

化学情報協会 情報事業部 202506



- CAS REGISTRY ファイルの概要
- 辞書検索
- 構造検索(基礎編)
- 便利な作図機能
- クロスオーバー検索







#### CAS REGISTRY ファイルの概要

3 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



化学物質のデータベース

- 製作者:CAS
- 収録情報:
  - Chemical Abstracts (CAplus ファイル) に索引されている特定の化学物質
  - CASREACT ファイルに収録されている反応中の反応関与物質
  - 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 (CAS RN®) を付与した物質
  - 化合物ライブラリー (CHEMCATS ファイル) から登録された物質
  - 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)
  - 他のデータベースからの収録 (ChemBank, ChemSpider など)
- ・ 収録件数:2億9千万件以上(2025年6月現在)
- 更新頻度:毎日

4 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS

#### CAS REGISTRY ファイル

REGISTRY ファイルには CAS RN® が付与された化学物質を収録

ポリマー 合金 • 有機化合物 0.9% 0.5% 無機化合物 配位化合物 • 無機化合物 1.6 % 0.3% ・ タンパク質、核酸 ポリマー • 配位化合物 バイオシーケンス • 有機金属化合物 25.6 % 金属 有機化合物 71.1 % 合金 • 鉱物 元素

5 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS RN® レコード作成日 CA索引名 旧CA索引名	RN 194-10-5 REGISTRY ED Entered STN: 16 Nov 1984 CN Pyrimido[4,5,6-gh]perimidine (CA INDEX NAME) OTHER CA INDEX NAMES:			
他の化学物質名	OTHER NAMES: CN 1,3,6,8-Tetraazapyrene CN 3,5,8 10-Tetraazapyrene			
分子式 INChl InChlKey クラス識別子 収録源 CAS RN®所在	<pre>MF C12 H6 N4 INCH InChI=IS/C12H6N4/c1-2-8-12-10(16-6-14-8)4-3-9-11(12)7(1)13-5-15-9/h1-6H INKY JLCGSDBQJSZYCY-UHFFFAOYSA-N CI COM, RPS SR CA LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, REAXYSFILES*, REAXYSFILESUB*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL (*File contains numerically searchable property data)</pre>			
構造図				
物性データの存在	**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**			
CAの文献数	23 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE) 7 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA			
CAplusの文献数	23 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)			



CAS

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

6













\* L 番号、回答番号、表示形式を省略すると、デフォルト (直前の L 番号、1 番目の回答、IDE 表示形式) が表示 回答番号 表示形式 =>D L番号

回答は収録の新しい物質順 (CAS RN<sup>®</sup> の新しい順) に並ぶ ・ 回答番号 1 が最も収録が新しい物質

#### ・ 主な表示形式 (青字は利用頻度の高い表示形式)

表示形式	内容	
IDE (デフォルト)	基本的な物質情報 (化学物質名 は 50 まで表示 )	
SAM	CA 索引名 、分子式、INChl、InChlKey、クラス識別子、構造図、配列長	
CAN	CA 索引名 、分子式、クラス識別子、構造図、配列長 (回答番号指定不可 : ランダム表示)	
ERL	IDE,CAplus ファイルのスーパーロールと資料種類	
IDE	すべての物質情報 (RSD、スーパーロール、物性などを含む)	
<b>\LL</b>	FIDE, CA ファイル中の最新の 10 文献 (ALL 表示形式)	
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.		







# 辞書検索フィールド

適切なフィールドを指定して検索



### CAS 登録番号 (CAS RN®)

CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) => S 194-10-5 ← 基本索引で検索

成分 CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) => S 194-10-5/**CRN** 

- CAS 登録番号 (CAS RN®) は基本索引 (なし、または/BI) で検索する
- 多成分物質として登録されている塩やコポリマーなどの成分 CAS RN®は /CRN で検索する



### CAS 登録番号 (CAS RN®)



化学物質名

#### 完全名検索

=> S PARAMOUNT/CN

- ・ レコードに収録されているすべての名称から検索できる
- 名称中の角括弧は丸括弧に変更する
- 名称に特別な記号を含む場合は二重引用符で囲む



### 化学物質名

#### 部分名検索

=> S QUINOLIN? AND BROMO?

← 基本索引で検索

- 部分名は基本索引 (なし または /BI) で検索する
- 特徴的な部分名を利用する
- 分子式関連情報と組み合わせて検索すると効果的に目的物質の検索ができる



## 化学物質名

8-Bromo-2,4-quinolinedicarboxylic acid の検索

=> FILE REGISTRY	=> D
=> E 8-BROMO-2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID/CN ← 完全名を /CN で EXPAND E1 1 8-BROMO-2,4-OCTADIEN-6-YNE/CN E2 1 8-BROMO-2,4-QUINAZOLINEDIAMINE/CN E3 1> 8-BROMO-2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID/CN E4 1 8-BROMO-2,4-QUINOLINEDIOL/CN : => S E3 ← E番号で検索すると入力ミスをしない L1 1 "8-BROMO-2,4-QUINOLINEDICARBOXYLIC ACID"/CN	L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2024 ACS on STN RN 216060-06-9 REGISTRY ED Entered STN: 24 Dec 1998 CN 2,4-Quinolinedicarboxylic acid, 8-bromo- (CA INDEX NAME) OTHER CA INDEX NAMES: CN 8-Bromo-2,4-quinolinedicarboxylic acid ←完全名でヒットしている MF C11 H6 Br N 04 SR CA LC STN Files: CA, CAPLUS, CASBIOACTIVI, CASREACT, CHEMCATS, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL





### 分子式

完全分子式 (物質全体の分子式) => S C4H11NO2.C3F6/MF

成分分子式 (単成分物質の完全分子式を含む) => S C4H11NO2 ← 基本索引で検索

- 括弧を含む分子式を直接検索する際は二重引用符で囲む
  - EXPANDの際は、二重引用符は不要
- 物質全体の分子式が明確な場合は、/MF フィールドを利用する
- 多くの塩は多成分物質として登録される
  - 例) 酢酸ナトリウム C2H4O2.Na、硫酸カリウム H2O4S.2K

17 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



分子式 Hill 方式

分子式は Hill 方式に従って入力する

- ・ 炭素を含む物質の場合、炭素、水素、その他の元素 (アルファベット順)の順
  - 例) カフェイン: C8H10N4O2
- 炭素を含まない物質の場合、すべての元素をアルファベット順
  - 例) ケイ酸: H4O4Si
- 元素の存在数は元素記号の後ろにスペースを空けずに入力する。存在数が1の 場合は省略する



CAS

**分子式** 多成分物質の記述優先順序

#### => S C4H5N.C2H4O2/MF ← 各成分はピリオド (.) で区切る

- 有機化合物の場合
  - 炭素を含む成分とそれ以外の成分が存在する場合は、炭素を含む成分を優先する
  - ・ 炭素数の多い成分を優先する
  - ・ 炭素数が同じ場合は、水素数の多い成分を優先する
  - ・ 炭素および水素数が同じならば、他の元素のアルファベット順
- - 元素のアルファベット順
  - 元素のアルファベット順で決まらなければ、原子数が多い方を優先する

19 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.







## 分子式



21 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

## その他の分子式関連フィールド

成分数 (物質全体の成分数) => S 2/NC

- ・数値検索フィールドなので、範囲を指定した検索ができる
  => S 2<=NC ← 成分数 2 以上</li>
  - =>S1-3/NC ← 成分数1から3

元素種 (各成分の特定元素) => S N/**ELS** 

• 一般元素 (X: ハロゲン、M: 金属) が利用できる

22 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS

#### その他の分子式関連フィールド

ピクリン酸 (88-89-1) とナトリウムを含む成分から成る2成分物質の検索





#### InChlKey

全セグメントを検索 => S JLCGSDBQJSZYCY-UHFFFAOYSA-N/**INKY** 

先頭から 2 セグメントを検索 ⇒ S JLCGSDBQJSZYCY-UHFFFAOYSA/INKY

先頭の セグメントを検索 => S JLCGSDBQJSZYCY/**INKY** 

- InChI は構造ベースの化学物質識別子で、InChIKey は InChI を 27 文字に簡略化したデジタル表現
- InChIKey は検索および表示が可能 (InChI は表示のみ可能)

\* InChI と InChIKeyの詳細は InChI Trust のページを参照 (<u>https://www.inchi-trust.org/</u>)



クラス識別子			
クラス識別子 => S PMS <b>/CI</b>			
成分クラス識別子 => S CCS/ <b>CCI</b>			

- /CIと /CCIを併用すると網羅的な検索ができる
  - 例) クラス識別子が CCS (配位化合物) であるものを成分も含めて検索
    => S CCS/CI,CCI

25 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



#### クラス識別子

クラス識別子	定義	クラス識別子	定義
AYS	合金	MNS	鉱物
CCS	配位化合物	MXS	混合物
СОМ	多成分物質成分	PMS	ポリマー
CTS	概念語登録	RIS	ラジカルイオン
GRS	一般式登録	RPS	環母核
IDS	定義の不完全な物質	TIS	表形式無機化合物
MAN	手作業登録		組成不明、組成不定、
		UVCB	複雑な反応生成物、生体物質

PMS と TIS は、/CI で /CCI を含んだ検索ができる

• PMS/CIと PMS/CI,CCIの検索結果は同じになる



#### **クラス識別子** ε-カプロラクタム (105-60-2) をモノマーとしたポリマーの検索



#### 実習1 メタクリル酸エチルを含む2成分ポリマーの検索

メタクリル酸エチル (CAS RN<sup>®</sup> 97-63-2) を含む 2 種類のモノマーからなるポリマーを検索する。 回答を SCAN 表示形式で確認する

検索の流れ

- ・ メタクリル酸エチルの CAS RN® を /CRN で検索する
- ・ クラス識別子 (/CI) を利用してポリマー (PMS) に限定する
- 成分数 (/NC) で限定する









下記の物質を分子式や部分名を使って検索する。回答は IDE 表示形式で表示する



- 分子式 (/MF) の記述は Hill 方式に従う
  - ・ 炭素、水素、その他の元素のアルファベット順
- 部分名は /BI またはなしで検索する
  - ・ 部分名の例: THIADIAZOLE, METHYLAMINO, CARBONITRILE, NITRILE, AMINO 等

## 実習2(回答)









## 構造検索の流れ





下図のような部分構造を含む物質をすべて検索する



- 条件1:Xの部分はハロゲンであれば何でもよい
- 条件2:置換基が付いたり、さらに追加の環が縮合してもよい





REGISTRY ファイルに入って 🕐 Draw ボタンをクリックして構造作図画面を開く



















構造作図









=> S L# 検索タイプ 検索範囲				
	検索タイプ	内容		
EXA	完全一致検索	構造質問式に完全に一致する物質を検索		
FAM	ファミリー検索	EXA に加えて他の成分が含まれていてもよい		
CSS	閉構造部分構造検索	FAM に加えて可変構造質問式を使用できる 特定の位置に置換基を含めることができる		
SSS	部分構造検索 (デフォルト)	CSS に加えて追加の置換基が存在してもよい		

検索範囲		内容
SAM	サンプル検索 (デフォルト)	フルファイルの一部 (5 %) をテスト的に検索
FUL	フルファイル検索	ファイルのすべて (100 %) を検索



## サンプル検索



## サンプル検索 (続き)



## フルファイル検索



実習3

右記の部分構造を含む物質を検索する

- 条件:環は縮合してもよい
- 条件:作図していない置換基がついていてもよい



作図のポイント

• X メニュー (可変原子選択) X から Ak (炭素鎖)、X (ハロゲン) を指定する 検索のポイント

• 置換基や縮環を許容する場合は、特別な指定はせずに部分構造検索を実行する

\* 実習 3 の回答は実習 4 で利用します。そのため、STN を切断する場合は、LOG H をご利用ください

CAS











#### 置換の禁止 特定のノードへの置換基の追加を禁止する際に使用



#### 環の孤立化 環が縮合またはスピロ型結合しないことを指定



## 可変置換位置

環または一つの環系に対して、置換基の可変な結合位置を指定する際に使用



#### **繰り返しグループ** 繰り返しを含む構造をまとめて作図可能





-つのノードに複数の原子やショートカット、可変原子、フラグメントを指定可能



53 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



## Rグループ(続き)



## R グループ (続き)





属性を指定するとノードや結合に詳細な設定が可能

属性の種	内容
ノードの属性	ノードが「環上」、「鎖上」、「環または鎖上」にあることを指定する属性
結合の属性	Bond Type は結合の種類 (環、鎖、環または鎖) を、Bond Value はノーマライ ズド結合の可能性を指定する
元素数	「元素数」 を指定すると、一般式グループ (Hy,Cb,Cy,Ak) について、元素 の種類と数を限定することができる
一般式属性	一般式グループ記号 (Hy,Cb,Cy,Ak) について 「飽和度」、「鎖の種類」、 「ヘテロ原子の数」、「環系の種類」、「炭素原子数」 を指定する際に使用 する
結合非水素数	結合非水素数を指定すると、特定のノードに結合する水素以外のノードの数を 限定できる

\* 詳細については「<詳細版>化学物質検索」 (<u>https://www.jaici.or.jp/download\_file/view/53583d3c-ba50-45a3-a7ab-b75c48a0e321/</u>) 参照





CAS

#### クロスオーバー検索

57 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

#### 化学物質のクロスオーバー検索



クロスオーバー検索の流れ

#### Step 1: REGISTRY ファイルで物質を検索

=> FILE REGISTRY	
=> S 58-08-2	(CAS RN <sup>®</sup> 検索)
=> S CAFFEINE/CN	(完全名称検索)
L1	

#### Step 2 : CAplus ファイルで REGISTRY ファイルの L 番号を検索

=>	FILE CAPLUS		
	J LI	L1 の物質の CAS RN® が索引されている 文献がヒット	
59	© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.		A division of the American Chemical Society

## クロスオーバー検索の流れ

クラリスロマイシンに関する検索

Step 1

=> FILE REGISTRY			
=> E CLARI	THROMYCIN/CN		
E1	1 CLARITH/CN		
E2	1 CLARITHRO/CN		
E3	1> CLARITHROMYCIN/CN		
E4	1 CLARITHROMYCIN 9-OXIME/CN		
:			
=> S E3	← 化学物質を検索する (L1)		
L1	1 CLARITHROMYCIN/CN		
L			

#### Step 2



クラリスロマイシンに関するすべての文献がヒット

=> D SCAN HITRN

- L2 13248 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2023 ACS on STN IT **81103-11-9**, Clarithromycin
  - RL: THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); USES (Uses) (mols. that target proteins of coronaviruses and uses).

クラリスロマイシンの CAS RN<sup>®</sup> が索引されているレコードがヒットする

クラリスロマイシンの合成文献がヒット

=> D SCAN HITRN

- L3 174 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2023 ACS on STN
- IT 81103-11-9P, Clarithromycin RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation) (method for synthesis of clarithromycin)

合成文献には CAS RN® に P がついている



#### 検索例

Isatin の部分構造を持つ物質を検索し、その合成文献を検索



Isatin の CAS RN®: 91-56-5

- 条件1:追加の置換基が存在してもよい
- 条件2:環はこれ以上縮合しない

61 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



## 検索例(続き)











CAplus ファイルの回答は ALL HITSTR 表示形式で表示する

#### 実習 3

右記の部分構造を含む物質を検索する

- 条件:環は縮合してもよい
- 条件:作図していない置換基がついていてもよい









#### JAICI ヘルプデスク

Tel:0120-003-462(平日 9:00-17:00)

Mail:support@jaici.or.jp



## Thank you

Connect with us at cas.org



in linkedin.com/company/cas

@CASchemistry

