

STN kemian perusteet

7.12.2010

Tämän oppaan viimeisin versio on katsottavissa ja tulostettavissa sivulla http://www.vtt.fi/service/inf/STN_guides_manuals.jsp. Oppaan on laatinut Riitta Housh ja sen tekijänoikeus on VTT:llä. Oppaan ja sen osien tulostus ja kopiointi STN-käyttöön on sallittu. Muihin käyttötarkoituksiin vaaditaan VTT:n lupa.

STN International www.stn-international.de
c/o FIZ Karlsruhe
P.O. Box 2465, D-76012 Karlsruhe, Germany
Telephone: +49 7247 808 555
Telefax: +49 7247 808 259
Email: hlpdeskk@fiz-karlsruhe.de Email: etunimi.sukunimi@vtt.fi

VTT, Tietoratkaisut www.vtt.fi/service/inf/
Vuorimiehentie 5, Espoo
PL 1000, 02044 VTT
Riitta Housh Puh. 020 722 4381
Riitta Metsäkoivu Puh. 020 722 4372

Sisällysluettelo

1. Registry	3
1.1 Haku yhdisteen nimillä Registryssä	4
1.1.1 Haku kokonimellä /CN.....	5
1.1.2 Haku nimen osalla /CNS.....	6
1.1.3 Haku nimen fragmentilla perushakemistosta BI.....	8
1.2 Haku molekyylikaavalla Registryssä.....	10
1.2.1 Yksikomponenttiset yhdisteet.....	10
1.2.2 Happojen ja amiinien suolat.....	13
1.2.3 Metalliseokset (Alloy).....	14
1.2.4 Seokset.....	15
1.2.5 Hydraatit.....	16
1.2.6 Additio-yhdisteet	16
1.2.7 Polymeerit.....	17
1.2.8 Basic Indexin käyttö yhdisteluokkien hakuun.....	18
1.2.9 Yhteenveto monikomponenttisten seosten molekyylikaavojen järjestämisestä..	19
1.3 Haku yhdisteen rakenteella (EXACT ja FAMILY).....	20
1.3.1 Piirtäminen.....	20
1.3.2 Rakennehakujen suoritus.....	21
2. Chemical Abstracts (CAplus, HCAplus, ZCAplus)	22
2.1 CAS-roolit (RL).....	26
2.2 CA Lexicon (CT)	28
2.3 CA:n luokituskoodit (CC ja SX) ja osasegmentit (FS).....	30
2.4 Rautalankamalli osuviin hakuihin (H)CAplussassa	33
3. Kemialliset yhdisteet WPINDEXissä	34
4. Kemiallista yhdistettä koskevien viitteiden haku STN:ssä	36
4.1 Yhdistehaku CAplussassa ja WPINDEXissä.....	36
4.2 Yhdistehaku INPAFAMDB/INPADOCDB:ssä.....	39
4.3 Yhdistehaku tietokannoissa, joissa ei ole CAS-numeroita (SEL CHEM).....	40
4.4 Yhteenveto kemiallisen yhdisteen tietojen hausta (CAplus).....	41
5. Yhdisteen ominaisuustietojen haku	42
6. Jatkuva seuranta yhdisteen julkaisuista (SMARTracker)	43

1. Registry

- Tiedot niistä kemiallisista aineista, jotka ovat esiintyneet CAS:n seuraamassa kirjallisuudessa v. 1907-
- 100 milj. ainetta (yli 60 milj. biosekvenssiä, 30 milj. org. ja epäorg. yhdistettä), yli 2 miljardia mitattua & laskennallista ominaisuusarvoa
- Kullakin aineella on oma tietue ja oma CAS-numero 0000-00-0
- CAS-numero linkkinä Registryn ja CA:n välillä: nimet, kaavat ja rakenteet Registryssä => kirjallisuusviitteet ja tiivistelmät CA:ssa
- Biosekvenssihaut myös BLAST-algoitmillla
- **Hae kemiallisten yhdisteiden tiedot aina Registryn kautta!**

L4 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2000 ACS

RN **98-86-2** REGISTRY

CAS-numero

CN Ethanone, 1-phenyl- (9CI) (CA INDEX NAME)

CA:n indeksinimet

OTHER CA INDEX NAMES:

CN Acetophenone (8CI)

OTHER NAMES:

Kaikki nimet, joilla yhdiste ollut CA:ssa v. 1907-

CN 1-Phenyl-1-ethanone

CN 1-Phenylethanone

CN Acetophenon

CN Acetylbenzene

CN Hypnon

CN Hypnone

CN Methyl phenyl ketone

CN NSC 98542

CN Phenyl methyl ketone

FS 3D CONCORD

MF C8 H8 O

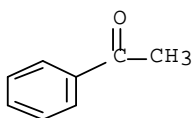
Molekyylikaava

CI COM

STN:n tietokannat, joissa tietoa yhdisteestä CAS-numerolla haettuna

LC STN Files: AGRICOLA, ANABSTR, APILIT, APILIT2, APIPAT, APIPAT2, REAXYSFILE*, BIOBUSINESS, BIOSIS, CA, CANCERLIT, CAOLD, CAPLUS, CASREACT, CBNB, CEN, CHEMCATS, CHEMINFORMRX, CHEMLIST, CHEMSAFE, CIN, CSCHM, CSNB, DDFU, DETHERM*, DIPPR*, DRUGU, EMBASE, GMELIN*, DOC*, HSDB*, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, IPA, MEDLINE, MRCK*, MSDS-OHS, NAPRALERT, NIOSHTIC, PDLCOM*, PIRA, PROMT, RTECS*, SPECINFO, TOXLINE, TOXLIT, TULSA, ULIDAT, USPATFULL, VTB (*File contains numerically searchable property data)
Other Sources: DSL**, EINECS**, TSCA**

Rakenne



Montako viiettä CA:ssa

15365 REFERENCES IN FILE CA (1967 TO DATE)

258 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

15406 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1967 TO DATE)

13 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)

1.1 Haku yhdisteen nimillä Registryssä

Kolme mahdollisuutta:

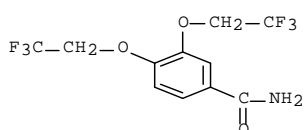
- Haku kokonimellä /CN
- Haku nimen segmentillä /CNS
- Haku nimen fragmentilla perushakemistosta BI (ilman kenttäkoodia)

To locate compounds of the following type:

RN 50778-62-6 REGISTRY

CN **Benzamide, 3,4-bis(2,2,2-trifluoroethoxy)-** (9CI) (CA INDEX NAME)

MF C11 H9 F6 N O3



■

This search approach	Is useful for locating compounds that
Complete chemical name searching (CN)	Match the name exactly
Chemical name segment searching (CNS)	Contain <i>natural segments</i> of the full name 3,4 trifluoroethoxy bis benzamide 2,2,2
Name fragment searching in the Basic Index (BI)	Contain either <ul style="list-style-type: none"> ■ <i>Natural segments</i> ■ <i>Basic segments</i> of the full name – the smallest chemically distinct name fragments remaining after punctuation is removed 3 fluoro 4 eth bis oxy 2 benz tri amide <ul style="list-style-type: none"> ■ <i>Recombined segments</i> – basic segments recombined Trifluoroethoxy benzamide Trifluoro Trifluoroeth Fluoroeth Fluoroethoxy Ethoxy

1.1.1 Haku kokonimellä /CN

- Tutki CN (Chemical name) –kenttää EXPAND-komennolla (E)
- Valitse listasta sopiva(t)termit

Hankalien kokonimien haku:

If the chemical name contains	Then your action is
Superscripts Subscripts Italic letters/numbers	Ignore the italicization or the fact that a character is super/subscripted => E DICHLOROMETHANE-D2/CN
Greek letters	Spell out the name of the Greek letter and place a period before and after the name of the Greek letter => E .ALPHA.-ACETYLNAPHTHALENE/CN
Primes (apostrophes)	Place quotation marks (“ ”) around the entire name => S “N,N’-DIMETHYL-1,2-ETHANEDIAMINE”/CN
Parentheses	Place quotation marks (“ ”) around the entire name => S “2-(1-ACETOXYETHYL)FURAN”/CN
Brackets	Replace brackets with parentheses and place quotation marks (“ ”) around the entire name => S “BENZO(B)THIOPHENE”/CN

=> e benzamide/cn

```

E1      1      BENZAMELID/CN
E2      1      BENZAMIDASE/CN
E3      1  --> BENZAMIDE/CN
E4      1      BENZAMIDE 1/CN
E5      1      BENZAMIDE 2-BROMO-4-NITROPHENYLHYDRAZONE/CN
E6      1      BENZAMIDE ADENINE DINUCLEOTIDE/CN
E7      1      BENZAMIDE ANION/CN
E8      1      BENZAMIDE CARBAMOYLHYDRAZONE/CN
E9      1      BENZAMIDE CARBETHOXYHYDRAZONE/CN
E10     1      BENZAMIDE COMPD. WITH PHOSPHORIC ACID (1:1)/CN
E11     1      BENZAMIDE COMPD. WITH TIN TETRABROMIDE (2:1)/CN
E12     1      BENZAMIDE COMPOUND WITH M-NITROPHENOL (2:1)/CN

```

1.1.2 Haku nimen osalla /CNS

Chemical Name Segment (CNS) indeksi sisältää vain luonnollisia nimen osia. Useimmat haut onnistuvat hyvin perushakemistosta (ks. seuraava kohta). Käytä silloin sitä. Etsi käytettävissä olevat segmentit CNS-kentästä EXPANDilla.

Seuraavissa tapauksissa CNS-kenttä on hyödyllinen:

- Pidemmällä nimen fragmenteilla saadaan kohdistetumpi tulos ja vähemmän vääriä yhdisteitä.
- Katkaisu vasemmalta on mahdollista neljälle tai suuremmalle merkkimäärälle. Näin saadaan sellaista, mitä aina ei perushakemistosta saada.
- Hyödyllinen kauppa- ja triviaalinimille

Tip	Example
Keep multiplicative or structural prefixes with the segment to which they apply	<ul style="list-style-type: none"> ■ Use dichloro, rather than di (W) chloro ■ Use cyclohexane, rather than cyclo (W) hexane
Include locant strings only when they are needed for refinement	2,4,6-
Use proximity to relate segments, taking care not to overspecify	Benzoic (L) 4-chloro will retrieve <ul style="list-style-type: none"> ■ Benzoic acid, 4-chloro ■ 4-Chloro-3-methylbenzoic acid
Include alternative names for functional groups	Picryl is the trivial name for the group with the systematic name 2,4,6-trinitrophenyl

=> e benzamide/cns

E1	3723	BENZAMIDATO/CNS
E2	1	BENZAMIDAZOLYL/CNS
E3	1023139 -->	BENZAMIDE/CNS
E4	1	BENZAMIDIC/CNS
E5	29	BENZAMIDIN/CNS
E6	3	BENZAMIDINATE/CNS
E7	19	BENZAMIDINATO/CNS
E8	7	BENZAMIDINATONICKEL/CNS
E9	2	BENZAMIDINATOTRIPHENOXY/CNS
E10	2	BENZAMIDINATOTRIS/CNS
E11	2672	BENZAMIDINE/CNS
E12	9	BENZAMIDINIUM/CNS

Esimerkki: vitamiinien haku CNS-kentän avulla.

=> FILE REGISTRY

=> S VITAMIN

L1 1404 VITAMIN
(VITAMIN OR VITAMINS)

=> E LEFT VITAMIN/CNS

E1 1 VITAMEDIN/CNS
 E2 1 CEVITAMIC/CNS
 E3 1086 --> VITAMIN/CNS
 E4 1 AMBOVITAMIN/CNS
 E5 3 ANHYDROVITAMIN/CNS
 E6 1 AQUOPSEUDOVITAMIN/CNS
 E7 1 AZAVITAMIN/CNS
 E8 1 CEVITAMIN/CNS
 E9 2 CHLOROVITAMIN/CNS
 E10 11 CYCLOVITAMIN/CNS
 E11 1 DECAVITAMIN/CNS
 E12 6 DEHYDROVITAMIN/C

The E LEFT command is used to see word variants with different prefixes.

=> S ?VITAMIN?/CNS

L2 1462 ?VITAMIN?/CNS

=> S L2 NOT L1

L3 58 L2 NOT L1

=> D HIT 2 13 17

L3 ANSWER 2 OF 58 REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS
 CN DNA (human gene SMVT sodium-dependent multivitamin transport protein isoform II N-terminal fragment-specifying cDNA plus 5'-flank) (9CI)

L3 ANSWER 13 OF 58 REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS

OTHER NAMES:

CN 1.alpha.-hydroxyprevitamin D4

L3 ANSWER 17 OF 58 REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS

OTHER NAMES:

CN 2-Ambovitamin E

The left- and right-truncated CNS search finds the term embedded in any longer fragment, not just natural segments.

1.1.3 Haku nimen fragmentilla perushakemistosta BI

Käytä tarvittaessa läheisyysoperaattoreita:

This proximity operator	Ensures that nomenclature search terms are
(L)	In the same name
(W)	Adjacent, in order of input
(XW)	Anywhere in name, in order of input
(A)	Adjacent, in any order

=> **e benzamide**

E1	2	BENZAMIDAZOLE/BI
E2	1	BENZAMIDAZOLYL/BI
E3	1025679	--> BENZAMIDE/BI
E4	1	BENZAMIDETIN/BI
E5	1	BENZAMIDIC/BI
E6	3	BENZAMIDIENINE/BI
E7	120	BENZAMIDIN/BI
E8	8	BENZAMIDINATE/BI
E9	58	BENZAMIDINATO/BI
E10	8	BENZAMIDINATONICKEL/BI
E11	4	BENZAMIDINATOTRI/BI
E12	2	BENZAMIDINATOTRIPHEN/BI

Esimerkki: Penisilliini

=> **FILE REGISTRY**

=> **S PENICILLIN**

L1 2493 PENICILLIN

=> **D SCAN**

L1 2493 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS

IN **Penicillin-binding protein 1A (Enterococcus faecalis strain V583 gene EF1148) (9CI)**

SQL 778

MF Unspecified

CI MAN

RELATED SEQUENCES AVAILABLE WITH SEQLINK

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

*** USE 'SQD' OR 'SQIDE' FORMATS TO DISPLAY SEQUENCE ***

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

These protein and DNA sequence records are not of interest.

L1 2493 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS
 IN DNA (human fetal brain clone pBS-2078a07 11.33-kilodalton
 isopenicillin N synthetase structure domain sequence homolog
 containing protein cDNA) (9CI)
 SQL 312
 MF Unspecified
 CI MAN

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0

Refine the search to eliminate sequences

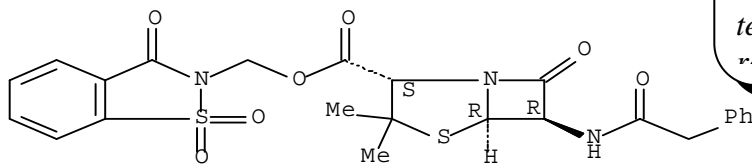
=> S L1 NOT SEQUENCE/FS

L2 1201 L1 NOT SEQUENCE/FS

=> D SCAN

L2 1201 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS
 IN Penicillin G, ester with 2-(hydroxymethyl)-1,2-benzisothiazolin-3-
 one 1,1-dioxide (7CI)
 MF C24 H23 N3 O7 S2

Absolute stereochemistry.

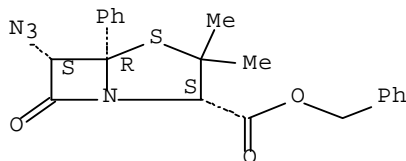


These answers are the organic substances containing the penicillin ring. The D SCAN mode does not show all chemical names, so the hit term does not appear in the second record

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

L2 1201 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS
 IN 4-Thia-1-azabicyclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid, 6-azido-3,3-
 dimethyl-7-oxo-5-phenyl-, phenylmethyl ester, [2S-(2 α ,5 α ,6 α)]- (9CI)
 MF C21 H20 N4 O3 S

Absolute stereochemistry.



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0

1.2 Haku molekyylikaavalla Registryssä

1.2.1 Yksikomponenttiset yhdisteet

- Step 1 Arrange the molecular formula in Hill System order
- Step 2 Locate compounds with a common molecular formula
- Step 3 Refine answers using known properties
- Step 4 Display answers

1) Arrange the molecular formula in Hill System order

Elements in a molecular formula must be arranged in a standardized order called **Hill System** order before they can be searched.

Substances without carbon

- Arrange the elements in alphabetical order, and indicate the number of each element present. If an element is present only once, no number is required.
- Esim. H2O4S CLH, CL6SB

Substances with carbon

- Arrange the carbons first, hydrogens second (if present), and all other elements in alphabetical order.
- Esim. C8H18, C2AG2N8, C9H8CL4N8O

2) Locate compounds with a common molecular formula (MF)

In REGISTRY, complete molecular formulas are in the **Molecular Formula index (MF)**.

```
=> FILE REGISTRY
```

```
=> E C3H9N3S/MF
```

```
E1          1      C3H9N3PB/MF
E2          1      C3H9N3PT/MF
E3         23 -->  C3H9N3S/MF
E4          1      C3H9N3S.1/2BR3CU.BRH.H/MF
E5          1      C3H9N3S.1/2H2O4S/MF
E6          5      C3H9N3S.2BRH/MF
```

*23 substances in
REGISTRY have the same
molecular formula as the
compound of interest.*

E7	1	C3H9N3S.2C2H4O2/MF
E8	1	C3H9N3S.2CLH/MF
E9	1	C3H9N3S.2CLHO4/MF
E10	1	C3H9N3S.2H/MF
E11	1	C3H9N3S.2HI/MF
E12	1	C3H9N3S.2HNO3/MF
=> S E3		
L1	23	C3H9N3S/MF

3) Refine answers using known properties

Numeric properties can be searched in the individual property fields. There are two ways to format the search term:

- By appending the appropriate field codes to the property value — 150/BP
- By creating a property value equation — BP=150

When you are interested in this property	Search in this field	Example
pKa	/PKA	=> S PKA<=-0.62 => S -0.62/PKA
Molecular weight	/MW	=> S MW<200
Lipinski "Rule of 5" properties	/CALC	=> S LIPINSKI/CALC => S LIP/CALC
Boiling point	/BP	=> S 150-155/BP => S BP>=150
Density	/DEN	=> S DEN>=1.002
Optical rotary power	/ORP	=> S 70-80/ORP
Refractive index	/RI	=> S 1.427/RI => S RI=1.427

Helpful HINT

For additional information on searching property fields in REGISTRY,

=> HELP PROPERTIES

=> S L1 AND MW=119.19

L2 139 MW=119.19
20 L1 AND MW=119.19

MW= Molecular Weight
PKA= pKa

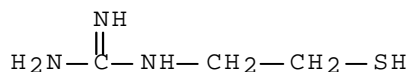
=> S L2 AND PKA=9.77

L3 1277177 PKA=9.77
1 L2 AND PKA=9.77

*Use IDE and PROP together for a
comprehensive substance display.*

=> D L3 IDE PROP

L3 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN 1190-74-5 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Guanidine, (2-mercaptoethyl)- (6CI, 8CI, 9CI) (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN (β -Mercaptoethyl)guanidine
CN (2-Mercaptoethyl)guanidine
CN (Mercaptoethyl)guanidine
CN MEG
CN N-(2-Mercaptoethyl)guanidine
MF C3 H9 N3 S
CI COM
LC STN Files: REAXYSFILE*, BIOSIS, CA, CAOLD, CAPLUS, CASREACT, DDFU,
DRUGU, EMBASE, IMSDRUGNEWS, IMSRESEARCH, MEDLINE, RTECS*,
TOXCENTER, USPATFULL
(*File contains numerically searchable property data)



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

160 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
11 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
160 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
29 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)

Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
Carbon-13 NMR Spectra	(1) CAS
Mass Spectra	(1) CAS
Proton NMR Spectra	(1) CAS

(1) Solodenko, Wladimir; Synthesis 2006(3) P461-466 CAPLUS

Predicted Properties (PPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 2 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 3 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 4 25 deg C	(1)

(Continued ...)

1.2.2 Happojen ja amiinien suolat

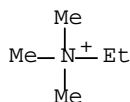
Simple salts of acids and amines are represented in the REGISTRY file as multicomponent substances:

For salts of	The MF is composed of	For example:
Acids	<ul style="list-style-type: none"> ■ Neutral acid component ■ Metal component 	C2 H4 O2 . Na
Amines quaternized with at least one hydrogen	<ul style="list-style-type: none"> ■ Neutral base component ■ Neutral acid component 	C3 H9 N.Cl H
Amines where none of the quaternizing groups are hydrogen	<ul style="list-style-type: none"> ■ Charged base component ■ Charged acid component 	C5 H14 N . Cl

```

RN 27697-51-4 REGISTRY
CN Ethanaminium, N,N,N-trimethyl-, chloride (9CI) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Ammonium, ethyltrimethyl-, chloride (8CI)
CN Ethyltrimethylammonium chloride (6CI)
OTHER NAMES:
CN Trimethylethylammonium chloride
MF C5 H14 N . Cl
CI COM
LC STN Files: REAXYSFILE*, BIOSIS, CA, CAOLD, CAPLUS, CHEMLIST,
  GMELIN*, TOXCENTER, USPATFULL
  (*File contains numerically searchable property data)
  Other Sources: NDSL**, TSCA**
  (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
CRN (15302-88-2)

```



● Cl⁻

In this amine salt, none of the quaternizing groups are hydrogen.

39 REFERENCES IN FILE CA (1957 TO DATE)
 39 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1957 TO DATE)
 2 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)

1.2.3 Metalliseokset (Alloy)

MAC (Material Composition)-kenttä eri atomien välisten suhteellisten osuuksien määrittämiseen. Numeeriset operaattorit.

```
=> s 85-90 co/mac and mo <5/mac
      127176 85-90/MAC
      135812 CO/MAC
      3615 85-90 CO/MAC
          (85-90/MAC (P) CO/MAC)
      206047 MO/MAC
      764370 MAC < 5
      164646 MO <5/MAC
          (MO/MAC (P) MAC < 5)
L1      142 85-90 CO/MAC AND MO <5/MAC
```

=> d sam

```
L1 ANSWER 1 OF 142 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
IN Cobalt alloy, base, Co 20-87,Cr 8-30,Mo 1-30,W 0-9,Si 1-3.5,Fe 1.5-3,Ni
  1.5-3,C 0.1-1.8
MF C . Co . Cr . Fe . Mo . Ni . Si . W
CI AYS
```

Component	Component Percent
====+=====	
Co	20 - 87
Cr	8 - 30
Mo	1 - 30
W	0 - 9
Si	1 - 3.5
Fe	1.5 - 3
Ni	1.5 - 3
C	0.1 - 1.8

ELR.xx (Element Ratio)-kentässä voidaan antaa kahden alkuaineen suhde, mutta valittavissa vain C, H, N ja O.

Yksittäisten atomien lukumäärien määrittämiseen on useita kenttiä, joissa voidaan käyttää numeerisia operaattoreita, ks. Quick Reference Card

1.2.4 Seokset

Mixtures of substances which have been reported in the literature to have particular properties or uses are assigned their own CAS RN. Only the active ingredients of mixtures are indexed: Solvents, fillers, and trace ingredients are not included. **Ratios between the substances are ignored.** The **index name** usually contains “**mixt. with**” or “**mixt. contg.**”.

Illustration of ascophen, an aspirin–caffeine–phenacetin mixture:

RN 8003-03-0 REGISTRY
 CN Benzoic acid, 2-(acetyloxy)-, **mixt. with** 3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6-dione and N-(4-ethoxyphenyl)acetamide
 (9CI) (CA INDEX NAME)

OTHER CA INDEX NAMES:

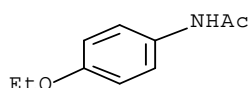
CN Ascophen
 MF C10 H13 N O2 . C9 H8 O4 . C8 H10 N4 O2
 CI MXS

Components in the complete molecular formula are arranged in decreasing carbon count.

CM 1

CRN 62-44-2
 CMF C10 H13 N O2

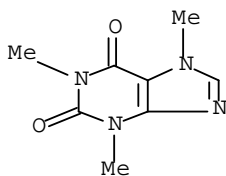
Mixtures are identified by MXS in the Class Identifier (CI) field.



Individual components in multicomponent compounds are also identified by Component Registry Numbers (CRN).

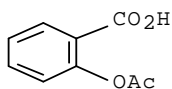
CM 2

CRN 58-08-2
 CMF C8 H10 N4 O2



CM 3

CRN 50-78-2
 CMF C9 H8 O4

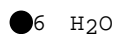
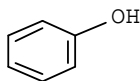


1.2.5 Hydraatit

Hydrates are multicomponent substances in which one of the components is water. **Ratios are included, unless 1:1.**

Water will display in the structure diagram of simple hydrates, but may not display in more complex hydrated substances.

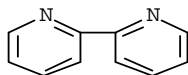
```
RN 220761-70-6 REGISTRY
CN Phenol, hexahydrate (9CI) (CA INDEX NAME)
MF C6 H6 O . 6 H2 O
```



1.2.6 Additio-yhdisteet

Addition compounds are held together by hydrogen bonds or weaker interactions. **Ratios are included in the molecular formula, unless 1:1.** The **index name** usually contains “**compd. with**”.

```
RN 32015-01-3 REGISTRY
CN 2,2'-Bipyridine, compd. with iodine (1:1) (8CI, 9CI) (CA INDEX NAME)
MF C10 H8 N2 . I2
CM 1
```



1.2.7 Polymeerit

CAS defines a polymer as a naturally occurring or synthetic macromolecule formed by linking together smaller molecules (monomers). **Homopolymers** are polymers of a single monomer. **Copolymers** are polymers of two or more different monomers. **Most polymers are registered by CAS in terms of their component monomers. Ratios between monomers are ignored.**

The MF entries for polymers consist of:

- Each component monomer separated from the others with dots
- All the monomer component formulas enclosed in parentheses
- The parentheses followed by X

```
RN 9005-09-8 REGISTRY
CN 2-Butenedioic acid (2Z)-, polymer with chloroethene and ethenyl acetate
(9CI) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
```

●
●

```
MF (C4 H6 O2 . C4 H4 O4 . C2 H3 Cl)x
```

```
CI PMS, COM
```

```
PCT Chloropolymer, Polyvinyl
```

```
LC STN Files: AGRICOLA, CA, CAPLUS, CHEMCATS
```

```
IFIPAT, IFIUDB, MSDS-OHS, PIRA, PROMT, TOX
```

```
Other Sources: DSL**, TSCA**
```

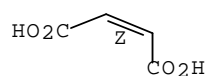
```
(**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
```

```
CM 1
```

```
CRN 110-16-7
```

```
CMF C4 H4 O4
```

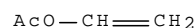
Double bond geometry as shown.



```
CM 2
```

```
CRN 108-05-4
```

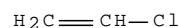
```
CMF C4 H6 O2
```



```
CM 3
```

```
CRN 75-01-4
```

```
CMF C2 H3 Cl
```



Polymers are identified by PMS in the CI index. The specific type of polymer is indicated in the Polymer Class Term (PCT) index.

1.2.8 Basic Indexin käyttö yhdisteluokkien hakuun

The structure of the MF index makes it easy to find families of substances containing the same parent backbone.

The MF index contains the **complete** molecular formula for a substance. The **Basic Index (BI)** of REGISTRY contains the **individual** component formulas making up the complete molecular formula.

If the /MF term is...	Then the associated /BI term(s) is ...
C16H32O2	C16H32O2
C16H32O2.H3N	C16H32O2 and H3N
C16H32O2.NA	C16H32O2 and NA

Helpful HINT

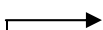
To retrieve a substance and all multicomponent substances of which it is a component (such as salts and mixtures), search the molecular formula for the substance in the **Basic Index** of REGISTRY.

1.2.9 Yhteenveto monikomponenttisten seosten molekyylikaavojen järjestämisestä

When the MF term consists of more than one component formula, the components are arranged according to the following rules:

If ...	Then the order of arrangement is ...
There is a carbon-containing component and a non-carbon containing component	Carbon -containing component comes first Example: C ₂ H ₄ O ₂ .K/MF
There are no carbon-containing components	Alphabetical, using the first element of each component Example: H ₂ O ₄ S.2K/MF
All components contain carbon	Component with highest number of carbons comes first, with others arranged in descending order Example: (C ₈ H ₈ .C ₂ H ₄)X/MF
Two or more components have the same number of carbons	Determine the number of hydrogen atoms, the component with the highest number of hydrogens comes first Example: C ₃ H ₉ N.C ₃ H ₆ O ₂ /MF
Two or more components have the same number of carbons and hydrogens	Alphabetical, using the remaining elements

note



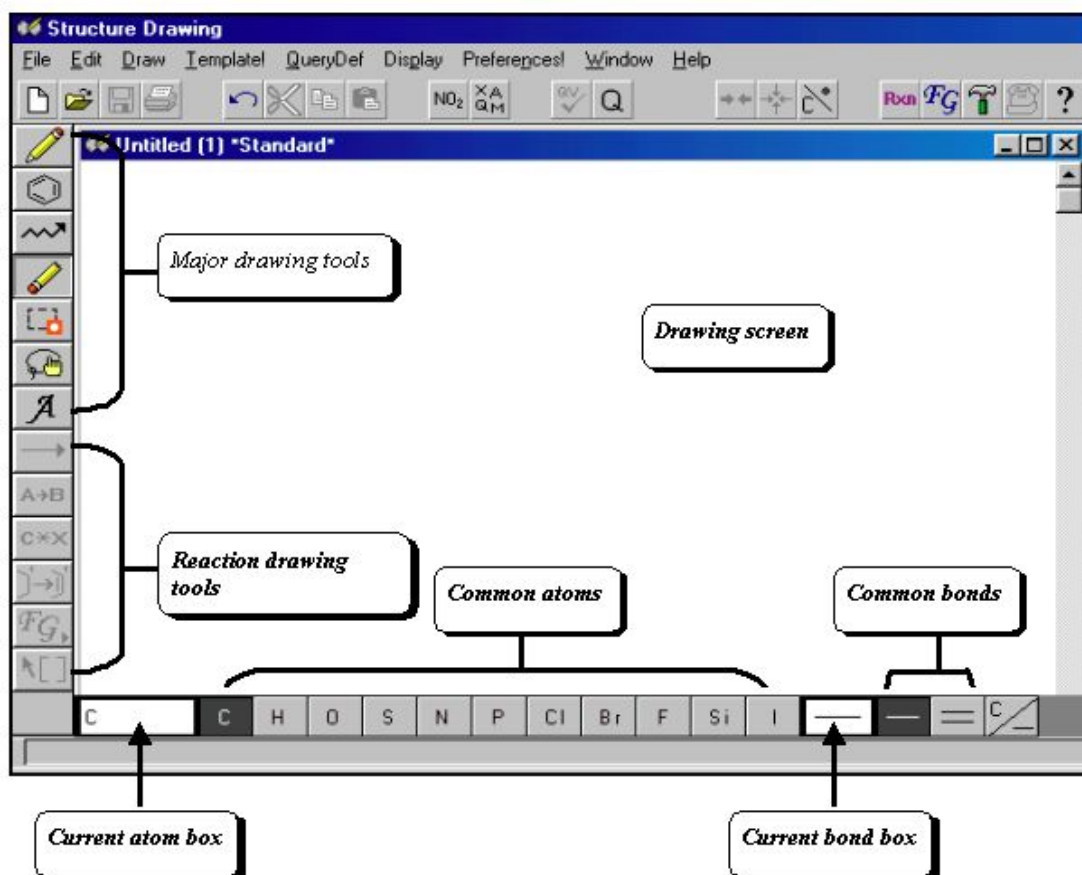
If a ratio is needed between components, the ratio is specified so that the count for the first component is 1, e.g. the MF for calcium acetate is C₂H₄O₂.1/2CA, while the MF for disodium adipate is C₆H₁₀O₄.2NA.

1.3 Haku yhdisteen rakenteella (EXACT ja FAMILY)

Pelkkä yhdiste ja/tai sen stereoisomeerit, isotoopit, suolat ja seokset on helppoa hakea rakenteella. Kokeile kuitenkin ensin nimihakua.

Rakennehaku toimii myös monissa muissa tietokannoissa, esim. ReaxysFile, WPIINDEX

1.3.1 Piirtäminen



Piirrä ensin koko rakenne järjestyksessä käyttäen hiiltä ja yksöissidoksia, (myös CH₂-ketjut ja CH₃).

- Käytä hyväksi vasemman palkin rengas- ja ketjutyökaluja.
- Fuusioituja renkaita kannattaa piirtää useita kerralla (656 tai 6d56), jos mahdollista. Lyhyet ketjut kannattaa piirtää käsin.
- Renkaan suunnan kääntö: Piirrä rengas + Ympyröi se vasemman palkin lassotyökaluilla + Ota Display/Rotate ja käännä.
- Rakenneosan siirto: Ympyröi lassotyökalulla ja kun kämmen, niin siirrä.
- Tarkista, löytyykö Template-valikosta sopiva perusrakenne.
- Voit myös käyttää pohjana valmista STN:stä saatua rakennetta (online tai Transcript). Maalaa rakenne tai klikkaa sitä hiiren oikealla.

Vaihda atomit ja sidokset oikeiksi.

- Yleisimmät löytyvät alareunan paletista. Loput Draw-valikosta.
- Valitse kynä aina ennen kuin teet muutoksia yläpalkin valikoiden kautta. esim. jos rengas on valittuna, niin Draw-valikosta valitut Shortcutit tulevat valittuun renkaaseen...
- Varmista, että kynässä näkyy A, kun vaihdat atomia ja – kun vaihdat sidosta. Suorissa ketjuissa kannattaa pitää hiilet näkyvissä, kun vaihtaa atomeja toisiksi. Samoin, jos saat virheilmoituksen.
- Oletukset (C ja yksöissidos) helposti takaisin näpäyttämällä Space Baria.
- Atomien paikan vaihto (OH => HO): Selection Tool + Display/Reverse Shortcut.

Virheiden korjaus

- Undo(ylhäällä) tai Eraser Tool (vasen palkki) tai Edit tai koko ikkunalle Clear All

1.3.2 Rakennehakujen suoritus

Mitä haetaan?

- **EXA** = rakenne sellaisenaan + stereoisomeerit + isotooppeja sisältävät
 - **FAM** = EXA + suolat + seokset
- (Lisäksi on SSS eli osarakennehaku, joka sallii substituution avoimissa kohdissa)

Koehaku vai maksullinen haku?

- **SAM** = sample, maksuton koehaku tietokannan osasta
- **FULL** =maksullinen haku koko tietokannasta

Rakennehaun suoritus

- Piirrä rakenne ja tallenna se.
- **FIL REG**
- Lataa rakenne **Upload Structure Query**
- Tarkista rakenne **D L1**
- Tee aina ensin koehaku (SAMPLE-haku) **S L1 SSS SAM** => L2
- Tutki tuloksia **D SCAN**
- Tee lopullinen haku **S L1 SSS FULL** => L3
- Tutki tuloksia **D SCAN**
- Siirry (H)CAplussaan **FIL CAPLUS**
- Hae Registryn joukko **S L3**
- Rajaa tarvittaessa esim. rooleilla (**S L3/PREP**) tai patenteihin (**S ... AND P/DT**)
- Tulosta viitteet. Liitä komentoon HITSTR. (**D IBIB ABS HITSTR 1-**)
- **LOG Y**
- Muuta transkripti Word-muotoon **Results/Export Transcript**

2. Chemical Abstracts (CAplus, HCAplus, ZCAplus)

- Erittäin laaja kemian ja lähialojen tietokanta
- Tieteelliset julkaisut ja patentit
- Tuottaja Chemical Abstracts Service (CAS), Columbus, Ohio, USA
- Yli 30 milj. viitettä. Pääosin v. 1907-, mutta myös 1800-luvulta, esim US-patentit v.1808-
Patentteja 21 % (yli 6 milj.)
- Päivitys CAplus-tietokannoissa joka päivä n. 3000 uutta viitettä

Kattavuus/lähteet

- 10 000 sarjaa
- Mukana 61 patenttivistoa. Ks. <http://info.cas.org/EO/caspat.html>

Eri CA-tietokantojen erot

- Useita tietokantoja, joissa sama sisältö, mutta eri hinnoitteluperiaate
 - **Z-alkuiset:** ei yhteysaikaveloitusta, kalliit hakutermit
 - **H-alkuiset:** kallis yhteysaika, ei hakuterminmaksuja
 - **ilman alkukirjainta:** alhainen yhteysaikaveloitus, alhaiset hakuterminmaksut
- **CAplus-tietokannat:** CAplus, HCAplus, (ZCAplus)
 - Päivitys joka päivä - 3000 uutta/pv; 14 000 indeksointua /viikko
 - WO, EP, DE, GB, FR, RU, US, CA ja JP: viive max. 2 pv
 - Uusissa viitteissä aluksi vain bibl. tiedot ja alkuperäinen tiivistelmä; ei-englanninkielisille konekielikäännökset tai EP-julkaisuille tiivistelmät saksaksi tai ranskaksi.
 - CAS:in laatima indeksointi ym. lisätään heti, kun ne on saatu valmiiksi (alle 30 pv)
 - 1500 ydinlehteä referoitu kannesta kanteen
 - Käytä CAplus, jos vähän hakutermejä. Muuten HCAplus ja mietiskelyajaksi STNGUIDE, koska yhteysaika ei siellä maksa.
- **(CA-tietokannat:** CA, HCA, ZCA)
 - Päivitetään kerran viikossa; Sisältää vain täydellisesti indeksoituja CA-viitteitä (vastaa CA-referaattilehteä)
 - Käytä vain manuaalisissa uutuusvalvonnoissa tarvittaessa
- **REGISTRY** – CA:n yhdisterekisteri v. 1907-

Viiteen rakenne/sisältö

- Sisältää patenttiperhetiedot. Kaikki samaan patenttiperheeseen kuuluvat julkaisut samassa viitteessä. Patenttiperheeseen kuuluvat CA:ssa ne julkaisut, joilla on sama viimeisin prioriteetti, joten mm. USA:n CIP-jatkohakemuksilla on omat viitteensä.
- PCT-hakemuksista on 1.7.2008 lähtien tullut tietokantaan usein kaksi viitettä, sillä CAS indeksoi sekä WO-julkaisun että sitä vastaavan vanhimman kansallisen US-, DE-, GB-, FR-, CA- tai EP-ekvivalenttihakemuksen. Hakujoukosta saa STN Expressin uudella Patent Family Managerilla erotettua sellaisen osan, jossa jokaisesta perheestä on vain yksi jäsen. Tärkeä tehdä ennen analyysiä ja haluttaessa myös tulostusta!
- Syväallinen kemiallinen indeksointi mm.
 - yhdisteiden CAS-rekisterinumerot
 - "roolit" ilmoittavat, millaista tietoa käsitellään, esim. Preparation Lisätiedot **HELP ROLES**
 - nimeltä mainitut yhdisteet vaatimuksista ja todella valmistetut yhdisteet esimerkeistä
 - Prophetic substances v. 2004 -: Esimerkeissä nimellä tai rakenteella kuvatut yhdisteet, joita ei ole karakterisoitu ja joita ei mainita vaatimuksissa. Tunnetut yhdisteet, joilla on uusi käyttö
- Hierarkkinen sanasto CA Lexicon käytettävissä online. Lisätiedot **HELP LEXICON**
- Patenttiluokitukset: IPC, US, ECLA (v. 1993-), F-Term (v. 2004-) Kaikkien luokkien tulostus: D CLASS
- Osa otsikoista uusia tai laajennettuja. Vieraskieliset tiivistelmät käännetty englanniksi osa tiivistelmistä hiukan laajennettu.
- Viitejulkaisut v. 1982-: pääosa USA (US) ja WIPO (WO). Lisäksi EPO (EP), Saksa (DE) . 1997- ja Iso-Britannia (GB) ja Ranska (FR) v. 2003- ja Kanada (CA) v. 2005- (annettu RE-kentässä)
- Viittaukset 1500 ydinlehdessä ja ACS:n julkaisuista
- Viittaavat uudemmat julkaisut
- US-patenttien status v. 1980-

Esimerkkiviite CAPlus-tietokannasta (Tulostusmuoto IALL)
--

L3 ANSWER 1 OF 2 CAPLUS COPYRIGHT 2002 ACS

ACCESSION NUMBER: 2000:307128 CAPLUS **Viiteen nro tietokannassa**DOCUMENT NUMBER: 132:322148 **Viiteen nro painetussa CA:ssa**
TITLE: Preparation of thrombin inhibitors based on the amino acid sequence of hirudin**Laajennettu otsikko**

INVENTOR(S): Dimaio, John; Konishi, Yasuo; Ni, Feng;

Steinmetzer, Torsten **Keksijä**

PATENT ASSIGNEE(S): The National Research Council of Canada, Can.

Patentinhakija

SOURCE: U.S., 49 pp., Cont.-in-part of U.S. Ser. No. 302,245, abandoned. CODEN: USXXAM

DOCUMENT TYPE: Patent

LANGUAGE: English

INT. PATENT CLASSIF.: **Kansainvälinen patenttiluokitus (IPC)**

MAIN: A61K038-00

US PATENT CLASSIF.: 514013000

CLASSIFICATION: 34-3 (Amino Acids, Peptides, and Proteins)

Section cross-reference(s): 1

CASin karkea luokitus, joka määrää viiteen sijoituksen painetussa Chemical Abstractsissa.FAMILY ACC. NUM. COUNT: 2 **Perheeseen kuuluvien viiteiden lukumäärä**PATENT INFORMATION: **Patenttiperhe: kaikki hakemus- ja patenttijulkaisut**

Hakemus tai patentti- koodi	Julkaisu- tyyppi-	Julkaisu- päivä	Hakemus- numero	Hakemus- päivä	numero
PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE	
US 6060451	A	20000509	US 1995-406142	19950320	
CA 2215702	AA	19960926	CA 1996-2215702	19960318	
WO 9629347	A1	19960926	WO 1996-CA164	19960318	
W: AL, AM, AT, AU, AZ, BB, BG, BR, BY, CA, CH, CN, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, GB, GE, HU, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MD, MG, MK, MN, MW, MX, NO, NZ, PL, PT, RO, RU, SD, SE, SG, SI					
RW: KE, LS, MW, SD, SZ, UG, AT, BE, CH, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE, BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN					
AU 9649349	A1	19961008	AU 1996-49349	19960318	
AU 695920	B2	19980827			
EP 815139	A1	19980107	EP 1996-905636	19960318	
EP 815139	B1	20011107			
R: AT, BE, CH, DE, DK, ES, FR, GB, GR, IT, LI, LU, NL, SE, MC, PT, IE, FI					
CN 1182436	A	19980520	CN 1996-193457	19960318	
BR 9607839	A	19980616	BR 1996-7839	19960318	
JP 11502203	T2	19990223	JP 1996-527932	19960318	
IL 117526	A1	19991231	IL 1996-117526	19960318	
AT 208401	E	20011115	AT 1996-905636	19960318	
ZA 9602267	A	19960927	ZA 1996-2267	19960320	
NO 9704342	A	19971119	NO 1997-4342	19970919	

Etuoikeushakemuksen numero ja hakemispäiväPRIORITY APPLN. INFO.: US 1994-302245 B2 19940908
US 1995-406142 A 19950320
WO 1996-CA164 W 19960318

OTHER SOURCE(S): MARPAT 132:322148

**Muut CASin tietokannat, joissa on viite samasta julkaisusta.
(MARPAT-viiteesta saatavat lisätiedot esitetty MARPATin kohdalla.)**

ABSTRACT:

Thrombin inhibitors AS-Y-Z-A [AS is a hydrophobic moiety which binds the catalytic site of thrombin and which comprises (a) one or two hydrophobic α -amino acids which are optionally substituted by alkyl, aryl, or aralkyl and (b) a guanidino group; Y = CO, CH₂, CH₂OH; Z is a divalent, straight-chained linker moiety that has a chain length of approx. 10-85 atoms; A is an acidic portion of formula -G-X'-G'-Q-Q₁-Q₂(W')-, where G and G' are each an L- α -amino acid having pk value ≤ 5 , X' is a hydrophobic L- α -amino acid, Q is and L- α -amino acid or a cyclic L-imino acid; Q₁ and Q₂ are different and are either Ile or Pro; W' is H, alkyl, aryl, or aralkyl, with the proviso that W' is linked to whichever of Q₁ or Q₂ is Pro] and its pharmaceutically acceptable salts were prepd. for treatment of thrombotic disorders. Thus, Ac-D-Phe-Pro-Arg- Ψ [COCH₂]CH₂CO-Gln-Ser-His-Asn-Asp-Gly-Asp-Phe-Glu-Glu-Ile-Pro-Glu-Glu-Tyr-Leu-Gln-OH (P79) was prepd. by the solid phase method and tested for thrombin inhibitory activity (IC₅₀ = 2 nM in the platelet aggregation test).

Vapaat asiasanat

SUPPL. TERM: hirudin analog prepn thrombin inhibitor

Kontrolloidut asiasanat ja niiden lisämääreet.

INDEX TERM: Anticoagulants

(prepn. of thrombin inhibitors based on the amino acid sequence of hirudin)

INDEX TERM: Peptides, preparation

ROLE: BAC (Biological activity or effector, except adverse); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses) (prepn. of thrombin inhibitors based on the amino acid sequence of hirudin)

INDEX TERM: Blood vessel, disease

(treatment; prepn. of thrombin inhibitors based on the amino acid sequence of hirudin)

INDEX TERM: **Valmistettujen uusien yhdisteiden CAS-numerot (P=Preparation)**

8001-27-2DP, Hirudin, analogs 130996-26-8P, P52

.....
267011-66-5P, BCH-2757 trifluoroacetic acid salt 267011-68-7P, BCH-2758 trifluoroacetate salt 267011-69-8P, BCH-2763 trifluoroacetate salt 267011-71-2P, BCH-2767

Yhdisteiden roolikoodit

ROLE: BAC (Biological activity or effector, except adverse); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)

Selitysosa vapaata tekstiä

(prepn. of thrombin inhibitors based on the amino acid sequence of hirudin)

INDEX TERM: **Muita yhdisteitä joista julkaisussa on esitetty uutta tietoa niin, että ne on indeksoitu.**

625-60-5, s-Ethyl thioacetate 1119-51-3, 5-Bromo-1-pentene
2695-47-8, 6-Bromo-1-hexene 5162-44-7, 4-Bromo-1-butene
13836-37-8 17460-56-9

ROLE: RCT (Reactant)

(prepn. of thrombin inhibitors based on the amino acid sequence of hirudin)

Viitejulkaisut WO-, EP-, US- ja DE-virastoista: patentit ja muu viitattu kirjallisuus

REFERENCE COUNT: 30 THERE ARE 30 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD.

REFERENCE(S): (1) Anon; EP 0129163 1984 CAPLUS
(2) Anon; AU 4365585 1985
(3) Anon; EP 0276014 1988 CAPLUS

2.1 CAS-roolit (RL)

Erittäin tehokas tapa rajata yhdistehaku relevantteihin viitteisiin.

CA-viitteen indeksoinnissa IT-kohdan lopussa oleva termi, esim. RL: **USES (Uses)**. Kertoo, mitä tietoa yhdisteelle tai yhdisteryhmälle viitteessä on annettu. Samassa IT-kohdassa voi olla useampiakin rooleja.

Katso koodit 1) seuraavalta sivulta 2) komennolla [HELP ROLES](http://www.cas.org/ASSETS/EB85B919049C4E448DCF8D391788F0DD/casroles.pdf) tai 3) <http://www.cas.org/ASSETS/EB85B919049C4E448DCF8D391788F0DD/casroles.pdf> Valmistusrooli PREP on käytössä koko tietokannassa. Muut v. 1967 lähtien, mutta osa vasta v. 2002 lähtien (merkitty (2):lla).

Tietoa roolin sisällöstä saat roolitesauruksella **E rooli+ALL/RL**

```
=> e bmf+all/rl
E1      5258669    BT1  BIOL/RL
E2          0     BT1  BIOL valid Vol. 66 (1967) to present/RL
E3     2935775    BT1  PREP/RL
E4          0     BT1  PREP valid Vol. 66 (1967) to present/RL
E5     46618      -->  BMF/RL
E6     46618      Bioindustrial Manufacture/RL
NOTE Vol. 66 (1967) to present - Assigned to a substance
in a study reporting the commercial-scale
biomanufacture of the substance. In multistep
syntheses where the biomediated step is key or
novel, BMF, along with the IMF role, is assigned to
products of subsequent chemical steps.
```

Roolin käyttö

	<u>yksi rooli</u>	<u>kaksi roolia</u>
1) Registryn L-numero	S L2/THU	S L1/THU OR L1/ADV
2) CAS-numero	S 64-17-5/THU	S 64-17-5/THU,ADV
3) yhdisteryhmän indeksitermi	S PHENOLS/REM	S PHENOLS/REM,POL

```
=> s 9003-07-0/uses
      85334 9003-07-0
      4709774 USES/RL
L1     58280 9003-07-0/USES (9003-07-0 (L) USES/RL)
```

Voit **rajata hakua lisää** indeksitermin seliteosan **sanoilla**, väliin **(L)**-operaattori.

```
=> s 11(1>window?
      53643 WINDOW?
L2          85 L1(L)WINDOW?
=> d scan ti hitind
L2     85 ANSWERS  CAPLUS  COPYRIGHT 2002 ACS
TI     ThermoChromic plastic laminated sheets
IT     9003-07-0, Polypropylene 9003-20-7, Poly(vinyl acetate)
      RL: USES (Uses)
          (films, laminated with thermoChromic coating layers, for window)
```

CASin roolit (1)**ANST Analytical Study**

ANT Analyte
AMX Analytical Matrix
ARG Analytical Reagent Use
ARU Analytical Role, Unclassified

BIOL Biological Study

ADV Adverse Effect, Including Toxicity
AGR Agricultural Use
BAC Biological Activity or Effector, Except Adverse (1)
BCP Biochemical Process (3)
BMF Bioindustrial Manufacture
BOC Biological Occurrence (2)
BPN Biosynthetic Preparation
BPR Biological Process (1)
BSU Biological Study, Unclassified
BUU Biological Use, Unclassified
COS Cosmetic Use (3)
DGN Diagnostic Use (3)
DMA Drug Mechanism of Action (3)
FFD Food or Feed Use
MFM Metabolic Formation (2)
NPO Natural Product Occurrence (3)
PAC Pharmacological Activity (3)
PKT Pharmacokinetics (3)
THU Therapeutic Use

CMBI Combinatorial Study (3)

CPN Combinatorial Preparation (3)
CRT Combinatorial Reactant (3)
CRG Combinatorial Reagent (3)
CST Combinatorial Study (3)
CUS Combinatorial Use (3)

FORM Formation, Nonpreparative

FMU Formation, Unclassified
GFM Geological or Astronomical Formation
MFM Metabolic Formation (2)

OCCU Occurrence

BOC Biological Occurrence (2)
GOC Geological or Astronomical Occurrence
NPO Natural Product Occurrence (3)
OCU Occurrence, Unclassified
POL Pollutant

PREP Preparation (4)

BMF Bioindustrial Manufacture
BPN Biosynthetic Preparation
BYP Byproduct
CPN Combinatorial Preparation (3)
IMF Industrial Manufacture
PNU Preparation, Unclassified (5)
PUR Purification or Recovery
SPN Synthetic Preparation

PROC Process

BCP Biochemical Process (3)
BPR Biological Process (2)
GPR Geological or Astronomical Process
PEP Physical, Engineering, or Chemical Process
CPS Chemical Process (6)
EPR Engineering Process (6)
PYP Physical Process (6)
REM Removal or Disposal

PRPH Prophetic Substance (7)**RACT Reactant or Reagent (2,6)**

RCT Reactant (8)
CRT Combinatorial Reactant (3)
RGT Reagent (3)
CRG Combinatorial Reagent (3)

USES Uses

AGR Agricultural Use
ARG Analytical Reagent Use
BUU Biological Use, Unclassified
CAT Catalyst Use
COS Cosmetic Use (3)
CUS Combinatorial Use (3)
DEV Device Component Use (5)
DGN Diagnostic Use (3)
FFD Food or Feed Use
MOA Modifier or Additive Use
NUU Other Use, Unclassified (9)
POF Polymer in Formulation
TEM Technical or Engineered Material Use
THU Therapeutic Use

Specific roles that are not upposted to any super roles:

MSC Miscellaneous
PRP Properties

(1) Super roles have 4-letter codes. Specific roles have 3-letter codes. Under each super role are listed the specific roles that are retrieved when you search that super role.
 (2) Used from CA Vol. 66 (1967) to Vol. 135 (2001).
 (3) Used starting with CA Vol. 136 (2002).
 (4) The PREP super role has been added to records back to 1907.
 (5) Used from CA Vol. 66 (1967) to Vol. 145 (2006).
 (6) Used from CA Vol. 136 (2002) to CA Vol. 145 (2006).

(7) Used starting with records from CA Vol. 148 (2008).
 (8) Searching the RCT role retrieves references from CA Vol. 66 (1967) to the present. Searching the RACT super role retrieves references with RCT, CRT, RGT, or CRG references starting with CA Vol. 136 (2002).
 (9) Starting with CA Vol. 136 (2002), the searchable text for the NUU role changed from NONBIOLOGICAL USE, UNCLASSIFIED/RL to OTHER USE, UNCLASSIFIED/RL. Search NUU/RL to retrieve records from CA Vol. 66 (1967) to the present.

2.2 CA Lexicon (CT)

Hakutermien etsintään ja poimimiseen hakulausekkeen osaksi.

CA Lexicon on hierarkkinen tesaurus CA:n indeksitermeistä. Se sisältää

- CAS:n indeksoimat termit (yli 21 000 termiä)
- kemialliset yhdisteluokat (yli 10 000 termiä)
- kasvien ja organismien taksonomisen sanaston (yli 120 000 termiä).

Lisätietoa [HELP LEXICON](#).

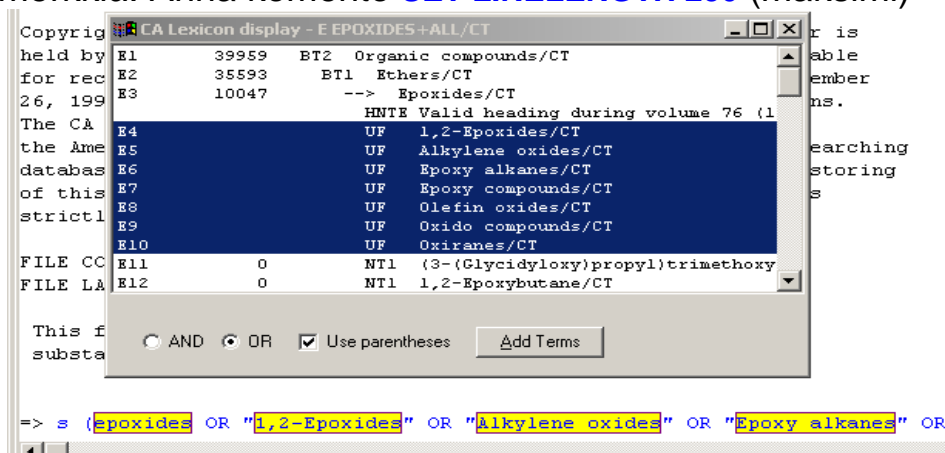
CA Lexicon on erityisen hyödyllinen haettaessa laajempaa yhdisteryhmää. Tällöin hakuun voi CA Lexiconin avulla helposti liittää yhdisteryhmän alaryhmät ja tärkeimmät yhdisteet.

Tärkeimpien koodien selitykset:

- **UF** Used For Epäviralliset synonyymit
- **NT** Narrower Term Termiin liittyvät hierarkkisesti suppeammat termit
- **RT** Related Term Termiin liittyvät rinnakkaiset termit
- **RTCS** Related Compounds Termiin liittyvät yleisimmät yhdisteet

1) CA Lexicon käyttö STN Expressin helpon liittymän kautta

- CA Lexiconissa oleva sana esitetään keltaisessa laatikossa.
- Kirjoita hakusanaasi, kunnes se muuttuu **keltaiseksi**. Klikkaa sanaa sitten hiiren oikealla painikkeella => CA Lexicon avautuu uuteen ikkunaan
- Tutki listaa ja kirjaa ylös sopivia uusia hakutermejä tai maalaa sopivat termit ja lisää ne suoraan hakulausekkeeksi **Add Terms**.
- Hakulausekkeen pituutta joudutaan yleensä muuttamaan, sillä oletuksena on 80 merkkiä. Anna komento **SET LINELENGTH 250** (maksimi)



2) CA Lexicon käyttö selaamalla CT-kenttää komennolla E sana/CT

```

=> e nanoparticles/ct
E#   FREQUENCY   AT   TERM
--   -
E1           0     2   NANOPARTICLE SUSPENSION/CT
E2           0     2   NANOPARTICLE SUSPENSIONS/CT
E3    90475     20 --> NANOPARTICLES/CT
=> e e3+all
E1    69730     BT1  Particles/CT
E2    90475     --> Nanoparticles/CT
                        HNTE Valid heading during volume 126 (1997) to present.
E3                                OLD Particles (L) nano-/CT
E4                                OLD Particles (L) ultrafine/CT
E5                                UF Nanoparticle/CT
E6                                UF Nanoscale particle/CT
E7                                UF Nanoscale particles/CT
E8                                UF Nanosize particles/CT
E9                                UF Nanosized particles/CT
E10                               UF Ultrafine particles/CT
E11    5662     NT1  Pharmaceutical nanoparticles/CT
E12    395      NT2  Pharmaceutical nanocapsules/CT
E13    328      NT2  Pharmaceutical nanospheres/CT
E14    1625     RT   Mesophase/CT
E15    31227    RT   Nanocomposites/CT
E16    5723     RT   Nanocrystalline metals/CT
E17    20401    RT   Nanocrystals/CT
E18    507      RT   Nanofluids/CT
E19    4916     RT   Nanostructured materials/CT
E20                               RTCS 11-Mercaptoundecanoic acid/CT
***** END *****

```

Mahdollisia virheilmoituksia

- Jos hakusanasi ei ole indeksitermi eli CA Lexiconissa juuri hakemassasi muodossa ja annat komennon `E +ALL/CT` saat ilmoituksen `'CT+ALL' IS NOT A VALID EXPAND FIELD CODE FOR FILE 'HCAPLUS'`. Jätä silloin `+ALL` pois ja kirjoita pelkästään `E .../CT`
- Jos yhteenkuuluvia sanoja on niin paljon, että niitä ei ilmoituksen mukaan voida näyttää, kokeile `E E3+NT1`

a) Listan käyttö uusien hakusanojen etsintään

- Käytä ZCAplussaa, koska yhteysaika ei maksa siellä mitään.

b) Listan termien haku CT-kentästä

- Käytä HCAplussaa!!! CAplus veloittaa hakuterminmaksut.

```

=> s e2-e13
          90475 NANOPARTICLES/CT ....jne .....
L1      97577 (NANOPARTICLES/CT OR "PARTICLES (L) NANO-"/CT OR....jne .....

```

c) Listan termien haku perushakemistosta

- Kentätunnus pitää ensin vaihtaa CT => BI (Basic Index)

```

=> edit e2-e13
ENTER STRING TO BE REPLACED OR (END):ct
ENTER REPLACING STRING (NONE):bi

```

```

=> s e2-e13
          139517 NANOPARTICLES/BI... ..jne .....
L2      151204 (NANOPARTICLES/BI OR "PARTICLES (L) NANO-"/BI OR ....jne .....

```

2.3 CA:n luokituskoodit (CC ja SX) ja osasegmentit (FS)

Haun karkeaan rajaukseen halutulle teknologian alalle.

Pääluokituskoodeja on 80 ja ylätasoja viisi. Alatasot antavat tarkemman aiheajauksen eri vuosina. Kullakin viitteellä on yksi varsinainen luokituskoodi **CC** (Classification Code). Lisäksi sillä voi olla useita ristiviittauksia **SX** (Section cross-reference(s)).

Koodit ovat käytettävissä koko tietokannassa v. 1907-, mutta ne ovat muuttuneet jonkin verran aikojen kuluessa. Tesauuksen avulla voit selvittää, mitkä koodit vastaavat kysyttyä koodia eri aikoina.

Luokituskoodit ja niiden ylätasot **FS** (File Segment) näet 1) seuraavalta sivulta 2) online **HELP SECTIONS** ja 3) <http://www.cas.org/products/print/ca/casections.html>

Alatasot saat selville online-tesauuksen avulla jatkamalla E *luokituskoodi*+ALL-komentoa loppuun asti **E 43/CC; E E3+ALL**.

Mikä koodi milloinkin?

- **Karkein** rajaus yläkoodin avulla **S MAC/FS**
- **"Normaali"** CC- ja SX-kentän avulla **S L3 AND 43/CC,SX**
- **Tarkin** rajaus alakoodilla **S L3 AND 57-2/CC**

```
=> e 57+all/cc      Voit lähteä liikkeelle koodilla
E1      427707      --> 57/CC
E2      414248      USE 57 CERAMICS, 1967 TO PRESENT/CC
E3      12050       USE 57 ENZYMES, 1963-1966/CC
E4      1409        USE 57 RADIATION EFFECTS ON BIOLOGICAL MATERIALS, 1962
                          ONLY/CC
***** END *****
```

```
=> e e2+all        Antaa kaikki saatavilla olevat tiedot
E1      6258373     BT1 APPLIED/CC
E2      414248     --> 57 CERAMICS, 1967 TO PRESENT/CC
                          NOTE THIS SECTION INCLUDES THE PREPARATION, COMPOSITION,
                          ANALYSIS, PROPERTIES, AND USES OF GLASS, CERAMICS,
                          GLAZES, ENAMELS, REFRACTORIES, CLAY PRODUCTS,
                          ABRASIVES, AND CARBON PRODUCTS. ORGANIC GLASSES ARE
                          INCLUDED IN SECTION 37. STUDIES OF RAW MATERIALS ARE
                          INCLUDED IN SECTION 53 WHEN THE INTEREST IS OF
                          GEOLOGICAL SIGNIFICANCE AND ULTIMATE USE IS
                          INCIDENTAL. CERMETS CONTAINING MORE THAN ONE PERCENT
                          METAL ARE INCLUDED IN SECTION 56. SOME SPECIFIC USES
                          AND PROPERTIES OF CERAMICS ARE COVERED IN OTHER
                          SECTIONS (E.G., 63, 65, 75, AND 76).
E3      1860        OLD 17 CERAMICS, 1962 ONLY/CC
E4      496         OLD 19 GLASS AND CERAMICS, 1908-1909/CC
E5      4422        OLD 19 GLASS AND CERAMICS, 1911-1920/CC
```

E6	846	OLD	19 GLASS AND POTTERY, 1906-1907/CC
E7	46601	OLD	19 GLASS, CLAY PRODUCTS, REFRACTORIES, AND ENAMELED METALS, 1921-1961/CC
E8	252	OLD	20 GLASS AND CERAMICS, 1910 ONLY/CC
E9	9758	OLD	21 CERAMICS, 1963-1966/CC
E10	0	NT1	57-0 CERAMICS, 1972 TO PRESENT, REVIEWS/CC
E11	0	NT1	57-1 CERAMICS, 1972 TO PRESENT, GLASS (OXIDE AND NONOXIDE GLASSES)/CC
E12	0	NT1	57-2 CERAMICS, 1972-1981, CLAYS AND CLAY PRODUCTS/CC
E13	0	NT1	57-2 CERAMICS, 1982 TO PRESENT, CERAMICS/CC
E14	0	NT1	57-3 CERAMICS, 1972-1981, GLAZES/CC
E15	0	NT1	57-3 CERAMICS, 1982 TO PRESENT, PORCELAIN/CC
E16	0	NT1	57-4 CERAMICS, 1972-1981, WHITEWARE/CC
E17	0	NT1	57-4 CERAMICS, 1982 TO PRESENT, GLAZES AND GLASSY COATINGS/CC
E18	0	NT1	57-5 CERAMICS, 1972-1981, REFRACTORIES/CC
E19	0	NT1	57-5 CERAMICS, 1982 TO PRESENT, CLAYS AND CLAY PRODUCTS/CC
E20	0	NT1	57-6 CERAMICS, 1972-1981, ABRASIVES/CC
E21	0	NT1	57-6 CERAMICS, 1982 TO PRESENT, REFRACTORIES/CC
E22	0	NT1	57-7 CERAMICS, 1972-1981, OTHER/CC
E23	0	NT1	57-7 CERAMICS, 1982 TO PRESENT, ABRASIVES/CC
E24	0	NT1	57-8 CERAMICS, 1982 TO PRESENT, CARBON PRODUCTS/CC
E25	0	NT1	57-9 CERAMICS, 1982 TO PRESENT, OTHER/CC

***** END *****

=> e ceramics/cc **Voit lähteä liikkeelle myös sanalla.**

E#	FREQUENCY	AT	TERM
--	-----	--	----
E1	0	1	CERAMIC/CC
E2	0	1	CERAMIC JUNCTIONS/CC
E3	431036	4 -->	CERAMICS/CC
E4	0	3	CERAMICS, ABRASIVES/CC
E5	0	2	CERAMICS, CARBON PRODUCTS/CC
E6	0	2	CERAMICS, CERAMICS/CC
E7	0	3	CERAMICS, CLAYS AND CLAY PRODUCTS/CC
E8	0	2	CERAMICS, ELECTRICAL/CC
E9	0	2	CERAMICS, GLASS (OXIDE AND NONOXIDE GLASSES)/CC
E10	0	2	CERAMICS, GLAZES/CC
E11	0	2	CERAMICS, GLAZES AND GLASSY COATINGS/CC
E12	0	2	CERAMICS, METAL JUNCTIONS/CC

=> e e4+all

E1	6258373	BT1	APPLIED/CC
E2	414248	-->	57 CERAMICS, 1967 TO PRESENT/CC
			NOTE THIS SECTION INCLUDES THE PREPARATION, COMPOSITION, ANALYSIS, PROPERTIES, AND USES OF GLASS, CERAMICS, GLAZES, ENAMELS, REFRACTORIES, CLAY PRODUCTS, ABRASIVES, AND CARBON PRODUCTS. ORGANIC GLASSES ARE INCLUDED IN SECTION 37. STUDIES OF RAW MATERIALS ARE INCLUDED IN SECTION 53 WHEN THE INTEREST IS OF GEOLOGICAL SIGNIFICANCE AND ULTIMATE USE IS INCIDENTAL. CERMETS CONTAINING MORE THAN ONE PERCENT METAL ARE INCLUDED IN SECTION 56. SOME SPECIFIC USES AND PROPERTIES OF CERAMICS ARE COVERED IN OTHER SECTIONS (E.G., 63, 65, 75, AND 76).
E3	1860	OLD	17 CERAMICS, 1962 ONLY/CC
E4	496	OLD	19 GLASS AND CERAMICS, 1908-1909/CC
E5	4422	OLD	19 GLASS AND CERAMICS, 1911-1920/CC
E6	846	OLD	19 GLASS AND POTTERY, 1906-1907/CC

..... jne

***** END *****

CASin luokituskoodit (CA Sections)**Biochemistry (BIO/FS)**

- 1 Pharmacology
- 2 Mammalian Hormones
- 3 Biochemical Genetics
- 4 Toxicology
- 5 Agrochemical Bioregulators
- 6 General Biochemistry
- 7 Enzymes
- 8 Radiation Biochemistry
- 9 Biochemical Methods
- 10 Microbial, Algal, and Fungal Biochemistry
- 11 Plant Biochemistry
- 12 Nonmammalian Biochemistry
- 13 Mammalian Biochemistry
- 14 Mammalian Pathological Biochemistry
- 15 Immunochemistry
- 16 Fermentation and Bioindustrial Chemistry
- 17 Food and Feed Chemistry
- 18 Animal Nutrition
- 19 Fertilizers, Soils, and Plant Nutrition
- 20 History, Education, and Documentation

Organic Chemistry (ORG/FS)

- 21 General Organic Chemistry
- 22 Physical Organic Chemistry
- 23 Aliphatic Compounds
- 24 Alicyclic Compounds
- 25 Benzene, Its Derivatives, and Condensed Benzenoid Compounds
- 26 Biomolecules and Their Synthetic Analogs
- 27 Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom)
- 28 Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom)
- 29 Organometallic and Organometalloidal Compounds
- 30 Terpenes and Terpenoids
- 31 Alkaloids
- 32 Steroids
- 33 Carbohydrates
- 34 Amino Acids, Peptides, and Proteins

Macromolecular Chemistry (MAC/FS)

- 35 Chemistry of Synthetic High Polymers
- 36 Physical Properties of Synthetic High Polymers
- 37 Plastics Manufacture and Processing
- 38 Plastics Fabrication and Uses
- 39 Synthetic Elastomers and Natural Rubber
- 40 Textiles and Fibers
- 41 Dyes, Organic Pigments, Fluorescent Brighteners, and Photographic Sensitizers
- 42 Coatings, Inks, and Related Products
- 43 Cellulose, Lignin, Paper, and Other Wood Products

- 44 Industrial Carbohydrates
- 45 Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats and Waxes
- 46 Surface-Active Agents and Detergents

Applied Chemistry and Chemical Engineering (APP/FS)

- 47 Apparatus and Plant Equipment
- 48 Unit Operations and Processes
- 49 Industrial Inorganic Chemicals
- 50 Propellants and Explosives
- 51 Fossil Fuels, Derivatives, and Related Products
- 52 Electrochemical, Radiational, and Thermal Energy Technology
- 53 Mineralogical and Geological Chemistry
- 54 Extractive Metallurgy
- 55 Ferrous Metals and Alloys
- 56 Nonferrous Metals and Alloys
- 57 Ceramics
- 58 Cement, Concrete, and Related Building Materials
- 59 Air Pollution and Industrial Hygiene
- 60 Waste Treatment and Disposal
- 61 Water
- 62 Essential Oils and Cosmetics
- 63 Pharmaceuticals
- 64 Pharmaceutical Analysis

Physical, Inorganic, and Analytical Chemistry (PIA/FS)

- 65 General Physical Chemistry
- 66 Surface Chemistry and Colloids
- 67 Catalysis, Reaction Kinetics, and Inorganic Reaction Mechanisms
- 68 Phase Equilibria, Chemical Equilibria, and Solutions
- 69 Thermodynamics, Thermochemistry, and Thermal Properties
- 70 Nuclear Phenomena
- 71 Nuclear Technology
- 72 Electrochemistry
- 73 Optical, Electron, and Mass Spectroscopy and Other Related Properties
- 74 Radiation Chemistry, Photochemistry, and Photographic and Other Reprographic Processes
- 75 Crystallography and Liquid Crystals
- 76 Electric Phenomena
- 77 Magnetic Phenomena
- 78 Inorganic Chemicals and Reactions
- 79 Inorganic Analytical Chemistry
- 80 Organic Analytical Chemistry

2.4 Rautalankamalli osuviin hakuihin (H)CAplussassa

- Tee kemialliseen **yhdisteeseen** liittyvät haut aina **REGISTRYn** kautta. Etsi sieltä yhdisteen tietue ja tee sitten (H)CAplussassa haku REGISTRYn joukkonumeron avulla. Voit kokeilla haun tekoa myös nimellä ja katsoa, tuoko sanahaku jotakin uutta hyödyllistä.
- Käytä **CASin rooleja**, jos haluat yhdisteelle vain tietyn tyyppisiä tietoja. Sillä saat helpoimman ja kattavimman rajauksen. Tarkista kuitenkin aina, mitä jäi roolin käytön takia pois.
- Käytä **CA Lexiconia** hakusanojen etsimiseen. Löydät useimmiten uusia hakusanoja, joita et ollut tullut ajatelleeksi. Erityisen hyödyllinen Lexicon on kun menet itsellesi vieraalle alueelle.
- Muista **CA:n luokituskoodit** haun karkeaan rajaukseen.
- **(S)**-operaattorin avulla saat helposti esille parhaat viitteet. Se vaatii, että hakusanasi ovat samassa otsikossa, samassa indeksitermissä (samassa IT-kohdassa) tai samassa lauseessa tiivistelmässä. Tarkista kuitenkin aina, mitä jäi rajauksen takia pois.
- Kaikkein tärkeimmät viitteet saat esille, kun **rajaat** koko haun vain **otsikkoon ja indeksitermeihin**. Silloin ei riitä, että sanat esiintyvät pelkästään tiivistelmässä. Rajaus on helpointa tapa OBI-kentän avulla (= Original Basic Index).
 - SET SFIELDS OBI (Kaikkien tulevien hakujen rajaus etukäteen)
 - S SOIL/OBI (Rajaus heti haussa)
 - S L5/OBI (Joukon rajaus jälkikäteen)Tarkista aina, mitä jäi rajauksen takia pois. Uutuustutkimuksissa ym. selvityksissä, joissa on tärkeää saada kaikki viitteet, pitää ehdottomasti tutkia myös normaalihaulla (/BI) saatavat viitteet.
- Hyödyllinen tulostusmuoto **D TI HITIND**. Se antaa otsikon ja ne indeksitermit, joissa on haussa käytettyjä termejä. Vastaava maksuton muoto on **D SCAN TI HITIND**, antaa viitteet satunnaisessa järjestyksessä.

3. Kemiaalliset yhdisteet WPINDEXissä

Derwent Chemistry Resource (DCR) v. 1980-

- Viitteen IT-kentässä 1999-
- Yhdisterekisteri v. 1999- jälkeen tietokannassa esiintyneistä yhdisteistä.
- CAS-numeroa vastaava **DCSE**-numero (Structured Derwent Chemistry Resource Numbers)
 - Kullakin yhdisteellä oma numero muotoa 00000000-00-00-00 Johdannaisilla on sama alkuosa
 - 00000000-00-00-00 perusyhdisteen sarjanumero
 - 00000000-00-00-00 stereoisomeereille
 - 00000000-00-00-00 suoloille
 - 00000000-00-00-00 erilaisille fysikaalisille muodoille, isotoopeille, tautomeereille yms
 - **S 111250/DCSE** antaa myös isomeerit, suolot, isotoopit ym.
- Yhdistetietueet ovat samassa WPINDEX-tietokannassa kuin patenttitietueet

Yhdistettä koskevien viitteiden haku

- Hae yhdisteen tietue => **L1**
 - nimellä CN (Chemical Name) -kentästä **S ZYPREXA/CN**
 - nimen segmentillä CNS-kentästä (Chemical Name Segment) **S PANTOPRAZOLE/CNS**
 - tai tee (osa)rakennehaku
- Hae yhdistettä koskevat patenttiviitteet tekemällä haku DCR-kentästä **S L1/DCR**

Haun rajaus rooleilla

- Hae myös koodi DCR-kentästä ja yhdistä patenteihin (T)-operaattorilla. **S L5/DCR (T) T/DCR** antaa terapeuttista käyttöä koskevat viitteet.
- Kolme erillistä roolisysteemiä.
- Roolilistat ja apua saat komennolla **HELP ROLES**
- Derwent Chemistry Resource Numbers (DCR-roolit v. 1980-)

Role	Definition	Scope Notes
----	-----	-----
CL	CLAIM	Applied to compounds present in the patent claims (1999-date).
EX	EXAMPLE	Applied to compounds present in the examples, but not in the claims (from update 200253).
DISC	DISCLOSURE	Applied to compounds present in the

		disclosure, but not in the claims nor in the examples (from update 200253)
NEW	NEW	Substance, process, or apparatus claimed or described as new. (Before 1999 rarely applied.)
PRD	PRODUCED	Production or manufacture of substance or apparatus is claimed or described.
USE	USE	Use of substance or apparatus is claimed or described.
DET	DETECTED	Applied to the keyword for a condition or substance which has been detected as a result of testing.
RCT	REACTANT	Applied to starting materials or products defined in terms of starting materials (1987-date)
RGT	REAGENT	Applied to reaction components apart from starting materials e.g. catalysts, purifying agents (1987-date)
CMP	COMPONENT	Applied to components of a mixture (1987-date)
PUR	PURIFIED	
REM	REMOVED	
TES	TESTED	
ST	SALT	Applied to alkali or alkaline earth metal salts of organic acids; also to certain salts of organic bases e.g. hydrohalides, acetates.

- DWPI Compound Numbers (= DCN-roolit) Chemical Code (CMC)-kentässä, 1987-

Role	Definition/Notes
-----	-----
A	Analysed or detected
C	Catalyst
D	Detecting agent
R	Removing or purifying agent
S	Intermediate or starting material
X	Substance removed
N	New Compound
P	Known compound produced
Q	Product defined by its starting material(s)
M	Component of a Mixture
U	Use of a single compound
E	Excipient (from 1998)
T	Therapeutically active agent or prodrug (from 1998)
V	Reagent (from 1998)
K	Known compound (from 1998)

- DRN (DWPI Registry Numbers) 1981-

Role	Definition/Scope Notes
-----	-----
S	Intermediate or starting material
P	Compound produced
U	Use of a compound (single use or as a mixture)

4. Kemiaalista yhdistettä koskevien viitteiden haku STN:ssä

4.1 Yhdistehaku CAplussassa ja WPINDEXissä

Esimerkki: Rizatriptania ja sen johdannaisia käsittelevät patentit

1) REGISTRY

=> fil reg

FILE 'REGISTRY' ENTERED AT 14:48:05 ON 02 SEP 2009
COPYRIGHT (C) 2009 American Chemical Society (ACS)

Hae yhdisteen viite nimellä tai rakenteella. Tutki CN-kenttää (Chemical Name) EXPANDilla.

=> e rizatriptan/cn

E1	1	RIYUSEI KH 1000/CN
E2	1	RIZABEN/CN
E3	1 -->	RIZATRIPTAN/CN
E4	1	RIZATRIPTAN ACETATE/CN
E5	1	RIZATRIPTAN BENZOATE/CN
E6	1	RIZATRIPTAN DIMER/CN
E7	1	RIZATRIPTAN HYDROBROMIDE/CN
E8	1	RIZATRIPTAN HYDROCHLORIDE/CN
E9	1	RIZATRIPTAN MALEATE/CN
E10	1	RIZATRIPTAN OXALATE/CN
E11	1	RIZATRIPTAN SUCCINATE/CN
E12	1	RIZATRIPTAN SULFATE HYDRATE/CN

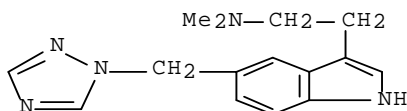
Jos haluat vain puhtaan rizatriptanin, niin valitse se listasta (S E3 tai S RIZATRIPTAN/CN). Jos haluat kaikki yhdisteet, joiden nimessä on rizatriptan, niin tee haku perushakemistosta (S RIZATRIPTAN)

=> s rizatriptan

L1 11 RIZATRIPTAN

=> d **Viitteitä ei tarvitse tulostaa**

L1 ANSWER 11 OF 11 REGISTRY COPYRIGHT 2002 ACS
RN 144034-80-0 REGISTRY
CN 1H-Indole-3-ethanamine, N,N-dimethyl-5-(1H-1,2,4-triazol-1-ylmethyl)-
(9CI) (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN Maxalt
CN MK 462 free base
CN Risatriptan
CN **Rizatriptan**
FS 3D CONCORD
DR 174662-68-1
MF C15 H19 N5
CI COM
SR CA
LC STN Files: ADISINSIGHT, ADISNEWS, BIOBUSINESS, BIOSIS, BIOTECHNO, CA,
CAPLUS, CASREACT, CIN, DDFU, DRUGNL, DRUGPAT, DRUGU, DRUGUPDATES,
EMBASE, IPA, MRCK*, PROMT, SYNTHLINE, TOXCENTER, USAN, USPAT2, USPATFULL
(*File contains numerically searchable property data)



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

270 REFERENCES IN FILE CA (1962 TO DATE)

5 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

271 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1962 TO DATE)

2) HCAplus (Tärkeintä on tehdä tämä haku!)

=> fil hcaplus

FILE 'HCAPLUS' ENTERED AT 14:55:06 ON 02 SEP 2009

COPYRIGHT (C) 2009 AMERICAN CHEMICAL SOCIETY (ACS)

Tee haku Registryn L-joukonumeron avulla. Haku tapahtuu silloin CAS-numeroilla.

=> s l1

L2 453 L1

Syventävää tietoa: Harkitse pitäisikö haku tehdä myös nimellä (s l2 or rizatriptan). CAS-numero puuttuu aivan uusimmista (alle 3 - 4 viikkoa) viitteistä, joten voisit tehdä nimihaun ainakin viimeisen neljän viikon aineistosta S RIZATRIPTAN AND ED=>=20061020. Joissakin tapauksissa nimihaku kannattaa tehdä koko tietokannasta. Nimihaku antaa kaikki yhdisteet, joissa hakusana nimen osana, joten se voi tuoda myös vääriä yhdisteitä koskevia viitteitä.

Tässä tapauksessa haku kannattaa tehdä myös nimellä, mutta yleensä Registryn joukonumero riittää.

=> s l2 or rizatriptan

459 RIZATRIPTAN

L3 483 L2 OR RIZATRIPTAN

Jos haluat rajata haun tiettyä asiaa käsitteleviin julkaisuihin, käytä rooleja.

Esim. S L1/PREP antaa vain valmistusta koskevat viitteet.

Voit myös yhdistää saatuun joukkoon aihetta kuvaavia sanoja (L)-operaattorilla.

Rajoita haku patenteihin

=> s l3 and p/dt

6819824 P/DT

L4 231 L3 AND P/DT

Tulosta viitteet haluamassasi muodossa

=> d ti hitind 1-231 => d iall 1,4-6,...

3) WPINDEX (Tämä haku ei ole yhtä tärkeä, mutta voi antaa lisää tietoja.)

=> fil wpin

FILE 'WPINDEX' ENTERED AT 14:56:24 ON 02 SEP 2009

COPYRIGHT (C) 2009 THOMSON REUTERS

Hae yhdisteen viite nimellä CN-kentästä tai rakenteella.

=> e rizatriptan/cn

E1 1 RIXIPROL/CN

E2 1 RIZABEN/CN

E3 2 --> RIZATRIPTAN/CN

E4 1 RIZATRIPTAN BENZOATE/CN

E5 1 RIZATRIPTAN-BENZOATE/CN

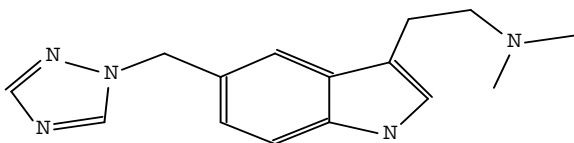
E6 1 RIZE/CN
 E7 1 RIZELAN/CN
 E8 1 RIZEN/CN
 E9 1 RIZINOMYCINE/CN
 E10 1 RIZINSAN K2 A2/CN
 E11 1 RIZINSAN-A/CN
 E12 1 RIZINSAN-AL/CN

=> s e3-e5

2 RIZATRIPTAN/CN
 1 "RIZATRIPTAN BENZOATE"/CN
 1 RIZATRIPTAN-BENZOATE/CN
 L5 2 (RIZATRIPTAN/CN OR "RIZATRIPTAN BENZOATE"/CN OR RIZATRIPTAN-BENZOATE/CN)

=> d a11 **Viitteitä ei kuitenkaan tarvitse tulostaa**

L5 ANSWER 1 OF 2 WPINDEX (C) 2002 THOMSON DERWENT
 ACCESSION NUMBER: DCR-164232
 DERWENT CHEM.RES.NO.: 164232-0-0-0
 PREF. CHEMICAL NAME: RIZATRIPTAN
 SYSTEMATIC NAME: Dimethyl-[2-(5-[1,2,4]triazol-1-ylmethyl-1H-indol-3-yl)-ethyl]-amine
 SYNONYM: MAXALT; **RIZATRIPTAN**



MOLECULAR FORMULA: C15 H19 N5
 STANDARD MOL. FORMULA: C15 H19 N5 *1; TYPE *1; TOTAL *1
 MOLECULAR WEIGHT: 269.3501
 RING INDEX NUMBER: 00096
 DERWENT COMPOUND NO.: RA1EJ9
 SMILES STRING: CN(C)CCc1c[nH]c2ccc(Cn3cncn3)cc12
 ISOSMILES STRING: CN(C)CCc1c[nH]c2ccc(Cn3cncn3)cc12

Hae patentit saadun L-numeron avulla DCR-kentästä=> s 15/dcr

L6 163 L5/DCR

Jos haluat rajata haun tiettyä asiaa käsitteleviin julkaisuihin, käytä rooleja. Roolilistan saat komennolla HELP ROLES. Hae myös koodia DCR-kentästä ja yhdistä haku (T)-operaattorilla yhdisteen patentteihin, esim. L5/DCR (T) T/DCR antaa vain terapeuttista käyttöä koskevat viitteet.

WPINDEXissä haku kannattaa useimmiten tehdä myös yhdisteen eri nimillä (DCR alkoi vasta vuodesta 1999 ja se on päivitetty v. 1981-)

=> s 16 or rizatriptan

203 RIZATRIPTAN/BI
 45 RIZATRIPTAN/BIEX
 L7 221 L6 OR RIZATRIPTAN/BI,BIEX

4) CA:N VIITTEIDEN POISTAMINEN WPINDEXIN VIITTEIDEN JOUKOSTA TRANSFER-KOMENNON AVULLA

Hae CA:n viitteet WPINDEXistä siirtämällä ne patentti- ja hakemusnumeroiden avulla.

- Anna komento TRANSFER ja vastaa kysymyksiin tai
- Anna suoraan komento: TRANSFER L4 PN,APPS 1-

=> transfer

```
ENTER L# (L6) OR ?:L4
ENTER ANSWER NUMBERS, RANGES (1-), OR ?:.
ENTER DISPLAY FIELDS (TI) OR ?:PN,APPS
L7          TRANSFER L4 1- PN,APPS :      3604 TERMS
L8          504 L7
```

Poista CA:sta tulleet viitteet WPINDEXin viitteistä.

```
=> s 16 not 18
L9          25 L6 NOT L8
```

Tulosta viitteet.

```
=> d ti 1-25      tai      d ifullg clmen 1-25      tms
```

Esimerkki jatkuu seuraavan kohdan jälkeen!!

4.2 Yhdistehaku INPAFAMDB/INPADOCDB:ssä

Samaan yhdisteeseen kuuluvien nimen osien väliin (T)-operaattori

S ?METHYL?(T)?AMINO? => esim. 2-AMINOMETHYLPYRIDIN JAdimethyl-8-(2,6-dimethylbenzylamino)-n-hydroxyethyl....

4.3 Yhdistehaku tietokannoissa, joissa ei ole CAS-numeroita (SEL CHEM)

1. Hae yhdisteen tietue Registrystä
2. Poimi tietueessa esitetyt nimet **SEL CHEM**
3. Avaa haluamasi tietokanta/tietokannat.
4. Anna komento **S E1-E8** tms

Esimerkki: Rizatriptania käsittelevät patentit WPINDEXistä käyttämällä apuna SEL CHEMIä (jatkoa edellisen esimerkkiin)

=> fil reg

FILE 'REGISTRY' ENTERED AT 15:14:17 ON 02 SEP 2009
COPYRIGHT (C) 2009 American Chemical Society (ACS)

Hae yhdisteen tietue Registrystä ja poimi tietueessa esitetyt nimet

=> sel chem l1

E1 THROUGH E29 ASSIGNED

Avaa tietokanta/tietokannat, joista haluat hakea kaikilla kemiallisilla nimillä.

=> fil wpin

FILE 'WPINDEX' ENTERED AT 15:14:36 ON 02 SEP 2009
COPYRIGHT (C) 2009 THOMSON REUTERS

Anna komento S E1-E29 tms

=> s e1-e29

```
L11          210 (MAXALT/BI OR "MK 462 FREE BASE"/BI OR "MK 462"/BI OR "N,N-DIMET
              HYL-2-(5-(1H-1,2,4-TRIAZOL-1-YLMETHYL)-1H-INDOL-3-YL)ETHYLAMINE"
              /BI OR RISATRIPTAN/BI OR "RIZATRIPTAN ACETATE"/BI OR "RIZATRIPTA
              N BENZOATE"/BI OR "RIZATRIPTAN DIMER"/BI OR "RIZATRIPTAN HYDROBR
              .....
              145202-66-0/BI OR 159776-67-7/BI OR 174662-68-1/BI OR 260435-43-
              6/BI OR "3-(2-(DIMETHYLAMINO)ETHYL)-5-(1H-1,2,4-TRIAZOL-1-YLMETH
              YL)INDOLE"/BI OR 6-HYDROXYRIZATRIPTAN/BI OR 887001-08-3/BI)
```

Poista WPINDEXin DCR-hausta saadut julkaisut

=> s l11 not l7

L12 5 L11 NOT L7

Poista WPINDEXin DCR-hausta ja HCAplus-hausta saadut julkaisut

=> s l11 not (l7 or l9)

L13 1 L11 NOT (L7 OR L9)

=> d scan

L13 1 ANSWERS WPINDEX COPYRIGHT 2009 THOMSON REUTERS on STN

TI Use of epinastin to treat migraine, headache, muscle and inflammatory pain, neuralgia and Bing-Horton syndrome - optionally in combination with non-steroidal antiinflammatory drug, 5-hydroxy tryptamine-(1D) agonist, dopamine-(D2) or other pain relief agent

4.4 Yhteenveto kemiallisen yhdisteen tietojen hausta (CAplus)

Step 1	Locate the CAS RN for the compound of interest	
	A. Enter REGISTRY	=> FILE REGISTRY
	B. Verify the chemical name	=> E RESVERATROL/CN
	C. Run the search	=> S E3 L1 1 RESVERATROL/CN
	D. Display answers	=> D L1 1 IDE
Step 2	Locate references citing the substance	
	A. Enter CAplus	=> FILE CAPLUS
	B. Run the search using the REGISTRY L-number	=> S L1 L2 2118 S L1
	C. Evaluate answers	=> D SCAN
Step 3	Append a CAS Role code to isolate specific records	=> S L1/PREP
Step 4	Display answers	=> D L2 4 IBIB ABS
Step 5 (optional)	Extract nomenclature and CAS RNs for searching in other STN files	=> FILE REGISTRY => SEL CHEM L1
Step 6 (optional)	Extend the search to additional STN files	=> FILE USPATALL PCTFULL => S E1-E2 OR E4-E10
Step 7 (optional)	Remove duplicate records and display answers	=> DUP REM L2 L7 => D 1 FROM EACH

Hae myös WPINDEX!!!!

5. Yhdisteen ominaisuustietojen haku

STN-tietopankin numeeriset tietokannat

Tietokanta	Aineita	Tietueita	Vuodesta	Yhdisteet	Sisältö - ominaisuudet
REGISTRY	30 milj. (100 milj.)	30 milj. (100 milj.)	1907	Kaikki	2 miljardia kokeellista ja laskennallista ominaisuusarvoa
REAXYSFILE	10,6 milj.	10,6 milj.	1779	Org. aineet	Fysikaalisia, termodynaamisia ja EcoPharm-ominaisuuksia, spektrejä
CHEMSAFE	1 500	47 000		Palavat kaasut, nesteet, seokset	40 turvallisuusteknistä ominaisuutta
DETERM	20 000 + seoksia	750 000 taulukkoa, 47000 lähdetä	1819	Epäorg. ja org. aineet, paljon seoksia	500 termofysikaalista ominaisuutta
GMELIN	1,1 milj.	1,1 milj.	1817	Epäorg. ja organomet. aineet, seokset	80 fysikaalista ja termokemiallista ominaisuutta
ICSD		104 000	1913	Epäorg. yhdisteet	Rakenneparametrit
MRCK	10 500	10 500	1890	Org. ja epäorg. aineet	Toksisuus ja fysikaaliset ominaisuudet
RTECS	166 000	166 000	1971	Org. ja epäorg. aineet	Toksisuus

STN Expressin automaattitoiminto

- REAXYSFILE on erikseen valittava mukaan: Preferences/ STN Online and Results/Account. Ruksaa ReaxysFile kohdassa Property Databases
- DETERM ei ole mukana, joten se pitää aina hakea erikseen komentokielellä. Kaikki ominaisuudet eivät myöskään ole mukana.
- Kun klikkaat rekisterinumeroa hiiren vasemmalla painikkeella minkä tahansa STN:n tietokannan tietueessa, saat ruudulle seuraavia valikoita.

The screenshot shows the STN Express interface. The main window displays search results for 'METHYL MERCAPTAN' (RN 74-93-1). A context menu is open over the result, listing various property databases and their associated properties. The 'Physical Properties' option is highlighted, and a sub-menu is visible showing properties like Vapor Pressure, Boiling Point, and Melting Point.

```

=> s e3
L1 1 "METHYL MERCAPTAN"/CN
=> d
L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
RN 74-93-1 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Methanethiol (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN Mercaptomethane
CN Methyl mercaptan
DR 63933-47-1
MF c H4 S
CI COM
LC STN File
  CAOLD
  CHEMSAFE
  ENCOM
  IFIUD
  RTECS
  (*F:
Other Sc
  (**E
H3C-SH
***PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FOR
7824 REFERENCES IN FILE CA (190
94 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
  
```

Context Menu Options:

- Get REGISTRY data
- Get catalog data
- Get regulatory data
- Get MSDS data
- Get spectra
- Get property data
- Structure search
- Get Related Polymers
- Get Related Sequences
- Return to last file

Property Database Selections:

- BEILSTEIN*, BIOSIS, BI
- ATS, CHEMINFORMRX, CHEML
- ETHERM*, DRUGO, EMBASE,
- MELIN*, HSDB*, IFICDE, I
- E, NAPRALERT, PIRA, PROM

Physical Properties List:

- Azeotrope
- Adsorption Coefficient (KOC)
- Boiling Point
- Critical Properties
- Density
- Dynamic Viscosity
- Flash Point
- Glass Transition Temperature
- Ignition Properties
- Ionization Potential
- Kinematic Viscosity
- Liquid Properties
- Melting Point
- Moisture Content
- Molar Properties
- Molecular Weight
- Relative Density
- Specific Gravity
- Sublimation Point
- Surface Tension
- Tensile Strength
- Triple Point
- Vapor Pressure

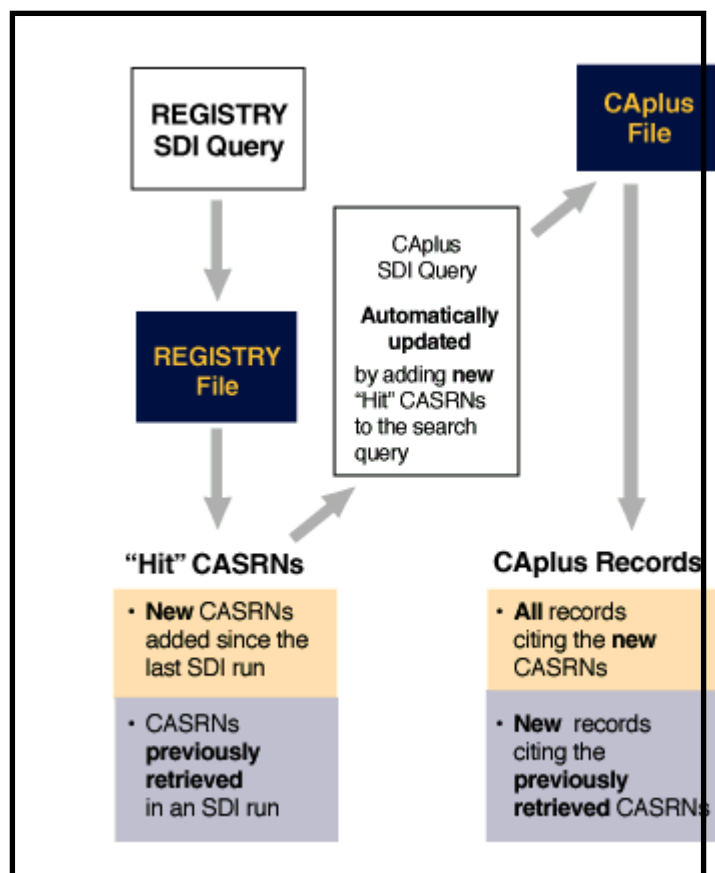
- Klikkaa esim. Vapor Pressure.
- Kaikki tapahtuu sen jälkeen automaattisesti. Vastaa vain kysymyksiin.

6. Jatkuva seuranta yhdisteen julkaisuista (SMARTracker)

STN has powerful current awareness tools. A unique feature of STN current awareness is the ability to run a multifile search of the REGISTRY/CPlus files.

Known as SMARTracker, this current awareness search monitors the REGISTRY file to find substances matching a REGISTRY query. It automatically searches and returns

- CPlus references to new substance matches
- New CPlus references to previously found substance matches



A SMARTracker query may be

- A REGISTRY dictionary query L-number
- A REGISTRY structure query L-number
- A CAplus file L-number which incorporates a REGISTRY dictionary or structure query L-number and any additional terms desired

Up to 10 REGISTRY L-numbers may be included in the final search query. The L-number from the final CAplus search is the basis of the SMARTracker alert.

Search Question: *Set up an alert to monitor references where organolanthanides have been used in medical imaging applications, such as MRI or positron emission tomography.*

Search Strategy to set up a SMARTracker alert

- | | |
|--------|---|
| Step 1 | Perform a REGISTRY to (H)CAplus crossfile search. |
| Step 2 | Enter SMART command and the L-number created by the crossover search. |

Perform a REGISTRY to HCAplus crossfile search

```
=> FILE REGISTRY
=> S LNTH/PG (P) C/ELS (P) H/ELS
L1          72987 LNTH/PG (P) C/ELS (P) H/ELS
=> FILE HCAPLUS
=> S NMR OR MRI OR MRS OR MAGNETIC RESONANCE OR PET OR POSITRON EMISSION
    TOMOGRAPHY
L2          450265 NMR OR MRI OR MRS OR MAGNETIC RESONANCE OR PET OR POSITRON
    EMISSION TOMOGRAPHY
=> S L1 AND L2
          18705 L1
L3          4148 L1 AND L2
=> S L3 AND IMAG?
L4          976 L3 AND IMAG?
```

Enter the SMART command

The SMART command initiates SMARTracker. It automatically enters both REGISTRY and HCAplus (since it was invoked from HCAplus) and prompts for necessary information.

```
=> SMART
    SMARTracker INITIATED

ENTER QUERY L# FOR SDI REQUEST OR (END):L4
ENTER UPDATE FIELD CODE (UP) OR ?:UP
ENTER SDI REQUEST NAME, (AA031/S), OR END:ORGANOLANTH/S
ENTER COST CENTER (NONE) OR NONE:NONE
ENTER TITLE (NONE):ORGANOLANTHANIDE CONTRAST AGENTS
ENTER METHOD OF DELIVERY (OFFLINE), ONLINE, OR EMAIL:EMAIL
ENTER EMAIL ID (5584C):JDOE@CAS.ORG, STNID123@STNALERTS.ORG
JDOE@CAS.ORG,STNID123@STNALERTS.ORG
RECEIVE DELIVERY NOTIFICATION? (Y)/N:N
ELIMINATE PREVIOUSLY SEEN ANSWERS WITH EACH SDI RUN? Y/(N):Y
ENTER PRINT FORMAT (BIB) OR ?:IBIB ABS HITSTR
HIGHLIGHT HIT TERMS? (Y)/N:Y
ARCHIVE ANSWERS? Y/(N):N
REDISTRIBUTE ANSWERS? Y/(N):N
ENTER MAXIMUM NUMBER OF HITS TO BE PRINTED PER RUN (100):.
SORT SDI ANSWER SET (N)/Y?:N
SEND SDI WITH NO ANSWERS? (Y)/N:N
DISPLAY CURRENCY INFORMATION? (Y)/N:Y
ENTER SDI RUN FREQUENCY - (WEEKLY), BIWEEKLY, OR ?:BIWEEKLY
ENTER SDI EXPIRATION DATE 'YYYYMMDD' OR (NONE):20041231
QUERY L4 HAS BEEN SAVED AS SDI REQUEST 'ORGANOLANTH/S'
```