Vol.37 ——— 夏号

ST/Vews

TOPICS

<u>2021年2月リリース</u> Biosequences Search

データベースニュース <u>ひとこと</u>







2021 年 2 月リリース

Biosequences Search



STNext 上で実行できる新しい配列検索機能「Biosequences Search」がリリースされました. 配列の収録が大幅に拡大され,新しい配列検索プログラムも追加されました. ヒットした配列の由来となった特許を STN の各種データベースで検索でき,配列と特許情報をセットで Excel 形式でダウンロードすることもできます. また,配列検索の回答集合から配列の類似性により解析したマップを作成する解析機能 (Bioscape) もリリースされました.

■ 配列の収録拡大

Biosequences Search では,60 以上の特許発行機関の約 110 万件の特許から収録された 5 億 8,000 万件以上の配列を検索できます.収録している配列情報は下記の通りです.

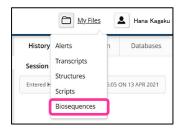
- ◆ REGISTRY ファイルの配列 (CAS の収録基準に基づいて収集した配列)
- ◆ 7 つの主要特許発行機関 (US, EP, WO, CA, KR, JP, CN) の特許から独自に抽出した配列

■ 配列検索プログラム

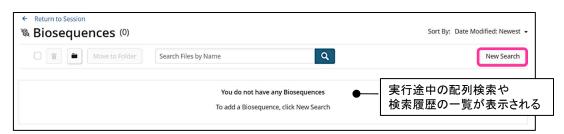
配列検索プログラム	内容
BLAST ホモロジー検索	局所的に類似した配列を検索するプログラム
CDR 配列検索	抗体と T 細胞受容体の CDR を指定し, 検索するプログラム
Motif 配列検索	DNA, RNA, タンパク質中の短いパターン配列を検索するプログラム

■ Biosequence 検索を始めるには

1. STNext にログインし、画面右上の My Files から Biosequences を選択します.

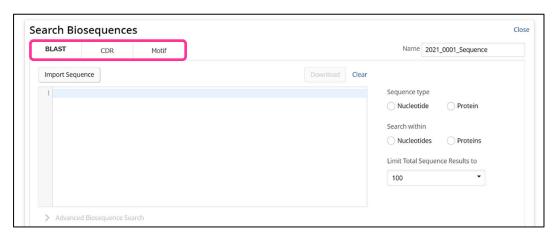


2. New Search をクリックし、検索を始めます.





3. 検索したいプログラムのタブを選択します.BLAST,CDR,Motifの3種類を利用できます.



■ BLAST ホモロジー検索

BLAST (Basic Local Alignment Search Tool) は、データベース中の配列の中から、局所的に類似した配列を高速で検索するプログラムです。

1. BLAST タブを選び、配列質問式を入力、あるいはアップロードします。次に、質問式の配列、回答の配列、回答の上限数を選択し、検索を実行します。

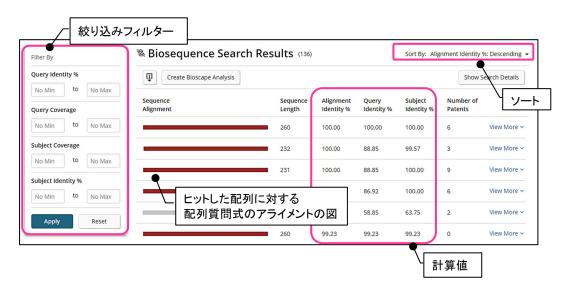


2. 検索が完了したら、View Results をクリックします.



3. 検索結果が表示されます。ヒットした配列に対する配列質問式のアライメントの図や各項目の計算値を確認できます。アライメントとは、配列質問式と回答配列のどこが類似した領域か特定できるようにしたものです。





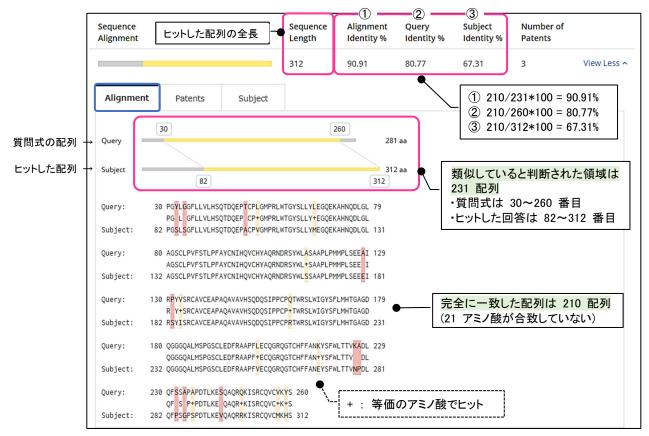
◆ 各項目の計算値による絞り込みやソート(並べ替え)が可能です。

項目	内容	Filter By	Sort By
Alignment Identity %	一致したコード÷類似領域×100	-	0
Query Identity %	一致したコード÷配列質問式×100	0	0
Query Coverage	類似領域÷配列質問式×100	0	0
Subject Identity %	一致したコード÷回答配列×100	0	0
Subject Coverage	類似領域÷回答配列×100	0	0

4. View More をクリックすると、詳細を確認できます.

【Alignment タブ】ヒットした配列に対する配列質問式のアライメントの詳細が表示されます.

(例) 配列長 260 の配列質問式で検索してヒットしたタンパク質の回答

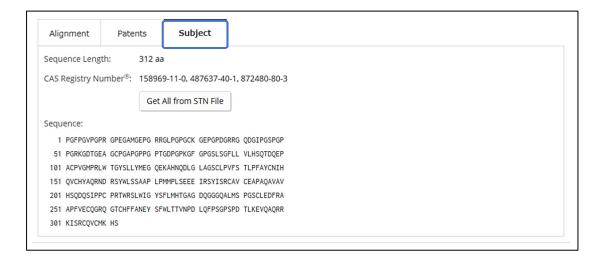




【Patents タブ】ヒットした配列の由来となった特許が表示されます.



【Subject タブ】ヒットした配列の配列長、全配列コード、CAS RN® が表示されます。



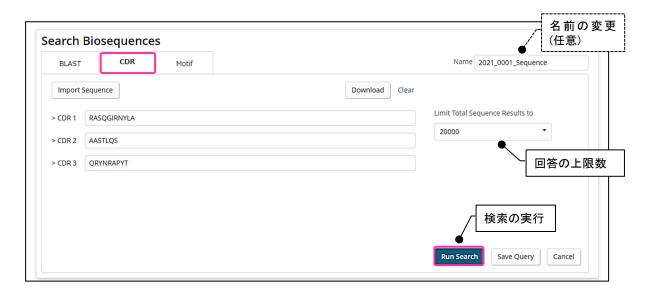


■ CDR 配列検索

CDR (Complementarity determining region) 検索は、抗体と T 細胞受容体の CDR を指定し検索できるプログラムです. BLAST アルゴリズムをベースとしています.

(例) アダリムマブの軽鎖の CDR DIQMTQSPSSLSASVGDRVTITCRASQGIRNYLAWYQQKPGKAPKLLIYAASTLQSGVPSRFSGSGSGTDFTLTISSLQPEDVATY YCQRYNRAPYTFGQGTKVEIKRTVAAPSVFIFPPSDEQLKSGTASVVCLLNNFYPREAKVQWKVDNALQSGNSQESVTEQDSKD STYSLSSTLTLSKADYEKHKVYACEVTHQGLSSPVTKSFNRGEC

- 1. CDR タブを選び、配列質問式を入力、あるいはアップロードします. 次に、質問式の配列を入力し、回答の上限数を選択し、検索を実行します.
 - ・ CDR 検索は短い配列検索に適したパラメータに最適化されているため、パラメータ設定は必要ありません.

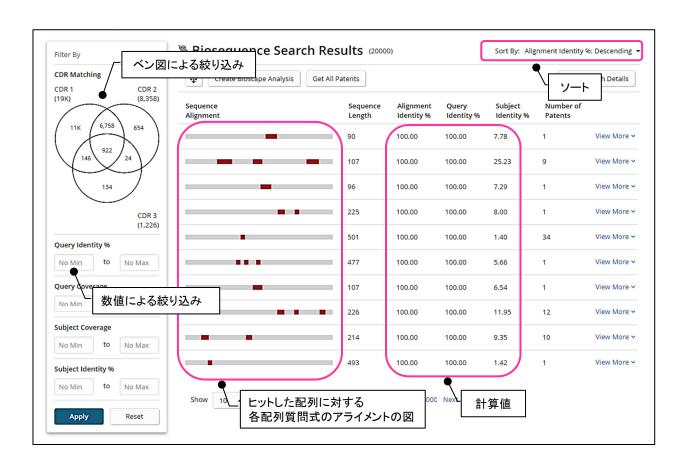


2. 検索が完了したら、View Results をクリックします.

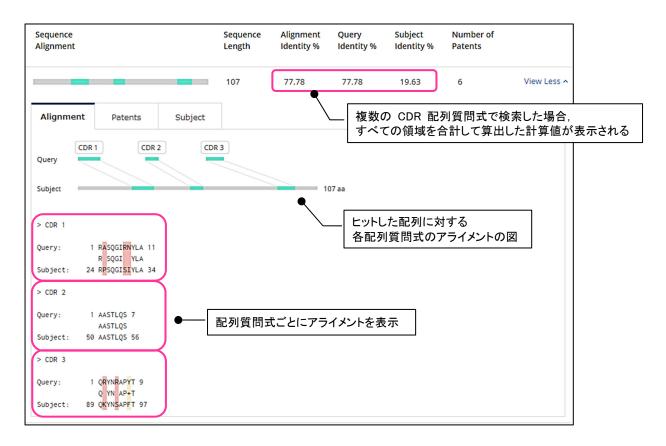


3. CDR 検索の結果が表示されます. CDR 検索の場合, 各項目の計算値の絞り込みだけでなく, ベン図の領域をクリックして絞り込むことができます.





4. View More をクリックすると、詳細を確認できます. CDR 検索の場合は、配列質問式ごとのアライメントが表示されます.





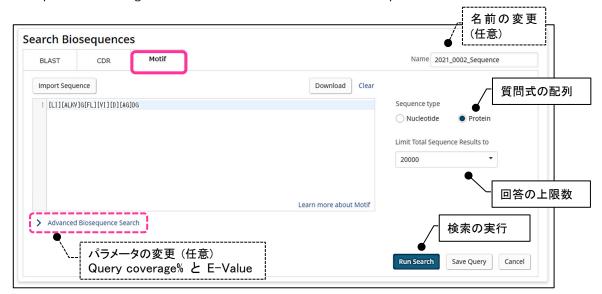
■ Motif 配列検索

Motif 検索は、DNA、RNA、タンパク質中の短いパターン配列を検索するプログラムです。BLAST アルゴリズムをベースとしています。

(例) 代替残基を [] で指定した配列パターンの配列質問式:[LI][ALKV]G[FL][VI][D][AG]DG

- 1. Motif タブを選び、配列質問式を入力、あるいはアップロードします. 次に、質問式の配列、回答の上限数を選択し、検索を実行します.
 - ・ 代替残基は [] で指定します、100 質問式の組み合わせまで検索可能です、 その他に利用できるギャップ記号や特殊記号は下記資料をご参照ください。

https://www.cas.org/sites/default/files/documents/stnextmotif.pdf

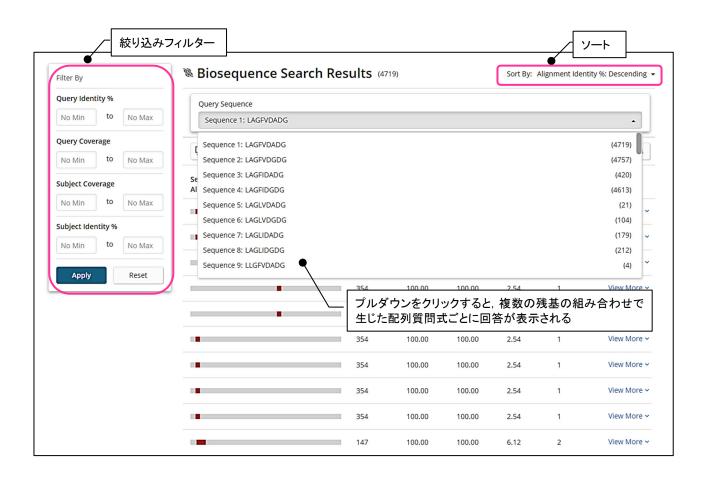


2. 検索が完了したら、View Results をクリックします.

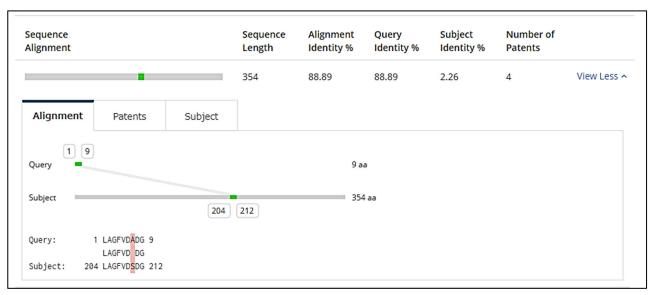


3. Motif 検索の結果が表示されます. 代替残基などの指定をした配列質問式を使った場合, プルダウンから, 複数の残基の組み合わせで生じた配列 質問式ごとに回答を確認できます.





4. View More をクリックすると、詳細を確認できます.





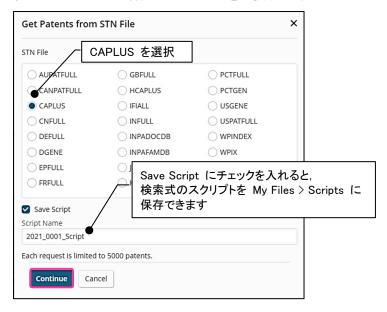
■ STN のデータベースへクロスオーバー

ヒットした配列の由来となった特許を STN の各種データベースで検索できます.

1. Biosequences Search 結果の Patent タブにあるボタンをクリックします.



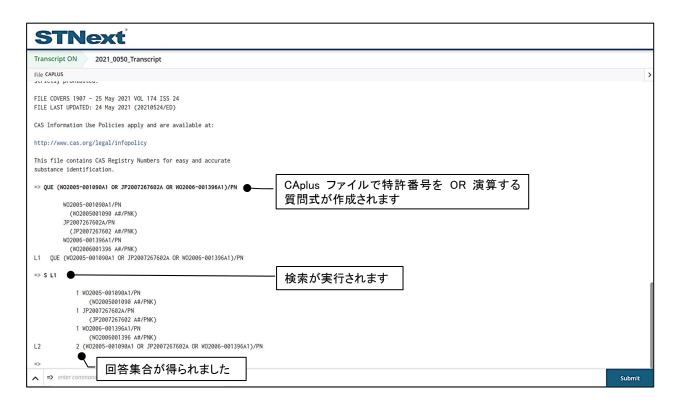
2. 検索したい STN の特許データベースを選択すると、STN のコマンドラインに移動し、検索が実行されます。



Get Patents from STN file 画面で 選択できるデータベースは一つです.

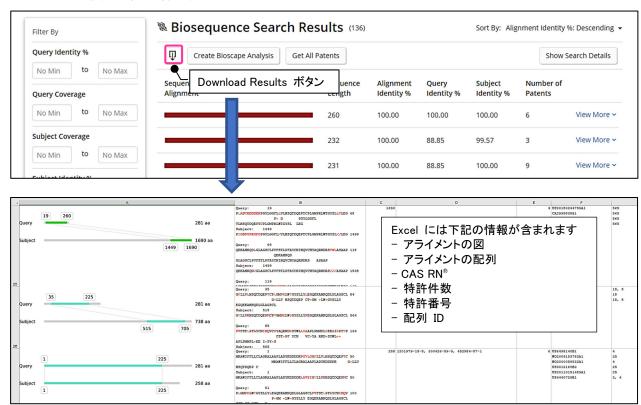
他のファイルで検索したい場合は、作成したスクリプトを使用します.





■ 検索結果の出力

検索結果は Excel 形式で出力できます. レポート作成や結果の共有に適しています. Biosequence Search Results 画面の Download Results ボタンをクリックしてダウンロードします. ダウンロードの上限は 1,000 件です.

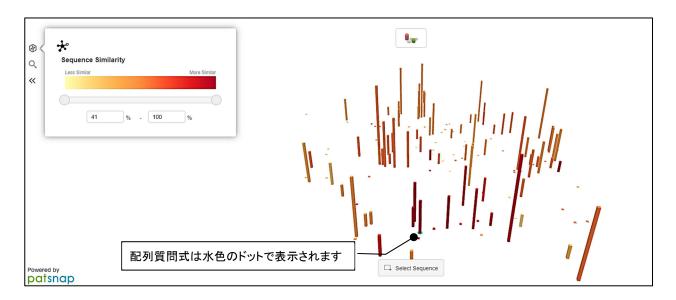




Bioscape

Bioscape (バイオスケープ) は Biosequences Search で得られた回答集合から, 配列の類似性により解析したマップを作成する機能です. マップ内には特許の件数が 3D で示されるため, 視覚的にわかりやすく配列関連特許を解析できます.

- 1. Biosequence Search Results 画面の上側にある Create Bioscape Analysis ボタンをクリックします. 最初の 1,000 件について解析が行われます.
- 2. 配列の類似性により解析したマップが表示されます.
 - ・ 配列質問式は水色のドットで表示されます (CDR の解析結果では表示されません).
 - ・アライメントの類似性が高い配列が赤色で、類似性が低い配列は黄色で示されます。
 - バーの高さは特許の件数を示しています。



■ まとめ

今回は、STNext 上で実行できる新しい Biosequences Search をご紹介しました.

Biosequences Search では、60 以上の特許発行機関の約 110 万件の特許から収録された 5 億 8,000 万件以上の配列を検索できます。CAS が独自のルールに基づいて収集した REGISTRY ファイルの配列だけでなく、7 つの主要特許発行機関(US, EP, WO, CA, KR, JP, CN) の特許から抽出した配列が新たに検索できるようになりました。

新しい配列検索プログラムも追加され、BLAST ホモロジー検索、CDR 配列検索、Motif 配列検索が可能です。また、ヒットした配列の由来となった特許を STN の各種データベースで検索でき、配列と特許情報をセットで Excel 形式でダウンロードできます、ぜひ今後の業務にお役立てください。

* STN GVP 契約の方が Biosequences Search を利用するには、オプション契約が必要です。ご興味のある方は、 化学情報協会 情報事業部へご連絡ください。

ANABSTR ファイル

- リロード

ANABSTR ファイルは、世界中の分析化学の文献を収録した書誌情報データベースです.

ANABSTR ファイルがリロードされました.

◇ 主な変更点

- 抄録の検索フィールド (/AB) の追加
- 標題 (/TI), 抄録 (/AB) フィールドの強化 後方一致検索, 中間一致検索が可能に
- テキスト中の数値検索機能(Ver.3.3)の搭載 テキスト中の数値を物性の種類とリンクさせて検索できる機能が搭載されました. 検索できる物性値は 59 種類です. 物性の種類と検索フィールドはファイルに入ってから HELP NPS を入力すると確認できます. 検索方法については STN 簡易ガイド テキスト中の数値検索をご覧ください.
- 索引(IT) フィールドの表示強化化学物質名, Analyte (/CNA) と化学物質名, Matrix (/CNM) が別々に表示されるようになりました。

- 新規の定型表示形式

表示形式	内容
DALL	デリミタ型の ALL
IALL	フィールド名付きインデント型の ALL
IBIB	フィールド名付きインデント型の BIB
SCAN	回答チェック用の表示形式(ランダム表示)

- レコード番号の形式変更
- 索引から CAS RN® (CAS 登録番号) を削除

CHEMLIST ファイル

- 中国の現有化学物質目録 (IECSC) データ の追加

CHEMLIST ファイルは、化学物質の規制情報に関するデータベースです、特に、世界の主要な既存化学物質リストの収載状況を調査できます。

2020 年に現有化学物質名録 (IECSC) に追加された物質が収録されました. => S L# AND IECSC/INV で IECSC に収載の物質に限定できます.

◇ レコード例(IDE 表示形式)

AN 12818 CHEMLIST
RN 5891-21-4
CN 2-Pentanone, 5-chloro- (TSCA, NDSL, TCSI, NZIoC)
5-Chloro-2-pentanone (IECSC)
5-Chloropentan-2-one (English, French) (NDSL, REACH,
:
FS CANADA: NDSL: CHINA: IECSC: EEC: EINECS: EU: REACH:

Harmonized Tariff

Code: HTC; NEW ZEALAND: NZIOC; TAIWAN: TCSI; USA: TSCA

CBI Public

RLN EC No.: 227-565-8 EINECS No.: 227-565-8 HTC Harmonized Tariff Code: 291479 EU Customs Code CN: 29147900

INV On TSCA Inventory

February 2021 TSCA Inventory
Commercial Status: Active

On IECSC

Inventory of Existing Chemical Substances in China, 2020.

On NDSI

Canada Gazette, Part I, January 31, 1998.

On REACH

List of Registered Substances

https://echa.europa.eu/substance-information/-/substanceinfo/100.025.059.

On EINECS

Annex to Official Journal of the European Communities,

15 June 1990.

On TCSI

Taiwan Government Gazette, 2015.

On NZIoC

New Zealand Inventory of Chemicals, 2006.

HSNO Approval: HSR005535.

FA RN CAS Registry Number
RLN Regulatory List Number
INV Inventory Status
HTC Harmonized Tariff Code

EMBASE ファイル

- EMTREE 語のオンラインシソーラス更新

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

2021 年 5 月に EMTREE 語のオンラインシソーラスの更新が行われ, 新規ターム 1,150 個 (drug terms 140 個, non-drug terms 1,010 個 (medical device term 98 個を含む)) が追加されました. 新規に追加された語および変更された語のリストは Elsevier 社のサイトの <u>Emtree terms added and changed 2021 V2</u> および <u>Emtree release</u>

notes, 2021 V2 をご確認ください.

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

EPFULL ファイル

- リロード

EPFULL ファイルは、1978 年以降に発行された欧州特許(出願および登録) および PCT (特許協力条約) 経由で EPO に移行された欧州特許の全文を収録するデータベースです。

製作者が European Patent Office/FIZ Karlsruhe から LexisNexis Univentio に変更されたことに伴い、データベースのリロードが行われました.

◇ 主な変更点

- 収録内容の強化

従来は登録特許の抄録は収録されていませんでしたが、 リロード後は公開特許、登録特許ともに抄録、詳細な説明、 クレームが収録されるようになりました。

また、ドイツ語あるいはフランス語の抄録、詳細な説明、 クレームについて、オリジナル言語の情報に加えて、機械 翻訳された英語の情報または対応特許由来の英語情報 が収録されるようになりました。この強化により、英語での キーワード検索の網羅性が向上しました。

- 特許分類の強化

共通特許分類 (CPC) の収録を開始しました. 発明の特徴を複数の CPC (共通特許分類) の組み合わせにより表現した CPC コンビネーションセット (C-Sets) も収録されました. CPC の検索方法の詳細は, EPFULL ファイルに入り => HELP CPC で確認できます.

また、国際特許分類、再分類(/IPCR)の収録を開始しました。

- テキスト中の数値検索機能 (Version 3.3) の搭載

テキスト中の数値を物性の種類とリンクさせて検索できる機能が搭載されました. 検索できる物性値は 59 種類です. 物性の種類と検索フィールドはファイルに入ってから => HELP NPS を入力すると確認できます. 検索方法については STN 簡易ガイド - テキスト中の数値検索をご覧ください.

- Key Terms (/KT)

Key Terms (/KT) は, 言語学的および統計学的手法を用いて, 英語の特許全文中から機械的に抽出した 1-5 単語からなる名詞句で, STN が独自に付与しています. Key Terms の検索方法については, STN ユーザーミーティング資料 (2019) の p.61-62 (PDF では p.73-74) をご覧ください.

- 特許出願人検索

特許出願人 (PA) に加え、標準化/統制した特許出願人情報の収録を開始しました。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 を利用します。

検索フィールド	内容
/PA	特許出願人
/PAS	特許出願人, 標準形式 (すべての特許出願人について, 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)
/PAN	特許出願人,統制形式 (約 3,000 機関について特許出願人情報 を統制したデータ)
/PASS	出願人グループ (/PA, /PA.T, /PAS, /PAN を同時に検 索するスーパーフィールド)

- 更新コード

検索フィールド	内容
/UP	更新日 (入力日とすべての更新日)
/UPTX	更新日, テキスト (全文(詳細な説明, クレーム) の更新日)

- オリジナル形式の特許番号類の収録

オリジナル形式の特許番号 (/PNO), 出願番号 (/APO), 優先権出願番号 (/PRNO) が収録されました. オリジナル形式の特許番号類はカスタム表示形式でのみ表示できます.



- 関連出願情報 (RLI フィールド)

PCT 経由の場合は PCT 出願番号,分割出願の場合は EP 出願番号が RLI フィールドに収録されます.

- 全レコード番号の変更
- 書誌情報由来の法的状況データを削除 法的状況検索は INPADOCDB/INPAFAMDB ファイルを ご利用ください.

INSPEC ファイル

- リロード

INSPEC ファイルは、物理学、電気・電子工学、コンピュータ/制御、IT、製造・生産工学に関する文献データベースです。

INSPEC ファイルがリロードされました.

◇ 主な変更点

- 著者, 所属機関表示の強化

AU, CS フィールにおいて、著者名と所属機関の組み合わせを番号で表すようになりました.

AU Salehi-Amiri, A. (1); Zahedi, A. (2); Akbapour, N. (2); Hajiaghaei-Keshteli, M. (2)

CS (1) University of Quebec, Department of Systems Engineering, Montreal, QC, Canada; (2) Escuela de Ingenieria y Ciencias, Tecnologico de Monterrey, Puebla, Mexico

- テキスト中の数値検索機能 (Version 3.3) の搭載

テキスト中の数値を物性の種類とリンクさせて検索できる機能が搭載されました. 検索できる物性値は 59 種類です. 物性の種類と検索フィールドはファイルに入ってから => HELP NPS を入力すると確認できます. 検索方法については STN 簡易ガイド - テキスト中の数値検索をご覧ください.

なお、テキスト中の数値検索機能の追加に伴い、従来の INSPEC ファイルの物性検索に関する検索フィールドおよび表示フィールドは削除されました.

- デジタルオブジェクト識別子(DOI)情報の追加

SO(収録源) フィールドにデジタルオブジェクト識別子 (DOI) 情報が収録されるようになりました. DOI は/FTDOI フィールドで検索できます.

- 所属機関識別子 (RIN) 情報の追加 CSID フィールドに所属機関識別子 (RIN) が収録されるようになりました. RIN は / CSID で検索できます.

- 引用情報の収録開始

RE フィールドに引用情報が収録されるようになりました. 2021 年 6 月現在, 2010 以降に発行された文献の約 260 万件に引用情報が収録されています. 引用情報は /RE で検索できます.

- 新規の表示形式

表示形式	内容
MAX (定型表示形式)	ALL の情報 + 引用情報
RE (カスタム表示形式)	引用情報

- 元素記号(/ET), 周期律グループ(/PG) 及び元素数(/ELC)の検索フィールドを削除
- 図面イメージを削除図を含む ALLG, BIBG 表示形式も削除されました。
- レコード番号の形式変更

WPINDEX/WPIDS/WPIXファイル

- マニュアルコード改訂 (2021 年度版)

WPI ファイルは,世界の 59 特許発行機関から発行される特許および 2 技術公開誌の情報を収録しているデータベースです.

マニュアルコードが 2021 年版に改訂され, DW (ダウエントアップデート) 2021001 より, 改訂されたマニュアルコードが使用されています. STN のマニュアルコードのオンラインシソーラスも新版に対応しています.

◇ 新しく追加されたコード

86 個 (CPI: 29 個, EPI/GMPI: 57 個)

◇ 主な強化点

- コロナウイルスに関する新コード (例 B04-F11B2: コロナウイルス)
- 化学増感剤に関する新コード: B14-H06C
- 代謝障害の診断に関する新コード: B12-K04G2K
- 車両とネットワーク/クラウド通信に関する新コード: X21-K02
- 車両間通信に関する新コード: X21-K05

詳細は, Clarivate Analytics 社のサイトにある <u>Manual</u> Code Revision をご参照ください.

◆ 検索およびアラート (自動 SDI 検索) の注意点 検索の際は、新コードをご利用ください。 アラートの検索式は必要に応じて編集してください。

STNext

- パフォーマンスの改善, Biosequences Search の強化

STNext は Classic STN のすべてのコンテンツにアクセスできる Web インターフェースです.

パフォーマンスの改善

STNext のパフォーマンスが大幅に改善され、高速にデータを表示できるようになりました。 ANALYZE コマンドによる特許番号の抽出 (=>ANA PN) にかかる時間も短縮されました.

Biosequences Search の強化

1. 配列質問式のチェック機能の追加

STNext の Biosequences Search が強化され,配列質問式のチェック機能が追加されました. 不正な質問式を入力すると,検索前に警告が表示され,質問式を修正できるようになりました.

◇ 検索可能な配列質問式の形式

検索タイプ	形式
BLAST 検索	プレーンテキスト形式, EMBL 形式, GenBank 形式, FASTA 形式
CDR 検索	FASTA 形式
Motif 検索	プレーンテキスト形式

◇ 配列質問式中に使用できる文字・記号

- BLAST, CDR 検索

A~Z または a~z のアルファベットと 0~9 の数字

- モチーフ検索

 $A \sim Z$ または $a \sim z$ のアルファベットと $0 \sim 9$ の数字および下記の記号

{} [] ^\$, .

2. STN データベースとの連携を強化

Biosequences Search の回答に、配列の由来となった特許や、REGISTRY ファイル由来の配列を STN のデータベースで検索するためのボタンが追加されました。

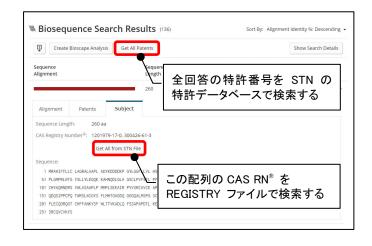
◇ 回答一覧画面に Get All Patents ボタンの追加

回答一覧画面に Get All Patents ボタンが追加されました. Get All Patents ボタンを利用すると、ヒットした配列の由来となった特許を一括して STN の特許データベースで検索できます。検索できる特許番号の上限は 5,000 件です.

◇ Subject タブに Get (All) from STN File ボタンの追加

各配列の CAS RN® を REGISTRY ファイルで検索する ために Get (All) from STN File ボタンが追加されました. 検索できる CAS RN® の上限は 5,000 件です.

検索フィールド	内容
Get from STN File	配列に一つの CAS RN® が付与されている 場合, 該当する一つの CAS RN® が検索さ れます
Get All from STN File	配列に複数の CAS RN® が付与されている 場合, すべての CAS RN® が検索されます.









『レモンドリズルケーキ』

休日にレモンドリズルケーキを作りました。作り方は簡単で、削ったレモンの 皮を加えた生地でパウンドケーキを焼き、熱々のうちにレモン果汁と粉砂糖で 作ったシロップをかけます、ドリズル (drizzle) には霧雨、小雨という意味があ り、その名の通りレモンシロップを霧雨のように降らせるのがポイントです.冷 めると外側のシロップは固まり、内側はしっとりします、甘酸っぱくてとてもおい しいので、レモンが好きな方はぜひお試しください。



テクニカルグループ NM



『よっ友』

最近、大学生の娘が「○○さんとせめてよっ友になりたい」と話していまし た. SNS でやり取りしたり、オンラインで勉強会をしても、会ったことがないの で、実際にすれ違ったら気軽に挨拶してよいか、ビミョーなんだとか、昨年度 からオンライン授業が続いており、挨拶一つでも悩むのか一と思ってしまいま した. *よっ友=すれ違ったときに「よっ」と声を掛け合う距離の友達(私は知ら なかったのでネットで検索したら、たくさんヒットしました...)



カスタマーグループ TS





『二人も同時にだ...』

漫画スラムダンクで大活躍する桜木と流川を見て安西先生が心の中でか つての教え子に「おい…見てるか谷沢…お前を超える逸材がここにいるの だ!!それも二人も同時にだ…」とつぶやく名シーンがあります. そして今年 NBA では八村塁と渡邊雄太の二人の日本人が活躍しています。安西先生の 予言は的中したわけです!かつては日本人が活躍するのは難しいと言われ ていた舞台で躍動する二人を見ていると、自分で限界を決めてはいけないな と勇気をもらっています. がんばろう… マーケティンググループ ON





·STN サービスセンター

STN 東京(日本)

化学情報協会 東京都文京区本駒込 6-25-4 中居ビル Tel:0120-003-462 Email:support@jaici.or.jp Web:www.jaici.or.jp STN コロンバス (北アメリカ)

CAS
Columbus, OH 43210-0012 U.S.A
Tel:61-447-3700
Email:help@cas.org
Web:www.cas.org

STN カールスルーエ (ヨーロッパ)

FIZ Karlsruhe 76012 Karlsruhe Germany Tel:+49-7247-808-555 Email:helpdesk@fiz-karlsruhe.de Web:www.stn-international.de