

ポリマー登録ルールの基礎

- REGISTRY ファイル



本日の内容



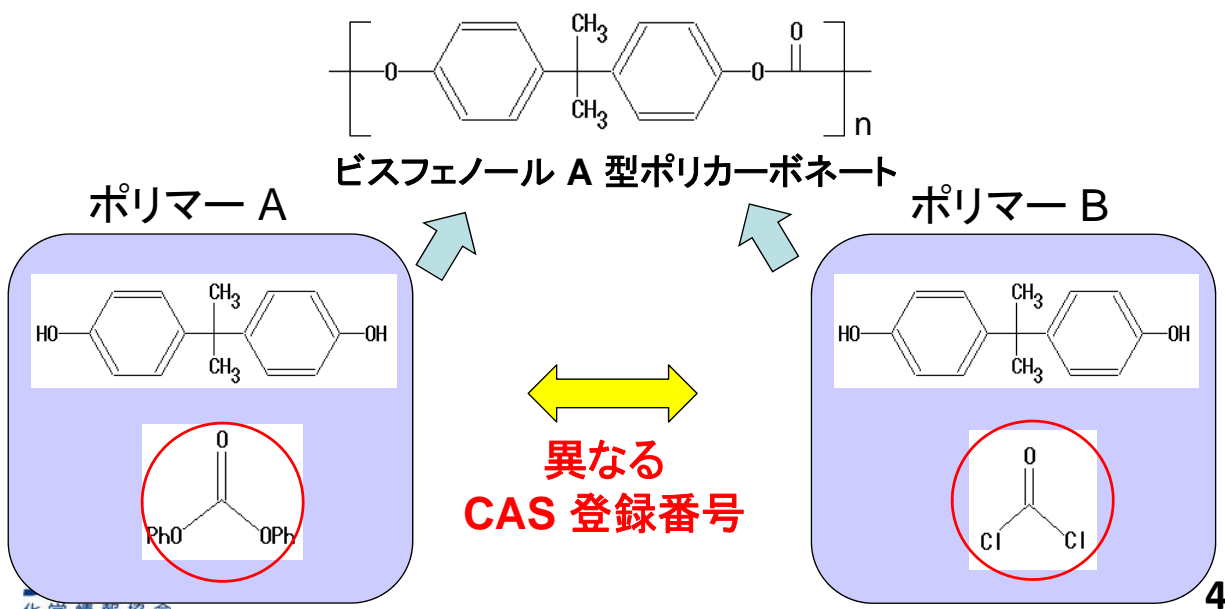
- **ポリマーの定義**
 - どのような物質をポリマーとみなしているのか？
- **登録方針**
 - 異なる CAS 登録番号をつける or つけない
- **登録形式**
 - 構造や分子式の収録ルール

ポリマーの定義

- REGISTRY ファイルでは, 下記の物質をポリマーと定義している
 - 重合度が **11** 以上の物質
 - 重合度が**不明**の物質
 - 重合度が **10** 以下で**重合後の構造が不明な**オリゴマー

ポリマーの登録方針①

- **原料が異なる場合は, 重合後のポリマーが同一**であっても, **異なる CAS 登録番号**が付与される

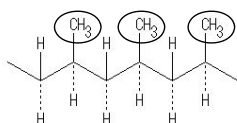


ポリマーの登録方針②

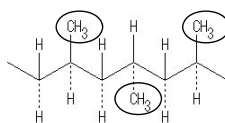
- **立体規則性 (Tacticity)** や重合形態 (ランダム, グラフトなど) が異なる場合は, 異なる CAS 登録番号が付与される

例) ポリプロピレン

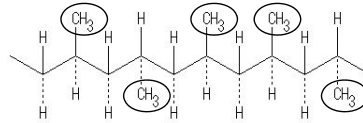
イソタクチック
(Isotactic)



シンジオタクチック
(Syndiotactic)



アタクチック
(Atactic)



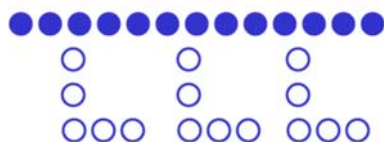
異なる
CAS 登録番号

・ブロック共重合体



* diblock, triblock, tetrablock, pentablock は区別して登録される

・グラフト共重合体



* どのモノマーが主鎖に属するかグラフト鎖に属するかという区別はされない

・交互共重合体



・ランダム共重合体



異なる
CAS 登録番号

- 立体規則性や重合形態は, CA 索引名で
区別できる

例: エチレン – プロピレンコポリマー

IN 1-Propene, polymer with ethene

IN 1-Propene, polymer with ethene, **isotactic**

IN 1-Propene, polymer with ethene, **syndiotactic**

IN 1-Propene, polymer with ethene, **graft**

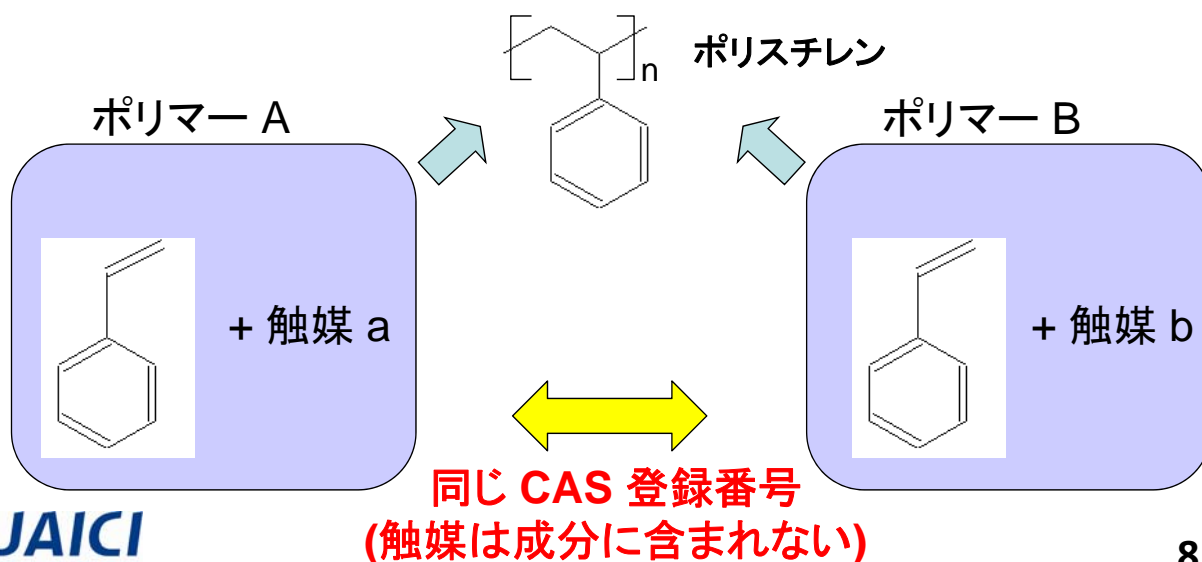
IN 1-Propene, polymer with ethene, **block**

IN 1-Propene, polymer with ethene, **diblock**

IN 1-Propene, polymer with ethene, **isotactic, diblock**

ポリマーの登録方針③

- 重合開始剤や触媒は, 原則として除外
されるため, **開始剤, 触媒のみが異なる**
ポリマーは同じ **CAS 登録番号**となる



ポリマーの登録方針④

- **重合度や分子量, 組成比が異なっても同じ CAS 登録番号が付与される**

数平均分子量 1,000 の
ポリスチレン

数平均分子量 20,000 の
ポリスチレン

同じ CAS 登録番号

エチレン:プロピレン = 3:1 の
エチレン・プロピレンコポリマー

エチレン:プロピレン = 6:1 の
エチレン・プロピレンコポリマー

同じ CAS 登録番号

モノマー単位登録と SRU 登録

- **モノマー単位登録**
 - 原料モノマーを成分として登録
- **SRU 登録 (Structure Repeating Unit)**
 - ポリマーの繰り返し構造で登録

モノマー単位ポリマーのレコード例

RN 26062-94-2 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, **polymer with** 1,4-butanediol
 (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN 1,4-Butanediol, polyester
 :
MF (C8 H6 O4 . C4 H10 O2)x
CI PMS, COM クラス識別子
PCT Polyester, Polyester formed
 : ポリマー分類用語

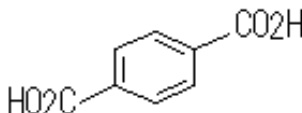
ホモポリマーの場合 : (モノマーの分子式) x

コポリマーの場合 :
 (モノマー 1 の分子式. モノマー 2 の分子式) x

CM 1
CRN 110-63-4
CMF C4 H10 O2

 $\text{HO}-(\text{CH}_2)_4-\text{OH}$

CM 2
CRN 100-21-0
CMF C8 H6 O4





**モノマーの CAS 登録番号
 や構造から検索できる!**

SRU 登録ポリマーのレコード例

RN 24968-12-5 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Poly(oxy-1,4-butanediylloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)
 (CA INDEX NAME)
 OTHER NAMES:
 CN 1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate copolymer, SRU

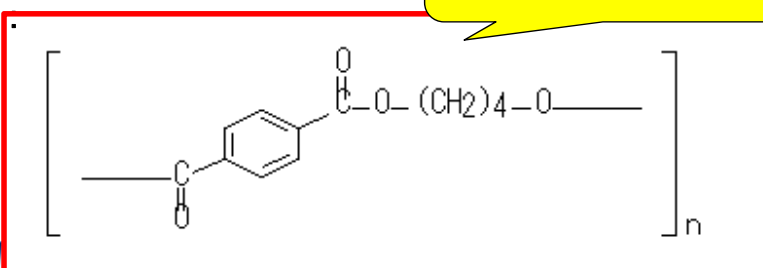
MF (C12 H12 O4)_n

(繰り返し単位部分の分子式)_n

CI PMS

PCT Polyester

繰り返し単位の構造



ポリマーの種類と登録形式

ポリマーの種類		登録形式	
		モノマー単位	SRU
付加重合系ポリマー		○	×
縮合系ポリマー	ホモポリマー	○	○
	対称な構造の2種のモノマーから成る	○	○
	5種の汎用ポリマー*	△	○
	上記以外(非対称2種のモノマーから成る場合など)	○	×

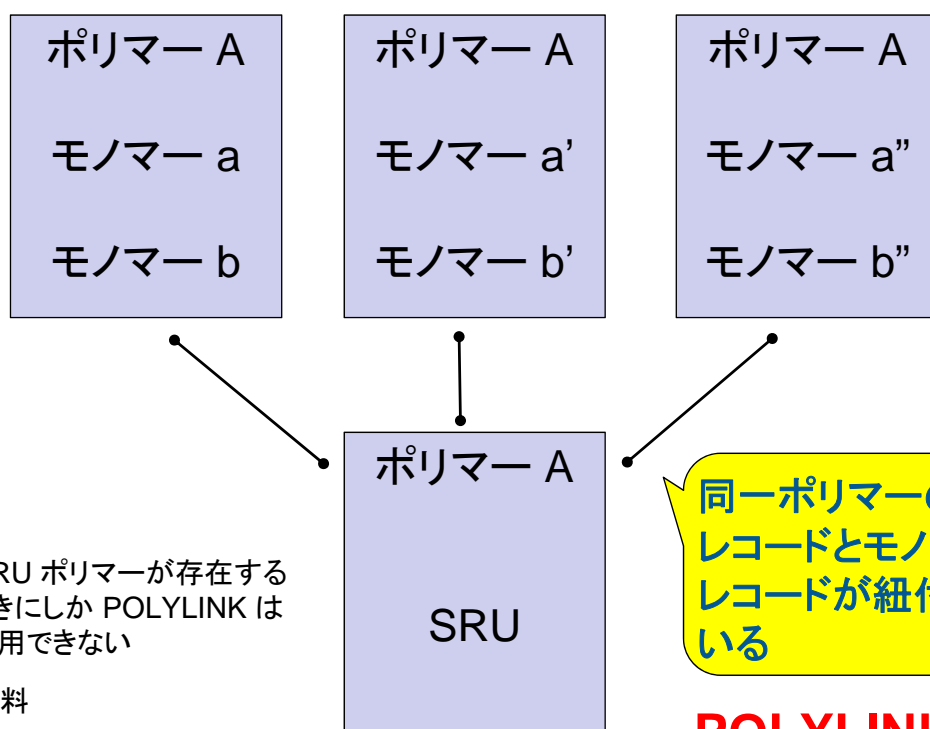
* Nylon 6, Nylon66, PET (Poly (ethylene terephthalate)), PEG (Polyethylene glycol), PPG (Polypropylene glycol)

ポリマーの種類と登録形式

ポリマーの種類	登録形式	
	モノマー単位	SRU
	○	×
ホモポリマー	○	○
対称な構造の2種のモノマー	○	○
一部の縮合系ポリマーについては SRU 登録も存在する	△	○
その他(非対称な構造の2種のモノマーから成る場合など)	○	×

* Nylon 6, Nylon66, PET (Poly (ethylene terephthalate)), PEG (Polyethylene glycol), PPG (Polypropylene glycol)

POLYLINK



* SRU ポリマーが存在するときにしか POLYLINK は利用できない

* 有料

POLYLINK コマンド
で集められる!

ポリマー検索のポイント

付加重合系ポリマー
(ビニルポリマー, アクリル樹脂など)

➡ モノマーから検索

縮合系ポリマー
(ポリエステル, ポリアミド, ポリウレタンなど)

➡ モノマーから検索



POLYLINK で同一ポリマー
を集める

【検索例】

- ポリブチレンテレフタレート (PBT) を
REGISTRY ファイルで探す
 - 一般的なモノマーであるブチレングリコール
(RN110-63-4) とテレフタル酸 (RN100-21-0)
から探す
 - POLYLINK で同一のポリマーを集める

デモ画面でご紹介します



まとめ

- 同じポリマーでも REIGSTRY ファイルに別の CAS 登録番号で登録される場合がある
- モノマー単位で登録される場合と繰り返し単位 (SRU) で登録される場合がある
- SRU 登録も存在する縮合系ポリマーの場合, POLYLINK が便利



参考資料

- ポリマー検索 - 応用
<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-polymer.pdf>
- 2009 年 STN 特許情報セミナー
http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/patent_200911.pdf

【検索例】

ポリブチレンテレフタレート (PBT) を REGISTRY ファイルで探す

- 一般的なモノマーであるブチレングリコール (RN110-63-4) とテレフタル酸 (RN100-21-0) から探す
- POLYLINK で同一のポリマーを集める

=> FILE REGISTRY

=> S 110-63-4/CRN
L1 24966 110-63-4/CRN

モノマーの CAS 登録番号を成分 CAS 登録番号 (/CRN) フィールドで検索する

=> S 100-21-0/CRN
L2 30533 100-21-0/CRN

=> S L1 AND L2
L3 3147 L1 AND L2

L1 と L2 をかけ合わせる

=> S L3 AND 2/NC
L4 4278045 2/NC
3 L3 AND 2/NC

件数が多いので、成分数 (/NC) フィールドで 2 成分に限定する

=> D SCAN

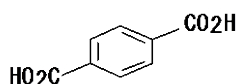
SCAN 表示形式で回答を確認

L4 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2012 ACS on STN
IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, compd. with 1,4-butanediol (1:1)
MF C8 H6 O4 . C4 H10 O2

CM 1

HO—(CH₂)₄—OH

CM 2



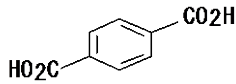
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 2

L4 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2012 ACS on STN
IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, ester with 1,4-butanediol
MF C8 H6 O4 . x C4 H10 O2

CM 1

HO—(CH₂)₄—OH

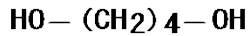
CM 2



L4 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2012 ACS on STN
 IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-butanediol
 MF (C8 H6 O4 . C4 H10 O2)x
 CI PMS, COM

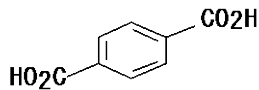
RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1



目的のレコード

CM 2



名称で検索しなおして、目的のレコードのみの回答集合を作成する

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> S 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-butanediol /CN
 L5 1 "1,4-BENZENEDICARBOXYLIC ACID, POLYMER WITH 1,4-BUTANEDIOL"/CN

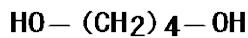
=> D SCAN

L5 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2012 ACS on STN
 IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-butanediol
 MF (C8 H6 O4 . C4 H10 O2)x
 CI PMS, COM

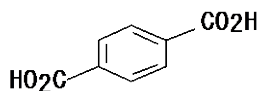
RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

レコード中にこの記載がある場合 POLYLINK で同一ポリマーを集めることができる

CM 1



CM 2



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> POLYLINK L5 ● POLYLINK を実行する

L6 17 POLYLINK L5

17

同一ポリマーがほかに 16 件存在していた

=> D SCAN

POLYLINK で集めることができたレコードを SCAN
表示形式で確認

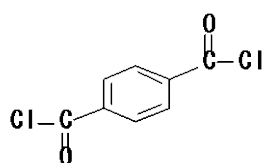
L6 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2012 ACS on STN
IN 1,4-Benzenedicarbonyl dichloride, polymer with 1,4-butanediol
MF (C8 H4 Cl2 O2 . C4 H10 O2)x
CI PMS, COM

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1

HO—(CH₂)₄—OH

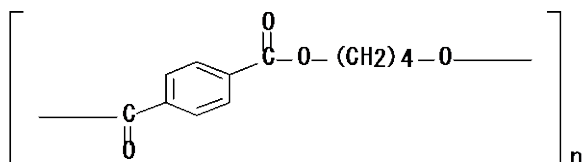
CM 2



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1) : 4

L6 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2012 ACS on STN
IN Poly(oxy-1,4-butanediyl oxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT
MF (C12 H12 O4)_n
CI PMS

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



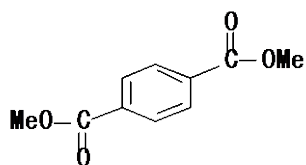
SRU 登録ポリマー

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

L6 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2012 ACS on STN
IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, 1,4-dimethyl ester, polymer with
1,4-butanediol
MF (C10 H10 O4 . C4 H10 O2)x
CI PMS, COM

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1



CM 2

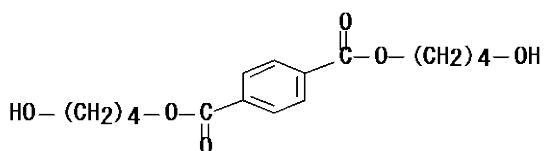
HO—(CH₂)₄—OH

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

L6 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2012 ACS on STN
 IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, bis(4-hydroxybutyl) ester, homopolymer (9CI)
 MF (C16 H22 O6)x
 CI PMS, COM

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1



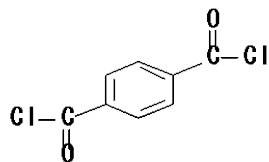
L6 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2012 ACS on STN
 IN 1,4-Benzenedicarbonyl dichloride, polymer with 1,4-butanediol
 MF (C8 H4 Cl2 O2 . C4 H10 O2)x
 CI PMS, COM

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1

HO—(CH₂)₄—OH

CM 2



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