STN インターネットセミナー

REGISTRY –
分子式関連情報の検索

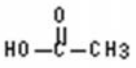
JAICI
化学情報協会

2014 年 10 月

REGISTRY ファイルの分子式情報

RN　5153-63-9　REGISTRY
ED　Entered STN:　16 Nov 1984
CN　Acetic acid, compd. with pyridine (1:1)　(CA INDEX NAME)
　　:
MF　C5 H5 N . C2 H4 O2
　　:
CM　1
CRN　110-86-1
CMF　C5 H5 N

CM　2
CRN　64-19-7
CMF　C2 H4 O2



　　:

完全分子式 C5H5N. C2H4O2

部分分子式 C5H5N
C2H4O2

分子式検索

N を含む物質

2 成分から成る物質

分子式関連
情報検索

本日の内容

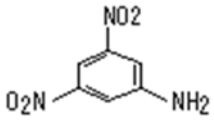
- 分子式の収録
- 物質 / 成分 について
- 分子式関連情報の検索
- 検索例

JAICI 化学情報協会

分子式の収録

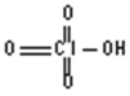
◆ 有機化合物（単成分）

RN　618-87-1　REGISTRY
ED　Entered STN:　16 Nov 1984
CN　Benzenamine, 3,5-dinitro-　(CA INDEX NAME)
　　:
MF　C6 H5 N3 O4
CI　COM
　　:



◆ 無機化合物

RN　7601-90-3　REGISTRY
ED　Entered STN:　16 Nov 1984
CN　Perchloric acid　(CA INDEX NAME)
　　:
MF　Cl H O4
CI　COM
　　:



炭素を含む物質
→ ① 炭素
② 水素
③ その他の元素（アルファベット順）

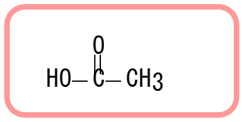
炭素を含まない物質
→ すべての元素のアルファベット順

JAICI 化学情報協会

分子式の収録

◆ 金属塩

RN　127-09-3　REGISTRY
ED　Entered STN:　16 Nov 1984
CN　Acetic acid, sodium salt (1:1) (CA ...)
　　:
MF　C2 H4 O2 . Na
CI　COM
　　:
CRN (64-19-7)



成分 1

● Na

成分 2

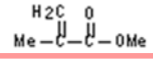
複数の成分からなる物質
(= **多成分物質**) として収録

◆ ポリマー (モノマー単位, コポリマー)

RN　25014-10-2　REGISTRY
ED　Entered STN:　16 Nov 1984
CN　2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene　(CA INDEX NAME)
　　:
MF　(C5 H8 O2 . C5 H8)x
CI　PMS
PCT　Polyacrylic, Polyolefin

CM　1

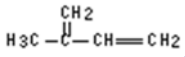
CRN　80-62-6
CMF　C5 H8 O2



成分 1

CM　2

CRN　78-79-5
CMF　C5 H8



成分 2

分子式の収録

◆ 無機化合物 (表形式)

RN　12024-22-5　REGISTRY
ED　Entered STN:　16 Nov 1984
CN　Gallium sulfide (Ga2S3)　(CA INDEX NAME)
　　:
MF　Ga . S
AF　Ga2 S3
CI　COM, TIS
　　:

Component	Ratio	Component Registry Number
成分 1		
S	3	7704-34-9
Ga	2	7440-55-3
成分 2		

◆ 合金

RN　244153-61-5　REGISTRY
ED　Entered STN:　13 Oct 1999
CN　Iron alloy, base, Fe 70-97,Al 3-30 (9CI)...
MF　Al . Fe
CI　AYS
　　:

Component	Component Percent	Component Registry Number
成分 1		
Fe	70 - 97	7439-89-6
Al	3 - 30	7429-90-5
成分 2		

複数の成分からなる物質
(= **多成分物質**) として収録

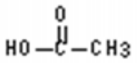
成分と物質

RN　5153-63-9　REGISTRY
ED　Entered STN:　16 Nov 1984
CN　Acetic acid, compd. with pyridine (1:1)　(CA INDEX NAME)

MF　C5 H5 N . C2 H4 O2

CM　1
CRN　110-86-1
CMF　C5 H5 N

CM　2
CRN　64-19-7
CMF　C2 H4 O2



分子式 C5H5N と C2H4O2 の 2 成分から成る物質
=> S C5H5N.C2H4O2/MF

分子式 C5H5N の成分を含む物質
=> S C5H5N　（基本索引で検索）

分子式 C2H4O2 の成分を含む物質
=> S C2H4O2　（基本索引で検索）

JAICI 化学情報協会

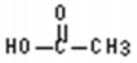
分子式関連情報

RN　5153-63-9　REGISTRY
ED　Entered STN:　16 Nov 1984
CN　Acetic acid, compd. with pyridine (1:1)　(CA INDEX NAME)

MF　C5 H5 N . C2 H4 O2

CM　1
CRN　110-86-1
CMF　C5 H5 N

CM　2
CRN　64-19-7
CMF　C2 H4 O2



N を含む成分を有する物質

C と H と O から成る成分を有する物質

2 成分から成る物質

4 つの異なる原子から成る物質 (C, H, N, O)

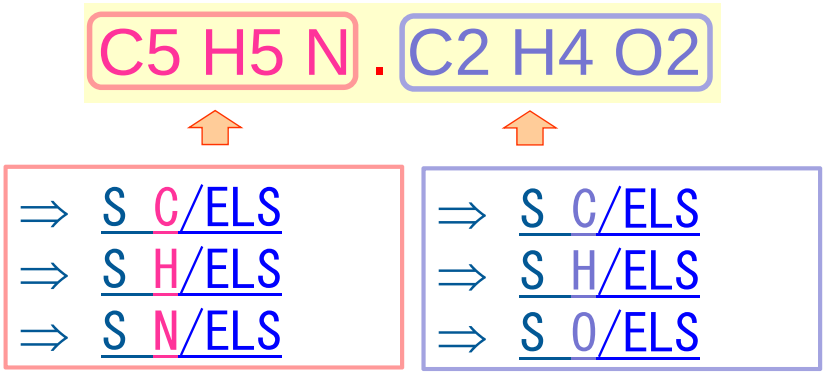
分子式関連情報検索

JAICI 化学情報協会

元素種 <ELS>

成分

- 各成分の特定元素，一般元素 (X, M) の存在

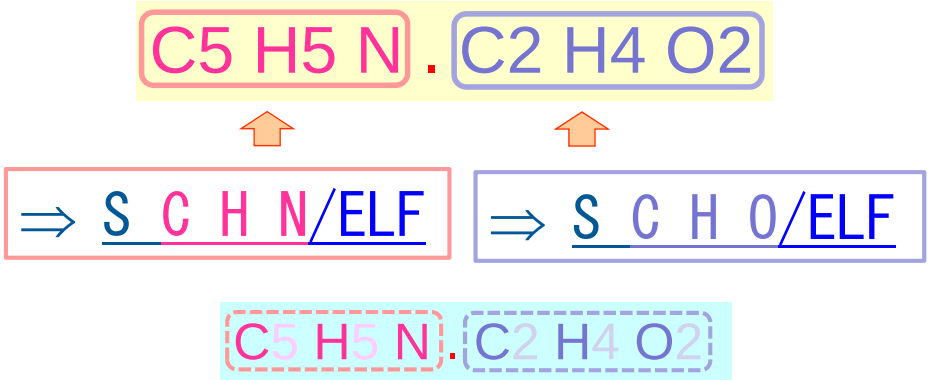


- X：ハロゲン，M：金属 を指定した検索も可能

元素式 <ELF>

成分

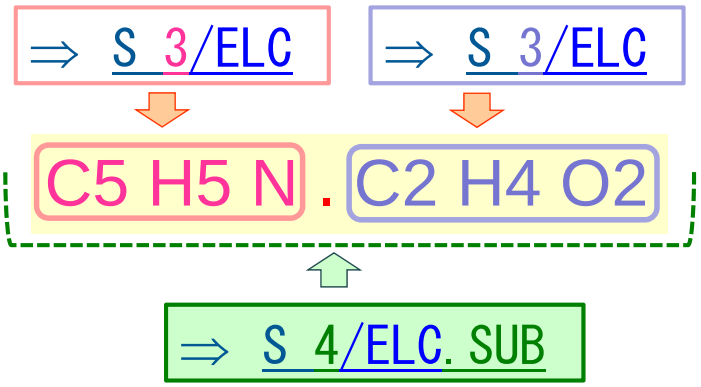
- 各成分の構成元素
(分子式から数値を除いたデータ)



元素数 <ELC, ELC.SUB>

成分　全体

- 異なる元素の種類数
  - ELC：各成分 / ELC.SUB ： 物質全体

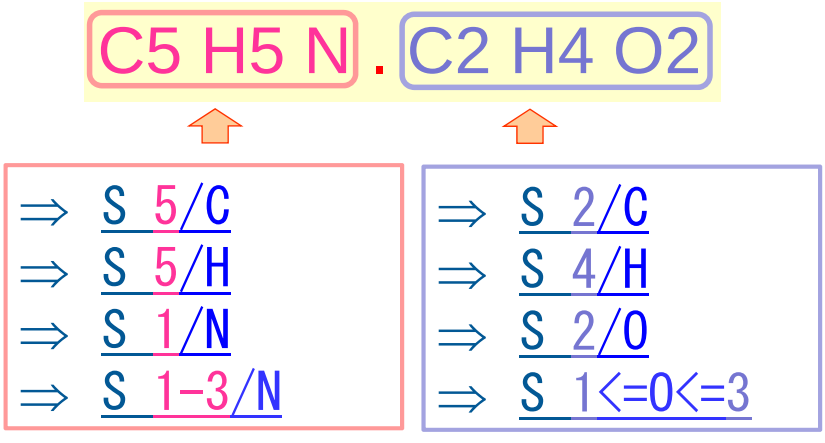


  - 数値検索フィールド

特定元素数 <元素記号>

成分

- 各成分の特定元素，一般元素 (X, M) の数



  - X：ハロゲン，M：金属 を指定した検索も可能
  - 数値検索フィールド

成分数 <NC>

全体

- 物質全体の成分数 (= ピリオドの数 +1)

C5 H5 N . C2 H4 O2

⇒ S 2/NC
⇒ S 1-3/NC
⇒ S 3>=NC

- 数値検索フィールド

JAICI 化学情報協会

成分同士の演算

- (P) 演算子 : 同一成分中に限定

C5 H5 N (P) . C2 H4 O2 (P)

AND

⇒ S 5/C (P) 5/H ← ヒットする
⇒ S 5/C (P) 4/H ← ヒットしない

⇒ S N/ELS (P) O/ELS ← ヒットしない
⇒ S N/ELS AND O/ELS ← ヒットする

JAICI 化学情報協会

検索例 1

- 下記の条件を満たす物質検索
  - 炭素，水素，リンのみから成る成分（成分 A）を含む物質
    - /ELF
  - 成分 A は 3 つ以上のリンを含む
    - /元素記号，(P) 演算子

JAICI 化学情報協会

検索例 2

- 触媒として酸化インジウムを用いている文献検索

ポイント

- 網羅的な無機化合物の検索

  => S <構成元素>/ELS AND <物質中の元素数>/ELC.SUB

  <参考> 酸化インジウムの収録
  ① $In_x O_y$　　② In. O (表形式化合物)

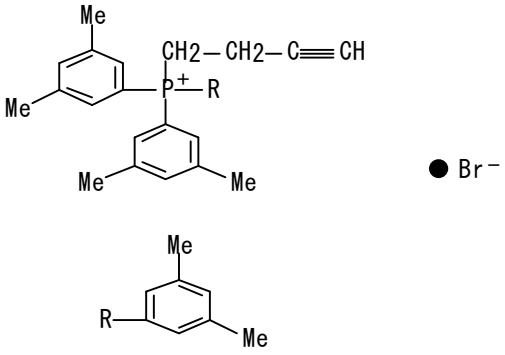
- CAS ロール：CAT (触媒用途，1967 年以降)

JAICI 化学情報協会

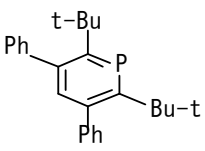
■ 検索例 1 : 下記の条件を満たす物質検索

・ 炭素, 水素, リンのみから成る成分（成分 A）を含む物質.
・ 成分 A は 3 つ以上のリンを含む.

```
=> FILE REGISTRY

=> E C H P/ELF
E1            2     C H OS SN/ELF
E2            1     C H OS TH/ELF
E3        44683 --> C H P/ELF
E4            1     C H P . BR/ELF
E5            2     C H P . C H/ELF
E6            1     C H P . C H CL . C H O . CL/ELF
E7            1     C H P . C H N/ELF
E8            1     C H P . C H N . CL/ELF
E9            1     C H P . C H N O . BR . CL H/ELF
E10           1     C H P . C H N O . C H O . BR/ELF
E11           1     C H P . C H N O . CL/ELF
E12           1     C H P . C H O . C H O/ELF

=> S E3
L1        44683 "C H P"/ELF

=> D SCAN

L1   44683 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN   Phosphonium, 3-butyn-1-yltris(3,5-dimethylphenyl)-, bromide (1:1)
MF   C28 H32 P . Br
```




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

L1   44683 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN   Phosphorin, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-3,5-diphenyl-
MF   C25 H29 P
```



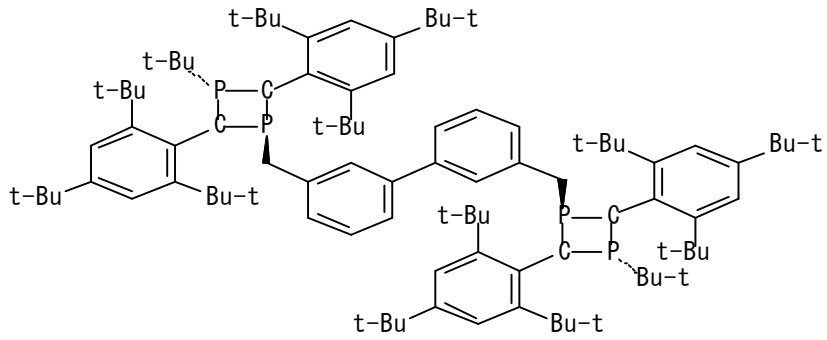

```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

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

=> S L1 (P) 3<=P
L2 3292 L1 (P) 3<=P

=> D SCAN

L2 3292 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN 1,3-Diphosphetane-2,4-diyl, 1,1'-[[1,1'-biphenyl]-3,3'-diylbis(methylene)]bis[3-(1,1-dimethylethyl)-2,4-bis[2,4,6-tris(1,1-dimethylethyl)phenyl]-, (trans,trans)-
MF C98 H146 P4

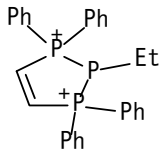
Relative stereochemistry.



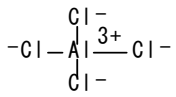
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L2 3292 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN 1H-1,2,3-Triphospholium, 2-ethyl-2,3-dihydro-1,1,3,3-tetraphenyl-, (T-4)-tetrachloroaluminate(1-) (1:2)
MF C28 H27 P3 . 2 Al Cl4

CM 1



CM 2



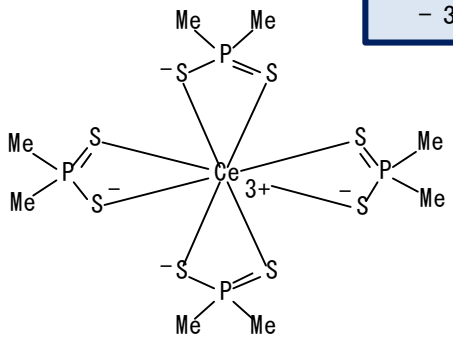
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

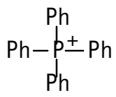
・ <参考>(P) 演算子ではなく, AND 演算した場合

```
=> S L1 AND 3<=P
L3          3517 L1 AND 3<=P

=> S L3 NOT L2
L4           225 L3 NOT L2

=> D SCAN

L4   225 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN   Phosphonium, tetraphenyl-, (DD-8-111''1''1'1'1'''1''')-
     tetrakis(dimethylphosphinodithioato-S,S')cerate(1-) (9CI)
MF   C24 H20 P . C8 H24 Ce P4 S8

     CM   1
```

＊ 下記の 2 条件が別成分である物質もヒット
- 炭素, 水素, リンのみから成る成分
- 3 つ以上のリンを含む




```
     CM   2
```




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

■ 検索例 2 : 触媒として酸化インジウムを用いている文献検索

```
=> FILE REGISTRY

=> S (IN AND O)/ELS AND 2/ELC.SUB
L1          113 (IN AND O)/ELS AND 2/ELC.SUB

=> D SCAN

L1   113 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN   Indium oxide (InO0.95)
MF   In . O
CI   TIS

  Component   |       Ratio
==============+====================
O             |        0.95
In            |         1

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):3

L1   113 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN   Indium(1+), oxopenta- (9CI)
MF   In . O
CI   TIS

  Component   |       Ratio
==============+====================
O             |         1
In            |         5


L1   113 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN   Indium oxide (InO2.56)
MF   In . O
CI   TIS

  Component   |       Ratio
==============+====================
O             |        2.56
In            |         1


L1   113 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN   Indium oxide (In2O3)
MF   In2 O3
CI   COM, MAN

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

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

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

=> FILE CAPLUS

=> S L1/CAT
L2          996 L1/CAT
                (L1 (L) CAT/RL)
```

=> D SCAN TI HITIND

L2 996 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2014 ACS on STN
TI Photochemically deposited nano-Ag/sol-gel TiO2-In2O3 mixed oxide mesoporous-assembled nanocrystals for photocatalytic dye degradation
TIJP 光触媒色素分解のための光化学的に堆積ナノ- Ag /ゾル - ゲルの TiO2-In2O3 の複合酸化物の中間多孔性組み立てナノ結晶 [機械翻訳]
IT 1312-43-2P, Indium oxide (In2O3) 7440-22-4P, Silver, properties 13463-67-7P, Titanium oxide (TiO2), properties
    RL: CAT (Catalyst use); NANO (Nanomaterial); PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); USES (Uses)
    (photocatalytic degradation of congo red by titania-indium oxide mesoporous nanocomposite loaded with silver nanoparticles)

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

L2 996 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2014 ACS on STN
TI Synthesis of CNT/In2O3 nanocomposite by sol-gel method and its photocatalytic property
TIJP ゾル - ゲル法とその光触媒特性による CNT/In2O3 ナノ複合材料の合成 [機械翻訳]
IT 1312-43-2P, Indium oxide
    RL: CAT (Catalyst use); NANO (Nanomaterial); PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); USES (Uses)
    (synthesis of CNT/In2O3 nanocomposite by sol-gel method and its photocatalytic property)

L2 996 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2014 ACS on STN
TI Method for manufacturing metal-doped In2O3 composite
TIJP メタルドープ In2O3 複合体を製造するための方法 [機械翻訳]
IT 1312-43-2, Indium trioxide
    RL: CAT (Catalyst use); PEP (Physical, engineering or chemical process); PROC (Process); USES (Uses)
    (preparation of metal-doped In2O3 composite catalyst for synthesis of propene from ethanol)

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

=> D BIB ABS HITIND 1-4

L2 ANSWER 1 OF 996 CAPLUS COPYRIGHT 2014 ACS on STN
AN 2014:1597280 CAPLUS Full-text
TI Superhydrophilic coating composition
TIJP 超親水性の被覆組成 [機械翻訳]
IN Shi, Jinzhen; Tarng, Ming-Ren; Li, Jigui; Zhou, Shuxue; Wu, Limin; Yang, Ling
PA Behr Process Corporation, USA
SO PCT Int. Appl., 27pp.
    CODEN: PIXXD2
DT Patent
LA English
FAN.CNT 2

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2014149916	A1	20140925	WO 2014-US21511	20140307

W: AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW

RW: AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR,

HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS,
SE, SI, SK, SM, TR, BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM,
ML, MR, NE, SN, TD, TG, BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW,
SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW, AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM

US 20140275374 A1 20140918 US 2013-13838501 20130315

PRAI US 2013-13838501 A 20130315

ASSIGNMENT HISTORY FOR US PATENT AVAILABLE IN LSUS DISPLAY FORMAT

AB Disclosed is a composition for forming a hydrophilic coating includes an organic binder having an average particle size from about 1 to about 100 nm and an inorg. binder having an average particle size from about 1 to about 40 nm. The composition further includes an inorg. photocatalyst that catalyzes an oxidation-reduction reaction.

:

IPCI C09D0001-12 [I]; C08K0003-00 [I]

CC 42-10 (Coatings, Inks, and Related Products)

IT 1306-38-3, Cerium oxide (CeO2) 1309-48-4, Magnesium oxide 1309-64-4, Antimony oxide (Sb2O3) **1312-43-2**, Indium oxide (In2O3) 1313-96-8, Niobium oxide (Nb2O5) 1314-13-2, Zinc oxide 1314-23-4, Zirconium oxide (ZrO2) 1317-36-8, Lead oxide (PbO) 1317-61-9, Iron oxide (Fe3O4) 1332-29-2, Tin oxide 1344-28-1, Aluminum oxide 10101-39-0

RL: **CAT (Catalyst use)**; USES (Uses)

(superhydrophilic coating composition)

:

L2 ANSWER 4 OF 996 CAPLUS COPYRIGHT 2014 ACS on STN

AN 2014:1427521 CAPLUS Full-text

TI A universal method to form Pd nanoparticles on low-surface-area inorganic powders and their support-dependent catalytic activity in hydrogenation of maleic acid

TIJP マレイン酸の水素化で低表面積無機粉末とそれらの支持体依存する触媒活性に Pd ナノ粒子を形成するための普遍的方法 [機械翻訳]

AU Kulagina, M. A.; Gerasimov, E. Yu.; Kardash, T. Yu.; Simonov, P. A.; Romanenko, A. V.

CS Novosibirsk State University, Novosibirsk, 630090, Russia

SO Catalysis Today (2014) Ahead of Print

CODEN: CATTEA; ISSN: 0920-5861

DOI 10.1016/j.cattod.2014.07.048

PB Elsevier B.V.

DT Journal

LA English

AB A simple method for preparation of Pd catalysts supported on low-surface-area inorg. powders as carbons, oxides (SiO2, diatomites, WO3, Ta2O5, Nb2O5, V2O5, TiO2, CeO2, ZrO2, Ga2O3, In2O3, Cr2O3, Fe2O3, Al2O3) and salts (CaF2, BaSO4, Ca3(PO4)2) was developed. It implies hydrolytic deposition of Pd(II) precursors onto a support in basic solns. Regularities of the hydrolysis process without and in the presence of the support are studied by various physicochem. methods. A scheme of the formation of catalytically active component was put forward. Reduced with H2 at 50-120 °C, the palladium catalysts

:

CC 45-4 (Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats, and Waxes)

IT 1306-38-3, Cerium oxide (CeO2) 1308-38-9, Chromium oxide (Cr2O3) 1309-37-1, Ferric oxide **1312-43-2**, Indium oxide (In2O3) 1313-96-8, Niobium oxide (Nb2O5) 1314-23-4, Zirconium oxide (ZrO2) 1314-35-8, Tungsten oxide (WO3) 1314-61-0, Tantalum oxide (Ta2O5) 1314-62-1, Vanadium oxide (V2O5) 1344-28-1, Alumina 7440-05-3, Palladium 7631-86-9, Silica 7727-43-7, barium sulfate (BaSO4) 7789-75-5, Calcium fluoride (CaF2) 12024-21-4, Gallium oxide (Ga2O3) 13463-67-7, Titanium oxide (TiO2) 53572-14-8, Phosphorus oxide (PO4)

RL: **CAT (Catalyst use)**; USES (Uses)

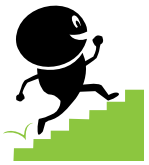
(universal method to form Pd nanoparticles on low-surface-area inorg. powders and their support-dependent catalytic activity in hydrogenation of maleic acid)

RE.CNT 17 THERE ARE 17 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD

ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

まとめ

- 分子式の情報は，物質単位（/MF）
  および成分単位（基本索引）で検索できる
- 分子式だけでなく，分子式に含まれる
  構成元素や数などの情報も検索できる
- (P) 演算子で演算すると，同一成分中に
  限定した検索ができる



JAICI 化学情報協会

参考資料

- 化学物質検索Ⅰ － 基礎
  http://www.jaici.or.jp/
- 化学物質検索Ⅲ
  http://www.jaici.or.jp/stn/ref-substance.pdf
- REGISTRY 検索テクニック 2013
  http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-reg2013.pdf

JAICI 化学情報協会