実践！MARPAT
STN INTERNATIONAL
リフレッシュセミナー
A. MARPAT ファイルの概要

MARPAT ファイルとは ........................................................................................................ 1
収録対象 ............................................................................................................................ 2
レコード構成 ....................................................................................................................... 6
マルクーシュ構造の索引 ...................................................................................................... 8
マッチレベル .................................................................................................................... 10
元素数レベル .................................................................................................................. 12
まとめ ................................................................................................................................. 14

B. 検索例

MARPAT ファイルの検索 ...................................................................................................... 15
MARPAT ファイルの構造検索の注意点 ............................................................................. 16
検索例 1：複素環化合物の検索 ....................................................................................... 17
  参考：MARPAT ファイルでの総合環・スピロ環の索引 ............................................... 22
  参考：フルファイル検索の結果に INCOMPLETE の回答が含まれている場合 .......... 28
  参考：回答の経済的な表示方法 ................................................................................. 35
検索例 2：配位化合物の検索 ........................................................................................... 36
  参考：CPlus ファイルでの配位化合物の索引 ............................................................ 45
  参考：REGISTRY/CPlus ファイルでの配位化合物の検索 ........................................ 46
  参考：MARPAT ファイルでの塩の収録 ...................................................................... 49
  参考：CASLINK ............................................................................................................ 50
A MARPAT ファイルの概要

MARPAT ファイルの収録内容やマッチレベルについてご紹介します。
A MARPAT ファイルの概要

MARPAT ファイルとは

■ MARPAT ファイルは、Chemical Abstracts Service (CAS) が作成する、マルクーシュ構造を含む特許情報のデータベースであり、マルクーシュ構造を対象にした構造検索を行うことができる。

■ MARPAT ファイルと REGISTRY ファイルでは、索引対象や索引方針、検索機能が異なる。構造検索を用いて物質に関する特許調査を行う際、REGISTRY/CAplus ファイルだけではなく、MARPAT ファイルも利用することによって、より網羅的な調査を行うことができる。

■ この章では、MARPAT ファイルのコンテンツおよび検索について、下記の 4 つを中心に紹介する。

  • 収録対象
  • レコード構成
  • マルクーシュ構造の索引
  • マッチレベルと元素数レベル
A MARPAT ファイルの概要

収録対象

■ MARPAT ファイルには、CA 収録対象特許のうち、マルクーシュ構造の記載がある特許が収録される。

・ MARPAT ファイルに収録されている特許はすべて CA ファイルにも収録されている。

■ 収録対象物質

・ 有機化合物、有機金属化合物、低重合の物質（重合度が 10 までの物質）

■ 収録対象外の化合物

・ 合金、金属酸化物、無機塩、金属間化合物、ポリマー*、タンパク質・核酸*

・ 特定の化学物質（REGISTRY ファイルに収録されるような構造定義が明確な物質）

・ MARPAT ファイルに検索可能な構造を収録することができないような表現（例：“Ph-R” R is any substituent, “halogenated alkenediols”) で特許中に記載されている物質

* ポリマー関連の特許でも下記の物質は収録対象となる。

- 重合度が 10 までのオリゴマー
- クレームされているモノマー（例：We claim a monomer of the formula....）
- 重合触媒や添加剤

* 核酸・タンパク質の特許でも下記の場合は収録対象となる。

- ～150 アミノ残基までのペプチド、～30 残基までの核酸

（MARPAT ファイルでは核酸・タンパク質は構造で収録され、1 文字コードや 3 文字コードは使用しない。）

MARPAT ファイルには、無機化合物やポリマーは収録されていない
A MARPAT ファイルの概要

収録対象

■ マルクーシュ構造の収録源と収録年

・ CAS が作成しているレコードと, INPI（フランス特許庁） 提供のデータがある。

・ 1985 年（特許発行年）以降 - CAplus/CA ファイルのベーシック特許から収録（CAS 作成）

<table>
<thead>
<tr>
<th>マルクーシュ構造の存在位置</th>
<th>MARPAT ファイル中の記載</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>特許請求範囲</td>
<td>マルクーシュ構造が収録される</td>
</tr>
<tr>
<td>発明の詳細な説明</td>
<td>特許請求範囲中にマルクーシュ構造 がない場合に収録される</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>発明の詳細な説明のマルクーシュ構造 が, 特許請求範囲のマルクーシュ構造 を包括する場合に収録する</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>Patent location: claim 1</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>Patent location: disclosure</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>Note: also incorporates broader disclosure</td>
</tr>
</tbody>
</table>

・ 1961～1987 年（特許発行年）- INPI より提供されたデータ（ベーシック特許とは限らない）

<table>
<thead>
<tr>
<th>マルクーシュ構造の存在位置</th>
<th>MARPAT ファイル中の記載</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>特許請求範囲または 発明の詳細な説明</td>
<td>INPI が所有するデータの中で, CA 収録特許であるもの</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>Patent location: claims</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>Note: record may include structures from disclosure</td>
</tr>
</tbody>
</table>

* 1985～1987 年のレコードは, CAS 作成のデータおよび INPI 由来のデータのどちらかを収録している

■ ベーシック特許発行年ごとのレコード件数

![レコード数（件）](image)

ベーシック特許発行年

CAS
INPI
A MARPAT ファイルの概要

収録対象

■ 特許中の化学物質索引

化学関連の特許

- 書誌情報、抄録、索引が作成され、CAplus/CAファイルに収録される。
- 実施例・特許請求範囲中の重要な特定の化学物質は、CAS登録番号で索引される。

MSTR1:
CAS登録番号
Pr-ii-Pr
OMeMeO
F
C
O
N
C
O

CAplus/CA の
特許情報（書誌情報）、抄録、索引

マルクーシュ構造

化学関連の特許

- MARPATファイルには、特許請求範囲中のマルクーシュ構造が索引される。
- MARPATファイルには CAファイルと同じ特許の情報が含まれている。

実施例 特許請求範囲*

R1, R5 = C1-10 alkyl, C6-10 aryl; R2, R4 = H, C1-10 alkyl, CO2R6 ...

* 発明の詳細な説明から索引する場合もある
A MARPAT ファイルの概要

収録対象

■ MARPAT ファイルと REGISTRY ファイルの収録範囲の違い

・ REGISTRY ファイルは、特許請求項中（1981-）または実施例中（1907-）に記載されている特定の化学物質（構造が明確な物質）が収録対象。

・ MARPAT ファイルは、特許請求項中または発明の詳細な説明中のマルクーシュ構造が収録対象。

<table>
<thead>
<tr>
<th></th>
<th>MARPAT</th>
<th>REGISTRY/CAplus</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>特許請求範囲</td>
<td>1961-</td>
<td>1981-</td>
</tr>
<tr>
<td>マルクーシュ構造</td>
<td></td>
<td>発明の内容に関わる特定の化学物質</td>
</tr>
<tr>
<td>発明の詳細な説明</td>
<td>1961-</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>特許請求範囲中にマルクーシュ構造がない場合、または発明の詳細な説明のマルクーシュ構造が、特許請求範囲のマルクーシュ構造を包括する場合に収録する（ただし、発明の詳細な説明からは反応物や中間体は収録しない）</td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>実施例</td>
<td></td>
<td>1907-</td>
</tr>
<tr>
<td>発明の内容に関わる特定の化学物質</td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
</tbody>
</table>
* 何らかの hard data がある物質が索引される。
* 1993 年以降の一部の特許については、実施例中の hard data のない物質（Prophetic 物質）も索引される。
* 比較として挙げられている例示物質は索引されない。

REGISTRY ファイルはクレーム、実施例中に具体的に記載された化学物質が収録され、MARPAT ファイルはマルクーシュ構造が収録される
A MARPAT ファイルの概要

レコード構成

■ MARPAT ファイルは、CA ファイルと同様、特許ファミリー単位で構成されている。

・ CA ファイルのレコード番号 (AN) (= Caplus ファイルの CA 抄録番号 (DN)) と MARPAT ファイルのレコード番号 (AN) は共通である。

・ MARPAT ファイルのレコードは、CA ファイルと同じ書誌情報 (BIB)・抄録(ABS)・索引(IND)と、マルクーシュ構造 (MSTR) で構成されている。

■ 下記以外のフィールドは表示のみ可能で検索はできない。

<table>
<thead>
<tr>
<th>検索項目</th>
<th>コード</th>
<th>説明</th>
<th>入力例</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>レコード番号</td>
<td>/AN</td>
<td>CA 抄録番号</td>
<td>=&gt; S 109:73345/AN</td>
</tr>
<tr>
<td>基本索引</td>
<td>/BI (なし)</td>
<td>マルクーシュ構造中のテキスト情報 から切り出した単語</td>
<td>=&gt; S SALT#</td>
</tr>
<tr>
<td>入力日</td>
<td>/ED</td>
<td>入力日</td>
<td>=&gt; S 20070321/ED</td>
</tr>
<tr>
<td>更新日</td>
<td>/UP</td>
<td>更新日</td>
<td>=&gt; S 20070321/UP</td>
</tr>
</tbody>
</table>

・ CAplus/CA ファイルと MARPAT ファイル間は、無料で L 番号を用いたクロスオーバー検索ができる。書誌情報やキーワードで絞り込める場合は、CAplus/CA ファイルにクロスオーバーしてから検索する。

![MARPAT ファイル構成図](image)

検索できない

×

=> FILE MARPAT : L1
=> S L1 AND 2013/PY

無料

![CA ファイル構成図](image)

![CAplus ファイル構成図](image)

○

=> FILE MARPAT : L1
=> FILE CAPLUS

=> S L1 AND 2013/PY
A MARPAT ファイルの概要

レコード構成

■ レコード例

レコード番号（AN）は CA ファイルと同じ（CA 抄録番号）

AN 136:102298 MARPAT
TI Preparation of substituted pyridines
IN Norbert, Lui; Panskus, Hans; Schnatterer, Albert
PA Bayer A.-G., Germany
CODEN: JKXXAF
DT Patent
LA Japanese
IPCI C07D0213-807 [ICM, 7]: C07D0213-00 [ICM, 7, C*]: C07B0061-00 [ICS, 7]
IPCR C07D0213-807 [I, A]: C07B0061-00 [1, C*]: C07B0061-00 [1, A]: C07D0213-00
[I, C*]: C07D0213-79 [N, A]: C07D0213-80 [I, A]: C07D0213-803 [I, A]
CC 27-16 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))
FAN.CNT 2

PATENT NO. KIND DATE APPLICATION NO. DATE
---------------  ----  --------       ---------------  --- ----- 
PI JP 2002020372 A2 20020123 JP 2001-169465 20010605
DE 10111874 A1 20011213 DE 2001-10111874 20010313
PRAI DE 2000-10028141 20000608

GI

AB Title compds. I (R1, R5 = C1-10 alkyl, C6-10 aryl; R2, R4 = H, C1-10 alkyl, CN, CO2R6; R6 = C1-10 alkyl; R3 = H, C1-10 alkyl, (un)substituted C6-10 aryl) are prepared by reaction of 1,4-dihydropyridine II (R1-R5 = same

ST pyridine prepn; hydropyridine oxind methyl nitrite
IT Oxidation
(preparation of substituted pyridines)
IT 122549-42-2P
RL: IMF (Industrial manufacture); SPN (Synthetic preparation): PREP

MSTR 1

基本骨格 1
(G グループを含めた構造)

G1 = alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> / (Example: Pr-i)
G2 = H / alkyl <containing 1-10 C> / CN / alkoxycarbonyl <containing 1-10 C> / (Examples: CO2Me / CO2Et)
G3 = H / alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> (opt. std. by 1 or more G4) / (Example: 13)

基本骨格 1 中の G グループ（置換基）の定義

* 数字は構造フラグメント中の結合点

BIB

ABS

IND

MSTR
マルクーシュ構造の索引

マルクーシュ構造は、基本骨格（G グループを含めた構造）と置換基（G グループ）で索引される。

例 1

【特許請求範囲の抜粋】

【MARPAT ファイルに収録されるマルクーシュ構造】

MSTR 1

G1 = alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> / (Example: Pr-i)

G2 = H / alkyl <containing 1-10 C> / CN / alkoxy carbonyl <containing 1-10 C> / (Examples: CO2Me / CO2Et)

G3 = H / alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> / (opt. subst. by 1 or more G4) / (Example: 13)

G4 = halo / NO2 / alkoxy carbonyl <containing 1-10 C> / CN / alky 〈containing 1-10 C> / (opt. subst. by 1 or more G4) / (Example: 13)

特許位置: claim 1

【発明の詳細な説明の抜粋】

0012 式 (I) 及び式 (II) において、R及びR'は特によし乳はイソプロピルを表し、R及びR'は特に好ましくは COOR（ここでR'はメチル又はエチルである）を表し、そしてR'は特に好ましくは 4-ブーフオキシチルを表す。
A MARPAT ファイルの概要
マルクーシュ構造の索引

例 2>
【特許請求範囲の抜粋】
【MARPAT ファイルに収録されるマルクーシュ構造】

MSTR 1

G1 = R "electron-withdrawing group" /
(Specifically claimed: C(O)) /...

R グループ
この中に説明が記述されるが、この部分は検索できない

別のクレーム中（従属項など）で権利請求されている置換基を (Specifically claimed) として収録している

G グループは下記の 3 つのレベルのいずれかで索引されている。

・ 特定原子 （H, NO₂, pyridine, 構造フラグメントなど）
・ 一般式グループ （halo, alkyl, cycloalkyl など）
・ R グループ （構造で表現できない organic group や electron withdrawing group など）

G グループには、マルクーシュ構造の定義中の置換基の情報だけでなく、従属項や詳細の説明中に記載された具体的な置換基の情報も追加している。
A MARPAT ファイルの概要

マッチレベル

- MARPAT ファイルの構造検索では、作図した置換基が「特定原子」「一般式グループ」「R グループ」のどのレベルで索引されているものが欲しいのかを、マッチレベルという属性でコントロールすることができる。
- マッチレベルには、「原子（atom）」「クラス（class）」「不定（any）」の 3 種類がある。
- 同じ構造でも、マッチレベルの指定の仕方によって得られる回答が異なる。

■ マッチレベル：「原子（atom）」

・ G グループの定義中、特定原子で書かれているものだけがヒットする。

① 特定原子で作図したノードにマッチレベル [原子] を指定した場合

構造質問式

MARPAT ファイルの回答

* マッチレベル [原子] を指定したノードは、特定原子の回答のみがヒットする。この場合は、Me のみ。
* alkyl や i-Pr はヒットしない。

alkyl や alkylene などの回答も必要な場合は [クラス] の指定に変更する
i-Pr の回答も必要な場合は、Me で作図したノードを Ak などに変更する

② 一般式グループで作図したノードにマッチレベル [原子] を指定した場合

構造質問式

MARPAT ファイルの回答

* マッチレベル [原子] を指定したノードが一般式グループノード Ak であっても、特定原子の回答のみがヒットする。
* alkyl はヒットしない。

alkyl や alkylene の回答も必要な場合は [クラス] の指定に変更する
A MARPAT ファイルの概要

マッチレベル

■ マッチレベル：「クラス（class）」

・ G グループの定義中、特定原子、または一般式グループで書かれているものがヒットする。

① 特定原子で作図したノードにマッチレベル [クラス] を指定した場合

構造質問式  

MARPAT ファイルの回答

* マッチレベル [クラス] を指定したノードは、特定原子または一般式グループの回答がヒットする。
* i-Pr はヒットしない。

・ i-Pr の回答も必要な場合は、Me で作図したノードを Ak などに変更する

② 一般式グループで作図したノードにマッチレベル [クラス] を指定した場合

構造質問式  

MARPAT ファイルの回答

* マッチレベル [クラス] を指定したノードは、特定原子または一般式グループの回答がヒットする。

■ マッチレベル：「不定（any）」

・ G グループの定義中、特定原子、一般式グループに加え、R グループで書かれているものもヒットする。

構造質問式  

MARPAT ファイルの回答

* マッチレベル [不定] を指定したノードは、特定原子または一般式グループ、R グループの回答がヒットする。
A MARPAT ファイルの概要

元素数レベル

■ マッチレベルを「クラス (class)」に指定した場合には, さらに, 元素数レベルという属性で,得られる回答をコントロールすることができる。

・ 元素数レベルには, 「限定する (limited)」と「限定しない (unlimited)」の 2 種類がある。

■ 一般式グループの表現と元素数レベル

・ MARPAT ファイル中の一般式グループには, 後に続く < > の中に元素の種類と数が記載されている場合と, 記載されていない場合がある。

- 元素の種類と数の記載有りの例

<table>
<thead>
<tr>
<th>元素の種類と数</th>
<th>元素の種類と数</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>G2 = alkyl &lt;containing 1-20 C&gt; / cycloalkyl &lt;containing 3-20 C&gt; / alkoxy &lt;containing 1-6 C&gt; / cycloalkyloxy &lt;containing 3-6 C&gt; /</td>
<td></td>
</tr>
</tbody>
</table>

- 元素の種類と数の記載無しの例

<table>
<thead>
<tr>
<th>元素の種類と数</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>G1 = alkyl / alkoxy / alkylamino / dialkylamino</td>
</tr>
</tbody>
</table>

・ 一般式グループにおける元素の種類と数を回答の条件に含めるには, 元素数レベルを指定する。

■ 元素数レベルの指定と得られる回答

<table>
<thead>
<tr>
<th>限定 (LIMITED)</th>
<th>一般式グループがヒットする場合, 指定した元素の種類と数の条件を満たす記載のある回答のみが得られる</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>限定しない (UNLIMITED)</td>
<td>上記に加え, 元素の種類と数が明記されていない回答 (指定した元素の存在が否定されない回答を含む) も得られる</td>
</tr>
</tbody>
</table>

* 元素数の指定がない場合は, 元素数レベルの設定は検索結果に影響しない。

・ 元素数の指定方法

- Ak, Hy などの一般式グループに元素数を指定する。

- 特定の構造を作図する。
A MARPAT ファイルの概要

元素数レベル

■ マッチレベルとの関係

・ マッチレベル [原子]  : [限定], [限定しない] のいずれを指定しても回答に影響なし

・ マッチレベル [クラス]  : [限定], [限定しない] の指定で回答に違いがある．
  * 元素数の指定がある場合

・ マッチレベル [不定]  : 必ず [限定しない] を指定して検索する．

* グループ原子記号 X (ハロゲン), M (金属) の
  元素数レベルを変更しても回答に影響はない

炭素数 1-3 を指定

Ak 以外のノードは
マッチレベル [原子]

R は、具体的な置換基が記載されていないことを表す
A MARPAT ファイルの概要

まとめ

■ MARPAT ファイルでは、マルクシュ構造の置換基を、「特定原子」「一般式グループ」「R グループ」という 3 つのレベルで索引している。

■ 構造検索の際、上記のどのレベルで索引されているものが欲しいのかをマッチレベルで指定することができる。

■ 元素数レベルを「限定」にすると、一般式グループのうち、元素の種類と数が作図した条件に合うものだけに限定することができる。

■ マッチレベルと元素数レベルとの違いによる回答の包含関係（例：炭素数 1-5 を指定した場合）
B 検索例

MARPAT ファイルを用いた構造検索について、検索の流れとポイントをご紹介します。
B 検索例

MARPAT ファイルの検索

■ MARPAT ファイルと REGISTRY ファイルでは、索引対象が異なる。REGISTRY ファイルには、実施例、クレームで構造や名称が具体的に記載された化合物（特定化合物）のみが収録されるが、MARPAT ファイルは、マルクーシュ構造で定義された置換基がそのまま収録されている。

・ そのため、実際に実施例で使われた化合物に目的の構造が含まれないが、クレームの範囲には含まれる、というような特許を MARPAT ファイルでは見つけることができる。

■ MARPAT ファイルを検索するには、下記の 2 通りの方法がある。

① CASLINK を利用して、REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルをまとめて検索する。

② MARPAT ファイルで検索する。

REGISTRY ファイルと同じ構造問問式で検索する場合

---

簡単に検索できる CASLINK がおすすめ

* P.50 参照

REGISTRY ファイルの検索結果を見てから MARPAT ファイルでも検索するかどうか決める場合

---

MARPAT ファイルで検索する

REGISTRY ファイルと異なる構造問問式で検索する場合*

* 例えば、塩や配位化合物は REGISTRY と MARPAT で作図方法が異なるので、同じ構造問問式を用いることができない。（検索例 2 参照）
B 検索例

MARPAT ファイルの構造検索の注意点

■ REGISTRY ファイルではできるが、MARPAT ファイルではできない機能がある。

・ 検索タイプは、CSS（閉構造部分構造検索）か SSS（部分構造検索）のみ。
  - EXA（完全一致検索）、FAM（ファミリー検索）は利用できない。

・ 複数の構造質問式を AND, OR, NOT を用いて演算することはできない。

・ スクリーン検索は利用できない。

・ 結合属性「環/鎖」は利用できない。（ただし、ノード属性は「環/鎖」が指定できる。）

■ G グループや繰り返しグループを多数使用すると、STRUCTURE TOO LARGE のエラーになってしまう場合がある。

・ REGISTRY ファイルでは検索可能でも、MARPAT ファイルでは検索できない場合もある。

=> FILE MARPAT

=> $ L1
STRUCTURE TOO LARGE - SEARCH ENDED
A structure in your query is too large. You may delete attributes or atoms to reduce the size of the structure and try again.
検索例 1: 複素環化合物の検索

- 下記のような構造を有する化合物がホスホジエステラーゼ阻害剤*として有効であることが分かった。これらの物質に関して出願を検討するため特許調査を行う。

- 構造質問式の検討
  - 重要な部分構造を決める。
    - 今回は、下記の 6-5 員環または 6-7 員環に、さらに環がスピロ結合した環構造が重要である。

- その他の条件を決める。
  - R に結合する環は、炭素環、ヘテロ環両方を含めて検索する。

* ホスホジエステラーゼ阻害剤とは...ホスホジエステラーゼ (PDE) を阻害することにより、cAMP あるいは cGMP の細胞内濃度を上昇させる薬である。cAMP は炎症反応の調節に重要な物質であり、特に PDE 4 阻害剤は炎症性疾患、例えば喘息やアトピー性皮膚炎などの治療に有効であるとして研究されている。
B 検索例

検索例 1 : 複素環化合物の検索

構造質問式の作図 : スピロ環を繰り返しグループで作図する場合

作図のポイント

- 6-5 員環と 6-7 員環をまとめて検索したい → 繰り返しグループを利用する

- 必ずスピロ結合するが、スピロ環の構造は限定しないため
  → 不定結合（-----）と A (H 以外の元素) を利用すると、スピロ環を作図する

  * この作図方法だと、特定の環数を決める必要があるので、今回は 3-7
  員環がヒットするよう作図する

- カルボニル基の下の環は、ヘテロ環も含めて広めに探したい
  → Cy (環系) で作図

注 : 一般式グループ記号 (Ak, Cy, Hy, Cb) を環上に作図することはできない。

G1 = O, S, N
G2 = CH₂, NH
環の孤立を指定
B 検索例
検索例 1：複素環化合物の検索

■ サンプル検索（REGISTRY ファイル）

=> FILE REGISTRY
=>
Uploading C:\...\STN Express 8.5\Queries\text20140116-a.str

L1  STRUCTURE UPLOADED
=> $ L1

FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **INCOMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:  26053925 TO 26178155
PROJECTED ANSWERS:      1 TO      94

L2  1 SEA SSS SAM L1
=> SCR 945
L3  SCREEN CREATED
=> $ L1 AND L3
SAMPLE SEARCH INITIATED 14:06:02
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 32486 TO ITERATE
100.0% PROCESSED 32486 ITERATIONS 4 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:  638930 TO 660510
PROJECTED ANSWERS:      4 TO      200

L4  4 SEA SSS SAM L1 AND L3

■ サンプル検索（MARPAT ファイル）

=> FILE MARPAT
=> $ L1

STRUCTURE TOO LARGE - SEARCH ENDED
A structure in your query is too large. You may delete attributes or atoms to reduce the size of the structure and try again.

MARPAT ファイルでは STRUCTURE TOO LARGE のため構造検索できない
B 検索例
検索例 1 : 複素環化合物の検索

構造質問式の作図 : 繰り返しグループを減らした作図

・ 作図のポイント

- STRUCTURE TOO LARGE のエラーを回避するため, 繰り返しグループや G グループを
減らしたい → フィド結合の部分を, 結合非水素数で指定

- スピロ環を含めるためには環の孤立は指定できない
→ 結合非水素数で, 環の一部のみ縮環を禁止する

この構造質問式は, MARPAT ファイルで検索可能だった。

MARPAT ファイルでは, マッチレベルの指定の仕方によって得られる回答
が変わる。
各部分構造がそれぞれどのレベル（特定原子, 一般式グループ, R グループ）
で索引されているものをヒットさせたいかをマッチレベルで設定する
必要がある。
B 検索例

検索例 1 : 複素環化合物の検索

・ マッチレベル : スピロ環部分を広く検索したい場合

- スピロ環の全ての部分が重要であるので、特定原子として索引されているものだけに限定する → マッチレベル「原子」（デフォルト）

- スピロ結合する環と Cy で作図した環は、一般式グループ（Carbocycle など）でもヒットしてほしい → スピロ結合するノードと Cy のマッチレベルを「クラス」に変更する

・ マッチレベル : スピロ環部分を特定原子で索引されているものに限定する場合

- スピロ環も含めて重要な部分構造なので、特定原子として索引されているものだけに限定する → マッチレベル「原子」（デフォルト）

- Cy で作図した環は、一般式グループ（Carbocycle など）でもヒットしてほしい → Cy のマッチレベルを「クラス」に変更する
参考：MARPAT ファイルでの縮合環・スピロ環の索引

MARPAT ファイルでは、スピロ環や縮合環を一般式グループで表す際に、下記のように索引する場合がある。

注1）ただし、上記のノードについて、スピロ結合に限定するため、結合非水素数を「ちょうど4、環」に設定しても、下記③のようなレコードがノイズとして含まれてしまう。

注2）さらに、環上のノードがRグループで表される場合は、例外的に、マッチレベル「クラス」でもRグループがヒットする。
B 検索例

検索例 1：複素環化合物の検索

構造質問式の作図：一般式グループで作図した部分についてヒットする回答を限定したい場合

- 作図のポイント
  - Cy で作図した部分について、環の大きさを限定したい
  - 一般式属性で、単環に限定する
  - 元素数属性で、炭素の数を指定する

P.20 と同じ作図

ヒットする

ヒットしない

マッチレベル

元素数レベル

Cy

〈C 4-7 単環〉

原子

(上記に加え)

phenyl, pyridyl
cycloalkyl 〈containing 3-6 C〉
cycloalkyl
carbocycle 〈3-4 rings〉
naphthyl
cycloalkyl
carbocycle 〈3-4 rings〉

クラス限定

クラス限定しない

元数数レベルは一般式属性には影響しない
元数数レベル「限定」でも、monocyclic などの記載がないものもヒットする

元素数を指定した場合、
元数数レベル「限定」「限定しない」で得られる回答が変わる

元素数：C (炭素) 4-7

一般式属性：単環

クラス限定

(上記に加え)
cycloalkyl 〈containing 3-6 C〉
cycloalkyl
carbocycle 〈3-4 rings〉
naphthyl
cycloalkyl
carbocycle 〈3-4 rings〉
B 検索例

検索例 1 : 複素環化合物の検索

■ 構造問問式の決定

・ 今回は、A で構造検索を行い、ノイズが多いようなら、B の構造問問式でサブセット検索する。

■ 検索の流れ

REGISTRY ファイルで構造検索

↓

CAplus ファイルにクロスオーバー
回答を全件表示

↓

MARPAT ファイルで構造検索

↓

マッチレベルを変更した構造問問式で
サブセット検索

↓

REGISTRY/CAplus ファイルでヒットした
回答を除き、MARPAT ファイルでのみ
ヒットした回答を表示
B 検索例

検索例 1：複素環化合物の検索

1. REGISTRY ファイルで構造検索する

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> Uploading C:\...\STN Express 8.5\Queries\EX1-1.str ← 構造質問式 A をアップロード

=> D QUE ← D QUE で構造質問式属性を確認できる

VAR G1=19/20/21
VAR G2=22/23
REP G1=(0-1) 16-14 16-17
REP G19=(0-1) 10-9 10-11
REP G20=(0-1) 8-7 8-9

NODE ATTRIBUTES:
HCOUNT IS M2 AT 8
: NSPEC IS R AT 1
: NSPEC IS R AT 2
: NSPEC IS C AT 18
CONNECT IS E2 R AT 2
CONNECT IS E2 R AT 3
CONNECT IS E2 R AT 4
CONNECT IS E4 R AT 9
DEFAULT MLEVEL IS ATOM
MLEVEL IS CLASS AT 9 14 15 17 22 23
DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:
RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED
NUMBER OF NODES IS 23
STEREO ATTRIBUTES: NONE

=> SCR 945 ← スクリーンを利用
L2 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2 ← 構造質問式とスクリーンを掛け合わせる（サンプル検索）
L3 4 SEA SSS SAM L1 AND L2
B 検索例

検索例 1: 複素環化合物の検索

=> S L1 AND L2 FUL  ← フルファイル検索を実行
L4  TOT SEA SSS FUL L1 AND L2

=> D SCAN  ← SCAN 表示形式で回答をチェック
L4  101 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN  Ethanone, 2-([3,5-dichloro-1-oxido-4-pyridinyl]-1-(2',3',5',6'-tetrahydro-7-methoxyspiro[1,3-benzodioxole-2,4'-[4H]pyran]-4-yl)-
MF  C19 H17 Cl2 N O6

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

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

2. CAplus ファイルに REGISTRY ファイルの回答をクロスオーバーする

=> FILE CAPLUS  ← CAplus ファイルに入る
=> S L4  ← REGISTRY ファイルの回答をクロスオーバーする
L5  29 L4

=> D BIB HITSTR 1-29  ← 全件を BIB HITSTR 表示形式で表示
L5  ANSWER 1 OF 29 CAPLUS COPYRIGHT 2014 ACS on STN
AN  2012:1819594 CAPLUS Full-text
DN  158:77097
TI  Derivatives of 1-phenyl-2-pyridinyl alkyl alcohols as phosphodiesterase inhibitors and their preparation
TIJP ホスホジエステラーゼ阻害薬としての 1-フェニル-2-
ビリジニアルキルアルコールの誘導体. それらの調製 [機械翻訳]
IN  Armani, Elisabetta; Amari, Gabriele; Carzaniga, Laura; Capaldi, Carmelida;
Esposito, Oriana; Villetti, Gino; De Fanti, Renato
PA  Chiesi Farmaceutici S.p.A., Italy
CODEN: PIXXD2
DT  Patent
LA  English
FAN.CNT 1

PATENT NO. KIND DATE APPLICATION NO. DATE
-------------- ----- ---------- ------------------------ --------
CA  2838435 A1  20121213 CA 2012-2838435  20120605
US  20130005716 A1  20130103 US 2012-13488818  20120605
AU  20122666514 A1  20140109 AU 2012-2666514  20120605
B 検索例

検索例 1 : 複素環化合物の検索

PRAI EP 2011-168853  A  20110606
WO 2012-EP60579        W  20120605

ASSIGNMENT HISTORY FOR US PATENT AVAILABLE IN LSUS DISPLAY FORMAT
OS CASREACT 158:77097  MARPAT 158:77097
IT 185406-34-2  2-(3,5-Dichloropyridin-4-yl)-1-(4-methoxyspiro[benzo[d][1,3]dioxole-2,1’-cyclopentane]-7-y)- (preparation of phenyl(pyridinyl)alkyl alcs. as phosphodiesterase inhibitors)
RN 185406-34-2  CAPLUS
CN Ethanone, 2-(3,5-dichloro-4-pyridinyl)-1-(7-methoxyspiro[1,3-benzodioxole-2,1’-cyclopentan]-4-yl)- (CA INDEX NAME)

OSC.G 1  THERE ARE 1 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (1 CITINGS)
RE.CNT 1  THERE ARE 1 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT
3. MARPAT ファイルで構造検索する

=> FILE MARPAT ← MARPAT ファイルに入る

=> S L4 ← サンプル検索を実行

QUERY CONTAINS NON-SEARCHABLE SCREENS IN L2. ← MARPAT ファイルではスクリーンは利用できないので、L1 の構造質問式のみが実行される

SAMPLE SEARCH INITIATED 14:55:02

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 8914 TO ITERATE

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 173975 TO 182585
PROJECTED ANSWERS: 2 TO 357

L6 2 SEA SSS SAM L1

=> S L4 FUL ← フルファイル検索を実行

100.0% PROCESSED 178943 ITERATIONS ( 2 INCOMPLETE) 158 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.03.47 ↑ 照合が不完全な回答が含まれている（下記参照）

L7 158 SEA SSS FUL L1

=> S L7/COM ← 照合作業が COMPLETE した回答に限定
L8 156 L7/COM

=> S L7/INC ← 照合作業が INCOMPLETE の回答に限定
L9 2 L7/INC

=> D L9 SCAN TI FQHIT ← L9 が必要な回答がどうか無料の SCAN TI FQHIT 表示形式で確認する

参考：フルファイル検索の結果に INCOMPLETE の回答が含まれている場合

■ 構造検索を実行した時に、一定の時間内に構造質問式との照合が完了しなかったレコードは、INCOMPLETE の回答として構造検索の回答セットに含まれる。

・ INCOMPLETE の回答はノイズの可能性が高いが、必ずしもノイズとは限らない。念のために内容を確認するとよい。

・ L#/COM または L#/INC と入力すると、COMPLETE の回答と INCOMPLETE の回答を分けることができる。

=> S L3/COM ← COMPLETE の回答に限定（無料）

=> S L3/INC ← INCOMPLETE の回答に限定（無料）

※ L3 はフルファイル検索の回答
検索例 1：複素環化合物の検索

=> D SCAN TI FQHIT L8 ← L8 の回答を無料の SCAN TI FQHIT 表示形式で確認

L8 156 ANSWERS MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN
TI Nitrogen-containing fused ring compounds as inhibitors of URAT1 activity and process for the preparation thereof

MSTR 1 Assembled

378: alkylene <containing 1-3 C> (opt. subst. by alkyl <containing 1-6 C> (opt. subst.))
G1 = 59

476: carbocycle <containing 3-14 C, 0 or more double bonds> (opt. subst.)
Patent location: claim 1
Note: or salts or reactive derivatives
Note: additional ring and oxo formation also claimed
Note: substitution is restricted

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

L8 156 ANSWERS MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN
TI Preparation of (hetero)arylcarboxamides as inhibitors of microsomal triglyceride transfer protein (MTP) and of apolipoprotein B (apo B) secretion.

MSTR 1 Assembled

206: arylene <containing 6-12 C, mono- or bicyclic> (opt. subst.)
729: alkylene
Patent location: claim 1
Note: substitution is restricted
Note: or pharmaceutically acceptable salts

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

Ak がノイズとしてかなり含まれていたため、スピロ原子のマッチレベルを「原子」に変更した構造質問式でサブセット検索する
B 検索例

検索例 1 : 複素環化合物の検索

4. MARPAT ファイルでサブセット検索する

Uploading C:\Users\...\STN Express 8.5\Queries\EX1-2.str ← サブセット検索するため
構造質問式 B をアップロード

L10     STRUCTURE UPLOADED

=> S L10 SUB=L8 SAM ← L8 を母集合にしてサブセット検索を実行（サンプル検索）
L11     1 SEA SUB=L8 SSS SAM L10

=> S L10 SUB=L8 FUL ← L8 を母集合にしてサブセット検索を実行（フルファイル検索）
L12     25 SEA SUB=L8 SSS FUL L10

MARPAT ファイルの回答 (L8)
（スピロ原子のマッチレベル「クラス」）

CAplus ファイルの回答 (L5)
非特許：5 件
MARPAT に収録なし：11 件

MARPAT ファイルの回答 (L12)
（スピロ原子のマッチレベル「原子」）
5. REGISTRY/CAplus ファイルでヒットした回答を除く

=> S L12 NOT L5 ← REGISTRY/CAplus ファイルでヒットした回答を除く
L13  17 L12 NOT L5

CAplus ファイルの回答は L 番号を用いて
MARPAT ファイルにクロスオーバーできる（無料）

=> D BIB FQHIT 1-17 ← 全件を BIB FQHIT 表示形式で表示

L13 ANSWER 1 OF 17 MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN
AN 158:215968 MARPAT Full-text
TI Preparation of spiro compounds useful for preventing or treating hepatitis
IN Zhang, Jiacun; Zhang, Yingjun; Xie, Hongming; Ren, Qingyun; Luo, Huichao;
Yu, Tianzhu; Tan, Yumei
PA HEC Pharm Co., Ltd., Peop. Rep. China
CODEN: CNNXEV
DT Patent
LA Chinese
FAN.CNT 1

PATENT NO. KIND DATE APPLICATION NO. DATE
--------------- ----- --------------------------
PI CN 102863428 A 20130109 CN 2012-10239748 20120709

MSTR 1A Assembled

367: any ring <containing 3-12 atoms, zero or more N, mono- or polycyclic>
G1  17-12 18-6 / 19-12 20-6 / 21-12 23-6
G3  = NO (opt. substd.)
G4  = 195-9 196-367 / 197-9 198-367 / 199-9 201-367
G5  = 192-9 193-9 194-367
G6  = 34
G7  = 3

1. 如式 (I) 所示の化合物：

(従属クレームに下記例あり)

実施例中の物質例
B 検索例

検索例 1：複素環化合物の検索

■ MARPAT ファイルのみでヒットした回答（17 件）の適合性

<table>
<thead>
<tr>
<th>適合性</th>
<th>レコード件数</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>○</td>
<td>0 件</td>
</tr>
<tr>
<td>△</td>
<td>14 件</td>
</tr>
<tr>
<td>×</td>
<td>3 件</td>
</tr>
</tbody>
</table>

・目的の構造がクレームに含まれ、目的の用途（ホスホジエステラーゼ阻害剤）も記載されているものを ○ とした。

・目的の構造が、クレームされている構造のうちの部分構造の一つとして含まれるものを △ とした。

・スピロ結合する環がさらに縮合している場合は × とした。
B 検索例

検索例 1 : 複素環化合物の検索

=> S L8 NOT L12 ← スピロ原子のマッチレベルを「クラス」にしたときのみ
L14 13L8 NOT L12 ヒットする回答

=> S L14 NOT L5 ← L14 のうち、REGISTRY/CAplus ファイルではヒットしなかった回答
13 L5
L15 131 L13 NOT L5

=> D BIB FQHIT 6

L15 ANSWER 6 OF 131 MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN
AN 156:638081 MARPAT Full-text
TI New triarylmethyl radicals and their preparation and use in NMR improved
by Nuclear Dynamic Polarization
IN Stephan, Michel; Guenther, Ulrich
PA PhosPhoenix Sarl, Fr.
SO PCT Int. Appl., 26pp.: Chemical Indexing Equivalent to 156:613415 (FR)
CODEN: PIXXD2
DT Patent
LA French
FAN.CNT 2
PATENT NO. KIND DATE APPLICATION NO. DATE
--------------- ---- -------- ------------------------ -------
PI WO 2012062975 A1 20120518 WO 2011-FR577 20111026
FR 2967158 A1 20120511 FR 2010-4364 20101108
FR 2010-4364 20101108
OS CASREACT 156:638081
MSTR 3 Assembled

マッチレベルを「クラス」にすることで、
スピロ環が一般式グループで収録されているレコードがヒット

元数レベルを「限定」にすることで、
炭素が1という条件を満たす記載がある回答のみがヒット

425: any ring <containing 1 or more C, attached through 1 or more C> (opt. substd.)
G7 = 0
Patent location: claim 8
Note: substitution is restricted

RE.CNT 3 THERE ARE 3 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT
B 検索例

検索例１：複素環化合物の検索

=> S L12 AND L5
T3 L5
L16 8 L12 AND L5
=> D BIB FQHIT L16 5

L16 ANSER 5 OF 8 MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN
AN 139:18567 MARPAT Full-text
TI Inhaling compositions containing heterocyclic compounds and
anticholinergics for the treatment of airway diseases
IN Meade, Christopher John Montague; Pairet, Michel; Pieper, Michael P.
PA Boehringer Ingelheim Pharma G.m.b.H. & Co. K.-G., Germany
CODEN: PIXXD2
DT Patent
LA German
FAN.CNT 1

PATENT NO. KIND DATE APPLICATION
--------------- -------- -------------------- -----
W: AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BS
CO, CR, CU, GZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, ES
GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KF
LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX
PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, TJ
UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZM, ZW
RW: GH, GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TJ, UZ
KA, KD, MD, RU, TJ, TM, AT, BE, BG, CH, CN
FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PT
BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GU, GV, GW, ML, MR
DE 10205274 A1 20030821 DE 2002-10205274
AU 2003205717 A1 20030902 AU 2003-205717
US 20030203918 A1 20030130 US 2003-358918
PRAI DE 2002-10205274 20020208
WO 2003-EP961 20030131

MSTR 1 Assembled

Patent location: claim 1
Note: and pharmacologically acceptable acid addition
salts, solvates, or hydrates
Stereochemistry: and optical isomers, mixtures, and racemates

RE.CNT 3 THERE ARE 3 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

* US20030203918 で確認
B 検索例

参考：回答の経済的な表示方法

■ SCAN 表示形式で表示した回答から、下記の流れで目的のレコードを特定することができる。

MARPAT ファイルで、SCAN TI FQHIT 表示形式で回答を出力
↓
検索語料無料の HCAplus ファイルで標題を検索
↓
MARPAT ファイルにクロスオーバー
↓
構造検索の結果と AND 演算
（ヒットした構造をハイライト表示させるため）

■ 利用例

=> FILE MARPAT

=> D SCAN TI FQHIT ← SCAN TI FQHIT 表示形式で表示

L15  131 ANSWERS  MARPAT  COPYRIGHT 2014 ACS on STN
TI New triarylmethyl radicals and their preparation and use in NMR improved by Nuclear Dynamic Polarization
MSTR 3 Assembled

425: any ring <containing 1 or more C, attached through 1 or more C> (opt. subst.)
G7 = O
Patent location: claim 8
Note: substitution is restricted

=> FILE HCAPLUS ← HCAplus ファイルに入る

=> $ (New triarylmethyl radicals (1W) their preparation (1W) use in NMR improved by Nuclear Dynamic Polarization)/TI ← 標題をコピー＆ペーストして /TI で検索
L17  2 NEW TRIARYLMETHYL RADICALS (1W) THEIR PREPARATION (1W) USE IN NMR IMPROVED BY NUCLEAR DYNAMIC POLARIZATION /TI

=> FILE MARPAT ← MARPAT ファイルに入る

=> $ L15 AND L17 ← HCAplus ファイルの回答をクロスオーバーし、元の回答とかけ合わせる
L18  1 L15 AND L17

=> D BIB FQHIT
B 検索例

検索例 2 : 配位化合物の検索

■ 下記のような構造の配位化合物について、REGISTRY/CAplus ファイルで既に調査済みだが、MARPAT ファイルで追加調査を行うことになった。

![配位化合物の図]

* 環はこれ以上縮環しない

■ MARPAT ファイルでの配位化合物の索引

・ 配位子と金属が結合した形で登録されている場合と、分離した形で登録されている場合の 2 つのパターンがある。

パターン 1 配位子と金属が結合している例

配位化合物は
金属は M (一般式グループ) で索引

金属と結合している場合、この結合は環結合になる

金属は別の G グループで収録される

G1 = alkyl <containing 1-6 C> / (Specifically claimed: Me) / (Examples: Et / Pr-i)
G2 = H / alkyl <containing 1-6 C> / (Specifically claimed: Me / Pr-i) / Bu-t
G3 = Ir
Patent location: claim 1
B 検索例

検索例 2：配位化合物の検索

パターン2 配位子と金属が分離している例

配位子と金属を結合させた形で構造検索すると、こちらのパターンはヒットしない

金属は別の G グループで収録される

G1  = 91

G1  = Ir

Patent location: claim 1

Note: as complexes with g11

Note フィールドに錯体であることが記載されている場合もある

* 配位位置が特定されていない場合や配位子の構造の候補が非常に多い場合には、配位子と金属は分離した形で収録される。
B 検索例

検索例 2 : 配位化合物の検索

■ 構造質問式の作図 : 2 つのパターンを別々の構造質問式で検索する場合

・ 作図のポイント

- 金属結合型

  ・ 中心金属は必ず一般式グループ記号 M（金属）で作図し、マッチレベルを「クラス」にする。
  ・ 具体的な金属（今回はイリジウム）は同一作図画面中に離して作図する。

- 金属分離型

  ・ 同一作図画面中に配位子と金属を離して作図する。

M で作図
マッチレベル: 「クラス」

金属を特定したい場合は、同一作図画面中に離して作図

配位子の数や配位する位置を特定したい場合

M 以外: マッチレベル「原子」
環の孤立を指定

3 配位のものが欲しいが、分離型で索引されている可能性もあるため、こちらの構造質問式でも検索する

マッチレベルはすべて「原子」
環の孤立を指定
検索例 2 : 配位化合物の検索

構造質問式的作図 : 2 つのパターンを 1 つの構造質問式にまとめる場合

・作図のポイント

金属結合型と金属分離型それぞれがヒットするような構造をフラグメントとして作図し,それを G グループに含める。

構造検索を 1 回で済ませたいので, 今回はこちらの構造質問式を用いることとした。
検索例 2: 配位化合物の検索

=> FILE MARPAT ← MARPAT ファイルに入る

=> Uploading C:\Users\...\STN Express 8.5\Queries\EX2.str ← 構造質問式をアップロード

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1 ← サンプル検索を実行
SAMPLE SEARCH INITIATED 11:37:50
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 623 TO ITERATE
100.0% PROCESSED 623 ITERATIONS 3 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 10980 TO 13940
PROJECTED ANSWERS: 3 TO 164

L2 3 SEA SSS SAM L1

=> D SCAN TI FQHIT ← SCAN TI FQHIT 表示形式でヒットしたレコードを確認

L2 3 ANSWERS MARPAT COPYRIGHT 2014 ACS on STN
TI Organometallic cyclometalated complexes of Group 9 and Group 10 metals with substituted 1,2,4-triazole and 1,3,4-oxadiazole ligands exhibiting green to blue phosphorescence as components for organic light-emitting devices

MSTR 1 Assembled

Patent location: claim 1
Note: as complexes with G11

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END
B 検索例

検索例 2 : 配位化合物の検索

-> S L1 FUL ← フルファイル検索を実行
FULL SEARCH INITIATED 11:38:16
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 11998 TO ITERATE

100.0% PROCESSED  11998 ITERATIONS  65 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01
L3  65 SEA SSS FUL L1

<REGISTRY/CAplus ファイルでヒットした回答を除いて表示する> ファイルでヒットした回答を除いて表示する

-> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入れる

-> ACT EX2CAPLUS/A ← 保存しておいた回答集合を呼び出す
L4 STR
L5 ( 452879)SEA FILE=REGISTRY SSS FUL L4
L6 ( 110)SEA FILE=REGISTRY SPE=ON ABB=ON PLU=ON L5 AND IR/ELS
L7 ( 1)SEA FILE=REGISTRY SPE=ON ABB=ON PLU=ON  7439-88-5
L8 ( 39)SEA FILE=CAPLUS SPE=ON ABB=ON PLU=ON L6
L9 ( 114)SEA FILE=CAPLUS SPE=ON ABB=ON PLU=ON L5/D
L10 ( 2991)SEA FILE=CAPLUS SPE=ON ABB=ON PLU=ON L7/D
L11 ( 2)SEA FILE=CAPLUS SPE=ON ABB=ON PLU=ON L9 AND L10
L12 ( 40)SEA FILE=CAPLUS SPE=ON ABB=ON PLU=ON L8 OR L11

-> FILE MARPAT ← MARPAT ファイルに入れる

-> S L12 ← CAplus ファイルの回答集合をクロスオーバー
L13 31 L12

-> S L3 NOT L13 ← MARPAT ファイルの構造検索の結果から REGISTRY/CAplus ファイルで
ヒットした回答を除く
L14 46 L3 NOT L13

MARPAT ファイルの回答 (L3)

CAplus ファイルの回答 (L12)

非特許 : 0 件
MARPAT に収録なし : 9 件
B 検索例

検索例 2 : 配位化合物の検索

=> D 1-46 BIB FQHIT ← 全件を BIB FQHIT 表示形式で表示

L14  ANSWER 5 OF 46  MARPAT  COPYRIGHT 2014 ACS on STN
AN  159:9295  MARPAT  Full-text
TI  Organometallic complex, light-emitting element, light-emitting device, electronic device, and lighting device
IN  Inoue, Hideko; Seo, Hiromi; Seo, Satoshi
PA  Semiconductor Energy Laboratory Co., Ltd., Japan
CODEN: USXXCO
DT  Patent
LA  English
FAN.CNT 1

<table>
<thead>
<tr>
<th>PATENT NO.</th>
<th>KIND</th>
<th>DATE</th>
<th>APPLICATION NO.</th>
<th>DATE</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>PI  US 20130137866</td>
<td>A1</td>
<td>20130530</td>
<td>US 2012-13688688</td>
<td>20121129</td>
</tr>
<tr>
<td>JP 2013136567</td>
<td>A</td>
<td>20130711</td>
<td>JP 2012-260852</td>
<td>20121129</td>
</tr>
<tr>
<td>PRAI</td>
<td>JP 2011-261289</td>
<td>20111130</td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
</tbody>
</table>

OS CASREACT 159:9295

G3 = 425

Patent location: claim 1

例示物質の中に下記の構造あり

配位子と金属が結合している例
(ただし、配位子数は 2)

What is claimed is:
1. An organometallic complex having a structure represented by General Formula (G1),

   \[ \text{R}^1 \text{R}^2 \text{R}^3 \text{R}^4 \text{N}^5 \text{N}^6 \text{N}^7 \text{N}^8 \text{N}^9 \text{N}^{10} \text{N}^{11} \text{N}^{12} \text{N}^{13} \text{N}^{14} \]

   (G1)

   wherein:
   \( \text{R}^1 \) represents a halogenate aromatic ligand and has at least a bond between carbon of an aromatic ring and Ir.

2. The organometallic complex according to claim 1, wherein the aromatic ligand is represented by any one of General Formulæ (L1) to (L3),

   \[ \text{R}^1 \text{R}^2 \text{R}^3 \text{R}^4 \text{N}^5 \text{N}^6 \text{N}^7 \text{N}^8 \text{N}^9 \text{N}^{10} \text{N}^{11} \text{N}^{12} \text{N}^{13} \text{N}^{14} \]

   (L3)

   wherein:
   \( \text{R}^5 \) to \( \text{R}^6 \) separately represent hydrogen, a substituted or unsubstituted alkyl group having 1 to 4 carbon atoms, or a substituted or unsubstituted phenyl group, and
   \( \text{A}^1 \) to \( \text{A}^5 \) separately represent oxygen, sulfur, nitrogen, \( \text{sp}^3 \) hybridized nitrogen bonded to any of an alkyl group having 1 to 4 carbon atoms and a phenyl group, \( \text{sp}^3 \) hybridized carbon bonded to hydrogen, or \( \text{sp}^3 \) hybridized carbon bonded to any of an alkyl group having 1 to 4 carbon atoms and a phenyl group.
B 検索例

検索例 2: 配位化合物の検索

配位子と金属が分離している例

G₂ = CH (opt. substd.) / N

Patent location: claim 1
Note: as complexes with G₅

m₁ = 3, m₂ = 0 のとき目的の配位化合物になる
B 検索例

検索例 2 : 配位化合物の検索

■ MARPAT ファイルのみでヒットした回答 (46 件) の適合性

### MARPAT ファイルの回答 (L3)

<table>
<thead>
<tr>
<th>適合性</th>
<th>レコード件数</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>○</td>
<td>10 件</td>
</tr>
<tr>
<td>△</td>
<td>10 件</td>
</tr>
<tr>
<td>×</td>
<td>26 件</td>
</tr>
</tbody>
</table>

### CAplus ファイルの回答 (L12)

- 非特許 : 0 件
- MARPAT に収録なし : 9 件

- 目的の配位子が 3 配位となる条件がクレームに含まれる場合は ○ とした。
- 他の配位子との組み合わせでクレームされている場合は △ とした。
- 配位する位置が異なる場合や、2核錯体などは × とした。
CAplus ファイルでは、配位化合物は CAS 登録番号で索引されている場合がほとんどである。しかし、原報の記載により、配位子と金属の塩の CAS 登録番号で索引されたり、配位子と金属の CAS 登録番号 + D（非特定誘導体）で索引される場合もある。

<例> サルチル酸とアルミニウムの配位化合物の例

・ 配位化合物の CAS 登録番号で索引されている例

AN 2004:305433 CAPPLUS Full-text
DN 140:341891
TI Additive for stabilizing and promoting natural gas hydrate formation rate and preventing bacterial spoilage of water during storage or transporting:

PATENT NO. KIND DATE APPLICATION NO. DATE
--------------- ---- -------- ------------------- -
PI JP 2004115613 A2 20040415 JP 2002-279098

IT 15479-57-9, Aluminum salicylate
RL: MOA (Modifier or additive use); USES (Uses) (additive for stabilizing and promoting natural gas hydrate formation rate and preventing bacterial spoilage of water during storage or transporting)

・ 配位子と金属の塩の CAS 登録番号で索引されている例

AN 1998:268384 CAPPLUS Full-text
DN 129:3855
TI Adjuvant, in particular as an emulsion, containing a trivalent metal cation and sympathomimetic compound, and vaccine composition containing it:

PATENT NO. KIND DATE APPLICATION NO. DATE
--------------- ---- -------- ------------------- -
PI WO 9817311 A1 19980430 WO 1997-FR1816

IT 207113-11-9
RL: THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study) (adjuvant emulsion, with trivalent metal cation and sympathomimetic compound, and vaccine composition containing it)

・ 配位子と金属の CAS 登録番号 + D で索引されている例

AN 2003:259981 CAPPLUS Full-text
DN 138:294888
TI Toners for image formation and method for image formation using the same:

PATENT NO. KIND DATE APPLICATION NO. DATE
--------------- ---- -------- -------------------- -
PI JP 2003098858 A 20030404 JP 2001-286136

IT 69-72-7D, Salicylic acid, complex with metal 98-48-6, m-Benzenedisulfonic acid 7429-90-5D, Aluminum, complex with salicylic acid
RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses) (toners for image formation)
B 検索例
参考 : REGISTRY/CAplus ファイルでの配位化合物の検索

■ 検索方針
・ 今回は、REGISTRY ファイルで、①配位化合物、②塩、③配位子のみの3種類を1回の構造検索でヒットさせることができるよう構造質問式を作図する。

- そのため、配位子のみ作図する。その際、①配位化合物もヒットさせるため、結合属性を変更する。

- ①配位化合物をヒットさせるため、環の孤立は指定しない。結合非水素数を利用すると、金属と配位する箇所以外の縮環を禁止できる。

- ②塩や③配位子のみは作図画面に金属(Ir)を描くとヒットしないので描かない。

REGISTRY

構造検索の結果
Ir/ELS で限定
①配位化合物
②塩
クロスオーバー
CAplus
①配位化合物
②塩で索引
/D をつけてクロスオーバー
③配位子のみ + D で索引（イリジウム + D が同時に索引されているレコードに限定）

■ 検索の流れ
=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る
=> Uploading C:\...\STN Express 8.5\Queries\EX2reg.str ← 構造質問式をアップロード

結合非水素数ちょっと2、環
結合属性「環/鎖」を指定

L1 STRUCTURE UPLOADED
=> S L1 ← サンプル検索
L2 50 SEA SSS SAM L1
=> S L1 FUL ← フルファイル検索
L3 452879 SEA SSS FUL L1
B 検索例

参考：REGISTRY/CAplus ファイルでの配位化合物の検索

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で回答をチェック
L3 452879 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN Benzenamine, 2-(4-ethyl-5-methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)-5-
(trifluoromethyl)-
MF C12 H13 F3 N4

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

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

=> S L3 AND IR/ELS ← イリジウムを含む物質に限定
L4 110 L3 AND IR/ELS

=> D SCAN
L4 110 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED
MF C29 H26 Ir N7
CI CCS

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

=> S 7439-88-5 ← イリジウムの CAS 登録番号を検索
L5 1 7439-88-5

=> D SCAN
L5 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN Iridium
MF Ir
CI COM

Ir

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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED
B 検索例

参考：REGISTRY/CAplus ファイルでの配位化合物の検索

=> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る

=> S L4 ← L4 をクロスオーバー (配位化合物または塩として索引されている文献がヒット)

=> D SCAN TI HITIND

L6 39 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2014 ACS on STN
TI Organic electroluminescent materials, components, and display devices
TIJP 有機エレクトロルミネッセンス素子、有機エレクトロルミネッセンス素子材料、表示装置及び照明装置 [原題]
IT 878168-98-0
RL: PRP (Properties); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
(organic electroluminescent materials and components and display devices)

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

=> S L3/D ← 配位子の CAS 登録番号 + D で索引されている文献
L7 114 L3/D

=> S L5/D ← イリジウムの CAS 登録番号 + D で索引されている文献
L8 2990 L5/D

=> S L7 AND L8 ← 配位子とイリジウム両方が D 付きで索引されているものに限定
L9 2 L7 AND L8

=> D SCAN TI HITIND

L9 2 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2014 ACS on STN
TI Organic electroluminescent device employing organic layer containing at least organic light emitting layer comprising mixture media of host/phosphorescent dopant having controlled electron mobility
TIJP /のホストの蓄光のドーパントの有のコントロールされた電子伝送速度の混合物媒体を含む少なくとも有機発光層を含む有機的な層を使う有機電界発光デバイス [機械翻訳]
RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
(organic electroluminescent device employing organic light emitting layer comprising mixture media of host/dopant having controlled electron mobility)

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

=> S L6 OR L9 ← L6 と L9 の回答をまとめる
L10 40 L6 OR L9

=> SAVE L10 EX2CAPLUS/A ← 回答を保存する (P.41 で使用)
### B 検索例

参考：MARPATファイルでの塩の収録

■ MARPATファイルでは、塩は下記のような形式で収録されている。

\[
\begin{align*}
\text{AN} & \quad 156:34833 \\
\text{MSTR} & \quad 1
\end{align*}
\]

\[
\begin{align*}
\text{G10} & \quad = \text{OH} / 255 / 257 \\
\text{G11} & \quad = \text{R "metal"} / \text{Na} / \text{K} / \text{Ca} / \text{Mg} / \text{Zn} / \text{Fe} / \text{Al}
\end{align*}
\]

■ 作図例

同一作図画面中に金属も作図する

\[
\text{G1} = \text{Ca}, \text{K}, \text{Na}
\]
CASLINKはSTNのファイルクラスターのひとつで、REGISTRY、CAplus、MARPATファイルのマルチファイル環境に入る。REGISTRY/CAplusとMARPATの連続検索がスムーズに行えるような特別な仕組みが組み込まれている。

・CASLINKを利用すると、一回のSEARCHコマンドで以下の検索が自動的に実行される。
（フルファイル検索の場合）
①REGISTRYファイルでの構造検索
②MARPATファイルでの構造検索
③REGISTRYファイルの回答セットによるCAplusファイルでのクロスオーバー検索
④MARPAT、CAplusファイル間の重複文献除去

＊サンプル検索の場合は①②のみ実行され、クロスオーバー検索や重複除去は実行されない。

<table>
<thead>
<tr>
<th>=&gt; FILE CASLINK</th>
<th>REGISTRY</th>
<th>MARPAT</th>
<th>CAplus</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>=&gt; Uploading abc.str</td>
<td>構造質問式L1（構造式）</td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>L1 STRUCTURE CREATED</td>
<td></td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>=&gt; $L1</td>
<td>サンプル検索</td>
<td>サンプル検索</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>L2</td>
<td>L3</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>=&gt; $L1 FULL</td>
<td>フルファイル検索</td>
<td>フルファイル検索</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>$L4 FULL</td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>L4</td>
<td>L5</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>クロスオーバー検索</td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>L6</td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>重複文献除去</td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>DUP REM L5 L6</td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>L7（MARPAT、CAplus）</td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
</tbody>
</table>
B 検索例

参考 : CASLINK

検索の流れ

=> FILE CASLINK

FILE 'CAPLUS' ENTERED AT 18:30:23 ON 04 NOV 2013
FILE 'MARPAT' ENTERED AT 18:30:23 ON 04 NOV 2013
FILE 'REGISTRY' ENTERED AT 18:30:23 ON 04 NOV 2013

=> Uploading C:\Users\...\Documents\STN Express 8.5\Queries\48.str

REGISTRY・MARPAT ファイル両方で共通に使用できる構造質問式をあらかじめ作図する

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

S L1 SSS SAM FILE=REGISTRY
SAMPLE SEARCH INITIATED 18:31:05 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 5795 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 5795 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 111335 TO 120465
PROJECTED ANSWERS: 173 TO 747

L2 23 SEA SSS SAM L1

S L2 SSS SAM FILE=MARPAT
SAMPLE SEARCH INITIATED 18:31:06 FILE 'MARPAT'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 805 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 805 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 14425 TO 17775
PROJECTED ANSWERS: 21 TO 419

L3 11 SEA SSS SAM L1

* サンプル検索の場合はクロスオーバー検索は実行されず REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルのサンプル検索のみが実行される
B 検索例

参考 : CASLINK

=> S L1 FUL ← フルファイル検索
S L1 SSS FUL FILE=REGISTRY
FULL SEARCH INITIATED 18:34:12 FILE 'REGISTRY'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 118126 TO ITERATE
100.0% PROCESSED 118126 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01
L4  465 SEA SSS FUL L1

S L4 SSS FUL FILE=MARPAT
FULL SEARCH INITIATED 18:34:13 FILE 'MARPAT'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 16632 TO ITERATE
100.0% PROCESSED 16608 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.02
L5  237 SEA SSS FUL L1

S L4 FILE=CAPLUS
L6  41 FILE CAPLUS

SET DUPORDER FILE
SET COMMAND COMPLETED

DUP REM L5 L6
PROCESSING COMPLETED FOR L5
PROCESSING COMPLETED FOR L6
L7  256 DUP REM L5 L6 (22 DUPLICATES REMOVED)
ANSWERS '1-237' FROM FILE MARPAT ← MARPAT ファイルの回答
ANSWERS '238-256' FROM FILE CAPLUS ← CAplus ファイルの回答

REGISTRY ファイルのフルファイル検索
465 ANSWERS

MARPAT ファイルのフルファイル検索
237 ANSWERS

REGISTRY → CAplus のクロスオーバー

重複除去 (L5 の MARPAT ファイルが優先)

・ 入力するコマンドは太字部分のみ
・ CAplus ファイルと MARPAT ファイルの重複除去も自動で実行される

* CASLINK については、下記資料参照。
  ・ リフレッシュセミナー「MARPAT ファイル – 検索テクニック」 C 章
  ・ おさらいセミナー「MARPAT ファイル」
インターネットセミナー

インターネット経由で視聴していただく、WebExを利用したオンライン形式のセミナーです。
講習会当日は、講師のPC画面をインターネット経由でご覧いただきながら、音声で説話をお聞きいただきます。
ご質問は、チャット形式で受け付けます。

今後も、初心者向けの入門セミナーや、上級者向けのテーマ別セミナーなど様々な内容で開催致します！
過去のセミナーの録画セッションや今後の開催予定を掲載しておりますので、ぜひ弊社ホームページをご覧ください！
(http://www.jaici.or.jp/webex/e-seminar.html)

e-ラーニング

STNの検索方法をお手元のPCで学ぶことができます。ビデオ形式/ブラウザ形式の教材です。
定期講習会に参加できない方は自習ツールとして、また社内教育などにぜひ活用ください。

<table>
<thead>
<tr>
<th>ビデオ形式教材</th>
<th>ブラウザ形式教材</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>サイズ</td>
<td>サイズ</td>
</tr>
<tr>
<td>550KB</td>
<td>161KB</td>
</tr>
<tr>
<td>410KB</td>
<td>100KB</td>
</tr>
<tr>
<td>50KB</td>
<td>18KB</td>
</tr>
<tr>
<td>371KB</td>
<td>18KB</td>
</tr>
<tr>
<td>490KB</td>
<td>18KB</td>
</tr>
<tr>
<td>414KB</td>
<td>18KB</td>
</tr>
<tr>
<td>591KB</td>
<td>18KB</td>
</tr>
</tbody>
</table>

今後も定期的に教材を追加していく予定です！ぜひご活用ください！
(http://www.jaici.or.jp/ston/elearning/index.html)

JAICI
化 学 情 報 協 会

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