

## マーカッシュ構造をDB化し構造検索を実現

### ■Markush Search

Markush Search は、特許出願などに用いられるマーカッシュ構造をデータベースに登録し、エニュメレーションすることなく、部分構造検索や完全一致検索を実現する JChem Base、JChem Cartridge および Instant JChem 用のアドオンです。

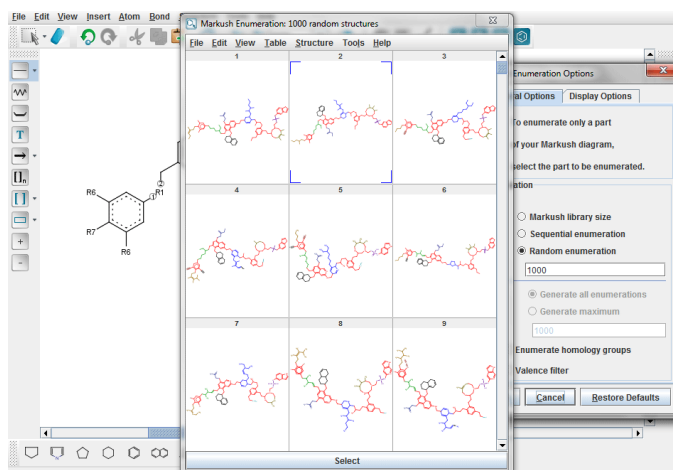
Markush Search は現在下記のような一般化表現をサポートしています。

- R-group (無限のネスティングをサポート)
- アトムボンドリスト
- リンクノード及びリピーティングユニット
- ポジションバリエーションボンド
- ホモロジーバリエーション (alkyl, aryl などのジェネリックアトム。ユーザーによる定義も可能)

Markush Search は Markush Enumeration plugin を包含しています。これらの2つのツールを用いることにより、複雑なマーカッシュ構造の解析やマーカッシュ構造によって記述されたケミストリースペースのブラウジングを格段に容易にします。また、DARC format のインポート機能を実装しており、Tomson Reuters 社の提供する特許のデータベース MMS (Merged Markush Service) を利用することができます。

### ■Markush Enumeration

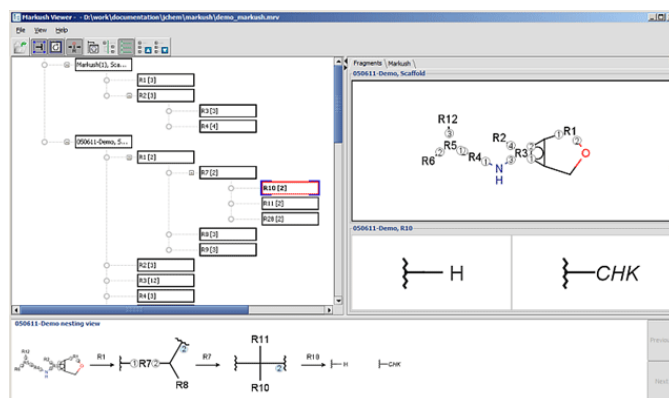
マーカッシュ構造から個別構造を生成したり、個別構造の数をカウントすることができます。



### ■Markush Viewer

多くの R グループが定義された複雑なマーカッシュ構造を見やすく表示することは容易ではありません。

Markush Viewer はマーカッシュ構造をインポートして、視覚的に見やすく表示します。マーカッシュ構造の骨格とすべての R グループは階層的なリスト形式により表示されます。ユーザーはクリックすることによりそれぞれの R グループに異なる置換基を指定して表示させることができます。



### ■動作環境

- ソフトウェア要件

項目	内容
OS	Windows8.1(32bit/64bit) Windows10(32bit/64bit)

※ご検討時にお問い合わせください。

**Patcore, Inc.**  
〒100-0005 東京都千代田区丸の内 1-7-12 サピアタワー26F

**富士通株式会社**  
ソーシャルデザイン事業本部 デジタルラボ事業部  
〒212-0014 神奈川県川崎市幸区大宮町 1 番地 5 JR 川崎タワー24 階

URL: <https://www.fujitsu.com/jp/patcore/>

Copyright © Patcore, Inc., All rights reserved. は Patcore, Inc. の登録商標です。  
その他の会社名、商品名、製品名は、一般に各社の登録商標または商標です。  
本ドキュメントの記載内容、製品およびサービスの仕様は予告なく変更されることがあります。

**FUJITSU**