

CAS STNext®

ポリマー検索

202510





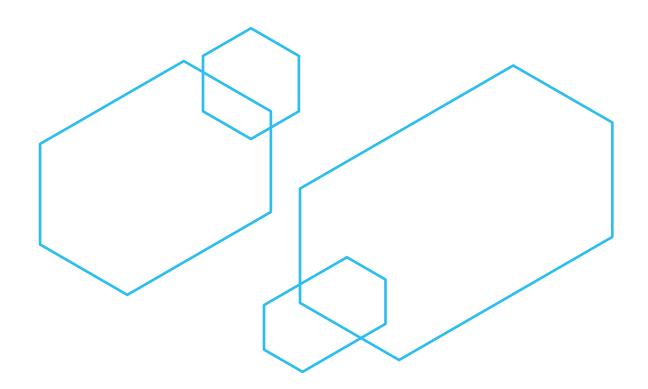
# 目次

A	概要
	CAS STNext のポリマー関連ファイル1
	ポリマーの定義 (REGISTRY ファイル)2
	ポリマーの登録方針3
	ポリマーの登録形式
В	ポリマー検索
	ポリマーを検索する際のポイント (REGISTRY ファイル)11
	ポリマーの検索フィールド12
	モノマー単位ポリマーの検索13
	参考 : スクリーン22
	SRU ポリマーの検索
	参考 : PMS/CI とスクリーン 2043 の違い30
	POLYLINK32
_	ポリマー分類用語
C	ポリマー分類用語とは37
	ポリマー分類用語の付与
	ポリマー分類用語を用いた検索
D	各論
	ポリマーの種類と CAplus/CA ファイルでの索引方針45
	ポリマーの登録の流れと検索方法
	縮合系ポリマー
	ビニル系ポリマー
	参考 : 重合形態を区別したポリマーの文献検索53
	汎用ポリマー54
	ポリアルキレングリコール55
	ポリエーテルポリオール57
	多段階重合ポリマー58
	架橋ポリマー (多段階重合ポリマー)62
	後処理ポリマー66
	後処理ポリマー - 塩、付加化合物
	参考 : 例外的な塩の検索
	* * = - · · · · · · · · · · · · · · · · · ·

後処理ポリマー - エーテル化	75
後処理ポリマー – その他の化学的処理 (塩素化など)	79
参考 : * (アスタリスク) つきの CAS RN® と文献検索	84
参考 : 一義的に定義できない成分を含むポリマーの検索	86
シリコーン	90
ポリビニルアルコール	94
アセタール樹脂	95
ポリマーブレンド、ポリマーアロイ	98
デンドリマー、スターポリマー、ハイパーブランチポリマー	99
テロマー	102
クマロン-インデン樹脂、石油系樹脂	103
合成繊維	104
合成ゴム	106
参考 : 重合条件、触媒を限定したポリマーの文献検索	108
参考 : モノマーの索引	110
練習問題	
練習問題	113
練習問題 1	114
練習問題 2	116
練習問題 3	117
練習問題 4	118
練習問題 5	121
練習問題 6	124

# A 概要

ポリマーを検索するためには、その定義や登録内容を正しく理解することが不可欠です。この章では REGISTRY ファイルにおける代表的なポリマーのレコード例を参考にその登録形式を説明します。



# CAS STNext のポリマー関連ファイル

### ポリマー情報を収録している CAS STNext の主なファイル

(2025 年 10 月現在)

		(202	5 年 10 月現仕)
ファイル名	内容	収録年	レコード数
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-	296,052,000
APOLLIT	プラスチック、ゴム、繊維の製造、処理工程、応用、 技術的性質およびポリマーの物理的/化学的性質の文 献情報	1973- 2005	436,200
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、クレーム、特許 ステータス、索引、引用・被引用情報、米国特許 の譲渡情報などを収録	1808-	50,998,000
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、 CA 収録対象外の情報も収録	1808-	66,902,000
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-	407,500
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
DCR	WPI ファイルの特許レコードで索引された化学物質のデータベース DCR レコード番号、名称、構造分子式等を収録	1981-	6,310,000
RAPRA	ゴム、プラスチック、接着剤、高分子化合物に関す る文献および企業ディレクトリ情報	1972-	1,521,000
ReaxysfileSub	化学物質の名称や分子式、構造などの情報を収録	1771-	57,411,000
ReaxysfileBib	ReaxysfileSub ファイルで得られた物質の出典情報 を調査するためのデータベース	1771-	67,780,000
WPINDEX/ WPIDS/WPIX	世界の主要 60 特許発行機関および 2 技術公開誌 の特許情報、対応特許情報、抄録、図面、DCR レコ ード番号、ポリマー等に関する各種索引	1963-	68,450,000
POLYMERS	ポリマー科学クラスター APOLLIT、CAplus、CBNB、CIN、COMPENDEX、IFIALL、 ReaxysfileBib、SciSearch、USPATFULL、USPATOL WPINDEX/WPIDS/WPIX、WSCA	-	

# ポリマーの定義 (REGISTRY ファイル)

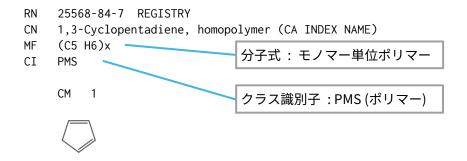
CAS 化学物質登録システムでは、ポリマーとみなす物質については、厳密に定義している。

- ポリマーと定義された物質については、CI フィールドに PMS を付与

#### ポリマーの定義

重合度が 11 以上の物質、あるいは重合度不明の物質は、ポリマーとみなされる。

- レコード例 : 1,3 シクロペンタジエンホモポリマー

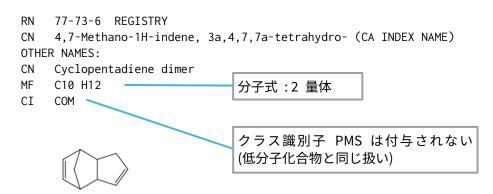


重合度が 10 以下であっても、重合後の構造が不明なオリゴマーもポリマーとみなされる。

- 重合度毎に CAS RN® が付与される (2 量体、3 量体...)。



重合度が単一で重合後の構造が明確なオリゴマーは、通常の低分子化合物と同じ扱いになる。



# ポリマーの登録方針

ルール 1 : 大部分のポリマーは、ポリマーの主鎖 (backbone) を構成する 「原料モノマー」 に 基づいて登録される。

原料が異なれば、同じポリマーであっても異なる CAS RN® が付与される。

- 例:ポリブチレングリコール

テトラヒドロフランから合成 RN 24979-97-3

1.4-ブタンジオールから合成 RN 28324-25-6

同じポリマーでも、異なる CAS RN® を持つ

原則として、ポリマーの主鎖 (backbone) を構成する原料モノマーに基づくので、下記のような物質 は登録する際に除外されている。

- 重合開始剤、重合停止剤
- 分子量調整剤
- 触媒
- 安定剤
  - 例:同じ原料から合成し触媒だけが異なるポリマーには、同じ CAS RN® を付与。 (=触媒については無視し、同じ原料モノマーからなるポリマーとして登録)

下記の条件等についても区別せず、同じポリマーとして登録。

- 重合条件(温度、圧力、触媒の有無や種類など)が異なるポリマー
- 組成比 (原料モノマー比) が異なるコポリマー
- 分子量や分子量分布が異なるポリマー
- 分岐の有無や分岐の程度が異なるポリマー
- 重合開始剤が異なるポリマー
  - 例:同じ原料から合成し重合度が異なる場合でも、同じ CAS RN® を付与。 (重合度については無視し、同じ原料モノマーからなるポリマーとして登録)

#### ルール 2 : 同じ原料モノマーからであっても、異なるポリマーとしてみなされる場合がある。

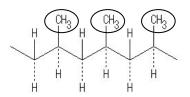
下記のポリマーについては、同じ原料でも異なる CAS RN® が付与されている。

- 立体規則性 (タクチシチー : Tacticity) の異なるポリマー
- 重合形態 (ブロック、グラフト、交互、ランダム) の異なるコポリマー
- ① 立体規則性 (タクチシチー : Tacticity) の異なるポリマー
- 立体規則性は、「イソタクチック」 「シンジオタクチック」 「アタクチック」 を区別して登録。 重合方法に基づくその他の構造の違いは区別されず、同一ポリマーとみなされる。
- 立体規則性が不明な場合は、アタクチックの CAS RN® が付与される。
  - イソタクチック : 主鎖に沿って隣の単位が常に同じ立体配置をとる (DD または LL)。

例: イソタクチック (Isotactic) ポリプロピレン

25085-53-4 REGISTRY RN

ΙN 1-Propene, homopolymer, isotactic



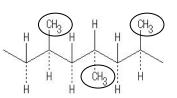
- シンジオタクチック : 主鎖に沿って隣の単位が常に反対の立体配置をとる (DL または LD)。

例: シンジオタクチック (Syndiotactic) ポリプロピレン

26063-22-9 REGISTRY

ΙN 1-Propene, homopolymer,

syndiotactic



- アタクチック : ランダムな立体配置をとる (DD、LL、DL、LD が等確率)。

例:アタクチック (Atactic) ポリプロピレン

RN 9003-07-0 REGISTRY

1-Propene, homopolymer ΙN

Atactic polypropylene CN

CH<sub>3</sub>

- ステレオブロック : ホモポリマーにタクシチーの異なるブロックが存在。

例 : ステレオブロック (Stereoblock) ポリプロピレン (イソタクチックブロックとアタクチック ブロックからなるポリプロピレン)

779327-97-8 REGISTRY RN

1-Propene, homopolymer, stereoblock

#### ② 重合形態 (ブロック、グラフト、交互、ランダム) の異なるコポリマー

- ブロック、グラフト、交互などの構造的特徴のあるコポリマーは、異なる CAS RN® が付与され、 区別されている。
- 構造的特徴が不明なコポリマーは、構造的特徴のないコポリマー、すなわちランダム共重合体の CAS RN® を付与。
  - ブロック共重合体 (Block Copolymer)

構成単位 A(○) 構成単位 B(●)

•••000000

- ブロック共重合体のうち、diblock、triblock、tetrablock、pentablock は、さらに区別して登録される。

ジブロック共重合体 (Diblock Copolymer)

•••0000000

トリブロック共重合体 (Triblock Copolymer)

●●●○○○○●●● または ○○○●●●○○○

テトラブロック共重合体 (Tetrablock Copolymer)

ペンタブロック共重合体 (Pentablock Copolymer)

●●●○○○●●○○○●● または ○○●●○○○●●○○○

- グラフト共重合体 (Graft Copolymer)

- 交互共重合体 (Alternating Copolymer)

- ランダム共重合体 (Random Copolymer)

 $\bullet \bigcirc \bullet \bullet \bullet \bigcirc \bullet \bigcirc \bigcirc \bullet \bullet$ 

– ブロック、グラフトなどが組み合わさったポリマーについても、組み合わせごとに、個別の CAS RN®を付与。

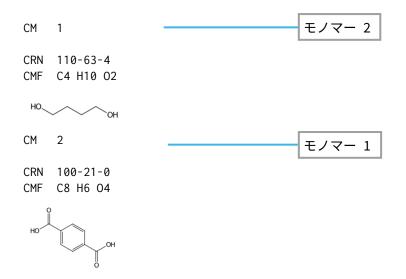
## ポリマーの登録形式

REGISTRY ファイルのポリマーのレコードは、以下の 4 種類の形式である。

- モノマー単位ポリマー : 原料モノマーを成分とした登録
- SRU (Structural Repeating Unit) ポリマー : 規則的な構造の繰り返し単位で登録
- 商品名ポリマー : 構造が不明で商品名そのものを CA 索引名として登録
- \*(アスタリスク) つきのポリマー

#### レコード例: モノマー単位ポリマー (原料モノマーを成分とした登録)

```
26062-94-2 REGISTRY
RN
                                                            モノマー単位ポリマーの名称
ED
    Entered STN: 16 Nov 1984
    1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-butanediol (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
    1,4-Butanediol, polyester with terephthalic acid (8CI)
    1,4-Butanediol, polymer with 1,4-benzenedicarboxylic acid (9CI)
CN
    Terephthalic acid, polyester with 1,4-butanediol (8CI)
OTHER NAMES:
CN
    1,4-Benzenedicarboxylic acid-1,4-butanediol copolymer
    1,4-Butanediol-terephthalate copolymer
CN
    1,4-Butanediol-terephthalic acid copolymer
CN
CN
    1,4-Butanediol-terephthalic acid polymer
CN
    1,4-Butylene glycol-terephthalic acid copolymer
CN
    1,4-Butylene glycol-terephthalic acid polymer
    Butanediol-terephthalic acid copolymer
CN
    Butylene glycol-terephthalic acid copolymer
CN
CN
    Butylene glycol-terephthalic acid polymer
    PBT, monomer-based
CN
CN
    Poly(1,4-butanediol terephthalate)
CN
    Poly(1,4-butylene terephthalate)
    Poly(butylene terephthalate)
CN
    Poly(tetramethylene terephthalate)
CN
                                     (モノマー 1 の分子式. モノマー 2 の分子式)x
    1027097-35-3
DR
MF
    (C8 H6 O4 . C4 H10 O2)x
INCH InChI=1S/C8H604.C4H1002/c9-7(10)5-1-2-6(4-3-5)8(11)12;5-3-1-2-4-6/h1-
    4H, (H, 9, 10) (H, 11, 12); 5-6H, 1-4H2
                                     PMS は、ポリマーを表すクラス識別子コード
INKY PCVVBHUFWPHCAL-UHFFFAOYSA N
    PMS, COM
PCT Polyester, Polyester formed
                                     PCT : ポリマー分類用語 (C章)
LC
    STN Files: BIOSIS, CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CBNB, CHEMCATS,
      CHEMLIST, CIN, ENCOMPLIT, ENCOMPLIT2, ENCOMPPAT, ENCOMPPAT2, IFIALL,
      IPA, MEDLINE, PIRA, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL, USPATOLD
                    DSL**. TSCA**
    Other Sources:
        (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
```



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

39569 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
1016 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
39648 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

#### レコード例:SRU (Structural Repeating Unit) ポリマー (規則的な構造の繰り返し単位で登録)

```
24968-12-5 REGISTRY
RN
ED
    Entered STN: 16 Nov 1984
    Poly (oxy-1_4-butanediyloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl) (CA INDEX NAME)
CN
OTHER NAMES:
                                                             SRU ポリマーの名称
    1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate copolymer, SRU
CN
CN
    1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate polymer, SRU
    1,4-Butanediol-divinyl terephthalate copolymer, SRU
CN
    1,4-Butanediol-monomethyl terephthalate copolymer, SRU
CN
    1,4-Butanediol-terephthalic acid copolymer, SRU
CN
    1,4-Butanediol-terephthalic acid polymer, SRU
CN
CN
    1,4-Butanediol-terephthaloyl chloride copolymer, SRU
CN
    1,4-Butanediol-terephthaloyl chloride polymer, SRU
    1,4-Butylene glycol-terephthalic acid polymer, SRU
CN
CN
    1000F
CN
    100M
CN
    100M (polyester)
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT - Use FCN, FIDE, or ALL for
    DISPLAY
DR
    9078-57-3, 9087-65-4, 50939-46-3, 51635-90-6, 51848-46-5, 51931-15-8,
    52231-97-7, 52232-31-2, 52232-99-2, 52705-10-9, 54650-84-9, 54650-85-0,
    57284-97-6, 58967-80-9, 60617-28-9, 61912-84-3, 64814-97-7, 66369-03-7,
    67527-19-9, 74239-00-2, 74239-01-3, 74239-02-4, 74239-03-5, 74239-04-6,
    80450-27-7, 83381-95-7, 92880-67-6, 97380-75-1, 97794-54-2, 136799-43-4,
    145319-68-2, 159294-93-6, 168317-05-3, 176179-88-7, 193363-39-2,
    193363-40-5, 202289-59-6, 213128-73-5, 335661-31-9, 437613-30-4,
    639483-01-5, 910537-56-3, 940968- (繰り返し単位 (SRU) の分子式) n
    1802176-06-2, 1897365-26-2, 20848
MF
    (C12 H12 O4)n
CI
    PMS
                                     PMS は、ポリマーを表すクラス識別子コード
PCT Polyester
                 BIOSIS, CA, CAPLUS, PCT : ポリマー分類用語 (C章)
                                                                    MLIST,
      CIN, IFIALL, MEDLINE, PIRA, RTE
      USPATOLD
        (*File contains numerically searchable property data)
**RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK**
                                     繰り返し単位(SRU)の構造
```

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

45435 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
1094 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
45702 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- 原則、一部のホモポリマーや対称な構造の2種のモノマーからなるポリマーに存在する。
- 上記のポリマーと前ページのポリマーは実質的に同じポリマーであるが、異なる CAS RN® を持つ。
- 汎用ポリマーについては、SRU ポリマーしか存在しないものもある。

#### レコード例: 商品名ポリマー (構造が不明で商品名そのものを CA 索引名として登録)

論文や特許に商品名でのみ記載されたポリマーがあり、そのポリマーの詳細 (原料モノマー、繰り返し単位など) が不明な場合は、商品名を CA 索引名として REGISTRY ファイルに登録する。

その後、既登録ポリマーと同一であることが判明すると、その CAS RN® は削除された CAS RN® (DR: Deleted CAS Registry Number) になる。

```
718635-98-4 REGISTRY
RN
FD
    Entered STN: 29 Jul 2004
                                               索引者情報
    Diaformer Z 632 (CA INDEX NAME)
ENTE An N,N-dimethyl-N-(2-methacryloyloxyethyl)amine N-oxide-alkyl methacrylate
    copolymer (Mitsubishi Chemical)
                                   分子式は不明
MF
    Unspecified
CI
    PMS, COM, MAN
                                    PMS は、ポリマーを表すクラス識別子コード
PCT Manual registration
SR
                                   PCT : ポリマー分類用語 (C章)
    STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT
                                   (構造不明のため手作業登録)
*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
            12 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
            12 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
```

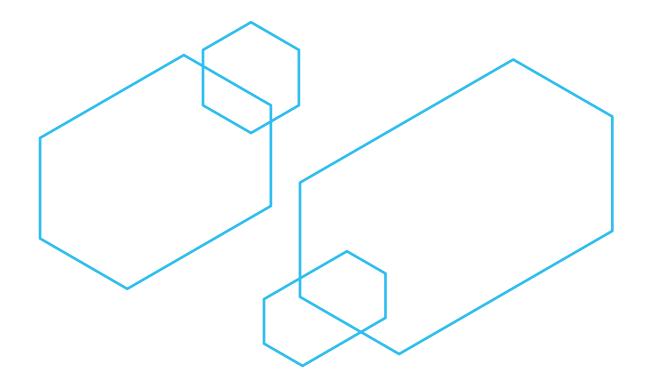
#### レコード例:\*(アスタリスク) つきのポリマー

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® が付与されたポリマー。 (詳細は p.84 参照)

```
RN 64742-16-1 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 (=>).
    Entered STN: 16 Nov 1984
    Petroleum resins (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
                                CAS STNext のほかのファイルでこの CAS RN® を
CN
    18X0103
                                用いた検索を行うと、不完全な結果になる可能性が
    700E
CN
                                あるという警告
    700E (petroleum resin)
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT - Use FCN, FIDE, or ALL for
    DISPLAY
DEF A complex combination of organic compounds, predominantly hydrocarbons,
    obtained as a fraction of the extract from solvent extraction of residuum.
     It consists predominantly of high molecular weight compounds with high
    carbon-to-hydrogen ratios.
    9077-49-0, 9085-73-8, 11098-41-2, 37199-53-4, 37263-39-1, 37291-70-6,
DR
    Unspecified
MF
                                分子式は不明
    PMS, COM, MAN, CTS
CI
PCT Manual registration
                               PCT : ポリマー分類用語 (C 章)
    STN Files: BIOSIS, CAPLUS,
                                                                CIN,
      IFIALL, PIRA, RTECS*, TOXCE (構造不明のため手作業登録)
        (*File contains numerically searchable property data)
    Other Sources: DSL**, EINECS**, TSCA**
        (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
  *** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
```

# B ポリマー検索

この章では REGISTRY ファイルにおける基本的なポリマー検索の手法についてご紹介します。



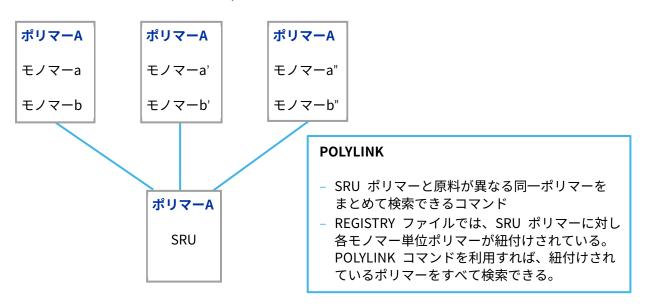
## ポリマーを検索する際のポイント (REGISTRY ファイル)

#### ポイント 1 : 大部分のポリマーはモノマー単位ポリマーとして登録されているので、原料モノマー から検索する。

- 原料が異なる場合、異なる CAS RN® が付与されているので、特定のポリマーの文献を検索するときには、原料のバリエーションを考えて検索する必要がある。
  - POLYLINK コマンド (後述) を利用すると、原料が異なる同じポリマーをまとめて検索することができる。(ただし、一部適用できないポリマーも存在する。)
- 原料から検索すれば、p.4 の ① 立体規則性が異なるポリマーや、② 重合形態が異なるポリマーもまとめて検索できる。

#### ポイント 2 : 特定のポリマー (縮合系ポリマーなど) には、SRU ポリマーも存在するので、それも 含めて検索する。

- POLYLINK コマンドを用いると、SRU ポリマーおよび同じポリマーでも原料が異なるポリマーをまとめて検索できる (POLYLINK (p.32) 参照)。



- SRU ポリマーを介して紐付けされているので、SRU ポリマーが存在しないと POLYLINK コマンドは利用できない。
  - 基本的に、一部のホモポリマーや対称な構造の 2 種のモノマーからなるポリマーに対して SRUポリマーが存在する。

# ポリマーの検索フィールド

### ポリマー検索用の主な検索フィールド

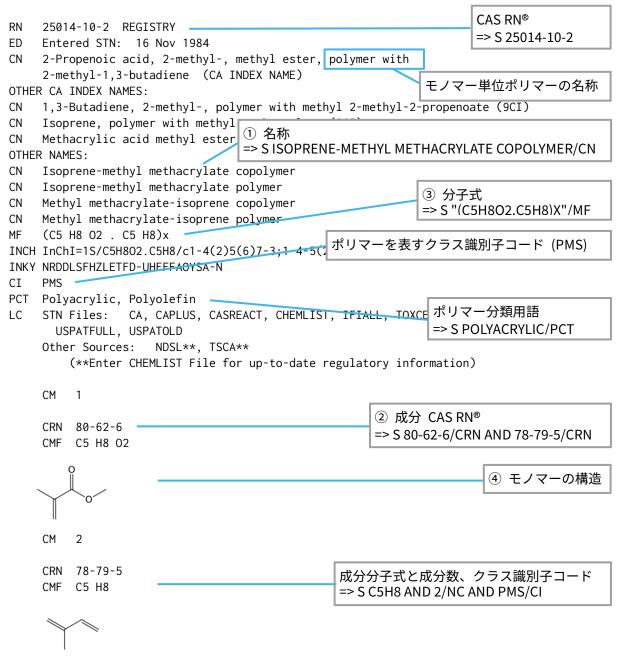
検索フィールドなど		登録形式		
		モノマー単位	SRU	
CAS RN®	/RN /BI	ポリマーの CAS RN®		
成分 CAS RN®	/CRN	各モノマーの CAS RN®	不可	
		モノマーの名称を基本とする	繰り返し単位に対する名称	
CA 索引名	/BI /CN	ホモポリマー:…, homopolymer 共重合体 : …, polymer with …	末端基なし:Poly(・・・・) 末端基あり:Poly(・・・), α-・・・-の-・・・-	
慣用名	/CNS	慣用名 - 慣用名 POLYMER 慣用名 - 慣用名 COPOLYMER	慣用名 - 慣用名 POLYMER, SRU 慣用名 - 慣用名 COPOLYMER, SRU	
分子式	/MF	モノマーの分子式を基本とする	繰り返し単位の組成 (末端基はカッコ外にまとめる)	
	,	ホモポリマー : (C2H4)x 共重合体 : (C8H8.C2H4)x	末端基なし : (C2H4O)n 末端基あり : (C2H4O)nH2O	
成分分子式	/BI	各モノマーの成分分子式	繰り返し単位の分子式	
成分数	/NC	物質全体の成分数		
クラス識別子	/CI	PMS/CI でポリマーに限定できる。	。自動的に PMS/CCI も含まれる	
成分クラス識別子	/CCI	PMS/CCI で成分中にポリマーを含	含む物質に限定できる	
ポリマー分類用語 /PC		<ul> <li>POLYACETYLENE</li> <li>POLYACRYLIC</li> <li>POLYOLEFIN</li> <li>POLYSTYRENE</li> <li>POLYVINYL</li> </ul>	- POLYAMIDE - POLYCARBONATE - POLYESTER - POLYETHER - POLYKETONE ほか	
		(FORMED 付き用語) - POLYESTER FORMED - POLYIMIDE FORMED ほか	なし	
		モノマーの構造 共重合体は複数の構造	繰り返し単位に対する単一の構造	
構造		スクリーン* - 2043 : ポリマー (一般) - 2067 : モノマー単位ポリ - 2068 : SRU ポリマー	リマー (ホモポリマー、コポリマー)	
		<ul> <li>- 2069 : 末端基のある SRU ポリマー</li> <li>- 2070 : 末端基のない SRU ポリマー</li> <li>- 2127 : 2 成分以上</li> <li>- 2077 : 3 成分以上</li> <li>- 2078 : 4 成分以上</li> </ul>		

<sup>\*</sup> スクリーンは構造検索時に検索対象物を制限するための機能。詳細は p.22 参照

## モノマー単位ポリマーの検索

原料モノマー単位で登録されているポリマーは、慣用名、成分 CAS RN®、分子式などで効率的に検索することができる。

#### レコード例 : モノマー単位ポリマー (イソプレン-メチルメタクリレート共重合体)



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

286 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
13 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
287 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

#### 検索例 : モノマー単位ポリマー (アクリロニトリル・ブタジエン・スチレン共重合体) の検索

① 慣用名による検索 (/CN)

```
← REGISTRY ファイルに入る
=> FILE REGISTRY
                                                      完全物質名称フィールド
=> E ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE COPOLYMER/CN
                 ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE BLOCK (/CN) で EXPAND する
            1
                  ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE BLOCK GRAFT COPOLYMER/CN
E2
            1
            1 --> ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE COPOLYMER/CN
F3
E4
                 ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE COPOLYMER RESINS/CN
E5
            1
                  ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE COPOLYMER TRIBLOCK/CN
=> S E3
                                ← E 番号で検索する
L1
           1 "ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE COPOLYMER"/CN
                                ← デフォルトの IDE 表示形式で表示する
=> D
    ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
I 1
RN
    9003-56-9 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
    2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN 1,3-Butadiene polymer, with acrylonitrile and styrene (6CI)
    1,3-Butadiene, polymer with ethenylbenzene and 2-propenenitrile (9CI)
OTHER NAMES:
CN 0215A
    Acrylonitrile-butadiene-styrene copolymer
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT - Use FCN, FIDE, or ALL for
    DISPLAY
    37229-19-9, 37331-48-9, 39291-19-5, 39306-83-7, 52433-83-7, 52434-26-1,
DR
MF
     (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x
INCH InChI=1S/C8H8.C4H6.C3H3N/c1-2-8-6-4-3-5-7-8;1-3-4-2;1-2-3-4/h2-7H,1H2;3-
     4H, 1-2H2; 2H, 1H2
INKY XECAHXYUAAWDEL-UHFFFAOYSA-N
CI PMS, COM
PCT Polyacrylic, Polyolefin, Polystyrene
SR
    CA
LC
    STN Files: ADISNEWS, BIOSIS, CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CBNB,
      CHEMCATS, CHEMLIST, CIN, EMBASE, IFIALL, MEDLINE, PIRA, REAXYSFILESU*,
      RTECS*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL, USPATOLD
```

CM 1

CRN 107-13-1 CMF C3 H3 N



CM 2

CRN 106-99-0 CMF C4 H6



CM 3

CRN 100-42-5 CMF C8 H8



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

63513 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
2133 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
64025 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- ② 成分 CAS RN® による検索 (/CRN)
- モノマーの CAS RN® を知っている場合は、成分 CAS RN® 検索を行うとよい。
  - アクリロニトリル (107-13-1)、ブタジエン (106-99-0)、スチレン (100-42-5)
- /NC(成分数) フィールドでモノマーの数を限定できる。
- => FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

モノマーの CAS RN® と 成分数を AND 演算

=> S 107-13-1/CRN AND 106-99-0/CRN AND 100-42-5/CRN AND 3/NC

7 107-13-1/CRN AND 106-99-0/CRN AND 100-42-5/CRN AND 3/NC

=> D SCAN IN MF

← SCAN IN MF 表示形式で表示する

REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN 7 ANSWERS L1

ΙN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, graft

(C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x

物質全体の成分数は成分数 HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WIS (/NC) フィールドで検索する。 分子式が検索対象のため、MF∥立体規則性や重合形態の異 フィールドがハイライトされる

|慣用名検索とは異なり、 モノマーから検索すると、 なるポリマーもヒットする

L1 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, triblock

(C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x

7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN L1

ΙN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene

(C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x

L1 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, block ΙN

(C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x MF

L1 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, graft, triblock ΤN

(C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x MF

REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN L1

2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, block, graft ΙN

(C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x MF

REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN L1

2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, diblock ΙN

(C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x

#### 参考 : 構成モノマーを一部特定しない場合

分かっている成分 CAS RN® のみで検索する。

例: アクリロニトリル (107-13-1) とブタジエン (106-99-0) を含む 3 成分からなるポリマーの検索

=> FILE REGISTRY

=> S 107-13-1/CRN AND 106-99-0/CRN AND 3/NC AND PMS/CI

- モノマーの CAS RN® が分からない場合には、SELECT コマンドを使用する。
- => FILE REGISTRY
- => S ACRYLONITRILE/CN
- L1 1 ACRYLONITRILE/CN
- => S 1,3-BUTADIENE/CN
- L2 1 1,3-BUTADIENE/CN
- => S STYRENE/CN
- L3 1 STYRENE/CN
- => SEL L1 1 RN
- E1 THROUGH E1 ASSIGNED
- => SEL L2 1 RN
- E2 THROUGH E2 ASSIGNED
- => SEL L3 1 RN
- E3 THROUGH E3 ASSIGNED
- => D SEL
- E1 1 107-13-1/BI (アクリロニトリル)
- E2 1 106-99-0/BI (1,3-ブタジエン)
- E3 1 100-42-5/BI (スチレン)
- => S E1/CRN AND E2/CRN AND E3/CRN AND 3/NC
  - 31709 107-13-1/CRN 17055 106-99-0/CRN
  - 140588 100-42-5/CRN
  - 1564253 3/NC
- L4 7 107-13-1/CRN AND 106-99

- ← モノマーの化学物質名称で検索する
- ← モノマーの化学物質名称で検索する
- ← モノマーの化学物質名称で検索する
- ← CAS RN® を抽出する
- 抽出した CAS RN® に E1 が付与された
  - ← CAS RN® を抽出する
  - ← CAS RN® を抽出する
  - ← 抽出したタームを表示する

抽出した CAS RN® には /BI が付与 されているので、/CRN へ変更する

(注:L#/CRN は検索できない) ← 成分 CAS RN® と成分数検索

7 107-13-1/CRN AND 106-99-0/CRN AND 100-42-5/CRN AND 3/NC

#### 参考 : SELECT コマンド

SELECT コマンドは、回答中の指定したフィールドから情報 (ターム) を抽出し、抽出したタームに E 番号を付与するコマンドである。

入力方法 : => SEL L 番号 回答番号 抽出フィールド 抽出オプション

SELECT コマンドについての詳細は下記資料を参照 「CAS STNext コマンド応用」 http://www.jaici.or.jp/download\_file/view/b552bd83-dfc3-47c7-a62e-3783011afb4a/ ③ 分子式による検索 (/MF)

CI

PMS

- モノマーの分子式はそれぞれアクリロニトリル  $(C_3H_3N)$ 、ブタジエン  $(C_4H_6)$ 、スチレン  $(C_8H_8)$  なので、共重合体の分子式は  $(C_8H_8.C4H_6.C3H_3N)$ x である。
- 分子式検索では、構造異性体 (同じ分子式を持つが構造が異なるもの) が含まれる。

```
=> FILE REGISTRY
                               ← REGISTRY ファイルに入る
=> E (C8H8.C4H6.C3H3N)X/MF
                               ← 共重合体の分子式で EXPAND
                 (C8H8.C4H6.C3H2O3)X/MF
E1
           1
E2
                 (C8H8.C4H6.C3H3CLO)X/MF
            1
            7 --> (C8H8.C4H6.C3H3N)X/MF
E3
E4
                 (C8H8.C4H6.C3H3N)X.H3N/MF
            1
                 (C8H8.C4H6.C3H3N.(C2H4O)N(C2H4O)N(C2H4O)NC15H20O6)X/MF
E5
            1
=> S E3
                               ← E 番号で検索する
           7 "(C8H8.C4H6.C3H3N)X"/MF
L1
                               ← SCAN 表示形式で表示する
=> D SCAN
    7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, graft, triblock
    (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x
MF
CI
    PMS
    CM
    CM
         2
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):6
    7 ANSWERS
               REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene, triblock
MF
    (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x
```

CM 1



CM 2



CM 3



ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

#### 参考 : 分子式検索のポイント

- 各モノマー成分を Hill 方式で記述する。

- 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 (例:O2Ti)

- 下記の表記規則にしたがって各モノマー成分を並べ替える。

- ① 炭素を含む有機成分を優先
- ② 炭素数の多い成分を優先
- ③ 炭素数が同じ場合には水素数の多い成分を優先
- 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

④ 構造による検索 (誘導体を含む検索)

L6

MF CI

PMS

- 原料モノマーから検索する場合、モノマーごとに 1 構造質問式を作図する。
  - 共重合体の場合は、各原料モノマーの構造を別々に作図して AND 演算で検索する。
- ポリマーのスクリーン (ポリマー一般 : 2043 など) を組み合わせて検索すると、効率よくポリマーを検索することができる。(詳細は p.22 参照)

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る Uploading structure file: 2025\_0002\_Structure アクリロニトリル STRUCTURE UPLOADED L1 モノマーごとに個別の構造 Uploading structure file: 2025\_0003\_Structure 質問式をアップロードする ブタジエン L2 STRUCTURE UPLOADED Uploading structure file: 2025\_0004\_Structure スチレン (環は孤立) L3 STRUCTURE UPLOADED - ポリマー一般のスクリーン (モノマー単位ポリマーのスクリーン (2067) でもよい) フルファイル検索後に AND PMS/CI で検索することも可能 => SCR 2043 (PMS/CI とスクリーン 2043 の違いは p.30 参照) SCREEN CREATED => S L1 AND L2 AND L3 AND L4 ← サンプル検索 50 SEA SSS SAM L1 AND L2 AND L3 AND L4 L5 => S L1 AND L2 AND L3 AND L4 FUL ← フルファイル検索 3028 SEA SSS FUL L1 AND L2 AND L3 AND L4 L6 ← SCAN 表示形式で表示する => D SCAN

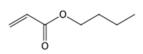
2-Propenoic acid, butyl ester, polymer with 1,3-butadiene, ethenylbenzene

(C8 H8 . C7 H12 O2 . C4 H6 . C3 H3 N)x ← 4 成分からなるポリマー

3028 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

and 2-propenenitrile, block

CM 1



CM 2



CM 3



CM 4



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

=> S L6 AND 3/NC

← 3 成分に限定する

L7 119 L6 AND 3/NC

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で回答を確認する

L7 119 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and (1-methylethenyl)benzene

MF (C9 H10 . C4 H6 . C3 H3 N)x

CI PMS

CM 1



CM 2



CM 3



#### 検索タイプと得られる回答の違い

- 完全一致検索 (EXA) では、作図したとおりのポリマー
- ファミリー検索 (FAM) では、EXA の回答+他の成分 も含んだポリマー
- 部分構造検索 (SSS) では、FAM の回答+作図した 母核に対してあらゆる置換基をもつポリマー (デフォルト)

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

### 参考 : スクリーン

構造検索の際は、スクリーンを利用すると効率よくポリマーを検索することができる。

- スクリーンは構造検索時に検索対象を制限するための機能。3-4 桁数字のコードで指定
- 詳細は https://www.cas.org/sites/default/files/documents/screendict.pdf 参照

#### スクリーンの利用方法

- ① SCREEN コマンドでスクリーンセットを作成する
- => SCR [スクリーン番号]
- => SCR [スクリーン番号] OR [スクリーン番号]
- => SCR [スクリーン番号] AND [スクリーン番号]

スクリーンセットの L 番号が作成される

- SCREEN コマンドの中で NOT は使用できない。NOT 演算が必要な場合は各々 L 番号を作成し て検索時に NOT する (② 参照)
- ② 構造質問式の L 番号と組み合わせて検索する
- => S [構造質問式の L 番号] AND [スクリーンの L 番号] ← そのスクリーンに限定
- => S [構造質問式の L 番号] NOT [スクリーンの L 番号] ← そのスクリーンを除く
- => S [構造質問式の L 番号] AND [スクリーンの L 番号] NOT [スクリーンの L 番号]
- 演算子 AND と NOT の両方を使用する場合は、AND を先に指定する

#### ポリマー検索に利用する主なスクリーン

番号	内容
2043	ポリマー一般
2067	ホモポリマー、コポリマー
2068	SRU ポリマー
2069	末端基のある SRU ポリマー
2070	末端基のない SRU ポリマー
2127	2 成分以上
2077	3 成分以上
2078	4 成分以上

#### 検索例 : 3成分以上の物質を除く

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2077 ← 除きたいスクリーン番号を検索する(3 成分以上)

L2 SCREEN CREATED

=> S L1 NOT L2 ← 構造 (L1) とスクリーン番号 (L2) を NOT 演算する。(SSS サンプル検索)

2 成分以下の物質が検索対象になる

### SRU ポリマーの検索

SRU で登録されているポリマーは、名称、分子式、構造などから検索できる。

#### レコード例 : SRU ポリマー (ポリブチレンテレフタレート)

```
RN
    24968-12-5 REGISTRY
                                                         CAS RN° => S 24968-12-5
    Entered STN: 16 Nov 1984
    Poly(oxy-1,4-butanediyloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl) (CA INDEX NAME)
CN
OTHER NAMES:
    1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate copolymer, SRU
    1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate polymer, SRU
CN
    1,4-Butanediol-divinyl terephthalate copolymer, SRU
CN
    1,4-Butanediol-monomethyl terephthalate copolymer, SRU
CN
    1,4-Butanediol-terephthalic acid conolymer SRII
CN
    1,4-Butanediol-tereph IDE 表示形式では、化学物質名は 50 個まで表示される。
CN
CN
    1,4-Butanediol-tereph 全物質名を表示するには、FCN や FIDE 表示形式を使用
    1,4-Butanediol-tereph する。
CN
    1,4-Butylene glycol-t
CN
CN
    1000F
                         => D FCN
    100M
CN
CN
    100M (polyester)
                         CN
                               Poly(oxy-1,4-butanediyloxycarbonyl-
CN
    101GX54
                              1,4-phenylenecarbonyl) (CA INDEX NAME)
    1084HQII
CN
CN
    1097A
                         CN
                               V-PTS Createc B 3NM800/25
CN
    1097A (polyester)
                                                         ① 名称 => S VALOX/CN
                         CN
                               Valox
CN
    140EM
                         CN
                               XW 321
    1494X02
CN
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT - Use FCN, FIDE, or ALL for
DR
    9078-57-3, 9087-65-4, 50939-46-3, 51635-90-6, 51848-46-5, 51931-15-8,
    52231-97-7, 52232-31-2, 52232-99-2, 52705-10-9, 54650-84-9, 54650-85-0,
                                                        ② 分子式
MF
    (C12 H12 O4)n
                                                        => S "(C12H12O4)N"/MF
CI
    PMS
SR
    CA
                                                           ポリマー分類用語
PCT Polyester
                                                           => S POLYESTER/PCT
                 BIOSIS, CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT
      CIN, IFIALL, MEDLINE, PIRA, RTECS*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL,
      USPATOLD
        (*File contains numerically searchable property data)
**RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK**
                                                    ③ 繰り返し単位 (SRU) の構造
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
          45487 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
```

1097 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

45728 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

#### ポリブチレンテレフタレートの検索

#### ① 商品名 (Valox) による検索 (/CN)

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> E VALOX/CN ← 化学物質名を /CN で EXPAND する

E1 1 VALOTRAT/CN
E2 1 VALOUR/CN
E3 1 --> VALOX/CN
E4 1 VALOX 175/CN
E5 1 VALOX 195/CN

:

=> S E3 ← E 番号で検索する

L1 1 VALOX/CN

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で表示する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Poly(oxy-1,4-butanediyloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)
 ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT

MF (C12 H12 O4)n

CI PMS

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

#### ② 分子式による検索 (/MF)

- SRU ポリマーは、繰り返し単位の組成を分子式として入力する。

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る => E (繰り返し単位)N/MF を入力 => E (C12H12O4)N/MF 1 (C12H12O3SI)X/MF (C12H12O3SI.C12H12O2SI.C6H8O3SI.C3H8O2SI)X/MF E3 62 --> (C12H12O4)N/MF (C12H12O4)N(C10H10O3)N(C9H8O2)NC26H26O6/MF E4 ← E 番号で検索する => S E3 62 "(C12H12O4)N"/MF L1 ← SCAN 表示形式で表示する => D SCAN L1 62 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN Poly[oxy-1,2-phenyleneoxy(1,6-dioxo-1,6-hexanediyl)] (9CI) ΙN (C12 H12 O4)n MF PMS CI \*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\* HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):61 62 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN L1 IN Poly(oxy-1,4-butanediyloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl) ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT MF (C12 H12 O4)n CI PMS \*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\* 目的の SRU ポリマー

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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

- 目的の SRU ポリマーのみの回答集合を作成する場合は SCAN 表示形式で確認した CA 索引名 (IN) を用いて検索する

=> E	Poly(oxy-1,4-butanediyloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)/CN
E1	1 POLY(OXY-1,4-BUTANEDIYLOXYCARBONYL-1,4-PHENYLENE-1,3-BUTADIY
	NE-1,4-DIYL-1,4-PHENYLENECARBONYL)/CN
E2	1 POLY(OXY-1,4-BUTANEDIYLOXYCARBONYL-1,4-PHENYLENEAZO-1,4-PHEN
	YLENEOXY-1,6-HEXANEDIYLOXY-1,4-PHENYLENEAZO-1,4-PHENYLENECAR
	BONYL)/CN
E3	1> POLY(OXY-1,4-BUTANEDIYLOXYCARBONYL-1,4-PHENYLENECARBONYL)/CN
E4	1 POLY(OXY-1,4-BUTANEDIYLOXYCARBONYL-1,4-PHENYLENECARBONYL), .
	ALPHA.,A'-((1R,2R)-4-(2-(3,5,7,9,1,13,15-HEPTAKIS(2-ME
	THYLPROPYL)PENTACYCLO(9.5.1.13,9.15,15.17,13)OCTASILOXAN-1-Y
	L)ETHYL)-1,2-CYCLOHE/CN
	:
=> S	E3 ← E 番号で検索する
L2	<pre>1 "POLY(OXY-1,4-BUTANEDIYLOXYCARBONYL-1,4-PHENYLENECARBONYL)"/CN</pre>

#### ③ 構造による検索

- SRU ポリマーの場合は繰り返し単位を構造質問式として作図して検索する。
  - スクリーン (ポリマー一般 2043、SRU ポリマー 2068、末端基付き SRU ポリマー 2069、末端基なし SRU ポリマー 2070) を組み合わせて検索する。

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=>

Uploading structure file: 2025\_0005\_Structure



•

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2070 未端基なし SRU ポリマーのスクリーン (2070)

← サンプル検索

誘導体が不要な場合は、

分子式検索または完全 一致検索 (EXA) を行う

L2 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2

L3 3 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> S L1 AND L2 FUL ← フルファイル検索

L4 37 SEA SSS FUL L1 AND L2

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で表示する

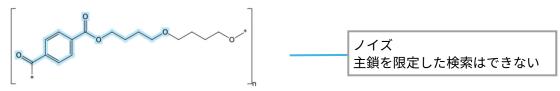
L4 37 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Poly(oxy-1,4-butanediyloxy-1,4-butanediyloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl) (9CI)

MF (C16 H20 O5)n

CI PMS

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*



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

L4 37 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Poly[oxy-1,4-butanediyloxycarbonyl(2,5-difluoro-1,4-phenylene)carbonyl] (9CI)

MF (C12 H10 F2 O4)n

CI PMS

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*



#### ポリブチレンテレフタレートに下記のような末端基が付いたポリエステルの検索

#### ② 分子式による検索 (/MF)

- 末端基付き SRU ポリマーは、繰り返し単位の組成と、左右の末端の合計の分子式を入力する。

← REGISTRY ファイルに入る => FILE REGISTRY => E (繰り返し単位)N 両末端の分子式の合計/MF => E (C12H12O4)NC7H5CLO/MF を入力する E1 1 (C12H12O4)NC72H134O4/MF (C12H12O4)NC7H14O2/MF E2 2 E3 1 --> (C12H12O4)NC7H5CLO/MF ← E 番号で検索する => S E3 1 "(C12H12O4)NC7H5CLO"/MF L1 ← SCAN 表示形式で表示する => D SCAN 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN L1

CI PMS

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

 $\alpha\text{-benzoyl-}\omega\text{-chloro-}$  (9CI) (C12 H12 O4)n C7 H5 Cl O

 $\mathsf{MF}$ 

Poly(oxy-1,4-butanediylcarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl),

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

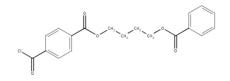
#### ③ 構造による検索

- 末端基付き SRU ポリマーに限定したい場合は、繰り返し単位を構造質問式として作図し、末端基付き SRU ポリマーのスクリーン (2069) を組み合わせて検索する。
- => FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=>

Uploading structure file: 2025\_0006\_Structure



繰り返し単位を構造質問式として作成する。 末端基の構造も指定する場合は、繰り返し単位と末端基とを結合させて作図する

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2069

末端基付き SRU ポリマーのスクリーン (2069)

L2 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2

L3 1 SEA SSS SAM L1 AND L2

**/** ← フルファイル検索

← サンプル検索

誘導体が不要な場合は、 分子式検索または完全 一致検索 (EXA) を行う

=> S L1 AND L2 FUL

L4 4 SEA SSS FUL L1 AND L2

=> S L4 AND 1/NC

← 1 成分に限定する

L5 2 L4 AND 1/NC

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する

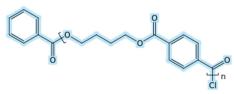
L5 2 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Poly(oxy-1,4-butanediylcarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl), $\alpha$ -benzoyl- $\omega$ -chloro- (9CI)

MF (C12 H12 O4)n C7 H5 Cl O

CI PMS

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*



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

L5 2 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Poly(oxy-1,4-butanediylcarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl), $\alpha$ -benzoyl- $\omega$ -chloro- (9CI)

MF (C4 H8 O)n C16 H8 C12 O5

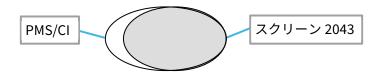
CI PMS, COM



ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

# 参考 : PMS/CI とスクリーン 2043 の違い

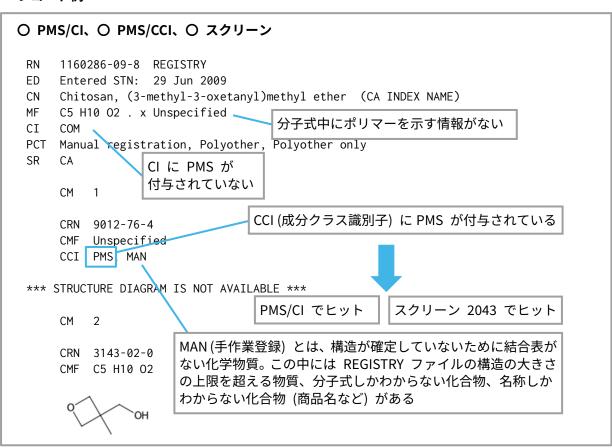
- ポリマーに限定する方法として、クラス識別子とスクリーンがあるが、ポリマーを認識する仕組 みが異なる。
  - PMS/CI とスクリーン 2043 の検索イメージ



#### ポリマーの識別

	PMS/CI (= PMS/CI,CCI)	スクリーン 2043
CI (クラス識別子) の PMS		$\circ$
CCI (成分クラス識別子) の PMS	$\circ$	$\bigcirc$
MF (分子式) フィールドの ( )x または ( )n	0	-

### レコード例

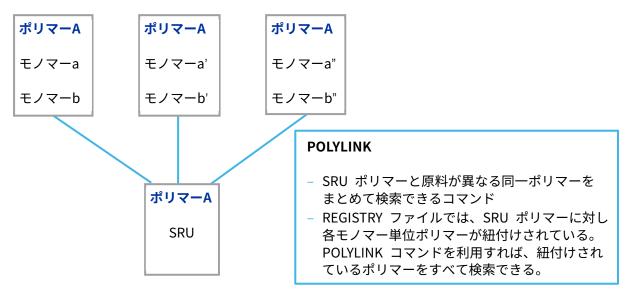


# **POLYLINK**

REGISTRY ファイルに登録されている大部分のポリマーは、原料モノマーに基づいて記述される「モノマー単位ポリマー」である。

- 重合後のポリマーが同じでも、原料モノマーが違えば異なる CAS RN® が付与される。

POLYLINK コマンドは、「実質的には同じポリマーでありながら、各々独自の CAS RN® を持つポリマー」を自動的に一つの回答セットにまとめる機能である。



対応する SRU ポリマーとモノマー単位ポリマーを、CAS 索引者がリンク付けしている。

- POLYLINK コマンドは、SRU ポリマーが存在するときのみ有効である。
- POLYLINK が利用できるレコードには、「\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*」 が記される。
- SCAN 表示形式で簡単に確認することができる。

IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-butanediol

MF (C8 H6 O4 . C4 H10 O2)x

CI PMS, COM

1

CM

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

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

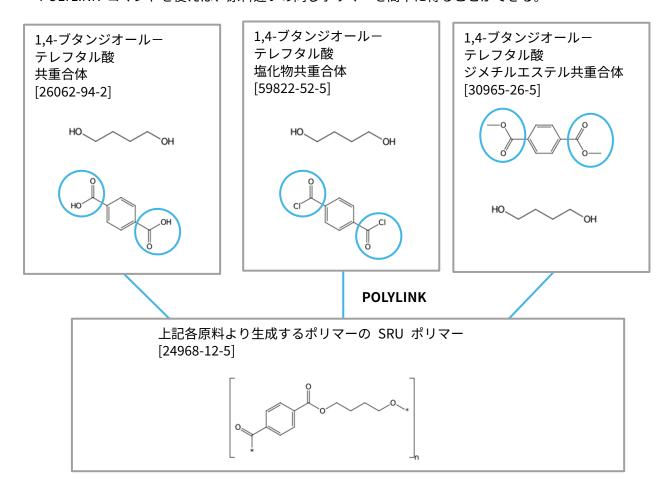
## 入力方法

=> POLYLINK CAS RN® (または L# または E#)

L#、E# : CAS RN® を含む L 番号または E 番号

# 同一ポリマーだが、複数の CAS RN® を持つポリマーの例 : ポリブチレンテレフタレート

- POLYLINK コマンドを使えば、原料違いの同じポリマーを簡単に得ることができる。



## POLYLINK コマンドが適用できるポリマー、適用できないポリマー例

- ビニル系ポリマーは SRU として登録しないので、POLYLINK コマンドを利用する必要がない。



一義的に繰り返し構造で定義できない。 (-A-B-A-B- や -A-A-B-B- など二つ以上の 繰り返し構造が考えられる)

- 縮合系ポリマーは、モノマー単位ポリマーと SRU ポリマーで登録される場合がある。そのため、 POLYLINK コマンドが適用できる。
  - 同一ポリマーであっても、さまざまな原料から作られることが多い。POLYLINK コマンドが使用可能なときは、必ず POLYLINK コマンドを利用して、実質的に同じポリマーを集める。

## ビニル系ポリマーと縮合系ポリマー

ポリマーの種類		登録形式 モノマー単位  SRU	
ビニル系ポリマー		0	×
縮合系ポリマー	縮合ホモポリマー 対称な構造の二種のモノマーから成る 縮合ポリマー	○*3	<b>○</b> *3
	5 種の汎用ポリマー <sup>*1</sup>	△*3	○,*3
	上記以外の縮合ポリマー*2	$\circ$	×

#### \*15種の汎用ポリマー

Nylon 6、Nylon 66、Polyethylene glycol (PEG)、Polypropylene glycol (PPG) Poly(ethylene terephthalate)

- \*2 非対称 2 種のモノマーからの縮合ポリマーなど
- \*3 POLYLINK コマンドで、同一ポリマーを集めることができる

### POLYLINK コマンド使用例

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> S VALOX/CN

← 化学物質名称から検索

L1 1 VALOX/CN

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Poly(oxy-1,4-butanediyloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)

ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT

MF (C12 H12 O4)n

CI PMS

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

関連するポリマーが存在する

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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> POLYLINK L1

POLYLINK コマンドを実行する

L2 23 POLYLINK L1

=> S L2 NOT L1 -

POLYLINK コマンドを実行した結果、増えた回答を確認する

L3 22 L2 NOT L1

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する

L3 22 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-butanediol and

1,4-dimethyl 1,4-benzenedicarboxylate

MF (C10 H10 O4 . C8 H6 O4 . C4 H10 O2)x

CI PMS

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*



## まとめ

- 大部分のポリマーはモノマー単位ポリマーとして登録されているので、原料モノマーから検索する。
- 特定のポリマー (縮合系ポリマーなど) には、SRU ポリマーも存在するので、それも含めて検索する。
  - POLYLINK コマンドを用いると、SRU ポリマーや同じポリマーでも原料が異なるポリマーを まとめて検索できる。



## 練習問題

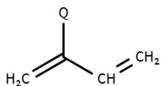
1. イソプレン (ISOPRENE) とメチルメタクリレート (METHYL METHACRYLATE) の共重合体を検索する。

(ヒント)

- モノマーの CAS RN® から検索する。

回答は p.114

2. 下記のように炭素以外の元素で置換されたブタジエンをモノマーとする 2 成分系ポリマーを検索 する (Q :  $C \in H$  以外)。



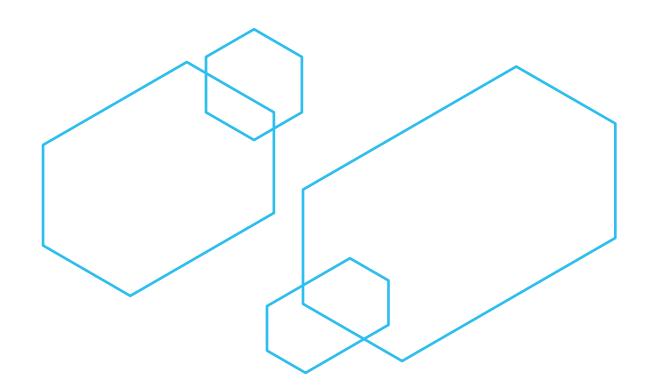
(ヒント)

- ポリマーの誘導体を検索するときは、構造検索を用いる。
- スクリーンを組み合わせて検索する。
  - モノマー単位ポリマーのスクリーン 2067
- 成分数は (/NC) で限定する

回答は p.116

# C ポリマー分類用語

REGISTRY ファイルのポリマーにはポリマー分類用語が付与されています。 ポリマー分類用語は、構造に元々存在する結合だけでなく、重合によって生成する結合も検索するこ とができる非常にユニークなフィールドです。



# ポリマー分類用語とは

ポリマー分類用語は、各ポリマーの構造をコンピュータ・アルゴリズムによって解析し、結合の種類 に基づいて付与されるコードである。

- REGISTRY ファイルのポリマーに対して、43 種のポリマー分類用語 (PCT; Polymer Class Terms) が付与されている。

RN 27056-66-2 REGISTRY

ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN 1,3-Benzenedicarbonyl dichloride, polymer with
4,4'-diamino[1,1'-biphenyl]-3,3'-diol (CA INDEX NAME)

: MF (C12 H12 N2 O2 . C8 H4 C12 O2)x

INCH InChI=1S/C12H12N2O2.C8H4Cl2O2/c13-9-3-1-7(5-11(9)15)8-2-4-10(14)12(16)6-8; 9-7(11)5-2-1-3-6(4-5)8(10)12/h1-6,15-16H,13-14H2;1-4H

INKY AMALGLGIPFNKLB-UHFFFAOYSA-N

CI PMS, COM

PCT Polyamide, Polyamide formed, Polybenzoxazole, Polybenzoxazole formed, Polyester, Polyester formed

LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

ポリマー分類用語

CM 1

CRN 2373-98-0

CMF C12 H12 N2 O2

CM 2

CRN 99-63-8

CMF C8 H4 C12 O2

52 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

13 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

52 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- ポリマー分類用語は、下記の 2 種類の結合を解析して付与される。
  - ① 主鎖に存在する結合
  - ② 重合反応によって生成する (と推定し得る) 結合 (FORMED 付き用語)

ポリマー分類用語を用いると、ポリマーの種類に基づいた検索ができる。

例 : ポリエステルの検索

# ポリマー分類用語の付与

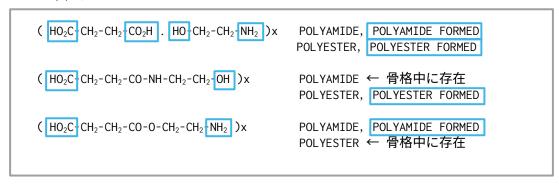
ポリマー分類用語は、構造に元々存在する結合だけでなく、重合反応によって生成しうる結合に対しても付与される。

- ① 構造に元々存在する結合 : FORMED なしのポリマー分類用語のみ収録
  - モノマー単位ポリマー

```
( HO<sub>2</sub>C-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-CO-NH-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-OH )x POLYAMIDE
```

- SRU ポリマー

- ② 重合によって生成する (と推定し得る) 結合 : FORMED なしの用語とともに、FORMED 付きのポリマー分類用語も収録
  - モノマー単位ポリマー



- SRU ポリマー中の官能基は必ず骨格中に存在するので、FORMED 付きのポリマー分類用語は付かない。

注: ポリマー分類用語は、その主鎖 (backbone) 中に存在する結合に基づいて付与される。

- 例えば下図のポリマーは、エステル結合が存在するが、主鎖ではなく側鎖であるのでポリマー 分類用語の POLYESTER は付かない。

# ポリマー分類用語を用いた検索

ポリマー分類用語は /PCT フィールドで検索する。

- 分類名とコードのいずれでも検索できる。
  - 入力ミスを避けるためにできるだけ EXPAND を利用する。
  - => S POLYESTER/PCT と検索すると、構造に元々存在する結合だけでなく、重合によって生成する (と推定される) 結合に基づくポリマーの両方が回答として得られる。

## ポリマー分類用語と検索用コード一覧

ポリマー分類用語 ① AMINO RESIN CHLOROPOLYMER DOUBLE STRAND EPOXY RESIN FLUOROPOLYMER MANUAL COMPONENT MANUAL REGISTRATION PHENOLIC RESIN POLYACETYLENE POLYACRYLIC	AR CLPO DBLSTR EP FLPO MANC MANR PR PACT PACR	FORMED 付きポリマー分類用語 ②	コード
POLYAMIC ACID POLYAMIDE POLYAMINE POLYANHYDRIDE POLYAZOMETHINE POLYBENZIMIDAZOLE POLYBENZOXAZOLE POLYCARBODIIMIDE POLYCARBONATE POLYCYANURATE POLYESTER POLYETHER POLYHYDRAZIDE POLYIMIDE POLYIONENE POLYISOCYANURATE POLYKETONE	PAMA PA PM PANH PAZM PBI PBO PCD PC PCY PES PETH PHZ PI PION PIR PK	POLYAMIC ACID FORMED POLYAMIDE FORMED POLYAMINE FORMED POLYANHYDRIDE FORMED POLYAZOMETHINE FORMED POLYBENZIMIDAZOLE FORMED POLYBENZOXAZOLE FORMED POLYCARBODIIMIDE FORMED POLYCARBONATE FORMED POLYCYANURATE FORMED POLYESTER FORMED POLYETHER FORMED POLYHYDRAZIDE FORMED POLYIMIDE FORMED POLYIONENE FORMED POLYISOCYANURATE FORMED POLYKETONE FORMED	PAMA F PA F PM F PANH F PAZM F PBO F PCD F PC F PCY F PES F PETH F PHZ F PI F PION F PIR F PK F
POLYNUCLEOTIDE POLYOLEFIN POLYOTHER POLYOTHER ONLY	PNUC POLF OTHER OTHERO		
POLYPHENYL POLYPHOSPHAZENE POLYQUINOXALINE POLYSTYRENE	PPH PPSZ PQ PSTY	POLYPHENYL FORMED POLYPHOSPHAZENE FORMED POLYQUINOXALINE FORMED	PPH F PPSZ F PQ F
POLYSULFIDE POLYSULFONAMIDE POLYSULFONE POLYTHIOESTER POLYTHIOETHER POLYUREA POLYURETHANE POLYVINYL * 学知か完美については下記名	PSF PSA PSU PTES PTETH PUA PUR PVIN	POLYSULFIDE FORMED POLYSULFONAMIDE FORMED POLYSULFONE FORMED POLYTHIOESTER FORMED POLYTHIOETHER FORMED POLYUREA FORMED POLYURETHANE FORMED	PSF F PSA F PSU F PTES F PTETH F PUA F PUR F

<sup>\*</sup> 詳細な定義については下記参照。

https://www.cas.org/sites/default/files/documents/polymerclass.pdf

<sup>\*</sup> 一般の核酸に対して分類用語の "POLYNUCLEOTIDE" は付与されない。

<sup>\*</sup> 一般のタンパク質、ペプチドに対して分類用語の "POLYAMIDE" は付与されない。

<sup>\*</sup> 重合度の確定しているオリゴマー (2 量体、3 量体など) には、ポリマー分類用語は付与されない。

# 検索例 : グアニジンをモノマーとするアミノ樹脂の検索

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る => E GUANIDINE/CN ← 名称を EXPAND する E1 1 GUANIDAN/CN E2 GUANIDIN/CN 1 E3 1 --> GUANIDINE/CN GUANIDINE ((CH7N3)2WO4), TUNGSTATE(VI)/CN E4 : ← E 番号で検索する => S E3 1 GUANIDINE/CN => SEL L1 1 RN ← CAS RN® を抽出する E1 THROUGH E1 ASSIGNED ← 抽出した CAS RN® を表示して確認する => D SEL 1 E1 113-00-8/BI ← 成分 CAS RN® 検索を行う => S E1/CRN L2 4809 113-00-8/CRN グアニジンを成分とする多成分物質の検索 ← ポリマー分類用語を EXPAND する => E AMINO RESIN/PCT \*\*\*\* START OF FIELD \*\*\*\* 24975 --> AMINO RESIN/PCT AR/PCT E4 24975 E5 10671 CHLOROPOLYMER/PCT: ポリマー分類用語を使ってグアニジンを => S E3 AND L2 成分とするアミノ樹脂に限定する 120 "AMINO RESIN"/PCT AND L2 => D SCAN ← SCAN 表示形式で表示する 120 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN L3 Guanidine, polymer with [1,1'-biphenyl]-2,2'-diol and formaldehyde ΙN (C12 H10 O2 . C H5 N3 . C H2 O)x MF CI PMS CM CM 2 CM 3

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

```
L3
    120 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
     Guanidine, cyano-, polymer with ammonium chloride ((NH4)Cl), formaldehyde
     and guanidine (9CI)
MF
     (C2 H4 N4 . C H5 N3 . C H2 O . Cl H4 N)x
CI
     PMS
     CM
          1
       CI-NH<sub>4</sub>
     CM 2
     CM
          3
     CM
          4
         =0
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END
=> D L3 1
   ANSWER 1 OF 120 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L3
RN
    3074816-19-3 REGISTRY
ED
    Entered STN: 26 Feb 2025
CN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED
     (C10 H24 N2 . C H5 N3 . C H2 O . Cl H)x
INCH InChI=1S/C10H24N2.CH5N3.CH2O.ClH/c11-9-7-5-3-1-2-4-6-8-10-12;2-1(3)4;1-2;
     /h1-12H2; (H5,2,3,4); 1H2; 1H
INKY MSGMGTWQYSVUMG-UHFFFAOYSA-N
CI
    PMS
PCT Amino resin
SR
    CAss
LC
    STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT
     CM
         1
     CRN 646-25-3
     CMF C10 H24 N2
      H_2N_{\searrow}
     CM
     CRN 50-01-1 (113-00-8)
     CMF C H5 N3 . Cl H
          HN
               NH<sub>2</sub>
              \dot{N}H_2

 HCI

          3
     CM
     CRN 50-00-0
     CMF C H2 O
          =0
```

2 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

2 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

# 検索例 : エステル重合によって得られる 1 または 2 元系ポリエステルを検索する。 ただし、モノマー中にエーテル結合が存在する。

- エステル重合によって得られるポリエステル → POLYESTER FORMED

- モノマー中にエーテル結合が存在

→ POLYETHER

- 重合によって生成するエーテル結合を除く → POLYETHER FORMED を除く

=> FILE REGISTRY

ポリマー分類用語で検索

=> S (POLYESTER FORMED AND POLYETHER NOT POLYETHER FORMED)/PCT

L1 113291 (POLYESTER FORMED AND POLYETHER NOT POLYETHER FORMED)/PCT

=> S L1 AND 3>NC

1 または 2 成分に限定

L2 12154 L1 AND 3>NC

#### => D L2 1 ← 1 番目の回答を IDE 表示形式で表示する

L2 ANSWER 1 OF 12154 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

3096910-45-8 REGISTRY RN

ED Entered STN: 28 Aug 2025

CN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED

MF (C15 H14 O6 . C6 H14 O2)x

CI

PCT Polyester, Polyester formed, Polyether

SR

LC STN Files: CAPLUS

CM 1

CRN 1001469-26-6 CMF C15 H14 O6

CM 2

CRN 629-11-8 CMF C6 H14 O2

1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

# まとめ

- ポリマー分類用語は、構造に元々存在する結合および重合によって生成する結合に対して付与 される。
- ポリマー分類用語を用いると、ポリマーの種類に基づいた検索ができる。



# 練習問題

3. 4,4'-ビフェニルジカルボン酸 (787-70-2) をモノマーとするポリマーを網羅的に検索する。 件数が多い場合はポリアミド系ポリマーに限定する。

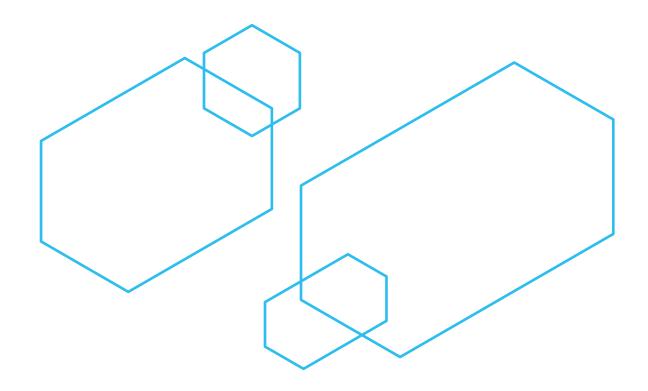
## (ヒント)

- 実質的に同じポリマーを網羅的に検索するには POLYLINK コマンドを実行する。
- ポリマーの種類で検索する場合はポリマー分類用語を用いる。

回答は p.117

# D 各論

ポリマーの物質検索や文献検索はポリマーの種類によって大きく異なります。 この章では、ポリマーの種類ごとの検索方法をご紹介します。



# ポリマーの種類と CAplus/CA ファイルでの索引方針

ポリマーの種類により、CAplus/CA 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	参照
縮合系ポリマー	0	48
ビニル系ポリマー	0	51
参考 : 重合形態を区別したポリマーの文献検索	$\bigcirc \triangle$	53
汎用ポリマー	0	54
ポリアルキレングリコール	0	55
ポリエーテルポリオール	0	57
多段階重合ポリマー	0	58
架橋ポリマー (多段階重合ポリマー)	0	62
後 塩、付加化合物	0	67
処 理 エステル化 ポ リ エーテル化	0	70
	0	75
マート その他の化学的処理 (塩素化など)	$\triangle$	79
参考 : * (アスタリスク) つきの CAS RN® と文献検索	$\triangle\Box$	84
参考 : 一義的に定義できない成分を含むポリマーの検索	$\triangle$	86
シリコーン		90
ポリビニルアルコール	$\bigcirc \triangle$	94
アセタール樹脂		95
ポリマーブレンド、ポリマーアロイ	$\triangle$	98
デンドリマー、スターポリマー、ハイパーブランチポリマー	$\bigcirc \triangle$	99
テロマー	0	102
クマロンーインデン樹脂、石油系樹脂	×	103
合成繊維		104
合成ゴム		106
参考 : 重合条件、触媒を限定したポリマーの文献検索	_	108
参考 : モノマーの索引	_	110

_				
$\sim$	_	~ ± ]	されるポリ	1 —
)	- (	ハッシュ	しょんんだし	1 -

<sup>□</sup> 原則として CAS RN® と統制語で索引されるポリマー

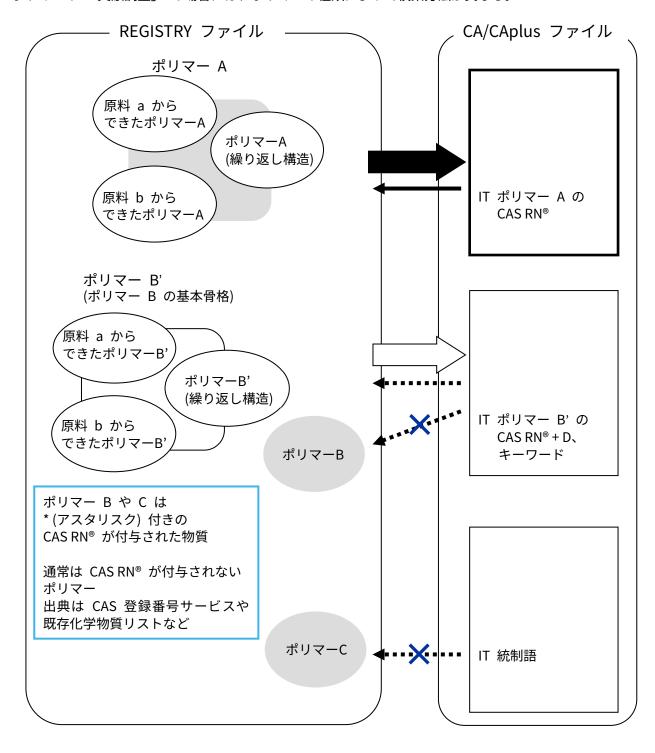
<sup>×</sup> 原則として統制語で索引されるポリマー

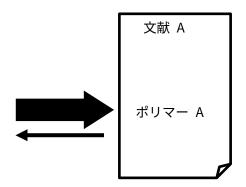
# ポリマーの登録の流れと検索方法

ポリマーの「CAS RN®調査」や「物質調査」の場合には REGISTRY ファイルを用いる。

- 同じポリマーでも、複数の CAS RN® を持つことがある。

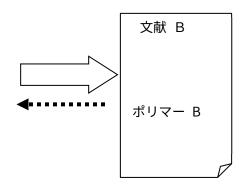
ポリマーの 「文献調査」 の場合には、ポリマーの種類によって検索方法が異なる。





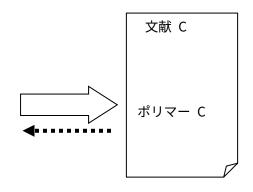
一般的にポリマーの文献検索は、ポリマーA の 検索方法になる。

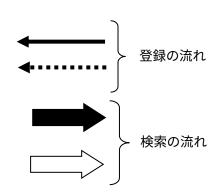
- REGISTRY ファイルで、できる限り同じ ポリマーを検索し、(例 : POLYLINK を 用いる等) クロスオーバーを行う。



ポリマーの種類によって、ポリマー独自の CAS  $RN^{\circ}$  ではなく "CAS  $RN^{\circ}$  + D" や "統制語" で CAplus/CA ファイルに索引されているものもある。

- これらのポリマーは、索引方式にあった 方法で検索する。





# 縮合系ポリマー

ポリエステル、ポリアミドなどの縮合系ポリマーは、同じポリマーでも原料が異なることが多い。

- POLYLINK コマンドが適用可能な場合は、必ず POLYLINK コマンドを使用する。
- 非対称なモノマーからなるポリマーは POLYLINK コマンドが適用できない。各モノマーのバリエーションを考えて検索する (モノマーからの構造検索が有効)。

## 検索例 : p-フェニレンジアミンとテレフタル酸からなるポリマーの検索

```
=> FILE REGISTRY
                             ← REGISTRY ファイルに入る
                                                           CAS RN® & 物質調査
                            ← 名称で EXPAND する
=> E P-PHENYLENEDIAMINE/CN
               P-PHENYLENEDIALDEHYDE-M-PHENYLENEDIAMINE COPOLYMER/CN
          1
E2
                P-PHENYLENEDIALDEHYDE-M-PHENYLENEDIAMINE COPOLYMER, SRU/CN
          1 --> P-PHENYLENEDIAMINE/CN
E3
=> S E3
                             ← E 番号で検索する
           1 P-PHENYLENEDIAMINE/CN
                             ← CAS RN® を抽出する
=> SEL L1 1 RN
E1 THROUGH E1 ASSIGNED
                             ← 成分 CAS RN® 検索を行う
=> S E1/CRN
      12222 106-50-3/CRN
=> E TEREPHTHALIC ACID/CN
                            ← 名称で EXPAND する
                TEREPHTHALHYDROXIMOYL CHLORIDE/CN
E1
     1
E2
                TEREPHTHALHYDROXYAMOYL CHLORIDE-4,4'-THIODIBENZENETHIOL POLYMER/CN
          1 --> TEREPHTHALIC ACID/CN
E3
=> S E3
                             ← E 番号で検索する
           1 "TEREPHTHALIC ACID"/CN
                             ← CAS RN® を抽出する
=> SEL L3 1 RN
E1 THROUGH E1 ASSIGNED
                             ← 成分 CAS RN® 検索を行う
=> S E1/CRN
      51185 100-21-0/CRN
                             ← 各成分を含む 2 成分物質を検索
=> S L2 AND L4 AND 2/NC
          3 L2 AND L4 AND 2/NC
=> S L5 AND PMS/CI
                             ← ポリマーに限定する
    2 L5 AND PMS/CI
=> D SCAN
                             ← SCAN 表示形式で確認する
L6 2 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, compd. with 1,4-benzenediamine (1:1), homopolymer (9CI)
```

```
MF (C8 H6 O4 . C6 H8 N2)x
CI
    PMS
**RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK**
                                                          関連ポリマーが存在する
    CM
         1
         CM
              2
         CM
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
    2 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L6
IN
    1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-benzenediamine
MF
    (C8 H6 O4 . C6 H8 N2)x
CI
    PMS, COM
**RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK**
    CM
    CM
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED
                                     POLYLINK コマンドで関連するポリマーを集める
=> POLYLINK L6
          21 POLYLINK L6
L7
                                ← SCAN 表示形式で確認する
=> D SCAN
    21 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L7
    Benzoic acid, 4-[[[4-(acetylamino)phenyl]amino]carbonyl]-, homopolymer (9CI)
ΤN
\mathsf{MF}
    (C16 H14 N2 O4)x
CI
    PMS
```

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

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

縮合系ポリマーの文献検索は、REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする。

# ビニル系ポリマー

ビニル系ポリマーを検索するときは、モノマーから検索すると幅広く検索できる。

### 検索例 : スチレン (100-42-5) とイソプレン (78-79-5) 共重合体を調査する。

```
=> FILE REGISTRY
                                ← REGISTRY ファイルに入る
                                                                CAS RN® & 物質調査
=> S 100-42-5/CRN AND 78-79-5/CRN AND PMS/CI AND 2/NC
           27 100-42-5/CRN AND 78-79-5/CRN AND PMS/CI AND 2/NC
                           ↑ スチレンとイソプレンからなる 2 成分ポリマーを検索
                                ← 1-27 番目の回答の CA 索引名を表示する
=> D 1-27 IN
L1
    ANSWER 1 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, alternating
IN
    ANSWER 2 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic, pentablock
ΙN
L1
    ANSWER 3 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
ΙN
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, isotactic
    ANSWER 4 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
ΙN
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic, triblock
    ANSWER 5 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic, diblock
ΙN
    ANSWER 6 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, isotactic, diblock
ΙN
    ANSWER 7 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic
TN
    ANSWER 8 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic,
ΤN
    graft, triblock (9CI)
    ANSWER 9 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic,
ΙN
    diblock, graft (9CI)
I 1
    ANSWER 10 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    Benzene, ethe 重合形態ごとに、異なる CAS RN® が diene, graft, triblock (9CI)
ΤN
                 付与されている
    ANSWER 11 OF
L1
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, isotactic, triblock (9CI)
TN
I 1
    ANSWER 12 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, diblock, graft
ΤN
    ANSWER 13 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, pentablock
```

```
ANSWER 14 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, tetrablock
ΤN
    ANSWER 15 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
ΤN
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, triblock
    ANSWER 16 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, diblock
ΙN
    ANSWER 17 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, isotactic, block
L1
    ANSWER 18 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene,
                                                            isotactic, graft
I 1
    ANSWER 19 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic, graft (9CI)
ΤN
    ANSWER 20 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, block, graft
TN
    ANSWER 21 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
IN
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic, block
L1
    ANSWER 22 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, graft
    ANSWER 23 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
ΤN
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, block
    ANSWER 24 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
ΙN
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, hydrogenated
L1
    ANSWER 25 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, epoxidized
    ANSWER 26 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene dimer (9CI)
IN
L1
    ANSWER 27 OF 27 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
ΙN
    Benzene, ethenyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene
```

原料モノマーから検索すると、さまざまな重合形態のポリマーを検索できる。

ビニル系ポリマーの文献検索は、REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする。

# 参考 : 重合形態を区別したポリマーの文献検索

重合形態を指定した文献検索の際は、目的の重合形態に対応する CAS RN® を利用する。 固有の CAS RN® で索引されていない文献を入手する場合は、ランダム共重合体などの CAS RN® と 重合形態のキーワードを組み合わせて検索する。

### CAplus/CA ファイルの重合形態の違いにおける索引の変遷

年代	CAplus/CA ファイルの索引方針
1976 年以前	重合形態に関わらず、ランダム共重合体の CAS RN® を索引し、構造的特徴(block、graft、alternating など) はテキスト説明句で区別する。
1977 年以降	ブロック (diblock、triblock、tetrablock、pentablock、stereoblock)、ランダム共重合体は、固有の CAS RN® を索引。その他の類似の構造的特徴(グラフト、交互、ladder など)は テキスト説明句で区別する。
1987 年以降	グラフト、交互共重合体についても固有の CAS RN® で索引する。

### 検索例 : スチレン (100-42-5) とイソプレン (78-79-5) のブロック共重合体に関する文献検索

文献調査 => FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る 応用 => S 100-42-5/CRN AND 78-79-5/CRN AND PMS/CI AND 2/NC 27 100-42-5/CRN AND 78-79-5/CRN AND PMS/CI AND 2/NC ↑ スチレンとイソプレンからなる 2 成分ポリマーを検索 => D 1-27 IN ← 1-27 番目の回答の CA 索引名を表示する => SEL L1 2 4-6 8-17 20-21 23 RN ブロック共重合体の CAS RN® を抽出する E1 THROUGH E17 ASSIGNED ← E 番号で検索する => S E1-E17 L2 17 (1011463-57-2/BI OR 1011463-59-4/BI OR 105729-79-1/BI OR 154801-ランダム共重合体の CAS RN® を抽出する => SEL L1 27 RN E18 THROUGH E18 ASSIGNED ← E 番号で検索する => S E18 L3 1 25038-32-8/BI (25038-32-8/RN) ← CAplus ファイルに入る => FILE CAPLUS

=> S L2 ブロック共重合体の CAS RN® を使って索引していた文献 L4 20298 L2 (1977 年以降の文献調査)

=> S L3(L)?BLOCK? RAN=,1976 L5 317 L3(L)?BLOCK? 1976 年以前は、ブロック共重合体でも、ランダム共重 合体の CAS RN® を使って索引していたので、1976 年

以前に限定して検索 (1976 年以前の文献調査)

=> S L4 OR L5

L6 20607 L4 OR L5

# 汎用ポリマー

5 種の汎用ポリマー (ナイロン 6、ナイロン 66、ポリエチレングリコール、ポリプロピレングリコー ル、ポリエチレンテレフタレート) については、SRU ポリマーの CAS RN® を主に用いる。

ポリマー名	SRU 登録ポリマーの CAS RN®	POLYLINK
Nylon 6	[25038-54-4]	$\circ$
Nylon 66	[32131-17-2]	$\bigcirc$
Polyethylene glycol (PEG)	[25322-68-3]	$\bigcirc$
Polypropylene glycol (PPG)	[25322-69-4]	×
Poly(ethylene terephthalate)	[25038-59-9]	$\bigcirc$

- POLYLINK コマンドの項に○が付与されているポリマーには、モノマー単位ポリマーも存在する。
  - 汎用ポリマーであってもポリマーの文献を網羅的に検索するには、POLYLINK コマンドの併用 が必要な場合がある。

検索例 : ポリエチレンテレフタレートの検索

CAS RN® & 物質調査

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> S POLYETHYLENE TEREPHTHALATE/CN

← 名称で検索する

1 POLYETHYLENE TEREPHTHALATE/CN

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

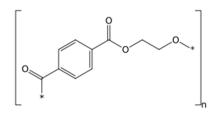
IN Poly(oxy-1,2-ethanediyloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)

ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT

MF (C10 H8 O4)n

PMS, COM CI

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\* ← 関連ポリマーが存在する



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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> POLYLINK L1

← POLYLINK コマンドを実行する

L2

50 POLYLINK L1

汎用ポリマーの文献は REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする。

=> FILE CAPLUS

← CAplus ファイルに入る

文献調査

=> S L2

← L 番号をクロスオーバーする

L3 295271 L2

# ポリアルキレングリコール

ポリアルキレングリコールは、環状のアルキレンオキシド (エチレンオキサイド、テトラヒドロフランなど) の開環重合によって生成するポリマーである。

一般式 : H-[-O-(CR<sub>2</sub>)m-]n-OH (R=H, m=2 の場合: H-[-O-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-]n-OH)

汎用ポリマー

### ポリアルキレングリコールは、種類によって REGISTRY ファイルの登録形式が異なる

種類	モノマー単位	SRU	
PPG (ポリプロピレングリコール、ポリプロピレンオキサイド)	×	0	
その他のポリアルキレングリコール (ホモポリマー)	0	$\circ$	
共重合体 (コポリマー)	0	×	

モノマー単位、SRU の両方の登録形式が存在する場合は POLYLINK コマンドを実行する。

検索例: ポリプロピレングリコール (PPG) の検索

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> E POLYPROPYLENE GLYCOL/CN ← 名称を EXPAND する
E1 1 POLYPROPYLENE FIBERS, ISOTACTIC/CN
E2 1 POLYPROPYLENE FIBERS, WOVEN/CN
E3 1 --> POLYPROPYLENE GLYCOL/CN
:

=> S E3 ← E 番号で検索する
L1 1 "POLYPROPYLENE GLYCOL"/CN

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Poly[oxy(methyl-1,2-ethanediyl)],  $\alpha$ -hydro- $\omega$ -hydroxy-ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT

MF (C3 H6 O)n H2 O

CI IDS, PMS, COM

HO (C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>) H

ポリプロピレングリコールは SRU ポリマーのみ

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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

ポリアルキレングリコールの文献検索は、REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする。

⇒ FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る

文献調査

=> S L1 ← L 番号をクロスオーバーする

L2 60911 L1

### モノマー単位と SRU 登録が存在する場合

=> S L3

L4 29034 L3

- レコード例 : テトラヒドロフランホモポリマー 24979-97-3 REGISTRY ED Entered STN: 16 Nov 1984 CN Furan, tetrahydro-, homopolymer (CA INDEX NAME) \*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\* モノマー単位登録 CM CRN 109-99-9 CMF C4 H8 O 25190-06-1 REGISTRY RN ED Entered STN: 16 Nov 1984 Poly(oxy-1,4-butanediyl),  $\alpha$ -hydro- $\omega$ -hydroxy- (CA INDEX NAME) SRU 登録 \*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\* 検索例 : テトラヒドロフランホモポリマーの検索 CAS RN® & 物質調査 ← REGISTRY ファイルに入る => FILE REGISTRY => S 109-99-9/CRN ← テトラヒドロフランを成分とする物質を検索する L1 20612 109-99-9/CRN ← ホモポリマーに限定する => S L1 AND PMS/CI AND 1/NC 1 L1 AND PMS/CI AND 1/NC => D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する L2 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN IN Furan, tetrahydro-, homopolymer \*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\* CM ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED ← POLYLINK コマンドで関連ポリマーを検索する => POLYLINK L2 L3 4 POLYLINK L2 ポリアルキレングリコールの文献検索は、REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする。 => FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る 文献調査

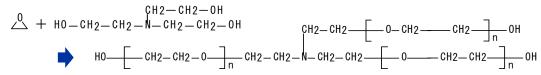
← L 番号をクロスオーバーする

# ポリエーテルポリオール

ポリエーテルポリオールは、活性水素を有する多価アルコール (またはアミン) と、アルキレンオキシドを酸またはアルカリ存在下で反応させて得られるポリマーである。

多価アルコール、またはアミンとしてエチレングリコール、グリセリン、エチレンジアミン、 トリエタノールアミンなどが使われる。

## 検索例 : オキシランをトリエタノールアミンの存在下で重合させたポリエーテルポリオールの検索



- この種のポリマーは構造や分子式で検索可能である。化合物の全体の構造が明確な場合は、分子 式の検索が有効である。部分構造のみを指定する場合は、構造検索を利用する。
  - 分子式の作成方法
    - ① [CH2CH2O]n をまとめる。 ・・・ (C2H4O)N(C2H4O)N
    - ② その他の分子式をまとめる。 ・・・ C6H15NO3
    - ③ ① を最初に、② を次に入力する。 ・・・ (C2H4O)N(C2H4O)N(C2H4O)NC6H15NO3
- => FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る
- => E (C2H4O)N(C2H4O)N(C2H4O)NC6H15NO3/MF ←分子式で EXPAND する
- E1 1 (C2H40)N(C2H40)N(C2H40)NC6H15N012S3/MF
- E2 1 (C2H40)N(C2H40)N(C2H40)NC6H15NO12S3.3NA/MF
- E3 1 --> (C2H4O)N(C2H4O)N(C2H4O)NC6H15NO3/MF

:

=> S E3 ← E 番号で検索する

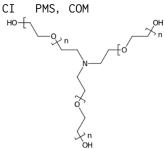
L1 1 "(C2H4O)N(C2H4O)N(C2H4O)NC6H15NO3"/MF

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Poly(oxy-1,2-ethanediyl),  $\alpha,\alpha',\alpha''$ -(nitrilotri-2,1-ethanediyl)tris[ $\omega$ -hydroxy-

MF (C2 H4 O)n (C2 H4 O)n (C2 H4 O)n C6 H15 N O3



ポリエーテルポリオールの文献は、REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする。

=> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る

文献調査

CAS RN® & 物質調査

=> S L1

← L 番号をクロスオーバーする

L2 192 L1

# 多段階重合ポリマー

多段階重合ポリマーは、ポリマーの種類により、最終生成物のポリマーがモノマーに戻して登録され ている場合と、ポリマー + モノマーで登録されている場合がある。

#### モノマーに戻して登録されている場合

- 例 1) アクリル酸エチル-メタクリル酸コポリマーにさらにアクリル酸ブチルを加えて得られる ポリマー (最終生成物はアンモニウム塩)

RN 827029-51-6 REGISTRY

Entered STN: 07 Feb 2005

2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl 2-propenoate, block, ammonium salt (9CI) (CA INDEX NAME)

OTHER NAMES:

Butyl acrylate-ethyl acrylate-methacrylic acid block copolymer ammonium salt

(C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x . x H3 N

INCH InchI=1S/C7H1202.C5H802.C4H602.H3N/c1-3-5-6-9-7(8)4-2;1-3-5(6)7-4-2;1-3(2)4(5)6;/h4H,2-3,5-6H2,1H3;3H,1,4H2,2H3;1H2,2H3,(H,5,6);1H3

INKY FVOYWQXGICBRRE-UHFFFAOYSA-N

PCT Polyacrylic

SR CA

LC STN Files: CA, CAPLUS

> CM 1

CRN 827029-50-5

CMF (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x

CCI PMS

CM 2

CRN 141-32-2 CMF C7 H12 O2

CM 3

CRN 140-88-5 C5 H8 O2 CMF

CM

CRN 79-41-4 CMF C4 H6 O2

アクリル酸エチル-メタクリル酸コポリマーはモノマー 単位ポリマーであり、さらにモノマーを重合させた場合 は、重合前のポリマーをモノマーに戻して登録する



アクリル酸エチル-メタクリル酸コポリマーの CAS RN® は、 左記のレコードには登録されていない。

RN 25212-88-8

MF (C5H802.C4H602)x

CM 1

CRN 140-88-5

CMF C5 H8 O2

CM

CRN 79-41-4

CMF C4 H6 O2

よって左記のレコードは => S 25212-88-8/CRN 検索では ヒットしない

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

# - 例 2) ポリエチレンテレフタレートと 4-ヒドロキシ安息香酸からなるポリマー

RN 25822-54-2 REGISTRY

ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,2-ethanediol and 4-hydroxybenzoic acid (CA INDEX NAME)

OTHER CA INDEX NAMES:

CN 1,2-Ethanediol, polymer with 1,4-benzenedicarboxylic acid and 4-hydroxybenzoic acid (9CI)

CN Benzoic acid, 4-hydroxy-, polymer with 1,4-benzenedicarboxylic acid and 1,2-ethanediol (9CI)

:

MF (C8 H6 O4 . C7 H6 O3 . C2 H6 O2)x

INCH InChI=1S/C8H604.C7H603.C2H602/c9-7(10)5-1-2-6(4-3-5)8(11)12;8-6-3-1-5(2-4-6)7(9)10;3-1-2-4/h1-4H,(H,9,10)(H,11,12);1-4,8H,(H,9,10);3-4H,1-2H2

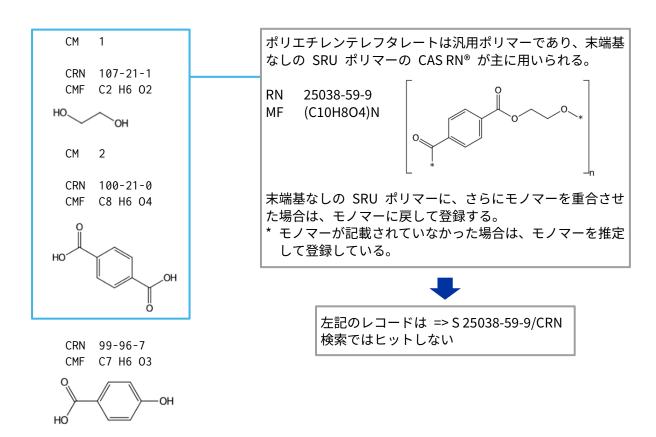
INKY RRTCLOUDZRDLKM-UHFFFAOYSA-N

CI PMS, COM

PCT Polyester, Polyester formed

SR CA

LC STN Files: CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMLIST, CIN, IFIALL, PIRA, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL, USPATOLD



1203 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

18 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
1204 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

### ポリマー + モノマーで登録されている場合

- 例 3) ポリエチレングリコールとテレフタル酸からなるポリエステル

RN 9057-77-6 REGISTRY

ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with

 $\alpha$ -hydro- $\omega$ -hydroxypoly(oxy-1,2-ethanediyl) (CA INDEX NAME)

OTHER NAMES:

CN PEG-Terephthalic acid copolymer

CN Poly(ethylene glycol-co-terephthalate)

.

MF (C8 H6 O4 . (C2 H4 O)n H2 O)x

CI PMS, COM

PCT Polyester, Polyester formed, Polyether SR CA LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, IFIALL, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL, USPATOLD

CM 1

CRN 25322-68-3

CMF (C2 H4 0)n H2 0

CCI PMS

$$HO - O - H$$

ポリエチレングルコールは汎用ポリマーであり、末端基 つき SRU ポリマーの CAS RN® が用いられる。

末端基つき SRU ポリマーが、さらに別のモノマーと重合する場合は、通常はモノマー単位に戻さず、ポリマーの成分として登録される

CM 2

CRN 100-21-0

CMF C8 H6 O4

100 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

8 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

100 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

## 検索例 : アクリル酸エチル-メタクリル酸コポリマーに、さらにアクリル酸ブチルを加えて得られる ポリマーの検索

CAS RN® & 物質調査

```
← REGISTRY ファイルに入る
=> FILE REGISTRY
=> S 140-88-5/CRN AND 79-41-4/CRN AND 141-32-2/CRN
                                                          各成分モノマーから検索する
         3133 140-88-5/CRN AND 79-41-4/CRN AND 141-32-2/CRN
                       ← 3 成分に限定する
=> S L1 AND 3/NC
           5 L1 AND 4/NC
                       ← CA 索引名と分子式を表示する
=> D 1-5 IN MF
L2
    ANSWER 1 OF 5 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl
    2-propenoate, diblock
                                         ジブロック
MF
    (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x
    ANSWER 2 OF 5 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L2
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl
ΙN
    2-propenoate, block (9CI)
                                         ブロック
MF
    (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x
L2
    ANSWER 4 OF 5 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl
ΙN
    2-propenoate, graft (9CI)
                                         グラフト
    (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x
MF
    ANSWER 5 OF 5 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L2
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl
ΙN
MF
    (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x
=> S L1 AND 4/NC AND H3N
                                    p.58 のアンモニウム塩を検索するには 3 成分ではなく、
L3
            3 L1 AND 4/NC AND H3N
                                    4 成分 (4/NC) で限定する。また、NH₃ は単原子フラグメ
                                    ント (p.69 参照) であり、成分 CAS RN® が収録されてい
=> D L3 1-3 IN MF
                                    ないので、成分分子式 (H3N) を利用して検索する
    ANSWER 2 OF 3 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on SIN
L3
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl
ΤN
    2-propenoate, block, ammonium salt (9CI)
MF
    (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x . x H3 N
L3
    ANSWER 3 OF 3 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with butyl 2-propenoate and ethyl
    2-propenoate, ammonium salt
MF
    (C7 H12 O2 . C5 H8 O2 . C4 H6 O2)x . x H3 N
```

多段階重合ポリマーの文献検索は、REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする。

=> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る 文献調査 文献を検索するときは、L 番号を CAplus/CA => S L2 ファイルにクロスオーバーする 148 L2 L3

# 架橋ポリマー (多段階重合ポリマー)

架橋ポリマーは各ポリマー成分とともに、架橋剤も含めて登録されている。

- ただし、触媒 (光、放射線、加硫、過酸化物) による架橋の場合は、基本的に架橋剤を含めない形で登録される。

## 例 1) アジピン酸-エチレングリコール-無水マレイン酸から得られる不飽和ポリエステルの スチレン架橋ポリマー

```
RN
     35381-60-3 REGISTRY
     Entered STN: 16 Nov 1984
FD
    Hexanedioic acid, polymer with 1,2-ethanediol, ethenylbenzene and
     2,5-furandione (9CI) (CA INDEX NAME)
     (C8 H8 . C6 H10 O4 . C4 H2 O3 . C2 H6 O2)x
MF
INCH InChI=1S/C8H8.C6H1004.C4H203.C2H602/c1-2-8-6-4-3-5-7-8;7-5(8)3-1-2-4-
     6(9)10;5-3-1-2-4(6)7-3;3-1-2-4/h2-7H,1H2;1-4H2,(H,7,8)(H,9,10);1-2H;3-4H,1-2H2
INKY FGZMXDQNVBAJMU-UHFFFAOYSA-N
CI
    PMS
PCT Polyester, Polyester formed, Polystyrene, Polyvinyl
     STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT
     CM
         1
     CRN 124-04-9
         C6 H10 O4
     CMF
     HO
     CM
         2
     CRN 108-31-6
     CMF
         C4 H2 O3
     CM
         3
     CRN 107-21-1
     CMF
         C2 H6 O2
     HO.
              NO'
     CM
         4
     CRN 100-42-5
         C8 H8
     CMF
                            架橋剤 (100-42-5) も成分として登録される
```

# 例 2) ビスフェノール A - エピクロロヒドリン共重合体のアクリル酸エステルへのスチレン 架橋ポリマー

```
RN
     95932-78-8 REGISTRY
    Entered STN: 21 Apr 1985
ED
    Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with
     2-(chloromethyl)oxirane, 2-propenoate, polymer with ethenylbenzene (CA INDEX NAME)
MF
     ((C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . C8 H8 . x C3 H4 O2)x
INCH InChI=1S/C15H1602.C8H8.C3H5Cl0.C3H402/c1-15(2,11-3-7-13(16)8-4-11)12-5-9-
     14(17)10-6-12;1-2-8-6-4-3-5-7-8;4-1-3-2-5-3;1-2-3(4)5/h3-10,16-17H,1-2H3;2-
     7H, 1H2; 3H, 1-2H2; 2H, 1H2, (H, 4, 5)
INKY IYFPIVYUEZWPFJ-UHFFFAOYSA-N
CI
    PMS
PCT Epoxy resin, Polyacrylic, Polystyrene
SR
LC
    STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, USPATFULL
     CM
         1
     CRN 100-42-5
     CMF C8 H8
                    架橋剤 (100-42-5) も成分として登録される
     CM
     CRN 55818-57-0
                                                ビスフェノール A-エピクロロヒドリン共重合体の
         (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . x C3 H4 O2
                                                アクリル酸エステル (55818-57-0)
         CM
              3
         CRN 79-10-7
         CMF C3 H4 O2
          0_
                           エステル化剤 (79-10-7)
                           (p.70 参照)
             ÓН
         CM
              4
                                                 ビスフェノール A-エピクロロヒドリン共重合体
         CRN 25068-38-6
         CMF
             (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x
                                                 (25068-38-6)
         CCI PMS
              CM
              CRN 106-89-8
              CMF C3 H5 C1 O
              CM
              CRN 80-05-7
              CMF C15 H16 O2
```

# 検索例: アジピン酸 (124-04-9)、エチレングリコール (107-21-1)、無水マレイン酸 (108-31-6) から得られる不飽和ポリエステルのスチレン架橋ポリマーの文献検索

CAS RN® & 物質調査

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> S 124-04-9/CRN AND 107-21-1/CRN AND 108-31-6/CRN AND 100-42-5/CRN AND 4/NC

1 124-04-9/CRN AND 107-21-1/CRN AND 108-31-6/CRN AND 100-42-5/CRN AND 4/NC

スチレンをモノマーの一つとする 4 元共重合体を検索する

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Hexanedioic acid, polymer with 1,2-ethanediol, ethenylbenzene and 2,5-furandione

MF (C8 H8 . C6 H10 O4 . C4 H2 O3 . C2 H6 O2)x

CI PMS

OH

CM 2

CM 3

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

架橋ポリマーの文献検索は、原則 REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーすればよい。

=> FILE CAPLUS

← CAplus ファイルに入る

文献調査

=> S L1

← REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする

L2 4 L1

=> D SCAN TI HITRN

← SCAN 表示形式 (TI, HITRN のみ表示) で確認する

L2 4 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Mechanical properties and curing characteristics of unsaturated polyesters synthesized for large casting

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

ただし、下記のように架橋剤がモノマーとして扱われていない場合もあるので、架橋剤を除いたポリマーも含めて検索すると網羅的な回答が得られる。

- 1986 年以前は、架橋剤と明記されたものについてはモノマーの扱いをしていなかった。また、索引方針が曖昧な時期もある。
- 架橋剤が特殊である場合ならびに架橋剤が研究・発明の主眼である場合には、架橋剤をモノマー としないポリマーの CAS RN® で索引し、別途架橋剤の CAS RN® も索引する。
- としないボリマーの CAS RN® で索引し、別途架橋剤の CAS RN® も索引する。

  => FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

  => S 124-04-9/CRN AND 107-21-1/CRN AND 108-31-6/CRN AND 3/NC

  L1 1 124-04-9/CRN AND 107-21-1/CRN AND 108-31-6/CRN AND 3/NC

スチレンを除く 3 元重合体を検索する

スチレンを検索する

=> FILE CAPLUS

3 元重合体ポリマーと架橋や硬化などのキーワードを掛け合わせる。 また、スチレンも同時に含む文献を調査する

=> S L1 (L) (CROSSLINK? OR CUR? OR HARD?) AND L2
L3 5 L1 (L) (CROSSLINK? OR CUR? OR HARD?) AND L2

- => D SCAN TI HITIND ← SCAN 表示形式 (TI, HITIND のみ表示) で確認する
- L3 5 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- TI Radiation copolymerization of ethylene maleate-adipate oligomer with various monomers
- IT 29060-29-5

RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
 (crosslinking of, by -irradiation)

IT 100-42-5, uses and miscellaneous 101-37-1 108-05-4, uses and miscellaneous 1025-15-6

RL: USES (Uses)

(polyesters from adipic acid and ethylene glycol and maleic anhydride crosslinked by)

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

- L3 5 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- TI Effect of maleic anhydride and styrene content on the thermal stability of unsaturated polyester resins
- IT 100-42-5, reactions

RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)

(crosslinking by, of unsatd. polyesters, phys. properties in relation to)

IT 29060-29-5 29403-67-6

RL: USES (Uses)

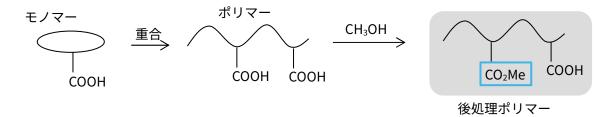
(styrene-crosslinked, heat resistance of)

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

# 後処理ポリマー

ポリマーが部分的もしくは全体的な修飾を受けて得られるポリマー生成物を後処理ポリマーという。

<例 1> 重合後にポリマー側鎖のカルボニル基をメタノールでエステル化したポリマー



<例 2> ポリイミドの末端封止剤として無水フタル酸を使用したポリマー (末端のイミド化)



## 後処理ポリマーの索引方針

- 後処理の種類により、後処理ポリマーに関する CAplus/CA ファイルの索引方針が異なる。
  - 1. 後処理ポリマー独自の CAS RN® が付与され、その CAS RN® で索引される。

IT 後処理ポリマーの CAS RN®

2. 後処理前のポリマーの非特定誘導体 (D 付き) が後処理に関するキーワード とともに索引される。後処理ポリマーには独自の CAS RN® は付与されない。 例) 塩素化物 : [原料ポリマーの CAS RN®] D+chlorinated など

IT 後処理前のポリマー の CAS RN®+ D + キーワード

- 後処理タイプ別の索引方針

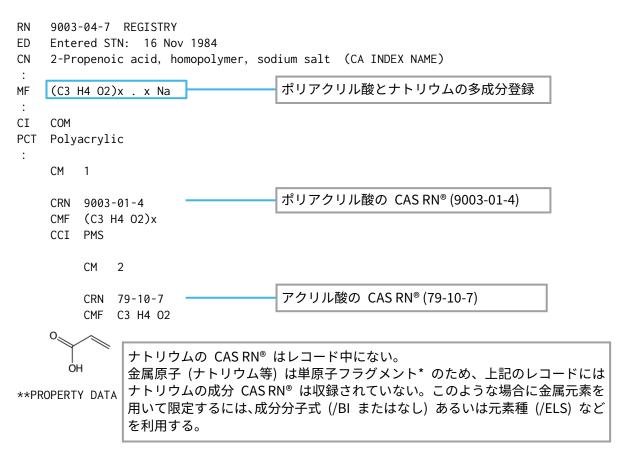
後処理の種類	CAplus/CA ファイルの索引方針	
塩、付加化合物		
エステル化	  独自の CAS RN® で索引	
エーテル化	独自の CA3 KN* C系引	
(ポリアルキレングリコール、天然物ポリマーのみ)		
エーテル化 (上記以外)		
上記以外の後処理ポリマー アミド化、イミド化、ウレタン化、加水分解、塩素 化、酸化、アルキル化、上記の後処理でも構造を確 定できないものなど		

後処理ポリマー自身には CAS RN® が 付与されない場合もある

# 後処理ポリマー - 塩、付加化合物

ポリマーを後処理した金属塩、塩酸塩、四級アンモニウム塩、付加化合物は、後処理に関する成分を 別成分として REGISTRY ファイルに登録される。

レコード例 : ポリアクリル酸のナトリウム塩 (後処理ポリマー、金属塩)



\* 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。

#### 参考: アクリル酸ナトリウムのホモポリマー

- 下記レコードのようにアクリル酸ナトリウムをモノマーとするホモポリマーの登録も存在する (後処理ポリマーではない)。ビニル系ポリマーは POLYLINK は利用できないため、下記のレコードも得たい場合は、別途検索する必要がある。

```
RN 25549-84-2 REGISTRY
:
MF (C3 H4 O2 . Na)x
:
CM 1
CRN 7446-81-3 (79-10-7)
CMF C3 H4 O2 . Na

OH
Na
```

# 検索例 : 2-(ジメチルアミノ)エチルメタクリレートホモポリマー (25154-86-3) と 1,8-ジョード-3,6-ジオキサオクタン (36839-55-1) の付加化合物の検索

CAS RN® & 物質調査 ← REGISTRY ファイルに入る => FILE REGISTRY => S 36839-55-1/CRN AND 25154-86-3/CRN AND 2/NC ← 各成分を含む 2 成分物質を検索 1 36839-55-1/CRN AND 25154-86-3/CRN AND 2/NC L1 => D ← デフォルトの表示形式 (IDE 表示形式) で表示する ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN I 1 1040924-95-5 REGISTRY RN ED Entered STN: 14 Aug 2008 CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, 2-(dimethylamino)ethyl ester, homopolymer, compd. with 1,2-bis(2-iodoethoxy)ethane (CA INDEX NAME) (C8 H15 N O2)x . x C6 H12 I2 O2 MF CM 1 CRN 36839-55-1 CMF C6 H12 I2 O2 CM 2 2-(ジメチルアミノ)エチル CRN 25154-86-3 メタクリレートホモポリマー (C8 H15 N O2)x CMF (25154-86-3)CCI PMS CM 3 CRN 2867-47-2 CMF C8 H15 N O2 1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE) 1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE) 塩や付加化合物の後処理ポリマーの文献検索は、REGISTRY ファイルで後処理後のポリマーを検索し、 その L 番号をクロスオーバーする。 文献調査 => FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る ← L 番号をクロスオーバー検索する => S L1 1 L1 => D SCAN TI HITIND ← SCAN 表示形式で確認する (無料) 1 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN L2 Synthesis of Well-Defined Branched Copolymers by Quaternization of Near-Monodisperse Homopolymers ΙT 1040924-95-5P

注) ポリマーの塩には例外的な登録がされているものも存在する (次ページ参照)

RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation) (synthesis of well-defined branched copolymers by quaternization of

near-monodisperse homopolymers)

# 参考 : 例外的な塩の検索

手作業登録のポリマー (MAN/CI) の一部の塩は、各成分に関する情報は収録されない。

- 単原子フラグメントと手作業成分ポリマーのみからなるポリマーの金属塩が対象。
  - 単原子フラグメントとは、任意の数の水素原子と一つまたは 0 の非水素原子のみからなる成分。

例: Na, Ag, HCl, NH3

- 手作業登録とは構造が確定していないために結合表が作られない化学物質である。
  - この中には REGISTRY ファイルの構造の大きさの上限 (水素以外の元素数が 252 原子まで) を超える物質、分子式しかわからない化合物、および名称しかわからない化合物 (商品名など) がある。

例 : セルロース

- レコード例 (セルロースのナトリウム塩)

RN 9069-34-5 REGISTRY

ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN Cellulose, sodium salt (CA INDEX NAME)

OTHER NAMES:

CN Sodium cellulosate

CN Sodium cellulose

DR 9065-40-1

MF <u>Unspecified</u>

CI PMS, COM, MAN

PCT Manual registration

LC STN Files: CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMLIST, IFIALL, PIRA, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL, USPATOLD

Other Sources: NDSL\*\*, TSCA\*\*

(\*\*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

\*\*\* STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE \*\*\*

794 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
44 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

813 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)



セルロース、ナトリウムに関する各成分情報は収録されていない



これらの塩は、成分 CAS RN® (/CRN) で検索してもヒットしない。

検索する場合は、部分名称検索 (/BI またはなし)、自然セグメント (/CNS) やクラス識別子 (PMS/CI、MAN/CI) などを利用する。

# 後処理ポリマー - エステル化

後処理でエステル化されたポリマーは、後処理過程を含めた形で REGISTRY ファイルに登録される。

- モノマー単位ポリマーは、エステル化される前のポリマーとエステル化剤を各成分として登録。
  - エステル化剤は、カルボン酸などの酸、あるいはアルコールが登録されている。例: アセテートの場合は、エステル化剤として酢酸を登録する。塩化アセチル等は登録されない。
- SRU ポリマーは末端が置換されたポリマーとして登録。

#### **レコード例 : ビスフェノール A- エピクロロヒドリンからなるエポキシ樹脂のアクリル酸エステル化**

```
55818-57-0 REGISTRY
RN
    Entered STN: 16 Nov 1984
CN
    Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with 2- (chloromethyl)oxirane,
   2-propenoate (CA INDEX NAME)
   (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . x C3 H4 O2
MF
CI
   COM
PCT Epoxy resin
                               エステル化剤
    CM 1 -
    CRN 79-10-7
    CMF C3 H4 O2
                                     成分数は分子式の . (ピリオド) の数 +1
                                     => このポリマーは 3 成分物質
   ÓН
    CM
        2
                                ビスフェノール A - エピクロロヒドリン共重合体
                                (25068-38-6)
    CRN 25068-38-6
    CMF (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x
    CCI PMS
                 ポリマーのクラス識別子コード
        CM
           3
        CRN 106-89-8
        CMF C3 H5 Cl O
        CM
            4
        CRN 80-05-7
                               エステル化された後処理ポリマーを検索する場合は、
        CMF C15 H16 O2
                               モノマーやポリマーとエステル化剤を /CRN で検索し、
                               成分数で絞り込む
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
```

## 検索例 : ビスフェノール A - エピクロロヒドリンからなるエポキシ樹脂 (25068-38-6) のアクリル 酸エステル化物の文献検索

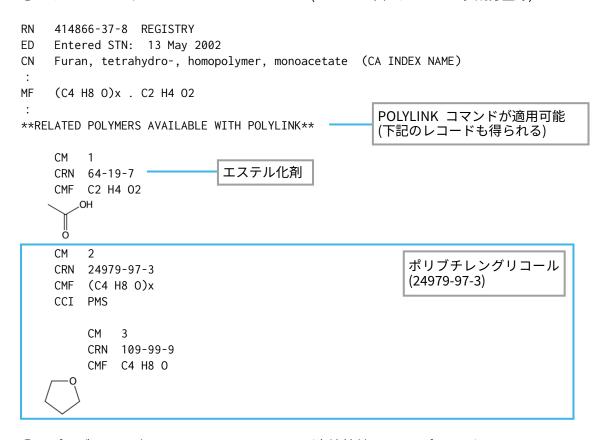
CAS RN® & 物質調査

```
原料モノマーから検索することもできる。
=> FILE REGISTRY
                           => S 106-89-8/CRN AND 80-05-7/CRN AND 79-10-7/CRN AND 3/NC
=> S 25068-38-6/CRN AND 79-10-7/CRN AND 3/NC
            9 25068-38-6/CRN AND 79-10-7/CRN AND 3/NC
=> D 1-9 IN MF
                       ← CA 索引名と分子式を表示する
L1
    ANSWER 1 OF 9 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    (C15 H16 O2 . C3 H5 C1 O)x . x C10 H12 O6
                                                         ノイズ
MF
    ANSWER 2 OF 9 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
                                                         ノイズ
MF
    (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . x C14 H14 O6
    ANSWER 3 OF 9 REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
L1
    (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . x C15 H12 Cl6 O6
                                                         ノイズ
MF
    ANSWER 6 OF 9 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
I 1
    Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with
ΙN
    2-(chloromethyl)oxirane, mono-2-propenoate
    (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x C3 H4 O2
MF
L1
    ANSWER 7 OF 9 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with
    2-(chloromethyl)oxirane, 2-propenoate, homopolymer
    ((C15 H16 O2 . C3 H5 C1 O)x . x C3 H4 O2)x
MF
                                                         ノイズ
    ANSWER 8 OF 9 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with
ΤN
    2-(chloromethyl)oxirane, 2-propenoate
    (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . x C3 H4 O2
MF
L1
    ANSWER 9 OF 9 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-, polymer with
    2-(chloromethyl)oxirane, di-2-propenoate
    (C15 H16 O2 . C3 H5 Cl O)x . 2 C3 H4 O2
MF
=> SEL 6 8 9 RN
                               ← 6、8、9 番目の CAS RN® を抽出する
E1 THROUGH E3 ASSIGNED
                               ← E 番号で検索する
=> S E1-E3
L2
            3 (53814-24-7/BI OR 55818-57-0/BI OR 98913-50-9/BI)
エステル化された後処理ポリマーの文献検索は、REGISTRY ファイルで後処理後のポリマーを検索し、
そのL番号をクロスオーバーする。
                                                                       文献調査
=> FILE CAPLUS
                               ← CAplus ファイルに入る
                               ← L 番号をクロスオーバー検索する
=> S L2
L3
         2357 L2
```

後処理前のポリマーにモノマー単位ポリマーと SRU ポリマーがある場合は、エステル化後も 2 種類のポリマーが存在する場合がある。

#### レコード例 : ポリブチレングリコールのモノアセテート化物

① ポリブチレングリコールのモノアセテート (モノマー単位ポリマーの多成分登録)



② ポリブチレングリコールのモノアセテート (末端基付き SRU ポリマー)

```
RN
    76246-18-9 REGISTRY
ED
    Entered STN: 16 Nov 1984
    Poly(oxy-1,4-butanediyl), \alpha-acetyl-\omega-hydroxy- (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN
    Polytetramethylene glycol monoacetate
    (C4 H8 O)n C2 H4 O2
MF
                                                POLYLINK コマンドが適用可能
**RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK**
                                                (上記のレコードも得られる)
     50
   Ö
           片末端がエステル化されている
```

## 検索例: ポリブチレングリコールのアセテートを網羅的に検索する。

CAS RN® & 物質調査

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る => S 24979-97-3/CRN AND 64-19-7/CRN AND 2/NC ← ポリブチレングリコールと酢酸を含む 3 24979-97-3/CRN AND 64-19-7/CRN AND 2/NC 二成分物質を検索する ← SCAN 表示形式で確認する => D SCAN L1 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN ← ジアセテート IN Furan, tetrahydro-, homopolymer, diacetate (C4 H8 O)x . 2 C2 H4 O2 \*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\* CM POLYLINK コマンドが適用可能 CM CM 3 モノマー単位ポリマー HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):2 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN L1 ← アセテート Furan, tetrahydro-, homopolymer, acetate (C4 H8 0)x . x C2 H4 O2 (比が不明) \*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\* L1 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN ← モノアセテート IN Furan, tetrahydro-, homopolymer, monoacetate MF (C4 H8 0)x . C2 H4 O2 \*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\* ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED => POLYLINK L1 ← POLYLINK コマンドを実行する 6 POLYLINK L1 ← SCAN 表示形式で確認する => D SCAN 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN Poly(oxy-1,4-butanediyl),  $\alpha$ -acetyl- $\omega$ -hydroxy-ΤN MF (C4 H8 O)n C2 H4 O2 PMS, COM CI \*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

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

← 片末端基つき SRU ポリマー

L2 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Poly(oxy-1,4-butanediyl),  $\alpha$ -acetyl- $\omega$ -(acetyloxy)-

MF (C4 H8 0)n C4 H6 O3

CI PMS, COM

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

~0×~~0×n

← 両末端基つき SRU ポリマー

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

L2 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Poly(oxy-1,4-butanediyl),  $\alpha$ -hydro- $\omega$ -hydroxy-, acetate

MF (C4 H8 0)n H2 0 . x C2 H4 O2

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

$$CM$$
 1

← 比が不明な SRU ポリマー



エステル化されたポリマーを検索するときには、L 番号をクロスオーバーすればよい。

=> FILE CAPLUS

← CAplus ファイルへ入る

文献調査

=> S L2

L3 191 L2

← L 番号をクロスオーバー検索する

今回の例のように SRU ポリマーとモノマー単位ポリマーの両方が存在する場合は、POLYLINK コマンドを利用できる。

# 後処理ポリマー - エーテル化

後処理でエーテル化されたポリアルキレングリコールあるいは天然物ポリマーは、後処理過程を含め た形で REGISTRY ファイルに登録されている。

- 天然物ポリマーは、エーテル化前のポリマーとエーテル化剤を各成分として登録。
- ポリアルキレングリコールは、種類によって REGISTRY ファイルの登録形式が異なる。

種類	モノマー単位	SRU
PPG (ポリプロピレングリコール、ポリプロピレンオキサイド)	×	
その他のポリアルキレングリコール (ホモポリマー)	0	$\circ$
共重合体のポリアルキレングリコール (コポリマー)	0	×

- モノマー単位ポリマーは、エーテル化前のポリマーとエーテル化剤(一般的にアルコール)を 各成分として登録。
- SRU ポリマーは、末端が置換されたポリマーとして登録。
- 上述以外のポリマーのエーテル化物は、原則として後処理ポリマー独自の CAS RN®を持たない。
- レコード例 : メチルエーテル化したセルロース

```
9004-67-5 REGISTRY
RN
    Entered STN: 16 Nov 1984
    Cellulose, methyl ether (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
    26: PN: CN117099771 SEQID: 26 sequence
CN
MF
    C H4 O . x Unspecified
CI
    COM
PCT Manual registration, Polyother, Polyother only
        1
    CM
                                                     セルロース (9004-34-6)
    CRN 9004-34-6
    CMF Unspecified
    CCI PMS, MAN
                           手作業登録 (MAN)
*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
    CM
         2
    CRN 67-56-1
    CMF C H4 O
                   エーテル化剤
```

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

—он -

#### - レコード例 : ポリブチレングリコールのモノメチルエーテル化物

① ポリブチレングリコールのモノメチルエーテル (モノマー単位ポリマーの多成分登録) RN 178033-63-1 REGISTRY Entered STN: 04 Jul 1996 ED CN Furan, tetrahydro-, homopolymer, monomethyl ether (CA INDEX NAME) (C4 H8 O)x . C H4 O INCH InChI=1S/C4H80.CH40/c1-2-4-5-3-1;1-2/h1-4H2;2H,1H3 INKY GRWIABMEEKERFV-UHFFFAOYSA-N PCT Polyether, Polyether formed POLYLINK コマンドが利用可能 \*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\* (下記のレコードも得られる) CM 1 CRN 67-56-1 CMF C H4 O —он エーテル化剤 CM ポリブチレングリコール (モノマー単位ポリマー) CRN 24979-97-3 (24979-97-3) CMF (C4 H8 0)x CCI PMS CM 3 CRN 109-99-9 CMF C4 H8 O ポリブチレングリコールのモノメチルエーテル (末端基付き SRU ポリマー) RN 39420-53-6 REGISTRY Entered STN: 16 Nov 1984 FD Poly(oxy-1,4-butanediyl),  $\alpha$ -methyl- $\omega$ -hydroxy- (CA INDEX NAME) CN OTHER NAMES: CN Polybutylene glycol monomethyl ether Polymeg 1000M CN DR 80371-35-3 MF (C4 H8 O)n C H4 O PMS, COM CI PCT Polyether POLYLINK コマンドが利用可能 \*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\* (上記のレコードも得られる)  $\checkmark$ <sub>n</sub>OH X01 片末端がエーテル化されている

SRU ポリマーとモノマー単位ポリマーの両方が存在する場合は、両方を含めて検索すると網羅的に検索できる。(例: POLYLINK コマンドを利用する)

#### 検索例 : エチレンオキサイド - プロピレンオキサイド共重合体のメチルエーテル化物の検索

- ポリアルキレングリコールの共重合体は、モノマー単位登録されているので、エーテル化される 前のポリマーと、エーテル化剤が成分として登録されている。
  - エーテル化される前のポリマー : エチレンオキサイド (EO)(75-21-8)と プロピレンオキサイド (PO)(75-56-9)の共重合体
  - エーテル化剤 (アルコール) : メタノール (67-56-1)

CAS RN® & 物質調査

- => FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る
- => S 75-21-8/CRN AND 75-56-9/CRN AND 67-56-1/CRN AND 3/NC
- L1 8 75-21-8/CRN AND 75-56-9/CRN AND 67-56-1/CRN AND 3/NC
- ↑ エチレンオキサイド-プロピレンオキサイドとメタノールを成分とする物質を検索
- => D 1-8 RN IN MF
- ← CAS RN® と CA 索引名、分子式を表示
- L1 ANSWER 1 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- RN 2412280-07-8 REGISTRY ↓ EO-PO ジブロック共重合体のジメチルエーテル
- IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, dimethyl ether, diblock
- MF (C3 H6 O . C2 H4 O)x . 2 C H4 O
- L1 ANSWER 2 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- RN 777932-69-1 REGISTRY ↓ EO–PO トリブロック共重合体のジメチルエーテル
- IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, dimethyl ether, triblock
- MF (C3 H6 O . C2 H4 O)x . 2 C H4 O
- L1 ANSWER 3 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- RN 749875-37-4 REGISTRY ↓ EO-PO ジブロック共重合体のモノメチルエーテル
- IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, monomethyl ether, diblock
- MF (C3 H6 O . C2 H4 O)x . C H4 O
- L1 ANSWER 4 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- RN 704871-65-8 REGISTRY ↓ EO-PO トリブロック共重合体のモノメチルエーテル
- IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, monomethyl ether, triblock
- MF (C3 H6 O . C2 H4 O)x . C H4 O
- L1 ANSWER 5 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- RN 132894-01-0 REGISTRY ↓ EO-PO ブロック共重合体のジメチルエーテル
- IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, dimethyl ether, block
- MF (C3 H6 O . C2 H4 O)x . 2 C H4 O
- L1 ANSWER 6 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- RN 106494-51-3 REGISTRY ↓ EO-PO ブロック共重合体のモノメチルエーテル
- IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, monomethyl ether, block
- MF (C3 H6 O . C2 H4 O)x . C H4 O
- L1 ANSWER 7 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- RN 61419-46-3 REGISTRY ↓ EO-PO 共重合体のジメチルエーテル
- IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, dimethyl ether
- MF (C3 H6 O . C2 H4 O)x . 2 C H4 O
- L1 ANSWER 8 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- RN 9063-06-3 REGISTRY 

  ↓ EO-PO 共重合体のモノメチルエーテル
- IN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, monomethyl ether
- MF (C3 H6 O . C2 H4 O)x . C H4 O

```
← デフォルトの表示形式で表示
```

```
L1 ANSWER 8 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN RN 9063-06-3 REGISTRY ED Entered STN: 16 Nov 1984 CN Oxirane, 2-methyl-, polymer with oxirane, monomethyl ether (CA INDEX NAME):
MF (C3 H6 O . C2 H4 O)x . C H4 O

CM 1

CRN 67-56-1 CMF C H4 O

—OH — エーテル化剤
```

=> D 8

```
CM 2

CRN 9003-11-6

CMF (C3 H6 O . C2 H4 O)x

CCI PMS

CM 3

CRN 75-56-9

CMF C3 H6 O

CM 4

CRN 75-21-8

CMF C2 H4 O
```

ポリアルキレングリコールのエーテル化物や、天然物ポリマーのエーテル化物の文献を検索する場合には、L 番号をクロスオーバー検索すればよい。

```
=> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る
                                                                       文献調査
                      ← L 番号をクロスオーバー検索する
=> S L1
L2
         1000 L1
                      ← SCAN 表示形式 (TI と HITIND のみ) で表示する
=> D SCAN TI HITIND
L2
     1000 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    Laundry detergent formulation and method of washing a fabric article
ΤI
ΙT
    9004-74-4P, Poly(ethylene glycol) monomethyl ether 136229-57-7P
    749875-37-4P, Ethylene oxide-propylene oxide diblock copolymer
    monomethyl ether 2390140-18-6P 3023872-07-0P 3023872-08-1P 3024260-72-5P
    RL: IMF (Industrial manufacture); RCT (Reactant); PREP (Preparation); RACT:
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END
```

上述以外のポリマーのエーテル化物の文献検索は、エーテル化前のポリマーの CAS RN® を用いる。

# 後処理ポリマー - その他の化学的処理(塩素化など)

塩素化、アルキル化、アミド化、イミド化、ウレタン化、加水分解、スルホン化などの後処理を加えたポリマーには、原則として独自の CAS RN® は付与されない。

- しかし、CAS 登録番号サービスで依頼された場合や各国の既存化学物質リストから登録した場合には、独自の CAS RN® を付与する。

- レコード例 : 塩素化ポリエチレン \* (アスタリスク)が付いている場合、 本来は CAS RN® を付与しない物質 RN 64754-90-1 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 (=>). CAS STNext の他のファイルでこの Entered STN: 16 Nov 1984 FD CAS RN® を用いた検索をすると不完全 Ethene, homopolymer, chlorinated (CA INDEX NAME) CN な結果になる可能性があるという警告 MF Unspecified CI PMS, MAN, GRS GRS が付与されている PCT Manual registration STN Files: CHEMCATS, CHEMLIST, RTECS\*, USPAT2, USPATFULL (\*File contains numerically searchable property data) Other Sources: DSL\*\*, TSCA\*\* (\*\*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information) \*\*\* STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE \*\*\*

その他の化学的処理を加えたポリマーを REGISTRY ファイルで検索するときには、CA 索引名を用いた 部分名称検索と、GRS/CI(GRS: 一般式登録)を掛け合わせて検索する。(GRS については p.84 参照)

### 検索例 : 塩素化ポリエチレンの CAS RN® を検索する

PMS, COM

CT

CAS RN® & 物質調査

```
← REGISTRY ファイルに入る
=> FILE REGISTRY
                              ← 後処理ポリマー (ポリエチレン) の名称を EXPAND する
=> E POLYETHYLENE/CN
                POLYETHYLEE GLYCOL DIETHER WITH 1,4-BUTANEDIOL (2:1)/CN
F1
           1
E2
                 POLYETHYLEE GLYCOL MONOETHER WITH ETHANOL/CN
E3
           1 --> POLYETHYLENE/CN
=> S E3
                              ← E 番号で検索する
I 1
           1 POLYETHYLENE/CN
                              ← SCAN 表示形式で確認する
=> D SCAN
    1 ANSWERS
              REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
I 1
IN Ethene, homopolymer
                                                 ポリエチレンの CA 索引名を確認
ADDITIONAL NAMES - UNAVAILABLE AT THIS TIME
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT
MF
    (C2 H4)x
```

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

```
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED
                                                        ポリエチレンの CA 索引名と
=> S ETHENE (L) HOMOPOLYMER (L) CHLOR? -
                                                        塩素に関する部分名称検索
          218 ETHENE (L) HOMOPOLYMER (L) CHLOR?
=> S L2 AND GRS/CI -
                                  GRS/CI で限定する
           7 L2 AND GRS/CI
=> D SCAN IN
                               ← SCAN 表示形式 (IN のみ表示) で確認する
   7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
13
    Ethene, homopolymer, chlorinated, oxidized
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):6
L3
    7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN
    Ethene, chlorotrifluoro-, homopolymer, pyrolyzed
L3
    7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN Ethene, homopolymer, chlorinated
                                                        目的のポリマー(前のページの
                                                        レコード 64754-90-1)
13
    7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN
    Ethene, chloro-, homopolymer, chlorinated
               REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
13
    7 ANSWERS
    Acetic acid ethenyl ester, polymer with chloroethene, ethene and
ΤN
    ethene homopolymer, chlorinated
               REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L3
    7 ANSWERS
    Ethene, homopolymer, chlorinated, maleated
IN
13
               REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    Ethene, homopolymer, chlorinated, chlorosulfonated
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED
=> E Ethene, homopolymer, chlorinated/CN ← 名称をコピー&ペーストして EXPAND する
                 ETHENE, HOMOPOLYMER, CATENA COMPD. WITH CYCLODODECENE/CN
            1
                 ETHENE, HOMOPOLYMER, CATENA COMPD. WITH DIMETHYL TETRACOSANE
E2
            1
                 DIOATE/CN
            1 --> ETHENE, HOMOPOLYMER, CHLORINATED/CN
E3
                ETHENE, HOMOPOLYMER, CHLORINATED, CHLOROSULFONATED/CN
E4
                                       ← E 番号で検索する
=> S E3
L4
            1 "ETHENE, HOMOPOLYMER, CHLORINATED"/CN
```

塩素化、アルキル化、アミド化、イミド化、ウレタン化、加水分解、スルホン化などの後処理を加えたポリマーの文献検索は、年代によって検索手法が異なる。

年代	CAplus/CA ファイルでの検索	CAplus/CA ファイルでの検索例
10CI 以降 (1977年 -)	後処理前のポリマーの CAS RN® + D <sup>*1</sup>	=> FILE REGISTRY => S 9002-88-4 ··· (L1) => FILE CAPLUS => S L1/D (L) 後処理に関するキーワード
9CI 以前 (- 1976 年)	後処理前のポリマーの CA 索引名と CAS RN®	=> FILE REGISTRY => S 9002-88-4 ··· (L1) => FILE CAPLUS => S (L1 OR ETHENE HOMOPOLYMER) (L) 後処理に関するキーワード RAN=,1976

- \*1 「CAS RN® + 接尾辞 D」は CAS RN® の物質の非特定誘導体 (処理後の構造を特定できないような誘導体) を表す。原則として 1977 年以降のレコードで付与される。1976 年以前のレコードにも一部 D 付きの CAS RN® が存在する。
- 例外 : ポリビニルアルコールについては、ポリビニルアルコールの項目を参照。
- 各年代とも、後処理 「前」 のポリマーに関する情報+後処理のキーワードを用いて検索する。

#### 主な後処理のキーワード

後処理	キーワード	
塩素化	CHLORINAT? OR CHLORO	
アルキル化	ALKYLAT? OR ALKYL	
アミド化	AMIDAT? OR AMIDE#	
イミド化	IMIDAT? OR IMIDE# OR IMIDIZ?	
ウレタン化	URETHAN? OR CARBAMOY?	
加水分解	HYDROL? OR SAPON?	
スルホン化	SULFONAT? OR SULFONE#	
エーテル化	ETHER# OR METHOXYLAT?*	* エーテル化の種類によって異なる

## 検索例 : 塩素化ポリブタジエンに関する文献 (ポリブタジエンの CAS RN®: 9003-17-2)

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

文献調査

=> S 9003-17-2

← CAS RN® 検索を行う

L1 1 9003-17-2

(9003-17-2/RN)

=> D

← デフォルトの IDE 表示形式で確認する

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

RN 9003-17-2 REGISTRY

ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN 1,3-Butadiene, homopolymer (CA INDEX NAME) -

OTHER CA INDEX NAMES:

CN 1,3-Butadiene, polymers (8CI)

OTHER NAMES:

CN 1,3-Butadiene oligomers

:

旧索引名も含めて CA 索引名を 確認する

```
MF (C4 H6)x
INCH InChI=1S/C4H6/c1-3-4-2/h3-4H,1-2H2
INKY KAKZBPTYRLMSJV-UHFFFAOYSA-N
CI PMS, COM
      :
    CM 1
    CRN 106-99-0
    CMF C4 H6
=> FILE CAPLUS
                         ← CAplus ファイルに入る
                                             ポリブタジエンの CAS RN® に D 付きで
=> S L1/D (L) (CHLORINAT? OR CHLORO) -
                                             索引されているレコードの検索
         228 L1/D (L) (CHLORINAT? OR CHLORO)
=> S (L1 OR 1,3-BUTADIENE (W) (HOMOPOLYMER# OR POLYMER#)) (L) (CHLORINAT? OR CHLORO)
RAN=.1976
L3
         210 (L1 OR 1,3-BUTADIENE (W) (HOMOPOLYMER# OR POLYMER#)) (L) (CHLORI
            NAT? OR CHLORO)
                                      ポリブタジエンの CA 索引名または D の付かない
                                      CAS RN®で索引されているレコードの検索
=> S L2 OR L3
                                      (ノイズを減らすために、年代限定をする)
        438 L2 OR L3
14
=> D 76 279 360 BIB HITIND
                         ← 76、279、360 番目の回答を BIB HITIND 表示形式で表示する
    ANSWER 76 OF 438 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L4
ΑN
    2013:1801616 CAPLUS Full-text
                                               1977 年以降の文献
    Halogenated diene rubber composition, tire and pro ポリブタジエンの CAS RN®+D および
TT
                                               塩素化に関するキーワードで索引
PΙ
    PATENT NO.
                    KIND DATE
                                    APPLICATION NO.
                                                         DATE
                     ----
                                    -----
                     A1
    WO 2013173473
                          20131121
                                    WO 2013-US41177
                                                         20130515
      :
TT
    9003-17-2DP, chlorinated
    RL: IMF (Industrial manufacture); POF (Polymer in formulation); PRP
    (Properties); SCLM (Substance claimed); TEM (Technical or engineered
    material use); PREP (Preparation); USES (Uses)
       (butadiene rubber; halogenated diene rubber compn., tire and prodn.
      method)
   ANSWER 279 OF 438 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L4
    1972:489757 CAPLUS Full-text
ΑN
                                                1976 年以前の文献 - 1
                                                ポリブタジエンの CA 索引名
    Chlorinated polybutadiene
                                                 + 塩素化に関するキーワードで索引
PΙ
                     KIND DATE
    PATENT NO.
                                    APPLICATION NO.
                                    -----
    CS 142156
                          19710815
                                    CS 1967-7609
                                                         19671027
   1,3-Butadiene, homopolymer, chlorinated
    RL: IMF (Industrial manufacture); PREP (Preparation)
```

L4 ANSWER 360 OF 438 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN ΑN 1966:105767 CAPLUS <u>Full-text</u> 1976 年以前の文献 - 2 ポリブタジエンの CAS RN® ΤI Binders for electrical insulation materials + 塩素化に関するキーワードで索引 ΡI PATENT NO. KIND DATE APPLICATION NO. \_\_\_\_\_ --------------DD 42859 19660105 DD 19630705 ΙT 9003-17-2, 1,3-Butadiene, homopolymer (chlorinated, coatings from phenolic resins and, on elec. insulators)

# 参考 : \*(アスタリスク) つきの 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 \* (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 $^{\circ}$  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。

### CTS の検索例 : 天然物ポリマー (ダンマル (ダマール) 樹脂) の検索

- => FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る
- => S DAMMAR RESIN/CN ← 名称で検索する
- L1 1 DAMMAR RESIN/CN
- => D ← デフォルトの表示形式 (IDE 表示形式) で表示する
- L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- 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

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
                                 CTS なので、文献を検索する場合は、統制語検索を行う
CI
    COM, MAN, CTS
*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
=> FILE CAPLUS
                       ← CAplus ファイルに入る
                                 REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバー
=> S L1
                                 検索してもヒットしない
L2
            0 L1
=> E DAMMAR RESIN/CT
E#
    FREQUENCY
                ΑT
                      TERM
                --
                 2
                      DAMMAR GUM BATU/CT
E1
            0
E2
           0
                 2
                      DAMMAR PINE/CT
F3
          727
               19
                   --> DAMMAR RESIN/CT
                      DAMMAR RESINS/CT
E4
                 2
           36
                                  関係語 (AT) が 2 以上であることを確認したら、
                                  その E 番号を +ALL で EXPAND する
=> E E3+ALL
E1
        48250
               BT6 Materials/CT
E2
        35393
                 BT5 Mixtures/CT
E3
        28896
                   BT4 Disperse systems/CT
E4
        72966
                    BT3 Colloids/CT
E5
                      BT2 Hvdrocolloids/CT
         6105
                        BT1 Gums and Mucilages/CT
F6
        16753
E7
        48250
                      BT2 Materials/CT
E8
       119334
                        BT1 Natural products/CT
E9
          714
                          --> Dammar resin/CT
                            HNTE Valid heading during volume 146 (2007) to
                            NOTE Hard resins from several species of trees
                                of the family Dipterocarpaceae originating
                                 in the East Indies.
E10
          332
                            OLD
                                Dammar/CT
                            OLD
                                Dammar resins/CT
E11
           36
F12
                            UF
                                Damar gum/CT
E13
                            UF
                                Damar resin/CT
E14
                            UF
                                Gum Damar/CT
E15
                            UF
                                Gum Dammar/CT
                            UF
                                Resin Damar/CT
F16
E17
                            UF
                                Valdamar/CT
           26
                                Batu gum/CT
F18
                            RT
E19
          218
                            RT
                                Dipterocarpaceae/CT
****** END ******
                                  統制語の検索 (+PFT を付与すると、旧統制語 (OLD)、
                                 非優先語 (UF) を含めて検索できる)
=> S E9+PFT/CT •
         1095 "DAMMAR RESIN"+PFT/CT (9 TERMS)
L3
                                  統制語だけでなく、同義名 (非統制語 (UF)) も含めて
=> S DAMMAR OR DAMAR
                                  できるだけ網羅的に検索する場合は基本索引で検索する
L4
         2135 DAMMAR OR DAMAR
```

# 参考 : 一義的に定義できない成分を含むポリマーの検索

原則、モノマーや後処理成分が一義的に定義できないポリマーの場合、独自の CAS RN® を CAS は 付与しない。

- 例 : ポリアクリル酸の 「C18-C22 アルキル」 エステルなど

しかし、CAS 登録番号サービスで依頼された場合や各国の規制化学物質リストから登録した場合には、 独自の CAS RN® を付与する。

RN 1189754-09-3 REGISTRY \*

\*(アスタリスク)が付いている場合、 本来は CAS RN® を付与しない物質

- \* 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: 23 Oct 2009
- 2-Propenoic acid, homopolymer, C18-22-alkyl esters (CA INDEX NAME)
- MF Unspecified
- PMS, MAN, GRS
- PCT Manual registration
- CAS Client Services

CAS 登録番号サービス由来

\*\*\* STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE \*\*\*

一義的に定義できないポリマーの CAS RN® を調査する場合は、CA 索引名で検索する。

#### 検索例 : ポリアクリル酸のアルキルエステルの調査

応用 => FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る CAS RN® & 物質調査

=> E POLY(ACRYLIC ACID)/CN ← 後処理前のポリマー (ポリアクリル酸) の名称を EXPAND する

POLY(ACRYLIC ACID TRIETHANOLAMINE SALT)/CN E1 1

POLY(ACRYLIC ACID VINYL ALCOHOL)/CN E2

E3 1 --> POLY(ACRYLIC ACID)/CN

← E 番号で検索する => S E3

1 "POLY(ACRYLIC ACID)"/CN

=> D SCAN IN ← SCAN 表示形式 (IN のみ表示) で確認する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN 2-Propenoic acid, homopolymer

CA 索引名を確認する

ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> S 2-PROPENOIC ACID HOMOPOLYMER (L) ALKYL ← 名称で検索する

9 2-PROPENOIC ACID HOMOPOLYMER (L) ALKYL L2

=> D SCAN IN ← SCAN 表示形式 (IN のみ表示) で確認する

L2 9 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

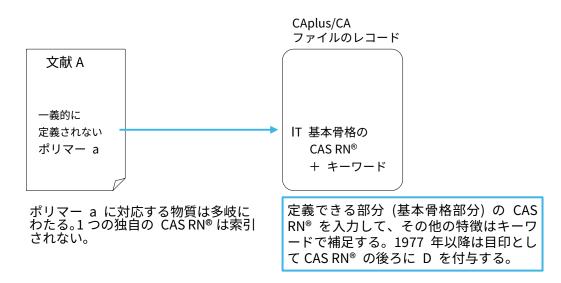
IN 2-Propenoic acid, homopolymer, C16-18-alkyl esters

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):8

### ポリマー自身の成分や後処理成分が一義的に定義されていない文献の調査方法

応用 文献調査

- 例 :「アルキル」 エステル化されたポリアクリル酸 ポリエチレングリコールと 「イソシアナート化合物」 からなるポリウレタン



- 一義的に定義されていない成分を含むポリマーの場合、ポリマー自身の CAS RN® では索引されず、 定義できる部分(基本骨格部分)の CAS RN® が索引される。
- CAS は構造や分子式を特定できないような誘導体を非特定誘導体と定義している。非特定誘導体が 文献に記載されていた場合には、誘導体化する前の CAS RN® の後ろに D を付けて索引している。
- 例 : ポリアクリル酸の 「アルキル」 エステル
- 9003-01-4D, Polyacrylic acid, alkyl esters 134590-50-4, Maleic anhydride-Octadecyl acrylate copolymer

RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses) ポリアクリル酸の CAS RN® (9003-01-4) + D (pour-point depressant for diesel fuel)

+ アルキルエステルに関するキーワード

(参考) アクリル酸アルキルエステルのポリマー

79-10-7D, Acrylic acid, alkyl esters, polymers

9005-64-5, Sorbon T 20 34406-66-1, Poem J 0021 324760-61-4, Jurymer FC 80

RL: TEM (Technical or engineered materia アクリル酸の CAS RN® (79-10-7) + D (biaxially stretched poly(lactic acid + アルキルエステルとポリマーに関するキーワード resins containing nonionic surfactant resistance)

- 一義的に定義できない成分を含む文献検索の場合、一義的に定義できる基本骨格部分の CAS RN® を 用いて検索する。
- 文献検索の時には下記のように検索する(1977 年以降)

=> FILE CAPLUS => S 基本骨格の CAS RN®/D (L) 特徴に関するキーワード

- /D を用いた検索で得られる回答は原則として 1977 年以降のレコードに限定される。

#### 検索例 : ポリアクリル酸のアルキルエステルの文献検索 (1977 年以降)

エステル化の場合、一般的には CAS RN® で索引されるポリマーだが、「アルキル」 エステルと一義的に特定できない成分を含んでいるため、独自の CAS RN® で索引されない。

- ポリアクリル酸の CAS RN®+ アルキルエステルに関するキーワードを用いて検索する。

```
応用
                           ← REGISTRY ファイルに入る
=> FILE REGISTRY
                                                                      文献調査
=> E POLY(ACRYLIC ACID)/CN
                           ← 後処理前のポリマー (ポリアクリル酸)の名称を EXPAND する
                POLY(ACRYLIC ACID TRIETHANOLAMINE SALT)/CN
F1
           1
E2
                 POLY(ACRYLIC ACID VINYL ALCOHOL)/CN
E3
           1 --> POLY(ACRYLIC ACID)/CN
=> S E3
                            ← E 番号で検索する
           1 "POLY(ACRYLIC ACID)"/CN
L1
                            ← SCAN 表示形式で確認する
=> D SCAN
L1
    1 ANSWERS
              REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    2-Propenoic acid, homopolymer
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT
    (C3 H4 O2)x
CI
    PMS, COM
    CM
       1
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED
=> FILE CAPLUS
                            ← CAplus ファイルに入る
=> S L1/D (L) ALKYL (XW) ESTER?
                                         基本骨格の CAS RN®/D に、後処理に関する
          82 L1/D (L) ALKYL (XW) ESTER?
L2
                                         キーワードを組み合わせて検索する
                                         - (XW) は入力した順序で左右の語が同一
=> D SCAN TI HITRN
                                           フィールド中あるいは同一情報単位内に
                CAPLUS COPYRIGHT 2025 AC
L2
     82 ANSWERS
                                          存在することを指定する近接演算子
ΤI
    Composition for infrared shielding film
    9003-01-4D, alkyl esters
TT
    RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)
       (compn. for IR shielding film)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
               CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L2
     82 ANSWERS
    Sustained-release agricultural chemicals with polymer coating
ΤI
    9003-01-4D, C1-18 alkyl esters
TT
    RL: BIOL (Biological study)
       (agrochem. coating by, sustained-release)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END
```

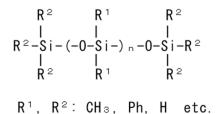
## 検索例 : ポリエチレングリコール (25322-68-3) とイソシアネート化合物のみからなるポリウレタン の文献検索 (1977 年以降)

```
応用
                              ← REGISTRY ファイルに入る
=> FILE REGISTRY
                                                                     文献調査
=> S 25322-68-3/CRN AND POLYURETHANE/PCT AND 2/NC
         190 25322-68-3/CRN AND POLYURETHANE/PCT AND 2/NC
                              ↑ 成分 CAS RN®、ポリマー分類用語、成分数で検索する
                             ← ポリエチレングリコールを検索する
=> S 25322-68-3
          1 25322-68-3
=> FILE CAPLUS
                             ← CAplus ファイルに入る
                             ← L 番号をクロスオーバーする
=> S L1
L3
        3220 L1
=> S L2/D (L) (POLYURETHANE? OR ?ISOCYANAT?)
                                                       非特定誘導体の検索
        7536 L2/D (L) (POLYURETHANE? OR ?ISOCYANAT?)
=> S L3 OR L4
                            ← L3 と L4 を OR 演算する
L5 10368 L3 OR L4
=> D 3 8 HITSTR
                             ← 3、8 番目の回答を HITSTR 表示形式で表示する
    ANSWER 3 OF 10368 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L5
    25322-68-3DP, polyurethanes
    RL: IMF (Industrial manufacture); PEP (Physical, engineering or chemical
    process); POF (Polymer in for ポリエチレングリコールの
       :
                               非特定誘導体でヒット
    25322-68-3 CAPLUS
RN
    Poly(oxy-1,2-ethanediyl), \alpha-hydro-\omega-hydroxy- (CA INDEX NAME)
CN
    ANSWER 8 OF 10368 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L5
ΙT
    39318-45-1P -
    RL: MOA (Modifier or additive use); PRP (Properties); SPN (Synthetic
    preparation); PREP (Preparati CAS RN® を持つポリウレタンでヒット
       (grafted on copper; synergy
       fouling-release coating and peroxidase-like Cu NPs composited
       polysiloxane-based polyurethane PDMS-PUA with enhanced antifouling properties)
RN
    39318-45-1 CAPLUS
    Poly(oxy-1,2-ethanediyl), \alpha-hydro-\omega-hydroxy-, polymer with
    5-isocyanato-1-(isocyanatomethyl)-1,3,3-trimethylcyclohexane (CA INDEX
    NAME)
    CM 1
                              CM
                                  2
                             CRN 4098-71-9
    CRN 25322-68-3
    CMF (C2 H4 0)n H2 0
                             CMF C12 H18 N2 O2
    CCI PMS
```

## シリコーン

シリコーン (ポリシロキサン) は、-O-Si-O-Si- を主鎖とするポリマーである。

#### - シリコーンの代表的な構造



R-Si-(-0-Si-0-Si-) n -R -Ši-0-Ši-0-

R: CH3, Ph etc.

下記のシリコーンについては CAS RN® を持つ。また、POLYLINK コマンドが利用できる。

- ① アルコキシシランを加水分解重合したシリコーン
- ② ハロシランを加水分解重合したシリコーン
- ③ 一つの繰り返し単位で表現されるシリコーン
- ④ 複数の繰り返し単位で表現されるシリコーン
- ⑤ アルコキシまたはクロロシランを加水分解重合したシルセスキオキサン
- ⑥ トリアルコキシ末端の有機ポリマーを含んだアルコキシシランとテトラアルコキシシランを加水 分解重合によって生成したセラマー
- ⑦ シロキサン SRU の末端グループ
- ⑧ シロキサン成分を含むコポリマー
- ⑨ シロキサンとシルセスキオキサンの商品名
- ⑩ シリコーンゴム

#### 検索例 : ジエチルシロキサンの検索

← REGISTRY ファイルに入る => FILE REGISTRY => E DIETHYLSILOXANE/CN ← 名称で EXPAND する DIETHYLSILANOL/CN E1 1 E2 DIETHYLSILICATE/CN E3 1 --> DIETHYLSILOXANE/CN => S E3 ← E 番号で検索する 1 DIETHYLSILOXANE/CN L1 ← SCAN 表示形式で確認する => D SCAN 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN L1 Poly[oxy(diethylsilylene)]

応用 CAS RN® & 物質調査

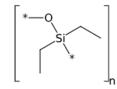
**PMS** 

(C4 H10 O Si)n

CI

ΙN

MF



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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> POLYLINK L1

← POLYLINK コマンドを実行する

L2 13 POLYLINK L1

=> D SCAN IN MF STR

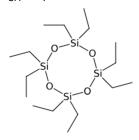
← SCAN 表示形式 (IN、MF、STR のみ表示) で確認

L2 13 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Cyclotetrasiloxane, 2,2,4,4,6,6,8,8-octaethyl-, homopolymer

MF (C16 H40 O4 Si4)x

CM 1



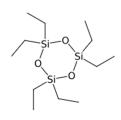
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):12

L2 13 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Cyclotrisiloxane, 2,2,4,4,6,6-hexaethyl-, homopolymer

MF (C12 H30 O3 Si3)x

CM ·



環状のジエチルシロキサンの モノマー単位ポリマー

- L2 13 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- IN Cyclopentasiloxane, decaethyl-, homopolymer (9CI)
- MF (C20 H50 O5 Si5)x

CM 1

L2 13 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN IN Poly[oxy(diethylsilylene)],  $\alpha\text{-hydro-}\omega\text{-hydroxy-}$  MF (C4 H10 0 Si)n H2 0

ジエチルシロキサンの 末端基付き SRU ポリマー

L2 13 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Poly[oxy(diethylsilylene)]

MF (C4 H10 O Si)n

ジエチルシロキサンの SRU ポリマー

L2 13 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Silane, diethoxydiethyl-, homopolymer

MF (C8 H20 O2 Si)x

CM 1

L2 13 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Silanediol, diethyl-, diformate, homopolymer (9CI)

MF (C6 H12 O4 Si)x

CM 1

0 0 5i 0 0

ジエチルシロキサンの モノマー単位ポリマー

L2 13 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Silane, dichlorodiethyl-, homopolymer, hydrolytic

MF (C4 H10 Cl2 Si . H2 O)x

CM 1

 $H_2O$ 

CM 2

CI Si CI

:

#### シリコーンの文献検索

基本的にシリコーンは統制語で索引されている。ただし、CAS RN®を持つシリコーンは 1995 年以降 CAS RN® で索引しているので、シリコーンの文献検索では、統制語検索と CAS RN® 検索を併用する。

- 統制語とは、同じ概念を持つ複数の言葉がある場合、統一した表記で表現された言葉である。 CAplus/CA ファイルでは、IT フィールドに入力されている。

- シリコーンの 統制語
  - "Polysiloxanes" (以前は "Siloxanes and Silicones" または "Siloxanes"、"Silicones")
  - "Silicone rubber" (以前は "Rubber, silicone")

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

- シリコーンの索引変更に関する詳細 https://www.cas.org/ja/training/lesson/siloxanes-indexing

#### 検索例 : ジエチルシロキサンの文献検索

```
文献調査
                      ← CAplus ファイルに入る
=> FILE CAPLUS
                                 CAplus ファイルに CAS RN® で索引されている
=> S L2 -
                                 ジエチルシロキサンの文献検索
         648 L2
L3
=> S (POLYSILOXANE# OR SILOXANE# OR SILICONE#)/CW (L) (DIETHYL OR DI ET)
L4
         771 (POLYSILOXANE# OR SILOXANE# OR SILICONE#)/CW (L) (DIETHYL OR DI ET)
                                 CAplus ファイルに CAS RN® で索引されていない
=> S L3 OR L4
                                 ジエチルシロキサンの文献検索 (/CW:統制語 (単語))
        1352 L3 OR L4
L5
=> D SCAN HITIND
                      ← SCAN 表示形式 (TI、HITIND のみ表示) で確認
L5
    1352 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    28323-47-9, Polydiethylsiloxane 56267-41-5,
TT
    Polydiethylsiloxane
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):2
L5
     1352 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    Polysiloxanes
TT
    RL: ARU (Analytical role, unclassified); PRP (Properties); ANST
    (Analytical study)
       (di-Et; simulator of free precession signals of NMR
       and spin echo from oil and phospholipids in soya bean lecithin)
L5
    1352 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
ΙT
    Siloxanes and Silicones, uses and miscellaneous
    RL: USES (Uses)
                                 "Siloxanes and Silicones"という統制語を「句」として検
       (di-Et, hydroxy-terminated,
       contg., moisture-curable sel 索する場合は /CT、"Siloxane" や "Silicons" のように
                                 「単語」 で検索する場合は /CW を用いる
```

ポリマー検索 | 93

## ポリビニルアルコール

ポリビニルアルコール (PVA) は、ポリ酢酸ビニル (PVAc) を加水分解して得られるポリマーである。通常の加水分解処理ポリマーは独自の CAS RN® を持たないが、PVA は例外的に独自の CAS RN® (9002-89-5) を持つ。ただし、CAplus/CA ファイルでは、原報の表現の仕方によって以下の 3 通りの方式で索引される。

- 網羅的な検索をするためには、これらをすべて考慮して検索する。
- どの方式で索引されるかは、加水分解の程度とは関係なく、原報での表記のみに依存する。

	索引方式	CAplus/CA ファイルでの検索
1	Poly(vinyl alcohol) で索引 [CAS RN® : 9002-89-5]	=> FILE REGISTRY => S 9002-89-5 ··· (L1) => FILE CAPLUS => S L1
2	Vinyl alcohol と Vinyl acetate の共重合体で索引 [CAS RN® : 25213-24-5]	=> FILE REGISTRY => S 25213-24-5··· (L1) => FILE CAPLUS => S L1
3	Poly(vinyl acetate) の非特定誘導体 (D 付き) で索引 [CAS RN® : 9003-20-7]	=> FILE REGISTRY => S 9003-20-7 ··· (L1) => FILE CAPLUS => S L1/D (L) (HYDROL? OR SAPON?)

#### 検索例 : ポリビニルアルコールに関する文献検索

文献調査

```
=> FILE REGISTRY
                            ← REGISTRY ファイルに入る
                                  PVA、PVA-PVAc の CAS RN® を検索
=> S 9002-89-5 OR 25213-24-5
         2 9002-89-5 OR 25213-24-5
=> S 9003-20-7 -
                                  PVAc の CAS RN® で検索
          1 9003-20-7
=> FILE CAPLUS
                           ← CAplus ファイルに入る
                            ← PVA, PVA-PVAc の L 番号をクロスオーバーする
=> S L1
L3 303471 L1
                                      PVAc の L 番号に加水分解に関する
=> S L2/D (L) (HYDROL? OR SAPON?) ----
                                      キーワードを掛け合わせて検索する
        4080 L2/D (L) (HYDROL? OR SAPON?)
=> S L3 OR L4
    306087 L3 OR L4 ← L3 と L4 を OR 演算する
=> D SCAN TI HITIND
                           ← SCAN 表示形式 (TI、HITIND のみ表示) で確認する
     306087 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L5
    Ink-jet printing paper with no feathering nor blotting and good
    scratch resistance of printed inks
    9002-89-5, Polyvinyl alcohol 9003-20-7D, Poly(vinyl acetate), sapond.
ΙT
```

# アセタール樹脂

アセタール樹脂は、ポリビニルアルコールやビニルアセテートービニルアルコール共重合体に対し、 アルデヒドを反応させた後処理ポリマーである。

- アセタール樹脂は、原則、固有の CAS RN® を持たなかったが、2006 年 11 月以降は固有の CAS RN® を持つようになった。
  - アセタール化剤も成分として登録される。

## 検索例 : ポリビニルブチラールの検索 (n-ブチルアルデヒドの CAS RN® : 123-72-8)

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

CAS RN® & 物質調査

=> S 9002-89-5/CRN AND 123-72-8/CRN AND 2/NC

PVA とアセタール化剤を成分と して含む 2 成分物質を検索

.1 1 9002-89-5/CRN AND 123-72-8/CRN AND 2/NC

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN IN Ethenol, homopolymer, cyclic acetal with butanal ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT

MF C4 H8 O . x (C2 H4 O)x

CI COM

CM 1

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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> S 25213-24-5/CRN AND 123-72-8/CRN AND 3/NC L2 1 25213-24-5/CRN AND 123-72-8/CRN AND 3/NC PVA-PVAc とアセタール化剤を 成分とする 3 成分物質を検索

- L2 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- IN Acetic acid ethenyl ester, polymer with ethenol, cyclic acetal with butanal
- MF C4 H8 0 . x (C4 H6 O2 . C2 H4 O)x
- CI COM

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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

### アセタール樹脂の文献検索

CAplus/CA ファイルでのアセタール樹脂に関する索引方針

年代	索引方針	
	統制語で索引 (右側 : 旧統制語)	
	POLYVINYL ACETALS POLYVINYL BUTYRALS	VINYL ACETAL POLYMERS VINYL ACETAL POLYMERS (L) BUTYRAL#
- 2006年10月	その他のアセタール樹脂	
	POLYVINYL ACETALS	VINYL ACETAL POLYMERS
	(L) キーワード 例: POLYVINYL ACETALS (L) FORMAL#	(L) キーワード 例:VINYL ACETAL POLYMERS (L) FORMAL#
2006年11月-	個々の CAS RN® で索引 * 統制語でも索引 2006 年 11 月- POLYVINYL ACETALS POLYVINYL BUTYRALS	
	その他のアセタール樹脂 : POLYVINYL ACETALS (L) キーワード	

<sup>\*</sup> 原報中で、ポリビニルアルコールを 「加水分解されたポリビニルアセテート」 と記載してある場合は、固有の CAS RN® で索引されず、ポリビニルアセテートの非特定誘導体 D + 加水分解 (HYDRO?) とアセタール化剤の名称を索引。

#### 検索例 : ポリビニルブチラールの文献検索

```
文献調查
=> FILE CAPLUS
                     ← CAplus ファイルに入る
=> S L1-L2
                     ← REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーする
L3
       19115 (L1 OR L2)
=> S POLYVINYL BUTYRALS/CT OR VINYL ACETAL POLYMERS/CT (L) BUTYRAL#
       32665 POLYVINYL BUTYRALS/CT OR VINYL ACETAL POLYMERS/CT (L) BUTYRAL#
                                                       アセタール樹脂の統制語を
                     ← L3 と L4 を OR 演算する
=> S L3 OR L4
                                                       利用した検索
       40176 L3 OR L4
=> D SCAN HITIND
                     ← SCAN 表示形式 (HITIND のみ表示) で確認する
     40176 ANSWERS
                 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L5
    Polyvinyl butyrals
    RL: PEP (Physical, engineering or chemical process); PRP (Properties); TEM
```

(Technical or engineered material use); PROC (Process); USES (Uses) (SEKISUI RZN 12 SAF; acoustically insulating interlayer)

(Technical or engineered material use); PROC (Process); USES (Uses) (Sekisui RZN 12SAF acoustic; acoustically insulating interlayer)

RL: PEP (Physical, engineering or chemical process); PRP (Properties); TEM

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

915977-69-4, PVB

ΙT

## ポリマーブレンド、ポリマーアロイ

9003-09-2, Poly(vinyl methyl ether)

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

RL: POF (Polymer in formulation); PRP (Properties); USES (Uses)

(blends with polystyrene; consistent modeling of

ポリマーブレンドやポリマーアロイに対しては原則固有の CAS RN® は付与されない。

検索例 : ポリメチルビニルエーテルのポリマーブレンドに関する文献検索

- CAplus/CA ファイルでは、主要な樹脂成分とその他の成分 (特許では新規性に関与している成分) が索引される。
  - ポリマーブレンドやポリマーアロイの文献検索の際は、各成分ポリマーの CAS RN® とキーワードや、ポリマー組成物に関するロール(POF や MOA)を組み合わせて検索する。

```
=> FILE REGISTRY
                              ← REGISTRY ファイルに入る
                                                  ポリメチルビニルエーテルを検索
=> S "(C3H6O)X"/MF AND (VINYL OR ETHENE)
      11 "(C3H6O)X"/MF AND (VINYL OR ETHENE)
                              ← CA 索引名を表示
=> D 1-11 IN
    ANSWER 1 OF 11 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Ethene-14C2, methoxy-, homopolymer (9CI)
ΙN
    ANSWER 8 OF 11 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Ether, methyl vinyl-1,2-d2, (E)-, polymers (8CI)
ΤN
    ANSWER 9 OF 11 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    1-Propen-1-ol, homopolymer ← ノイズ
ΙN
L1
    ANSWER 10 OF 11 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    Ethene, methoxy-, homopolymer, isotactic
ΙN
    ANSWER 11 OF 11 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    Ethene, methoxy-, homopolymer
                              ← CAS RN® を抽出
=> SEL RN 9
E1 THROUGH E1 ASSIGNED
=> S L1 NOT E1
                              ← ノイズを除いた L# を作成する
          10 L1 NOT 28388-89-8/BI
L2
                                                        キーワードやポリマー組成物の
                              ← CAplus ファイルに入る
=> FILE CAPLUS
                                                        ロールを組み合わせて検索する
=> S L2 (L) (BLEND# OR MIXT# OR ALLOY# OR COMPOSITE# OR (POF OR MOA)/RL)
        1579 L2 (L) (BLEND# OR MIXT# OR ALLOY# OR COMPOSITE# OR (POF OR MOA)/RL)
L3
                              ← SCAN 表示形式 (HITRN のみ表示) で確認
=> D SCAN HITRN
L3
    1579 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
```

文献調査

## デンドリマー、スターポリマー、ハイパーブランチポリマー

デンドリマー、スターポリマー、ハイパーブランチポリマーは、構造の大きさにより低分子化合物も しくはポリマーとして登録される。ポリマーの登録では、構造的特徴が含まれる場合と含まれない場 合がある。

- 構造的特徴が含まれていないポリマーの CAS RN® である場合、CAplus ファイルにクロスオーバー検索し、構造的特徴 (デンドリマー、スターポリマー、ハイパーブランチポリマー) を表すキーワードを組み合わせて検索する (検索例参照)。
  - 構造的特徴が含まれているポリマーの CAS RN® である場合、化学物質名称に構造的特徴が収録されている (次ページの登録例を参照)。

#### 検索例: デンドリティックポリ L-リジンに関する文献検索

文献調査

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> E POLY(L-LYSINE)/CN

E1 1 POLY(L-LYSINE MONOHYDROBROMIDE), SRU/CN

E2 1 POLY(L-LYSINE PHTHALAMIDE)/CN

E3 1 --> POLY(L-LYSINE)/CN

:

=> S E3

ポリ L-リジンを検索

L1 1 "POLY(L-LYSINE)"/CN

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

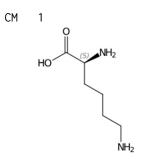
IN L-Lysine, homopolymer

MF (C6 H14 N2 O2)x

CI PMS, COM

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

POLYLINK コマンドが実行できる



Absolute stereochemistry shown

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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> POLYLINK L1

POLYLINK を実行する

L2 8 POLYLINK L1

```
=> FILE CAPLUS
                               ← CAplus ファイルに入る
=> S L2 (L) DENDRI?
                                      デンドリマーに関するキーワードで限定する
          479 L2 (L) DENDRI?
                               ← SCAN 表示形式 (TI、HITIND のみ表示) で確認
=> D SCAN TI HITIND
     479 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L3
    Compounds and methods for suppressing an immune response to substances
    containing polyethylene glycol
    25104-18-1, Poly-L-lysine
TT
    RL: BSU (Biological study, unclassified); SCLM (Substance claimed); THU
     (Therapeutic use); BIOL (Biological study); USES (Uses)
       (dendrimers; compds. and methods for suppressing an immune
       response to substances contg. polyethylene glycol)
    38000-06-5, Poly-L-lysine
    RL: BSU (Biological study, unclassified); THU (Therapeutic use); BIOL
     (Biological study); USES (Uses)
       (dendrimers; compds. and methods for suppressing an immune
       response to substances contg. polyethylene glycol)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END
登録例:構造的特徴が含まれているポリマーの登録
RN
    26937-01-9 REGISTRY
    Entered STN: 16 Nov 1984
```

```
FD
    2-Propenoic acid, methyl ester, polymer with 1,2-ethanediamine (CA INDEX
    NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN
    PAMAM G 4.5
CN
    PAMAM starburst G-2
CN
    PAMAM-G 2
CN
    PAMAM-G 3
CN
    PAMAM-G 4
CN
    PAMAM-G 5
    PAMAM-G 6
CN
                                               構造的特徴が名称に含まれる
CN
    PAMAM-G 7
CN
CN
    Polyamidoamine-dimethyl maleic anhydide copolymer
CN
    Starburst 2nd Generation
CN
    Starburst Dendrimer Generation 2
    Starburst Generation 2
DR
    93376-66-0, 156260-01-4, 255398-46-0, 255398-47-1, 255398-51-7,
     (C4 H6 O2 . C2 H8 N2)x
INCH InChI=1S/C4H602.C2H8N2/c1-3-4(5)6-2;3-1-2-4/h3H,1H2,2H3;1-4H2
INKY QHXLNBWHWBDFHS-UHFFFAOYSA-N
CI
    PMS, COM
PCT Polyacrylic, Polyamine, Polyamine formed
SR
I C
    STN Files: CA, CAPLUS, CASBIOACTIVI, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS,
      CHEMLIST, CIN, IFIALL, IPA, PIRA, REAXYSFILESU*, RTECS*, TOXCENTER,
      USPAT2, USPATFULL, USPATOLD
         (*File contains numerically searchable property data)
```

#### \*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

CM 1

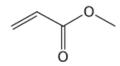
CRN 107-15-3 CMF C2 H8 N2

$$H_2N$$
  $NH_2$ 

CM 2

CRN 96-33-3

CMF C4 H6 O2



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

6853 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

2677 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

7121 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

#### 登録例:構造的特徴が含まれているが構造情報がない登録

153891-46-4 REGISTRY RN ED Entered STN: 25 Mar 1994 Starburst 3rd Generation (CA INDEX NAME) 構造的特徴が名称に含まれているが、 OTHER NAMES: 構造情報がない登録 CN Starburst AMAM Generation 3 Starburst PAMAM-G 3 457622-51-4 DR ENTE A polyamidoamine dendrimer; molecular weight 6909, made froman ethylenediamine core and sequenced copolymers of ethylenediamine and methyl acrylate (Dendritech, Inc.) MF Unspecified PMS, COM, MAN CI PCT Manual registration SR STN Files: CA, CAPLUS, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, LC RTECS\*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL (\*File contains numerically searchable property data) \*\*\* STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE \*\*\* \*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\* 239 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE) 88 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

242 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

## テロマー

テロマー (Telomer) は、テロゲンの存在下で、ビニル系モノマー (タキソーゲン) を重合して得られるビニル系オリゴマーである。テロゲンとして、ハロゲン化炭素、メルカプタン、アルコールなどが使われ、テロゲンはオリゴマーの両末端基に導入される。

- 重合度不明、または重合度 11 以上のテロマーは、ポリマーとして登録される。
  - 例:モノマー単位ポリマーのレコード

RN 51877-03-3 REGISTRY ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN 1-Propene, telomer with tetrachloromethane and tetrafluoroethene (9CI)

(CA INDEX NAME)

MF (C3 H6 . C2 F4)x . C C14

PCT Fluoropolymer, Polyolefin, Polyvinyl

CM 1 CRN 56-23-5 CMF C C14

CM 2

CRN 27029-05-6

CMF (C3 H6 . C2 F4)x

CCI PMS

CM 3

CRN 116-14-3

CMF C2 F4

1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- 例:SRU ポリマーのレコード

RN 27322-01-6 REGISTRY

ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN Poly(difluoromethylene),  $\alpha$ -chloro- $\omega$ -[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethyl]- (8CI, 9CI)

(CA INDEX NAME)

MF (C F2)n C3 H C1 F6

CI PMS

PCT Polyother, Polyother only

:

1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

テロマーの文献検索は、REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバーすると良い。

## クマロン-インデン樹脂、石油系樹脂

CAplus/CA ファイルにおいて、石油系樹脂、クマロン-インデン樹脂は原則的に全年代を通じて CAS RN® は索引していない。文献検索の際は、該当する統制語を利用する。

ポリマー名	統制語
クマロン-インデン樹脂	COUMARONE-INDENE RESINS
	PETROLEUM RESINS (1977年以降)
石油系樹脂	PETROLEUM (L) RESINS (1976年以前)
	RESINS (L) PETROLEUM (1976年以前)

#### 検索例 : クマロン-インデン樹脂、石油系樹脂の文献検索

文献調査

=> FILE CAPLUS

← CAplus ファイルに入る

=> S COUMARONE-INDENE RESIN#

← 統制語で検索

L1 4527 COUMARONE-INDENE RESIN#

=> D SCAN TI HITIND

- ← SCAN 表示形式 (TI、HITIND のみ表示) で確認
- L1 4527 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- TI Rubber compositions comprising antidegradants for use in vehicle tires
- IT Coumarone-indene resins

RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)
(Novares C 30; rubber compns. comprising antidegradants for use in vehicle tires)

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

=> S PETROLEUM RESIN#

← 統制語で検索 -1

L2 25987 PETROLEUM RESIN#

=> S PETROLEUM/CT (L) RESIN# OR RESINS/CT (L) PETROLEUM ← 統制語で検索 -2

L3 1993 PETROLEUM/CT (L) RESIN# OR RESINS/CT (L) PETROLEUM

=> S L2 OR L3

← L2 と L3 を OR 演算する

L4 27164 L2 OR L3

=> D SCAN TI HITIND

- ← SCAN 表示形式 (TI、HITIND のみ表示) で確認
- L4 27164 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- TI Adhesives for fuel cells
- IT Petroleum resins

RL: POF (Polymer in formulation); TEM (Technical or engineered material

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

- L4 27164 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- TI Trace element distribution in petroleum components
- IT Resins

RL: USES (Uses)

(petroleum, trace elements in)

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

## 合成繊維

CAplus/CA ファイルで合成繊維の文献を検索する際は、ポリマーの CAS RN® と繊維 (FIBER 等) の キーワードを併用する。

汎用繊維とその統制語および CAS RN® の例

ポリマー	CAS RN®	主な統制語
ナイロン 6 Polycaprolactam 6-Aminohexanoic acid homopolymer Nylon 6 ε-Caprolactam polymer ナイロン 66	25038-54-4	Polyamide fibers
Nylon 66 Adipic acid-1,6-hexanediamine polymer Poly(hexamethylene adipamide)	32131-17-2	
PET Poly(ethylene terephthalate) Terephthalic acid polyethylene ester	25038-59-9	Polyester fibers
PP Polypropylene	25085-53-4	Polypropene fibers Fiber,propene polymer
PAN Polyacrylonitrile	25014-41-9	Acrylic fibers
セルロースアセテート Cellulose acetate	9004-35-7	Acetate fibers
再生セルロース Cellulose (regenerated)	(9004-34-6)*	Rayon
PVA Poly(vinyl alcohol)	9002-89-5	Vinal fibers
PVC Poly(vinyl chloride)	9002-86-2	Vinyon fibers Fiber,vinyon
グラファイト繊維 Graphite	7782-42-5	Carbon fibers
炭素繊維 Carbon	7440-44-0	Carbon fibers

<sup>\*</sup>再生セルロース由来の繊維の場合は、例外的に CAS RN® (9004-34-6) は索引されない。

<sup>–</sup> 上記以外の合成繊維については、Polyimide fibers、Polyolefin fibers、Spandex fibers、Polyurethane fibers、Synthetic polymeric fibers という統制語が付与されている。

#### 検索例 : ポリアクリロニトリル合成繊維に関する文献検索

文献調査

```
=> FILE REGISTRY
                       ← REGISTRY ファイルに入る
=> S POLYACRYLONITRILE/CN
I 1
            1 POLYACRYLONITRILE/CN
                                                          CAS RN® とキーワード、および
                        ← CAplus ファイルに入る
=> FILE CAPLUS
                                                          統制語も含めて検索する
=> S ((L1 OR POLYACRYLONITRILE OR PAN) (L) FIB?) OR (ACRYLIC (A) FIBER#)/CW
        72025 ((L1 OR POLYACRYLONITRILE OR PAN) (L) FIB?) OR (ACRYLIC (A) FIBER#)/CW
=> D SCAN TI HITIND
                        ← SCAN 表示形式 (TI、HITIND のみ表示) で確認
     72025 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
ΤI
    Polymer Composite Electrolytes Membrane Consisted of Polyacrylonitrile
    Nanofibers Containing Lithium Salts: Improved Ion Conductive
    Characteristics and All-Solid-State Battery Performance
    Acrylic fibers
    RL: NANO (Nanomaterial); TEM (Technical or engineered material use); USES
     (Uses)
        (polymer composite electrolytes membrane consisted of
       polyacrylonitrile nanofibers contg. lithium salts improved ion
       conductive characteristics and all-solid-state battery performance)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
     72025 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L2
ΤI
    Preparation method for reverse osmosis membranes
    Acrylic fibers
    RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
       (prepn. method for reverse osmosis membranes)
                25014-41-9
                           25085-53-4, Isotactic polypropylene
    RL: SCLM (Substance claimed); TEM (Technical or engineered material use);
    USES (Uses)
        (fibers: prepn. method for reverse osmosis membranes)
```

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

## 合成ゴム

CAplus/CA ファイルで合成ゴムの文献を検索する際は、ポリマーの CAS RN® とゴム (RUBBER、ELASTOMER 等) のキーワードを併用する。

汎用ゴムとその統制語および CAS RN® の例

ポリマー	CAS RN®	主な統制語
BR (ブタジエンゴム) 1,3-Butadiene polymer	9003-17-2	Butadiene rubber Rubber,butadiene
NBR (ニトリルゴム) Acrylonitrile-1,3- butadiene copolymer	9003-18-3	Nitrile rubber Rubber,nitrile
IR (イソプレンゴム) Isoprene polymer	9003-31-0	Isoprene rubber Rubber,isoprene
SBR (スチレンブタジエンゴム) 1,3-Butadiene-styrene copolymer	9003-55-8*2	Styrene-butadiene rubber Rubber,butadiene-styrene
EPM (エチレンプロピレンゴム) Ethylene-propylene copolymer	9010-79-1	Ethylene-propylene rubber Rubber,ethylene-propene
IIR (ブチルゴム) Isobutylene-isoprene copolymer	9010-85-9 <sup>*3</sup>	Butyl rubber Rubber,butyl
CR (クロロプレンゴム) 2-Chloro-1,3-butadiene homopolymer または Polychloroprene	9010-98-4	Neoprene rubber Rubber,neoprene
チオコールゴム Polymers containing S (n>1) linkages in the main chain (通称 Thiokol)		Polysulfide rubber Rubber,polysulfide
ポリシロキサン (シリコーン) Siloxanes		Silicone rubber Rubber,silicone
ポリウレタンゴム Urethane polymers⁺¹		Urethane rubber Rubber,urethane
アクリルゴム		Acrylic rubber
フッ素ゴム		Fluoro Rubber
ポリエステルゴム		Polyester rubber Rubber, synthetic(L)polyester
ポリオレフィンゴム		Polyolefin rubber

- \*1 組成の明確なポリマーは CAS RN® も索引される。
- \*2 ブロック共重合体 (106107-54-4)、トリブロック共重合体 (694491-73-1)、グラフト共重合体 (106974-54-3) なども存在する。
- \*3 ブロック共重合体 (106974-57-6)、グラフト共重合体 (106930-78-3)、交互共重合体 (106974-56-5) なども存在する。
- 加硫ゴムは加硫前のポリマーの CAS RN® で索引される。
- ゴムが接着剤かタイヤの材料として利用されている場合は、1991 年以前は例外的にゴムの統制語ではなく、「Adhesives」 または 「Tires」 の統制語が索引されていた。
  - IT Adhesives

(nitrile rubber, phenolic resin blends, with improved heat resistance)

ゴムの名称はテキスト説明句に記載される

```
文献調査
=> FILE REGISTRY
                       ← REGISTRY ファイルに入る
                       ← ブタジエンホモポリマーを検索する
=> S 9003-17-2
           1 9003-17-2
                      ← CAplus ファイルに入る
=> FILE CAPLUS
                                                     ブタジエンゴムの L 番号にゴムの
=> S L1 (L) (RUBBER? OR ELASTOMER?)
                                                     キーワードを組み合わせて検索する
        59477 L1 (L) (RUBBER? OR ELASTOMER?)
=> S BUTADIENE (A) (RUBBER? OR ELASTOMER?)
                                                     統制語を考慮して検索する*
       188381 BUTADIENE (A) (RUBBER? OR ELASTOMER?)
                       ← L2 と L3 を OR 演算する
=> S L2 OR L3
       190117 L2 OR L3
L4
=> D SCAN HITIND ← SCAN 表示形式 (HITIND のみ表示) で確認する
     190117 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L4
    Butadiene rubber
IT
    RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
       (cathode binder; composite cathode for all-solid-state lithium
       secondary battery, and all-solid-state lithium secondary battery
       including same)
    9003-17-2
ΙT
    RL: SCLM (Substance claimed); TEM (Technical or engineered material use);
    USES (Uses)
       (butadiene rubber, cathode binder; composite
       cathode for all-solid-state lithium secondary battery, and
       all-solid-state lithium secondary battery including same)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):3
                    CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L4
     190117 ANSWERS
    Butadiene rubber, preparation
ΙT
    RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
       (anionic polymerization of butadiene with)
     190117 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L4
IT
    9003-17-2
    RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)
       (of 1,2-configuration; ethylene-propylene rubber compns. with good
       resistance to Freon coolants for refrigerator seals)
I 4
     190117 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    Rubber, butadiene
TT
    RL: USES (Uses)
       (of cis-1,4-configuration, golf ball core compns., contg. zinc diacrylate)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END
```

\*ただし、この検索の結果には "styrene-butadiene rubber" などの回答も含まれる。

検索例 : ブタジエンゴム (9003-17-2) の文献検索

## 参考 : 重合条件、触媒を限定したポリマーの文献検索

重合条件、触媒などの情報は CAplus/CA ファイルでキーワードを用いて絞り込む。

– 重合反応に主眼を置いた研究は、モノマーの CAS RN® のみ索引される場合もあるので、ポリマー およびモノマー双方の CAS RN® を検索したほうがよい。

#### 検索例 : ポリスチレンの重合触媒としてゼオライトを用いている文献検索

- ポリスチレンの合成文献と併せて、モノマーであるスチレン (100-42-5) の重合反応文献も検索する。

```
=> FILE REGISTRY
                             ← REGISTRY ファイルに入る
                             ← スチレンを成分として含む1成分物質を検索
=> S 100-42-5/CRN AND 1/NC
         17 100-42-5/CRN AND 1/NC
=> D SCAN IN
                             ← SCAN 表示形式 (IN のみ表示) で確認する
   17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
I 1
TN
    Benzene, ethenyl-, trimer
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
I 1
    17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    Benzene, ethenyl-, homopolymer, syndiotactic
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END
                             ← ホモポリマーに限定
=> S L1 AND HOMOPOLYMER
L2
           5 L1 AND HOMOPOLYMER
=> S 100-42-5
                             ← スチレンを検索
L3
          1 100-42-5
=> FILE CAPLUS
                             ← CAplus ファイルに入る
                                         ポリスチレンの合成文献およびスチレンの重合
=> S L2/P OR (L3/RACT (L) POLYM?)
                                         に関する文献を検索する
       53644 L2/P OR (L3/RACT (L) POLYM?)
                                         触媒としてゼオライトを用いている文献を検索
=> S ZEOLIT? (L) (CAT/RL OR CATAL?)
                                          する
      147412 ZEOLIT? (L) (CAT/RL OR CATAL?)
                             ← L4 と L5 を OR 演算する
=> S L4 AND L5
         169 L4 AND L5
                             ← SCAN 表示形式 (HITIND のみ表示) で確認する
=> D SCAN HITIND
    169 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L6
    Zeolites, synthetic
    RL: CAT (Catalyst use); PRP (Properties); SPN (Synthetic
    preparation); PREP (Preparation); USES (Uses)
       (high-efficiency visible-light-driven mesoporous AgI@Fe-MIL-88B-NH2
       photocatalyst via Z-scheme mechanism)
    9003-53-6P, Polystyrene
ΙT
    RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT
```

```
(Reactant or reagent)
        (high-efficiency visible-light-driven mesoporous AgI@Fe-MIL-88B-NH2
        photocatalyst via Z-scheme mechanism)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
L6
     169 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
ΙT
    Polymerization catalysts
        (peroxide- or hydroperoxide-zeolite, radical stabilization in
        relation to)
    80-62-6
             100-42-5, reactions
ΙT
     RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
        (polymn. of, in presence of peroxide-zeolite-
        catalysts, rate of)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END
```

## 参考 : モノマーの索引

ポリマーが主題である場合は、ポリマーの CAS RN® が索引されるが、以下の場合は、モノマーの CAS RN® が索引される。

- ① モノマーを合成している場合
- ② 重合反応に関する研究をしている場合
- ③ 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)
- ④ 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)

#### 上記 ③ の索引例

- 請求項1の内容
  - 主たる繰り返し単位がエチレンテレフタレート
  - 共重合成分が、① ジエチレングリコール、② 1,3-プロパンジオール、③ 1,4-ブタンジオール、④ 1,6-ヘキサンジオール、⑤ 数平均分子量 650 以下のポリエチレングリコール、⑥ 2,2-ビス[4-(2-ヒドロキシエトキシ)フェニル]プロパン、⑦ 1,3-ビス(2-ヒドロキシエトキシ)ベンゼン、⑧ 1,4-シクロヘキサンジメタノールからなる群から選ばれる少なくとも 1 成分である、制電性共重合ポリエステル組成物。
- レコードの索引例

クレーム中のモノマーの CAS RN® の後ろに「D」 を付与し、かつ POLYMERS という言葉も索引する



#### まとめ

- ポリマーの種類によって CAplus/CA ファイルの索引方針が異なり、検索方法が決まる。



#### 練習問題

4. 1,6-ヘキサンジオール (1,6-HEXANEDIOL) とイソフタル酸 (ISOPHTHALIC ACID) からなるポリマー の製造に関する 1907 年以降の文献を検索する。

#### (ヒント)

- /NC (成分数) フィールドを用いて 2 成分に限定する。
- 実質的に同じポリマーを網羅的に検索するには POLYLINK コマンドを利用する。

回答は p.118

5. スルホン化ポリエチレン (SULFONATED POLYETHYLENE) の文献を検索する。(1977 年以降)

#### (ヒント)

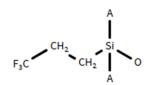
 スルホン化で後処理をしたポリマーは、原則として独自の CAS RN® を持たず、1977 年以 降、CAplus/CA ファイルでは、後処理前のポリマーの CAS RN®+D と スルホン化のキーワー ドで索引されている。

回答は p.121

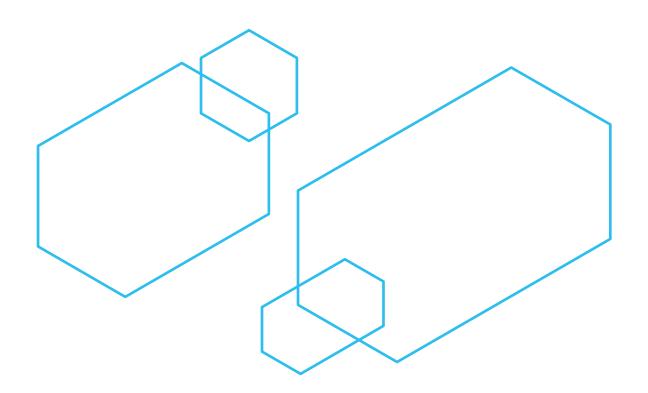
6. 3,3,3-トリフルオロプロピル基が置換しているシリコーンに関する文献を検索する。

### (ヒント)

- シリコーンは基本的に統制語で索引されているが、CAS RN®を持つシリコーンは 1995 年以 降 CAS RN® も索引されているため、統制語検索と REGISTRY ファイルからのクロスオーバー 検索の両方を行う。
- 環状シロキサンの可能性も考慮して、Si-O、Si-A の結合属性を環/鎖に指定する。(A は H 以 外の元素)



回答は p.124



練習問題 1:イソプレン (ISOPRENE) とメチルメタクリレート (METHYL METHACRYLATE) の 共重合体を検索する。

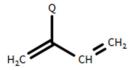
(ヒント)

- モノマーの CAS RN® から検索する。

練習問題 2:下記のように炭素以外の元素で置換されたブタジエンをモノマーとする 2 成分系ポリマーを検索する (Q : C、H以外)

(ヒント)

- ポリマーの誘導体を検索するときは、構造検索を用いる。
- スクリーンを組み合わせて検索する。
  - モノマー単位ポリマーのスクリーン 2067
- 成分数は (/NC) で限定する。



練習問題 3:4,4'-ビフェニルジカルボン酸 (787-70-2) をモノマーとするポリマーを網羅的に検索する。 件数が多い場合はポリアミド系ポリマーに限定する。

(ヒント)

- 実質的に同じポリマーを網羅的に検索するには POLYLINK コマンドを利用する。
- ポリマーの種類で検索する場合はポリマー分類用語を用いる。

**練習問題 4:1,6-ヘキサンジオール (1,6-HEXANEDIOL) とイソフタル酸 (ISOPHTHALIC ACID)** からなるポリマーの製造に関する 1907 年以降の文献を検索する。

(ヒント)

- /NC (成分数) フィールドを用いて 2 成分に限定する。
- 実質的に同じポリマーを網羅的に検索するには POLYLINK コマンドを利用する。

練習問題 5:スルホン化ポリエチレン (SULFONATED POLYETHYLENE) の文献を検索する。 (1977 年以降)

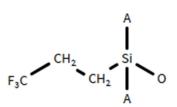
(ヒント)

- スルホン化で後処理をしたポリマーは、原則として独自の CAS RN® を持たず、1977 年以降、 CAplus/CA ファイルでは、後処理前のポリマーの CAS RN® + D およびスルホン化のキーワードで 索引されている。

練習問題 6:3,3,3-トリフルオロプロピル基が置換しているシリコーンに関する文献を検索する。

(ヒント)

- シリコーンは基本的に統制語で索引されているが、CAS RN®を 持つシリコーンは 1995 年以降 CAS RN® も索引されているため、統制語検索と REGISTRY ファイルからのクロスオーバー 検索の両方を行う。
- 環状シロキサンの可能性も考慮して、Si-O、Si-A の結合属性を環/鎖に指定する。(A は H 以外の元素)



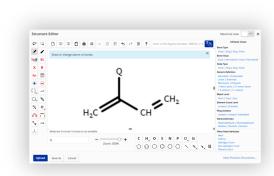
```
=> FILE REGISTRY
=> E ISOPRENE/CN
                 ISOPRENALINE TETRAACETATE/CN
E1
           1
E2
                 ISOPRENALONE HYDROGEN SULFATE/CN
           1
E3
           1 --> ISOPRENE/CN
                 ISOPRENE BIOSYNTHESIS RELATED REDUCTASE PROTEIN (BACTEROIDES FRAGILIS
           1
                  STRAIN ATCC25285)/CN
E5
           1
                ISOPRENE BROMOHYDRIN/CN
=> S E3
                              ← イソプレンを検索する
           1 ISOPRENE/CN
L1
=> E METHYL METHACRYLATE/CN
E1
                 METHYL METAPHOSPHIMATE, TETRAMER/CN
           1
                 METHYL METHACARYLATE-BUTYL ACRYLATE-ETHYLENE GLYCOL DIMETHACRYLATE-
E2
                 AE 3280-PAM 100 GRAFT COPOLYMER/CN
           1 --> METHYL METHACRYLATE/CN
E3
                 METHYL METHACRYLATE - 2-ETHYLHEXYL ACRYLATE - BENZYL METHACRYLATE
E4
           1
                 COPOLYMER/CN
E5
                 METHYL METHACRYLATE - BUTYL ACRYLATE - ACRYLIC ACID - 2-HYDR
                 OXYETHYL ACRYLATE - DIACETONE ACRYLAMIDE COPOLYMER/CN
                              ← メチルメタクリレートを検索する
=> S E3
           1 "METHYL METHACRYLATE"/CN
12
=> SEL L1 RN
E1 THROUGH E1 ASSIGNED
                                  イソプレンとメチルメタクリレートの CAS RN® を抽出する
=> SEL L2 RN
E2 THROUGH E2 ASSIGNED
                                           各モノマーの CAS RN® が成分 CAS RN® として
=> S E1/CRN AND E2/CRN AND 2/NC
                                           収録されている 2 成分物質を検索
           8 78-79-5/CRN AND 80-62-6/CRN AND
=> D SCAN
   8 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L3
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, block
    (C5 H8 O2 . C5 H8)x
MF
                                                                ブロック共重合体
CI
    PMS
                             成分数を限定した場合、分子式が
                             ヒットタームになる
    CM
         1
    CM
```

```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):7
     8 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L3
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, graft
ΤN
MF
     (C5 H8 O2 . C5 H8)x
                                                                      グラフト共重合体
CI
    PMS
:
L3
               REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene,
ΤN
    alternating (9CI)
                                                                          交互共重合体
     (C5 H8 O2 . C5 H8)x
MF
CI
    PMS
:
L3
    8 ANSWERS
               REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with
    2-methyl-1,3-butadiene, syndiotactic, block (9CI)
MF
     (C5 H8 O2 . C5 H8)x
                                                  シンジオタクチック、ブロック共重合体
CI
    PMS
:
L3
    8 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene, diblock
ΙN
MF
    (C5 H8 O2 . C5 H8)x
CI
    PMS
                                                                   ジブロック共重合体
                REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L3
    8 ANSWERS
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with
     2-methyl-1,3-butadiene, triblock
MF
    (C5 H8 O2 . C5 H8)x
                                                                 トリブロック共重合体
    PMS
CI
:
               REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    8 ANSWERS
L3
ΙN
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene
MF
    (C5 H8 O2 . C5 H8)x
CI
    PMS
                                        立体規則性、重合形態が指定されていない共重合体
                REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L3
    8 ANSWERS
    2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymers with polyisoprene of
    cis-1,4-configuration
MF
     (C5 H8 O2 . C5 H8)x
                                                                           GRS 物質
CI
    PMS, MAN, GRS
    THE COMPLETE SUBSTANCE MAY NOT BE REPRESENTED BY THESE COMPONENTS. CHECK
    THE CN OR IN FIELD FOR THE COMPLETE SUBSTANCE DESCRIPTION.
```

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

- 原料モノマーから検索すると、さまざまな重合形態、立体規則性を持つポリマーもまとめて検索 できる。

#### => FILE REGISTRY



=>

Uploading structure file: 2025\_0001\_Structure

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2067 ← モノマー単位ポリマーのスクリーン

L2 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2 ← スクリーンを使った構造検索 (サンプル検索)

SAMPLE SEARCH INITIATED 21:57:18

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 9003 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 9003 ITERATIONS 50 ANSWERS

INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)

SEARCH TIME: 00.00.01

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

BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED ITERATIONS: 175255 TO 186665 PROJECTED ANSWERS: 576 TO 1424

L3 50 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> S L1 AND L2 FUL ← スクリーンを使った構造検索 (フルファイル検索)

L4 928 SEA SSS FUL L1 AND L2

=> S L4 AND 2/NC

L5 329 L4 AND 2/NC

=> D SCAN

L5 329 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Benzene, ethenyl-, polymer with 2-ethoxy-1,3-butadiene (9CI)

MF (C8 H8 . C6 H10 0)x

CI PMS

CM 1

CM 2

```
=> FILE REGISTRY
=> S 787-70-2/CRN AND PMS/CI
L1
         1197 787-70-2/CRN AND PMS/CI
=> D SCAN
    1197 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L1
    [1,1'-Biphenyl]-4,4'-dicarboxylic acid, polymer with
    4,4'-[(2,2'-dimethyl[1,1'-biphenyl]-4,4'-diyl)bis(oxy)]bis[3-
     (trifluoromethyl)benzenamine] (9CI)
MF
     (C28 H22 F6 N2 O2 . C14 H10 O4)x
CI
    PMS
                                                    POLYLINK コマンドが利用可能
**RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK**
     CM
         1
CM
    2
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END
                                        ← POLYLINK コマンドを実行する
=> POLYLINK L1
L2
        1620 POLYLINK L1
=> S L2 AND POLYAMIDE/PCT
                                        ← ポリマー分類用語を用いてポリアミドに限定する
          509 L2 AND POLYAMIDE/PCT
=> D SCAN
    509 ANSWERS
                 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L3
    Poly(2,3-quinoxalinediyl-1,4-phenyleneiminocarbonyl[1,1'-biphenyl]-4,4'-
     diylcarbonylimino-1,4-phenylene) (9CI)
     (C34 H22 N4 O2)n
MF
    PMS
CI
**RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK**
```

```
=> FILE REGISTRY
=> E 1,6-HEXANEDIOL/CN
                 1,6-HEXANEDIOIC ACID-NEOPENTYL GLYCOL COPOLYMER/CN
E1
           1
E2
                 1,6-HEXANEDIOIC ACID-NEOPENTYL GLYCOL DIGLYCIDYL ETHER COPOLYMER/CN
E3
           1 --> 1,6-HEXANEDIOL/CN
E4
                1,6-HEXANEDIOL - SUBERIC ACID - STYRENE BLOCK COPOLYMER/CN
                                      ← 1,6-ヘキサンジオールを検索する
=> S E3
L1
           1 "1,6-HEXANEDIOL"/CN
=> E ISOPHTHALIC ACID/CN
                 ISOPHTHALDOXIME-N,N'-M-PHENYLENEBISMALEIMIDE POLYMER/CN
           1
                 ISOPHTHALDOXIME-N, N'-M-PHENYLENEBISMALEIMIDE POLYMER, SRU/CN
E2
E3
            1 --> ISOPHTHALIC ACID/CN
                 ISOPHTHALIC ACID -GLYCERIN-TRIMETHYLOLPROPANE-ETHYLENE GLYCO
E4
                 L-NEOPENTYL GLYCOL COPOLYMER/CN
:
                                      ← イソフタル酸を検索する
=> S E3
           1 "ISOPHTHALIC ACID"/CN
L2
=> SEL L1 RN
E1 THROUGH E1 ASSIGNED
                                1,6-ヘキサンジオールとイソフタル酸の CAS RN® を抽出する
=> SEL L2 RN
E2 THROUGH E2 ASSIGNED
                                            各モノマーの CAS RN® が成分 CAS RN® として
                                            収録されている 2 成分物質を検索する
=> S E1/CRN AND E2/CRN AND 2/NC
L3
           1 629-11-8/CRN AND 121-91-5/CRN AND 2/NC
=> D SCAN
   1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L3
ΙN
    1,3-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,6-hexanediol
    (C8 H6 O4 . C6 H14 O2)x
    PMS, COM
CI
                                                       POLYLINK コマンドが利用可能
**RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK**
    CM
         1
     HO.
    CM
         2
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED
=> POLYLINK L3
                                      ← POLYLINK コマンドを実行する
          12 POLYLINK L3
```

#### => D SCAN IN MF

- L4 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED
- MF (C12 H8 N6 O2 . C6 H14 O2)x

#### HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):11

- L4 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- IN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, dipotassium salt, polymer with
  1,6-dibromohexane (9CI)
- MF (C8 H6 O4 . C6 H12 Br2 . 2 K)x
- L4 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED
- MF (C12 H14 O4 . C6 H14 O2)x
- L4 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- IN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, diphenyl ester, polymer with 1,6-hexanediol
   (9CI)
- MF (C20 H14 O4 . C6 H14 O2)x
- L4 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- IN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,6-hexanediol
- MF (C8 H6 O4 . C6 H14 O2)x
- L4 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- IN 1-Butanaminium, N,N,N-tributyl-, 1,3-benzenedicarboxylate (2:1), polymer
  with 1,6-dibromohexane (9CI)
- MF (C16 H36 N . 1/2 C8 H4 O4 . C6 H12 Br2)x
- L4 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- IN Poly(oxycarbonyl-1,3-phenylenecarbonyloxy-1,6-hexanediyl)
- MF (C14 H16 O4)n
- L4 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED
- MF (C14 H10 N4 O2 . C6 H14 O2)x
- L4 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- IN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, 1,3-dimethyl ester, polymer with 1,6-hexanediol
- MF (C10 H10 O4 . C6 H14 O2)x
- L4 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- IN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, 1,3-bis[2-(2-propen-1-yl)phenyl] ester,
   polymer with 1,6-hexanediol
- MF (C26 H22 O4 . C6 H14 O2)x
- L4 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- MF (C12 H10 O4 . C6 H14 O2)x
- L4 12 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
- IN 1,3-Benzenedicarbonyl dichloride, polymer with 1,6-hexanediol
- MF (C8 H4 Cl2 O2 . C6 H14 O2)x

```
← CAplus ファイルに入る
=> FILE CAPLUS
                          合成文献を検索する。
=> S L4/P
                          /P を用いた合成文献検索を実行して得られる回答は
L5
           71 L4/P
                          1907 年以降のレコードに限定される
=> D SCAN TI HITRN
L5
     71 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
ΤI
    Method for preparing and polymerizing macrocyclic poly(alkylene
    discarboxylate) oligomers
    59199-71-2P
                59199-93-8P
ΙT
    RL: PREP (Preparation)
       (prepn. of, macrocyclic oligomers)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
L5
     71 ANSWERS
                CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
ΤI
    Scratch-resistant oligoester coatings
                 80570-34-9P, Dimethyl isophthalate-1,6-hexanediol copolymer
ΙT
    59199-93-8P
    RL: IMF (Industrial manufacture); RCT (Reactant); PREP (Preparation); RACT
    (Reactant or reagent)
       (scratch-resistant oligoester coatings)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END
```

```
=> FILE REGISTRY
=> E POLYETHYLENE/CN
E1
            1
                 POLYETHYL A/CN
E2
                 POLYETHYL LL-UE 320, POLYMER WITH ETHENYLTRIMETHOXYSILANE/CN
            1
E3
           1 --> POLYETHYLENE/CN
E4
                 POLYETHYLENE ACETATE/CN
           1
                 POLYETHYLENE AS/CN
E5
           1
                                       ポリエチレンを検索する
=> S E3
            1 POLYETHYLENE/CN
L1
=> D
L1
    ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    9002-88-4 REGISTRY
RN
    Entered STN: 16 Nov 1984
    Ethene, homopolymer (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN
    0017ZSK
CN
    Polyethylene
MF (C2 H4)x
INCH InChI=1S/C2H4/c1-2/h1-2H2
INKY VGGSQFUCUMXWEO-UHFFFAOYSA-N
CI PMS, COM
PCT Polyolefin
  CM 1
    CRN 74-85-1
    CMF C2 H4
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
         514242 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
          45667 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
         521397 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
                                        ← CAplus ファイルに入る
=> FILE CAPLUS
=> S L1/D (L) (SULFONAT? OR SULFONE#) ---
                                              1977 年以降の文献には、CAS RN® の後ろに
          473 L1/D (L) (SULFONAT? OR SULFONE)
L2
                                              D が付与され、後処理のキーワードと共に
                                              索引されている
=> D SCAN HITIND
L2
     473 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
    9002-88-4D, Polyethylene, sulfonated 9003-07-0D, Polypropylene, sulfonated
    9003-53-6D, Polystyrene, sulfonated 9052-45-3, Acrylic acid-divinylbenzene copolymer
    68586-00-5, Divinylbenzene-methyl acrylate-sodium styrenesulfonate copolymer 84686-85-
    1, Divinylbenzene-sodium styrenesulfonate-styrene copolymer
```

RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses) (particles; ammonia-trapping material having anion microparticles with carboxy or sulfo groups on nonwoven fabric for alkaline batteries)

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

- L2 473 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN

  IT 9002-88-4D, Polyethylene, sulfonated,
   (lithium-exchanged) 98846-22-1, Acrylic acid-ethylene graft copolymer
   125350-34-7, Acrylic acid-ethylene graft copolymer, lithium salt
   RL: DEV (Device component use); USES (Uses)
   (separator; nonaq. electrolyte secondary batteries with porous
   polyolefin separators having cation-exchanging surfaces)
- L2 473 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN

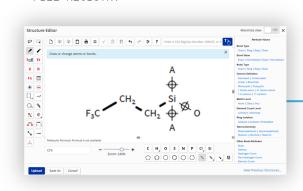
  IT 9002-88-4DP, Polyethylene, fluorinated and sulfonated
  9011-17-0DP, F 26, sulfonated 25684-76-8DP, F 42, sulfonated
  RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
  (multiple surface structures and surface properties of polyolefins formed by modification methods)

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

#### 参考:1976 年以前の文献も含めて検索する場合

```
=> S (L1 OR ETHENE HOMOPOLYMER#)(L)(SULFONAT? OR SULFONE#) RAN=,1976
          164 (L1 OR ETHENE HOMOPOLYMER#)(L)(SULFONAT? OR SULFONE#) RAN=,1976
                                   1976 年以前の文献については、CAS RN®と CA 索引名に
=> D SCAN
                                   後処理のキーワードを組み合わせて検索する
     164 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L3
INCL 210030000
CC
    24 (Water)
TI
    Water softening with fine cation exchange tubes
TT
    Water, purification or conditioning of
        (softening, by permselective base-exchanging tubes)
ΙT
    25068-12-6, Styrene, polymer with ethylene
        (graft, sulfonated, water softening by tubes of)
    9002-88-4, Ethylene polymers
TT
        (grafted with styrene, sulfonated, water softening by tubes of)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
     164 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IPCI C08J0007-16; C08G0065-26
IPCR C08F0008-00 [I]; C08F0008-34 [I]; C08G0065-26 [I]; C08J0007-16 [I]
    36-4 (Plastics Manufacture and Processing)
    Surface treatment of plastics with sulfur trioxide and oxiranes
ΤI
IT
    Benzene, ethenyl-, homopolymer, sulfonated, reaction products with
       ethylene oxide
      Ethene, homopolymer, sulfonated, reaction
       products with ethylene oxide
    RL: USES (Uses)
        (gas permeation-resistant and dyeable)
    75-21-8D, Oxirane, reaction products with sulfonated polyethylene
IT
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END
=> S L2 OR L3
         637 L2 OR L3
```

#### => FILE REGISTRY



環状シロキサンも検索するために以下の 指定をした構造質問式を用いて検索する Si-O、Si-A の結合属性 : 環/鎖

=>

Uploading structure file: 2025\_0002\_Structure

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2043

← ポリマー一般 (2043) のスクリーン

L2 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2

← サンプル検索

:

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

BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED ITERATIONS: 10212 TO 13108 PROJECTED ANSWERS: 997 TO 2043

L3 50 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> D SCAN

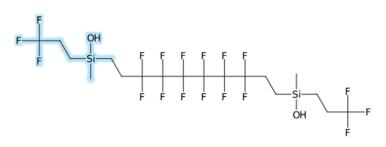
L3 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Silanol, (3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8-dodecafluoro-1,10 decanediyl)bis[methyl(3,3,3-trifluoropropyl)-, homopolymer (9CI)

:

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

CM 1



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

```
REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN
L3
    50 ANSWERS
    Cyclotrisiloxane, 2,4,6-trimethyl-2,4,6-tris(3,3,3-trifluoropropyl)-,
    polymer with ethenylbenzene (9CI)
    CM
    CM
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END
=> S L1 AND L2 FUL
                               ← フルファイル検索
L4
           1916 SEA SSS FUL L1 AND L2
                               ← POLYLINK コマンドを実行する
=> POLYLINK L4
       1934 POLYLINK L4
L5
=> FILE CAPLUS
=> S L5
L6
         2712 L5
=> S (POLYSILOXANE# OR SILOXANE# OR SILICONE#)/CW (L) TRIFLUOROPROPYL
        1405 (POLYSILOXANE# OR SILOXANE# OR SILICONE#)/CW (L) TRIFLUOROPROPYL
=> S L6 OR L7
                                         網羅的に文献検索をしたい時は統制語を含めた
18
         3888 L6 OR L7
                                         検索も行う
=> D SCAN TI HITIND
L8
     3888 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
TI
    Lubricating oil composition containing amine and phenol based antioxidants
    for shock absorber
ΙT
    Polysiloxanes
    RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)
       (di-Me, Me 3,3,3-trifluoropropyl; lubricating oil compn.
       contg. amine and phenol based antioxidant for shock absorber)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):2
```

L8 3888 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN ΤI High-stability weather-resistant conductive silicone rubber compositions IT Silicone rubber RL: POF (Polymer in formulation); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses) (fluorine-contg., trifluoropropyl; high-stability weather-resistant conductive silicone rubber compns.) L8 3888 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN Self-association behavior of amphiphilic molecules based on incompletely condensed cage silsesquioxanes and poly(ethylene glycol)s 213453-16-8P 625077-43-2P 656800-07-6P 1808917-89-6P 2188258-71-9P 2188258-72-0P **2188258-73-1P** RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation) (self-assocn. behavior of amphiphilic mols. based on incompletely condensed cage silsesquioxanes and poly(ethylene glycol)s)

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

#### 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** 



