

SciFinder (Web 版) のマルクーシュ構造検索について

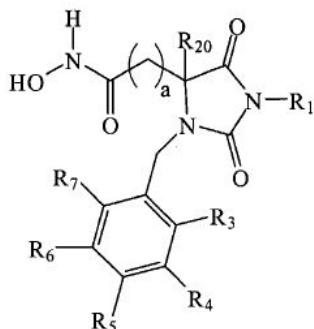
2010年8月
社団法人 化学情報協会

※マルクーシュ構造検索をご利用いただけるのは、部分構造検索オプション付きの ID のみです。

1. マルクーシュ構造とは？

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。

(マルクーシュ構造の例)



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, -SO₂H, -SR, -SO₂-NRR, -OCF₃, and -tetrazole; where each R is independently selected from the group consisting of -H, (C₁-C₆) alkyl, (C₁-C₆) alkenyl, (C₁-C₆) alkynyl, (C₅-C₂₀) aryl, (C₆-C₂₄) alkaryl, 6-20 membered heteroaryl and 6-26-membered alk-heteroaryl.

2. マルクーシュ構造検索とは

従来の構造検索では特許の実施例や特許請求範囲中で具体的に描かれている新規性と関わりのある具体的な構造が確定した化学物質のみ検索対象となっています。それに対し、マルクーシュ構造検索では特許請求範囲中や発明の詳細な説明*1に有機化合物*2のマルクーシュ構造が含まれる特許を検索できます。よって、より多くの特許情報が得られ新規性調査に役立ちます。なお、検索結果は文献(特許のみ)リストとして表示され、マルクーシュ構造自体は表示されません。

構造検索
検索対象：実施例中，
特許請求範囲中

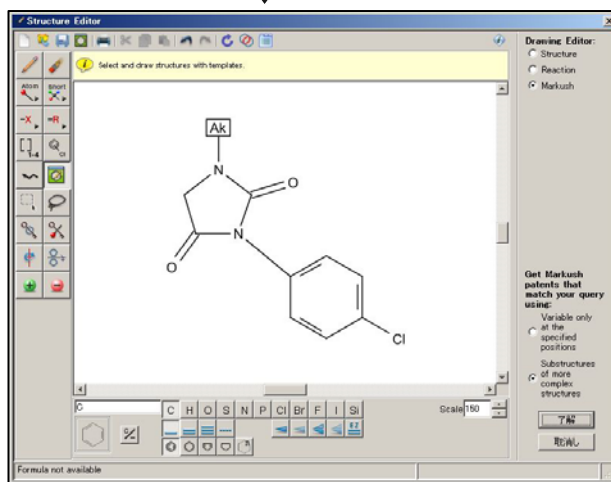
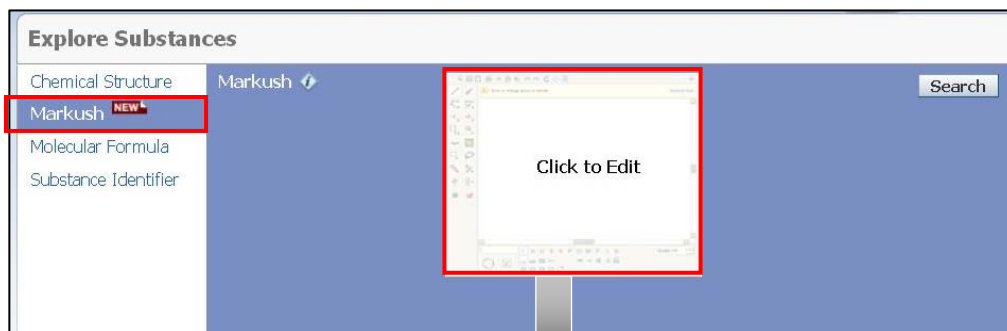
マルクーシュ構造検索
検索対象：特許請求範囲中，
発明の詳細な説明中*1

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

- * 1 : 発明の詳細な説明に記載されているマルクーシュ構造が収録対象となるのは次の場合である。
 - ①特許請求範囲中にマルクーシュ構造がない場合。
 - ②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。
- * 2 : マルクーシュ構造の収録対象化合物は 1961 年以降の特許請求範囲中や発明の詳細な説明に記載された有機化合物, 有機金属化合物。

3. マルクーシュ構造検索の検索例

物質検索項目の「Markush」を選択し構造を作図します。



※ 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。つまり、環にはそれ以上の縮合環追加は禁止となり、鎖は環の一部になることが禁止されます。このため、マルクーシュ構造検索では Lock Rings ツールの利用の有無は検索結果に影響を及ぼしません。

マルクーシュ構造検索の結果は文献(特許のみ)リストとして表示されます。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。上記の構造による検索では 118 特許得られました。

1. Preparation of imidazolidine compounds as androgen receptor modulators
By Niozo, Francois; Jagerschmidt, Catherine; Blinquez, Roland; Lefrançois, Jean-Michel; Pasoto, Christophe; Duprez, Pierre; Triballeau, Nicolas; Wigorinck, Piet; Tom Bert Paix, Namour, Florence Sylvie

English, Database: CAPLUS
[n]substituted (cydo)alkyl, alkenyl, alkynyl or acyl; R2a = H, P(O)(OH)2 or C(O)alkyl; R3a = H, (un)substituted alkyl, amido, etc.; R3b = halo, CN, NO2 or (un)alkyl, alkoxy, etc.; or R4a/R4b = (hetero)cyclyl or (hetero)aryl; R4c = halo, CN or alky acceptable salts or solvates thereof were prepd. as androgen receptor

Comments 0 Tags

ification for use as immunomodulators

French, Database: CAPLUS
thioxo-1,3-thiazolidin-5-ylidene)methyl]-2-furyl]benzoate) is shown to block the nd-binding domain lies outside the active site of the enzyme. This effect can be tic use as immunomodulators and anti-allergy agents. Similarly, information from SYK ligands from a com. library is demonstrated.

Comments 0 Tags

and analogs for use as cystic fibrosis transmembrane conductance regulator

English, Database: CAPLUS
H, C(S), or C(O); Y = absent or NH; each Z independently = O or S; R1, R2, R3, H, halo, or alkyl; each R6 independently = H, halo, OH, SH, etc.; R7 = absent, O, y acceptable salts, are prepd. and disclosed as cystic fibrosis transmembrane pd. by Knoevenagel condensation of 2-thioxo-3-(3-trifluoromethylphenyl)-4-thiazolidone (prepn. given) with

4. Preparation of amino acid furo[3,2-b]pyrrol-3-one amides as cathepsin S inhibitors
By Qubell, Martin; Watts, John Paix; Finn, Nicholas Sean
From PCT Int. Appl. (2009), WO 2009112826 A1 20090917, Language: English, Database: CAPLUS
Title compds. (I); 1 of R3, R4 = H, the other = alkyl, haloalkyl, alkoxy, aralkyl; or R3, R4 = alkyl, halo; R9 = substituted 5-6 membered aryl, heteroaryl, 6,5- or 6,6-fused biaryl or heterobiaryl; were prepd. Thus, title compd. (II) (solid phase prepn. outlined) inhibited cathepsin S with

参考: マルクーシュ構造検索と従来の構造検索で得られた特許情報の比較

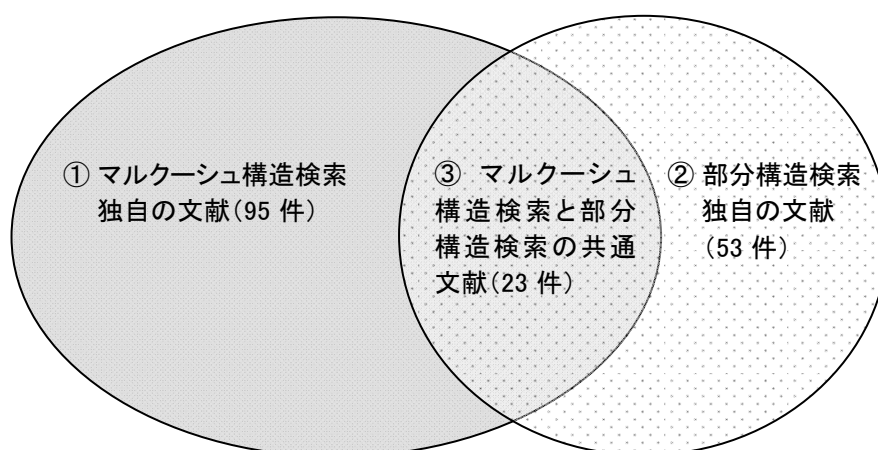
2 ページと同じ構造質問式を用いて部分構造検索を行うと、390 物質が得られました。得られた物質に関する文献は 76 件見つかりました。

The screenshot displays the 'Substances' search results page for 'substances (390)'. It shows three substance detail cards: 201. Substance Detail 125243-50-7 (Cis H1z Clz Nz Oz 8), 202. Substance Detail 125243-31-4, and 203. Substance Detail 1102229-05-9 (C17 H19 Cl F N3 Os). Below these, the 'References (76)' section is visible, listing several patent entries related to imidazolidinone compounds as androgen receptor modulators.

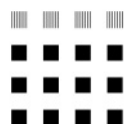
Combine 機能を利用すると、マルクーシュ構造検索由来の文献情報と部分構造検索由来の文献情報との差分を確認することができます。

The screenshot shows the 'Combine Answer Sets' dialog box. It prompts the user to 'Select saved answer sets to combine with your current answer set (76)'. A table lists three reference answer sets: 201008-MARPAT (118), claim (1), and Liptor frame3 patents July 13(1701) (1701). Below the table, there are four radio button options for combining the sets: 'Combine' (selected), 'Intersect', 'Exclude', and 'Exclude'. The 'Exclude' option is highlighted with a red box, indicating the selection of 'Exclude'.

結果として従来の部分構造検索では得られなかったマルクーシュ構造検索独自の文献情報は 95 件あることが分かりました。



※ ② 部分構造検索独自の文献(53 件)とは、主に雑誌論文とマルクーシュ構造の収録がなかった特許です。



JAICI 社団法人 化学情報協会

情報事業部 ヘルプデスク

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

TEL: 0120-003-462 FAX: 03-5978-3600

URL: www.jaici.or.jp

E-mail: support@jaici.or.jp