

超越专利检索

STN® 全新改版——CAS IP FINDER™ 重构专业检索体验， 让知识产权情报触手可及

陈开乾 博士，美国化学文摘社 (CAS)

CAS

A division of the
American Chemical Society



药物研发知识产权信息被淹没在海量数据中

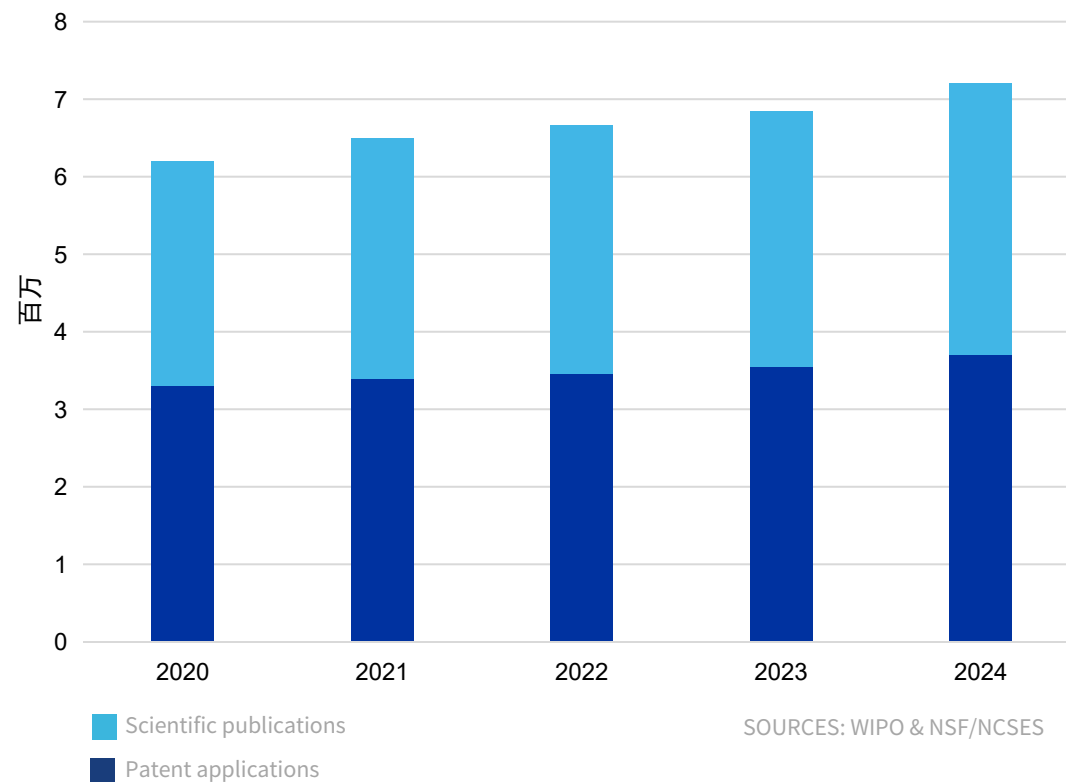
科学与专利数据爆发增长，情报挖掘难度加剧

海量数据

- 科学文献与专利分散在互不打通的数据源，数据体量与全球覆盖范围持续扩大

日益增长的复杂性

- 各来源信息编码标准不一，异构数据并存，重要的技术关联极易被掩盖，难以识别



海量异构数据，导致关键技术关联难以被发现

现有检索工具的核心痛点：效率与风险的权衡

简单专利工具：易用但风险高

- 操作便捷，但结果准确性不足：虽然容易上手，但是无法保证检索结果的全面性与精确性
- 关键信息遗漏：无法在单一平台有效检索 Markush 结构和非专利文献，导致关键技术信息缺失
- 潜在侵权风险：信息不全直接导致 FTO 风险，为后续研发与商业化埋下隐患

专业检索工具：精准但效率低

- 结果精准，但使用门槛极高：虽然能提供准确结果，但需要专业的检索知识，普通研发人员难以掌握。
- 协作与赋能困难：工具的复杂性导致团队协作效率低下，难以将情报能力有效赋能给广大研发团队。
- 研发流程脱节：专业工具与日常研发流程存在壁垒，无法实现高效的信息流转与决策支持。

CAS IP Finder 输出可落地知识产权业务成果

从情报检索到业务落地，释放知识产权实际价值

提升效率

- 获取全面高质量知识产权情报，贯穿创新研发全流程，减少返工迭代，加速产品上市进程。

拓展机遇

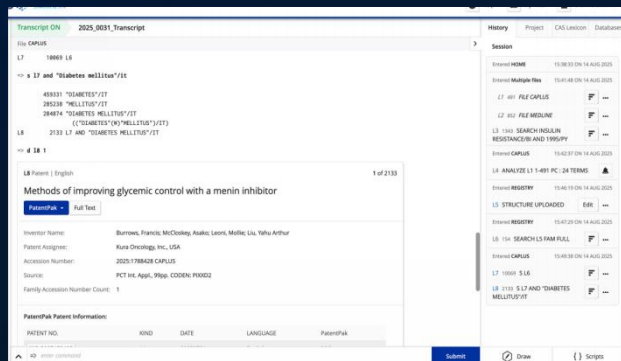
- 洞察技术空白赛道，对标竞争对手，优化专利布局策略；丰富产品管线，最大化知识产权资产价值。

风险管控

- 依托完整情报实现数据驱动决策，全局识别知识产权隐患，降低 FTO 与商业化风险，保障项目商业成功。

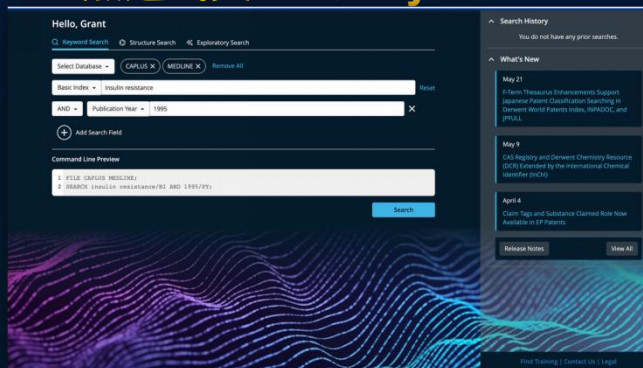
多元检索模式，满足各类情报需求

指令式检索



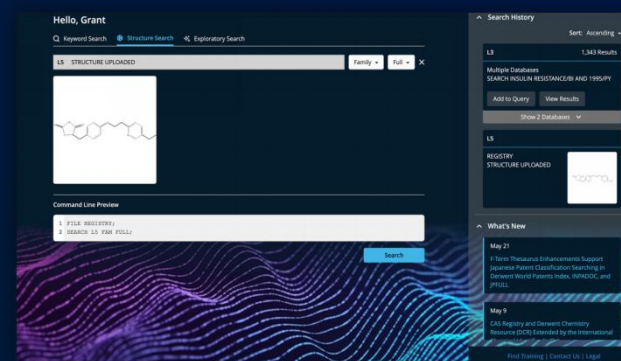
面向资深情报专家，支持完整STN检索语法，实现多数据库精准检索，是情报专家信赖的检索方式。

点选式交互 Query Builder



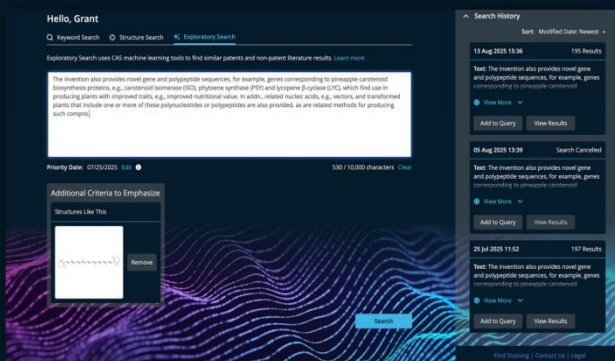
面向日常检索人员，可视化操作界面，无需掌握指令语法，即可完成 STN 级别高精度检索。

结构检索



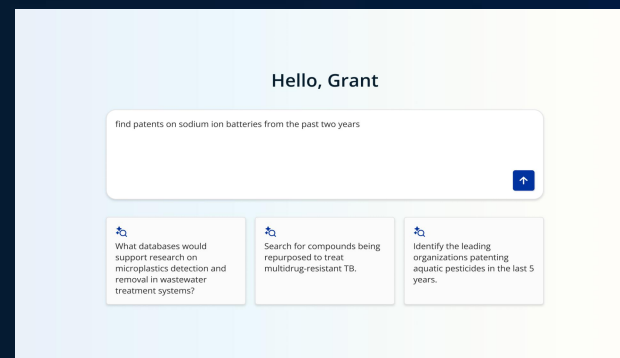
面向化学结构检索从业者，搭载 CAS 专属结构绘制工具，支持化学结构维度的专利与文献检索。

探索性检索



适用于自由文本发散调研；粘贴摘要、权利要求、新闻稿件，AI自动匹配高度相关专利与非专利文献。

CAS NewtonSM



面向对话式情报挖掘，专为研发与知识产权人员打造的科学智能助手；接收自然语言提问，自动构建检索策略并输出答案。

一站式整合多源权威数据，赋能知识产权情报检索

100+

全球高质量数据库集合

覆盖科技文献和全球专利；依托 CAS 深度人工标引，整合全球高质量第三方数据源。

一个平台实现多库+精准检索

CAS IP Finder 将海量内容整合为可定向检索资源，支持知识产权人员同时检索多个数据库，高效定位目标情报信息。



人工标引 CAS 内容

CAS 科学家人工标引物质、化学反应与理化属性，构建权威的化学基础数据集。



全球领先的专利内容

汇集全球主要专利局全文专利，融合 Derwent 世界专利索引、PatentPak 专利工作流程方案，覆盖全球含非英语语种专利。



非专利文献

整合主流出版商期刊、会议论文、学位论文等科研公开文献资源。



专业数据库

包含序列、化学结构、配方以及生命科学拓展数据，覆盖 SAR、ADME、毒性等关键研发信息。

CAS 科学家对专利文献的多维度挖掘及标引

Example WO2025195327 from Beijing Avistone Biotechnology Co., Ltd.

(12) 按照专利合作条约所公布的国际申请

(19) 世界知识产权组织
国际局

(43) 国际公布日
2025 年 9 月 25 日 (25.09.2025)

WIPO PCT

(10) 国际公布号
WO 2025/195327 A1

(51) 国际专利分类号:
C07D 498/14 (2006.01) A61K 31/5383 (2006.01)
C07D 498/20 (2006.01) A61K 31/5386 (2006.01)
C07D 498/22 (2006.01) A61P 35/00 (2006.01)
C07D 519/00 (2006.01)

(21) 国际申请号: PCT/CN2025/082933

(22) 国际申请日: 2025 年 3 月 17 日 (17.03.2025)

(25) 申请语言: 中文

(26) 公布语言: 中文

(30) 优先权:
202410312074.2 2024 年 3 月 19 日 (19.03.2024) CN
202411294647.X 2024 年 9 月 14 日 (14.09.2024) CN

(71) 申请人: 北京爱石生物科技股份有限公司(BEIJING AVISTONE BIOTECHNOLOGY CO., LTD.) [CN/CN]; 中国北京市朝阳区利泽中二路望京科技园B座5层502 100102 (CN)。

(72) 发明人: 薛海(XUE, Hai); 中国北京市朝阳区利泽中二路望京科技园B座5层502 100102 (CN)。石和鹏(SHI, Hepeng); 中国北京市朝阳区利泽中二路望京科技园B座5层502 100102 (CN)。张培龙(ZHANG, Peilong); 中国北京市朝阳区利泽中二路望京科技园B座5层502 100102 (CN)。李祥秋(LI, Xiangqiu); 中国北京市朝阳区利泽中二路望京科技园B座5层502 100102 (CN)。兰文丽(LAN, Wenli); 中国北京市朝阳区利泽中二路望京科技园B座5层502 100102 (CN)。

(74) 代理人: 北京乾成律信知识产权代理有限公司(BEIJING LAWSING IP LTD.); 中国北京市海淀区知春路6号锦秋国际大厦A座2008室 100089 (CN)。

(81) 指定国(除另有指明, 要求每一种可提供的国家保护): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UY, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW。

(84) 指定地区(除另有指明, 要求每一种可提供的地区保护): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 欧亚 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 欧洲 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG)。

本国际公布:
— 包括国际检索报告(条约第21条(3))。

(54) Title: SPIRO/BRIDGED POLYCYCLIC COMPOUNDS AS WELL AS PREPARATION METHOD THEREOF AND USE THEREOF

11 claims

42 concepts

522 substances

9 Markush structure

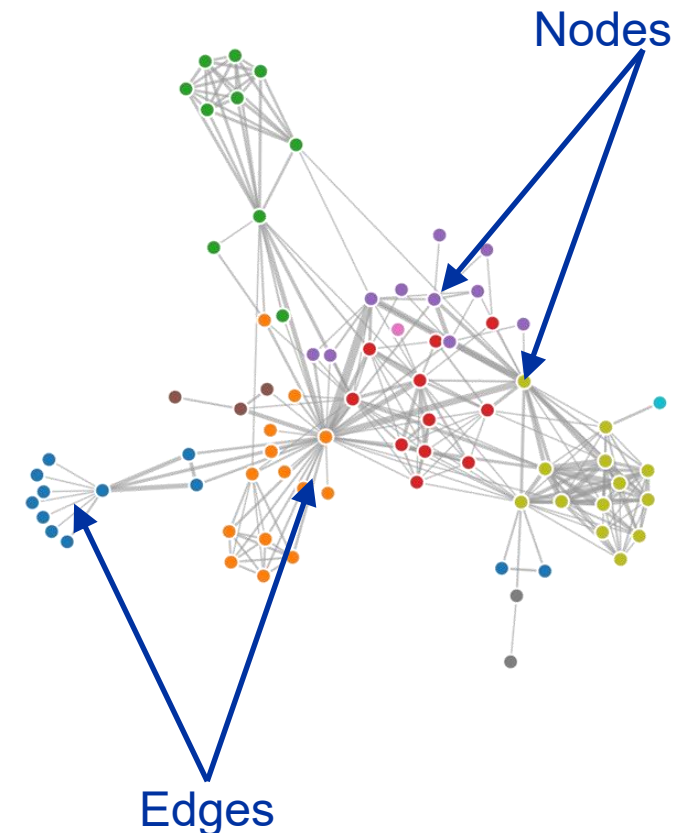
449 reactions

124 Pharmacological Data

43 ADME Data

3 patent family members

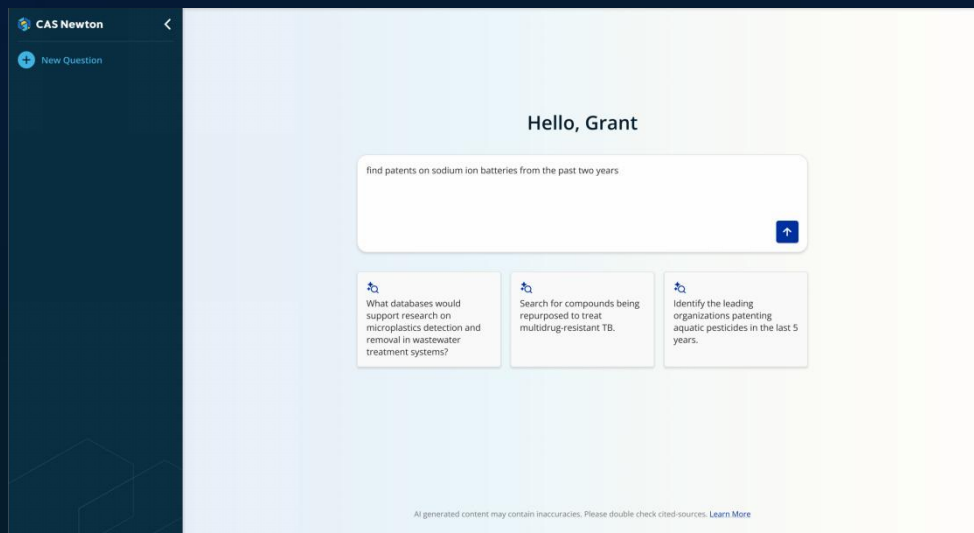
5 cited documents



CAS NewtonSM 对话式AI，缩短情报调研和立项分析周期

用日常语言提问，CAS Newton 执行检索，您始终掌控全局

1. 用您擅长的语言提问



一次提问，全面检索

CAS Newton 会在你授权的所有数据库中检索：专利、文献、结构和序列，而且都是一次对话完成。

简单易用

不用语法，也不用挑数据库。跟 CAS Newton 聊天就像跟同事聊天一样。

2. CAS Newton 构建指令并完成检索



指令全程可见

CAS Newton 显示它选取的数据库和生成的指令。您仍然掌控全局。

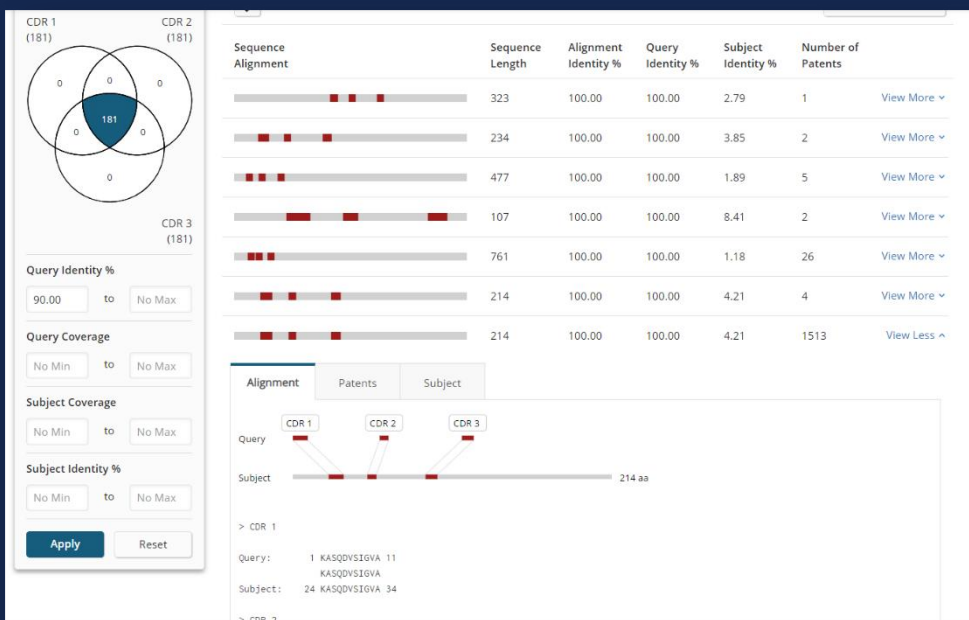
提供洞察，而非仅仅是结果

自然语言总结提供清晰明确的见解

CAS 生物序列

专注用户体验，满足您的一切需求

CAS Sequences



- CAS REGISTRY, DGENE, USGENE, PCTGEN 等多个权威数据库；
- 进行 BLAST， CDR 和 Motif 序列检索；
- 为用户提供序列结构、序列修饰、技术概念、法律状态等丰富的专利信息以及权利要求文本查阅。

CAS 生物活性信息

缓解数据碎片化、信息复杂度高、调研耗时长的痛点

CAS Bioactivity

Select Database ▾ CASBIOACTIVI ✕ Remove All

Basic Index ▾ antifungal drug

AND ▾ SAR Parameter ▾ mic

L1 Results for "ANTIFUNGAL DRUG AND MIC/SPAM"

CASBIOACTIVI (6) Sort: Ligand RN Descending

☐ Create Report

☐ 1

873546-31-7

Ligand Entry Date: Entered STN: 26 Jun 2025

Chemical Name: Benzenecarboximidamide, 4,4'-[1,4-piperidinediylbis(3,1-propanediylloxy)]bis- (CA Index Name)

Ligand InChI String: InChI=1S/C25H35N5O2/c26-24(27)20-4-8-22(9-5-20)31-17-1-3-19-12-15-30(16-13-19)14-2-18-32-23-10-6-21(7-11-23)25(28)29/h4-11,19H,1-3,12-18H2,(H3,26,27)(H3,28,29)

Ligand InChI Key: KUNDLEJVAIBADY-UHFFFAOYSA-N

ADME Assay Count: 28

☐ 1 Previous Next ↗ ✕

^ SAR Properties

(15) 44th Interscience Conference on Antimicrobial Agents and Chemotherapy (Abstr. F-847), 2004,Locator: T-23207

Target Name	TRICHOSPORON ASAHII
Parameter	norm:MIC
Value	orig:2 ug/mL, norm:2 mg/L
Organism	Trichosporon asahii

CAS Bioactivity 数据库拥有业界规模领先的归一化、标准化生命科学数据集。

- 汇集海量 ADME、毒理 (TOX) 与构效关系 (SAR) 实验数据
- 深度人工标引，能够精准挖掘常规检索难以获取的隐匿活性数据
- 支持传统指令检索，也可使用全新可视化交互界面开展查询
- 面向药物研发与知识产权检索人员专项设计

应用案例

支持药物创新中的知识产权决策

检索场景 1: 查找 EGFR 抑制剂近三年过期的专利

无需复杂口令，点选式操作即可获得所需信息

Keyword Search

Structure Search

Exploratory Search

Get started faster with CAS NewtonSM
Our new AI chat experience helps you uncover insights quicker. Learn more. [Ask CAS Newton](#)

Select Database INPADOCDB [Remove All](#)

Basic Index EGFR inhibitor

AND Expiration Year 2023-2026

Add Field Previous Search

Command Line Preview

```
1 FILE INPADOCDB;
2 SEARCH EGFR inhibitor AND 2023-2026/XPY;
```

L17 Results for "EGFR INHIBITOR AND 2023-2026/XPY"

INPADOCDB (149)

☐ Create Report

☐ 1 Patent | 20250529

Methods of treating gefitinib resistant cancers.

Abstract: The present invention relates to methods of treating gefitinib and/or erlotinib resistant cancers. A cancer patient is monitored for cancer progression following treatment with gefitinib and/or erlotinib. The progression of cancer indicates that the cancer is resistant...

☐ 2 Patent | 20230727

METHOD FOR TREATING GEFITINIB RESISTANT CANCER.

Abstract: The present invention is directed to methods for the treatment of gefitinib and/or erlotinib resistant cancer.

Show 25 per page Previous [1](#) [2](#) [3](#) [4](#) [5](#) [6](#) Next

DAV 20250523 unexamined-printed-without-grant

STA PRE-GRANT PUBLICATION

XPB 20260202

STI DEAD

AS National Office

National Office

AL English

Chinese

计算的专利到期日

Priority Application Information

Priority Application Number

US 2005-649483P

Priority Kind

P

Priority Application Date

20050203

Priority Kind Text

USP Provisional application (Y,20140220)

Priority Application Number

US 2005-671989P

Copyright 2026 EPO/FIZ KA on STN INPADOCDB

满足不同立项调研需求

主要作用靶点

从数据中识别出的肺癌TGI相关靶点:

靶点	代表化合物数量	典型IC50范围
PDE6S	~15个测试	0.7-1.5 μM
EGFR	数百个	0.1-10 μM
KRAS	数十个	0.1-10 μM
ALK	数十个	0.1-10 μM
多靶点抑制剂	大量	0.1-10 μM

总结归纳与趋势分析

活性趋势分析

1. 高活性化合物的活性范围:

- 纳摩尔级 (nM): 极高活性, 如PDE6S
- 亚微摩尔级 (0.1-1 μM): 高活性
- 低微摩尔级 (1-10 μM): 中等活性
- >50 μM: 低活性

2. 研究热点:

- KRAS突变型肺癌: 针对KRAS G12C
- PDE6S依赖性信号通路: 阻断RAS
- 免疫检查点联合治疗: TGI抑制剂与

3. 测试模型:

- 体外: 人肺癌细胞系 (NCI-H358, SK-LU-1, NCI-H460等)
- 体内: KRAS/TP53突变小鼠模型, PDX模型

2. 其他值得关注的高活性配体类型

基于检索的4,028个IC50化合物, 主要类别包括:

A. 哌嗪二酮衍生物系列

- RN: 3123586-33-1 (2-甲氧基苯亚甲基哌嗪二酮)
- RN: 3123586-32-0 (4-溴苯亚甲基哌嗪二酮)
- RN: 3123586-30-8 (4-甲基苯亚甲基哌嗪二酮)

活性: 大多数GI50 > 50 μM (筛选中中等活性)

测试细胞系: H460 (肺癌), MCF-7, HT-29等多种肿瘤细胞系

B. KRAS抑制剂类

- RN: 3099574-58-7 (吡啶羧酰胺衍生物)
- RN: 3085516-79-3 (哌嗪乙腈衍生物)

C. EGFR/多激酶抑制剂类

- RN: 3097651-16-3 (喹唑啉胺衍生物)
- RN: 3087688-92-1, 3067470-12-3

不仅总结现有内容, 还有洞察

最具前景的化合物特征

根据高活性化合物的结构分析:

核心结构特征:

1. 磺酰胺基团: 增强靶点结合力
2. 杂环芳香结构: 吡啶、喹唑啉、哌嗪等
3. 氟取代: 提高代谢稳定性和生物利用度
4. 柔性连接基: 允许与靶点的构象适应

CAS Newton: 适配不同检索场景

查ADC药物信息，用哪些关键词比较好？

检索策略定制

您好！搜索ADC（抗体偶联药物，Antibody-Drug Conjugate）药物信息时，我建议使用以下关键词策略：

核心关键词

1. 主要术语：

- antibody drug conjugate? 或 antibody-drug conjugate?
- ADC 或 ADCs
- immunocojugate?
- antibody conjugate?

2. 相关组成部分：

- 抗体部分：monoclonal antibod?, mAb?, antibod?
- 连接器：linker, linker technology, cleavable linker, non-cleavable linker
- 有效载荷/毒素：payload, cytotoxic agent?, cytotoxic drug?, warhead
- 常见毒素：auristatin?, maytansinoid?, calicheamicin?, duocarmycin?, pyrrolobenzodiazepine?, PBD

3. 搜索示例组合：

```
(antibody(W)drug(W)conjugate?) OR ADC OR ADCs OR immunoconjugate?
```

建议您先告诉我：

1. 您想查什么类型的文献？

- 专利？
- 期刊文章？
- 两者都要？

2. 有特定的研究方向吗？

- 特定靶点（如HER2, CD20等）？
- 特定药物（如Kadcyla, Adcetris等）？
- 制备方法？
- 临床应用？

告诉我这些信息后，我可以为您推荐最合适的数据库并制定更精准的搜索策略！

12:11:48

我想查小核酸药物信息，去哪些数据库查比较好？

数据库如何使用

根据您的需求，我已经为您整理了最适合查询小核酸药物（siRNA、反义寡核苷酸、miRNA、适配体等）的数据库推荐方案。

核心推荐数据库

CAplus - 综合首选

- 覆盖全球化学和生物医学文献 + 专利（1907至今）
- 包含小核酸药物的完整研发信息
- 支持精确物质搜索（CAS注册号、结构搜索）

BIOSIS - 生物医学文献补充

- 5000+生物医学期刊，专注生命科学研究
- 强大的生物学索引和受控术语

WPINDEX - 专利专项

- 德温特全球专利索引，60个专利局覆盖
- 增强的专利标引和分类

Embase - 临床医学

- 8500+医学期刊，侧重药物和临床研究

GENESEQ - 核酸序列专利

- 从专利中提取的6900万条基因序列
- 适合查找特定siRNA/miRNA序列的专利

AdisInsight - 药物开发追踪

- 全球制药R&D管线实时追踪
- 临床试验阶段、适应症信息

我的建议

对于小核酸药物研究，我建议采用“文献+专利”双轨检索策略：

- 文献检索：使用 BIOSCIENCE 集群（同时搜索CAplus、BIOSIS、Embase等）获取最全面的科研文献
- 专利检索：使用 WPINDEX 追踪全球专利动态
- 临床开发：使用 AdisInsight 了解药物开发进展

请问您：

- 是否已有具体的小核酸药物名称或CAS号？
- 更关注基础研究还是临床应用/专利？
- 有没有特定的时间范围或地域要求？

我可以根据您的具体需求帮您制定更精准的搜索策略！

12:04:21

CAS Newton: 适配不同检索场景

可应用于双靶点的替尼类药物，是否可应用与偶联药物

模糊/繁琐检索12:14:49

很好！现在我为您设计一个具体的搜索策略来回答您的问题。我建议从CASplus数据库开始，因为它提供全面的药物/化学和制药专利文献覆盖。

让我开始搜索：

FILE CAPLUS

现在让我搜索双靶点替尼类药物：

S (TINIB OR TINIB? OR KINASE INHIBITORS) AND (MULTI (2A) TARGET? OR DUAL TARGET?)

很好！找到2231条关于双靶点/多靶点替尼类药物的文献。

S L1 AND (CONJUGATE? OR DUAL TARGET?)

太好了！找到85条关于双靶点激酶抑制剂与抗体偶联物的文献。

D L2 1-15 BIB ABS

太好了！让我再搜索更多特定的替尼类药物与抗体偶联物：

S TINIB? AND (ANTIBODY (2A) OR IMMUNOCONJUGATE?)

搜索结果总结

基于对CASplus数据库的系统搜索，我为您找到了关于双靶点替尼类药物与偶联药物应用的重要文献证据：

核心发现

是的，双靶点激酶抑制剂（替尼类药物）可以应用于双靶点/多靶点激酶抑制剂与抗体偶联物。

我找到了：

85条文献：关于双靶点/多靶点激酶抑制剂与偶联物。

7条文献：专门针对替尼类药物（-tinib）与抗体偶联物。

主要应用策略

1. 联合治疗策略

最常见的应用模式是将替尼类药物与抗体偶联物（ADC）联合使用。

临床案例 - Tucatinib + Trastuzumab Deruxtecan

Tucatinib: HER2选择性酪氨酸激酶抑制剂（替尼类药物）。

Trastuzumab deruxtecan (T-DXd): HER2靶点抗体偶联物。

适应症: HER2阳性转移性乳腺癌。

临床结果：

客观缓解率(ORR): 51.4%

中位无进展生存期(PFS): 11.5个月

中位总生存期(OS): 28.4个月

双靶点机制: 酪氨酸激酶抑制剂与ADC形成非协同作用。

2. 双靶点策略优势 (Answer 2, 6, 7)

多项研究证实双靶点方法的协同作用：

Answer 2 (2026年综述):

2025年EMA批准的38个新药中，11个是多靶点药物。

大部分是抗体偶联物、双特异性抗体或激酶抑制剂。

全部用于肿瘤治疗，包括：

Daratumumab deruxtecan (ADC)

Tucatinib deruxtecan (ADC)

Trastuzumab deruxtecan (ADC)

临床意义

这篇重要的中文综述系统总结了双靶点策略：

酪氨酸激酶抑制剂(TKIs): tucatinib, lapatinib

单克隆抗体: trastuzumab

双特异性抗体

抗体偶联物(ADCs): trastuzumab deruxtecan

双靶点策略: 最近FDA批准代表了二线治疗的重大里程碑

关键机制:

ADC能够精确递送细胞毒性Payload

减少脱靶毒性

有效抑制致癌通路

答案总结

双靶点替尼类药物确实可以应用于偶联药物，主要方式包括：

1. 联合治疗: 替尼类药物 + ADC联用 (如Tucatinib + T-DXd)

2. Linker设计: 替尼类药物作为ADC或PROTAC中的活性部分，通过Linker偶联

3. 纳米偶联载体: 激酶抑制剂与靶向配体共同封装/偶联

4. 双靶点机制: 通过不同作用机制（酪氨酸激酶抑制 + ADC递送细胞毒性载荷）实现协同效应

这种策略在HER2阳性乳腺癌、结直肠癌、鼻咽癌等多种肿瘤治疗中显示出显著临床获益。

如果您需要更详细的信息，我可以：

搜索特定替尼类药物（如达沙替尼、埃罗替尼等）的偶联应用

查找特定癌症类型的临床试验数据

溶出率大于60%的片剂药物的制备工艺有哪些？12:21:11

数值相关检索

好的，现在让我开始搜索。根据您的要求，我将：

我在CAS FORMULATIONS和IPA数据库中搜索到了关于溶出率大于60%的片剂药物制备工艺的丰富信息：

搜索统计

CAS FORMULATIONS

IPA (药学文献): 174

使用特定工艺的记录

主要片剂制备工艺

根据搜索结果，以下是5种主要工艺：

1. 湿法制粒 (Wet Granulation)

工艺步骤：

混合原料药和辅料

加入粘合剂溶液

干燥颗粒 (通常通过筛分)

加入润滑剂

压片

包衣

实例: Empagliflozin片

使用羟丙基纤维素作为粘合剂

干燥温度: 80°C, 12小时

压片压力: 10 kN

2. 直接压片 (Direct Compression)

优点: 工艺简单、快速

5. 双螺杆湿法制粒 (Twin-Screw Wet Granulation)

新型连续工艺！

实例: Amiodarone片剂

对比批次工艺 (高剪切混合器) 和连续工艺 (双螺杆制粒机)

连续工艺生产时间缩短80%以上

溶出曲线相似性因子f2 > 50

6. 挤出/滚圆技术 (Extrusion/Spheronization)

实例: Irbesartan脉冲释放多单元丸系统

干混10分钟

加入粘合剂液 (PVP K30 3%)

挤出 (1mm筛网)

滚圆 (1000 rpm, 3-5分钟)

干燥 (40°C, 24小时)

流化床包衣

关键辅料和技术要点

提高溶出率的关键辅料：

1. 超级崩解剂：

交联羧甲基纤维素钠

交联聚维酮

2. 固体分散载体：

聚乙烯吡咯烷酮 (PVP)

羟丙甲纤维素羧酸盐 (HPMCP)

共聚维酮

3. 增溶剂：

环糊精 (β-CD, HP-β-CD)

Solutol HS-15

Gelucire 44/14

4. 润滑剂: 硬脂酸镁

工艺参数控制：

干燥温度: 40-80°C

制粒转速: 200-1000 rpm

压片速度: 20-40 rpm

17

© 2026 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS
A division of the
American Chemical Society

Exploratory 探索性检索：便捷获取现有技术信息

基于 AI 技术和 CAS 科学家的标引内容，为可专利性和专利自由实施策略提供信息支撑

L2 Results for "L1 SSS FULL"

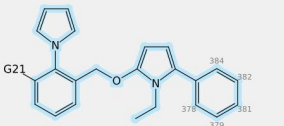
MARPAT (1) Sort: Accession Number Descending

Create Report Get Related Documents

1

168:387462

MSTR 1C Assembled



378,379,381,382,384: opt. substd. by G16

Patent Information

Patent Number	WO 2018062978
Kind	A1
Publication Date	20180405
Application No.	WO 2017-KR11091

Show 25 per page Previous 1 Next

Copyright 2026 ACS on STN MARPAT

Keyword Search Structure Search **Exploratory Search**

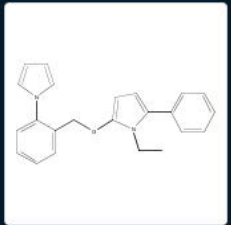
Exploratory Search uses CAS machine learning tools to find similar patents and non-patent literature results. [Learn more](#)

Disclosed are compds. I [X1 = O, S or -N(Et)-; X2, X3 = independently N or CH; Y = absent, -CH2-, -CH2NH-, etc.; Z = absent, -CH2S-, -CH2NH-, etc.; R1 = Q1, Ph (optionally substituted with halo, alkyl, trifluoromethyl, etc.), pyridin-2-yl, etc.; Ra = halo, alkyl, (un)substituted Ph, etc.; n = 0-3; R2 = H, Q2, naphthalen-1-yl, etc.; Rb = Ph (optionally substituted with alkyl or halo), alkyl, methoxy, etc.; m = 0-2; or enantiomers, diastereomers or pharmaceutically acceptable salts thereof]. Thus, compd. II was prepd. from 4-bromo-3,5-dimethyl-1H-pyrazole via conversion into 2-[(4-bromo-3,5-dimethyl-1H-pyrazol-1-yl)methyl]-5-mercapto-1,3,4-oxadiazole followed by alkylation with 2-(bromomethyl)biphenyl and oxidn. using oxone. The invention compds. showed remarkably superior antiviral activity against influenza A virus and influenza B virus.

Priority Date: 08/21/2026 Edit ⓘ 851 / 10,000 characters Clear

Additional Criteria to Emphasize

Structures Like This



Remove

Search

检索场景 3：包含以下结构可用于癌症治疗，有制备信息的化合物

Q Keyword Search Structure Search Exploratory Search

L1 STRUCTURE UPLOADED Substructure Full X

Structure Editor - 2023_0002_Structure

Maximize view OFF X

Enter a CAS Registry Number, SMILES, or InChI...

Draw or change atoms or bonds.

Command Line Preview

```
1 FILE REGISTRY;  
2 SEARCH L1 SSS FULL;
```

Molecular Formula: Formula is not available

Zoom: 100%

Node Attributes

- Hydrogen Count
- Markush Attributes
- Mass
- Node Type
 - Chain
 - Ring
 - Ring/Chain
- Non-Hydrogen Count
- Valency

Node Attributes

- Hydrogen Count
- Match Level
 - Atom
 - Class
 - Any
- Element Count Level
 - Limited
 - Unlimited
- Markush Attributes
- Mass
- Node Type
- Non-Hydrogen Count

Node Attributes

- Element Counts
 - Any
 - Specific
 - 1. Select an element
 - N
 - Mo
 - N
 - Na
 - Nb
 - Nd
 - 2. Select a count
 - Exact
 - Minimum
 - Maximum
 - 3. Add/Remove Element Count
 - Add
 - Remove
 - N: Max 2
- Generic Definition: Heterocycles
- Markush Attributes
- Non-Hydrogen Count

Attribute Values

- Bond Type
 - Chain
 - Ring
 - Ring / Chain
- Bond Value
 - Exact
 - Normalized
 - Exact / Normalized
- Node Type
 - Chain
 - Ring
 - Ring / Chain
- Generic Definition
 - Saturated
 - Unsaturated
 - Linear
 - Branched
 - Monocyclic
 - Polycyclic
 - 1 hetero atom
 - 2+ hetero atoms
 - 1-6 carbons
 - 7+ carbons
- Match Level
 - Atom
 - Class
 - Any
- Element Count Level
 - Limited
 - Unlimited
- Ring Isolation
 - Isolated
 - Isolated / Embedded
- Stereochemistry
 - Relative(default)
 - Absolute(default)
 - Relative
 - Absolute
 - Racemic
- Other Node Attributes
 - Mass
 - Valency
 - Hydrogen Count
 - Non-Hydrogen Count
 - Element Count

精细结构定义为可专利性提供专业支持，确保您的知识产权受到保护

检索结果均精确命中

L10 Results for "L5 AND LUNG CANCER AND PREP/RL AND THU/RL"

CAPLUS (17)

Sort: Accession Number Descending

☐ Create Report

7

Patent | 2021

Preparation of (1H-indol-5-yl)acrylamide derivatives as inhibitors of TEAD proteins and the HIPPO-YAP1/TAZ signaling cascade for the treatment of cancer

Abstract: The invention relates to 1H-indolyl-acrylamide derivs. I [n = 0-1; R1 = a single bond, alkenyl; R2 = (fluoro)alkyl, (fluoro)alkoxy, (un)substituted Ph, etc.; R4 = H, alkyl; R7 = H, CN, alkyl; R8 = H, (un)substituted alkyl] or pharmaceutically acceptable salts thereof, useful as...

7

PatentPak Patent Information

PatentPak

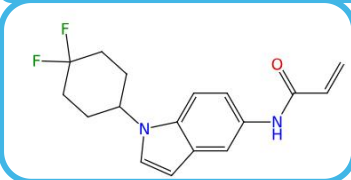
PDF

Number of Claims:

View Additional Information

Copyright 2021

RN : 2725122-85-8

CAS Registry Data	ED	Entered STN: 05 Nov 2021
Catalog Data	CN	2-Propenamide, N-[1-(4,4-difluorocyclohexyl)-1H-indol-5-yl]- (CA INDEX NAME)
Regulatory Data		OTHER CA INDEX NAMES:
Spectra		N-[1-(4,4-Difluorocyclohexyl)-1H-indol-5-yl]-2-propenamide
Properties	MF	C17 H18 F2 N2 O
✓ Biological ✓ Chemical ✓ Electrical ✓ Lipinski Properties ✓ Magnetic Properties ✓ Physical Properties	SR	CA
	LC	STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, TOXCENTER, USPATELIII
	RL.P	Roles from patents: BIOL (Biological study); PREP (Preparation); SCLM (Substance in claims); USES (Uses)
	STR	

ASTERISK_NO

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Markush 结构检索：专利通式结构保护范围分析

- 专利中物质的标引方式：

- ✓ 具体物质 Specific Substance：

以具体化学结构陈述的特定物质，会被分配 CAS Number

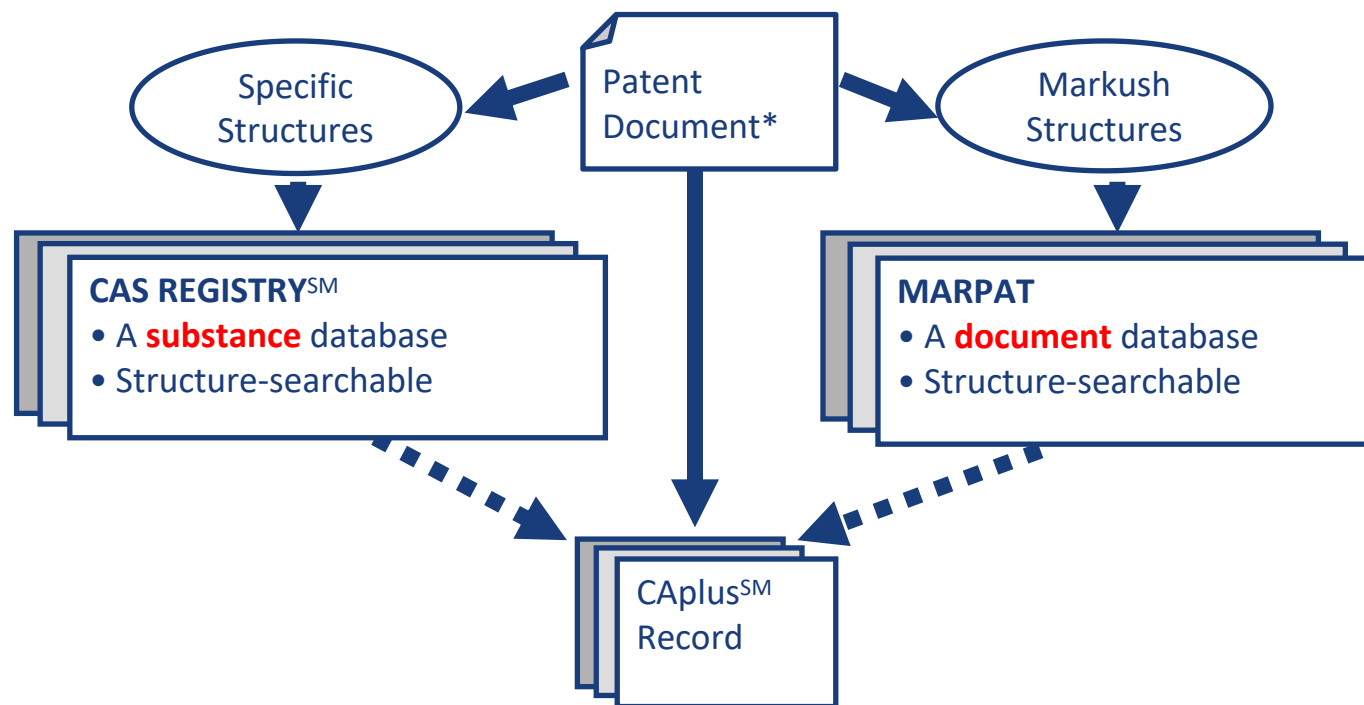
- ✓ 预测性物质 Prophetic Substance

使用 Markush 结构描述的预测物质

- Markush 检索的重要性：

- ✓ CAS 专利马库什数据集是进行可专利性检索的重要参考依据

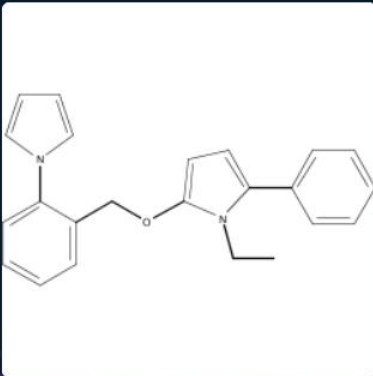
- ✓ 马库什检索可以使用具体结构、骨架结构和通式结构来进行迭代检索，确保获得完整的公开结构信息



检索场景 4: 该结构进行精确结构, 亚结构均无结果, 是否隐藏在 Markush 结构中

Q Keyword Search **Structure Search** Exploratory Search

L1 STRUCTURE UPLOADED Substructure Full X



Command Line Preview

```
1 FILE REGISTRY;  
2 SEARCH L1 SSS FULL;
```

Select Structure Database X

Select one of the following databases to search structure.

☐ CASREACT

The Chemical Abstracts Reaction Database ⓘ

☐ DCR

DERWENT CHEMISTRY RESOURCE ⓘ

☐ DWPIM

DERWENT MARKUSH RESOURCE 1961 TO DATE ⓘ

☐ MARPAT

CAS Markush Database ⓘ

☐ REAXYSFILESU

SUBSTANCES TO THE REFERENCES OF REAXYSFILEBI, 1771- ⓘ

☒ REGISTRY

CAS REGISTRY File ⓘ

Continue Cancel

Search

REGISTRY
SEARCH L1 SSS FULL

L2 Results for "L1 SSS FULL"

REGISTRY (0)

Query Builder: 无需掌握口令, 即可构建检索



No Results Found

We couldn't find any results. Please update your search query and try again.

Edit Search

Show 25 per page Previous 1 Next

在 Query Builder 中进行 Markush 结构检索

L1 STRUCTURE UPLOADED Substructure Full X

Command Line Preview

```
1 FILE MARPAT;  
2 S L1 SSS FULL;
```

Database: MARPAT

L2 SEARCH L1 SSS FULL Edit Search

Search History Sort: Ascending

L1

MARPAT
STRUCTURE UPLOADED

L2 1 Results

MARPAT
S L1 SSS FULL

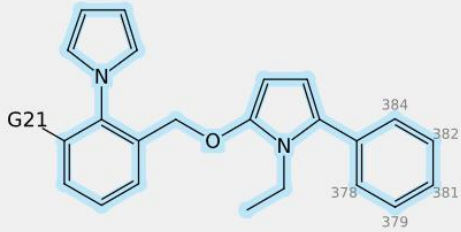
L2 Results for "L1 SSS FULL"

MARPAT (1) Sort: Accession Number Descending

Create Report Get Related Documents

168:387462 Markush 结构详细信息

MSTR 1C Assembled



378,379,381,382,384: opt. substd. by G16

Patent location: claim 1

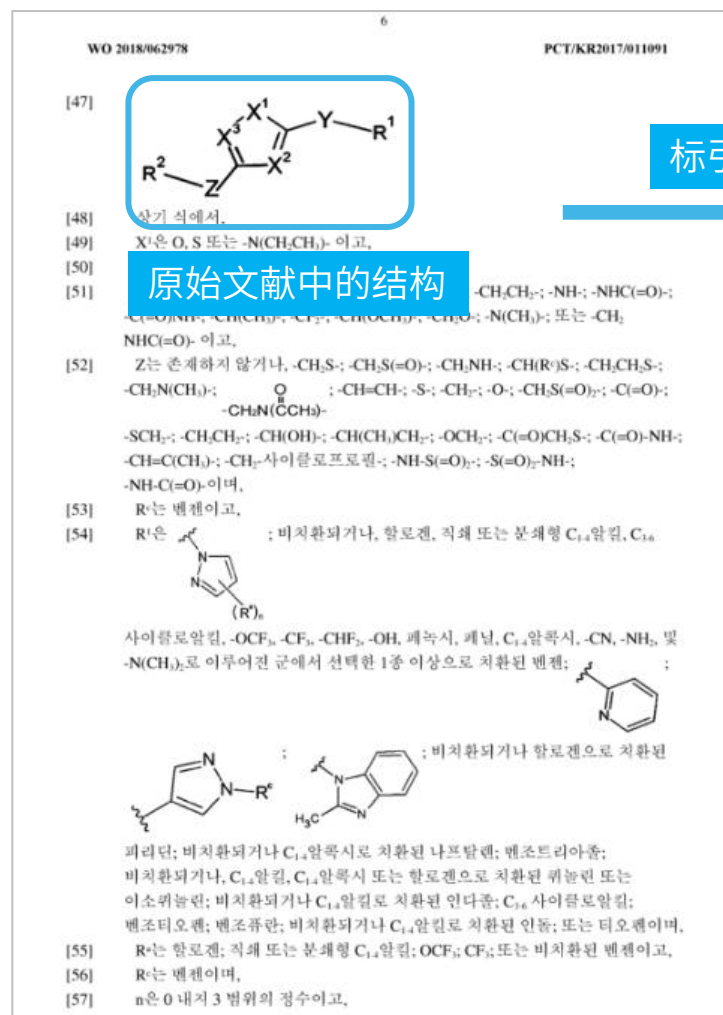
Show 25 per page Previous 1 Next

Patent Information

Patent Number	WO 2018062978
Kind	A1
Publication Date	20180405
Application No.	WO 2017-KR11091

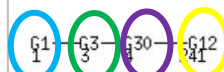
Copyright 2026 ACS on STN MARPAT

利用 CAS 科学家拆解与解读的 Markush 结构，便捷进行 FTO 与结构可专利性分析，助力规避专利风险，减少研发浪费

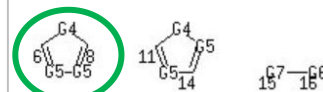


标引

在 CAS IP Finder 呈现的、
由 CAS 科学家解读的结构



G3 = 6-1 8-4 / 11-1 14-4 / 15-1 16-4

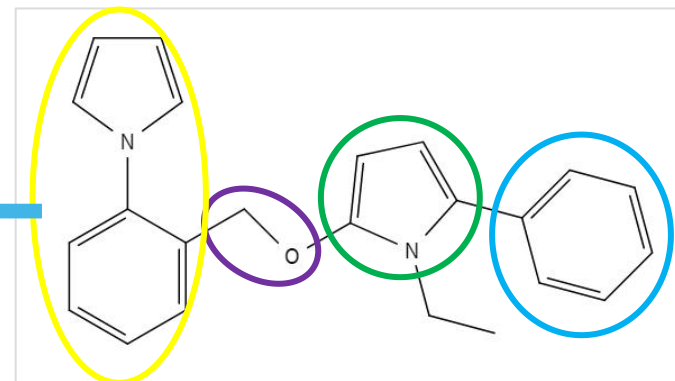


G30 = 243-3 244-241 / **245-3 246-241** / 264-3 265-241 / 266-3 267-241 / 0 / CHOH / 278-3 279-241 / 280-285-3 286-241 / 291-3 292-241

G33 = S / S(O) / NH / 255 / **0** / SO₂ / 257 / 260-3 262-246 / 271-3 272-246



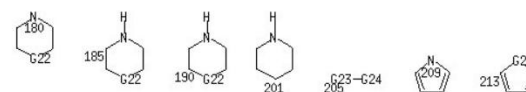
命中



查询结构如何被覆盖均可清晰展示

G12 = H / **139** / carbocycle bonds all normalized

G21 = H / Ph (opt. substd. by G18) / alkyl <containing 1-5 C> / OMe / heteroaryl <containing 1 or more heteroatoms, zero or more N, zero or more O, zero or more S, monocyclic> / cycloalkyl <containing 5-7 C> / COMe / CO₂H / 205 / CF₃ / OCF₃ / OH / NMe₂ / 180 / 185 / 190 / 201 / **209** / 213 / 217 / alkoxy <containing 1-4 C> (opt. substd. by morpholinyl) / 222 / halo



检索场景 5：应用脂质粒制备的索非布韦制剂，希望查看到制备工艺，药物溶出率等信息

Select Database ▾ CASFORMULTNS X Remove All

Chemical Name ▾ sofosbuvir

Group ↑↓

AND ▾ Basic Index ▾ lipid X

Group ↑↓

AND Experimental Activity Description ▾ dissolu? X

Add Field Previous Search ▾

Query Builder: 无需掌握口令，即可构建复杂检索

Reset

Command Line Preview

```
1 FILE CASFORMULTNS;  
2 SEARCH sofosbuvir/CN AND lipid AND dissolu?/EAD;
```

Search

CAS 优质标引有助于精准定位信息

COMPONENT C1

RN 1190307-88-0

CNM sofosbuvir

CVO Antiviral agents; Virustats; Viricides; Virucide; Antivirals; Virucidal disinfectants; Antivirus; Antiviral agent; Antiretroviral agents; Antiviral drugs; Antiretrovirals; Antiviral; Virucidal microbicidal and microbiostatic action; Viricidal action; Virucidal action; Synergistic virucides; Viricide; Virustat; Viral inhibitor; Anti-viral; Anti-virus; Viruses inhibitors; Virus inhibitors; Virus inhibitor; Viral inhibitors;

活性成分

EAD particle size distribution

EAN particle size distribution of the composition was measured by a laser particle size analyzer (US PSS Nicomp 380DLS), and counting the number of sofosbuvir nanocomposite micelles with a particle size between 90 and 120 nm as a percentage of the total number of total sofosbuvir nanocomposite micelles.

EAM Single: 80 %, Desc: particle size distribution

溶出率信息

EAD dissolution rate

EAN dissolution rate of the composition in acetate buffer, pH 4.5 was measured at 3 minutes.

EAM Single: 68.87 %, Desc: dissolution rate

EAD dissolution rate

GROUP G3

GCN Phospholipids

GCN Phospholipins

GCN Alpha Lipid 300 ; Darmstoff; Emulpur N; Epikuron 110; Epuikuron 170; Essentiale H; Lipids, phospho ; Lipoid R LPC 20; Lipoid R-LPC 20; NAT 3003; Nat 89; Ovothin 170; Phosphoderm; Phospholipids, mixed-chain; Platelin

RN 123465-35-0

GDS phospholipid

辅料信息

PNTE sofosbuvir tablets or capsules for treating chronic hepatitis C virus infection preparation: mixing sofosbuvir, poly(fumaric acid-sebacic acid), cholesterol, chenodeoxycholic acid, bile salt and vitamin E to obtain a total mixture, adding the total mixture to an ethanol solution, and dissolving it in a water bath to form organic solution A; dissolving the organic solution A using a CO₂ supercritical extraction device to form an organic solution B; adding the organic solution B to the ethanol solution to the total mixture is 70 g of the total mixture per 1 L of the ethanol solution; adding the phospholipid (egg yolk lecithin, hydrogenated soybean lecithin, dipalmitoylphosphatidylcholine, distearoylphosphatidylcholine or dioleoylphosphatidylcholine) to a phosphate buffer solution at 70 °C for 10 minutes to prepare a phospholipid solution, wherein the concentration of the phosphate buffer solution is 0.01 mol/L, and the pH is 7.4; injecting the organic solution B into the phospholipid solution while stirring, and maintaining the temperature of the phospholipid

制剂制备工艺

CAS 值得信赖的合作伙伴

服务制药全生态领域的创新领军企业



TOP 10

全球十大专利局



25 of 25

全球 25 家头部制药企业



7 of 10

全球前十顶尖知识产权律所

SOURCE: CAS data

携手 CAS，赋能您的创新战略

我们持续精进核心能力，帮您从容应对瞬息万变的科学生态，支撑长期创新发展

平台解决方案

- **CAS Newton**
- CAS SciFinder®
- CAS BioFinder®
- CAS IP Finder

定制服务

- 数据授权
- 数据治理

workflows集成

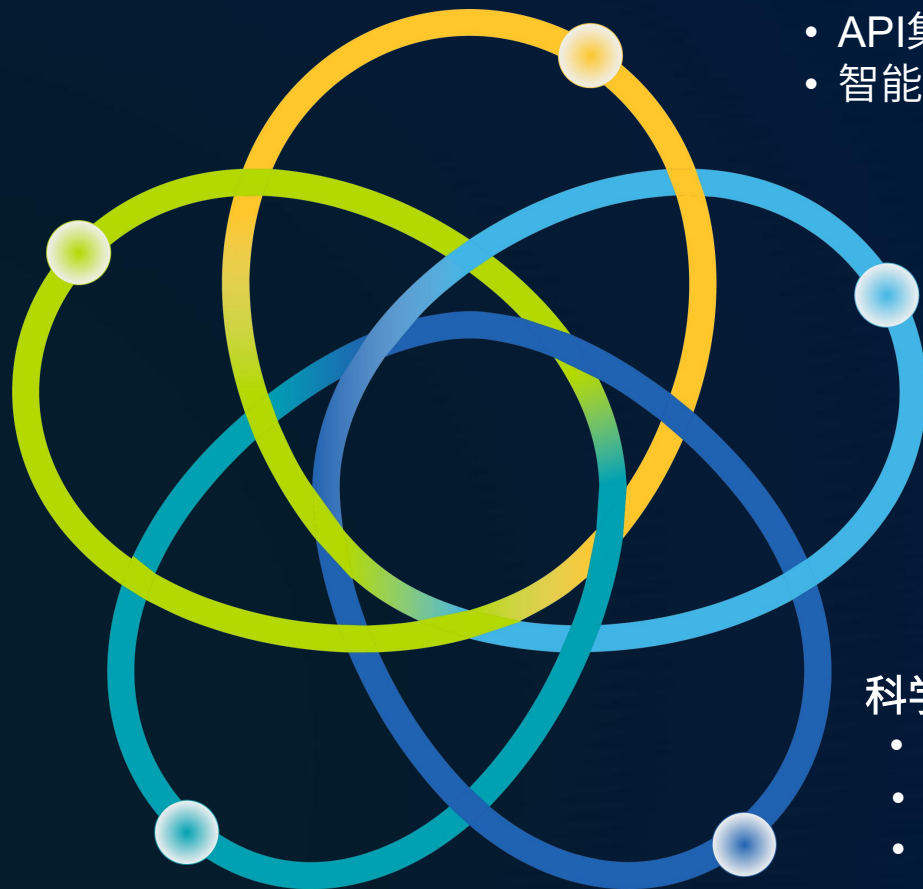
- **CAS ConnectionsSM**
- API集成
- 智能体间交互

咨询服务

- 数据数字化
- AI 模型训练
- 知识系统设计

科学数据管理

- CAS Intelligence HubSM
- 构建受控数据环境
- 专家数据归一化服务



Between problems
and progress **are**
connections that
matter

谢谢!

欢迎联系美国化学文摘社 (CAS) 北京代表处

China@acs-i.org

+86-10-6250 8026/7

获取更多信息!





欢迎到访 CAS展位