

# 実践！ MARPAT

**STN INTERNATIONAL**

リフレッシュセミナー

**JAICI**

化学情報協会



## \* 目 次 \*

### A. MARPAT ファイルの概要

MARPAT ファイルとは .....	1
収録対象 .....	2
レコード構成 .....	6
マルクーシュ構造の索引 .....	8
マッチレベル .....	10
元素数レベル .....	12
まとめ .....	14

### B. 検索例

MARPAT ファイルの検索 .....	15
MARPAT ファイルの構造検索の注意点 .....	16
検索例 1 : 複素環化合物の検索 .....	17
参考 : MARPAT ファイルでの縮合環・スピロ環の索引 .....	22
参考 : フルファイル検索の結果に INCOMPLETE の回答が含まれている場合 ..	28
参考 : 回答の経済的な表示方法 .....	35
検索例 2 : 配位化合物の検索 .....	36
参考 : CAplus ファイルでの配位化合物の索引 .....	45
参考 : REGISTRY/CAplus ファイルでの配位化合物の検索 .....	46
参考 : MARPAT ファイルでの塩の収録 .....	49
参考 : CASLINK .....	50



## *A MARPAT ファイルの概要*

MARPAT ファイルの収録内容やマッチレベルについてご紹介します.



## A MARPAT ファイルの概要

### MARPAT ファイルとは

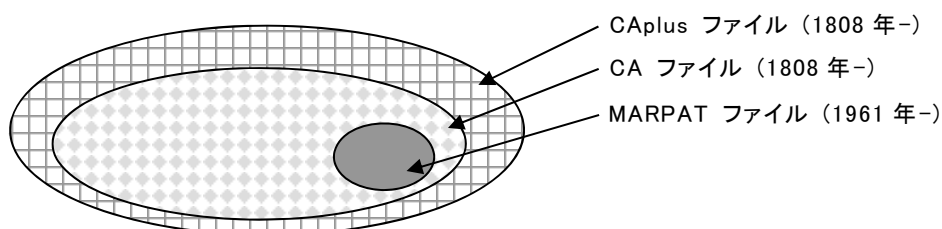
- MARPAT ファイルは、Chemical Abstracts Service (CAS) が作成する、マルクーシュ構造を含む特許情報のデータベースであり、マルクーシュ構造を対象にした構造検索を行うことができる。
  
- MARPAT ファイルと REGISTRY ファイルでは、索引対象や索引方針、検索機能が異なる。構造検索を用いて物質に関する特許調査を行う際、REGISTRY/CAplus ファイルだけではなく、MARPAT ファイルも利用することによって、より網羅的な調査を行うことができる。
  
- この章では、MARPAT ファイルのコンテンツおよび検索について、下記の 4 つを中心に紹介する。
  - ・ 収録対象
  - ・ レコード構成
  - ・ マルクーシュ構造の索引
  - ・ マッチレベルと元素数レベル

## A MARPAT ファイルの概要

### 収録対象

- MARPAT ファイルには、CA 収録対象特許のうち、マルクーシュ構造の記載がある特許が収録される。

- ・ MARPAT ファイルに収録されている特許はすべて CA ファイルにも収録されている。



### ■ 収録対象物質

- ・ 有機化合物, 有機金属化合物, 低重合の物質 (重合度が 10 までの物質)

### ■ 収録対象外の化合物

- ・ 合金, 金属酸化物, 無機塩, 金属間化合物, ポリマー\*, タンパク質・核酸\*
- ・ 特定の化学物質 (REGISTRY ファイルに収録されるような構造定義が明確な物質)
- ・ MARPAT ファイルに検索可能な構造を収録することができないような表現 (例: "Ph-R" R is any substituent, "halogenated alkenediols") で特許中に記載されている物質

\* ポリマー関連の特許でも下記の物質は収録対象となる。

- 重合度が 10 までのオリゴマー
- クレームされているモノマー (例: We claim a monomer of the formula...)
- 重合触媒や添加剤

\* 核酸・タンパク質の特許でも下記の場合は収録対象となる。

- ~150 アミノ残基までのペプチド, ~30 残基までの核酸

(MARPAT ファイルでは核酸・タンパク質は構造で収録され, 1 文字コードや 3 文字コードは使用しない。)



MARPAT ファイルには、無機化合物やポリマーは収録されていない



## A MARPAT ファイルの概要

### 収録対象

#### ■ マルクーシュ構造の収録源と収録年

- ・ CAS が作成しているレコードと, INPI (フランス特許庁) 提供のデータがある.
- ・ 1985 年 (特許発行年) 以降 - CAplus/CA ファイルのベーシック特許から収録 (CAS 作成)

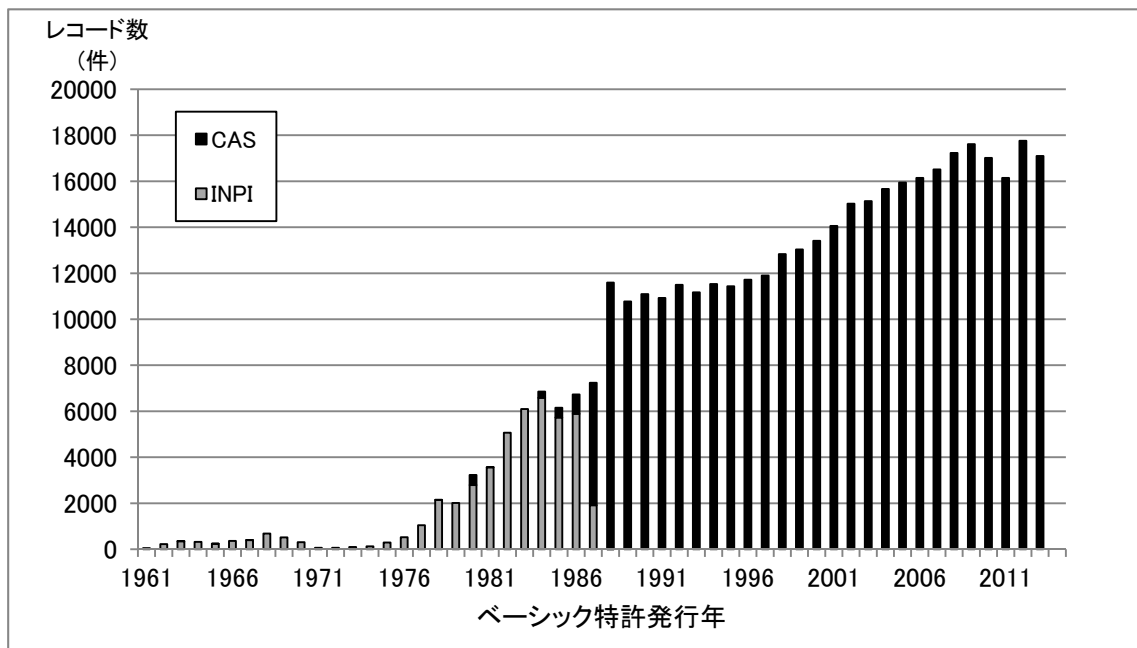
マルクーシュ構造の存在位置		MARPAT ファイル中の記載
特許請求範囲	マルクーシュ構造が収録される	Patent location: <b>claim 1</b>
発明の詳細な説明	特許請求範囲中にマルクーシュ構造がない場合に収録される	Patent location: <b>disclosure</b>
	発明の詳細な説明のマルクーシュ構造が, 特許請求範囲のマルクーシュ構造を包括する場合に収録する	Patent location: claim 10 Note: also incorporates <b>broader disclosure</b>

- ・ 1961~1987 年 (特許発行年) - INPI より提供されたデータ (ベーシック特許とは限らない)

マルクーシュ構造の存在位置		MARPAT ファイル中の記載
特許請求範囲または発明の詳細な説明	INPI が所有するデータの中で, CA 収録特許であるもの	Patent location: claims Note: record may include structures from disclosure

\* 1985~1987 年のレコードは, CAS 作成のデータおよび INPI 由来のデータのどちらかを収録している

#### ■ ベーシック特許発行年ごとのレコード件数



# A MARPAT ファイルの概要

## 収録対象

### ■ 特許中の化学物質索引

- 書誌情報、抄録、索引が作成され、CAplus/CAファイルに収録される。
- 実施例・特許請求範囲中の重要な特定の化学物質は、CAS登録番号で索引される。

### 化学関連の特許

(19)日本国特許 (J P)	(12)公開特許公報 (A)	(11)特許出願の発明号 特許2002-20372 [P2002-20372A]
(43)公開日 平成14年1月29日(2002.1.29)		
(51)Int.Cl. C07D 213/07 / C07B 61/00	発明の名称 306	F 1 C 07 D 213/07 C 07 B 61/00
5-10-1 (特許) 4 C 0 5 5 4 H 0 3 9		
審査請求 未請求 請求書の数 1 O L (全 5 P)		
(21)出願番号 特願2001-189455(2001-189455)	(71)出願人 30002607 バイエル・アクチエンゲゼルシャフト BAYER AG AKTIENGESELLS CHAFT ドイツ連邦共和国ゲグー-53068 レーフエル クレーゼン (書名なし)	
(22)出願日 平成13年6月5日(2001.6.5)		
(31)優先権主張番号 1 9 0 2 8 1 4 1 . 0		
(32)優先日 平成12年6月8日(2000.6.8)		

- MARPAT ファイルには、特許請求範囲中のマルクーシュ構造が索引される
- MARPAT ファイルには CA ファイルと同じ特許の情報が含まれている

**実施例**

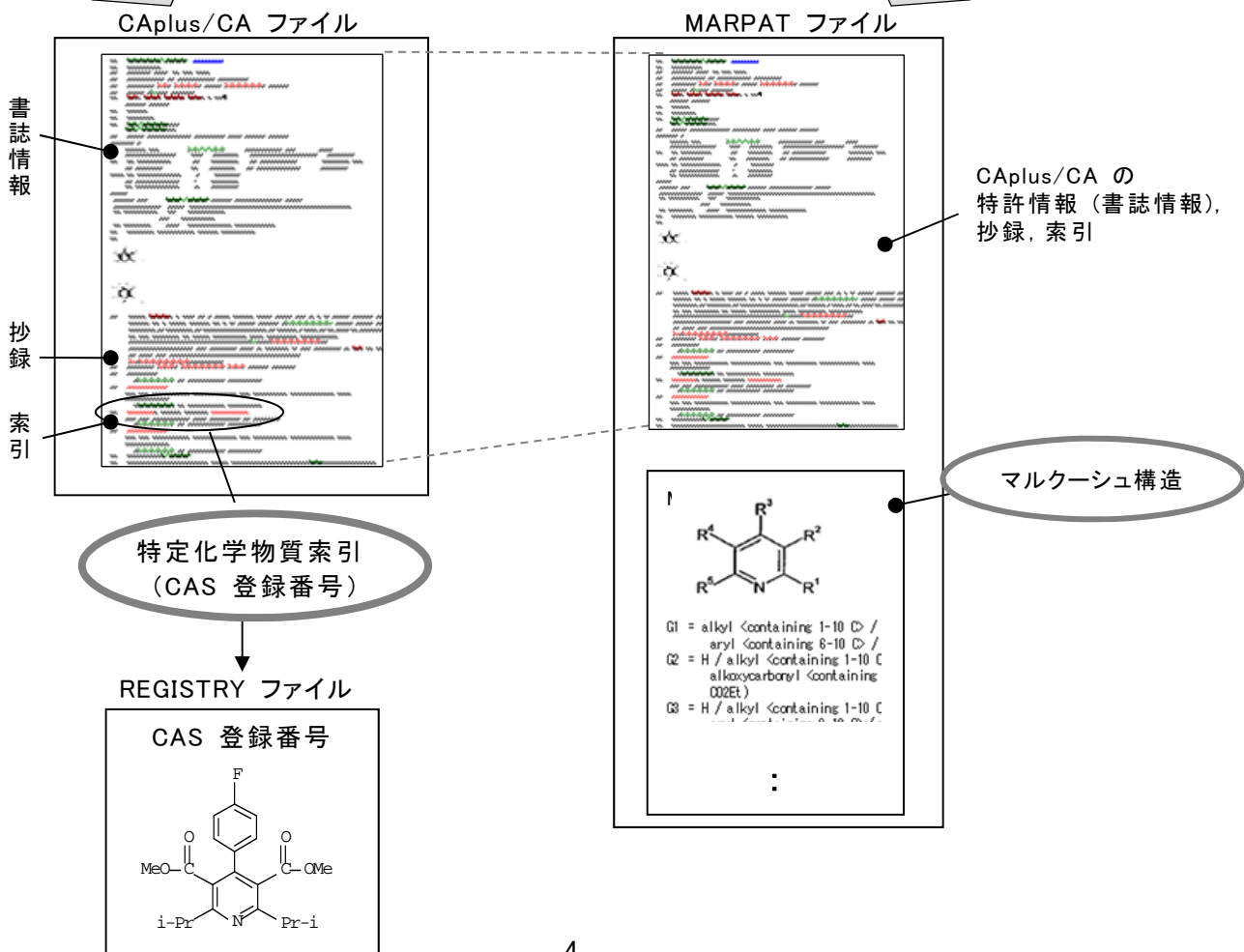
MeO-C(=O)-C<sub>5</sub>H<sub>3</sub>(F)-N-Pr-i

**特許請求範囲\***

R1, R5 = C1-10 alkyl, C6-10 aryl; R2, R4 = H, C1-10 alkyl, CO2R6 ...

\* 発明の詳細な説明から索引する場合もある

(注) R1, R2, R3, R4, R5, R6 は、C1-C10-アルキル基により置換された場合もよい。C1-C10-アルキル基を示す。



## A MARPAT ファイルの概要

### 収録対象

#### ■ MARPAT ファイルと REGISTRY ファイルの収録範囲の違い

- ・ REGISTRY ファイルは、特許請求項中（1981-）または実施例中（1907-）に記載されている 特定の化学物質（構造が明確な物質）が収録対象。
- ・ MARPAT ファイルは、特許請求項中または発明の詳細な説明中の マルクーシュ構造 が収録対象。

	MARPAT	REGISTRY/CAplus
特許請求範囲	1961-	1981-
	マルクーシュ構造	発明の内容に関わりのある特定の化学物質
発明の詳細な説明	1961-	/
	特許請求範囲中にマルクーシュ構造がない場合、または発明の詳細な説明のマルクーシュ構造が、特許請求範囲のマルクーシュ構造を包括する場合に収録する（ただし、発明の詳細な説明からは反応物や中間体は収録しない）	
実施例	/	1907-
		発明の内容に関わりのある特定の化学物質 * 何らかの hard data がある物質が索引される。 * 1993 年以降の一部の特許については、実施例中の hard data のない物質（Prophetic 物質）も索引される。 * 比較として挙げられている例示物質は索引されない。



REGISTRY ファイルはクレーム、実施例中に具体的に記載された化学物質が収録され、MARPAT ファイルはマルクーシュ構造が収録される

## A MARPAT ファイルの概要

### レコード構成

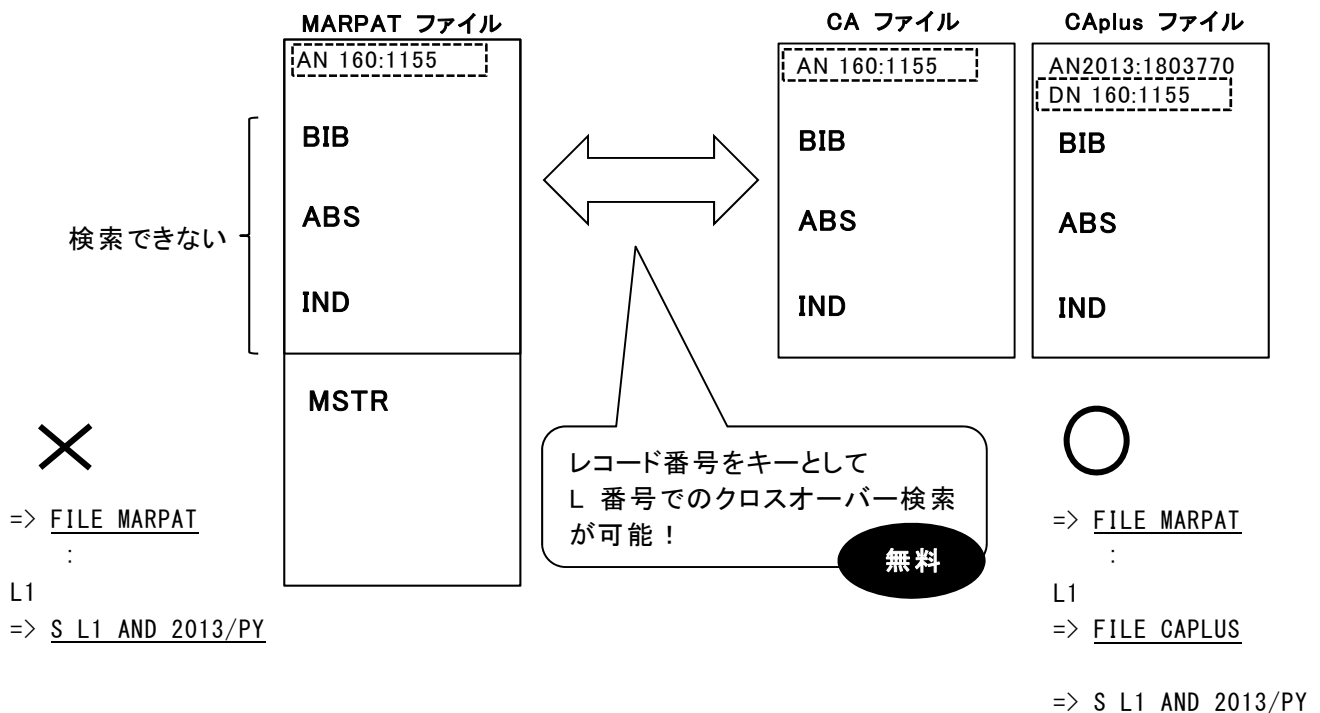
■ MARPAT ファイルは、CA ファイルと同様、特許ファミリー単位で構成されている。

- ・ CA ファイルのレコード番号 (AN) (= CAplus ファイルの CA 抄録番号 (DN)) と MARPAT ファイルのレコード番号 (AN) は共通である。
- ・ MARPAT ファイルのレコードは、CA ファイルと同じ書誌情報 (BIB)・抄録 (ABS)・索引 (IND) と、マルクーシュ構造 (MSTR) で構成されている。

■ 下記以外のフィールドは表示のみ可能で検索はできない。

検索項目	コード	説明	入力例
レコード番号	/AN	CA 抄録番号	=> <u>S 109:73345/AN</u>
基本索引	/BI (なし)	マルクーシュ構造中のテキスト情報から切り出した単語	=> <u>S SALT#</u>
入力日	/ED	入力日	=> <u>S 20070321/ED</u>
更新日	/UP	更新日	=> <u>S 20070321/UP</u>

- ・ CAplus/CA ファイルと MARPAT ファイル間は、無料で L 番号を用いたクロスオーバー検索ができる。書誌情報やキーワードで絞り込む場合は、CAplus/CA ファイルにクロスオーバーしてから検索する。



# A MARPAT ファイルの概要

## レコード構成

### レコード例

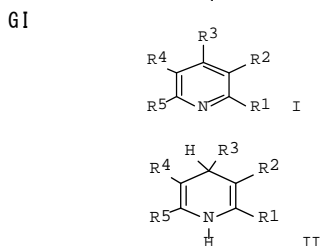
**BIB**

AN 136:102298 MARPAT  
 TI Preparation of substituted pyridines  
 IN Norbert, Lui; Pankus, Hans; Schnatterer, Albert  
 PA Bayer A.-G., Germany  
 SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 5 pp.  
 CODEN: JKXXAF  
 DT Patent  
 LA Japanese  
 IPCI C07D0213-807 [ICM, 7]; C07D0213-00 [ICM, 7, C\*]; C07B0061-00 [IGS, 7]  
 IPGR C07D0213-807 [I, A]; C07B0061-00 [I, C\*]; C07B0061-00 [I, A]; C07D0213-00 [I, C\*]; C07D0213-79 [N, A]; C07D0213-80 [I, A]; C07D0213-803 [I, A]  
 CC 27-16 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))  
 FAN. CNT 2

レコード番号 (AN) は CA ファイルと同じ (CA 抄録番号)

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	JP 2002020372	A2	20020123	JP 2001-169465	20010605
	DE 10111874	A1	20011213	DE 2001-10111874	20010313
PRAI	DE 2000-10028141	20000608			

**ABS**



- MARPAT ファイルのレコードは特許ファミリー単位
- CAplus/CA ファイルの情報は表示のみ可能で、検索はできない

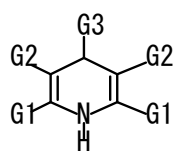
AB Title compds. I (R1, R5 = C1-10 alkyl, C6-10 aryl; R2, R4 = H, C1-10 alkyl, CN, C02R6; R6 = C1-10 alkyl; R3 = H, C1-10 alkyl, (un)substituted C6-10 aryl) are prepared by reaction of 1,4-dihydropyridine II (R1-R5 = same

**IND**

ST pyridine prepn: dihydropyridine oxidn methyl nitrite  
 IT Oxidation  
 (preparation of substituted pyridines)  
 IT 122549-42-2P  
 RL: IMF (Industrial manufacture); SPN (Synthetic preparation); PREP

**MSTR**  
 クレーム中の  
 マルクーシュ  
 構造  
 (MARPAT  
 ファイル特有  
 の情報)

MSTR 1

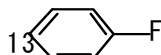


基本骨格 1  
 (G グループを含めた構造)

- G1 = alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> / (Example: Pr-i)  
 G2 = H / alkyl <containing 1-10 C> / CN / alkoxy carbonyl <containing 1-10 C> / (Examples: C02Me / C02Et)  
 G3 = H / alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> (opt. substd. by 1 or more G4) / (Example: 13)

基本骨格 1 中の  
 G グループ (置換基) の  
 定義

\* 数字は構造フラグメント  
 中の結合点



# A MARPAT ファイルの概要

## マルクーシュ構造の索引

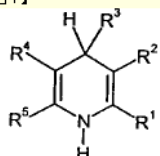
- マルクーシュ構造は、基本骨格（G グループを含めた構造）と置換基（G グループ）で索引される。

<例 1>

### 【特許請求範囲の抜粋】

#### 請求の範囲

【特許請求の範囲】  
【請求項1】式(II)  
【化1】



(II)

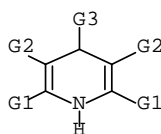
式中、R<sup>1</sup>及びR<sup>5</sup>は同一であるか又は相異なり、そして各々C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>-アルキル又はC<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>-アリールを表し、R<sup>2</sup>及びR<sup>4</sup>は同一であるか又は相異なり、そして各々水素、C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>-アルキル、CN又はCOOR<sup>6</sup>（ここでR<sup>6</sup>はC<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>-アルキルである）を表し、R<sup>3</sup>は水素、C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>-アルキルを表すか、又は場合によりハロゲン、ニトロ、COOR<sup>6</sup>（R<sup>6</sup>は上記で定義したとおりである）、CNもしくはC<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>-アルキルにより置換されているC<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>-アリールを表す、の置換された1,4-ジヒドロピリジン<sup>6</sup>を酸化成分20重量%未満を含有する酸の存在下に亜硝酸メチルと反応させることを特徴とする式(I)

### 【発明の詳細な説明の抜粋】

【0012】式(I)及び式(II)において、R<sup>1</sup>及びR<sup>5</sup>は特に好ましくはイソプロピルを表し、R<sup>2</sup>及びR<sup>3</sup>は特に好ましくはCOOR<sup>6</sup>（ここでR<sup>6</sup>はメチル又はエチルである）を表し、そしてR<sup>3</sup>は特に好ましくは4-フルオロフェニルを表す。

### 【MARPAT ファイルに収録されるマルクーシュ構造】

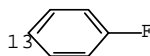
MSTR 1



G1 = alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> / (Example: Pr-i)

G2 = H / alkyl <containing 1-10 C> / CN / alkoxycarbonyl <containing 1-10 C> / (Examples: CO2Me / CO2Et)

G3 = H / alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> (opt. substd. by 1 or more G4) / (Example: 13)



G4 = halo / NO2 / alkoxycarbonyl <containing 1-10 C> / CN / alkyl <containing 1-10 C>

Patent location: claim 1

マルクーシュ構造の番号

基本骨格

置換基

マルクーシュ構造の記載位置

特定原子

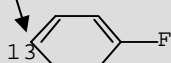
一般式グループ

(opt. substd. by) は任意の置換基の存在を表す  
必ず置換する場合は、(substd. by) で表される

G3 = H / alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> (opt. substd. by 1 or more G4)

/ (Example: 13)

構造フラグメント中の番号に対応している



実施例や詳細な説明中に記載されている具体的な例示物質を (Example) として選択的に収録している

特定原子 (構造フラグメント)

## A MARPAT ファイルの概要

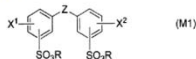
### マルクーシュ構造の索引

<例 2>

#### 【特許請求範囲の抜粋】

【請求項 1】

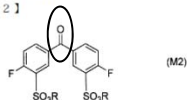
下記一般式 (M1) で表されることを特徴とする芳香族スルホン酸エステル誘導体。  
【化 1】



(式 (M1) 中、Z は、電子求引性基を表す。R はスルホン酸エステル基ごとにそれぞれ独立して炭素数 1~20 の炭化水素基を表し、ヘテロ原子を含んでも良い。また X<sup>1</sup>、X<sup>2</sup> はハロゲン原子を表す。)

【請求項 2】

前記一般式 (M1) が下記一般式 (M2) で表される請求項 1 記載の芳香族スルホン酸エステル誘導体。  
【化 2】



(式 (M2) 中、R はスルホン酸エステル基ごとにそれぞれ独立して炭素数 1~20 の炭化水素基を表し、ヘテロ原子を含んでも良い。)

#### 【MARPAT ファイルに収録されるマルクーシュ構造】

MSTR 1

G4—O—S02—G2—G1—G3—S02—O—G4

G1 = R <"electron-withdrawing group"> /  
(Specifically claimed: C(O)) /...

R グループ

<> の中に説明が記述されるが、この部分は検索できない

G1 = R <"electron-withdrawing group"> /

(Specifically claimed: C(O)) /...

別のクレーム中 (従属項など) で権利請求されている置換基を (Specifically claimed) として収録している



G グループは下記の 3 つのレベルのいずれかで索引されている。

- ・ 特定原子 (H, NO<sub>2</sub>, pyridine, 構造フラグメントなど)
- ・ 一般式グループ (halo, alkyl, cycloalkyl など)
- ・ R グループ (構造で表現できない organic group や electron withdrawing group など)



G グループには、マルクーシュ構造の定義中の置換基の情報だけでなく、従属項や詳細の説明中に記載された具体的な置換基の情報も追加している。

## A MARPAT ファイルの概要

### マッチレベル

- MARPAT ファイルの構造検索では、作図した置換基が「特定原子」「一般式グループ」「R グループ」のどのレベルで索引されているものが欲しいのかを、マッチレベルという属性でコントロールすることができる。



- ・ マッチレベルには、「原子 (atom)」「クラス (class)」「不定 (any)」の 3 種類がある。
- ・ 同じ構造でも、マッチレベルの指定の仕方によって得られる回答が異なる。

#### ■ マッチレベル : 「原子 (atom)」

- ・ G グループの定義中、特定原子で書かれているものだけがヒットする。

#### ① 特定原子で作図したノードにマッチレベル [原子] を指定した場合

構造質問式

MARPAT ファイルの回答

\* マッチレベル [原子] を指定したノードは、特定原子の回答のみがヒットする。この場合は、Me のみ。

\* alkyl や i-Pr はヒットしない。

- ・ alkyl や alkylene などの回答も必要な場合は [クラス] の指定に変更する
- ・ i-Pr の回答も必要な場合は、Me で作図したノードを Ak などに変更する

#### ② 一般式グループで作図したノードにマッチレベル [原子] を指定した場合

構造質問式

MARPAT ファイルの回答

\* マッチレベル [原子] を指定したノードが一般式グループノード Ak であっても、特定原子の回答のみがヒットする。

\* alkyl はヒットしない。

- ・ alkyl や alkylene の回答も必要な場合は [クラス] の指定に変更する



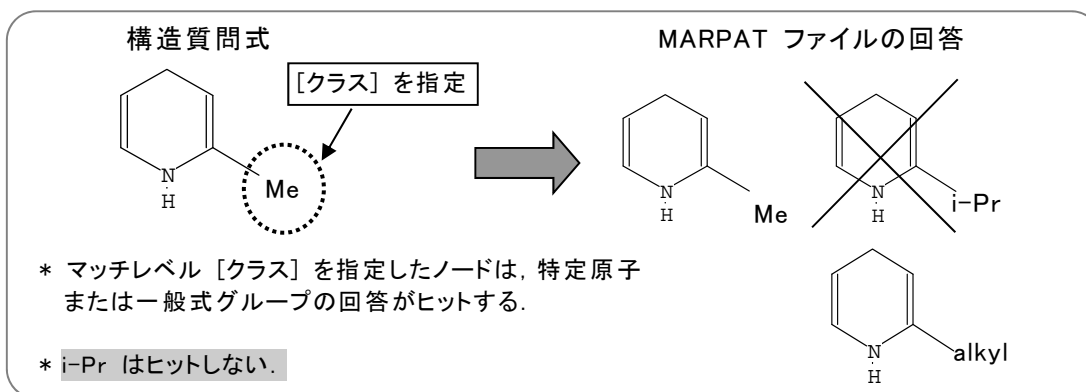
## A MARPAT ファイルの概要

### マッチレベル

#### ■ マッチレベル : 「クラス (class)」

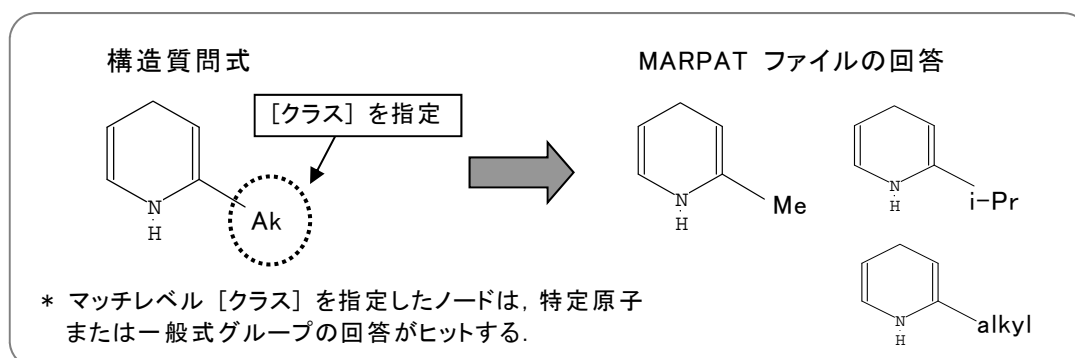
- ・ G グループの定義中, 特定原子, または一般式グループで書かれているものがヒットする.

#### ① 特定原子で作図したノードにマッチレベル [クラス] を指定した場合



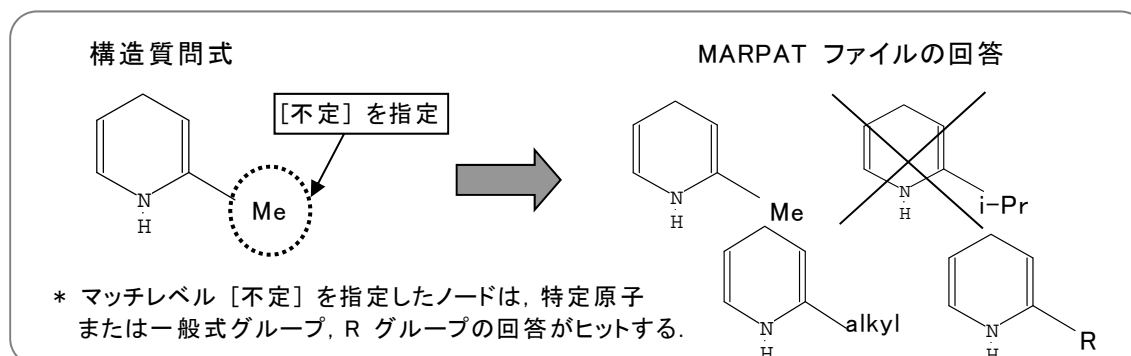
- ・ i-Pr の回答も必要な場合は, Me で作図したノードを Ak などに変更する

#### ② 一般式グループで作図したノードにマッチレベル [クラス] を指定した場合



#### ■ マッチレベル : 「不定 (any)」

- ・ G グループの定義中, 特定原子, 一般式グループに加え, R グループで書かれているものもヒットする.



## A MARPAT ファイルの概要

### 元素数レベル

- マッチレベルを「クラス (class)」に指定した場合には、さらに、元素数レベルという属性で、得られる回答をコントロールすることができる。

- ・ 元素数レベルには、「限定する (limited)」と「限定しない (unlimited)」の 2 種類がある。

- 一般式グループの表現と元素数レベル

- ・ MARPAT ファイル中の一般式グループには、後続く < > の中に元素の種類と数が記載されている場合と、記載されていない場合がある。

- 元素の種類と数の記載有りの例

```
G2 = alkyl <containing 1-20 C> / cycloalkyl <containing 3-20 C> /  
      alkoxy <containing 1-6 C> / cycloalkoxy <containing 3-6 C> /
```

● 元素の種類と数

- 元素の種類と数の記載無しの例

```
G1 = alkyl / alkoxy / alkylamino / dialkylamino
```

- ・ 一般式グループにおける元素の種類と数を回答の条件に含めるには、元素数レベルを指定する。

- 元素数レベルの指定と得られる回答

限定 (LIMITED)	一般式グループがヒットする場合、 <u>指定した元素の種類と数の条件を満たす記載のある回答のみ</u> が得られる
限定しない (UNLIMITED)	上記に加え、元素の種類と数が明記されていない回答 (指定した元素の存在が否定されない回答を含む) も得られる

\* 元素数の指定がない場合は、元素数レベルの設定は検索結果に影響しない。

- ・ 元素数の指定方法

- Ak, Hy などの一般式グループに元素数を指定する。

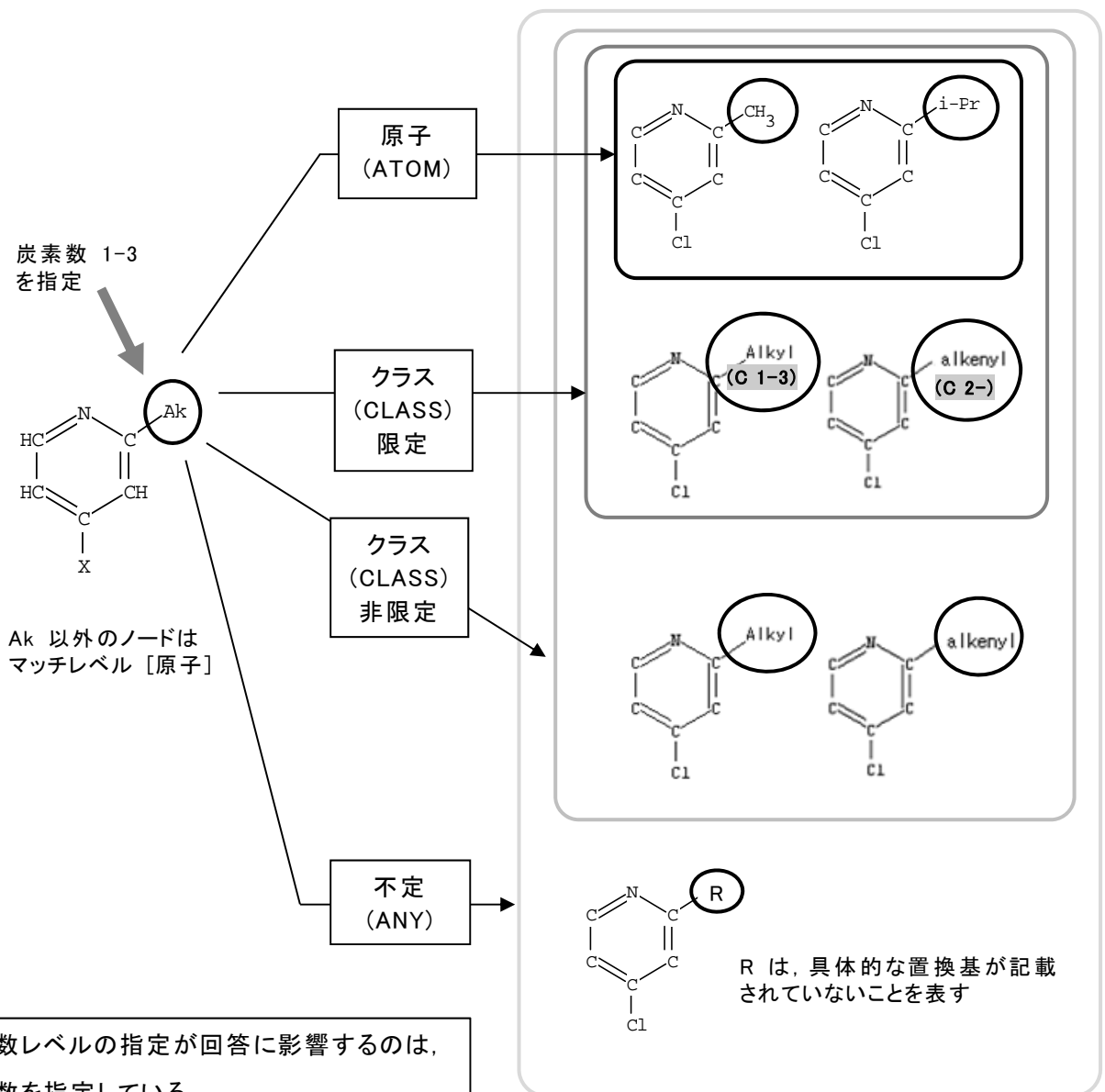
- 特定の構造を作図する。

## A MARPAT ファイルの概要

### 元素数レベル

#### ■ マッチレベルとの関係

- ・ マッチレベル [原子] : [限定], [限定しない] のいずれを指定しても回答に影響なし
- ・ マッチレベル [クラス] : [限定], [限定しない] の指定で回答に違いがある。  
\* 元素数の指定がある場合
- ・ マッチレベル [不定] : 必ず [限定しない] を指定して検索する。



\* グループ原子記号 X (ハロゲン), M (金属) の元素数レベルを変更しても回答に影響はない

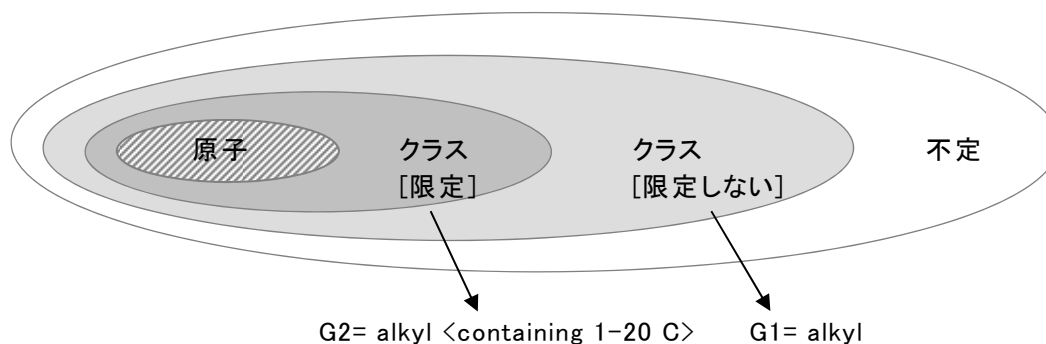


元素数レベルの指定が回答に影響するのは、  
元素数を指定している  
+  
マッチレベルを「クラス」にしている  
場合である。

## A MARPAT ファイルの概要

### まとめ

- MARPAT ファイルでは、マルクーシュ構造の置換基を、「特定原子」「一般式グループ」「R グループ」という 3 つのレベルで索引している。
- 構造検索の際、上記のどのレベルで索引されているものが欲しいのかをマッチレベルで指定することができる。
- 元素数レベルを「限定」にすると、一般式グループのうち、元素の種類と数が作図した条件に合うものだけに限定することができる。
- マッチレベルと元素数レベルとの違いによる回答の包含関係（例：炭素数 1-5 を指定した場合）



## *B* 検索例

MARPAT ファイルを用いた構造検索について、検索の流れとポイントをご紹介します。



## B 検索例

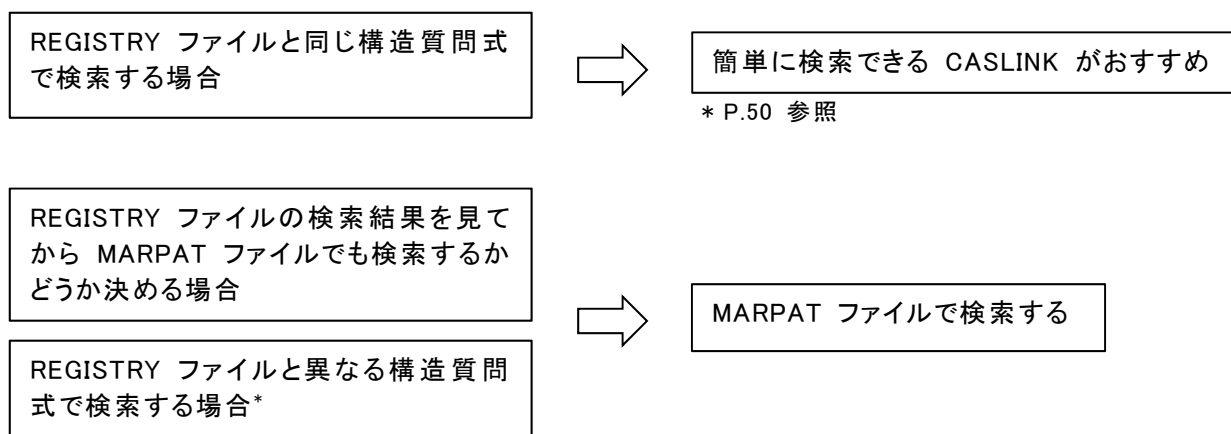
### MARPAT ファイルの検索

■ MARPAT ファイルと REGISTRY ファイルでは、索引対象が異なる。REGISTRY ファイルには、実施例、クレームで構造や名称が具体的に記載された化合物（特定化合物）のみが収録されるが、MARPAT ファイルは、マルクーシュ構造で定義された置換基がそのまま収録されている。

- ・ そのため、実際に実施例で使われた化合物に目的の構造が含まれないが、クレームの範囲には含まれる、というような特許を MARPAT ファイルでは見つけることができる。

■ MARPAT ファイルを検索するには、下記の 2 通りの方法がある。

- ① CASLINK を利用して、REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルをまとめて検索する。
- ② MARPAT ファイルで検索する。



\* 例えば、塩や配位化合物は REGISTRY と MARPAT で作図方法が異なるので、同じ構造質問式を用いることができない。(検索例 2 参照)

## B 検索例

### MARPAT ファイルの構造検索の注意点

- REGISTRY ファイルではできるが, MARPAT ファイルではできない機能がある.
  - ・ 検索タイプは, CSS (閉構造部分構造検索) か SSS (部分構造検索) のみ.
    - EXA (完全一致検索), FAM (ファミリー検索) は利用できない.
  - ・ 複数の構造質問式を AND, OR, NOT を用いて演算することはできない.
  - ・ スクリーン検索は利用できない.
  - ・ 結合属性「環/鎖」は利用できない。(ただし, ノード属性は「環/鎖」が指定できる.)
  
- G グループや繰り返しグループを多数使用すると, STRUCTURE TOO LARGE のエラーになってしまう場合がある.
  - ・ REGISTRY ファイルでは検索可能でも, MARPAT ファイルでは検索できない場合もある.

=> FILE MARPAT

=> S L1

**STRUCTURE TOO LARGE - SEARCH ENDED**

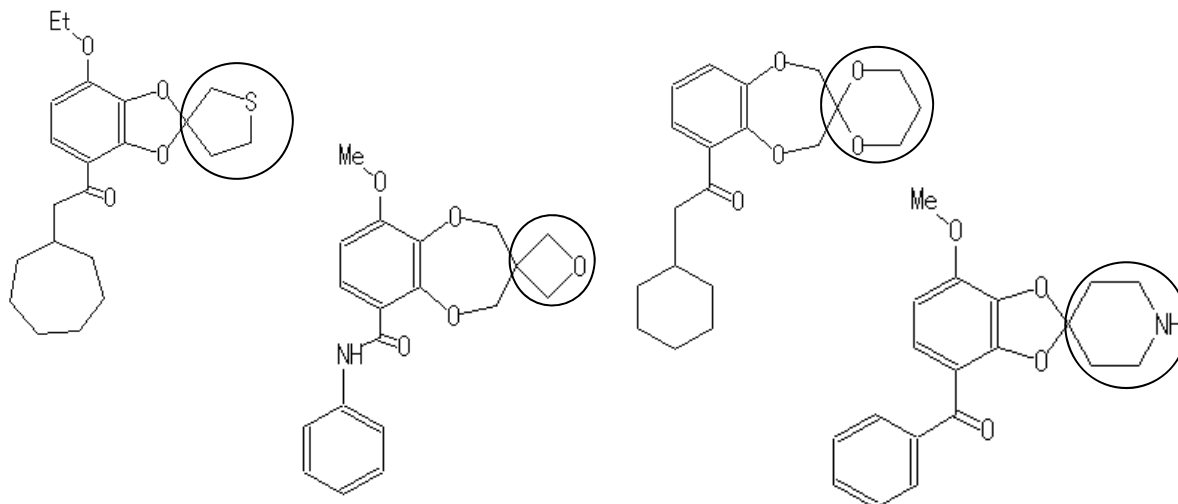
A structure in your query is too large. You may delete attributes or atoms to reduce the size of the structure and try again.



## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

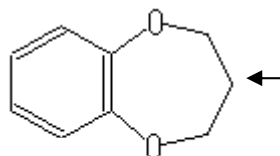
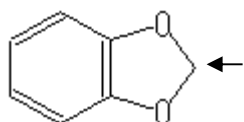
- 下記のような構造を有する化合物が ホスホジエステラーゼ阻害剤\* として有効であることが分かった。これらの物質に関して出願を検討するため特許調査を行う。



### ■ 構造質問式の検討

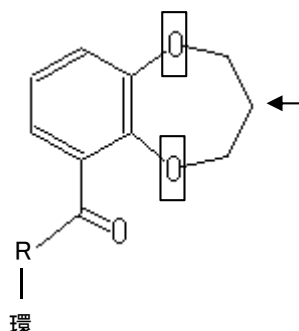
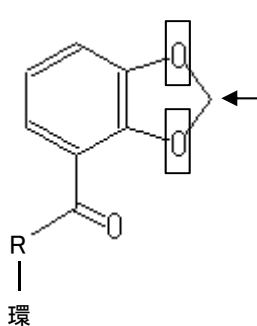
- ・ 重要な部分構造を決める。

- 今回は、下記の 6-5 員環または 6-7 員環に、さらに環がスピロ結合した環構造が重要である。



← の位置は必ずスピロ結合する

- ・ その他の条件を決める。



□ 内は、O のほか、S, N でもよい

R は CH<sub>2</sub> または NH または結合

← 以外の位置は縮環しない

- R に結合する環は、炭素環、ヘテロ環両方を含めて検索する。

\* ホスホジエステラーゼ阻害剤とは・・・ホスホジエステラーゼ (PDE) を阻害することにより、cAMP あるいは cGMP の細胞内濃度を上昇させる薬である。cAMP は炎症反応の調節に重要な物質であり、特に PDE 4 阻害剤は炎症性疾患、例えば喘息やアトピー性皮膚炎などの治療に有効であるとして研究されている。

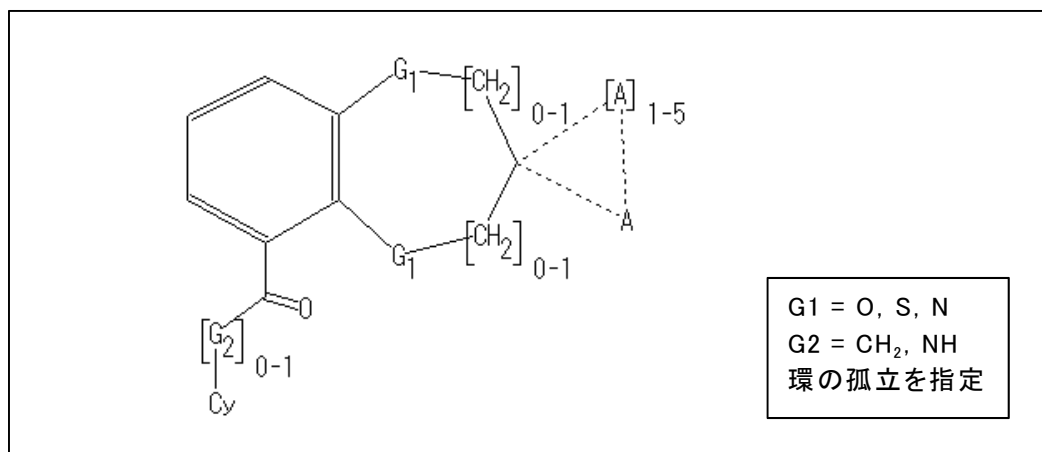
## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

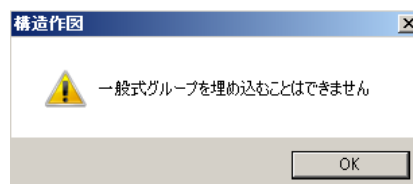
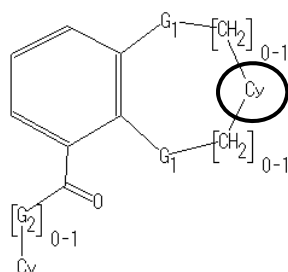
#### ■ 構造質問式の作図 : スピロ環を繰り返しグループで作図する場合

##### ・ 作図のポイント

- 6-5 員環と 6-7 員環をまとめて検索したい → 繰り返しグループを利用する
- 必ずスピロ結合するが, スピロ環の構造は限定したくない
  - 不定結合 (----) と A (H 以外の元素), 繰り返しグループを利用すると, 元素の種類や数, 位置を限定せずにスピロ環を作図できる
  - \* この作図方法だと, 員数を決める必要があるのですが, 今回は 3-7 員環がヒットするよう作図する
- カルボニル基の下は, ヘテロ環も含めて広めに探したい
  - Cy (環系) で作図



注 : 一般式グループ記号 (Ak, Cy, Hy, Cb) を環上に作図することはできない。



## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

#### ■ サンプル検索 (REGISTRY ファイル)

=> FILE REGISTRY

=>

Uploading C:\¥...¥STN Express 8.5¥Queries¥text20140116-a.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

:

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **\*\*INCOMPLETE\*\***  
BATCH **\*\*INCOMPLETE\*\***  
PROJECTED ITERATIONS: 26053925 TO 26178155  
PROJECTED ANSWERS: 1 TO 94

INCOMPLETE のため、このままではフルファイル検索できない

L2 1 SEA SSS SAM L1

=> SCR 945

L3 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L3

SAMPLE SEARCH INITIATED 14:06:02

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 32486 TO ITERATE

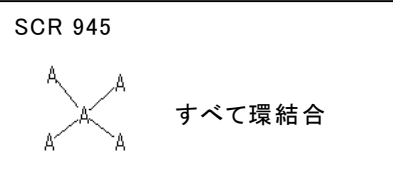
100.0% PROCESSED 32486 ITERATIONS  
SEARCH TIME: 00.00.01

4 ANSWERS

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **\*\*COMPLETE\*\***  
BATCH **\*\*COMPLETE\*\***  
PROJECTED ITERATIONS: 638930 TO 660510  
PROJECTED ANSWERS: 4 TO 200

スクリーンをかけるとCOMPLETE になった

L4 4 SEA SSS SAM L1 AND L3



#### ■ サンプル検索 (MARPAT ファイル)

=> FILE MARPAT

=> S L1

**STRUCTURE TOO LARGE - SEARCH ENDED**

A structure in your query is too large. You may delete attributes or atoms to reduce the size of the structure and try again.

MARPAT ファイルではSTRUCTURE TOO LARGEのため構造検索ができない



MARPAT ファイル検索用に構造質問式を見直す

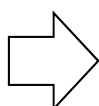
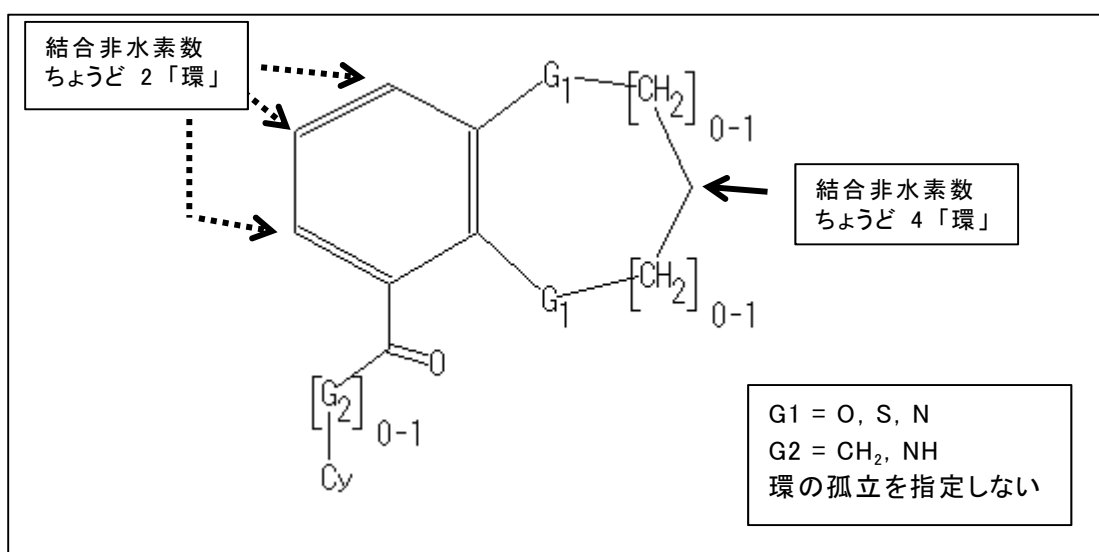
## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

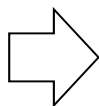
#### ■ 構造質問式の作図 : 繰り返しグループを減らした作図

##### ・ 作図のポイント

- STRUCTURE TOO LARGE のエラーを回避するため、繰り返しグループや G グループを減らしたい → スピロ結合の部分で、結合非水素数で指定
- スピロ環を含めるためには環の孤立は指定できない  
→ 結合非水素数で、環の一部のみ縮環を禁止する



この構造質問式は、MARPAT ファイルで検索可能だった。

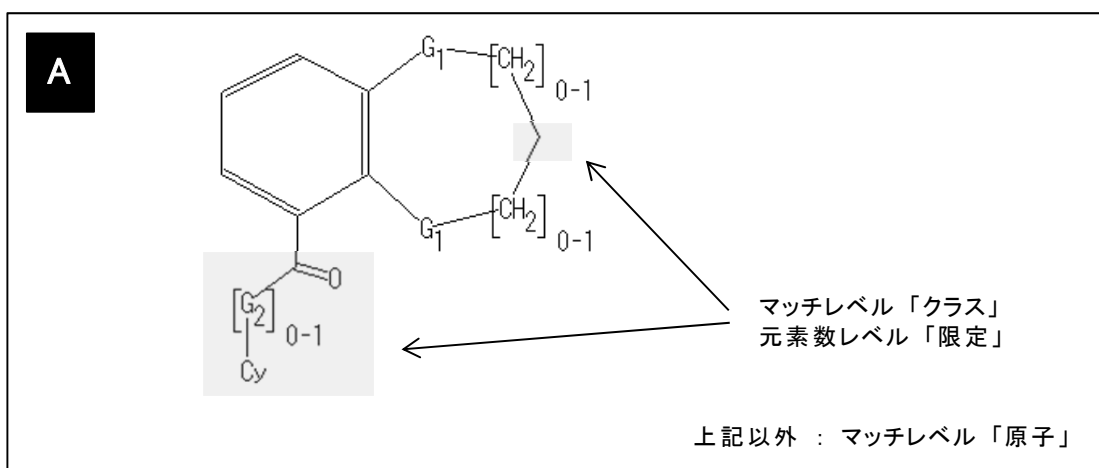


MARPAT ファイルでは、マッチレベルの指定の仕方によって得られる回答が変わる。  
各部分構造がそれぞれのレベル（特定原子、一般式グループ、R グループ）で索引されているものをヒットさせたいかをマッチレベルで設定する必要がある。

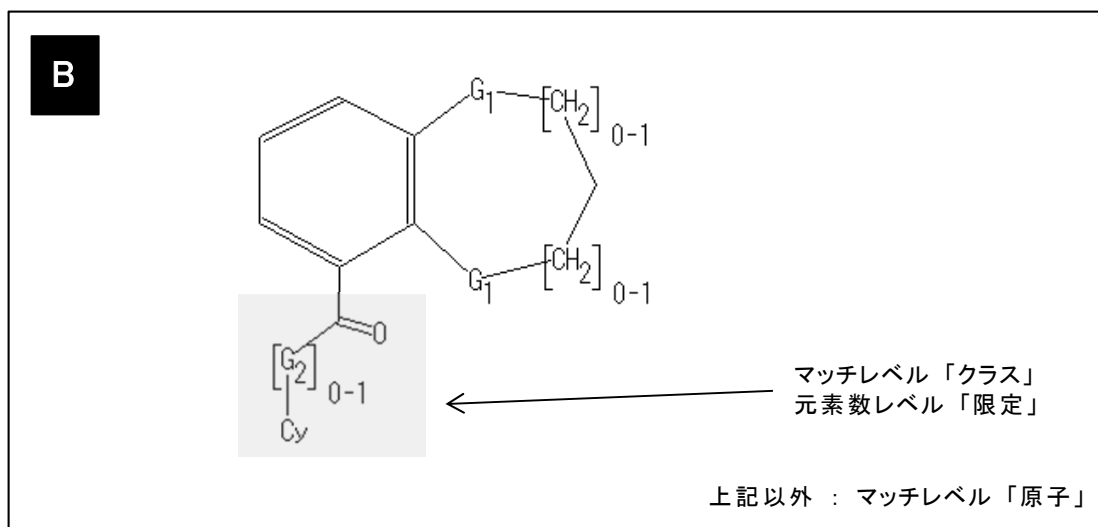
## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

- ・ マッチレベル : スピロ環部分を広めに検索したい場合
  - スピロ環の左側の縮合環は, 重要な部分構造なので, 特定原子として索引されているものだけに限定する → マッチレベル「原子」(デフォルト)
  - スピロ結合する環と Cy で作図した環は, 一般式グループ (Carbocycle など) でもヒットしてほしい → スピロ結合するノードと Cy のマッチレベルを「クラス」に変更する



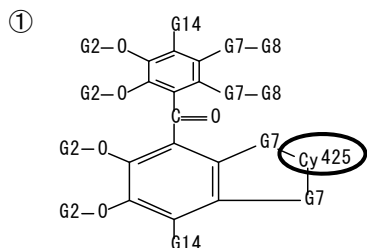
- ・ マッチレベル : スピロ環部分を特定原子で索引されているものだけに限定する場合
  - スピロ環も含めて重要な部分構造なので, 特定原子として索引されているものだけに限定する → マッチレベル「原子」(デフォルト)
  - Cy で作図した環は, 一般式グループ (Carbocycle など) でもヒットしてほしい → Cy のマッチレベルを「クラス」に変更する



## B 検索例

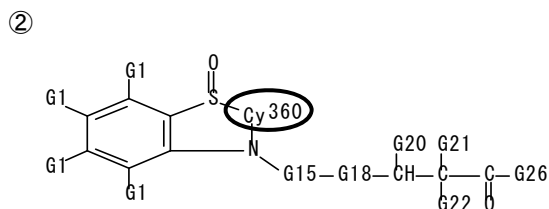
参考：MARPAT ファイルでの縮合環・スピロ環の索引

■ MARPAT ファイルでは、スピロ環や縮合環を一般式グループで表す際に、下記のように索引する場合があります。



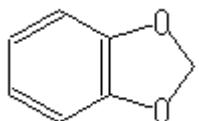
425: any ring <containing 1 or more C, attached through 1 or more C> (opt. substd.)

\*<attached through 1 C> からスピロ結合であることが分かる



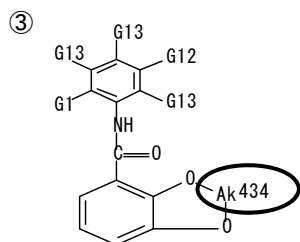
360: any ring <containing 5 or more C> (opt. substd.)

- ・上記のような構造をヒットさせるには、作図した環の該当部分のマッチレベルを「クラス」に変更する必要がある。



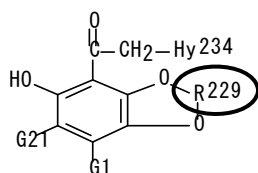
このノードのみ、マッチレベルを「クラス」に変更  
\* マッチレベルは同一環上でもノードごとに変更が可能

注1) ただし、上記のノードについて、スピロ結合に限定するため、結合非水素数を「ちょうど 4、環」に設定しても、下記 ③ のようなレコードがノイズとして含まれてしまう。



434: alkylene <containing 1-3 C>

注2) さらに、環上のノードが R グループで表される場合は、例外的に、マッチレベル「クラス」でも R グループがヒットする。



マッチレベル「クラス」で R グループがヒットする唯一の例外

229: R <"group to form ring">

## B 検索例

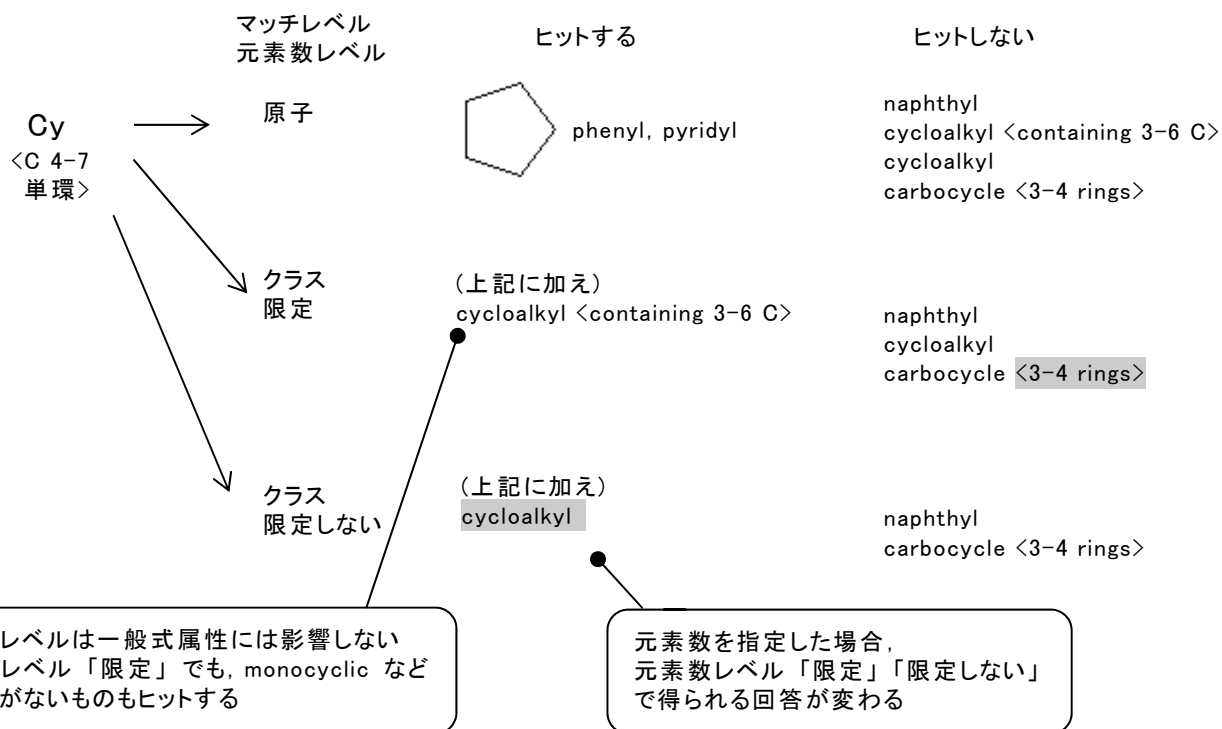
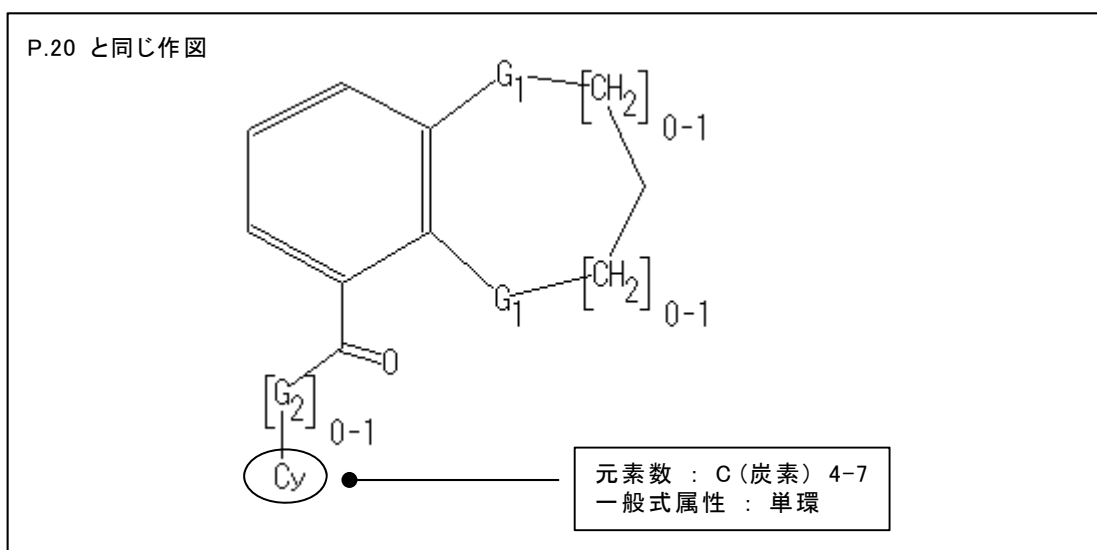
### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

#### ■ 構造質問式の作図 : 一般式グループで作図した部分についてヒットする回答を限定したい場合

##### ・ 作図のポイント

- Cy で作図した部分について、環の大きさを限定したい
  - 一般式属性で、単環に限定する
  - 元素数属性で、炭素の数を指定する

一般式グループ記号で作図した場合、元素数や一般式属性でおおまかな限定が可能



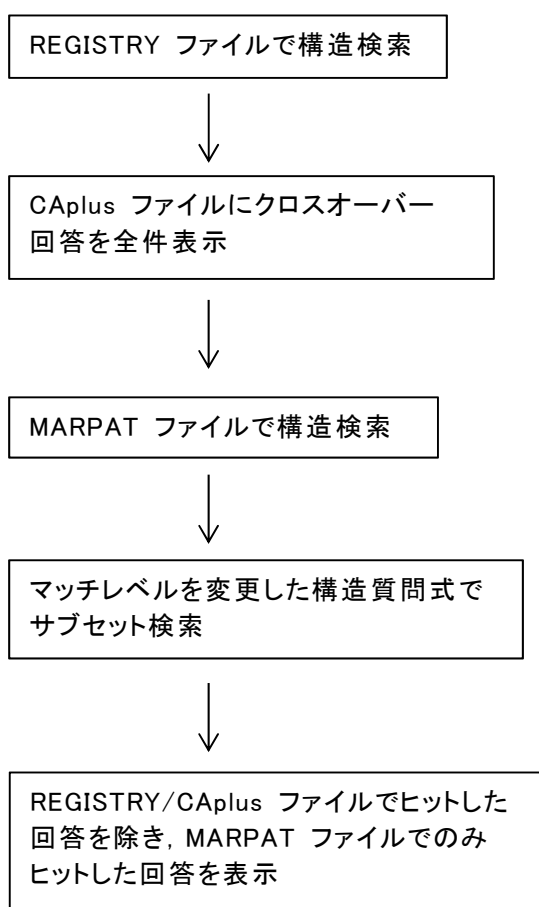
## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

#### ■ 構造質問式の決定

- ・ 今回は, **A** で構造検索を行い, ノイズが多いようなら, **B** の構造質問式でサブセット検索する.

#### ■ 検索の流れ





## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

#### ■ 検索例

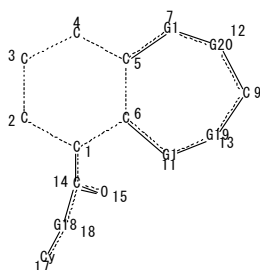
##### 1. REGISTRY ファイルで構造検索する

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

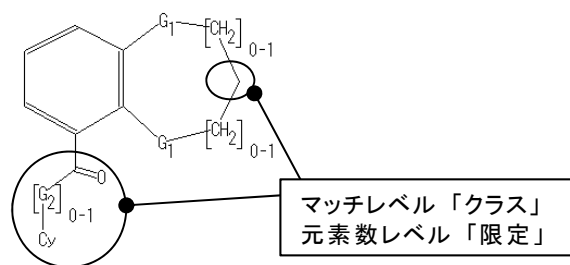
=>

Uploading C:\¥...¥STN Express 8.5¥Queries¥EX1-1.str ← 構造質問式 **A** をアップロード  
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE ← D QUE で構造質問式属性を確認できる



8 C M2    10 C M2    G2 16    0 19    S 20 N 21    22 N M1    23 C M2



マッチレベル「クラス」  
元素数レベル「限定」  
それ以外はマッチレベル「原子」

```

VAR G1=19/20/21
VAR G2=22/23
REP G18=(0-1) 16-14 16-17
REP G19=(0-1) 10-9 10-11
REP G20=(0-1) 8-7 8-9
NODE ATTRIBUTES:
HCOUNT IS M2 AT 8
:
NSPEC IS R AT 1
NSPEC IS R AT 2
:
NSPEC IS C AT 18
CONNECT IS E2 R AT 2
CONNECT IS E2 R AT 3
CONNECT IS E2 R AT 4
CONNECT IS E4 R AT 9
DEFAULT MLEVEL IS ATOM
MLEVEL IS CLASS AT 9 14 15 17 22 23
DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED
  
```

} G グループ  
 } 繰り返しグループ  
 } 結合非水素数  
 } マッチレベル  
 ← 元素数レベル

GRAPH ATTRIBUTES:  
RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED  
NUMBER OF NODES IS 23

STEREO ATTRIBUTES: NONE

=> SCR 945 ← スクリーンを利用  
L2 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2 ← 構造質問式とスクリーンを掛け合わせる (サンプル検索)  
L3 4 SEA SSS SAM L1 AND L2

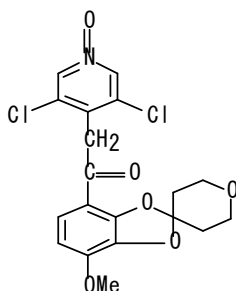
## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

=> S L1 AND L2 FUL ← フルファイル検索を実行  
L4 101 SEA SSS FUL L1 AND L2

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で回答をチェック

L4 101 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN  
IN Ethanone, 2-(3,5-dichloro-1-oxido-4-pyridinyl)-1-(2',3',5',6'-tetrahydro-7-methoxyspiro[1,3-benzodioxole-2,4'-[4H]pyran]-4-yl)-  
MF C19 H17 Cl2 N O6



\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

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

#### 2. *CAplus* ファイルに *REGISTRY* ファイルの回答をクロスオーバーする

=> FILE CAPLUS ← *CAplus* ファイルに入る

=> S L4 ← *REGISTRY* ファイルの回答をクロスオーバーする  
L5 29 L4

=> D BIB HITSTR 1-29 ← 全件を *BIB HITSTR* 表示形式で表示

L5 ANSWER 1 OF 29 CAPLUS COPYRIGHT 2014 ACS on STN  
AN 2012:1819594 CAPLUS Full-text  
DN 158:77097  
TI Derivatives of 1-phenyl-2-pyridinyl alkyl alcohols as phosphodiesterase inhibitors and their preparation  
TIJP ホスホジエステラーゼ阻害薬としての1-フェニル-2-ピリジニルアルキルアルコールの誘導体. それらの調製 [機械翻訳]  
IN Armani, Elisabetta; Amari, Gabriele; Carzaniga, Laura; Capaldi, Carmelida; Esposito, Oriana; Villetti, Gino; De Fanti, Renato  
PA Chiesi Farmaceutici S.p.A., Italy  
SO PCT Int. Appl., 342pp.  
CODEN: PIXXD2  
DT Patent  
LA English  
FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2012168226	A1	20121213	WO 2012-EP60579	20120605
	CA 2838435	A1	20121213	CA 2012-2838435	20120605
	US 20130005716	A1	20130103	US 2012-13488818	20120605
	AU 2012266514	A1	20140109	AU 2012-266514	20120605

## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

PRAI EP 2011-168853 A 20110606  
 WO 2012-EP60579 W 20120605

ASSIGNMENT HISTORY FOR US PATENT AVAILABLE IN LSUS DISPLAY FORMAT

OS CASREACT 158:77097; MARPAT 158:77097

IT **185406-34-2**, 2-(3,5-Dichloropyridin-4-yl)-1-(4-methoxyspiro[benzo[d][1,3]dioxole-2,1'-cyclopentane]-7-y

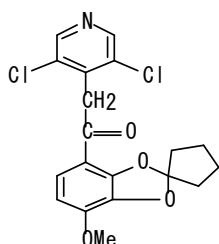
OS フィールドで、このレコードが MARPAT ファイルに収録されているかどうか確認できる

RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)

(preparation of phenyl(pyridinyl)alkyl alcs. as phosphodiesterase inhibitors)

RN 185406-34-2 CAPLUS

CN Ethanone, 2-(3,5-dichloro-4-pyridinyl)-1-(7-methoxyspiro[1,3-benzodioxole-2,1'-cyclopentan]-4-yl)- (CA INDEX NAME)



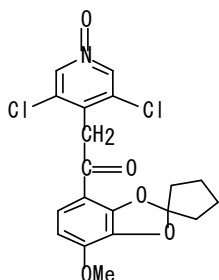
IT **1416001-97-2P**, 3,5-Dichloro-4-(2-(4-methoxyspiro[benzo[d][1,3]dioxole-2,1'-cyclopentane]-7-yl)-2-oxoethyl)pyridine N-oxide

RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)

(preparation of phenyl(pyridinyl)alkyl alcs. as phosphodiesterase inhibitors)

RN 1416001-97-2 CAPLUS

CN Ethanone, 2-(3,5-dichloro-1-oxido-4-pyridinyl)-1-(7-methoxyspiro[1,3-benzodioxole-2,1'-cyclopentan]-4-yl)- (CA INDEX NAME)



OSC.G 1 THERE ARE 1 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (1 CITINGS)

RE.CNT 1 THERE ARE 1 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD

ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

:

## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

#### 3. MARPAT ファイルで構造検索する

=> FILE MARPAT ← MARPAT ファイルに入る

=> S L4 ← サンプル検索を実行

QUERY CONTAINS NON-SEARCHABLE SCREENS IN L2.

ONLY STRUCTURE L1 WILL BE SEARCHED.

SAMPLE SEARCH INITIATED 14:55:02

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 8914 TO ITERATE

← MARPAT ファイルではスクリーンは利用できないので、L1 の構造質問式のみが実行される

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*

BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED ITERATIONS: 173975 TO 182585

PROJECTED ANSWERS: 2 TO 357

REGISTRY ファイルのフルファイル検索の結果の L 番号を用いると、割引料金で MARPAT ファイルの構造検索が実行できる

L6 2 SEA SSS SAM L1

=> S L4 FUL ← フルファイル検索を実行

100.0% PROCESSED 178943 ITERATIONS ( 2 INCOMPLETE) 158 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.03.47

↑ 照合が不完全な回答が含まれている (下記参照)

L7 158 SEA SSS FUL L1

=> S L7/COM ← 照合作業が COMPLETE した回答に限定

L8 156 L7/COM

=> S L7/INC ← 照合作業が INCOMPLETE の回答に限定

L9 2 L7/INC

=> D L9 SCAN TI FQHIT ← L9 が必要な回答がどうか無料の SCAN TI FQHIT 表示形式で確認する

(今回は 2 件ともノイズだった)

#### 参考 : フルファイル検索の結果に INCOMPLETE の回答が含まれている場合

■ 構造検索を実行した時に、一定の時間内に構造質問式との照合が完了しなかったレコードは、INCOMPLETE の回答として構造検索の回答セットに含まれる。

- ・ INCOMPLETE の回答はノイズの可能性が高いが、必ずしもノイズとは限らない。念のために内容を確認するとよい。
- ・ L#/COM または L#/INC と入力すると、COMPLETE の回答と INCOMPLETE の回答を分けることができる。

=> S L3/COM ← COMPLETE の回答に限定 (無料)

=> S L3/INC ← INCOMPLETE の回答に限定 (無料)

\* L3 はフルファイル検索の回答

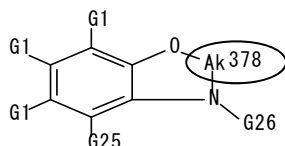
## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

=> D SCAN TI FQHIT L8 ← L8 の回答を無料の SCAN TI FQHIT 表示形式で確認

L8 156 ANSWERS MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN  
TI Nitrogen-containing fused ring compounds as inhibitors of URAT1 activity and process for the preparation thereof

MSTR 1 Assembled



378: alkylene <containing 1-3 C>  
(opt. substd. by alkyl <containing 1-6 C> (opt. substd.))

G1 = 59

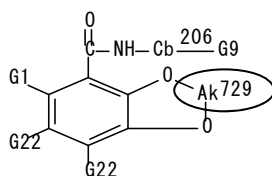
476: carbocycle <containing 3-14 C, 0 or more double bonds>  
(opt. substd.)

Patent location: claim 1  
Note: or salts or reactive derivatives  
Note: additional ring and oxo formation also claimed  
Note: substitution is restricted

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

L8 156 ANSWERS MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN  
TI Preparation of (hetero)arylcarboxamides as inhibitors of microsomal triglyceride transfer protein (MTP) and of apolipoprotein B (apo B) secretion.

MSTR 1 Assembled



206: arylene <containing 6-12 C, mono- or bicyclic>  
(opt. substd.)

729: alkylene  
Patent location: claim 1  
Note: substitution is restricted  
Note: or pharmaceutically acceptable salts

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

Ak がノイズとしてかなり含まれていたため、スピロ原子のマッチレベルを「原子」に変更した構造質問式でサブセット検索する

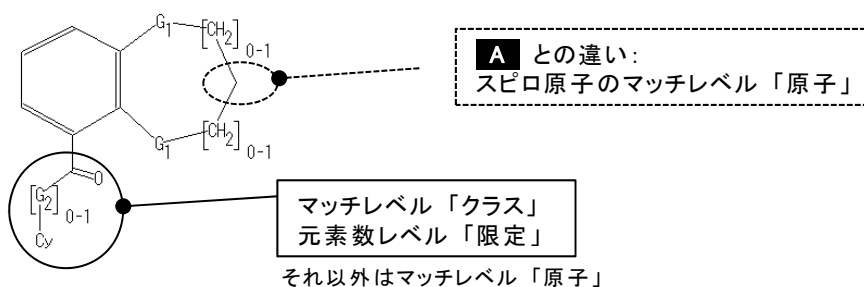
## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

#### 4. MARPAT ファイルでサブセット検索する

Uploading C:\Users\...¥STN Express 8.5¥Queries¥EX1-2.str ← サブセット検索するため  
構造質問式 **B** をアップロード

L10 STRUCTURE UPLOADED

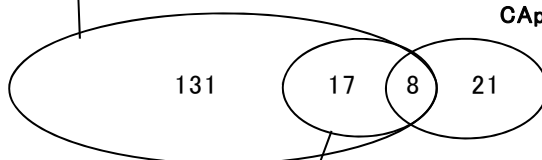


=> S L10 SUB=L8 SAM ← L8 を母集合にしてサブセット検索を実行 (サンプル検索)  
L11 1 SEA SUB=L8 SSS SAM L10

=> S L10 SUB=L8 FUL ← L8 を母集合にしてサブセット検索を実行 (フルファイル検索)  
L12 25 SEA SUB=L8 SSS FUL L10

MARPAT ファイルの回答 (L8)

(スピロ原子のマッチレベル「クラス」)



CAplus ファイルの回答 (L5)

非特許 : 5 件  
MARPAT に収録なし : 11 件

MARPAT ファイルの回答 (L12)

(スピロ原子のマッチレベル「原子」)

B 検索例

検索例 1 : 複素環化合物の検索

5. REGISTRY/CAplus ファイルでヒットした回答を除く

=> S L12 NOT L5 ← REGISTRY/CAplus ファイルでヒットした回答を除く

L13 13 L5  
17 L12 NOT L5

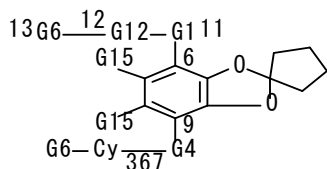
CAplus ファイルの回答は L 番号を用いて  
MARPAT ファイルにクロスオーバーできる (無料)

=> D BIB FQHIT 1-17 ← 全件を BIB FQHIT 表示形式で表示

L13 ANSWER 1 OF 17 MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN  
AN 158:215968 MARPAT [Full-text](#)  
TI Preparation of spiro compounds useful for preventing or treating hepatitis C  
IN Zhang, Jiancun; Zhang, Yingjun; Xie, Hongming; Ren, Qingyun; Luo, Huichao; Yu, Tianzhu; Tan, Yumei  
PA HEC Pharm Co., Ltd., Peop. Rep. China  
SO Faming Zhuanli Shenqing, 255pp.  
CODEN: CNXXEV  
DT Patent  
LA Chinese  
FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	CN 102863428	A	20130109	CN 2012-10239748	20120709

MSTR 1A Assembled



367: any ring <containing 3-12 atoms, zero or more hetero atoms, mono- or polycyclic>

G1 = 17-12 18-6 / 19-12 20-6 / 21-12 23-6

1 G2-G3 1 G3-G2 2 G2-G3-G2

G2 = NH (opt. substd.)

G3 = C(O)

G4 = 195-9 196-367 / 197-9 198-367 / 199-9 201-367

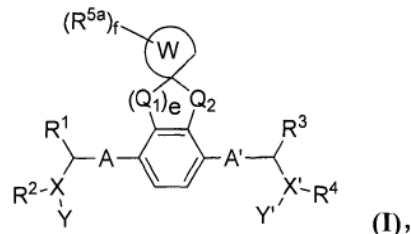
1 G2-G3 1 G3-G2 1 G2-G3-G2

G6 = 34

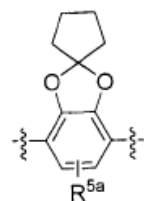
3 G7-G8 3 G2-G9 3 G10

:

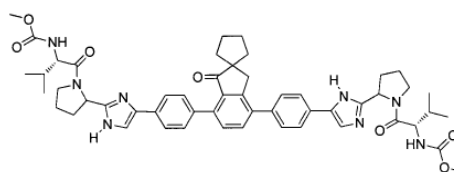
1. 如式 (I) 所示の化合物:



(従属クレーム中に下記例あり)



実施例中の物質例

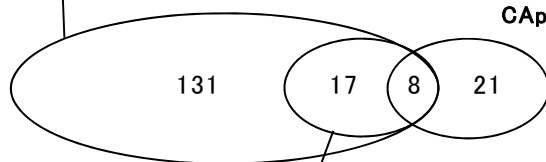


## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

#### ■ MARPAT ファイルのみでヒットした回答 (17 件) の適合性

MARPAT ファイルの回答 (L8)  
(スピロ原子のマッチレベル「クラス」)



CAplus ファイルの回答 (L5)

非特許 : 5 件  
MARPAT に収録なし : 11 件

MARPAT ファイルの回答 (L12)  
(スピロ原子のマッチレベル「原子」)

適合性	レコード件数
○	0 件
△	14 件
×	3 件

- ・ 目的の構造がクレームに含まれ、目的の用途 (ホスホジエステラーゼ阻害剤) も記載されているものを ○ とした。
- ・ 目的の構造が、クレームされている構造のうちの部分構造の一つとして含まれるものを △ とした。
- ・ スピロ結合する環がさらに縮合している場合は × とした。



## B 検索例

### 検索例 1 : 複素環化合物の検索

=> S L8 NOT L12 ← スピロ原子のマッチレベルを「クラス」にしたときのみ <参考>  
 L14 131 L8 NOT L12 ヒットする回答

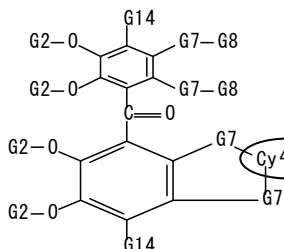
=> S L14 NOT L5 ← L14 のうち, REGISTRY/CaPlus ファイルではヒットしなかった回答  
 13 L5  
 L15 131 L13 NOT L5

=> D BIB FQHIT 6

L15 ANSWER 6 OF 131 MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STM  
 AN 156:638081 MARPAT Full-text  
 TI New triarylmethyl radicals and their preparation and use in NMR improved  
 by Nuclear Dynamic Polarization  
 IN Stephan, Michel; Guenther, Ulrich  
 PA PhosPhoenix Sarl, Fr.  
 SO PCT Int. Appl., 28pp.; Chemical Indexing Equivalent to 156:613415 (FR)  
 CODEN: PIXXD2  
 DT Patent  
 LA French  
 FAN. CNT 2

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2012062975	A1	20120518	WO 2011-FR577	20111026
	FR 2967158	A1	20120511	FR 2010-4364	20101108
PRAI	FR 2010-4364		20101108		
OS	CASREACT 156:638081				

MSTR 3 Assembled



マッチレベルを「クラス」にすることで、スピロ環が一般式グループで収録されているレコードがヒット

元素数レベルを「限定」にすることで、炭素が 1 という条件を満たす記載がある回答のみがヒット

425: any ring <containing 1 or more C,  
 attached through 1 or more C> (opt. substd.)

G7 = 0

Patent location: claim 8

Note: substitution is restricted

RE. CNT 3 THERE ARE 3 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

B 検索例

検索例 1 : 複素環化合物の検索

=> S L12 AND L5

13 L5

L16 8 L12 AND L5

REGISTRY/CAplus, MARPAT ファイル  
両方でヒットした回答

<参考>

L16 ANSWER 5 OF 8 MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN

AN 139:185667 MARPAT [Full-text](#)

TI Inhalant compositions containing heterocyclic compounds and anticholinergics for the treatment of airway diseases

IN Meade, Christopher John Montague; Pairet, Michel; Pieper, Michael P.

PA Boehringer Ingelheim Pharma G.m.b.H. & Co. K.-G., Germany

SO PCT Int. Appl., 63 pp.

CODEN: PIXXD2

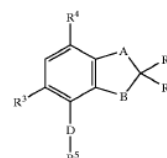
DT Patent

LA German

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION
PI	WO 2003066044	A1	20030814	WO 2003-EP96
	W: AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, ES, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, TJ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW			
	RW: GH, GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TZ, UG, KG, KZ, MD, RU, TJ, T M, AT, BE, BG, CH, C, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PT, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR			
	DE 10205274	A1	20030821	DE 2002-1020
	AU 2003205717	A1	20030902	AU 2003-2057
	US 20030203918	A1	20031030	US 2003-3589
PRAI	DE 2002-10205274		20020208	
	WO 2003-EP961		20030131	

1) A pharmaceutical composition comprising an anticholinergic and a compound of the formula (2)



wherein

R<sup>1</sup> may represent hydrogen, methyl, ethyl, n-butyl, i-butyl, phenyl, 2-ethylphenyl, 2-i-propylphenyl, benzyl, 4-pyridyl, 2-pyridyl, —CO-phenyl, CN or together with R<sup>2</sup> may represent a butylene or pentylene bridge;

R<sup>2</sup> may represent hydrogen, methyl, ethyl, or together with R<sup>3</sup> may represent a butylene or pentylene bridge, or together with R<sup>13</sup> may represent a single bond or a butylene bridge;

R<sup>3</sup> may represent hydrogen;

R<sup>4</sup> may represent methoxy;

R<sup>5</sup> may represent cyclohexyl, phenyl, 3-methoxycarbonylphenyl, 4-methoxycarbonylphenyl, 3-carboxyphenyl, 4-carboxyphenyl, CN, —COOH, —COOMe, —COOEt, 3,5-dichloro-pyridin-4-yl, 4-pyridyl or 4-pyridyl-N-oxide;

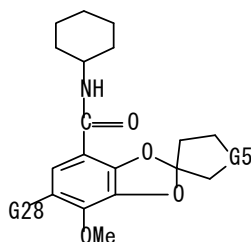
A may represent oxygen or —CH<sub>2</sub>—;

B may represent oxygen or one of the groups —C(R<sup>12</sup>)(R<sup>13</sup>) or —CH(R<sup>15</sup>)—CH(R<sup>17</sup>);

D may represent a group selected from —CH<sub>2</sub>—CH<sub>2</sub>, —CH(Ph)—CH<sub>2</sub>, —CONH, —CO—CH<sub>2</sub>, —CH=CH, —C(Ph)=CH, —C(CR<sup>18</sup>)(CR<sup>19</sup>)—X, —C(R<sup>19a</sup>)=Y, —C=C or phenylene;

\* US20030203918 で確認

MSTR 1 Assembled



Patent location:

claim 1

Note:

and pharmacologically acceptable acid addition salts, solvates, or hydrates

Stereochemistry:

and optical isomers, mixtures, and racemates

RE. CNT 3

THERE ARE 3 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

## B 検索例

参考：回答の経済的な表示方法

- SCAN 表示形式で表示した回答から、下記の流れで目的のレコードを特定することができる。

MARPAT ファイルで、SCAN TI FQHIT 表示形式で回答を出力

↓

検索語料無料の HCAplus ファイルで標題を検索

↓

MARPAT ファイルにクロスオーバー

↓

構造検索の結果と AND 演算

(ヒットした構造をハイライト表示させるため)

- 利用例

=> FILE MARPAT

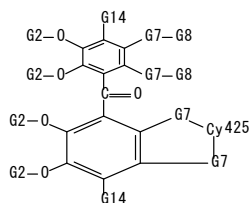
:

=> D SCAN TI FQHIT ← *SCAN TI FQHIT* 表示形式で表示

L15 131 ANSWERS MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN

TI New triarylmethyl radicals and their preparation and use in NMR improved by Nuclear Dynamic Polarization

MSTR 3 Assembled



425: any ring <containing 1 or more C,  
attached through 1 or more C> (opt. substd.)

G7 = 0

Patent location: claim 8

Note: substitution is restricted

:

=> FILE HCAPLUS ← *HCAplus* ファイルに入る

=> S (New triarylmethyl radicals (1W)their preparation (1W) use in NMR improved by Nuclear Dynamic Polarization)/TI ← 標題をコピー&ペーストして /TI で検索

L17 2 NEW TRIARYLMETHYL RADICALS (1W)THEIR PREPARATION (1W)USE IN NMR  
IMPROVED BY NUCLEAR DYNAMIC POLARIZATION/TI

=> FILE MARPAT ← *MARPAT* ファイルに入る

=> S L15 AND L17 ← *HCAplus* ファイルの回答をクロスオーバーし、元の回答とかけ合わせる  
L18 1 L15 AND L17

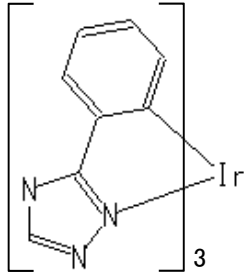
=> D BIB FQHIT

:

## B 検索例

### 検索例 2 : 配位化合物の検索

- 下記のような構造の配位化合物について、REGISTRY/CAplus ファイルで既に調査済みだが、MARPAT ファイルで追加調査を行うことになった。

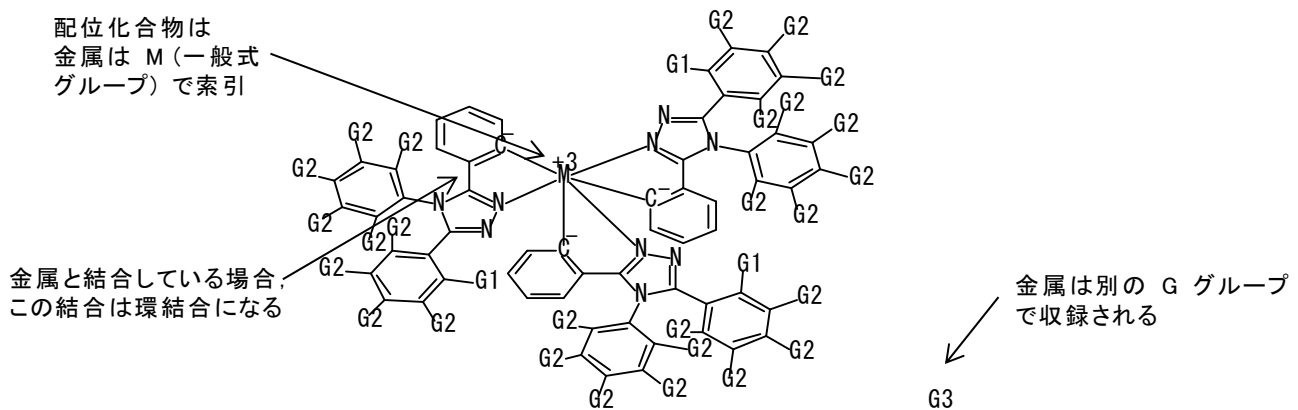


\* 環はこれ以上縮環しない

### ■ MARPAT ファイルでの配位化合物の索引

- ・ 配位子と金属が結合した形で登録されている場合と、分離した形で登録されている場合の 2 つのパターンがある。

#### パターン1 配位子と金属が結合している例



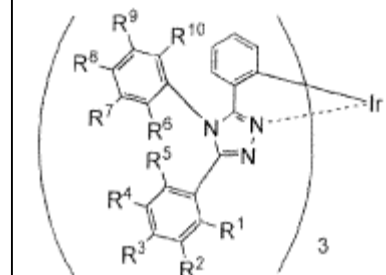
G1 = alkyl <containing 1-6 C> /  
(Specifically claimed: Me) / (Example)

G2 = H / alkyl <containing 1-6 C> /  
(Specifically claimed: Me / Pr-i) /  
Bu-t)

G3 = **Ir**

Patent location: claim 1

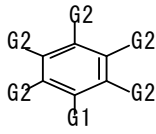
#### 特許中の記載



## B 検索例

### 検索例 2 : 配位化合物の検索

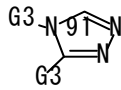
#### パターン 2 配位子と金属が分離している例



G1 = 91

G11 ← 金属は別の G グループで収録される

配位子と金属を結合させた形で構造検索すると、こちらのパターンはヒットしない



G11 = Ir

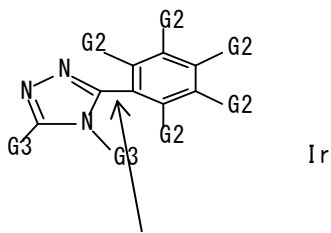
Patent location:

Note:

claim 1

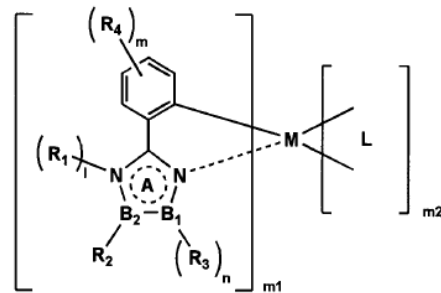
as complexes with g11 ← Note フィールドに錯体であることが記載されている場合もある

#### FQHIT 表示形式での表示



金属と分離している場合、この結合は鎖結合になる

#### 特許中の記載



\* 配位位置が特定されていない場合や配位子の構造の候補が非常に多い場合には、配位子と金属は分離した形で収録される。

## B 検索例

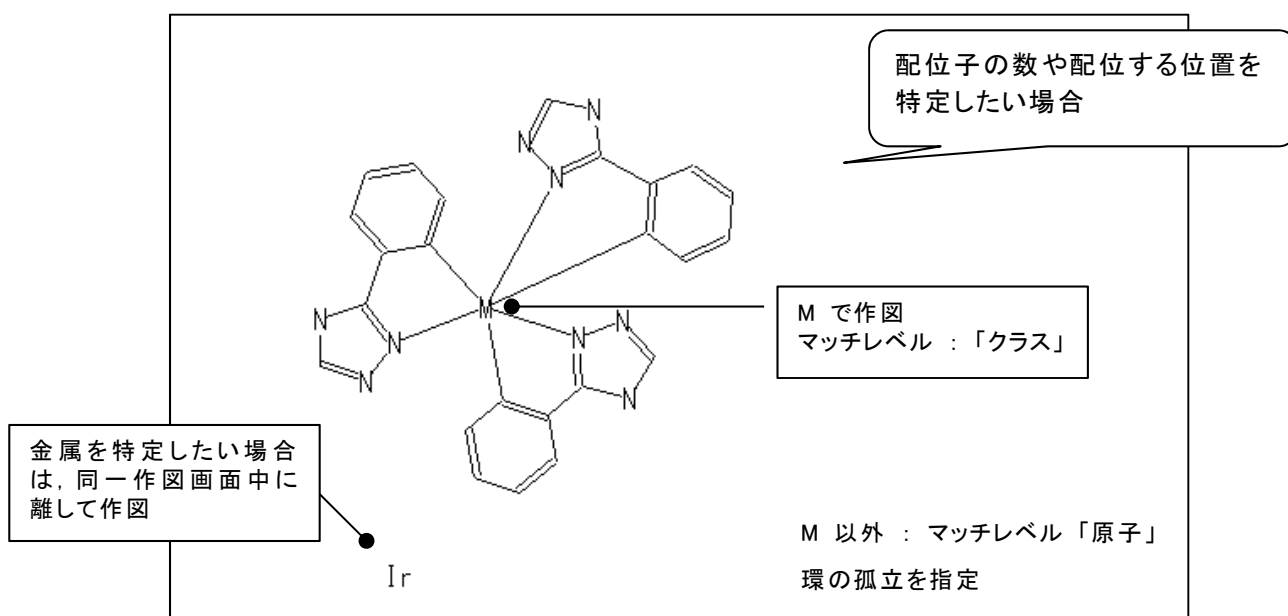
### 検索例 2 : 配位化合物の検索

#### ■ 構造質問式の作図 : 2 つのパターンを別々の構造質問式で検索する場合

##### ・ 作図のポイント

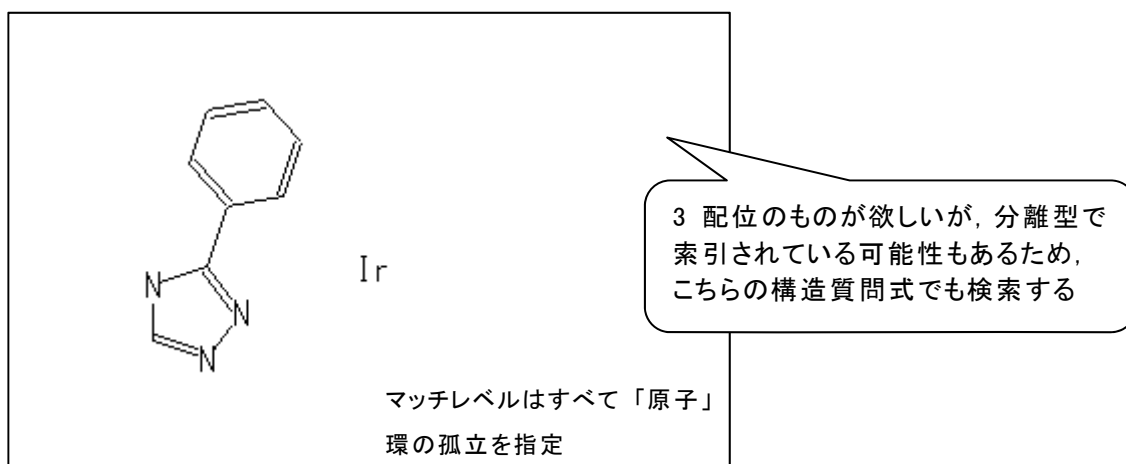
##### - 金属結合型

- ・ 中心金属は必ず一般式グループ記号 M (金属) で作図し, マッチレベルを「クラス」にする.
- ・ 具体的な金属 (今回はイリジウム) は同一作図画面中に離して作図する.



##### - 金属分離型

- ・ 同一作図画面中に配位子と金属を離して作図する.



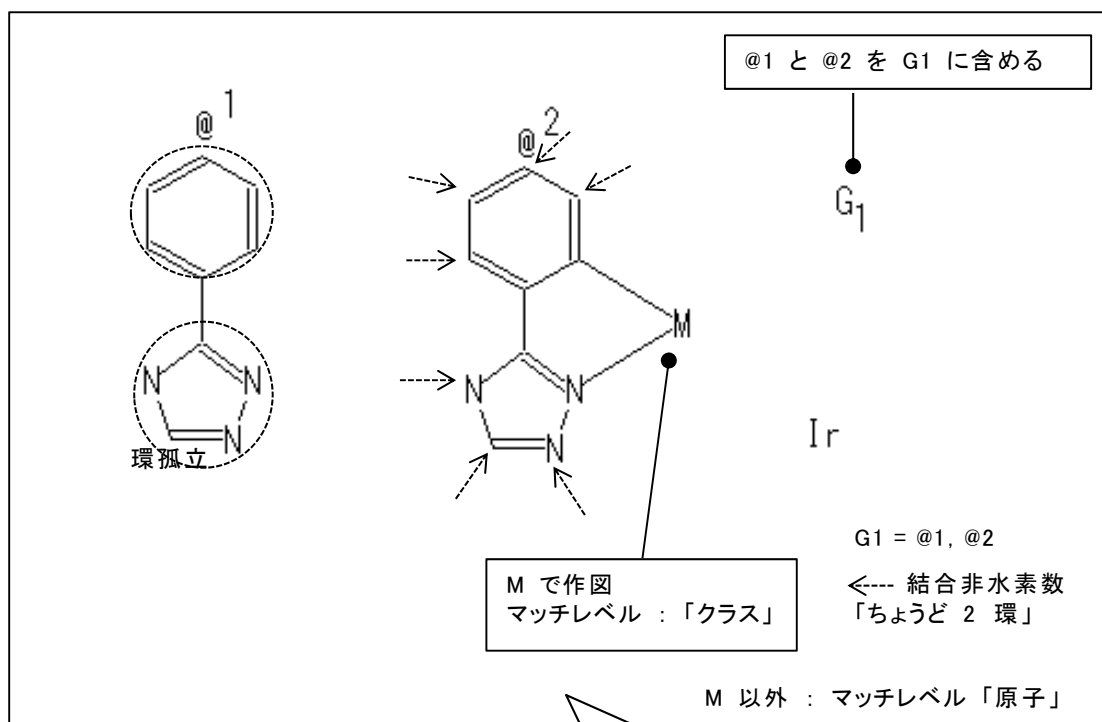
## B 検索例

### 検索例 2 : 配位化合物の検索

#### ■ 構造質問式の作図 : 2 つのパターンを 1 つの構造質問式にまとめる場合

##### ・ 作図のポイント

金属結合型と金属分離型それぞれがヒットするような構造をフラグメントとして作図し、それを G グループに含める。



この例では、金属結合型も配位子の数を 3 配位に限定しないこととする



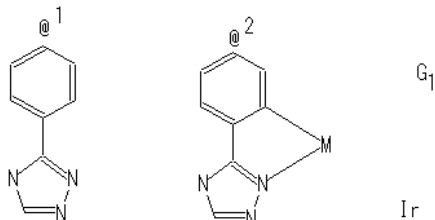
構造検索を 1 回で済ませたいので、今回はこちらの構造質問式を用いることとした。

## B 検索例

### 検索例 2 : 配位化合物の検索

=> FILE MARPAT ← MARPAT ファイルに入る

=>  
Uploading C:\Users\... \STN Express 8.5\Queries\EX2.str ← 構造質問式をアップロード



L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1 ← サンプル検索を実行

SAMPLE SEARCH INITIATED 11:37:50  
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 623 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 623 ITERATIONS 3 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

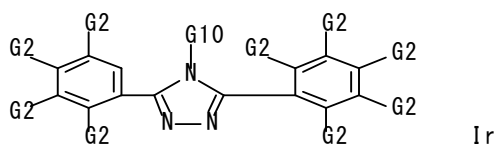
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 10980 TO 13940  
PROJECTED ANSWERS: 3 TO 164

L2 3 SEA SSS SAM L1

=> D SCAN TI FQHIT ← SCAN TI FQHIT 表示形式でヒットしたレコードを確認

L2 3 ANSWERS MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN  
TI Organometallic cyclometalated complexes of Group 9 and Group 10 metals with substituted 1,2,4-triazole and 1,3,4-oxadiazole ligands exhibiting green to blue phosphorescence as components for organic light-emitting devices

**MSTR 1 Assembled**



Patent location: claim 1  
Note: as complexes with G11

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



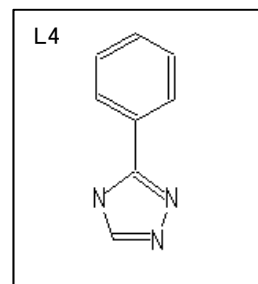
## B 検索例

### 検索例 2 : 配位化合物の検索

=> S L1 FUL ← フルファイル検索を実行  
FULL SEARCH INITIATED 11:38:16  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 11998 TO ITERATE  
  
100.0% PROCESSED 11998 ITERATIONS 65 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01  
  
L3 65 SEA SSS FUL L1

<REGISTRY/CAPLUS ファイルでヒットした回答を除いて表示する> \* 検索の流れは p.46~ を参照

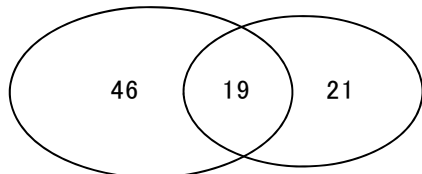
=> FILE CAPLUS ← CAPLUS ファイルに入る  
  
=> ACT EX2CAPLUS/A ← 保存しておいた回答集合を呼び出す  
L4 STR  
L5 ( 452879)SEA FILE=REGISTRY SSS FUL L4  
L6 ( 110)SEA FILE=REGISTRY SPE=ON ABB=ON PLU=ON L5 AND IR/ELS  
L7 ( 1)SEA FILE=REGISTRY SPE=ON ABB=ON PLU=ON 7439-88-5  
L8 ( 39)SEA FILE=CAPLUS SPE=ON ABB=ON PLU=ON L6  
L9 ( 114)SEA FILE=CAPLUS SPE=ON ABB=ON PLU=ON L5/D  
L10 ( 2991)SEA FILE=CAPLUS SPE=ON ABB=ON PLU=ON L7/D  
L11 ( 2)SEA FILE=CAPLUS SPE=ON ABB=ON PLU=ON L9 AND L10  
L12 40 SEA FILE=CAPLUS SPE=ON ABB=ON PLU=ON L8 OR L11



=> FILE MARPAT ← MARPAT ファイルに入る  
  
=> S L12 ← CAPLUS ファイルの回答集合をクロスオーバー  
L13 31 L12

=> S L3 NOT L13 ← MARPAT ファイルの構造検索の結果から REGISTRY/CAPLUS ファイルで  
ヒットした回答を除く  
L14 46 L3 NOT L13

#### MARPAT ファイルの回答 (L3)



#### CAPLUS ファイルの回答 (L12)

非特許 : 0 件  
MARPAT に収録なし : 9 件

B 検索例

検索例 2 : 配位化合物の検索

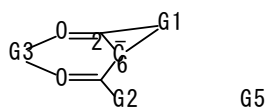
=> D 1-46 BIB FQHIT ← 全件を BIB FQHIT 表示形式で表示

L14 ANSWER 5 OF 46 MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN  
 AN 159:9295 MARPAT [Full-text](#)  
 TI Organometallic complex, light-emitting element, light-emitting device,  
 electronic device, and lighting device  
 IN Inoue, Hideko; Seo, Hiromi; Seo, Satoshi  
 PA Semiconductor Energy Laboratory Co., Ltd., Japan  
 SO U.S. Pat. Appl. Publ., 61pp.  
 CODEN: USXXCO  
 DT Patent  
 LA English  
 FAN. CNT 1

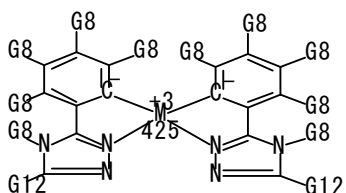
配位子と金属が結合している例  
 (ただし、配位子数は 2)

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	US 20130137866	A1	20130530	US 2012-13688688	20121129
	JP 2013136567	A	20130711	JP 2012-260852	20121129
PRAI	JP 2011-261289		20111130		
OS	CASREACT 159:9295				

MSTR 1



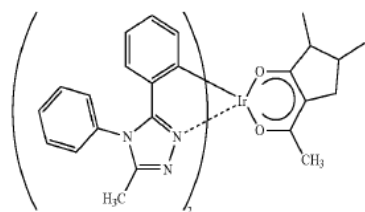
G3 = 425



G5 = Ir

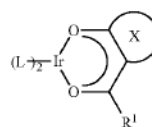
Patent location: claim 1

例示物質の中に下記の構造あり



What is claimed is:

1. An organometallic complex having a structure represented by General Formula (G1),

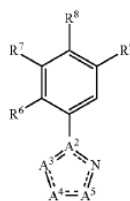


(G1)

wherein:

L represents a bidentate aromatic ligand and has at least a bond between carbon of an aromatic ring in the aromatic ligand and Ir,

3. The organometallic complex according to claim 1, wherein the aromatic ligand is represented by any one of General Formulae (L1) to (L3),



(L2)

wherein:

R<sup>6</sup> to R<sup>9</sup> separately represent hydrogen, a substituted or unsubstituted alkyl group having 1 to 4 carbon atoms, or a substituted or unsubstituted phenyl group, and

A<sup>2</sup> to A<sup>6</sup> separately represent oxygen, sulfur, nitrogen, sp<sup>2</sup> hybridized nitrogen bonded to any of an alkyl group having 1 to 4 carbon atoms and a phenyl group, sp<sup>2</sup> hybridized carbon bonded to hydrogen, or sp<sup>2</sup> hybridized carbon bonded to any of an alkyl group having 1 to 4 carbon atoms and a phenyl group.

## B 検索例

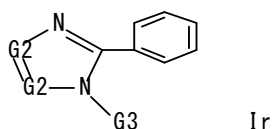
### 検索例 2 : 配位化合物の検索

L14 ANSWER 26 OF 46 MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN  
 AN 150:179594 MARPAT [Full-text](#)  
 TI Organic electroluminescence (EL) devices with high luminous efficiency and suppressed dark spot, and display devices and lamps having them  
 IN Yasukawa, Noriko; Kato, Eisaku  
 PA Konica Minolta Holdings, Inc., Japan  
 SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 105pp.  
 CODEN: JKXXAF  
 DT Patent  
 LA Japanese  
 FAN. CNT 1

配位子と金属が分離している例

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	JP 2009021336	A	20090129	JP 2007-182063	20070711
	JP 5194596	B2	20130508		
	JP 2013084965	A	20130509	JP 2012-257480	20121126
PRAI	JP 2007-182063		20070711		

MSTR 1 Assembled

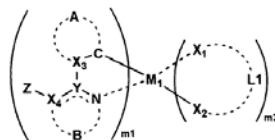


G2 = CH (opt. substd.) / N  
 Patent location: claim 1  
 Note: as complexes with G5

【請求項 1】  
 構成層として少なくとも陽極、発光層、電子輸送層及び陰極を有し、発光層には少なくともホスト化合物と金属錯体を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記発光層が下記一般式 (A) で表される金属錯体を含有し、且つ前記電子輸送層が下記一般式 (1) で表される化合物を含有することを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1】

一般式(A)



(一般式 (A) 中、 $X_1$  は窒素原子または炭素原子を表し、 $Z$  は炭化水素環基または複素環基を表し、 $X_3$  及び  $Y$  は炭素原子または窒素原子を表し、 $A$  は  $X_3-C$  と共に 5~6 員の炭化水素環または複素環を形成するのに必要な原子群を表す。 $B$  は  $-C(R_{01})=C(R_{02})-$ 、 $-N=C(R_{02})-$ 、 $-C(R_{01})=N-$  または  $-N=N-$  を表し、 $R_{01}$  及び  $R_{02}$  は水素原子または置換基を表す。 $X_1-L1-X_2$  は 2 座の配位子を表し、 $X_1$ 、 $X_2$  は各々独立に炭素原子、窒素原子または酸素原子を表す。 $L1$  は  $X_1$ 、 $X_2$  と共に 2 座の配位子を形成する原子群を表す。 $m1$  は 1、2 または 3 の整数を表し、 $m2$  は 0、1 または 2 の整数を表すが、 $m1+m2$  は 2 または 3 である。中心金属である  $M1$  は元素周期表における 8~10 族の金属を表す。)

【請求項 5】

前記一般式 (A) の  $A$  と共に形成される環がベンゼン環であることを特徴とする請求項 1~4 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 6】

前記一般式 (A) で表される金属錯体が同一の配位子のみで構成されることを特徴とする請求項 1~5 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 7】

前記一般式 (A) において、 $M1$  がイリジウムであることを特徴とする請求項 1~6 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

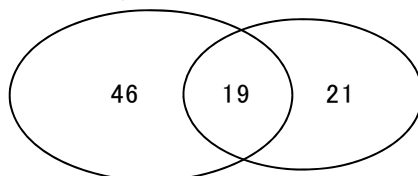
$m1 = 3, m2 = 0$  のとき目的の配位化合物になる

## B 検索例

### 検索例 2 : 配位化合物の検索

#### ■ MARPAT ファイルのみでヒットした回答 (46 件) の適合性

##### MARPAT ファイルの回答 (L3)



##### CAplus ファイルの回答 (L12)

非特許 : 0 件

MARPAT に収録なし : 9 件

適合性	レコード件数
○	10 件
△	10 件
×	26 件

- ・ 目的の配位子が 3 配位となる条件がクレームに含まれる場合は ○ とした.
- ・ 他の配位子との組み合わせでクレームされている場合は △ とした.
- ・ 配位する位置が異なる場合や, 2核錯体などは × とした.

## B 検索例

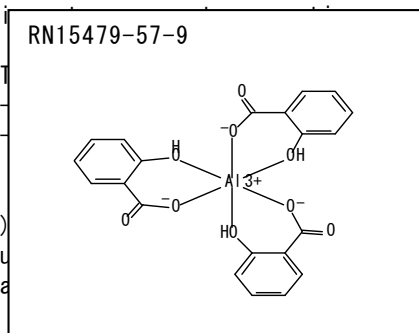
参考 : CAplus ファイルでの配位化合物の索引

- CAplus ファイルでは、配位化合物は CAS 登録番号で索引されている場合がほとんどである。しかし、原報の記載により、配位子と金属の塩の CAS 登録番号で索引されたり、配位子と金属の CAS 登録番号 + D (非特定誘導体) で索引される場合もある。

<例> サルチル酸とアルミニウムの配位化合物の例

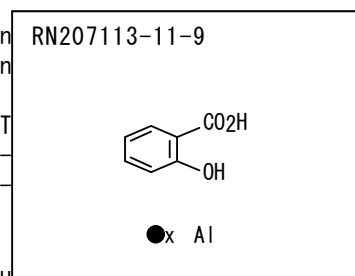
- ・ 配位化合物の CAS 登録番号で索引されている例

AN 2004:305433 CAPLUS [Full-text](#)  
 DN 140:341891  
 TI Additive for stabilizing and promoting natural gas hydrate formation rate and preventing bacterial spoilage of water during transporting  
 PATENT NO. KIND DATE APPLICAT  
 PI JP 2004115613 A2 20040415 JP 2002-  
 IT **15479-57-9**, Aluminum salicylate  
 RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses)  
 (additive for stabilizing and promoting natural gas hydrate formation rate and preventing bacterial spoilage of water during transporting)



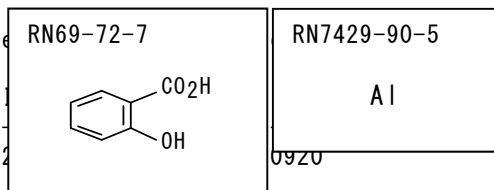
- ・ 配位子と金属の塩の CAS 登録番号で索引されている例

AN 1998:268384 CAPLUS [Full-text](#)  
 DN 129:3855  
 TI Adjuvant, in particular as an emulsion, containing a metal cation and a sympathomimetic compound, and vaccine composition containing it  
 PATENT NO. KIND DATE APPLICAT  
 PI WO 9817311 A1 19980430 WO 1997-  
 IT **207113-11-9**  
 RL: THU (Therapeutic use); BIOL (Biological studies)  
 (adjuvant emulsion, with trivalent metal cation and sympathomimetic compound, and vaccine composition containing it)



- ・ 配位子と金属の CAS 登録番号 + D で索引されている例

AN 2003:259981 CAPLUS [Full-text](#)  
 DN 138:294888  
 TI Toners for image formation and method for image formation  
 PATENT NO. KIND DATE APPLICAT  
 PI JP 2003098858 A 20030404 JP 2001-2  
 IT **69-72-7D**, Salicylic acid, complex with metal ion, 98-48-6, m-Benzenedisulfonic acid **7429-90-5D**, Aluminum, complex with salicylic acid  
 RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)  
 (toners for image formation)



## B 検索例

参考 : REGISTRY/CAplus ファイルでの配位化合物の検索

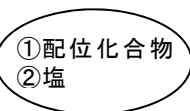
### ■ 検索方針

- ・ 今回は, REGISTRY ファイルで, ①配位化合物, ②塩, ③配位子のみ の 3 種類を 1 回の構造検索でヒットさせることができるよう構造質問式を作図する.
- そのため, 配位子のみ作図する. その際, ①配位化合物もヒットさせるため, 結合属性を変更する.
- ①配位化合物をヒットさせるため, 環の孤立は指定しない. 結合非水素数を利用すると, 金属と配位する箇所以外の縮環を禁止できる.
- ②塩や③配位子のみは作図画面に金属 (Ir) を描くとヒットしないので描かない.

### REGISTRY



Ir/ELS で限定



クロスオーバー

### CAplus

①配位化合物  
②塩 で索引

/D をつけてクロスオーバー

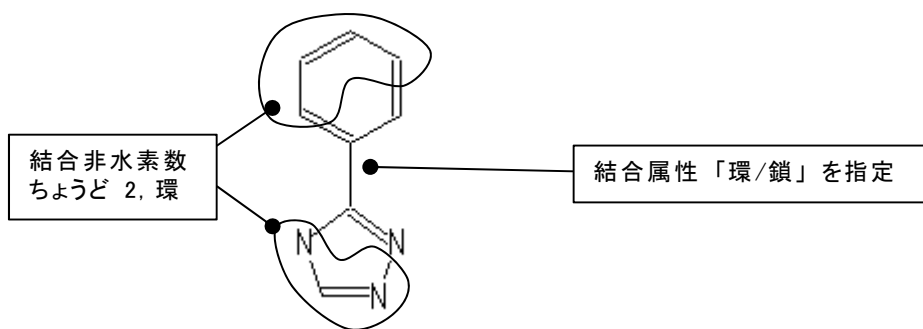
③配位子のみ + D で索引  
(イリジウム + D が同時に  
索引されているレコードに限定)

### ■ 検索の流れ

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=>

Uploading C:\¥...¥STN Express 8.5¥Queries¥EX2reg.str ← 構造質問式をアップロード



L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1 ← サンプル検索  
L2 50 SEA SSS SAM L1

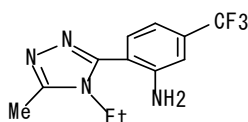
=> S L1 FUL ← フルファイル検索  
L3 452879 SEA SSS FUL L1

## B 検索例

参考 : REGISTRY/CAplus ファイルでの配位化合物の検索

=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式で回答をチェック

L3 452879 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN  
 IN Benzenamine, 2-(4-ethyl-5-methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)-5-(trifluoromethyl)-  
 MF C12 H13 F3 N4



3-フェニル 1,2,4-トリアゾールを含む物質を  
 まとめて検索

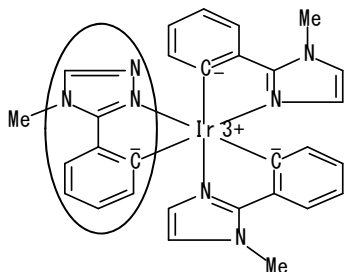
\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

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

=> S L3 AND IR/ELS ← イリジウムを含む物質に限定  
 L4 110 L3 AND IR/ELS

=> D SCAN

L4 110 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN  
 IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED  
 MF C29 H26 Ir N7  
 CI CCS



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

=> S 7439-88-5 ← イリジウムの CAS 登録番号を検索  
 L5 1 7439-88-5

=> D SCAN

L5 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN  
 IN Iridium  
 MF Ir  
 CI COM

Ir

\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

## B 検索例

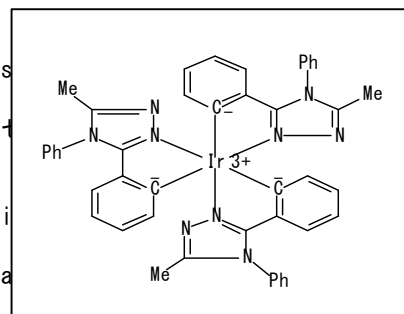
参考 : REGISTRY/CAPLUS ファイルでの配位化合物の検索

=> FILE CAPLUS ← CAPLUS ファイルに入る

=> S L4 ← L4 をクロスオーバー (配位化合物または塩として索引されている  
L6 39 L4 文献がヒット)

=> D SCAN TI HITIND

L6 39 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2014 ACS on STN  
TI Organic electroluminescent materials, components, and dis  
lighting devices  
TIJP 有機エレクトロルミネッセンス素子、有機エレクトロルミネッセ  
示装置及び照明装置 [原題]  
IT **878168-98-0**  
RL: PRP (Properties); TEM (Technical or engineered materi  
(Uses)  
(organic electroluminescent materials and components a  
and lighting devices)



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

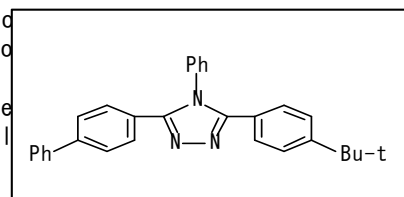
=> S L3/D ← 配位子の CAS 登録番号 + D で索引されている文献  
L7 114 L3/D

=> S L5/D ← イリジウムの CAS 登録番号 + D で索引されている文献  
L8 2990 L5/D

=> S L7 AND L8 ← 配位子とイリジウム両方が D 付きで索引されているもの限定  
L9 2 L7 AND L8

=> D SCAN TI HITIND

L9 2 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2014 ACS on STN  
TI Organic electroluminescent device employing organic layer containing at  
least organic light emitting layer comprising mixture media of  
host/phosphorescent dopant having controlled electron mobility  
TIJP /のホストの蓄光のドーパントの有のコントロールされた電子伝送速度の混合物媒  
体を含む少なくとも有機発光層を含む有機的な層を使う有機電界発光デバイス  
[機械翻訳]  
IT **7439-88-5D**, Iridium, complexes 7440-06-4D, Platinum, co  
7440-27-9D, Terbium, complexes 7440-53-1D, Europium, co  
58328-31-7D, derivs. **150405-69-9D**, complexes  
RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Use  
(organic electroluminescent device employing organic l  
organic light emitting layer comprising mixture media  
dopant having controlled electron mobility)



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

=> S L6 OR L9 ← L6 と L9 の回答をまとめる  
L10 40 L6 OR L9

=> SAVE L10 EX2CAPLUS/A ← 回答を保存する (P. 41 で使用)

:



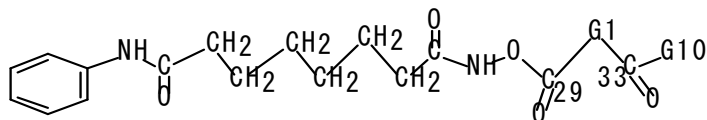
## B 検索例

参考 : MARPAT ファイルでの塩の収録

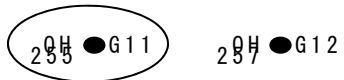
■ MARPAT ファイルでは, 塩は下記のような形式で収録されている.

AN 156:34833

MSTR 1

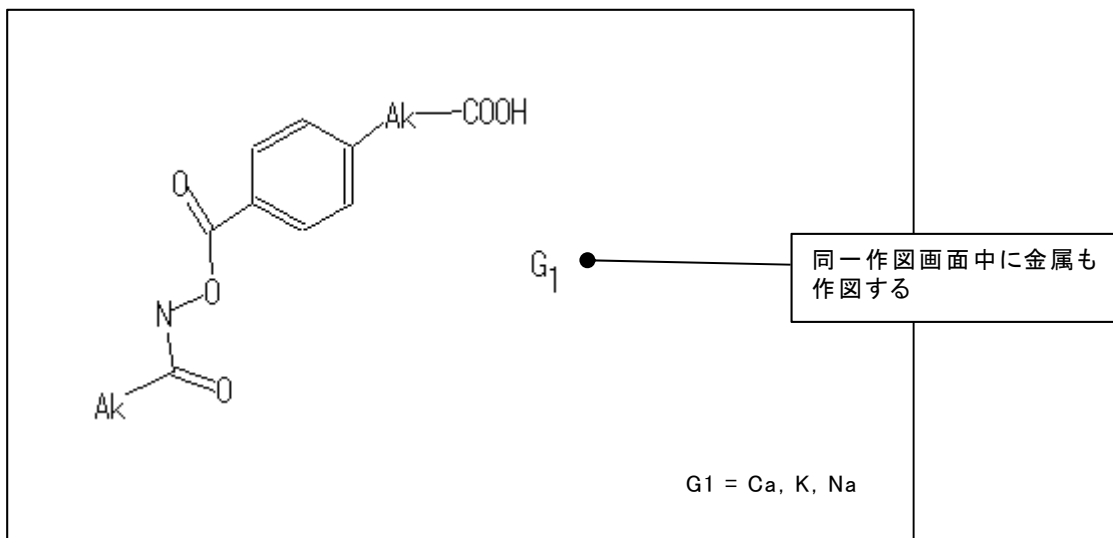


G10 = OH / 255 / 257



G11 = R <"metal"> / Na / K / Ca / Mg / Zn / Fe / Al

■ 作図例



## B 検索例

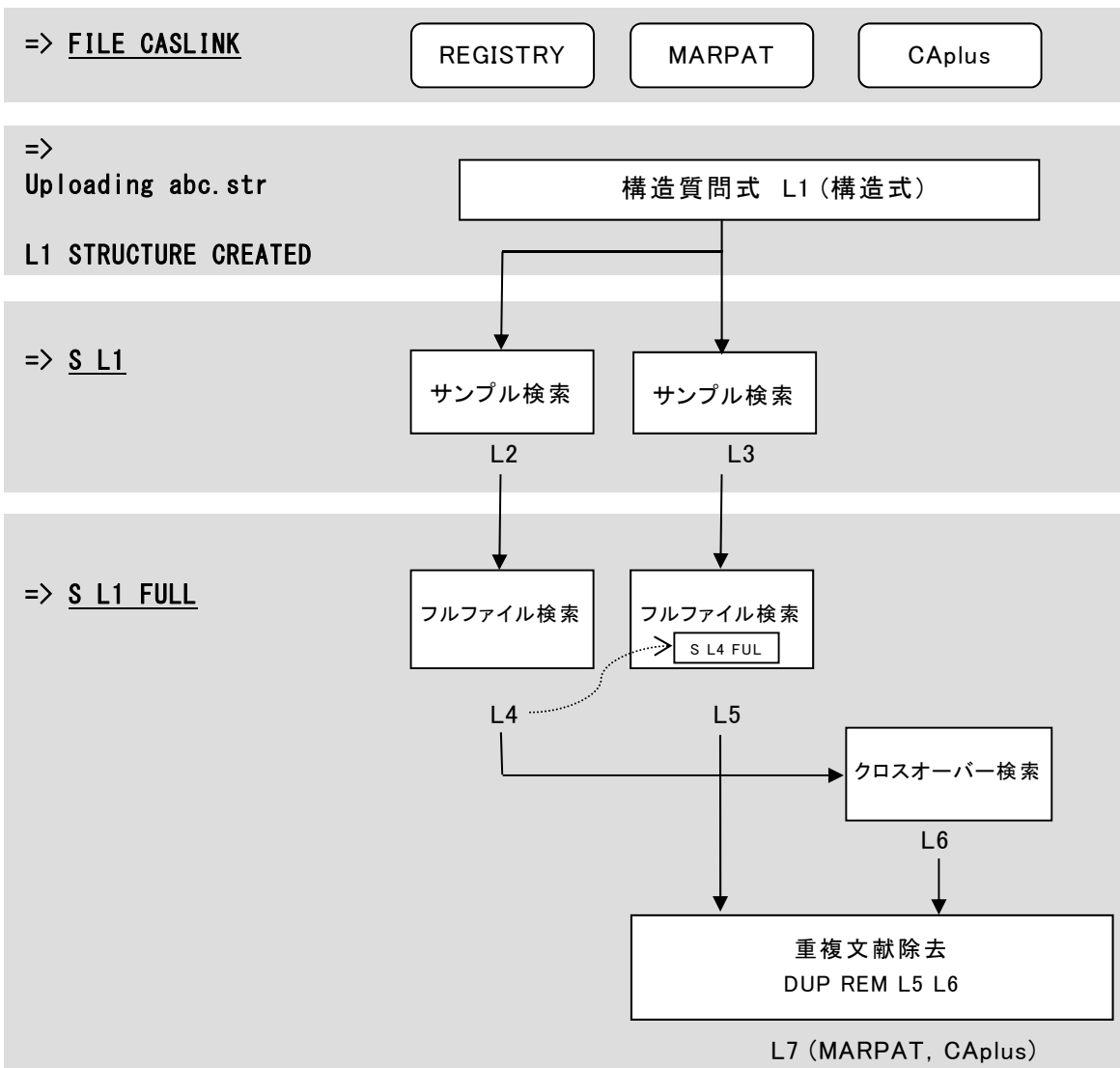
参考 : CASLINK

■ CASLINK は STN のファイルクラスターのひとつで、REGISTRY、CAplus、MARPAT ファイルのマルチファイル環境に入る。REGISTRY/CAplus と MARPAT の連続検索がスムーズに行えるような特別な仕組みが組み込まれている。

・ CASLINK を利用すると、一回の SEARCH コマンドで以下の検索が自動的に実行される。(フルファイル検索の場合)

- ① REGISTRY ファイルでの構造検索
- ② MARPAT ファイルでの構造検索
- ③ REGISTRY ファイルの回答セットによる CAplus ファイルでのクロスオーバー検索
- ④ MARPAT, CAplus ファイル間の重複文献除去

\* サンプル検索の場合は ①② のみ実行され、クロスオーバー検索や重複除去は実行されない。



B 検索例

参考 : CASLINK

・ 検索の流れ

=> **FILE CASLINK**

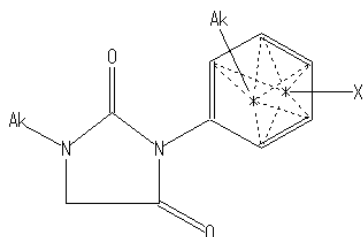
← CASLINK に入る

```
FILE 'CAPLUS' ENTERED AT 18:30:23 ON 04 NOV 2013
:
FILE 'MARPAT' ENTERED AT 18:30:23 ON 04 NOV 2013
:
FILE 'REGISTRY' ENTERED AT 18:30:23 ON 04 NOV 2013
:
```

CAplus, REGISTRY, MARPAT の  
マルチファイル環境に入る

=>

Uploading C:\Users\¥...¥Documents¥STN Express 8.5¥Queries¥48.str



REGISTRY・MARPAT ファイル両方で共通に  
使用できる構造質問式をあらかじめ作図する

L1 STRUCTURE UPLOADED

← 構造質問式をアップロードする

=> **S L1**

← サンプル検索

```
S L1 SSS SAM FILE=REGISTRY
SAMPLE SEARCH INITIATED 18:31:05 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 5795 TO ITERATE
```

100.0% PROCESSED 5795 ITERATIONS  
SEARCH TIME: 00.00.01

23 ANSWERS

```
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
                        BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 111335 TO 120465
PROJECTED ANSWERS:   173 TO 747
```

REGISTRY ファイルのサンプル検索

L2 23 SEA SSS SAM L1

```
S L2 SSS SAM FILE=MARPAT
SAMPLE SEARCH INITIATED 18:31:06 FILE 'MARPAT'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 805 TO ITERATE
```

100.0% PROCESSED 805 ITERATIONS  
SEARCH TIME: 00.00.01

11 ANSWERS

```
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
                        BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 14425 TO 17775
PROJECTED ANSWERS:   21 TO 419
```

MARPAT ファイルのサンプル検索

L3 11 SEA SSS SAM L1

\* サンプル検索の場合はクロスオーバー検索は  
実行されず REGISTRY ファイルと MARPAT  
ファイルのサンプル検索のみが実行される

## B 検索例

参考 : CASLINK

=> **S L1 FUL** ← フルファイル検索

S L1 SSS FUL FILE=REGISTRY  
FULL SEARCH INITIATED 18:34:12 FILE 'REGISTRY'  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 118126 TO ITERATE

REGISTRY ファイルのフルファイル検索

465 ANSWERS

100.0% PROCESSED 118126 ITERATIONS  
SEARCH TIME: 00.00.01

L4 465 SEA SSS FUL L1

S L4 SSS FUL FILE=MARPAT  
FULL SEARCH INITIATED 18:34:13 FILE 'MARPAT'  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 16632 TO ITERATE

MARPAT ファイルのフルファイル検索

237 ANSWERS

100.0% PROCESSED 16608 ITERATIONS  
SEARCH TIME: 00.00.02

L5 237 SEA SSS FUL L1

S L4 FILE=CAPLUS  
L6 41 FILE CAPLUS

REGISTRY → CAplus のクロスオーバー

SET DUPORDER FILE  
SET COMMAND COMPLETED

DUP REM L5 L6  
PROCESSING COMPLETED FOR L5  
PROCESSING COMPLETED FOR L6  
L7 256 DUP REM L5 L6 (22 DUPLICATES REMOVED)

重複除去 (L5 の MARPAT ファイルが優先)

ANSWERS '1-237' FROM FILE MARPAT ← MARPAT ファイルの回答  
ANSWERS '238-256' FROM FILE CAPLUS ← CAplus ファイルの回答



- ・ 入力するコマンドは太字部分のみ
- ・ CAplus ファイルと MARPAT ファイルの重複除去も自動で実行される

\* CASLINK については、下記資料参照.

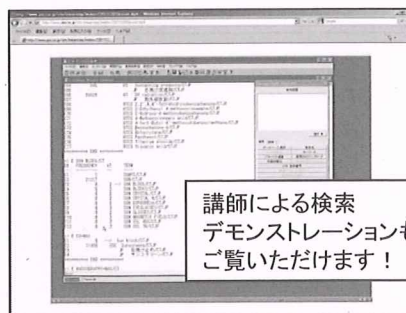
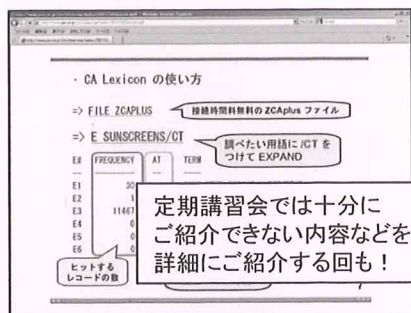
- ・ リフレッシュセミナー「MARPAT ファイル - 検索テクニック」C 章  
<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-marpat.pdf>
- ・ おさらいセミナー「MARPAT ファイル」  
<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/osr-marpat.pdf>



# STN<sup>®</sup> インターネットセミナー

## ■ インターネットセミナーとは？

インターネット経由で視聴していただく、WebEx を利用したオンライン形式のセミナーです。  
講習会当日は、講師の PC 画面をインターネット経由でご覧いただきながら、音声で解説をお聞きいただけます。  
ご質問は、チャット形式で受け付けます。



今後も、初心者向けの入門セミナーや、上級者向けのテーマ別セミナーなど様々な内容で開催致します！  
過去のセミナーの録画セッションや今後の開催予定を掲載しておりますので、ぜひ弊協会ホームページをご覧ください！ (<http://www.jaici.or.jp/webex/e-seminar.html>)

# STN<sup>®</sup> e-ラーニング

## ■ e-ラーニングとは？

STN の検索方法をお手元の PC で学ぶことができる、ビデオ形式/ブラウザ形式の教材です。  
定期講習会に参加できない方の自習ツールとして、また社内教育などにぜひご活用ください。

ビデオ形式教材		
STN 基本操作		
テーマ	時間	サイズ
STN コマンド検索の基本	約 10 分	559 MB
キーワード検索のポイント	約 9 分	410 MB
演算子の利用	約 11 分	525 MB
検索フィールドを指定した検索	約 8 分	371 MB
回答の表示	約 8 分	458 MB
料金・検索経費の確認	約 12 分	635 MB
回答の保存と呼び出し	約 10 分	464 MB

ブラウザ形式教材	
基本操作 コマンド入門	<ul style="list-style-type: none"> <li>STN Express での検索とセッション記録の保存</li> <li>STN コマンド入門 ・ STN の演算子とランクジョイント記号</li> <li>回答セット、質問式の保存</li> </ul>
文献検索	<ul style="list-style-type: none"> <li>複数の検索語を用いた文献検索 ・ 網羅的あるいは適合性の高い検索</li> <li>著者名の検索 ・ 所属機関・特許出願人の検索</li> </ul>
物質検索	<ul style="list-style-type: none"> <li>CAS 登録番号検索 ・ 化学物質名検索 (上級)</li> <li>化学物質名検索 ・ 化学物質名検索 (上級)</li> <li>完全一致検索とファミリー検索 ・ 部分構造検索</li> </ul>
反応検索	<ul style="list-style-type: none"> <li>構造作図入門 ・ 構造作図画面の詳細設定</li> <li>原子と結合 ・ 環構造 ・ テンプレートを利用した作図</li> <li>可変原子 ・ 環のグループ ・ 可変置換位置 (VPA)</li> <li>グループ ・ 複数の結合位置があるグループ</li> <li>環の孤立化、結合の種類、置換基の有無</li> </ul>
反応検索	<ul style="list-style-type: none"> <li>反応質問式の作図</li> </ul>

\* 教材の再生には最新版の Adobe Flash Player が必要です。  
Flash Player は無料でダウンロードできます。

今後も定期的に教材を追加していく予定です！ぜひご活用ください！  
(<http://www.jaici.or.jp/stn/elearning/index.html>)

# JAICI

化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル  
TEL: 0120-003-462  
E-mail: support@jaici.or.jp