

CAS STNext®

ポリマー検索

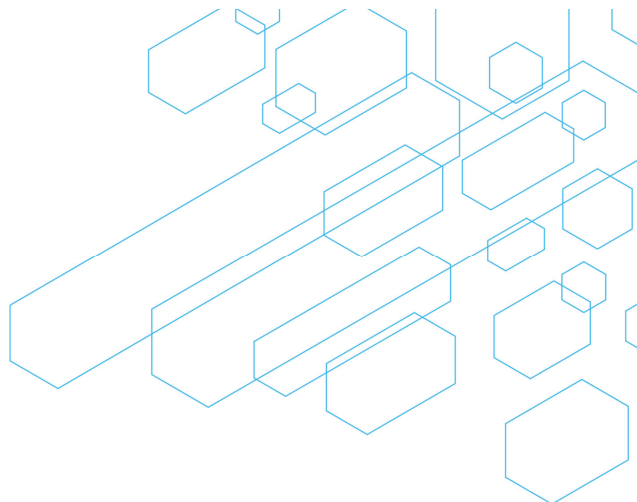
化学情報協会 情報事業部
202503

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



本日の内容

- CAS REGISTRY ファイルのポリマー登録
- CAS REGISTRY ファイルのポリマー検索
 - 成分 CAS RN®、分子式、成分数、クラス識別子
 - POLYLINK
 - 構造検索
 - ポリマー分類用語
- ポリマーに関する文献の検索





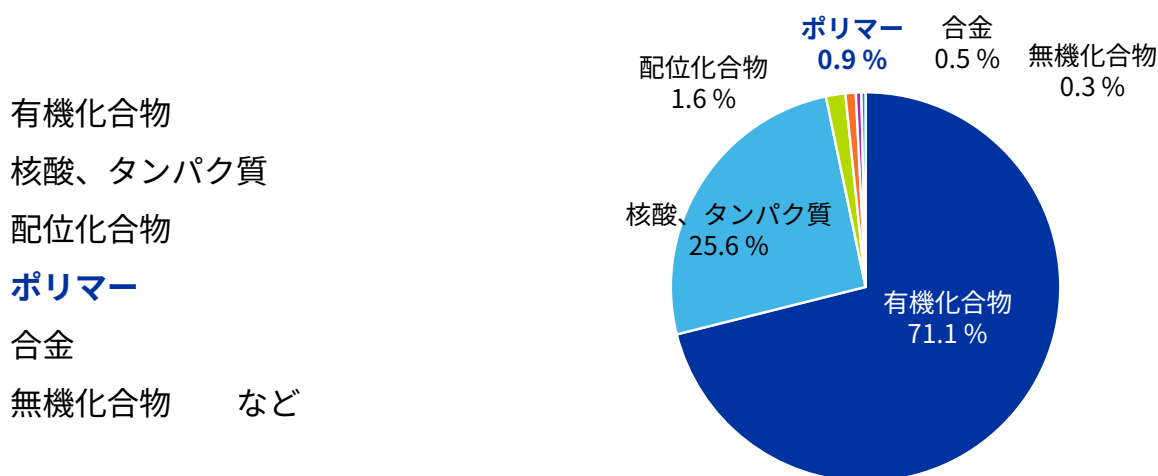
CAS REGISTRY ファイルのポリマー登録

3 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



REGISTRY ファイルの収録内容

REGISTRY ファイルには CAS RN® が付与された化学物質が収録されている



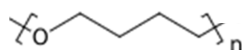
4 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



ポリマーの登録方針

ポリマーの主鎖 (backbone) を構成する原料モノマーに基づいて登録される

例：ポリブチレングリコール

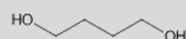


テトラヒドロフランから合成



CAS RN® 24979-97-3

1,4-ブタンジオールから合成



CAS RN® 28324-25-6

同じポリマーでも原料が異なれば
異なる CAS RN® が付与される

ポリマーの登録方針

ポリマーの主鎖にならない下記のような物質は成分に含まれない

- 重合開始剤、重合停止剤
- 分子量調整剤
- 触媒
- 安定剤

例：
異なる触媒を用いていても、同じ原料モノマーから得られたポリマーは同じ CAS RN® が付与される

ポリマーの登録方針

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する

- **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

例：

- 同じ原料モノマーから成る場合は重合度が異なっても同じ CAS RN® が付与される
- モノマー A とモノマー B の組成比が 4:6 のポリマーも 6:4 のポリマーも同じ CAS RN® が付与される

ポリマーの登録方針

同じ原料モノマーからであっても、異なるポリマーとみなされる場合がある

- **立体規則性** (タクチシティー : Tacticity) の異なるポリマー

例：

イソタクチック (Isotactic)、シンジオタクチック (Syndiotactic)、アタクチック (Atactic)
ポリプロピレンはそれぞれ異なる CAS RN® が付与される

- **重合形態** (ブロック、グラフト、交互、ランダム) の異なるポリマー

例：

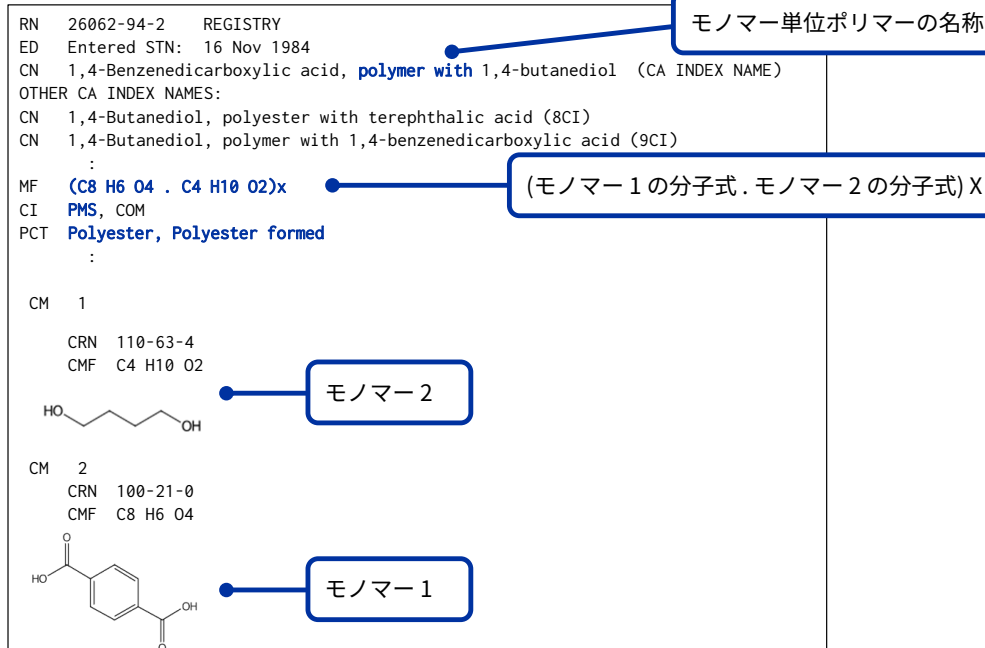
モノマーが同じでも、ブロック共重合体とグラフト共重合体は異なる CAS RN® が付与される

ポリマーの登録形式

REGISTRY ファイルのポリマーのレコードは 4 種類の形式がある

1. モノマー単位ポリマー
2. SRU (Structural Repeating Unit) ポリマー
3. 商品名ポリマー
4. * (アスタリスク) 付きのポリマー

1. モノマー単位ポリマー



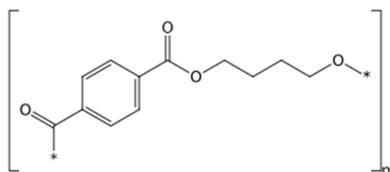
2. SRU (Structural Repeating Unit) ポリマー

```
RN 24968-12-5   REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Poly(oxy-1,4-butanediylloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl) (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN 1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate copolymer, SRU
:
MF (C12 H12 O4)n
CI PMS
PCT Polyester
:
```

SRU ポリマーの名称

(繰り返し単位の分子式) n

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



繰り返し単位の構造

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

43915 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
1021 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
44148 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

3. 商品名ポリマー

文献に商品名でのみ記載されたポリマーの詳細 (原料モノマーや繰り返し単位など) が不明な場合は、商品名を CA 索引名として収録する

```
RN 718635-98-4   REGISTRY
ED Entered STN: 29 Jul 2004
CN Diaformer Z 632 (CA INDEX NAME)
ENTE An N,N-dimethyl-N-(2-methacryloyloxyethyl)amine N-oxide-alkyl methacrylate
copolymer (Mitsubishi Chemical)
MF Unspecified
CI PMS, COM, MAN
PCT Manual registration
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, CASFORMULINS, CASREACT, USPAT2, USPATFULL
```

索引者情報が収録されている場合もある

分子式は不明

構造不明のため手作業登録

構造は不明

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

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

4. * (アスタリスク) 付きのポリマー

通常は CAS RN® が付与されないタイプの物質であるが、既存化学物質リストへの登録などのために例外的に CAS RN® が付与されたポリマー

```
RN 64742-16-1 REGISTRY *
* Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may result in incomplete search
results. For additional information, enter HELP RN* at an online arrow prompt (=>).
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Petroleum resins (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN 18X0103
:
DEF A complex combination of organic compounds, predominantly hydrocarbons, obtained as a fraction of the
extract from solvent extraction of residuum. It consists predominantly of high molecular weight compounds
with high carbon-to-hydrogen ratios.
:
MF Unspecified
CI PMS, COM, MAN, CTS
PCT Manual registration
LC STN Files: BIOSIS, CAPLUS, C
IFIALL, PIRA, RTECS*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
(*File contains numerically searchable property data)
Other Sources: DSL**, EINECS**, TSCA**
(**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
```

STN の他のファイルでこの CAS RN® を検索すると不完全な結果になる可能性があるという警告

分子式は不明

構造不明のため手作業登録

構造は不明

ポリマーの定義

重合度が 11 以上の物質、あるいは重合度が不明な物質はポリマーとみなされる

```
RN 25568-84-7 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 1,3-Cyclopentadiene, homopolymer (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN 1,3-Cyclopentadiene, polymers (8CI)
OTHER NAMES:
CN Cyclopentadiene homopolymer
CN Cyclopentadiene polymer
:
MF (C5 H6)x
CI PMS
PCT Polyether, Polyether only
:
CM 1
CRN 542-92-7
CMF C5 H6
```

クラス識別子: PMS (ポリマー)



ポリマーの定義

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はポリマーとみなされる

```
RN 7313-32-8   REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 1,3-Cyclopentadiene, dimer (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Cyclopentadiene, dimer (6CI, 7CI)
OTHER NAMES:
CN Cyclopentadiene dimer
MF (C5 H6)2
CI PMS, COM
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, CASF,
  IFIALL, TOXCENTER, USPAT2,
```

分子式は 2 量体

クラス識別子 : PMS (ポリマー)



CAS REGISTRY ファイルのポリマー検索

付加重合系ポリマーと縮合系ポリマーの登録形式

- 付加重合系のポリマーはモノマー単位ポリマーとして登録される
- 一方、縮合系のポリマーの一部はモノマー単位ポリマーと SRU ポリマーの2つの登録形式で収録されており、**POLYLINK** でリンク付けされている

ポリマーの種類		登録形式	
		モノマー単位	SRU
付加重合系ポリマー		○	×
縮合系ポリマー	縮合ホモポリマー 対称な構造の2種のモノマーからなる縮合ポリマー	○	○
	5種の汎用ポリマー*	△	○
	上記以外の縮合ポリマー	○	×

モノマー単位ポリマーを
想定して検索する

POLYLINK

* Nylon6, Nylon66, Polyethylene glycol (PEG), Polypropylene glycol (PPG), Poly(ethylene terephthalate)

(参考) 付加重合系ポリマーと縮合系ポリマー

付加重合系ポリマー

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

縮合系ポリマー

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、ヘテロ原子を主鎖に含むポリマー

例：ポリエステル、ポリアミド、ポリウレタン、ポリエーテル、フェノール樹脂など

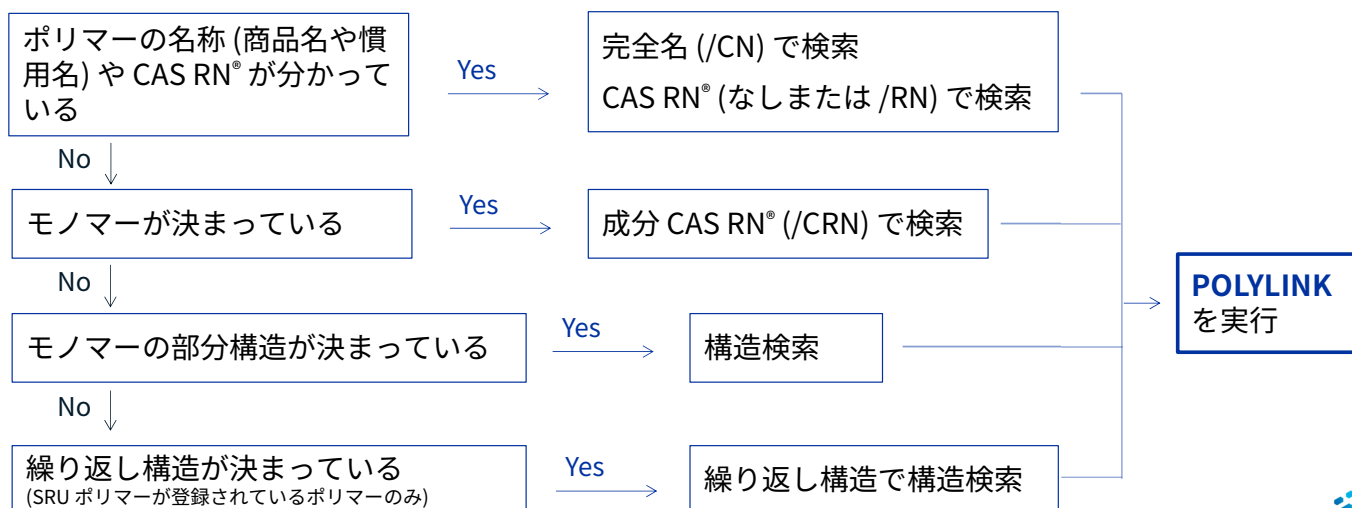
付加重合系ポリマーの検索方針

- 付加重合系ポリマーはモノマー単位ポリマーとして登録されているので、モノマーの CAS RN® や構造から検索する



縮合系ポリマーの検索方針

- 縮合系ポリマーも基本的にはモノマーから検索する。SRU ポリマーが存在する場合は POLYLINK で同一ポリマーを集める。



成分 CAS RN® 検索

モノマーの CAS RN® がわかる場合は、成分 CAS RN® 検索を行う

- 100-42-5 をモノマーとして含むポリマーを検索
=> S 100-42-5/[CRN](#) AND PMS/CI
- 78-79-5、80-62-6、100-42-5 を成分として含む物質を検索
=> S 78-79-5/[CRN](#) AND 80-62-6/[CRN](#) AND 100-42-5/[CRN](#)

分子式検索

モノマーや繰り返し単位の分子式が分かれば分子式検索を行う

- モノマー単位ポリマー
=> S "(C8H8.C4H6)[X](#)"/MF

モノマーの分子式を入力し、全体を ()X でくくる
コポリマーの場合は各モノマーの分子式をピリオドで区切る

- SRU ポリマー
=> S "(C12H12O4)[N](#)"/MF

繰り返し単位部分の分子式を入力し、全体を ()N でくくる

- 末端基付き SRU ポリマー
=> S "(C12H12O4)[NC7H5ClO](#)"/MF

(繰り返し単位部分の分子式)N の後ろに続けて、
両末端の分子式の合計を入力する

成分数、クラス識別子

回答を限定するには成分数 (/NC) やクラス識別子 (/CI) を用いる

- ホモポリマーに限定

=> S 100-42-5/CRN AND 1/NC AND PMS/CI

1/NC で単成分に限定できる

PMS/CI でポリマーに限定できる

- 2 成分以上のポリマーに限定

=> S 100-42-5/CRN AND 2=< NC AND PMS/CI

/NC は範囲指定検索も可能

検索例

アクリロニトリル (107-13-1)、ブタジエン (106-99-0)、スチレン (100-42-5) からなる
3 成分系ポリマーの検索

=> FILE REGISTRY

=> S 107-13-1/CRN AND 106-99-0/CRN AND 100-42-5/CRN AND 3/NC
L1 7 107-13-1/CRN AND 106-99-0/CRN AND 100-42-5/CRN AND 3/NC

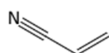
各モノマーの CAS RN® を /CRN で検索

=> D SCAN

成分数を /NC で限定

L1 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2024 ACS on STN
IN 2-Propenenitrile, polymer with 1,3-butadiene and ethenylbenzene
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT
MF (C8 H8 . C4 H6 . C3 H3 N)x
CI PMS, COM

CM 1



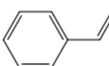
← アクリロニトリル

CM 2



← ブタジエン

CM 3



← スチレン

(参考) モノマーの CAS RN[®] が分からない場合

まずモノマーを検索し、SELECT コマンドで CAS RN[®] を抽出する

```
=> FILE REGISTRY

=> S ACRYLONITRILE/CN
L1          1 ACRYLONITRILE/CN

=> S 1,3-BUTADIENE/CN
L2          1 1,3-BUTADIENE/CN

=> S STYRENE/CN
L3          1 STYRENE/CN

=> SEL L1 RN
E1 THROUGH E1 ASSIGNED

=> SEL L2 RN
E2 THROUGH E2 ASSIGNED

=> SEL L3 RN
E3 THROUGH E3 ASSIGNED
```

各モノマーの
化学物質名で検索

各回答から CAS
RN[®] を抽出する

```
=> D SEL
E1          1      107-13-1/BI
E2          1      106-99-0/BI
E3          1      100-42-5/BI

=> S E1/CRN AND E2/CRN AND E3/CRN AND 3/NC
L4          7 107-13-1/CRN AND 106-99-0/CRN AND 100-42-5/CRN AND 3/NC
```

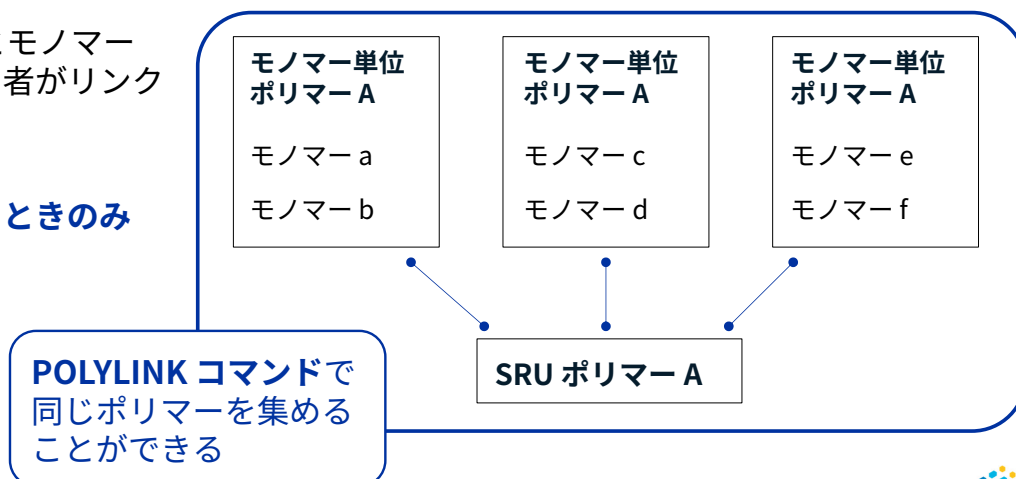
抽出した CAS RN[®] には E 番号が
付与される

E 番号/CRN で検索する

POLYLINK

POLYLINK コマンドを実行すると「**実質的には同じポリマーだが別の CAS RN[®] を持つポリマー**」をまとめて検索できる

- 対応する SRU ポリマーとモノマー単位ポリマーを CAS 索引者がリンク付けている
- POLYLINK コマンドは、**SRU ポリマーが存在するときのみ有効**である



POLYLINK 利用例

=> FILE REGISTRY

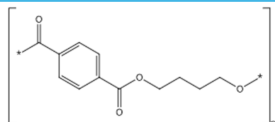
=> S VALOX/CN
L1 1 VALOX/CN

商品名の検索

=> D SCAN

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2024 ACS on STN
IN Poly(oxy-1,4-butanediylloxycarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)
ADDITIONAL NAMES NOT AVAILABLE IN THIS FORMAT
MF (C12 H12 O4)n
CI PMS

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



POLYLINK が利用できる場合、
このメッセージが表示される

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> POLYLINK L1
L2 23 POLYLINK L1

POLYLINK で L1 (VALOX) と同じポリマーを探して
まとめると、全部で 23 件となった

POLYLINK 利用例 (続き)

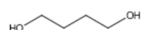
=> D SCAN

L2 23 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2024 ACS on STN
IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,4-butanediol
MF (C8 H6 O4 . C4 H10 O2)x
CI PMS, COM

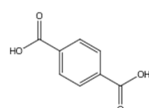
モノマー単位ポリマー

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1



CM 2



1,4-ブタンジオール -
テレフタル酸共重合体

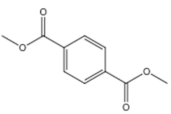
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):22

L2 23 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2024 ACS on STN
IN 1,4-Benzenedicarboxylic acid, 1,4-dimethyl ester, polymer with
1,4-butanediol
MF (C10 H10 O4 . C4 H10 O2)x
CI PMS, COM

POLYLINK 利用例 (続き)

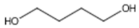
RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1



1,4-ブタンジオール - テレフタルジメチル
エステル共重合体

CM 2



1,4-ブタンジオール - テレフタル酸塩化物
共重合体

L2 23 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2024 ACS on STN
 IN 1,4-Benzenedicarbonyl dichloride, polymer with 1,4-butanediol
 MF (C8 H4 Cl2 O2 . C4 H10 O2)x
 CI PMS, COM

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

POLYLINK で原料が異なるモノマー
単位ポリマーと SRU ポリマーを
まとめて検索できた

実習 1

イソプレン (ISOPRENE, 78-79-5) とメチルメタクリレート (METHYL METHACRYLATE, 80-62-6) の共重合体を検索する

- ヒント
 - モノマーの CAS RN® から検索する (/CRN)
 - 2 成分に限定する (/NC)
 - ポリマー (PMS) に限定する (/CI)

実習 1 の回答

```

=> FILE REGISTRY          ← REGISTRY ファイルに入る

=> S 78-79-5/CRN AND 80-62-6/CRN  ← モノマーの CAS RN® から検索する
L1      299 78-79-5/CRN AND 80-62-6/CRN

=> S L1 AND 2/NC AND PMS/CI      ← 2 成分、ポリマーに限定
L2      8 L1 AND 2/NC AND PMS/CI

=> D SCAN                    ← 得られた回答を SCAN 表示形式で確認

L2  8 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2024 ACS on STN
IN   2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with
MF   2-methyl-1,3-butadiene, graft
CI   (C5 H8 O2 . C5 H8)x      ↑ グラフト共重合体
     PMS

      CM  1
      
      CM  2
      

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

```

31

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



実習 2

1,6-ヘキサンジオール (1,6-HEXANEDIOL, 629-11-8) とイソフタル酸 (ISOPHTHALIC ACID, 121-91-5) からなるポリマーを検索し、POLYLINK を利用して SRU ポリマーや異なるモノマーからなる同じポリマーを集める

- ヒント
 - モノマーの CAS RN® から検索する (/CRN)
 - 2 成分に限定する (/NC)
 - ポリマー (PMS) に限定する (/CI)
 - 得られた回答集合について POLYLINK コマンドを実行する

32

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



実習2の回答

```
=> FILE REGISTRY          ← REGISTRY ファイルに入る

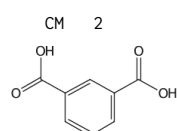
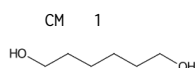
=> S 629-11-8/CRN AND 121-91-5/CRN    ← モノマーの CAS RN® から検索する
L1      6126 629-11-8/CRN AND 121-91-5/CRN

=> S L1 AND 2/NC AND PMS/CI          ← 2 成分、ポリマーに限定
L2      1 L1 AND 2/NC AND PMS/CI

=> D SCAN                          ← 得られた回答を SCAN 表示形式で確認
```

```
L2  1 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2024 ACS on STN
IN   1,3-Benzenedicarboxylic acid, polymer with 1,6-hexanediol
MF   (C8 H6 O4 . C6 H14 O2)x
CI   PMS, COM
```

****RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK**** ← POLYLINK が利用できる



ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

実習2の回答

```
=> POLYLINK L2          ← POLYLINK を実行する

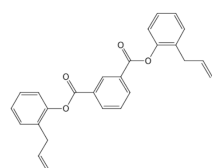
L3      12 POLYLINK L2

=> D 1-12              ← 全件をデフォルトの IDE 表示形式
                        で表示
```

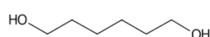
```
L3  ANSWER 1 OF 12  REGISTRY  COPYRIGHT 2024 ACS on STN
RN   2851041-30-8  REGISTRY
CN   1,3-Benzenedicarboxylic acid, 1,3-bis[2-(2-propen-1-yl)phenyl] ester, polymer with 1,6-hexanediol (CA INDEX NAME)
MF   (C26 H22 O4 . C6 H14 O2)x
CI   PMS
PCT  Polyether, Polyvinyl
```

:

CM 1

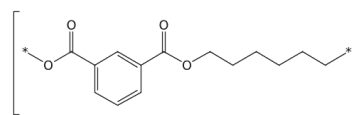


CM 2



← 異なるモノマーからなるポリマー

```
:
L3  ANSWER 10 OF 12  REGISTRY  COPYRIGHT 2024 ACS on STN
RN   59199-93-8  REGISTRY
CN   Poly(oxy carbonyl-1,3-phenylene carbonyloxy-1,6-hexanediyl)
(CA INDEX NAME)
:
MF   (C14 H16 O4)n
CI   PMS
PCT  Polyester
:
**RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK**
```

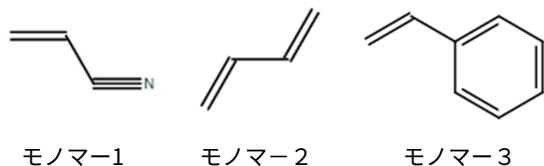


← SRU ポリマー

:

ポリマーの構造検索のポイント

ポイント 1：各モノマーを別々の構造作図画面に作図する



ポイント 2：スクリーン (SCREEN)* を利用する

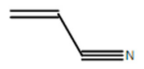
- 2043：ポリマー一般
- 2067：モノマー単位のポリマー
- 2068：SRU ポリマー
- 2069：末端基付き SRU ポリマー
- 2070：末端基なし SRU ポリマー

*スクリーンは構造検索時に検索対象を制限するための機能。
SCR (SCREEN) コマンドの後ろに 3-4 桁のスクリーン番号を入力する。

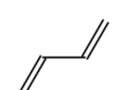
モノマー単位ポリマーの構造検索

```
=> FILE REGISTRY

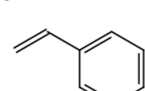
=>
Uploading structure file: 2024_0004_Structure


L1 STRUCTURE UPLOADED

=>
Uploading structure file: 2024_0005_Structure


L2 STRUCTURE UPLOADED

=>
Uploading structure file: 2024_0006_Structure


L3 STRUCTURE UPLOADED
```

モノマーごとに構造質問式を作成

```
=> SCR 2067
L4 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2 AND L3 AND L4
L5 50 SEA SSS SAM L1 AND L2 AND L3 AND L4

=> S L1 AND L2 AND L3 AND L4 FUL
L6 2921 SEA SSS FUL L1 AND L2 AND L3 AND L4
```

モノマー単位ポリマーのスクリーン

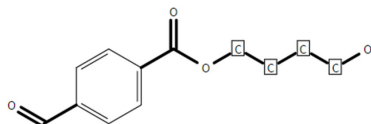
各モノマーの構造質問式およびスクリーンの L 番号を AND 演算

SRU ポリマーの構造検索

=> FILE REGISTRY

=>

Uploading structure file: 2024_0047_Structure



繰り返し単位を作図する

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2068

L2 SCREEN CREATED

SRU ポリマーのスクリーン

=> S L1 AND L2

L3 14 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> S L1 AND L2 FULL

L4 204 SEA SSS FUL L1 AND L2

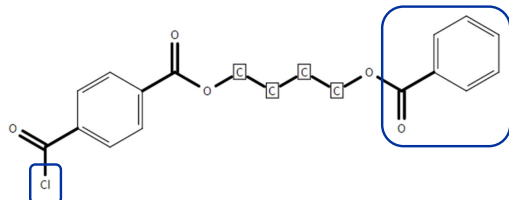
構造質問式およびスクリーンの
L 番号を AND 演算

末端基付き SRU ポリマーの構造検索

=> FILE REGISTRY

=>

Uploading structure file: 2024_0048_Structure



末端基がある場合は末端基も
作図する*

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2069

L2 SCREEN CREATED

末端基付き SRU ポリマーのスクリーン

=> S L1 AND L2

L3 1 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> S L1 AND L2 FULL

L4 4 SEA SSS FUL L1 AND L2

構造質問式およびスクリーンの
L 番号を AND 演算

* 主鎖を限定した検索はできない

ポリマー分類用語 (PCT: Polymer Class Terms)

ポリマー分類用語は、主鎖 (backbone) 中に存在する結合に基づきコンピュータ・アルゴリズムによって付与されるコード

- ポリマーの種類によって大まかな検索ができる
- 重合によってできる結合を指定して検索できる

RN	27056-66-2	REGISTRY
ED	Entered STN: 16 Nov 1984	
CN	1,3-Benzenedicarbonyl dichloride, polymer with 4,4'-diamino[1,1'-biphenyl]-3,3'-diol (CA INDEX NAME)	
MF	(C12 H12 N2 O2 . C8 H4 C12 O2)x	
CI	PMS, COM	
PCT	Polyamide, Polyamide formed, Polybenzoxazole, Polybenzoxazole formed, Polyester, Polyester formed	

ポリマー分類用語

ポリマー分類用語 (PCT: Polymer Class Terms)

ポリマー分類用語には下記の 2 種類がある

1. 構造に元々存在する結合
2. 重合によって生成する結合 (FORMED が付く)

モノマー単位ポリマー $(\text{HO}_2\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH})_x$

POLYAMIDE
POLYESTER

$(\text{HO}_2\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CO}_2\text{H} . \text{OH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NH}_2)_x$

POLYAMIDE
POLYESTER

SRU ポリマー $(-\text{CO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-)_n$

POLYAMIDE
POLYESTER

FORMED 付きの
ポリマー分類用語

POLYESTER FORMED

POLYAMIDE FORMED
POLYESTER FORMED

* SRU ポリマーの官能基は骨格中に必ず存在するので FORMED 付きのポリマー分類用語は付与されない

(参考) ポリマー分類用語一覧

ポリマー分類用語

AMINO RESIN	POLYAMINE	POLYONENE	POLYSULFONAMIDE
CHLOROPOLYMER	POLYANHYDRIDE	POLYISOCYANURATE	POLYSULFONE
DOUBLE STRAND	POLYAZOMETHINE	POLYKETONE	POLYTHIOESTER
EPOXY RESIN	POLYBENZIMIDAZOLE	POLYNUCLEOTIDE	POLYTHIOETHER
FLUOROPOLYMER	POLYBENZOXAZOLE	POLYOLEFIN	POLYUREA
MANUAL COMPONENT	POLYCARBODIIMIDE	POLYOTHER	POLYURETHANE
MANUAL REGISTRATION	POLYCARBONATE	POLYOTHER ONLY	POLYVINYL
PHENOLIC RESIN	POLYCYANURATE	POLYPHENYL	
POLYACETYLENE	POLYESTER	POLYPHOSPHAZENE	
POLYACRYLIC	POLYETHER	POLYQUINOXALINE	
POLYAMIC ACID	POLYHYDRAZINE	POLYSTYRENE	
POLYAMIDE	POLYIMIDE	POLYSULFIDE	



(参考) ポリマー分類用語一覧

FORMED 付きポリマー分類用語

POLYAMIC ACID FORMED	POLYHYDRAZINE FORMED	POLYTHIOETHER FORMED
POLYAMIDE FORMED	POLYIMIDE FORMED	POLYUREA FORMED
POLYAMINE FORMED	POLYONENE FORMED	POLYURETHANE FORMED
POLYANHYDRIDE FORMED	POLYISOCYANURATE FORMED	
POLYAZOMETHINE FORMED	POLYKETONE FORMED	
POLYBENZIMIDAZOLE FORMED	POLYPHENYL FORMED	
POLYBENZOXAZOLE FORMED	POLYPHOSPHAZENE FORMED	
POLYCARBODIIMIDE FORMED	POLYQUINOXALINE FORMED	
POLYCARBONATE FORMED	POLYSULFIDE FORMED	
POLYCYANURATE FORMED	POLYSULFONAMIDE FORMED	
POLYESTER FORMED	POLYSULFONE FORMED	
POLYETHER FORMED	POLYTHIOESTER FORMED	



ポリマー分類用語を用いた検索

ポリマー分類用語は /PCT で検索する

=> S AMINO RESIN/PCT

=> S POLYESTER/PCT

構造に元々存在する結合だけでなく重合によって生成する結合に基づくポリマーの両方が得られる

=> S POLYESTER FORMED/PCT

FORMED 付きのポリマー分類用語で検索すると、重合によって生成する結合に基づくポリマーが得られる

検索例

エステル重合によって得られる 1 または 2 成分系ポリエステルを検索する
(ただしモノマー中にエーテル結合が存在する)

=> FILE REGISTRY

=> S POLYESTER FORMED/PCT

L1 328851 POLYESTER FORMED/PCT

エステル重合によって生成するポリエステル

=> S (POLYETHER NOT POLYETHER FORMED)/PCT

L2 488650 (POLYETHER NOT POLYETHER FORMED)/PCT

ポリエーテルのうち、モノマー中にエーテル結合が存在するものに限定

=> S L1 AND L2 AND 3>NC

L3 11743 L1 AND L2 AND 3>NC

2 成分以下に限定

=> D 11743

L3 ANSWER 11743 OF 11743 REGISTRY COPYRIGHT 2024 ACS on STN

RN 9010-83-7 REGISTRY

ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN Acetic acid, 2,2'-oxybis-, polymer with 1,2-propanediol (9CI) (CA INDEX NAME)

OTHER CA INDEX NAMES:

CN 1,2-Propanediol, polymer with 2,2'-oxybis[acetic acid] (9CI)

CN Acetic acid, oxydi-, polyester with 1,2-propanediol (8CI)

OTHER NAMES:

:

検索例 (続き)

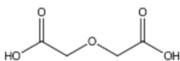
MF (C4 H6 O5 . C3 H8 O2)x
CI PMS
PCT Polyester, **Polyester formed**, **Polyether**
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, CHEMCATS, IFIALL, USP

POLYESTER FORMED が収録されている

POLYETHER が収録されているが、
POLYETHER FORMED は収録されていない

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1
CRN 110-99-6
CMF C4 H6 O5

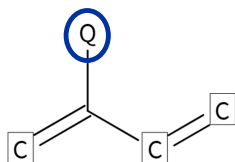


CM 2
CRN 57-55-6
CMF C3 H8 O2



実習 3

下記のブタジエンをモノマーとする 2 成分ポリマーを検索する



可変原子 Q は「C と H 以外の元素」

- ヒント
 - ポリマーの誘導体を検索する際は構造検索を行う
 - モノマー単位ポリマーのスクリーン: 2067
 - 2 成分に限定する (/NC)

実習3の回答

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

 Draw
 から構造作図画面を起動し、構造質問式を作図する

=>

Uploading structure file: 2024_0051_Structure

L1 STRUCTURE UPLOADED ← 構造質問式をアップロード

=> SCR 2067 ← モノマー単位ポリマーのスクリーン

L2 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2 ← スクリーンを使った構造検索 (サンプル検索)

:

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

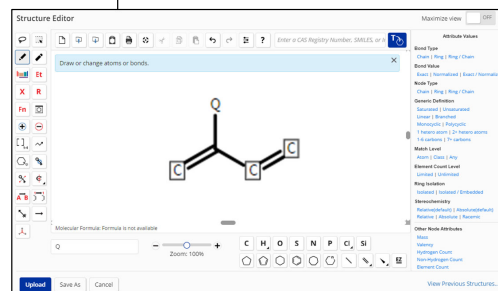
PROJECTED ITERATIONS: 166162 TO 177278

PROJECTED ANSWERS: 545 TO 1375

L3 48 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> S L1 AND L2 FUL ← スクリーンを使った構造検索 (フルファイル検索)

L4 902 SEA SSS FUL L1 AND L2



実習3の回答

=> S L4 AND 2/NC ← 2成分に限定

L5 324 L4 AND 2/NC

=> D SCAN ← SCAN表示形式で回答を表示

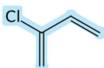
L5 324 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2024 ACS on STN

IN 1,3-Butadiene, 2-chloro-, polymer with 1-(ethenyloxy)-2-methylpropane (9CI)

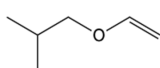
MF (C6 H12 O . C4 H5 Cl)x

CI PMS

CM 1



CM 2



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

実習 4

4,4'-ビフェニルジカルボン酸 (787-70-2) をモノマーとするポリアミド系ポリマーを検索する

- ヒント

- 実質的に同じポリマーを網羅的に検索するには POLYLINK を行う
- ポリマーの種類で限定する際はポリマー分類用語 (/PCT) を用いる

実習 4 の回答

```
=> FILE REGISTRY          ← REGISTRY ファイルに入る

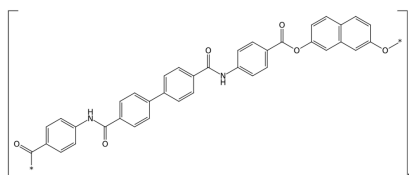
=> S 787-70-2/CRN AND PMS/CI  ← /CRN で検索、PMS/CI でポリマーに限定
L1      1175 787-70-2/CRN AND PMS/CI

=> POLYLINK L1             ← POLYLINK を実行
L2      1592 POLYLINK L1

=> S L2 AND POLYAMIDE/PCT   ← ポリマー分類用語を用いてポリアミドに限定
L3      501 L2 AND POLYAMIDE/PCT

=> D SCAN                   ← SCAN 表示形式で回答を表示
                               (SCAN 表示形式では PCT フィールドは表示されない)
L3      501 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2024 ACS on STN
IN      Poly(oxy-2,7-naphthalenediylloxycarbonyl-1,4-phenyleneiminocarbonyl[1,1'-
MF      biphenyl]-4,4'-diylcarbonylimino-1,4-phenylenecarbonyl) (9CI)
CI      (C38 H24 N2 O6)n
        PMS
```

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK





ポリマーに関する文献の検索

ポリマーに関する文献検索 (CAplus)

ポリマーに関する文献検索は CAplus ファイルで行う

ポイント ポリマーの種類により索引方針が異なる

論文や特許

ポリマー-A

➡ ① ポリマー A の CAS RN®

➡ ② D 付きの CAS RN®

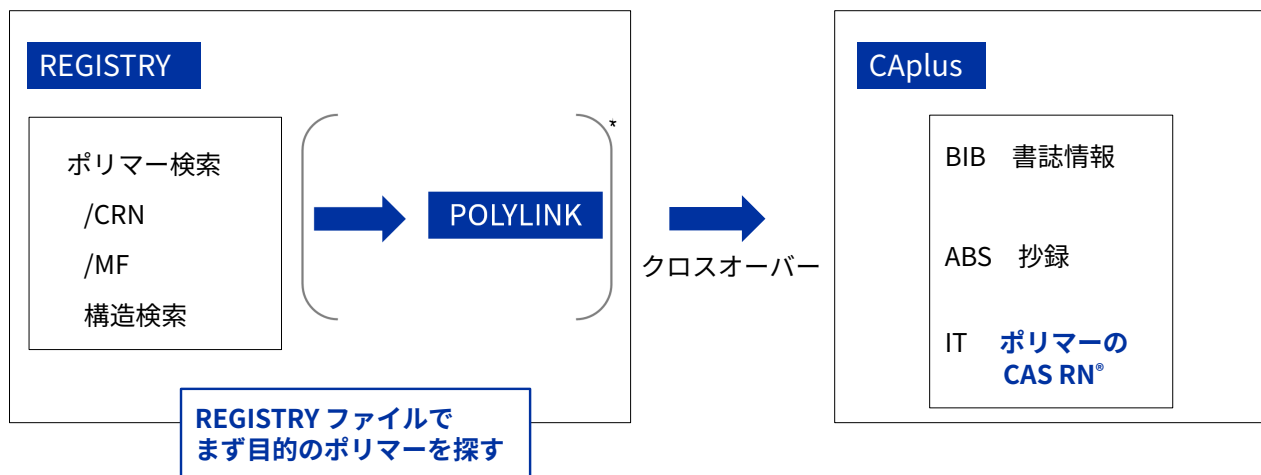
ポリマー A' の CAS RN® + D + キーワード

* ポリマー A' = ポリマー A の基本骨格

➡ ③ 統制語

① CAS RN®で索引されるポリマーの文献検索

検索の流れ



* 縮合系ポリマーの場合

① CAS RN®で索引されるポリマーの文献検索

① のケースの検索のポイント

- 縮合系ポリマー、ビニル系ポリマー、一部の後処理を加えたポリマー (塩、付加化合物、エステル化、エーテル化等) は**独自の CAS RN®**で索引される
- REGISTRY ファイルで目的のポリマーを検索する
- 縮合系ポリマーの場合は **POLYLINK** を行う
- 文献検索は REGISTRY ファイルから CAplus ファイルへクロスオーバー検索する

① CAS RN®で索引されるポリマーの文献検索

p-フェニレンジアミン (106-50-3) とテレフタル酸 (100-21-0) からなるポリマーの文献検索

```
=> FILE REGISTRY

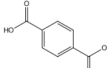
=> S 106-50-3/CRN AND 100-21-0/CRN AND 2/NC AND PMS/CI
L1      2 106-50-3/CRN AND 100-21-0/CRN AND 2/NC
        AND PMS/CI

=> D SCAN

L1  2 ANSWERS  REGISTRY
IN  1,4-Benzenedicarboxylic acid, diamine
MF  (C8 H6 O4 . C6 H8 N2)x
CI  PMS, COM

**RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK**

CM1

CM2

```

REGISTRY ファイルで目的のポリマーを検索する

```
:

=> POLYLINK L1
L2      21 POLYLINK L1

=> FILE CAPLUS

=> S L2
L3      8203 L2
```

POLYLINK を行う

REGISTRY ファイルの回答 (L2) を
CAplus ファイルにクロスオーバーする

目的のポリマーの CAS RN® が
索引されている文献

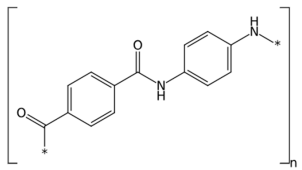
55 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



① CAS RN®で索引されるポリマーの文献検索

```
=> D BIB HITSTR 12

L3  ANSWER 12 OF 8203  CAPLUS  COPYRIGHT 2024 ACS on STN
AN  2024:1576145  CAPLUS Full-text
DN  187:270621
TI  Regulating pore structure of aramid nanofiber (ANF) separators for
    lithium-sulfur (Li-S) batteries
:
SO  Materials Today Energy (2024), 44, 101640
    CODEN: MTEACH; ISSN: 2468-6069
:
IT  24938-64-5
RL  NANO (Nanomaterial); PRP (Properties)
    (regulating pore structure of aramid nanofiber (ANF) separators for
    lithium-sulfur (Li-S) batteries)
RN  24938-64-5  CAPLUS
CN  Poly(imino-1,4-phenyleneiminocarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl) (CA INDEX
    NAME)
```



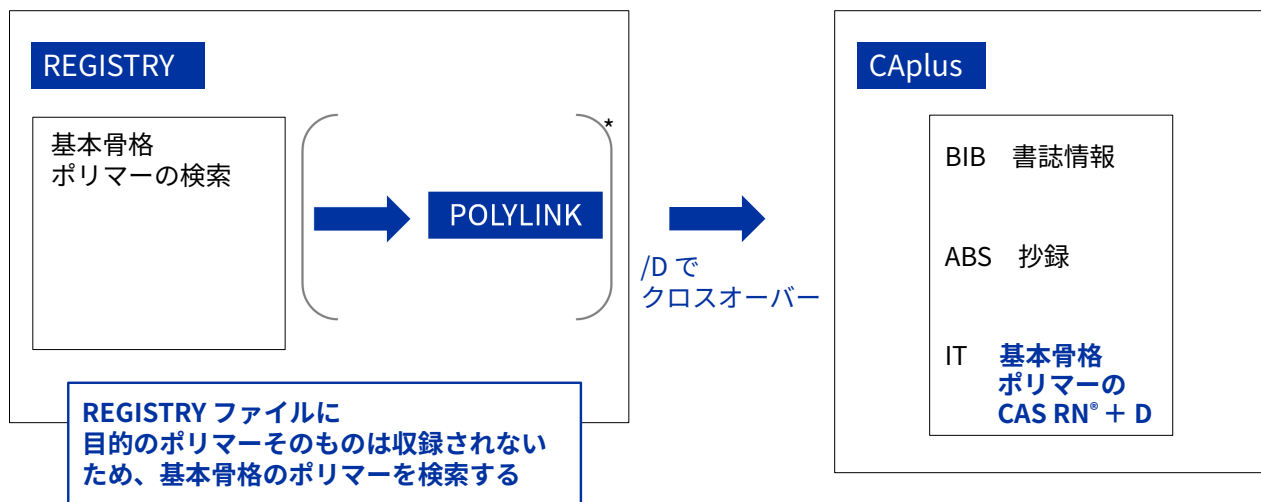
POLYLINK で関連ポリマーを集めたことで
このような SRU ポリマーのみが索引され
ている特許を得ることができた

56 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



② D 付きの CAS RN® で索引されるポリマーの文献検索

検索の流れ



* 縮合系ポリマーの場合

57 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



② D 付きの CAS RN® で索引されるポリマーの文献検索

② のケースの検索のポイント

- 塩素化、アルキル化、アミド化、イミド化、ウレタン化、加水分解、スルホン化などの後処理を加えたポリマーは**独自の CAS RN® はもたない**
- CAplus ファイルでは、**後処理前のポリマーの CAS RN® + D (非特定誘導体を表す接尾辞)**が**後処理に関するキーワード**とともに索引される *
- REGISTRY ファイルでは**後処理前のポリマー**を検索する
- 文献検索は REGISTRY ファイルから CAplus ファイルへクロスオーバー検索する
=> **SL#/D (L) 後処理に関するキーワード**

* 接尾辞 D は 1977 年以降のレコードに付与

58 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



② D 付きの CAS RN® で索引されるポリマーの文献検索

塩素化ポリブタジエンの文献検索 (ポリブタジエンの CAS RN® : 9003-17-2)

=> FILE REGISTRY

=> S 9003-17-2

L1 1 9003-17-2

=> D

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2024 ACS on STN
RN 9003-17-2 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 1,3-Butadiene, homopolymer (CA INDEX NAME)
:
CM 1



:
=> FILE CAPLUS

=> S L1/D (L)(CHLORINAT? OR CHLORO)

L2 225 L1/D (L) (CHLORINAT? OR CHLORO)

ポリブタジエン (後処理前のポリマー) を検索

/D をつけてクロスオーバーし、後処理に関するキーワードをかけ合わせる

=> D BIB HITIND 2

L2 ANSWER 2 OF 225 CAPLUS COPYRIGHT 2024 ACS on STN
AN 2024:31872 CAPLUS Full-text
DN 185:220471
TI Preparation of bridge support rubber

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
CN 117343412	A	20240105	CN 2022-10735018	20220627

IT **9003-17-2D, chlorinated**

RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
(butadiene rubber; prepn. of bridge support rubber)

ポリブタジエンの CAS RN® が D 付きで塩素化のキーワードとともに索引されている

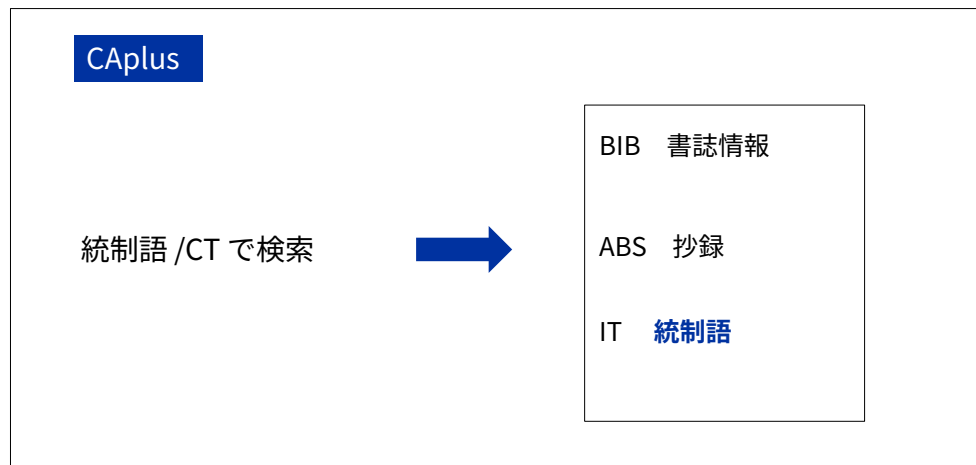
(参考) 主な後処理のキーワード

後処理	キーワード
塩素化	CHLORINAT? OR CHLORO
アルキル化	ALKYLAT? OR ALKYL
アミド化	AMIDAT? OR AMIDE #
イミド化	IMIDAT? OR IMIDE # OR IMIDIZ?
ウレタン化	URETHAN? OR CARBAMOY?
加水分解	HYDROL? OR SAPON?
スルホン化	SULFONAT? OR SULFONE#
エーテル化	ETHER# OR METHOXYLAT? *

* エーテル化の種類によって異なる

③ 統制語で索引されるポリマーの文献検索

検索の流れ



③ 統制語で索引されるポリマーの文献検索

③ のケースの検索のポイント

- 石油系樹脂、クマロン-インデン樹脂は統制語のみで索引される
- シリコーンは基本的に統制語で索引される*
- 文献検索は C.A.B. Plus ファイルで統制語検索を行う

* 独自の CAS RN® をもつシリコーンもある。その場合は ①② の検索の流れに沿う。

③ 統制語で索引されるポリマーの文献検索

石油系樹脂の文献検索

```
=> FILE CAPLUS  
=> S PETROLEUM RESINS/CT  
L1 22488 PETROLEUM RESINS/CT  
=> S PETROLEUM/CT (L) RESIN# OR RESINS/CT (L) PETROLEUM  
L2 1956 PETROLEUM/CT (L) RESIN# OR RESINS/CT (L) PETROLEUM  
=> S L1 OR L2  
L3 24366 L1 OR L2  
=> D SCAN TI HITIND  
L3 24366 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2024 ACS on STN  
TI Modified asphalt for ultrathin overlay and preparation method thereof  
IT Petroleum resins  
RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)  
(C5; modified asphalt for ultrathin overlay and prepn. method thereof)  
  
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1  
L3 24366 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2024 ACS on STN  
TI Chlorination of petroleum resins  
IT Resins  
RL: USES (Uses)  
(petroleum, chlorination of)
```

石油系樹脂の統制語で検索

石油系樹脂の統制語

- 1977 年以降
Petroleum resins
- 1976 年以前
Petroleum (L) Resins
Resins (L) Petroleum

実習 5

スルホン化ポリエチレンの文献を検索する

ヒント

- スルホン化の後処理をしたポリマーは原則として独自の CAS RN® をもたず、CAplus ファイルでは後処理前のポリマーの CAS RN® が **D 付き** で **キーワードとともに** 索引されている
- REGISTRY ファイルで後処理前のポリマー (ポリエチレン) を検索
- CAplus ファイルにクロスオーバー
=> **S L#/D (L) 後処理に関するキーワード**
- スルホン化のキーワードの例: SULFONAT? OR SULFONE#

実習5の回答

```
=> FILE REGISTRY          ← REGISTRY ファイルに入る

=> E POLYETHYLENE/CN

E1      1    POLYETHYLEE GLYCOL DIETHER WITH 1,4-BUTANEDIOL (2:1)/CN
E2      1    POLYETHYLEE GLYCOL MONOETHER WITH ETHANOL/CN
E3      1 --> POLYETHYLENE/CN
E4      1    POLYETHYLENE ACETATE/CN
:

=> S E3                    ← ポリエチレンを完全名 (/CN) で検索
L1      1    POLYETHYLENE/CN

=> FILE CAPLUS             ← CAPLUS ファイルに入る

=> S L1/D                  ← /D をつけてクロスオーバー検索する
L2      44051 L1/D

=> S L2 (L) (SULFONAT? OR SULFONE#) ← スルホン化のキーワードで絞り込む
L3      459 L2 (L) (SULFONAT? OR SULFONE#)
```

実習5の回答

```
=> D SCAN TI HITIND       ← ヒットした回答を SCAN TI HITIND で表示

L3      459 ANSWERS  CAPLUS  COPYRIGHT 2024 ACS on STN
TI      Sulfonation with high sulfonation degree
IT      9002-84-0DP, Polytetrafluoroethylene, sulfonated 9002-88-4DP,
Polyethylene, sulfonated
RL: IMF (Industrial manufacture); TEM (Technical or engineered material
use); PREP (Preparation); USES (Uses)
(sulfonation of plastics with high sulfonation
degree using sulfites or pyrosulfites)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):5

L3      459 ANSWERS  CAPLUS  COPYRIGHT 2024 ACS on STN
TI      Radiochemical sulfonation of polymer surfaces
IT      9002-88-4D, sulfonated
RL: PEP (Physical, engineering or chemical process); PROC (Process)
(low-d.; radiochem. sulfonation of polymer surfaces)

:
```

まとめ

- REGISTRY ファイルでは**モノマー単位ポリマー**のレコードを想定して検索する
- 縮合系ポリマーの場合は **POLYLINK** を行うと「実質的には同じポリマーだが別の CAS RN® を持つポリマー」をまとめることができる
- ポリマーに関する文献検索は CAplus ファイルで行う。**ポリマーの種類により索引方針が異なる**ため、索引方針に沿って適切な検索を行う

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)

