

## STN インターネットセミナー

# 一歩進んだクロスオーバー検索



## 本日の内容

- クロスオーバー検索でヒットするもの
- 非特定誘導体
- 接尾辞を利用したクロスオーバー検索



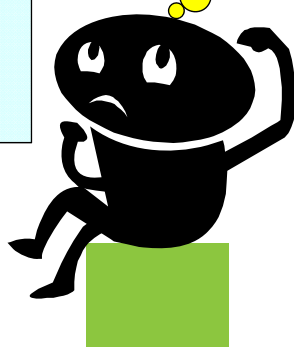
# ご存じですか？

～クロスオーバー検索でヒットするもの～

REGISTRY から CAPlus へクロスオーバー

⇒ FILE REGISTRY  
⇒ S 83-67-0  
L1 1 83-67-0  
⇒ FILE CAPLUS  
⇒ **S L1**  
L2 4148 L1

L2 の  
ヒットタームは？



L2 4148 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0**, Theobromine

RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)  
(oxidative stress damage reduction during exercise)

テオブロミンの文献

L2 4148 ANSWERS CAPLUS COPYR

IT **83-67-0P**, 3,7-Dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
(preparation of 3,7-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione using trimethylphosphite)

テオブロミンの  
合成文献 (P付)

テオブロミンの  
非特定誘導体 (D付) の文献

L2 4148 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0D**, Theobromine, derivs.

RL: COS (Cosmetic use); BIOL (Biological study)  
(cosmetic composition including cosmetic active ingredients)

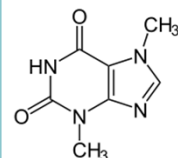
テオブロミンの  
非特定誘導体の合成文献 (DP付)

L2 4148 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0DP**, Theobromine, complex with hydroxypropyl-

RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use)  
(Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)  
(interactions of .beta.- and hydroxypropyl-.beta.-cyclodextrin with  
alkaloids)

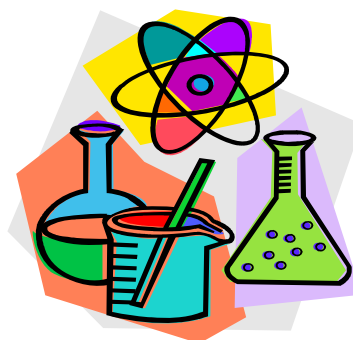
(参考)テオブロミン



---

## 非特定誘導体とは

# 構造や分子式を 特定できない誘導体



---

## 非特定誘導体は. . .

- CAS 登録番号は付与されない
  - REGISTRY ファイルには存在しない
  - D 付索引がある物質は 100 万件
- CA の索引中に出現
  - 特許レコード中にも, 非特許レコード中にも存在する

# 非特定誘導体のレコード例

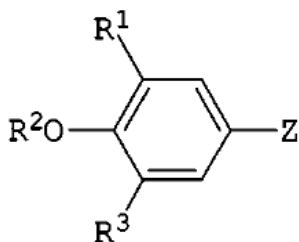
## ● 特表2011-520775

ベンゼン誘導体を含むリポプロテインリパーゼ活性化組成物

【請求項1】

LPL活性化処理を必要とする患者に、ベンゼン化合物の有効量を投与することにより、該患者のLPLを活性化する方法であって、前記ベンゼン化合物が、一般式(1)：

【化1】



このように特定できないものが  
**非特定誘導体**

IT 71-43-2DP, Benzene, derivs.

# 非特定誘導体に関する索引の年代変遷

1977 年以降

IT 83-67-0D, derivs.

誘導体化する前の化合物の  
CAS 登録番号に D を付与

主に1976 年以前

IT 83-67-0, derivs.

誘導体化する前の化合物の  
CAS 登録番号とキーワード

非特定誘導体のキーワード例

- derivs.
- conjugates
- compds with
- polymers
- complex with
- reaction products

## 代表的な非特定誘導体

### ● 一般的な誘導体, 塩, エステル

IT 119-61-9D, derivs.  
IT 77907-69-8D, Interferon alfa-2a, pegylated  
IT 162808-62-0D, Caspofungin, salts  
IT 98-11-3D, Benzenesulfonic acid, C10-13-alkyl derivs., calcium salt  
IT 57-88-5D, Cholesterol, fatty acid esters  
IT 57-13-6D, Urea, compds. with paraffins  
IT 120-12-7D, Anthracene, adduct

9

## 代表的な非特定誘導体

### ● 反応生成物

IT 57987-55-0DP, 2,4-Diethyl-1,5-pentanediol,  
reaction products with formaldehyde  
IT 50-00-0DP, Formaldehyde, reaction products with diols

#### 特開 2013-159606

ホルムアルデヒドガス製造方法, およびホルムアルデヒドガス製造装置

##### <実施例1>

ホルムアルデヒドを50質量%含む(B)ホルムアルデヒド水溶液と、2,4-ジエチル-1,5-ペンタンジオール(DEPD)とを、ホルムアルデヒドのモル数とDEPDの水酸基のモル数の比(DEPDの水酸基のモル数/ホルムアルデヒド基のモル数)が、1.3になるように混合し、室温、反応時間12時間の条件で、第一工程を行った。

##### 【0072】

反応終了後、反応物である(C)ヘミホルマール水溶液を、1000g/hrで連続的に蒸発缶へフィードし、蒸発缶2段(1段目の温度条件が48℃、2段目の温度条件が47℃~89℃の間の6条件)、操作圧力35mmHg、平均滞留時間70分の条件で第二工程を行った。(D)ヘミホルマール濃縮物中の水分量(質量%)を、カールフィッシャ

10

## 代表的な非特定誘導体

### ● 配位化合物

IT 7440-06-4DP, Platinum, complex with doxorubicin

IT 23214-92-8DP, complex with platinum

### ● 複合体

IT 9002-62-4D, Prolactin, conjugates

IT 2873-38-3D, conjugates with albumin or ovalbumin

IT 919-30-2D, APTES, conjugate with CF 405S

11

## 代表的な非特定誘導体

### ● 混合物

IT 1397-89-3D, Amphotericin b, mixts. containing

1400-61-9D, Nystatin, mixts. containing

7681-93-8D, Natamycin, mixts. containing

13058-67-8D, Lucensomycin, mixts. containing

#### 特開平6-271401

食品及び農産物のかびの発育を防止するための殺真菌組成物

【特許請求の範囲】

【請求項1】 組成物であって、ポリエン抗真菌剤、抗真菌酸性化合物又はその塩、及び追加の酸又はその塩を含む組成物。

【請求項2】 抗真菌剤がナタマイシン、ルセンソマイシン、ナイスタチン又はアムホテリシンBである請求項1記載の組成物。

12

# 代表的な非特定誘導体

## • アナログ

ある化合物と受容体結合特性などの分子生物学的な性質や構造が類似しているが、ある化合物の原子/原子団が、別の原子/原子団と置換された組成を持つ別の化合物

IT 115966-68-2D, Histatin 5, cyclic analogs

IT 11061-68-ODP, Insulin (human), analogs and derivs.

IT 347396-82-1DP, Ranibizumab, Fc-modified derivs.

IT 347396-82-1D, Ranibizumab, deamidized or oxidized products

# WO 2012/061937

METHODS AND COMPOSITIONS COMPRISING CYCLIC ANALOGUES OF HISTATIN 5 FOR TREATING WOUNDS

### Example 1 - Activity of DB2121 to treat wounds

[0035] **MATERIALS AND METHODS:** DB2121, a cyclic derivative of histatin 5 was synthesized in-house using a peptide synthesizer and established methods. DB2121 was confirmed to be a cyclic peptide (as shown in Figure 1) of mass 2558.23 g/mol with the amino acid sequence N-RHHCYKRKFHEKHHCHRGY-C. The compound was then purified using HPLC to a purity of 95% and then resuspended in 10 mM

IT 115966-68-2D, Histatin 5, cyclic analogs

stock solution for subsequent experiments. Exact mass was verified by direct injection into a Micromass ESI-Qtof Quattro Micro mass spectrometer operated by MassLynx 4.0 software. Ketoconazole was purchased from Sigma Chemical Co. The Balb/c mice were supplied by Charles River and were housed in the Universities' Animal Care Facility. The mice were acclimated first for a minimum of 48 hours to confirm health prior to experimentation. Pentobarbital, Euthanyl, Buprenorphine and chlorhexidine were purchased from Sigma Chemical Co. All procedures performed on the animals were approved by the Animal Care and Use Committee at the University of Western Ontario.

## 代表的な非特定誘導体

### • ポリマー

IT 74-85-1DP, Ethylene, polymers with olefin and alkyl(meth)acrylates  
79-10-7DP, Acrylic acid, alkyl esters, polymers  
79-41-4DP, Methacrylic acid, alkyl esters, polymers

#### 特開平7-150181

潤滑油添加剤組成物およびその製造方法

【請求項1】 下記一般式〔1〕で表されるカーボネート、  
 $R^1-O-C(=O)-O-R^2$  …〔1〕

固有粘度が0.25ないし2.0dl/gの油溶性エチレン・ $\alpha$ -オレフィンランダム共重合体、  
ポリアルキル(メタ)アクリレート、および前記エチレン・ $\alpha$ -オレフィンランダム共重合体とアルキル(メタ)アクリレートとのグラフト共重合体を含むことを特徴とする潤滑油添加剤組成物。

15

## 代表的な非特定誘導体

### • 後処理ポリマー

塩素化, アルキル化, アミド化などの後処理を加えたポリマー

IT 9003-17-2D, Polybutadiene, chlorinated  
IT 9003-17-2D, Polybutadiene, amide-terminated  
IT 9003-17-2DP, Polybutadiene, sulfonated  
IT 9003-17-2DP, Polybutadiene, epoxidized, hydrolyzed



## 代表的な非特定誘導体

- 融合タンパク質 (キメラタンパク質)

遺伝子組み換え技術を使い、人工的に2種類以上の異なるタンパク質を結合させたもの

IT 113516-56-6D, fusion proteins  
IT 123475-27-4DP, fusion products  
IT 2543-43-3DP, chimeric derivative  
IT 26791-46-8DP, chimeric derivative

\* CAS 登録番号で索引されるタンパク質と、統制語で索引されるタンパク質があるが、上記は CAS 登録番号で索引される場合、酵素やホルモンに多い。

17

## こんな記載があったら非特定誘導体

- 原報中に

～の誘導体

～の塩

～の混合物

特に農業・医薬分野

の記載がある

- 「～を反応させて」のような記載があるが具体的な**反応物が記載されていない**

## 非特定誘導体を含めた/除く文献は

# 接尾辞付クロスオーバー で区別できます

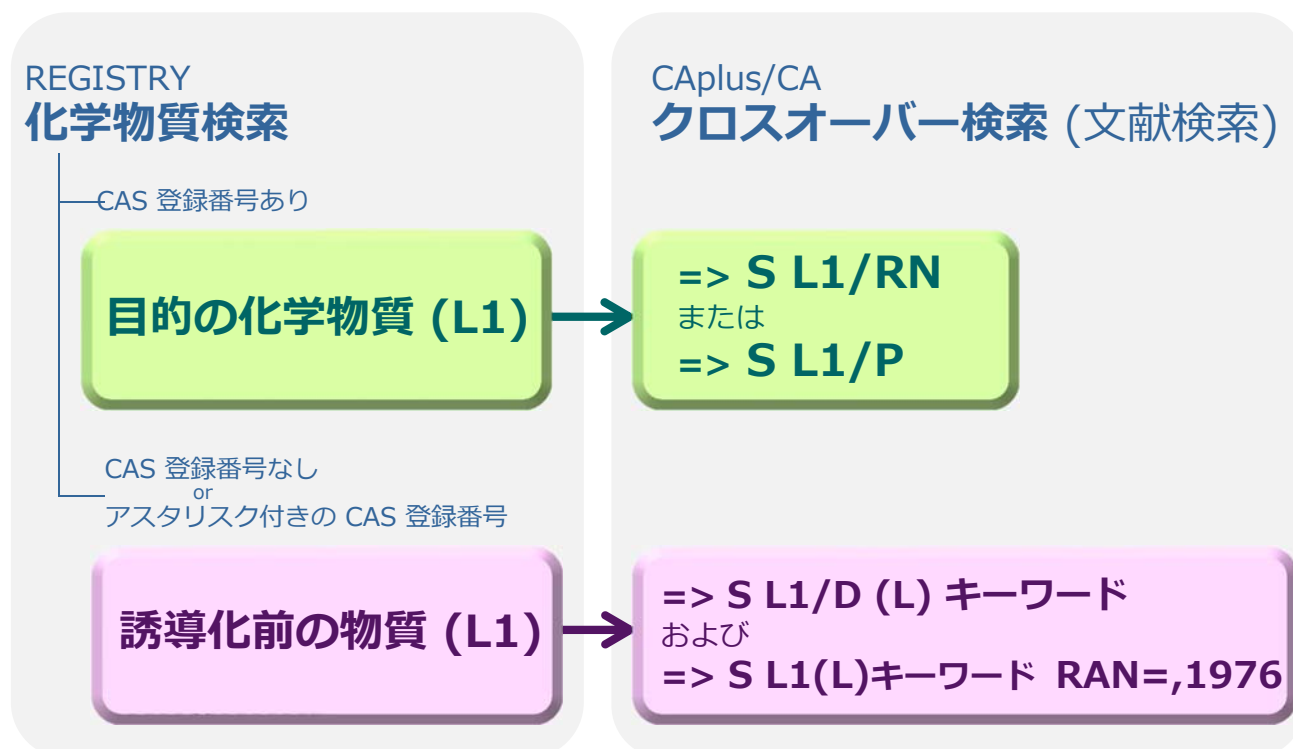


## CAplus/CA ~ 接尾辞を利用した検索

内容	入力例
全文献	S L1
合成文献	S L1/P
非特定誘導体	S L1/D (L)キーワード
1976 年以前	S L1 (L)キーワード RAN=,1976
全文献 (非特定誘導体を除く)	S L1/RN
合成文献 (非特定誘導体を除く)	S L1/P (NOTL) L1/D
非特定誘導体の合成文献	S L1/DP

\* L1 は REGISTRY ファイルの回答セットの L 番号

# 検索方針



21

## CAS 登録番号がある物質の文献検索

REGISTRY から CAplus へクロスオーバー

```
⇒ FILE REGISTRY
⇒ S 83-67-0
L1      1 83-67-0
⇒ FILE CAPLUS
⇒ S L1/RN
L2     4114 L1
⇒ S L1/P
L3     253 L1
```

(非特定誘導体以外の) **すべての文献**

**合成文献** (非特定誘導体を含む)

L2 4114 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0**, Theobromine

=> S L1/RN でヒット

RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)  
(oxidative stress damage reduction during or after exercise)

L3 253 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0P**, 3,7-Dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
(preparation of 3,7-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione by methylation of 3-methylxanthine using trimethylphosphate)

L4 51 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0D**, Theobromine, derivs.

RL: COS (Cosmetic use); BIOL (Biological study); USES (Uses)  
(cosmetic composition including cosmetic active agent and effervescent system)

L5 23 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0DP**, Theobromine, complex with hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin

RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)  
(interactions of .beta.- and hydroxypropyl-.beta.-cyclodextrin with purine alkaloids)

L2 4114 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0**, Theobromine

RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)  
(oxidative stress damage reduction during or after exercise)

L3 253 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0P**, 3,7-Dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione

=> S L1/P でヒット

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
(preparation of 3,7-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione by methylation of 3-methylxanthine using trimethylphosphate)

L4 51 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0D**, Theobromine, derivs.

RL: COS (Cosmetic use); BIOL (Biological study); USES (Uses)  
(cosmetic composition including cosmetic active agent and effervescent system)

L5 23 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0DP**, Theobromine, complex with hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin

=> S L1/P でヒット

RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)  
(interactions of .beta.- and hydroxypropyl-.beta.-cyclodextrin with purine alkaloids)

# CAS 登録番号がない物質の文献検索

元の物質の CAS 番号をクロスオーバー

⇒ FILE REGISTRY

⇒ S 83-67-0

L1 1 83-67-0

⇒ FILE CAPLUS

:

⇒ S L1/D

L4 253 L1

⇒ S L1/DP

L5 23 L1

非特定誘導体の文献

非特定誘導体の合成文献

\* 非特定誘導体を検索する場合は、必要に応じてキーワードを (L) でリンクする。  
また、1976 年以前の文献も網羅的に検索したい場合は、さらに下記の検索式を実行する。  
=> S L1(L)キーワード RAN=,1976

25

L2 4114 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0**, Theobromine

RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)  
(oxidative stress damage reduction during or after exercise)

L3 253 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0P**, 3,7-Dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
(preparation of 3,7-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione by methylation of  
3-methylxanthine using trimethylphosphate)

L4 51 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0D**, Theobromine, derivs.

⇒ S L1/D でヒット

RL: COS (Cosmetic use); BIOL (Biological study); USES (Uses)  
(cosmetic composition including cosmetic active agent and effervescent system)

L5 23 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0DP**, Theobromine, complex with hydroxypropyl-β-cyclodextrin

RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL  
(Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)  
(interactions of .beta.- and hydroxypropyl-.beta.-cyclodextrin with purine  
alkaloids)

L2 4114 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0**, Theobromine

RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)  
(oxidative stress damage reduction during or after exercise)

L3 253 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0P**, 3,7-Dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
(preparation of 3,7-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione by methylation of  
3-methylxanthine using trimethylphosphate)

L4 51 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0D**, Theobromine, derivs.

RL: COS (Cosmetic use); BIOL (Biological study); USES (Uses)  
(cosmetic composition including cosmetic active agent and effervescent system)

L5 23 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0DP**, Theobromine, complex with **=> S L1/DP でヒット** in

RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL  
(Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)  
(interactions of .beta.- and hydroxypropyl-.beta.-cyclodextrin with purine  
alkaloids)

## 本日のポイント

- 非特定誘導体のみが索引されている文献を除く場合は

**=> S L1/RN**

# ここがポイント

## 下記のように

83-67-0 と 83-67-0D の

## 2 種類の索引を含む文献を考慮に入れる

IT **83-67-0**  
RL: ADV (Adverse effect, including biological study, unclassified); BIOLOGICAL STUDY (Biological study, unclassified); BIOLOGICAL STUDY (Biological study, unclassified); PROC (Process) (metabolism and toxicity of, diet effect on)

IT **83-67-0D**, metabolites  
RL: BIOL (Biological study) (of urine, diet effect on theobromine metabolism in relation to)

=> S ..... NOT L1/D と NOT 演算するとこのレコードは除かれてしまう

# ポイントのおさらい

- “/RN” は “NOT /D” とは結果が異なる

=> FILE REGISTRY  
=> S 83-67-0  
L1 1 83-67-0  
=> FILE CAPLUS  
=> S L1/RN  
L2 4114 L1/RN  
(L1 (NOTL) L1/D)  
=> S L1 NOT L1/D  
L3 4101 L1 NOT L1/D

/RN は (NOTL) L#/D

# 非特定誘導体を除いた合成文献検索

- 接尾辞 DP を除く 合成文献検索の場合は

=> S L1/P (NOTL) L1/D

L2 4114 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0**, Theobromine

RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)  
(oxidative stress damage reduction during or after exercise)

L3 253 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013

IT **83-67-0P**, 3,7-Dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)

(preparation of 3,7-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione by methylation of  
3-methylxanthine using trimethylphosphate)

L4 51 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0D**, Theobromine, derivs.

RL: COS (Cosmetic use); BIOL (Biological study); USES (Uses)

(cosmetic composition including cosmetic active agent and effervescent system)

L5 23 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IT **83-67-0DP**, Theobromine, complex with hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin

RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL  
(Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)

(interactions of .beta.- and hydroxypropyl-.beta.-cyclodextrin with purine  
alkaloids)



# 非特定誘導体の文献 ～ ある？ない？

RN 7782-44-7 REGISTRY  
CN Oxygen (CA INDEX NAME)  
:  
MF O2  
CI COM  
LC STN Files: ADISNEWS, ANAE  
CHEMCATS, CHEMINFORMR  
ENCOMPLIT, ENCOMPLIT2, E  
RTECS\*, SPECINFO, TOXCEN  
(\*File contains numerically searchable property data)  
Other Sources: DSL\*\*, EINECS\*\*, TSCA\*\*  
(\*\*Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

目的の物質を REGISTRY で  
表示すれば一目瞭然

0 = 0

\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

585701 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

**71433 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA**

588178 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

IDE 表示形式

33

本日はご参加いただき  
誠にありがとうございました

次回は 10 月 9 日開催です

「MARPAT ～ マッチレベル, 元素数レベルをマスターしよう！」