

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 フォーマレーションズ



© 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！**

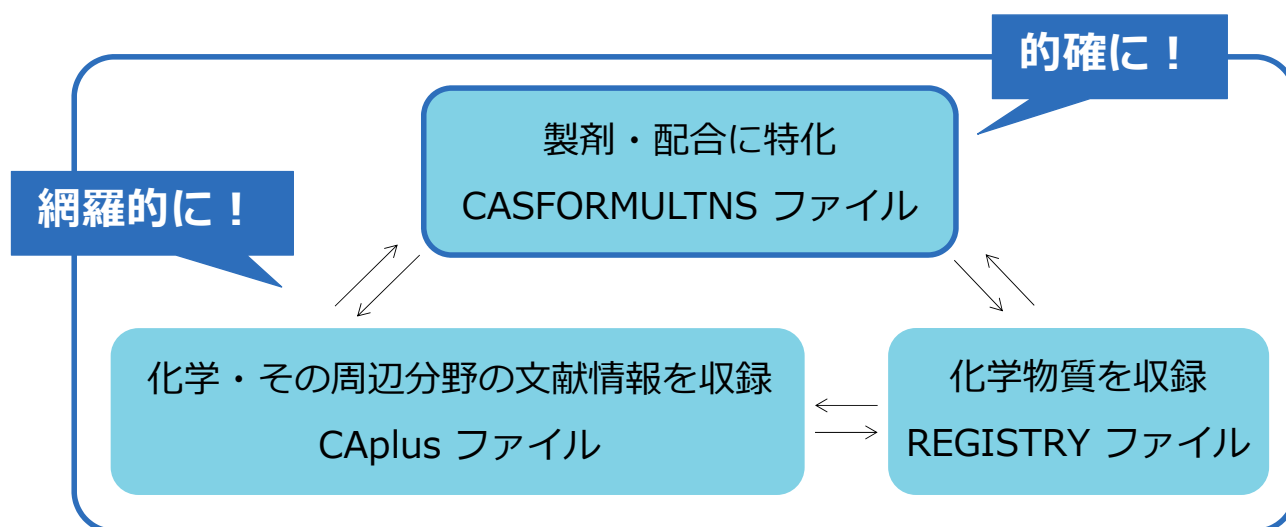
© 2020 化学情報協会

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



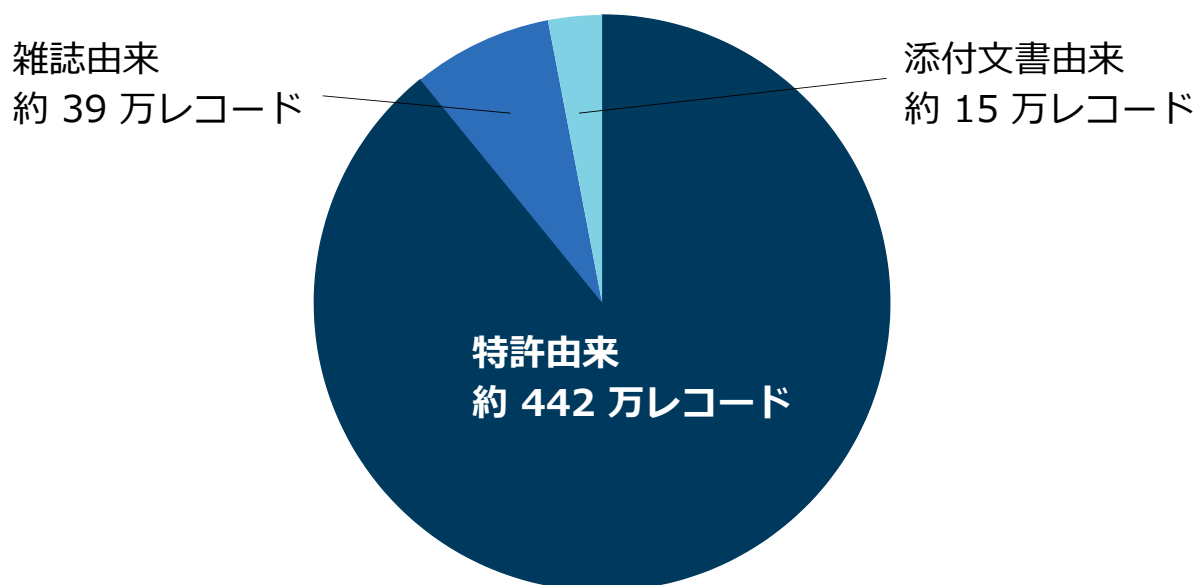
© 2020 化学情報協会

収録状況

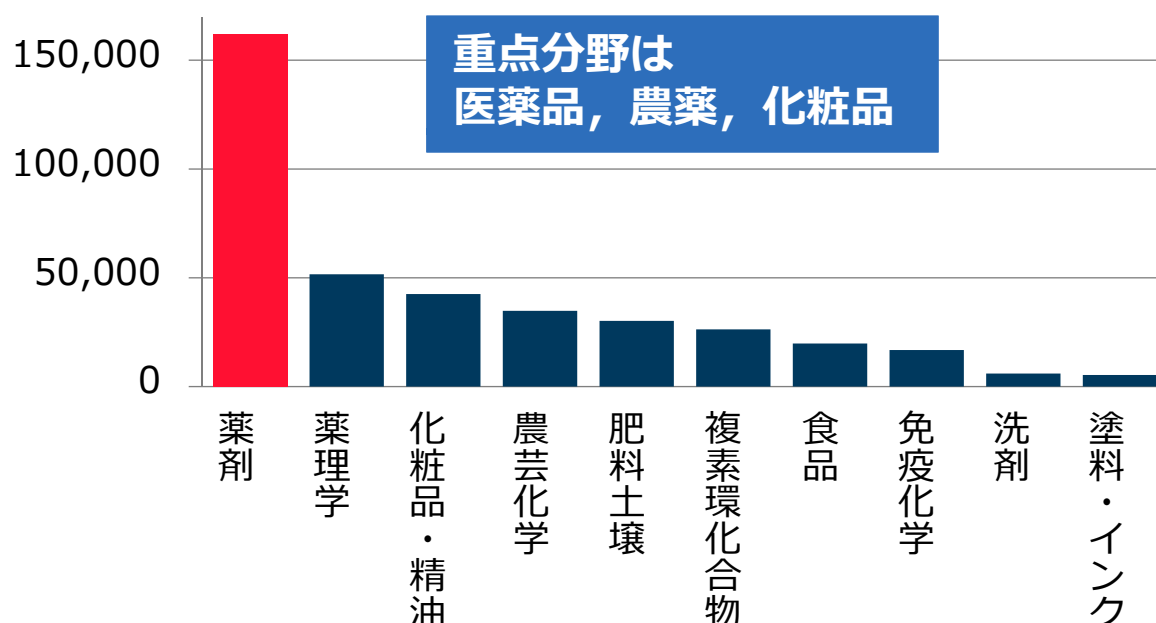
製剤・配合のレコード数

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

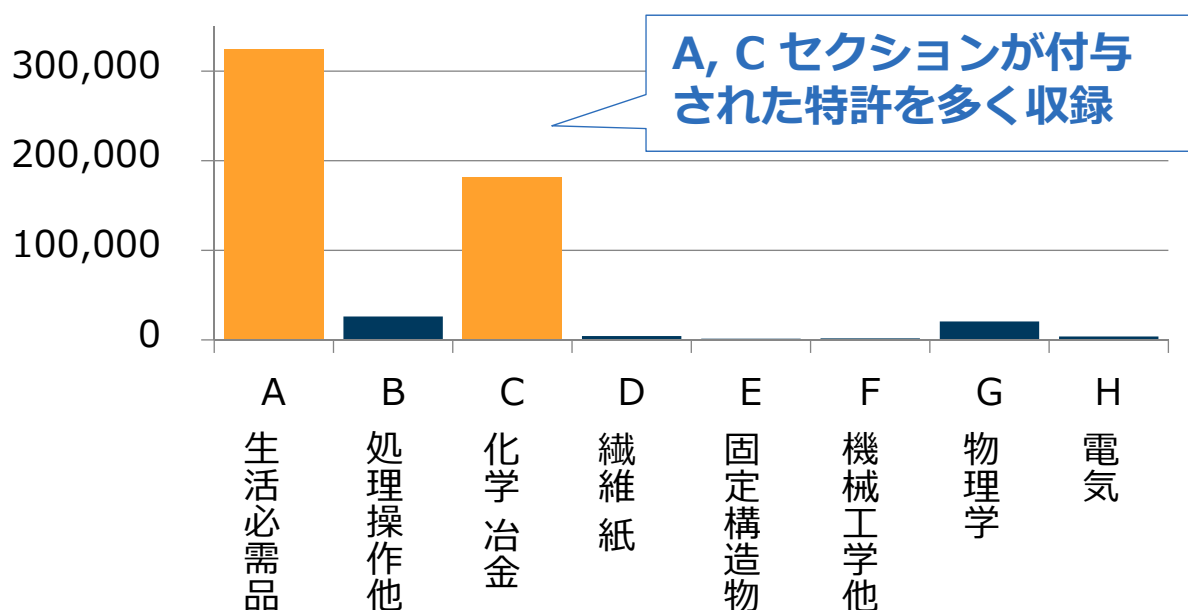


CASFORMULTNS ファイルに含まれている文献の
主な **CA セクション**



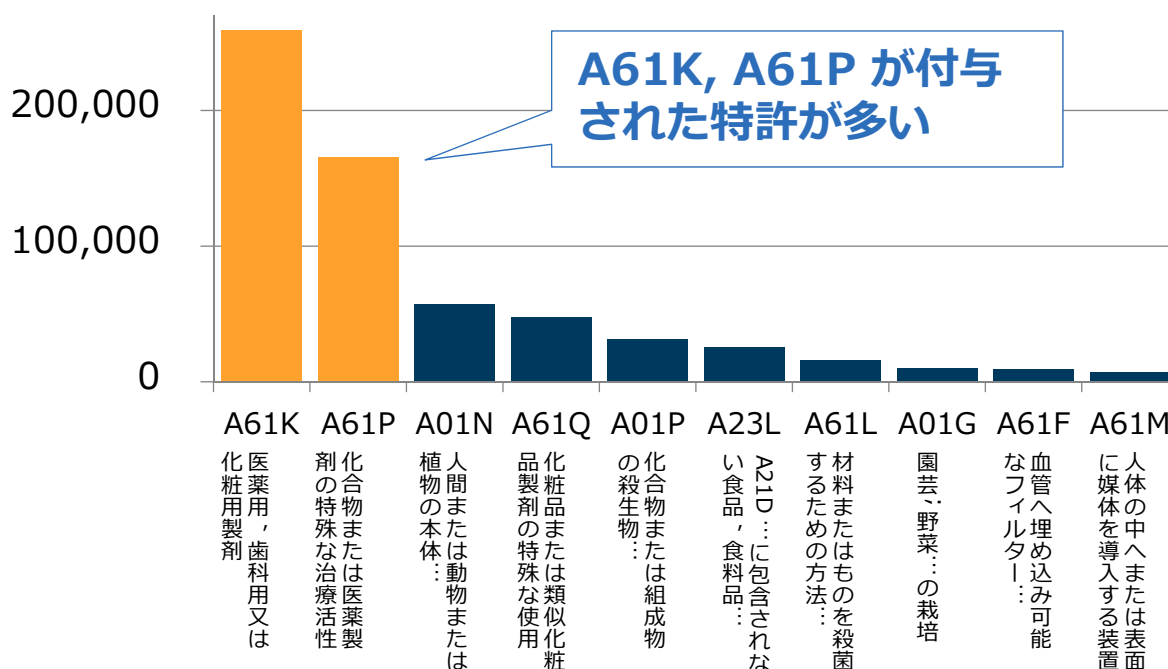
© 2020 化学情報協会

CASFORMULTNS ファイルに含まれている特許の
IPC セクション



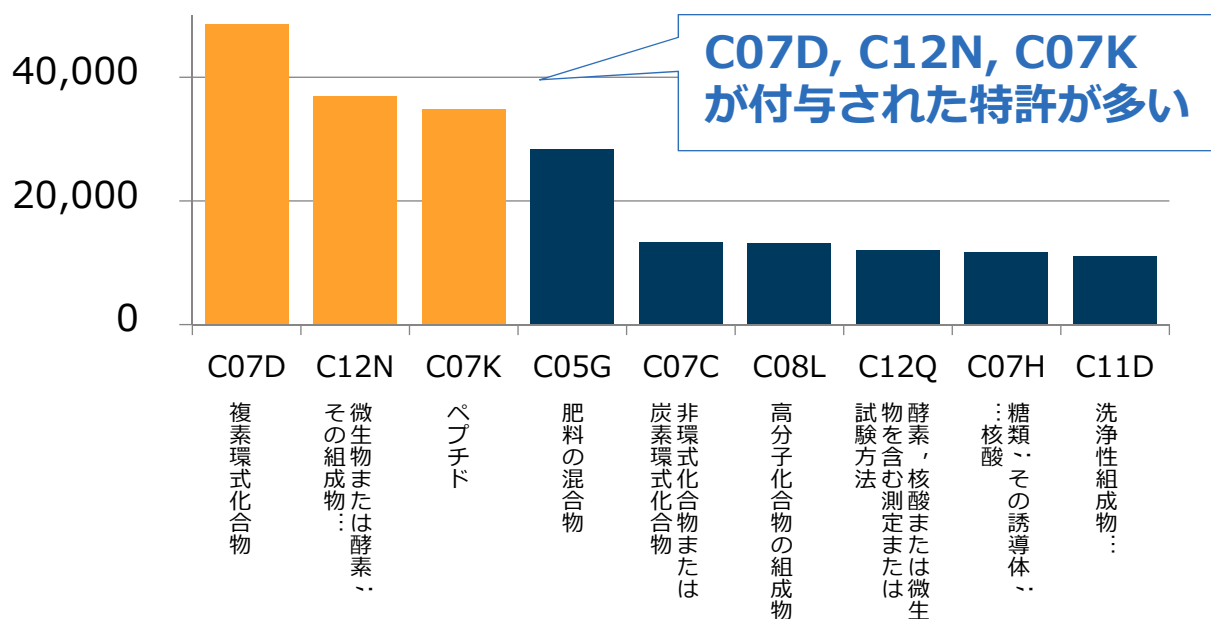
© 2020 化学情報協会

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

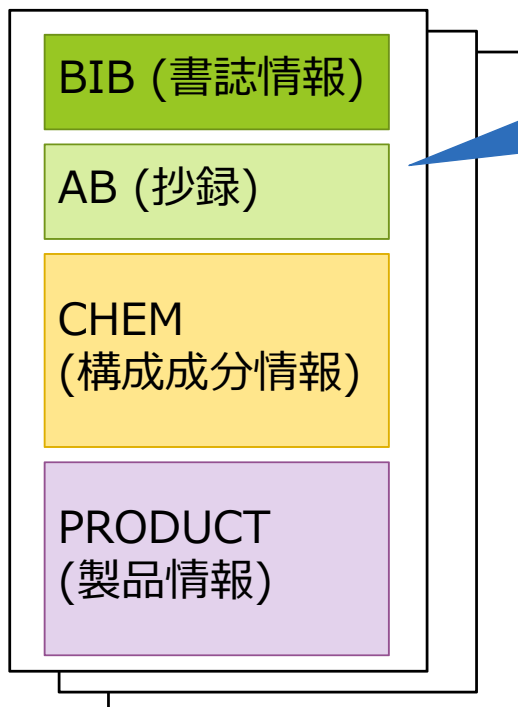
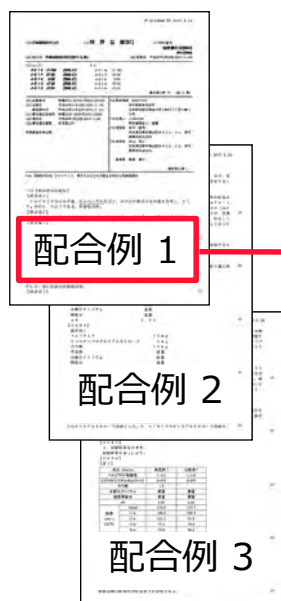
収録源	特許 (CAplus ファイル由来) 雑誌 (CAplus ファイル由来) 添付文書 (NLM の DailyMed データベース由来)
収録分野	重点分野： 医薬品 ， 農薬 ， 化粧品 一部収録分野：コーティング剤，日用品，食品，材料
収録期間	約 23 年 ・ 英語の特許：1996 年～ ・ 日本語，中国語，韓国語，ドイツ語，フランス語の特許：2000 年～ (言語による) ・ 英語の雑誌：2011 年～

© 2020 化学情報協会

レコード構成

文献

配合レコード 1



1 レコード =
1 製剤・配合

© 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	出願人, 発明者名
(22) 出願日 平成28年11月24日 (2016. 11. 24)	参天製薬株式会社	
審査請求日 平成28年11月25日 (2016. 11. 25)	大阪府大阪市東淀川区下新庄 3 丁目 9 番 1 号	
(31) 優先権主張番号 特願2016-16389 (P2016-16389)	(74) 代理人 110001508	
(32) 優先日 平成28年1月29日 (2016. 1. 29)	特許業務法人 津国	
(33) 優先権主張国 日本国 (JP)	(72) 発明者 森本 隆司	
早期審査対象出願	奈良県生駒市高山町 8916-16 参天製薬株式会社内	
	(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	
	審査官 鳥居 福代	
最終頁に続く		
(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		

特許番号類

出願人,
発明者名

標題

© 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. Tokyo 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

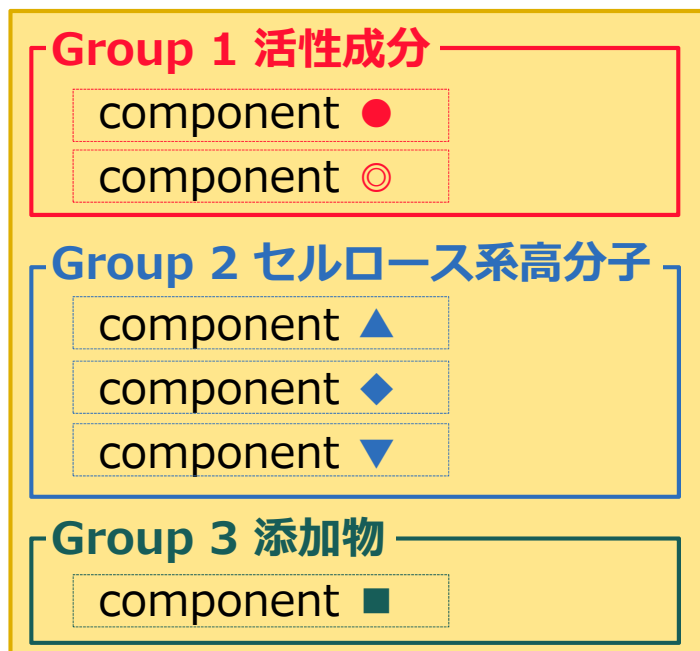
文献

CHEM (構成成分情報)

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



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 **ヒドロキシプ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: カテゴリー 記載位置: デscri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scri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-, 7,7-dioxide, (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)

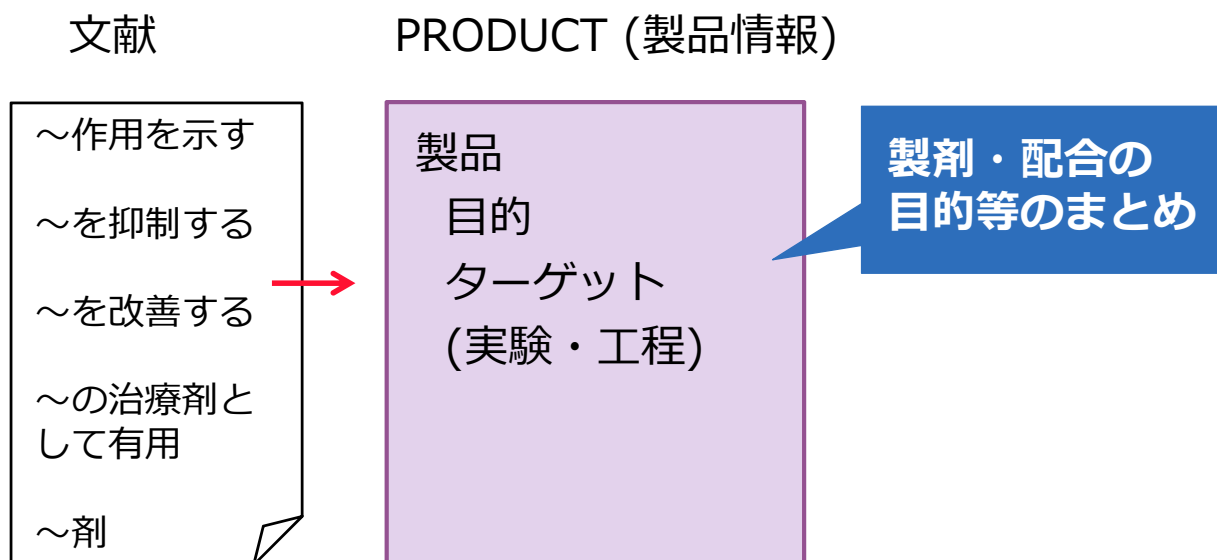
グループ 2 グループ デscriプション 成分リスト グループ : 選択性 グループ : キーワード グループ : 量	GROUP G2 GROUP DESCRIPTOR: cellulosic polymers COMPONENT LIST: C3-C5 OPTIONALITY: Mandatory GROUP VOCABULARY: Cellulosic materials GROUP AMOUNT: 0.001-10 w/w %	グループ 2 セルロース系高分子
成分 CAS RN® 成分名 化学物質名	COMPONENT C3 REGISTRY NUMBER: 37353-59-6 COMPONENT NAME: hydroxymethylcellulose PREFERRED CHEMICAL NAME: Cellulose, hydroxymethyl ether (C3, C4, C5) OTHER NAMES: Cellosize QPS 52000; Hydroxymethylcellulose; Marpolon 888; Tylose DKL; 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) OTHER NAMES: : COMPONENT OPTIONALITY: One or more	
成分 : 量		
グループ 3 グループ デscri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) OTHER NAMES: : COMPONENT AMOUNT: 0.001-10 w/w % COMPONENT NOTES: salt thereof COMPONENT OPTIONALITY: Mandatory	
成分 : 量 成分 : ノート 成分 : 選択性		

© 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

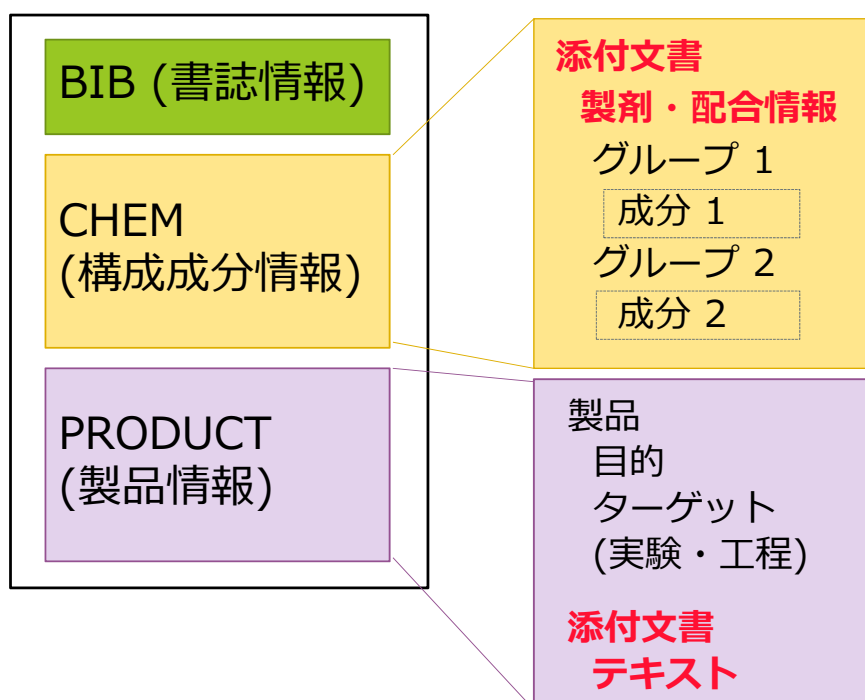
製品名：コード 製品名、概要	PRODUCT NAME CODE: author PRODUCT NAME VALUE: pharmaceutical composition containing dor	目的や形状 (点眼液)
製品 1 製品：目的 製品の剤形・形状 製品：キーワード	PRODUCT PA1 PURPOSE: ophthalmic agents PHYSICAL FORM: Desc: ophthalmic solutions PRODUCT VOCABULARY: Ophthalmic agents; Ophthalmic drug; Ophthalmic drugs; Ophthalmic agent; Eye drugs; Eye drug; Eye treatment : DELIVERY ROUTE: ophthalmic	
投与経路	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	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



© 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: カテゴリ	LOC SECTION CATEGORY: Product insert
記載位置: デscriプション	LOC SECTION DESCRIPTOR: Product insert
グループ 1	GROUP G1
グループ デscri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: 13609-67-1
成分名	COMPONENT NAME: hydrocortisone butyrate
成分: キーワード	COMPONENT VOCABULARY: Formulation active agents; Active agents; Formulation
成分: 量	COMPONENT AMOUNT: 1 mg/1 mL
成分: 機能	FUNCTION DESCRIPTION: active agent
成分: ノート	COMPONENT NOTES: (UNII: 05RMF7YPWN) (hydrocortisone UNII: WI4X0X7BPJ)
成分: 選択性	COMPONENT OPTIONALITY: Mandatory
グループ 2	GROUP G2
グループ デscriプション	GROUP DESCRIPTOR: Additional ingredients
成分リスト	COMPONENT LIST: C2
グループ: 選択性	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

NDC Code(s): 16781-391-60

Packager: Bausch Health US, LLC

Category: HUMAN PRESCRIPTION DRUG LABEL

DEA Schedule: None

Marketing Status: New Drug Application

+ SPL UNCLASSIFIED SECTION

FOR TOPICAL USE ONLY

+ DESCRIPTION (性状)

Locoid® (hydrocortisone butyrate) Solution, 0.1% contains the topical corticosteroid, hydrocortisone butyrate, a nonfluorinated hydrocortisone ester. It has the chemical name ...

+ CLINICAL PHARMACOLOGY (薬効薬理)

Topical corticosteroids share anti-inflammatory, anti-pruritic, and vasoconstrictive actions. The mechanism of anti-inflammatory activity of topical corticosteroids is unclear. Various laboratory ...

+ PHARMACOKINETICS (薬物動態)

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

+ 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.

+ CONTRAINDICATIONS (禁忌)

None.

+ 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 ...

+ ADVERSE REACTIONS (副作用)

The following local adverse reactions are reported infrequently with topical corticosteroids but may occur more frequently with the use of occlusive dressings. These reactions are listed in an ...

+ 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.

© 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: appli 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：関連性 ターゲット：種類	TARGET RELATIONSHIP: treats TARGET TYPE: human	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：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：活性ノート	ACTIVITY NOTES: description: for topical use.	
製品：活性ノート	ACTIVITY NOTES: DESCRIPTION: Locoid® (hydrocortisone butyrate) (性状) solution, 0.1% contains the topical corticosteroid, :	
製品：活性ノート	ACTIVITY NOTES: clinical pharmacology: topical corticosteroids share (薬効薬理) antiinflammatory, anti-pruritic and vasoconstrictive :	
製品：活性ノート	ACTIVITY NOTES: pharmacokinetics: the extent of percutaneous (薬物動態) absorption of topical corticosteroids-is determined by :	
製品：活性ノート	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：活性ノート	ACTIVITY NOTES: Contraindications: none.	
製品：活性ノート	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：活性ノート	ACTIVITY NOTES: information for p corticosteroids s information and i :	

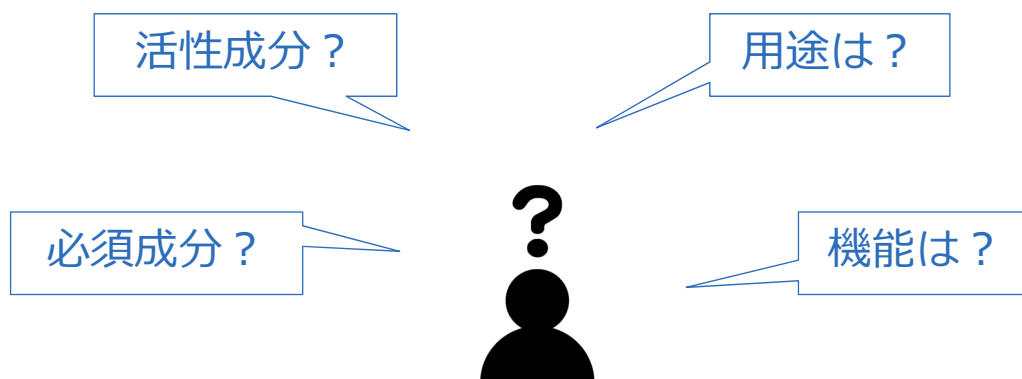
© 2020 化学情報協会

活用シーン

こんなお悩みに CASFORMULTNS

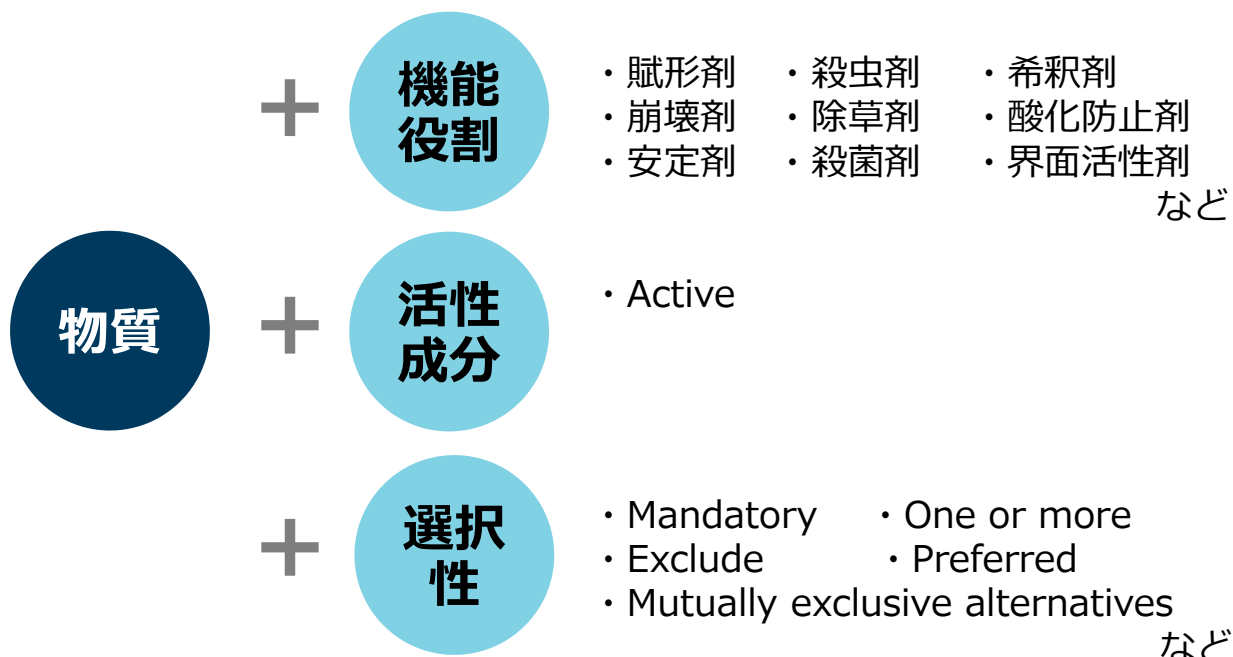
37

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
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
成分：選択性	COMPONENT OPTIONALITY:	Mandatory

同一成分

物質

機能：除草剤

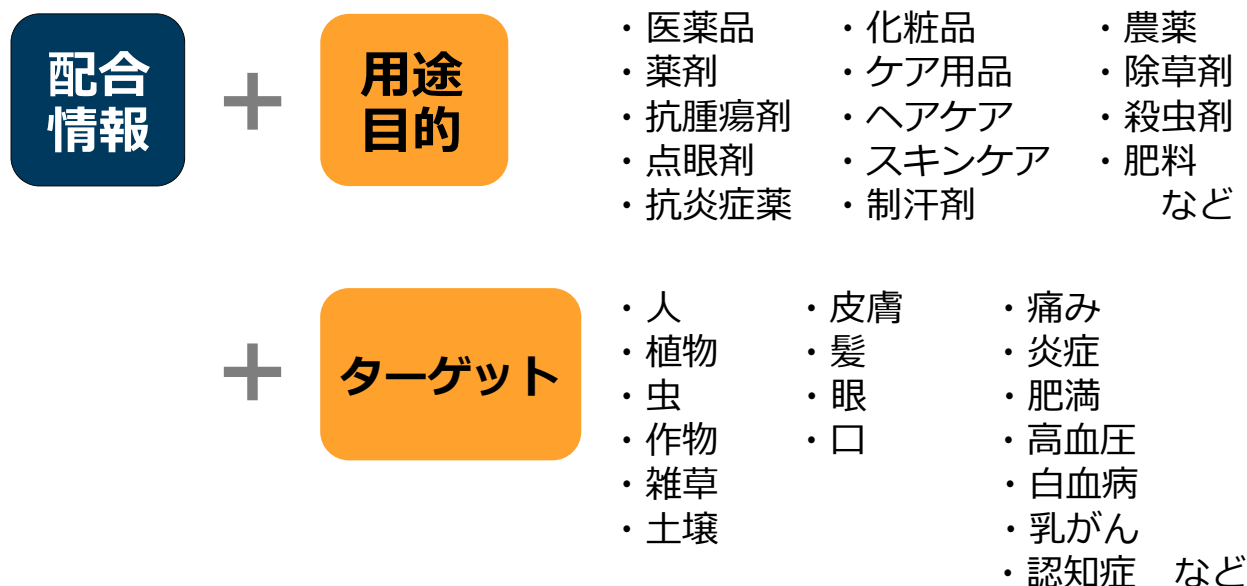
活性成分

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



© 2020 化学情報協会

レコード例

41

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

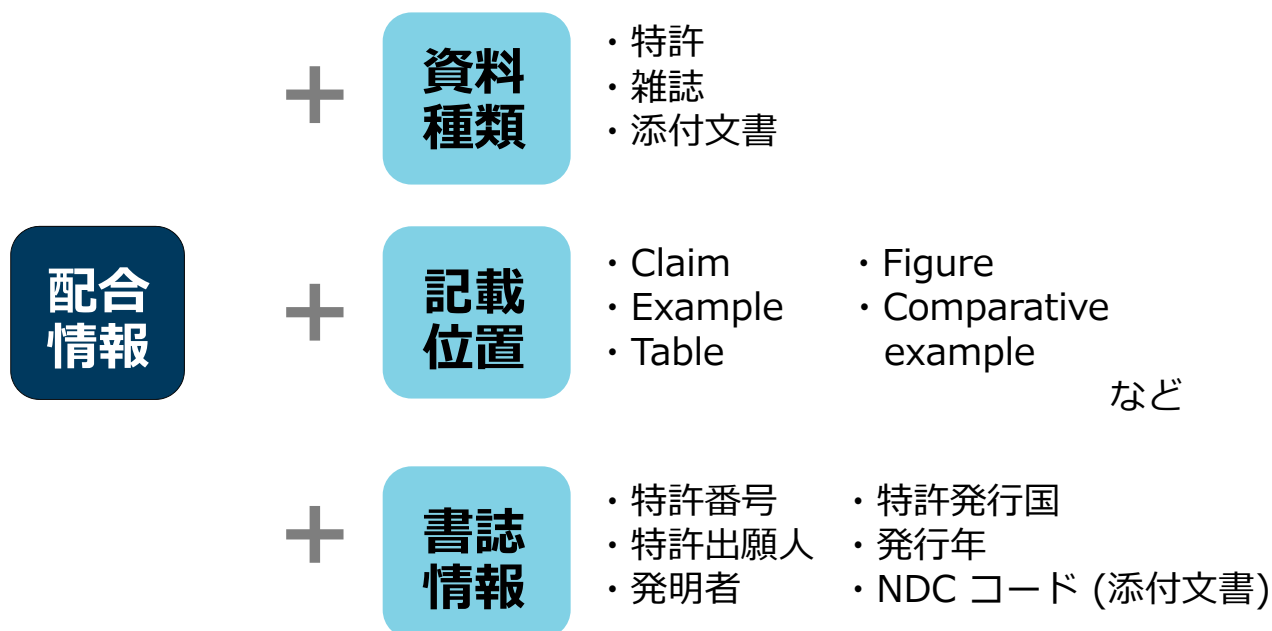
目的のフィールド

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

43

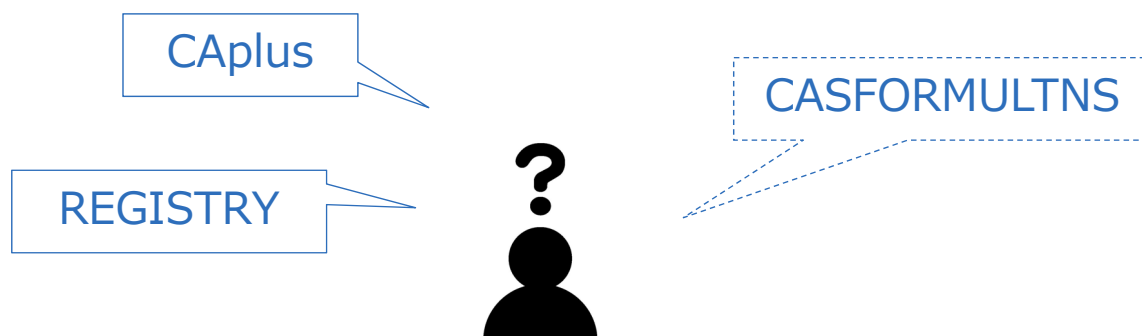
原報の記載位置の情報を用いた検索が可能

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・配合デスクリプション	FORMULATIONS DESC:	Agrochemical Composition: Pesticide
グループリスト	GROUP NUMBERS:	G1-G5
グループ数	GROUP COUNT:	5
成分数	COMPONENT COUNT:	15
ターゲット数	TARGET COUNT:	2
記載位置: カテゴリー	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

© 2020 化学情報協会

ケース 1

45

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

© 2020 化学情報協会

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	
成分：機能 成分：選択性	FUNCTION DESCRIPTION: COMPONENT OPTIONALITY:	pharmaceutical excipient Mandatory	CASFORMULTNS ではこれらの成分が 収録されている
成分 CAS RN® 成分名	COMPONENT REGISTRY NUMBER: COMPONENT NAME:	C5 9004-64-2 hydroxypropyl cellulose	
成分：機能 成分：選択性	FUNCTION DESCRIPTION: COMPONENT OPTIONALITY:	disintegrant Mandatory	崩壊剤
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

47

CAplus 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

=> <u>FILE REGISTRY</u>	
=> <u>S TEA TREE OIL/CN</u>	
L1 1 TEA TREE OIL/CN	
=> <u>FILE CAPLUS</u>	
=> <u>S L1</u>	
L2 0 L1	
=> <u>FILE CASFORM</u>	
=> <u>S L1 OR TEA TREE OIL/CN, CNM</u>	
L3 5633 L1 OR TEA TREE OIL/CN, CNM	

* (アスタリスク) 付きの CAS RN® : CAplus 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

CAPLUS ではヒットしない

CASFORMULTNS ではヒット

© 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	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
	:	
		alternifolia (cheel); Oil, Melaleuca; Oils, tea tree;
		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)

Group G1
Component C1
Component C2
Group G2
Component C3
Component C4
Group G3
Component C5

レコード例 1

活性成分
成分 A
成分 B
安定剤
成分 C
成分 D
溶剤
成分 E

レコード例 2

水層成分
成分 A
成分 B
油層成分
成分 C
成分 D
粉体成分
成分 E

© 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 substanc
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

© 2020 化学情報協会

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

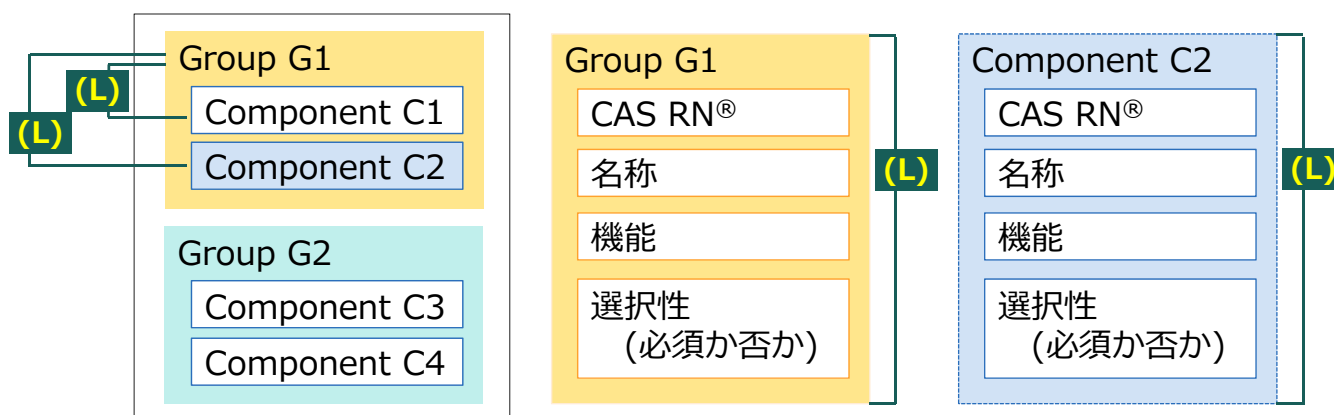
⇒ S ?PARAFFIN?/CNS OR ?PARAFFIN? (P) CNM/FA

© 2020 化学情報協会

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



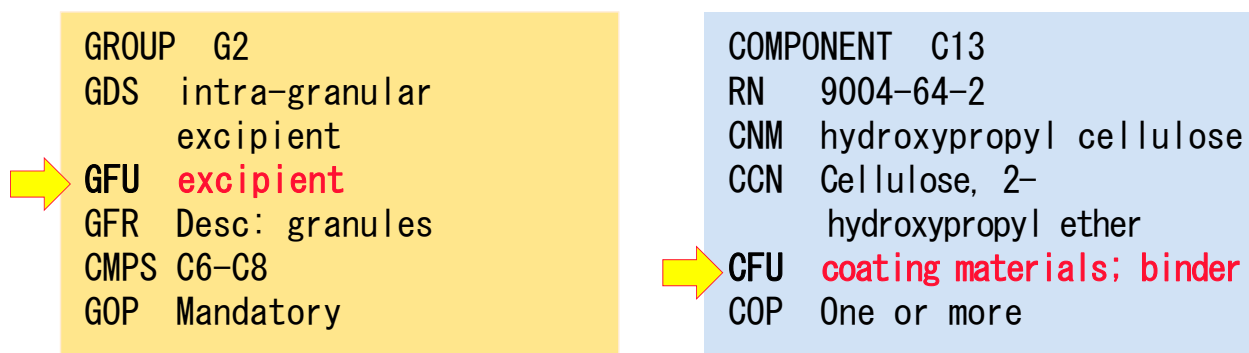
同一グループ内，同一成分内に限定する場合には
(L) 演算子を利用する



© 2020 化学情報協会

機能・役割の収録，検索

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 & 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/GFU
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/GFU
:

=> 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

蜜蝋が安定化剤である配合の検索

11

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)
:
```

```
GROUP G8          グループ 8 - 安定化剤
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
:

GROUP G3 **グループ 3 - 補助剤**
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**
COP 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
COP One or more

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

COMPONENT C10 **抗酸化剤**
RN 1406-18-4
CNM vitamin E
CCN Vitamin E (9CI, ACI)
CFU antioxidants
COP 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?

L4 112 BEESWAX/CT (L) STABILIZ?

パターン 1 の検索

=> S STABILIZING AGENTS+NT, PFT/CT (L) BEESWAX

L5 2 STABILIZING AGENTS+NT, PFT/CT (L) BEESWAX

パターン 2 の検索

=> S L4 OR L5

L6 114 L4 OR L5

← 回答を一つにまとめる

=> 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

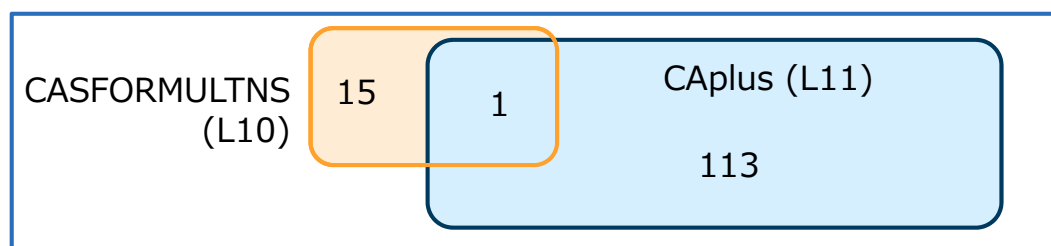


=> TRA L# **AN** /CPAN

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

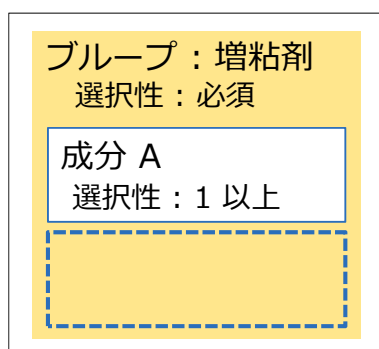
化粧品の防腐剤として古くから利用されている成分であるが、ごく稀にアレルギー等の皮膚トラブルを起こす可能性があるとして厚生労働省によって旧表示指定成分とされていた

特定成分を含まない配合

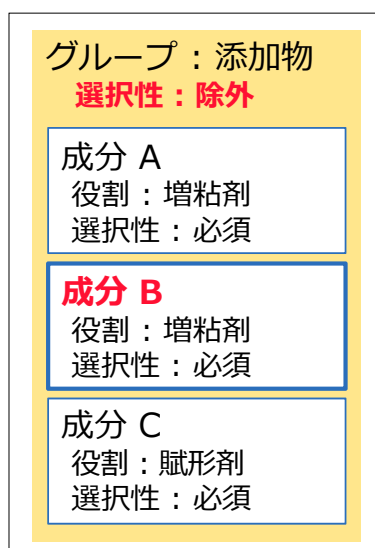
17

“特定成分 B を含まない” 配合は下記のように収録される

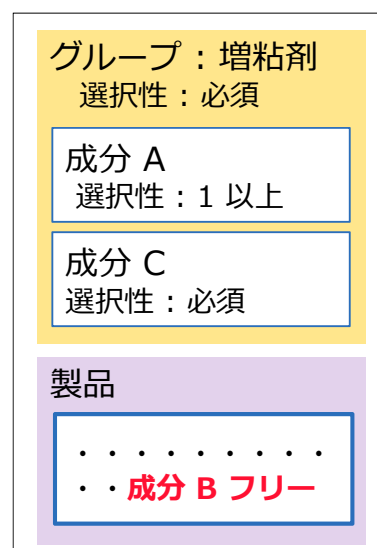
- パターン 1
成分の収録なし



- 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

用途の収録

19

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)	
CHEM (構成成分情報)	グループのディスクリプション (/GDS) 【単語・フレーズ】
PRODUCT (製品情報)	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】



フレーズ単位の検索フィールドでは, EXPAND で事前を確認するか, 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
	2. パラベンの検索	
	3. 日焼け止めの検索	パターン 1
CASFORMULTNS	4. パラベンを含まない日焼け止めの検索	
	5. パラベンの選択性が Exclude である日焼け止めの検索	パターン 2
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

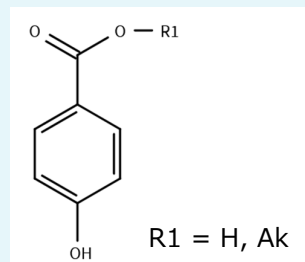
=>
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> 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
L4 656 L3 AND CASFORM?/LC

CASFORMULTNS に収録されている物質に限定する



© 2020 化学情報協会

パラベンを含まない日焼け止めの検索

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)

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

L5, L6 : パラベンを含む配合
L7 : 日焼け止めの配合

パターン 2 (選択性が Exclude の配合)

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

(L) 演算子で、パラベンの
選択性を EXCLUDE に限定する

=> 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

パラベンを含まない日焼け止めの検索

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

パラベンを含まない日焼け止めの検索

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

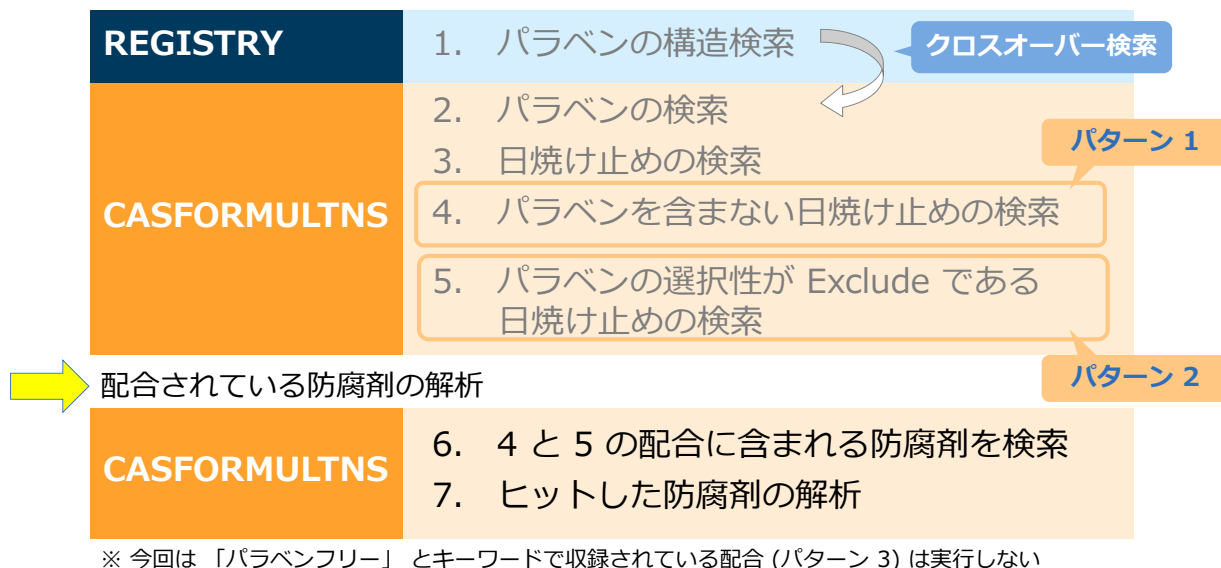
L10	ANSWER 17300 OF 82457	CASFORMULTNS
	COPYRIGHT 2020 ACS on STN	
AN	2018:279418	CASFORMULTNS
	:	
FN	Form 4	
FD	Cosmetic Sunscreen : Cosmetic Application	
	:	
GROUP	G4	グループ 4 - 除外される成分 (選択性: Exclude)
GDS	ingredients	
CMPS	C23-C29	
GOP	Exclude	
COMPONENT	C23	配合に含まれない成分 ①
CNM	alkanediols	
COP	One or more	
COMPONENT	C24	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

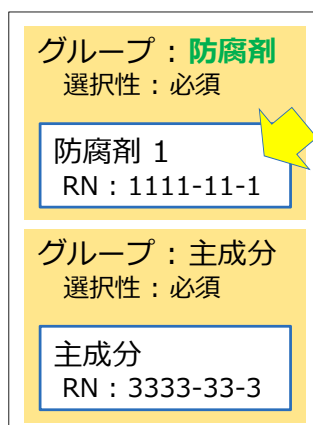
パラベンを含まない日焼け止めの検索



配合されている防腐剤の解析

29

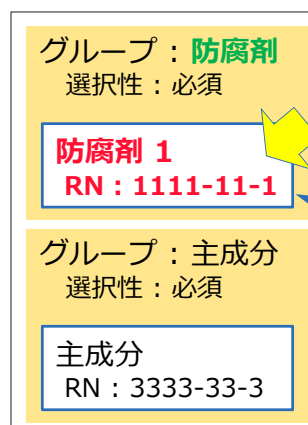
配合されている防腐剤 1 を知りたい



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

CAS RN® の抽出

1111-11-1
3333-33-3

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

© 2020 化学情報協会

配合されている防腐剤の解析

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

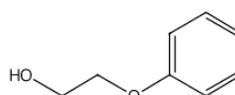
=> D DOC TOP 10

← 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



© 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

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

