



知財戦略 & 特許調査に差がつく  
STN IP Protection Suite セミナー  
&  
CAS STNNext ユーザーミーティング資料

2022 年 9 月



## \* 目次 \*

### ◆ 知財戦略&特許調査に差がつく STN IP Protection Suite セミナー

1. CAS Scientific Patent Explorer™  
～ 特許検索・解析をより簡単に ～ ..... 1
2. Biosequences Search  
～ CAS STNext® の新しい配列検索機能 ～ ..... 25
3. CAS FORMULATIONS™ ファイル  
～ 製剤・配合の調査に最適なデータベース ～ ..... 41

### ◆ CAS STNext ユーザーミーティング

1. CAS FILES の強化 ..... 63
2. WPI ファイルのリロード ..... 79
3. 配列ファイルのリロード ..... 97
4. CAS STNext の強化 ..... 111

知財戦略 & 特許調査に差がつく  
STN IP Protection Suite セミナー

CAS Scientific Patent Explorer™  
～ 特許検索・解析をより簡単に ～



# CAS Scientific Patent Explorer™

## ～特許検索・解析をより簡単に～

化学情報協会 情報事業部

## 目次

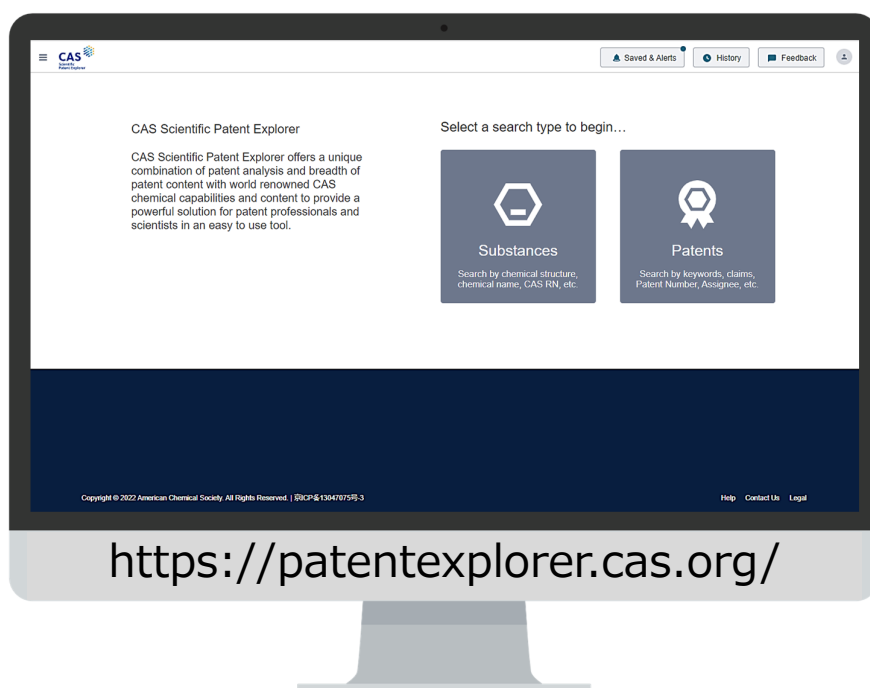
1. CAS Scientific Patent Explorer とは
2. 活用事例 1 - 特許の動向を調査する
3. 活用事例 2 - 物質関連特許の動向を調査する
4. 強化一覧

# CAS Scientific Patent Explorer とは

## CAS Scientific Patent Explorer とは

3

CAS 独自の化学物質情報と特許情報を組み合わせた  
特許調査のための検索ツール



簡単な操作で世界中の特許を調査できる

- 検索：広範な特許情報を対象とした検索  
化学物質とその関連特許の検索
- 表示：特許公報・特許ファミリー、法的状況、引用情報、CAS 由来の情報をまとめて確認
- 解析：特許・化学物質の検索結果をビジュアル化  
様々な観点で俯瞰できる

© 2022 化学情報協会

## 広範な特許情報を収録

5

(2022 年 8 月)

	CAS Scientific Patent Explorer	CAS STNext <sup>*3</sup>		
		CAplus	WPI	INPADOCDB/ INPAFAMDB
特許発行国・機関	115	63	61	約 100
収録分野	全産業	化学および周辺分野	全産業	全産業
特許全文	約 60 <sup>*1</sup>	13 <sup>*4</sup>	24 <sup>*2</sup>	×
法的状況	○	○	×	○
特許分類	IPC, CPC, F-TERM, FI	IPC, CPC, F-TERM	IPC, CPC, F-TERM, FI	IPC, CPC, F-TERM, FI
引用, 被引用情報	○	○	○	×
更新頻度	毎週	毎日	週 2 回	毎週

\*1 特許全文の収録は特許発行国の特許種別や年代により異なる

\*2 全クレームの収録は 21 特許発行国・機関、メインクレームの収録は 3 特許発行国

\*3 CAS STNext では 13 特許発行国・機関の全文データベースを利用できる

\*4 ベーシック特許の全クレームを収録

© 2022 化学情報協会

(2022年8月)

	CAS REGISTRY (REGISTRY)	CAS Markush (MARPAT)	CAS References (CAplus)	CAS Formulations (CASFORM)	CAS Reactions (CASREACT)
内容	化学物質	特許中の マルクーシュ構造	化学および周辺 分野の文献情報	製剤・配合情報	重要な有機化学 反応
検索	○ ・ CAS RN® ・ SMILES ・ InChI ・ Molfile ・ 化学物質名称 ・ 構造質問式	○ ・ 構造質問式	×	×	×
表示	○ ・ CAS RN® ・ 化学物質名称 ・ 分子式 ・ 構造図 ・ 基本的な物性情報	○ ・ マルクーシュ構造 ・ 特許番号	○ ・ 重要な化学物質 ・ 主題に関わる 概念の索引	○ ・ 配合情報 ・ CAS Formulus リンク	○ ・ 反応スキーム

( ) 内は CAS STNext のファイル名

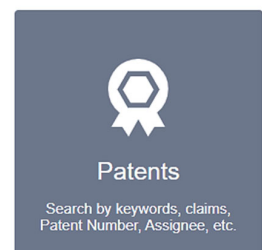
© 2022 化学情報協会

## 活用事例 1 特許の動向を調査する



## リチウムイオン電池のリサイクルについて、特許の動向を調査する

- 広範な特許情報を収録
- 検索・絞り込み機能
- 特許検索結果のビジュアル化



© 2022 化学情報協会

## Advanced Patent Search

メニュー形式で簡単に複数の語や項目を組み合わせた検索が可能

The screenshot shows the 'Advanced' search tab selected. On the left, there are filters for 'Patent type' (Application, Patent, Utility) and 'All databases' (IP 5, United States, China, EPO, Japan, Korea, Major jurisdictions, WIPO, Austria). The main search area has a 'Field search' section with a dropdown menu and a search box containing the query: "lithium-ion" OR "lithium ion" OR "li-ion" OR "li ion". Below this, there are three rows of search criteria: "battery", "recover\* OR recyc\* OR reclaim\*", and "Enter keyword, company name, or patent number". A callout box points to the search criteria with the text: "検索項目と演算子 (AND, OR, NOT) の選択". At the bottom, a table lists search fields: Text, Classification Number, Company/People, Date, Number, Address, Family, IPC, Main IPC, CPC, FI, F-TERM. A callout box points to this table with the text: "Advanced Patent Search 検索項目". At the bottom left, a callout box points to the 'Patent type' filters with the text: "特許の種類、発行国の選択". The bottom of the interface shows "Found 9,345 patents" and a "Search" button.

© 2022 化学情報協会

Includes Machine Translations for Title, Abstract, or Claims  を指定すると標題、抄録、クレームについて翻訳語も含めた検索が実行される

(TAC\_ALL:(“lithium-ion” OR “lithium ion” OR “li-ion” OR “li ion”)) AND (TAC\_ALL:(battery)) AND (TAC\_ALL:(recover\* OR recycl\* OR reclaim\*))

[Edit search](#) [Combine searches](#)

Found 9,345 patents

Includes Machine Translations for Title, Abstract, or Claims  [Clear](#) [Search](#)

項目	質問式の言語	翻訳される言語	翻訳語の検索対象
標題 抄録	英語 日本語 中国語	英語 日本語 中国語 ドイツ語*1、フランス語*1	オリジナル言語 英語、日本語*2、中国語*2、 ドイツ語*2、フランス語*2  機械翻訳の英語
クレーム	英語	—	オリジナル言語の英語 機械翻訳の英語

\*1 ドイツ語、フランス語には翻訳されない場合がある  
\*2 収録されている場合

自動的に作成された検索式は適宜編集できる

(TAC\_ALL:(“lithium-ion” OR “lithium ion” OR “li-ion” OR “li ion”) AND (TAC\_ALL:(battery)) AND (TAC\_ALL:(recover\* OR recycl\* OR reclaim\*))

[Edit search](#) [Combine searches](#)

Found 9,345 patents

Includes Machine Translations for Title, Abstract, or Claims  [Clear](#) [Search](#)

---

Switch to Field Search Found 3,475 patents [Settings](#)

TAC\_ALL:(("lithium-ion" OR "lithium ion" OR "li-ion" OR "li ion")\$W5 (battery)\$W7 (recover\* OR recycl\* OR reclaim\*))

AND | OR | NOT | \$W | \$PRE | \$WS | [ ] | \* | ( ) | ? | \* | [Search Helper](#)

[Clear](#) [Search](#)

記号	定義	近接演算子	定義
" "	フレーズ検索	\$Wn	入力順序に関係なく検索語の間は n 個以下の語が存在する
*	何文字でもよい * は単語の中間もしくは末尾に使用可能	\$PREn	入力順序通りに検索語の間は n 個以下の語が存在する
?	ちょうど一文字 ? は単語の中間もしくは末尾に使用可能	\$WS	入力順序に関係なく検索語の間は 99 個以下の語が存在する
<b>ブール演算子 優先順位</b>			
NOT > AND > OR			

検索結果は見やすい表形式で表示され、カスタマイズできる

並び替え

表示のカスタマイズ

公報単位、ファミリー単位の切り替え

ファミリー単位の際の代表公報の設定

© 2022 化学情報協会

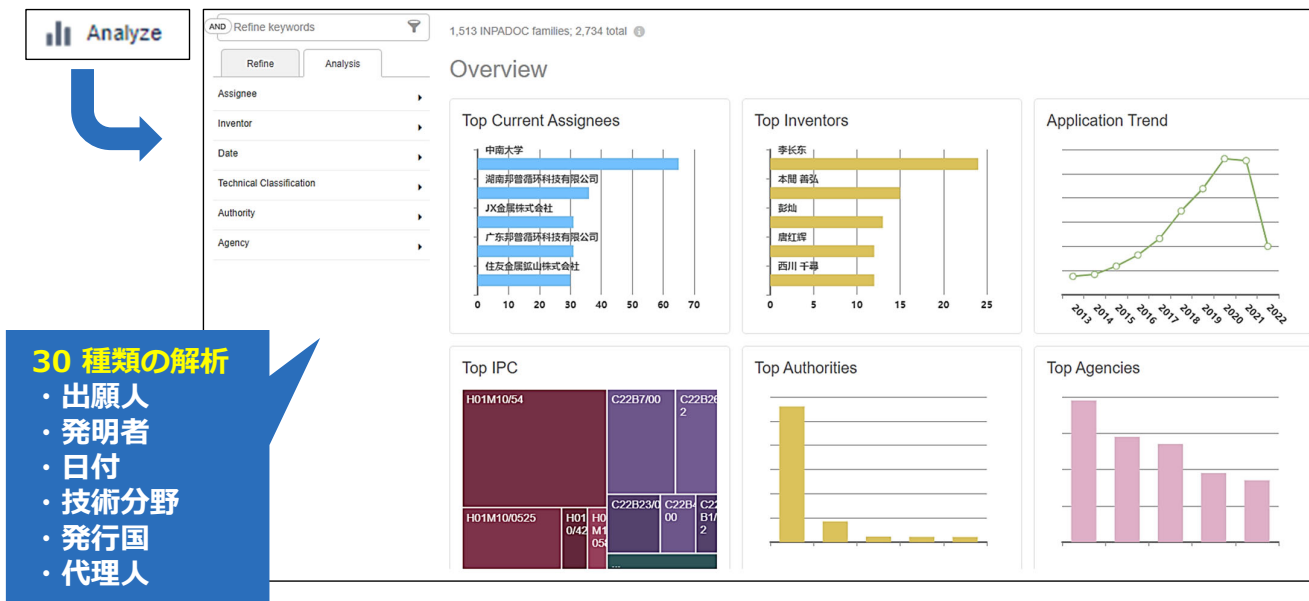
様々な項目のフィルターを利用した絞り込みができ、効率的に回答を確認できる

法的状況

フィルタにチェックを入れる。指定した項目を含める場合は Refine 除外する場合は Exclude

© 2022 化学情報協会

特許検索の結果をクリック一つで解析でき、様々な観点から特許の動向を把握できる

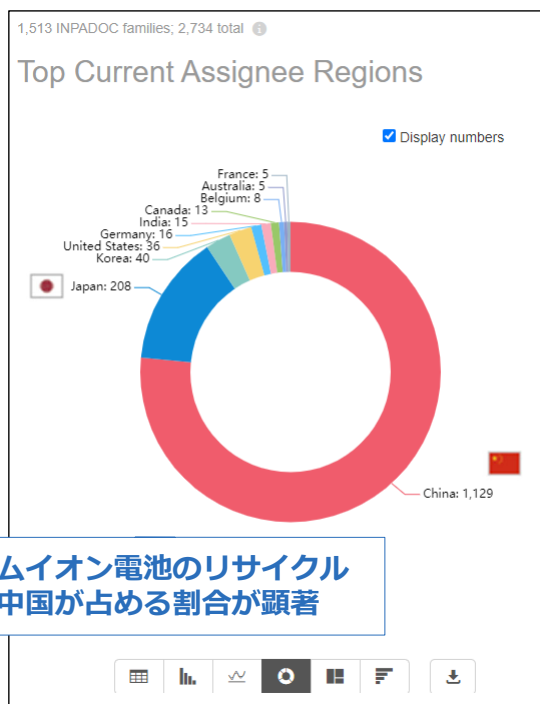
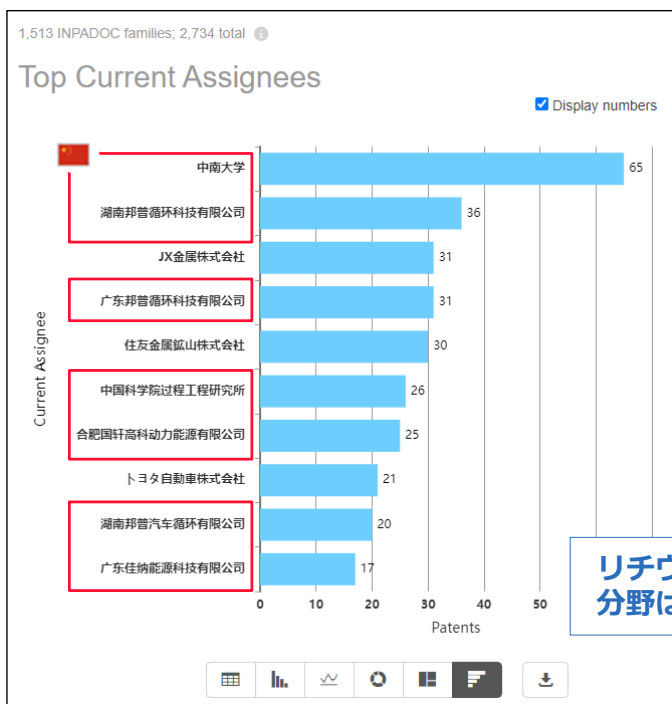


© 2022 化学情報協会

## Analyze – Assignee / Authority

上位の特許出願人

上位の特許出願人の所属国



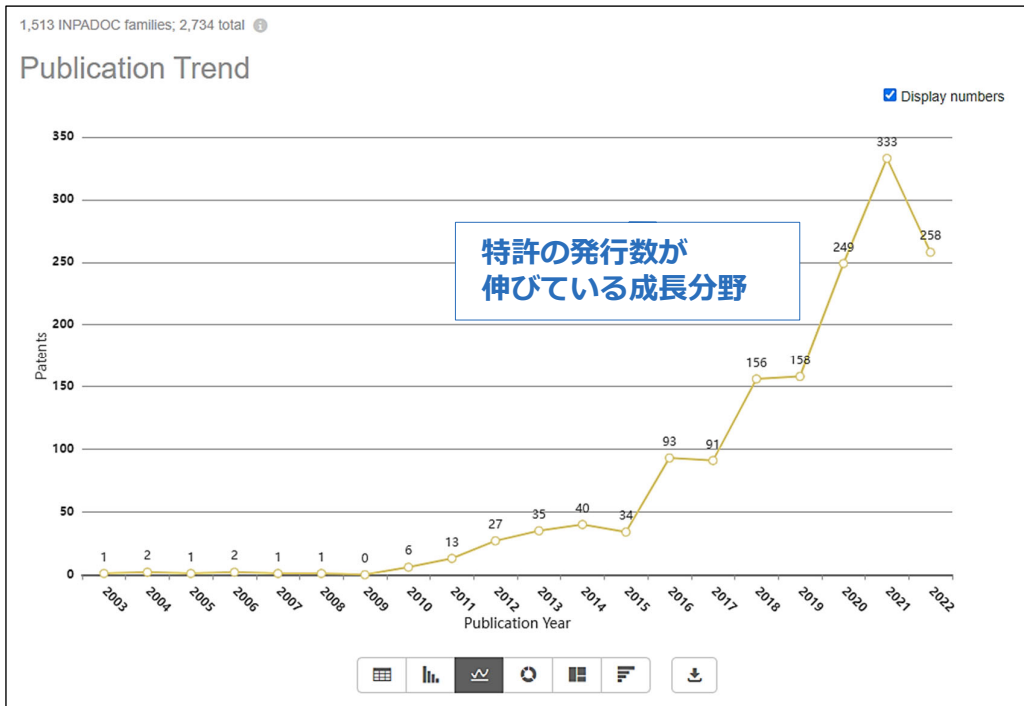
リチウムイオン電池のリサイクル分野は中国が占める割合が顕著

Assignee - Top Current Assignees

Authority - Top Current Assignee Regions

© 2022 化学情報協会

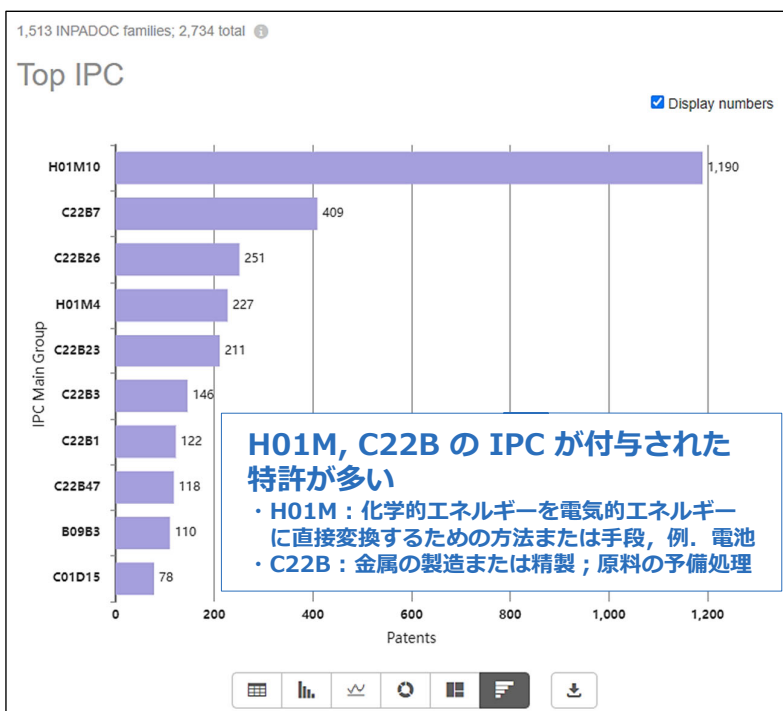
## 特許発行トレンド



Date – Publication Trend

# Analyze – Technical Classification

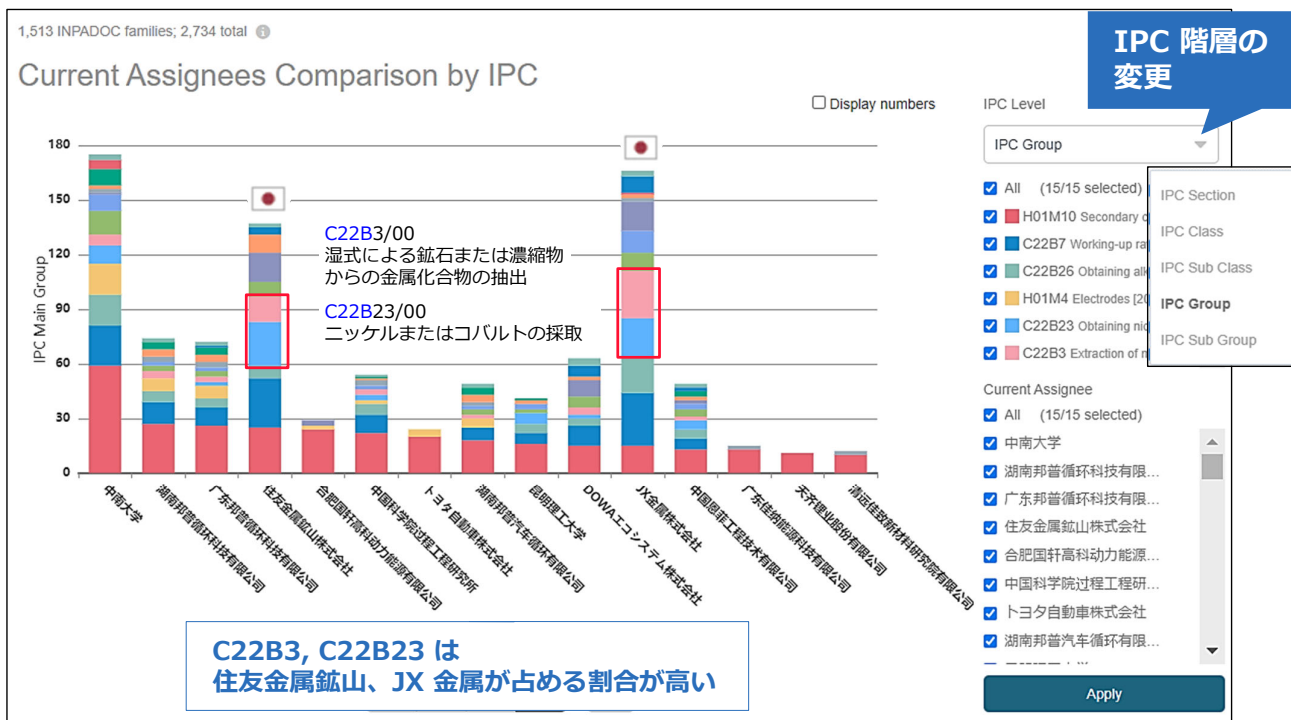
## 上位 IPC (メイングループで解析)



- H01M10/00**  
二次電池 ; その製造
- C22B7/00**  
鉍石以外の他の原材料, 例. スクラップ, からの非鉄金属またはその化合物抽出のための処理
- C22B26/00**  
アルカリ金属, アルカリ土類金属またはマグネシウムの採取
- H01M4/00**  
電極
- C22B23/00**  
ニッケルまたはコバルトの採取
- C22B3/00**  
湿式による鉍石または濃縮物からの金属化合物の抽出
- C22B1/00**  
原鉍石またはスクラップの予備的処理一般
- C22B47/00**  
マンガン採取
- B09B3/00**  
固体廃棄物の破壊あるいは固体廃棄物の有用物化もしくは無害化
- C01D15/00**  
リチウム化合物

Technical Classification – Top IPC

Top IPC による出願人の解析（メイングループで解析）



Technical Classification – Current Assignees Comparison by IPC

© 2022 化学情報協会

## 活用事例 1 – まとめ

リチウムイオン電池のリサイクルについて、以下の特許動向を確認できた

- 中国がこの分野の中心である
- 直近 10 年で急激に特許が発行されている
- IPC の解析により、日本が強い技術分野がわかる

© 2022 化学情報協会

## (参考)

CAS References (CAplus ファイル) は、ベーシック特許の IPC で選別し化学および周辺分野の特許を収録している。CAplus ファイルで選択収録となる分野については、全分野を収録する CAS Scientific Patent Explorer の検索が有効

(例) H01M のリチウムイオン電池関連 IPC

H 電気	
H01	基本的電気素子
H01M	化学的エネルギーを電気的エネルギーに直接変換するための方法または手段, 例. 電池
H01M10/00	二次電池; その製造
H01M10/05	・ 非水電解質二次電池
H01M10/052	・ ・ リチウム二次電池
H01M10/0525	・ ・ ・ ロッキングチェア電池, すなわち両方の電極でリチウムの挿入を伴うもの; リチウムイオン電池

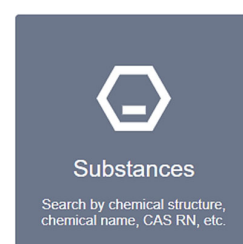
(例) CAplus ファイルの H01M 特許収録範囲 ([www.cas.org/support/documentation/references/patentcoverage](http://www.cas.org/support/documentation/references/patentcoverage))

収録保証 IPC (IPC リスト I)	
H01M	4/13-4/1399, 4/24-4/60, 4/86-6/00, 6/04-6/06, 6/14-6/20, 6/24-6/28, 8/06-8/22
選択収録 IPC (IPC リスト II)	
H01M	00/00-4/12, 4/14-4/23, 4/62-4/84, 6/02, 6/08-6/12, 6/22, 6/30-8/04992, 8/24-16/00

## 活用事例 2 物質関連特許の動向を調査する

イーライリリーの乳がんの治療薬アベマシクリブとその誘導体について、特許の動向を調査する

- 化学物質の構造検索
- 化学物質と特許を関連づけた解析



© 2022 化学情報協会

## 化学物質の検索

23

構造検索は、検索対象と構造検索タイプを選んで検索する

Structure Search Text Search

The structure editor has been updated with a new look and feel. Learn more

1231929-97-7

Draw or change atoms or bonds.

アベマシクリブの構造

Molecular Formula: C<sub>27</sub>H<sub>32</sub>F<sub>2</sub>N<sub>8</sub> (506.60)

Search for:

Substances Patents Markush

Search this structure as:

As Drawn

As Substructure

As Similarity

Search

### 検索対象

- Substances  
化学物質の検索
- Patents  
化学物質に関する  
特許情報の検索
- Markush  
マルクーシュ構造  
を含む特許検索

### 構造検索タイプ

- As Drawn  
完全一致検索
- As Substructure  
部分構造検索
- As Similarity  
類似性構造検索

© 2022 化学情報協会



Substances の検索結果は化学物質の一覧で表示される

**解析**

**全化学物質に関する特許をまとめて表示**

**該当の化学物質に関する特許を表示**

**化学物質の詳細を表示**

**絞り込み**

© 2022 化学情報協会

化学物質検索の結果を二通りの方法で解析できる

**Analyze**

化学物質と関連する特許情報を紐づけて解析

**ChemScape**

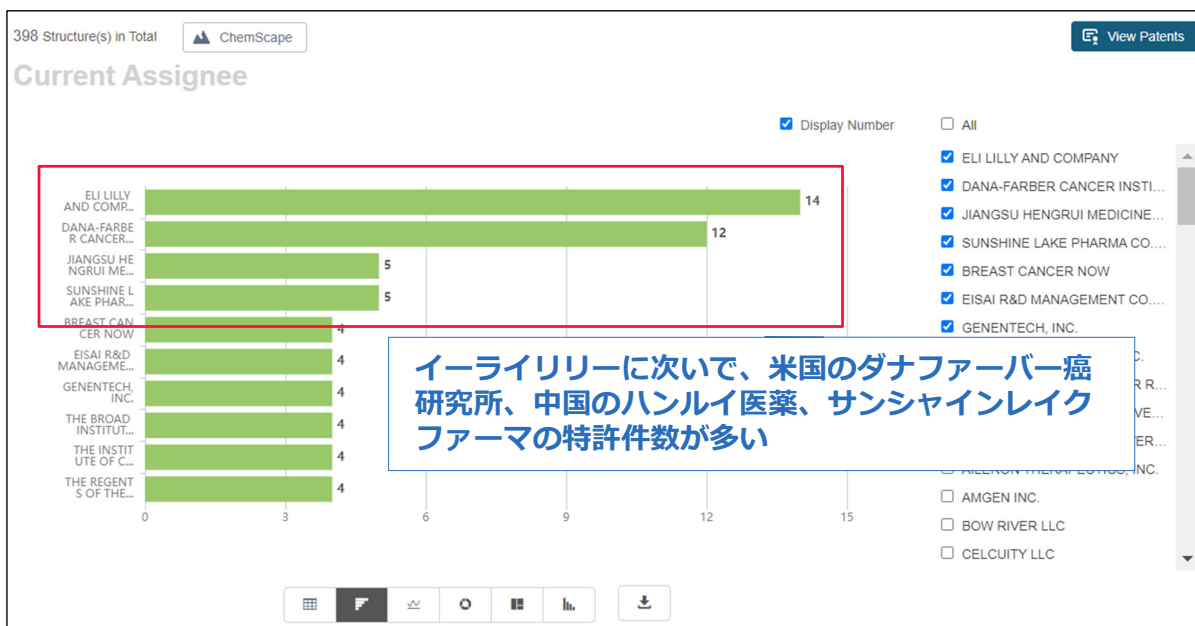
化学物質の構造の類似性と関連する特許情報を紐づけて解析

**8 種類の解析**

© 2022 化学情報協会

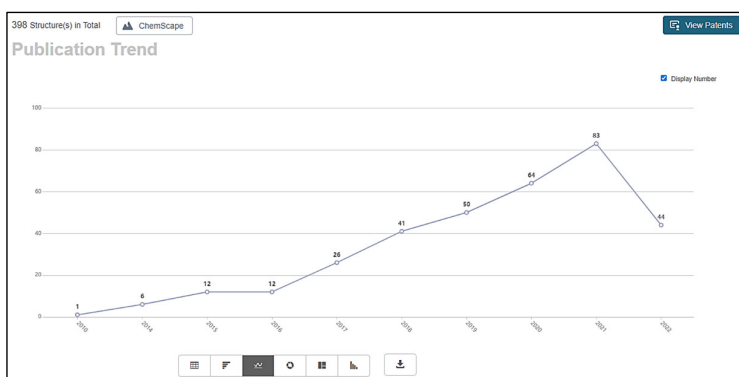
## Analyze は化学物質に関する特許情報を解析できる

上位の特許出願人



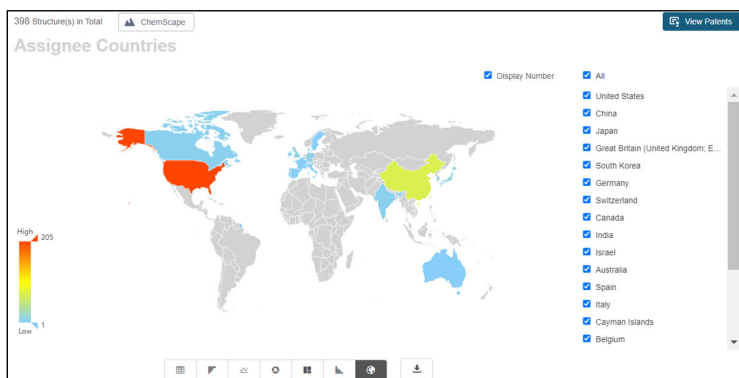
© 2022 化学情報協会

# Analyze - Publication Trend / Assignee Countries 27



特許発行トレンド

特許の発行は増加傾向

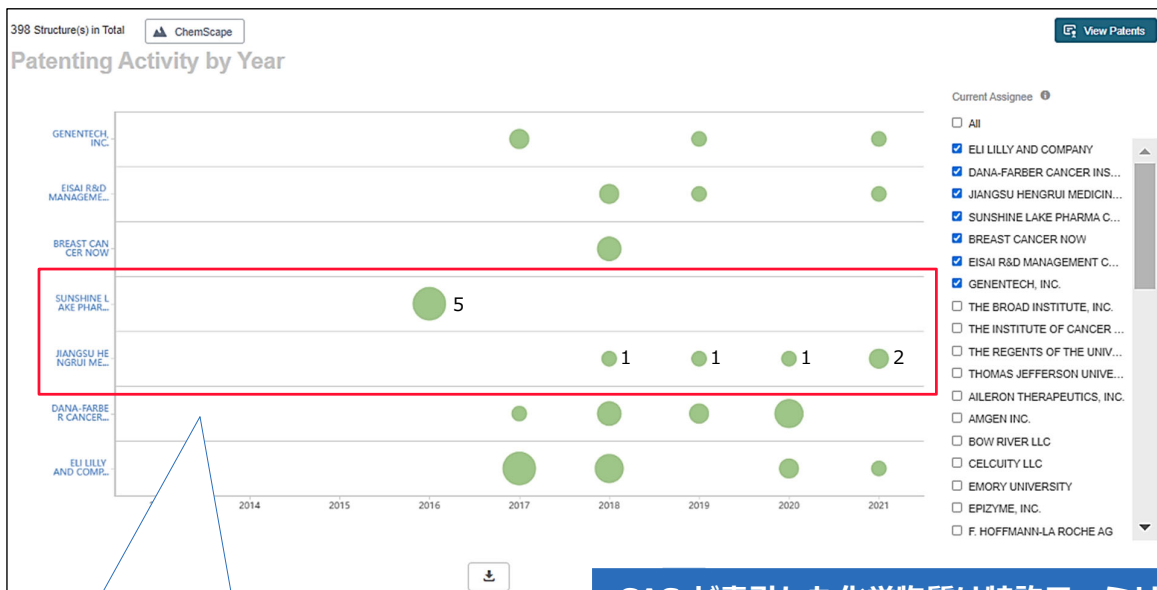


出願人の所属国

米国や中国所属の特許出願人が多い

© 2022 化学情報協会

## 特許出願人ごとの特許発行年解析

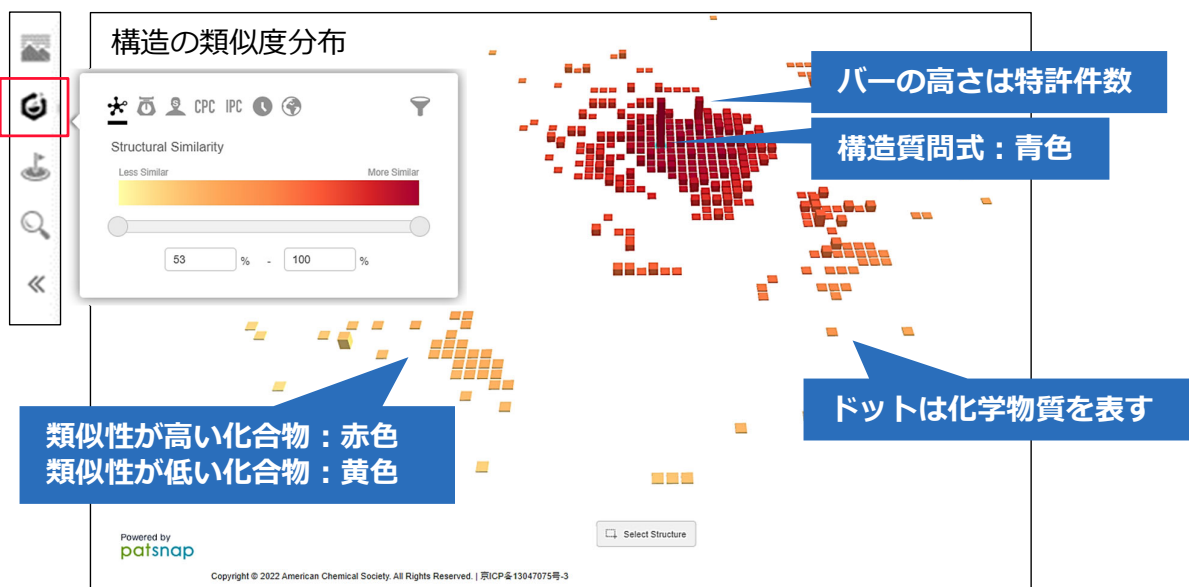


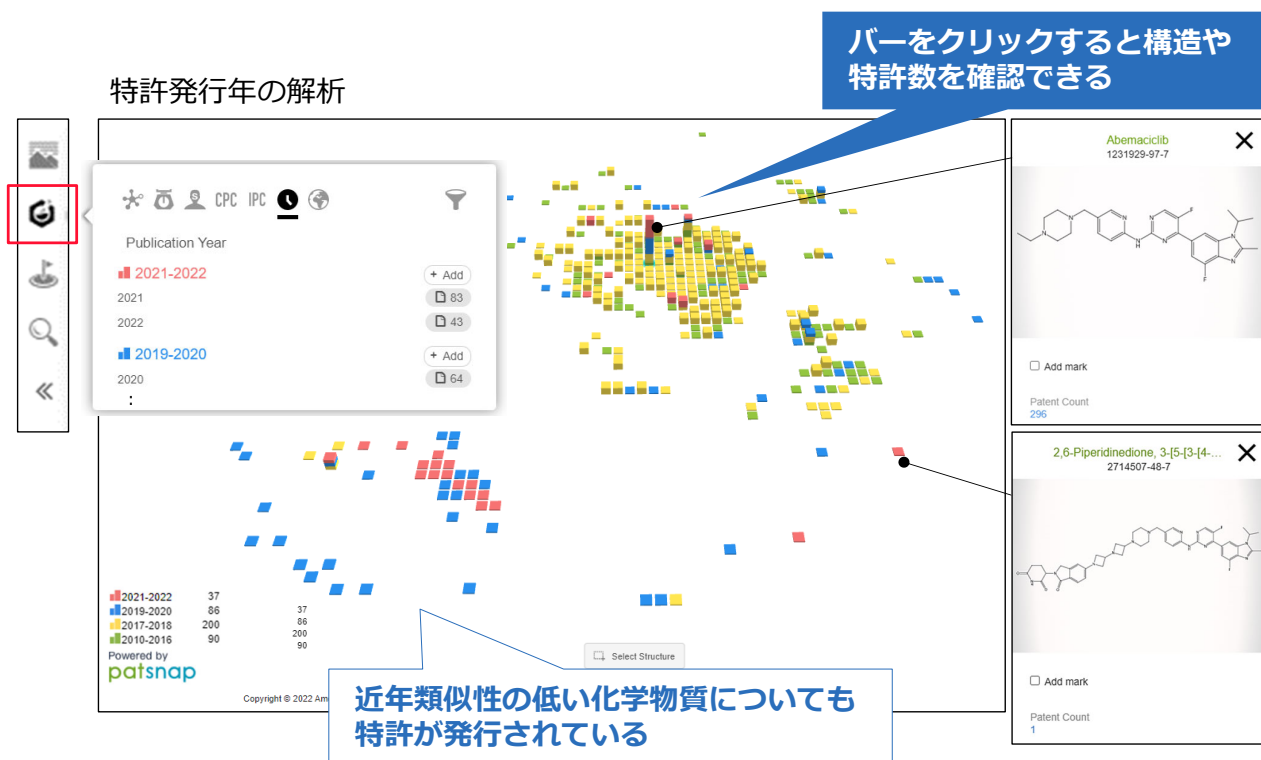
中国のハンルイ医薬、サンシャインレイクファーマは同じ特許件数だが、発行年は異なっていることがわかる

CAS が索引した化学物質は特許ファミリーのうち最初に受け入れた代表の特許（ベーシック特許）に索引されており、この特許で解析している

# Chemscape Analysis

Chemscape Analysis は、構造の類似性と特許情報を紐づけた新しい視点の解析ができる





© 2022 化学情報協会

特許に含まれるキーワードや書誌情報でマップ内を検索できる



© 2022 化学情報協会

Current Assignee: hengrui

Results (1): Abemaciclib, 1231929-97-7

Patents: 5

ハンルイ医薬は、アベマシクリブのみハイライトされた

サンシャインレイクファーマはアベマシクリブ以外の関連物質もハイライトされた

Current Assignee: sunshine

Results (49): 1231929-97-7, 1873301-04-2, 1873299-48-9, 1873300-09-4, 1873299-47-8, 1873299-27-4, 1873300-98-1

Patents: 5, 1, 1, 1, 1, 1, 1

化学物質に関する特許を表示

バーやCAS RN® をクリックすると構造や特許数を確認できる

(3-Ethyl-3,8-Diazabicyclo[3.2.1]... 1873300-39-0

Add mark

Patent Count: 1

© 2022 化学情報協会

## 化学物質から文献の検索

検索した化学物質に関する特許は、View Patents や Chemscape Analysis のリンクから確認できる

Chemscape Analysis から個別の回答を表示する

Results (49): 1231929-97-7, 1873301-04-2

Patents: 5, 1

View Patents

物質一覧から全体の回答を表示し、フィルターで限定する

Publication Number	Title	Legal Status & Events	Publication Date	Application Number	Application Date	Agency	IPC	CPC
1	WO/2016/008433A1	Substituted urea derivatives and pharmaceutical uses thereof	21 Jan 2016	PCT/CN2015/064253	16 Jul 2015		C07D281/14 C07D491/056 C07D413/12 C07D413/14 +25	C07D281/14 C07D413/12 C07D413/14 +24
2	WO/2016/015605A1	Compounds as cdk small-molecule inhibitors and uses thereof	04 Feb 2016	PCT/CN2015/065036	24 Jul 2015		C07D401/14 C07D491/056 A61K315/06 +3	C07D401/14 C07D403/14 C07D405/14 +30
3	WO/2016/015604A1	Compounds as cdk small-molecule inhibitors and uses thereof	04 Feb 2016	PCT/CN2015/065034	24 Jul 2015		C07D401/14 A61K315/17 A61P35/00 +9	C07D401/14 C07D403/14 C07D405/14 +29
4	WO/2016/015597A1	Compounds as cdk small-molecule inhibitors and uses thereof	04 Feb 2016	PCT/CN2015/064863	23 Jul 2015		C07D519/00 C07D471/04 A61K315/37 +4	C07D471/04 C07D519/00 A61K315/19 +32
5	WO/2016/015584A1	2-amino-pyrid(2,3-d)pyrimidin-7(8H)-one derivatives as cdk inhibitors and uses thereof	04 Feb 2016	PCT/CN2015/064804	23 Jul 2015		C07D519/00 C07D471/04 A61K315/33 +3	C07D471/04 C07D519/00 A61K315/19 +32

© 2022 化学情報協会

**Overview**  
Abstract  
Claims  
Description

**Overview**  
Abstract  
Claims

**CAS PatentPak**  
Key Substances in Patent  
CAS RN 187328-51-8  
CAS RN 187328-34-0  
CAS RN 187328-33-5  
CAS RN 187328-51-8

**利用可能な場合は、CAS PatentPak で表示。化学物質の記載位置の確認を効率よくできる**

**Dual View**  
テキストとオリジナル公報を二分割画面で表示

**Citation**  
Cited by (6)  
Cited by (6)

**Citation Map**  
New  
Citation Map を作成できる

**Citation**  
引用・被引用情報は、特許ファミリーに切り替えることが可能

**Family**  
Simple, INPADOC 特許ファミリーを確認できる

WO2016015597A1 Compounds as cdk small-molecule inhibitors and uses thereof

Overview Dual View Citation Family **Concepts** Substances Formulations Reactions

Pharmaceutical excipients

Pharmaceutical adjuvants

Pharmaceutical diluents

Infection

Inflammation

Anti-infective agents

Pharmaceutical carriers

Interferon  $\alpha$   
 Modifier: co-drug  
 Role: Pharmacological Activity; Therapeutic Use

Nonsteroidal anti-inflammatory agents

Autoimmune disease

Proliferative disorders

Cyclin-dependent kinase-inhibiting proteins  
 Role: Biological Study; Unclassified

Homo sapiens

Human

Combination chemotherapy

WO2016015597A1 Compounds as cdk small-molecule inhibitors and uses thereof

Overview Dual View Citation Family **Substances** Formulations Reactions

274 Substances

1 64-19-7 <chem>CC(=O)O</chem> Acetic acid View 144,231 Relevant Patents	2 50-00-0 <chem>C=O</chem> Formaldehyde View 91,538 Relevant Patents	3 68-12-2 <chem>CN(C)C=O</chem> Dimethylformamide View 63,833 Relevant Patents	4 15663-27-1 <chem>Cl[Pt](Cl)(Cl)N</chem> Cisplatin View 12,446 Relevant Patents	5 23214-92-8 <chem>C1=C(C=C2C=CC(=C2C=C1)O</chem> Docetaxel Absolute stereochemistry shown.
6 50-02-2 <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> Desamethasone View 8,543 Relevant Patents	7 75-07-0 <chem>CC=O</chem> Acetaldehyde View 19,011 Relevant Patents	8 50-18-0 <chem>C1CN2CCN(C1)CC2</chem> Cyclophosphamide View 8,792 Relevant Patents	9 51-21-8 <chem>Fc1cnc(=O)c1=O</chem> 5-Fluorouracil View 11,043 Relevant Patents	10 59-05-2 <chem>COC1=CC=C(C=C1)OC</chem> Methotrexate View 10,952 Relevant Patents
11 33069-62-4 <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> Absolute stereochemistry shown; Rotation (-) <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem>	12 53-03-2 <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> Absolute stereochemistry shown. <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem>	13 57-22-7 <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> Absolute stereochemistry shown; Rotation (+) <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem>	14 53123-88-9 <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> Absolute stereochemistry shown; Double bond <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem>	15 33419-42-0 <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> Absolute stereochemistry shown; Rotation (-) <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem>

**Concepts** (CAS References 由来)  
 特許中で発明者が強調している点や主題に関わる概念を収録

**Substances** (CAS References 由来)  
 発明に関する重要な化学物質が索引されており、特許内容の把握が容易になる

WO2016015597A1 Compounds as cdk small-molecule inhibitors and uses thereof

Overview Dual View Citation Family Concepts Substances **Formulations** Reactions

4 Formulations

1. Pharmaceutical Composition: Antitumor agent, Infection, Etc.  
 View CAS Formulus Detail  
 Location: Claim 9, 10  
 Purpose: Anti-inflammatory agents; Antiproliferative agents  
 Target: autoimmune disease; human; proliferation

**CAS Formulus リンク**

#	Component	Function	Amount Reported
1	Group: CDK small molecule inhibi...	active agent; CDK small molecule inhibi...	-
	acetylcyclopentyl(methylaminopyri...	CDK small molecule inhibitor	-
	6-Acetyl-8-cyclopentyl-5-methyl-2...	CDK small molecule inhibitor	-
	4-[3-[6-[[6-Acetyl-8-cyclopentyl-7,...	CDK small molecule inhibitor	-
	4-[3-[6-[[6-Acetyl-8-cyclopentyl-7,...	CDK small molecule inhibitor	-
Additional Components Reported in CAS Formulus®			
2	Group: Drugs	therapeutic agent	-
	Antitumor agents	drug	-
	Antiproliferative agents	antiproliferative agent	-
	Immunosuppressants	therapeutic agent	-
	Immunologic stimulant	therapeutic agent	-
Additional Components Reported in CAS Formulus®			
3	Pharmaceutical carriers	carrier	-
4	Pharmaceutical excipients	excipient	-
5	Diluents	diluent	-

**Formulations** (CAS Formulations 由来)  
 特許中の製剤・配合の情報が、成分名、機能などと共に表形式でまとめられている

WO2016015597A1 Compounds as cdk small-molecule inhibitors and uses thereof

Overview Dual View Citation Family Concepts Substances Formulations **Reactions**

248 Reactions

1	<chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> → <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem>	Steps: 1	Yield: 99%
2	<chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> → <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem>	Steps: 1	Yield: 97%
3	<chem>CN(C)C=O</chem> + <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> → <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem>	Steps: 1	Yield: 93%
4	<chem>C=O</chem> + <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem> → <chem>C12C3CC4C(C1)O[C@H]5[C@@H](C=C2)O[C@H](C=C3)C5</chem>	Steps: 1	Yield: 86%

**Reactions** (CAS Reactions 由来)  
 特許中の重要な有機化学反応情報を収録

イーライリリーの乳がんの治療薬アベマシクリブとその誘導体について、以下の特許の動向を確認できた

- 米国や中国所属の特許出願人が多い
- 近年、類似性の低い化学物質についても特許が発行されている
- 特許件数は同等でも、特許発行の傾向や研究対象物質が異なることがわかった

© 2022 化学情報協会

## まとめ

39

CAS Scientific Patent Explorer は

- **簡単な操作**で特許調査を行える
- **広範な特許情報**を対象に検索できる
- キーワードだけでなく**化学物質の構造式**からも特許調査できる
- 個々の内容を確認するだけでなく、回答全体を解析し、**様々な観点から特許の動向を把握**できる

© 2022 化学情報協会



## 強化一覧

### 強化一覧（2021年6月以降）

41

	強化内容	開始時期
特許	ヒットタームのハイライト機能の追加	2021.6
特許	引用・被引用情報のビジュアル化機能 Citation Map を追加	2021.6
特許	INPADOC 特許ファミリーの追加	2021.6
特許	CAS Formulus リンクが利用可能に	2021.6
特許	CAS PatentPak の搭載 CAS PatentPak の索引物質にクレーム記載情報を追加	2022.3 2022.8
特許	★中国語や日本語の特許に機械翻訳の英語クレームを追加	2022.4
特許	★複数の特許番号，出願番号の一括検索機能 Bulk Patent Search を追加	2022.6
物質	検索結果のフィルター追加 - Substance Patents, Bioactivity Indicator	2021.8
物質	構造作図画面の変更	2022.7
特許・物質	データの更新頻度が毎週に	2021.10
特許・物質	★History（検索履歴）ページの追加	2021.11
特許・物質	★質問式の保存とアラート機能の追加 Substance Search の質問式の保存とアラート機能を追加	2022.1 2022.3

★の強化を次ページから紹介

複数の特許番号、出願番号を一括検索できる機能 Bulk Patent Search が追加された

番号は、改行、カンマ、スペースで区切り入力する。最大 5,000 件まで入力可能

照合する

照合の詳細は Excel 形式でダウンロード可能

検索する

Numbers entered	Exact match	Similar match	Type of number	Final output
1				
2	WO2000000504	WO2000000504A1	Publication number	WO2000000504A1
3	WO2001002571	WO2001002571A2	Publication number	WO2001002571A2
4		WO2001002571A3	Publication number	WO2001002571A3
5	WO2002000711	WO2002000711A2	Publication number	WO2002000711A2
6		WO2002000711A3	Publication number	WO2002000711A3
7	JP2021178828	JP2021178828A	Publication number	JP2021178828A
8	JP2019147811	JP2019147811A	Publication number	JP2019147811A
9		JP2019147811A5	Publication number	JP2019147811A5
10	JP2015221813	JP2015221813A	Publication number	JP2015221813A
11	US20030190722	US20030190722A1	Publication number	US20030190722A1
12	US20020114779	US20020114779A1	Publication number	US20020114779A1
13	US10059949	US10059949B2	Publication number	US10059949B2

© 2022 化学情報協会

中国語や日本語の特許に機械翻訳の英語クレームが追加された

JP7041879B2 アンチセンス核酸

Overview Dual View Citation Family Concepts Substances Formulations Reactions

Abstract

Claims

Description

【請求項1】  
ヒトシトクロフィン遺伝子のエクソン44のスキッピングを誘導する、配列番号55または配列番号106から選ばれるいずれか一つの塩基配列からなるアンチセンスオリゴマー、またはその医薬的に許容可能な塩もしくは水和物。

【請求項2】  
オリゴヌクレオチドである、請求項1に記載のアンチセンスオリゴマー、またはその医薬的に許容可能な塩もしくは水和物。

【請求項3】  
前記オリゴヌクレオチドを構成する少なくとも1つのヌクレオチドの糖部分および/またはリン酸結合部分が修飾されている、請求項2に記載のアンチセンスオリゴマー、またはその医薬的に許容可能な塩もしくは水和物。

【請求項4】  
前記オリゴヌクレオチドを構成する少なくとも1つのヌクレオチドの糖部分が、2'位の-OH基が、OR、R、R'OR、SH、SR、NH<sub>2</sub>、NHR、NR<sub>2</sub>、N<sub>3</sub>、CN、F、Cl、BrおよびIからなる群より選択されるいずれかの基で置換されたリボースである、請求項2または3に記載のアンチセンスオリゴマー、またはその医薬的に許容可能な塩もしくは水和物。  
(上記Rは、アルキル又はアリールを示し、上記R'は、アルキレンを示す。)

【請求項5】  
前記オリゴヌクレオチドを構成する少なくとも1つのヌクレオチドのリン酸結合部分が、ホスホロチオエート結合、ホスホロジチオエート結合、アルキルホスホネート結合、ホスホロアミデート結合およびボランフォスフェート結合からなる群より選択されるいずれか1つのものである、請求項2～4のいずれか一項に記載のアンチセンスオリゴマー、またはその医薬的に許容可能な塩もしくは水和物。

【請求項6】  
モルホリノオリゴマーである、請求項1に記載のアンチセンスオリゴマー、またはその医薬

【Translation】  
[Claim 1]  
An antisense oligomer consisting of any one of the base sequences selected from SEQ ID NO: 55 or SEQ ID NO: 106, which induces skipping of exon 44 of the human dystrophin gene, or a pharmaceutically acceptable salt or hydrate thereof.  
[Claim 2]  
The antisense oligomer according to claim 1, which is an oligonucleotide, or a pharmaceutically acceptable salt or hydrate thereof.  
[Claim 3]  
The antisense oligomer of claim 2, or a pharmaceutically acceptable salt or hydrate thereof, wherein the sugar moiety and / or the phosphate binding moiety of at least one nucleotide constituting the oligonucleotide is modified.  
[Claim 4]  
The sugar moiety of at least one nucleotide constituting the oligonucleotide has an -OH group at the 2' position of OR, R, R'OR, SH, SR, NH<sub>2</sub>, NHR, NR<sub>2</sub>, N<sub>3</sub>, CN, F, Cl, Br and I, the antisense oligomer according to claim 2 or 3, which is a ribose substituted with any group selected from the group, or a pharmaceutically acceptable salt thereof. Or hydrate.  
(The above R indicates alkyl or aryl, and the above R' indicates alkylene.)  
5.  
The phosphate-binding moiety of at least one of the oligonucleotides constituting the oligonucleotide is selected from the group consisting of a phosphorothioate bond, a phosphorodithioate bond, an alkylphosphonate bond, a phosphoramidate bond and a boranephosphate bond. The antisense oligomer according to any one of claims 2 to 4, which is one, or a pharmaceutically acceptable salt or hydrate thereof.  
[Claim 6]

機械翻訳の英語を収録

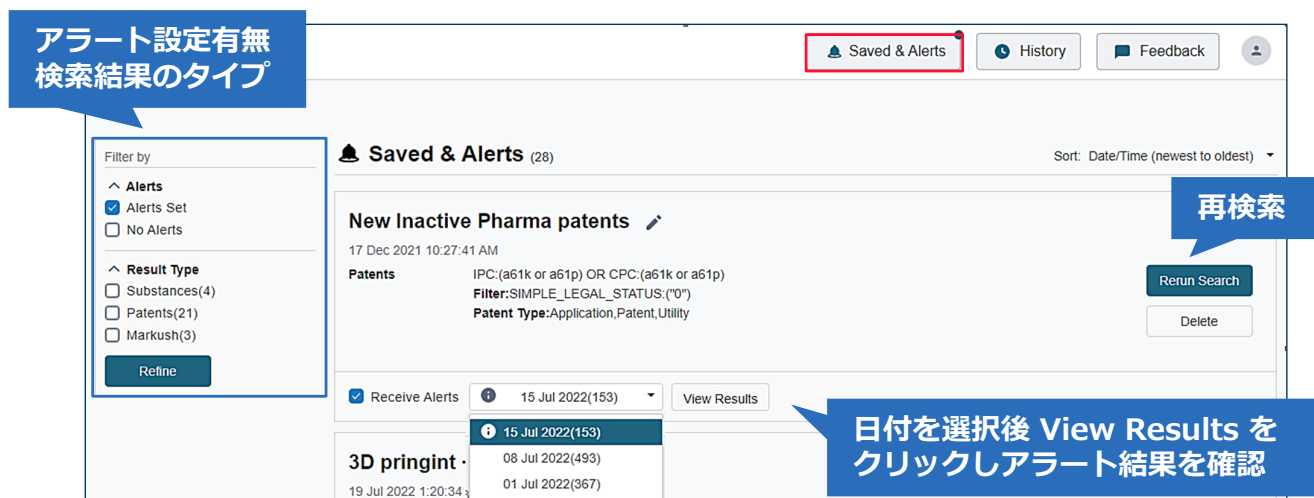
© 2022 化学情報協会

質問式の保存とアラート機能が利用可能になった



- (注意)
- Substances で化学物質検索を行い、その物質に関連する特許を検索した結果に対してアラート設定すると、設定した時点でヒットした物質に関する新規特許の情報が得られる (アラート実行時に物質は再検索されない)
  - Substances でマルクーシユ構造検索し View Patents 後に設定したアラートは 0 件になる

保存した質問式やアラート結果は Saved & Alerts で確認できる



検索に用いた構造やテキストの質問式が自動的に History ページに保存されるようになった

The screenshot shows a web interface for a search history page. At the top right, there are buttons for 'Saved & Alerts', 'History' (highlighted with a red box), and 'Feedback'. On the left, a 'Filter by' sidebar shows 'Result Type' with options for 'Substances(174)', 'Patents(119)', and 'Markush(19)', along with a 'Refine' button. The main content area is titled 'History (312)' and lists search entries. The first entry is dated 'Thu Jul 07 2022' at '1:32:40 PM' and is labeled 'Markush As Substructure'. It includes a chemical structure diagram of a pyridine derivative and buttons for 'Rerun Search' and 'Edit Search'. The second entry is dated '3:44:24 PM' and is labeled 'Patents'. It contains a complex search query: '(TACD\_ALL:(3d printing)) AND IPC:(a43) Patent Type:Application,Patent,Utility Jurisdictions:WO,EP,AT,AU,BE,BX,CA,CH,CN,DE,DK,ES,FI,FR,GB,HK,IE,IL,IN,JP,KR,MO,NL,NO,NZ,PL,RU,SE,SG,TH,TW,US,AE,AM,AP,AR,BA,BG,BH,BN,BO,BR,BY,CL,CO,CR,CS,CU,CY,CZ,DD,DO,DZ,EA,EC,EE,E,G,GC,GE,GR,GT,HN,HR,HU,ID,IS,IT,JO,KE,KG,KH,KZ,LA,LB,LT,LU,LV,MA,MC,MD,ME,MK,MN,MT,MW,MY,NL,OA,PA,PE,PH,PT,PY,RO,RS,SA,SI,SK,SM,SU,SV,TJ,TN,TR,TT,UA,UY,UZ,VE,VN,YU,ZA,ZM,ZW'. It also has 'Rerun Search' and 'Edit Search' buttons. Three blue callout boxes with white text point to specific features: '検索結果のタイプ' (Search result type) points to the filter sidebar; '検索内容' (Search content) points to the text of the second search entry; and '再検索' (Re-search) and '検索式の編集' (Edit search formula) point to the 'Rerun Search' and 'Edit Search' buttons respectively.

知財戦略 & 特許調査に差がつく  
STN IP Protection Suite セミナー

Biosequences Search  
～ CAS STNext<sup>®</sup> の新しい配列検索機能 ～



# Biosequences Search

## ～ CAS STNnext<sup>®</sup> の新しい配列検索機能 ～

化学情報協会 情報事業部

### 目次

1. Biosequences Search とは
2. 活用事例
3. 最近の強化

## Biosequences Search とは

### Biosequences Search

3

既存の配列データベースとは独立した  
CAS STNext の新しい配列検索機能

- 膨大な配列コンテンツ
- 3 つの配列検索プログラム
- シームレスな検索



## 特許・非特許文献由来の配列を収録

(2022年8月)

資料種類	特許	非特許文献
収録件数	7億5000万件以上の配列 (156万件以上の特許)	16億2000万件以上の配列 (236万件以上の非特許文献)
収録源	- 主要国を中心にした73カ国の特許 (主要国: EP, WO, US, CN, JP, KR, CA) - REGISTRY ファイル	- NCBI <span style="background-color: red; color: white; padding: 2px;">New</span> - REGISTRY ファイル

参考: REGISTRY ファイルに収録されている配列

CASの独自のルールに基づいた収録

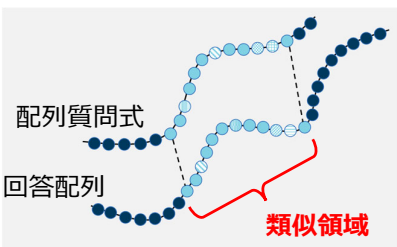
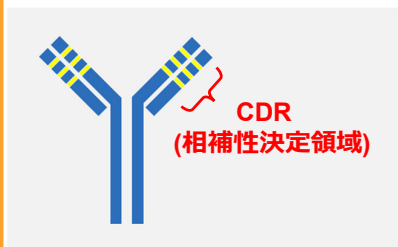
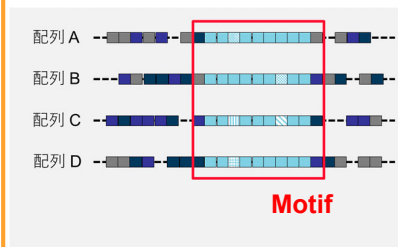
- CPlus ファイルに索引された特許・非特許文献に記載の重要な配列  
(特許由来: 2210万件以上、非特許文献由来: 2380万件以上)
- GenBank 由来の配列 (4980万件以上)

© 2022 化学情報協会

## 3つの配列検索プログラム

## BLAST をベースにした検索プログラム

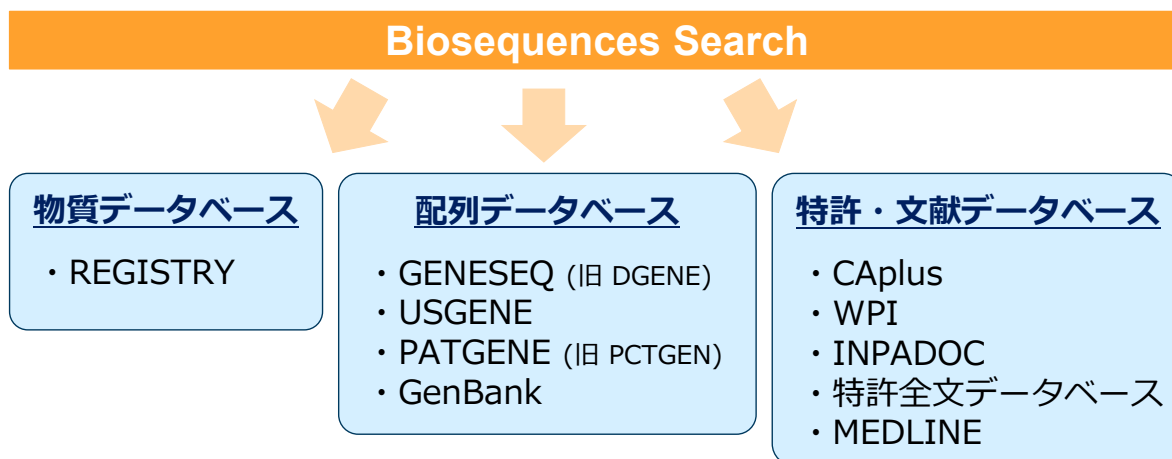
- 類似配列だけでなく、CDR (相補性決定領域) やパターン配列を対象に検索できる

BLAST 配列検索	CDR 配列検索	Motif 配列検索
局所的に類似した配列の検索	抗体と T 細胞受容体の CDR を指定した検索	DNA, RNA, タンパク質中の短いパターン配列の検索
		
	CDR: 抗原に特異的な部分	Motif: ある一定の機能を持つと期待される特徴的な共通の配列や構造

© 2022 化学情報協会

得られた配列情報とその出典情報を CAS STNext のファイルで再現できる

- 配列や出典情報の詳細を表示するだけでなく、キーワードによる絞り込みや出願人による解析などが可能



© 2022 化学情報協会

## 活用事例

REGN 10933 の CDR として知られている下記のセグメントを持つタンパク質を検索し、SARS-CoV-2 に関する特許を調査する

- **CDR1 : DYYMS**
- **CDR2 : YITYSGSTIYYADSVKG**
- **CDR3 : DRGTTMVPFDY**

REGN 10933

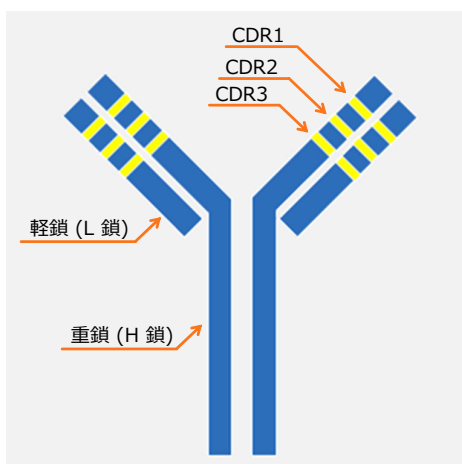
Regeneron 社によって開発された SARS-CoV-2 の中和抗体。成分名は Casirivimab

© 2022 化学情報協会

## 抗体と CDR (相補性決定領域)

抗体とは、抗原と特異的に結合して生体内から除去するためのタンパク質

- 抗体は 2 本の軽鎖 (L 鎖) と重鎖 (H 鎖) から成る

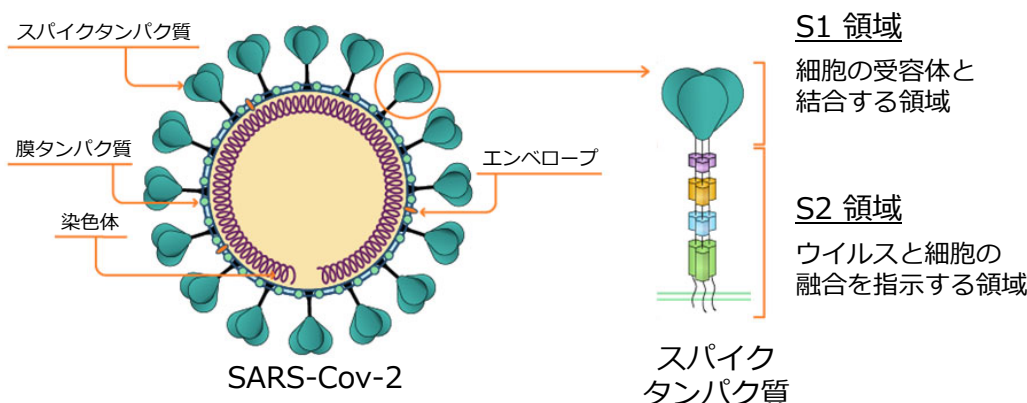


- CDR は抗原結合部位であり、L 鎖と H 鎖にそれぞれ CDR1, CDR2, CDR3 がある
- 抗原ごとに異なる配列を持つ

© 2022 化学情報協会

SARS-Cov-2 のスパイクタンパク質の S1 領域が細胞の受容体結合ドメインと結合することで感染する

- スパイクタンパク質の変異は、抗体への抵抗性や細胞への侵入速度、感染力と関連する



Omicron variant accelerates need for more diverse COVID-19 vaccine strategy  
<https://www.cas.org/resources/blog/omicron-variant>

© 2022 化学情報協会

## 検索の流れ

### Biosequences Search

1. CDR 配列検索
2. 回答の絞り込み  
(3つのセグメントを持つ配列に限定)

### REGISTRY ファイル

3. ヒットした配列の名称や修飾の有無を確認する

### CAplus ファイル

4. ヒットした配列の特許情報を検索する
5. 特許出願人の出願動向を解析する

CDR タブを選択して配列質問式を入力し、回答の上限数を選択する

- 最大で 3 つの配列質問式を使って検索できる

Biosequences (72) Sort By: Date Modified: Newest

Search Files by Name [Search] [New Search]

Search Biosequences [Close]

BLAST CDR Motif Name: 2022\_0004\_Sequence

Import Sequence [Download] [Clear]

> CDR 1: DYYSMS  
> CDR 2: YITYSGSTIYYADSVKG  
> CDR 3: DRGTTMVPFDY

Limit Total Sequence Results to: 20000

[Run Search] [Save Query] [Cancel]

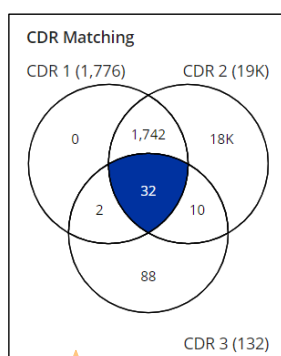
回答の上限数

© 2022 化学情報協会

## 2. 回答の絞り込み

様々なフィルターによる絞り込みが可能

- CDR 配列検索
- BLAST/CDR/Motif 配列検索



CDR セグメント  
の重なり

Sequence Length: 13 to 15960 [New]

Query Identity %: No Min to No Max

Query Coverage: No Min to No Max

Subject Coverage: No Min to No Max

Subject Identity %: No Min to No Max

Organism: [Homo sapiens (41)] [Mycobacteroides abscessus (22)] [Sus scrofa (9)] [View All] [New]

[Apply] [Reset]

配列長

様々な計算値

生物種 (NCBI 由来の配列に限定)

© 2022 化学情報協会



項目	内容	上記の例
Alignment Identity %*	一致したコード ÷ 類似領域 × 100	9 ÷ 10 × 100 = 90%
Query Identity %	一致したコード ÷ 配列質問式 × 100	9 ÷ 10 × 100 = 90%
Query Coverage %	類似領域 ÷ 配列質問式 × 100	10 ÷ 10 × 100 = 100%
Subject Identity %	一致したコード ÷ 回答配列 × 100	9 ÷ 11 × 100 = 81.82%
Subject Coverage %	類似領域 ÷ 回答配列 × 100	10 ÷ 11 × 100 = 90.91%

\* Advanced Biosequences Search では Sequence Identity % と表される

## ヒットした配列の確認

Alignment タブで、各配列質問式とヒット配列の類似領域を確認できる

得られた配列や出典情報について CAS STNnext のファイルで検索できる

- 絞り込みや解析が可能
  - 配列情報：配列の名称、修飾の有無
  - 出典情報：キーワード、出願人・所属機関、発行年 など

The screenshot shows the CAS STNnext interface. On the left, under the 'Patents (81)' tab, it displays 'The first 10 of 81 patents found are shown below.' and a 'Get All Patent Numbers' button. Below this, under the 'Subject' tab, it shows '1 of 81' results for 'Anti-SAR'. The 'Sequence Length' is 450 aa. The 'CAS Registry Number®' is listed as 2415933-42-3, 2492581-32-3, 2749663-84-9, 2750308-80-4, 2767482-10-8. A 'Get All CAS Registry Numbers' button is highlighted. The 'Sequence' is shown as a list of amino acid residues. On the right, a 'Transcript ON' window is open, showing details for '2022\_0193\_Transcript'.

© 2022 化学情報協会

### 3. ヒットした配列の名称や修飾の有無の確認

CAS RN® を持つ配列は、REGISTRY ファイルで配列の名称や修飾の有無について確認できる

The screenshot shows the CAS STNnext interface. Under the 'Subject' tab, it displays 'Sequence Length: 450 aa' and 'CAS Registry Number®: 2415933-42-3, 2492581-32-3, 2749663-84-9, 2750308-80-4, 2767482-10-8'. A 'Get All CAS Registry Numbers' button is highlighted. An arrow points from this button to a dialog box titled 'Get CAS Registry Numbers from STN File'. The dialog box has a close button (X) and contains the following options:
 

- REGISTRY
- CAPLUS
- ZREGISTRY
- HCAPLUS
- Save Script

 Below the options, it states 'Each request is limited to 5000 CAS Registry Numbers.' and has 'Continue' and 'Cancel' buttons.

© 2022 化学情報協会

```

=> fil REGISTRY
=> QUE (2415933-42-3 OR 2492581-32-3 OR 2749663-84-9 OR 2750308-80-4 OR 2767482-10-8)
L1 QUE (2415933-42-3 OR 2492581-32-3 OR 2749663-84-9 OR 2750308-80-4 OR 2767482-10-8)
=> S L1
L2 5 (2415933-42-3 OR 2492581-32-3 OR 2749663-84-9 OR 2750308-80-4 OR 2767482-10-8)

=> D 1-5 SQIDE
L2 ANSWER 1 OF 5 REGISTRY COPYRIGHT 2022 ACS on STN
RN 2767482-10-8 REGISTRY
ED Entered STN: 10 May 2022
CN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED
OTHER NAMES:
CN 108: PN: W02022082217 SEQID: 121 claimed protein
FS PROTEIN SEQUENCE
SQL 450

PATENT ANNOTATIONS (PNTE):
Sequence |Patent
Source |Reference
=====+=====
Not Given|W02022082217
|claimed SEQID
|121

SEQ 1 QVQLVESGGG LVKPGGSLRL SCAASGFTFS DYYMSWIRQA PGKGLV
51 ITYSGSTIYY ADSVKGRFTI SRDPAKSSLY LQMNSLRAED TAVYYCA
    
```

Script による  
自動検索

```

L2 ANSWER 5 OF 5 REGISTRY COPYRIGHT 2022 ACS on STN
RN 2415933-42-3 REGISTRY
ED Entered STN: 06 May 2020
CN Immunoglobulin G1, anti-(severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 spike glycoprotein) (human monoclonal REGN10933 Y1-chain), disulfide with human monoclonal REGN10933 K-chain, dimer (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN Casirivimab
CN REGN 10933
CN RG 6413
FS PROTEIN SEQUENCE
SQL 1328,450,450,214,214
NTE multichain
modified (modifications unspecified)
    
```

配列の名称

type	location	description
bridge	Cys-22 - Cys-96	disulfide bridge
bridge	Cys-147 - Cys-203	disulfide bridge
bridge	Cys-223 - Cys-214''	disulfide bridge

修飾情報

配列の記載位置

# 4. ヒットした配列の特許情報の検索

すべての配列の特許情報は画面上部の  
Get All Patent Numbers から検索する

**Biosequence Search Results (32)** Sort By: Alignment Identity %: Descending

Get All Patent Numbers

すべての配列の特許情報の検索

Get Patent Numbers from STN File

STN File

- AUPATFULL
- GENESEQ
- PATGENE
- CANPATFULL
- HCAPLUS
- PCTFULL
- CAPLUS
- IFIALL
- USGENE
- CNFULL
- INFULL
- USPATFULL
- DEFULL
- INPADOCDB
- WPINDEX
- EPFULL
- INPAFAMDB
- WPIX
- FRFULL
- JPFULL
- ZCAPLUS
- GBFULL
- KRFULL

Save Script

Each request is limited to 5000 Patent Numbers.

Continue Cancel

チェックを入れると  
検索に使われる  
Script を保存できる



```

=> fil CAPLUS

=> QUE (KR20130067314A OR US20150086563A1 OR JP5980384B2 OR KR1346530B1 OR JP2014140372A OR
SG10201400798VA OR CN102388068A OR IL232008A OR US8444981B2 OR CN103382222B OR JP5775615B2 OR
JP2015214563A OR EP2408816A2 OR KR1391472B1 OR KR20110128948A)/PN

L3 QUE (KR20130067314A OR US20150086563A1 OR JP5980384B2 OR KR1346530B1 OR JP
2014140372A OR SG10201400798VA OR CN102388068A OR IL232008A OR US844498
81B2 OR CN103382222B OR JP5775615B2 OR JP2015214563A
KR1391472B1 OR KR20110128948A)/PN

=> QUE (CA2754113A1 OR CA2754113C OR JP5498566B2 OR US20120177662A1 OR US9499620B2 OR
CN103382222A OR IL232008D0 OR CN102388068B OR US20170275365A1 OR US8871490B2 OR JP2012520679A
OR SG174344A1 OR WO2010-107752A3 OR US20120183561A1 OR US8454962B2 OR IL232009A OR
IL232009D0)/PN

L4 QUE (CA2754113A1 OR CA2754113C OR JP5498566B2 OR US20120177662A1 OR US9499
620B2 OR CN103382222A OR IL232008D0 OR CN102388068B OR US20170275365A1
OR US8871490B2 OR JP2012520679A OR SG174344A1 OR WO2010-107752A3 OR U
S20120183561A1 OR US8454962B2 OR IL232009A OR IL232009D0)/PN

:

=> QUE (CN114395034A OR WO2022-087484A1 OR WO2022-094139A1 OR WO2022-090469A2 OR
US20220153815A1 OR WO2022-101839A1 OR CA3158642A1 OR CA3158742A1 OR WO2022-112392A1 OR WO2022-
119548A1 OR WO2022-133318A2 OR KR20220100011A OR CN114751988A OR CN114787928A)/PN

L11 QUE (CN114395034A OR WO2022-087484A1 OR WO2022-094139A1 OR
OR US20220153815A1 OR WO2022-101839A1 OR CA3158642A1 O
R WO2022-112392A1 OR WO2022-119548A1 OR WO2022-133318A
11A OR CN114751988A OR CN114787928A)/PN

=> S L3 OR L4 OR L5 OR L6 OR L7 OR L8 OR L9 OR L10 OR L11

L12 67 L3 OR L4 OR L5 OR L6 OR L7 OR L8 OR L9 OR L10 OR L11

=>
    
```

作成された質問式

得られた配列の特許情報

Script による  
自動検索

配列に紐づいた特許番号が  
検索される

各配列の出典情報は Patents タブと Journals タブ  
の Get All xxx で検索できる

配列・特許データ  
ベースで検索

Patents : 特許  
Journals : 非特許文献

CAplus  
ファイル  
で検索

MEDLINE  
ファイル  
で検索

得られた特許情報の特許出願人を出願年で解析する

**CAS STNext の解析機能**

**Analyze**  
67 answers available

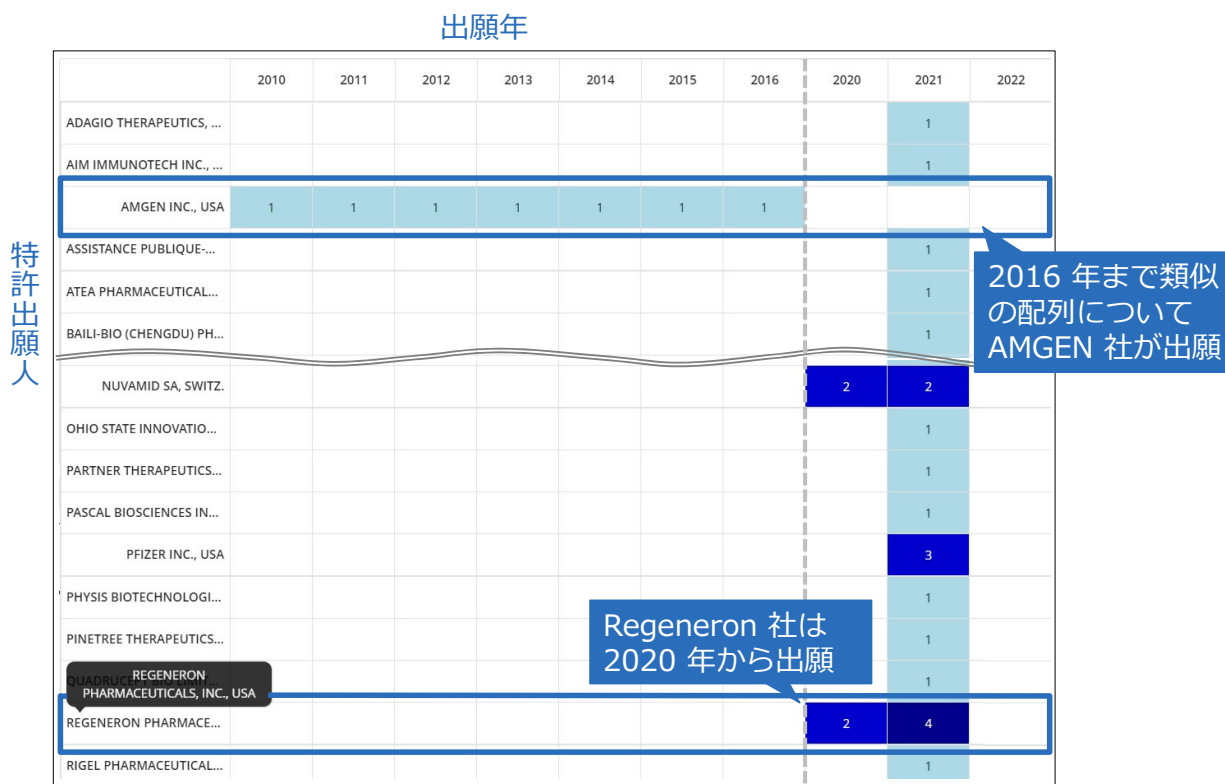
1-67

Select up to 2 fields to analyze

- Author / Inventor
- Corporate Source / Patent Assignee
- Publication Year
- Controlled Terms
- Patent Country
- ^ Cooperative Patent Classification
- ^ International Patent Classification
- ^ Custom Analyze
  - AY
  - Custom field

**Analyze** **Cancel**

**Corporate Source / Patent Assignee と AY (出願年) を指定して相関を解析する**



- 3つのセグメントを持つ配列：32件
  - CAS RN® を持たない配列：20件
- 得られた特許情報：67ファミリー (CAplus)
  - Casirivimabを開発した Regeneron社よりも前(2010~2016年)に AMGEN社が類似の配列を出願していた
  - 2020年から Regeneron社をはじめとする様々な企業・大学が出願している

**最近の強化**

強化内容	開始時期
NCBI 由来の配列の追加	2021.12
非特許文献情報の追加	2021.9
Organisms フィルターの追加	2022.2
★ Motif 配列検索の強化 - Combine Motif Results オプションの追加 - ヒットした配列質問式のパターン数の表示	2021.12 2022.1
配列長フィルターの追加	2022.8

★の強化を紹介

## 最近の強化 – Motif 配列検索の強化

### Combine Motif Results オプションの追加

- 代替残基などの指定をした配列質問式を使用した際の回答配列の表示方法を指定する機能

Search Biosequences

BLAST CDR Motif Name: 2022\_0006\_Sequence\_01

Import Sequence Download Clear

1 GIIAIFGTT[SB]YAQKFQG

Sequence type  
 Nucleotide  Protein

Combine Motif Results **New**

Limit Total Sequence Results to  
 20000

Run Search Save Query Cancel

[ ] : 代替残基の指定  
 [SB] は S または B の指定となり、  
 下記の 2 パターンの配列質問式で検索される

- GIIAIFGTTSYAQKFQG
- GIIAIFGTTBYAQKFQG

## Combine Motif Results : オフ

Biosequence Search Results (7215)

Query Sequence

Sequence 1: GIIAIFGTTSYAQKFQG (20000)

Sequence 2: GIIAIFGTTBYAQKFQG (20000)

Alignment Patents (0) Journals (0) Subject

Query: 1 GIIAIFGTTSYAQKFQG 17

Subject: 50 GIIAIFGTTSYAQKFQG 66

配列質問式のパターンごとに回答を表示

## Combine Motif Results : オン New

Biosequence Search Results (7649)

Alignment (2) Patents (0) Journals (0) Subject

Query: 1 GIIAIFGTTSYAQKFQG 17

Subject: 50 GIIAIFGTTSYAQKFQG 66

Query: 1 GIIAIFGTTBYAQKFQG 17

Subject: 50 GIIAIFGTTBYAQKFQG 66

複数のパターンの配列質問式でヒットした配列は一つにまとめて表示される

Biosequence Search Results (7820)

Query Sequence

Sequence 2: GIIAIFGTTBYAQKFQG

Alignment Patents (0) Journals (0) Subject

Query: 1 GIIAIFGTTBYAQKFQG 17

Subject: 50 GIIAIFGTTBYAQKFQG 66

同じ配列が別の配列質問式のパターンでヒット



知財戦略 & 特許調査に差がつく  
STN IP Protection Suite セミナー

CAS FORMULATIONS™ ファイル  
～ 製剤・配合の調査に最適なデータベース ～





# CAS FORMULATIONS™ ファイル

～ 製剤・配合の調査に最適なデータベース ～

化学情報協会 情報事業部

## 目次

1. CAS FORMULATIONS ファイルの概要
2. 利用例 1 - 複数の成分を指定した検索
3. 利用例 2 - REGISTRY/CAplus を併用した検索
4. まとめ

## CAS FORMULATIONS ファイルの概要

### CAS FORMULATIONS ファイルとは

3

製剤・配合情報に特化したデータベース

- 製剤・配合に関するデータを**人手**で収集・整理
- **配合単位**のレコード
- **配合中のすべての成分**を収録
- **精密で柔軟な検索**が可能
- **REGISTRY** や **CAplus** ファイルとの**連携もスムーズ**

(2022 年 8 月)

ファイル名	シーエーエス フォーミュレーションズ CAS FORMULATIONS (CASFORM, CASFORMULTNS)
製作者	CAS
収録源	<b>特許</b> (CAplus ファイル由来) : 414 万レコード以上 <b>雑誌</b> (CAplus ファイル由来) : 40 万レコード以上 <b>添付文書*</b> : 19 万レコード以上
収録分野	重点分野 : <b>医薬品、農薬、化粧品</b> 一部収録分野 : コーティング剤、日用品、食品、材料
レコード構成	製剤・配合単位
収録期間	<ul style="list-style-type: none"> <li>・英語の特許 : 1996 年～</li> <li>・日本語、中国語、韓国語、ドイツ語、フランス語の特許 : 2000 年～ (言語による)</li> <li>・英語の雑誌 : 2014 年～</li> </ul>

8 割以上が特許

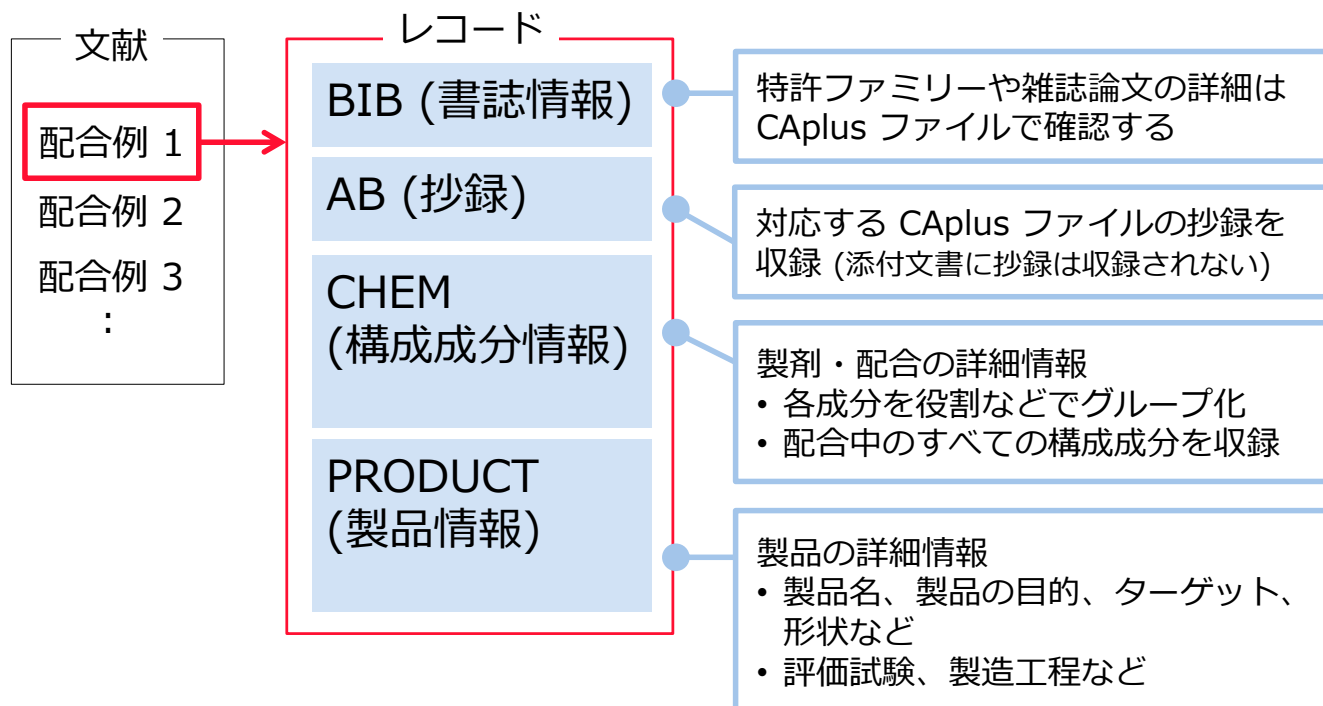
\* NLM の DailyMed 由来および EMA (欧州医薬品庁) の European public assessment reports (EPAR) 由来

© 2022 化学情報協会

## 収録の強化

- 医薬品は、2019 年のファイルリリース時は経口医薬品がメインだったが、現在は下記も収録対象に
  - 皮膚外用薬、注射剤、点眼剤、点鼻剤
- 界面活性剤化学関連の収録を強化
  - 洗剤、掃除用製品、パーソナルケア製品など

## 1 レコード = 1 製剤・配合

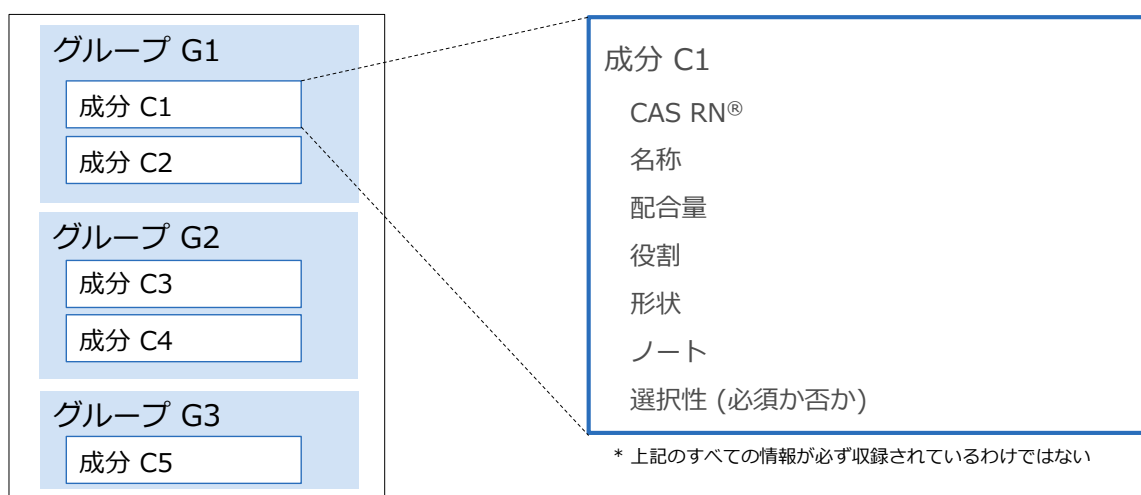


© 2022 化学情報協会

## レコード構成 - CHEM (構成成分情報)

- 1 つの配合に含まれるすべての成分を収録
- 各成分 (Component) をグループ (Group) に分けて収録
- 名称、CAS RN<sup>®</sup>、役割、選択性などを収録

CHEM のイメージ



© 2022 化学情報協会

## レコード例 1 (CHEM 表示形式)

8

記載位置	AN 2019:246295 CASFORMULTNS LCC Claim LCD Claim 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10	JP 6132968
グループ (G1) の情報	GROUP G1 GDS active ingredient CMPS C1-C2 GOP Mandatory GAM 0.1-5 w/w %	【請求項 1】 ドルゾラミド 又はその塩、セルロース系高分子、及び ホウ酸 又はその塩を含有し、そして pH が 6.0 以下である、医薬組成物。 【請求項 2】 ドルゾラミド 又はその塩が <b>ドルゾラミド塩酸塩</b> である、請求項 1 に記載の医薬組成物。 【請求項 3】 ドルゾラミド又はその塩の含有量が 0.1 ~ 5% (w/w) である、請求項 1 又は 2 に記載の医薬組成物。 :
成分 (C1) の情報	COMPONENT C1 RN 130693-82-2 CNM dorzolamide hydrochloride CCN 4H-Thieno[2,3-b]thiopyran-2-sulfonamide, 4-(ethylamino)-5,6-dihydro-6-methyl-, 7,7-dioxide, hydrochloride (1:1), (4S,6S)-(ACI) CAM 0.1-5 w/w % CFU carbonic anhydrase inhibitors COP Mutually exclusive alternatives	成分ごとに情報が整理されている
成分 (C2) の情報	COMPONENT C2 RN 120279-96-1 CNM dorzolamide CCN 4H-Thieno[2,3-b]thiopyran-2-sulfonamide, 4-(ethylamino)-5,6-dihydro-6-methyl-, 7,7-dioxide, (4S,6S)-(9CI, ACI) CAM 0.1-5 w/w % CFU carbonic anhydrase inhibitors CNO or its salt COP Mutually exclusive alternatives :	

© 2022 化学情報協会

## レコード例 2 (CHEM 表示形式)

9

記載位置	AN 2022:15007 CASFORMULTNS LCC Claim LCD Claim 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7	JP 6995182
グループ (G1) の情報	GROUP G1 GDS Additional ingredients CMPS C1 GOP Mandatory	【請求項 1】 次の成分 (A) ~ (D) ; (A) <b>煙霧シリカ</b> (B) <b>アルキル変性カルボキシビニルポリマー</b> (C) 疎水化ヒドロキシプロピルメチルセルロース又はヒドロキシプロピルメチルセルロース (D) 油剤 を含有し、 前記成分 (C) の含有量は 0.01 重量%以上 3.0 重量%以下であり、 前記成分 (D) が、成分 (D1) 油溶性紫外線吸収剤及び成分 (D2) アルキル変性シリコン及び/又はフェニル変性シリコンを含有する、 ことを特徴とする水中油型乳化化粧料。 :
成分 (C1) の情報	COMPONENT C1 RN 7631-86-9 CNM fumed silica CCN Silica (9CI, ACI) COP Mandatory	CAS RN® を持たない成分もある
グループ (G2) の情報	GROUP G2 GDS Additional ingredients CMPS C2 GOP Mandatory	
成分 (C2) の情報	COMPONENT C2 CNM alkyl-modified carboxyvinyl polymer COP Mandatory :	

© 2022 化学情報協会

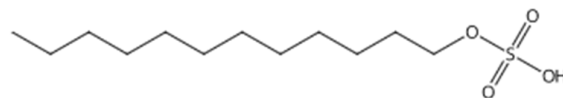
## 利用例

### 利用例 1

下記の両方が使われている配合を調べる

- 硫酸エステル塩系アニオン性界面活性剤 (成分 1)

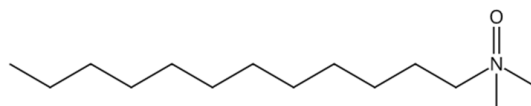
例：ラウリル硫酸ナトリウム (CAS RN<sup>®</sup> : 151-21-3)



• Na

- アミンオキシド系両性界面活性剤 (成分 2)

例：ラウリルジメチルアミンオキシド (CAS RN<sup>®</sup> : 1643-20-5)



- 1 レコード = 1 製剤・配合単位なので簡単に“**同一配合中**”に限定できる
- “**必須の成分**である”という限定ができる
- 物質と“**役割**” (界面活性剤など) を紐づけた検索ができる

© 2022 化学情報協会

## 検索方針

13

- 成分 1、2 について **REGISTRY** ファイルで構造検索し、CAS FORMULATIONS ファイルへクロスオーバーする
- 成分 1、2 について CAS FORMULATIONS ファイルで部分名称からも検索する

さらに…

- 成分 1 と成分 2 がどちらも**必須 (Mandatory)**である配合に限定する
- 成分 1 と成分 2 について**役割 (界面活性剤)**で限定する
- 成分 1 と成分 2 を**両方含む配合**に限定する

© 2022 化学情報協会

- 成分 1、2 について REGISTRY ファイルで構造検索し、CAS FORMULATIONS ファイルへクロスオーバーする
- 成分 1、2 について CAS FORMULATIONS ファイルで部分名称からも検索する

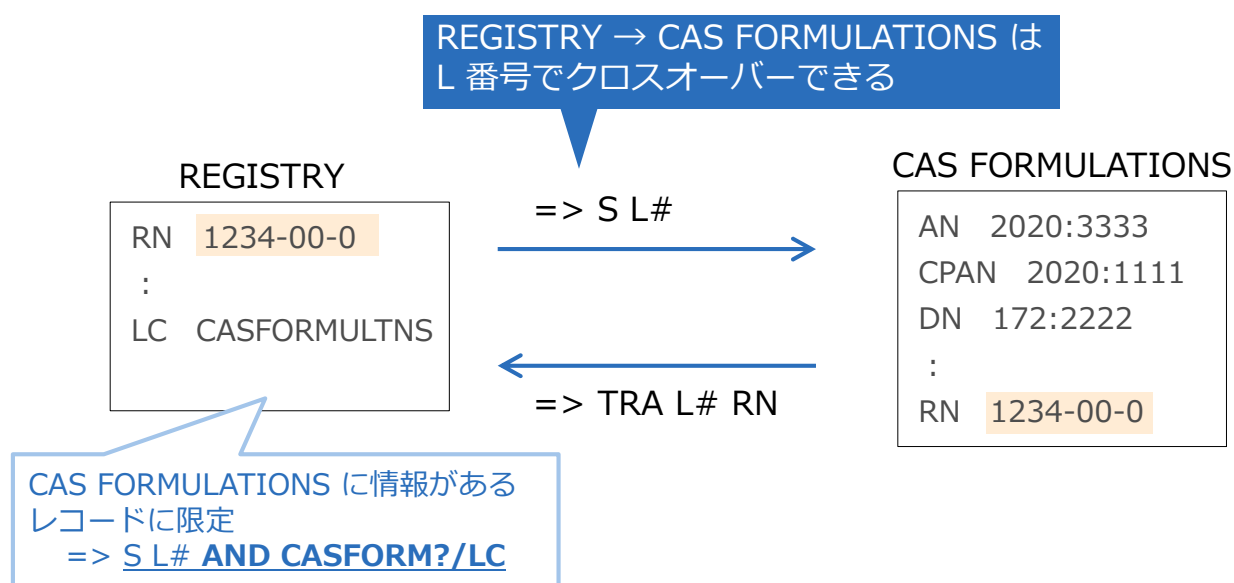
さらに…

- 成分 1 と成分 2 がどちらも必須 (Mandatory) である配合に限定する
- 成分 1 と成分 2 について役割 (界面活性剤) で限定する
- 成分 1 と成分 2 を両方含む配合に限定する

© 2022 化学情報協会

## REGISTRY ファイルとの連携

- CAS FORMULATIONS ファイルと REGISTRY ファイルは CAS RN® で関連づけられている



© 2022 化学情報協会



● CAS FORMULATIONS ファイルには 2 種類の物質名関連フィールドがある

REGISTRY 由来の名称  
を最大 50 名称収録

- CAS RN® に基づく物質名 (GCN, CCN フィールド)  
CAS RN® を持つ物質のみに存在

=> S BENZOIC ACID/CN (完全名、フレーズ) \* 前方一致のみ可能

=> S ?HYALURON?/CNS (部分名、単語) \* 前方・中間・後方一致可能

- 原報の記載に基づく成分名 (CNM フィールド)  
CAS RN® を持たず CNM のみの成分もある

=> S BENZOIC ACID/CNM (完全名、フレーズ) \* 前方一致のみ可能

=> S ?HYALURON? (P) CNM/FA (部分名、単語) \* 前方・中間・後方一致可能

© 2022 化学情報協会

## 利用例 1 – 成分 1 の構造検索

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> Uploading structure file: Component1 ← 構造質問式をアップロード

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1 ← 構造検索 (サンプル検索)  
L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL ← 構造検索 (フルファイル検索)  
L3 4002 SEA SSS FUL L1

=> S L3 AND CASFORM?/LC  
L4 237 L3 AND CASFORM?/LC

CAS FORMULATIONS ファイルに  
情報があるレコードに限定

© 2022 化学情報協会

=> Uploading structure file: Component2 ← 構造質問式をアップロード

CN(C)C=O

4  
1  
2 3

L5 STRUCTURE UPLOADED

=> S L5 ← 構造検索 (サンプル検索)  
L6 50 SEA SSS SAM L5

=> S L5 FUL ← 構造検索 (フルファイル検索)  
L7 4361 SEA SSS FUL L5

=> S L7 AND CASFORM?/LC ← CAS FORMULATIONS ファイルに情報があるレコードに限定  
L8 194 L7 AND CASFORM?/LC

© 2022 化学情報協会

# 利用例 1 – クロスオーバー検索、部分名検索

## ・成分 1

=> FILE CASFORM ← CAS FORMULATIONS ファイルに入る

=> S L4 ← REGISTRY から CAS FORMULATIONS へは L 番号でクロスオーバー検索する  
L9 204088 L4

=> S ((SULFURIC ACID OR SULFATE) (P) ALKYL)/CNS OR ((SULFURIC ACID OR SULFATE) (P) ALKYL) (P) CNM/FA  
L10 58941 ((SULFURIC ACID OR SULFATE) (P) ALKYL)/CNS OR ((SULFURIC ACID OR SULFATE) (P) ALKYL) (P) CNM/FA

=> S L9 OR L10 ← クロスオーバーした結果と部分名検索の結果をまとめる  
L11 259950 L9 OR L10

部分名は /CNS と 基本索引 (P) CNM/FA を併用する

## ・成分 2

=> S L8 ← REGISTRY の回答をクロスオーバー  
L12 13058 L8

=> S (?AMINE OXIDE?)/CNS OR (?AMINE OXIDE?) (P) CNM/FA ← 部分名で検索  
L13 27833 (?AMINE OXIDE?)/CNS OR (?AMINE OXIDE?) (P) CNM/FA

=> S L12 OR L13 ← クロスオーバーした結果と部分名検索の結果をまとめる  
L14 28509 L12 OR L13

© 2022 化学情報協会

- 成分 1、2 について REGISTRY ファイルで構造検索し、CAS FORMULATIONS ファイルへクロスオーバーする
- 成分 1、2 について CAS FORMULATIONS ファイルで部分名称からも検索する

さらに…

- 成分 1 と成分 2 がどちらも必須 (Mandatory) である配合に限定する
- 成分 1 と成分 2 について役割 (界面活性剤) で限定する
- 成分 1 と成分 2 を両方含む配合に限定する

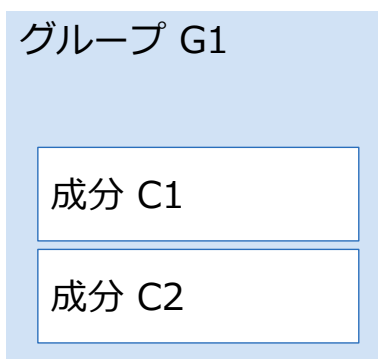
© 2022 化学情報協会

## 同一成分情報に限定した検索

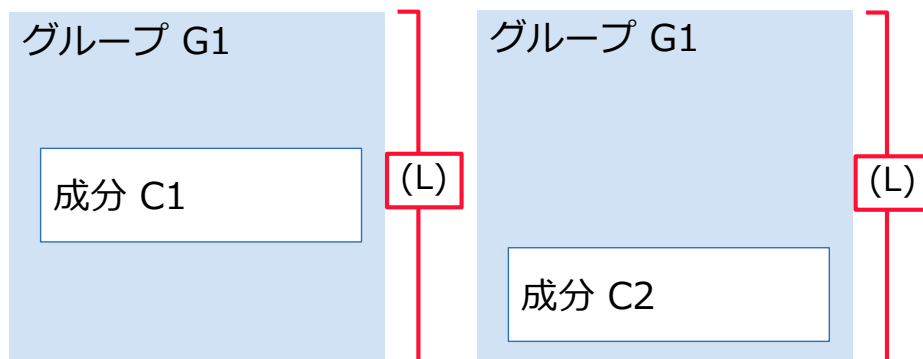
21

- 同一成分情報およびその成分が属するグループ情報は (L) 演算子でかけ合わせる

実際の表示



(L) 演算子の範囲のイメージ



異なる成分 (C1 と C2) は (L) 演算子の範囲に含まれない

© 2022 化学情報協会

- 配合中の成分の選択性は /GOP および /COP フィールドで検索

GOP : グループ (Group) の選択性 (Optionality)  
 COP : 成分 (Component) の選択性 (Optionality)

- => S L1 (L) MANDATORY/GOP, COP (必須成分に限定)
- => S L1 (L) EXCLUDE/GOP, COP (除外成分に限定)

- 選択性には下記の 9 種類がある

EXCLUDE	MANDATORY
MUTUALLY EXCLUSIVE ALTERNATIVES	NON-PREFERRED
ONE OR MORE	OPTIONAL
PREFERRED	SPECIFIED *COP のみ
UNDEFINED	

© 2022 化学情報協会

- 機能・役割は GFU, CFU フィールドに収録

GROUP G1  
 GDS surfactants  
**GFU surfactants**  
 CMPS C1-C2  
 GOP Mandatory  
 GAM 0.2 mass %

COMPONENT C2  
 RN 151-21-3  
 CNM sodium laurylsulfate  
 CCN Sulfuric acid monododecyl ester sodium salt (1:1) (ACI)  
**CFU anionic surfactants**  
 CNO HLB value of 33, molecular weight of 289  
 COP Mandatory

- さらに GVO, CVO フィールドに類義語を収録

GVO Surfactants; Cleaning agents, surfactant; Tensides; Surface-active agents; Surfactant; Surface-active agent; Surface-active substance; Tenside; Interface-active substance; Surface active agent

CVO Anionic surfactants; Interface-active substances, anionic; Anionic surfactant; Anionic tensides; Tensides, anionic; Anion surfactants

© 2022 化学情報協会

## ● 機能・役割は /GFU,CFU フィールドで検索

=> S L1 (L) (SURFACTANT? OR ANIONIC SURFACTANT?)/GFU, CFU

- フレーズ単位の検索フィールド
- あらかじめ EXPAND で収録されているフレーズを確認

SURFACTANT?/GFU,CFU で ANIONIC SURFACTANT はヒットしない!

## ● さらに基本索引 (/BI) を加えると網羅的

=> S L1 (L) (SURFACTANT? OR ANIONIC SURFACTANT?)/GFU, CFU, BI

- 基本索引には GVO, CVO フィールドが含まれる
- 基本索引は単語単位で検索可能

SURFACTANT が含まれていれば ヒット!

© 2022 化学情報協会

## 利用例 1 – 選択性、役割での絞り込み

## ・成分 1

=> S L11 (L) MANDATORY/GOP, COP ← 成分 1 が必須である配合に限定  
L15 256645 L11 (L) MANDATORY/GOP, COP=> S L15 (L) (ANIONIC SURFAC? OR SURFACTANT? OR SURFACE ACTIVE?)/CFU, GFU, BI  
↑ 成分 1 の役割がアニオン性界面活性剤または界面活性剤である配合に限定  
L16 78457 L15 (L) (ANIONIC SURFAC? OR SURFACTANT? OR SURFACE ACTIVE?)/CFU, GFU, BI

## ・成分 2

=> S L14 (L) MANDATORY/GOP, COP ← 成分 2 が必須である配合に限定  
L17 28017 L14 (L) MANDATORY/GOP, COP=> S L17 (L) (AMPHOTERIC SURFAC? OR SURFACTANT? OR SURFACE ACTIVE?)/CFU, GFU, BI  
↑ 成分 2 の役割が両性界面活性剤または界面活性剤である配合に限定  
L18 10257 L17 (L) (AMPHOTERIC SURFAC? OR SURFACTANT? OR SURFACE ACTIVE?)/CFU, GFU, BI

## ・成分 1 と成分 2 を両方含む配合に限定

=> S L16 AND L18  
L19 2747 L16 AND L18

1 レコード = 1 配合なので、AND 演算で同一配合中に限定できる

© 2022 化学情報協会

=> D TI FD 1-40

TI FD 表示形式で回答をチェック

L19 ANSWER 1 OF 2747 CASFORMULTNS COPYRIGHT 2022 ACS on STN

TI Liquid hand dishwashing cleaning composition  
 FD Liquid Hand Dishwashing Cleaning Composition: Dishwashing Detergents ← FD (配合ディスクリプション) フィールドには配合の説明が含まれる

L19 ANSWER 38 OF 2747 CASFORMULTNS COPYRIGHT 2022 ACS on STN

TI Cleaning composition with excellent diffusibility and foaming property for hard surfaces  
 FD Cleaning Composition for Hard Surfaces: Cleaning Agents

=> D HIT 38

HIT 表示形式でヒット部分を確認

L19 ANSWER 38 OF 2747 CASFORMULTNS COPYRIGHT 2022 ACS on STN

AN 2021:78413 CASFORMULTNS

GROUP G1  
 GDS Additional ingredients  
 CMPS C1  
 GOP **Mandatory**

COMPONENT C1  
 RN **151-21-3**  
 CNM sodium lauryl sulfate  
 CCN Sulfuric acid monododecyl ester sodium salt (1:1) (AC1)  
 CAM 4.5 parts by mass  
 CFU **anionic surfactants**  
 COP **Mandatory**

(続き)

AN 2021:78413 CASFORMULTNS

GROUP G2  
 GDS Additional ingredients  
 CMPS C2  
 GOP **Mandatory**

COMPONENT C2  
 CNM **lauryldimethylamine oxide (AO)**  
 CAM 10.5 parts by mass  
 CFU **amphoteric surfactants**  
 COP **Mandatory**

協会

=> D BIB CHEM 38

BIB CHEM 表示形式で書誌情報と構成成分情報を確認

L19 ANSWER 38 OF 2747 CASFORMULTNS COPYRIGHT 2022 ACS

AN 2021:78413 CASFORMULTNS  
 CPAN 2021:2383867  
 DN 176:473618  
 ED 26 Jun 2022  
 UP 26 Jun 2022

TI Cleaning composition with excellent diffusibility and foaming property for hard surfaces  
 AU Tamura, Nozomu; Handa, Hiroyuki; Maehara, Kunikazu; Egashira, Masatoshi  
 JT Jpn. Kokai Tokkyo Koho  
 PA Earth Chemical Co.  
 DT Patent

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
JP 2021175786	A	20211104	JP 2020-194264	20201124

FN Form 21  
 FD Cleaning Composition for Hard Surfaces: Cleaning Agents  
 GRPS G1-G6  
 GRPC 6  
 CMPC 6  
 TGTC 1

AN 2021:78413 CASFORMULTNS  
 LCC Example  
 LCD Table 6, Example 13

GROUP G1  
 GDS Additional ingredients  
 CMPS C1  
 GOP **Mandatory**

COMPONENT C1 ① 成分 1

RN **151-21-3**  
 CNM sodium lauryl sulfate  
 CCN Sulfuric acid monododecyl ester sodium salt (1:1) (A)  
 CAM 4.5 parts by mass  
 CFU **anionic surfactants**  
 COP **Mandatory**

GROUP G2  
 GDS Additional ingredients  
 CMPS C2  
 GOP **Mandatory**

COMPONENT C2 ② 成分 2

RN **1643-20-5**  
 CNM **lauryldimethylamine oxide (AO)**  
 CCN 1-Dodecanamine, N, N-dimethyl-, N-oxide (9CI, ACI)  
 CAM 10.5 parts by mass  
 CFU **amphoteric surfactants**  
 COP **Mandatory**

**硫酸エステル塩系界面活性剤 (成分 1) とアミノオキシド系界面活性剤 (成分 2) が両方含まれる配合が得られた**

成分名		実施例 1 2	実施例 1 3
アニオン性 界面活性剤	POE(3)ラウリル硫酸エーテル硫酸Na (AES)	5.4	
	ラウリル硫酸ナトリウム		4.5
両性 界面活性剤	ラウリルジメチルアミノオキサイド ※1	14.4	
	ラウリルジメチルアミノオキサイド (AO)		10.5
	ミリスチルプロピルベタイン		
ノニオン性 界面活性剤	POE(4)ラウリルエーテル		20
	ビス(3-アミノプロピル)ドデシルアミン		
	ヤシ油脂肪酸N-メチルエタノールアミド		
	POE(30)ラウリルエーテル		
アルコール	3-メトキシ-3-メチル-1-ブタノール	15	10
	ジエチレングリコールモノブチルエーテル		
	ラウリアルコール		
	エタノール		
	ジデシルジメチルアンモニウムメトサルフェート	1.6	
	塩化ベンザルコニウム		2.5
	プロピレングリコールモノラウレート		
	水	残部	残部
合計		100	100

GROUP G3  
 GDS Additional ingredients  
 CMPS C3  
 GOP **Mandatory**

COMPONENT C3 ③

CNM POE (4) lauryl ether  
 CAM 20 parts by mass  
 CFU nonionic surfactants  
 COP **Mandatory**

GROUP G4  
 GDS Additional ingredients  
 CMPS C4  
 GOP **Mandatory**

COMPONENT C4 ④

RN 56539-66-3  
 CNM 3-methoxy-3-methyl-1-butanol  
 CCN 1-Butanol, 3-methoxy-3-methyl- (6CI, 9CI, ACI)  
 CAM 10 parts by mass  
 COP **Mandatory**

成分名		実施例 1 2	実施例 1 3
アニオン性 界面活性剤	POE(3)ラウリル硫酸エーテル硫酸Na (AES)	5.4	
	ラウリル硫酸ナトリウム		4.5
両性 界面活性剤	ラウリルジメチルアミノオキサイド ※1	14.4	
	ラウリルジメチルアミノオキサイド (AO)		10.5
	ミリスチルプロピルベタイン		
ノニオン性 界面活性剤	POE(4)ラウリルエーテル		20
	ビス(3-アミノプロピル)ドデシルアミン		
	ヤシ油脂肪酸N-メチルエタノールアミド		
	POE(30)ラウリルエーテル		
アルコール	3-メトキシ-3-メチル-1-ブタノール	15	10
	ジエチレングリコールモノブチルエーテル		
	ラウリアルコール		
	エタノール		
	ジデシルジメチルアンモニウムメトサルフェート	1.6	
	塩化ベンザルコニウム		2.5
	プロピレングリコールモノラウレート		
	水	残部	残部
合計		100	100

GROUP G5  
GDS Additional ingredients  
CMPS C5  
GOP Mandatory

COMPONENT C5 ⑤  
RN 8001-54-5  
CNM benzalkonium chloride  
CCN Quaternary ammonium compounds, alkylbenzyltrimethyl,  
CAM 2.5 parts by mass  
COP Mandatory

GROUP G6  
GDS Additional ingredients  
CMPS C6  
GOP Mandatory

COMPONENT C6 ⑥  
RN 7732-18-5  
CNM water  
CCN Water (8CI, 9CI, ACI)  
COP Mandatory

成分名		実施例 1 2	実施例 1 3
アニオン性 界面活性剤	POE(3)ラウリル硫酸エーテル硫酸Na (AES)	5.4	
	ラウリル硫酸ナトリウム		4.5
両性 界面活性剤	ラウリルジメチルアミノオキサイド ※ 1	14.4	
	ラウリルジメチルアミノオキサイド (AO)		10.5
	ミスチルプロピルベタイン		
ノニオン性 界面活性剤	POE(4)ラウリルエーテル		20
	ビス(3-アミノプロピル)ドデシルアミン		
	ヤシ油脂肪酸N-メチルエタノールアミド		
	POE(30)ラウリルエーテル		
アルコール	3-メトキシ-3-メチル-1-ブタノール	15	10
	ジエチレングリコールモノブチルエーテル		
	ラウリルアルコール		
	エタノール		
	ジデシルジメチルアンモニウムメトサルフェート	1.6	
	塩化ベンザルコニウム		2.5
	プロピレングリコールモノラウレート		
	水	残部	残部
合計		100	100

© 2022 化学情報協会

## 参考：特許全文情報を一括で確認したい場合

CAS FORMULATIONS の回答から特許番号を抽出して CAS Scientific Patent Explorer で検索することで、特許の全文情報を確認できる

- CAS FORMULATIONS ファイルでヒットした特許の特許番号 (PN) を ANALYZE コマンドで抽出

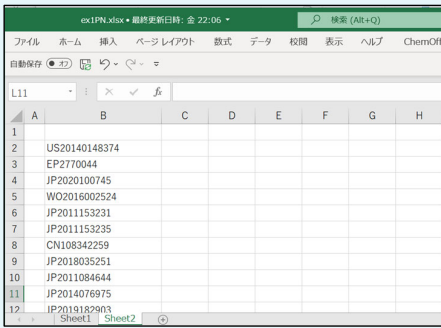
=> [ANA L19 PN](#)

L20 ANALYZE L19 1- PN : 761 TERMS

=> [D 1-](#)

L20 ANALYZE L19 1- PN : 761 TERMS

TERM #	# OCG	# DOC	% DOC	PN
1	108	108	4.04	US20140148374
2	72	72	2.69	EP2770044
3	45	45	1.68	JP2020100745
4	44	44	1.64	WO2016002524



- CAS Scientific Patent Explorer の Bulk Patent Search\*で検索

Simple **Bulk** Chemical

US20140148374  
EP2770044  
JP2020100745  
WO2016002524

\* CAS Scientific Patent Explorer の章参照

© 2022 化学情報協会



The top screenshot shows the 'Dual View' tab of the CAS Patent Explorer. It displays the chemical structure of CAS RN 64-17-5 (2-propanol) and the corresponding patent text. The bottom screenshot shows the 'Formulations' tab, which provides a detailed view of a cleaning composition for hard surfaces, including a table of components and their functions.

#	Component	Function	Amount Reported
1	Sodium dodecyl sulfate	anionic surfactants	4.5 parts by mass
2	lauryldimethylamine oxide (AO)	amphoteric surfactants	10.5 parts by mass
3	POE (4) lauryl ether	nonionic surfactants	20 parts by mass
4	3-Methoxy-3-methyl-1-butanol	-	10 parts by mass
5	Quaternary ammonium compounds, alk...	-	2.5 parts by mass

© 2022 化学情報協会

## 利用例 2

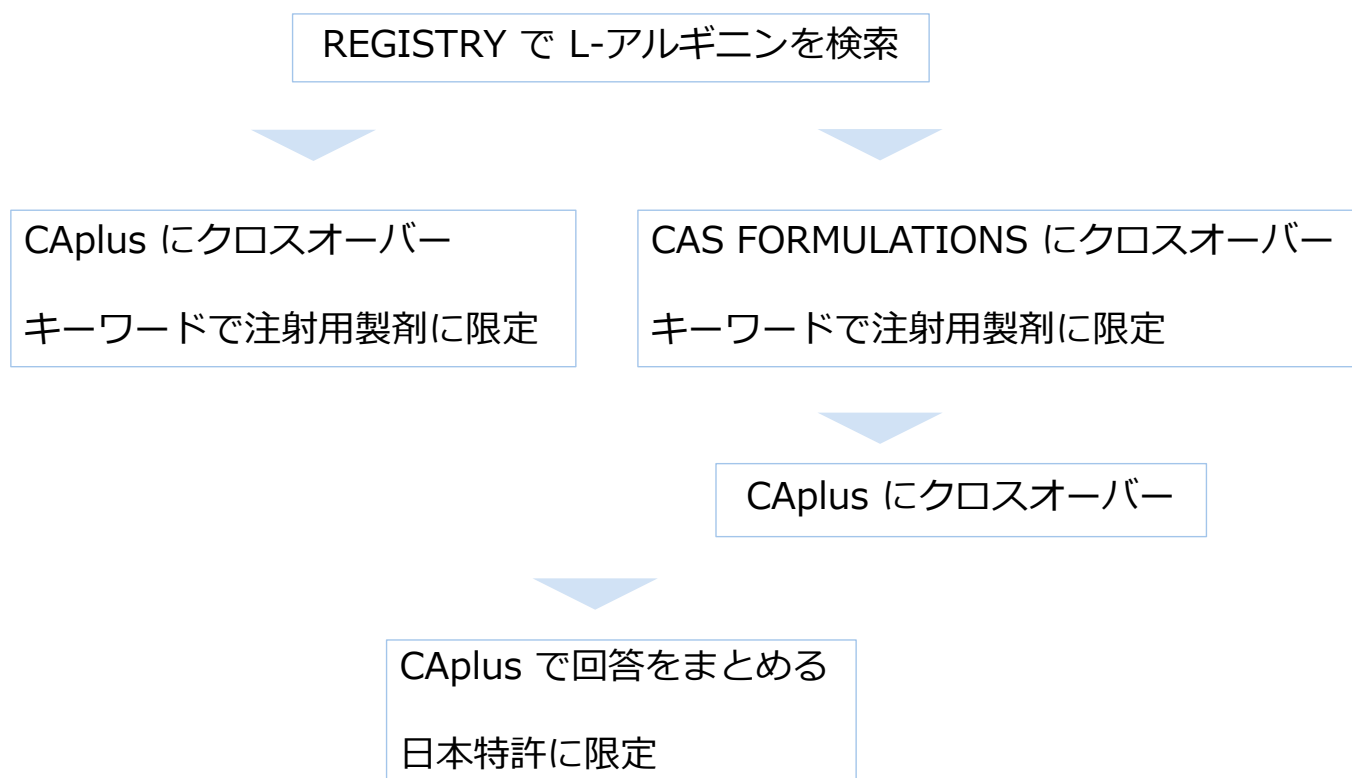
L-アルギニン (CAS RN® : 74-79-3) が含まれる注射用製剤に関する日本特許を、REGISTRY、CPlus、CAS FORMULATIONS ファイルを使って網羅的に調べる

- 配合中のすべての成分の情報が収録されており、CAplus ではヒットしない回答が得られる可能性がある
- 投与経路や用途に関する情報が収録されている

© 2022 化学情報協会

## 検索方針

35



© 2022 化学情報協会

```

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S 74-79-3 ← L-アルギニンの CAS RN® で検索
L1 1 74-79-3

=> FILE CAPLUS ← CPlus ファイルに入る

=> S L1 ← REGISTRY ファイルの回答をクロスオーバー
L2 120280 L1

=> S L2 AND (INJECT? OR INFUS?) ← 「注射」に関するキーワードで限定
L3 7774 L2 AND (INJECT? OR INFUS?)
    
```

CPlus ファイルで L-アルギニンが含まれる注射用製剤に関する文献を検索

## 投与経路、用途に関するフィールド 37

- 投与経路の情報は**投与経路 (DR)** フィールドに含まれる
- **用途に関する情報**は複数のフィールドに含まれる

BIB (書誌情報)

**FD** 配合ディスクリプション

ABS (抄録)

CHEM (構成成分情報)

Group G1  
**GDS** グループ  
 ディスクリプション

Component C1

Component C2

PRODUCT (製品情報)

Purpose  
**PNV** 製品名  
**PUP** 製品の目的  
**PF** 剤形・形状  
**DR** 投与経路  
**PVO** 製品のキーワード

Target

Experimental activity

Process

- 下記の検索フィールドで検索

	内容	検索フィールド	検索単位
投与経路	投与経路	/DR	単語
用途	配合ディスクリプション*1	/FD	単語
	グループディスクリプション	/GDS	単語・フレーズ
	製品：目的	/PUP	フレーズ
	製品の剤形・形状	/PF	フレーズ
	製品名, 概要	/PNV	単語・フレーズ
	製品：キーワード*1	/PVO	フレーズ

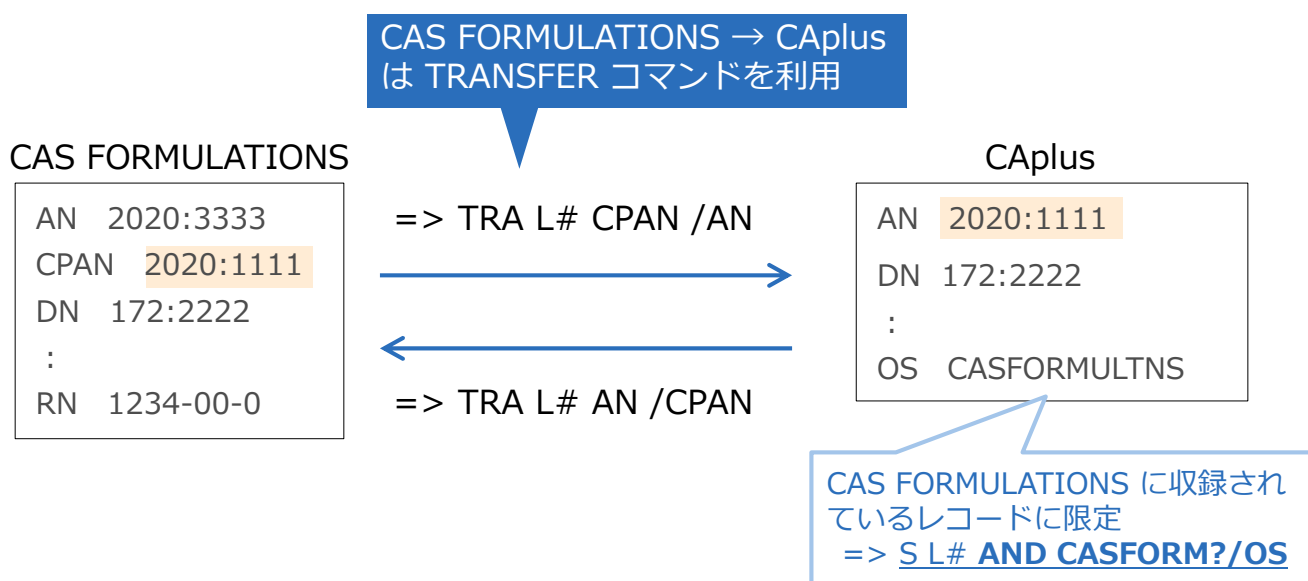
\*1 基本索引に含まれるフィールド

- 基本索引では検索されないフィールドが多いため、検索フィールドを指定する
- フレーズ単位のフィールドはあらかじめ EXPAND で収録されているフレーズを確認する

© 2022 化学情報協会

## CAplus ファイルとの連携

CAS FORMULATIONS ファイルと CAplus ファイルは **レコード番号**で関連づけられている



© 2022 化学情報協会

```

=> FILE CASFORM          ← CAS FORMULATIONS ファイルに入る
=> S L1                  ← REGISTRY ファイルの回答をクロスオーバー
L4      30438 L1
=> S L4 AND (INJECT? OR INFUS?)/DR, FD, GDS, PUP, PF, PNV, PVO ← 投与経路、用途関連のフィールドで
L5      2459 L4 AND (INJECT? OR INFUS?)/DR, FD, GDS, PUP, PF, PNV, PVO 「注射」に関するキーワードで限定
=> FILE CAPLUS          ← CAplus ファイルに入る
=> TRA L5 CPAN /AN      CAS FORMULATIONS から CAplus へは
L6      TRANSFER L5 1- CPAN :      690 TERMS      TRANSFER コマンドでクロスオーバー
L7      690 L6/AN
ALL TERMS IN L6/AN RETRIEVED.
=> S L3 OR L7          ← CAplus の検索結果と OR でまとめる
L8      7842 L3 OR L7
=> S L8 AND JP/PC      ← 日本特許に限定
L9      758 L8 AND JP/PC
    
```

**L9 の内訳**

CAplus の検索でヒット

84      157      517

**CAS FORMULATIONS**  
からのクロスオーバーでヒット

CAS FORMULATIONS には対応特許情報は含まれないため、特許発行国で絞り込む場合は CAplus にクロスオーバーしてから検索する

## CAS FORMULATIONS のみでヒットした回答の例

```

AN 2003:150891 CASFORMULTNS
CPAN 2003:1006769
:
TI Medicament combinations of sodium channel blockers and fibrinolytics for
treating ischemic conditions
AU Banzet, Sophie; Duettmann, Hermann; Mauz, Annerose
JT PCT Int. Appl.
PA Boehringer Ingelheim Pharma G.m.b.H. & Co. K.-G.
DT Patent
PI
PATENT NO.      KIND  DATE      APPLICATION NO.      DATE
-----
WO 2003105844  A1   20031224  WO 2003-EP5813      20030604
FN Form 19
FD Anti-Ischemic Infusion Solution: Anti-Ischemic Agents ← 配合ディスクリプション
:
LCC Example
LCD Example
                                対応特許 (JP2005536478) で確認
GROUP G1
:
COMPONENT C1
RN 191588-94-0  ①
CNM tenecteplase
:
    
```

**【0027】**  
D.3.1)成分2の医薬製剤実施例

成分2の製剤は従来技術に知られており、商業上得られてもよい。本発明に従って使用し得る幾つかの市販の製剤が例として、また説明として以下に挙げられる。

アルテプラーゼ：（注射/注入用の溶液を調製するための粉末及び溶媒）

組成： アルテプラーゼ10mg/20mg/50mg/100mg

その他の成分： アルギニン、リン酸、ポリソルベート80

注射用の水

テネクテプラーゼ：（注射溶液を調製するための粉末及び溶媒）

組成： テネクテプラーゼ8000U/10000U (40mg/50mg) ← ①

その他の成分： アルギニン、リン酸、ポリソルベート20

注射用の水8ml/10ml

GROUP G2  
: 対応特許 (JP2005536478) で確認

COMPONENT C2  
RN 74-79-3 ②  
CNM arginine

COMPONENT C3  
RN 7664-38-2 ③  
CNM phosphoric acid

COMPONENT C4  
RN 9005-64-5 ④  
CNM polysorbate 20

COMPONENT C5  
RN 7732-18-5 ⑤  
CNM water for injection

PNC author  
PNV Anti-ischemic **infusion** solution ← 製品名

PRODUCT PA1  
PUP Anti-ischemic agents  
PF Desc: pharmaceutical solutions  
DR **infusion drug delivery systems** ← 投与経路

【0027】  
D.3.1)成分2の医薬製剤実施例  
成分2の製剤は従来技術に知られており、商業上得られてもよい。本発明に従って使用し得る幾つかの市販の製剤が例として、また説明として以下に挙げられる。  
アルテプラーゼ：（注射／注入用の溶液を調製するための粉末及び溶媒）  
組成： アルテプラーゼ10mg/20mg/50mg/100mg  
その他の成分： アルギニン、リン酸、ポリソルベート80  
注射用の水  
テネクテプラーゼ：（注射溶液を調製するための粉末及び溶媒）  
組成： テネクテプラーゼ8000U/10000U (40mg/50mg)  
その他の成分： アルギニン、リン酸、ポリソルベート20  
注射用の水8ml/10ml

② ③ ④ ⑤

✓ 実施例中の製剤例にアルギニンが記載されている特許がヒット

CPlus ファイルは重要な化学物質のみが索引されるためアルギニンは索引されていなかった  
(クレームにはアルギニンについての言及なし)

© 2022 化学情報協会

## まとめ

43

## CAS FORMULATIONS ファイルは

- 製剤・配合単位なので、同一配合中に限定した検索ができる
- 役割や用途などの情報で絞り込みができる
- REGISTRY や CPlus ファイルと組み合わせて検索することでより便利に利用できる



© 2022 化学情報協会

CAS STNext ユーザーミーティング

CAS FILES の強化





# CAS FILES の強化

化学情報協会 情報事業部

## 目次

1. CAplus/CA ファイルの強化
2. MARPAT ファイルの強化
3. CHEMLIST ファイルの強化

## CAplus/CA ファイルの強化

### CAplus/CA ファイルの強化

3

- 特許請求項の収録拡大
- Prior Art Analysis 機能の搭載
- CAS PatentPak 関連の強化
- 特許ステータス関連の強化

世界中の科学技術分野の学術論文、単行本、61 特許発行機関の特許、2 技術公開誌を収録する文献データベース

(2022 年 8 月)

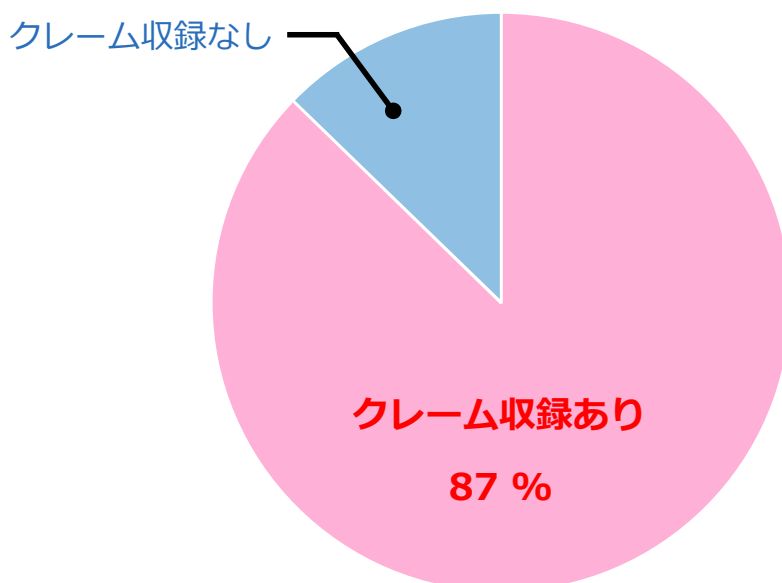
製作者	CAS
レコード構成	文献単位, 特許は発明単位
収録期間	1808 年～
収録件数	5,800 万件以上
特長	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 統制語による索引が付与されており、特に化学物質に関する文献検索が的確かつ容易に実行できる</li> <li>• 特許レコードは同一発明単位 (ファミリー単位) で構成されており、対応特許情報が容易に得られる</li> <li>• CAS PatentPak で物質情報付き明細書を表示できる</li> </ul>

© 2022 化学情報協会

## 特許請求項の収録拡大

特許請求項の収録対象が 13 の特許発行機関に拡大

- CAplus ファイルの特許レコードの 87 % に収録 (2022 年 8 月)



© 2022 化学情報協会

ベーシック特許発行国が下記の場合に収録

	ベーシック特許発行国	収録期間	レコード数 (CAplus)
収録期間拡大	PCT 出願 (WO)	1979 -	176 万件 (98.9%)
	米国 (US)	1906 -	184 万件 (84.1%)
	中国 (CN)	1985 -	653 万件 (99.5%)
New	イギリス (GB)	1927 -	7.6 万件 (35.1%)*
	ドイツ (DE)	1997 -	37 万件 (99.2%)
	ロシア (RU)	1994 -	28 万件 (99.4%)
	ヨーロッパ (EP)	1979 -	44 万件 (99.8%)
	韓国 (KR)	1995 -	100 万件 (98.9%)
	オーストラリア(AU)	2000 -	2 万件 (96.9%)
	ブラジル(BR)	2000 -	2 万件 (89.0%)
	スイス(CH)	1975 -	0.5 万件 (93.4%)
	インド(IN)	2007 -	9.8 万件 (96.2%)
	日本 (JP)	1983 -	282 万件 (89.6%)

\* 1970 年以降は 7.5 万件 (89.1%)

© 2022 化学情報協会

## 特許請求項の検索方法

- 請求項を検索

=> S 検索語 / **CLM**

=> S 検索語 / **BIEX**

CAplus/CA ファイルでは、請求項は /CLM または /BIEX で検索できる  
(どちらも請求項のみが検索対象)

- 基本索引および請求項を検索

=> S 検索語 / **BI, CLM**

=> S 検索語 / **BI, BIEX**

© 2022 化学情報協会

## 検索例：豚糞を利用した土壌改良資材に関する特許の検索

```

=> FILE CAPLUS
=> S ((SOIL OR EDAPHIC) (10A) (IMPROV? OR AMEND?) (L) (PIG OR PIGLET OR HOG))/BI, CLM
L1 2093 ((SOIL OR EDAPHIC) (10A) (IMPROV? OR AMEND?) (L) (PIG OR PIGLET OR HOG))/BI, CLM
=> D 20 ALL CLM

L1 ANSWER 20 OF 2093 CAPLUS COPYRIGHT 2022 ACS on STN
AN 2022:1509508 CAPLUS Full-text
DN 179:151475
ED Entered STN: 16 Jun 2022
TI Soil improvement material containing methane fermentation digestive juice
:
DT Patent
LA Japanese
CLMN 8
:
PI
PATENT NO.      KIND  DATE      APPLICATION NO.  DATE
-----
JP 2022089338  A   20220616   JP 2020-201668  20201204
PRAI JP 2020-201668
:
    
```

**請求項の数** (請求項の数を確認できる (ALL, MAX 表示形式に含まれる))

**日本の特許** (JP 2022089338)

**ALL** (検索結果の表示形式)

**請求項の数を確認できる (ALL, MAX 表示形式に含まれる)**

**日本の特許**

**/BI, CLM で基本索引と請求項を検索**

```

:
AB The invention relates to a soil improvement material which can effectively
utilize methane fermn. digestive juice and is easy to handle, and has an
effect of suppressing soil pests.
:
IT Aggregates
(porous; soil improvement material contg. methane fermn. digestive
juice)
:
請求項 CLM What is claimed is:
1. A soil improvement material that has an inhibitory effect on soil
disease bacteria, and is a soil improvement material obtained by
immobilizing methane fermentation digestive juice with a carrier
material made of a porous material.
: (途中省略)
請求項 4 4. The soil improvement material according to any one of claims 1 to
3, wherein the methane fermentation digestive juice is made from
sewage sludge, human waste, cow dung, pig dung, and food waste.
:
    
```

**ALL** (検索結果の表示形式)

**請求項** (請求項の表示形式)

**請求項 4** (請求項 4 の表示形式)

**ALL**

**請求項**

**書誌情報**

**抄録**

**索引**

**引用情報**

**請求項**

**ベーシック特許の請求項が英語で収録**

**請求項のみに記載されたキーワードでヒット**

**【請求項 3】**  
前記メタン発酵消化液の細菌叢における主要細菌が、クロストリジウム (Clostridium) 属細菌及びクロストリジウム綱 (Clostridia) に属する細菌である、請求項 1 又は 2 に記載の土壌改良資材。

**【請求項 4】**  
前記メタン発酵消化液が、下水汚泥、し尿、牛糞、**豚糞**、食品廃棄物を原料とする、請求項 1～3 のいずれか 1 項に記載の、**土壌改良資材**。

**日本語**

CAS が開発した AI ベースの類似特許検索エンジンを使用して、自動的に先行技術文献を検索

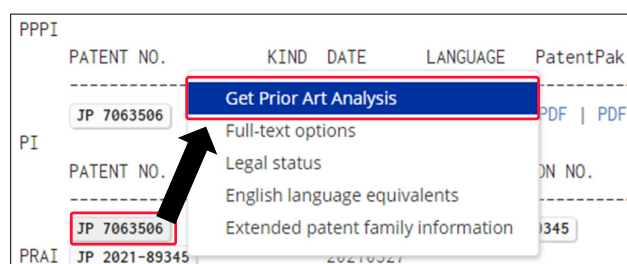
- 他の検索方法では見つからなかった先行技術文献が得られる可能性がある
- 簡単かつ迅速に検索できる
- 特許および非特許の文献が得られる



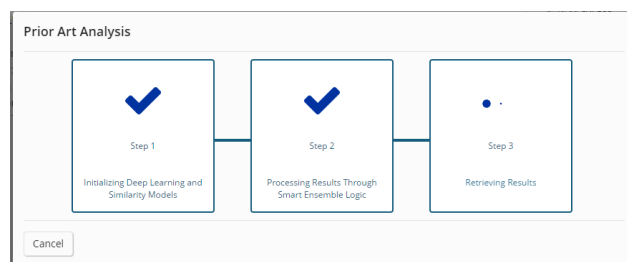
ワンクリックで  
先行技術文献が得られる

## Prior Art Analysis 機能の利用方法

- ① 特許番号をクリックして **Get Prior Art Analysis** を選択



- ② AI による検索が開始



- ③ 得られた複数のレコードが HCAplus ファイルで一つにまとめられ、回答集合が得られる

L15 190 L3 OR L4 OR L5 OR L6 OR L7 OR L8 OR L9 OR L10 OR L11 OR L12 OR L13 OR L14

## 新型コロナウイルスの検出方法に関する特許 US11149320 の先行技術文献を調査する

```

=> FILE CAPLUS
=> S US11149320/PN.B
L1 1 US11149320/PN.B

=> D BIB
L1 ANSWER 1 OF 1 CAPLUS COPYRIGHT 2022 ACS on STN
AN 2021:2255055 CAPLUS Full-text
DN 176:397366
TI LAMP- and PCR-based assays for the detection of SARS-CoV-2
IN Brambati, Chiara; Bocchetta, Simone; Minnucci, Giulia
:
PI

```

特許 US11149320  
「LAMP 法および PCR 法に基づいた SARS-CoV-2 の検出方法」において  
**Get Prior Art Analysis** を実行

PATENT NO.	Full-text options	TION NO.	DATE
<b>US 11149320</b>	Legal status	-17078249	20201023
US 2021032448	English language equivalents		
US 10815539	Extended patent family information	-16837364	20200401
WO 2021198325		WO 2021-EP58424	20210331
US 20210340636		US 2021-17374333	20210713

© 2022 化学情報協会

# Prior Art Analysis - 実施されるコマンド

```

=> fil HCAPLUS ←自動的に HCAplus ファイルに入る
=> QUE (2020:1564571 OR 2020:1585215 OR 2020:2286915 OR 2020:1972097 OR 2020:2334651 OR
2020:2540492 OR 2020:1810140 OR 2020:2286901 OR 2020:1319887 OR 2020:1370729 OR 2020:2202449
OR 2020:2046015 OR 2020:904311 OR 2010:293140 OR
2020:2487665)/AN

```

得られた先行技術文献のレコード番号 (AN) による検索が実行  
最も関連度が高い非特許文献

```

L2 QUE (2020:1564571 OR 2020:1585215 OR 2020:2286915 OR 2020:1972097 OR
.... OR 2020:936850 OR 2020:904311 OR 2010:293140 OR 2020:2487665)/AN
:
=> QUE (2013:828379 OR 2005:1055750 OR 2018:1542754 OR 2013:835535 OR 2015:675177 OR
.... OR 2020:2157046 OR 2014:617571)/AN

```

レコード番号は非特許文献、特許文献の順  
にまとまっている  
➤ それぞれ関連度の高い順に整理される

```

L7 QUE (2013:828379 OR 2005:1055750 OR 2018:1542754 OR 2013:835535 OR 2015:675177 OR
.... OR 2020:2157046 OR 2014:617571)/AN
:
=> QUE (1999:194298 OR 2017:1964291 OR 1997:735877 OR 2005:1026840 OR 2008:805956 OR
1997:491567 OR 2001:748059 OR 2002:522048 OR 2003:472652 OR 2009:1536083 OR 2008:1363987)/AN
L13 QUE (1999:194298 OR 2017:1964291 OR 1997:735877 OR 2005:1026840 OR
.... OR 2009:1536083 OR 2008:1363987)/AN
=> S L2 OR L3 OR L4 OR L5 OR L6 OR L7 OR L8 OR L9 OR L10 OR L11 OR L12 OR L13
L14 192 L2 OR L3 OR L4 OR L5 OR L6 OR L7 OR L8 OR L9 OR L10 OR L11 OR L12 OR L13
=> S L14 AND P/DT
L15 93 L14 AND P/DT
=> S L14 NOT P/DT
L16 99 L14 NOT P/DT

```

最大 200 件の  
文献が得られる

192 件の文献が得られた  
(特許 93 件、非特許 99 件)

© 2022 化学情報協会

## ヒットした関連度が最も高い非特許文献

AN 2020:1564571 HCAPLUS [Full-text](#)  
 DN 173:382188  
 ED Entered STN: 12 Aug 2020  
 TI Comparison of the analytical sensitivity of seven commonly used commercial SARS-CoV-2 automated molecular assays  
 AU Mostafa, Heba H.; Hardick, Justin; Morehead, Elizabeth; Miller, Jo-Anne; Gaydos, Charlotte A.; Manabe, Yukari C.  
 CS Division of Medical Microbiology, School of Medicine, Department of Pathology, Johns Hopkins University, Baltimore, MD, USA  
 SO Journal of Clinical Virology (2020), 130, 104578  
 CODEN: JCVIFB; ISSN: 1386-6532  
 :  
 AB The SARS-CoV-2 pandemic has challenged mol. microbiol. labs. to quickly implement and validate diagnostic assays and to expand testing capacity in a short timeframe. Multiple mol. diagnostic methods received FDA emergency use authorization (EUA) and were promptly validated for use nationwide.  
 :  
 IT Microbial gene  
 RL: ANT (Analyte); DGN (Diagnostic use); ANST (Analytical study); BIOL (Biological study); USES (Uses)  
 (E: comparison of the anal. sensitivity of seven commonly used com. SARS-CoV-2 automated mol. assays)  
 :  
 IT COVID-19  
 Homo sapiens  
 Human  
 :

SARS-CoV-2 の検出方法の比較についての非特許文献が得られた

© 2022 化学情報協会

## ヒットした関連度が最も高い特許文献

AN 2020:2157046 HCAPLUS [Full-text](#)  
 DN 173:810242  
 ED Entered STN: 28 Oct 2020  
 TI Oligonucleotide primers and probes and assays for the detection of SARS-CoV-2  
 IN Brambati, Chiara; Bocchetta, Simone; Minnucci, Giulia  
 PA DiaSorin S.p.A., Italy  
 :  
 PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
US 10815539	B1	20201027	US 2020-16837364	20200401
US 11149320	B1	20211019	US 2020-17078249	20201023
US 20210324484	A1	20211021		
WO 2021198325	A1	20211007	WO 2021-EP58424	20210331
WO 2021198326	A1	20211007	WO 2021-EP58426	20210331
US 20210340636	A1	20211104	US 2021-17374333	20210713

:  
 AB The present invention is directed to methods for assaying for the presence of severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2) in a sample, ...  
 :  
 IT Microbial gene  
 RL: ANT (Analyte); DGN (Diagnostic use); ANST (Analytical study); BIOL (Biological study); USES (Uses)  
 (ORF1ab; oligonucleotide primers and probes and assays for detection of SARS-CoV-2)

SARS-CoV-2 検出方法に関する特許文献が得られた

© 2022 化学情報協会



```

=> S (SARS_COV_2 OR NOVEL_CORONA_VIRUS OR COVID_19) (10A) (DETECT? OR ANALY?) AND
(AD<20201023 OR PRD<20201023)
L17      1283 (SARS_COV_2 OR NOVEL_CORONA_VIRUS OR COVID_19) (10A) (DETECT?
OR ANALY?) AND (AD<20201023 OR PRD<20201023)

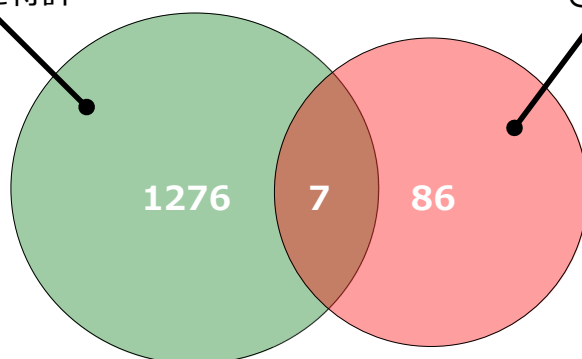
=> S L15 AND L17
L18      7 L15 AND L17

=> S L15 NOT L17
L19      86 L15 NOT L17
    
```

キーワード検索で SARS-CoV-2 の検出についての特許調査

キーワード検索で  
得られた特許

Prior Art Analysis  
で得られた特許



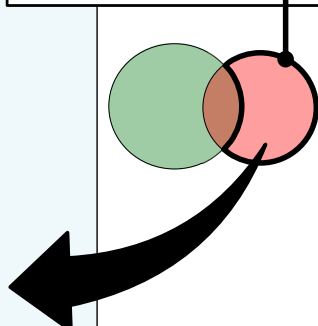
キーワード検索とは別の  
関連特許が得られた

```

=> D L19 4 ALL

L19 ANSWER 4 OF 86 HCAPLUS COPYRIGHT 2022 ACS on STN
AN 2017:1964291 HCAPLUS Full-text
DN 168:72736
ED Entered STN: 14 Dec 2017
TI Enzyme-linked oligonucleotide sorbent assay method for detecting
oligonucleotides in a test sample
IN Walker, Ameae M.; Lorenson, Mary Y.
PA The Regents of the University of California, USA
:
PI
PATENT NO.      KIND  DATE      APPLICATION NO.      DATE
-----
WO 2017214145   A1   20171214   WO 2017-US36153     20170606
US 20190136302   A1   20190509   US 2018-16306807    20181203
:
AB Certain embodiments of the invention provide a method (i.e., Enzyme Linked
Oligonucleotide Sorbent Assay (ELOSAs)) for the detection and/or
quantification of a test oligonucleotide (e.g., a small oligonucleotide)
in a test sample, such as a biol. fluid, comprising:
:
IT Bioassay
(ELOSAs (Enzyme-linked oligonucleotide sorbent); enzyme-linked
oligonucleotide sorbent assay method for detecting oligonucleotides in
a test sample)
:
    
```

Prior Art Analysis  
のみで得られた特許



核酸 (オリゴヌクレオチド) の検出に  
関する特許文献が得られた

- 特許明細書中における化学物質の記載位置を瞬時に確認できる CAS 独自の機能
- 明細書 PDF をワンクリックで簡単にダウンロードできる

The screenshot shows the CAS PatentPak interface. On the left, there is a table of patent search results with columns for Patent No., Kind, Date, Language, and PatentPak. One entry is highlighted with a red box and labeled 'Interactive'. An arrow points from this entry to the main document view on the right. The document view shows a patent document with a 'Key Substances in Patent' sidebar on the left. One substance, CAS RN 1881221-47-1, is highlighted with a red box and labeled 'Interactive'. An arrow points from this substance to a chemical structure in the main text area, which is also highlighted with a red box. The text area contains a paragraph of text and a chemical structure labeled 'Endo-BCN-PEG4'. Below the structure, there is a section titled 'Example 1: Synthesis of clickable payload'.

Interactive を利用すると、ワンクリックで化学物質の記載位置を表示できる

© 2022 化学情報協会

## CAS PatentPak - Claim タグの付与開始

物質が請求項に記載されている場合に PPAK フィールドに Claim タグが付くようになった

The screenshot shows the CAS PatentPak interface. On the left, there is a table of patent search results with columns for Patent No., Kind, Date, Language, and PatentPak. One entry is highlighted with a red box and labeled 'Claim'. An arrow points from this entry to the main document view on the right. The document view shows a patent document with a 'Key Substances in Patent' sidebar on the left. One substance, CAS RN 2776960-04-2, is highlighted with a red box and labeled 'Claim'. An arrow points from this substance to a chemical structure in the main text area, which is also highlighted with a red box. The text area contains a paragraph of text and a chemical structure labeled 'Compound 1'. Below the structure, there is a section titled 'What is claimed is:'. The text area also contains a section titled 'Example 1: Synthesis of clickable payload'.

請求項 1 のページを表示するリンク

請求項に記載された物質であることがわかる

2020 年以降に発行された米国特許、中国特許が対象

ワンクリックで請求項に記載されている位置がわかる

© 2022 化学情報協会

## 配列の記載位置の収録開始

PPAK

- 33069-62-4, Taxol, Pg 53
- 180288-69-1, Herceptin, Pg 53
- 946414-94-4, Nivolumab, Pg 53
- 2770087-61-9, Pg 26
- 2770087-62-0, Pg 26
- 2770087-63-1, Pg 26
- 2770087-64-2, Pg 26

# CAS PatentPak のリンクの有効期限延長

## リンクの有効期限が 365 日に延長

### レポート (Excel)

Answer Line	Database	PatentPak PDF	PatentPak PDF+	PatentPak Interactive	Title	Accession Number
L3 8 OF 4761	CAPLUS	<a href="#">PatentPak PDF</a>	<a href="#">PatentPak PDF+</a>	<a href="#">PatentPak Interactive</a>	Soluble interleukin-7 receptor (IL7R) modulating therapy to treat autoimmune disorder and cancer	2022:119741 8 CAPLUS
L3 10 OF 4761	CAPLUS	<a href="#">PatentPak PDF</a>	<a href="#">PatentPak PDF+</a>	<a href="#">PatentPak Interactive</a>	Preparation of prodrug glycoconjugates having antibody cell-binding agent	2022:103957 3 CAPLUS

### セッション記録

```
L3 ANSWER 10 OF 4761 CAPLUS COPYRIGHT 2022 ACS on STN
PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive
PPAK
65-47-4, CTP, Pg 56
98-59-9, 4-Toluenesulfonyl chloride, Pg 74
104-94-9, 4-Methoxyaniline, Pg 71
107-86-8, 3-Methylbut-2-enal, Pg 71
108-24-7, Acetic anhydride, Pg 76
108-30-5, Succinic anhydride, Pg 66
814-68-6, Acryloyl chloride, Pg 74
821-09-0, 4-Penten-1-ol, Pg 74
```

リンクの有効期限が 90 日から 365 日へ延長

特許ステータス更新コード STUP がアラート更新コードとして設定可能になった

Alert Settings

Title \*  
Name ① /S  
Method of delivery ① EMAIL Expires MM/DD/YYYY  
Delivery to \* (separate with comma)  
Cost center NONE  
UP  
UPM  
UPIT  
UPI  
ED  
UPP  
UPOG  
Database settings  
Database CAPLUS Print format Frequency Weekly STUP Advanced  
Save Cancel

Eliminate previously seen answers OFF  
Send alerts with no answers OFF  
Highlight hit terms ON

【重要】重複除去：OFF (NO)

STUP を選択



CAplus/CA ファイルで特許ステータス更新のウォッチングが可能に！

© 2022 化学情報協会

MARPAT ファイルの強化

## マルクージュ構造が検索できる特許データベース

(2022 年 8 月)

製作者	CAS
レコード構成	文献単位 (発明単位)
収録期間	1961 年～
収録件数	130 万件以上のマルクージュ構造
特長	<ul style="list-style-type: none"> <li>CA ファイルに収録する特許のうち、マルクージュ構造の記載がある特許を収録</li> <li>有機化合物、有機金属化合物、重合度が 10 以下のオリゴマーが収録対象</li> </ul>

© 2022 化学情報協会

## 特許ステータス収録開始

### 書誌情報に特許ステータスが収録されるようになった

```

AN 163:544811 MARPAT Full-text
TI Asparagine endopeptidase inhibitors for managing cancer and related
compositions
IN Ye, Keqiang; Fu, Haiyan; Du, Yuhong
PA Emory University, USA
:
PI
PATENT NO.      KIND  DATE      APPLICATION NO.      DATE
-----
WO 2015157376   A1    20151015   WO 2015-US24850     20150408
EP 3129375      A1    20170215   EP 2015-776775     20150408
US 20170166569  A1    20170615   US 2016-15303481    20161011
US 10759803     B2    20200901
PRAI US 2014-61978225 20140411
WO 2015-US24850 20150408
PSPI
PATENT NO.      KIND  STATUS      STATUS DATE
-----
WO 2015157376   A1    Dead        20201202
EP 3129375      A1    Dead        20201203
US 20170166569  A1    Alive       20201121
US 10759803     B2    Alive       20201121
:
    
```

CAplus/CA ファイルの  
書誌情報、抄録、索引が  
収録されている

特許ステータス表示  
PSPI フィールド

- 特許ステータス (PSPI) は CAplus, CA, MARPAT ファイルに収録されている。より詳細な法的状況データは INPADOCDB/INPAFAMDB ファイルで確認できる。

© 2022 化学情報協会

## 特許ステータス (PSPI) 分類

特許ステータス	1文字コード	内容
ALIVE	A	出願中, 特許権存続期間中など、有効な場合に付与
DEAD	D	期間満了、放棄、取り下げなど、有効な可能性がない場合に付与
TRANSITIONAL	T	最新の法的状況イベントで特許失効になる可能性があることが示された場合に付与 (取り下げ、年金未払いなど)
INDETERMINATE	I	欧州登録特許固有のステータス。 欧州登録特許は各国の国内特許権となるため、期間満了日 (計算値) までの間付与

ALIVE に戻る  
可能性もある

CHEMLIST ファイルの強化

## 化学物質の規制に関するデータベース

(2022 年 8 月)

製作者	CAS
レコード構成	化学物質単位
収録期間	1980 年～
収録件数	41 万件以上
特長	<ul style="list-style-type: none"> <li>世界の主要国の既存化学物質リスト情報を収録</li> <li>その他各国により規制されている化学物質情報を収録</li> </ul>

© 2022 化学情報協会

## UK REACH の収録開始

29

- RSTR フィールドにイギリスの UK REACH より下記リストが追加された
  - Substances of Very High Concern (SVHC)
  - Substances Subject to Authorisation (Annex XIV)

```

=> FILE CHEMLIST
=> S UK REACH/RSTR
L1      293 UK REACH/RSTR
      ((UK (W) REACH)/RSTR)

=> D L1 1 IDE

L1 ANSWER 1 of 293 CHEMLIST COPYRIGHT 2022 ACS on STN
AN  440519 CHEMLIST
CN  Oligomers of chromic acid and dichromic acid
FS  Restricted Chemical Lists: RSTR
CBI Public
RSTR UK REACH: Candidate List of Substances of Very High Concern for
      Authorisation
      Listed Name(s): Oligomers of chromic acid and dichromic acid
      Reason for Inclusion: Carcinogenic (Article 57a).
FA   RSTR Restricted Chemical Lists

```

=> S UK REACH/RSTR で検索

制限されている化学物質リスト (RSTR フィールド) に表示

© 2022 化学情報協会





CAS STNext ユーザーミーティング

WPI ファイルのリロード

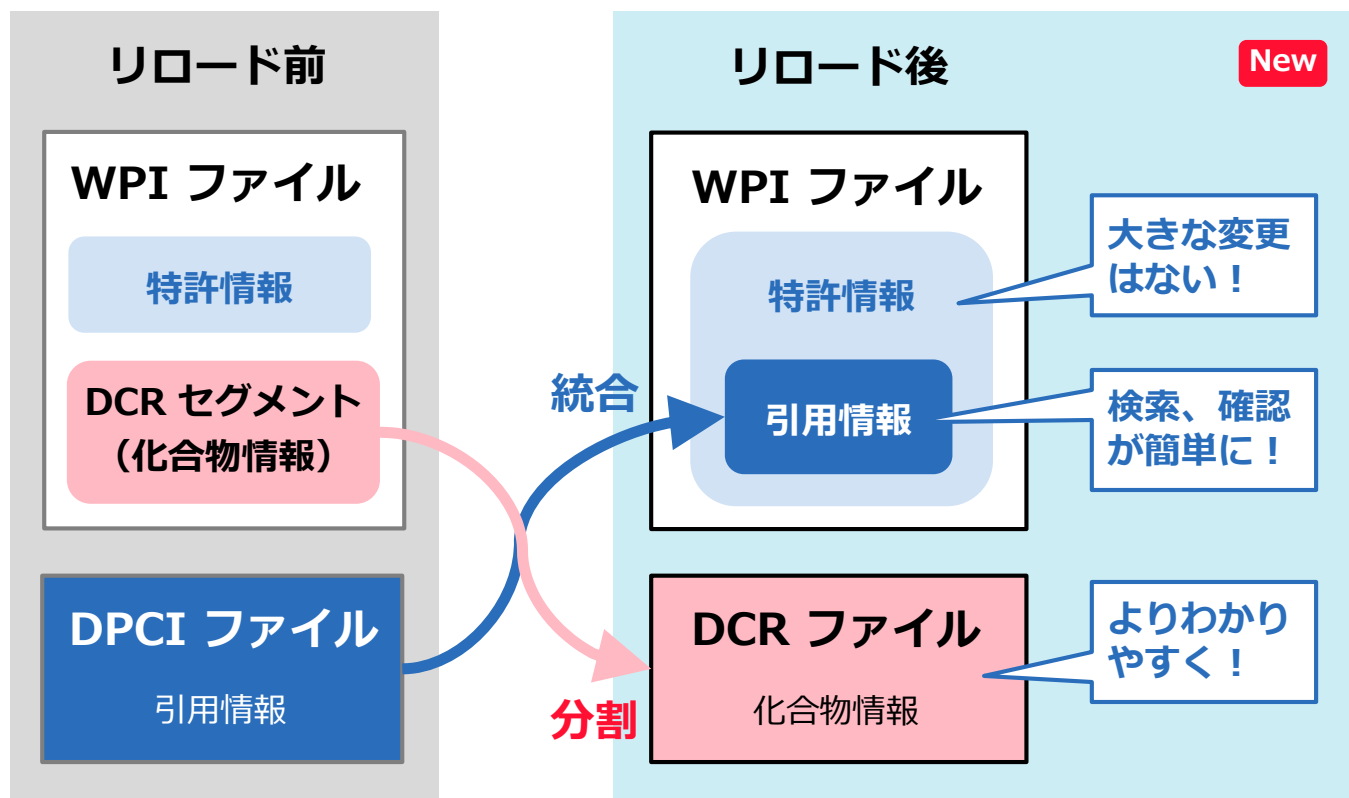


# WPI ファイルのリロード

化学情報協会 情報事業部

## 目次

1. リロードの概要
2. WPI ファイル
3. DCR ファイル



© 2022 化学情報協会

WPI ファイル

## 世界中の特許を収録しているデータベース

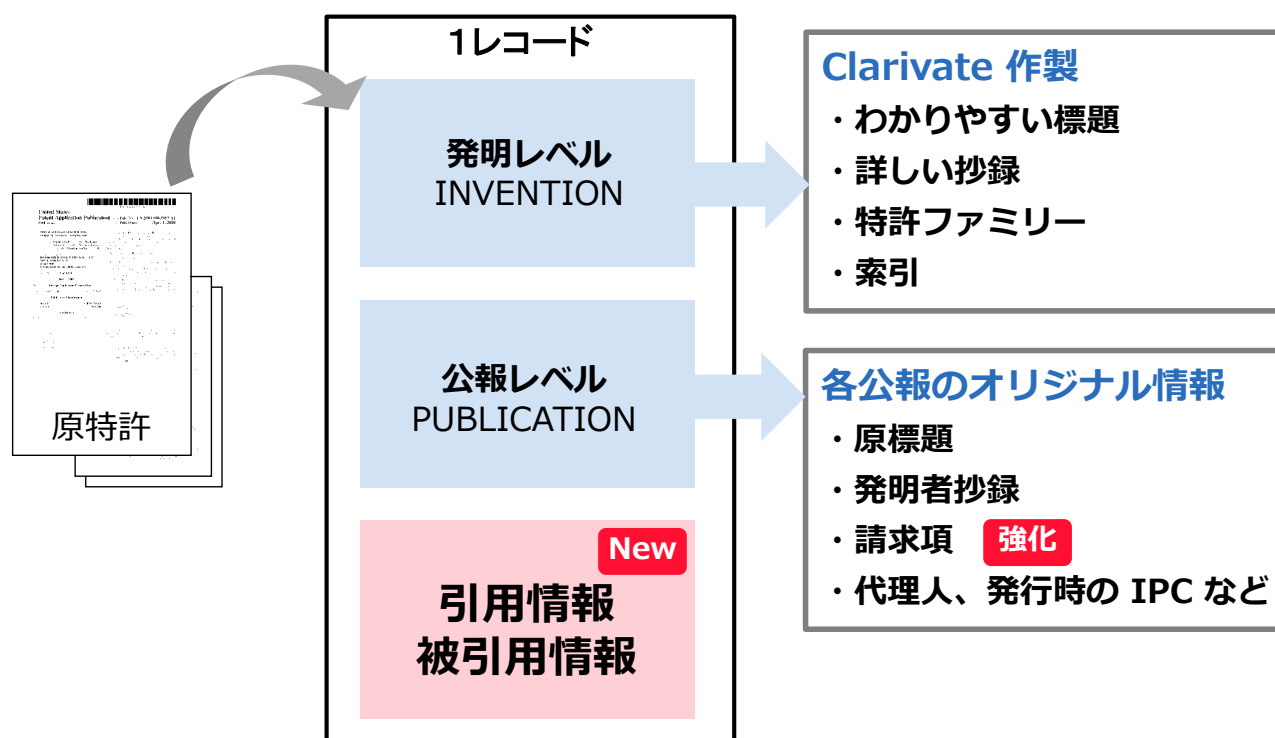
(2022 年 8 月)

製作者	Clarivate
収録国	59 特許発行機関、2 技術公開誌
収録内容	書誌情報、抄録、索引、特許分類、独自の分類コード
収録分野	<b>全技術分野</b>
レコード構成	<b>発明単位</b>
収録期間	1963 年～ (国、分野によって異なる)
更新頻度	週 2 回
特長	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Clarivate 作製の詳細な特許標題、抄録、索引を利用できる</li> <li>• 特許公報由来の原題、発明者抄録、クレームなども一部収録</li> </ul>

© 2022 化学情報協会

# WPI ファイルのレコード構成

1 レコード = 1 発明 = 1 特許ファミリー



© 2022 化学情報協会

特許情報はこれまでと同様に検索できる

### 強化点

- 引用情報の収録開始（旧 DPCI ファイルの統合）
- 特許請求項の収録対象の拡大
- 中間一致・後方一致検索可能なフィールドの拡大
- ケミカルフラグメンテーションコードに関する強化

© 2022 化学情報協会

## 引用情報の収録開始

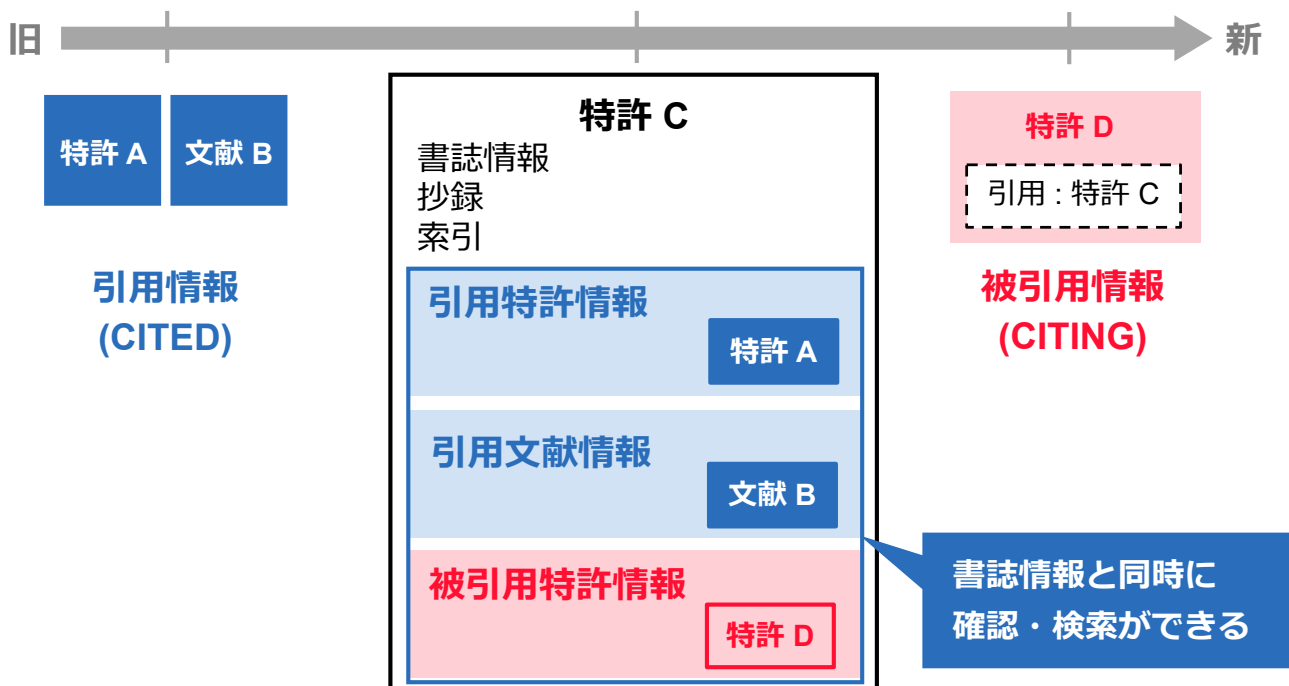
旧 DPCI ファイルの引用情報が WPI ファイルに統合

- 書誌情報と引用・被引用情報を同時に表示可能に
- 特許情報と組み合わせた引用・被引用情報の検索が WPI ファイルで完結



© 2022 化学情報協会

引用特許情報、引用文献情報、被引用特許情報がレコードに収録



© 2022 化学情報協会

## レコード例（BIB CITN 表示形式）

AN 2014-E51864 [201428] WPINDEX <a href="#">Full-text</a>	<b>BIB</b>
TI New indole carboxamide derivative, useful for treating tuberculosis in a human having sputum smear-positive, sputum smear-negative, or extrapulmonary tuberculosis, caused by drug resistant Mycobacterium tuberculosis complex organisms	
DC B02	
IN JIRICEK J; KONDREDDI R; KONDREDDI R R; KONDREDDI RAVINDER R; PAUL W; SMITH P W; SMITH PAUL W; SMITH R	
PA (NOVS-C) NOVARTIS AG; (JIRI-I) JIRICEK J; (KOND-I) KONDREDDI R R; (SMIT-I) SMITH P W	
CYC 130	
PI WO 2014037900 A1 20140313 (201428) * EN 93[0]	
CA 2881351 A1 20140313 (201514) EN	
AU 2013311235 A1 20150226 (201518) EN	
:	
Citation Counters	<b>CITN</b>
PNC. D 23 Cited Patents Count	← 引用特許数 (/PNC. D)
PCC. D 4 Cited Patents Country Count	← 引用特許の特許発行国数 (/PCC. D)
CRC 125 Cited Literature Reference Count	← 引用文献数 (/CRC)
REC 148 Cited Reference Count (total)	← 引用数 (合計) (/REC)
ANC. D 15 Cited DWPI Accession Number Count	← 引用特許の WPI レコード数 (/ANC. D)
PNC. G 15 Citing Patents Count	← 被引用特許数 (/PNC. G)
PCC. G 5 Citing Patents Country Count	← 被引用特許の特許発行国数 (/PCC. G)
ANC. G 13 Citing DWPI Accession Number Count	← 被引用特許の WPI レコード数 (/ANC. G)
EXF Examiner 's Field of Search	← 審査官調査フィールド
Citing Publication EXF Examiner's Field of Search	
JP 6223452 B2 JPC C07D; A61K; A61P	特許審査官が引用特許を検索した際に使用した特許分類を収録

© 2022 化学情報協会

CDP Cited Patents					
Citing Publication	By	Cat	Cited Patent	Date	Accession Number
WO 2014037900 A1	E	X	JP 2012107001 A	20120607	2012-G42265
PA: (SHIO-C) SHIONOGI&CO LTD IN: FUCHINO M; FUJIKOSHI C; HASHIMOTO A; KOBAYASHI N; NISHITOMI K; TAODA Y Relevant passages: abstract 1, 5, 25, 26, 29, 70, 73, 130					
EP 2892880 B1	A		WO 2011014817 A1	20110203	2011-B36360
PA: (BCRY-C) BIOCRYST PHARM INC IN: BABU Y S; KOTIAN P L; KUMAR V S; LIN T; WU M					

CDL Literature Citations			
Citing Publication	By	Cat	Literature Reference
WO 2014037900 A1	E	X	MAHBOOBI S ET AL: "Bis (1H-2-indolyl)-methanones as a Novel Class of Inhibitors of the Platelet Derived Growth Factor Receptor Kinase". JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY, AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, US, vol. 45, no. 5, 1 January 2002 (2002-01-01), pages 1002-1018, XP002374958, ISSN: 0022-2623, DOI: 10.1021/JM010988N DOI: <a href="https://doi.org/10.1021/JM010988N">https://doi.org/10.1021/JM010988N</a>

© 2022 化学情報協会

CGP Citing Patents					
Cited Publication	By	Cat	Citing Patent	Date	Accession Number
WO 2014037900 A1	E	A	CN 106715417 A	20170524	2015-610100
PA: (IOME-N) IOMET PHARMA LTD IN: COWLEY P; WISE A					
		XY	CN 107298650 A	20171027	2017-756345
PA: (SHRG-C) SHANGHAI COSMANTIC CHEM INST IN: FAN M; JIANG X; LI Y; ZHOU W					
	E		CN 106715417 A	20170524	2015-610100
PA: (IOME-N) IOMET PHARMA LTD IN: COWLEY P; WISE A					
EP 2892880 B1	E	X	WO 2019220461 A1	20191121	2019-982667
PA: (COUI-C) COUNCIL SCI & IND RES INDIA IN: CHOPRA S; DASGUPTA A; RAMANA S R; REDDY D S; SHINGARE R D					

© 2022 化学情報協会



専用の検索フィールドを使うことで、簡単に検索可能

検索フィールド	本願	引用特許	被引用特許
レコード番号	/AN	/AN.D	/AN.G
出願人コード	/PACO	/PACO.D	/PACO.G
発行国	/PC	/PC.D	/PC.G
特許番号	/PN	/PN.D	/PN.G
発行年	/PY	/PY.D	/PY.G
審査官カテゴリー	-	/CAT	
		/CAT.D	/CAT.G
引用者	-	/ORC	
引用・被引用特許のレコード数	-	/ANC.D	/ANC.G

引用特許 (CITED) の検索には **.D** を、  
被引用特許 (CITING) の検索には **.G** をつけるだけ！

© 2022 化学情報協会

引用・被引用情報を両方表示したい場合、**CITN** 表示形式（省略形式：**CITNA** 表示形式）を利用

	表示形式（括弧内は重複を除いた省略形式*）	
引用数	CITC	<b>CITN (CITNA)</b>
審査官の検索分野	EXF (EXFA)	
引用特許	CDP (CDPA)	
引用文献	CDL (CDLA)	
被引用特許	CGP (CGPA)	

\* レコードに含まれるファミリー内のすべての特許ごとに引用・被引用情報が収録されるため、重複している情報もある。省略形式を利用すると重複を除いてコンパクトに表示することができる

© 2022 化学情報協会

# CRISPR/Cas システムによる多重ゲノム編集について広く特許調査する

- キーワード検索と引用・被引用情報の検索を併用
  - キーワード検索では公報レベルを含めて網羅的に検索 /BI,BIEX
  - 引用・被引用特許情報中の WPI レコード番号を利用して、引用・被引用特許を検索

CRISPR/Cas システム：  
DNA の二本鎖切断を原理とする高精度・簡単・安価な遺伝子改変技術



© 2022 化学情報協会

```

=> FILE WPIINDEX                ← WPI ファイルに入る
=> S ((CRISPR (S) CAS##) AND (MULTI? (2A) GEN? (2A) EDIT?))/BI,BIEX
L1      102 ((CRISPR (S) CAS##) AND (MULTI? (2A) GEN? (2A) EDIT?))/BI,BIEX
=> D CITNA 100-102              ← 引用情報を確認 (CITNA 表示形式：コンパクトに引用、被引用情報を表示)
L1      ANSWER 100 OF 102 WPIINDEX COPYRIGHT 2022  CLARIVATE on STN
AN      2014-T38051 [201469]  WPIINDEX

Citation Counters
-----
PNC.D    63      Cited Patents Count
:
PNC.G    148     Citing Patents Count
:

Cited Patents
-----
Cited Publication  By      Accession Number
-----
US 5571690 A      E      1996-505399
US 8252535 B2     E      2008-N67499
US 8697359 B1     E      2014-G67519
:

Citing Patents
-----
Citing Publication  By      Accession Number
-----
CN 112195164 A     E      2021-08582H
CN 112195164 B     E      2021-08582H
:
    
```

キーワード検索

引用・被引用特許番号、引用者および WPI レコード番号がコンパクトに表示

引用特許のレコード番号 /AN.D

関連技術分野も広く調査するために、引用・被引用特許を検索

被引用特許のレコード番号 /AN.G

© 2022 化学情報協会

```

=> TRA L1 AN. D AN. G /AN
L2 TRANSFER L1 1- AN. D AN. G : 1521 TERMS
L3 1414 L2/AN

=> S L3 OR L1 ← L1 と L3 をまとめる
L4 1478 L3 OR L1

=> D MAX MEMB 1-2 ← MAX MEMB 表示形式で回答を確認

L4 ANSWER 1 OF 1478 WPINDEX COPYRIGHT 2022 CLARIVATE on STN
AN 2022-77868U [2022056] WPINDEX Full-text
CR 2021-52487U; 2021-A1774W; 2021-D02876; 2022-351510
TI Type I CRISPR system for identifying cells having genome that is rationally edited comprises first vector comprising nucleic acid sequence encoding first half of split protein reporter system comprising cascade-T7 polymerase fusion protein
DC B04; C06; D16
IN FEDEROWICZ S; GARST A; MIR A; SEAMON K
:

L4 ANSWER 2 OF 1478 WPINDEX COPYRIGHT 2022 CLARIVATE on STN
AN 2022-713894 [2022052] WPINDEX Full-text
TI Genetically altering target cells by combining within each of wells of first well plate, liposome comprising crRNA portion of guide RNA, liposome comprising tracrRNA portion, liposome comprising Cas enzyme, and target cell
:
AB US 20220162601 A1 UPAB 20220701
:
ADVANTAGE - The methods using CRISPR-Cas systems provide a platform for high efficiency genome editing of cells. The use of a multi-well plate and CRISPR-Cas system components produces high throughput, multiplexed genome-wide cell editing.
:
    
```

L1 のレコードから引用・被引用情報中の WPI レコード番号 (AN.G, AN.D) を抽出し、レコード番号 /AN で検索

引用・被引用検索でヒット

キーワード検索でヒット

```

Member (0001)
PI US 20220162601 A1 20220526 (2022052)* EN
TIEN HIGH THROUGHPUT GENE EDITING SYSTEM AND METHOD
:
CLMEN [CLAIM 1] 1. A method of genetically altering a plurality of target cells comprising (a) combining within each of a plurality of wells of a first well plate (1) a liposome comprising a crRNA portion of a guide RNA,
:
[CLAIM 29] 29. The method of claim 1 wherein the well concentration of Cas enzyme is between 60 nM and 80 nM.
[CLAIM 30] 30. The method of claim 1 wherein the liposome comprising a crRNA portion of a guide RNA, the liposome comprising a tracrRNA portion of the guide RNA, the liposome comprising a Cas enzyme or a nucleic acid sequence encoding the Cas enzyme, and the target cell are provided to the well by droplet transfer from a source container to the well using sound waves.
[CLAIM 31] 31. The method of claim 1 wherein the Cas enzyme is a Cas enzyme of a Type II CRISPR system.
    
```

(S)

(S)

(S)

(S)

(P)

**特許請求項の演算子の範囲** New

- (P) 演算子 : 同一公報の同一言語内
- (S) 演算子 : 同一クレーム (パラグラフ) 内

下記 21 特許発行機関で全クレームが収録されるように

全クレーム収録				
アルゼンチン (AR)	ブラジル (BR)	カナダ (CA)	スイス (CH)	中国 (CN)
ヨーロッパ特許庁 (EP)	スペイン (ES)	フランス (FR)	イギリス (GB)	インドネシア (ID)
インド (IN)	日本 (JP)	韓国 (KR)	マレーシア (MY)	ロシア (RU)
タイ (TH)	トルコ (TR)	台湾 (TW)	アメリカ (US)	ベトナム (VN)
PCT 出願 (WO)				

リロード前、多くは  
メインクレームのみ収録。  
(中国・韓国はリロード前  
も全クレーム収録)

メインクレーム収録		
ドイツ (DE)	メキシコ (MX)	シンガポール (SG)

多くの機関は 2015 年以降の特許レコードで収録。詳細は下記ページを参照  
<https://www.stn-international.com/en/training-center/documentation/dwpi-summary-table-first-level-patent-data>

© 2022 化学情報協会

## 中間一致・後方一致検索可能なフィールドの拡大

下記フィールドで中間一致・後方一致検索が可能

入力例) => S ?SENSOR?/TIEN

「BIOSENSOR」や  
「SENSORY」もヒット

基本索引	/BI, /BIEX
標題	/TI, <b>/TIEN, /TIDE, /TIFR, /TIES, /TIOL</b>
クレーム	/CLM, <b>/CLMEN, /CLMDE, /CLMFR, /CLMES, /CLMOL</b>
抄録	/AB, /TECH, /ABEX*, /ABDE, /ABEN, /ABES, /ABFR, /ABOL, <b>/ABDT*</b>

赤字が追加

※ WPIX ファイルでのみ表示可能。ABEX : 拡張抄録、ABDT : ドキュメンテーション抄録

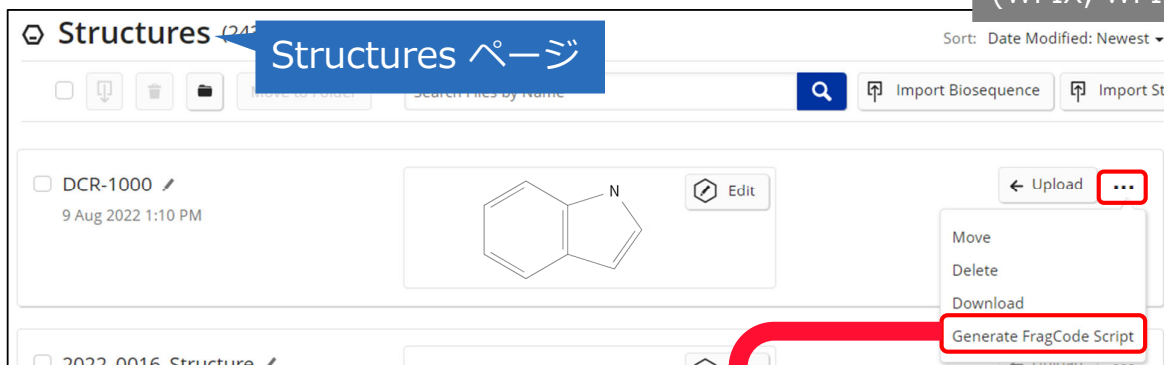


公報レベルの検索がより便利に!

© 2022 化学情報協会

CAS STNNext に構造質問式からケミカルコードの検索式を自動作成する機能が搭載！

会員のみ  
(WPIX, WPIDS)

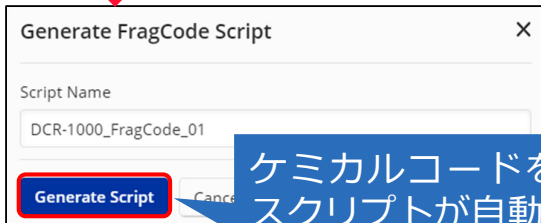


※ 会員のみ表示

ケミカルフラグメンテーションコードとは、構造を断片的にコード化したもので、WPIファイルの索引に利用される

```
M3 *01* D000 D601 M280 M320 M412 M511 M520 M530 M540 M750 N134 Q431
M905 M904 M910
DCN-R01003-X DCN-R01003-K
DCR-1000-X DCR-1000-K
```

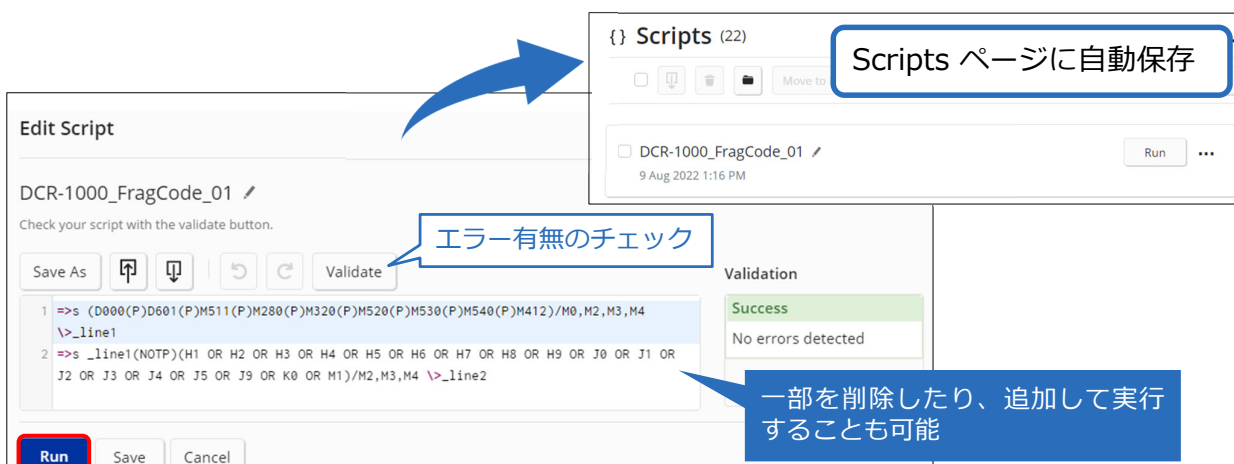
WPI ファイルの索引



ケミカルコードを含むスクリプトが自動作成

© 2022 化学情報協会

作成されたスクリプトの編集画面が自動で立ち上がる



WPIX または WPIDS  
ファイルに入った状態  
で実行



自動で検索が実行される

\* => S L# (NOTP)(DCR OR MCN)/MALL で DCR, MCN の索引がないレコードに限定できる

© 2022 化学情報協会

● テキスト中の数値検索機能の強化

- ppm、磁界強度、屈折率などが追加され、59 種類に

● 更新コードの追加

新規更新コード	定義
UPD	引用情報の更新
UPG	被引用情報の更新
UPIN	発明者情報 (発明レベル) の更新
UPPA	出願人情報 (発明レベル) の更新

● 特許番号入力形式の変更

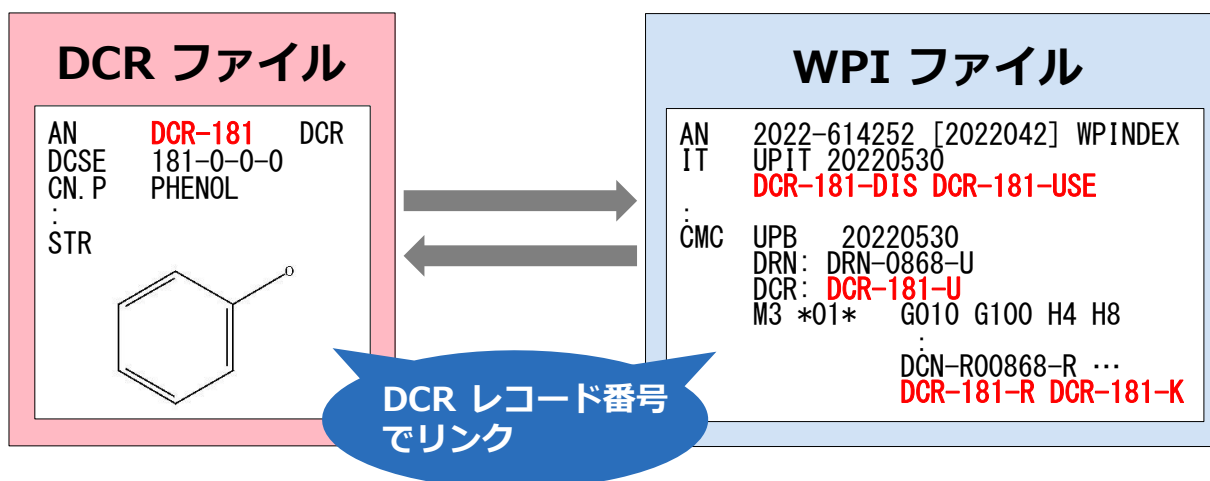
	入力形式	検索例
日本登録特許 (JPB, JPB1, JPB2)	番号の後ろに B を追加	=> S JP6972444B/PN
実用新案	番号の後ろに U を追加	=> S CN214259850U/PN

● ロールの検索フィールド /RL の追加 (後述)

DCR ファイル

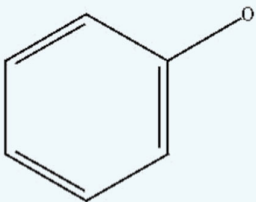
化学物質情報が WPI ファイルから分離され、独立したデータベースとしてリリース！

- WPI レコードに索引された重要な特定化学物質が収録  
(ダウエントセクション B (医薬)、C (農薬)、E (一般化学))



© 2022 化学情報協会

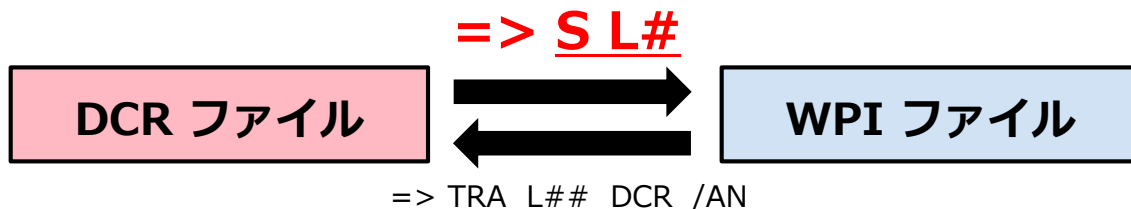
## DCR ファイルのレコード例

DCR レコード番号	AN	DCR-181	DCR	収録内容や収録状況に変更点はない														
DCR 番号	DCSE	181-0-0-0																
優先化学物質名	CN. P	PHENOL																
統制化学物質名	CN. S	Phenol																
同義名	SY	2, 5-CYCLOHEXADIENE-1-ONE; CARBOL; CARBOLIC ACID; CARBOLIC-ACID; CEPASTAT; CHLORASEPTIC; CHLORASEPTIC; DOBELLS-SOLUTION; GREEN THROAT SPRAY; JABON-FENICADO; JASON-FENICADO; MENTOSEPTAN; MIKRO-BAC; NORAVERT; PAOSCLE; PHENASEPTIC; PHENOL; PHENOL-IN-OIL; PHOH; RED THROAT SPRAY; TRIAMINIC SORE THROAT SPRAY																
																		
分子式	MF	C6 H6 O																
標準化分子式	SMF	TYPE *1; C6 H6 O *1; TOTAL *1																
分子量	MW	94.1124																
ダウエント化合物番号	SDCN	R00868																
ダウエント登録番号	SDRN	0868																
入力日・更新日	ED	Entered STN: 26 Apr 1999 Last updated on STN: 30 Jan 2017 Update DWPI Cross Ref.: 4 Aug 2022																
		<table border="1" style="width: 100%;"> <thead> <tr> <th colspan="2">主な検索フィールド</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>/AN</td> <td>DCR レコード番号</td> </tr> <tr> <td>/CN</td> <td>化学物質名称 (CN.P, CN.S, SY)</td> </tr> <tr> <td>/CNS</td> <td>化学物質名称セグメント</td> </tr> <tr> <td>/MF</td> <td>分子式</td> </tr> <tr> <td>/ELC</td> <td>元素数</td> </tr> <tr> <td>/ELS</td> <td>元素記号</td> </tr> </tbody> </table>		主な検索フィールド		/AN	DCR レコード番号	/CN	化学物質名称 (CN.P, CN.S, SY)	/CNS	化学物質名称セグメント	/MF	分子式	/ELC	元素数	/ELS	元素記号	
主な検索フィールド																		
/AN	DCR レコード番号																	
/CN	化学物質名称 (CN.P, CN.S, SY)																	
/CNS	化学物質名称セグメント																	
/MF	分子式																	
/ELC	元素数																	
/ELS	元素記号																	

© 2022 化学情報協会

化学物質から特許情報を検索する方法が大きく変更！

### DCR ファイルの L 番号を WPI ファイルで検索



物質検索から文献を得る検索の流れが、すべて L 番号によるクロスオーバー検索に統一！

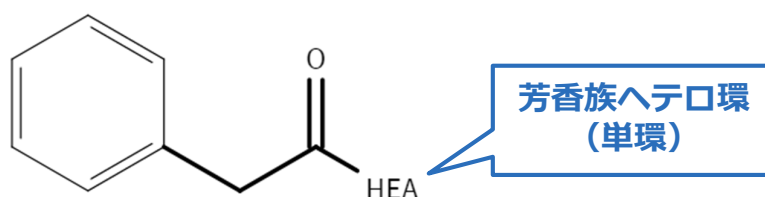


© 2022 化学情報協会

## 検索例2

27

下記の構造を持つ物質を合成している特許の検索



- **DCR ファイル**で部分構造検索
- WPI ファイルに**クロスオーバー検索**
- □ール（特許中の化学物質の役割を表すコード）を利用
  - **/RL フィールド**（WPI ファイル） New
    - ・合成の□ール      : **PRD** または **P**
    - ・新規物質の□ール : **NEW** または **N**

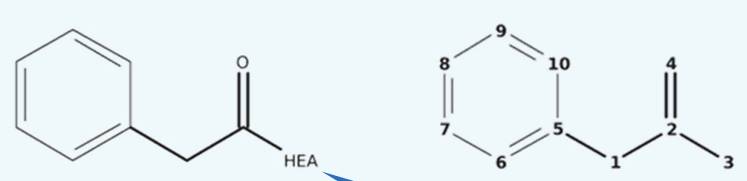
© 2022 化学情報協会



=> **FILE DCR**

=>  
Uploading structure file: 2022\_0020\_Structure

DCR ファイルで構造検索



Node Attributes  
Ring Nodes : 5 6 7 8 9 10  
Chain Nodes : 1 2 4  
Bond Attributes  
Ring Bonds : 5-6 6-7 7-8 8-9 9-10 10-5  
Chain Bonds : 1-2 1-5 2-3 2-4  
Exact Bonds : 1-2 1-5  
Normalized Bonds : 5-6 6-7 7-8 8-9 9-10 10-5  
Exact/Normalized Bonds : 2-3 2-4  
Markush Attributes  
Match Level (ATOM) : 1 3 5 6 7 8 9 10  
Match Level (CLASS) : 2 4  
Element Count Level (LIMITED) : 1 2 3 4 5 6 7

DCR/DWPIM 用スーパーアトムを利用できるように New

Variables		Derwent (DWPIM/DCR) generic nodes	
X	Any halogen	▶ Metals	
M	Any metal	▶ Carbon Chains	
A	Any atom except H	▶ Carbocycles	
Q	Any atom except C or H	▼ Heterocycles ヘテロ環	
Ak	Any carbon chain	HEA	Heteroaryl
Cy	Any cycle	HET	Heterocycle
Cb	Any carbocycle	HEF	Fused heterocycle
Hy	Any heterocycle	Hy をさらに細分化	
Id	ID generic node	▶ Miscellaneous (DWPIM only)	

L1      STRUCTURE UPLOADED

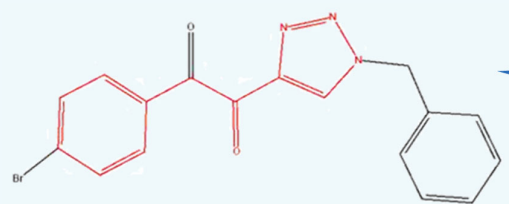
© 2022 化学情報協会

=> **S L1**      ← 部分構造検索 (SSS) のサンプル検索 (SAM) : SSS と SAM は省略可

:  
L2            45 SEA SSS SAM L1

=> **D SAM 1-**      ← SAMPLE 表示形式でヒットした構造を確認

L2      ANSWER 1 OF 45 DCR    COPYRIGHT 2022 CLARIVATE on STN.  
MF      C17 H12 Br N3 O2



ヒット部分がハイライト New

:  
=> **S L1 FUL**      ← 部分構造検索のフルファイル検索 (FUL)

FULL SEARCH INITIATED 15:30:48 FILE 'DCR'  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 4512125 TO ITERATE  
:  
L3            412 SEA SSS FUL L1

検索範囲	回答件数の制限
サンプル検索	50
<span style="background-color: red; color: white; padding: 2px;">強化</span> フルファイル検索	<b>1,500,000</b>

© 2022 化学情報協会

⇒ FILE WPINDEX ← WPI ファイルに入る

⇒ S L3 (T) (PRD OR P OR NEW OR N)/RL  
 L4 128 L3 (T) (PRD OR P OR NEW OR N)/RL

⇒ D BIB HITCODE HITSTR 1-  
 :  
 L4 ANSWER 2 OF 128 WPINDEX COPYRIGHT 2022 CLARIVATE  
 AN 2022-15956J [2022030] WPINDEX [Full-text](#)  
 :  
 PI CN 113912556 A 20220111 (2022030)\* ZH  
 ADT CN 113912556 A CN 2021-11375686 20211119  
 PRAI CN 2021-11375686 20211119  
 IT UPIT 20220419  
 DCR-5725479-EX **DCR-5725479-PRD**; DCR-5725480-EX **DCR-5725480-PRD**;  
 DCR-5725481-EX **DCR-5725481-PRD**; DCR-148-CL DCR-148-RCT; DCR-129372-CL  
 :  
 AN S DCR-5725479  
 CN P 1-(1-benzyl-1H-1,2,3-triazol-4-yl)-2-phenylethane-1,2-dione  
 MF C17 H13 N3 O2  
 STR

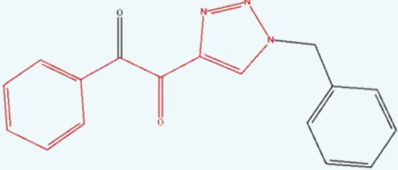
WPI ファイルへは L 番号でクロスオーバー！  
 WPI ファイルへクロスオーバー可能な DCR  
 ファイルの回答件数は 20 万件

ロール検索をできる /RL が追加 **New**  
 化学物質とロールを組み合わせる場合は  
 (T) 演算子を利用

HITCODE

HITSTR

HITSTR 表示形式を利用  
 すると、WPI ファイル中  
 でヒットした構造を確認  
 できる



© 2022 化学情報協会

## 参考：WPI ファイルのロール

### ■ DCR レコード番号用ロール

ロール	定義	説明	ロール	定義	適用範囲
CL	CLAIM	クレームに記載	RCT	REACTANT	出発物質、中間体
EX	EXAMPLE	実施例に記載	RGT	REAGENT	試薬
DIS	DISCLOSURE	発明の詳細な説明に記載	CMP	COMPONENT	混合物の構成成分
NEW	NEW	新規の物質、方法、装置	PUR	PURIFIED	精製
PRD	PRODUCED	合成方法、製造方法	REM	REMOVED	除去された物質、不純物
USE	USE	用途	TES	TESTED	テストされた物質、機器
DET	DETECTED	検出条件、検出された物質	ST	SALT	塩

### ■ ダウメント化合物番号 (DCN) 用ロール

ロール	説明	ロール	説明
A	分析、検出	Q	出発物質によって規定された製品
C	触媒	R	除去剤、精製剤
D	検出剤	S	出発物質、中間体
E	賦形剤	T	治療活性物質、プロドラッグ
K	既知化合物	U	用途
M	混合物の構成要素	V	試薬
N	新規の物質	X	除去された物質
P	既知物質の合成方法、製造方法	Z	その他

DCR ファイルから WPI ファイルへのクロスオーバー検索についてアラート (SMARTracker) が設定可能に

## SMARTracker

関心ある物質の最新文献情報を得る際に設定するアラート。物質データベースから文献データベースへのクロスオーバーまでの一連の検索について設定できる

=> FILE DCR WPINDEX

DCR と WPI の  
両ファイルに入る

=> SDI XFILE

定期的に最新情報が  
メール等で配信！



© 2022 化学情報協会

## 設定例 (検索例 2)

=> FILE DCR WPINDEX

← DCR ファイルと WPI ファイル (マルチファイル) に入る

=> SDI XFILE

DCR ファイルからのクロスオーバー  
検索を含む L 番号

ENTER QUERY L# FOR SDI REQUEST OR (END): L4

ENTER UPDATE FIELD CODE (UP), ED, UPP, UPPA, UPIN, UPIT, UPCP, UPIC, UPFT, UPTI, UPAB, UPMC, UPB, UPA, UPAG, UPAT, UPA, UPCL, UPG, UPD OR ? : UPIT

UPIT : 索引情報の更新

ENTER SDI REQUEST NAME, (AA052/S), OR END: PARA/S

ENTER COST CENTER (NONE) OR NONE: \_

ENTER TYPE OF SEARCH (SSS), CSS, FAMILY, OR EXACT: SSS

構造検索のタイプを指定

ENTER TITLE (NONE): PARA DCR

ENTER METHOD OF DELIVERY (EMAIL), ONLINE OR RSS: \_

ENTER EMAIL ID (7152T): OOOO@jaici.or.jp

RECEIVE DELIVERY NOTIFICATION? Y/(N): N

ELIMINATE PREVIOUSLY SEEN ANSWERS WITH EACH SDI RUN? Y/(N): Y

ENTER PRINT FORMAT (STD) OR ? : IBIB AB HITCODE HITSTR

表示形式を指定

HIGHLIGHT HIT TERMS? (Y)/N: \_

ARCHIVE ANSWERS? Y/(N): \_

REDISTRIBUTE ANSWERS? Y/(N): \_

ENTER MAXIMUM NUMBER OF HITS TO BE DELIVERED PER RUN (100): \_

SORT SDI ANSWER SET (N)/Y?: \_

SEND SDI WITH NO ANSWERS? (Y)/N: \_

実行頻度は毎週、更新毎、  
毎月から選択

ENTER SDI RUN FREQUENCY - WEEKLY, (EVERYUPDATE), MONTHLY, OR ? : WEEKLY

ENTER SDI EXPIRATION DATE 'YYYYMMDD' OR (NONE): \_

QUERY L4 HAS BEEN SAVED AS SDI REQUEST 'PARA/S'

© 2022 化学情報協会

● 新規検索フィールドの追加

検索フィールド	内容
BI	基本索引 (CN, CMT, MF, SCT から切り出した語を含む)
FA	フィールドの存在

● 検索フィールドの変更

検索フィールド	内容
/NC	成分数 (リロード前の /NFRAG は削除)
/NC.TOT	係数を含めた成分数 (リロード前の /NC から変更)
/MF	分子式 (スペースの有無にかかわらず検索できるように変更)

© 2022 化学情報協会

WPI ファイルがリロードされ、

- 引用情報 (旧DPCI ファイルの情報) が含まれるように
- 21 特許発行機関で全クレーム情報が収録されるように
- DCR ファイルが独立し、REGISTRY/CAplus ファイルと同様の仕組みで検索が可能に



© 2022 化学情報協会

CAS STNext ユーザーミーティング

配列ファイルのリロード



# 配列ファイルのリロード

化学情報協会 情報事業部

## 目次

1. 配列ファイル
2. リロードに伴う強化点
3. 検索例

## 配列ファイル

### CAS STNext の配列関連のファイル

3

GENESEQ (旧 DGENE), USGENE, PATGENE (旧 PCTGEN) ファイルがリロードされた

ファイル名	内容	配列検索機能		
		完全配列/ 部分配列	BLAST ホモロジー	GETSIM ホモロジー
GENESEQ	世界の特許から抽出した配列を収録	○	○	○
USGENE	米国特許に記載された配列を収録			
PATGENE	PCT 出願に記載された配列を収録			
REGISTRY	世界の雑誌や特許から抽出した配列を収録	○	○	-
GenBank	米国国立衛生研究所作成の核酸配列データベース	-	-	-

リロード

機能	内容	配列検索機能
Biosequences Search	下記から配列を収録 <ul style="list-style-type: none"> <li>REGISTRY ファイル</li> <li>73 カ国の特許発行機関の特許</li> <li>NCBI 由来の配列</li> </ul>	BLAST 配列検索 CDR 配列検索 Motif 配列検索



(2022 年 8 月)

	GENESEQ (旧 DGENE)	USGENE	PATGENE (旧 PCTGEN)
製作者	Clarivate	SequenceBase Corp	FIZ Karlsruhe
収録源	WPI ファイルのベーシック特許	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ INSCD (核酸)</li> <li>・ NCBNI/EMBL-EBI (タンパク質)</li> <li>・ USPTO PSIPS 配列情報</li> <li>・ 米国特許の Sequence Listing</li> </ul>	PCT 出願
レコード構成	配列単位	配列単位	配列単位
収録期間	1981 年～	1981 年～	2001 年 8 月～
収録件数 (合計)	5,900 万件以上	1 億件以上	2,500 万件以上
核酸	4,100 万件以上	7,300 万件以上	1,800 万件以上
タンパク質	1,800 万件以上	2,800 万件以上	720 万件以上
更新頻度	毎週	毎週	毎週
特長	GENESEQ 独自の抄録を作成しているため配列に関する説明情報が豊富	速報性に優れている (通常 3 日以内)	速報性に優れている (通常 1 日)

© 2022 化学情報協会

## RUN コマンドを使用した配列検索

配列検索は RUN コマンドで実行する

BLAST ホモロジー検索    => RUN BLAST コード/検索フィールド パラメータ  
 GETSIM ホモロジー検索    => RUN GETSIM コード/検索フィールド パラメータ  
 完全配列・部分配列検索    => RUN GETSEQ コード/検索フィールド パラメータ

- コードは以下の順で入力する
  - 核酸：5' 末端から 3' 末端の順
  - タンパク質：N 末端 (NH<sub>2</sub>) から C 末端 (COOH)
- パラメータは各ファイルの HELP OPTIONS および HELP GSEQ で確認できる

© 2022 化学情報協会

## リロードに伴う強化点

### ホモロジー検索のプログラムの強化

7

#### BLAST ホモロジー検索

- 最新版の BLAST プログラム Version 2.12.0 になり検索タイプが追加された

#### GETSIM ホモロジー検索

- 最新版の GETSIM プログラム Version 36.3.8h になり検索速度が大幅に改善された

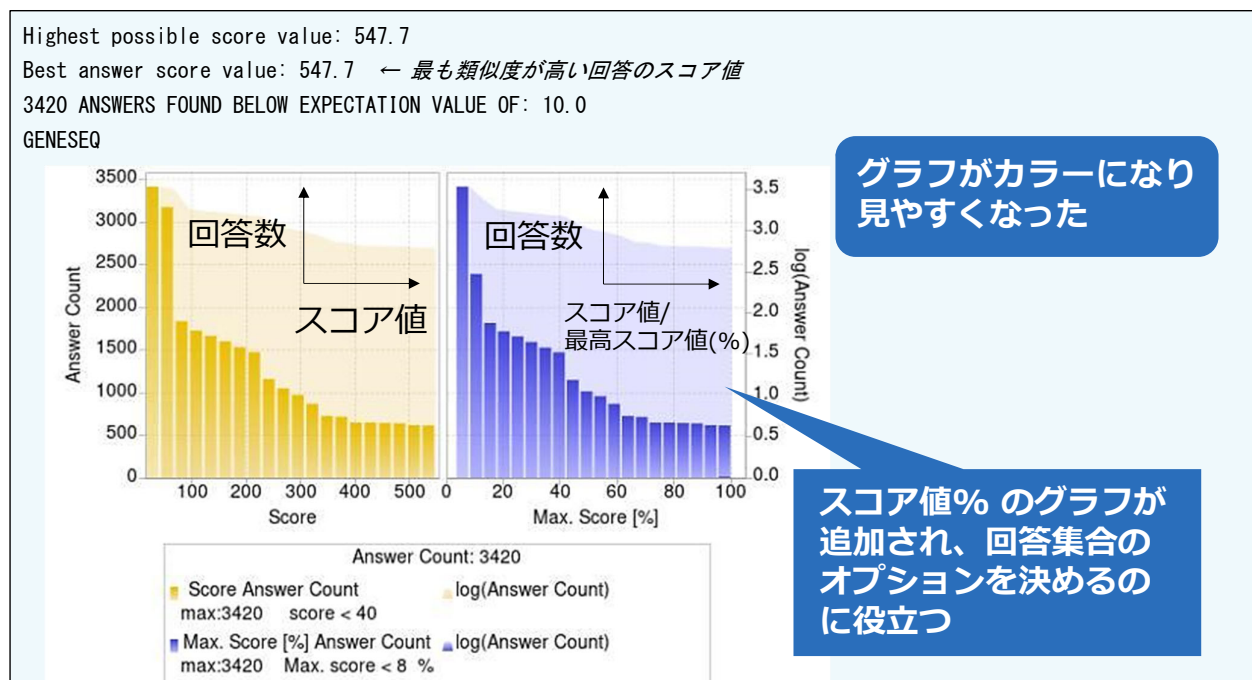
## BLAST ホモロジー検索は検索タイプが 7 つに増加

検索フィールド	BLAST	GETSIM	内容	質問式	回答
/SQN	○	○	塩基配列の質問式に類似した塩基配列を検索	塩基配列	塩基配列
/TSQN	○	○	データベース中の塩基配列をアミノ酸に翻訳した配列の中からアミノ酸配列の質問式に類似した配列を検索	アミノ酸配列	塩基配列
/SQP	○	○	アミノ酸配列の質問式に類似したアミノ酸配列を検索	アミノ酸配列	アミノ酸配列
<b>New</b> /SQM	○	-	非常に類似した（種内などの）配列用に最適化された BLASTn (megaBLAST)	塩基配列	塩基配列
/SQDM	○	-	一部の塩基を無視し（多少のミスマッチを許容し）、より離れた（種間などの）配列を検索するために最適化された BLASTn (discontiguous megaBLAST)	塩基配列	塩基配列
/TSQP	○	-	塩基配列の質問式をアミノ酸配列に翻訳してこれに類似したアミノ酸配列を検索 (BLASTx)	塩基配列	アミノ酸配列
/TSQNX	○	-	塩基配列の質問式をアミノ酸配列に翻訳してこれに類似したアミノ酸配列に翻訳された塩基配列を検索 (tBLASTx)	塩基配列	塩基配列

© 2022 化学情報協会

## ホモロジー検索のワークフローの変更

ワークフローがより便利になり、様々な観点で回答集合を作成可能に！



© 2022 化学情報協会

Query time: 681

- ① EITHER "ALL" TO KEEP ALL ANSWERS
- ② OR ENTER THE MINIMUM SCORE VALUE YOU WISH TO KEEP
- ③ OR ENTER THE MINIMUM PERCENT OF SCORE FOLLOWED BY "% SCORE"
- ④ OR ENTER THE MINIMUM PERCENT OF IDENTITY FOLLOWED BY "% IDENT"
- ⑤ OR COMBINE MINIMUM PERCENT OF SCORE AND IDENTITY AS "X% SCORE Y% IDENT"
- ⑥ OR ENTER "END". "END" MUST BE ENTERED TO COMPLETE THE RUN COMMAND.

ENTER (ALL) OR ?:ALL 回答集合のオプションを選択する

	内容	入力例
①	回答全件 (ALL と入力)	ALL
②	入手したいスコア値の最低値 (数字を入力)	300
③	入手したいスコア値パーセント (スコア値/最高スコア値) の最低値	85% または 85% SCORE
④	入手したい同一性パーセント (一致コード数/Alignment コード数) の最低値	100% IDENT
⑤	入手したいスコア値パーセントの最低値と同一性パーセントの最低値	85% SCORE 100% IDENT
⑥	終了時 (END を入力)	END

① ENTER EITHER "ALL" TO KEEP ALL ANSWERS  
 ② OR ENTER THE MINIMUM SCORE VALUE YOU WISH TO KEEP  
 ③ OR ENTER THE MINIMUM PERCENT OF SCORE FOLLOWED BY "% SCORE"  
 ④ OR ENTER THE MINIMUM PERCENT OF IDENTITY FOLLOWED BY "% IDENT"  
 ⑤ OR COMBINE MINIMUM PERCENT OF SCORE AND IDENTITY AS "X% SCORE Y% IDENT"  
 ⑥ OR ENTER "END". "END" MUST BE ENTERED TO COMPLETE THE RUN COMMAND.  
 ENTER (ALL) OR ?:

回答集合のオプションを変えて、  
 何度でも回答集合を作成できる

© 2022 化学情報協会

## 回答件数の上限の緩和

### ホモロジー検索において回答上限数が増加

	リロード前	リロード後
BLAST ホモロジー検索 GETSIM ホモロジー検索	10,000 件	15,000件 (デフォルト) ● パラメータ設定で <b>最大 100,000 件</b> まで変更可能
完全配列検索 部分配列検索	250,000 件 (L 番号は 25,000 件ずつ作成されるので最後に複数の L 番号をまとめる)	250,000 件 ( <b>1 つの L 番号</b> にまとまる)

- ホモロジー検索で回答数の上限を変更するには、  
-MAXSEQ パラメータを利用する。

=> RUN BLAST L1/SQN **-MAXSEQ 100000**

この設定で最大 10 万件に!

© 2022 化学情報協会

● ホモロジー検索

検索フィールド	BLAST		GETSIM	
	最小	最大	最小	最大
/SQN	9	30,000	9	30,000
/TSQN	9	20,000	3	10,000
/SQP	6	30,000	4	30,000
/SQM	28	30,000	-	-
/SQDM	36	30,000	-	-
/TSQP	18	30,000	-	-
/TSQNX	18	5,000	-	-

リロードにより、最大値が 1 万コードから 3 万コードに増加

● 完全配列検索、部分配列検索

検索フィールド	最小	最大
/SQEN	2	10,000
/SQSN	8	10,000
/SQEP	2	10,000
/SQEFP	2	10,000
/SQSP	3	10,000
/SQSFP	5	10,000

リロードにより、最大値が 2000 コードから 1 万コードに増加

# 相補鎖検索の強化

核酸検索で相補鎖が自動的に含まれるようになった

● 相補鎖を含めるかどうかはパラメータで変更可能

=> RUN GETSIM コード/SQN ← 入力したコードと相補鎖を検索

相補鎖のコードを別途検索する必要がなくなった！

=> RUN GETSIM コード/SQN -S SIN ← 入力したコードのみ検索

-S オプションで指定

オプション	定義	BLAST 検索タイプ	GETSIM 検索タイプ	完全配列検索、 部分配列検索
SIN	入力した配列コードのみ検索			
COM	入力した配列コードの相補鎖のみを検索	/SQN, /SQM, /SQDM, /TSQNX	/SQN	/SQEN, /SQSN
BOTH (デフォルト)	入力した配列コードとその相補鎖の両方を検索			

核酸またはアミノ酸の種類、数、比率 (%) を示す表が ALL および SQIDE 表示形式に追加

## ● 核酸

```
SEQ
1 gcaggtatta ccctgggtat ggatgaataa
NA ← 核酸表
Code Count Percent
A 9 30.0
C 4 13.3
G 9 30.0
T 8 26.7 (S)
U 0 0.0
Other 0 0.0
```

検索フィールド	内容
NA	核酸の種類
NA.CNT	核酸の数
NA.PER	核酸の比率

(S) 演算子で同一コードの情報に限定  
例) T が 20-30% 含まれる

=> `S T/NA(S)20-30/NA.PER`

## ● アミノ酸

```
SEQ
1 hsqgtftsdk seyldserar dfvawleagg
AA ← アミノ酸表
Code Count Percent
A 3 10.0
R 2 6.7 (S)
N 0 0.0
D 3 10.0
B 0 0.0
:
V 1 3.3
Others 0 0.0
```

検索フィールド	内容
AA	アミノ酸の種類
AA.CNT	アミノ酸の数
AA.PER	アミノ酸の比率

配列を SHA-2 アルゴリズムによりコード化した配列キー (SEQK) の収録を開始

```
=> FILE GENESEQ          ← GENESEQ ファイルに入る
=> RUN GETSEQ GACATGCGGAAGCACGTGGCCAT/SQEN ← 完全配列検索
GENESEQ
Query time:          323
L1  RUN STATEMENT CREATED
L1  3 GACATGCGGAAGCACGTGGCCAT/SQEN
=> D SQIDE              ← SQIDE 表示形式で表示
L1  ANSWER 1 OF 3 GENESEQ COPYRIGHT 2022 CLARIVATE on
AN  BHT33478  GENESEQ ED 20211030 UP 20211030
:
SEQK 812c12a2e0fe13dad3e72bc50e3f764cee046b0efbdb4cff8456dd3e2ee29d2f
SEQ
      1 gacatgcgga agcacgtggc cat
=> FILE PATGENE        ← PATGENE ファイルに入る
=> S 812c12a2e0fe13dad3e72bc50e3f764cee046b0efbdb4cff8456dd3e2ee29d2f/SEQK
L2  2 812C12A2E0FE13DAD3E72BC50E3F764CEE046B0EFBDB4CFF8456DD3E2EE29D2F/SEQK
```

**配列キー**

- GENESEQ, USGENE, PATGENE ファイルにおいて同一配列には同一の配列キーを収録している
- どの生物に由来する配列であっても、同じ配列であれば同一の文字列で表現される

完全配列検索と同じ結果が得られる

検索フィールド	内容	入力例
<b>GENESEQ, USGENE, PATGENE</b>		
/APO	出願番号、オリジナル	S WOBE000003/APO
/DED	データ入力日	S 20190307/DED
/DUPD*	データ更新日	S 20190307/DUPD
/PNO	特許番号、オリジナル	S WO200206834/PNO
/PRDF	最先の優先権主張日	S 20150608/PRDF
/PRNO	優先権出版番号、オリジナル	S DE04447388/PRNO
<b>USGENE</b>		
/INA	発明者住所	S LONDON/INA
/PAA	特許出願人住所	S NEW YORK/PAA
/RLPC	関連出願の特許発行国	S WO/RLPC
/RLPD	関連出願の特許発行日	S 20140116/RLPD
/RLPN	関連出願の特許番号	S WO2014001422/RLPN
/RLPY	関連出願の特許発行年	S 2015/RLPY
/RLT	関連出願のタイプ	S EARLIER APPLIATION/RLT

\* GENESEQ, PATGENE のみ利用可能

© 2022 化学情報協会

## 検索例

## 関節リウマチ治療薬であるアダリムマブの重鎖と類似している配列を調べる

```
EVQLVESGGG LVQPGRSLRL SCAASGFTFD DYAMHWVRQA PGKGLEWVSA
ITWNSGHIDY ADSVEGRFTI SRDNAKNSLY LQMNSLRAED TAVYYCAKVS
YLSTASSLDY WGGGTLVTVS SASTKGPSVF PLAPSSKSTS GGTAALGCLV
KDYFPEPVTV SWNSGALTSG VHTFPAVLQS SGLYSLSSVV TVPSSSLGTQ
TYICNVNHKP SNTKVDKKE PKSCDKHTC PPCAPELLG GPSVFLFPPK
PKDTLMISRT PEVTCVVVDV SHEDPEVKFN WYVDGVEVHN AKTKPREEQY
NSTYRVVSVL TVLHQDWLNG KEYKCKVSNK ALPAPIEKTI SKAKGQPREP
QVYTLPPSRD ELTKNQVSLT CLVKGFYPSD IAVEWESNGQ PENNYKTPP
VLDSGGSFFL YSKLTVDKSR WQQGNVFCSS VMHEALHNHY TQKLSLSPGK
```

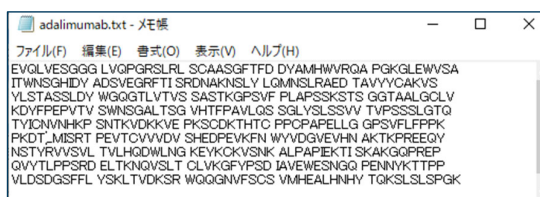
### ● 検索条件

- GENESEQ ファイルで BLAST ホモロジー検索を行う
  - 直接入力できるコードは 278 コードまでのため、長い配列質問式はアップロード機能を利用する
- 抗体のキーワードで限定
- クレームされている配列に限定

© 2022 化学情報協会

## 配列質問式のアップロード

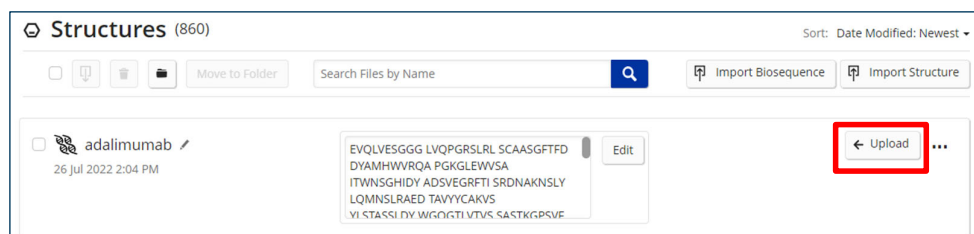
### 1. 配列質問式のテキストファイルを作成



### 2. GENESEQ ファイルに入り、My Files の Structures ページで Import Biosequence をクリックし、上記 1 のファイルをインポート



### 3. Upload をクリックする



© 2022 化学情報協会



=&gt; FILE GENESEQ

=&gt;

Uploading sequence file: adalimumab  
 UPLOAD R BLAST

UPLOAD SUCCESSFULLY COMPLETED

L1 GENERATED

← アップロードした配列質問式の L 番号が表示される

=&gt; D LQUE

← LQUE 表示形式でアップロードした配列を確認できる

L1 ANSWER 1 GENESEQ COPYRIGHT 2022 CLARIVATE on STN.

LQUE EVQLVESGGGLVQPGRSLRLSCAASGFTFDDYAMHWVRQAPGKLEWVSAITWNSGHIDYADSVEGRFTISR  
 DNAKNSLYLQMNSLRAEDTAVYYCAKVSYLSTASSLDYWGQGLVTVSSASTKGPSVFPLPSSKSTSGGTA  
 ALGCLVKDYFPEPVTVSWNSGALTSGVHTFPAVLQSSGLYSLSSVVTVPSSSLGTQTYICNVNHKPSNTKVD  
 KKVEPKSCDKTHTCPPCPAPPELLGGPSVFLFPPKPKDTLMISRTPEVTCVVVDVSHEDPEVKFNWYVDGVEV  
 HNAKTKPREEQYNSTYRVVSVLTVLHQDWLNGKEYKCKVSNKALPAPIEKTISKAKGQPREPQVYTLPPSRD  
 ELTKNQVSLTCLVKGFYPSDIAVEWESNGQPENNYKTPPVLDSDGSFFLYSKLTVDKSRWQQGNVSGSVM  
 HEALTHHNYTQKSLSLSPGK

=&gt; RUN BLAST L1/SQP -F F

← フィルターを外して BLAST ホモロジー検索を実行する

Algorithm: BLAST - BLAST

:

**低複雑度領域フィルタ**

低複雑度領域のマスクフィルタリングが行われ、生物学的に無意味なアライメントは取り除かれる。特許性調査の場合は -F F でフィルタをはずした方がよい

© 2022 化学情報協会

## 検索例

Highest possible score value: 929.9

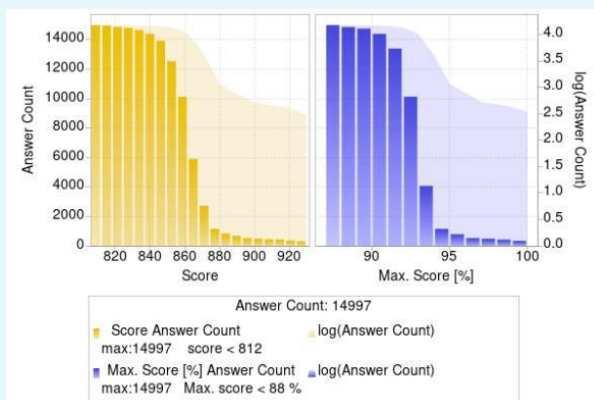
Best answer score value: 929.9

← 最も類似度が高い回答のスコア値

14997 ANSWERS FOUND BELOW EXPECTATION VALUE OF: 10.0

← 回答件数

GENESEQ



Query time: 4108

ENTER EITHER "ALL" TO KEEP ALL ANSWERS

OR ENTER THE MINIMUM SCORE VALUE YOU WISH TO KEEP

OR ENTER THE MINIMUM PERCENT OF SCORE FOLLOWED BY "% SCORE"

OR ENTER THE MINIMUM PERCENT OF IDENTITY FOLLOWED BY "% IDENT"

OR COMBINE MINIMUM PERCENT OF SCORE AND IDENTITY AS "X% SCORE Y% IDENT"

OR ENTER "END". "END" MUST BE EN

全件を得るには ALL を入力

ENTER (ALL) OR ?:ALL

© 2022 化学情報協会

```

L2  RUN STATEMENT CREATED
L2  14997  EVQLVESGGGLVQPGRSLRLSCAASGFTFDDYAMHWVRQAPGKGLEWVSA
      :
      VLDSDGSFFLYSKLTVDKSRWQQGNVFCSCVMHEALHNHYTQKLSLSLSPGK/SQP -F F

```

ENTER EITHER "ALL" TO KEEP ALL ANSWERS  
OR ENTER THE MINIMUM SCORE VALUE YOU WISH TO KEEP  
OR ENTER THE MINIMUM PERCENT OF SCORE FOLLOWED BY "% SCORE"  
:

ENTER (ALL) OR ?:90%

L3 RUN STATEMENT CREAT  
L3 14611 EVQLVESGGGLVQPGRSLRLSCAASGFTFDDYAMHWVRQAPGKGLEWVSA  
 :
 VLD

ENTER EITHER "ALL" TO KEEP ALL ANSWERS  
OR ENTER THE MINIMUM SCORE VALUE YOU WISH TO KEEP  
OR ENTER THE MINIMUM PERCENT OF SCORE FOLLOWED BY "% SCORE"  
:

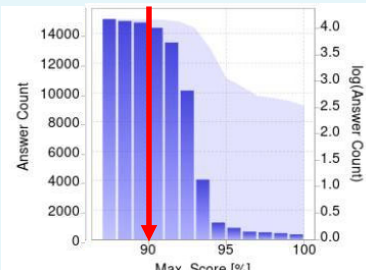
ENTER (ALL) OR ?:END

任意

回答集合のオプションは複数回指定できる  
例) スコア値が 90% 以上の回答のみを得る

新たに別の L 番号が作成される

終了するには END を入力



## 検索例 – SORT を利用した回答の並び替え

```

=> S L2 AND ANTIBOD?          ← 抗体のキーワードで限定
L4  14863 L2 AND ANTIBOD?

=> S L4 AND CLAIM?/PSL       ← クレームされている配列に限定
L5  5574 L4 AND CLAIM?/PSL

=> SORT L5 1- SCORE D IDENT D
L6  5574 SORT L5 1- SCORE D IDENT D

=> FSORT L6
:
L7  SEL L6 1- PN APPS : 4803 TERMS

'L7' DELETED
L7  5574 FSO L6

668 Multi-record Families  Answers 1-4892 ← 関連特許ファミリー
    Family 1                Answers 1-4
    Family 2                Answers 5-15
    :
    Family 668              Answers 4889-4892

682 Individual Records    Answers 4893-5574 ← 関連特許ファミリーがないレコード
0 Non-patent Records

```

SORT コマンドを利用してスコア値 (SCORE) の降順 (D) かつ同一性 (IDENT) の降順 (D) で回答を並び替える

特許情報の重複表示を回避したい場合は、FSORT コマンドを使用して関連特許ファミリーごとにまとめる

FSORT コマンド  
回答から PN (特許番号), AP (出願番号), PRN (優先権出願番号) を抽出して関連特許ファミリーごとにまとめる

=> D L7 4889 BIB AB ALIGN ← BIB AB ALIGN 表示形式で表示

```

L7 ANSWER 4889 OF 5574 GENESEQ COPYRIGHT 2022 CLARIVATE on STN. FAMILY 668
AN AAM52156 GENESEQ ED 20211030 UP 20211030
DED 20020205 Full-text
TI Novel compound used to treat cancer has target cell-specific portion comprising
humanized monoclonal antibody having specificity for polymorphic epithelial mucin,
and cytotoxic portion having endonucleolytic activity.
IN Young RJ
PA ANTISOMA RES LTD (ANTI-N)
LA English
DT Patent
PI WO 2001074905 A1 20011011
PIT WOA1 INTERNATIONAL APPLICATION PUBLISHED WITH INTERNATIONAL SEARCH REPORT
AI WO 2001-GB1324 20010326
PRAI GB 2000-8049 20000403
US 2000-237159P 20001002
FS PROTEIN; PS
OS 2001-662969 [76]
MTY protein
PSL Claim 20; Fig 7; 176pp
DESC Humanised HMFG-1 heavy chain/DNase I fusion protein 1.
AB The invention relates to a compound which comprises a target cell-
specific portion, comprising an humanised monoclonal antibody, having
specificity for polymorphic epithelial mucin (PEM) or its antigen
    
```

← WPI のレコード番号  
 ← 分子タイプ  
 ← 配列情報の記載位置  
 ← 配列の説明

**配列独自の抄録**

ALIGN  
ALIGNMENT FROM L-NUMBER L2

```

Query Length: 451; Sequence Length: 731;
Score: 814.7 bits (2103), 87.6% of highest possible score 929.9;
Expect value: 2.341e-234;
Identities: 396 / 451 (87.8%); Positives: 419 / 451 (92.9%);
Query Identity: 87.8%; Query Coverage: 100.0%;
Subject Identity: 54.2%; Subject Coverage: 61.7%;
Alignment Length: 451;
Q: 1 EVQLVESGGGLVQPGRSRLRSCAASGFTFDDYAMHWVRQAPGKGLEWVSAITWNSGHIDY 60
+|||+|| + +|| |+++|| ||+|| | + ||||| ||||| | | + |
S: 20 QVQLVQSGAEVKKPGASVKVSCKASGYTFSAYWIEWVRQAPGKGLEWVGEILPGSNNRY 79

Q: 61 ADSVEGRFTISRDNKNSLYLQMNSLRAEDTAVYYCAKVSYLSSTASSLDYWGQGLTIVTS 120
+ +|| |++|| + | +++++||+|||+||| + || | ||||| |||||
S: 80 NEKFKGRVTVTRDSTNTAYMELSSLRSEDVAVYYCAR-SY--DFAWFAYWGQGLTIVTS 136

Q: 121 SASTKGPVSFPLPSSKSTSGGTAALGCLVKDYFPEPVTVSWNSGALTSVHTFPAVLQS 180
||||| ||||| ||||| ||||| ||||| ||||| ||||| ||||| ||||| |||||
S: 137 SASTKGPVSFPLPSSKSTSGGTAALGCLVKDYFPEPVTVSWNSGALTSVHTFPAVLQS 196
:
Q: 421 WQQGNVFSCSVMHEALHNHYTQKLSLSPGK 451
||||| ||||| ||||| ||||| ||||| ||||| ||||| ||||| |||||
S: 437 WQQGNVFSCSVMHEALHNHYTQKLSLSPGK 467
    
```

← 配列質問式の長さ; 回答配列の配列長  
 ← スコア値  
 ← 期待値  
 ← 同一性パーセント

ヒットした回答配列の配列長は 731 コードであり、ヒットは 20~467 コードの位置で一致している

アライメント表示  
 Q (配列質問式: Query)  
 S (回答の配列: Subject)  
 | は一致しているコード  
 + はファミリーで一致しているコード

GENESEQ, USGENE, PATGENE ファイルが  
リロードされ、

- ホモロジー検索では何度もオプションを変えて複数の回答集合を作成できる
- ホモロジー検索の回答件数の上限がリロード前に比べ最大 10 倍になった
- 核酸検索ではデフォルトで相補鎖が含まれる

CAS STNext ユーザーミーティング

CAS STNext の強化



# CAS STNNext の強化

化学情報協会 情報事業部

## 目次

1. 検索記録の強化
2. 構造作図に関する強化
3. CAS SciFinder<sup>n</sup> との連携
4. その他の強化

## 検索記録の強化

### 検索記録の強化内容

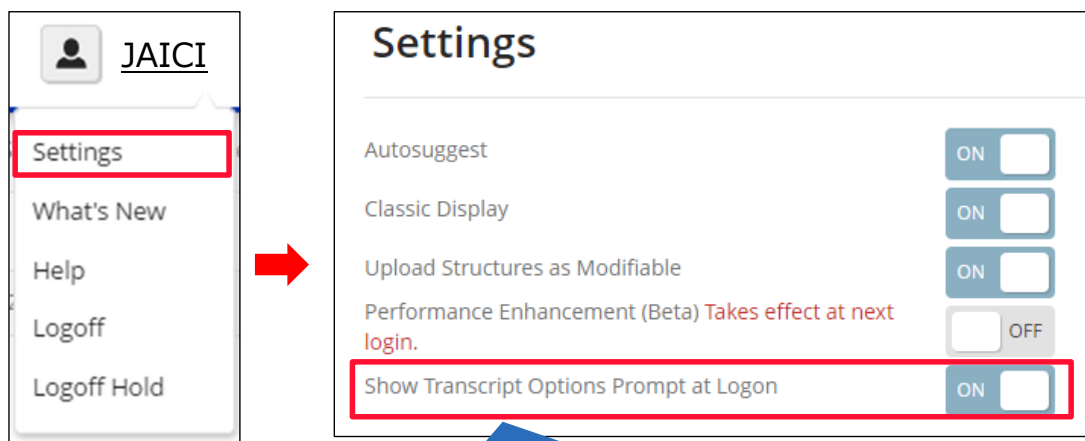
3

- セッション開始時に Transcript Options を表示可能に
- 検索記録のヒットタームハイライト色を選択可能に
- レポート作成時にハイライト色などを選択可能に
- Excel 形式テーブルのダウンロードオプション追加
- レポートを XML, BizInt 形式でダウンロード可能に



## セッション開始時に Transcript Options を表示可能に 4

Settings で表示の ON/OFF を選択できる



セッション開始時に Transcript (検索記録) Options 画面を表示する

© 2022 化学情報協会

## セッション開始時に Transcript Options を表示可能に 5

分かりやすい Transcript 名に変更してから検索開始

The image shows a screenshot of the CAS STNext interface. At the top left, it says 'CAS STNext'. Below that, 'Transcript ON' is displayed. The main area shows a 'Transcript Options' dialog box with two radio buttons: 'Start a new Transcript' (selected) and 'Append an existing Transcript'. Under 'Start a new Transcript', there is a text input field containing '3D Printing' and a note: 'The name cannot exceed 50 characters or contain: <>:\*\|?\*'.

**Start a new Transcript**  
デフォルトの Transcript 名 (例 : 2022\_0001\_Transcript) ではなく、検索テーマに関連した名前などに変更できる

**Append an existing Transcript**  
Continue ボタンをクリックすると過去の Transcript 一覧が表示されるので、検索情報を付け足したい Transcript を選択する

© 2022 化学情報協会

出力した検索記録は様々な形式でダウンロードできる

**検索記録をそのままダウンロード**  
 PDF RTF TXT ZIP  
**検索記録 (Transcript)**

**見栄えのよいレポートでダウンロード**  
**Excel 形式のテーブルでダウンロード**  
**New XML 形式でダウンロード**  
**レポート機能 (Report)**

© 2022 化学情報協会

My Files の Transcripts からダウンロードしたい形式を選択する

My Files  
 Alerts  
**Transcripts**  
 Structures  
 Scripts  
 Biosequences

**Transcripts**

- 2022\_0118\_Transcript / 20 Jul 2022 10:46 AM
- COVID-19 / 19 Jul 2022 1:31 PM
- Taxol / 19 Jul 2022 10:11 AM

検索記録のダウンロード (PDF/RTF/TXT)

Transcript  
**Create Report**  
 Append  
 Move  
 Delete

レポート機能

Query Summary  
 Download PDF  
 Download RTF

\* レポート機能の詳細は「CAS STNext 利用ガイド」参照  
<https://www.jaici.or.jp/stn-ip-protection-suite/cas-stnext/documents/>

© 2022 化学情報協会

## ハイライト色は Settings で設定する

**Settings**

Autosuggest  ON

Classic Display  ON

Upload Structures as Modifiable  ON

Performance Enhancement (Beta) *Takes effect at next login.*  OFF

Show Transcript Options Prompt at Logon  OFF

---

**Transcript Download**

Prompt at Logoff/Logoff Hold  OFF

**Document Hit Highlight Color** ▼ Dark Pink

- Blue
- Light Blue
- Yellow
- Dark Blue
- Aqua
- Green
- Orange
- Dark Pink
- Red
- Black
- Gray

**好みのハイライト色を設定できる**

L3 ANSWER 10 OF 347 CAPLUS COPYRIGHT 2022 ACS on STM  
 AB Abstr.: Background: Preliminary evidence suggests that individuals living in lower income neighborhoods are at higher risk of COVID-19 infection. The relationship between sociodemog. characteristics and COVID-19 risk warrants further study. Methods: We explored the assocn. between COVID-19 test positivity and patients' socio-demog. variables, using neighborhood sociodemog. data collected retrospectively from two COVID-19 Assessment Centers in Toronto, ON. Results: Eighty-three thousand four hundred forty three COVID-19 tests completed between Apr. 5-Sept. 30, 2020, were analyzed. Individuals living in neighborhoods with the lowest income or highest concn. of immigrants were 3.4 (95% CI: 2.7 to 4.9) and 2.5 (95% CI: 1.8 to 3.7) times more likely to test pos. for COVID-19 than those in highest income or lowest immigrant neighborhoods, resp. Testing was higher among individuals from higher income neighborhoods, at lowest COVID-19 risk, compared with those from low-income neighborhoods. Conclusions: Targeted efforts are needed to improve testing availability in high-risk regions. These same strategies may also ensure equitable COVID-19 vaccine delivery.

# レポート作成時にハイライト色などを選択可能に

## レポートのヒットタームのフォント、スタイル、サイズ、ハイライト色を選択できる

**Reporting**

Select L#s to Include  
 Clear | Collapse All

- L5 L1 AND P/DT (5)
- Answer 1
- Answer 2
- Answer 3
- Answer 4
- Answer 5

Select Field Template  
 Manage Custom Templates

- Journal
- Patent
- Patent and Journal
- Substance Report

Select Report Format  
Hit Highlighting Options

**Hit Highlighting Options**

Standard Enhanced Table

Font: Courier New | Style: Bold | Size: 10

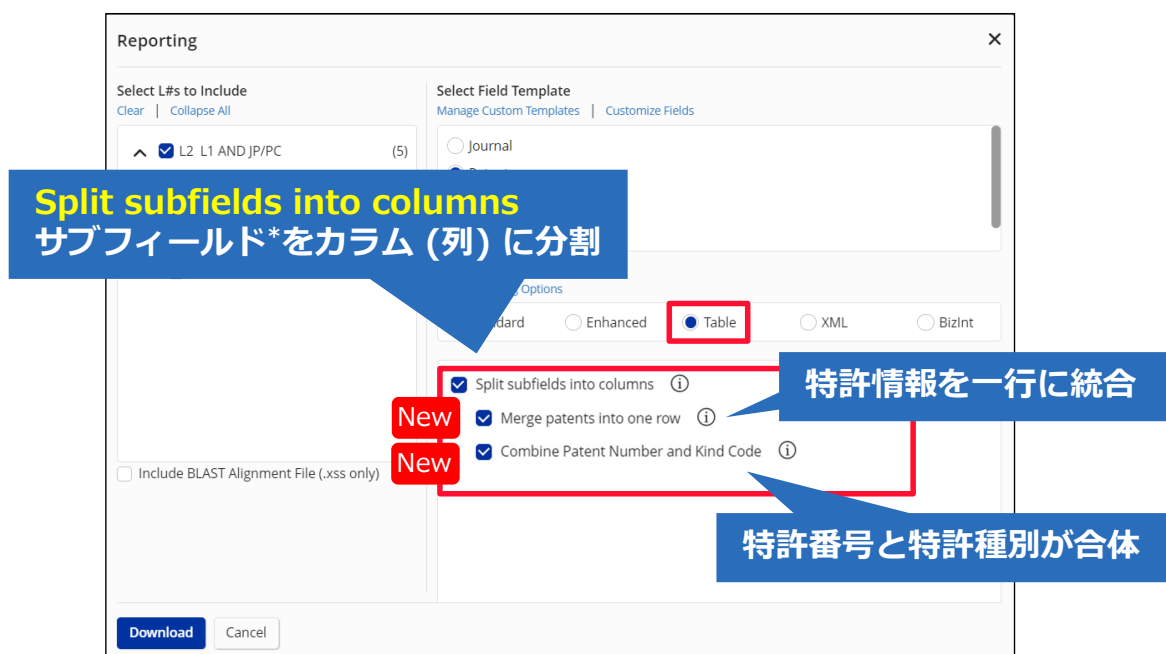
Color: ▼ Dark Pink

- Blue
- Light Blue
- Yellow
- Dark Blue
- Aqua
- Green
- Orange
- Dark Pink
- Red
- Black
- Gray

**Excel 形式でダウンロード**

Answer Line	Database	Abstract
L1 5 OF 342	CAPLUS	Abstr.: Background: Preliminary evidence suggests that individuals living in lower income neighborhoods are at higher risk of COVID-19 infection. The relationship between sociodemog. characteristics and COVID-19 risk warrants further study. Methods: We explored the assocn. between COVID-19 test positivity and patients' socio-demog. variables, using neighborhood sociodemog. data collected retrospectively from two COVID-19 Assessment Centers in Toronto, ON. Results: Eighty-three thousand four hundred forty three COVID-19 tests completed between Apr. 5-Sept. 30, 2020, were analyzed. Individuals living in neighborhoods with the lowest income or highest concn. of immigrants were 3.4 (95% CI: 2.7 to 4.9) and 2.5 (95% CI: 1.8 to 3.7) times more likely to test pos. for COVID-19 than those in highest income or lowest immigrant neighborhoods, resp. Testing was higher among individuals from higher income neighborhoods, at lowest COVID-19 risk, compared with those from low-income neighborhoods. Conclusions: Targeted efforts are needed to improve testing availability in high-risk regions. These same strategies may also ensure equitable COVID-19 vaccine delivery.
L1 6 OF 342	CAPLUS	Abstr.: Immunotherapy and vaccines have revolutionized disease treatment and prevention. Vaccines against infectious diseases have been in use for several decades. In contrast, only few cancer vaccines have been approved for human use. These include preventative vaccines against infectious agents associated with cancers, and therapeutic vaccines used as immunotherapy agents to treat cancers. Challenges in developing cancer vaccines include heterogeneity within and between cancer types, screening and identification of appropriate tumor-specific antigens, and the choice of mRNA delivery platform. Recent advances in all of these areas and the lessons learnt from COVID-19 vaccines have significantly boosted interest in cancer vaccines. Further advances in these areas are expected to facilitate development of

Merge Patents into one row と Combine Patent Number and Kind Code が追加された



\* PI フィールドの PN (特許番号), PK (特許種別), PD (特許発行日) など

© 2022 化学情報協会

1. Merge Patents into one row のみチェックを入れる

Split subfields into columns ⓘ  
 Merge patents into one row ⓘ  
 Combine Patent Number and Kind Code ⓘ

Patent No. (PI)	Kind (PI)	Publication Date (PI)	Application No. (PI)	Application Date (PI)	Priority No.	Kind (PRAI)	Priority Date
CN 114767707	A	20220722	CN 2021-11437836	20211129	KR 2021-9584	A	20210122
KR 2022106912	A	20220801	KR 2021-119259	20210907	KR 2021-119259	A	20210907

特許情報を一行に統合

2. Combine Patent Number and Kind Code のみチェックを入れる

Split subfields into columns ⓘ  
 Merge patents into one row ⓘ  
 Combine Patent Number and Kind Code ⓘ

Patent No./Kind (PI)	Publication Date (PI)	Application No. (PI)	Application Date (PI)	Priority No.	Kind (PRAI)	Priority Date
CN 114767707 A	20220722	CN 2021-11437836	20211129	KR 2021-9584	A	20210122
KR 2022106912 A	20220801	KR 2021-119259	20210907	KR 2021-119259	A	20210907

特許番号と特許種別が合体

© 2022 化学情報協会

### 3. 両方にチェックを入れる

Split subfields into columns ⓘ  
 Merge patents into one row ⓘ  
 Combine Patent Number and Kind Code ⓘ

Patent No./Kind (PI)	Publication Date (PI)	Application No. (PI)	Application Date (PI)	Priority No.	Kind (PRAI)	Priority Date
CN 114767707 A	20220722	CN 2021-11437836	20211129	KR 2021-9584	A	20210122
KR 2022106912 A	20220801	KR 2021-119259	20210907	KR 2021-119259	A	20210907

特許情報を一行に統合  
特許番号と特許種別が合体

### 4. 両方にチェックを入れない

Split subfields into columns ⓘ  
 Merge patents into one row ⓘ  
 Combine Patent Number and Kind Code ⓘ

Patent No. (PI)	Kind (PI)	Publication Date (PI)	Application No. (PI)	Application Date (PI)	Priority No.	Kind (PRAI)	Priority Date
CN 114767707	A	20220722	CN 2021-11437836	20211129	KR 2021-9584	A	20210122
KR 2022106912	A	20220801	KR 2021-119259	20210907	KR 2021-119259	A	20210907

© 2022 化学情報協会

## 参考：特許情報と出願情報を一つのセルに入れられる 13

Split subfields into columns のチェックを入れずに  
テーブルを作成

Split subfields into columns ⓘ  
 Merge patents into one row ⓘ  
 Combine Patent Number and Kind Code ⓘ

Patent Information					Priority Application Information		
PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE			
-----	-----	-----	-----	-----	JP 2021-12663	A	20210129
US 20220242916	A1	20220804	US 2022-17578049	20220118			
JP 2022116482	A	20220810	JP 2021-12663	20210129			
-----	-----	-----	-----	-----	KR 2021-9584	A	20210122
CN 114767707	A	20220722	CN 2021-11437836	20211129	KR 2021-119259	A	20210907
KR 2022106912	A	20220801	KR 2021-119259	20210907			

特許情報（特許番号、特許種別、特許発行日）と  
出願情報（出願番号、出願日）の表が一つのセル  
に入ったテーブルを作成できる

優先権情報の表も  
一つのセルに入る

© 2022 化学情報協会

## 2つのダウンロード形式が追加された

The screenshot shows a 'Reporting' dialog box with the following sections:

- Select L#s to Include:** Includes 'L5 L1 AND P/DT (5)' and five 'Answer' items (Answer 1 to Answer 5), all of which are checked.
- Select Field Template:** Includes 'Patent', 'Patent and Journal', 'Substance Report', and 'Patent\_Phthalocyanine'. 'Patent' is selected.
- Select Report Format:** Includes 'Standard', 'Enhanced', 'Table', 'XML', and 'Bizint'. 'XML' is selected and highlighted with a red box. A red 'New' label is positioned above the 'XML' option.
- Hit Highlighting Options:** This section is currently empty.
- Buttons:** 'Download' and 'Cancel' buttons are located at the bottom left.

Two callout boxes provide additional information:

- A blue callout box points to the 'XML' option with the text: **.xml ファイルが ZIP 形式でダウンロードされる**
- A blue callout box points to the 'XML' and 'Bizint' options with the text: **BizInt Smart Charts for Patents の Version 5.6 以降で開ける**

© 2022 化学情報協会

## 構造作図に関する強化

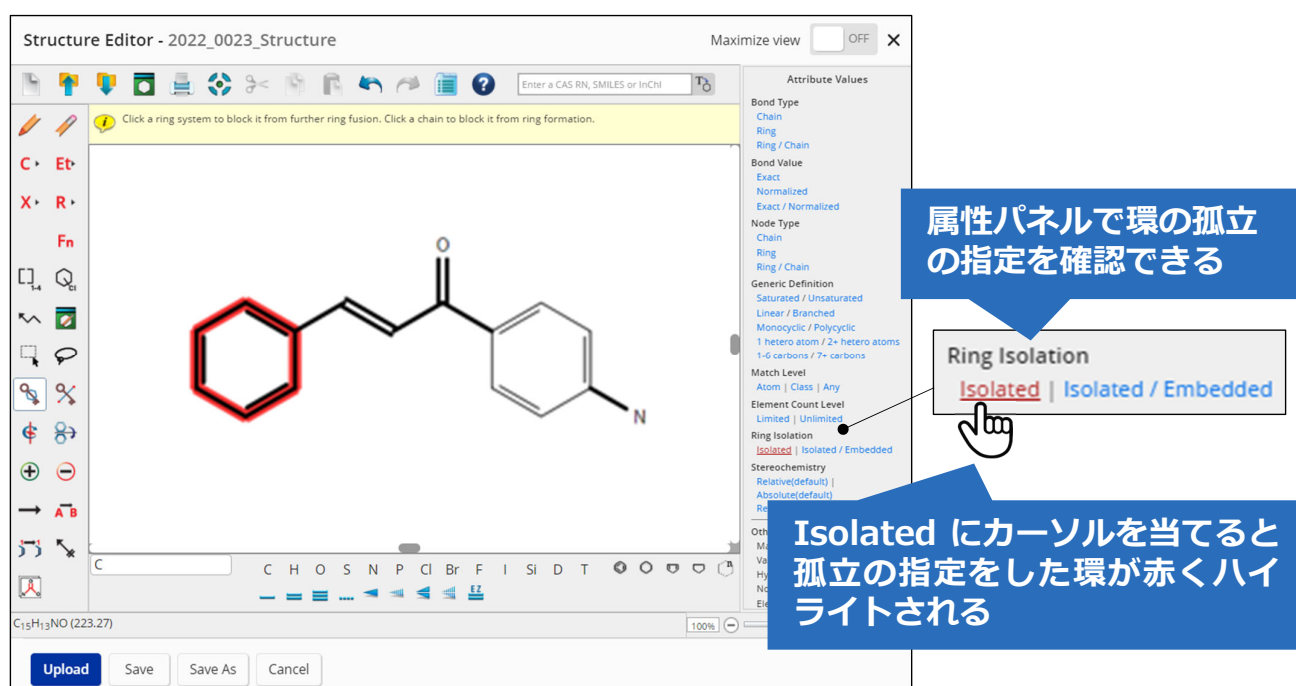
- 構造作図画面の属性パネルの強化
- 立体化学構造に関する設定の追加
- 構造質問式のインポートに関する強化
- 構造質問式のアップロードに関する強化

© 2022 化学情報協会

## 構造作図画面の属性パネルの強化

17

環の孤立の指定を確認できる



Structure Editor - 2022\_0023\_Structure

Maximize view  OFF X

Click a ring system to block it from further ring fusion. Click a chain to block it from ring formation.

Attribute Values

- Bond Type
  - Chain
  - Ring
  - Ring / Chain
- Bond Value
  - Exact
  - Normalized
  - Exact / Normalized
- Node Type
  - Chain
  - Ring
  - Ring / Chain
- Generic Definition
  - Saturated / Unsaturated
  - Linear / Branched
  - Monocyclic / Polycyclic
  - 1 hetero atom / 2+ hetero atoms
  - 1-6 carbons / 7+ carbons
- Match Level
  - Atom | Class | Any
- Element Count Level
  - Limited | Unlimited
- Ring Isolation
  - Isolated** | Isolated / Embedded
- Stereochemistry
  - Relative(default) | Absolute(default)

Ring Isolation  
**Isolated** | Isolated / Embedded

Isolated にカーソルを当てると孤立の指定をした環が赤くハイライトされる

© 2022 化学情報協会

## 不斉中心炭素の立体化学 (Stereochemistry) 属性を指定できる

デフォルトの立体化学属性を指定できる

属性パネルで立体化学属性を確認できる

© 2022 化学情報協会

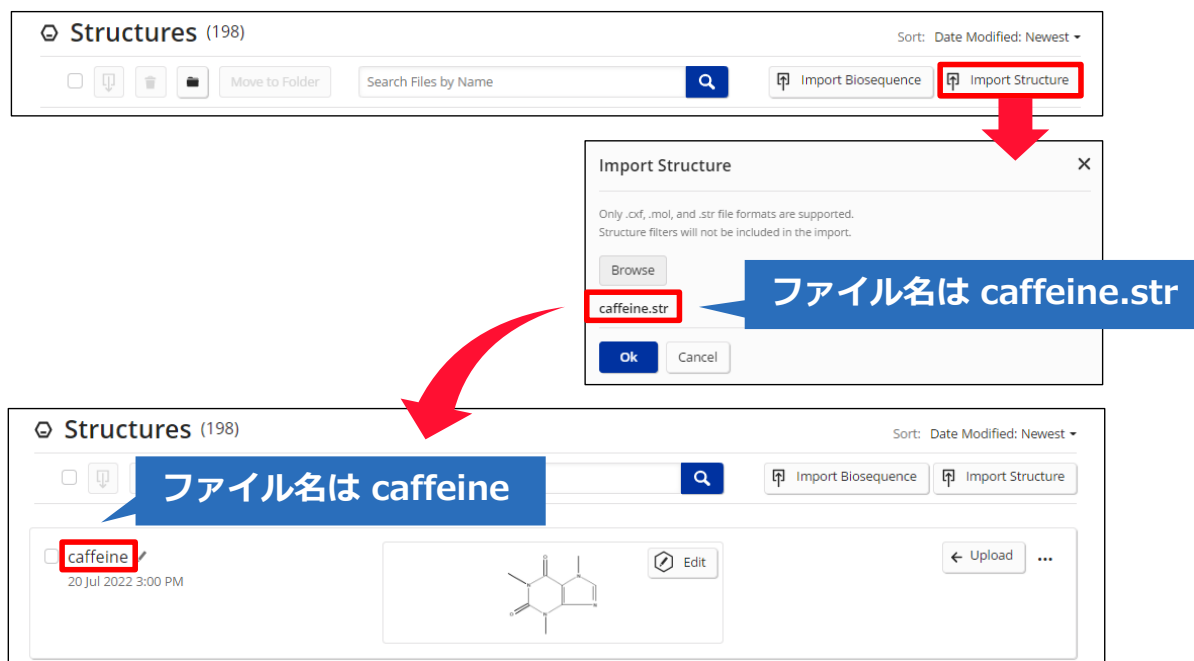
## 構造質問式の立体化学属性とヒットする回答

構造質問式		REGISTRY ファイルのレコード	
構造質問式	デフォルトの立体化学属性	Absolute stereochemistry shown Rotation (+)	Relative stereochemistry shown
	Absolute (絶対)	○	×
	Relative (相対)	○	○
	Absolute (絶対)	×	×
	Relative (相対)	○	○

© 2022 化学情報協会

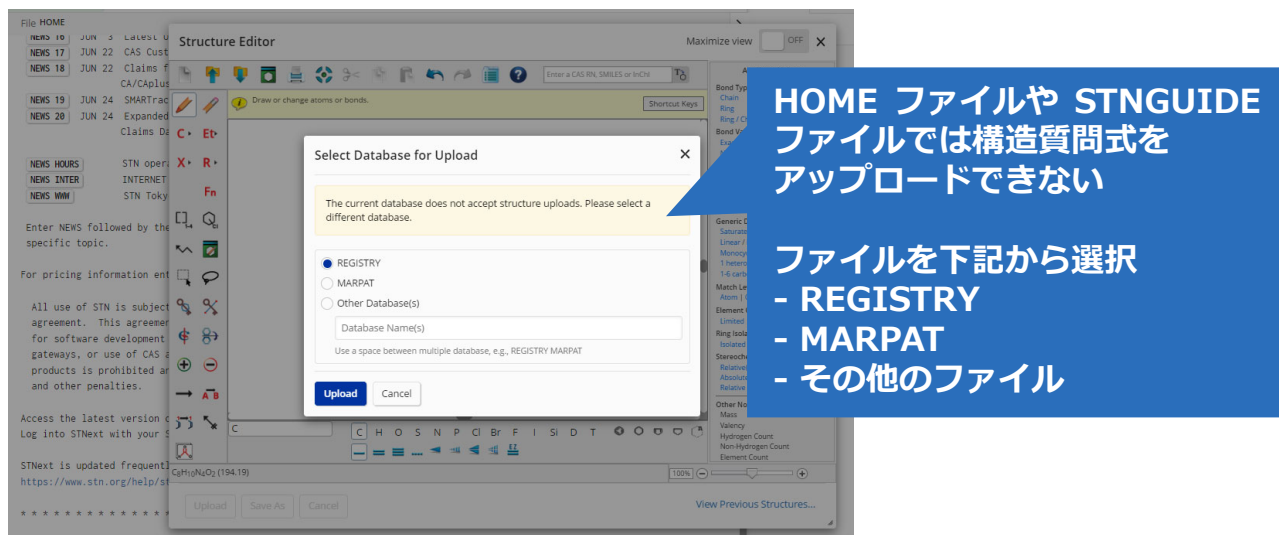


構造質問式をインポートした際、インポートしたファイルの名前が反映される



構造質問式のアップロードを HOME ファイルや STNGUIDE ファイルで行った場合でも、ファイルの選択ができる

例：HOME ファイルに入った状態で構造質問式をアップロード



## CAS SciFinder<sup>n</sup> との連携

### CAS SciFinder<sup>n</sup> との連携

23

CAS STNnext の検索結果を CAS SciFinder<sup>n</sup> で再現できる

#### 対象ファイル

- REGISTRY, ZREGISTRY, LREGISTRY
- CAPlus, HCAplus, ZCAplus
- MEDLINE

The screenshot shows the CAS STNnext interface with a search history table. The table has columns for 'History', 'Project', 'CAS Lexicon', and 'Databases'. Under the 'History' column, there is a 'Session' section with the following entries:

History	Project	CAS Lexicon	Databases
Session			
Entered HOME			16:30:33 ON 17 AUG 2022
Entered CAPLUS			16:32:53 ON 17 AUG 2022
L1 14014 S BIODEGR?(2A)?POLY? AND C08/IPC			[Menu] ...
L2 520203 S 2020<=PY(P)JP/PC			[Menu] ...
L3 322 S L1 AND L2			[Menu] ...

Below the search results, a 'Share Results' menu is open, showing options: 'Create an Alert', 'Patent Family Manager', 'View in SciFinder<sup>n</sup>', and 'Email link to SciFinder<sup>n</sup>'. The 'View in SciFinder<sup>n</sup>' and 'Email link to SciFinder<sup>n</sup>' options are highlighted with a red box.

2通りの方法がある  
- View in SciFinder<sup>n</sup>  
- Email link to SciFinder<sup>n</sup>

CAS SciFinder<sup>n</sup> で回答を表示

The screenshot shows the CAS SciFinder interface. On the left, a sidebar contains a 'Share Results' menu with 'View in SciFinder<sup>n</sup>' highlighted in a red box. A blue callout box points to this menu with the text '一度に移行できる回答数は 1 万件' (Number of answers that can be transferred at once is 10,000). The main area shows search results for 'Resin composition for blow molding with excellent mechanical properties and production method thereof'. A blue callout box at the top right says 'CAS SciFinder<sup>n</sup> の回答が新しいタブで開く' (CAS SciFinder<sup>n</sup> answers are opened in a new tab). Below the search results, two dialog boxes are shown: 'Select Answers' and 'Exporting Answers To SciFinder<sup>n</sup>'. The 'Select Answers' dialog has a 'Continue' button highlighted in red. The 'Exporting Answers To SciFinder<sup>n</sup>' dialog has an 'Open SciFinder<sup>n</sup>' button highlighted in red. A blue callout box on the right says 'CAS SciFinder<sup>n</sup> の ID を入力' (Enter CAS SciFinder<sup>n</sup> ID). A red arrow points from the 'Open SciFinder<sup>n</sup>' button to the SciFinder interface.

© 2022 化学情報協会

CAS SciFinder<sup>n</sup> へのリンクが入ったメールを作成

The screenshot shows the CAS SciFinder interface. On the left, a sidebar contains a 'Share Results' menu with 'Email link to SciFinder<sup>n</sup>' highlighted in a red box. A blue callout box points to this menu with the text '一度に移行できる回答数は 1 万件' (Number of answers that can be transferred at once is 10,000). The main area shows search results for 'Resin composition for blow molding with excellent mechanical properties and production method thereof'. A blue callout box at the top right says 'CAS SciFinder<sup>n</sup> の ID を入力' (Enter CAS SciFinder<sup>n</sup> ID). Below the search results, two dialog boxes are shown: 'Select Answers' and 'Exporting Answers To SciFinder<sup>n</sup>'. The 'Select Answers' dialog has a 'Continue' button highlighted in red. The 'Exporting Answers To SciFinder<sup>n</sup>' dialog has an 'Open Email' button highlighted in red. A blue callout box on the right says 'CAS SciFinder<sup>n</sup> へのリンクが入ったメールが作成される' (An email with a link to CAS SciFinder<sup>n</sup> is created). A red arrow points from the 'Open Email' button to the SciFinder interface.

© 2022 化学情報協会

## その他の強化

### Project タブの追加

27

調査に関する情報を一つのプロジェクトにまとめて管理できる

History **Project** CAS Lexicon Databases

New Project Open Project

Create New Project

Project Name

NSAIDs

Continue Cancel

プロジェクト名を付ける

History **Project** CAS Lexicon Databases

NSAIDs

Files **Transcripts**

Sort: Date Modified: Newest

2022\_0070\_Transcript currently active

Transcript

History **Project** CAS Lexicon Databases

NSAIDs

**Files** Transcripts

Sort: Date Modified: Newest

2022\_0017\_Structure

Sequence 1

{ } 2021\_0001\_Script

Files

- 構造質問式
- 配列質問式
- スクリプト

## Alert Settings 画面でアラート登録名を設定できる

アラート登録名はアルファベットで始まる  
12 文字以内の半角英数字

© 2022 化学情報協会

## Keyboard Shortcuts 設定の追加

## Settings に Keyboard Shortcuts が追加された

© 2022 化学情報協会

- セッション開始時に、デフォルトの Transcript 名から、わかりやすい名前に変更できる
- 検索記録やレポートでヒットタームハイライト色を選択できる
- 構造作図画面の属性パネルで環の孤立や立体化学属性を確認できる
- CAS STNext の検索結果を CAS SciFinder<sup>n</sup> で再現できる

2021 年 6 月以降の強化一覧

■ データベースの強化・変更

ファイル名	強化点
ADISNEWS	・ Pharmacoeconomics and Outcomes News の発行終了
AUPATFULL	・ INPADOC 由来の情報を表示不可に
CANPATFULL	・ INPADOC 由来の情報を表示不可に
CAplus/CA	・ Prior Art Analysis (先行技術調査) 機能の搭載 ・ 特許請求項の収録を拡大 ・ 更新コード STUP がアラートで利用可能に
CHEMLIST	・ UK REACH 関連情報の追加
DCR	・ リリース
CNFULL	・ INPADOC 由来の情報を表示不可に
DEFULL	・ INPADOC 由来の情報を表示不可に
EMBASE	・ EMTREE 語のオンラインシソーラス更新
EPFULL	・ アラートの実行頻度に毎月が追加 ・ INPADOC 由来の情報を表示不可に
FRFULL	・ INPADOC 由来の情報を表示不可に
GENESEQ (旧 DGENE)	・ リロード ・ 完全配列検索、部分配列検索に相補鎖オプション追加 ・ ホモロジー検索 (BLAST, GETSIM) 結果の回収オプションの追加
GRFULL	・ INPADOC 由来の情報を表示不可に
INFULL	・ INPADOC 由来の情報を表示不可に
INPADOCDB INPAFAMDB	・ 特許ステータスの追加 ・ 米国特許の特許調整期間が検索可能に ・ 法的状況イベントクラス (LSEC) の追加 ・ ウクライナ特許の収録強化
JPFULL	・ INPADOC 由来の情報を表示不可に
KRFULL	・ INPADOC 由来の情報を表示不可に
MARPAT	・ 特許ステータスが表示されるように
MEDLINE	・ リロード - 2022 年度版 MeSH シソーラスの搭載 - 索引付与の自動化
NTIS	・ リロード - /TI, /AB フィールドで後方一致検索, 中間一致検索可能に - テキスト中の数値検索機能 (Ver.3.3) の追加 - アラートを設定可能に - /PN, /AP フィールドの削除 - レコード番号の形式変更

2021 年 6 月以降の強化一覧

■ データベースの強化（続き）

ファイル名	強化点
PATGENE (旧 PCTGEN)	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ リロード</li> <li>・ ホモロジー検索の回答作成時のオプション変更</li> <li>・ 完全配列検索、部分配列検索に相補鎖オプション追加</li> <li>・ ホモロジー検索 (BLAST, GETSIM) 結果の回収オプションの追加</li> </ul>
TOXCENTER	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ MEDLINE セグメントのリロード</li> </ul>
RAPRA	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 更新中止</li> </ul>
RDISCLOSURE	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ リロード</li> <li>- /TX で後方一致検索, 中間一致検索可能に</li> <li>- テキスト中の数値検索機能 (Ver.3.3) の追加</li> <li>- 国際特許分類 (IPC), ヨーロッパ特許分類 (EPC) 関連情報を削除</li> </ul>
RUFULL	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ リリース (ロシア特許全文データベース)</li> </ul>
USGENE	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ リロード</li> </ul>
WSCA	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 更新中止</li> </ul>
WPINDEX/WPIDS/WPIX	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ リロード</li> <li>・ マニュアルコード改訂 (2022 年版)</li> </ul>

■ データベースのサービス終了

文献データベース	AEROSPACE	COMPUSCIENCE	DKF	DJSMDS/DJSMONLINE
	ENERGY	INSPHYS	METADDEX	TRIBO
	WELDASEARCH			
特許データベース	DPCI	FRANCEPAT	JAPIO	KOREAPAT
	PATDD	PATDPA	PATDPAFULL	PATDPASPC
	RUSSIAPAT			
化学物質データベース	ICSD			
化学物質規制データベース	MSDS-OHS			
練習ファイル	LDPCI	LDRUG	LPATDPA	LWPI



2021 年 6 月以降の強化一覧

■ STNext の強化

	強化点
検索記録の強化	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ ログオン時に Transcript Options を表示可能に</li> <li>・ 検索記録のヒットタームハイライト色を選択可能に</li> <li>・ レポート作成時にハイライト色などを選択可能に</li> <li>・ Excel 形式テーブルのダウンロードのオプション追加</li> <li>・ レポートを XML 形式でダウンロード可能に</li> <li>・ レポートを BizInt 形式でダウンロード可能に</li> <li>・ レポートに自動で含まれていたフィールドが選択可能に</li> <li>・ HITSTR 表示形式の出力を含むレポートやテーブルの改善 (CAplus/CA ファイル)</li> <li>・ HITSTR 表示形式の出力を含むレポートやテーブルの改善 (USPATFULL/USPATOLD/USPAT2 ファイル)</li> </ul>
構造作図に関する強化	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 構造作図画面の最大化が可能に</li> <li>・ 環の孤立の設定の確認が簡単に</li> <li>・ 立体化学構造のより詳細な指定が可能に</li> <li>・ 炭素の表示を変更可能に</li> <li>・ 結合の重なり警告が表示されるように</li> <li>・ インポートした構造質問式の名前がファイル名に反映されるように</li> <li>・ 構造質問式をアップロードする際のデータベースに関する強化</li> </ul>
CAS SciFinder <sup>®</sup> との連携	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ CAS STNext の結果を CAS SciFinder<sup>®</sup> で再現できるように</li> </ul>
Biosequences Search の強化	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ NCBI 由来の配列の追加</li> <li>・ Biosequences Search の結果に非特許文献情報を追加</li> <li>・ Biosequences Search に Organism フィルターと Sequence Length フィルターを追加</li> <li>・ Motif 配列検索機能の強化</li> </ul>
その他	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ Project タブの追加</li> <li>・ Project タブの Transcript から Query Summary をダウンロード可能に</li> <li>・ Alert Settings 画面でアラート登録名を設定できるように</li> <li>・ Alert Settings 画面で E-mail アドレスの入力漏れに対して警告が表示されるように</li> <li>・ Keyboard Shortcuts 設定の追加</li> <li>・ スクリプト実行速度の改善</li> <li>・ 構造質問式からケミカルコードの検索式を作成可能に (ダウエント会員のみ)</li> </ul>

## 2021 年 6 月以降の強化一覧

### ■ CAS PatentPak の強化

- ・ PPAK フィールドに Claim タグを追加
- ・ 物質情報付き明細書 (Interactive Viewer) の強化
- ・ 配列の記載位置情報の付与開始
- ・ リンク有効期間が 365 日に

### ■ STN の従来型インターフェースのサービス終了

- ・ STN のインターフェースは STNext に統一された。それに伴い下記のサービスは終了した。
  - STN 新プラットフォーム
  - STN Express
  - STN on the Web
  - STN Easy
  - STN AnaVist





**情報事業部**

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

TEL: 0120-003-462 FAX: 03-5978-4090

URL: [www.jaici.or.jp](http://www.jaici.or.jp)

E-mail: [support@jaici.or.jp](mailto:support@jaici.or.jp)