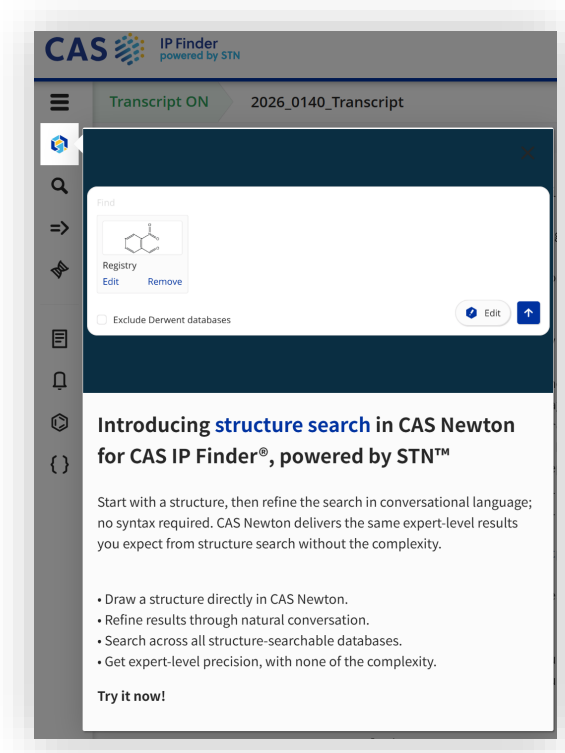


## 構造検索機能の追加

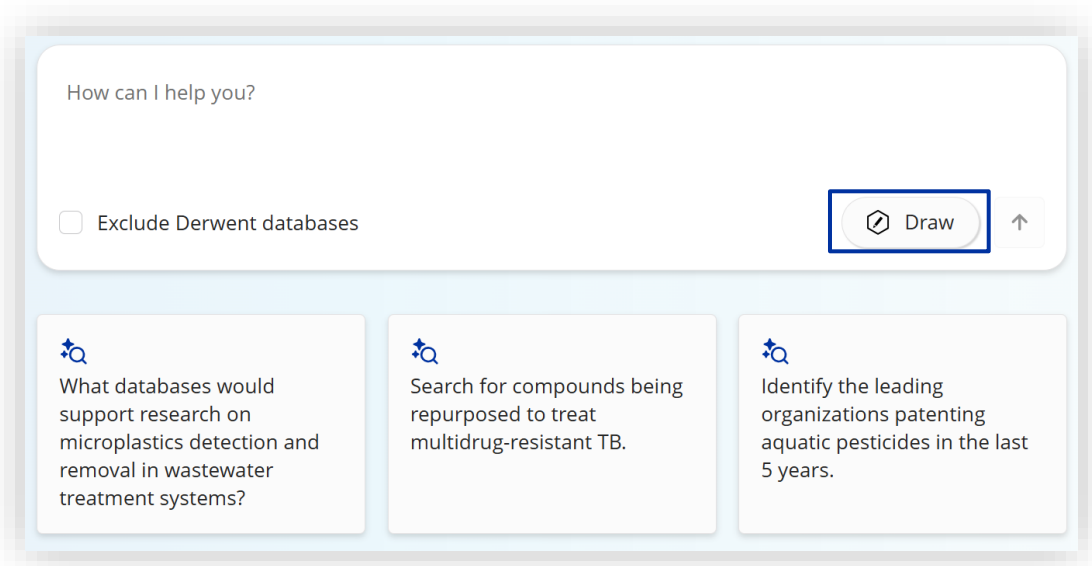
このたび、CAS Newton が強化され、構造検索機能が追加されました。これにより、キーワード検索と同じような手軽さで構造検索を利用できるようになりました。

- CAS IP Finder の初回ログイン時に、機能強化に関するお知らせが表示されます。

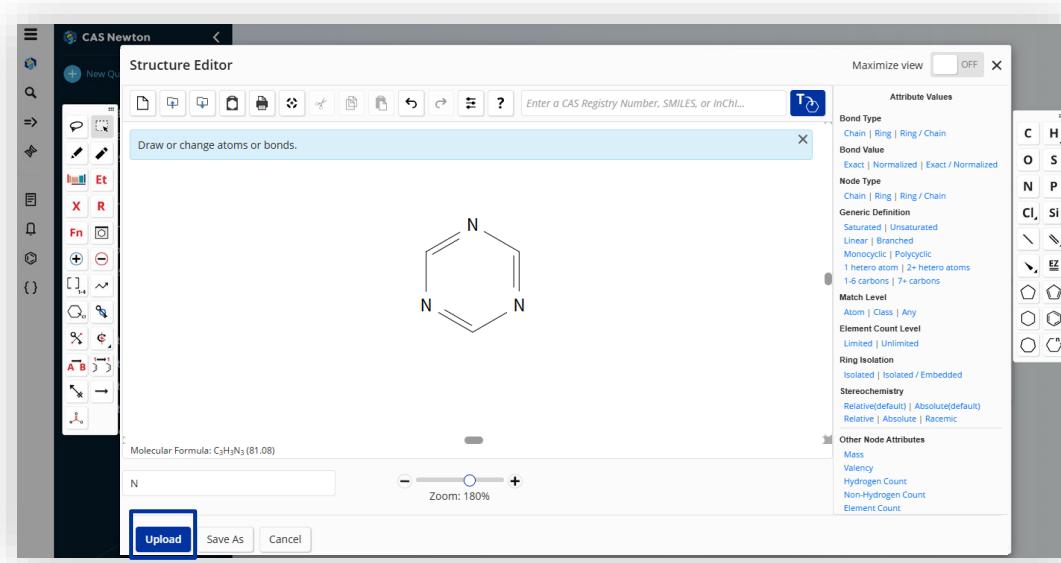


### 構造を追加した検索

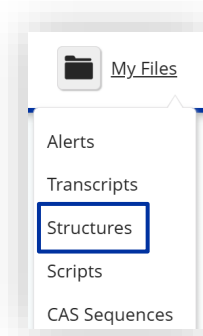
- CAS Newton の画面で検索ボックスの Draw ボタンをクリックし、構造作図画面を開きます。



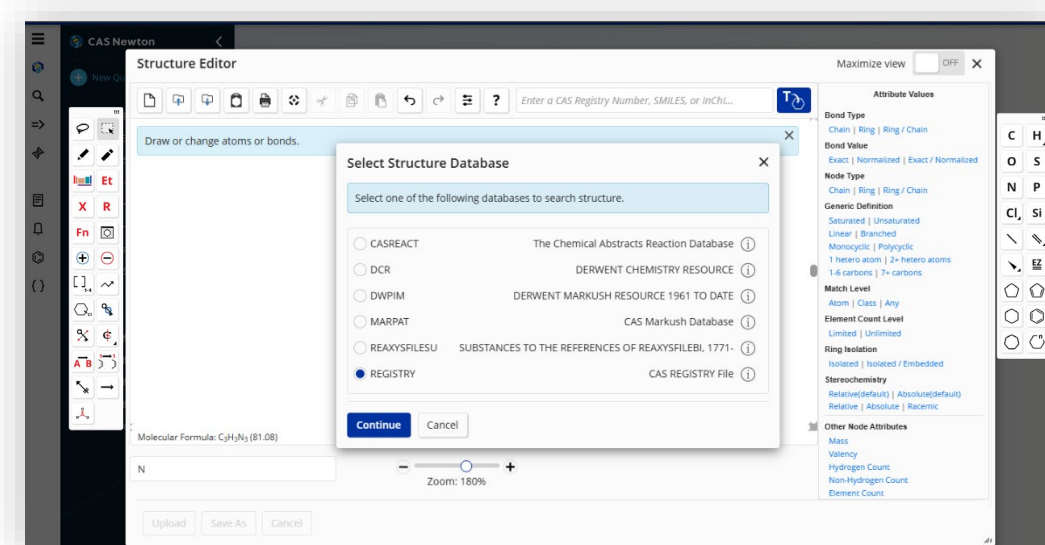
- 構造を描画する、既存の構造をインポートする、または既知の CAS RN® を入力する方法で構造を作図します。その後、Upload ボタンをクリックします。



- なお、現時点では Structure ページから CAS Newton に構造を読み込むことはできません。

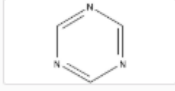


- データベースを選択し、構造を追加します。なお、データベースを1つ選択しますが、自然言語で指示すれば、複数のデータベースで構造検索を実行することが可能です。



- 構造を追加後、検索ボックスに質問内容を入力して、検索を実行します。質問内容に基づいて、CAS Newton が適切な構造検索オプションを選択し、検索を実行します。

この骨格を有する物質で、薬理活性研究についてよく使われている物質と最近の研究動向を調べてください。



REGISTRY  
Edit Remove

☐ Exclude Derwent databases

Edit

**私が取った母集団**

- REGISTRY でこの骨格の SSS を試すと、全体では 約166.4万~169.9万件 projected と非常に広く出ました。
- そこで、CASBIOACTIVI に実際に薬理活性データがある物質に限定して REGISTRY で部分構造検索し、直ぐに 26,261 物質を抽出しました。
- その 26,261 物質を CASBIOACTIVI に渡して、SAR/ADME/TOX assay count を見ました。

**薬理活性研究でよく使われている代表物質**

CASBIOACTIVI の assay count を見ると、上位は次のような顔ぶれでした。

| RN           | 物質                                        | 主な指標                 |
|--------------|-------------------------------------------|----------------------|
| 1225037-39-7 | omipalisib / GSK2126458                   | SCNT 2015, ACNT 1157 |
| 1197160-78-3 | gedatolisib                               | SCNT 1157, ACNT 1157 |
| 475110-96-4  | ZSTK474                                   | SCNT 929, ACNT 1157  |
| 1927857-61-1 | 4,6-dimorpholinyl-1,3,5-triazine 系 analog | SCNT 677, ACNT 677   |
| 1927857-55-3 | 同系 analog                                 | SCNT 629, ACNT 344   |
| 1912-24-9    | atrazine                                  | SCNT 1146, ACNT 1146 |

**読み方**

- 医薬系で本当に“よく使われている”代表は、omipalisib, gedatolisib, ZSTK474 とその近縁の dimorpholino-triazine 系です。
- atrazine も件数は非常に多いですが、こちらは 創薬 というより 毒性・曝露・環境影響 で件数を人ターゲット寄りに見ると

CASBIOACTIVI で human/homo sapiens を含む集合にすると 15,065 物質あり、その中で SCNT>300 の物質は 17 件でした。ここでも中心は PI3K/mTOR 系のトリアジン誘導体で

**最近の研究動向**

**1) 骨格全体の最近5年**

CASplus では、この骨格を持つ薬理活性データ付き物質に関する最近5年の記録は 87,596 件

- 特許: 55,351
- ジャーナル: 32,023

ただしこの集合は広く、医薬・農業・毒性・環境が混在します。なので、医薬寄りの代表 3 物質

- omipalisib
- gedatolisib
- ZSTK474

に絞ると、最近5年で 448 件

- 特許: 287
- ジャーナル: 160

年次では

- 2021: 137
- 2022: 165
- 2023: 144
- 2024: 155
- 2025: 160
- 2026: 104 (現時点)

で、近年も安定して研究・出願が続いていると見てよいです。

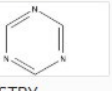
**2) 医薬系の中心テーマ**

私が最近記録を読んで確認できた主流は次の4本です。

**A. PI3K/AKT/mTOR 軸のがん治療**

最も太い流れです。

- 実行後、入力した質問と構造式が Conversation パネル上部に表示されます。構造を修正して再検索したい場合は、構造の下の Edit を利用します。



REGISTRY  
Edit

この骨格を有する物質で、薬理活性研究についてよく使われている物質と最近の研究動向を調べてください。

13:34:37

Edit から構造を修正すると、追加質問用の検索ボックスに構造が読み込まれ、新たな質問を行うことができます。また、ダウンロードした Conversation および Command line transcript にも検索に利用した構造が表示されます。

## 「Exclude Derwent databases」 チェックボックスの追加

このたび CAS Newton に「Exclude Derwent databases」チェックボックスが追加され、チェックを入れることで、Derwent データベースを検索対象から簡単に除外できるようになりました。

高速充電時のリチウムイオン拡散促進に関する材料設計に関する特許を調べてください。

☒ Exclude Derwent databases

Draw

↑

その会話中は Derwent データベースの検索が無効となり、途中で Derwent データベースを検索しようとしても、検索は実行されません。

例)

WPI ファイルでも調べてください  
14:00:07

WPIはこのセッションでは使えないため、代替として特許ファミリーに強いINPAFAMDBで対応します。

FILE INPAFAMDB; S (LITHIUM(1A) ION(1A) BATTER? OR LI(1A) ION(1A) BATTER? OR SECONDARY(1A) LITHIUM(1A) BATTER?)

S FAST(1A) CHARG? OR RAPID(1A) CHARG? OR HIGH(1A) RATE OR RATE(1A) CAPABILIT? OR CHARGE(1A) ACCEPT?

「Exclude Derwent databases」にチェックを入れることによって、以下のデータベースが検索対象から除外されます。

- BIOTECHABS
- CROPB / CROPR / CROPU
- DCR
- DDFU / DRUGU
- DWPIIM
- GENESEQ
- VETB / VETU
- WPIDS / WPINDEX / WPIX