



**STNext<sup>®</sup>**

# マルクーシユ構造検索

**JAICI**



## \* 目次 \*

### A 概要

化学物質に関する特許性調査 .....	1
MARPAT ファイルと REGISTRY/CAplus ファイル .....	2
MARPAT ファイル .....	3
CAS FILES における化学物質索引 .....	6

### B MARPAT ファイル

MARPAT ファイルの検索 .....	11
マルクーシュ構造の索引 .....	12
マッチレベル .....	16
元素数レベル .....	18
マッチレベルと元素数レベルのまとめ .....	20
マッチレベル指定のポイント .....	21
参考 : acyl を検索する上での注意点 .....	25
マッチレベル, 元素数レベルの指定 .....	26
構造検索 .....	30
参考 : フルファイル検索結果に INCOMPLETE の回答が含まれている場合 .....	34
回答表示 .....	35
参考 : SET MPT (SET MPTASSEMBLY) .....	40

### C CAS FILES を利用した特許調査

CAS FILES を利用した化学物質関連の特許調査 .....	43
CASLINK .....	44
CASLINK の検索結果の絞り込み (辞書検索) .....	52
CASLINK の検索結果の絞り込み (サブセット検索).....	53
CASLINK の検索結果の保存 .....	55
REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルの連続検索 .....	56
書誌情報・抄録・索引情報の検索 .....	62
REGISTRY サブセット検索結果を使った連続検索 .....	64
参考 : MARPAT と CAplus/CA 間のクロスオーバー検索時の制限 .....	65

練習問題 .....	67
------------	----

### APPENDIX

マルクーシュ構造中の一般式グループアトリビュート.....	81
CAS の化学物質索引方針.....	82
検索できない構造データ.....	86
マッチレベルと環の孤立.....	87
配位化合物.....	88
マッチレベルのまとめ.....	89



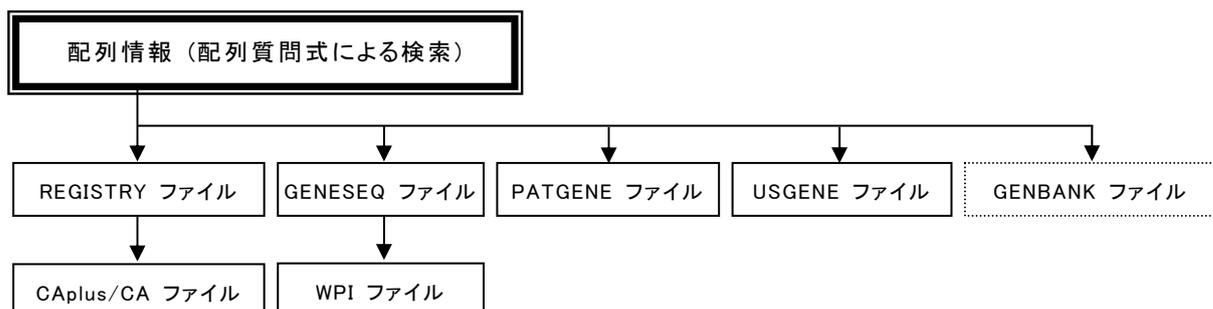
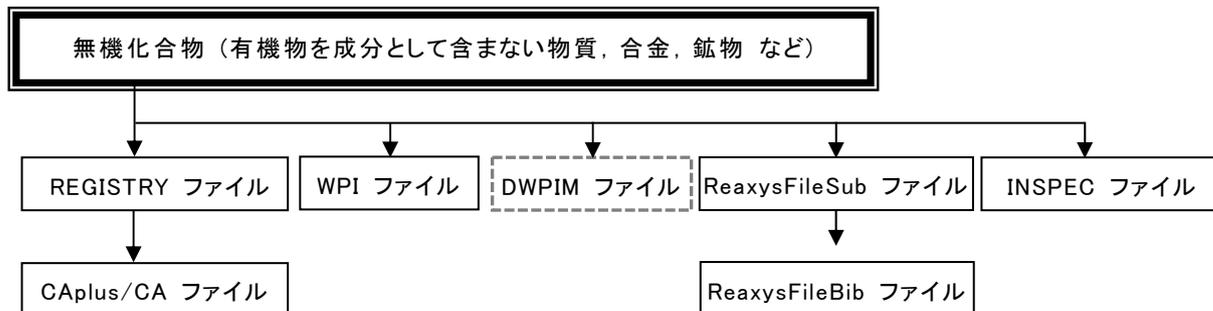
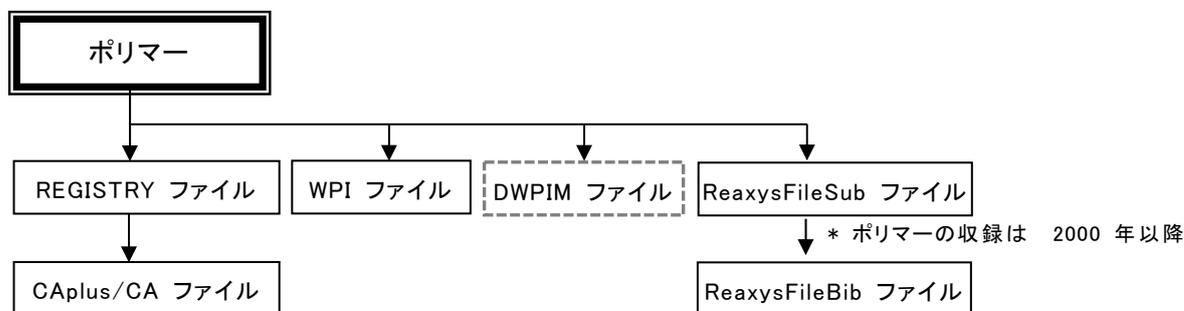
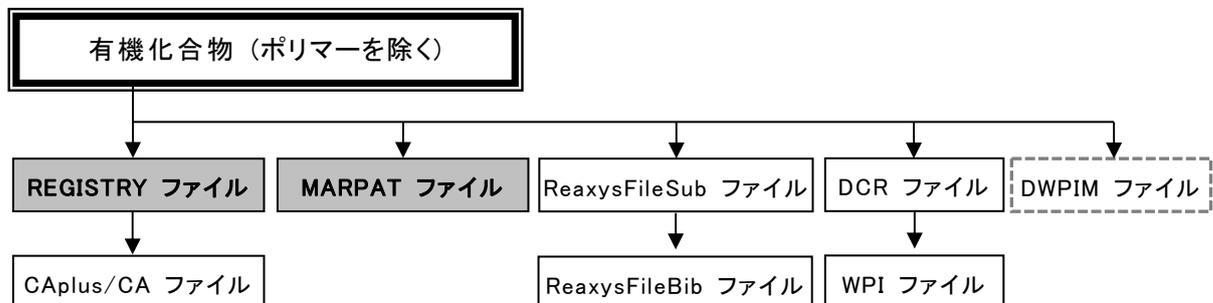
## A 概要

MARPAT ファイルの概要と, CAS FILES における特許中の化学物質の索引方針についてご紹介します.



## 化学物質に関する特許性調査

- ファイルによって、収録対象の化学物質、収録源などが異なるため、化学物質に関する特許調査を網羅的に行う場合は、複数ファイルを併用する必要がある。



## MARPAT ファイルと REGISTRY/CAplus ファイル

### ■ MARPAT ファイルと、REGISTRY ファイル、CAplus ファイルの比較

(2022 年 11 月)

	MARPAT	REGISTRY	CAplus/CA
レコード構成	文献単位 (特許ファミリー単位)	化学物質単位	文献単位 (特許はファミリー単位)
概要	CA ファイルに収録した 特許クレーム中のマルク ーシュ構造*を収録	化学構造, 配列, 名称, 分子式, 物性値, 参照文 献情報等を収録	特許, 雑誌論文 学会会議録等を収録
特長	・ マルクーシュ構造*を検索 可能	・ 収録物質数が多い ・ 構造検索が可能	・ 速報性 ・ 収録文献数が多い ・ 抄録および物質索引が 充実している
収録件数 (収録年)	約 57 万レコード (すべて特許レコード)  (CA 由来 1984 年～) (INPI 由来 1961 年～)	約 2 億 7,000 万レコード ・ 配列以外のレコード (1907 年～) 約 1 億 9,910 万件 ・ 配列のレコード (1957 年～) 約 7,380 万件	CAplus ファイル : 約 5,970 万レコード (特許は約 1,840 万件) (1808 年～)  CA ファイル : 約 4,680 万レコード (特許は約 1,120 万件) (1808 年～)
収録 物質	有機化合物	○ (構造)	○ (CAS RN®)
	ポリマー	× *1	○ (CAS RN®)
	無機化合物	×	○ (CAS RN®)
	タンパク質・ 核酸配列	△ *2	○ (CAS RN®)
更新頻度	毎日	毎日	CAplus ファイル : 毎日 CA ファイル : 毎週
タイムラグ	特許発行後約 2 ヶ月以内 (CA ファイルに収録された 後に MARPAT ファイルに 収録)		CAplus ファイル : 主要国特許は発行後 1~2 日以内に収録 CA ファイル: 3~6 週間

\*1 低重合の物質は収録対象。また、モノマー自体がクレームされている場合、そのモノマーは収録対象。

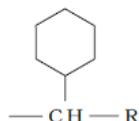
\*2 150 アミノ酸残基くらいまでのペプチドは収録対象。



#### マルクーシュ構造とは

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。化学分野の特許に多く見られ、マーカッシュ構造、マーカッシュ形式とも呼ばれる。

(マルクーシュ構造の例)



(Rは、C1~4のアルキル基、アルケニル基、アリール基を示す。)

## MARPAT ファイル

- MARPAT ファイルは、Chemical Abstracts Service (CAS) が作成するマルクーシュ (Markush) 構造を含む特許情報のファイルである (マルクーシュ構造とは化学構造の一般式のこと)。クレーム中のマルクーシュ構造から特許調査ができるファイルである。
  - ・ レコード単位
    - 文献 (特許) 単位。レコード番号 (AN) は CA ファイルと同じ (CA 抄録番号)。
  - ・ 収録対象特許
    - CAplus/CA ファイル収録対象と同じく 56 ヶ国 5 国際機関, 2 技術公開誌の特許であり, CA ファイルに収録する特許のうち, マルクーシュ構造の記載がある特許を収録  
\* <http://www.cas.org/content/references/patentcoverage> 参照
  - ・ 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
    - 特定の化学物質 (REGISTRY ファイルに収録されるような構造定義が明確な物質)
    - 不完全な定義のマルクーシュ構造 (例: --NR-(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-C(=O)-- のような部分構造)
    - テキスト (文字列) で記載されたマルクーシュ構造 (例: "halogenated alkenediols")
    - ポリマー (ただし, マルクーシュ構造で表され, かつクレームされているモノマーは収録対象)
  - ・ マルクーシュ構造の収録源と収録年
    - 1984 年 (特許発行年) 以降 - CAplus/CA ファイルのベーシック特許から収録 (CAS 作成)

マルクーシュ構造の存在位置		MARPAT ファイル中の記載
特許請求範囲	マルクーシュ構造が収録される	Patent location: <b>claim 1</b>
発明の詳細な説明	特許請求範囲中にマルクーシュ構造がない場合に収録される	Patent location: <b>disclosure</b>
	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する	Patent location: <b>claim 10</b> Note: also incorporates <b>broader disclosure</b>

- 1961~1988 年 (特許発行年) - INPI より提供されたデータ (ベーシック特許とは限らない)

マルクーシュ構造の存在位置		MARPAT ファイル中の記載
特許請求範囲または発明の詳細な説明	INPI が所有するデータの中で, CA 収録特許であるもの	Patent location: <b>claims</b> Note: record may include <b>structures from disclosure</b>

- \* 1984~1988 年のレコードは, CAS 作成のデータおよび INPI 由来のデータのどちらかを収録している

## ■ MARPAT ファイルのレコード例 : ALL 表示形式 (2002 年の公開番号 20372 号の日本特許)

BIB

CAplus/CA  
ファイルの  
書誌情報

AN 136:102298 MARPAT レコード番号 (AN) は CA ファイルと同じ (CA 抄録番号)

TI Preparation of substituted pyridines

IN Norbert, Lui; Panskus, Hans; Schnatterer, Albert

PA Bayer A.-G., Germany

SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 5 pp.  
CODEN: JKXXAF

DT Patent

LA Japanese

IPC1 C07D0213-807 [ICM, 7]; C07D0213-00 [ICM, 7, C\*]; C07B0061-00 [ICS, 7]

IPCR C07D0213-807 [I, A]; C07B0061-00 [I, C\*]; C07B0061-00 [I, A]; C07D0213-00 [I, C\*]; C07D0213-79 [N, A]; C07D0213-80 [I, A]; C07D0213-803 [I, A]

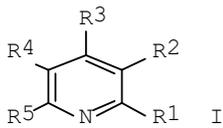
CC 27-16 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))

FAN. CNT 2

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	JP 2002020372	A2	20020123	JP 2001-169465	20010605
	DE 10111874	A1	20011213	DE 2001-10111874	20010313
PRAI	DE 2000-10028141	20000608			
	DE 2001-10111874	20010313			
	DE 2000-10028414	20000608			

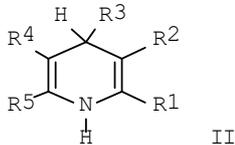
OS CASREACT 136:102298; MARPAT 136:102298

GI



I

注:  
MARPAT ファイルでは  
CAplus/CA ファイルの情報  
を表示することができるが,  
検索することはできない。



II

AB Title compds. I (R1, R5 = C1-10 alkyl, C6-10 aryl; R2, R4 = H, C1-10 alkyl, CN, C02R6; R6 = C1-10 alkyl; R3 = H, C1-10 alkyl, (un)substituted C6-10 aryl) are prepared by reaction of 1,4-dihydropyridine II (R1-R5 = same as I) with Me nitrite in the presence of acids containing <20% oxidizing components. 4-(4-Fluorophenyl)-2,6-diisopropyl-3,5-di(methoxycarbonyl)-1,4-dihydropyridine was oxidized with Me nitrite in the presence of HCl at 60 - to give 98% 4-(4-fluorophenyl)-2,6-diisopropyl-3,5-di(methoxycarbonyl)pyridine.

ST pyridine prepn; hydropyridine oxidn methyl nitrite

IT Oxidation  
(preparation of substituted pyridines)

IT 122549-42-2P  
RL: IMF (Industrial manufacture); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
(preparation of substituted pyridines)

IT 624-91-9, Methyl nitrite 132008-67-4  
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
(preparation of substituted pyridines)

ABS

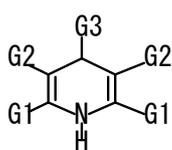
CAplus/CA  
ファイルの  
抄録

IND

CAplus/CA  
ファイルの  
索引情報

**MSTR**  
クレーム中の  
マルクーシュ  
構造  
(MARPAT  
ファイル特有  
の情報)

**MSTR 1**



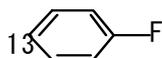
基本骨格 1  
(G グループを含めた構造)

マルクーシュ構造は  
基本骨格と置換基で  
索引される

- G1 = alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> / (Example: Pr-i)
- G2 = H / alkyl <containing 1-10 C> / CN / alkoxy carbonyl <containing 1-10 C> / (Examples: CO2Me / CO2Et)
- G3 = H / alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> (opt. substd. by 1 or more G4) / (Example: 13)

基本骨格 1 中の  
G グループ (置換基) の  
定義

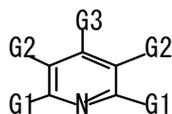
\* 数字は構造フラグメント  
中の結合点



- G4 = halo / NO2 / alkoxy carbonyl <containing 1-10 C> / CN / alkyl <containing 1-10 C>
- Patent location: claim 1

マルクーシュ構造記載位置

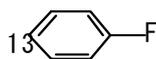
**MSTR 2**



基本骨格 2

- G1 = alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> / (Example: Pr-i)
- G2 = H / alkyl <containing 1-10 C> / CN / alkoxy carbonyl <containing 1-10 C> / (Examples: CO2Me / CO2Et)
- G3 = H / alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> (opt. substd. by 1 or more G4) / (Example: 13)

基本骨格 2 中の  
G グループ (置換基) の  
定義



- G4 = halo / NO2 / alkoxy carbonyl <containing 1-10 C> / CN / alkyl <containing 1-10 C>
- Patent location: claim 1

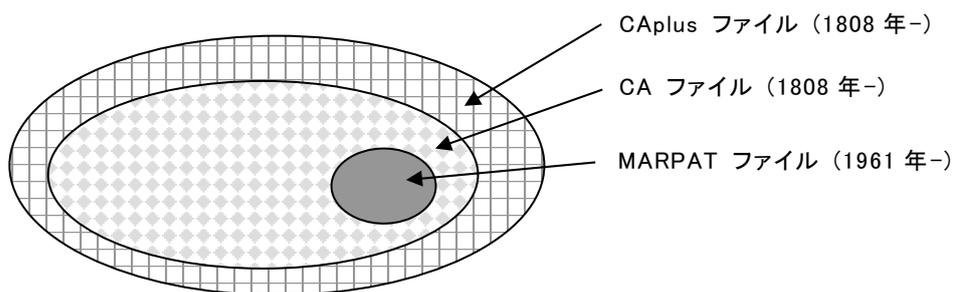
マルクーシュ構造記載位置

・ MSTR 中の記載

MSTR 中の記載	内容	例
(Specifically claimed)	別のクレーム中 (従属項など) で、権利請求されている置換基を収録	(Specifically claimed: Me) メチル基が権利請求されている
(Example)	実施例や発明の詳細な説明中に記載されている具体的な例示物質から選択的に収録	(Example: Pr-i) イソプロピル基が例示として特許中に記載されている
(subst. by) substituted by	必ず置換する	(subst. by 1 or more aryl) 1 以上の aryl 基が置換する
(opt. subst. by.) optionally substituted by	任意の置換基の存在を表す	(opt. subst. by 1 or more G4) 1 以上の G4 が置換していてもよい



■ MARPAT ファイルと CAplus/CA ファイルの収録特許の関係



■ 化学物質の索引方針

	MARPAT	REGISTRY/CAplus
	1961-	1981-
特許請求範囲	マルクーシュ構造	発明の内容に関わりのある特定の化学物質
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する（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 * 何らかの hard data がある物質が索引される。 * 1993 年以降の一部の特許については、実施例中の hard data のない物質（Prophetic 物質）も索引される。 * 比較として挙げられている例示物質は索引されない。

■ 索引例：原特許文献（2002 年の公開番号 20372 号の日本特許）

- ・ REGISTRY/CAplus ファイル

CAplus/CA ファイルに、特定化学物質の CAS RN<sup>®</sup> が索引される。  
REGISTRY ファイルで、それらの特定化学物質を構造検索することができる。

実施例の抜粋

【0030】  
【実施例】実施例1（本発明にはよらない）  
下記実施例で使用された亜硝酸メチルを、2.5重量%濃度の水性亜硝酸ナトリウム溶液1重量部及びメタノール0.14重量部の溶液を4.8重量%濃度の水性硫酸0.37重量部で処理することにより必要に応じて製造し、そして式（II）の置換された1,4-ジヒドロピリジンの本発明に従う酸化（芳香族化）のためにガス状でを使用した。

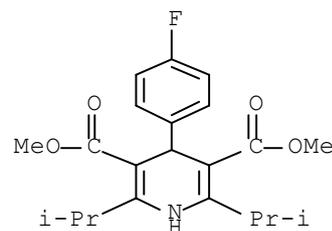
【0031】実施例2  
4 lのガラス反応器中で、4-（4-フルオロフェニル）-2,6-ジイソプロピル-3,5-ジ（メトキシカルボニル）-1,4-ジヒドロピリジン75.0 gを水225.0 g及び3.7重量%濃度の水性塩化水素酸20.7 g中に最初に加えた。次いで亜硝酸メチル1.5モルを60℃で導入した。20℃に冷却した後、4.5重量%濃度の水性水酸化ナトリウム溶液19.8 gを使用してpH8に調節した。得られる懸濁液をろ過し、ろ別した生成物を各場合に800 mlの水で2回洗浄し、次いで減圧下に55℃で乾燥した。4-（4-フルオロフェニル）-2,6-ジイソプロピル-3,5-ジ（メトキシカルボニル）-ピリジン73.6 gが単離され、これは理論の98%の収率に相当する。

【0032】実施例3  
2 lのガラス反応器中で、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

CAplus/CA ファイルの化合物索引

反応物

132008-67-4



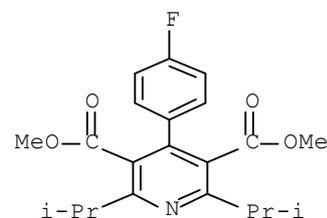
試薬

624-91-9, Methyl nitrite



生成物

122549-42-2P



CAplus/CA ファイルの索引部分

ST pyridine prepn; hydroypyridine oxidn methyl nitrite  
IT Oxidation  
(preparation of substituted pyridines)  
IT **122549-42-2P**  
RL: IMF (Industrial manufacture); SPN (Synthetic preparation); PREP  
(Preparation)  
(preparation of substituted pyridines)  
IT **624-91-9, Methyl nitrite** **132008-67-4**  
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
(preparation of substituted pyridines)

Point

CAplus ファイルで化学物質から調査する場合は上記の 3 物質から検索しないとヒットしない！

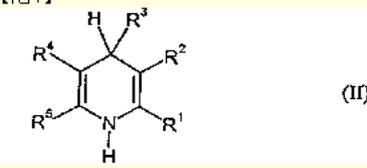
・ MARPAT ファイル

alkyl, aryl といった一般式が Pr-i とともに索引されている。  
 MARPAT ファイルでは、それらの一般式グループを検索することができる。

特許請求範囲の抜粋

**請求の範囲**

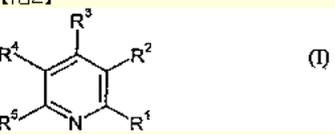
【特許請求の範囲】  
 【請求項1】式(II)  
 【化1】



(II)

式中、R<sup>1</sup>及びR<sup>5</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>-アリールを表し、R<sup>2</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>3</sup>は水素、C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>-アルキルを表すか、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>-アリールを表す、の置換された1,4-ジヒドロピリジンを経酸成分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】

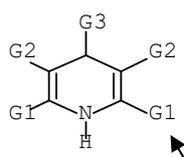


(I)

式中、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類の製造方法。

MARPAT ファイルに収録されるマルクেশユ構造

**MSTR 1**

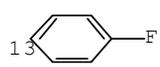


alkyl (1-10) または aryl (6-10)  
(具体例 : イソプロピル)

G1 = alkyl <containing 1-10 C> /  
 aryl <containing 6-10 C> / (Example: Pr-i)

G2 = H / alkyl <containing 1-10 C> / CN /  
 alkoxycarbonyl <containing 1-10 C> /  
 (Examples: CO2Me /CO2Et)

G3 = H / alkyl <containing 1-10 C> /  
 aryl <containing 6-10 C> (opt. substd.  
 by 1 or more G4) / (Example: 13)



G4 = halo / NO2 / alkoxycarbonyl <containing 1-10 C>  
 /CN / alkyl <containing 1-10 C>

Patent location: claim 1

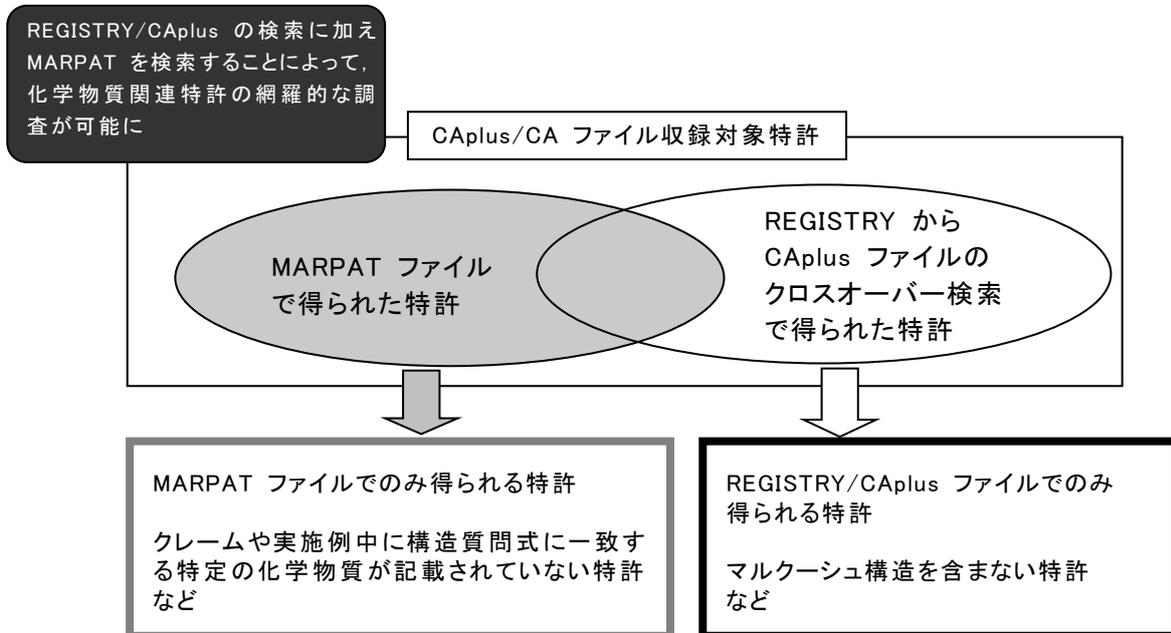
Point

MARPAT ファイルには請求項中に記載された広い定義の物質が収録されている

構造検索を行う際に一般式グループも含めた検索を実行すれば REGISTRY/CAplus ファイルよりも比較的容易にこの特許を見つけることができる

■ REGISTRY ファイル, CAplus ファイルと MARPAT ファイルで得られる特許の違い

- ・ MARPAT ファイルで得られる特許は、すべて CAplus/CA ファイルに収録されている。
- ・ しかし、化学物質の索引方針および検索機能の違いによって、それぞれのファイルで得られる特許に違いが生じる。



(参考) マルクーシュ構造のみで記載できる化学物質の例：

- 1) 置換基が一般式（アルキル，ヘテロ環など）で記載されている化合物
- 2) 選択枝を有する置換基が複数あり，組み合わせにより多数の構造が発生する化合物

## *B MARPAT* ファイルの検索

MARPAT ファイルの検索に特有の設定であるマッチレベル、元素数レベルの指定方法と、検索および回答表示方法をご紹介します。



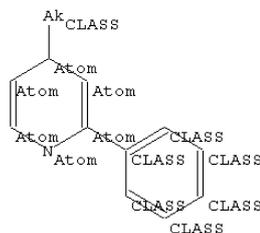
## MARPAT ファイルの検索

### ■ MARPAT ファイルの検索

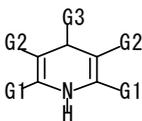
- ・ MARPAT ファイルは、クレーム中のマルクেশ構造から特許調査をするためのファイルである。よって、原則として構造検索を利用する。

構造質問式

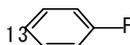
MARPAT ファイルの回答



MSTR 1



G1 = alkyl <containing 1-10 C> /  
**aryl <containing 6-10 C>** / (Example: Pr-i)  
 G2 = H / alkyl <containing 1-10 C> / CN /  
 alkoxy carbonyl <containing 1-10 C> /  
 (Examples: CO2Me / CO2Et)  
 G3 = H / **alkyl <containing 1-10 C>** /  
 aryl <containing 6-10 C> (opt. substd. by  
 1 or more G4) / (Example: 13)



G4 = halo / NO2 / alkoxy carbonyl <containing 1-10 C> /  
 CN / alkyl <containing 1-10 C>  
 Patent location: claim 1

- ・ MARPAT ファイルで実行可能な辞書検索フィールド

検索項目	コード	説明	入力例
レコード番号	/AN	CA 抄録番号	=> <u>S 109:73345/AN</u>
基本索引	/BI (なし)	マルクেশ構造中のテキスト情報から切り出した単語	=> <u>S SALT#</u>
入力日	/ED	入力日	=> <u>S 20070321/ED</u>
更新日	/UP	更新日	=> <u>S 20070321/UP</u>

- MARPAT ファイルでは、CAplus/CA ファイルと同じ文献情報を表示することができるが、上記の表以外のフィールドを検索することはできない。
- 書誌情報、抄録、索引情報を検索するときは、CAplus/CA ファイルにクロスオーバーして検索する。
- MARPAT ファイルのレコード番号 (AN) は、CAplus ファイルの資料番号 (DN) および CA ファイルのレコード番号 (AN) と共通しており、L 番号によるクロスオーバーが可能。

## マルクーシュ構造の索引

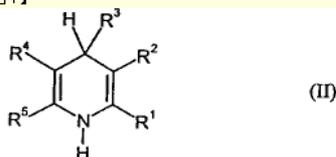
■ MARPAT ファイルには、マルクーシュ構造が収録されている。

- ・ マルクーシュ構造は、基本骨格（G グループを含めた構造）と置換基（G グループ）で索引される。
- G グループの値はテキスト（H, alkyl, aryl 等）または数字（13 など）で示される。数字は、構造フラグメント中の結合点を表している。

### 【特許請求範囲の抜粋】

#### 請求の範囲

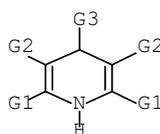
【特許請求の範囲】  
【請求項1】式(II)  
【化1】



式中、R<sup>1</sup>及びR<sup>5</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>-アリールを表し、R<sup>2</sup>及びR<sup>6</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>3</sup>は水素、C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>-アルキルを表すか、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>-アリールを表す、の置換された1,4-ジヒドロピリジンを経化成分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)

### 【MARPAT ファイルに収録されるマルクーシュ構造】

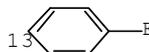
MSTR 1



G1 = alkyl <containing 1-10 C> / aryl

<containing 6-10 C> / (Example: Pr-i)  
G2 = H / alkyl <containing 1-10 C> / CN /  
alkoxycarbonyl <containing 1-10 C> /  
(Examples: CO2Me /CO2Et)

G3 = H / alkyl <containing 1-10 C> /  
aryl <containing 6-10 C> (opt. substd.  
by 1 or more G4) / (Example: 13)



G4 = halo / NO2 / alkoxy carbonyl  
<containing 1-10 C> /CN /  
alkyl <containing 1-10 C>

Patent location: claim 1

マルクーシュ  
構造の番号

基本骨格

置換基

マルクーシュ  
構造の記載  
位置

①                      ②                      ③

G3 = H / alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> (opt. substd. by 1 or more G4)

/ (Example: 13)

④

構造フラグメント中の  
番号に対応している

① 炭素 (C) 1~10 の alkyl  
② または  
③ 炭素 (C) 6~10 の aryl  
④ 例示物質 :

### G3 の定義

水素 (H), または炭素数 1-10 の alkyl, または 1 以上の G4 が置換してもよい炭素数 6-10 の aryl, または 13 を含む構造フラグメントである。

- G グループ内で使用される置換基に関する表現

- 置換の許容

MSTR 中の記載	内容	例
(substd. by) substituted by	<u>必ず</u> 置換する	(substd. by 1 or more aryl) 1 以上の aryl 基が置換する
(opt. substd by.) optionally substituted by	<u>任意の</u> 置換基の存在を表す	(opt. substd. by 1 or more G4) 1 以上の G4 が置換していてもよい

- 置換の補足

MSTR 中の記載	内容	例
(Specifically claimed)	別のクレーム中（従属項など）で、 権利請求されている置換基を収録 している	(Specifically claimed: Me) メチル基が権利請求されている
(Example)	実施例や発明の詳細な説明中に記載 されている具体的な例示物質から 選択的に収録している	(Example: Pr-i) イソプロピル基が例示として特許中に 記載されている

- G グループの選択枝の一つとして null や bond の表記が用いられることがある。  
これらはその G グループが構造中に存在せず、代わりに結合が存在することを意味する。

- マルクーシュ構造に関する説明

- 各マルクーシュ構造には特許中の記載位置とともに、場合によっては誘導体情報や注記などが記載されている。これらの説明中の単語は、基本索引で検索することができる。

- マルクーシュ構造の記載位置

Patent location: claim 5  
 Patent location: claims (明細書中のクレームに番号が付与されていない場合)  
 Patent location: disclosure

- 誘導体情報

Derivative: or a salt  
 Derivative: or physiologically acceptable salts

- 注記

Note: also incorporates broader disclosure  
 Note: record may include structures from disclosure  
 Note: or pharmaceutically acceptable derivatives  
 Note: or salts, esters or derivatives  
 Note: if G7 = NH<sub>2</sub>(so) or forms a ring then G6 = 32, 35, or 39

- 立体情報

Stereochemistry: or enantiomers or diastereomers  
 Stereochemistry: and stereoisomers or diastereoisomers

■ G グループ（置換基）として収録されるノードの種類

- ① 特定原子：C, N, O, S, Cl 等, ショートカット (CH3, Et, NH2 等), 構造フラグメント
- ② 一般式グループ：可変原子 (halo, metal 等), 一般式テキストショートカット (alkyl, aryl 等)
- ③ R グループ：明細書中で「保護基」「有機原子団」のように記述されていて構造式で表現できないグループを表すための特別な記述. R のあとに説明がテキストで記述されて引用符で囲まれ, 全体は < > で区切られる.

G3 = H / alkyl <containing 1-10 C> / aryl <containing 6-10 C> (opt. substd. by 1 or more G4)

(Example: 13)

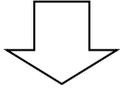
特定原子      一般式グループ

G5 = R <"organic group">      R グループ

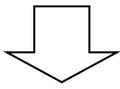
G6 = R <"non-reactive counter-ion">

G7 = R <"salt additive or electron acceptor", negatively charged>

<p><b>【特定原子】</b> (ショートカットを含む)</p> <p>[例] C, N, O, S F, Cl, I CH2, CH3 phenylene pyridine</p>	<p><b>【一般式グループ】</b>(可変原子を含む)</p> <p>[例] halo (ハロゲン), metal (金属) heteroatom (C, H 以外の元素) alkyl (飽和の炭素鎖) alkylene (-alkyl- (-CH2-)) loweralkyl (1-6 個の飽和炭素鎖) alkoxy (alkyl-O-) alkenyl (1 以上の不飽和炭素鎖) aryl (芳香環), arylene (-aryl-) cycloalkyl (飽和炭素環) cycloalkenyl (1 以上の二重結合を持ち, 三重結合を持たない炭素環) heteroaryl (ヘテロ元素を含む芳香環) alkanoyl (Alkyl-C(O)-, H-C(O)-)</p>	<p><b>【R グループ】</b></p> <p>① 構造では表現できない部分</p> <p>[例] organic group electron withdrawing group</p> <p>② 具体的な内容が記載されていない置換基の存在</p> <p>[例] alkyl (opt.substd.)</p> <p>③ acyl</p>
----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------



MARPAT ファイルのレコードには、「特定原子」だけでなく、「一般式グループ」や「R グループ」も収録されているのが特徴



MARPAT ファイルでは構造作図する際の「マッチレベル\*」によってどのレベル（特定原子 or 一般式グループ or R グループ）まで回答を広げたいかを指定することができる

\* 構造作図時に指定可能な属性（アトリビュート）の一種（後述）

参考 : 一般式テキストの定義 (MARPAT ファイル内での表記)

1. 炭素鎖 (直鎖, 分岐, 飽和, 不飽和を問わず, 1 以上の炭素鎖) に関するもの

- alkanoyl Ak-C(O)-, H-C(O)-
- alkenyl 1 以上の二重結合を持ち, 三重結合を持たず, 炭素数 2 以上の Ak  
Ak <EC (2-) C, BD (1-) D, (0) T> -  
1 価 (たとえば, CH<sub>2</sub>-CH=CH-CH<sub>2</sub>-)
- alkenylene 1 以上の二重結合を持ち, 三重結合を持たず, 炭素数 2 以上の Ak  
- Ak <EC (2-) C, BD (1-) D, (0) T> -  
2 価 (たとえば, -CH=CH-)
- alkenylenedioxy -O-alkenylene-O-
- alkoxy alkyl-O- (alkyloxy または alkoxy)
- alkyl 単結合のみを持つ飽和の Ak (線上 / 枝分かれ)  
1 価 (たとえば, Me-, Et-, t-Bu-)
- alkylene -alkyl-  
2 価 (たとえば, -CH<sub>2</sub>-)
- alkylidene alkyl=  
1 価 (たとえば, =CH-CH-CH<sub>3</sub>)
- alkynyl 二重結合を持たず, 1 以上の三重結合を持ち, 炭素数 2 以上の Ak  
Ak <EC (2-) C, BD (1-) T, (0) D> -  
1 価 (たとえば, CH≡C-, HC≡C-CH<sub>2</sub>-)
- lower 炭素数 1-6
- loweralkyl 炭素数 1-6 の単結合のみを持つ Ak
- perhaloalkyl 水素全てがハロゲンで置き換えられた Ak

2. 炭素環 (単環, 多環, 飽和, 不飽和を問わず炭素環) や, ヘテロ環 (単環, 多環, 飽和, 不飽和を) を問わず 1 以上のヘテロ原子を持つ環) に関するもの

- aryl 1 以上の芳香環を持ち, 6 以上のノーマライズド結合を持ち, 1 以上の 6 員環を持つ Cb  
Cb <AR (1-), BD (6-) N, RS (1-) E6>
- arylene -aryl-  
2 価 (たとえば, phenylene)
- cycloalkenyl 1 以上の二重結合を持ち, 三重結合を持たない Cb  
1 価 (たとえば, cyclopentadienyl, cyclohexenyl)
- cycloalkyl 単結合のみを持つ Cb  
1 価 (たとえば, cyclopropyl, decahydronaphthyl)
- heteroaryl 1 以上の芳香環を持ち, 6 以上のノーマライズド結合を持ち, 1 以上の 6 員環を持つ Hy,  
または 1 以上の芳香環を持ち, 2 以上の二重結合を持ち, 1 以上の 5 員環を持つ Hy  
(たとえば, pyridyl, benzopyranyl)  
Hy <AR (1-), BD (6-) N, RS (1-) E6> / Hy <AR (1-), BD (2-) D, RS (1-) E5>

3. その他

- acyl -C(O)-H または -C(O)-R または -C(O)-Ak-(R)<sub>n</sub>
- aralkyl 1-3 の aryl 基と結合している alkyl 基
- hydrocarbyl Ak  
Cb  
Cb に結合している Ak で, Ak が結合点である  
Ak に結合している Cb で, Cb が結合点である  
Cb に結合している Cb で, 片方の Cb が結合点である

## マッチレベル

- マッチレベルは、原子、クラス、不定の 3 種類がある。

**重要**

- ・ 同じ構造でも、それぞれのノードに対するマッチレベルの指定によって得られる回答が異なる。

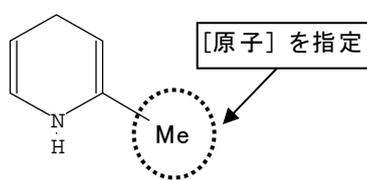
- マッチレベルの種類

### 原子 (ATOM)

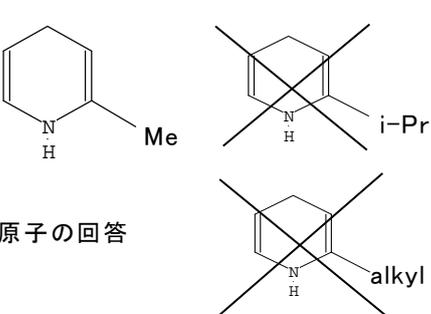
[特定原子] で収録されている回答のみが得られる

- ① 特定原子で作図したノードにマッチレベル [原子] を指定した場合

構造質問式



MARPAT ファイルの回答



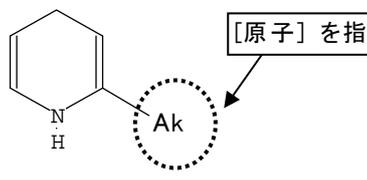
\* マッチレベル [原子] を指定したノードは、特定原子の回答のみがヒットする。この場合は、Me のみ。

\* alkyl や i-Pr はヒットしない。

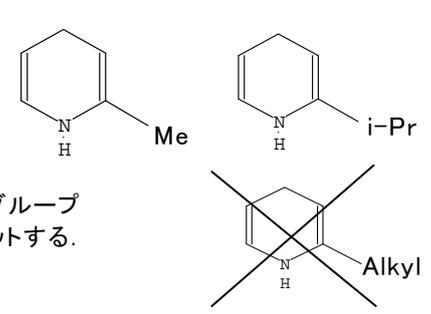
- ・ alkyl や alkylene などの回答も必要な場合は [クラス] の指定に変更する
- ・ i-Pr の回答も必要な場合は、Me で作図したノードを Ak などに変更する

- ② 一般式グループで作図したノードにマッチレベル [原子] を指定した場合

構造質問式



MARPAT ファイルの回答



\* マッチレベル [原子] を指定したノードが一般式グループノード Ak であっても、特定原子の回答のみがヒットする。

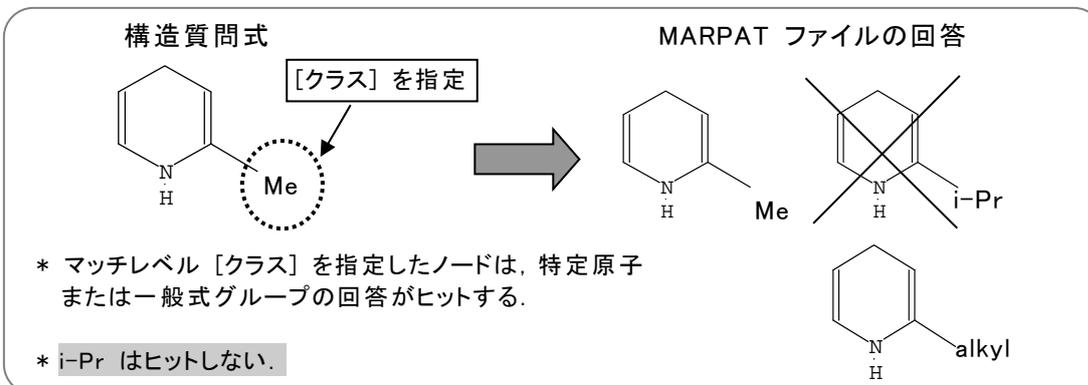
\* alkyl はヒットしない。

- ・ alkyl や alkylene の回答も必要な場合は [クラス] の指定に変更する

**クラス (CLASS)**

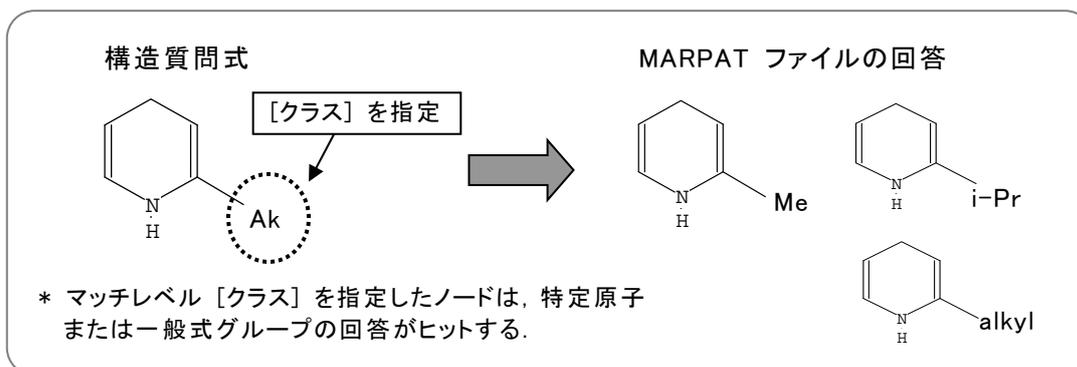
[特定原子]+[一般式グループ] で収録されている回答が得られる

## ① 特定原子で作図したノードにマッチレベル [クラス] を指定した場合

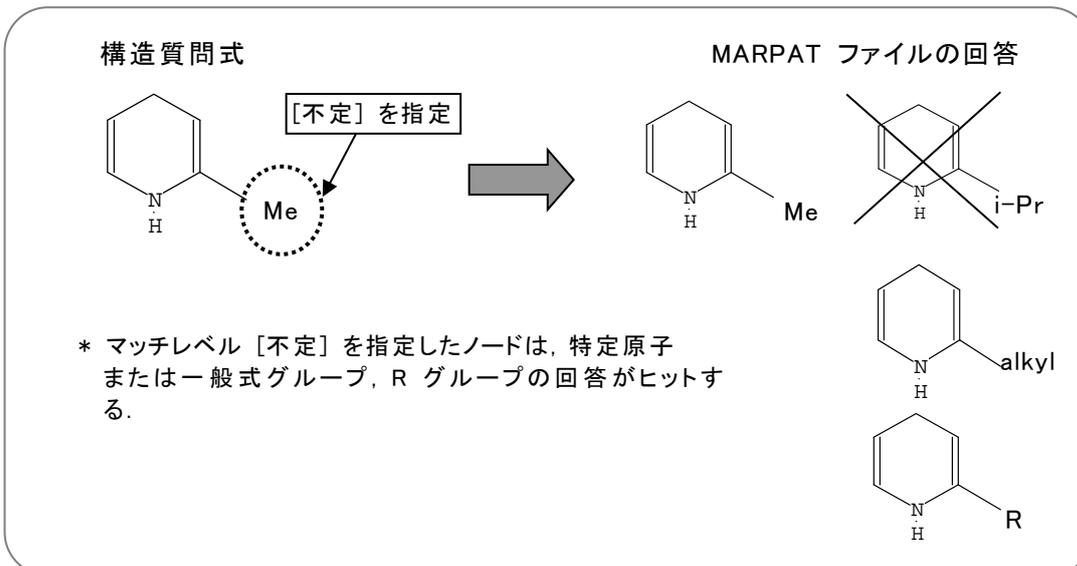


- ・ i-Pr の回答も必要な場合は、Me で作図したノードを Ak などに変更する

## ② 一般式グループで作図したノードにマッチレベル [クラス] を指定した場合

**不定 (ANY)**

[特定原子]+[一般式グループ]+[R グループ] で収録されている回答が得られる



## 元素数レベル

### ■ 元素数レベルの利用

- ・ 一般式グループには、後に続く < > の中に元素の種類と数が記載されている場合と、記載されていない場合がある。

- 元素の種類と数の記載有りの例

G2 = alkyl <containing 1-20 C> / cycloalkyl <containing 3-20 C> /  
alkoxy <containing 1-6 C> / cycloalkyloxy <containing 3-6 C> /

元素の種類と数

- 元素の種類と数の記載無しの例

G1 = alkyl / alkoxy / alkylamino / dialkylamino

- ・ 一般式グループにおける元素の種類と数を条件に検索するには、元素数レベルを指定する。

### ■ 元素数レベルの種類

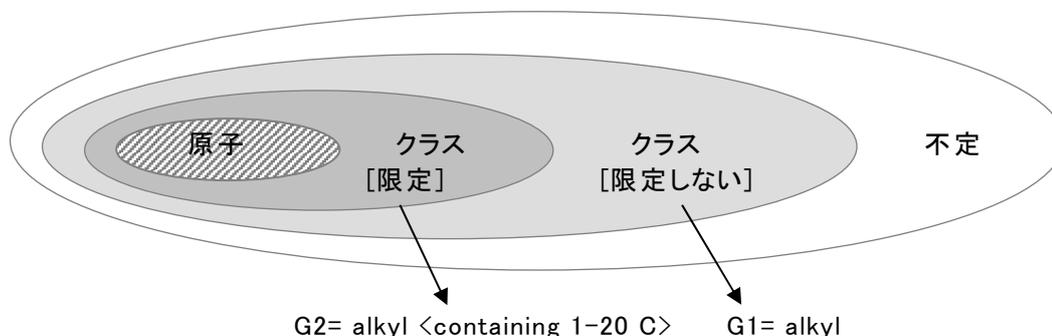
限定 (LIMITED)	一般式グループがヒットする場合、 <u>指定した元素の種類と数の条件を満たす記載のある回答のみ</u> が得られる
限定しない (UNLIMITED)	上記に加え、元素の種類と数が明記されていない回答（指定した元素の存在が否定されない回答を含む）も得られる

\* 元素数の指定をしていない場合は、元素数レベルの設定は検索結果に影響しない。

- ・ 元素数の指定方法

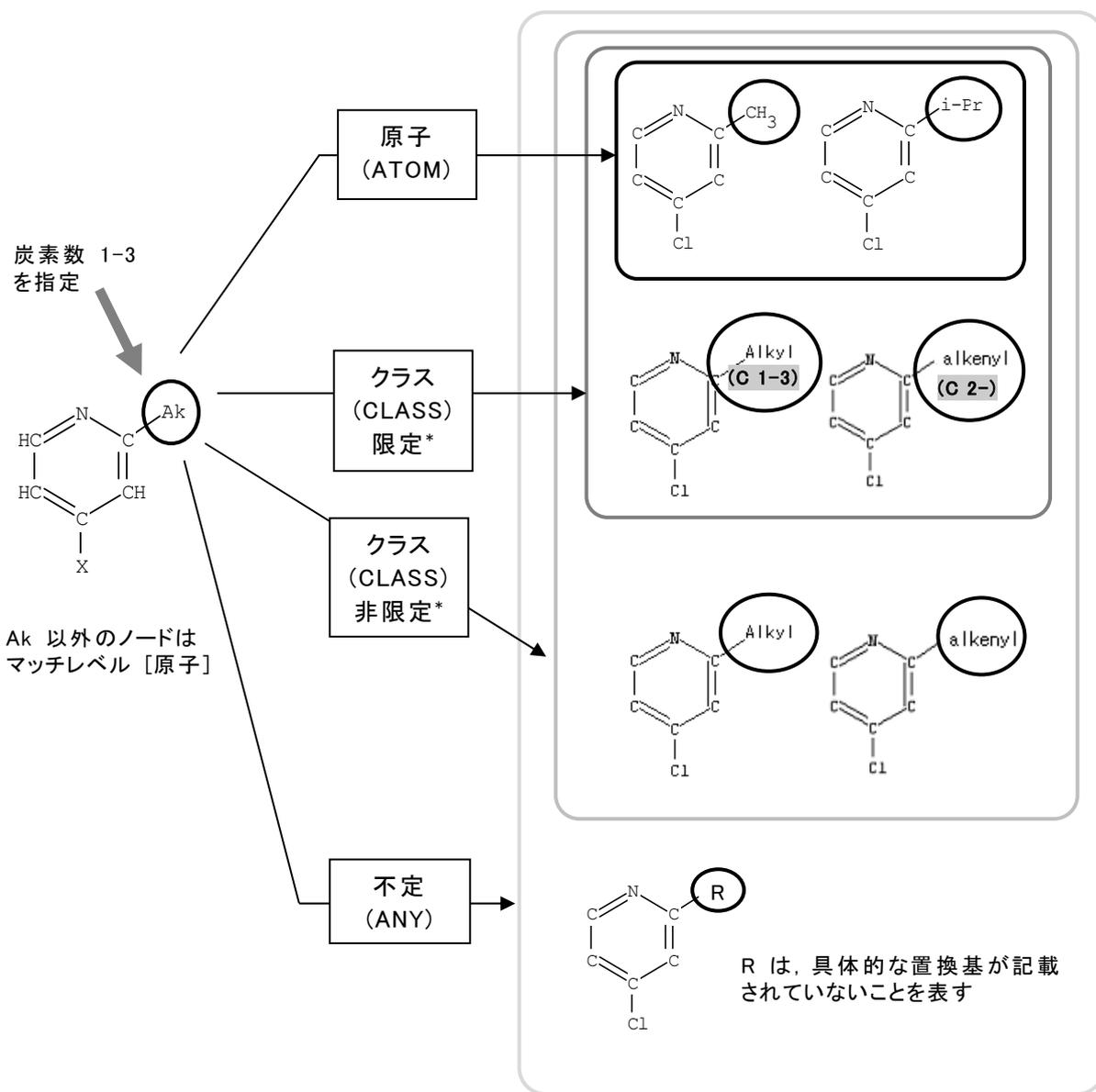
- Ak, Hy, Cy, Cb に元素数を指定する。(X, M には元素数の指定はできない)
- 特定の構造を作図する。

### ■ 回答の包含関係（例：炭素数 1-5 を指定した Ak が G グループでヒットした場合）



■ マッチレベルとの関係

- ・ マッチレベル [原子] : [限定], [限定しない] のいずれを指定しても回答に影響なし
- ・ マッチレベル [クラス] : [限定], [限定しない] の指定で回答に違いがある。  
\* 元素数の指定をしている場合
- ・ マッチレベル [不定] : 必ず [限定しない] を指定して検索する。



\* グループ原子記号 X (ハロゲン), M (金属) には元素数を指定できないため、元素数レベルを変更しても回答に影響はない。

## マッチレベルと元素数レベルのまとめ

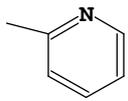
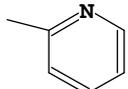
### ■ マッチレベルと元素数レベルの指定の違いによる回答例

- ・ マッチレベル「原子」：指定部位が〔特定原子〕で収録されている回答のみが得られる。
  - ・ マッチレベル「クラス」：指定部位が〔特定原子〕または〔一般式グループ〕で収録されている回答が得られる。
- － 元素数を指定した Ak や Hy などの構造質問式に対して、マッチレベル「クラス」を指定した場合は、元素数レベル〔限定〕／〔限定しない〕の指定によってさらに回答が異なる。

↓

ヒットした置換基が一般式グループであった場合 . . .

- ・ 〔限定〕：検索条件に合う元素の種類と数が記載された一般式グループのみがヒット
- ・ 〔限定しない〕：〔限定〕で得られる回答に加え、元素の種類と数が記載されていない一般式グループもヒット（指定した元素の存在が否定されない回答を含む）

構造質問式の一部	マッチレベル 〔原子〕の回答例	マッチレベル〔クラス〕の回答例	
		限定	限定しない
-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> - (元素数：炭素 3)	-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -	-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> - -Alkyl<containing 1-5 C>-	-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> - -Alkyl<containing 1-5 C>- -Alkyl-
-Ak (元素数指定なし)	-CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -	-CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> - -Alkyl<containing 1-5 C>- -Alkyl-	
-Ak 元素数：炭素 1-3	-CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -	-CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> - -Alkyl<containing 1-5 C>-	-CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> - -Alkyl<containing 1-5 C>- -Alkyl-
 (元素数：窒素 1)*	-pyridyl 	-pyridyl -heteroaryl<containing zero or more N.../	-pyridyl -heteroaryl<containing zero or more N.../ -heteroaryl
-Hy (元素数指定なし)	-pyridyl 	-pyridyl -heteroaryl<containing zero or more N> -heteroaryl	
-Hy 元素数：窒素 ちょうど 1	-pyridyl 	-pyridyl -heteroaryl<containing zero or more N>	-pyridyl -heteroaryl<containing zero or more N.../ -heteroaryl

\* 孤立環の場合

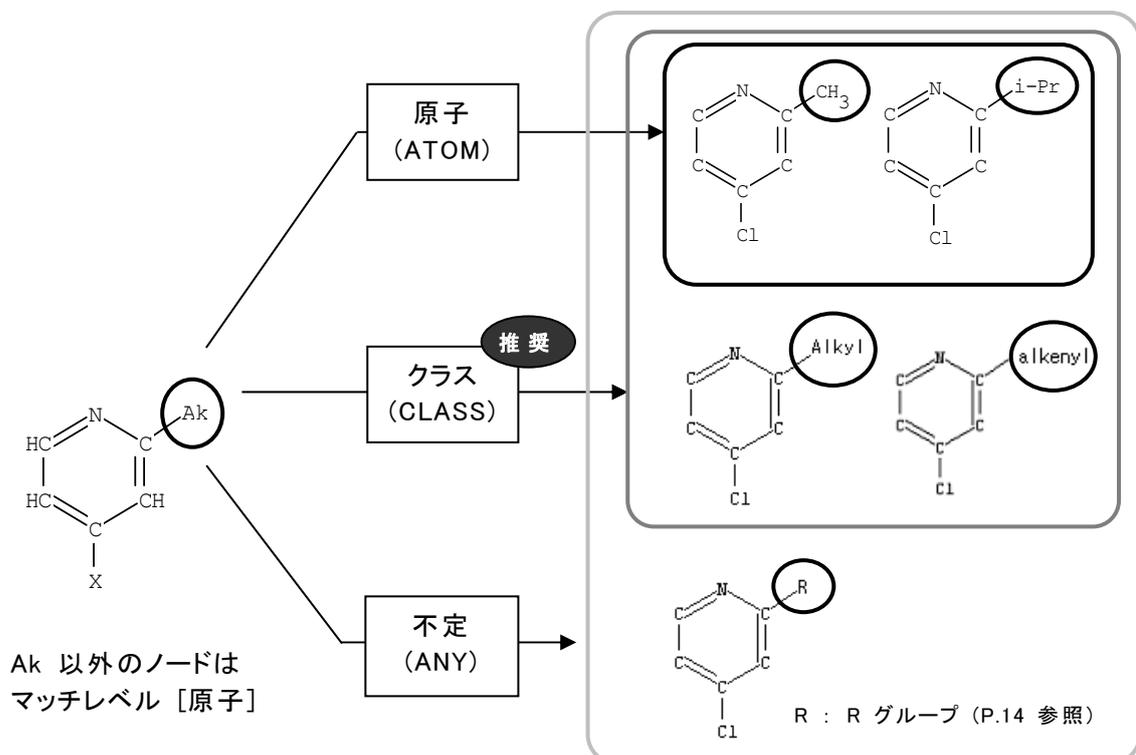
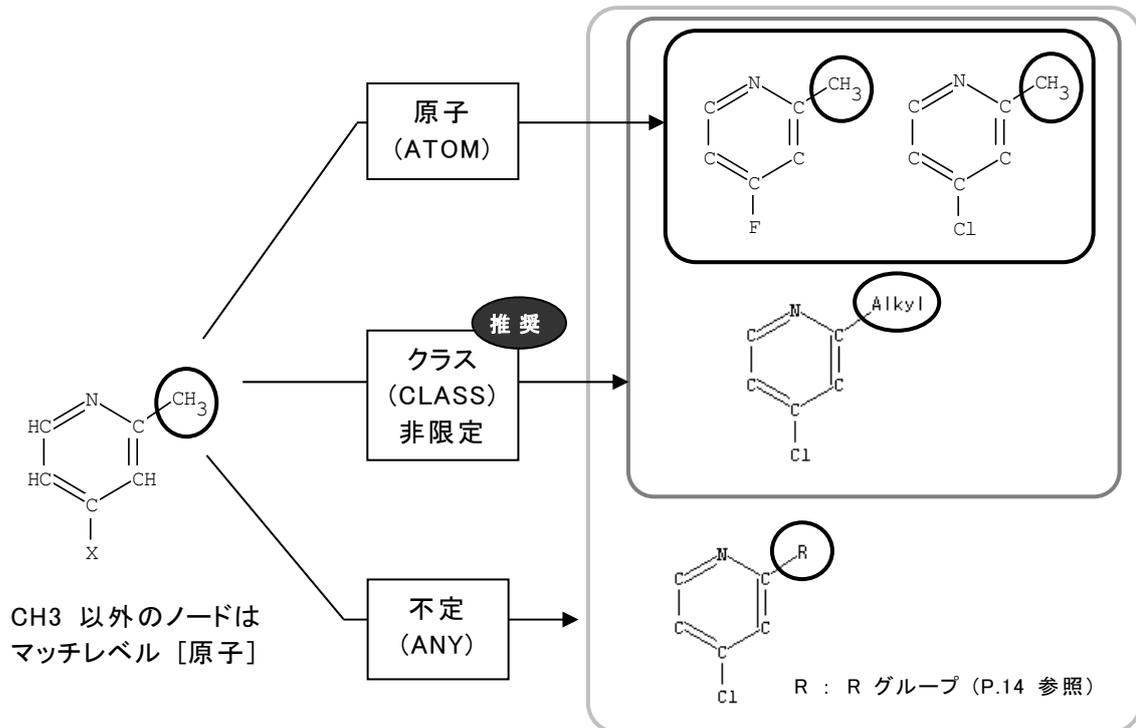


■ 構造質問式中の“鎖ノード”に対するマッチレベルの指定

- ・ 特定原子からなる鎖に加えて、一般式グループ (alkyl や alkenyl など) も回答に含めなければ、鎖ノードのマッチレベルを「クラス」にする。
- ・ 構造で明記されている鎖に限定したいときは、鎖のノードのマッチレベルを「原子」にする。

[構造質問式]

[MARPAT ファイル中の回答例]

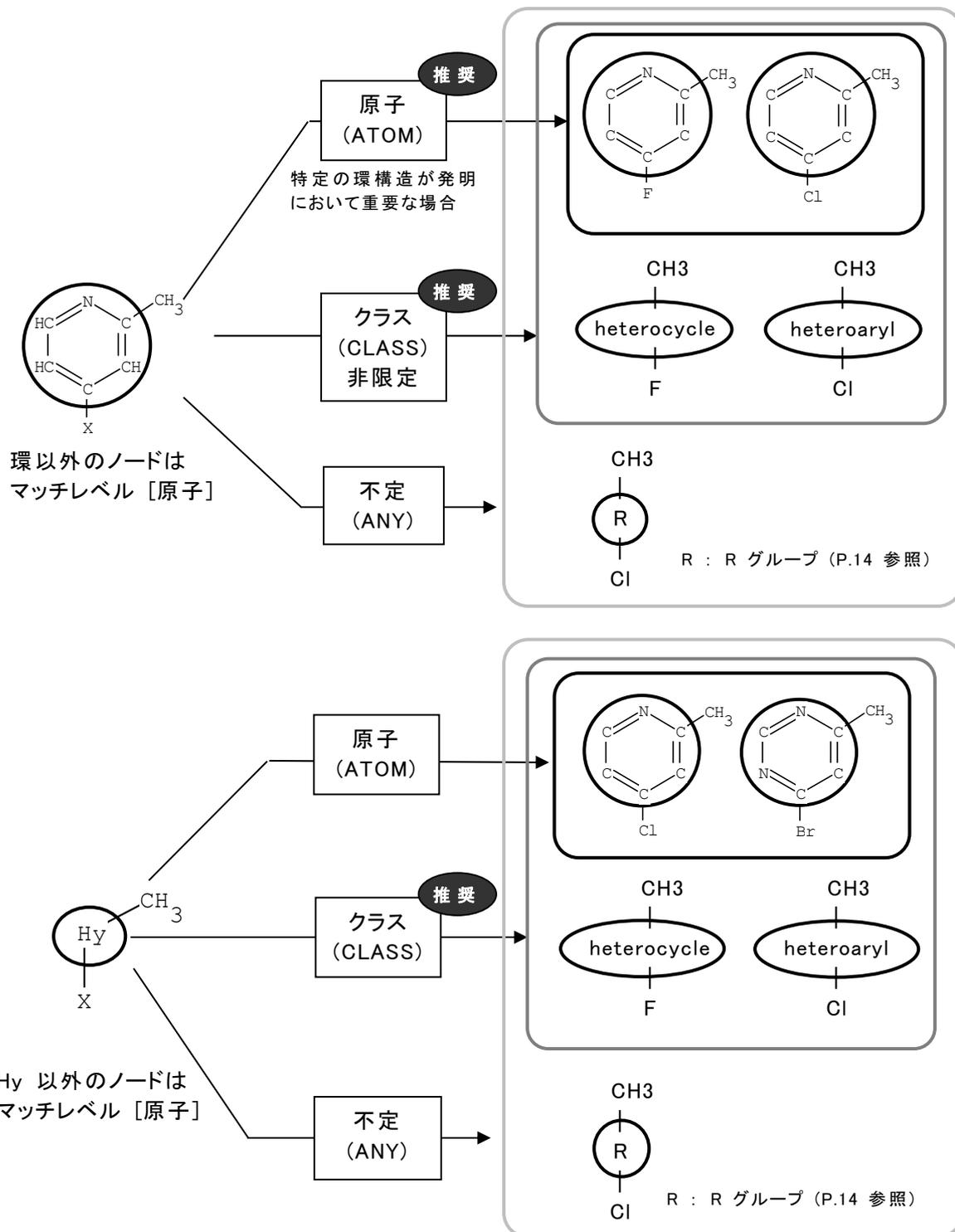


■ 構造質問式中の“環ノード”に対するマッチレベルの指定

- ・ 回答中に明確に存在してほしい重要な環のマッチレベルは「原子」にする。
- ・ 特定原子から成る環構造に加えて、作図した環構造に合致した一般式グループ（たとえば, aryl や heteroaryl も回答に含めたければ, 環系の全ノード/一般式グループ (Hy, Cb, Cy) のノードのマッチレベルは「クラス」にする。

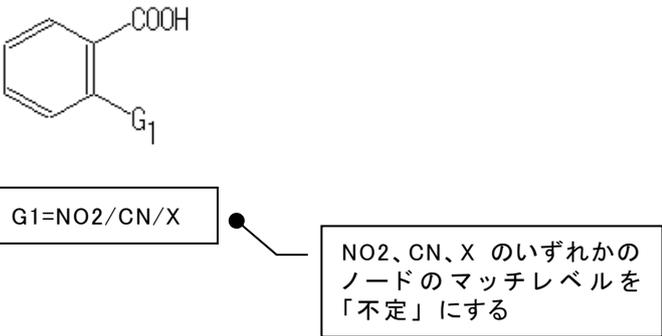
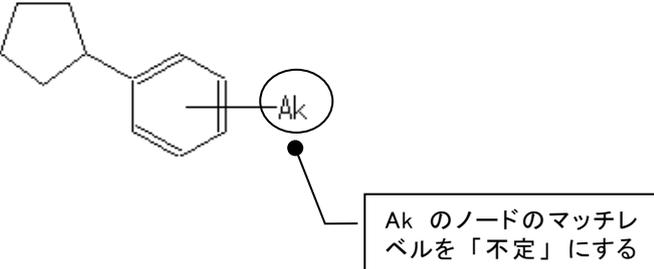
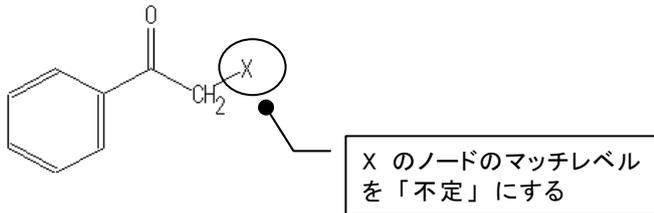
[構造質問式]

[MARPAT ファイル中の回答例]

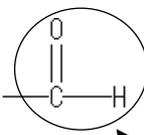
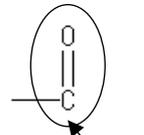
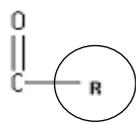
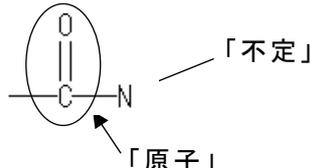
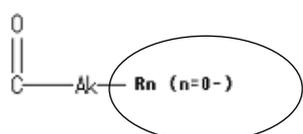
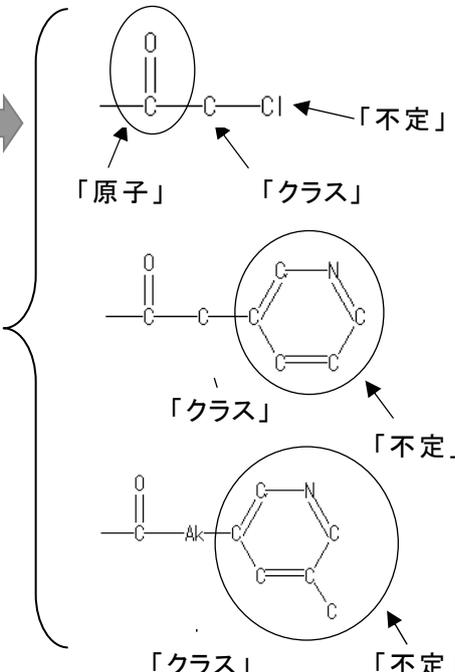
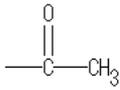
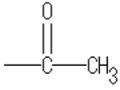
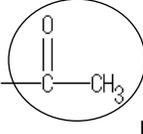
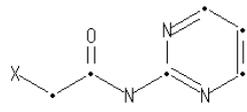
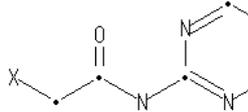
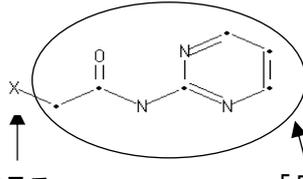


■ マッチレベルを「不定」にしたほうがよい部分

- ・ 構造質問式のノードにマッチレベル「不定」を指定したときにのみ、R グループがヒットする。
- ・ R に続く < > 内のテキストの内容は照合しないため、ノイズがヒットする可能性もある。
- ・ マッチレベルを「不定」にしたノードは、必ず元素数レベルを「限定しない」にする。

回答に含めたい内容	マッチレベルの指定
<p>置換基の部分が、特許のクレーム中で一般的によく使われる表現のもの（構造では表現できない部分）も回答に含めたいとき</p> <p>例：            G1= R &lt;TX "leaving group"&gt;            G2= R &lt;TX "electron withdrawing group"&gt;</p>	<p>置換基のノードのマッチレベルを「不定」にする。</p> 
<p>置換基が許される (opt. substd by), または必要 (substd. by) と記載されているが、具体的な置換基の記載がない置換基も回答に含めたいとき</p> <p>例：            G1= X/NO2/Ph (opt. substd by)</p>	
<p>テキスト記載された "acyl" も回答に含めたいとき</p> <p>例：            G1=OH/acyl</p>	

参考 : acyl を検索する上での注意点

特許中の記載	MARPAT ファイルでの索引	acyl をヒットさせることができる構造質問式
		 
		
acyl	 <p>注意) R の部分に該当する構造質問式中のノードは、マッチレベル「不定」で指定する。Ak の部分に該当する構造質問式中のノードに炭素鎖を作図した場合には、マッチレベル「クラス」を指定する。</p>	
		
		

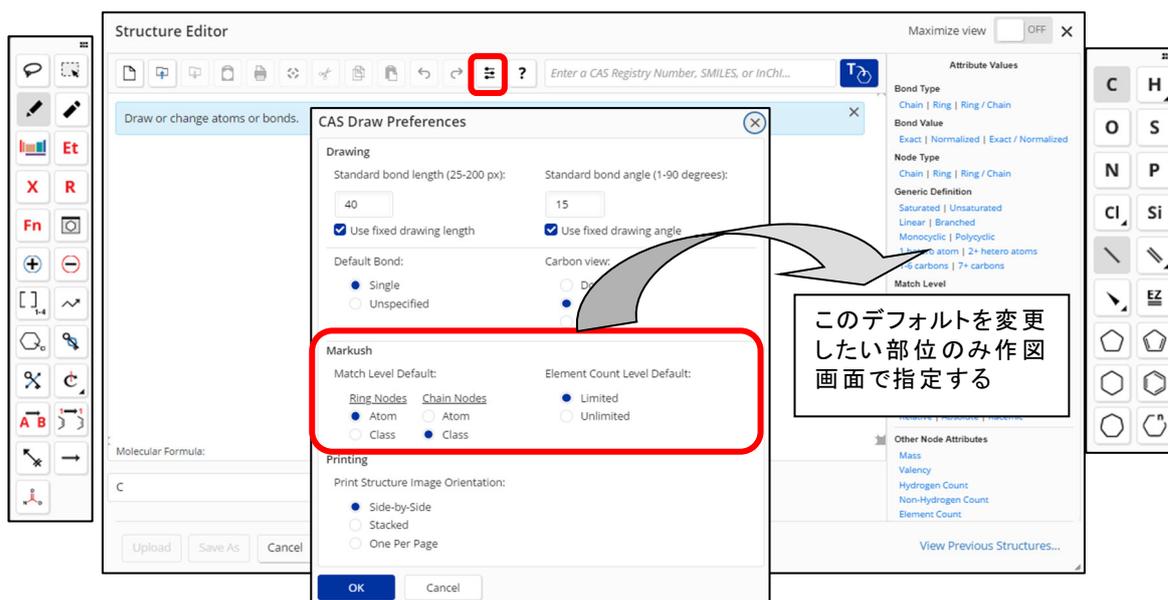
\* マッチレベルが「原子」でヒットする場合、「クラス」、「不定」でもヒットする。

\* マッチレベルが「クラス」でヒットする場合、「不定」でもヒットする

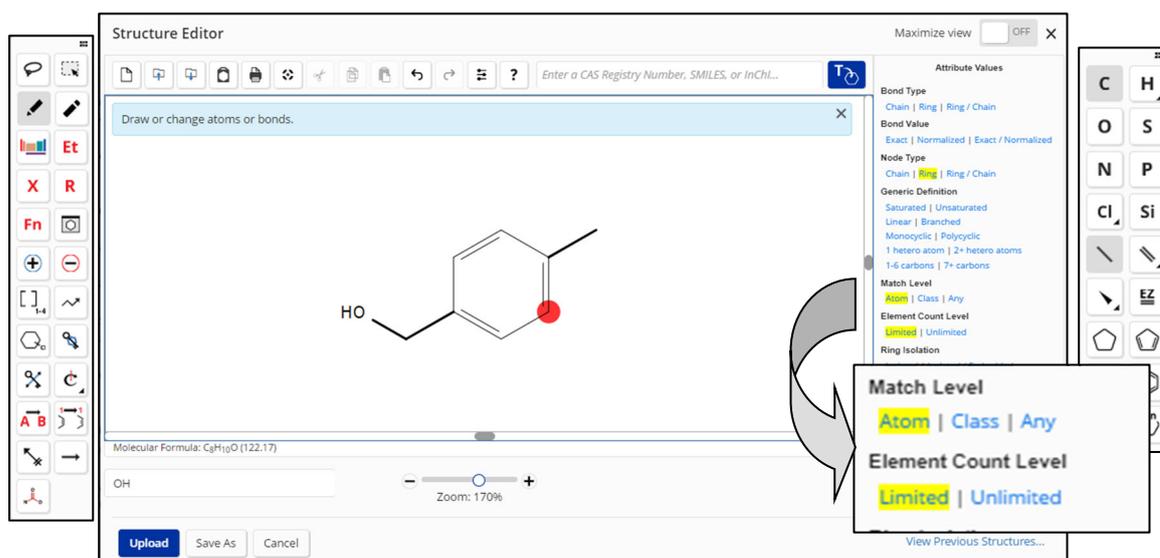
## マッチレベル, 元素数レベルの指定

- STNext の構造作図画面で作図する場合は, デフォルトのマッチレベル, 元素数レベルの値がそれぞれ有効になる.

- ・ インストール時のデフォルト
  - マッチレベル : 環ノードは「原子 (ATOM)」, 鎖ノードは「クラス (CLASS)」
  - 元素数レベル : 限定 (Limited)
- ・ デフォルトの値は作図画面の Preferences > Markush で確認・変更することができる.



- 特定のノードにポインタを近づけると, 属性が黄色でハイライトされ, マッチレベルや元素数レベルの指定を確認できる.



## ■ マッチレベル、元素数レベルの指定

- ① 作図画面でノードを右クリックするか、ハイライトツールでノードをハイライトした後に画面右の「Attribute Values」から変更したい属性を選択する。

指定したいノードにポインタを合わせて  
右クリックする  
(作図の Ak : 炭素数 1-5 を指定)

- ② 「Markush Attributes」の画面でマッチレベルと元素数レベルを選択し、OK をクリックする。

マッチレベルを指定する

マッチレベルを「Class」または「Any」にした場合は元素数レベルの指定も行う  
同じ環系上のノードについては、同じ元素数レベルを指定する  
(異なる元素数レベルを指定することはできない)

## ■ R グループ内のノードに対するマッチレベルの指定

- ・ R グループの内容をフラグメントとして作図し、フラグメントに対してマッチレベルを指定する。  
(R グループのノードに直接マッチレベルを指定することはできない)

### - 作図手順

- ① 構造質問式を作図する。R グループに含めたい置換基は構造フラグメントとして同一作図画面中に作図する。

Structure Editor

Draw or change atoms or bonds.

Enter a CAS Registry Number, SMILES, or InChI...

Bond Type: Chain | Ring | Ring / Chain

Bond Value: Exact | Normalized | Exact / Normalized

Match Level: Atom | Class | Any

Element Count Level: Limited | Unlimited

Ring Isolation: Isolated | Isolated / Embedded

Stereochemistry: Relative(default) | Absolute(default) | Relative | Absolute | Racemic

Other Node Attributes: Mass, Valency, Hydrogen Count, Non-Hydrogen Count, Element Count

Molecular Formula: Formula is not available

X

Zoom: 173%

Upload Save As Cancel View Previous Structures...

R グループの内容となる構造フラグメントに対して、マッチレベルなどの各種属性を指定する

重要

- ② 作図メニューから **Fn** を選択し、作図したフラグメントに F 番号を付与する。

Structure Editor

Select attachment point(s) of desired fragments to include in R-groups.

Enter a CAS Registry Number, SMILES, or InChI...

Bond Type: Chain | Ring | Ring / Chain

Match Level: Atom | Class | Any

Element Count Level: Limited | Unlimited

Ring Isolation: Isolated | Isolated / Embedded

Stereochemistry: Relative(default) | Absolute(default) | Relative | Absolute | Racemic

Other Node Attributes: Mass, Valency, Hydrogen Count, Non-Hydrogen Count, Element Count

Molecular Formula: Formula is not available

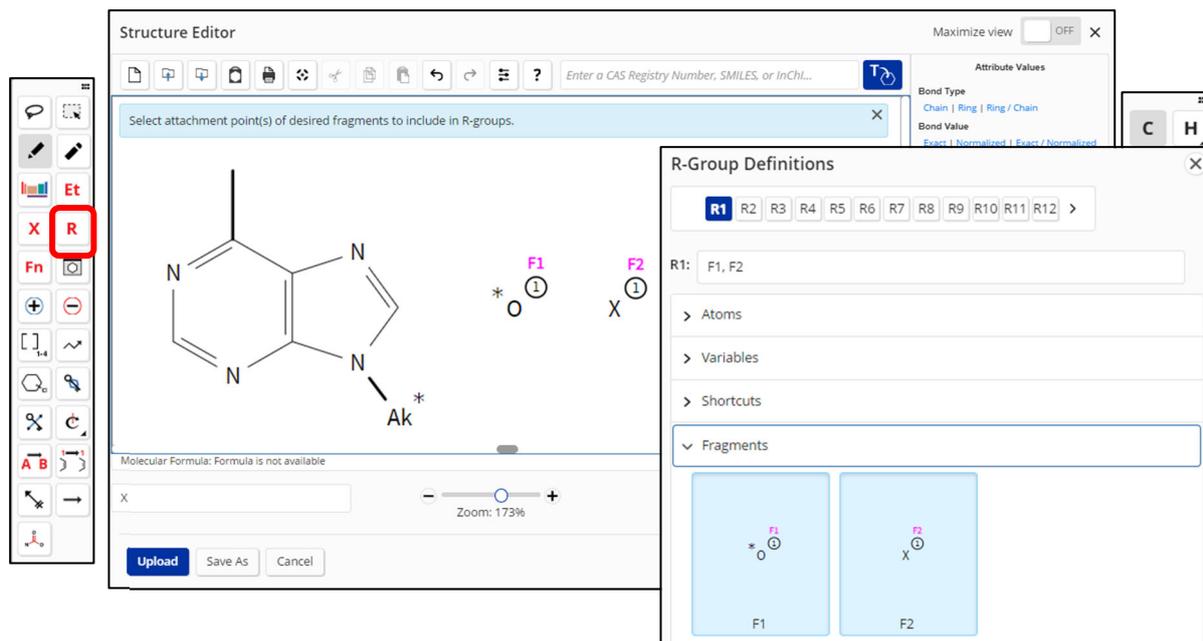
X

Zoom: 173%

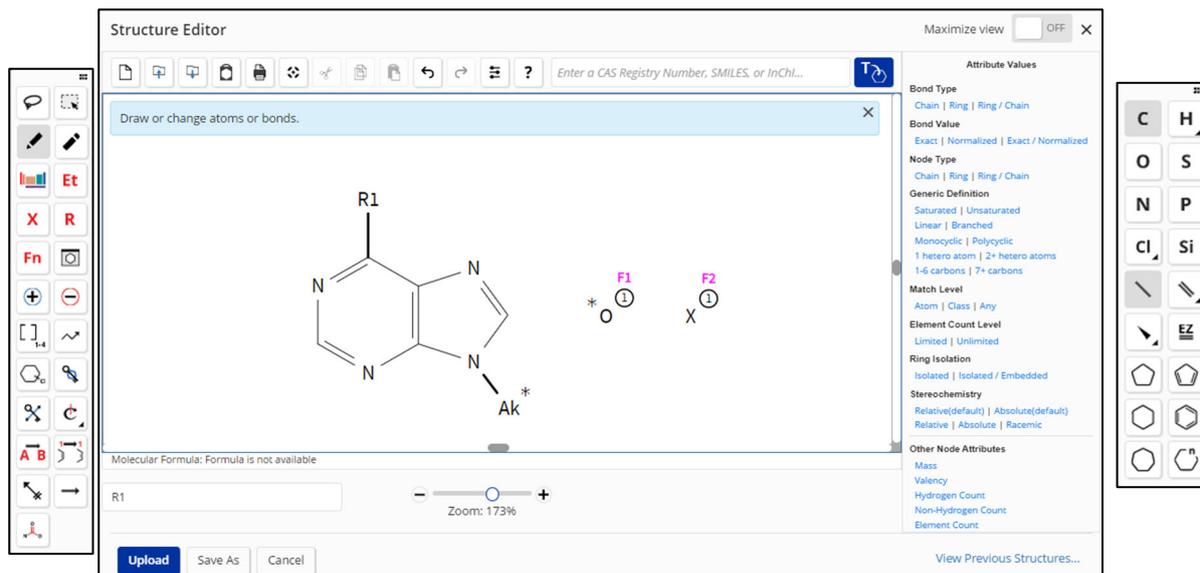
Upload Save As Cancel View Previous Structures...

鉛筆ツールで、R グループに含める構造フラグメントの結合点をクリックする (F 番号が付与される)

- ③ 作図メニューで R グループをクリックする。R グループに含めるフラグメントを Fragments 欄で選択する。



- ④ R グループを作図する。



\* このように R グループの内容を構造フラグメントとして作図しない場合は、デフォルトのマッチレベルの設定になる。

## 構造検索

- MARPAT ファイルにおける構造検索は、REGISTRY ファイルとほぼ同様である。使用する構造質問式も、REGISTRY ファイル同様に元素記号、一般式記号、R グループ、属性が利用できる。

- ・ 検索タイプ
  - 部分構造検索 (SSS: Substructure Search)
  - 閉構造部分構造検索 (CSS: Closed Substructure Search)
- ・ 検索範囲
  - サンプル検索 (SAMPLE)
  - フルファイル検索 (FULL)
  - 範囲指定検索 (RANGE)
  - サブセット検索 (SUBSET)

### 【MARPAT ファイルでできない構造作図・検索】

注意

- \*1 「結合の属性」で「結合の種類」の「環/鎖」を指定した作図はできない。
- \*2 一般式グループノード Ak の炭素 (C) の元素数にゼロを指定することはできない。
- \*3 完全一致検索 (EXA) とファミリー検索 (FAM) はできない。  
(CASLINK (後述) の中で指定すると、自動的に CSS 検索が実行される。)
- \*4 複数の構造の L 番号をブール演算子 AND, OR, NOT を利用して検索することはできない。
- \*5 スクリーン番号の L 番号を使った検索はできない。  
(スクリーンの L 番号を構造の L 番号と演算した場合は、スクリーンは無視して構造のみ検索される)。

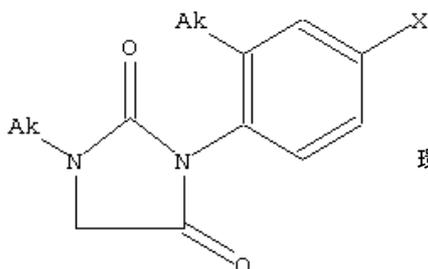
\* 上記 \*1 の場合は、結合属性が異なる部分を R グループとして作図し、結合属性「環」のフラグメントと、結合属性「鎖」のフラグメントをその R グループに含めることで代用する。\*2 の場合も R グループを利用すればよい。

- 構造検索のシステム制限値と回答に対する制限値

検索範囲		ITERATION 数	検索時間	回答数
オンライン検索	サンプル検索	2,000	5 分	50
	フルファイル検索	100,000,000	30 分	100,000,000
	RANGE 検索	100,000,000	30 分	100,000,000
バッチ検索	フルファイル検索	100,000,000	360 分	100,000,000
	RANGE 検索	100,000,000	360 分	100,000,000

■ 検索例

構造質問式



環はいずれも縮合してもよい

■ 作図例

Ak や X など一般式グループやグループノードで作図した部分のマッチレベルは「クラス」にする

一般式グループで存在してもよい環のマッチレベルは「クラス」にする  
元素の種類や数が適合する回答にしたい場合は元素数レベルを「限定」

明確に存在してほしい重要な環のマッチレベルは「原子」にする

マッチレベルや元素数レベルは、デフォルトの設定を変更したいところだけ、指定すればよい  
この作図例では、ベンゼン環上の炭素のマッチレベルを「クラス」に変更している

■ 検索

=> FILE MARPAT

← MARPAT ファイルに入る

=>

Uploading structure file: 2020\_0017\_Structure ← 構造質問式をアップロードする

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1 ← サンプル検索を実行する  
 SAMPLE SEARCH INITIATED 18:08:00 FILE 'MARPAT'  
 SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 946 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 946 ITERATIONS 8 ANSWERS  
 SEARCH TIME: 00.00.01

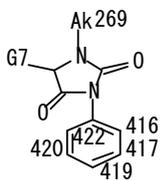
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\* ← ONLINE COMPLETE を確認する  
 BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
 PROJECTED ITERATIONS: 17102 TO 20738  
 PROJECTED ANSWERS: 8 TO 330

L2 8 SEA SSS SAM L1

=> D SCAN TI FQHIT ← サンプル検索の結果を確認する (ここでは SCAN TI FQHIT を指定)

L2 8 ANSWERS MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN  
 TI Peptoid matrix metalloproteinase inhibitors and method of using same ← 標題

**MSTR 1 Assembled**



SCAN 表示形式 (ランダム表示) に含まれる全フィールドを表示すると表示が長くなるので、このように標題 TI と FQHIT のみに限定してコンパクトに表示すると効率よく回答を確認できる

FQHIT 表示形式では、そのレコード中で最初にヒットしたマルクシェ構造と、置換基の G グループのみが表示される

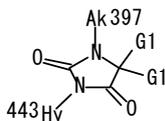
ただし、ヒット部分が水素の場合は、FQHIT 表示形式では表示されないため、そのような部位も表示したい場合は、FHIT, HIT 表示形式等で表示する

269: alkyl <containing 1-12 C>  
 416, 417, 419, 420, 422: opt. substd. by (1-2) G4  
 G4 = alkyl <containing 1-6 C> / F  
 Patent location: claim 1  
 Note: and pharmaceutically suitable salts

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 7

L2 8 ANSWERS MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN  
 TI Monocyclic N-aryl hydantoins as modulators of androgen receptor function, their preparation and pharmaceutical compositions

**MSTR 1 Assembled**



Assembled 表示:  
 ヒット部分を組み立てた構造を表示 (P.43 参照)

397: alkyl (opt. substd.)  
 443: heterocycle <containing 5-7 atoms, 1-4 heteroatoms, zero or more N, zero or more O, zero or more S (no other heteroatoms), 0 or more double bonds, mono- or polycyclic, including 5-, 6- or 7-membered rings> (opt. substd. by 1 or more G16)  
 G16 = F / alkyl (opt. substd.)  
 Patent location: claim 1  
 Note: substitution is restricted

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> S L1 FUL ← フルファイル検索を実行する  
 FULL SEARCH INITIATED 18:09:21 FILE 'MARPAT'  
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 19185 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 19185 ITERATIONS 184 ANSWERS  
 SEARCH TIME: 00.00.02

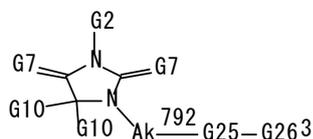
L3 184 SEA SSS FUL L1

=> D BIB FQHIT ← 書誌情報 BIB と最初にヒットしたマルクシェ構造 FQHIT を表示する

L3 ANSWER 1 OF 184 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN  
 AN 165:236078 MARPAT [Full-text](#)  
 TI Preparation of thioxoimidazolidinone compounds and methods for the  
 targeted degradation of the androgen receptor  
 IN Jin, Meizhong; Crew, Andrew P.; Dong, Hanqing; Wang, Jing; Siu, Kam;  
 Ferraro, Caterina; Chen, Xin; Qian, Yimin  
 PA Arvinas, Inc., USA  
 SO PCT Int. Appl., 351pp.  
 CODEN: PIXXD2  
 DT Patent  
 LA English  
 FAN.CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2016118666	A1	20160728	WO 2016-US14187	20160120
	W: AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE,				
	:				
PRAI	US 2015-62105210		20150120		
OS	CASREACT 165:236078				

#### MSTR 1 Assembled



792: alkylene <containing 1 or more C>  
 (opt. substd. by 1 or more G12)  
 G2 = heteroaryl <containing 1 or more heteroatoms,  
 zero or more N, zero or more O, zero or more S>  
 (opt. substd. by 1 or more G3)  
 G3 = F / alkyl <containing 1-6 C>  
 (opt. substd. by 1 or more G4)  
 G7 = 0  
 Patent location: claim 1  
 Note: substitution is restricted  
 Note: additional derivatization also claimed  
 Note: also incorporates later claims

RE.CNT 4 THERE ARE 4 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

参考 : フルファイル検索の結果に INCOMPLETE の回答が含まれている場合

■ 構造検索を実行した時に、一定の時間内に構造質問式との照合が完了しなかったレコードは、INCOMPLETE の回答として構造検索の回答セットに含まれる。

- ・ INCOMPLETE の回答はノイズの可能性が高いが、必ずしもノイズとは限らない。念のために内容を確認するとよい。
- ・ L#/COM または L#/INC と入力すると、COMPLETE の回答と INCOMPLETE の回答を分けることができる。

=> S L3/COM            ← COMPLETE の回答に限定

=> S L3/INC            ← INCOMPLETE の回答に限定

\* L3 はフルファイル検索の回答

- 入力例

=> S L1 FULL

FULL SEARCH INITIATED 11:29:13 FILE 'MARPAT'  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 11709 TO ITERATE

INCOMPLETE の回答  
が 2 件あった

100.0% PROCESSED    11709 ITERATIONS ( 2 INCOMPLETE)    28 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.14

L3                    28 SEA SSS FUL L1

=> S L3/COM

L4                    26 L3/COM

フルファイル検索の回答の L 番号に /COM を付けると  
COMPLETE の回答に限定することができる

## 回答表示

### ■ 回答表示形式

	定型形式		内容
マルクेश構造	MAX IMAX DMAX	SCAN	TI, IPC, NCL, CC, ST, IT, FQHIT (ランダム表示)
		SAM	SCAN と同じ (回答番号指定可)
		FHIT HIT	最初にヒットしたマルクेश構造 ヒットしたマルクेश構造すべて
		FQHIT QHIT	FHIT のヒット部分のみ HIT のヒット部分のみ
		FQHITEXG QHITEXG	FQHIT とすべての G グループ定義 QHIT とすべての G グループ定義
		MSTR	マルクेश構造すべて
		MSTR(n)	n 番目のマルクेश構造
		IDE	AN, MSTR
文献	ALL IALL DALL	CAN	AN (レコード番号)
		BIB	書誌情報 (対応特許情報, 引用文献数) (デフォルト)
		CBIB	BIB (圧縮型. ただし対応特許情報, 引用文献数は含まない)
		IBIB	BIB (インデント形式)
		OBIB	BIB (ベーシック特許情報のみ)
		FBIB	BIB, FAM
		STD	BIB, 特許分類
		ISTD	STD (インデント形式)
		FAM	AN, 対応特許情報, 関連特許ファミリー情報
		ABS	抄録, 抄録中の構造図
		IABS	ABS (インデント形式)
		IND	索引情報

■ SCAN 表示形式

=> D L2 SCAN

SCAN 表示形式は, TI, IPC, NCL, CC, ST, IT, FQHIT の各フィールドが表示される表示形式で, 回答はランダムに表示される

特許分類 L2 8 ANSWERS MARPAT  
 IPCI C07D0239-14 [ICM, 7]  
 A01N0043-653 [ICS, 7]; C07D0231-20 [ICS, 7]; C07D0513-00 [ICS, 7];  
 C07D0231-16 [ICS, 7]; A01N0043-56 [ICS, 7]  
 IPCR A01N0043-54 [I, A]; C07D0213-20 [I, A]; C07D0231-12 [I, A]; C07D0231-16  
 [I, A]; C07D0231-56 [I, A]; C07D0239-54 [I, A]; C07D0249-12 [I, A];  
 C07D0471-04 [I, A]; C07D0513-04 [I, A]  
 CA セクション CC 28-16 (Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom))  
 Section cross-reference(s): 5  
 標題 TI Herbicidal heterocyclic substituted sulfonic acid anilides  
 ST heterocyclylsulfonanilide prepn herbicide; sulfonanilide heterocyclyl  
 prepn herbicide  
 IT Herbicides  
 (preparation of herbicidal N-(heterocyclylaryl)sulfonamides)  
 IT 1139491-02-3 1139491-03-4 1139491-04-5 1139491-05-6 1139491-06-7  
 1139491-07-8 1139491-08-9 1139491-09-0 1139491-10-3 1139491-11-4  
 1139491-12-5 1139491-13-6  
 RL: PRPH (Prophetic)  
 (Herbicidal heterocyclic substituted sulfonic acid anilides)  
 IT 391277-09-1P 391277-10-4P 391277-11-5P 391277-12-6P  
 RL: AGR (Agricultural use); BSU (Biological study, unclassified); SPN  
 (Synthetic preparation); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES  
 (Uses)

索引

IT 391277-13-7P 391277-18-2P 391277-19-1P  
 RL: AGR (Agricultural use); BSU (Biological study, unclassified); SPN (Synthetic preparation); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)  
 IT 110-06-5, tert.-Butyl chloride 148397-01-1  
 RL: RCT (Reactant)  
 (preparation of)

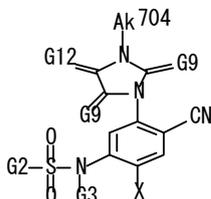
=> D L2 SCAN TI FQHIT

L2 8 ANSWERS MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN  
 TI Herbicidal heterocyclic substituted sulfonic acid anilides

SCAN に続けて個別のフィールドコードを入力すると, SCAN 表示形式で出力する項目を限定してコンパクトに表示できる

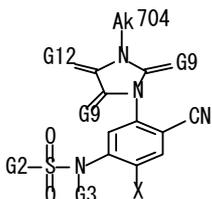
おすすめ表示

MSTR 1 Assembled



704: alkyl (opt. substd.)  
 G9 = 0  
 Patent location: claim 1  
 Note: additional ring formation also claimed  
 Note: substitution is restricted  
 Note: also incorporates claim 11, structure 2

MSTR 1 Assembled



FQHIT

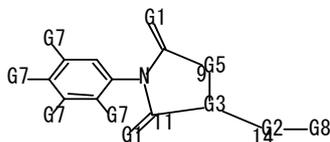
704: alkyl (opt. substd.)  
 G9 = 0  
 Patent location: claim 1  
 Note: additional ring formation also claimed  
 Note: substitution is restricted  
 Note: also incorporates claim 11, structure 2

## ■ FHIT 表示形式と FQHIT 表示形式

=&gt; D L3 29 FHIT

L3 ANSWER 29 OF 184 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN

## MSTR 1



FHIT 表示形式では、そのレコード中で最初にヒットしたマルクシェ構造と、その全 G グループが表示される

G1 = 0 / S  
 G2 = NH / bond  
 G3 = 16-11 17-14 16-9 / 18-11 19-14 18-9



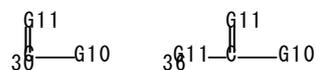
G4 = S / 0 / C(S) / C(0)  
 G5 = 20 / 22 / 0 / S



G6 = H / F / Cl / Br / I / carbon chain <containing 1-6 C, 0 or more double bonds, 0 or more triple bonds> (opt. substd.) / carbocycle <containing 3-6 C, 0 or more double bonds, 0 or more triple bonds> (opt. substd.) / (Specifically claimed: Me)  
 G7 = H / carbon chain <containing 1-6 C, 0 or more double bonds, 0 or more triple bonds> (opt. substd.) / carbocycle <containing 3-6 C, 0 or more double bonds, 0 or more triple bonds> (opt. substd.) / 44 / F / Cl / Br / I / CF3 / 28 / OCF3 / (Specifically claimed: Me)



G8 = Ph (opt. substd. pyridyl (opt. substd.))  
 G9 = (up to 4) G12 /  
 G10 = OH / SH  
 G11 = 0 / S  
 G12 = OH / SH / F / Cl / 30 / 36 / 41



G13 = OH / tetrazolyl /  
 G14 = CO2H

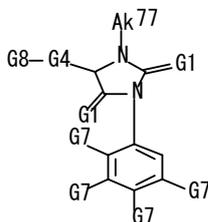
G14 = carbon chain <containing 1-6 C, 0 or more double bonds, 0 or more triple bonds> (opt. substd.) / carbon chain <containing 1-6 C, 0 or more double bonds, 0 or more triple bonds> (opt. substd.)

Patent location:  
 Note:  
 Stereochemistry:

=&gt; D L3 29 FQHIT

L3 ANSWER 29 OF 184 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN

## MSTR 1 Assembled



おすすめ表示

FQHIT 表示形式では、そのレコード中で最初にヒットしたマルクシェ構造と、構造質問式に一致する選択肢（網がけ部分）のみが表示される

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

G1 = 0

G7 = carbon chain <containing 1-6 C, 0 or more double bonds, 0 or more triple bonds> (opt. substd.) / F

Patent location: claim 1

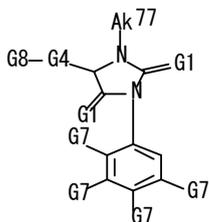
:

■ FQHITEXG 表示形式と FQHIT 表示形式

=> D L3 29 FQHITEXG

L3 ANSWER 29 OF 184 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN

**MSTR 1 Assembled**



FQHITEXG 表示形式では、FQHIT の表示内容に加え、基本骨格中に含まれるヒットに関与していない G グループ (Additional displayed G-groups) の内容も表示されるため、物質全体の構造を把握することができる

おすすめ表示

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

G1 = 0

G7 = carbon chain <containing 1-6 C, 0 or more double bonds, 0 or more triple bonds> (opt. substd.) / F

Additional displayed G-groups:

G4 = S / O / C(S) / C(O)

G8 = Ph (opt. substd. by 1 or more G9) / pyridyl (opt. substd. by 1 or more G9)

ヒットに関与していない G グループ定義

Patent location:

claim 1

Note:

or pharmaceutically acceptable salts or prodrugs

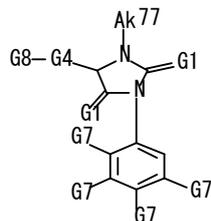
Stereochemistry:

or stereoisomers

=> D L3 29 FQHIT

L3 ANSWER 29 OF 184 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN

**MSTR 1 Assembled**



FQHIT 表示形式では、ヒットしたマルクシェ構造と、ヒットに関与する G グループのみが表示される

そのためヒットに関与していない置換基である G4, G8 の構造はこの表示ではわからない

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

G1 = 0

G7 = carbon chain <containing 1-6 C, 0 or more double bonds, 0 or more triple bonds> (opt. substd.) / F

Patent location:

claim 1

Note:

or pharmaceutically acceptable salts or prodrugs

Stereochemistry:

or stereoisomers

■ F 付きの表示形式とは

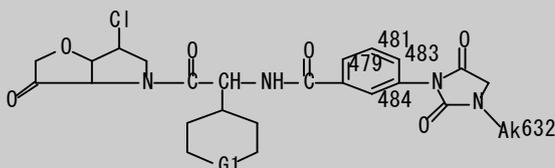
- ・ F 付きの表示形式を用いると、回答レコード中で複数のマルクシェ構造がヒットしている場合に、最初のマルクシェ構造のみ (MSTR 1 と MSTR 2 がヒットした場合は MSTR 1 のみ) が表示される。

=> D L3 31 QHIT

F なしの表示形式では、レコード中でヒットしたすべてのマルクシェ構造が表示される

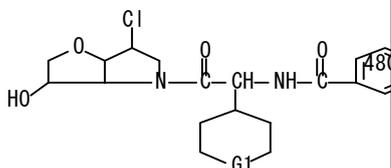
L3 ANSWER 31 OF 184 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN

**MSTR 1 Assembled**



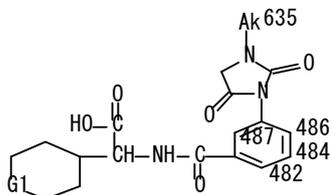
479, 481, 483, 484: opt. substd. by (1-4) G7  
 632: alkyl <containing 1-6 C>  
 G7 = alkyl <containing 1-6 C> / F  
 Patent location: claim 1  
 Note: or pharmaceutically acceptable salts, hydrates, complexes or pro-drugs  
 Note: substitution is restricted

**MSTR 2 Assembled**



480, 482, 484, 485: opt. sub  
 633: alkyl <containing 1-6 C>  
 G7 = alkyl <containing 1-6 C> / F  
 Patent location:  
 Note:

**MSTR 3 Assembled**



482, 484, 486, 487: opt. substd. by (1-4) G7  
 635: alkyl <containing 1-6 C>  
 G7 = alkyl <containing 1-6 C> / F  
 Patent location: claim 33  
 Note: substitution is restricted

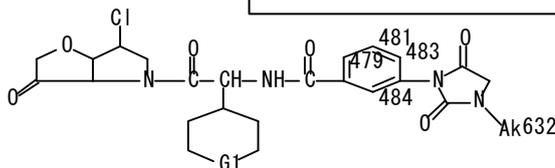
おすすめ表示

=> D L3 31 FQHIT

L3 ANSWER 18 OF 184 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN

**MSTR 1 Assembled**

F 付きの表示形式では、そのレコード中で最初にヒットしたマルクシェ構造のみ (この場合 MSTR 1 のみ) が表示される



479, 481, 483, 484: opt. substd. by (1-4) G7  
 632: alkyl <containing 1-6 C>  
 G7 = alkyl <containing 1-6 C> / F  
 Patent location: claim 1  
 Note: or pharmaceutically acceptable salts, hydrates, complexes or pro-drugs  
 Note: substitution is restricted

参考 : SET MPT (SET MPTASSEMBLY)

■ QHIT/FQHIT, QHITEXG/FQHITEXG 表示形式利用時の G グループの表示を切り替える設定.

=> SET MPT ON : ヒット部分を組み立てた構造 (Assembled) を表示 (デフォルト)

=> SET MPT OFF : ヒット部分を組み立てずに表示

=> SET MPT BOTH : ヒット部分を組み立てた構造と, ヒット部分を組み立てない構造の両方を表示

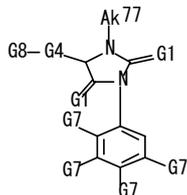
・ SET MPT BOTH 利用例

=> SET MPT BOTH  
SET COMMAND COMPLETED

=> D L3 29 FQHIT

L3 ANSWER 29 OF 184 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN

**MSTR 1 Assembled**



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

G1 = 0

G7 = carbon chain <containing 1-6 C,  
0 or more double bonds, 0 or more triple bonds>  
(opt. substd.) / F

Patent location: claim 1

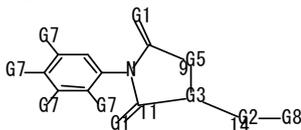
Note: or pharmaceutically acceptable salts or prodrugs

Stereochemistry: or stereoisomers

ヒット部分を組み立てて表示している構造は「Assembled」と表示される

SET MPT ON 設定時 (デフォルト) は, この部分のみ表示される

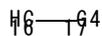
**MSTR 1**



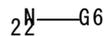
G1 = 0

G2 = bond

G3 = 16-11 17-14 16-9



G5 = 22



G6 = carbon chain <containing 1-6 C,  
0 or more double bonds, 0 or more triple bonds>  
(opt. substd.)

G7 = carbon chain <containing 1-6 C,  
0 or more double bonds, 0 or more triple bonds>  
(opt. substd.) / F

Patent location: claim 1

Note: or pharmaceutically acceptable salts or prodrugs

Stereochemistry: or stereoisomers

Assembled でない場合は, ヒット部分を組み立てず, 置換基はすべて G グループとして表示される

SET MPT OFF を設定すると, この部分のみ表示される



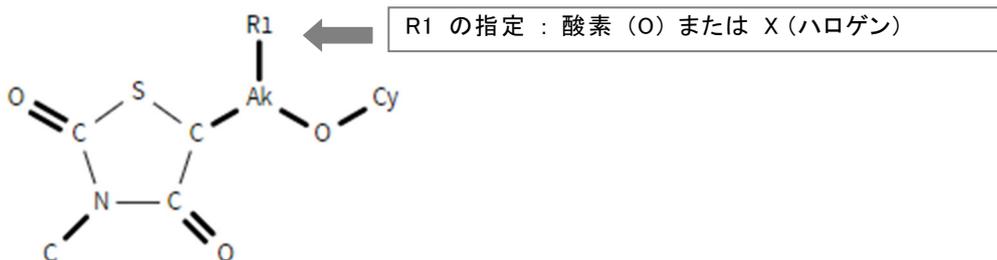
## まとめ

- MARPAT ファイルのマルクーシュ構造に収録されている置換基は、特定原子、一般式グループ、R グループの 3 種類に分類される。
- マッチレベルには原子 (ATOM), クラス (CLASS), 不定 (ANY) の 3 種類がある。これらの指定によって、特定原子、一般式グループ、R グループのどこまでを回答に含めるか調節することができる。
- 元素数レベルを限定に指定すると、一般式グループがヒットする場合に、指定した条件を満たす元素の種類と数が記載された回答に限定できる。
- F 付きの表示形式はヒットした最初のマルクーシュ構造のみを、Q 付きの表示形式は構造質問式に一致した選択肢のみを表示する。



## 練習問題

1. 以下の構造を MARPAT ファイルで検索する。



- \* 特に指定していないノードのマッチレベルは、鎖ノード「クラス」、環ノード「原子」



## *C CAS FILES* を利用した特許調査

MARPAT ファイルと REGISTRY/CAplus ファイルを利用した効率的な特許調査の手法についてご紹介します。

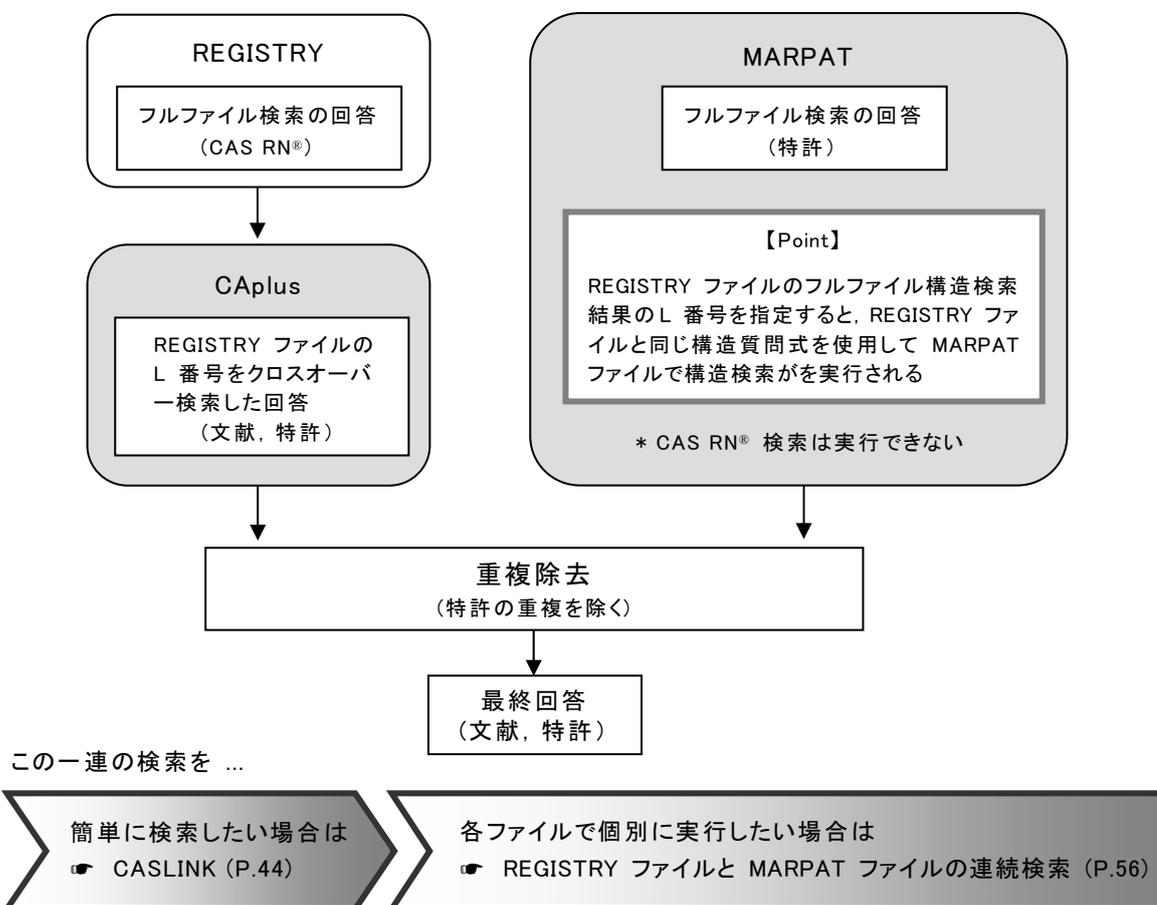


## CAS FILES を利用した化学物質関連の特許調査

- 化学物質に関する特許を広く調査する場合は、REGISTRY ファイルから CAplus ファイルへのクロスオーバー検索に加え、MARPAT ファイルの検索を実行すると、REGISTRY/CAplus ファイルの検索で得られなかった回答を補完することができる。

### ■ 検索の主な流れ

1. REGISTRY ファイルで構造検索（フルファイル検索）を実行する。
2. CAplus ファイルに入り、REGISTRY ファイルのフルファイル検索結果として得られた L 番号を検索する（クロスオーバー検索）。
3. MARPAT ファイルで構造検索（フルファイル検索）を実行する。
  - REGISTRY ファイル、MARPAT ファイルでは、同じ構造質問式を用いることができる。（REGISTRY ファイルの検索結果には、マッチレベルや元素数レベルの指定は影響しない）
  - REGISTRY ファイルのフルファイル構造検索結果の L 番号を使用して MARPAT ファイルで構造検索を実行する。
4. 上記 2, 3 で得られた重複回答を除いて、表示する。



## CASLINK

### ■ CASLINK

- ・ CASLINK は STN のファイルクラスターのひとつで、特別な検索の流れが組み込まれている。
  - REGISTRY ファイルから CAplus ファイルへのクロスオーバー検索と、CAplus ファイルと MARPAT ファイルの重複除去を自動的に行う。
  - REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルで同じ構造質問式を使用して構造検索が実行される。
- ・ CASLINK で得られた回答に、さらに CAplus ファイルの検索フィールドを演算することもできる。
- ・ サブセット検索も実行できる。

### ■ CASLINK 使用上の注意点

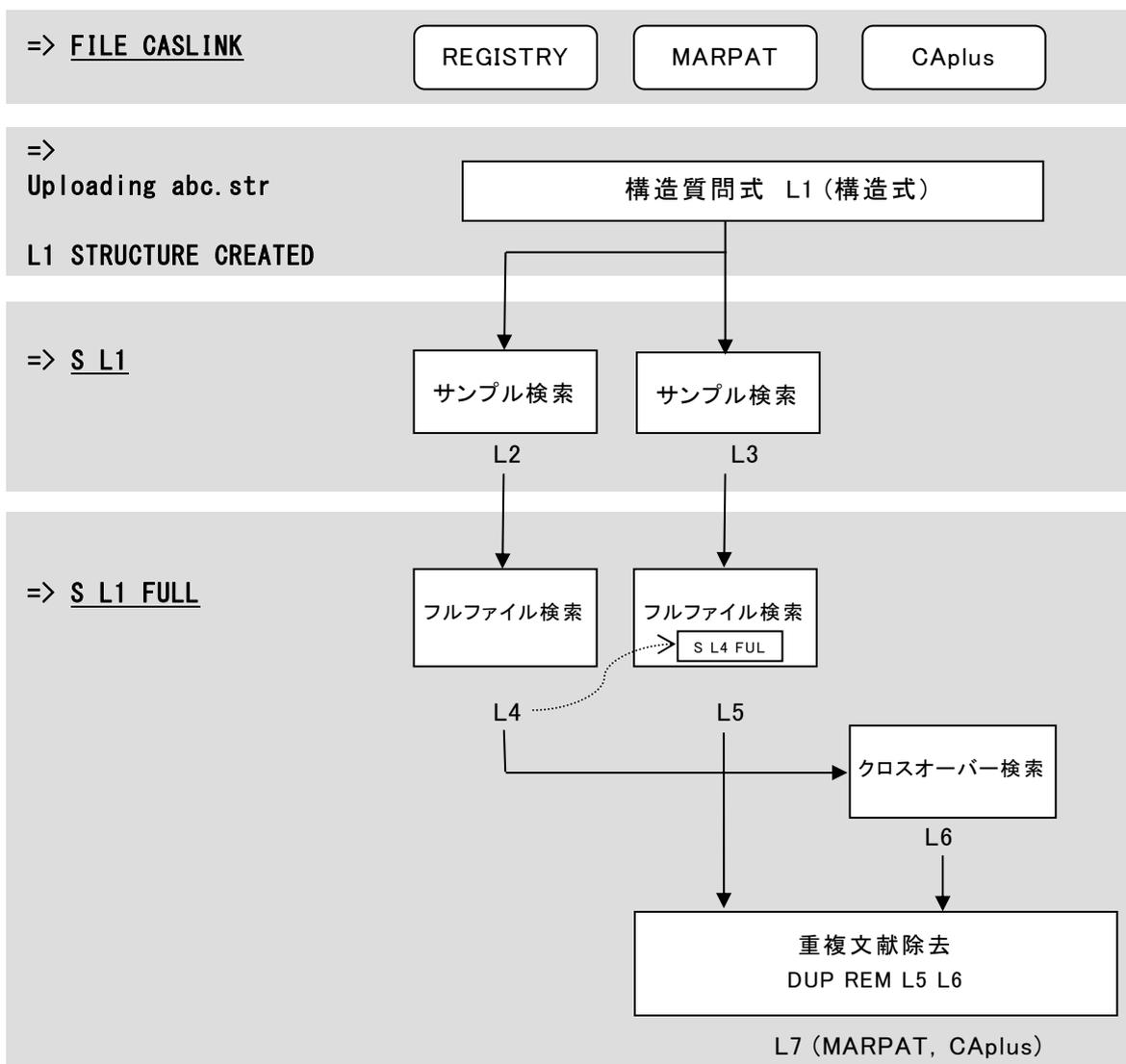
- ・ 構造作図
  - MARPAT ファイルでは「結合の属性」の「結合の種類」における「環/鎖」の指定をした構造質問式を使って検索することはできない。この指定をした構造質問式を用いて、CASLINK で検索を実行すると MARPAT ファイルでエラーになるため、作図する時点で「結合の属性」の「結合の種類」における「環/鎖」の指定をしないようにする。
- ・ 検索
  - MARPAT ファイルでは完全一致検索 (EXA) とファミリー検索 (FAM) は実行できないため、これらの検索タイプを指定した場合、MARPAT ファイルでは自動的に CSS 検索が実行される。
  - MARPAT ファイルではスクリーンを利用できない。スクリーンの L 番号を指定した場合、MARPAT ファイルでは自動的にスクリーンを無視して検索される。
  - MARPAT ファイルでは複数の構造質問式の L 番号をブール演算子 (AND, OR, NOT) で演算した検索は実行できない。
  - 重複文献除去は、MARPAT ファイルの回答が優先的に残る。
- ・ 保存・呼び出し
  - CASLINK の中で、重複除去した回答を保存することができるが、呼び出した回答に対して、さらに別の検索式を演算することはできないため、ACTIVATE 後の回答を演算したい場合は、CAplus と MARPAT ファイルの回答セットを各ファイルで個別に保存する。

■ CASLINK 検索の流れ

- ・ CASLINK を利用すると、一回の SEARCH コマンドで以下の検索が自動的に実行される。  
(フルファイル検索の場合)

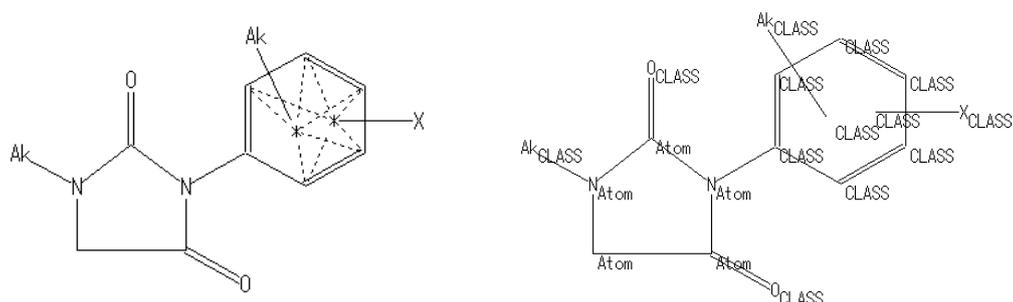
- ① REGISTRY ファイルでの構造検索
- ② MARPAT ファイルでの構造検索
- ③ REGISTRY ファイルの回答セットによる CAplus ファイルでのクロスオーバー検索
- ④ MARPAT, CAplus ファイル間の重複文献除去

\* サンプル検索の場合は ①② のみ実行され、クロスオーバー検索や重複除去は実行されない。



## ■ 検索例

- ・ 構造質問式



- ・ 環はいずれも縮合してもよい
- ・ マッチレベル・元素数レベルの指定
  - ベンゼン環 : マッチレベルをクラスに変更
  - 上記以外のノード : デフォルトの設定のまま

### 【CASLINK で検索を実行する前に ...】

CASLINK では一連の検索がすべて自動的に実行されるので、REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルの両方で共通に使用できる構造質問式をあらかじめ作図する

 マッチレベル, 元素数レベルの指定をする

## ■ 検索の流れ

```

=> FILE CASLINK                               ← CASLINK に入る
:
FILE 'CAPLUS' ENTERED AT 18:30:23 ON 21 FEB 2017
USE IS SUBJECT TO THE TERMS OF YOUR STN CUSTOMER AGREEMENT.
PLEASE SEE "HELP USAGETERMS" FOR DETAILS.
COPYRIGHT (C) 2017 AMERICAN CHEMICAL SOCIETY (ACS)

FILE 'MARPAT' ENTERED AT 18:30:23 ON 21 FEB 2017
USE IS SUBJECT TO THE TERMS OF YOUR STN CUSTOMER AGREEMENT.
PLEASE SEE "HELP USAGETERMS" FOR DETAILS.
COPYRIGHT (C) 2017 American Chemical Society (ACS)

FILE 'REGISTRY' ENTERED AT 18:30:23 ON 21 FEB 2017
USE IS SUBJECT TO THE TERMS OF YOUR STN CUSTOMER AGREEMENT.
PLEASE SEE "HELP USAGETERMS" FOR DETAILS.
COPYRIGHT (C) 2017 American Chemical Society (ACS)

=>
Uploading structure file: 1219structure

L1      STRUCTURE UPLOADED   ← 構造質問式をアップロードする
    
```

=> S L1 ← サンプル検索

S L1 SSS SAM FILE=REGISTRY  
 SAMPLE SEARCH INITIATED 18:31:05 FILE 'REGISTRY'  
 SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 7657 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 7657 ITERATIONS  
 SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
 BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
 PROJECTED ITERATIONS: 147892 TO 158388  
 PROJECTED ANSWERS: 300 TO 978

L2 32 SEA SSS SAM L1

S L2 SSS SAM FILE=MARPAT  
 SAMPLE SEARCH INITIATED 18:31:06 FILE 'MARPAT'  
 SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 997 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 997 ITERATIONS  
 SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
 BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
 PROJECTED ITERATIONS: 18076 TO 21804  
 PROJECTED ANSWERS: 32 TO 448

L3 12 SEA SSS SAM L1

32 ANSWERS

REGISTRY ファイルのサンプル検索

12 ANSWERS

MARPAT ファイルのサンプル検索

\* サンプル検索の場合はクロスオーバー検索は  
 実行されず REGISTRY ファイルと MARPAT  
 ファイルのサンプル検索のみが実行される

=> S L1 FUL ← フルファイル検索

S L1 SSS FUL FILE=REGISTRY  
 FULL SEARCH INITIATED 18:34:12 FILE 'REGISTRY'  
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 156591 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 156591 ITERATIONS  
 SEARCH TIME: 00.00.01

L4 627 SEA SSS FUL L1

S L4 SSS FUL FILE=MARPAT  
 FULL SEARCH INITIATED 18:34:13 FILE 'MARPAT'  
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 19983 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 19983 ITERATIONS  
 SEARCH TIME: 00.00.02

L5 258 SEA SSS FUL L1

S L4 FILE=CAPLUS  
 L6 46 FILE CAPLUS

SET DUPORDER FILE  
 SET COMMAND COMPLETED

DUP REM L5 L6  
 PROCESSING COMPLETED FOR L5  
 PROCESSING COMPLETED FOR L6  
 L7 278 DUP REM L5 L6 (26 DUPLICATES REMOVED)

REGISTRY ファイルのフルファイル検索

627 ANSWERS

MARPAT ファイルのフルファイル検索

258 ANSWERS

REGISTRY → CAPLUS のクロスオーバー

重複除去 (L5 の MARPAT ファイルが優先)

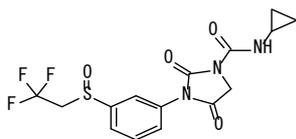
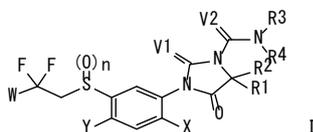
ANSWERS '1-258' FROM FILE MARPAT ← MARPAT ファイルの回答  
 ANSWERS '259-278' FROM FILE CAPLUS ← CAPLUS ファイルの回答

=> D L7 1 50 BIB ABS FQHIT ● ヒットしたマルクеше構造 (FQHIT) とともに、書誌情報 (BIB) や抄録 (ABS) も表示すると、収録源である特許とその概要を同時に把握できる

L7 ANSWER 1 OF 278 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN **DUPLICATE 1**  
 AN 165:101050 MARPAT [Full-text](#)  
 TI Preparation of five-membered C-N bonded aryl sulfide and aryl sulfoxide derivatives as pest control agents  
 IN Cerezo-Galvez, Silvia; Alig, Bernd; Fischer, Reiner; Hahn, Harschneck, Tobias; Wilcke, David; Ilg, Kerstin; Malsam, Olga; Loeser, Peter; Koehler, Adeline; Portz, Daniela; Goergens, Ulrich; Eilmus, Sascha  
 PA Bayer CropScience Aktiengesellschaft, Germany  
 SO PCT Int. Appl., 131pp.  
 CODEN: PIXXD2  
 DT Patent  
 LA German  
 FAN. CNT 1

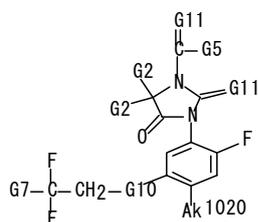
この回答は REGISTRY/CAplus の検索でも得られた重複回答

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2016091857	A1	20160616	WO 2015-EP78934	20151208
PRAI	EP 2014-197404		20141211		
OS	CASREACT 165:101050				
GI					



AB Disclosed are compds. of formula I, which are suitable for controlling animal pests. Compds. of formula I wherein W is H and halo; n is 0, 1 and 2; Y is H, halo, C1-6 alkyl, C1-6 haloalkyl, etc.; X is H, halo, CN, C1-6 alkyl, etc.; V1 and V2 are independently O and S; R1 and R2 are independently H, halo, OH, CN, etc.; R3 is alkyl, haloalkyl, alkoxyalkyl, alkenyl, etc.; R4 is H, alkyl, haloalkyl, alkoxyalkyl, etc.; are claimed.

### MSTR 1 Assembled



1020: alkyl <containing 1-6 C> (opt. substd. by G12)

G11 = 0

Patent location:

claim 1

Note:

additional oxo formation also disclosed

Note:

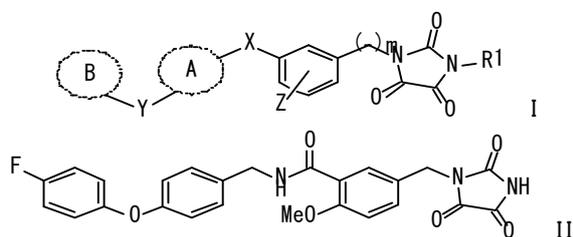
also incorporates claim 6, 7 and 8, structures II, III and VI

RE. CNT 4 THERE ARE 4 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

L7 ANSWER 50 OF 278 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN  
 AN 155:123409 MARPAT [Full-text](#)  
 TI Preparation of novel parabanic acid derivatives  
 lowering blood glucose and lipid  
 IN Sato, Taro; Komine, Takashi; Nomura, Masahiro;  
 Kobayashi, Naoki  
 PA Kyorin Pharmaceutical Co., Ltd., Japan  
 SO PCT Int. Appl., 285pp.  
 CODEN: PIXXD2  
 DT Patent  
 LA Japanese  
 FAN. CNT 2

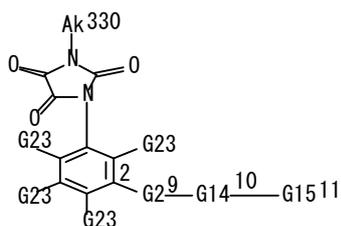
MARPAT ファイルのみで得られた回答  
 (このレコードは CAplus ファイルにも  
 収録されているが MARPAT ファイルの  
 検索でのみ得られた)

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2011078370	A1	20110630	WO 2010-JP73460	20101224
PRAI	JP 2009-296301		20091225		
OS	CASREACT 155:123409				
GI					



AB The title compds. I [wherein R1 = H, alkyl, etc.; X = alkylene, alkenylene, etc.; Y = a bond, none, etc.; Z = H, halo, alkyl, etc.; m = 0-2; and rings A and B = independently cycloalkyl, heterocycle, aryl, etc.], or pharmaceutically acceptable salts, or hydrates thereof were prepd. as AMPK activators for lowering blood glucose and lipid. For example, the compd. II was prepd. in a multi-step synthesis in good yield. Compd. II showed good AMPK.alpha. activating property, and inhibitory activity against De novo lipid synthesis (with data).

### MSTR 1 Assembled



330: alkyl <containing 1-6 C> (opt. substd.)  
 G23 = F / alkyl <containing 1-6 C> (opt. substd.)  
 Patent location: claim 1  
 Note: or pharmacologically acceptable salts or hydrates

RE. CNT 12 THERE ARE 12 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

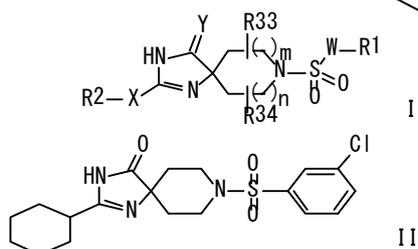
=> D L7 262 264 BIB ABS HITSTR

L7 ANSWER 262 OF 278 CAPLUS COPYRIGHT 2017 ACS on STN  
 AN 2010:1374753 CAPLUS [Full-text](#)  
 DN 153:580318  
 TI Preparation of spiroimidazolone derivatives for activating intracellular cAMP response  
 TIJP 細胞内の cAMP 反応を活性化するためのスピロイミダゾロン誘導体の調製  
 [機械翻訳]  
 IN Esaki, Tohru; Nishimura, Yoshikazu; Isshiki, Yoshiaki; Okamoto, Naoki; Furuta, Yoshiyuki; Mizutani, Akemi; Ohta, Masateru; Lai, Wayne Wen; Kotake, Tomoya  
 PA Chugai Seiyaku Kabushiki Kaisha, Japan  
 SO PCT Int. Appl., 1436pp.  
 CODEN: PIXXD2  
 DT Patent  
 LA Japanese  
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2010126030	A1	20101104	WO 2010-JP57432	20100427
	:				
PRAI	JP 2009-109256	A	20090428		
	WO 2010-JP57432	W	20100427		

ASSIGNMENT HISTORY FOR US PATENT AVAILABLE IN LSUS DISPLAY FORMAT

OS **MARPAT 153:580318**  
 GI



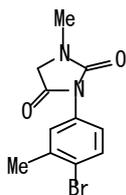
CAplus ファイルのみで得られた回答  
 (このレコードは MARPAT ファイルにも  
 収録されているが REGISTRY/CAplus  
 の検索でのみ得られた)

AB Title compds., e.g., I [W = single bond, alkylene contg. carbonyl group (optionally substituted with halo and/or hydroxy), alkenylene (optionally substituted with halo, etc.), etc.; X = single bond, alkylene (optionally substituted with halo or cycloalkyl), alkenylene (optionally substituted with halo), etc.; Y = oxygen, sulfur atom, :NR37, etc.; R37 = H, hydroxy

IT **1253927-66-0P** **1253927-70-6P** **1253928-24-3P**  
**1253930-25-4P**

RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)  
 (prepn. of spiroimidazolone derivs. for activating intracellular cAMP response)

RN 1253927-66-0 CAPLUS  
 CN 2,4-Imidazolidinedione, 3-(4-bromo-3-methylphenyl)-1-methyl- (CA INDEX NAME)



L7 ANSWER 264 OF 278 CAPLUS COPYRIGHT 2017 ACS on  
 AN 2008:223698 CAPLUS [Full-text](#)  
 DN 148:276718  
 TI Methods of increasing the sensitivity of cancer  
 TIJP がん細胞の感度をDNA損傷に増加させる方法 [機械翻訳]  
 IN Ashworth, Alan; Lord, Christopher James; Turner, Nicholas Charles  
 PA Kudos Pharmaceuticals Limited, UK; The Institute of Cancer Research  
 SO PCT Int. Appl., 96 pp.  
 CODEN: PIXXD2  
 DT Patent  
 LA English  
 FAN. CNT 1

CAplus ファイルのみで得られた回答  
 (このレコードは MARPAT ファイルには  
 収録されていない特許)

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2008020180	A2	20080221	WO 2007-GB3062	20070810

PRAI US 2006-60838703 P 20060817

AB The present invention relates to the finding that cells which have a kinase-deficient phenotype have increased sensitivity to DNA damage promoting agents, in particular poly(ADP-Ribose) polymerase (PARP) inhibitors. Methods of treating cancers with a kinase-deficient phenotype using DNA damage promoting agents and methods of treating cancers with a combination of DNA damage promoting agents and kinase inhibitors are provided, along with screening methods for identifying new therapeutics for use in combination with DNA damage promoting agents.

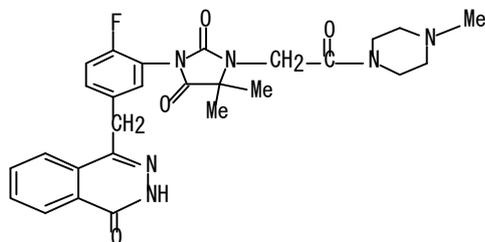
IT **934818-21-0** **934818-25-4**

RL: PAC (Pharmacological activity); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); USES (Uses)

(treatment of cancer cells with kinase-deficient phenotype to DNA damage agents such as PARP inhibitors and combination with kinase inhibitors)

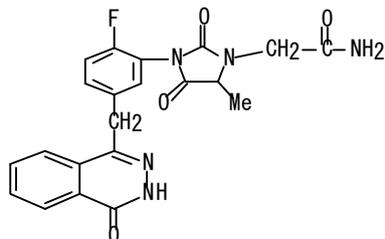
RN 934818-21-0 CAPLUS

CN 2,4-Imidazolidinedione, 3-[5-[(3,4-dihydro-4-oxo-1-phthalazinyl)methyl]-2-fluorophenyl]-5,5-dimethyl-1-[2-(4-methyl-1-piperazinyl)-2-oxoethyl]- (CA INDEX NAME)



RN 934818-25-4 CAPLUS

CN 1-Imidazolidineacetamide, 3-[5-[(3,4-dihydro-4-oxo-1-phthalazinyl)methyl]-2-fluorophenyl]-5-methyl-2,4-dioxo- (CA INDEX NAME)



OSC. G 2 THERE ARE 2 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (2 CITINGS)

## CASLINK の検索結果の絞り込み（辞書検索）

- CASLINK の検索結果に CPlus の検索フィールドを掛け合わせて、さらに絞り込み検索を実行することもできる。

```
=> S L7 AND JP/PC                                ← CASLINK の結果の L7 を特許ファミリー中に日本特許があるレコードに限定
S L6 AND JP/PC FILE=CAPLUS
L8          18 FILE CAPLUS
  1 FILES SEARCHED...
```

```
S L5 AND JP/PC FILE=CAPLUS                       ← MARPAT ファイルの回答は自動的に CPlus ファイルで検索
L9          162 FILE CAPLUS
  1 FILES SEARCHED...
```

```
S L9 AND L5 FILE=MARPAT                          ← 絞り込んだ回答を MARPAT ファイルへ戻す
L10         162 FILE MARPAT
  1 FILES SEARCHED...
```

```
DUP REM L10 L8
PROCESSING COMPLETED FOR L10
PROCESSING COMPLETED FOR L8
L11         168 DUP REM L10 L8 (12 DUPLICATES REMOVED)
           ANSWERS '1-162' FROM FILE MARPAT
           ANSWERS '163-168' FROM FILE CAPLUS
```

```
=> S L11 AND 2000>PY.B                          ← ベーシック特許の発行年が 2000 年より前のレコードに限定
S L8 AND 2000>PY.B FILE=CAPLUS
L12         5 FILE CAPLUS
  1 FILES SEARCHED...
```

```
S L10 AND 2000>PY.B FILE=CAPLUS
L13         73 FILE CAPLUS
  1 FILES SEARCHED...
```

```
S L13 AND L10 FILE=MARPAT
L14         73 FILE MARPAT
```

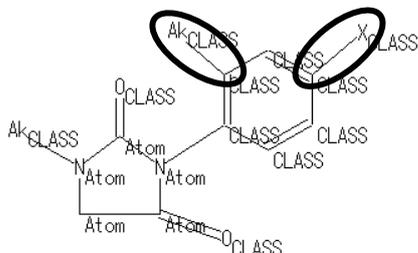
```
DUP REM L14 L12
PROCESSING COMPLETED FOR L14
PROCESSING COMPLETED FOR L12
L15         76 DUP REM L14 L12 (2 DUPLICATES REMOVED)
           ANSWERS '1-73' FROM FILE MARPAT
           ANSWERS '74-76' FROM FILE CAPLUS
```

## CASLINK の検索結果の絞り込み（サブセット検索）

■ CASLINK の検索結果は、サブセット検索に使用することができる。

- ・ 構造検索結果に対するサブセット検索は、構造検索で絞り込みを実行したい場合に有効な手法である。

### サブセット構造質問式



左図（L16）の条件でサブセット検索を実行する  
（P.48 の構造質問式を元に、ベンゼン環上の置換基 Ak, X の結合位置を特定したもの）

=>

Uploading structure file: 1220\_Structure

L16 STRUCTURE UPLOADED

=> S L16 SUB=L7 SAM ← CASLINK の回答セット L7 を対象に L16 でサブセット検索を実行する  
（サブセット検索では検索範囲 SAM を省略できない）

S L16 SUBSET=L4 SSS SAM FILE=REGISTRY

```

PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):          ONLINE  **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):  301 TO   979
PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):     2 TO   124
    
```

L17 2 SEA SUB=L4 SSS SAM L16

S L17 SUBSET=L5 SSS SAM FILE=MARPAT

サンプル検索の場合はクロスオーバー検索は実行されず、REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルのサンプル検索のみが実行される

```

PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):          ONLINE  **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):  32 TO   448
PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):     8 TO   330
    
```

L18 8 SEA SUB=L5 SSS SAM L16

=> S L16 SUB=L7 FUL ← サブセット検索のフルファイル検索を実行する

S L16 SUBSET=L4 SSS FUL FILE=REGISTRY

L19 11 SEA SUB=L4 SSS FUL L16

S L19 SUBSET=L5 SSS FUL FILE=MARPAT

各ファイルのフルファイル検索の結果を対象としてサブセット検索が実行される

L20 184 SEA SUB=L5 SSS FUL L16

S L19 FILE=CAPLUS

L21 8 FILE CAPLUS

DUP REM L20 L21

PROCESSING COMPLETED FOR L20

PROCESSING COMPLETED FOR L21

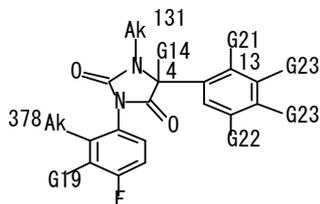
L22 187 DUP REM L20 L21 (5 DUPLICATES REMOVED)  
ANSWERS '1-184' FROM FILE MARPAT  
ANSWERS '185-187' FROM FILE CAPLUS

フルファイル検索を実行すると、CAplus ファイルでの重複除去まで自動的に実行される

=> D L22 1 2 FQHIT

L22 ANSWER 1 OF 187 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN DUPLICATE 1

**MSTR 1 Assembled**



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

378: alkyl <containing 1-6 C> (opt. substd. by OH)

Patent location: claim 1

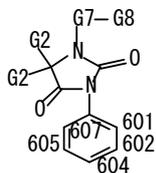
Note: and pharmaceutically acceptable salts and esters

Note: substitution is restricted

Note: additional substitution also claimed

L22 ANSWER 2 OF 187 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN DUPLICATE 2

**MSTR 1 Assembled**



601, 602, 604, 605, 607: opt. substd. by (1-5) G15

G7 = (1-5) CH2

G15 = F / alkyl <containing 1-4 C>  
(opt. substd. by 1 or more F)

Patent location: claim 1

Note: and physiologically acceptable salts

Note: additional oxo formation also claimed

## CASLINK の検索結果の保存

- CASLINK で得られた回答を保存したい場合は、REGISTRY, CAplus, MARPAT ファイルの各回答を、それぞれのファイルで保存するとよい。 **推奨**

- ・ 回答を呼び出す際は、保存したファイルで ACTIVATE コマンドを用いて呼び出す。呼び出した回答セットは検索、表示に利用できる。

```

=> FILE REGISTRY
      :
=> SAV TEMP L4 REGISTRY/A
ANSWER SET L4 HAS BEEN SAVED AS 'REGISTRY/A'
  
```

REGISTRY ファイルのフルファイル検索の回答 (L4) を保存する

```

=> FILE MARPAT
      :
=> SAV TEMP L5 MARPAT/A
ANSWER SET L5 HAS BEEN SAVED AS 'MARPAT/A'
  
```

MARPAT ファイルのフルファイル検索の回答 (L5) を保存する

```

=> FILE CAPLUS
      :
=> SAV TEMP L6 CAPLUS/A
ANSWER SET L6 HAS BEEN SAVED AS 'CAPLUS/A'
  
```

CAplus ファイル回答 (L6) を保存する

- ・ CASLINK の環境で重複文献除去後の回答を保存することもできるが、呼び出した回答集合は検索に利用できない (表示は可能)。

```

=> FILE CASLINK
=> ACT CASLINK/A          ← 重複文献除去後の回答を呼び出す
L1          STR
L2 (        627)SEA FILE=REGISTRY SSS FUL L1
L3 (        258)SEA FILE=MARPAT SSS FUL L1
L4          278 DUP REM L3 L4 (26 DUPLICATES REMOVED)

=> S L4 AND WO/PC

S L4 AND WO/PC FILE=CAPLUS
L5          6 FILE CAPLUS
  1 FILES SEARCHED...

S L3 AND WO/PC FILE=CAPLUS
COMBINATION OF STRUCTURE AND TEXT TERMS NOT VALID
COMMAND STACK INTERRUPTED.  ENTER "DISPLAY HISTORY"
TO SEE WHICH COMMANDS WERE EXECUTED.
:
  
```

エラーメッセージが表示されて検索できない

## REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルの連続検索

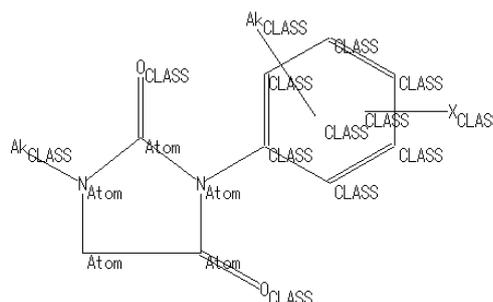
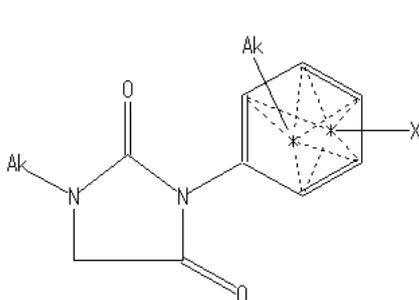
- 調査開始時点から REGISTRY/CAplus, MARPAT を用いることが検索方針として決定している場合は, CASLINK を利用すると便利である. しかし, 始めに REGISTRY/CAplus を調査し, その回答を確認した後に, さらに MARPAT ファイルを使った検索が必要になるケースもある.

そのような REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルの連続検索を行う場合は・・・

- ・ 同じ構造質問式を利用できる場合は, REGISTRY ファイルでのフルファイル構造検索結果を用いて MARPAT ファイルを検索する.
- ・ REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルでそれぞれ異なる構造質問式を用いることもできる.
- ・ CAplus/CA ファイルと MARPAT ファイルの L 番号を用いてクロスオーバー検索を実行することで, 容易に重複した回答を除いて表示することができる.

- 検索例 : 下記の構造を持つ物質について最先の優先権情報を確認する.

### 構造質問式



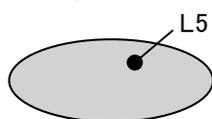
\* ベンゼン環のマッチレベルをクラスに変更

### 検索のポイント

- ・ MARPAT ファイルで, REGISTRY ファイルのフルファイル検索結果を用いた構造検索を実行する.
- ・ CAplus ファイルと MARPAT ファイルの回答には重複が含まれている可能性がある. 効率よく確認するためには, 重複を除いて表示する. 今回は以下の ①② の流れで検索する.

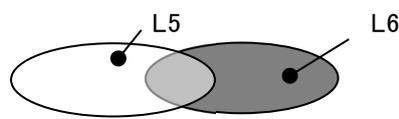
- ① REGISTRY/CAplus ファイルで検索して全回答を出力する
- ② MARPAT ファイルで検索を実行し, ① の結果を除いて表示する

<CAplus ファイル>



- ① CAplus ファイルの検索結果 (L5) を表示する.

<MARPAT ファイル>



- ② MARPAT ファイルの検索結果 L6 を表示する時に, CAplus ファイルの回答 L5 を MARPAT ファイルで除いて表示する (=) S L6 NOT L5).

## 1. サンプル検索

- REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルの連続検索を実行する場合は、必ず両ファイルでサンプル検索を実行する。

```

=> FILE MARPAT                ← MARPAT ファイルに入る

=>
Uploading structure file: 2020_0017_Structure

L1      STRUCTURE UPLOADED    ← 構造質問式をアップロードする

=> S L1                        ← サンプル検索を実行する
:
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
                        BATCH  **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:  18076 TO 21804
PROJECTED ANSWERS:     32 TO 448

L2      12 SEA SSS SAM L1

=> FILE REGISTRY              ← REGISTRY ファイルに入る

=> S L1                        ← サンプル検索
:
L3      32 SEA SSS SAM L1

```

## 2. REGISTRY ファイルの検索

- REGISTRY ファイルでフルファイル検索を実行する。

```

=> S L1 FUL                    ← フルファイル検索
:
L4      627 SEA SSS FUL L1

```

[参考] 構造検索のシステム制限値と回答数に対する制限値

ファイル名	検索範囲		ITERATION 数 または VERIFICATION 数	検索時間 (分)	回答数
REGISTRY	オンライン検索 サブセット検索	サンプル検索 フルファイル検索 RANGE 検索	1,000,000 100,000,000 100,000,000		50 100,000,000 100,000,000
	バッチ検索	フルファイル検索 RANGE 検索	100,000,000 100,000,000		100,000,000 100,000,000
MARPAT	オンライン検索 サブセット検索	サンプル検索 フルファイル検索 RANGE 検索	2,000 100,000,000 100,000,000	5 30 30	50 100,000,000 100,000,000
	バッチ検索	フルファイル検索 RANGE 検索	100,000,000 100,000,000	360 360	100,000,000 100,000,000

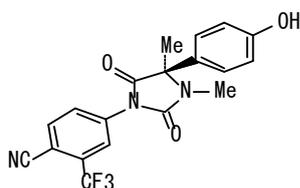
## 3. クロスオーバー検索

=> FILE CAPLUS ← *CAplus* ファイルに入る

=> S L4 ← *REGISTRY* ファイルのフルファイル構造検索で得られた  
L5 46 L4 L 番号をクロスオーバー検索する

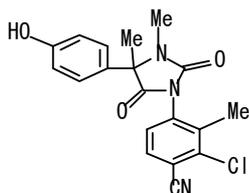
=> D 1-46 BIB ABS HITSTR ← 回答を全件表示する

:  
L5 ANSWER 7 OF 46 CAPLUS COPYRIGHT 2017 ACS on STN  
AN 2012:1206060 CAPLUS [Full-text](#)  
DN 157:548547  
TI Discovery of Diarylhydantoin as New Selective Androgen Receptor  
Modulators  
TIJP 新しい選択的なアンドロゲン受容体調節薬としてのDiarylhydantoinの発見.  
[機械翻訳]  
AU Nique, Francois; Hebbe, Severine; Peixoto, Christophe; Annot, Denis;  
Lefrancois, Jean-Michel; Duval, Eric; Michoux, Laurence; Triballeau,  
Nicolas; Lemoullac, Jean-Michel; Mollat, Patrick; Thauvin, Maxime; Prange,  
Thierry; Minet, Dominique; Clement-Lacroix, Philippe; Robin-Jagerschmidt,  
Catherine; Fleury, Damien; Guedin, Denis; Deprez, Pierre  
CS Parc Biocitech, GALAPAGOS, Romainville, 93230, Fr.  
SO Journal of Medicinal Chemistry (2012), 55(19), 8225-8235  
CODEN: JMCMAR; ISSN: 0022-2623  
PB American Chemical Society  
DT Journal; (online computer file) ● ———— REGISTRY -> CAplus での検索では  
非特許文献も得られる  
LA English  
OS CASREACT 157:548547  
GI



AB A novel selective androgen receptor modulator scaffold has been discovered through structural modifications of hydantoin antiandrogens. Several 4-(4-hydroxyphenyl)-N-arylhdyantoin displayed partial agonism with

:  
IT **959690-13-2P**  
RL: PAC (Pharmacological activity); SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)  
(prepn. and biol. evaluation of diarylhydantoin derivs. as selective androgen receptor modulators)  
RN 959690-13-2 CAPLUS  
CN Benzonitrile, 2-chloro-4-[4-(4-hydroxyphenyl)-3,4-dimethyl-2,5-dioxo-1-imidazolidinyl]-3-methyl- (CA INDEX NAME)



OSC.G 3 THERE ARE 3 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (3 CITINGS)  
RE.CNT 40 THERE ARE 40 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

L5 ANSWER 45 OF 46 CAPLUS COPYRIGHT 2017 ACS on STN  
 AN 1972:564701 CAPLUS [Full-text](#)  
 DN 77:164701  
 OREF 77:27051a, 27054a  
 TI Herbicidal 1-phenyl-3-methyl-2,4-imidazolidinediones  
 IN Moser, Hans; Vogel, Christian  
 PA Ciba-Geigy A.-G.  
 SO Ger. Offen., 47 pp.  
 CODEN: GWXXBX  
 DT Patent  
 LA German  
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	DE 2212558	A	19721005	DE 1972-2212558	19720315
	CH 544491	A	19740115	CH 1971-3856	19710316
	IL 38932	A	19760331	IL 1972-38932	19720308
	US 3818032	A	19740618	US 1972-233275	19720309
	NL 7203446	A	19720919	NL 1972-3446	19720315
	FR 2129674	A5	19721027	FR 1972-8955	19720315
	IT 953510	B	19730810	IT 1972-21895	19720315
	GB 1343368	A	19740109	GB 1972-12117	19720315
	JP 57013521	B	19820317	JP 1972-26937	19720316
PRAI	CH 1971-3856	A	19710316		

GI For diagram(s), see printed CA Issue.

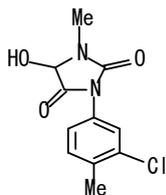
AB About 60 title compds. [I, R = H, Cl, Me, Br, MeSO<sub>2</sub>; R<sub>1</sub> = H, MeO, Me, Br, Cl, Me<sub>2</sub>NSO<sub>2</sub>, MeSO<sub>2</sub> Cl, P(O)(OMe)<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>CNHMe, O<sub>2</sub>CCH<sub>2</sub>Cl, SP(S)(OMe)<sub>2</sub>, OCH<sub>2</sub>-CN, NHCH<sub>2</sub>CN, NCS, CN,

REGISTRY/CAplus ファイルでの検索では、1971年に優先権が主張されている特許が得られた

IT **38655-50-4P** **38655-51-5P** **38655-61-7P**  
 RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation) (prepn. of)

RN 38655-50-4 CAPLUS

CN 2,4-Imidazolidinedione, 3-(3-chloro-4-methylphenyl)-5-hydroxy-1-methyl-  
 (CA INDEX NAME)



## 4. MARPAT ファイルの検索

=> FILE MARPAT

← MARPAT ファイルに入る

=> S L4 FUL ●

FULL SEARCH INITIATED 14:11:03 FILE 'MARPAT'  
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 19983 TO IT

REGISTRY ファイルのフルファイル検索の結果を利用して MARPAT ファイルで検索を実行する

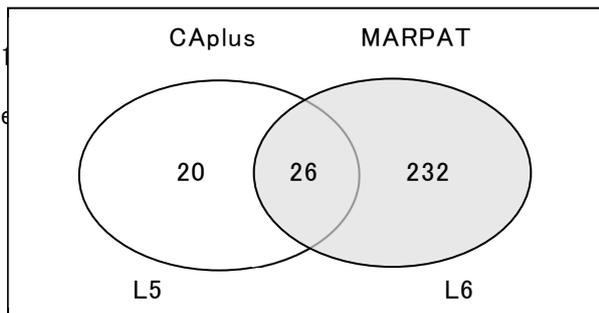
100.0% PROCESSED 19983 ITERATIONS  
 SEARCH TIME: 00.00.02

258 ANSWERS

L6 258 SEA SSS FUL L1



L7 ANSWER 232 OF 232 MARPAT COPYRIGHT 201  
 AN 76:85578 MARPAT [Full-text](#)  
 TI Insecticidal urea or thiourea derivative  
 IN Wellinga, Kobus; Mulder, Rudolf  
 PA N. V. Philips' Gloeilampenfabrieken  
 SO Ger. Offen., 76 pp.  
 CODEN: GWXXBX  
 DT Patent  
 LA German  
 FAN. CNT 1



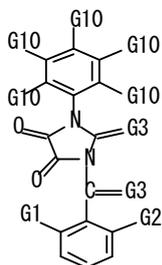
	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	DE 2123236	A	19711202	DE 1971-2123236	19710511
	DE 2123236	B2	19791031		

PRAI	NL 1970-7040	19700515
	CH 1971-7008	19710512
	US 1971-143668	19710514
	US 1973-354393	19730425
	US 1974-522058	19741108
	US 1975-625126	19751023
	US 1976-717633	19760825
	US 1979-35978	19790504
	US 1981-302591	19810915
	US 1984-665508	19841030
	US 1986-867695	19860528
	US 1986-882723	19860707
	US 1992-892365	19920603

MARPAT ファイルの検索では、1970 年に優先権が主張されている特許が得られた

GI For diagram(s), see printed CA Issue.  
 AB Benzoylurea derivs. (I, R = H, Me, MeO; R1 = phenyl substituted by halogen, lower alkyl, CN, or Ph; R2 = H, Me, Et, Ac, pentyl, cyclohexenyl; R3 = Cl, Me; X and Y = O, S) and the corresponding hydantoins and parabanic acids are strong insecticides. They are prepd. by known methods. Thus, I (R = R2 = H, R1 = 3,4-Cl2C6H3, R3 = Cl, X = Y = O) (II) was prepd. by treating 2,6-Cl2C6H3CONH2 with 3,4-Cl2C6H3NCO. II was active against Pieris brassicae larvae on cabbage plants (sprayed with 1 mg/l. II) and caused 50-90% mortality of Aedes aegypti larvae at the same concn.

MSTR 1 Assembled



G3 = O  
 G10 = CF3 / Cl  
 Patent location:  
 Note:

claims  
 record may include structures from disclosure

## 書誌情報・抄録・索引情報の検索

- MARPAT ファイルの中では、書誌情報、抄録、索引情報の検索はできない。CAplus/CA ファイルにクロスオーバー検索してから、キーワードや書誌情報を掛け合わせて限定する。

以下の検索は前ページまでの検索結果の回答を未表示の場合に実行する。  
 (この検索例ではすでに L5 や L7 を表示しているため、本来は絞込み検索後の再表示は不

=> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る

=> S L5 OR L6 ← CAplus ファイルの結果 (L5) と MARPAT ファイルの結果 (L6) をまとめる  
 258 L6 (重複が除かれる)  
 L8 278 L5 OR L6

=> S L8 AND (19970328<=PRD OR 19970328<=AD) ← 1997 年 3 月 28 日以降に出願された特許に限定  
 L9 206 L8 AND (19970328<=PRD OR 19970328<=AD)

=> S L8 NOT P/DT AND 1998<=PY ← 1998 年以降に発行された  
 L10 4 L8 NOT P/DT AND 1998<=PY 非特許文献に限定

=> S L9 OR L10  
 L11 210 L9 OR L10

=> D 56 BIB HITSTR

L11 ANSWER 56 OF 210 CAPLUS- COPYRIGHT 2017 ACS on STN

AN 2009:974953 CAPLUS- [Full-text](#)

DN **151:245667**

TI Preparation of phenylimidazolinediones as CB1 cannabinoid receptor modulators.

TIJP CB1 カンナビノイド受容体調節薬としてのフェニルイミダゾリジンジオン類の調製。  
 [機械翻訳]

IN Jaehne, Gerhard; Stengelin, Siegfried; Gossel, Matthias; Winkler, Irvin; Bigot, Antony; Diu-Hercend, Anita

PA Sanofi-Aventis, Fr.

SO PCT Int. Appl., 151pp.

CODEN: PIXXD2

DT Patent

LA German

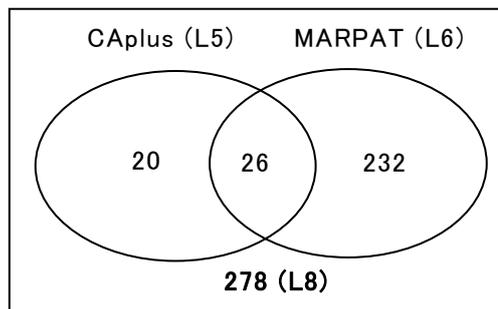
FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2009097996	A1	20090813	WO 2009-EP589	20090130 <--
	AR 71345	A1	20100616	AR 2009-100397	20090205 <--
PRAI	EP 2008-290132	A	20080207 <--		

OS CASREACT 151:245667; MARPAT 151:245667

RE. CNT 1 THERE ARE 1 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

CAplus ファイルで HITSTR 表示形式を用いても MARPAT ファイル由来の回答の場合はヒットした構造図を表示することができない



- MARPAT ファイルでヒットした構造部分を表示したい場合は, CAplus/CA ファイルにクロスオーバー検索してキーワードや書誌情報を掛け合わせた回答を MARPAT ファイルの回答と掛け合わせる。

=> FILE MARPAT ← MARPAT ファイルに入る

=> S L11 AND L6 ●  
 202 L11  
 L12 200 L11 AND L6

CAplus/CA および MARPAT では CA 抄録番号が共通しているため, L 番号のクロスオーバーをすると, 容易に同じレコードを再現してまとめることができる

=> D 51 BIB ABS FQHIT

L12 ANSWER 51 OF 200 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN

AN 151:245667 MARPAT [Full-text](#)

TI Preparation of phenylimidazolidinediones as CB1 cannabinoid receptor modulators.

IN Jaehne, Gerhard; Stengelin, Siegfried; Gossel, Matthias; Winkler, Irvin; Bigot, Antony; Diu-Hercend, Anita

PA Sanofi-Aventis, Fr.

SO PCT Int. Appl., 151pp.

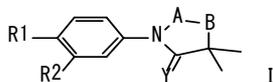
CODEN: PIXXD2

DT Patent

LA German

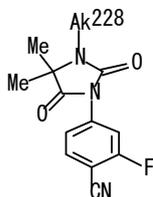
FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2009097996	A1	20090813	WO 2009-EP589	20090130
	:				
	AR 71345	A1	20100616	AR 2009-100397	20090205
PRAI	EP 2008-290132		20080207		
OS	CASREACT 151:245667				
GI					



AB Title compds. [I; R1 = cyano, NO<sub>2</sub>, halo; R2 = CF<sub>3</sub>, halo; AB = C(X)NR<sub>3</sub>, (R<sub>3</sub>S)C:N; X = O, S; R<sub>3</sub> = H, (substituted) alkyl, alkenyl, alkynyl, aryl, aralkyl; Y = O, S, NH], were prepd. Thus, title compd. 4-[4,4-dimethyl-2,5-dioxo-3-(4-trifluoromethylbenzyl)-1-imidazolidinyl]-2-trifluoromethylbenzyl nitrile (prepn. outlined) bound to CB1 receptors with IC<sub>50</sub> = 90 nM.

#### MSTR 1 Assembled



MARPAT ファイルでは, ヒットしたマルクーシュ構造を書誌情報とあわせて確認することができる

228: carbon chain <containing 1-12 C,  
 0 or more double bonds, 0 or more triple bonds>  
 (opt. substd. by 1 or more G8)

Patent location: claim 1

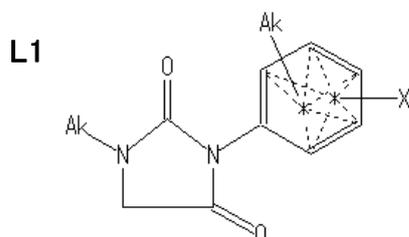
Note: and physiologically acceptable salts

RE. CNT 1 THERE ARE 1 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

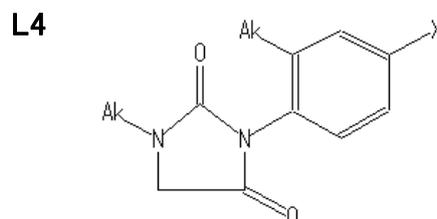
## REGISTRY サブセット検索結果を使った連続検索

- REGISTRY ファイルのフルファイル検索後のサブセット検索の結果の L 番号を使用して、MARPAT ファイルで構造検索を実行する。

構造質問式 ①



構造質問式 ②

=> FILE REGISTRY

=&gt;

Uploading C:\Users\...Documents\STN Express 8.6\Queries\str1.str

L1        STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

:

L2        32 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

:

L3        627 SEA SSS FUL L1

=&gt;

Uploading C:\Users\...Documents\STN Express 8.6\Queries\str2.str

L4        STRUCTURE UPLOADED

=> S L4 SUB=L3 SAM

:

L5        2 SEA SUB=L3 SSS SAM L4

=> S L4 SUB=L3 FUL ●

:

L6        11 SEA SUB=L3 SSS FUL

=> FILE MARPAT=> S L6

:

L7        8 SEA SSS SAM L4

=> S L6 FUL ●

:

L8        184 SEA SSS FUL L4

REGISTRY ファイルで得られたサブセット検索のフルファイル検索結果を使って MARPAT ファイルで構造検索を実行する

REGISTRY  
ファイルの検索

MARPAT  
ファイルの  
検索

参考: CAplus ファイルで検索した回答を対象にして、MARPAT ファイルでサブセット検索を実行することもできる。

参考 : MARPAT と CAplus/CA 間のクロスオーバー検索時の制限

■ MARPAT ファイルと CAplus/CA ファイル間では、L 番号を用いてクロスオーバー検索が実行できるが、以下の制限がある。

- ・ 一度にクロスオーバーできるのは最大 10 万件まで。
- ・ MARPAT ファイルから ZCAplus/ZCA ファイルへは、L 番号を用いたクロスオーバー検索が実行できない。



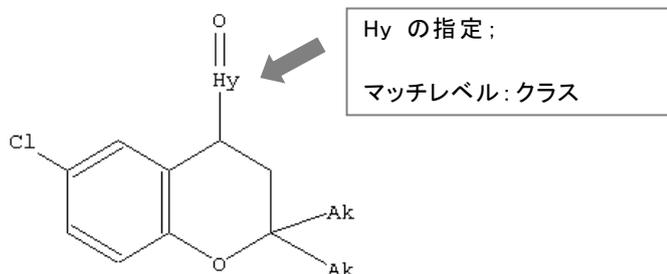
まとめ

- ・ CASLINK を利用すると、REGISTRY/CAplus ファイルおよび MARPAT ファイルを併用した検索を簡単に実行することができる。
  - REGISTRY/CAplus ファイル、MARPAT ファイルでの検索が自動的に実行され、重複を除いた回答が得られる。
  - REGISTRY ファイル、MARPAT ファイルの両方で共通に使用できる構造質問式を作図して構造検索を実行する。
- ・ CASLINK を利用しない場合は、各ファイルで検索を実行する。
  - MARPAT ファイル、CAplus ファイル間では L 番号を用いたクロスオーバー検索が可能。



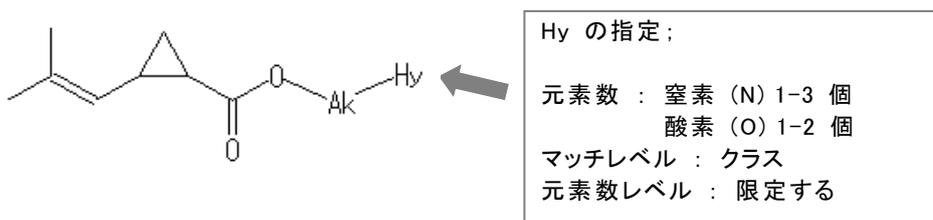
## 練習問題

2. 以下の構造の化合物に関する特許，文献を CASLINK で検索して，特許に限定する。



- \* 特に指定していないノードのマッチレベルは，鎖ノード「クラス」，環ノード「原子」
- \* 環は縮環してもよい

3. 以下の構造の化合物に関する特許を REGISTRY/CAplus ファイル，MARPAT ファイルで検索して，国際特許分類 A01N が付与されている特許に限定する。



- \* 特に指定していないノードのマッチレベルは，鎖ノード「クラス」，環ノード「原子」
- \* 環は縮環してもよい

### (ヒント)

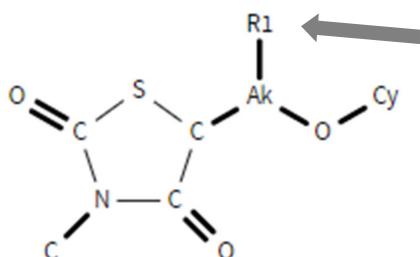
- ・ REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルで共通して使用できる構造質問式を作図する。
- ・ 国際特許分類は /IPC フィールドで検索する。MARPAT ファイルでは国際特許分類を検索できないため，CAplus ファイルへクロスオーバーして限定し，MARPAT ファイルへ戻してから表示する。
- ・ CAplus ファイルの回答を優先的に表示して，MARPAT ファイルの回答は重複を除いて表示する。

## 練習問題



## 練習問題

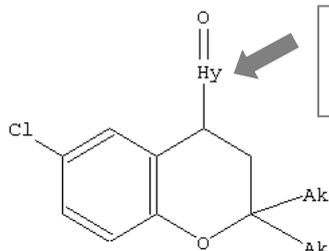
- 練習問題 1 : 以下の構造の化合物に関する特許を MARPAT ファイルで検索する.



R1 の指定: 酸素 (O) または X (ハロゲン)

- \* 特に指定していないノードのマッチレベルは、鎖ノード「クラス」、環ノード「原子」
- \* 環は縮環してもよい

- 練習問題 2 : 以下の構造の化合物に関する特許, 文献を CASLINK で検索して, 特許に限定する.

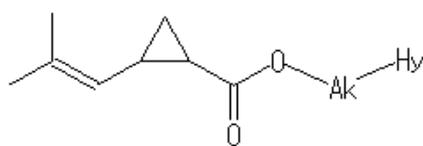


Hy の指定;

マッチレベル : クラス

- \* 特に指定していないノードのマッチレベルは、鎖ノード「クラス」、環ノード「原子」
- \* 環は縮環してもよい

- 練習問題 3 : 以下の構造の化合物に関する特許を REGISTRY/CAplus ファイル, MARPAT ファイルで検索して, 国際特許分類 A01N が付与されている特許に限定する.



Hy の指定;

元素数 : 窒素 (N) 1-3 個

酸素 (O) 1-2 個

マッチレベル : クラス

元素数レベル : 限定する

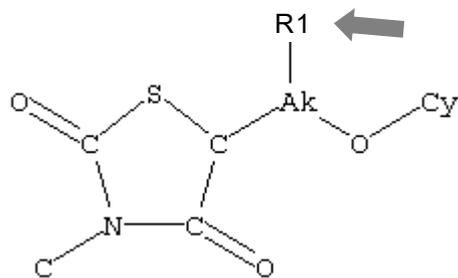
- \* 特に指定していないノードのマッチレベルは、鎖ノード「クラス」、環ノード「原子」
- \* 環は縮環してもよい

(ヒント)

- ・ REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルで共通して使用できる構造質問式を作図する.
- ・ 国際特許分類は /IPC フィールドで検索する. MARPAT ファイルでは国際特許分類を検索できないため, CAplus ファイルへクロスオーバーして限定し, MARPAT ファイルへ戻してから表示する.
- ・ CAplus ファイルの回答を優先的に表示して, MARPAT ファイルの回答は重複を除いて表示する.

## 練習問題 1

- 練習問題 1 : 以下の構造の化合物に関する特許を MARPAT ファイルで検索する。



R1 の指定 :

R1 は酸素 (O) または X (ハロゲン)

\* 特に指定していないノードのマッチレベルは、鎖ノード「クラス」、環ノード「原子」

### ■ 作図例

### ■ 検索

=> FILE MARPAT

← MARPAT ファイルに入る

=>  
Uploading .....

L1        STRUCTURE UPLOADED

← 作図した構造質問式をアップロードする

=> S L1

← サンプル検索を実行する

L2                    2 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

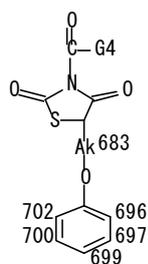
← フルファイル検索を実行する

L3                    13 SEA SSS FUL L1

=> D BIB FQHIT 1-13 ← 書誌情報と最初にヒットしたマルクローシュ構造を表示する

L3 ANSWER 1 OF 13 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN  
 AN 164:302946 MARPAT [Full-text](#)  
 TI Conjugation of pharmaceutically active agents with transthyretin ligands through adjustable linkers to increase serum half-life  
 IN Alhamadsheh, Mamoun M.; Park, Miki S.; Chan, William K.; Li, Xiaoling; Penchala, Sravan C.; Miller, Mark R.  
 PA USA  
 SO PCT Int. Appl., 125pp.  
 CODEN: PIXXD2  
 DT Patent  
 LA English  
 FAN. CNT 1

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI WO 2016025129	A1	20160218	WO 2015-US41189	20150720
W: AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW				
RW: AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR, BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG, BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW, AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM				
US 20160045609	A1	20160218	US 2015-14804024	20150720
PRAI US 2014-62037592		20140814		
OS CASREACT 164:302946				

**MSTR 1 Assembled**

683: carbon chain <containing 1 or more C,  
 0 or more double bonds, 0 or more triple bonds>  
 (opt. substd. by 1 or more I)

696, 697, 699, 700, 702: opt. substd. by 1 or more G20

Patent location: claim 5

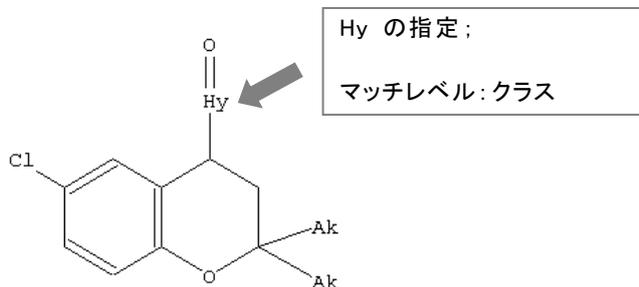
Note: or pharmaceutically acceptable salts, esters,  
 enols, amides, acetals, ketals, hydrates, solvates  
 or prodrugs

RE. CNT 4 THERE ARE 4 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

:

## 練習問題 2

- 練習問題 2 : 以下の構造の化合物に関する特許, 文献を CASLINK で検索して, 特許に限定する.



\* 特に指定していないノードのマッチレベルは, 鎖ノード「クラス」, 環ノード「原子」

### ■ 作図例

### ■ 検索

=> FILE CASLINK

← CASLINK に入る

=>

Uploading ...

L1 STRUCTURE UPLOADED

← 作図した構造質問式をアップロードする

=> S L1

← サンプル検索を実行する

S L1 SSS SAM FILE=REGISTRY

:  
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED ITERATIONS: 472420 TO 491020  
PROJECTED ANSWERS: 1 TO 80

L2 1 SEA SSS SAM L1

:

```

S L2 SSS SAM FILE=MARPAT
SAMPLE SEARCH INITIATED 16:57:11 FILE 'MARPAT'
:
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:   12750 TO  15930
PROJECTED ANSWERS:      5 TO      234

```

```
L3          5 SEA SSS SAM L1
```

```

:
=> S L1 FUL          ← フルファイル検索を実行する

```

```

S L1 SSS FUL FILE=REGISTRY
FULL SEARCH INITIATED 16:08:35 FILE 'REGISTRY'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 481813 TO ITERATE

```

```

100.0% PROCESSED      481813 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

```

20 ANSWERS

```

L4          20 SEA SSS FUL L1
          1 FILES SEARCHED...

```

```

S L4 SSS FUL FILE=MARPAT
FULL SEARCH INITIATED 16:08:37 FILE 'MARPAT'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 14816 TO ITERATE

```

```

100.0% PROCESSED      14816 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

```

67 ANSWERS

```

L5          67 SEA SSS FUL L1
          1 FILES SEARCHED...

```

```

S L4 FILE=CAPLUS
L6          21 FILE CAPLUS
          1 FILES SEARCHED...

```

```

SET DUPORDER FILE
SET COMMAND COMPLETED

```

```

DUP REM L5 L6
L7          77 DUP REM L5 L6 (11 DUPLICATES REMOVED)
                ANSWERS '1-67' FROM FILE MARPAT
                ANSWERS '68-77' FROM FILE CAPLUS

```

```

=> S L7 AND P/DT    ← 特許に限定する

```

```

S L6 AND P/DT FILE=CAPLUS
L8          13 FILE CAPLUS

```

```

S L5 AND P/DT FILE=CAPLUS
L9          67 FILE CAPLUS

```

```

S L9 AND L5 FILE=MARPAT
L10         67 FILE MARPAT

```

```

DUP REM L10 L8
PROCESSING COMPLETED FOR L10
PROCESSING COMPLETED FOR L8
L11         69 DUP REM L10 L8 (11 DUPLICATES REMOVED)
                ANSWERS '1-67' FROM FILE MARPAT
                ANSWERS '68-69' FROM FILE CAPLUS

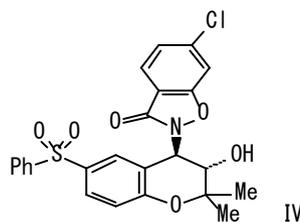
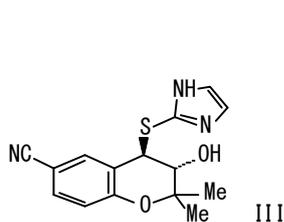
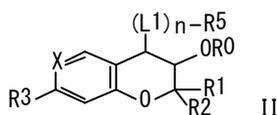
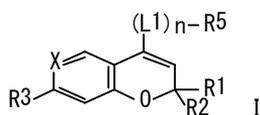
```

=> D 1-67 BIB ABS FQHIT

← MARPAT ファイルの回答を表示する

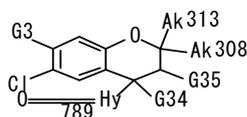
L11 ANSWER 1 OF 69 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN DUPLICATE 1  
 AN 146:316776 MARPAT [Full-text](#)  
 TI Novel benzopyran derivatives as potassium channel openers and their preparation, pharmaceutical compositions and use in the treatment of potassium channel related disorders  
 IN Zhang, Xuqing; Li, Xiaojie; Sui, Zhihua  
 PA Janssen Pharmaceutica N.V., Belg.  
 SO PCT Int. Appl., 140pp.  
 CODEN: PIXXD2  
 DT Patent  
 LA English  
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2007027780	A2	20070308	WO 2006-US33871	20060830
	WO 2007027780	A3	20070712		
	:				
PRAI	US 2005-60713550		20050901		
	WO 2006-US33871		20060830		
OS	CASREACT 146:316776				
GI					



AB Compds. of formula I and II [R0 = H, C1-4 alkyl, C0-C1-4 alkyl, and (un)substituted benzoyl; R1, R2 = independently C1-4 alkyl; or R1R2 are taken together to form a (un)substituted 5- to 7-membered  
 :

### MSTR 1 Assembled



308: alkyl <containing 1-4 C>

313: alkyl <containing 1-4 C>

789: heterocycle <containing 5-10 atoms,

1 or more heteroatoms, 1 or more N, zero or more O,

zero or more S (no other heteroatoms), mono- or polycyclic>

(opt. substd. by 1 or more G29)

Patent location: claim 1

Note: substitution is restricted

:

=> D 68-69 BIB ABS HITSTR← *Caplus* ファイルの回答を表示する

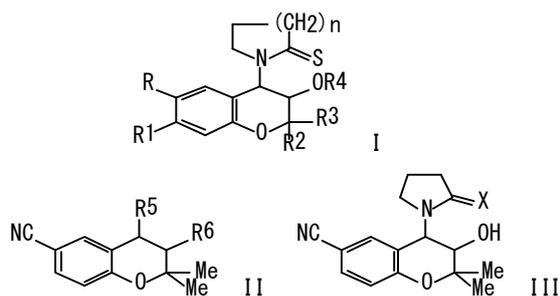
L11 ANSWER 68 OF 69 CAPLUS COPYRIGHT 2017 ACS on STN  
 AN 1985:113296 CAPLUS [Full-text](#)  
 DN 102:113296  
 OREF 102:17794h,17795a  
 TI Active compounds with pharmacological activity  
 IN Evans, John Morris; Buckingham, Robin Edwin; Willcocks, Kenneth  
 PA Beecham Group PLC, UK  
 SO Eur. Pat. Appl., 41 pp.  
 CODEN: EPXXDW  
 DT **Patent**  
 LA English  
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	EP 120427	A1	19841003	EP 1984-102962	19840317
	EP 120427	B1	19881221		
	R: CH, DE, FR, GB, IT, LI, NL				
	US 4610992	A	19860909	US 1984-592115	19840322
	JP 59181278	A	19841015	JP 1984-55935	19840323
PRAI	GB 1983-8064	A	19830324		

ASSIGNMENT HISTORY FOR US PATENT AVAILABLE IN LSUS DISPLAY FORMAT

OS MARPAT 102:113296

GI



AB Antihypertensive pyrrolidinyl- or piperidinylbenzopyrans I [R = H, R1 = NO<sub>2</sub>, -CN, Cl, CF<sub>3</sub>, (un)substituted alkyl, acyl, amino, sulfinyl, sulfonyl, thioacyl, or vice versa; R = NO<sub>2</sub>, -CN, acyl, R1 = (un)substituted OMe, amino, or vice versa; R2 = H, alkyl; R3 = alkyl; R2R3 = (CH<sub>2</sub>)<sub>2-5</sub>; R4 = H,

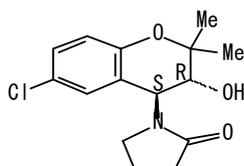
IT **86776-76-3P**

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (preparation of)

RN 86776-76-3 CAPLUS

CN 2-Pyrrolidinone, 1-(6-chloro-3,4-dihydro-3-hydroxy-2,2-dimethyl-2H-1-benzopyran-4-yl)-, trans- (9CI) (CA INDEX NAME)

Relative stereochemistry.

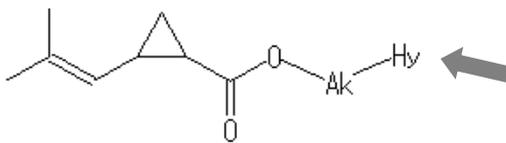


OSC. G 6 THERE ARE 6 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (6 CITINGS)

:

## 練習問題 3

- 練習問題 3 : 以下の構造の化合物に関する特許を REGISTRY/CAplus ファイル, MARPAT ファイルで検索して, 国際特許分類 A01N が付与されている特許に限定する.



Hy の指定 :

元素数 : 窒素 (N) 1-3 個  
 酸素 (O) 1-2 個  
 マッチレベル : クラス  
 元素数レベル : 限定する

- \* 特に指定していないノードのマッチレベルは, 鎖ノード「クラス」, 環ノード「原子」
- \* 環は縮環してもよい

## ■ 作図例

Structure Editor

Draw or change atoms or bonds.

Enter a CAS Registry Number, SMILES, or InChI...

Attribute Values

Bond Type  
Chain | Ring | Ring / Chain

Bond Value  
Exact | Normalized | Exact / Normalized

Node Type  
Chain | Ring | Ring / Chain

Generic Definition  
Saturated | Unsaturated  
Linear | Branched  
Monocyclic | Polycyclic  
1 hetero atom | 2+ hetero atoms  
1-6 carbons | 7+ carbons

Match Level  
Atom | Class | Any

Element Count Level  
Limited | Unlimited

Ring Isolation

Node Attributes

Element Counts

Generic Definition: Heterocycles

Markush Attributes

Non-Hydrogen Count

1. Select an element

2. Select a count

3. Add/Remove Element Count

Match Level

Element Count Level

Changing the Element Count Level may result in changes to extended ring systems and carbon chain clusters.

OK

=> FILE MARPAT ← *MARPAT* ファイルに入る

=>  
Uploading structure file: 1201ex3\_structure

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1 ● —————  
: REGISTRY ファイルと同じ構造質問式を利用することを想定して、  
MARPAT ファイルでフルファイル検索が可能であることを確認しておく

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **\*\*COMPLETE\*\*** ← *COMPLETE* を確認  
BATCH **\*\*COMPLETE\*\***  
PROJECTED ITERATIONS: 158944 TO 167776  
PROJECTED ANSWERS: 0 TO 0

L2 0 SEA SSS SAM L1

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

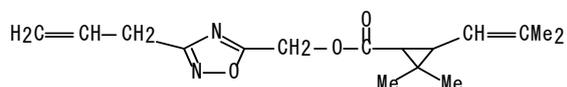
=> S L1 ← サンプル検索

:  
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **\*\*COMPLETE\*\***  
BATCH **\*\*COMPLETE\*\***  
PROJECTED ITERATIONS: 16695 TO 20345  
PROJECTED ANSWERS: 2 TO 124

L3 2 SEA SSS SAM L1

=> D SCAN ← 回答を確認

L3 2 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2017 ACS on STN  
IN Cyclopropanecarboxylic acid, 2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propen-1-yl)-,  
[3-(2-propen-1-yl)-1,2,4-oxadiazol-5-yl]methyl ester  
MF C16 H22 N2 O3



\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S L1 FUL ← フルファイル検索  
FULL SEARCH INITIATED 16:09:44 FILE 'REGISTRY'  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 19154 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 19154 ITERATIONS 56 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

L4 56 SEA SSS FUL L1

=> FILE CAPLUS ← *Caplus* ファイルに入る

=> S L4 ← *REGISTRY* ファイルの検索結果をクロスオーバーする  
L5 20 L4

=> S L5 AND A01N/IPC ← 国際特許分類 *A01N* が付与されている特許に限定する  
L6 11 L5 AND *A01N/IPC*

=&gt; D 1-11 STD ABS HITSTR ← 全件の書誌情報, 特許分類, 抄録, ヒットした化合物の構造を表示する

L6 ANSWER 1 OF 11 CAPLUS COPYRIGHT 2017 ACS on STN

AN 2002:688148 CAPLUS [Full-text](#)

DN 137:216941

TI Preparation of 2,2-dimethylcyclopropanecarboxylic acid  
5-methyl-5-propargyl-2,4-dioxooxazolidin-3-ylmethyl esters and the  
pyrethroid insecticide composition containing them as the active  
ingredients

IN Nishida, Nobuyuki; Inoue, Masafumi; Nakayama, Koji

PA Dainippon Jochugiku Co., Ltd., Japan

SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 6 pp.

CODEN: JKXXAF

DT Patent

LA Japanese

FAN. CNT 1

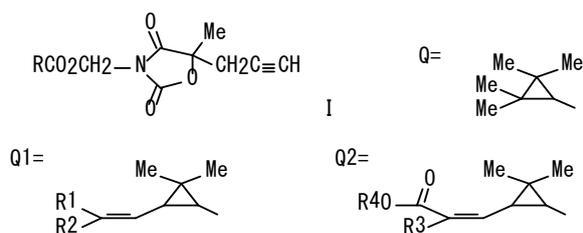
	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	JP 2002255946	A	20020911	JP 2001-50630	20010226 <--
PRAI	JP 2001-50630		20010226		

CLASS

PATENT NO.	CLASS	PATENT FAMILY CLASSIFICATION CODES	
JP 2002255946	IPC1	C07D0263-44 [ICM, 7]; A01N0053-04 [ICS, 7]	<--
	IPCR	C07D0263-44 [I]; A01N0053-04 [I]	<--

OS MARPAT 137:216941

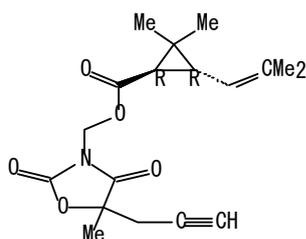
GI

AB The title compds. (I; R = Q, Q1, Q2; wherein R1, R2 = H, F, Cl, Me, CF<sub>3</sub>;  
R3 = H, Me; R4 = C1-4 alkyl), which are quick-working with high mortalityIT **455261-46-8P**RL: AGR (Agricultural use); BSU (Biological study, unclassified); SPN  
(Synthetic preparation); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES  
(Uses)(prepn. of 2,2-dimethylcyclopropanecarboxylic acid  
5-methyl-5-propargyl-2,4-dioxooxazolidin-3-ylmethyl esters and the  
pyrethroid insecticide compn. contg. them as the active ingredients)

RN 455261-46-8 CAPLUS

CN Cyclopropanecarboxylic acid, 2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propen-1-yl)-,  
[5-methyl-2,4-dioxo-5-(2-propyn-1-yl)-3-oxazolidinyl]methyl ester,  
(1R,3R)- (CA INDEX NAME)

Absolute stereochemistry.



:

=> FILE MARPAT ← *MARPAT* ファイルに入る=> S L4 FUL  
FULL SEARCH INITIATED 16:10:  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETEDREGISTRY ファイルのフルファイル検索の結果 (L4) を用いて  
MARPAT ファイルでフルファイル検索を実行する100.0% PROCESSED 164541 ITERATIONS 40 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.07

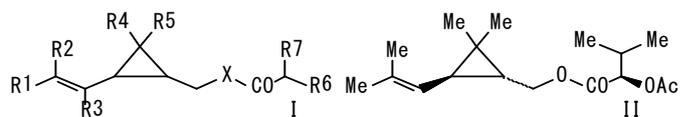
L7 40 SEA SSS FUL L1

=> FILE CAPLUS ← *CAplus* ファイルに入る=> S L7 AND A01N/IPC  
40 L7  
215911 A01N/IPC  
L8 18 L7 AND A01N/IPCMARPAT ファイルでは国際特許分類の検索ができないため、  
CAplus ファイルにクロスオーバーして限定する=> S L8 NOT L6 ← *CAplus* ファイルで得られた回答を除く  
L9 17 L8 NOT L6=> FILE MARPAT ← *MARPAT* ファイルに入る=> S L9 AND L7  
17 L9  
L10 17 L9 AND L7再度 MARPAT ファイルへクロスオーバーする。L9 はレコード番号に  
より検索が実行されるため、構造検索のヒット情報が含まれない。  
構造検索の回答 L7 と演算するとヒット情報が反映され、FQHIT など  
の表示形式でヒット部分を表示できる=> D 1-17 STD ABS FQHIT

L10 ANSWER 1 OF 17 MARPAT COPYRIGHT 2017 ACS on STN  
 AN 154:513569 MARPAT [Full-text](#)  
 TI Chrysanthemyl derivatives as mealy bug attractant  
 IN El-Sayed, Ashraf M.; Bergmann, Jan Heinrich Albrecht; Unelius, Carl Rikard  
 PA N. Z.  
 SO PCT Int. Appl., 38pp.  
 CODEN: PIXXD2  
 DT Patent  
 LA English  
 IPCI C07C0069-67 [I]; A01P0019-00 [I]; A01N0037-06 [I]; C07C0067-08 [I]  
 IPCR C07C0069-67 [I]; A01N0037-06 [I]; A01P0019-00 [I]; C07C0067-08 [I]  
 FAN. CNT 1

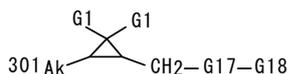
	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2011053168	A1	20110505	WO 2010-NZ217	20101029
	:				
	AU 2010313864	A1	20120607	AU 2010-313864	20101029
	EP 2493842	A1	20120905	EP 2010-827208	20101029
	R: AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LI, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR				
	ZA 2012003093	A	20130130	ZA 2012-3093	20120426
PRAI	NZ 2009-580852		20091030		
	WO 2010-NZ217		20101029		
OS	CASREACT 154:513569				

GI



AB Chrysanthemyl derivs., such as I [R1-7 = independently, alkyl, alkenyl, alkynyl, aryl, heteroaryl, heterocyclyl, heterocyclylalkyl, haloalkyl, amino, acyl, acyloxy, carbamoyl, etc.; X = O, S, NR8, R8 = H, alkyl, alkenyl, alkynyl, etc.], were prepd. for use controlling and monitoring populations of mealy bugs. Thus, (R,R,R)-deriv. II was prepd. starting from (2R)-2-hydroxy-3-methylbutanoic acid and chrysanthemol. Chrysanthemyl deriv. II and related stereoisomers were evaluated for mealy bug attractant activity.

**MSTR 1 Assembled**



301: carbon chain <containing 2 or more C, 1 or more double bonds, 0 or more triple bonds> (opt. substd. by G21)

G1 = 10 / 25 / 34

10 G3-G7    64-G3-C25=O    34 G10-G4

G3 = 0

G4 = alkyl (substd. by G6)

G6 = heteroaryl <containing up to 10 atoms, 1 or more heteroatoms, zero or more N, zero or more O, zero or more S (no other heteroatoms)>

G21 = 85 / 96

85 G3-G7    96 G10-G4

Patent location:

claim 1

Note:

or salts

Note:

additional oxo formation and substitution also claimed

:

## マッチレベルの理解度チェック

- 左欄の構造質問式を作図し，マッチレベル「原子」「クラス（限定/限定しない）」を指定した場合に，回答（候補）欄の部分構造がヒットするかどうかを考えます。

ヒットする場合は ○ を，ヒットしない場合は ✕ を記入してみましょう。

構造質問式	回答（候補）	マッチレベル		
		原子	クラス	
			限定	限定しない
F	F			
F	Cl			
F	X			
X	F/Cl/Br/I/At			
X	X			
				
				
	Hy			
	Hy<containing zero or more O>			
Hy	 			
Hy	Hy			
Hy (元素数 0 (2-3))	Hy<containing -1 O>			
Hy (元素数 0 (2-3))	Hy			

## ■ 前ページの回答

構造質問式	回答 (候補)	マッチレベル		
		原子	クラス	
			限定	限定しない
F	F	○	○	○
F	Cl	×	×	×
F	X	×	○	○
X	F/Cl/Br/I/At	○	○	○
X	X	×	○	○
		○	○	○
		×	×	×
	Hy	×	×	○
	Hy<containing zero or more O>	×	○	○
Hy	 	○	○	○
Hy	Hy	×	○	○
Hy (元素数 0 (2-3))	Hy<containing -1 O>	×	×	×
Hy (元素数 0 (2-3))	Hy	×	×	○

## *APPENDIX*



## マルクーシュ構造中の一般式グループアトリビュート

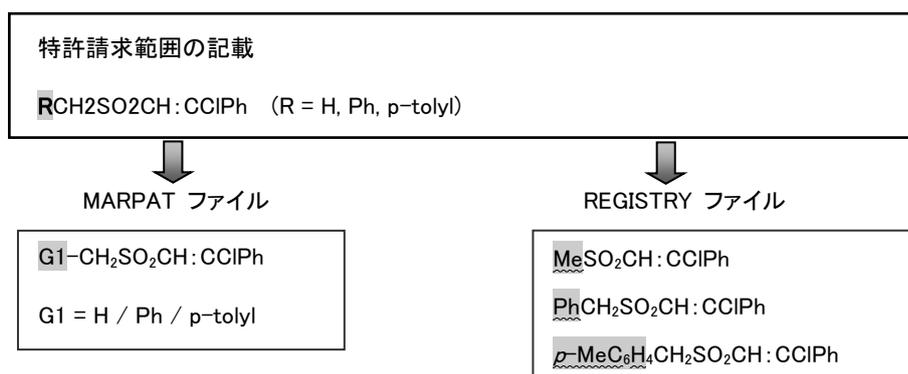
- MARPAT ファイルに収録されているマルクーシュ構造中では、以下のような一般式グループアトリビュート記号が用いられることがある。

記号	例	意味
AN Attachment Nodes	AN (3) A AN (2) N	3 個の任意の原子で結合 2 個の窒素で結合
AR Aryl	AR (1-) AR (0)	1 以上の芳香環を持つ 芳香環ではない
BD Bonds	BD (0) T BD (1-) D (2) SE	三重結合ではない 1 以上の二重結合と 2 個の単結合
CH Charge	CH (2) + CH (1-) +-	2 個の正電荷 1 以上の正、または負の電荷
DC Degree of Connectivity	DC (0) M3 DC (1-) M3	分岐なし 分岐あり
EC Element Count	EC (1-8) C (1-8) EC (2-3) N	1-8 の炭素 1-8 の炭素 (C 表示省略) 2-3 の窒素
FA Fusion Atoms	FA (2-4) C FA (2-) C	2-4 の炭素原子が縮合点 2 以上の炭素原子が縮合点
RC Ring Count	RC (2-) RC (1)	2 以上の成分環を持つ多環 単環
RS Ring Size	RS (2-3) E6 RS (1) M5 (1) X6	2-3 の 6 員環 5 または 6 員環
TX Text Qualifiers	R <TX "Protecting group"> R <TX "residue">	

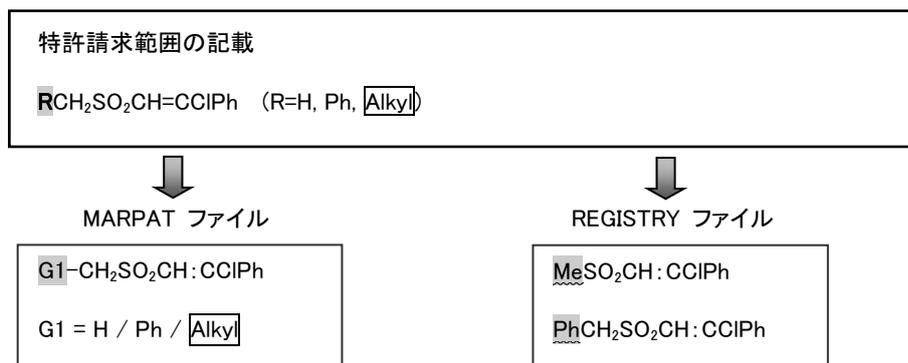
## CAS の化学物質索引方針 1 - クレーム中の化合物

- クレーム（特許請求範囲）に記載されている化学物質の索引（MARPAT ファイルと REGISTRY ファイルにおける収録）

- ・ MARPAT ファイル : マルクーシュ構造があれば索引される.
- ・ REGISTRY ファイル : 特許請求範囲にマルクーシュ構造で記載されている化学物質でも, 明確に定義できる特定物質の場合は個々に化学物質が索引される.
- ・ 例 1 : 一つだけ可変基を持ち, 特定可能な定義が与えられている場合

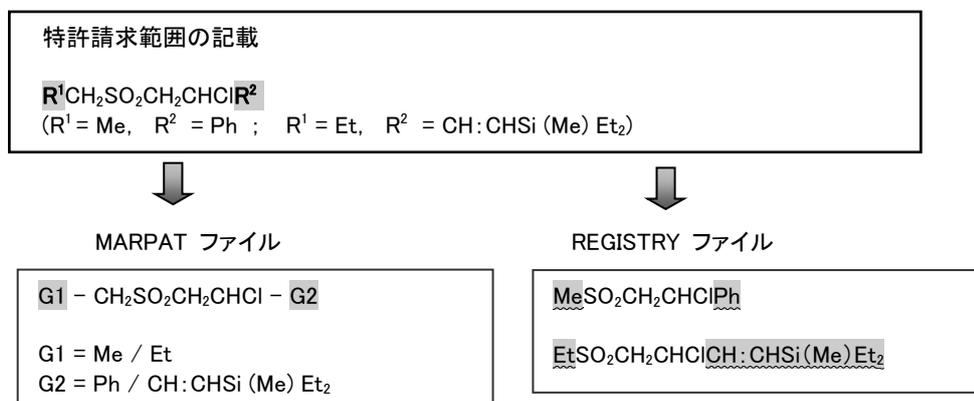


- ・ 例 2 : 一つだけ可変基を持ち, 一部非特定な定義が与えられている場合

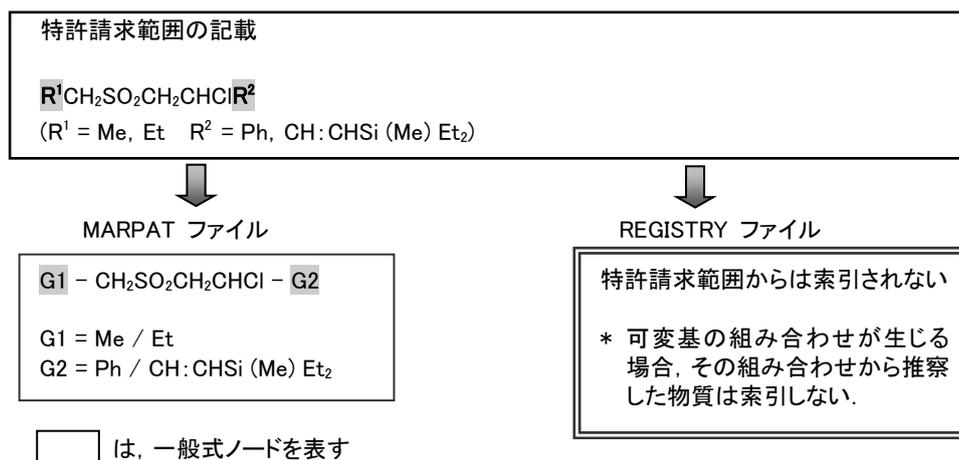


$\square$  は, 一般式ノードを表す

- ・ 例 3 : 2 以上の可変基を持ち, 特定可能な定義が与えられている場合



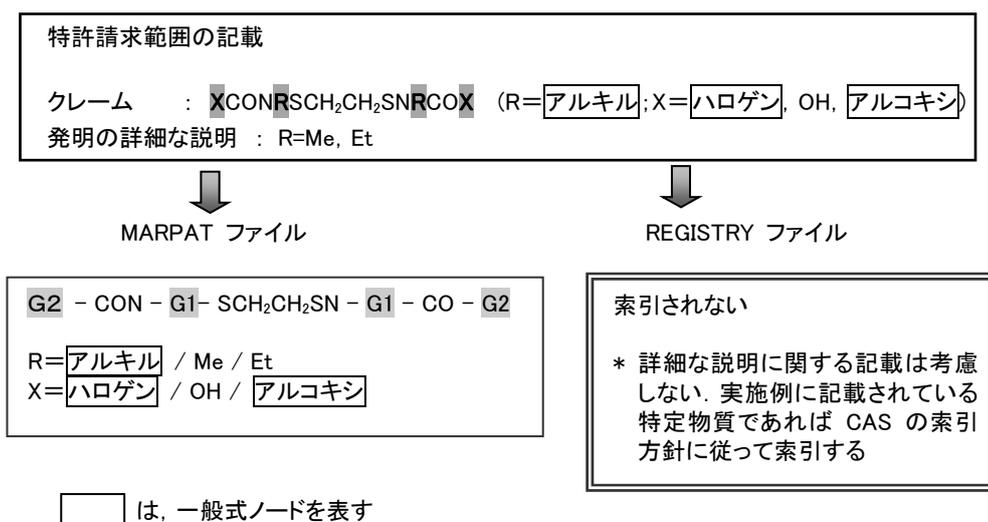
- 例 4 : 2 以上の可変基を持ち, 組み合わせにより複数の物質が推定される場合



- 例 5 : 2 以上の可変基を持ち, 特定可能な定義が与えられている場合



- 例 6 : 置換基に関する具体的なノードについて, 特許請求範囲には記載がなく, 発明の詳細な説明の中に記載されている場合, 重要なものと判断された場合には, Example として索引される。



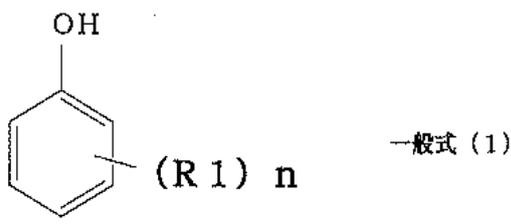
## CAS の化学物質索引方針 2 – 発明の詳細な説明中の化合物

## ■ 発明の詳細な説明中に記載されている化合物の索引 (MARPAT ファイルのみに収録される化学物質)

- ・ 特許請求範囲内にマルクーシュ構造がない場合に、マルクーシュ構造を収録する。
- ・ 特許請求範囲内のマルクーシュ構造よりも発明の詳細な説明中のマルクーシュ構造の定義が広い場合、発明の詳細な説明のマルクーシュ構造が索引される。
- ただし、反応物 (Starting Materials) と中間体はクレームのみから収録され、発明の詳細から収録されることはない。
- ・ 例 : 原特許文献 (日本の公開番号 2005 年 125193)

## 発明の詳細な説明一部抜粋 (特許請求範囲内にマルクーシュ構造がない場合)

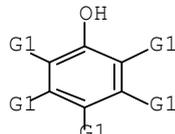
[0013]  
本発明で除去の対象となるフェノール化合物は、一般式(1)で示される化合物である。  
[0014]  
【化1】



(ただし、式中のR1は、水素または炭素数1~4のアルキル基を示し、nは1~3の整数を示す。)

好ましくは、R1が水素またはメチルである。  
具体的には、フェノール、クレゾール、エチルフェノール、イソプロピルフェノール、tert-ブチルフェノール、sec-ブチルフェノール、アリルフェノール、キシレノールが挙げられる。これらのフェノール化合物は単独又は混合して用いることもできる。  
好ましくは、フェノール、クレゾール、キシレノールが挙げられ、より好ましくは、フェノールである。

MSTR 1



G1 = 2 or more H / alkyl <containing 1-4 C> /

(Examples: Me / Et / Pr-i / Bu-t / Bu-s / CH2CH=CH2)

Patent location: disclosure

## CAS の化学物質索引方針 3 – 実施例中の化合物

## ■ 実施例に記載されている化学物質の索引 (REGISTRY ファイルにおける収録)

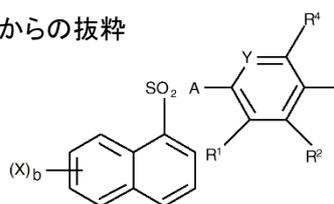
- ・ 実施例に記載されている化学物質のうち、新規性、改良点に関連するものや重要な事項 (クレームされている必要はない) に関連する化学物質で何らかの hard data がある物質が索引される。
  - 以下の特許がベーシック特許となった場合には、実施例中の hard data のない物質 (Prophetic 物質) も索引される。
  - 2009 年 1 月以降の CA, DE, EP, FR, GB, JP, RU, US, WO 特許。ただし、日本特許については、2000-2008 年の特許も部分的に収録
  - 1998-2008 年の CA, DE, EP, FR, GB, US, WO で発行された英語、仏語、独語の特許 (1993-1997 年も部分的に収録)

## Prophetic 物質の定義

特許の実施例に記載されている hard data のない特定の化学物質 (例 : 反応物, 単離された中間体, 生成物) で、クレームには記載されていないもの。構造式だけでなく、化学物質名で表現されているものや、表にまとめられているものも含まれる。

新規や今までにない用途が報告されているが、その用途が実証されていない物質。

## 実施例からの抜粋

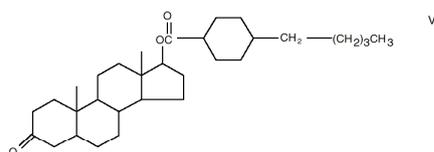


## 【Point】

- ・ 化合物 1, 2, 3, 4, 6 は、融点が記載されているので索引される。
- ・ 化学物質 5, 7 は、hard data が記載されていない Prophetic 物質である。このような物質は上記の基準にもとづいて収録される。

Ex.	X	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	CH	NH	
1	2-Cl	H	CONH2	H	H	CH	NH	202-205
2	5-Cl	H	COHN2	H	H	CH	NH	257-259
3	4-Cl	CONH2	H	H	H	CH	NH	238-239
4	H	H	CONH2	H	H	CH	NH	182-185
5	3-Cl	H	CONH2	H	H	CH	NH	
6	4-Cl	H	CONH2	H	H	CH	NH	185-190
7	6-Cl	H	CONH2	H	H	CH	NH	

## EXAMPLE III

Testosterone  
17β-(trans-4-n-pentyl)cyclohexanecarboxylate (V)

## Preparation 1: trans-4-n-pentylcyclohexanecarboxylic acid (16)

This compound was prepared from 4-n-pentylzoic acid (15, 53.8 g, 0.28 mol), in a manner similar to the procedure described for trans-4-n-butylcyclohexanecarboxylic acid (11) in Example I, Preparation 1 in an overall yield of 80% (43 g); m.p. 50-51°C. (pet. ether).

Preparation 3: Testosterone  
17β-(trans-4-n-pentyl)cyclohexanecarboxylate (V)

Testosterone (7, 26.02 mg, 0.09 mmol) was dissolved in anhydrous benzene (1 ml) and pyridine (0.10 ml) under nitrogen. The trans-acid chloride (17, 29.26 mg, 0.135 mmol), dissolved in anhydrous benzene (0.5 ml), was added to the above solution. The reaction mixture was allowed to stir for 30 min under nitrogen. TLC (silica gel, EtOAc: hexane (2:3)) of the reaction mixture

## 【Point】

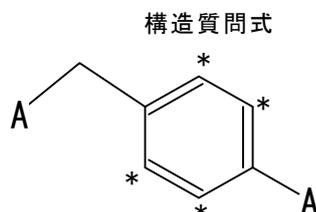
- ・ benzene や pyridine のような汎用の溶媒, 試薬などは、それを用いることが強調されていなければ索引されない

Evaporation of the solvent gave 42 mg of the crude ester. The crude product was recrystallized from ether-pet. ether to give 35.8 mg (85%) of white crystals:

## 検索できない構造データ

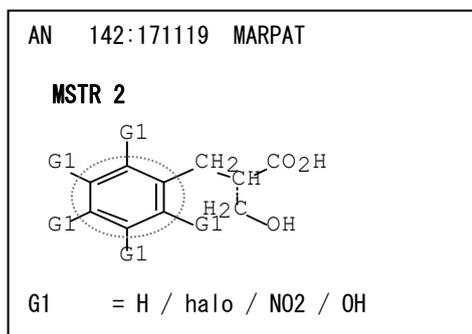
- マルクーシュ構造のデータとして MARPAT ファイル中のデータとして存在していても、検索できない構造データが存在する。

- ・ 回答中にノイズが混入する場合（検索できないデータ）
  - 一般式グループテキストに対する置換基・置換数（下記参照）
  - 一般式グループテキストの属性（\* 元素数は検索可能）
  - G グループの選択枝の個数
- ・ 構造質問式中で水素を作図していたり、置換基制御のために結合水素数、結合非水素数を指定していても上記のようなケースでは、回答中にノイズが含まれることがある。ただし、検索漏れはない。
- ・ ノイズが混入する例

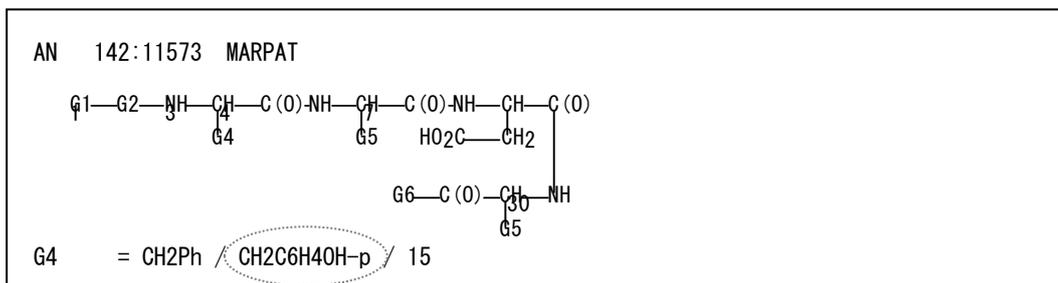


\* の位置は水素数 1 または 非水素結合数 2  
環は孤立

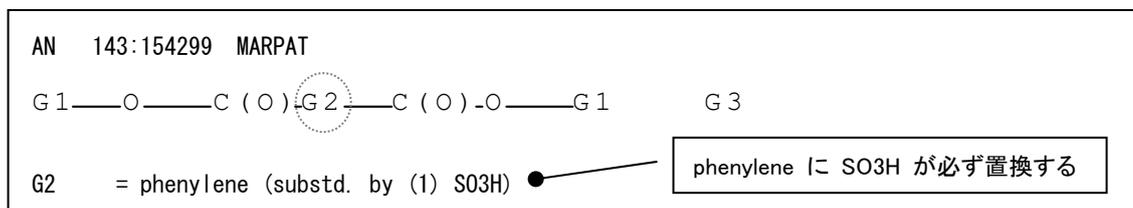
- 回答 1 (ヒット)



- 回答 2 (ヒット)

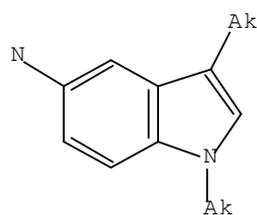


- 回答 3 (ノイズ)



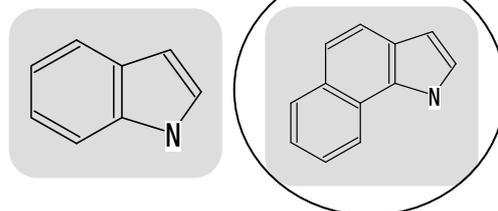
## マッチレベルと環の孤立

- 環の孤立と、マッチレベルは直接関係しない。

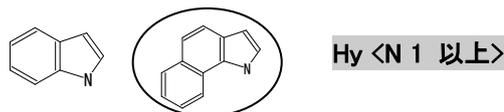


環系は孤立しない

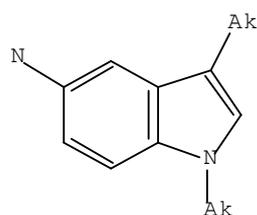
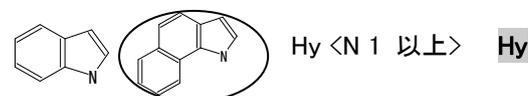
環ノードの  
マッチレベル ATOM



環ノードの  
マッチレベル CLASS  
元素数レベル 限定

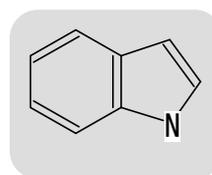


環ノードの  
マッチレベル CLASS  
元素数レベル 限定しない

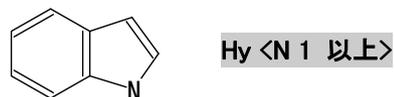


環系は孤立

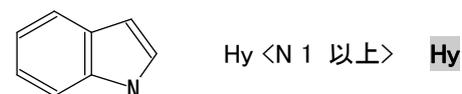
環ノードの  
マッチレベル ATOM



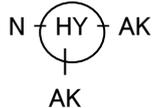
環ノードの  
マッチレベル CLASS  
元素数レベル 限定



環ノードの  
マッチレベル CLASS  
元素数レベル 限定しない

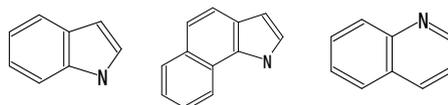


参考：一般式記号には、環の孤立を限定できない。HY の一般式属性で、単環、多環、炭素数（7 未満，7 以上，ヘテロ原子数（2 以上，ちょうど 1）を指定することができる。元素数で、具体的な各原子の数を指定することができる。

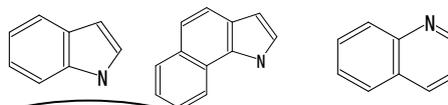


HY は、多環、  
N が 1

HY はマッチレベル ATOM



HY はマッチレベル CLASS  
元素数レベル 限定

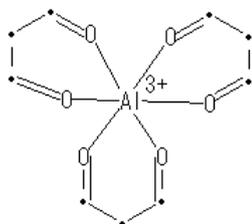


Hy <N 1 以上>

## 配位化合物

- 配位化合物は REGISTRY ファイルと MARPAT ファイルの収録形式が異なるため、REGISTRY/CAplus ファイルと MARPAT ファイルの連続検索を実行する場合は、特に構造質問式の作図に注意する。

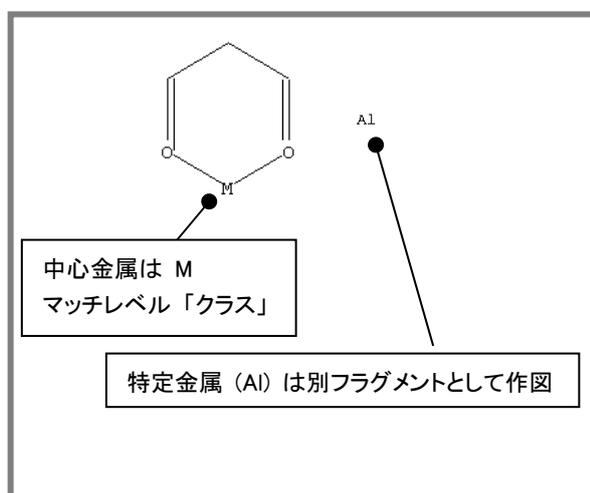
- ・ 配位化合物の例



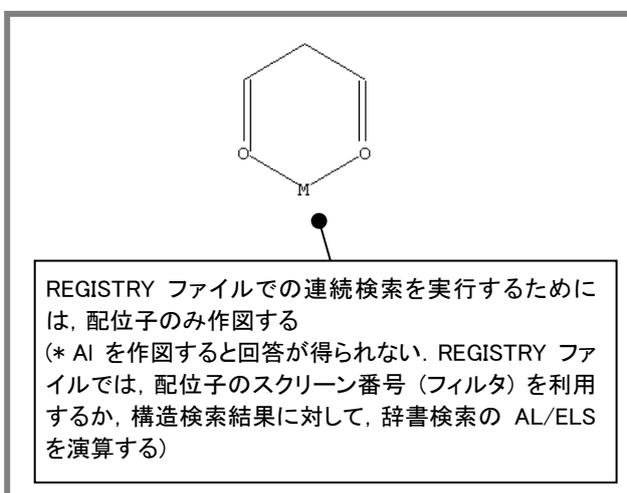
REGISTRY ファイル	MARPAT ファイル
<p>(1) 配位子の構造が明確な場合</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin: 5px 0;"> <p>RN 単成分</p> </div> <p>(2) 著者が塩として記載している場合は、塩として収録される。</p>	<p>(4) 配位子の構造が明確な場合 (中心金属 G3)</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin: 5px 0;"> <p>MSTR 1</p> <p>G3 = Al G3 = R&lt;TX "metal"&gt; / (SC Al)</p> </div>
CAplus/CA ファイル	
<p>(3) 配位子の構造が不明確な場合は、CAS 登録番号は付与されない。ただし、非特定誘導体として索引されている可能性がある。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 配位子の CAS 登録番号 + D</li> <li>- 中心金属の CAS 登録番号 + D</li> </ul>	<p>(5) 著者が塩として記載している場合は、塩として収録される。</p>

- 作図例

【 MARPAT ファイル用の構造質問式】



【REGISTRY ファイルからの連続検索を実行する場合】



## マッチレベルのまとめ

■ マッチレベル, 元素数レベルと回答の比較表 (検索タイプは部分構造検索)

構造質問式中のノード	マッチレベル	元素数レベル	回答
Br	ATOM	*	Br
	CLASS	*	Br <b>X</b>
	ANY	*	Br X <b>R</b>
X	ATOM	*	Br, Cl, F, I, At
	CLASS	*	Br, Cl, F, I, At <b>X</b>
	ANY	*	Br, Cl, F, I, At X <b>R</b>
Na	ATOM	*	Na, alkali metal atom/ion
	CLASS	*	Na, alkali metal atom/ion <b>M</b>
	ANY	*	Na, alkali metal atom/ion M <b>R</b>
N	ATOM	*	N
	CLASS	*	N <b>Q</b>
	ANY	*	N Q <b>R</b>
Q	ATOM	*	N, O, S
	CLASS	*	N, O, S <b>Q</b>
	ANY	*	N, O, S, Q <b>R</b>
CH2	ATOM	*	CH2
	CLASS	限定	CH2 AlkyK(1-2) C>
		限定しない	CH2 AlkyK(1-2) C> <b>AK</b>
ANY	限定しない	CH2 AlkyK(1-2) C> AK <b>R</b>	
AK	ATOM	*	CH2-CH2-CH2
	CLASS	*	CH2-CH2-CH2 AlkyK(1-5) C>, <b>AK</b>
	ANY	*	CH2-CH2-CH2 AlkyK(1-5) C>, AK <b>R</b>

\* 元素数レベルの指定は回答に影響しない。

構造質問式中のノード	マッチレベル	元素数レベル	回答
-CH2-CH2-CH3 -n-Pr -AK 元素数:炭素 3 (飽和, 直鎖)	ATOM	*	-CH2-CH2-CH3
	CLASS	限定	-CH2-CH2-CH3 <del>-Alkyl&lt;(1-5) C&gt;</del>
		限定しない	-CH2-CH2-CH3 -Alkyl<(1-5) C> <del>-AK-</del>
ANY	限定しない	-CH2-CH2-CH3 -Alkyl<(1-5) C> -AK- <del>-R</del>	
ピリジン環	ATOM	*	ピリジン環
	CLASS	限定	ピリジン環 Hy <(1) N (0-) O> Hy <(0-2) N>
		限定しない	ピリジン環 HY <(1) N (0-) O> HY <(0-2) N> HY heteroaryl
ANY	限定しない	ピリジン環 HY <(1) N (0-) O> HY <(0-2) N> HY heteroaryl R	
HY	ATOM	*	ピリジン環
	CLASS	*	ピリジン環 HY <(1) N (0-) O> HY <(0-2) N> HY <(2) O> HY heteroaryl
		限定しない	ピリジン環 HY <(1) N (0-) O> HY <(0-2) N> HY <(2) O> HY heteroaryl R
ANY	限定しない	ピリジン環 HY <(1) N (0-) O> HY <(0-2) N> HY <(2) O> HY heteroaryl R	
-HY- 元素数:窒素 1	ATOM	*	morpholinyl
	CLASS	限定	morpholinyl Hy <(1) N (0-) O> Hy <(1-) Q (1-) N>
		限定しない	morpholinyl Hy <(1) N (0-) O> Hy <(1-) Q (1-) N> Hy heteroaryl
ANY	限定しない	morpholinyl Hy <(1) N (0-) O> Hy <(1-) Q (1-) N> Hy heteroaryl R	

\* 元素数レベルの指定は回答に影響しない。





化学情報協会

**情報事業部**

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

TEL: 0120-003-462 FAX: 03-5978-4090

URL: [www.jaici.or.jp](http://www.jaici.or.jp)

E-mail: [support@jaici.or.jp](mailto:support@jaici.or.jp)