



SciFinder®  
インターネットセミナー

マルクチャーシュ構造検索 ②  
～マルクチャーシュ構造検索の活用

**JAICI**  
化学情報協会

2012年11月

# 本日の内容

## マルクーシュ構造検索を活用しよう



The screenshot displays the SciPlanner interface. The top navigation bar includes 'Explore', 'Saved Searches', and 'SciPlanner'. The left sidebar is divided into three sections: 'REFERENCES', 'SUBSTANCES', and 'REACTIONS'. Under 'SUBSTANCES', the 'Markush' option is highlighted with a red dashed circle. The main content area is titled 'SUBSTANCES: MARKUSH' and features a 'Structure Editor' with 'Java' and 'Non-Java' tabs. The editor contains the text 'Click to Edit'. To the right of the editor, the 'Search Type' is set to 'Substructure' (indicated by a selected radio button). Below the editor is an 'Import CXF' link and a blue 'Search' button.

---

# 本日の内容

1. マルクーreshu構造検索とは
2. 活用例 1 – 物質の新規性調査
3. 活用例 2 – 特許の動向調査
4. 利用上の注意点

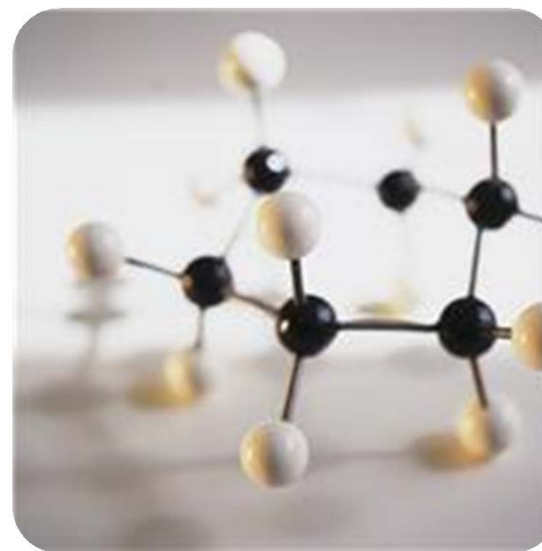
---

# 本日の内容

1. マルクーシュ構造検索とは
2. 活用例 1 – 物質の新規性調査
3. 活用例 2 – 特許の動向調査
4. 利用上の注意点

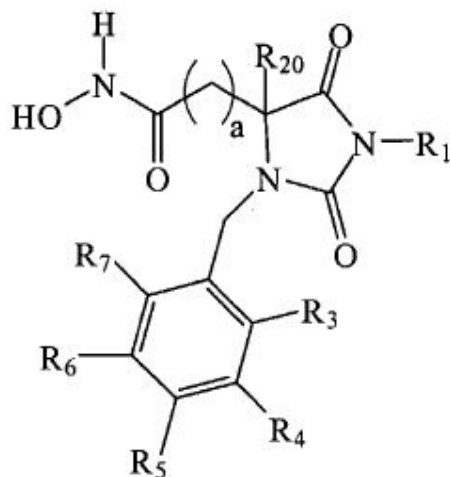
# マルクーシュ構造検索とは

SciFinder では特許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



# マルクーシュ構造とは

## マルクーシュ構造例



a, R<sub>1</sub>, and R<sub>20</sub> are as defined as in Claim 2; and  
R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, and R<sub>7</sub> 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, -NO<sub>2</sub>, -N<sub>3</sub>, -NR-C(O)R, -NR-C(O)-NRR, -NR-C(O)-OR, -NR-SO<sub>2</sub>-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)<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>R, -S(O)-R, -SO<sub>3</sub>H, -SR, -SO<sub>2</sub>-NRR, -OCF<sub>3</sub> and -tetrazole; where each R is independently selected from the group consisting of -H, (C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>) alkyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>) alkenyl, (C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>) alkynyl, (C<sub>5</sub>-C<sub>20</sub>) aryl, (C<sub>6</sub>-C<sub>26</sub>) 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。

# マルクージュ構造検索とは

マルクージュ構造を含む特許を検索する



化学物質関連特許をより網羅的に  
得ることができる

※ マルクージュ構造検索の概要については  
インターネットセミナー 録画セッション  
「マルクージュ構造検索①」をご覧ください

# マルクージュ構造検索とは

マルクージュ構造検索の活用例:

- ・ 物質の新規性調査
- ・ 網羅的な特許の調査

など



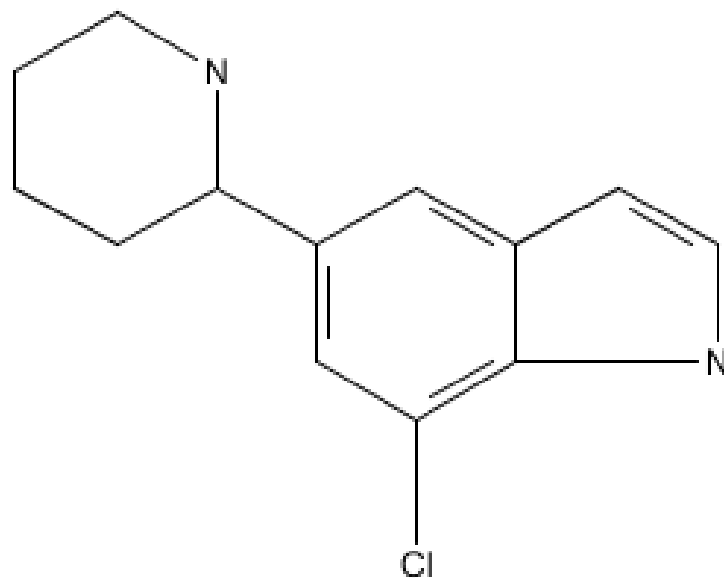
---

# 本日の内容

1. マルクーreshu構造検索とは
- 2. 活用例 1 – 物質の新規性調査**
3. 活用例 2 – 特許の動向調査
4. 利用上の注意点

# 活用例 1- 物質の新規性調査

下記の骨格を持つ物質の新規性について調査する



# 活用例 1 - 物質の新規性調査

## ✓ 検索の流れ

- ① 部分構造検索  
→ 物質の有無を確認
- ② 部分構造検索にて目的の物質が  
なかった場合、マルクーシュ構造検索  
を実施

# 活用例 1 - 物質の新規性調査



## 物質の新規性調査の手順

目的の構造について構造検索を実施



マルクーシュ構造検索を実施

※ 新規性を追跡調査するにはマルクーシュ構造検索についても Keep Me Posted 機能を利用しましょう！

Markush substructure > references (22)

REFERENCES ⓘ

Get Substances | Get Reactions | Get Related Citations | Tools ▾

Create Keep Me Posted Alert | Send to SciPlanner

Analyze | Refine | Categorize

Sort by: Accession Number ▾

0 of 22 References Selected

Analyze by: ⓘ

Author Name ▾

Donahue Frances Anne	4
Ku Mannching Sherry	4
Nikam Sham Shridhar	2
Scott Ian Leslie	2
Allen Darin Arthur	1
Andersen Kim	1

1. Indoles as 5-lipoxygenase-activating protein (FLAP) inhibitors and their preparation and use in the treatment of respiratory and cardiovascular agents

Q Quick View PatentPak ▾

By Hutchinson, John H.; Prasit, Petpiboon Peppi; Moran, Mark; Evans, Jillian F.; Li, Yiwei; Zunic, Jasmine Eleanor; Haddach, Mustapha; Stock, Nicholas Simon

From PCT Int. Appl. (2007), WO 2007056220 A2 20070518. | Language: English, Database: CAPLUS

Described herein are compds. of formula I and pharmaceutical compns. contg. such compds., which modulate the activity of 5-lipoxygenase-activating protein (FLAP). Also described herein are methods of using such FLAP modulators, alone and in combination with other compds., for treating respiratory and cardiovascular diseases. Compds. of formula I wherein Z is (un)substituted C<sub>1-4</sub> alkoxy, C<sub>3</sub> alkenylene; Y is (un)substituted heteroalicyclic, (un)substituted alkyl-heteroalicyclic, (un)substituted alkenyl-heteroalicyclic, etc.; R<sup>2</sup> is H, halo, (un)substituted C<sub>1-6</sub> alkyl, etc.; R<sup>3</sup> is H, (un)subst...

2. Preparation of peptidomimetic as selective galanin receptor GalR1 or GalR2 modulators

Q Quick View PatentPak ▾

By Roberts, Edward; Bartfal, Tamas; Lu, Xiaoying; Liu, Tianyu; Sagi, Vasudeva Naidu

From PCT Int. Appl. (2012), WO 2012009258 A2 20120119. | Language: English, Database: CAPLUS

# 物質の特許調査時の注意点



SciFinder の結果だけで新規性や権利範囲の調査結果を判断できないこともあります。

権利範囲調査などの、さらなる調査には  
STN を活用しましょう

## 活用例 2- 特許の動向調査

### フェニルエチルレゾルシノールの特許出願人の動向を探る

#### ◇ 検索の流れ

- (1) フェニルエチルレゾルシノールを構造検索
- (2) Get References で文献・特許を検索→ 特許に限定
- (3) フェニルエチルレゾルシノールの構造から  
マーカーシュ構造検索を実行
- (4) (2)の結果と演算(Combine 機能)し, 特許出願人を  
確認する

# 活用例 2- 特許の動向調査

## ◆ 特許出願人の解析

### ① 完全一致検索 → 特許

Analysis Value	Count
Symrise Gmbh & Co KG, Germany	8
L'Oreal, Fr	6
The Procter & Gamble Company, USA	3
Kawasaki Steel Corp, Japan	2
Pierre Fabre Dermo Cosmetique, Fr	2
Indspec Chemical Corp, USA	1
Johnson & Johnson Consumer Companies Inc, USA	1
Kuraray Co Ltd, Japan	1
Neocutis SA, Switz	1
Pola Chemical Industries Inc	1
Shanghai Laipusen Biotechnology Co Ltd, Peop Rep China	1
Sumitomo Chemical Co Ltd, Japan	1
USA	1

### ② ① + マルクーシュ構造検索の結果

Analysis Value	Count
L'Oreal, Fr	17
Fujifilm Corporation, Japan	14
Kyocera Mita Corporation, Japan	13
Sumitomo Chemical Co Ltd, Japan	11
Ciba Geigy A G, Switz	10
Shinetsu Chemical Industry Co Ltd, Japan	8
Symrise Gmbh & Co KG, Germany	8
Rhone Poulenc Chimie SA, Fr	7
Rhodia Chimie, Fr	6
Tokyo Ohka Kogyo Co Ltd, Japan	6

## 活用例 2- 特許の動向調査

- 物質に関連する特許の動向調査を行う場合には、目的に応じてマルクーフシュ構造検索の結果にも注目しましょう
- Combine 機能を活用しましょう

Select an option for combining the answer sets:



**Combine** Include all answers from both sets



**Intersect** Include only answers that appear in both sets



**Exclude** Include only answers from **current answer set (304)** that are not in **4-(1-phenylethyl)-1,3-benzenediol (28)**



**Exclude** Include only answers from **4-(1-phenylethyl)-1,3-benzenediol (28)** that are not in **current answer set (304)**



---

# 本日の内容

1. マルクーシュ構造検索とは
2. 活用例 1 – 物質の新規性調査
3. 活用例 2 – 特許の動向調査
4. 利用上の注意点

# 利用上の注意点

## ◆ 収録対象化合物

- 有機化合物, 有機金属化合物,
- 低重合の物質(重合度が 10 までの物質)

## ◆ 収録対象外の化合物

- 合金, 金属酸化物, 無機塩, 金属間化合物, ポリマー

## ◆ 収録年

1961 年～

# - まとめ -

## ◆ マルクーシュ構造検索と従来の構造検索の違い

(18) 日本国特許庁 ( J P ) (12) 公開特許公報 ( A ) (11) 特許出願公開番号  
特開2002-20372  
( P2002-20372A )  
(43) 公開日 平成14年1月29日 (2002.1.29)

(51) Int.Cl. <sup>7</sup> C 0 7 D 213/807 F 0 0 7 B 61/00	識別記号 3 0 0	F I C 0 7 D 213/807 C 0 7 B 61/00	子-ロー' ( 参考 ) 4 C 0 5 5 4 H 0 3 9
---	---------------	---	--

審査請求 未請求 請求項の数 1 O L ( 全 5 頁 )

(21) 出願番号 特開2001-169485(P2001-169485)	(71) 出願人 390028607 バイエル・アクチエンゲゼルシャフト BAYER AKTIENGESELLSCHAFT ドイツ連邦共和国デ-51308 レーフエル クレーゼン ( 番地なし )
(22) 出願日 平成13年6月5日 (2001.6.5)	(72) 発明者 アルベルト・ルイ ドイツ51061ケルン・ロゲンドルフシュト ラーゼ55
(31) 優先権主張番号 1 0 0 2 8 1 4 1 . 0	(70) 代理人 100060782 弁護士 小田島 平吉
(32) 優先日 平成12年6月8日 (2000.6.8)	
(33) 優先権主張国 ドイツ ( D E )	
(34) 優先権主張番号 1 0 1 1 1 8 7 4 . 0	
(35) 優先日 平成13年3月13日 (2001.3.13)	
(36) 優先権主張国 ドイツ ( D E )	

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 置換されたピリジン環の改良された製造方法

(57) 【要約】  
【課題】 対応する1, 4-ジヒドロピリジン類の酸化により置換されたピリジン環を製造するための、実施が容易で、コスト効果があり且つ高い収率を与える方法を提供すること。  
【解決手段】 式 ( I )  
【化1】  


式 ( I ) 中、R<sup>1</sup> 及び R<sup>2</sup> は同一であるか又は相異なり、そして各々 C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>-アルキル又は C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>-アリアルを表し、R<sup>3</sup> 及び R<sup>4</sup> は同一であるか又は相異なり、そして各々水素、C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>-アルキル、CN又は COOR<sup>6</sup> (ここで R<sup>6</sup> は C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>-アルキルである) を表し、R<sup>5</sup> は水素、C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>-アルキルを表すが、又は場合によりハロゲン、ニトロ、COOR<sup>6</sup> (R<sup>6</sup> は上記で定義したとおりである)、CNもしくは C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>-アルキルにより置換されていてもよい C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>-アリアルを表す。

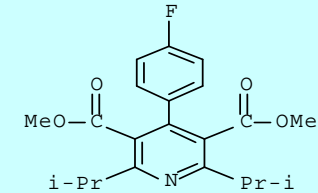
の置換された1, 4-ジヒドロピリジン類を酸化成分20重量%未満を含有する酸の存在下に亜硝酸メチルと反応させることを特徴とする式 ( I )  
【化2】  


式 ( I ) 中、R<sup>1</sup>~R<sup>5</sup> は式 ( I ) で定義したとおりである、の置換されたピリジン環の製造方法。

### ■ 構造検索

検索対象 : 実施例  
特許請求範囲

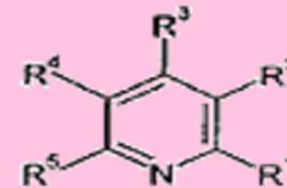
特定化合物



### ■ 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 . . .

## - まとめ -

- ・ 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可能となります！
- ・ 物質の新規性調査には、構造検索とマルクーシュ構造検索を併用しましょう！