CAplus ファイルのレコード作成と化学物質索引

化学情報協会　情報事業部

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

目次

- CAplus ファイルのレコード作成の流れ
- 特許の収録基準
- 索引
- 化学物質の索引方針
- 参考

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAplus ファイルのレコード作成の流れ

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAplus ファイルのレコード構成

CAplus ファイルのレコードは下記のデータで構成されている

- 書誌情報 (Bibliography)
- 抄録 (Abstracts)
- 索引 (Index)
- その他の情報 (引用、被引用情報、請求項など)

抄録

- CAS のアナリストが新規性、有用性などを簡潔にまとめた英語抄録を作成
- 原報の英語抄録をそのまま収録する場合もある

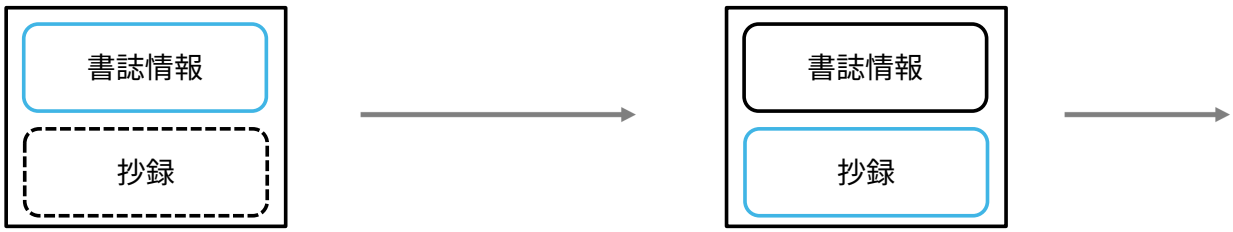
索引

- CAS のアナリストが、著者や発明者が強調している点、文献の主題に関わる概念や化学物質を索引

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAplus ファイルのレコード作成の流れ

レコード作成後にデータが順次追加される



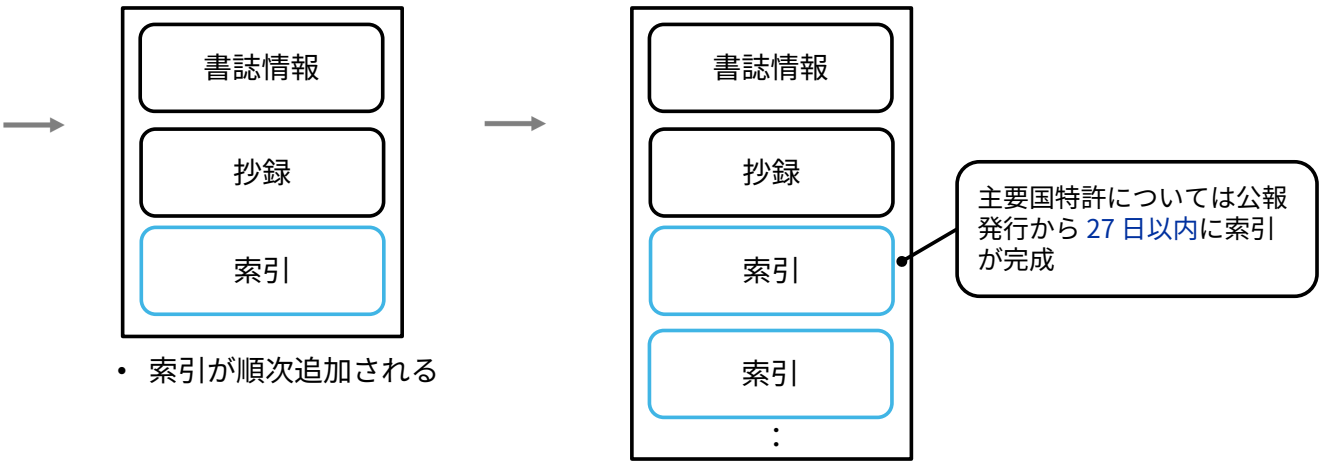
- 原報を入手後、書誌情報を入力してレコードを作成
  - 主要国*1 特許は公報発行後 2 日以内に収録
  - 主要雑誌*2 は CAS に到着後 1 週間以内に収録
- 原報由来の英語抄録または機械翻訳の英語抄録を収録

- CAS 作成の抄録に置き換わる
- 原報が英語抄録の場合、原報の抄録がそのまま利用されることもある

*1 CAS が定める主要国は次の 9 カ国 (CA, DE, EP, FR, GB, JP, RU, US, WO)
*2 主要雑誌 (Core Journal) のリストは https://www.cas.org/training/documentation/references/corejournals 参照

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAplus ファイルのレコード作成の流れ (続き)



- 索引が順次追加される

- 索引完成

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

特許の収録基準

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

特許の収録基準

収録される特許発行機関、特許種別が決まっている

主要国特許庁や INPADOC から特許情報を入手

↓

① 特許発行国および機関による選択
② 特許種別による選択
(ベーシック特許収録対象リスト*1、対応特許収録対象リスト*2 による選択)

↓

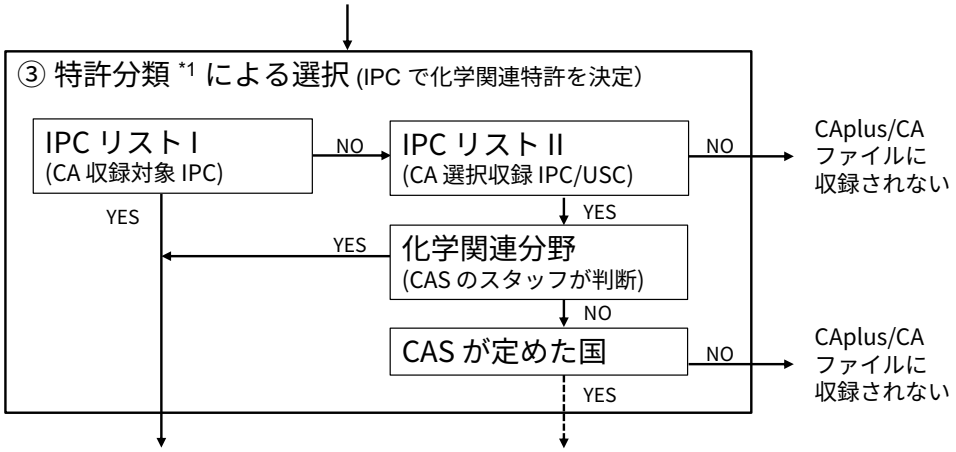
*1 ベーシック特許収録対象リスト
https://www.cas.org/training/documentation/references/patyear

*2 対応特許収録対象リスト
https://www.cas.org/training/documentation/references/patkind

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

特許の収録基準 (続き)

化学関連の特許を選択して収録している

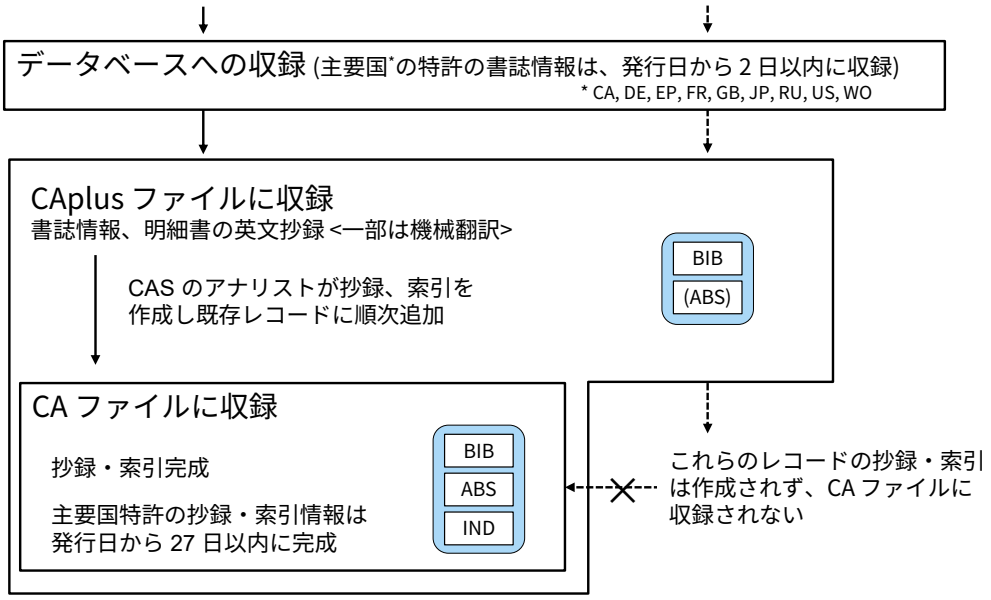


*1 IPC/USC のリストは下記に掲載されている
https://www.cas.org/training/documentation/references/patentcoverage

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

特許の収録基準 (続き)

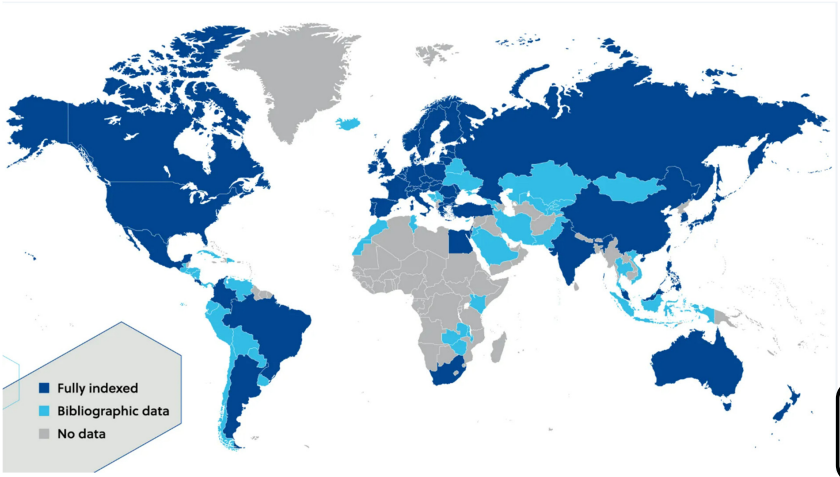
抄録・索引が作成されない特許もある



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

収録対象国

107 特許発行機関の特許および 2 技術公開誌*1 が収録対象



現状では水色で色付けされた国については
書誌情報しか収録されていない

*1 IP.com, Research Disclosure

https://www.cas.org/training/documentation/references/patworld

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

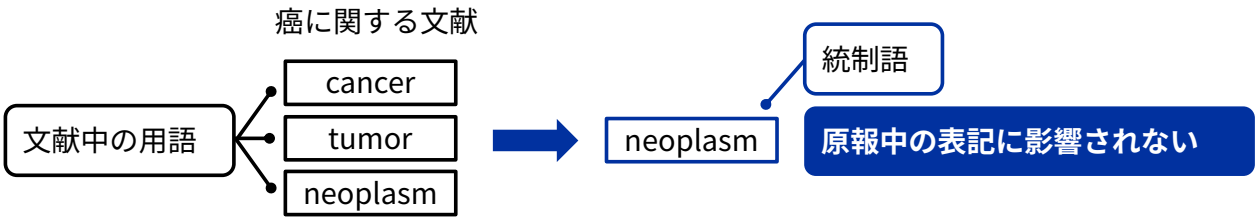
索引

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

主題の索引

文献の主題に関わる重要な概念を索引する

- 索引には統制語が用いられる
  - 統制語は一つの概念を一つの語で表現するようデータベース中で統制された語
  - 文献による用語のぶれの影響がない



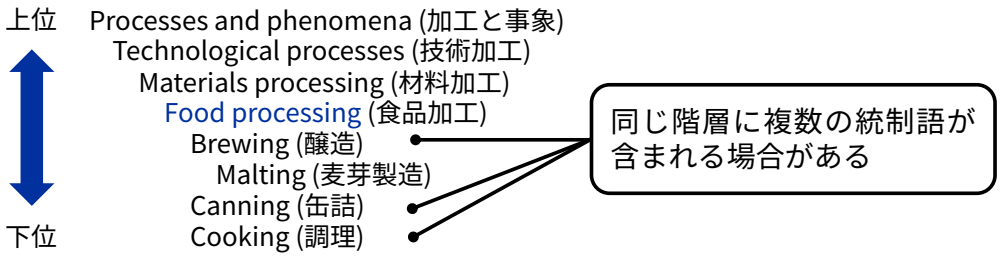
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAplus ファイルの統制語

階層構造

CA の統制語は階層構造に整理されている

- 階層構造の統制語から最も適切な索引語を使用
  - 上位の階層の語は付与されない



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

参考：CA Lexicon

オンラインシソーラス

CA Lexicon は、CAplus ファイルにおける統制語のオンラインシソーラス
(階層関係を含んだ辞書)

- 統制語を調べたい時に利用できる
- 上位語、下位語などを確認することができる

```
E5     174698     BT2  Apparatus/CT
E6       4609       BT1  Energy converters/CT
E7     174698     BT2  Apparatus/CT
E8      31577       BT1  Power supplies/CT
E9     129267         -->  Fuel cells/CT
                        HNTE Valid heading during volume 66 (1967) to
                             present.
                        NOTE Electrochemical energy conversion devices that
                             utilize hydrogen and oxygen to generate
                             electricity, heat, and water.
E10                     OLD  Cells, voltaic (L) fuel/CT
E11                     OLD  Voltaic cells (L) fuel/CT
E12                     UF   Cell (fuel cell)/CT
E13                     UF   Cells (fuel cell)/CT
E14                     UF   Fuel cell/CT
E15                     UF   Fuel-cell battery/CT
E16      1931           NT1  Alkaline fuel cells/CT
E17     14006           NT1  Biochemical fuel cells/CT
E18       599           NT1  Direct alcohol fuel cells/CT
E19       994           NT1  Direct ethanol fuel cells/CT
E20       469           NT1  Direct formic acid fuel cells/CT
E21      6102           NT1  Direct methanol fuel cells/CT
```

BT：上位語

-->：調べた統制語

OLD：旧統制語

UF：非優先語

NT：下位語

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

概念による索引

統制語とテキスト説明句

原報　【特許請求の範囲】

・・・茶抽出物を有効成分として含有することを特徴とする抗酸化剤組成物。

索引

```
IT   Antioxidants
     Extraction
     Food preservatives
        (antioxidant compns. contg. tea exts. contg.
        catechins and gallic acid for food preservation)
```

統制語

テキスト説明句 (統制語の内容を補足する自由語の説明)

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

補遺語索引 (/ST)

統制されていない語

ST フィールドには、原報の標題、抄録中の重要な用語を収録している

- 著者が使っている用語をそのまま使用
  - 補遺語は統制されていない
- 一般に単語の単数形を優先的に使用

自由語で記述

```
ST  human milk cream lipid manuf enteral parenteral infant nutrition;
    polyunsatd fatty acid human milk infant formula
```

概念をセミコロン (;) で区切る

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

化学物質索引

化合物クラス名 (統制語)

CAS RN®

CAS ロール

テキスト説明句

接尾辞つきの CAS RN®

```
IT  Diterpenes
    RL: BPN (Biosynthetic preparation); RCT (Reactant); BIOL (Biological study);
    PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)
    (labdane; trans of a labdane by an enzymic treatment)
IT  9001-62-1 , Lipase
    RL: RGT (Reagent); RACT (Reactant or reagent)
    (Chromobacterium viscosum lipase; transformation of a labdane by an enzymic  treatment)
IT  863507-69-1P
    RL: BPN (Biosynthetic preparation); BIOL (Biological study); PREP (Preparation)
    (transformation of a labdane by an enzymic treatment)
```


© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

化学物質索引

化合物クラス名と CAS 登録番号 (CAS RN®)

化学物質索引には、化合物クラス名と CAS 登録番号 (CAS RN®) がある

- 化合物クラス名 (統制語)
  - ある化合物グループ全般について述べられている場合に付与される

- CAS 登録番号 (CAS RN®)
  - 特定の化学物質について述べられている場合に付与される
    - CAS RN® は化学物質に固有の番号
  - 合成文献は P (1907 年以降)、非特定誘導体* の文献は D (1977 年以降) が付与される

* 非特定誘導体とは、構造や分子式を特定できないような誘導体を指す

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS ロール

化学物質の役割

CAS ロールは、化学物質の文献中での役割を表すコード

- 化合物クラス名や CAS RN® と共に CAS ロールが索引される
- 3 文字コードの特定ロールと、その上位の 4 文字コードのスーパーロールがある
  - 特定ロールが属するスーパーロールは、自動的に付与される

特定ロール　スーパーロール

```
IT   Fatty acids
     RL: REM (Removal or disposal); PROC (Process)
        (salts; automatic dishwashing detergent compns. comprising a lipase)
IT   9001-62-1, Lipase
     RL: SCLM (Substance claimed); TEM (Technical or engineered material use);
     USES (Uses)
        (automatic dishwashing detergent compns. comprising a lipase)
```

* SCLM のように特定ロールが存在しないスーパーロールもある

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS ロールの付与年代

付与年代に注意

CAS ロールで限定すると、自動的にそのロールが付与されている年代に限定される

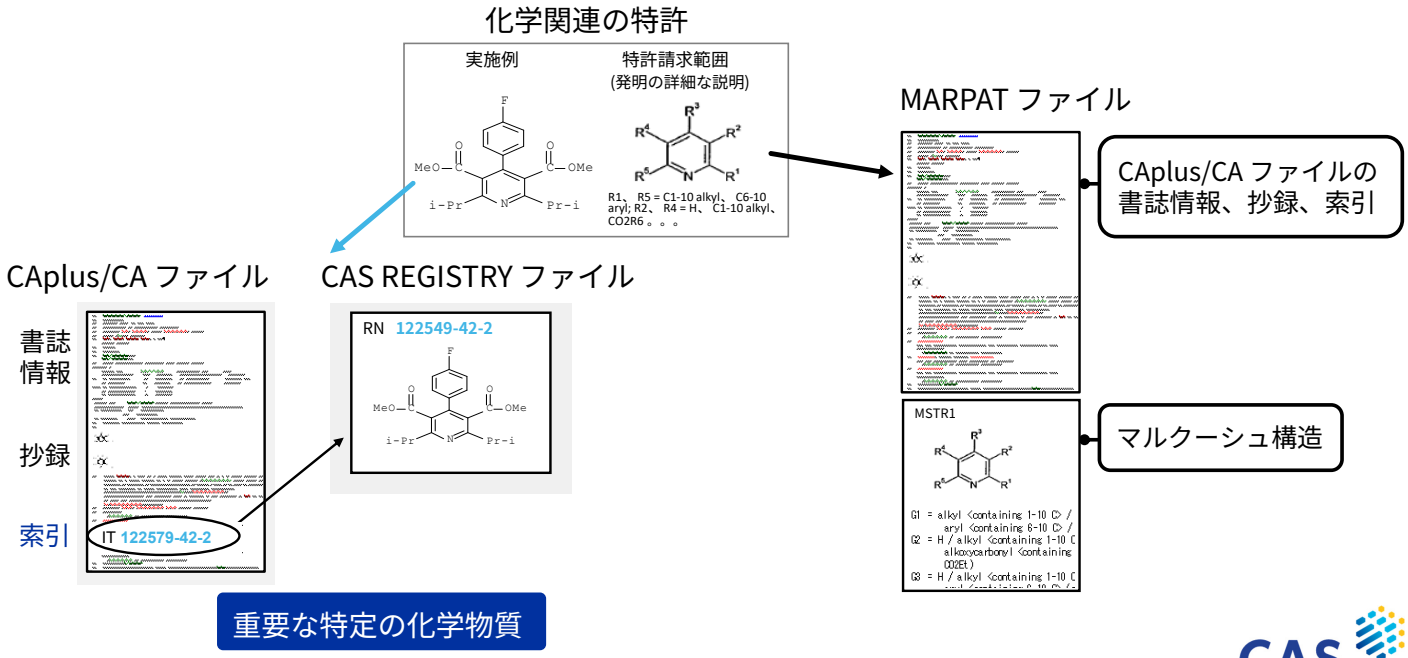
- CAS ロールにより付与年代に違いがある
- 製造を表すスーパーロール PREP および接尾辞 P は 1907 年以降のレコードに付与されている
- 多くの CAS ロールが 1967 年以降のレコードに付与されているが、それ以後に追加された CAS ロールや削除された CAS ロールもある
  - CAS ロールの 詳細は 「<詳細版> CA 文献検索」 参照 https://www.jaici.or.jp/download_file/view/a8f8f93d-63cd-4fe5-b732-c7932c94ba0f/

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

化学物質の索引方針

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS FILES における化学物質の索引



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAplus ファイルの化学物質の索引方針

雑誌論文の場合

文献中に記載されている科学的・技術的に新しい知見があった特定の化学物質

- 索引される化学物質
  - 新規物質
  - 新しい知見があった既存物質
- 通常索引されない化学物質
  - 汎用の試薬、溶媒、触媒
  - 計算物性値だけが記載されている物質や、公表されたデータ評価のために示された物質

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAplus ファイルの化学物質の索引方針

特許の場合 ①

- 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特定の化学物質
- 実施例由来の場合は、何らかの hard data (融点や NMR スペクトル等) のある特定の化学物質 (名称のみが記述されているような例示物質は索引されない)

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAplus ファイルの化学物質の索引方針

特許の場合 ②

- 以下の特許がベーシック特許 (特許ファミリーの中で CAS が最初に入手した特許) の場合は、実施例中の hard data のない化学物質 (Prophetic 物質) も索引される
  - 2009 年 1 月以降に発行された、主要国 (CA, DE, EP, FR, GB, JP, RU, US, WO) の特許
  - 1998-2008 年に CA, DE, EP, FR, GB, US, WO で発行された特許のうち、英語、 仏語または独語で書かれた特許 (1993-1997 年は一部収録)
  - 2000-2008 年に発行された、日本語で書かれた特許 (一部収録)

参考 : Prophetic 物質

- 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
- 新規/改良した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

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAplus ファイルの化学物質の索引方針

総説や学会会議録の場合

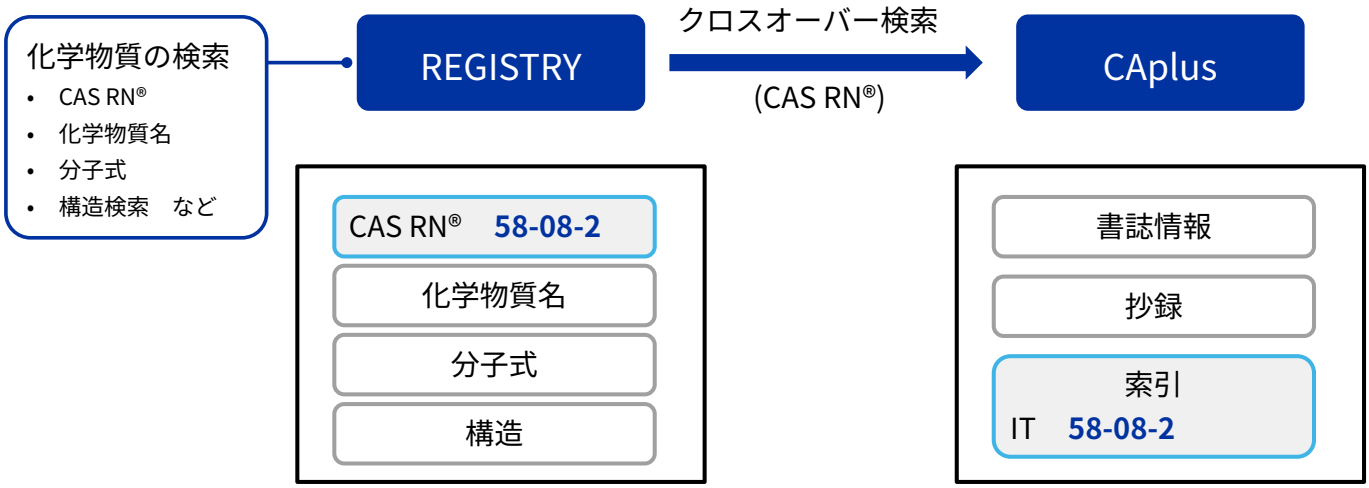
総説 (General Review) や学会会議録 (Conference) は、特許や雑誌の索引方針と異なる

- 総説や学会会議録の主題である化学物質が索引される
- 新たにデータが開示された化学物質は、基本的な索引方針に従い索引される
- 総説や学会会議録において以前に報告された情報は索引されない

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

化学物質に関する文献検索の流れ

REGISTRY ファイルから CAplus ファイルへクロスオーバー検索



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

化学物質の索引方針 - 各論

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

ご紹介する化学物質タイプ

化学物質タイプ	スライド番号
塩	31
配位化合物	40
水和物・溶媒和物	45
立体異性体	48
同位体	50
イオン・ラジカルイオン	55
優先形・非優先形	59
表形式無機化合物	63
ポリマー	67
核酸	71
タンパク質	72
Antibody Drug Conjugate (ADC)	74

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

塩の索引方針

CAplus ファイルでは、塩の CAS RN® で索引される

- 塩の種類に応じて REGISTRY ファイルでの登録形式が異なる

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

塩の種類

REGISTRY ファイルの塩は下記のように分類される

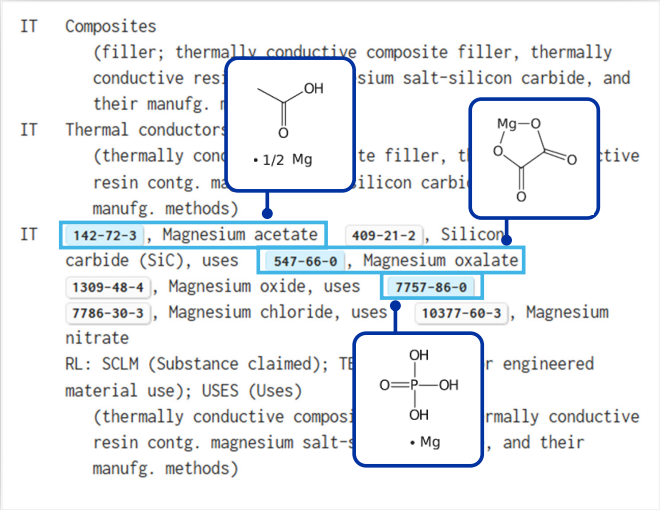
- 有機塩
  - 金属塩
  - カルボアニオンの塩
  - オニウム化合物の塩
  - アミン類の塩
- 無機塩

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

金属塩の索引 - レコード例

【原報の記述】

シュウ酸マグネシウム、リン酸マグネシウムまたは
酢酸マグネシウムを主成分とする充填剤の製造方法。

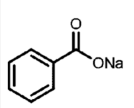
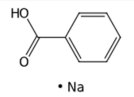
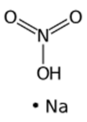


© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

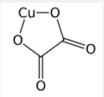
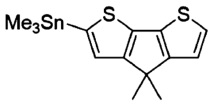
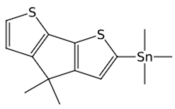
REGISTRY ファイルの登録 – 金属塩

塩の種類や構造によって多成分物質また単成分物質として登録される

- 多成分物質
  - ヘテロ原子* に結合している水素が
    無置換の金属で置換されて生成された塩

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
	RN 532-32-1 MF C7 H6 O2 . Na 
$NaNO_3$	RN 7631-99-4 MF H N O3 . Na  無機塩 (スライド 38 参照)

- 単成分物質
  - 環状構造をとる塩
  - 2 種類以上の有機成分と金属の塩

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
CuC_2O_4	RN 814-91-5 MF C2 Cu O4 
	RN 2142609-34-3 MF C14 H18 S2 Sn 

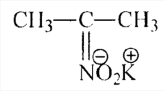
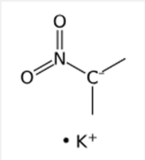
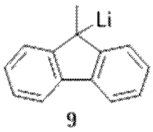
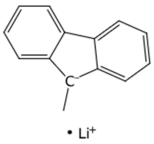
* O, S, Se, Te, N, P, As

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

REGISTRY ファイルの登録 – カルボアニオンの塩

多成分物質として登録される

- 炭素上に電荷が局在化しているカルボアニオンの成分と、カチオンの金属の成分から成る

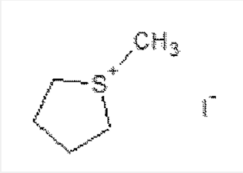
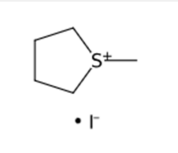
原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
	RN 28273-55-4 CN Propane, 2-nitro-, ion(1-), potassium (1:1) MF C3 H6 N O2 . K 
	RN 64918-35-0 CN 9H-Fluorene, 9-methyl-, ion(1-), lithium (1:1) MF C14 H11 . Li 

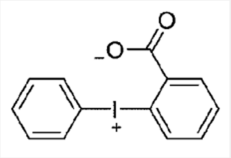
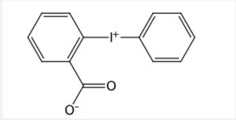
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

REGISTRY ファイルの登録 – オニウム化合物の塩

大部分のオニウム化合物の塩は、アニオンを独立成分とした多成分物質として登録されている

- 分子内塩を形成する場合には単成分物質で登録される
  - 多成分物質：大部分のオニウム化合物の塩
  - 単成分物質：分子内塩

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
	RN 28608-92-6 CN Thiophenium, tetrahydro-1-methyl-, iodide (1:1) MF C5 H11 S . I 

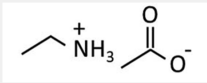
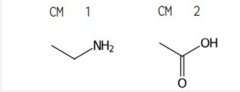
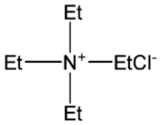
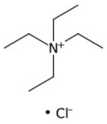
原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
	RN 1488-42-2 CN Iodonium, (2-carboxyphenyl) phenyl-, inner salt MF C13 H9 I O2 

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

REGISTRY ファイルの登録 – アミン類の塩

多成分物質として登録される

- 例外：塩化アンモニウムは単成分物質として登録される

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
	RN 25596-29-6 CN Ethanamine, acetate (1:1) MF C2 H7 N . C2 H4 O2 
	RN 56-34-8 CN Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, chloride (1:1) MF C8 H20 N . Cl 
NH_4Cl	RN 12125-02-9 CN Ammonium chloride ((NH4)Cl) MF Cl H4 N Cl—NH_4

例外 (単成分物質)

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

REGISTRY ファイルの登録 – 無機塩

基本的に表形式無機化合物 (後述) として登録される

- 古い年代に登録された無機塩は単成分物質として登録されている
  - 表形式無機化合物 (TIS) として登録

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
塩化マンガン	RN 11132-78-8 CN Manganese chloride MF Cl . Mn CI COM, TIS Component | Ratio | Component Registry Number ==========+==========+========== Cl | x | 22537-15-1 Mn | x | 7439-96-5

  - 単成分物質として登録

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
$MnCl_2$	RN 7773-01-5 CN Manganese chloride (MnCl2) MF Cl2 Mn CI COM Cl—Mn—Cl

- 硝酸塩のように、ヘテロ原子に結合している水素が無置換の金属で置換されて生成された塩は金属塩と同じ登録となる (スライド 34 参照)

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

参考：医薬品の索引

医薬品が塩である場合、活性成分であるフリー体のみが索引されることがある

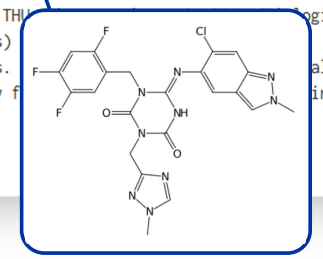
- 医薬品に関する文献検索では、フリー体も含めて検索する

【原報の記述】

・・・at least one anti-viral agent is selected from the group consisting of ivermectin, oseltamivir, ・・・, xocova, ensovibep, ・・・

ゾコーバはエンシトレルビルのフマル酸塩だが、このレコードでは活性成分であるエンシトレルビル (2647530-73-0) が索引されていた

IT 36791-04-5 60940-34-3 70288-86-7, Ivermectin
82956-11-4 83799-24-0 134523-00-5 155213-67-5
158966-92-8 192725-17-0 196618-13-0 259793-96-9
375823-41-9 1809249-37-3 2492423-29-5
2647530-73-0 2742611-24-9, Ensovibep
RL: PAC (Pharmacological activity); SCLM (Substance
claimed); THU ... ogical study);
USES (Uses)
(compns. ... al combination
therapy f ... in patient)



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

配位化合物の索引方針

著者の記述によって、以下の 2 通りで索引される

- 全体の構造が明らかな場合　　：配位化合物の CAS RN® で索引
- 完全な構造が不明な場合　　：配位子と中心原子のそれぞれの CAS RN® + 接尾辞 D で索引
  - ごく一般的な配位子は特に強調されていない限り索引されない

【原報の記述】

イオン交換膜に金エチレンジアミン錯体を吸着させて製造するイオン交換膜複合体

金 (7440-57-5) は D 付きで索引されているが、配位子である 1,2-エチレンジアミンは索引されていない

ST ion exchange membra
IT Ion exchange membra
(gold-bonded; ma
membranes)
IT 7440-57-5 D, Gold, ethylenediamine complex,
processes
RL: PEP (Physical, engineering or chemical process);
PROC (Process)
(in manuf. of gold-bonded ion-exchange membranes)

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

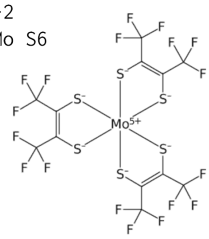
REGISTRY ファイルの登録 – 配位化合物

配位化合物にはクラス識別子 CCS が付与される

- CCS の定義：中心原子に他の原子、または原子団 (配位子) が結合し、それらと中心原子との間の結合数が原子価数に等しくない分子、またはイオンを指す。中心原子に対する限定はないが、通常は金属原子である。
- 配位化合物であってもクラス識別子 CCS が付与されない場合がある

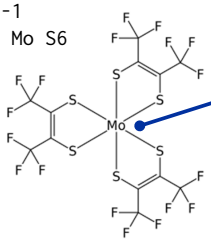
CCS が付与された配位化合物

RN 47784-53-2
MF C12 F18 Mo S6
CI CCS, COM



CCS が付与されていない配位化合物

RN 1494-07-1
MF C12 F18 Mo S6
CI COM



中心原子と結合している原子団との結合数が原子価と等しいため、CCS は付与されない

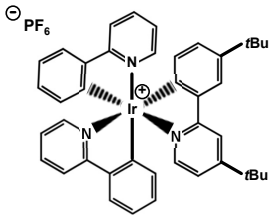
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

配位化合物の索引 - レコード例

全体の構造が明確な場合

【原報の記述】

Ir $(ppy)_2(dtbpy)PF_6$ 錯体 (I) の合成反応

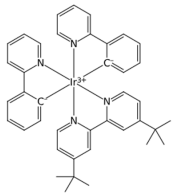


(I)

IT 94928-86-6 P 132958-92-0 P 149005-33-4 P 264906-16-3 P
370878-69-6 P 370878-73-2 P 391665-84-2 P 435293-93-9 P
911142-72-8 P 947254-90-2 P 1516880-30-0 P
2173009-59-9 P 2945838-99-1 P 3035069-10-1 P
RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(prepn. of iridium complex by mechanochem. reaction of iridium halide compd.(s) with ligand(s))

対イオン PF_6^- を含む多成分物質が索引

CM1
CCI CCS



CM2
CCI CCS

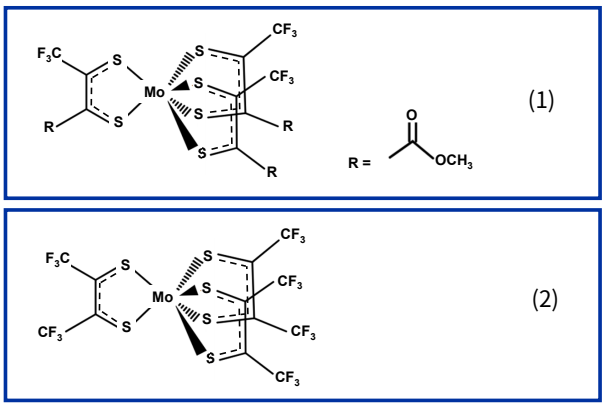
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

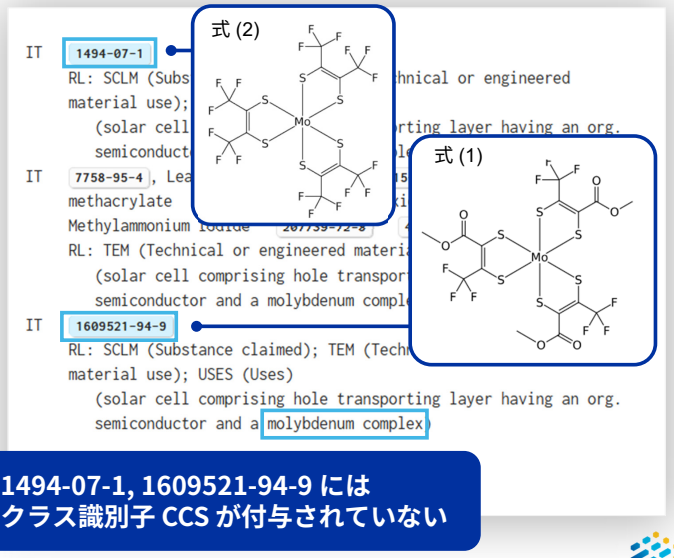
配位化合物の索引 - レコード例

全体の構造が明確な場合

【原報の記述】

下記式 (1) または (2) で表されるモリブデン錯体であることを特徴とする太陽電池。





1494-07-1, 1609521-94-9 には クラス識別子 CCS が付与されていない

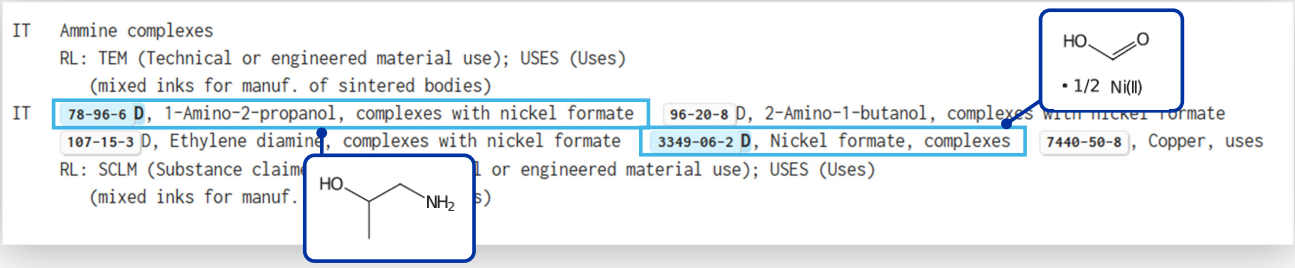
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

配位化合物の索引 - レコード例

完全な構造が不明確な場合

【原報の記述】

アミノ基を含有する配位子を有するギ酸ニッケル錯体を含む錯体で、前記アミノ基を含有する配位子が 1-アミノ-2-プロパノール、及びエチレンジアミンから選択されるインク。



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

水和物・溶媒和物の索引方針

通常は非水和物/非溶媒和物の CAS RN® が索引される

- 水和物/溶媒和物の分子形が重要である場合には、水和物/溶媒和物の CAS RN® で索引される
  - 溶媒和物の物理化学的物性やプロセス
  - 結晶、結晶の成長、沈殿、溶解度、溶解速度
  - 溶媒和としての用途
    (例：触媒、コンクリート、誘電体、イオン交換体、吸収剤、製薬、顔料、断熱材など)
- 特許クレーム中の水和物/溶媒和物は、水和物/溶媒和物の CAS RN® で索引される

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

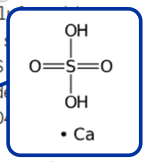
水和物・溶媒和物の索引 - レコード例

水和物・溶媒和物であることが重要ではない場合

【原報の記述】

・・・、沈降シリカ、硫酸カルシウム２水和物、尿素、
リン酸２ナトリウムを混合し、粉末状農薬組成物を得た。

IT 119-12-0, Pyridaphenthion 950-37-8, DMTP 1861-40-1,
Bethrodine 2921-88-2, Chlorpyrifos 5103-95-7, Beslogine
36001-88-4, Aminoprophos methyl 39515-41-8, Fenpropathrin
68694-11-1, Triflumizole 180409-60-3, Cyfl
RL: AGR (Agricultural use); BSU (Biological
unclassified); BIOL (Biological study); USES
(light-stable powder or granular pestici
polyoxyalkylene ethers and kaolin or CaSO
IT 7778-18-9, Calcium sulfate 36348-64-8,
Polyoxyethylene hexadecyl ether sulfate sodium salt
70903-63-8, Polyoxyethylene hexadecyl ether phosphate sodium
salt 119432-41-6
RL: AGR (Agricultural use); BSU (Biological study,
unclassified); MOA (Modifier or additive use); BIOL (Biological
study); USES (Uses)
(light-stable powder or granular pesticides contg.
polyoxyalkylene ethers and kaolin or CaSO4)
:



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

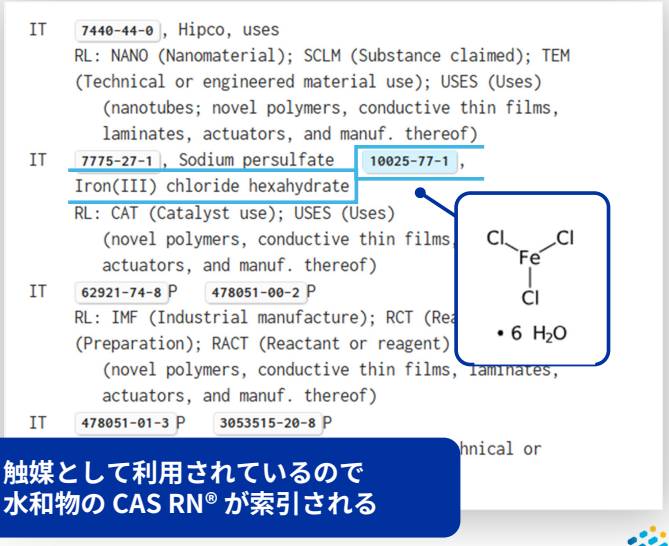
水和物・溶媒和物の索引 - レコード例

水和物・溶媒和物であることが重要な場合

【原報の記述】

メトキシトリエチレングリコールを導入したポリ (3,4- エチレンジオキシチオフェン) (I) の合成

・・・装置にメタノール、水、メトキシトリエチレングリコール 3,4- エチレンジオキシチオフェンを入れ、室温で攪拌した。ここに塩化鉄 (III) 六水和物と過硫酸ナトリウムを加え、さらに室温で攪拌した。



触媒として利用されているので
水和物の CAS RN® が索引される

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

立体異性体の索引方針

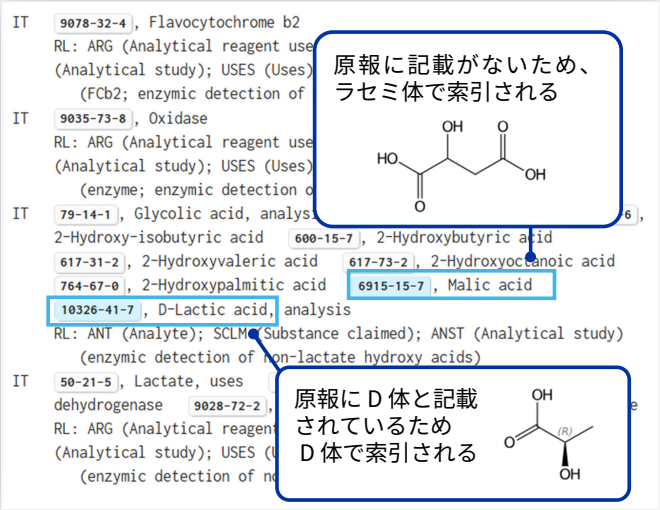
- 著者や発明者が立体情報を強調・明記していない場合、原則として立体異性体はラセミ体 (平面構造) の CAS RN® で索引される
- エナンチオマー、ジアステレオマーが分離されており、存在比率の低い方を明らかに副生成物とみなしているような場合には、比率の高い方のみを索引する

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

立体異性体の索引 - レコード例

【原報の記述】

・・・, wherein the hydroxy acid other than lactate is selected from : group A consisting of 2-hydroxybutyric acid, ・・・malic acid, 2-hydroxy-isobutyric acid, D-lactic acid, and the respective salt of any one of the foregoing.



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

同位体の索引方針

通常は、同位体標識化合物の CAS RN® が索引される

- 自然存在比が 98% 以上の同位体の場合は、原則として標準元素の CAS RN® が索引される
  - 自然存在比が 98% 以上の同位体の例：
    ^{1}H, ^{4}He, ^{9}Be, ^{12}C, ^{14}N, ^{16}O, ^{19}F, ^{23}Na, ^{27}Al, ^{31}P, ^{40}Ar, ^{45}Sc, ^{51}V, ^{55}Mn, ^{59}Co, ^{75}As, ^{89}Y, ^{93}Nb, ^{103}Rh, ^{127}I, ^{133}Cs, ^{139}La, ^{141}Pr, ^{159}Tb, ^{165}Ho, ^{169}Tm, ^{181}Ta, ^{197}Au, ^{209}Bi, ^{232}Th, ^{238}U
- 2001 年までは同位体標識化合物の製法に関する文献以外は非標識化合物の CAS RN® で索引していた

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

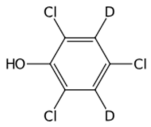
REGISTRY ファイルの登録 – 同位体

同位体標識化合物には独自の CAS RN® が付与される

- 重水素と三重水素は、個別の元素記号 (D, T) を用いた分子式が収録される
- 水素以外の元素の同位体は分子式に示されず、CA 索引名に反映される
- 同位体の数や位置の情報が明示されていない場合、CA 索引名は labeled with と表記される

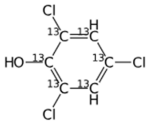
D または T を含む同位体

RN 93951-80-5
CN Phen-3,5-d2-ol, 2,4,6-trichloro-
MF C6 H Cl3 D2 O



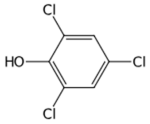
水素以外の同位体

RN 208461-28-3
CN Phenol-13C6, 2,4,6-trichloro-
MF C6 H3 Cl3 O



同位体の数や位置が不明

RN 68695-36-3
CN Phenol, 2,4,6-trichloro-, labeled with carbon-14
MF C6 H3 Cl3 O
IL XC-14

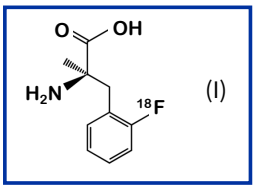


© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

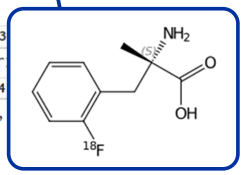
同位体の索引 - レコード例

【原報の記述】

[^{18}F] フッ素イオンを用いた化合物 (I) の製造



IT 190143-07-8 P, 4-(Fluoro-18F)-α-methyl-L-phenylalanine
190143-08-9 P, 2-(Fluoro-18F)-α-methyl-L-phenylalanine 751470-99-2 P,
3-(Fluoro-18F)-α-methyl-L-phenylalanine 2348449-01-2 P,
2-(Fluoro-18F)-α-methyl-D-phenylalanine 2348449-11-4 P,
3-(Fluoro-18F)-α-methyl-D-phenylalanine 2348449-12-5 P,
4-(Fluoro-18F)-α-methyl-D-phenylalanine
RL: BSU (Biological study, unclassified); DGN (Diagnostic use); PAC (Pharmacological activity); SPN (Synthetic preparation); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)
(prepn. of radioactive fluorine-18 labeled α-methylphenylalanine for positron emission tomog. of tumors)
IT 67-56-1, Methanol, reactions 3282-3
6131-90-4, Acetic acid sodium salt tr
Lithium tetrafluoroborate 17350-84-4
D-α-Methylphenylalanine 23239-35-2,
L-α-Methylphenylalanine 23978-09-8
:



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

同位体の索引 - レコード例

自然存在数 98% 以上の同位体の文献

【原報の記述】

The library contains evaluated nuclear data, which are listed in Table 1.

Table 1　List of nuclides and MAT numbers

Nuclides	
:	:
39Y	89
39Y	91
40Zr	92
40Zr	93
40Zr	94
:	:

IT　1333-74-0, Hydrogen, reactions　7440-44-0, Carbon, reactions
:
reactions　14191-87-8, Mercury 199, reactions
14234-24-3, Yttrium 91, reactions　14234-29-8, Cesium 136, reactions　14255-03-9, Calcium 44, reactions　14257-58-0, Sulfur 33, reactions　14258-72-1, Lithium 6, reactions
14265-72-6, Antimony 121, reactions　14265-76-0, Hafnium 179, reactions　14265-77-1, Hafnium 178, reactions　14265-78-2, Hafnium 180, reactions　14265-80-6, Tungsten 182, reactions
14265-81-7, Tungsten 183, reactions　14265-82-8, Tungsten 184, reactions　142
Actinium 225, r
:
IT　7440-62-2, Vana
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
(vanadium 51 neutron cross sections in JENDL-3.3)
IT　7440-65-5, Yttrium, reactions
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
(yttrium 89 neutron cross sections in JENDL-3.3)

^{91}Y の索引

核種として ^{89}Y が記載されているが、自然存在数 98% 以上の同位体であるため、標準元素の Y (Yttrium) を索引

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

同位体の索引 - レコード例

2001 年よりも前の文献 (古いレコード)

【原報の記述】

Malonate did not show any effect on ^{137}Cs uptake at concentration of 0.05 μg/g body. On the other hand, the inhibition in ^{137}Cs uptake has been even more pronounced at 25 μg malonate/g body.

IT　Heart, metabolism
Muscle, metabolism
(of cesium, glucose and malonate and succinate effect on)
IT　7440-46-2, biological studies
RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)
(metabolism of, by muscle, glucose, malonate and succinate effect on)

原報では ^{137}Cs が記載されているが、同位体化合物の製造に関する文献ではないため、標準元素の Cs が索引された

IT　50-99-7, biological studies　110-15-6, biological studies
141-82-2, biological studies
RL: BIOL (Biological study)
(muscle metabolism of cesium response to)

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

イオン・ラジカルイオンの索引方針

通常、イオンではない形で索引する

- 著者や発明者が文献中でイオンやラジカルイオンである局面を強調している場合は、該当する分子形の CAS RN® で索引される
- 双性イオンの場合、分子内塩に分類されるものの中にはイオンの形で索引されるものがある (スライド 36 参照)

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

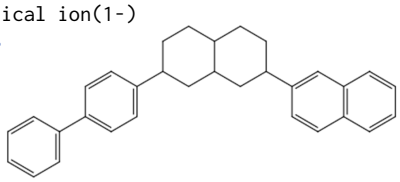
REGISTRY ファイルの登録 – ラジカルイオン (RIS)

ラジカルイオンにはクラス識別子 RIS が付与される

- RIS の定義：不対電子と正または負の電荷をもつ有機化合物であり、形式的には中性化合物から電子を取り除くか、あるいは電子を付加することによって得られる物質
- ラジカルイオンであってもクラス識別子 RIS が付与されない場合がある (例 : 構造が不確定な物質、軸不斉などの特殊な立体化学を持つ物質)

RIS が付与されたラジカルイオン

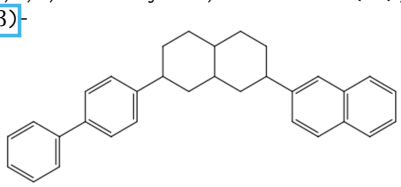
RN 188070-35-1
CN 2,2‘-Binaphthalene, 7-[1,1’-biphenyl]-4-yl-1,2,3,4,4a,5,6,7,8,8a-decahydro-, radical ion(1-)
CI **RIS**



RIS が付与されていないラジカルイオン

RN 173935-55-2
CN 2,2‘-Binaphthalene, 7-[1,1’-biphenyl]-4-yl-1,2,3,4,4a,5,6,7,8,8a-decahydro-, radical ion(1+), (2α,4aα,7β,8aβ)-

軸不斉を持つため RIS が付与されない



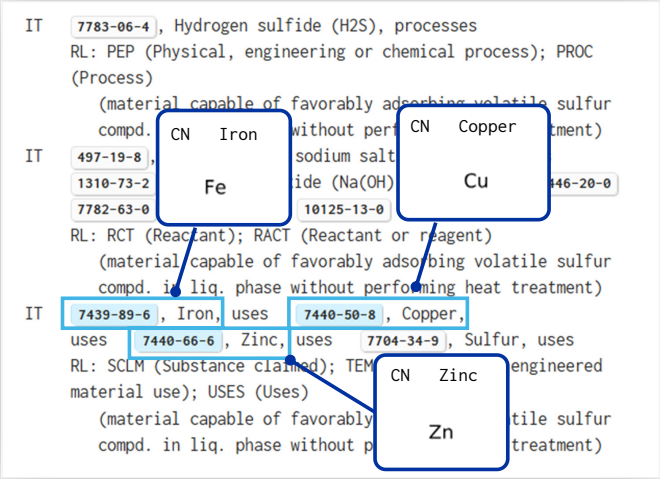
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

イオン・ラジカルイオンの索引 - レコード例

通常の索引

【原報の記述】

2 価陽イオンが亜鉛イオン、鉄イオン又は銅イオンであり、
3 価陽イオンが鉄イオンである吸着剤。



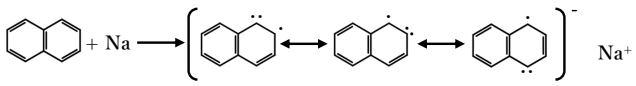
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

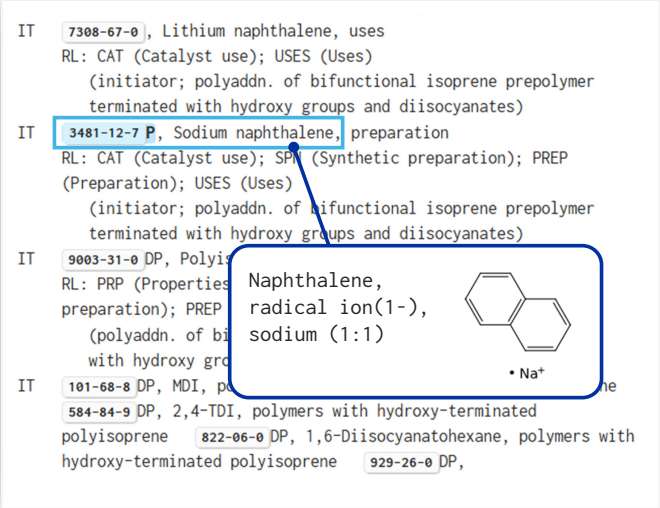
イオン・ラジカルイオンの索引 - レコード例

著者や発明者が強調している場合

【原報の記述】

開始剤としてナトリウム-ナフタレンを使用することで、
末端にヒドロキシル基を持つポリマーが収率よく生成すること
がわかった。





© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

優先形・非優先形の索引方針

物質によっては、索引に用いる優先形が決まっている化学物質がある

- 例
  - アミノ酸　　：L 体が優先形。原報で特に指定されていない限り L 体とみなして索引される
  - 単糖類　　：アノマー位の立体化学 (α-D-、β-D- など) が明記されているか、置換や エステル化などで環状構造に固定されていない限り、鎖状構造の CAS RN® が索引される
  - 互変異性体　：原則、優先される分子形で索引される。 著者が特に非優先の分子形を強調している場合は、その分子形で索引される

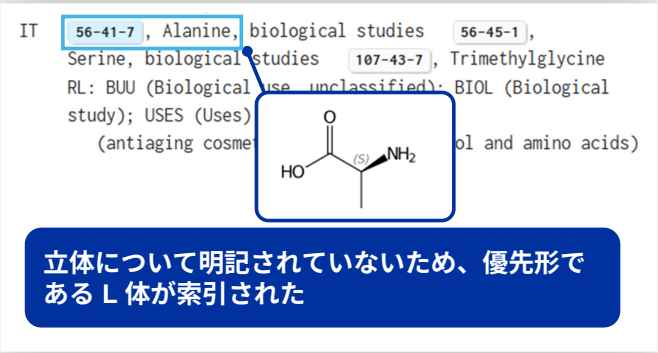
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

優先形・非優先形の索引 - レコード例

アミノ酸

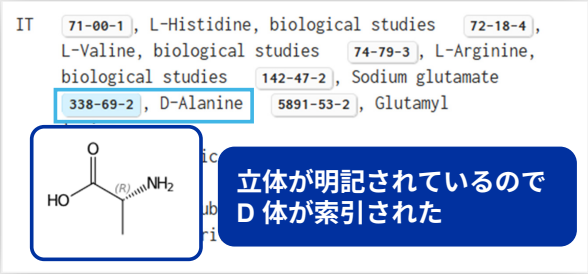
【原報の記述】

セリン、アラニンおよびトリメチルグリシンの少なくとも 1 種を配合することを特徴とする皮膚外用薬。



【原報の記述】

前記有効成分を D- アラニンに変更した以外は例 1 と同様にして実験を行った。



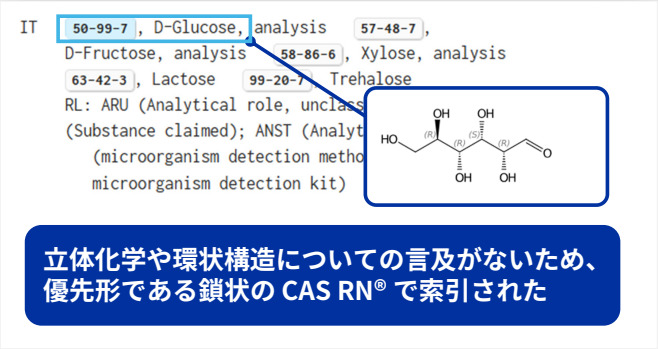
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

優先形・非優先形の索引方針

単糖類

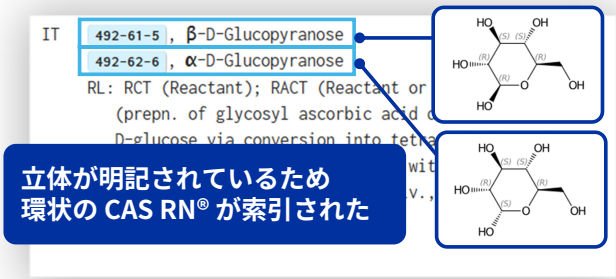
【原報の記述】

・・・の糖類が、グルコース、フルクトース、キシロース、ラクトース、及びトレハロースから選択される・・・



【原報の記述】

・・・を加熱還流させ、D-グルコース (α 体/β 体の混合物) を 15 分かけて段階的に加えた。



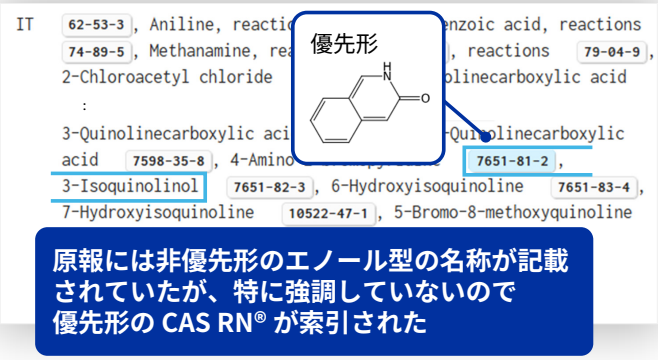
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

優先形・非優先形の索引 - レコード例

互変異性体

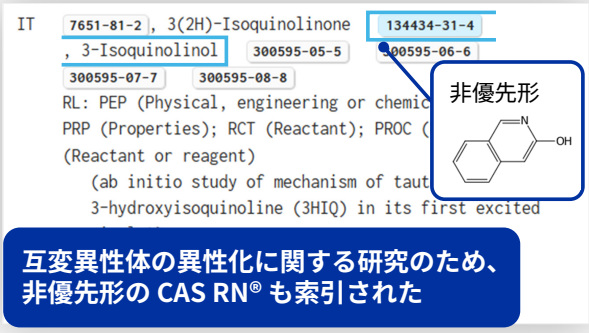
【原報の記述】

The title compound (b) was prepared from 3-isoquinolinol in the same fashion as Example 1.



【原報の記述】

Table 1 summarizes that the main geometrical parameters involved the proton transfer in the isolated 3-hydroxyisoquinoline are listed in Table I.



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

表形式無機化合物の索引方針

結合表を作れない無機化合物は表形式無機化合物 (TIS) として登録され、
その CAS RN® が索引される

- 結合表を作れない理由は下記の通り
  - 構造が不明である
  - 独立した分子を持たない物質
  - 3 次元格子構造を持つ物質
  - 非化学量論的な成分を含む物質
    (組成比が非整数ないし数値範囲で表される物質)

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

REGISTRY ファイルの登録 - 表形式無機化合物 (TIS)

- クラス識別子 TIS が付与される
- 組成比はモル比で収録される
  - 組成比は完全分子式 (MF) には含まれない
  - 組成比は CA 索引名、非優先分子式 (AF) や
    組成表に含まれる

```
RN   12030-85-2    REGISTRY
ED   Entered STN:  16 Nov 1984
CN   Niobium potassium oxide (NbKO3)  (CA INDEX NAME)
 :
MF   K . Nb . O
 :
AF   K Nb O3
CI   COM, TIS
 :
  Component    |       Ratio        |     Component
               |                    |  Registry Number
==============+====================+===================
O              |         3          |       17778-80-2
K              |         1          |        7440-09-7
Nb             |         1          |        7440-03-1
```

組成比は非優先分子式 (AF) や表、CA 索引名に含まれる

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

表形式無機化合物の索引 - レコード例

複合酸化物

【原報の記述】

前記導電性複合酸化物が、組成式：$La_{1-x}Sr_xMnO_3$ (式中、x は 0.02～0.50 の数) で表される複合酸化物であることを特徴とする触媒。

```
IT   911682-62-7 , Lanthanum manganese strontium oxide
     (La0.5-0.98MnSr0.02-0.5O3)
     RL: CAT (Catalyst use); SCLM (Substance claimed); USES (Uses)
        (catalyst comprising elec. conductive perovskite-type (La,Sr)MnO3, app.,
        method for oxidative removal of hydrocarbons from exhaust gas)
IT   108916-22-9 P, Lanthanum manganese strontium oxide (La0.8MnSr0.2O3)
     126345-48-0 P, Lanthanum manganese strontium oxide (La0.95MnSr0.05O3)
     140905-40-4 P, Lant                                   5O3)
     141588-90-1 P, Lant                                   O3)
     RL: CAT (Catalyst                                  ration), US
     (Uses)
        (catalyst comprising elec. conductive perovskite-type (La,Sr)MnO3, app.,
        method for oxidative removal of hydrocarbons from exhaust gas)
```

La と Sr の組成比は、規定された x をもとに算出した値が収録される

```
RN   911682-62-7  REGISTRY
CN   Lanthanum manganese strontium oxide
     (La0.5-0.98MnSr0.02-0.5O3)  (CA INDEX NAME)
MF   La . Mn . O . Sr
AF   La0.5-0.98 Mn O3 Sr0.02-0.5
CI   TIS
```

Component	Ratio	Component Registry Number
O	3	17778-80-2
Sr	0.02 - 0.5	7440-24-6
Mn	1	7439-96-5
La	0.5 - 0.98	7439-91-0

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

表形式無機化合物の索引 - レコード例

複合酸化物

【原報の記述】

電極活性物質として $LiMn_{0.5}Ni_{0.5}O_2$ をコーティングさせた負極を得た。

```
IT   12031-65-1 P, Lithium nickel oxide (LiNiO2)
     128975-24-6 P, Lithium manganese nickel oxide
     (LiMn0.5Ni0.5O2)   144973-42-2 P, Lithium manganese nickel oxide
     (LiMn0.3Ni0.7O2)   163596-49-4 P, Lithium manganese nickel oxide
     (LiMn0.2Ni0.8O2)   166187-76-4 P, Lithium manganese oxide
     (LiMnO2)   172484-40-1 P, Aluminum lithium nickel oxide
     (Al0.1LiNi0.90                                  oxide
     (LiMn0.8Ni0
     (LiMn0.6Ni0
     (LiMn0.4Ni0
     (Al0.15LiNi
     oxide (Al0.
```

組成比をなるべく整数比になるように索引するというルールのため、明細書中の記載とは異なる存在比の CAS RN® で索引されている

```
RN   128975-24-6  REGISTRY
ED   Entered STN:  24 Aug 1990
CN   Lithium manganese nickel oxide (Li2MnNiO4)  (CA INDEX NAME
  :
AF   Li2 Mn Ni O4
  :
```

Component	Ratio	Component Registry Number
O	4	17778-80-2
Ni	1	7440-02-0
Mn	1	7439-96-5
Li	2	7439-93-2

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

ポリマーの索引方針

ポリマーの種類により CAplus ファイルでの索引方針が異なる

ポリマーの種類	索引方針
• 縮合系ポリマー • ビニル系ポリマー • 一部の後処理を加えたポリマー (塩、付加化合物、エステル化、エーテル化など)	ポリマーの CAS RN® で索引
• 後処理を加えたポリマー (塩素化、アルキル化、アミド化、イミド化、加水分解など)	後処理前ポリマーの CAS RN® + D + キーワードで索引
• 石油系樹脂 • クマロン-インデン樹脂 • シリコーン *	統制語で索引

* 独自の CAS RN® を持つシリコーンの場合、CAS RN® も索引される

検索方法の詳細は 「<詳細版> ポリマー検索」 D 章参照
https://www.jaici.or.jp/download_file/view/f89ee95c-3b12-4d4d-b8ee-487225e36de9/

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

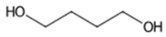
REGISTRY ファイルの登録 - ポリマー (PMS)

- ポリマー (PMS) の定義
  - 重合度 11 以上または重合度不明の物質
  - 重合後の構造が不明なオリゴマー
- 大部分のポリマーは主鎖を構成する「原料モノマー」 に基づいて登録する (モノマー単位ポリマー)
- 規則的な構造の繰り返しで表すことができる縮合系ポリマーは、繰り返し単位でも登録される (SRU ポリマー)

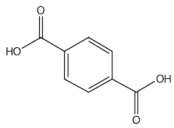
モノマー単位ポリマー

RN 26062-94-2
MF (C8 H6 O4 . C4 H10 O2)x
CI PMS, COM
PCT Polyester, Polyester formed

CM 1
CRN 110-63-4

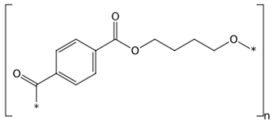


CM 2
CRN 100-21-0



SRU ポリマー

RN 24968-12-5
MF (C12 H12 O4)n
CI PMS
PCT Polyester



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

参考：モノマーの索引方針

原則としてポリマーの CAS RN® が索引されるが、下記の場合はモノマーの CAS RN® が索引される

- モノマーを合成している場合
- 重合反応に関する研究をしている場合
- 特許の請求項で、ポリマーがモノマーの組み合わせとして表現されている場合 (2007 年 12 月以降)
- 特許の実施例で、モノマーを重合させてポリマーを得た場合 (2015 年 9 月以降)

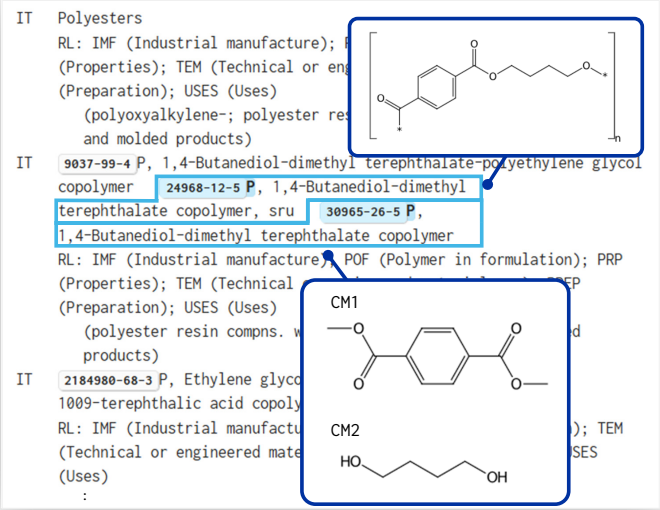
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

ポリマーの索引 - レコード例

【原報の記述】

ポリブチレンテレフタレートの製造

反応槽に、ジメチルテレフタレート、1,4-ブタンジオールを加え、槽内液温を 170 ℃ にした。



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

核酸の索引方針

核酸は、原報に配列情報が記載されているかによって索引が異なる

配列情報を記載している文献*	配列情報を記載していない文献
化合物クラス名 (統制語)	化合物クラス名 (統制語)
核酸の CAS RN®	

* 核酸の配列を記載しており、研究にとって重要だが新規性がない場合

- 非特許文献　：新規性がない配列なので核酸の CAS RN® は索引しない
- 特許　　：新規性がなくてもクレームされていれば核酸の CAS RN® を索引する
  クレームされておらず、新規性もなければ CAS RN® は索引しない

収録基準や検索方法の詳細は 「核酸・タンパク質の文献検索」 参照
https://seminar.jaici.or.jp/doc/stn_seqref.pdf

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

タンパク質の索引方針

タンパク質は、タンパク質の種類と研究内容によって索引が異なる

タンパク質の種類	研究内容	
	構造・配列の研究	機能・働きの研究
主に酵素やホルモン	CAS RN® (配列情報あり)	CAS RN® (配列情報なし)
主に酵素やホルモン以外のタンパク質	CAS RN® (配列情報あり)	化合物クラス名 (統制語)

- 医薬品として使われているタンパク質の場合、配列情報の有無にかかわらず
  医薬品名を持つ CAS RN® が索引される

収録基準や検索方法の詳細は 「核酸・タンパク質の文献検索」 参照
https://seminar.jaici.or.jp/doc/stn_seqref.pdf

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

REGISTRY ファイル - 核酸・タンパク質の収録基準

- 核酸・タンパク質の定義
  - 核酸：塩基数が 9 以上の配列
  - タンパク質：アミノ酸が 4 以上の配列

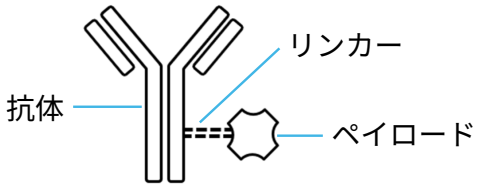
- 由来となる文献の資料種類と年代によって収録基準* が異なる
  - 例：特許由来の配列
    - 1999 年 (核酸は 1999 年 10 月)～2014 年 4 月
      新規性の有無や記載位置に関係なく、特許に記載されたすべての配列
    - 2014 年 5 月以降
      請求項および実施例中の請求項に関連した主要な配列

* 収録基準の詳細は 「<詳細版> REGISTRY ファイル配列検索」 参照
https://www.jaici.or.jp/download_file/view/b2ba0aad-6fef-44c1-b51f-1b311a0d4bb5/

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

Antibody Drug Conjugate (ADC) の索引方針

ADC の索引は原報の記載により様々である



- ADC の CAS RN® が索引

```
IT    1607824-64-5 , Naratuximab emtansine
      RL: PAC (Pharmacological activity); THU (Therapeutic use); BIOL
      (Biological study); USES (Uses)
         (Debio 1562 (Naratuximab emtansine); anti-CD37 antibody drug conjugate
         combination therapy with anti-CD20 antibody and dosing regimens
         thereof)
```

- ペイロード、リンカー、抗体、ペイロードとリンカーの CAS RN® で索引

```
IT    180288-69-1 D, antibody conjugates
      RL: PAC (Pharmacological activity); PRP (Properties); THU (Therapeutic
      use); BIOL (Biological study); USES (Uses)
         (method for prepg. carrier-drug conjugate comprising heterogeneous
         drugs for prevention and treatment of cancer)
IT    474645-27-7 D, antibody conjugates    3003834-30-5 D, antibody
      conjugates    3003834-34-9 D, antibody conjugates
      RL: PAC (Pharmacological activity); THU (Therapeutic use); BIOL
      (Biological study); USES (Uses)
         (method for prepg. carrier-drug conjugate comprising heterogeneous
         drugs for prevention and treatment of cancer)
```

抗体

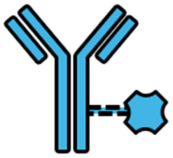
ペイロード

- ADC に関する情報がテキスト説明句等に含まれている

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

REGISTRY ファイルの登録 – ADC

ADC 全体としての登録



```
RN    1607824-64-5      REGISTRY
ED    Entered STN:  21 May 2014
CN    Immunoglobulin, anti-(human CD antigen CD37) (human-Mus musculus
      monoclonal K7153A heavy chain), disulfide with human-Mus musculus
      monoclonal K7153A light chain, dimer, tetraamide with
      N2'-[3-[[1-[(trans-4-carboxycyclohexyl)methyl]-2,5-dioxo-3-
      pyrrolidinyl]thio]-1-oxopropyl]-N2'-deacetylmaytansine  (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN    Debio 1562
CN    IMGN 529
CN    Naratuximab emtansine
FS    PROTEIN SEQUENCE
MF    Unspecified
CI    MAN
SR
LC

**RELAT
SEQ      1 QVQVQESGPG LVAPSQTLSI TCTVSGFSLT TSGVSWVRQP PGKGLEWLGV
        51 IWGDGSTNYH PSLKSRLSIK KDHSKSQVFL KLNSLTAADT ATYYCAKGGY
       101 SLAHWGQGTL VTVSSASTKG PSVFPLAPSS KSTSGGTAAL GCLVKDYFPE

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
** USE 'SQD' OR 'SQIDE' FORMATS TO DISPLAY SEQUENCE **

47 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
48 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

抗体の抗原、鎖などの情報

リンカーの部分名

ペイロードの部分名

医薬品名や開発コードが含まれることがある

配列情報を含む場合と、含まない場合がある

- ADC 全体としての登録は、USAN (United States Adopted Names : 米国一般名) や、INN (International Non-proprietary Names : 国際一般名) の情報を受け取ったときに作成される

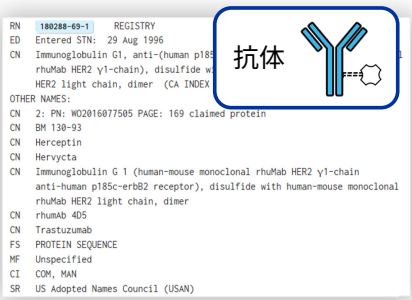
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

REGISTRY ファイルの登録 – ADC (続き)

ADC の各部位ごとの登録

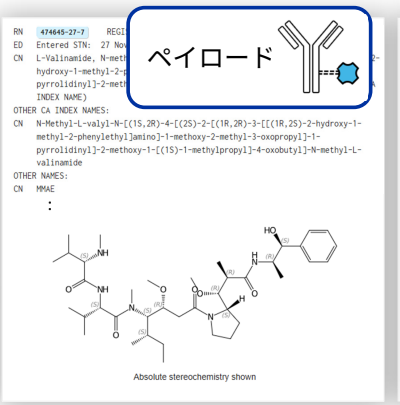
抗体、リンカー、ペイロードがそれぞれ単独の物質の CAS RN® を有する場合がある

- ペイロードとリンカーが結合した物質の CAS RN® を持つ場合がある



```
RN    180288-69-1      REGISTRY
ED    Entered STN:  29 Aug 1996
CN    Immunoglobulin G1, anti-(human p185
      rhuMab HER2 γ1-chain), disulfide w
      HER2 light chain, dimer  (CA INDEX
OTHER NAMES:
CN    2: PN: WO2016077505 PAGE: 169 claimed protein
CN    BM 130-93
CN    Herceptin
CN    Hervycta
CN    Immunoglobulin G 1 (human-mouse monoclonal rhuMab HER2 γ1-chain
      anti-human p185c-erbB2 receptor), disulfide with human-mouse monoclonal
      rhuMab HER2 light chain, dimer
CN    rhumAb 4D5
CN    Trastuzumab
FS    PROTEIN SEQUENCE
MF    Unspecified
CI    COM, MAN
SR    US Adopted Names Council (USAN)
```

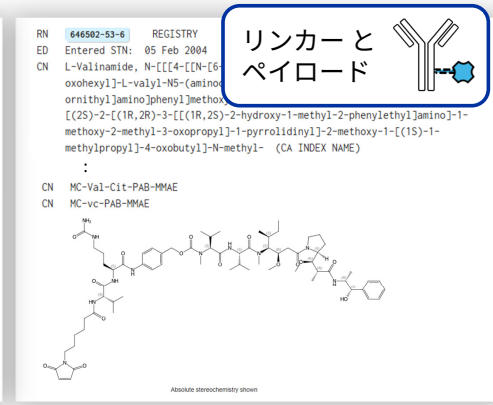
抗体



```
RN    474645-27-7      REGI
ED    Entered STN:  27 Nov
CN    L-Valinamide, N-meth
      hydroxy-1-methyl-2-p
      pyrrolidinyl]-2-meth
      INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN    N-Methyl-L-valyl-N-[(1S,2R)-4-[(2S)-2-[(1R,2R)-3-[[(1R,2S)-2-hydroxy-1-
      methyl-2-phenylethyl]amino]-1-methoxy-2-methyl-3-oxopropyl]-1-
      pyrrolidinyl]-2-methoxy-1-[(1S)-1-methylpropyl]-4-oxobutyl]-N-methyl-L-
      valinamide
OTHER NAMES:
CN    MMAE
      :
```

Absolute stereochemistry shown

ペイロード



```
RN    646502-53-6      REGISTRY
ED    Entered STN:  05 Feb 2004
CN    L-Valinamide, N-[[[4-[[N-[6-
      oxohexyl]-L-valyl-N5-(amino
      ornithyl]amino]phenyl]methox
      [(2S)-2-[(1R,2R)-3-[[(1R,2S)-2-hydroxy-1-methyl-2-phenylethyl]amino]-1-
      methoxy-2-methyl-3-oxopropyl]-1-pyrrolidinyl]-2-methoxy-1-[(1S)-1-
      methylpropyl]-4-oxobutyl]-N-methyl-  (CA INDEX NAME)
      :
CN    MC-Val-Cit-PAB-MMAE
CN    MC-vc-PAB-MMAE
```

Absolute stereochemistry shown

リンカーとペイロード

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

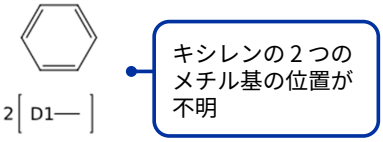
参考：定義の不完全な物質 (IDS)

分子式は確定しているが完全な構造が不明な物質 (IDS) も REGISTRY ファイルに収録し、CAplus ファイルに索引される

- 定義の不完全な物質 (IDS) の種類
  - ① 置換基の位置が不明な物質
  - ② 飽和または不飽和結合の位置が不明な物質
  - ③ 枝分かれ構造が不明なアルキル鎖を含む物質
  - ④ 環構造が不明な糖基を含む物質
  - ⑤ 縮合反応生成物で、正確な構造が不明な物質
- 定義の不完全な物質のレコードは、構造図だけでなく、分子式や CA 索引名から構造を判断するのが重要である

① 置換基の位置が不明な物質

```
RN    1330-20-7
CN    Benzene, dimethyl-
OTHER CA INDEX NAMES:
CN    Xylene (8CI)
MF    C8 H10
```



キシレンの 2 つのメチル基の位置が不明

詳細は 「REGISTRY 検索テクニック 2013」 参照
https://www.jaici.or.jp/download_file/view/6ec43f96-c153-4cce-bf01-2d0a6882ecf6/

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

参考

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

複数のレコードが作成される場合

CAplus ファイルのレコード構成は、1 レコード= 1 文献 (1 レコード= 1 特許ファミリー)
単位であるが、複数のレコードが作成される場合がある

- 主な例
  - ダブルベーシック特許のレコード
  - 索引が多いレコード

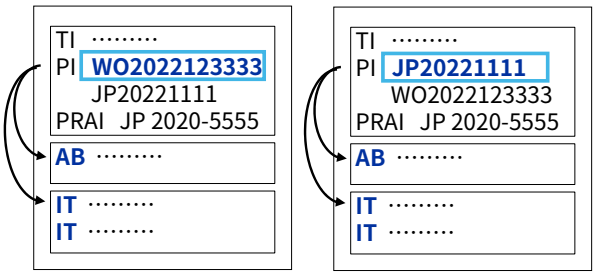
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

ダブルベーシック特許

より網羅的な検索が可能に

PCT 出願公報および PCT 出願の基礎となった最も古い優先権情報を持つ国内出願公報の両方をベーシック特許として収録する

- PCT 出願公報にしか記載されていない化学物質や配列の情報も索引されるため、より網羅的な検索が可能となる
  - 特許発行国/機関により対象となる年代が異なる。詳細は 「<詳細版> CA 文献検索」参照 https://www.jaici.or.jp/download_file/view/a8f8f93d-63cd-4fe5-b732-c7932c94ba0f/



各レコードにおいて、ベーシック特許を元に索引や抄録を作成する

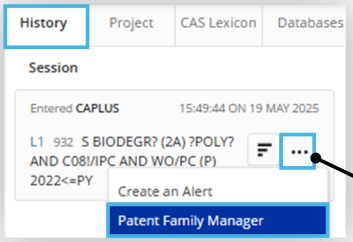
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

ダブルベーシック特許の重複除去

Patent Family Manager

ダブルベーシック特許のレコードが同一の化学物質索引である場合もあり、その場合には SO (収録源) フィールドに “Chemical Indexing Equivalent to …” と表示される (…部分に該当の CA 抄録番号が入る)

- 同一の化学物質索引を持つダブルベーシック特許の重複を除きたい場合は、CAS STNext の Patent Family Manager (特許ファミリーマネージャー) を利用する
  - “ Chemical Indexing Equivalent” タグを利用して、ダブルベーシック特許を判別する



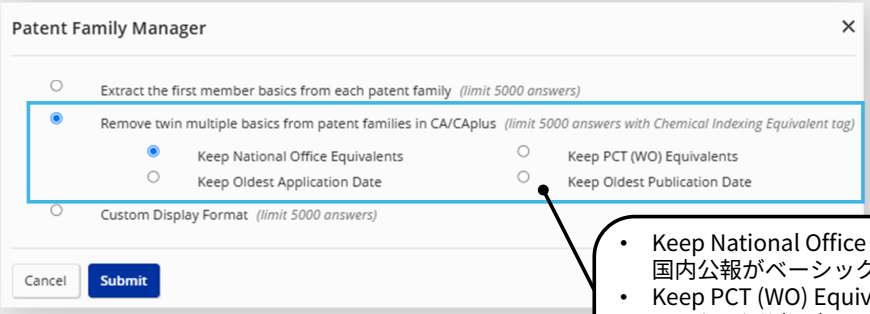
History タブの三点アイコンから
Patent Family Manager をクリックする

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

ダブルベーシック特許の重複除去

Patent Family Manager

残すレコードを選択して Submit をクリックすると、Patent Family Manager が自動実行され、重複を除いた回答セットが作成される



- Keep National Office Equivalents
  国内公報がベーシック特許のレコードを残す
- Keep PCT (WO) Equivalents
  PCT (WO) 公報がベーシック特許のレコードを残す
- Keep Oldest Application Date
  ベーシック特許の出願日が古い方を残す
- Keep Oldest Publication Date
  ベーシック特許の発行日が古い方を残す

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

索引の多いレコード

レコードの分割

多くの配列や Prophetic 物質の収録により索引数が CAS STNext のシステム制限値を超える場合、複数のレコードに分割される

- 1 レコードに索引される物質が、約 5,000 を超える場合に分割される
- 分割されたレコードには、抄録中に何件のレコードに分割されているか示す記述がある

```
AN   2009:1076201  CAPLUS Full-text
DN   151:259362
TI   Pyrimidinium compounds as mesoionic pesticides and their preparation
        :
AB   Disclosed are compds. of formula I, compns                    of formula
     I and methods for controlling an invertebr                    ontacting
        :
     [This abstr. record is one of 8 records for this
     document necessitated by the large no. of index entries required to fully
     index the document and publication system constraints.]
```

8 レコードに分割

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

分割されたレコードの重複除去

DUPLICATE コマンド

分割されたレコードを簡単に重複除去するには、DUPLICATE REMOVE コマンドを使用する

- 最新のレコードのみが得られるが、対応特許の情報が含まれない
  - 対応特許の情報は、基本となった最も古いレコードのみに含まれる

```
=> S (PYRIMIDINIUM COMPOUNDS AS MESOIONIC PESTICIDES AND THEIR PREPAR ATION)/TI
L1            8 (PYRIMIDINIUM COMPOUNDS AS MESOIONIC PESTICIDES AND THEIR PREPAR ATION)/TI

=> DUP REM L1
L2             1 DUP REM L1 (7 DUPLICATES REMOVED

=> D
L2   ANSWER 1 OF 1  CAPLUS  COPYRIGHT 2025 ACS on STN  DUPLICATE 1
AN   2009:1076201  CAPLUS Full-text
DN   151:259362
TI   Pyrimidinium compounds as mesoionic pesticides and th
```

DUP REM コマンドを実行すると、重複文献が除去され、新たな回答セットが作成される

重複文献には、DUPLICATE 番号が付与される

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

まとめ

- CAplus ファイルは、CAS のアナリストが原報の全文を読み込んで作成した索引情報を付与している

- 化学物質索引は、物質のタイプや原報での記載によって索引方針が異なるため、網羅的な調査の際には様々な索引パターンを考慮して検索する

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.