



STN 新旧プラットフォームの相違点

(CAplus ファイル/REGISTRY ファイル/構造作図)

2016 年 11 月

JAICI
化学情報協会

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

*** 目次 ***

◆ CAplus ファイルの相違点	1
基本索引の検索	2
トランケーション記号	2
近接演算子	3
所属機関名の検索	4
著者名の検索	4
発行年・発行日の検索	4
REGISTRY から CAplus へのクロスオーバー検索	5
CAS ロールの検索	5
接尾辞 (/P など) の検索	6
CAplus から REGISTRY へのクロスオーバー検索	6
特許情報の検索	7
特許分類の検索	7
◆ REGISTRY ファイルの相違点	9
基本索引の検索	10
CAS 登録番号の検索	10
化学物質名称の検索	10
分子式の検索	11
分子式関連の検索	11
化学物質名称・CAS 登録番号の抽出	12
環系データ, 物性情報, ポリマー, 配列検索	13
構造検索	13
◆ 構造作図の相違点	15
作図機能の違い	16
構造検索機能の違い	19

STN 新旧プラットフォーム

～ CAplus ファイルの相違点 ～

STN 新プラットフォームの CAplus ファイルは、Classic STN の CAplus ファイルと同様の検索ができます。しかし、検索フィールドや検索対象などが異なる場合があります。

この資料では、CAplus ファイルでよく使われる検索を中心に、STN 新プラットフォームにおける検索の違いについて紹介します。

p.2～3	p.4	p.5～6	p.7
・基本索引の検索	・所属機関名の検索	・クロスオーバー検索	・特許情報の検索
・トランケーション記号	・著者名の検索	・CAS ロールの検索	・特許分類の検索
・近接演算子	・発行年・発行日の検索	・接尾辞 (/P など) の検索	

CAplus ファイル概要

- ・ CAplus ファイルは、化学および周辺分野の文献・特許情報を収録するデータベースです。

収録内容

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
書誌情報	○	○
抄録	○	○
索引	○	○
引用・被引用情報	○	×

収録期間

- ・ 1907 年以降（ただし 1906 年以前の 180,000 件以上のレコードも収録）

更新頻度

- ・ 毎日

特長

- ・ 統制語による索引が人手で付与されています。特に化学物質に関する文献を的確かつ容易に検索できます。
- ・ 世界中の特許・非特許文献をまとめて英語で検索できます。
- ・ 特許レコードは発明単位の構成で、対応特許の確認も容易です。



基本索引の検索

基本索引の検索は Classic STN と同じです。検索フィールドなし、または /BI フィールドで検索できます。

- ・ 入力例

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
VACCINE (ワクチン) の検索	=> S VACCINE	VACCINE
FUEL CELL (燃料電池) の検索	=> S FUEL CELL	FUEL CELL

S (SEARCH) コマンドは不要

- 基本索引には、標題 (/TI), 抄録 (/AB), 補遺語 (/ST), 索引 (/IT) が含まれます。



トランケーション記号

トランケーション記号の ? は * (アスタリスク) に変更されました。

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
何文字でもよい (0 以上の文字列)	?	*
1 文字またはなし (0 または 1 文字)	#	#
ちょうど 1 文字	!	!

- ・ 入力例

入力例	ヒットターム
MICROELEC*	microelectromechanical
*MICROELECTRONIC	submicroelectronic
MICROELEC	ultramicroelectrodes
MICRO*ELEC*	micronanoelectronic
POL	extrapolation

* ターム内でも利用できます
* 語幹が短くても利用できます



近接演算子

(L) 演算子は, (U) 演算子に変更されました.

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
同一ターム中に左右の検索語が存在する	(T)	対応なし*
入力した順序で左右の検索語が存在する	(W)	(W)
入力順序に関係なく左右の検索語が存在する	(A)	(A)
同一センテンス中に左右の検索語が存在する	(S)	(S)
同一情報単位中に左右の検索語が存在する	(L)	(U)

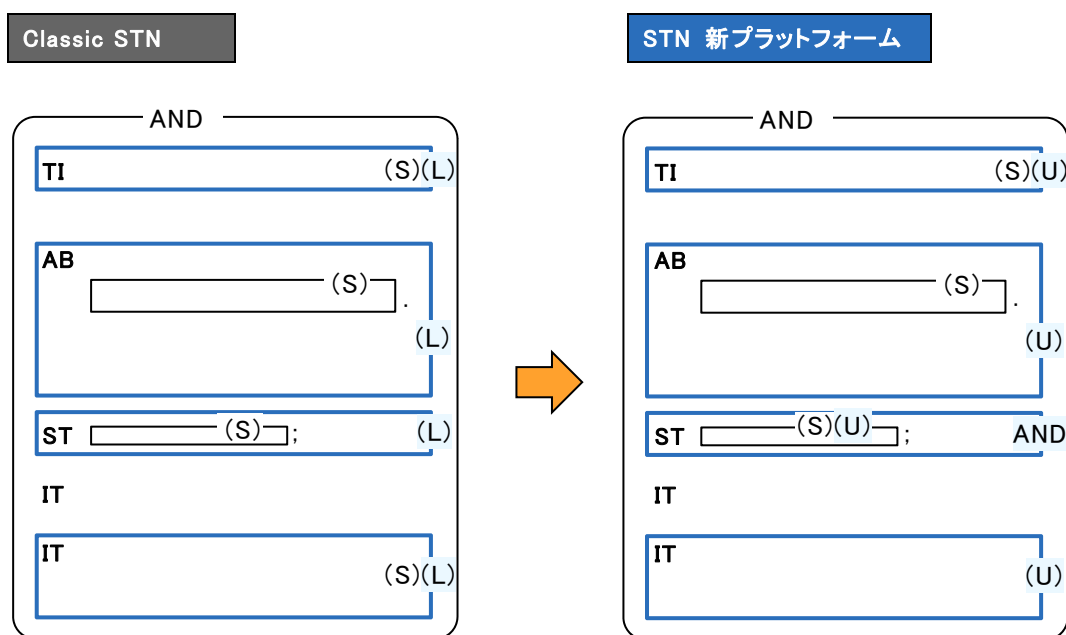
* ターム内にトランケーション記号 * を入れる (前ページ参照), あるいは (A) 演算子 (下記参照) で同等の検索ができます.

- (A) 演算子 : トランケーション記号 * と共に (A) 演算子を使うと, 同一ターム中に左右の検索語が存在するタームも検索されるようになりました.

	検索式	ヒットターム
Classic STN	=> S TETRA? (A) ?AMMONIUM	tetraethyl ammonium butylammonium tetrafluoroborate
STN 新プラットフォーム	TETRA* (A) *AMMONIUM	tetraethyl ammonium butylammonium tetrafluoroborate tetraethylammonium

同一ターム中も
ヒット

基本索引 (TI, AB, ST, IT) における演算子の範囲





所属機関名の検索

/COMPANY フィールドが新設されました。網羅的な所属機関名の検索には /COMPANY フィールドをお使いください。

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
所属機関名・特許出願人	/CS	/COMPANY
所属機関名（非特許文献）	-	/CS
特許出願人（特許）	/PA	/PA

- STN 新プラットフォームで /CS の検索をした場合、回答は非特許文献のみとなります。



著者名の検索

/PERSON フィールドが新設されました。網羅的な著者名の検索には /PERSON フィールドをお使いください。

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
著者名・発明者名・編集者	/AU	/PERSON
著者名（非特許文献）	-	/AU
発明者名（特許）	/IN	/IN
編集者	-	/EDTR

- STN 新プラットフォームで /AU の検索をした場合、回答は非特許文献のみとなります。



発行年・発行日の検索

.B 付きの検索フィールド の検索対象が特許レコードのみになりました。

- 検索対象

内容	検索フィールド	Classic STN	STN 新プラットフォーム
発行年	/PY	全レコード	全レコード*
発行日	/PD		
発行年（ベーシック）	/PY.B	全レコード	特許レコードのみ
発行日（ベーシック）	/PD.B		

* 現在 Ahead-of-print は含まれません。



REGISTRY から CAplus へのクロスオーバー検索

REGISTRY の回答を CAplus にクロスオーバーするには、REFX コマンドもしくは Get References ボタンを使います。

Classic STN	STN 新プラットフォーム
=> <u>FILE REGISTRY</u>	データベース選択 : REGISTRY
=> <u>S 50-00-0</u> L1	50-00-0/RN L1
=> <u>FILE CAPLUS</u>	方法 1 方法 2
=> <u>S L1</u> L2	データベース選択 : CAplus
	REFX L1 L2
	Get References Search をクリック



CAS ロールの検索

CAS ロールの検索は下記 A, B の 2 通りがあります。

A) REGISTRY から CAplus へのクロスオーバー時に CAS ロールを指定する

Classic STN	STN 新プラットフォーム
=> <u>FILE REGISTRY</u>	データベース選択 : REGISTRY
=> <u>S 50-00-0</u> L1	50-00-0/RN L1
=> <u>FILE CAPLUS</u>	方法 1 方法 2
=> <u>S L1/ANST</u> L2	データベース選択 : Caplus
	(REFX L1) (U) ANST/RL L2
	() を忘れずに
	Get References ボタンをクリック
	Limit results to: <input type="checkbox"/> Adverse Effect, Including Toxicity <input checked="" type="checkbox"/> Analytical Study
	Search をクリック

B) CAplus でダイレクトに検索する

Classic STN	STN 新プラットフォーム
=> <u>FILE CAPLUS</u>	データベース選択 : CAplus
=> <u>S 50-00-0/IT (L) BIOL/RL</u> L1	50-00-0/IT (U) BIOL/RL L1
(=> <u>S 50-00-0 (L) BIOL/RL</u> でもよい)	(50-00-0 (U) BIOL/RL は実行できない)



接尾辞 (/P など) の検索

接尾辞 (/P など) の検索は、CAplus でダイレクトに行います。

Classic STN	STN 新プラットフォーム
=> <u>FILE REGISTRY</u>	
=> <u>S 50-00-0</u> L1	
合成文献を検索	合成文献を検索
=> <u>FILE CAPLUS</u>	データベース選択 : CAplus
=> <u>S L1/P</u> L2	50-00-0/IT (U) PREP/RL L2
非特定誘導体を検索	非特定誘導体を検索
=> <u>S L1/D</u> L3	(50-00-0D OR 50-00-0DP)/IT L3
非特定誘導体のみが索引された文献を除く	非特定誘導体のみが索引された文献を除く
=> <u>S L1/RN</u> L4	50-00-0/IT (NOTU) (50-00-0D OR 50-00-0DP)/IT



CAplus から REGISTRY へのクロスオーバー検索

CAplus のレコードに索引された物質を REGISTRY で確認する場合は、SUBX コマンドもしくは Get Substances ボタンを使います。

Classic STN	STN 新プラットフォーム
(SELECT コマンドを利用した例)	
=> <u>FILE CAplus</u>	データベース選択 : CAplus
=> <u>S JP2008201728/PN</u> L1	JP2008201728/PN L1
=> <u>SEL L1 RN</u> E1 THROUGH E10 ASSIGNED	
=> <u>FILE REGISTRY</u>	
=> <u>S E1-E10</u> L2	
	<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> 方法 1 データベース選択 : Caplus SUBX L1 L2 </div> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> 方法 2 <input type="button" value="Get References"/> <input type="button" value="Search"/> をクリック </div> </div>



特許情報の検索

特許関連フィールドを組み合わせた検索は、すべて (U) 演算子になりました。

Classic STN								STN 新プラットフォーム								
	/PC	/PY (/PD)	/PK	/AC	/AY (/AD)	/PRC	/PRY (/PRD)		/PC	/PY (/PD)	/PK	/AC	/AY (/AD)	/PRC	/PRY (/PRD)	
/PC		(P)	—	(L)	(L)	(L)	(L)	(U)	/PC							
/PY (/PD)			(S)	(L)	(L)	(L)	(L)		/PY (/PD)							
/PK				(L)	(L)	(L)	(L)		/PK							
/AC					(S)	(L)	(L)		/AC							
/AY (/AD)						(L)	(L)		/AY (/AD)							
/PRC							(S)		/PRC							
/PRY (/PRD)									/PRY (/PRD)							

・ 入力例

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
2002 年発行の日本登録特許	2002/PY (S) JPB2/PK	2002/PY (U) JPB2/PK
2002 年発行の日本特許	2002/PY (P) JP/PC	2002/PY (U) JP/PC
優先権主張国が日本である米国特許	JP/PRC (L) US/PC	JP/PRC (U) US/PC



特許分類の検索

特許分類の検索は、Classic STN とほぼ同じです。サブグループを含めた検索の入力方法のみ異なります。

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
D の下位を含めて検索	=> S D?/IPC	D*/IPC
D21 の下位も含めて検索	=> S D21!/IPC	D21!/IPC
D21C の下位も含めて検索	=> S D21C/IPC	D21C/IPC
D21C9 の下位も含めて検索	=> S D21C0009/IPC	D21C0009/IPC
D21C9/10 の下位も含めて検索	=> S D21C0009-10+NT	実行不可
D21C0009-10 から 16 を範囲検索	=> S D21C0009-10-D21C0009-16/IPC	実行不可
D21C9/10 を検索	=> S D21C0009-10/IPC	D21C0009/10/IPC
D21C9 のうち 1 で始まるサブグループをすべて検索	=> S D21C0009-1*/IPC	D21C0009/1*/IPC

－ 特許分類のシソーラスを利用すると階層関係を確認でき、必要な分類にチェックをつけるだけで簡単に検索式を作成することができます。

STN 新旧プラットフォーム

～ REGISTRY ファイルの相違点 ～

STN 新プラットフォームの REGISTRY ファイルは、Classic STN の REGISTRY ファイルと同様の検索ができます。しかし、検索フィールドや検索対象などが異なる場合があります。

この資料では、REGISTRY ファイルでよく使われる検索を中心に、STN 新プラットフォームにおける検索の違いについて紹介します。

p.10	p.11	p.12	p.13
<ul style="list-style-type: none">基本索引の検索CAS 登録番号の検索化学物質名称の検索	<ul style="list-style-type: none">分子式の検索分子式関連の検索	<ul style="list-style-type: none">化学物質名称, CAS 登録番号の抽出	<ul style="list-style-type: none">環系データ検索物性情報検索ポリマー検索配列検索構造検索

REGISTRY ファイル概要

- 化学物質および核酸・タンパク質の情報を収録するデータベースです。化学物質には、CAS 登録番号という個々の化学物質に固有の識別番号が付与されています。

収録内容

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
物質同定情報	○	○
CAplus の文献数, スーパーロール, 資料種類	○	○
物性情報 (実測・予想物性値)	○	p.13 参照

収録期間

- 1800 年代初頭

更新頻度

- 毎日

特長

- 有機化合物, 無機化合物, タンパク質, 核酸, ポリマー, 配位化合物, 有機金属化合物, 金属, 合金, 鉱物, 元素などを含むあらゆる種類の化学物質を収録しています。
- Chemical Abstract (CAplus ファイル) をはじめとする様々な出典から化学物質を収録しています。



基本索引の検索

REGISTRY ファイルの基本索引はなくなりました。必ずフィールドコードを付けて検索してください。

内容		Classic STN	STN 新プラットフォーム
基本索引 (検索フィールドなし または /BI)	CAS 登録番号 (/RN)	=> S 50-00-0	50-00-0/RN
	部分名	=> S CHLORO	*CHLORO*/CN
	成分分子式	=> S C4H11NO2	C4H11NO2/CMF



CAS 登録番号の検索

CAS 登録番号は /RN フィールドで検索します。

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
CAS 登録番号	検索フィールドなし, または /BI	/RN
	/RN	
成分 CAS 登録番号	/CRN	/CRN



化学物質名称の検索

化学物質の完全名称は /CN フィールドで, 化学物質名称の自然セグメントは /CNS フィールドで検索します。

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
完全名称	/CN	/CN
部分名称	検索フィールドなし, または /BI	*BUTANEDIOIC*/CN
自然セグメント	/CNS	/CNS

・ 入力例

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
BENZOIC ACID で始まる名称	=> S BENZOIC ACID*/CN	BENZOIC ACID*/CN
BUTANEDIOIC~を含む名称	=> S BUTANEDIOIC?	*BUTANEDIOIC*/CN
~MYCIN~を含む名称	=> S ?MYCIN*/CNS	*MYCIN*/CN
ISO~FURAN を含む名称	=> S (ISO?(T)?FURAN?)/CNS	*ISO*FURAN*/CN
同一名称中に限定*	=> S (?QUINOL?(L)?FURAN?)/CNS	(*QUINOL*(U)*FURAN*)/CNS

*STN 新プラットフォームで近接演算子を用いた名称検索を実行したい場合は /CNS フィールドを使用します。



分子式の検索

成分分子式は、新設の /CMF フィールドで検索します。

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
分子式	/MF	/MF
成分分子式	検索フィールドなし、 または /BI	/CMF



分子式関連の検索

元素種 (/ELS) は、元素数も含めて検索できるようになりました。

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
元素種	/ELS	/ELS
特定元素数	/元素記号	

・ 入力例

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
Cl を含む物質	=> S L# AND CL/ELS	L# AND CL/ELS
Cl を 5 個含む物質	=> S L# AND 5/CL	L# AND 5CL/ELS
Cl を 5-10 個含む物質	=> S L# AND 5-10/CL	L# AND 5-10CL/ELS
Cl を 5 個以上含む物質	=> S L# AND 5<=CL	L# AND 5-CL/ELS

- /ELS の登録単位は成分です。多成分物質の場合は、各成分が検索対象となります。



化学物質名称・CAS 登録番号の抽出

REGISTRY の回答から CAS 登録番号や化学物質名称を抽出するには、Create Term List を使います。

Classic STN

=> FILE REGISTRY

=> S 768-94-5
L1

=> SEL CHEM
E1 THROUGH E15 ASSIGNED

=> FILE MEDLINE

=> S E1-E15/BI



STN 新プラットフォーム

データベース選択 : REGISTRY

768-94-5/RN
L1

Create Term List  アイコンをクリックし
Advanced から RN と CN を選択して
Create Term List をクリックすると
Q# (Q 番号) が付与される

データベース選択 : MEDLINE

Q#/BI

- 抽出した CAS 登録番号や化学物質名称の確認


Classic STN

=> D SEL

E1	1	(ADAMANTAN-1-YL)AMINE/BI
E2	1	ADAMANTAMINE/BI
:		
E13	1	1-AMINOADAMANTANE/BI
E14	1	744952-70-3/BI
E15	1	768-94-5/BI




STN 新プラットフォーム

Manage Term List  アイコンをクリックし、
該当する Q# の Term Count をクリック

Manage Term Lists ?

Expand All | Collapse All

List	List Name	Term Count
 Q1	Add Name	15

↓

Manage Term Lists ?

← Return

List name: Q1
Term Count: 15

Source Field	Term
CN	(Adamantan-1-yl)amine
CN	1-Adamantamine
CN	1-Adamantanamine
CN	1-Adamantylamine
CN	1-Amantadine
CN	1-Aminoadamantane
RN	744952-70-3
RN	768-94-5



環系データ, 物性情報, ポリマー, 配列検索

現在, 一部データの収録・検索機能に違いがあります。

内容		Classic STN	STN 新プラットフォーム	
		表示・検索	表示	検索
環系データ	最小環の数 (/NRRS, /NR, /CNR)	○	×	○
	環系の数 (/NRS, /CNRS)			×
	その他			×
物性情報	・実測物性値	○	○	×
	・スペクトルデータ (グラフィック)		×	
	・参照文献タグ (ETAG)		×	
	・予想物性値		○	
ポリマー		○	○	*1
配列情報		○	○	×

*1 現在, POLYLINK コマンドは利用できません。



構造検索

詳しくは, 次項「STN 新旧プラットフォーム 構造作図の相違点」をご覧ください。

- ・ 主な違い

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
検索タイプ	EXA, FAM, CSS, SSS	EXA, FAM, CSS, SSS
SET EXT ON, スクリーンコマンド (SCREEN) の使用	○	×
バッチ, サブセット, RANGE 検索	○	*1
構造質問式同士のブール演算	○	○

*1 STN 新プラットフォームは構造検索のシステム制限がないため, これらの検索は不要

- ・ システム制限

内容	Classic STN	STN 新プラットフォーム
サンプル検索のヒット件数	50	-
フルファイル検索のヒット件数 (オンライン)	6,000,000	制限なし

STN 新旧プラットフォーム

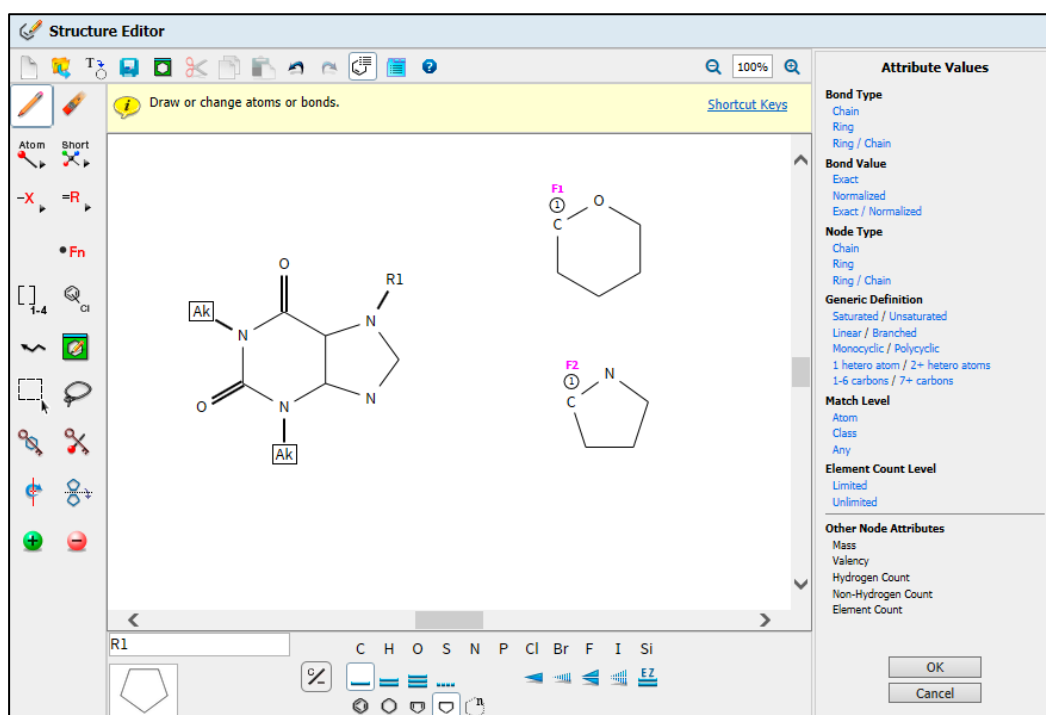
～ 構造作図の相違点 ～

- STN 新プラットフォームの構造作図画面は Classic STN (STN Express や STN on the Web) の構造作図画面と似ており、作図機能 (可変原子やショートカット, 可変置換位置, R グループ など) や構造質問式の属性指定も同等です。

しかし、いくつかのツールが追加されると同時に、各ツールの操作性が見直され、細かい部分で異なっている箇所があります。

この資料では、新旧プラットフォームの構造作図および検索機能を比較し、表にまとめました。

【STN 新プラットフォームの構造作図画面】


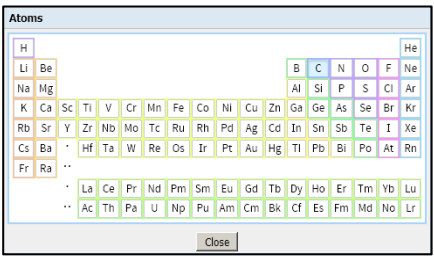
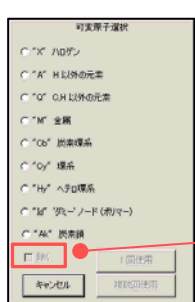
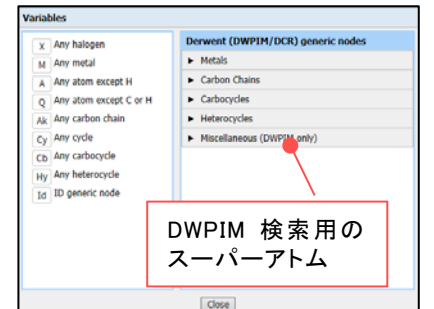
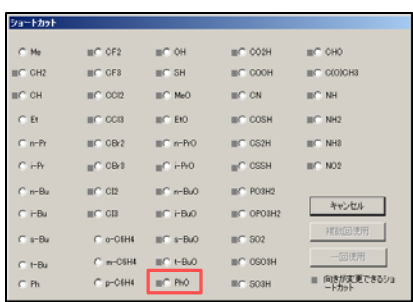
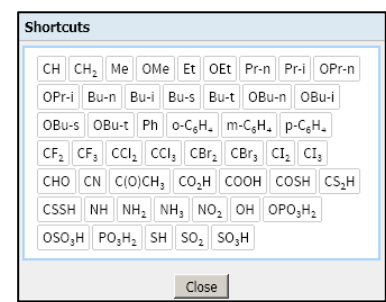
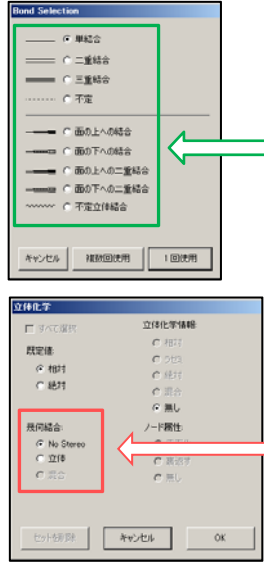






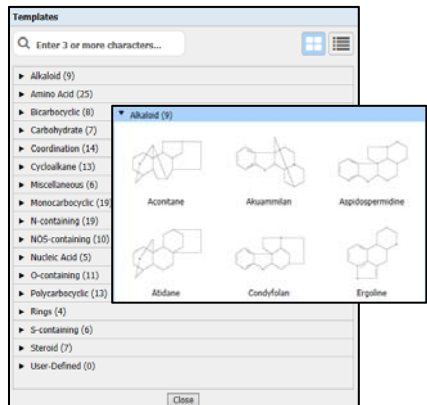
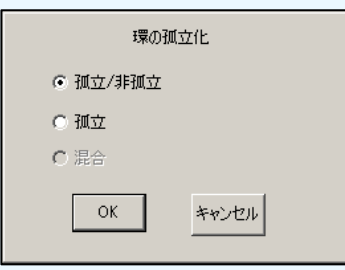


■ 次ページ以降の表記について

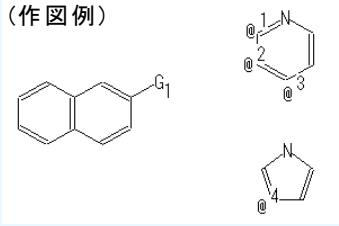
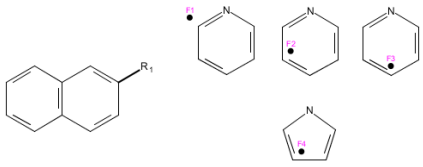
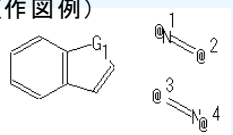
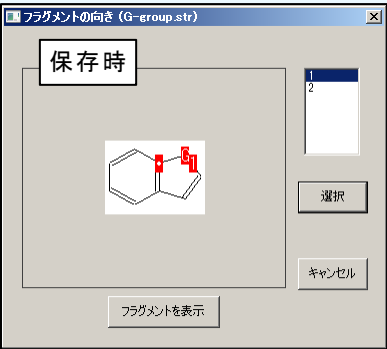
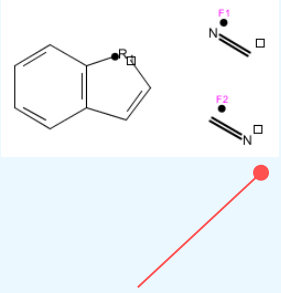
- ・ 表中の (水色の網掛け) は、新旧プラットフォームで違いがある項目です。
- ・ 表中での「○」「×」の記号は、以下の意味で用いています。
 - : 機能を利用できる, 検索でヒットする
 - ×: 機能を利用できない, 検索でヒットしない

- STN 新プラットフォームの構造作図についての詳細は、「構造作図ガイド」をご覧ください。
<http://www.jaici.or.jp/newstn/pdf/structure.pdf>

作図機能の違い

項目	Classic STN	STN 新プラットフォーム
原子の指定	 <p>「除く」の指定は Classic STN のみ</p>	
可変原子の指定	 <p>「除く」は Classic STN のみ</p>	 <p>DWPIM 検索用のスーパーアトム</p>
ショートカットの指定		
結合の指定		

項目	Classic STN	STN 新プラットフォーム
環の作図		
構造テンプレート		
環の孤立の指定		 Lock Rings ツール <p>環の縮合を禁止し、孤立させるために使用します。また、鎖が環の一部になることを禁止します。</p>
無置換の指定	×	 Lock Atoms ツール <p>特定のノードへの置換基の追加を禁止するために使用します。</p>
繰り返しグループ	○ (0-20)	○ (0-20)
可変置換位置	○	○
元素数	○	○
結合非水素数	○	○
ChemDraw, ISIS/Draw からのコピーペースト	×	×
SMILES, InChI, CAS 登録番号からの作図	×	○
キーボードショートカット	×	○
保存ファイル形式	.str, .cxf	.cxf, .mol
コマンドでの作図/修正	○	×

項目		Classic STN	STN 新プラットフォーム
R グループ (G グループ)	R グループの数	20	20*
	R グループに含まれる項目数	20	20
	R グループの定義に G グループを含める	○	○
	同一フラグメントに指定できる結合点の数	50 以上 (作図例) 	20* 
同一フラグメントに結合点を 2 箇所指定した場合	保存時に向きを指定 (作図例)  	作図時に向きを指定  <div style="border: 1px solid red; padding: 5px; width: fit-content; margin-left: auto; margin-right: auto;"><p>● と □ でフラグメントの向きを指定する</p></div>	
ノード属性	デフォルト	鎖上のノード:「鎖」 環上のノード:「環」	
	指定可能な属性	鎖, 環, 環/鎖	
	備考	ノード属性を変更しても, そのノードに係わる結合の属性は影響されない	
結合属性	デフォルト	鎖上の結合:「鎖」 環上の結合:「環」	
	指定可能な属性	鎖, 環, 環/鎖	
	備考	結合の属性を変更すると, その結合の両端のノードの属性も変更される	
一般式属性	飽和度	飽和, 不飽和, 不定	
	鎖の種類	直鎖, 分岐, 不定	
	ヘテロ原子の数	ちょうど 1, 2 以上, 不定	
	環系の種類	単環, 多環, 不定	
	炭素原子数	7 未満, 7 以上, 不定	

* REGISTRY, MARPAT ファイルの場合

構造検索機能の違い

構造検索機能

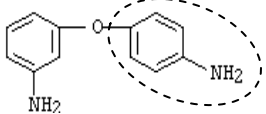
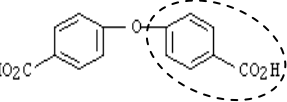
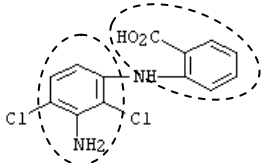
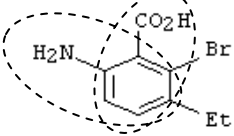
項目	Classic STN	STN 新プラットフォーム
検索タイプ	EXA, FAM, CSS, SSS	EXA, FAM, CSS, SSS
デフォルトの検索範囲	SAM	FUL
SET EXT ON	○	×
スクリーンコマンド (SCREEN) の使用	○	×
バッチ検索	○	× (*1)
サブセット検索	○	× (*1)
RANGE 検索	○	× (*1)
構造質問式同士のブール演算	○	○

*1 STN 新プラットフォームは構造検索のシステム制限がないため、バッチ検索、サブセット検索、RANGE 検索は不要。

システム制限

項目	Classic STN	STN 新プラットフォーム
サンプル検索のヒット件数	50	-
フルファイル検索のヒット件数 (オンライン)	6,000,000	制限なし

複数の構造質問式を利用した検索

	別々に作図して AND 演算		同一画面中に離して作図	
	Classic STN	STN 新プラットフォーム	Classic STN	STN 新プラットフォーム
<p>A, B が別成分に存在</p> <p>CM 1</p>  <p>CM 2</p> 	○	○	×	○
<p>A, B が同一成分中に独立して存在</p> 	○	○	○	○
<p>A, B が重複</p> 	○	○	×	×

