

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

この資料は、2006 年に開催した STN 特許セミナー資料の一部抜粋したものです。
ファイルによっては、現在のフィールドや件数、収録基準、表示形式等が異なる場合があることをご理解いただいた上で、ご覧ください。

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

無効資料調査とは

■ 無効資料調査

- ・ 無効資料調査とは、自社特許または実施技術の障害となるような他企業の特許出願の権利の無効および権利縮小を図ることを目的とした証拠資料を探すことである。無効審判請求にも利用できる。
- ・ 無効資料を提出するための特許庁の制度

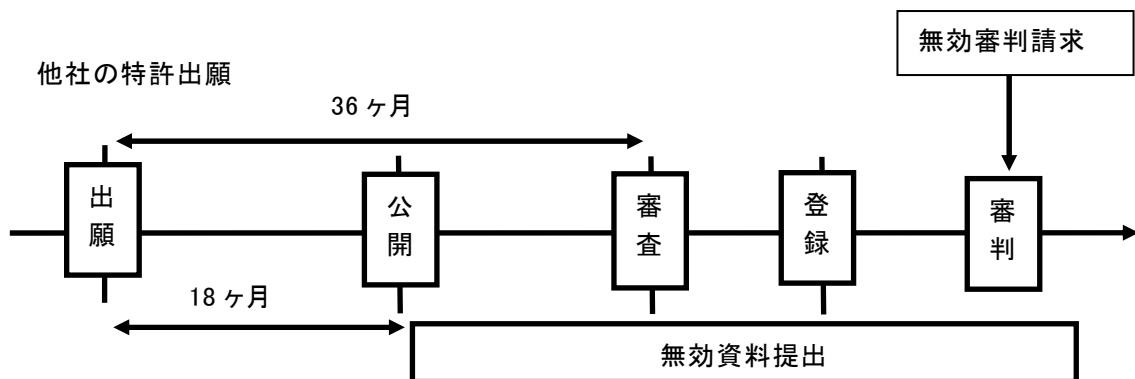
- 特許出願に対する情報提供（特許法施行規則 13 条の 2）

情報提供制度は、審査の的確性及び迅速性の向上に資することを目的として、特許法施行規則に規定されたものである。

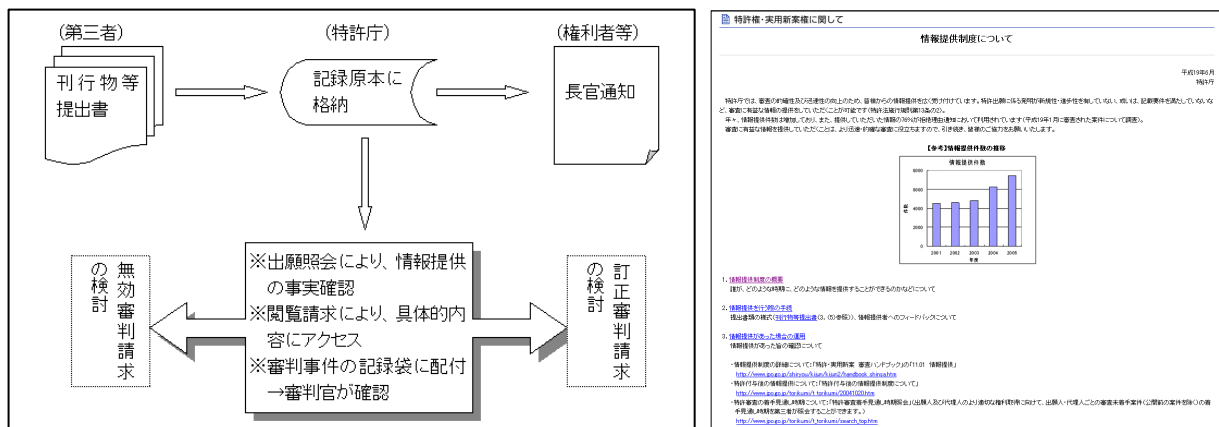
- 特許付与後の情報提供（特許法施行規則 13 条の 3）

権利の有効性についての情報を収集する手段を充実するため、平成 16 年 1 月 1 日より特許付与後の情報提供制度が導入され、特許付与後においても情報提供が可能となっている。

- ・ 提出時期概念図



参考：特許庁「情報提供制度」関連情報 (http://www.wjpo.go.jp/seido/s_tokkyo/tt1210-037_sanko2.htm)



特許要件

■ 発明についての特許要件

- ① 産業上利用できる。(特許法第 29 条第 1 項柱書)
 - ② 特許を受けることができない発明に該当しないこと。(特許法第 32 条)
「公の秩序, 善良の風俗または公衆の衛生を害するおそれがある発明」は特許を受けることができない。
 - ③ 新規性(特許法第 29 条第 1 項) または進歩性(特許法第 29 条第 2 項) があること。
- ・ 新規性・進歩性がなく特許を受けることができない場合
 - 出願前に国内または外国で公然知られた発明(公知)
 - 出願前に国内または外国で公然実施された発明(公用)
 - 出願前に国内または外国で頒布された刊行物に記載された発明(文献公知)
 - 出願前に電機通信回線を通して公衆が利用可能となった発明(インターネット公知)

CAplus/CA ファイル検索
の有効性

■ 物質特許(化学物質発明)

- ・ 昭和 50 年法により物質特許が認められるようになった。
- ・ 物質特許は, 次の要件を満足していることが必要とされる。
 - ① 産業上, 利用することができる化学物質発明である。(用途が想定できない単なる化学物質は, 発明として成立しない。)
 - ② 第三者に実施(再現)できるものである。具体的な生産方法や物性が示されている化学物質は, 第三者が生産可能である。

■ 用途特許

- ・ 化学物質自体は新しい化学物質ではないが, 新たな用途を創造したことによる発明を用途発明とする
 - 例: 化学物質 A は, 除草剤の用途があったが, 新たに血圧降下剤として使用できることを見出した。

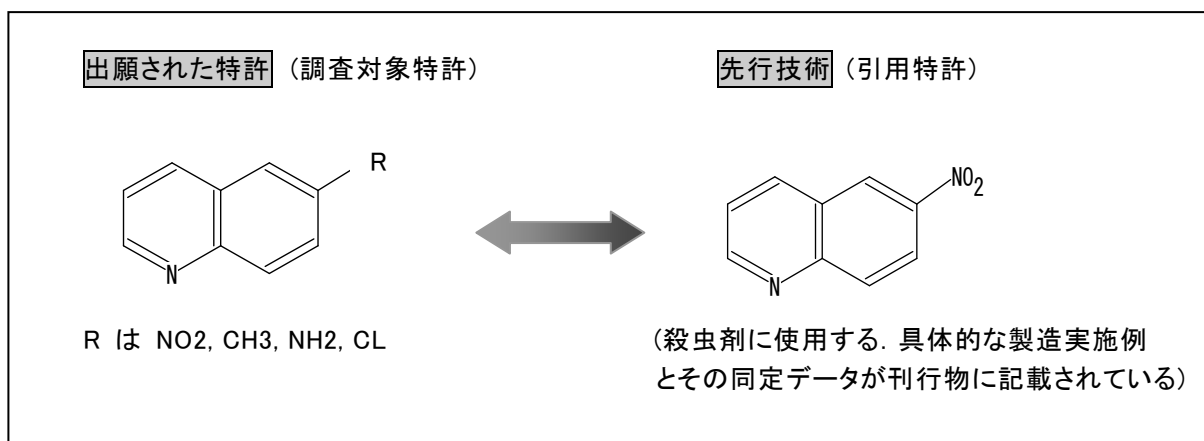
新規性

■ 新規性（第 29 条第 1 項各号）

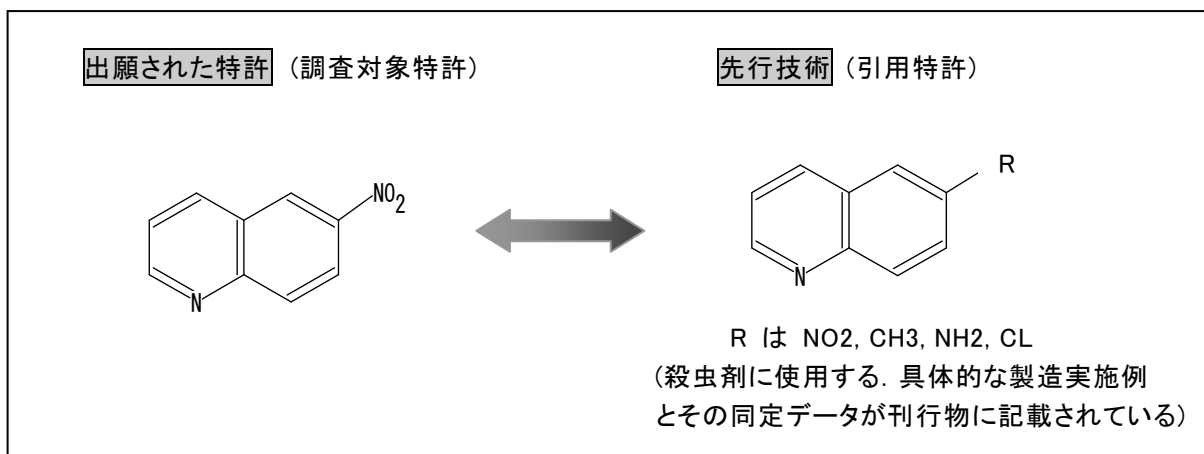
- ・ 新規性がない場合

マルクーシュ形式で記載されている場合、その選択肢がそれぞれ別の発明と仮定される。

- ① 選択肢の NO₂ が引用化学物質発明に記載されていたため新規性は否定されている。



- ② NO₂ が引用化学物質発明の選択肢に記載されていたため新規性は否定されている。



進歩性

■ 進歩性（第 29 条第 2 項各号）

- ・ 進歩性が認められる場合

通常、下位概念の発明（後願）が上位概念の発明（先願）の範囲に含まれていれば、その新規性は否定される。しかしながら、上位概念の発明にはない顕著な効果を有する場合には、選択発明として特許化される。

出願された特許（調査対象特許）	先行技術（引用特許）
<p>温血動物に対する毒性が極めて少ない殺虫剤</p>	<p>Z = O/S, R1,R2=アルキル, アリル, Y=H, NO2 以外 m= 3 以下の整数</p>

- ・ 進歩性が認められない場合

① 先行技術に比べて、顕著に優れた効果がない発明

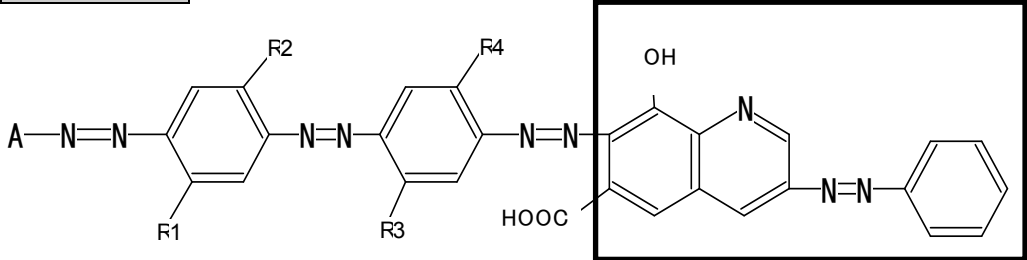
出願された特許（調査対象特許）
<p>R は炭素数 1-5 の低級アルキル基を表す。 ○疾患治療薬として有効であることを示す試験結果が明細書に記載されている。</p>
先行技術（引用特許）
<p>R1, R4=炭素数 1-4 のアルキル基, R2, R3=水素原子, 炭素数 1-4 のアルキル基, n は 2-4 を表す。 n=2, ○疾患治療薬として有効であることを示す試験結果が刊行物に記載されている。 n=3, -NHSO2R1 が p-NHSO2CH3 である具体的な化合物は記載されていない。</p>

進歩性

② 複数の先行技術の組み合わせによる進歩性の否定

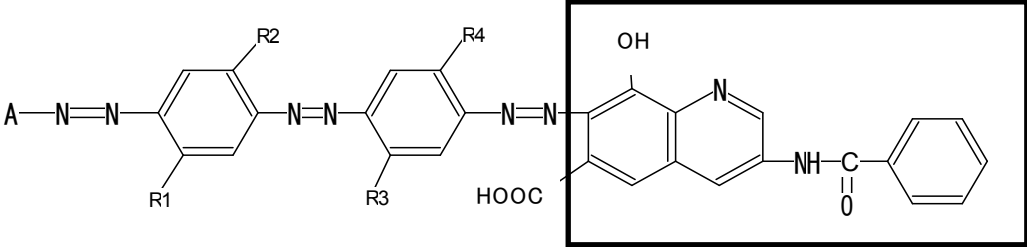
先行技術 1 のキノリン環の 3 位のベンゾイルアミノ基に「-N=N-フェニル」を導入したアゾ化合物は、先行技術 2 より簡単に思いつく。さらに請求項に係る化学物質発明には、先行技術 1 と比較して、予測しえない効果もない。

出願された特許 (調査対象特許)



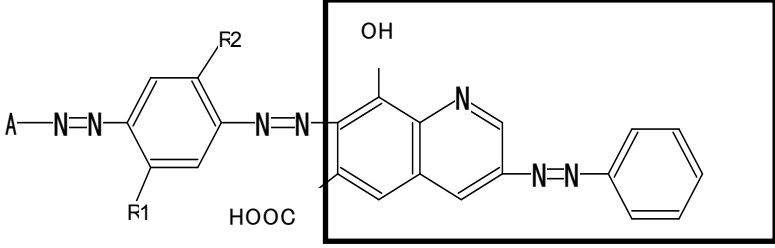
A=スルホン酸基を有するフェニル基, R1-R4=水素, 低級アルキル基, 低級アルコキシ基
このアゾ化合物は、偏光膜に使用される。
このアゾ化合物の製造例および偏光膜としての具体的な使用例が明細書に記載されている。

先行技術 1 (引用特許)



A=スルホン酸基を有するフェニル基, R1-R4=水素, 低級アルキル基, 低級アルコキシ基
このアゾ化合物は、偏光膜に使用される。このアゾ化合物の製造例および偏光膜としての具体的な使用例が刊行物に記載されている。

先行技術 2 (引用特許)



A=スルホン酸基を有するフェニル基, R1-R4=水素, 低級アルキル基, 低級アルコキシ基
このアゾ化合物は、偏光膜に使用される。製造例および偏光膜としての具体的な使用例が刊行物に記載されている。

注意) 新規性を否定しない刊行物、実施可能とはいええない化学物質であっても、進歩性を否定する根拠として引用される可能性はある。

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

請求項中の物質と CAS の索引物質との比較

■ 新規性・進歩性の判断対象となる化学物質発明は、「請求項に係る化学物質発明」である。

記載場所	特許の新規性・進歩性の判断となる化学物質の記載方法	CAS の索引方針により特許から索引される物質	
		CAplus/CA	MARPAT
請求項 (クレーム)	化学物質名	名称だけでも索引される	マルクーシュ構造式であれば索引する
	特定化学構造式	索引される	索引されない
	マルクーシュ構造式	特定できる物質は収録される。 <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 5px auto;">置換基の組み合わせが生じる場合、各化合物は収録されない</div>	索引される

↓
参考 1 参照

■ 新規性・進歩性の判断対象ではないが、「実施例」は、実施可能であることを示すだけでなく、進歩性のきわめて稀な効果等を証明するものとなる。

記載場所	特許の新規性・進歩性の判断となる化学物質の記載方法	CAS の索引方針により特許から索引される物質	
		CAplus/CA	MARPAT
実施例	化学物質名	索引される	重要な置換基が、マルクーシュ構造中に Example として収録されることがある。
	特定化学構造式	索引される	
	マルクーシュ構造式	索引されない	
実施例以外の発明の詳細な説明	請求項に記載された化学物質は、明細書に記載された物質の一部である	索引しない	発明の詳細な説明のマルクーシュ構造が請求項に比べて広い場合は、発明の詳細のマルクーシュ構造が収録される。 重要な置換基が、マルクーシュ構造中に Example として収録されることがある。

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

CAplus/CA ファイルの化学物質索引

■ CAplus/CA ファイルに、CAS 登録番号で索引されている物質

- ① 構造、分子式が明確な特定物質
- ② 構造が特定されていないが分子式が特定されている物質 (IDS 化合物)

■ CAplus/CA ファイルに、その物質の CAS 登録番号以外で索引されている物質

① 非特定誘導体

- ・ 反応生成物 (生成物が具体的に記載されていない場合、生成物を想定して索引しない)
例: ヒドロキノリンと炭酸タリウムとの反応生成物 (構造不明)
 - ・ 後処理ポリマー (エステル化, 塩, 一部のエーテル化を除く)
 - ・ 配位化合物 (構造, 分子式が特定できないもの)
例: チタンとキニンの錯体
 - ・ 一部の構造が不確かな化合物
例: 塩素化ポリエチレン, アルキルベンゼンスルホン酸, アミノ化ナフタレン
- * CA 索引名, CAS 登録番号+D, CAS 登録番号で索引されている。
年代によって、取り扱いが異なるため、検索には注意が必要である。

② 1971 年 (8CI) までは特定化学物質として索引していなかった物質

- テトクローム, 素粒子, 酵素, ガム, ホルモン, リグニン誘導体, 多糖類 (グルカン)
ある種の抗生物質, ある種のセルロース誘導体, ある種のポリマー, 特定のヘモグロビン
- * CAS 登録番号とともに、統制語で、CAplus/CA ファイルを検索する。



③ 索引見出し語などを用いて索引されるポリマー

- シリコーン, シロキサン (1993 年以前)
- 一部のゴム (汎用ゴム:1986 年以前), 一部の繊維 (汎用繊維:1986 年以前)
- 石油樹脂, クマロン-インデン樹脂, アセタール樹脂
- ポリマーブレンド (構成する各ポリマーごとに CAS 登録番号で索引)
- ポリマーアロイ (構成する各ポリマーごとに CAS 登録番号で索引)

* CAS 登録番号とともに、統制語で、CAplus/CA ファイルを検索する。

④ 構造、分子式が不明な物質 (UVCB 物質: Unknown or Variable Composition, Complex reaction Products and Biological Materials) (TSCA, EINECS 等の既存化学物質台帳や CAS 登録サービスなどによって特別に CAS 登録番号が付与された物質)

■ CAplus/CA ファイルに索引されない物質

- ・ 物性データの存在による判断
 - 実施例中で物性データが記載されていない化学物質  参考 2 参照
 - データ検証のための、既出の文献中から作成された物性リスト中の個々の物質
 - 計算物性値だけ記載されている物質（計算法の正当性を示すための一連の化学物質）
- ・ 反応の場合  参考 3 参照
 - 生成物・中間体は、収率、沸点や屈折率などの物性値、クロマトグラフや NMR スペクトルなどの解析データのいずれのデータもない場合索引されない。
 - 収率や物性データのない中間体、二次生成物・副生成物は、著者が強調していない限り索引されない。
 - 付加化合物やポリマーの合成に用いられる原料（モノマー）は索引されない（ポリマーとして索引）
 - ペプチドおよびタンパク質を合成するために用いられるアミノ酸や、ヌクレオシド/ヌクレオチドを合成するために用いられる核酸は特に著者が強調していない限り、索引されない。
 - エステル、アミド合成における一般的な反応物は索引されない。
- ・ マルクーシュ構造で組み合わせが生じる特定化学物質
- ・ 研究対象となっている化合物の分離や分析を助ける目的で作られる誘導体
- ・ 汎用物質（例：汎用な試薬、溶媒、触媒など）
- ・ 比較例、参考例として記載された物質

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

参考 1 - CAplus/CA ファイルの化学物質索引方針

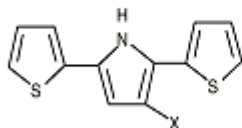
■ CAplus/CA ファイルの特許レコードに、索引される CAS 登録番号の基準と条件

注意) CAS の方針により CAS 登録番号が索引されない物質でも、無効資料を作成する際に重要であれば、それらの構造にも配慮した構造質問式を作成する必要がある。

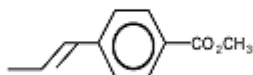
① 特許請求範囲から索引される特定物質に対する一般的な索引例

特許請求範囲からの抜粋

8. The compound



in which X is -CHO, -CH=CH-NO₂, -CH=CH-CO₂CH₃, -CHOHCH₂SO₃CH₃, -CHOH-CH₂-CO₂-t-C₄H₉, -CH=CH-(CH₂)₂-CO₂H.



-N(C₂H₅)₂, -NH(CH₂)₂-NHCOCF₃, -NH-(CH₂)₃-CO₂CH₃, -NH-C₆H₄-CO₂-CH₃, -(CH₂)₂-NHCOCF₃, -Br, -

CA に索引される物質

1. クレーム 8 で構造によって表記された 18 物質

- ・ 特許請求範囲にマルクーシュ構造で記載されている化学物質でも、明確に定義できる特定物質の場合は個々の化学物質が索引される。

特許請求範囲の記載

クレーム 1 : XCONRSCH₂CH₂SNRCOX (R=アルキル; X=ハロゲン, OH, アルコキシ)

クレーム 2 : クレーム 1 において X=F, R=Me

CA に索引される物質 クレーム 2 の物質

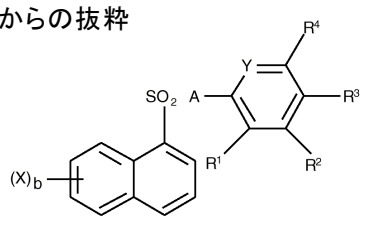
注) R1CH₂SO₂CR₂:CCIPh (R=H, Ph, p-tolyl, R₂=H, CH, CH₂CH)

のように、複数の可変基を持ち、その組み合わせが生じる場合には、すべての化学物質が索引されない (MARPAT ファイルで、検索できる)。

② 実施例から索引される hard data がある物質の例

- ・ 特許中に記載されている化学物質や概念のうち、新規性、改良点に関連するものや重要な事項(必ずしもクレームされている必要はない)に関連する化学物質が索引される。必要なデータなどの条件や基準は雑誌論文の場合と同じ。

実施例からの抜粋



【Point】

- ・ 特許明細書に記載されている表中の化学物質のうち、化合物 1, 2, 3, 4, 6, 9, 10 は、融点が記載されているため索引される。
- ・ 化学物質 5, 7, 8 は、これらに関するデータが記載されていないので索引されない。*1

Ex.	X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	Y	A	mp(°C)
1	2-Cl	H	CONH2	H	H	CH	NH	202-205
2	5-Cl	H	COHN2	H	H	CH	NH	257-259
3	4-Cl	CONH2	H	H	H	CH	NH	238-239
4	H	H	CONH2	H	H	CH	NH	182-185
5	3-Cl	H	CONH2	H	H	CH	NH	
6	4-Cl	H	CONH2	H	H	CH	NH	185-190
7	6-Cl	H	CONH2	H	H	CH	NH	
8	7-Cl	H	CONH2	H	H	CH	NH	
9	H	CONH2	H	H	H	CH	NH	255-256
10	2-Cl	CONH2	H	H	H	CH	NH	235-239

CA に索引される物質 1, 2, 3, 4, 6, 9, 10

*1 2007 年 12 月に特許の実施例に記載されている hard data の無い物質(「Prophetic 物質」)に関する索引基準が変更され、2011 年現在では、主要 9 ヶ国(カナダ、フランス、ドイツ、日本、ロシア、英国、米国、ヨーロッパ特許庁、世界知的所有権機構)から発行された特許がベーシック特許になる場合は、使用言語等に係わらず Prophetic 物質を索引するようになった。(参照:<http://www.cas.org/expertise/cascontent/prophetics.html>)

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

参考 3 - CAplus/CA ファイルの化学物質索引方針

③ 反応情報の索引例

- ・ 反応物と生成物が定義されている合成プロセスがクレームされている場合には、特定の反応物と生成物が索引される。
- ・ 反応物のみが特定されている場合に、反応物から生成物を推定して索引されることはない。例えば、反応物（モノマー）のリストのみが示されている場合、その組み合わせによって重合体生成物が索引されることはない。
- ・ 中間体は、それが特にクレームされているか、合成・単離・同定されている場合には索引されるが、存在が疑わしい中間体や、構造が確かではない中間体は索引されない。

Claims

1. A process for making a polyarylketone comprising polycondensing at least one aromatic monomer having at least two hydrogen atoms susceptible to electrophilic substitution with carbon dioxide in solution in the presence of an acid capable of activating the condensation reaction.

2. A process according to claim 1, in which said at least one monomer is selected from monomers having formula:-

H-Ar-H

wherein Ar is the divalent aromatic residue comprised of at least two phenylene units connected by linkages selected from a direct link, -O-, -S-, -CO-, -SO₂- or -CR₂- where R is hydrogen, C₁ to C₄ alkyl, phenyl or the two groups R (which otherwise may be the same or different) are joined externally to form a cycloaliphatic ring, are present or of polynuclear aromatic units either alone or with like units and/or phenylene units linked as aforesaid.

3. A process according to claim 1 or claim 2, in which said at least one monomer is selected such that the ratio of -SO₂- linkages to -CO-linkages between aromatic moieties is not more than 1:5, preferably not more than 1:10.

4. A process according to any one of the preceding claims, in which said at least one monomer is selected from:-

diphenylether

4,4'-diphenoxybenzophenone

4,4'-diphenoxydiphenylsulfone

dibenzofuran

1,4-bis(4-phenoxybenzoyl)benzene;

and their thioether equivalents; and

biphenyl

1,2-, 1,3- or, preferably, 1,4-diphenylbenzene

naphthalene

anthracene

phenanthrene or:-

Ph-CR₂-Ph

wherein Ph is 1,4-phenylene and CR₂ is as herein before defined, R preferably being -C(CH₃)₂-.

共重合可能な単量体がリストされているだけの場合には、特定の単量体も、仮定できる生成物も索引されない。

CA に索引される物質 : なし

特許からの抜粋

According to the present invention there is provided a process for the preparation of a compound of the formula CF₃CHFOCHF₂ comprising reacting a starting compound of the formula CF₃CHClOCHF₂ with hydrogen fluoride in the presence of an effective amount of catalyst comprising antimony pentachloride.

⋮

Hydrogen fluoride and antimony pentachloride react to form a mixed antimony fluorochloride *in situ* which catalyses the reaction according to the invention. Such a mixed catalyst would be likewise useable in the present invention. For reasons of economy, and ease of preparation it is preferred to utilize pure antimony pentachloride and form the mixed catalyst *in situ*.

CA に索引される物質

1. antimony pentachloride
2. hydrogen fluoride
3. CF₃CHClOCHF₂
4. CF₃CHFOCHF₂

反応の途中で触媒の役割をしているアンチモンフッ化塩化物の混合物 (mixed antimony fluorochloride) はクレームされておらず、また単離もされていないため索引されない。

無効資料調査のポイント

■ 調査の流れ

前準備：特許明細書の取り寄せと内容の確認

- ・ 無効資料調査は、網羅性よりも適合率が重要である。そのため、引例が得られた時点で、調査は完了する。

① 対応特許の審査状況（対応特許の出願状況と法的状況）の調査

- －INPADOC ファイル他、法的状況データ収録ファイル
- －CAplus/CA, WPINDEX/WPIDS/WPIX ファイル

② 引用特許・文献の調査

－審査官引用情報

DPCI ファイル（著者引用も一部収録）、CAplus/CA ファイル、その他の引用情報を収録しているファイル

－PCT 出願、EP 特許の審査官の判断（審査官カテゴリコード）

DPCI ファイル

③ 物質調査

－特定物質の検索（CAS 登録番号等）

無効にしたい出願のレコードに索引されている物質（CAS 登録番号）を収録している別の特許文献を検索する。

－類似物質の検索（構造検索、環データ、分子式関連検索フィールド、キーワード等

a. CAplus/CA, MARPAT ファイルの索引をチェックする。

CAS FILES の索引の特徴を知る。（ただし、CAplus/CA, MARPAT ファイルの索引は、ベーシック特許により索引しているため、特許内容が異なる場合もあるので注意する。）

- －CAplus/CA に索引されている物質の置換基が異なる部分をチェックする。
- －IDS 化合物、D 付きの存在をチェックする。
- －CAS ロールやテキスト説明句をチェックする。（絞りこみに利用する）。
- －マルクーシュ構造が存在する場合には、MARPAT ファイルで索引されている G グループの中で一番広い定義の置換基を検討する。

b. 構造検索の場合、構造質問式を何パターンが作成し、サンプル検索（無料）と

無料の SCAN 表示形式を利用して最終的な構造質問式を決定する。

サブセット検索用の構造質問式および絞りこみ検索用の検索語、調査期間等の検索式も用意する。

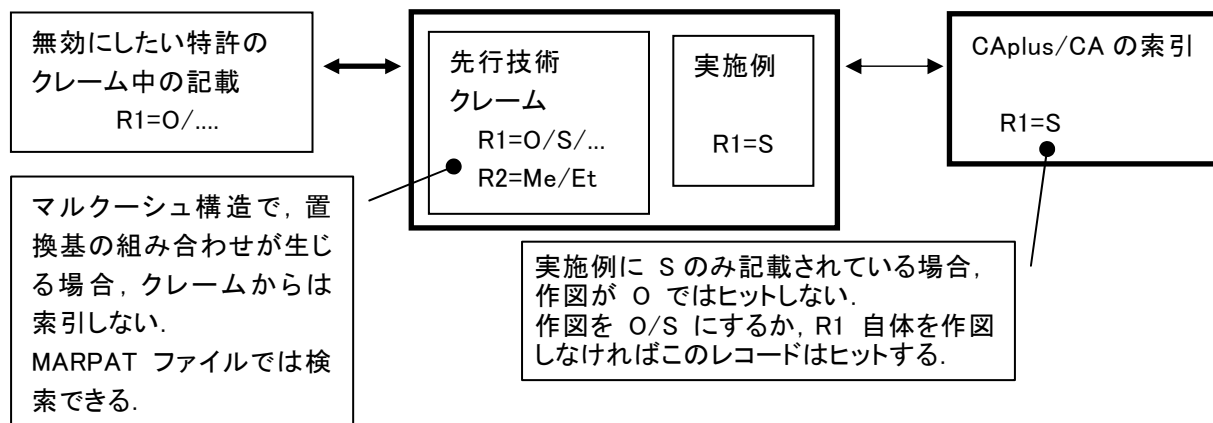
④ 出願人調査（出願人の特許包囲網を検討する）。

－出願人、発明者を限定して検索し、類似特許の審査状況および類似特許・文献の引用情報をチェックする。

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

無効資料調査における構造検索のポイント

■ CAplus/CA の化合物の索引の特徴を理解した上で作図をする。



構造作図をどの程度広げるかがポイントである。

- 置換基の一般化（上位概念をどこまで広げるか）
 - 同族を含める O → S/O Me → AK Cl → F/Cl → X
- 置換基の数の限定
 - 置換基数を限定しない DINITRO → NITRO
 - 置換基を作図しない
- 結合の一般化と削除
 - 一般的な置換基を間に含む場合 一般的な部分構造を削除し、特徴のある構造のみを作図する。
 - IDS 化合物を含めた検索 飽和、不飽和が明確ではない IDS 物質を検索するためには、不定の結合にする。置換基位置が明確ではない IDS 物質を検索する場合には、結合を作図しない。
- 構造の分割（進歩性について検討するため）

例 無効にしたい出願	X-P-A	除草剤として使用（先行技術 1,2 より進歩性なし）
先行技術 1	X-P-B	除草剤として使用
先行技術 2	Y-P-A	除草剤として使用

X-P と P-A を別々に作図して、構造検索する

参考：補助引例（置換容易性を示す補助引例を検索する）。

作用効果や技術分野等が同じまたは相当の関連性のある文献中で、出願されている物質の置換基と同様に扱われている置換基を検索する。同一のマルクーシュ構造に、ともに含有してしている特許の検索には MARPAT ファイルが有効である。

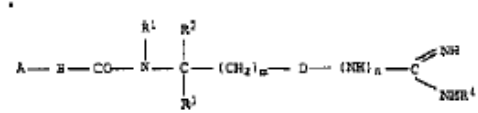
- | | | |
|------------|---------|----------------------------|
| 例 無効にしたい出願 | X-P-A | 除草剤として使用（先行技術 1,2 より進歩性なし） |
| 先行技術 1 | X-P-B | 除草剤として使用 |
| 先行技術 2 | X-P-A/B | 除草剤として使用 |

● ———— 補助引例

検索例 1 : 新規性調査

■ 検索例 1 : 下記の特許は、拒絶理由通知書が発行されたものである。

- ・ この特許の拒絶理由となった引用を、どのようにして得ることができるかを検証する。

(19) 日本国特許庁 (JP)	(12) 公表特許公報 (A)	(11) 特許出願公表番号 特表平10-501541
		(43) 公表日 平成10年(1998)2月10日
(51) Int.Cl. ⁸ C 0 7 D 207/16 A 6 1 K 31/40 38/55 C 0 7 K 5/06	識別記号 ACB	庁内整理番号 9638-4C 9454-4C
		FI C 0 7 D 207/16 A 6 1 K 31/40
(21) 出願番号 (86) (22) 出願日 (85) 翻訳文提出日 (86) 国際出願番号 (87) 国際公開番号 (87) 国際公開日 (31) 優先権主張番号 (32) 優先日 (33) 優先権主張国	特願平8-5015 平成7年(1995) 平成8年(1996) PCT/EP WO95/3 平成7年(1995) P44210 1994年6月17日 ドイツ (DE)	(54) 【発明の名称】 新規のトロンビン阻害剤、その製造方法及び使用 (57) 【要約】 式：  【式中の置換基は、明細書の中に記載されたものである】で示される化合物、その生理学的に認容される酸との塩及びその立体異性体を開示する。また、これらの製造のための中間体を記載する。該化合物は、疾病を治療するために好適である。

【発明の詳細な説明】

新規のトロンビン阻害剤、その製造方法及び使用 本発明は、新規のトロンビン阻害剤、その製造方法及び疾患の治療のための使用に関する。

トロンビンは、血清蛋白の族に属しかつ末端酵素として血液凝結カスケードにおける中心的部位の役割を演じる。内因性及び外因性凝固カスケードの両者は、数種の増幅段階を介して、プロトロンビンからのトロンビンの生産を惹起する。次いで、フィブリノゲンのフィブリゲンへのトロンビン触媒開裂は血液凝固及び血小板凝結を開始し、該凝結は一方血小板因子3及び凝結因子XIII 並びに高活性メディエータの全系列の結合によりトロンビン形成を強化する。

トロンビンの形成及び効果は、白色の動脈トロンビン並びにまた赤色の静脈トロンビンの両者の産生における中心的現象であり、従って医薬の効能的に有効な攻撃の作用点である。トロンビン阻害剤は、ヘパリンと異なり、補助因子に依存せず同時に凝結カスケードにおける並びにまた血小板に対するトロンビンの作用を完全に抑制する。これらは急性期における経皮の透管腔性の冠状血管形成(PTCA)及びリリース後の血栓塞栓症を阻止しかつ体外循環(心肺機械、血液透析)における抗凝結薬として利用することができる。

これらはまた一般的に例えば外科手術的介入後の血栓症予防のためにも利用することができる。

(略)

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 1 : 新規性調査

■ 拒絶理由通知書 (一部)

<p>拒絶理由通知書</p> <p>特許出願の番号 平成 8 年 特許 起案日 平成 18 年 8 月 特許庁審査官 今村 玲英子 特許出願人代理人 矢野 敏雄 (外 適用条文 第 29 条第 1 項、 第 36 条</p> <p>この出願は、次の理由によって拒絶をすべきものである。この通知書の発送の日から 3 か月以内は</p>	<p style="text-align: right;">P.5</p> <p style="text-align: center;">引用文献等一覧</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Voigt B., Synthesis of N_{α}-(arylsulfonyl)-4-amidinophenylalanylprolines and N_{α}-(arylsulfonylglycyl)-4-amidinophenylalanylprolines and their testing as inhibitors of serine proteases. Part 33 Synthetic inhibitors of serine proteases, Pharmazie, 1988, Vol.43, No.6, p.412-414 2. Voigt B., Synthesis of N_{α}-(arylsulfonylglycylglycyl)-4-amidinophenylalanine amides as thrombin inhibitors, Pharmazie, 1984, Vol.39, No.6, p.379-381 3. Voigt B., Synthesis of N_{α}-(benzoylglycyl)- and N_{α}-(benzyloxycarbonylglycyl)-4-amidinophenylalanine as thrombin inhibitors, Pharmazie, 1985, Vol.40, No.8, p.527-529 4. Sturzebecher J., Synthetic inhibitors of bovine factor Xa and thrombin: Comparison of their anticoagulant efficiency, Thrombosis Research, 1989, Vol.54, No.3, p.245-252 5. 特開平 3-86852 号公報 6. 特願平 7-501665 号 (国際公開第 94/29336 号、特表平 3-511018 号) 7. 特願平 5-301535 号 (特開平 6-211894 号) 8. 特願平 7-523007 号 (国際公開第 95/23609 号、特表平 9-509937 号) 9. 特願平 7-89222 号 (特開平 7-252217 号)
<p>理由 1 について</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 請求項 1、2 ・ 引用文献等 1-4 ・ 備考 <p>引用文献 1 には、第 413 頁 Table1 において、上から 2、4、6、8、11、13 番目の化合物が記載されている。 引用文献 2 には、化合物 52、56、60 (第 379 頁) が記載されている。 引用文献 3 には、化合物 34 が記載されている (第 527 頁)。 引用文献 4 には、第 248 頁 Table3 の化合物 (12 個すべて) が記載されている。</p> <p>本願の請求項 1、2 に係る発明は、引用文献 1-4 に記載された発明である。</p> <p>理由 2 について</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 請求項 1、2 ・ 引用文献等 1-5 ・ 備考 <p>上記引用文献 1-4 に記載の化合物は、すべてトロンビン阻害作用を有するものとして開示されているものである。 また、引用文献 5 には、具体的開示ではないが、Phe-Pro-NHCH(J-1)-C₇F₅-Ac-Ala-NHCH(J-1)-C₇F₅ (J-1 については特許請求の範囲 1 参照) がトロンビン阻害作用を有する化合物として記載されている。</p>	<p style="text-align: center;">各引用文献の CA 抄録番号</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 110:95774 2. 102:25017 3. 105:97888 4. 111:70318 5. 115:115112 (JP03086852) 6. 122:285553 (JP08511018) 7. 122:240445 (JP06211894) 8. 128:217644, 128:128289, 128:128286, 124:87791 (JP09509937) 9. 124:56705 (JP07252217)
<p>してみると、これら引用文献 1-5 に記換基を適宜組み合わせることは当業者が容奏する効果についても格別顕著なものと</p> <p>理由 3 について</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 請求項 1-3 ・ 引用文献等 6-9 ・ 備考 <p>出願 6 の当初明細書には、実施例 1-6、25、26、29、31-35、39、4 が記載されている。</p>	<p style="text-align: right;">P.3</p> <p>出願 7 の当初明細書には、実施例 30-32、34、35、49-53 の化合物が記載されている。 出願 8 の当初明細書には、実施例 15、16、18、19、25、28、29、32、33、38-41、46、48、51、52、56、57、64、66、67、69、71、72、85、86 の化合物が記載されている。 出願 9 の当初明細書には、実施例 16、17、21-24、26、27、29-37、40-45、47、74、88-94、96-101 が記載されている。</p> <p>本願の請求項 1、2 に係る発明は出願 6-9 の当初明細書に記載の発明と同一である。</p> <p>出願 9 の当初明細書には、4-シアノー [(S)-プロリル] アミノメチルベンゼン塩酸塩 (実施例 1 【0156】)、トランス-4-(S)-プロリルアミノメチル-シクロヘキシルニトリル (実施例 15 【0181】) が記載されている。</p> <p>本願の請求項 3 に係る発明は出願 9 の当初明細書に記載の発明と同一である。</p>

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 1 : 新規性調査

- 調査 (拒絶理由になった引例を, 検索式によってどの程度, ヒットさせることができるかを検証する)

① 対応特許情報と法的状況データの確認

=> FILE INPADOC

=> S JP10501541/PN

L1 1 JP10501541/PN

=> D FFAM

L1 ANSWER 1 OF 1 INPADOC COPYRIGHT 2006 EPO on STN

MEMBER 1

LEVEL 1

AN 206038049 INPADOC ED 20030602 EW 200322 UP 20030722 UW 200329
TI NEUE THROMBININHIBITOREN, IHRE HERSTELLUNG UND VERWENDUNG.
IN BOEHM, HANS-JOACHIM; KOSER, STEFAN; MACK, HELMUT; PFEIFFER, THOMAS;
:

MEMBER 7

LEVEL 1

AN 27576002 INPADOC UP 20031014 UW 200341
TI Neue Thrombininhibitoren, ihre Herstellung und Verwendung.
IN BOEHM, HANS-JOACHIM, DR., 67117 LIMBURGERHOF, DE; KOSER, STEFAN, DR.,
:
INS BOEHM HANS-JOACHIM DR; KOSER STEFAN DR; MACK HELMUT DR; PFEIFFER THOMAS
DR; SEITZ WERNER DR; HOFFKEN HANS WOLFGANG DR; HORNBERGER WILFRIED DR
INA DE; DE; DE; DE; DE; DE; DE
PA BASF AG, 67063 LUDWIGSHAFEN, DE
PAS BASF AG
PAA DE
DT Patent
PIT DE A1 DOCUMENT LAID OPEN (FIRST PUBLICATION)
PI **DE 4421052** A1 19951221
AI DE 1994-4421052 A 19940617
PRAI DE 1994-4421052 A 19940617 (EDPR 19990317)
ICM (6) C07K005-00
:

LEGAL STATUS

AN 27576002 INPADOC
19960328 DE8181 INVENTOR (NEW SITUATION)
BOEHM, HANS-JOACHIM, DR., 67117 LIMBURGERHOF, DE KOSER,
STEFAN, DR., 67063 LUDWIGSHAFEN, DE MACK, HELMUT, DR.,
67067 LUDWIGSHAFEN, DE PFEIFFER, THOMAS, DR., 67459
BOEHL-IGGELHEIM, DE SEITZ, WERNER, DR., 68723 PLANKSTADT,
DE HOFFKEN, HANS WOLFGANG, DR., 67069 LUDWIGSHAFEN, DE
HOEFFKEN, HANS WOLFGANG, DR., 67069 LUDWIGSHAFEN, DE
HORNBERGER, WILFRIED, DR., 67434 NEUSTADT, DE ZIERKE,
THOMAS, DR., 67459 BOEHL-IGGELHEIM, DE
19960926 DE8130 - **WITHDRAWAL** ← 取り下げ

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 1 : 新規性調査

MEMBER 10

LEVEL 2

AN 14658499 INPADOC ED 20030423 EW 200316 UP 20030423 UW 200316
 TI NEW THROMBIN INHIBITORS, THEIR PREPARATION AND USE.
 IN BOEHM, HANS-JOACHIM; KOSER, STEFAN; MACK, HELMUT; PFEIFFER, THOMAS;
 SEITZ, WERNER; HOFFKEN, HANS, WOLFGANG; HORNBERGER, WILFRIED
 INS BOEHM HANS-JOACHIM; KOSER STEFAN; MACK HELMUT; PFEIFFER THOMAS; SEITZ
 WERNER; HOFFKEN HANS WOLFGANG; HORNBERGER WILFRIED
 INA DE; DE; DE; DE; DE; DE; DE
 PA BASF AKTIENGESELLSCHAFT
 PAS BASF AG
 PAA DE
 TL English; French; German
 LA German
 DT Patent
 PIT EPB1 PATENT
 PI **EP 773955** **B1** 20030416
 DS R: AT BE CH DE DK ES FR GB GR IE IT LI LU NL PT SE
 AI EP 1995-923231 A 19950606
 PRAI DE 1994-4421052 A 19940617 (EDPR 19990317)
 WO 1995-EP2135 W 19950606 (EDPR 19990317)

LEGAL STATUS

AN 14658499 INPADOC
 19970521 EPAK + DESIGNATED CONTRACTING STATES:
 EP A1
 AT BE CH DE DK ES FR GB GR IE IT LI LU NL PT SE
 19970521 EP17P + REQUEST FOR EXAMINATION FILED
 19961213
 19971029 EP17Q + FIRST EXAMINATION REPORT
 19970912
 20030416 EPAK + DESIGNATED CONTRACTING STATES:
 AT BE CH DE DK ES FR GB GR IE IT LI LU NL PT SE
 20030416 EPREG REFERENCE TO A NATIONAL CODE
 GBFG4D + GB: EUROPEAN PATENT GRANTED
 NOT ENGLISH
 20030929
 20030430 EPREG REFERENCE TO A NATIONAL CODE
 CHEP + CH: ENTRY IN THE NATIONAL PHASE
 20030430 EPREG REFERENCE TO A NATIONAL CODE
 CHNV CH: NEW AGENT
 SCHMAUDER & PARTNER AG PATENTANWALTSBUERO
 20030507 EPRAP2 PATENT OWNER REASSIGNMENT (CORRECTION)
 ABBOTT GMBH & CO. KG
 20030522 EPREF CORRESPONDS TO:
 DE 59510645 P 20030522
 20030528 EPREG REFERENCE TO A NATIONAL CODE
 IIEFG4D + IE: EUROPEAN PATENTS GRANTED DESIGNATING IRELAND
 GERMAN
 20030923
 20030618 EPGBT + GB: TRANSLATION OF EP PATENT FILED (GB SECTION
 77(6) (A)/1977)
 20031014

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 1 : 新規性調査

20030701 EPNLT2 NL: MODIFICATIONS (OF NAMES), TAKEN FROM THE EUROPEAN
PATENT PATENT BULLETIN
ABBOTT GMBH & CO. KG
20030728 EPREG EPREG REFERENCE TO A NATIONAL CODE
DKT3 + DK: TRANSLATION OF EP PATENT
..... 20030905
20030930 EPREG EPREG REFERENCE TO A NATIONAL CODE
PTSC4A + PT: TRANSLATION IS AVAILABLE
AVAILABILITY OF NATIONAL TRANSLATION
PT: 20030716
..... 20050506
20040101 EPREG EPREG REFERENCE TO A NATIONAL CODE
ESFG2A ES: DEFINITIVE PROTECTION
ES 2197200 T3
..... 20040206
20040220 EPET + FR: TRANSLATION FILED
..... 20040308
20040303 EP26 - OPPOSITION FILED
ASTRA ZENECA AB
20040113
..... 20040308
20040503 EPNLR1 - NL: OPPOSITION HAS BEEN FILED WITH THE EPO
ASTRA ZENECA AB
..... 20040623
20060823 EPGBPR - GB: PATENT REVOKED UNDER ART. 102 OF THE EP CONVENTION
DESIGNATING THE UK AS CONTRACTING STATE
20060420
..... 20060831
20060823 EP27W - REVOKED ← 取り消し
20060420
..... 20060824
20060831 EPREG EPREG REFERENCE TO A NATIONAL CODE
CHPL - CH: PATENT CEASED
..... 20060907

MEMBER 16

LEVEL 1

AN 158296549 INPADOC ED 20011001 EW 200139 UP 20011001 UW 200139
DT Patent
PIT JPT2 PUBL. UNEXAM. PAT. APPL. BASED ON INTERNAT. APPL.
PI JP 10501541 T2 19980210
AI JP 1996-501568 A 19950606
PRAI DE 1994-4421052 A 19940617 (EDPR 19990317)
WO 1995-EP2135 W 19950606 (EDPR 19990317)
ICS (6) C07K005-06; (6) A61K038-55; (6) A61K031-40
ICM (6) C07D207-16
IPCR A61K0038-00 [N, A]; A61K0047-48 [I, A]; C07D0205-04 [I, A]; C07D0207-16
[I, A]; C07D0207-48 [I, A]; C07D0211-60 [I, A]; C07K0005-06 [I, A];
C07K0005-065 [I, A]; C07K0005-072 [I, A]; C07K0005-078 [I, A]
A61K0038-00 [N, C*]; A61K0047-48 [I, C*]; C07D0205-00 [I, C*]; C07D0207-00
[I, C*]; C07D0211-00 [I, C*]; C07K0005-00 [I, C*]
:

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 1 : 新規性調査

② この特許の引用文献調査 -DPCI ファイルで引用情報および審査官カテゴリーコードを確認

=> FILE DPCI

=> S JP10501541/PN
L1 1 S JP10501541/PN

=> D GDP

L1 ANSWER 1 OF 1 DPCI COPYRIGHT 2006 THE THOMS

GDP CITED PATENTS UPD: 20041126

カテゴリーコード

- X - 単独で、発明の新規性または進歩性がないと考えられるもの。
- Y- 発明の組み合わせによって進歩性がないと考えられるもの。
- P- 国際出願目前で、優先権主張の基礎となる出願日の後に公表された文献

CITING PATENT	BY CAT	CITED PATENT	A
DE 4421052	A1 In In	DE 3108810 EP 118280	A 1981-58785D /33 GYOG A 1984-226754 /37 THRO-N
JP10501541 の対応特許	A	Ex X EP 513543	A 1992-383182 /47 BEHW
		Ex X EP 601459	A 1994-184894 /23 KIMB-I
WO 9535309	A1	Ex X WO 9208709	A 1992-200114 /24 PENT-N
		Ex WO 9429336	A 1995-036397 /05 ASTR
	Ex X	EP 513543	A 1992-383182 /47 BEHW
	Ex X	EP 601459	A 1994-184894 /23 BRIM
	Ex X	WO 9208709	A 1992-200114 /24 PENT-N
	Ex PX	WO 9429336	A 1995-036397 /05 ASTR

REN LITERATURE CITATIONS UPR: 20041126

5. 115:115112 (JP03086852)
の対応特許

CITING PATENT	BY CAT	CITED LITERATURE
WO 9535309	A1 Ex X	PHARMAZIE, vol.43, no.11, Nov 1. 110:95774 BERLIN DD pages 782 - 783 J S AL. "Synthetische Inhibitoren der Serinprotease"
WO 9535309	A1 Ex X	PHARMAZIE, vol.43, no.6, June 1988, BERLIN DD pages 412 - 414 B VOIGT ET AL. "Sythese von N-alpha(Arylsulphonyl)-4-amidino-phenylalanyl-prolinen und von N-alpha-(Arylsulphonyl)-4-amidino-phenylalanyl-prolinen und deren Prufung als Inhibitoren von Serinproteinasen"
WO 9535309	A1 Ex X	PHARMAZIE, vol.39, no.5, May 1984, BERLIN DD pages 315 - 317 G WAGNER ET AL N-alpha-(Tosyl-Beta-alanyl-) (Tosyl-epsilon-aminocaproyl) inamiden als stark wirksame Thrombininhibitoren
WO 9535309	A1 Ex X	PHARMAZIE, vol.39, no.6, June 1984, BERLIN DD pages 379 - 381 B VOIGT & G WAGNER "Synthese von N-alpha-(arylsulphonyl)-4-amidinophenylalanin amiden als Thrombininhibitoren"
WO 9535309	A1 Ex X	PHARMAZIE, vol.40, no.8, August 1985, BERLIN DD pages 527 - 529 B VOIGT & G WAGNER "Synthese von N-alpha-(Benzoylglycyl) und N-alpha-(benzyloxycarbonylglycyl)-4-amidinophenylalaninamiden als Thrombininhibitoren"

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 1 : 新規性調査

③ この特許に索引されている物質 (CAS 登録番号) が, 索引されている先行技術文献の調査

=> FILE CAPLUS
=> S JP10501541/PN
L1 1 S JP10501541/PN

=> SEL L1 RN
E1 THROUGH E35 ASSIGNED

=> FILE REGISTRY

=> S E1-E35
L2 35 S E1-E35

=> FILE HCAPLUS

=> S L2
L3 27153 L2

=> S L2 AND (AD<=19950606 OR PRD<=19940617 OR PY<=1995)

L4 14301 L2 AND (AD<=19950606 OR PRD<=19940617 OR PY<=1995)

=> FILE REGISTRY

=> S L2 AND 1-80/REF. CAPLUS
52443336 1-80/REF. CAPLUS
L5 27 L2 AND 1-80/REF. CAPLUS

=> FILE HCAPLUS

=> S L5 AND (AD<=19950606 OR PRD<=19940617 OR PY<=1995)

L6 114 L5 AND (AD<=19950606 OR PRD<=19940617 OR PY<=1995)

=> S L6 AND (?THROMB?(S)?INHIBIT? OR ANTITHROMB? OR ANTI THROMB?)

L7 52 L14 AND (?THROMB?(S)?INHIBIT? OR ANTITHROMB? OR ANTI THROMB?)

検証:

L3, L4 11 ヒット 1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 9
ヒットしなかった回答 5

L6, L7 5 ヒット 7, 8, 9
ヒットしなかった回答 1, 2, 3, 4, 5, 6

期間を限定する

特許 AD (出願日),

PRD (優先権主張日)

文献 PY (出願年)

(AD, PRD が収録されていない場合
も考えて利用する.)

/REF.CAPLUS は, CAplus ファイルの文献数を限定する
検索フィールドであるが, 新規物質の場合, 文献数が多い
と考えられるため, 新規性調査には有効である.

進歩性も検討する場合には, 作用, 薬効, 症例などのキーワードで
絞りこむが, 新規性調査の場合, 必ずしも, 同じ研究に索引されて
いるとは限らないため絞りこみには, 注意する.

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 1 : 新規性調査

④ この特許中の物質と類似した物質を索引している文献・特許を検索（構造検索）

=> FILE CAPLUS ← *Caplus* ファイルに入る

=> S JP10501541/PN
L1 1 S JP10501541/PN

=> D L1 STD ABS IND

L1 ANSWER 1 OF 1 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
AN 1996:167600 CAPLUS [Full-text](#)
DN 124:233168
TI Preparation and use of novel thrombin-inhibiting peptide analogs
IN Boehn, Hans-Joachim; Koser, Stefan; Mack, Helmut; Pfeiffer, Thomas;
Seitz, Werner; Hoeffken, Hans Wolfgang; Hornberger, Wilfried
PA BASF A.-G., Germany
SO Ger. Offen., 28 pp.
CODEN: GWXXBX
DT Patent
LA German
FAN. CNT 1

特許が成立（登録）している国が多い。

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	<u>DE 4421052</u>	A1	19951221	<u>DE 1994-4421052</u>	19940617
	<u>CA 2193133</u>	AA	19951228	<u>CA 1995-2193133</u>	19950606
	<u>WO 9535309</u>	A1	19951228	<u>WO 1995-EP2135</u>	19950606
	W: AU, BG, BR, BY, CA, CN, CZ, FI, HU, JP, KR, KZ, MX, NO, NZ, PL, RU, SG, SI, SK, UA, US				
	RW: AT, BE, CH, DE, DK, ES, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE				
	<u>AU 9527875</u>	A1	19960115	<u>AU 1995-27875</u>	19950606
	<u>AU 699501</u>	B2	19981203		
	<u>EP 773955</u>	A1	19970521	<u>EP 1995-923231</u>	19950606
	<u>EP 773955</u>	B1	20030416		
	R: AT, BE, CH, DE, DK, ES, FR, GB, GR, IE, IT, LI, LU, NL, PT, SE				
	<u>BR 9508057</u>	A	19970812	<u>BR 1995-8057</u>	19950606
	<u>JP 10501541</u>	T2	19980210	<u>JP 1996-501568</u>	19950606
	<u>HU 78040</u>	A2	19990628	<u>HU 1996-3474</u>	19950606
	<u>PL 181405</u>	B1	20010731	<u>PL 1995-317989</u>	19950606
	<u>RU 2172741</u>	C2	20010827	<u>RU 1997-100941</u>	19950606
	<u>AT 237631</u>	E	20030515	<u>AT 1995-923231</u>	19950606
	<u>PT 773955</u>	T	20030930	<u>PT 1995-923231</u>	19950606
	<u>ES 2197200</u>	T3	20040101	<u>ES 1995-923231</u>	19950606
	<u>CZ 293426</u>	B6	20040414	<u>CZ 1996-3713</u>	19950606
	<u>IL 114127</u>	A1	20011125	<u>IL 1995-114127</u>	19950613
	<u>HR 950338</u>	B1	20051031	<u>HR 1995-950338</u>	19950614
	<u>ZA 9504972</u>	A	19961217	<u>ZA 1995-4972</u>	19950615
	<u>TW 458986</u>	B	20011011	<u>TW 1995-84106192</u>	19950616
	<u>FI 9605039</u>	A	19970214	<u>FI 1996-5039</u>	19961216
	<u>NO 9605412</u>	A	19970214	<u>NO 1996-5412</u>	19961216
	<u>US 6455671</u>	B1	20020924	<u>US 1996-682604</u>	19961216
	<u>US 2003004308</u>	A1	20030102	<u>US 2002-133384</u>	20020429
	<u>US 2006111553</u>	A1	20060525	<u>US 2004-973643</u>	20041025

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 1 : 新規性調査

CLASS
 PATENT NO. CLASS PATENT FAMILY CLASSIFICATION CODES

 DE 4421052 ICM C07K005-00
 ICS A61K038-05; C12N009-99; C12N009-74; C07D205-04;
 :
 OS MARPAT 124:233168
 AB Peptide analogs ABC(O)NR1CR2R3(CH2)mD(NH)nC(:NH)NHR4 [A = α -aminoacyl, aromatic
 :
 IC ICM C07K005-00
 ICS A61K038-05; C12N009-99; C12N009-74; C07D205-04; C07D207-16;
 C07D211-60
 CC 34-3 (Amino Acids, Peptides, and Proteins)
 Section cross-reference(s): 1
 ST peptide analog thrombin inhibitor prepn
 IT Anticoagulants and Antithrombotics
 (preparation of novel thrombin-inhibiting p
 IT Peptides, preparation
 RL: BAC (Biological activity or effector, except adverse); BSU (Biological study, unclassified); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)
 (analog, preparation of novel thrombin-inhibiting peptide analogs)

索引されてる物質は、ドイツに出願された公開特許に記載されている物質

CAS の索引は、ベーシック特許を基に索引されている。公報によって明細書中の記載は異なるので、注意が必要である。

IT **174490-96-1P 174490-97-2P 174490-98-3P 174490-99-4P 174491-00-0P 174491-01-1P**
 RL: BAC (Biological activity or effector, except adverse); BSU (Biological study, unclassified); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); **PREP** (Preparation); **USES** (Uses)
 (preparation of novel thrombin-inhibiting peptide analogs)

トロンビン阻害剤として利用

IT **2133-40-6**, L-Proline methyl ester hydrochloride **2577-48-2**, L-Proline methyl ester **3392-10-7 6066-82-6**, N-Hydroxysuccinimide **10172-89-1**, N-Acetyl-D-phenylalanine **10406-25-4**, p-Cyanobenzylamine **17201-43-3**, 4-Cyanobenzyl bromide **26588-36-3**, Naphthalenesulfonyl chloride **34403-48-0 38675-10-4 114526-00-0 132224-93-2 148980-29-4 174491-10-2**
 RL: **RCT** (Reactant); **RACT** (Reactant or reagent)
 (preparation of novel thrombin-inhibiting peptide analogs)

反応物

IT **15996-76-6P**, 4-Cyanobenzylamine hydrochloride **171846-09-6P 172348-68-4P 174491-04-4P 174491-05-5P 174491-06-6P 174491-07-7P 174491-08-8P 174491-09-9P 174661-67-7P 174661-68-8P**
 RL: **RCT** (Reactant); **SPN** (Synthetic preparation); **PREP** (Preparation); **RACT** (Reactant or reagent)
 (preparation of novel thrombin-inhibiting peptide analogs)

中間体

IT **174491-02-2P 174491-03-3P 174661-66-6P**
 RL: **SPN** (Synthetic preparation); **PREP** (Preparation)
 (preparation of novel thrombin-inhibiting peptide analogs)

生成物

IT **9002-04-4**, Thrombin
 RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study) (**inhibitors**; preparation of novel thrombin-inhibiting peptide analogs)

トロンビン

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 1 : 新規性調査

=> SEL L1 RN

=> FILE REGISTRY

E1 THROUGH E35 ASSIGNED

=> S E1-E35

L2 35 S E1-E35

=> FILE CAPLUS

=> S L1 AND L2

L3 1 S L1 AND L2

=> D HITSTR

L3 ANSWER 1 OF 1 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN

:

RN 9002-04-4 CAPLUS

CN Thrombin (8CI, 9CI) (CA INDEX NAME)

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***

IT **174490-96-1P 174490-97-2P 174490-98-3P**

174490-99-4P 174491-00-0P 174491-01-1P

RL: BAC (Biological activity or effector, except adverse); BSU

(Biological study, unclassified); SPN (Synthetic preparation); THU

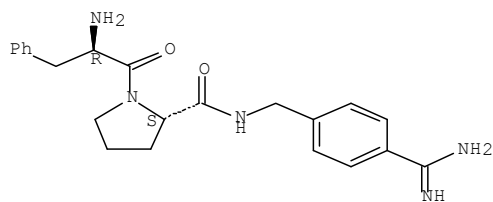
(Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)

(preparation of novel thrombin-inhibiting peptide analogs)

RN 174490-96-1 CAPLUS

CN L-Prolinamide, D-phenylalanyl-N-[[4-(aminoiminomethyl)phenyl]methyl]-, dihydrochloride (9CI) (CA INDEX NAME)

Absolute stereochemistry.

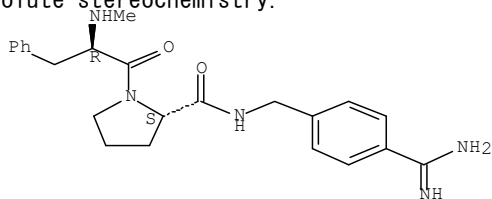


●2 HCl

RN 174490-97-2 CAPLUS

CN L-Prolinamide, N-methyl-D-phenylalanyl-N-[[4-(aminoiminomethyl)phenyl]methyl]-, dihydrochloride (9CI) (CA INDEX NAME)

Absolute stereochemistry.



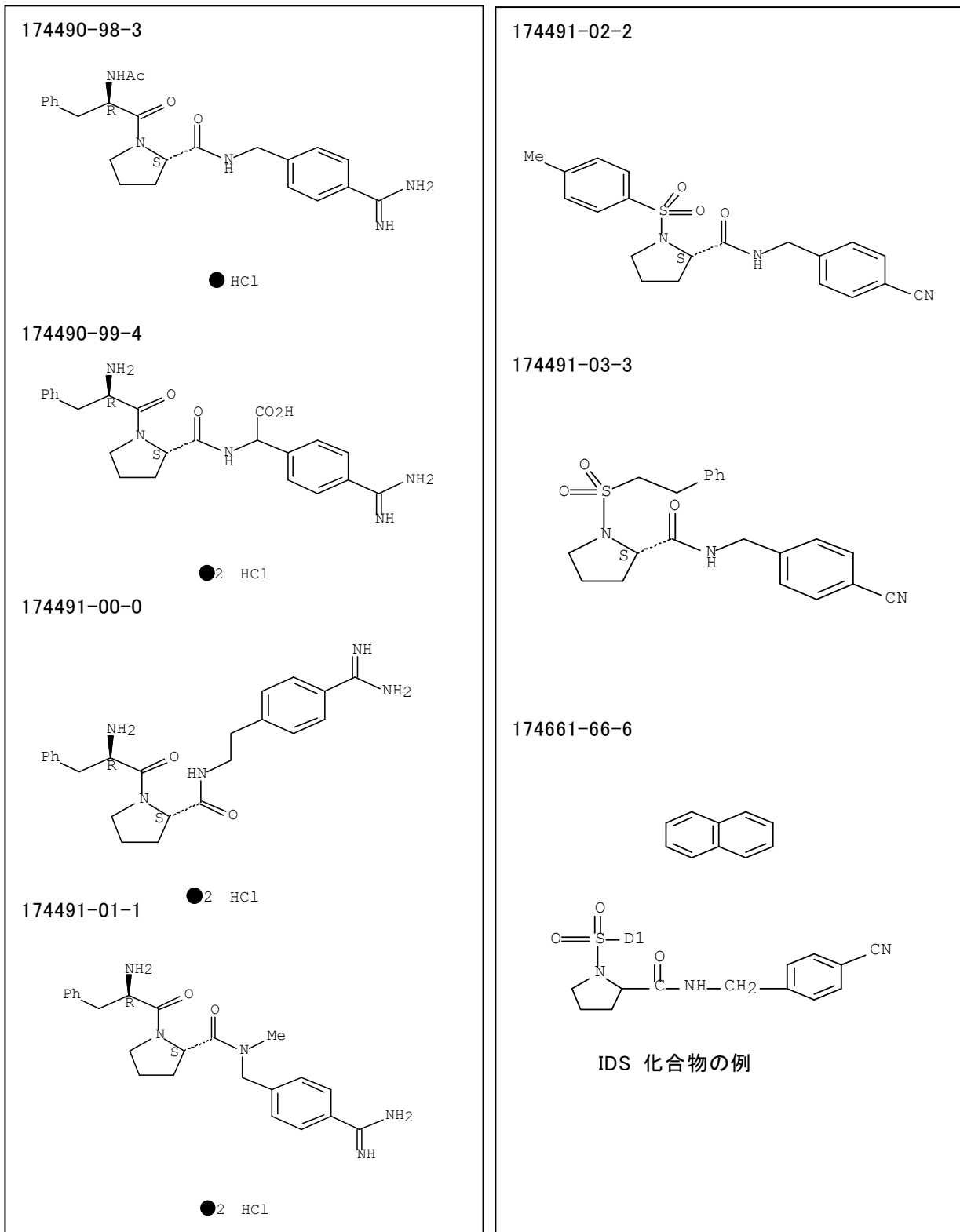
●2: HCl

L2 を REGISTRY ファイルで,
=> D SCAN で表示してもよい.

その結果を STN Express で表を作成すると
さらにわかりやすい.

検索例 1 : 新規性調査

■ その他の索引されている生成物（中間体は除く）



特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 1 : 新規性調査

- MARPAT ファイルのレコード (ドイツ特許を基に索引が作成されている)

=> FILE MARPAT

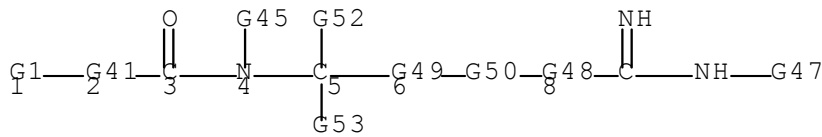
=> S L1
L4 1 L1

=> D MSTR

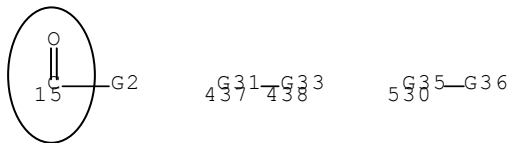
索引されてる物質は、ドイツに出願された公開特許に記載されている物質

L4 ANSWER 1 OF 1 MARPAT COPYRIGHT 2006 ACS on STN

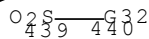
MSTR 1



G1 = 15 / 437 / 530

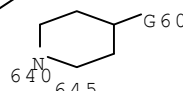
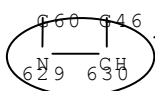
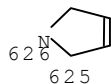
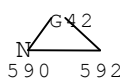


G31 = S02 / 439-2 440-438



G35 = (1-8) CH2

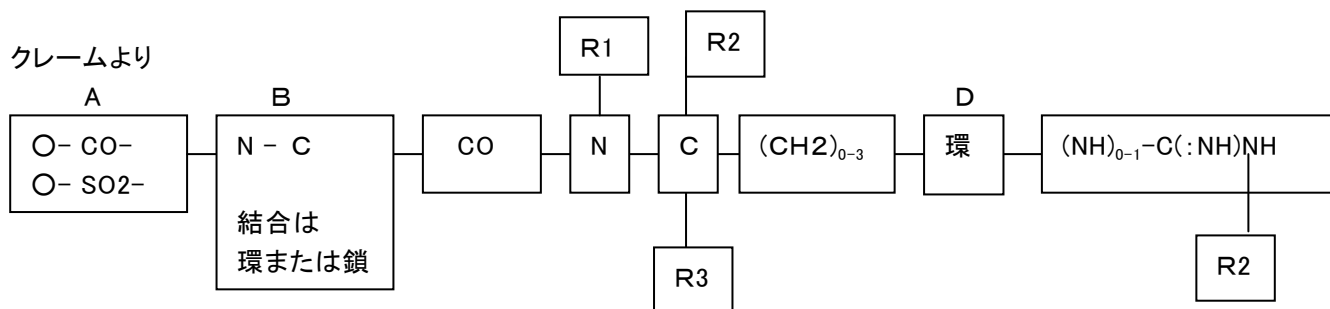
G41 = 590-1 592-3 / 626-1 625-3 / 629-1 630-3 / 640-1 645-3



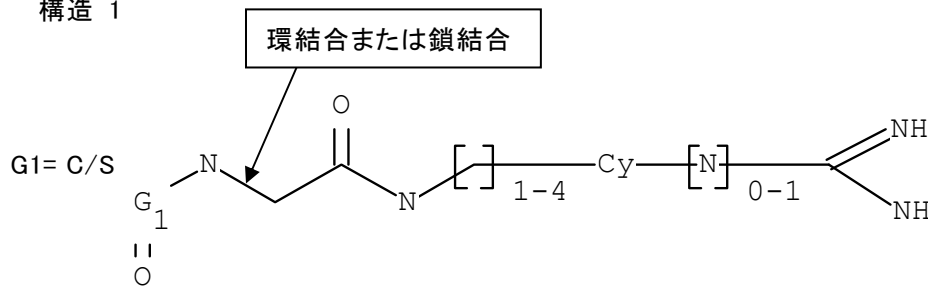
REGISTRY ファイルでは、環のみ索引されていたが、MARPAT ファイルでは C-N が鎖状のものも索引されている。

検索例 1 : 新規性調査

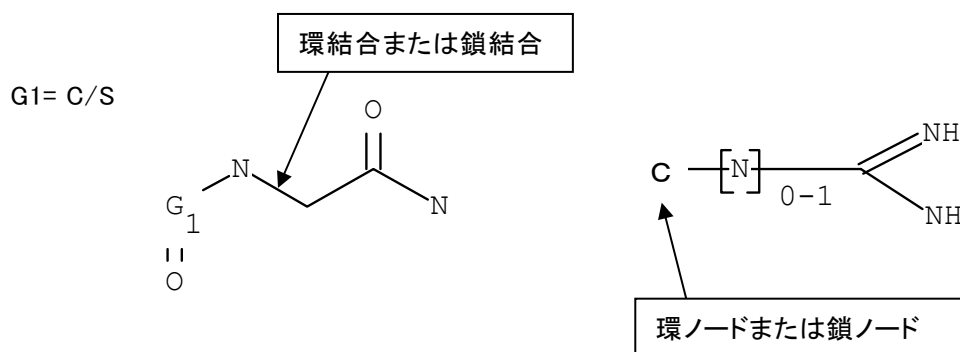
■ 構造検索式の作成



構造 1



構造 2 広めな構造質問式



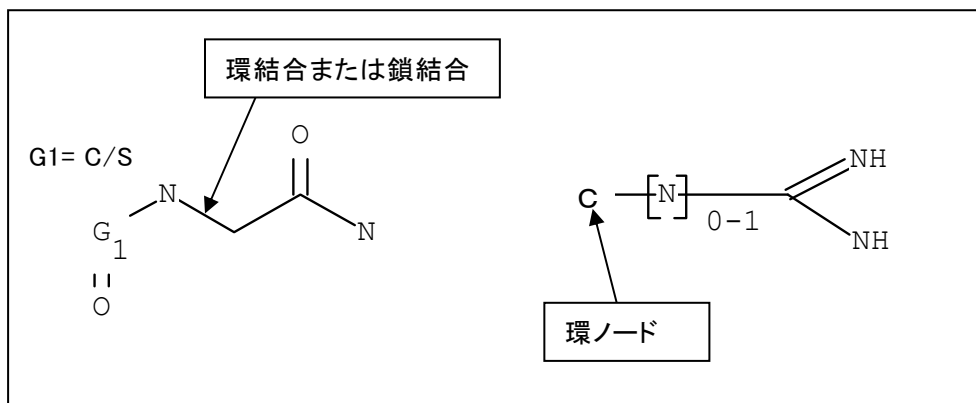
検索例 1 : 新規性調査

・ 構造検索の実行

1. 広めの構造で検索する.
2. 回答の絞りこみを行う.

絞りこみ方法 : 構造検索 (サブセット検索), 辞書検索 (分子式関連フィールド, 環データ等)
性質, 用途等 (CAplus/CA ファイル)

下記の構造を REGISTRY ファイルで検索する.



=> FILE REGISTRY

=>
Uploading C:\STNEXP\QUERIES\MOK01-A.str
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1
SAMPLE SEARCH INITIATED 13:35:57 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 23667 TO ITERATE

8.5% PROCESSED 2000 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.03

47 ANSWERS

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 464135 TO 482545
PROJECTED ANSWERS: 9709 TO 12537

L2 47 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

L3 11310 SEA SSS FUL L1

=> FILE HCAPLUS

=> S L3 AND (AD<=19950606 OR PRD<=19940617 OR PY<=1995)

L4 401 L3 AND (AD<=19950606 OR PRD<=19940617 OR PY<=1995)

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 1 : 新規性調査

=> FILE REGISTRY

=>

Uploading C:¥STNEXP¥QUI

L5 STRUCTURE UPLO

=> S L5 SUB=L3 SAM

L6 50 SEA SU

=> S L5 SUB=L3 FUL

100.0% PROCESSED 11255 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

L7 5586 SEA SUB=L3 SSS FUL L5

=> FILE HCAPLUS

=> S L7 AND (AD<=19950606 OR PRD<=19940617 OR PY<=1995)

L8 147 L7 AND (AD<=19950606 OR PRD<=19940617 OR PY<=1995)

=> S L8 AND (?THROMB?(S)?INHIBIT? OR ANTITHROMB? OR ANTI THROMB?)

L9 111 L8 AND (?THROMB?(S)?INHIBIT? OR ANTITHROMB? OR ANTI THROMB?)

=> S L9 NOT JP10501541/PN
1 JP10501541/PN

L10 110 L9 NOT JP10501541/PN

- 回答が多い場合には、さらに構造を限定してサブセット検索を行う。または、ヒットしている構造を確認する。

=> FILE REGISTRY

=> TRA L10 HIT RN

L11 TRANSFER L10 1- RN HIT : 850 TERMS

L12 850 L11

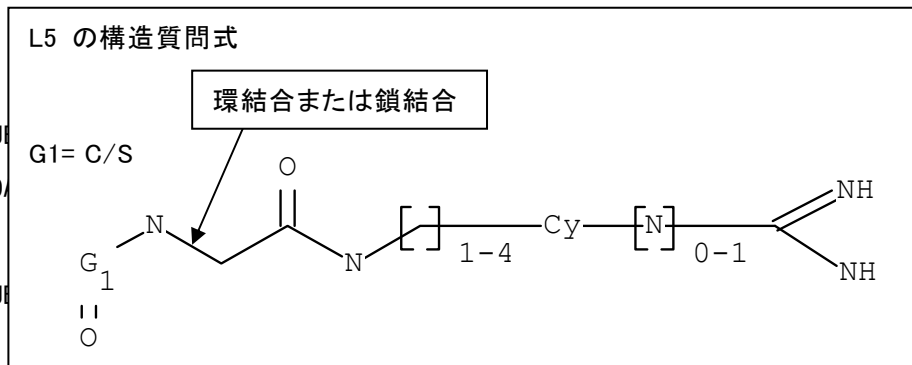
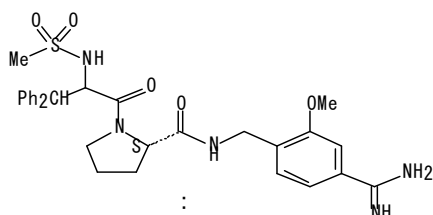
=> S L12 AND 1/REF. CAPLUS
43950264 1/REF. CAPLUS

L13 674 L12 AND 1/REF. CAPLUS

=> D SCAN

L13 674 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN L-Prolinamide, N-(methylsulfonyl)-β-phenylphenylalanyl-N-[[4-(aminoiminomethyl)-2-methoxyphenyl]methyl]- (9CI)
MF C30 H35 N5 O5 S
CI COM

Absolute stereochemistry.



検証:

L8, L9, L10 11 ヒット **1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9**
ヒットしなかった回答 **7**

検索例 1 : 新規性調査

■ まとめ

① 対応特許の審査状況の調査

ドイツ特許公開 取り下げ **WITHDRAWAL** (CA ベーシック特許)
EP 登録特許 取り消し **REVOKED**

② 引用情報

1, 2, 3, 5 の引用を見つけることができる.

③ CAS 登録番号

14301 件中 1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 9 の引用文献が含まれていた.
52 件中 7, 8, 9 の引用文献が含まれていた.

④ 構造検索

110 件中 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9 の引用文献が含まれていた.

結論:

約 100 件の文献を確認すれば 1-9 までの引用文献をすべて見つけることができる

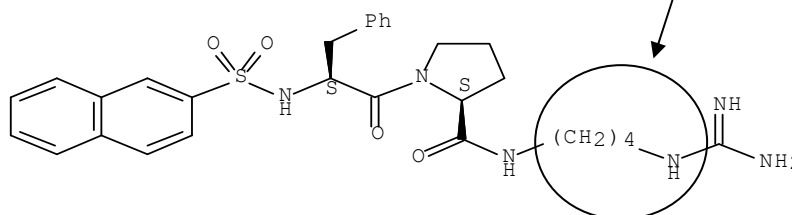
各引用文献の CA 抄録番号

1. 110:95774
2. 102:25017
3. 105:97888
4. 111:70318
5. 115:115112 (JP03086852)
6. 122:285553 (JP08511018)
7. 122:240445 (JP06211894)
8. 128:217644, 128:128289, 128:128286, 124:87791 (JP09509937)
9. 124:56705 (JP07252217)

【参考】 引用文献 7 は、無効にしたい出願 (JP10501541) と同じ反応物が索引されている。抗血栓薬としての生成物の一例を示す。

RN 162167-30-8 CAPLUS

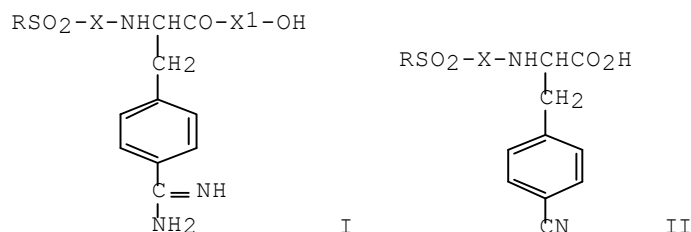
環ではないため構造検索ではヒットしない



検索例 1 : 新規性調査

■ 引用文献 1 (BIB ABS IND 表示形式)

AN 1989:95774 HCAPLUS [Full-text](#)
 DN **110:95774**
 TI Synthesis of N α -(arylsulfonyl)-4-amidinophenylalanylprolines and N α -(arylsulfonylglycyl)-4-amidinophenylalanylprolines and their testing as inhibitors of serine proteases. Part 33: Synthetic inhibitors of serine proteases
 AU Voigt, B.; Stuerzebecher, J.; Wagner, G.; Markwardt, F.
 CS Sekt. Biowiss., Karl-Marx Univ. Leipzig, Leipzig, Ger. Dem. Rep.
 SO Pharmazie (**1988**), 43(6), 412-14
 CODEN: PHARAT; ISSN: 0031-7144
 DT Journal
 LA German
 OS CASREACT 110:95774
 GI



AB Title compds. I (R = p-tolyl, α -naphthyl, β -naphthyl, X = null, X¹ = Pro; R = same, X = Gly, X¹ = Pro, D-Pro) were prepared from p-cyanophenylalanines II. The cyano group was converted into the amidino group in 4 steps by standard methods. The substitution of the pyrrolidine residue by L-proline in this type of **inhibitor** decreased the activity against serine proteases, especially against **thrombin**. In the case of the D-proline derivs., the decrease of the **inhibitor** activity against **thrombin** was very high.

ST arylsulfonylamidinophenylalanylproline prepn **thrombin inhibitor**; arylsulfonylglycylamidinophenylalanylproline prepn **thrombin inhibitor**; amidinophenylalanylproline arylsulfonyl; serine protease inhibitor arylsulfonylamidinophenylalanylproline

IT Molecular structure-biological activity relationship (serine proteinase-inhibiting, of (arylsulfonyl)amidinophenylalanylprolines and (arylsulfonylglycyl)amidinophenylalanylprolines)

IT 80852-42-2 80852-44-4 80852-46-6
 RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent) (acid chlorination of)

IT 73438-67-2 73438-76-3 73438-77-4 **86125-42-0** **86125-43-1** **86125-44-2**
 RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent) (inhibition by, of serine proteases)

IT 9001-90-5, Plasmin 9002-04-4, **Thrombin** 9002-07-7, Trypsin 37259-58-8, Serine protease
 RL: PROC (Process) (**inhibition** of, with (arylsulfonyl)amidinophenylalanylprolines and (arylsulfonylglycyl)amidinophenylalanylprolines)

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

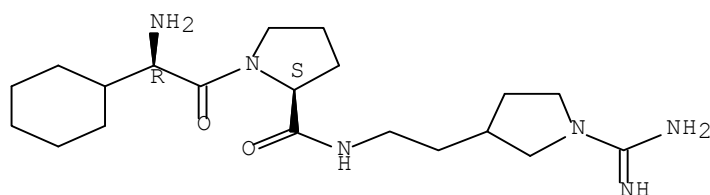
検索例 1 : 新規性調査

- IT 147-85-3, L-Proline, reactions 344-25-2, D-Proline
 RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
 (peptide coupling of, with cyanophenylalanine derivs.)
- IT 92771-15-8 92771-16-9 92842-16-5
 RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
 (peptide coupling of, with D- and L-proline)
- IT 80852-48-8P 80852-51-3P 80874-13-1P
 RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); **PREP**
(Preparation); RACT (Reactant or reagent)
 (preparation and peptide coupling of, with proline)
- IT 118964-60-6P 118964-61-7P 118964-62-8P 118964-76-4P 118964-77-5P
 118964-78-6P 118964-79-7P 118964-80-0P
 RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); **PREP**
(Preparation); RACT (Reactant or reagent)
 (preparation and reaction of, with ammonium acetate)
- IT 118964-54-8P 118964-55-9P 118964-56-0P 118964-66-2P 118964-67-3P
 118964-68-4P 118964-69-5P 118964-70-8P
 RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); **PREP**
(Preparation); RACT (Reactant or reagent)
 (preparation and reaction of, with hydrogen sulfide)
- IT 118964-86-6P 118964-87-7P 118964-88-8P **118964-89-9P**
118964-90-2P 118964-91-3P 118964-92-4P
118964-93-5P
 RL: SPN (Synthetic preparation); **PREP (Preparation)**
 (preparation and serine protease-inhibiting activity of)
- IT 118964-57-1P 118964-58-2P 118964-59-3P 118964-71-9P 118964-72-0P
 118964-73-1P 118964-74-2P 118964-75-3P
 RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); **PREP**
(Preparation); RACT (Reactant or reagent)
 (preparation and S-methylation of, with Me iodide)
- IT 118964-63-9P 118964-64-0P 118964-65-1P **118964-81-1P**
118964-82-2P 118964-83-3P 118964-84-4P
118964-85-5P
 RL: SPN (Synthetic preparation); **PREP (Preparation)**
 (preparation of)

RN 162990-00-3 CAPLUS

CN L-Prolinamide, D-2-cyclohexylglycyl-N-[2-[1-(aminoiminomethyl)-3-pyrrolidinyl]ethyl]-, dihydrochloride (9CI) (CA INDEX NAME)

Absolute stereochemistry.



●2 HCl

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

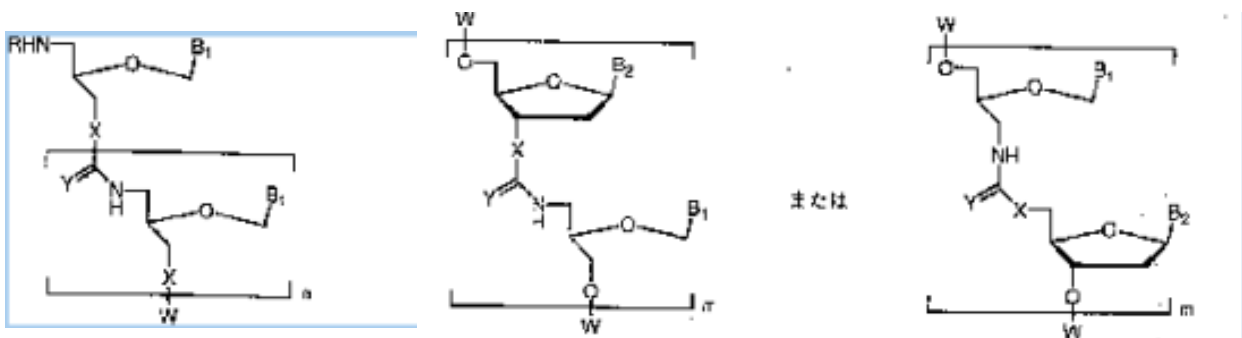
検索例 2 : 新規性・進歩性調査

■ 検索例 2 : 下記の特許は、拒絶理由通知書が発行されたものである。

- この特許の拒絶理由となった引用を、どのようにして得ることができるかを検証する。

公開特許公報 特開平 8-119945 (1996 年 5 月 14 日)
 出願日 平成 7 年 (1995) 8 月 31 日
 優先権主張日 平成 6 年 (1994) 8 月 31 日

発明の名称 新規ヌクレオチド類縁体



B1,B2=ピリミジン, プリン核酸塩基, またはそれらの誘導体
 X,Y=O,S
 R=H,AK,-CO-
 W=H,AK,-CO-, X が酵素の場合, リン酸エステル結合を解したヌクレオチド, オリゴヌクレオチド, ポリヌクレオチド
 n: 1-50 の整数 (n が 2 以上の場合, B1,B2 は同一塩基に限定されない)
 m: 1-25 (m が 2 以上の場合, B1,B2 は同一塩基に限定されない)

- 目的 : 生体内で酵素の加水分解を受けにくく, センス鎖との結合能が高く, しかも合成が容易であるオリゴヌクレオチド類縁体・アンチセンス分子を提供する。

■ 拒絶理由通知書 (一部)

拒絶査定		P.1
特許出願の番号	平成 7年 特許願 第222886号	
起案日	平成17年11月16日	
特許庁審査官	伊藤 幸司	9450 4000
発明の名称	新規ヌクレ	
特許出願人	今西 武	
代理人	社本 一夫	
この出願については、平成17年 8月理由1及び2によって、拒絶をすべきものである。なお、意見書の内容を検討したが、拒絶い。		
拒絶理由通知書		P.1
特許出願の番号	平成 7年 特許願 第222886号	
起案日	平成17年 8月 9日	
特許庁審査官	伊藤 幸司	9450 4000
特許出願人代理人	社本 一夫 (外 4名) 様	
適用条文	第29条第2項、第36条	
この出願は、次の理由によって拒絶をすべきものである。これについて意見があれば、この通知書の発送の日から60日以内に意見書を提出して下さい。		

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

記 (引用文献等については引用文献等一覧参照)

I.理由1

- ・請求項1、2
- ・引用文献1～3
- ・備考

引用文献1及び2には、DNAアナログのリン酸ジエステル部位をカーバメート結合で置換された誘導体がアンチセンスとして優れる旨記載されている。一方、引用文献3には、非環式のデオキシリボースがアンチセンス医薬として使用できる旨が記載されている。してみれば、同様にアンチセンス医薬として有用なヌクレオチド類縁体を提供するために、引用文献1～3に記載の知見に基づき、分子内にカーバメート結合を有し且つ非環式デオキシリボース構造を有する分子設計を行ってみることは当業者が容易になし得ることである。

P.2

そして、本願明細書には、特に、請求項2に記載の式で表されるヌクレオチド類縁体、即ち、環式及び非環式デオキシリボースを併せ持った分子についてアンチセンス機能が具体的に開示されているに過ぎず、従来から公知のカーバメート結合を有する又は非環式デオキシリボース構造を有するヌクレオチド類縁体に比していかなる有利なアンチセンス機能を有するのか確認することはできないことまた、請求項1の式で表される非環式デオキシリボース構造のみを有するヌクレオチド類縁体を用いた場合のアンチセンス機能を裏付ける具体的記載は一切ないことを鑑みるに、請求項1及び2に係る発明の効果が、従来技術から当業者にとって予測困難な格別顕著なものであるとまでは認められない。

II.理由2

請求項1及び2のB₁、B₂の定義中、「…それらの誘導体…」なる記載ではいかなるピリミジンもしくはプリン核酸塩基まで包含し得るのか明らかでないところ、同請求項に記載された発明の範囲が不明確である。

引用文献等一覧

- 1: ANTISENSE RESEARCH AND DEVELOPMENT 1, 1991, pages 319-327
- 2: 国際公開第93/24512号パンフレット
- 3: 特開平3-236396号公報

補正に当たっては、新規事項の追加とならないように留意されたい。
 なお、補正の根拠となる出願当初明細書又は図面の該当箇所を意見書において明示されることが望ましい。

各引用文献の CA 抄録番号

1. 117:39848
2. 120:271077
3. 117:49168

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

■ 調査 (拒絶理由になった引用を, 検索式によってどの程度, ヒットさせることができるかを検証する)

① 対応特許情報と法的状況データの確認

=> FILE INPADOC

=> S JP08119945/PN

L1 JP08119945/PN

=> D FFAM

L1 ANSWER 1 OF 1 INPADOC COPYRIGHT 2006 EPO on STN

MEMBER 2

LEVEL 1

AN 90444133 INPADOC
TI NEW NUCLEOTIDE ANALOG.
IN IMANISHI TAKESHI; OBIKA SATOSHI
INS IMANISHI TAKESHI; OBIKA SATOSHI
PA IMANISHI TAKESHI
PAS IMANISHI TAKESHI
TL English
DT Patent
PIT JPA2 DOCUMENT LAID OPEN TO PUBLIC INSPECTION
PI JP 08119945 A2 19960514
AI JP 1995-222886 A 19950831
PRAI JP 1995-222886 A 19950831
JP 1994-207343 A 19940831

MEMBER 3

PI WO 9606833 A1 19960307

LEGAL STATUS

AN 41279687 INPADOC

19960307 WOAK + DESIGNATED STATES

WO A1
AM AU BB BG BR BY CA CN CZ EE FI GE HU IS KE KG KR KZ LK
LR LT LV MD MG MK MN MW MX NO NZ PL RO RU SD SG SI SK TJ
TM TT UA US UZ VN

19960307 WOAL + DESIGNATED COUNTRIES FOR REGIONAL PATENTS

WO A1
KE MW SD SZ UG AT BE CH DE DK ES FR GB GR IE IT LU MC NL
PT SE BF BJ CF CG CI CM GA GN ML MR NE SN TD TG

19960404 WODFPE REQUEST FOR PRELIMINARY EXAMINATION FILED PRIOR TO
EXPIRATION OF 19TH MONTH FROM PRIORITY DATE

19960612 W0121 EP: THE EPO HAS BEEN INFORMED BY WIPO THAT EP WAS
DESIGNATED IN THIS APPLICATION

19971105 W0122 - EP: PCT APP. NOT ENT. EUROP. PHASE

特に有用な情報は得られなかった

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

② この特許の引用文献調査

=> FILE DPCI

=> S JP08119945/PN

0 JP08119945/PN
L1 0 JP08119945/PN ← DPCI ファイルには収録されていない

③ この特許に索引されている物質 (CAS 登録番号) が, 索引されている先行技術文献の調査

=> FILE CAPLUS

=> S JP08119945/PN

L1 1 S JP08119945/PN

=> D ALL

L1 ANSWER 1 OF 1 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
AN 1996:431361 CAPLUS
DN 125:115077
TI Preparation of novel antisense nucleotide analogs containing acyclic nucleoside analogs
IN Imanishi, Takeshi; Obika, Satoshi
PA Japan
SO PCT Int. Appl., 53 pp.
CODEN: PIXXD2
DT Patent
LA Japanese
FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 9606833	A1	19960307	WO 1995-JP1729	19950831
	W: AM, AU, BB, BG, BR, BY, CA, CN, CZ, EE, FI, GE, HU, IS, KE, KG, KR, KZ, LK, LR, LT, LV, MD, MG, MK, MN, MW, MX, NO, NZ, PL, RO, RU, SD, SG, SI, SK, TJ, TM, TT, UA, US, UZ, VN				
	RW: KE, MW, SD, SZ, UG, AT, BE, CH, DE, DK, ES, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE, BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, ML, MR, NE, SN, TD, TG				
	AU 9533545	A1	19960322	AU 1995-33545	19950831
	JP 08119945	A2	19960514	JP 1995-222886	19950831 <--
PRAI	JP 1994-207343	A	19940831		
	WO 1995-JP1729	W	19950831		

GI

* STRUCTURE DIAGRAM TOO LARGE FOR DISPLAY - AVAILABLE VIA OFFLINE PRINT *

AB **Antisense** mols. represented by the following general formulas (I, II, and III; B1, B2 = the same or different pyrimidine or purine nucleic acid base or a deriv. thereof; X, Y = oxygen or sulfur; R = H, alkyl, or acyl; W = H, alkyl, or acyl, or when X = oxygen, W = nucleotide, oligonucleotide, or polynucleotide bonded via a **phosphate linkage**; n = an integer of 1 to 50, provided when n > 2, B1 or B2 may be different from each other), which contain **carbamate or thiocarbamate** internucleotide linkages and acyclic nucleosides that alleviate the structural strain during the formation of a double strand and also suppress the manifestation of toxicity since they release glycerin derivs. in in vivo decompn. or metabolism, are prepd. Thus, a 12-mer 5'-GCGTTTT-Tt-GCT-3' (Tt = Q, B1 = B2 = T) was prepd. by the solid phase phosphoramidite method using a Pharmacia DNA synthesizer Gene Assembler Plus, and a heterodimer unit amidite (IV) [prepn. from (S)-glycidol

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

IT **Nucleotides, preparation**

RL: BAC (Biological activity or effector, except adverse); BSU (Biological study, unclassified); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)

(prepn. of novel antisense nucleotide analogs contg. acyclic nucleoside analogs and carbamate or thiocarbamate internucleotide linkages)

IT **Gene**

RL: BAC (Biological activity or effector, except adverse); BSU (Biological study, unclassified); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)

(expression, inhibitors; prepn. of novel antisense nucleotide analogs contg. acyclic nucleoside analogs and carbamate or thiocarbamate internucleotide linkages)

IT 178967-44-7P 178967-45-8P 178967-46-9P 178967-47-0P 178967-48-1P
178967-49-2P 178967-50-5P 178967-51-6P 178967-52-7P 178967-53-8P
178967-54-9P 178967-55-0P 178967-56-1P 178967-57-2P 178967-58-3P
178967-59-4P 178967-60-7P

RL: BAC (Biological activity or effector, except adverse); BSU (Biological study, unclassified); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); **PREP** (Preparation); **USES** (Uses)

(prepn. of novel antisense nucleotide analogs contg. **acyclic nucleoside analogs** and **carbamate or thiocarbamate** internucleotide linkages)

IT 67-68-5, DMSO, reactions 530-62-1, N,N'-Carbonyl diimidazole 5070-13-3, Bis(p-nitrophenyl) carbonate 7288-28-0 18055-47-5
21090-30-2 24424-99-5, tert-Butyl dicarbonate 40615-36-9,
4,4'-Dimethoxytrityl chloride 40615-39-2, 5'-O-(4,4'-
Dimethoxytrityl)thymidine 58479-61-1, tert-Butyldiphenylsilyl chloride
60456-23-7, (S)-Glycidol 64325-78-6 64339-87-3 67219-55-0
68892-41-1 102691-36-1 140613-56-5 140613-57-6

RL: **RCT** (Reactant); **RACT** (Reactant or reagent)

(prepn. of novel antisense nucleotide analogs contg. acyclic nucleoside analogs and carbamate or thiocarbamate internucleotide linkages)

IT 66211-46-9P 148983-23-7P 173465-37-7P 173465-38-8P 173465-40-2P
173465-41-3P 173465-42-4P 173465-43-5P 173465-44-6P 173465-45-7P
173465-46-8P 173465-47-9P 173465-48-0P 173465-49-1P 173465-50-4P
173465-51-5P 173465-52-6P 173465-53-7P 173465-54-8P 173465-55-9P
173465-56-0P 173465-57-1P 173465-58-2P 173465-59-3P 173465-60-6P
173465-61-7P 173465-62-8P 173465-63-9P 173465-64-0P 173465-65-1P
173465-66-2P 178748-32-8P 178748-33-9P 178748-34-0P 178748-35-1P
178748-36-2P 178748-37-3P 178748-38-4P 178748-39-5P 178748-40-8P
178808-61-2P

RL: **RCT** (Reactant); **SPN** (Synthetic preparation); **PREP** (Preparation); **RACT** (Reactant or reagent)

(prepn. of novel antisense nucleotide analogs contg. acyclic nucleoside analogs and carbamate or thiocarbamate internucleotide linkages)

IT 178967-61-8P 178967-62-9P 178967-63-0P 178967-64-1P 178967-65-2P
178967-66-3P 178967-67-4P 178967-68-5P 178967-69-6P 178967-70-9P
178967-71-0P 178967-72-1P

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

(prepn. of novel antisense nucleotide analogs contg. acyclic nucleoside analogs and carbamate or thiocarbamate internucleotide linkages)

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

- ・ 無効にしたい出願に索引されている物質 (CAS 登録番号) を同様に索引している文献の検索

=> SEL RN
E1 THROUGH E88 ASSIGNED

=> FILE REGISTRY

=> S E1-E88

L2 88 (102691-36-1/BI OR 140613-56-5/BI OR 140613-57-6/BI OR 148983-23

=> FILE HCAPLUS

=> S L2

L3 44544 L2

=> S L2 AND (AD<=19950831 OR PRD<=19940831 OR PY<=1995)

44544 L2
2930924 AD<=19950831
(AD<=19950831)
2214036 PRD<=19940831
(PRD<=19940831)
16769878 PY<=1995

L4 24848 L2 AND (AD<=19950831 OR PRD<=19940831 OR PY<=1995)

=> FILE REGISTRY

=> S L2 AND 1-5/REF. CAPLUS

51635738 1-5/REF. CAPLUS
L5 69 L2 AND 1-5/REF. CAPLUS

=> FILE HCAPLUS

=> S L5 AND (AD<=19950831 OR PRD<=19940831 OR PY<=1995)

7 L5
2930924 AD<=19950831
(AD<=19950831)
2214036 PRD<=19940831
(PRD<=19940831)
16769878 PY<=1995

L6 4 L5 AND (AD<=19950831 OR PRD<=19940831 OR PY<=1995)

=> D 1-4 HITSTR

:

該当構造なし

参考 :

=> D CAN L6 1-4

125:115077
124:146715
122:187170
119:95513

新規性の調査では、キーワードでの絞り込みは注意が必要である。
/REF.CAPLUS は、CAplus ファイルの文献数を限定する検索フィールド
であるが、新規物質の場合には、文献数が多くないと考えられるため、
新規性調査には有効である。

検証 :

L4 2 ヒット 2. 120:271077
3. 117:49168

L6 引用文献はヒットしない。

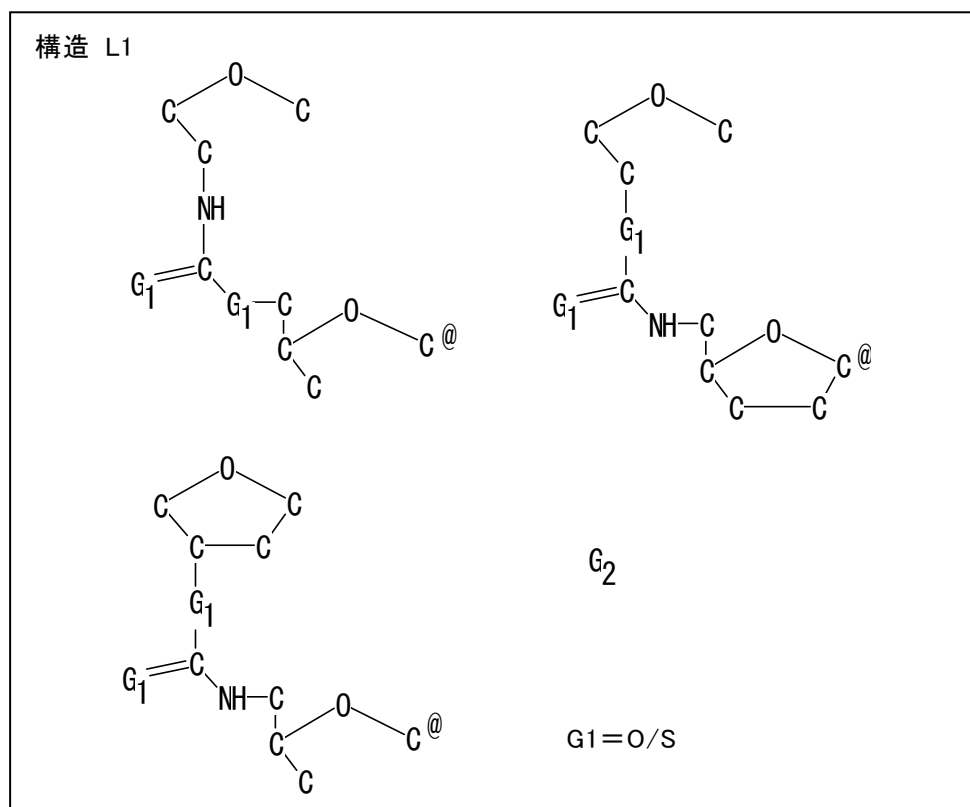
特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

④ この特許中の物質と類似した物質を索引している文献・特許を検索（構造検索）

- ・ クレーム中の構造を作図して検索する.

1) 新規性の検討



=> FILE REGISTRY

=>

Uploading

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

L2 0 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

L3 30 SEA SSS FUL L1

=> FILE HCAPLUS

=> S L3

L4 6 L3

=> S L4 AND (PY<=1995 OR AD<=19950831 OR PRD<=19940831)

L5 5 L4 AND (PY<=1995 OR ...

該当文献なし

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

2) 進歩性の検討

核酸誘導体（アンチセンスDNAアナログ）の設計

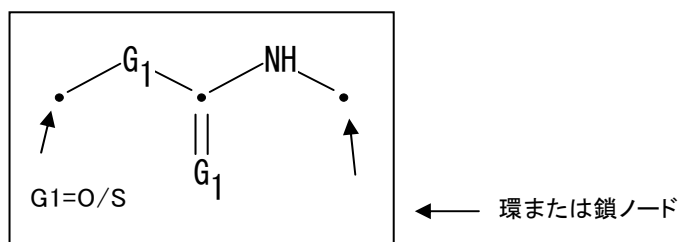
- ① 生体内の酵素により加水分解を受けるリン酸ジエステル結合をカルバメートまたはチオカルバメート結合に置換すること。
- ② そのカルバメートまたはチオカルバメート結合により生じる、二重鎖形成時の構造のひずみを解消するために、リボースを非環式骨格にして分子に自由度を持たせること。
- ③ 体内において分解、代謝を受けた際に、毒性の発現を抑えるために生体構成成分に近いグリセリン誘導体を基本骨格とすること。

・ 進歩性を 2 つの面から検討する。

- a. リン酸ジエステル結合をカルバメートまたはチオカルバメート基に置換することにより、加水分解を受けにくくなり、アンチセンス医薬品として有効であるという先行技術文献を検索する。

有効性：加水分解を受けにくくなる。センス鎖との結合能が高い。合成が容易であるオリゴヌクレオチド類縁体のアンチセンス医薬品として有効である。

カルバメートの骨格を作図して構造検索を実行する。



キーワード

=> S ?NUCLEOTID? AND (ANTISENS? OR ANTI SENS?)

期間

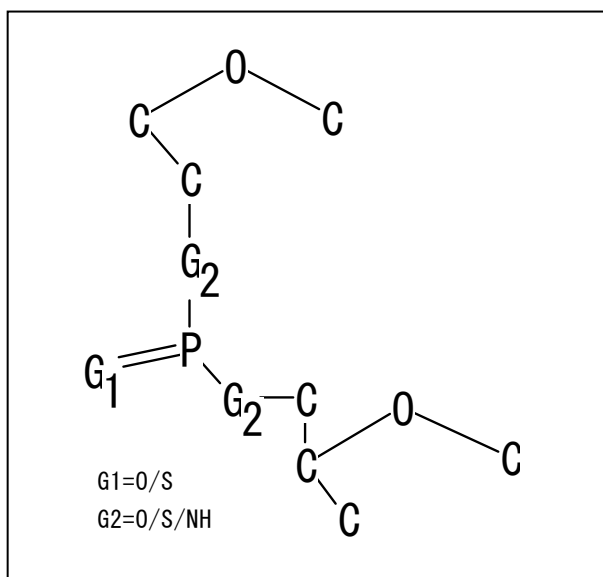
=> S (AD<=19950831 OR PRD<=19940831 OR PY<=1995)

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

- b. カルバメートまたはチオカルバメート結合により生じる二重鎖形成時の構造のひずみを解消するために、**リボースを非環式骨格**にすると、有効であるという先行技術文献を検索する。

有効性：加水分解を受けにくくなる。センス鎖との結合能が高い。合成が容易であるオリゴヌクレオチド類縁体のアンチセンス医薬品として有効である。



キーワード

=> S ?NUCLEOTID? AND ACYCL? AND HYDROLY?

期間

=> S (AD<=19950831 OR PRD<=19940831 OR PY<=1995)

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

a. カルバメート基の構造で検索する.

=> FILE REGISTRY

=>
Uploading C:\%STNEXP%QUERIES%ANTISEN2.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

```

:
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH  **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:   875977 TO  901143
PROJECTED ANSWERS:     644493 TO  666133
    
```

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

FULL SEARCH INITIATED 05:32:59 FILE 'REGISTRY'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 888410 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 888410 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.03

665383 ANSWERS

L3 665383 SEA SSS FUL L1

=> D 200000 400000 REG

```

200000 RN 351498-08-3 REGISTRY
400000 RN 146361-93-5 REGISTRY
    
```

=> S L3 AND L3 RAN=351498-08-3,

L4 200000 L3 AND L3

=> S L3 AND L3 RAN=146361-93-5, 351498-08-3

L5 200001 L3 AND L3

=> S L3 AND L3 RAN=, 146361-93-5

L6 265384 L3 AND L3

=> FILE HCAPLUS

=> S L4-L6

```

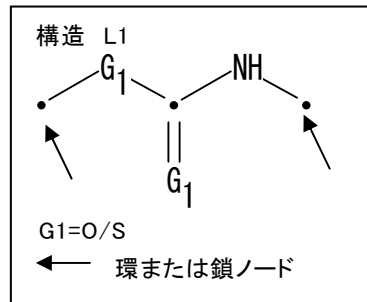
28726 L4
47616 L5
155839 L6
L7        191509 (L4 OR L5 OR L6)
    
```

=> S L7 AND (AD<=19950831 OR PRD<=19940831 OR PY<=1995)

L8 116913 L7 AND (AD<=19950831 OR PRD<=19940831 OR PY<=1995)

=> S L8 AND ?NUCLEOTID? AND (ANTISENS? OR ANTI SENS?)

L9 63 L8 AND ?NUCLEOTID? AND (ANTISENS? OR ANTI SENS?)



特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

=> S L9 AND (120:271077 OR 117:39848)/DN
 1 120:271077/DN
 1 117:39848/DN
 L10 2 L9 AND (120:271077 OR 117:39848)/DN

=> D BIB ABS HITSTR 1-2

L10 ANSWER 1 OF 2 HCAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN

AN 1994:271077 HCAPLUS

DN **120:271077**

TI Preparation of **antisense** nucleic acid homolog

IN Yano, Junichi; Ohgi, Tadaaki; Ishiyama, Kouichi

PA Nippon Shinyaku Co., Ltd., Japan

SO PCT Int. Appl., 37 pp.

CODEN: PIXXD2

DT Patent

LA Japanese

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 9324512	A1	19931209	WO 1993-JP684	19930524 <--
	W: JP, US				
	RW: AT, BE, CH, DE, DK, ES, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE				
PRAI	JP 1992-158652	A	19920525 <--		
	JP 1992-231445	A	19920805 <--		
OS	MARPAT 120:271077				
GI					

* STRUCTURE DIAGRAM TOO LARGE FOR DISPLAY - AVAILABLE VIA OFFLINE PRINT *

AB The title **polynucleotide** homologs (I; X, Y = S or O; B2, B2, B3, B4 = guanine, hypoxanthine, cytosine, thymine, uracil; n = an integer of 1 or above, provided that B2 and B3 need not necessarily be one and the same base when n is 2 or above) are prepared I provide a novel **antisense** mol. utilizable as a medicine which suppresses infection with herpesvirus, influenza virus, human immunodeficiency virus or the like and the action of cancer genes (no data). Thus, I (X = O, Y = S, n = 5) (homolog of 5'-TCTTTGAGCTTG-3') was prepared by block condensation of 4 dimer blocks II (B1 = Cbz (N-benzoylcytosine), B2 = T; B1 = B2 = T; B1 = Gib (N-isobutrylguanine), B2 = Cbz; B1 = Gib, B2 = N-benzoyladenine) (preparation given) and strongly formed a complex with a complimentary, natural **deoxyoligonucleotide** 3'-AGAAACTCGAAC-5'.
 Addnl. 3 I were prepared

IT **154495-16-6P**

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
 (preparation of, as antiviral and anticancer **antisense** nucleic acid homolog)

RN 154495-16-6 HCAPLUS

CN Cytidine, 2'-deoxyguanylyl-(3'→5')-2'-deoxy-3'-0-dephosphincoadenylylcarbonothioylimino-(3'→5')-5'-deoxythymidylyl-(3'→5')-2'-deoxy-3'-0-dephosphinocytidylylcarbonothioylimino-(3'→5')-2',5'-dideoxyguanylyl-(3'→5')-2'-deoxy-3'-0-dephosphincoadenylylcarbonothioylimino-(3'→5')-5'-deoxythymidylyl-(3'→5')-2'-deoxy- (9C1) (CA INDEX NAME)

Absolute stereochemistry.

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

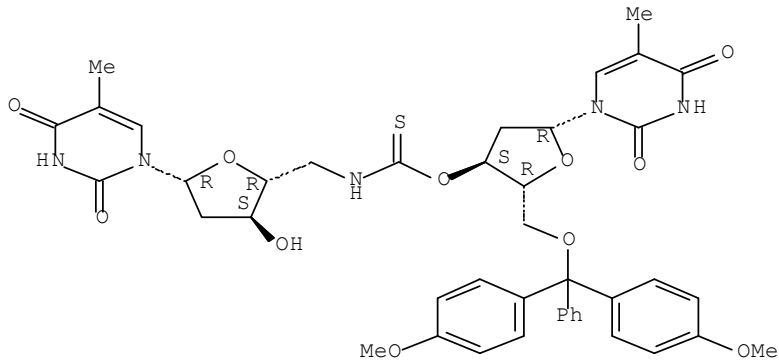
IT 154495-00-8P 154495-01-9P 154495-02-0P
154495-03-1P 154495-04-2P 154495-05-3P
154495-07-5P 154495-08-6P 154495-09-7P
154495-10-0P 154495-11-1P 154495-12-2P
154495-13-3P 154495-14-4P 154495-15-5P

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(preparation of, as intermediate for **antisense** nucleic acid
homolog)

RN 154495-00-8 HCAPLUS

CN Thymidine, 5'-O-[bis(4-methoxyphenyl)phenylmethyl]-3'-O-
dephosphinicothymidylylcarbonothioylimino-(3'↔5')-5'-deoxy- (9CI)
(CA INDEX NAME)

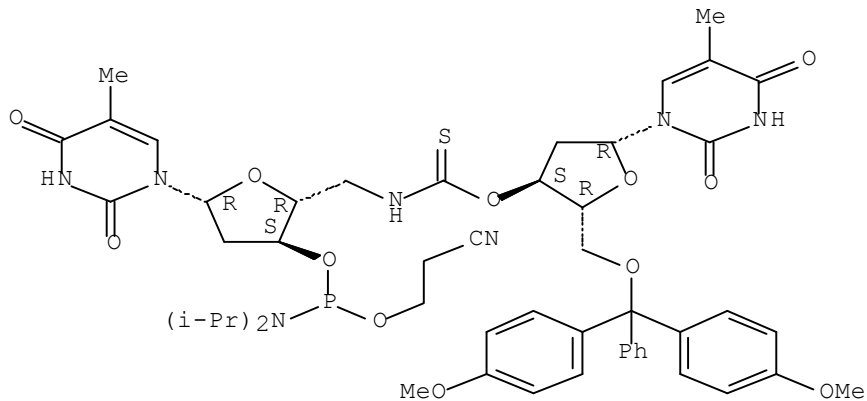
Absolute stereochemistry.



RN 154495-01-9 HCAPLUS

CN Thymidine, 5'-O-[bis(4-methoxyphenyl)phenylmethyl]-3'-O-
dephosphinicothymidylylcarbonothioylimino-(3'→5')-5'-deoxy-,
3'-[2-cyanoethyl bis(1-methylethyl)phosphoramidite] (9CI) (CA INDEX NAME)

Absolute stereochemistry.



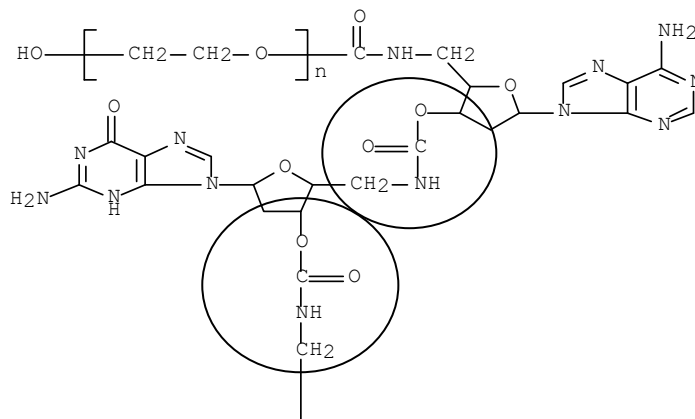
:

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

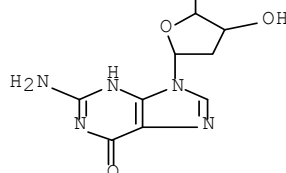
検索例 2 : 新規性・進歩性調査

L10 ANSWER 2 OF 2 HCAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 AN 1992:439848 HCAPLUS [Full-text](#)
 DN 117:39848
 TI Antibacterial activity and inhibition of protein synthesis in Escherichia coli by **antisense** DNA analogs
 AU Rahman, M. A.; Summerton, J.; Foster, E.; Cunningham, K.; Stirchak, E.; Weller, D.; Schaup, H. W.
 CS Dep. Biochem. Biophys., Oregon State Univ., Corvallis, OR, 97331-6503, USA
 SO Antisense Research and Development (1991), 1(4), 319-27
 CODEN: AREDEI; ISSN: 1050-5261
 DT Journal
 LA English
 AB Specific interaction between the 3' end CCUCC sequence of prokaryotic 16S rRNA and a partially complementary sequence preceding the initiating codon of mRNA is believed to be a prerequisite for initiation of protein synthesis. The use of short (3-6 **nucleotides**) synthetic DNA analogs complementary to this sequence to block protein synthesis *in vitro* and *in vivo* in *E. coli* is reported. In the DNA analogs the normal phosphodiester bond in the **antisense** DNA was replaced by methylcarbamate internucleoside linkages to enhance transport across plasma membranes. Of the analogs tested, those with the sequence AGG and GGA inhibit protein synthesis and colony formation by *E. coli* strains lacking an outer cell wall. Polyethylene glycol 1000 (PEG 1000) was attached to the 5' end of some of the test methylcarbamate DNAs to enhance solubility. Analogs of AGG and GGAG with PEG 1000 attached inhibited colony formation in normal *E. coli*. These analogs may be useful food additives to control bacterial spoilage and biomedically as antibiotics.
 IT 141656-50-0 141656-51-1 141679-91-6
 141679-92-7 141679-93-8 141698-71-7
 142339-80-8
 RL: BIOL (Biological study)
 (protein synthesis inhibition by, antibacterial activity in relation to)
 :
 RN 141679-91-6 HCAPLUS
 CN Poly(oxy-1,2-ethanediyl), a-hydro-w-hydroxy-, monoester with 5'-(carboxyamino)-2',5'-dideoxy-3'-O-dephosphinocoadenylylcarbonylimino-(3'↔5')-2',5'-dideoxy-3'-O-dephosphinocoguanlylcarbonylimino-(3'↔5')-2',5'-dideoxyguanosine (9C1) (CA INDEX NAME)

PAGE 1-A



PAGE 2-A



特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

b. リポースの非環式骨格の構造で検索する.

=> FILE REGISTRY

=>

Uploading C:\STNEXP\QUERIES\AMT0SEM3.str

L11 STRUCTURE UPLOADED

=> S L11

SAMPLE SEARCH INITIATED 04:57:43 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 10660 TO ITE

18.8% PROCESSED 2000 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 207013 TO 219387
PROJECTED ANSWERS: 56523 TO 63081

L12 50 SEA SSS SAM L11

=> S L11 FUL

FULL SEARCH INITIATED 04:57:46 FILE 'REGISTRY'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 216541 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 216541 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

61475 ANSWERS

L13 61475 SEA SSS FUL L11

=> FILE HCAPLUS

=> S L13

L14 24334 L13

=> S L14 AND (AD<=19950831 OR PRD<=19940831 OR PY<=1995)

L15 14204 L14 AND (AD<=19950831 OR PRD<=19940831 OR PY<=1995)

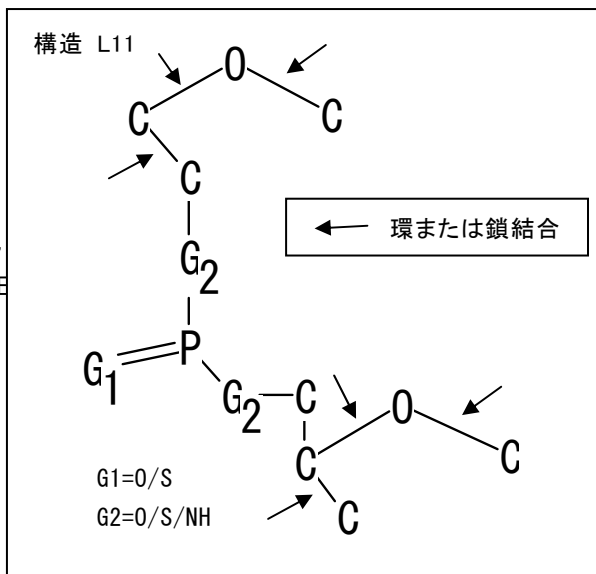
=> S L15 AND ?NUCLEOTID? AND HYDROLY? AND ACYCL?

577463 ?NUCLEOTID?

604852 HYDROLY?

21636 ACYCL?

L16 7 L15 AND ?NUCLEOTID? AND HYDROLY? AND ACYCL?



特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

=> D SCAN TI HITRN

L16 7 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
TI **Nucleotide** exchange reactions catalyzed by ribonuclease and spleen phosphodiesterase. II. Synthesis of **polynucleotides**
IT **4785-04-0**, Cytidine, guanylyl-(3'→5')- **10003-92-6**
, Dicytidine phosphate **17489-53-1**, Adenosine, cytidylyl-
106216-92-6, Uridylic acid, adenylyl-
(preparation of)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):6

L16 7 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
TI Preparation of modified **oligodeoxynucleotides** having restriction enzyme recognition sequences and DNA containing them
IT **135201-61-5P 135201-62-6P 135201-63-7P**
135201-79-5P 138937-88-9P 138965-09-0P
138965-10-3P 138965-11-4P
RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(preparation of, for resistance to restriction enzyme digestion)

L16 7 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
TI **Acyclic oligonucleotide** analogs
IT **169874-08-2P**
RL: BAC (Biological activity or effector, except adverse); BPR (Biological process); BSU (Biological study, unclassified); PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); PROC (Process)
(preparation and stability and hybridization ability of **acyclic oligonucleotides** (oligoglycerotides))

L16 7 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
TI Synthesis of cyclic and **acyclic** oligocytidylates by uranyl ion catalyst in aqueous solution
IT **2326-92-3 2578-53-2 64844-67-3**
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
(TLC mobility of)
IT **55779-61-8P 84311-66-0P 84877-28-1P**
84877-31-6P 140654-90-6P 140654-91-7P
RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(preparation of, by uranyl ion-catalyzed oligomerization of cytidine phosphoroimidazolid)

L16 7 ANSWERS HCAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
TI **Acyclic oligonucleotides**: possibilities and limitations
IT **106491-88-7P 106491-92-3P**
RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(preparation and melting temperature of)
IT **153326-27-3P**
RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(preparation and stability of, toward phosphodiesterase)

:

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

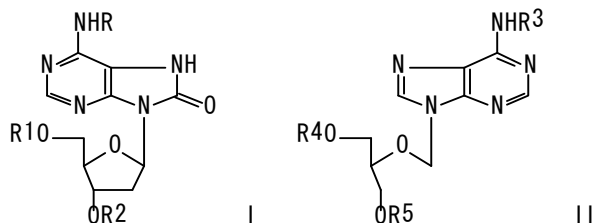
=> S L16 AND (Preparation of modified oligodeoxynucleotides having restriction enzyme)/TI

L17 1 L16 AND (PREPARATION OF MODIFIED OLIGODEOXYNUCLEOTIDES HAVING RESTRICTION ENZYME)/TI

=> D BIB ABS IND

L17 ANSWER 1 OF 1 HCAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
 AN 1992:449168 CAPLUS [Full-text](#)
 DN 117:49168
 TI **Preparation of modified oligodeoxynucleotides having restriction enzyme** recognition sequences and DNA containing them
 IN Takaku, Hiroshi; Ichikawa, Takashi; Komatsu, Hiroshi
 PA Tosoh Corp., Japan
 SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 8 pp.
 CODEN: JKXXAF
 DT Patent
 LA Japanese
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	JP 03236396	A2	19911022	JP 1990-30432	19900210 <--
PRAI	JP 1990-30432		19900210	<--	
GI					



AB Modified **oligodeoxynucleotides** containing 2'-deoxy-7,8-dihydro-8-oxoadenosine (I; R-R2 = H) (AOH) or 9-[[2-hydroxy-1-(hydroxymethyl)ethoxy]methyl]adenine (**acycloadenosine**) (II; R3-R5 = H) (acA), and DNA containing them are prepared Preferred **oligodeoxynucleotides** are d(GGX1TTCC) (III) and d(GXX1TTC) (X = AOH, X1 = A; X = A, X1 = AOH; X = acA, X1 = A; or (X = A, X1 = acA). The restriction enzyme is preferably EcoRI. These modified **oligodeoxynucleotides** show high nuclease resistance and are useful as restriction enzyme inhibitors and ligands for purification of restriction enzymes by affinity chromatog. Introduction of the modified **oligodeoxynucleotides** to DNA prevents the cleavage of the DNA by the restriction enzyme, which broadens the choice of enzymes used in recombinant DNA tech. Thus, tritylation of I (R = Ac, R1 = R2 = H) with 4,4'-dimethoxytrityl chloride in pyridine and esterification of the resulting I (R = Ac, R1 = 4',4-dimethoxytrityl, R2 = H) with [(F3C)2CHO]3P in the presence of pyridine in CH2Cl2 followed by **hydrolysis** in 1M Et3NHCO3 buffer (pH 7.6) gave I [R = Ac, R1 = 4',4-dimethoxytrityl, R2 = P(O)HOH] which was used to prepare III (X = AOH, X1 = A) and III (X1 = A, X1 = AOH) by the manual solid phase synthesis. Similarly II [R3 = Bz, R4 = 4',4-dimethoxytrityl, R5 = P(O)HOH] was prepared and was used to prepare III (X = acA, X1 = A) and III (X = A, X1 = acA). III were not **hydrolyzed** by EcoRI.

IT **135201-61-5P 135201-62-6P 135201-63-7P**
135201-79-5P 138937-88-9P 138965-09-0P
138965-10-3P 138965-11-4P

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
 (preparation of, for resistance to restriction enzyme digestion)

検索例 2 : 新規性・進歩性調査

■ まとめ

各引用文献の CA 抄録番号

1. 117:39848
2. 120:271077
3. 117:49168

① 対応特許の審査状況

- 有効な情報が得られなかった.

② 引用情報

- 引用文献が得られなかった.

③ CAS 登録番号

- 引用文献が得られなかった.

ただし、絞り込み検索によっては、2. 120:271077, 3. 117:49168 の引用文献が得られる可能性はある。

④ 構造検索

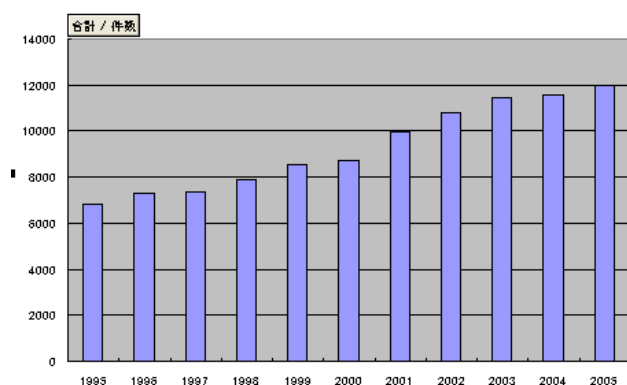
- ・ 新規性調査
 - 引用文献が得られなかった.
- ・ 進歩性調査 (構造を分割して検索)
 - 引用文献 1 (120:271077) が得られた.
 - 引用文献 2 (117:39848) が得られた.
 - 引用文献 3 (117:49168) が得られた.

IDS 化合物

■ IDS 化合物とは、定義の不完全な物質 (IDS : Incompletely-Defined Substance) である。

- ・ 分子式は確定しているが、完全な構造がわかっていない化合物を示す。
 - ① 置換基の位置がわからない化学物質
 - ② 飽和または不飽和結合の位置が特定できない化学物質
 - ③ 縮合反応生成物で正確な構造がわからないもの
 - ④ 構造不明の枝分かれアルキル鎖を含む化学物質
- ・ IDS 化合物の収録件数 25 万件 (特許に収録されている物質 11.7 万件)

IDS 化合物が索引されている特許レコードの年代的な変遷



- ・ ベーシック特許の発行年
- ・ IDS 化合物の検索のポイント
 - IDS 化合物の検索は、通常の化学物質の検索の補完のために行う。
 - 特定化合物を検索する場合は、分子式関連フィールドを利用して検索する。
 - 通常の化合物とともに構造検索を行う場合には、ノイズが入る可能性が高いため、サブセット検索を行う。

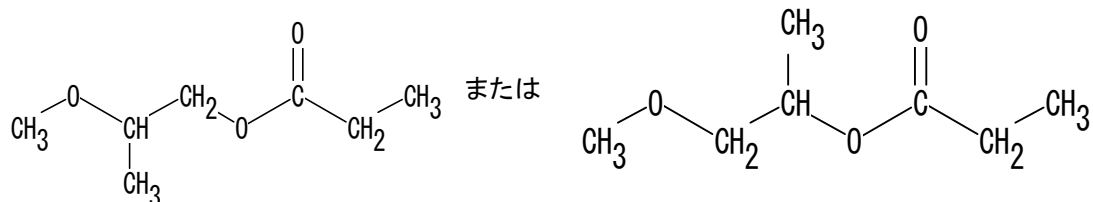
特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

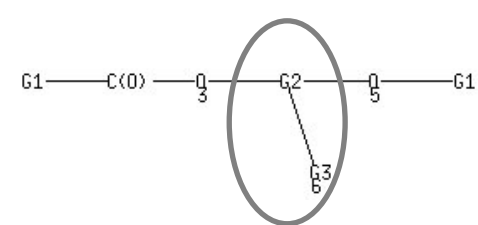
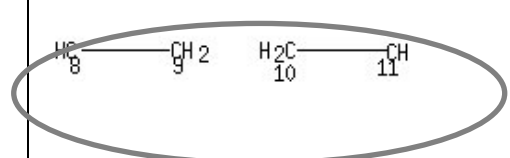
IDS 化合物

■ 特許明細書の記載と CAS の索引方針, MARPAT ファイルとの関係

例: EP 140545 (対応特許特開昭 JP60-078938 CA 抄録番号 103:141466)

下記の構造質問式では, REGISTRY ファイルはヒットしない. MARPAT ファイルはヒットする.



クレーム中の物質の記載	CA の索引	MARPAT
プロピオン酸メキシ プロピル methoxypropyl propionate	RN 98516-33-7 CN Propanol, 1(or 2)-methoxy-, propanoate (9CI) (CA INDEX NAME) CM 1 CRN 79-09-4 CMF C3 H6 O2 $\text{HO} - \overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$ CM 2 CRN 67-56-1 CMF C H4 O $\text{H}_3\text{C} - \text{OH}$ CM 3 CRN 57-55-6 CMF C3 H8 O2 $\begin{array}{c} \text{OH} \\ \\ \text{H}_3\text{C} - \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{OH} \end{array}$	MSTR 1  G1 = R / Me / Et G2 = 8-3 9-5 8-6 / 11-5 10-3 11-6  G3 = H / alkyl / Me / Et Patent location: claims Note: record may include structures from disclosure

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

IDS 化合物

■ IDS 化合物の検索

- ① 部分的に構造不明な物質であり、ある構造部分が分子式でしか示すことができない化学物質である。(構造不明の枝分かれアルキル鎖を含む化合物)

IDS 化合物

RN	26635-64-3	REGISTRY
IN	Isooctane (8CI, 9CI)	
MF	C8 H18	
CI	IDS, COM	
(iso-C7H15)-CH3		

構造が明確な枝分かれアルキル鎖

RN	589-53-7	REGISTRY
IN	Heptane, 4-methyl- (8CI, 9CI)	
MF	C8 H18	
$\begin{array}{c} \text{Me} \\ \\ \text{n-Pr}-\text{CH}-\text{Pr-n} \end{array}$		

■ Isooctane の検索

=> FILE REGISTRY

=> S C8H18/MF AND IDS/CI

129 C8H18/MF

251140 IDS/CI

L1 8 C8H18/MF AND IDS/CI

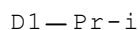
=> D SCAN

L1 8 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN

IN Pentane, (1-methylethyl)- (9CI)

MF **C8 H18**

CI **IDS**

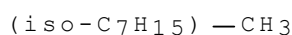


HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 7

IN Isooctane (8CI, 9CI)

MF **C8 H18**

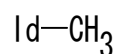
CI **IDS, COM**



:

■ Isooctane の関連 IDS 化合物の検索

構造質問式 L1



=> FILE REGISTRY

=>

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2071

L2 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2

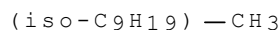
L3 50 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> S L1 AND L2 FULL

L4 18210 SEA SSS FUL L1 AND L2

得られた回答

IN Isodecane



CN Isononanoic acid




IDS 化合物

② ある部分構造の結合位置が不明の化学物質

IDS 化合物

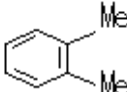
RN 1330-20-7 REGISTRY
 IN Benzene, dimethyl- (9CI)
 MF C8 H10
 CI IDS, COM



2 (D1—Me)

結合位置が明確な化学物質

RN 95-47-6 REGISTRY
 IN Benzene, 1,2-dimethyl- (9CI)
 MF C8 H10
 CI COM



■ Dimethyl Benzene の検索

=> FILE REGISTRY

=> S C8H10/MF AND IDS/CI

799 C8H10/MF

251140 IDS/CI

L1

34 C8H10/MF AND IDS/CI

=> D SCAN

L1 34 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN

IN Benzene, 1,2(or 1,4)-dimethyl- (9CI)

MF C8 H10

CI IDS



2 (D1—Me)

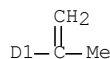
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):33

L1 34 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN

IN 1,3-Cyclopentadiene, (1-methylethenyl)- (9CI)

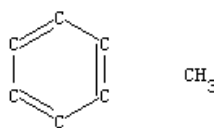
MF C8 H10

CI IDS



■ Dimethyl Benzene と関連 IDS 化合物の検索

構造質問式 L1



注意:

環と CH₃ は結合させない, dimethyl であるが, CH₃ を 2 個作図するとヒットしない。

=> FILE REGISTRY

=>

L1

STRUCTURE UPLOADED

=> SGR 2072

L2 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2

L3 50 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> S L1 FULL

L4 116897 SEA SSS FUL L1 AND L2

=> S L4 AND C H/ELF

330182 C H/ELF

L5

10248 L4 AND C H/ELF

得られた回答

25013-15-4



D1—Me

D1—CH=CH₂

IDS 化合物

- ③ 官能基誘導体の生成位置が不明の物質であり、誘導体生成の可能性を有する複数の官能基が存在し、実際に反応している官能基が不明な化学物質である。

IDS 化合物

RN 118573-28-7 REGISTRY
 IN Propanoic acid, 2-hydroxy-, monoester with 1,2-propanediol (9CI)
 MF C6 H12 O4
 CI IDS

CM 1

CRN 57-55-6
 CMF C3 H8 O2

$$\begin{array}{c} \text{OH} \\ | \\ \text{H}_3\text{C}-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{OH} \end{array}$$

CM 2

CRN 50-21-5
 CMF C3 H6 O3

$$\begin{array}{c} \text{OH} \\ | \\ \text{Me}-\text{CH}-\text{CO}_2\text{H} \end{array}$$

縮合反応生成物の構造が明確な物質

RN 14396-73-7 REGISTRY
 CN Propanoic acid, 2-hydroxy-, 2-hydroxypropyl ester (9CI)
 MF C6 H12 O4

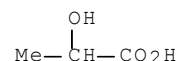
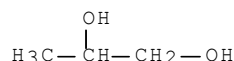
$$\begin{array}{c} \text{OH} \quad \quad \quad \text{O} \quad \text{OH} \\ | \quad \quad \quad || \quad | \\ \text{Me}-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{O}-\text{C}-\text{CH}-\text{Me} \end{array}$$

構造質問式:

スクリーン 2073

L1

L2



S L1 AND L2

■ 118573-28-7 の検索

=> FILE REGISTRY

=> S 57-55-6/CRN AND 50-21-5/CRN AND 1/NC

L1 2 57-55-6/CRN AND 50-21-5/CRN AND 1/NC

=> D SCAN

L1 2 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN

IN Propanoic acid, 2-hydroxy-, monoester with 1,2-propanediol (9CI)

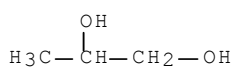
MF C6 H12 O4

CI IDS

CM 1

CRN 57-55-6

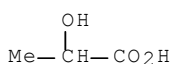
CMF C3 H8 O2



CM 2

CRN 50-21-5

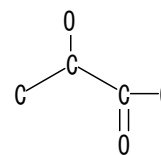
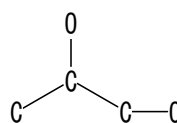
CMF C3 H6 O3



■ 118573-28-7 と 14396-73-7 の検索

構造 L1

構造 L2



=> FILE REGISTRY

=>

L1 STRUCTURE UPLOADED

=>

L2 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1 AND L2

L3 50 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> S L1 AND L2 FUL

L4 128889 SEA SSS FUL L1 AND L2

=> S L4 AND 1/NC AND IDS/CI

L5 942 L9 AND 1/NC AND IDS/CI

=> S L5 AND 118573-28-7

L6 1 L5 AND 118573-28-7

=> S L4 AND 14396-73-7

537 1 L4 AND 14396-73-7

IDS 化合物

- ④ 不飽和結合の位置が不明の物質であり, ある多重結合の位置が特定できず, 水素原子数のみしか示すことのできない物質.

IDS 化合物

```

RN  25167-67-3  REGISTRY
IN  Butene (8CI, 9CI)
MF  C4 H8
CI  IDS, COM

    CM  1

    CRN 106-97-8
    CMF C4 H10

    H3C—CH2—CH2—CH3
    
```

不飽和の位置が明確な化合物

```

RN  106-98-9  REGISTRY
IN  1-Butene (8CI, 9CI)
MF  C4 H8
CI  COM

    H3C—CH2—CH=CH2
    
```

■ Butene の検索

=> FILE REGISTRY

=> S C4H8/MF
L1 197 C4H8/MF

=> S L1 AND IDS/CI
251164 IDS/CI
L2 5 L1 AND IDS/CI

=> D SCAN

L2 5 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Butene (8CI, 9CI)
MF C4 H8
CI IDS, COM

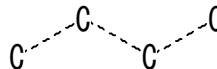
CM 1

CRN 106-97-8
CMF C4 H10

H3C—CH2—CH2—CH3

■ Butene と 1-Butene の検索

構造 L1



結合は不定

=> FILE REGISTRY

=>
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1 EXA
L2 35 SEA EXA SAM L1

=> S L1 EXA FUL
L3 820 SEA EXA FUL L1

=> S L3 AND IDS/CI
L4 212 L3 AND IDS/CI

=> S L4 AND 25167-67-3
L5 1 L4 AND 25167-67-3

=> S L3 AND 106-98-9
L6 1 L3 AND 106-98-9

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

非特定誘導体

■ 例：EP 243802（対応特許特開昭 JP62-24992 CA 抄録番号 108:169317）

- ・ 生成物が具体的に記載されていない場合，生成物を想定して索引しない。

公報中の物質の記載	CA の索引
<p>実施例</p> <p>シリコンウレタンメタアクリレートの合成</p> <p>γ-イソシアネートプロピルトリエトキシシランと2-ヒドロキシエチルアクリレートの反応</p>	<p>IT 818-61-1D, 2-Hydroxyethyl acrylate, reaction products with (isocyanatoalkyl)alkoxysilanes 868-77-9D, reaction products with (isocyanatoalkyl)alkoxysilanes 999-61-1D, 2-Hydroxypropyl acrylate, reaction products with (isocyanatoalkyl)alkoxysilanes 24801-88-5D, reaction products with hydroxyalkyl acrylates 33491-28-0D, reaction products with hydroxyalkyl acrylates 80413-52-1D, Placel FA-2, reaction products with (isocyanatoalkyl)alkoxysilanes 87320-06-7, Kayarad TC110S 113880-68-5</p> <p>RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses) (coatings, photocurable and storage-stable, for optical fibers)</p> <p>RN 24801-88-5 CAPLUS</p> <p>CN Silane, triethoxy(3-isocyanatopropyl)- (9CI) (CA INDEX NAME)</p>
<p>特許請求の範囲</p> <p>新規なシリコンウレタン(メタ)アクリレート，これを用いた樹脂組成物およびコーティング剤</p> $ \begin{array}{c} \text{OR}_2 \\ \\ \text{O}=\text{C}=\text{N}-\text{R}_1-\text{Si}-\text{OR}_3 \\ \\ \text{OR}_4 \end{array} $ <p style="text-align: center;">+</p> <p>メタアクリル酸 ヒドロキシル基含有 エステル</p>	$ \begin{array}{c} \text{OEt} \\ \\ \text{EtO}-\text{Si}-(\text{CH}_2)_3-\text{NCO} \\ \\ \text{OEt} \end{array} $ <p>RN 868-77-9 CAPLUS</p> <p>CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, 2-hydroxyethyl ester (9CI) (CA INDEX NAME)</p> $ \begin{array}{c} \text{H}_2\text{C} \quad \text{O} \\ \quad \\ \text{Me}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH} \end{array} $ <p>RN 999-61-1 CAPLUS</p> <p>CN 2-Propenoic acid, 2-hydroxypropyl ester (9CI) (CA INDEX NAME)</p> $ \begin{array}{c} \text{OH} \quad \quad \quad \text{O} \\ \quad \quad \quad \\ \text{Me}-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{O}-\text{C}-\text{CH}=\text{CH}_2 \end{array} $

特許の無効資料調査における CAS FILES の利用

非特定誘導体

- CAS は、構造や分子式を特定できないような誘導体を非特定誘導体と呼ぶ。

このような化合物には、固有の CAS 登録番号を付与できない。このため、1977 年以降のレコードでは、誘導体化する前の構造が明らかな化学物質（原料や基本骨格など）の CAS 登録番号の後ろに D を付けて索引している。

- 非特定誘導体の索引は、年代によって異なる。1976 年以前のレコードも網羅的に検索する際は、CAS 登録番号に D が付いていないレコードも検索する。

収録年 *	非特定誘導体の索引	検索例 (L1 は REGISTRY ファイルで得られた L#)
1967 年以降	CAS 登録番号 + D + キーワード	=> <u>S L1/D (S) CHLORINAT?</u>
1976 年以前	CA 索引名 + キーワード CAS 登録番号 + キーワード	=> <u>S ETHENE HOMOPOLYMER (S) CHLORINAT? RAN=(, 1976)</u> => <u>S ETHYLENE POLYMERS (S) CHLORINAT? RAN=(, 1976)</u> => <u>S L1 (S) CHLORINAT? RAN=(, 1976)</u>

* 現在、1976 年以前の索引に、D の付与作業を行っている。

- 検索例：無水マレイン酸 (108-31-6) とポリプロピレン (9003-07-0) の反応物の検索

```
=> FILE REGISTRY
=> S 108-31-6;S 9003-07-0
L1      1 108-31-6
        (108-31-6/RN)
L2      1 9003-07-0
        (9003-07-0/RN)
=> FILE HCAPLUS
=> S L1/D (S) POLYPROPYLENE OR L2/D (S) (MALEATED OR MALEIC ANHYDRIDE)
        :
L2      5053 L1/D (S) POLYPROPYLENE OR L2/D (S) (MALEATED OR MALEIC ANHYDRIDE)
=> S L1 (S) POLYPROPYLENE OR L2 (S) (MALEATED OR MALEIC ANHYDRIDE) RAN=, 1976 ← 1976 年以前
        :
L3      132 L1 (S) POLYPROPYLENE OR L2 (S) (MALEATED OR MALEIC ANHYDRIDE)
=> S 2,5-FURANDIONE (S) POLYPROPYLENE OR PROPENE HOMOPOLYMER (S) (MALEATED OR MALEIC
        ANHYDRIDE) RAN=, 1976 ← 1976 年以前
        :
L4      34 2,5-FURANDIONE (S) POLYPROPYLENE OR PROPENE HOMOPOLYMER (S) (MAL...
```

1977 年以降の回答	
AN	2006:1062189 HCAPLUS
IT	108-31-6D , 2,5-Furandione, reaction products with polypropylene RL: POF (Polymer in formulation); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses) (thermoplastic resin foams with high mech. strength)
1976 年以前の回答	
AN	1976:561461 HCAPLUS
IT	1-Propene, homopolymer, maleated RL: USES (Uses) (laminates with sapond. ethylene-vinyl acetate copolymer, adhesives for)