

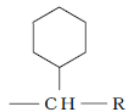
* 目次 *

マルクーシュ構造検索の概要

マルクーシュ構造検索とは.....	2
検索方法.....	3
通常の構造検索とマルクーシュ構造検索の併用	4

マルクーシュ構造検索とは

■ マルクーシュ構造とは？



(Rは、C1~4のアルキル基、アルケニル基、アリール基を示す。)

左図のように、化学分野の特許中に見られる置換基などを複数の選択肢として記載することで、多数の化学物質を表現した構造式のこと。

■ 通常の構造検索とマルクーシュ構造検索の違い

通常の構造検索 では、特許の実施例や特許請求範囲中で記載されていた重要な化学物質が検索対象である。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に、有機化合物のマルクーシュ構造が含まれる特許を検索できる。よって、包括的な調査結果が得られる。



通常の構造検索
 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

R1, R5 = C1-10 alkyl,
 C6-10 aryl; R2, R4 = H,
 C1-10 alkyl, C02R6

< 検索対象となる化学物質 >

		通常の構造検索	マルクーシュ構造検索
特許請求範囲		1981-	1961-
		発明の内容に関わりのある特定の化学物質	マルクーシュ構造
発明の詳細な説明			1961-
			特許請求範囲中にマルクーシュ構造がない場合、または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に収録(ただし、発明の詳細な説明からは、反応物や中間体は収録しない)
実施例		1907-	
		発明の内容に関わりのある特定の化学物質	
収録物質	有機化合物	○ (CAS 登録番号 (CAS RN®))	○ (構造)
	ポリマー		×
	無機化合物		
	タンパク質・核酸配列		

検索方法

■ 操作方法

- ① Substances の Draw から構造図を作図し、OK をクリックする。
- ② Search Patent Markush に を入れて、検索を実行する。

Searching for...
 Substances
 Reactions
 References
 Suppliers
 Biosequences

Substances
 Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. Learn More
 Enter a query...
 Draw Search Patent Markush

Chemical structure diagram of a substituted pyridine derivative.

を入れるとマルクーシュ構造が検索対象になる

Edit Drawing Remove

Search Patent Markush

- ③ ヒットしたマルクーシュ構造が表示される。

※同じ特許から複数のマルクーシュ構造がヒットした場合は、ヒットしたすべてのマルクーシュ構造が表示される。

Patent Markush Match
 As Drawn (18)
 Substructure (110)

Filter Behavior
 Filter by Exclude

Patent Office
 Japan (7)
 European Patent Organization (3)
 World Intellectual Property Organization (3)
 Germany (2)
 United States (2)
 China (1)

Patent Markush (18) Sort: Relevance

1
 US20110118299
 Treatment of mild cognitive impairment (MCI) and Alzheimer's disease using nifedipine derivatives and thyroxine
 By: Lovell, Mark Lynn, Bert
 United States, US20110118299 A1 2011-05-19 | Language: English, Database: CAPLUS
 Assignee: The University of Kentucky Research Foundation
 Patent disclosure
 PATENTPAK Full Text

2
 JP2002020372
 Preparation of substituted pyridines
 By: Norbert, Lui; Panskus, Hans; Schnatterer, Albert
 Japan, JP2002020372 A 2002-01-23 | Language: Japanese, Database: CAPLUS
 Assignee: Bayer A.-G.
 Patent claim 1
 PATENTPAK Full Text

完全一致検索
 部分構造検索

書誌情報（特許の標題，発明者，特許番号，特許発行日，特許出願人）

特許中の記載位置

56: carbon chain <containing 1-6 C, 0 or more double bonds, 0 or more triple bonds> (opt. substd.)
 128: carbon chain <containing 1-6 C, 0 or more double bonds, 0 or more triple bonds> (opt. substd.)

Ak の説明（炭素数 1～6 の炭素）

特許レコードを表示したい場合は特許番号をクリック

CAS Scifinder®
 Reference Detail
 Substances (3) Reaction (1) Cited By (0) Citation Map

Patent
 Preparation of substituted pyridines
 By: Norbert, Lui; Panskus, Hans; Schnatterer, Albert
 Patent Information
 Patent Number: JP2002020372
 Publication Date: 2002-01-23
 Application Number: JP2001-169465
 Application Date: 2001-06-05

The compounds I (R¹, R² = C₁₋₁₀ alkyl, C₁₋₁₀ aryl; R³ = H, C₁₋₁₀ alkyl, CN, CO, R⁴; R⁴ = C₁₋₁₀ alkyl; R⁵ = H, C₁₋₁₀ alkyl, (unsubstituted C₆-5 aryl) are prepared by reaction of 1,4-dihydropyridine II (R¹, R² = same as I) with Me nitrite in the presence of acids containing <20% oxidizing components, 4-(4-Fluorophenyl)-2,6-diisopropyl-3,5-dimethoxycarbonyl-1,4-dihydropyridine was oxidized with Me nitrite in the presence of HCl at 60° to give 58% 4-(4-Fluorophenyl)-2,6-diisopropyl-3,5-dimethoxycarbonylpyridine.

原報を表示したい場合は PatentPak か Full Text

特許公開公告 (A)

特許番号: JP2002020372

発明の名称: 置換ピリジン

発明者: ノーベルト、ルイ; パンスクス、ハンス; シナッター、アルベルト

特許権者: バイエル AG

特許の要旨: 本発明は、置換ピリジン化合物の調製方法及びその化合物に関する。...

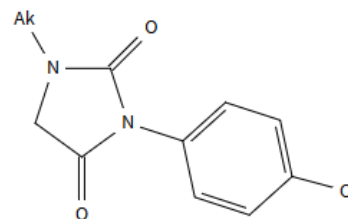
図 1: 置換ピリジン化合物の一般構造式

図 2: 1,4-ジヒドロピリジン化合物の一般構造式

通常の構造検索とマルクーシュ構造検索の併用

■ 検索例

右記の骨格を持つ物質について、通常の構造検索とマルクーシュ構造検索を併用し、網羅的に関連文献を調べる。



通常の構造検索

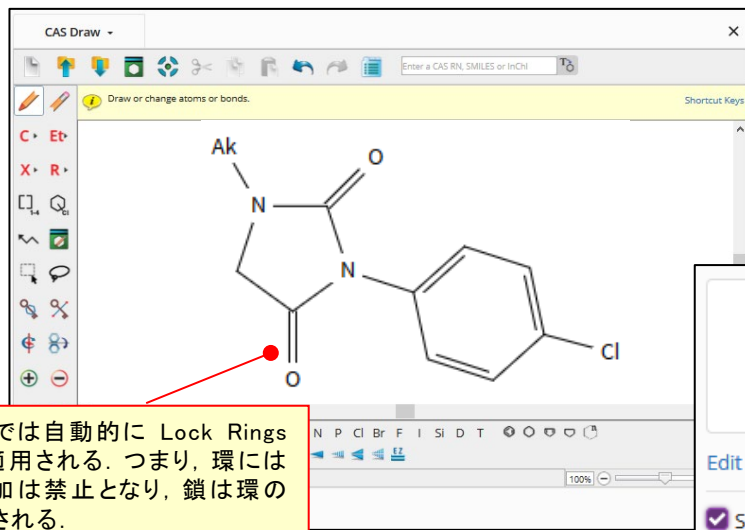
構造を作図し、Substances から検索を実行する。部分構造検索では 891 物質がヒットした。

次に、画面上部の **References** をから **All Results** をクリックすると、ヒットした物質が記載されている 147 件の文献がヒットした。なお、ヒットした文献中 102 件が特許情報。

※最初に構造を作図後、References の項目で検索をすると、直接文献回答を得ることができる

マルクーシュ構造検索

構造を作図し、Search Patent Markush に を入れて、検索を実行する。部分構造検索では 249 件のマルクーシュ構造がヒットした。次に、画面上部の **References** をから **All Results** をクリックすると、ヒットした物質が記載されている 200 件の特許文献がヒットした。



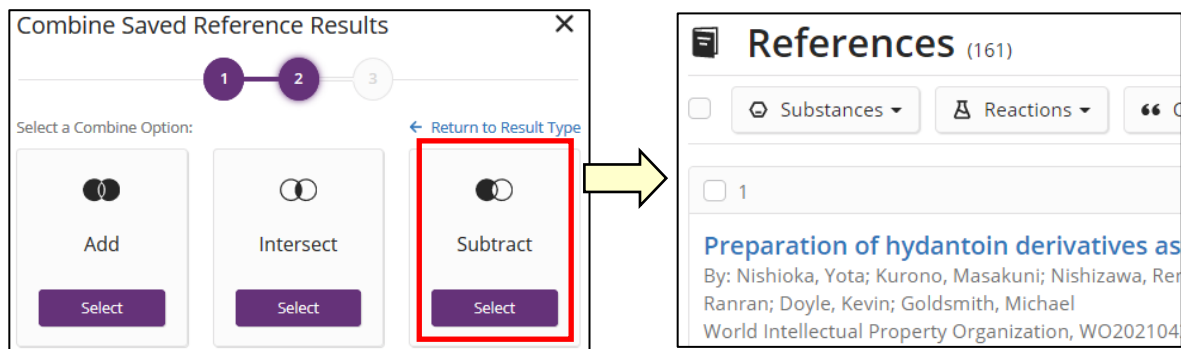
マルクーシュ構造検索では自動的に Lock Rings ツールが構造全体に適用される。つまり、環にはそれ以上の縮合環追加は禁止となり、鎖は環の一部になることが禁止される。

参考：通常の構造検索とマルクーシュ構造検索で得られた文献情報の比較（Combine 機能）

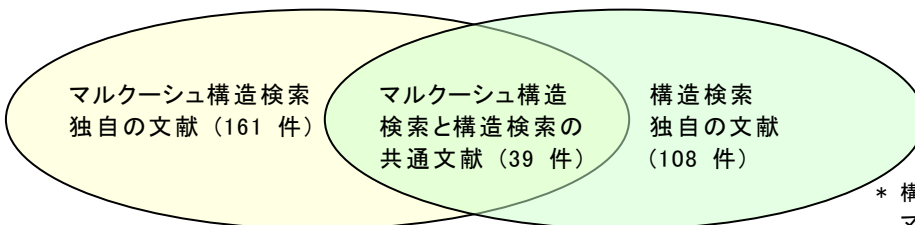
Combine 機能を利用すると、マルクーシュ構造検索由来の文献情報と構造検索由来の文献情報との差分を除いて、効率よく情報を確認することができる。Combine 機能を利用するためには、まず文献結果の画面上部の★Save でそれぞれの質問式を保存する。



画面右上の★ボタンをクリックし、「Saved」画面を開き、Combine のメニューから、NOT 演算（Subtract）を行うことで、マルクーシュ構造で得られた回答から通常の構造検索で得られた回答を除くことができる。



結果として従来の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 161 件あることが分かった。



* 構造検索独自の文献は、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



より網羅的な検索には、細かい検索条件の指定ができる STN のご利用を推奨します。STN を利用できる情報担当者にご相談ください。

STN と CAS SciFinder[®] のマルクーシュ構造検索の違いについては、次の資料をご確認ください。 https://www.jaici.or.jp/scifinder-n/ref/sfn_stnmarkush.pdf