

SciFinder®

インターネットセミナー

マルクेशーシュ構造検索 ①



JAICI
化学情報協会

1

本日の内容

マルクेशーシュ構造検索の意味を理解する!



JAICI
化学情報協会

SciFinder®

Explore ▾ Saved Searches ▾ SciPlanner

REFERENCES

- Research Topic
- Author Name
- Company Name
- Document Identifier
- Journal
- Patent
- Tags

SUBSTANCES

- Chemical Structure
- Markush**
- Molecular Formula
- Property
- Substance Identifier

REACTIONS

- Reaction Structure

SUBSTANCES: MARKUSH ?

Structure Editor:

Java Non-Java

Click to Edit

Import CXF

Search

Search Type:

- Allow variability only as specified
- Substructure

2

本日の内容

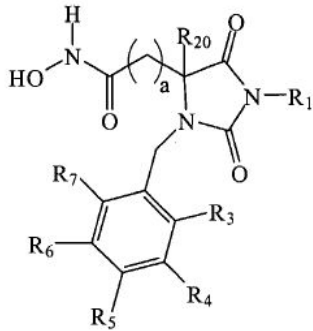
1. マルクーシュ構造とは
2. 従来 of 構造検索との違い
3. 検索の流れ
4. 回答の詳細

本日の内容

1. マルクーシュ構造とは
2. 従来 of 構造検索との違い
3. 検索の流れ
4. 回答の詳細

マルクーシュ構造とは

マルクーシュ構造例



a, R₁, and R₂₀ are as defined as in Claim 2; and R₃, R₄, R₅, R₆, and R₇ are each independently selected from the group consisting of, -hydrogen, -halogen, -trihalomethyl, -R, -C(O)OR, -CN, -C(O)-NR-OR, -C(NRR)=N-OR, -C(O)-R, -C(O)NRR, -C(S)NRR, -C(NRR)=NR, -NRR, -NO₂, -N₃, -NR-C(O)R, -NR-C(O)-NRR, -NR-C(O)-OR, -NR-SO₂-R, -NR-C(S)-NRR, -NR-C(O)R, -NR-C(O)-NRR, -NR-C(S)-NRR, -OR, -P(O)(OH)(NRR), -P(O)(OH)₂, -SO₂R, -S(O)-R, -SO₃H, -SR, -SO₂-NRR, -OCF₃ and -tetrazole; where each R is independently selected from the group consisting of -H, (C₁-C₆) alkyl, (C₃-C₆) alkenyl, (C₃-C₆) alkynyl, (C₆-C₂₆) aryl, (C₆-C₂₆) alkaryl, 6-20 membered heteroaryl and 6-26-membered alk-heteroaryl.

マルクーシュ構造とは、化学分野の**特許**中に表記される**化学構造の一般式**です。
置換基が、さまざまな選択肢を網羅する形で示されています。

マルクーシュ構造はどこに記載？

(01)特許庁発行 (JPT)	(02)公開特許公報 (A)	(03)特許公報 (特許公報)
特許庁発行 C O T B, 4100 J C O T B, 4100	特許庁発行 3 0 0	特許庁発行 C O T B, 4100 3 0 0

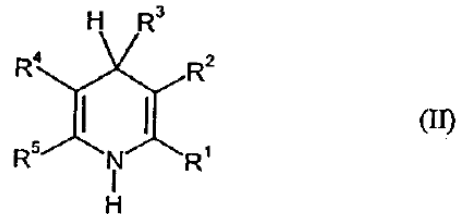
(04)特許公報 (特許公報)	(05)特許公報 (特許公報)
特許庁発行 C O T B, 4100 J C O T B, 4100	特許庁発行 C O T B, 4100 3 0 0

【特許請求の範囲】
【請求項1】式(II)
【化1】

式(II)は、式(II)で定義したものである、本発明のマルクーシュ構造を示す。

おもに**請求の範囲**に記載

【特許請求の範囲】
【請求項1】 式(II)
【化1】



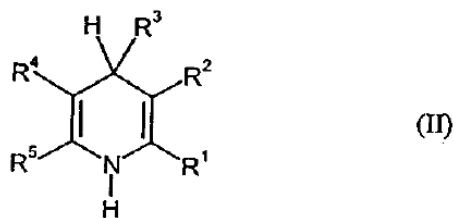
式中、R¹及びR⁵は同一であるか又は相異なり、そして各々C₁~C₁₀-アルキル又はC₆~C₁₀-アリアルを表し、R²及びR⁴は同一であるか又は相異なり、そして各々水素、C₁~C₁₀-アルキル、CN又はCOOR⁶(ここでR⁶はC₁~C₁₀-アルキルである)を表し、

なぜマルクーシュ構造で記載？

【特許請求の範囲】

【請求項1】 式(II)

【化1】



式中、

R¹及びR⁵は同一であるか又は相異なり、そして各々C₁~C₁₀-アルキル又はC₆~C₁₀-アリールを表し、
R²及びR⁴は同一であるか又は相異なり、そして各々水素、C₁~C₁₀-アルキル、CN又はCOOR⁶ (ここでR⁶はC₁~C₁₀-アルキルである)を表し、

特許権が認められると、
発明を独占的に使用できる



より多くの化学物質を
網羅したい



マルクーシュ構造にて
記載

JAICI
化学情報協会



本日の内容

1. マルクーシュ構造とは
2. 従来の構造検索との違い
3. 検索の流れ
4. 回答の詳細

JAICI
化学情報協会

従来の構造検索との違い

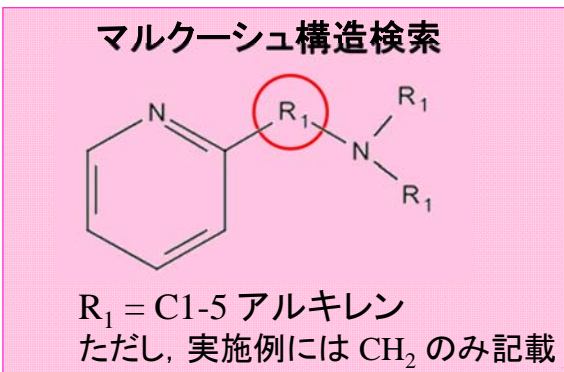
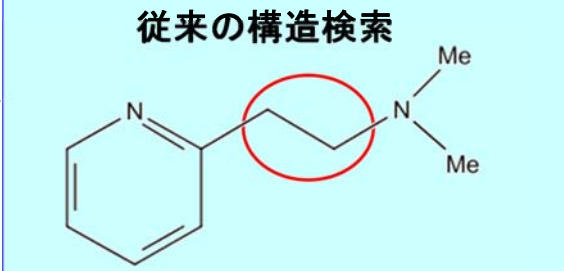
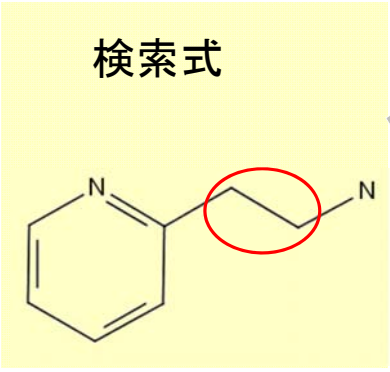
<p>(01) 特許出願番号 特開2012-20072 [F002]-2005(A)</p> <p>(02) 公開特許公報 (A)</p> <p>(03) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(04) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(05) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(06) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(07) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(08) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(09) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(10) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p>	<p>(01) 特許出願番号 特開2012-20072 [F002]-2005(A)</p> <p>(02) 公開特許公報 (A)</p> <p>(03) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(04) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(05) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(06) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(07) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(08) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(09) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p> <p>(10) 特許出願番号 F1 C67D 33/00 F C C 7 B 40/00</p>
---	---

■ 構造検索
検索対象 : 実施例
特許請求範囲
特定化合物

■ マルクーシュ構造検索
検索対象 : 特許請求範囲
(発明の詳細な説明)
一般式

R1, R5 = C1-10 alkyl, C6-10 aryl; R2, R4 = H, C1-10 alkyl, CO2R6 . . .

マルクーシュ構造検索の利点

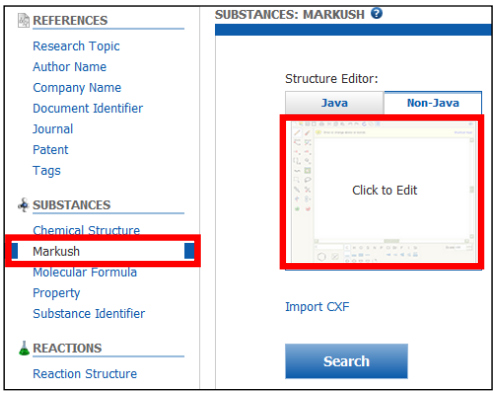


従来よりも、
さらに多くの特許情報が得られる

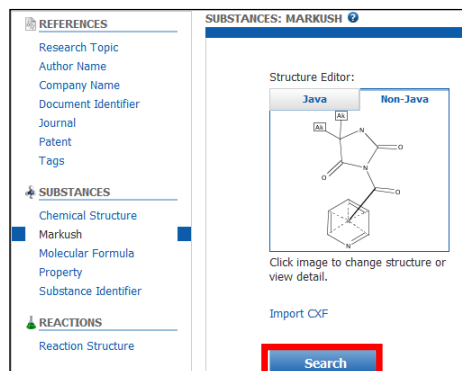
本日の内容

1. マルクーシュ構造とは
2. 従来 of 構造検索との違い
3. 検索の流れ
4. 回答の比較

マルクーシュ構造検索の流れ



The screenshot shows the 'SUBSTANCES: MARKUSH' interface. On the left is a 'REFERENCES' sidebar with categories like 'Research Topic', 'Author Name', etc. The main area is titled 'SUBSTANCES: MARKUSH' and contains a 'Structure Editor' window. The 'Structure Editor' has tabs for 'Java' and 'Non-Java'. A red box highlights the 'Structure Editor' window, which contains a 'Click to Edit' button. Below the editor are 'Import CXF' and 'Search' buttons.



The screenshot shows the 'SUBSTANCES: MARKUSH' interface after the chemical structure has been loaded into the 'Structure Editor'. The 'Structure Editor' window now displays the chemical structure. Below the editor, the 'Search' button is highlighted with a red box. The 'REFERENCES' sidebar is also visible on the left.

検索結果の表示

Markush substructure > references (2)

REFERENCES Get Substances Get Reactions Get Related Citations Get Full Text Tools Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine Categorize Sort by: Accession Number Display Options

Analyze by: Author Name

Barron Edward J	1
Enomoto Takashi	1
Koura Minoru	1
Kurobuchi Sayaka	1
Lyga John W	1
Matsuda Takayuki	1
Okuda Ayumu	1
Shibuya Kimiyuki	1
Sumida Hisashi	1
Theodoridis George	1

0 of 2 References Selected

1. Preparation of substituted imidazolidine-2,4-diones as LXR β agonists Full Text

By Yamaguchi, Yuki; Koura, Minoru; Kurobuchi, Sayaka; Matsuda, Takayuki; Okuda, Ayumu; Sumida, Hisashi; Watanabe, Yuuichirou; Enomoto, Takashi; Shibuya, Kimiyuki
From PCT Int. Appl. (2009), WO 2009144961 A1 20091203. | Language: Japanese, Database: CAPLUS

Title compds. represented by the formula I [wherein R¹ = H, alkyl or alkoxyalkylacyl; R², R³ = independently H, (cyclo)alkyl or (un)substituted (hetero)aryl; or R²R³C = cyclyl; R⁴ = H, (halo)alkyl or cycloalkyl; X¹-X⁴ = independently N or CR⁵; R⁵ = H, halo, (cyclo)alkyl, etc.; Y = a single bond, O, S, SO or SO₂; Z = (un)substituted (hetero)arylene; L = (oxo)-alkylene or -O-(alkylene)alkenylene; and pharmaceutically acceptable salts or solvates thereof] were prepd. as LXR β (liver X receptor β) agonists. For example, II was provided in a multi-step synthesis starting from 1-(benzodioxol-5-yl)et...

2. Insecticidal 3-(dihaloalkenyl)phenyl derivatives Full Text

By Barron, Edward J.; Zhang, Y. Larry; Zawacki, Frank J.; Lyga, John W.; Theodoridis, George
From PCT Int. Appl. (2006), WO 2006047438 A2 20060504. | Language: English, Database: CAPLUS

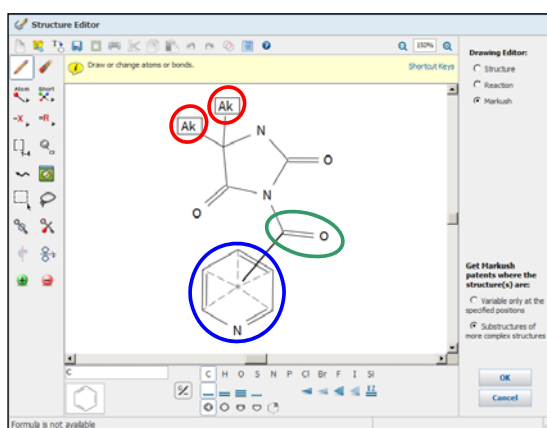
Certain novel 3-(dihaloalkenyl)phenyl derivs. have unexpected insecticidal activity. Compns. comprising an insecticidally effective amt. of ≥ 1 such compd., in admixt. with ≥ 1 agriculturally acceptable extender or adjuvant, and optionally, ≥ 1 compd. selected from pesticides, plant growth regulators, fertilizers and soil conditioners, are also disclosed, as are methods of controlling insects by applying said compns. to a locus where insects are present or are expected to be present. Thus, I (prepn. given), when applied to the surface of the diet of tobacco budworm (*Heliothis virescens*) at 0.25...

デモンストレーション

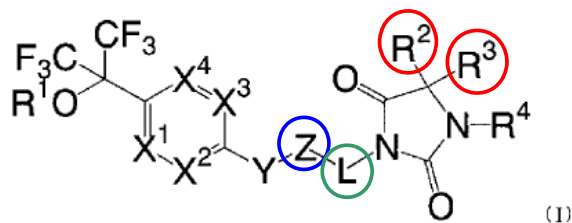
本日の内容

1. マルクーシュ構造とは
2. 従来 of 構造検索との違い
3. 検索の流れ
4. 回答の詳細

マルクーシュ構造検索のみでヒットした特許



(54) 発明の名称: 環状リンカーを有する置換カルビノール化合物



[式中 … R² および R³ はそれぞれ独立して、水素原子、C₁₋₈ アルキル基 … Z は、C₆₋₁₀ アリール又は5-11員ヘテロアリールを示し … L はオキソ基で置換されていてもよい C₁₋₈ アルキル鎖、… を示す]

“R² および R³” は C₁₋₈ アルキル基に該当

“Z” は 5-11員ヘテロアリールの 6員ヘテロアリールに該当

“L” は オキソ基で置換されてもよい C₁₋₈ アルキル鎖の C₁ に該当

従来の構造検索との違い



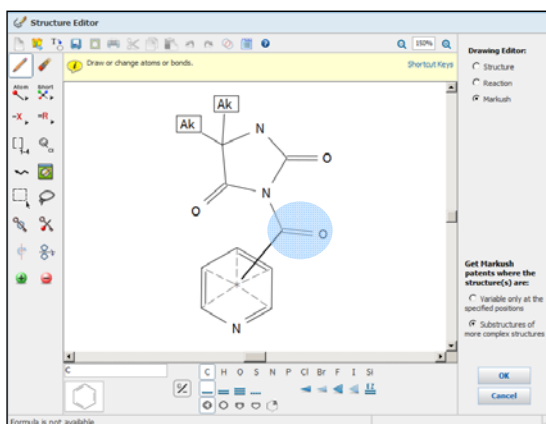
特許公開番号 (JP)	特許公開番号 (A)	特許公開番号 (JP)
067D 03370	F1	特許公開番号 (JP)
067D 03370	C67D 03370	特許公開番号 (JP)
067D 03370	030	特許公開番号 (JP)
067D 03370	030	特許公開番号 (JP)

■ 構造検索
検索対象 : 実施例 特定化合物
特許請求範囲

■ マルクーシュ構造検索
検索対象 : 特許請求範囲 一般式
(発明の詳細な説明)

R1, R5 = C1-10 alkyl, C6-10 aryl; R2, R4 = H, C1-10 alkyl, CO2R6 . . .

従来の構造検索での検索対象物質例

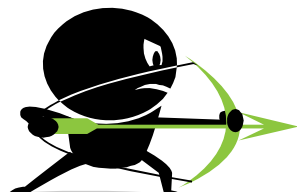


**“L” は オキソ基で置換されてもよい
 C₁₋₈ アルキル鎖の C₁ に該当**

**索引された物質は検索式に合致せず
 従来の構造検索ではヒットしない**

- まとめ -

マルクージュ構造検索を併用することで
より網羅的な調査が可能となります！



19

2回目もご覧ください！

活用例をご紹介します

SciFinder ラーニング

検索

■ トピック別 (インターネットセミナー録画セッション)