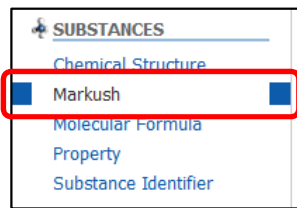


マルクーシュ構造検索

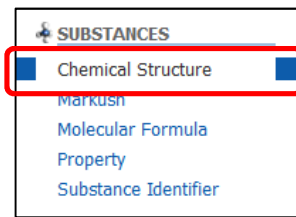
- ▶ マルクーシュ構造検索では、特許クレーム中に記載されている化学構造の一般式（マルクーシュ構造）を対象に検索を行うことができます。

〈利用シーン〉

- ・ 通常の構造検索 (Chemical Structure からの検索) では目的の特許が得られなかった場合
- ・ 物質の新規性/侵害性の調査などのため、より幅広い検索を行いたい場合



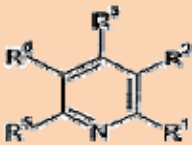
検索対象



検索対象



マルクーシュ構造

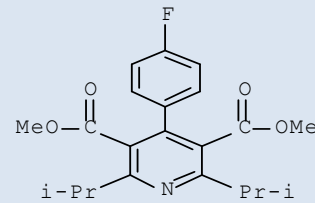


R1, R5 = C1-10 alkyl, C6-10 aryl; R2, R4 = H, C1-10 alkyl, CO2R6 ...



マルクーシュ構造はより幅広い化学構造を網羅している！

特定化合物の化学構造



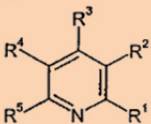
収録



収録



【化2】 マルクーシュ構造



式中、R¹~R⁵は式(1)で定義したとおりである

- ※ マルクーシュ構造とは、化学の分野の特許中に見られる複数の選択肢がある置換基について、選択肢を可変構造式で示したものです。



SciFinder のレコードのもとになった化学関連特許

特定化合物

に55℃で乾燥した。4-(4-フルオロフェニル)-2,6-ジイソプロピル-3,5-ジ(メトキシカルボニル)-ピリジン736gが単離され、これは理論の98%の収率に相当する。

マルクーシュ構造検索

➤ マルクーシュ構造検索の画面で、構造を作図し、“Search” ボタンで検索を実行します。

完全一致検索

部分構造検索

Search

- * マルクーシュ構造検索では自動的に Lock Rings ツールが構造全体に適用されます。
- * 環のマッチレベルは「原子」、鎖のマッチレベルは「クラス」に設定されており、変更はできません。

検索結果は特許のリストとして表示されます。(ヒットしたマルクーシュ構造自体は表示されません.)
これらの特許の明細書には、作図した構造を含むマルクーシュ構造が収録されています。

1. Bcl-2/bcl-xl inhibitors and therapeutic methods using the same

2. In vivo and in vitro carbene insertion and nitrene transfer reactions catalyzed by engineered and chimeric heme enzymes