REGISTRY/ZREGISTRY

収録範囲	・合金，配位化合物，鉱物，混合物，ポリマー，塩，ハイスループット スクリーニング（HTS）化合物，核酸配列，タンパク質配列情報を含む あらゆる種類の無機・有機物質 ・REGISTRY ファイルに収録されている化学物質の基準 － 特許，雑誌論文，化学品カタログ，Web に限らず CAS が信頼できると判断した情報源の物質 － 明確な名称で記述されている物質 － hard data のある物質，あるいは特許実施例中またはクレーム中に記載されている物質 － 原子の共有結合の構成の法則と一致している物質 ・実測物性値，予想物性値，参照文献タグ，スペクトルデータ
ファイル種類	化学物質データベース（数値，構造）
特徴	アラート（自動 SDI 検索） 隔週（デフォールト） CAS RN® (CAS登録番号) ☑ Keep & Share ☑ 中間一致・後方一致検索 ☑ 練習用ファイル ☑ STN Easy ☑ 構造図 ☑
レコード内容	・CAS 登録番号 ® ・CA 索引名，慣用名，商品名 ・分子式 ・構造図 ・配列情報 ・合金の組成表 ・ポリマー分類用語 ・環系データ ・実測物性値，予想物性値，参照文献タグ ・スペクトル情報 ・物質に関する情報を含むデータベースのリストと規制リスト ・CAplus ファイルのスーパーロールと資料種類 ・物質に関する最新 10 文献の情報（表示のみ）
レコード数	1 億 3,600 万件以上の有機・無機物質 7,100 万件以上の核酸・タンパク質配列情報（2018 年 4 月現在）
収録年代	1800 年代初頭 －
更新頻度	毎日更新
言語	英語
データベース製作者	Chemical Abstracts Service 2540 Olentangy River Road, P.O. Box 3012 Columbus, Ohio 43210-0012 USA Phone: 614-447-3700 Fax: 614-447-3751 E-mail: help@cas.org 著作権保有者
データベース代理店	化学情報協会 〒113-0021 東京都文京区本駒込 6-25-4 中居ビル 電話：0120-003-462 Fax: 03-5978-4090 E-mail: support@jaici.or.jp URL: http://www.jaici.or.jp/
収録源	・CAS 化学物質登録システム － CAS が選択した Chemical Abstracts（CA）に収録対象の雑誌，特許，学会会議録等から自動的に化学物質を同定するコンピューターシステム ・GenBank ®（アメリカ合衆国保健社会福祉省の登録商標）－ National Institute of Health が作成する核酸データベース ・各国の既存化学物質リストや Web 上のデータベース等で，CAS が CAS 登録番号を付与した化学物質のコレクション

日本
STN 東京
化学情報協会
〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
Phone: 0120-003-462 (Help Desk)
: 0120-151-462 (上記以外)
Fax: 03-5978-4090
E-mail: support@jaici.or.jp(Help Desk)
customer@jaici.or.jp (上記以外)
Internet: www.jaici.or.jp

北アメリカ
STN コロンバス
CAS
P.O. Box 3012
Columbus, Ohio 43210-0012 U.S.A
CAS Customer Care:
Phone: 800-753-4227 (North America)
614-447-3700 (worldwide)
Fax: 614-447-3751
E-mail: help@cas.org
Internet: www.cas.org

データベースサマリーシート作成: 化学情報協会

検索補助資料	・講習会テキスト http://www.jaici.or.jp/stn/text.html ・STN 技術資料 http://www.jaici.or.jp/stn/stn_doc_01.html ・オンラインヘルプ => HELP DIRECTORY ですべての利用可能なヘルプメッセージが表示されます ・STNGUIDE ファイル
利用可能な クラスター	・CASLINK ・CASRNS ・HCASLINK ・NUMERIC ・STRUCTURE
関連ファイル	・LREGISTRY

サマリーシートを初めてご覧になる方は,「サマリーシートの見方」をご参照ください.
http://www.jaici.or.jp/stn/dbsummary/db.html

検索フィールド

中間一致，後方一致検索が利用できるフィールドはアスタリスク（*）で示してあります（/CNS, /ENTE, /NTE）.

REG1stRY 機能は，REGISTRY ファイルの構造検索を含めたすべての検索を CAplus ファイル中で直接実行できる機能です．CAplus ファイルで REGISTRY ファイルの情報を検索する場合は，SEARCH コマンドと検索語に続けて REGISTRY ファイルの検索フィールドコードと /REG を入力（=> S FENFLURAMINE/CN/REG）すると，REGISTRY ファイルで検索した結果が自動的に CAplus ファイルにクロスオーバーされ，最終的に CAplus ファイルの回答セットの L 番号が得られます．CAplus ファイルで（=> HELP FIRST）と入力すると，当機能の説明を表示できます．

POLYLINK コマンドは，縮合系ポリマーをより包括的に検索するためのコマンドです．詳細は => HELP POLYLINK で表示できます．

SEQLINKコマンドは，タンパク質および核酸配列をより包括的に検索するためのコマンドです．詳細は => HELP SEQLINK で表示できます．

化学物質同定情報フィールド

SEARCH コード	内容	入力例	DISPLAY コード
なしまたは /BI	基本索引 名称フラグメント 成分分子式 1) 累積索引コード CAS 登録番号	S TOSYL? S 1,1(W)DICHLORO S 6CI S C5H10BR2O2 S 97-77-8	AF, CN, IN, MF RN, AR, DR, PR
/CCI	成分クラス識別子 （コードまたはテキスト）	S MXS/CCI S CCS/CCI	CCI
/CI	クラス識別子 （コードまたはテキスト）	S MXS/CI S ALLOY/CI	CI
/CRN	成分 CAS 登録番号	S 79-10-7/CRN	CRN
/DEF	物質の定義	S HYDROCARBONS/DEF	DEF
/ED	入力日 2)	S 20040101/ED	ED
/FA	フィールドの存在 （コードまたはテキスト）	S RSD/FA AND L5 S MATERIAL COMPOSITION/FA	表示されない
/FS	ファイルセグメント （コードまたはテキスト）	S PROTEIN/FS S PS/FS S NUCLEIC/FS	FS
/LC	CAS 登録番号所在	S TSCA/LC S GENBANK/LC S L1 AND CA/LC	LC
/PCT	ポリマー分類用語 （コードまたはテキスト）	S POLYAMINE/PCT S PM/PCT	PCT
/PCT.CNT	ポリマー分類用語数 2)	S 2-3/PCT.CNT	PCT
/REF.CA	CA ファイルでの文献数 2)	S L1 AND REF.CA<=10	REF
/REF.CAD	CA ファイルでの非特定誘導体の文献数 2)	S L3 AND 1/REF.CAD	REF
/REF.CAPLUS	CAplus ファイルでの文献数 2)	S L2 NOT REF.CAPLUS>10	REF
/RN	CAS 登録番号	S 97-77-8/RN	RN, AR, DR, PR
/SR	収録源	S L1 AND CHEMICAL LIBRARY /SR	SR
/UP	更新日 2)	S L1 AND UP>=20040101	表示されない

1) 成分分子式を基本索引で検索するときにはスペースなしで入力します．
2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです．

化学物質名称フィールド

SEARCH コード	内容	入力例	DISPLAY コード
/CN	化学物質完全名称	S 1-CHLORO-1,3-BUTADIENE /CN S INTERFERON .ALPHA.1?/CN S GENBANK M12334/CN	CN, IN
/CNS	化学物質名称自然セグメント* 1)	S IMINO/CNS S ?QUAT?/CNS NOT AQUA	CN, IN
/ENTE	索引者情報* 1)	S ?ENZYM?/ENTE	ENTE
/HP	見出し語母核	S BENZOIC ACID/HP	CN, IN
/INS.HP	索引名セグメント： 見出し語母核	S METHYLETHYL/INS.HP	CN, IN
/INS.NHP	索引名セグメント： 非見出し語母核	S ACRYLO/INS.NHP	CN, IN
/ONS	他の名称セグメント	S ANILINE/ONS	CN

1) 中間一致，後方一致検索を利用するには入力語は最低 4 文字が必要です.

分子式フィールド

SEARCH コード	内容	入力例	DISPLAY コード
/ATC	原子数 1)	S 5/ATC	表示されない
/ELC	元素数 1)	S 7-9/ELC	表示されない
/ELC.SUB	物質全体に対する元素数 1)	S ELC.SUB>=8	表示されない
/ELF	元素式 2)	S AL CO LA O/ELF	AF, MF
/ELR.xx	元素比 xx 1) (xx= CH, CN, CO, HC, HN, HO, NC, NH, NO, OC, OH または ON)	S 3.1666667/ELR.CH S 1-2/ELR.CN S ELR.CO<=1	表示されない
/ELS	元素種	S B/ELS AND H/ELS	AF, MF
/ELS.MCF	物質全体の元素種	S (N(XA)P)/ELS.MCF	AF, MF
/FW	分子式量 1)	S 420-460/FW	表示されない
/MAC	物質組成 3)	S 1-5 ND/MAC	STR
/MF	分子式 4)	S C7H3BR2FO2/MF S C4H4O4.2NA/MF S C24 H37 OS P3/MF	AF, MF
/NC	成分数 1)	S F/ELS NOT NC>=2	表示されない
/PG	周期律グループ	S B6/PG S LNTH/PG	表示されない
/RC	相対組成	S FE.CR.NI/RC	表示されない
/元素記号	特定元素数 1)	S 7/SI	AF, MF

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです.
2) 元素式では各元素記号間にスペースを入力します.
3) 数値およびテキストの両方が利用できます. 組成は数値演算子または範囲指定による検索が利用できます. 成分はテキスト検索です.
4) 分子式はスペースを入れても入れなくても検索できます.

環データフィールド

SEARCH コード	内容	入力例	DISPLAY コード
/CNR	最小環の数（成分内）[1]	S CNR>=12	表示されない
/CNRS	環系の数（成分内）[1]	S 4-5/CNRS	表示されない
/EA	元素式（環系）[2] （および成分内の EA の存在数）	S C4N-C5N/EA S 2 C3NO-C6/EA	RSD
/EAS	元素式（最小環）[2] （および環系内の EAS の存在数）	S C5NO4/EAS S >9 C6/EAS	RSD
/ES	元素配列（環系）[2] （および成分内の ES の存在数）	S NCOC2-C6/ES S 1-3 O2C4/ES	RSD, SRSD
/ESS	元素配列（最小環）[2] （および環系内の ESS の存在数）	S FE3/ESS S >=2 SC2SC2/ESS	RSD, SRSD
/NRS	環系の数（物質全体）[1]	S 7/NRS	表示されない
/NR	最小環の数（物質全体）[1]	S 10/NR	表示されない
/NRRS	環系内の環の数 [1]	S 5-6/NRRS	表示されない
/RATC	環系の原子数 [1]	S 4/RATC	表示されない
/REL	環系の構成元素種 [2] （および環系内の REL の存在数）	S SE/REL S 5 P/REL	RSD
/RELC	環系内の元素種の数 [1]	S 6/RELC	表示されない
/RELF	環系の構成元素式 [2], [3] （および成分内の RELF の存在数）	S C N O P/RELF S >3 C N O/RELF	RSD
/RF	環系の式 [2] （および成分内の RF の存在数）	S C20AGN4/RF S 5 C10/RF	RSD
/RID	環系識別子 [2] （および成分内の RID の存在数）	S 31779.1.2/RID S 1938/RID S >=2 1949.52/RID	RSD, SRSD
/SZ	環系の環の大きさ [2] （および成分内の SZ の存在数）	S 3-4-5/SZ S 3 5-5-6/SZ	RSD
/SZS	最小環の環の大きさ [1], [2] （および環系内の SZS の存在数）	S 8/SZS S 5 4/SZS	RSD

1)数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです.
2)存在数は検索フィールドの最初に入力します. 存在数は数値演算子または範囲指定による検索が利用できます.
3)元素式では各元素間にスペースを入力します.

配列検索フィールド

SEARCH コード	内容	入力例	DISPLAY コード
/NA	核酸タイプ [1]	S L1 AND 12-42 A/NA S L1 AND G/NA	NA
/NA.CNT	核酸数 [1], [2]	S L1 AND 12-42/NA.CNT	NA
/NTE	注記* [3]	S CYCLIC/NTE S ?CHLORO?/NTE	NTE
/PC	特許発行国 [4]	S L1 AND US/PC	PNTE
/PN	特許番号 [4]	S WO2000056771/PN	PNTE
/PNTE (/FEAT)	特許情報 [4]	S RATTUS/PNTE	PNTE
/SQL	配列長 [2]	S L1 AND SQL<=500	SQL

1)核酸配列のレコードにのみ存在するフィールドです.
2)数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです.
3)中間一致, 後方一致検索を利用するには入力語は最低 4 文字が必要です.
4)1999 年 10 月以降に特許から索引した配列にのみ存在するフィールドです.

物性検索フィールド

SEARCH コード	内容	デフォールト単位	入力例	DISPLAY コード
/CALC	Lipinski Rule にマッチする物質に限定 [1), 2)]	none	S L1 AND LIP/CALC	PROP, PPROP
/EPROPS	物性データの種類 [2)] (/ETAG および /FA を含む)	none	S TENSILE STRENGTH/EPROPS S BCF/EPROPS	ETAG, FA
/ETAG	参照文献タグ [2), 3)]	none	S MASS SPECTRA/ETAG	ETAG
/FA	フィールドの存在 [2)]	none	S HD/FA	FA
/FNA	存在しないフィールド [2)]	none	S PYRAZOL? AND HD/FNA	表示されない
/PNT	物性注釈 [2), 4)]	none	S MP<=30(P)DECOMP/PNT S MP=110(P)EXACT/PNT	EPROP
/PSO	物性収録源 [2)]	none	S L1 NOT ACD/PSO S L1 AND CAS/PSO	PROP
/PTYP	物性タイプ [2)]	none	S L1 AND CALCULATED/PTYP S EXPERIMENTAL/PTYP	PROP
/RAN.CA	出典の CA レコード番号 [2)]	none	S 90:102811/RAN.CA	EPROP
/SPEC	スペクトルデータ [2)]	none	S IR/SPEC S NMR SPECTRA/SPEC S MASS SPECTRA/SPEC	SPEC
/BCF	生物濃縮係数 [5)]	none	S 4000-5000/BCF	BCF
/BCF.PH	BCF 測定時の pH [5)]	none	S 4000-5000/BCF(P)7/BCF.PH	BCF
/BCF.T	BCF 測定時の温度 [5)]	deg C	S 25/BCF.T	BCF
/BP	沸点 [5)]	deg C	S 150-155/BP	BP
/BP.P	沸点測定時の圧力 [5)]	Torr	S 166/BP(P)3/BP.P	BP
/DEN	密度 [5)]	g/cm**3	S DEN>=1.002	DEN
/DEN.T	密度測定時の温度 [5)]	deg C	S 1.01-1.02/DEN(P)20/DEN.T	DEN
/DEN.P	密度測定時の圧力 [5)]	Torr	S 800/DEN.P	DEN
/ECND	電気伝導率 [5)]	S/cm	S 1400-1900/ECND	ECND
/ECND.T	電気伝導率測定時の温度 [5)]	deg C	S 1400-1900/ECND(P)110 /ECND.T	ECND
/ECON	コンダクタンス [5)]	Siemens	S 300<=ECON	ECON
/ECON.T	コンダクタンス測定時の温度 [5)]	deg C	S 280-300/ECON(P)25/ECON.T	ECON
/ERES	電気抵抗 [5)]	ohm	S 30-70/ERES	ERES
/ERES.T	電気抵抗測定時の温度 [5)]	deg C	S 30-100/ERES(P)250/ERES.T	ERES
/EREST	比電気抵抗 [5)]	ohm*cm	S EREST>=6600	EREST
/EREST.T	比電気抵抗測定時の温度 [5)]	deg C	S EREST>=6600(P)25/EREST.T	EREST
/FP	引火点 [5)]	deg C	S FP<250	FP
/FRB	回転可能な結合数 [4), 5)]	none	S 2-5/FRB	FRB
/HAC	水素受容基数 [4), 5)]	none	S 1-3/HAC	HAC
/HD	水素供与基数 [4), 5)]	none	S HD<=5	HD
/HDAS	水素供与基/水素受容基総数	none	S 12/HDAS	HDAS
/HVAP	蒸発エンタルピー [5)]	kJ/mol	S 100-110/HVAP	HVAP
/HVAP.P	蒸発エンタルピーの圧力	Torr	S 760/HVAP.P	HVAP
/ISLB.MASS	固有質量溶解度 [5)]	g/L	S 1.3/ISLB.MASS	ISLB.MASS
/ISLB.MOL	固有モル溶解度 [5)]	mol/L	S 1.6E-14/ISLB.MOL	ISLB.MOL
/KOC	有機炭素吸着係数 (K_{oc})	none	S 100-200/KOC	KOC
/KOC.PH	K_{oc} 測定時の pH [5)]	none	S 100-200/KOC(P)7/KOC.PH	KOC
/KOC.T	K_{oc} 測定時の温度 [5)]	deg C	S 25/KOC.T	KOC
/LD50	50% 致死量 [5)]	mg/kg	S 741-745/LD50	LD50
/LD50.ORGN	50% 致死量 (生物体) [5)]	none	S 741-745/LD50(P)MOUSE /LD50.ORGN	LD50
/LD50.RTE	50% 致死量 (投与経路) [5)]	none	S 450-520/LD50(P)ORAL /LD50.RTE	LD50

(続く)

物性検索フィールド（続き）

SEARCH コード	内容	デフォールト単位	入力例	DISPLAY コード
/LOGD	pH を考慮したオクタノール水分配係数の対数値 5)	none	S 2.21/LOGD	LOGD
/LOGD.PH	LogD 測定値の pH 5)	none	S 2.21/LOGD(P)10/LOGD.PH	LOGD
/LOGD.T	LogD 測定値の温度 5)	deg C	S 25/LOGD.T	LOGD
/LOGP	オクタノール-水分配係数の対数値 4), 5)	none	S LOGP<=3	LOGP
/LOGP.T	LogP 測定値の温度 5)	deg C	S 25/LOGP.T	LOGP
/MM	磁気モーメント 5)	muB	S MM<=0.98	MM
/MM.T	磁気モーメント測定時の温度 5)	K	S 0.021/MM(P)10/MM.T	MM
/MP	融点 5)	deg C	S MP<=30	MP
/MP.P	融点測定時の圧力 5)	Torr	S 70/MP(P)2/MP.P	MP
/MP.SOL	融点測定時の溶媒	none	S ACETIC ACID/MP.SOL	MP
/MVOL	モル体積 5)	CM**3/mol	S 31.1/MVOL	MVOL
/MVOL.T	モル体積測定値の温度 5)	deg C	S 20/MVOL.T	MVOL
/MVOL.P	モル体積測定値の圧力 5)	Torr	S 760/MVOL.P	MVOL
/MW	分子量 4), 5)	none	S MW<200	MW
/ORP	旋光度 5)	deg	S 70-80/ORP	ORP
/ORP.C	旋光度測定時の濃度 5)	g/100mL	S 0.12/ORP.C	ORP
/ORP.LEN	旋光度測定時の光路長 5)	dm	S 1/ORP.LEN	ORP
/ORP.SOL	旋光度測定時の溶媒	none	S METHANOL/ORP.SOL	ORP
/ORP.T	旋光度測定時の温度 5)	deg C	S 70-80/ORP(P)20/ORP.T	ORP
/ORP.W	旋光度測定時の波長 5)	nm	S 546/ORP.W	ORP
/PKA	酸塩基解離定数（pKa） 5)	None	S PKA<=-0.62	PKA
/PKA.T	pKa 温度 5)	deg C	S 25/PKA.T	PKA
/PKA.TYP	pKa タイプ 5)	none	S MOST ACIDIC/PKA.TYP	PKA
/PSA	極性表面積 5)	A**2 (Angstrom**2)	S 3.24/PSA	PSA
/RI	屈折率 5)	none	S 1.427/RI	RI
/RI.T	屈折率測定時の温度 5)	deg C	S 1.427/RI(P)25/RI.T	RI
/RI.W	屈折率測定時の波長 5)	nm	S 500-589.3/RI.W	RI
/SLB.MASS	質量溶解度 5)	g/L	S 1.4/SLB.MASS	SLB.MASS
/SLB.MOL	モル溶解度 5)	MOL/L	S SLB.MOL>=1	SLB.MOL
/SLB.PH	質量/モル溶解度測定値の pH 5)	none	S 1/SLB.MASS (P) 7/SLB.PH S SLB.MOL>=1(P)7-10/SLB.PH	SLB.MASS, SLB.MOL
/TG	ガラス転移温度 5)	deg C	S 7-8/TG	TG
/TS	引張強度 5)	MPa	S 42/TS	TS
/TS.T	引張強度測定時の温度 5)	deg C	S 200-315/TS(P)190/TS.T	TS
/UR	数値幅 5)	none	S BP=200(P)UR<=10	EPROP
/VP	蒸気圧 5)	Torr	S .0001-.0002/VP	VP
/VP.T	蒸気圧測定時の温度 5)	deg C	S .0001-.0002/VP(P)25/VP.T	VP

1)当物性データは，経口医薬品の候補物質を識別するために C.A.Lipinski 氏が提唱したもので，Lipinski's Rules（または rule of five）と呼ばれています．=> S L1 AND LIPINSKI/CALC あるいは LIP/CALC のように入力すると回答集合を Lipinski's Rules に合致した値を持つものに限定できます．
LIP/CALC は，実際には次の検索が実行されます．(=> S 0-5/HD AND 0-10/HAC AND LOGP<=5 AND 0-500/MW)

2)数値検索できないフィールドです．

3)検索語のリストは，Tagged Experimental Properties (PDF) (http://www.cas.org/ASSETS/9026A7E221F247BBBB7383A1127AFC24/taggedproperties.pdf) をご覧ください．

4)DECOMP（分解），SUBLM（昇華），POLYMORPH（多形間転移）の情報が原報に記載されていれば，物性注釈(/PNT) フィールドで限定することができます．物性注釈フィールドでは EXACT，CLOSED RANGE，OPEN RANGE も利用できます．これらのタームを用いて物性値を限定する場合は (P) 演算子で限定します．
・EXACT ： 特定の物性値　・CLOSED RANGE ： 両端が特定された範囲の物性値
・OPEN RANGE ： 一端のみ特定された範囲の物性値

5)数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです．

CAplus ファイルでのスーパーロールおよび資料種類の検索フィールド [1)]

SEARCH コード	内容	入力例	DISPLAY コード
/DT.CA	資料種類	S JOURNAL/DT.CA	DT.CA
/RL	特定物質として索引された文献で付与されている スーパーロール	S PREP/RL	RL, RL.NP, RL.P
/RL.NP	特定物質として索引された非特許レコードで 付与されているスーパーロール	S PREP/RL.NP	RL, RL.NP
/RL.P	特定物質として索引された特許で付与されている スーパーロール	S PREP/RL.P	RL, RL.P
/RLD	非特定物質として索引された文献で付与されて いるスーパーロール	S PREP/RLD	RLD, RLD.NP, RLD.P
/RLD.NP	非特定物質として索引された非特許レコードで 付与されているスーパーロール	S PREP/RLD.NP	RLD, RLD.NP
/RLD.P	非特定物質として索引された特許レコードで 付与されているスーパーロール	S PREP/RLD.P	RLD, RLD.P
/RLS	CAplus ファイルで付与されているスーパーロール (RL + RLD)	S PREP/RLS	RL, RL.NP, RL.P, RLD, RLD.NP, RLD.P
/RLS.NP	非特許レコードのスーパーロール (RL.NP + RLD.NP)	S PREP/RLS.NP	RL, RL.NP, RLD, RLD.NP
/RLS.P	特許レコードのスーパーロール (RL.P + RLD.P)	S PREP/RLS.P	RL, RL.P, RLD, RLD.P

1)REGISTRY ファイルで検索可能なスーパーロールのリストは => HELP ROLES で確認できます.

制限検索コード

SEARCH コード	内容	入力例	DISPLAY コード
/COMPLETE [1)]	イタレーションが完全に行われた回答	S L4/COM [2)]	表示されない
/INCOMPLETE [1)]	イタレーションが不完全に終わった回答	S L4/INC [2)]	表示されない

1)最初の 3 文字に省略可能です.
2)REGISTRY ファイルで作成された回答セットの L 番号のみ利用可能です.

構造検索の質問式

質問式 [1)]	入力例
STRUCTURE コマンドまたは STN Express/STN on the Web の アップロード機能を用いて作成された構造質問式の L 番号 (L 番号間のブール演算も可能)	SEARCH L1 FAM SAM SEA L1 AND L2 SSS FUL
SCREEN コマンドにより作成されたスクリーンセットの L 番号 (L 番号間のブール演算も可能)	S L3 OR L4 SSS SAM
STRUCTURE コマンドまたは STN Express/STN on the Web の アップロード機能を用いて作成された構造質問式の L 番号と SCREEN コマンドにより作成されたスクリーンセットの L 番号 の組み合わせ (L 番号間のブール演算も可能)	S L1 AND L2 NOT L3

1)構造検索の回答セットの L 番号は辞書検索と組み合わせることができます (例 : => S L3 AND TSCA/LC).

構造検索の種類

SEARCH コード	種類	内容	入力例
SSS	Substructure 部分構造検索 (デフォールト)	構造質問式を満足する物質を検索 置換可能なすべての位置に追加の 置換基が結合してもよい 他の成分が含まれていてもよい	SEARCH L1 SSS FUL S L2 OR L3 SSS SAM S L7 SSS RAN
CSS	Closed Substructure 閉構造部分構造検索	構造質問式に完全に一致する物質を検索 置換を許容したすべての位置に追加の 置換基が結合してもよい 他の成分が含まれてもよい	SEARCH L1 CSS FUL S L2 NOT L3 CSS S L4 OR L5 CSS RAN
FAM	Family ファミリー検索	構造質問式に完全に一致する物質を検索 他の成分が含まれてもよい	S L6 FAM SAM
EXA	Exact 完全一致検索	構造質問式に完全に一致する物質を検索	SEA L5 EXA FUL

構造検索の範囲

構造検索の際にスクリーンを通過した候補化合物の集合に L 番号を付けるには，検索実行の前に => SET EXTEND ON あるいは => SET EXTEND ON PERM と設定します．あるいは，SEARCH コマンドと同じ行に EXTEND と入力しても同様の機能が働きます．本機能の詳細は => HELP SET EXTEND でご覧いただけます．

SEARCH コード	種類	内容	入力例
SAM	Sample [1)] サンプル検索 (デフォールト)	ファイルの固定された一部 (5%) を検索	SEARCH L3 EXA SAM S L6 NOT L7 SSS SAM
FUL	Full フルファイル検索	ファイル全体 (100%) を検索	S L5 OR L8 SSS FUL
RAN	Range 範囲指定検索	ユーザーが指定した範囲内で 検索	S L4 RAN=(110507-58-9,) S L3 FAM RAN=(109784-14-7, 109904-92-9)
SUB SAM	Subset Sample [1)] サブセットサンプル検索	REGISTRY の検索で得られた 回答セットをさらに サンプル検索	S L7 CSS SUB=L5 SAM
SUB RAN	Subset Range サブセット範囲指定検索	REGISTRY の検索で得られた 回答セットをさらに 範囲指定検索	S L3 SUB=L2 RAN=(,50-11-3)
SUB FUL	Subset Full サブセットフルファイル 検索	REGISTRY の検索で得られた 回答セットをさらに フルファイル検索	S L8 SUB=L6 FAM FUL

1)SET EXTEND 機能は SAMPLE 検索では機能しません．

配列検索の質問式

質問式	入力例
一般アミノ酸の 1 文字コード [1)] 一般アミノ酸および特殊アミノ酸の 3 文字コード [1), 2)] コードまたはコード列は一重引用符で囲む コード間にはハイフンが必要 核酸の 1 文字コード [3)]	S LAGLL/SQSP S 'LEU-ALA-GLY-LEU-LEU'/SQSFP S F'HCY-STA'LF/SQSP S 'GLP'AGYSK/SQEP S 'CYS-ASN-THR-ALA'/SQEP S ATTTTTTTTTT/SQEN S AAGGTTACTA/SQSN

1)=> HELP AAC と入力すると一般アミノ酸の 1・3 文字コード表が表示されます.
2)=> HELP AAU と入力すると特殊アミノ酸の 3 文字コード表が表示されます.
3)=> HELP NUC と入力すると核酸コード表が表示されます.

配列検索の種類

SEQ フィールドでは核酸とタンパク質の配列は 1 文字コードで表示されます. SEQ3 フィールドではタンパク質の配列のみ 3 文字コードで表示されます.

SEARCH コード	種類	内容	入力例
/SQEP	タンパク質 完全配列検索	質問式に完全に一致する配列を検索. 質問式は完全に定義されて いなくてはならない	S YADAIF/SQEP S 'CYS-ASN-THR-ALA'/SQEP
/SQEFP	タンパク質 完全配列ファミリー 検索	質問式に完全に一致する配列と 質問式のアミノ酸の等価ファミリー に相当する配列を検索 [1)]	S YGGFL/SQEFP S 'TYR-GLY-GLY-PHE-LEU' /SQEFP
/SQSP	タンパク質 部分配列検索	質問式に完全に一致する配列と 質問式の配列を含む配列を検索. 特殊記号, ギャップ記号を利用できる	S LAGLL/SQSP S F'HCY-STA'LF/SQSP
/SQSFP	タンパク質 部分配列ファミリー 検索	質問式に完全に一致する配列, 質問式の配列を含む配列および 質問式のアミノ酸の等価ファミリー に相当する配列を検索 [1)]	S ATCXAWV/SQSFP S 'LEU-ALA-GLY-LEU-LEU' /SQSFP
/SQEN	核酸 完全配列検索	質問式に完全に一致する配列を検索 核酸の曖昧コードを利用できる	S ATTTTTTTTTT/SQEN
/SQSN	核酸 部分配列検索	質問式に完全に一致する配列と 質問式の配列を含む配列を検索 核酸の曖昧コードおよび特殊記号, ギャップ記号を利用できる	S AAGGTTACTA/SQSN

1)アミノ酸の等価ファミリーは以下のとおりです :

P, A, G, S, T	(弱疎水性, 中性)
Q, N, E, D, B, Z	(親水性, 酸アミド)
H, K, R	(親水性, 塩基)
L, I, V, M, J	(疎水性)
F, Y, W	(疎水性, 芳香族)
C	(架橋を形成)

部分配列検索の特殊記号（/SQSP，/SQSFP，および /SQSN）[1), 2)]

記号	内容	入力例
[ ]	代替残基の特定	S LGP[VL]/SQSP S LGP[‘VAL’LEU’]/SQSP
[-]	特定の代替残基の除外	S LGP[-H]/SQSP S LGP[-‘HIS’]/SQSPSP S LGP[-HL]/SQSP
{m}	直前の配列，配列質問式（L#，E# または保存された質問式）を m 回繰り返す	S (FL){2}/SQSP S L4{2}/SQSP S NAME/Q{3}/SQSP S (CTG){2}/SQSN S TAA(TAAA){2}/SQSN
{m，u} または {m-u}	直前の配列，配列質問式（L#，E# または保存された質問式）を m 回から u 回繰り返す	S GG(FL){1,2}/SQSP S L3{1,3}/SQSP S NAME/Q{1,4}/SQSP S (CTG){1,3}/SQSN
? または {0,1} または {0-1}	直前の配列，配列質問式（L#，E# または保存された質問式）をゼロまたは 1 回繰り返す	S FLRRI(RP)?K/SQSP S FLRRI(RP){0,1}K/SQSP S L1{0-1}NN/SQSP S NAME/Q{0,1}NN/SQSP S CAT(CGA){0,1}GGAC/SQSN
* または {0,} または {0-}	直前の配列，配列質問式（L#，E# または保存された質問式）をゼロ回以上繰り返す	S KLK(WD){0,}N/SQSP S KLK(WD)*N/SQSP S L1{0-}NN/SQSP S NAME/Q{0,}NN/SQSP S CAT(CTG){0,}TATT/SQSN
+ または {1,} または {1-}	直前の配列，配列質問式（L#，E# または保存された質問式）を 1 回以上繰り返す	S KLK(DLE){1,}/SQSP S KLK(DLE)+/SQSP S L2{1-}/SQSP S NAME/Q{1,}/SQSP S CAT(CTG){1,}TATT/SQSN
&	配列表現，配列質問式（L#，E# または保存された質問式）を結合する	S L1&L3/SQSFP S L2&L5{1,3}/SQSP S NAME1/Q{2}&NAME2/Q/SQSP S E1&E3/SQSP

1)部分配列質問式のさまざまな書式の詳細は，REGISTRY ファイルで（=> HELP SQQ）と入力すると表示されます．

2)上記の他に，キャレット（^），および垂直バー（|）も利用できます．キャレット（^）は質問式の配列の最初あるいは最後に付加し，配列の先頭あるいは末端であることを指定します．垂直バー（|）は配列の選択を表し，代替配列または配列質問式をします（例 ： => S TAA(TAC|AGG)/SQSN)．

部分配列検索のギャップ記号（/SQSP, /SQSFP, および /SQSN）

記号	内容	入力例
.(ピリオド)	1 残基のギャップ	S SY.RPG/SQSP S SY..RPG/SQSFP S AAG...TGC/SQSN
.{m} または {m.}	m 残基のギャップ	S SY.{2}RPG/SQSP S SY[2.]RPG/SQSP
.{m, u} または .{m-u}	m から u 残基のギャップ	S GFF.{2,10}LSS/SQSP S GFF.{2-10}LSS/SQSP S AAG.{2,5}TGC/SQSN
: または .? または .{0,1} または .{0-1}	ゼロまたは 1 残基のギャップ	S AGA:SRI/SQSFP S AGA.?SRI/SQSFP S AGA.{0,1}SRI/SQSFP S AGA.{0-1}SRI/SQSFP
.* または .{0,} または .{0-}	ゼロ残基以上のギャップ	S HLC.*TYG/SQSP S HLC.{0,}TYG/SQSP S HLC.{0-}TYG/SQSP S AAGGCAGATG.*GCAA/SQSN
.+ または .{1,} または {1-}	1 残基以上のギャップ	S SY.+TH/SQSFP S SY.{1,}TH/SQSFP S SY.{1-}TH/SQSFP S TCCTG.+GTGG/SQSN

BLAST® ホモロジー検索

タンパク質や核酸の BLAST® (Basic Local Alignment Search Tool) による配列ホモロジー検索は一般アカウントでご利用のお客様に限り, STN® on the Web, あるいは Windows® 対応の STN Express (V7.0 以上) のインターフェースから利用できます.

表示形式

回答の表示をする際は，下記の表示形式が利用できます．
複数のコードはスペースやカンマで区切ってください．フィールドは指定された順序で表示されます．
入力例 ： => D L1 1-5 IDE RSD
=> D L1 IDE MP

CA 文献表示形式も利用可能ですが，物質情報フィールドあるいは物性フィールドのいずれかと組み合わせて利用します．

カスタム表示形式の物質同定情報は物質の定型表示形式と組み合わせて使うことはできません（例 ： => D IDE FCN は不可）．

CM（成分番号）フィールドは多成分物質のレコードで表示されますが，カスタム表示形式はなく，表示およびオフライン出力で利用することはできません．

カスタム表示形式 - 物質同定情報

表示形式 [1]	英語名	内容	入力例
AF	Alternate Molecular Formula	非優先分子式	D L4 1-4 AF
AR	Alternate Registry Number	非優先 CAS 登録番号	D L1 3 AR
CCI	Component Class Identifier	成分クラス識別子	D CCI 1,3-5
CCN [2]	Condensed Chemical Name	圧縮型化学物質名称	D 20 CCN
CI	Substance Class Identifier	クラス識別子	D 1-3,7,8 CI
CIL	Component Isotope at Unknown Location	位置不明の成分同位体	D CIL
CMF	Component Molecular Formula	成分分子式	D L1 CMF 3
CN	Chemical Name	化学物質完全名称	D CN
COMP [3]	Composition	組成	D L7
CRN	Component Registry Number	成分 CAS 登録番号	D 1,3,6 CRN L5
DEF	Definition	定義	D DEF
DR	Deleted Registry Number	削除された CAS 登録番号	D L8 DR 1-3
ED	Entry Date	入力日	D ED
ENTE	Editor Note	索引者情報	D ENTE
FCN [2]	Full Chemical Name	すべての化学物質名称	D FCN L3 7
FS	File Segment	ファイルセグメント	D 1,4 FS
IL	Isotope at Unknown Location	位置不明の同位体	D IL
IN	CA Index Name	CA 索引名	D IN L1 4
LC	Registry Number Locator	CAS 登録番号所在	D LC 3,4
MF	Molecular Formula	分子式	D MF
PCT	Polymer Class Term	ポリマー分類用語	D L3 PCT
PR	Preferred Registry Number	優先 CAS 登録番号	D 5,3 PR
REF	Number of references in CA, CAplus	CAplus, CA ファイルの文献数	D REF
RN	CAS Registry Number	CAS 登録番号	D L4 RN 3
RR	Replaced Registry Number	置換された CAS 登録番号	D L3 2 RR
RSD [4]	Ring System Data	環系データ	D RSD
SCN [2], [5]	Short Chemical Name	簡略型化学物質名称	D 5-9 SCN
SR	Source of Registration	収録源	D SR 1,3 L12
SRSD [5], [6]	Short Ring System Data	簡略型環データ	D SRSD
STF [5], [7]	Flat Structure (no stereo indicated)	平面構造図（立体情報なし）	D L9 1 3
STR [7]	Structure Diagram (includes stereo bonds and R/S/E/Z labels when available)	構造図（立体結合，R/S/E/Z ラベルを含む）	D L4 STR
STS [5], [7]	Stereo Structure (includes stereo bonds when available)	立体構造図（あれば立体結合を表示）	D STS

カスタム表示形式 - 配列情報

表示形式 [1)]	英語名	内容	入力例
NA	Nucleic Acid	核酸	D 6 9 11 NA
NTE	Note	注釈	D NTE
PNTE	Patent Annotation	特許情報	D PNTE
SEQ	Sequence (1-letter codes)	配列 (1 文字コード)	D SEQ
SEQ3	Sequence (3-letter codes)	配列 (3 文字コード)	D SEQ3 1-10
SQL	Sequence Length	配列長	D L3 SQL

カスタム表示形式 - 物性情報

表示形式 [1)]	内容	入力例
BCF	生物濃縮係数の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記)	D IDE BCF 1-5
BP	沸点の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記, CAplus の出典情報)	D BP 1-2
DEN	密度の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記, CAplus の出典情報)	D DEN 1-2
ECND	電気伝導率の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記, CAplus の出典情報)	D ECND
ECON	コンダクタンスの表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記, CAplus の出典情報)	D ECON
ERES	電気抵抗の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記, CAplus の出典情報)	D ERES
EREST	比電気抵抗の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記, CAplus の出典情報)	D EREST
FP	引火点の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記)	D IDE FP 1-5
FRB	回転可能な結合数の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記)	D IDE FRB 1-2
HAC	水素受容基数の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記)	D HAC 1
HD	水素供与基数の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記)	D HD HAC
HDAS	水素供与基/水素受容基総数 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記)	D HDAS
HVAP	蒸発エンタルピーの表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記)	D IDE HVAP 1-5
ISLB.MASS	固有質量溶解度 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記)	D ISLB.MASS
ISLB.MOL	固有モル溶解度 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記)	D ISLB.MOL
KOC	有機炭素吸着係数の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記)	D IDE KOC 1-5
LD50	50% 致死量の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記, CAplus の出典情報)	D LD50
LOGD	pH を考慮したオクタノール-水分配係数の対数値の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記)	D LOGD 2-5
LOGP	オクタノール-水分配係数の対数値の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記)	D LOGP
MM	磁気モーメントの表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記, CAplus の出典情報)	D MM
MP	融点の表形式表示 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記, CAplus の出典情報)	D MP 1-2
MVOL	モル体積 (コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記)	D MVOL

(続く)

カスタム表示形式 - 物性情報（続き）

表示形式 [1)]	内容	入力例
MW	分子量の表形式表示 （コード，物性名，物性値，条件，注記）	D MW
ORP	旋光度の表形式表示 （コード，物性名，物性値，条件，注記，CAplus の出典情報）	D ORP
PKA	酸塩基解離定数の表形式表示 （コード，物性名，物性値，条件，注記）	D PKA
PSA	極性表面積 の表示形式 （コード，物性名，物性値，条件，注記）	D PSA
RI	屈折率の表形式表示 （コード，物性名，物性値，条件，注記，CAplus の出典情報）	D RI 1-2
SLB.MASS	質量溶解度の表形式表示 （コード，物性名，物性値，条件，注記）	D SLB.MASS
SLB.MOL	モル溶解度の表形式表示 （コード，物性名，物性値，条件，注記）	D SLB.MOL
SPEC [9)]	スペクトル情報	D SPEC
SPEC.C13NMR [9)]	^{13}C NMR スペクトル	D SPEC.C13NMR
SPEC.H1NMR [9)] (SPEC.PROTON NMR)	^{1}H NMR スペクトル	D SPEC.H1NMR
SPEC.IR [9)]	IR 吸収スペクトル	D SPEC.IR
SPEC.MASS [9)]	マススペクトル	D SPEC.MASS
TG	ガラス転移温度の表形式表示 （コード，物性名，物性値，条件，注記，CAplus の出典情報）	D TG
TS	引張強度の表形式表示 （コード，物性名，物性値，条件，注記，CAplus の出典情報）	D TS
VP	蒸気圧の表形式表示 （コード，物性名，物性値，条件，注記）	D IDE VP 1-5
DT.CA	資料種類	D DT.CA
PRFA（無料）	物性フィールドの存在	D PRFA
RL	特定物質として索引された文献で付与されているスーパーロール	D RL
RL.NP	特定物質として索引された非特許レコードで付与されている スーパーロール	D RL.NP
RL.P	特定物質として索引された特許で付与されているスーパーロール	D RL.P
RLD (RL.D)	非特定物質として索引された文献で付与されているスーパーロール	D RLD
RLD.NP	非特定物質として索引された非特許レコードで付与されている スーパーロール	D RLD.NP
RLD.P	非特定物質として索引された特許レコードで付与されている スーパーロール	D RLD.P
RLS	CAplus ファイルで付与されているスーパーロール (RL + RLD)	D RLS
RLS.NP	非特許レコードのスーパーロール (RL.NP + RLD.NP)	D RLS.NP
RLS.P	特許レコードのスーパーロール (RL.P + RLD.P)	D RLS.P

1) これらのカスタム表示形式および定型表示形式に加えて，その物質が索引された CA ファイル中の最新 10 件の文献情報（書誌情報の FAN.CNT，FAN，FAM，FBIB は除く）を表示させることができます．このとき (=> D RN TI AU) のように少なくとも一つの物質の表示形式を組み合わせます．物質の表示形式は最初に指定します．文献情報に関する表示形式は CA ファイルのサマリーシートをご覧ください．
2) 名称は表示コード CN で表示されます．
3) 合金および表形式無機化学物質の成分情報，成分 CAS 登録番号をまとめた表形式表示です．
4) EA，ES，SZ，RF，RID および RID の存在数をまとめた表形式表示です．
5) カスタム表示形式のみです．
6) ES，RID および RID の存在数をまとめた表形式表示です．
7) 立体構造はグラフィック機能付き通信ソフトか STN on the Web を利用した場合およびオフラインプリントで表示可能です．
8) スペクトル画像は STN on the Web か，STN Express V7.0 以降を利用した場合のみ表示可能です

定型表示形式

表示形式 [1]	内容	入力例
ALL [2]	すべての物質情報および物性情報（スペクトルは除く）と CA ファイル中の最新の 10 文献の情報 RN, ED, CN, ENTE, DEF, AR, PR, FS, DR, RR, MF, AF, CI, PCT, SR, LC, DT.CA, RL.P, RLD.P, RL.NP, RLD.NP, IL, RSD, CRN, CMF, CCI, CIL, STR, COMP, EPROP, ETAG, PPROP, REF, SQL, NA, NTE, SEQ, CA ファイル中の最新 10 文献の BIB ABS IND	D ALL
IALL [2]	フィールド名付きインデント型 ALL	D IALL
EPROP	すべての実測物性値の表形式表示 （コード, 物性名, 物性値, 条件, 注記, CAplus の出典情報）	D EPROP
OPROP	実測物性値の表形式表示（原報由来）	D OPROP
EPROPS	実測物性値と参照文献タグ EPROP, ETAG	D EPROPS
ETAG (無料)	参照文献タグ（表形式表示, 各物性について 1 行ずつ表示）	D ETAG
ETAGFULL (無料)	参照文献タグ（表形式表示, すべての参照文献を表示）	D ETAGFULL
FIDE	すべての物質情報および物性情報（スペクトル, 配列情報は除く） RN, ED, CN, ENTE, DEF, AR, PR, FS, DR, RR, MF, AF, CI, PCT, SR, LC, DT.CA, RL.P, RLD.P, RL.NP, RLD.NP, IL, RSD, CRN, CMF, CCI, CIL, STR, COMP, EPROP, ETAG, PPROP, REF	D FIDE
IDE (デフォールト)	物質の基本情報（CAS 登録番号, 名称, 構造, 分子式など） RN, ED, CN（最大 50 名称), DEF, AR, PR, FS, DR, RR, MF, AF, CI, PCT, SR, LC, IL, CRN, CMF, CCI, CIL, STR, COMP, REF	D
IDERL	IDE, CAplus ファイルのスーパーロールおよび資料種類	D IDERL L10
MAX [2]	すべての物質情報と CA ファイル中の最新の 10 文献の情報 RN, ED, CN, ENTE, DEF, AR, PR, FS, DR, RR, MF, AF, CI, PCT, SR, LC, DT.CA, RL.P, RLD.P, RL.NP, RLD.NP, IL, RSD, CRN, CMF, CCI, CIL, STR, COMP, EPROP, ETAG, PPROP, SPEC, REF, SQL, NA, NTE, SEQ, CA ファイル中の最新 10 文献の BIB ABS IND	D MAX
PPROP (CALC)	すべての予想物性値（計算物性値）の表形式表示	D PPROP
PROP (APROPS)	実測物性値, 参照文献タグ, 予想物性値の表形式表示 EPROP, ETAG, PPROP	D PROP
QRD	IDE とヒットした物性値を含むテーブルの行	D L4 7 QRD
REG	CAS 登録番号 RN, DR, AR, PR, RR	D REG
SAM	物質の名称, 構造を表示 IN, SQL, MF, CI, STR, COMP	D L3 1-18 SAM
SCAN [3] (無料)	回答チェック用の表示形式（ランダム表示） IN, SQL, MF, CI, STR, COMP	D SCAN
SQD	配列情報（CAS 登録番号, 配列など） RN, AR, PR, DR, RR, FS, SQL, NTE, PNTE, SEQ	D 5 SQD
SQD3	タンパク質配列を 3 文字コードで表示する以外は SQD と同様	D 2-4 SQD3
SQIDE	配列の基本情報（CAS 登録番号, 名称, 配列, 配列の記載位置など） RN, CN, DEF, AR, PR, DR, RR, FS, SQL, NA, NTE, PNTE, SEQ, MF, AF, CI, PCT, SR, LC, IL, STR, REF	D L4 SQIDE
SQIDE3	タンパク質配列を 3 文字コードで表示する以外は SQIDE と同様	D L4 SQIDE3
SQN	配列情報（CAS 登録番号, 名称など） RN, CN, AR, PR, FS, SQL, DR, RR, REF	D SQN L5 6-9

1)これらのカスタム表示形式および定型表示形式に加えて, その物質が索引された CA ファイル中の最新 10 件の文献情報（書誌情報の FAN.CNT, FAN, FAM, FBIB は除く）を表示させることができます. このとき (=> D RN TI AU) のように少なくとも一つの物質の表示形式を組み合わせます. 物質の表示形式は最初に指定します. 文献情報に関する表示形式は CA ファイルのサマリーシートをご覧ください.

2)スペクトル画像は STN on the Web か, STN Express V7.0 以降を利用した場合のみ表示可能です.

3)SCAN はコマンドに続けて入力します. (例: => D SCAN または DISPLAY SCAN)

網がけ はおすすめの定型表示形式です.

ヒットタームに関する表示形式

MAC, RC, CRN を除くすべての検索フィールドでヒットタームハイライト機能が使えます. (検索時にハイライト機能を ON にしておく必要があります.)

表示形式 [1)]	内容	入力例
HIT	ヒットタームを含むフィールド	D HIT 5-10
KWIC	ヒットタームの前後 20 語 (KeyWord-In-Context)	D KWIC 5-10

SELECT, ANALYZE および SORT フィールド

SELECT/ANALYZE コマンドは抽出・解析用のコマンドです.

入力例 : => SEL L1 RN　　(回答セット L1 の回答全件から CAS 登録番号を抽出する)

=> ANA L1 1- PN (回答セット L1 の回答全件から特許番号を抽出する)

詳細は, STN リフレッシュセミナーテキスト「STN コマンド応用 (2007.8)」をご参照ください.

http://www.jaici.or.jp/stn/stn_doc_03.html

SORT コマンドは指定したフィールドのアルファベット順または数値順に検索結果を並び替えるコマンドです. 入力例 : => SORT L1 PD (回答セット L1 の回答全件を発行日の古い順に並び替える)

○ は SELECT/ANALYZE/SORT 可能なコード, × は不可能なコードです.

SELECT/ANALYZE/ SORT コード	内容	ANALYZE/SELECT [1)]	SORT
AF	非優先分子式	○ [2)]	×
AR	非優先 CAS 登録番号	○ [3)]	×
CCI	成分クラス識別子	○ [4)]	×
CHEM	CAS 登録番号および名称	○ [5)] (デフォールト)	×
CI	クラス識別子	○	×
CMF	成分分子式	○ [3)]	×
CN	化学物質完全名称	○ [6)]	×
CRN	成分 CAS 登録番号	○	×
DEF	定義	○	×
DEN	密度	×	○
DR	削除された CAS 登録番号	○ [3)]	×
DT.CA	資料種類	○	×
EA	環系の元素式	○	×
ED	入力日	○	○
ENTE	索引者情報	○	×
EPROP	実測物性値	○ [7)]	×
ES	環系の元素配列	○	×
ETAG (TAGS)	実測物性値に関する参照文献タグ	○	×
FCN	すべての化学物質名称	○ [8)]	×
FRB	回転可能な結合数	×	○
FS	ファイルセグメント	○	○
HAC	水素受容基数	×	○
HD	水素供与基数	×	○
IN	CA 索引名	○ [8)]	○
LC	CAS 登録番号所在	○ [9)]	×
MF	分子式	○	×
MP	融点	×	○
MW	分子量	×	○
NAME	名称	○ [10)]	×
ORP	旋光度	×	○
PCT	ポリマー分類用語	○	×
PN	特許番号	○ [11)]	×
PR	優先 CAS 登録番号	○ [3)]	×

(続く)

SELECT, ANALYZE および SORT フィールド（続き）

SELECT/ANALYZE/ SORT コード	内容	ANALYZE/SELECT [1]	SORT
RAN.CA	CA ファイルのレコード番号	○	×
REF	CA ファイルの文献数	×	○
RF	環系の元素式	○	×
RI	屈折率	×	○
RID	環系識別子	○	×
RL	特定物質として索引された文献で付与されているスーパーロール	○	×
RL.NP	特定物質として索引された非特許レコードで付与されているスーパーロール	○	×
RL.P	特定物質として索引された特許レコードで付与されているスーパーロール	○	×
RLD	非特定物質として索引された文献で付与されているスーパーロール	○	×
RLD.NP	非特定物質として索引された非特許レコードで付与されているスーパーロール	○	×
RLD.P	非特定物質として索引された特許レコードで付与されているスーパーロール	○	×
RLS	スーパーロール（RL+RLD）	○	×
RLS.NP	非特許レコードのスーパーロール	○	×
RLS.P	特許レコードのスーパーロール	○	×
RN	CAS 登録番号	○	○
RR	置換された CAS 登録番号	○ [3]	×
SCN	簡略型化学物質名称	○ [8]	×
SEQ	配列（1 文字コード）	○ [12]	×
SEQ3	配列（3 文字コード）	○ [13]	×
SQEN	核酸配列（完全一致検索形式）	○	×
SQSN	核酸配列（部分一致検索形式）	○	×
SQEFP	タンパク質配列（完全一致ファミリー検索形式）	○	×
SQEP	タンパク質配列（完全一致検索形式）	○	×
SQSFP	タンパク質配列（部分一致ファミリー検索形式）	○	×
SQSP	タンパク質配列（部分一致検索形式）	○	×
SQL	配列長	×	○
SR	収録源	○	×
SZ	環系の環の大きさ	○	×

1) 回答セットからヒットタームだけを抽出するには HIT を使います（例 : => SEL HIT CN).
2) SELECT で抽出されたタームに /MF が付与されます.
3) SELECT で抽出されたタームに /BI が付与されます.
4) SELECT で抽出されたタームに /CI が付与されます.
5) 倒置された名称を除くすべての名称および AR, DR, PR, RN, RR フィールドが SELECT あるいは ANALYZE され, SELECT で抽出されたタームに /BI が付与されます.
6) CA 索引名, アルファベット順の最初の 50 名称, およびすべてのヒットした名称が SELECT あるいは ANALYZE されます.
7) SELECT で抽出されたタームに /FA が付与されます.
8) SELECT で抽出されたタームに /CN が付与されます.
9) このフィールド中に表示されるファイル名を含む E 番号はファイル名の代わりに FILE および INDEX コマンドの後に入力できます.
10) 倒置された名称を除くすべての名称が SELECT あるいは ANALYZE され, SELECT で抽出されたターム に /BI が付与されます. SELECT NAME は GenBank 由来の核酸レコードに対して GenBank の遺伝子名と GenBank 番号を抽出します. GenBank 番号は GenBank ファイルまたは MEDLINE など他の STN のファイルで検索語として利用できます.
11) 特許情報（PNTE）フィールドから特許番号を SELECT あるいは ANALYZE します.
12) SELECT で抽出されたタームに /SQSN（核酸配列の場合）/SQSP（タンパク質配列の場合）が付与されます.
13) SELECT で抽出されたタームに /SQSP が付与されます.

サンプルレコード

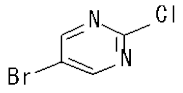
FIDE 表示形式

CAS 登録番号 RN 32779-36-5 REGISTRY
入力日 ED Entered STN: 16 Nov 1984
化学物質名 CN Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro- (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN 5-Bromo-2-chloropyrimidine
:
分子式 MF C4 H2 Br Cl N2
CAS 登録番号所在 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, REAXYSFILE*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
(*File contains numerically searchable property data)
資料種類 DT.CA CAplus document type: Journal; Patent
特許でのロール(特定物質) RL.P Roles from patents: BIOL (Biological study); PREP (Preparation); PRPH (Prophetic); RACT (Reactant or reagent); USES (Uses)
非特許文献でのロール(特定物質) RL.NP Roles from non-patents: BIOL (Biological study); FORM (Formation, nonpreparative); PREP (Preparation); PROC (Process); PRP (Properties); RACT (Reactant or reagent)

環データ Ring System Data

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

構造



実測物性値 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 (110-54-3)	(5) CAS
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.

出典 (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)
(3) Vlad, Gabor; Journal of Organic Chemistry 2002 V67(18) P6550-6552 CAPLUS
(4) Hannout, I. B.; Dyes and Pigments 1982 V3(2-3) P173-82 CAPLUS
(5) Hughes, Gregory; Organic & Biomolecular Chemistry 2003 V1(17) P3069-3077 CAPLUS

参照文献タグ 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	

FIDE 表示形式（続き）

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

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)
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 6 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 7 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 8 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 9 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	3.24	pH 10 25 deg C	(1)
Boiling Point (BP)	291.6+/-13.0 deg C	760 Torr	(1)
Density (DEN)	1.859+/-0.06 g/cm**3	20 deg C	(1)
		760 Torr	
Enthalpy of Vap. (HVAP)	50.97+/-3.0 kJ/mol	760 Torr	(1)
Flash Point (FP)	130.1+/-19.8 deg C		(1)
Freely Rotatable Bonds (FRB)	0		(1)
H acceptors (HAC)	2		(1)
H donors (HD)	0		(1)
Hydrogen Donors/Acceptors Sum (HDAS)	2		(1)
Koc (KOC)	80.80	pH 1 25 deg C	(1)
Koc (KOC)	80.80	pH 2 25 deg C	(1)
Koc (KOC)	80.80	pH 3 25 deg C	(1)
Koc (KOC)	80.80	pH 4 25 deg C	(1)
Koc (KOC)	80.80	pH 5 25 deg C	(1)
Koc (KOC)	80.80	pH 6 25 deg C	(1)
Koc (KOC)	80.80	pH 7 25 deg C	(1)
Koc (KOC)	80.80	pH 8 25 deg C	(1)
Koc (KOC)	80.80	pH 9 25 deg C	(1)
Koc (KOC)	80.80	pH 10 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	0.98	pH 1 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	0.98	pH 2 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	0.98	pH 3 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	0.98	pH 4 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	0.98	pH 5 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	0.98	pH 6 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	0.98	pH 7 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	0.98	pH 8 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	0.98	pH 9 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	0.98	pH 10 25 deg C	(1)
LOGP (LOGP)	0.975+/-0.400	25 deg C	(1)
Mass Intrinsic Solubility (ISLB.MASS)	12 g/L	25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	12 g/L	pH 1 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	12 g/L	pH 2 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	12 g/L	pH 3 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	12 g/L	pH 4 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	12 g/L	pH 5 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	12 g/L	pH 6 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	12 g/L	pH 7 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	12 g/L	pH 8 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	12 g/L	pH 9 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	12 g/L	pH 10 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	12 g/L	Unbuffered Water	(1)
		pH 7.00	
		25 deg C	

FIDE 表示形式（続き）

Molar Intrinsic Solubility (ISLB.MOL)	0.064 mol/L	25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.064 mol/L	pH 1 25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.064 mol/L	pH 2 25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.064 mol/L	pH 3 25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.064 mol/L	pH 4 25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.064 mol/L	pH 5 25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.064 mol/L	pH 6 25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.064 mol/L	pH 7 25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.064 mol/L	pH 8 25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.064 mol/L	pH 9 25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.064 mol/L	pH 10 25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.064 mol/L	Unbuffered Water	(1)
		pH 7.00	
		25 deg C	
Molar Volume (MVOL)	104.0+/-3.0 cm**3/mol	20 deg C	(1)
		760 Torr	
Molecular Weight (MW)	193.43		(1)
PKA (PKA)	-2.84+/-0.22	Most Basic	(1)
		25 deg C	
Polar Surface Area (PSA)	25.78 A**2		(1)
Vapor Pressure (VP)	3.38E-03 Torr	25 deg C	(1)

(1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02 ((C) 1994-2018 ACD/Labs)

See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.

文献数
793 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
798 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

SQIDE 表示形式（核酸）

CAS 登録番号 RN 91449-61-5 REGISTRY
化学物質名 CN DNA (Tikaut virus 5'-long terminal repeat) (9CI) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Deoxyribonucleic acid (Tikaut provirus 5'-long terminal repeat)
ﾌｧｲﾙｾｸﾞﾒﾝﾄ FS NUCLEIC ACID SEQUENCE
配列長 SQL 641
核酸タイプ NA 186 a 170 c 160 g 125 t
注記 NTE doublestranded

配列 SEQ
```
      1 tgaaagaccc caccataagg cttagcaagc tagctgcagt aacgccattt
     51 tgcaaggcat gaaaaagtac cagagctgag ttctcaaagt caacaacgaa
    101 gtttagttaa agaataaggc tgaacaaaac tgggacaggg gccaaacagg
    151 atatctgtgg tcgagcagct agggccccgg ctcagggcca agaacagatg
    201 gtactcagat aaagcgaagg gctgaacaaa acgggacagg ggccaaacag
    251 gatgggggcc aaacaggata tctgtggtcg agcacctggg ccccggctca
    301 gggccaagaa cagatggtac tcagataaag cgaaactaac aacagtttct
    351 ggaaagtccc acctcagttt caagttcccc aaaagaccgg gaaaaacccc
    401 aagccttatt taaactaacc aatcagctcg cttctcgctt ctgtaacccg
    451 cgctttttgc tcccagccct ataaaaaggg taaaaacccc acactcggcg
    501 ccccagtcct ccgatagact gagtcgcccg ggtacccgtg tatccaataa
    551 agcctttttgc tgttgcatcc gaatcgtggt ctcgctgatc cttgggaggg
    601 tctcctcaga gtgattgact gcccagcctg gggtctttc a
```

分子式 MF Unspecified
クラス識別子 CI MAN
CAS 登録番号所在 LC STN Files: CA, CAPLUS
資料種類 DT.CA CAplus document type: Journal
非特許文献でのロール（特定物質） RL.NP Roles from non-patents: BIOL (Biological study); PRP (Properties)

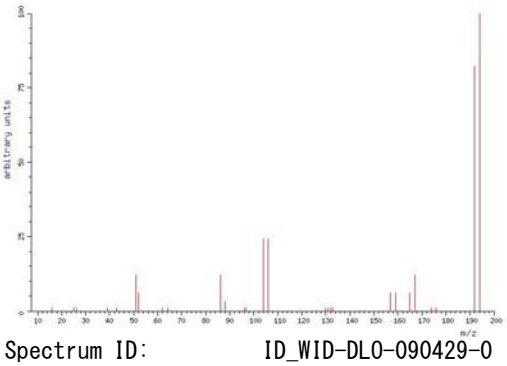
文献数
1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

SQIDE 表示形式（タンパク質）

CAS 登録番号 RN 91386-77-5 REGISTRY
化学物質名 CN Interferon α1 (human leukocyte protein moiety reduced), 1-L-serine- (9CI) (CA INDEX NAME)
ﾌｧｲﾙｾｸﾞﾒﾝﾄ FS PROTEIN SEQUENCE
配列長 SQL 166
配列 SEQ
```
  1 SDLPETHSLD NRRTLMLLAQ MSRISPSSCL MDRHDFGFPQ EEFDGNQFQK
 51 APAISVLHEL IQQIFNLFTT KDSSAAWDED LLDKFCTELY QQLNDLEACV
101 MQEERVGETP LMNADSILAV KKYFRRITLY LTEKKYSPCA WEVVRAEIMR
151 SLSLSTNLQE RLRRKE
```
分子式 MF Unspecified
クラス識別子 CI MAN
CAS 登録番号所在 LC STN Files: CA, CAPLUS
資料種類 DT.CA CAplus document type: Conference
非特許文献でのロール（特定物質） RL.NP Roles from non-patents: PREP (Preparation)
文献数
1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

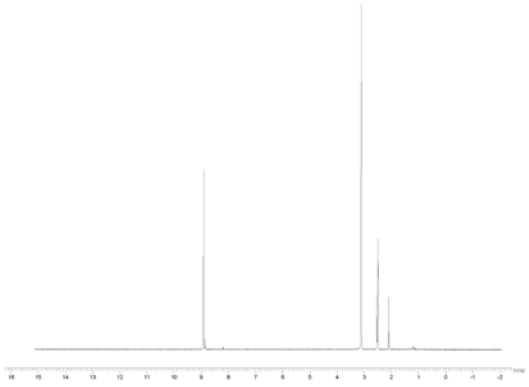
SPEC 表示形式

マススペクトル Mass Spectra



Spectrum ID: ID_WID-DLO-090429-0
Number Of Peaks: 27
Nominal Mass: 192
Source: Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)
COPYRIGHT 2018 ACS on STN

^{1}H NMR スペクトル Proton NMR Spectra



Spectrum ID: CC-02-H_NMR-3046
high-resolution image
Solvent: carbon tetrachloride (56-23-5)
dimethyl sulfoxide-d6 (2206-27-1)
Spectrometer: BRUKER AM-300
Working Frequency: 300 MHz
Source: Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)
COPYRIGHT 2018 ACS on STN