

収録範囲	<ul style="list-style-type: none"> ・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, 部分的に定義された構造 		
ファイル種類	マルクージュ構造		
アクセス	STNext のみ		
特徴	アラート (自動 SDI 検索)	毎月, 毎週, 更新ごと (週 2 回, デフォルト)	
	CAS RN [®] (CAS 登録番号)	<input type="checkbox"/> ページイメージ	<input type="checkbox"/> STN AnaVist <input type="checkbox"/>
	Keep & Share	<input type="checkbox"/> 中間一致・ 後方一致検索	<input type="checkbox"/> STN Easy <input type="checkbox"/>
	練習用ファイル	<input type="checkbox"/> 構造図	<input checked="" type="checkbox"/>
レコード内容	約 90 万件の DWPI ドキュメント由来のマルクージュ構造		
レコード数	226 万件以上 (2020 年 3 月現在)		
収録年代	1961 年ー		
更新頻度	週 2 回更新		
言語	英語		
データベース 製作者	Clarivate Analytics (UK) Limited Friars House, 160 Blackfriars Rd. London SE1 8EZ United Kingdom		
	Copyright Holder : Clarivate Analytics		
データベース 代理店	クラリベイト・アナリティクス・ジャパン株式会社 (日本法人) 〒107-6119 東京都港区赤坂5-2-20 赤坂パークビル19F		
収録源	DWPI 収録対象特許のクレーム, 実施例, 発明の詳細な説明		
検索補助資料	<ul style="list-style-type: none"> ・講習会テキスト http://www.jaici.or.jp/stn/text.html ・STN 技術資料 http://www.jaici.or.jp/stn/stn_doc_01.html ・オンラインヘルプ => HELP DIRECTORY ですべての利用可能なヘルプメッセージが表示されます ・STNGUIDE ファイル 		
利用可能な クラスター	なし		
関連ファイル	WPINDEX/WPIDS/WPIX		

ヨーロッパ
STN カールスルーエ
FIZ Karlsruhe
P.O. Box 2465
76012 Karlsruhe
Germany
Phone: +49-7247-808-555
Fax: +49-7247-808-259
E-mail: helpdesk@fiz-karlsruhe.de
Internet: www.stn-international.de

日本
STN 東京
化学情報協会
〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
Phone: 0120-003-462 (Help Desk)
: 0120-151-462 (上記以外)
Fax: 03-5978-4090
E-mail: support@jaici.or.jp (Help Desk)
customer@jaici.or.jp (上記以外)
Internet: www.jaici.or.jp

北アメリカ
STN コロンバス
CAS
P.O. Box 3012
Columbus, Ohio 43210-0012 U.S.A
CAS Customer Care:
Phone: 800-753-4227 (North America)
614-447-3700 (worldwide)
Fax: 614-447-3751
E-mail: help@cas.org
Internet: www.cas.org

検索フィールド

このファイルには中間一致および後方一致検索可能なフィールドはありません。

SEARCH コード	内容	入力例	DISPLAY コード
/AN /ED /MDE	レコード番号 入力日 ¹⁾ マルクーシュディスクリプタ	S 9925-IWM01/AN S 20151029/ED S S/MDE S SINGLE SPECIFIC STRUCTURE/MDE	AN ED MDE
/SDM	物質ディスクリプタ (デフォルト)	S N/SDM S NATURAL POLYMERS/SDM	SDM
/UP	更新日 ¹⁾	S UP=NOV 2017	UP

1) 数値演算子あるいは範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

構造検索項目

項目	検索例
STNext を用いて作られた構造の L 番号	SEARCH L1 SSS SAM S L1 SSS FULL

構造検索のタイプ

SEARCH コード	検索タイプ	内容	入力例
SSS	Substructure 部分構造検索 (デフォルト)	質問式の条件を満たす物質を検索 他の置換基が結合してもよい	S L1 SSS S L2 OR L3 SSS
CSS	Closed Substructure 閉構造部分構造検索	質問式に完全に一致する物質を検索 CONNECT (結合非水素数) によって 許された位置に置換基が結合してもよい	S L1 CSS S L2 OR L3 CSS

構造検索の範囲

SEARCH コード	範囲	内容	入力例
SAM	Sample サンプル検索 (デフォルト)	ファイルの一部 (10 %) を検索 (最大 50 レコードを表示できる)	S L1 SSS SAM
FUL	Full フルファイル検索	ファイルの全体 (100 %) を検索	S L2 SSS FUL

制限検索コード

DWPIM ファイルで作成された回答セットの L 番号を限定することができます。

SEARCH コード	内容	入力例	DISPLAY コード
/COM	イタレーション検索が完全な回答	S L4/COM	表示されない
/INC	イタレーション検索が不完全な回答	S L4/INC	表示されない

表示形式

回答の表示をする際は、下記の表示形式を自由に組み合わせることができます。複数のコードはスペースやカンマで区切ってください。フィールドは指定された順序で表示されます。

入力例：=> D L1 1-5 AN ED

ヒットタームハイライト機能はすべてのフィールドで使えます。HIT, KWIC, OCC 表示形式を指定する場合は、検索時にハイライト機能を ON にしておく必要があります。

カスタム表示形式

表示形式	英語名	内容	入力例
AN	Accession Number	レコード番号	D AN
ED	Entry Date	入力日	D ED
MDE ¹⁾	Markush Descriptor	マルクーシュディスクリプタ	D MDE
SDM	Substance Descriptor	物質ディスクリプタ	D SDM
STR	Structure	基本骨格とすべての G グループの定義	D STR
UP	Update Date	更新日	D UP

1) カスタム表示形式でのみ表示できます。

定型表示形式

表示形式	内容	入力例
ALL (FULL)	基本骨格とすべての G グループの定義 AN, SDM, STR, ED, UP	D ALL
IALL (IFULL)	フィールド名付きインデント型 ALL	D IALL
ASB (STD, IDE)	ヒットした部分を組み立てた構造 (デフォルト) AN, SDM, STR, ED, UP	D ASB
IASB (ISTD)	フィールド名付きインデント型 ASB	D IASB
BRIEF SCAN	基本骨格とヒットに関与する G グループの定義 回答チェック用の表示形式 (回答番号なしのランダム表示) SDM, ASB, ED, UP	D BRIEF D SCAN
TRIAL (TRI, SAMPLE, SAM)	回答チェック用の表示形式 SDM, ASB, ED, UP	D TRIAL
HIT KWIC OCC	ヒットタームを含むフィールド ヒットタームの前後 50 語 (KeyWord-In-Context) ヒットタームの出現頻度をフィールドごとに表示	D HIT D KWIC D OCC

SELECT, ANALYZE および SORT フィールド

SELECT/ANALYZE コマンドは抽出・解析用のコマンドです。SORT コマンドは指定したフィールドのアルファベット順または数値順に検索結果を並び替えるコマンドです。

○ は SELECT/ANALYZE/SORT 可能なコード，× は不可能なコードです。

SELECT/ANALYZE/SORT コード	内容	ANALYZE/SELECT	SORT
AN	レコード番号 (デフォルト)	○	×
ED	入力日	○	×
MDE	マルクーシュディスクリプタ	○	×
SDM	物質ディスクリプタ	○	×
UP	更新日	○	×

クロスオーバー

DWPIM ファイルから WPINDEX/WPIDS/WPIX ファイルへのクロスオーバー

DWPIM ファイルで作成された回答セットの L 番号を WPINDEX/WPIDS/WPIX ファイルで検索します。

```
=> FILE DWPIM
=> S L1 FULL
L2
=> FILE WPINDEX
=> S L2
```

ヒットしたマルクーシュ構造を表示するには下記の表示形式を使用します。

表示形式	内容
AHITSTR	ヒットした部分を組み立てた形式の構造と関連する G グループの定義
BHITSTR	基本骨格とヒットに関与する G グループの定義
FHITSTR	基本骨格と全 G グループの定義

WPINDEX/WPIDS/WPIX ファイルから DWPIM ファイルへのクロスオーバー

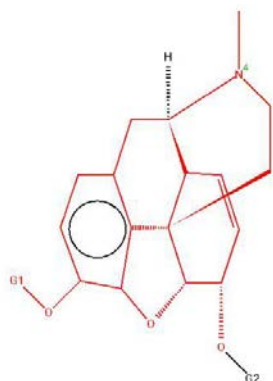
WPINDEX/WPIDS/WPIX ファイルのレコード中のマルクーシュ化合物番号 (MCN) を DWPIM へクロスオーバーするには、TRANSFER コマンドを使用します。その際、検索フィールド /AN を指定します。

```
=> FILE DWPIM
=> TRA L# [回答番号] MCN /AN
例：TRA L1 1-3 MCN /AN
```

サンプルレコード

ALL 表示形式

レコード番号 AN 2091-38502 DWPIIM
 物質ディスクリプタ SDM B: Pharmaceuticals, Agrochemicals; V: Simple organic compounds; Y: Mixtures



G-GROUP 1

H C XX

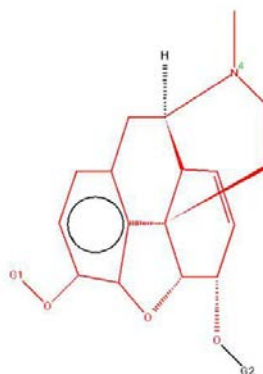
G-GROUP 2

H C XX

入力日 ED 20180409
 更新日 UP 20180409

BRIEF 表示形式

レコード番号 AN 2091-38502 DWPIIM
 物質ディスクリプタ SDM B: Pharmaceuticals, Agrochemicals; V: Simple organic compounds; Y: Mixtures



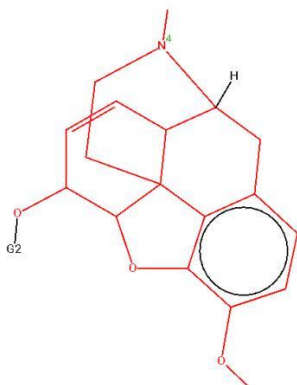
G-GROUP 1

H C XX

入力日 ED 20180409
 更新日 UP 20180409

■ ASB 表示形式 (デフォルト)

レコード番号 AN 2091-38502 DWPIM
物質ディスクリプタ SDM B: Pharmaceuticals, Agrochemicals; V: Simple organic compounds; Y:
Mixtures



入力日 ED 20180409
更新日 UP 20180409