



Derwent World Patents Index[®]

**Derwent Chemistry Resource (DCR)
on STN**

Oct 2017

Copyright ©2017 Clarivate Analytics
All rights reserved.

Derwent Chemistry Resource (DCR)

目次

1. DCRの概要	1
2. 化合物索引基準	1
3. 収録国	3
4. DCRセグメントとDWPIセグメント	5
5. 検索例	6
6. 検索フィールド	14
7. 表示形式	15
8. ヒットしたDWPIセグメントのDCR情報の抽出	17
9. 化合物の検索方法	19
10. DCRLコード番号	25
11. DWPIセグメントからDCRセグメントへのクロスオーバー	28
12. その他の検索例	30
検索例1: ポリペプチドの検索 —「/CMT」の使用例—	30
検索例2: Steroidの検索 —化合物ディスクリプタSteroidsの使用例—	31
13. 練習問題	35
Appendix	
1. ロール	42
2. 化合物ディスクリプタ(分類コード)	44
3. DWPI化学構造インデキシングシステム	55
4. DWPI分類	56
5. Chemical Fragmentation CodeとDCR	57
6. リングインインデックス番号(RIN)	58

1. DCR の概要

DCRは、DWPIのレコードに索引された特定化合物(Specific Compound)を検索するための化学構造データベースで、下記の特徴があります。

- 1) DWPI分類のセクションB(医薬)、C(農薬)、E(一般化学)のレコードに収録された化合物を索引しています。
- 2) マーカッシュ構造の化合物を含みません。
- 3) DW199916に収録を開始しました。
- 4) 2016年2月時点で、2,000,000件以上の化合物情報を収録しています。
- 5) 化学構造およびテキスト項目で検索可能です。
- 6) STN、Proquest Dialogでご利用頂けます。
- 7) DWPIファイルとの間のクロスオーバーが簡単です。
- 8) STNでは、WPINDEX, WPIDS, WPIX ファイルにて、DCR(化学構造)セグメントとDWPI(書誌)セグメント間のシームレスなクロスオーバーが可能です。
Proquest Dialogでは、DCRはDWPIファイルと別ファイルになっています。
- 9) すべてのユーザーが利用できます(CPI会員条件不要)。
- 10) 利用可能なファイル：
STN: WPINDEX, WPIDS, WPIX
Proquest Dialog: Derwent Chemistry Resource

2. 化合物索引基準

ベーシック特許を対象に以下の基準に基づいて化合物が収録されています。

- 1) 「特許請求の範囲」の項目に記載の全ての特定化合物
- 2) 実施例中の最も重要な化合物を少なくとも1つ
「特許請求の範囲」の項目に記載の化合物が少ない場合、さらに実施例まで索引対象を拡げます。
- 3) 「特許請求の範囲」の項目以外の化合物
「特許請求の範囲」の項目をサポートするために有効な物理的または生物学的データを有し、
「特許請求の範囲」の項目の構造的な多様性を最もよく表わすとアナリストが判断した化合物を可能な限り収録します。
- 4) 収録数
DWPIレコードに索引される化合物の上限はDCR(特定化合物)とMarkush化合物を合わせて99個までです。(化学索引のChemical Fragmentation Codeのパラグラフ数の上限である99個の制限のため)
DW200110までは、公報に記載の「新規化合物25個まで、および既に登録済みの化合物50個まで」と制限がありました。

補足: 2006年Derwent Chemistry Resource (DCR)の強化

以下の索引に対応するDCR番号がDWPIのバックファイルに付与されました。これにより1999年以前の約100万のDWPIレコードにDCR番号が追加されました。

- MMSのDWPI 特定化合物番号(DCN)(1987年以降現在まで)
- DWPI 登録番号(DRN)(1981年以降現在まで)
- Polymer Indexing Code(1993年以降現在まで)

※これらの索引の化合物が新たにDCRに追加登録されたわけではありません。

例) DW199916 よりも古い DWPI レコード

AN 1998-436609 [37] WPIX

TI Conjugates that bind to gonadotropin releasing hormone receptors -

comprising peptide hormone conjugated to nuclease by linking agent

PI US 5786457 A 19980728 (199837)* EN 27[5]

CMC UPB 20060114

DRN: 0927-S 0927-U

DCR: 7629-S 7629-U (←DRNに対応しているDCR)

.....

M2 *05* H1 H103 H181 K0 L2 L210 M210 M211 M212 M273 M283 M313 M321 M332
M342 M383 M391 M416 M431 M620 M782 P610 P614 P633 Q233 M903 M904

DCN: R22912-K R22912-M R22912-Q R22912-T

DCR: 640-K 640-M 640-Q 640-T (←DCNに対応しているDCR)

3. 収録国

DCRはDCR/CPI deep indexに○がある国のベーシック特許に対して索引付けされます。但し、ベーシック特許が下記の索引対象の特許発行機関以外であった場合には、索引対象の特許発行機関の特許が対応特許として収録された時点で索引します。

DWPI 収録範囲										更新日: 2016.3.31
国名(国コード)	DWPI title	Alerting abstract △: Only CPI	Manual code	DCR/CPI deep index	DCR/CPI deep indexの参照元コンテンツ			Extension abstract	Note	
					Documenta tion abstract	Alerting abstract	claim			
アルゼンチン(AR)	○	○	○	○	○	○			Applications/Utility models from 2015.	
オーストリア(AT)	○	△	○	○*	○			○	*CPI deep indexing codes are provided from DWPI week 199303.	
オーストラリア(AU)	○	○	○	○	○	○	○	○		
ベルギー(BE)	○	○	○	○	○	○	○	○		
ブラジル(BR)	○	○*	○	○*	○	○	○	○	*Create DWPI abstract for applications (A2)/utility models(U2,Y1) in all areas from 2010. (Only chemical area before 2010) *DCR / CPI deep indexing code are provided for applications (A2)・utility models(U2,Y1) from 2010.	
カナダ(CA)	○	○	○	○*	○	○	○	○	*CPI deep indexing codes are provided from 1969.	
スイス(CH)	○	○	○	○*	○	○		○	*CPI deep indexing codes are provided from 1969.	
中国(CN)	○	○	○	○*		○	○		*DCR / CPI deep indexing code are provided for applications (A)/utility models(U,Y) from 2008.	
旧チコスロバキア(CS)										
チェコ(CZ)	○		○							
旧東ドイツ(DD)										
ドイツ(DE)	○	○	○	○	○	○	○	○		
デンマーク(DK)	○	△	○							
ヨーロッパ特許(EP)	○	○	○	○	○	○	○	○		
スペイン(ES)	○	○*	○	○*	○	○	○	○	*Create DWPI abstract for applications (A, A1, A2, A6)/utility models(U) in all areas from 2010. (Only chemical area before 2010) *DCR / CPI deep indexing code are provided for applications (A, A1, A2, A6)・utility models(U) from	
フィンランド(FI)	○		○							
フランス(FR)	○	○	○	○	○	○	○	○		
イギリス(GB)	○	○	○	○	○	○	○	○		
満岸協力機構(GC)	○	○	○	○						
香港(HK)	○	○	○							
ハンガリー(HU)	○	△	○							
インドネシア(ID)	○	○	○	○*		○			*DCR / CPI deep indexing code are provided for applications (A) and simple patents from 2012.	
アイルランド(IE)	○	○	○	○*		○			*CPI deep indexing codes are provided from DWPI week 199517.	
イスラエル(IL)	○	△	○							
インド(IN)	○	○	○	○*		○*			*Based on Author's Abstract for applications from 2005. *Based on Author's Abstract for Granted applications	
イタリア(IT)	○		○							
日本(JP)	○	○	○	○*	○	○	○	○	*DCR is provided from 2000.	
韓国(KR)	○	○	○	○*	○	○	○	○	*DCR / CPI deep indexing code are provided for applications (A)/examined patent specifications/utility models(U,Y1) from 2008.	
ルクセンブルク(LU)	○		○							
マレーシア(MY)	○	○	○	○*	○	○	○	○	*DCR / CPI deep indexing code are provided for Granted patent (A, A1) from 2010.	
メキシコ(MX)	○	○	○	○*		○			*DCR / CPI deep indexing code are provided from DWPI week 201523.	
オランダ(NL)	○	○	○	○	○	○	○	○		
ノルウェー(NO)	○		○							
ニュージーランド(NZ)	○	○	○	○*	○	○	○	○	*DCR / CPI deep indexing code are provided from DWPI week 199301.	
フィリピン(PH)	○	○	○							
ポーランド(PL)	○	○	○	○*		○			*DCR / CPI deep indexing code are provided for applications /granted /utility models from 2011.	
ポルトガル(PT)	○	△	○							
ルーマニア(RO)	○	○	○							
ロシア(RU)	○	○	○	○*		○	○		*DCR / CPI deep indexing code are provided for applications (A, A8, A9)/utility models(U1,U8, U9) from 2010.	
スウェーデン(SE)	○	○	○	○	○	○	○	○		
シンガポール(SG)	○	○	○	○	○	○			*DCR / CPI deep indexing code and Documentation abstract are provided from DWPI week 201407.	
スロバキア(SK)	○		○							
旧ソ連(SU)										
トルコ(TR)	○	○	○	○	○	○			Applications/Utility models from 2015.	
台湾(TW)	○	○	○							
タイ(TH)	○	○	○	○*		○	○		*DCR / CPI deep indexing code are provided for Examined patent application (A) from 2010.	
アメリカ(US)	○	○	○	○	○	○	○	○		
ベトナム(VN)	○	○	○	○*	○	○	○	○	*DCR / CPI deep indexing code are provided for applications (A)/Granted patent(B) from 2010.	
PCT特許(WO)	○	○	○	○	○	○	○	○		
南アフリカ(ZA)	○	○	○	○		○*			*Based on Author's Abstract for unexamined accepted specifications.	
リサーチディスクロージャー(RD)	○	○	○	○	○	○*		○		
インターナショナルテクノロジーディスクロージャー(ITP)	○	○	○							

CPI deep index : Chemical Fragmentation code, MMS, Polymer Indexing code, Plasdoc code
 DCR : 1999- (additionally including DRN (1981-) and DCN (1987-))
 Chemical Fragmentation code : 1963-
 MMS : 1987-
 Polymer Indexing code : 1993-
 Plasdoc code : 1966-1994
 Alerting abstract : Basic abstract including subheadings of Novelty, Use and Advantage.
 Documentation abstract : Extended form of Alerting abstract. Summarize Alerting abstract, Extension abstract, Technology focus and Examples.

※対応特許から収録(Equivalent patent treated as Basic)

下記のレコードの場合、BR(ブラジル)の特許がBasic特許として登録されていますが、当時BRは索引対象の特許発行機関ではありませんでした。索引対象の特許発行機関であるUSの特許に基づいて、DCRが索引されています。

AN 2004-072103 [08] WPIX
 DNC C2004-138071 [35]
 TI Composition useful for cell growth inhibition and metastatic control
 of primary tumors comprises monoterpenes and solvents
 DC B04; B05; D16
 PI BR 2001007262 A 20030902 (200408)* PT 1[10] **Basic patent**
 US 20040087651 A1 20040506 (200435)B EN 16[10] **Equivalent patent treated as Basic**

----- 省略 -----

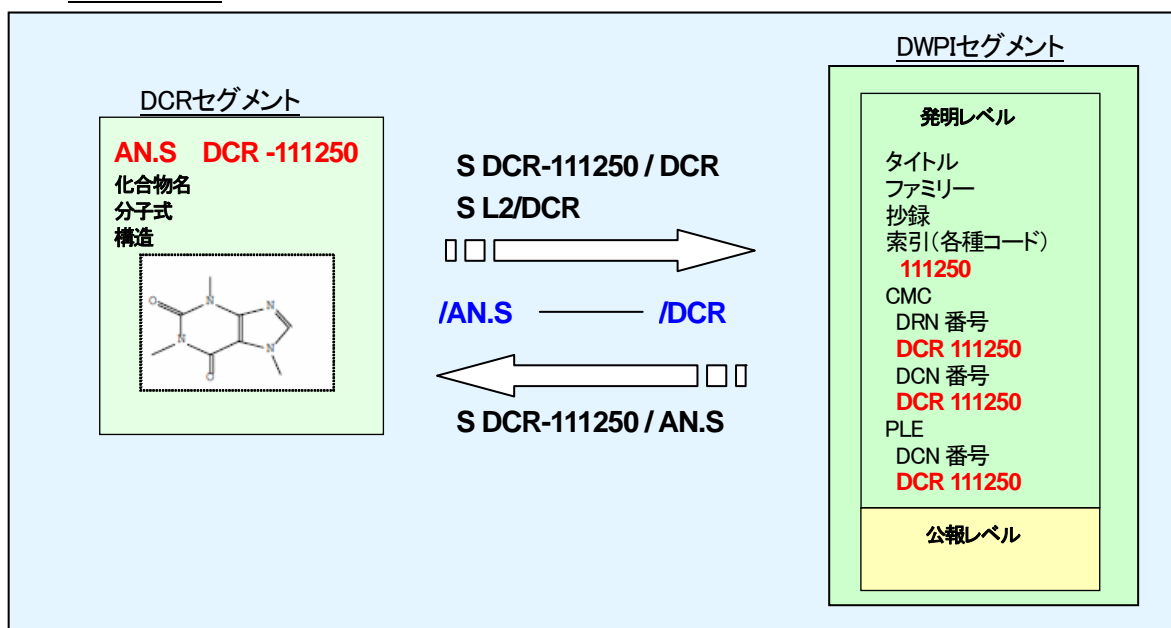
IT UPIT 20050528
 6632-CL; 93216-CL; 103650-CL; 901939-CL; 195133-CL; 6-CL
 FS CPI
 MC CPI: B10-C04E; B10-E04D; B14-H01; D05-H01; D05-H08
 CMC UPB 20050528
 DRN: 0245-U
 DCR: 131377-U 6-U

M2 *01* G035 G562 H4 H401 H481 H7 H721 H8 M210 M213 M232 M240 M281
 M311 M321 M342 M373 M391 M415 M431 M510 M520 M530 M541 M782
 P631 P633 Q233 M905 M904
 DCN: R18699-K R18699-M R18699-T
 DCR: 6632-K 6632-M 6632-T

M2 *02* G035 G563 H7 H721 J0 J011 J1 J151 M210 M213 M232 M240 M281
 M320 M415 M431 M510 M520 M530 M541 M782 P631 P633 Q233 M905
 M904
 DCN: RA3NVP-K RA3NVP-M RA3NVP-T
 DCR: 93216-K 93216-M 93216-T

4. DCRセグメント と DWPIセグメント

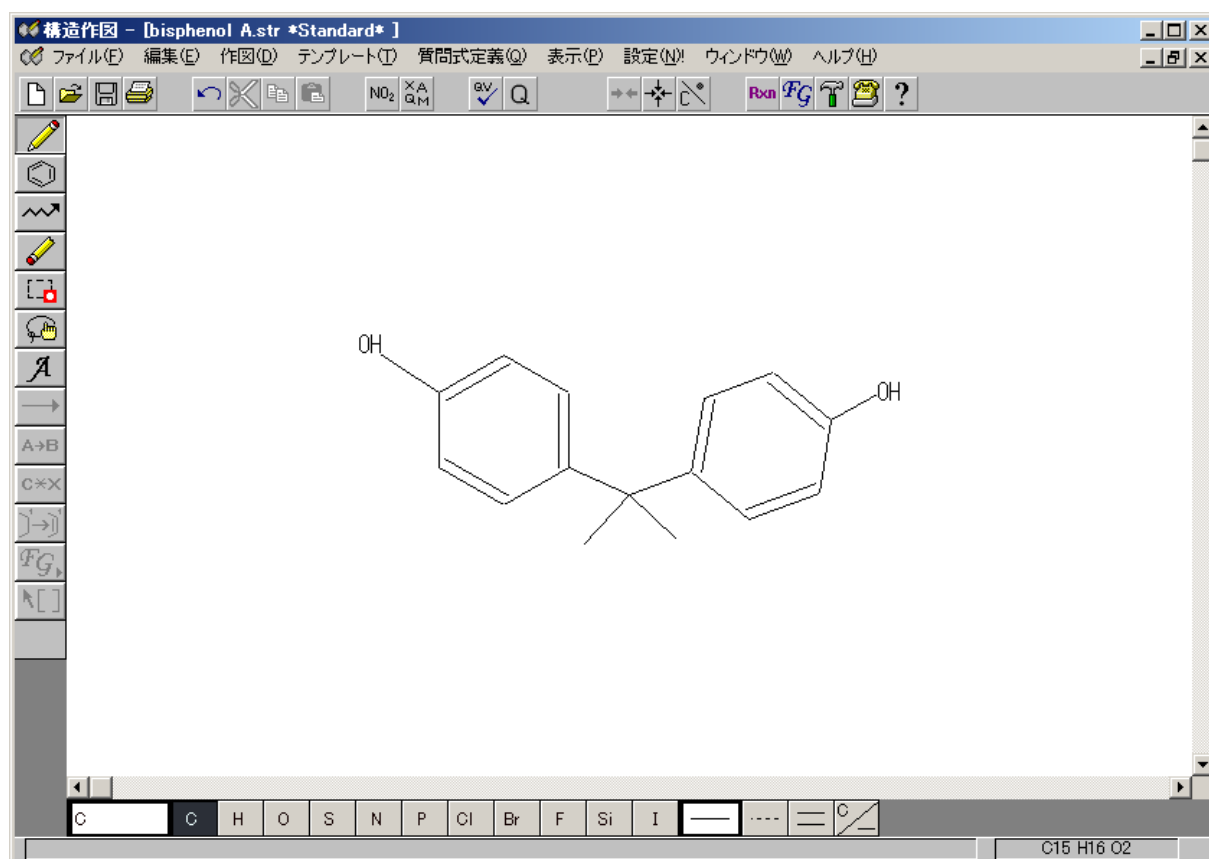
DWPIレコード ⇔ DCR セグメント ⇔ DCR Acc.No. ⇔ DWPI セグメント




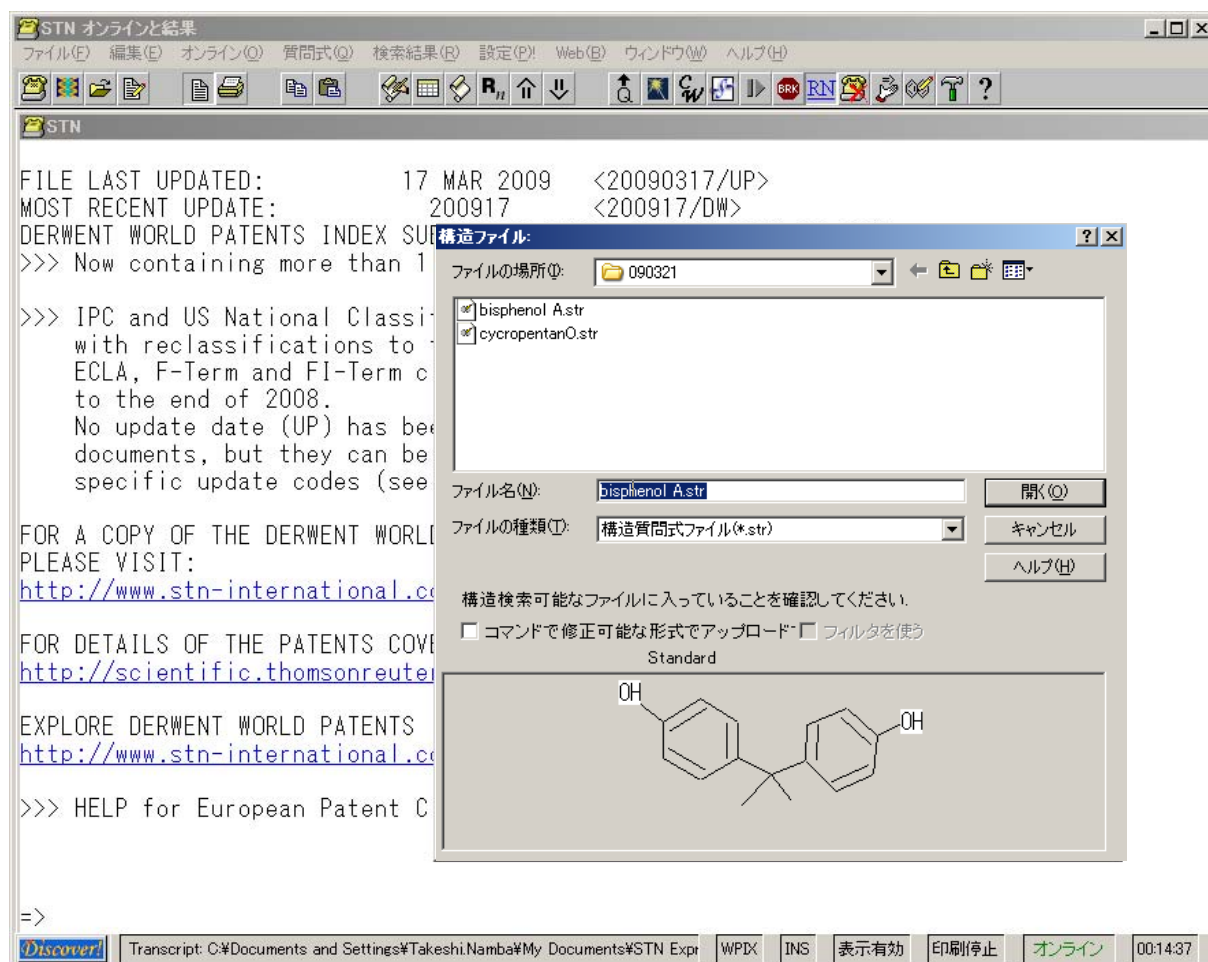
5. 検索例

課題:ビスフェノールAに関する特許の検索

1)STN Express で化学構造を作図します。作図したら、保存します。



2) WPINDEX(またはWPIDS、WPIX)のファイルを開き、[質問式]メニューの[構造質問式のアップロード]を選択するか  をクリックし、構造質問式ファイルを開きます。



STN オンラインと結果

ファイル(F) 編集(E) オンライン(O) 質問式(Q) 検索結果(R) 設定(P) Web(B) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)

STN

FILE LAST UPDATED: 17 MAR 2009 <20090317/UP>
MOST RECENT UPDATE: 200917 <200917/DW>
DERWENT WORLD PATENTS INDEX SU
>>> Now containing more than 1
>>> IPC and US National Classi
with reclassifications to
ECLA, F-Term and FI-Term c
to the end of 2008.
No update date (UP) has bee
documents, but they can be
specific update codes (see
FOR A COPY OF THE DERWENT WORL
PLEASE VISIT:
<http://www.stn-international.co>
FOR DETAILS OF THE PATENTS COV
<http://scientific.thomsonreute>
EXPLORE DERWENT WORLD PATENTS
<http://www.stn-international.co>
>>> HELP for European Patent C
=>

構造質問式ファイル

ファイルの場所: 090321

- bisphenol Astr
- cyclopentanO.str

ファイル名(N): bisphenol Astr 開く(O)

ファイルの種類(T): 構造質問式ファイル(*.str) キャンセル

ヘルプ(H)

構造検索可能なファイルに入っていることを確認してください。

コマンドで修正可能な形式でアップロード フィルタを使う

Standard

Oc1ccc(cc1)C(C)(C)c2ccc(O)cc2

3) 作図した化学構造をアップロードし、構造検索を行います。

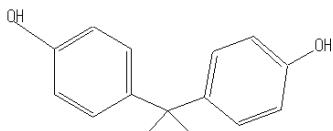
=>

Uploading C:\\$STNEXP¥Queries¥090321¥bisphenol A.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE

L1 STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1

SAMPLE SEARCH INITIATED 18:00:41 FILE 'WPINDEX'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 168 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 168 ITERATIONS

10 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**

BATCH **COMPLETE**

PROJECTED ITERATIONS: 1292 TO 2068

PROJECTED ANSWERS: 10 TO 194

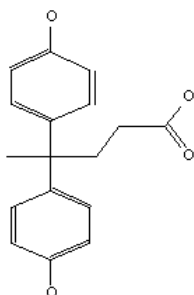
L2 10 SEA SSS SAM L1

=> D L2 SCAN

L2 10 ANSWERS WPINDEX

CN. S 4,4-Bis-(4-hydroxy-phenyl)-pentanoic acid

MF C17 H18 O4



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

=> S L1 FULL

FULL SEARCH INITIATED 18:01:36 FILE 'WPINDEX'

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 1969 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 1969 ITERATIONS

204 ANSWERS

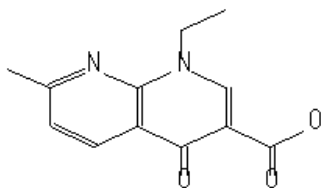
SEARCH TIME: 00.00.08

L3 204 SEA SSS FUL L1

 サンプルレコード : DCRセグメント

AN. S DCR-81119 ←DCRアクセッション番号(レコード番号)
 DCSE 81119-0-0-0 ←DCR番号 統制化学物質名
 CN. P NALIDIXIC-ACID ←優先化学物質名 ↓
 CN. S 1-Ethyl-7-methyl-4-oxo-1,4-dihydro-[1,8]naphthyridine-3-carboxylic acid
 SY ACIDO-NALIDIXICO; ACINAL; ALDIXIN; AMSALIDIXIN; ASKILLER; BACUR; BACURIN;
 BAKTOGRAM; BETAXINA; BREMIN; BRITAMYLON; CF-ANTIGRAM; CHEMIURIN; CISTIDIX;
 COXIDILINA; CYBIS; DALIC; DELIX; DEXILIN; DITRACIL; DIXIBEN; DIXIK;

.....
 NALI; NALIBAR; NALICIDIN; NALIDAC; NALIDEX; NALIDICRON; NALIDIN;
 NALIDIXANUM; NALIDIXATE; NALIDIXATE-ACID; NALIDIXIC ACID; NALIDIXIC-ACID;
 NALIDIXICO; NALIDIXICO-LEVEL; NALIDIXIN; NALIDIXOL; NALIDOL; NALIGEN;
 NALIGRAM; NALIPEX; NALIS; NALISMYLON; NALISRON; NALISSINA; NALITUCSAN;
 NALIX; NALIXAN; NALIXAR; NALURID; NALURIN; NALYDIXINE; NARIGIX; NARISLON;
 NAXURIL; NEFROLIN; NEG-GRAM; NEGABATT; NEGANIL; NEGATRATE; NEGGRAM;
 NEGOTIUM; NEGRAM; NEGRAM-CITRAT; NELIDRAN; NEMINAL; NEO-KYSTOFORINE;
 NEO-URIDIXICO; NEVIGRAMON; NIGELATE; NOGACIT; NOGERMIN; NOGRAM; NOTRICEL;
 NOVALDRIN; NOVOSTENON; NSC-82174; OXORANIL; PATOBAC; PICTOSTERAN; PIELOS;
 POLEON; PURMYLON; PUROMYLON; PYRCAR; RADIRAL; RANDIXIL; RENOGRAM;
 RESTELON; SALMOSAN-T; SELTOMILON; SELTOMYLON; SICMYLON; SPECIFIN;
 TAKESIMYLON; THIMECIL; UNASERUS; URALGIN; URETRENE; URI-FLOR; URIBEN;
 URICLAR; URIDIC; URIGRAM; URISAL; URISCO; URISTERIL; URLIX; UROCURU;
 URODIXIN; UROGRAM; UROLEX; UROLOGIN-N; UROMAN; UROMINA; URONAX; URONEG;
 URONIDIX; UROPAN; VALUREN; VIURINE; WIN-18320; WINSOMAL; WINTOGER;
 WINTOMILON; WINTOMYLON; WINTRON; YOUDEX-MITA; ZANOGAN ←同義名



MF C12 H12 N2 O3 ←分子式
 SMF C12 H12 N2 O3 *1; TYPE *1; TOTAL *1 ←標準化された分子式
 MW 232.2378 ←分子量
 SRIN 01683 ←リングインデックス番号
 SDCN R01243 ←DWPI特定化合物番号(DCN)
 SDRN 1243 ←DWPI登録番号(DRN)

※リングインデックス番号についてはP58をご覧ください。

4)DWPIセグメントにクロスオーバーします。

=> S L3/DCR

L4 17681 L3/DCR

=> D L4 AN TI IT 1-2

L4 ANSWER 1 OF 636 WPINDEX COPYRIGHT 2009 CLARIVATE ANALYTICS on STN

AN 2009-J76976 [39] WPINDEX

TI Manufacture of bivalent aromatic hydroxy compound and isocyanate compound used for coating material, involves subjecting carbamate obtained by reacting aromatic polycarbonate resin and amine compound, to thermolysis reaction

IT UPIT 20090619

1047-96902-CL 1047-96902-PRD; 1047-96904-DIS 1047-96904-PRD; 9523-EX 9523-PRD; 67214-EX 67214-PRD; 9521-EX 9521-PRD; 133627-EX 133627-PRD; 1047-96903-CL 1047-96903-PRD; 199335-EX 199335-RCT; 1385-EX 1385-RCT; 237424-EX 237424-RCT; 14903-EX 14903-RCT; 132696-EX 132696-RCT

L4 ANSWER 2 OF 636 WPINDEX COPYRIGHT 2009 CLARIVATE ANALYTICS on STN

AN 2009-J45042 [37] WPINDEX

TI Producing tetrabromobisphenol A comprises carrying out displacement reaction of bromine and bisphenol in benzene chloride by current technique, which forms tetrabromobisphenol A, and heating for hydrolyzing excess hydrogen peroxide

IT UPIT 20090615

129741-CL 129741-PRD; 247-CL 247-RCT; 9523-CL 9523-RCT; 40-CL 40-RGT 40-USE; 209-CL 209-RGT 209-USE; 107368-CL 107368-RGT 107368-USE; 154203-CL 154203-RGT 154203-USE; 185-CL 185-RGT 185-USE; 3518-CL 3518-RGT 3518-USE; 7398-CL 7398-RGT 7398-USE; 130081-CL 130081-RGT 130081-USE; 430-CL 430-RGT 430-USE

サンプルレコード : DWPIセグメント

AN 2003-441320 [41] WPIX
 ED 20050530
 DNC C2003-116790 [41]
 TI Reduction of a prostate specific antigen (PSA) level useful for reducing the need for a biopsy in men with suspected prostate cancer involves administration of an anti-inflammatory
 DC B05
 IN FISCH H
 PA (FISC-I) FISCH H
 CYC 98
 PI WO-2003037319 A1 20030508 (200341)* EN 9[0]
 US-20040043970 A1 20040304 (200417) EN
 AU-2002327659 A1 20030512 (200464) EN
 ADT WO-2003037319 A1 2002WO-US0029713 20020919; AU-2002327659 A1 2002AU-000327659 20020919; US-20040043970 A1 2002WO-US0029713 20020919; US-20040043970 A1 2003US-000381225 20030321
 FDT AU-2002327659 A1 Based on WO-2003037319 A
 PRAI 2002US-000351157P 20020123
 2001US-000340909P 20011029
 2003US-000381225 20030321
 IC ICM A61K-031/19
 IPCR A61K-0031/185 [I, C]; A61K-0031/19 [I, A]; A61K-0031/192 [I, A]; A61K-0031/403 [I, C]; A61K-0031/405 [I, A]; A61K-0031/415 [I, A]; A61K-0031/415 [I, C]; A61K-0031/47 [I, A]; A61K-0031/47 [I, C]; A61K-0031/60 [I, A]; A61K-0031/60 [I, C]
 AB WO 2003037319 A1 UPAB: 20050530
 NOVELTY - Reduction of a prostate specific antigen (PSA) level involves administration of an anti-inflammatory (A).
 DETAILED DESCRIPTION - INDEPENDENT CLAIMS are also included for:
 (1) a composition comprising (A) and an antibiotic (B); and
 (2) treatment of a patient having an elevated level of an antigen indicator of prostate involves administration of (A) and (B).
 ACTIVITY - Cytostatic.
 MECHANISM OF ACTION - None given.
 USE - For reducing the prostate specific antigen (PSA) level for reducing the need for a biopsy in men with suspected prostate cancer having above normal (greater than 3, preferably 4-10 ng/ml) level of an antigen indicator such as PSA level (claimed).
 ADVANTAGE - (A) Reduces inflammation of the prostate and (B) reduces bacterial colonization, microorganism colonization and infection in the prostate.
 TECH PHARMACEUTICALS - Preferred Drug: (A) Is a non-steroidal antiinflammatorye

ABEX ADMINISTRATION - (A) is administered for 2-6 (preferably 4) weeks
(claimed) orally, parenterally or topically. Diclofenac, etodolac,

.....

SPECIFIC COMPOUNDS - Diclofenac, etodolac, fenoprofen, ibuprofen,

.....

IT UPIT 20050530

81119-CL; 102303-CL; 91082-CL; 28954-CL; 99570-CL; 99342-CL; 7902-CL;

101051-CL; 20152-CL; 108017-CL; 135144-CL; 650208-CL; 108597-CL; 12641-CL;

94687-CL; 95025-CL; 7556-CL; 50639-CL; 70204-CL; 13208-CL; 100409-CL;

101564-CL; 72366-CL; 43216-CL; 6497-CL; 108086-CL; 155564-CL; 127393-CL;

129270-CL

FS CPI

MC CPI: B02-C01; B02-L; B02-O; B02-T; B06-H; B07-H; B10-A10; B10-B04A;

B10-C03; B10-C04B; B10-C04C; B14-A01; B14-C03; B14-N07A

CMC UPB 20050530

DRN: 0076-U 0210-U 0224-U 1243-U 1382-U 1445-U 1446-U 1987-U 2065-U

DCR: 108017-U 108597-U 11680-U 13208-U 142660-U 143583-U 145463-U 155180-U

20152-U 50639-U 7556-U 7902-U 81119-U 95025-U

M2 *01* D012 D014 D770 H1 H181 H2 H201 J0 J011 J1 J111 J5 J521 M210 M211
M212 M240 M273 M281 M320 M412 M431 M511 M520 M530 M540 M782 P220
P633 M905 M904 M910

RIN: 01683

DCN: R01243-K R01243-M R01243-T

DCR: 81119-K 81119-M 81119-T 81119-U

M2 *02* D014 D023 D622 F011 F553 H1 H141 H181 H2 H202 H6 H601 H641 J5
J521 M210 M212 M273 M281 M320 M412 M431 M511 M521 M530 M540 M782
P220 P633 M905 M904

DCN: R04550-K R04550-M R04550-T

DCR: 102303-K 102303-M 102303-T

M2 *03* D014 D023 D622 F011 F553 G030 G530 H1 H141 H161 H2 H202 H6 H601
H641 J0 J011 J1 J111 J5 J521 M280 M320 M412 M431 M511 M521 M530
M541 M782 P220 P633 M905 M904

DCN: R10124-K R10124-M R10124-T

DCR: 91082-K 91082-M 91082-T

.....

M2 *29* C316 F012 F013 F014 F112 G010 G013 G100 J5 J521 K0 K4 K442 L9
L942 M1 M113 M119 M210 M211 M271 M281 M320 M413 M431 M510 M521
M532 M540 M782 P420 P633 M905 M904

DCN: RA027J-K RA027J-M RA027J-T RA06CV-K RA06CV-M RA06CV-T

DCR: 129270-K 129270-M 129270-T 208737-K 208737-M 208737-T

※各ロール(例:81119-CL)の定義についてはP42をご覧ください。

※DWPIの表示の詳細については、STNのサマリーシート<http://www.jaici.or.jp/stn/dbsummary/db.html>

Proquest Dialogのブルーシート <http://www.proquest.com/products-services/title-lists/ProQuest-Dialog-Prosheets.html>
をご参照ください。

6. 検索フィールド

DWPIのファイルは、DCRセグメントとDWPIセグメントから構成されています。両セグメントに共通するフィールドでも各セグメントで名称が異なるのでご注意ください。

DCRセグメント	フィールド	DWPIセグメント
AN.S 例: S DCR-81119/AN.S	DCRアクセス番号 S L1/DCR ← TRA L2 DCR / AN.S	IT, DCR 例: S DCR-81119/DCR (S 81119/DCR も可) S DCR-49794/DCR(T)(USE or U)/DCR (ロール指定可)
	キーワード索引(DCR番号を含む)	IT(KW) 例: S (95341(T)CL)/IT (ロール指定可)
DCSE 例: S 270763-1-0-0/DCSE	DCR番号	
CN.P 例: S POTASSIUM PEROXIDE/CN.P	優先化学物質名 (クラリベイト・アナリティクスが選択)	
CN.S 例: S Methanedione/CN.S	系統的統制化学物質名 (Beilstein AUTONOM Softwareによる 化学物質名)	
SY 例: S CARBON DIOXIDE/SY	同義名	
CN 例: S ACINAL/CN	化学物質名 (CN.P: 優先化学物質名 と SY: 同義 語)	
CNS 例: S Trimethyl/CNS	化学物質名セグメント (対象フィールド: CN.P, CN.S, SY)	
STR	化学構造式	
MF 例: S C16 H12 F N3 O3/MF	分子式	
SMF 例: S "C2 H8 N2 *1; Cl *3; Co *1; TOTAL *5; TYPE *3"/SMF	標準化分子式	
CMF 例: S C13 CL2 F24 O4 *1/CMF	成分分子式	
NC 例: S 2/NC	成分数	
ELS 例: S (Na and Cl)/ELS	元素記号	
ELS.CNT 例: S O 2-3/ELS.CNT	元素数	

CMT 例: S Lys-Ser-Leu/CMT	注釈	
MW 例: S MW<100 S 100-159/MW	分子量	
SRIN 例: S 01683/SRIN	リングインデックス番号	
SDCN 例: S R01243/SDCN	DWPI化合物番号 (MMSで付与)	DCN 例: S R01243/DCN
SDRN 例: S 0470/SDRN	DWPI登録番号	DRN 例: S 0470/DRN
CC 例: S CROWN ETHERS/CC	化学構造ディスクリプタ(分類コード)	
EDCR 例: S 20071026/EDCR	DCR入力日	
UPCR 例: S 20071026/UPCR	DCR更新日	
UPWX 例: S 20071026/UPWX	DWPIクロスリファレンス更新日	

7. 表示形式

表示形式	表示対象
SCAN (無料)	CN.P, CN.S, MF, STR
TRIAL (無料)	CN.P, CN.S, MF, STR
STD (default)	AN.S, DCSE, CN.P, CN.S, SY, STR, SCR, CMT, MF
ISTD	インデント形式の STD
ALL	AN.S, DCSE, CN.P, CN.S, SY, STR, CMT, MF, SMF, MW, SRIN, SDCN, SDRN
IALL	インデント形式の ALL

その他

表示形式	表示対象
HITSTR(無料)	DWPIセグメントでヒットしたDCRアクセッション番号のSTRを表示 (表示対象のDCRアクセッション番号はITフィールドまたはCMCフィールドでヒットしたDCRアクセッション番号のみ。PLE(Polymer Indexing Code)フィールドでヒットしたDCRアクセッション番号は対象外)
ALLSTR(無料)	DWPIセグメントに索引されているDCRアクセッション番号のDCRセグメントのAN.S, CN.P, CN.S, SDCN, SDRN, STRを表示 (表示対象のDCRアクセッション番号はITフィールドまたはCMCフィールドでヒットしたDCRアクセッション番号のみ。PLE(Polymer Indexing Code)フィールドでヒットしたDCRアクセッション番号は対象外)

※料金は化学情報協会にお問い合わせ下さい。

Appendix: HITSTR と ALLSTR の対象と非対象

PLE UPA 20101002

[1.1] 2004 G1570-R G1558 D01 D11 D10 D23 D22 D31 D42 D50 D69 D73 D83
 F47 7A; G1161 G1150 G1149 G1092 D01 D11 D10 D19 D18 D32 D50 D76
 D93 F32 F30 DCN: R00470 **DCR: 9523**; H0022 H0011; P1898-R P0464
 D01 D10 D11 D18 D19 D22 D42 D76 F34 F47; M9999 M2722 M2711;
 L9999 L2391; L9999 L2722 L2711; P0475;

非対象

[1.2] 2004 ND03; Q9999 Q7476 Q7330; Q9999 Q7512-R; Q9999 Q7114-R;
 Q9999 Q9165-R; B9999 B4535; B9999 B3690-R;

[1.3] 2004 G4160 D01 D08 D17 D35 D99 D55 D59 D95 D30 D79; C999 C168;
 C999 C271; S9999 S1661; S9999 S1525;

[1.4] 2004 Rh 8B Tr; C999 C102 C000; C999 C271;

CMC UPB 20101002

DRN: 1570-S

DCR: **129518-S**

M3 *01* F012 F014 F019 F100 F113 F199 G030 G035 G563 H521 H522 H561 H562
 H581 H582 M126 M129 M135 M139 M280 M311 M312 M313 M314 M315 M316
 M321 M322 M323 M331 M332 M340 M342 M373 M391 M392 M393 M413 M424
 M510 M521 M522 M523 M530 M540 M541 M720 M740 N203 N209 N213 N309
 N321 N441 N513 Q332 Q454 Q610 Q620 R043 M905 M904
 RIN: 00012

対象

MCN: 1088-54401-K 1088-54401-P

M3 *02* F012 F019 F100 F199 G035 G039 G563 G599 H5 H562 H8 M1 M126 M132
 M280 M311 M313 M321 M322 M331 M340 M342 M373 M392 M413 M424 M510
 M522 M530 M542 M720 M740 N203 N209 N213 N309 N321 N441 N513 Q332
 Q454 Q610 Q620 R043 M905 M904
 RIN: 00012

DCN: R07850-K R07850-P

DCR: **186825-K 186825-P**

M3 *03* C106 C730 C810 M411 M730 Q421 Q423 R032 M905 M904

DCN: R05086-C R05086-K

DCR: **200716-C 200716-K**

M3 *04* A545 C810 M411 M730 Q421 R032 M905 M904

DCN: R06899-C R06899-K

DCR: **164-C 164-K**

M3 *05* F012 F019 F100 F199 G013 G019 G100 H5 H542 H8 M1 M121 M132 M150
 M280 M311 M313 M321 M322 M331 M340 M342 M373 M392 M413 M510 M522
 M532 M540 M730 M905 M904 M910

RIN: 00012

DCN: R01570-K R01570-S

DCR: **129518-K 129518-S**

8. ヒットしたDWPIセグメントのDCR情報の抽出

抽出形式																																						
DCR	<p>DWPIセグメントでヒットしたDWPIレコードからDCRアクセス番号をロールと検索フィールド/DCR付きで抽出する。</p> <p>=> S JP2010195776/PN</p> <p>L1 1 JP2010195776/PN</p> <p>=> SEL L1 DCR (無料)</p> <p>E1 THROUGH E12 ASSIGNED</p> <p>=> D SEL E1-E12 (無料)</p> <table border="0"> <tr> <td>E1</td> <td>2</td> <td>129518-S/DCR</td> <td rowspan="12"> <div data-bbox="842 546 1305 633" style="border: 1px solid black; padding: 2px;">CMC フィールドに表示される(DCN または DRN の)ロール付き番号の数</div> <div data-bbox="847 680 1321 808" style="border: 1px solid black; padding: 2px;">DCR アクセス番号が DCR-*****, または*****-ロール(DCN または DRN のロール付き)で表示される。</div> <div data-bbox="842 875 1106 920" style="border: 1px solid black; padding: 2px;">ロールなし番号の数</div> </td> </tr> <tr><td>E2</td><td>1</td><td>DCR-129518/DCR</td></tr> <tr><td>E3</td><td>1</td><td>DCR-164/DCR</td></tr> <tr><td>E4</td><td>1</td><td>DCR-186825/DCR</td></tr> <tr><td>E5</td><td>1</td><td>DCR-200716/DCR</td></tr> <tr><td>E6</td><td>1</td><td>129518-K/DCR</td></tr> <tr><td>E7</td><td>1</td><td>164-C/DCR</td></tr> <tr><td>E8</td><td>1</td><td>164-K/DCR</td></tr> <tr><td>E9</td><td>1</td><td>186825-K/DCR</td></tr> <tr><td>E10</td><td>1</td><td>186825-P/DCR</td></tr> <tr><td>E11</td><td>1</td><td>200716-C/DCR</td></tr> <tr><td>E12</td><td>1</td><td>200716-K/DCR</td></tr> </table> <p>=> S E1-E12</p> <p>123 129518-S/DCR</p> <p>281 DCR-129518/DCR</p> <p>5315 DCR-164/DCR</p> <p>21 DCR-186825/DCR</p> <p>16982 DCR-200716/DCR</p> <p>125 129518-K/DCR</p> <p>4395 164-C/DCR</p> <p>5247 164-K/DCR</p> <p>20 186825-K/DCR</p> <p>13 186825-P/DCR</p> <p>98 200716-C/DCR</p> <p>2178 200716-K/DCR</p> <p>L2 22541 (129518-S/DCR OR DCR-129518/DCR OR DCR-164/DCR OR DCR-186825/DCR OR DCR-200716/DCR OR 129518-K/DCR OR 164-C/DCR OR 164-K/DCR OR 186825-K/DCR OR 186825-P/DCR OR 200716-C/DCR OR 200716-K/DCR)</p> <p>同じ化合物が索引されているDWPIセグメントを検索できる。</p>	E1	2	129518-S/DCR	<div data-bbox="842 546 1305 633" style="border: 1px solid black; padding: 2px;">CMC フィールドに表示される(DCN または DRN の)ロール付き番号の数</div> <div data-bbox="847 680 1321 808" style="border: 1px solid black; padding: 2px;">DCR アクセス番号が DCR-*****, または*****-ロール(DCN または DRN のロール付き)で表示される。</div> <div data-bbox="842 875 1106 920" style="border: 1px solid black; padding: 2px;">ロールなし番号の数</div>	E2	1	DCR-129518/DCR	E3	1	DCR-164/DCR	E4	1	DCR-186825/DCR	E5	1	DCR-200716/DCR	E6	1	129518-K/DCR	E7	1	164-C/DCR	E8	1	164-K/DCR	E9	1	186825-K/DCR	E10	1	186825-P/DCR	E11	1	200716-C/DCR	E12	1	200716-K/DCR
E1	2	129518-S/DCR	<div data-bbox="842 546 1305 633" style="border: 1px solid black; padding: 2px;">CMC フィールドに表示される(DCN または DRN の)ロール付き番号の数</div> <div data-bbox="847 680 1321 808" style="border: 1px solid black; padding: 2px;">DCR アクセス番号が DCR-*****, または*****-ロール(DCN または DRN のロール付き)で表示される。</div> <div data-bbox="842 875 1106 920" style="border: 1px solid black; padding: 2px;">ロールなし番号の数</div>																																			
E2	1	DCR-129518/DCR																																				
E3	1	DCR-164/DCR																																				
E4	1	DCR-186825/DCR																																				
E5	1	DCR-200716/DCR																																				
E6	1	129518-K/DCR																																				
E7	1	164-C/DCR																																				
E8	1	164-K/DCR																																				
E9	1	186825-K/DCR																																				
E10	1	186825-P/DCR																																				
E11	1	200716-C/DCR																																				
E12	1	200716-K/DCR																																				

DCR.WR	<p>DWPIセグメントでヒットしたDWPIレコードからDCRアクセス番号を検索フィールド/DCR付きで抽出する。</p> <p>=> S JP2010195776/PN L1 1 JP2010195776/PN</p> <p>=> SEL L1 DCR.WR (無料) E1 THROUGH E4 ASSIGNED</p> <p>=> D SEL E1-E4 (無料)</p> <table border="0"> <tr> <td>E1</td> <td>4</td> <td>129518/DCR</td> </tr> <tr> <td>E2</td> <td>3</td> <td>164/DCR</td> </tr> <tr> <td>E3</td> <td>3</td> <td>186825/DCR</td> </tr> <tr> <td>E4</td> <td>3</td> <td>200716/DCR</td> </tr> </table> <p>=> S E1-E4</p> <p>281 129518/DCR 5315 164/DCR 21 186825/DCR 16982 200716/DCR</p> <p>L2 22541 (129518/DCR OR 164/DCR OR 186825/DCR OR 200716/DCR)</p> <p>同じ化合物が索引されているDWPIセグメントを検索できる。</p>	E1	4	129518/DCR	E2	3	164/DCR	E3	3	186825/DCR	E4	3	200716/DCR
E1	4	129518/DCR											
E2	3	164/DCR											
E3	3	186825/DCR											
E4	3	200716/DCR											
DCR.WRS	<p>DWPIセグメントでヒットしたDWPIレコードからDCRアクセス番号を検索フィールド/AN.S付きで抽出する。</p> <p>=> S JP2010195776/PN L1 1 JP2010195776/PN</p> <p>=> SEL L1 DCR.WRS (無料) E1 THROUGH E4 ASSIGNED</p> <p>=> D SEL E1-E4 (無料)</p> <table border="0"> <tr> <td>E1</td> <td>4</td> <td>DCR-129518/AN.S</td> </tr> <tr> <td>E2</td> <td>3</td> <td>DCR-164/AN.S</td> </tr> <tr> <td>E3</td> <td>3</td> <td>DCR-186825/AN.S</td> </tr> <tr> <td>E4</td> <td>3</td> <td>DCR-200716/AN.S</td> </tr> </table> <p>=> S E1-E4</p> <p>1 DCR-129518/AN.S 1 DCR-164/AN.S 1 DCR-186825/AN.S 1 DCR-200716/AN.S</p> <p>L2 4 (DCR-129518/AN.S OR DCR-164/AN.S OR DCR-186825/AN.S OR DCR-200716/AN.S)</p> <p>ヒットしたDCRアクセス番号のDCRセグメントを検索できる。</p>	E1	4	DCR-129518/AN.S	E2	3	DCR-164/AN.S	E3	3	DCR-186825/AN.S	E4	3	DCR-200716/AN.S
E1	4	DCR-129518/AN.S											
E2	3	DCR-164/AN.S											
E3	3	DCR-186825/AN.S											
E4	3	DCR-200716/AN.S											

ロールなし番号と(DRN と DCN の)ロール付き番号の数

9. 化合物の検索方法

1) 構造検索

化学構造式は、Expressの”Standard”を使用して作図します。下記の4つの構造検索が可能です。

- SSS (部分構造検索:CSSの回答に加えて、追加の置換基が存在してもよい。**デフォルト**)
- CSS (閉構造検索:FAMの回答に加えて、可変構造質問式を使用でき、特定の位置に置換基を含めることができる。)
- FAM (ファミリー検索:EXAの回答に加えて、他の成分が含まれていてもよい。)
- EXA (完全一致検索:構造質問式に完全に一致)

また、検索範囲は下記のとおりです。

SAM検索:DCRセグメントの10%を検索します。(無料)(**デフォルト**)

FUL検索:DCRセグメントの全体を検索します。

2) テキスト検索

(a) 化合物の名称による検索

化学物質名の後に「/CN」を加えて検索を行ないます。「/CN」を使用すると、優先化学物質名(CN.P)と同義語(SY)から網羅的に検索します。

=> S flunitrazepam/CN

L1 1 FLUNITRAZEPAM/CN

=> D

L1 ANSWER 1 OF 1 WPIX COPYRIGHT 2003 THOMSON DERWENT on STN

AN. S DCR-95341

DCSE 95341-0-0-0

統制化合物名

CN. P **FLUNITRAZEPAM**

←優先化合物名

↓

CN. S 5-(2-Fluoro-phenyl)-1-methyl-7-nitro-1,3-dihydro-benzo[e][1,4]diazepin-2-one

SY DARKENE; FLUNIPAM; FLUNITRAX; FLUNITRAX-2; FLUNITRAZEPAM;

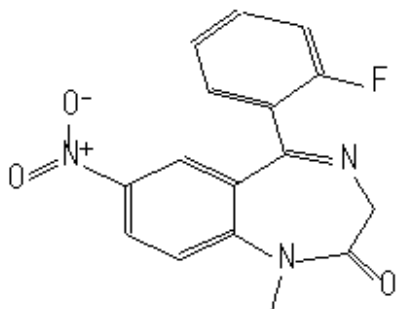
FLUNITRAZEPAMUM; FLUSERIN; FNZ; HIPNOSEDON; HYPNODORM; HYPNOSEDON; ILMAN;

LIBELIUS; NARCOZEP; NILIUM; NORIEL; PRIMUM; RO-5-4200; ROHIPNOL; ROHPINOL;

ROHYPNAL; ROHYPNOL; ROHYPOL; ROIPNOL; SEDEX; SILECE; SYLASE; SYLECE;

VALSERA; VULBEGAL

←同義語



MF C16 H12 F N3 O3

(b)Expandの利用

化学物質名で検索するときは、Expandコマンドを利用して検索に適する化学物質名の確認ができます。

化学物質名(CN)は、句で索引されているので、Expandリストには名前の全体が表示されます。

化学物質名セグメント(CNS)は、単語で索引されているので、Expandリストには名前のセグメントが表示されま

=> E ethyl/CN

E1	1	ETHYDINE/CN
E2	2	ETHYFRON/CN
E3	0	—> ETHYL/CN
E4	1	ETHYL (+)-3-HYDROXY-3-PHENYLPROPIONATE/CN
E5	1	ETHYL (2-(4-PHENOXYPHENOXY) ETHYL) CARBAMAT/CN
E6	1	ETHYL (2-METHOXYETHOXYCARBONYL THIO) ACETAT/CN
E7	1	ETHYL (E)-3-iodo-2-propenoate/CN
E8	1	ETHYL (METHYLTHIO) ACETATE/CN
E9	1	ETHYL (R)-(+)-3-HYDROXY-3-PHENYLPROPIONATE/CN
E10	1	ETHYL (R)-3-HYDROXY-3-PHENYLPROPIONATE/CN
E11	1	ETHYL (R)-CYSTEINE/CN
E12	1	ETHYL (S)-LACTATE/CN

=> E ethyl/CNS

E1	1	ETHYDINE/CNS
E2	2	ETHYFRON/CNS
E3	162451	—> ETHYL/CNS
E4	1	ETHYLACETAL/CNS
E5	1	ETHYLACETAMIDE/CNS
E6	1	ETHYLACETAMIDINE/CNS
E7	1	ETHYLACETOACETATATE/CNS
E8	12	ETHYLACETOACETATE/CNS
E9	1	ETHYLACETOACETATEALUMINUMISO/CNS
E10	2	ETHYLACETOACETATO/CNS
E11	1	ETHYLACETOACETATOALUMINUM/CNS
E12	1	ETHYLACETOACETONATE/CNS

(c) 中間一致および後方一致検索

化学物質名セグメント「/CNS」は、中間一致検索および後方一致検索が可能です。

=> S ?benzene?/CNS ←(S ?benzene?/CNIは不可)

L1 39001 ?BENZENE?/CNS

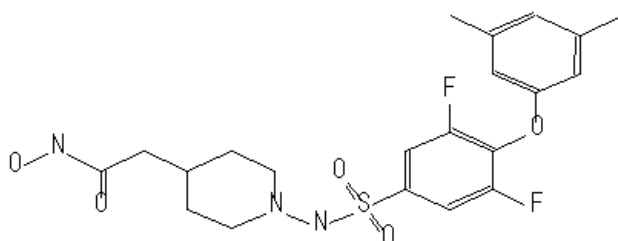
=> D 1-2

L1 ANSWER 1 OF 39001 WPIX COPYRIGHT 2003 THOMSON REUTERS on STN

AN. S DCR-749624

DCSE 749624-0-0-0

CN. S 2-[1-[4-(3,5-Dimethyl-phenoxy)-3,5-difluoro-benzenesulfonylamino
]-piperidin-4-yl]-N-hydroxy-acetamide



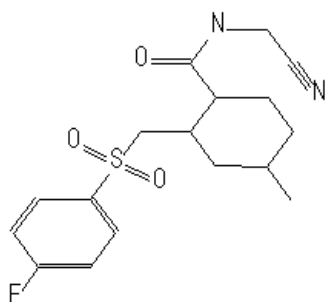
MF C21 H25 F2 N3 O5 S

L1 ANSWER 2 OF 39001 WPIX COPYRIGHT 2003 THOMSON REUTERS on STN

AN. S DCR-737224

DCSE 737224-0-0-0

CN. S 2-(4-Fluoro-benzenesulfonylmethyl)-4-methyl-
cyclohexanecarboxylic acid cyanomethyl-amide



MF C17 H21 F N2 O3 S

(d) 検索結果のDWPIセグメントへのクロスオーバー

化合物の名称による検索結果から、DWPIのレコードを検索するには、「/DCR」を使用し、DWPIにクロスオーバーすることができます。

=> S flunitrazepam/CN

L2 1 FLUNITRAZEPAM/CN

=> S L2/DCR

L3 70 L2/DCR

=> D MAX

L3 ANSWER 1 OF 70 WPIX COPYRIGHT 2007 THE THOMSON CORP on STN
AN 2007-725173 [68] WPIX
ED 20071024
DNC C2007-254091 [68]
DNN N2007-571560 [68]
TI Personal illicit drug e.g. flunitrazepam, detecting method for use by
woman, involves moistening layer on finger nail with liquid from beverage,
and observing change of layer, where change indicates presence of drug in
beverage
DC B04; D13; S03
IN BECHTEL P; HOPSON T; LEGGE R; MARACAS G
PA (BECH-I) BECHTEL P; (HOPS-I) HOPSON T; (LEGG-I) LEGGE R; (MARA-I) MARACAS
G
CYC 1
PI US——7238533 B1 20070703 (200768)* EN 5[2]
ADT US——7238533 B1 2003US-000624703 20030722
PRAI 2003US-000624703 20030722
IPC1 G01N-0033/48 [I, A]; G01N-0033/48 [I, C]
AB US 7238533 B1 UPAB: 20071024
NOVELTY - The method involves providing a substance chemically reactive
to a suspected drug e.g. flunitrazepam, where the substance is provided in
.....
IT UPIT 20071024
95341-CL 95341-DET; 132927-CL 132927-DET
FS CPI; EPI
MC CPI: B06-D07; B10-C04D; B11-C08E; B12-K04E3; D03-K03
EPI: S03-C02F1; S03-C06
CMC UPB 20071024
M2 *01* D014 D022 D780 G011 G100 H2 H211 H3 H341 H6 H601 H641 J5 J521 L9
L941 M1 M113 M210 M211 M273 M281 M320 M412 M511 M520 M531 M540
M750 N102 M905 M904
RIN: 01829
DCN: R07391-A R07391-K
DCR: 95341-A 95341-K
M2 *02* H4 H401 H481 H8 JO J011 J1 J171 M280 M313 M321 M332 M342 M381
M391 M416 M620 M750 N102 M905 M904
DCN: R14187-A R14187-K
DCR: 132927-A 132927-K

(d) 化合物ディスクリプタ(分類コード)

化合物ディスクリプタ(Substance Discriptore)は、構造検索では検索が困難な化合物のグループを検索するためのキーワードです。また、サブ検索の母集合を作るのに有効です。詳しくはAppendix 2(P44) をご覧下さい。

分類コード(/CC)を使用して検索します。HELP SDCとコマンドを入力すれば、化合物ディスクリプタをオンラインで参照することもできます。

```
=> S benzodiazepines/CC
L4      5675 BENZODIAZEPINES/CC
```

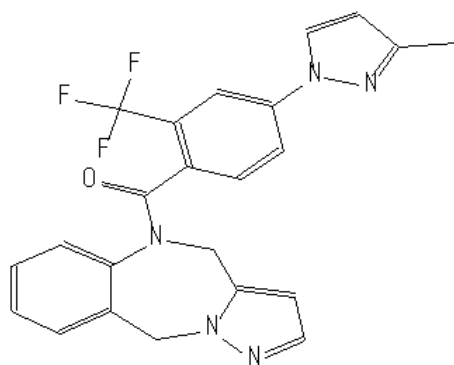
(e) 元素、元素数、分子量

分子を構成する元素、元素数、分子量からの検索も可能です。元素数、分子量については、範囲指定が可能です。

```
=> S N 5-6/ELS. CNT      ←窒素数 5~6 個を検索
      901956 N/ELS
      329365 5-6/ELS
L5      159206 N 5-6/ELS. CNT
          (N/ELS (T) 5-6/ELS)
```

```
=> D
```

```
L5 ANSWER 1 OF 159206 WPIX COPYRIGHT 2007      THE THOMSON CORP on STN
AN. S DCR-734416
CN. S [4-(3-Methyl-pyrazol-1-yl)-2-trifluoromethyl-phenyl]-(4H,10H-3,3a,9-triaza-
benzo[f]azulen-9-yl)-methanone
```



```
MF      C23 H18 F3 N5 O
```

```
=> S MW<100 and K/ELS      ←分子量 100 未満およびKを含有する化合物を検索
      4753 MW<100
      2633 K/ELS
L6      82 MW<100 AND K/ELS
```

=> D 5 10 MF MW

L6 ANSWER 5 OF 82 WPIX COPYRIGHT 2007 THE THOMSON CORP on STN

MF C4 H9 K

MW **96.2183**

L6 ANSWER 10 OF 82 WPIX COPYRIGHT 2007 THE THOMSON CORP on STN

MF 6 K . Mg . 4 0

MW **79.4134**

10. DCRLコード番号

AN.S	DCR-1525535	(DCRアクセッション番号)
DCSE	1525535-0-0-0	(DCR番号)
CN.S	Diphenyl-(3,5,5',5''-tetrakis-carbazol-9-yl-[1,1';3',1'']terphenyl-3''-yl)- amine	

- DCRアクセッション番号
DCRセグメントではAN.Sフィールドに表示されます。DWPIセグメントではIT、CMC、PLEに表示されます。
- DCR番号
DCRセグメントのDCSEフィールドに表示されます。下記の4つの部分から構成され、論理的な形式をとっています。

00000000-00-00-00

① ② ③

00000000 1～8桁の連続する数字

- ① 00 立体異性体(1～99)
- ② 00 塩(1～99)
- ③ 00 その他(アイソトープ、互変異性体等)(1～99)

化合物の異性体、塩等は根幹の1～8桁の連続する数字を共有しています。従って、根幹の1～8桁の連続する数字を検索すれば、トランケーションを使用しなくても、化合物の異性体、塩等を検索することが可能です。

=> S 270633/DCSE ←根幹の1～8桁の連続する数字で検索

L1 6 270633/DCSE

=> E 270633/DCSE

E1 1 270632/DCSE
 E2 1 270632-0-0-0/DCSE
 E3 6 → 270633/DCSE
 E4 1 270633-1-0-0/DCSE
 E5 1 270633-2-0-0/DCSE
 E6 1 270633-3-0-0/DCSE
 E7 1 270633-4-0-0/DCSE
 E8 1 270633-5-0-0/DCSE
 E9 1 270633-6-0-0/DCSE
 E10 2 270638/DCSE
 E11 1 270638-1-0-0/DCSE
 E12 1 270638-2-0-0/DCSE

=> S E3 ←異性体、塩等も検索

L2 6 270633/DCSE

=> D L2 ALL

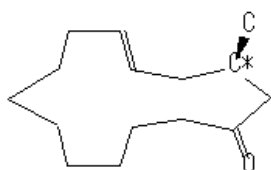
L2 ANSWER 1 OF 6 WPIX COPYRIGHT 2003 THOMSON DERWENT on STN

AN. S DCR-270825

DCSE 270633-5-0-0

CN. S 3-Methyl-cyclotetradec-5-enone

SY (S)-(E)-3-METHYL-CYCLOTETRADEC-5-ENONE



CMT (S)-E-isomer

MF C15 H26 O

SMF C15 H26 O *1; TOTAL *1; TYPE *1

MW 222.3739

SRIN 00536

SDCN RA1HHV

(b)DCRアクセッション番号とロール

ロール:化合物が精製されるのか、混合物の一部なのか、請求項に記載されているのか、実施例に記載されているのかなど補足情報を表します。詳しくはAppendix 1(P42) をご覧下さい。

DCRアクセッション番号は、ロールと組み合わせることにより、目的に合わせて検索結果を絞り込むことが可能です。DWPIセグメントでは、ロールとともに検索します。リンクには近接演算子(T)を使用します。

=> S DCR-49794/DCR(T) (USE or U)/DCR

2422 49794/DCR

780205 USE/DCR

872829 U/DCR

L1 52 49794/DCR(T) (USE OR U)/DCR

使用方法がクレームされた化合物であることを示す、DCRのロールUSEと、DCNまたはDRNのロールUをリンク

=> D L1 10 AN TI HIT

L1 ANSWER 10 OF 52 WPINDEX COPYRIGHT 2009 THOMSON REUTERS on STN

AN 2008-M82324 [76] WPINDEX

TI Manufacture of hydrogen for fuel cell, involves reacting alkali borohydride, hydroxide and hydrophilic material, adding water, forming gel hydrogen storage material, and adding catalyst to gel hydrogen storage material

IT UPIT 20081126

97153-CL 97153-PRD; 107320-CL 107320-RCT; 242-CL 242-RCT; 670-CL 670-RCT;

116-CL 116-RGT; 587-CL 587-RGT; 110-CL 110-RGT; 49794-CL 49794-RGT

49794-USE; 2-CL 2-RGT 2-USE; 104530-CL 104530-RGT 104530-USE; 89837-CL

89837-RGT 89837-USE; 8781-CL 8781-RGT 8781-USE; 135176-CL 135176-RGT

135176-USE; 790-CL 790-RGT 790-USE; 129457-CL 129457-RGT 129457-USE

CMC UPB 20081126

M3 *08* C108 C810 H7 H714 H721 JO J011 J3 J371 KO K4 K431 K432 M210 M212

M262 M281 M314 M321 M333 M342 M383 M391 M416 M620 M640 M781

M905 M904

DCN: R03538-K R03538-U R03538-V

DCR: 49794-K 49794-U 49794-V

※/DCRの代わりに/ITをしますと、DCRのロールに限定して検索できます。

例: S DCR-49794/IT(T) USE /IT

11. DWPI セグメントから DCR セグメントへのクロスオーバー

TRAコマンド(有料)(またはSELコマンド(無料))を使用してDCRレコード番号をDWPIセグメントからDCRセグメントへクロスオーバーすると、DCRに収録された関連化合物の構造情報を確認することが可能です。

=> c

L1 1 W02008106091/PN

=> TRA L1 DCR /AN. S

L2 TRANSFER L1 1- DCR : 24 TERMS

L3 8 L2/AN. S

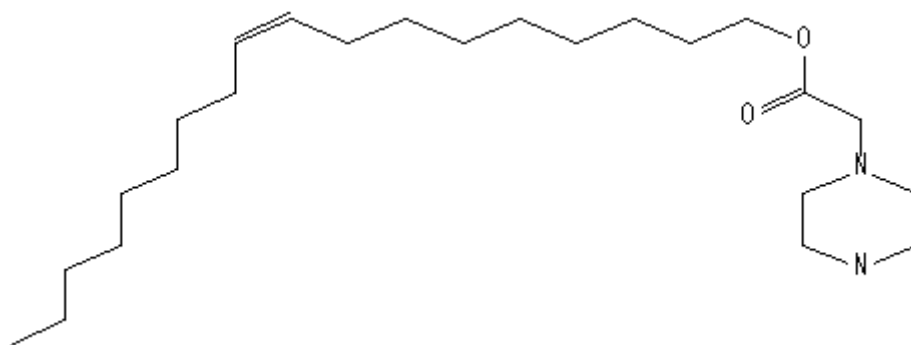
=> D 1-2

L3 ANSWER 1 OF 8 WPINDEX COPYRIGHT 2009 THOMSON REUTERS on STN

AN. S DCR-1866806

DCSE 895828-1-0-0

CN. S Piperazin-1-yl-acetic acid (Z)-octadec-9-enyl ester



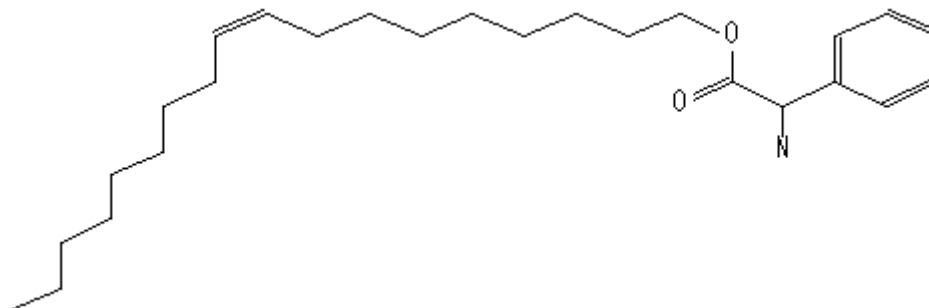
MF C24 H46 N2 O2

L3 ANSWER 2 OF 8 WPINDEX COPYRIGHT 2009 THOMSON REUTERS on STN

AN. S DCR-1866797

DCSE 895826-6-0-0

CN. S Amino-phenyl-acetic acid (Z)-octadec-9-enyl ester



MF C26 H43 N O2

=> SEL L1 DCR
E1 THROUGH E24 ASSIGNED

=> D SEL

E1	1	DCR-1828891/DCR
E2	1	DCR-1828893/DCR
E3	1	DCR-1828894/DCR
E4	1	DCR-1828896/DCR
E5	1	DCR-1866797/DCR
E6	1	DCR-1866806/DCR
E7	1	DCR-895826/DCR
E8	1	DCR-895828/DCR
E9	1	1828891-K/DCR
E10	1	1828891-U/DCR
E11	1	1828893-K/DCR
E12	1	1828893-U/DCR
E13	1	1828894-K/DCR
E14	1	1828894-U/DCR
E15	1	1828896-K/DCR
E16	1	1828896-U/DCR
E17	1	1866797-K/DCR
E18	1	1866797-U/DCR
E19	1	1866806-K/DCR
E20	1	1866806-U/DCR
E21	1	895826-K/DCR
E22	1	895826-U/DCR
E23	1	895828-K/DCR
E24	1	895828-U/DCR

12. その他の検索例

検索例 1: ポリペプチドの検索 —「/CMT」の使用例—

- 1) DCRにはアミノ酸残基30までのポリペプチドが収録されているので、「/CMT」を使用して目的のアミノ酸残基の配列を検索することが可能です。

=> S Lys-Ser-Leu/CMT

18013 LYS/CMT

19616 SER/CMT

24529 LEU/CMT

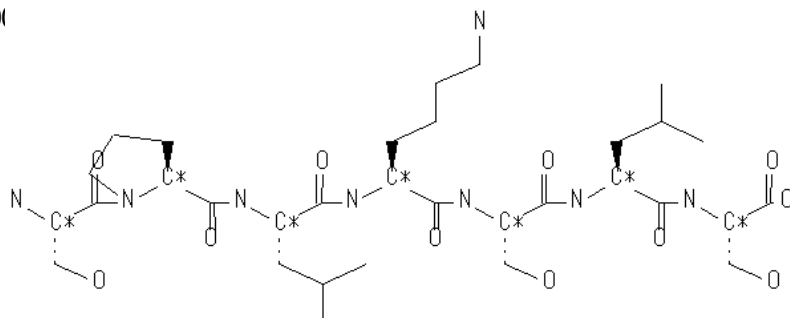
L2 93 LYS-SER-LEU/CMT

((LYS(W)SER(W)LEU)/CMT)

=> D ALL

AN. S DCR-689476

DI



CMT Ser-Pro-Leu-Lys-Ser-Leu-Ser

MF C32 H58 N8 O11

SMF C32 H58 N8 O11 *1; TOTAL *1; TYPE *1

MW 730.8661

SDCN RAA1R0

CC PEPTIDES

=> S L2/DCR

L3 456 L2/DCR

検索例 2 : Steroid の検索 —化合物ディスクリプタ Steroids の使用例—

OH基をシクロペンタン環上に有するステロイドを検索したい場合、ステロイド環には様々な置換基や不飽和状態があるので、構造検索だけで検索するのは非常に困難ですが、化合物ディスクリプタSteroidsを組み合わせて使用すると迅速に検索できます。

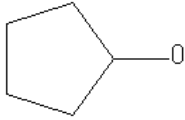
1)シクロペンタン環にOH基が単結合したサブ構造をSTN Expressで作図し、アップロードし、サンプル検索を行います。

```

=>
Uploading C:\Documents and Settings\デスクトップ\090321-cycropentan0.str

L1      STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE
L1      STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1
SAMPLE SEARCH INITIATED 11:20:33 FILE 'WPINDEX'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 54754 TO ITERATE

1.8% PROCESSED      1000 ITERATIONS                        45 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **INCOMPLETE**           ←不完全サーチが予想される
                        BATCH   **INCOMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:   542132 TO 552948
PROJECTED ANSWERS:     23164 TO 26114

L2      45 SEA SSS SAM L1

```

2) 化合物ディスクリプタSteroidsで検索の対象を絞り込んで、構造検索(サブセット検索)を行います。

=> S steroids/GC

L3 13598 STEROIDS/GC

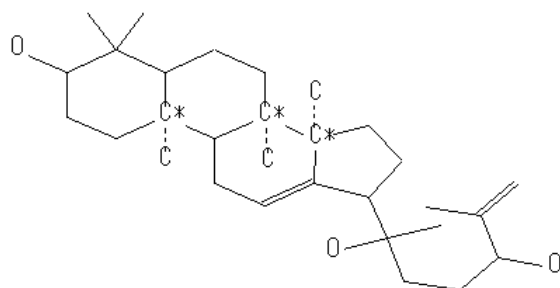
=> D 1-2

L3 ANSWER 1 OF 13598 WPINDEX COPYRIGHT 2009 THOMSON REUTERS on STN

AN. S DCR-1984080

DCSE 1984080-1-0-0

CN. S 2-((8R, 10R, 14S)-3-Hydroxy-4, 4, 8, 10, 14-pentamethyl-
2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 16, 17-tetradecahydro-1H-
cyclopenta[a]phenanthren-17-yl)-6-methyl-hept-6-ene-2, 5-diol



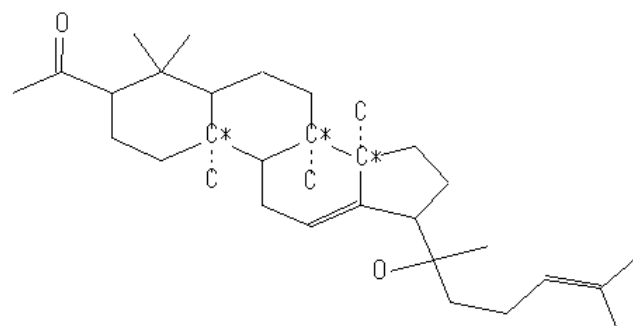
MF C30 H50 O3

L3 ANSWER 2 OF 13598 WPINDEX COPYRIGHT 2009 THOMSON REUTERS on STN

AN. S DCR-1984079

DCSE 1984079-1-0-0

CN. S 1-[(8R, 10S, 14S)-17-(1-Hydroxy-1, 5-dimethyl-hex-4-enyl)-4, 4, 8, 10, 14-
pentamethyl-2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 16, 17-tetradecahydro-1H-
cyclopenta[a]phenanthren-3-yl]-ethanone



MF C32 H52 O2

=> S L1 SUB=L3 SAM

SAMPLE SUBSET SEARCH INITIATED 11:22:40 FILE 'WPINDEX'

SAMPLE SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 1348 TO ITERATE

74.2% PROCESSED 1000 ITERATIONS 50 ANSWERS

INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)

SEARCH TIME: 00.00.01

PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): ONLINE **COMPLETE**

PROJECTED ITERATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 12385 TO 14575

PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 5455 TO 6945

L4 50 SEA SUB=L3 SSS SAM L1

=> S L1 SUB=L3 FULL

FULL SUBSET SEARCH INITIATED 11:23:43 FILE 'WPINDEX'

FULL SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 12842 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 12842 ITERATIONS 5543 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.03

L5 5543 SEA SUB=L3 SSS FUL L1

=> S L5/DCR

L6 11790 L5/DCR

=> D L6 BIB IT HITSTR

L6 ANSWER 1 OF 11790 WPINDEX COPYRIGHT 2009 THOMSON REUTERS on STN

AN 2009-N70016 [63] WPINDEX

TI Preparing pregnane compound e.g. ciclesonide useful for treating asthma involves ketalization of 16-alpha-hydroxyprednisolone or its ester with cyclohexanecarboxyaldehyde in presence of hydrobromic/hydroiodic acid as catalyst and solvent

DC B01

IN CURTI M; LA LOGGIA F; POZZOLI C G

PA (FARM-N) FARMABIOS SPA

CYC 122

PIA WO 2009112557 A2 20090917 (200963)* EN 17[2]

ADT WO 2009112557 A2 WO 2009-EP52945 20090312

PRAI IT 2009-MI16 20090109

IT 2008-MI426 20080313

IT UPIT 20091001

140642-CL 140642-PRD; 1057-44301-CL 1057-44301-PRD; 2129190-CL

2129190-NEW; 97376-CL 97376-RCT; 8261-CL 8261-RCT; 7530-CL 7530-RCT;

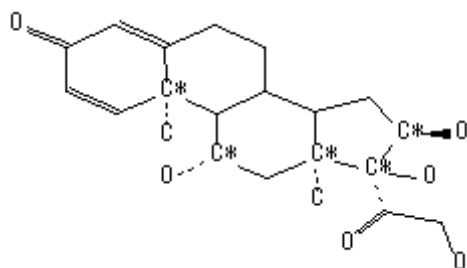
62-CL 62-RGT; 69-CL 69-RGT

AN. S DCR-97376

CN. S 11, 16, 17-Trihydroxy-17-hydroxyacetyl-10, 13-dimethyl-

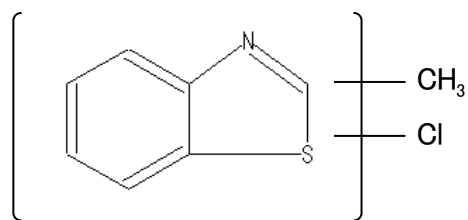
6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17-dodecahydro-cyclopenta[a]phenanthren-3-one

SDCN RAHYK8; RAZDYF

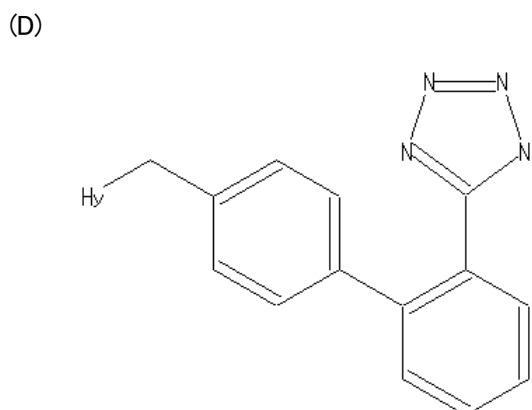
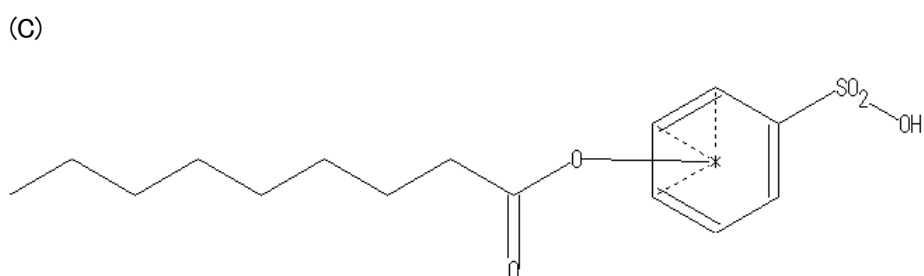
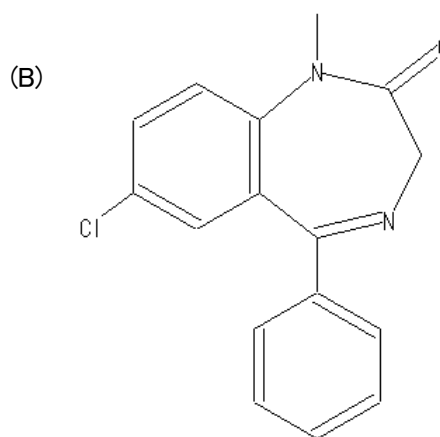
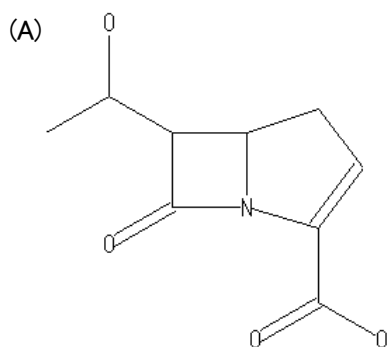


13. 練習問題

1. 下記のベンゾチアゾール(Benzothiazole)をクロロ基とメチル基で置換した化合物を化学物質名セグメント(/CNS)と分子式(/MF)で検索し、この化合物に関する特許を検索して下さい。



2. 下記の化合物を構造検索し、この化合物に関する特許を検索して下さい。



練習問題の解答

1.

=> S (BENZOTHIAZOLE AND METHYL AND CHLORO)/CNS AND C8 H6 CL N S/MF

1803 BENZOTHIAZOLE/CNS

392386 METHYL/CNS

168971 CHLORO/CNS

4 C8 H6 CL N S/MF

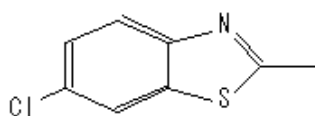
L1 3 (BENZOTHIAZOLE AND METHYL AND CHLORO)/CNS AND C8 H6 CL N S/MF

=> D L1 TRI 1-3

L1 ANSWER 1 OF 3 WPINDEX COPYRIGHT 2009

CNS 6-Chloro-2-methyl-benzothiazole

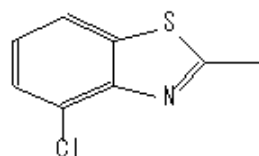
MF C8 H6 Cl N S



L1 ANSWER 2 OF 3 WPINDEX COPYRIGHT 2009

CNS 4-Chloro-2-methyl-benzothiazole

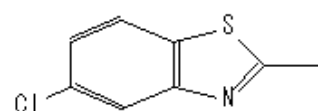
MF C8 H6 Cl N S



L1 ANSWER 3 OF 3 WPINDEX COPYRIGHT 2009

CNS 5-Chloro-2-methyl-benzothiazole

MF C8 H6 Cl N S



2-(A)

=> FILE WPINDEX

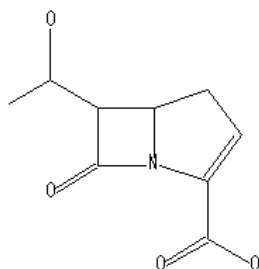
=>

Uploading C:\STNEXP\Queries\090321\exercise 2-A.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE

L1 STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1

SAMPLE SEARCH INITIATED 18:50:37 FILE 'WPINDEX'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 143 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 143 ITERATIONS

50 ANSWERS

INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)

SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**

BATCH **COMPLETE**

PROJECTED ITERATIONS: 1072 TO 1788

PROJECTED ANSWERS: 959 TO 1641

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

FULL SEARCH INITIATED 18:51:18 FILE 'WPINDEX'

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 1271 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 1271 ITERATIONS

1049 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.03

L3 1049 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN

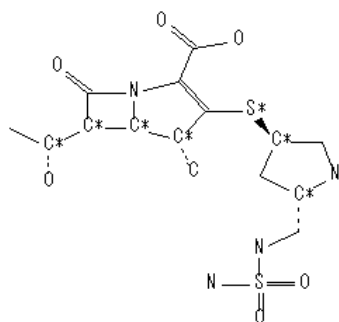
L3 1049 ANSWERS WPINDEX

MF C15 H24 N4 O6 S2 . H2 O

CM 1

O

CM 2



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

2-(B)

=> FILE WPINDEX

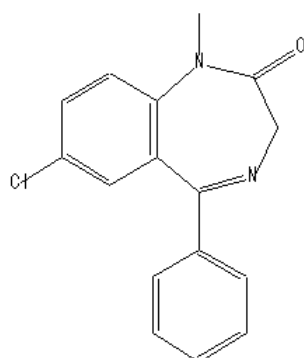
=>

Uploading C:\STNEXP\Queries\090321\excercise 2-B.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE

L1 STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1

SAMPLE SEARCH INITIATED 18:59:05 FILE 'WPINDEX'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 30 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 30 ITERATIONS

19 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**

BATCH **COMPLETE**

PROJECTED ITERATIONS: 136 TO 464

PROJECTED ANSWERS: 60 TO 320

L2 19 SEA SSS SAM L1

DCR

=> S L1 FUL

FULL SEARCH INITIATED 18:59:23 FILE 'WPIINDEX'

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 238 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 238 ITERATIONS

165 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.02

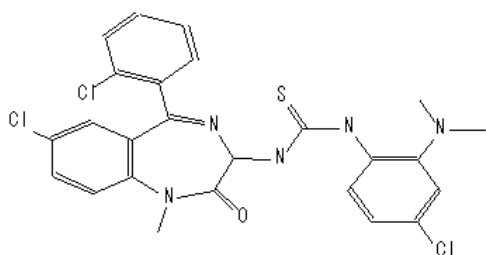
L3 165 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN

L3 165 ANSWERS WPIINDEX

CN.S 1-[7-Chloro-5-(2-chloro-phenyl)-1-methyl-2-oxo-2,3-dihydro-1H-
benzo[e][1,4]diazepin-3-yl]-3-(4-chloro-2-dimethylamino-phenyl)-thiourea

MF C25 H22 Cl3 N5 O S



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

2-(C)

=> FILE WPIINDEX

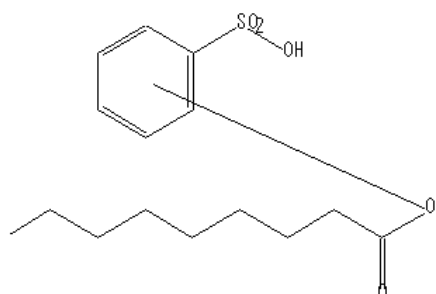
=>

Uploading C:\STNEXP\Queries\090321\exercise 2-C.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE

L1 STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1

SAMPLE SEARCH INITIATED 19:03:19 FILE 'WPIINDEX'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 121 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 121 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

2 ANSWERS

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 881 TO 1539
PROJECTED ANSWERS: 2 TO 62

L2 2 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

FULL SEARCH INITIATED 19:03:38 FILE 'WPINDEX'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 1239 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 1239 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.04

15 ANSWERS

L3 15 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN

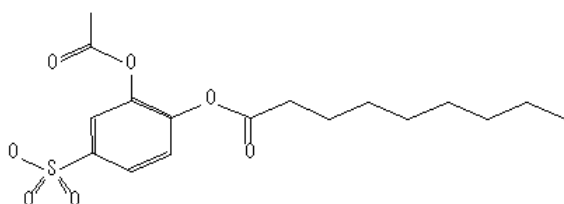
L3 15 ANSWERS WPINDEX

MF C17 H24 O7 S . Na

CM 1

Na

CM 2



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

2-(D)

=> FILE WPINDEX

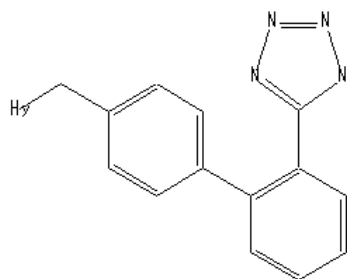
=>

Uploading C:\STNEXP\Queries\090321\exercice 2-D.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE

L1 STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1

SAMPLE SEARCH INITIATED 19:08:55 FILE 'WPINDEX'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 98 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 98 ITERATIONS

50 ANSWERS

INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)

SEARCH TIME: 00.00.02

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**

BATCH **COMPLETE**

PROJECTED ITERATIONS: 684 TO 1276

PROJECTED ANSWERS: 376 TO 844

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

FULL SEARCH INITIATED 19:09:06 FILE 'WPINDEX'

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 1091 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 1091 ITERATIONS

672 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.02

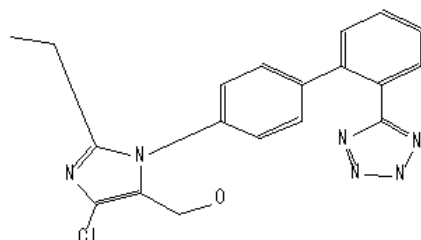
L3 672 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN

L3 672 ANSWERS WPINDEX

CN.S [2-Butyl-5-chloro-3-[2'-(2H-tetrazol-5-yl)-biphenyl-4-ylmethyl]-3H-imidazol-4-yl]-methanol

MF C22 H23 Cl N6 O



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

Appendix

1. ロール

ロールは当該化合物がどのように使われるのか、公報のどこに記載されているのか等を示します。DCR では DCR オリジナル、DCN 由来、DRN 由来の 3 種類のロールを使用することができます。「HELP ROLE」コマンドで定義をご覧ください。

① DCR オリジナルのロール(1987-現在, 1999-現在)

IT フィールドに表示されます。

Role	Definition	Scope Notes
CL	CLAIM	Applied to compounds present in the patent claims (1999-date).
EX	EXAMPLE	Applied to compounds present in the examples, but not in the claims. (from update 200253)
DIS	DISCLOSURE	Applied to compounds present in the disclosure, but not in the claims nor in the examples (from update 200253)
NEW	NEW	Substance, process, or apparatus claimed or described as new. (Before 1999 rarely applied.)
PRD	PRODUCED	Production or manufacture of substance or apparatus is claimed or described.
USE	USE	Use of substance or apparatus is claimed or described.
DET	DETECTED	Applied to the keyword for a condition or substance which has been detected as a result of testing.
RCT	REACTANT	Applied to starting materials or products defined in terms of starting materials (1987-date)
RGT	REAGENT	Applied to reaction components apart from starting materials e.g. catalysts, purifying agents (1987-date)
CMP	COMPONENT	Applied to components of a mixture (1987-date)
PUR	PURIFIED	
REM	REMOVED	
TES	TESTED	
ST	SALT	Applied to alkali or alkaline earth metal salts of organic acids; also to certain salts of organic bases e.g. hydrohalides, acetates.

例)

IT UPIT 20050530

81119-CL; 102303-CL; 91082-CL; 28954-CL; 99570-CL; 99342-CL; 7902-CL;
 101051-CL; 20152-CL; 108017-CL; 135144-CL; 650208-CL; 108597-CL; 12641-CL;
 94687-CL; 95025-CL; 7556-CL; 50639-CL; 70204-CL; 13208-CL; 100409-CL;
 101564-CL; 72366-CL; 43216-CL; 6497-CL; 108086-CL; 155564-CL; 127393-CL;
 129270-CL

② DCN由来のロール(1987-現在)

CMCフィールドのM0-M6フィールドに表示されます。

Role	Definition/Notes
A	Analysed or detected
C	Catalyst
D	Detecting agent
R	Removing or purifying agent
S	Intermediate or starting material
X	Substance removed
N	New Compound
P	Known compound produced
Q	Product defined by its starting material(s)
M	Component of a Mixture
U	Use of a single compound
E	Excipient (from 1998)
T	Therapeutically active agent or prodrug (from 1998)
V	Reagent (from 1998)
K	Known compound (from 1998)

例)

CMC UPB 20050530

DRN: 0076-U 0210-U 0224-U 1243-U 1382-U 1445-U 1446-U 1987-U 2065-U

DCR: 108017-U 108597-U 11680-U 13208-U 142660-U 143583-U 145463-U 155180-U
20152-U 50639-U 7556-U 7902-U 81119-U 95025-U

M2 *01* D012 D014 D770 H1 H181 H2 H201 J0 J011 J1 J111 J5 J521 M210 M211
M212 M240 M273 M281 M320 M412 M431 M511 M520 M530 M540 M782 P220
P633 M905 M904 M910

RIN: 01683

DCN: R01243-K R01243-M R01243-T

DCR: 81119-K 81119-M 81119-T 81119-U

③ DRN由来のロール

CMCフィールドのDCRまたはM0-Mフィールドに表示されます。

Role	Definition/Scope Notes
S	Intermediate or starting material
P	Compound produced
U	Use of a compound (single use or as a mixture)

例)

CMC UPB 20050530

DRN: 0076-U 0210-U 0224-U 1243-U 1382-U 1445-U 1446-U 1987-U 2065-U

DCR: 108017-U 108597-U 11680-U 13208-U 142660-U 143583-U 145463-U 155180-U
20152-U 50639-U 7556-U 7902-U 81119-U 95025-U

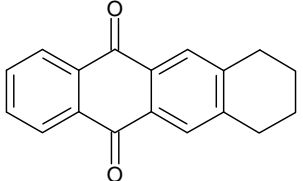
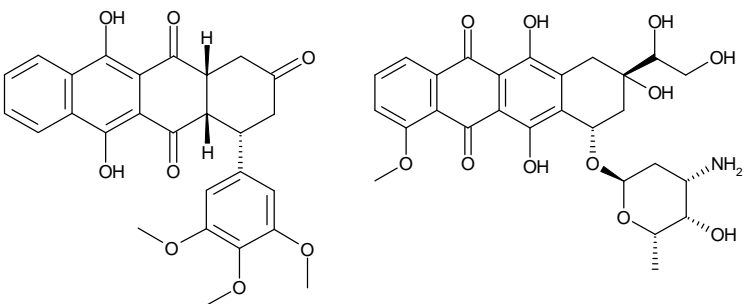
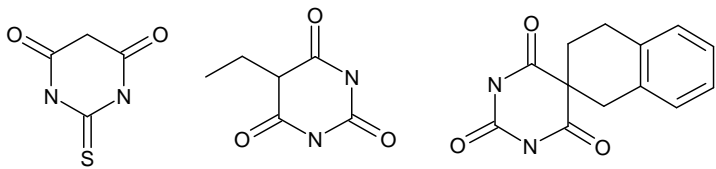
M2 *01* D012 D014 D770 H1 H181 H2 H201 J0 J011 J1 J111 J5 J521 M210 M211
M212 M240 M273 M281 M320 M412 M431 M511 M520 M530 M540 M782 P220
P633 M905 M904 M910

RIN: 01683

DCN: R01243-K R01243-M R01243-T

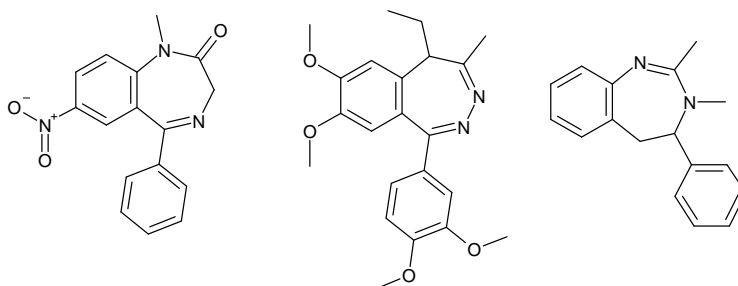
DCR: 81119-K 81119-M 81119-T 81119-U

2. 化合物ディスクリプタ(分類コード)

分類コード	説明
ALKALOIDS	主に植物由来の含窒素有機塩基。明細書で確認された場合のみ使用する。 化合物例: モルフィン、カフェイン、アトロピン、ストリキニン。
ALLOYS	2種以上の金属元素の混和物からなる金属。
ANTHRACYCLINES	下記の環系を含む化合物クラス。飽和度および置換の有無は限定されない。
	 <p>化合物例:</p> 
ANTIBODIES	抗原の導入に反応して生成するグロブリン分画の血清タンパク。明細書で確認された場合のみ使用する。
BARBITURATES	チオ類縁体を含むバルビツール酸の全誘導体。
	<p>化合物例:</p> 
BENZODIAZEPINES	窒素原子2個(どの位置でもよい)、かつ環内の他の原子は炭素である7員環にベンゼン環が

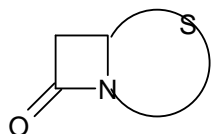
縮合している場合使用。飽和度および置換の有無は限定されない。

化合物例:

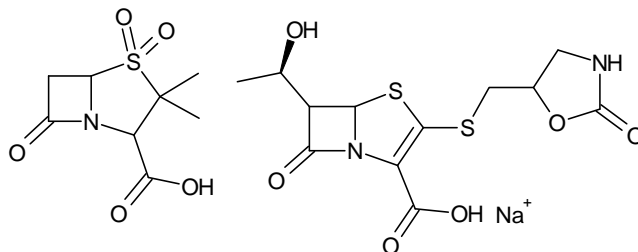


BETA LACTAMS セファロスポリン類、ペニシリン類などのチアジンまたはチアゾール環に縮合しているベータラクタム基を含む化合物。飽和度および置換の有無は限定されない。

基本的な環構造:



化合物例:

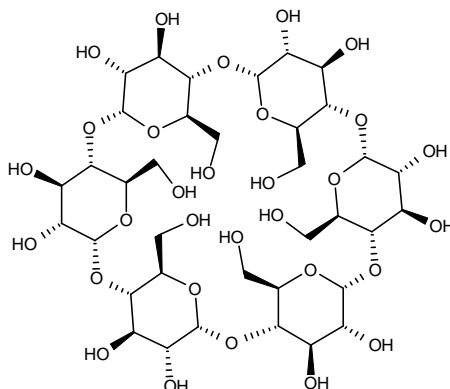


BORANES ホウ素と水素のみを含む化合物群。最も単純な例はジボラン B_2H_6 である。これより大きなボラン分子はホウ素原子の開多面体または閉多面体である。

CARBOHYDRATES ポリヒドロキシャルデヒド類(またはポリヒドロキシケトン類)、あるいは加水分解によりこれらの化合物を生成する物質。CARBOHYDRATEの一般式は $C_x(H_2O)_y$ である。糖部分を含む化合物にはCARBOHYDRATEが付与されている。糖の大きさについては下限が設定されており、化合物は不整中心を2個含むものでなければならない。従って、グリコアルデヒド($HOCH_2CHO$)およびグリセルアルデヒド($HOCH_2CHOHCHO$)はどちらも不整中心を2個含まないので、CARBOHYDRATEの範疇から除外される。

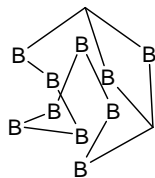
- Glycoproteins CARBOHYDRATEが結合しているタンパク質。PROTEINおよびCARBOHYDRATEも併用される。
- Polysaccharides 多糖類は、エーテルまたはチオエーテル結合を介して隣接する糖残渣(またはその誘導体)を少なくとも5つ含む化合物である。CARBOHYDRATEも併用する。

- Cyclodextrins 個々のグルコース単位が1,4-結合によって結合しているグルコースの環状オリゴマー。CARBOHYDRATEおよびPolysaccharideも併用する。



- CARBORANES 1種以上の多面体頂点が炭素によって置換されているホウ素クラスター化合物。
化合物例: $C_2H_{12}B_{10}$

- CROWN ETHERS 環構造中の供与原子としてOまたはSを有し、カチオンを空孔に取り込む性質を有する大環状化合物。公知のクラウンエーテルは、繰り返し単位 $(-OCR_2CR_2)_n$ (但し、Rは最も一般的にはHである)を含む大環状化合物であり、式: x -クラウン- y (但し、 x は環中の総原子数、 y は酸素数である)と称される。
化合物例:



- CYCLIC PEPTIDES PEPTIDESを参照。

- CYCLODEXTRINS CARBOHYDRATESを参照。

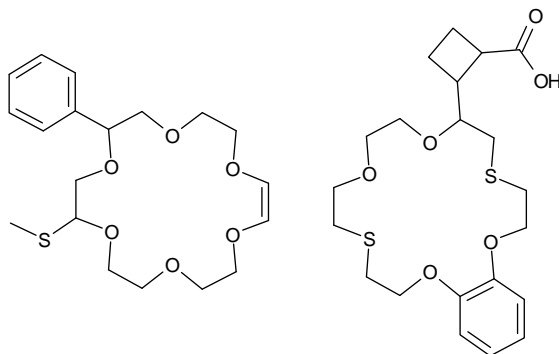
- DENDRIMERS 中心核から放射状に分岐し、周辺に広がるにつれて分岐が進みかつ密集する球状構造。

直径が10nmより長く、かつ分子量が1,000,000ダルトンを超えるデンドリマーもある。

第2のデンドリマー構造として、ハイパーブランチポリマーがある。この種のポリマーも化学結合のフラクタルパターンを有するが、中心核から分岐するものではない。ハイパーブランチポリマーはランダム構成かまたはかなり規則的な構成のどちらでもよい。

デンドリマー状リガンドを有する有機金属にも適用される。

化合物例:

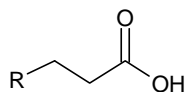


ENZYME

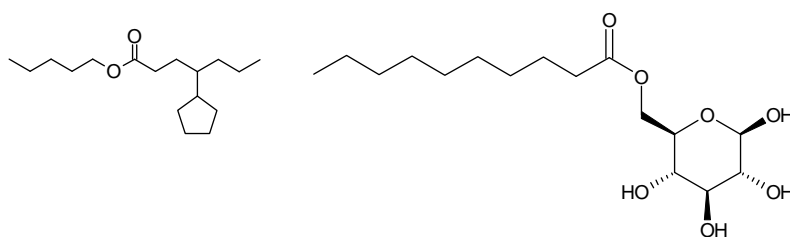
PROTEINSを参照。

FATTY ACID

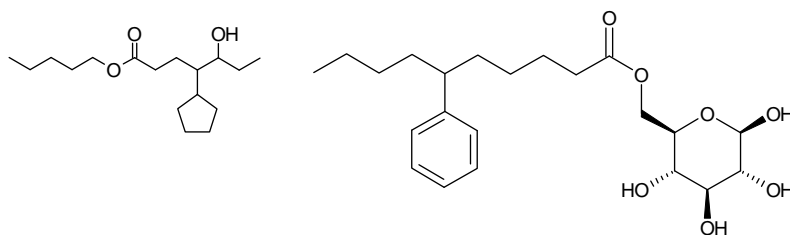
炭素数3以上の直鎖状または分岐状飽和未置換モノカルボン酸。エステルおよびアミドなどの誘導体を含み、また鎖中にシクロアルキル置換基を有する類似体を含む。不飽和の場合には、UNSATURATED FATTY ACIDを用いる。



化合物例:



アルキル鎖上にある置換基のため、下記の化合物にはFATTY ACIDは適応されない(許容される置換基はシクロアルキル基のみ)。

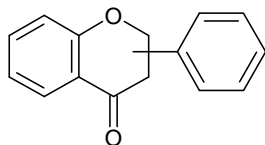


FALAVONOIDS

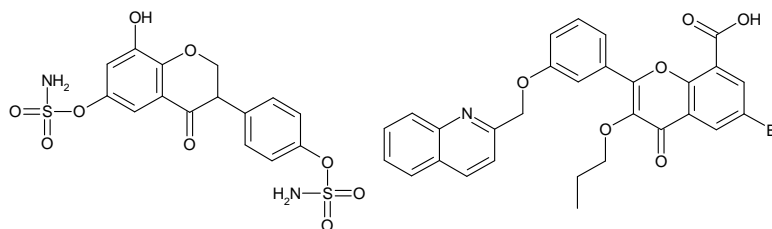
2位または3位の炭素がアリール基で置換されたベンゾピラン環を含む化合物。

飽和度および置換の有無は限定されない。

基本構造:



化合物物例:



FULLERENES

sp²混成状態の炭素のみで形成され、五角形と六角形の環が隣接して形成されるような閉じた巨大かご状分子。

炭素数=2(10+m) (12個の五員環とm個の六員環の場合)

環数=12+(n-20)/2 (n=炭素数)

ナノチューブは非常に大きい管状フラレン類であり、単一の分子としてみなされる。管状は六員環を構する多数の炭素原子に由来する。管状の両端は五員環によって塞がれている。

HETEROFULLERENEも参照して下さい。

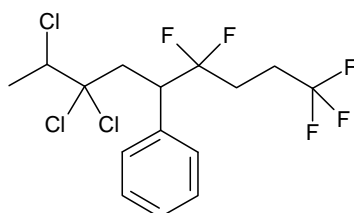
GLYCOPROTEINS

CARBOHYDRATESおよびPROTEINSを参照。

HALOCARBONS

1個以上のハロゲンで多置換された炭素骨格を含むが、他のヘテロ原子は含まない化合物。

化合物物例:



HETEROFULLERENES

1個以上の炭素原子が別の原子で置換されたフラレン類。FULLERENEも参照して下さい。

HETEROPOLY ACIDS

定義: 下記の一般式を満足する化合物:

$H_xA_yM_zOW$

A=磷、珪素、ホウ素、ヒ素

M=遷移金属(通常、モリブデン、バナジウム、タングステン)

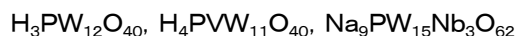
$x = > 0$

$$y \geq 0$$

$$z \geq 0$$

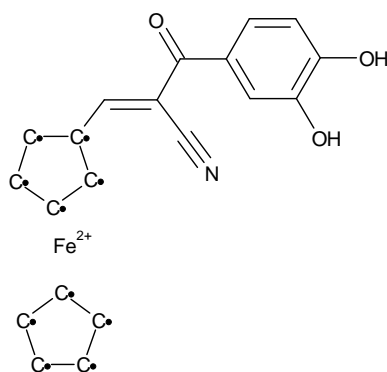
水素原子の一部または全部をカチオン(通常、アンモニウムまたはアルカリ金属カチオン)で置換した酸の塩も含む。原子Mの一部が第2の遷移金属(通常、ニオブ)で置換され、その結果2個の金属とメタロイドAを含有する構造のものでもよい。

化合物例:



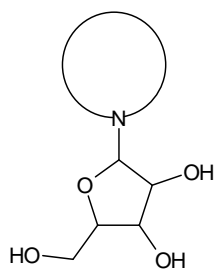
LIPOPROTEINS タンパク質と脂肪部分を含む化合物。明細書で確認された場合のみ使用する。

METALLOCENES 中心金属原子に結合した少なくとも1種のシクロペンタジエニル基、またはその誘導体を含む有機金属化合物。この定義に含まれるシクロペンタジエン配位子の誘導体は、シクロペンタジエニル環に縮合した環、例えばインデン、フルオレンなどを有する化合物である。
化合物例:

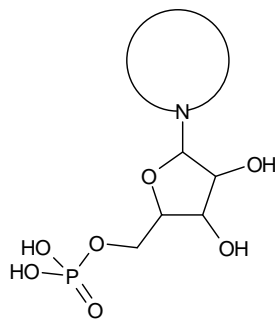


NOBLE GASES ヘリウム、ネオン、アルゴン、クリプトン、キセノン、ラドン。

NUCLEOSIDES ヌクレオシドはNを介して環状塩基に結合する糖残基を含む化合物である。塩基は通常プリンまたはピリミジン基の誘導体、またはそれらの環修飾誘導体で、thia 誘導体を含む。アデニン、シトシン、チミン、ウラシル、グアニン残基が一般的である。
ヌクレオシド系の基本構造を下記のとおりである。糖部分は置換されていてもよくNUCLEOSIDESはデオキシ/ジデオキシ類似体にも適応される。



NUCLEOTIDES 糖部分に結合した磷酸基を有するヌクレオシド。

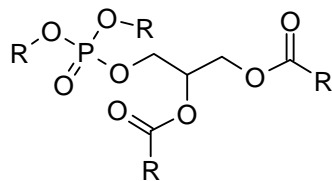


- oligonucleotides **磷酸基を介して結合する3個以上のヌクレオチド残基を含む化合物。通常ヌクレオチド塩基を表わす一文字のコードで表記する。**
例: TTUUGGCATU

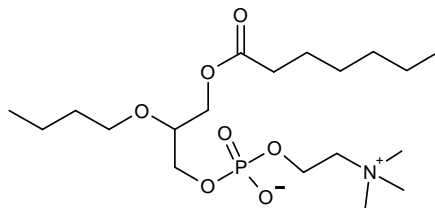
PEPTIDES **CO-NH基により複数のアミノ酸が結合して形成される化合物。50個以上の残基にはPROTEINSを用いる。**

- cyclic peptides **PEPTIDEのうち、PEPTIDE鎖の一部または全部が環をなすもの。**

PHOSPHOLIPIDS **リン酸基を含むアルコール成分で形成された脂肪酸のエステル。**



化合物例:



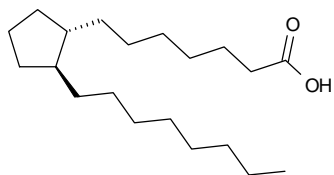
POLYMERS **5個以上の構造上の繰り返し単位を有する高分子。**

POLYSACCHARIDES **CARBOHYDRATESを参照。**

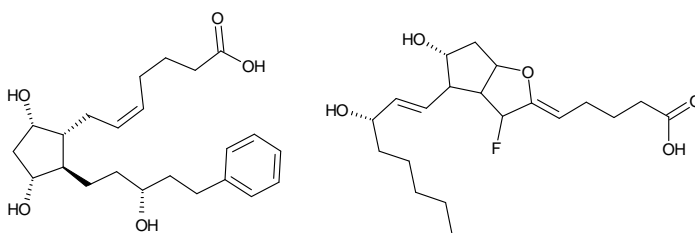
PROSTAGLANDINS **炭素数20の不飽和カルボン酸とシクロペンタン環から誘導される化合物、すなわち**

プロスタノ酸類似体。飽和度および置換の有無は限定されない。

プロスタノ酸:



化合物例:



PROTEINS

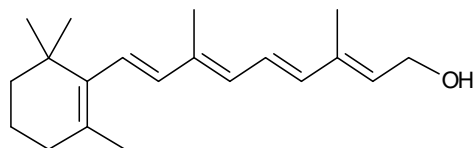
50個以上の残基の特定の配列のペプチド。PEPTIDEは併用されない。

- Enzymes 生細胞により生産され、生化学反応中で生体触媒として機能するタンパク物質。典型的に酵素はタンパク質部分(アポ酵素)と、酵素作用に必要な非タンパク質部分(補酵素)からなる。PROTEINも併用する。
明細書で確認された場合、または酵素名から明らかに同定できる、すなわち名前が-aseで終わる場合のみ使用する。
- Glycoproteins 炭水化物基が結合しているタンパク質。PROTEINおよびCARBOHYDRATEも併用する。

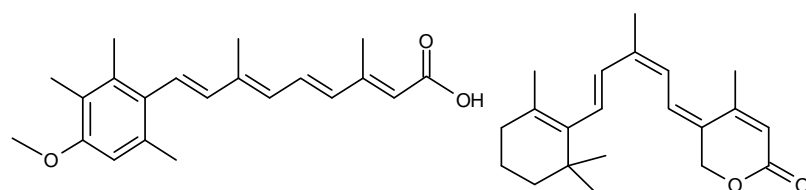
RETINOIDS

ビタミンAの合成類似体。飽和度および置換の有無は限定されない。

ビタミンA:

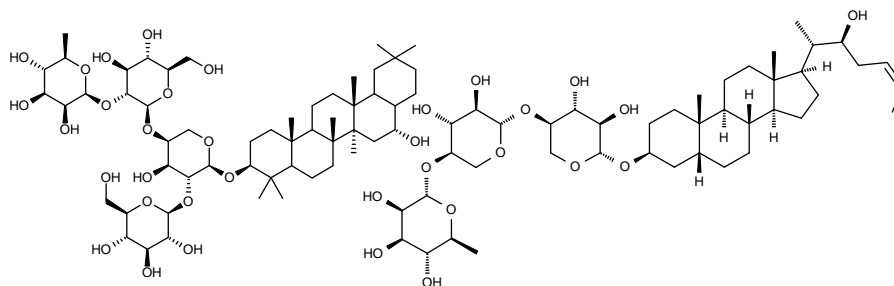


化合物例:



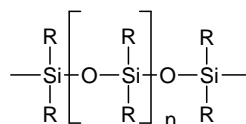
SAPONINS

ステロイドおよびトリテルペンの配糖体類で、植物また一部の海洋生物に広く分布している。
化合物例:



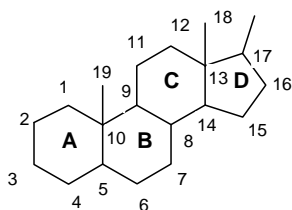
SILICONES

珪素と酸素が交互に並び珪素にさまざまな有機ラジカルが結合した構造を基本とする
シロキサンポリマー群。

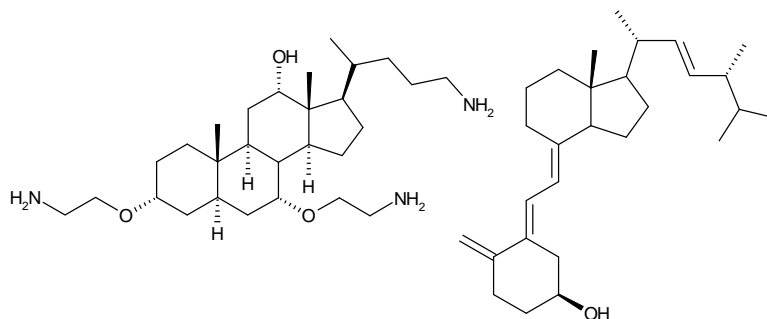


STEROIDS

シクロペンタ(a)フェナンスレン環を含む化合物。環が開裂した類似体にも適用される。
SAPONINSを参照。

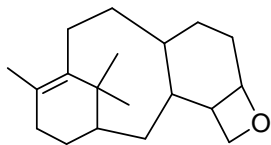


化合物例:



TAXANES

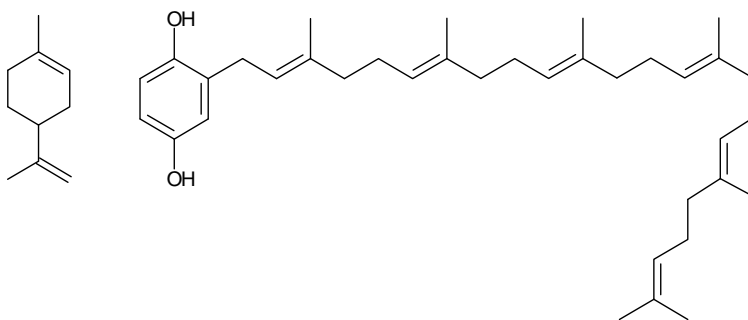
下記の基本環系を含む化合物。飽和度および置換の有無は限定されない。



TEPRENES

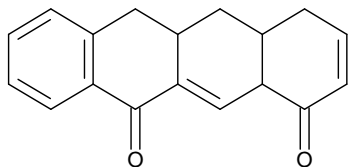
植物に存在して、イソプレン単位: $\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)\text{CH}=\text{CH}_2$ からなる不飽和炭化水素群。モンテルペンはイソプレン単位を2個、セスキテルペンは3個、ジテルペンは4個有する。

化合物例:

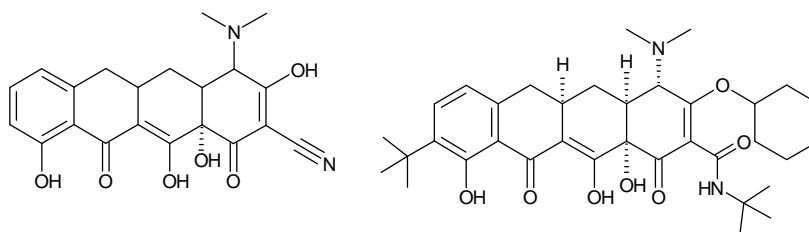


TETRACYCLINES

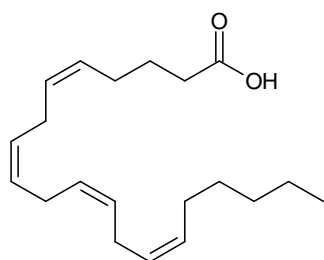
下記の基本環系を含む化合物。飽和度および置換の有無は限定されない。
典型的なものとして、下記に示すように2重結合が配置されているものが検索される。



化合物例:



UNSATURATED FATTY ACIDS 鎖中に1個以上の2重結合および／または3重結合が存在するFATTY ACID。
FATTY ACIDSも参照。



ZEOLITES アニオンおよび／またはカチオンの交換、ならびに水分子の吸着／脱着を促進する多孔性テクト珪酸塩鉱物(無限3次元網目構造)型アルミノ珪酸塩または構造類似体。拡張構造式も満たすもの。

3. DWPI 化学構造インデキシングシステム

DWPIには下記の化学構造索引システムがあります。これらを使用することにより、多面的な化合物検索が可能です。

	セクション(収録開始時)	メモ
ケミカルフラグメンテーションコード (Chemical Fragmentation Codes)	B(1963年～) C(1965年～) E(1970年～)	会員のみ
リングインデックス番号(RIN) (Ring Index Number)	B, C, E(1972年～)	会員のみ
CPIマニュアルコード(MC) (Manual Codes)	A(1966年～) B(1963年～) C(1965年～) D - M, N(1970年～)	会員のみ

DWPI登録番号(DRN) (DWPI Registry Number)	B, C, E(1981年～) A, D, H(198401～) F, G, J - M(198407～)	会員のみ 請求の範囲と実施例に頻繁に記載されている約2100個の特定化合物に付与
ダウエントケミストリリソース(DCR) (Derwent Chemistry Resource)	B, C, E(199916～) 日本特許 B, C(200028頃～) 日本特許 E(200038～)	構造検索はSTN, Dialogで可 (Questel.OrbitではMMSで構造検索が可能)
Merged Markush Service (MMS)		
DWPI 特定化合物番号(DCN) (DWPI Specific Compound Number)	B, C, E(1987年～)	Questel.OrbitのMMSで付与された番号
DWPI Markush化合物番号(MCN) (DWPI Markush Compound Number)	B, C, E(1987年～)	Questel.OrbitのMMSで付与された番号
ポリマーインデキシング プラスドックコード(パンチコード) (Plasdoc Punch Code) プラスドックコード(キーシリアル番号) (Plasdoc Key Serial) ポリマーインデキシングコード (Polymer Indexing Code)	A(1966-1993年) A(1978-1993年) A(1993年中頃～)	会員のみ

	特定化合物	マーカッシュ構造化合物	メモ
FRAG Code	○	○	
DRN	○		
DCR	○		
DCN	○		MMSで使用。1987年～
MCN		○	MMSで使用。1987年～

4. DWPI分類(技術分野セクション)

セグメント	セクション	内容
CPI 化学	A	高分子化学 : ポリマー及びその加工工程及び装置
	B	医薬: 医薬、獣医薬及びそれらの中間体
	C	農薬: 農薬及び家畜の医薬関連化合物
	D	食品、洗剤 : 商業用食品機械、工程、生産物
	E	一般化学 : 非高分子で医薬、農薬以外の目的のもの
	F	繊維、紙、セルロース:
	G	印刷、写真: 顔料、接着剤を含む
	H	石油: 石油の採掘、輸送、貯蔵、製造工程
	J	化学工学 : 一般化学工場加工装置(分離、混合、冷蔵等)
	K	原子力、火薬、保護: 消火

	L	セラミック、ガラス、電気化学
	M	冶金:合金、金属加工、表面処理
	N	触媒:(マニュアルコードの付与のみ)
EngPI 機械・一般	P	一般:生活必需品、健康娯楽品、金属成形、印刷等
	Q	機械:乗り物、運搬、建築、照明
EPI 電気	S	測定試験装置:時計、電子医療機器、電子写真
	T	計算及び制御:コンピュータ、データ記憶、計算機周辺装置、制御装置
	U	半導体、回路:半導体材料及び製造法
	V	電気構成要素:抵抗器、プリント回路、ファイバー光学機器、レーザ
	W	通信関係:電話、放送、ラジオ、テレビ、航空システム
	X	電力工学:発電、電池、自動車用電気装置、家電品

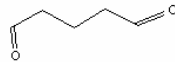
5. Chemical Fragmentation Code と DCR

CMC UPB 20060114	
DRN: 0927-S 0927-U	
DCR: 7629-S 7629-U	
M1 *01*	M423 M431 M782 P610 P614 P633 Q233 V400 V500 V600 V624 V752 V802 V814 V901 V902 M903
M2 *02*	F011 F012 F015 F019 F423 F431 H2 H211 JO J011 J2 J271 J5 J522 KO K2 K224 K8 K820 L9 L930 L943 M280 M312 M321 M332 M342 M381 M391 M413 M431 M510 M522 M530 M540 M782 P610 P614 P633 Q233 M903 M904 MCN: 9837-R7501-K 9837-R7501-M 9837-R7501-Q 9837-R7501-T
M2 *03*	F011 F012 F015 F019 F422 F423 F431 G012 G013 G015 G100 H2 H211 H212 H604 H681 JO J011 J012 J2 J231 J271 J341 J5 J522 J523 KO K224 K8 K820 L9 L930 L943 L999 M123 M146 M210 M211 M240 M280 M281 M311 M313 M320 M321 M332 M342 M349 M362 M372 M391 M413 M431 M510 M521 M522 M531 M540 M782 P610 P614 P633 Q233 M903 M904 MCN: 9837-R7502-K 9837-R7502-M 9837-R7502-Q 9837-R7502-T
M2 *04*	G013 G019 G100 H1 H101 H142 KO K5 K534 M1 M121 M145 M280 M320 M414 M431 M510 M520 M532 M540 M782 P610 P614 P633 Q233 M903 M904 MCN: 9837-R7503-K 9837-R7503-M 9837-R7503-Q 9837-R7503-T
M2 *05*	H1 H103 H181 KO L2 L210 M210 M211 M212 M273 M283 M313 M321 M332 M342 M383 M391 M416 M431 M620 M782 P610 P614 P633 Q233 M903 M904 DCN: R22912-K R22912-M R22912-Q R22912-T DCR: 640-K 640-M 640-Q 640-T

Markush 化合物に対する索引 (MCN)

特定化合物に対する索引 (DCN, DCR)

AN.S DCR-7629 DCR
 DCSE 7629-0-0-0
 CN.P GLUTARAL
 CN.S Pentanedial



MF C5 H8 O2
 SMF C5 H8 O2 *1; TYPE *1; TOTAL *1
 MW 100.1162
 SDCN R00927
 SDRN 0927

6. リングインデックス番号(RIN)

環構造の化合物に適用される番号です。環構造の化合物に適用される広い概念のChemical Fragmentation Codeを使う場合にリングインデックス番号を利用することで環構造を特定することができます

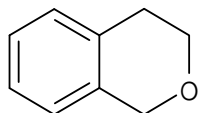
例)D130の場合

D130:酸素一つを含み、二つの環が縮合した他の縮合環。

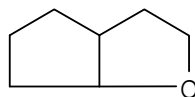
D130	
1-O*	←— ヘテロ原子として酸素を1つ含む。
2 (other)	←— 二つの環が縮合している。(D100~D120 以外)

D130は、酸素一つを含み、二つの環が縮合し、D100, D111, D112, D120には分類されない様々な環構造が対象となります。

D130の対象になる環の例は次のとおりです。



01732/RIN



01010/RIN

D130のような大きな概念のCodeを使用して検索すると、目的の環が記載された特許が検索されますが、関連のない環が原因でノイズとなるレコードも検索されます。このような場合、環のCodeとリングインデックス番号(RIN)を組合せることで、環を特定して検索することが可能です。

リングインデックス番号が適用されるCodeには、Chemical Indexing User Guideやコーディングシート上でアスタリスク(*)が付与されています。

- RIN は、RIN フィールドで検索します。
- AND 演算子を使用して、Chemical Fragmentation Code と結び付けます (STN では、近接演算子(P)を利用)。
- RIN は、5桁の数字です。

➤ RIN を組み入れた定型の検索式

RINを組み入れた場合の定型の検索式は以下の通りに変更する必要があります。

- L1 S (黒コード(P)黒コード(P)……)/M0,M2,M3
- L2 S L1(P)赤コード(P)赤コード(P)……)/M2,M3
- L3 S L2(P)青コード(P)青コード(P)……)/M2,M3
- L4 S L3(P)01732/RIN**
- L5 S L4(P)緑コード(P)緑コード(P)……)/M2,M3
- L6 S L1(P)M900/M0 OR L2(P)M901/M2,M3 OR L4(P)M902/M2,M3 OR L5

➤ RIN は次の構造に適用されます。

- Chemical Indexing User Guide やコーディングシートで * 付与されたコードに対応する環構造に適用されます。
- C、N、O、S 以外の原子を含む環にも適用されます。
- スピロ環に適用されます。

➤ リングインデックス番号の確認

Markush TOPFRAGまたはSTN Expressで構造を作図し、検索式を生成することで確認できます。

➤ Derwent Chemistry Resource (DCR)にも収録

DCRセグメントのSRINフィールドに表示されます。



クラリベイト・アナリティクス
clarivate.jp

ヘルプデスク
Tel 03-4589-3107
Tel 0800-888-8855 (フリーコール)
E-mail : ts.support.jp@clarivate.com

本書の内容は全部または一部を無断で転載する事は禁止されています。

(2017.10.31 Edition)
