

STN[®]



新規データベース「CASFORMULTNS」

新規データベース「CASFORMULTNS」

化学情報協会 情報事業部

目次

1. CASFORMULTNS ファイルリリース
2. 収録状況
3. レコード構成
4. 活用シーン

CASFORMULTNS ファイルリリース

製剤・配合の調査に悩みはつきもの

3

全文ファイルで検索すると…

- ヒット件数が多い
- ノイズが多い
- 目視で全文献チェックは大変



CAplus で検索すると…

- 収録ルールにあわない物質は収録されていない
- 配合情報に特化した検索フィールドがない

製剤・配合の構成成分や機能を効率よく調査できる
CASFORMULTNS ファイルをリリース！

New

CASFORMULTNS

シーエーエス フォーミュレーションズ



© 2020 化学情報協会

CASFORMULTNS ファイルとは

5

CASFORMULTNS ファイルとは

- 多くのユーザーからご要望をお聞きし、3年以上かけて開発したデータベース
- CAS の専門家が**人手で情報を収集・整理し、独自に配合データを収録**している
- 製剤・配合の調査にかかる多大な労力を **CAS の専門家が肩代わり**！

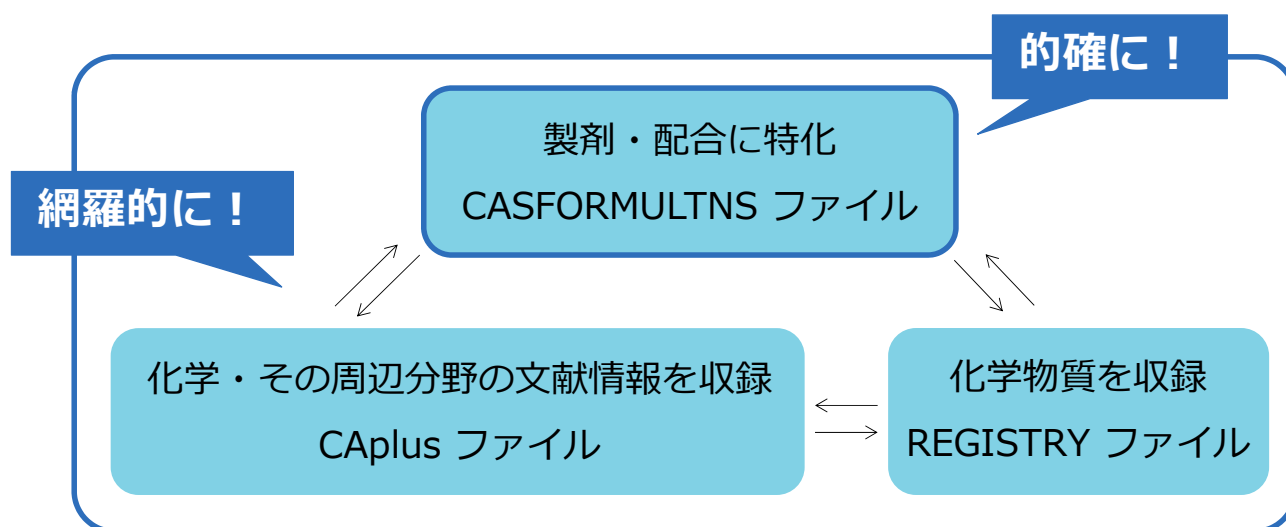
© 2020 化学情報協会

多様な観点から**効率的な調査**が可能



© 2020 化学情報協会

当ファイルのみで**的確な検索**, あるいは他の CAS FILES と連携した**網羅的な検索**のどちらにも使える



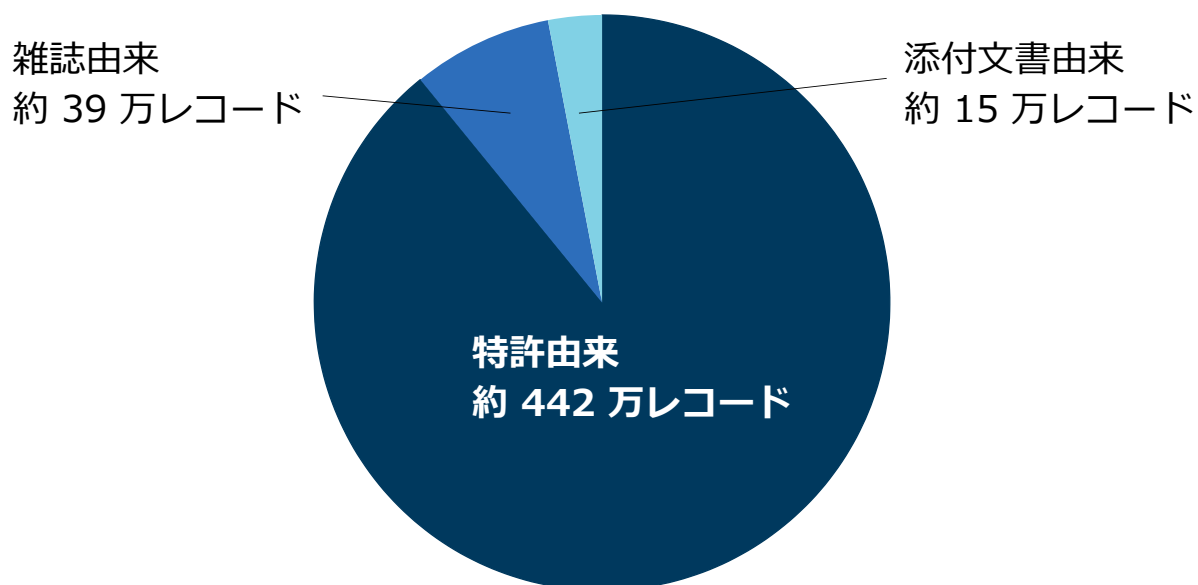
© 2020 化学情報協会

収録状況

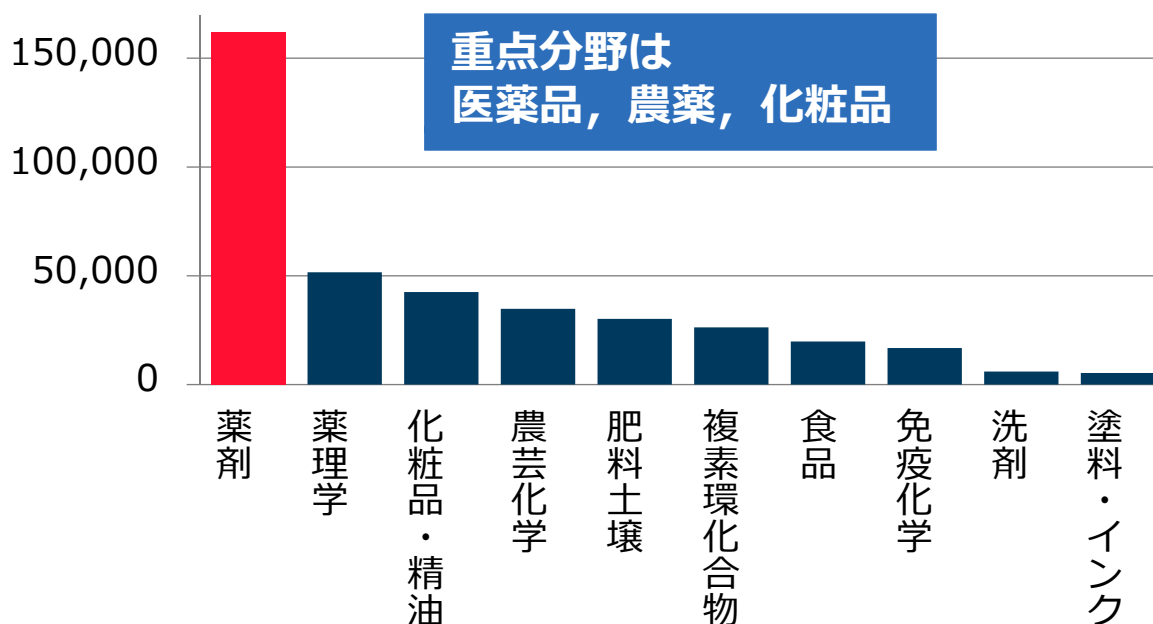
製剤・配合のレコード数

9

CASFORMULTNS ファイルは、三つの資料由来の製剤・配合のレコードを収録している

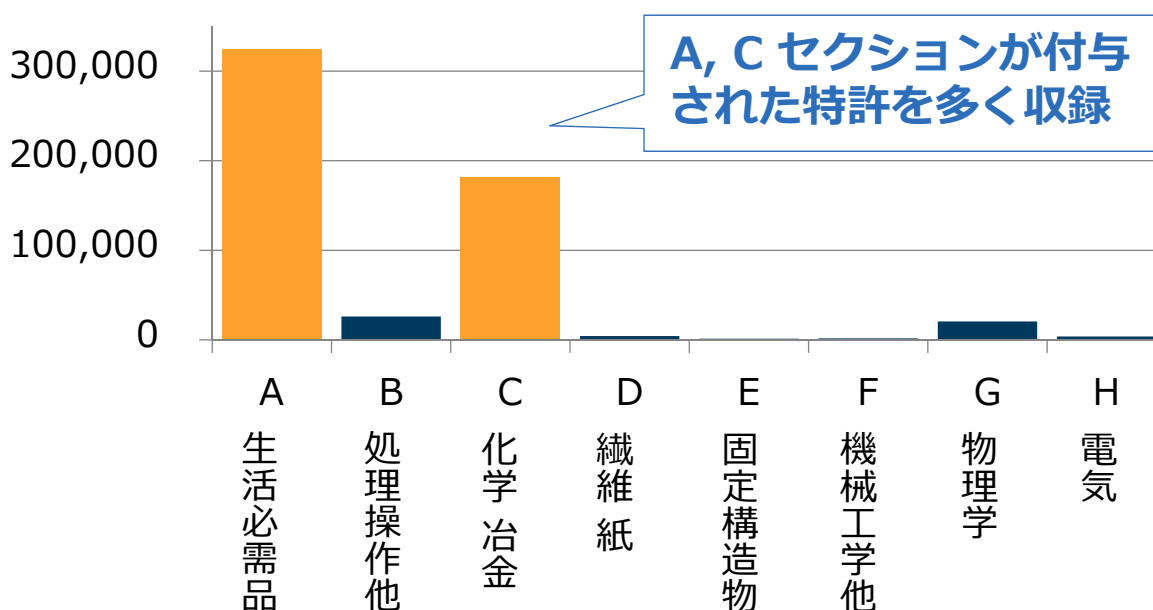


CASFORMULTNS ファイルに含まれている文献の
主な CA セクション

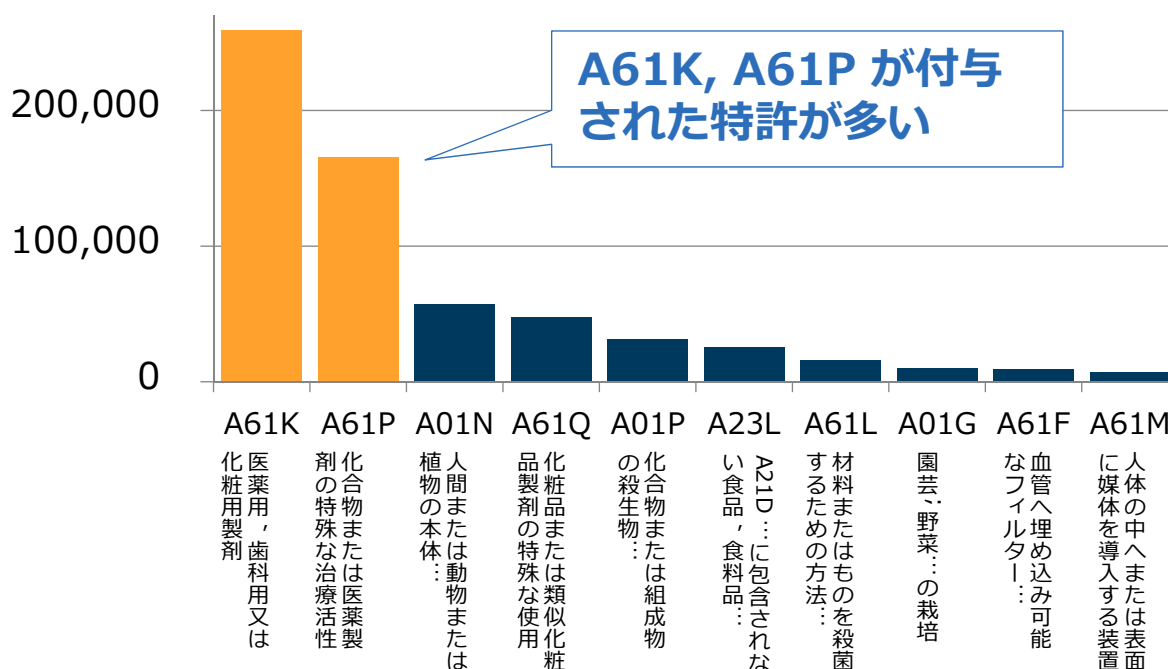


© 2020 化学情報協会

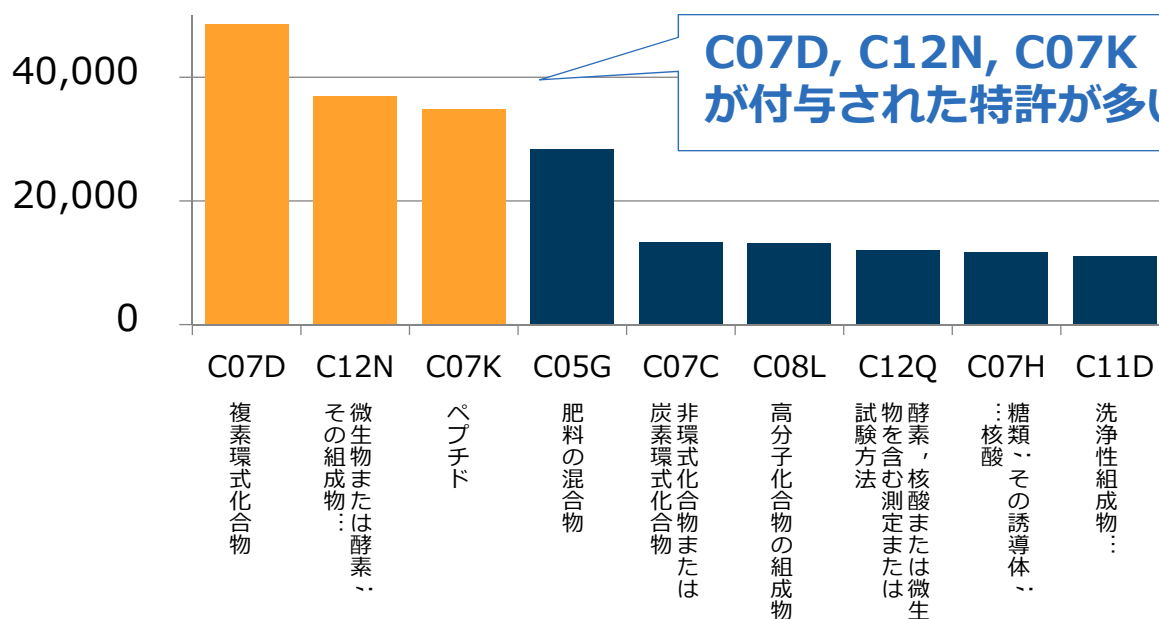
CASFORMULTNS ファイルに含まれている特許の
IPC セクション



© 2020 化学情報協会

CASFORMULTNS ファイルに含まれている特許の
IPC **A セクション**の上位サブクラス

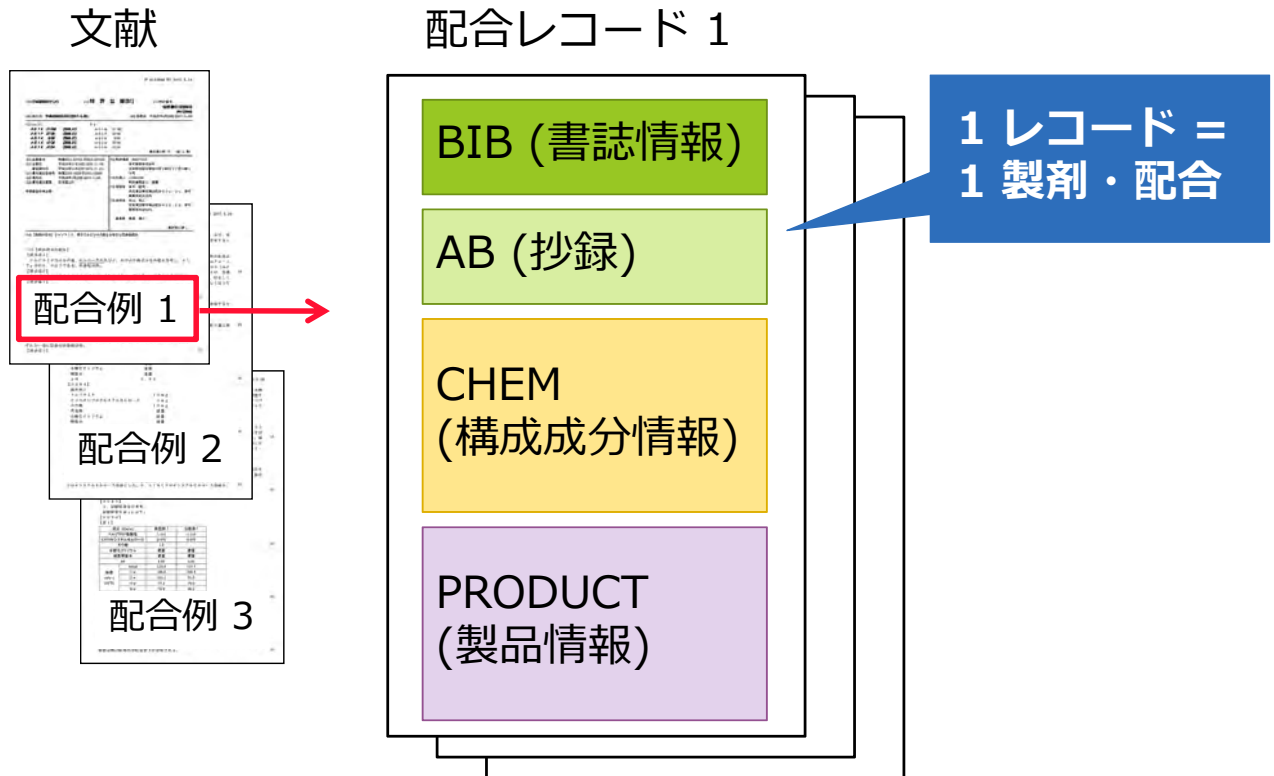
© 2020 化学情報協会

CASFORMULTNS ファイルに含まれている特許の
IPC **C セクション**の上位サブクラス

© 2020 化学情報協会

収録源	特許 (CAplus ファイル由来) 雑誌 (CAplus ファイル由来) 添付文書 (NLM の DailyMed データベース由来)
収録分野	重点分野： 医薬品, 農薬, 化粧品 一部収録分野：コーティング剤, 日用品, 食品, 材料
収録期間	約 23 年 ・英語の特許：1996 年～ ・日本語, 中国語, 韓国語, ドイツ語, フランス語の特許：2000 年～ (言語による) ・英語の雑誌：2011 年～

レコード構成



© 2020 化学情報協会

特許例

JP 6132968 【フロントページ】

(19) 日本国特許庁 (JP)	(12) 特許公報 (B1)	(11) 特許番号 特許第6132968号 (P6132968)
(45) 発行日 平成29年5月24日 (2017. 5. 24)	(24) 登録日 平成29年4月28日 (2017. 4. 28)	
(51) Int. Cl. F 1		
A 6 1 K 31/382 (2006. 01)	A 6 1 K 31/382	
A 6 1 P 27/06 (2006. 01)	A 6 1 P 27/06	
A 6 1 K 9/08 (2006. 01)	A 6 1 K 9/08	
A 6 1 K 47/38 (2006. 01)	A 6 1 K 47/38	
A 6 1 K 47/04 (2006. 01)	A 6 1 K 47/04	
請求項の数 10 (全 13 頁)		
(21) 出願番号 特願2016-227521 (P2016-227521)	(73) 特許権者 000177634 参天製薬株式会社 大阪府大阪市東淀川区下新庄3丁目9番19号	特許番号類
(22) 出願日 平成28年11月24日 (2016. 11. 24)	(74) 代理人 110001508 特許業務法人 津国	
審査請求日 平成28年11月25日 (2016. 11. 25)	(72) 発明者 森本 隆司 奈良県生駒市高山町8916-16 参天製薬株式会社内	出願人, 発明者名
(31) 優先権主張番号 特願2016-16389 (P2016-16389)	(72) 発明者 中山 祥江 奈良県生駒市高山町8916-16 参天製薬株式会社内	
(32) 優先日 平成28年1月29日 (2016. 1. 29)	審査官 鳥居 福代	最終頁に続く
(33) 優先権主張国 日本国 (JP)		
早期審査対象出願		タイトル
(54) 【発明の名称】 ドルゾラミド、高分子およびホウ酸を含有する医薬組成物		

© 2020 化学情報協会

書誌情報にベーシック特許の情報が収録される

レコード番号 CAplus レコード番号 資料番号 (CA 抄録番号) 入力日 更新日 標題	ACCESSION NUMBER: 2019:246295 CASFORMULTNS CAPLUS ACCESSION NUMBER: 2017:817473 DOCUMENT NUMBER: 167:13254 ENTRY DATE: 4 Nov 2019 UPDATE DATE: 1 Jun 2020 TITLE: Pharmaceutical composition containing dorzolamide, cellulose compound, and borate	標題
著者名, 発明者 雑誌名 特許出願人 資料種類	AUTHOR(S): Morimoto, Takashi; Nakayama, Yoshie JOURNAL TITLE: Jpn. Tokkyo Koho PATENT ASSIGNEE: Santen Pharmaceutical Co., Ltd. DOCUMENT TYPE: Patent	出願人, 発明者名
特許情報	PATENT INFORMATION: PATENT NO. KIND DATE APPLICATION NO. DATE JP 6132968 B1 20170524 JP 2016-227521 20161124	特許番号類
処方番号 製剤・配合でイスクリプション グループリスト グループ数 成分数 ターゲット数	FORM NUMBER: Form 1 FORMULATIONS DESC: Pharmaceutical Composition Containing Dorzolamide: Ophthalmic Agents GROUP NUMBERS: G1-G3 GROUP COUNT: 3 COMPONENT COUNT: 6 TARGET COUNT: 3	製剤・配合に関する概要

© 2020 化学情報協会

抄録に特許全体の概要が収録される

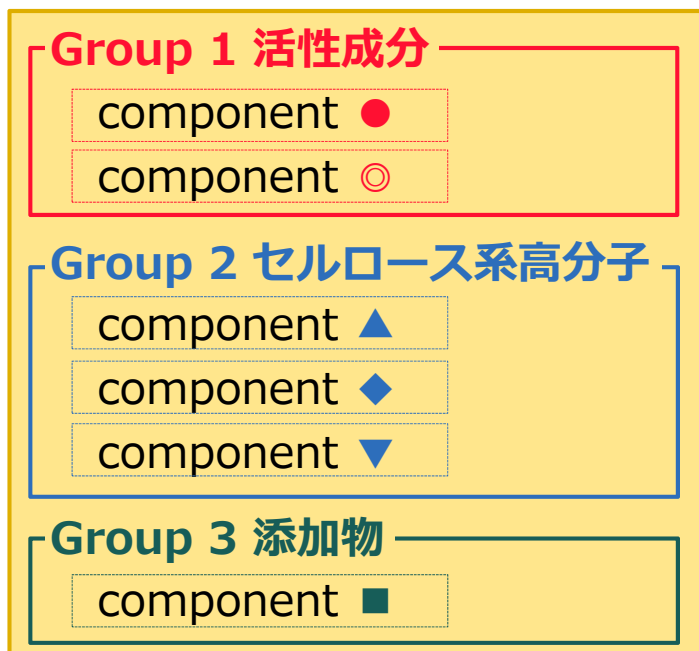
抄録	ABSTRACT: The present invention provides a pharmaceutical compn. contg. dorzolamide or a salt, a cellulose-based polymer, and boric acid or its salt with a pH of 6.0 or less, wherein the compn. is capable of suppressing the decrease in the viscosity of the pharmaceutical compn. over time.	CAplus ファイルの抄録
----	--	----------------

© 2020 化学情報協会

文献

配合例 1
 活性成分 ●, ◎ と
 セルロース系高分子
 ▲, ◆, ▼ と
 添加物 ■
 から成る組成物

CHEM (構成成分情報)



各成分を役割ごとに
グループ化し収録

© 2020 化学情報協会

特許例

JP 6132968 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

ドルゾラミド 又はその塩、セルロース系高分子、及び ホウ酸 又はその塩を含有し、そして pH が 6.0 以下である、医薬組成物。

【請求項 2】

ドルゾラミド 又はその塩が **ドルゾラミド塩酸塩** である、請求項 1 に記載の医薬組成物。

【請求項 3】

ドルゾラミド 又はその塩の含有量が 0.1 ~ 5% (w/w) である、請求項 1 又は 2 に記載の医薬組成物。

【請求項 4】

セルロース系高分子が、**ヒドロキシエチルセルロース**、**ヒドロキシメチルセルロース**、及び **ヒドロキシシロピルメチルセルロース** よりなる群から選択される 1 又は複数のセルロース系高分子である、請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に記載の医薬組成物。

【請求項 5】

セルロース系高分子の含有量が 0.001 ~ 10% (w/w) である、請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の医薬組成物。

【請求項 6】

ホウ酸 又はその塩の含有量が 0.001 ~ 10% (w/w) である、請求項 1 ~ 5 のいずれか一項に記載の医薬組成物。

【請求項 7】

pH が 3.0 ~ 6.0 である、請求項 1 ~ 6 のいずれか一項に記載の医薬組成物。

:

活性成分

セルロース系高分子

添加物

© 2020 化学情報協会

構成成分情報にグループ化した各成分が収録される

記載位置: 付コリ 記載位置: デスクリプション	LOC SECTION CATEGORY: Claim LOC SECTION DESCRIPTOR: Claim 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10
グループ 1 グループ デスクリプション 成分リスト グループ: 選択性 グループ: キーワード	GROUP G1 GROUP DESCRIPTOR: active ingredient COMPONENT LIST: C1-C2 OPTIONALITY: Mandatory GROUP VOCABULARY: Formulation active agents; Active agents; For
グループ: 量	GROUP AMOUNT: 0.1-5 w/w %
成分 CAS RN® 成分名 成分: キーワード	COMPONENT C1 REGISTRY NUMBER: 130693-82-2 COMPONENT NAME: dorzolamide hydrochloride COMPONENT VOCABULARY: Carbonic anhydrase inhibitors; Carb inhibitors; Carbonic acid anhydrase inhibitors, CA; Carbonic anhydrase inhibitor
化学物質名	PREFERRED CHEMICAL NAME: 4H-Thieno[2,3-b]thiopyran-2-sulfonamide, 4-(ethylamino)-5,6-dihydro-6-methyl-, 7,7-dioxide, hydrochloride (1:1), (4S,6S)- (ACI)
成分: 量 成分: 機能 成分: 選択性	COMPONENT AMOUNT: 0.1-5 w/w % FUNCTION DESCRIPTION: carbonic anhydrase inhibitors COMPONENT OPTIONALITY: Mutually exclusive alternatives

グループ 1
活性成分

各成分をグループ
ごとに収録

© 2020 化学情報協会

構成成分情報 (つづき)

成分 CAS RN® 成分名 成分: キーワード	COMPONENT C2 REGISTRY NUMBER: 120279-96-1 COMPONENT NAME: dorzolamide COMPONENT VOCABULARY: Carbonic anhydrase inhibitors; Carbonic inhibitors; Carbonic acid anhydrase inh inhibitors, CA; Carbonic anhydrase inh
化学物質名	PREFERRED CHEMICAL NAME: 4H-Thieno[2,3-b]thiopyran-2-sulfonamide 4-(ethylamino)-5,6-dihydro-6-methyl-, 7 (4S,6S)- (9CI, ACI)
	OTHER INDEXED NAMES: 4H-Thieno[2,3-b]thiopyran-2-sulfonamide, 4-(ethylamino)-5,6-dihydro-6-methyl-, 7,7-dioxide, (4S-trans)- (ZCI)
	OTHER NAMES: (4S,6S)-4-(Ethylamino)-5,6-dihydro-6-me [2,3-b]thiopyran-2-sulfonamide 7,7-diox 4S,6S-Dorzolamide; Dorzolamide
成分: 量 成分: 機能 成分: ノート 成分: 選択性	COMPONENT AMOUNT: 0.1-5 w/w % FUNCTION DESCRIPTION: carbonic anhydrase inhibitors COMPONENT NOTES: or its salt COMPONENT OPTIONALITY: Mutually exclusive alternatives

物質の基本情報

- CAS RN®
- 成分名
- 化学物質名

物質の機能
(炭酸脱水酵素
阻害剤)

© 2020 化学情報協会

構成成分情報 (つづき)

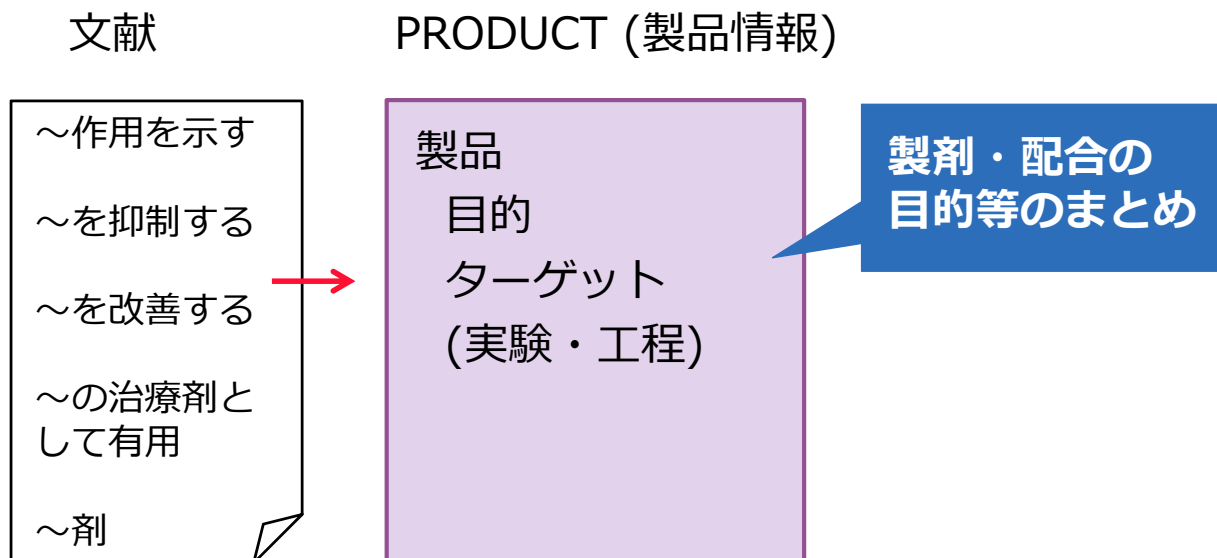
グループ 2 グループ ディスクリプション 成分リスト グループ : 選択性 グループ : キーワード グループ : 量	GROUP G2 GROUP DESCRIPTOR: cellulosic polymers COMPONENT LIST: C3-C5 OPTIONALITY: Mandatory GROUP VOCABULARY: Cellulosic materials GROUP AMOUNT: 0.001-10 w/w %	グループ 2 セルロース系高分子
成分 CAS RN® 成分名 化学物質名	COMPONENT C3 REGISTRY NUMBER: 37353-59-6 COMPONENT NAME: hydroxymethylcellulose PREFERRED CHEMICAL NAME: Cellulose, hydroxymethyl ether (8CI, 9CI, ACI) OTHER NAMES: Cellosize QPS 52000; Hydroxymethylcellulose; Marpolon 6000; Tylose DKL; Walocel MT 20.000PV; Walocel MT 20.000PV; Walocel MT 20.000PV; Walocel MT 20.000PV	グループの選択性 : 配合に必須なので Mandatory
成分 : 選択性	COMPONENT OPTIONALITY: One or more	成分の選択性 : 3 物質のうち 1 以上必要 なので One or more
成分 CAS RN® 成分名 化学物質名	COMPONENT C4 REGISTRY NUMBER: 9004-62-0 COMPONENT NAME: hydroxyethyl cellulose PREFERRED CHEMICAL NAME: Cellulose, 2-hydroxyethyl ether (8CI, 9CI, ACI) OTHER NAMES: 2-Hydroxyethyl cellulose; 2-Hydroxyethyl cellulose	
成分 : 選択性	COMPONENT OPTIONALITY: One or more	

© 2020 化学情報協会

構成成分情報 (つづき)

成分 CAS RN® 成分名 化学物質名	COMPONENT C5 REGISTRY NUMBER: 9004-65-3 COMPONENT NAME: hydroxypropylmethylcellulose PREFERRED CHEMICAL NAME: Cellulose, 2-hydroxypropyl methyl ether (9CI, ACI) :	
成分 : 量	COMPONENT OPTIONALITY: One or more	
グループ 3 グループ ディスクリプション 成分リスト グループ : 選択性	GROUP G3 GROUP DESCRIPTOR: Additional ingredients COMPONENT LIST: C6 OPTIONALITY: Mandatory	グループ 3 添加物
成分 CAS RN® 成分名 化学物質名	COMPONENT C6 REGISTRY NUMBER: 10043-35-3 COMPONENT NAME: boric acid PREFERRED CHEMICAL NAME: Boric acid (H3BO3) (6CI, 8CI, 9CI, ACI) :	
成分 : 量 成分 : ノート 成分 : 選択性	COMPONENT AMOUNT: 0.001-10 w/w % COMPONENT NOTES: salt thereof COMPONENT OPTIONALITY: Mandatory	

© 2020 化学情報協会



© 2020 化学情報協会

特許例

27

JP 6132968 【背景技術】 【発明を実施するための形態】

【背景技術】

【0002】

炭酸脱水酵素阻害剤であるドルゾラミドは、**眼圧下降作用**を示すことから**緑内障**又は**高眼圧症**の治療に有用であり、ドルゾラミドを含有する製剤がトルソプト（登録商標）**点眼液**として販売されている。また、ドルゾラミドとチモロールの両方を含有する組成物は**高眼圧の処置**に有用であることが特許文献1に記載されており、ドルゾラミドとチモロールを含有する製剤がコソプト（登録商標）配合**点眼液**として販売されている。

：

【発明を実施するための形態】

：

【0074】

本発明の医薬組成物の剤形は、医薬品として使用可能なものであれば特に制限されないが、特に**点眼剤**が好ましく、当該技術分野における通常の方法に従って製造することができる。

【0075】

本発明の医薬組成物は、水性組成物であり、例えば**眼科用**の予防剤及び／又は治療剤、特に**緑内障**又は**高眼圧症**の予防剤及び／又は治療剤として有用である。

どのような症状に
作用するか

どのような目的で
使われるか

© 2020 化学情報協会

製品情報に目的やターゲットが収録される

製品名：コード 製品名、概要	PRODUCT NAME CODE: author PRODUCT NAME VALUE: pharmaceutical composition containing dor	目的や形状 (点眼液)
製品 1 製品：目的 製品の剤形・形状 製品：キーワード	PRODUCT PURPOSE: PA1 PHYSICAL FORM: Desc: ophthalmic solutions PRODUCT VOCABULARY: Ophthalmic agents; Ophthalmic drug; Ophthalmic drugs; Ophthalmic agent; Eye drugs; Eye drug; Eye treatment ;	
投与経路	DELIVERY ROUTE: ophthalmic	
ターゲット：関連性 ターゲット：種類	TARGET RELATIONSHIP: treats TARGET TYPE: glaucoma ocular hypertension	ターゲット (緑内障, 高眼圧症, 人)
ターゲット：関連性 ターゲット：種類 ターゲット：キーワード	TARGET RELATIONSHIP: treats TARGET TYPE: ocular hypertension TARGET VOCABULARY: Ocular hypertension; Eye, intraocular hyp; Intraocular hypertension; Ocular hyperten; Intraocular hypertensions	
ターゲット：関連性 ターゲット：種類 ターゲット：キーワード	TARGET RELATIONSHIP: treats TARGET TYPE: human TARGET VOCABULARY: Human; Homo sapiens; Humans; Homo cro-magnonensis ;	

© 2020 化学情報協会

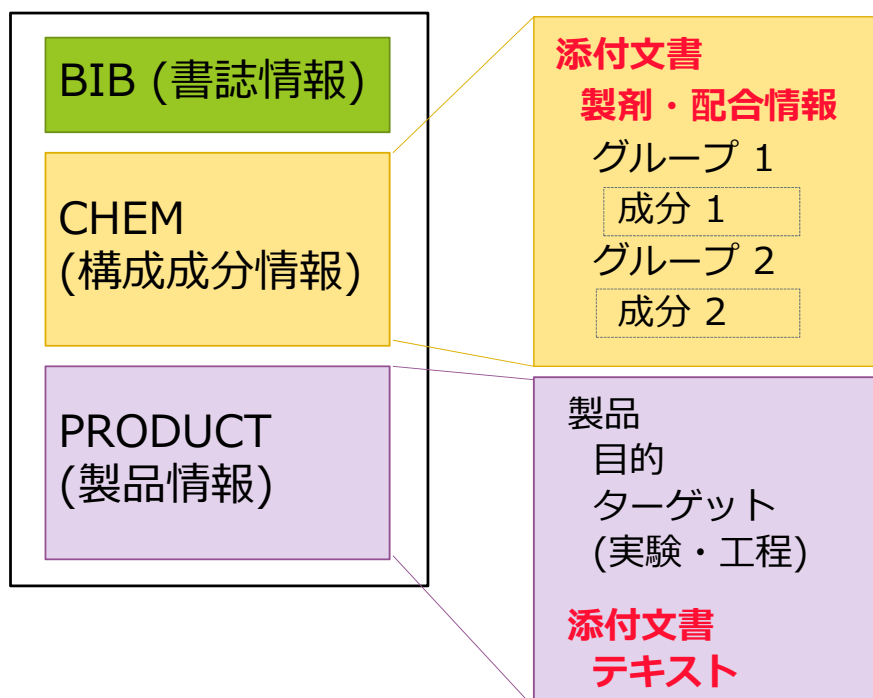
レコード構成 (添付文書)

添付文書

1 レコード = 1 製剤・配合

テキスト

配合情報



© 2020 化学情報協会

書誌情報から **DailyMed 由来** の添付文書であることがわかる

レコード番号 NDCコード 入力日 更新日	ACCESSION NUMBER: 2019:38334 CASFORMULTNS NATIONAL DRUG CODES: 16781-391-60 ENTRY DATE: 22 Sep 2019 UPDATE DATE: 21 Apr 2020	DailyMed 由来の 添付文書
添付文書の出典	ATTRIBUTION: DailyMed® is produced by the National Library of Medicine. DailyMed is a registered trademark of the U.S. National Library of Medicine	
資料種類	DOCUMENT TYPE: Insert	資料種類 : Insert
処方番号 製剤・配合剤 イスクリプション	FORM NUMBER: Form 1 FORMULATIONS DESC: Locoid: Corticosteroid Agent	
グループリスト グループ数 成分数 ターゲット数	GROUP NUMBERS: G1-G7 GROUP COUNT: 7 COMPONENT COUNT: 7 TARGET COUNT: 4	

© 2020 化学情報協会

添付文書例

NDC Code: 16781-391-60

INGREDIENTS AND APPEARANCE (成分と外観)

LOCOID hydrocortisone butyrate solution		
ACTIVE INGREDIENT/ACTIVE MOIETY		
Ingredient Name	Basis of Strength	Strength
HYDROCORTISONE BUTYRATE (UNII: 05RMF7YPWN) (HYDROCORTISONE - UNII: WI4X0X7BPJ)	HYDROCORTISONE BUTYRATE	1 mg in 1 mL
INACTIVE INGREDIENTS		
Ingredient Name	Strength	
ANHYDROUS CITRIC ACID (UNII: XF417D3PSL)		
GLYCERIN (UNII: PDC6A3C0OX)		
ISOPROPYL ALCOHOL (UNII: ND2M416302)		
POVIDONE, UNSPECIFIED (UNII: FZ989GH94E)		
WATER (UNII: 059QF0KO0R)		
SODIUM CITRATE, UNSPECIFIED FORM (UNII: 1Q73Q2JULR)		

活性成分

その他の成分

© 2020 化学情報協会

構成成分情報に 1 グループ = 1 成分で収録される

記載位置: 付コリー 記載位置: デイスクリプション	LOC SECTION CATEGORY: Product insert LOC SECTION DESCRIPTOR: Product insert
グループ 1 グループ デイスクリプション 成分リスト グループ: 選択性	GROUP G1 GROUP DESCRIPTOR: Additional ingredients COMPONENT LIST: C1 OPTIONALITY: Mandatory
成分 CAS RN® 成分名 成分: キーワード	COMPONENT C1 REGISTRY NUMBER: 13609-67-1 COMPONENT NAME: hydrocortisone butyrate COMPONENT VOCABULARY: Formulation active agents; Active agents; Formulation :
成分: 量 成分: 機能 成分: ノート	COMPONENT AMOUNT: 1 mg/1 mL FUNCTION DESCRIPTION: active agent COMPONENT NOTES: (UNII: 05RMF7YPWN) (hydrocortisone UNII: WI4X0X7BPJ) 0.1%
成分: 選択性	COMPONENT OPTIONALITY: Mandatory
グループ 2 グループ デイスクリプション 成分リスト グループ: 選択性	GROUP G2 GROUP DESCRIPTOR: Additional ingredients COMPONENT LIST: C2 OPTIONALITY: Mandatory :

添付文書の場合は
1 グループ = 1 成分

© 2020 化学情報協会

添付文書例

NDC Code: 16781-391-60

<p>NDC Code(s): 16781-391-60 Packager: Bausch Health US, LLC Category: HUMAN PRESCRIPTION DRUG LABEL DEA Schedule: None Marketing Status: New Drug Application</p>	
<p>+ SPL UNCLASSIFIED SECTION FOR TOPICAL USE ONLY</p> <p>+ DESCRIPTION (性状) Locoid® (hydrocortisone butyrate) Solution, 0.1% contains <u>the topical corticosteroid</u>, hydrocortisone butyrate, a nonfluorinated hydrocortisone ester. It has the chemical name ...</p> <p>+ CLINICAL PHARMACOLOGY (薬効薬理) <u>Topical corticosteroids</u> share anti-inflammatory, anti-pruritic, and vasoconstrictive actions. The mechanism of anti-inflammatory activity of topical corticosteroids is unclear. Various laboratory ...</p> <p>+ PHARMACOKINETICS (薬物動態)</p>	<p>+ INDICATIONS AND USAGE (効能, 用法) Locoid (hydrocortisone butyrate) Solution, 0.1% is indicated for the relief of the inflammatory and pruritic manifestations of seborrheic dermatitis.</p> <p>+ CONTRAINDICATIONS (禁忌) None.</p> <p>+ PRECAUTIONS (使用上の注意) General - Systemic absorption of topical corticosteroids has produced reversible hypothalamic-pituitary-adrenal (HPA) axis suppression, manifestations of Cushing's syndrome, hyperglycemia, and ...</p> <p>+ ADVERSE REACTIONS (副作用) The following local adverse reactions are reported infrequently with <u>topical corticosteroids</u> but may occur more frequently with the use of occlusive dressings. These reactions are listed in an ...</p> <p>+ DOSAGE AND ADMINISTRATION (用法・用量) Locoid (hydrocortisone butyrate) Solution, 0.1% should be applied to the affected areas as a thin layer 2 or 3 times daily depending on the severity of the condition.</p>
<p>性状や薬効薬理など FDA で決められた項目ごとに記載されている</p>	

© 2020 化学情報協会

製品情報に製品名，目的やターゲットが収録される

製品名：コード 製品名，概要	PRODUCT NAME CODE: brand PRODUCT NAME VALUE: Locoid	
製品 製品：目的 製品の特長 製品の剤形・形状 用量	PRODUCT PA1 PURPOSE: corticosteroid agent FEATURE: net content: 60 ml in 1 bottle PHYSICAL FORM: Desc: solutions DOSE: Non-Numeric: thin film, Desc: applic area	目的や形状 (コルチコ ステロイド剤)
製品：キーワード	PRODUCT VOCABULARY: Topical drug delivery systems; Topical pharmaceuticals; Topical medicaments; Pharmaceutical :	
投与経路	DELIVERY ROUTE: topical	ターゲット (人， 脂漏性皮膚炎， 炎症症状， 掻痒感)
ターゲット：関連性 ターゲット：種類	TARGET RELATIONSHIP: treats TARGET TYPE: human	
ターゲット：関連性 ターゲット：ディスクリプション ターゲット：種類	TARGET RELATIONSHIP: relieves TARGET DESCRIPTION: due to seborrheic dermatitis TARGET TYPE: inflammatory manifestation	
ターゲット：関連性 ターゲット：ディスクリプション ターゲット：種類	TARGET RELATIONSHIP: relieves TARGET DESCRIPTION: due to seborrheic dermatitis TARGET TYPE: pruritic manifestation :	

© 2020 化学情報協会

製品情報に添付文書のテキストが収録される

製品：活性ノト	ACTIVITY NOTES: description: for topical use.	
製品：活性ノト	ACTIVITY NOTES: DESCRIPTION: Locoid® (hydrocortisone butyrate) (性状) solution, 0.1% contains the topical corticosteroid, :	
製品：活性ノト	ACTIVITY NOTES: clinical pharmacology: topical corticosteroids share (薬効薬理) antiinflammatory, anti-pruritic and vasoconstrictive :	
製品：活性ノト	ACTIVITY NOTES: pharmacokinetics: the extent of percutaneous (薬物動態) absorption of topical corticosteroids-is determined by :	
製品：活性ノト	ACTIVITY NOTES: indications and usage: Locoid® (hydrocortisone (効能，用法) butyrate) solution, 0.1% is indicated for the relief of the inflammatory and pruritic manifestations of :	
製品：活性ノト	ACTIVITY NOTES: Contraindications: none.	
製品：活性ノト	ACTIVITY NOTES: general: systemic absorpt (使用上の注意) corticosteroids h hypothalamic-pitu :	基本索引で，添付文書の テキスト部分を網羅的に 検索できる
製品：活性ノト	ACTIVITY NOTES: information for p corticosteroids s information and i :	

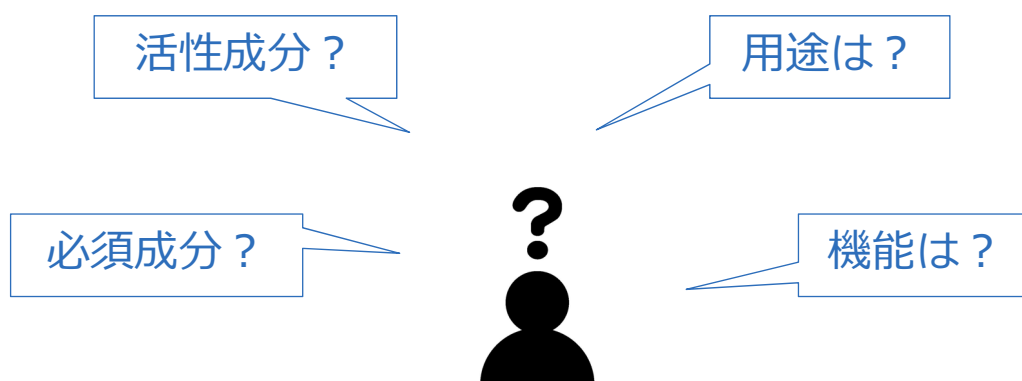
© 2020 化学情報協会

活用シーン

こんなお悩みに CASFORMULTNS

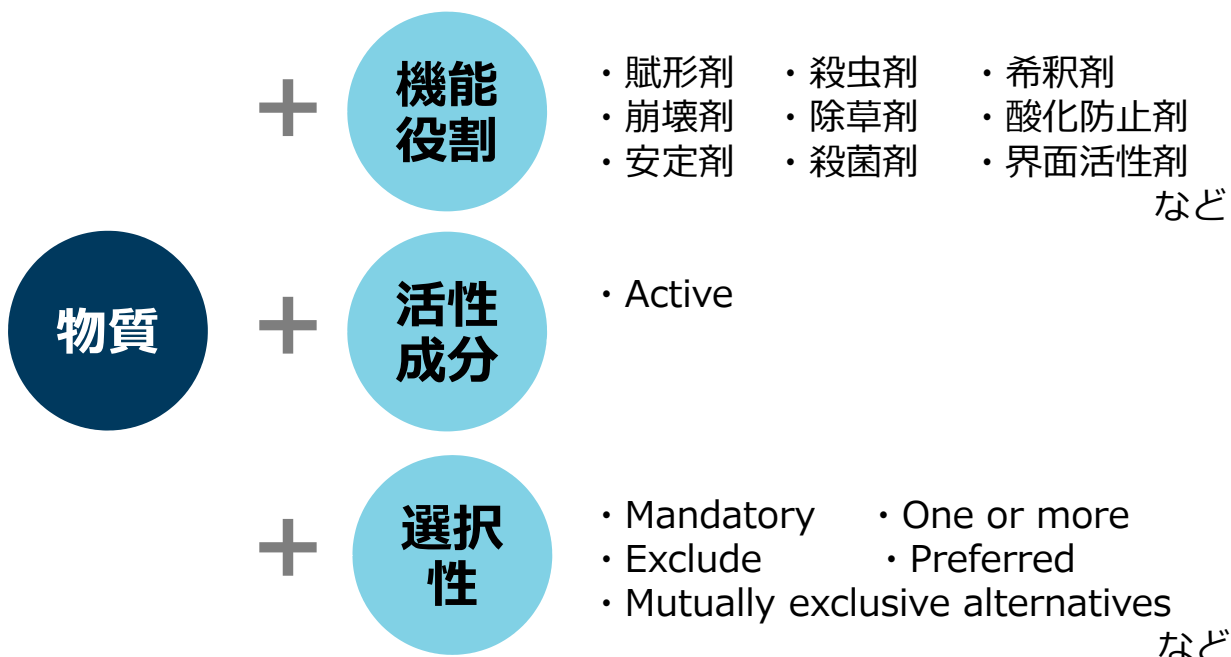
37

配合情報をうまく検索できず困っています



➡ CASFORMULTNS の利用をお勧めします！

製剤・配合に関する項目を指定できる



© 2020 化学情報協会

レコード例

物質情報と製剤・配合の関連項目を組み合わせた検索が可能

グループ 1	GROUP	G1
グループ ディスクリプション	GROUP DESCRIPTOR:	Additional ingredients
成分リスト	COMPONENT LIST:	C1
グループ : 選択性	OPTIONALITY:	Mandatory
成分	COMPONENT	C1
CAS RN®	REGISTRY NUMBER:	639826-16-7 物質
成分名	COMPONENT NAME:	fenoxasulfone
成分 : キーワード	COMPONENT VOCABULARY:	Herbicides; Weedicides; Phytocides; Herbicide; Weed control agents; Selective synergistic herbicides; :
化学物質名	PREFERRED CHEMICAL NAME:	Isoxazole, 3-[[[(2,5-dichloro-4-ethoxyphenyl)methyl]sulfonyl]-4,5-dihydro-5,5-dimethyl-
成分 : 機能	FUNCTION DESCRIPTION:	herbicides; active agent 機能 : 除草剤 活性成分
成分 : 選択性	COMPONENT OPTIONALITY:	Mandatory 必須成分

検索式 => S 639826-16-7 (L) HERBICIDE?/CFU (L) ACTIVE?/CFU (L) MANDATORY/COP

© 2020 化学情報協会

製剤・配合の用途・目的, ターゲットも収録

配合
情報

+

用途
目的

- ・医薬品
- ・化粧品
- ・農薬
- ・薬剤
- ・ケア用品
- ・除草剤
- ・抗腫瘍剤
- ・ヘアケア
- ・殺虫剤
- ・点眼剤
- ・スキンケア
- ・肥料
- ・抗炎症薬
- ・制汗剤
- など

+

ターゲット

- ・人
- ・皮膚
- ・痛み
- ・植物
- ・髪
- ・炎症
- ・虫
- ・眼
- ・肥満
- ・作物
- ・口
- ・高血圧
- ・雑草
- ・白血病
- ・土壌
- ・乳がん
- ・認知症
- など

© 2020 化学情報協会

レコード例

複数の関連フィールドで補完した検索が可能

(例) 目的：消毒剤

処方番号 製剤・配合デスクリプション 製品名：コード 製品名、概要 製品 製品：目的 製品の特長 製品の剤形・形状 製品：キーワード	FORM NUMBER: Form 1 FORMULATIONS DESC: Transparent Gel-Like Skin-Sterilizing Agent: Disinfectants : PRODUCT NAME CODE: author PRODUCT NAME VALUE: transparent gel-like skin-sterilizing agent PRODUCT PA1 PURPOSE: disinfectants
	FEATURE: transparent PHYSICAL FORM: Desc: gel PRODUCT VOCABULARY: Gels; Colloids, gels; Coll : Sterilant; Disinfecting agents; Synergistic bactericides, Disinfectants , and Antiseptics; Synergistic disinfectants ; Antiseptics, synergistic; Sanitizers; Sanitizer; Bactericides, Antiseptics, and :

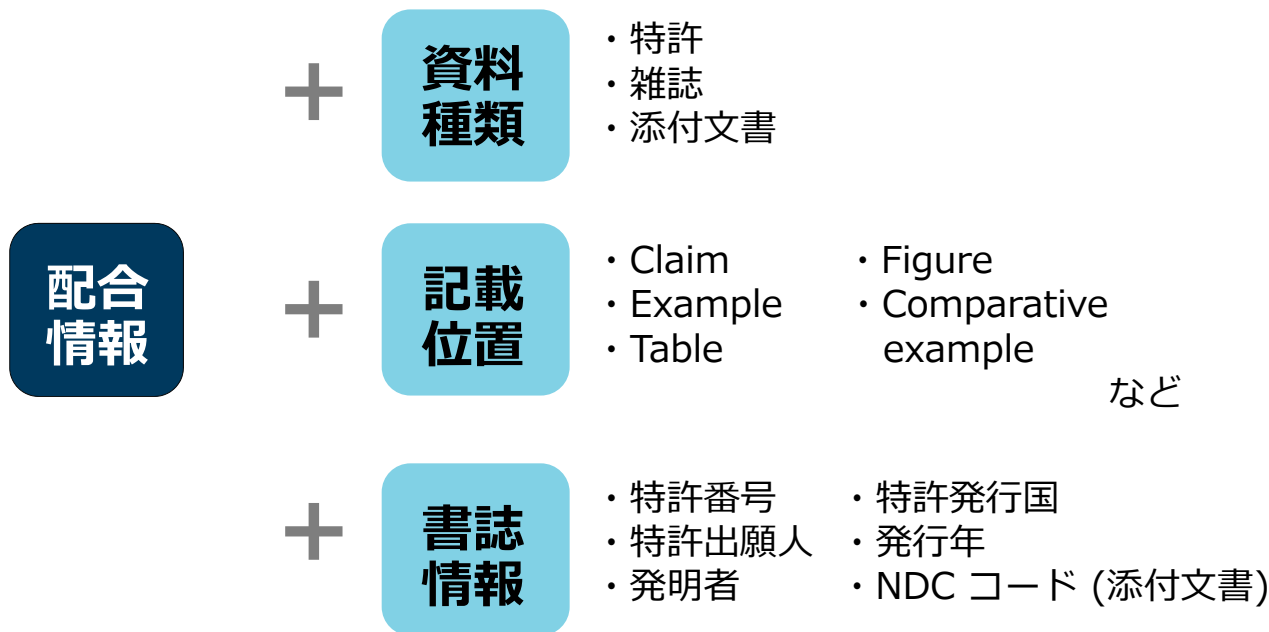
目的のフィールド

関連するフィールド
にも同義語を収録

検索式 => S L# AND DISINFECTANT?/FD,GDS,PUP,PNV,PVO,PF

© 2020 化学情報協会

その他にも，絞り込みに役立つ項目がある



© 2020 化学情報協会

レコード例

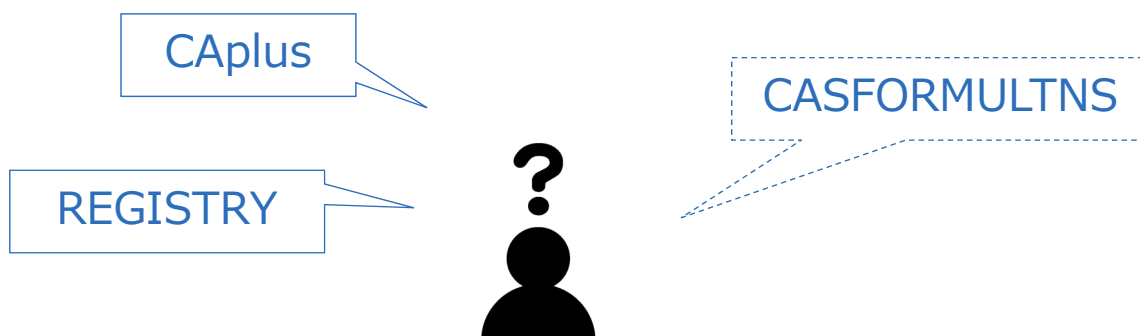
原報の記載位置の情報を用いた検索が可能

レコード番号	ACCESSION NUMBER:	2018:361908 CASFORMULTNS
標題	TITLE:	Oily suspended pesticide composition and method for producing the same
著者名, 発明者	AUTHOR(S):	Maeda, Kazuya; Takatori, Naohiko
雑誌名	JOURNAL TITLE:	Jpn. Kokai Tokkyo Koho
特許出願人	PATENT ASSIGNEE:	Nihon Nohyaku Co., Ltd.
資料種類	DOCUMENT TYPE:	Patent
特許情報	PATENT INFORMATION:	
	PATENT NO.	KIND DATE APPLICATION NO. DATE
	JP 2018083757	A 20180531 JP 2015-30643 20150219
処方番号	FORM NUMBER:	Form 2
製剤・配合剤	FORMULATIONS DESC:	Agrochemical Composition: Pesticide
デスクリプション	GROUP NUMBERS:	G1-G5
グループリスト	GROUP COUNT:	5
グループ数	COMPONENT COUNT:	15
成分数	TARGET COUNT:	2
ターゲット数		
記載位置: カテゴリ	LOC SECTION CATEGORY:	Example
記載位置: デスクリプション	LOC SECTION DESCRIPTOR:	Example 1

検索式 => S L# AND P/DT AND EXAMPLE/LCC AND NIHON NOHYAKU/PA

© 2020 化学情報協会

REGISTRY/CAplus の検索に加えて、CASFORMULTNS も使ったほうがいいのですか？



➔ CAplus には収録されない配合成分情報が CASFORMULTNS では得られる場合があります

ケース 1

CAplus には重要な事項に関連する物質が収録されている

(例) JP6618595 【請求項 1】

第 1 の徐放性顆粒と第 2 の徐放性顆粒を含む医薬組成物であって、各々の徐放性顆粒が、芯顆粒と徐放性膜を含み、芯顆粒が、**カフェイン** および **ヒヨスチアミン** を含み、徐放性膜が、芯顆粒を被覆する外層であって、**エチルセルロース**、**タルク** および **グリセリン脂肪酸エステル** を含み…

【実施例】

：

表1 医薬組成物（顆粒）の処方例 1

	原料名
芯顆粒	カフェイン
	ペラドンナ総アルカロイド（ヒヨスチアミン）
	トウモロコシデンプン
	結晶セルロース
	ヒドロキシプロピルセルロース
	乳糖
徐放性膜	エチルセルロース
	グリセリン脂肪酸エステル
	タルク

CAplus に収録されていない物質

CASFORMULTNS にはすべての配合成分が収録されている

成分 CAS RN® 成分名	COMPONENT REGISTRY NUMBER: COMPONENT NAME:	C3 9005-25-8 corn starch	賦形剤
成分：機能 成分：選択性	FUNCTION DESCRIPTION: COMPONENT OPTIONALITY:	pharmaceutical excipient Mandatory	
成分 CAS RN® 成分名	COMPONENT REGISTRY NUMBER: COMPONENT NAME:	C4 9004-34-6 crystalline cellulose	CASFORMULTNS ではこれらの成分が 収録されている
成分：機能 成分：選択性	FUNCTION DESCRIPTION: COMPONENT OPTIONALITY:	pharmaceutical excipient Mandatory	
成分 CAS RN® 成分名	COMPONENT REGISTRY NUMBER: COMPONENT NAME:	C5 9004-64-2 hydroxypropyl cellulose	崩壊剤
成分：機能 成分：選択性	FUNCTION DESCRIPTION: COMPONENT OPTIONALITY:	disintegrant Mandatory	
成分 CAS RN® 成分名	COMPONENT REGISTRY NUMBER: COMPONENT NAME:	C6 63-42-3 lactose	

© 2020 化学情報協会

ケース 2

CPlus では CAS RN® ではなくキーワード (統制語) で収録される物質がある

=> FILE REGISTRY	
=> S TEA TREE OIL/CN	* (アスタリスク) つきの CAS RN® : CPlus の索引に使われない RN 68647-73-4 REGISTRY * * Use of this CAS Registry Number alone as a search term in other STN files may result in incomplete search results. : CN Tea tree oil
L1 1 TEA TREE OIL/CN	
=> FILE CAPLUS	
=> S L1	CPlus ではヒットしない
L2 0 L1	
=> FILE CASFORM	
=> S L1 OR TEA TREE OIL/CN, CNM	CASFORMULTNS ではヒット
L3 5633 L1 OR TEA TREE OIL/CN, CNM	

© 2020 化学情報協会

CASFORMULTNS にはこのような総称名物質も成分として収録されている

グループ 3	GROUP	G3	
グループディスクリプション	GROUP DESCRIPTOR:	perfume	
成分	COMPONENT	C3	
CAS RN®	REGISTRY NUMBER:	68647-73-4	成分名
成分名	COMPONENT NAME:	tea tree oil	
成分: キーワード	COMPONENT VOCABULARY:	Essential oils, Melaleuca alternifolia; Oil of	
化学物質名	OTHER NAMES:	Essential oils, tea tree; Melaleuca	化学物質名
		alternifolia (cheel); Oil, Melaleuca	
		Oils, tea-tree; SH 0038; Tea tree oil;	
成分: 機能	FUNCTION DESCRIPTION:	perfumes	
成分: 形状	FORM DESCRIPTION:	Desc: oil	
成分: 選択性	COMPONENT OPTIONALITY:	Mandatory	

検索式 => S L1 OR TEA TREE OIL/CNM,CN

© 2020 化学情報協会

こんな時に CASFORMULTNS !

49

他のデータベースでは難しい以下のような検索が CASFORMULTNS ファイルなら可能です。

- 手指用アルコール消毒液の**配合を知りたい**
- “オリゴ糖” “~オイル” のような**総称名**から配合を探したい
- 自社で製造した物質の**新しい売り込み先**を探したい
- CAplus/MARPAT の検索にプラスして、**網羅的な調査**をしたい



© 2020 化学情報協会

CASFORMULTNS 検索事例

CASFORMULTNS 検索事例

事例 1 ・ 事例 2

化学情報協会 情報事業部

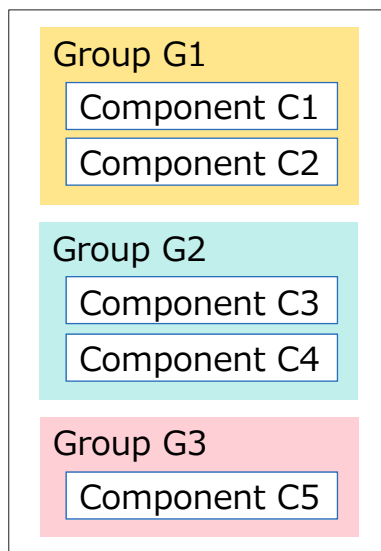
検索事例 1

蜜蝋が安定化剤として使われている配合を調べる

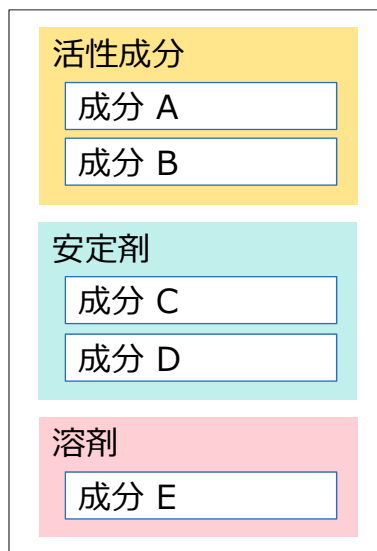


配合成分は役割ごとにグループ化されて収録される

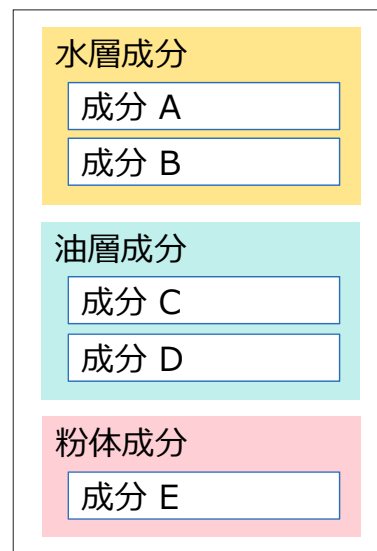
構成成分情報 (CHEM)



レコード例 1



レコード例 2



© 2020 化学情報協会

配合成分は名称や CAS RN® で収録される

GROUP G2
GCN Waxes and Waxy substances
RN 8063-08-9
GDS waxy substar
CMPS C3-C10
GOP Mandatory
GAM 0.2-52 wt %

グループの
化学物質名

グループに名称や CAS RN® が
収録されることもある

(WO2011052500 請求項 6)

ワックス状物質が、硬化油、植物性若しくは動物性油脂、高級アルコール、高級脂肪酸、グリセリン脂肪酸エステル及びシヨ糖脂肪酸エステルから選ばれる 1 種または 2 種以上である請求項 1 乃至 5 のいずれか 1 項に記載の医薬組成物。

COMPONENT C3
RN 555-43-1
CNM hardened oil
CCN Octadecanoic acid, 1,1',1''-(1,2,3-propanetriyl) ester (ACI)
CFR Desc: waxes
 :

成分名

成分の
化学物質名

COMPONENT C4
CNM vegetable or animal oil
CFR Desc: waxes
CNO wax-like substance having a melting point of 40 to
 :

© 2020 化学情報協会

慣用名など化合物の名称がわかっている場合

- /CN (グループ, 成分の化学物質名) で検索

⇒ S BENZOIC ACID/CN

検索対象

- ・グループの化学物質名 (GCN)
- ・成分の化学物質名 (CCN)

- /CNM (成分名) で検索

⇒ S BENZOIC ACID/CNM



完全名称の検索では /CN と /CNM を併用する

⇒ S BENZOIC ACID/CN, CNM

化合物の完全な名称がわからない場合
(前方・中間・後方一致検索)

- /CNS (自然名称セグメント) で検索

⇒ S ?PARAFFIN?/CNS

検索対象

- ・グループの化学物質名 (GCN)
- ・成分の化学物質名 (CCN)

- 成分名 (CNM) は, 基本索引の検索に (P) CNM/FA を演算する

⇒ S ?PARAFFIN? (P) CNM/FA



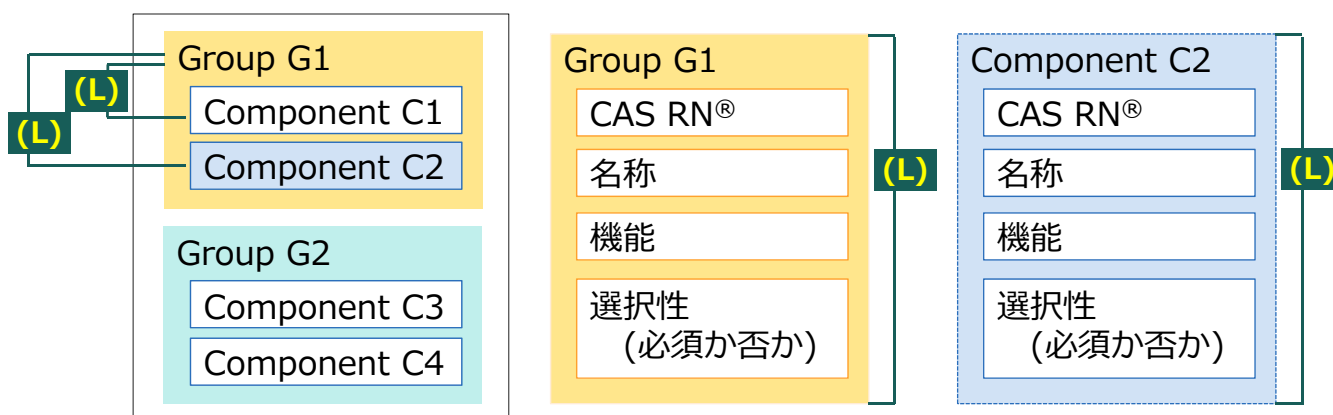
部分名称検索では /CNS と (P) CNM/FA を併用する

⇒ S ?PARAFFIN?/CNS OR ?PARAFFIN? (P) CNM/FA

各グループ/成分には、配合成分の名称や CAS RN®のほか、機能や選択性等が収録されている

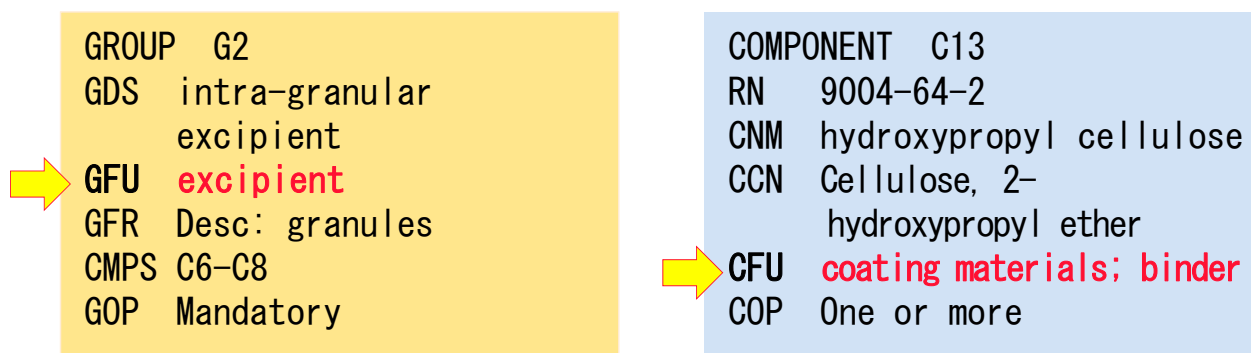


同一グループ内、同一成分内に限定する場合には
(L) 演算子を利用する



© 2020 化学情報協会

機能・役割は GFU, CFU フィールドに収録される



- /GFU や /CFU は **フレーズ単位の検索フィールド** である



EXPAND で事前に確認するか、トランケーション記号？
を使って検索する

© 2020 化学情報協会

蜜蝋の CAS RN® と CAS RN® 所在の確認 (REGISTRY ファイル)

```

=> FILE REGISTRY                ← REGISTRY に入る

=> E BEESWAX/CN                ← BEESWAX を /CN で EXPAND する
E1      1      BEESIOSIDE Q/CN
E2      1      BEESIX/CN
E3      1 --> BEESWAX/CN
E4      1      BEESWAX ALCOHOLS/CN
      :

=> S E3                        ← E3 を検索する
L1      1 BEESWAX/CN

=> D
L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2020 A
RN 8012-89-3 REGISTRY *
CN Beeswax (CA INDEX NAME)
      :
LC STN Files: ADISNEWS, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAPLUS,
      CHEMCATS, CHEMLIST, CIN, DDFU, DRUGU, EMBASE, IPA, MEDLINE, MSDS-OHS,
      :
    
```

8012-89-3 は CASFORMULTNS
に収録されていない

© 2020 化学情報協会

蜜蝋の検索 (CASFORMULTNS ファイル)

```

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

=> E BEESWAX/CN                ← /CN で EXPAND する
E1      1      BEESIOSIDE O/CN
E2      9590   BEESIX/CN
E3      0 --> BEESWAX/CN
E4      1      BEESWAX, REACTION PRODUCTS WITH HYDROXY-TERMINATED DI-ME SIL
      OXANES/CN
      :

=> E BEESWAX/CNM              ← /CNM (成分名) で EXPAND する
E1      4      BEESLOW/CNM
E2      3      BEESON VP 60/CNM
E3      19881 --> BEESWAX/CNM
E4      1      BEESWAX &AMP; BHT/CNM
      :

=> S BEESWAX?/CNM            ← BEESWAX で始まる成分名を検索する
L2      20588 BEESWAX?/CNM
    
```

© 2020 化学情報協会

蜜蝋の機能を「安定化剤」に限定 (CASFORMULTNS ファイル)

```

=> E STABILIZER/CFU, GFU          ← 安定化剤を /CFU, GFU で EXPAND する
E1          1      STABILIZED RETINOID/CFU
E2          5      STABILIZED RICE BRAN CARRIER/CFU
E3         31339 --> STABILIZER/CFU
E4         4470      STABILIZER/CFU
E5          1      STABILIZER (BUFFER)/CFU
E6          1      STABILIZER (KRATON G1701)/CFU
E7          4      STABILIZER ADDITIVE/CFU
E8         51      STABILIZER ADDITIVES/CFU
E9          9      STABILIZER AGENT/CFU
E10         4      STABILIZER AGENT/CFU
          :
=> S L2 (L) (STABILIZER? OR STABILIZING AGENT?)/CFU, GFU
L3          87 L2 (L) (STABILIZER? OR STABILIZING AGENT?)/CFU, GFU
    
```

成分名 (CNM) と機能 (CFU, GFU) を (L) 演算子で
 同一グループまたは同一成分内に限定する

© 2020 化学情報協会

安定化剤のグループの 1 成分に蜜蝋が含まれる配合

```

=> D CHEM 1 69

L3 ANSWER 1 OF 87 CASFORMULTNS
COPYRIGHT 2020 ACS on STN

AN 2020:13956 CASFORMULTNS
LCC Example
LCD Example 5, 6, CR072, Table 29, 32,
    33, 34

GROUP G1
GDS Additional ingredients
CMPS C1
GOP Mandatory

COMPONENT C1
RN 916056-79-6
CNM ADX-102
CCN 2-Quinolinemethanol, 3-amino-6-
    chloro- $\alpha$ ,  $\alpha$ -dimethyl- (ACI)
    :
    
```

グループ 8 - 安定化剤

```

GROUP G8
GDS stabilizing agent
GFU stabilizing agent
CMPS C14-C15
GOP Mandatory

COMPONENT C14
RN 8009-03-8
CNM white petrolatum
CCN Petrolatum
CAM 3.00 % (w/w)
CFU stabilizing agent
COP Mandatory

COMPONENT C15
CNM beeswax
CAM 3.00 % (w/w)
CFU stabilizing agent
COP Mandatory
        
```

安定化剤 ①

安定化剤 ②

蜜蝋が安定化剤
 として配合

© 2020 化学情報協会

補助剤のグループの 1 成分に安定化剤である蜜蝋が含まれる配合

L3 ANSWER 69 OF 87 CASFORMULTNS
COPYRIGHT 2020 ACS on STN

AN 2012:136959 CASFORMULTNS
LCC Claim
LCD Claim 1, 2, 3
:

グループ 3 - 補助剤

GROUP G3
GDS auxiliary agents
GFU auxiliary agents
CMPS C4-C13
GOP Mandatory
GAM 0.01-10 pbm

COMPONENT C4 安定化剤 ①
CNM **beeswax**
CFU **stabilizing agents**
GOP One or more

蜜蝋が安定化剤として配合

COMPONENT C8 安定化剤 ①
CNM shortening
CFU stabilizing agents
GOP One or more

COMPONENT C9 可溶化剤
RN 123465-35-0
CNM phospholipid
CCN Phospholipids
CFU solubilizers
GOP One or more

COMPONENT C10 抗酸化剤
RN 1406-18-4
CNM vitamin E
CCN Vitamin E (9CI, ACI)
CFU antioxidants
GOP One or more
:

© 2020 化学情報協会

参考 : CAplus の検索結果との比較

CAplus ファイルでは 2 パターンの収録が考えられる

- パターン 1 - 蜜蝋が統制語

IT 蜜蝋
(・・・安定化・・・)

- パターン 2 - 安定化剤が統制語

IT 安定化剤
(・・・蜜蝋・・・)

=> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る

=> S BEESWAX/CT (L) STABILIZ? パターン 1 の検索
L4 112 BEESWAX/CT (L) STABILIZ?

=> S STABILIZING AGENTS+NT, PFT/CT (L) BEESWAX パターン 2 の検索
L5 2 STABILIZING AGENTS+NT, PFT/CT (L) BEESWAX

=> S L4 OR L5 ← 回答を一つにまとめる
L6 114 L4 OR L5

=> TRA L3 CPAN /AN

L3 から CPAN (CAplus レコード番号) を抽出し, CAplus の /AN で検索する

L7 TRANSFER L3 1- CPAN : 16 TERMS
L8 16 L7/AN ↑ 抽出した CAplus レコード番号の数

=> S L6 AND L8 ← CAplus, CASFORMULTNS の両方で得られた文献

L9 1 L6 AND L8

=> S L8 NOT L6 ← CASFORMULTNS のみで得られた文献

L10 15 L8 NOT L6

=> S L6 NOT L8 ← CAplus のみで得られた文献

L11 113 L6 NOT L8

CASFORMULTNS

AN 2020:3333
CPAN 2020:1111
DN 172:2222
:

=> TRA L# CPAN /AN

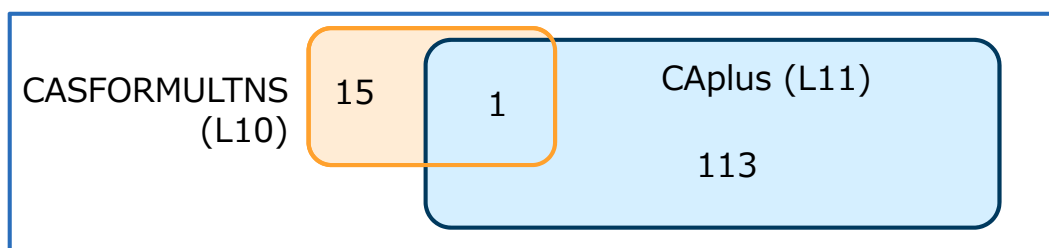


=> TRA L# AN /CPAN

CAplus

AN 2020:1111
DN 172:2222
:
OS CASFORMULTNS

参考 : CAplus の検索結果との比較



CASFORMULTNS のみで得られた回答

CAplus ファイルでは ;

- BEESWAX/CT または STABILIZING AGENTS/CT がない (6)
- BEESWAX または STABILIZING AGENTS がテキスト説明句中にない (9)

CAplus のみで得られた回答

- 言語 : スペイン語, ロシア語など
- 分野 : プラスチック, 合成高分子など
- 古い年代の文献
- 蜜蝋が異なる機能 (保湿剤など) で配合

検索事例 2

パラベンを含まない日焼け止めに配合されている防腐剤を解析する



パラベン：パラオキシ安息香酸エステルの総称

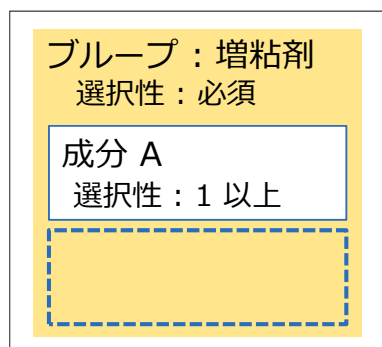
化粧品の防腐剤として古くから利用されている成分であるが、ごく稀にアレルギー等の皮膚トラブルを起こす可能性があるとして厚生労働省によって旧表示指定成分とされていた

特定成分を含まない配合

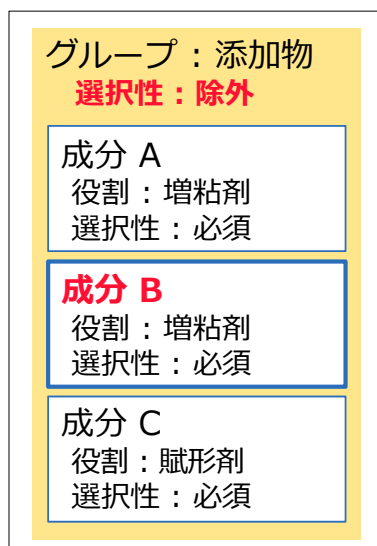
17

“特定成分 B を含まない” 配合は下記のように収録される

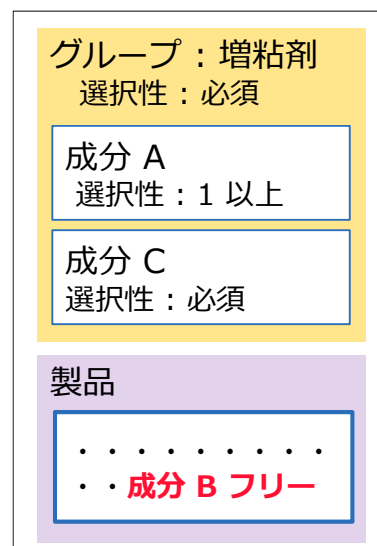
- パターン 1
成分の収録なし



- パターン 2
選択性：Exclude の収録



- パターン 3
キーワードで収録



配合に含まれないことが明記されている成分の
 選択性は **EXCLUDE** と収録される

(JP 2018033649)

【請求項 1】

成分 4

成分 3

グループ 2

簡易懸濁薬剤が、ゼラチンを包含せず寒天をゼリー基剤とするゼリー剤に内包されており、嚥下障害患者に対する薬剤投与に用いられることを特徴とするゼリー基剤。

GROUP G2
 GDS jelly base
 GFR Desc: jelly
 CMPS C3-C4
 GOP Mandatory
 GAM 0.9-1.1 wt %

COMPONENT C3
 RN 9002-18-0
 CNM agar
 CCN Agar (9CI, ACI)
 COP Mandatory

COMPONENT C4
 RN 9000-70-8
 CNM gelatin
 CCN Gelatins
 COP **Exclude**

© 2020 化学情報協会

用途情報は様々なフィールドに収録される

BIB (書誌情報)

FD 配合ディスクリプション

ABS (抄録)

CHEM (構成成分情報)

Group G1
**GDS グループ
 ディスクリプション**

Component C1

Component C2

PRODUCT (製品情報)

Purpose
PNV 製品名
PUP 製品の目的
PF 剤形・形状
PVO 製品のキーワード

Target

Experimental activity

Process

© 2020 化学情報協会

用途の主な検索フィールド

BIB (書誌情報)	配合ディスクリプション (/FD) 【単語】
ABS (抄録)	グループのディスクリプション (/GDS) 【単語・フレーズ】
CHEM (構成成分情報)	製品の目的 (/PUP) 【フレーズ】 製品の形状 (/PF) 【フレーズ】 製品名, 概要 (/PNV) 【単語・フレーズ】 製品のキーワード (/PVO) 【フレーズ】
PRODUCT (製品情報)	



フレーズ単位の検索フィールドでは, EXPAND で事前に確認するか, トランケーション記号 ? を使って検索する

© 2020 化学情報協会

パラベンを含まない日焼け止め中の防腐剤の解析

→ パラベンを含まない日焼け止めの検索

REGISTRY	1. パラベンの構造検索	クロスオーバー検索
CASFORMULTNS	2. パラベンの検索	パターン 1
	3. 日焼け止めの検索	
	4. パラベンを含まない日焼け止めの検索	パターン 2
5. パラベンの選択性が Exclude である日焼け止めの検索		
配合されている防腐剤の解析		
CASFORMULTNS	6. 4 と 5 の配合に含まれる防腐剤を検索	
	7. ヒットした防腐剤の解析	

※ 今回は「パラベンフリー」とキーワードで収録されている配合 (パターン 3) は実行しない

パラベンの構造検索 (REGISTRY ファイル)

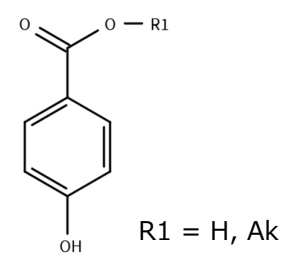
⇒ FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

⇒
L1 STRUCTURE UPLOADED

⇒ S L1 ← 部分構造検索 (サンプル検索)
L2 50 SEA SSS SAM L1

⇒ S L1 FULL ← 部分構造検索 (フルファイル検索)
L3 51890 SEA SSS FUL L1

⇒ S L3 AND CASFORM?/LC ← CASFORMULTNS に収録されている物質に限定する
L4 656 L3 AND CASFORM?/LC



R1 = H, Ak

© 2020 化学情報協会

パラベンの検索, 日焼け止めの検索 (CASFORMULTNS ファイル)

⇒ FILE CASFORMULTNS ← CASFORMULTNS ファイルに入る

⇒ S L4 ← REGISTRY の L# を使ったクロスオーバー検索 (CAS RN® の検索)
L5 122700 L4

⇒ S ?PARABEN?/CNS OR ?PARABEN? (P) CNM/FA ← パラベンの検索 (部分名称検索)
L6 108776 ?PARABEN?/CNS OR ?PARABEN? (P) CNM/FA

⇒ S (SUNSCREEN? OR SUNBLOCK? OR SUN BLOCK?)/FD, GDS, PUP, PNV, PVO, PF
L7 100348 (SUNSCREEN? OR SUNBLOCK? OR SUN BLOCK?)/FD, GDS, PUP, PNV, PVO, PF

用途が日焼け止めである配合を検索

© 2020 化学情報協会

パラベンを含まない日焼け止めの検索 (CASFORMULTNS ファイル)

パターン 1 (成分を含まない配合)

L5, L6 : パラベンを含む配合
L7 : 日焼け止めの配合

=> S L7 NOT (L5 OR L6)
L8 81952 L7 NOT (L5 OR L6)

パターン 2 (選択性が Exclude の配合)

(L) 演算子で, パラベンの
選択性を EXCLUDE に限定する

=> S L7 AND (L5 OR L6) (L) EXCLUDE/COP, GOP
L9 505 L7 AND (L5 OR L6) (L) EXCLUDE/COP, GOP

=> S L8 OR L9 ← パターン 1, 2 の回答を一つにまとめる
L10 82457 L8 OR L9

© 2020 化学情報協会

パターン 1 : パラベンを含まない配合

=> D BIB CHEM PRODUCT 512 2738 17300

L10 ANSWER 512 OF 82457 CASFORMULTNS
COPYRIGHT 2020 ACS on STN

AN 2020:13990 CASFORMULTNS
:
FN Form 4
FD Pharmaceutical Composition for
Treating Skin Disease: Therapeutic
Agent
:

GROUP G4 **グループ 4 - 防腐剤**
GDS preservative (選択性: Mandatory)
GFU preservatives
CMPS C7-C9
GOP Mandatory

COMPONENT C7 **配合に含まれる防腐剤 ①**
RN 122-99-6
CNM Phenoxyethanol
CCN Ethanol, 2-phenoxy- (6CI, 7CI, 8CI,
9CI, ACI)
CAM 1 % (w/w)
CFU preservatives
COP Mandatory

COMPONENT C8 **配合に含まれる防腐剤 ②**
RN 128-37-0
CNM butylated hydroxytoluene
CCN Phenol, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-
4-methyl- (9CI, ACI)
CAM 0.05 % (w/w)
CFU preservatives
COP Mandatory

パラベンは配合されていない

© 2020 化学情報協会

パターン 2 - パラベンの選択性が Exclude である配合

L10 ANSWER 2738 OF 82457 CASFORMULTNS
COPYRIGHT 2020 ACS on STN

AN 2019:331215 CASFORMULTNS
:
FN Form 1
FD Cosmetic Composition: **Sunscreens**
:

GROUP G5 **グループ 5 - 防腐剤
(選択性: Mandatory)**
GDS preservative
GFU preservatives
CMPS C37-C39; C97-C105
GOP Mandatory

COMPONENT C37 **配合に含まれる防腐剤 ①**
RN 122-99-6
CNM phenoxyethanol
CCN Ethanol, 2-phenoxy- (6CI, 7CI, 8CI,
9CI, ACI)
CFU preservatives
COP One or more

COMPONENT C38 **配合に含まれる防腐剤 ②**
RN 99-93-4
CNM 4-hydroxyacetophenone
CCN Ethanone, 1-(4-hydroxyphenyl)- (9CI, ACI)
CFU preservatives
COP One or more
:

COMPONENT C97 **配合に含まれない防腐剤 ①**
RN 99-96-7
CNM parabens
CCN Benzoic acid, 4-hydroxy- (9CI, ACI)
CFU preservatives
COP **Exclude**

COMPONENT C98 **配合に含まれない防腐剤 ②**
RN 2682-20-4
CNM methyl isothiazolinone
CCN 3(2H)-Isothiazolone, 2-methyl- (9CI, ACI)
CFU preservatives
COP Exclude
:

© 2020 化学情報協会

パターン 2 - パラベンを含むグループの選択性が Exclude の配合

L10 ANSWER 17300 OF 82457 CASFORMULTNS
COPYRIGHT 2020 ACS on STN

AN 2018:279418 CASFORMULTNS
:
FN Form 4
FD Cosmetic **Sunscreen**: Cosmetic
Application
:

GROUP G4 **グループ 4 -
除外される成分
(選択性: Exclude)**
GDS ingredients
CMPS C23-C29
GOP **Exclude**

COMPONENT G23 **配合に含まれない成分 ①**
CNM alkanediols
COP One or more

COMPONENT G24 **配合に含まれない成分 ②**
RN 122-99-6

CNM phenoxyethanol
:

COMPONENT C25 **配合に含まれない防腐剤 ①**
RN 128197-63-7
CNM ethylhexylglycerol
CCN 1,?-Propanediol, 2(or 3)-[(2-ethyl
hexyl)oxy]- (9CI, ACI)
CFU preservatives
COP One or more

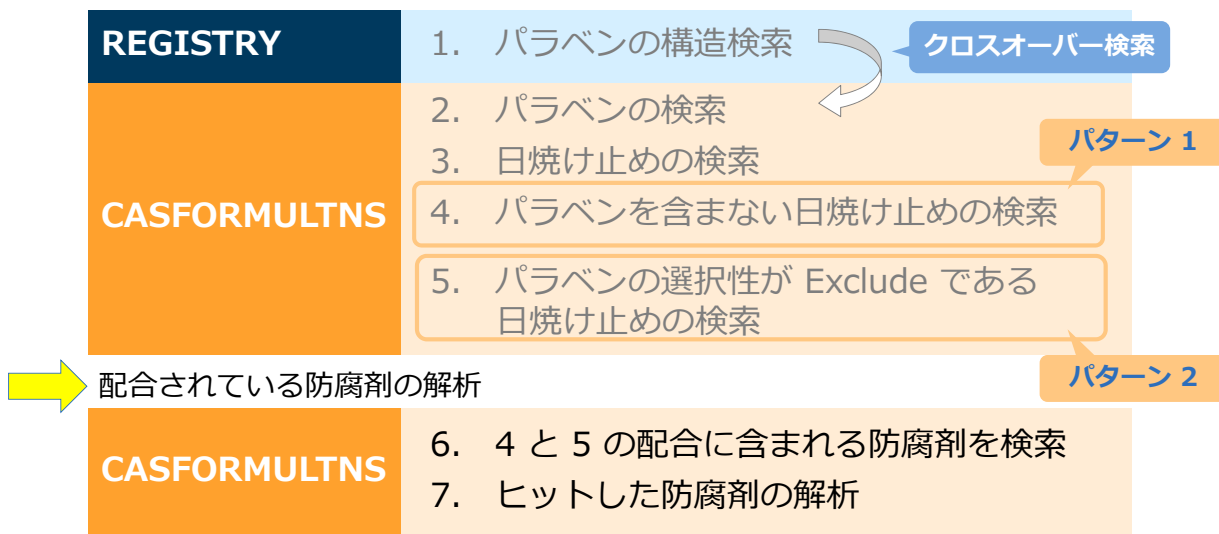
COMPONENT C26 **配合に含まれない防腐剤 ②**
RN 99-96-7
CNM parabens
CCN Benzoic acid, 4-hydroxy- (9CI, ACI)
CFU preservatives
COP One or more
:

PNC author
PNV cosmetic **sunscreen**

© 2020 化学情報協会

パラベンを含まない日焼け止め中の防腐剤の解析

パラベンを含まない日焼け止めの検索

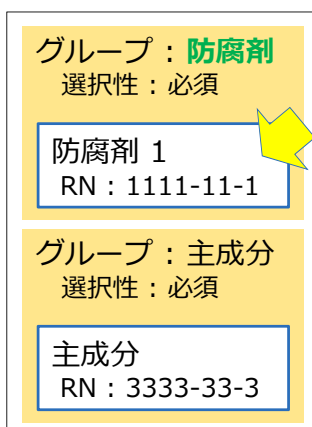


※ 今回は「パラベンフリー」とキーワードで収録されている配合 (パターン 3) は実行しない

配合されている防腐剤の解析

29

配合されている防腐剤 1 を知りたい



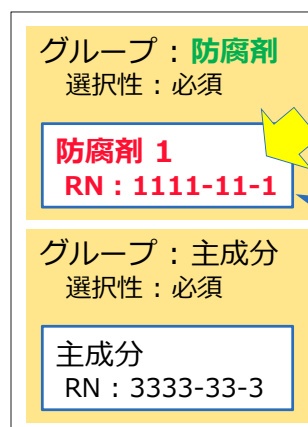
CAS RN® の抽出

1111-11-1
3333-33-3

防腐剤 (L) RN/FA

防腐剤の CAS RN®
だけを抽出するために
ヒットタームにする

ヒットした CAS RN® の解析



ヒットターム
になる

ヒットした CAS RN® の抽出

1111-11-1

防腐剤の CAS RN® だけ
抽出できる

L10 の防腐剤の CAS RN® をヒットタームにする (CASFORMULTNS ファイル)

=> S (PRESERVATIV? OR ANTISEPTIC?)/CFU, GFU (L) RN/FA
 L11 89161 (PRESERVATIV? OR ANTISEPTIC?)/CFU, GFU (L) RN/FA

防腐剤が CAS RN® を持つ配合の検索

=> S L11 (NOTL) EXCLUDE/COP, GOP
 L12 88961 L11 (NOTL) EXCLUDE/COP, GOP

防腐剤の選択性が Exclude ではない配合の検索

=> S L10 AND L12 ← L10 の結果を掛け合わせる
 L13 4039 L10 AND L12

L10 の防腐剤の CAS RN® がヒットタームになった

配合されている防腐剤の解析 (CASFORMULTNS ファイル)

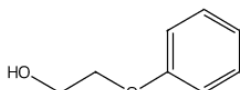
=> ANA HIT RN ← ヒットした CAS RN® を解析する

L14 ANALYZE L13 1- RN HIT : 386 TERMS
 ↑ ヒットした CAS RN® の数

=> D DOC TOP 10 ← レコード数順に上位 10 タームを表示

L14 ANALYZE L13 1- RN HIT : 386 TERMS

TERM #	# OCC	# DOC	% DOC	RN
1	1885	1847	45.73	122-99-6
2	294	247	6.12	1117-86-8
3	255	226	5.60	70445-33-9
4	172	165	4.09	6920-22-5
5	170	163	4.04	100-51-6
6	163	163	4.04	24634-61-5
7	163	163	4.04	532-32-1
8	125	124	3.07	8066-38-4
9	121	120	2.97	6440-58-0
10	116	116	2.87	65-85-0

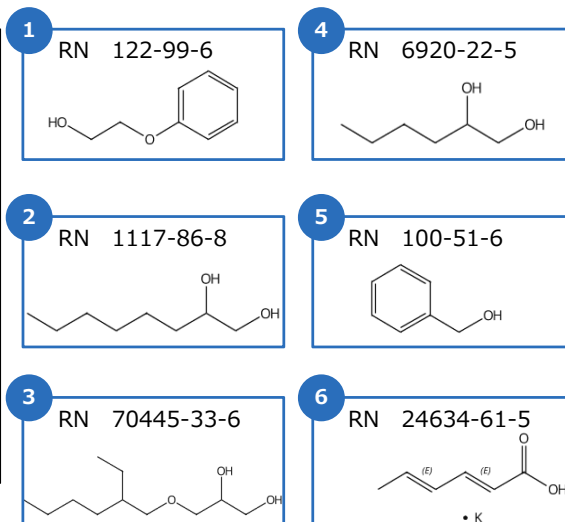
CAS RN® 122-99-6
 フェノキシエタノール


パラベンを含まない日焼け止め中の防腐剤の解析

上位 10 位の結果から、パラベンを含まない日焼け止めにはアルコール系の防腐剤が配合されていることが分かった

TERM #	# OCC	# DOC	% DOC	RN
1	1885	1847	45.73	① 122-99-6
2	294	247	6.12	② 1117-86-8
3	255	226	5.60	③ 70445-33-9
4	172	165	4.09	④ 6920-22-5
5	170	163	4.04	⑤ 100-51-6
6	163	163	4.04	⑥ 24634-61-5
7	163	163	4.04	532-32-1
8	125	124	3.07	8066-38-4
9	121	120	2.97	6440-58-0
10	116	116	2.87	65-85-0

※ 赤はアルコール系化合物



STNnext の強化

STNext の強化

化学情報協会 情報事業部

目次

1. STNext の特長
2. 最近の強化の Pick Up
 - 強化 1 ～構造検索関連の強化～
3. 最近の強化の Pick Up
 - 強化 2 ～検索式自動作成～
4. その他の強化

STNext の特長

STNext について

3

STNext は STN のすべてのデータベースとコマンドを使用できる最新のインターフェース

- すべてのデータベースにアクセス可能
 - CASFORMULTNS ファイルは STNext のみ **New**
- 構造検索でヒット部分がハイライト **New**
- システム制限値の緩和

STNext[®]



検索記録が自動的に保存されるので安心

構造作図画面が使いやすい



簡単に解析できる



アラートの登録が簡単で、内容も確認しやすい

在宅勤務で PC や環境が変わってもすぐに検索できる



今では多くの方にご利用いただいております

STNext®

© 2020 化学情報協会

Web ブラウザから STN にアクセス

STNext

The world's premier solution for scientific, technical and IP research.

Start Session Now

Copyright © 2019 American Chemical Society. All Rights Reserved. About STNext

STNext

The world's premier solution for scientific, technical and IP research.

- Unique content.
- Unparalleled power and precision.
- Proven reliability.

Learn more

Username

Password

Keep me signed in

Log In

Forgot Username or Password?

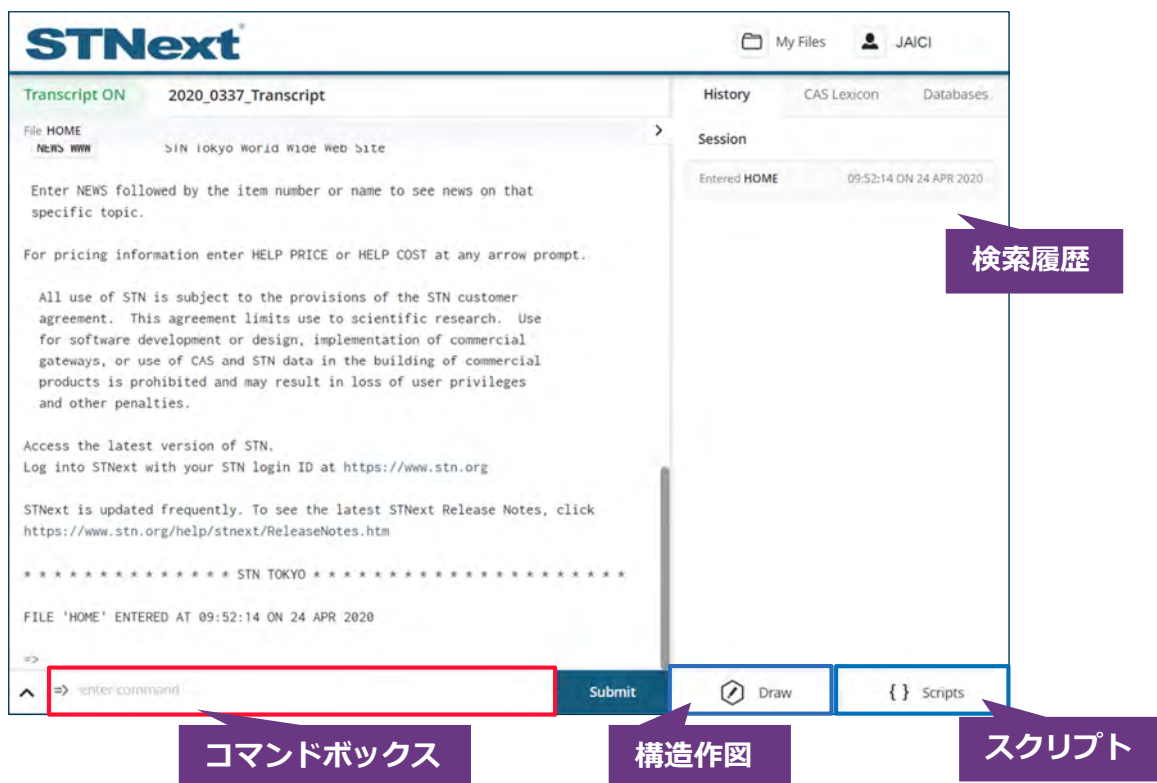
By using STNext®, you agree to the License Agreements and Policies

Copyright © 2019 American Chemical Society. All Rights Reserved. Contact Us

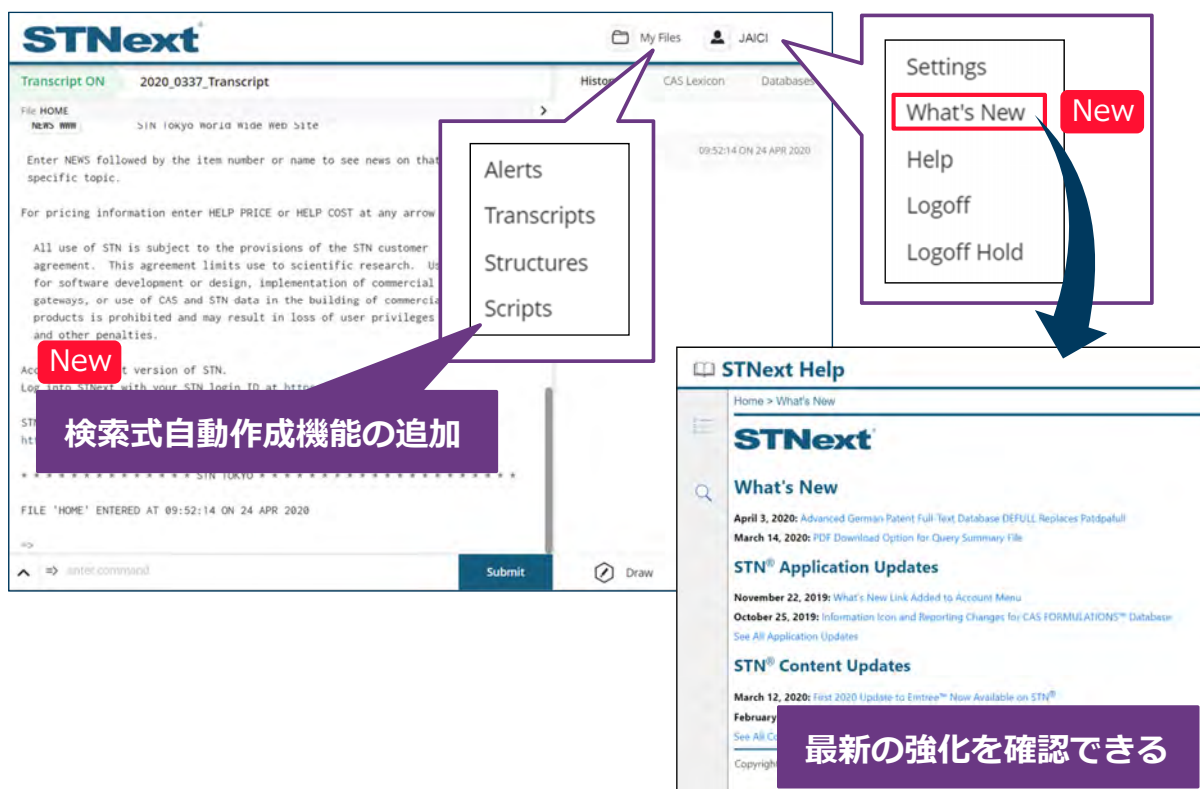
New

URL が変更
https://www.stn.org/

© 2020 化学情報協会



© 2020 化学情報協会



© 2020 化学情報協会

最近の強化の Pick Up

強化 1 ～構造検索関連の強化～

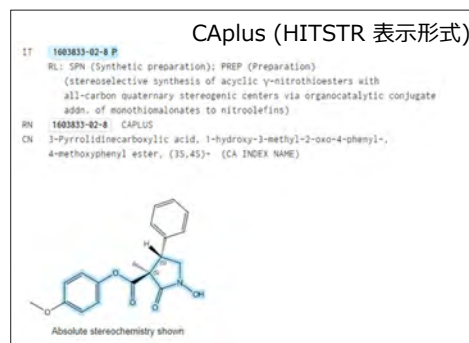
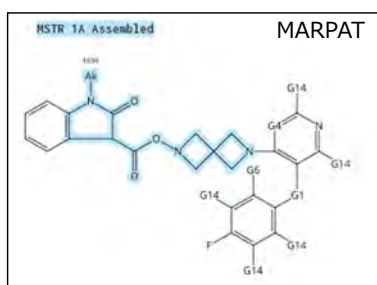
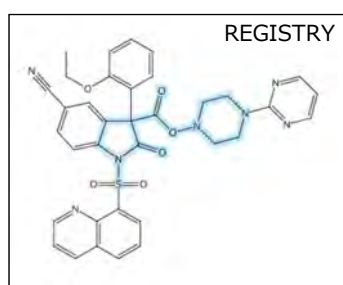
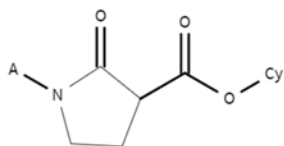
構造検索関連の強化

9

- ヒット構造のハイライト
- ショートカット -SH の Lock Atoms
- 表示の強化
 - より見やすい構造に
 - 表示不可だった構造が表示されるように
 - 分割されていた構造が一つの構造に
 - MARPAT ファイルの Assembled 表示が改善

構造検索の回答にハイライトがつき、一目でヒット部分ができるように

- 対象ファイル：REGISTRY, MARPAT, CAplus



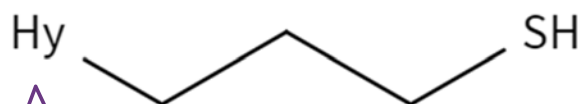
© 2020 化学情報協会

検索例

REGISTRY ファイルで以下の構造を検索

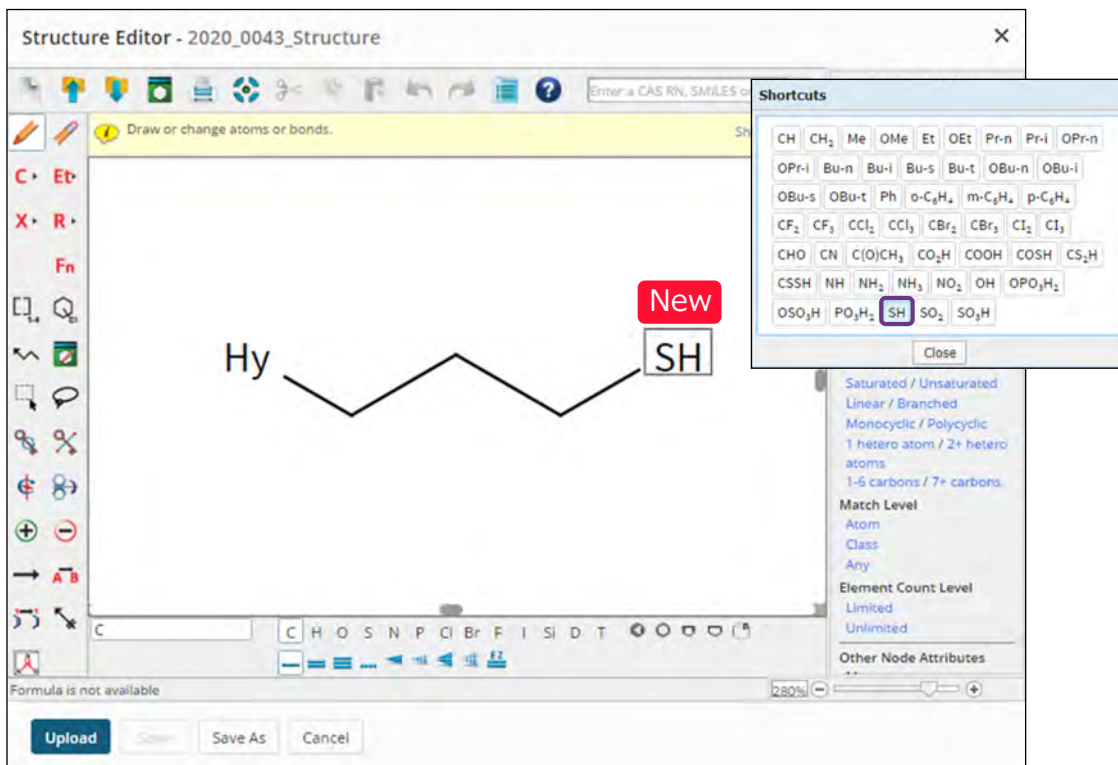
作図していないところは、
何が置換してもよい

「-SH」を含む物質



ヘテロ環
(どんなヘテロ環でもよい)

© 2020 化学情報協会



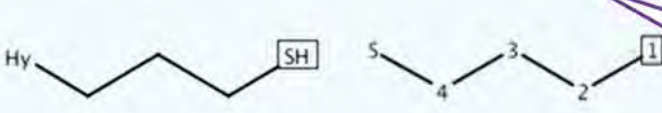
© 2020 化学情報協会

検索例 – アップロード

検索するファイルに入ってから構造質問式をアップロード

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> Uploading structure file: 2020_0156_Structure ← 構造質問式をアップロードする



Upload ボタンを押すと、デフォルト名で自動保存

```

Node Attributes
Chain Nodes : 2 3 4
Bond Attributes
Chain Bonds : 1-2 2-3 3-4 4-5
Exact Bonds : 2-3 3-4
Exact/Normalized Bonds : 1-2 4-5
Markush Attributes
Match Level (ATOM) : 5
Match Level (CLASS) : 1 2 3 4
Element Count Level (LIMITED) : 1 2 3 4 5
    
```

構造と属性が自動的に表示

L1 STRUCTURE UPLOADED ← L 番号が付与される

© 2020 化学情報協会

=> S L1

← 部分構造検索のサンプル検索

SAMPLE SEARCH INITIATED 13:45:54
 SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 554613 TO ITERATE

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE ****COMPLETE****
 BATCH ****COMPLETE****

STNext では、構造検索のシステム制限値が 1 億

PROJECTED ITERATIONS: 11048668 TO 11135852
 PROJECTED ANSWERS: 111844 TO 120996

STN Express, STN on the Web では不完全な検索となる

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE ****INCOMPLETE****
 BATCH ****INCOMPLETE****

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

← 部分構造検索のフルファイル検索

FULL SEARCH INITIATED 13:46:03
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 11089260 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 11089260 ITERATIONS
 SEARCH TIME: 00.00.17

113383 ANSWERS

L3 113383 SEA SSS FUL L1

© 2020 化学情報協会

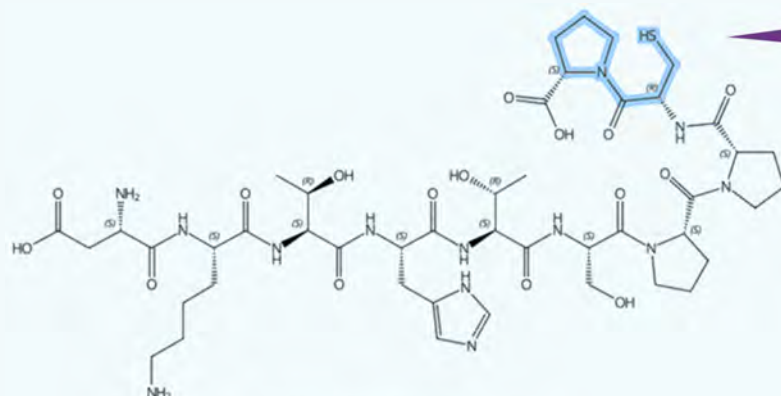
検索例 – ヒットレコード

ヒット部分がハイライトされるように New

=> D SCAN

L3 113383 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2020 ACS on STN
 IN L-Proline, L- α -aspartyl-L-lysyl-L-threonyl-L-histidyl-L-threonyl-L-
 seryl-L-prolyl-L-prolyl-L-cysteinyl-
 SQL 10
 MF C45 H71 N13 O16 S

すぐにヒット部分
 ができる



Absolute stereochemistry shown

© 2020 化学情報協会

例外 下記の場合はハイライトされない

- 複数の構造質問式を利用した場合
例) S L1 AND L2 SSS FUL
- 保存した回答を呼び出した場合
- サブセット検索の母集合でを使用した構造質問式の構造
- SAVE コマンドで保存した構造質問式を利用した場合
- コマンド作図した構造質問式を利用した場合
- Assembled 表示ではない場合 (MARPAT ファイル)

© 2020 化学情報協会

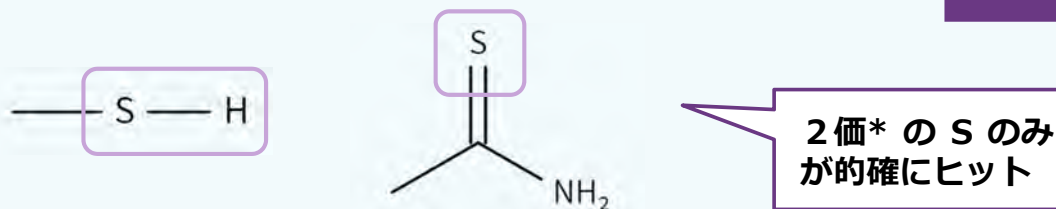
ショートカット -SH の Lock Atoms

17

ショートカットの -SH にデフォルトで Lock Atoms が適用されるように **New**

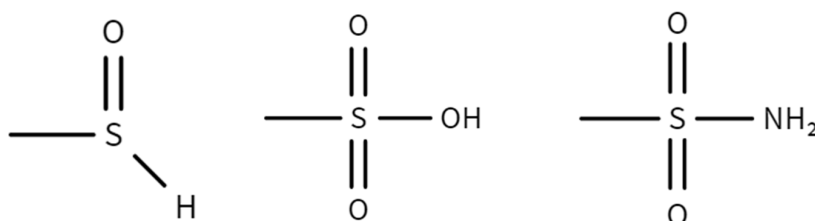
Lock Atoms 適用にヒットする構造

デフォルト



* Non-Hydrogen Count : Exact 1, Hydrogen count : exact 1

Lock Atoms 非適用 : 上記に加えて以下の構造もヒット



© 2020 化学情報協会

- ヒット構造のハイライト
- ショートカット -SH の Lock Atoms
- 表示の強化
 - より見やすい構造に
 - 表示不可だった構造が表示されるように
 - 分割されていた構造が一つの構造に
 - MARPAT ファイルの Assembled 表示が改善

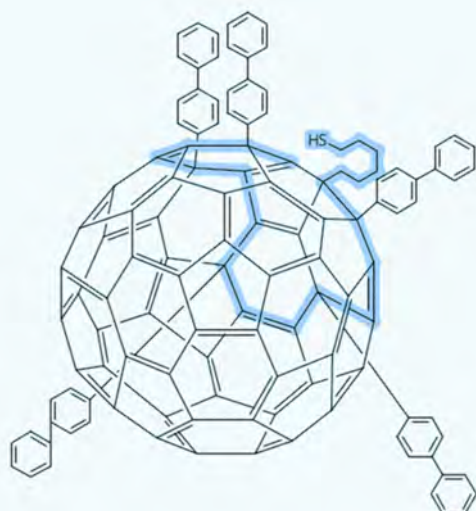
© 2020 化学情報協会

表示の強化

構造表示の強化で構造がわかりやすく

New

IN [5,6]Fullerene-C60-1h-1-hexanethiol,
6,9,12,15,18-pentakis([1,1'-biphenyl]-4-yl)-
MF C126 H58 S



New

従来表示不可だった構造
が表示されるように

STN Express, STN on the Web では構造が表示されない

IN [5,6]Fullerene-C60-1h-1-hexanethiol,
6,9,12,15,18-pentakis([1,1'-biphenyl]-4-yl)-
MF C126 H58 S

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***


構造検索でヒットするが,
表示できない

© 2020 化学情報協会

構造表示の強化で構造がわかりやすく

IN INDEX NAME NOT YET ASS
MF C202 H186 S2

**分割されていた構造
が一つの構造に** New



**ショートカット記号
を構造で表示** New

STN Express, STN on the Web での表示

3分割で表示

PAGE 1-A
Me-(CH2)7

PAGE 1-B

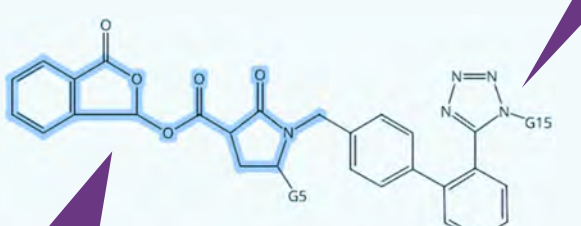
PAGE 2-A
Me-(CH2)7
R2-(CH2)7-Me

© 2020 化学情報協会

MARPAT ファイル

Assembled 表示の改善 New

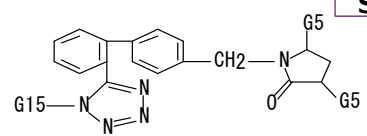
MSTR 1 Assembled STNNext



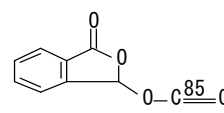
ヒット部分のハイライト New

Additional displayed G-groups:
 G5 = H / alkyl <containing 1-6 C> / CN / NO2 / CO2H / alkoxy carbonyl
 G6 = CH2Ph / 88 / 93 / 825
 G7 = alkylene <containing 1-6 C>
 G8 = H / alkyl <containing 1-5 C>

MSTR 1 Assembled STN Express
STN on the Web



G5 = 85



Additional displayed G-groups:
 G15 = H / R <"protecting group">

Patent location: claim 1
 Note: or salts New

**FQHITEXG, QHITEXG 表示形式で表示される
 Additional displayed G-groups をより詳しく表示**

© 2020 化学情報協会

最近の強化の Pick Up 強化2 ～検索式自動作成～

強化内容

23

特許番号や CAS RN[®] などのリストから、検索式を簡単に作成できるように **New**

リストを準備

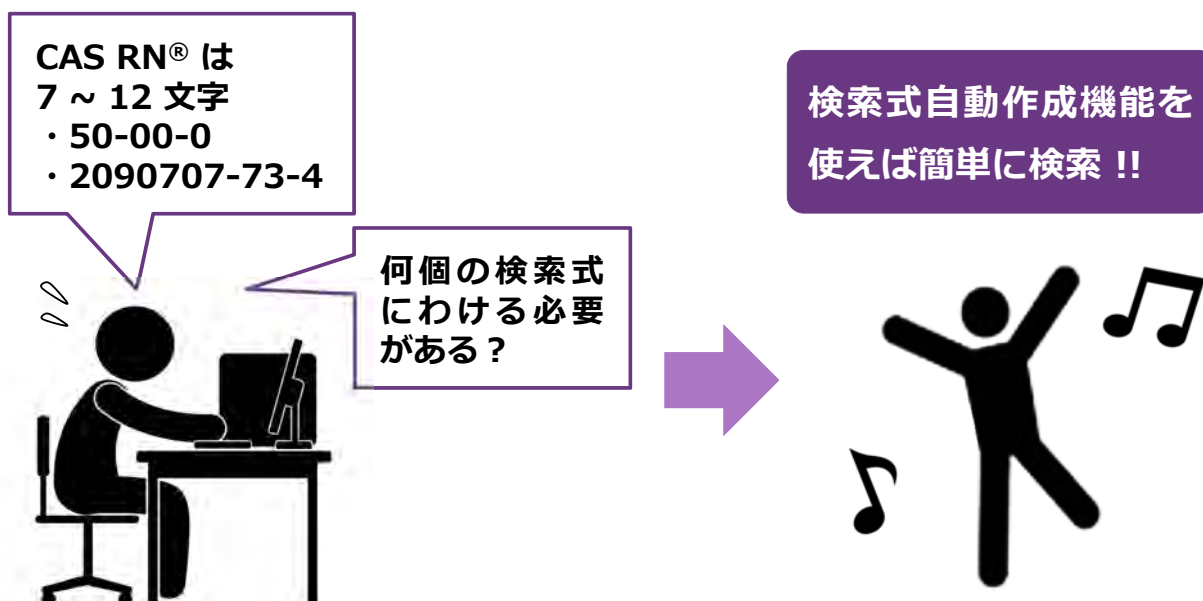
CN101309800
DE102012022398
EP1945451
EP2943414
CA2625996
CN102909924
CN106898414
ES2655324
ES2658887
US20080070047
:



リストから 自動で検索式を作成

```
=> QUE (CN101309800 OR DE102012022398 OR EP  
CN102909924 OR CN106898414 OR ES2655324 OR  
US20110129681 OR US20150284169 OR JP2020059  
JP2020061356 OR JP2020064721)/PN \>_lnum1  
=> QUE (JP2020064741 OR JP2020064757 OR JP2  
JP2020064782 OR JP2020064785 OR JP202006481  
JP2020068051 OR JP2020068061 OR JP202006806
```


REGISTRY ファイルで 100 個の CAS RN[®] を検索



© 2020 化学情報協会

ステップ 1

CAS RN[®] のリスト (.TXT, .CSV, .DATA 形式) を作成

CAS RN リスト_100.txt - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

2415001-08-8
2415004-98-5
151907-91-4
2415017-41-1
2415023-76-4
1061596-32-4
899-50-3
94-14-4
58-40-2
1714589-52-2
1841837-88-4

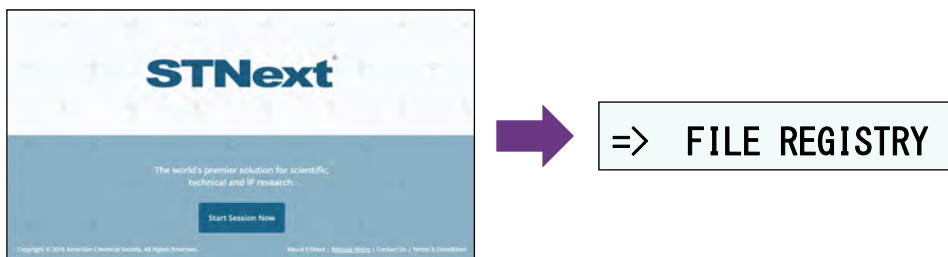
利用可能な検索語の区切り

- ・ 改行
- ・ スペース
- ・ タブ
- ・ カンマ [,]
- ・ セミコロン [;]
- ・ パーティカルバー [|]

SEARCH コマンドや
検索フィールドは入力しない

© 2020 化学情報協会

- STNext にログインし、REGISTRY ファイルに入る

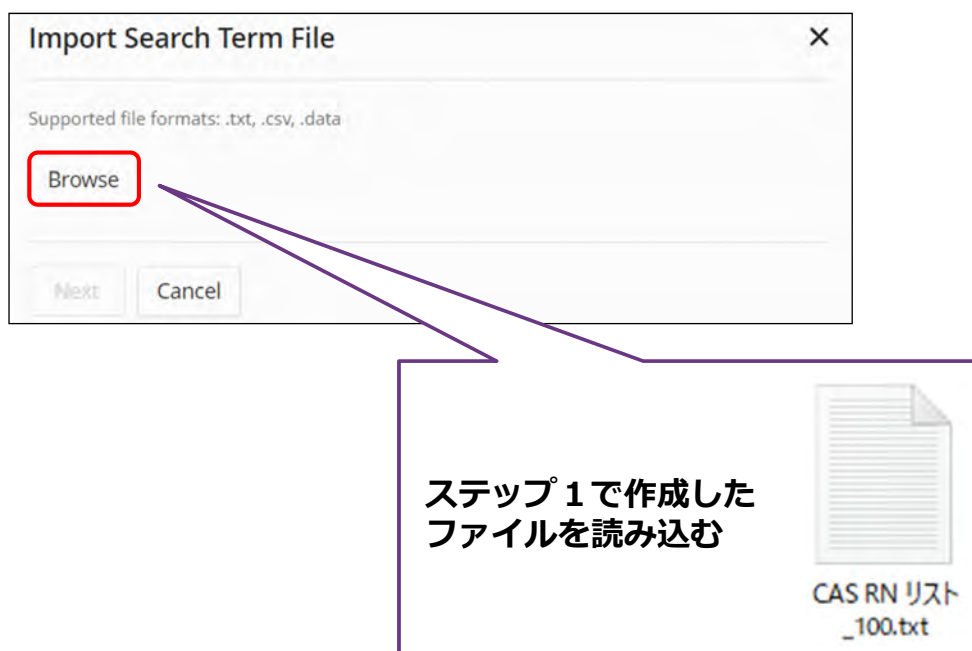


- My Files > Scripts ページで、Create New ボタンの Search Terms を選択



© 2020 化学情報協会

- Browse ボタンからリストを選択



© 2020 化学情報協会

検索フィールドや検索語の区切り記号を設定

Import Search Term File

Supported file formats: .txt, .csv, .data

Browse

CAS RN リスト_100.txt

Next Cancel

Create Search Term Script

Finish creating the script CAS RN リスト_100

Field Code(s) to Search

RN

Example: PN
TI, AB

Select term separator type. Carriage returns are interpreted as separators.

Comma Space Vertical Bar
 Semicolon Tab

Enclose each search term in quotes.

Back Ok Cancel

検索フィールドを入力

検索語の区切り記号を
チェック
改行の場合はチェック
不要

検索式を作成

© 2020 化学情報協会

ステップ 4 – 検索式の確認・修正

… > Edit から作成された検索式を確認・修正可能

CAS RN リスト_100

1 May 2020 9:51 AM

Run ...

Edit

Download

Move

Delete

Edit Script

CAS RN リスト_100

Check your script with the validate button.

Save As [icon] [icon] [icon] [icon] Validate

Validation

Success

No errors detected

1 => QUE (2415001-08-8 OR 2415004-98-5 OR 151907-91-4 OR 2415017-41-1 OR 2415023-76-4 OR 1061596-32-4 OR 899-58-3 OR 94-14-4 OR 58-40-2 OR 1714589-52-2 OR 1841837-88-4 OR 1890751-57-1 OR 1955839-09-4 OR 2007381-33-9 OR 2142173-30-4 OR 2201477-36-1 OR 2276842-78-5 OR 2332107-43-2)/RN \>_1num1

2 => QUE (2367070-87-7 OR 2383737-18-4 OR 2394259-11-9 OR 2482619-40-1 OR 2412564-82-8 OR 2412967-04-3 OR 2413109-03-0 OR 2413305-51-6 OR 2413575-38-7 OR 2413779-86-7 OR 2413881-76-8 OR 2413999-95-6 OR 2414060-83-4 OR 2414206-41-8 OR 2414387-94-1 OR 2414460-26-5 OR 2414543-46-5)/RN \>_1num2

3 => QUE (2414582-20-8 OR 2414923-73-0 OR 2415013-95-3 OR 106201-69-8 OR 1125272-60-7 OR 119780-23-1 OR 133454-97-4 OR 1434353-87-3 OR 147464-69-5 OR 162062-86-4 OR 179622-28-7 OR 202745-77-5 OR 237063-30-8 OR 24064-99-1 OR 304468-88-0 OR 336157-93-8 OR 391925-59-0)/RN \>_1num3

4 => QUE (457912-32-2 OR 50261-89-7 OR 516516-09-9 OR 625400-45-5 OR 65897-96-3 OR 700363-43-5 OR 770718-26-8 OR 81085-67-8 OR 845898-15-9 OR 883673-56-1 OR 899-30-9 OR 94056-14-1 OR 189750-84-3 OR 212498-58-3 OR 215184-02-4 OR 265101-11-9 OR 325846-76-2 OR 355122-22-4)/RN \>_1num4

5 => QUE (434309-73-6 OR 480460-23-9 OR 573653-77-7 OR 668263-95-4 OR 741648-54-4 OR

Run Save Cancel

複数の検索式に分割し、
最後に一つまとめる式が
自動で作成

他のコマンドを追加できる

1 => FILE REGISTRY

2 => QUE (2415001-08-8 OR 24150

© 2020 化学情報協会

Run ボタンで検索式を実行

```

=> QUE (2415001-08-8 OR 2415004-98-5 OR 151907-91-4 OR 2415017-41-1 OR ....
L1  QUE (2415001-08-8 OR 2415004-98-5 OR 151907-91-4 OR 2415017-41-1 OR ....

=> QUE (2367070-87-7 OR 2383737-18-4 OR 2394259-11-9 OR 2402610-...
L2  QUE (2367070-87-7 OR 2383737-18-4 OR 2394259-11-9 OR 2402610-...

=> QUE (2414582-20-8 OR 2414923-73-0 OR 2415013-95-3 OR 106201-69-8 OR ....
L3  QUE (2414582-20-8 OR 2414923-73-0 OR 2415013-95-3 OR 106201-69-8 OR ....
:
=> QUE (1347613-24-4 OR 1356107-68-... 097-15-7 OR ....
L6  QUE (1347613-24-4 OR 1356107-68-... 58097-15-7 ....

=> S L1 OR L2 OR L3 OR L4 OR L5 OR L6

L7  100 L1 OR L2 OR L3 OR L4 OR L5 OR L6
    
```

自動で6つの検索式に分割

最後に一つにまとめて検索

100個のCAS RN®が1つのL番号に



**特許番号やレコード番号などの
他のフィールドでも活用できる**

その他の強化

Excel 形式のレポートに回答番号とデータベース名の列が追加

New

	A	B	C	D
1	Answer Number	Database	Title	Document Type
1	L7 1 OF 281	CAPLUS	Clinical characteristics and fecal-oral transmission potential of patients with COVID-19	Preprint
2	L7 2 OF 281	CAPLUS	A new role for Biofoundries in rapid prototyping, development, and validation of automated clinical diagnostic tests for SARS-CoV-2	Preprint
3	L7 3 OF 281	CAPLUS	Pooling RT-PCR test of SARS-CoV-2 for large cohort of "healthy" and infection-suspected patients: a prospective and consecutive study on 1,000 individuals	Preprint
4	L7 4 OF 281	CAPLUS	The CoV-2 outbreak: how hematologists could help to fight Covid-19	Journal; General Review; (online computer file)
5	L7 5 OF 281	CAPLUS	A simple RNA preparation method for SARS-CoV-2 detection by RT-PCR	Preprint
6	L7 6 OF 281	CAPLUS	Comparison of a laboratory-developed modification of the CDC	Preprint

自動的にテーブルに含まれる

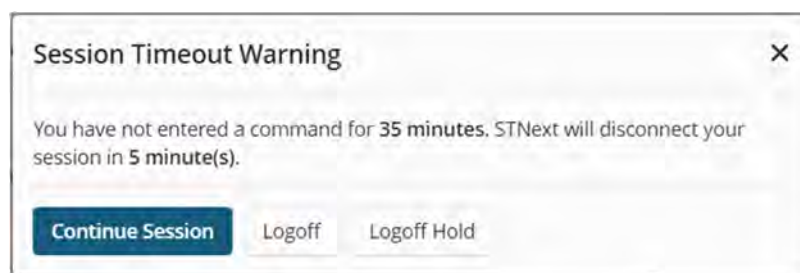
© 2020 化学情報協会

タイムアウト時の警告表示

STN は 40 分インアクティブな状態が継続すると、セッションが切断される

STNext では、35 分経過すると以下の警告が表示されるように

New



Continue Session

をクリックするとセッションを継続可能

© 2020 化学情報協会

	強化内容	開始時期
新規ファイル	製剤・配合データベース CASFORMULTNS ファイルを搭載	2019.10
	Database タブに CASFORMULTNS ファイルを追加	2019.11
構造検索関連	構造アップロードのパフォーマンス改善 - アップロード時間が従来より 20% 以上短縮 - 構造検索ができないファイルでアップロードすると、エラーのみが表示されるように変更	2019.7
	構造作図画面の強化 - 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 - Save As ボタンで保存する際に、デフォルト名が入力されるように	2019.7
	-SH 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	2019.7
	New ボタンをクリックした際の構造の保存先が My Structures に変更	2019.8
	インポートした構造質問式のマルクーシュ属性が保持されるように	2019.8
	REGISTRY, MARPAT ファイルでヒット部分がハイライトされるように - REGISTRY ファイルで構造検索した結果を CAplus ファイルにクロスオーバーした後、HITSTR 表示形式で回答を表示した場合もハイライト	2019.10
	REGISTRY, MARPAT ファイルで構造表示が改善	2019.10

© 2020 化学情報協会

	強化内容	開始時期
Transcript	ダウンロード形式が追加・変更 - PDF (Compressed) : 圧縮形式の PDF - RTF (Compressed) : 圧縮形式の RTF - Text (Plus Image Files) : 従来 "ZIP" と表示されていた形式	2019.10
	ダウンロード進行中であることを示すメッセージが表示されるように	2019.10
レポート機能	テーブル形式のレポートに回答番号とデータベース名の列が追加	2019.7
	各設定画面を Next/Back で前後しても選択した内容が保持されるように	2019.8
	CASFORMULTNS ファイル由来のフィールドが追加	2019.11
その他	カスタマイズ画面における項目名の表示の改善	2020.6
	STNext が新 URL : https://www.stn.org/ に変更	2019.7
	35 分間インアクティブな状態が継続すると警告画面が表示されるように	2019.8
	検索式の自動作成機能の追加	2019.10
	What's New のページが STNext に追加	2019.11
	Query Summary (質問式サマリーファイル) が RTF 形式に加え、PDF 形式でもダウンロードできるよう	2020.3
My Files の Transcripts などのファイル名・フォルダ名が検索可能に	2020.6	

© 2020 化学情報協会

特許データベースの強化

特許データベースの強化

化学情報協会 情報事業部

目次

1. KRFULL ファイルのリリース
2. CAplus ファイルの強化
3. WPI/DWPIM ファイルの強化
4. INPADOC ファイルの強化
5. USPATFULL/USPAT2 ファイルの強化

KRFULL ファイルのリリース

KRFULL ファイルの概要

3

韓国特許庁から発行された公開特許，登録特許，
実用新案の全文を収録するデータベース

2019年12月
リリース

(2020年6月現在)

製作者	LexisNexis Univentio B.V.
レコード構成	出願単位
収録公報	公開特許 (KRA), 登録特許 (KRB1) 実用新案 (KRU, KRY1)
収録期間	1978年～ (特許種別により異なる)
収録件数	455万件以上
更新	週1回
タイムラグ	公開特許は1-2週間で収録
特長	<ul style="list-style-type: none">• 英語と韓国語の情報を収録している。検索は英語のみ。• STNが独自に付与した Key Terms を収録• テキスト中の数値検索機能の搭載• INPADOC ファイル由来の特許ファミリー情報，法的状況，引用情報も表示可能

全文の英語での収録率が高い = **キーワード検索が有効**

(2020年6月現在)

特許種別	収録年	標題 (TI)		抄録 (AB)		詳細な説明 (DETD)		クレーム (CLM)	
		EN	KR	EN	KR	EN	KR	EN	KR
公開特許 (KRA)	1983~	100%	100%	100%	99%	100%	100%	100%	100%
公告/登録特許 (KRB1)	1978~	100%	100%	100%	99%	100%	100%	100%	100%
公開実用新案 (KRU)	1978~	100%	98%	76%	52%	61%	37%	99%	98%
登録実用新案 (KRY1)	1978~	100%	95%	94%	94%	95%	95%	95%	95%

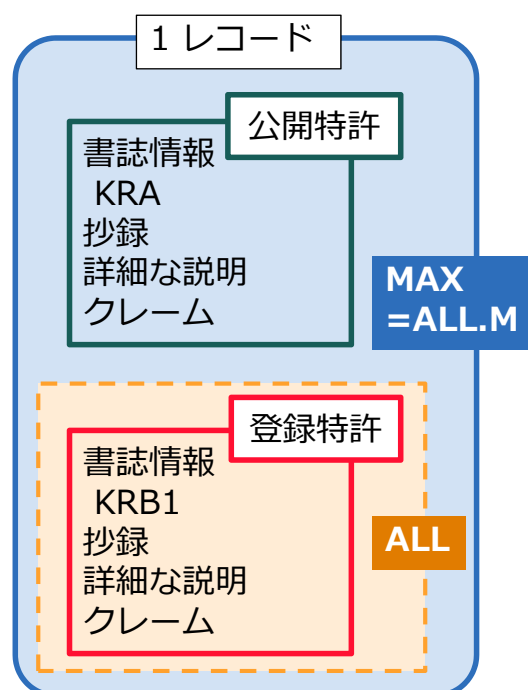
* EN は英語, KR は韓国語

© 2020 化学情報協会

レコード構成

レコードは**出願単位**

- レコード中の全公報の情報を表示するには, 表示形式の後ろに .M を付ける
 - ✓ BIB.M : 全公報の書誌情報
 - ✓ STD.M : BIB.M + 特許分類 (デフォルト表示形式)
 - ✓ MAX (ALL.M) : 全公報の全文



© 2020 化学情報協会

AN	3771171	KRFULL	ED	20191022	UP	20191203	EDTX	20191022	公開特許
	DED	20160408	DUPD	20191119			Full-text		
TIEN	REINFORCED POLYPROPYLENE COMPOSITION								
TIKO	강화 폴리프로필렌 조성물								
IN	JIN YI; :								
PA	DOW GLOBAL TECHNOLOGIES LLC, 미국 48674 미시건주 미들랜드 다우 센터 2040, , US								
PAS	DOW GLOBAL TECHNOLOGIES								
PAN	DOW								
LAF	Korean								
LA	Korean								
DT	Patent: (Fulltext)								
PIT	KRA OFFICIAL GAZETTE								
PI	KR 2016030941								
AI	KR 2016-200972								
RLI	WO 2013-US47267		20130624	WO 2014209256			PCT Application		
PRAI	WO 2013-US47267		20130624						
IPC1	C08L0023-16 [I, A]								
IPCR	C08L0023-12 [I, A]								
CPC	C08L0023-12; C08L0053-00; C08K0003-34; C08L0023-12, C08L0053-00; C08L0023-0815, C08L0053-00; C08L0053-00, C08K0003-34; C08L0023-12, C08L0023-12, C08L0023-12, C08L0023-12								

関連出願情報 (RLI) フィールド

- PCT 経由の場合は WO 出願番号を収録
- 分割出願の場合は韓国の出願番号を収録

CPC コンビネーションセット

- 発明の特徴を複数の CPC の組み合わせによって表現したもの

ABEN	← 抄録	Embodiments of the invention provide a reinforced polypropylene comprising a multi-modal molecular weight distribution elastomer and a block composite.	ALL, MAX 表示形式では抄録, 詳細な説明, クレームは英語フィールドのみ表示される
DETD	← 詳細な説明	The present invention refers to including composite block elastomer and reinforced polypropylene is directed to compositions. Different characteristics improve the impact strength comp enhance or impact strength in an effort to maintain many d	
CLMEN	← クレーム	Polypropylene; multi-multimodal molecular weight distribution elastomer; block composite; and random, including filler composition. According to Claim 1, said multi-multimodal molecular weight	

AN	3771171	KRFULL	ED	20191203	UP	20191203	EDTX	20191022	UPTX	20191029	登録特許
	DED	20191028	DUPD	20191121							
TIEN	REINFORCED POLYPROPYLENE COMPOSITION ← 標題										
TIKO	강화 폴리프로필렌 ← 標題 (韓国語)										
TIKO	조성물										
INKO	진 이, 미합중국 77459 ← 発明者 (韓国語)										
IN	:										
PA	DOW GLOBAL TECHNOLOGIES LLC ← 特許出願人										
PAKO	다우 글로벌 ← 特許出願人 (韓国語)										
PAKO	테크놀로지스										
IN	:										

PAS	DOW GLOBAL TECHNOLOGIES				
PAN	DOW				
LAF	Korean				
LA	Korean				
DT	Patent; (Fulltext)				
PIT	KRB1 PATENT SPECIFICATION				
PI	KR 2034340	B1	20191018		
AI	KR 2016-7000972		20130624		
RLI	WO 2013-US47267		20130624	WO 2014209256	PCT
	Application				
PRAI	WO 2013-US47267		20130624		
	:				
ABEN	Embodiments of the invention provide a reinforced polypropylene comprising a multi-modal molecular weight distribution elastomer and a block composite.				
DETD	The present invention relates to reinforced polypropylene compositions comprising elastomers and block composites.				
	:				
CLMEN	A composition comprising: a polypropylene; a multi-modal molecular weight distribution elastomer; a block complex; and optionally, a				
	:				
KT	reinforced polypropylene; polypropylene composition; low molecular weight fraction; high molecular weight fraction; comparative blend				
	:				

PAS : 特許出願人, 標準形式
PAN : 特許出願人, 統制形式

Key Terms

© 2020 化学情報協会

韓国語の情報を表示したい場合

9

韓国語のフィールドを表示したい場合は専用の表示形式を用いる

- 定型表示形式
 - ✓ BIBO, BIBO.M : 書誌情報
 - ✓ BRIEFO, BRIEFO.M : 書誌情報, 抄録, メインクレーム
 - ✓ MAXO : 全公報の全文
- カスタム表示形式
 - ✓ INKO (発明者), PAKO (特許出願人), DETDKO (詳細な説明), CLMKO (クレーム)

© 2020 化学情報協会

AN	3771171	KRFULL	ED	20191203	UP	20191203	EDTX	20191022	IPRTV	20191020
	DED	20191028	DUPD	20191121	Full-text	BRIEFO 表示形式では, 最新の公報の書誌情報, 抄録, メインクレームが表示される				
TIEN	REINFORCED POLYPROPYLENE COMPOSITION									
TIKO	강화 폴리프로필렌 조성물									
INKO	진 이, 미합중국 77459 텍사스주 미저리 시티 레드 블러프 턴 :									
PA	DOW GLOBAL TECHNOLOGIES LLC									
PAKO	다우 글로벌 테크놀로지스 엘엘씨, 미국 48674 미시건주 미들랜드 다우 센터 2040, US									
PAS	DOW GLOBAL TECHNOLOGIES									
PAN	DOW									
AGKO	양영준 류현경 김영									
LAF	Korean									
LA	Korean									
DT	Patent; (Fulltext)									
PIT	KRB1 PATENT SPECIFICATION									
PI	KR 2034340		B1	20191018						
AI	KR 2016-7000972			20130624						
RLI	WO 2013-US47267			20130624	WO 2014209256			PCT Application		
PRAI	WO 2013-US47267			20130624						
IPCI	C08L0023-12 [I, A]; C08L0023-16 [I, A] :									

レコード例 1 の登録特許

ABEN	← 抄録 (英語)	Embodiments of the invention provide a reinforced polypropylene comprising a multi-modal molecular weight distribution elastomer and a block composite.
ABKO	← 抄録 (韓国語)	본 발명의 구현에는 멀티-모달 분자량 분포 엘라스토머 및 블록 복합체를 포함하는 강화 폴리프로필렌을 제공한다.
MCLMEN	← 메인クレーム (英語)	A composition comprising: a polypropylene; a multi-modal molecular weight distribution elastomer; a block complex; and optionally, a filler, wherein the multi-modal molecular (low molecular weight
MCLMKO	← 메인クレーム (韓国語)	폴리프로필렌; 멀티-모달 분자량 분포 엘라스토머; 블록 복합체; 및 임의로, 충전재를 포함하는
KT		reinforced polypropylene; polypropylene composition; low molecular weight fraction; high molecular weight fraction; comparative blend blend

韓国語で抄録などを確認できる (検索は不可)

網羅的に特許出願人を検索するには，スーパー検索フィールド **/PASS** を利用する

(2020年6月現在)

検索フィールド		内容	収録率*
出願人グループ /PASS	/PA	特許出願人	89%
	/PAS	特許出願人，標準形式 ✓ LTD や AG などによるバリエーションを除外して標準化した特許出願人情報	89%
	/PAN	特許出願人，統制形式 ✓ 約 4,000 機関について特許出願人情報を統制したデータ	45%

* 韓国語の特許出願人 (PAKO) のみが収録されているレコードがある

© 2020 化学情報協会

Key Terms の収録

Key Terms (KT) は STN 独自の付加情報

- 特許全文中から言語学的，統計学的手法を用いて機械的に抽出された名詞句 (最大 30 ターム)
- 関連度の高い語から順に並んでいる

高

↑

関連度

↓

低

KT

reinforced polypropylene; polypropylene composition; low molecular weight fraction; high molecular weight fraction; comparative blending; molecular weight distribution; elastomer particle size; impact strength; melt flow rate

:

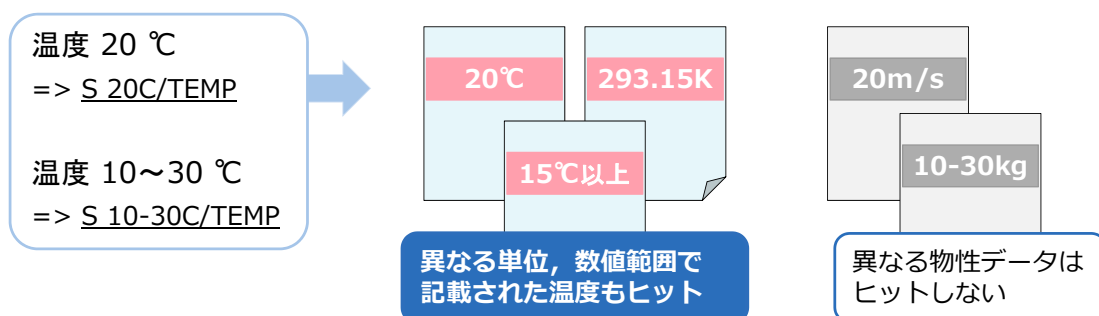
macromer admixing and reactor condition; blending and injection molding

特許の主要なキーワードを把握できる

© 2020 化学情報協会

数値と単位を組み合わせて検索できるテキスト中の数値検索機能を利用できる

- 特許中の具体的な数値を検索できる
- STN 独自の検索機能



© 2020 化学情報協会

検索例

有機 EL に関する韓国特許を調査する。
特に駆動電圧が 4 V以下である特許を調査する

```

=> FILE KRFULL
=> S (ORGANIC(W) (ELECTRO LUMINESCENCE OR LIGHT EMITTING(W) (DIODE OR DEVICE)) OR
OEL OR OLED)/CLM, KT
L1 36339 (ORGANIC(W) (ELECTRO LUMINESCENCE OR LIGHT EMITTING(W) (DIODE OR DEVICE)) OR OEL OR OLED)/CLM, KT
=> S L1 AND DRIV? VOLTAGE (5A) VOLT/PHP
L2 704 L1 AND DRIV? VOLTAGE (5A) VOLT/PHP
=> S L1 AND DRIV? VOLTAGE (5A) 4=>VOLT
L3 299 L1 AND DRIV? VOLTAGE (5A) 4 V =>VOLT
    
```

クレームおよび Key Terms に限定

駆動電圧について具体的な電圧の数値が記載されている特許に限定

電圧 4V 以下の数値記載がある特許に限定

© 2020 化学情報協会

=> D L3 15 ALL

L3 ANSWER 15 OF 299 KRFULL COPYRIGHT 2020 LNU on STN.
 AN 4405336 KRFULL ED 20191022 UP 20191113 EDTX 20191022
 DED 20190708 DUPD 20200305 [Full-text](#)

TIEN Organic Light Emitting Display Device and Method for Manufacturing the Same
 TIKO 유기 발광 표시 장치 및 이의 제조 방법

IN LEE HEUI DONG
 PA LG DISPLAY CO., LTD., 서울특별시 영등포구 여의대로 128(여의도동), 07336

PAS LG DISPLAY
 PAN LG

PI KR 2019074859 A 20190628
 AI KR 2017-176539 20171220
 PRAI KR 2017-176539 20171220
 IPCI H01L0051-52 [I, A]; H01L0027-32 [I, A]; H01L0051-56 [I, A]
 CPC H01L0051-56; H01L0027-3211; H01L0051-5237
 ABEN

The present invention provides an organic light emitting display device capable of preventing luminance defects of low gradation even if

公開特許

LG DISPLAY 社の
 PAS (特許出願人, 標準形式)
 PAN (特許出願人, 統制形式)

DETD

An organic light emitting display device and a manufacturing method thereof are. The organic light emitting display device of the present

As shown in Table 1, in Example 1 and Example 3, when the **driving voltages** are all equal to **2.5V**, the organic light-emitting devices 1 and 2 exhibit similar levels of current density, but the organic light-emitting device 2 emit light when **2.5V driving voltage** is applied.

2.5V の駆動電圧がヒット

CLMEN

An **organic light emitting diode** display comprising: an active region having a plurality of sub-pixels; and an outer region surrounding the active region; and an **organic light emitting device** having an anode, a plurality of organic layers and a cathode including

有機 EL がクレームと Key Terms でヒット

KT

extension layer; organic layer; common layer; outer region na; **organic light emitting device**; organic layers and cathode; color light emitting layer; organic layers os; **organic light emitting diode**; work function; green light emitting layer; white light emitting layer; extension layers integral; organic light emitting element; hole

物質質量	投与量	国際単位
ビットレート	動的粘度	動粘度
保存情報	電荷	長さ
静電容量	電荷密度	光度
電流密度	電気伝導率	照度
モル濃度	電流	光束
コンダクタンス	電場	質量
デシベル	エネルギー	質量電荷比
角度	電気抵抗率	磁束密度
密度, 質量濃度	力	質量流量
線量当量	周波数	モル質量, 分子量

© 2020 化学情報協会

テキスト中の数値検索機能 – 物性値一覧 (続き)

重量モル濃度	圧力	温度
メルトフローレート	放射能	時間
栄養素含量	電気抵抗	速度
パーセント	屈折率	角速度
誘電率	回転速度	体積流量
比誘電率	面積	体積
水素イオン指数	溶解度	電圧
電力	表面張力, ばね定数	水分活性
ppm	熱伝導率	

テキスト中の数値検索機能の詳細

https://www.jaici.or.jp/stn/pdf/nps_ver2.pdf

© 2020 化学情報協会

CAplus ファイルの強化

CAplus ファイルの概要

21

世界中の科学技術分野の学術論文，単行本，56 カ国
5 国際機関の特許，2 技術公開誌を収録する文献
データベース

(2020 年 6 月現在)

製作者	CAS
レコード構成	文献単位，特許は発明単位
収録期間	1808 年～
収録件数	5,267 万件以上
特長	<ul style="list-style-type: none">• 統制語による索引が付与されており，特に化学物質に関する文献検索が的確かつ容易に実行できる• 特許レコードは同一発明単位 (ファミリー単位) で構成されており，対応特許情報が容易に得られる

2019年3月以降発行の中国の特実同日出願を特許ファミリーとして収録するようになった

```

AN 2019:2310487 CAPLUS Full-text
TI Heat regenerator for micro gas turbine generator [Machine Translation].
IN Jiang, Xinping
:
FAN. CNT 1
PPPI
PATENT NO.      KIND  DATE      LANGUAGE  PatentPak
-----
CN 110514052    A    20191129  Chinese   PDF
CN 209706630    U    20191129  Chinese   PDF
PI
PATENT NO.      KIND  DATE      APPLICATION NO.  DATE
-----
CN 110514052    A    20191129  CN 2019-10910913  20190925
CN 209706630    U    20191129  CN 2019-21605209  20190925
PRAI CN 2019-10910913  TO    20190925
    
```

特許と実用新案が同日に出願されている

- * 中国では同一の出願人が同一の発明について、特許と実用新案を同日に出願することができる。実用新案は実体審査が行われないため、企業は自社の発明の早期の権利化を図ることができる
- * 2019年2月以前は、中国の特実同日出願の公開特許 (CNA) と実用新案 (CNU) は別ファミリー (別レコード) に収録されている

BIB, STD, ALL 等の定型表示形式は指定国 (DS) を含まない簡潔な表示形式に変更された

```

PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive
AN 2020:216218 CAPLUS Full-text
DN 172:233633
TI Process for making a micro gas turbine generator
:
PI
PATENT NO.      KIND  DATE      APPLICATION NO.  DATE
-----
EP 3604346      A1    20200205  EP 2018-186618  20180731
US 2020040108   A1    20200206  US 2019-16525620  20190730
WO 2020026143   A1    20200206  WO 2019-1856493  20190730
PRAI EP 2018-186618  A
ASSIGNMENT HISTORY FOR US PATENT
RE. CNT 4      THERE ARE 4 CITED
ALL CITATIONS AVAILABLE
    
```

WPI, INPAFAMDB ファイルと同様にコンパクトな表示形式になり、ファミリー情報が見やすい

DS, MAX 表示形式では指定国フィールドを含む
例) MAX 表示形式

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
EP 3604346	A1	20200205	EP 2018-186618	20180731
(R):			AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, 指定国 , ES, FI, FR, GB, GR, HR,	
WO 2020026143	A1	20200206	WO 2019-1856493	20190730
(W):			AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY,	

インドの公告・登録特許の特許種別が INA1 から INB に変更

公報	CAplus	WPI	INPADOC	INFULL
特許出願				INA 1993-2003
公開・公表特許	INA 2004-最新	INA 2004-最新	INA 2004-2018*	INA 2004-最新
公告・登録特許	INA1→INB 1975-最新	INB 2000-最新	INB 1975-2016*	INB 1912-最新

* INPADOC ファイルのインド特許の収録は途中にギャップがある。また更新が遅れている

登録特許の特許種別が他のファイルと同じに！

© 2020 化学情報協会

WPI ファイル, INPADOC ファイルの強化

世界の 59 特許発行機関から発行される特許および
2 技術公開誌を収録しているデータベース

- 韓国の公告・登録特許種別の変更
 - ✓ KRB, KRB1 → **KRB1** に統一
- 年間の更新数が 104 回になり, DW, DW.AN, DW.B, DUPD の桁数が 6 桁から 7 桁に変更
 - ✓ 例: 2020 年最初の DW 更新は **2020001**
- マニュアルコードの改訂*
 - ✓ 薬物投与, ナノ製剤などに関する新コード

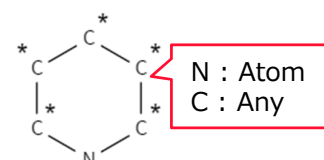
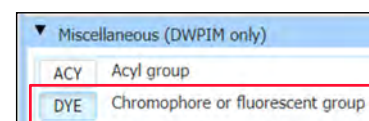
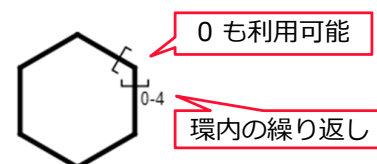
* マニュアルコードの詳細は Clarivate Analytics 社の下記サイトを参照
<https://clarivate.com/derwent/dwpi-reference-center/dwpi-manual-code/>

© 2020 化学情報協会

DWPIM ファイルの強化

WPI ファイル由来のマルクーシュ構造を収録する
データベース

- 繰返し範囲の下限に 0 を利用可能に
- 孤立環内で繰返しグループを利用可能に
- スーパーアトム of DYE (発色団または蛍光基) が検索可能に
- 同一環内の原子に, 異なるマッチレベルを指定可能に



© 2020 化学情報協会

世界 90 カ国以上の特許発行機関から発行される特許，実用新案を収録しているデータベース

● 法的状況データの強化

特許発行国	内容
日本	<ul style="list-style-type: none"> ● 法的状況データのタイムラグは，従来はガゼット掲載日から約 4 週間だったが，2019 年 10 月 10 日の更新分より約 2 週間に短縮された ● 遡及収録
クロアチア	1994 年 (法的状況日) 以降の法的状況データの収録を開始*
EP - イタリア	2020/4 週より EP 特許の法的状況データ中にイタリアの補充的保護証明書 (SPC) の申請・付与に関する情報の収録を開始 ✓ ITSPCF : SUPPLEMENTARY PROTECTION CERTIFICATE (SPC) FILED ✓ ITSPCG : SUPPLEMENTARY PROTECTION CERTIFICATE (SPC) GRANTED
ポーランド	2019 年 11 月 28 日(ED) より，EP 特許のポーランド語翻訳の収録を開始。特許種別は PLT3

* 法的状況コードは下記の Legal data available from Croatia を参照
<http://www.stn-international.de/sites/default/files/STN/search-materials/patents/INPADOC/INPADOC-News-Legal-data-available-from-Croatia.pdf>

© 2020 化学情報協会

USPATFULL/USPAT2 ファイルの強化

米国特許商標庁 (USPTO) が発行した米国特許の全文データベース

(2020年6月現在)

製作者	U.S. Patent and Trademark Office (USPTO)	
収録源	USPATFULL 最初に発行された特許	USPAT2 最新の特許
収録期間	1971年～	2001年～
収録件数	1,006万件以上	373万件以上
レコード構成	公報単位	
特長	<ul style="list-style-type: none"> 化学関連分野のレコードには CPlus ファイルの索引情報が収録されている 公報が3回以上発行された場合は、USPAT2 ファイルには常に最新の公報が収録され、その他の公報は特許番号が USPATFULL ファイルに対応特許情報として収録される 	

© 2020 化学情報協会

USPATFULL/USPAT2 ファイルの強化

PatentPak 機能が USPATFULL/USPAT2 ファイルで利用できるようになった

[PatentPak PDF](#) | [PatentPak PDF+](#) | [PatentPak Interactive](#)

AN 2019:192775 USPATFULL [Full-text](#)
 TI Inhibition of JAK-STAT Signaling Inhibits Formation of Neutrophil Extracellular Traps (NETs)
 PI US 20190167680 A1 20190606

PPAK

1310726-60-3, Upadacitinib, [Pg 56](#)1334298-90-6, INCB039110, [Pg 56](#)1526932-96-6, NS 018, [Pg 56](#)

CAS のアナリストが人手で付与した物質記載位置付きの特許公報 (PatentPak)

The screenshot displays the PatentPak interface for a patent document. On the left, there is a sidebar titled 'Key Substances in Patent' which lists two chemical structures with their corresponding CAS RN numbers: 1310726-60-3 and 944118-01-8. The main content area shows the patent text, including a claim (claim 7) and a list of related substances such as Upadacitinib, Baricitinib, Filgotinib, and others. The interface includes navigation controls like 'PAGE 56 / 56', 'ZOOM', and 'DOWNLOAD PDF'.

© 2020 化学情報協会

- PatentPak の情報が含まれる表示形式
 - ✓ ALL, MAX, SPP, BPP, HITPPAK
- PatentPak が収録されているレコードに限定する方法
 - ✓ => S L# AND PDF/FA
 - ✓ => S L# AND PPAK/FA

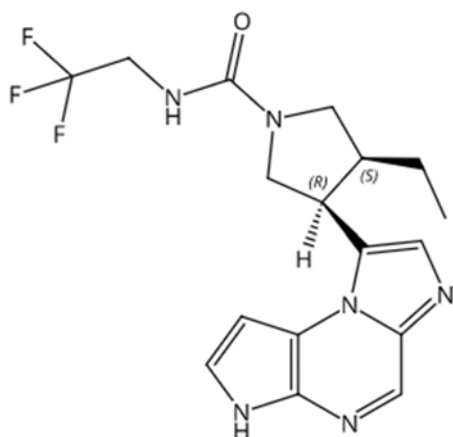
© 2020 化学情報協会

検索例

33

2019年8月の米国に続き、2020年1月に日本で承認された関節リウマチに用いる JAK1 阻害薬のウパダシチニブについて調査する

Upadacitinib



© 2020 化学情報協会

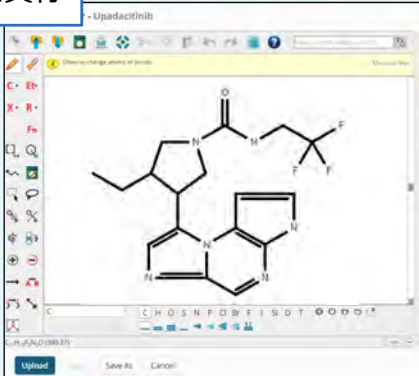
```

=> FILE REGISTRY
=>
Uploading structure file: Upadacitinib
L1      STRUCTURE UPLOADED

=> S L1 FAM          ← サンプル検索
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:   200 TO   800
PROJECTED ANSWERS:      0 TO     0
L2      0 SEA FAM SAM L1

=> S L1 FAM FUL      ← フルファイル検索
L3      18 SEA FAM FUL L1
    
```

ウパダシチニブのファミリー検索を実行



```

=> FILE USPATFULL USPAT2          ← USPATFULL, USPAT2 ファイルに入る

=> TRA L3 CHEM /BI, IT
L4      TRANSFER L3 1- CHEM : 29 TERMS
L5      126 FILE USPATFULL
L6      38 FILE USPAT2

TOTAL FOR ALL FILES
L7      164 L4/BI, IT

=> S (RHEUMAT? OR RA OR JAK OR JAK1 OR JANUS KINASE)/CLM
L8      43740 FILE USPATFULL
L9      13671 FILE USPAT2

TOTAL FOR ALL FILES
L10     57411 (RHEUMAT? OR RA OR JAK OR JAK1 OR JANUS KINASE)/CLM

=> S L7 AND L10
L11     63 FILE USPATFULL
L12     8 FILE USPAT2

TOTAL FOR ALL FILES
L13     71 L7 AND L10
    
```

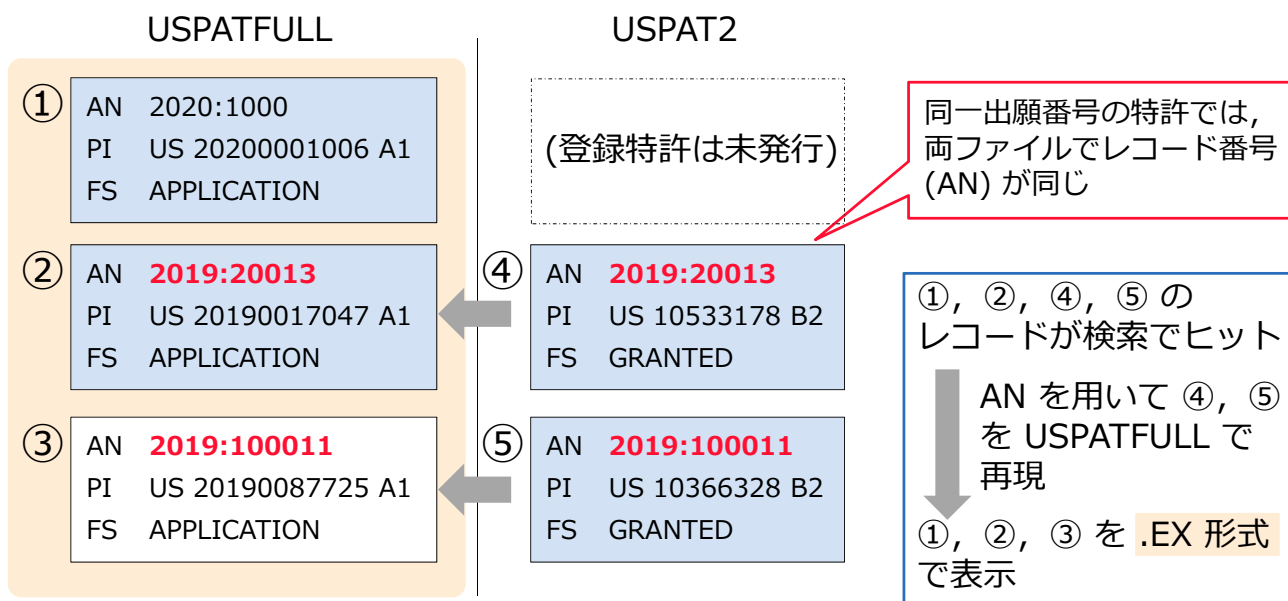
REGISTRY ファイルから CAS RN® と化学物質名を抽出して USPATFULL/USPAT2 ファイルの基本索引および索引フィールドで検索する

関節リウマチおよび JAK1 阻害薬のキーワードをクレーム検索

L11 63 FILE USPATFULL
 L12 8 FILE USPAT2

USPATFULL 63 件と USPAT2 8 件には重複の可能性がある

USPAT2 ファイルの回答を USPATFULL ファイルで再現し, 拡張表示形式 (.EX) で表示する



* レコード ④, ⑤ は USPATFULL ファイルで表示する際にはヒット部分がハイライトされない。
重複除去の詳細は, <https://www.jaici.or.jp/stn/pdf/uspat-rem.pdf> 参照

検索例

```

=> SEL L12 AN
E1 THROUGH E8 ASSIGNED
    
```

USPAT2 ファイルの L12 からレコード番号 (AN) を抽出

```

=> S E1-E8
L14      8 FILE USPATFULL
L15      8 FILE USPAT2
    
```

抽出した AN を検索

```

TOTAL FOR ALL FILES
L16      16 ( "2009:348946" /AN OR "2015:320817" /AN OR ~OR "2019:106160"/AN)
    
```

```

=> S L13 OR L16
L17      65 FILE USPATFULL
L18      8 FILE USPAT2
    
```

L13 と L16 をまとめる

L11 より L17 は 2 件多い

- USPAT2 ファイルでのみヒットしたレコード 2 件が USPATFULL ファイルで再現された

```

L11      63 FILE USPATFULL
L12      8 FILE USPAT2
TOTAL FOR ALL FILES
L13      71 S L7 AND L10
    
```

=> [D L17 34 MAX.EX](#)

USPATFULL ファイルの回答を .EX 形式で出力

L17 ANSWER 34 OF 65 USPATFULL on STN

-- Original Publication -- (APPLICATION - A1)

[PatentPak PDF](#) | [PatentPak PDF+](#) | [PatentPak Interactive](#)

AN 2019:192775 USPATFULL [Full-text](#)

TI Inhibition of JAK-STAT Signaling Inhibits Formation of Extracellular Traps (NETs)

IN Sellar, Rob, Newton, MA, UNITED STATES; Ebert, Benjamin, Brookline, MA, UNITED STATES; Wolach, Ofir, Boston, MA, UNITED STATES; Martinod, Kim, Boston, MA, UNITED STATES; Wagner, Denisa, Dover, MA, UNITED STATES

USPA The Brigham and Women's Hospital, Inc., Boston, MA, UNITED STATES; Children's Medical Center Corporation, Boston, MA, UNITED STATES

PI US 20190167680 A1 20190606 ← 公開特許

AI US 2018-16209698 A1 20181204 (16)

PRAI US 2017-62594266 20171204 (62)

DT Utility

FS APPLICATION

:

PatentPak

- PDF : 明細書
- PDF+ : 物質情報付き明細書
- Interactive : 物質情報と明細書を同一画面で確認

CLM What is claimed is: ← クレーム

:

13. The method of claim 8, wherein the inhibitor of **JAK**-STAT signaling is selected from the group consisting of Tofacitinib (CP690, 550); Baricitinib (INCB028050); Ruxolitinib (INCB018424); TG101348 (SAR302503); Lestaurtinib (CEP-701); AZD1480; R348; VX-509; GLPG0634; GSK2586184; AC-430; Pacritinib (SB1518); NS-018; CHZ868; INCB039110; Filgotinib (G-146034, GLPG-0634); Cerdulatinib (PRT062070); Gandotinib (LY-2784544); Momelotinib (GS-0387, CYT-387); PF-04965842); **Upadacitinib (ABT-494)**; Peficitinib (ASP015K, JNJ-54781532); Fedratinib (SAR302503); and BMS-911543.

:

CHEMICAL ABSTRACTS INDEXING COPYRIGHT 2020 ACS on STN

	PATENT	KIND	DATE
OS	CA 171:45530 * US	20190167680 A1	20190606

:

IT Signal transduction (JAK-STAT signaling; inhibition of JAK-STAT signaling inhibits formation of neutrophil extracellular traps (NETs) for treating diseases such as cardiovascular disease)

:

CAplus ファイルの索引情報

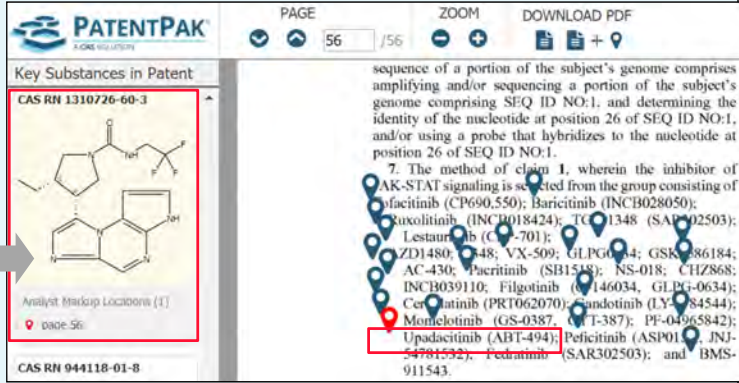
- 化学関連分野のレコードは CAplus ファイルの索引情報を収録している

IT 111358-88-4, Lestaurtinib 143831-71-4, Pulmozyme 477600-75-2,
 Tofacitinib 935666-88-9, AZD1480 936091-26-8, TG101348 937272-79-2,
 Pacritinib 941678-49-5, Ruxolitinib 944118-01-8, Peficitinib
 944842-54-0, VX-509 1056634-68-4, Momelotinib 1092707-60-2, R 348
 1187594-09-7, Baricitinib 1198300-79-6, Cerdulatinib 1206161-97-8,
 GLPG0634 1206163-45-2, GSK2586184 1229236-86-5, Gandotinib
 1271022-90-2, BMS-911543 **1310726-60-3**, Upadacitinib
 1334298-90-6, INCB039110 1526932-96-6, NS 018 1622902-68-4,
 PF04965842 1895895-38-1, CHZ868

(e) **物質索引から直接記載
ページヘジャンプ** ing inhibits formation of neutrophil
 treating diseases such as cardiovascular disease)

PPAK

1361415-84-0, [Pg 56](#)
 111358-88-4, Lestaurtinib, [Pg 56](#)
 143831-71-4, Pulmozyme, [Pg 49](#)
 :
 1229236-86-5, Gandotinib, [Pg 56](#)
 1271022-90-2, BMS-911543, [Pg 56](#)
1310726-60-3, Upadacitinib, [Pg 56](#)
 1334298-90-6, INCB039110, [Pg 56](#)
 1526932-96-6, NS 018, [Pg 56](#)
 1622902-68-4, PF04965842, [Pg 56](#)
 :



© 2020 化学情報協会

特許データベース強化のまとめ

- 韓国特許の全文検索が可能な KRFULL ファイルが Classic STN に搭載
- 中国の特実同日出願が CAplus, WPI, INPADOC ファイルで特許ファミリーに
- DWPIM ファイルの構造作図機能がより便利に
- PatentPak が USPATFULL/USPAT2 でも利用可能に

© 2020 化学情報協会

2019 年 7 月以降の強化一覧

2019 年 7 月以降の強化一覧

■ データベースの強化

ファイル名	強化点
CAplus/CA	<ul style="list-style-type: none"> ・ 中国の特実同日出願がファミリーに ・ 定型表示形式から指定国の削除
CASFORMULTNS	<ul style="list-style-type: none"> ・ 製剤・配合データベースとしてリリース ・ インデント型表示形式の追加 <ul style="list-style-type: none"> - IALL, ICHEM, IPRODUCT, ICHPR ・ CAS RN[®] 検索に関連する新規フィールドの追加 <ul style="list-style-type: none"> - /GRPRN, /CMPRN, /SOLRN ・ FA フィールドの強化
CHEMLIST	<ul style="list-style-type: none"> ・ 中国の現有化学物質名録 (IECSC) データの追加
CNFULL	<ul style="list-style-type: none"> ・ Key Terms フィールドの追加
DEFULL	<ul style="list-style-type: none"> ・ Key Terms フィールドの追加 ・ リロード <ul style="list-style-type: none"> - 特許出願人の標準化 - DED1, DET2, DET5 の収録の強化 - CPC コンビネーションセットの収録 - テキスト中の数値検索機能の強化
DWPIM	<ul style="list-style-type: none"> ・ 繰り返しグループ, スーパーアトム, マッチレベルの強化
EMBASE	<ul style="list-style-type: none"> ・ EMTREE 語のオンラインシソーラス更新
INPADOC	<ul style="list-style-type: none"> ・ 日本の法的状況データの速報性・網羅性の強化 ・ クロアチア, イタリア, ポーランドの法的状況データの強化
INSPEC	<ul style="list-style-type: none"> ・ INSPEC 分類コードの変更
KRFULL	<ul style="list-style-type: none"> ・ Classic STN (STNext, STN Express, STN on the Web) に搭載
MARPAT	<ul style="list-style-type: none"> ・ 構造表示の強化
MEDLINE	<ul style="list-style-type: none"> ・ 2020 年版 MeSH シソーラスの搭載 ・ リロード <ul style="list-style-type: none"> - 2020 年版 MeSH に対応 - 資料種類の追加と変更
PATDPAFULL	<ul style="list-style-type: none"> ・ 更新終了
REGISTRY	<ul style="list-style-type: none"> ・ 構造表示の強化
TOXCENTER	<ul style="list-style-type: none"> ・ MEDLINE セグメントの強化 <ul style="list-style-type: none"> - 2020 年版 MeSH に対応 - 資料種類の追加と変更
USPATFULL/USPAT2	<ul style="list-style-type: none"> ・ PatentPak 機能の追加
WPINDEX/WPIDS/WPIX	<ul style="list-style-type: none"> ・ マニュアルコードの改訂 (2020 年) ・ DW, DW.AN, DW.B, DUPD の桁数の変更 ・ 韓国の公告・登録特許種別の変更

2019 年 7 月以降の強化一覧

■ インターフェースの強化

・ STNext

	強化点
新規ファイル	<ul style="list-style-type: none"> ・ Databases タブに CASFORMULTNS ファイルが追加
構造検索関連	<ul style="list-style-type: none"> ・ 構造質問式の L 番号が生成されるまでの時間が 20% 以上短縮 ・ 構造検索ができないファイルで構造をアップロードした場合、エラーのみを表示 ・ 構造作図画面の強化 <ul style="list-style-type: none"> - 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 - Save As ボタンで保存する際に、デフォルト名が入力されるように - アップロードボタンの表記が「Save & Upload」から「Upload」に変更 ・ -SH 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 ・ New ボタンをクリックした際の構造の保存先が My Structures に変更 ・ インポートした構造質問式のマルクーシュ属性が保持されるように ・ REGISTRY, MARPAT ファイルでヒット部分がハイライトされるように <ul style="list-style-type: none"> - REGISTRY ファイルで構造検索した結果を CAplus ファイルにクロスオーバーした後、HITSTR 表示形式で回答を表示した場合もハイライト ・ REGISTRY, MARPAT ファイルで構造表示が改善
Transcript	<ul style="list-style-type: none"> ・ ダウンロード形式が追加・変更 <ul style="list-style-type: none"> - PDF (Compressed) : 圧縮形式の PDF - RTF (Compressed) : 圧縮形式の RTF - Text (Plus Image Files) : 従来 “ZIP” と表示されていた形式 ・ ダウンロード進行中であることを示すメッセージが表示されるように
レポート機能	<ul style="list-style-type: none"> ・ テーブル形式のレポートに回答番号とデータベース名の列が追加 ・ 各設定画面を Next/Back で前後しても選択した内容が保持されるように ・ CASFORMULTNS ファイル由来のフィールドが追加 ・ カスタマイズ画面における項目名の表示の改善
その他	<ul style="list-style-type: none"> ・ STNext の URL が https://www.stn.org に変更 ・ 35 分間のインアクティブな状態の継続で警告画面が表示されるように ・ 検索式の自動作成機能の追加 ・ What's New ページの追加 ・ Query Summary (質問式サマリーファイル) が RTF 形式に加え、PDF 形式でもダウンロードできるように ・ My Files の Transcripts などのファイル名・フォルダ名が検索可能に

・ STN Express

- サポートファイルの更新 (2020 年 5 月)

・ STN 新プラットフォーム

- URL の変更 (2019 年 7 月 1 日) : <https://nstn.stn.org>



講習会テキスト (PDF 版)

定期講習会で使用しているテキストの PDF ファイルをダウンロードできます。

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



STN 技術資料

サマリーシートや過去のセミナーの資料など、検索に役立つ資料を下記のサイトに多数掲載しています。

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



ヘルプデスク

検索方法に関するご質問をお受けしております。お気軽にご利用ください。

TEL	0120-003-462
FAX	03-5978-4090
e-メール	support@jaici.or.jp

JAICI

化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中層ビル

TEL: 0120-003-462

E-mail: support@jaici.or.jp