

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.



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

マルクーシュ構造検索とは

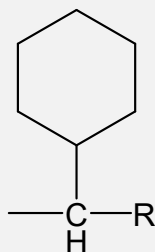
3 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



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**

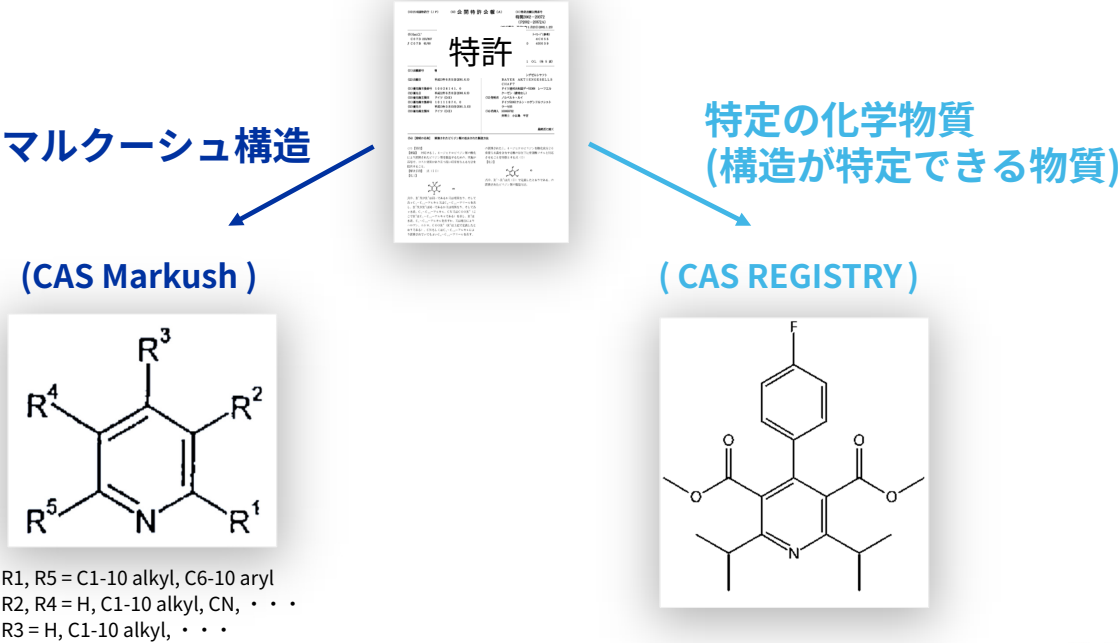
* 重合度が 10 までの物質は収録

** 短い配列は収録

4 © 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



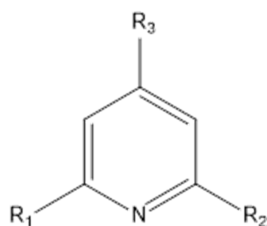
収録対象の違い

	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



CAS Markush の構成

特許の記載

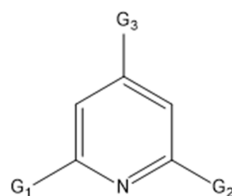


R₁、R₂は水素、OH、ハロゲン．．．を表し
R₃はC₁-C₁₀のシクロアルキル基、
アリール基．．．を表す．．．

R₃が4-クロロフェニル基である請求
項1に記載の化合物．．．



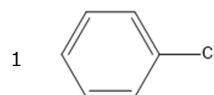
CAS Markush の構成



基本骨格と置換基の
定義を収録

G₁, G₂ = H, OH, halogen, ...

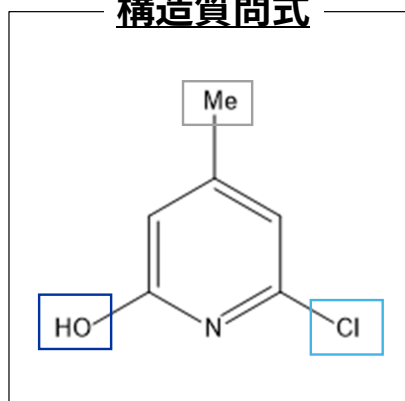
G₃ = cycloalkyl (C₁-C₁₀), aryl (C₁-C₁₀), ...
(Specifically claimed: 1)



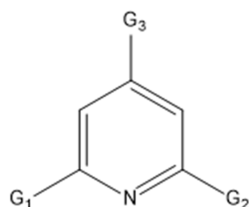
検索の仕組み

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, ...

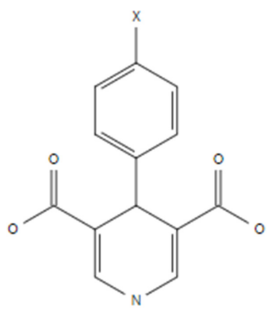
G₃ = alkyl (C₁-C₁₀), aryl (C₁-C₁₀),
... (Specifically claimed: 1)

- 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

CAS SciFinderでの回答表示

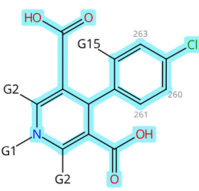
- ヒットした置換基を組み立てた形で表示されるのでヒットした構造が分かりやすい
- ヒット構造に関与しない置換基の情報は表示されない

構造質問式



CAS SciFinder

WO2009032286



Oligomeric polyethylene glycol-calcium channel blocker conjugates

Assignee: Nektar Therapeutics AI, Corporation
World Intellectual Property Organization, English, Database: CAPRI 9-03-12 | Language: English

Patent claim 9

PatentPak Fair Text

260,261,263: opt. substd. by 1 or more G16

マルクーシュ構造の記載位置

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

マルクーシュ構造の検索

検索画面

The screenshot shows the CAS search interface with the 'Substances' tab selected. The search bar contains the text: 'Search by Substance Name, Functional Group, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI.' Below the search bar, there is a button labeled '+ Add Advanced Search Field'. On the right side, there is a chemical structure drawing tool with buttons for 'Edit Drawing', 'Remove', and 'Search Patent Markush' (which is checked).

Annotations on the screenshot:

- マルクーシュ構造を検索する際は Substances の Draw から構造を作図し、Search Patent Markush にチェックを入れる

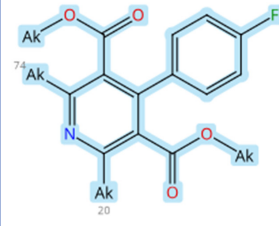
回答一覧画面

The screenshot shows the CAS search results page for a Patent Markush search. The search criteria are 'As Drawn (20)' and 'Substructure (140)'. The results are sorted by 'Relevance'. The first result is for US20110118299, titled 'Treatment of mild cognitive impairment (MCI) and Alzheimer's disease using nifedipine derivatives and thyroxine'. The second result is for JP2002020372, titled 'Preparation of...'. The page includes a sidebar with filters for 'Patent Office' and 'CA Section'. Annotations on the screenshot:

- 完全一致検索 (As Drawn (20))
- 部分構造検索 (Substructure (140))
- 特許レコードへのアクセス (US20110118299)
- 原報へのアクセス (Patent disclosure)
- 書誌情報 (特許の標題、特許番号、特許発行日、特許出願人) (Bibliographic information)
- 特許中の記載位置 (Preparation of...)
- 補足情報 (20, 74 Ak は炭素数 1-10) (Additional information)

特許レコードへのアクセス

JP2002020372



Preparation of substituted pyridines

特許レコード

抄録や索引を確認できる

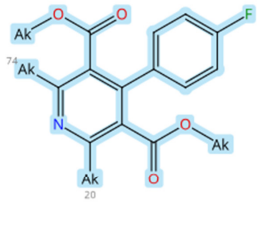
実施例等で報告されていた重要な特定の化学物質



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

JP2002020372



Preparation of substituted pyridines

Assignee: Bayer A.-G.

Japan, JP2002020372 A 2002-01-23 | Language: Japanese, D

Patent claim 1

PatentPak Full Text

Patent Language Kind Code PatentPak Option

JP2002020372 Japanese A PDF

EP1162197 German A1 PDF

① PDF のリンクをクリック

② マルクーシュ構造の記載箇所を確認

14 © 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

15 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

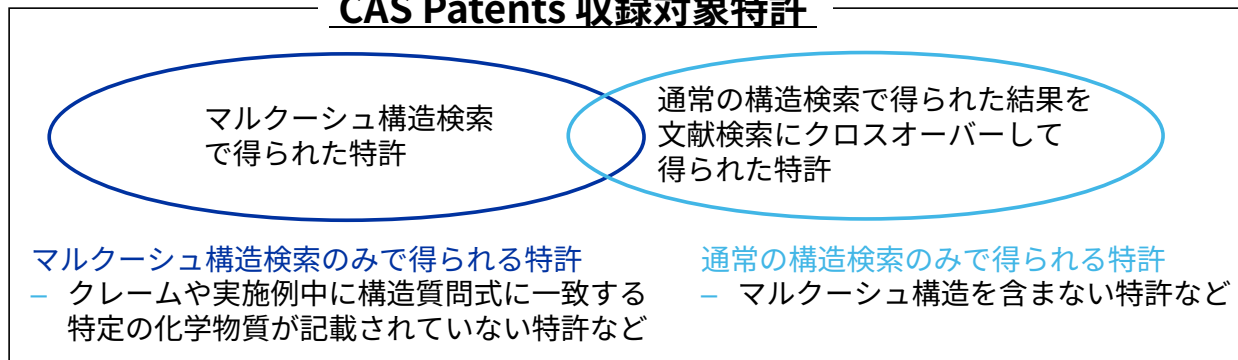


構造検索とマルクーシュ構造検索で得られる特許の違い

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



* 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)

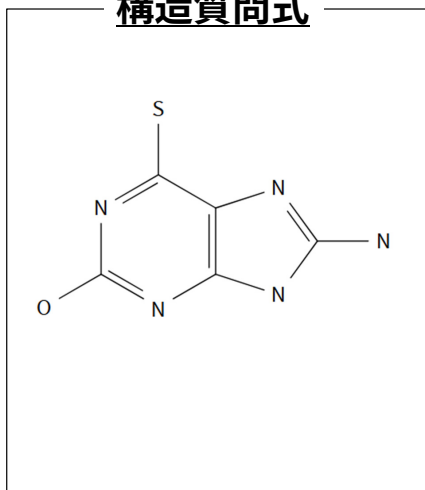
16 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



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)

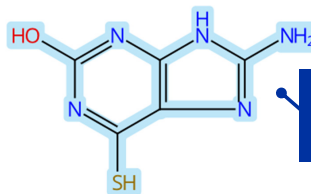
Substructure (0)

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

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

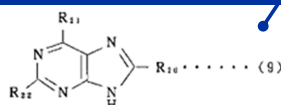


化学物質検索

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、R₂₀、R₂₁、R₂₂は、各々、-H、-S H、-OH、又は-NH₂を表し、且つ、R₂₀~R₂₂の少なくとも1つは、-SH、-OH、又は-NH₂である)

実施例

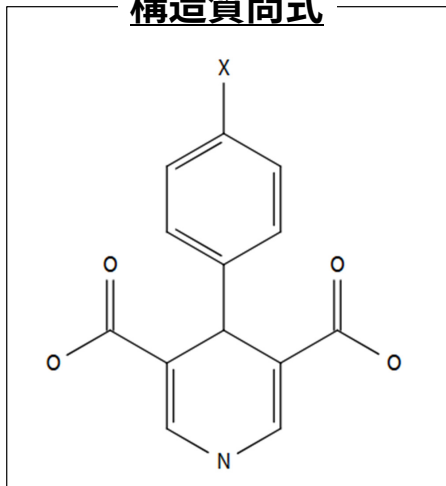
表 1									
有機インヒビター				添加量	コロイダル分散性	基	加工性	備考	
No.	化合物名	(wt%)	(wt%)	(wt%)	(wt%)	材	法	部	考
1	ピリジン-2,5-ジカルボン酸	2	73	25	G1	○	○	○	
2	ピリジン-2,6-ジカルボン酸	2	73	25	G1	○	○	○	
3	ピリジン-3,4-ジカルボン酸	2	73	25	G1	○	○	○	
4	ピリジン-3,5-ジカルボン酸	2	73	25	G1	○	○	○	
5	ピリジン-3,6-ジカルボン酸	2	73	25	G1	○	○	○	
6	ピリジン-2,3-ジオール	2	73	25	G1	○	○	○	
7	ピリジン-2,4-ジオール	2	73	25	G1	○	○	○	
8	ピリジン-2,6-ジオール	2	73	25	G1	○	○	○	
9	ピリジン-2-ヒドロキシ-3-カルボン酸	2	73	25	G1	○	○	○	
10	ピリジン-3-ヒドロキシ-2-カルボン酸	2	73	25	G1	○	○	○	
11	ピリジン-3-ヒドロキシ-2-カルボン酸	2	73	25	G1	○	○	○	
12	ピリジン-6-ヒドロキシ-2-カルボン酸	2	73	25	G1	○	○	○	
13	ピリジン-2-メルカプト-3-カルボン酸	2	73	25	G1	○	○	○	
14	ピリジン-6-メルカプト-3-カルボン酸	2	73	25	G1	○	○	○	
15	ピリジン-2,3-ジカルボキシル酸	2	73	25	G1	○	○	○	
16	2-ア								
17	2-ア								
18	2,3-二								
19	2,6-二								
20	ピリジ								
21	ピリジ								
22	ピリジ								
23	ピリジン-4-カルボン酸	2	73	25	G1	○	○	○	
24	2-ヒドロキシピリジン	2	73	25	G1	○	○	○	
25	3-ヒドロキシピリジン	2	73	25	G1	○	○	○	
26	4-ヒドロキシピリジン	2	73	25	G1	○	○	○	
27	2-メルカプトピリジン	2	73	25	G1	○	○	○	
28	4-メルカプトピリジン	2	73	25	G1	○	○	○	
29	2-アミノピリジン	2	73	25	G1	○	○	○	
30	3-アミノピリジン	2	73	25	G1	○	○	○	
31	4-アミノピリジン	2	73	25	G1	○	○	○	
32	テロメート系								

構造質問式に一致する物質の記載はない

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



通常の構造検索で得られた回答 (865 件)

- 雑誌論文
- 特許(マルクーシュ構造を含まない特許など)

マルクーシュ構造検索で得られた特許 (275 件)

共通文献 (72 件)

検索例 2 (2/4)

構造からの文献検索

① 構造検索

② 回答で得られた化合物のいずれかが索引された文献を得る

③ 得られた文献を保存する

チェックしない

検索例 2 (3/4)

マルクーシュ構造検索

Search by Substance Name, Functional Group, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. ① マルクーシュ構造検索

Patent Markush search for drawn structure

References - ② ヒットしたマルクーシュ構造

Get References for Patent Markush Structures

All Results Selected Results

Substructure (510)

Filter Behavior

Filter by Exclude

Patent Office

European Patent Organization (136)

World Intellectual Property

510 Results

Sort: Relevance

1

CN102491939

Process for preparation of substituted dipinic acid compounds

Assignee: Shandong Xinhua Pharmaceutical Co., Ltd.
China, CN102491939 A 2012-06-13 | Language: Chinese, Database: CPlus

Patent claim 1

PatentPak - Full Text -

There are no notes to display for this structure.

Edit Drawing Remove

Search Patent Markush

Patent Markush search

チェックする

21 © 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

Patent Markush search for drawn structure

References -

Get References for Patent Markush Structures

All Results Selected Results

Substructure (510)

Filter Behavior

Filter by Exclude

Patent Office

European Patent Organization (136)

World Intellectual Property

510 Results

Sort: Relevance

1

CN102491939

Process for preparation of substituted dipinic acid compounds

Assignee: Shandong Xinhua Pharmaceutical Co., Ltd.
China, CN102491939 A 2012-06-13 | Language: Chinese, Database: CPlus

Patent claim 1

PatentPak - Full Text -

There are no notes to display for this structure.

Combine Reference Results

Select a Combine Option:

Add Intersect Subtract

Select Select Select

③ マルクーシュ構造検索で得られた特許

④ 通常の構造検索で得られた文献を除く (about Combine)

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=vyuyjyS0zCQ>

22 © 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

23 © 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

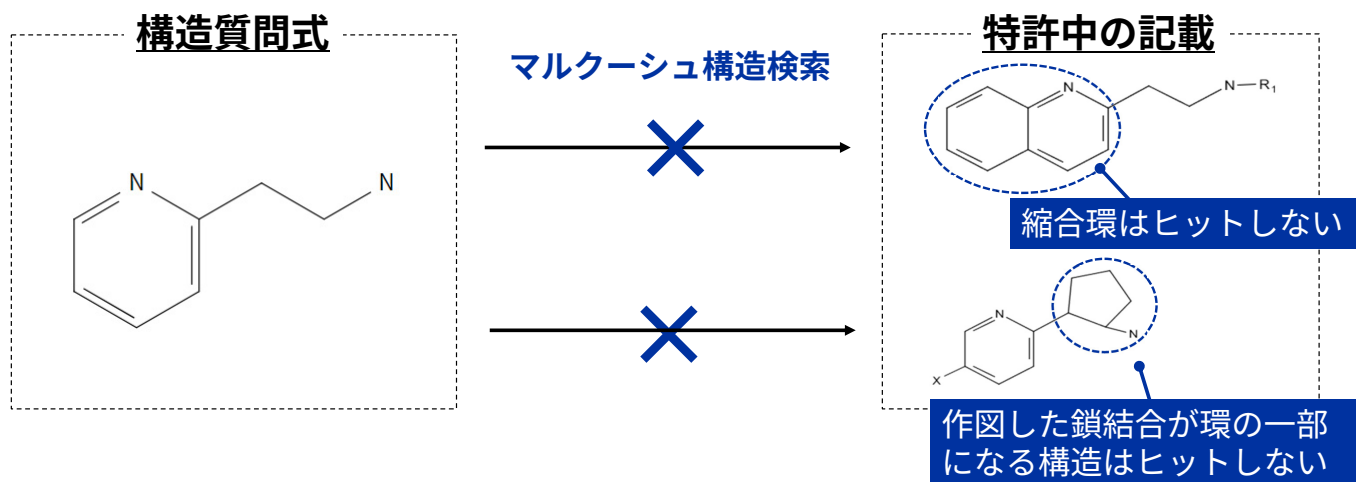
- CAS SciFinder は検索条件があらかじめ決められており、変更できない
- CAS STNext は細かな条件もコマンドを使って変更することができる
- 詳細な検索条件をつけて、マルクーシュ構造を検索したい場合は、CAS STNext の利用を推奨する

24 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS STNext との違い (1/5)

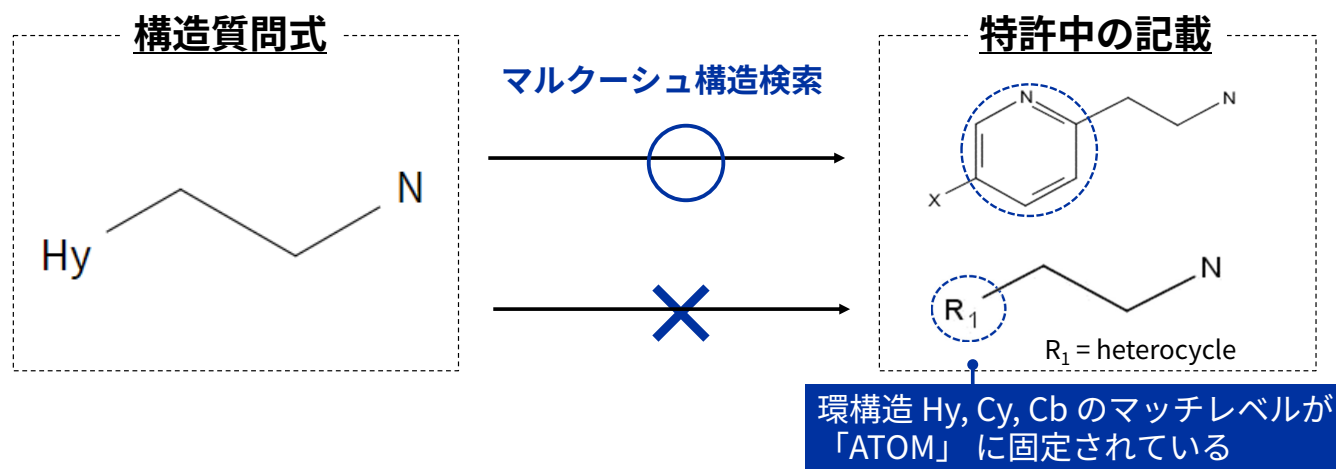
CAS SciFinder のマルクーシュ構造検索では作図した結合は自動的に Lock Rings が設定される



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

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

(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

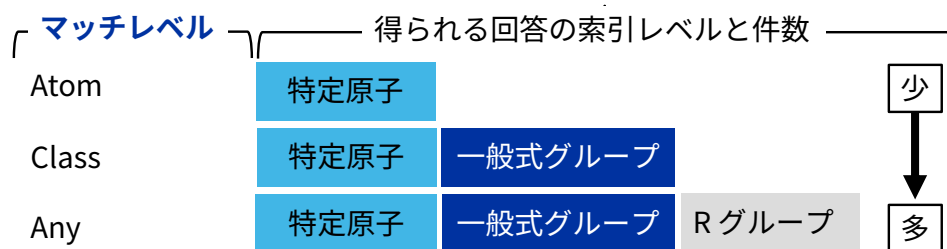
— 索引レベル

特定原子 : C、N、CH₃、Pyridine など

一般式グループ : halo、alkyl、carbon chain など

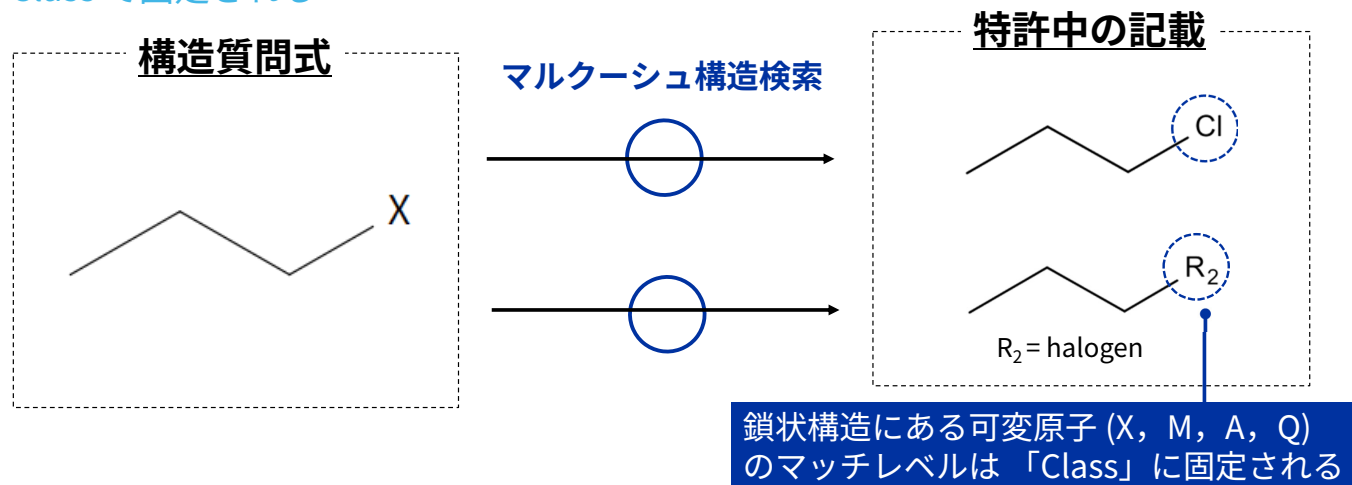
R グループ : 構造で表現できない記載 (organic group、negatively charged など)

— マッチレベルと得られる回答



CAS STNext との違い (3/5)

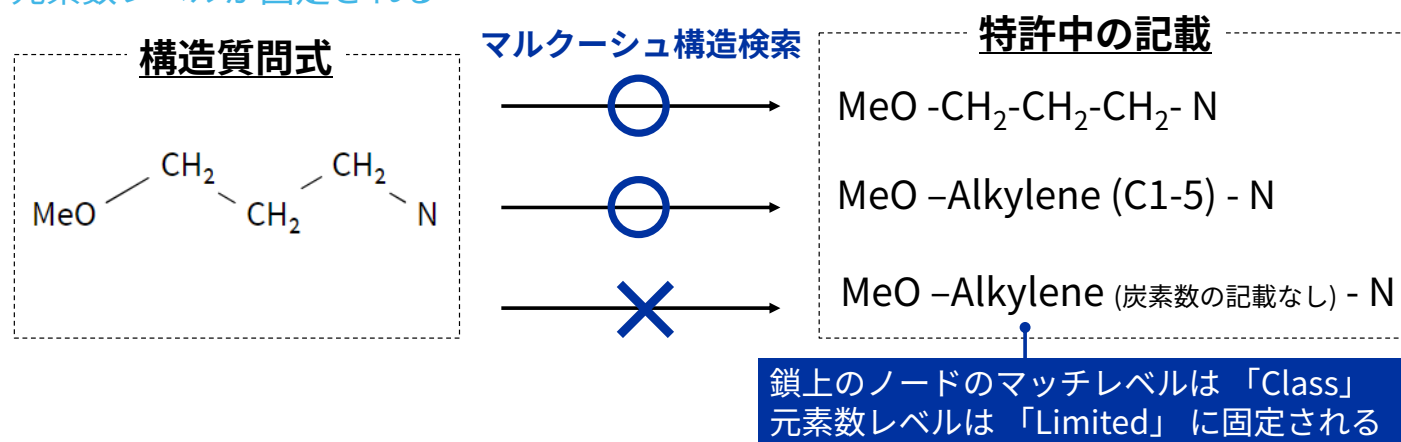
CAS SciFinder のマルクーシュ構造検索では可変原子のマッチレベルが Class で固定される



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

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

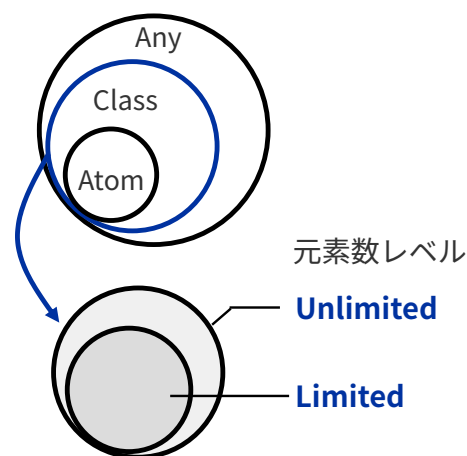


CAS STNext のマルクーシュ構造検索では元素数レベルを「非限定」に変更できる

(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

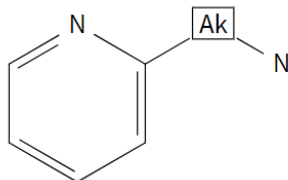
- Limited :** 一般式グループに対して**元素の種類と数の記載があり、かつその条件を満たす**回答 (デフォルト)
- Unlimited :** 上記に加え、**元素の種類と数が記載されていない回答** (指定した元素の存在が否定されない回答を含む)



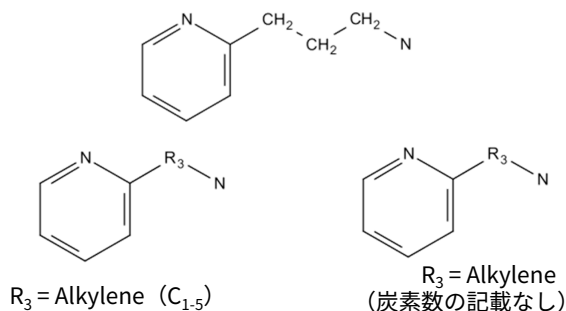
CAS STNext との違い (5/5)

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



CAS STNext では Ak に元素数を指定した検索が可能

まとめ

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

JAICI ヘルプデスク

0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

support@jaici.or.jp

Thank you

Connect with us at cas.org

 linkedin.com/company/cas

 [@CASchemistry](https://twitter.com/CASchemistry)

