



STN 新プラットフォーム  
DWPIIM  
マルクーシュ構造検索

**JAICI**  
化学情報協会

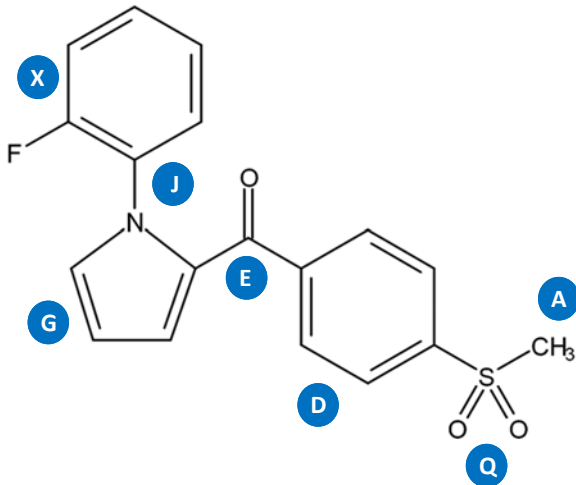
**STN** DWPIIM ファイル – ファイル概要

2

- データベース製作者 : Thomson Reuters
- レコード単位 : マルクーシュ構造単位
- 収録年代 : 1961 年～ (Thomson Reuters および INPI 作成のデータ)
- 収録件数 : 190 万件以上
- 更新頻度 : 週 1～2 回
- 収録対象物質 : 有機化合物, 有機金属化合物, 無機化合物, ポリマー, ペプチド, フラーレン
- 収録対象特許 : DWPI 特許のうち, 医薬 (B), 農薬 (C), 一般化学 (E) 分野に分類された特許

## 包括的な調査にはマルクーシユ構造検索を

- なぜマルクーシユ構造検索が必要なのでしょう？
  - 下記の化合物について CPlus で見つかる一番古い文献の発行年は 2010 年
  - しかし 2002 年発行の US 20020091116 A1 で既にクレームされています：



### US 20020091116 A1 のメインクレームの抜粋：

A compound of the formula (I): **A-Q-D-E-G-J-X** wherein:

**A** = **-C 1-6 alkyl** and **-C 3-8 cycloalkyl**; ...

**Q** = a direct link, divalent alkyl, alkenyl, ...

**-S(-O)<sub>2</sub>-**, ...

**D** = a direct link; **phenyl**, which is substituted with **0-2 R 1a groups**; and a 5-10 membered aromatic...

**E** = a direct link, **-(CH<sub>2</sub>)<sub>q</sub>-C(-O)**, **-(CH<sub>2</sub>)<sub>q</sub>-N(R<sup>5</sup>)-C(-O)-(CH<sub>2</sub>)<sub>x</sub>-**; ...; **q** and **x** ... integer of **0-2**;...

**G** = phenyl, which ...; and **a 5-6 membered aromatic heterocyclic ring containing 1-4 hetero atoms selected from N, O, ...**

**J** = **a direct link, -S(-O)<sub>2</sub>-**, ...

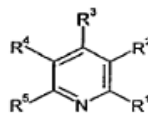
**X** = **phenyl**, which is substituted with **0-3 R 1c groups**;...

R 1c is selected from the group: **halo**, **-CF 3**, ...

## マルクーシユ構造を検索することで網羅的な特許調査が可能

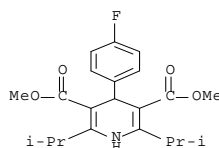
特許明細書

### クレーム



R1, R5 = C1-10 alkyl, C6-10 aryl;  
R2, R4 = H, C1-10  
alkyl, C02R6 . . . .

### 実施例



:

### MARPAT DWPIIM

置換基の定義に含まれる特定構造や一般式、置換基のあらゆる組み合わせパターンが検索可能

### REGISTRY DCR/(DWPIIM)

クレーム、  
実施例中の  
特定物質

## なぜ DWPIIM ファイルが必要なのでしょう？

### • MARPAT と DWPIIM は補完関係にあります

- 収録期間
- 収録対象国・機関
- 収録対象物質
- 索引方針

### • STN の DWPIIM のメリット

- 検索が容易，表示の見易さ
- 全マルクーシュ構造 DB (MARPAT と DWPIIM) を同一プラットフォーム上で検索できる.
- DWPII における特定物質索引 (DCR) は 1999 年に開始. それ以前の年代については DWPIIM に含まれていた.

## DWPIIM の収録範囲

### DWPII 収録特許および INPI 由来の情報を収録

- 約 2,900 万件の特許由来のマルクーシュ構造を収録
  - 医薬 (B), 農薬 (C), 一般化学 (E) 分野の特許
- 33 特許発行国・機関
- US, EP, WO は 1978 年以降, その他の主要国 1987 年以降
- 全 INPI データ (Backfile, Mpharm)

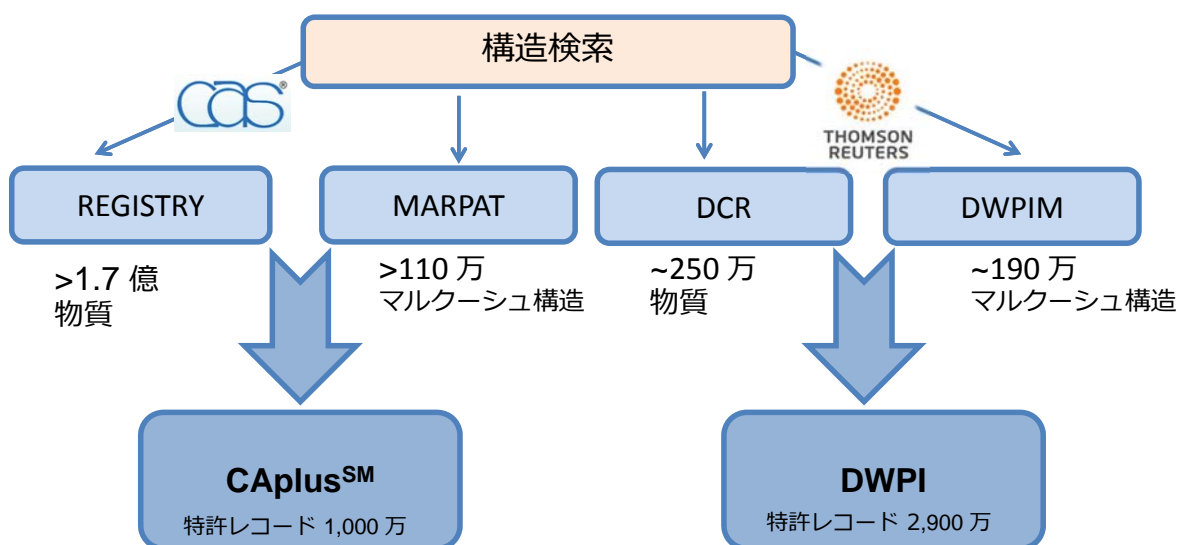
### 収録対象物質

- 有機化合物, 有機金属化合物
- 無機化合物: 塩, 金属, 非金属元素
- 遷移金属錯体
- ポリマー, ペプチド, フラーレン

Argentina	2015	Malaysia	2010
Austria	1987	Mexico	2015
Australia	1987	Netherlands	1987
Belgium	1987	New Zealand	1987
Brazil	2010	PCT/WO	1978 (Pharma) 1982 (Agro + Gen. Chem.)
Canada	1987	Poland	2011
China	2008	Russia	1993-1998 and 2010 to date
European Patents	1978 (Pharma) 1982 (Agro + Gen. Chem.)	Singapore	2014
France	1961-1976 (FR-M)* 1978 (Pharma) 1982 (Agro + Gen. Chem.)	South Africa	1987
Germany	1980 (Pharma) 1983-84 and 1987 to date (Agro + Gen. Chem.)	Spain	2010
Great Britain	1980 (Pharma) 1983-84 and 1987 to date (Agro + Gen. Chem.)	Sweden	1987
Gulf Cooperation Council	2008	Switzerland	1987
India	2000	Thailand	2010
Indonesia	2013	Turkey	2015
Ireland	1987	United States	1978 (Pharma) 1982 (Agro + Gen. Chem.)
Japan	1987	Vietnam	2010
Korea	2008		

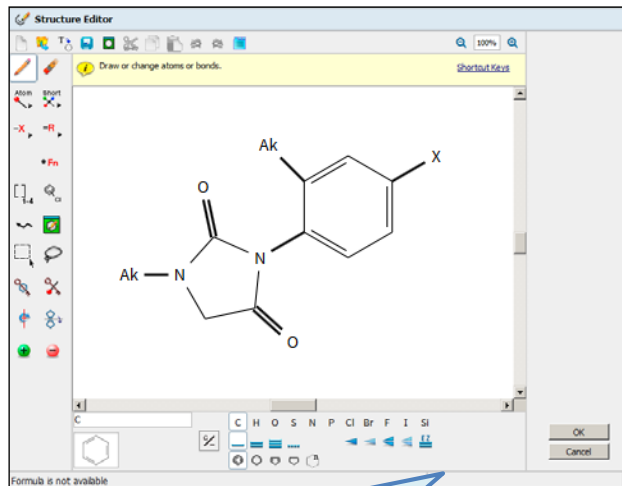
\* FR-M : フランス医薬特許      : CA 収録対象外の国

## 物質関連特許の網羅的な検索



- Thomson Reuters および CAS のコンテンツを一括検索
- 一般構造式および特定構造を一括検索

## DWPIM ファイルの特長 ①

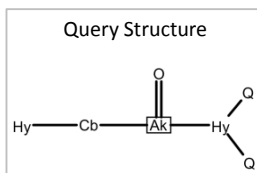


- 一般式グループ記号
- 属性
- 結合の種類
- マッチレベル
- 元素数レベル

STN の構造作図機能がそのまま利用できる  
 ||  
 MARPAT ファイルと同じ構造質問式が  
 利用できる！



## DWPIM ファイルの特長 ②



The screenshot shows the search results page in STN. At the top, there are tabs for 'COUNTS' and 'RESULTS'. Below these, there are three tabs: 'DWPI (161)', 'DCR (260)', and 'DWPIM (57)'. The 'DWPIM (57)' tab is highlighted with a red box. The main content area shows a list of search results. The first result is for '2012-A61677' and the second is for '2011-Q86169'. To the right of the results, there is a section for 'Hit Structures' and 'DWPIM Hits'. The 'DWPIM Hits' section shows 'DWPIM Accession Number 1125-15507' and 'assembled' structures. A chemical structure is displayed, showing a complex molecule with a benzamide core and a benzimidazole-like ring system. The structure is highlighted with a red box. A text box at the bottom right of the structure says: 'DWPIM でヒットした マルクーシュ構造を DWPI の特許レコード 中に含めて表示できる'. At the bottom of the page, it says 'Selected: 0 | Total: 0' and 'DWPIM Copyright © 2015 Thomson Reuters on STN'.

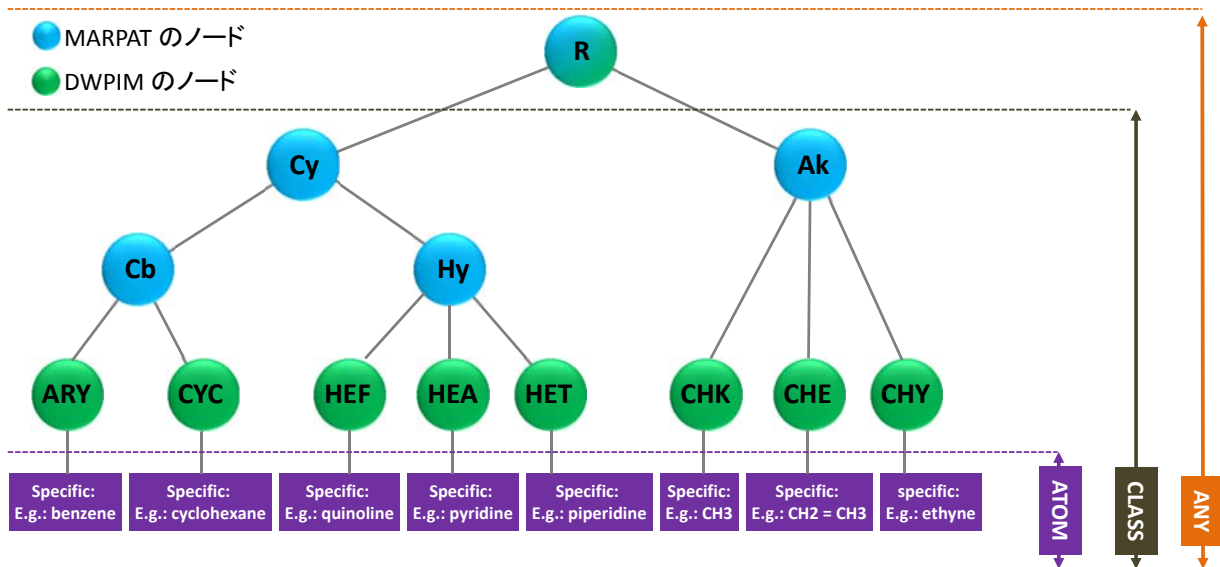
## DWPIM ファイルの特長 ③

- 特定原子
- ショートカット
- Superatom

(DWPIM 独自の一般式グループ記号)

STN の一般式グループ記号よりもきめ細かい索引

## Superatom と一般式グループ記号の対応関係



- 2016年2月現在：● MARPAT のノード のみ検索可能
- 2016年強化予定：● DWPIM のノード も検索可能になる

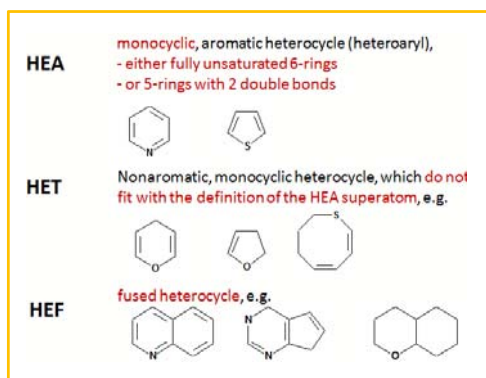
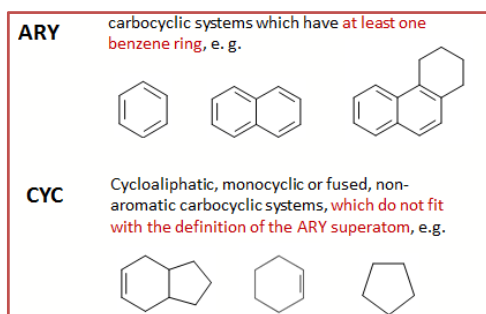
## 代表的な Superatom

Superatom	定義
ARY	1 以上のベンゼン環を有する炭素環
CYC	ベンゼン環を含まない炭素環
HEF	ヘテロ環 (多環)
HEA	芳香族ヘテロ環 (単環)
HET	HEA 以外のヘテロ環 (単環)
CHK	単結合のみから成る炭素鎖 (methyl, ethyl, t-butyl など)
CHE	1 以上の二重結合をもつ炭素鎖 (ethenyl, propenyl など)
CHY	1 以上の三重結合をもつ炭素鎖 (ethynyl, propynyl など)

## Superatom のメリット

- Superatom によって一般式グループをより精密に索引
  - 22 種類の Superatom
  - 非環式, 環式, 元素, その他の 4 セクションで多様な化学物質タイプをカバー
  - 目的に合った化合物を的確に検索

Acyclic / Cyclic (ML: Atom, Class, Any)	Elements (ML: Atom, Class, Any)	Others (only match on themselves)
CHK (Alkyl, Alkylene)	MX (Any metal)	ACY (Acyl)
CHE (Alkenyl, Alkenylene)	A35 (Group III A - V A metal)	DYE (Chromophore)
CHY (Alkynyl, Alkynylene)	ACT (Actinide)	PEG (Polymer end group)
ARY (Aryl)	AMX (Alkali/alkaline earth metal)	POL (Polymer)
CYC (Cycloaliphatic)	LAN (Lanthanide)	PRT (Protecting group)
HEA (Monocyclic heteroaryl)	TRM (Transition metal)	UNK (Any atom or group including H)
HET (Monocyclic nonaromatic)	HAL (Halogen)	XX (Any atom or group excluding H)
HEF (Fused heterocyclic)		

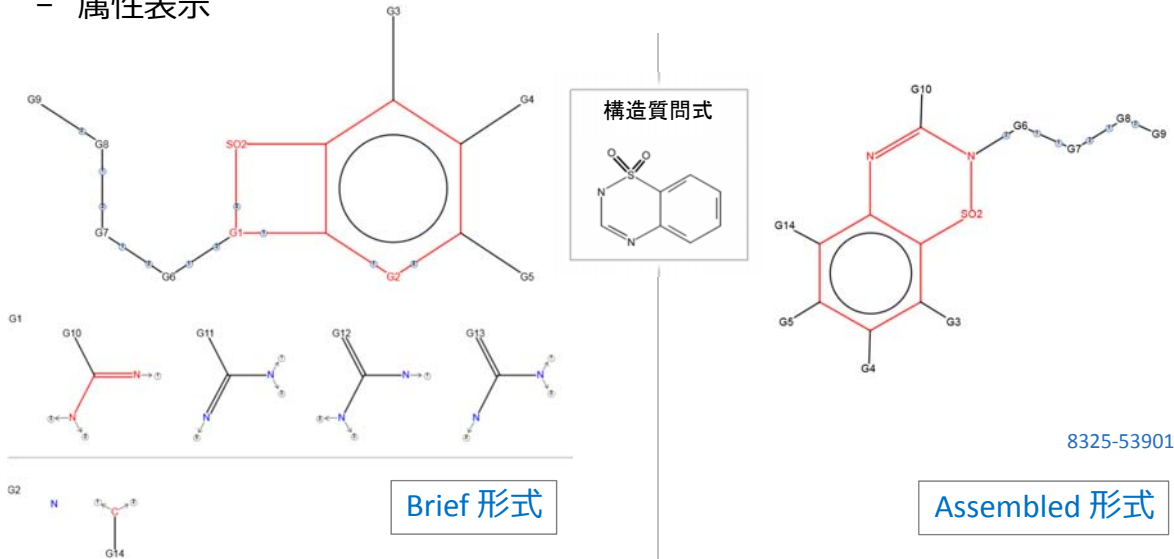


## DWPIM の表示形式

- 即時にヒットした構造の評価が可能
  - ヒット部分を組み立てた表示や詳細な表示が可能
  - ヒットした部分のハイライト
  - 属性表示

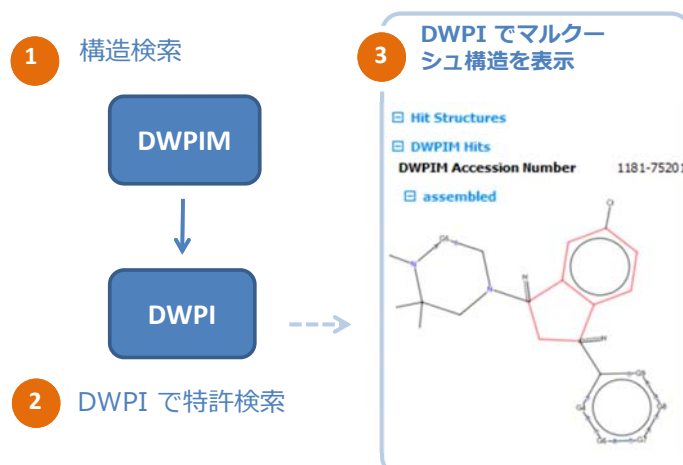
Amount of detail

Assembled 形式	: ヒット構造
Brief 形式	: 基本骨格+ヒット
Full 形式	: 詳細



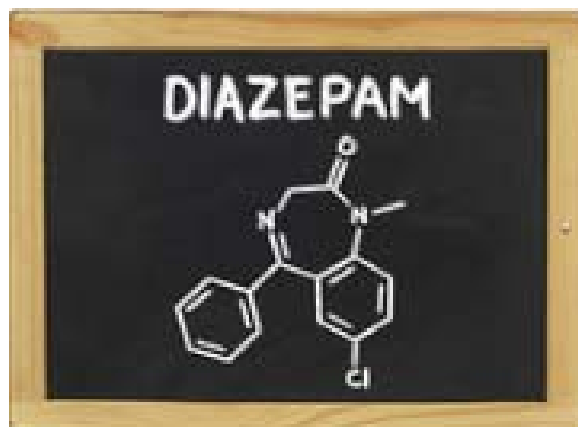
## クロスオーバー検索

- DWPIM で構造検索を実行する
- DWPIM でヒットしたマルクーシュ構造に関する特許を DWPI で検索 (REFX コマンドまたは Get References ボタン)
- DWPI 中で特許情報とヒットしたマルクーシュ構造を表示





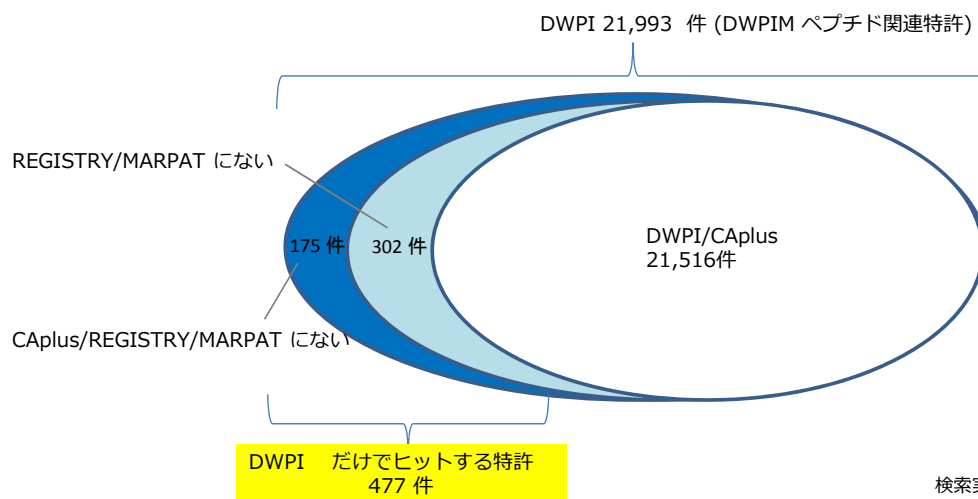
# デモ



439-14-5

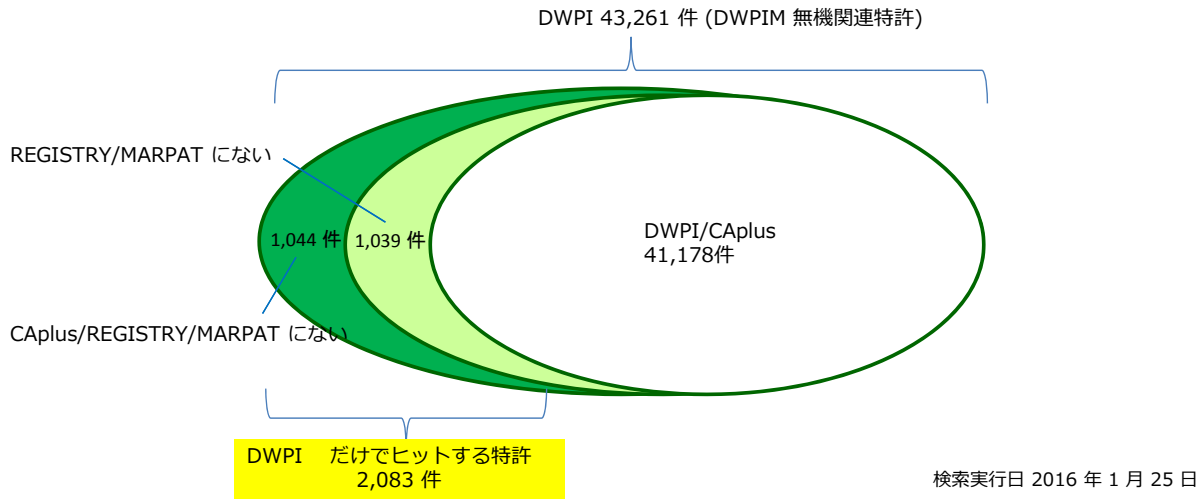
## DWPIM ペプチド関連特許

- DWPIM に含まれているペプチド関連特許のうち約 500 件は REGISTRY/MARPAT から CAplus へのクロスオーバー検索で得られない情報



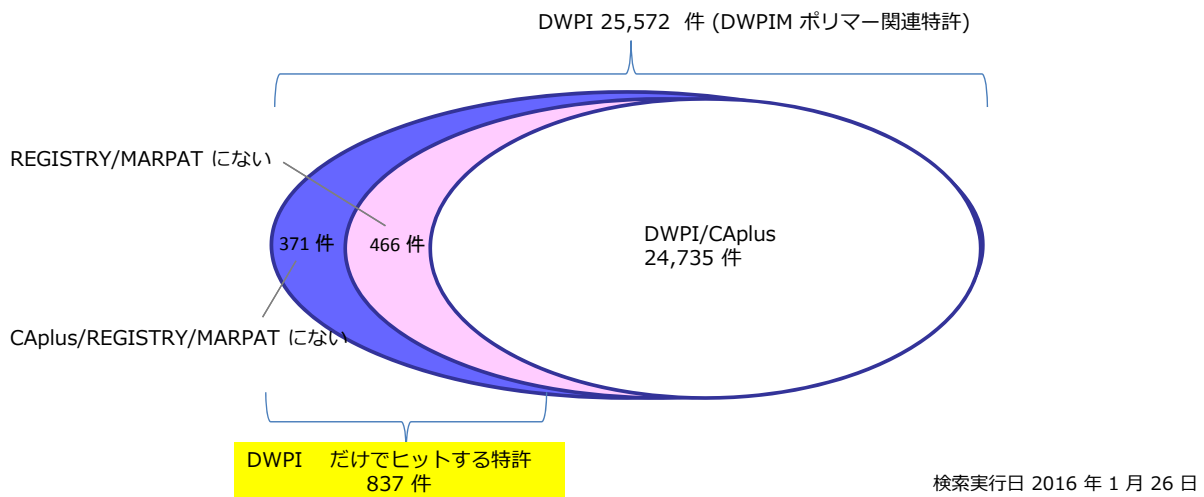
## DWPIM 無機物質関連特許

- DWPIM に含まれている無機関連特許のうち約 2,000 件は REGISTRY/MARPAT から CAplus へのクロスオーバー検索で得られない情報



## DWPIM ポリマー関連特許

- DWPIM に含まれているポリマー関連特許のうち約 800 件は REGISTRY/MARPAT から CAplus へのクロスオーバー検索で得られない情報



## MARPAT/CAplus に収録されていない特許が DWPIM/DWPI で得られる主な理由

- 国**
  - インドネシア, タイ, ベトナム
    - CAplus 収録対象外の国, 特許種別, 期間
- 分野**
  - 独自に収録分野を決定 (B,C,E セクション)
    - CAplus では特許分類で収録対象特許を決定している
- 物質**
  - 無機化合物
    - クレー, ゼオライト, ヘテロポリ酸のように複雑な構造を有する無機物質や合金も含む
  - ポリマー
    - 収録対象は医薬および農薬特許に限定
  - ペプチド
- 索引方針**
  - 部分的に定義されたマルクーシュ構造を収録
  - 構造図がなくてもマルクーシュ構造を収録

## Simple inorganics in the Derwent Markush Resource

- Typically multi-fragment consisting of anionic and cationic parts
- E.g. Alkali metal hypochlorites, especially Sodium or Potassium

In the patent (DE102005062012 A1):

Die Erfindung betrifft ein wässriges Handgeschirrspülmittel, umfassend eine Tensidkombination aus anionischem und nichtionischem Tensid, das ein Bleichmittel in Form eines Alkalihypochlorits enthält.

• • •

Obzwar auch andere Alkalihypochlorite, wie beispielsweise Kaliumhypochlorit, brauchbar sind, ist es doch bevorzugt, in erfindungsgemäßen Mitteln Natriumhypochlorit einzusetzen.

In DWPIM, e.g.:



## DWPIM トライアルのご案内

- 2 週間のトライアルが可能です。
- 情報事業部マーケティンググループへお気軽にお問い合わせください。

化学情報協会 情報事業部  
マーケティンググループ  
0120-151-462



## DWPIM 詳細資料

Derwent Markush Resource Database on STN  
Reference Manual

[http://www.jaici.or.jp/newstn/pdf/dwpim\\_manual.pdf](http://www.jaici.or.jp/newstn/pdf/dwpim_manual.pdf)

## STN 新プラットフォーム技術資料

<http://www.jaici.or.jp/newstn/doc.html>

