

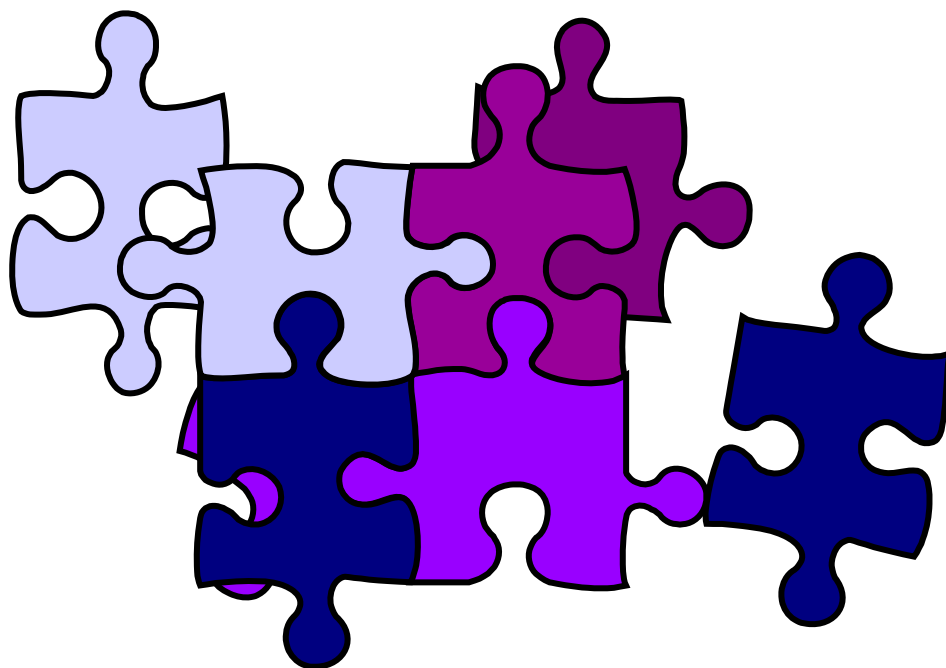
*Derwent World Patents Index<sup>®</sup> (DWPI)*  
*Chemical Patents Index (CPI)*

## **Chemical Fragmentation Code**

Sep 2017

Copyright ©2017 Clarivate Analytics

All rights reserved.



## 目次

1. Chmchemical Fragmetation Code の概要	1
(1) なぜ Chemical Fragmentation Code が必要なのか？	1
(2) 収録国	3
(3) 収録範囲	6
(4) 利用可能なファイル	6
(5) Markush TOPFRAG/STN Express	7
(6) 構造作図から検索式の生成	8
(7) サンプルレコード	15
2. 定型検索式	16
(1) サブヘディング	16
(2) 近接演算子	17
(3) 色分けされたコード(コーディングシート)	17
(4) 定型の検索式	18
年代別の検索式	18
タイムレンジコード	18
(5) 参考資料	20
3. コードの概要	21
4. 環に対するコード	23
(1) 縮合ヘテロ環のコード: D/Eグループ	23
(2) コードの詳細	24
(3) 広い概念のコードとリングインデックス番号(RIN)	25
(4) RINを組み入れた定型の検索式	26
(5) リングインデックス番号の起源と特定方法	27
パターソン・リングインデックス(Patterson Ring Index)	27
ダウエントリングインデックス	27
(6) 単環ヘテロ環: Fグループ	29
(7) 炭素環: Gグループ	30
ステロイド:グループGIには包含されない炭素環	30
DWPI で定義されるステロイドとは？	30
縮合していないベンゼン	31
(8) 置換位置	33
縮合ヘテロ環の置換基	33
単環ヘテロ環の置換基	35

炭素環の置換基 .....	36
(9) 練習問題 1-2 .....	38
<b>5. 官能基 .....</b>	<b>39</b>
(1) 4種類の官能基 .....	39
(2) 出現頻度の高い官能基: グループH, J .....	39
(3) ケト-エノール互変異性体-OH, SH .....	41
(4) 練習問題 3 .....	42
(5) 3級環状窒素(Tertiary Ring Nitrogen): H2 グループ .....	43
アミン・タイプの定義 .....	43
アミン・タイプの例 .....	43
ノンアミン・タイプの例 .....	44
(6) ネゲーション・コード(否定コード) .....	45
サンプル例 .....	45
ネゲーション・コードを含んだ定型検索式の例 .....	46
(7) 出現頻度の低い官能基: K, Lグループ .....	47
有機ヘテロ原子同士の結合: K グループ .....	47
K, Lグループの 198127 以前のコード .....	47
複雑な官能基 .....	48
(8) 練習問題 4-5 .....	49
<b>6. その他のコード: Mグループ .....</b>	<b>50</b>
(1) 基本構造(Basic Group): M4 グループ .....	50
(2) 環構造の総数: M5 グループ .....	51
(3) 塩のコード: M6 グループ .....	51
塩の検索上注意 .....	51
<b>7. 環と環の結合: M1 グループ .....</b>	<b>52</b>
(1) 結合で直接つながった環 .....	52
M11 コード .....	52
(2) 原子を介してつながった環 .....	53
M12 コード .....	53
リンキング・グループ: M13, M14 グループ .....	54
M150: ARYL-C-ARYL .....	55
(3) 練習問題 6 .....	56
(4) 炭素鎖: M2, M3 グループ .....	57
(5) 0 価、1 価の炭素鎖: M2 グループ .....	59
炭素鎖の長さ: M21, M22 .....	59

直鎖であるか枝分かれしているか: M23 グループ.....	59
Terminating Atom.....	60
Terminating Atom のマルチプライヤー .....	61
<b>(6) 2 価以上の炭素鎖: M3 グループ.....</b>	<b>62</b>
炭素鎖の長さ: M31 グループ .....	62
長さに対するマルチプライヤ: M32 グループ .....	62
直鎖であるか枝分かれしているか: M33 グループ.....	62
炭素鎖の価数: M34 グループ.....	62
Terminating Atom.....	63
Terminating Atom のマルチプライヤー .....	64
<b>(7) 練習問題 7-8.....</b>	<b>65</b>
<b>練習問題の解答 .....</b>	<b>66</b>

## 1. Chemical Fragmentation Code の概要

### (1) なぜ Chemical Fragmentation Code が必要なのか？

特定化合物の検索は、化合物名をキーワードとして使用したりCASのレジストリ番号を使用することによって行なうことができます。しかし、特許中の化学構造を漏れなく検索するには、特定化合物に加えてマーカッシュ構造を考慮して検索する必要があります。

1963年に、特許抄録の作成者であったダウエント社(現クラリベイト・アナリティクス)は、化合物を部分構造に分割し、各々にコードを付与するフラグメンテーションシステムに基づいた化合物検索システムを開発いたしました。

Chemical Fragmentation Code(BCEケミカルコード、ケミカルコードまたはフラグメンテーションコードとも称されます)による索引付けは、化学特許に記載された幅広い範囲の化学構造を包括的に索引するために、ダウエント社が導入した索引システムです。ドキュメンテーション抄録と特許明細書に記載されたマーカッシュ構造と特定構造の化合物にChemical Fragmentation Codeを付与しています。

1963年 FARMDOCサービス (現在のCPIセクションBです)

収録範囲: 医薬及び動物薬特許

1965年 AGDOCサービス (現在のCPIセクションCです)

収録範囲: 農薬特許

1970年 全ての化学分野 (現在のCPIセクションEを含む)

収録範囲が、特に一般化学分野にまで拡大されました。

### Chemical Fragmentation Codeを使用した検索の特徴

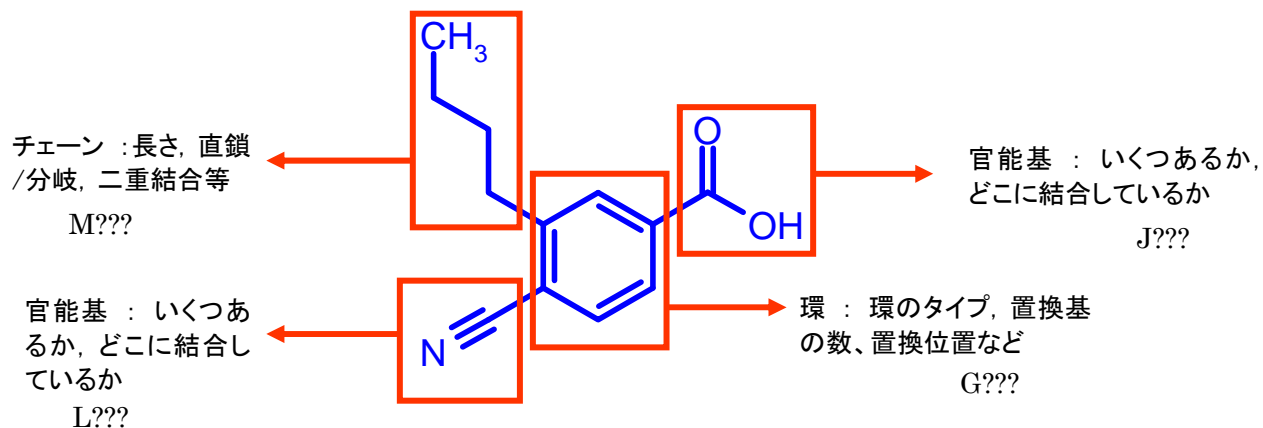
- DWPI 抄録には書かれていない情報を検索できる。
- キーワードによる検索だけでは得られない、適合率の高い回答が得られる。
- 高額な構造検索料が不要である。
- 古くから(1963年から索引)マーカッシュ構造および特定構造の化合物を索引している。
- 構造式の多様性に対応できる柔軟なシステムである。
- 分類コード(IPC, MC など)と組み合わせて検索することが容易である。
- 用途、活性など構造情報以外のコードもある。
- 検索結果にノイズを生じやすい。

# Fragmentation Coding

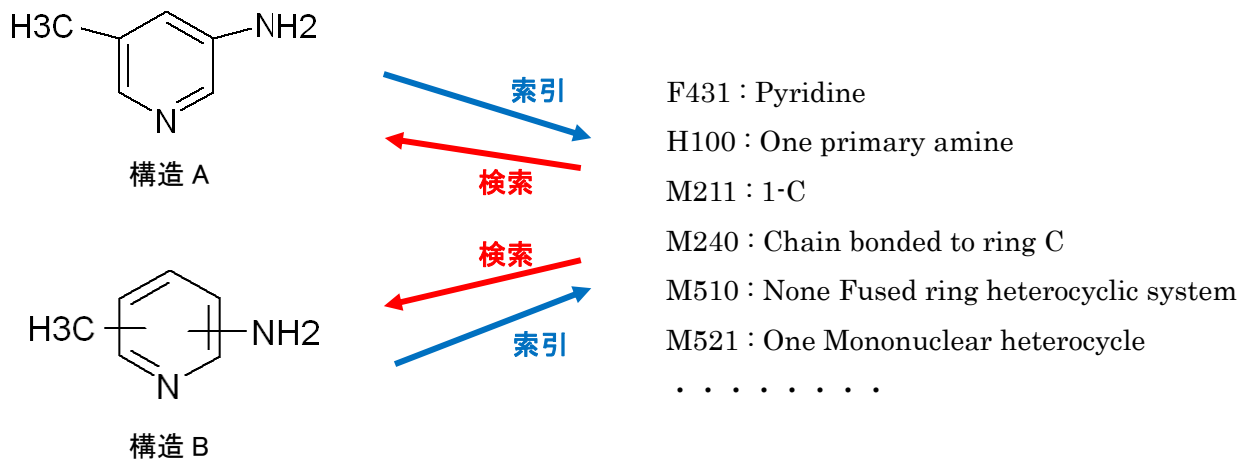
- Chemical Fragmentation Codeによる化合物索引

DWPI編集チームは

- 化学特許の化合物を断片化する。
- 各断片に対応するコードをDWPIレコードに登録する。



- Chemical Fragmentation Codeによる化合物索引と検索



Topological Information(位相幾何学的情報)などを曖昧にすることにより、少ないタームで、たくさんの構造を表現できるようになる。例えば、6種類の特徴があって、それぞれ5つの可能性がある場合、全部で  $5+5+5+5+5+5 = 30$  コードで  $5 \times 5 \times 5 \times 5 \times 5 = 15,625$  の組み合わせを表現することができる。

## (2) 収録国

通常はBasic特許から索引を行います。 但し、Basic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: 2014.5.21
国名(国コード)	DWPI contents									
DWPI title	Alerting abstract △: Only CPI	Manual code	DCR / CPI deep index	DCR / CPI deep index of the reference content	Alerting abstract	claim	Extension abstract	Note		
アルゼンチン(AR)										
オーストラリア(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.	
旧チェコスロバキア(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 2010.	
フィンランド(FI)	○		○							
フランス(FR)	○	○	○	○	○	○	○	○		
イギリス(GB)	○	○	○	○	○	○	○	○		
湾岸協力機構(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 from 2000.	
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)	○	○	○							
オランダ(NL)	○	○	○	○	○	○	○	○		
ノルウェー(NO)	○	○	○							
ニュージーランド(NZ)	○	○	○	○*	○	○	○	○	*CPI deep indexing code are provided from DWPI week 199301.	
フィリピン(PH)	○	○	○							
ポーランド(PL)	○	○	○							
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)										
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 (TP)	○	○	○							

## Chemical Fragmentation Code

---

CPI deep index : Chemical Fragmentation code, MMS, Polymer Indexing code, Plasdac code

DCR : 1999- (additionally including DRN (1981-) and DCN (1987-))

Chemical Fragmentation code : 1963-

MMS : 1987-

Polymer Indexing code : 1993-

Plasdac 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、やChemical Fragmentation Code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

```

---

### (3) 収録範囲

索引は、ドキュメンテーション抄録、クレーム、実施例、(詳細な説明)に基づいて行われます。

特許中の全ての化合物が索引されるわけではありません。クレームに記載されている最終生成物は索引されますが、出発物質や中間生成物は索引されません。但し、出発物質や中間生成物が新規の化合物である場合、これらの化合物も索引されます。

#### 収録基準

##### ➤ 特定構造の化合物

- 「特許請求の範囲」の項目に記載の全ての特定化合物
- 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。
- 「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。

##### ➤ マーカッシュ構造の化合物

- 「特許請求の範囲」
- 発明をより広く表わす「実施例」

#### 収録数

1つのDWPIレコードに索引される化合物の上限は特定化合物とMarkush化合物を合わせて99個までです。

#### 索引対象

- 新規であると開示されている物質
- 新規の方法で製造された物質
- 組成物の中で発明にとって本質的である成分
- 新規の用途で使われた既知物質
- 検出された物質と検出剤
- 検出に用いられる媒質(1970年以降のB, Cセクション)
- 新規の方法で回収または精製された物質
- 除去された物質と除去剤(1977年以降)
- 活性、性質、用途
- 製剤と装置
- 新規の触媒(1970年以降)
- 新規の出発物質
- 

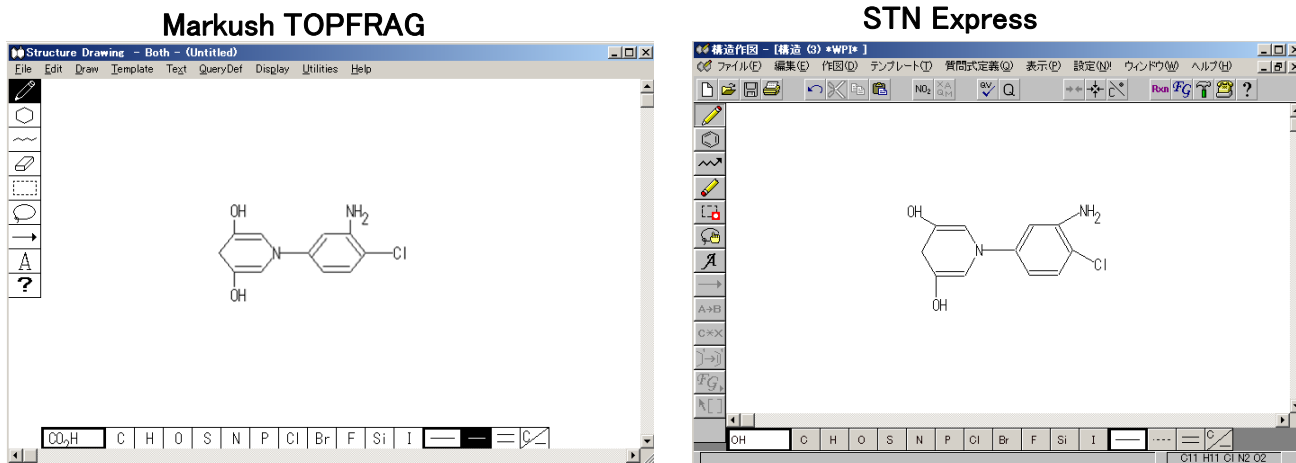
### (4) 利用可能なファイル

STN : WPIDS、WPIX、LWPI(練習用ファイル)

## (5) Markush TOPFRAG/STN Express

コンピュータ画面上に化学構造を描く事により、各ホスト用のケミカルコード検索式を自動的に作成します。

互変異性構造などを自動的に判断し、適切な検索式を作成できます。



↓

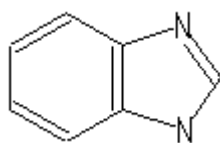
↓ 検索式が自動的に作成されます。

↓

```
S (F433(P)G100(P)H142(P)H201(P)H602(P)J522(P)M413(P)M531)/M0,M2,M3
S L1(P)M521/M2,M3
S L2(P)(M280(P)M320)/M2,M3
S L3(P)(F011(P)F013(P)F015(P)G015(P)H100(P)H641)/M2,M3
S (L1(P)M900/M0) OR (L2(P)M901/M2,M3) OR (L3(P)M902/M2,M3)
S L5 OR L4
S L6(NOTP)(H3 OR H4 OR H5 OR H7 OR H8 OR H9 OR J0 OR J1 OR J2 OR J3)/M2,M3
S L7(NOTP)(J4 OR J6 OR J9 OR K0 OR M1)/M2,M3
```

目的に応じて、コードをいくつか削除して条件を緩めたり、新たにコードを追加して条件を厳しくしたりするなど、調整します。

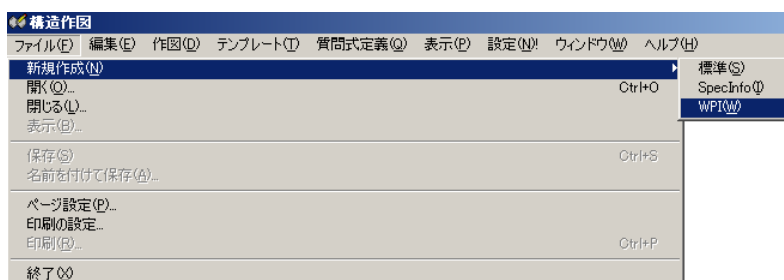
## (6) 構造作図から検索式の生成



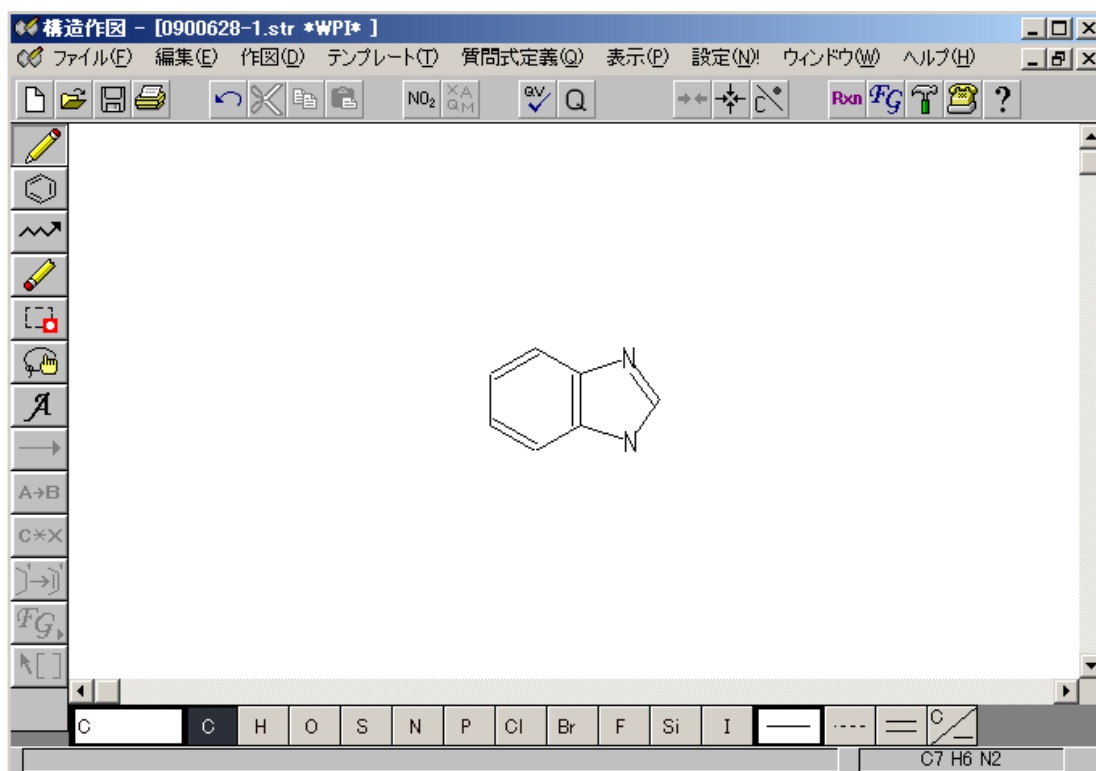
Benzimidazole

この構造を含む化合物が記載されている特許(B セクションまたは C セクション)を検索します。

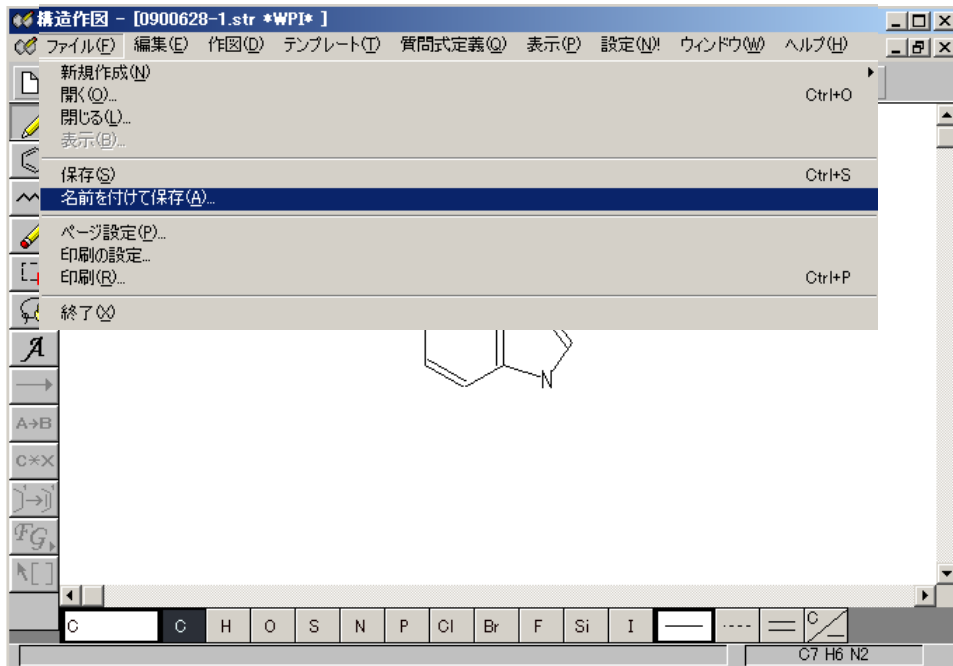
1. STN express の「構造作図」を立ち上げ、WPI フォーマットでファイルを新規作成します。



2. 構造を作図します。

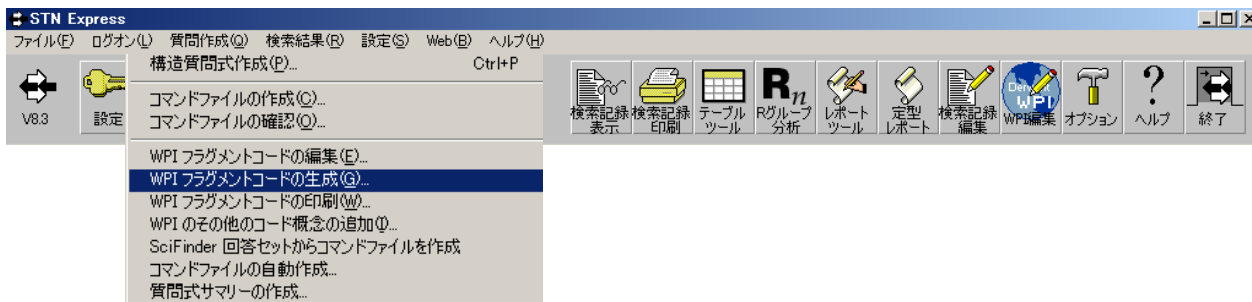


## 3. 名前を付けて保存します。

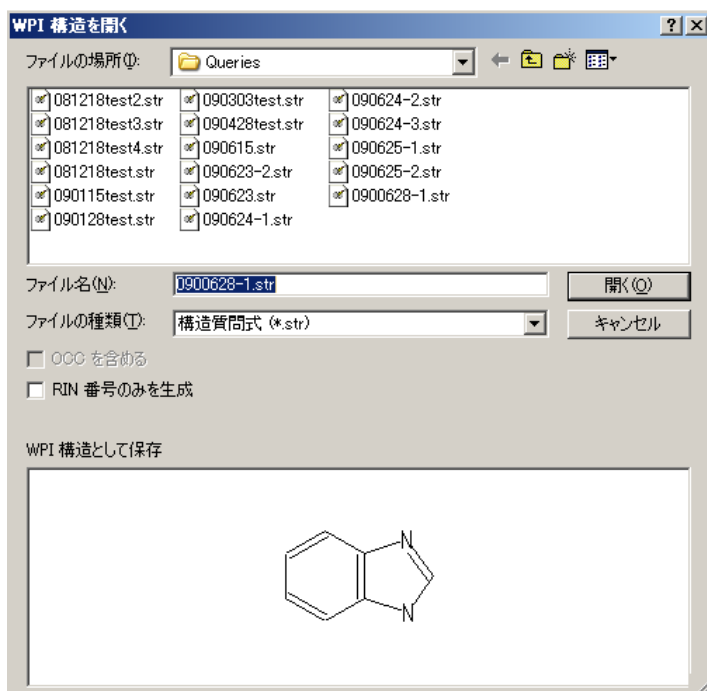


## 4. 作図した構造の検索式を生成します。

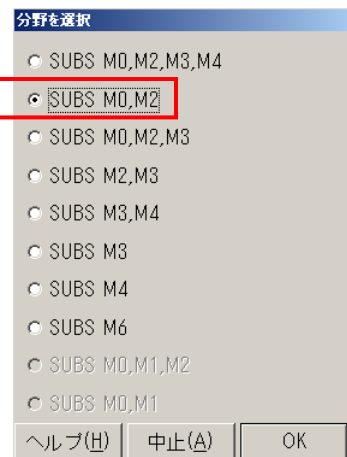
[質問作成]メニューの[WPIフラグメンテーションコードの生成]を選択します。



先程保存したファイルを開きます。



検索対象のフィールド(サブヘディング)を選択し、[OK]をクリックします。



索引は、技術分野と収録年に基づいて7種のサブヘディングごとにまとめられています。検索式ではサブヘディングを検索フィールドとして指定します。

#### サブヘディングと検索対象

サブヘディング	セクション	天然物・ポリマー	収録年代
M0:	B,C	<ul style="list-style-type: none"> <li>化学構造によって定義される物質</li> <li>タンパクや多糖体の様に化学構造によって定義されない物質</li> <li>非ステロイド</li> </ul>	1963～1969
M1:	B,C	天然物・ポリマー	1970～
M2:	B,C	特定化合物・マーカッシュ化合物(M1、M5 でカバーされない化合物)	1970～
M3:	E	一般化学(染料、ステロイド化合物を除く)	1970～
M4:	E	染料及び関連化合物	1970～
M5:	B,C	ステロイド化合物	1963～199915 199916からはDCRで索引
M6:	B,C	ガレニカル(製剤、製薬機器、診断薬等)	1976～ (198127～診断薬)

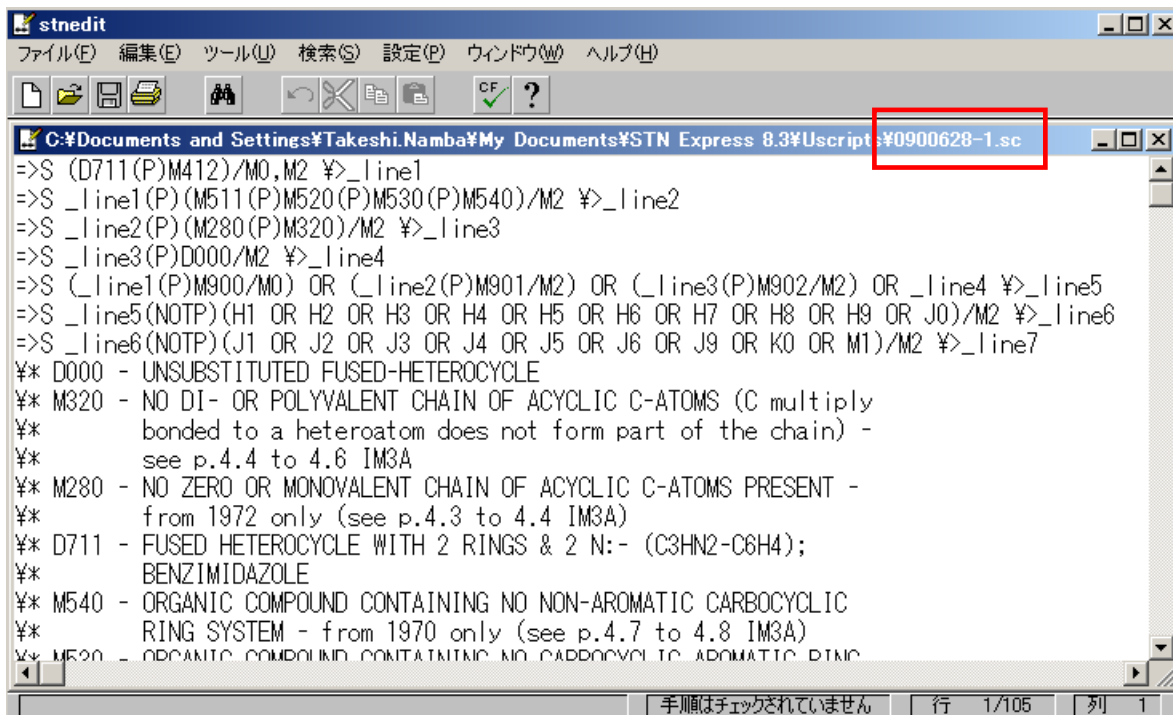
セクションB: 医薬  
セクションC: 農薬  
セクションE: 一般化学

※M1とM5はSTN expressとTOPFRAGで自動生成される検索式では指定できません。マニュアルで検索式を作成する場合に使用できます。

※M1はM0と組み合わせて使用できます。

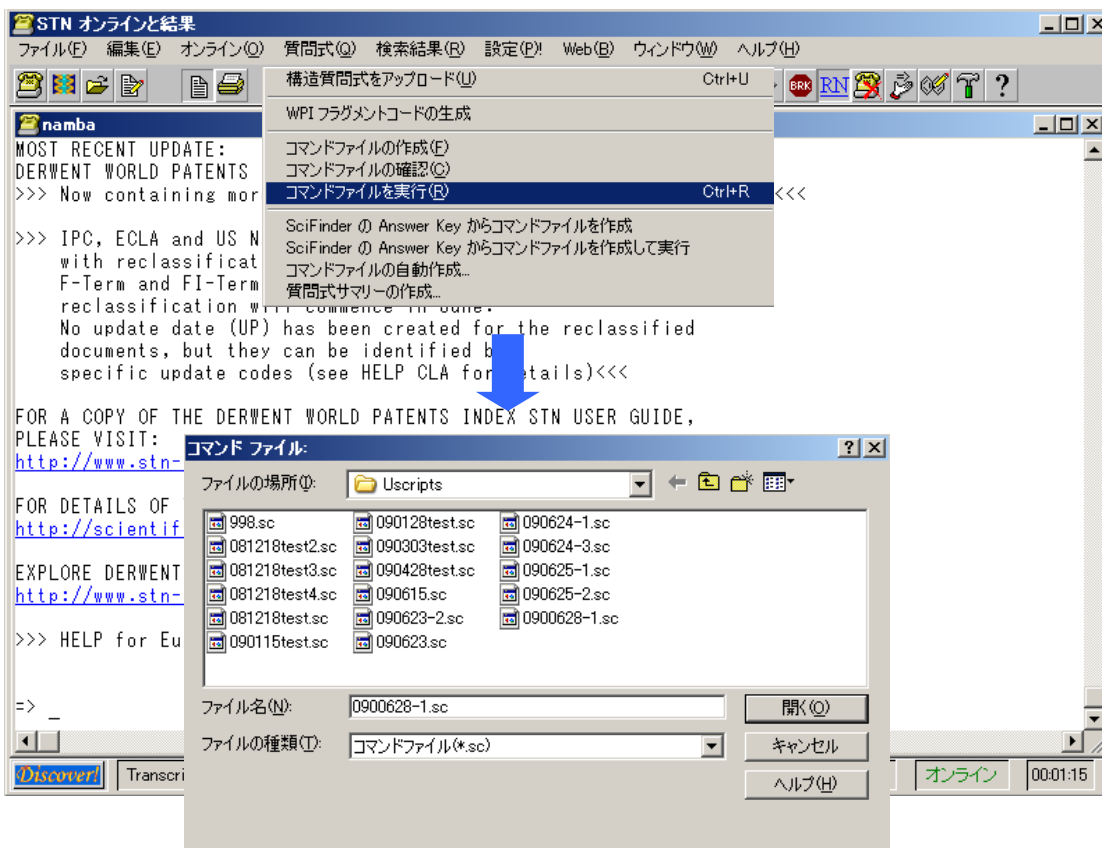
※M5は他のサブヘディングと組み合わせて使用することはできません。

5. 検索式が生成されますから、保存します。必要に応じて、コードを追加したり、削除したりするなど検索式を修正します。



6. STN にログイン後、WPIDS または WPIX にアクセスします。

[質問式]メニューの[コマンドファイルを実行]を選択し、5 の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)
namba
146189 J1/M2
103204 J2/M2
105510 J3/M2
31440 J4/M2
180415 J5/M2
18846 J6/M2
7539 J9/M2
234922 KO/M2
154997 M1/M2
L7 843 L6(NOTP)(J1 OR J2 OR J3 OR J4 OR J5 OR J6 OR J9 OR KO OR M1)/M2
=> D HIS
(FILE 'HOME' ENTERED AT 19:28:48 ON 28 JUN 2009)
FILE 'WPIX' ENTERED AT 19:29:14 ON 28 JUN 2009
L1 13768 S (D711(P)M412)/M0,M2
L2 4781 S L1(P)(M511(P)M520(P)M530(P)M540)/M2
L3 2090 S L2(P)(M280(P)M320)/M2
L4 634 S L3(P)D000/M2
L5 1186 S (L1(P)M900/M0) OR (L2(P)M901/M2) OR (L3(P)M902/M2) OR L4
L6 1038 S L5(NOTP)(H1 OR H2 OR H3 OR H4 OR H5 OR H6 OR H7 OR H8 OR H9 O
L7 843 S L6(NOTP)(J1 OR J2 OR J3 OR J4 OR J5 OR J6 OR J9 OR KO OR M1)/
=> _
Discover! Transcript: C:\Documents and Settings\Takeshi.Namba\My Doc WPIX INS 表示有効 印刷停止 オンライン 00:04:41

```

=> D TRIAL HIT 1-2

L7 ANSWER 1 OF 843 WPIX COPYRIGHT 2009

AN 2009-H21909 [30] WPIX

TI Novel bisbenzimidazole compound and onium compound for drug composite e.g. tablet, capsule, oral liquid, spraying agent, injection, freeze-dried powder for injection, ointment, liniment or suppository for treating fungal infection

DC B02; C02

IPC I A61K0031-4164 [I,C]; A61K0031-4184 [I,A]; A61P0031-00 [I,A]; A61P0031-00 [I,C]; A61P0031-04 [I,A]; C07D0235-00 [I,C]; C07D0235-14 [I,A]; C07D0235-28 [I,A]

MC CPI: B06-D05; B14-A01; B14-A02; C06-D05; C14-A01; C14-A02

CMC UPB 20090514

M2 \*06\* D000 D711 M280 M320 M412 M511 M520 M530 M540  
M730 M905 M904 M910  
DCN: R00042-K R00042-S  
DCR: 8635-K 8635-S

L7 ANSWER 2 OF 843 WPIX COPYRIGHT 2009

AN 2009-H15128 [29] WPIX

TI Inhibiting hypoxia inducible factor production in a subject, comprises administering benzimidazole carbamate compound, 2-aminobenzimidazole compound and/or benzoxazole compound to the subject

DC B02; B05

IPC I A61K0031-4164 [I,C]; A61K0031-4184 [I,A]; A61K0031-423 [I,A]; A61K0031-423 [I,C]; A61P0001-00 [I,C]; A61P0001-16 [I,A]; A61P0011-00 [I,A]; A61P0011-00 [I,C]; A61P0017-00 [I,C]; A61P0017-06 [I,A]; A61P0019-00 [I,C]; A61P0019-02 [I,A]; A61P0027-00 [I,C]; A61P0027-02 [I,A]; A61P0035-00 [I,A]; A61P0035-00 [I,C]; A61P0007-00 [I,C]; A61P0007-10 [I,A]; A61P0009-00 [I,A]; A61P0009-00 [I,C]; A61P0009-10 [I,A]

MC CPI: B01-B01; B01-B02; B02-A; B02-B; B02-D; B02-M; B04-C02; B04-G21; B04-H05A; B04-H19; B04-J02; B04-N04; B05-A01B; B05-A03B3; B05-B01J; B05-C01; B06-H; B07-H; B10-A07D; B10-A09B; B10-A13D; B10-A19; B10-B01; B10-B02A; B10-B04B; B10-C02; B14-C09; B14-F01; B14-F02; B14-H01; B14-K01; B14-L06; B14-N03; B14-N12; B14-N14; B14-N16; B14-N17C; B14-S16

CMC UPB 20090509

M2 \*41\* C216 C316 D000 D010 D011 D012 D013 D020 D021 D022 D040 D711  
F010 F020 F021 G010 G019 G020 G021 G029 G030 G039 G040 G050 G100  
G111 G112 G113 G221 G299 G551 G552 G553 G561 G562 G563 G599 H181  
H201 H341 H401 H402 H403 H421 H441 H481 H494 H498 H521 H541 H542  
H561 H581 H594 H596 H598 H599 H713 H714 H715 H716 H721 H722 H723  
J011 J131 J231 J411 J431 J521 J581 J582 K433 K442 K499 L120 L143  
L199 L220 L462 L650 L660 L921 L922 M112 M113 M114 M115 M116 M119  
M121 M122 M123 M124 M125 M126 M129 M131 M132 M135 M136 M137 M139  
M141 M142 M143 M149 M150 M210 M211 M212 M213 M214 M215 M216 M220  
M221 M222 M223 M224 M225 M226 M231 M232 M233 M240 M262 M271 M272  
M273 M280 M281 M282 M283 M311 M312 M313 M314 M315 M316 M320  
M321 M322 M323 M331 M332 M333 M340 M342 M372 M373 M383 M391 M392  
M393 M412 M431 M511 M512 M520 M521 M530 M531 M532 M533  
M540 M541 M542 M543 M782 P420 P421 P423 P446 P519 P520 P522  
P523 P528 P617 P631 P633 P721 P820 P922 P943 M905 M904  
MCN: 1044-19501-K 1044-19501-M

(7) サンプルレコード (STN, Nov.2006)

AN 1998-436609 [37] WPIX  
 TI Conjugates that bind to gonadotropin releasing hormone receptors -  
 comprising peptide hormone conjugated to nuclease by linking agent

サブヘディング

CMC UPB 20060114  
**DRN: 0927-S 0927-U**  
**DCR: 7629-S 7629-U**

化合物1つの構造情報

Chemical Fragmentation Code

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 J0 J011 J2 J271 J5 J522 K0  
 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 J0 J011 J012 J2 J231 J271 J341 J5 J522 J523 K0  
 M123 M146 M210 M211 M240 M280  
Markush 構造に対する索引 (MCN も表示される) 342 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 K0 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**

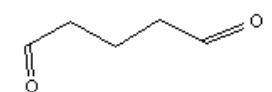
M2 \*05\* H1 H103 H181 K0 L2 L210 M210 M211 M212 M273 M283 M313 M321 M332  
 M342 M383 M391 M416 M431 M620 M782 P610 P614 P633 Q233 M903  
 M904  
**DCN: R22912-K R22912-M R22912-Q R22912-T**  
**DCR: 640-K 640-M 640-Q 640-T**

M2 \*06\* J4 J472 M280 M313 M321 M332 M342 M382 M391 M416 M431 M620 M782  
 P610 P614 P633 Q233 M903 M904 M910  
**DCN: R00927-K R00927-M R00927-Q R00927-T**  
**DCR: 7629-K 7629-M 7629-Q 7629-S 7629-T 7629-U**

M2 \*07\* F012 F213 K0 L3 L352 M280 M320 M413 M431 M510 M521 M530 M540  
 M782 P610 P614 P633 Q233 M903 M904  
**DCN** 特定化合物構造に対する索引 (DCN, DCR も表示される)  
**DCF**

DCR

AN.S DCR-7629  
 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

※近接演算子により関連付けられるのは一つのサブヘディング内のコードです。

## 2. 定型検索式

### (1) サブヘディング

索引は、化合物の技術分野と収録年に基づいて7種のサブヘディングごとにまとめられています。検索式ではサブヘディングを検索限定辞として使用します。

- M0 CPI Bセクション、Cセクション(非ステロイド)(1963～1969)  
 化学構造によって定義される物質  
 タンパク質や多糖体の様に化学構造によって定義されない物質
- M5 ステロイド化合物(1963年以降のBセクション、Cセクション)

1970年に、M0は四つのサブヘディング(M1, M2, M3, M4)に分割されました。

- |    |  |  |
|----|--|--|
| M1 | Bセクション、Cセクション - 天然物・ポリマー                     | Bセクション: 医薬<br>Cセクション: 農薬<br>Eセクション: 一般化学 |
| M2 | Bセクション、Cセクション - 医薬・農薬                        |  |
| M3 | Eセクション - 一般化学                                |  |
| M4 | 染料及び関連化合物(Eセクション)                            |  |
| M6 | ガレニカル(Bセクション、Cセクション)(1976年以降)<br>製薬機器、製剤、診断薬 |  |

- Bセクション、Cセクション、Eセクションに使用されているコードは共通していますので、様々な検索限定辞を組合せて使用できます。例えば、医薬あるいは一般化学に分類されているかもしれない化合物を検索するためには、M0, M2, M3の三つの検索限定辞を一緒に使用しなければなりません。
- ステロイドの検索限定辞(M5)は、他の検索限定辞と組合せることはできません。
- 検索限定辞M1のコードは、M0とだけ組合せることができます。

## (2) 近接演算子(P)

特許は、新規化合物に関する発明の場合もありますし、活性成分の組成物に関する発明の場合もあります。組成物の場合には、各成分が各々の索引情報を持ちます。1レコード内の複数の化合物に同一のコードが割り振られている場合に、AND演算子を使って検索するとノイズが生じます。

S (F011 AND F213)/M2 :この検索式の場合、15ページのレコードがノイズとしてヒットする。

S (F011 (P) F213)/M2 :この検索式の場合、15ページのレコードはヒットしない。

一部のコードが化合物Aを検索し、残りのコードが化合物Bを検索することにより発生するノイズを避けるため、AND演算子を使うのではなく、近接演算子(P)を使うことが必要です。

## (3) 色分けされたコード(コーディングシートに記載)

1963年に最初のChemical Fragmentation Codeが導入されて以来、数多くの改善が行なわれました。幾つかのコードは、特定性を増すために細分化が行なわれ、幅広く構造の特性を表すための新たなコードが追加されました。

現在使用されているChemical Fragmentation Codeは、コーディングシートに記載されています。コードが導入された年で区別できるように、年代ごとに異なる色で書かれています。

1963年に導入されたコード	黒
1970年に導入されたコード	赤
1972年に導入されたコード	青
1981年27週に導入されたコード	緑

コードが異なった年に導入されているため、コードは年代ごとの定型の検索式に組み込む必要があります。

## (4) 定型の検索式

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)(緑コード(P)緑コード(P)……)/M2,M3

L5 S L1(P)M900/M0 OR L2(P)M901/M2,M3 OR L3(P)M902/M2,M3 OR L4

	1963~1969	1970~1971	1972~198126	198127~	使用されているコード
1 行目	M900	M901	M902	M903	黒のみ
2 行目	↓	M901	M902	M903	黒+赤
3 行目	↓	↓	M902	M903	黒+赤+青
4 行目	↓	↓	↓	M903	黒+赤+青+緑
	↓	↓	↓	↓	
5 行目	1 行目 × M900	2 行目 × M901	3 行目 × M902	4 行目	1963年以降の最適な回答

## ➤ 年代別の検索式

コードは1963年、1970年、1972年、198127に導入・追加されました。定型の検索式では、導入・追加された年代を考慮して検索を行う必要があります。選んだコードを色毎に組み合わせて検索式を作成してください。

検索式1行目                    黒のコードを近接演算子(P)でリンク

検索式2行目                    1行目(P)赤のコードと近接演算子(P)を使用して検索

検索式3行目                    2行目(P)青のコードと近接演算子(P)を使用して検索

検索式4行目                    3行目(P)緑のコードと近接演算子(P)を使用して検索

検索式の4行目は緑のコードが組み込まれていますので、198127以降の結果しか得られないことに注意してください。

## ➤ タイムレンジコード

全ての期間(1963年以降)からの結果を得るためには、検索式5行目のようにタイムレンジコードを使用して下さい。

M900                    1963年~1969年

M901                    1970年~1971年

M902                    1972年~198126

M903                    198127~ (Fragmentation Code Back-indexingにも付く)

- 各レコードは、索引された時期によって、タイムレンジコードの一つが付与されています。

- 
- 検索式の1行目の回答は、コードが1963年から使用されていますので、M900、M901、M902及びM903の年代レコードを含みます。
  - 検索式の2行目の回答は、赤のコードが1970年以前は使用されていないので、M901、M902及びM903の年代レコードを含みます。
  - 検索式の3行目の回答は、M902及びM903の年代レコードを含みます。
  - 検索式の4行目の回答は、M903の年代レコードのみを含みます。
  - タイムレンジコードは、検索式の5行目で使われます。M903は定型の検索式では使われません。
  - 検索式の5行目の回答が1963年から現在まで(医薬分野)の回答を含む最も適切な回答です(農薬分野は1965年から現在まで、一般化学の分野は1970年から現在まで)。

## (5) 参考資料

- Chemical Fragmentation Code 紹介ページ  
<http://clarivate.jp/products/dwpi/support/ChemCode/>
- Chemical Indexing User Guide  
コード順のリスト及び定義などがまとめられています。コードの意味を確認できます。  
PDF file の入手先:<http://clarivate.jp/scientific/m/pdfs/mgr/chemindguide.pdf>
- コーディングシート  
コードの一覧表です。コードを簡単に見つけられます。  
PDF fileの入手先:  
[http://clarivate.jp/media/ps/dwpi/Support/ChemFragCode\\_table.zip](http://clarivate.jp/media/ps/dwpi/Support/ChemFragCode_table.zip)
- Markush TOPFRAG の使い方資料  
化学構造を作図してケミカルフラグメンテーションコードの検索式を作成するツールの解説書です。  
PDF fileの入手先:[http://clarivate.jp/media/ps/dwpi/Support/markush\\_topfrag.pdf](http://clarivate.jp/media/ps/dwpi/Support/markush_topfrag.pdf)



### 3. コードの概要

ケミカルコードはアルファベット一文字と数字三桁の記号です。コードは体系的に配置されており、最初のアルファベットで大きくグループ分けされています。検索に必要なコードを見つける際には、その部分構造がどのグループに属するものであるかということを検討します。また、構造以外に用途等のコードも用意されており、構造と用途を組み合わせて検索する事も可能です。

#### ➤ グループ A: 金属の存在

アルカリ金属、アルカリ土類金属、IIIA 族～VA 族等の個々の原子に対するコード。無機及び有機金属は対象となりますが、単独の原子や合金は、通常対象にはなりません。

#### ➤ グループ B: 非金属(出現頻度が低い)

希ガス、B, Si, P, As, Se, Te。無機化合物、有機化合物が対象となります。

#### ➤ グループ C: 非金属(出現頻度が高い)

グループA, Bに収録されない原子。無機化合物及び無機イオンが対象です。これらのコードには、他のコードと組合せて使用するものもあります。

#### ➤ グループ D, E, F: ヘテロ環

O, S, N原子を含む環状構造のコードです。

#### ➤ グループ G: 炭素環

#### ➤ グループ H, J, K, L: 官能基

#### ➤ グループ M: 炭素鎖等

炭素鎖等重要なコードがあります。

#### ➤ グループ N: 製法や装置

これらのコードのほとんどは緑のコードです。従って、DWPI更新週198127に導入されたものです。

#### ➤ グループ P: 医薬, 農薬の活性

セクションB, Cの化合物や組成物の活性、特性、用途を索引します。

#### ➤ グループ Q: その他の用途

セクションEの化合物や組成物の活性、特性、用途を索引します。

#### ➤ グループ R0: 製剤

ガレニカルコードの一部(サブヘディングM6)。R0グループは、M6同様にM0、M1、M2、M3にも適用されます。

➤ **グループ S, T, U:ステロイド**

ステロイドのコードは、一般のコーディングシートにはありません。またこの講習会テキストにも掲載されていません。ステロイドのコードは、Derwent Chemistry Resourceの導入と同時に新たなレコードの索引が中止されました。Derwent Chemistry Resource導入以前のレコードは、引き続き検索して頂くことが可能です。

➤ **グループ V:天然物**

セクションB、Cのみが対象。これらのコードは、M1には必ず適用されますが、その一部は構造コードを補足する目的で、M2にも適用されます。

➤ **グループ W:色素、染料**

セクションEが対象で、M4に分類される色素及び染料のコードです。

## 4. 環に対するコード

### (1) 縮合ヘテロ環のコード: D/Eグループ

D, Eのコードは、少なくとも二つの環が縮合しO, S, N中の少なくとも一つのヘテロ原子を含んだ縮合環が対象です。環に対する全てのコードは、1963年まで遡ることができます(全て黒のコードです)。

このコードは、以下の様に配列されています。

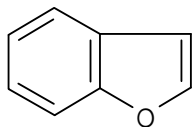
Oを含んだ環、Sを含んだ環、Nを含んだ環の順に配置されています。

小さな環(環が小さい及び縮合した環の数が少ない)が先に配置され、続いて大きい環(環が大きい及び縮合した環の数が多い)が配置されています。

コーディングシートで網掛けされた部分が一つのグループの先頭に当たります。コードを見つける場合には、これを目安として見つけると、簡単にコードを見つけることができます。

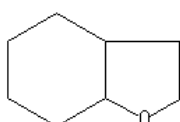
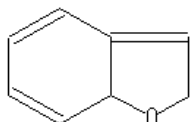
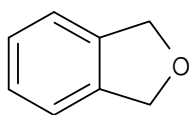
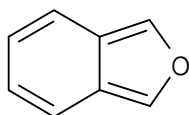
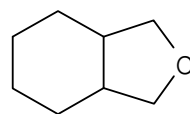
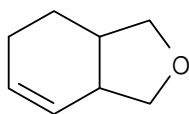
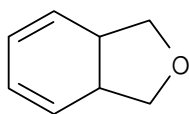
D1:	
O ONLY	← ヘテロ原子として酸素のみ含む。
2 RINGS	← 二つの環が縮合している。

## (2) コードの詳細

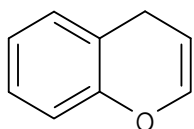
**D100: ベンゾ(B)フラン(Benzo(b)furan)**

このコードは、ベンゾ(B)フランに加えて、様々な飽和された環が対象となります。

※コードの最後の桁(1の位)がゼロのコードは、以下のような様々な飽和状態の環が対象となります。

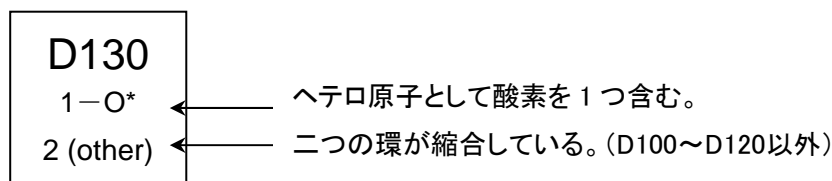
**D111: (1,3-ジヒドロ)・ベンゾ(C)フラン(Benzo(c)furan)****D112: D111以外の飽和度のベンゾ(C)フラン(Benzo(c)furan)****D120: ベンゾ(B)ピラン(Benzo(b)pyran)**

様々な飽和された環が対象になります。



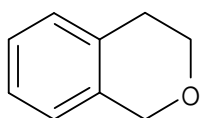
## (3) 広い概念のコードとリングインデックス番号(RIN)

D130: 酸素一つを含み、二つの環が縮合した他の縮合環。

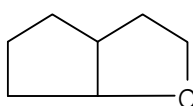


D130は、酸素一つを含み、二つの環が縮合し、D100, D111, D112, D120には分類されない様々な環構造が対象となります。

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コード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。

これらをより効率的に検索する目的で、1972年以降、環のコードと組合せてリングインデックス番号(RIN)が導入され、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は、D130の様に環の形を特定できないコードと共に適用されます。リングインデックス番号が適用されるChemical Fragmentation Codeには、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(STN)、RR(Dialog)、RR(QO)フィールドで検索します。
- RIN は、5桁の数字です。

#### (4) 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

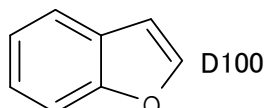
## (5) リングインデックス番号の起源と特定方法

### ➤ パターソン・リングインデックス(Patterson Ring Index)

およそ26,000件の環とそれに対応する番号を収載した、パターソン(2版、3追補版)をアメリカ化学会は編集しました。DWPIではこの26,000件の番号の一部を使用しています。

例外1 下記の場合、パターソン・リングインデックス番号は使用しません。

#### I. 特定のコードがある環構造



#### II. 金属が含まれる環に対してパターソンが番号を付与していても、DWPIではこれらは環として考慮されていません。このような構造は、酸の金属塩として索引されています。



例外2 下記の場合、両者に同じパターソン・リングインデックス番号が適用されます。

- パターソンは、異なった飽和状態や荷電した環等には、別の番号を割り当てています。しかしDWPIでは、異なった飽和状態は区別されません。以下の構造にはどちらも01732が適用されています。



### ➤ ダウエントリングインデックス

パターソン・リングインデックスにない環構造に関して、40,000番台または77,000番台(1998年に採用)のダウエントリングインデックス番号が付与されています。

Ring Index Numbers (RINs)による索引は1972年から継続されています。但し、1998年12月で新たなRINの採用は中止されました。

### ➤ 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

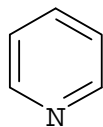
Markush TOPFRAGまたはSTN Expressで構造を作図し、検索式を生成することで確認できます。

- **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。

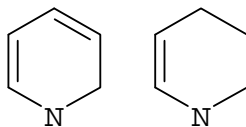


## (6) 単環ヘテロ環: Fグループ

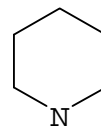
単環ヘテロ環は、Oを含む環、Sを含む環、Nを含む環、複数のヘテロ原子が含まれる環の順に配置されています。また、多くの場合、飽和状態が区別されています。例えばピリジンでは、ピリジンと水素化された3種類の環のコードがあります。



F431



F432



F433

コーディングシートで網掛けされた部分が一つのグループの先頭に当たります。コードを見つける場合には、これを目安として見つけると、簡単にコードを見つけることができます。

<b>F1:</b>	
O-SOLE	← ヘテロ原子として酸素のみを含む
HETERO	← ヘテロ環

Oのみを含む	F100～F170
Sのみを含む	F200～F250
O+Sのみを含む	F300～F330
Nのみを含む	F400～F590
N+Oのみを含む	F600～F660
N+Sのみを含む	F700～F750
O+S+Nを含む	F760

**(7) 炭素環: Gグループ**

三つのタイプの炭素環があります。

- I. 縮合していないベンゼン環: G1グループ
- II. 縮合芳香族環: G2グループ~G4グループ (RINが適用される場合あり)
- III. 環状脂肪族 (芳香族環以外): G5グループ~G8グループ (RINが適用される場合あり)

縮合芳香族環とは、少なくとも一つの環が芳香環である縮合した炭素環です。環状脂肪族とは、芳香環がない、単環及び縮合環です。

**➤ ステロイド: グループGには包含されない炭素環**

ステロイドは、グループGでは索引されません。ステロイド用の検索フィールドM5とステロイド用のコード(S~U)があります。ステロイドのコードはDerwent Chemistry Resource (DCR)の導入に伴い、新たな付与が中止されました。

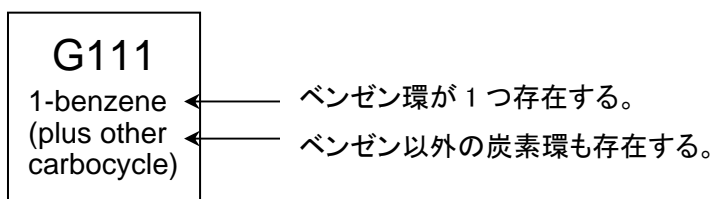
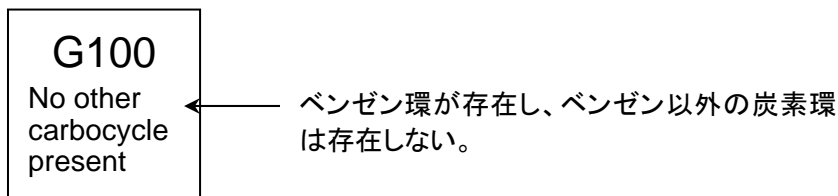
**➤ DWPIで定義されるステロイドとは？**

6:6:6:5のステロイド骨格(シクロペンタ(a)フェナンスレン環)を含む構造がステロイドとして索引されます。置換基が結合したステロイド骨格や環が縮合したステロイド骨格も索引対象です。しかし、ステロイド骨格自体が変形されている場合は索引対象から外されます。環の大きさが変更されたり原子が置換されたり(例えば、炭素がヘテロ原子に置換されたり)したセコステロイドやホモステロイドは、DWPIではステロイドと見なされません。構造がステロイドであるか否かを見極めることは、正しい索引を行うために重要です。

**ステロイドの例****非ステロイドの例**

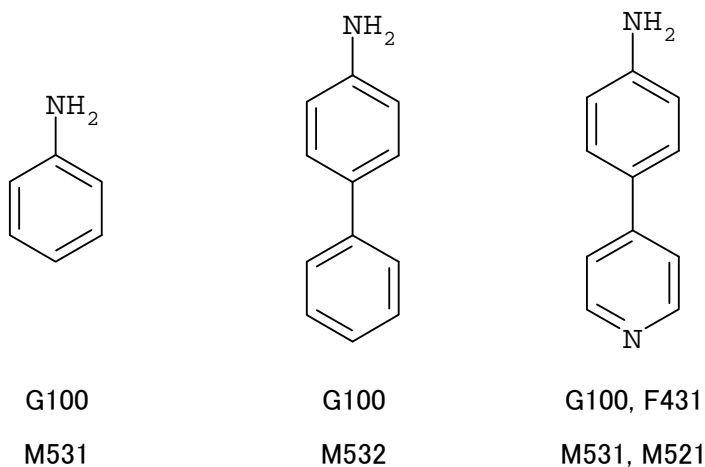
➤ 縮合していないベンゼン

G100はベンゼン環以外の環が含まれていない構造に付与され、1963年から使用されています。198127以降は新たな三つのコードG111、G112、G113が芳香族環に対して使用されています。これら三つのコードは、即ちベンゼン環以外の炭素環が含まれている場合に適用されます。

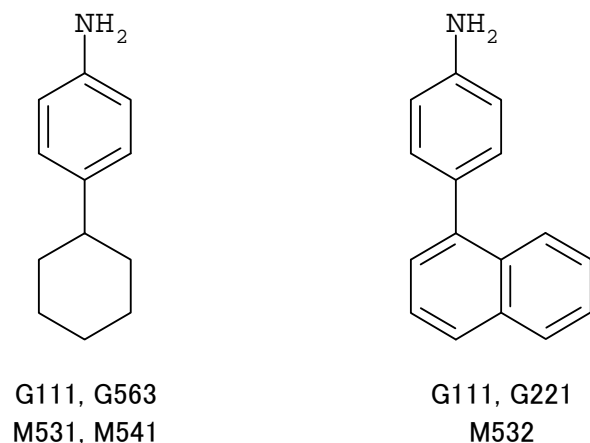


例) アニリン及びその誘導体を検索する場合

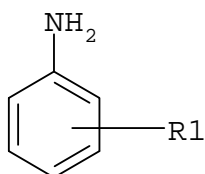
### A. G100が適用される例



### B. G111が適用される例



### C. 任意に置換したアニリン



R1 = 任意の置換基

G1で始まるコードは使用できません。

可能性を検討してみましょう。R1に炭素環が含まれていなければG100です。R1にベンゼン以外の炭素環が含まれていて、R1に更にベンゼン環がいくつ含まれているかによってG111, G112, G113の何れかが適用されます。このような炭素環を検索する場合、G100とG111, G112, G113は導入された年代が異なるため、G100は1963年以降を対象とする検索式に、G111, G112, G113は198127以降の年代を対象とする検索式に加えなければなりません。但しベンゼン環に関連するコード(芳香族環のコード)も考慮する場合は、M531(芳香族環の数指定)等のコードを1963年の年代を対象とする検索式に加えた方が効果的です。

**(8) 置換位置****▶ 縮合ヘテロ環の置換基**

縮合ヘテロ環の置換位置に関するコードは、縮合している環一つ一つについて置換基を有する原子の数に基づいて付与されます。このコードは緑色のコードですから、198127以降のDWPIレコードで使用できません。

- 縮合環は、一つ一つの環について考慮してください。
- コードは、環の中で置換基を有する原子の数に基づいて付与されています。
- 一つの原子のみが置換基を有している場合、場合によって、置換の位置を特定できます。縮合位置に最も近い位置を $\alpha$ 位、それ以外の位置は $\beta$ 位以上と判断して下さい。
- D010やD020は置換位置が特定されていない場合のコードです。使用はお勧めしません。D000は適用されることが希です。
- ポリ・コード: コードの各グループには、POLY(ポリ)と書かれたコードがあります。ポリコードは、グループ中の同一コードを2回以上使用したことを示します。ポリコードは、下一桁が9で表示されます。

**D01グループ: 縮合環のうちヘテロ原子を含む環の置換基に関するコード**

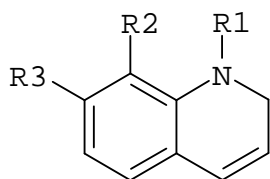
- D011  $\alpha$  位に置換基1ヶ所
- D012  $\beta$  位以上に置換基1ヶ所
- D013 置換基2ヶ所
- D014 置換基3ヶ所
- D015 置換基4ヶ所以上
- D016 二つ以上の置換基が同じ位置に存在する
- D019 ポリコード

**D02グループ: 縮合環のうち炭素原子のみの環の置換基に関するコード**

- D021  $\alpha$  位に置換基1ヶ所
- D022  $\beta$  位以上に置換基1ヶ所
- D023 置換基2ヶ所
- D024 置換基3ヶ所
- D025 置換基4ヶ所以上
- D026 二つ以上の置換基が同じ位置に存在する
- D029 ポリコード

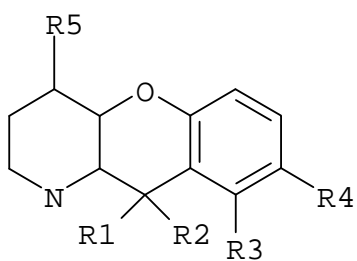
**D030 縮合位置に置換**

例1



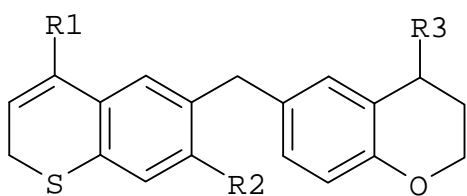
D011, D023, D622

例2



D023, D011, D016, D019, E520

例3



D011, D023, D022, D019, D320, D120

**※索引の対象は置換基が結合している原子(置換位置)の数です。**

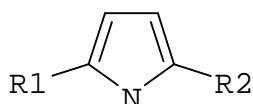
## ➤ 単環ヘテロ環の置換基

単環ヘテロ環の置換基に関するコードは、置換基の位置に基づいて付与されます。

- 置換位置はヘテロ原子に最も小さな番号を付与するIUPAC命名法に基づいて番号付けされます。
- 置換位置に加えて、他の二つのコードがあります。
- F010は置換位置が特定されていない場合のコードです。使用はお勧めしません。

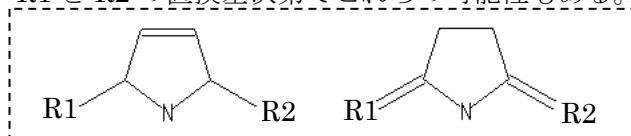
F011	1位
F012	2位
F013	3位
F014	4位
F015	5位
F016	6位、又はそれ以上の位置
F017	同一の炭素原子に二つ以上の置換基が存在
F018	同一のヘテロ原子に二つ以上の置換基が存在
F019	ポリコード
F000	置換されていないヘテロ環

### 例1

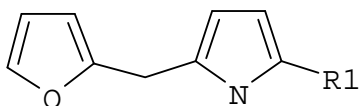


F012, F015, F421, F422, F423

R1 と R2 の置換基次第でこれらの可能性もある。



### 例2



F012, F015, F019, F111, (F421 or F422)

**※索引の対象は置換基が結合している原子の位置です。**

**➤ 炭素環の置換基**

炭素環の置換位置に関するコードは、縮合ヘテロ環と同様、環中の置換基を有する原子の数に基づいて付与されます。炭素環の場合は、置換位置を特定できるコードもあります。但し置換位置は、IUPACの番号付けとは異なります。

- 単環の場合、ベンゼン環に対する置換基は、G01グループが適用されます。
- 単環の脂肪属炭素環の置換基は、G03グループが適用されます。
- 縮合炭素環の置換基は、縮合ヘテロ環に類似した形で、G02グループ(芳香族環部分)及びG03グループ(非芳香族環部分)が適用されます。

**G01グループ:ベンゼン環の置換基**

- G010 置換基1ヶ所
- G011 置換基2ヶ所(1,2)
- G012 置換基2ヶ所(1,3)
- G013 置換基2ヶ所(1,4)
- G014 置換基3ヶ所(1,2,3)
- G015 置換基3ヶ所(1,2,4)
- G016 置換基3ヶ所(1,3,5)
- G017 置換基4ヶ所
- G018 置換基5ヶ所又は6ヶ所
- G019 ポリコード

**G02グループ:縮合環の芳香族環部分の置換基**

- G020 縮合部から $\alpha$ 位に置換基1ヶ所
- G021 縮合部から $\beta$ 位に置換基1ヶ所
- G022 置換基2ヶ所
- G023 置換基3ヶ所
- G024 置換基4ヶ所
- G029 ポリコード

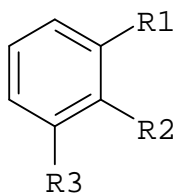


**G03グループ: 脂肪属環／縮合環の非芳香族環部分の置換基**

- G030 置換基1ヶ所(単環)  
 G031 縮合部から $\alpha$ 位に置換基1ヶ所  
 G032 縮合部から $\beta$ 位以上に置換基1ヶ所  
 G033 置換基2ヶ所(1,2)  
 G034 置換基2ヶ所(1,3)  
 G035 置換基2ヶ所(1,4以上)  
 G036 置換基3ヶ所  
 G037 置換基4ヶ所以上  
 G038 同一炭素に二つ置換  
 G039 ポリコード

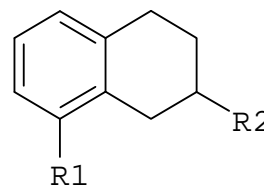
**G060 縮合部位に置換**

例1



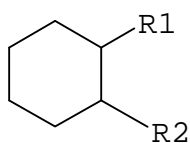
G014

例2



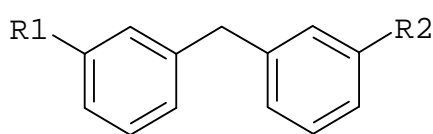
G020, G032 G223

例3



G033

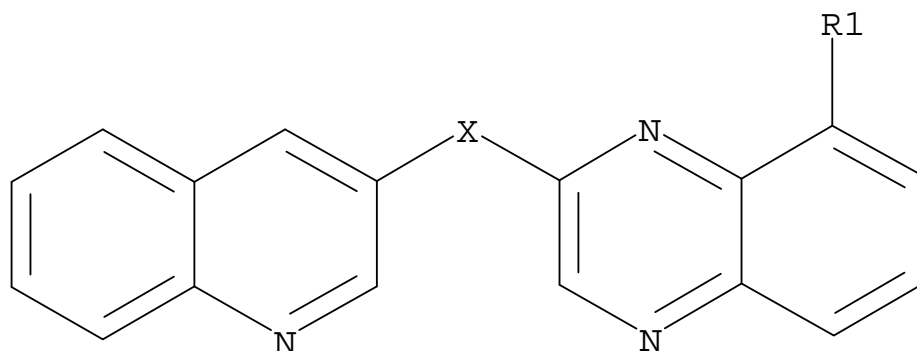
例4



G012, G019

**※索引の対象は置換基が結合している原子(置換位置)の数です。**

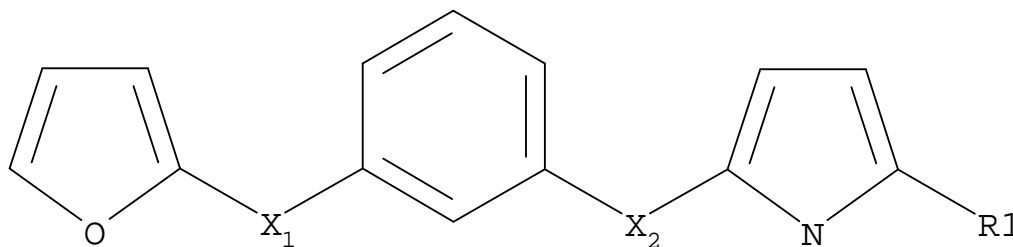
## (9) 練習問題1



X はあらゆる置換基

R1 は水素を除くあらゆる置換基

## 練習問題2



X1, X2 はあらゆる置換基

R1 は水素を除くあらゆる置換基

## 5. 官能基

### (1) 4種類の官能基

- グループH: C=O, C=Sを含まず、出現頻度の高い官能基
- グループJ: C=O, C=Sを含み、出現頻度の高い官能基
- グループK: 有機のヘテロ原子同士の結合(ニトロを除く)
- グループL: 出現頻度の低い官能基

これらのグループのコードに対応する官能基は、少なくとも一つのヘテロ原子、O, S, Nを含みます。またグループHのコードの中には、オレフィン及びアセチレン結合(H7グループ)も含まれます。

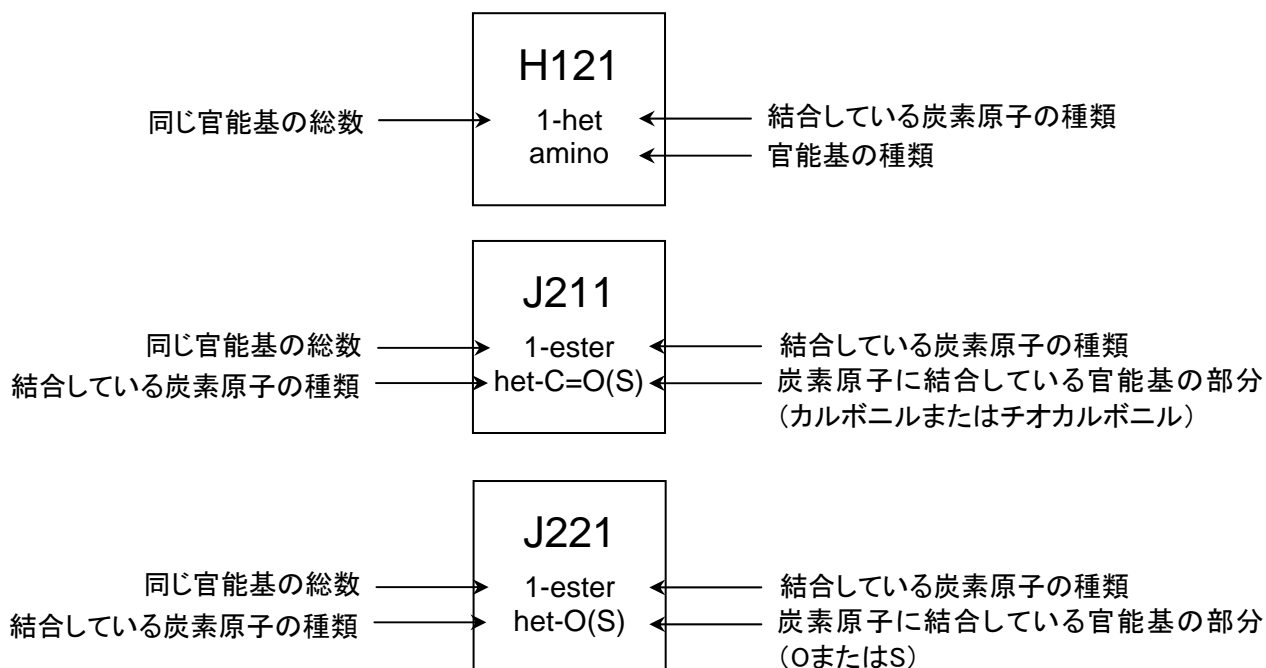
### (2) 出現頻度の高い官能基: グループH, J

一つのコードの中に3種類の情報が含まれています。

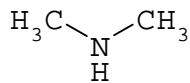
- 官能基の種類
- 一つの構造に存在するその官能基の数
- その官能基が結合している炭素原子の種類

官能基が結合している炭素原子には四つのタイプ(ヘテロ環、芳香族環、脂肪族環、脂肪鎖)があります。どのコードを選ぶ場合には、次の優先順位に従って注意深くコードを選んでください。

ヘテロ環 > 芳香族環 > 脂肪族環 > 脂肪鎖

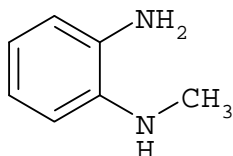


例1



H181, H102

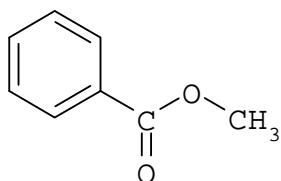
例2



H142, H100, H102

芳香族環が優先され、H181 は適用されません。

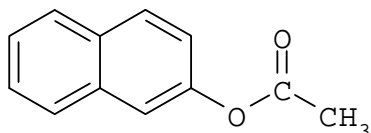
例3



J231, J011

カルボニルが芳香族環に結合しているコードが優先されます。

例4



J241, J011

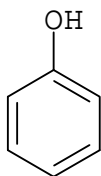
酸素が芳香族環に結合しているコードが優先され、J271 は適用されない。

## (3) ケト・エノール互変異性体 -OH, SH

ケト・エノールの互変異性体は通常ケト型で索引されます。

但し、OHやSHが完全に共役した炭素環に結合している場合には、エノール型で索引されます。

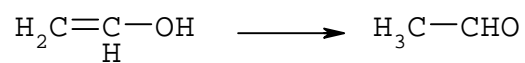
例えば、フェノールは、



H441

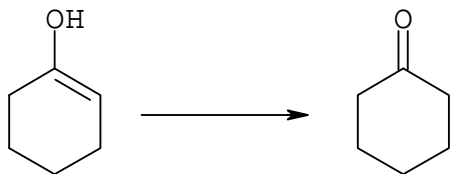
互変異性体が存在するような場合、ケト型が選ばれ索引されます。

ビニル・アルコールは、アセトアルデヒドとして索引されます。



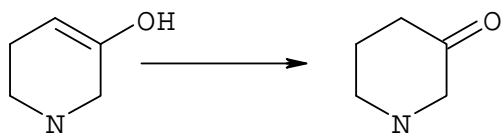
J471

1-シクロヘキセノールは、シクロヘキサノンとして索引されます。

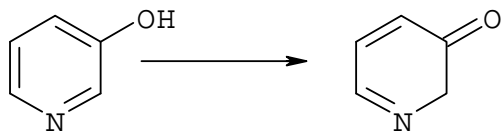


J561, G563

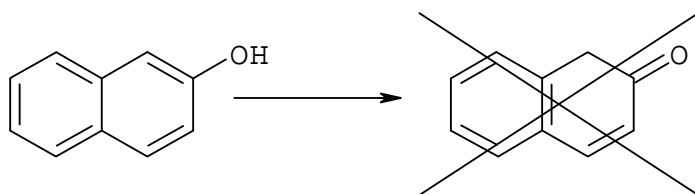
その他の例



J521, F433



J521, F432

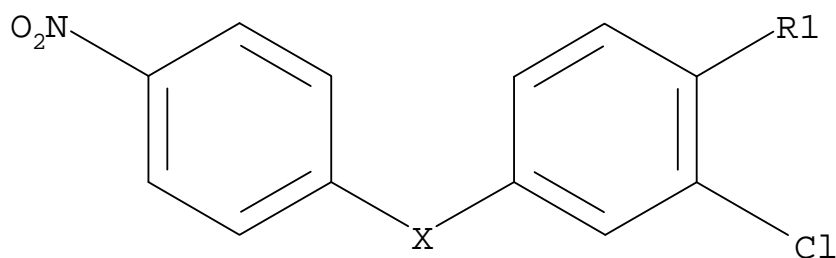


(エノール型のまま)

H441, G221

完全に共役した炭素環に結合しているのでエノール型が優先されます。

(4) 練習問題3



X はあらゆる置換基

R1 はあらゆる置換基

**(5) 3級環状窒素(Tertiary Ring Nitrogen): H2グループ**

3級環状窒素は、アミン・タイプとノンアミン・タイプの二種類があります。

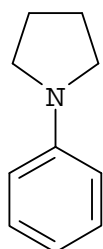
アミン・タイプは以下の二つの条件を満たす必要があります。

**➤ アミン・タイプの定義**

- 窒素原子は、三つの炭素原子と結合していなければならない。
- 三つの炭素原子は、環外のヘテロ原子と多重結合してはならない。

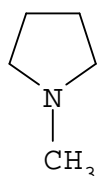
DWPIではこれらの官能基を複雑な官能基と考えています。3級環状窒素がアミン・タイプの場合には、H2グループのコードに加えて、アミンのコード(H1グループ)も併せて検索式に追加してください。

N-フェニル・ピロリジンを例にとると、この官能基はアミンタイプの条件を充たすのでH201が適用されます。加えてアミンのコードも考慮され、芳香族環に結合しているアミン、H141も同時に適用されます。

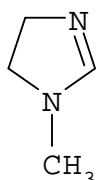


H201, H141

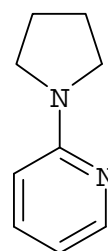
(G100, F423, G010, F011...)

**➤ アミン・タイプの例**

H201, H181



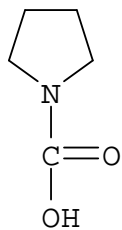
H201, H181



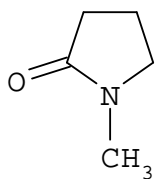
H201, H121

➤ **ノンアミン・タイプの例**

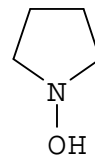
アミンではないので、H1で始まるコードは適用されない。



H211



H211



H211



## (6) ネゲーションコード(否定コード)

ネゲーションコードは、コーディングシート上では各グループの先頭に配置されており、網掛けされていない2桁のコードで、“essential”と記載されています。

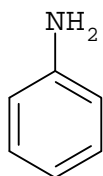
ネゲーションコードは、そのグループの官能基が必須の部分構造である場合に適用され、可能性の一部である場合(Markush構造の官能基)には適用されません。従って、このコードを利用して否定的に検索した場合でも可能性の一部である官能基のコードが付与されているDWPILEコードが漏れることはありません。

明細書上で化学構造が十分に定義されていれば、ネゲーションコードを使用することで、多すぎる回答を扱いやすい数に減らすことができます。但し、思慮なくネゲーションコードを使うと、必要な回答を失うこともあるので注意して下さい。

ネゲーションコードを使用する場合、定型検索式のタイムレンジングの後、すなわち検索式の6行目に適切な近接演算子を使用して取り入れてください。STNで使用する近接演算子は(NOTP)です。

## ▶ サンプル例

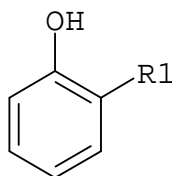
検索したい構造



検索で使用するコード

G100, G010, H141

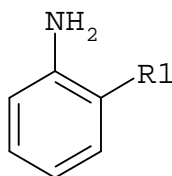
データベースに登録された構造



データベース中で付与されているコード

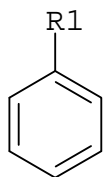
G100, G010, G011, H141, H441, H4

R1 = H, NH2



G100, G010, G011, H141, H441, H1

R1 = H, OH



G100, G010, G000, H141, H441

R1 = H, OH, NH2

➤ ネゲーション・コードを含んだ定型検索式の例

- 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)(緑コード(P)緑コード(P).....)/M2,M3
- L5 S L1(P)M900/M0 OR L2(P)M901/M2,M3 OR L3(P)M902/M2,M3 OR L4
- L6 S L5(NOTP)(H1 OR H2 OR H3 OR H4 OR .....)/M2,M3

## (7) 出現頻度の低い官能基: K, L グループ

## ➤ 有機ヘテロ原子同士の結合: K グループ

K1グループ	X-Y, X=Y (X= F, Cl, Br, I; Y = O, S, Se, Te, N, F, Cl, Br, I)
K2グループ	S-S, S=S
K3グループ	S-N, S=N
K4グループ	S-O, S=O
K5グループ	N=N, N≡N
K6グループ	N-N
K7グループ	N=O
K8グループ	N-O
K9グループ	O-O

ニトロ基は、Kグループではなく、H3グループで索引されています。

## ➤ K, L グループの198127以前のコード

198127以降に収録されたDWPIレコードを検索する際には、緑のコードを利用しますが、これ以前に収録されたレコードを検索するためには、当時使われていた広い概念のコードを使用して検索することが可能です。

この広い概念のコードは現在索引に使われていませんが、1963年から198126までに収録されたレコードの検索には有効です。このコードは、198127に導入された限定的なコードが表す官能基を包含しています。

このコードは、コーディングシートには掲載されていませんが、Chemical Indexing User Guideにその定義が掲載されています。

この広い概念のコードは、緑のコードの最後の桁を0(ゼロ)に置き換えることで作成できます。

例を一つ挙げると、

1963~198126	198127以降
K350 その他のS-N結合	K351# : S-N-C=U, N-S-C=U
	K352# : S-N-Y, N-S-Y, S-N=U
	K353# : その他のS-N結合

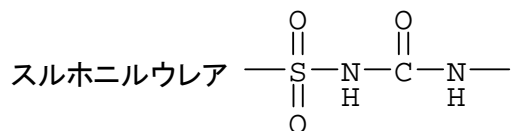
コーディングシート上“#”印は、そのコードを包含する広い概念のコードが存在することを表しています。

現在使用されているコードと中止されたコードを、定型検索式の1行目に入力し、またタイムレンジコードも使って、それらが適用された年代も考慮して検索します。上記の例の場合、検索式の1行目に、(K350 OR K352)等を入力します。

## ➤ 複雑な官能基

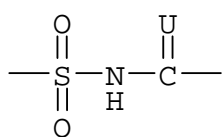
複雑な官能基を完全に定義するためには、複数のコードが必要です。K、Lコードの多くは、複雑な官能基に頻繁に使用されます。

例えば、



を考えると、S-N結合、S=O結合、変性ウレアについて各々の官能基に対するコードを選択し、検索式に組み込まなければなりません。

### S-N結合



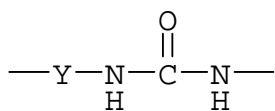
U=O, S, Se, Te, N

(K350 OR K351), C316

### S=O結合

S=O 結合に対する適切な官能基コードはありません。

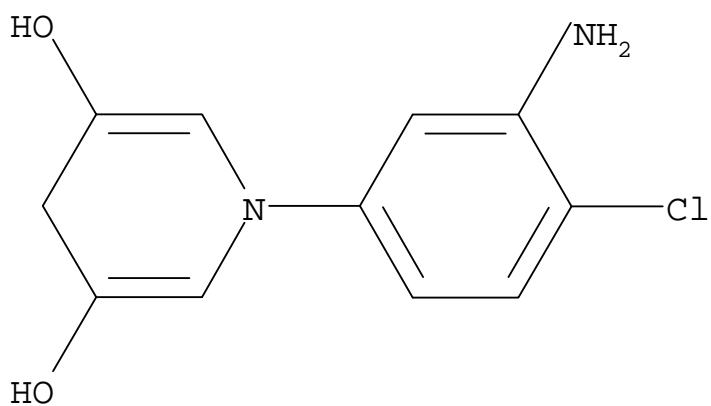
### 変性ウレア部位に対するコード



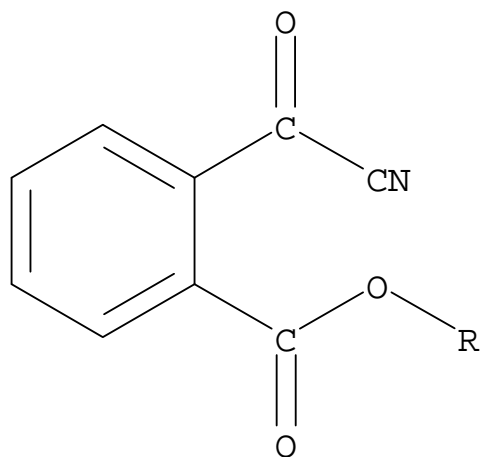
Y=O, S, Se, Te, N, ハロゲン

L431

## (8) 練習問題4



## 練習問題5



Rは水素あるいはアルキル基

## 6. その他のコード: Mグループ

Mで始まるコードには、様々な概念を定義するコードが含まれています。タイムレンジング・コードもその一つです。

M1グループ	環中の炭素と、環中の炭素との結合
M2グループ	0又は1価 (valent) の炭素鎖
M3グループ	2価以上の炭素鎖
M4グループ	基本構造 (Basic Group) (構造全体に対する優先順位が適用)
M5グループ	環構造の存在
M6グループ	その他のコードー様々な概念が含まれる
M7グループ	特許の特徴
M8グループ	立体化学
M9グループ	タイムレンジング・コード

### (1) 基本構造 (Basic Group): M4グループ

基本構造コードは、優先順位を考慮して適用されます。例えば、ある構造がピリジン環とキノリン環を有していた場合、基本構造を決定するのはキノリン環です。優先順位は次の通りです。

高   優 先 順 位   低	M411	M412～M416には分類されない化合物及び無機化合物
	M412	縮合ヘテロ環
	M413	単環ヘテロ環
	M414	芳香環
	M415	環状脂肪族
	M416	鎖状脂肪族
	M417	完全に定義されていない構造 (検索には有用ではありません)

基本構造は、検索構造が十分に定義されている場合にのみ使用できます。構造が置換されていてもよい場合には、基本構造コードを適用できない場合があります。

**(2) 環構造の総数: M5グループ**

これらのコードは、存在する環構造の数を表すために使用します。

M51グループ	縮合ヘテロ環の数
M52グループ	単環ヘテロ環の数
M53グループ	芳香環(Aromatic)の数
M54グループ	脂肪族環の数

**(3) 塩のコード: M6グループ**

M630	有機酸の金属/アミン塩
M640	有機塩基の無機酸塩
M650	有機塩基の有機酸塩

**➤ 塩の検索上注意**

特許がプロピオン酸ナトリウムをクレームしている場合、酸と対イオンが索引されます。

一方、プロピオン酸及びそのナトリウム塩をクレームしている場合、酸のコードとM630は索引されますが、対となるイオンは索引されません。検索する場合に注意が必要です。

**例:プロピオン酸ナトリウムの検索**

- ①. プロピオン酸に対応するコードM630を定型の検索式の1行目にを加えてください。
- ②. 対になるイオンのコードA111と金属塩のコードA960を①の結果とLINKしてください。
- ③. ①の結果から、“sodium”や“Na”等の言葉があるものを検索してください。
- ④. ②と③の結果をORしてください。

**検索式**

```
L1      S (J171(P)M416(P)M630)/M0,M2,M3
.....
L6      S L5(NOTP)(H1 OR H2 OR H3 OR H4 OR H5.....)/M2,M3
L7      S L6(P)(A111 OR A960)/M0,M2,M3
L8      S L6 AND sodium OR L6 AND na
L9      S L7 OR L8
```

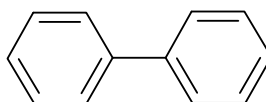
## 7. 環と環の結合： M1グループ

結合する環の中の原子は、炭素でなければなりません。これはM11グループ、M12グループ共通の規定です。

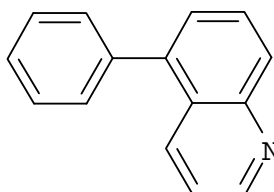
### (1) 結合で直接つながった環

#### ➤ M11コード

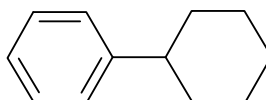
M111          ベンゼンーベンゼン



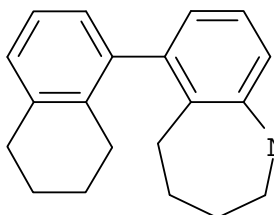
M112          ベンゼンーAryl



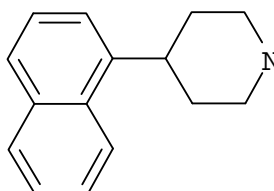
M113          ベンゼンーOther



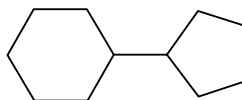
M114          ArylーAryl



M115          ArylーOther



M116          OtherーOther



M119          ポリ・コード

同じコードが 2 回以上使用された

### 各環の定義

ベンゼン : 縮合していないベンゼン

Aryl : 他の環に縮合したベンゼン

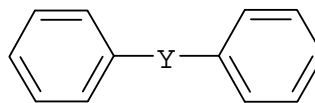
Other : 非芳香族炭素環又はヘテロ環



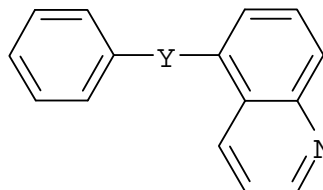
## (2) 原子を介してつながった環

## ➤ M12コード

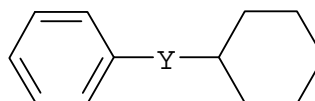
M121      ベンゼンーベンゼン



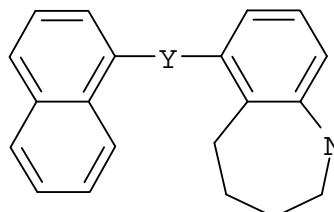
M122      ベンゼンーAryl



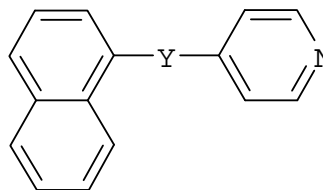
M123      ベンゼンーOther



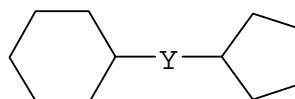
M124      ArylーAryl



M125      ArylーOther



M126      OtherーOther



M129      ポリ・コード

同じコードが 2 回以上使用された

## ※注意事項

環は、M13グループ又はM14グループで定義された基(リンキンググループ=上記構造中Yで示された部分)でつながっていなければなりません。即ちM12グループコードを適用するには、M13グループ又はM14グループコードも同時に適用されなければなりません。リンキンググループは、M13グループ、M14グループを参照ください。

### ➤ リンキング・グループ: M13, M14グループ

先ず、環を結合させている基(リンキング・グループ)が存在しているかを考慮します。リンキング・グループが、M13グループ又はM14グループ中に見つからなければ、M12グループコードは適用されません。

リンキング・グループは、環と環の間の原子を定義するもので、その周りに置換基が結合しても構いませんが、リンキング・グループが環の一部であってははいけません。

#### ■ M13グループ: 炭素を含むリンキンググループ(Linking Group)

M131	$-\text{C}(=\text{W})-$
M132	M131 以外の炭素原子一つ
M133	$-\text{C}=\text{C}-$ 又は $-\text{C}\equiv\text{C}-$
M134	ポリメチン(polymethine)又は(ポリ)アザメチン((poly)azamethine)
M135	その他の二つ以上の炭素原子
M136	$-\text{C}(=\text{W})-\text{W}$ 又は $-\text{C}(-\text{W})=\text{W}-$
M137	$-\text{W}-\text{C}(=\text{W})-\text{W}$ 又は $-\text{W}-\text{C}(-\text{W})=\text{W}-$
M139	ポリ・コード(同じコードが 2 回以上利用された)

W: あらゆるヘテロ原子

#### ■ M14グループ: 炭素を含まないリンキンググループ

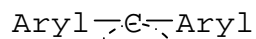
M141	$-\text{O}-$
M142	$-\text{S}-$ , $-\text{Se}-$ , $-\text{Te}-$
M143	$-\text{N}-$
M144	ヘテロ原子一つ(M141~M143 以外)
M145	$-\text{N}=\text{N}-$
M146	$-\text{W}_n-$ ( $n \geq 2$ , W は全て同じ)
M147	$-\text{W}-\text{W}-$ (W は異なる)
M148	$-\text{W}-\text{W}-\text{W}-$ (W は少なくとも 2 種類)
M149	ポリ・コード(同じコードが 2 回以上利用された)

W: あらゆるヘテロ原子

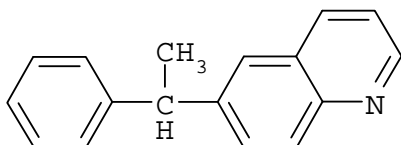
➤ **M150: Aryl-C-Aryl**

M150の炭素原子は、鎖状でも環の一部であってもかまいません。鎖状であれば、M121、M132も同時に索引されることもあります。

尚、ここでのArylの定義は、縮合していないベンゼン及び他の環に縮合したベンゼンの両方を含みます。

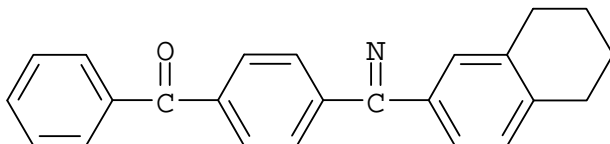


**例1**



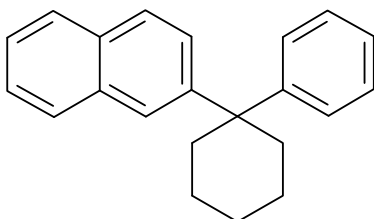
M122, M132, M150

**例2**



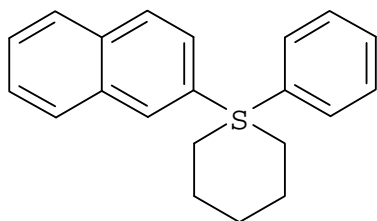
M121, M122, M131, M139

**例3**



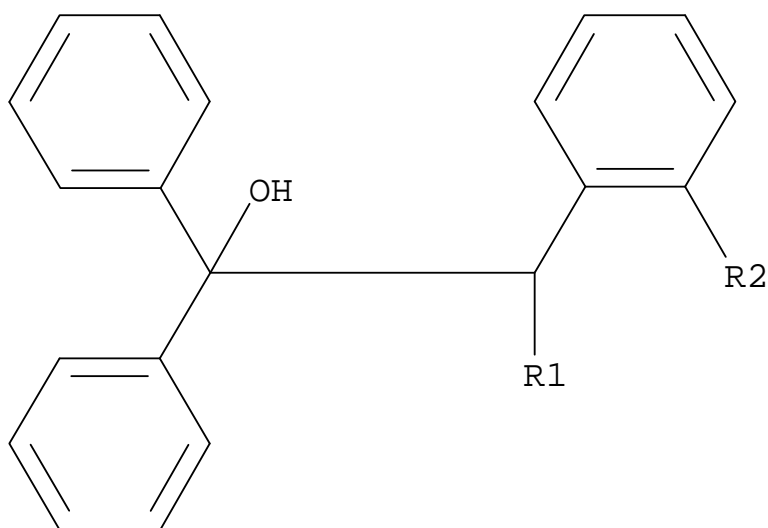
M113, M115, M150

例4



M1 グループコードは適用されません。

(3) 練習問題6



R1, R2 は炭素環を除くあらゆる置換基

**(4) 炭素鎖： M2, M3グループ**

炭素鎖のコードは、1972年以降DWPIレコードでのみ適用されます。

**➤ 炭素鎖とは？****■ 炭素鎖はTerminating Atomを含みます。**

Terminating Atomは、3種類あります。

- I. ヘテロ原子
- II. 環内の炭素原子
- III. ヘテロ原子に多重結合した原子

**■ 炭素鎖とTerminating Atomsの結合の数すなわち炭素鎖の価数 (Valency)によって適用されるコードが決まります。**

- I. 0価、1価 : M2グループ・コード
- II. 2価以上 : M3グループ・コード

**■ 炭素鎖に適用されるコード**0価、1価の炭素鎖－M2グループ

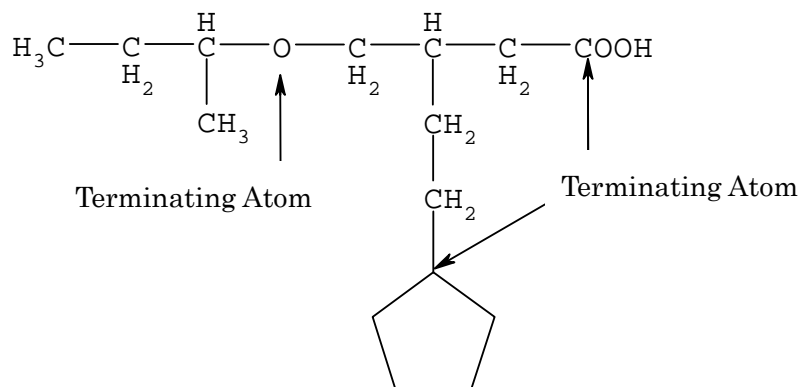
以下の点に基づいて、コードが適用されます。

- I. 炭素鎖の長さ。(炭素鎖中の炭素原子の数)
- II. 直鎖であるか枝分かれしているか。
- III. 炭素鎖が結合しているTerminating Atomの種類。
- IV. Terminating Atomに対するマルチプライヤー。(同じコードを適用する炭素鎖の数)

2価以上の炭素鎖－M3グループ

- I. 炭素鎖の長さ。(即ち炭素鎖中の炭素原子の数)
- II. 炭素鎖の長さに対するマルチプライヤー。(同じコードを適用する炭素鎖の数)
- III. 直鎖であるか枝分かれしているか。
- IV. 炭素鎖の価数 (Valency)。
- V. 炭素鎖が結合しているTerminating Atomの種類。
- VI. Terminating Atomに対するマルチプライヤー。(同じコードを適用する炭素鎖の数)

### Terminating Atomはどこか



**(5) 0価、1価の炭素鎖： M2グループ****➤ 炭素鎖の長さ： M21, M22**

炭素鎖の長さは、炭素原子の数を特定するか、一群の長さを表す広い概念の数のコードを使用するか2種類の方法で表すことができます。

M210	炭素原子1~6 (General)
M211	炭素原子1つ
M212	炭素原子2つ
M213	炭素原子3つ
M214	炭素原子4つ
M215	炭素原子5つ
M216	炭素原子6つ
M220	炭素原子7~10 (General)
M221	炭素原子7つ
M222	炭素原子8つ
M223	炭素原子9つ
M224	炭素原子10
M225	炭素原子11~18
M226	炭素原子19以上

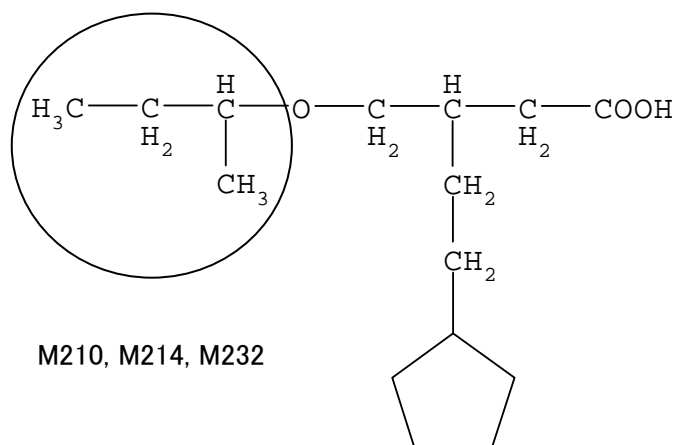
M210, M220は炭素原子数を一群の長さとして検索できるコードです。例えば、M210はM211からM216のいずれかのコードと合わせて適用されています。

**➤ 直鎖であるか枝分かれしているか： M23グループ**

枝分かれに対するコードは、炭素原子三つ以上の炭素鎖に対してのみ適用されます。

M231	直鎖 (炭素原子三つ以上)
M232	$C=C(-C)-R$ , $(C-)_2CH-R$ (例: isopropyl)
M233	$(C-)_3C-R$ (例: tertiary butyl)

ある炭素鎖にisoとtertiaryの両方の部分がある場合、tertiary部分が優先されますので、M232ではなくM233コードで検索して下さい。



### ➤ Terminating Atom

- M240 炭素鎖が環に結合  
 M250 炭素鎖がV, C=Vに結合 (V=O,S,Se,Te,N以外のヘテロ原子)

M26グループ 炭素鎖がC=U(例:カルボニル)に結合している。

- M261# C=S, C=Se, C=Te  
 M262# C=O  
 M263# C=N

M27グループ 炭素鎖がU(例:窒素原子)に結合している。

- M271# S, Se, Te  
 M272# O  
 M273# N

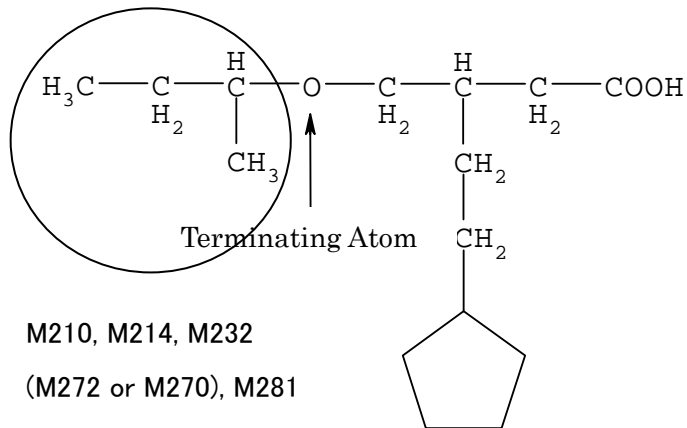
M26, M27グループのコードは緑で記載されていますので、198127以降で適用されています。但し、各コードに#が付いています。#は、198127以前に他のコード(広い概念)が使われていたこと(現在使用中)を示しています。他のコードとはM260またはM270です。これらのコードも使用する場合、

例えば、カルボニル基に結合している炭素鎖のTerminating Atomのコードは、(M262 or M260)を定型検索式の3行目に取り入れてください。



➤ Terminating Atom のマルチプライヤー

M280	M240～M273のコードが1回も使用されていない
M281	M240～M273の同一コードが1回使用されている
M282	M240～M273の同一コードが2回使用されている
M283	M240～M273の同一コードが3回使用されている



**(6) 2価以上の炭素鎖: M3グループ****➤ 炭素鎖の長さ: M31グループ**

炭素鎖の長さは、1価の炭素鎖と同様に、Terminating Atomに挟まれた炭素原子を数えます。

M311	炭素原子1つ
M312	炭素原子2つ
M313	炭素原子3つ
M314	炭素原子4つ
M315	炭素原子5~8
M316	炭素原子9以上

**➤ 長さに対するマルチプライヤ: M32グループ**

M31グループコードの出現回数、即ち同じコードが使用される炭素鎖の数を定義します。

M320	2価以上の炭素鎖なし
M321	M31グループのなかの一つを1回使用
M322	M31グループのなかの一つを2回使用
M323	M31グループのなかの一つを3回以上使用

**➤ 直鎖であるか枝分かれしているか: M33グループ**

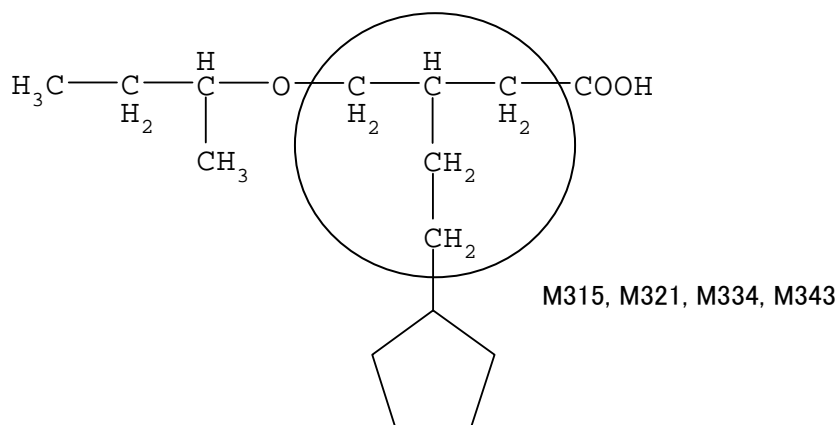
このコードは、炭素鎖が直鎖であるか枝分かれしているか、及び末端にQ部分を有しているか否かを示します。Qは、3種類あります(Q =  $-\text{CH}_3$  ,  $>\text{C}=\text{CH}_2$  ,  $-\text{C}\equiv\text{CH}$ )

M331	末端にQがある直鎖
M332	末端にQがない直鎖
M333	末端にQがある枝分かれ
M334	末端にQがない枝分かれ

**➤ 炭素鎖の価数: M34グループ**

価数は、Terminating Atomとの結合次数の総計によって決定されます。加えて、特別な構造を示すコードがあります。

M340	全てのTerminating Atomが、一つの炭素原子に結合(炭素原子一つの炭素鎖には適用されない)
M341	環中の炭素に二重結合で結合
M342	2価
M343	3価
M344	4価以上
M349	$-\text{C}(-\text{W})\text{C}=\text{W}$ , $-\text{C}(-\text{W})-\text{C}\equiv\text{W}$ (一般的に $\alpha$ アミノ酸に適用される)



### ➤ Terminating Atom

2価以上の炭素鎖のTerminating Atomは、次の4種類に分類されます。

#### M35グループ

- M351# 環中の炭素及び(V', C=V', C≡V'の少なくとも一つ)  
V'=O, S, Se, Te, N,ハロゲン以外のヘテロ原子
- M352# 環中の炭素、X及び(U, C=U, C≡Uの少なくとも一つ)のみ
- M353# 環中の炭素及びXのみ

#### M36グループ

- M361# V', C=V', C≡V'の少なくとも一つ  
V'=O, S, Se, Te, N,ハロゲン以外のヘテロ原子
- M362# X及び(U, C=U, C≡Uの少なくとも一つ)のみ
- M363# Xのみ

#### M37グループ

- M371# 環中の炭素及びU及び(C=U又は/及びC≡U)
- M372# 環中の炭素及び(C=U又はC≡U)のみ
- M373# 環中の炭素及びUのみ

#### M38グループ

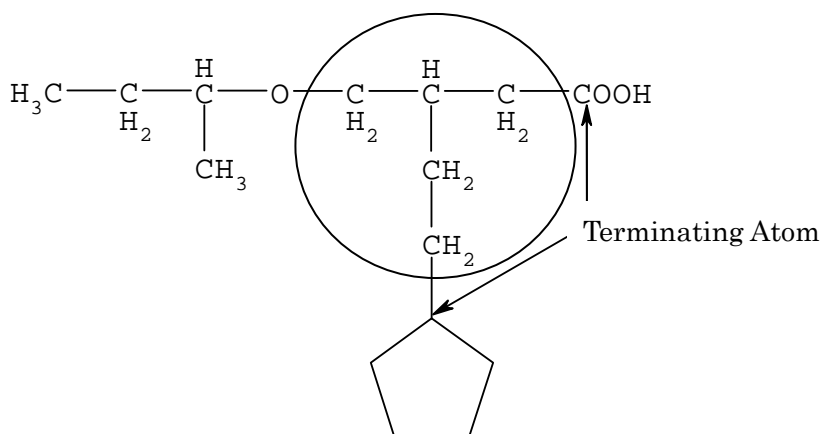
- M381# U及び(C=U又はC≡U)
- M382# C=U, C≡Uの少なくとも一つのみ
- M383# Uのみ

これらのコードは198127以降で適用されています。但し、各コードに#が付いています。#は、198127以前に他のコード(広い概念)が使われていたこと(現在使用中止)を示しています。他のコードとはM350、M360、M370、M380です。これらのコードも使用する場合、

例えば、(M380 or M381)を定型検索式の3行目に取り入れてください。

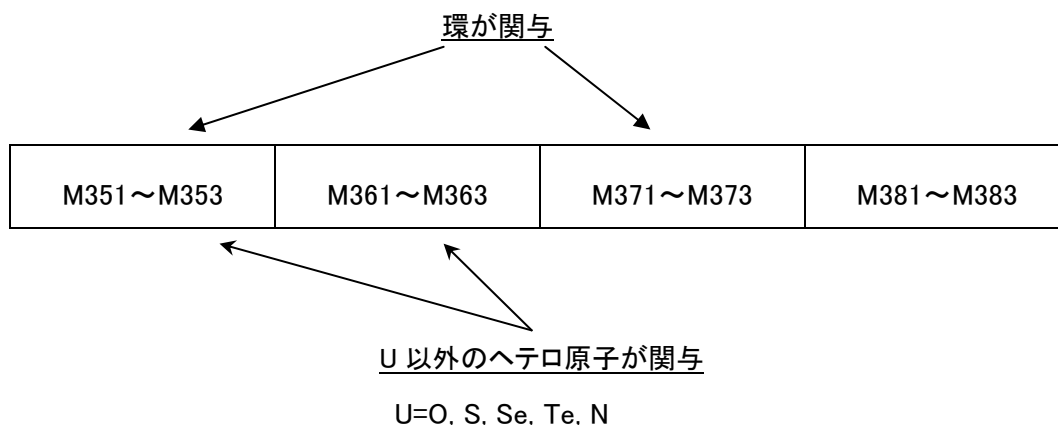
➤ **Terminating Atom のマルチプライヤー**

- M391            M350～M383の中の一つのコードを1回使用
- M392            M350～M383の中の一つのコードを2回使用
- M393            M350～M383の中の一つのコードを3回使用

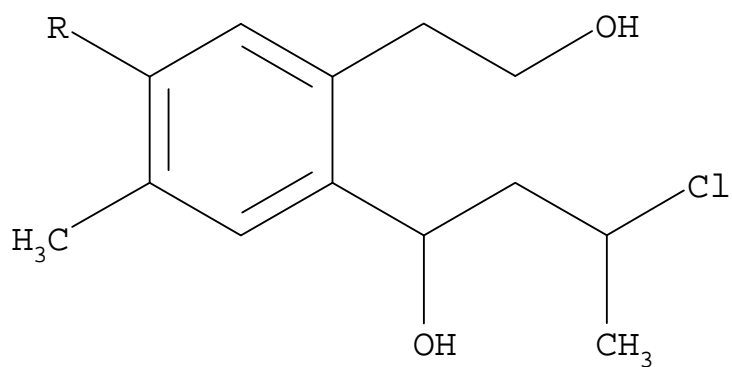


M315, M321, M334, M343  
(M371 or M370), M391

\* **Terminating Atom のコードを選択するためのヒント**

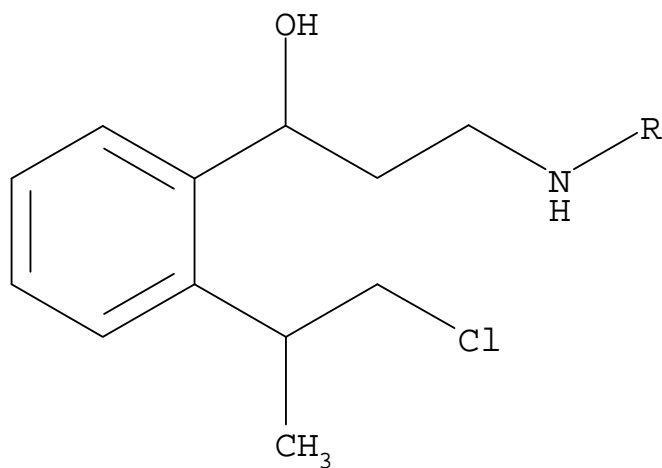


## 練習問題7



Rは水素またはアルキル基

## 練習問題8



Rは水素、アルキルまたは脂肪族カルボニル

ベンゼン環は他に置換基を有しても良いが、他に環は存在しない

## 練習問題の解答

### 練習問題1

S (D621(P)D750/M0,M2,M3  
 S L1(P)(M512 OR M513)/M2,M3  
 S L2  
 S L3(P)(D012(P)D019(P)D021)/M2,M3  
 S (L1(P)M900/M0) OR (L2(P)M901/M2,M3) OR (L3(P)M902/M2,M3) OR L4

### 練習問題2

S (F111(P)(F421 OR F422)(P)(M531 OR M532 OR M533))/M0,M2,M3  
 S L1(P)(M522 OR M523)/M2,M3  
 S L2  
 S L3(P)(F012(P)F015(P)F019(P)G012)/M2,M3  
 S (L1(P)M900/M0) OR (L2(P)M901/M2,M3) OR (L3(P)M902/M2,M3) OR L4

### 練習問題3

S (H34?(P)H602(P)(M532 OR M533))/M0,M2,M3  
 S L1  
 S L2  
 S L3(P)((G012 OR G015)(P)G013(P)H64?)/M2,M3  
 S (L1(P)M900/M0) OR (L2(P)M901/M2,M3) OR (L3(P)M902/M2,M3) OR L4

### 練習問題4

S (F433(P)G100(P)H142(P)H201(P)H602(P)J522(P)M413(P)M531)/M0,M2,M3  
 S L1(P)M521/M2,M3  
 S L2(P)(M280(P)M320)/M2,M3  
 S L3(P)(F011(P)F013(P)F015(P)G015(P)H100(P)H641)/M2,M3  
 S (L1(P)M900/M0) OR (L2(P)M901/M2,M3) OR (L3(P)M902/M2,M3) OR L4  
 S L5(NOTP)(H3 OR H4 OR H5 OR H7 OR H8 OR H9 OR J0 OR J1 OR J2 OR J3)/M2,M3  
 S L6(NOTP)(J4 OR J6 OR J9 OR K0 OR M1)/M2,M3

### 練習問題5

S (G100(P)(J131 OR J231)(P)J581(P)M414(P)M531(P)("L140" OR  
 "L141"))/M0,M2,M3  
 S L1  
 S L2  
 S L3(P)(G011(P)J011)/M2,M3  
 S (L1(P)M900/M0) OR (L2(P)M901/M2,M3) OR (L3(P)M902/M2,M3) S L4

S L5(NOTP)(H1 OR H2 OR H3 OR H4 OR H5 OR H6 OR H7 OR H8 OR H9)/M2,M3  
S L6(NOTP)(J3 OR J4 OR J6 OR J9 OR K1 OR K2 OR K3 OR K4 OR K5 OR K6)/M2,M3  
S L7(NOTP)(K7 OR K8 OR K9 OR "L2" OR "L3" OR "L4" OR "L5" OR "L6" OR "L7")/M2,M3  
S L8(NOTP)("L8" OR "L9" OR M1)/M2,M3

### 練習問題6

S (G100(P)H48?(P)M150(P)M533)/M0,M2,M3  
S L1(P)(M121(P)M129(P)M132(P)M135)/M2,M3  
S L2  
S L3(P)(G010(P)G019)/M2,M3  
S (L1(P)M900/M0) OR (L2(P)M901/M2,M3) OR (L3(P)M902/M2,M3) OR L4

### 練習問題7

S (G100(P)H482(P)H602(P)M240(P)M331(P)M414(P)M531)/M0,M2,M3  
S L1  
S  
L2(P)(M210(P)(M281+M282)(P)M312(P)M314(P)M321(P)M332(P)M342(P)M343)/M2,M3  
S L3(P)((M370 OR M373)(P)(M350 OR M352))/M2,M3  
S L4(P)((G015 OR G017)(P)H402(P)H682(P)M211)/M2,M3  
S (L1(P)M900/M0) OR (L2(P)M901/M2,M3) OR (L4(P)M902/M2,M3) L5  
S L6(NOTP)(H1 OR H2 OR H3 OR H5 OR H7 OR H9 OR J0 OR J1 OR J2 OR J3)/M2,M3  
S L7(NOTP)(J4 OR J5 OR J6 OR J9 OR K0 OR M1)/M2,M3

### 練習問題8

S (G100(P)(H18? OR J37?)(P)H48?(P)H602(P)M331(P)M414(P)M531)/M0,M2,M3  
S L1  
S L2(P)(M313(P)(M322 OR M323)(P)M332(P)M342(P)M343)/M2,M3  
S L3(P)((M370 OR M373)(P)(M350 OR M353))/M2,M3  
S L3(P)H681/M2,M3  
S (L1(P)M900/M0) OR (L2(P)M901/M2,M3) OR (L4(P)M902/M2,M3) L5



---

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](mailto: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。

(2017.9.8 Edition)