

CAS STN[®]next

ユーザーミーティング

2025 年 7 月

目次

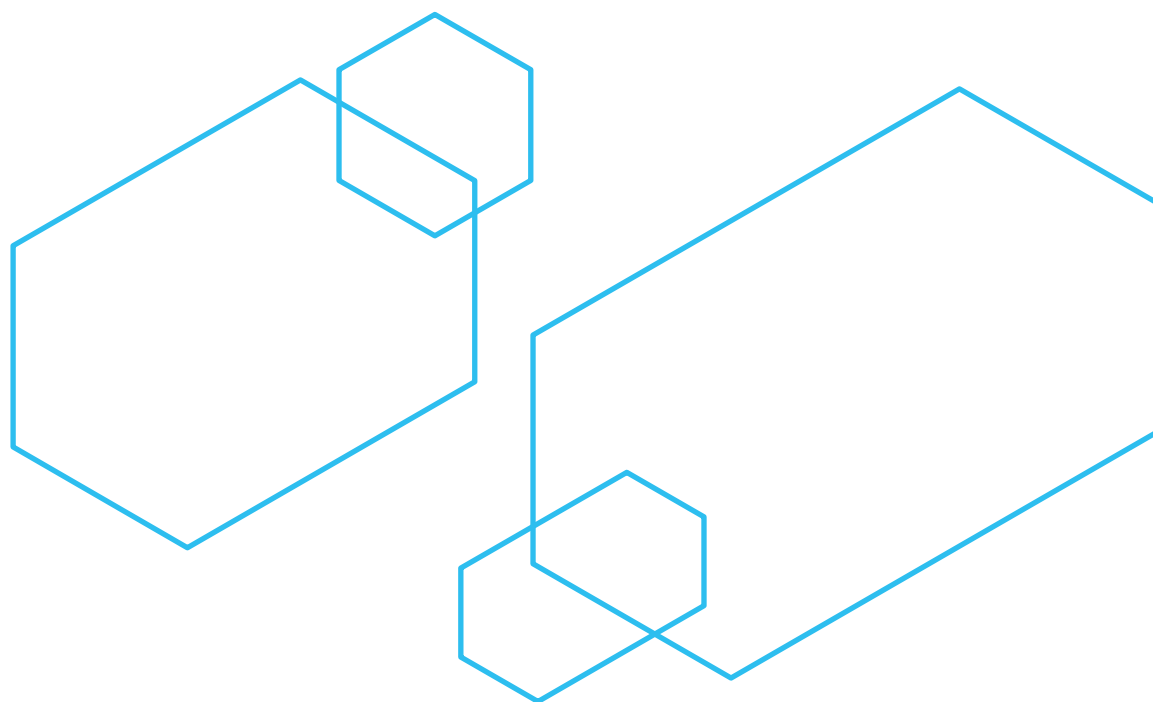
第一部：CAS STNext® の一年間の強化内容

CAS FILES の強化.....	1
特許・配列データベースの強化.....	16
医薬系データベースの強化.....	35
2024 年 7 月以降の強化一覧	46

第二部：トピック

CAplus ファイルのレコード作成と化学物質索引.....	51
--------------------------------	----

第一部：CAS STNext® の一年間の強化内容



CAS STNext®

CAS FILES の強化

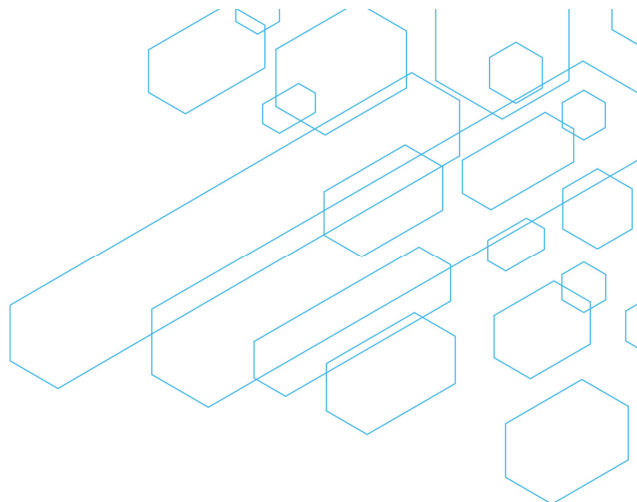
化学情報協会 情報事業部

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



目次

- CPlus ファイル
 - CAS ロール SCLM (請求項に記載された物質) の追加
 - CAS PatentPak® - Claim タグの付与対象拡大
- CAS REGISTRY ファイル
 - InChI、InChIKey の追加
- MARPAT ファイル
 - CAS PatentPak リンクの追加





CAplus ファイルの強化

3 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CAplus ファイル

概要

化学および周辺分野の文献データベース

- 製作者：CAS
- レコード構成：文献単位、特許は発明単位
- 収録情報：化学および周辺分野の雑誌、特許 (107 特許発行機関、2 技術公開誌)、会議録、単行本などの書誌情報、抄録、索引、特許のクレーム、引用・被引用情報など
- 収録期間：1808 年～
- 収録件数：およそ 6,690 万件
- 更新頻度：毎日
- 特徴：統制語による索引が付与されており、特に化学物質に関する文献検索が的確かつ容易に実行できる
特許レコードは同一発明単位で構成されており、対応特許情報が容易に得られる
CAS PatentPak で物質情報付き明細書を表示できる

* CA ファイル：CAplus ファイルの索引が完成したレコードを収録するファイル

4 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS ロール SCLM (請求項に記載された物質) の追加

新たな CAS ロールとして、SCLM (請求項に記載された物質) が追加された

- その物質が特許の請求項に記載されていることを表す CAS ロール
- CAS PatentPak の Claim タグが付与された物質に対して機械的に付与される
- SCLM の付与対象国・年代 (ベーシック特許) (Claim タグの付与対象国・年代と同じ)
 - CN (中国) 2012 年～
 - EP (EPO) 1998 年～
 - JP (日本) 2012 年～
 - KR (韓国) 2012 年～
 - US (米国) 1976 年～
 - WO (PCT 出願) 1978 年～

すべての国、年代が対象
ではない点に注意

検索例

チルゼパチド (Tirzepatide) が請求項に記載されている特許を検索する

- ① REGISTRY ファイルで物質名 (/CN) から物質を検索 → CAplusファイルにクロスオーバーする際、
/SCLM で限定する
- ② CAplusファイルで、クレーム (/CLM) 中に物質名が記載されている特許を検索する
- ③ ① と ② の回答をまとめる

検索例

```
=> FILE REGISTRY      ← REGISTRY ファイルに入る
=> E TIRZEPATIDE/CN    ← 完全名 (/CN) で EXPAND

E1      1      TIRNEESIIN/CN
E2      1      TIRVALIMOGENE TERAPLASMID/CN
E3      1 --> TIRZEPATIDE/CN
E4      1      TIRZEPATIDE ACETATE/CN
:
```

```
=> S E3                ← E 番号で検索
L1      1 TIRZEPATIDE/CN
```

```
=> FILE CAPLUS         ← CAPLUS ファイルに入る
=> S L1/SCLM
L2      132 L1/SCLM
```

/SCLM でチルゼパチドが
請求項に記載されている
特許に限定する

(参考) REGISTRY ファイルには CAPLUS ファイルで付与された CAS ロールの情報が含まれており、SCLM が付与されている物質が確認できる

```
RN      2023788-19-2  REGISTRY
:
CN      Tirzepatide
FS      PROTEIN SEQUENCE
MF      C225 H348 N48 O68
:
DT.CA   CAPLUS document type:  Journal; Patent

RL.P    Roles from patents:  ANST (Analytical study); BIOL
      (Biological study); NANO (Nanomaterial); PREP
      (Preparation); PROC (Process); PRP (Properties);
      RACT (Reactant or reagent); SCLM (Substance claimed);
      USES (Uses)
RLD.P   Roles for non-specific derivatives from patents:
      BIOL (Biological study); SCLM (Substance claimed);
      USES (Uses)
:
```

検索例

```
=> S (TIRZEPATIDE OR BG 121 OR BG121 OR LY 3298176 OR LY3298176)/CLM ← クレーム中のキーワードで検索
L3      142 (TIRZEPATIDE OR BG 121 OR BG121 OR LY 3298176 OR LY3298176)/CLM

=> S L2 OR L3          ← CAS ロールで限定した回答 (L2) とクレーム中のキーワードで検索した回答 (L3)
                        を OR でまとめる
L4      167 L2 OR L3

=> D BIB ABS HITRN HITPPAK CLM 1-167 ← ヒットした回答を表示
:
L4      ANSWER 8 OF 167  CAPLUS  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
      PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive
AN      2025:1064950  CAPLUS Full-text
DN      191:61690
TI      Pharmaceutical composition containing biologically active substances and
      its preparation method and application thereof
IN      Zheng, Hongbing; Song, Gengshen; Shi, Hongyan; Yu, Fei
PA      Beijing Youcare KeChuang Pharmaceutical Technology Co., Ltd., Peop. Rep.
      China
SO      Faming Zhuanli Shenqing, 18pp.
      CODEN: CNXXEV
DT      Patent
LA      Chinese
FAN.CNT 1
```

検索例

PPPI

PATENT NO.

KIND

DATE

LANGUAGE

PatentPak

CN 119950684

A

20250509

Chinese

PI

PATENT NO.

KIND

DATE

APP

Key Substances in Patent

CN 119950684

A

20250509

CN

CAS RN 2023788-19-2

L-Serinamide, L-tyrosyl-2-methylalanyl-L-α-glutamylglycyl-L-threonyl-L-phenylalanyl-L-threonyl-L-seryl-L-α-aspartyl-L-tyrosyl-L-seryl-L-isoleucyl-2-methylalanyl-L-leucyl-L-α-aspartyl-L-lysyl-L-isoleucyl-L-alanyl-L-glutamyl-N-[(2Z)-22,42-dicarboxy-1,10,19,24-tetraoxo-3,6,12,15-triazadotetracont-1-yl]-L-lysyl-L-alanyl-L-phenylalanyl-L-valyl-L-glutamyl-L-tryptophyl-L-leucyl-L-isoleucyl-L-alanylglycylglycyl-L-prolyl-L-seryl-L-serylglycyl-L-alanyl-L-prolyl-L-prolyl-L-prolyl-

PRAI

CN 2025-10148429

20250211

AB

The present invention relates to a pharmaceutical bioactive substance, and a prepn. method pharmaceutical compn. comprises a bioactive permeation enhancer. The bioactive substance is tirzepatide, semaglutide or liraglutide. polymer and an enteric polymer. The pharmaceutical composition comprises the bioactive substance and the enteric polymer.

IT

2023788-19-2

RL: SCLM (Substance claimed); THU (Therapeutic use); BIO (Biological study); USES (Uses) (pharmaceutical compn. contg. tirzepatide, as biol. substance and its prepn. method a)

PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive

PPAK

2023788-19-2, Pg 2 Claim

CAS RN® と CAS ロールの検索でヒットした回答 (中国語の化学物質名の翻訳の問題でクレーム中のキーワードではヒットしなかった)



検索例

L4

ANSWER 65 OF 167

CAPLUS

COPYRIGHT 2025 ACS on STM

PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive

AN

2024:1799545

CAPLUS

Full-text

DN

188:310306

TI

Process for the preparation of tirzepatide

IN

Kuppanna, Ananda; Tripathi, Anil Kumar; Shanigaram, Chandrashekhar; Bulli Raju, Kamana; Vanjivaka, Sreelatha; Bandi, Nagadurgarao; Dokka, Mallikharjuna Sarma

PA

Viatis, India; Mylan Laboratories Ltd.

SO

Indian Pat. Appl., 23pp.

CODEN:

INXXBQ

DT

Patent

LA

English

FAN.CNT

1

PI

PATENT NO.

KIND

DATE

APPLICATION NO.

DATE

IN 202341003770

A

20240726

IN 2023-41003770

20230119

CLM

What is claimed is:

1. A process for the preparation of tirzepatide, which comprises:

a) anchoring thirty-nine protected terminal amino acid to a resin;

b) capping the resin obtained in step a);

c) selectively deprotecting the amino group;

クレーム中のキーワードでヒットした回答 (インド特許がベーシック特許のため SCLM の付与対象外)



参考：CAS PatentPak と Claim タグ

特許明細書中における化学物質の記載位置を瞬時に把握できる CAS 独自の機能。
明細書 PDF の即時ダウンロードも可能。

- 物質が請求項に記載されている場合に PPAK フィールドに Claim タグが付く

PPPI

PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
JP 7305118	B2	20230710	Japanese	PDF PDF+ Interactive

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
JP 7305118	B2	20230710	JP 2019-121893	20190628
PRAI JP 2019-62418	A	20190328		

PPAK

50-70-4, D-Glucitol, Pg 1 Claim
56-81-5, 1,2,3-Propanetriol, Pg 1 Claim
9005-64-5, Pg 7
9005-67-8, Pg 7
12709-64-7, Pg 7
25339-99-5, Pg 7

請求項に記載された物質であることがわかる

CAS PatentPak

PAGE 2 / 14 CLAIMS Jump To Claims ZOOM DOWNLOAD PDF

Key Substances in Patent

CAS RN 50-70-4

CAS RN 56-81-5

Analyst Markup Locations (2)

page 1 - Claim

page 7

page 8

請求項 1 のページを表示するリンク



Claim タグの付与対象拡大

CAS PatentPak の Claim タグ付与対象国に、EP (欧州) が追加された

Claim タグ付与対象国	付与年代
CN (中国)	2012 年～
EP (欧州)	1998 年～
JP (日本)	2012 年～
KR (韓国)	2012 年～
US (米国)	1976 年～
WO (PCT 出願)	1978 年～

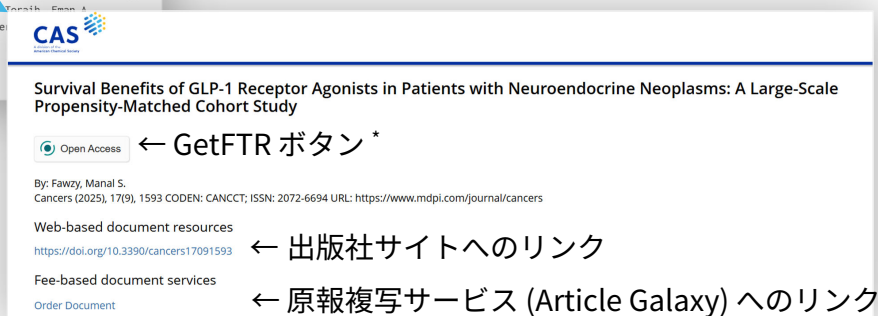


参考：CAS Full Text Options

CAS Full Text Options は CAS STNext で検索した特許や雑誌論文の全文情報へのリンクを提供するサービス。文献データベースの書誌情報中に表示される Full-text リンクから利用する。

雑誌論文の例

AN 2025:1141356 CAPLUS Full-text
TI Survival Benefits of GLP-1 Receptor Agonists in Patients with
Neuroendocrine Neoplasms: A Large-Scale Propensity-Matched Cohort Study
AU Fawzy, Manal S.; Alenezy, Awwad; Jishu, Jeyson A.; Khan, Issa; Dessouky,
Ahmad; Abdelmaksoud, Ahmed; Limbach, Kristen E.; et al.
CS Center for Health Research, Northern Border Univer
SO Cancers (2025), 17(9), 1593
CODEN: CANCCT; ISSN: 2072-6694
URL: <https://www.mdpi.com/journal/cancers>
DOI 10.3390/cancers17091593



CAS
Full Text Options

Survival Benefits of GLP-1 Receptor Agonists in Patients with Neuroendocrine Neoplasms: A Large-Scale Propensity-Matched Cohort Study

☒ Open Access ← GetFTR ボタン *

By: Fawzy, Manal S.
Cancers (2025), 17(9), 1593 CODEN: CANCCT; ISSN: 2072-6694 URL: <https://www.mdpi.com/journal/cancers>

Web-based document resources
<https://doi.org/10.3390/cancers17091593> ← 出版社サイトへのリンク

Fee-based document services
Order Document ← 原報複写サービス (Article Galaxy) へのリンク

社内でお使いのツールへのリンクを表示するようカスタマイズも可能

* GetFTR ボタンについては CAS STNext の強化を参照

13 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS REGISTRY ファイルの強化

14 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS REGISTRY ファイル

概要

化学物質データベース

- 製作者：CAS
- レコード構成：物質単位
- 収録情報：CA ファイルに収録された文献由来の物質、既存化学物質リスト、化学品カタログ、他の物質データベースなどから収集した物質の CAS 登録番号 (CAS RN®)、化学物質名、分子式、構造、配列、物性情報、スペクトルデータなど
- 収録期間：1800 年初頭 ～
- 収録件数：2.95 億件以上
- 更新頻度：毎日
- 特徴：化学物質名や分子式からの検索だけでなく、構造検索や配列検索を行うことができる
CAplus/CA ファイルと組み合わせて利用することで化学物質に関する文献情報を的確に検索できる

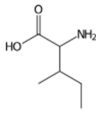
15 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



InChI、InChIKey の追加

化学構造をテキスト形式で表現するためのフォーマットである InChI および InChIKey のデータが追加された

```
RN 2095501-92-9 REGISTRY
ED Entered STN: 11 May 2017
CN Pentanoic acid, 2-amino-3-methyl- (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN 2-Amino-3-methyl-pentanoic acid
CN 2-Amino-3-methylpentanoic acid
MF C6 H13 N O2
INCH InChI=1S/C6H13NO2/c1-3-4(2)5(7)6(8)9/h4-5H, 3, 7H2, 1-2H3, (H, 8, 9)
INKY AGPKZVBTJJNPAG-UHFFFAOYSA-N
CI COM
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, CASBIOACTIVI, CASFORMULTNS, CASREACT, CHEMCATS,
TOXCENTER, USPATFULL
```



Chemical structure of 2-amino-3-methylpentanoic acid is shown below the text.

16 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



InChI、InChIKey とは

- InChI (IUPAC International Chemical Identifier)

IUPAC および InChI Trust が開発した、化学構造をテキストで一意に表現するためのフォーマット。構造情報をテキスト形式で階層的に記述。InChI= から始まり、/ で区切られたレイヤーで構成される。

例: InChI=1S/C6H13NO2/c1-3-4(2)5(7)6(8)9/h4-5H,3,7H2,1-2H3,(H,8,9)

- InChIKey

InChI の長い文字列を簡潔に表した (ハッシュ化した) もので、27 文字の固定長を持つ。データベースでの検索に適している。

例: AGPKZVBTJJNPAG-UHFFFAOYSA-N

参考: <https://www.inchi-trust.org/>

17 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



InChI、InChIKey の検索と表示

検索フィールドと表示形式

InChIKey フィールドは検索および表示が可能。InChI フィールドは表示のみ可能。

- 検索フィールド

検索フィールド	内容
/INKY	InChIKey

- 表示形式

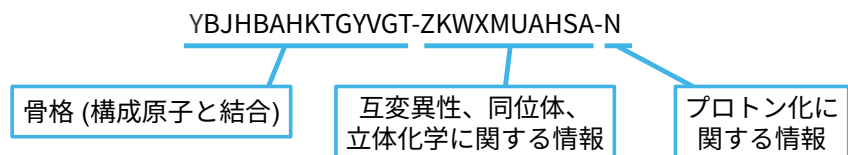
定型表示形式	SAM、IDE、IDERL、FIDE、ALL など
カスタム表示形式	INCH (InChI)、INKY (InChIKey)

18 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



InChIKey の検索

InChIKey は 3 つのセグメントから構成されている



=> S YBJHBAHKTGYVGT-ZKWXMUAHSA-N/INKY ← 全セグメントを検索

=> S YBJHBAHKTGYVGT-ZKWXMUAHSA/INKY ← 先頭と 2 目のセグメントを指定して検索
(異なる電荷の物質もヒット)

=> S YBJHBAHKTGYVGT/INKY ← 先頭のセグメントのみを指定して検索
(同位体を含む物質や立体情報の異なる物質などもヒット)

19 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



ヒットする構造の例

Absolute stereochemistry shown
Rotation (+)

YBJHBAHKTGYVGT-ZKWXMUAHSA-N

=> S YBJHBAHKTGYVGT-ZKWXMUAHSA-N/INKY

異なる電荷の物質
もヒット

Absolute stereochemistry shown

YBJHBAHKTGYVGT-ZKWXMUAHSA-M

=> S YBJHBAHKTGYVGT-ZKWXMUAHSA/INKY

Relative stereochemistry shown

YBJHBAHKTGYVGT-JYGKPPRMNA-N

Relative stereochemistry shown

YBJHBAHKTGYVGT-UTJXQYKFNA-N

同位体を含む物質や立体
情報の異なる物質なども
ヒット

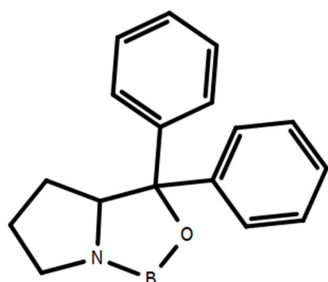
=> S YBJHBAHKTGYVGT/INKY

20 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

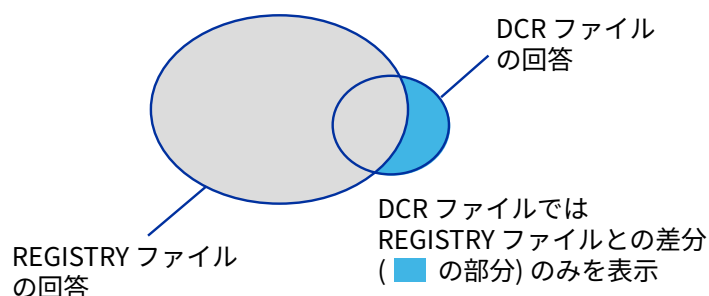


検索例

下記のような構造を持つ物質を REGISTRY と DCR ファイルで検索する



- REGISTRY ファイルで部分構造検索を行う
- DCR ファイルでも部分構造検索を行い、REGISTRY ファイルでは得られなかった物質を確認する



DCR ファイルは WPI ファイルで索引された物質を収録する化学物質のデータベース (特許・配列データベースの強化を参照)

21 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例

```
=> FILE REGISTRY  ← REGISTRY ファイルに入る
=>
Uploading structure file: INKY_example
```

```
L1 STRUCTURE UPLOADED  ← 構造質問式をアップロード
=> S L1  ← サンプル検索
L2      25 SEA SSS SAM L1
=> S L1 FUL  ← フルファイル検索
L3      453 SEA SS FUL L1
```

```
=> D SCAN  ← SCAN 表示形式で表示

L3  453 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
IN  1H,3H-Pyrrolo[1,2-c][1,3,2]oxazaborole,
    3,3-bis(3,5-dimethylphenyl)tetrahydro-1-[2-(1-
MF  C30 H36 B N O
CI  COM
```

Absolute stereochemistry shown

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

22 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例

```
=> FILE DCR          ← DCR ファイルに入る

=> S L1              ← サンプル検索
L4                  1 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL          ← フルファイル検索
L5                  26 SEA SS FUL L1

=> TRA INKY L3 1-    ●—————
L6                TRANSFER L3 1- INKY :      428 TERMS ← 抽出されたタームの集合
L7                17 L6                      ← 抽出されたタームで検索した結果の回答集合
L8                QUE TERMS FROM L6 WITH NO HITS: 411 TERMS ← ヒットしなかったタームの集合

=> S L5 NOT L7        ← DCR ファイルで構造検索した回答集合 (L5) から、REGISTRY ファイルで得られた物質 (L7) を除く
L9                  9 L5 NOT L7
```

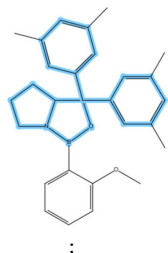
REGISTRY ファイルの回答集合から InChIKey (INKY) を抽出・検索することで、REGISTRY ファイルで得られた物質の集合を DCR ファイルで再現できる

検索例

```
=> D SCAN          ← SCAN 表示形式で表示

L9      9 ANSWERS DCR  COPYRIGHT 2025 CLARIVATE on STN.

CN.S    3,3-Bis-(3,5-dimethyl-phenyl)-1-(2-methoxy-phenyl)-tetrahydro-
        pyrrolo[1,2-c][1,3,2]oxazaborole compound with trifluoro-methanesulfonic
        acid
MF      C28 H32 B N O2 . C H F3 O3 S
```



DCR ファイルのみで
得られた物質

```
=> FILE WPINDEX

=> S L9
L10      5 L9 ← DCR ファイルで得られた物質に関する特許は WPI ファイルにクロスオーバーして確認する
```



MARPAT ファイルの強化

25 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



MARPAT ファイル

概要

マルクーシュ構造が検索できる特許データベース

- 製作者：CAS
- レコード構成：文献単位 (発明単位)
- 収録情報：CA ファイルに収録する特許のうちマルクーシュ構造の記載がある特許を収録
- 収録期間：1961 年～
- 収録件数：60 万件以上
- 更新頻度：毎日
- 特徴：有機化合物、有機金属化合物が収録対象
マルクーシュ構造を対象にした構造検索を行うことができる
具体的な置換基だけではなく一般式で書かれた置換基も検索できる
マッチレベルでどのレベル(特定原子、一般式) でヒットさせたいかをコントロールして検索できる

26 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS PatentPak リンクの追加

ベーシック特許の CAS PatentPak リンクが MARPAT ファイルでも表示されるようになった

- CAS PatentPak リンクが含まれる表示形式
 - BIB、STD、ALL、MAX
- 対応特許の PDF リンク、および PPAK (索引物質の記載ページ) フィールドは表示されない
 - これらを表示するには CAplus ファイルを利用する

27 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



表示例 BIB 表示形式

PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive

AN 161:4/4447 MARPAT Full-text

TI Amino acid phosphoramidate pronucleotides of 2'-cyano, azido and amino nucleosides for the treatment of HCV

IN Dukhan, David; Parsy, Christophe Claude; Gosselin, Gilles; Griffon, Jean-Francois; Brandt, Guillaume; Dousson, Cyril B.

PA Idenix Pharmaceuticals, Inc., USA; Centre National de la Recherche Scientifique; Universite Montpellier 2 Sciences et Techniques

UO UNIVERSITY OF MONTPELLIER; CENTRE NATIONAL DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE; MERCK & CO INC

UOS University of Montpellier; CNRS; Merck & Co

SO U.S. Pat. Appl. Publ., 103pp.
CODEN: USXXCO

DT Patent

LA English

FAN.CNT 11

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
-----		-----	-----	-----
US 20140271547	A1	20140918	US 2014-14210221	20140313
WO 2014160484	A1	20141002	WO 2014-US26798	20140313
EP 2970357	A1	20160120	EP 2014-721626	20140313

- PatentPak PDF :
特許明細書のダウンロード (ベーシック特許)
- PatentPak PDF+ :
化学物質リスト付き明細書のダウンロード (ベーシック特許)
- PatentPak Interactive :
物質情報付き明細書をブラウザ上に表示 (ベーシック特許)

28 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



まとめ

- CAplus ファイルに新たな CAS ロールとして、SCLM (請求項に記載された物質) が追加された
- EP 特許にも CAS PatentPak の Claim タグが付与されるようになった
- REGISTRY ファイルに InChI、InChIKey のデータが追加された
 - 他の物質データベース (DCR、REAXYSFILESUB、PS ファイル) との共通の検索キーとして利用できて便利
- MARPAT ファイルのレコードにも CAS PatentPak のリンクが含まれるようになった

CAS STNext®

特許・配列データベースの強化

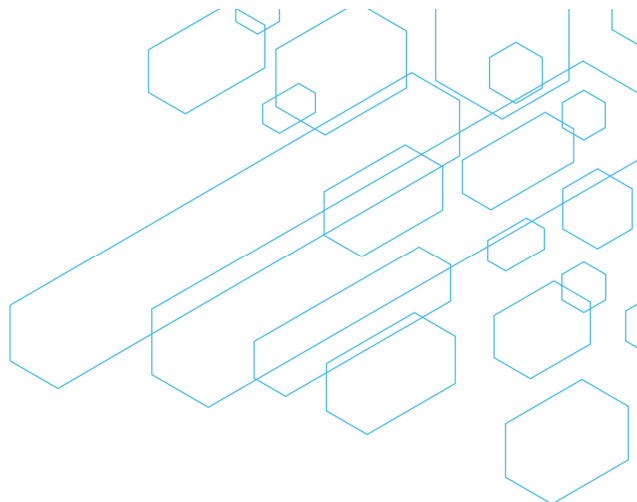
化学情報協会 情報事業部

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



目次

- 特許全文ファイルの強化
- INPADOCDB/INPAFAMDB ファイル
- WPI ファイル
- DCR ファイル
- GENESEQ、PATGENE、USGENE ファイル





特許全文ファイルの強化

3

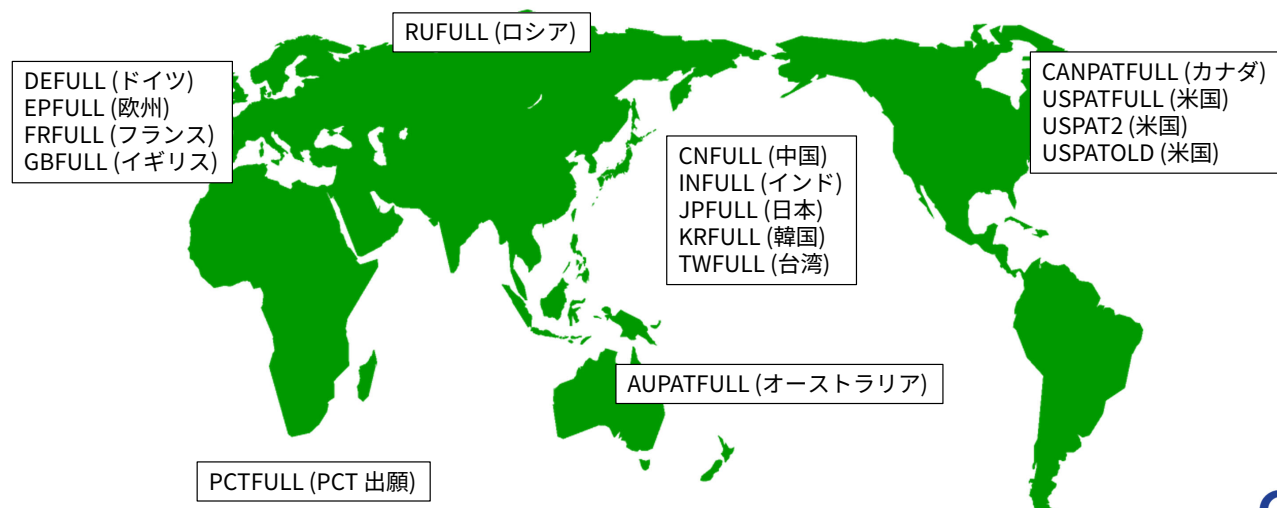
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



特許全文ファイル

概要

CAS STNext では、14 特許発行国・機関の特許全文ファイルを利用できる



4

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



特許全文ファイル

特許全文ファイルの特長

- 検索機能の特長
 - オリジナル言語にかかわらず、英語で検索・表示できる
 - CAS REGISTRY、CAplus ファイルなど CAS STNext の他のファイルとの連携が可能
 - STN 独自の機能 (テキスト中の数値検索、Key Terms を含めた検索) を利用できる
- ファイルによって利用可能な機能
 - USPATFULL/USPAT2/USPATOLD ファイルでは、CA の索引情報を利用した検索ができる
 - USPATFULL/USPAT2 ファイルでは、特許明細書中の重要な化学物質の記載位置確認に便利な CAS PatentPak® を利用できる
 - EPFULL、JPFULL、PCTFULL ファイルでは、特許請求項をツリー形式で表示する Interactive Claims Viewer を利用できる

5 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



特許全文ファイルの強化

強化一覧 (1/2)

- ファイルのリロード : [AUPATFULL](#)、[CANPATFULL](#)、[DEFULL](#)、[FRFULL](#)、[GBFULL](#)、[INFULL](#)、[KRFULL](#)
 - 最終権利者の検索・表示が可能に (/UO、/UOS)
 - テキスト中の数値検索機能で検索できる物性値が 59 種類に増加
 - 特許出願人に関する新規検索フィールドの追加 (/PAS: 特許出願人、標準形式など)
 - 関連特許情報に関する新規検索フィールドの追加 (/RLPN: 関連出願の特許番号など)
 - クレームに関する新規検索・表示フィールド /CLM.IC、/CLM.CG の追加
 - 英語の詳細な説明検索フィールド (/DETDEn) の追加
 - Key Terms (/KT) の収録強化 : [AUPATFULL](#)、[CANPATFULL](#)、[INFULL](#)
 - 特許ステータス情報 (/STI、/STED) の追加 : [INFULL](#)、[KRFULL](#)
 - 収録対象の拡大: 1869 年以降の意匠が収録対象に : [CANPATFULL](#)
 - 意匠レコードにロカルノ分類を追加 : [AUPATFULL](#)

6 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



特許全文ファイルの強化

強化一覧 (2/2)

- 最終権利者の検索・表示が可能に：CNFULL、EPFULL、PCTFULL、JPFULL、USPATFULL、USPAT2
- 日本特許分類 (FI) シソーラスが利用可能に：JPFULL
- 日本特許分類 (F ターム) シソーラスが利用可能に：JPFULL



特許全文ファイルの検索機能

検索フィールド (1/2)

ファイル	収録国	基本索引 (/BI)					独立クレーム (CLM.IC) クレームグループ (CLM.CG)	最終権利者 (/UO, /UOS)	特許ステータス (/STI)	テキスト中の数値検索	特許分類	
		標題 (/TI)	抄録 (/AB)	クレーム (/CLM)	詳細な説明 (/DETD /DETDEN)	Key Terms (/KT)					IPC /CPC	F ターム / FI
AUPATFULL	オーストラリア	○	○	○	○	○	○	○	×	○	○	×
CANPATFULL	カナダ	○	○	○	○	○	○	○	×	○	○	×
CNFULL	中国	○	○	○	○	○	○	○	×	○	○	×
DEFULL	ドイツ	○	○	○	○	○	○	○	×	○	○	×
EPFULL	欧州	○	○	○	○	○	○	○	×	○	○	×
FRFULL	フランス	○	○	○	○	○	○	○	×	○	○	×
GBFULL	イギリス	○	○	○	○	○	○	○	×	○	○	×
INFULL	インド	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	×
JPFULL	日本	○	○	○	○	○	○	○	×	○	○	○
KRFULL	韓国	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	×



特許全文ファイルの検索機能

検索フィールド (1/2)

ファイル	収録国	基本索引 (/BI)					独立クレーム (CLM.IC) クレームグループ (CLM.CG)	最終権利者 (/UO, /UOS)	特許ステータス (/STI)	テキスト中の数値検索	特許分類	
		標題 (/TI)	抄録 (/AB)	クレーム (/CLM)	詳細な説明 (/DETD /DETDEN)	Key Terms (/KT)					IPC /CPC	F ターム / FI
PCTFULL	PCT 出願	○	○	○	○	○	○	○	×	○	○	×
TWFULL	台湾	○	○	○	○	○	○	×	×	○	○	×
RUFULL	ロシア	○	○	○	×	×	×	×	×	○	○	×
USPATFULL	米国	○	○	○	×	×	×	○	×	○	○	×
USPAT2	米国	○	○	○	×	×	×	○	×	○	○	×
USPATOLD	米国	○	○	○	×	×	×	×	×	×	○	×

○ が強化された項目、*1 情報は収録されているが検索フィールドを利用できない、*2 情報が収録されていない

各ファイルの詳細はサマリーシートを参照：
<https://www.cas.org/training/documentation/stn/database-summary-sheets>



特許ステータスの追加

INFULL、KRFULL ファイル

特許や実用新案のステータス情報 (STI:Patent Status Indicator) が追加された

- /STI (特許ステータス)
 - KRFULL ファイルには、INPADOCDB から特許ステータスが収録される
 - INFULL ファイルには、単純なルールが適用された特許ステータスが収録される (INPADOC はインドの法的状況を提供していないため)

特許ステータス		INFULL	KRFULL
ALIVE	出願中、特許権存続期間中など、有効な場合に付与	○	○
DEAD	期間満了、放棄、取り下げなど、有効な可能性がない場合に付与	○	○
TRANSITIONAL	最新の法的状況イベントで特許失効になる可能性があることが示された場合に付与 (取り下げ、年金未払いなど) (ALIVE に戻る可能性もある)	—	○



特許ステータスの追加

INFULL、KRFULL ファイル

- /STED (特許ステータス入力または更新日)
 - /STED は、2020 年 11 月 6 日以降の日付で利用可能
- 特許ステータスの含まれる表示形式

定型表示形式	BIB、STD、BRIEF、ALL、MAX
カスタム表示形式	STI

特許ステータスの詳細は CAS STNext のヘルプを参照：

<https://cas-stnext.zendesk.com/hc/en-us/articles/30921825335437-INPADOCDB-and-INPAFAMDB-Calculated-Expiration-Date-and-Patent-Status-Indicator>

検索例

薬剤 (スルファサラジン) がポリマーなどで修飾された医薬品がクレームされている特許を JPFULL ファイルで検索する。分子量で限定した回答を優先的に確認する

```
=> FILE REGISTRY
=> S SULFASALAZINE/CN
L1      1 SULFASALAZINE/CN

=> SEL CHEM
E1 THROUGH E29 ASSIGNED

=> D SEL
E1      1 AZOPYRIN/BI
E2      1 AZOPYRINE/BI
E3      1 AZULFIDINE EN/BI
:
E29     1 599-79-1/BI

=> FILE JPFULL
=> S E1-E29/CLM
L2      441 (AZOPYRIN/CLM OR AZOPYRINE/CLM OR "AZULFIDINE...
```

← REGISTRY ファイルに入る

← 化学物質名称で検索する

← 化学物質名称と CAS RN® を抽出する

← 抽出したタームを確認する

← JPFULL ファイルに入る

← 抽出したタームをクレーム (/CLM) で検索する

事前に REGISTRY ファイルで CAS RN® や化学物質の同義名を SELECT コマンドで抽出する

検索例

=> E A61K0047-50+ALL/FCL	← 調べたい FI に関係コード +ALL を付与して /FCL で EXPAND する (メイングループは 4 桁、/(スラッシュ) は - (ハイフン) で入力する)
E4 847 BT1 A61K0047-00/FCL	← BT は上位の分類 (使用する不活性成分, 例. 担体または不活性添加剤, に特徴のある医薬品製剤)
DEF Medicinal preparations characterised by the non-active ingredients used, e.g. carriers or inert additives; Targeting or modifying agents chemically bound to the active ingredient (2)	
E5 520 --> A61K0047-50/FCL	← 調べたい FI (・活性成分と化学結合した不活性成分, 例. 重合体医薬結合体 [2017.01])
DEF . the non-active ingredient being chemically bound to the active ingredient, e.g. polymer-drug conjugates (2017.01)	
E6 106 NT1 A61K0047-51/FCL	← NT は下位の分類 (・・不活性成分が修飾剤であるもの [2017.01])
DEF . . the non-active ingredient being a modifying agent (2017.01)	
E10 440 NT2 A61K0047-56/FCL	← NT は下位の分類 (・・・修飾剤が有機高分子化合物であるもの, 例. オリゴマー, ポリマー またはデンドリマー [2017.01])
DEF . . . the modifying agent being an organic macromolecular compound, e.g. an oligomeric, polymeric or dendrimeric molecule (2017.01)	
E13 1719 NT4 A61K0047-60/FCL	← NT は下位の分類 (・・・・有機高分子化合物がポリオキシアルキレンのオリゴマー, ポリマー またはデンドリマーであるもの, 例. PEG, PPG, PEO または ポリグリセロール [2017.01])
DEF the organic macromolecular compound being a polyoxyalkylene oligo polymer or dendrimer, e.g. PEG, PPG, PEO or polyglycerol (2017.01)	

13 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例

=> S A61K0047-50+NT/FCL OR A61K0047-30+NT/FCL	← FCL に +NT を付与して下位を含めて検索する
L3 53156 A61K0047-50+NT/FCL OR A61K0047-30+NT/FCL	
=> S L2 AND L3	← L2 と L3 を AND 演算する
L4 116 L2 AND L3	
=> S L2 (P) MM/PHP AND L3	← L2 のタームと分子量の記載が同一フィールド内 (クレーム内) にある回答に限定する
L5 10 L2 (P) MM/PHP AND L3	
=> S L2 (10A) MM/PHP AND L3	← L2 のタームと分子量の記載が 順不同で隣り合い 間に 10 単語あっていい回答に限定する
L6 1 L2 (10A) MM/PHP AND L3	
=> D BIB KWIC	← BIB 表示形式で書誌情報を、KWIC 表示形式でヒットタームの前後を確認する
L6 ANSWER 1 OF 1 JPFULL COPYRIGHT 2025 LNBIS on STN.	
AN 2017329200 JPFULL EDP 20200309 ED 20220904	
TIEN Antitumor agents	
TIJA 抗腫瘍剤	
PA KEIO GIJUKU;	
Tokyo Institute of Technology;	
PAS KEIO GIJUKU; TOKYO INSTITUTE OF TECHNOLOGY	PAS: 特許出願人、標準形式

/FCL,IPC,CPC と入力すると、IPC,CPC も含めより網羅的に検索できる

テキスト中の数値検索による限定
・ /MM は分子量のフィールド
・ MM/PHP で分子量の数値が記載されている文献を検索できる

テキスト中の数値検索の詳細は「特許全文ファイル」参照:
https://www.jaici.or.jp/download_file/view/7dd1804a-2ca4-43c2-9e1c-6fdb34fe14e/

14 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例

UO	INSTITUTE OF SCIENCE TOKYO				
UOS	Institute of Science Tokyo				
:					
PI	JP 6803589B	B2	20201223		
:					
AI	JP 2017-560416		20170105		
PRAI	JP 2017-184		20170105		
	JP 2016-1128		20160106		
RLPI	WO 2017119462		20170713		
RLI	WO 2017-JP184		20170105	PCT Application	
IPCI	A61K0031-635 [I,A]; A61K0047-60 [I,A]; A61P0035-00 [I,A]; A61P0043-00 [I,A]				
CPC	A61K0009-0019; A61K0031-635; A61K0047-60				
FCL	A61K0031-635; A61K0047-60 ; A61P0035-00; A61P0043-00 111				
FTRM	4C076/AA11; 4C076/BB11; 4C076/CC27; 4C076/EE23; 4C076/EE59;				
:					
CLMEN	[CLM0002] The average molecular weight of 6000 or less than 500 are modified sulfasalazine PEG, claim 1 wherein the antineoplastic agent.				
CLMEN	[CLM0003] The average molecular weight of 6000 or less than 4000 PEG are modified sulfasalazine, claim 1 or 2 wherein				
:					

UO：最終権利者
UOS：標準化した最終権利者

関連特許情報に関するフィールド

FCL：日本特許分類 (FI)
FTRM：日本特許分類 (F ターム)

テキスト中の数値検索でのヒット

INPADOCDB/INPAFAMDB ファイルの強化

INPADOCDB/INPAFAMDB ファイル

概要

全技術分野に渡る世界中の特許情報を収録しているデータベース

- 製作者：EPO (European Patent Office)、FIZ Karlsruhe
- レコード構成：出願単位 (INPADOCDB)、発明単位 (INPAFAMDB)
- 収録情報：書誌情報、抄録、特許分類、法的状況
- 収録期間：1782 年～ (国によって異なる)
- 収録国：約 100 以上の特許発行機関
- 収録分野：全技術分野
- 更新頻度：毎週
- 特長：多くの特許発行機関、広い年代の調査ができる。EPO から入手したデータを修正し、信頼性の高いデータを提供。独自の法的状況カテゴリーコードが収録されており、各国の法的状況をまとめて検索できる。

17 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



リロード

強化一覧

- 最終権利者に関する新規検索フィールド
 - /UO (Ultimate Owner : 最終権利者)
 - /UOS (Ultimate Owner Standardized : 標準化した最終権利者)
- 新規 SELECT、ANALYZE および SORT フィールド (INPAFAMDB ファイルのみ)
 - PN.B (特許番号、ベーシック特許)
 - PD.B (特許発行日、ベーシック特許)
 - PNK.B (種別付き特許番号、ベーシック特許)
 - PY.B (特許発行年、ベーシック特許)
 - PC.B (特許発行国、ベーシック特許)

* INPAFAMDB ファイルでは、最も発行日が古い公報がベーシック特許となる
- 日本特許分類 (FI) シソーラスが利用可能に
- 日本特許分類 (F ターム) シソーラスが利用可能に

18 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



収録拡大

- フィリピン (PH)
 - 2011-2024 年に公開された下記の種別のフィリピン特許を追加で収録した

特許種別	内容	収録件数
PHA1	公開特許	13,000 件以上
PHB1	登録特許	2,700 件以上
PHU1	実用新案出願	3,500 件以上
PHU3	実用新案登録	4,700 件以上
PHS1	意匠出願	18,600 件以上



収録拡大

- メキシコ (MX)
 - メキシコの登録特許 (MXB) を約 22,000 件追加で収録した
 - 追加収録された登録特許の大半は 2025 年に発行されたものである
- サンマリノ (SM)
 - 2017 年以降に公開されたサンマリノの特許を 5,000 件以上追加した

特許種別	内容	収録件数
SMA1	公開特許	200 件以上
SMB1	登録特許	200 件以上
SMT1	欧州特許の翻訳	4,800 件以上

特許種別の一覧は CAS STNext のヘルプを参照：<https://cas-stnext.zendesk.com/hc/en-us/articles/30704009387021-INPADOC-Kind-Codes>





WPI ファイルの強化

21 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



WPI ファイル

概要

全技術分野に渡る世界中の特許情報を収録しているデータベース

- 製作者：Clarivate
- レコード構成：発明単位
- 収録情報：書誌情報、抄録、索引、特許分類、独自の分類コード、引用・被引用情報
- 収録期間：1963 年～(国、分野によって異なる)
- 収録国：60 特許発行機関、2 技術公開誌
- 収録分野：全技術分野
- 更新頻度：週 2 回
- 特長：Clarivate 作製の詳細な特許標題、抄録、索引を利用できる。収録特許公報由来の原題、発明者抄録、クレームなども一部収録。テキスト中の数値検索機能に対応しており、数値と単位を組み合わせた検索ができる

22 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



マニュアルコード改訂 (2025 年版)

WPI ファイルでは、特許情報が 3 つの分野 (CPI, GMPI, EPI) に分類されている

- CPI (Chemical Patents Index), EPI (Electrical Patents Index) の全ダウエントセクションと、GMPI (General and Mechanical Patents Index) の P,Q セクションにマニュアルコードが付与されている
- マニュアルコードが 2025 年版に改訂
 - 新しく 41 個 のマニュアルコードが追加された (CPI: 12 個、EPI/GMPI: 29 個)
 - マニュアルコードは /MC で検索できる
例: => S T01-J16C3A/MC ← 2025 年版で新設された AI の使用をカバーする
音声処理のコードの検索
 - 詳細は Clarivate のサイト「Manual Code Revision – Changes 2025」を参照
<https://clarivate.com/intellectual-property/training-support/derwent/dwpi-reference-center/manual-codes/>
- CPI マニュアルコードは Derwent 会員のみ検索が可能

23 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



F タームシソーラス更新

F タームシソーラスが更新され、およそ 38 万件の F タームを含む 2024 年版 F タームのシソーラスが利用できるようになった

- F タームシソーラスは、/FTRM フィールドを用いて確認、検索できる

=> FILE WPINDEX ← WPINDEX ファイルに入る				E2	18	NT1	4J200/AA00/FTRM
=> E 4J200/FTRM ← F タームのテーマコードを EXPAND する							CATEGORY OF THE INVENTION
E#	FREQUENCY	AT	TERM			RFI	C08L101/16
--	-----	--	----	E3	331	NT2	4J200/AA01/FTRM
E1	83	2	4J128/GB06/FTRM				substances
E2	632	2	4J128/GB07/FTRM			RFI	C08L101/16
E3	9450	133	--> 4J200/FTRM	E4	1156	NT3	4J200/AA01/FTRM
E4	18	29	4J200/AA00/FTRM				Materials
:						RFI	C08L101/16
=> E E3+ALL ← E3 に+ALL を付与して EXPAND する				E5	206	NT3	4J200/AA03/FTRM
E1	9450	-->	4J200/FTRM				Raw materials
			Biological depolymerization polymers			RFI	C08L101/16
			RFI C08L101/16				:
				=> S E3+NT ← E3 の下位を含めて検索する			
				L2	7117	4J200/AA01+NT/FTRM	(6 TERMS)

F タームリストを確認できる

24 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



DCR ファイル

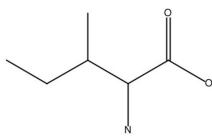
概要

WPI ファイルで索引された物質を収録する化学物質のデータベース

- ・ 製作者：Clarivate
- ・ レコード構成：物質単位
- ・ 収録情報：物質の化学物質名、分子式、構造など
- ・ 収録期間：1999 年～
- ・ 収録件数：625 万件以上
- ・ 更新頻度：週 2 回
- ・ 特長：化学物質名や分子式、構造検索を行うことができる。DCR ファイルとWPI ファイルが DCR レコード番号でリンクされているため、物質に関する特許を的確に検索できる
詳細：https://www.jaici.or.jp/download_file/view/4bf51132-508e-452e-8e53-bfeae753484d/

InChI、InChIKey の追加

化学構造をテキスト形式で表現するためのフォーマットである InChI および InChIKey のデータが追加された

AN	DCR-129497 DCR
DCSE	129497-0-0-0
CN.P	ISOLEUCINE
CN.S	2-Amino-3-methyl-pentanoic acid
SY	ISOLEUCINE
	
CMT	Unspecified stereoisomer
MF	C6 H13 N O2
SMF	C6 H13 N O2 *1; TOTAL *1; TYPE *1
INCH	InChI=1S/C6H13NO2/c1-3-4(2)5(7)6(8)9/h4-5H, 3, 7H2, 1-2H3, (H, 8, 9)
INKY	AGPKZVBTJJNPAG-UHFFFAOYSA-N
MW	131.1737
	:

InChI、InChIKey の検索と表示

検索フィールドと表示形式

InChIKey フィールドは検索および表示が可能。InChI フィールドは表示のみ可能。

- 検索フィールド

検索フィールド	内容
/INKY	InChIKey

- 表示形式

定型表示形式	STD、ALL、MAX
カスタム表示形式	INCH (InChI)、INKY (InChIKey)

- 詳細は CAS FILES の強化の REGISTRY ファイルを参照

27 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



GENESEQ、PATGENE、USGENE ファイルの強化

28 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



GENESEQ、PATGENE、USGENE ファイル

概要

特許種別	GENESEQ	PATGENE	USGENE
製作者	Clarivate	FIZ Karlsruhe	Clarivate
レコード構成	配列単位	配列単位	配列単位
収録情報	書誌情報、独自の抄録、配列情報	書誌情報、配列情報	書誌情報、抄録、クレーム、配列情報
収録国	58 特許発行機関	PCT 出願	米国
収録期間	1980 年～	1999 年～	1981 年～
収録件数	7,400 万件以上	5,300 万件以上	1 億 1,300 万件以上
更新頻度	毎週	毎週	毎週
特長	WPI ファイルベーシック特許から独自の収録基準にあう配列を収録。独自の抄録を作成しており、配列に関する情報が豊富	PCT 出願から配列を収録	種別にかかわらず、米国特許の配列を収録

ALIGNC 表示形式の追加

ホモロジー検索 (BLAST、GETSIM) と完全配列検索 / 部分配列検索の回答を掛け合わせた際、ヒットしたアライメント情報をまとめて表示できる **ALIGNC 表示形式**が新たに追加された

- ホモロジー検索でヒットした長い配列中に、特定の短い配列が含まれているかどうかを確認できる
- ALIGNC 表示形式は CDR や抗体の検索の際に便利な表示形式

検索例

ホモロジー検索と部分配列検索

グラクソ・スミスクライン (GSK) のメポリズマブの重鎖配列でホモロジー検索し、その CDR3 が含まれる配列がクレームに記載されている特許を GSK の特許を除いて確認する

- メポリズマブの重鎖配列

```
QVTLRESGPA LVKPTQTLTL TCTVSGFSLT SYSVHWVRQP PGKGLEWLGV
IWASGGTDYN SALMSRLSIS KDTSRNQVVL TMTNMDPVDT ATYYCARDPP
SSLLRLDYWG RGTPTVTSSA STKGPSVFPL APSSKSTSGG TAALGCLVKD
YFPEPVTVSW NSGALTSGVH TFAVLQSSG LYSLSVVTV PSSSLGTQTY
ICNVNHKPSN TKVDKRVPEK SCDKTHTCP CPAPPELLGGP SVFLFPPKPK
DTLMISRTPE VTCVVVDVSH EDPEVKFNWY VDGVEVHNAK TKPREEQYNS
TYRVVSVLTV LHQDWLNGKE YKCKVSNKAL PAPIEKTISK AKGQPREPQV
YTLPPSREEM TKNQVSLTCL VKGFYPSDIA VEWESNGQPE NNYKTTTPVL
DSDGSFFLYS KLTVDKSRWQ QGNVFSCSVM HEALHNHYTQ KSLSLSPGK
```

CDR 3

検索例

ホモロジー検索

```
=> FILE GENESEQ          ← GENESEQ ファイルに入る

=>
Uploading sequence file: Mepolizumab      ← 配列をアップロードする
UPLOAD SUCCESSFULLY COMPLETED
L1 GENERATED

=> RUN BLAST L1/SQP -F F      ← ホモロジー検索を行う
:
14992 ANSWERS FOUND BELOW EXPECTATION VALUE OF: 10.0
GENESEQ
:
ENTER EITHER "ALL" TO KEEP ALL ANSWERS
OR ENTER THE MINIMUM SCORE VALUE YOU WISH TO KEEP
OR ENTER THE MINIMUM PERCENT OF SCORE FOLLOWED BY "% SCORE"
OR ENTER THE MINIMUM PERCENT OF IDENTITY FOLLOWED BY "% IDENT"
OR COMBINE MINIMUM PERCENT OF SCORE AND IDENTITY AS "X% SCORE Y% IDENT"
OR ENTER "END". "END" MUST BE ENTERED TO COMPLETE THE RUN COMMAND.
ENTER (ALL) OR ?:ALL      ← 全件回収する

L2 RUN STATEMENT CREATED
L2 14992 QVTLRESGPALVKPTQTLTLCTVSGFSLTSYSVHWVRQPPGKGLEWLG...
:
ENTER (ALL) OR ?:END      ← 終了する
```

検索例

部分配列検索、回答の限定

```
=> RUN GETSEQ DPPSLLRLDY/SQSP          ← 部分配列検索を行う (CDR3)
L3   RUN STATEMENT CREATED
L3   80 DPPSLLRLDY/SQSP

=> S L2 AND L3                          ← ホモロジー検索と部分配列検索の結果をAND 演算する
L4   30 L2 AND L3

=> S L4 AND CLAIM/PSL                   ← クレームに記載の配列に限定する
L5   16 L4 AND CLAIM/PSL

=> S L5 NOT GLAXO?/PA                  ← GSK の特許を除く
L6   10 L5 NOT GLAXO?/PA

=> SOR L6 SCORE D IDENT D              ← スコア値・同一性の降順で回答を並べ替える
L7   10 SOR L6 SCORE D IDENT D

=> FSORT L7                             ← FSORT コマンドで同じ関連特許ファミリーをまとめる
L8   10 FSO L7
      :
      2 Multi-record Families  Answers 1-6 ← 関連特許ファミリー
        Family 1              Answers 1-3
        Family 2              Answers 4-6
      4 Individual Records    Answers 7-10 ← 関連特許ファミリーがないレコード
      0 Non-patent Records
      :
```

33 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例

BIB 表示形式

```
=> D L8 BIB ALIGNC 1-10                ← BIB (書誌情報)、ALIGNC 表示形式で表示する
      :
L8   ANSWER 6 OF 10 GENESEQ COPYRIGHT 2025 CLARIVATE on STN. FAMILY 2
AN   BE060065 GENESEQ ED 20211030 UP 20211030
      DED 20171228 Full-text
TI   Adeno-associated virus particle used in pharmaceutical composition for
      preventing disease in subject, such as Parkinson's Disease, comprises
      capsid and viral genome, where viral genome comprises inverted terminal
      repeat and payload region.
IN   Paul S; Ward DT
PA   VOYAGER THERAPEUTICS INC (VOYA-N)
LA   English
DT   Patent
PI   WO 2017189959 A1 20171102
PIT  WOA1 INTERNATIONAL APPLICATION PUBLISHED WITH INTERNATIONAL SEARCH
      REPORT
AI   WO 2017-US30054 20170428
PRAI US 2016-329442P 20160429
      US 2016-367317P
FS   PROTEIN; PS
OS   2017-745268 [77]
MTY  protein
PSL  Claim 1; SEQ ID NO 5366; 726pp
DESC Cancer/Inflammation/Immune system-related antibody, SEQ:5366.
```

WPI ファイルのベーシック特許

特許記載位置

34 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例

ALIGNC 表示形式

```
ALIGN
ALIGNMENT FROM L-NUMBER L2
Query Length: 449; Sequence Length: 449;
Score: 854.0 bits (2205), 92.1% of highest possible score 927.5;
Expect value: 4.834e-246;
Identities: 431 / 465 (92.7%); Positives: 432 / 465 (92.9%);
Query Identity: 96.0%; Query Coverage: 100.0%;
Subject Identity: 96.0%; Subject Coverage: 100.0%;
Alignment Length: 465;
Q: 1 QVTLRESGPALVKPTQTLTLCTVSGFSLTSYSVHWVRQPPGKLEWLGW--IWASGGTD 58
|
S: 1 QVTLRESGPALVKPTQTLTLCTVSGFSLTSYSVHWVRQPPGKLEWLGVSRIWASGGTD 60

Q: 59 YNSALMSRLSISKDTSRNQVVLMTNMDPVDATATYICARDPPSSLLRLDYWGRGTPVTVS 118
|
L3
S: 61 YNSALM--LSISKDTSRNQVVLMTNMDPVDATATYICARDPPSSLLRLDYWGRGTLVTVS 118

Q: 119 SASTKGPSVFPLAPSSKSTSGGTAALGCLVKD-----YFPEPVTWSWNSGALTSGVHTF 172
|
S: 119 SASTKGPSVFPLAPSSKSTSGGTAALGCLVKDNSGALTYFPEPVTWSW-----SGVHTF 172
:
```

ALIGNC 表示形式を利用すると、
ホモロジー検索と部分配列検索の
ヒット情報をまとめて表示できる

ホモロジー検索のヒット情報

部分配列検索のヒット情報

計算値の詳細は CAS STNext のヘルプを参照：

<https://cas-stnext.zendesk.com/hc/en-us/articles/29435428761613-GENESEQ-USGENE-PATGENE-Alignment-Information>

35 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



ALIGN 表示形式のコンパクト化

完全配列検索および部分配列検索で利用する RUN GETSEQ コマンドの検索結果において
ALIGN 表示形式で表示される配列がヒットしたコードとその前後のみとなった

- 処理速度が向上し、素早く結果を表示できるようになった

```
=> FILE GENESEQ          ← GENESEQ ファイルに入る
=> RUN GETSEQ CGCATACGC/SQSN ← 部分配列検索を行う
:
L1   RUN STATEMENT CREATED
L1   55649 CGCATACGC/SQSN

=> D 3 ALIGN             ← ALIGN 表示形式で出力

L1   ANSWER 3 OF 55649 GENESEQ  COPYRIGHT 2025 CLARIVATE on STN.
ALIGN
Sequence Length: 12414;
Strand: Plus / Plus;
Hits at: 7481-7489
7441 TATCAGCGAC CGACTTAGTC CATCGATGTC CACCAACCTCGCATACGCA CAGCGTAGGG
=====
7501 GATAAGGTAC CATAGAGCGC GCAGCTTCGAG TTGATCCAAG AACAGAGTC GACCTTGAGA
```

配列長

ヒットしたコードと
その前後を表示

36 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



SEQC フィールドの追加 (GENESEQ)

同一特許から GENESEQ ファイルに収録された配列の数を表す SEQC フィールドが追加された

- 新規検索フィールド : /SEQC
- 新規表示フィールド : SEQC
- SEQC が含まれる定型表示形式 : SQIDE、SQ3IDE、ALL
 - SEQC フィールドは抽出およびソートも可能

```
AN  BRA03912  GENESEQ
:
PI   WO 2025061648
:
PSL  Example; Page; 34pp
SEQC 5
```

同じ特許由来の配列が
5 レコードある

```
AN  BRA03911  GENESEQ
:
PI   WO 2025061648
:
PSL  Example; Page; 34pp
SEQC 5
PSL  Claim 6;
SEQC 5
PSL  Disclosure; SEQ ID NO1; 34pp
SEQC 5
```

左のレコードと同じ特許
由来の配列レコード
PSL フィールドで特許記載
位置がわかる

37

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



まとめ

- 特許全文データベース
 - 多くのファイルでリロードや強化が行われ、テキスト中の数値検索機能が更新されたり、最終権利者の検索・表示などが利用可能になった
- INPADOCDB/INPAFAMDB ファイル
 - 日本特許分類 (FI、F ターム) シソーラスが利用可能になった
- WPI ファイル
 - マニュアルコードが 2025 年版に改訂、F タームシソーラスが更新された
- DCR ファイル
 - InChI および InChIKey のデータが表示でき、InChIKey で検索できるようになった
- GENESEQ、USGENE、PATGENE ファイル
 - ヒットしたアライメント情報をまとめて表示できる ALIGNC 表示形式が追加された

38

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS STNext®

医薬系データベースの強化

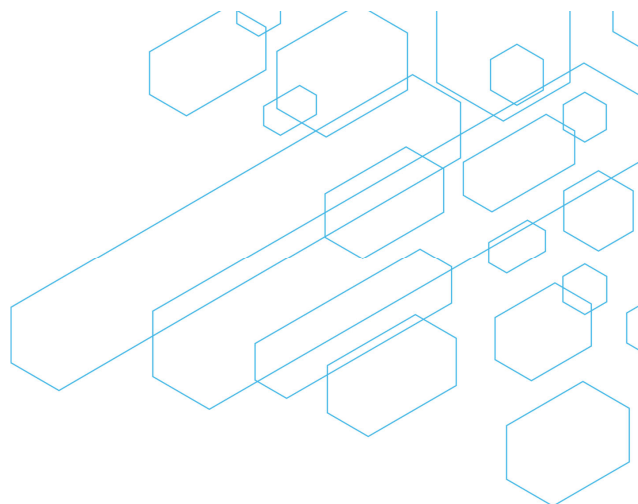
化学情報協会 情報事業部

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



目次

- MEDLINE ファイルの強化
- EMBASE ファイルの強化
- PS ファイルの強化





MEDLINE ファイルの強化

3 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



MEDLINE ファイル

概要

世界中の医学・薬学分野の文献データベース

- 製作者：U.S. National Library of Medicine (NLM)
- レコード構成：文献単位
- 収録情報：生物医学および薬学、歯科学、看護学などの幅広い文献情報
- 収録期間：1946 年～
- 収録件数：3,860 万件以上
- 更新頻度：週 6 回
- 特長：収録範囲が広く、歯学や看護学、栄養学などの文献も収録
文献の主題が統制語 (MeSH) で索引され、再現率と適合率の高い検索が可能
毎年 1 回リロードが行われ、ファイル全体の索引が最新の統制語に更新される
引用・被引用情報を収録

4 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



MEDLINE ファイルの強化

リロード

2025 年 3 月にリロードされた

- MeSH の改訂 (2025 年版)
 - 新規の MeSH ターム：192 語
 - MeSH の詳細は NLM のサイトを参照
https://www.nlm.nih.gov/pubs/techbull/nd24/nd24_annual_mesh_processing.html

- 2025 年以降に付与が中止された資料種類 (DT)

資料種類 (DT)			
AUTOBIOGRAPHY	BIBLIOGRAPHY	CONSENSUS DEVELOPMENT CONFERENCE NIH	DICTIONARY
DIRECTORY	INTERACTIVE TUTORIAL	LEGAL CASE	LEGISLATION
PERIODICAL INDEX	PORTRAIT	TECHNICAL REPORT	



MEDLINE ファイルの強化

リロードに関する注意点

NLM より、一部のレコードについて 2024 年版の MeSH のままであるとの報告があった

- 2025 年版で変更のあった MeSH (32 個) の一覧：
https://nlmpubs.nlm.nih.gov/projects/mesh/MESH_FILES/newterms/replace2025.txt

=> FILE MEDLINE

検索方法

=> E Persons with Disabilities+ALL/CT

↑ 2025 年版で変更のあった MeSH

E10

41

UF

Disabled Persons/CT

2025 年版 MeSH

E5

0

BT2

M Named Groups/CT

E2

270

BT1

Persons/CT

E3

50380

-->

Persons with Disabilities/CT

E4

77596

MN

M1.150./CT

:

E5

0

UF

Disabilities, People with/CT

E6

0

UF

Disabilities, Persons with/CT

E7

0

UF

Disability, Persons with/CT

E8

0

UF

Disabled Person/CT

E9

41

UF

Disabled Persons/CT

E10

0

UF

Disabled, Physically/CT

:

E21

4695

NT1

Amputees/CT

E22

7412

NT1

Children with Disabilities/CT

E23

223

NT1

Para-Athletes/CT

:

=> S E3+PFT,NT/CT ← 2025 年版 MeSH を非優先語 (UF) と下位語 (NT) を含めて検索

L1

77723

"PERSONS WITH DISABILITIES"+PFT,NT/CT (25 TERMS)

UF に件数がある場合は +PFT を含めた式にする

- 影響を受けた用語の数が非常に少ないため、NLM では 2026 年のリロードで修正を行う予定





EMBASE ファイルの強化

7 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



EMBASE ファイル

概要

世界中の生物医学および薬学分野の文献データベース

- 製作者：Elsevier B. V.
- レコード構成：文献単位
- 収録情報：生物医学、薬学、医療機器関連の文献情報
- 収録期間：1947 年～
- 収録件数：4,710 万件以上
- 更新頻度：毎日
- 特長：文献中の主題が統制語 (EMTREE) で索引されており、再現率と適合率の高い検索ができる
特に医薬品の索引が優れており、医薬品に関する文献を効率よく検索できる
EMBASE ファイル独自のレコードと重複しない MEDLINE ファイルのレコードも収録している

8 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



EMBASE ファイルの強化

EMTREE 語のオンラインシソーラス更新

EMBASE ファイルの統制語である EMTREE 語のオンラインシソーラスは年に 3 回更新される。
昨年 7 月以降の更新月と新規に追加されたターム数は下記の通り

シソーラス更新月	drug terms	non-drug terms
2024 年 9 月	57 個	496 個
2025 年 2 月	279 個	1,395 個
2025 年 5 月	245 個	992 個

- 2025 年 5 月の更新では、INN (国際一般名) や USAN (米国一般名) として新たに登録された医薬品名や、眼疾患、先天性疾患関連の統制語などが追加された

詳細は Elsevier のページを参照

https://service.elsevier.com/app/answers/detail/a_id/16354/supporthub/embase/kw/emtree/

PS ファイルの強化

PS ファイル

概要

上市された医薬品有効成分 (API : Active Pharmaceutical Ingredient) に関する物質データベース

- 製作者：Georg Thieme Verlag
- レコード構成：物質単位
- 収録情報：上市された医薬品有効成分に関する物質同定情報、上市情報、製剤情報、反応情報、文献情報
- 収録期間：1957 年～
- 収録件数：2,930 件
- 更新頻度：不定期
- 特長：すべての物質に CAS 登録番号 (CAS RN®) が収録されている
医薬品に限定した調査ができ、重要な医薬品に関する様々な情報を入手できる
工業的スケールの合成反応を確認できる

11

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



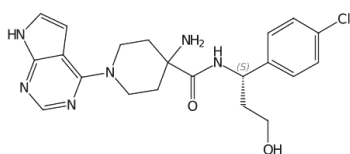
PS ファイルの強化

データの追加

100 以上の API の情報が追加された

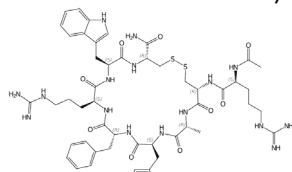
- 新規 API：がん治療用のキナーゼ阻害薬、抗肥満薬、希少疾患治療薬など

例：Capivasertib
(CAS RN® 1143532-39-1)



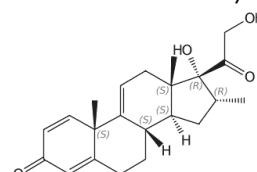
Absolute stereochemistry shown

例：Setmelanotide
(CAS RN® 920014-72-8)



Absolute stereochemistry shown

例：Vamorolone
(CAS RN® 13209-41-1)



Absolute stereochemistry shown

12

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

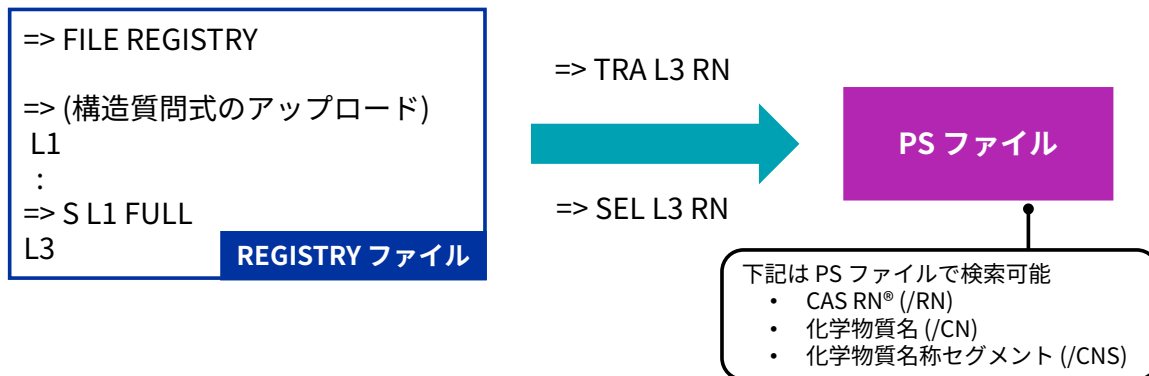


構造を使った検索方法

REGISTRY ファイルからクロスオーバー

PS ファイルでは合成スキームがイメージ図で収録されているため、構造検索はできない

- 構造から検索する場合は REGISTRY ファイルで実行し、PS ファイルへ CAS RN® をクロスオーバーする



検索例

1,2,4-トリアゾール環を有する API を検索する

=> FILE REGISTRY

=>

Uploading structure file: 2025_0286_Structure

Node Attributes

Ring Nodes : 1 2 3 4 5

Bond Attributes

:

L1 STRUCTURE UPLOADED

← REGISTRY ファイルに入る

← 構造質問式をアップロードする

1,2,4-トリアゾール環

REGISTRY ファイル

検索例

1,2,4-トリアゾール環を有する API を検索する

=> S L1 ← 部分構造検索のサンプル検索を行う
L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FULL ← 部分構造検索のフルファイル検索を行う
L3 3719870 SEA SSS FUL L1

=> S L3 AND PS/LC ← CAS RN® 所在 (LC) フィールドに PS を含むレコードに限定する
L4 23 L40 AND PS/LC

LC フィールドは、
その物質の CAS RN® が含まれているレコードが
存在するファイル名を収録している

REGISTRY ファイル

検索例

1,2,4-トリアゾール環を有する API を検索する

=> SEL L4 RN 1- ← L4 から CAS RN® を抽出する
E1 THROUGH E23 ASSIGNED

REGISTRY ファイル

=> FILE PS ← PS ファイルに入る

=> S E1-23 ← L4 で抽出した CAS RN® を検索する
L5 23 L4

=> D L5 ALL 19 ← L5 の 19 番目の回答を ALL 表示形式で表示する

PS ファイル

1,2,4-トリアゾール環を有する API を検索する

	L5	ANSWER 19 OF 23 PS COPYRIGHT 2025 THIEME on STN.	
レコード番号	AN	50144 PS	
入力日	ED	Entered STN: 7 Feb 2025	
		Last updated on STN: 7 Feb 2025	
化学物質名称	CN	GENERIC: Ensitrelvir	エンシトレビル
		SYNONYM: S-217622; GLXC-25566	
		SYSTEMATIC: 6-((6-chloro-2-methyl-2H-indazol-5-yl)amino)-3-((1-methyl-1,2,4-triazol-3-yl)methyl)-1-((2,4,5-trifluorophenyl)methyl)-1,3,5-triazine-2,4(1H,3H)-dione	
ATCコード	CC	n/a	
適応症	THER	oral antiviral agent; SARS-CoV-2 protease inhibitor for treatment of COVID-19	
CAS RN®	RN	2647530-73-0	
分子式	MF	C22H17ClF3N9O2	
InChIKey	INCHI	QMPBBNUOB0FBFS-UHFFFAOYSA-N	

1,2,4-トリアゾール環を有する API を検索する

分子量

FRM

DEF

DRV

誘導体

MW

FRM

DEF

DRV

誘導体

531.88

tabl. 125 mg (fumarate)

1,3,5-Triazines (also hydro derivatives); Indazoles; 1,2,4-Triazoles

CN.DRV Fumarate

LSF.DRV C22H17C1F3N9O2・C4H4O4

MW.DRV 647.9

RN.DRV 2757470-18-9

錠剤 125 mg (フマル酸塩)

誘導体の情報

上市情報

Trade Data

Launch

Country

JP

Trade Data

Launch

Country

JP

Shionogi, 2022 (emergency app

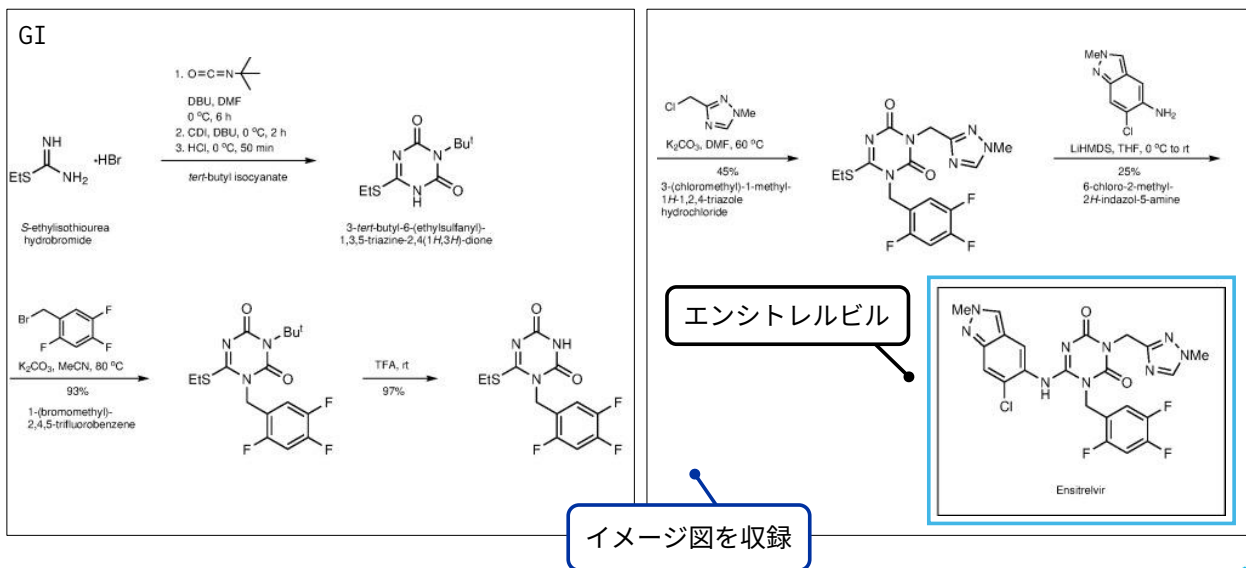
roval)

塩野義製薬(株)が2022年に『ゾコーバ錠』として日本国内で緊急承認を取得

検索例

1,2,4-トリアゾール環を有する API を検索する

合成スキーム



19

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例

1,2,4-トリアゾール環を有する API を検索する

中間体情報

INT		
Intermediate(s) in Substance Preparation		
CAS RN	Molecular Formula Chemical Name	
133514-72-4	C3H9BrN2S	S-ethylisothiourrea hydrobromide; (CA Index Name)
1609-86-5	C5H9NO	tert-butyl isocyanate; (CA Index Name)
1360105-53-8	C9H15N3O2S	3-tert-butyl-6-(ethylsulfanyl)-1,3,5-triazine-2,4(1H,3H)-dione; (CA Index Name)
CAS RN®	分子式	化学物質名称
:		
RE		
WO 2022 138 987 A1 (Shionogi and Hokkaido University,30.06.2022; JP-prior. 14.04.2021, 25.06.2021, 22.09.2021) - "Triazine Derivative having Virus Propagation Inhibitory Effect".		
:		

参考文献

20

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



まとめ

- MEDLINE ファイル
 - 2025 年版の MeSH に対応した
- EMBASE ファイル
 - シソーラスの更新が例年どおり実施された
- PS ファイル
 - 100 以上の API の情報が追加された
 - 構造から検索する場合は REGISTRY ファイルで実行し、PS ファイルへクロスオーバーする

2024 年 7 月以降の強化一覧

データベースの強化・変更

ファイル名	強化・変更点
AUPATFULL	- リロード - 最終権利者に関するフィールド /UO、/UOS の追加 - テキスト中の数値検索機能で検索できる物性値が 59 種類に増加 - 特許出願人に関するフィールド /PAS、/PAN、/PASS の追加 - 関連特許情報に関するフィールド /RLPC、/RLPD、/RLPN、/RLPY の追加 - クレームに関するフィールド /CLM.IC、/CLM.CG の追加 - Key Terms (/KT) の収録強化 - 英語の詳細な説明フィールド /DETDEN の追加 - 意匠レコードにロカルノ分類を追加
CANPATFULL	- リロード - 最終権利者に関するフィールド /UO、/UOS の追加 - テキスト中の数値検索機能で検索できる物性値が 59 種類に増加 - 特許出願人に関するフィールド /PAS、/PAN、/PASS の追加 - 関連特許情報に関するフィールド /RLPC、/RLPD、/RLPN、/RLPY の追加 - クレームに関するフィールド /CLM.IC、/CLM.CG の追加 - Key Terms (/KT) の収録強化 - 英語の詳細な説明フィールド /DETDEN の追加 - 収録対象が拡大され、1869 年以降の意匠が収録対象に
CAplus/CA	- CAS ロール SCLM (請求項に記載された物質) の追加 - CAS PatentPak® の Claim タグの付与対象国に EP を追加
CEABA	更新再開
CNFULL	最終権利者に関するフィールド /UO、/UOS の追加
DCR	- InChI と InChIKey の収録を開始 - InChIKey の新規検索フィールド /INKY を追加 - 基本索引に /INKY が含まれるように - 新規表示フィールド INCH (InChI)、INKY (InChIKey) の追加
DEFULL	- リロード - 最終権利者に関するフィールド /UO、/UOS の追加 - 特許出願人に関するフィールド /PAS、/PAN、/PASS の追加 - 関連特許情報に関するフィールド /RLPC、/RLPD、/RLPN、/RLPY の追加 - クレームに関するフィールド /CLM.IC、/CLM.CG の追加 - 英語の詳細な説明フィールド /DETDEN の追加 - テキスト中の数値検索機能の更新
EMBASE	EMTREE 語のオンラインシソーラス更新
EPFULL	最終権利者に関するフィールド /UO、/UOS の追加
FRFULL	- リロード - 最終権利者に関するフィールド /UO、/UOS の追加 - 特許出願人に関するフィールド /PAS、/PAN、/PASS の追加 - 関連特許情報に関するフィールド /RLPC、/RLPD、/RLPN、/RLPY の追加 - クレームに関するフィールド /CLM.IC、/CLM.CG の追加 - 英語の詳細な説明フィールド /DETDEN の追加 - テキスト中の数値検索機能の更新

データベースの強化・変更（続き）

ファイル名	強化・変更点
GBFULL	- リロード - 最終権利者に関するフィールド /UO、/UOS の追加 - 特許出願人に関するフィールド /PAS、/PAN、/PASS の追加 - 関連特許情報に関するフィールド /RLPC、/RLPD、/RLPN、/RLPY の追加 - クレームに関するフィールド /CLM.IC、/CLM.CG の追加 - 英語の詳細な説明フィールド /DET DEN の追加 - テキスト中の数値検索機能の更新
GENESEQ	- ホモロジー検索と完全配列検索/部分配列検索の回答を掛け合わせた際、ヒットしたアライメント情報をまとめて表示できる ALIGNC 表示形式の追加 - RUN GETSEQ コマンドの検索結果における ALIGN 表示形式のコンパクト化 - ホモロジー検索 (BLAST、GETSIM) の回答作成時に、スコア値パーセントまたは同一性パーセントの少数第 2 位までの数値入力が可能に - SEQC (配列の数) フィールドの追加 - PNK (種別付き特許番号) フィールドについて、SELECT、ANALYZE および SORT が可能に
INFULL	- リロード - 最終権利者に関するフィールド /UO、/UOS の追加 - テキスト中の数値検索機能で検索できる物性値が 59 種類に増加 - 特許出願人に関するフィールド /PAS、/PAN、/PASS の追加 - 関連特許情報に関するフィールド /RLPC、/RLPD、/RLPN、/RLPY の追加 - クレームに関するフィールド /CLM.IC、/CLM.CG の追加 - Key Terms (/KT) の収録強化 - 英語の詳細な説明フィールド /DET DEN の追加 - 特許ステータスに関するフィールド /STI、/STED の追加
INPADOCDB INPAFAMDB	- リロード - 最終権利者に関するフィールド /UO、/UOS の追加 - PN.B、PNK.B、PC.B、PD.B、PY.B フィールドについて SELECT、ANALYZE および SORT が可能に (INPAFAMDB のみ) - 日本特許分類 (FI) のシソーラスが利用可能に - 日本特許分類 (F ターム) シソーラスが利用可能に - フィリピン、メキシコ、サンマリノ特許の収録強化
JPFULL	- 最終権利者に関するフィールド /UO、/UOS の追加 - 日本特許分類 (FI) のシソーラスが利用可能に - 日本特許分類 (F ターム) シソーラスが利用可能に
KRFULL	- リロード - 最終権利者に関するフィールド /UO、/UOS の追加 - 関連特許情報に関するフィールド /RLPC、/RLPD、/RLPN、/RLPY の追加 - クレームに関するフィールド /CLM.IC、/CLM.CG の追加 - 特許ステータスに関するフィールド /STI、/STED の追加 - テキスト中の数値検索機能の更新
MARPAT	CAS PatentPak リンクの追加
MEDLINE	- リロード 2025 年版 MeSH に対応

データベースの強化・変更（続き）

ファイル名	強化・変更点
PATGENE	- ホモロジー検索と完全配列検索/部分配列検索の回答を掛け合わせた際、ヒットしたアライメント情報をまとめて表示できる ALIGNC 表示形式の追加 - RUN GETSEQ コマンドの検索結果における ALIGN 表示形式のコンパクト化 - ホモロジー検索 (BLAST、GETSIM) の回答作成時に、スコア値パーセントまたは同一性パーセントの少数第2位までの数値入力が可能に - SEQC (配列の数) フィールドの追加 - PNK (種別付き特許番号) フィールドについて、SELECT、ANALYZE および SORT が可能に
PCTFULL	最終権利者に関するフィールド /UO、/UOS の追加
PS	医薬品有効成分 (API) に関するデータの追加
RAPRA	更新再開
REGISTRY	- InChI および InChIKey の追加 - InChIKey の新規検索フィールド /INKY を追加 - 基本索引に /INKY が含まれるように - 新規表示フィールド INCH (InChI)、INKY (InChIKey) の追加
TEMA	更新再開
USGENE	- ホモロジー検索と完全配列検索/部分配列検索の回答を掛け合わせた際、ヒットしたアライメント情報をまとめて表示できる ALIGNC 表示形式の追加 - RUN GETSEQ コマンドの検索結果における ALIGN 表示形式のコンパクト化 - ホモロジー検索 (BLAST、GETSIM) の回答作成時に、スコア値パーセントまたは同一性パーセントの少数第2位までの数値入力が可能に - SEQC (配列の数) フィールドの追加 - PNK (種別付き特許番号) フィールドについて、SELECT、ANALYZE および SORT が可能に
USPATFULL USPAT2	最終権利者に関するフィールド /UO、/UOS の追加
WPINDEX WPIDS WPIX	- 日本特許分類 (FI) のシソーラス更新 - F タームシソーラス更新 - マニュアルコード改訂 (2025 年版)

CAS PatentPak の強化

- Claim タグの付与対象国に EP を追加

データベースのサービス終了

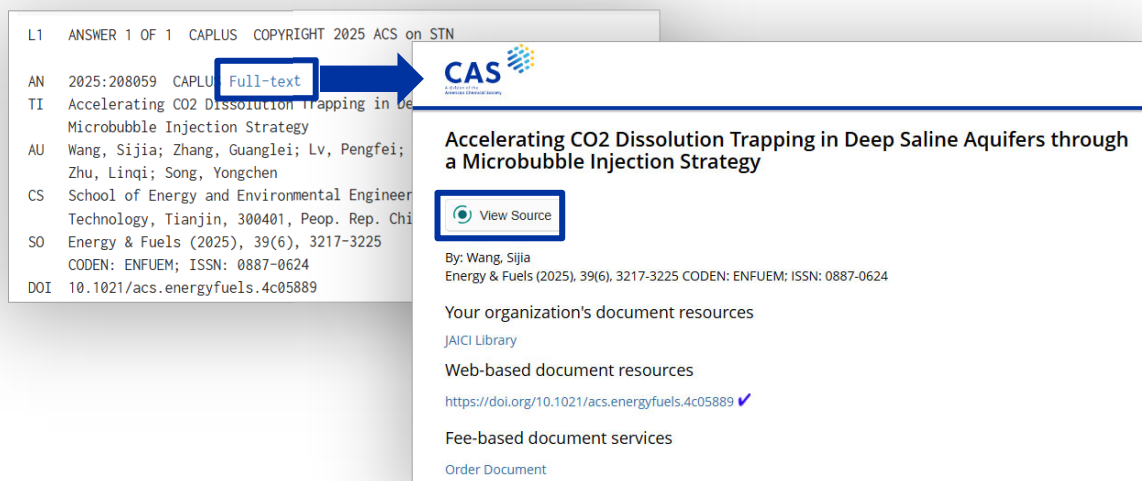
- INSPEC、TULSA/TULSA2

CAS STNext® の強化

- CAS Full Text Options に GetFTR ボタンを追加

CAS Full Text Options は、CAS STNext で検索して得られた文献や特許の全文情報へのリンクを提供するサービスです。このたび、CAS Full Text Options に GetFTR ボタンが追加されました。

CAS STNext でレコードを表示した際に表示される Full-Text リンクをクリックすると、CAS Full Text Options の画面が開きます。この画面に、下図のように GetFTR (Get Full Text Research) ボタンが追加されました。

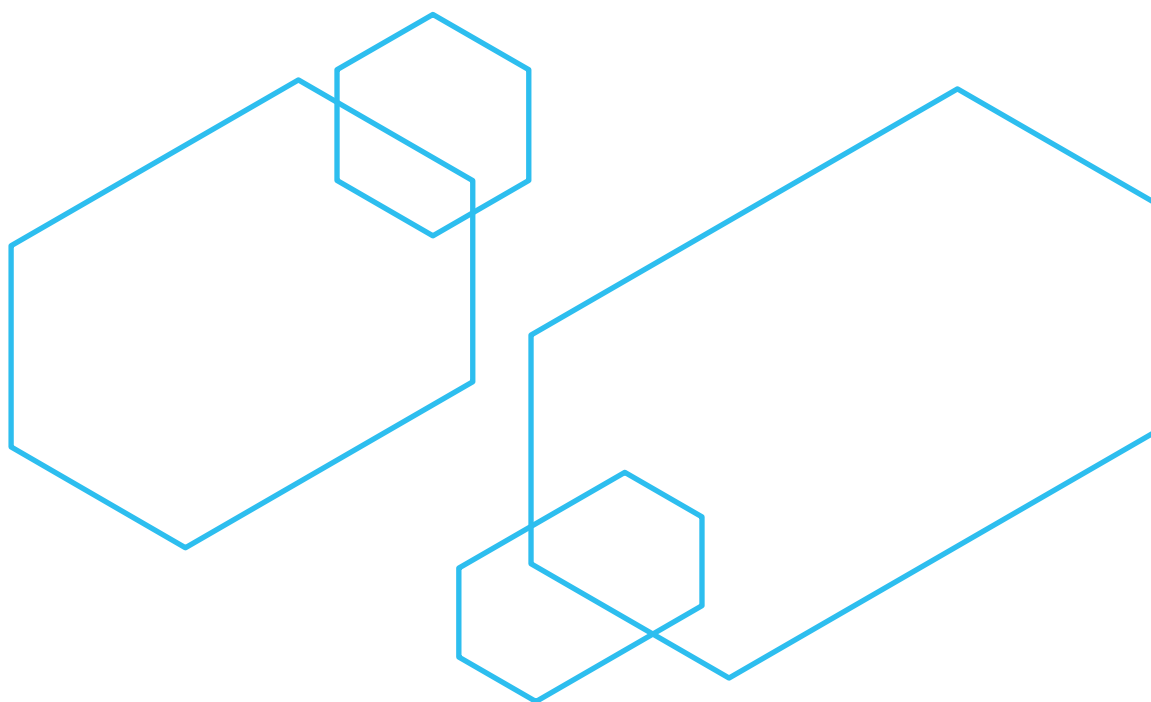


ボタンは利用可否などにより表示が変わります。

- ☐ View PDF - PDF で入手できます
- ☐ View Source - html バージョンで入手できます
- ☐ View Source - 全文を表示できませんが、雑誌社のサイトで抄録、Supporting Information など、代替情報を確認できます
- ☐ View PDF - 全文を表示できず、利用可能な代替情報もありません*

* 原報が入手可能な場合でも、出版元が GetFTR に参加していないとボタンはグレーになります

第二部：トピック



CAplus ファイルのレコード作成と 化学物質索引

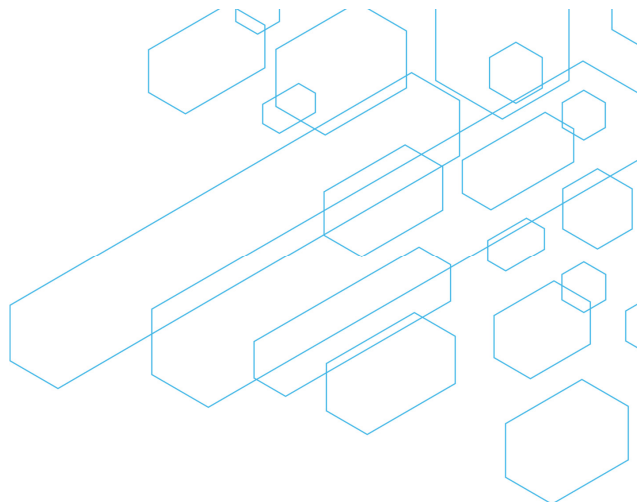
化学情報協会 情報事業部

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



目次

- CAplus ファイルのレコード作成の流れ
- 特許の収録基準
- 索引
- 化学物質の索引方針
- 参考





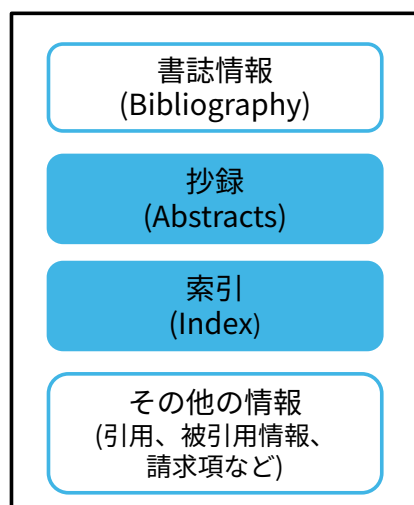
CPlus ファイルのレコード作成の流れ

3 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CPlus ファイルのレコード構成

CPlus ファイルのレコードは下記のデータで構成されている



抄録

- CAS のアナリストが新規性、有用性などを簡潔にまとめた英語抄録を作成
- 原報の英語抄録をそのまま収録する場合もある

索引

- CAS のアナリストが、著者や発明者が強調している点、文献の主題に関わる概念や化学物質を索引

4 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CAplus ファイルのレコード作成の流れ

レコード作成後にデータが順次追加される



- 原報を入手後、書誌情報を入力してレコードを作成
 - 主要国^{*1}特許は公報発行後 **2 日以内**に収録
 - 主要雑誌^{*2}はCAS に到着後 **1 週間以内**に収録
- 原報由来の英語抄録または機械翻訳の英語抄録を収録
- CAS 作成の抄録に置き換わる
- 原報が英語抄録の場合、原報の抄録がそのまま利用されることもある

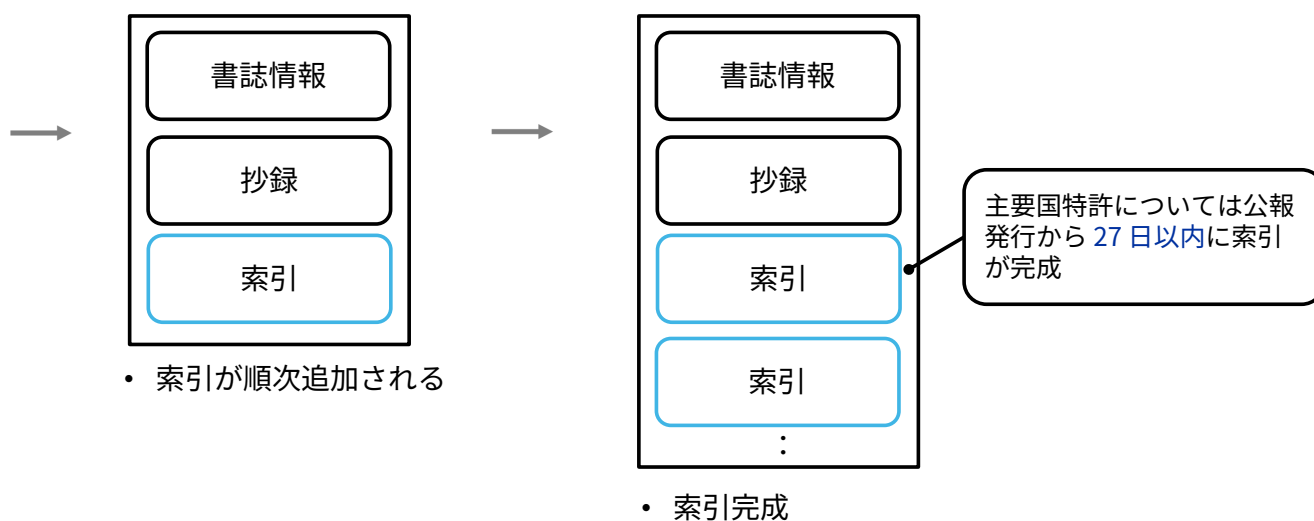
*1 CAS が定める主要国は次の 9 カ国 (CA, DE, EP, FR, GB, JP, RU, US, WO)

*2 主要雑誌 (Core Journal) のリストは <https://www.cas.org/training/documentation/references/corejournals> 参照

5 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CAplus ファイルのレコード作成の流れ (続き)



6 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.





特許の収録基準

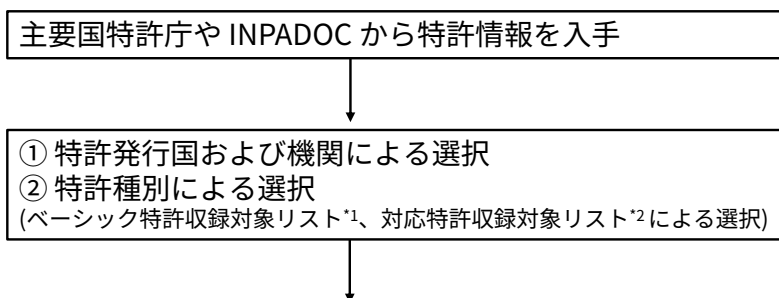
7

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



特許の収録基準

収録される特許発行機関、特許種別が決まっている



*1 ベーシック特許収録対象リスト
<https://www.cas.org/training/documentation/references/patyear>

*2 対応特許収録対象リスト
<https://www.cas.org/training/documentation/references/patkind>

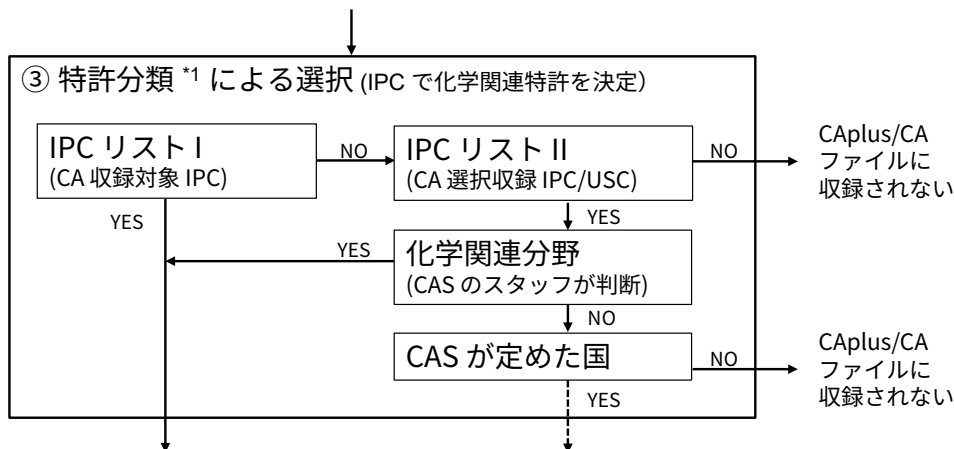
8

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



特許の収録基準 (続き)

化学関連の特許を選択して収録している



^{*1} IPC/USC のリストは下記に掲載されている

<https://www.cas.org/training/documentation/references/patentcoverage>

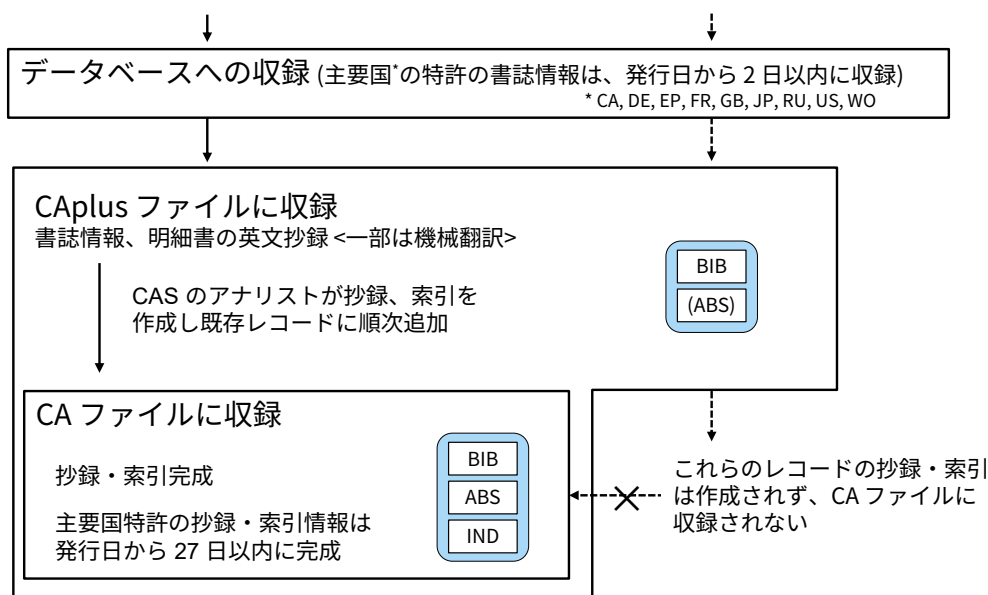
9

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



特許の収録基準 (続き)

抄録・索引が作成されない特許もある



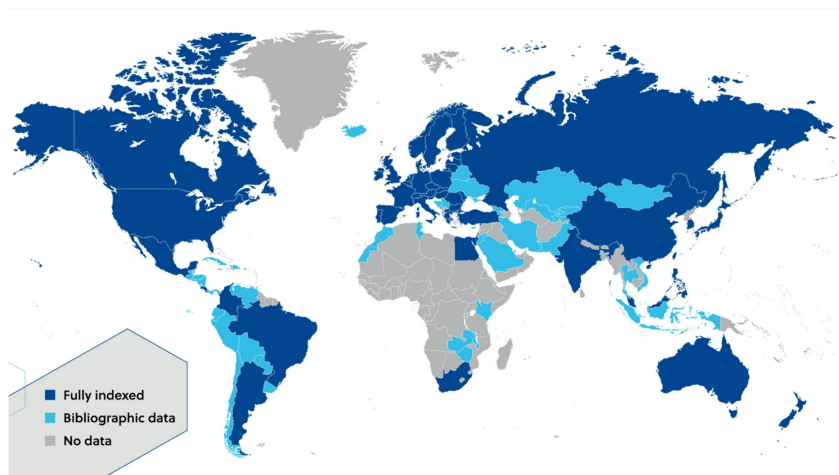
10

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



収録対象国

107 特許発行機関の特許および 2 技術公開誌*¹ が収録対象



*1 IP.com, Research Disclosure

現状では水色で色付けされた国については
書誌情報しか収録されていない

<https://www.cas.org/training/documentation/references/patworld>

11

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



索引

12

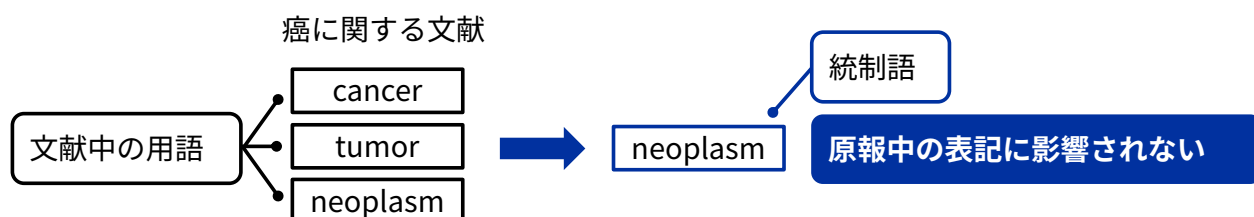
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



主題の索引

文献の主題に関わる重要な概念を索引する

- 索引には統制語が用いられる
 - 統制語は一つの概念を一つの語で表現するようデータベース中で統制された語
 - 文献による用語のぶれの影響がない

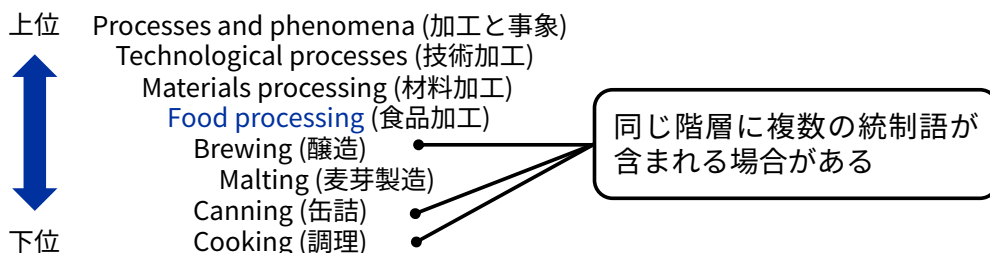


CAplus ファイルの統制語

階層構造

CA の統制語は階層構造に整理されている

- 階層構造の統制語から最も適切な索引語を使用
 - 上位の階層の語は付与されない



参考：CA Lexicon

オンラインシソーラス

CA Lexicon は、CAplus ファイルにおける
統制語のオンラインシソーラス
(階層関係を含んだ辞書)

- ・ 統制語を調べたい時に利用できる
- ・ 上位語、下位語などを確認することができる

E5	174698	BT2	Apparatus/CT	BT：上位語
E6	4609	BT1	Energy converters/CT	
E7	174698	BT2	Apparatus/CT	
E8	31577	BT1	Power supplies/CT	-->：調べた統制語
E9	129267	-->	Fuel cells/CT	
			HNTE Valid heading during volume 66 (1967) to present.	
			NOTE Electrochemical energy conversion devices that utilize hydrogen and oxygen to generate electricity, heat, and water.	
E10		OLD	Cells, voltaic (L) fuel/CT	OLD：旧統制語
E11		OLD	Voltaic cells (L) fuel/CT	
E12		UF	Cell (fuel cell)/CT	UF：非優先語
E13		UF	Cells (fuel cell)/CT	
E14		UF	Fuel cell/CT	
E15		UF	Fuel-cell battery/CT	
E16	1931	NT1	Alkaline fuel cells/CT	NT：下位語
E17	14006	NT1	Biochemical fuel cells/CT	
E18	599	NT1	Direct alcohol fuel cells/CT	
E19	994	NT1	Direct ethanol fuel cells/CT	
E20	469	NT1	Direct formic acid fuel cells/CT	
E21	6102	NT1	Direct methanol fuel cells/CT	

概念による索引

統制語とテキスト説明句

原報 【特許請求の範囲】

- ・・・茶抽出物を有効成分として含有することを特徴とする抗酸化剤組成物。



索引

IT	Antioxidants	統制語
	Extraction	
	Food preservatives	
	(antioxidant compns. contg. tea exts. contg. catechins and gallic acid for food preservation)	テキスト説明句 (統制語の内容を補足する自由語の説明)

補遺語索引 (/ST)

統制されていない語

ST フィールドには、原報の標題、抄録中の重要な用語を収録している

- 著者が使っている用語をそのまま使用
 - 補遺語は統制されていない
- 一般に単語の単数形を優先的に使用

自由語で記述

ST human milk cream lipid manuf enteral parenteral infant nutrition;
polyunsatd fatty acid human milk infant formula

概念をセミコロン (;) で区切る

化学物質索引

IT Diterpenes 化合物クラス名 (統制語)
RL: BPN (Biosynthetic preparation); RCT (Reactant); BIOL (Biological study);
PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)
(labdane; trans-10-acetylbaldane of a labdane by an enzymic treatment)

IT 9001-62-1, Lipase CAS RN®
RL: RGT (Reagent); RACT (Reactant or reagent) CAS ロール
(Chromobacterium viscosum lipase; transformation of a labdane by an enzymic treatment) テキスト説明句

IT 863507-69-1P 接尾辞付きの CAS RN®
RL: BPN (Biosynthetic preparation); BIOL (Biological study); PREP (Preparation)
(transformation of a labdane by an enzymic treatment)

化学物質索引

化合物クラス名と CAS 登録番号 (CAS RN®)

化学物質索引には、化合物クラス名と CAS 登録番号 (CAS RN®) がある

- 化合物クラス名 (統制語)
 - ある化合物グループ全般について述べられている場合に付与される
- CAS 登録番号 (CAS RN®)
 - 特定の化学物質について述べられている場合に付与される
 - CAS RN® は化学物質に固有の番号
 - 合成文献は P (1907 年以降)、非特定誘導体* の文献は D (1977 年以降) が付与される

* 非特定誘導体とは、構造や分子式を特定できないような誘導体を指す

CAS ロール

化学物質の役割

CAS ロールは、化学物質の文献中での役割を表すコード

- 化合物クラス名や CAS RN® と共に CAS ロールが索引される
- 3 文字コードの特定ロールと、その上位の 4 文字コードのスーパーロールがある
 - 特定ロールが属するスーパーロールは、自動的に付与される

	特定ロール	スーパーロール
IT Fatty acids	RL: REM (Removal or disposal);	PROC (Process)
	(salts; automatic dishwashing detergent compns. comprising a lipase)	
IT 9001-62-1, Lipase	RL: SCLM (Substance claimed);	TEM (Technical or engineered material use);
	USES (Uses)	
	(automatic dishwashing detergent compns. comprising a lipase)	

* SCLM のように特定ロールが存在しないスーパーロールもある

CAS ロールの付与年代

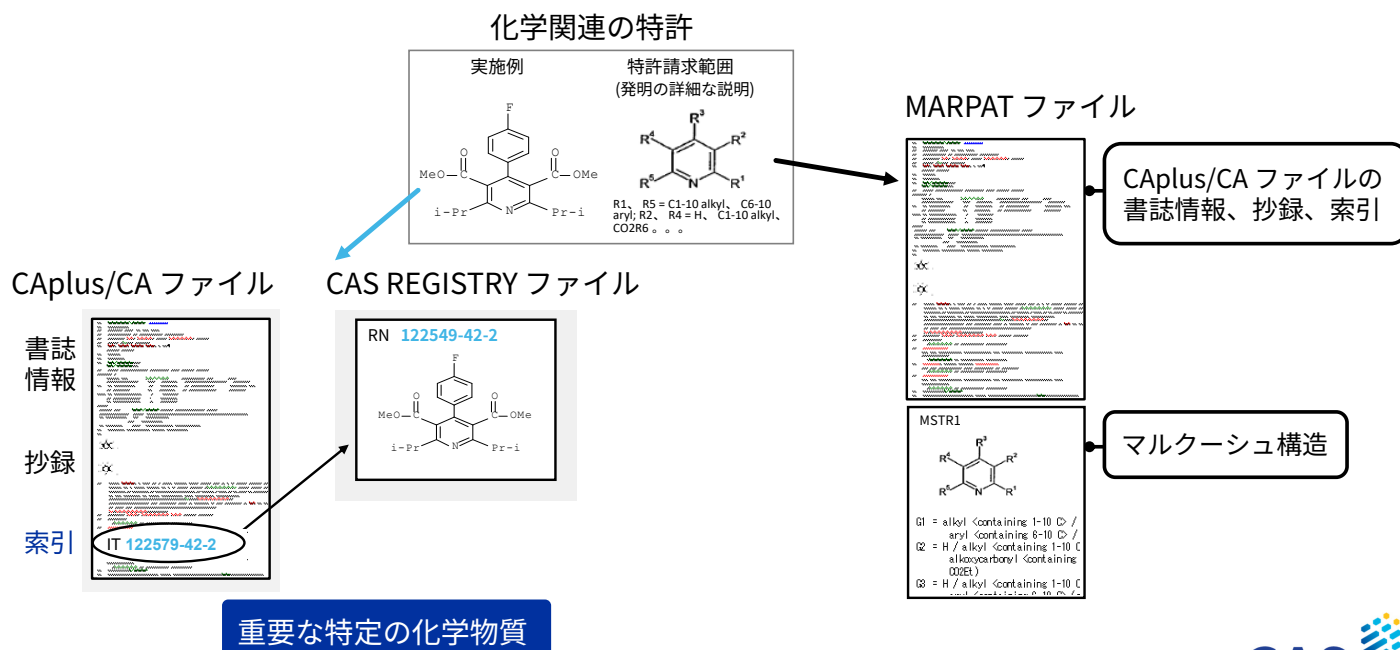
付与年代に注意

CAS ロールで限定すると、自動的にそのロールが付与されている年代に限定される

- CAS ロールにより付与年代に違いがある
- 製造を表すスーパーロール PREP および接尾辞 P は 1907 年以降のレコードに付与されている
- 多くの CAS ロールが 1967 年以降のレコードに付与されているが、それ以後に追加された CAS ロールや削除された CAS ロールもある
- CAS ロールの 詳細は「<詳細版> CA 文献検索」参照
https://www.jaici.or.jp/download_file/view/a8f8f93d-63cd-4fe5-b732-c7932c94ba0f/

化学物質の索引方針

CAS FILES における化学物質の索引



23 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CPlus ファイルの化学物質の索引方針

雑誌論文の場合

文献中に記載されている科学的・技術的に新しい知見があった特定の化学物質

- 索引される化学物質
 - 新規物質
 - 新しい知見があった既存物質
- 通常索引されない化学物質
 - 汎用の試薬、溶媒、触媒
 - 計算物性値だけが記載されている物質や、公表されたデータ評価のために示された物質

24 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CAplus ファイルの化学物質の索引方針

特許の場合 ①

- 特許実施例中またはクレーム (1981 年以降) に記載されており、新規性・改良点、重要な事項に関連する特定の化学物質
- 実施例由来の場合は、何らかの hard data (融点や NMR スペクトル等) のある特定の化学物質 (名称のみが記述されているような例示物質は索引されない)

CAplus ファイルの化学物質の索引方針

特許の場合 ②

- 以下の特許がベーシック特許 (特許ファミリーの中で CAS が最初に入手した特許) の場合は、**実施例中の hard data のない化学物質 (Prophetic 物質) も索引される**
 - 2009 年 1 月以降に発行された、主要国 (CA, DE, EP, FR, GB, JP, RU, US, WO) の特許
 - 1998-2008 年に CA, DE, EP, FR, GB, US, WO で発行された特許のうち、英語、仏語または独語で書かれた特許 (1993-1997 年は一部収録)
 - 2000-2008 年に発行された、日本語で書かれた特許 (一部収録)

参考 : Prophetic 物質

- 特許の実施例に記載されている hard data のない特定の化学物質 (例 : 反応物、単離された中間体、生成物) で、クレームには記載されていないもの。構造式だけでなく、化学物質名で表現されているものや、表にまとめられているものも含まれる
- 新規/改良した用途が報告されているが、その用途が実証されていない既知物質

CAplus ファイルの化学物質の索引方針

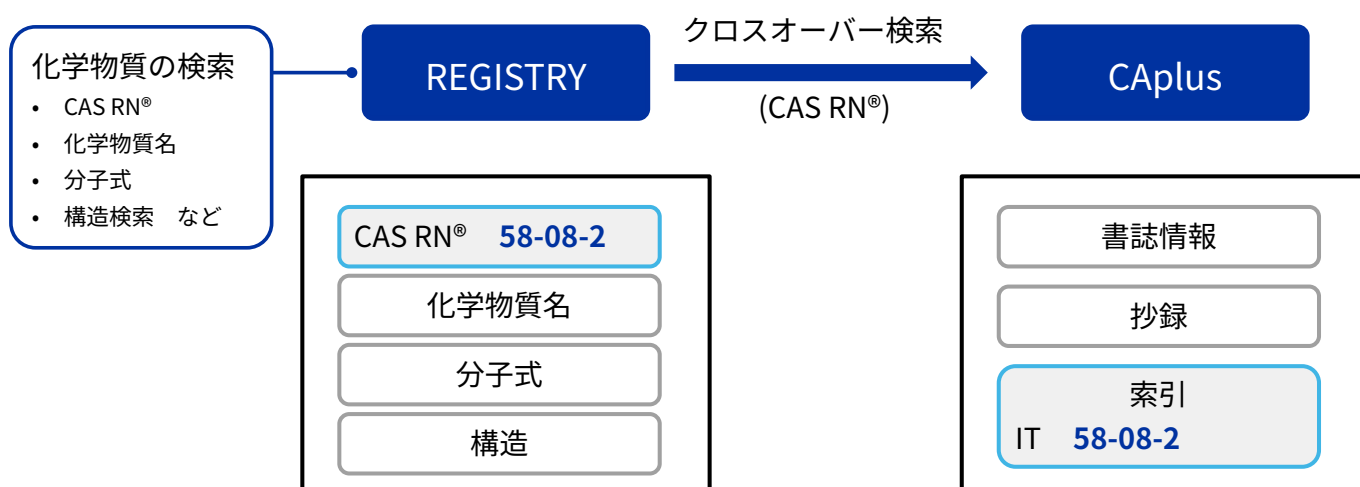
総説や学会会議録の場合

総説 (General Review) や学会会議録 (Conference) は、特許や雑誌の索引方針と異なる

- 総説や学会会議録の主題である化学物質が索引される
- 新たにデータが開示された化学物質は、基本的な索引方針に従い索引される
- 総説や学会会議録において以前に報告された情報は索引されない

化学物質に関する文献検索の流れ

REGISTRY ファイルから CAplus ファイルへクロスオーバー検索





化学物質の索引方針 - 各論

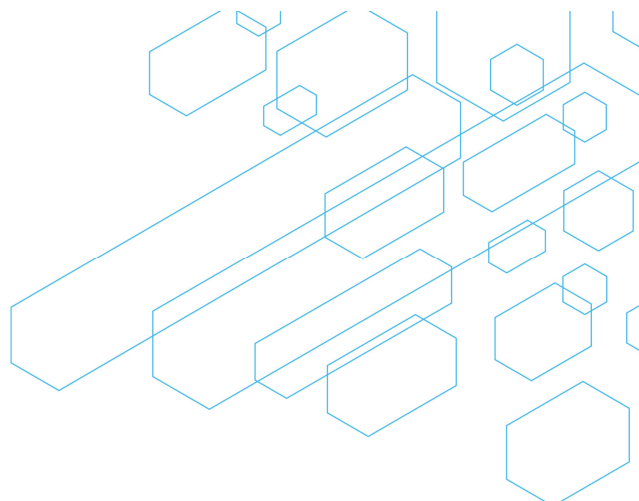
29 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



ご紹介する化学物質タイプ

化学物質タイプ	スライド番号
塩	31
配位化合物	40
水和物・溶媒和物	45
立体異性体	48
同位体	50
イオン・ラジカルイオン	55
優先形・非優先形	59
表形式無機化合物	63
ポリマー	67
核酸	71
タンパク質	72
Antibody Drug Conjugate (ADC)	74

30 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



塩の索引方針

CAPLUS ファイルでは、塩の CAS RN® で索引される

- 塩の種類に応じて REGISTRY ファイルでの登録形式が異なる

塩の種類

REGISTRY ファイルの塩は下記のように分類される

- 有機塩
 - 金属塩
 - カルボアニオンの塩
 - オニウム化合物の塩
 - アミン類の塩
- 無機塩

金属塩の索引 - レコード例

【原報の記述】

シュウ酸マグネシウム、リン酸マグネシウムまたは酢酸マグネシウムを主成分とする充填剤の製造方法。

IT Composites
(filler; thermally conductive composite filler, thermally conductive resin, magnesium salt-silicon carbide, and their manuf. methods)
IT Thermal conductors
(thermally conductive composite filler, thermally conductive resin contg. magnesium salt-silicon carbide, and their manuf. methods)
IT 142-72-3, Magnesium acetate, 409-21-2, Silicon carbide (SiC), uses 547-66-0, Magnesium oxalate, 1309-48-4, Magnesium oxide, uses 7757-86-0, 7786-30-3, Magnesium chloride, uses 10377-60-3, Magnesium nitrate
RL: SCLM (Substance claimed); TE: Thermally conductive material use); USES (Uses)
(thermally conductive composite resin contg. magnesium salt-silicon carbide, and their manuf. methods)

33

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



REGISTRY ファイルの登録 - 金属塩

塩の種類や構造によって多成分物質また単成分物質として登録される

- 多成分物質
 - ヘテロ原子* に結合している水素が無置換の金属で置換されて生成された塩
- 単成分物質
 - 環状構造をとる塩
 - 2 種類以上の有機成分と金属の塩

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
	RN 532-32-1 MF C7 H6 O2 . Na
NaNO_3	RN 7631-99-4 MF H N O3 . Na 無機塩 (スライド 38 参照)

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
CuC_2O_4	RN 814-91-5 MF C2 Cu O4
	RN 2142609-34-3 MF C14 H18 S2 Sn

* O, S, Se, Te, N, P, As

34

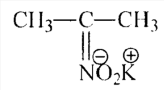
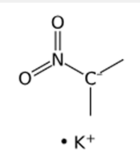
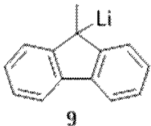
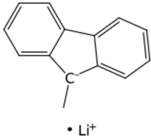
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



REGISTRY ファイルの登録 – カルボアニオンの塩

多成分物質として登録される

- 炭素上に電荷が局在化しているカルボアニオンの成分と、カチオンの金属の成分から成る

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
	RN 28273-55-4 CN Propane, 2-nitro-, ion(1-), potassium (1:1) MF C3 H6 N O2 . K 
	RN 64918-35-0 CN 9H-Fluorene, 9-methyl-, ion(1-), lithium (1:1) MF C14 H11 . Li 

35

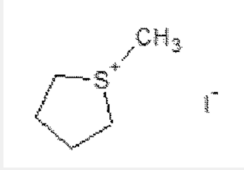
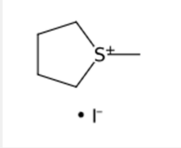
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

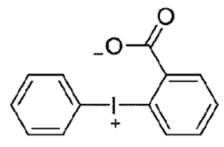
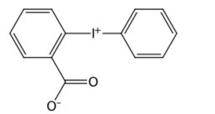


REGISTRY ファイルの登録 – オニウム化合物の塩

大部分のオニウム化合物の塩は、アニオンを独立成分とした多成分物質として登録されている

- 分子内塩を形成する場合には単成分物質で登録される
- 多成分物質：大部分のオニウム化合物の塩
- 単成分物質：分子内塩

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
	RN 28608-92-6 CN Thiophenium, tetrahydro-1-methyl-, iodide (1:1) MF C5 H11 S . I 

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
	RN 1488-42-2 CN Iodonium, (2-carboxyphenyl)phenyl-, inner salt MF C13 H9 I O2 

36

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



REGISTRY ファイルの登録 – アミン類の塩

多成分物質として登録される

- 例外：塩化アンモニウムは単成分物質として登録される

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
	RN 25596-29-6 CN Ethanamine, acetate (1:1) MF C2 H7 N . C2 H4 O2
	RN 56-34-8 CN Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, chloride (1:1) MF C8 H20 N . Cl
NH₄Cl	RN 12125-02-9 CN Ammonium chloride ((NH ₄)Cl) MF Cl H4 N 例外 (単成分物質)

37 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



REGISTRY ファイルの登録 – 無機塩

基本的に表形式無機化合物 (後述) として登録される

- 古い年代に登録された無機塩は単成分物質として登録されている
 - 表形式無機化合物 (TIS) として登録
 - 単成分物質として登録

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録			
塩化マンガン	RN	11132-78-8		
	CN	Manganese chloride		
	MF	Cl . Mn		
	CI	COM, TIS		
	Component	Ratio	Component	
			Registry Number	
	=====			
Cl	x		22537-15-1	
Mn	x		7439-96-5	

原報中の記載・構造	REGISTRY の登録
MnCl ₂	RN 7773-01-5 CN Manganese chloride (MnCl ₂) MF Cl ₂ Mn CI COM Cl-Mn-Cl

- 硝酸塩のように、ヘテロ原子に結合している水素が無置換の金属で置換されて生成された塩は金属塩と同じ登録となる (スライド 34 参照)

38 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



参考：医薬品の索引

医薬品が塩である場合、活性成分であるフリー体のみが索引されることがある

- 医薬品に関する文献検索では、フリー体も含めて検索する

【原報の記述】

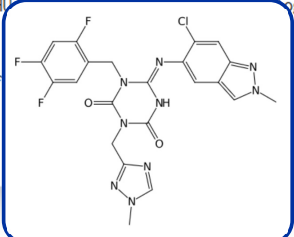
... at least one anti-viral agent is selected from the group consisting of ivermectin, oseltamivir, ..., **xocova**, ensovibep, ...

ゾコーバはエンシトレルビルのフマル酸塩だが、このレコードでは活性成分であるエンシトレルビル (2647530-73-0) が索引されていた

IT 36791-04-5 60940-34-3 70288-86-7, Ivermectin
82956-11-4 83799-24-0 134523-00-5 155213-67-5
158966-92-8 192725-17-0 196618-13-0 259793-96-9
375823-41-9 1809249-37-3 2492423-29-5
2647530-73-0 2742611-24-9, Ensovibep

RL: PAC (Pharmacological activity); SCLM (Substance claimed); THU (Therapeutic use);
USES (Uses)

(comps. al combination therapy f in patient)



配位化合物の索引方針

著者の記述によって、以下の2通りで索引される

- 全体の構造が明らかな場合 : 配位化合物の CAS RN® で索引
- 完全な構造が不明な場合 : 配位子と中心原子のそれぞれの CAS RN® + 接尾辞 D で索引
- ごく一般的な配位子は特に強調されていない限り索引されない

【原報の記述】

イオン交換膜に金エチレンジアミン錯体を吸着させて製造するイオン交換膜複合体

ST ion exchange membrane
IT Ion exchange membrane (gold-bonded; membranes)

IT 7440-57-5 D, Gold, ethylenediamine complex, processes

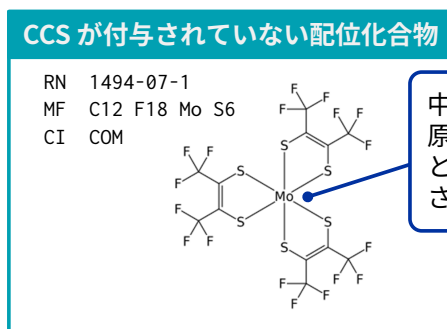
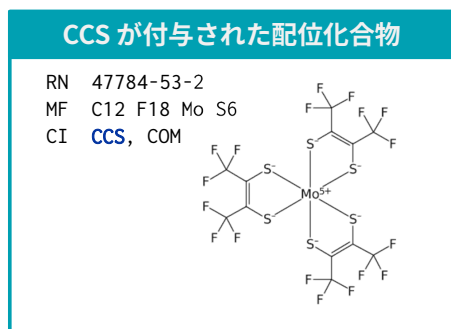
RL: PEP (Physical, engineering or chemical process); PROC (Process)
(in manuf. of gold-bonded ion-exchange membranes)

金 (7440-57-5) は D 付きで索引されているが、配位子である 1,2-エチレンジアミンは索引されていない

REGISTRY ファイルの登録 – 配位化合物

配位化合物にはクラス識別子 CCS が付与される

- CCS の定義：中心原子に他の原子、または原子団 (配位子) が結合し、それらと中心原子との間の結合数が原子価数に等しくない分子、またはイオンを指す。
中心原子に対する限定はないが、通常は金属原子である。
- 配位化合物であってもクラス識別子 CCS が付与されない場合がある



41

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

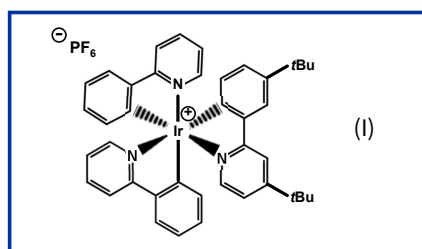


配位化合物の索引 - レコード例

全体の構造が明確な場合

【原報の記述】

Ir (ppy)₂(dtbpy)PF₆ 錯体 (I) の合成反応



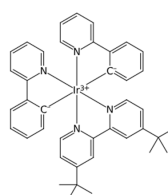
IT 94928-86-6 P 132958-92-0 P 149005-33-4 P 264906-16-3 P
370878-69-6 P 370878-73-2 P 391665-84-2 P 435293-93-9 P
911142-72-8 P 947254-90-2 P 1516880-30-0 P
2173009-59-9 P 2945838-99-1 P 3035069-10-1 P
RL SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(prepn. of iridium complex by mechanochem. reaction of
iridium halide compd.(s) with ligand(s))

対イオン PF₆⁻を含む多成分物質が索引

CM1

CCI

CCS



CM2

CCI

CCS



42

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

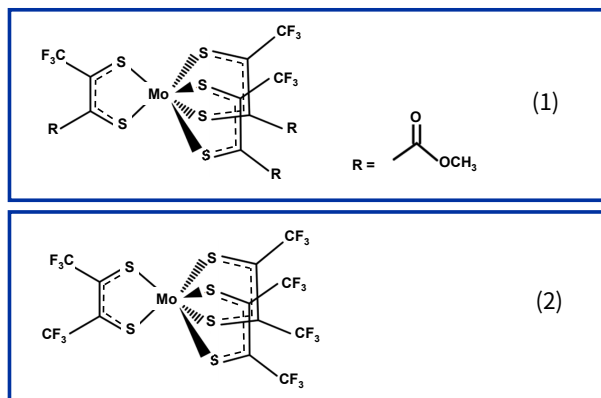


配位化合物の索引 - レコード例

全体の構造が明確な場合

【原報の記述】

下記式 (1) または (2) で表されるモリブデン錯体であることを特徴とする太陽電池。

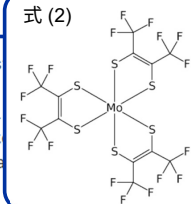


IT 1494-07-1
RL: SCLM (Substance claimed); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
(solar cell comprising hole transporting layer having an organic semiconductor and a molybdenum complex)

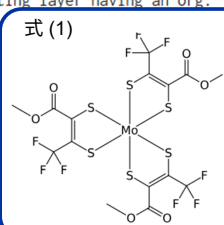
IT 7758-95-4, Lead methacrylate
RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
(solar cell comprising hole transporting layer having an organic semiconductor and a molybdenum complex)

IT 1609521-94-9
RL: SCLM (Substance claimed); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
(solar cell comprising hole transporting layer having an organic semiconductor and a molybdenum complex)

式 (2)



式 (1)



1494-07-1, 1609521-94-9 には
クラス識別子 CCS が付与されていない



配位化合物の索引 - レコード例

完全な構造が不明確な場合

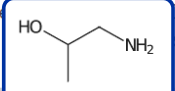
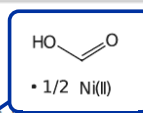
【原報の記述】

アミノ基を含有する配位子を有するギ酸ニッケル錯体を含む錯体で、前記アミノ基を含有する配位子が1-アミノ-2-プロパノール、及びエチレンジアミンから選択されるインク。

IT Amine complexes
RL: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
(mixed inks for manuf. of sintered bodies)

IT 78-96-6 D, 1-Amino-2-propanol, complexes with nickel formate
107-15-3 D, Ethylene diamine, complexes with nickel formate
RL: SCLM (Substance claimed); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)
(mixed inks for manuf. of sintered bodies)

96-20-8 D, 2-Amino-1-butanol, complexes with nickel formate
3349-06-2 D, Nickel formate, complexes
7440-50-8, Copper, uses



水和物・溶媒和物の索引方針

通常是非水和物/非溶媒和物の CAS RN® が索引される

- 水和物/溶媒和物の分子形が重要である場合には、水和物/溶媒和物の CAS RN® で索引される
 - 溶媒和物の物理化学的物性やプロセス
 - 結晶、結晶の成長、沈殿、溶解度、溶解速度
 - 溶媒和としての用途
(例：触媒、コンクリート、誘電体、イオン交換体、吸収剤、製薬、顔料、断熱材など)
- 特許クレーム中の水和物/溶媒和物は、水和物/溶媒和物の CAS RN® で索引される

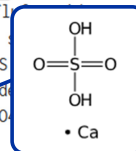
水和物・溶媒和物の索引 - レコード例

水和物・溶媒和物であることが重要ではない場合

【原報の記述】

・・・、沈降シリカ、硫酸カルシウム 2 水和物、尿素、リン酸 2 ナトリウムを混合し、粉末状農薬組成物を得た。

IT 119-12-0, Pyridaphenthion 950-37-8, DMTP 1861-40-1, Bethrodine 2921-88-2, Chlorpyrifos 5103-95-7, Beslogine 36001-88-4, Aminoprophos methyl 39515-41-8, Fenprothrin 68694-11-1, Triflumizole 180409-60-3, Cyfl
RL: AGR (Agricultural use); BSU (Biological study); UNCLASSIFIED; BIOL (Biological study); USES (light-stable powder or granular pesticide)
polyoxyalkylene ethers and kaolin or CaSO₄
IT 7778-18-9, Calcium sulfate 36348-64-8, Polyoxyethylene hexadecyl ether sulfate sodium salt 70903-63-8, Polyoxyethylene hexadecyl ether phosphate sodium salt 119432-41-6
RL: AGR (Agricultural use); BSU (Biological study); UNCLASSIFIED; MOA (Modifier or additive use); BIOL (Biological study); USES (Uses)
(light-stable powder or granular pesticides contg. polyoxyalkylene ethers and kaolin or CaSO₄)



水和物・溶媒和物の索引 - レコード例

水和物・溶媒和物であることが重要な場合

【原報の記述】

メトキシトリエチレングリコールを導入したポリ(3,4-エチレンジオキシチオフェン) (I) の合成

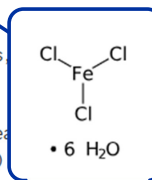
・・・装置にメタノール、水、メトキシトリエチレングリコール、3,4-エチレンジオキシチオフェンを入れ、室温で攪拌した。ここに塩化鉄(III)六水和物と過硫酸ナトリウムを加え、さらに室温で攪拌した。

IT 7440-44-0, Hipco, uses
RL: NANO (Nanomaterial); SCLM (Substance claimed); TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses) (nanotubes; novel polymers, conductive thin films, laminates, actuators, and manuf. thereof)

IT 7775-27-1, Sodium persulfate 10025-77-1, Iron(III) chloride hexahydrate
RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses) (novel polymers, conductive thin films, actuators, and manuf. thereof)

IT 62921-74-8 P 478051-00-2 P
RL: IMF (Industrial manufacture); RCT (Reaction); RACT (Reactant or reagent) (novel polymers, conductive thin films, laminates, actuators, and manuf. thereof)

IT 478051-01-3 P 3053515-20-8 P



触媒として利用されているので
水和物の CAS RN® が索引される

立体異性体の索引方針

- 著者や発明者が立体情報を強調・明記していない場合、原則として立体異性体はラセミ体 (平面構造) の CAS RN® で索引される
- エナンチオマー、ジアステレオマーが分離されており、存在比率の低い方を明らかに副生成物とみなしているような場合には、比率の高い方のみを索引する

立体異性体の索引 - レコード例

【原報の記述】

..., wherein the hydroxy acid other than lactate is selected from : group A consisting of 2-hydroxybutyric acid, ..., malic acid, 2-hydroxy-isobutyric acid, D-lactic acid, and the respective salt of any one of the foregoing.

IT 9078-32-4, Flavocytochrome b2
RL: ARG (Analytical reagent use)
(Analytical study); USES (Uses)
(FCb2; enzymic detection of

IT 9035-73-8, Oxidase
RL: ARG (Analytical reagent use)
(Analytical study); USES (Uses)
(enzyme; enzymic detection of

IT 79-14-1, Glycolic acid, analysis
2-Hydroxy-isobutyric acid 600-15-7, 2-Hydroxybutyric acid
617-31-2, 2-Hydroxyvaleric acid 617-73-2, 2-Hydroxyoctanoic acid
764-67-0, 2-Hydroxypalmitic acid 6915-15-7, Malic acid
10326-41-7, D-Lactic acid, analysis
RL: ANT (Analyte); SCLM (Substance claimed); ANST (Analytical study)
(enzymic detection of non-lactate hydroxy acids)

IT 50-21-5, Lactate, uses
dehydrogenase 9028-72-2,
RL: ARG (Analytical reagent use)
(Analytical study); USES (Uses)
(enzymic detection of no

原報に記載がないため、ラセミ体で索引される

原報にD体と記載されているためD体で索引される

同位体の索引方針

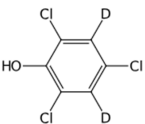
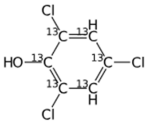
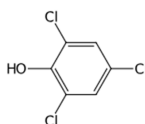
通常は、同位体標識化合物の CAS RN® が索引される

- 自然存在比が 98% 以上の同位体の場合は、原則として標準元素の CAS RN® が索引される
- 自然存在比が 98% 以上の同位体の例：
 ^1H , ^4He , ^9Be , ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O , ^{19}F , ^{23}Na , ^{27}Al , ^{31}P , ^{40}Ar , ^{45}Sc , ^{51}V , ^{55}Mn , ^{59}Co , ^{75}As , ^{89}Y , ^{93}Nb , ^{103}Rh , ^{127}I , ^{133}Cs , ^{139}La , ^{141}Pr , ^{159}Tb , ^{165}Ho , ^{169}Tm , ^{181}Ta , ^{197}Au , ^{209}Bi , ^{232}Th , ^{238}U
- 2001 年までは同位体標識化合物の製法に関する文献以外は非標識化合物の CAS RN® で索引していた

REGISTRY ファイルの登録 – 同位体

同位体標識化合物には独自の CAS RN® が付与される

- 重水素と三重水素は、個別の元素記号 (D, T) を用いた分子式が収録される
- 水素以外の元素の同位体は分子式に示されず、CA 索引名に反映される
- 同位体の数や位置の情報が明示されていない場合、CA 索引名は labeled with と表記される

D または T を含む同位体	水素以外の同位体	同位体の数や位置が不明
RN 93951-80-5 CN Phen-3,5-d2-ol, 2,4,6-trichloro- MF C6 H C13 D2 O 	RN 208461-28-3 CN Phenol-13C6, 2,4,6-trichloro- MF C6 H3 C13 O 	RN 68695-36-3 CN Phenol, 2,4,6-trichloro-, labeled with carbon-14 MF C6 H3 C13 O IL XC-14 

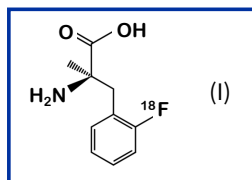
51 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



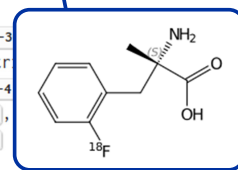
同位体の索引 - レコード例

【原報の記述】

[¹⁸F] フッ素イオンを用いた化合物 (I) の製造



IT	190143-07-8 P, 4-(Fluoro-18F)-α-methyl-L-phenylalanine	
	190143-08-9 P, 2-(Fluoro-18F)-α-methyl-L-phenylalanine	751470-99-2 P,
	3-(Fluoro-18F)-α-methyl-L-phenylalanine	2348449-01-2 P,
	2-(Fluoro-18F)-α-methyl-D-phenylalanine	2348449-11-4 P,
	3-(Fluoro-18F)-α-methyl-D-phenylalanine	2348449-12-5 P,
	4-(Fluoro-18F)-α-methyl-D-phenylalanine	
	RL: BSU (Biological study, unclassified); DGN (Diagnostic use); PAC (Pharmacological activity); SPN (Synthetic preparation); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses) (prepn. of radioactive fluorine-18 labeled α-methylphenylalanine for positron emission tomog. of tumors)	
IT	67-56-1, Methanol, reactions	3282-3
	6131-90-4, Acetic acid sodium salt tr	
	Lithium tetrafluoroborate	17350-84-4
	D-α-Methylphenylalanine	23239-35-2,
	L-α-Methylphenylalanine	23978-09-8
	:	



52 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



同位体の索引 - レコード例

自然存在数 98% 以上の同位体の文献

【原報の記述】

The library contains evaluated nuclear data, which are listed in Table 1.

Table 1 List of nuclides and MAT numbers

Nuclides

:	:
39Y	89
39Y	91
40Zr	92
40Zr	93
40Zr	94
:	:

53

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

IT 1333-74-0, Hydrogen, reactions 7440-44-0, Carbon, reactions

: 91Y の索引

reactions 14191-87-8, Mercury 199, reactions

14234-24-3, Yttrium 91, reactions 14234-29-8, Cesium

136, reactions 14255-03-9, Calcium 44, reactions 14257-58-0,

Sulfur 33, reactions 14258-72-1, Lithium 6, reactions

14265-72-6, Antimony 121, reactions 14265-76-0, Hafnium 179,

reactions 14265-77-1, Hafnium 178, reactions 14265-78-2,

Hafnium 180, reactions 14265-80-6, Tungsten 182, reactions

14265-81-7, Tungsten 183, reactions 14265-82-8, Tungsten 184,

reactions 14265-83-9, Tungsten 186, reactions

Actinium 225, reactions 14265-84-0, Yttrium 89, reactions

: 核種として ⁸⁹Y が記載されているが、自然存在数 98% 以上の同位体であるため、標準元素の Y (Yttrium) を索引

IT 7440-62-2, Vanadium, reactions

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

(vanadium 51 neutron cross sections in JENDL-3.3)

IT 7440-65-5, Yttrium, reactions

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

(yttrium 89 neutron cross sections in JENDL-3.3)



同位体の索引 - レコード例

2001 年よりも前の文献 (古いレコード)

【原報の記述】

Malonate did not show any effect on ¹³⁷Cs uptake at concentration of 0.05 µg/g body. On the other hand, the inhibition in ¹³⁷Cs uptake has been even more pronounced at 25 µg malonate/g body.

IT Heart, metabolism

Muscle, metabolism

(of cesium, glucose and malonate and succinate effect on)

IT 7440-46-2, biological studies

RL: BSU (biological study, unclassified); BIOL (Biological study)

(metabolism of, by muscle, glucose, malonate and succinate effect on)

原報では ¹³⁷Cs が記載されているが、同位体化合物の製造に関する文献ではないため、標準元素の Cs が索引された

IT 50-99-7, biological studies 110-15-6, biological studies

141-82-2, biological studies

RL: BIOL (Biological study)

(muscle metabolism of cesium response to)

54

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



イオン・ラジカルイオンの索引方針

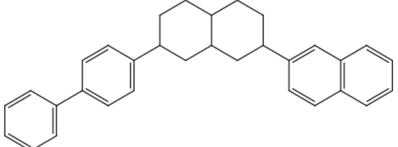
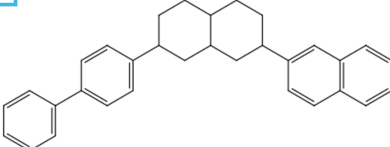
通常、イオンではない形で索引する

- 著者や発明者が文献中でイオンやラジカルイオンである局面を強調している場合は、該当する分子形の CAS RN® で索引される
- 双性イオンの場合、分子内塩に分類されるものの中にはイオンの形で索引されるものがある (スライド 36 参照)

REGISTRY ファイルの登録 – ラジカルイオン (RIS)

ラジカルイオンにはクラス識別子 RIS が付与される

- RIS の定義：不対電子と正または負の電荷をもつ有機化合物であり、形式的には中性化合物から電子を取り除くか、あるいは電子を付加することによって得られる物質
- ラジカルイオンであってもクラス識別子 RIS が付与されない場合がある (例：構造が不確定な物質、軸不斉などの特殊な立体化学を持つ物質)

RIS が付与されたラジカルイオン	RIS が付与されていないラジカルイオン
RN 188070-35-1 CN 2,2'-Binaphthalene, 7-[1,1'-biphenyl]-4-yl-1,2,3,4,4a,5,6,7,8,8a-decahydro-, radical ion(1-) CI RIS 	RN 173935-55-2 CN 2,2'-Binaphthalene, 7-[1,1'-biphenyl]-4-yl-1,2,3,4,4a,5,6,7,8,8a-decahydro-, radical ion(1+), (2α,4α,7β,8αβ)- 軸不斉を持つため RIS が付与されない 

イオン・ラジカルイオンの索引-レコード例

通常の索引

【原報の記述】

- 2 価陽イオンが亜鉛イオン、鉄イオン又は銅イオンであり、
3 価陽イオンが鉄イオンである吸着剤。

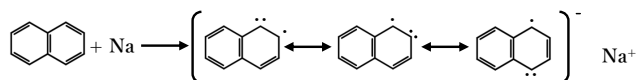
IT 7783-06-4, Hydrogen sulfide (H₂S), processes
RL: PEP (Physical, engineering or chemical process); PROC (Process)
(material capable of favorably adsorbing volatile sulfur compd. without performing heat treatment)
IT 497-19-8, 1310-73-2, 7782-63-0, Fe, 10125-13-0, Cu, 446-20-0
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
(material capable of favorably adsorbing volatile sulfur compd. in liq. phase without performing heat treatment)
IT 7439-89-6, Iron, uses 7440-50-8, Copper, uses 7440-66-6, Zinc, uses 7704-34-9, Sulfur, uses
RL: SCLM (Substance claimed); TEM (Technology employed in material use); USES (Uses)
(material capable of favorably adsorbing volatile sulfur compd. in liq. phase without performing heat treatment)
CN Iron, CN Copper, Fe, Cu, Zn

イオン・ラジカルイオンの索引-レコード例

著者や発明者が強調している場合

【原報の記述】

開始剤としてナトリウム-ナフタレンを使用することで、末端にヒドロキシル基を持つポリマーが収率よく生成することがわかった。



IT 7308-67-0, Lithium naphthalene, uses
RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)
(initiator; polyaddn. of bifunctional isoprene prepolymer terminated with hydroxy groups and diisocyanates)
IT 3481-12-7 P, Sodium naphthalene, preparation
RL: CAT (Catalyst use); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); USES (Uses)
(initiator; polyaddn. of bifunctional isoprene prepolymer terminated with hydroxy groups and diisocyanates)
IT 9003-31-0 DP, Polyisoprene
RL: PRP (Properties)
(polyaddn. of bifunctional isoprene prepolymer terminated with hydroxy groups and diisocyanates)
IT 584-84-9 DP, MDI, polymers with hydroxy-terminated polyisoprene
IT 822-06-0 DP, 1,6-Diisocyanatohexane, polymers with hydroxy-terminated polyisoprene
IT 929-26-0 DP, Naphthalene, radical ion(1-), sodium (1:1)
• Na⁺

優先形・非優先形の索引方針

物質によっては、索引に用いる優先形が決まっている化学物質がある

例

- アミノ酸 : L 体が優先形。原報で特に指定されていない限り L 体とみなして索引される
- 単糖類 : アノマー位の立体化学 (α -D-, β -D- など) が明記されているか、置換やエステル化などで環状構造に固定されていない限り、鎖状構造の CAS RN® が索引される
- 互変異性体 : 原則、優先される分子形で索引される。
著者が特に非優先の分子形を強調している場合は、その分子形で索引される

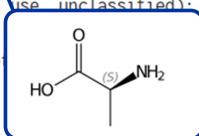
優先形・非優先形の索引 - レコード例

アミノ酸

【原報の記述】

セリン、アラニンおよびトリメチルグリシンの少なくとも 1 種を配合することを特徴とする皮膚外用薬。

IT 56-41-7, Alanine, biological studies 56-45-1, Serine, biological studies 107-43-7, Trimethylglycine
RL: BUU (Biological use unclassified); BIOL (Biological study); USES (Uses)
(antiaging cosmetic) and amino acids)

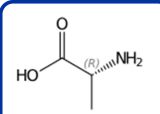


立体について明記されていないため、優先形である L 体が索引された

【原報の記述】

前記有効成分を D-アラニンに変更した以外は例 1 と同様にして実験を行った。

IT 71-00-1, L-Histidine, biological studies 72-18-4, L-Valine, biological studies 74-79-3, L-Arginine, biological studies 142-47-2, Sodium glutamate
338-69-2, D-Alanine 5891-53-2, Glutamyl



立体が明記されているので D 体が索引された

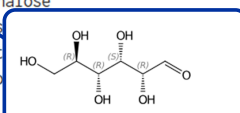
優先形・非優先形の索引方針

単糖類

【原報の記述】

・・・の糖類が、グルコース、フルクトース、キシロース、ラクトース、及びトレハロースから選択される・・・

IT 50-99-7, D-Glucose, analysis 57-48-7, D-Fructose, analysis 58-86-6, Xylose, analysis 63-42-3, Lactose 99-20-7, Trehalose
RL: ARU (Analytical role, unclassified); ANST (Analytical role, unclassified) (microorganism detection method); ANST (Analytical role, unclassified) (microorganism detection method)

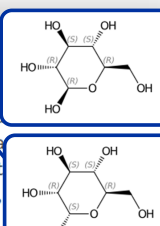


立体化学や環状構造についての言及がないため、優先形である鎖状の CAS RN® で索引された

【原報の記述】

・・・を加熱還流させ、D-グルコース (α 体/ β 体の混合物) を 15 分かけて段階的に加えた。

IT 492-61-5, β -D-Glucopyranose 492-62-6, α -D-Glucopyranose
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or product) (prepn. of glycosyl ascorbic acid); RACT (Reactant or product) (D-glucose via conversion into tetrahydrofuran)



立体が明記されているため環状の CAS RN® が索引された

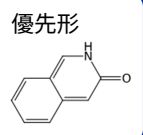
優先形・非優先形の索引 - レコード例

互変異性体

【原報の記述】

The title compound (b) was prepared from 3-isoquinolinol in the same fashion as Example 1.

IT 62-53-3, Aniline, reaction 74-89-5, Methanamine, reaction 79-04-9, 2-Chloroacetyl chloride
3-Quinolincarboxylic acid 7598-35-8, 4-Aminoquinolinecarboxylic acid 7651-81-2, 3-Isoquinolinol 7651-82-3, 6-Hydroxyisoquinoline 7651-83-4, 7-Hydroxyisoquinoline 10522-47-1, 5-Bromo-8-methoxyquinoline



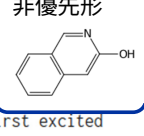
優先形

原報には非優先形のエノール型の名称が記載されていたが、特に強調していないので優先形の CAS RN® が索引された

【原報の記述】

Table 1 summarizes that the main geometrical parameters involved the proton transfer in the isolated 3-hydroxyisoquinoline are listed in Table I.

IT 7651-81-2, 3(2H)-Isoquinolinone 134434-31-4, 3-Isoquinolinol 300595-05-5 300595-06-6
RL: PEP (Physical, engineering or chemical properties); RCT (Reactant); PROC (Reactant or reagent) (ab initio study of mechanism of tautomerization of 3-hydroxyisoquinoline (3HIQ) in its first excited state)



非優先形

互変異性体の異性化に関する研究のため、非優先形の CAS RN® も索引された

表形式無機化合物の索引方針

結合表を作れない無機化合物は表形式無機化合物 (TIS) として登録され、その CAS RN® が索引される

- 結合表を作れない理由は下記の通り
 - 構造が不明である
 - 独立した分子を持たない物質
 - 3次元格子構造を持つ物質
 - 非化学量論的な成分を含む物質
(組成比が非整数ないし数値範囲で表される物質)

REGISTRY ファイルの登録 - 表形式無機化合物 (TIS)

- クラス識別子 TIS が付与される
- 組成比はモル比で収録される
 - 組成比は完全分子式 (MF) には含まれない
 - 組成比は CA 索引名、非優先分子式 (AF) や組成表に含まれる

```

RN 12030-85-2   REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Niobium potassium oxide (NbK03) (CA INDEX NAME)
:
MF K . Nb . O
:
AF K Nb O3
CI COM, TIS
    
```

組成比は非優先分子式 (AF) や表、CA 索引名に含まれる

Component	Ratio	Component Registry Number
O	3	17778-80-2
K	1	7440-09-7
Nb	1	7440-03-1

表形式無機化合物の索引 - レコード例

複合酸化物

【原報の記述】

前記導電性複合酸化物が、組成式: $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ (式中、 x は 0.02~0.50 の数) で表される複合酸化物であることを特徴とする触媒。

IT 911682-62-7, Lanthanum manganese strontium oxide (La0.5-0.98MnSr0.02-0.503)

RL: CAT (Catalyst use); SCLM (Substance claimed); USES (Uses)
(catalyst comprising elec. conductive perovskite-type (La,Sr)MnO₃, app., method for oxidative removal of hydrocarbons from exhaust gas)

IT 108916-22-9 P, Lanthanum manganese strontium oxide (La0.8MnSr0.203)
126345-48-0 P, Lanthanum manganese strontium oxide (La0.95MnSr0.0503)
140905-40-4 P, Lanthanum manganese strontium oxide (La0.95MnSr0.0503)
141588-90-1 P, Lanthanum manganese strontium oxide (La0.95MnSr0.0503)

RL: CAT (Catalyst use)
(catalyst comprising elec. conductive perovskite-type (La,Sr)MnO₃, app., method for oxidative removal of hydrocarbons from exhaust gas)

La と Sr の組成比は、規定された x をもとに算出した値が収録される

RN 911682-62-7 REGISTRY
CN Lanthanum manganese strontium oxide (La0.5-0.98MnSr0.02-0.503) (CA INDEX NAME)
MF La . Mn . O . Sr
AF La0.5-0.98 Mn O3 Sr0.02-0.5
CI TIS

Component	Ratio	Component Registry Number
O	3	17778-80-2
Sr	0.02 - 0.5	7440-24-6
Mn	1	7439-96-5
La	0.5 - 0.98	7439-91-0

表形式無機化合物の索引 - レコード例

複合酸化物

【原報の記述】

電極活性物質として $\text{LiMn}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{O}_2$ をコーティングさせた負極を得た。

IT 12031-65-1 P, Lithium nickel oxide (LiNiO₂)
128975-24-6 P, Lithium manganese nickel oxide (LiMn0.5Ni0.5O2)
144973-42-2 P, Lithium manganese nickel oxide (LiMn0.3Ni0.7O2)
163596-49-4 P, Lithium manganese nickel oxide (LiMn0.2Ni0.8O2)
166187-76-4 P, Lithium manganese oxide (LiMnO2)
172484-40-1 P, Aluminum lithium nickel oxide (Al0.1LiNi0.9O2)
179186-40-4 P, Lithium manganese nickel oxide (LiMn0.8Ni0.2O2)
179186-40-4 P, Lithium manganese nickel oxide (LiMn0.6Ni0.4O2)
179186-40-4 P, Lithium manganese nickel oxide (LiMn0.4Ni0.6O2)
179186-40-4 P, Lithium manganese nickel oxide (Al0.15LiNi0.85O2)

組成比をなるべく整数比になるように索引するというルールのため、明細書中の記載とは異なる存在比の CAS RN® で索引されている

RN 128975-24-6 REGISTRY
ED Entered STN: 24 Aug 1990
CN Lithium manganese nickel oxide (Li2MnNiO4) (CA INDEX NAME)
:
AF Li2 Mn Ni O4
:
Component | Ratio | Component Registry Number

O	4	17778-80-2
Ni	1	7440-02-0
Mn	1	7439-96-5
Li	2	7439-93-2

ポリマーの索引方針

ポリマーの種類により CAplus ファイルでの索引方針が異なる

ポリマーの種類	索引方針
- 縮合系ポリマー - ビニル系ポリマー - 一部の後処理を加えたポリマー (塩、付加化合物、エステル化、エーテル化など)	ポリマーの CAS RN® で索引
後処理を加えたポリマー (塩素化、アルキル化、アミド化、イミド化、加水分解など)	後処理前ポリマーの CAS RN® + D + キーワードで索引
- 石油系樹脂 - クマロン-インデン樹脂 - シリコーン*	統制語で索引

* 独自の CAS RN® を持つシリコーンの場合、CAS RN® も索引される

検索方法の詳細は「<詳細版> ポリマー検索」D 章参照

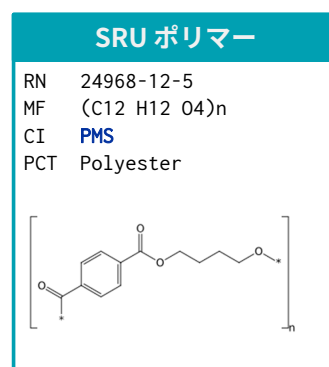
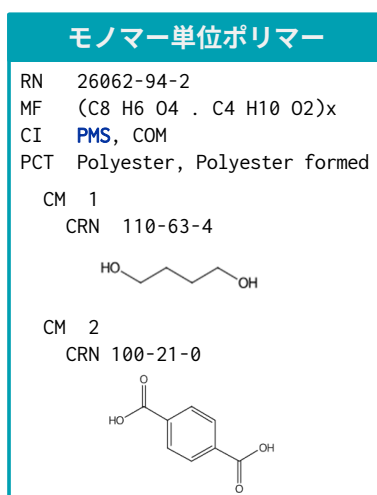
https://www.jaici.or.jp/download_file/view/f89ee95c-3b12-4d4d-b8ee-487225e36de9/

67 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



REGISTRY ファイルの登録 - ポリマー (PMS)

- ポリマー (PMS) の定義
 - 重合度 11 以上または重合度不明の物質
 - 重合後の構造が不明なオリゴマー
- 大部分のポリマーは主鎖を構成する「原料モノマー」に基づいて登録する (モノマー単位ポリマー)
- 規則的な構造の繰り返しで表すことができる縮合系ポリマーは、繰り返し単位でも登録される (SRU ポリマー)



68 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



参考：モノマーの索引方針

原則としてポリマーの CAS RN® が索引されるが、下記の場合はモノマーの CAS RN® が索引される

- モノマーを合成している場合
- 重合反応に関する研究をしている場合
- 特許の請求項で、ポリマーがモノマーの組み合わせとして表現されている場合 (2007 年 12 月以降)
- 特許の実施例で、モノマーを重合させてポリマーを得た場合 (2015 年 9 月以降)

ポリマーの索引 - レコード例

【原報の記述】

ポリブチレンテレフタレート製造

反応槽に、ジメチルテレフタレート、1,4-ブタンジオールを加え、槽内液温を 170 °C にした。

IT Polyesters
RL: IMF (Industrial manufacture); F (Formulation); P (Polymer in formulation); PRP (Properties); TEM (Technical or engineered material); TEP (Technical or engineered material preparation); USES (Uses)
(polyoxyalkylene-; polyester resin components and molded products)

IT 9037-99-4 P, 1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate-polyethylene glycol copolymer 24968-12-5 P, 1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate copolymer, structure 30965-26-5 P, 1,4-Butanediol-dimethyl terephthalate copolymer

RL: IMF (Industrial manufacture); POF (Polymer in formulation); PRP (Properties); TEM (Technical or engineered material); TEP (Technical or engineered material preparation); USES (Uses)
(polyester resin components and molded products)

IT 2184980-68-3 P, Ethylene glycol 1009-terephthalic acid copolymer
RL: IMF (Industrial manufacture); POF (Polymer in formulation); PRP (Properties); TEM (Technical or engineered material); TEP (Technical or engineered material preparation); USES (Uses)

CM1
CM2
HO-CH₂-CH₂-CH₂-CH₂-OH

核酸の索引方針

核酸は、原報に配列情報が記載されているかによって索引が異なる

配列情報を記載している文献*	配列情報を記載していない文献
化合物クラス名 (統制語)	化合物クラス名 (統制語)
核酸の CAS RN®	

- * 核酸の配列を記載しており、研究にとって重要だが新規性がない場合
- ・ 非特許文献 : 新規性がない配列なので核酸の CAS RN® は索引しない
 - ・ 特許 : 新規性がなくてもクレームされていれば核酸の CAS RN® を索引する
クレームされておらず、新規性もなければ CAS RN® は索引しない

収録基準や検索方法の詳細は「核酸・タンパク質の文献検索」参照
https://seminar.jaici.or.jp/doc/stn_segref.pdf



タンパク質の索引方針

タンパク質は、タンパク質の種類と研究内容によって索引が異なる

タンパク質の種類	研究内容	
	構造・配列の研究	機能・働きの研究
主に酵素やホルモン	CAS RN® (配列情報あり)	CAS RN® (配列情報なし)
主に酵素やホルモン以外のタンパク質	CAS RN® (配列情報あり)	化合物クラス名 (統制語)

- ・ 医薬品として使われているタンパク質の場合、配列情報の有無にかかわらず
医薬品名を持つ CAS RN® が索引される

収録基準や検索方法の詳細は「核酸・タンパク質の文献検索」参照
https://seminar.jaici.or.jp/doc/stn_segref.pdf



REGISTRY ファイル - 核酸・タンパク質の収録基準

- 核酸・タンパク質の定義
 - 核酸：塩基数が 9 以上の配列
 - タンパク質：アミノ酸が 4 以上の配列
- 由来となる文献の資料種類と年代によって収録基準* が異なる
 - 例：特許由来の配列
 - 1999 年 (核酸は 1999 年 10 月)～2014 年 4 月
新規性の有無や記載位置に関係なく、特許に記載されたすべての配列
 - 2014 年 5 月以降
請求項および実施例中の請求項に関連した主要な配列

* 収録基準の詳細は「<詳細版> REGISTRY ファイル配列検索」参照
https://www.jaici.or.jp/download_file/view/b2ba0aad-6fef-44c1-b51f-1b311a0d4bb5/

73 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

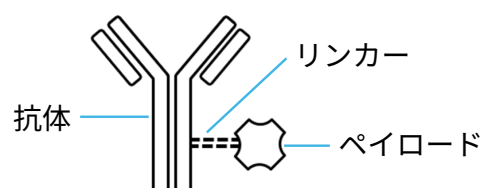


Antibody Drug Conjugate (ADC) の索引方針

ADC の索引は原報の記載により様々である

- ADC の CAS RN® が索引

```
IT 1607824-64-5, Naratuximab emtansine
RL: PAC (Pharmacological activity); THU (Therapeutic use); BIOL
(Biological study); USES (Uses)
(Debio 1562 (Naratuximab emtansine); anti-CD37 antibody drug conjugate
combination therapy with anti-CD20 antibody and dosing regimens
thereof)
```



- ペイロード、リンカー、抗体、ペイロードとリンカーの CAS RN® で索引

```
IT 180288-69-1 D, antibody conjugates
RL: PAC (Pharmacological activity); PRP (Properties); THU (Therapeutic
use); BIOL (Biological study); USES (Uses)
(method for prep. carrier-drug conjugate comprising heterogeneous
drugs for prevention and treatment of cancer)
IT 474645-27-7 D, antibody conjugates 3003834-30-5 D, antibody
conjugates 3003834-34-9 D, antibody conjugates
RL: PAC (Pharmacological activity); THU (Therapeutic use); BIOL
(Biological study); USES (Uses)
(method for prep. carrier-drug conjugate comprising heterogeneous
drugs for prevention and treatment of cancer)
```

抗体

ペイロード

- ADC に関する情報がテキスト説明句等に
含まれている

74 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



REGISTRY ファイルの登録 – ADC

ADC 全体としての登録



```

RN 1607824-64-5 REGISTRY
ED Entered STN: 21 May 2014
CN Immunoglobulin, anti-(human CD antigen CD37) (human-Mus musculus
monoclonal K7153A heavy chain), disulfide with human-Mus musculus
monoclonal K7153A light chain, dimer, tetraamide with
N2'-[3-[[1-[(trans-4-carboxycyclohexyl)methyl]-2,5-dioxo-3-
pyrrolidinyl]thio]-1-oxopropyl]-N2'-deacetylmaytansine (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN Debio 1562
CN IMGN 529
CN Naratuximab emtansine
FS PROTEIN SEQUENCE
MF Unspecified
CI MAN
SR
LC
SEQ 1 QVQVQESGPG LVAPSQTLSI TCTVSGFSLT TSGVSWVRQP PGKLEWLGV
**RELAT 51 IWGDGSTNYH PSLKSRSLIK KDHSKSQVFL KLNLSLAADT ATYYCAKGGY
101 SLAHWGQGTI VTVSSASTKG PSVFPLAPSS KSTSGGTAAL GCLVKDYFPE
*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***
** USE 'SQD' OR 'SQIDE' FORMATS TO DISPLAY SEQUENCE **

47 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
48 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
    
```

抗体の抗原、鎖などの情報

リンカーの部分名

ペイロードの部分名

医薬品名や開発コードが含まれることがある

配列情報を含む場合と、含まない場合がある

- ADC 全体としての登録は、USAN (United States Adopted Names : 米国一般名) や、INN (International Non-proprietary Names : 国際一般名) の情報を受け取ったときに作成される

75 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



REGISTRY ファイルの登録 – ADC (続き)

ADC の各部位ごとの登録

抗体、リンカー、ペイロードがそれぞれ単独の物質の CAS RN® を有する場合がある

- ペイロードとリンカーが結合した物質の CAS RN® を持つ場合がある

```

RN 180288-49-1 REGISTRY
ED Entered STN: 29 Aug 1996
CN Immunoglobulin G1, anti-(human p185-erbB2 receptor), disulfide with
rhuMab HER2 y1-chain), disulfide with human-Mus musculus
HER2 light chain, dimer (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN 2: PN: W02016077505 PAGE: 169 claimed protein
CN BM 130-93
CN Herceptin
CN Herveycta
CN Immunoglobulin G 1 (human-mouse monoclonal rhuMab HER2 y1-chain
anti-human p185-erbB2 receptor), disulfide with human-mouse monoclonal
rhuMab HER2 light chain, dimer
CN rhuMab 4D5
CN Trastuzumab
FS PROTEIN SEQUENCE
MF Unspecified
CI COM, MAN
SR
US US Adopted Names Council (USAN)
    
```

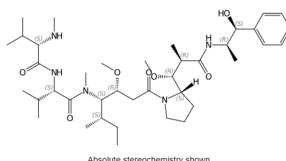
抗体



```

RN 474645-27-7 REGISTRY
ED Entered STN: 27 Nov 2004
CN L-Valinamide, N-[[[4-[[[N-[[[6-oxohexyl]-L-valyl-N5-(aminomethyl)amino]phenyl]methoxy]-(2S)-2-[[[(1R,2R)-3-[[[(1R,2S)-2-hydroxy-1-methyl-2-phenylethyl]amino]-1-methoxy-2-methyl-3-oxopropyl]-1-pyrrolidinyl]-2-methoxy]-1-[[1S)-1-methylpropyl]-4-oxobutyl]-N-methyl-L-valinamide
OTHER CA INDEX NAMES:
CN N-Methyl-L-valyl-N-[[[(1S,2R)-4-[(2S)-2-[[[(1R,2R)-3-[[[(1R,2S)-2-hydroxy-1-methyl-2-phenylethyl]amino]-1-methoxy-2-methyl-3-oxopropyl]-1-pyrrolidinyl]-2-methoxy]-1-[[1S)-1-methylpropyl]-4-oxobutyl]-N-methyl-L-valinamide
OTHER NAMES:
CN MMAE
    
```

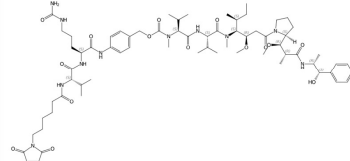
ペイロード



```

RN 646502-53-6 REGISTRY
ED Entered STN: 05 Feb 2004
CN L-Valinamide, N-[[[4-[[[N-[[[6-oxohexyl]-L-valyl-N5-(aminomethyl)amino]phenyl]methoxy]-(2S)-2-[[[(1R,2R)-3-[[[(1R,2S)-2-hydroxy-1-methyl-2-phenylethyl]amino]-1-methoxy-2-methyl-3-oxopropyl]-1-pyrrolidinyl]-2-methoxy]-1-[[1S)-1-methylpropyl]-4-oxobutyl]-N-methyl-L-valinamide
OTHER NAMES:
CN MC-Val-Cit-PAB-MMAE
CN MC-vc-PAB-MMAE
    
```

リンカーとペイロード



76 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



参考：定義の不完全な物質 (IDS)

分子式は確定しているが完全な構造が不明な物質 (IDS) も REGISTRY ファイルに収録し、CAplus ファイルに索引される

- 定義の不完全な物質 (IDS) の種類

- ① 置換基の位置が不明な物質
- ② 飽和または不飽和結合の位置が不明な物質
- ③ 枝分かれ構造が不明なアルキル鎖を含む物質
- ④ 環構造が不明な糖基を含む物質
- ⑤ 縮合反応生成物で、正確な構造が不明な物質

- 定義の不完全な物質のレコードは、構造図だけでなく、分子式や CA 索引名から構造を判断するのが重要である

① 置換基の位置が不明な物質

RN 1330-20-7
CN Benzene, dimethyl-
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Xylene (8CI)
MF C8 H10



2 [D1—]

キシレンの2つのメチル基の位置が不明

詳細は「REGISTRY 検索テクニック 2013」参照

https://www.jaici.or.jp/download_file/view/6ec43f96-c153-4cce-bf01-2d0a6882ecf6/

77 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



参考

78 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



複数のレコードが作成される場合

CAplus ファイルのレコード構成は、1 レコード= 1 文献 (1 レコード= 1 特許ファミリー) 単位であるが、複数のレコードが作成される場合がある

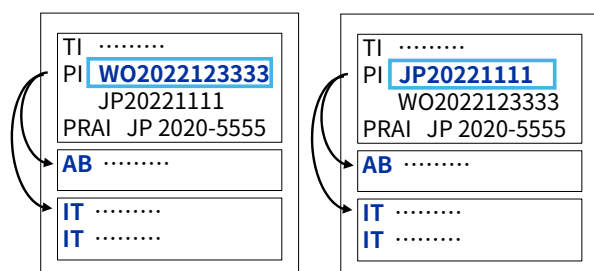
- 主な例
 - ダブルベーシック特許のレコード
 - 索引が多いレコード

ダブルベーシック特許

より網羅的な検索が可能に

PCT 出願公報および PCT 出願の基礎となった最も古い優先権情報を持つ国内出願公報の両方をベーシック特許として収録する

- PCT 出願公報にしか記載されていない化学物質や配列の情報も索引されるため、より網羅的な検索が可能となる
- 特許発行国/機関により対象となる年代が異なる。詳細は「<詳細版> CA 文献検索」参照
https://www.jaici.or.jp/download_file/view/a8f8f93d-63cd-4fe5-b732-c7932c94ba0f/



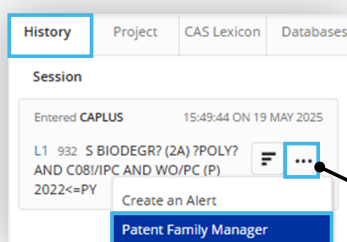
各レコードにおいて、ベーシック特許を元に索引や抄録を作成する

ダブルベーシック特許の重複除去

Patent Family Manager

ダブルベーシック特許のレコードが同一の化学物質索引である場合もあり、その場合には SO (収録源) フィールドに “Chemical Indexing Equivalent to …” と表示される (…部分に該当の CA 抄録番号が入る)

- 同一の化学物質索引を持つダブルベーシック特許の重複を除きたい場合は、CAS STNext の Patent Family Manager (特許ファミリーマネージャー) を利用する
- “Chemical Indexing Equivalent” タグを利用して、ダブルベーシック特許を判別する



History タブの三点アイコンから Patent Family Manager をクリックする

81

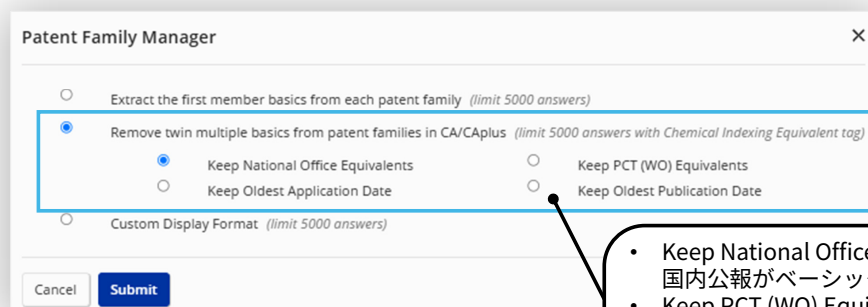
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



ダブルベーシック特許の重複除去

Patent Family Manager

残すレコードを選択して Submit をクリックすると、Patent Family Manager が自動実行され、重複を除いた回答セットが作成される



- Keep National Office Equivalents
国内公報がベーシック特許のレコードを残す
- Keep PCT (WO) Equivalents
PCT (WO) 公報がベーシック特許のレコードを残す
- Keep Oldest Application Date
ベーシック特許の出願日が古い方を残す
- Keep Oldest Publication Date
ベーシック特許の発行日が古い方を残す

82

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



索引の多いレコード

レコードの分割

多くの配列や Prophetic 物質の収録により索引数が CAS STNext のシステム制限値を超える場合、**複数のレコードに分割**される

- 1 レコードに索引される物質が、約 5,000 を超える場合に分割される
- 分割されたレコードには、抄録中に何件のレコードに分割されているか示す記述がある

```
AN 2009:1076201 CAPLUS Full-text
DN 151:259362
TI Pyrimidinium compounds as mesoionic pesticides and their preparation
:
AB Disclosed are compds. of formula I, compns. of formula I and methods for controlling an invertebrate pest of formula I and methods for controlling an invertebrate pest
:
[This abstr. record is one of 8 records for this document necessitated by the large no. of index entries required to fully index the document and publication system constraints.]
```

8 レコードに分割

分割されたレコードの重複除去

DUPLICATE コマンド

分割されたレコードを簡単に重複除去するには、**DUPLICATE REMOVE コマンド**を使用する

- 最新のレコードのみが得られるが、対応特許の情報が含まれない
- 対応特許の情報は、基本となった最も古いレコードのみに含まれる

```
=> S (PYRIMIDINIUM COMPOUNDS AS MESOIONIC PESTICIDES AND THEIR PREPAR ATION)/TI
L1 8 (PYRIMIDINIUM COMPOUNDS AS MESOIONIC PESTICIDES AND THEIR PREPAR ATION)/TI
```

```
=> DUP REM L1
L2 1 DUP REM L1 (7 DUPLICATES REMOVED)
```

DUP REM コマンドを実行すると、重複文献が除去され、新たな回答セットが作成される

```
=> D
L2 ANSWER 1 OF 1 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN DUPLICATE 1
AN 2009:1076201 CAPLUS Full-text
DN 151:259362
TI Pyrimidinium compounds as mesoionic pesticides and th
```

重複文献には、DUPLICATE 番号が付与される

まとめ

- CPlus ファイルは、CAS のアナリストが原報の全文を読み込んで作成した索引情報を付与している
- 化学物質索引は、物質のタイプや原報での記載によって索引方針が異なるため、網羅的な調査の際には様々な索引パターンを考慮して検索する

JAICI について

一般社団法人化学情報協会 (JAICI) は、化学技術情報の流通を図るため 1971 年に設立されました。米国 CAS をはじめ世界各国の情報機関などと協力関係を築き、日本の研究者をサポートする情報センターとして、大学・企業などの情報取得・分析から研究・開発までを支援しています。

CAS STNext に関するお問い合わせ先
<https://www.jaici.or.jp/inquiry/>

About CAS

CAS connects the world's scientific knowledge to accelerate breakthroughs that improve lives. We empower global innovators to efficiently navigate today's complex data landscape and make confident decisions in each phase of the innovation journey. As a specialist in scientific knowledge management, our team builds the largest authoritative collection of human-curated scientific data in the world and provides essential information solutions, services, and expertise. Scientists, patent professionals, and business leaders across industries rely on CAS to help them uncover opportunities, mitigate risks, and unlock shared knowledge so they can get from inspiration to innovation faster. CAS is a division of the American Chemical Society. Connect with us at **cas.org**