

STNNews

CASREACT

特徴的な触媒を用いる反応の検索 2

REGISTRY ファイル

文献情報を使った絞り込み 8

Vol.
35
秋号

CNFULL ファイル	12
DEFULL ファイル	12
EMBASE ファイル	12
PatentPak	12
STNext	13
STN 新プラットフォーム	14
ホームページの資料掲載のお知らせ	15
STN 講習会	15
PatentPak 明細書中の物質記載位置を瞬時に把握	16
スタッフ紹介	18
ひとこと広場	19
2019 特許・情報フェア&コンファレンス 出展のお知らせ	20

CASREACT

特徴的な触媒を用いる反応の検索

「有機分子触媒」は、これまでの金属触媒と異なり有機低分子化合物を触媒として用いたもので、特に不斉合成反応に触媒として用いられる光学活性な有機分子を指します。有害な金属廃棄物を排出せず、環境負荷の少ない不斉触媒として近年注目を集めています。有機分子触媒の最初の報告は1970年代前半のプロリンを触媒とする分子内環化反応に遡りますが、2000年に報告された、同じくプロリンを触媒とした分子間のアルドール反応の論文をきっかけに多くの研究者が研究に参入し、急速に発展しつつある分野です。

今回は、有機分子触媒の検索を例に、CASREACT ファイルで、特徴的な触媒を用いた反応を検索する方法をご紹介します。

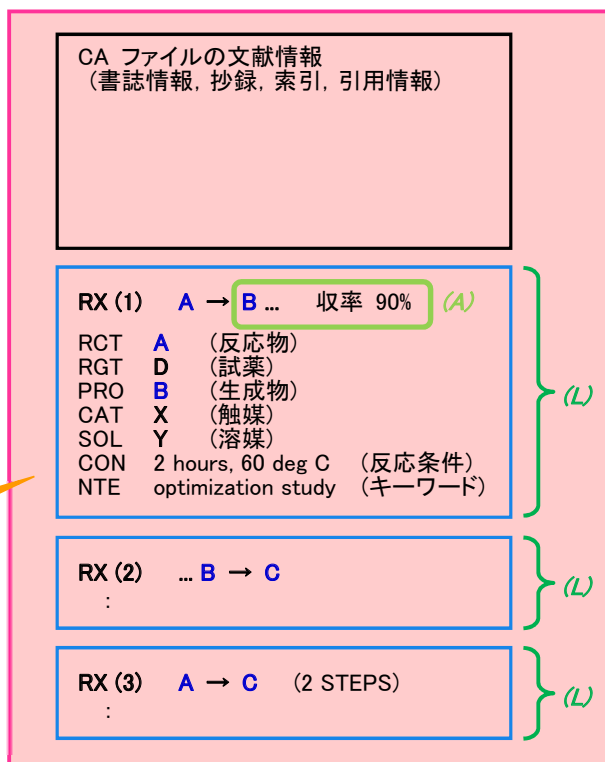
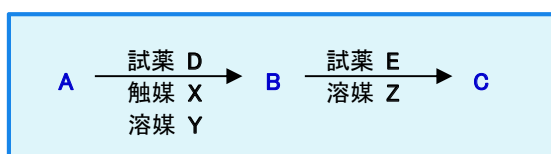
■ CASREACT ファイルのレコード構成

CASREACT ファイルは、有機化学反応を収録するデータベースです。当ファイルには CA ファイル収録対象の雑誌論文、特許から合成的に意義のある反応が収録されます。

CASREACT ファイルのレコードには CAplus/CA ファイルと同じ情報（書誌情報、抄録、索引）と、CASREACT ファイル独自の反応情報を収録しています。レコード構成は文献単位、すなわち「1レコード = 1文献」で、1レコード中に複数の反応を含む場合があります。文献中に多段階反応が記載されていた場合は、反応物と生成物のどの組み合わせでも検索できるように、一段階および多段階の反応を収録しています。各反応には試薬、触媒、溶媒を含めたすべての反応関与物質が索引されており、さらに原文献に記載されていれば収率や反応条件、反応に関するキーワードも収録されています。

CASREACT ファイル

原報中の反応



多段階反応のすべての反応を収録!

反応に関与するすべての物質を索引!

(L) で同一反応中、(A) で生成物と収率をリンクして検索可能!

■ CASREACT ファイルの検索

CASREACT ファイルでは、反応関与物質の CAS RN® (CAS 登録番号)、反応質問式、官能基用語から反応を検索できます。

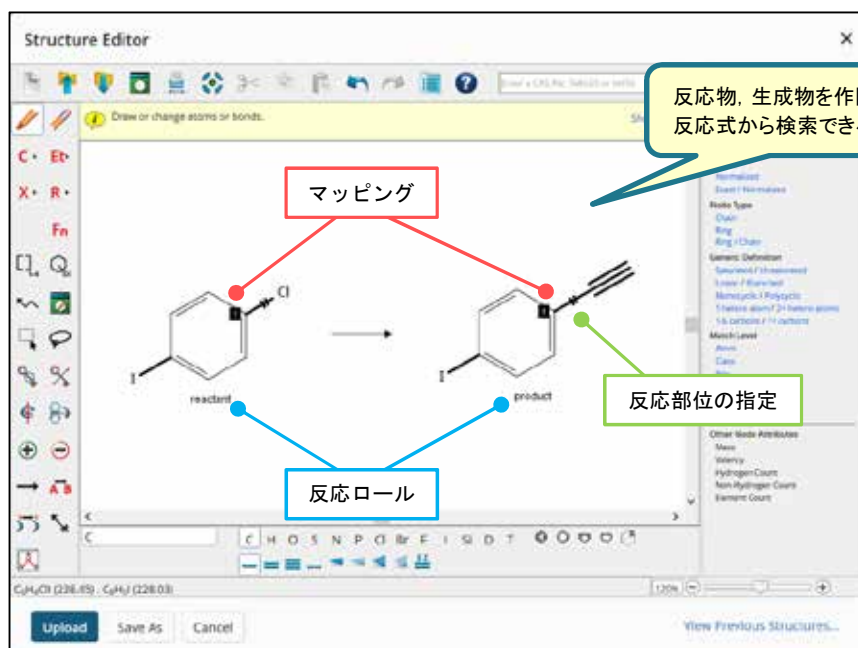
◆ CAS 登録番号 (CAS RN®) 検索：CAS RN® もしくは REGISTRY ファイルの L 番号と反応ロールを組み合わせた検索

=> S 75-05-/8/RRT (L) 3102-33-8/PRO
=> S L1/PRO (* L1 は REGISTRY ファイルの回答集合)

/RCT	反応物 (Reactant)	/RRT	反応物または試薬 (Reactant or Reagent) (/RCT, RGT)
/RGT	試薬 (Reagent)		
/PRO	生成物 (Product)		
/NPRO	生成物以外の物質 (NonProducts) (/RCT, RGT, SOL, CAT)		
/SOL	溶媒 (Solvent)		
/CAT	触媒 (Catalyst) *ANY/CAT：触媒反応に限定		

溶媒, 触媒は, CAS RN®
からのみ検索可能

◆ 反応質問式による構造検索



=> S L# 検索タイプ 検索範囲

◆ 官能基検索：反応関与物質の官能基の名称から検索

=> S KETONES/FG.RXN (S) SECONDARY ALCOHOL/PRO (L) LACTONE/FG.NON
(ラクトン存在下でケトンが第二級アルコールに還元する反応)

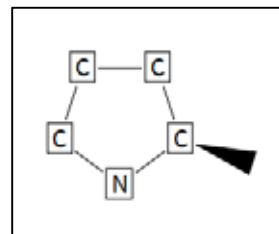
/FG.RXN	反応した官能基
/FG.FORM	生成した官能基
/FG.NON	反応しない官能基

■ 検索例：プロリン誘導体（配列を除く）を有機分子触媒として用いる、炭素-炭素二重結合への立体選択的付加反応で、収率が 70% 以上の反応を検索する。



検索のポイント

- ・ CASREACT ファイルでは、触媒は CAS RN® で検索します。まず REGISTRY ファイルでプロリン誘導体を検索し、回答の L 番号を CASREACT ファイルにクロスオーバーします。
 - －今回は、プロリンのカルボン酸部位を炭素で作図し、ピロリジン部位は Lock Atoms で置換を禁止します（下図）
 - －金属を含む物質は除きます（金属のスクリーン 1918 を利用）
 - －単成分物質に限定します（2 成分以上のスクリーン 2127 を利用）
 - －クロスオーバー検索では /CAT で触媒に限定します
- ・ 炭素-炭素二重結合への付加反応は、CASREACT ファイルで反応検索します。
 - －クロスオーバー検索結果を母集合としてサブセット検索を行います
- ・ 構造検索の結果と収率は (A) 演算子でリンクさせます。
- ・ 立体選択的反応は NTE フィールドの語句で限定します。



● REGISTRY ファイルの検索

```

=> FILE REGISTRY                               ← REGISTRY ファイルに入る
=>
Uploading structure file: 2019_0101_Structure   ← 構造質問式をアップロード
:
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2127                                     ← 2 成分以上のスクリーンを作成
L2 SCREEN CREATED

=> SCR 1918                                     ← 金属のスクリーンを作成
L3 SCREEN CREATED

=> S L1 NOT (L2 OR L3)                          ← 金属を含まない単成分物質に限定してサンプル検索
:
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
                        BATCH  **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:  14999526 TO 15100074
PROJECTED ANSWERS:     222583 TO 235417

L4 50 SEA SSS SAM L1 NOT (L2 OR L3)

=> S L1 NOT (L2 OR L3) FULL                     ← フルファイル検索
:
L5 228537 SEA SSS FUL L1 NOT (L2 OR L3)

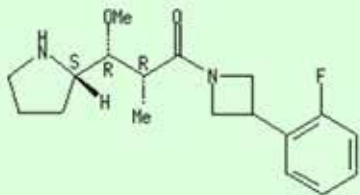
=> S L5 NOT SEQUENCE/FS                       ← 配列を除く
L6 65196 L5 NOT SEQUENCE/FS
  
```

STNext は構造検索のシステム制限値が 1 億件に緩和されたため Complete する

=> D_SCAN

L6 65196 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2019 ACS on STN
 IN 1-Propanone, 1-[3-(2-fluorophenyl)-1-azetidiny]-3-methoxy-2-methyl-3-(2S)-
 2-pyrrolidinyl-, (2R,3R)-
 MF C18 H25 F N2 O2
 CI COM

Absolute stereochemistry.



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

- CASREACT ファイルにクロスオーバー検索

=> FILE_CASREACT

← CASREACT ファイルに入る

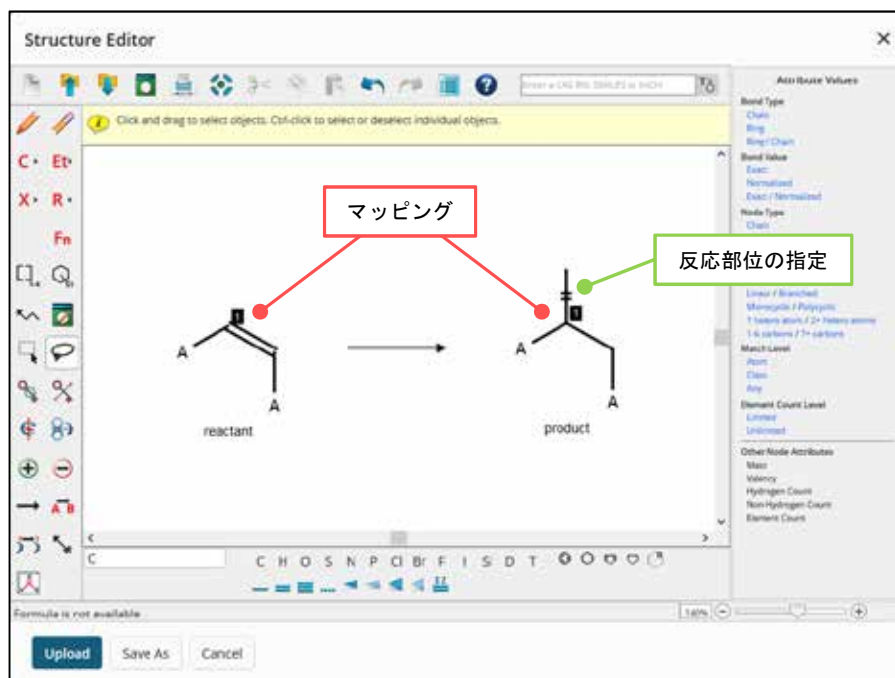
=> S_L6/CAT

← 触媒に限定してクロスオーバー検索

L7 5429 L6/CAT ●

プロリン誘導体が触媒である反応の集合

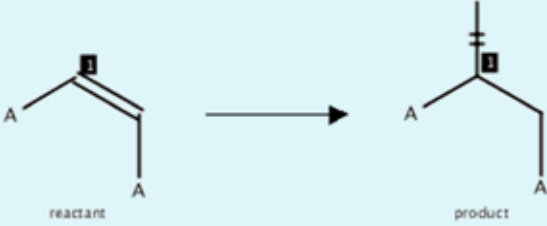
- CASREACT ファイルで反応質問式による検索



```

=>
Uploading structure file: 2019_0102_Structure          ← 反応質問式をアップロード

```



reactant → product

```

:
L8      STRUCTURE UPLOADED

=> S L8 SUB=L7 SSS SAM                               ← L7 を母集合にしてサブセット検索 (サンプル検索)
:
L9      2 SEA SUB=L7 SSS SAM L8 (      8 REACTIONS)

=> S L8 SUB=L7 SSS FUL                               ← L7 を母集合にしてサブセット検索 (フルファイル検索)

FULL SUBSET SEARCH INITIATED 16:22:36 FILE 'CASREACT'
SCREENING COMPLETE - 121109 REACTIONS TO VERIFY FROM 2436 DOCUMENTS
:
L10     352 SEA SUB=L7 SSS FUL L8 ( 5393 REACTIONS)

```

生成物と収率は (A) 演算子でリンク

```

=> S L10 (A) 70<=YD                                ← 収率 70% 以上の反応に限定
1049094 70<=YD
L11     236 L10 (A) 70<=YD

```

同一反応中は (L) 演算子でリンク

```

=> S L11 (L) (STEREOSELECT? OR ENANTIOSELECT?)/NTE ← 立体選択的反応に限定
259645 STEREOSELECT?/NTE
2016 ENANTIOSELECT?/NTE
L12     225 L11 (L) (STEREOSELECT? OR ENANTIOSELECT?)/NTE

=> S L12 (L) 1/NS                                    ← 1 ステップの反応に限定
1753842 1/NS
L13     145 L12 (L) 1/NS

=> D SCAN                                           ← SCAN 表示形式で回答を確認

L13 145 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2019 ACS on STN

TI Efficient proline-catalyzed Michael additions of unmodified ketones to nitro olefins
RX

```

RX(6) OF 9

$$i\text{-Pr}-\text{CH}=\text{CH}-\text{NO}_2 \xrightarrow[\text{DMSO}]{\text{Me}_2\text{CO}, (\text{S})\text{-Proline}} i\text{-Pr}-\text{CH}(\text{NO}_2)-\text{CH}_2-\text{C}(=\text{O})-\text{Me}$$

87%

NOTE: stereoselective, Michael reaction

```

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

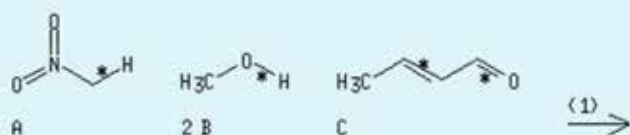
```

=> D L13 1 BIB FHIT

← 1 番目の書誌情報とヒットした最初の反応を表示

L13 ANSWER 1 OF 145 CASREACT COPYRIGHT 2019 ACS on STN
 AN 170:257602 CASREACT [Full-text](#)
 TI Asymmetric Synthesis of Chiral 1,3-Dimethyl Units Through a Double Michael Reaction of Nitromethane and Crotonaldehyde Catalyzed by Diphenylprolinol Silyl Ether
 AU Hayashi, Yujiro; Toda, Shunsuke
 CS Department of Chemistry, Graduate School of Science, Tohoku University, 6-3 Aramaki-Aza Aoba, Aoba-ku, Sendai, 980-8578, Japan
 SO Synlett (2019), 30(4), 442-448
 CODEN: SYNLES; ISSN: 0936-5214
 PB Georg Thieme Verlag
 DT Journal; (online computer file)
 LA English

RX(1) OF 372 A + 2 B + C ==> D...

D
YIELD 94%

収率 94%

RX(1) RCT A 75-52-5, B 67-56-1, C 4170-30-3

STAGE(1)

RGT E 7732-18-5 Water

CAT 1189040-47-8 Pyrrolidine, 2-[[methyl(diphenylsilyl)oxy]diphenylmethyl]-, (2S)-

CON 2 days, room temperature

STAGE(2)

RGT F 149-73-5 CH(OMe)3

CAT 104-15-4 TsOH

CON 4 hours, room temperature

PRO D 1435884-52-8

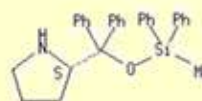
NTE %ee = 90, Michael addition, MeOH also used as solvent stage 1, stereoselective

RE.CNT 42 THERE ARE 42 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

立体選択的反応

RN 1189040-47-8

Absolute stereochemistry.



～ 参照テキスト ～

- CASREACT ファイルの検索方法の詳細は、「反応情報検索」テキストをご覧ください。
https://www.jaici.or.jp/stn/pdf/text_react.pdf

REGISTRY ファイル 文献情報を使った絞り込み



REGISTRY ファイルで得られた化合物を、「特許に記載されている物質」や「合成された物質」に限定したいと思ったことはありませんか？ 化学物質の同定情報を収録する REGISTRY ファイルには、CAplus/CA ファイル由来の情報も収録されているため、これらのフィールドを使用するとヒット化合物を文献情報で限定することができます。

▶ CAplus/CA ファイル由来の情報 (IDERL 表示形式)

```

RN 17735-97-6 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 15-Docosenoic acid, (15Z)- (CA INDEX NAME)
:
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, CHEMCATS, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
DT.CA CAplus document type: Conference; Journal; Patent
RL.P Roles from patents: BIOL (Biological study); USES (Uses)
RL.NP Roles from non-patents: ANST (Analytical study); BIOL (Biological
study); FORM (Formation, nonpreparative); OCCU (Occurrence); PREP
(Preparation); PROC (Process); PRP (Properties); USES (Uses)

```

Double bond geometry as shown.

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

```

348 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
352 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

```

CAS RN® 所在
(CAS RN® を収録しているファイル)

資料種類
(索引された文献の資料種類)

スーパーロール
(索引された文献で付与されたスーパーロール)

レコード数
(索引された文献数)



検索例 : 以下の構造検索で得られた物質を文献情報で絞り込む

=> FILE REGISTRY

=>

Uploading structure file: 2019_0106_Structure



L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

L3 588583 SEA SSS FUL L1

CAplus ファイル収録文献に
索引された物質に限定する

特許に記載されている物質に
限定する

合成されている物質に限定する



▶ CAplus ファイル収録文献に索引された物質に限定する方法

LC(CAS RN® 所在)フィールドは, CAS RN® を収録しているファイル名を示すフィールドです. ファイル名/LC を AND 演算すると, 指定したファイルに収録されている物質に限定できます. ヒット件数が多すぎてクロスオーバーできない場合に使うと, 回答を分割しなくてもクロスオーバーが可能になることがあります.



Let's TRY! L3 のヒット化合物を, CAplus ファイルに索引された物質に限定しましょう!

=> FILE REGISTRY

:

=> S L1 FUL

L3 588583 SEA SSS FUL L1

CAplus ファイルへのクロスオーバーの上限は 50 万件のため, このままではクロスオーバーできません.

(参考) L3 を CAplus ファイルへクロスオーバーしても, エラーが表示されます

=> FILE CAPLUS

=> S L3

TOO MANY TERMS FOR FILE CROSSOVER IN L3

There are limits on the size of an answer set being crossed over from one file to another. Enter HELP CROSSOVER at an arrow prompt (=>) for specific information.

=> S L3 AND CAPLUS/LC

L4 227888 L3 AND CAPLUS/LC

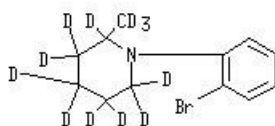
CAplus ファイルに収録されている物質に限定

RN 2363789-65-3 REGISTRY

:

SR Chemical Catalog

Supplier: CombiPhos Catalysts, Inc.



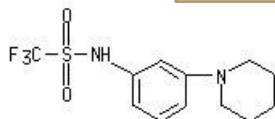
除かれた化合物
(カタログ由来の化合物,
LC フィールドなし)

RN 1432589-99-5 REGISTRY

:

SR CAS Client Services

LC STN Files: CHEMLIST



**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE

除かれた化合物
(CAplus ファイルに未収録)

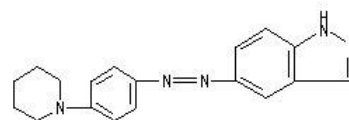
RN 122168-72-3 REGISTRY

:

SR US National Library of Medicine (NLM)

LC STN Files: CHEMCATS, MEDLINE, RTECS*, TOXCENTER

(*File contains numerically searchable property data)



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

=> FILE CAPLUS

=> S L4

L5 42069 L4

L3 を分割せずに CAplus ファイルへクロスオーバーすることができました

▶ CAplus の資料種類、レコード数で限定する方法

DT.CA フィールドは、CAplus ファイルに索引された文献の資料種類のフィールドです。/DT.CA フィールドを使うと、CAplus ファイルに索引された文献の資料種類でヒット化合物を限定できます。検索の際には、資料種類名または資料種類コードを利用します。

・資料種類一覧 (/DT.CA)

内容	資料種類名 (資料種類コード)	内容	資料種類 (資料種類コード)
単行本	BOOK (B)	非特許文献	NONPATENT
学会会議録	CONFERENCE (C)	特許	PATENT (P)
学位論文	DISSERTATION (D)	電子出版	PREPRINT (N)
雑誌	JOURNAL (J)	技術レポート	REPORT (R)

また、/REF.CAPLUS を使うと CAplus ファイルのレコード数で、/REF.CA を使うと CA ファイルのレコード数で限定できます。/DT.CA や /REF.CAPLUS, /REF.CA フィールドを演算すると、自動的に CAplus/CA ファイルに収録の物質に限定されるので、CAPLUS/LC や CA/LC の演算は必要ありません。



Let's TRY! L3 のヒット化合物を、特許レコードで索引された物質に限定し、さらに、CAplus ファイルで 50 以上のレコードに索引された物質に限定しましょう!

=> FILE REGISTRY

:

=> S L1 FUL

L3 588583 SEA SSS FUL L1

=> S L3 **AND PATENT/DT.CA**

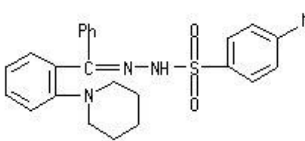
L6 188082 L3 AND PATENT/DT.CA

特許に記載の物質に限定

```

RN 2365112-67-8 REGISTRY
:
LC STN Files: CAPLUS
DT.CA CAplus document type: Journal
RL.NP Roles from non-patents: RACT (Reactant
or reagent)

```



L6 で除かれた化合物
(雑誌に索引)

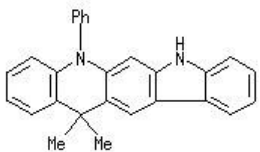
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

```

RN 2088580-88-3 REGISTRY
:
LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS
DT.CA CAplus document type: Patent
RL.P Roles from patents: PREP (Preparation);
RACT (Reactant or reagent)

```



L7 で除かれた化合物
(特許に索引されているが、レコード数が 50 以下)

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

=> S L6 **AND 50<=REF.CAPLUS**

L7 100 L6 AND 50<=REF.CAPLUS

特許に記載の物質のうち、CAplus ファイルで 50 以上のレコードに索引されている物質に限定

▶ 文献中で合成された物質に限定する方法

REGISTRY ファイルでは、索引された文献レコードに付与されたスーパーロールも収録されており、ヒット化合物をスーパーロールで限定することができます。スーパーロールの検索フィールドは複数あり、資料種類（特許と非特許文献）や非特定誘導体であるかを考慮して検索することができます。

検索フィールド	内容
/RLS	CAplus ファイルで付与されたスーパーロール (RL + RLD)
/RL	特定物質として索引された文献で付与されたスーパーロール
/RL.P	特定物質として索引された特許レコードで付与されたスーパーロール
/RL.NP	特定物質として索引された非特許レコードで付与されたスーパーロール
/RLD	非特定誘導体として索引された文献で付与されたスーパーロール
/RLD.P	非特定誘導体として索引された特許レコードで付与されたスーパーロール
/RLD.NP	非特定誘導体として索引された非特許レコードで付与されたスーパーロール



Let's TRY! L3 のヒット化合物を、文献中で「合成 (PREP)」された物質に限定しましょう!

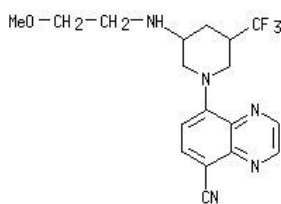
=> FILE REGISTRY
:

=> S L1 FUL
L3 588583 SEA SSS FUL L1

=> S L3 AND PREP/RLS
L8 173280 L3 AND PREP/RLS

PREP (製造) のスーパーロールが付与された物質に限定

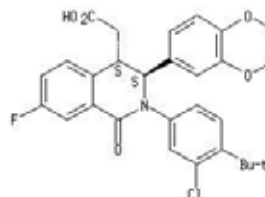
RN 2360953-11-1 REGISTRY
:
LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER
DT.CA CAplus document type: Patent
RL.P Roles from patents: BIOL (Biological study); USES (Uses)



L8 で除かれた化合物 (PREP が付与されていない)

RN 2365039-41-2 REGISTRY
:
LC STN Files: CAPLUS, TOXCENTER
DT.CA CAplus document type: Journal
RL.NP Roles from non-patents: BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)

Absolute stereochemistry.



L9 で除かれた化合物 (PREP が付与されているが特許レコードではない)

=> S L3 AND PREP/RL.P
L9 137643 L3 AND PREP/RL.P

特許レコードで PREP (製造) のスーパーロールが付与された物質に限定



ヒット化合物を文献情報で絞り込むことができました。

得られた化合物数が多いときだけでなく、あらかじめ文献情報で絞り込みたい場合にもぜひご活用ください!

CNFULL ファイル

－ Key Terms フィールドの追加

CNFULL ファイルは、中国特許の全文を収録するデータベースです。

Key Terms フィールドが追加されました。

Key Terms (KT) は、言語学および統計学的手法を用いて英語の特許全文から機械的に抽出した名詞句で、STN が独自に付与しています。Key Terms を活用することで、精度と網羅性を重視した検索や技術内容の容易な把握が可能です。

◇ Key Terms の検索

KT フィールドは単語およびフレーズで検索可能です。

(例) => S BEVERAGE MACHINE/KT

=> S (NANOPARTICLE? (3A) LIGAND)/TI, AB, CLM, KT

◇ Key Terms の収録状況

2019 年 8 月現在, 2019 年 5 月 21 日以降に更新された全レコード (約 604 万件) に Key Terms が収録されています。

DEFULL ファイル

－ Key Terms フィールドの追加

DEFULL ファイルは、ドイツ特許の全文を収録するデータベースです。

Key Terms フィールドが追加されました。詳細は CNFULL ファイルの項をご覧ください。

◇ Key Terms の収録状況

2019 年 8 月現在, 2019 年 5 月 10 日以降に更新された全レコード (約 51 万件) に Key Terms が収録されています。

EMBASE ファイル

－ EMTREE 語のオンラインシソーラス更新

EMBASE ファイルは、生物医学および薬学医学領域の世界中の文献を収録するデータベースです。

2019 年 5 月に, EMTREE 語のオンラインシソーラスの更新が行われ, 新規ターム 567 個 (drug terms 176 個,

non-drug terms 391 個) が追加されました。新規に追加された語および変更された語のリストは Elsevier 社のサイトをご確認ください。

https://service.elsevier.com/app/answers/detail/a_id/16354/c/10547/supporthub/embase/

なお、ファイル全体の索引語の書き換えは、不定期に実行されます。このため、非優先語 (オンラインシソーラス中の UF で表示されるターム) のレコードがある場合には、UF も含めて検索してください。また、アラート (自動 SDI 検索) の質問式の見直しを行い、必要があれば変更してください。

各ファイル記事の補足情報

各ファイルの記事に関する補足情報はサマリーシートをご参照ください。

<https://www.cas.org/support/documentation/stn/database-summary-sheets> (最新の英語版)

<https://www.jaici.or.jp/stn/dbsummary/db.html> (和訳版)

ヘルプデスク

<https://www.jaici.or.jp/helpdesk/index.htm>

STN 技術資料

https://www.jaici.or.jp/stn/stn_doc.html

PatentPak

－ 14 カ国の特許明細書の収録を開始

PatentPak は CPlus ファイルのレコードから付加情報付きの特許明細書を表示するサービスです。

下記 14 カ国の特許明細書の収録を開始しました。収録年は 2016 年以降で、2019 年 8 月現在、遡及収録中です。

アルゼンチン (AR)	ブルガリア (BG)
チェコ (CZ)	デンマーク (DK)
フィンランド (FI)	ハンガリー (HU)
イスラエル (IL)	イタリア (IT)
マレーシア (MY)	モルドバ (MD)
オランダ (NL)	フィリピン (PH)
ポーランド (PL)	南アフリカ (ZA)

この強化により、PatentPak の収録国は 46 特許発行国・機関になりました。収録国については、下記サイトをご覧ください。

<https://www.jaici.or.jp/stn/patentpak.html>

STNext

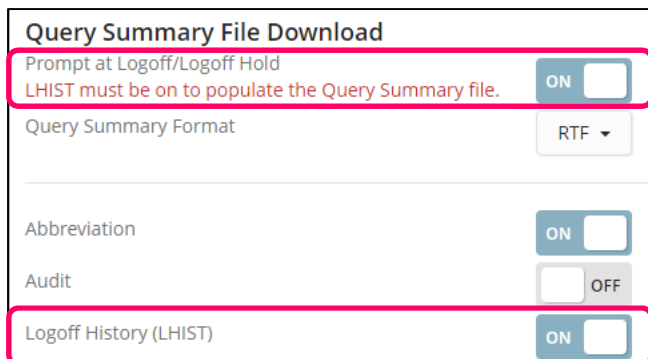
質問式サマリーに関する設定の強化, 構造アップロードのパフォーマンス改善, 構造作図画面の強化, レポート機能の強化, セッションタイムアウトに関する変更, URL 変更のお知らせ

STNext は Classic STN のすべてのコンテンツにアクセスできる Web インターフェースです。2019 年 6 月以降の強化は下記の通りです。

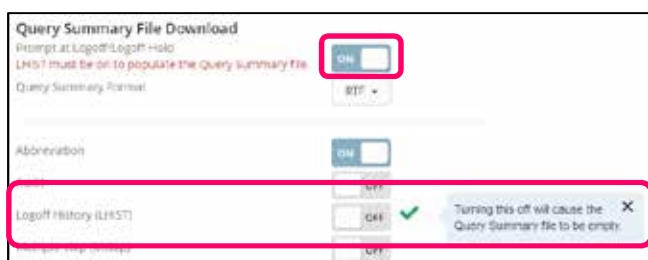
■ 質問式サマリーに関する設定の強化

Settings (設定) 画面で, 「Query Summary File Download」を ON にすると, ログオフ時に質問式サマリーファイル (検索履歴から入力したコマンドのみを抽出したものを) をダウンロードすることができます。

質問式サマリーを作成する際は, 「Logoff History (LHIST)」を ON にする必要がありますが, このたびの強化で「Query Summary File Download」を ON にすると, 「Logoff History (LHIST)」が自動的に ON になるようになりました。



また, 「Query Summary File Download」が ON の状態で, 「Logoff History (LHIST)」を OFF に変更しようとすると, 「OFF では 質問式サマリーファイルが空になる」というメッセージが表示されるようになりました。



「Query Summary File Download」が ON, 「Logoff History (LHIST)」が OFF に設定されている場合でも, 次回ログイン時には「Logoff History (LHIST)」が自動的に ON になるようになりました。

■ 構造アップロードのパフォーマンス改善

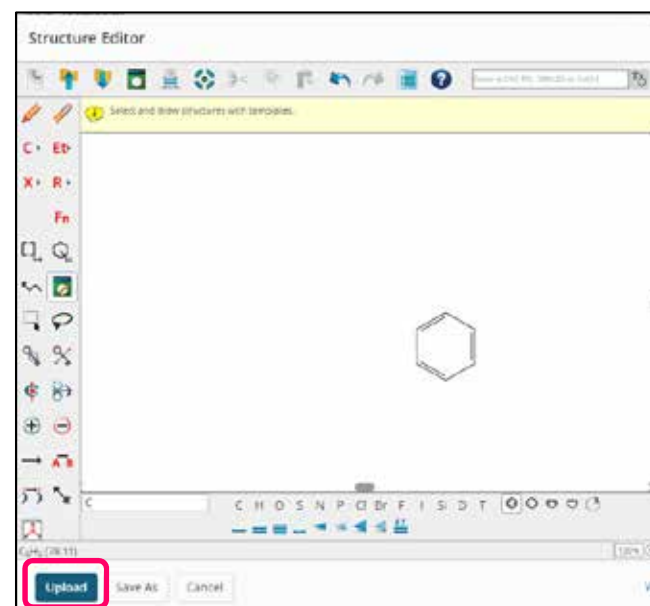
構造のアップロードのパフォーマンスが大幅に改善されました。Upload ボタンをクリックしてから構造質問式の L 番号が生成されるまでの時間が, 従来より 20% 以上短縮されました。

また, 構造検索ができないファイル (HOME ファイルなど) で構造をアップロードした場合に, 質問式属性を表示せず, エラーのみを表示するように変更されました。

■ 構造作図画面の強化

◇ Upload ボタンに関する変更

構造作図画面のアップロードボタンの表記および位置が変更されました。アップロードボタンの表記は, 従来の「Save & Upload」から「Upload」に変更されました。構造のアップロード時には, 従来通り自動的に STNext のサーバー上に構造が保存されます。



[注意] お使いの環境によっては, Upload ボタンをクリックしても構造をアップロードできない場合があります。その場合は, ブラウザの「再読み込み」ボタンあるいは F5 キーで画面を更新してください。

◇ Save As ボタンに関する変更

Save As ボタンをクリックして構造を別名で保存する際に、デフォルト名が入力されるようになりました。



◇ チオールのショートカットに関する変更

-SH (チオール) のショートカットを作図すると、デフォルトで Lock Atoms が適用されるようになりました。これにより、R-SO₂NH₂ などの 4 価, 6 価の硫黄化合物を回答から除くことができます。

◇ New ボタンに関する変更

作図画面左上の New ボタンをクリックした時の動作が「エクスポート」から My Structures の「保存」に変更されました。

◇ マルクーシュ属性に関する変更

インポートした構造質問式のマルクーシュ属性には Preferences で設定したデフォルトの属性が適用されましたが、元の属性が保持されるようになりました。

■ レポート機能の強化

◇ Next/Back ボタンに関する変更

レポート作成時に各設定画面を Next/Back ボタンで前後しても、選択した内容を保持したまま操作できるようになりました。

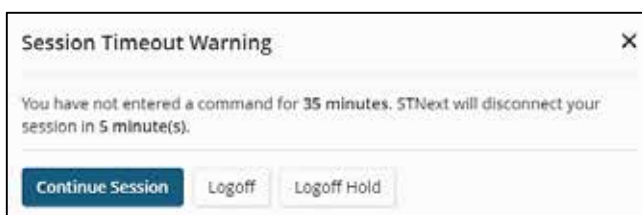
◇ テーブル形式のレポートに回答番号とデータベース名を追加

レポート機能が強化され、テーブル形式のレポートに回答番号 (Answer Number) とデータベース名 (Database) の列が追加されました。回答番号とデータベース名は自動的にテーブルに含まれます。

Answer Number	Database	Title	Document Type	Language	Accession Number
14 1 OF 4244	CASL05	THE ATTENDANCE OF AROMATIC AROMATIC ON THE AROMATIC QUALITY OF METHYL	Journal	Japanese	20191247284 CASL05
14 2 OF 4244	CASL05	STUDIES OF STYRENE ON THE VOLATILE FLOWER ESSENCE IN THE METHYLIC ESTER	Journal	Japanese	20191244294 CASL05
14 3 OF 4244	CASL05	AROMATIC COMPOUNDS IN AROMATIC APET APPE METHYLIC FLOWER	Journal (online)	English	20191242264 CASL05

■ セッションタイムアウトに関する変更

35 分間インアクティブな状態が継続すると、下図の画面が表示されるようになりました。



■ URL 変更のお知らせ

STNext の URL が <https://www.stn.org> に変更されました。

当面、旧 URL (<https://next.stn.org>) から新しい URL (<https://www.stn.org>) へリダイレクトされますが、Web ブラウザのお気に入り設定をされている方は、お早めに URL の変更をお願いいたします。

なお、STNext に接続するための Username (ID) およびパスワードは変更ありません。

STN 新プラットフォーム

- URL 変更のお知らせ

STN 新プラットフォームは、より簡便に STN の代表的なデータベースを検索できるインターフェースです。

STN 新プラットフォームの URL は <https://nsth.stn.org> に変更されました。Web ブラウザのお気に入り設定をされている方は、お手数ですが URL の変更をお願いいたします。

なお、旧 URL (<https://www.stn.org>) は STNext のログインページに接続します。

ホームページの資料掲載のお知らせ

2019年6月～8月に化学情報協会ホームページに掲載したSTN関連の資料をお知らせします。
ぜひご利用ください。

■ 新規掲載資料

資料名	内容
2019年STN ユーザーミーティング資料	STN ユーザーミーティング (2019年7月開催) の資料
1999年から2019年の総索引	STN ユーザーミーティング資料の総索引
STNext スクリプトガイド	STNext のスクリプト言語を紹介するガイド
スクリプト利用例 1, 検索語リスト例	上記ガイドの利用例 1 (CAS RN [®] 一覧を自動的に REGISTRY ファイルで検索・表示) のスクリプト
スクリプト利用例 2	上記ガイドの利用例 2 (CA セクションの年代別収録件数を検索) のスクリプト
BLAST 検索スクリプト	DGENE/PCTGEN/USGENE ファイル用の BLAST 検索スクリプト
STN 簡易ガイド - テキスト中の数値検索	テキスト中の数値検索についてまとめた資料. 物性値一覧, 検索方法など
STNews Vol.35 夏号	STNews (本冊子) の前号

■ 改訂資料

資料名	内容
コマンド入門	STN 講習会テキスト
CA 文献検索	
ポリマー検索	
STNext 利用ガイド	STNext の操作方法等を紹介するガイド
STNext 簡易ガイド	
STNext 構造作図ガイド	
STN 検索カード (2019.8)	Classic STN の主要なコマンドと STNext の検索の流れをまとめた資料
各国の特許種別コード一覧表 (2019.7)	INPADOC, WPI, CAplus ファイルの各国の特許種別の一覧表
CAplus - 統制語を活用した検索テクニック	統制語を用いた検索方法と, 統制語の調べ方を紹介する資料
CNFULL, DEFULL, JPFULL	サマリーシート

§ STN 講習会 §

STN を検索する際に必要な知識や技術を身につけていただけるように, 検索に必要なコマンドや, 各データベースの概要, 検索のポイントなどをご説明する講習会を毎月開催しています。

会場は東京会場, または大阪会場です。

各会場での開催内容と日程につきましては, 同封のリーフレットまたは弊協会ホームページをご覧ください。

STN 講習会のサイト

<https://www.jaici.or.jp/seminar/index.php>



PATENTPAK®

A CAS SOLUTION

調査時間が
半分に!

明細書中の物質記載位置を瞬時に把握


CAplus ファイルの回答から PatentPak を使えば、特許明細書の確認にかかる時間を大幅に短縮でき、特許明細書の即時ダウンロードもワンクリックで完了します。

PatentPak とは？

CAplus ファイルでは特許実施例中またはクレームに記載されていて新規性・改良点、重要な事項に関する化学物質は CAS RN® で索引されています。この索引は CAS のアナリストが原報を読み手作業で付与している大変有益な情報です。


しかし、これらの物質が特許明細書のどこに記載されているかは、あらためて自分で確認する必要があります。

この作業を効率化するのが PatentPak です。

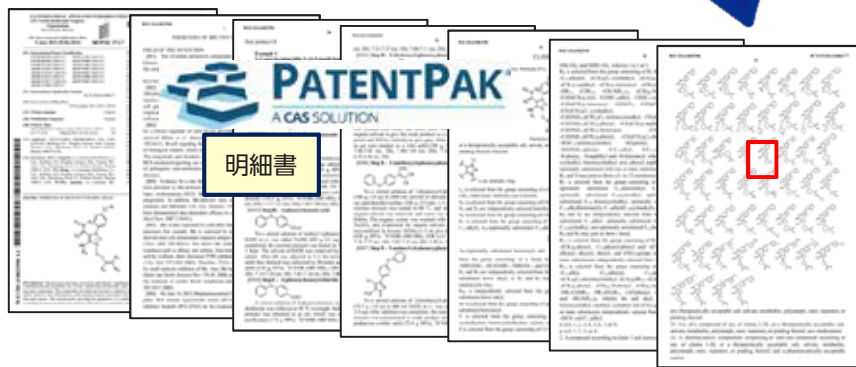


検索結果

IT	1558036-75-1P	1558036-85-3P	1609467-02-8P	1609467-45-9P
	:			
	1612774-31-8P	1612774-32-9P	1612774-33-0P	1612774-34-1P
	1612774-35-2P	1612774-36-3P	1612774-37-4P	1612774-38-5P
	:			
	RL: PAC (Pharmacological activity); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); B (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses) (prepn. of substituted 5-membered heterocyclic compds. as inhibitors of bruton's tyrosine kinase)			



明細書



化学物質が特許明細書のどこに書かれているかすぐわかる!



特長 1 物質情報付きの明細書 >>> 明細書のチェックをスピードアップ

CAplus ファイルのレコードから索引化合物のページ番号をクリックするだけで、物質情報付き明細書 (Interactive Viewer) が開き、その化学物質が記載されているページが表示されます。物質情報と明細書を同一画面で確認できるので、効率よく明細書をチェックできます。

PPAK	
1612774-16-9P,	Pg 69
1558036-75-1P,	Pg 76
:	
1612774-30-7P,	Pg 78
1612774-31-8P,	Pg 79
:	



特長 2 明細書の即時ダウンロード >>> ワンクリックで明細書を手入

PatentPak でダウンロードできる特許明細書は、テキストのコピーや全文検索も可能な PDF ファイルです。対応特許の明細書も入手可能なため、読みやすい言語で確認できます。

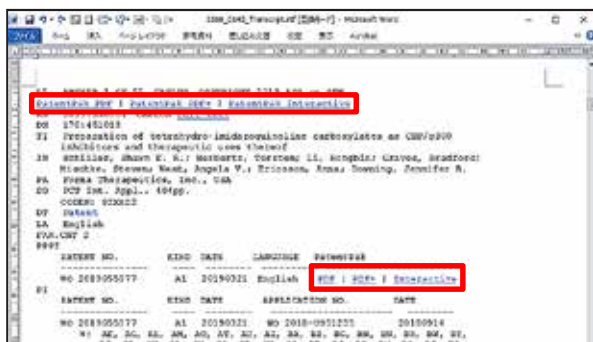
PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
CN 110027268	A	20190719	Chinese	PDF PDF+ Interactive
JP 2019125618	A	20190725	Japanese	PDF
KR 2019086391	A	20190722	Korean	PDF

テキスト抽出可能な PDF
全文検索もできる!



特長 3 PatentPak 情報の共有 >>> 社内全体で活用できる

PatentPak はオンライン中だけでなく検索記録からも利用できます。検索記録中のリンクは STN ユーザーに限らず利用でき、どなたでも PatentPak の各種 PDF にアクセスすることができるので、社内の情報共有に役立ちます。



検索記録中の PatentPak
リンクは誰でも利用できる

Patent No.	Patent No. (JP)	Pub. No.	Pub. Date	Language	PatentPak	PatentPak	PatentPak
1612774-16-9P	20190719	1612774-16-9P	20190719	Chinese	PDF	PDF+	Interactive
1612774-30-7P	20190725	1612774-30-7P	20190725	Japanese	PDF		
1612774-31-8P	20190722	1612774-31-8P	20190722	Korean	PDF		

スタッフ紹介



しまだ のりこ
島田 記子

化学情報協会
情報事業部
テクニカルグループ

今年 2 月に情報事業部テクニカルグループに配属になりました
島田 記子（しまだ のりこ）と申します。

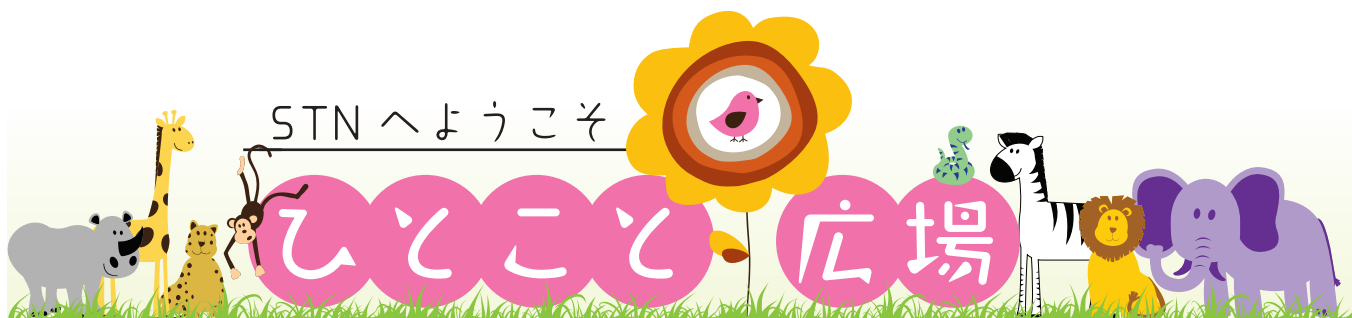
大学、大学院時代は、無機化学の研究室に所属しておりました。無機化学は有機化学よりも目立たないイメージはありますが、扱える元素の多さは圧倒的に無機化学が多いと思います。無機化学の研究室を選びました。実際には、有機無機ハイブリッドであるシルセスキオキサンの合成をテーマに研究を行い、無機化学の研究室ではありながら、有機化学と同じような実験や分析を行っておりました。

大学院修了後は、大阪にある電機機器メーカーの研究職として約 3 年間、その後公的機関の技術職員として約 8 年間勤務してまいりました。電気機器メーカーでは、ケミカルリサイクル後に得られる高分子物質の新規用途開発の研究を担当。添加剤用途を広く探索する必要があり、様々な分野に対する知識を吸収する日々でした。また、学生時代には縁のなかった特許に触れ、先行的な研究だけではなく、より早く特許を出願することの重要性を感じました。公的機関では、様々な未知物質について化学分析を行っていました。扱う分析対象は、有機、無機、高分子物質、生体物質と様々であり、ここでも幅広い化学分野の知識が必要でした。

今回ご縁があって、化学情報協会へ入社し、現在は、STN や SciFinder に関するサポートの仕事に携わっています。講習会の講師やヘルプデスクを担当するほか、各種技術資料の作成も行っています。入社するまでは、自分で STN の検索を行ったことがなく、現在勉強中ですが、STN のすごさ、便利さ、難しさを日々実感しております。ヘルプデスクでお問い合わせをいただいた際には、すぐにお答えできず、ご迷惑をおかけすることがあるかもしれませんが、誠心誠意対応いたしますのでよろしくお願いいたします。これまで幅広い化学分野に携わってきたことを生かし、様々な分野でご活躍のお客様の疑問に迅速かつ的確にお答えできるよう、日々精進してまいります。

また、いずれの前職でも、幅広い化学分野の情報が必要であり、情報検索に多くの時間を費やしましたが、STN や SciFinder を使用していなかったのも、今になってみると、十分な情報を得られていなかったのかなと思うことがあります。インターネットが簡単に使え、情報の真偽を見分けることが難しいと感じる世の中ですので、これから研究の道に入る方々には情報検索の重要性も伝えていきたいと思っております。

最後に、プライベートな話ですが、私は化学情報協会のある駒込で生まれ、大学院修了まで駒込で育ちました。大学院修了後は、大阪（守口市）で約 3 年間暮らしましたので、東京、大阪の講習会にいらした際には、駒込や大阪の地についてもお話できればと思っています。よろしければお声がけください。



『オリンピック観戦チケット』

東京オリンピックまであと 1 年ですね。オリンピックスタジアムももうすぐ完成するそうです。来年は猛暑にならないことを祈るばかりです。さて皆様は観戦チケットの抽選に応募されましたか？私はオリンピックを直に見たいと思い応募しました。下調べすることなく登録を開始したので、登録に電話番号認証が必要なことや、競技を選択するまでの待ち時間に驚きました。結果はというと、残念メールが届きました。ニュースで外れた方が圧倒的に多いと聞き、オリンピックへの関心の高さを実感しました。

テクニカルグループ AT



『無ければ作ればいい』

皆様は、こんなものが欲しいが、見つからなかった、といった経験がありますか。

私は最近、娘に似合う服を着せてあげたいが、なかなか見つからない、といったことが多々あります。なかなか無いので、それなら自分で作ってみようかと思いました。裁縫は小学校の家庭科以来やってきませんでした。最近ではネットに情報がたくさんあるので、調べながら実際にやってみると、意外と簡単にできるのだな、と感じました。

今後も何かできないことがあれば、自分でやってみようと思ったきっかけでした。

マーケティンググループ KT



『たまご 50 個』

今夏、我が家に新しい家族が増えました。カブトムシ夫婦です。くじ引きで偶然引き当て、急遽ケース、土、ゼリーなど飼育セットを購入。昨年は、飼育後 1 日でお亡くなりになった経験もあり、丁寧にお世話をしていたところ、先日、土の中に大量のたまごを発見！調べると一匹当たり 30 個平均とあったので、夫婦は相性がよかったです。当面の課題は、たまごが孵った後のお世話。幼虫から成虫になるまでに、一匹当たり 2-3 L の良質な土が必要とのこと。糞の交換もあるので、家が土と糞だらけになりそうです。

事業戦略グループ AW



2019 特許・情報フェア&コンファレンス 出展のお知らせ

国内最大の知的財産関連の見本市である特許・情報フェア&コンファレンスが
11月6日(水)~8日(金)に東京・北の丸公園の科学技術館で開催されます。

弊協会もブースを設け、STNext や高精度機械翻訳を活用したサービスである
JAICI AutoTrans などの展示とデモンストレーションを予定しています。

また、11月7日(木) 11:15 より企業プレゼンテーションを実施します。企業
プレゼンテーションでは、NICT の研究者の方に NMT 翻訳エンジンを専門分野に
特化する技術と効果についてお話しいただく予定です。ご興味をお持ちの方はぜひ
ご参加ください。

会期	2019年11月6日(水)~8日(金) 10:00-17:00
会場	科学技術館 (東京都千代田区北の丸公園 2-1)
交通	東京メトロ『竹橋』または『九段下』 駅徒歩 7 分
ブース番号	33 (6 号館)
企業プレゼンテーション	2019年11月7日(木) 11:15~12:00 AI 翻訳 (NMT) の最新動向と機械翻訳サービスへの適用
入場料	1,000 円 (公式サイトにて来場登録証 (無料招待券) が配布される予定です)

STN[®] 東京サービスセンター

JAICI
化学情報協会

ヨーロッパ
STN カールスルーエ
FIZ Karlsruhe
P.O. Box 2465
76012 Karlsruhe
Germany
Phone: +49-7247-808-555
Fax: +49-7247-808-259
E-mail: helpdesk@fiz-karlsruhe.de
Internet: www.stn-international.de

日本
STN 東京
化学情報協会
〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
Phone: 0120-003-462 (Help Desk)
: 0120-151-462 (上記以外)
Fax: 03-5978-4090
E-mail: support@jaici.or.jp (Help Desk)
customer@jaici.or.jp (上記以外)
Internet: www.jaici.or.jp

北アメリカ
STN コロンバス
CAS
P.O. Box 3012
Columbus, Ohio 43210-0012 U.S.A
CAS Customer Care:
Phone: 800-753-4227 (North America)
614-447-3700 (worldwide)
Fax: 614-447-3751
E-mail: help@cas.org
Internet: www.cas.org