CAS SciFinder^{n} ポリマー検索の概要　（中上級編）

＊　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 11

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
TEL: 0120-003-462 FAX: 03-5978-4090
URL: www.jaici.or.jp
E-mail: support@jaici.or.jp

ポリマーの例

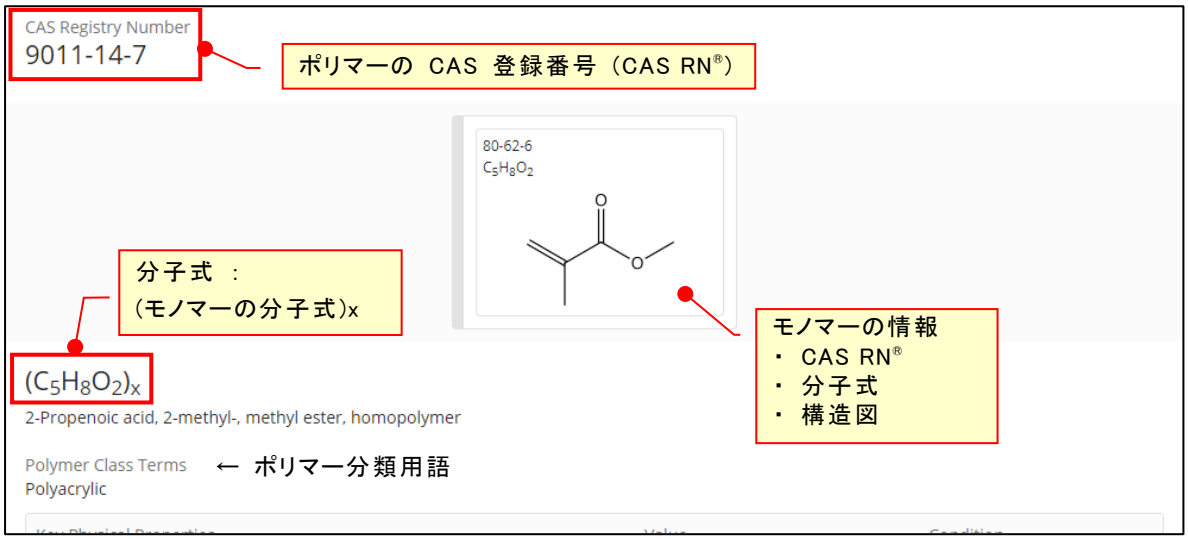
大部分のポリマーは，ポリマーの主鎖を構成する「原料モノマー」に基づいて登録される

付加重合系ポリマー

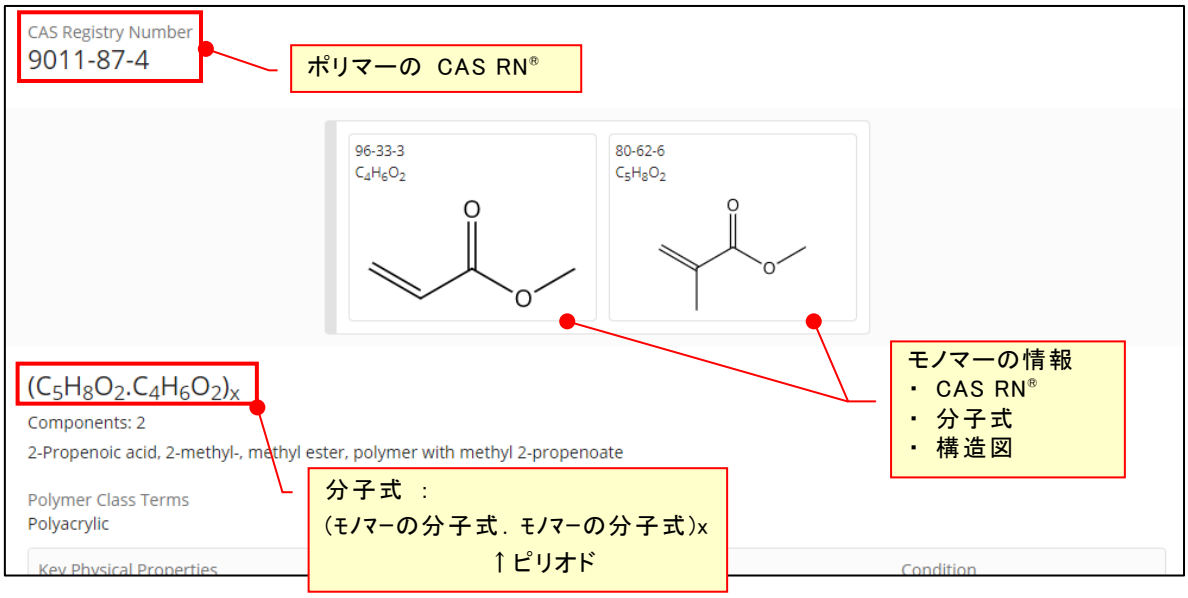
主に，二重結合や三重結合の付加重合によって形成される，炭素鎖主体のポリマー
（例）ビニルポリマー，ポリオレフィン，アクリル樹脂，ポリアセチレン，ジエンポリマーなど

■ 原料モノマーを成分として登録

ホモポリマー



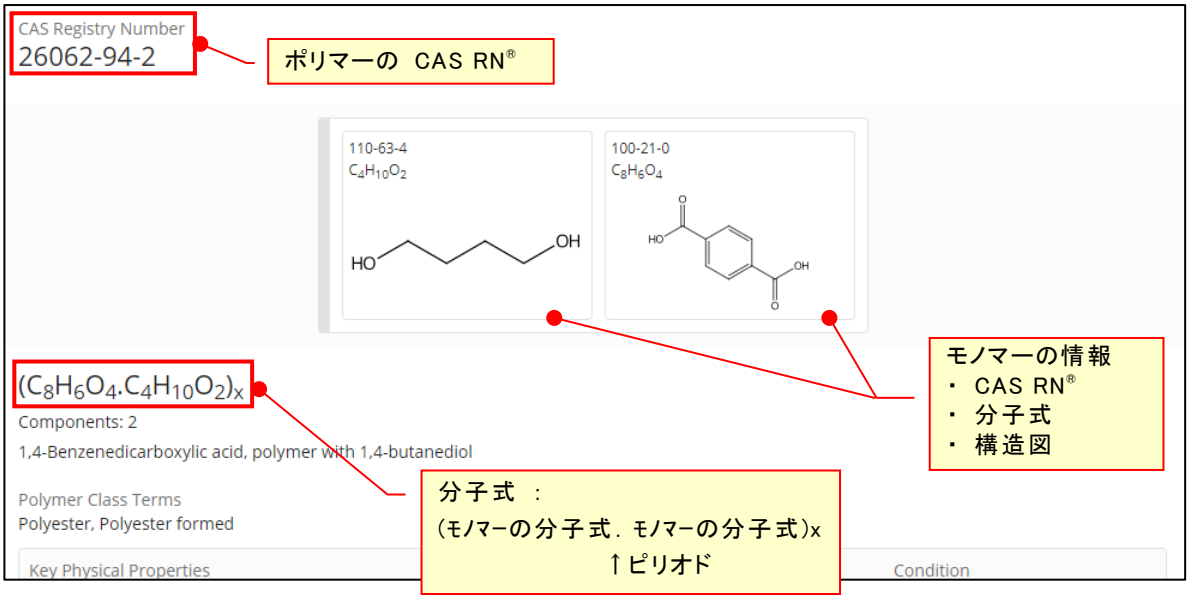
コポリマー



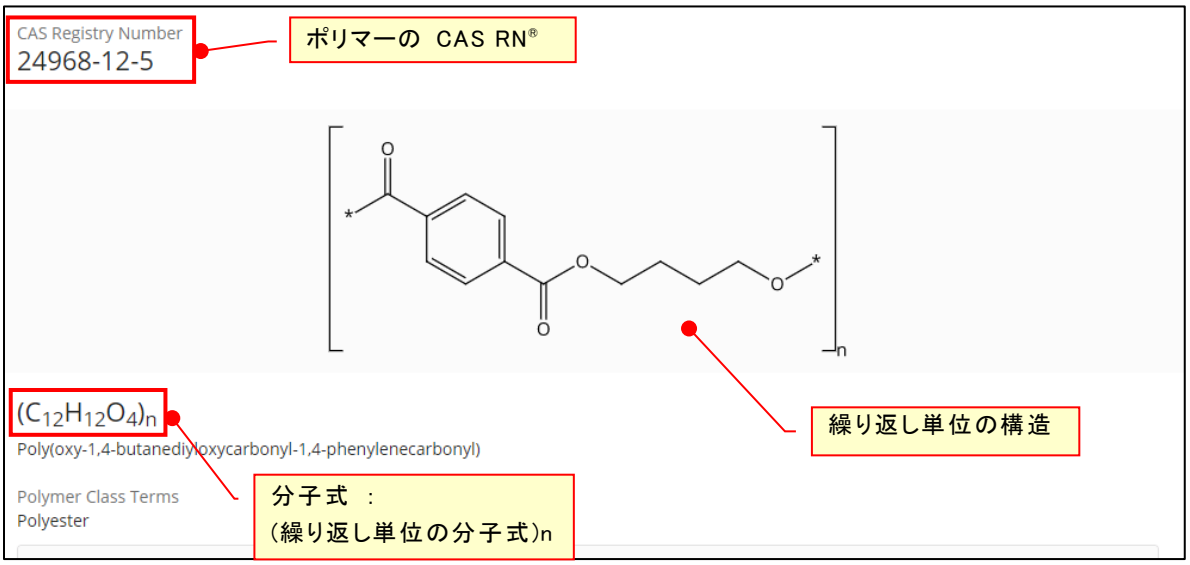
縮合系ポリマー

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

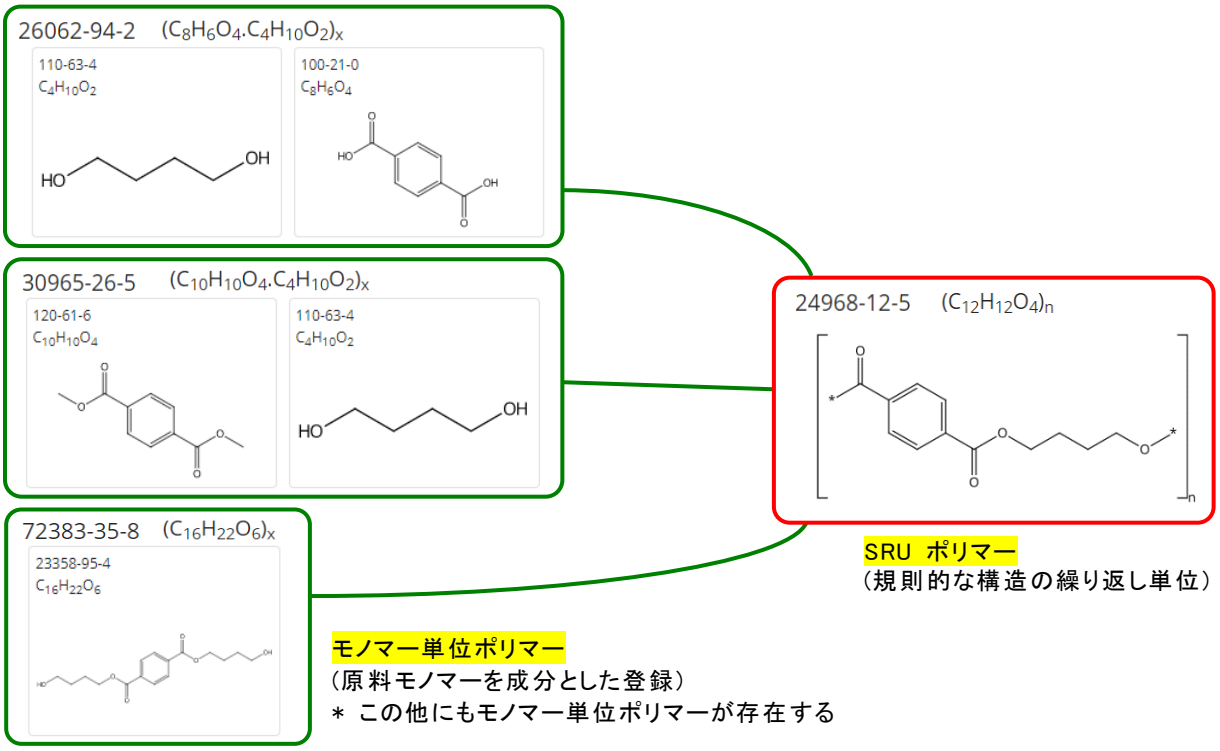


■ 規則的な構造の繰り返し単位で登録（SRU（Structural Repeating Unit）ポリマー）



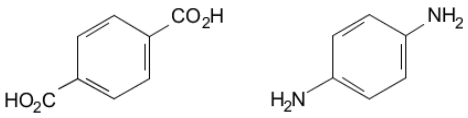
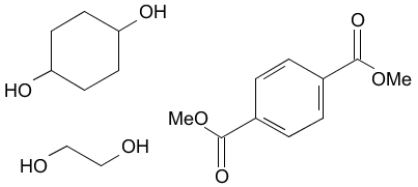
– 縮合系ポリマーは，モノマー単位ポリマー（原料モノマーを成分とした登録）と，SRU ポリマー（規則的な構造の繰り返し単位）で登録される場合がある．

（例）SRU ポリマー（CAS RN® 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



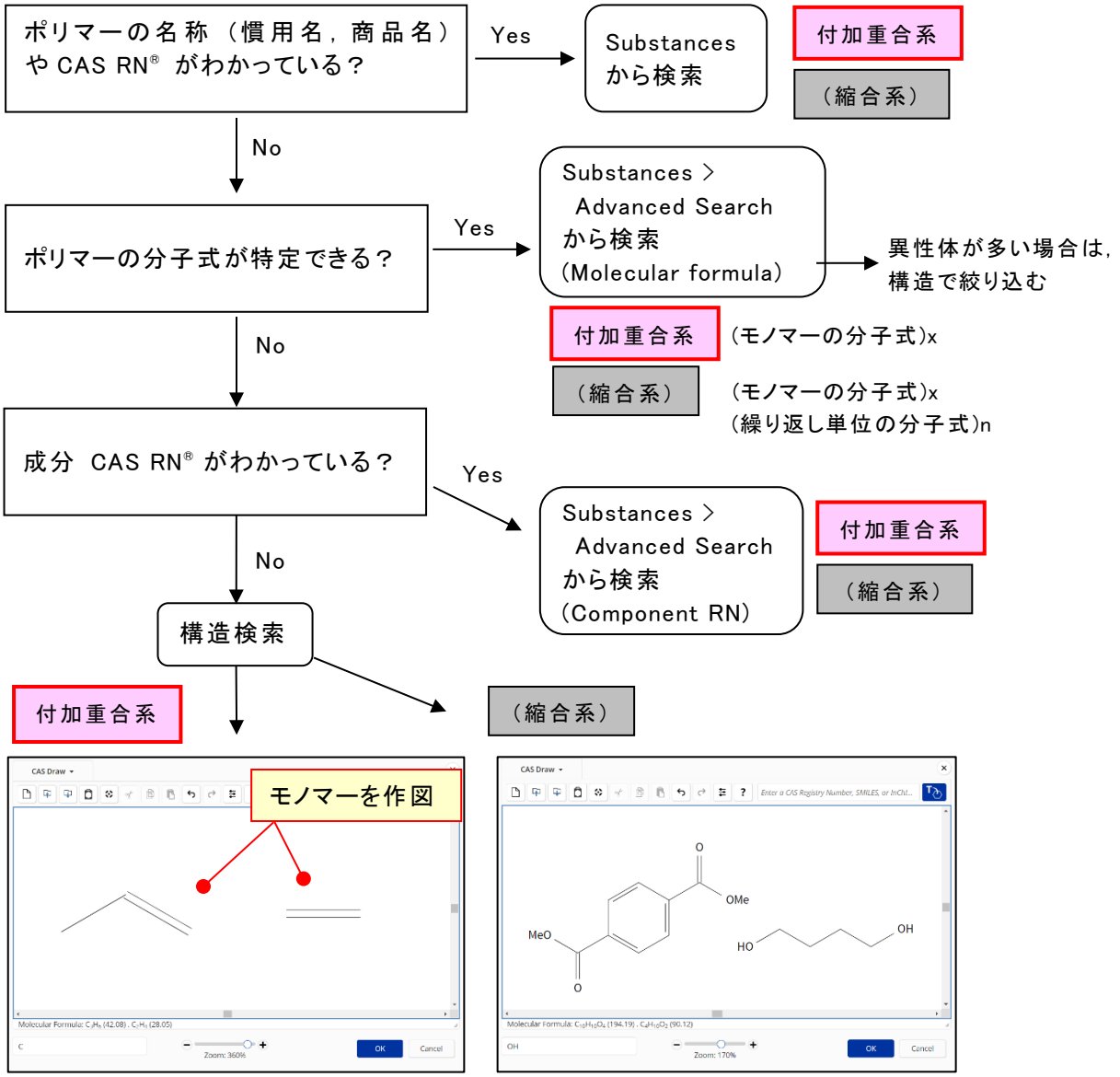
－ 縮合系ポリマーを網羅的に検索するには，原料モノマーを考慮したモノマー単位ポリマーの検索と，SRU ポリマーの検索が必要である．検索システム STN では，上記のような「実質的には同じポリマーでありながら，各々独自の CAS RN® を持つポリマー」を一括検索することができる．

■ 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（ﾎﾟﾘｴﾁﾚﾝｸﾞﾘｺｰﾙ） PPG（ﾎﾟﾘﾌﾟﾛﾋﾟﾚﾝｸﾞﾘｺｰﾙ） PET（ﾎﾟﾘｴﾁﾚﾝﾃﾚﾌﾀﾚｰﾄ）
	・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	○	×	 上記 3 種から成るポリマー

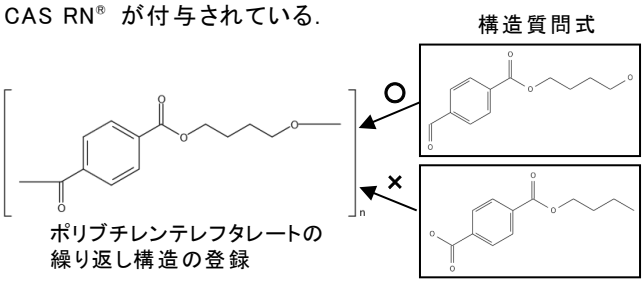
ポリマー検索の手順

■ ポリマー検索は、通常以下のチャートにしたがって行う



（注意 1）
モノマーの種類が違えば別の化合物とみなし，異なる CAS RN® が付与されている．

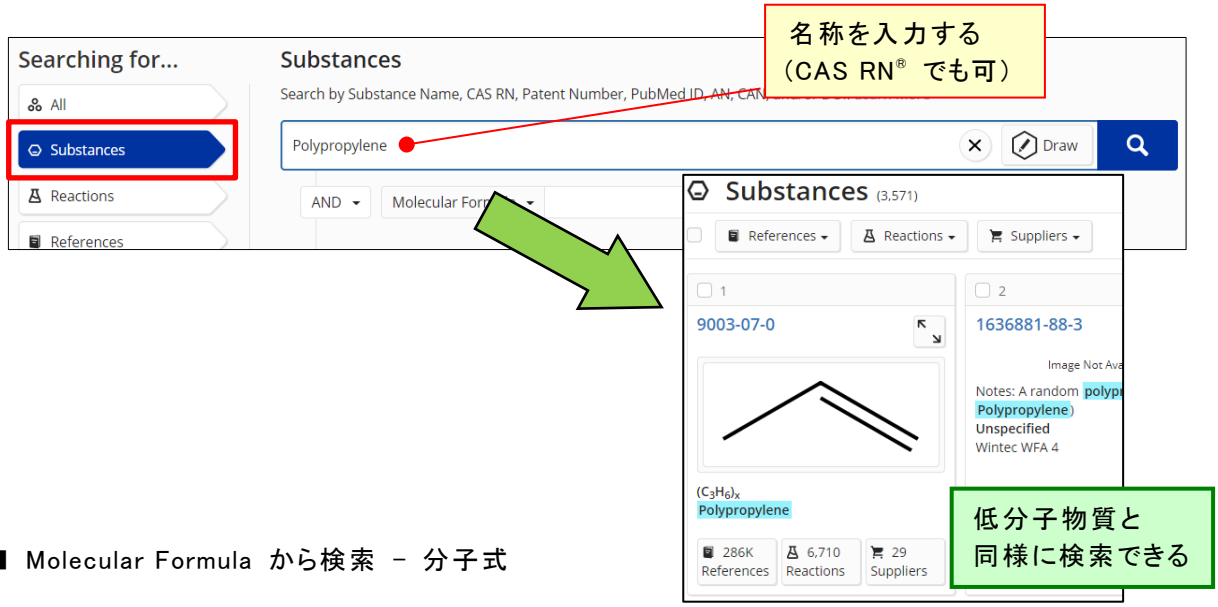
（注意 2）
繰り返し構造（SRU ポリマー）は，登録された通りの繰り返し構造を作図しないとヒットしない．



縮合系ポリマーの検索は，検索システム STN がおすすめです．網羅的な縮合系ポリマーの検索は，STN を利用できる情報担当者にご相談ください．

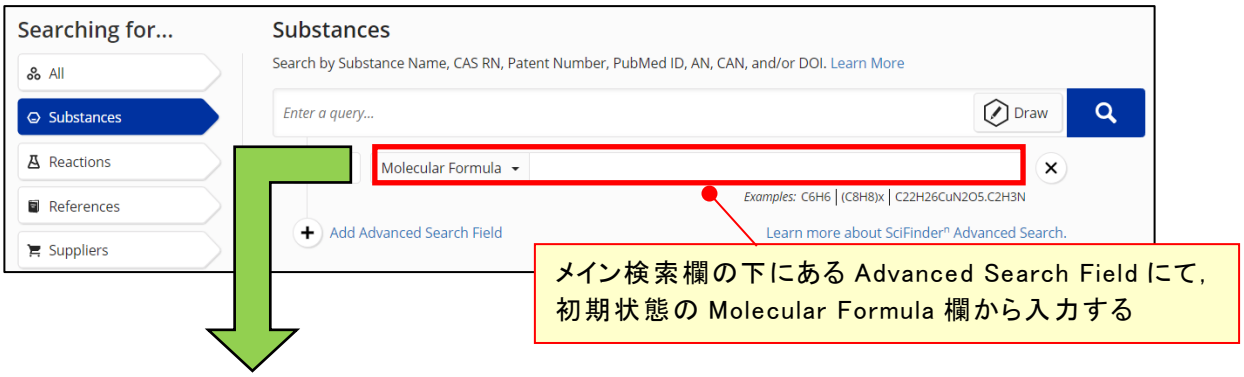
ポリマーの基本的な検索例

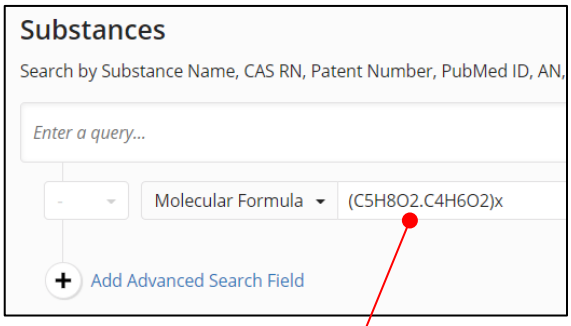
■ Substances から検索 － 名称や CAS RN®



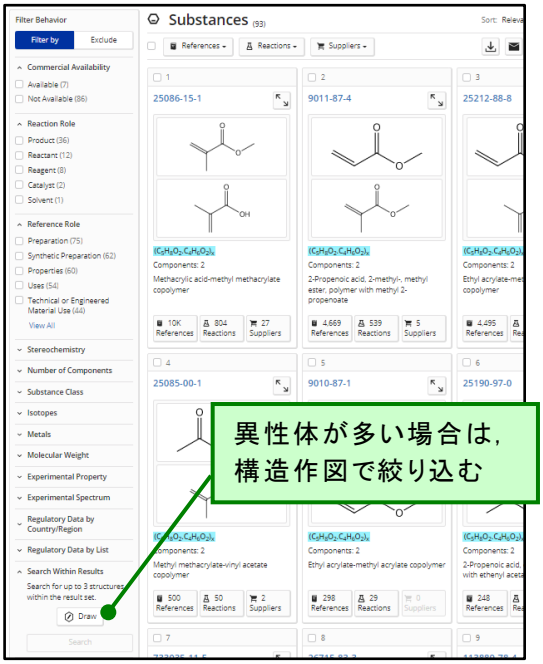
■ Molecular Formula から検索 － 分子式

・ 構成モノマーすべてが特定できる場合に検索可



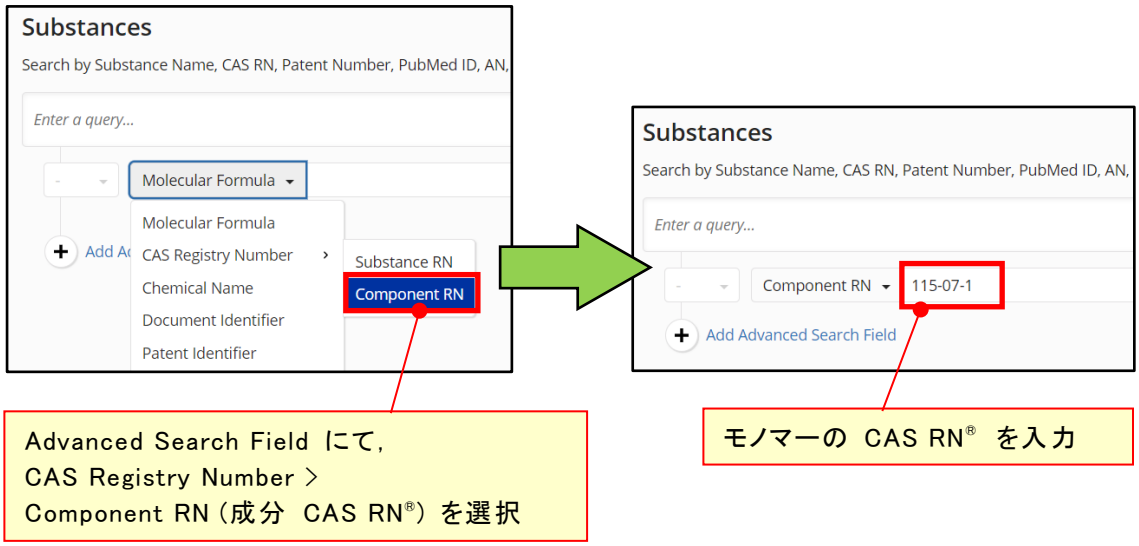


・各モノマーをピリオド（. ）で区切る
・分子式全体をカッコでくくり，
その後に X をつける
例）(C5H8O2.C4H6O2)x



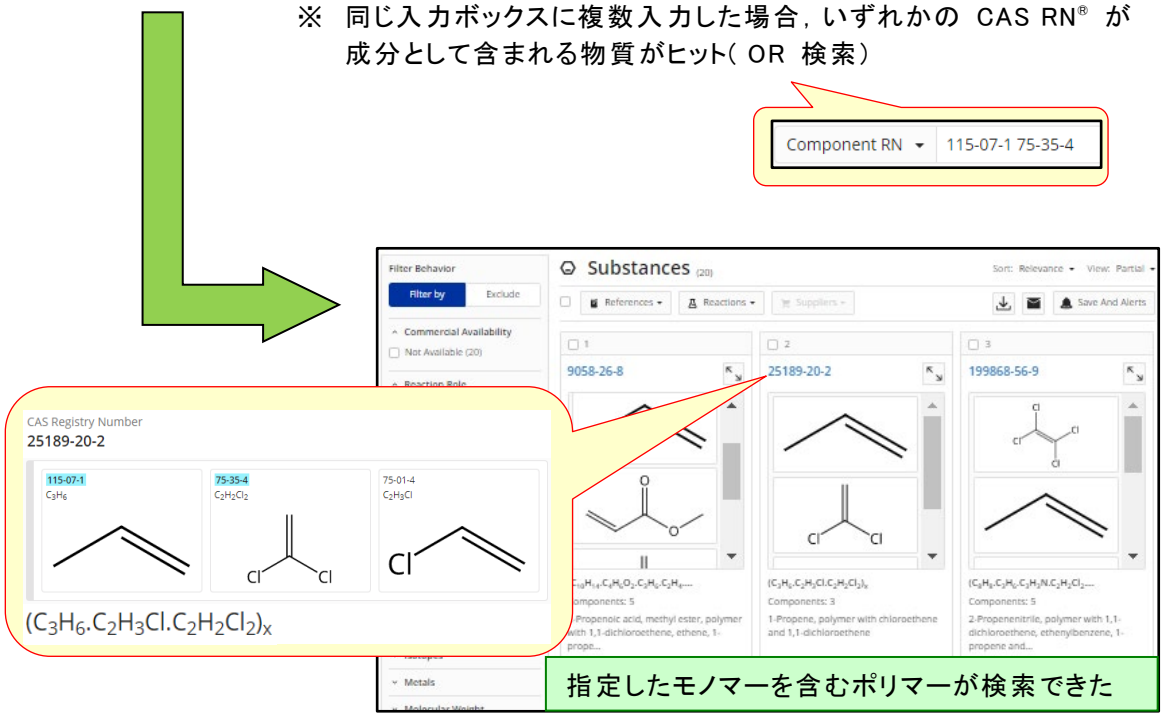
■ 成分 CAS RN® を利用した検索

・ モノマーの CAS RN® が特定できる場合に検索可



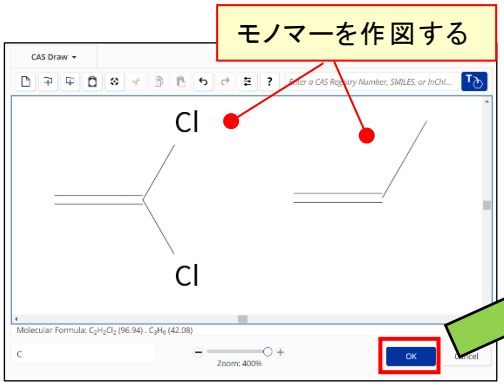
・ 複数の CAS RN® すべてが含まれる物質を検索したい場合は，＋アイコンまたは Advanced Search Field のリンクをクリックして入力ボックスを追加し，AND 演算子でかけ合わせる

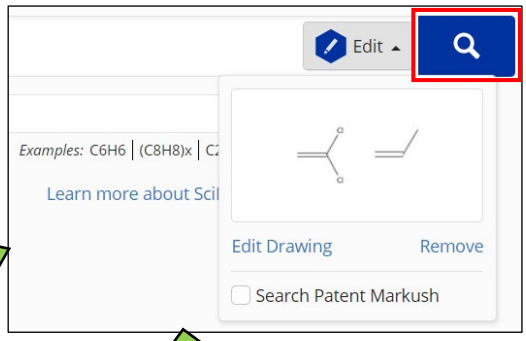
※ 同じ入力ボックスに複数入力した場合，いずれかの CAS RN® が成分として含まれる物質がヒット（OR 検索）



■ 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





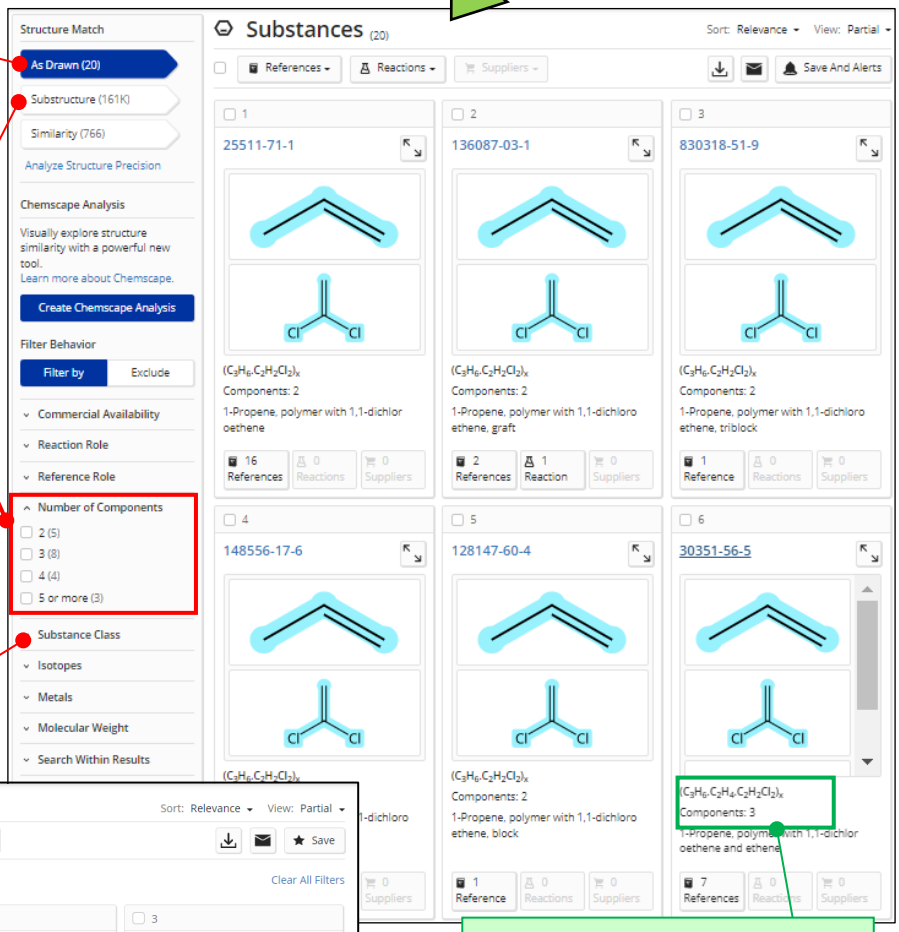
完全一致構造検索結果
→ As Drawn

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

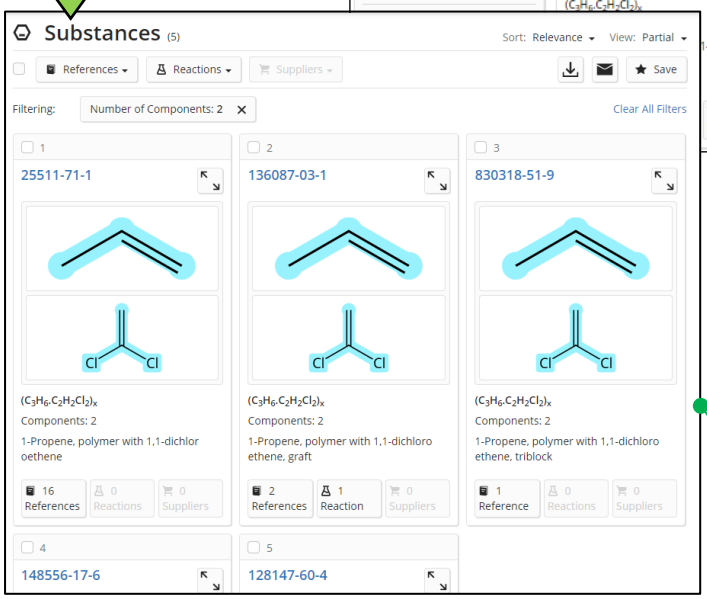
すべての構成モノマーが特定できている場合，作図した成分のみに限定

2 (5)

ポリマーに限定

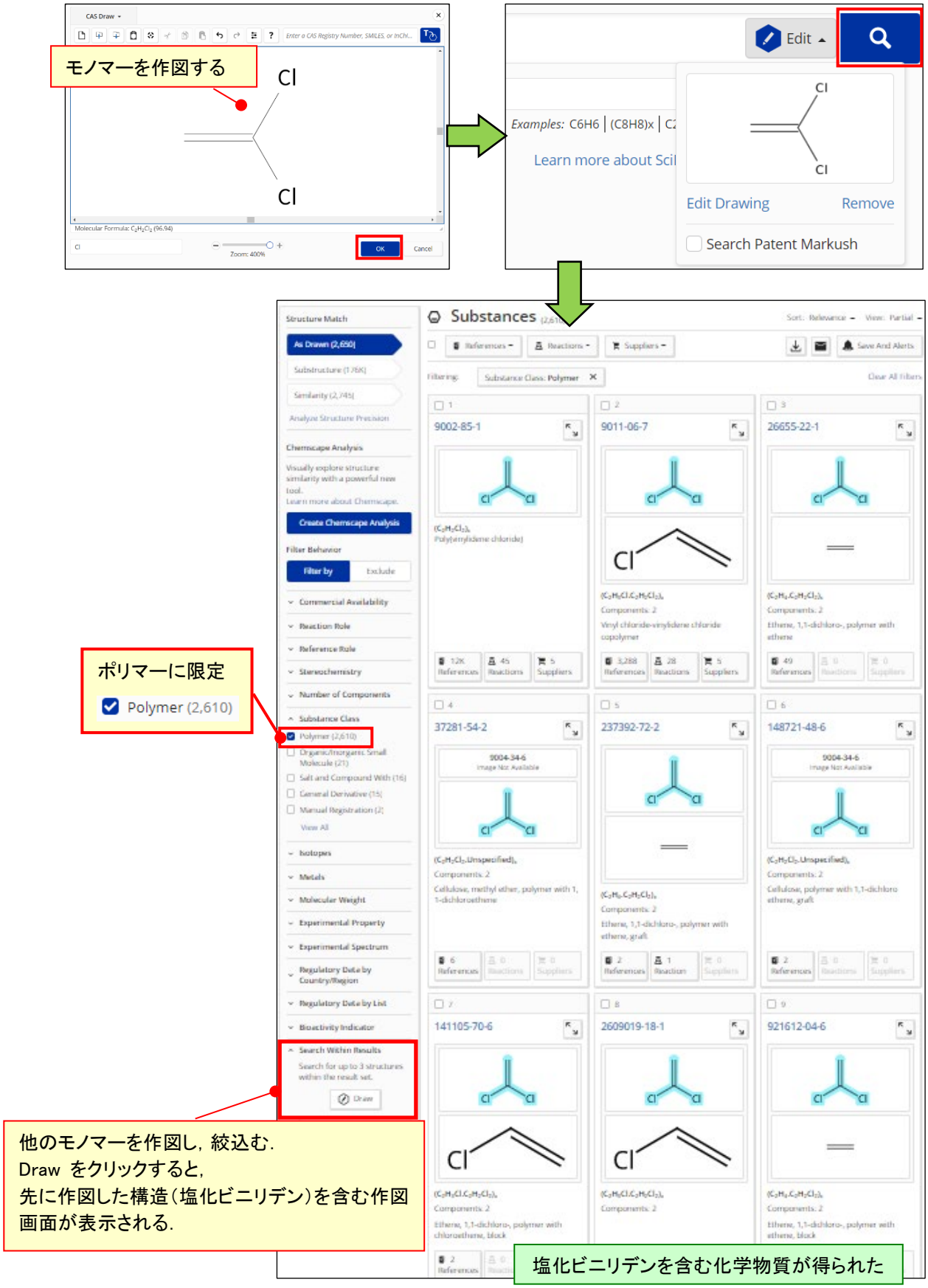


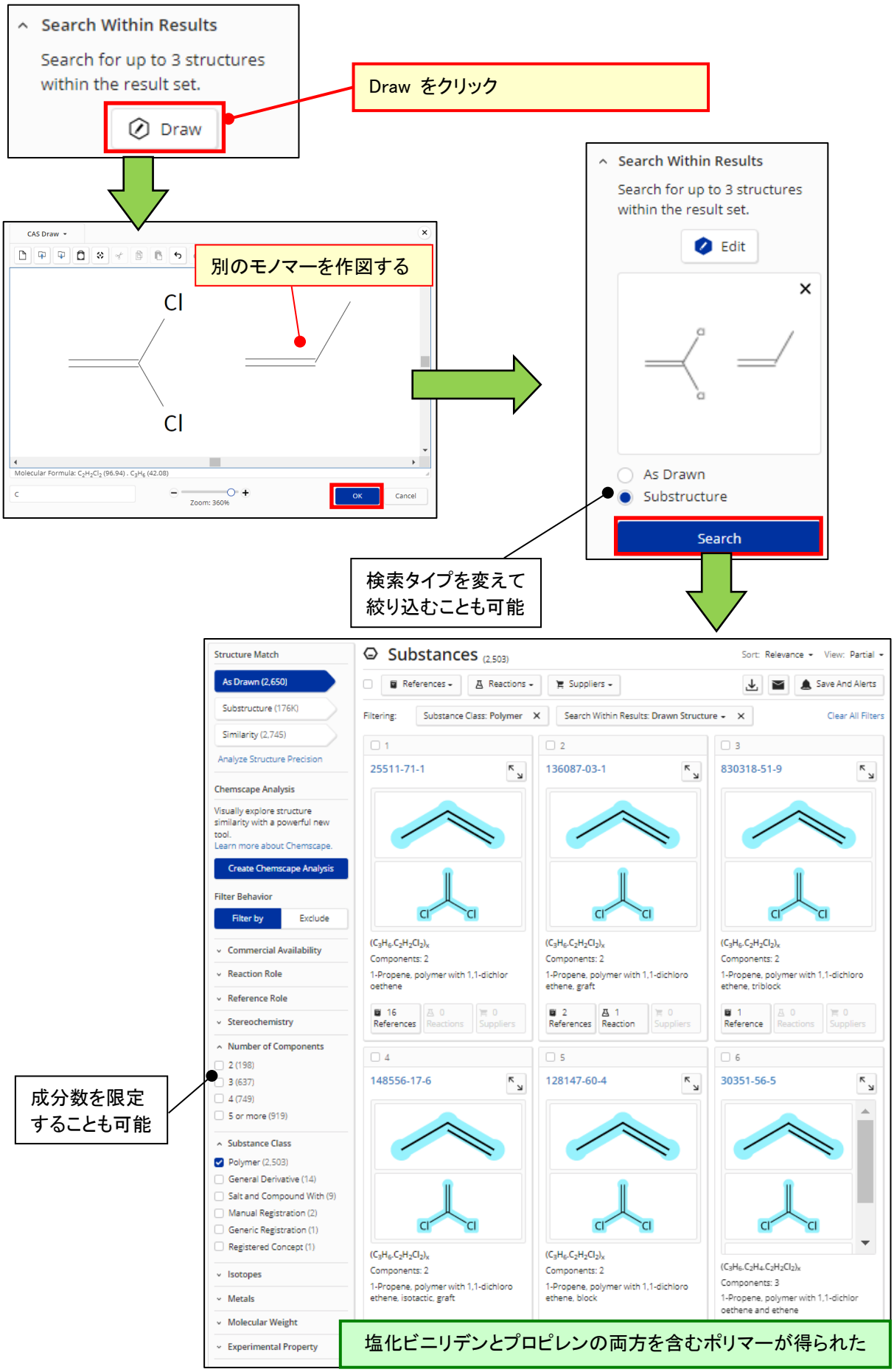
3 成分で構成されるポリマー．別のモノマー（C_2H_4 ：エテン）も含む



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，Search Within Results で他のモノマーを同一画面に作図し絞込み検索する




Search Within Results
Search for up to 3 structures within the result set.
Draw
Draw をクリック
CAS Draw
別のモノマーを作図する
Cl
Cl
Molecular Formula: C2H2Cl2 (96.94) . C3H6 (42.08)
OK
Cancel
Zoom: 360%
Search Within Results
Search for up to 3 structures within the result set.
Edit
As Drawn
Substructure
Search
検索タイプを変えて絞り込むことも可能
Structure Match
As Drawn (2,650)
Substructure (176K)
Similarity (2,745)
Analyze Structure Precision
Chemscape Analysis
Visually explore structure similarity with a powerful new tool.
Learn more about Chemscape.
Create Chemscape Analysis
Filter Behavior
Filter by
Exclude
Commercial Availability
Reaction Role
Reference Role
Stereochemistry
Number of Components
2 (198)
3 (637)
4 (749)
5 or more (919)
Substance Class
Polymer (2,503)
General Derivative (14)
Salt and Compound With (9)
Manual Registration (2)
Generic Registration (1)
Registered Concept (1)
Isotopes
Metals
Molecular Weight
Experimental Property
成分数を限定することも可能
Substances (2,503)
Sort: Relevance
View: Partial
References
Reactions
Suppliers
Save And Alerts
Filtering:
Substance Class: Polymer
Search Within Results: Drawn Structure
Clear All Filters
25511-71-1
136087-03-1
830318-51-9
148556-17-6
128147-60-4
30351-56-5
Components: 2
1-Propene, polymer with 1,1-dichloroethene
1-Propene, polymer with 1,1-dichloroethene, graft
1-Propene, polymer with 1,1-dichloroethene, triblock
1-Propene, polymer with 1,1-dichloroethene, isotactic, graft
1-Propene, polymer with 1,1-dichloroethene, block
Components: 3
1-Propene, polymer with 1,1-dichloroethene and ethene
塩化ビニリデンとプロピ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

■ CAS SciFinder^{n} 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.

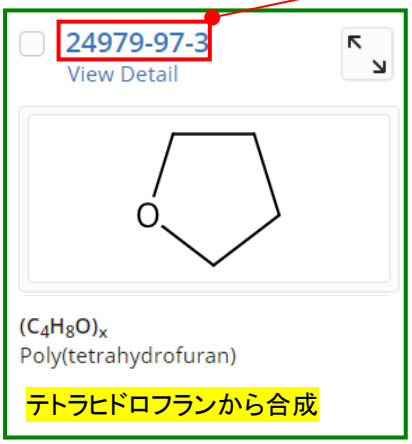
■ ルール 1 ：

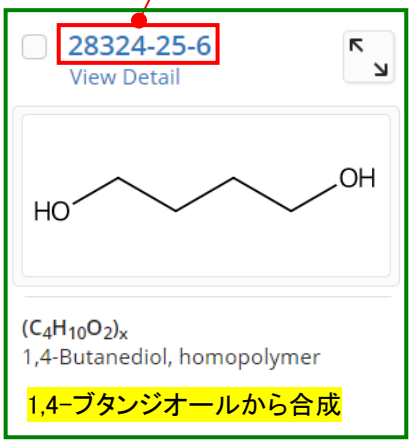
大部分のポリマーは，ポリマーの主鎖を構成する「原料モノマー」に基づいて登録される

・ 原料が異なれば，同じポリマーであっても 異なる CAS RN® 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® 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

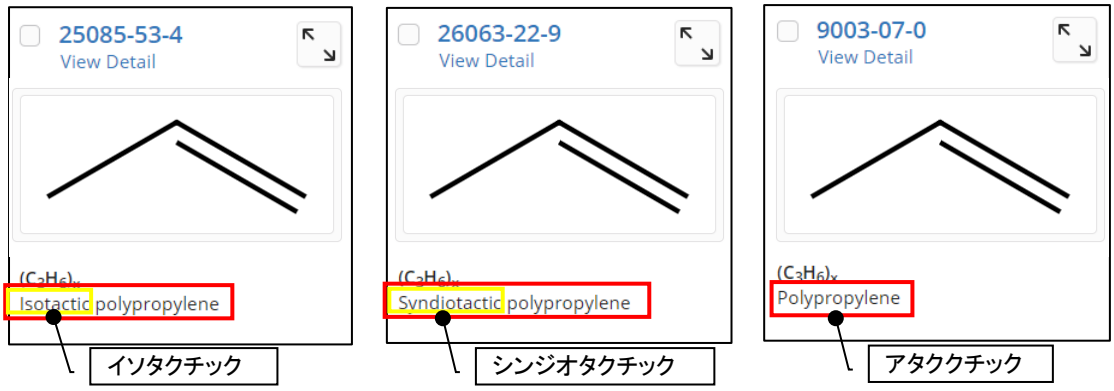
■ ルール 2 ： 同じ「原料モノマー」からであっても，異なるポリマーとしてみなされる場合がある．

・ 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（タクチシチー ： 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．



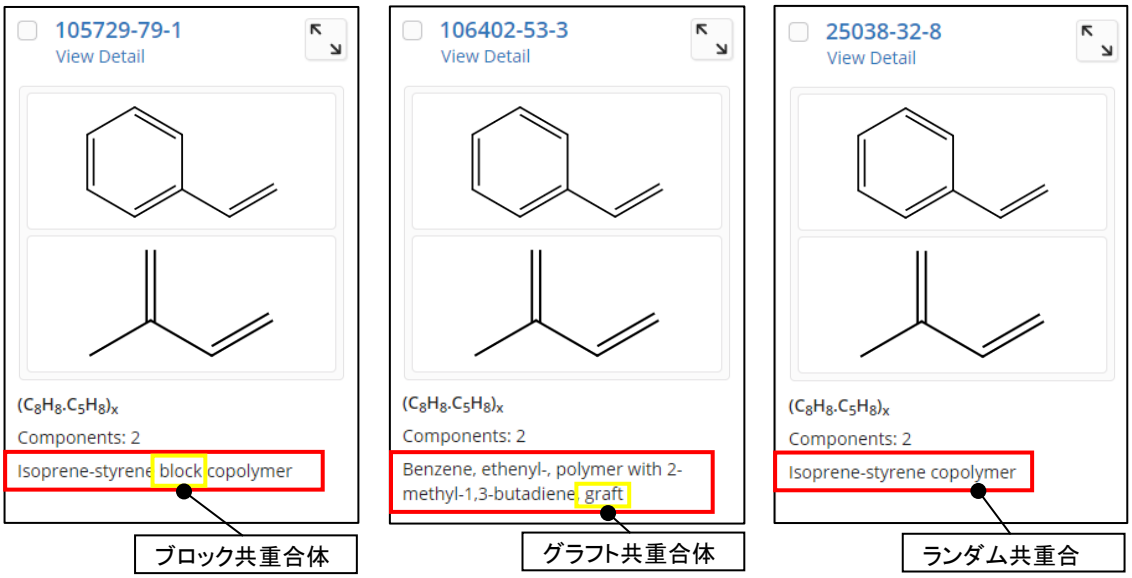
化学物質名称で判断できる

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．

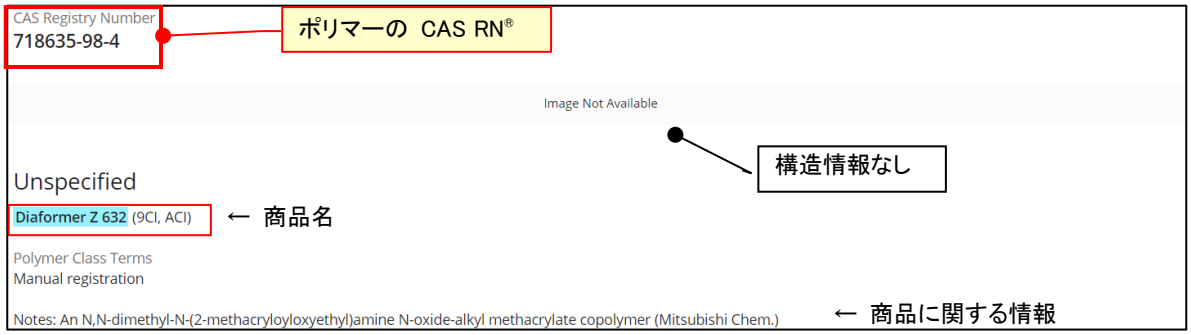


化学物質名称で判断できる

■ その他のポリマー

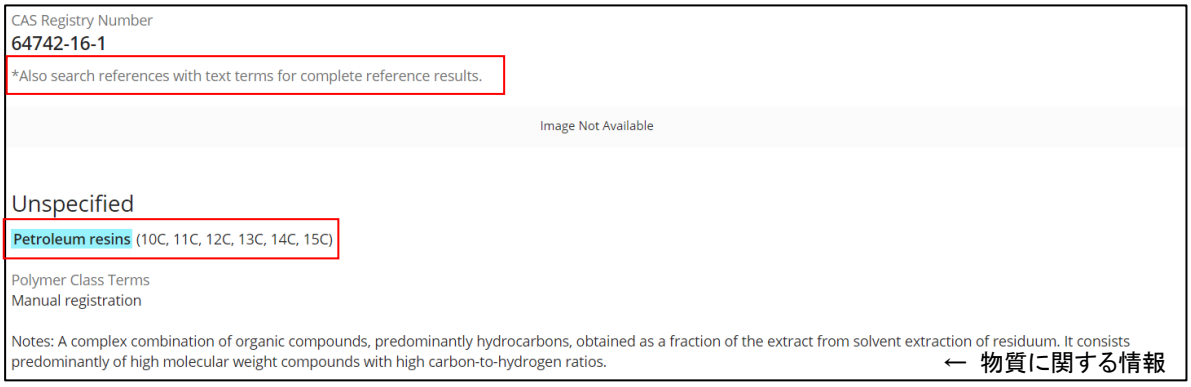
・ 商品名ポリマー ： 構造が不明で商品名そのものを CA 索引名として登録

－ 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．



・ ＊（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．



JAICI
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
TEL: 0120-003-462 FAX: 03-5978-4090
URL: www.jaici.or.jp
E-mail: support@jaici.or.jp

202204