

ポリマー登録ルールの基礎

- REGISTRY ファイル



本日の内容



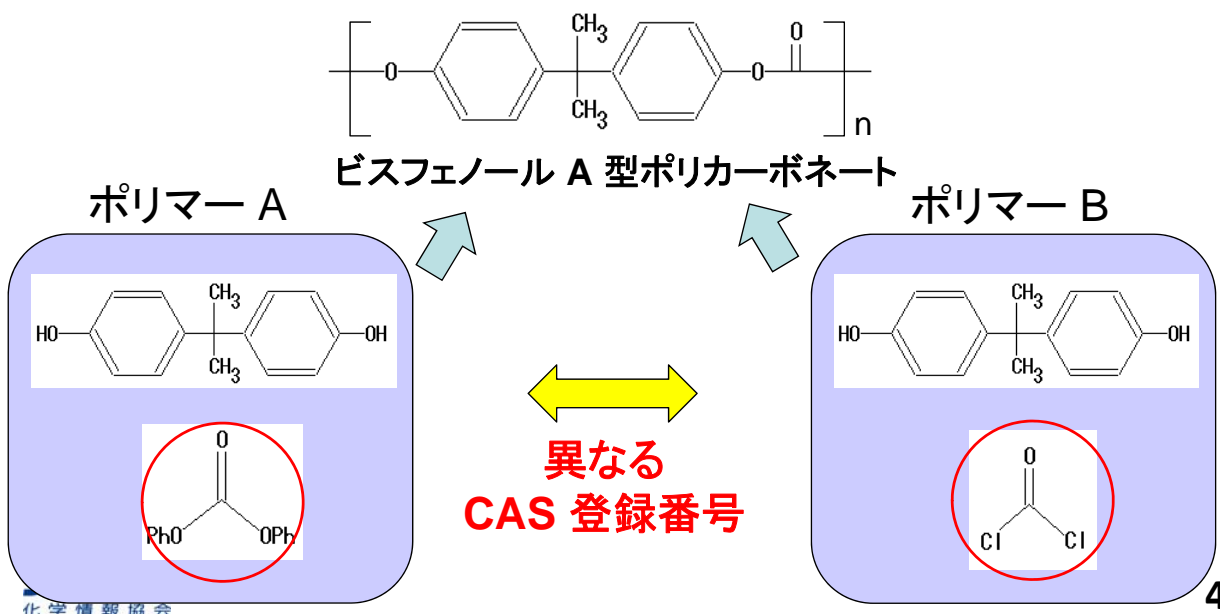
- **ポリマーの定義**
 - どのような物質をポリマーとみなしているのか？
- **登録方針**
 - 異なる CAS 登録番号をつける or につけない
- **登録形式**
 - 構造や分子式の収録ルール

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

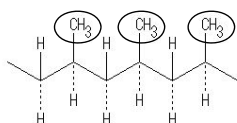


ポリマーの登録方針②

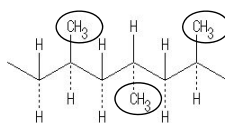
- **立体規則性 (Tacticity)** や重合形態 (ランダム, グラフトなど) が異なる場合は, 異なる CAS 登録番号が付与される

例) ポリプロピレン

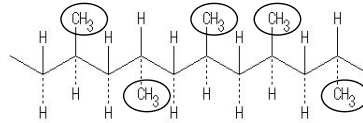
イソタクチック
(Isotactic)



シンジオタクチック
(Syndiotactic)



アタクチック
(Atactic)



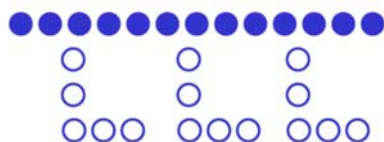
異なる
CAS 登録番号

・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

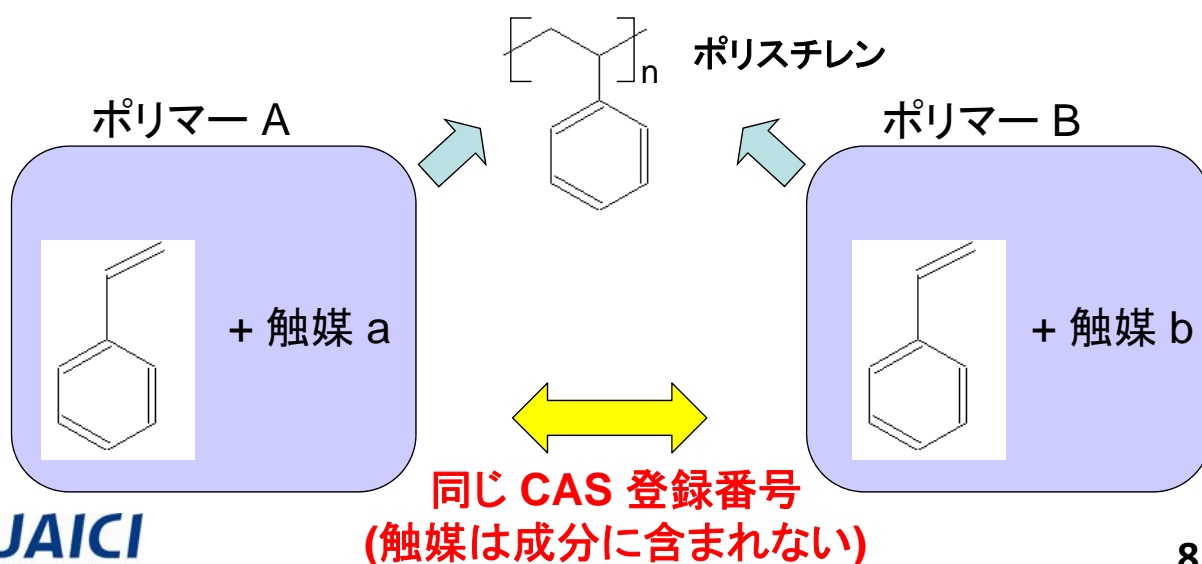
- 立体規則性や重合形態は, CA 索引名で
区別できる

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

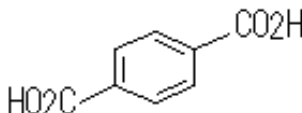
ホモポリマーの場合 : (モノマーの分子式) x

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





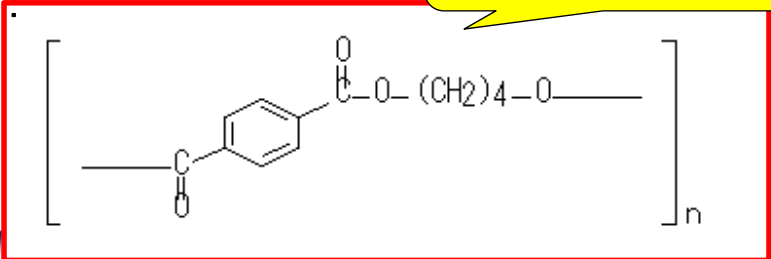
**モノマーの CAS 登録番号
 や構造から検索できる!**

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)	○	×

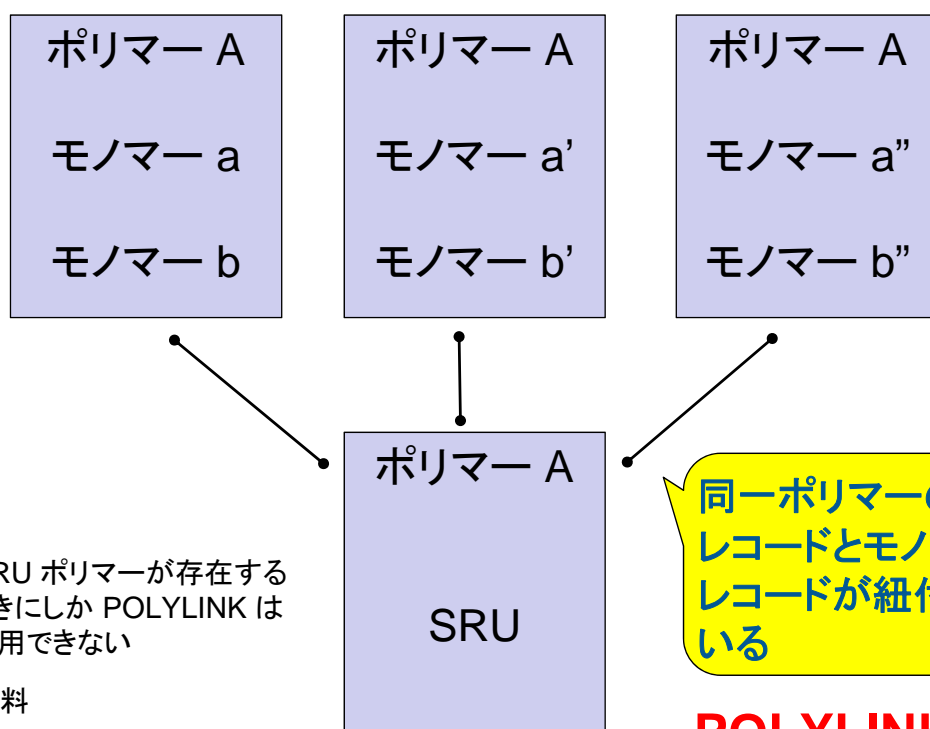
* Nylon 6, Nylon66, PET (Poly (ethylene terephthalate)), PEG (Polyethylene glycol), PPG (Polypropylene glycol)

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 (無料)

=> 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 (705 円)

=> D SCAN

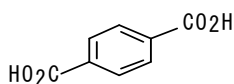
● ●
SCAN 表示形式で回答を確認

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



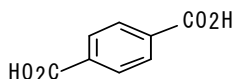
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):2

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

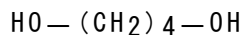
CM 2



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

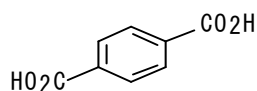
RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

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 (705 円)

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

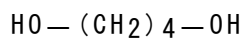
=> D SCAN

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

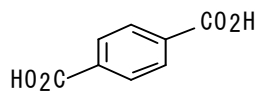
RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

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 (3,920 円)

L6 17 POLYLINK L5

同一ポリマーがほかに 16 件存在していた

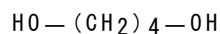
=> D SCAN

POLYLINK で集めることができたレコードを SCAN
表示形式で確認

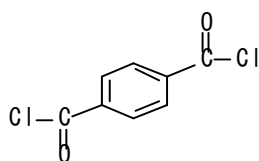
L6 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2012 ACS on STN
IN 1,4-Benzenedicarbonyl dichloride, polymer with 1,4-butanediol
MF (C8 H4 Cl2 O2 . C4 H10 O2)x
CI PMS, COM

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1



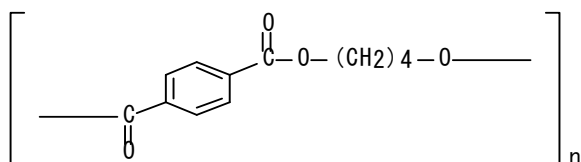
CM 2



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-butanedioloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT
MF (C12 H12 O4)n
CI PMS

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



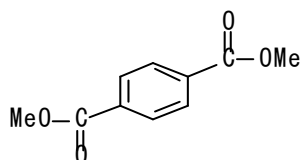
SRU 登録ポリマー

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

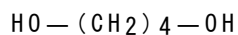
L6 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2012 ACS on STN
IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, 1,4-dimethyl ester, polymer with
1,4-butanediol
MF (C10 H10 O4 . C4 H10 O2)x
CI PMS, COM

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1



CM 2

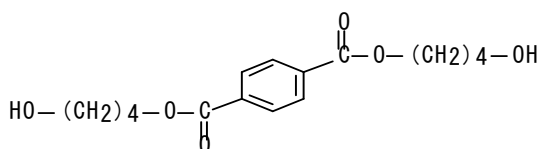


PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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



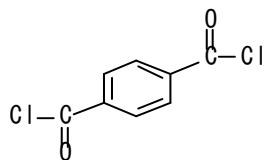
L6 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2012 ACS on STN
 IN 1,4-Benzenedicarbonyl dichloride, polymer with 1,4-butanediol
 MF (C8 H4 Cl2 O2 . C4 H10 O2)x
 CI PMS, COM

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1



CM 2



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