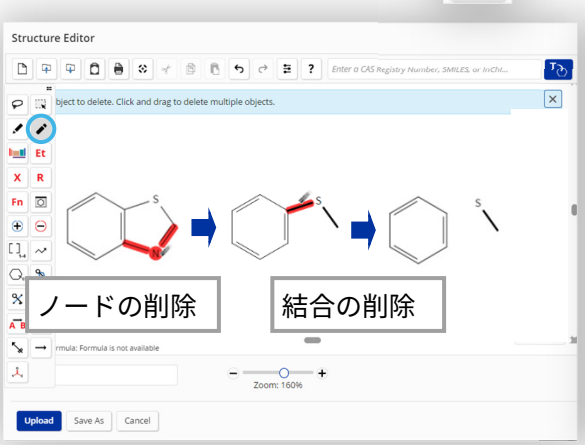
- または、二重結合 を展開して作図したい結合を選択し、変更したいところにポインタを合わせ、結合がハイライトされている状態でクリックする。

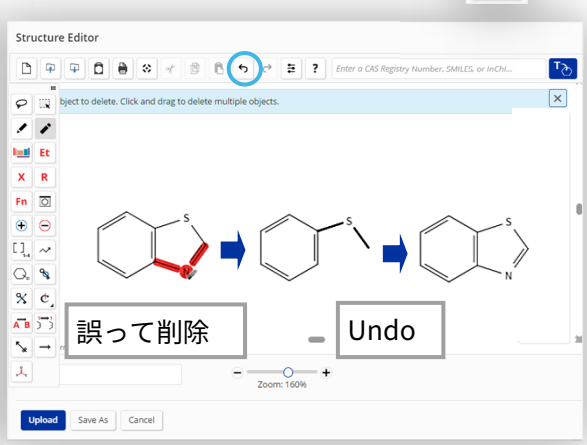


構造質問式の修正

特定部位の削除 – 消しゴムツール

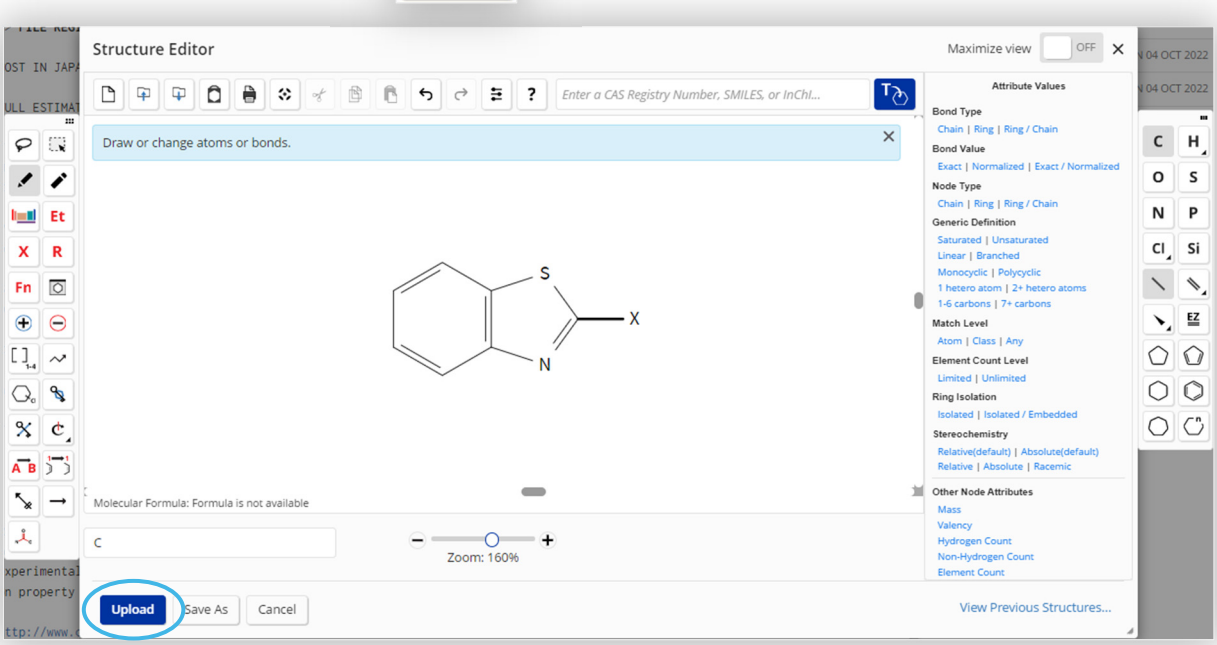
直前に行った操作を取り消す – Undo





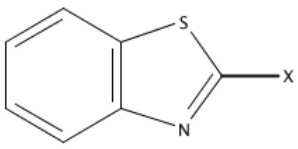
STEP 2 構造質問式の保存とアップロード

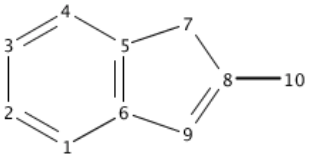
作図が完了したら、画面左下の **Upload** をクリックする。



構造質問式がアップロードされ、L 番号が付与される。

```
=>
Uploading structure file: 2025_0212_Structure
```






```
Node Attributes
Ring Nodes : 1  2  3  4  5  6  7  8  9
Chain Nodes : 10
Bond Attributes
Ring Bonds : 1-2  2-3  3-4  4-5  5-6  5-7  6-1  7-8  8-9  9-6
Chain Bonds : 8-10
Exact Bonds : 8-10
Normalized Bonds : 1-2  2-3  3-4  4-5  5-6  6-1
Exact/Normalized Bonds : 5-7  7-8  8-9  9-6
Markush Attributes
Match Level (ATOM) : 1  2  3  4  5  6  7  8  9
Match Level (CLASS) : 10
Element Count Level (LIMITED) : 1  2  3  4  5  6  7  8  9  10

L1      STRUCTURE UPLOADED
```

アップロードした構造質問式の構造と属性が自動的に表示される

STEP 3 サンプル検索

サンプル検索 (ファイル全体の 5％ の試し検索) を行い、以下の内容を確認する。

【ポイント 1】 FULL FILE PROJECTIONS (フルファイル検索の予想) が COMPLETE か？

- INCOMPLETE (フルファイル検索が完了しない予想) と表示された場合は、構造質問式や検索条件を変更する。

【ポイント 2】 サンプル検索の結果として得られた回答にノイズが含まれていないか？

- ノイズが多く含まれていた場合は、構造質問式を修正する。

```
=> S L1
SAMPLE SEARCH INI
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -      565 TO ITERATE

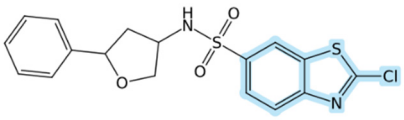
100.0% PROCESSED        565 ITERATIONS                          50 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE   **COMPLETE**
                        BATCH    **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:          9874 TO    12726
PROJECTED ANSWERS:             6062 TO     8338

L2           50 SEA SSS SAM L1

=> D SCAN

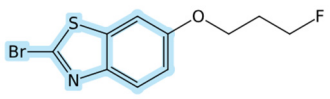
L2    50 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    6-Benzothiazolesulfonamide, 2-chloro-N-(tetrahydro-5-phenyl-3-furanyl)-
MF    C17 H15 Cl N2 O3 S2
```




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

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

L2    50 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    Benzothiazole, 2-bromo-6-(3-fluoropropoxy)-
MF    C10 H9 Br F N O S
```




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

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

サンプル検索を実行する
(構造検索のタイプはデフォルトの SSS：部分構造検索)

【ポイント 1】 COMPLETE となっているか

「INCOMPLETE」の場合、フルファイル検索を行っても不完全な検索となる

【ポイント 2】
SCAN 表示形式で、構造質問式の適合性をチェックする

表示したい件数を入力する

END または 0 を入力すると終了する

STEP 4 フルファイル検索

サンプル検索の結果 「FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**」 であったら、
フルファイル検索 (ファイル全体を対象とした検索) を実行する。

– 検索範囲として FUL または FULL を指定する。

```
=> S L1 FULL
FULL SEARCH INITIATED 15:58:22
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -    11435 TO ITERATE

100.0% PROCESSED      11435 ITERATIONS                          7512 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

L3         7512 SEA SSS FUL L1
```

フルファイル検索を実行する

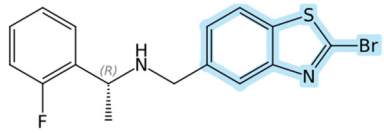
このフルファイル検索の結果 (L3) は
E 章で利用する

参考：SAVE コマンド
回答セットは SAVE コマンドで保存できる。
入力例：=> SAVE TEMP L3 STRUCTURE/A

SAVE コマンドの詳細は
＜詳細版＞CAS STNext 入門
https://www.jaici.or.jp/stn-ip-protection-suite/cas-stnext/documents/ 参照

```
=> D 2 18

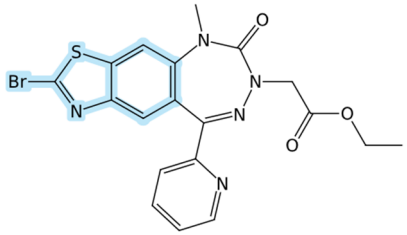
L3   ANSWER 2 OF 7512  REGISTRY  COPYRIGHT
RN   3075695-65-4  REGISTRY
ED   Entered STN:  07 Mar 2025
CN   INDEX NAME NOT YET ASSIGNED
FS   STEREOSEARCH
MF   C16 H14 Br F N2 S
SR   CA
LC   STN Files:   CA, CAPLUS, TOXCENTER
```



Absolute stereochemistry shown

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

L3   ANSWER 18 OF 7512  REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
RN   3065408-11-6  REGISTRY
ED   Entered STN:  27 Dec 2024
CN   3H-Thiazolo[4,5-h]-1,3,4-benzotriazepine-3-acetic acid,
     8-bromo-1,2-dihydro-1-methyl-2-oxo-5-(2-pyridinyl)-, ethyl ester  (CA INDEX NAME)
MF   C19 H16 Br N5 O3 S
SR   CA
LC   STN Files:   CA, CAPLUS
```




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

参考 ： イタレーションが不完全な回答

構造検索結果にイタレーションが不完全に終わった回答が含まれた場合は、=> S L#/COM を実行すると、イタレーションが完全に終わった回答に限定できる。

```
=> S L1 FUL

FULL SEARCH INITIATED 08:53:40
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 4286555 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 4286555 ITERATIONS (       42 INCOMPLETE)     53 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.09

L3          53 SEA SSS FUL L1

=> S L3/COM                ← イタレーションが完全 (COMPLETE) に終わった回答に限定
L4          11 L3/COM

=> S L3/INC                ← イタレーションが不完全 (INCOMPLETE) な回答に限定
L5          42 L3/INC
```

イタレーションが不完全な回答がある時は、カッコ内に件数が表示される

参考 ： 構造質問式の自動保存

アップロードした構造質問式は My Files > Structures に自動的に保存され、過去に作成した構造質問式の再検索や編集を簡単に行うことができる。

保存済みの構造質問式を編集して再利用する際に、
- Save As をせずに Upload ボタンクリックすると、構造質問式が上書き保存される。
- Save As から別の名前を付けてからアップロードすると、新しい構造質問式が保存される。(上書き保存されない)

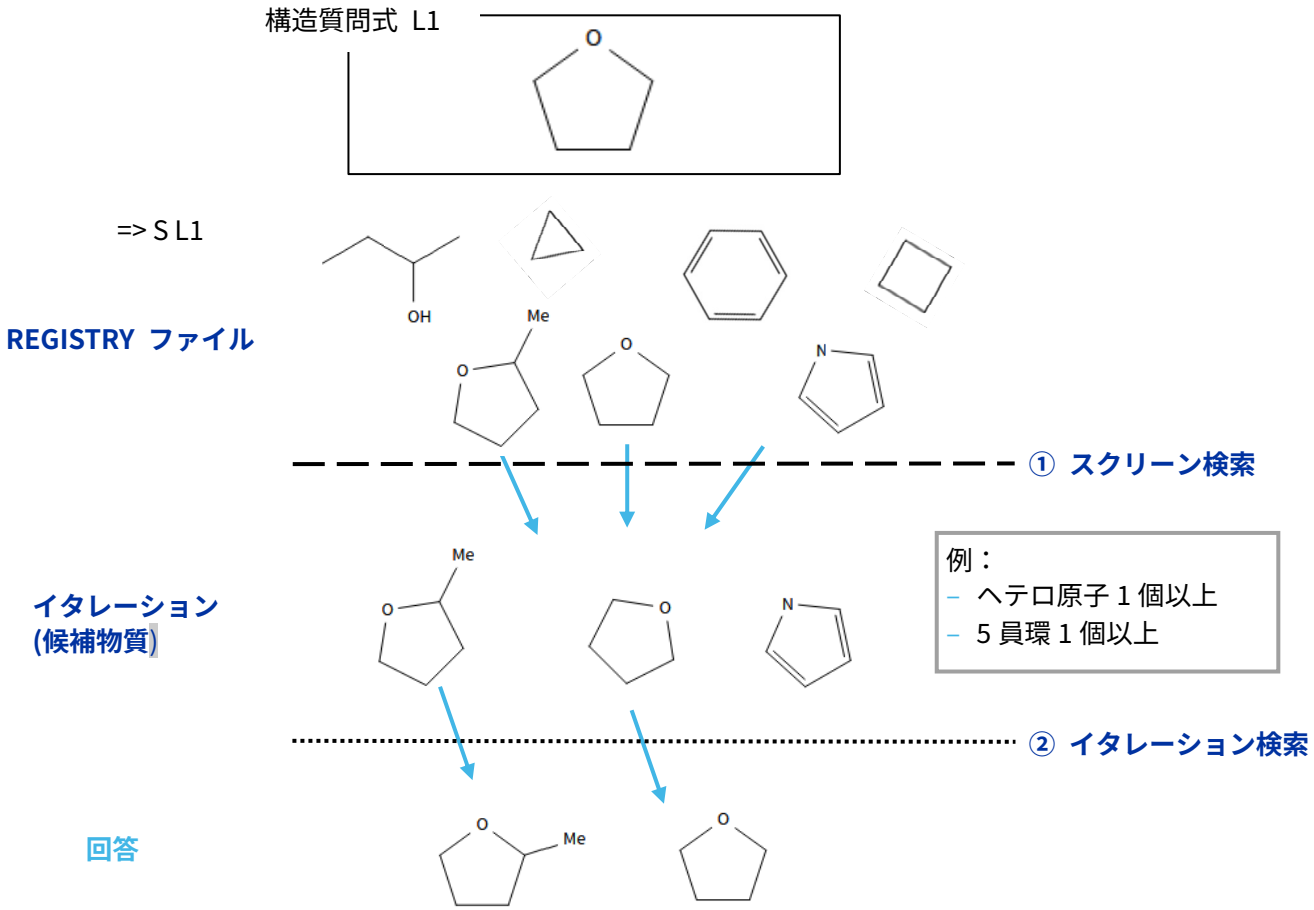


参考 ： 構造検索のしくみとシステム制限

構造検索は、二つのステップを経て実行されている。

① スクリーン検索　　：作図した構造と大まかな特徴が一致する化学物質の集合を作成する

② イタレーション検索 ：スクリーン検索を通過した物質について、作図した構造と適合するかを詳細にチェックする



– REGISTRY ファイルの構造検索におけるシステム制限値

	オンライン検索		BATCH 検索 *
	サンプル検索	フルファイル検索	フルファイル検索
イタレーション数	100 万件	1 億件	1 億件
回答数	50 件	1 億件	1 億件

BATCH 検索とは、構造質問式をシステムに登録しておき、データベースの利用が少ない時間に一括して検索させる方法である。

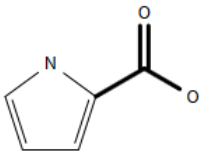
– REGISTRY ファイルでは PROJECTED ITERATIONS （予想候補物質）の数がシステム制限値を超える場合に、FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **INCOMPLETE** となる。
そのままフルファイル検索を実行すると、システム制限値以降の候補物質を検索することなく終わってしまうため、不完全な検索となる。

まとめ

- 構造検索は、作図した構造質問式を用いて目的物質を検索する手法である。
  - 検索の際には、検索のタイプ、検索範囲を指定する。
- サンプル検索を実行し、FULL FILE PROJECTIONS が COMPLETE であることを確認する。
  - 必要に応じて構造質問式を修正し、再度検索を行う。

練習問題

3. 下図の部分構造を含む物質の検索



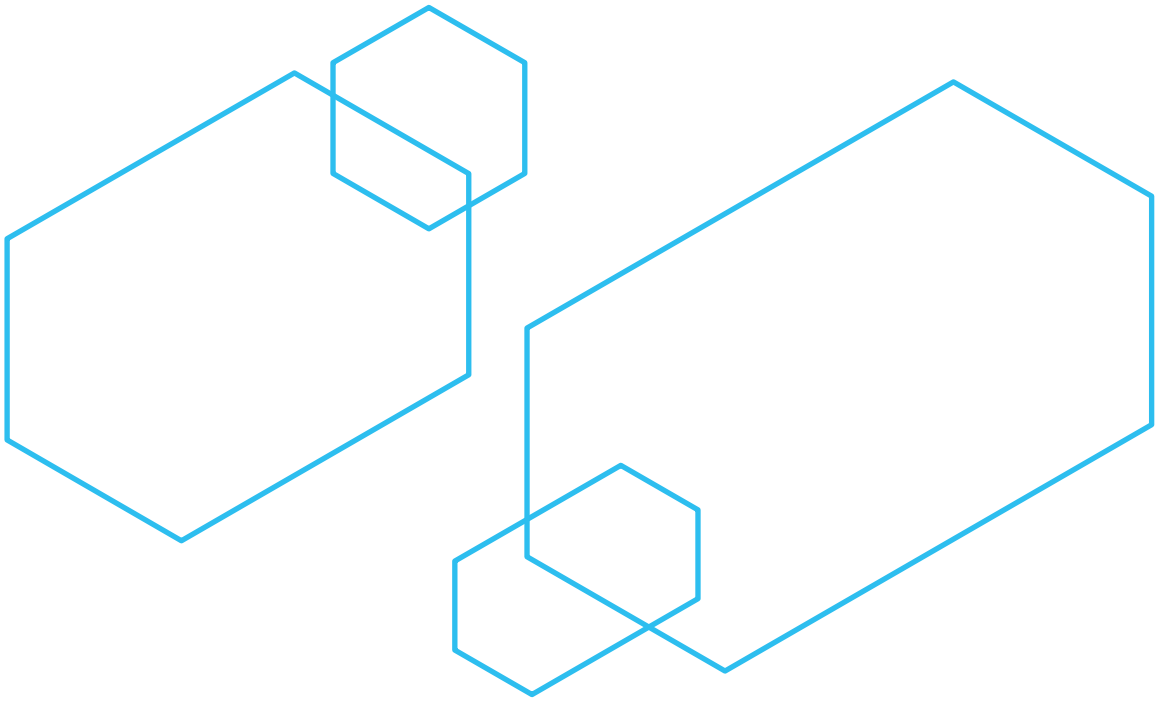
（条件） 作図した以外の環が縮合しても、しなくてもよい。

(ヒント) 置換基や縮環を許容する場合は、特別な指定はせずに部分構造検索を実行する。

回答は p.86

D 便利な作図機能

誘導体検索に欠かせない便利な作図機能をご紹介します。
繰り返しグループや可変置換位置、R グループなどの作図機能や、ノードや結合などの属性（アトリビュート）を指定すると、幅広い誘導体検索が可能です。

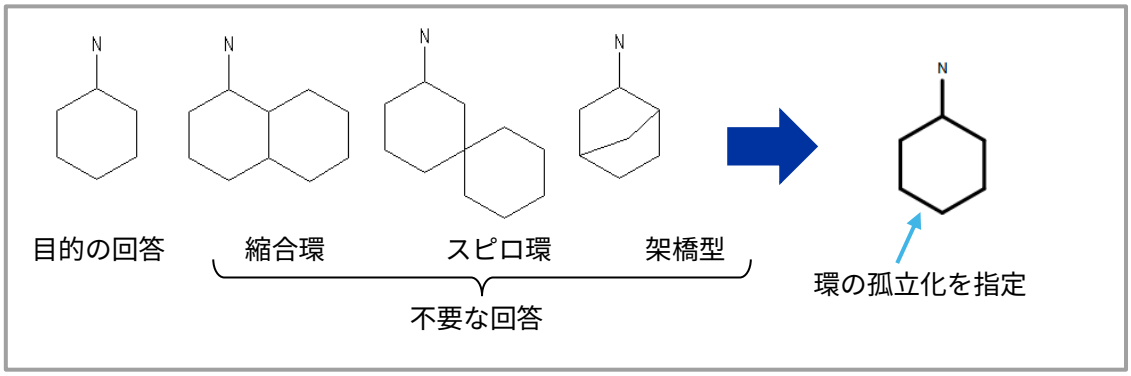


便利な作図機能一覧

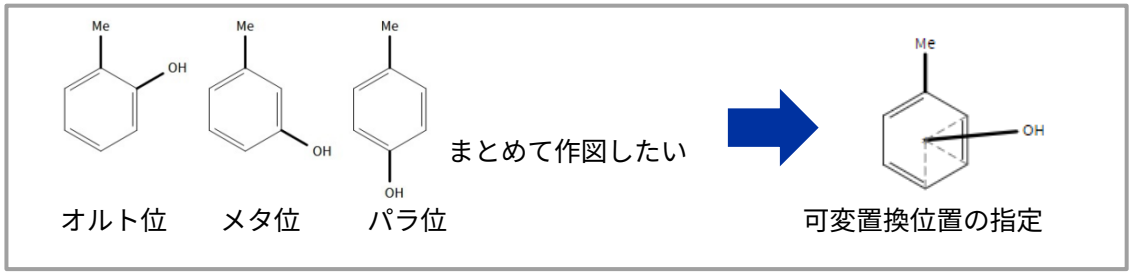
REGISTRY ファイルの部分構造検索（SSS）または閉構造部分構造検索（CSS）では、誘導体検索に便利な様々な作図機能を利用することができる。

便利な作図機能の例

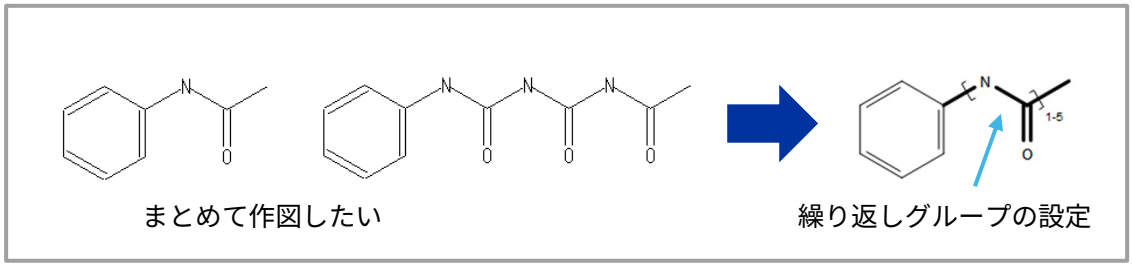
- 環の孤立化 ： 作図した以外の環の縮合やスピロ型結合は除く



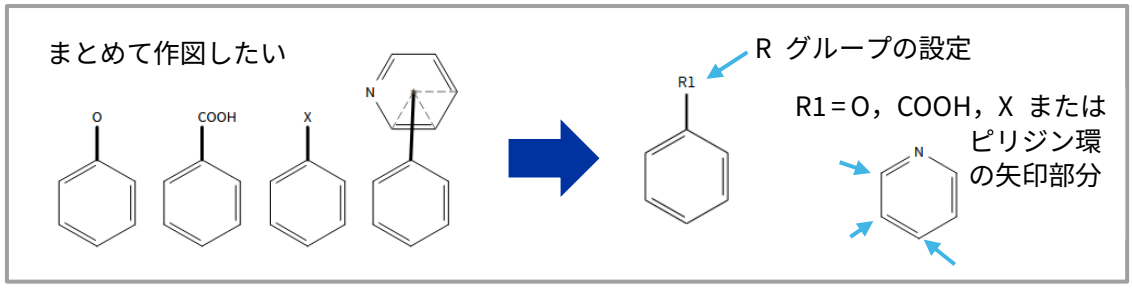
- 可変置換位置 ： 環上の置換位置が可変である場合の作図



- 繰り返しグループ ： 繰り返し単位を含む構造をまとめて作図

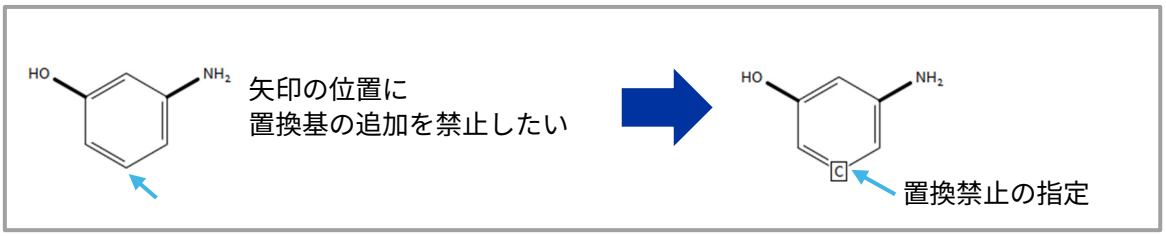


- R グループ ： 一つのノードが複数の原子や部分構造となる可能性がある場合の作図



置換の禁止（Lock Atoms ツール）

特定のノードへの置換基の追加を禁止する際に使用する。

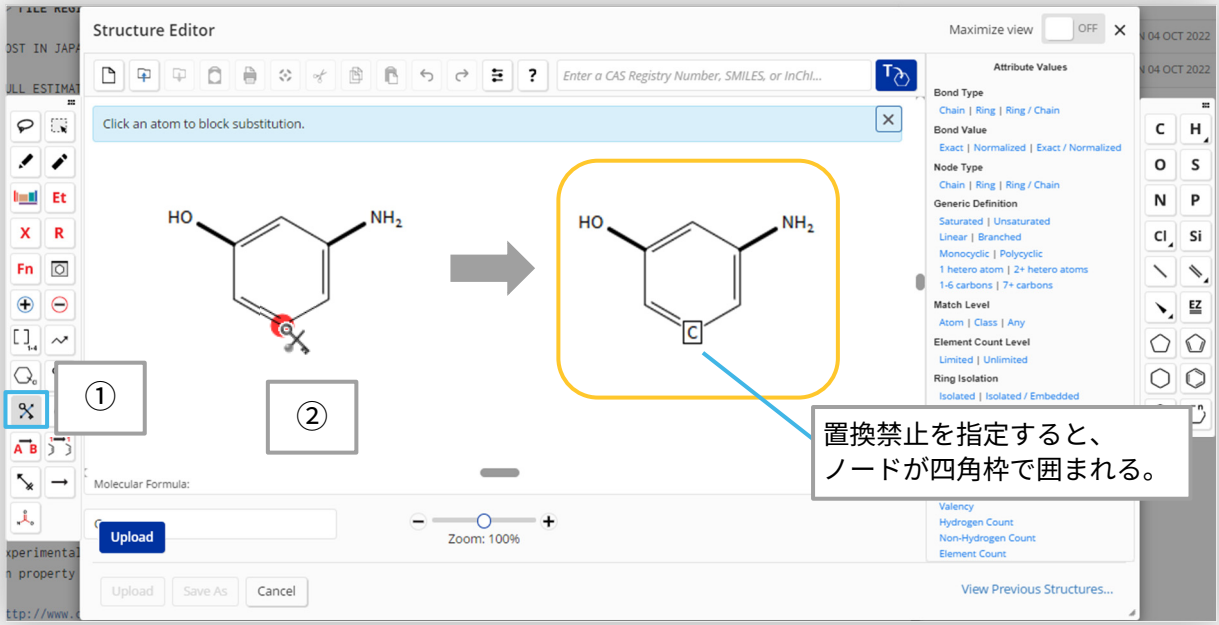


作図方法

①  をクリックする。

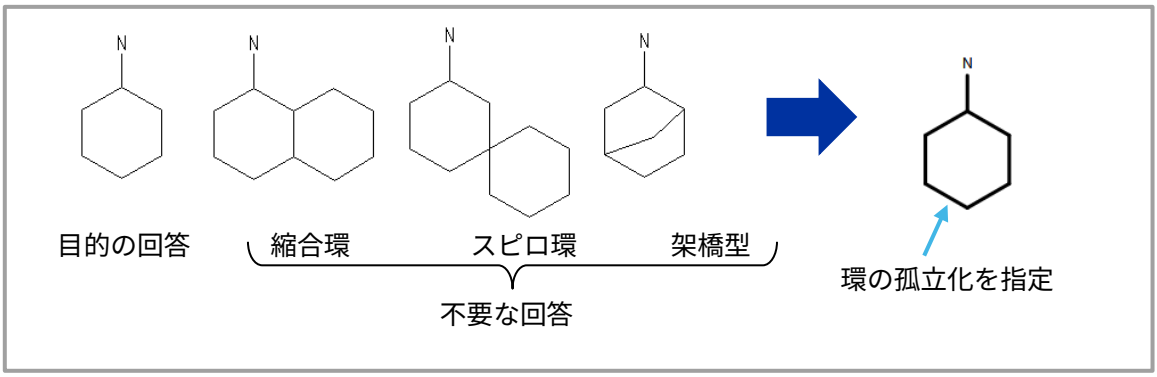
② 置換基の追加を禁止したいノードにカーソルを合わせ、クリックする。

- 置換禁止を指定すると、ノードが四角枠で囲まれる。



環の孤立化（Lock Ring ツール）

作図した環系を孤立させる、つまり他の環が縮合またはスピロ型結合しないことを指定する属性である。

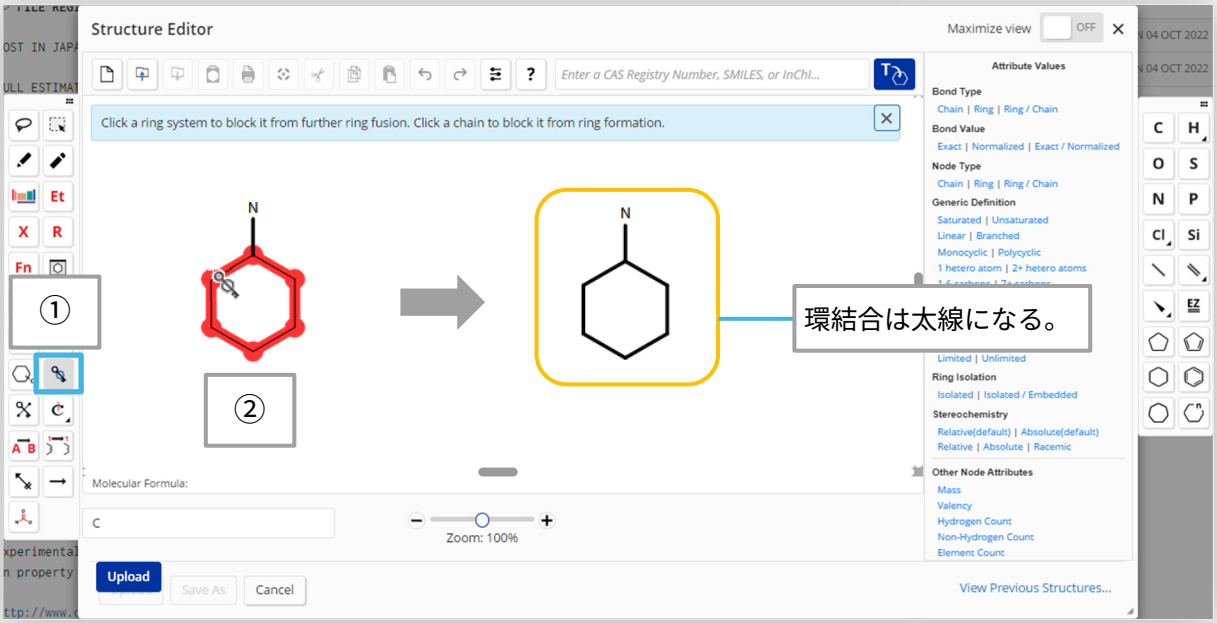


作図方法

①  をクリックする。

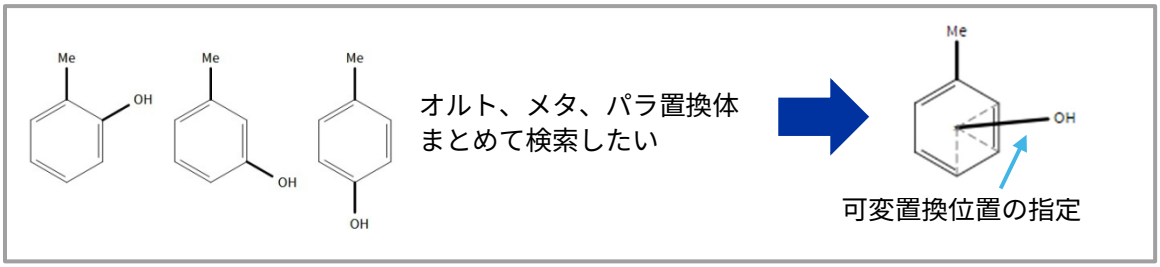
② 孤立を指定したい環にカーソルを合わせてクリックする。

– 環の孤立を指定すると、環結合が太線に変わる。



可変置換位置

環または一つの環系に対して、置換基の可変な結合位置を指定する際に使用する。

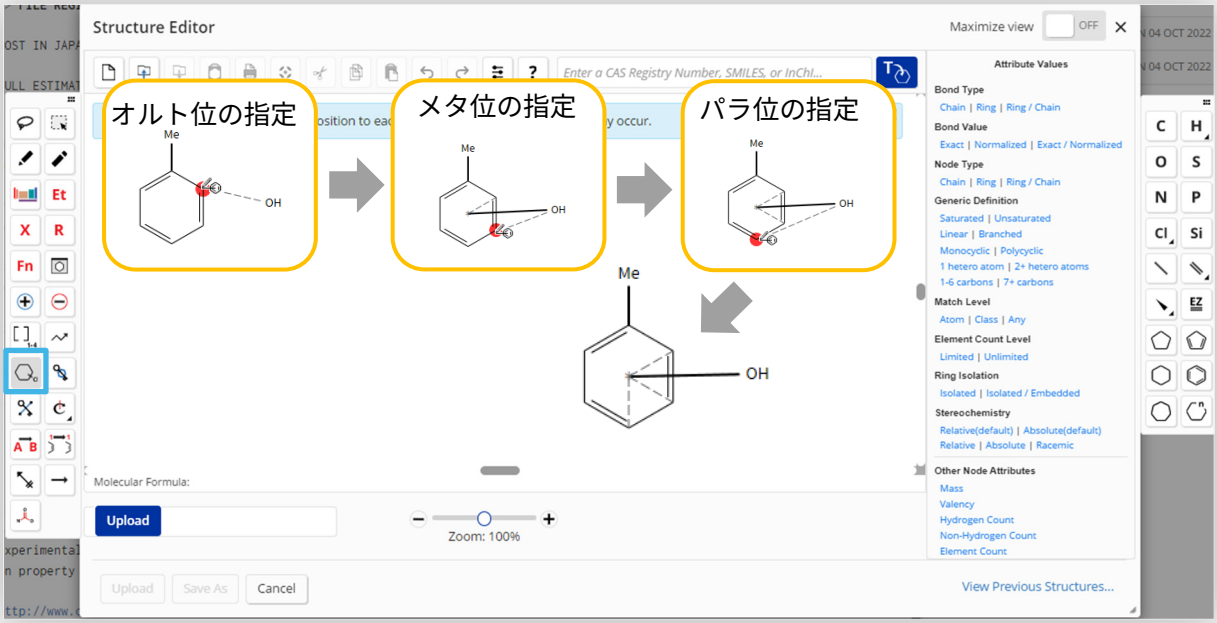


作図方法

① 基本骨格と置換基を離して作図する。

②  をクリックし、置換基をクリックして結合位置までドラッグする。

③ ② の操作を繰り返し、結合位置を複数 (2 箇所以上) 指定する。

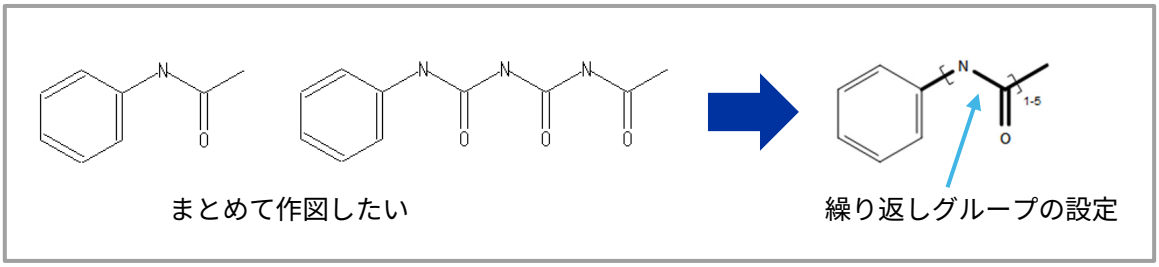


注意点

- 各置換基の結合先は 20 箇所まで指定できる。
- 置換基の結合先として指定できるのは、一つの環系上のノードのみ。鎖上のノードや、複数の環系上のノードには指定できない。
- 置換基の結合先として指定できるのは、非金属原子、X (ハロゲン原子)、Q (C, H 以外の原子)、A (H 以外の原子)。
  - ショートカット、金属原子、M，Ak，Cb，Cy，Hy，繰り返しグループ内のノードは指定できない。
- 二つ以上の置換基が結合する場合は、置換基を必要な数だけ作図して、それぞれに可変置換位置を指定する。

繰り返しグループ

繰り返しグループを利用すると、繰り返しを含む構造をまとめて作図できる。

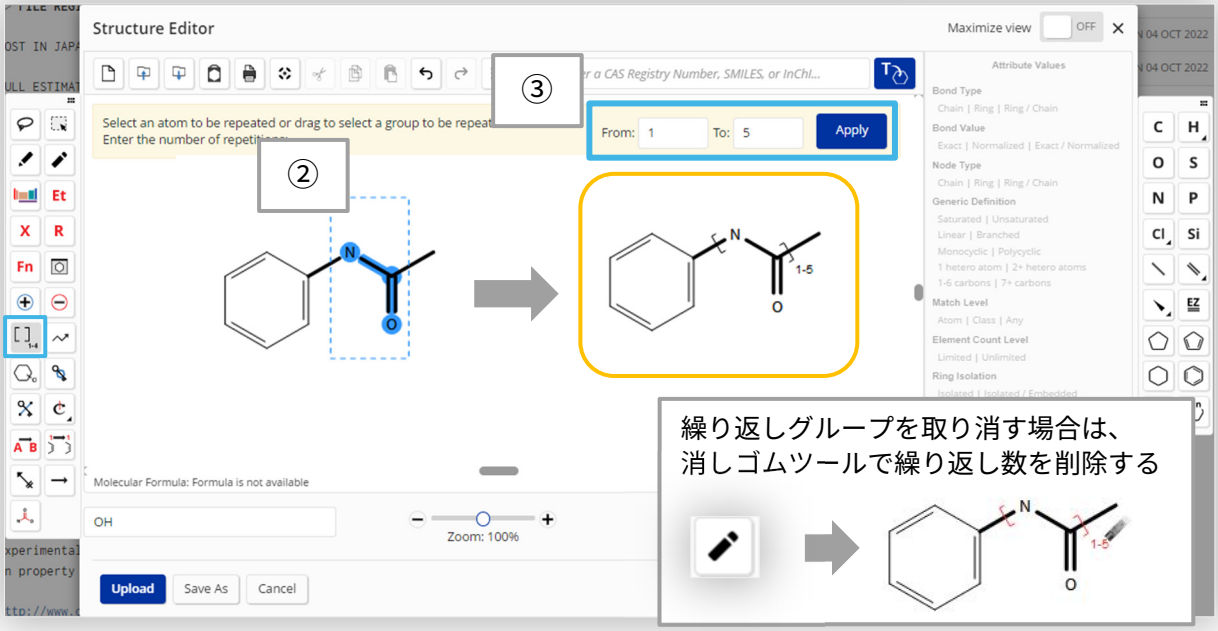


作図方法

① 繰り返し部分を含めて基本骨格を作図する。

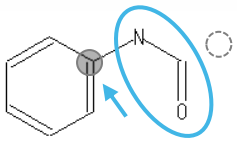
②  をクリックし、繰り返し部分をドラッグする。

③ 作図画面上部のボックスに繰り返し数を入力して 「Apply」 をクリックする。

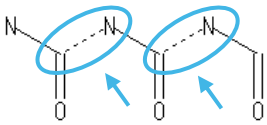


注意点

- 繰り返しの範囲は 0〜20
- 繰り返しグループには結合点が二つ必要。
- 繰り返し単位間の結合の次数は指定できない。
  「不定結合」 として検索される。
- Ak のみを 2 回以上繰り返す指定はできない。



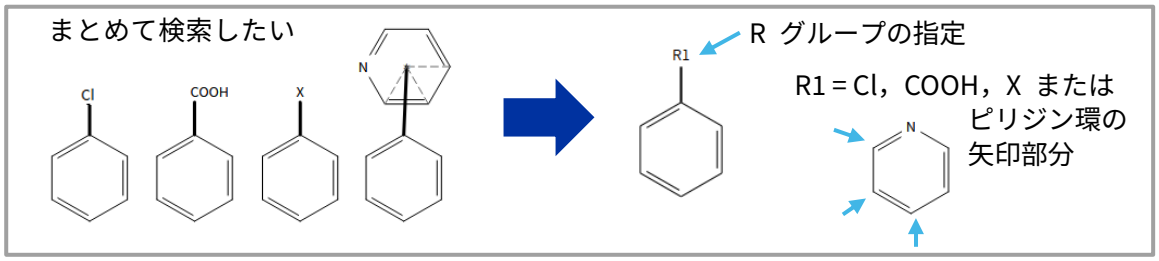
結合点が一つしかないため
繰り返しの指定はできない



繰り返し単位間の結合は
不定として検索される

R グループ

一つのノードに複数の原子やショートカット、可変原子、フラグメントを指定する際に使用する。



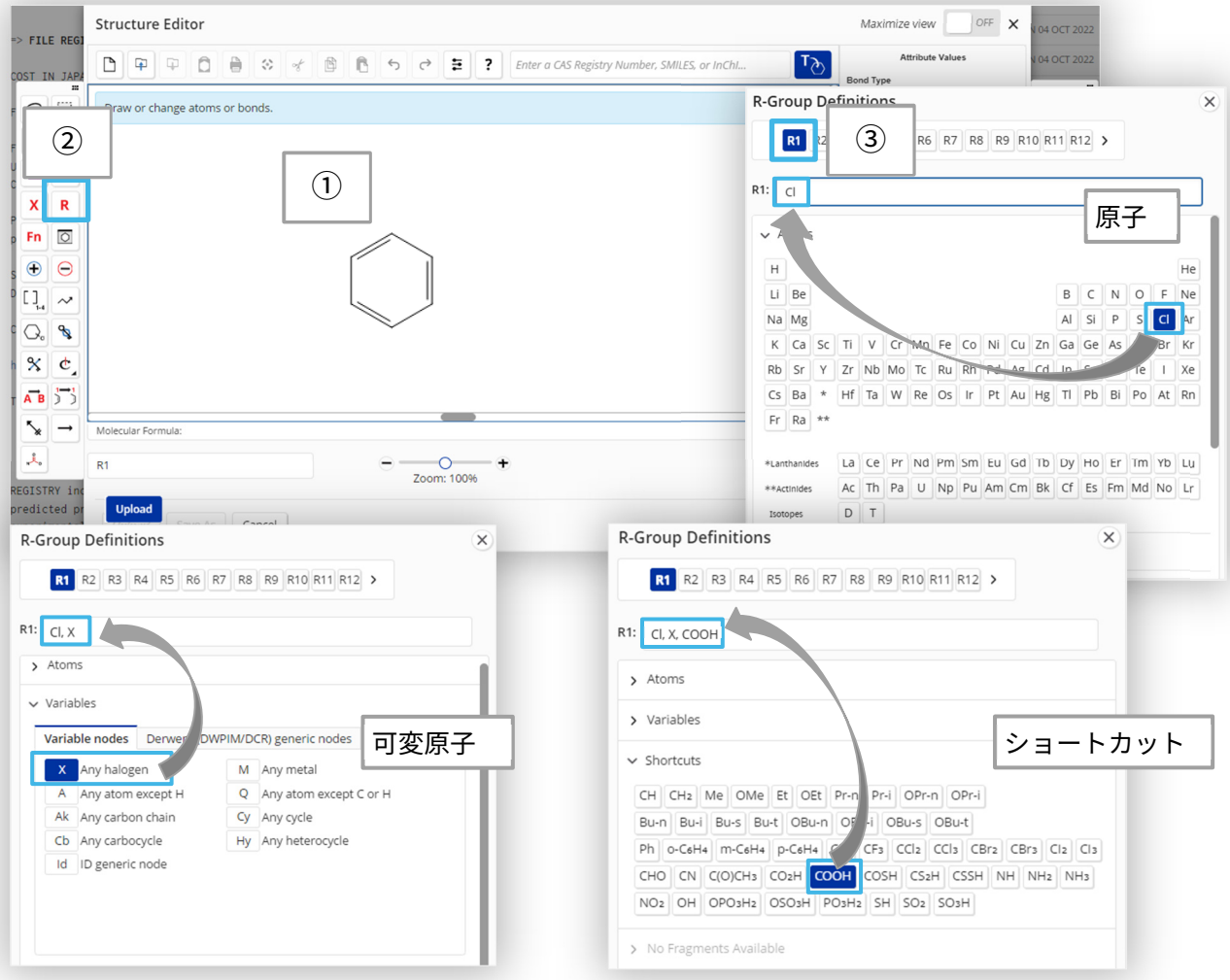
作図方法

① 基本骨格を作図する。

② R をクリックし R グループメニューを表示する。

③ R1 をクリックし、原子、可変原子、ショートカットから目的のものを選択する。

- 選択すると自動的にボックスに入力される。



④ R グループに含めたいフラグメント (部分構造) を離して作図する。

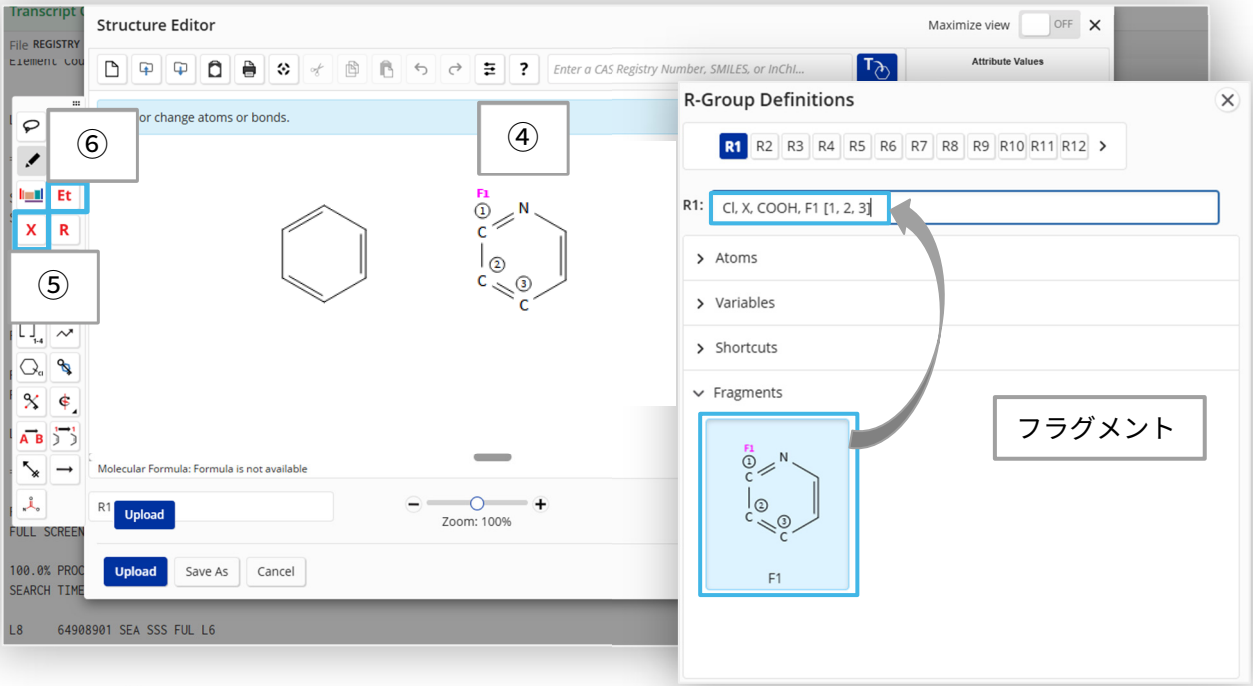
- 原子、ショートカット、可変原子にない構造でも、自分で作図して R グループに指定することができる。

⑤ Fn をクリックし、基本骨格とフラグメントの結合点を選択して F 番号を付与する。

- F 番号が付与された構造は R グループのフラグメントとして認識される。

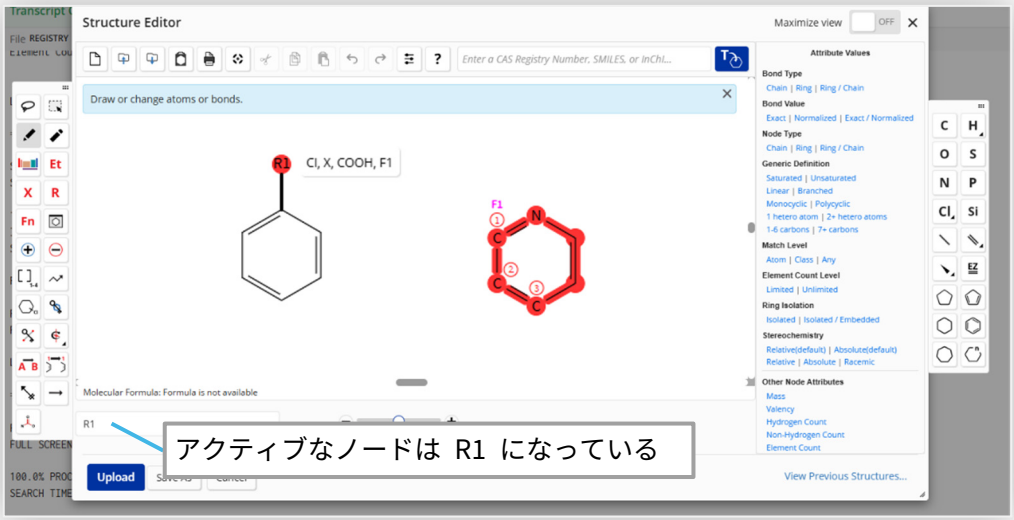
⑥ R をクリックし R1 を選択し、Fragments から目的のフラグメントを選択する。

- 選択すると、フラグメントに付与された F 番号がボックスに入力される。



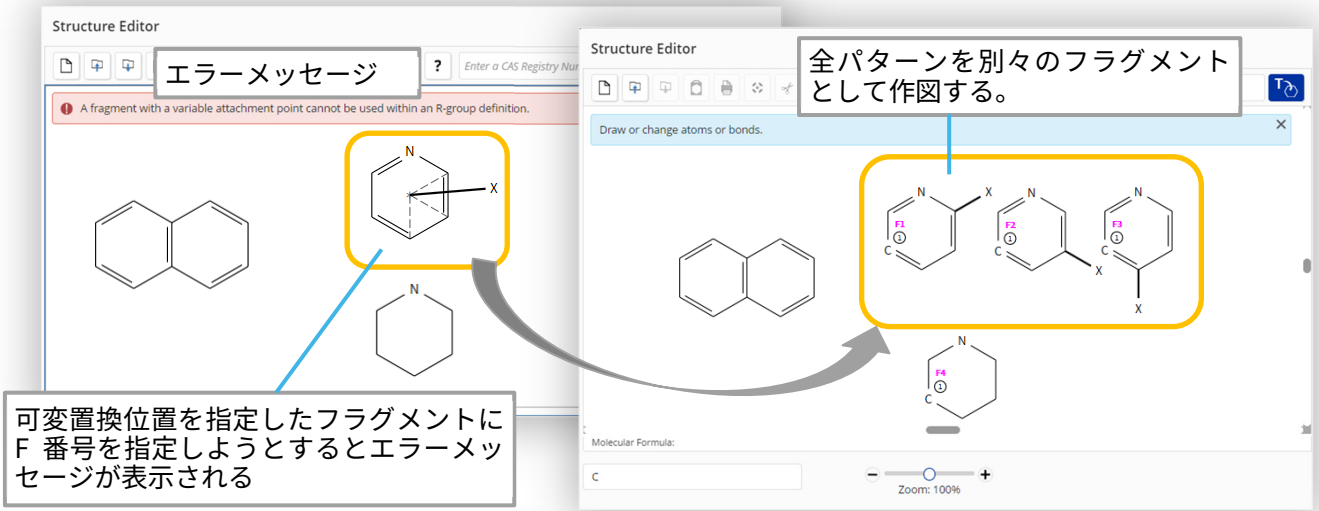
⑦ 基本骨格に R1 を作図する。

- 作図した R グループにカーソルをかざすと、R グループに指定した内容を確認できる。

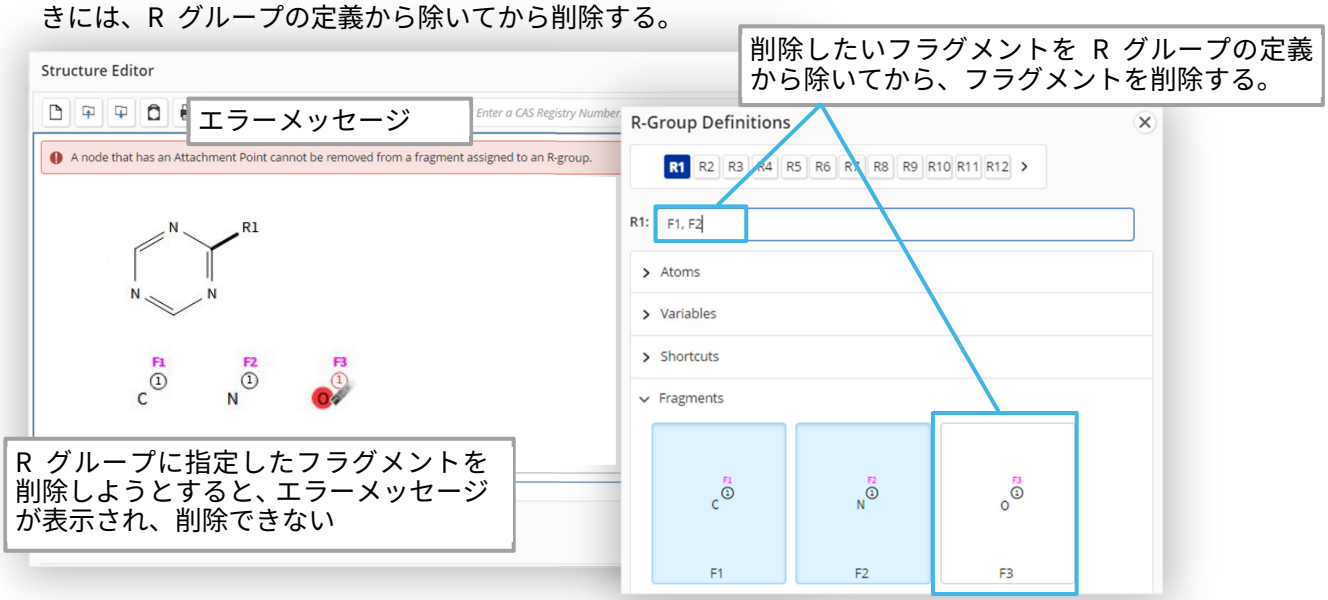


注意点

- 最大 20 個の R グループ (R1-R20) を指定できる。
- 各 R グループに最大 20 項目 (原子、可変原子、ショートカット、フラグメントの結合点) を指定できる。
- 同一フラグメントに最大 20 個の結合点を指定できる。
- 可変置換位置を指定したフラグメントを指定することはできない。



- R グループにショートカットの Ph を指定した場合、無置換ベンゼンの指定となる。ベンゼン環の置換基を許容したい場合は、フラグメントとしてベンゼン環を作図する。
- 使用しないフラグメントは必ず削除する。一度 R グループに指定したフラグメントを削除するときには、R グループの定義から除いてから削除する。



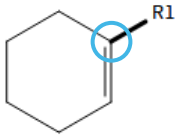
- Current value based on structure (Exact) の結合を含む構造に R グループを付与すると Bond Value は自動的に Current value based on structure (Exact/Normalized) に変更される。
- R グループに H (水素) を含めると、ノイズを生じる場合がある。

参考 ： R グループ内に水素を指定する場合の注意点

R グループ内に水素を指定するとノイズを生じることがある。ただし、目的の化合物が検索からもれることはない。

– ノイズを生じない場合

R グループに結合するノードが他に水素と結合しない

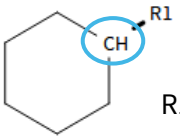


R1 = H，Cl，CH3

– ノイズを生じる場合

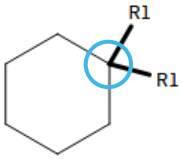
R グループに結合するノードが …

① 水素に結合している，または水素を含むショートカット記号の場合



R1 = H, Cl, CH3

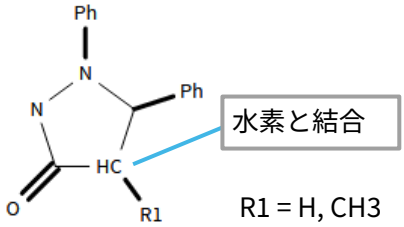
② 水素を含む複数の R グループと結合する場合



R1 = H, Cl, CH3

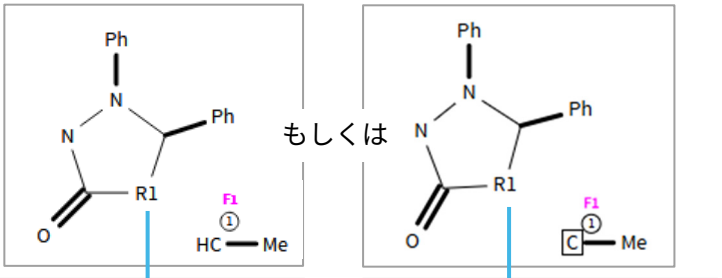
作図例と検索結果の比較

– ノイズを生じる作図例 (L1)



R1 = H, CH3

– 好ましい作図例 (L2)



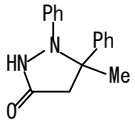
R1 = CH2, F1
(CH を含めたフラグメントと CH2 を R グループとして作図する)

R1 = CH2, F1
(C に 置換禁止を指定したフラグメントと CH2 を R グループとして作図する)

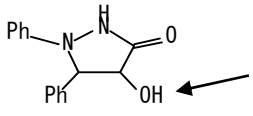
```
=> FILE REGISTRY

=> S L1
     :
=> S L1 FUL
L4            81 SEA SSS FUL L1

=> S L2
     :
=> S L2 FUL
L6            72 SEA SSS FUL L2
```



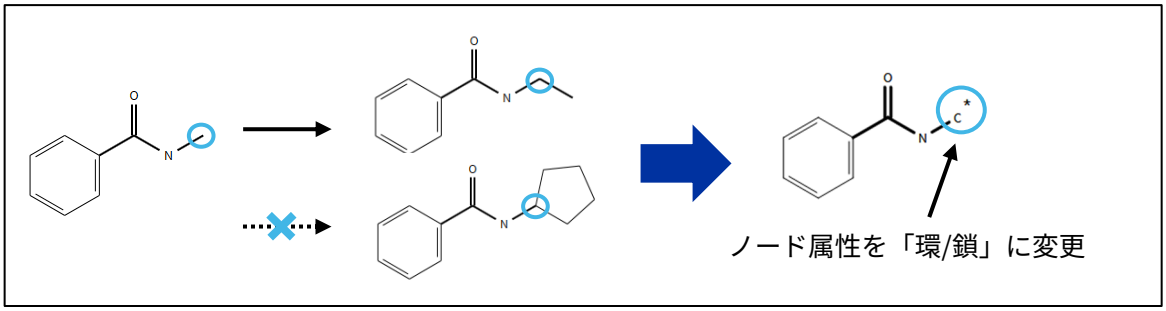
[正しい回答]



[L4 に含まれるノイズ]

ノードの属性（Node Attributes - Node Type）

ノードが 「環上」、「鎖上」、「環または鎖上」 にあることを指定する属性である。



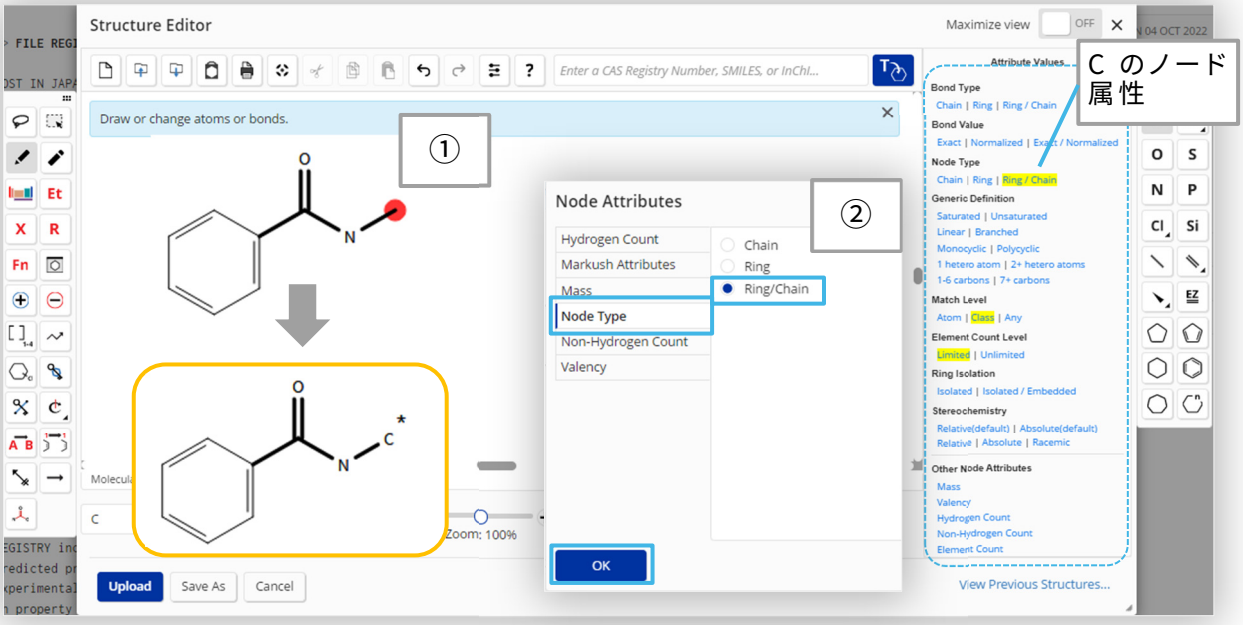
- 作図したままのデフォルトでは、鎖上のノードの属性は「鎖」に指定されている。属性を変更しない限り、このノードが環の一部となるような物質は検索されない。環の一部になってもよい場合は「ノードの属性」を「環/鎖」に変更する。

作図方法

① 属性を変更したいノード（原子）にカーソルを合わせて右クリックする。

② 「Node Type」を選択し、属性を指定して「OK」をクリックする。

- ノードの属性を変更すると * が付与される。
- ノードにカーソルを合わせると、属性パネルの該当部分が黄色くハイライトされる。

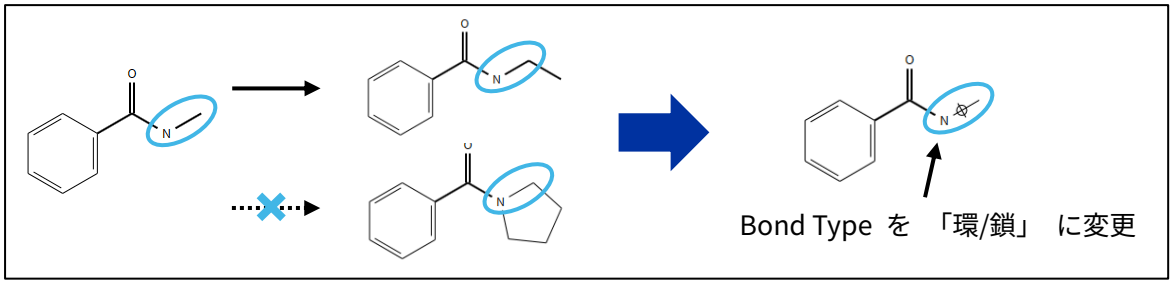


注意点

- ノード属性を変更しても、そのノードに係わる Bond Type は変更されない。
- R グループに属性を指定する場合は、R グループの内容となる原子や可変原子（X, M, A, Q）をフラグメントとして作図し、そのフラグメントに属性を指定する。

結合の属性（Bond Attributes - Bond Type/Bond Value）

Bond Type は結合の種類（環、鎖、環または鎖）を、Bond Value はノーマライズド結合*の可能性を指定する属性である（* ノーマライズド結合については Appendix を参照）。



- 作図したままのデフォルトでは、環外の Bond Type は「鎖」に指定されている。属性を変更しない限り、この結合が環の一部となる物質は検索されない。

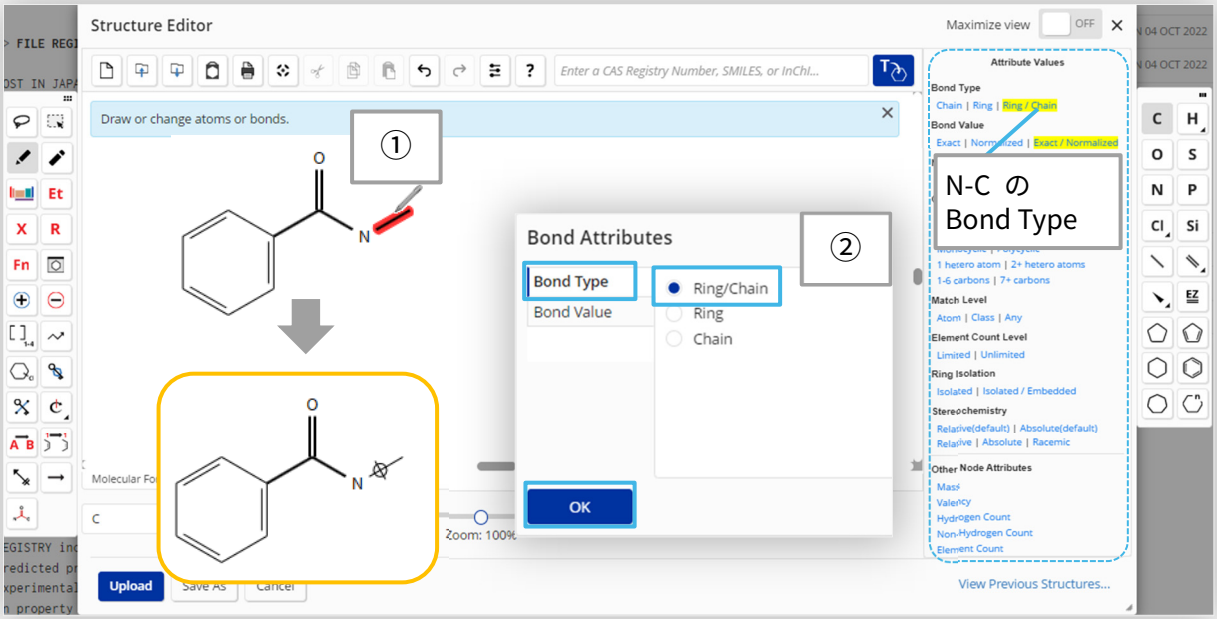
- 作図した鎖結合が環の一部になってもよい場合は「Bond Type」を「環/鎖」に変更する。

作図方法

① 属性を変更したい結合にカーソルを合わせて右クリックする。

②「Bond Type」を選択し、属性を指定して「OK」をクリックする。

- Bond Type を変更すると結合の線が変化する（環/鎖の場合は ）
- 結合にカーソルを合わせると、属性パネルの該当部分が黄色くハイライトされる。



注意点

- Bond Type を変更すると、その結合の両端のノードの属性も自動的に変更される。

参考 ： 鎖結合に対する Lock Ring の指定

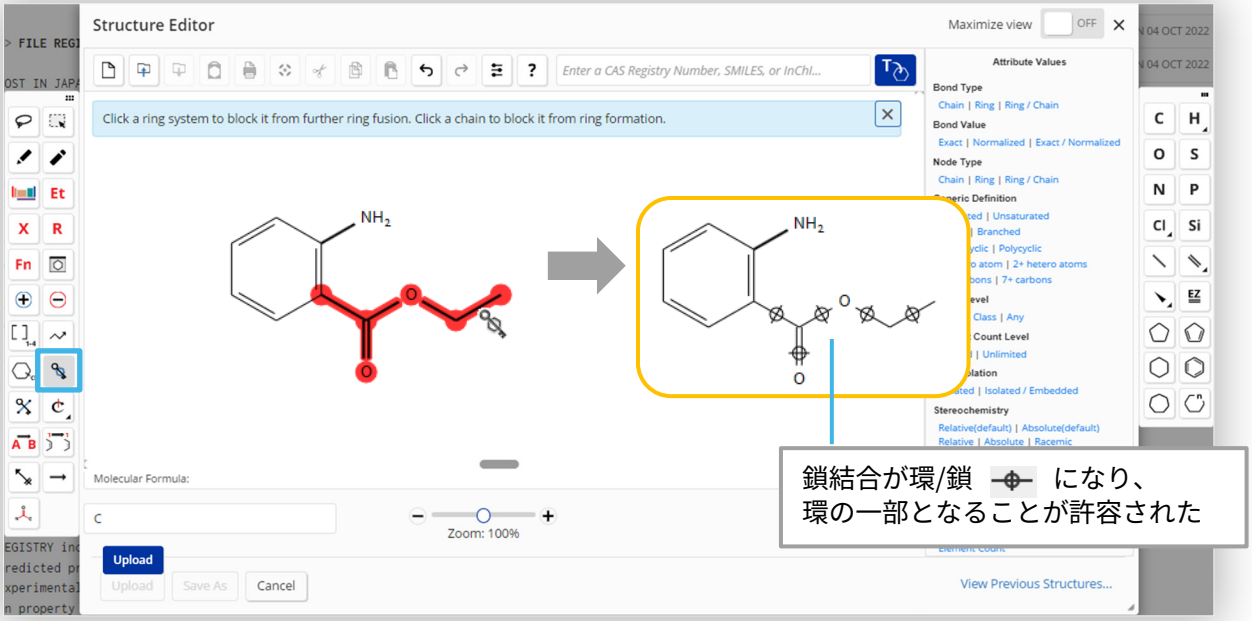
環の孤立化を指定する Lock Ring ツールを鎖結合に適用すると、鎖結合の Bond Type を「環/鎖」へ簡単に変更することができる。

- Lock Ring ツールを適用すると、鎖結合全体の Bond Type が変化する。鎖結合の一部の Bond Type を変更する場合は、Bond Attribute で Bond Type を変更する。

作図方法

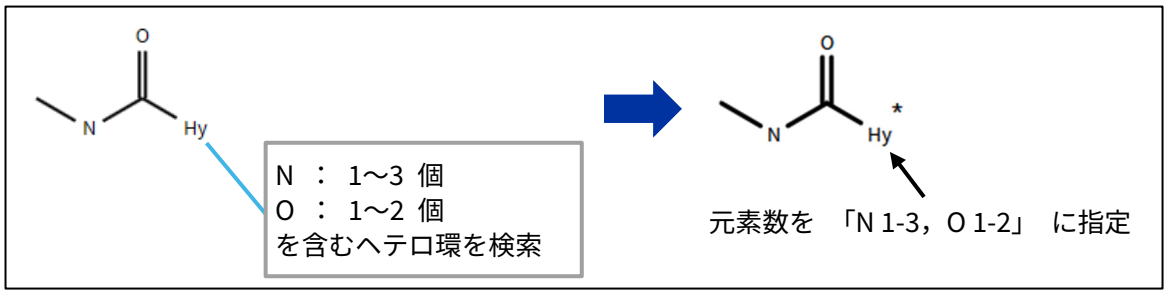
①  をクリックする。

② 環の一部になることを許容したい鎖結合をクリックする。



元素数（Node Attributes – Element Counts）

「元素数」を指定すると、一般式グループ（Hy，Cb，Cy，Ak）について、元素の種類と数を限定することができる。



– Ak（鎖式炭素）および Cb（炭素環）に対して指定できる元素は C（炭素）のみ。また、C（炭素）の数として 0（ゼロ）は指定できない。

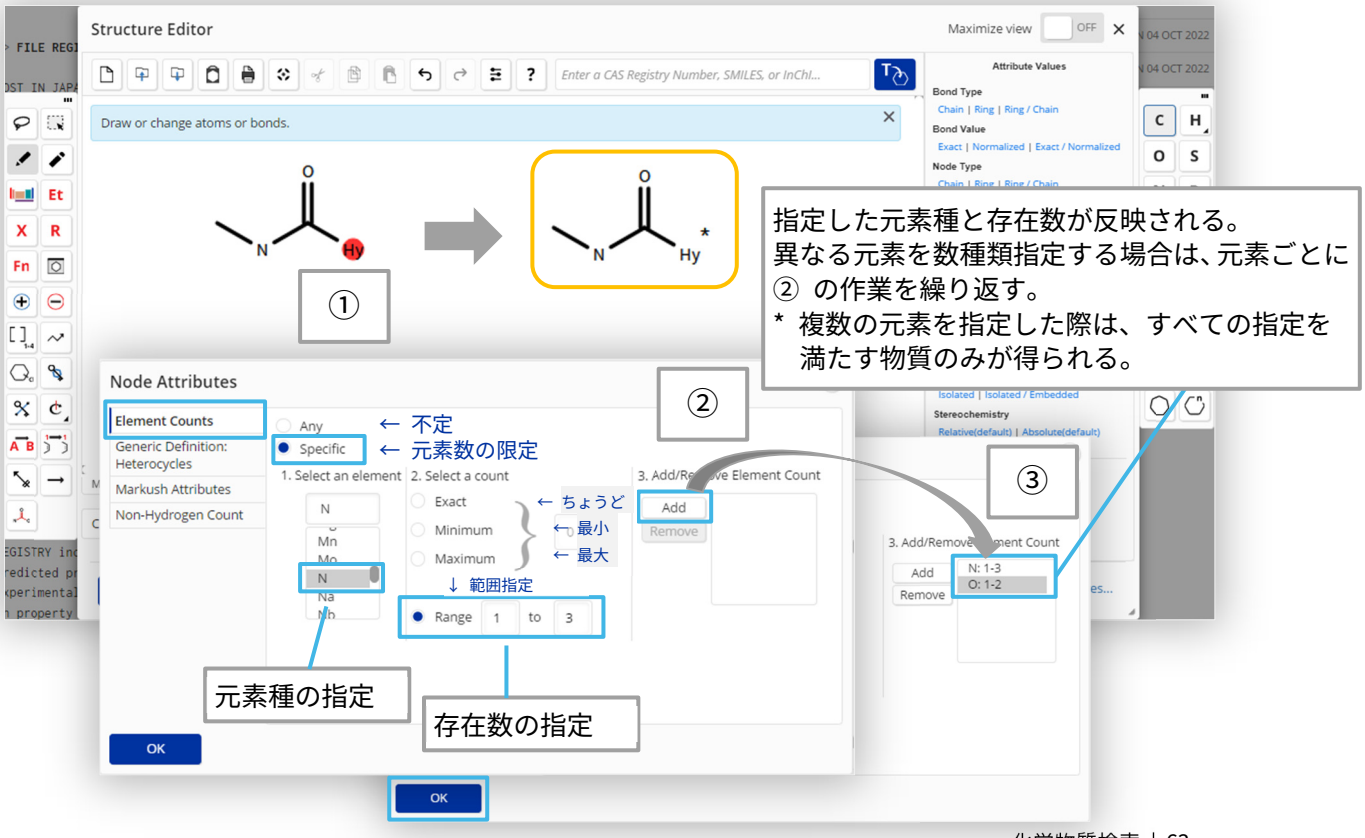
作図方法

① 一般式グループ（Hy，Cb，Cy，Ak）にカーソルを合わせて右クリックする。

②「Node Attributes」から「Element Counts」を選択する。
「Specific」を選択し、元素種と存在数を指定して「Add」をクリックする。

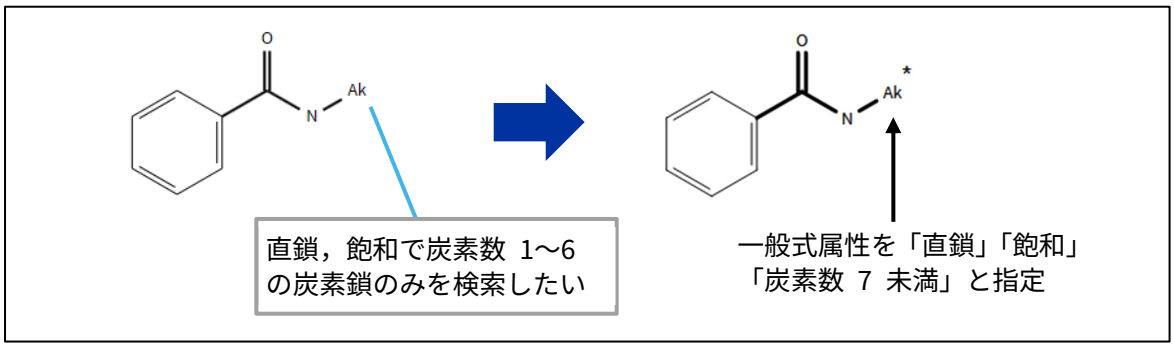
③ 右のボックスに ② の指定が反映されたことを確認し、「OK」をクリックする。

– 元素数を指定すると * が付与される。



一般式属性（Node Attributes – Generic Definition）

一般式グループ記号（Hy，Cb，Cy，Ak）について「飽和度」、「鎖の種類」、「ヘテロ原子の数」、「環系の種類」、「炭素原子数」を指定する際に使用する。

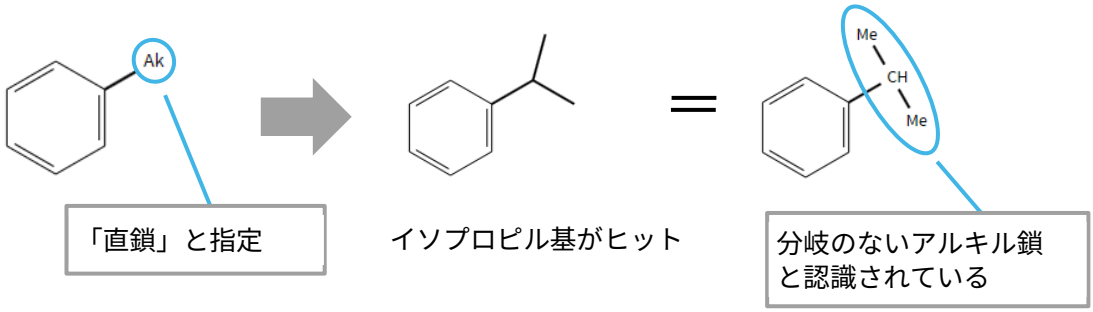


- 一般式グループ記号として、次の 4 種類を使用できる。

一般式記号	Hy	Cb	Cy	Ak*
内容	ヘテロ環	炭素環	任意の環	鎖式炭素
検索される構造	少なくとも一つの非炭素原子を含む環	炭素のみからなる環	環なら何でもよい	全鎖式炭素 直鎖 分岐 飽和 不飽和
	環とは縮合環、スピロ環を含む			
作図可能な置換基の数	16 個まで置換基の指定が可能			

Ak の「直鎖/分岐」に関する注意点

- イソプロピル基、*sec*-ブチル基などはシステム上、直鎖のアルキル鎖として認識されている。

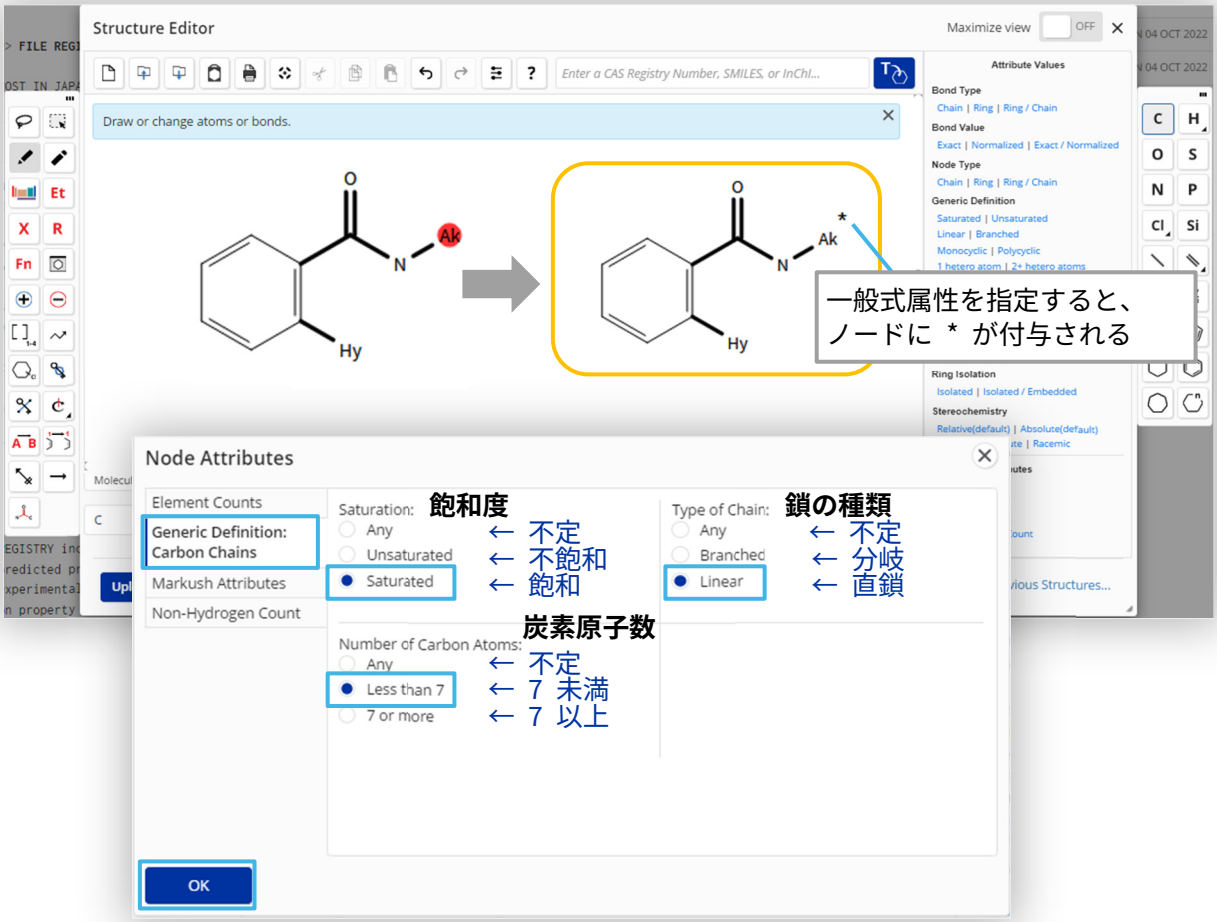


- Ak ノードに分岐を指定すると、イソプロピル基や *sec*-ブチル基などは除かれてしまう。

作図方法

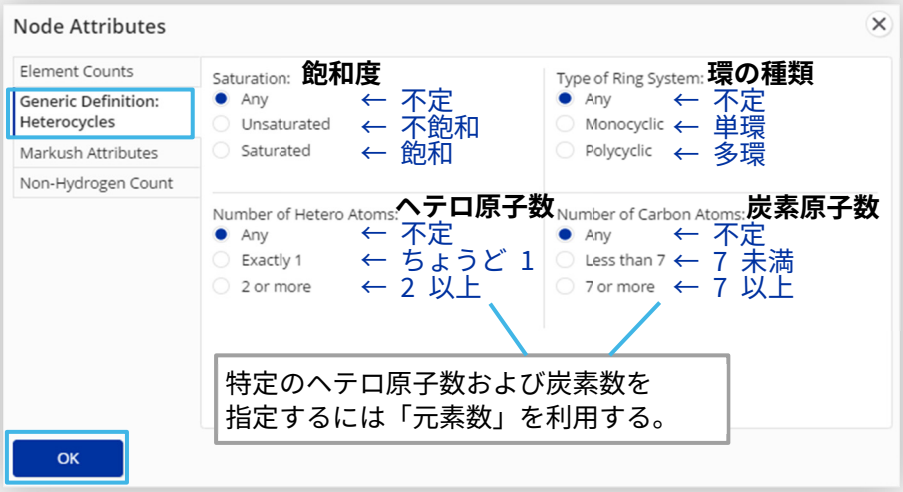
① 一般式属性を指定したいノード（Hy，Cb，Cy，Ak）にカーソルを合わせて右クリックする。

② 「Node Attributes」のボックスから「Generic Definition」を選択する。
目的の属性を指定して「OK」をクリックする。一般式属性を指定すると * が付与される。



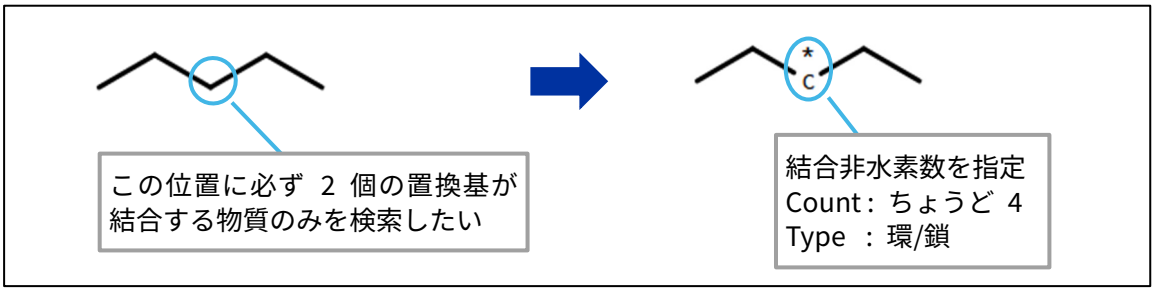
Hy (ヘテロ環)、Cb (炭素環)、Cy (任意の環) の一般式属性の指定

– 環の種類（単環/多環）を指定できる。

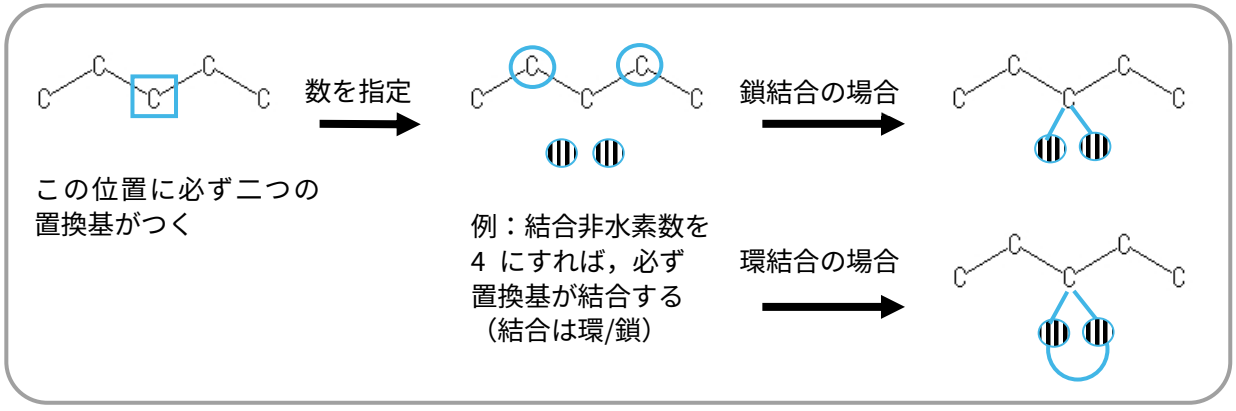


結合非水素数（Node Attributes - Non-Hydrogen Count)

結合非水素数を指定すると、特定のノードに結合する水素以外のノードの数を限定できる。



- 特定のノードに結合する水素以外のノードの数だけでなく、Bond Type (環、鎖、環/鎖) も指定できる。
  - 結合次数 (単結合、二重結合など) は指定できない。
  - 既に作図している構造中のノードの数、Bond Type も含める。



指定内容

- 非水素ノードの数

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

- 結合非水素数を指定したノードからの Bond Type

指定範囲	内　容
Chain (鎖)	指定したノードからの鎖結合の数
Ring (環)	指定したノードからの環結合の数
Ring/Chain (環/鎖)	指定したノードからの鎖または環結合の数

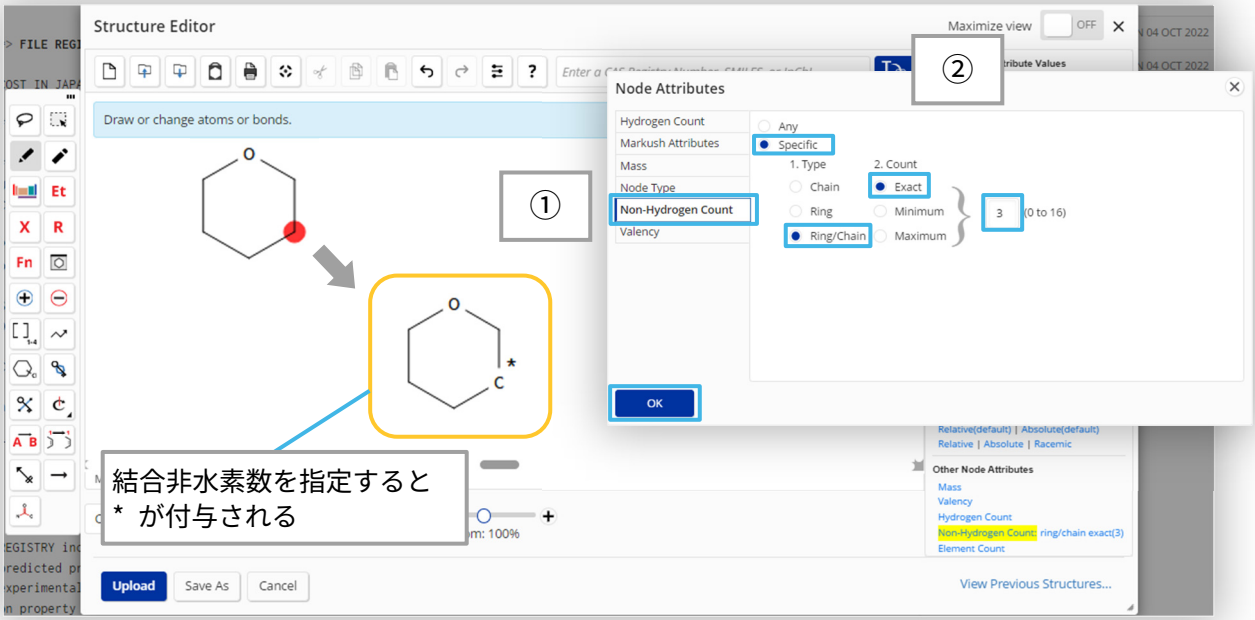
作図方法



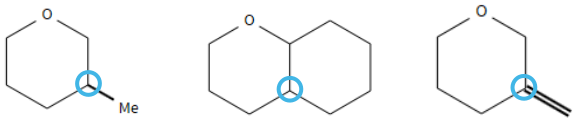
① 結合非水素数を指定したいノードにカーソルを合わせて右クリックし、「Node Attributes」ボックスから「Non-Hydrogen Count」を選択する。

②「Specific」を選択し、「Type：環/鎖、Count：ちょうど 3」を 指定し、「OK」をクリックする。

– 結合非水素数を指定すると * が付与される。

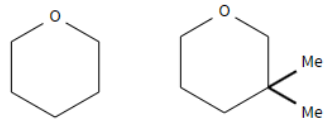


ヒットする構造



鎖：1 環：2 **環/鎖：3**	鎖：0 環：3 **環/鎖：3**	鎖：1* 環：2 **環/鎖：3***

ヒットしない構造



鎖：0 環：2 **環/鎖：2**	鎖：2 環：2 **環/鎖：4**

* 結合次数は問わないため、二重結合も単結合と同じように 1 とカウントする。

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

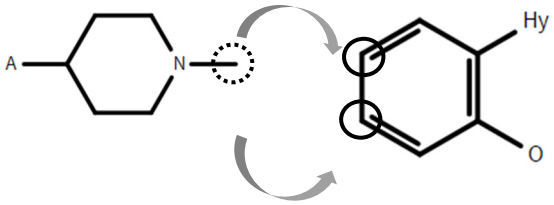
– Bond Type は問わず、置換の数だけ指定したいときは「環/鎖」で指定する。

まとめ

便利な作図機能を活用することで、一つの構造質問式でさまざまな誘導体を効率よく検索することができる。

練習問題

4. 点線枠で囲った炭素が、ベンゼン環の実線枠で囲った 2 箇所のいずれかの炭素に結合する構造を検索する。



(条件)

環はこれ以上縮合しない。
Hy はヘテロ環、A は水素以外の原子

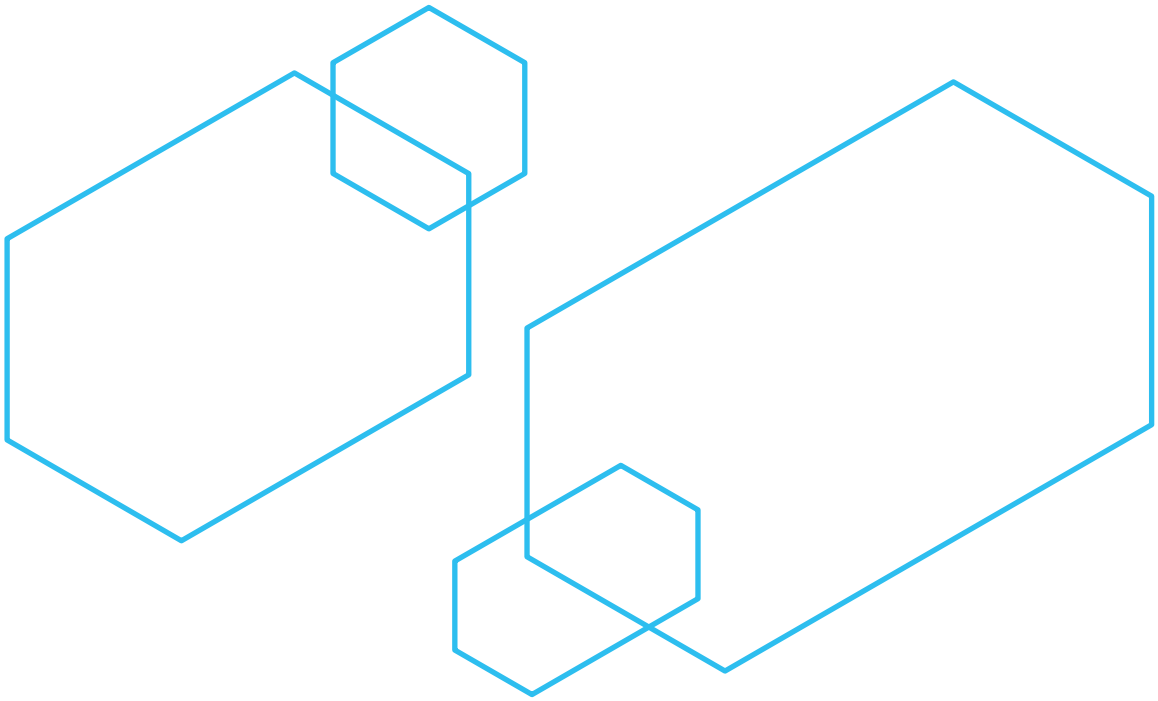
(ヒント)

- 可変置換位置を利用して 1 つの構造質問式を作図する。
- 環を縮合させないためには環の孤立化を行う。
- Hy，A は X メニュー (可変原子選択) から選択する

→ 回答は P.88

E クロスオーバー検索

REGISTRY ファイルの L 番号を用いたクロスオーバー検索をすると、その化学物質に関する様々な情報 (文献情報、特許情報、毒性・規制情報など) を入手することができます。REGISTRY ファイルと CAplus ファイルなどの文献データベースとの関係も正確に把握しておきましょう

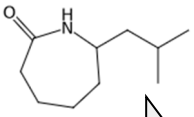


化学物質のクロスオーバー検索

REGISTRY ファイルと STN の他ファイルは CAS RN® をキーに関係付けされている。

REGISTRY ファイル

```
RN   145632-68-4 REGISTRY
ED   Entered STN:  02 Feb 1993
CN   2H-Azepin-2-one, hexahydro-7-(2-methylpropyl)-  (CA INDEX NAME)
       :
SR   CA
LC   STN Files:   CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, REAXYSFILE*, REAXYSFILESU*,
       TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
       (*File contains numerically searchable property data)
```



L 番号でクロスオーバー検索可能なファイル (LC フィールド)

```
**PROPERTY D     AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

          REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DA
          REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 T
```

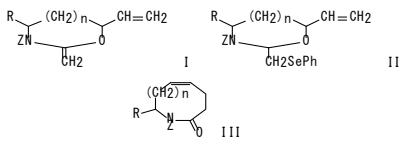
クロスオーバー検索

CA に索引された特定の化学物質は REGISTRY ファイルに収録される

REGISTRY ファイルの検索結果として得られた L 番号を CAplus ファイルで検索すると、その物質に関する文献を検索できる。

CAplus ファイル

```
AN   1993:101782  CAPLUS  Full-
DN   118:101782
OREF 118:17821a,17824a
ED   Entered STN:  19 Mar 199
TI   Synthesis of monocyclic me  um ring lactams
AU   Evans, P. Andrew; Holmes, Andrew B.; Russell, Keith
CS   Chem. Lab., Univ. Cambridge, Cambridge, CB2 1EW, UK
SO   Tetrahedron Letters (1992), 33(45), 6857-8
     CODEN: TELEAY; ISSN: 0040-4039
DT   Journal
LA   English
CC   27-21 (Heterocyclic Compounds (One Heter
OS   CASREACT 118:101782
GI
```



```
AB    The Claisen rearrangement of the vinyl substituted ketene
aminals I (n = 0, R = CH2CHMe2; n = 1, R = Me; n = 2, R = CO2CMe3)
which were generated in situ by selenoxide
        :
IT   Claisen rearrangement
       (of vinyl substituted ketene aminals)
IT   Lactams
        :
IT   16106-34-6P   145576-77-8P   145632-68-4P
     RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
       (prepn. of)
        :
```

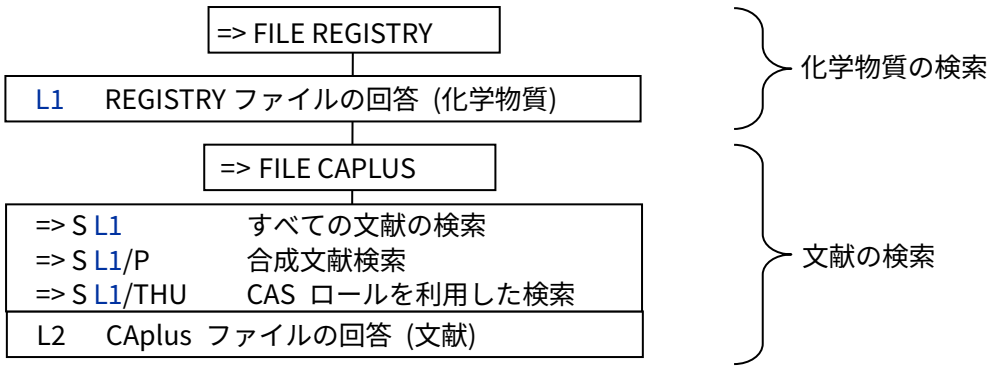
CAplus ファイル

化学および周辺分野の文献データベース

REGISTRY ファイルで検索した回答セットの L 番号を用いてクロスオーバー検索を行うと、その化学物質に関連する文献や物性などの様々な情報を簡単に入手することができる。

- 特に CAS FILES では、化学物質に関する情報を CAS RN® で索引しているため、L 番号のクロスオーバー検索をすると網羅性の高い検索ができる。

- REGISTRY ファイルから CAplus ファイルへのクロスオーバー検索の流れ



* CAS ロールを用いた検索は CAS ロールの付与年代に自動的に限定される (p.70-71 参照)
* CAplus/CA ファイルに文献がない場合については APPENDIX 参照。

- クロスオーバー制限値
  - 下記の 7 ファイルでは REGISTRY ファイルからのクロスオーバー制限値は 50 万件
    BIOSIS、CAplus/CA、EMBASE、MEDLINE、USPATFULL、USPAT2
  - それ以外の多くのファイルでは 30 万件

参考 : CAS ロール

CAS ロールは、文献中でのその化学物質の役割 (ロール) をコード化したもの。
CAplus ファイルで、特定の化学物質 (CAS RN®) や化合物クラス用語 (統制語) と共に
CAS ロールが索引されている。

- ロールの定義はユーザーマニュアル https://www.jaici.or.jp/stn-ip-protection-suite/cas-stnext/documents/ 掲載の「CAS ロール定義一覧」を参照。

コード	英語名	定義	備考*1
ANST*2	Analytical Study	分析に関する研究	
ANT	Analyte	分析対象	
AMX	Analytical Matrix	分析マトリックス	
ARG	Analytical Reagent Use	分析試薬用途	
ARU	Analytical Role, Unclassified	上記以外の分析に関する研究	
BIOL*2	Biological Study	生物学的研究	
ADV	Adverse Effect, Including Toxicology	副作用 (毒性を含む)	
AGR	Agricultural Use	農業関連用途	
BCP	Biochemical Process	生化学的プロセス	2002-
BMF	Bioindustrial Manufacture	生化学的工業生産	
BPN	Biosynthetic Preparation	生化学的合成	
COS	Cosmetic Use	化粧品用途	2002-
DGN	Diagnostic Use	診断用途	2002-

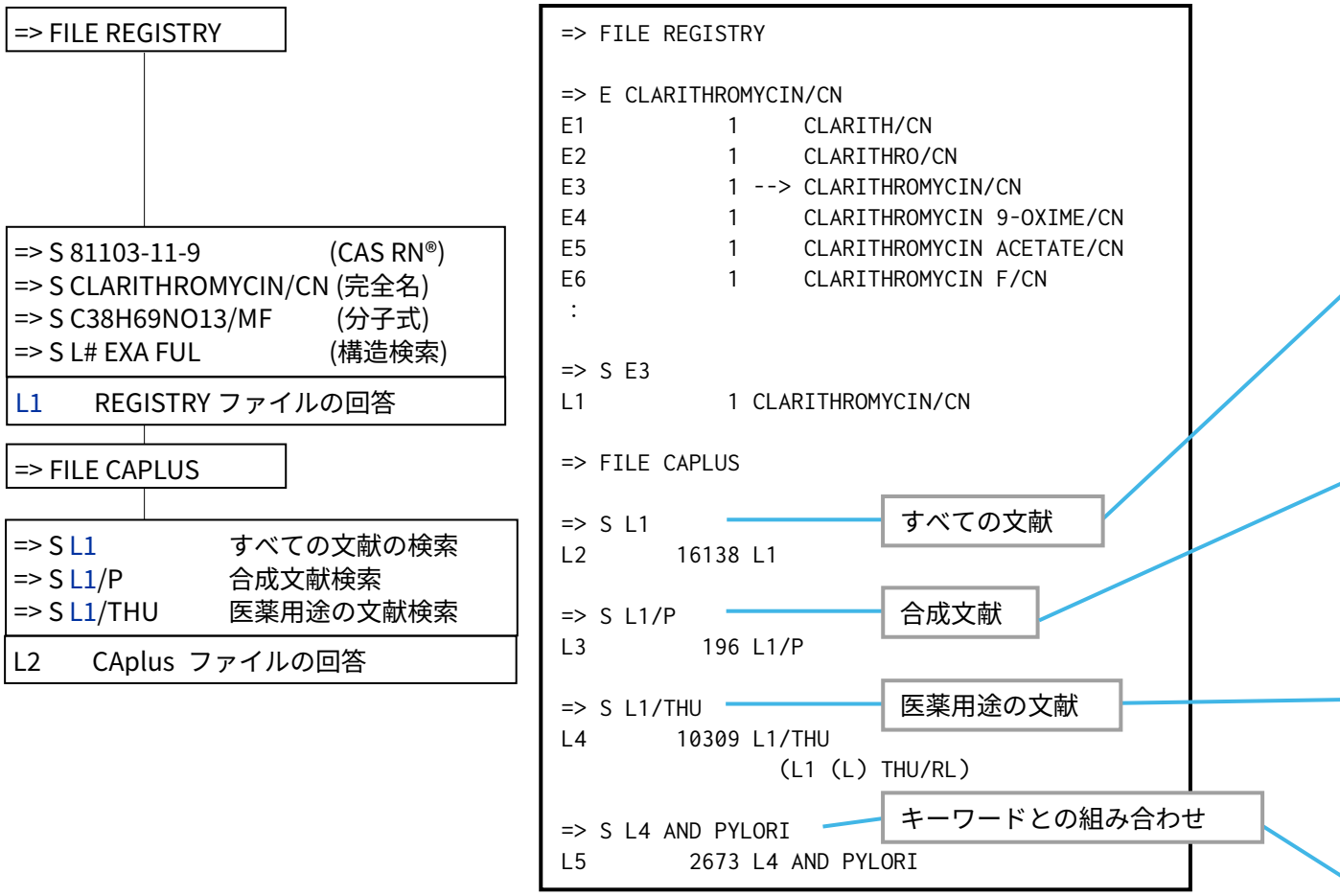
*1 表中の備考欄が空欄の CAS ロールの付与年代は、1967 年以降
*2 4 文字コード (青文字のコード) はスーパーロール

コード	英語名	定義	備考[*1]
FFD	Food or Feed Use	食品または飼料用途	
NPO	Natural Product Occurrence	天然物の起源・分布	2002-
PAC	Pharmacological Activity	薬理活性	2002-
PKT	Pharmacokinetics	薬物動態	2002-
THU	Therapeutic Use	医薬用途	
BUU	Biological Use, Unclassified	上記以外の生物関連用途	
BSU	Biological Study, Unclassified	上記以外の生物学的研究	
BAC	Biological Activity or Effector, Except Adverse	生理活性またはエフェクター（副作用を除く）	-2001
CMBI[*2]	Combinatorial Study	ｺﾝﾋﾞﾅﾄﾘｱﾙ･ｹﾐｽﾄﾘｰに関する研究	2002-
FORM[*2]	Formation, Nonpreparative	生成（意図的合成ではない）	
GFM	Geological or Astronomical Formation	地質学的、天文学的生成	
FMU	Formation, Unclassified	上記以外の生成	
NANO[*2]	Nanomaterial	ナノ材料	1992-
OCCU[*2]	Occurrence	起源・分布	
GOC	Geological or Astronomical Occurrence	地質学的、天文学的起源・分布	
NPO	Natural Product Occurrence	天然物の起源・分布	2002-
POL	Pollutant	汚染物質	
OCU	Occurrence, Unclassified	上記以外の起源・分布	
PREP[*2,3]	Preparation	製造	1907-
BMF	Bioindustrial Manufacture	生化学的工業生産	
BPN	Biosynthetic Preparation	生化学的合成	
BYP	Byproduct	副生成物	
IMF	Industrial Manufacture	化学的工業生産	
PUR	Purification or Recovery	精製	
SPN	Synthetic Preparation	化学合成	
PROC[*2]	Process	プロセス	
PEP	Physical, Engineering or Chemical Process	物理的、工学的または化学的ﾌﾟﾛｾｽ	
BCP	Biochemical Process	生化学的プロセス	2002-
GPR	Geological or Astronomical Process	地質学的、天文学的プロセス	
REM	Removal or Disposal	除去または処分	
PRPH[*2,4]	Prophetic	Prophetic 物質	1993-
RACT[*2]	Reactant or Reagent	反応物または試薬	
RCT	Reactant	反応物	
RGT	Reagent	試薬	2002-
USES[*2]	Uses	用途	
AGR	Agricultural Use	農業関連用途	
ARG	Analytical Reagent Use	分析試薬用途	
CAT	Catalyst Use	触媒用途	
COS	Cosmetic Use	化粧品用途	2002-
DGN	Diagnostic Use	診断用途	2002-
FFD	Food or Feed Use	食品または飼料用途	
MOA	Modifier or Additive Use	改良剤または添加物用途	
POF	Polymer in Formulation	ポリマー組成物	
TEM	Technical or Engineered Material Use	工学・工業材料用途	
THU	Therapeutic Use	医薬用途	
BUU	Biological Use, Unclassified	上記以外の生物学的用途	
NUU	Other Use, Unclassified	上記以外の用途	
PRP	Properties	物性	
MSC	Miscellaneous	その他	
SCLM	Substance Claimed	請求項に記載された物質	[*5]

*3　PREP のロールは CAS RN® 索引に付加されている接尾辞 P と対応
*4　Prophetic 物質の詳細は p.3 参照
*5 詳細は https://www.jaici.or.jp/news/products/2024/2024-10-28/ に記載

検索例

検索例 ： クラリスロマイシン（Clarithromycin：分子式 $C_{38}H_{69}NO_{13}$）の文献を検索する



CAplus ファイル（文献・特許）の主な定型表示形式

		表示形式	内容
書誌情報	非特許文献	BIB[1] (デフォルト)	書誌情報
	特許	FBIB[1]	書誌情報 (BIB)、関連特許ファミリー情報
		STD[1]	書誌情報 (BIB)、すべての特許分類
抄録		ABS	抄録、グラフィック情報 (抄録を説明するための図)
索引		IND	索引情報 ベーシック特許の特許分類、CC、ST、IT、RL
全情報		ALL[1]	レコードの全情報 (STD，ABS，IND，引用・被引用情報)
		MAX[1]	ALL、関連特許ファミリー情報
回答確認用		SCAN	TI，IND (回答番号の指定はできない)
ヒットターム		HIT	ヒットタームを含むフィールド
		HITIND	ヒットタームを含む ST・IT・RL、ベーシック特許の IPC・NCL、CC
		HITPPAK[2]	ヒットした CAS RN® の PPAK (索引物質の記載ページ)
		HITRN	ヒットした CAS RN®、その CAS ロールとテキスト説明句
		HITSTR	ヒットした CAS RN®、その CAS ロールとテキスト説明句、 CA 索引名および構造図

1） CAS PatentPak 契約者は、さらに CAS PatentPak 関連フィールドが表示される
2） CAS PatentPak 契約者のみ表示可能

```
=> D L2 SCAN TI HITRN

L2    16138 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
TI   Lipopolysaccharide O-antigen profiles of Helicobacter pylori strains from
     Southwest China
IT   81103-11-9
     RL: PAC (Pharmacological activity); BIOL (Biological study)
        (lipopolysaccharide o-antigen profiles of helicobacter pylori strains
        from southwest china)

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

=> D L3 SCAN TI HITRN

L3    196 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
TI   Preparation of a non-pharmaceutical grade clarithromycin
IT   81103-11-9P, Clarithromycin
     RL: PEP (Physical, engineering or chemical process); PRP (Properties); SPN
     (Synthetic preparation); PREP (Preparation); PROC (Process)
        (prepn. of a non-pharmaceutical grade clarithromycin)

HOW MANY MORE ANSWERS

=> D L4 SCAN TI HITRN

L4    10309 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
TI   Salts of cycloserine compounds and applications thereof
IT   81103-11-9, Clarithromycin
     RL: SCLM (Substance claimed); THU (Therapeutic use); BIOL
     (Biological study); USES (Uses)
        (salts of cycloserine compds. and applications thereof)

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

=> D L5 SCAN TI HITRN

L5    2673 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
TI   Analysis of Helicobacter pylori resistance in patients with different
     gastric diseases
IT   81103-11-9
     RL: PAC (Pharmacological activity); THU (Therapeutic use); BIOL
     (Biological study); USES (Uses)
        (anal. of helicobacter pylori resistance in patients with
        different gastric diseases)

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

L5    2673 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
TI   Comparison of tailored Helicobacter pylori eradication versus modified
     bismuth quadruple therapy in Korea: a randomized controlled trial

IT   81103-11-9
     RL: PAC (Pharmacological activity); THU (Therapeutic use); BIOL
     (Biological study); USES (Uses)
        (comparison of tailored Helicobacter pylori eradication vs.
        modified bismuth quadruple therapy in Korea)

HOW MANY MORE ANSWERS DO Y
```

CAS RN® に P が付いている (合成文献)

CAS ロール

キーワード

(L)

CAS RN® とキーワードを同一索引中に
限定したい場合は (L) 演算子を利用する

検索例 ： P.47 でフルファイル検索の結果として得られた L3 の合成文献を検索する

```
=> FILE REGISTRY
        :

=> S L1 FUL
L3          7512 SEA SSS FUL L1

=> FILE CAPLUS

=> S L3/P
L4         1007 L3/P

=> D 1-50 BIB ABS HITSTR HITPPAK    * HITPPAK 表示形式は CAS PatentPak 契約者のみ表示可能
        :
L4   ANSWER 20 OF 1007  CAPLUS  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive
AN   2024:2624799  CAPLUS Full-text
DN   189:65968
TI   4,5,6,7-Tetrahydro-1H-imidazo[4,5-c]pyridine-1,3-benzothiazole compounds
     as ATG9A modulators and their preparation, pharmaceutical compositions and
     use in the treatment of neurological diseases
IN   Ebrahimi-Fakhari, Darius; Sahin, Must
PA   The Children's Medical Center Corpora
UO   UMASS MEMORIAL HEALTH CARE INC
UOS  UMass Memorial Health Care
SO   PCT Int. Appl., 213pp.
     CODEN: PIXXD2
DT   Patent
LA   English
FAN.CNT 1
PPPI
     PATENT NO.          KIND  DATE      LANGUAGE   PatentPak
     ---------------     ----  --------  ---------- ------------------------
     WO 2024243015        A2   20241128  English    PDF | PDF+ | Interactive
PI
     PATENT NO.          KIND  DATE        APPLICATION NO.          DATE
     ---------------     ----  --------    ---------------------    --------
     WO 2024243015        A2   20241128    WO 2024-US29856          20240517
PRAI US 2023-63503262     P    20230519
PSPI
     PATENT NO.          KIND  STATUS          STATUS DATE
     ---------------     ----  -------------   -----------
     WO 2024243015        A2   Alive           20241205
OS   CASREACT 189:65968
AB   Provided herein are 4,5,6,7-tetrahydro-1H-imidazo[4,5-c]pyridine-1,3-
     benzothiazole compds. that modulate Autophagy Related 9 A (ATG9A)
     trafficking and/or increase autophagic flux.  Also provided are
     pharmaceutical compns. comprising the compds., and methods of treating
     neurol. disease or disorder, such as hereditary spastic paraplegia (HSP).
     The invention compds. were prepd. by given steps.  All the invention
     compds. were evaluated for their ATG9A modulating activity.
```

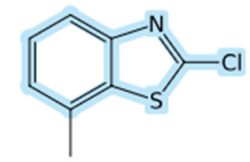
C 章参照

REGISTRY ファイルで得られた L 番号に/P を付けると合成文献検索ができる

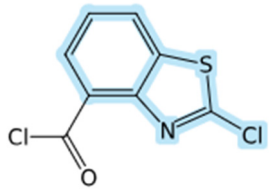
CAS PatentPak 契約者は、
BIB 表示形式に物質情報付き明細書や明細書 PDF のリンクが含まれる

IT **2942-24-7P** **37525-58-9P** **1175277-80-1P**
1208225-86-8P
RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)
(prepn. of tetrahydroimidazo[4,5-c]pyridine-1,3-benzothiazole compds. as ATG9A modulators and their prepn., pharmaceutical compns. and use in the treatment of neurol. diseases)

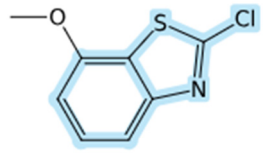
RN 2942-24-7 CAPLUS
CN Benzothiazole, 2-chloro-7-methyl- (CA INDEX NAME)



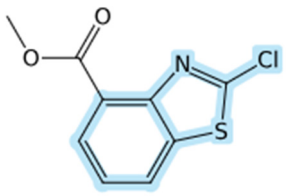
RN 37525-58-9 CAPLUS
CN 4-Benzothiazolecarbonyl chloride, 2-chloro- (CA INDEX NAME)



RN 1175277-80-1 CAPLUS
CN Benzothiazole, 2-chloro-7-methoxy- (CA INDEX NAME)



RN 1208225-86-8 CAPLUS
CN 4-Benzothiazolecarboxylic acid, 2-chloro-, methyl ester (CA INDEX NAME)



HITSTR 表示形式で表示すると、
ヒットした物質の CA 索引名と構造を確認できる

PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive

PPAK
2942-24-7P, Pg 86
37525-58-9P, Pg 88
1175277-80-1P, Pg 84
1208225-86-8P, Pg 88

CAS PatentPak 契約者は、HITPPAK 表示形式で表示すると、ヒットした物質の明細書中での記載ページが確認できる

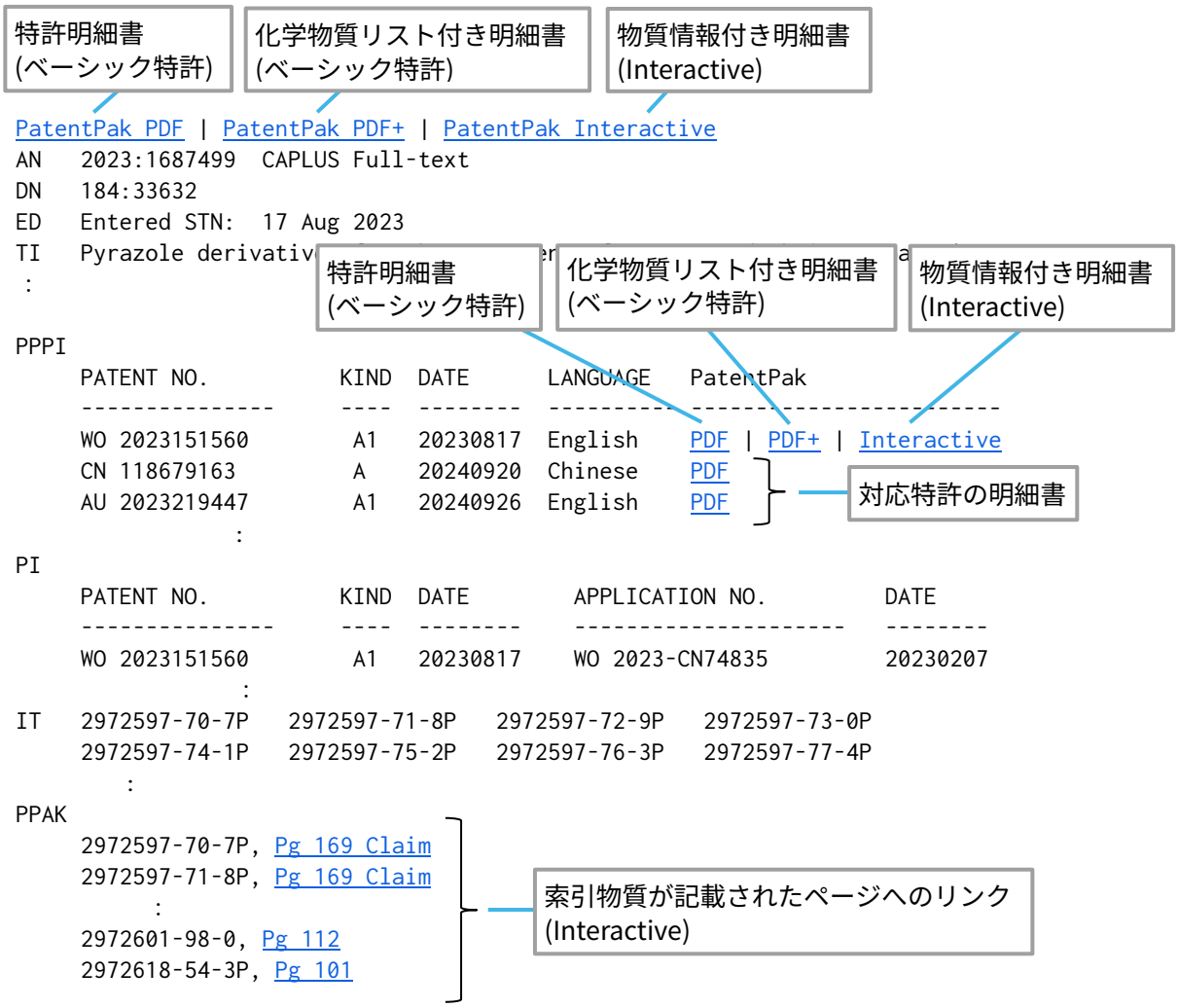
参考 ： 特許調査を効率化する CAS PatentPak®

CAS PatentPak は、特許調査を効率化するオプション機能である。CAplus ファイルのレコードに索引された重要な物質が、明細書のどこに記載されているのかすぐに確認できる。

- CAS PatentPak 契約者が、以下の定型表示形式を使うと、通常の表示に加え、 CAS PatentPak 関連フィールドが表示される。

内容	表示形式	内容
書誌情報	BIB (デフォルト)	書誌情報 レコード番号の上に CAS PatentPak 関連リンク、PPPI
	STD	書誌情報、すべての特許分類 レコード番号の上に CAS PatentPak 関連リンク、PPPI、PPAK
全情報	ALL	レコードの全情報 レコード番号の上に CAS PatentPak 関連リンク、PPPI、PPAK
	MAX	ALL、関連特許ファミリー情報 レコード番号の上に CAS PatentPak 関連リンク、PPPI、PPAK
ヒットターム	HITPPAK	ヒットした CAS RN® の PPAK

- レコード例 (ALL 表示形式)

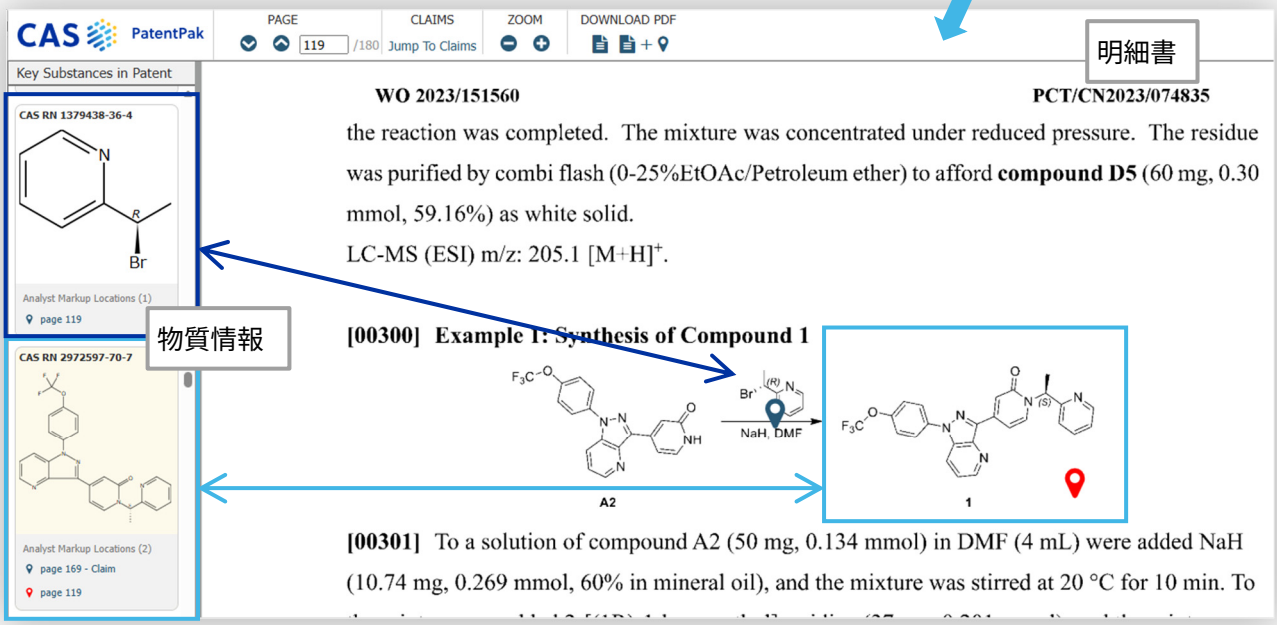


物質情報付き明細書（Interactive）

- レコード上の PatentPak Interactive リンクまたは PPPI フィールド中の Interactive リンクをクリックすると，特許中の索引物質のリストと特許明細書が同一画面で表示される Interactive Viewer が開く。

PPPI

PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
WO 2023151560	A1	20230817	English	PDF | PDF+ | Interactive

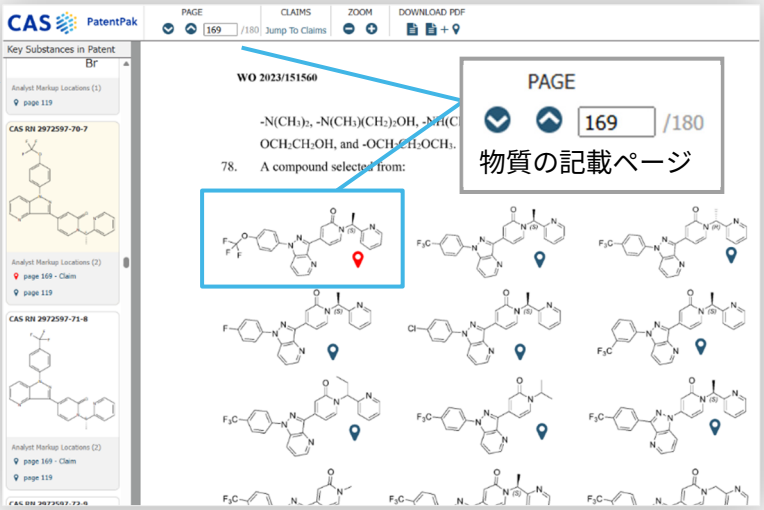


明細書中のマークをクリックすると、該当する化学物質が左側の物質情報に表示される。
明細書に構造情報がない場合でも、左側の物質情報で構造を確認しながら明細書を読むことができる

- PPAK フィールド中の記載ページのリンクをクリックすると，明細書の索引化合物記載ページをダイレクトに確認できる。

PPAK

2972597-70-7P, Pg 169 Claim
2972597-71-8P, Pg 169 Claim
2972597-72-9P, Pg 169 Claim
2972597-73-0P, Pg 169 Claim
:
2972601-98-0, Pg 112
2972618-54-3P, Pg 101



参考 ：CAplus/CA ファイルから REGISTRY ファイルへのクロスオーバー

CAplus ファイルでは、特定の化学物質は CAS RN® で索引されている。
索引物質の名称や構造を知りたい場合は REGISTRY ファイルで検索する。

- 確認したい物質 (CAS RN®) が少ない場合は REGISTRY ファイルで直接 1 件ずつ検索してもよいが、件数が多い場合は SELECT コマンドまたは TRANSFER コマンドを利用するとよい。

- SELECT コマンドを利用すると、CAplus ファイルで索引されている全物質 (CAS RN®) を抽出し、REGISTRY ファイルでまとめて検索できる。(SELECT コマンドは最大 999 物質を抽出可能)

```
=> FILE CAPLUS
 :
L1            1 US12168662/PN

=> D ALL

L1    ANSWER 1 OF 1  CAPLUS  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive
AN    2024:2762870  CAPLUS Full-text
DN    189:84835
ED    Entered STN:  18 Dec 2024
TI    Pyrido[4',3':4,5]pyrrolo[2,3-c][2,7]naphthyridines compounds as CK2
      inhibitors and their preparation
IN    Tratrat, Christophe; Haroun, Michelyne
PA    King Faisal University, Saudi Arabia
UO    KING FAISAL UNIVERSITY
UOS   King Faisal University
SO    U.S., 15pp.
      CODEN: USXXAM
DT    Patent
       :
IT    366806-33-9, CK2
      RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)
         (prepn. of pyrido[4',3':4,5]pyrrolo[2,3-c][2,7]naphthyridines compds.
         as CK2 inhibitors)
IT    3037757-40-4P   3065837-28-4P   3065837-30-8P   3065837-32-0P
      3065837-34-2P   3065837-36-4P   3065837-38-6P   3065837-39-7P
      3065837-42-2P   3065837-45-5P   3065837-47-7P   3065837-49-9P
      3065837-51-3P   3065837-53-5P   3065837-55-7P   3065837-57-9P
      RL: PAC (Pharmacological activity); SCLM (Substance claimed); SPN
      (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study);
      PREP (Preparation); USES (Uses)
         (prepn. of pyrido[4',3':4,5]pyrrolo[2,3-c][2,7]naphthyridines compds.
         as CK2 inhibitors)
IT    98-16-8, 3-Trifluoromethylaniline   102-28-3, N-(3-Aminophenyl)acetamide
      104-94-9, 4-Methoxyaniline   106-47-8, 4-Chloroaniline, reactions
      106-49-0, 4-Toluidine, reactions   108-00-9,
      N1,N1-Dimethylethane-1,2-diamine   108-42-9, 3-Chloroaniline   108-44-1,
      m-Toluidine, reactions   536-90-3, 3-Methoxyaniline   934-98-5,
      2-(4-Methylpiperazin-1-yl)ethan-1-amine   2836-04-6,
      3-Dimethylaminoaniline   4152-90-3, 3-Chlorobenzylamine   5369-16-4,
      3-Isopropylaniline   6274-18-6, 3-Amino-N,N-dimethylbenzenesulfona-mide
      18437-58-6, 2-Methylpyridin-4-amine   33322-60-0,
       :
```

CAplus/CA ファイルでは化学物質が CAS RN® で索引されている。
化学物質の構造や名前は表示されない

REGISTRY ファイルで確認する

```
=> SEL L1 1 RN
E1 THROUGH E37 ASSIGNED
```

L1 の回答から CAS RN® を抽出する

抽出したタームには E 番号が付与される

抽出したタームを表示して確認する

```
=> D SEL
E1            1     1000550-30-0/BI
E2            1     102-28-3/BI
E3            1     104-94-9/BI
 :
E37           1     98-16-8/BI
```

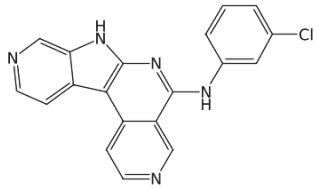
```
=> FILE REGISTRY

=> S E1-37
L2          37 (1000550-30-0/BI OR 102-28-3/BI OR 104-94-9/BI OR 106-47-8/BI...
```

REGISTRY ファイルに入り、E 番号を検索する

```
=> D SCAN

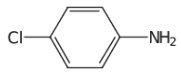
L2    37 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    7H-Pyrido[4',3':4,5]pyrrolo[2,3-c][2,7]naphthyridin-5-amine,
      N-(3-chlorophenyl)-
MF    C19 H12 Cl N5
```



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

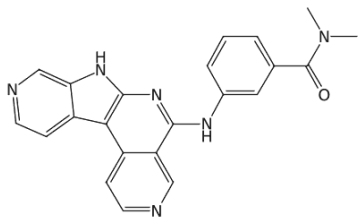
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):36

L2    37 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    Benzenamine, 4-chloro-
MF    C6 H6 Cl N
CI    COM
```



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

L2    37 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    Benzamide, N,N-dimethyl-3-(7H-pyrido[4',3':4,5]pyrrolo[2,3-
      c][2,7]naphthyridin-5-ylamino)-
MF    C22 H18 N6 O
```



CAplus ファイルのレコード中に索引されていた物質

まとめ

- 化学物質に関する文献を検索する場合は、REGISTRY ファイルの検索結果として得られた L 番号を用いて、CAplus ファイルで検索する (クロスオーバー検索)。
  - 接尾辞や CAS ロールを利用すると、物質の文献中での役割を限定した検索を簡単に行うことができる。
  - CAplus ファイルで CAS RN® と CAS ロールおよびキーワードを掛け合わせるときは、(L) 演算子を用いる。

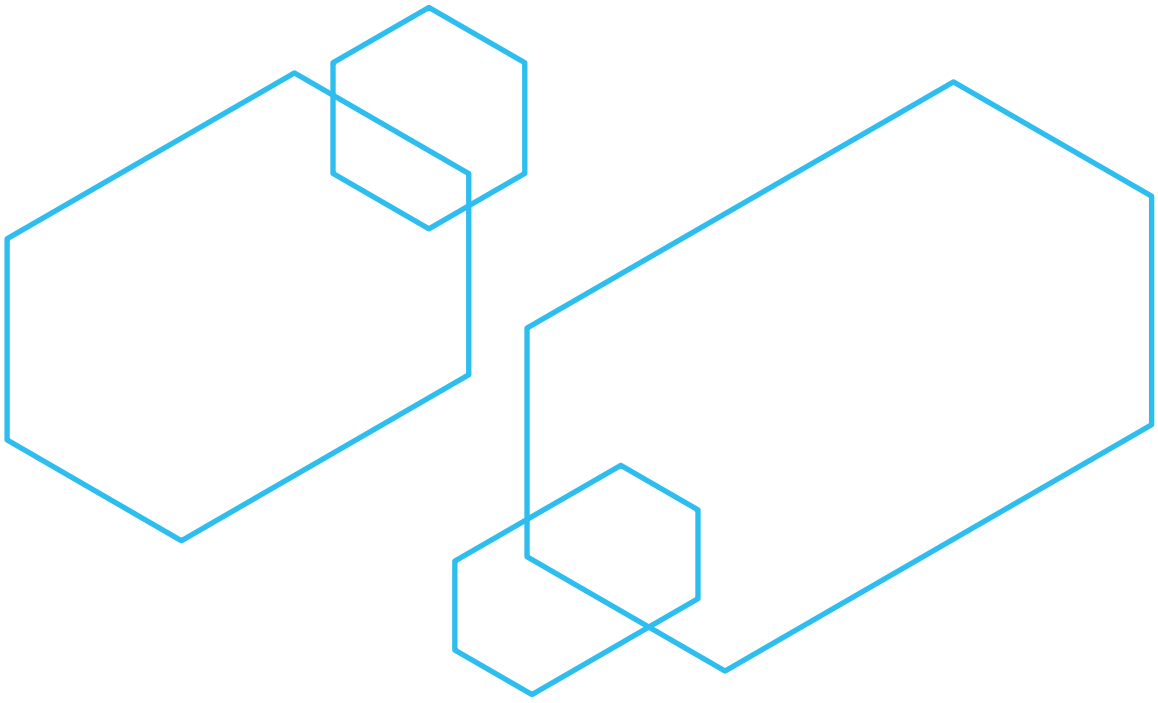
練習問題

5. 練習問題 4 で得た物質について CAplus ファイルで特許情報を得る。回答は、ALL HITSTR HITPPAK 表示形式で出力する。

(ヒント) 化学物質に関する文献を検索するには、REGISTRY ファイルの L 番号を CAplus ファイルで検索する。

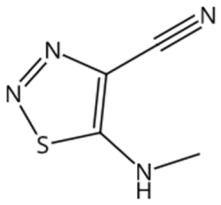
回答は p.90

練習問題



練習問題

練習問題 1 ：右図の物質を分子式や部分名を使って検索する。
回答は FIDE 表示形式で表示する。

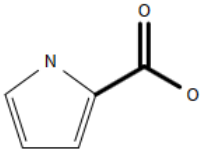


(ヒント)
- 分子式は Hill 方式に従って入力し /MF で検索する。
- 分子式の検索結果の回答が多い場合は部分名で限定する。
  - 化学物質の部分名は基本索引で検索する。
  - 部分名の例 : THIADIAZOLE，METHYLAMIN，CARBONITRILE，NITRILE，AMIN 等

練習問題 2 ：メタクリル酸エチル (CAS RN® 97-63-2) を含む 2 種類のモノマーからなるポリマーを検索する。

(ヒント)
- メタクリル酸エチルの CAS RN® を /CRN で検索する。
- クラス識別子 (/CI)、成分クラス識別子 (/CCI) を利用してポリマーに限定する。
- 成分数 (/NC) で限定する。

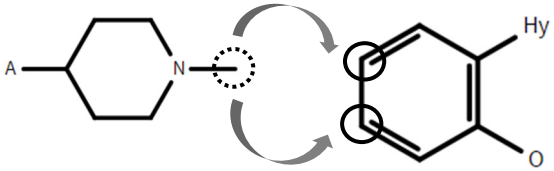
練習問題 3 ：下図の部分構造を含む物質を検索する。



（条件） 作図した以外の環が縮合しても、しなくてもよい。

(ヒント) 置換基や縮環を許容する場合は、特別な指定はせずに部分構造検索を実行する。

練習問題 4 ：点線枠で囲った炭素が、ベンゼン環の実線枠で囲った 2 箇所のいずれかの炭素に結合する構造を検索する。



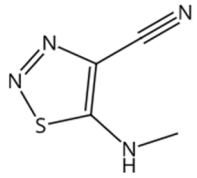
（条件）
環はこれ以上縮合しない.
Hy はヘテロ環，A は水素以外の原子

(ヒント)
- 可変置換位置を利用して 1 つの構造質問式を作図する。
- 環を縮合させないためには環の孤立化を行う。
- Hy，A は X メニュー (可変原子選択) から選択する

練習問題 5 ：練習問題 4 で得た物質について CAplus ファイルで特許情報を得る。
回答は、ALL HITSTR HITPPAK 表示形式で出力する。

(ヒント) 化学物質に関する文献を検索するには、REGISTRY ファイルの L 番号を CAplus ファイルで検索する。

練習問題 1 ： 下図の物質の辞書検索



分子式の記述は Hill 方式に従う
- 炭素を含む物質は炭素、水素、その他の元素のアルファベット順 ： $C_4H_4N_4S$

```
=> FILE REGISTRY                          ← REGISTRY ファイルに入る

=> E C4H4N4S/MF                           ← 完全分子式 (/MF) で EXPAND する

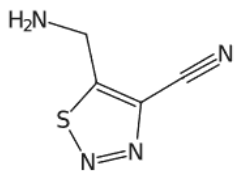
E1            1      C4H4N4PDS4ZN/MF
E2            1      C4H4N4PTS4/MF
E3          127 --> C4H4N4S/MF
E4            2      C4H4N4S.C2HF3O2/MF
E5            1      C4H4N4S.CH3CLO4/MF
:

=> S E3                                   ← E 番号を用いて検索する
L1          127 C4H4N4S/MF

=> S L1 AND THIADIAZOLE?                  ← 部分名で限定する
        454659 THIADIAZOLE?
L2          17 L1 AND THIADIAZOLE?

=> D SCAN                                 ← SCAN 表示形式で表示する

L2   17 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   1,2,3-Thiadiazole-4-carbonitrile, 5-(aminomethyl)-
MF   C4 H4 N4 S
```

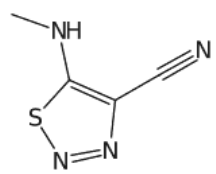


```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):16 ← 残りの 16 件も表示する
 :

L2   17 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   1,2,3-Thiadiazole-4-carbonitrile, 5-(methylamino)-
MF   C4 H4 N4 S
```

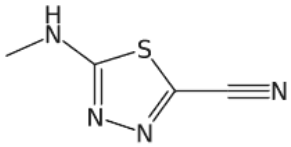
SCAN 表示形式に含まれていた名称をコピー



目的物質

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

```
L2    17 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN    1,3,4-Thiadiazole-2-carbonitrile, 5-(methylamino)-
MF    C4 H4 N4 S
```



```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
 :

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> E 1,2,3-Thiadiazole-4-carbonitrile, 5-(methylamino)-/CN
```

コピーした名称をペーストし、完全名 (/CN) で EXPAND する

```
E1            1     1,2,3-THIADIAZOLE-4-CARBONITRILE, 5-(MERCAPTOMETHYL)-/CN
E2            1     1,2,3-THIADIAZOLE-4-CARBONITRILE, 5-(METHOXYMETHYL)-/CN
E3            1 --> 1,2,3-THIADIAZOLE-4-CARBONITRILE, 5-(METHYLAMINO)-/CN
E4            1     1,2,3-THIADIAZOLE-4-CARBONITRILE, 5-(METHYLTHIO)-/CN
E5            1     1,2,3-THIADIAZOLE-4-CARBONITRILE, 5-(PHENOXYMETHYL)-/CN
 :

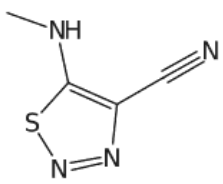
=> S E3
L3            1 "1,2,3-THIADIAZOLE-4-CARBONITRILE, 5-(METHYLAMINO)-"/CN

=> D FIDE                ← FIDE 表示形式で表示する

L3    ANSWER 1 OF 1  REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
RN    117971-49-0  REGISTRY
ED    Entered STN:  16 Dec 1988
CN    1,2,3-Thiadiazole-4-carbonitrile, 5-(methylamino)-  (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN    5-(Methylamino)-1,2,3-thiadiazole-4-carbonitrile
MF    C4 H4 N4 S
SR    CA
LC    STN Files:   CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, REAXYSFILE*, REAXYSFILESU*
          (*File contains numerically searchable property data)
DT.CA  CAplus document type:  Journal
RL.NP  Roles from non-patents:  PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)

Ring System Data

Elemental|Elemental| Size of |Ring System|   Ring    |   RID
Analysis |Sequence |the Rings|  Formula  |Identifier|Occurrence
   EA    |   ES    |   SZ    |    RF     |   RID    |  Count
=========+=========+=========+===========+==========+==========
C2N2S    |N2SC2    |5        |C2N2S      |16.308.6  |1
```



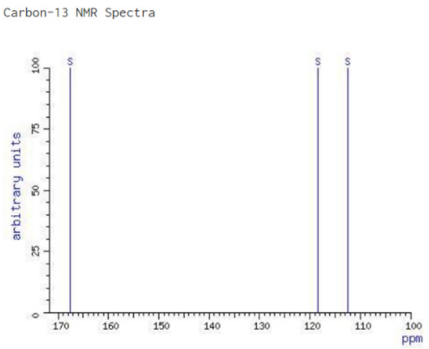
Experimental Properties (EPROP)　　← 実測物性値

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(1) WSR
Mass Spectra	Spectrum		(2) WSS
Melting Point (MP)	138 deg C		
Melting Point (MP)	138 deg C	Solv: e	
		(64-17-	
		water	
		(7732-1	

Spectra may be displayed by clicking th
bulk using the SPEC or MAX formats.

(1)　Wolfgang Robien / University of
from Wiley Subscription Service
(2)　Spectral data were obtained fro
(3)　Bakulev, V. A.; Tetrahedron 198
(4)　Dankova, E. F.; Izvestiya Akade
1988(5) P1126-8 CAPLUS

Spectrum リンクをクリックするとスペクトルデータが表示される
- スペクトルデータは SPEC または MAX 表示形式でも表示可能



Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
IR Absorption Spectra	(1) IC
Mass Spectra	(1) IC
NMR Spectra	(1) IC
Proton NMR Spectra	(1) IC

(1)　Dankova, E. F.; Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Khimicheskaya
1988(5) P1126-8 CAPLUS

Predicted Properties (PPROP)　　← 予想物性値

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	2.60	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	2.60	pH 2 25 deg C	(1)
:			
Density (DEN)	1.40+/-0.1 g/cm**3	20 deg C	(1)
		760 Torr	
:			
logP (LOGP)	0.849+/-0.762	25 deg C	(1)
Mass Intrinsic Solubility (ISLB.MASS)	9.4 g/L	25 deg C	(1)
:			
pKa (PKA)	-3.18+/-0.42	Most Basic	(1)
		25 deg C	
Polar Surface Area (PSA)	89.84 A**2		(1)
Vapor Pressure (VP)	7.14E-05 Torr	25 deg C	(1)

(1)　Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02
((C) 1994-2025 ACD/Labs)

See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.
3 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
3 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

練習問題 2 ： メタクリル酸エチルを含む 2 成分ポリマーの検索

```
=> FILE REGISTRY

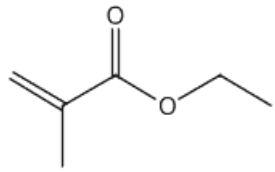
=> S 97-63-2/CRN AND PMS/CI,CCI
L1       10024 97-63-2/CRN AND PMS/CI,CCI

=> S L1 AND 2/NC                    ← 2 成分に限定する
L2         958 L1 AND 2/NC

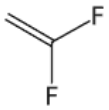
=> D SCAN                           ← SCAN 表示形式で表示する

L2   958 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   2-Propenoic acid, 2-methyl-, ethyl ester, polymer with 1,1-difluoroethene, diblock
MF   (C6 H10 O2 . C2 H2 F2)x
CI   PMS
```

メタクリル酸エチルの CAS RN® を /CRN で検索し、クラス識別子と成分クラス識別子を用いてポリマーに限定する



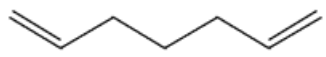

```
     CM   2
```



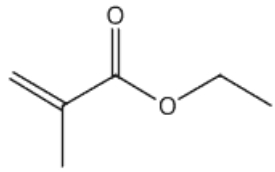

```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L2   958 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   2-Propenoic acid, 2-methyl-, ethyl ester, polymer with 1,6-heptadiene
MF   (C7 H12 . C6 H10 O2)x
CI   PMS

     CM   1
```



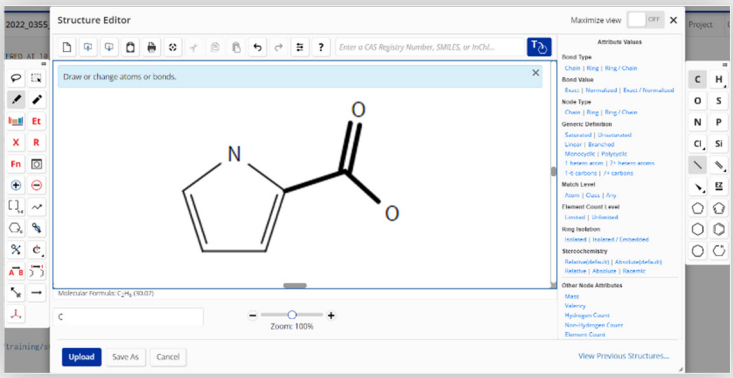
```
     CM   2
```



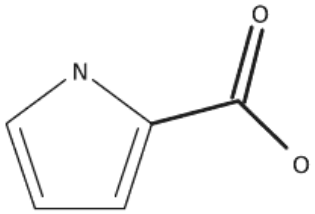

```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END
```

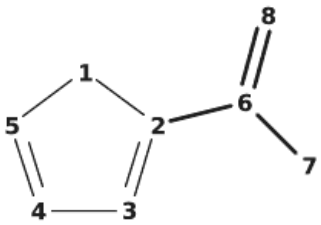
練習問題 3 ： 部分構造検索

```
=> FILE REGISTRY
```




```
=>
Uploading structure file: 2025_0218_Structure                ← 構造質問式をアップロード
```






```
Node Attributes
Ring Nodes : 1  2  3  4  5
Chain Nodes : 6  7  8
Bond Attributes
Ring Bonds : 1-2  2-3  3-4  4-5  5-1
Chain Bonds : 2-6  6-7  6-8
Exact Bonds : 2-6
Exact/Normalized Bonds : 1-2  2-3  3-4  4-5  5-1  6-7  6-8
Markush Attributes
Match Level (ATOM) : 1  2  3  4  5
Match Level (CLASS) : 6  7  8
Element Count Level (LIMITED) : 1  2  3  4  5  6  7  8

L1       STRUCTURE UPLOADED

=> S L1                              ← 部分構造検索 (SSS) のサンプル検索を実行

SAMPLE SEARCH INITIATED 13:57:46
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -   181966 TO ITERATE

100.0% PROCESSED     181966 ITERATIONS                          50 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE   **COMPLETE**
                        BATCH    **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:       3613884 TO  3664756
PROJECTED ANSWERS:           315301 TO   330539

L2           50 SEA SSS SAM L1
```

サンプル検索を実行し、
「ONLINE **COMPLETE**」
であることを確認する

```
=> S L1 FUL                          ← フルファイル検索を実行

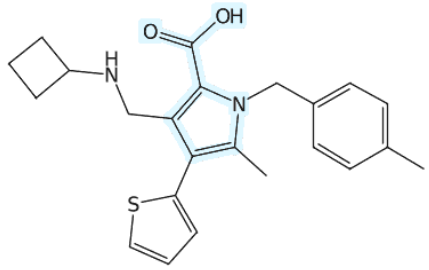
FULL SEARCH INITIATED 13:57:49
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -  3636525 TO ITERATE

100.0% PROCESSED    3636525 ITERATIONS                          321497 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

L3       321497 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN

L3   321497 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   1H-Pyrrole-2-carboxylic acid, 3-[(cyclobutylamino)methyl]-5-methyl-1-[(4-
     methylphenyl)methyl]-4-(2-thienyl)-
MF   C23 H26 N2 O2 S
```

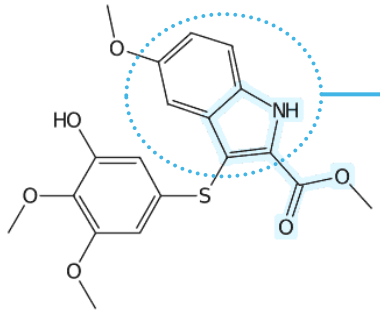


作図した構造にあらゆる置換基を
許容した物質がヒット

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

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

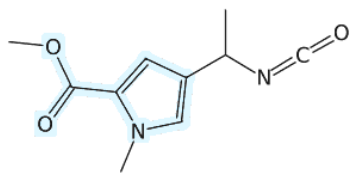
L3   321497 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   1H-Indole-2-carboxylic acid, 3-[(3-hydroxy-4,5-dimethoxyphenyl)thio]-5-
     methoxy-, methyl ester
MF   C19 H19 N O6 S
```



環の孤立化を指定していないため
縮環した物質も得られる

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

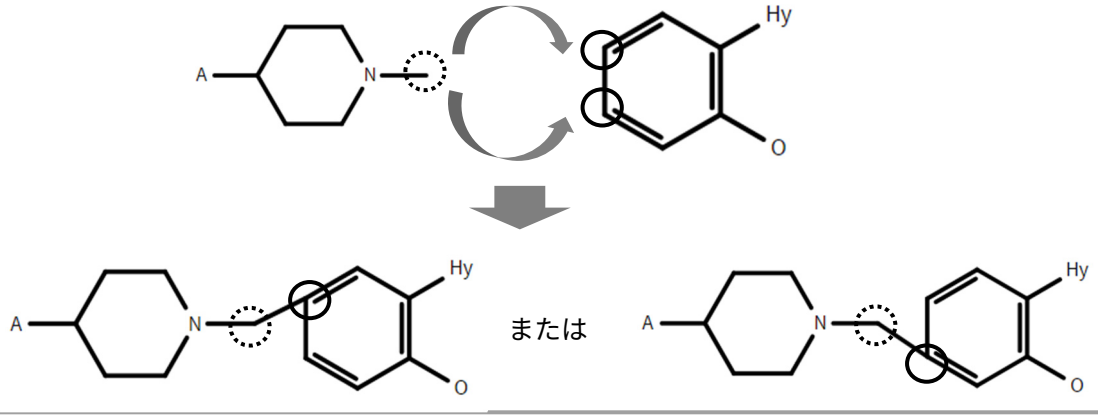
L3   321497 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   1H-Pyrrole-2-carboxylic acid, 4-(1-isocyanatoethyl)-1-methyl-, methyl ester
MF   C10 H12 N2 O3
```



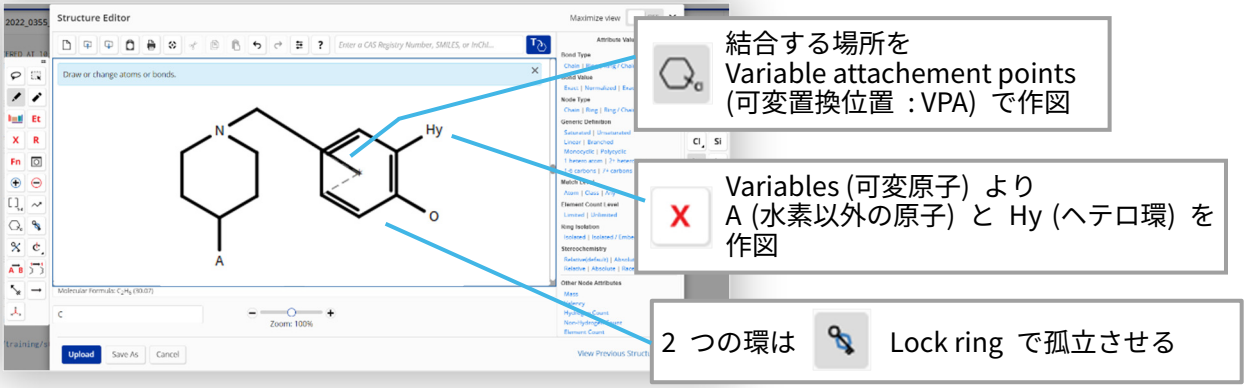

```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END
```

練習問題 4 ： 可変置換位置を用いた構造質問式の検索

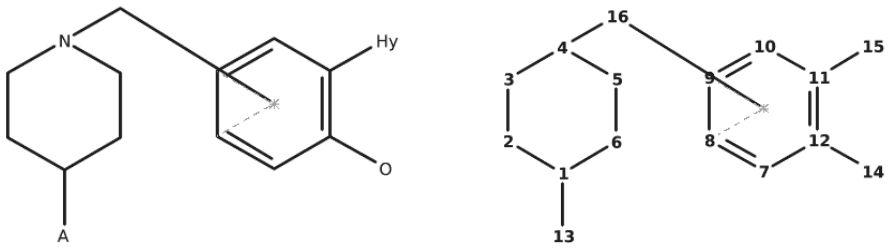
点線枠で囲った炭素が、ベンゼン環の実線枠で囲った 2 箇所のいずれかの炭素に結合する構造




```
=> FILE REGISTRY
```




```
>
Uploading structure file: 2025_0219_Structure      ← 構造質問式をアップロード
```




```
Node Attributes
Ring Nodes : 1  2  3  4  5  6  7  8  9  10  11  12
Isolated Ring Nodes : 1  2  3  4  5  6  7  8  9  10  11  12        ← 環の孤立
Chain Bonds : 1-13  4-16  11-15  12-14  16-17
Normalized Bonds : 7-8  8-9  9-10  10-11  11-12  12-7
Exact/Normalized Bonds : 1-2  1-13  2-3  3-4  4-5  4-16  5-6  6-1  11-15  12-14  16-17
Markush Attributes
Match Level (ATOM) : 1  2  3  4  5  6  7  8  9  10  11  12  15
Match Level (CLASS) : 13  14  16
Element Count Level (LIMITED) : 1  2  3  4  5  6  7  8  9  10  11  12  13  14  15  16
   :
L1      STRUCTURE UPLOADED
```

```
=> S L1                              ← 部分構造検索 (SSS) のサンプル検索を実行する

SAMPLE SEARCH INITIATED 10:19:59
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -   390970 TO ITERATE

100.0% PROCESSED     390970 ITERATIONS                                39 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:      7782383 TO  7856417
PROJECTED ANSWERS:             406 TO     1154

L2           39 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL                          ← フルファイル検索を実行する

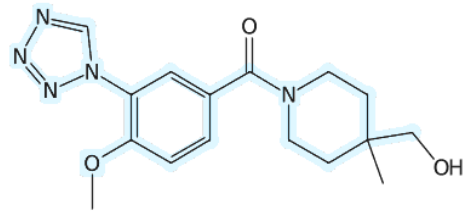
FULL SEARCH INITIATED 10:20:01
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -  7839648 TO ITERATE

100.0% PROCESSED    7839648 ITERATIONS                               848 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.02

L3          848 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN                            ← SCAN 表示形式で表示する

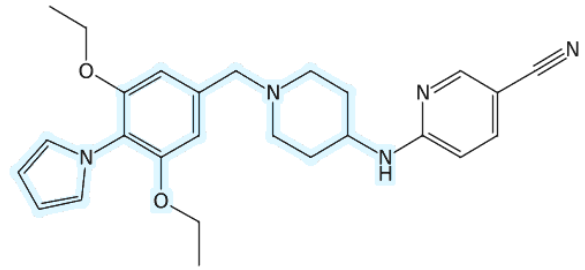
L3   848 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   Methanone, [4-(hydroxymethyl)-4-methyl-1-piperidinyl][4-methoxy-3-(1H-
     tetrazol-1-yl)phenyl]-
MF   C16 H21 N5 O3
```




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

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

L3   848 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN   3-Pyridinecarbonitrile, 6-[[1-[[3,5-diethoxy-4-(1H-pyrrol-1-
     yl)phenyl]methyl]-4-piperidinyl]amino]-
MF   C26 H31 N5 O2
```




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

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

練習問題 5 ： 練習問題 4 で得た物質の特許調査

```
=> D HIS

     FILE 'REGISTRY'
L1              STRUCTURE UPLOADED
L2           39 S L1
L3          848 S L1 FUL

=> FILE CAPLUS                  ← CAplus ファイルに入る

=> S L3                         ← L3 をクロスオーバー検索する
L4          85 L3

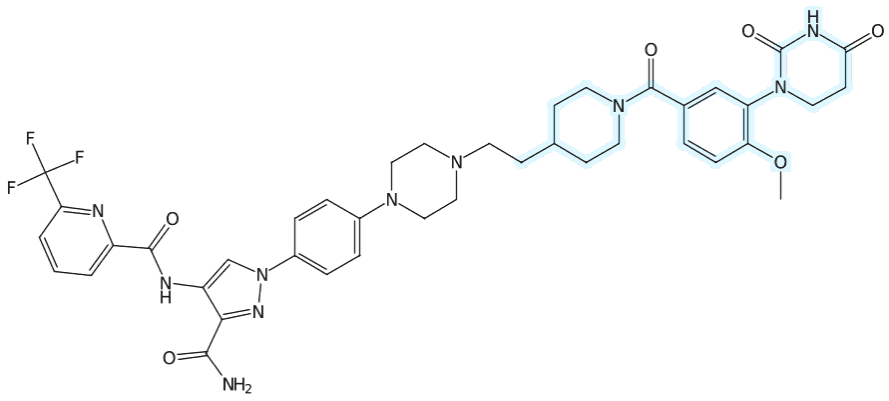
=> S L4 AND P/DT                ← 特許に限定する
L5          73 L4 AND P/DT

=> D 1 73 ALL HITSTR HITPPAK    ← ALL HITSTR HITPPAK 表示形式で出力

L7   ANSWER 1 OF 73  CAPLUS  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive
AN   2025:421284  CAPLUS Full-text
DN   1900:71201
ED   Entered STN:  21 Feb 2025
TI   Heterocyclic carboxamide compounds as IRAK protein inhibitors and their
     preparation, pharmaceutical compositions and use in the treatment of
     diseases
IN   Liu, Jinsong; Zhu, Jiabin; Zhao, Mohan; Gan, Qingqing; Lin, Jialu; Chen,
     Rui; Qi, Huaiyuan
PA   Pamplona Therapeutics (Shenzhen) Co., Ltd., Peop. Rep. China; Guangzhou
     IMD Pharmaceutical Co., Ltd.
UO   GUANGZHOU IMD PHARMACEUTICAL; PAMPLONA THERAPEUTICS SHENZHEN
UOS  GUANGZHOU IMD PHARMACEUTICAL; PAMPLONA THERAPEUTICS SHENZHEN
SO   PCT Int. Appl., 706pp.
     CODEN: PIXXD2
DT   Patent
LA   Chinese
CLMN 31
CC   28-17 (Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom))
     Section cross-reference(s): 1, 27, 63
FAN.CNT 1
PPPI
     PATENT NO.          KIND  DATE      LANGUAGE   PatentPak
     ---------------     ----  --------  ---------- ------------------------
     WO 2025036451        A1   20250220  Chinese    PDF | PDF+ | Interactive
PI
     PATENT NO.          KIND  DATE        APPLICATION NO.         DATE
     ---------------     ----  --------    ----------------------  --------
     WO 2025036451        A1   20250220    WO 2024-CN112342        20240815
PRAI CN 2023-11025660     A    20230815
     CN 2024-10175807     A    20240207
PSPI
     PATENT NO.          KIND  STATUS          STATUS DATE
     ---------------     ----  -------------   -----------
     WO 2025036451        A1   Alive           20250227
 :
```

HITPPAK は、ヒットした索引化合物の明細書の記載ページへのリンクであり、一部の特許レコードで有効 (CAS PatentPak 契約者対象)

AB The invention relates to a heterocyclic carboxamide compd. targeting IRAK protein inhibition or degrdn., a prepn. method therefor, and the use thereof in the treatment or prevention of related diseases mediated by
:
ST heterocyclic carboxamide prepn IRAK inhibitor treatment disease
IT Disease, animal
:
IT 3076356-59-4P 3076356-61-8P 3076356-62-9P 3076356-63-0P
3076356-64-1P 3076356-66-3P 3076356-67-4P 3076356-68-5P
3076356-70-9P 3076356-71-0P 3076356-72-1P 3076356-73-2P
:
3076359-04-8P **3076359-05-9P** 3076359-07-1P 3076359-09-3P
3076359-11-7P **3076359-13-9P** 3076359-15-1P 3076359-16-2P
3076359-17-3P **3076359-18-4P** **3076359-19-5P**
:
PPAK
57-13-6, Urea, Pg 316
:
3076359-04-8P, Pg 317
3076359-05-9P, Pg 318
3076359-07-1P, Pg 319
:
3076366-72-5P, Pg 583
3076366-73-6P, Pg 598
3076388-13-8P, Pg 605
IT **3076359-05-9P** **3076359-13-9P** **3076359-18-4P**
3076359-19-5P **3076359-20-8P** **3076359-21-9P**
:
RL: PAC (Pharmacological activity); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)
(prepn. of heterocyclic carboxamide compds. as IRAK protein inhibitors useful in the treatment of diseases)
RN 3076359-05-9 CAPLUS
CN 2-Pyridinecarboxamide, N-[3-(aminocarbonyl)-1-[4-[4-[2-[1-[4-methoxy-3-(tetrahydro-2,4-dioxo-1(2H)-pyrimidinyl)benzoyl]-4-piperidinyl]ethyl]-1-piperazinyl]phenyl]-1H-pyrazol-4-yl]-6-(trifluoromethyl)- (CA INDEX NAME)



HITSTR

:

PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive
PPAK
3076359-05-9P, Pg 318
3076359-13-9P, Pg 323

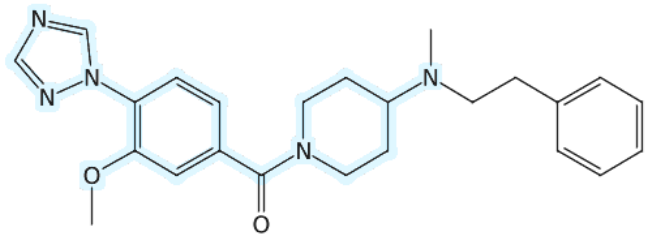
HITPPAK

L5 ANSWER 73 OF 73 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
PatentPak PDF
AN 1995:511433 CAPLUS Full-text
DN 123:198624
OREF 123:35453a,35456a
ED Entered STN: 27 Apr 1995
TI Preparation of N-benzoylpiperidine-4-amines as peripheral vasodilators
IN Fujioka, Takafumi; Teramoto, Shuji; Tanaka, Michinori; Shimizu, Hiroshi;
    Tabusa, Fujio; Tominaga, Michiaki
PA Otsuka Pharmaceutical Co., Ltd., Japan
SO PCT Int. Appl., 505 pp.
    CODEN: PIXXD2
DT **Patent**
LA English
CLMN 1
CC 27-16 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))
    Section cross-reference(s): 1
FAN.CNT 1
PPPI
    PATENT NO.   KIND DATE   LANGUAGE   PatentPak
    ---------------   ---- -------- ---------- ------------------------
    WO 9422826   A1   19941013 English   PDF
PI
    PATENT NO.   KIND DATE   APPLICATION NO.   DATE
    ---------------   ---- --------   ---------------------   --------
    WO 9422826   A1   19941013   WO 1994-JP549   19940404
    CA 2136999   A1   19941013   CA 1994-2136999   19940404
    CA 2136999   C   20040511
    AU 9462928   A   19941024   AU 1994-62928   19940404
    AU 674207   B2   19961212
       :
PRAI JP 1993-80712   A   19930407
    WO 1994-JP549   W   19940404
    US 1994-347454   A3   19941206
    US 1997-794322   A3   19970203
PSPI
    PATENT NO.   KIND STATUS   STATUS DATE
    ---------------   ---- -------------   -----------
    WO 9422826   A1   Dead   20201106
    CA 2136999   A1   Dead   20201107
    CA 2136999   C   Dead   20201106
       :
CLASS
 PATENT NO.   CLASS PATENT FAMILY CLASSIFICATION CODES
 --------------- ----- --
 WO 9422826   IPCI   C07D0211-58 [ICM,5]; C07D0401-06 [ICS,5]; C07D0401-10
                        [ICS,5]; C07D0211-76 [ICS,5]; A61K0031-445 [ICS,5];
                        C07D0413-10 [ICS,5]; C07D0401-14 [ICS,5]; C07D0401-12
       :
AB Title compds. [I; R = substituted Bz, (un)substituted carbamoyl, etc.; R1
    = H, (hydroxy)alkyl; R2 = (un)substituted phenyl(oxy)alkyl; NR1R2 =
    (un)substituted pyrrolidino, -piperidino, morpholino,
    -1,2,3,4-tetrahydroisoquinolino] were prepd. Thus, title compd. II gave
    24.0mL/min increase in femoral artery blood flow at 10-30μL of a 100nM
    soln. intra-arterially in dogs.
ST benzoylpiperidineamine prepn peripheral vasodilator
IT Vasodilators
       (peripheral; N-benzoylpiperidine-4-amines)

当レコードは、物質情報付きの明細書（Interactive）がないため
PatentPak Interactive のリンクが表示されない

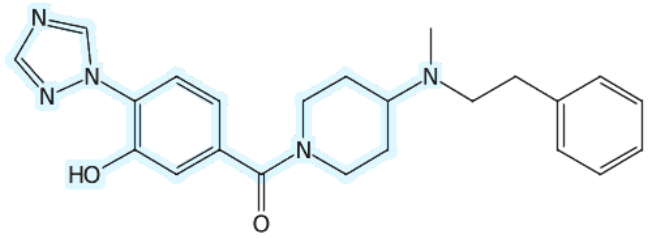
IT 167621-24-1P 167621-25-2P 167621-26-3P 167621-28-5P 167621-29-6P
:
167622-16-4P **167622-17-5P** 167622-18-6P
:
167622-76-6P 167622-77-7P 167622-78-8P **167622-79-9P**
:
IT **167622-16-4P** **167622-17-5P** **167622-79-9P**
:
RL: BAC (Biological activity or effector, except adverse); BSU (Biological study, unclassified); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)
(prepn. of N-benzoylpiperidine-4-amines as peripheral vasodilators)

RN **167622-16-4** CAPLUS
CN Methanone, [3-methoxy-4-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)phenyl][4-[methyl(2-phenylethyl)amino]-1-piperidinyl]-, hydrochloride (1:1) (CA INDEX NAME)



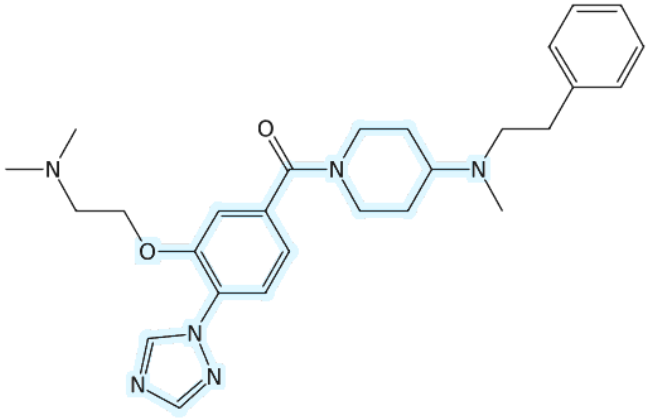
• HCl

RN **167622-17-5** CAPLUS
CN Methanone, [3-hydroxy-4-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)phenyl][4-[methyl(2-phenylethyl)amino]-1-piperidinyl]-, hydrochloride (1:1) (CA INDEX NAME)



• HCl

RN **167622-79-9** CAPLUS
CN Methanone, [3-[2-(dimethylamino)ethoxy]-4-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)phenyl][4-[methyl(2-phenylethyl)amino]-1-piperidinyl]- (CA INDEX NAME)



HITSTR

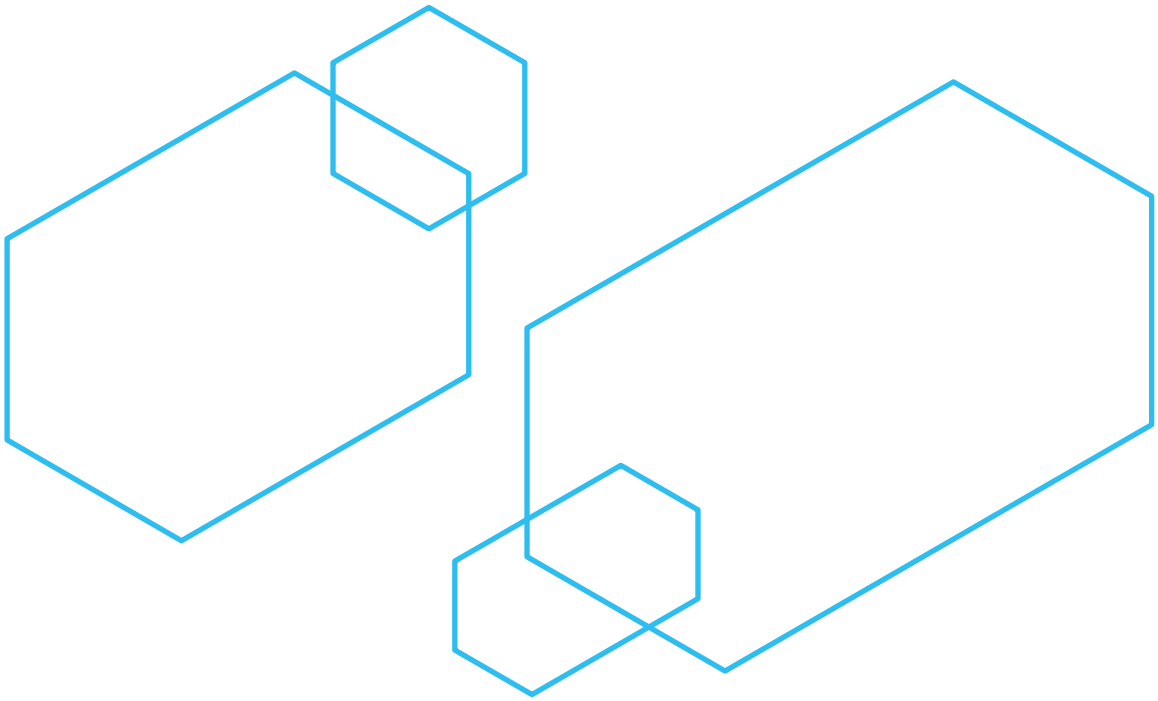
PatentPak PDF

当レコードは物質情報付きの明細書（Interactive）がないため、索引物質の記載ページが表示されない

HITPPAK

APPENDIX

複数の構造質問式を利用した構造検索
BATCH 検索
サブセット検索
RANGE 検索 (範囲指定検索)
ノーマライズド結合
削除された CAS RN® (DR)
優先 CAS RN®、非優先 CAS RN®
* (アスタリスク) 付きの CAS RN® と文献検索
CAplus/CA ファイルに文献のない場合
多成分物質のカウント方法
第四級アンモニウム塩と塩化アンモニウム
同位体標識化合物



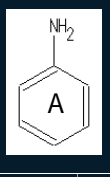
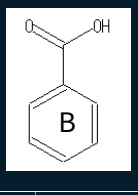
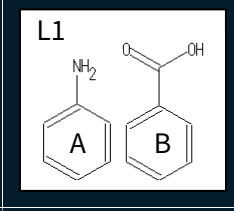
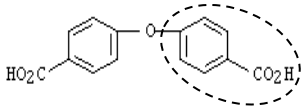
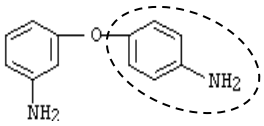
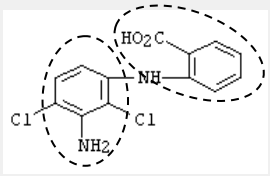
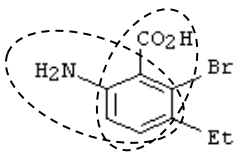
複数の構造質問式を利用した構造検索

構造検索では、複数の構造質問式を用いた検索も可能

- 入力例

=> S L1 AND L2　　← L1 と L2 の構造を両方含む検索 (サンプル検索)
=> S L1 OR L2　　← L1 と L2 の構造のどちらかを含む検索 (サンプル検索)
=> S L1 NOT L2 FUL　　← L2 の構造を含まない L1 を検索 (フルファイル検索)

作図および演算の仕方と得られる回答 (○：ヒットする / ×：ヒットしない)

	別々に作図			同一画面中に離して作図
	 			
	L1 AND L2	L1 OR L2	L1 NOT L2*	
A，B が別成分に分かれて存在 CM 1  CM 2 	○	○	×	×
A，B が同一成分中に独立して存在 	○	○	×	○
A，B が重複して存在 	○	○	×	×
A の構造のみが存在	×	○	○	×
B の構造のみが存在	×	○	×	×

* L1 NOT L2 では、A の構造が含まれていてもヒットしない場合があることに注意する。

BATCH 検索

BATCH 検索を利用すると、構造質問式をシステムに登録することで、コンピュータの利用度の少ない時に一括して構造検索を行わせることができる。

BATCH 検索の実行

- BATCH コマンド入力例

```
=> BATCH                                                    ← 初心者モードでの入力
ENTER QUERY L# FOR BATCH REQUEST OR (END):L1                ← 質問式の L 番号
ENTER BATCH REQUEST NAME OR (END):STR1/B                    ← 注文名/B
ENTER TYPE OF SEARCH (SSS), CSS, FAMILY, OR EXACT:.         ← 検索のタイプ
ENTER SCOPE OF SEARCH (FULL) OR RANGE:.                     ← 検索の範囲
QUERY L1 HAS BEEN SAVED AS BATCH REQUEST 'STR1/B'

=> BATCH L1 STR2/B SSS FUL                                  ← まとめて入力する場合
QUERY L1 HAS BEEN SAVED AS BATCH REQUEST 'STR2/B'
```

- 質問式には、構造質問式、スクリーンセット、両者を結合した質問式、あるいはこれらによって得られた回答の L 番号が使える。

- 検索が実行されるまでは、=> D SAVED/B で質問式が確認できる。BATCH 検索が終了すると /B のついた質問式は削除される。

```
=> D SAVED/B

NAME             CREATED      NOTES/TITLE
--------------   -----------  -----------------------------------
STR1/B           01 APR 2025  BATCH REQUEST FOR FILE REGISTRY
```

BATCH 検索の回答表示

- BATCH 検索実行後 (1〜2 日後)、回答は BATCH 検索登録の時つけた名前に /A がついた回答セットとして保存されている。

```
=> D SAVED/A

NAME             CREATED      NOTES/TITLE
--------------   -----------  -----------------------------------
STR1/A           03 APR 2025  848 ANSWERS IN FILE REGISTRY
```

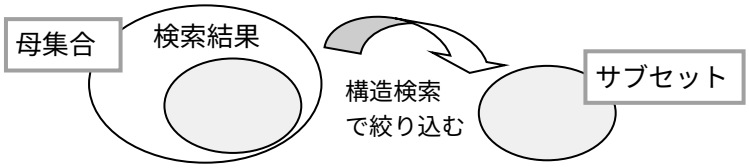
- 保存されている回答セットは ACTIVATE コマンドで呼び出して表示する。

```
=> FILE REGISTRY
     :

=> ACT STR1/A
L1               STR
L2     848 SEA FILE=REGISTRY SSS FUL L1
```

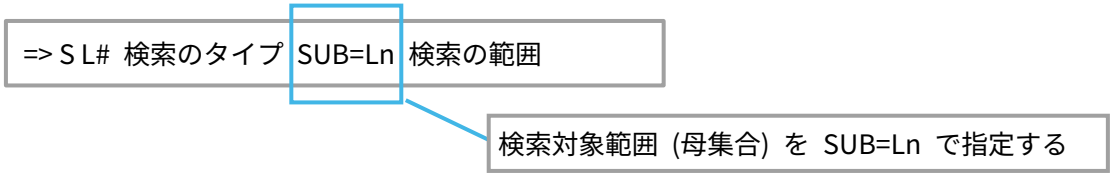
サブセット検索

サブセット検索は、回答集合の L 番号の中をさらに構造検索する機能である。



- 母集合は辞書検索の回答と構造検索の回答のどちらでもよい。

入力方法



L# ： 構造質問式
検索のタイプ ： EXA，FAM，CSS，SSS
SUB=Ln ： 母集合の L 番号
検索範囲の指定 ： SAM，FUL，RANGE

- サブセット検索では検索の範囲 (SAM，FUL，RANGE) を必ず入力する。

効果的な利用方法

- 構造検索で得られた回答が多く、さらに構造質問式で限定したい場合
- INCOMPLETE を回避したい場合 (辞書検索の結果を母集合として利用) など

RANGE 検索（範囲指定検索）

RANGE 検索とは、データベースの特定の範囲を対象として行う検索である。

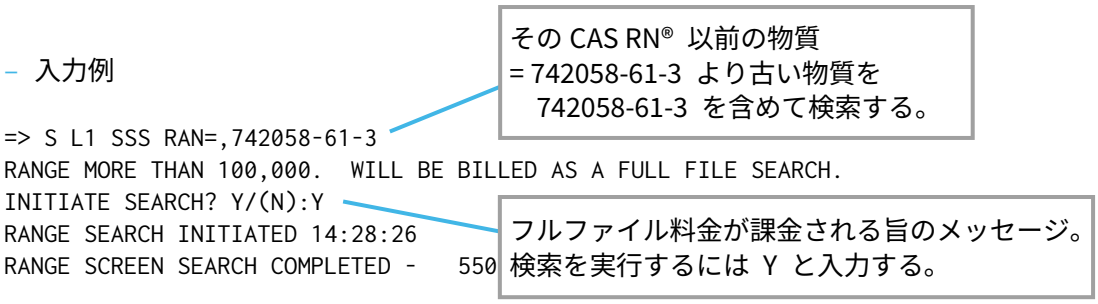
- REGISTRY ファイルでは CAS RN® を用いて範囲を指定することができる。

```
=> S L# 検索タイプ RAN=，CAS RN®
                    ↑ CAS RN® 以前に登録された物質を構造検索する
=> S L# 検索タイプ RAN=CAS RN®，
                    ↑ CAS RN® 以降に登録された物質を構造検索する
```

- カンマ（，）の位置で、「以前」「以降」 を指定する。

- RANGE 検索にはサンプル検索はなく、すべてフルファイル検索になる。

- 入力例




```
=> S L1 SSS RAN=,742058-61-3
RANGE MORE THAN 100,000.  WILL BE BILLED AS A FULL FILE SEARCH.
INITIATE SEARCH? Y/(N):Y
RANGE SEARCH INITIATED 14:28:26
RANGE SCREEN SEARCH COMPLETED -    550

100.0% PROCESSED     550352 ITERATIONS                    12600 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

L4       12600 SEA RAN=(,742058-61-3) SSS L1
```

- フルファイル検索を複数回行う場合は、必ず事前に PROJECTED ITERATIONS の数を確認して、何回フルファイル検索を行う必要があるのかを予想する。

- 構造検索は、新規に登録された物質から順に遡って実行される。したがって、検索が中断されたレコードまでの検索は完全に行われているため、その物質以前に登録された CAS RN® の範囲で RANGE 検索を実行し、ファイル全体の検索を完了させる。

ノーマライズド結合

ノーマライズド結合とは、偶数員環中の単結合と二重結合の交互結合、および互変異性結合などに指定される結合の属性（Bond Value）である。

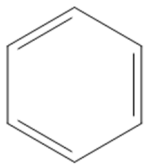
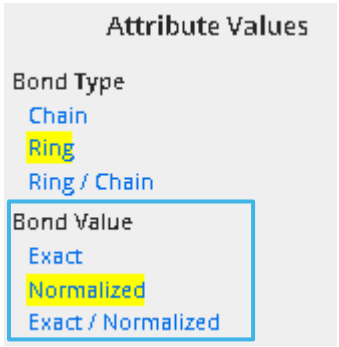
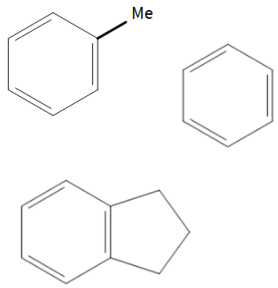
- 「エグザクト」を指定した場合は、その部分の結合が「エグザクト」で登録されている化合物のみが得られ、その部分の結合が「ノーマライズド」で登録されている化合物は得られない。

STN の構造作図ツールで作図するとノーマライズド結合を認識し、自動的に Bond Value が指定される。

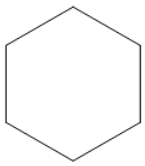
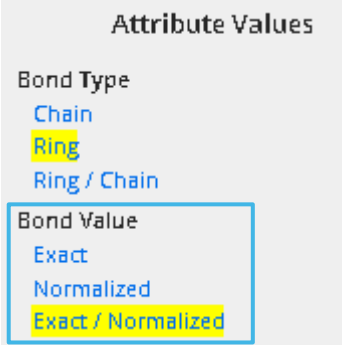
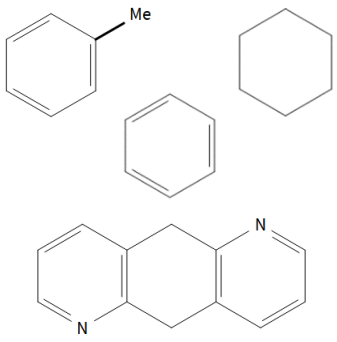
- STN の構造作図ツールではあらゆる可能性を考慮して、自動的にエグザクト/ノーマライズド結合が指定される。
  - 自動的に指定された Bond Value を変更したい場合は、Bond Attributes で変更する。

- 自動的に指定される Bond Value の例

[例 1 ： ベンゼン環]

作図した構造図	Bond Value	回答例
		

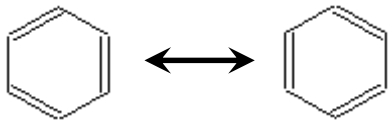
[例 2 ： シクロヘキサン環]

作図した構造図	Bond Value	回答例
		

ノーマライズド結合の例 － 環

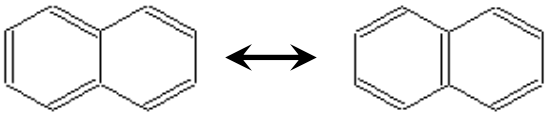
- 次の条件を満たす単環のすべての結合はノーマライズド結合として登録されている。

単環の場合



- 環の構成原子数が偶数である。
- 単結合と二重結合が環上に交互に存在する。

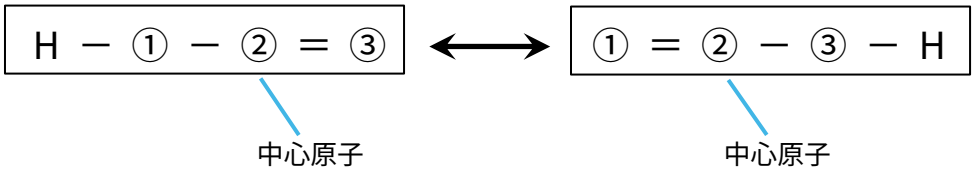
縮合環の場合



- 環の構成原子数が偶数である閉径路がある。
- 単結合と二重結合がその径路に沿って交互に存在する。

ノーマライズド結合の例 － 互変異性 (Tautomer)

- 次の定義に合致する互変異性結合は、ノーマライズド結合として登録されている。



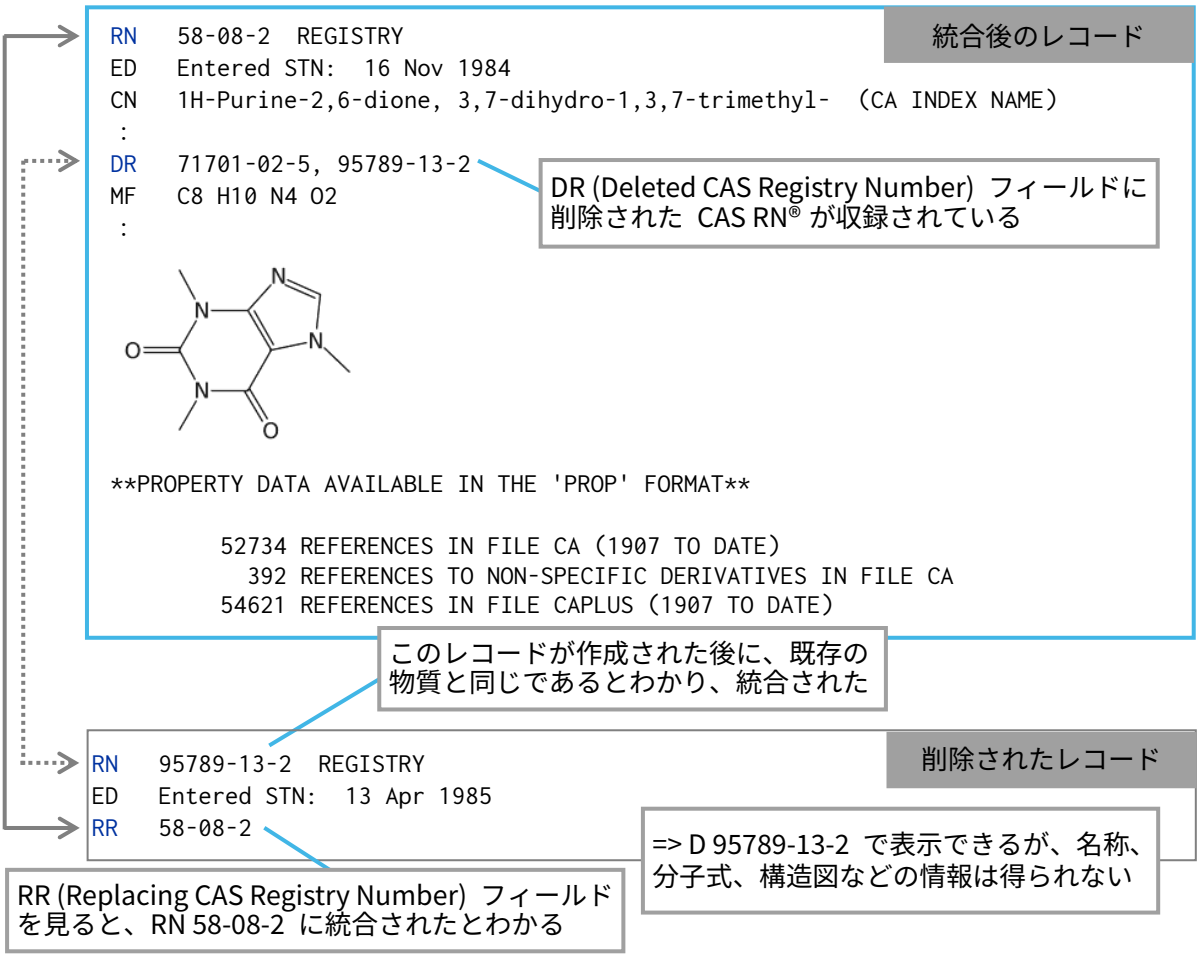
- 中心原子が 2 個のヘテロ原子に結合している。
  - 中心原子 (②)　　：C，N，P，As，Sb，S，Se，Te，Cl，Br，I
  - ヘテロ原子 (①，③)　：N，O，S，Se，Te
- 中心原子 (②) と一方のヘテロ原子との結合は二重結合である。
- 中心原子 (②) ともう一方のヘテロ原子との結合は単結合で表記でき、そのヘテロ原子には水素、水素の同位体、または電荷がある。

削除された CAS RN® (DR)

ある物質が新規物質である (既存の CAS RN® の物質とは一致しない) と判断された場合、新規の CAS RN® が付与され、REGISTRY ファイルで新規レコードが作成される。

- しかし後になって、既存の CAS RN® の物質と同じとわかる場合がある。
  (例 : 登録時に構造情報が不明であった物質 (商品名で登録された物質、天然物など))
  - そのような場合、REGISTRY ファイルではいずれかのレコードに統合される。
    (残りの CAS RN® は削除される)
  - 削除された CAS RN® が CAplus/CA ファイルに索引されていた場合、統合後の CAS RN® に置換される。(ただし、抄録など索引以外のフィールドに収録されている CAS RN® は置換されない)

レコード例 : DR を含むレコード



DR は /DR で検索しないと、統合後のレコード (名称、分子式、構造図などの情報) を得られないのですか？

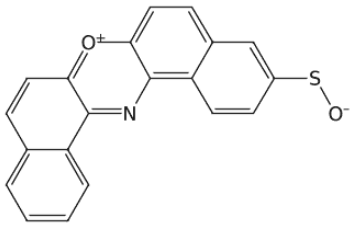
=> S 95789-13-2 のように基本索引 (もしくは /RN) で検索した場合も、RN 58-08-2 (統合後) のレコードが 1 件得られます。ヒットタームは 95789-13-2 (DR) となります。

優先 CAS RN®、非優先 CAS RN®

優先 CAS RN® (Preferred CAS REGISTRY Number ： PR)、
非優先 CAS RN® (Alternate CAS REGISTRY Number ： AR)

- 二つ以上の構造の表現法を持つ物質で、より優先される構造に対して付与された CAS RN® を優先 CAS RN® と呼ぶ。(例 ： 閉環 (スピロ) 型構造と開環型構造)
  - 優先構造レコード中の AR フィールドに非優先 CAS RN® が表示される。
  - 非優先構造レコード中の PR フィールドに優先 CAS RN® が表示される。
- レコード例 ： 優先構造のレコード

```
RN    38598-19-5  REGISTRY
ED    Entered STN:  16 Nov 1984
CN    Dibenzo[a,j]phenoxazin-7-ium, 3-sulfeno-, inner salt  (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN    Dibenzo[a,j]phenoxazin-7-ium,
AR    216-47-7
MF    C20 H11 N O2 S
```



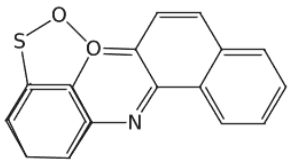
AR フィールドに
非優先 CAS RN® が表示される

=> S 216-47-7 のように AR を基本索引で検索した場合はどうなる？

RN 38598-19-5 のレコードが 1 件得られる

- レコード例 ： 非優先構造のレコード (=> D 216-47-7 で表示できる)

```
RN    216-47-7  REGISTRY
ED    Entered STN:  16 Nov 1984
CN    Dibenzo[a,j]phenoxazin-7-ium, 11-sulfeno-, inner salt (9CI)  (CA INDEX
      NAME)
PR    38598-19-5
MF    C20 H11 N O2 S
```



PR フィールドに
優先 CAS RN® が表示される

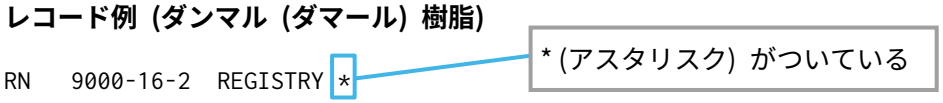
文献検索では，REGISTRY ファイルから CAplus ファイルへのクロスオーバー検索を行えばすべての CAS RN® (RN，DR*，AR，PR) がクロスオーバーされる。

* (アスタリスク) 付きの CAS RN® と文献検索

通常は CAS RN® が付与されないタイプの物質であるが、例外的に CAS RN® が付与された物質には * (アスタリスク) が付与されている。

- 主に、CAS 登録番号サービスや既存化学物質リストに基づいて登録されているため、* (アスタリスク) が付与された物質の CAS RN® を CAplus/CA ファイルで検索しても文献はほとんど得られない。
  - CAplus/CA ファイルの文献検索ではアスタリスクつきの CAS RN® は使用しない。
- * (アスタリスク) が付与されているものは、「UVCB 物質」 (Unknown or Variable Composition，Complex reaction Products，and Biological Materials，組成不明もしくは可変物質、複雑な反応生成物、生物物質) と呼ばれており、以下の二種類がある。
  - CTS (概念語登録) ： CAplus/CA ファイルで、基本的に統制語 (キーワード) で索引されている物質に付与された CAS RN® (例 ： ダンマル樹脂)
    CTS の場合には、まれに CAS RN® が索引されていることもある。
  - GRS (一般式登録) ： CAplus/CA ファイルで、基本骨格の CAS RN® ＋ キーワードで索引されている物質に付与された CAS RN® (例 ： 塩素化ポリエチレン)
- * (アスタリスク) つきの CAS RN® の場合、CI フィールドを見て GRS か CTS かを判断し、それに基づいた検索を行う。

レコード例 (ダンマル (ダマール) 樹脂)




```
RN   9000-16-2  REGISTRY *
* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may
  result in incomplete search results.  For additional information, enter HELP
  RN* at an online arrow prompt (=>).
ED   Entered STN:  16 Nov 1984
CN   Dammar resin (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN   Dammar
CN   Dammar resins
OTHER NAMES:
CN   Damar gum
CN   Damar resin
CN   Gum Damar
CN   Gum Dammar
CN   Gums and Mucilages, dammar
 :
DEF  Extractives and their physically modified derivatives.  It is a product
     which may contain resin acids and their esters, terpenes, and oxidation or
     polymerization products of these terpenes.  (Shorea, Dipterocarpaceae).
MF   Unspecified
CI   COM, MAN, CTS
LC   STN Files:   BIOSIS, CHEMCATS, CHEMLIST, CIN, TOXCENTER
     Other Sources:   DSL**, EINECS**, TSCA**
         (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
```

CAplus/CA ファイルに文献のない場合

REGISTRY ファイルのある物質 A のレコードを CAplus/CA ファイルにクロスオーバーしても、回答が得られない（0 件になる）場合がある。その場合、下記のいずれかと考えられる。

① 物質 A は CAplus/CA ファイルに索引されていないが、物質 A を含む多成分物質が CAplus/CA ファイルに索引されている。

- REGISTRY ファイルに多成分物質が登録される場合、その個々の成分もすべて収録される。
- 物質 A のレコードのクラス識別子（CI）フィールドに COM と表示されていれば、「物質 A を一成分として含む多成分物質が REGISTRY ファイルに収録されている」とわかる。

② CHEMCATS ファイルから収録された物質である。

- 収録源（SR）フィールドに Chemical Catalogs あるいは Chemical Library と表記され、提供業者情報が表示される。

③ その物質が索引された文献が CAplus/CA ファイルにあるが、抄録・索引がまだ完成していない。

- 登録情報源（SR）フィールドに CA と表示されており、クラス識別子（CI）フィールドに COM の表示がない場合は、CAplus/CA ファイルのレコード作成中であり、まだ完成していない。REGISTRY ファイルの入力から日が浅いレコードは、この可能性がある。

④ 下記の既存化学物質リスト等から収録された物質である。

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

* CAS RN® 所在（LC）フィールドに TSCA，EINECS，DSL または NDSL の表示がある。

⑤ ④以外の機関の契約・依頼により、CAS RN® が付与された物質である。

- また、政府機関等への届出の必要から、民間会社からの依頼により CAS RN® を付与する場合もある。この場合は、1985 年半ば以降のものについては登録情報源（SR）フィールドに記載がある。

⑥ 環母核（Ring Parent）として収録された物質である。

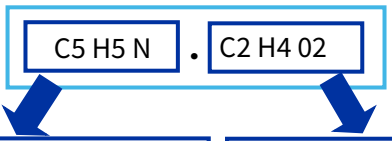
- 環母核（すべての置換基を削除した単環、縮合環、スピロ環）は、その物質自身が文献に記載されていなくても、またそのような化合物が実在しなくても REGISTRY ファイルに登録される。環母核のレコードのクラス識別子（CI）フィールドには RPS と表示される。

⑦ ハンドブックから採録された物質である。

- CAS 登録システムがスタートしたときに、ハンドブック類から収録された化学物質がある。

⑧ 他のデータベースから採録された物質である。

多成分物質のカウント方法



成分 1 (C5H5N)

- 成分分子式
  C5H5N ← C_5H_5N の成分を含む
- 元素種
  C/ELS ← 炭素が存在する (数は不定)
  H/ELS ← 水素が存在する (数は不定)
  N/ELS ← 窒素が存在する (数は不定)
- 特定元素数
  5/C ← 炭素が 5 個存在する
  5/H ← 水素が 5 個存在する
  1/N ← 窒素が 1 個存在する
- 元素式
  C H N/ELF ← 炭素、水素、窒素のみから成る
- 元素数
  3/ELC ← 3 種類の元素からなる成分を含む

成分 2 (C2H4O2)

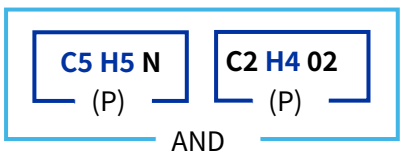
- 成分分子式
  C2H4O2 ← C2H4O2 の成分を含む
- 元素種
  C/ELS ← 炭素が存在する (数は不定)
  H/ELS ← 水素が存在する (数は不定)
  O/ELS ← 酸素が存在する (数は不定)
- 特定元素数
  2/C ← 炭素が 2 個存在する
  4/H ← 水素が 4 個存在する
  2/O ← 酸素が 2 個存在する
- 元素式
  C H O/ELF ← 炭素、水素、酸素のみから成る
- 元素数
  3/ELC ← 3 種類の元素からなる成分を含む

物質全体 (C5H5N.C2H4O2)

- 完全分子式
  C5H5N.C2H4O2/MF ← C_5H_5N と $C_2H_4O_2$ から成る物質
- 成分数
  2/NC ← 2 成分物質である (成分数 = 分子式中のピリオドの数 + 1)
- 物質に対する元素数
  4/ELC.SUB ← 4 種類の元素から成る物質

* 単成分物質の場合は、「物質全体」=「成分」となる。

* 多くの分子式関連フィールドでは、(P) 演算子で同一成分中に限定することができる。




```
=> S 5/C (P) 5/H        左記の物質がヒットする
=> S 5/C AND 5/H        左記の物質がヒットする

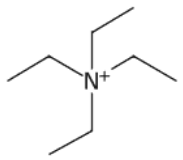
=> S 5/C (P) 4/H        左記の物質はヒットしない
=> S 5/C AND 4/H        左記の物質がヒットする
```

第四級アンモニウム塩と塩化アンモニウム

アミン類の塩や第四級アンモニウム塩は通常、多成分物質として登録される。
ただし、塩化アンモニウム (NH_4Cl) は単一成分として登録される。

– 塩化テトラエチルアンモニウム

```
RN   56-34-8  REGISTRY
ED   Entered STN:  16 Nov 1984
CN   Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, chloride (1:1)  (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN   Ammonium, tetraethyl-, chloride (8CI)
CN   Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, chloride (9CI)
CN   Tetraethylammonium chloride (6CI, 7CI)
       :
MF   C8 H20 N . Cl
       :
CRN  (66-40-0)
```



2 成分物質として収録されている



:

– 塩化アンモニウム

```
RN   12125-02-9  REGISTRY
ED   Entered STN:  16 Nov 1984
CN   Ammonium chloride ((NH4)Cl)  (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN   Ammonium chloride (8CI)
       :
MF   Cl H4 N
       :
```



:

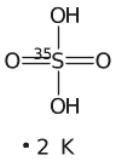
種類	示性式	REGISTRY ファイルでの分子式
第四級アンモニウム塩	$(C_2H_5)_4N^+.Cl^-$	C8H20N.CL
	$(C_2H_5)_4N^+.OH^-$	C8H20N.HO
	$(C_2H_5)_4N^+.CH_3CO_2^-$	C8H20N.C2H3O2
第一、二、三級アミンの塩	C_2H_5-NH_2.HCl	C2H7N.CLH
	C_2H_5-NH_2.CH_3COOH	C2H7N.C2H4O2
	$(C_2H_5)_2$NH.HCl	C4H11N.CLH
	$(C_2H_5)_3$N.HCl	C6H15N.CLH
ピリジンの塩	$C_5H_6N^+.Cl^-$	C5H5N.CLH
	$C_5H_6N^+.CH_3CO_2^-$	C5H5N.C2H4O2
塩化アンモニウム	NH_4Cl	CLH4N

同位体標識化合物

同位体標識化合物の分子式は、基本的には通常の化合物と同じ分子式で記述される。

- レコード例

```
RN   23725-97-5  REGISTRY
CN   Sulfuric-35S acid, dipotassium salt (8CI, 9CI)  (CA INDEX NAME)
MF   H2 O4 S . 2 K
CRN  (13770-01-9)
```



重水素（deuterium）と三重水素（tritium）は、分子式中で D，T で記述される。

- 重水素（deuterium）と三重水素（tritium）は、D，T を含む分子式で検索できる。
  D，T を H で置換した分子式でも検索することができる。

検索例 ： C_6H_5D は、以下のいずれの検索式でも検索できる。
=> S C6H5D/MF ← 重水素（deuterium）を一個含む化合物のみヒット
* $C_6H_4D_2$ などはヒットしない
=> S C6H6/MF ← ラベル無し（C_6H_6）に加えて、同位体標識化合物もヒット

同位体標識化合物の除き方

① 重水素と三重水素で標識された化合物を回答から除く場合

=> S L1 NOT (D OR T)/ELS ← 分子式中の情報を利用（/ELS で検索）

② 分子式には重水素や三重水素が反映されていない物質（① では削除できないような物質）も除きたい場合

=> S L1 NOT (DEUTERIUM OR TRITIUM) ← 部分名称で除く

③ 重水素（deuterium）と三重水素（tritium）以外の標識化合物を除きたい場合

=> S L1 NOT (13C? OR CARBON 13) ← 部分名称で除く（^{13}C を除きたい場合）

④ 構造検索で標識化合物を除く場合

```
=> FILE REGISTRY
     :
L1       STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2039              ←「異常質量 - すべての同位体」のスクリーンを発生させる
L2   SCREEN CREATED
          :
=> S L1 NOT L2 FUL       ← 構造検索を実行する
```

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**

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

JAICI 化学情報協会 | CAS A division of the American Chemical Society