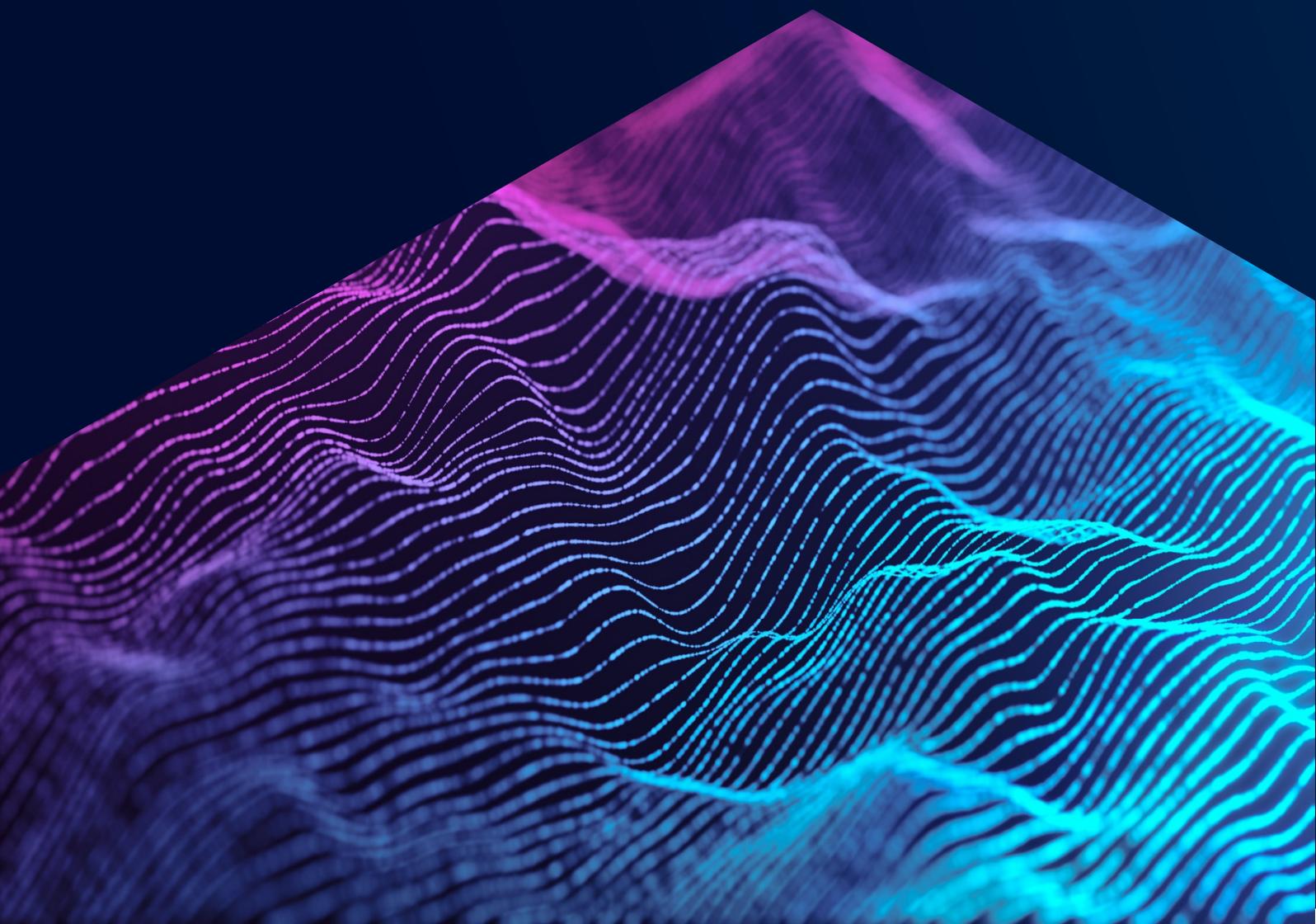


CAS STN[®]Next

DCR ファイル

202410



目次

A 概要

DCR ファイルとは.....	1
DCR ファイルに収録される物質	2
DCR ファイルのレコード	3

B 辞書検索

辞書検索.....	5
化学物質名称検索	6
分子式検索	8

C 構造検索

構造検索.....	11
構造検索の流れ.....	12
参考：スーパーアトム	16
参考：構造検索の注意点	17

D 化学物質に関する特許の検索

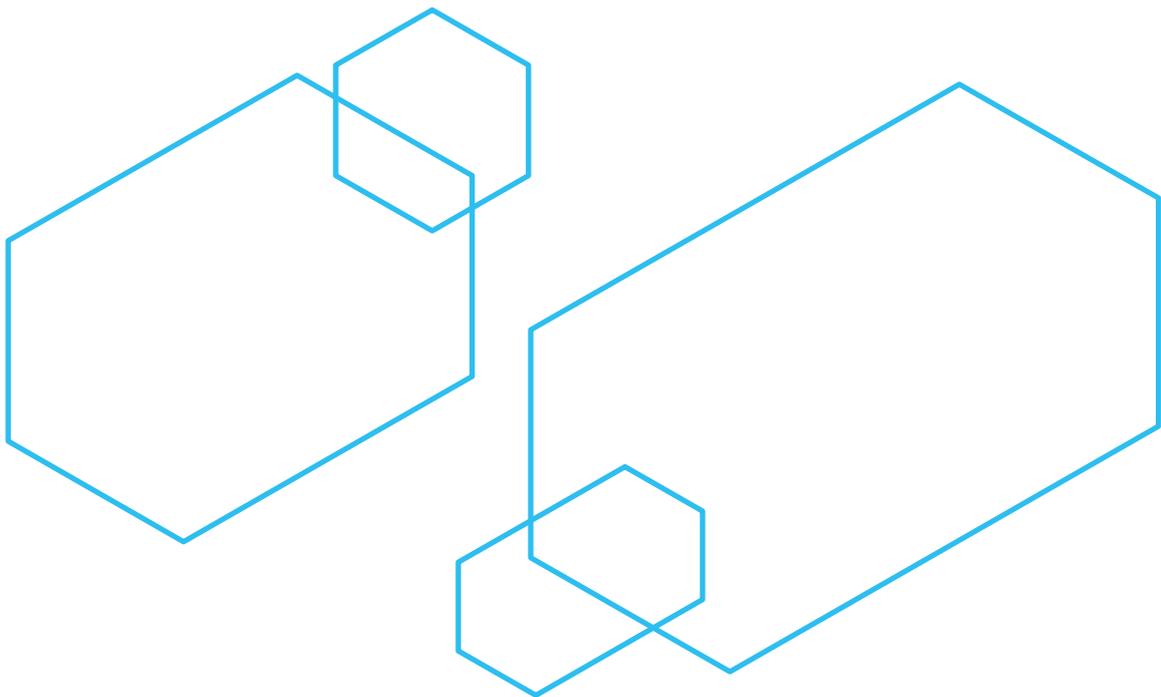
化学物質に関する特許の検索 (クロスオーバー検索)	19
ルール.....	25
ルール一覧	26

Appendix

DWPI 登録番号・DWPI 化合物番号.....	31
アラート	35

A 概要

DCR ファイルを検索するためには、収録内容やレコード構成を正しく理解することが不可欠です。



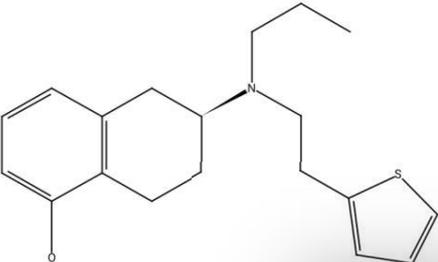
DCR ファイルとは

DCR ファイルは、WPI ファイルで索引された物質を収録する Clarivate 作成の化学物質のデータベースである。

- DCR ファイルは、579 万件以上の物質の物質を収録している (2024 年 10 月現在)。
- 化学物質には DCR レコード番号 (AN) が付与され、化学物質名称や構造図など物質の基本情報と共に、DCR ファイルに収録される。
- DCR レコード番号で DCR ファイルと WPI ファイルがリンクされているため、クロスオーバー検索すれば、DCR ファイルでヒットした物質に関する特許を簡単に検索できる。

DCR ファイルのレコード (化学物質レコード)

AN **DCR-101539** DCR
DCSE 101531-2-0-0 DCR レコード番号
CN.P ROTIGOTINE
CN.S 6-[Propyl-(2-thiophen-2-yl-ethyl)-amino]-5,6,7,8-tetrahydro-naphthalen-1-ol
SY |



WPI ファイルのレコード (特許レコード)

CMT (S)-isomer of N-0437
MF C19 H25 N O S
:

AN 2022-27702P [2022020] WPINDEX Full-text
TI Adhesive patch comprises support and adhesive layer laminated and integrated on one surface of support, where adhesive layer comprises medicine, levulinic
:
PI WO 2022039195 A1 20220224 (2022020)* JA 53[1]
JP 2022540626 X 20220831 (2022071) JA
JP 7173415 B2 20221116 (2022097) JA
:
IT UPIT 20220311
DCR-86573-CL DCR-86573-USE; DCR-89512-CL
DCR-89512-USE; **DCR-101539-CL** **DCR-101539-USE**;
DCR-96517-CL DCR-96517-USE; DCR-7440-CL
DCR-7440-USE; MCN-2268-14301-CL MCN-2268-14301-RCT
MCN-2268-14301-USE; MCN-2268-14302-CL **DCR レコード番号**
MCN-2268-14302-RCT MCN-2268-14302-USE
:

WPI ファイルは、世界の 60 特許発行機関から発行される特許および 2 技術公開誌の情報を収録している。

DCR ファイルに収録される物質

特許情報を収録する WPI ファイルは、以下の収録基準で化学物質を選択し索引している。索引された物質は、DCR ファイルに収録される。

収録基準

- ダウエントセクション B (医薬)、C (農業)、E (一般化学) に分類された特許から索引された、特許請求項や実施例中の重要な特定の化学物質が収録されている。

DWPI 更新週 199916-200110

各特許のクレームまたは実施例から新規化学物質 (最高 25 まで) と既知化学物質 (最高 50 まで) を収録

DWPI 更新週 200111-

クレームされた化学物質

少なくとも主要な実施例から化学物質を一つ収録する。クレームされた化学物質が少ない場合、追加で実施例から選択して収録

クレーム以外からの化学物質はデータの存在する化学物質が対象

実施例からの化学物質は特許中の化学物質の構造の多様性を代表するものを選択して収録

最高 99 個*の化学物質を収録

- 以上の基準に基づいて収録される化学物質の例
 - 1. 新規であると開示されている物質
 - 2. 新規な方法で製造された物質
 - 3. 組成物の中で発明にとって本質的である成分
 - 4. 新規な用途で使用された既知物質
 - 5. 検出された物質と検出剤
 - 6. 検出に用いられた媒質
 - 7. 新規の方法で回収・精製された物質
 - 8. 除去された物質と除去剤

* 索引数の制限を拡張 (2022 年以降)

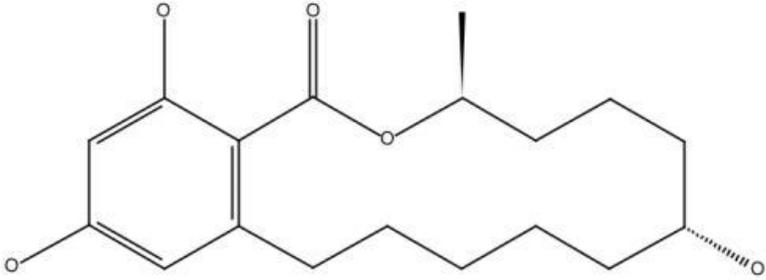
索引化合物の上限を DCR (特定化合物) と Markush 化合物を合わせて 999 個まで拡張している

- 下記の公報がベーシック特許の場合に拡張される
 - イギリス (GBA) 公開 2020 年 12 月 9 日以降発行の公報、DWPI 更新週 2020104 以降に収録
 - 米国 (US) 2021 年 2 月 2 日以降発行の公報、DWPI 更新週 2021014 以降に収録
 - 中国 (CN) 2021 年 9 月 24 日以降発行の公報、DWPI 更新週 2021082 以降に収録
 - さらに対象国を拡大予定 (インド (IN)、ドイツ (DE)、オーストラリア (AU)、日本 (JP)、カナダ (CA) を含む)

DCR ファイルのレコード

DCR ファイルでは、DCR レコード番号が付与された物質の基本情報を確認できる。

DCR ファイルのレコード例 (MAX 表示形式)

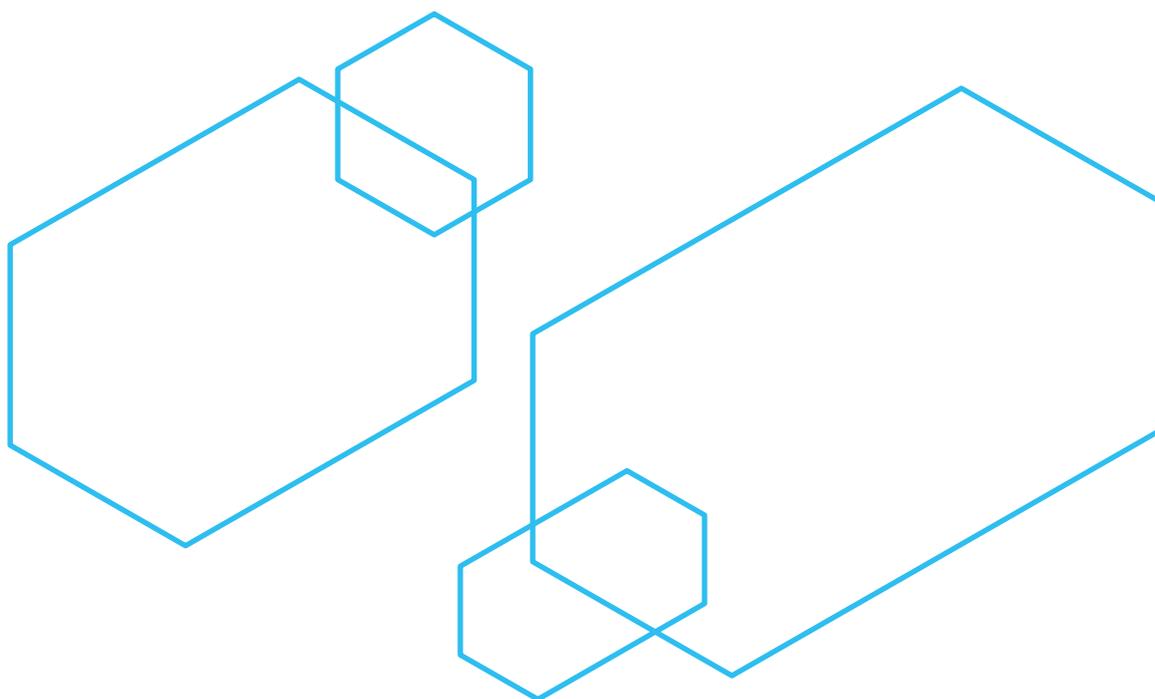
DCR レコード番号	AN	DCR-110813	DCR
DCR 番号	DCSE	110813-1-0-0	
優先化学物質名	CN.P	ZERANOL	
統制化学物質名	CN.S	2,4,11-Trihydroxy-7-methyl-7,8,9,10,11,12,13,14,15,16-decahydro-6-oxa-benzocyclo tetradecen-5-one	
同義名	SY	FRIDERON; MK-188; P-1496; RALABOL; RALGRO; RALONE; THFES; ZEARALANOL; ZERANO; ZERANOL	
			
注記	CMT	3R,7S-diastereoisomer see also TALERANOL	
分子式	MF	C18 H26 O5	
標準化された分子式	SMF	C18 H26 O5 *1; TOTAL *1; TYPE *1	
分子量	MW	322.3984	
リングインデックス番号	SRIN	40640	
DWPI 化合物番号	SDCN	R02051	
DWPI 登録番号	SDRN	2051	
DWPI 登録名	DDRN	ZERANOL	
物質の統制語 (薬物活性)	SCT.DA	ANABOLICS; ESTROGENS	
物質の統制語 (作用機序)	SCT.MA	Estrogen; in veterinary practice: growth-factor.; contraceptive	
部分構造名	SS	ALCOHOL; MACROCYCLE; POLYPHENOL; OXACYCLOTETRADECANE; LACTONE; COND.RING	
DCR 入力日	ED	Entered STN: 23 Mar 2000 Last updated on STN: 23 Mar 2000 Update DWPI Cross Ref.: 5 Aug 2022	

主な表示形式

表示形式	内容
STD (デフォルト)	基本的な物質情報 (AN, DCSE, CN.P, CN.S, SY, STR, CMT, MF, ED, UP, UPWX)
ALL	詳細な物質情報 (STD 表示形式+SMF, MW, SRIN, SDCN, SDRN, SD)
MAX	すべての物質情報 (ALL 表示形式+DDRN, SD, SCT.DA, SCT.MA, SS)
SAM	一部の物質情報 (CN.S, MF, STR)
SCAN	一部の物質情報 (SAM と同じだが、回答番号指定不可: ランダム表示)

B 辞書検索

DCR ファイルの辞書検索についてご説明します。



辞書検索

DCR ファイルに収録された物質は、以下の辞書検索フィールド (化学物質名や分子式など) を用いて検索できる。

主な辞書検索フィールド

	検索フィールド	内容	入力例	索引単位
	/BI	基本索引 化学物質名称 (/CN, /CN.P, /CN.S, /SY)、コメント (/CMT)、分子式 (/MF)、統制語 (/SCT.DA, /SCT.MA)	S BENZENESULFONYL S ?PHENYLETHER? S C19H19FN2O2S	単語
名称	/CN /CN.P /CN.S /SY /CNS	優先化学物質名 医薬品 (INN 名, USAN 名), 農薬 (ISO 名, BSI 名) 統制化学物質名 (AUTONOM 名) 同義名 化学物質名称セグメント (CN からのセグメント)	S MANDELIC ACID/CN S DISULFONYL?/CNS	句 単語
分子式 関連	/MF /SMF /CMF /CMF.CNT /ELS /ELS.CNT /MW /NC /NC.TOT	完全分子式 標準化された分子式 成分分子式 成分分子式の数 元素記号 元素記号の数 分子量 フラグメント数 成分数	S H CL2 N/MF S "H CL2 N *1; TYPE *1; TOTAL *1"/SMF S C12H20/CMF S H2O/CMF (S) 5/CMF.CNT S 16 C/ELS S C/ELS (S) 16/ELS.CNT S 17-21/MW S 9-11/NC S 4/NC.TOT AND L#	句 句 句 数値 句 数値 数値 数値
コード類	/AN /DCSE /SD (/CC) /SDCN /SDRN /SRIN	DCR レコード番号 DCR 番号 分類コード DWPI 化合物番号 DWPI 登録番号 物質のリングインデックス番号	S DCR-5303196/AN S 5303196-0-0-1/DCSE S HALOCARBONS/SD S R20123/SDCN S 1029/SDRN S 11895/SRIN	句 句 句 句 句 句
その他	/DDRN /SS /SCT (/SCT.DA (/CT) /SCT.MA /CMT /FA	DWPI 登録名 部分構造名 物質の統制語,薬物活性 物質の統制語,作用機序 注記 フィールドの存在	S 2-184/DDRN S DIPHENYLMETHANE/SS S MAO-INHIBITOR/SCT S SEROTONINERGICS/SCT S RATIO/CMT S L1 AND MW/FA	句 句 句 単語 単語
日付	/ED /UP (/UPCR) /UPWX	DCR 入力日 DCR 更新日 WPI クロスリファレンス更新日 (DCR 登録化学物質が WPI ファイルに索引された日)	S 20210323/ED S 20210323/UP S 20240102/UPWX	数値

化学物質名称検索

化学物質名に関するフィールド (/CN.P, /CN.S, /SY) をまとめて完全化学物質名称検索するには、/CN を利用する。前方一致検索を利用できる。

- 完全名称検索
 - => S CAFFEINE/CN ← カフェインの検索
 - => S 3,7-DICHLORO?/CN ← 3,7-dichloro から始まる名称の物質の検索

部分名称から検索する場合は、/BI または /CNS を利用する。前方一致検索だけでなく、後方一致、中間一致検索も利用できる。

- 部分名称検索
 - => S ?AZIDE/CNS ← ?AZIDE の部分名称を含む物質の検索
 - => S ?CHLORO? AND QUINOLI? ← ?CHLORO? と QUINOLI? の部分名称を含む物質の検索

検索例：化学物質名称からフェブキソスタット (Febuxostat) を検索する。

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

=> E FEBUXOSTAT/CN                          ← 完全物質名称を /CN で EXPAND する

E1      1      FEBUPROL/CN
E2      1      FEBURIC/CN
E3      1  --> FEBUXOSTAT/CN
E4      1      FEBUXOSTAT BENZYLAMINE/CN
E5      1      FEBUXOSTAT CALCIUM/CN
E6      1      FEBUXOSTAT CYCLOHEXYL AMINE/CN
E7      1      FEBUXOSTAT DICYCLOHEXYLAMINE/CN
E8      1      FEBUXOSTAT DIISOPROPYLAMINE/CN
E9      1      FEBUXOSTAT LIGUSTRAZINE/CN
E10     1      FEBUXOSTAT LITHIUM/CN
E11     1      FEBUXOSTAT MAGNESIUM (2:1)/CN
E12     1      FEBUXOSTAT PIDOLATE/CN

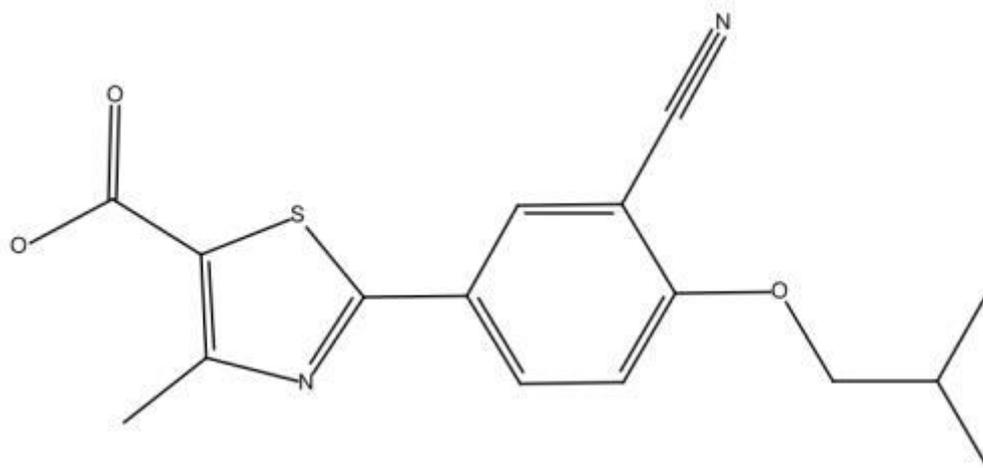
=> S E3                                      ← E 番号を用いて検索する

L1      1      FEBUXOSTAT/CN

=> D MAX                                    ← MAX 表示形式で表示する

L1      ANSWER 1 OF 1 DCR  COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN.
AN      DCR-255631  DCR
DCSE    255631-0-0-0
CN.P    FEBUXOSTAT
CN.S    2-(3-Cyano-4-isobutoxy-phenyl)-4-methyl-thiazole-5-carboxylic acid
SY      ADENURIC; FEBURIC; FEBUXOSTAT; TEI-6720; TMX-67; ULORIC
```

/CN は化学物質名に関するフィールドを検索する



MF C16 H16 N2 O3 S

SMF C16 H16 N2 O3 S *1; TOTAL *1; TYPE *1

MW 316.3815

SDCN RA15U6

DDRN TEI-6720

SCT.DA ANTIGOUTS; CYTOSTATICS; MUCIN-1-INHIBITORS; MUCIN-INHIBITORS;
URICOSURICS; XANTHINE-OXIDASE-INHIBITORS

SCT.MA MUCIN-1-INHIBITOR; MUCIN-INHIBITOR; XANTHINE-OXIDASE-INHIBITOR

SS AMINOACID; THIAZOLE; BH-LINKED-CC; NITRILE; PHENOL-ETHER

ED Entered STN: 28 Feb 2000

Last updated on STN: 14 Apr 2016

Update DWPI Cross Ref.: 5 Mar 2024

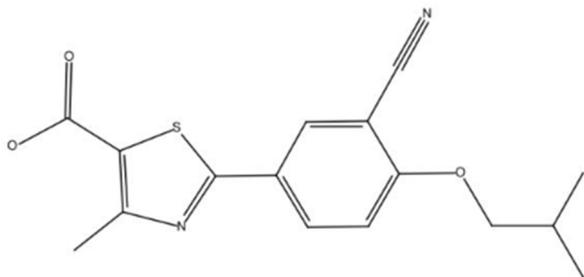
分子式検索

完全化学物質名が不明な場合は、分子式検索を行う。

- 分子式検索は /MF で検索する。
 - => S C8 H10 N4 O2/MF ← C を含む場合は、C、H、その他の元素はアルファベット順に並べる
 - => S HCL2N/MF ← C を含まない場合は、その他の元素のアルファベット順に並べる
- 成分分子式 (/CMF の回答は /MF の回答を包括しない場合があるので、成分分子式検索は /MF,CMF で検索する。
 - => S C16H16N2O3S/MF,CMF ← C16H16N2O3S を成分として含む物質を検索する

検索例：分子式から目的の物質を検索する。

- 絞り込みには、部分名称 (/BI またはなし) や分子式関連フィールドを利用する。



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

=> E C16H16N2O3S/MF                         ← 完全分子式 (/MF) で EXPAND する
E1          1      C16H16N2O3.C2H6O.V.HO/MF
E2          1      C16H16N2O3P/MF
E3         120 --> C16H16N2O3S/MF
E4          1      C16H16N2O3S.C12H23N/MF
E5          1      C16H16N2O3S.C2H6O/MF
E6          1      C16H16N2O3S.C3H4N2.H2O/MF
E7          1      C16H16N2O3S.C4H10N2/MF
E8          1      C16H16N2O3S.C4H11N/MF
E9          1      C16H16N2O3S.C4H11NO/MF
E10         1      C16H16N2O3S.C4H6N2/MF
E11         1      C16H16N2O3S.C4H8O2/MF
E12         1      C16H16N2O3S.C6H13N/MF

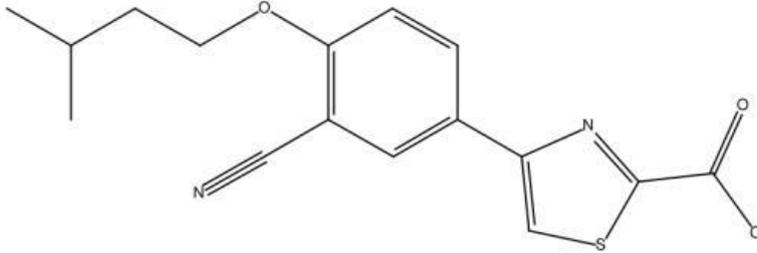
=> S E3                                       ← E 番号を用いて検索する
L1         120 C16H16N2O3S/MF

=> S L1 AND THIAZOLE?                         ← 部分名称で限定する
L2         15 L1 AND THIAZOLE?
```

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認する

L2 15 ANSWERS DCR COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN.
CN.S 4-[3-Cyano-4-(3-methyl-butoxy)-phenyl]-thiazole-2-carboxylic acid
MF C16 H16 N2 O3 S

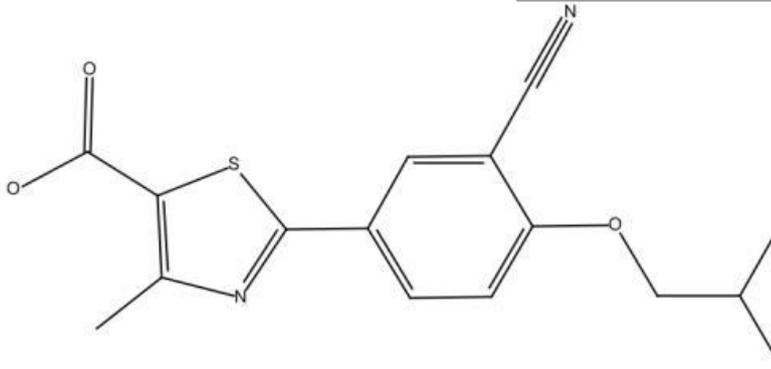


HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):14

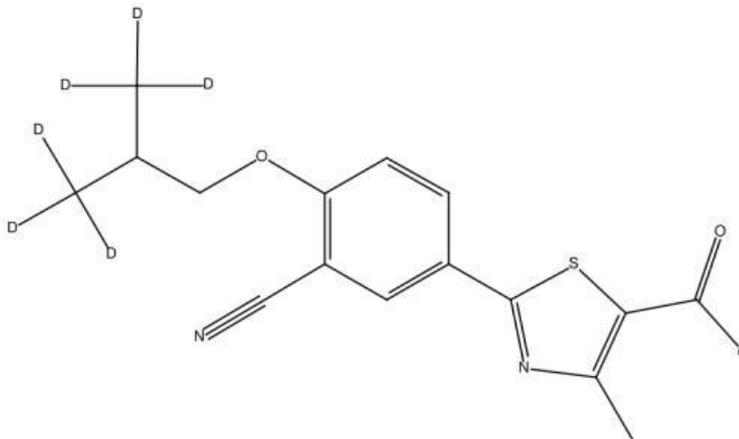
← 出力件数を入力

L2 15 ANSWERS DCR COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN.
CN.S 2-(3-Cyano-4-isobutoxy-phenyl)-4-methyl-thiazole-5-carboxylic acid
MF C16 H16 N2 O3 S

目的物質の CN.S をコピーする



L2 15 ANSWERS DCR COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN.
CN.S 2-(3-Cyano-4-isobutoxy-phenyl)-4-methyl-thiazole-5-carboxylic acid
MF C16 H16 N2 O3 S



:

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

```

=> E 2-(3-Cyano-4-isobutoxy-phenyl)-4-methyl-thiazole-5-carboxylic acid/CN
E1      1      2-(3-CYANO-4-ISOBUTOXY-PHENYL)-4-METHYL-SELENAZOLE-5-CARBOXYLIC ACID BENZYL ESTER/CN
E2      1      2-(3-CYANO-4-ISOBUTOXY-PHENYL)-4-METHYL-SELENAZOLE-5-CARBOXYLIC ACID ETHYL ESTER/CN
E3     11 --> 2-(3-CYANO-4-ISOBUTOXY-PHENYL)-4-METHYL-THIAZOLE-5-CARBOXYLIC ACID/CN
E4      1      2-(3-CYANO-4-ISOBUTOXY-PHENYL)-4-METHYL-THIAZOLE-5-CARBOXYLIC ACID METHYLAMINE/CN
          :

```

/CN でコピーした物質を EXPAND する

不要な回答を
除く操作

```

=> S E3 AND L2      ← L2 と E3 を演算して限定する
L3      6 "2-(3-CYANO-4-ISOBUTOXY-PHENYL)-4-METHYL-THIAZOLE-5-CARBOXYLIC ACID"/CN AND L2

```

```

=> SEL L3 CMT      ← 注記 (CMT) を SELECT する
E1 THROUGH E4 ASSIGNED

```

```

=> D SEL      ← 抽出した語を確認する
E1      5      FEBUXOSTAT/CMT
E2      5      ISOTOPE/CMT
E3      5      LABELED/CMT
E4      5      2H/CMT

```

物質の名称以外だと、注記を利用して不要な回答を除ける場合がある。ここでは注記のタームを抽出し同位体関連のタームを除く

```

=> S L3 NOT (ISOTOPE OR LABELED OR 2H)/CMT      ← 注記 (CMT) に含まれる同位体
L4      1 L3 NOT (ISOTOPE OR LABELED OR 2H)/CMT 関連のキーワードを除く

```

```

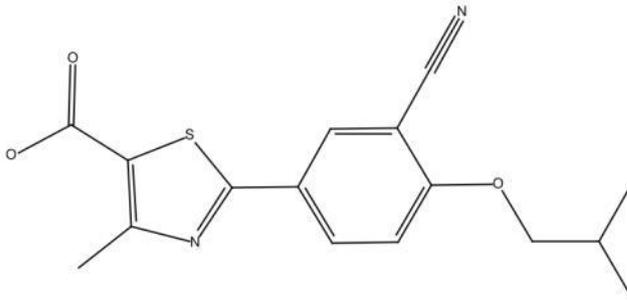
=> D MAX      ← MAX 表示形式で表示する

```

```

L4      ANSWER 1 OF 1 DCR  COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN.
AN      DCR-255631  DCR
DCSE    255631-0-0-0
CN.P    FEBUXOSTAT
CN.S    2-(3-Cyano-4-isobutoxy-phenyl)-4-methyl-thiazole-5-carboxylic acid
SY      ADENURIC; FEBURIC; FEBUXOSTAT; TEI-6720; TMX-67; ULORIC

```



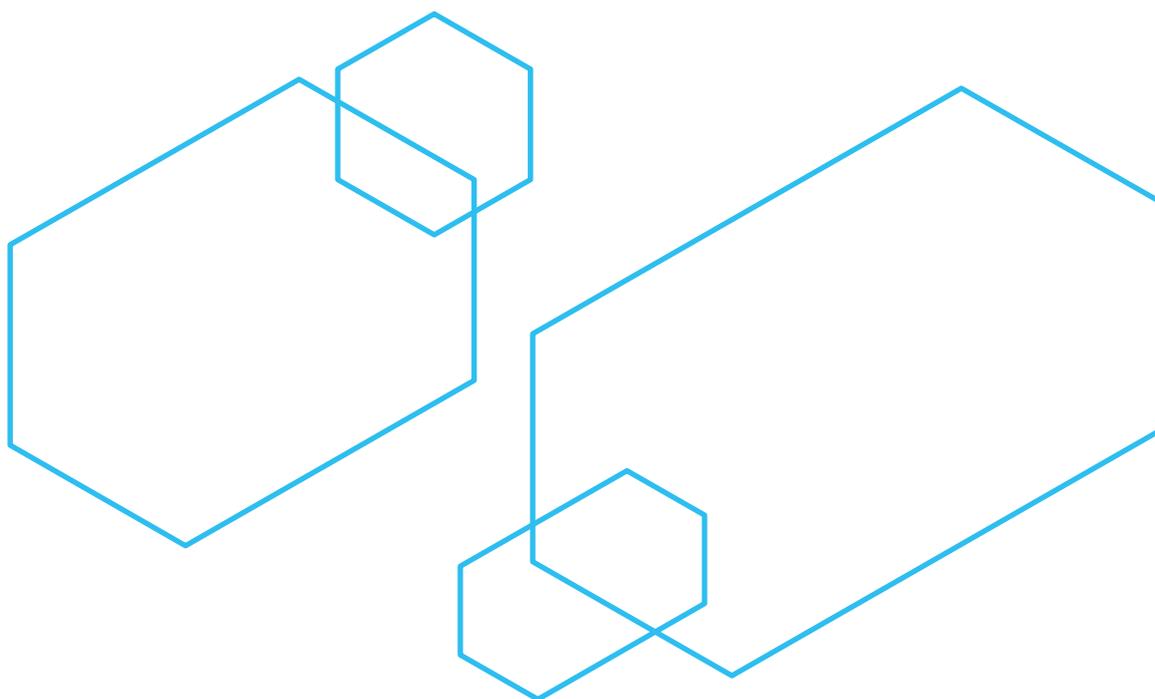
```

MF      C16 H16 N2 O3 S
SMF     C16 H16 N2 O3 S *1; TOTAL *1; TYPE *1
MW      316.3815
SDCN    RA15U6
DDRN    TEI-6720
SCT.DA  ANTIGOUTS; CYTOSTATICS; MUCIN-1-INHIBITORS; MUCIN-INHIBITORS;
        URICOSURICS; XANTHINE-OXIDASE-INHIBITORS
SCT.MA  MUCIN-1-INHIBITOR; MUCIN-INHIBITOR; XANTHINE-OXIDASE-INHIBITOR
SS      AMINOACID; THIAZOLE; BH-LINKED-CC; NITRILE; PHENOL-ETHER
ED      Entered STN: 28 Feb 2000
        Last updated on STN: 14 Apr 2016
        Update DWPI Cross Ref.: 8 May 2024

```

C 構造検索

DCR ファイルの構造検索についてご説明します。



構造検索

DCR ファイルでは、CAS STNext® の他ファイルと同様に構造検索の機能を利用できる。

構造検索コマンド

- => S L# 検索タイプ 検索範囲 (L# は構造質問式の L 番号)

構造検索の検索タイプ

構造検索を実行する際に検索タイプを指定することで、「作図した構造と完全に一致する」「作図した部分構造を含む化学物質」などの条件を指定することができる。

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

構造検索の検索範囲

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

DCR ファイルの構造検索におけるシステム制限値

	オンライン検索 サンプル検索	オンライン検索 フルファイル検索	BATCH 検索*
回答数	50 件	150 万件	150 万件

- * BATCH 検索とは、構造質問式をシステムに登録しておき、データベースの利用が少ない時間に一括して検索させる方法である。

注意点

既存の構造質問式 (.str, .cxf, .mol 形式) を CAS STNext にインポートして使用できるが、他のファイルとの構造検索の相違点があるため、後述の「参考：構造検索の注意点」を確認する。

構造検索の流れ

CAS STNext の REGISTRY ファイルと同様に、DCR ファイルで構造検索できる。作図機能など構造検索の詳細については、「化学物質検索」のテキスト参照。

- ユーザーマニュアルのページの講習会関連資料一覧 - 化学物質検索
<https://www.jaici.or.jp/stn-ip-protection-suite/cas-stnext/documents/>

構造検索の流れ

- STEP 1：DCR ファイルに入り、構造を作図する。
 - CAS STNext 画面右下の Draw ボタンをクリックすると構造作図画面が起動する。
- STEP 2：構造質問式の保存とアップロード
 - 構造作図画面右下の Upload ボタンをクリックすると、構造質問式の保存とアップロードが同時に行われる。
- STEP 3：サンプル検索
 - フルファイルの一部をテスト的に検索する。
 - DCR ファイルの構造検索は、REGISTRY ファイルの構造検索と仕組みが異なり、イタレーション検索を行わない。(FULL FILE PROJECTIONS (フルファイル検索の予測) の表示がない)
 - サンプル検索を行うと、最大 50 件回答が得られる。意図した回答が得られているか、フルファイル検索前に確認できる。
- STEP 4：フルファイル検索
 - ファイルのすべて (100 %) を対象に構造検索を行う。

検索例：フェブキシスタット (Febuxostat) あるいはその誘導体を検索する。

=> FILE DCR

← DCR ファイルに入る

CAS STNext 画面右下の Draw ボタンをクリックし、構造を作図する

Structure Editor

Draw or change atoms or bonds.

Molecular Formula: C₁₄H₁₉N₂O₅ (316.38)

Zoom: 100%

アップロード

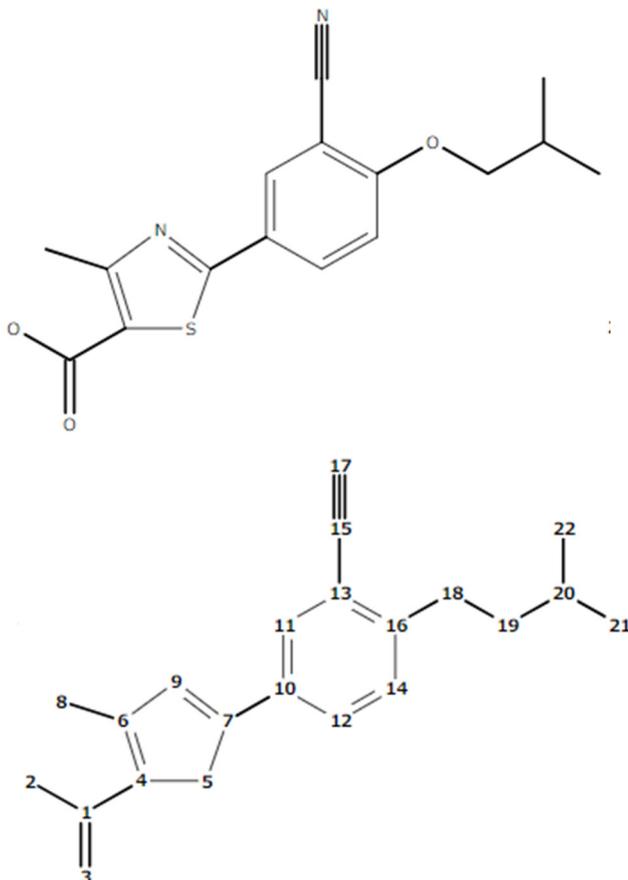
Upload Save As Cancel

View Previous Structures...

=>

← 構造質問式をアップロードする

Uploading structure file: 2024_0034_Structure



Node Attributes

Ring Nodes : 4 5 6 7 9 10 11 12 13 14 16

Chain Nodes : 1 2 3 8 15 17 18 19 20 21 22

Bond Attributes

Ring Bonds : 4-5 4-6 5-7 6-9 7-9 10-11 10-12 11-13 12-14 13-16 14-16

Chain Bonds : 1-2 1-3 1-4 6-8 7-10 13-15 15-17 16-18 18-19 19-20 20-21 20-22

Exact Bonds : 1-4 6-8 7-10 13-15 15-17 19-20 20-21 20-22

Normalized Bonds : 10-11 10-12 11-13 12-14 13-16 14-16

Exact/Normalized Bonds : 1-2 1-3 4-5 4-6 5-7 6-9 7-9 16-18 18-19

Markush Attributes

Match Level (ATOM) : 4 5 6 7 9 10 11 12 13 14 16

Match Level (CLASS) : 1 2 3 8 15 17 18 19 20 21 22

Element Count Level (LIMITED) : 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16
17 18 19 20 21 22

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

← 部分構造検索のサンプル検索を行う

SAMPLE SEARCH INITIATED 14:08:47 FILE 'DCR'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 0 TO ITERATE

0.0% PROCESSED 564884 ITERATIONS

6 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.01

L2 6 SEA SSS SAM L1

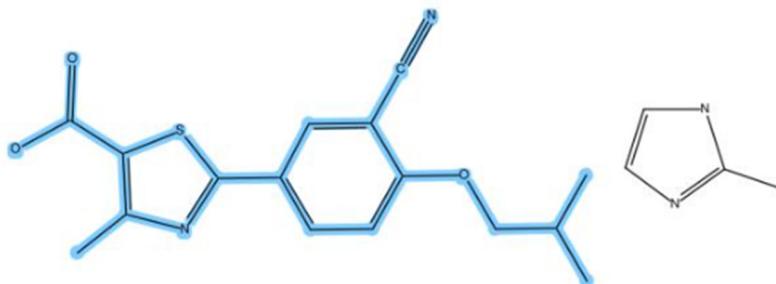
=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認する

L2 6 ANSWERS DCR COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN.

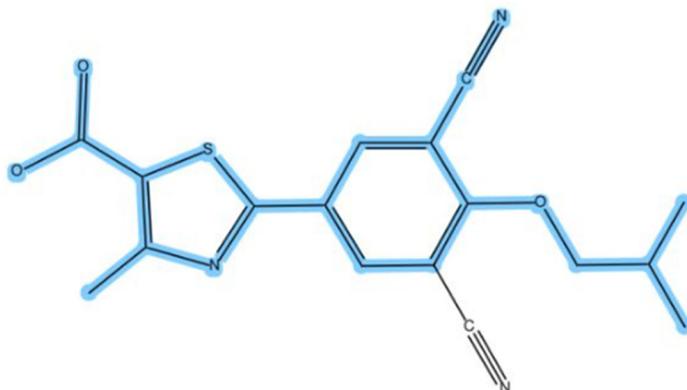
CN.S 2-(3-Cyano-4-isobutoxy-phenyl)-4-methyl-thiazole-5-carboxylic acid
compound with 2-methyl-1H-imidazole

MF C16 H16 N2 O3 S . C4 H6 N2



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

L2 6 ANSWERS DCR COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN.
CN.S 2-(3,5-Dicyano-4-isobutoxy-phenyl)-4-methyl-thiazole-5-carboxylic acid



:
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

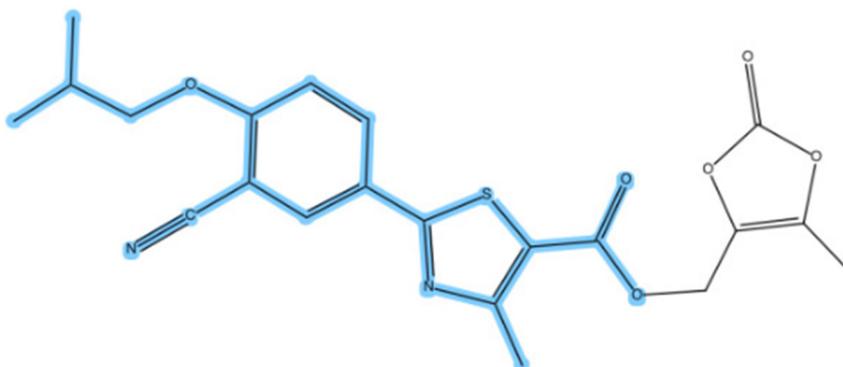
=> S L1 FUL ← 部分構造検索のフルファイル検索を行う
FULL SEARCH INITIATED 14:10:18 FILE 'DCR'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 0 TO ITERATE

0.0% PROCESSED 5648840 ITERATIONS 72 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

L3 72 SEA SSS FUL L1

=> D L3 1 ← STD 表示形式 (デフォルト) で表示する

L3 ANSWER 1 OF 72 DCR COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN.
AN DCR-7153198 DCR
DCSE 7153198-0-0-0
CN.P (5-methyl-2-oxo-2H-1,3-dioxol-4-yl)methyl
2-[3-cyano-4-(2-methylpropoxy)phenyl]-4-methyl-1,3-thiazole-5-
Carboxylate

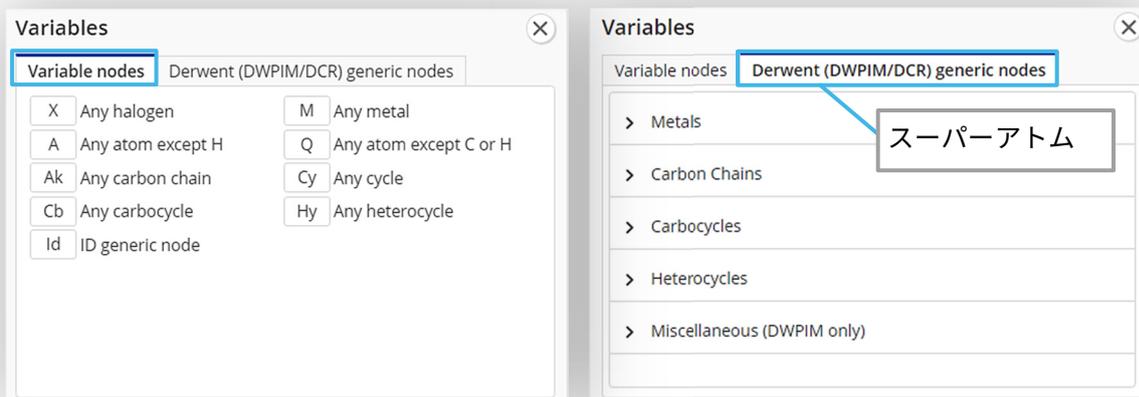


MF C21 H20 N2 O6 S
ED Entered STN: 24 May 2024
Last updated on STN: 24 May 2024
Update DWPI Cross Ref.: 24 May 2024

参考：スーパーアトム

DCR ファイルでは、STN の一般式グループに加え、より細分化した一般式グループ記号であるスーパーアトムを利用できる。

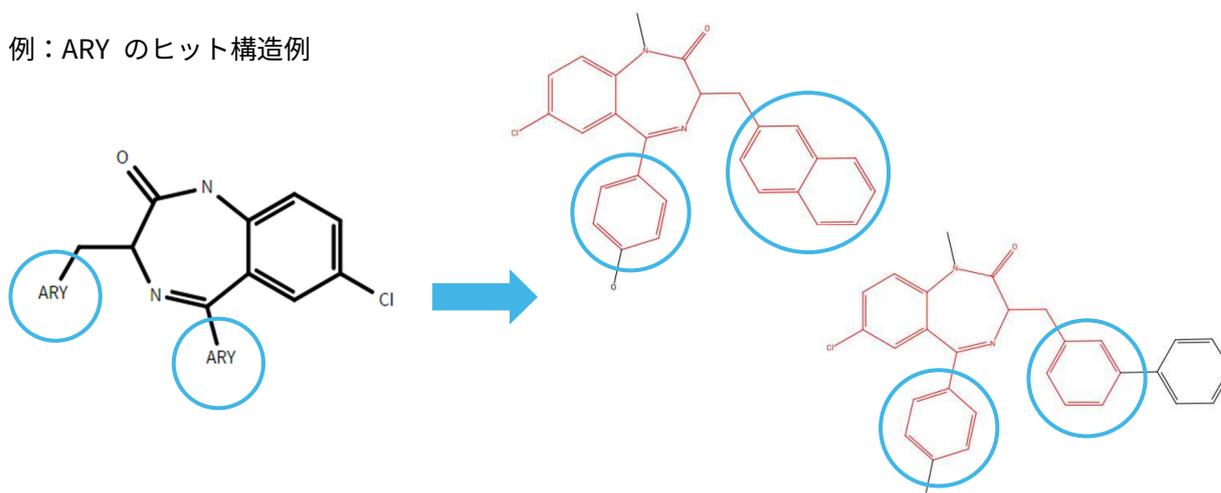
- 構造作図画面の X メニュー（可変原子）



- 細分化したスーパーアトムを利用することで、よりの確な検索ができる。

Variable nodes		Derwent generic nodes		
Ak	Any carbon chain	Carbon Chains	CHK	Alkyl, alkylene
			CHE	Alkenyl, alkenylene
			CHY	Alkynyl, alkynylene
Cb	Any carbocycles	Carbocycles	ARY	Carbocycle (at least one benzene)
			CYC	Cycloaliphatics (all others)
Hy	Any heterocycles	Heterocycles	HEA	Heteroaryl
			HET	Heterocycle
			HEF	Fused heterocycle
M	Any metal	Metals	A35	Group IIIA-VA metals
			ACT	Actinides
			AMX	Alkali and alkaline earth metals
			LAN	Lanthanide
			TRM	Transition metals

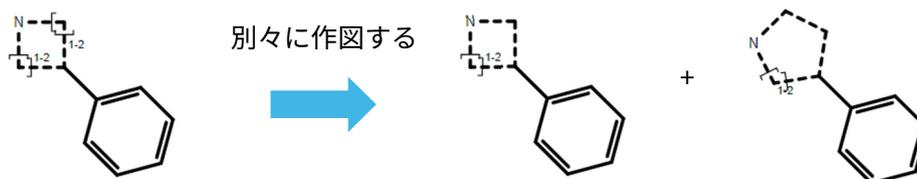
- 例：ARY のヒット構造例



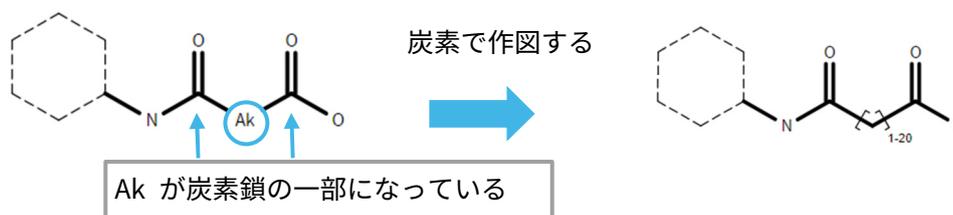
参考：構造検索の注意点

一部の作図機能を利用すると、正しい回答が得られないため作図の際は注意する。

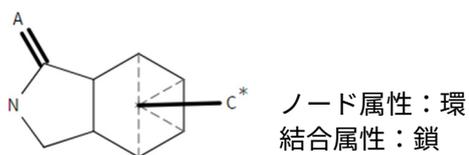
- 1. 繰り返しグループを二つ以上使った環の作図
 - 環で利用できる繰り返しグループは一つのみであるため、可能性のある組み合わせを別々に描き検索する。



- 2. 可変原子 Ak, CHK, CHE, CHY が炭素鎖の一部になる作図
 - 可変原子 Ak など炭素以外の元素に結合させた場合のみ有効であるため、可変原子でなく炭素を作図する (必要であれば、さらに置換禁止や結合非水素数を設定する)。

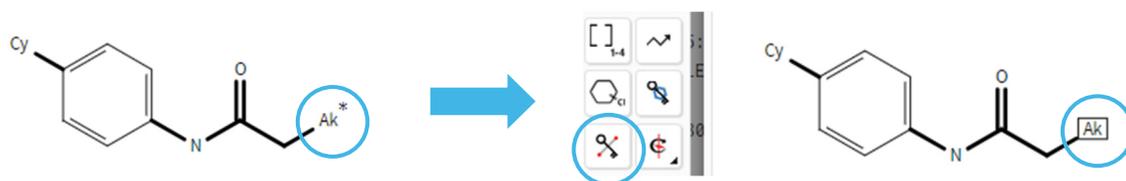


- 3. ノードの属性を環にした置換基の可変置換位置
 - ノードの属性を環にした置換基を可変置換位置に指定すると、結合属性が鎖でも縮環構造を含めヒットする。回避方法がないため、可変置換位置を利用せず、全パターンを作図する。



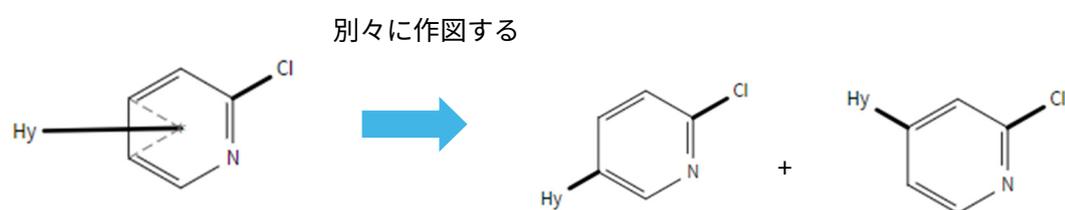
- 4. 一般式への結合非水素数の指定

- Lock Atoms ツールを利用する



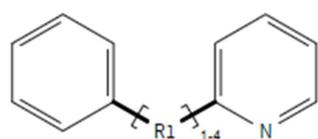
- 5. 環や鎖の一般式を可変置換位置の置換基としてダイレクトに結合させる作図

- 回避方法がないため、可変置換位置を利用せず、全パターンを作図する。

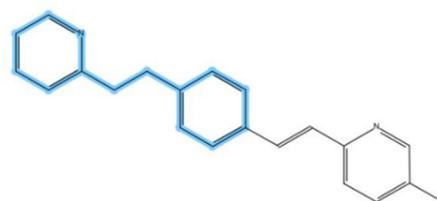
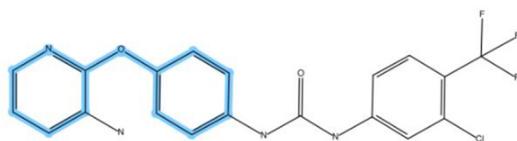


- 6. 繰り返しに R グループを使う作図

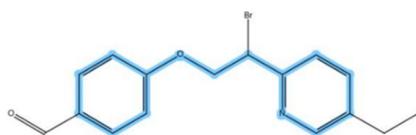
- 以下の例で R1=O,C とした時、繰り返しが C だけ、あるいは O だけが得られ、繰り返しに C と O が含まれる構造が得られない。回避方法がないため、全パターンを作図する。



ヒットする構造

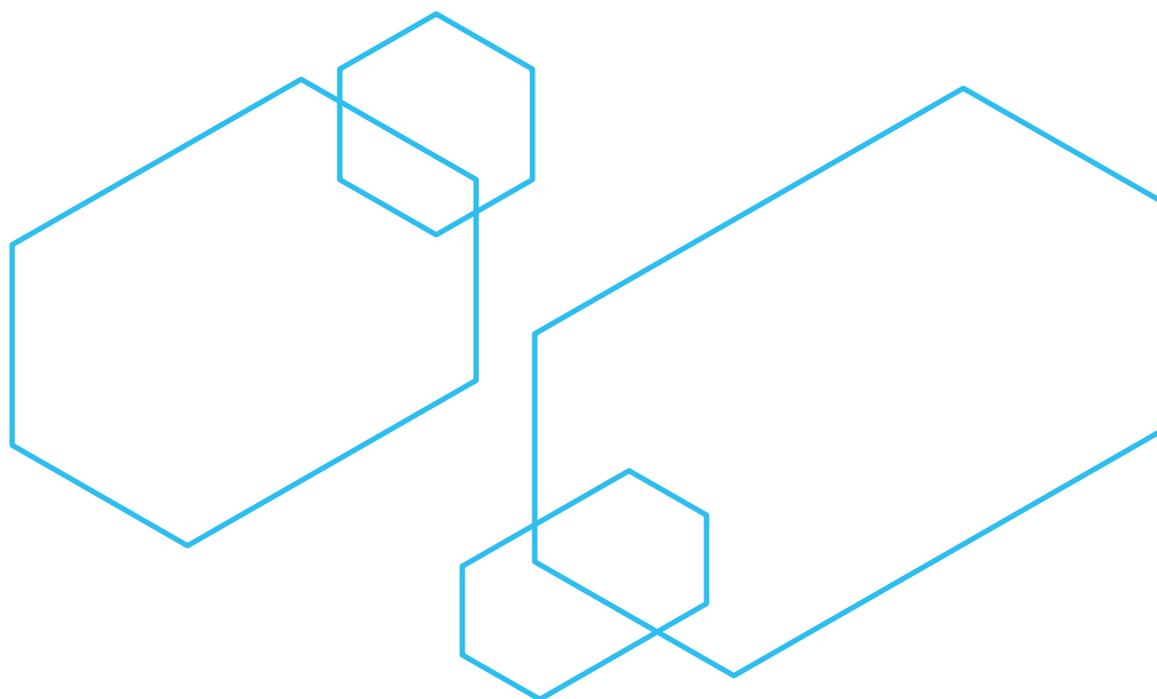


ヒットしない構造



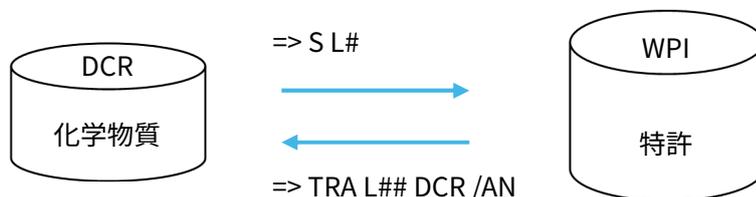
D 化学物質に関する特許の検索

DCR ファイルで検索した化学物質に関する特許の検索についてご説明します。



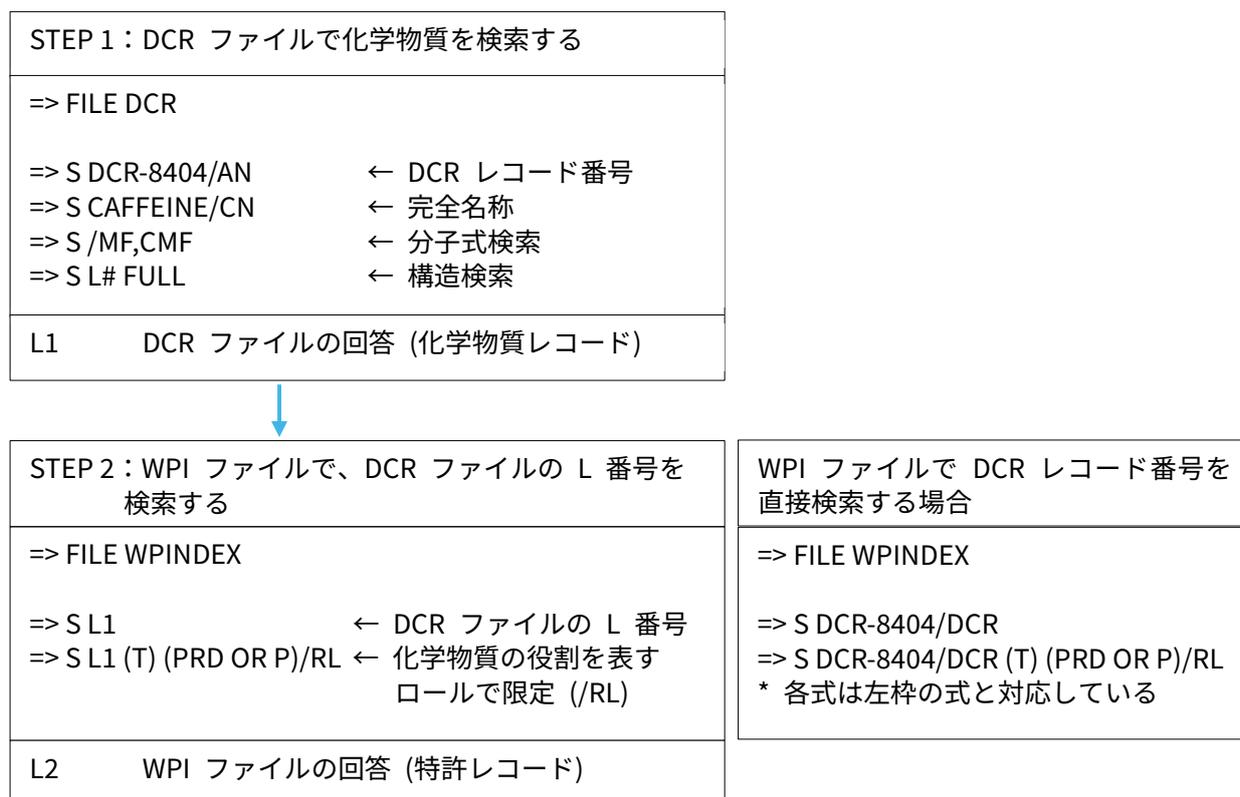
化学物質に関する特許の検索 (クロスオーバー検索)

DCR ファイルで得られた化学物質に関する特許は、WPI ファイルを利用すると簡単に検索できる。



- DCR レコード番号で DCR ファイルと WPI ファイルがリンクされているため、DCR ファイルで得られた L 番号を WPI ファイルで検索すると、その物質に関する特許を検索できる。
 - WPI ファイルへのクロスオーバー検索は 20 万件まで可能。
- WPI ファイルに索引された物質を DCR ファイルで確認するには、TRANSFER コマンドを利用する。

化学物質に関する特許を検索する場合の流れ



- DCR ファイルから WPI ファイルへのクロスオーバー検索に加え、基本索引や拡張基本索引で化学物質名称を検索した結果を合わせるとより網羅的に検索できる (後述)。
- DWPI 化合物番号 (DCN) や DWPI 登録番号 (DRN 会員用コード) を併用すると、さらに網羅的な調査ができる (APPENDIX 参照)。

検索例：エンテロシン (Enterocin) に関する特許を検索する。

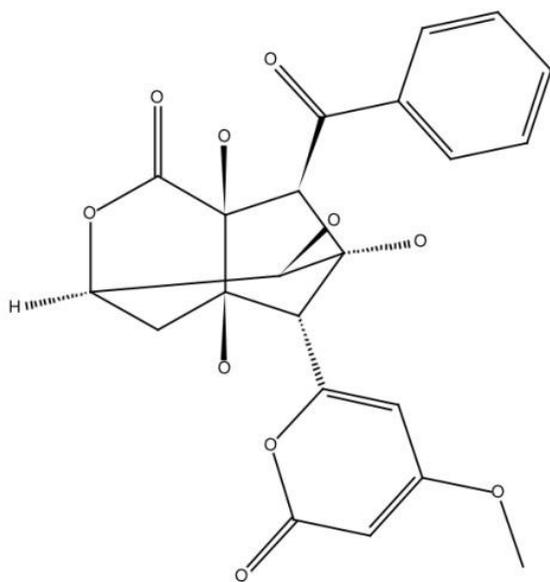
```
=> FILE DCR                                ← DCR ファイルに入る
=> E ENTEROCIN/CN                          ← エンテロシン (Enterocin) を化学物質名 (/CN) で
E1      1      ENTEROCALM/CN              EXPAND する
E2      1      ENTEROCHELIN/CN
E3      1 --> ENTEROCIN/CN
E4      1      ENTEROCIN-CRL-35/CN
E5      1      ENTEROCOLORAN/CN
E6      1      ENTEROCOCCUS/CN
E7      1      ENTEROCOL/CN
E8      1      ENTEROCUR/CN
E9      1      ENTEROCURA/CN
E10     1      ENTEROCURAT/CN
E11     1      ENTERODIAMOEBIN/CN
E12     2      ENTERODIOL/CN
```

```
=> S E3                                    ← E 番号で検索する
L1      1 ENTEROCIN/CN
```

```
=> D                                        ← STD 表示形式 (デフォルト) で表示する (表示は任意)
```

```
L1      ANSWER 1 OF 1 DCR  COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN.
AN      DCR-94247 DCR
DCSE    94247-1-0-0
CN.P    ENTEROCIN
CN.S    (1S,2S,3S,6R,8R,9S,10S)-2-Benzoyl-1,3,8,10-tetrahydroxy-9-(4-methoxy-6-oxo-6H-
pyran-2-yl)-5-oxa-tricyclo[4.3.1.0(3,8)]decan-4-one
SY      ENTEROCIN; VULGAMYCIN
```

DCR レコード番号



```
MF      C22 H20 O10
ED      Entered STN: 4 Dec 2012
        Last updated on STN: 10 Sep 2020
        Update DWPI Cross Ref.: 17 Apr 2023
```

=> FILE WPINDEX

← WPINDEX ファイルに入る

=> S L1

← DCR ファイルで得られた L 番号で検索する

L2 9 L1

=> D L2 1 MAX

← 1 番目の回答を MAX 表示形式で表示する

L2 ANSWER 1 OF 9 WPINDEX COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN

AN 2023-31195R [2023030] WPINDEX Full-text

ED 20230417

TI New genetically modified Mycoplasma bacterium comprising in its genome a deletion, substitution, and/or insertion of at least one nucleotides in the operons used in treatment of pneumonia

DC B04; B05; D16; P34

IN LLUCH SENAR M; MAZZOLINI R; RIBEIRO DOS SANTOS C J; SERRANO PUBUL L

PA (REGU-N) FUNDACIO CENT REGULACIO GENOMICA; (CATA-N) INST CATALANA RECERCA & ESTUDIS AVANCATS; (PULM-N) PULMOBIOTICS SL

CYC 138

PI WO 2023041809 A1 20230323 (2023030)* EN 80[13]

ADT WO 2023041809 A1 WO 2022-EP76135 20220920

PRAI EP 2021-382847 20210920

IPCI A61K0035-00 [I,A]; A61L0002-00 [I,A]; A61P0031-04 [I,A]; C12N0001-36 [I,A]; C12N0015-74 [I,A]

CPC A61K2035-11; A61K0031-431; A61K0031-496; A61K0031-546; A61K0031-551; A61K0035-74; A61K0038-00; A61K0038-4886; A61K0045-06; A61P0031-04;

:

AB WO 2023041809 A1 UPAB 20230417

NOVELTY - Genetically modified Mycoplasma bacterium comprising in its genome a deletion, substitution, and/or insertion of at least one nucleotides in the operons of the calcium ions dependent cytotoxic nuclease gene (MPN133) or orthologues and adenosine diphosphate (ADP)-ribosyltransferase gene (MPN372) or orthologues, that reduce the pathogenicity and/or immunogenicity of Mycoplasma bacterium compared to a reference M129-B7 Mycoplasma pneumoniae bacterium, is new.

DETAILED DESCRIPTION - Genetically modified Mycoplasma bacterium comprising in its genome a deletion, substitution, and/or insertion of at least one nucleotides in the operons of the calcium ions dependent cytotoxic nuclease gene (MPN133) or orthologues and adenosine diphosphate (ADP)-ribosyltransferase gene (MPN372) or orthologues, that reduce the pathogenicity and/or immunogenicity of Mycoplasma bacterium compared to a reference M129-B7 Mycoplasma pneumoniae bacterium, the reduction in pathogenicity and/or immunogenicity being characterized by reduction of toxicity by at least 30% upon introduction into host organism when

:

ACTIVITY - Antiinflammatory; Respiratory-Gen.

MECHANISM OF ACTION - None given.

USE - The modified Mycoplasma bacterium is useful for treating pneumonia, preferably ventilator-associated pneumonia (claimed), and pulmonary infections associated with biofilm formation caused by multiple bacteria. Test details are described but no results given.

ADVANTAGE - The bacterium dissolves biofilms caused by bacteria in the respiratory tract, preferably biofilms generated by a group of bacteria comprising Pseudomonas aeruginosa and/or Staphylococcus aureus , comprises all biological machinery needed to synthesize complex therapeutics, complex regulatory circuits can be integrated into bacteria to sense and to respond specifically to diseased tissue, and provides low risk of bacterial DNA integration into the host genome.

書誌情報と
特許分類

抄録

TECH BIOTECHNOLOGY - Preparation: No preparation method is given. Preferred Components: The bacterium further comprises at least one antimicrobial agent not encoded by or expressed in a reference Mycoplasma pneumoniae bacterium, preferably the antimicrobial agents are encoded by the genome of genetically modified Mycoplasma bacterium . The antimicrobial agent is a bacteriocin, antimicrobial peptide, antibiotic and/or defensin. The bacteriocin comprises acidocin, actagardine, agrocin, alveicin, aureocin, aureocin A53, aureocin A70, bisin, camocin, camocyclin, caseicin, cerein, circularin A, colicin, curvaticin, divercin, duramycin, enterocin, enterolysin, epidermin, gallidermin, erwiniocin, gardimycin, gassericin A,

抄録

IT UPIT 20230417

← 索引

DCR-200757-CL DCR-200757-NEW; DCR-110025-CL DCR-110025-USE; DCR-86481-CL DCR-86481-USE; DCR-924068-CL DCR-924068-USE; DCR-93796-CL DCR-93796-USE; DCR-94247-CL DCR-94247-USE; DCR-94300-CL DCR-94300-USE; DCR-113788-CL DCR-113788-USE; DCR-1430656-CL DCR-1430656-USE; DCR-99897-CL DCR-99897-USE; DCR-100518-CL DCR-100518-USE; DCR-102062-CL DCR-102062-USE;

DCR レコード番号

FS CPI; GMPI

← ファイルセグメント

MC CPI: B02-A; B02-C04; B02-P; B02-P02; B02-V01; B04-C01; B04-E99; ← マニュアルコード B04-F10A4E; B06-D02; B06-D04; B06-D07; B06-F03; B07-D03; B07-E01; B07-E03; B10-B02D; B14-A01; B14-A02; B14-A04; B14-K01; B14-S18; D05-H14A1; D05-H99

EngPI: P34-A01

CMC UPB 20230417

← ケミカルコード

M1 *01* M423 M710 N131 N135 P210 P220 P241 P820 Q233 M905 DCN-RA00GT-N DCR-200757-N
M1 *02* F012 F013 F014 F015 F016 F017 F019 F123 F199 G015 G017 G019 G100 H1 H100 H101 H102 H121 H181 H182 H183 H4 H403 H405 H423 H443 H483 H5 H522 H542 H6 H602 H608 H642 H8 J0 J011 J012 J013 J1 J171 J172 J173 J3 J371 K0 L8 L814 L818 L822 L831 L834 L835 M1 M111 M121 M123 M126 M129 M141 M149 M210 M211 M240 M273 M280 M281 M282 M311 M312 M315 M321 M322 M332 M333 M340 M342 M343 M344 M349 M371 M373 M381 M391 M392 M393 M412 M423 M431 M510 M520 M522 M530 M532 M533 M540 M620 M782 M800 P210 P220 P241 P820 Q233 M905 M904 RIN-60980 DCN-R04258-K DCN-R04258-M DCR-110025-K DCR-110025-M

索引

M1 *06* D011 D023 D029 D030 D220 F012 F014 F016 F121 G010 G100 H4 H404 H422 H462 H5 H521 H8 J5 J522 J581 L9 L942 L999 M1 M116 M123 M131 M210 M211 M272 M281 M320 M412 M423 M431 M511 M521 M531 M540 M782 P210 P220 P241 P820 Q233 RIN-60662 DCN-RBIHYE-K DCN-RBIHYE-M

DCR レコード番号

DCR-94247-K DCR-94247-M

M1 *07* D015 D019 E730 E799 F013 F015 F016 F750 G010 G013 G019 G100 H1 H101 H183 H4 H401 H441 H7 H721 H8 J0 J014 J3 J312 J322 J373 J5 J523 L9 L941 L999 M1 M123 M126 M129 M132 M136 M139 M210 M211 M214 M232 M240 M282 M311 M312 M313 M314 M315 M321 M322 M323 M331 M332 M333 M340 M342 M343 M349 M372 M373 M381 M391 M393 M412 M423 M431 M512 M521 M533 M540 M782 P210 P220 P241 P820 Q233 M905 M904 RIN-70713 RIN-70715 RIN-73930 DCN-RA0T3X-K DCN-RA0T3X-M DCR-94300-K DCR-94300-M

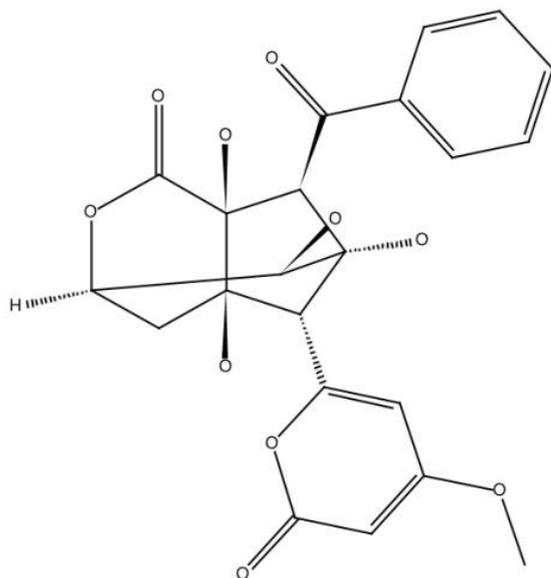
参考：HITCODE, HITSTR 表示形式

- 索引情報や特許分類で検索した検索結果について、
 - HITCODE 表示形式を用いると、ヒットしたコードをコンパクトに表示できる。
 - HITSTR 表示形式を用いると、ヒットした構造のみを表示できる。

=> D L2 1 HITCODE HITSTR ← 1 番目の回答を HITCODE HITSTR 表示形式で表示する

```
L2 ANSWER 1 OF 9 WPINDEX COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN
IT UPIT 20230417
DCR-200757-CL DCR-200757-NEW; DCR-110025-CL DCR-110025-USE; DCR-86481-CL
DCR-86481-USE; DCR-924068-CL DCR-924068-USE; DCR-93796-CL DCR-93796-USE;
DCR-94247-CL DCR-94247-USE; DCR-94300-CL DCR-94300-USE; DCR-113788-CL
DCR-113788-USE; DCR-1430656-CL DCR-1430656-USE; DCR-99897-CL
DCR-99897-USE; DCR-100518-CL DCR-100518-USE; DCR-102062-CL DCR-102062-USE;
:
CMC UPB 20230417
M1 *06* D011 D023 D029 D030 D220 F012 F014 F016 F121 G010 G100 H4 H
H422 H462 H5 H521 H8 J5 J522 J581 L9 L942 L999 M1 M116 M123 M151
M210 M211 M272 M281 M320 M412 M423 M431 M511 M521 M531 M540 M782
P210 P220 P241 P820 Q233 M905 M904
RIN-60662
DCN-RBIHYE-K DCN-RBIHYE-M
DCR-94247-K DCR-94247-M
AN.S DCR-94247
CN.P ENTEROCIN
CN.S (1S,2S,3S,6R,8R,9S,10S)-2-Benzoyl-1,3,8,10-tetrahydroxy-9-(4-methoxy-6-oxo-
6H-pyran-2-yl)-5-oxa-tricyclo[4.3.1.0(3,8)]decan-4-one
MF C22 H20 O10
STR
```

HITCODE
表示形式



HITSTR
表示形式

参考：より網羅的な化学物質に関する特許検索

- DCR ファイルから WPI ファイルへのクロスオーバー検索に加え、基本索引 (/BI) や拡張基本索引 (/BIEX) で化学物質名称を検索した結果を合わせるとより網羅的に検索できる。
- すべてのレコードにおいて化学物質が索引されているわけではないため、化学物質名称検索を併用するとよいが、ノイズが含まれることもある。

```
=> S (ENTEROCIN OR VULGAMYCIN)/BI,BIEX ← 化学物質名を /BI,BIEX で検索
L3      81 (ENTEROCIN OR VULGAMYCIN)/BI,BIEX

=> S L3 NOT L2 ← クロスオーバー検索でヒットしなかった回答を確認
L4      72 L3 NOT L2

=> D L4 MAX MEMB 2 7

L4 ANSWER 2 OF 72 WPINDEX COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN
AN 2024-26973R [2024025] WPINDEX Full-text
ED 20240327
TI New Enterococcus faecium strain EFEL8600 useful for providing
antibacterial or probiotic effect in food composition, and antioxidant,
and anti-inflammatory effects, and useful as health functional probiotic
starter
:
PI KR 2024032224 A 20240312 (2024025)* KO 22[13]
:
Member(0001)
PI KR 2024032224 A 20240312 (2024025)* KO 22[13]
:
ABEN The present invention relates to a novel Enterococcus faecium FFEL8600
(KCTC14743BP), which produces an Enterocin P and promotes the gro
索引ではヒットせず、公報レベルの
キーワードでヒットしたレコード
:

L4 ANSWER 7 OF 72 WPINDEX COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN
AN 2022-C83520 [2022096] WPINDEX Full-text
ED 20221205
TI Microencapsulating enterocin in serum milk powder useful as food
preservative, by adding hydrated encapsulating solution with hydrated
enterocin, performing microencapsulation, drying product, and collecting
encapsulated material

PI BR 102020019489 A2 20220405 (2022096)* PT 20[7]
:
AB BR 102020019489 A2 UPAB 20221205
NOVELTY - Process for microencapsulating enterocin in serum milk powder
involves (a) preparing encapsulating agent by dissolving whey powder in
:
FS CPI
MC CPI: D03-H02F 索引がないレコード

Member(0001)
PI BR 102020019489 A2 20220405 (2022096)* PT 20[7]
TIEN ENTEROCIN MICROENCAPSULATION PROCESS IN WHEY POWDER AND PRODUCT OBTAINED
IN MAIA L F
:
```

ルール

WPI ファイルには DCR レコード番号とともに、ルールが索引されている。ルールは、化学物質の特許中の役割を表すコードである。

- レコード例

```
IT  UPIT 20240802
    DCR-130597-CL DCR-130597-USE; DCR-147083-CL DCR-147083-USE;
    DCR-129967-CL DCR-129967-USE; DCR-99490-CL DCR-99490-USE; DCR-2-CL
    DCR-2-USE; DCR-107324-CL DCR-107324-USE; DCR-87252-EX DCR-87252-PRD;
    DCR-187004-EX DCR-187004-RCT; DCR-358813-EX DCR-358813-RCT;
    MCN-A004-PSM01-CL MCN-A004-PSM01-USE
FS  CPI
MC  CPI: E10-B02E; E31-B03D; E33-A03; E33-D; E33-G; J01
CMC UPB 20240802
    DRN: DRN-1514-U DRN-1366-U DRN-1513-U DRN-1287-U
    DCR: DCR-2-U DCR-99490-U DCR-147083-U DCR-107324-U
M3 *01* C017 C100 C720 C730 C801 C803 C804 C805 C806 C807
        M740 M782 N105 Q431 R032 M905 M904
        DCN-R06671-M DCN-R06671-K
        DCR-130597-M DCR-130597-K
M3 *02* A103 A940 C101 C108 C550 C730 C
        M740 M782 N105 Q431 R032 M905
        DCN-R01513-M DCN-R01513-K
        DCR-147083-M DCR-147083-K
```

DCR レコード番号に対するルール

DWPI 登録番号 (DRN) に対するルール

対応する DCR レコード番号に対するルール

DWPI 化合物番号 (DCN) に対するルール

対応する DCR レコード番号に対するルール

- DWPI 化合物番号 (DCN)*、DWPI 登録番号 (DRN 会員用コード)* に対応する DCR レコード番号にも同じルールが付与されている。
 - DCR レコード番号用のルールの他に、DRN/DCN 用のルールも使用できる。
- ルールは /RL フィールドで検索する。DCR ファイルの回答の L 番号とルールを組み合わせる場合は、(T) 演算子を利用する。
 - => S DCR ファイルの L 番号 (T) ルール/RL
 - => S DCR レコード番号/DCR (T) ルール/RL
- DCR レコード番号以外の番号とルールを組み合わせる場合も (T) 演算子を利用する。
 - => S DWPI 化合物番号/DCN (T) ルール/RL
 - => S DWPI 登録番号/DRN (T) ルール/RL
 - => S マルクーシュ化合物番号/MCN (T) ルール/RL
 - => S DWPI ファイルの L 番号 (T) ルール/RL

* Appendix 参照

ロール一覧

ロール一覧は WPI ファイルに入って => HELP ROLES で確認できる。

- DCR レコード番号用のロール

ロール	定義	定義
CL	CLAIM	Applied to compounds present in the patent claims (1999-date).
EX	EXAMPLE	Applied to compounds present in the examples, but not in the claims (from update 200253).
DIS	DISCLOSURE	Applied to compounds present in the disclosure, but not in the claims nor in the examples (from update 200253)
NEW	NEW	Substance, process, or apparatus claimed or described as new. (Before 1999 rarely applied.)
PRD	PRODUCED	Production or manufacture of substance or apparatus is claimed or described.
USE	USE	Use of substance or apparatus is claimed or described.
DET	DETECTED	Applied to the keyword for a condition or substance which has been detected as a result of testing.
RCT	REACTANT	Applied to starting materials or products defined in terms of starting materials (1987-date)
RGT	REAGENT	Applied to reaction components apart from starting materials e.g. catalysts, purifying agents (1987-date)
CMP	COMPONENT	Applied to components of a mixture (1987-2000)
PUR	PURIFIED	Applied to a substance that is purified, either by removing impurities from the compound, or by separating off the compound to leave behind the impurities.
REM	REMOVED	Applied to an unwanted compound, impurity, contaminant etc. which is removed from a mixture, or left behind when the desired substance is separated off.
TES	TESTED	Applied to an apparatus, substance, medium, composition or article which is being tested.
ST	SALT	Applied to alkali or alkaline earth metal salts of organic acids; also to certain salts of organic bases e.g. hydrohalides, acetates.

- DWPI 化合物番号 (DCN) 用のロール

ロール	定義
A	Analysed or detected
C	Catalyst
D	Detecting agent
R	Removing or purifying agent
S	Intermediate or starting material
X	Substance removed
N	New Compound
P	Known compound produced
Q	Product defined by its starting material(s)
M	Component of a Mixture
U	Use of a single compound
E	Excipient (from 1998)

ロール	定義
T	Therapeutically active agent or prodrug (from 1998)
V	Reagent (from 1998)
K	Known compound (from 1998)

- DWPI 登録番号 (DRN) 用のロール

ロール	定義
S	Intermediate or starting material
P	Compound produced
U	Use of a compound (single use or as a mixture)

検索例：フェブキソスタット (Febuxostat) あるいはその誘導体の合成に関する特許を検索する

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

=>                          ← 構造質問式をアップロードする
Uploading structure file: 2024_0034_Structure
L1      STRUCTURE UPLOADED

=> S L1                    ← 部分構造検索のサンプル検索を行う
L2      6 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL                ← 部分構造検索のフルファイル検索を行う
L3      72 SEA SSS FUL L1

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

=> S L3 (T) (PRD OR P)/RL ← 合成に関するロールで限定する
L4      187 L3 (T) (PRD OR P)/RL

=> D MAX ALLSTR 2         ← L4 の 2 番目の回答を MAX ALLSTR 表示形式で表示する
```

```
L5  ANSWER 2 OF 156 WPINDEX COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN
AN  2024-349028 [2024042] WPINDEX Full-text
ED  20240524
TI  New 4-methyl-2-phenylthiazole-5-carboxylic acid-based compounds are
    xanthine oxidase inhibitors useful in inhibiting xanthine oxidase, and in
    preparing medicines for treating hyperuricemia and gout
DC  B03; K08
IN  PAN Y; QIN J; TANG H; ZHU Y
PA  (UNGT-C) UNIV GUANGXI NORMAL
CYC 1
PI  CN 117777050 A 20240329 (2024042)* ZH
ADT CN 117777050 A CN 2023-11680155 20231207
PRAI CN 2023-11680155 20231207
IPCI A61K0031-426 [I,A]; A61K0031-427 [I,A]; A61P0019-06 [I,A]; C07D0277-56
    [I,A]; C07D0417-12 [I,A]
AB  CN 117777050 A UPAB 20240524
    NOVELTY - 4-Methyl-2-phenylthiazole-5-carboxylic acid-based compounds
    (I)-(III) and its enantiomers, diastereomers, racemates, stereoisomers,
    geometric isomers, nitrogen oxides, metabolites, medicinally acceptable
    salts, esters, solvates, hydrates, isotopes labeled compounds or prodrugs
    are new.
    DETAILED DESCRIPTION - 4-Methyl-2-phenylthiazole-5-carboxylic
    acid-based compounds (A) of formulae (I)-(III) and its enantiomers,
    diastereomers, racemates, stereoisomers, geometric isomers, nitrogen
    oxides, metabolites, medicinally acceptable salts, esters, solvates,
    hydrates, isotopes labeled compounds or prodrugs are new.
        n, m = 1, 2 or 3;
        R1, R2= 1-10C alkyl, 1-10C halogenated alkyl, 3-6C cycloalkyl-1-6C
        alkyl or 3-6C cycloalkyl;
        R3= H, 1-10C alkyl, 1-10C halogenated alkyl, 3-6C cycloalkyl-1-6C
        alkyl or 3-6C cycloalkyl; and
        R4= 1-6C halogenated alkyl, 3-6C halogenated cycloalkyl-1-4C alkyl
        or 3-6C halogenated cycloalkyl, preferably trifluoromethyl, difluoromethyl
        or monofluoromethyl.
    INDEPENDENT CLAIMS are also included for:
        :
```

C 章の検索
例と同じ

TECH ORGANIC CHEMISTRY - Preparation (claimed): The preparation of (A) comprises (i) either dispersing ethyl 2-(3-cyano-4-hydroxyphenyl)-4-methylthiazole-5-carboxylate and first base in first organic solvent, dropwise adding halogenated compound A into the mixture solution, and reacting under heating conditions to obtain

IT UPIT 20240524

DCR-7153191-CL DCR-7153191-NEW DCR-7153191-
DCR-7153192-NEW DCR-7153192-PRD; DCR-715319
DCR-7153193-PRD; DCR-7153194-CL DCR-7153194
DCR-7153195-CL DCR-7153195-NEW DCR-7153195-
DCR-7153196-NEW DCR-7153196-PRD; DCR-7153197-CL DCR-7153197-NEW
DCR-7153197-PRD; DCR-7153198-CL DCR-7153198-NEW
DCR-7153199-CL DCR-7153199-NEW DCR-7153199-PRD; DCR-7153200-CL

ヒットした DCR レコード番号が PRD (PRODUCED) ロールと共に索引されている

[DCR-7153198-PRD](#);

FS CPI

MC CPI: B07-F01; B14-C02; B14-D05A; B14-S13A; K09-B02

CMC UPB 20240524

DRN: DRN-1391-U DRN-1408-U

DCR: DCR-68-U DCR-231-U

M2 *01* C116 F012 F014 F019 F710 G015 G019 G100 G111 H5 H6 H8 H541 H601
H607 H608 H682 H684 H689 J0 J1 J011 J111 J211 K0 L1 L143 M113
M210 M211 M240 M281 M320 M343 M362 M372 M391 M413 M510 M521 M531
M540 M710 M720 N242 N262 N342 N362 N511 N512 N513 P426 P601 P617
Q444 M905 M904
DCR-7153191-N DCR-7153191-P

M2 *08* C116 F012 F014 F019 F150 F710 G015 G019 G100 G111 H5 H8 H541 J0
J2 J5 J011 J211 J521 K0 L1 L9 L143 L922 L999 M1 M113 M210 M211
M213 M214 M231 M232 M240 M272 M283 M311 M320 M322 M331 M332 M342
M372 M392 M413 M510 M522 M531 M540 M710 M720 N242 N262 N342 N362
N511 N512 N513 P426 P601 P617 Q444 M905 M904
DCR-7153198-N [DCR-7153198-P](#)

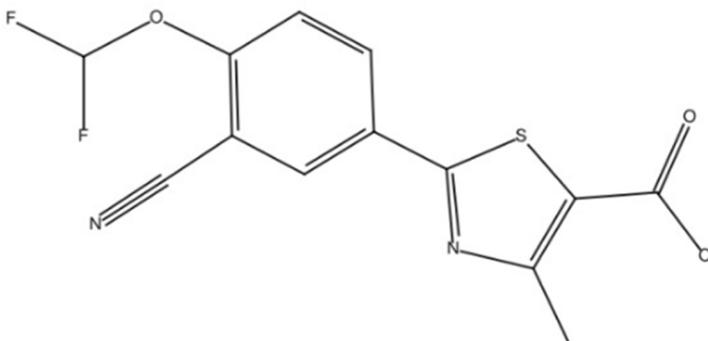
M2 *30* A119 A940 C106 C108 C530 C730 C801 C802 C803 C805 C807 M411 M781
M905 M904 M910
DCN-R01391-U DCN-R01391-V DCN-R01391-K
DCR-68-U DCR-68-V DCR-68-K

AN.S DCR-7153191

CN.P 2-[3-cyano-4-(difluoromethoxy)phenyl]-4-methyl-1,3-thiazole-5-carboxylic acid

MF C13 H8 F2 N2 O3 S

STR



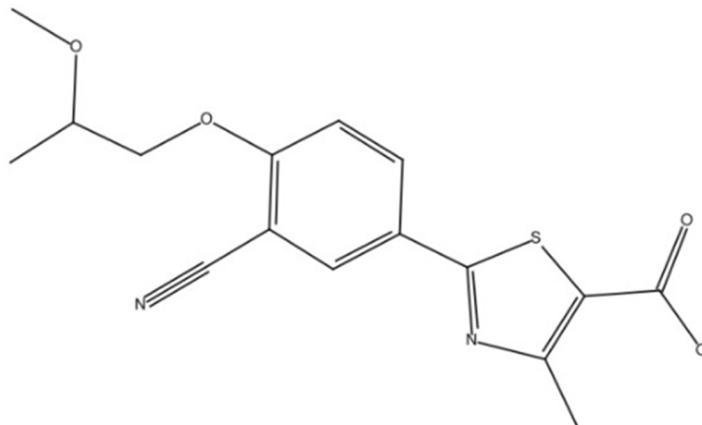
ALLSTR 表示形式では、レコード中の全索引物質が表示される。
ヒットした物質のみ表示したい場合は HITSTR 表示形式を利用する

AN.S DCR-7153192

CN.P 2-[3-cyano-4-(2-methoxypropoxy)phenyl]-4-methyl-1,3-thiazole-5-carboxylic acid

MF C16 H16 N2 O4 S

STR



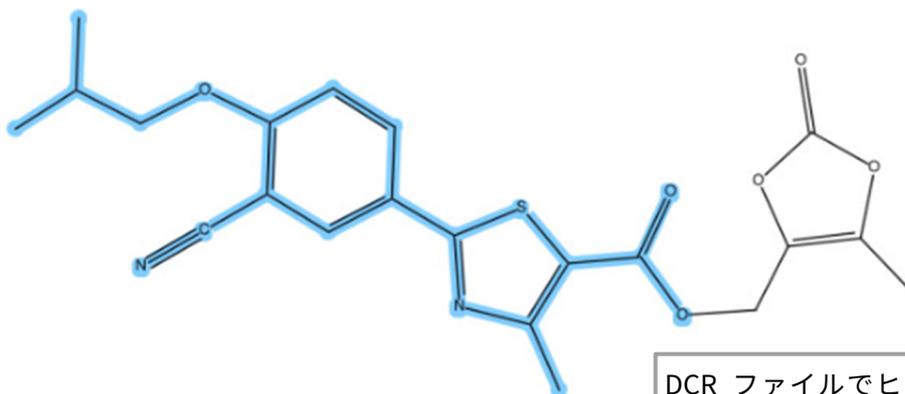
:

AN.S DCR-7153198

CN.P (5-methyl-2-oxo-2H-1,3-dioxol-4-yl)methyl 2-[3-cyano-4-(2-methylpropoxy)phenyl]-4-methyl-1,3-thiazole-5-carboxylate

MF C21 H20 N2 O6 S

STR



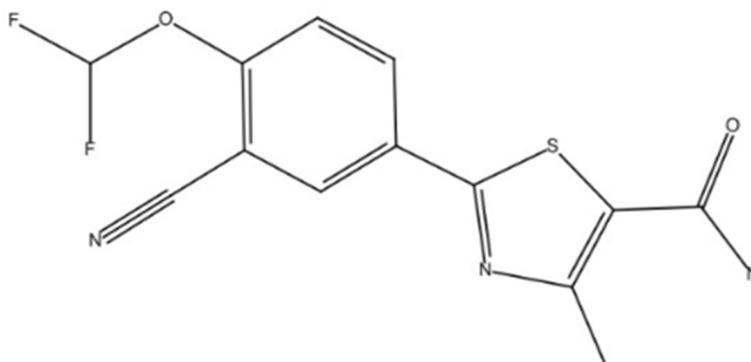
DCR ファイルでヒットした
部分構造はハイライトされる

AN.S DCR-7153199

CN.P 2-[3-cyano-4-(difluoromethoxy)phenyl]-4-methyl-1,3-thiazole-5-carboxamide

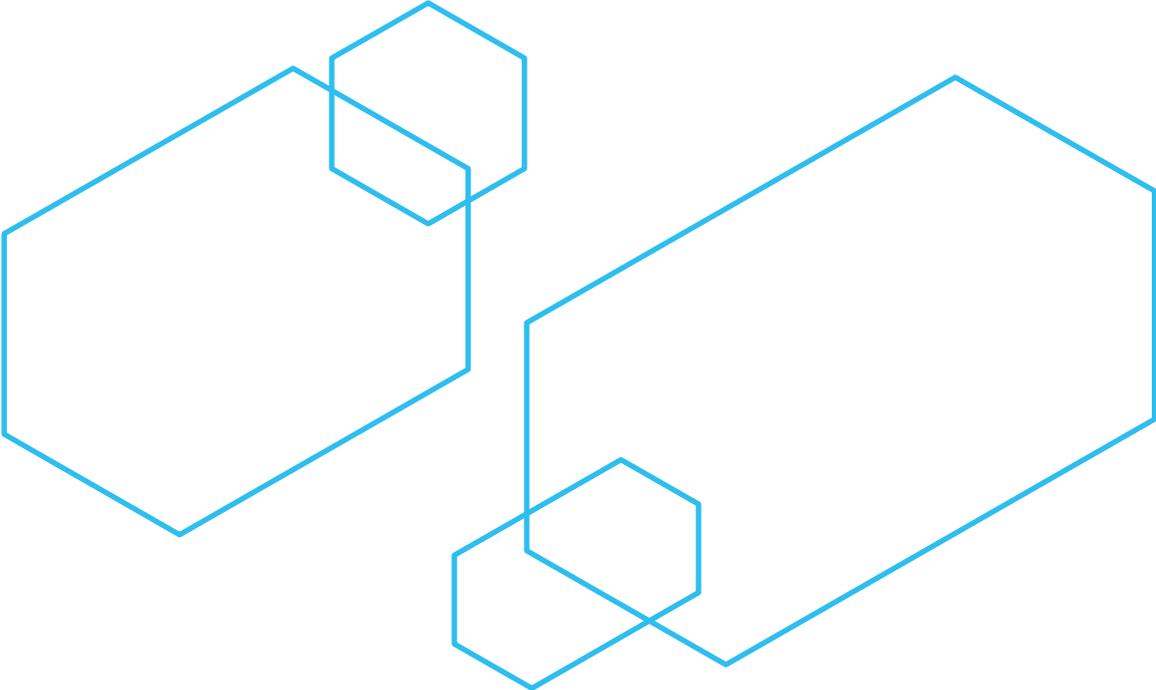
MF C13 H9 F2 N3 O2 S

STR



:

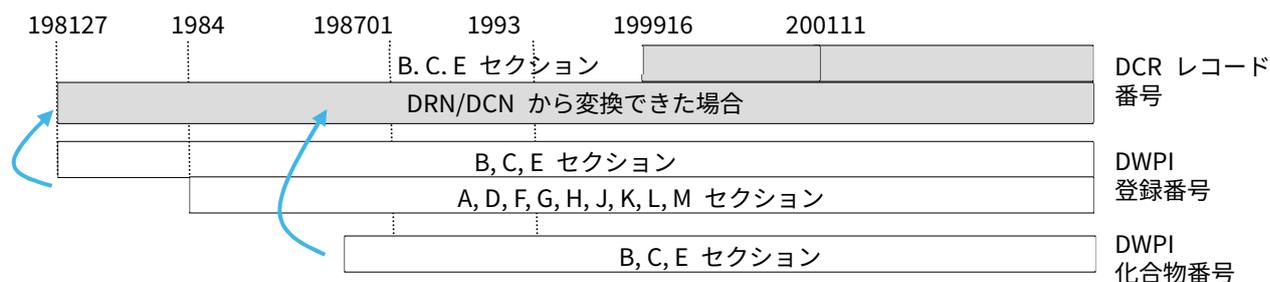
Appendix



DWPI 登録番号・DWPI 化合物番号

化学物質に関するそのほかの索引として、DWPI 登録番号 (SDRN/DRN) と DWPI 化合物番号 (SDCN/DCN) がある。

- 現在は、DRN、DCN に対応する DCR レコード番号が遡及付与されているので、DCR レコード番号を用いると、1981 年まで遡って検索できる。



より網羅的な検索のために、DWPI 化合物番号 (DCN) や DWPI 登録番号 (DRN) を検索すると、DCR レコード番号 (AN) に未対応の物質も含めて検索できるため、網羅的な調査が可能である。

- DWPI 登録番号 (DRN 会員用コード)
 - 会員用ファイル WPIDS、WPIX ファイルで検索・表示が可能。非会員用ファイル WPINDEX ファイルでは、表示はできるが検索はできない。

会員用コードの詳細については、製作元である Clarivate にお問い合わせください

- DWPI 化合物番号 (DCN)
 - 会員用ファイル WPIDS、WPIX、非会員用ファイル WPINDEX ファイルで検索・表示が可能。
- DWPI 登録番号や DWPI 化合物番号を DCR ファイルで確認できない場合は、オンラインソースで確認する。

検索例：Benzil Dimethyl Ketal に関する特許を網羅的に調査する

=> FILE DCR

=> E BENZIL DIMETHYL KETAL/CN

← 化学物質名を /CN で EXPAND する

E1 1 BENZIKEN/CN
 E2 1 BENZIL/CN
 E3 0 --> BENZIL DIMETHYL KETAL/CN
 E4 1 BENZIL MONOHYDRAZONE/CN
 E5 1 BENZIL,4,4'-DICHLORO-/CN
 :

← 収録がない

=> E BENZIL-DIMETHYL-KETAL/CN

← 念のためハイフンでつないだ
化学物質名も/CN で EXPAND する

E1 1 BENZIL,4,4'-DIMETHOXY-/CN
 E2 1 BENZIL,4-FLUORO-/CN
 E3 1 --> BENZIL-DIMETHYL-KETAL/CN
 E4 1 BENZIL-DIUROMETON/CN
 E5 1 BENZILAMIDE/CN
 :

← 収録があった

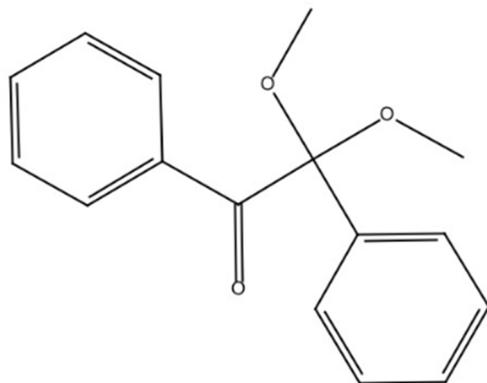
=> S E3

← E 番号で検索する

L1 1 BENZIL-DIMETHYL-KETAL/CN

=> D ALL

L1 ANSWER 1 OF 1 DCR COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN.
 AN DCR-71750 DCR
 DCSE 71750-0-0-0
 CN.P **BENZIL-DIMETHYL-KETAL**
 SY BENZOIN DIMETHYL ETHER



MF C16 H16 O3
 SMF C16 H16 O3 *1; TOTAL *1; TYPE *1
 MW 256.3041
 SDCN R05038
 ED Entered STN: 19 Apr 1999
 Last updated on STN: 12 Aug 2022
 Update DWPI Cross Ref.: 2 Aug 2024

DWPI 登録番号 (DRN) が不明

```

=> FILE WPIDS          ← 会員用の WPIDS ファイルに入る

=> S L1                ← DCR ファイルで得られた L 番号で検索する
L2          1751 L1

=> E BENZIL DIMETHYL KETAL/DRN ← 化学物質名を /DRN で EXPAND する
E#  FREQUENCY  AT  TERM      (DWPI 登録番号のオンラインシソーラスの確認)
--  -
E1      0      2  BENZIIDAZOLETHIOL/DRN
E2      0      2  BENZIL/DRN
E3      0      2  --> BENZIL DIMETHYL KETAL/DRN ← AT に 2 件以上ある
E4      0      2  BENZIMIDAZOLE/DRN
E5      0      2  BENZIMIDAZOLE, 2-(4-THIAZOLYL)-/DRN
:

```

```

=> E E3+ALL          ← E 番号を +ALL で展開する
E1      0      --> BENZIL DIMETHYL KETAL/DRN
E2      1150  USE 5038/DRN ← DWPI 登録番号 (DRN) が確認できた
***** END *****

```

```

=> S 5038/DRN        ← DWPI 登録番号で検索する
L3      1150 5038/DRN

```

DWPI 登録番号 (DRN) は会員用コード
なので WPINDEX ファイルでは検索不可

```

=> S L2 OR L3        ← L2 (DCR 登録番号の検索で得られた回答) と
L4      2818 L2 OR L3 OR 演算する。本例では回答が増えた

```

```

=> D L4 898 TI IND

```

```

L4  ANSWER 898 OF 2818 WPIDS COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN
TI  Thermosettable compsn. for prodn. of endless objects with good temp.,
    flame, corrosion and/or solvent resistance and good mechanical properties,
    useful for cable sheathing, optical fibre etc.
DC  A18; A28; A32; A94; F01; L03; P81; V01; V07; X12
IPCR B29C0047-00 [I,A]; C08K0007-02 [I,A]; C08L0101-00 [I,A]; C08L0063-00
    [I,A]; C08L0067-06 [I,A]; C08L0067-07 [I,A]; D01F0006-52 [I,A];
    D01F0006-62 [I,A]; D01F0006-76 [I,A]; D01F0006-92 [I,A]; G02B0006-00 [I,A]
CPC  C08L0063-00; C08L0067-06; C08L0067-07; D01F0006-52; D01F0006-52;
    D01F0006-76; C08L2666-02, C08L0063-00, C08L0067-06; C08L2666-02,
:
MC  CPI: A05-D02B; A08-M03; A11-B15; A11-C02; A12-S05S; F03-C05; L01-F03L;
    L03-A01B1; L03-G02; L03-J
    EPI: V01-B03B; V07-F01A3B; X12-D03B1
PLC  UPA 20090629
KS: 0011 0013 0036 0038 0216 0218 0226 0307 0377 0500 0535 0780 0781 0787
    1279 1283 1418 1588 1602 1996 2007 2016 2020 2021 2194 2198 2211 2212
    2285 2300 2302 2318 2371 2450 2471 2475 2476 2491 2493 2506 2513 2514
    2522 2524 2545 2547 2556 2578 2585 2600 2605 2607 2608 2612 2621 2628
    2629 2635 2645 2654 2669 2679 2702 2715 2727 2740 2780 2828 3000 3011
    3181 3204 3205 3224 3225 3226 3276 3298 3311 9000
FG: *001* 014 02& 028 034 040 066 11& 143 146 147 198 226 23& 231 236 239
    299 30& 308 309 316 331 336 341 353 357 359 381 387 388 398 415
:

```

```

CMC  UPB 20220805
     DRN: DRN-5038-U

```

DWPI 登録番号の検索でヒットしたレコード

- DWPI 化合物番号 (DCN) のオンラインシソーラス

```

=> E BENZIL DIMETHYL KETAL/DCN          ← 化学物質名を /DCN で EXPAND する
E#  FREQUENCY  AT  TERM                (DWPI 化合物番号のオンラインシソーラスの
--  -----  --  ----                確認)
E1      0      2  BENZIDINE YELLOW (C.I.)/DCN
E2      0      2  BENZIL/DCN
E3      0      2 --> BENZIL DIMETHYL KETAL/DCN ← AT に 2 件以上ある
E4      0      2  BENZILIC ACID/DCN
E5      0      2  BENZILIDENE CHARTREUSIN, 3',4'-O-/DCN
:

=> E E3+ALL                              ← E 番号を +ALL で展開する
E1      0      --> BENZIL DIMETHYL KETAL/DCN
E2      1751   USE  R05038/DCN          ← DWPI 化合物番号 (DCN) が確認できた
***** END *****

=> S R05038/DCN                          ← DWPI 化合物番号 (DCN) で検索する
L5      1751  R05038/DCN

=> S L4 OR L5                             ← L4 (DCR 登録番号、DWPI 登録番号 (DRN)
L6      2818  L4 OR L5                の検索で得られた回答) と OR 演算する

```

DWPI 化合物番号 (DCN) は
WPINDEX ファイルで検索可能

アラート (SMARTracker)

STN の アラート (自動 SDI 検索) 機能を利用すると、登録した質問式の検索が定期的に行われ、最新情報を自動的に入手できる。

- DCR ファイルでは 2 つのアラートを利用できる。
 - ケース 1: 新規または更新された化学物質のみをウォッチング
→ DCR ファイルで通常の SDI を登録
 - ケース 2: 新規または既知物質に関する特許情報をウォッチング
→ WPI ファイルと DCR ファイルで SMARTracker(*) を登録
- * SMARTracker は、物質ファイルから文献ファイルへのクロスオーバー検索を伴うアラート。
DCR ファイルから WPI ファイルへクロスオーバー検索する場合利用する。
- アラートの詳細は CAS STNext アラートガイド (CAS STNext の使い方・コマンド) 参照
<https://www.jaici.or.jp/stn-ip-protection-suite/cas-stnext/documents/>

SMARTTracker の登録例

=> FILE DCR

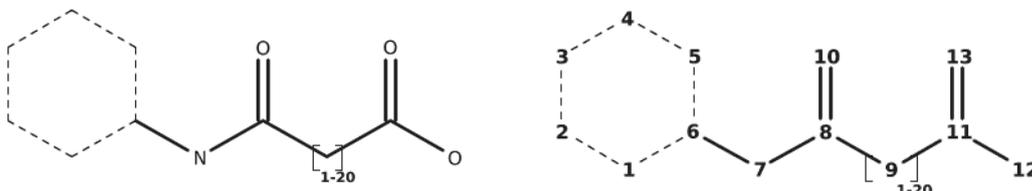
← DCR ファイルに入る

=>

← 構造質問式をアップロードする

Uploading structure file: 2024_0003_Structure_dcr1

アラート登録用の検索を実行する



Node Attributes

Ring Nodes : 1 2 3 4 5 6

Chain Nodes : 7 8 9 10 11 12 13

Bond Attributes

Ring Bonds : 1-2 2-3 3-4 4-5 5-6 6-1

Chain Bonds : 6-7 7-8 8-9 8-10 9-11 11-12 11-13

Exact Bonds : 8-9 9-11

Exact/Normalized Bonds : 1-2 2-3 3-4 4-5 5-6 6-1 6-7 7-8 8-10 11-12 11-13

Markush Attributes

Match Level (ATOM) : 1 2 3 4 5 6

Match Level (CLASS) : 7 8 9 10 11 12 13

Element Count Level (LIMITED) : 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

← 部分構造検索のサンプル検索を行う

SAMPLE SEARCH INITIATED 16:42:56 FILE 'DCR'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 0 TO ITERATE

0.0% PROCESSED 109006 ITERATIONS

50 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.03

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

← 部分構造検索のフルファイル検索を行う

FULL SEARCH INITIATED 16:43:06 FILE 'DCR'

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 0 TO ITERATE

0.0% PROCESSED 5472130 ITERATIONS

2585 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.08

L3 2585 SEA SSS FUL L1

=> FILE WPINDEX

← WPINDEX ファイルに入る

=> S L3

← DCR ファイルで得られた L 番号で検索する

L4 1204 L3

アラートの登録に使う L 番号

=> FILE WPINDEX DCR ← マルチファイル環境に入る

=> SDI XFILE ← SMARTracker の場合は SDI XFILE コマンドを入力する

ENTER QUERY L# FOR SDI REQUEST OR (END):L4 ← アラートを設定する L 番号

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

ENTER SDI REQUEST NAME, (AA081/S), OR END:DCR1/S ← アラート登録名

ENTER COST CENTER (NONE) OR NONE:. ← コストセンター

ENTER TYPE OF SEARCH (SSS), CSS, FAMILY, OR EXACT:. ← 構造検索タイプの指定

ENTER TITLE (NONE):DCR STRUCTURE SEARCH ← タイトルの付与

ENTER METHOD OF DELIVERY (EMAIL), ONLINE OR RSS:. ← 入手方法

ENTER EMAIL ID (1721T):XXXX@JAICI.OR.JP ← email アドレス

XXXX@JAICI.OR.JP

RECEIVE DELIVERY NOTIFICATION? Y/(N):Y ← STNmail ファイルで送付確認

ELIMINATE PREVIOUSLY SEEN ANSWERS WITH EACH SDI RUN? Y/(N):N ← 重複除去

ENTER PRINT FORMAT (STD) OR ?:MAX HITSTR ← WPI ファイルの表示形式

HIGHLIGHT HIT TERMS? (Y)/N:. ← ヒットタームハイライトの指定

ARCHIVE ANSWERS? Y/(N):. ← 利用制限を超えてデータを蓄積

REDISTRIBUTE ANSWERS? Y/(N):. ← 利用制限を超えてコピーを配布

ENTER MAXIMUM NUMBER OF HITS TO BE DELIVERED PER RUN (100):. ← 最大出力数

SORT SDI ANSWER SET (N)/Y?:. ← ソートの指示

SEND SDI WITH NO ANSWERS? (Y)/N:. ← 回答がない場合の通知の指示

ENTER SDI RUN FREQUENCY - WEEKLY, (EVERYUPDATE), MONTHLY, OR ?:WEEKLY ← 実行頻度

ENTER SDI EXPIRATION DATE 'YYYYMMDD' OR (NONE):20250601 ←アラート実行の終了日

UPIT (索引が更新された特許レコード) を指定する

化学物質の索引は特許レコード作成後に追加される可能性もあるので、重複除去は必ず N を指定する

QUERY L4 HAS BEEN SAVED AS SDI REQUEST 'DCR1/S'

DCR1/S という名前のアラートを登録できた

各プロンプトで . (ピリオド) を入力すると、デフォルト (括弧内の内容) が選ばれる

SDI 受取例 - メールで受け取った場合

STN Results: DCR STRUCTURE SEARCH

1721T@stnt.cas.org
宛先 XXXX@JAICI.OR.JP

返信 全員に返信 転送 ...
2024/04/22 (月) 0:07

Your STN results are just a click away. STN brings you more electronic delivery options than ever. Delivering sci-tech information as you like it, STN is proud to be your choice for the most current and timely information available.

Click on a link below to retrieve your results:
Title: DCR STRUCTURE SEARCH
Reference Number: AFZ0651C
Number of Answers: 3
File Name: WPINDEX
SDI Name: DCR1/S
SDI Run Number: 016
SDI Run Date: APR 21, 2024

1. [RTF](#) (Rich Text Format)
2. [PDF](#) (Adobe Portable Document Format)
3. [Self-extracting](#) or [Zipped HTML](#) (Hypertext Markup Language)
4. [Plain Text](#) (ASCII)

All formats except Plain Text include images.
Links will expire 90 days from the date this message was sent. Be sure to save your results.

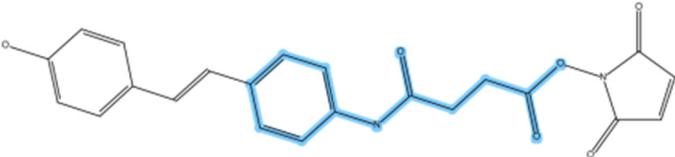
If you have any questions regarding these options or require assistance retrieving your results, please contact the [Help Desk](#).

STN® - Your Connection to Science and Technology

リンクをクリックし、アラートの回答をダウンロードする (リンクの有効期間は 90 日間)

回答例 (PDF)

```
L4 ANSWER 3 OF 3 WPINDEX COPYRIGHT 2024 CLARIVATE on STN
Full Text
AN 2024-24611G [2024030] WPINDEX
ED 20240412
CR 2020-48966B; 2020-C0651F
TI New styryl compounds for preparing optically detectable peroxidase
substrates utilized for detection, discrimination and quantification of
molecular or immunological targets such as biological or chemical molecule
or molecular structure and events, in sample and for diagnostic assay of
cancer.
DC A89; B0
IN DIWU Z;
FA (AATB-N
CXC 1
PI US 2024 chemical molecules or molecular structures) and events, in a sample and
ADT US 2024 for diagnostic assay of cancer e.g. an assay for breast cancer, cervical
US 2020 ADVANTAGE - The styryl compounds allow faster, more sensitive and
FDT US 2024 precise detection of molecular targets than the existing compositions and
1182190 methods.
PRAI US 2023 TECH ORGANIC CHEMISTRY - Preparation: No preparation method is given.
US 2020 IT UPIT 20240412
US 2018 DCR-7070114-CL DCR-7070114-NEW; DCR-7070182-CL DCR-7070182-NEW;
CPC C07D033 DCR-7070179-CL DCR-7070179-NEW; DCR-7070184-CL DCR-7070184-NEW;
AB US 2024 DCR-7070186-CL DCR-7070186-NEW; DCR-7070187-CL DCR-7070187-NEW;
NOVELTY DCR-7070189-CL DCR-7070189-NEW; DCR-7070190-CL DCR-7070190-NEW;
DI DCR-7070191-CL DCR-7070191-NEW; DCR-7070193-CL DCR-7070193-NEW;
EJ MCN-A004-08H01-CL MCN-A004-08H01-NEW; MCN-A004-08H02-CL MCN-A004-08H02-NEW
alkylth FS CPI; EPI
phospho MC CPI: A10-E01; A12-V03C2; B04-L03B; B11-C07B3; B11-C07B5; B11-C08J;
R2/R3, i B11-C12; B12-K04G2A; D05-A02A; D05-H09; E05-C02; E05-G01; E05-G02;
isoptio E06-H; E07-H02; E10-A09B6; E10-A09B7; E10-A15A; E10-A15B; E10-A16A;
R E10-B01A; E10-B01C; E10-B01D; E10-C02B; E10-C02C1A; E10-C04C;
arylthi E10-E01P; E10-E02A; E10-E02C1; E10-E03P; E10-E04D2
non-arc EPI: S03-E09F
K base of PLE UFA 20240412
L [1.1] 2004 G2006 D01 D23 D22 D31 D43 D51 D54 D56 D59 D75 D84 F00
TI DCN-R00898 J523 K534 K599 K741 K799 K820 K899 L142 L143 L144 L199 L220 L722
digoxig D56 D59 F0 L724 L921 L941 L942 L999 M1 M111 M112 M113 M115 M116 M119 M121
complex [1.2] 2004 G1650 M122 M123 M124 M125 M126 M129 M132 M133 M139 M141 M143 M149 M150
polymer, F07 DCN-R0 M210 M211 M212 M213 M214 M215 M216 M220 M221 M222 M223 M224 M225
Z D56 D59-F M226 M231 M232 M233 M240 M272 M273 M280 M281 M282 M283 M311 M312
R [1.3] 2004 D56-R M313 M314 M315 M316 M320 M321 M322 M323 M331 M332 M333 M334 M340
A [1.4] 2004 ND01; M342 M343 M344 M372 M373 M382 M383 M391 M392 M393 M411 M412 M413
(II). CMC UPB 20240412 M414 M424 M510 M511 M520 M521 M522 M523 M531 M532 M533 M540 M541
TI M3 *01* F011 F012 M650 M710 M740 N102 P831 Q505 M905 M904
E H201 H211 MCN-A004-08H02-N
U M393 M413 M6 *01* M710 P831 Q233 Q454 Q505 Q613 R514 R515 R521 R533 R624 R625 R626
substra M905 M904 DCR-707011 R627 M905
of mole M3 *02* F011 F012 AN.S DCR-7070179
H211 H401 CN.P 2,5-dioxo-2,5-dihydro-1H-pyrrol-1-yl
L999 M1 M1 3-((4-[(1E)-2-(4-hydroxyphenyl)ethenyl]phenyl)carbamoyl)propanoate
M531 M540 MF C22 H18 N2 O6
DCR-707018 STR
M3 *03* F011 F012
H201 H211
K820 L9 L9
M381 M382
P831 Q505
DCR-707017
```



JAICI について

一般社団法人化学情報協会 (JAICI) は、化学技術情報の流通を図るため 1971 年に設立されました。米国 CAS をはじめ世界各国の情報機関などと協力関係を築き、日本の研究者をサポートする情報センターとして、大学・企業などの情報取得・分析から研究・開発までを支援しています。

CAS STNext に関するお問い合わせ先
<https://www.jaici.or.jp/inquiry/>

About CAS

CAS connects the world's scientific knowledge to accelerate breakthroughs that improve lives. We empower global innovators to efficiently navigate today's complex data landscape and make confident decisions in each phase of the innovation journey. As a specialist in scientific knowledge management, our team builds the largest authoritative collection of human-curated scientific data in the world and provides essential information solutions, services, and expertise. Scientists, patent professionals, and business leaders across industries rely on CAS to help them uncover opportunities, mitigate risks, and unlock shared knowledge so they can get from inspiration to innovation faster. CAS is a division of the American Chemical Society. Connect with us at cas.org