CAS SciFinder®

マルクーシュ構造検索

化学情報協会　情報事業部
2025/03

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS
A division of the
American Chemical Society

目次

- マルクーシュ構造検索とは
- マルクーシュ構造の検索
- 構造検索とマルクーシュ構造検索の違い
- マルクーシュ構造検索における CAS STNext® との違い
- まとめ

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS
A division of the
American Chemical Society

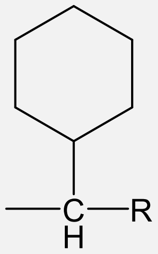
マルクーシュ構造検索とは

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

マルクーシュ構造

CAS SciFinder は特許中のマルクーシュ構造を収録

マルクーシュ構造とは



R は、C1~C4 のアルキル基、
アルケニル基、アリール基を示す。

置換基などを**複数の選択肢として記載**することで、多数の化学物質を表現した構造式のこと

主に化学分野の**特許**の請求範囲で用いられる

収録対象物質

- **有機化合物**

収録対象外の物質

- 無機化合物
- ポリマー*
- 核酸・タンパク質**

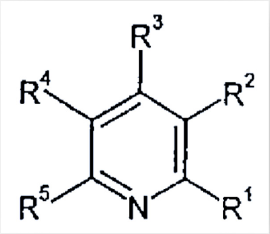
* 重合度が 10 までの物質は収録
** 短い配列は収録

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

原報の記載により収録されるデータベースが異なる

マルクーシュ構造

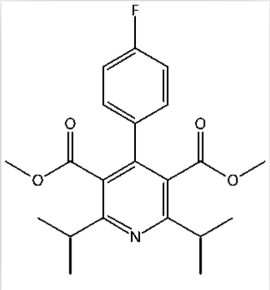
(CAS Markush)



R1, R5 = C1-10 alkyl, C6-10 aryl
R2, R4 = H, C1-10 alkyl, CN, ・・・
R3 = H, C1-10 alkyl, ・・・

特定の化学物質
(構造が特定できる物質)

(CAS REGISTRY)



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

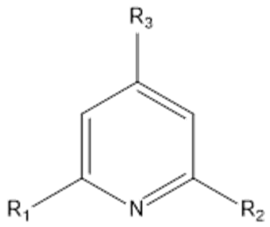
収録対象の違い

	CAS Markush	CAS REGISTRY
特許請求範囲	1961 年 – マルクーシュ構造	1981 年 – 発明内容に関わりのある特定の化学物質
発明の 詳細な説明	1961 年 – 特許請求範囲中にマルクーシュ構造がない場合、または発明の詳細な説明のマルクーシュ構造が、特許請求範囲のマルクーシュ構造を包括する場合に収録	
実施例		1907 年 – 発明内容に関わりのある特定の化学物質

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS Markush の構成

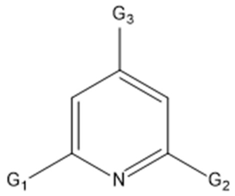
特許の記載



R_1、R_2 は水素、OH、ハロゲン．．．を表し
R_3 は C_1-C_{10} のシクロアルキル基，
アリール基．．．を表す．．．

R_3 が 4ークロロフェニル基である請求項１に記載の化合物．．．

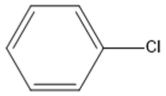
CAS Markush の構成



基本骨格と置換基の定義を収録

G1 , G2 = H，OH，halogen, ...

G3 = cycloalkyl (C_1-C_{10}), aryl (C_1-C_{10})，...
(Specifically claimed: 1)

1 

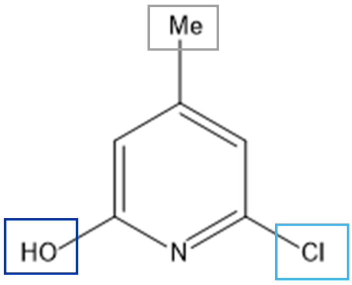
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS
A division of the American Chemical Society

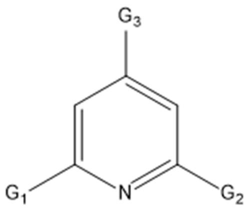
検索の仕組み

作図した構造を含むマルクーシュ構造が記載された特許が見つかる

構造質問式



CAS Markush の構成



G1 = H，**OH**，halogen, ...

G2 = H，OH，**halogen**, ⋯

G3 = **alkyl (C1-C10)**, aryl (C1-C10)，
... (Specifically claimed: 1)

- 置換基の定義の中でマッチするものがあればヒット
- alkyl などの一般式でもヒット

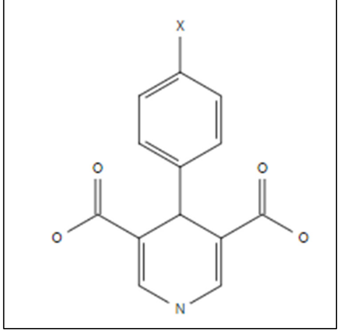
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS
A division of the American Chemical Society

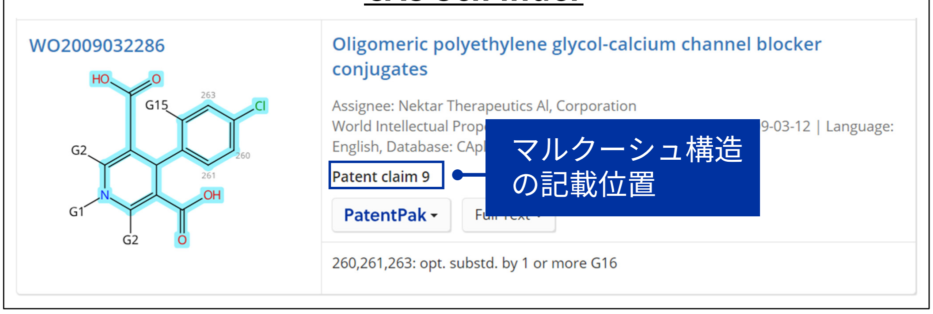
CAS SciFinder での回答表示

- ヒットした置換基を組み立てた形で表示されるのでヒットした構造が分かりやすい
- ヒット構造に関与しない置換基の情報は表示されない

構造質問式



CAS SciFinder



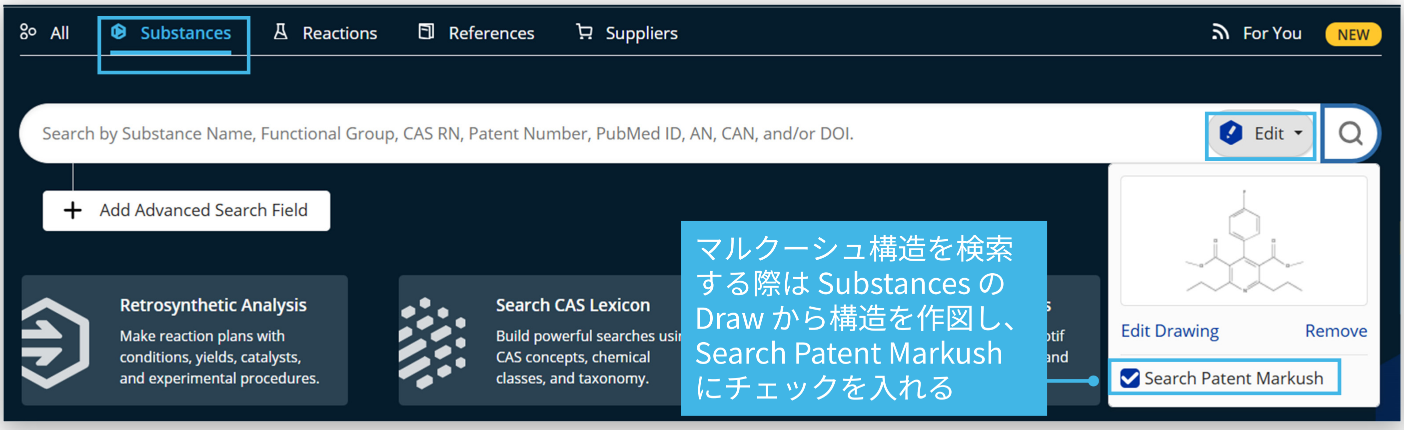
特許番号または標題をクリックすると、該当特許の書誌情報、抄録、索引を確認できる

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

マルクーシュ構造の検索

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

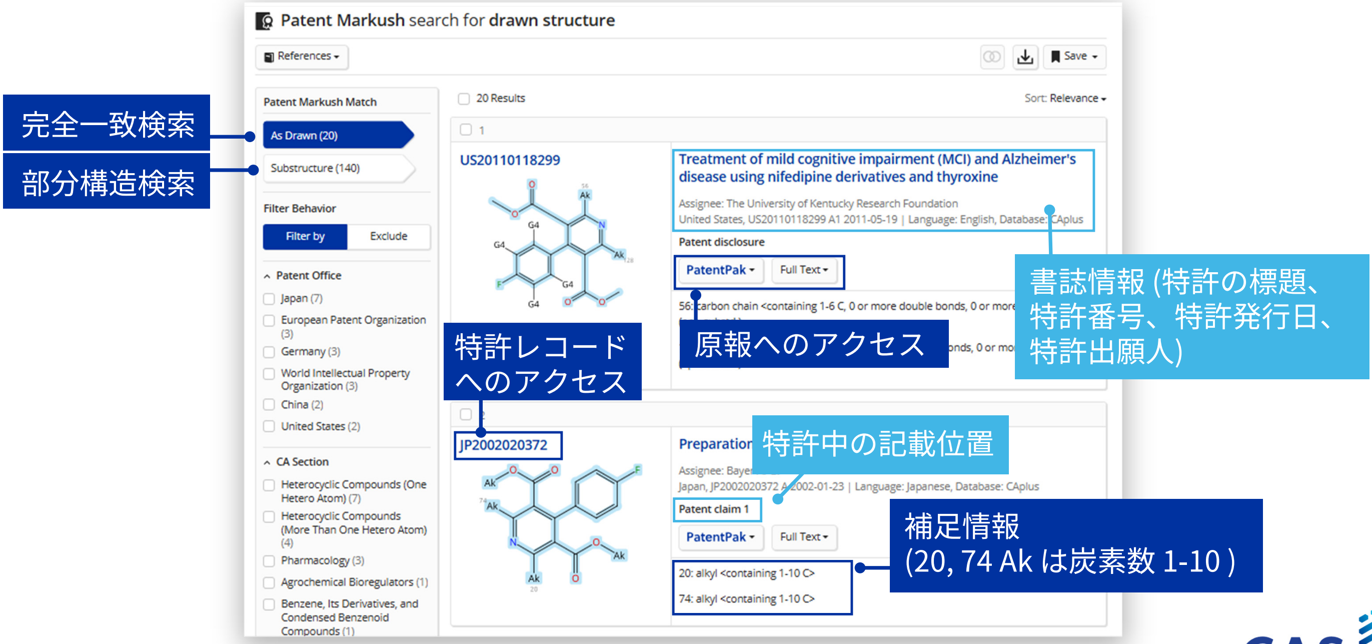
検索画面



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS
A division of the American Chemical Society

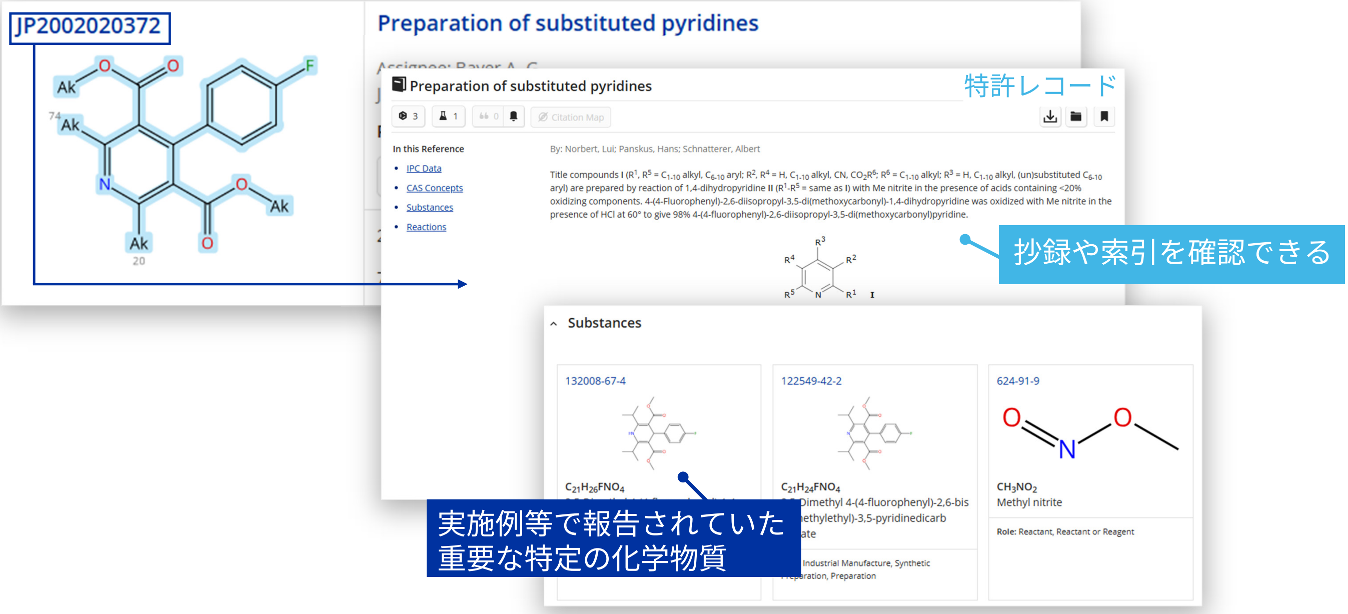
回答一覧画面



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS
A division of the American Chemical Society

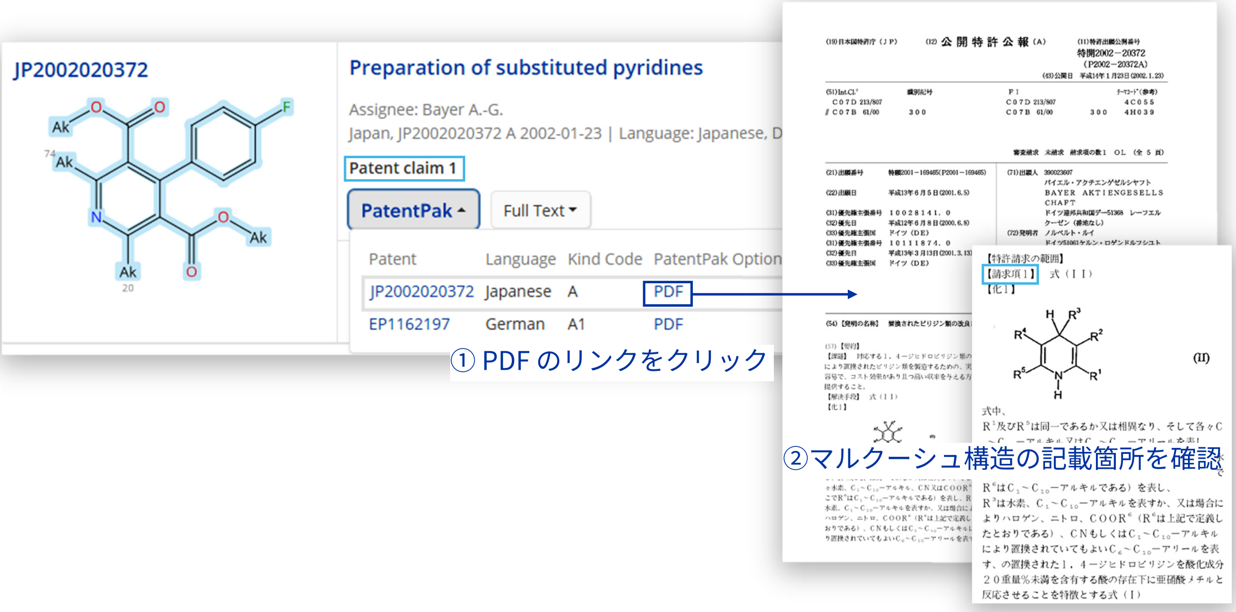
特許レコードへのアクセス



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

原報へのアクセス – CAS PatentPak®

ワンクリックで明細書を取得できる



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

構造検索とマルクーシュ構造検索の違い

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

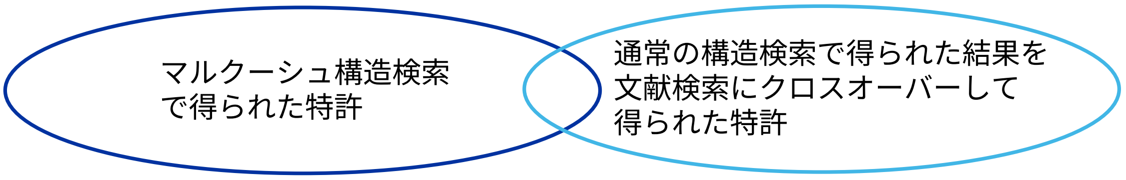
CAS
A division of the American Chemical Society

構造検索とマルクーシュ構造検索で得られる特許の違い

マルクーシュ構造検索を利用することで化学物質関連特許の調査をより網羅的に

– マルクーシュ構造検索で得られる特許は、すべて CAS Patents* に収録されている
– しかし化学物質の索引方針および検索機能の違いによって、
  通常の構造検索とマルクーシュ構造検索で得られる特許に違いが生じる

CAS Patents 収録対象特許



マルクーシュ構造検索のみで得られる特許
– クレームや実施例中に構造質問式に一致する
  特定の化学物質が記載されていない特許など

通常の構造検索のみで得られる特許
– マルクーシュ構造を含まない特許など

* CAS SciFinder に収録される文献データベース (化学および周辺分野の特許を収録)

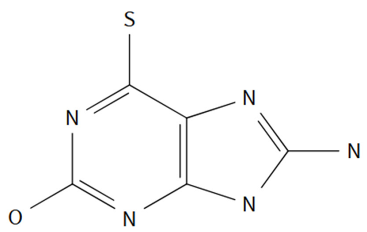
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS
A division of the American Chemical Society

検索例1 (1/2)

マルクーシュ構造検索により、通常の構造検索では得られない特許が見つかる可能性がある

構造質問式



化学物質検索 →

Structure Match

As Drawn (0)

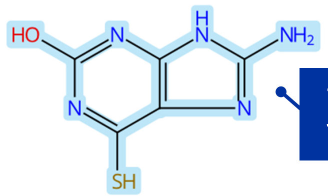
Substructure (0)

Similarity (15K)

部分構造検索でも一致する物質はなし

マルクーシュ構造検索 →

JP2002086613



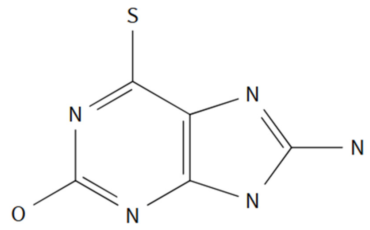
マルクーシュ構造でヒット

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例1 (2/2)

マルクーシュ構造検索でヒットした回答の例 (JP2002086613)

構造質問式



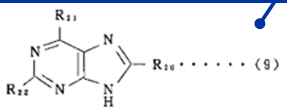
化学物質検索 →

マルクーシュ構造検索 →

– 特許請求範囲

【0017】（16）前記有機化合物が、下記一般式

構造質問式を含むマルクーシュ構造の記載がある



（式中、R_{20} ，R_{21} ，R_{22}は、各々、－H，－SH，－OH，又は－NH_2 を表し、且つ、R_{20}～R_{22}の少なくとも1つは、－SH，－OH，又は－NH_2 である）

– 実施例

表 1

No.	有機インヒビター 化合物名	有機インヒビター 添加量 (wt%)	樹脂エマルジョン (Wt%)	コロイダルシリカ (wt%)	基材	耐食性 平板部	耐食性 加工部	備考
1	ピリジン－2,5－ジカルボン酸	2	73	25	GI	○	○	本発明例
2	ピリジン－2,6－ジカルボン酸	2	73	25	GI	◎	○	
3	ピリジン－3,4－ジカルボン酸	2	73	25	GI	◎	○	
4	ピリジン－3,5－ジカルボン酸	2	73	25	GI	○	○	
5	ピリジン－3,6－ジカルボン酸	2	73	25	GI	○	○	
6	ピリジン－2,3－ジオール	2	73	25	GI	◎	◎	
7	ピリジン－2,4－ジオール	2	73	25	GI	○	○	
8	ピリジン－2,6－ジオール	2	73	25	GI	◎	◎	
9	ピリジン－2－ヒドロキシ－3－カルボン酸	2	73	25	GI	◎	◎	
10	ピリジン－6－ヒドロキシ－3－カルボン酸	2	73	25	GI	◎	◎	
11	ピリジン－3－ヒドロキシ－2－カルボン酸	2	73	25	GI	○	○	
12	ピリジン－6－ヒドロキシ－2－カルボン酸	2	73	25	GI	○	○	
13	ピリジン－2－メルカプト－3－カルボン酸	2	73	25	GI	◎	◎	
14	ピリジン－6－メルカプト－3－カルボン酸	2	73	25	GI	◎	◎	
15	ピリジン－2,[illegible]－ジカルボキサルデヒド	2	73	25	GI	◎	◎	
16	2－ア[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	△	
17	2－ア[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	△	
18	2,3－[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	△	
19	2,6－[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	△	
20	ピリジ[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	×	比較例
21	ピリジ[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	×	
22	ピリジ[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	×	
23	ピリジン－4－カルボン酸	2	73	25	GI	×	×	
24	2－ヒドロキシピリジン	2	73	25	GI	×	×	
25	3－ヒドロキシピリジン	2	73	25	GI	×	×	
26	4－ヒドロキシピリジン	2	73	25	GI	×	×	
27	2－メルカプトピリジン	2	73	25	GI	×	×	
28	4－メルカプトピリジン	2	73	25	GI	×	×	
29	2－アミノピリジン	2	73	25	GI	×	×	
30	3－アミノピリジン	2	73	25	GI	×	×	
31	4－アミノピリジン	2	73	25	GI	×	×	
32	クロメート処理				GI	○	△	

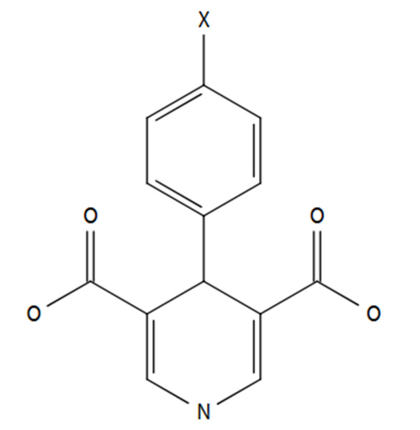
構造質問式に一致する物質の記載はない

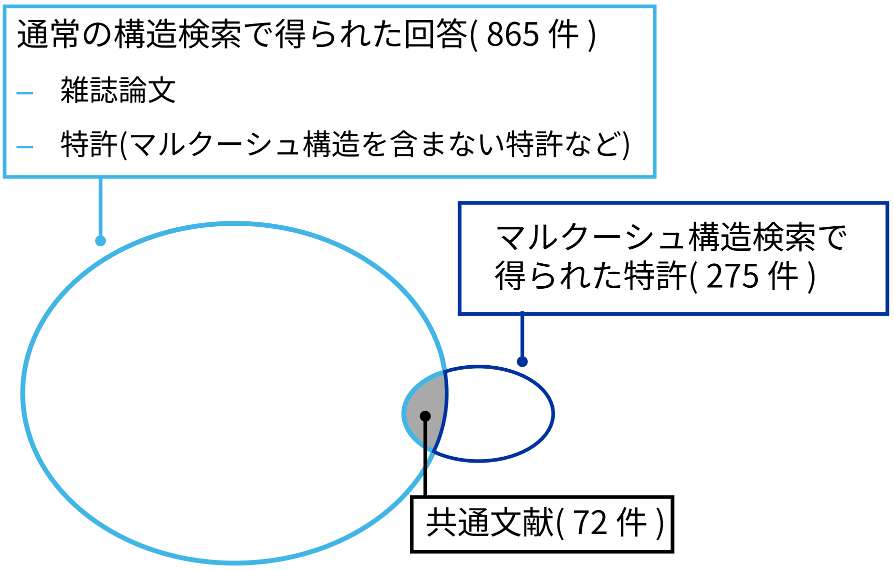
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例2(1/4)

マルクーシュ構造検索により、通常の構造検索では得られない特許が見つかる可能性がある

構造質問式

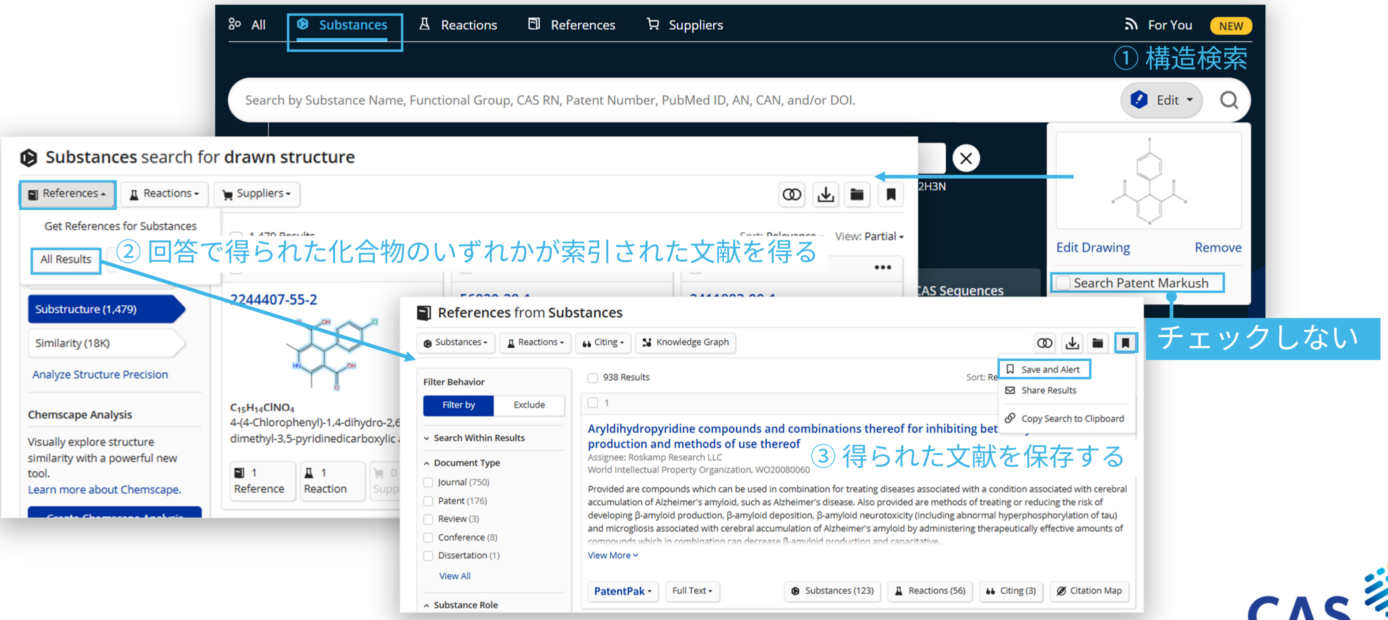




 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例2(2/4)

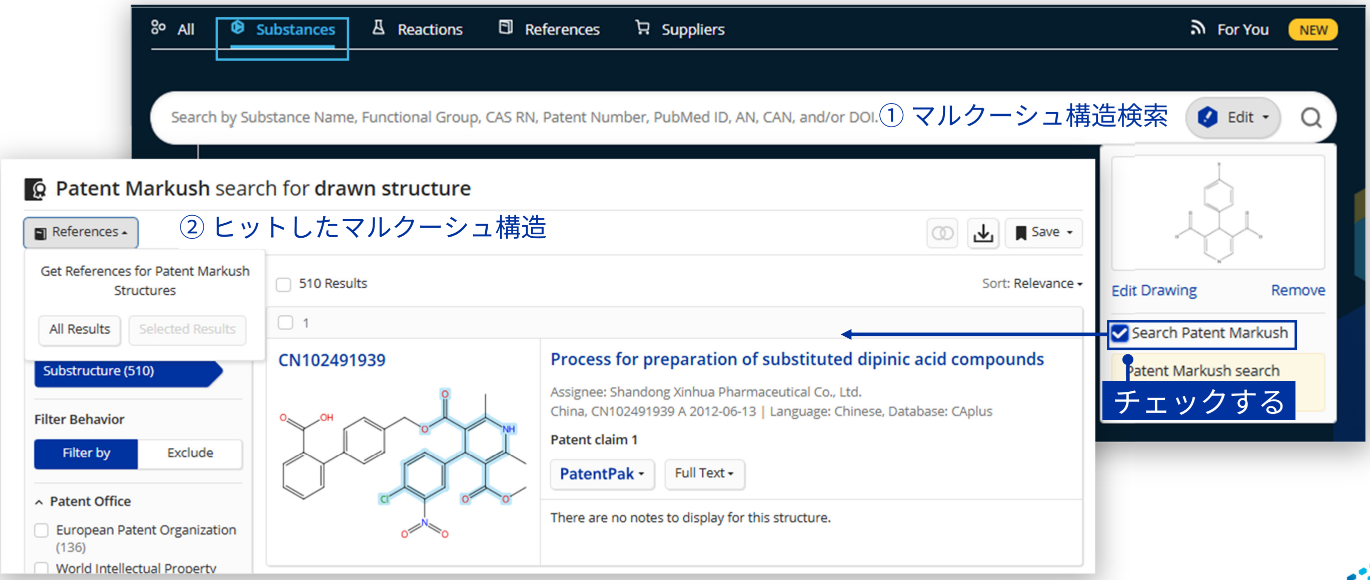
構造からの文献検索



 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例２(３/４)

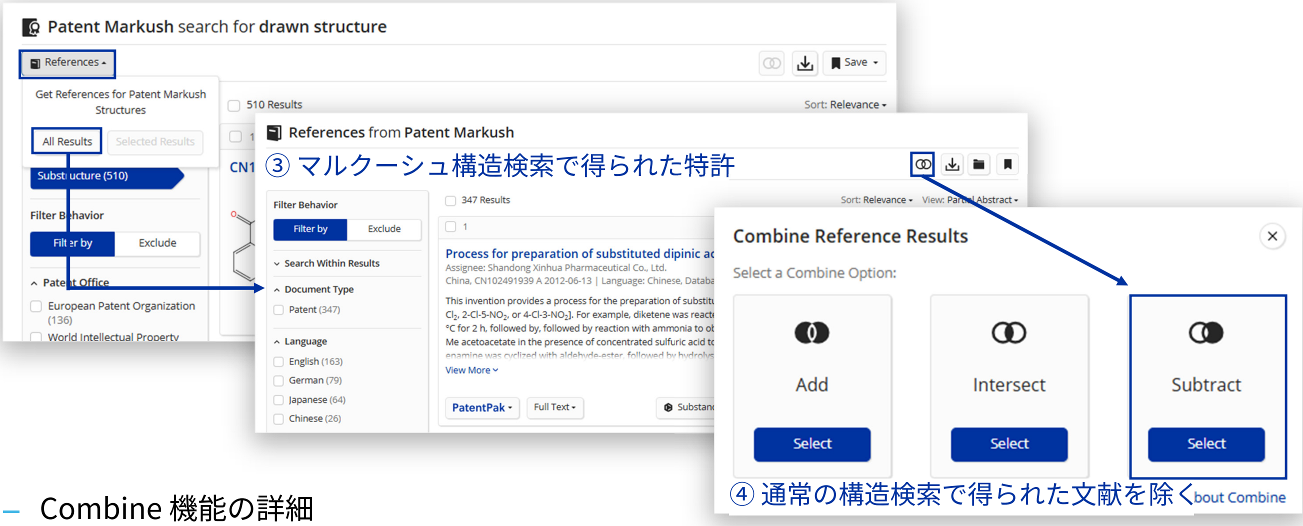
マルクーシュ構造検索



 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例２(４/４)

マルクーシュ構造検索で得られた特許を抽出し、Combine 機能で差分を取る



– Combine 機能の詳細

(資料) https://seminar.jaici.or.jp/doc/sf_combine.pdf

(動画) https://www.youtube.com/watch?v=vyujyjS0zCQ

 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

マルクーシュ構造検索における CAS STNEXT® との違い

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS STNext とは

知財・情報担当者向け情報ソリューション

対象ユーザーによる違い

- CAS SciFinder は研究者向けに直感的に操作できるよう設計されている
- CAS STNext は知財・情報担当者向けに細かな条件を指定した漏れのない検索ができるよう設計されている

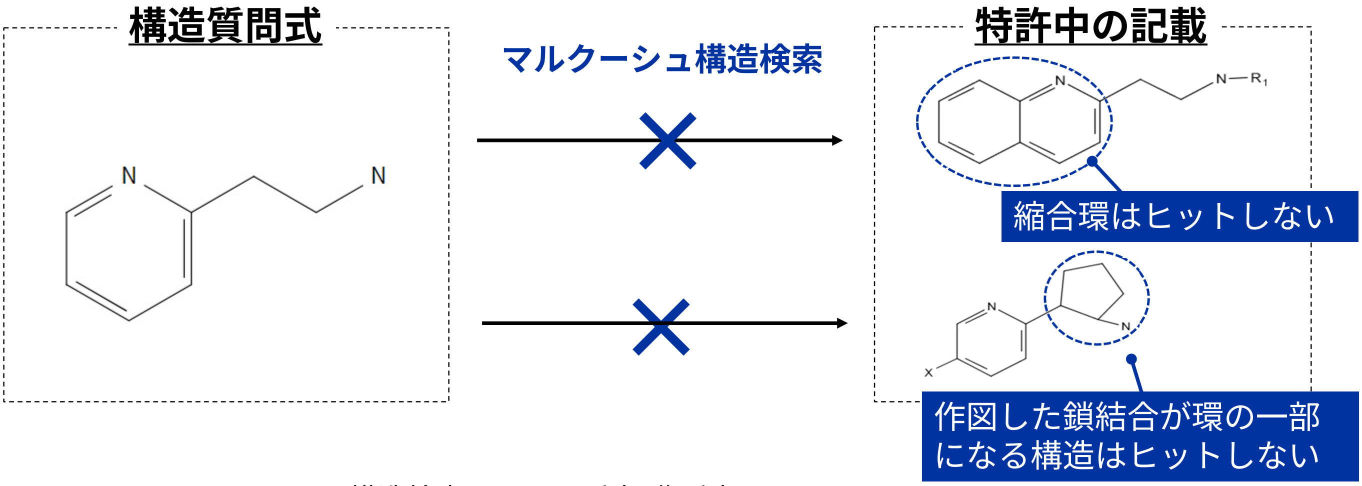
マルクーシュ構造検索における違い

- CAS SciFinder は検索条件があらかじめ決められており、変更できない
- CAS STNext は細かな条件もコマンドを使って変更することができる
- 詳細な検索条件をつけて、マルクーシュ構造を検索したい場合は、CAS STNext の利用を推奨する

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS STNext との違い (1 / 5)

CAS SciFinder のマルクーシュ構造検索では作図した結合は
自動的に Lock Rings が設定される

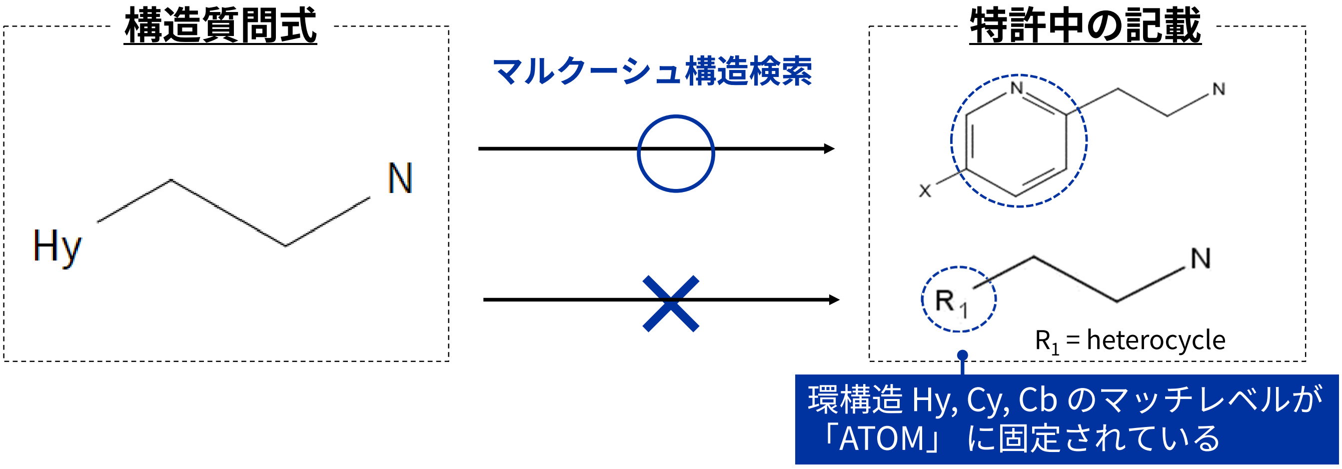


CAS STNext のマルクーシュ構造検索では環の孤立/非孤立、
鎖結合の属性を鎖 / 環に変更できるため上記 2 つもヒットさせることができる

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS STNext との違い (2 / 5)

CAS SciFinder のマルクーシュ構造検索では環は一般式ではヒットしない



CAS STNext のマルクーシュ構造検索ではマッチレベルを「Class」に変更できるため
上記 2 つともヒットさせることができる

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

(参考) マッチレベルとは？

CAS STNext ではマルクーシュ構造を構成する置換基を 3 つのレベルで索引している

- 索引レベル

特定原子　:　C、N、CH_3、Pyridine など

一般式グループ　:　halo、alkyl、carbon chain など

R グループ　:　構造で表現できない記載 (organic group、negatively charged など)

- マッチレベルと得られる回答

マッチレベル	得られる回答の索引レベルと件数			
Atom	特定原子			少
Class	特定原子	一般式グループ		↓
Any	特定原子	一般式グループ	R グループ	多

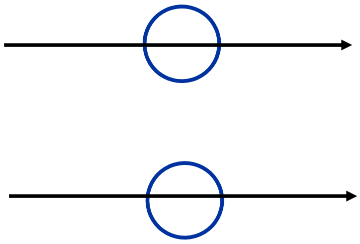
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS STNext との違い (3 / 5)

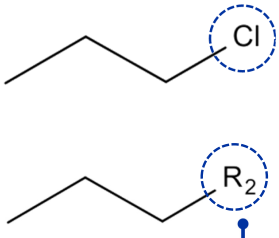
CAS SciFinder のマルクーシュ構造検索では可変原子のマッチレベルが Class で固定される

構造質問式

マルクーシュ構造検索



特許中の記載



R_2 = halogen

鎖状構造にある可変原子 (X，M，A，Q) のマッチレベルは 「Class」に固定される

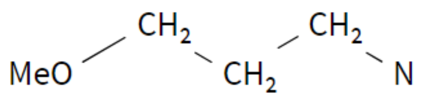
CAS STNext のマルクーシュ構造検索ではマッチレベルを「Class」以外にも変更できる

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

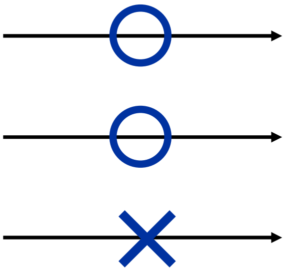
CAS STNext との違い (4 / 5)

CAS SciFinder のマルクーシュ構造検索では鎖状構造のマッチレベルと
元素数レベルが固定される

構造質問式



マルクーシュ構造検索



特許中の記載

MeO -CH_2-CH_2-CH_2- N

MeO –Alkylene (C1-5) - N

MeO –Alkylene (炭素数の記載なし) - N

鎖上のノードのマッチレベルは 「Class」
元素数レベルは 「Limited」 に固定される

CAS STNext のマルクーシュ構造検索では元素数レベルを「非限定」に変更できる

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS
A division of the American Chemical Society

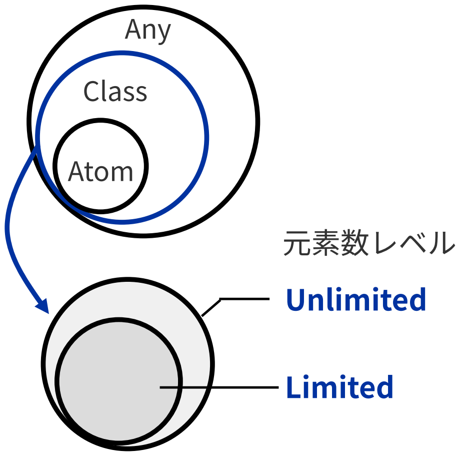
(参考) 元素数レベル (Element Count Level) とは？

– 元素の種類と数が記載されていない一般式グループを回答に含めるかを指定する属性

– マッチレベルを **Class にした場合**に検討する

Limited : 一般式グループに対して**元素の種類と数の記載があり、かつその条件を満たす**回答 (デフォルト)

Unlimited : 上記に加え、**元素の種類と数が記載されていない回答**
(指定した元素の存在が否定されない回答を含む)



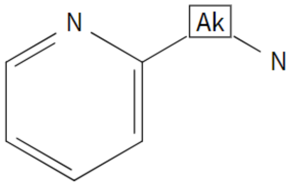
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

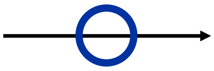
CAS
A division of the American Chemical Society

CAS STNext との違い (5 / 5)

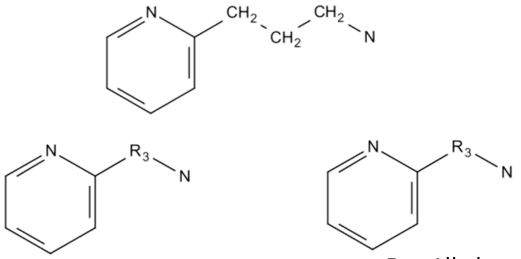
CAS SciFinder では Ak に元素数を指定できない

構造質問式





特許中の記載



R_3 = Alkylene（C_{1-5}）

R_3 = Alkylene
（炭素数の記載なし）

CAS STNext では Ak に元素数を指定した検索が可能

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

まとめ

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

まとめ

- CAS Markush の収録対象はマルクーシュ構造が記載されている特許であり、非特許文献は含まれない
- 特定の化学物質の検索は構造検索を使用する
- 構造検索とマルクーシュ構造検索を併用することでより網羅的な調査が可能

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

JAICI ヘルプデスク

0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

support@jaici.or.jp

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

Thank you

Connect with us at cas.org

linkedin.com/company/cas

@CASchemistry

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS
A division of the American Chemical Society