



- MARPAT ファイルの概要
- マルクーシュ構造の索引
- マッチレベルと元素数レベル
- MARPAT ファイルの検索
- CAS FILES を使った特許調査 (CASLINK)







MARPAT ファイルの概要

3 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

MARPAT ファイル

MARPAT ファイルはマルクーシュ構造が検索できる特許データベース

- 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~
 CAS 作成 1984年~
 INPI (フランス特許庁) 由来 1961年~1987年
- 更新頻度: 毎日



MARPAT ファイルの収録対象

- 収録対象化合物
 - 有機化合物
 - 有機金属化合物
 - ・ 重合度が 10 以下のオリゴマー
- 収録対象外の化合物
 - 無機化合物
 - ・ ポリマー
 - 核酸・タンパク質
- ・ 特定化学物質 (構造が明確な物質) は収録されない
- 5 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



レコード例:ALL 表示形式

AN TI IN PA UO UOS	136:102298 MA Preparation of Norbert, Lui; Bayer AG., C LANXESS AG Lanxess	ARPAT Fi 'substi Panskus Germany	ull-text ituted pyr s, Hans; S	idines chnatterer, Albert		
PI	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE	
	JP 2002020372 DE 10111874	A A1	20020123 20011213	JP 2001-169465 DE 2001-10111874	20010605 20010313	
R4 R5	R ³ R ² R ¹ H II					
AB	Title compds. I (alkyl, CN, CO2R6; C6-10 aryl) are p	R1, R5 = R6 = C1 repd. by	C1-10 alky -10 alkyl; F reaction of	l, C6-10 aryl; R2, R4 R3 = H, C1-10 alkyl, (f 1,4-dihydropyridine	= H, C1-10 un)substituted II (R1-R5 = same	
ST IT	pyridine prepn; hy Oxidation (prepn. of subs	dropyrid tituted	ine oxidn me pyridines)	ethyl nitrite		
IT	122549-42-2 P RL: IMF (Industria (Preparation) (prepn. of subs	l manufa tituted	cture); SPN pyridines)	(Synthetic preparation); PREP	

- レコードは文献 (特許) 単位
- CAplus/CA ファイルの書誌情報、抄録、 索引が収録されている
- レコード番号 (AN) 以外は検索不可



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

6

レコード例:ALL 表示形式(続き)



CAS FILES における化学物質の索引



化学物質の索引方針

	MARPAT	REGISTRY/CAplus
特許請求範囲	マルクーシュ構造 (1961 年 ~)	発明の内容に関わりのある 特定化学物質 (1981 年 ~)
発明の詳細な 説明	マルクーシュ構造 (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		発明の内容に関わりのある 特定化学物質 (1907 年 ~) 何らかの hard data がある物質を索引。 1993 年以降一部の特許については実施例中 の hard data のない物質も索引。 比較として挙げられている例示物質は索引 されない

9 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

MARPAT ファイルの概要 - まとめ

- MARPAT ファイルは低分子有機化合物のマルクーシュ構造が検索可能な特許の データベース
- 同じ特許からでも、特定化学物質は REGISTRY/CAplus に、マルクーシュ構造は MARPAT に索引される
- ・ 化学物質関連特許の網羅的な調査にはREGISTRY/CAplus と MARPAT を併用する



CAS



マルクーシュ構造の索引

11 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

マルクーシュ構造の索引

MARPAT ファイルは、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

- ・ 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表記 organic group、negatively charged など)



公報の記載と MARPAT ファイルの索引の比較-1



公報の記載と MARPAT ファイルの索引の比較-2



マルクーシュ構造の置換基に関する索引

MARPAT ファイルは、置換基の許容や補足を以下のように索引している

	MSTR 中の記載	内容
「	(substd. by) substituted by	必ず置換する
¦容	(opt. substd by.) optionally substituted by	任意の置換基の存在を表す
「補	(Specifically claimed)	別のクレーム中 (従属項など) で、権利請求 されている置換基を収録
定	(Example)	請求項以外の特許中に記載されている具体的 な例示物質

15 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



公報中の記載 (JP2011-207785)

【請求項1】



(式中、R1 は、ハロゲン原子または炭素数 1 から 4 のアル コキシ基で置換されていてもよい炭素数 1 から 10 のアルキ ル基;炭素数 1 から 10 のアルキル基、炭素数 1 から 10 の ハロアルキル基またはハロゲン原子で置換されていてもよ い炭素数 3 から 8 のシクロアルキル基;…)で表される 4-シクロペンチルシクロヘキサノン誘導体。

【請求項4】

R1 が、プロピル基である請求項 3 に記載の 4- シクロペンチルシクロヘキサノン誘導体。

MARPAT ファイルの索引

MSTR 1 G1_ -0

G1 = alkyl <containing 1-10 C> (opt. substd. by 1 or more G2) /..

/(Specifically claimed : Pr-n)
G2 = halo / alkoxy <containing 1-4 C>

「置換されていてもよい」は "opt. substd. by" で表される

マルクーシュの定義の記載以外から も置換基の情報を補足している







マッチレベルと元素数レベル

17 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS

MARPAT ファイルの構造検索とマッチレベル



マッチレベルの指定で得られる回答をコントロールできる



マッチレベルとは?

 構造質問式に指定できるマルクーシュ構造検索用の属性 Atom (原子) Class (クラス) Any (不定) の3種類がある

• マッチレベルと得られる回答



19 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

マッチレベルと MARPAT の索引レベル

MARPAT ファイル中での "ピリジン" に関連する様々な記載

pyridyl heterocycle <containing 1 N> heteroaryl <containing 1 N> heterocycle heteroaryl R <Cyclic Organic Substituent> R <Organic Substituent>

"ピリジン" を作図して、どのマッチレベルを 指定したら、上記の内容が回答に含まれるか?





-般式グループの定義

MARPAT ファイル中の一般式グループには、元素の種類と数が記載されている場合と記載 されていない場合がある

• 元素の種類と数の記載あり

alkyl <containing 1-20 C> (炭素数 1-20 のアルキル基) heterocycle <containing 1 N> (窒素数 1 のヘテロ環)

• 元素の種類と数の記載なし

alkyl

heterocycle



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











構造作図 – マッチレベル、元素数レベルの指定



デフォルト設定

環のマッチレベル : Atom 鎖のマッチレベル : Class 元素数レベル : Limited

CAS CAS



構造作図 – マッチレベル、元素数レベルの指定



マッチレベル練習-1

「構造質問式」欄の構造を作図した場合、各マッチレベル・元素数レベルで「MARPAT 中 の記載」欄の構造がヒットするかどうか考えます

		マッチ	レベル・元素数レベ	いの指定 ―――
構造 質問式	MARPAT 中 の記載	Atom	Class Limited	Class Unlimited
1) F	F			
	Cl			
	X (halo)			
② X	F/Cl/Br/I/At			
	X (halo)			

* X (ハロゲン) や M (金属) はマッチレベル Class でも元素数レベルの設定は回答に影響しない





		~ ~~	レベル・元素数レベ	いの指定 ———	
構造 質問式	MARPAT 中 の記載	Atom	Class Limited	Class Unlimited	
	F	0)	
1) F	Cl	×	>	<	
	X (halo)	×	C) Point	!
② X	F/Cl/Br/I/At	0	C	マッチでは一	・レベル Atom ・般式グループ
	X (halo)	×	C		アレない

*X (ハロゲン)や M (金属) はマッチレベル Class でも元素数レベルの設定は回答に影響しない

29 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

マッチレベル練習-2

			ベル・元系数レベ	ルの指定
構造 質問式	MARPAT 中の記載	Atom	Class Limited	Class Unlimited
3	Q .C-C-C- Q			
C C C	Alkyl <(1-5) C>			
	Alkyl			
(4) (Ak)	Q.C-C-C-Q			
0~00	Alkyl <(1-5) C>			
元素数 炭素 1-2	Alkyl			
5	Q.C-C-C-Q			
Q AK Q	Alkyl <(1-5) C>			
元素数 指定なし	Alkyl			
*Q(C, H以外)				

CAS Advision of the American Chemical Society



マッチレベル練習-2(回答)

		~ マッチレ・	ベル・元素数レベ	ルの指定 ―――	۱
構造 質問式	MARPAT 中の記載	Atom	Class Limited	Class Unlimited	
3	Q .C-C-C- Q	×	×	×	
0 0 0	Alkyl <(1-5) C>	×	\bigcirc	\bigcirc	
	Alkyl	×	×	0	1
	Q-C-C-C-Q	×	×	×	oint! - 表物しべせが影響する
Q Q	Alkyl <(1-5) C>	×	0	\bigcirc	し来数レベルが影響する Dは、元素数を指定した
元素数 炭素 1-2	Alkyl	×	×	\circ	▶図をしている場合の∂
5	Q-C-C-C-Q	\bigcirc	()	
Q AK Q	Alkyl <(1-5) C>	×	()	_
元素数 指定なし	Alkyl	×	()	
Q (C, H 以外)					-

31 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

マッチレベル練習-3

		マッチレイ	ベル・元素数レ^	ベルの指定 ――
構造 質問式	MARPAT 中の記載	Atom	Class Limited	Class Unlimited
6 _N				
	Heterocycle <(2) N, (0-) O> •			
環孤立	Heterocycle			
(7) Hu		窒素が2個 酸素が0個以	F	
liy	Heterocycle <(2) N, (0-) O>	という条件		
元素数 窒素 1	Heterocycle			
8		/		
Ну	Heterocycle<(2) N, (0-) O>			
元素数 指定なし	Heterocycle			

Hy (ヘテロ環)





マッチレベル練習-3(回答)

		レ マッチレイ	ヾル・元素数レ∧	ベルの指定 ――	Г
構造 質問式	MARPAT 中の記載	Atom	Class Limited	Class Unlimited	
6		×	×	×	
	Heterocycle <(2) N, (0-) O>	×	×	×	Point I
環孤立	Heterocycle	×	×	0	元素数が条件を満たさない
(7) H.		×	×	×	回答は Class 、Unlimited で もヒットしない
пу	Heterocycle <(2) N, (0-) O>	×	×	×	
元素数 窒素1	Heterocycle	×	×	0	_
(8) Hv		0	(\sum	
- = *	Heterocycle<(2) N, (0-) O>	×	(\supset	
元素数 指定なし	Heterocycle	×	(\supset	
* Hy (ヘテロ環)		•			

33 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

マッチレベル、元素数レベルのまとめ

- 重要な環など、特定原子で明確に存在してほしい部分はマッチレベルを Atom に指定
- 一般式グループで定義されている場合も回答に含めたい部分はマッチレベルを Class に 指定
- 元素の種類と数が記載されていない一般式グループも回答に含めたい部分は、マッチ レベルを Class に、元素数レベルを Unlimited に指定



AD.



MARPAT ファイルの検索

35 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

MARPAT ファイルの構造検索

=> S L# 検索タイプ 検索範囲

	検索タイプ	内容
CSS	閉構造部分構造検索	構造質問式に一致する回答。追加の置換基を許容しない
SSS	部分構造検索 (デフォルト)	追加の置換基が存在してもよい

	検索範囲	内容
SAM	サンプル検索 (デフォルト)	フルファイルの一部をテスト的に検索
FUL	フルファイル検索	ファイルのすべて (100 %) を検索





構造検索時の注意点

- 完全一致 (EXA) およびファミリー (FAM) 検索はない
- 結合属性 (Bond Type) で 環/鎖 (Ring/Chain) を指定した作図はできない
 - 結合属性を Ring に指定したフラグメントと Chain に指定したフラグメントを描き R グループに含めればよい
- 構造質問式同士を演算 (AND, OR, NOT) することはできない

37 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

MARPAT ファイルの主な表示形式

表示形式	内容
SCAN	標題、特許分類、索引情報、FQHIT (ランダム表示)
FQHIT	最初にヒットしたマルクーシュ構造 (ヒット部分のみ)
FQHITEXG	FQHIT と関連する G グループの定義
MSTR	マルクーシュ構造情報すべて
BIB	書誌情報 (デフォルト)
ALL	レコードの全情報
回答の適合性をチェ	・ ックー ナーン -> D SCAN TI FOHIT * SCAN に含まれる TI (標題) と FOHIT だけを

回答の適合性をチェックしたい => D SCAN TI FQHIT 書誌情報とヒットした => D BIB FQHIT マルクーシュ構造を見たい * SCAN に含まれる TI (標題) と FQHIT だけを コンパクトに表示できる









- 環は縮合してもよい
- 青丸で囲った環は明確に存在して 欲しい重要な環なのでマッチレベルは Atom で検索
- それ以外のノードはマッチレベル Class、 元素数レベル Limited で検索

CASS Advision of the American Chemical Society

39 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

作図画面の起動

Transcript ON 2022_0156_Transcript		History	Project
File MARPAT	>	Session	
All use of STN is subject to the provisions of the STN customer agreement. This agreement limits use to scientific research. Use for software development or design, implementation of commercial		Entered HC	ME ARPAT
gateways, or use of CAS and STN data in the building of commercial products is prohibited and may result in loss of user privileges and other penalties.			
Access the latest version of STN. Log into STNext with your STN login ID at https://www.stn.org			
STNext is updated frequently. To see the latest STNext Release Notes, click https://www.stn.org/help/stnext/ReleaseNotes.htm			
* * * * * * * * * * * * * STN TOKYO * * * * * * * * * * * * * * * * * * *			
FILE 'HOME' ENTERED AT 14:39:34 ON 09 JUN 2022			
=> [inter command	Submit	\oslash	Draw

- CAS STNext にログインし、 MARPAT ファイルに入る
- 右下の Draw ボタンで 構造作図画面を起動する





デフォルトでは下記のよう に指定される

環のマッチレベル : Atom 鎖のマッチレベル : Class 元素数レベル : Limited

41 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



作図例



- デフォルトの設定から変更したいところだけ変更すればよい
- ベンゼン環部分のマッチ レベルを Class に変更する



作図例



作図例









45 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.





46

検索の流れ

=> S	L1 FUL	•			フルファイル検索	索を実行
L3	209 SEA SS	5 FUL L1				
=> D	BIB FQHIT	•		(1件目の書誌情報 FQHIT を表示	 (BIB) と
L3	ANSWER 1 OF 209	1ARPAT	COPYRIGHT 2	022 ACS on S		
AN	178:255170 MARPA	F Full-t	ext			
11	NLKP3 activators 1	or use	in the trea	itment of infe	ctious diseases or	r cancer
TN	Gross Olaf: Neuwi	'S IIIIIa irt Emi	lia: Tung	Manfred		
	Albert-Ludwigs-Uni	iversita	et Freiburg	Germany		
SO	PCT Int. Appl., 25	54pp.		,, ocrinally		
00	CODEN: PIXXD2					
DT	Patent					
LA	English					
FAN.	CNT 2					
	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION	NO. DATE	
ΡI	WO 2022079246	A1	20220421	WO 2021-EP7	8623 20211	1015
	EP 3984535	A1	20220420	EP 2020-202	297 20201	1016
PRAI PSPI	EP 2020-202297		20201016			
	PATENT NO.	KIND	STATUS	STATUS	DATE	
	WO 2022079246	A1	Alive	2022042	8	

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



検索の流れ

47





参考:回答の絞り込み

MARPAT ファイルでは発行年やキーワードなどで検索できないため、絞り込み検索を行い たい場合は、CAplus ファイルにクロスオーバーする



49 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

実習1 下記の構造を MARPAT ファイルで検索する



- マッチレベル、元素数レベルを下記のように指定 する
 - **パターン1** デフォルトのまま (環のマッチレベル: Atom、鎖のマッチ レベル: Class、 元素数レベル: Limited)
 - パターン2 ベンゼン環のマッチレベルを Class に変更 (元素数レベルは Limited のまま)
- ・ パターン1 とパターン2 でヒットする回答の違い を確認する



実習1の流れ

手順	ヒント
1. MARPAT ファイルに入る	FILE MARPAT
2. 作図画面を起動してまずパターン1で 作図	② Draw で作図画面を起動
3. 構造質問式をアップロード	Uploadでアップロード
4. サンプル検索を実行	S L1
5. フルファイル検索を実行	S L1 FUL
6. 回答を表示	D SCAN TI FQHIT D BIB FQHIT 1-2 など

51 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



実習1の流れ(続き)

- 7. CAS STNext 画面右側の History パネルにある Edit ボタンから構造質問式を開く
- History
 Project
 CAS Lexicon
 Databases

 Session
 Entered HOME
 15:16:09 ON 20 JUN 2022

 Entered MARPAT
 15:16:17 ON 20 JUN 2022

 L1
 STRUCTURE UPLOADED
 Edit
- 8. ベンゼン環のマッチレベルを Class に変更する

back to 1 covered by	Structure Editor	Maximize view	OFF X 17:04:33 0	
terived from Industrie	🗅 🖗 🖗 🖨 🏶 🐔 📽 🐔 🗢 🕫 🗷 ? Enter a CAS Registry Number, SMILES, or InCAL.	Attribute Bond Type	Values	
0	Click and drag to select objects. Ctri-click to select or deselect individual objects.	Chain Ring Ring / I Bond Value	сн	H.
 ▲ Et R ▲ R ④ ○ ◇ ● ● □ ○ ◇ ● ● ○ ◇ ● ● ○ ◇ ○ ○<th></th><th>Lact (Monaco) Node Xyse Chain (Ring (Ring / C Generic Definition Sanzanic (Umaziar Linear (Branchet Manogolet (Polygol 1) here atom (2 + and 1) 6 cartone (2 + cart 1) 6 cartone (2 + cart Atom (Cart (Are) Eliment Count (Are) Unined (Uninhed Ring Ioalan) Baland (Ioaland / B Bareacobamistry Pateriordenaut) Ab</th><th>Node Attributes Hydrogen Count Markush Attributes Mass Node Type Non-Hydrogen Count Valency</th><th>Match Level Metch Level Metch Level Metch Level Metch Level Uninited Cuse Adm Cused Many Cused Cuse Cused Cused</th>		Lact (Monaco) Node Xyse Chain (Ring (Ring / C Generic Definition Sanzanic (Umaziar Linear (Branchet Manogolet (Polygol 1) here atom (2 + and 1) 6 cartone (2 + cart 1) 6 cartone (2 + cart Atom (Cart (Are) Eliment Count (Are) Unined (Uninhed Ring Ioalan) Baland (Ioaland / B Bareacobamistry Pateriordenaut) Ab	Node Attributes Hydrogen Count Markush Attributes Mass Node Type Non-Hydrogen Count Valency	Match Level Metch Level Metch Level Metch Level Metch Level Uninited Cuse Adm Cused Many Cused Cuse Cused Cused
PAT displa	Malach Fenda Sire antida x - O + + Zoori, 10% +	Relative Absolute Other Node Attributes Mass Weinsy Hydrogen Count Non-Hydrogen Count Dement Count View Previous	ок	ベンゼン環を選択して右クリックし Markush Attributes で設定を変更

9. 変更した構造質問式をアップロードして構造検索



実習1の流れ(続き)





CAS FILES を使った特許調査 (CASLINK)



CAS FILES を使った特許調査

- 化学物質に関する特許の調査は、REGISTRY/CAplus と MARPAT ファイルを併用 すると網羅的
- CASLINK を利用すると、REGISTRY/CAplus/MARPAT での検索が簡単に実行できる
 - 3ファイルでの一連の検索を簡単なコマンドで行うことができる
 - REGISTRY と MARPAT で同じ構造質問式を用いる場合に利用できる



55 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CASLINK - 検索の流れ

入力するコマンド		検索の流れ		
=> FILE CASLINK	REGISTRY	MARPAT	CAplus	
=> Uploading structure file L1 STRUCTURE UPLOADED	構造	資問式 (L1)		
=> S L1	サンプル検索 (L2)	サンプル検索 (L3)	REGISTRY/CAp の検索と、重複	olus および MARPAT 夏文献除去が自動実行
=> S L1 FUL	フルファイル検索 (L4)	フルファイル検索 (L5)	उगठ	
			L4 をクロスオーバー → 検索した回答 (L6) ↓	
		L5 と L6 を重複文 (L7)	献除去した回答	

検索例

下図の構造を、 CASLINK を使って REGISTRY/CAplus/MARPAT で検索する



- 環は縮合してもよい
- ベンゼン環のマッチレベルを Class に変更する
- それ以外のマッチレベル、元素数レベル はデフォルトの設定のまま
- ベンゼン環上の Ak と X は可変置換位置
 を使って作図









検索の流れ



59 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



検索の流れ



© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

61

参考: CASLINK を利用しない場合の検索の流れ

REGISTRY と MARPAT で同じ構造質問式を利用する場合

=> FILE MARPAT => Uploading L1 STRUCTURE UPLOADED	MARPAT ファイルでシステム 制限を超えないか先に確認し ておく	=> FILE MARPAT => S L4 FUL L6	MARPAT ファイルに入る REGISTRY ファイルのフルファイ ル検索の結果のL番号を用いて 構造検索する
=> S L1 L2		=> S L6 NOT L5 L7	MARPAT ファイルの回答 から、REGISTRY/CAplus ファイ ルでヒットした回答 (15) を除い
=> FILE REGISTRY	REGISTRY ファイルで構造検索 を実行	(回答を表示)	て回答を表示する
=> S L1 L3 => S L1 FUI	(サンプル検索、フルファイル 検索)		(CAplus→ MARPAT も L番号を使ってクロスオーバー検 索できる)
L4			
=> FILE CAPLUS	REGISTRY ファイルの回答を CAplus ファイルヘクロスオー		
=> S L4 L5	バーし、回答を表示する		
(回答を表示)			



実習2 下記の構造を CASLINK で検索する



- 環は縮合してもよい
- Hy (ヘテロ環) のマッチレベルを Class に 変更する
- それ以外のマッチレベル、元素数 レベルはデフォルトの設定のまま



63 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



手順	ヒント
1. CASLINK に入る	FILE CASLINK
2. 作図画面を起動して作図	② Draw で作図画面を起動
3. 構造質問式をアップロード	Upload でアップロード
4. サンプル検索を実行	S L1
5. フルファイル検索を実行	S L1 FUL
6. 回答を表示 MARPAT ファイルの回答の 1-5 件目を BIB FQHIT で表示 CAplus ファイルの回答の 1-5 件目を BIB HITSTR で表示	D 1-5 BIB FQHIT D ○○ BIB HITSTR (↑ 検索結果の回答番号を確認して入力)



JAICI ヘルプデスク

Tel: 0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

Mail:support@jaici.or.jp

Thank you

Connect with us at cas.org

in linkedin.com/company/cas









