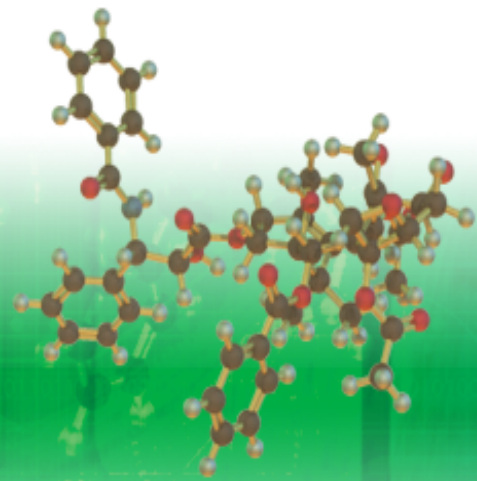
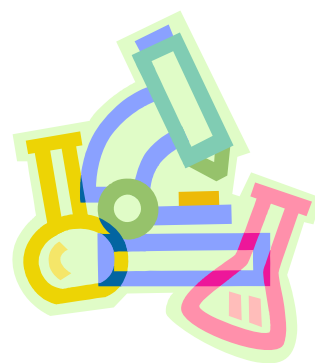




JAICI 社団法人 化学情報協会



STN おさらいセミナー 基礎からの REGISTRY



2011 年 2 月

本日の内容

- **REGISTRY ファイルの概要**
- **特定の化学物質検索**
- **多成分物質検索**
- **誘導体検索**



本日の内容

- **REGISTRY ファイルの概要**
- 特定の化学物質検索
- 多成分物質検索
- 誘導体検索



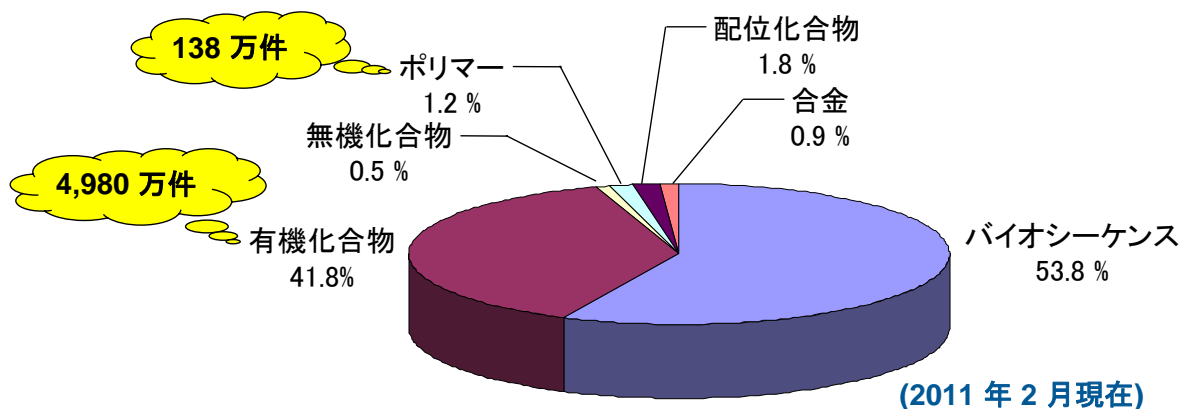
REGISTRY ファイルとは

- **化学物質情報** (CAS 登録番号, 分子式, 名称, 構造など) を収録
- **物性データ** (予想値, 実測値, 参照文献タグ, スペクトルデータ) を収録
 - 製作機関 : CAS (Chemical Abstracts Service)
 - 収録期間 : 1907 年~



REGISTRY ファイルの収録化合物

- 収録件数 : **約 1 億 1,800 万件**
 - 更新は毎日
- 収録されている化合物の種類



REGISTRY ファイルの収録源 - 1

- **Chemical Abstracts (CAplus ファイル) に索引されているすべての特定化学物質**
- **CASREACT ファイルに収録されている反応中の反応関与物質**
- **米国 (TSCA), カナダ (DSL, NDSL), EC (EINECS) の化学物質規制法に基づく既存化学物質リストに収載された物質**
- **公的機関や企業からの依頼により CAS 登録番号を付与した物質 (CAS 登録番号サービス)**



REGISTRY ファイルの収録源 - 2

- **登録システムの開始時に各種ハンドブック類から収載された化学物質**
 - Merck Index, Color Index など
- **化合物ライブラリー (CHEMCATS ファイル) から登録された化学物質**
- **Web 上で報告された他のデータベースからの化学物質情報**
 - ChemBank , ChemSpider など



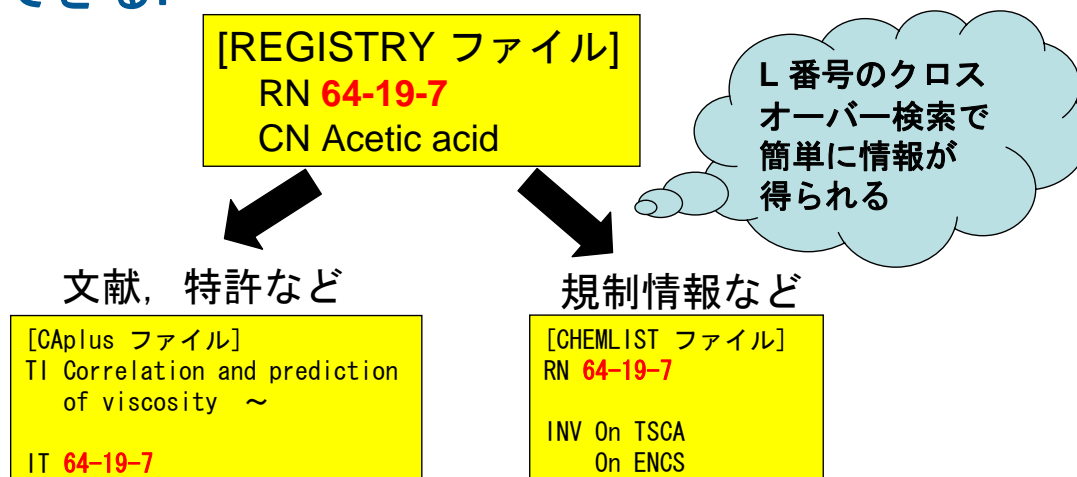
REGISTRY ファイルの特徴 - 1

- 収録されているすべての化学物質に CAS 登録番号が付与されている。
 - CAS 登録番号とは, CAS が付与している化学物質を特定するユニークな番号
 - 化学物質の同定は細かく区別されており, 一つの化学物質に一つの番号が付与される。



REGISTRY ファイルの特徴 - 2

- クロスオーバー検索を行うと, その化学物質に関する文献や物性などの様々な情報を入手できる。



REGISTRY ファイルのレコード構成

物質同定情報

CAS 登録番号, 化学物質名, 分子式, 構造などが収録されている

物性情報

実測物性値, 計算物性値が収録されている

CA ファイルの最新 10 文献の情報



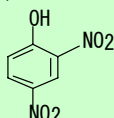
ALL 表示形式を利用すると最新 10 件の文献情報を表示でき、経済的である。しかし、表示が長くなるため、物質同定情報および物性情報のみを表示したい場合は、IDE, FIDE など別の表示形式を利用した方がよい



REGISTRY ファイルのレコード

```
RN 51-28-5 REGISTRY ← CAS 登録番号
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Phenol, 2,4-dinitro- (CA INDEX NAME) ← 化学物質名
OTHER NAMES:
CN α-Dinitrophenol
CN 1,3-Dinitro-4-hydroxybenzene
CN 1-Hydroxy-2,4-dinitrobenzene
CN 2,4-Dinitrophenol
:
CN Phenol, α-dinitro-
MF C6 H4 N2 O5 ← 分子式
CI COM
LC STN Files: ANABSTR, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CABA, CAPLUS, CASREACT,
:
```

Other Sources: DSL**, EINECS**, TSCA**
(*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)



← 構造

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

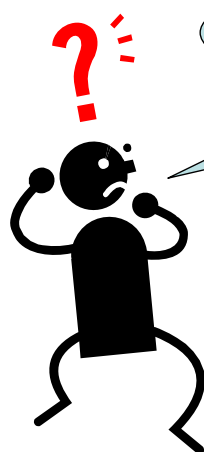
9195 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
168 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
9213 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

物質の同定情報は
IDE (デフォルト)
表示形式で確認できる



本日の内容

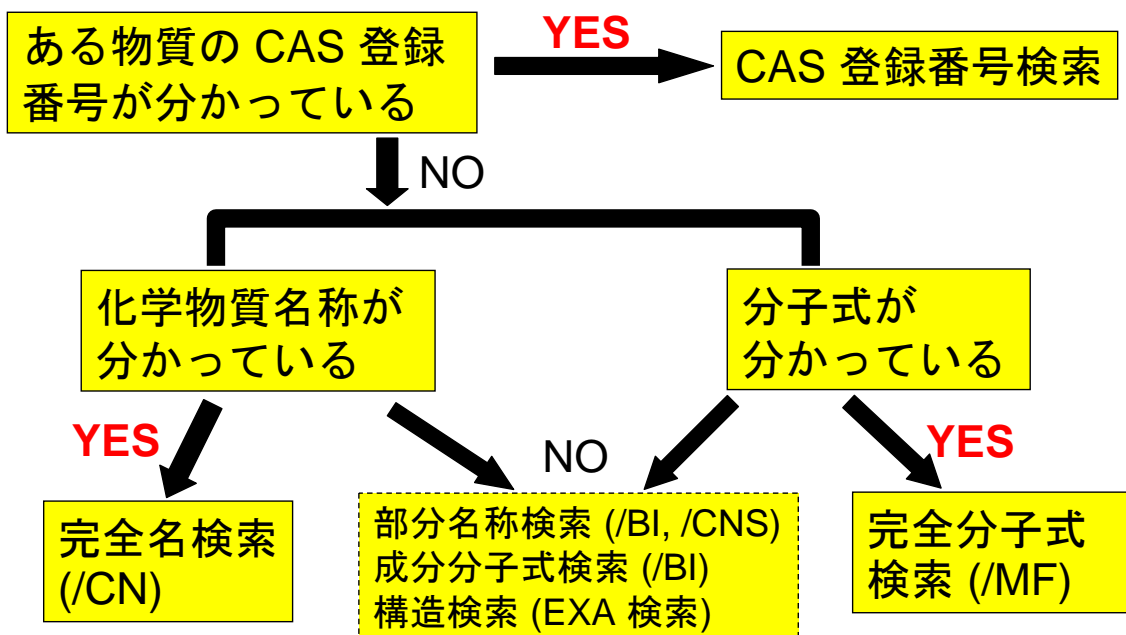
- REGISTRY ファイルの概要
- **特定の化学物質検索**
- 多成分物質検索
- 誘導体検索



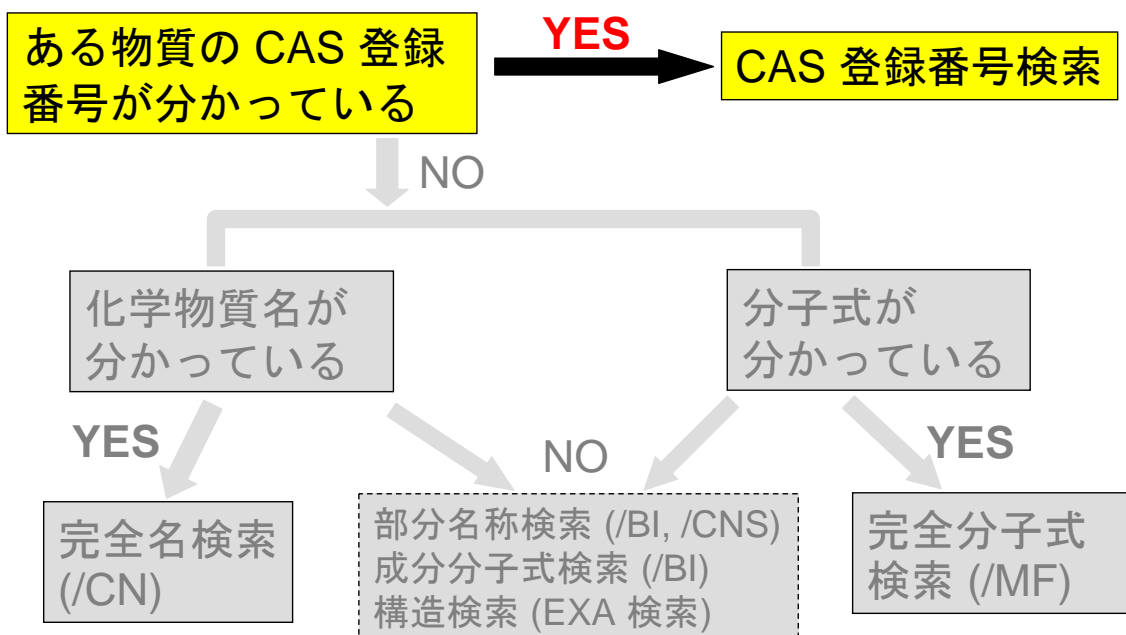
特定の化学物質を調査したい。
おすすめの検索方法は？



検索の流れ



検索の流れ



CAS 登録番号検索 – 検索例 1

検索例 1

CAS 登録番号 693794-98-8 がどのような物質であるか知りたい。



=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> E 693794-98-8

← 入力ミスを防ぐため EXPAND して確認する (無料)

E1	1	693794-96-6/RN
E2	1	693794-97-7/RN
E3	1	693794-98-8/RN
E4	1	693794-99-9/RN
E5	1	693795-00-5/RN
E6	1	693795-01-6/RN
E7		
E8		
E9		
E10		
E11	1	693795-06-1/RN
E12	1	693795-07-2/RN

1 件であることを確認する
0 件ならば存在しない CAS
登録番号である

CAS 登録番号は無料であるが、
存在しない CAS 登録番号を
/BI で検索すると課金される。
そのため、EXPAND で確認して
から検索する。

=> S 693794-98-8

L1	1	693794-98-8 (693794-98-8/RN)
----	---	---------------------------------

CAS 登録番号検索は基本索引
(/BI またはなし) および /RN で
検索できる。(無料)

(=> S E3 でもよい)



=> D

← IDE (デフォルト) 表示形式で表示する (265 円/件)

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN

RN 693794-98-8 REGISTRY

ED Entered STN: 16 Jun 2004

CN Iridium, tris[2-(2-pyridinyl-κN)phenyl-κC]- (CA INDEX NAME)

OTHER NAMES:

CN Ir (ppy) 3

CN Tris (2-phenylpyridinato) iridium

CN Tris (2-phenylpyridine) iridium

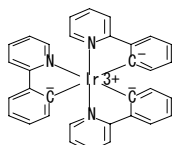
CN Tris[2-(2-pyridinyl-κN)phenyl-κC] iridium

MF C33 H24 Ir N3

CI CCS, COM

SR CA

LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL



化学物質名
(名称がまだ収録されていない
レコードもある)

クラス識別子 (CI) は物質の
広いクラスを示す
CCS : 配位化合物

CAS 登録番号所在 (LC) フィールドには、
L 番号でクロスオーバー検索可能なファイル
名が表示される

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

938 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

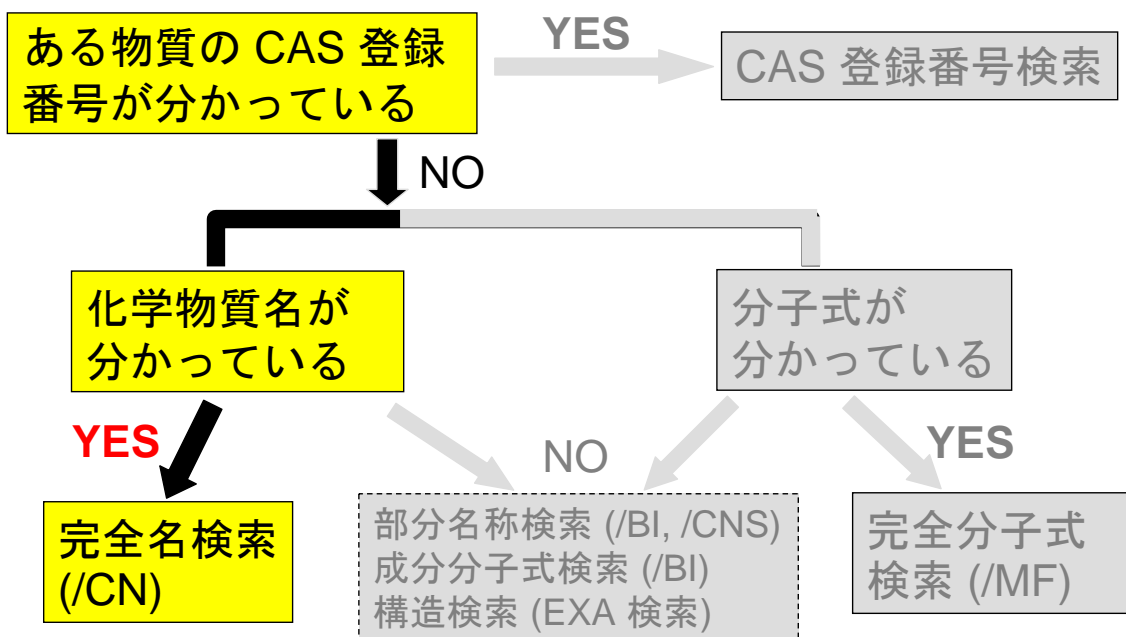
5 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

967 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

CAplus/CA ファイルの
文献数が表示される



検索の流れ



化学物質名のおさらい - 完全名

RN 84087-01-4 REGISTRY
CN 8-Quinolinecarboxylic acid, 3,7-dichloro- (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN 3,7-Dichloro-8-quinolinecarboxylic acid
CN BAS 514
CN BAS 514H
CN Drive
CN Face
CN Facet LA
CN Paramount
CN Parmount 75WG
CN Quinclorac
DR 113875-40-4
MF C10 H5 Cl2 N O2

☞ 内が完全名を示す

/CN 検索は前方一致検索は可能だが、
中間・後方一致検索はできない。
よって、/CN による完全名検索では、
名称の出だしが明確であることが必要



化学物質名のおさらい - 部分名

RN 84087-01-4 REGISTRY
CN 8-Quinolinecarboxylic acid, 3,7-dichloro- (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN 3,7-Dichloro-8-quinolinecarboxylic acid
CN BAS 514
CN BAS 514H
CN Drive
CN Facet
CN Facet LA
CN Paramount
CN Parmount 75WG
CN Quinclorac
DR 113875-40-4
MF C10 H5 Cl2 N O2

完全名は下記の方法で切断され
部分名が生じている
- スペース, ハイフン, 句読点
など **自然な位置で切断**
(自然セグメント)
- "di" "cyclo" など化学的に意味
を持つ最小単位で切断

部分名は /BI (またはなし) で検索する。
- 基本索引フィールド (/BI) : 前方一致検索が可能
中間一致および**後方一致**を利用して部分名を
検索したい場合は /CNS を利用する。
- 自然セグメントフィールド (/CNS) : 前方一致,
中間・後方一致検索が可能



完全名称検索 – 検索例 2

検索例 2 :

1-[(6-Chloro-3-pyridinyl)methyl]-N-nitro-2-imidazolidinimine の CAS 登録番号 および構造, 物性情報について知りたい.



検索のポイント – 名称の入カールール

- 角カッコ [] は, 丸カッコ () に直す.
- 名称中に特別な記号・文字を含む場合は, 二重引用符 “ ” で囲んで検索する.
 - 例 : Olah's reagent
=> S “OLAH'S REAGENT”/CN
=> S “OLAH'S” REAGENT/CN
- ギリシャ文字はアルファベットに書き下し, 前後にピリオドを付ける.
 - 例 : β -Alanine
=> S .BETA.-ALANINE/CN



入力ルールに従い, [] 括弧を () 括弧で書きかえる

1-[(6-Chloro-3-pyridinyl)methyl]-N-nitro-2-imidazolidinimine

⇒ 1-((6-Chloro-3-pyridinyl)methyl)-N-nitro-2-imidazolidinimine

⇒ FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

⇒ E 1-((6-Chloro-3-pyridinyl)methyl)-N-nitro-2-imidazolidinimine/CN

E1 1 1-((6-CHLORO-3-PHENYL-(1,2,4-IMIDAZOL-5-YL)METHYL)-

-4-PROPYLPYRROLIDIN-2-ONE/CN

完全名を /CN フィールドで
EXPAND する (無料)

E2 1 1-((6-CHLORO-3-PYRIDINYL)METHYL)

-2-AMINE/CN

E3 1 → 1-((6-CHLORO-3-PYRIDINYL)METHYL)-N-NITRO-2-IMIDAZOLIDINIMINE/CN

E4 1 1-((6-CHLORO-3-PYRIDYL)CARBONYL)-N-(3,4-DICHLOROPHENYL)-N-(3-

PROPYL)-4-PIPERIDINECARBO

1件であることを確認する
0件ならば, その名称は
収録されていない

E5 1 1-((6-CHLORO-3-PYRIDINYL)METHYL)-N-NITRO-2-IMIDAZOLE-3-CARBOXYLIC ACID/CN

E6 1 1-((6-CHLORO-3-PYRIDINYL)METHYL)-N-NITRO-2-IMIDAZOLIDINIMINE-3-((3-HYDROXY-4,4,4-TRIFLUORO-

BUTYL))-2-NITROIMIDAZOLIDINE/CN

E 番号を用いて検索すると入力ミスが少ない (702 円)

⇒ S E3

L1 1 "1-((6-CHLORO-3-PYRIDINYL)METHYL)-N-NITRO-2-IMIDAZOLIDINIMINE"/CN

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

23

JAICI 社団法人 化学情報協会

⇒ D FIDE

← FIDE 表示形式で表示する (666 円/1 件)

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN

RN 138261-41-3 REGISTRY

ED Entered STN: 10 Jan 1992

CN 2-Imidazolidinimine, 1-[(6-chloro-3-pyridinyl)methyl]-N-nitro-

FIDE 表示形式を利用すると
物性情報を確認できる

OTHER NAMES:

CN 1-(2-Chloro-5-pyridylmethyl)-2-(N-nitroimino)imidazolidine

CN 1-[(6-Chloro-3-pyridinyl)methyl]-4,5-dihydro-N-nitro-1H-imidazol-2-amine

CN 1-[(6-Chloro-3-pyridinyl)methyl]-N-nitro-2-imidazolidinimine

CN Trimax Pro

AR 105827-78-9

DR 937701-26-3, 1223531-53-0

MF C9 H10 Cl N5 O2

CI COM

SR CAS Client Services

LC STN Files: BIOSIS, BIOTECHNO, CA, GABA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS,

DT.CA CPlus document type: Conference; Dissertation; ← CPlus/CA ファイルの
Journal; Patent; Report 資料種類

RL.P Roles from patents: ANST (Analytical study); ← 物質に付与されている

BIOL(Biological study); FORM (Formation, nonpreparative); スーパーロール

MSC (Miscellaneous); NANO (Nanomaterial); OCCU (Occurrence);

PREP (Preparation); PROC (Process); PRP (Properties); PRPH (Prophetic);

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

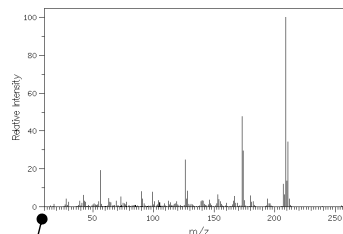
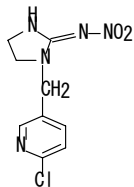
24

JAICI 社団法人 化学情報協会

Ring System Data

← 環データ

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C3N2	NCNC2	5	C3N2	16. 195. 1	1
C5N	NC5	6	C5N	46. 156. 30	1



Experimental Properties (EPROP)

実測物性値

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Mass Spectra	Spectrum		(1) AIST (2) CAS
Median Lethal Dose (LD50)	700 mg/kg	Orgn: rat Rte: oral	

リンクをクリックするとスペクトルデータが表示される

- (1) "Integrated Spectral Data Base System of Organic Compounds" data were obtained from the National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (Japan)
- (2) Ammar, Ibrahim M.; Alexandria Journal of Pharmaceutical Sciences 2003 V17(1) P21-27 CAPLUS

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

25



JAIGI 社団法人 化学情報協会

Experimental Property Tags (ETAG)

参考文献タグ

PROPERTY	NOTE
Bioconcentration Factor	(1) CAS
Crystal Structure	(2) CAS

(1) Ding, Zhonghai; Yingyong Shengtai Xuebao 2004 V15(5) P888-890 CAPLUS

(2) Chopra, Deepak; Acta Crystallographica, Section E: Structure Reports Online 2004 VE60(12) Po2415-o2417 CAPLUS



数値データとして物性値を収録できない場合でも、実測データがある場合には、その物性が記載されている文献情報を収録している

Predicted Properties (PPROP)

計算物性値

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 1 25 deg C	(1)
Polar Surface Area (PSA)	86.34 A**2		(1)
Vapor Pressure (VP)	5.07E-08 Torr	25 deg C	(1)

- (1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V9.04 ((C) 1994-2011 ACD/Labs)

See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.

4276 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

313 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

4360 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

2011/02

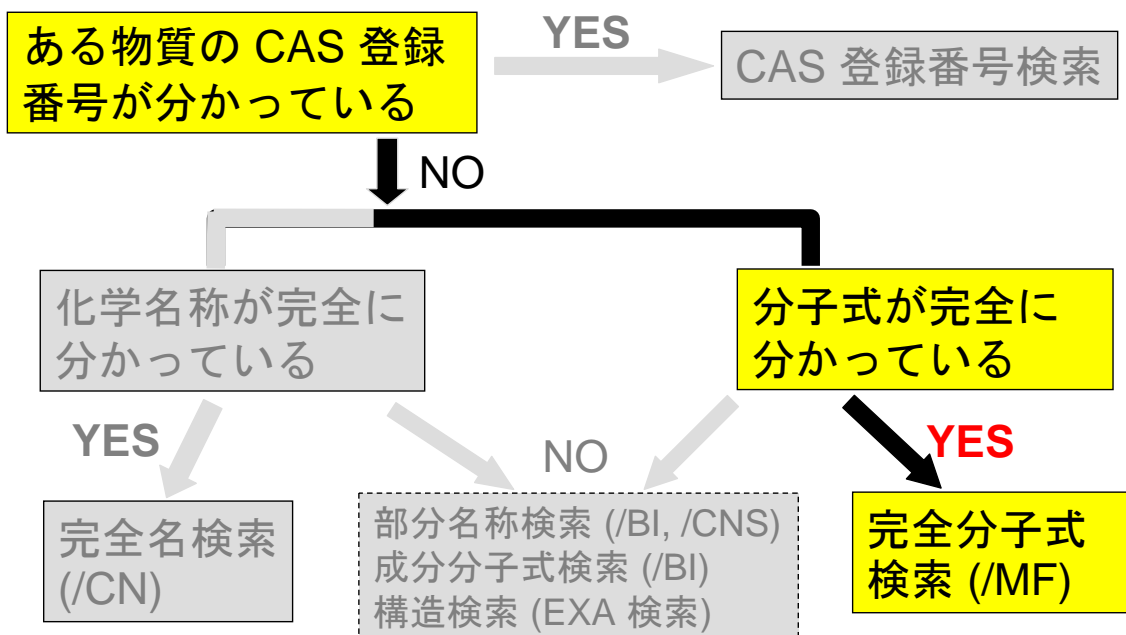
STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

26

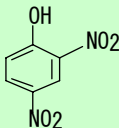
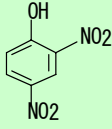


JAIGI 社団法人 化学情報協会

検索の流れ



分子式のおさらい

<p>単成分</p> <p>RN 51-28-5 REGISTRY ED Entered STN: 16 Nov 1984 CN Phenol, 2,4-dinitro- (CA INDEX NAME) OTHER NAMES: CN α-Dinitrophenol : CN Phenol, α-dinitro- MF C6 H4 N2 O5 CI COM LC STN Files: ANABSTR, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CABA, CAPLUS, CASREACT,</p> 	<p>多成分物質</p> <p>RN 14314-69-3 REGISTRY ED Entered STN: 16 Nov 1984 CN Phenol, 2,4-dinitro-, potassium salt (1:1) (CA INDEX NAME) OTHER CA INDEX NAMES: CN Phenol, 2,4-dinitro-, potassium salt (8Cl, 9Cl) : CN Potassium 2,4-dinitrophenoxide MF C6 H4 N2 O5 . K CI COM LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, : GRN (51-28-5)</p>  <p>● K</p>
---	---

C6 H4 N2 O5 の分子式を /MF で検索できる

2 成分から成る多成分物質



分子式のおさらい – Hill 方式

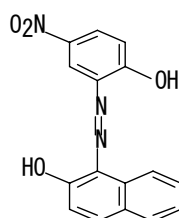
- 分子式の記述は Hill 方式に従う。
 - 炭素を含む物質：炭素，水素，その他の元素
(アルファベット順)
 - 炭素を含まない物質：すべての元素を
アルファベット順に記述
- 分子式検索のポイント
 - 物質全体の完全な分子式が分かっている場合は
/MF で検索する.
 - 多成分物質の一部の成分の分子式が分かっている
場合は成分分子式 (/BI) が利用できる



分子式検索 – 検索例 3

検索例 3

化学物質名は分からないが、構造は下記の通りである。この物質の CAS 登録番号を知りたい。



=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> E C16H11N3O4/MF

E1	27	C16H11N3O3S3/MF
E2	2	C16H11N3O3SE/MF
E3	590	→ C16H11N3O4/MF
E4	1	C16H11N3O4. 1/2BA/MF
E5	1	C16H11N3O4. 1/2CA/MF
E6	1	C16H11N3O4. 4H2O/MF
E7	1	C16H11N3O4. BRH/MF
E8	1	C16H11N3O4. C12H27N/MF
E9	1	C16H11N3O4. C16H11N3O3/MF
E10	1	C16H11N3O4. C2H6O/MF
E11	2	C16H11N3O4. C2H7N/MF
E12	1	C16H11N3O4. C3H7N/MF

Hill 方式に従った分子式を /MF
フィールドで EXPAND する
(無料)

=> S E3

L1 590 C16H11N3O4/MF

分子式を用いて検索する (702 円)

=> S L1 AND NAPHTH?

L2 62 L1 AND NAPHTH?

=> S L2 AND AZO

L3 26 L2 AND AZO

同じ分子式を持つ物質が多数存在する
場合は、部分名を用いて更に限定する
(702 円/1 語 × 2 = 1,404 円)



JAIGI 社団法人 化学情報協会

2011/02

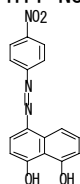
STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

31

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する (無料)

L3 26 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN 1,8-Naphthalenediol, 4-[2-(4-nitrophenyl)diazonyl]-
MF C16 H11 N3 O4



SCAN 表示形式

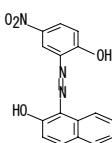
回答番号の指定はできないが、
無料で CA 索引名, 分子式,
クラス識別子, 構造図が確認できる



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):25

L3 26 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN 2-Naphthalenol, 1-[2-(2-hydroxy-5-nitrophenyl)diazonyl]-
MF C16 H11 N3 O4
CI COM



目的物質の IN フィールド中の名称を
/CN フィールドで検索することにより
目的物質のみに限定する

* 名称を Ctrl+C を利用してコピーする



JAIGI 社団法人 化学情報協会

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

32

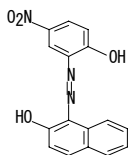
=> E 2-Naphthalenol, 1-(2-(2-hydroxy-5-nitrophenyl)diazanyl)-/CN 5
 E1 1 2-NAPHTHALENOL, 1-(2-(2-HYDROXY-5-NITROPHENYL) DIAZENYL)-/CN
 E2 1 2-NAPHTHALENOL, 1-(2-(2-HYDROXY-5-METHYL-4-NITROPHENYL) DIAZENYL)-/CN
 E3 1 → 2-NAPHTHALENOL, 1-(2-(2-HYDROXY-5-NITROPHENYL) DIAZENYL)-/CN
 E4 1 2-NAPHTHALENOL, 1-(2-(2-HYDROXY-5-NITROPHENYL) DIAZENYL)-/CN
 E5 1 2-NAPHTHALENOL, 1-(2-(2-HYDROXY-5-NITROPHENYL) DIAZENYL)-/CN
 SODIUM SALT (METHYLSULFONATE)

Ctrl+V で名称をペーストし、入力ルールに従い [] 括弧を () 括弧に変更する。そして EXPAND で再度その化学物質レコードが存在することを確認する

=> S E3
 L4 1 "2-NAPHTHALENOL, 1-(2-(2-HYDROXY-5-NITROPHENYL) DIAZENYL)-"/CN

=> D

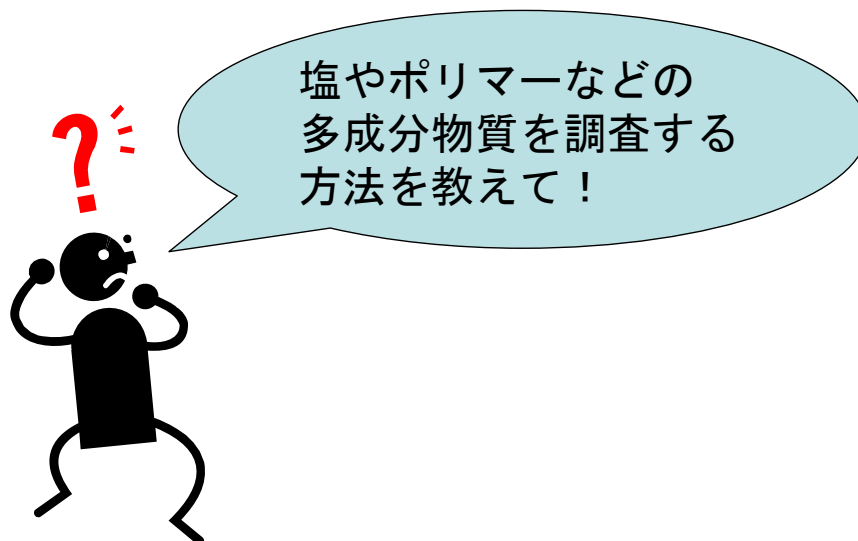
L4 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 RN 14847-54-2 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN 2-Naphthalenol, 1-[2-(2-hydroxy-5-nitrophenyl)diazanyl]- (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN 2-Naphthalenol, 1-[(2-hydroxy-5-nitrophenyl)azo]- (9CI)
 MF C16 H11 N3 O4
 CI COM
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, GMELIN*, IFICDB,



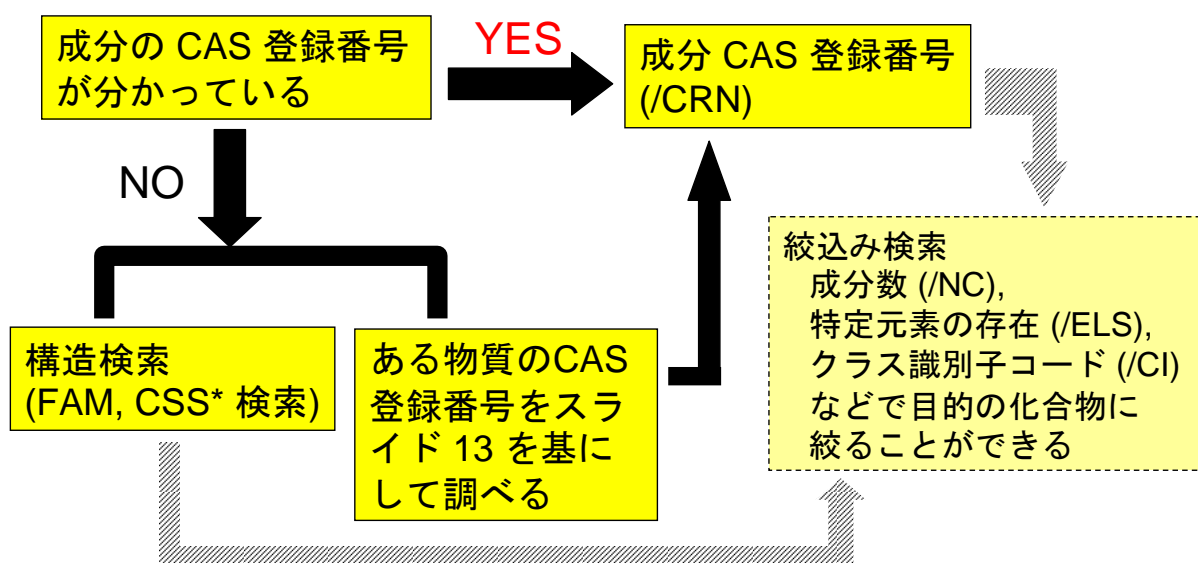
本日の内容

- REGISTRY ファイルの概要
- 特定の化学物質検索
- 多成分物質検索
- 誘導体検索



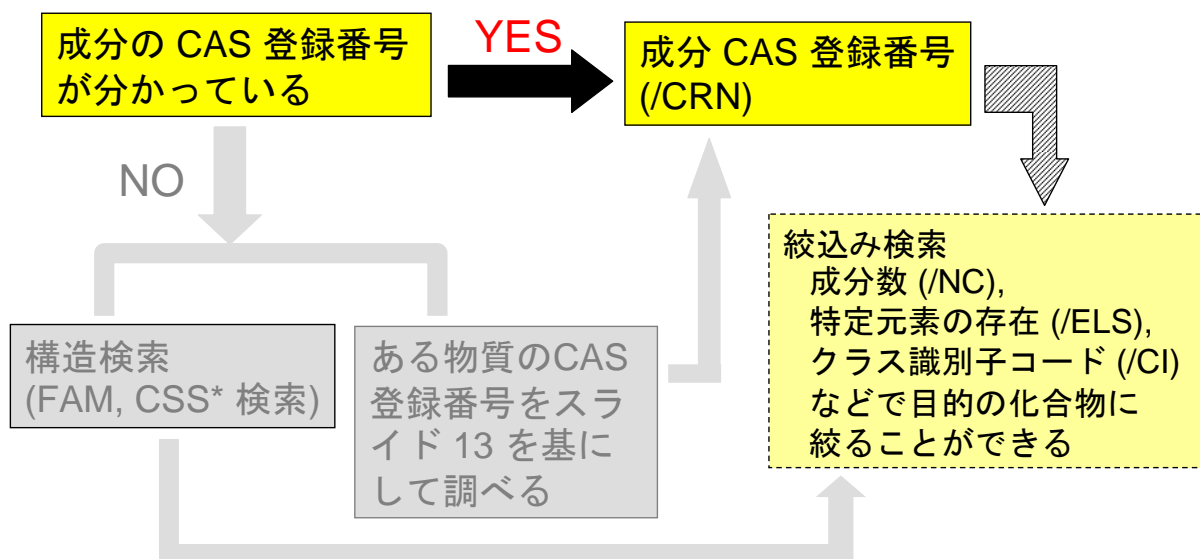


多成分物質検索の流れ



* 構造質問式に可変原子, G グループ, 繰り返し構造, 可変置換位置などを利用している場合には CSS 検索を行う

多成分物質検索の流れ



* 構造質問式に可変原子, G グループ, 繰り返し構造, 可変置換位置などを利用している場合には CSS 検索を行う



成分 CAS 登録番号のおさらい

多成分物質

RN 25034-86-0 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with ethenylbenzene (CA INDEX NAME)
 MF (C8 H8 . C5 H8 O2)x
 CI PMS, COM
 PCT Polyacrylic, Polystyrene
 LC STN Files: AGRICOLA, BIOSIS,

多成分物質の CAS 登録番号

CM 1
 CRN 100-42-5
 CMF C8 H8
H2C=CH-Ph

成分 CAS 登録番号

CM 2
 CRN 80-62-6
 CMF C5 H8 O2
Me-C(=O)-C(=O)-OMe



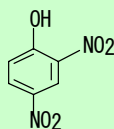
ある化学物質の成分 CAS 登録番号 (/CRN) 検索 (無料) によりその化学物質を一成分とする多成分物質を検索できる



単原子フラグメントを含む多成分物質

RN 1011-73-0 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Phenol, 2,4-dinitro-, sodium salt (1:1) (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Phenol, 2,4-dinitro-, sodium deriv. (6CI)
 CN Phenol, 2,4-dinitro-, sodium salt (8CI,
 OTHER NAMES:
 CN 2,4-Dinitrophenol sodium salt
 :
 CN Sodium 2,4-dinitrophenoxide
 DR 89488-60-8
 MF C6 H4 N2 O5 . Na
 CI COM
 LC STN Files: AGRICOLA, BIOSIS, CA, CAPLUS, CASREACT,

CRN (51-28-5)



● Na

単原子フラグメントの成分 CAS 登録番号は収録されていない

単原子フラグメント

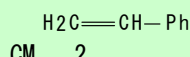
- 単一の原子のみから成る成分 (例: Na, K など)
- 水素と単一の他の原子からなる成分 (例: CLH, H₂O, H₃N など)

単原子フラグメントの CAS 登録番号を利用した多成分物質検索はできない

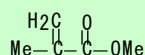


成分数のおさらい

RN 25034-86-0 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with ethenylbenzene (CA INDEX NAME)
 MF (C8 H8 . C5 H8 O2) x
 CI PMS, COM
 PCT Polyacrylic, Polystyrene
 LC STN Files: AGRICOLA, BIOSIS,
 :
 CM 1
 CRN 100-42-5
 CMF C8 H8



CM 2
 CRN 80-62-6
 CMF C5 H8 O2

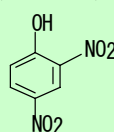


両レコードとも成分数は 2

成分数は表示される CM や CRN の数ではない

RN 1011-73-0 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN Phenol, 2,4-dinitro-, sodium salt (1:1) (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:
 CN Phenol, 2,4-dinitro-, sodium deriv. (6CI)
 CN Sodium 2,4-dinitrophenoxide
 DR 89488-60-8
 MF C6 H4 N2 O5 . Na
 CI COM
 LC STN Files: AGRICOLA, BIOSIS, CA, CAPLUS, CASREACT,

CRN (51-28-5)



● Na

成分数とは物質全体を構成している成分の数 (= 分子式 (MF) フィールドの成分分子式の数)

成分数は /NC で検索する



元素種および特定元素数のおさらい

- 成分中に**特定元素**、**ハロゲン**、**金属**を含む物質に**限定**したい場合には、**元素種 (/ELS)** を利用する。
- 元素の数**を**限定**したい場合は、**特定元素数 (/元素記号)** を利用する。

例)

- ナトリウムを含む物質 : => S Na/ELS
- ハロゲンを含む物質 : => S X/ELS
- 窒素を 1-3 個含む物質 : => S 1-3/N
- 金属を 2 個以上含む物質 : => S 2=<M



元素種および特定元素数の登録形式

RN 879658-08-9 REGISTRY
 ED Entered STN: 07 Apr 2006
 CN Sodium hydroxide (Na(OH)), compd. with 2,4,6-trinitrophenol (1:1) (9CI)
 (CA INDEX NAME)

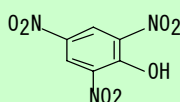
MF C6 H3 N3 O7 . H Na O
 SR CAS EARLY REGISTRATIONS
 LC STN Files: CA, CAPLUS

成分分子式 : HNaO
 元素種 (/ELS) : H/ELS, Na/ELS, O/ELS
 特定元素数 : 1/H, 1/Na, 1/O

CM 1
 CRN 1310-73-2
 CMF H Na O
 Na-OH
 CM 2

成分分子式 : C6H3N3O7
 元素種 (/ELS) : C/ELS, H/ELS, N/ELS, O/ELS
 特定元素数 : 6/C, 3/H, 3/N, 7/O

CRN 88-89-1
 CMF C6 H3 N3 O7



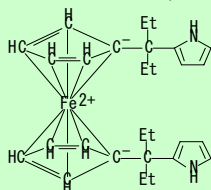
元素種および特定元素数のデータは
各成分ごとに登録されている



クラス識別子のおさらい

RN 959679-58-4 REGISTRY
 ED Entered STN: 28 Dec 2007
 CN Ferrocene, 1,1'-bis[1-ethyl-1-(1H-pyrrol-2-yl)propyl]- (CA INDEX NAME)
 MF C28 H36 Fe N2
 CI **CCS**
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT

配位化合物

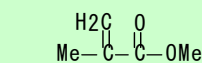


RN 25014-10-2 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 Nov 1984
 CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene (CA INDEX NAME)
 OTHER CA INDEX NAMES:

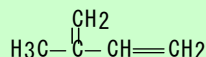
MF (C5 H8 O2 . C5 H8)x
 CI **PMS**
 PCT Polyacrylic,
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CHEMLIST,

ポリマー

CM 1
 CRN 80-62-6
 CMF C5 H8 O2



CM 2
 CRN 78-79-5
 CMF C5 H8



クラス識別子は物質の分類を示すコードである

/CI で検索できる



JAICI 社団法人 化学情報協会

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

43

成分 CAS 登録番号検索 - 検索例 4

検索例 4

テレフタル酸 (CAS 登録番号 100-21-0) と金属を含む 3 成分以下の物質を調査したい。



JAICI 社団法人 化学情報協会

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

44

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S 100-21-0/CRN
L1 29119 100-21-0/CRN

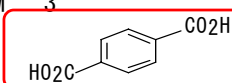
100-21-0/CRN の検索により、テレフタル酸 (100-21-0) を含む多成分物質が検索できる (無料)

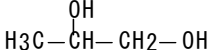
=> D SCAN

L1 29119 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,2-ethanediol, 1,2-propanediol and 1,3-propanediol
MF (C8 H6 O4 . C3 H8 O2 . C3 H8 O2 . C2 H6 O2)x ← 4 成分
CI PMS ← ポリマー

CM 1
HO-CH₂-CH₂-CH₂-OH

CM 2
HO-CH₂-CH₂-OH

CM 3


CM 4


テレフタル酸 (100-21-0)

/CRN で検索すると、その CAS 登録番号自身のレコードは結果に含まれない。

そのため、それ自身も結果に含める場合は、下記のように検索する
=> S 100-21-0 OR 100-21-0/CRN

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

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

45

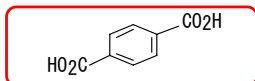
JAICI 社団法人 化学情報協会

=> S L1 AND M/ELS
4935970 M/ELS
L2 2807 L1 AND M/ELS

M/ELS を利用し、金属を含む物質に限定する (702 円)

=> D SCAN

L2 2807 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, potassium salt (1:1)
MF C8 H6 O4 . K ← 2 成分
CI COM



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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



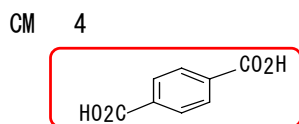
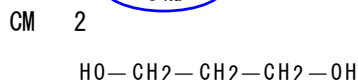
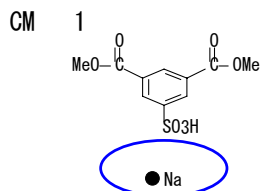
JAICI 社団法人 化学情報協会

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

46

L2 2807 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 IN 1,3-Benzenedicarboxylic acid, 5-sulfo-, 1,3-dimethyl ester, sodium salt
 (1:1), polymer with 1,4-benzenedicarboxylic acid, decanedioic acid and
 1,3-propanediol
 MF (C10 H18 O4 . C10 H10 O7 S . C8 H6 O4 . C3 H8 O2 . Na)x ← 5 成分
 CI PMS ← ポリマー



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

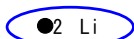
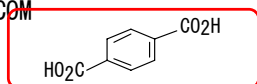


=> S L2 AND 3=>NC
 117936909 3=>NC
 L3 339 L2 AND 3=>NC

成分数 (/NC) を利用して 3 成分以下に限定する
(702 円)

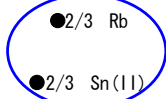
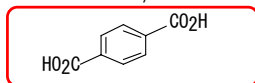
=> D SCAN

L3 339 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, lithium salt (1:2)
 MF C8 H6 O4 . 2 Li ← 2 成分
 CI COM



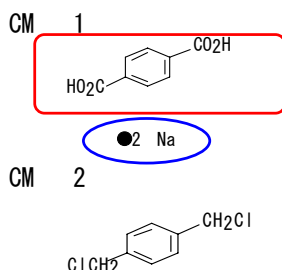
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):2

L3 339 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
 IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, rubidium tin(2+) salt (3:2:2)
 MF C8 H6 O4 . 2/3 Rb . 2/3 Sn ← 3 成分



L3 339 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, disodium salt, polymer with
1,4-bis(chloromethyl)benzene (9Cl)
MF (C8 H8 Cl2 . C8 H6 O4 . 2 Na)x ← 3 成分
CI PMS ← ポリマー

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



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



成分 CAS 登録番号検索 - 検索例 5

検索例 5

イソプレン (CAS 登録番号 : 78-79-5) と
メチルメタクリレート (CAS 登録番号 : 80-62-6)
を含む 3 成分からなるポリマーを調べたい。



=> FILE REGISTRY

← *REGISTRY* ファイルに入る

=> S 78-79-5/CRN AND 80-62-6/CRN AND PMS/CI

2634 78-79-5/CRN

87878 80-62-6/CRN

1377926 PMS/CI

L1 194 78-79-5/CRN AND 80-62-6/CRN AND PMS/CI

クラス識別子を利用してポリマーに
限定 (PMS/CI) する (702 円)
(CRN 検索は無料)

=> D SCAN

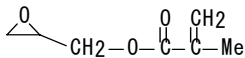
L1 194 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN

IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with
2-methyl-1,3-butadiene and 2-oxiranylmethyl 2-methyl-2-propenoate

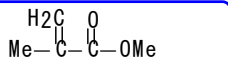
MF (C7 H10 O3 . C5 H8 O2 . C5 H8)x ← 3 成分

CI **PMS** ← ポリマー

CM 1

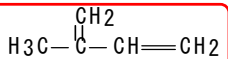


CM 2



メチルメタクリレート (80-62-6)

CM 3



イソプレン (78-79-5)



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

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

51

JAICI 社団法人 化学情報協会

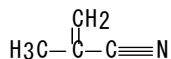
L1 194 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN

IN Methacrylic acid methyl ester, polymer with isoprene, methacrylonitrile
and styrene (8CI)

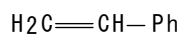
MF (C8 H8 . C5 H8 O2 . C5 H8 . C4 H5 N)x ← 4 成分

CI **PMS** ← ポリマー

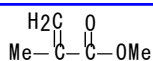
CM 1



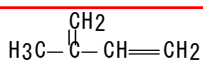
CM 2



CM 3



CM 4



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



2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

52

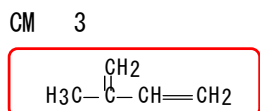
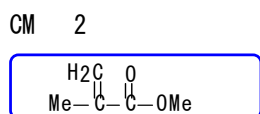
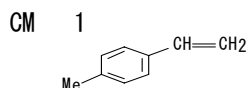
JAICI 社団法人 化学情報協会

=> S L1 AND 3/NC
890887 3/NC
L2 53 L1 AND 3/NC

3成分に限定する (702円)

=> D SCAN

L2 53 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with
1-ethenyl-4-methylbenzene and 2-methyl-1,3-butadiene, graft (9CI)
MF (C9 H10 . C5 H8 O2 . C5 H8)x ← 3成分
CI PMS ← ポリマー



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



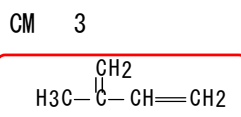
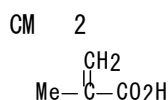
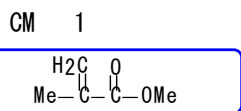
JAICI 社団法人化学情報協会

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

53

L2 53 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, polymer with 2-methyl-1,3-butadiene and
methyl 2-methyl-2-propenoate, graft (9CI)
MF (C5 H8 O2 . C5 H8 . C4 H6 O2)x ← 3成分
CI PMS ← ポリマー



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



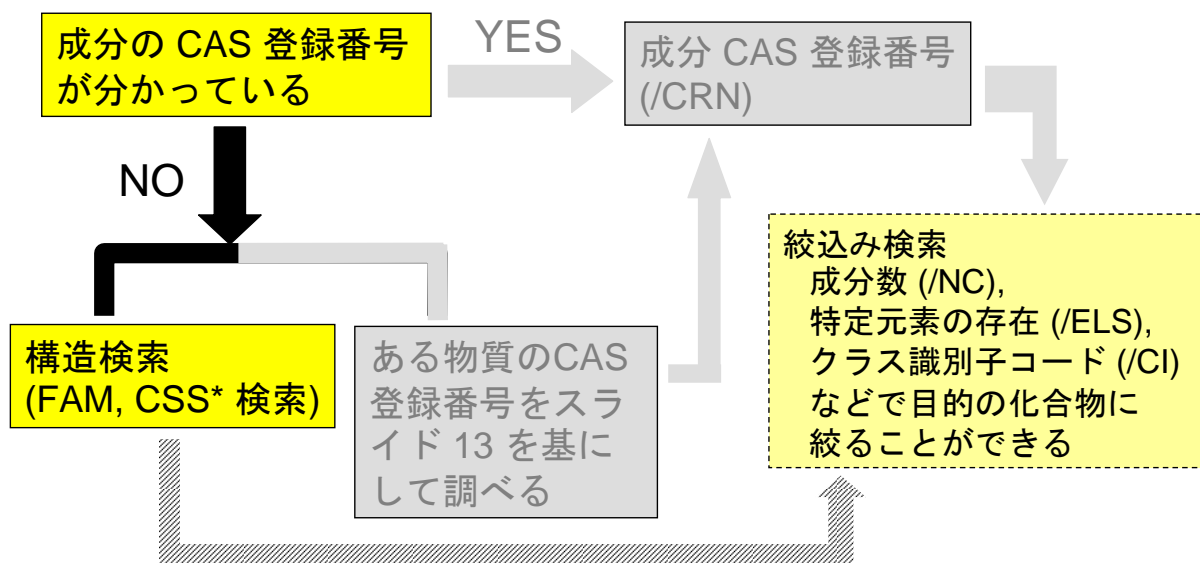
JAICI 社団法人化学情報協会

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

54

多成分物質検索の流れ



* 構造質問式に可変原子, G グループ, 繰り返し構造, 可変置換位置などを利用している場合には CSS 検索を行う



構造検索のおさらい

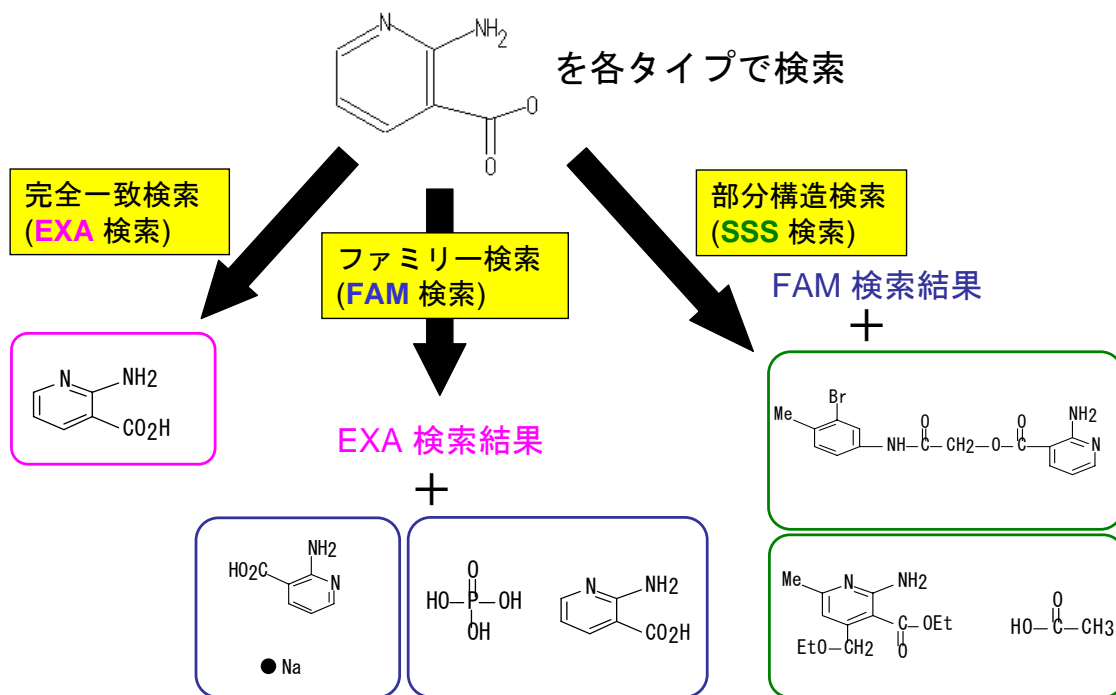
- 同じ構造図でも検索タイプにより回答が異なる。

検索タイプ	回答	特徴
完全一致検索 (EXA 検索)	構造質問式に完全に一致する物質を検索	作図していないところは H (水素) がつく
ファミリー検索 (FAM 検索)	構造質問式に完全に一致する物質 + 多成分物質	
★ 閉構造部分構造検索 (CSS 検索)	構造質問式に完全に一致する物質 + 多成分物質	
★ 部分構造検索 (SSS 検索)	構造質問式を含む物質 + 多成分物質	作図していないところは、あらゆる基が置換する

★ 可変原子, G グループ, 繰り返し構造, 可変置換位置など便利な作図機能が利用できる



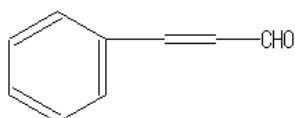
検索タイプによる回答の違い



ファミリー検索 - 検索例 6

検索例 6

下記の構造とこの構造を含む多成分物質を調査したい。



その際には立体異性体および標識化合物も含めて調査したい。



=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=>

← 構造質問式をアップロードする

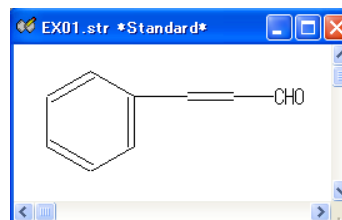
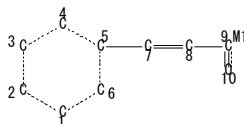
Uploading C:\Documents and Settings\~\My Documents\STN Express 8.4\Queries\EX01.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D_QUE

← アップロードした構造を確認する

L1 STR



NODE ATTRIBUTES:

HCOUNT IS M1 AT 9

:

NSPEC IS C AT 10

DEFAULT MLEVEL IS ATOM

MLEVEL IS CLASS AT 7 8 9 10

DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:

RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED

NUMBER OF NODES IS 10

STEREO ATTRIBUTES: NONE

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

59



JAICI 社団法人 化学情報協会

=> S L1 FAM

SAMPLE SEARCH INITIATED 13:24:19 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 1708 TO ITERATE

サンプル検索を実行 (無料)

100.0% PROCESSED 1708 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

10 ANSWERS

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
BATCH **COMPLETE**

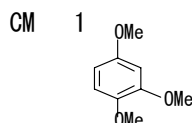
PROJECTED ITERATIONS: 31681 TO 36639
PROJECTED ANSWERS: 11 TO 389

FULL FILE PROJECTIONS :
ONLINE が **COMPLETE** になっていることを確認する。
INCOMPLETE の場合はフルファイル検索が途中で終了する。
INCOMPLETE の場合には、構造質問式の修正などが必要となる。

L2 10 SEA FAM SAM L1

=> D_SCAN

L2 10 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on
IN 2-Propenal, 3-phenyl-, mixt. with 1,2,4-trimethoxybenzene (9CI)
MF C9 H12 O3 . C9 H8 O
CI MXS



CM 2

Ph-CH=CH-CHO

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



JAICI 社団法人 化学情報協会

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

60

=> S L1 FAM FUL
FULL SEARCH INITIATED 13:25:15 FILE 'REGISTRY'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 34667 TO ITERATE

フルファイル検索を実行 (9,520 円)

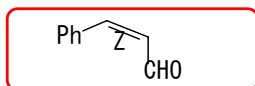
100.0% PROCESSED 34667 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

154 ANSWERS

L3 154 SEA FAM FUL L1

=> D SCAN

L3 154 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT
IN 2-Propenal, 3-phenyl-, (2Z)-
MF C9 H8 O

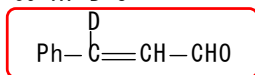


Double bond geometry as shown.

今回の検索例のように非対称の二重結合を有している構造では、デフォルトの設定 (No Stereo) で構造検索すると、**立体情報のないレコード**および E/Z の情報を有する**幾何異性体**が得られる。
さらに、自動的に**標識化合物**まで得られる。

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

L3 154 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN 2-Propenal-3-d, 3-phenyl- (9CI)
MF C9 H7 D O



2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

61



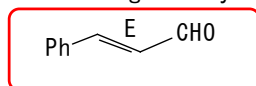
JAICI 社団法人 化学情報協会

L3 154 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
IN 2-Propenal, 3-phenyl-, (2E)-, polymer with 1H-pyrrole (9CI)
MF (C9 H8 O . C4 H5 N)x
CI PMS

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1

Double bond geometry as shown.



CM 2



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

=> SAVE L3 TEMP EXAMPLE/A
ANSWER SET L3 HAS BEEN SAVED AS 'EXAMPLE/A'

SAVE コマンドで回答を保存する
• TEMP を入力した場合
無料で一週間保存される
• TEMP を入力しない
恒久保存になり毎月保管料がかかる



JAICI 社団法人 化学情報協会

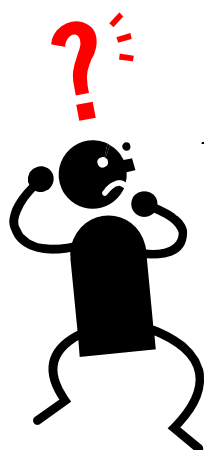
2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

62

本日の内容

- REGISTRY ファイルの概要
- 特定の化学物質検索
- 多成分物質検索
- **誘導体検索**



誘導体を調査したい場合
の検索法は？



誘導体検索の流れ

部分構造検索 (SSS 検索)

推奨

辞書検索, 環系データ,
部分名検索など

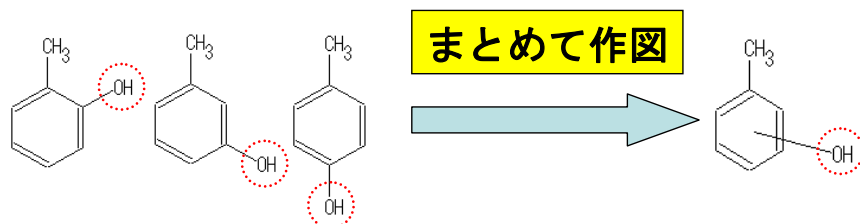
誘導体検索で構造検索以外の手法 (環系データの利用など) では, 目的物質以外の物質が多数得られることがあり, 絞り込みに多額の検索語料がかかる場合がある



部分構造 (SSS) 検索で利用できる 便利な作図機能のおさらい - 1

• 可変置換位置

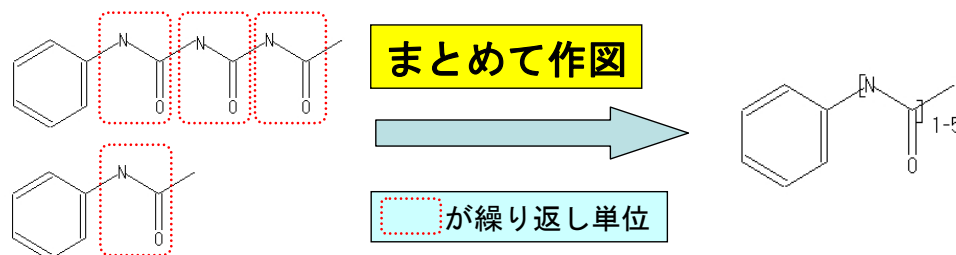
- 環に対して置換位置が可変である場合は, 可変置換位置の機能を利用して, 一つの構造質問式にまとめることができる.



部分構造 (SSS) 検索で利用できる 便利な作図機能のおさらい - 2

• 繰り返しグループ

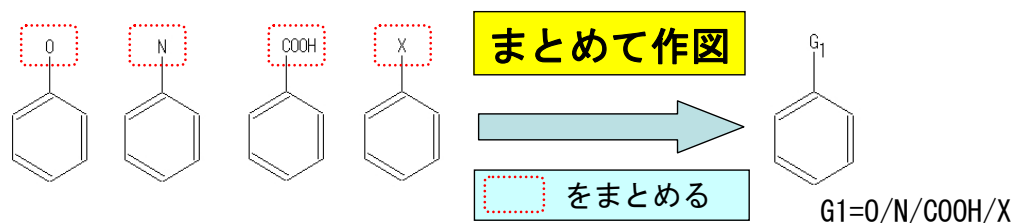
- 繰り返し単位を含む場合には、繰り返しグループを利用して、一つの構造質問式にまとめることができる。



部分構造 (SSS) 検索で利用できる 便利な作図機能のおさらい - 3

• G グループ

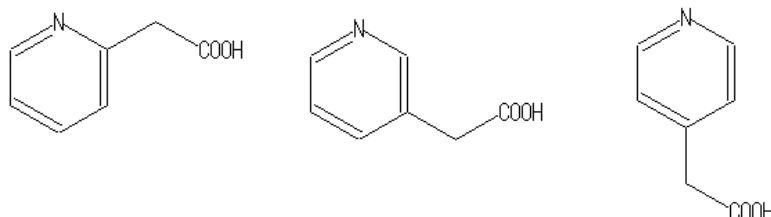
- 一つのノードが複数の原子やショートカット、可変原子やフラグメントで構成される場合には、G グループを利用して、一つの構造質問式にまとめることができる。



誘導体検索 - 検索例 7

検索例 7

下記の骨格を有する物質の特許を調査したい。

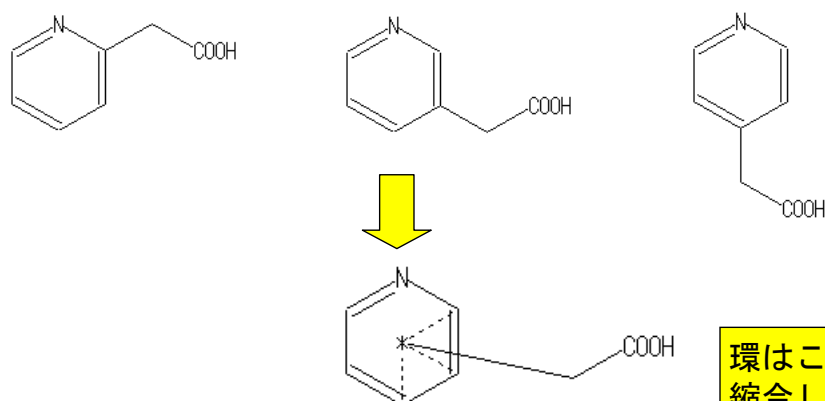


(ピリジン環に対して、これ以上他の環は縮合しない)



検索例 7 の作図のポイント

- 3つの目的化合物は、ピリジン環に対して、置換基である C-COOH 基の位置が異なっているだけである。このような場合は可変置換位置を利用すれば一つの構造質問式にまとめられる。



環はこれ以上は縮合しないので環の孤立も指定



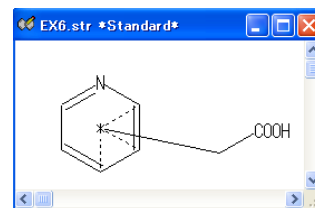
=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> Uploading C:\Documents and Settings\~\STN Express 8.4\Queries\EX6.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1 ← サンプル検索を実行する (無料)

SAMPLE SEARCH INITIATED 11:29:57 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 27695 TO ITERATE



50 ANSWERS

100.0% PROCESSED 27695 ITERATIONS

INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)

SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**

BATCH **COMPLETE**

PROJECTED ITERATIONS: 543938 TO 563862

PROJECTED ANSWERS: 4034 TO 5926

L2 50 SEA SSS SAM L1

サンプル検索のイタレーション数の制限値 (100 万件) または回答数の制限値 (50 件) に達すると検索が完了して、INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED) が表示されるが、**FULL FILE PROJECTIONS : ONLINE** が **COMPLETE** ならばフルファイル検索の予測は有効であり、フルファイル検索も実行できる

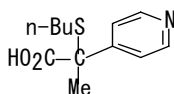


=> D SCAN

L2 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN

IN 4-Pyridineacetic acid, α -(butylthio)- α -methyl-

MF C12 H17 N O2 S



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

=> S L1 FUL

← フルファイル検索を実行する (24,200 円)

FULL SEARCH INITIATED 11:30:21 FILE 'REGISTRY'

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 552894 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 552894 ITERATIONS

5025 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.01

L3 5025 SEA SSS FUL L1

=> SAVE TEMP L3 EXAMPLE7/A

← SAVE コマンドで回答を保存する

ANSWER SET L3 HAS BEEN SAVED AS 'EXAMPLE7/A'



=> FILE CAPLUS

CAplus ファイルにクロスオーバー検索して
文献情報を得る

=> S L3

L4 2240 L3

REGISTRY ファイルの L 番号を検索する (無料)

=> S L4 AND P/DT

7555847 P/DT

← 特許に限定する (291円)

L5

1382 L4 AND P/DT

=> D SCAN TI HITRN

← SCAN TI HITRN 表示形式で確認する (無料)

L5 1382 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN

TI Thienopyridine derivatives as MEK inhibitors and their preparation,
pharmaceutical compositions and use in the treatment of diseases

TIJP MEK阻害剤としてのチエノピリジン誘導体. 疾患の処置におけるそれらの調製,
製薬学的な組成物, および使用 [機械翻訳]

IT 61494-55-1P, (2-Chloropyridin-3-yl)acetic acid

RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT
(Reactant or reagent)

(intermediate; preparation of thienopyridine derivs. as MEK inhibitors
useful in the treatment of diseases)

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



=> D L5 6 BIB HITSTR

← 書誌情報とヒットした CAS 登録番号の構造図を確認する (506 円/件)

L5 ANSWER 6 OF 1382 CAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN

AN 2010:1601790 CAPLUS Full-text

DN 154:64842

TI Preparation of indolylmethyl-morpholine derivatives as kinase inhibitors

TIJP キナーゼ阻害薬としてのインドリルメチル-モルホリン誘導体の調製 [機械翻訳]

IN Ali, Mezher Hussein; Brown, Julien Alistair; De Candole, Benjamin Charles;

PA UCB Pharma S.A., Belg.

SO PCT Int. Appl., 199pp.

CODEN: PIXXD2

DT Patent

LA English

FAN. CNT 1

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
WO 2010146351	A1	20101223	WO 2010-GB1171	20100615
W: AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ,				

PRAI GB 2009-10493 A 20090617

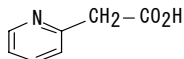
IT 13115-43-0 2-Pyridylacetic acid 408367-22-6

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

(preparation of indolylmethyl-morpholine derivs. as kinase inhibitors)

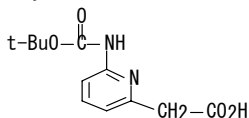
RN 13115-43-0 CAPLUS

CN 2-Pyridineacetic acid (CA INDEX NAME)



RN 408367-22-6 CAPLUS

CN 2-Pyridineacetic acid, 6-[[[(1,1-dimethylethoxy)carbonyl]amino]- (CA INDEX NAME)



HITSTR 表示形式:
ヒットした CAS 登録番
号, その CAS ロールと
テキスト説明句, CA 索
引名, 構造図を表示する

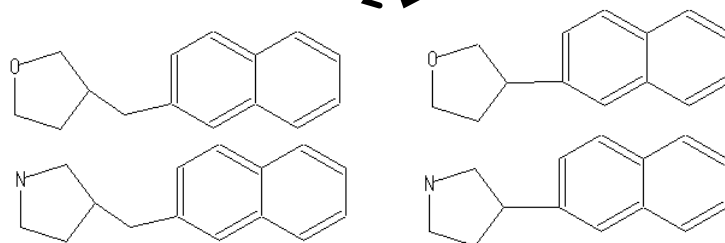
1 レコード中で複数の CAS 登録番号が
ヒットした場合でも, HITSTR 表示形式
は 1 件あたり 340 円でヒットしたすべて
の構造を確認できるため経済的である



誘導体検索 - 検索例 8

検索例 8

下記の4つの構造を有し、特許に記載されている物質を調査したい。さらに特許中で合成されている物質を調査したい。

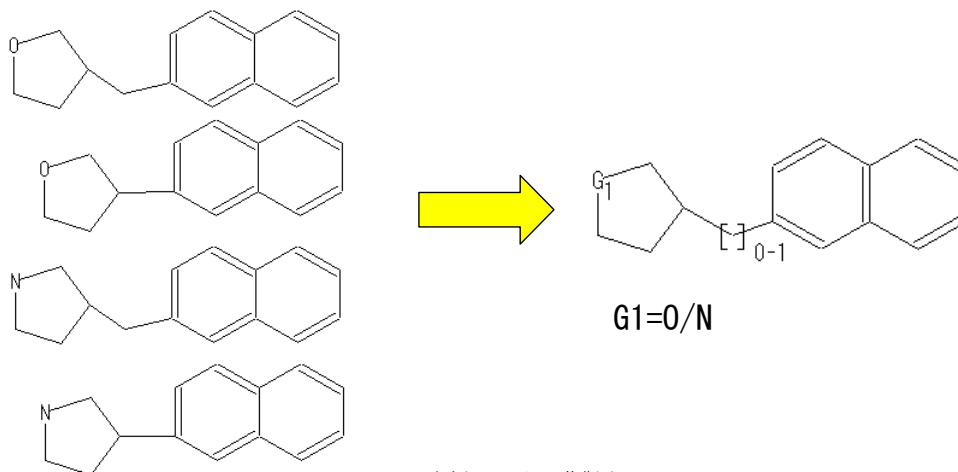


(各環はさらに他の環と縮合してもよい)



検索例 8 の作図のポイント

- ピロリジン環とテトラヒドロフラン環は G グループを使用すると一つの5員環にまとまる。
- 5員環とナフタレン環の間の結合は炭素が1か0である。そのため、炭素に対して繰り返しグループを利用できる。



=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=>

Uploading C:\¥Documents and Settings¥~¥STN Express 8.4¥Queries¥EX8.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1 ← サンプル検索を実行する (無料)

SAMPLE SEARCH INITIATED 17:03:11 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 21788 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 21788 ITERATIONS

SEARCH TIME: 00.00.01

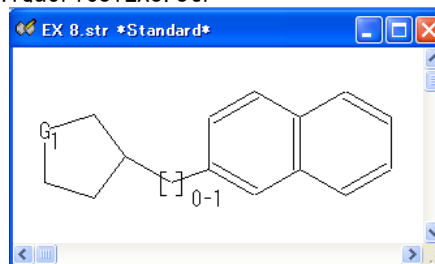
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**

BATCH **COMPLETE**

PROJECTED ITERATIONS: 426920 TO 444600

PROJECTED ANSWERS: 452 TO 1228

L2 42 SEA SSS SAM L1



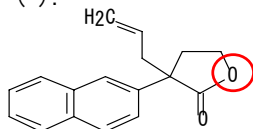
=> D SCAN

L2 42 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN

IN 2(3H)-Furanone, dihydro-3-(2-naphthalenyl)-3-(2-propen-1-yl)-, (-)-

MF C17 H16 O2

Rotation (-).



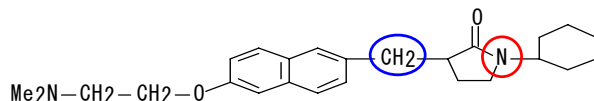
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 1

L2 42 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN

IN 2-Pyrrolidinone, 1-cyclohexyl-3-[[6-[2-(dimethylamino)ethoxy]-2-naphthalenyl]methyl]-

MF C25 H34 N2 O2

CI COM



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



=> S L1 FUL ← フルファイル検索を実行する (24,200 円)
FULL SEARCH INITIATED 17:03:39 FILE 'REGISTRY'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 435984 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 435984 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.02

961 ANSWERS

L3 961 SEA SSS FUL L1

=> S L3 AND P/DT.CA
38438409 P/DT.CA
L4 522 L3 AND P/DT.CA

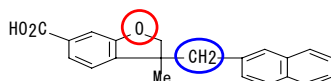
L3 (961 件) の物質で特許に記載されている物質に
限定する (702 円)
/DT.CA : CAplus/CA ファイルの資料種類で限定

=> S L4 AND PREP/RL.P
15062040 PREP/RL.P
L5 485 L4 AND PREP/RL.P

特許中で特定物質として合成されている物質に
限定する (702 円)
/RL.P : 特定物質として索引された特許レコード
で付与されているスーパーロールで限定

=> D SCAN

L5 485 ANSWERS REGISTRY COPYRI
IN 6-Benzofurancarboxylic acid, 2,3-dihydro-3-methyl-3-(2-naphthalenylmethyl)-
MF C21 H18 O3



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



JAICI 社団法人化学情報協会

2011/02

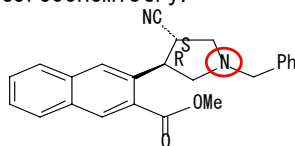
STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

79

=> D IDERL 1
L5 ANSWER 1 OF 485 REGISTRY COPYRIGHT
RN 1256599-53-7 REGISTRY
ED Entered STN: 15 Dec 2010
CN 2-Naphthalenecarboxylic acid, 3-[(3R,4S)-4-cyano-1-(phenylmethyl)-3-
pyrrolidinyl]-, methyl ester, rel- (CA INDEX NAME)
FS STEREOSEARCH
MF C24 H22 N2 O2
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL
DT.CA CAplus document type: Patent
RL.P Roles from patents: PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)

IDERL 表示形式
IDE (デフォルト) + CAplus ファイルの
スーパーロールと資料種類が表示される
(265 円/件 : IDE 表示形式と同じ料金)

Relative stereochemistry.



CAplus ファイルの資料種類

CAplus ファイルのスーパーロール

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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



JAICI 社団法人化学情報協会

2011/02

STN おさらいセミナー - 基礎からの REGISTRY

80

参考情報 – リフレッシュセミナー

- **REGISTRY ファイル – 構造検索テクニック**
 - 構造作図のポイント, 立体化学構造検索, INCOMPLETE の対処方法

<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-registrystr.pdf>

- **REGISTRY ファイル – 検索テクニック**
 - 環系データ検索, 分子式関連検索, 標識化合物の検索

<http://www.jaici.or.jp/stn/ref-registry.pdf>

- **REGISTRY ファイル – 検索テクニック 2**
 - 塩の検索方法, 結合非水素数

<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-registry2.pdf>



■ ヘルプデスク



・ 化学情報協会（JAICI）の問い合わせ先

- ヘルプデスク（STN の技術的な内容について）

TEL 0120-003-462

FAX 03-5978-3600

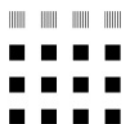
E-mail support@jaici.or.jp

- そのほかの内容について（契約、住所・担当者変更等）

TEL 0120-151-462

FAX 03-5978-3600

E-mail customer@jaici.or.jp



JAICI 社団法人 化学情報協会

情報事業部

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
サービス全般 TEL: 0120-151-462

E-mail: customer@jaici.or.jp

ヘルプデスク TEL: 0120-003-462

E-mail: support@jaici.or.jp

FAX: 03-5978-3600 URL: www.jaici.or.jp