

CAS SciFinder®

文献中の物質の役割 (ロール)

化学情報協会 情報事業部
202503

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



目次

- 化学物質索引とロール
- ロールを用いた回答の絞り込み
- ロールと階層関係
- ロールの定義

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



化学物質索引とロール

3

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



化学物質索引とロール

文献の主旨や著者や発明者が強調している点をもとに、重要な化学物質を索引している

- 物質情報と一緒に、その物質が文献中で示す役割(ロール)も索引している

Preparation of heterocyclic derivative as mitogen-activated protein kinase (MEK) inhibitor 文献の詳細画面

245 588 0 Citation Map

In this Reference

- IPC Data
- CAS Concepts
- Substances
- Reactions

Substances

3061498-54-9

C17H9F4NO7S
Methanesulfonic acid, 1,1,1-trifluoro-, 3-[(2-fluoro-3-nitrophenyl)methyl]-2-oxo...

PatentPak

Role: Reactant, Synthetic Preparation, Reactant or Reagent, Preparation

3061498-54-9

C17H9F4NO7S
Methanesulfonic acid, 1,1,1-trifluoro-, 3-[(2-fluoro-3-nitrophenyl)methyl]-2-oxo...

PatentPak

Role: Reactant, Synthetic Preparation, Reactant or Reagent, Preparation

3061498-51-6

Role: Pharmacological Activity, Synthetic Preparation, Therapeutic Use, Biological Study, Preparation, Uses

ロールを確認することで、原文献を読まなくても、文献中の物質の役割を確認することができる

4

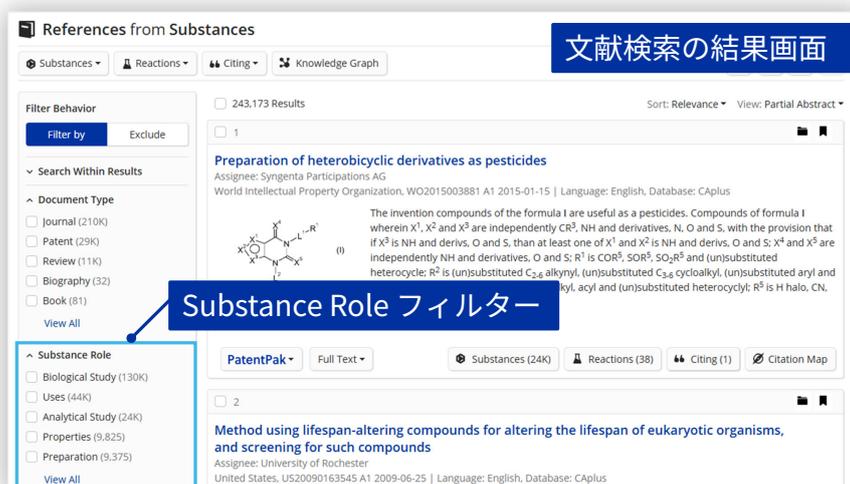
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



ルールを用いた回答の絞り込み

ルールを用いた文献回答の絞り込み

文献検索の結果画面で、Substance Role フィルターでルールを限定すると、その役割をもつ物質の文献に限定できる



References from Substances

Document Type

- Journal (210K)
- Patent (29K)
- Review (11K)
- Biography (32)
- Book (81)

Substance Role

- Biological Study (130K)
- Uses (44K)
- Analytical Study (24K)
- Properties (9,825)
- Preparation (9,375)

Preparation of heterobicyclic derivatives as pesticides

Assignee: Syngenta Participations AG
World Intellectual Property Organization, WO2015003881 A1 2015-01-15 | Language: English, Database: CAplus

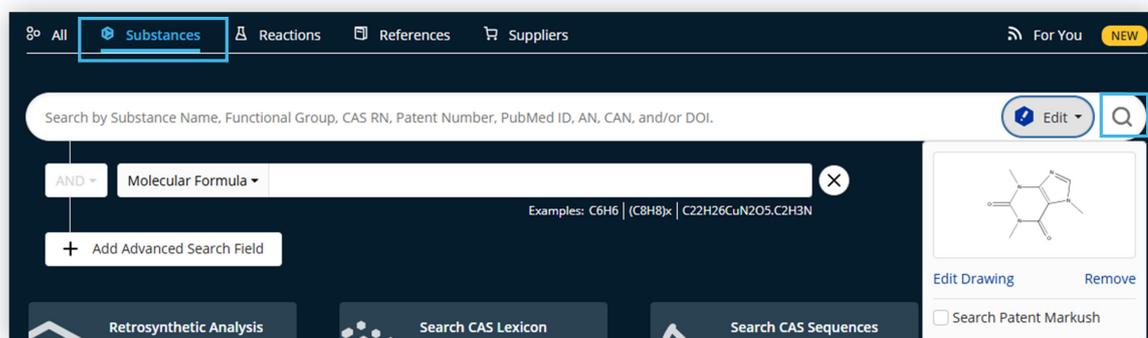
The invention compounds of the formula I are useful as pesticides. Compounds of formula I wherein X¹, X² and X³ are independently CR², NH and derivatives, N, O and S, with the provision that if X³ is NH and derivs, O and S, than at least one of X¹ and X² is NH and derivs, O and S, X⁴ and X⁵ are independently NH and derivatives, O and S; R¹ is COR⁵, SO₂R⁵ and (un)substituted heterocycle; R² is (un)substituted C₂₋₆ alkynyl, (un)substituted C₃₋₆ cycloalkyl, (un)substituted aryl and klyl, acyl and (un)substituted heterocycle; R⁵ is H halo, CN,

- 物質情報を介して文献を検索した時のみ、Substance Role フィルターが表示される

検索例

カフェイン (CAS RN® : 58-08-2) の構造を有する物質の合成文献を調べる

1. Substances で化学物質を検索



7 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



検索した物質に関する文献検索

2. References ボタンをクリックし、物質に対する文献情報を得る

選した物質に関する文献を検索

物質の選択

ヒットした全物質に関する文献を検索

特定の物質に関する文献を検索

Substance	References	Reactions	Suppliers
58-08-2	73K	1,818	133
72238-85-8	28	3	36
26351-03-1	20	4	30

8 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



ルールでの限定

Substance Role フィルターの利用

3. Substance Role フィルターの Preparation にチェックをつけ合成文献に限定する

The screenshot shows the 'References from Substances' interface. On the left, the 'Substance Role' filter menu is open, with 'Preparation (6,280)' selected. A blue callout box points to this selection with the text: 'Substance Role フィルターで Preparation (合成) を選択'. The main search results area shows a list of results, with the first result titled 'Preparation of heterobicyclic derivatives as pesticides'. A blue callout box points to the title with the text: '1 件目のタイトルをクリックして 詳細情報を表示'. The interface also shows document type filters and other search options.

文献の詳細画面

4. 文献の詳細画面で索引物質を確認する

The screenshot shows the document detail page for 'Preparation of heterobicyclic derivatives as pesticides'. The 'Substances' section is highlighted, showing two entries. A blue callout box points to the 'Substance Role' field of the first entry with the text: 'Substance Role (文献中での役割)'. The first entry is '1644765-32-1' with the role 'Agricultural Use, Biological Study, Unclassified, Prophetic, Synthetic Preparation, Biological Study, Uses, Preparation'. The second entry is '1644791-88-7' with the role 'Agricultural Use, Biological Study, Unclassified, Prophetic, Synthetic Preparation, Biological Study, Uses, Preparation'. A blue callout box at the top right of the substances section says '文献の物質索引'.

ルールを用いた物質回答の絞り込み

Reference Role フィルター

物質検索の結果画面の Reference Role フィルターでルールを限定すると、その役割をもつ物質に限定できる

The image shows two screenshots of the CAS search interface. The left screenshot shows the 'Substances search for drawn structure' page with the 'Reference Role' filter expanded. A blue box highlights the 'View All' button at the bottom of the filter list. A text box says: '付与されている全ルールを確認するには View All をクリックする'. The right screenshot shows the search results for 'Indole' (120-72-9) with the 'Reference Role' filter set to 'Natural Product Occurrence'. A blue box highlights the filter name and the 'View All' button. A text box says: '天然物の起源・分布に関する物質に限定された'.

物質検索の結果画面

天然物の起源・分布に関する物質に限定された

付与されている全ルールを確認するには View All をクリックする

- Food or Feed Use (6,784)
- Formation, Unclassified (6,439)
- Byproduct (6,391)
- Natural Product Occurrence (5,743)
- Other Use, Unclassified (4,818)
- Polymer in Formulation (2,845)
- Biochemical Process (2,298)

ルールと階層関係

ルールと階層関係 (1/6)

スーパールール全 8 種類、特定ルール全 53 種類

- 特定ルールを選んだ場合、選んだルールのみで絞り込まれる
- スーパールールを選ぶと、その下位にある特定ルールも含めて絞り込まれる
- 各ルールの詳細な定義は、「ルールの定義」項目を参照

スーパールール (付与期間)	特定ルール	定義	付与年代
Analytical Study 分析に関する研究 (1967-)	Analyte	分析対象	1967-
	Analytical Matrix	分析マトリックス	1967-
	Analytical Reagent Use	分析試薬用途	1967-
	Analytical Role, Unclassified	上記以外の分析に関する研究	1967-

ルールと階層関係 (2/6)

スーパールール (付与期間)	特定ルール	定義	付与年代
Biological Study 生物学的研究 (1967-)	Adverse Effect	副作用 (毒性を含む)	1967-
	Agricultural Use	農業関連用途	1967-
	Biochemical Process	生化学的プロセス	2002-
	Bioindustrial Manufacture	生化学的工業生産	1967-
	Biological activity or effector, except adverse	副作用を除く生理活性またはエフェクター	1967-2001
	Biosynthetic Preparation	生化学的合成	1967-
	Cosmetic Use	化粧品用途	2002-
	Diagnostic Use	診断用途	2002-
	Food or Feed Use	食品または飼料用途	1967-
	Natural Product Occurrence	天然物の起源・分布	2002-
	Pharmacokinetics	薬物動態	2002-
	Pharmacological Activity	薬理活性	2002-
	Therapeutic Use	医薬用途	1967-
	Biological Use, Unclassified	上記以外の生物関連用途	1967-
	Biological Study, Unclassified	上記以外の生物学的研究	1967-

ルールと階層関係 (3/6)

スーパーロール (付与期間)	特定ロール	定義	付与年代
Formation, Non-preparative 生成 (意図的合成ではない) (1967-)	Geological or Astronomical Formation	地質学的, 天文学的生成	1967-
	Formation, Unclassified	上記以外の生成	1967-
スーパーロール (付与期間)	特定ロール	定義	付与年代
Occurrence 起源・分布 (1967-)	Geological or Astronomical Occurrence	地質学的, 天文学的起源・分布	1967-
	Natural Product Occurrence	天然物の起源・分布	2002-
	Occurrence, Unclassified	汚染物質	1967-
	Pollutant	汚染物質	1967-
	Occurrence, Unclassified	上記以外の起源・分布	1967-
スーパーロール (付与期間)	特定ロール	定義	付与年代
Preparation 製造 (1907-)	Bioindustrial Manufacture	生化学的工業生産	1967-
	Biosynthetic Preparation	生化学的合成	1967-
	Byproduct	副生成物	1967-
	Industrial Manufacture	化学的工業生産	1967-
	Purification or Recovery	精製	1967-
	Synthetic Preparation	化学合成	1967-

ルールと階層関係 (4/6)

スーパーロール (付与期間)	特定ロール	定義	付与年代
Process プロセス (1967-)	Biochemical Process	生化学的プロセス	2002-
	Geological or Astronomical Process	地質学的, 天文学的プロセス	1967-
	Physical, Engineering or Chemical Process	物理的, 工学的, または化学的プロセス	1967-
	Removal or Disposal	除去または処分	1967-
スーパーロール (付与期間)	特定ロール	定義	付与年代
Reactant or Reagent 反応物または試薬 (1967-)	Reactant	反応物	1967-
	Reagent	試薬	2002-

ルールと階層関係 (5/6)

スーパーロール (付与期間)	特定ロール	定義	付与年代
Uses 用途 (1967-)	Agricultural Use	農業関連用途	1967-
	Analytical Reagent Use	分析試薬用途	1967-
	Catalyst Use	触媒用途	1967-
	Cosmetic Use	化粧品用途	2002-
	Diagnostic Use	診断用途	2002-
	Food or Feed Use	食品または飼料用途	1967-
	Modifier or Additive Use	改良剤または添加物用途	1967-
	Polymer in Formulation	ポリマー組成物	1967-
	Technical or Engineered Material Use	工学・工業材料用途	1967-
	Therapeutic Use	医薬用途	1967-
	Biological Use, Unclassified	上記以外の生物学的用途	1967-
	Other Use, Unclassified	上記以外の用途	1967-

ルールと階層関係 (6/6)

- 下記のスーパーロールには特定ロールが存在しない

スーパーロール	定義	付与年代
Combinatorial Study	コンビナトリアル・ケミストリーに関する研究	2002-
Nanoscale	ナノ材料	1992-
Prophetic Synthesis or Use	Prophetic 物質	1993-

- 下記の特定ロールにはスーパーロールが存在しない

特定ロール	定義	付与年代
Miscellaneous Properties	その他 物性	1967-

ロールの定義

ロールの定義 (1/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Adverse Effect (1967-)	<p>副作用 (毒性を含む) 生体系に対する、または生体系中での、物質の好ましくない影響を示す。このロールは医薬品の副作用、農薬の対象生物以外に対する悪影響などの研究でも付与される。また物質の毒性に関するスクリーニングに対しても、原報で重点となっていれば結果が否定的でも付与される。 例：医薬品の副作用・毒性、物質の光毒性・発癌性・催奇形性・変異原性、疾病の病因と因果関係がある場合 (病理学的状態の誘導に用いられている場合を含む)。</p>
Agricultural Use (1967-)	<p>農業関連用途 農業用途が実証、特許請求、または明らかに意図された物質に付与される。食品および収穫後の作物に使用される物質には Food or Feed Use が付与される。 例：肥料、土壌改良剤、作物・家畜用農薬、家畜の繁殖調節用ホルモン、植物・動物の収量を増やすための成長促進剤・調節剤、あるいはそれらに含まれる物質</p>
Analyte (1967-)	<p>分析対象 診断を含め、分析を意図した材料ないし試料に含まれ、検出、同定、定量分析またはバイオアッセイの対象となる物質に付与される。分析を意図して分離される物質や同定された未知物質にも付与される。 環境試料中の汚染物質が分析される場合は、Analyteと共に Pollutant が付与される。反応あるいはプロセスの結果の確認や、組成情報を得るため通常行われるありふれた分析のように、分析自体が関心の対象でない場合には Analyte は付与されない。</p>

ロールの定義 (2/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Analytical Matrix (1967-)	<p>分析マトリックス 分析試料中の同定や定量の対象でない物質に付与される。分析の目的がその物質自体の同定にあり、通常のありふれた分析手法でない場合は Analyte が付与される。 例：鉄・硫黄クラスター化合物中の硫黄の定量におけるクラスター化合物(*)、鉄鉱石または鉄・ニッケル合金中のニッケルの分析における鉱石(*)や合金(*)、炭酸ストロンチウム中のストロンチウム同位体の存在比の測定における炭酸ストロンチウム(*)、市販の酵素中の特定酵素成分の分析における市販酵素(*) (*がマトリックス)</p>
Analytical Reagent Use (1967-)	<p>分析試薬用途 分析において、試料中の対象物質の検出または定量のために使用する物質に付与される。対象物質と反応して検出可能な生成物を生ずる分析試薬は、その反応が重点であるか、あるいは新規なものである場合に限り、Analytical Reagent Use と共に Reactant が付与される。 例：指示薬 (KHP 滴定におけるフェノールフタレイン)、キレート化剤およびマスキング剤 (金属イオン除去のための EDTA)、抽出剤 (アクチニド抽出のためのリン配位化合物)、酸化・還元剤 (分析対象物質の酸化状態を調整するための KMnO_4)、分析で使用する触媒 (Pt 触媒)、エンザイムアッセイ用酵素 (乳酸塩の分析に用いられる乳酸デヒドロゲナーゼ)、プローブ (遺伝子ないし遺伝子要素の検出に用いるオリゴヌクレオチド)、イムノアッセイで用いる抗体 (抗原またはハプテンの検出または定量に用いられる一次または二次抗体)</p>

ロールの定義 (3/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Analytical Role, Unclassified (1967-)	<p>Analyte, Analytical Matrix, Analytical Reagent Use 以外の分析に関する研究 分析妨害物質、共存物質、分析における補助媒体・支持体・非反応性溶媒、標準ないし参照物質または溶液に付与される。このロール以外の Analytical Study の下位のロールは付与されないが、分析において重要な関与物質とされているものにも付与される。 例：イオン交換体 (ランタノイドの定量の一部として Er と Pr を除去するためのリン酸ジルコニウム)、吸着剤 (選択的ガス除去のためのゼオライト)、クロマトグラフィーの固定相および移動相 (シロキサンまたはシリカ固定相)、センサー成分 (微量化学的水流測定に用いる Si チップ)、緩衝剤 (pH 調整のための炭酸イオン)、標準物質 (米国連邦標準技術局 (NIST) の標準ダイオキシシン)、標準溶液 (原子吸光分析のための NIST 標準金溶液)</p>
Analytical Study (1967-)	<p>分析に関する研究 材料の成分の検出または同定、材料の成分の定量、定性的または定量的バイオアッセイ、物質の分析プロセスでの使用、分析のための物質の分離、未知物質の同定など、分析に重点を置いた研究に関わる物質に付与される。反応あるいはプロセスの確認や組成情報を得るための日常的手段として用いられるありふれた分析では、このロールは付与されない。 例：分析法の開発または改良、ある分析方法による物質の定性または定量分析、定量分析における干渉の対策や検出限界の改善、分析法または分析機器の性能向上のための試薬の開発または改良など</p>

ロールの定義 (4/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Biochemical Process (2002-)	生化学的プロセス 応用プロセスと反応メカニズムの研究において、生化学系で作用を受けた、または変換された物質に付与される。このようなプロセスには商業的関心がある場合が多い。 例：発酵基質変換 (ワインの発酵でエタノールに変換される糖類)、地下水の土着細菌によるクロロベンゼン類の分解、プラスチックの生分解、材料の生物付着 物質が生体系中で単に作用を受けたり、変換・輸送されていたりする場合は、Biological Study, Unclassified が付与される。生化学的な段階を経た合成反応における反応物には Reactant が付与される。
Bioindustrial Manufacture (1967-)	生化学的工業生産 商業規模で生化学的に生産される物質に付与される。多段階合成では、生化学的段階が重要または新規であれば、それ以降の化学的段階の生成物に Industrial Manufacture と共に Bioindustrial Manufacture が付与される。

ロールの定義 (5/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Biological activity or effector, except adverse (1967-2001)	副作用を除く生理活性またはエフェクター 生理活性や、生体分子・生体系に対する (副作用を除く) 生物学的影響が研究されている物質に付与される。生体分子・生体系に対する物質の作用機構が研究されている場合にも付与される。 生理活性の例：抗腫瘍剤、酵素、ホルモン、免疫調節物質、医薬、栄養素、農薬 (対象生物における) エフェクターの例：活性化剤、阻害剤、活性調節因子、増強剤、メディエーター このロールは 2002 年以降の付与が中止されている。2002 年以降は BAC の代わりに PAC (薬理活性)、PKT (薬物動態)、BSU (その他の生物学的研究) のいずれかのロールが付与される。
Biological Study (1967-)	生化学的研究 生体分子・生体系 (生物体、器官、細胞、細胞内系を含む) における物質の役割あるいは生体分子・生体系に対する影響の研究に関わる物質に付与される。 例：代謝、毒性、分布、生物学的応用、組成などの研究

ロールの定義 (6/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Biological Study, Unclassified (1967-)	<p>Adverse Effect, Agricultural Use, Biological activity or effector, except adverse, Biochemical Process, Bioindustrial Manufacture, Biosynthetic Preparation, Biological Use, Unclassified, Cosmetic Use, Diagnostic Use, Food or Feed Use, Natural Product Occurrence, Pharmacological Activity, Pharmacokinetics, Therapeutic Use 以外の生物学的研究</p> <p>(1) 物質の生物学的研究であるが Biological Study の下位のその他ロールが付与されない場合に付与される。 例：生命の起源の研究における前生物学的アミノ酸、植物アルカロイド免疫調節剤の分子進化の研究におけるアルカロイド、老人斑における胎児性抗原の存在、代謝経路における中間体、物質の生物学的輸送</p> <p>(2) それ自体は研究対象でないが、生物学的に研究された他の物質あるいは条件を記述・規定するために索引された物質に付与される。 例：核酸配列の同定に関する研究でその核酸がコーディングしているタンパク質、物質を同定するために阻害剤や賦活剤として用いる酵素 (好中球の酸化的破壊に作用するリボキシゲナーゼ阻害剤の研究におけるリボキシゲナーゼ)、特定の抗体の研究における抗原 (抗テトロドトキシンモノクローナル抗体の研究におけるテトロドトキシン)、受容体の研究におけるリガンド (テトラサイクリン受容体の研究におけるテトラサイクリン)、疾病の研究における関連物質 (高コレステロール症の微小血管系血管拡張反応の研究におけるコレステロール)</p> <p>特許中でクレームされておらず新規性にも関与しない配列には Biological Study, Unclassified と共に Properties が付与される。他の物質または条件を記述・規定する以外にその物質自体も研究対象となっていれば、Biological Study, Unclassified と共にほかの適切なロールが付与される。</p>

ロールの定義 (7/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Biological Use, Unclassified (1967-)	<p>Agricultural Use, Cosmetic Use, Diagnostic Use, Food or Feed Use, Therapeutic Use 以外の生物関連用途生物学的ツールとして使用された物質、または生物学的ターゲットを持つ物質、または生物学的に研究されているが USES の下位の他の生物関連のロールが適用できない場合に付与される。 例：塗料や材料に添加される抗菌剤、船舶用塗料に用いられる徐放性防汚剤、上水中の微生物を標的とする水処理剤、建造物周辺の土壌に用いられる殺シロアリ剤などの殺生物剤、家庭用殺虫スプレー</p> <p>生物学的関連以外での用途に対しては USES の下位にある非生物学的ロールが付与される。 例：分析を目的としない分離・精製のための溶媒または溶離液 → Other Use, Unclassified 織物におけるセルロース繊維 → Technical or Engineered Material Use 製造を目的とする生体合成で用いられる酵素や触媒抗体 → Catalyst Use 分析におけるツールとして使用される酵素 → Analytical Reagent Use</p> <p>1967～2001年の期間、Biological Use, Unclassified は化粧品、または化粧品組成物として使用された物質にも付与されていた。2002年以降、化粧品用途の物質には Cosmetic Use が付与される。</p>
Biosynthetic Preparation (1967-)	<p>生化学的合成 製造を意図して実験室規模で生合成された物質に付与される。 多段階合成では生物学的段階が重要または新規であれば、それ以降の化学的段階の生成物には Synthetic Preparation と Biosynthetic Preparation が付与される。</p>

ロールの定義 (8/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Byproduct (1967-)	副生成物 製造の研究において、目的とした物質以外に付随的に得られた物質に付与される。このような物質は収率が比較的低いことが多く、また収率が比較的高くても著者が副生成物として示している場合もある。
Catalyst Use (1967-)	触媒用途 実験室規模または商業規模の何らかの反応またはプロセスにおいて、促進剤、開始剤、あるいはこれらと同等の機能を果たすことが実証、特許請求、または明らかに意図された物質に付与される。触媒担体、助触媒、触媒添加物は触媒系の一部と見なして Catalyst Use が付与される。 製造を目的とした生合成に用いられる酵素や、負触媒その他の反応阻害剤にもこのロールが付与される。分析で触媒が用いられる場合は、新規なもの、あるいは特に触媒作用に重点がある場合を除き、Analytical Reagent Use が付与される。
Combinatorial Study (2002-)	コンビナトリアル・ケミストリーに関する研究 コンビナトリアル技術によって合成された物質、または研究、使用された物質に付与される。
Cosmetic Use (2002-)	化粧品用途 人体に直接適用することで外見を美化・洗浄・修正するため設計された調剤中の物質に付与される。 2001年以前の化粧品用途の研究では、一般に Biological Use, Unclassified が付与されている。 例：メイク落とし中のイソパラフィン、歯磨き剤中のネオテーム、口紅中のオクチルアリルアミド-アクリルエステル共重合体

ロールの定義 (9/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Diagnostic Use (2002-)	診断用途 疾病・病原体・外傷などを同定する目的で、診断のための臨床検査や画像技術などで使用された物質に付与される。 例：心筋梗塞を診断するための血清中の乳酸デヒドロゲナーゼアイソザイム LD1 分析、糖尿病を診断するためブドウ糖負荷試験で同定される血漿グルコース 2001年以前の診断用途に関する研究では、一般に研究のタイプによって Therapeutic Use または Biological Activity or Effector, Except Adverse が付与されている。
Food or Feed Use (1967-)	食品または飼料用途 物質が食品または動物用飼料の製造、加工、改良に使用されていることが実証、特許請求または明らかに意図されている場合に付与される。 例：食品または飼料の添加剤ないし強化剤、甘味料、香料、保存剤、食品または飼料用包装材、食品製造に用いられる酵素などとして用いられる物質、あるいはこれらに含まれる物質
Formation, Non-preparative (1967-)	生成、意図的合成ではない 製造の意図あるいは関心のない、自然的偶発的生成に関わる物質に付与される。2001年以前は代謝的生成研究についてもこのロールが付与されていた。

ロールの定義 (10/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Formation, Unclassified (1967-)	Geological or Astronomical Formation 以外の生成 (1) 製造の意図を持たない人間活動または放射性崩壊や素粒子の崩壊などの自然現象による物質の生成 (2) 製造の意図を持たない理論上の反応による物質の生成 (3) Formation, Non-preparative (生成、意図的合成ではない) の下位の他のロールが付与できない生成の場合に付与される。 例：水の塩素処理後のハロカーボンの生成、バッテリーにおけるガスの発生、ラドン 210 の崩壊によるポロニウム 206 の生成、分光学的研究の過程での物質生成、MO 法の研究における物質の理論的生成 (実際には反応は行われず、また研究の主眼が製造にない場合)、金属の腐食による表面生成物、廃棄物または燃料の燃焼による水中汚染物質の生成、材料の製造または加工における不純物の生成、中世のステンドグラスの風化によって生じた鉛物
Geological or Astronomical Formation (1967-)	地質学的、天文学的生成 地質学系または天文学系において自然生成された物質に付与される。 例：星間物質系における有機化合物の生成、月面における玄武岩の生成、タングステン鉱床における鉱化

ロールの定義 (11/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Geological or Astronomical Occurrence (1967-)	地質学的、天文学的起源・分布 地球、大気、惑星、その他諸天体などの系における物質の分布あるいは検出に関する研究で、生成のメカニズムには関心がない場合に付与される。地質学系・天文学系におけるトレーサー物質・指示物質、将来の商業生産を予想した天然資源の探査などの研究にもこのロールが付与される。 例：トンガ海溝の間隙水における有機酸の分布、赤道磁気圏の炭素イオンの検出、底水層の沈みの地理学的指示物質としてのストロンチウム、ガラスまたは触媒製造の可能性のある粘土鉱床の探査と評価
Geological or Astronomical Process (1967-)	地質学的、天文学的プロセス 地質学・天文学時系において自然変容に関与した物質に付与される。 例：マグマの活動、接触変成作用、鉱化、堆積物の続成作用、花崗岩化作用、蛇紋岩化作用、造山運動、アナテクシス、混合岩化、プレートの沈み込み、原始太陽系の凝縮、地球のガス発生、火山活動、隕石衝突
Industrial Manufacture (1967-)	化学的工業生産 商業規模で化学的方法 (生物学的ではなく) によって製造されている物質に付与される。スケールアップの意図を含むプロセス特許で生成されている物質にも付与される。 反応を伴わずに単に物質を加工していたり、物理的形態が変化していたりする場合は Physical, Engine の方が適切である。

ロールの定義 (12/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Miscellaneous (1967-)	<p>その他</p> <p>(1) 他のロールが適用できない物質に付与される。 例：アルカロイドの命名法におけるアルカロイド、鉄化学の教育における鉄</p> <p>(2) 直接研究対象とはなっていないが、生物学的関連以外で研究された他の物質や条件を記述するために索引された物質に付与される。 例：砂糖製造工場の廃水処理における蔗糖、製鉄所の廃棄物の有効利用におけるスチール、エラストマーゼ阻害剤の結晶構造の決定におけるエラストマーゼ</p> <p>直接研究対象とはなっていないが、生物学的関連で研究された他の物質や条件を記述するために索引された物質には Biological Study, Unclassified が付与される。</p>
Modifier or Additive Use (1967-)	<p>改良剤または添加物用途</p> <p>他の物質・材料・組成物の特性・機能を強化するために用いることが特許請求または実証されている物質に付与される。このような物質は意図的に導入される場合もあるし、天然に存在する場合もある。 例：光学的または半導体用ドーパント、蛍光体付活剤、セラミックス安定化剤、ポリマー系複合材料強化用ガラス繊維、塗料中のアルミ箔用分散剤、プラスチックの耐衝撃性向上のために添加された EPDM ゴム、ポリエチレンの退色防止剤に用いるステアリン酸亜鉛</p> <p>2002 年以降、組み合わせに新規性のない混合物・組成物中の物質には Modifier or Additive Use は付与されず Technical or Engineered Material Use または Other Use, Unclassified が付与される。2002 年以降は、新規性のある添加物だけに Modifier or Additive Use が付与されている。</p>

ロールの定義 (13/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Nanoscale (1992-)	<p>ナノ材料</p> <p>文献中に 0.05-100 nm の範囲でサイズが記述されているか、具体的なサイズの表記はないがナノスケールまたはナノ形態のように記述されている特定の物質または化合物クラス用語に付与される。</p>
Geological or Astronomical Process (1967-)	<p>天然物の起源・分布</p> <p>植物、動物、微生物のような自然源での存在が研究されている物質に付与される。新しく発見された天然物や、自然源中の天然物の存在に関する新しい発見、天然物の単離と構造解析などの研究が含まれる。 例：海綿の一種である <i>Axinella tenuidigitata</i> から単離されたプロモピロールアルカロイド、<i>Taxus yunnanensis</i> 樹皮から単離・精製されたタキソイド</p> <p>2001 年以前の天然物の起源・分布に関する研究では、一般に Properties, Purification or Recovery が付与されている。</p>
Occurrence (1967-)	<p>起源・分布</p> <p>物質の起源・分布に関する研究の物質に付与される。</p>
Occurrence, Unclassified (1967-)	<p>Geological or Astronomical Occurrence、Natural Product Occurrence、Pollutant 以外の起源・分布</p> <p>人間活動により生成する無害な物質の存在や、材料中の好ましくない不純物の存在、考古学発掘品中の微量元素などに関して研究されている場合など、Occurrence の下位のその他のロールが適用できない場合に付与される。</p>

ロールの定義 (14/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Other Use, Unclassified (1967-)	Agricultural Use, Analytical Reagent Use, Biological Use, Unclassified, Catalyst Use, Cosmetic Use, Diagnostic Use, Food or Feed Use, Modifier or Additive Use, Polymer in Formulation, Technical or Engineered Material Use, Therapeutic Use 以外の用途 Uses の下位の他のロールが適用できない場合に付与される。 このロールは処理工程に用いられる工業用試薬に付与される。また、反応・プロセスで用いられる工業用物質で反応に関与しないものにも付与される。
Pharmacokinetics (2002-)	薬物動態 動物体における物質の吸収、分布、組織中の局在性、生体内変換、バイオアベイラビリティ、代謝、排泄の程度とプロセスが研究されている薬物・物質に付与される。 例：臓器移植患者におけるシクロスポリンの腸内吸収と血中濃度、小児患者におけるバンコマイシンの薬物動態プロファイル、エンロフロキサシンの経口吸収とバイオアベイラビリティ 2001年以前の薬物動態に関する研究では、一般に Biological Activity or Effector, Except Adverse, Therapeutic Use, Biological Study, Unclassified が付与されている。
Pharmacological Activity (2002-)	薬理活性 生体系に対する薬理作用が研究されている薬物に付与される。例えば、βアドレナリン作動性受容体と心臓血管系に対するアテノロールの作用に関する研究がこれに当たる。 2001年以前の薬理活性に関する研究では、一般に Therapeutic Use, Biological Study, Unclassified が付与されている。

ロールの定義 (15/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Physical, Engineering or Chemical Process (1967-)	物理的、工学的、または化学的プロセス 物質の物理的変換または化学反応プロセスが研究されている場合に付与される。例えば、プロセスの動的エネルギー、機械的、工学的、動的側面に関する研究に参与している物質に付与される。また、個々の化学反応のメカニズムの研究での反応物に付与される。この他、輸送現象の動的側面、物質が成分として含まれる材料(系、組成物、複合材、混合物など)の変換に関する研究の場合に付与される。 <ul style="list-style-type: none"> 物理・物理化学的プロセスの例：流動、拡散、磁化、導電性の変化、立体配座遷移、分極、スピン緩和、イオン対形成、伝導メカニズム、電荷輸送、キャリアの分散 物質を変換する物理化学的・工学的プロセスの例： <ul style="list-style-type: none"> 鋳造、押し出し、金属加工、焼結、蒸着、電着、物理的ゲル化、浸透、吸着、石油精製、リサイクリング 化学反応プロセスの例：電気分解、酸化還元反応、腐食、燃焼 物質が個々の化学反応(化学反応式または反応スキームで表される)の反応物であり、かつ反応のメカニズムや反応力学に重点が置かれていない場合は Physical, Engineering or Chemical Process でなくむしろ Reactant が付与される。一方、化学プロセスにおいて、個々の反応に関心が持たれている場合は、Physical, Engineering or Chemical Process と共に Reactant が付与される。 また、Physical, Engineering or Chemical Process はプロセスに関する他のロールが適用できない複雑なプロセスの関与物質にも付与される。

ロールの定義 (16/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Pollutant (1967-)	<p>汚染物質 物質 (有害物質と見なされているもの) が屋内、屋外、大気、土壌、水、建造物、生物系などの環境中に見出されている場合、その物質に付与される。このロールは物質が生態系に入ったときの悪影響の可能性に関する研究にも付与される。環境試料中の汚染物質を分析する研究では、分析対象となる汚染物質に Pollutant と Analyte が付与される。</p>
Polymer in Formulation (1967-)	<p>ポリマー組成物 ポリマーが組成物の有用性を高めることが特許請求または実証され、組成の新規性に重点が置かれている場合にポリマーに付与される。ポリマーブレンドに重点がある研究では、ブレンドのすべての成分ポリマーにこのロールが付与される。 例：柔軟性を高めるために可塑剤を配合した PVC 組成物、ブタジエンゴムをブレンドして耐衝撃性を高めたポリスチレン 2002 年以降、組成物中の変成剤や添加剤に新規性があるか重点が置かれている場合は、一般に Modifier or Additive Use が付与されている。</p>
Preparation (1907-)	<p>製造 製造の意図があり、化学反応、生化学反応、核反応によって合成された物質に付与される。また、製造の意図があり、回収、精製、分離、その他の方法で生成された物質にも付与される。</p>

ロールの定義 (17/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Process (1967-)	<p>プロセス 物質の複雑な多段階処理、動的変化の研究に関わる物質に付与される。</p>
Properties (1967-)	<p>物性 (1) 物質の化学的、物理的、熱力学的、速度論的物性の (日常的な測定を超えた) 研究 (2) 物質を成分として含む材料 (系、混合物、組成物など) の物性の研究 (3) 物質の反応物性の研究 (4) 物質が関与するプロセスの物性の研究 における物質に付与される。反応物性は通常、数値、図、グラフで表現されるものである。 例：電気伝導度、熱拡散率、粘度、静電的・磁氣的物性、流動性、反射率、仕事関数、ポリマーの相溶性、結晶性、湿潤性、ガラス転移点、チクソ性、結晶構造、分子構造、臨界ミセル濃度、状態図、分光学的物性、生成熱 物性値がありふれた物質同定のために報告されている場合は Properties は付与されない。 プロセスの物性に関する研究では、Properties と共に Physical, Engineering or Chemical Process が付与される。反応の性質に関する研究では、Properties と共に Reactant が付与される。物質がその物性によってツールとして利用されていても、物性自体に新規性がない場合には、その物質には USES の下位の適切なロールが付与される。例えば、重合を引き起こすためにアルゴンレーザーを用いた場合、アルゴンには Other Use, Unclassified が付与される。</p>

ロールの定義 (18/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Prophetic Synthesis or Use (1998-)	<p>Prophetic 物質 特許の実施例に記載されており hard data のない特定の化学物質 (例: 反応物、単離された中間体、生成物) に付与される。 化学名や構造が表中に表示されているが物性データが記述されていない物質にも付与される。新規や今までにない用途が報告されているが、その存在や用途が実証されていない物質にも付与される。 Prophetic Synthesis or Use 物質には、条件さえ合えば他のロールも付与される。</p>
Purification or Recovery (1967-)	<p>精製 製造を意図して精製・抽出・回収・分離された物質に付与される。またこのロールは、製造を意図して生物から新規物質、または新規生物から既知物質を単離・精製する場合にも付与される。新規または改良された方法で精製された場合にも付与される。 多段階合成の過程で分割されたエナンチオマーに対しては、たとえ分割自体が化学反応に関与していなくても、Purification or Recovery と共に Preparation の下位の適切なロールが付与される。好ましい生成物の分割で得られるすべてのジアステレオマーや酵素分解で得られる生成物にも Purification or Recovery が付与される。</p>

ロールの定義 (19/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Reactant (1967-)	<p>反応物 化学反応に関与しており、生成物の分子に組み込まれる物質に付与される。生成物が必ずしも同定されていない反応や失敗反応の反応物にも付与される。核反応のように原子番号や質量数の変化する反応の反応物にも付与される。 文献中で生成され、さらに反応出発物質でもある中間体が索引された場合は Reactant と共に Preparation の下位の適切なロールが付与される。 1967-2001 年の期間では、このロールは試薬にも付与されていた。</p>
Reactant or Reagent (1967-)	<p>反応物または試薬 個々の反応中の反応物 (生成物の構造の一部を形成する) または試薬 (反応に関与するが生成物の一部とはならない) に付与される。 核反応や生化学物質 (例えば標識化合物など) の意図的な化学修飾に関わる物質や失敗反応の反応物質にも付与される。 2001 年以前は、同様の物質に Reactant が付与されている。</p>

ロールの定義 (20/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Reagent (2002-)	試薬 化学反応に関与しているが、生成物の分子に組み込まれない物質に付与される。このロールは、合成研究における試薬に対してのみ付与される。 触媒には Catalyst Use、分析で使用する試薬には Analytical Reagent Use、プロセスや処理で仕様する試薬には Other Use, Unclassified が付与される。 2001年以前の試薬に関する研究では、一般に Reactant または Other Use, Unclassified が付与されている。
Removal or Disposal (1967-)	除去または処分 効果的に除去するため用いられるプロセスの種類を問わず、製造の意図なく除去される好ましくない物質に付与される。 例：生成物からの不純物の除去、水処理のプロセスにおける汚染物質の除去、核廃棄物の処理

ロールの定義 (21/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Synthetic Preparation (1967-)	化学合成 実験室規模で製造を意図して (生物学的ではなく) 化学合成または核反応によって合成された物質に付与される。 例：有機・無機合成された生成物、物性データを利用して単離された物質、化学蒸着法や原子層エピタキシーその他の化学的方法によって小規模に合成された物質 大量合成を意図、あるいは実証された生成物には Industrial Manufacture が付与される。
Technical or Engineered Material Use (1967-)	工学・工業材料用途 USES (用途) の下位のその他のロール (Analytical Reagent Use, Catalyst Use, Modifier or Additive Use と Cosmetic Use, Diagnostic Use, Food or Feed Use, Therapeutic Use) が適用できない場合で、商業的・工学的利用のために開発・設計された物質に付与される。付与される物質は、その材料自体が単成分物質である場合もあり、複合材料や混合物の一成分である場合もある。 例：耐衝撃性ガラス-PMMA 積層材、鉄筋コンクリート、バリア層樹脂用ポリマーブレンド、防食用ガラス被覆、建材用陽極酸化アルミニウム、ポリシロキサン系油圧油、異方性ケイ素鋼シート、可溶性洗剤タブレットの成分

ロールの定義 (22/22)

ロール (付与期間)	定義の内容
Therapeutic Use (1967-)	<p>医薬用途 2002年以降の期間：医学または獣医学における治療・予防への応用が研究されている物質に付与される。潜在的な応用が言及・暗示されている場合も含まれる。診断への応用に関する研究では Diagnostic Use (診断用途)、薬物動態に関する研究では Pharmacokinetics、薬理活性に関する研究では Pharmacological Activity が付与される。 例：医薬品 (として期待されているもの)、製剤中の医薬品以外の成分 (索引されている場合は賦形剤も含む)、栄養補助食品、人工装具・避妊具・その他の治療用器具または材料 (人工股関節、歯科用アマルガム、コンタクトレンズなど) に用いられる物質</p> <p>1967-2001年の期間：医学または獣医学における治療・予防・診断への応用が、特許請求、実証、または明確に意図されている物質に付与される。 例：医薬品、医薬製剤およびその成分 (索引されている場合は賦形剤も含む)、治療効果や作用メカニズムの評価のための薬理学的研究に用いられた物質、人工装具・避妊具・その他の治療用器具または材料 (人工股関節、歯科用アマルガム、コンタクトレンズなど) に用いられる物質、内因性指示薬のように医学的状態を知るための診断用物質</p>
Uses (1967-)	<p>用途 新規な用途・応用の研究に関わる物質に付与される。このロールは、物質の利用が実証、特許請求、または明確に意図された場合に限り付与される。その物質が単に周知の用途を持つだけでは不十分である。</p>

JAICI ヘルプデスク

0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

support@jaici.or.jp

Thank you

Connect with us at cas.org

 linkedin.com/company/cas

 [@CASchemistry](https://twitter.com/CASchemistry)

