



SCIFINDER<sup>n</sup>  
A CAS SOLUTION

# ポリマー検索の概要 (中上級編)

2019年5月

## \* 目次 \*

### ポリマー検索の概要

ポリマーの例 .....	2
ポリマー検索の手順 .....	5
ポリマーの基本的な検索例 .....	6
ポリマー検索の基礎知識 .....	10

**JAICI**  
化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル  
TEL: 0120-003-462  
E-mail: support@jaici.or.jp

## ポリマーの例



大部分のポリマーは、ポリマーの主鎖を構成する「原料モノマー」に基づいて登録される

### 付加重合系ポリマー

主に、二重結合や三重結合の付加重合によって形成される、炭素鎖主体のポリマー  
(例) ビニルポリマー、ポリオレフィン、アクリル樹脂、ポリアセチレン、ジエンポリマーなど

#### ■ 原料モノマーを成分として登録

#### ホモポリマー

CAS Registry Number  
9011-14-7

ポリマーの CAS 登録番号 (CAS RN®)

分子式 :  
(モノマーの分子式)<sub>x</sub>

(C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>)<sub>x</sub>

2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, homopolymer

Polymer Class Terms ← ポリマー分類用語  
Polyacrylic

モノマーの情報  
・ CAS 登録番号 (CAS RN®)  
・ 分子式  
・ 構造図

#### コポリマー

CAS Registry Number  
9011-87-4

ポリマーの CAS 登録番号 (CAS RN®)

分子式 :  
(モノマーの分子式. モノマーの分子式)<sub>x</sub>  
↑ピリオド

(C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>.C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>)<sub>x</sub>

Components: 2  
2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with methyl 2-propenoate

Polymer Class Terms  
Polyacrylic

モノマーの情報  
・ CAS 登録番号 (CAS RN®)  
・ 分子式  
・ 構造図

## 縮合系ポリマー

主に、重縮合、重付加、開環重合、付加縮合などによって形成されるヘテロ鎖ポリマー

(例) ポリエステル、ポリアミド、ポリウレタン、ポリエーテル (ポリオキシアルキレンを含む)、フェノール樹脂など

### ■ 原料モノマーを成分として登録

CAS Registry Number  
26062-94-2

ポリマーの CAS RN®

110-63-4  
C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub>

100-21-0  
C<sub>8</sub>H<sub>6</sub>O<sub>4</sub>

(C<sub>8</sub>H<sub>6</sub>O<sub>4</sub>·C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub>)<sub>x</sub>

Components: 2  
1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-butanediol

Polymer Class Terms  
Polyester, Polyester formed

分子式 :  
(モノマーの分子式 · モノマーの分子式)<sub>x</sub>  
↑ピリオド

モノマーの情報  
・ CAS 登録番号 (CAS RN®)  
・ 分子式  
・ 構造図

Key Physical Properties

Condition

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

CAS Registry Number  
24968-12-5

ポリマーの CAS RN®

(C<sub>12</sub>H<sub>12</sub>O<sub>4</sub>)<sub>n</sub>

Poly(oxy-1,4-butanediyl oxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)

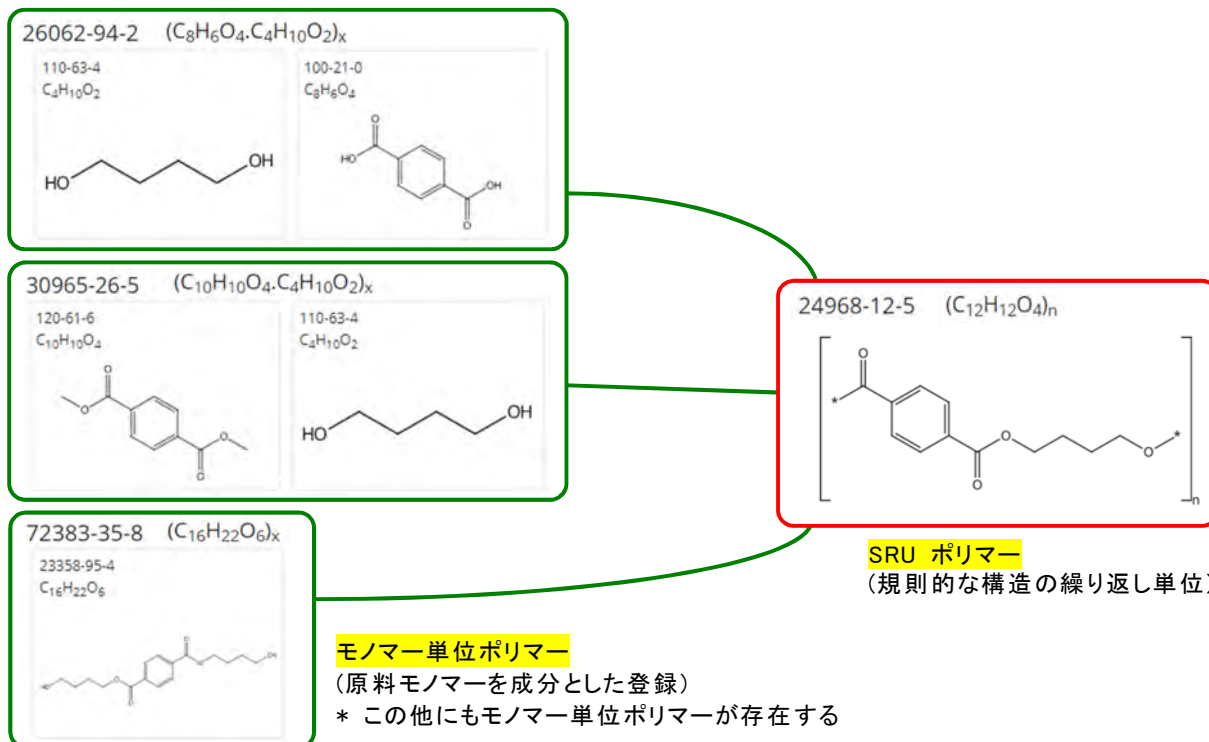
Polymer Class Terms  
Polyester

分子式 :  
(繰り返し単位の分子式)<sub>n</sub>

繰り返し単位の構造

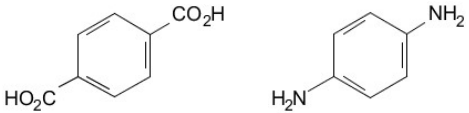
- 縮合系ポリマーは、モノマー単位ポリマー (原料モノマーを成分とした登録) と、SRU ポリマー (規則的な構造の繰り返し単位) で登録される場合がある。

(例) SRU ポリマー (24968-12-5) と最終的には同じポリマーであるモノマー単位ポリマー



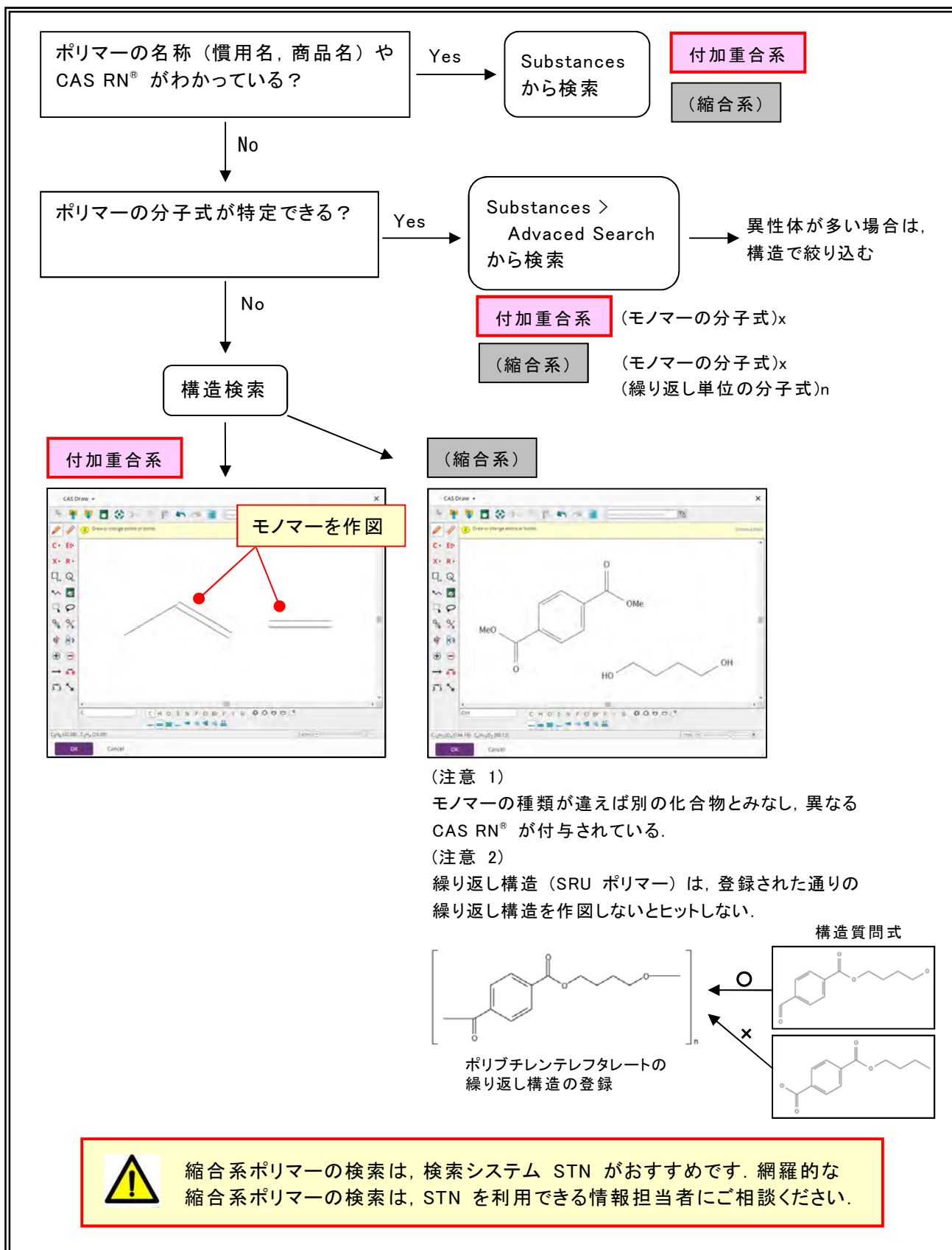
- 縮合系ポリマーを網羅的に検索するには、原料モノマーを考慮したモノマー単位ポリマーの検索と、SRU ポリマーの検索が必要である。検索システム STN では、上記のような「実質的には同じポリマーでありながら、各々独自の CAS RN® を持つポリマー」を一括検索することができる。

#### ■ ポリマーの種類と登録形式

ポリマーの種類	モノマー単位	SRU	例
付加重合系ポリマー	○	×	ポリプロピレン ポリスチレン ブタジエン・スチレンのコポリマー
縮合系ポリマー	・縮合ホモポリマー ・2 種のモノマーから成る縮合ポリマー (2 種とも対称)	○	 上記 2 種から成るポリマー
	・5 種の汎用ポリマー	△	Nylon 6, Nylon 66 PEG (ホ <sup>リ</sup> エチレング <sup>リ</sup> コール) PPG (ホ <sup>リ</sup> プロピレング <sup>リ</sup> コール) PET (ホ <sup>リ</sup> エチレンテレフ <sup>テ</sup> レート)
	・2 種のモノマーから成る縮合ポリマー (少なくとも 1 種は非対称) ・3 種以上のモノマーから成る縮合ポリマー	○	×

# ポリマー検索の手順

■ ポリマー検索は、通常以下のチャートにしたがって行う



# ポリマーの基本的な検索例

## ■ Substances から検索 - 名称や CAS RN®

The screenshot shows the search interface with the search bar containing 'polypropylene'. A red box highlights the 'Substances' button in the left sidebar. A yellow callout box points to the search bar with the text '名称を入力する (CAS RN®でも可)'. A green arrow points from the search bar to a detailed view of '9003-07-0 Polypropylene', which includes a chemical structure and statistics: 248K References, 4,918 Reactions, and 256 Suppliers. A green callout box points to this detailed view with the text '低分子物質と同様に検索できる'.

## ■ Molecular Formula から検索 - 分子式

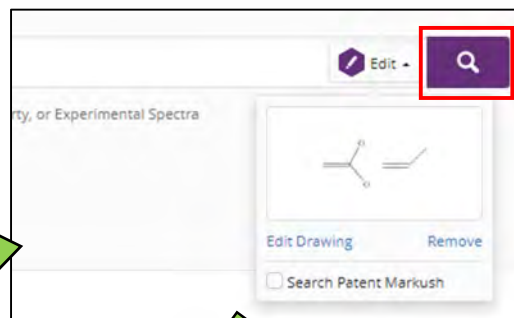
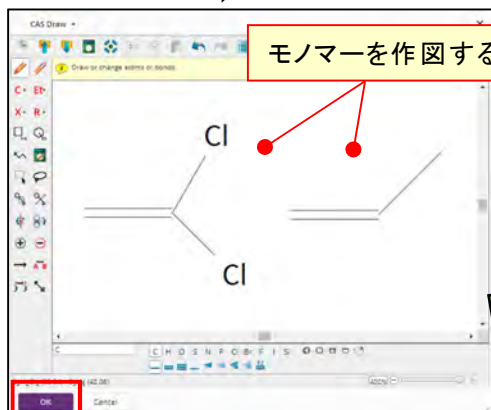
- ・ 構成モノマーすべてが特定できる場合に検索可

The screenshot shows the search interface with the 'Advanced Search' button highlighted in the search bar. A yellow callout box points to this button with the text: '各モノマーをピリオド(.)で区切る', '分子式全体をカッコでくくり、', 'その後 X をつける', '例) (C5H8O2.C4H6O2)x'. A green arrow points from the search bar to the 'Advanced Substance Search' panel. In this panel, the 'Molecular Formula' field contains '(C5H8O2.C4H6O2)x'. A red callout box points to this field with the same text. A green arrow points from the search bar to the search results page, which shows a grid of chemical structures for copolymers. A green callout box points to the search results with the text '異性体が多い場合は、構造作図で絞り込む'. A red box highlights the search button at the bottom right of the advanced search panel.



## ■ 構造検索

① 一度に検索 → 同一画面にモノマーを離して作図し検索する



完全一致構造検索結果  
→ As Drawn

・部分構造検索結果  
→ Substructure  
・類似性構造検索結果  
→ Similarity

すべての構成モノマーが  
特定できている場合、  
作図した成分のみに限定

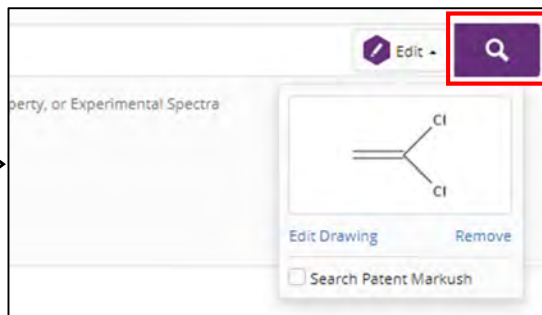
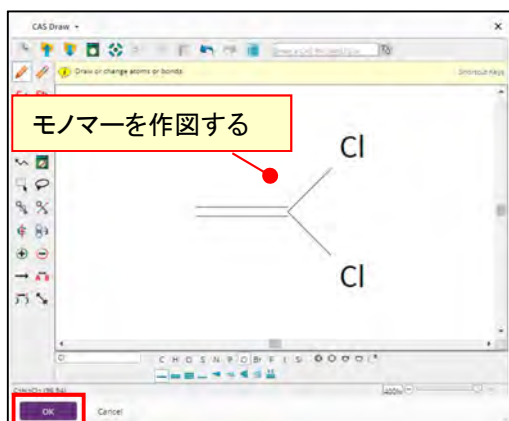
2 (3)

ポリマーに限定

3 成分で構成されるポリマー。  
別のモノマー (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> : エテン)  
も含む

構造が一致するモノマーのみ。  
(ただし同位体は含まれる)

② 段階的に検索 → 一つ目のモノマーを作図し検索した後、Refine で他のモノマーを同一画面に作図し絞込み検索する



ポリマーに限定  
 Polymer (2,466)

他のモノマーを作図し、絞込む。

Draw using current structure をクリックすると、先に作図した構造(塩化ビニリデン)を含む作図画面が表示される。

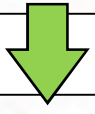


Search Within Results

Draw

Draw using current structure

Draw using current structure をクリック



CAS Draw

Draw or change atoms or bonds.

別のモノマーを作図する

OK



Experimental spectrum

Regulatory Information

Search Within Results

Edit Drawing

Remove

As Drawn

Substructure

Find

検索タイプを変えて  
絞り込むことも可能



成分数を限定  
することも可能

Structure Match

As Drawn (2,505)

Substructure (166K)

Similarity (1,199)

Analyze Structure Precision

Filter by

- Commercial Availability
- Reference Role
- Number of Components
  - 2 (5)
  - 3 (8)
  - 4 (4)
  - 5 or more (3)
- Substance Class
  - Polymer (20)
- Isotopes
- Metals
- Regulatory Information
- Search Within Results

Remove and Edit

Remove

Substances (20)

Sort: Relevance

References

25511-71-1

136087-03-1

830318-51-9

148556-17-6

128147-60-4

30351-56-5

(C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)<sub>x</sub>

Components: 2

1-Propene, polymer with 1,1-dichloro ethene

1-Propene, polymer with 1,1-dichloro ethene, graft

1-Propene, polymer with 1,1-dichloro ethene, triblock

14 References

2 References

1 Reference

塩化ビニリデンとエチレンの両方を含むポリマーが得られた

## ポリマー検索の基礎知識

### ■ SciFinder でポリマーとみなされるもの

- ・ 重合度が 11 以上の物質, あるいは重合度不明の物質.
- ・ 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.

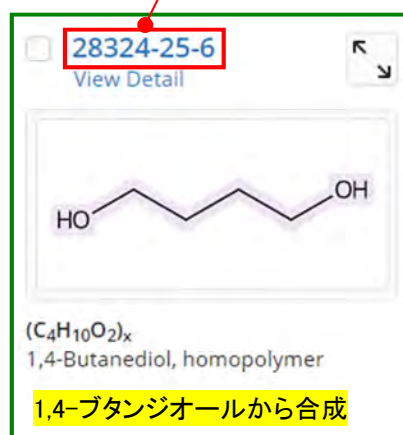
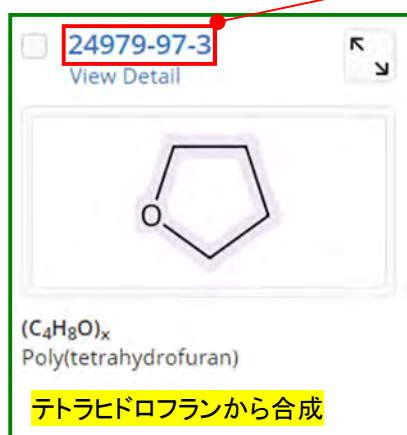
### ■ ルール 1 :



大部分のポリマーは, ポリマーの主鎖を構成する「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<sup>®</sup> が付与される.

(例) ポリブチレンオキサイド



最終的に同じポリマーでも,  
異なる CAS RN<sup>®</sup> を持つ

- ・ 原則として, ポリマーの主鎖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      - 触媒      - 分子量調整剤      - 安定剤

- ・ 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

■ 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.

- ・ 立体規則性や重合形態の異なるポリマーについては,同じ原料モノマーでも異なる CAS RN® が付与されている.

① 立体規則性 (タクチシティー : 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.



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, 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.



## ■ その他のポリマー

- ・ 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、商品名を登録する。

CAS Registry Number  
718635-98-4

ポリマーの CAS RN®

Image Not Available

構造情報なし

Unspecified  
Diaformer Z 632 ← 商品名

Polymer Class Terms  
Manual registration

Notes: An N,N-dimethyl-N-(2-methacryloyloxyethyl)amine N-oxide-alkyl methacrylate copolymer (Mitsubishi Chem.) ← 商品に関する情報

## ・ \*(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® が付与された場合、CAS RN® の下に \*(アスタリスク) つきの注釈が表示される。この CAS RN® で文献検索をしても、文献はほとんど得られない。

CAS Registry Number  
64742-16-1

\*Also search references with text terms for complete reference results.

Image Not Available

Unspecified  
Petroleum resins

Polymer Class Terms  
Manual registration

Notes: 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. ← 物質に関する情報