



CAS SciFinder[®] オンライン講習会 (マルクーシュ構造検索)



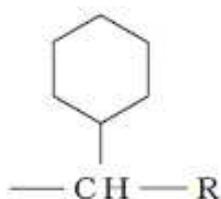
本日の内容

- マルクーシュ構造とは
- 通常の構造検索との違い
- 検索例 (デモ)
- 利用上の注意点

本日の内容

- マルクーシュ構造とは
- 通常の構造検索との違い
- 検索例 (デモ)
- 利用上の注意点

マルクーシュ構造とは



(Rは、C1~4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

本日の内容

- マルクーシュ構造とは
- 通常の構造検索との違い
- 検索例 (デモ)
- 利用上の注意点

収録対象の違い

マルクーシュ構造

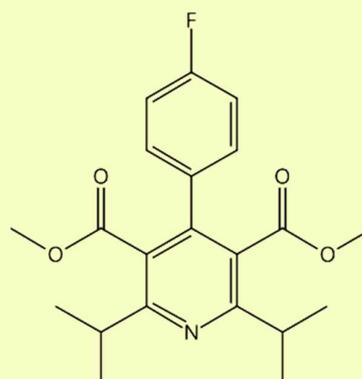


R1, R5 = C1-10 alkyl, C6-10 aryl
R2, R4 = H, C1-10 alkyl, CN, . . .
R3 = H, C1-10 alkyl, . . .

マルクーシュ構造データベース



特定化学物質
(構造が特定できる物質)



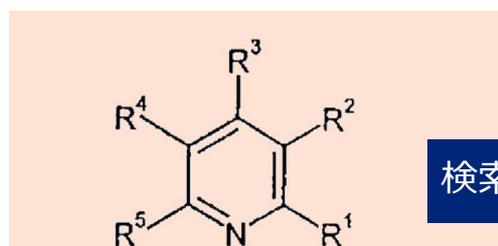
化学物質データベース

収録対象の違い (詳細)

	マルクーシュ構造データベース	化学物質データベース
特許請求 範囲	1961-	1981-
	マルクーシュ構造	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-	/
	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-
		発明内容に関わりのある 特定の化学物質

構造検索の検索対象

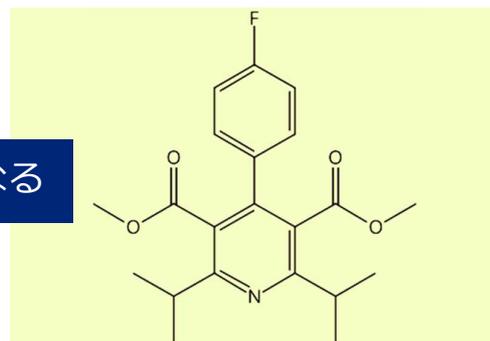
マルクーシュ構造検索



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

マルクーシュ構造データベース

通常の構造検索

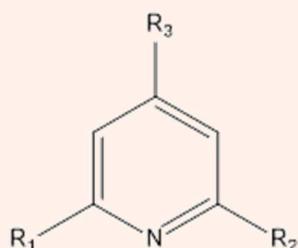


化学物質データベース

検索対象が異なる

マーカーシユ構造データベース

特許の記載



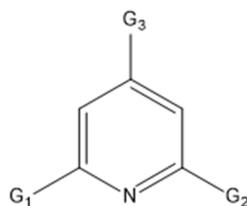
R₁, R₂ は水素, OH, ハロゲン... を表し,
R₃ はC₁-C₁₀のシクロアルキル基, アリール基
... を表す...

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...

JAICI
化学情報協会

データベースの構成

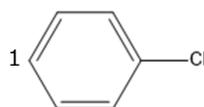
(CAS SciFinder[®] ではこのデータは表示されない)



G1 = H, OH, halogen, ...

G2 = H, OH, halogen, ...

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

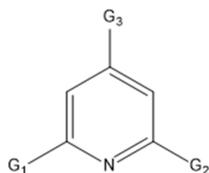
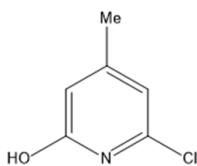


基本骨格と置換基の
定義を収録

9

マーカーシユ構造検索

構造質問式



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

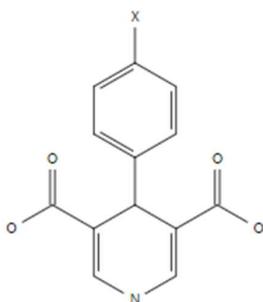
通常の構造検索では得られない特許
が見つかる

JAICI
化学情報協会

10

CAS SciFinderⁿ での表示

構造質問式



WO2009032286

Oligomeric polyethylene glycol-calcium conjugates

By: Ren, Zhongxu; Deng, Bo-Liang; Riggs-Sauthier, World Intellectual Property Organization, WO2009 English, Database: CAplus
Assignee: Nektar Therapeutics AI, Corporation

Patent claim 9

PATENTPAK ▾ Full Text ▾

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

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

本日の内容

- マルクーシュ構造とは
- 通常の構造検索との違い
- 検索例 (デモ)
- 利用上の注意点

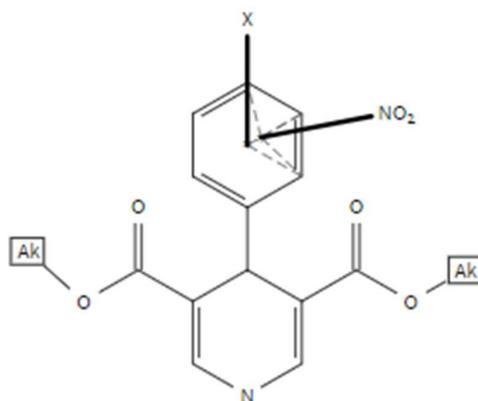
マルクーシュ構造検索手順

The screenshot shows the CAS SciFinder search interface. On the left, under 'Searching for...', the 'Substances' option is highlighted with a red box and labeled '1. 検索項目は Substances を選択'. In the center, there is a search bar with a 'Draw' button highlighted by a red box and labeled '2. Draw ボタンで作図画面を起動して構造質問式を作図'. Below the search bar, the 'Search Patent Markush' checkbox is checked and highlighted with a red box, labeled '3. Search Patent Markush にチェックを入れて検索実行'. A chemical structure is shown in a drawing window with 'Edit Drawing' and 'Remove' buttons below it.

検索結果画面

The screenshot shows the search results page for Patent Markush structures. On the left, there are filter options: 'Patent Markush Match' with 'As Drawn (27)' selected (labeled '完全一致検索') and 'Substructure (212)' (labeled '部分構造検索'). Below this is the 'Filter Behavior' section with 'Filter by' selected. The main results area shows a list of patent records. The first record is for JP2003021898, titled 'Photosensitive resin compositions containing 1,4-dihydropyridines as crosslinking catalysts, their cured products, and their application'. The title is highlighted with a blue box and labeled '特許レコードの表示'. Below the title, there is a 'Patent claim 3' section with a dropdown menu set to 'PATENTPAK' (labeled '特許中の記載位置') and a 'Full Text' link (labeled 'Full Text リンク'). The 'Full Text' link is also labeled 'CAS PatentPak'. The text below the dropdown says 'There are no notes to display for this structure.'

検索例：
下記の構造について通常の構造検索と
マルクーシュ構造検索を行う



検索の流れ

① 通常の構造検索



References ボタンで
文献を得る



質問式を保存



② マルクーシュ構造検索



References ボタンで
文献を得る



質問式を保存



③ Combine 機能で回答をまとめる
or 差分をみる

本日の内容

- マルクーシュ構造とは
- 通常の構造検索との違い
- 検索例 (デモ)
- 利用上の注意点

マルクーシュ構造検索

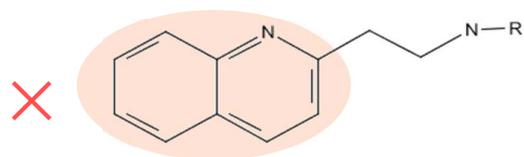
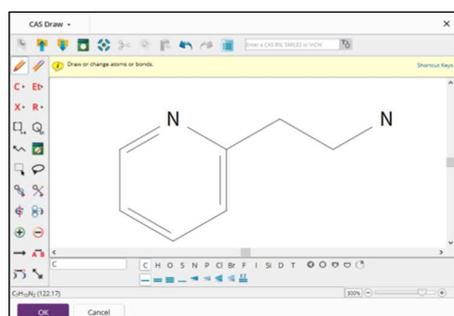
- 収録対象はマルクーシュ構造が記載されている特許
- 非特許は含まれない
- 特定化学物質は含まれない

収録対象の物質

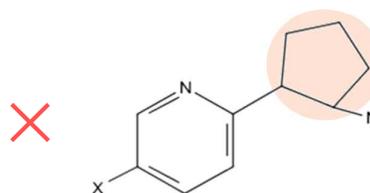
- 収録対象物質
 - 有機化合物
- 収録対象外の物質
 - 無機化合物
 - ポリマー *
 - 核酸・タンパク質 **

構造質問式の設定

- 検索する際、作図した結合は自動的に Lock Rings が設定される



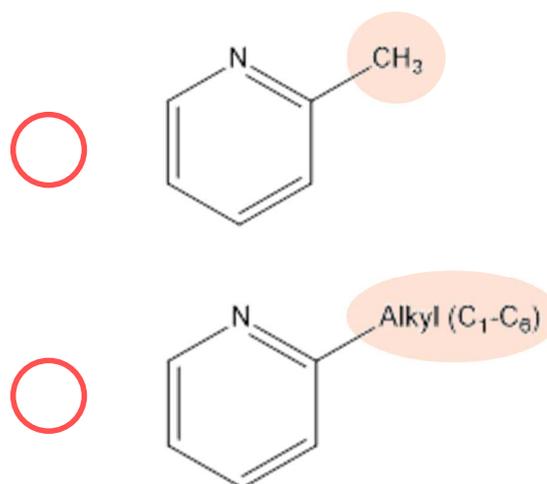
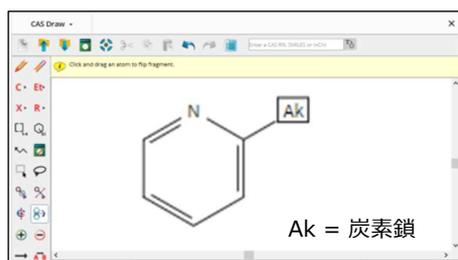
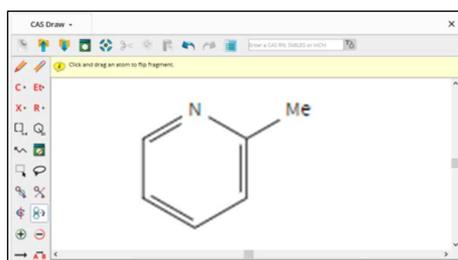
縮合環はヒットしない



作図した鎖結合が環の一部
になる構造はヒットしない

一般式で表される置換基

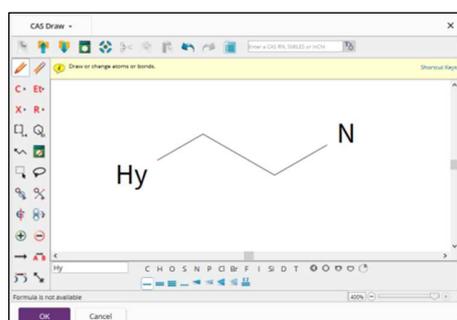
- 鎖は一般式でもヒットする



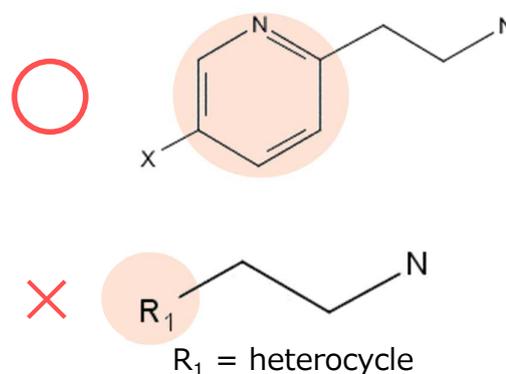
* ただし、メチル (炭素数 1) のように炭素数を限定している場合は炭素数の記載のない Alkyl とのみ定義されている一般式はヒットしない

一般式で表される置換基

- 環は一般式ではヒットしない



Hy = ヘテロ環



一般式 (heterocycle) では
ヒットしない

より網羅的な検索には、細かい検索条件の指定ができる STN のご利用を推奨します。

まとめ

- マルクーシュ構造検索は、特許中のマルクーシュ構造が検索対象
- 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できます