

特許調査ツール CAS Scientific Patent Explorer オンラインセミナー

化学情報協会 情報事業部

2021年8月31日

目次

1. CAS Scientific Patent Explorer リリース
2. 特許情報検索
3. Patents 検索の解析機能
4. より高度な使い方
5. 化学物質関連特許の検索
6. Substances 検索の解析機能

CAS Scientific Patent Explorer リリース

特許調査の悩み

3

検索式の作成が
難しい

生死情報の
調査方法は？

特許の動向を
把握したい



化学物質の特許を
調査する方法は？

直感的に特許調査ができる CAS Scientific Patent Explorer をリリース!

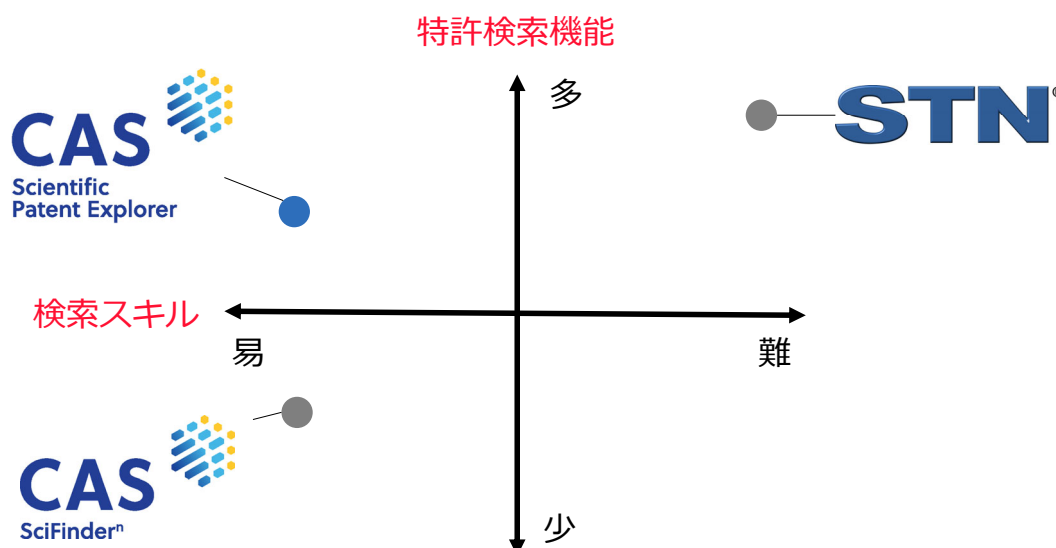
- 化学物質の情報と特許情報を組み合わせた特許調査ツール
- 様々な解析機能を利用できる



© 2021 化学情報協会

CAS Scientific Patent Explorer の位置づけ

CAS Scientific Patent Explorer を用いれば、特許検索のスキルに関わらず特許調査が可能



© 2021 化学情報協会

| | STN | | | | CAS Scientific Patent Explorer |
|--------|---|-----------------|-------------------------|--|---|
| | CAplus | WPI | INPADOCDB/ INPAFAMDB | 特許全文データ ベース | |
| 特許発行国数 | 63 | 61 | 約 100 | 13* ¹ | 115 |
| 分野 | 化学および 周辺分野 | 全産業 | 全産業 | 全産業 | 全産業 |
| 索引 | ○ | ○ | × | △ (USPATFULL/ USPAT2 には CAS が作成した 索引情報を収録) | △ (CAS が作成した索引情報, 製剤・配合情報, 反応情報 を収録) |
| 特許全文 | △* ² | △* ² | × | ○ | 約 60* ³ |
| 法的状況 | ○ | × | ○ | ○ INPADOC 由来 | ○ |
| 特長 | 【STN の特長】 <ul style="list-style-type: none"> ● コマンドによる高度な検索および解析が可能 ● 特許だけでなく文献データベース, 規制・安全性など科学技術分野を包括する約 100 のデータベースを利用できる。 | | | | <ul style="list-style-type: none"> ● 直感的な操作で検索が可能 ● 多様な解析機能 |

*1 AUPATFULL, CANPATFULL, CNFULL, DEFULL, EPFULL, FRFULL, GBFULL, INFULL, JPFULL, KRFULL, PCTFULL, USPATFULL, USPAT2

*2 一部の特許発行国についてはクレームを収録している

*3 特許全文の収録は特許発行国の特許種別や年代により異なる

© 2021 化学情報協会

2 つの検索方法

CAS Scientific Patent Explorer (<https://patentexplorer.cas.org/>)

The screenshot shows the CAS Scientific Patent Explorer homepage. It features a navigation menu, a feedback button, and a main content area with the following text:

CAS Scientific Patent Explorer offers a unique combination of patent analysis and breadth of patent content with world renowned CAS chemical capabilities and content to provide a powerful solution for patent professionals and scientists in an easy to use tool.

Select a search type to begin...

Substances
Search by chemical structure, chemical name, CAS RN, etc.

Patents
Search by keywords, claims, Patent Number, Assignee, etc.

Two callout boxes provide detailed search criteria:

- 化学物質検索 (Chemical Substance Search):**
 - 構造質問式 (Structural Formula): CAS RN®, 化学物質名称 (Chemical Name)
 - SMILES, InChi, MolFile
- 特許情報検索 (Patent Information Search):**
 - キーワード (Keywords), 特許分類 (Patent Classification), 特許番号 (Patent Number)
 - 出願番号 (Application Number), 特許発行日 (Patent Issue Date), 出願日 (Application Date)
 - 特許出願人 (Patent Applicant), 発明者 (Inventor)

© 2021 化学情報協会

特許情報検索

検索タイプ

9

Patents には 3 つの検索タイプがある



| 検索タイプ | 利用シーン |
|----------|--|
| Simple | 検索語を入力するだけの簡単な検索 |
| Advanced | 複数の検索語を組み合わせた検索 |
| Chemical | 化学物質名, CAS RN®, 構造などから化学物質を調べ, その物質に関する特許を検索 |

キーワードを入力するだけのシンプルな検索

Simple Advanced Chemical

All Databases HERBICIDE* 件数 ~ 421K Search

特許の種類, 発行国を選択

検索対象を選択することも可能

All Databases TAC:(HERBICIDE*) ~ 179K Search

| Keywords Fields | Assignee Fields |
|------------------------------|-----------------------|
| TA Title/Abstract | ANC Current Assignee |
| TAC Title/Abstract/Claims | Other Fields |
| TTL Title | IN Inventor Name |
| ABST Abstract | PBD Publication Date |
| Classification Number Fields | APD Application Date |
| IPC IPC | PN Publication Number |
| CPC CPC | |

Search Helper >

© 2021 化学情報協会

Advanced Patent Search

複数の検索語を組み合わせた検索も可能

Simple Advanced Chemical

Patent type

- Application
- Patent
- Utility

All databases (115/115)

- IP 5
- United States (US)
- China (CN)
- EPO (EP)
- Japan (JP)
- Korea (KR)
- Major jurisdictions
- WIPO (WO)
- Austria (AT)

Field search 検索対象を指定できる

Title/Abstract/Claims RESISTANT PLANT*

AND IPC A01P13/00 OR A01P13/02 IPC Helper

AND Application Date 2001/06/01 To YYYYMMDD

演算子 (AND, OR, NOT) を利用可能

(TAC_ALL:(RESISTANT PLANT*)) AND IPC:(A01P13/00 OR A01P13/02) AND APD:[20010601 TO *]

検索式が自動的に作成される

Edit search Combine searches

Found 1,035 patents 件数

Includes Machine Translations for Title or Abstract On にすると機械翻訳したキーワードも含めて検索

Clear Search

© 2021 化学情報協会

検索結果は見やすい表形式で表示される

特許番号, 標題, 法的状況, 特許発行日, 出願番号など

特許番号や標題をクリックすると詳細情報が表示される

© 2021 化学情報協会

特許全文の特定項目 (クレームなど) だけを選択してすばやく内容をチェック

3項目に分割

Overviewでは非英語特許の標題と抄録が英語に機械翻訳されている

特許番号をクリックすれば他の特許の詳細情報に切り替わる

© 2021 化学情報協会

公報も同時に表示されるのでテキストに含まれていない図や表などを確認できる

公報で構造を確認することで内容理解に役立つ

© 2021 化学情報協会

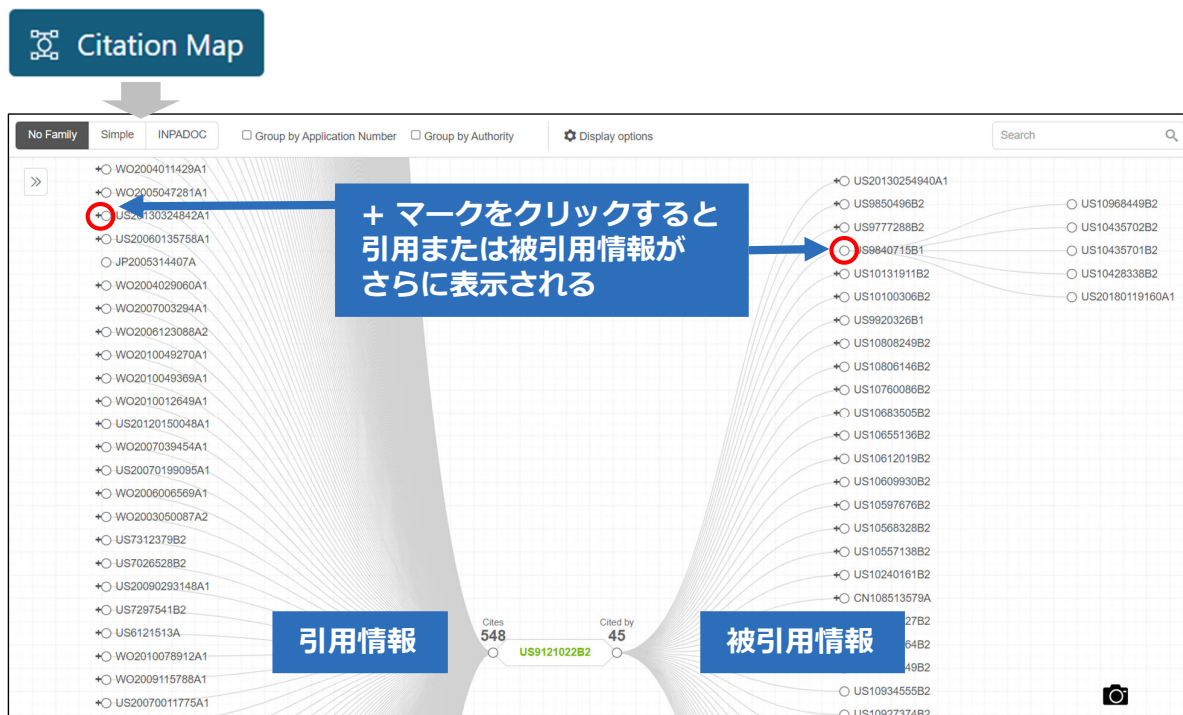
引用情報に加え，被引用情報が表示されるので，特許評価に活用できる

US9121022 は 45 回引用されている

| Publication Number/Title | Current Assignee | Application Date | Publication Date |
|--|---|------------------|------------------|
| US3687808A Synthetic polynucleotides | BOARD OF TRUSTEES OF THE LELAND STANFORD JUNIOR UNIV.:THE | 14 Aug 1969 | 29 Aug 1972 |
| US3791932A Process for the dem... components having sp... | ZONA CORPORATION | 27 Jan 1972 | 12 Feb 1974 |
| CN108513579A 新颖的RNA导向性核酸酶及其用途 | 孟山都技术公司 | 07 Oct 2016 | 07 Sep 2018 |
| CN108738326A 新型CRISPR相关转座酶及其用途 | 孟山都技术公司 | 29 Dec 2016 | 02 Nov 2018 |

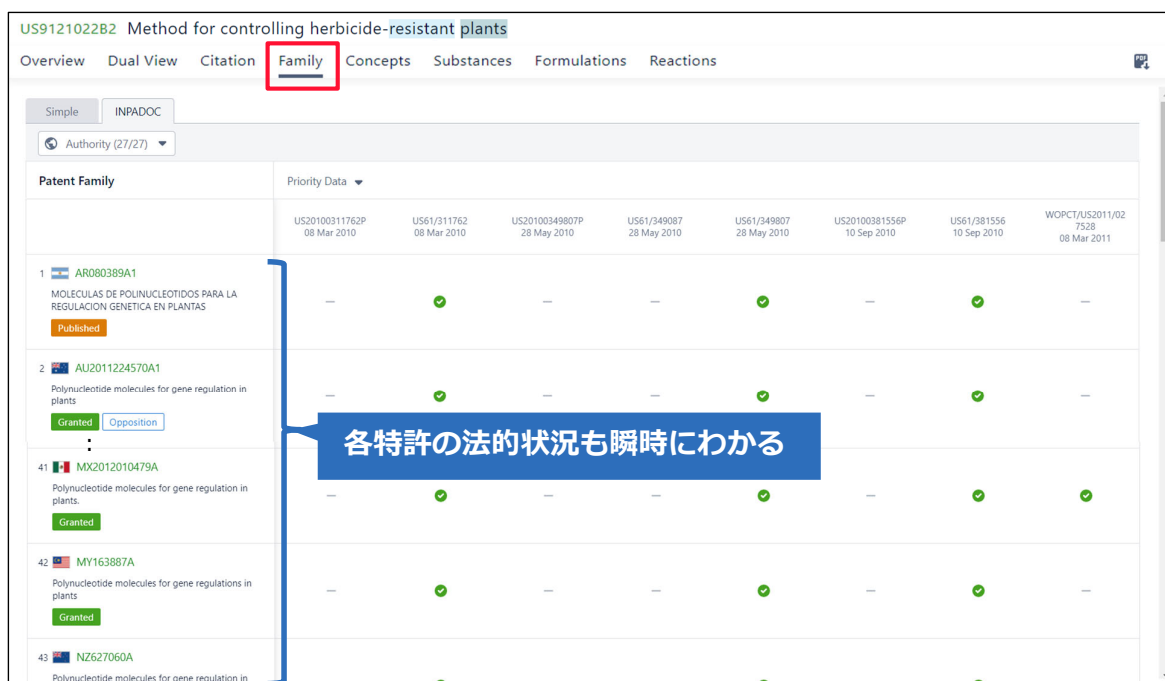
© 2021 化学情報協会

引用・被引用情報をツリー形式で確認



© 2021 化学情報協会

特許ファミリーの各国の法的状況が一目でわかる



© 2021 化学情報協会

化学関連分野の特許には**人手で索引が付与**されており、
特許の主題を把握できる

US20130023416A1 Methods and compositions to produce rice resistant to accase inhibitors

Overview Dual View Citation Family **Concepts** Substances Formulations Reactions

Flower

Flower anther

Flower pistil

Promoter (genetic element)
Role: Biological Study, Unclassified

Plant gene
Modifier: for acetyl-CoA carboxylase
Role: Biological Study, Unclassified; Properties

Leaf

Substitution mutation

Plant breeding

Plant cell

Plant tissue culture

Hypocotyl

Meristem

特許中で発明者が強調している点や主題に関わる概念が収録されている

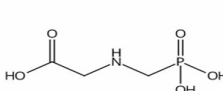
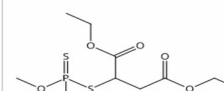
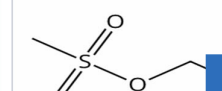
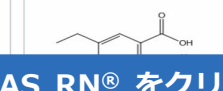
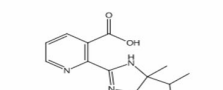
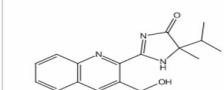
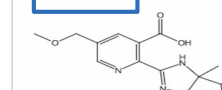
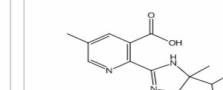
© 2021 化学情報協会

発明に関する重要な化学物質が索引されているので、
化学関連特許の内容把握が容易になる

US20120023601A1 Herbicide-resistant sunflower plants and methods of use

Overview Dual View Citation Family Concepts **Substances** Formulations Reactions

12 Substances

| | | | |
|--|--|---|--|
| <p>1 1071-83-6</p>  <p>C₃H₈NO₅P Glyphosate</p> <p>View 8,416 Relevant Patents</p> | <p>2 121-75-5</p>  <p>C₁₀H₁₉O₆PS₂ Malathion</p> <p>View 1,666 Relevant Patents</p> | <p>3 62-50-0</p>  <p>C₃H₈O₃S Ethyl methanesulfonate</p> <p>View 749 Relevant Patents</p> | <p>4 81335-77-5</p>  <p>C₁₄H₁₇N₃O₃ Imazapic</p> <p>View 613 Relevant Patents</p> |
| <p>5 81334-34-1</p>  <p>C₁₃H₁₅N₃O₃ Imazapyr</p> <p>View 713 Relevant Patents</p> | <p>6 81335-37-7</p>  <p>C₁₇H₁₇N₃O₃ Imazaquin</p> <p>View 693 Relevant Patents</p> | <p>7 114311-32-9</p>  <p>C₁₅H₁₉N₃O₄ Imazamox</p> <p>View 724 Relevant Patents</p> | <p>8 104098-48-8</p>  <p>C₁₄H₁₇N₃O₃ Imazapic</p> <p>View 613 Relevant Patents</p> |

CAS RN® をクリックすると、物性情報も含めた物質の詳細情報が表示される

© 2021 化学情報協会

調査が難しい製剤・配合の情報も理解しやすいように表にまとめられている

WO2014101237A1 Photolysis-resistant pesticide and applications thereof

Overview Dual View Citation Family Concepts Substances **Formulations** Reactions

13 Formulations

1. 20% Atrazine Suspension: Pesticides
[View CAS Formulus Detail](#)
 Location: Example 5, Table 8
 Purpose: Pesticides
 Target: insect pest

製剤・配合情報の特許の記載位置, 目的, ターゲット

| # | Component | Function | Amount Reported |
|---|----------------------------------|-----------------------|-----------------|
| 1 | Atrazine | herbicide | 20 wt % |
| 2 | 4-Methoxycinnamic acid | - | 3 wt % |
| 3 | Octocrylene | UV absorbers | 2 wt % |
| 4 | 2,6-Di-tert-butyl-4-methylphenol | - | 4 wt % |
| 5 | Silica | filler; solid carrier | 0.6 wt % |

成分名 **機能** **容量**


© 2021 化学情報協会

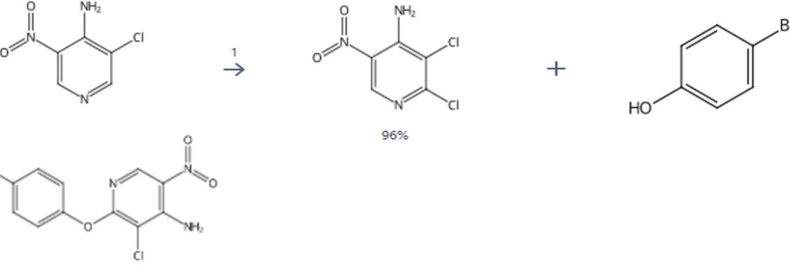
特許中の重要な有機化学反応情報も収録されている

EP3747868A1 Substituted phenoxy pyridines, their salts and use of said compounds as herbicidal agents

Overview Dual View Citation Family Concepts Substances Formulations **Reactions**

22 Reactions

1  Steps: 1 Yield: 96%

17  Steps: 2

収率

多段階反応も収録されている

© 2021 化学情報協会

特定の条件を含めたり除くことで調査目的に沿った回答のみ得られる

© 2021 化学情報協会

必要な項目のみを選択しエクスポートすることで、結果のスクリーニングを効率アップ

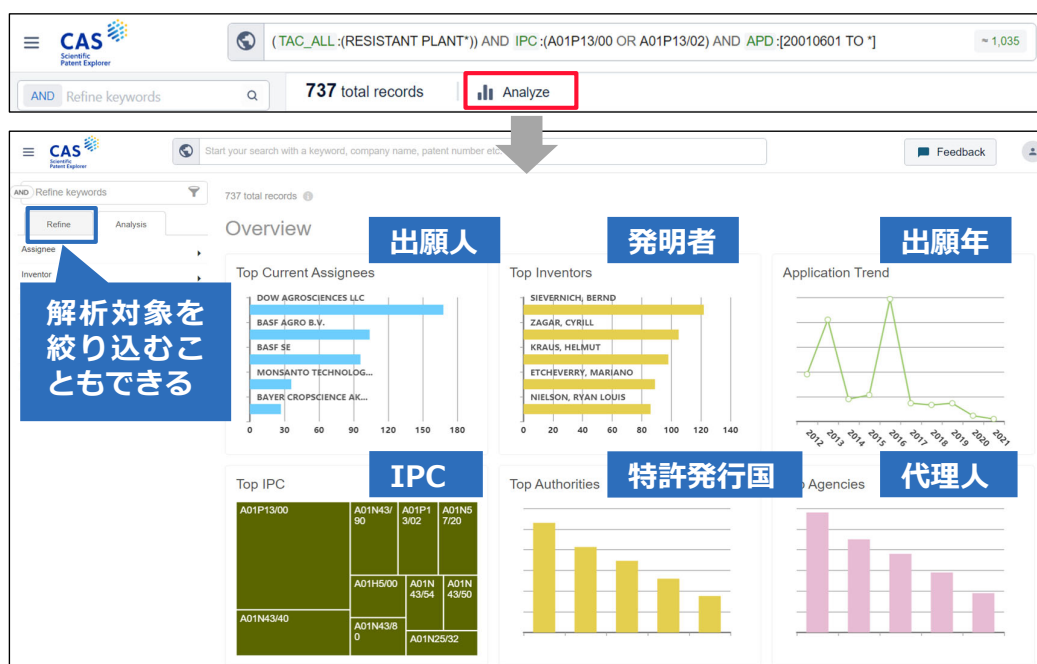
© 2021 化学情報協会

Patents 検索の解析機能

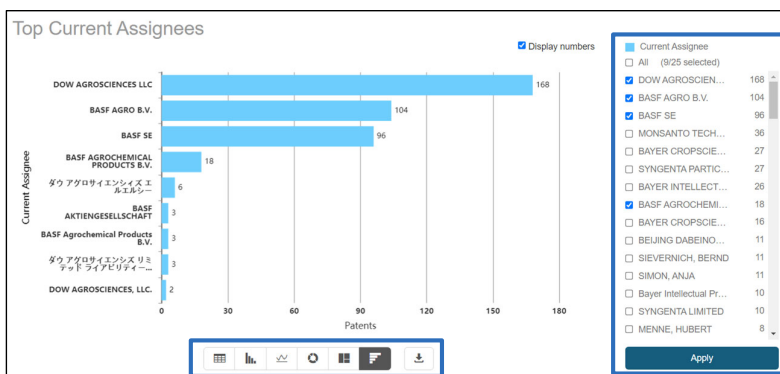
特許検索結果の解析

25

様々な解析結果が瞬時に表示され、複数の観点から特許の動向把握が行える



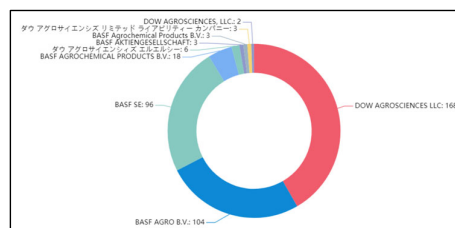
グラフに含める項目を選択できるので、目的の項目だけの比較が容易になる



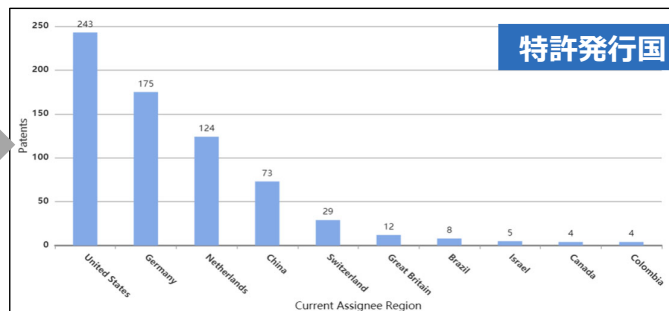
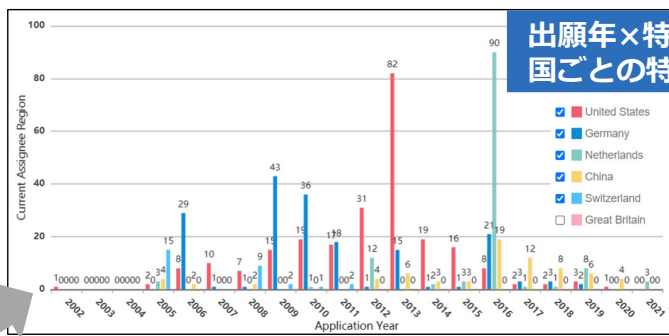
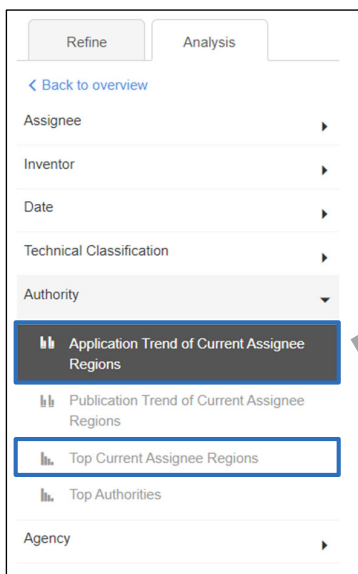
グラフ化する対象を選択

表、円グラフなどの切り替えが可能

| Current Assignee | Patent num |
|---------------------------------|------------|
| DOW AGROSCIENCES LLC | 168 |
| BASF AGRO B.V. | 104 |
| BASF SE | 96 |
| BASF AGROCHEMICAL PRODUCTS B.V. | 18 |
| ダウアグロサイエンシズ エルエルシー | 6 |
| BASF AKTIENGESELLSCHAFT | 3 |
| BASF Agrochemical Products B.V. | 3 |



30 種類の解析結果が用意されているので、分析業務の効率が向上する



ナノ粒子による Drug Delivery System について調査する

The screenshot shows a patent search interface with the following elements:

- Search Mode:** Simple, Advanced, Chemical (selected).
- Patent type filters:**
 - Patent type
 - Application
 - Patent
 - Utility
- Field search:**
 - Field 1: Title/Abstract/Claims, DRUG DELIVERY SYSTEM*
 - Field 2: AND, Title/Abstract/Claims, NANOSPHER* OR NANOPARTICLE*
 - + Add Field
- Database filters:**
 - All databases (115/115)
 - IP 5
 - United States (US)
 - China (CN)
 - EPO (EP)
 - Japan (JP)
 - Korea (KR)
 - Major jurisdictions
 - WIPO (WO)
- Search Query:** (TAC_ALL:(DRUG DELIVERY SYSTEM*)) AND (TAC_ALL:(NANOSPHER* OR NANOPARTICLE*))
- Results:** Found 5,984 patents
- Options:** Edit search, Combine searches, Includes Machine Translations for Title or Abstract (toggle on), Clear, Search

© 2021 化学情報協会

より高度な使い方

検索語の近接性を指定するには近接演算子を利用する

The screenshot shows the 'Advanced' search tab in a patent database. The initial search is for 'FLAVOR OR AROMA OR ODOR' AND 'EXTRACT* OR DISTILL*'. An 'Edit search' button is clicked, leading to a 'Switch to Field Search' screen. The search formula is updated to `TACD_ALL:((FLAVOR OR AROMA OR ODOR)$W5(EXTRACT* OR DISTILL*))`. Callouts explain the changes: 'AND から \$Wn に変更' (Change from AND to \$Wn), '近接演算子' (Proximity operator), and 'ワイルドカード' (Wildcard).

演算子, ワイルドカード

- AND, OR, NOT
 - 優先順位 : NOT > AND > OR
- 近接演算子

| | 定義 | 例 |
|--------|-------------------------------|----------------------|
| \$Wn | 入力順序に関係なく検索語の間は n 個以下の語が存在する | CELLULOSE \$W2 PULP |
| \$PREn | 入力順序通りに検索語の間は n 個以下の語が存在する | SOLAR \$PRE5 BATTER* |
| \$WS | 入力順序に関係なく検索語の間は 99 個以下の語が存在する | DISPLAY \$WS HDMI |

- ワイルドカード

| | 定義 | 例 |
|---|------------------------------|----------|
| * | 何文字でもよい. * は単語の中間もしくは末尾に使用可能 | ELECTR* |
| ? | ちょうど一文字. ? は単語の中間もしくは末尾に使用可能 | GRA???NE |

複雑な検索を実行したい場合は集合間演算が役立つ

集合間演算では, S# を最大 20 個まで利用可能

© 2021 化学情報協会

機械翻訳

Includes Machine Translations for Title or Abstract

を指定すると標題

または抄録について翻訳語も含めた検索が実行される

| 質問式の言語 | 翻訳される言語 | 翻訳語の検索対象 |
|--------|---------------------------------------|--|
| 英語 | 英語 日本語 中国語 ドイツ語*1 フランス語*1 | 英語, 日本語*2, 中国語*2, ドイツ語*2, フランス語*2 の標題または抄録 |
| 日本語 | | |
| 中国語 | | |

*1 ドイツ語, フランス語には翻訳されない場合がある

*2 収録されている場合

© 2021 化学情報協会

化学物質関連特許の検索

2つの検索方法

35

化学物質や化学物質関連特許は Substances から検索する

CAS Scientific Patent Explorer

Select a search type to begin...

Substances
Search by chemical structure, chemical name, CAS RN, etc.

Patents
Search by keywords, claims, Patent Number, Assignee, etc.

化学物質検索

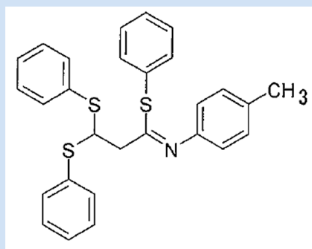
構造質問式 CAS RN® 化学物質名称
SMILES InChi MolFile

特許情報検索

キーワード 特許分類 特許番号
出願番号 特許発行日 出願日
特許出願人 発明者

実施例中の化学物質 (特定化学物質)

【0141】
 合成例 1
 フェニル-N-(4-メチルフェニル)-3,3-ビス(フェニル
 スルファニル)プロパンイミドチオエートの合成
 【0142】
 【化23】



化合物名

構造図

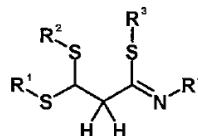
：
 【0169】
 上記合成例と同様の方法により得られる本発明の
 式 (I) の化合物を第 1 表~第 4 表に示す。代表化

合物の物性値を第 5 表に示す。尚、上記合成例の
 化合物も表に示す。

：

【0171】
 【表1】
 第 1 表

表形式



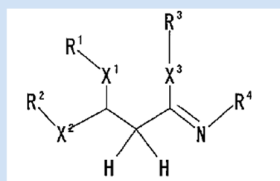
| No. | R ¹ | R ² | R ³ | R ⁴ |
|-----|-----------------------|----------------|----------------|----------------|
| 1-1 | Ph | Ph | Ph | Ph |
| 1-2 | 2-CH ₃ -Ph | Ph | Ph | Ph |
| 1-3 | 3-CH ₃ -Ph | Ph | Ph | Ph |
| 1-4 | 4-CH ₃ -Ph | Ph | Ph | Ph |
| 1-5 | 2-F-Ph | Ph | Ph | Ph |
| 1-6 | 3-F-Ph | Ph | Ph | Ph |

(JP2010-132583)

© 2021 化学情報協会

特許請求項の化学物質 (マルクーシュ構造)

【請求項 1】
 式 (I) :
 【化 1】



基本骨格

置換基

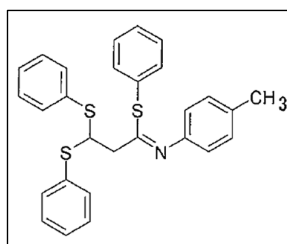
式中、
 X¹, X² 及び X³ は、それぞれ独立して、O 又は S を示し、
 R¹ および R² は、それぞれ独立して、置換されていてもよいアルキル、置換されていてもよいシクロアルキル、置換されていてもよいアルケニル、置換されていてもよい芳香族炭化水素基、又は置換されていてもよい複素環式基を示し、
 また、R¹ と R² は、-X¹-C-X²- と一緒になって環を形成してもよく、
 R³ は、置換されていてもよいアルキル、置換されていてもよいシクロアルキル、置換されていてもよいアルケニル、置換されていてもよい芳香族炭化水素基、又は置換されていてもよい複素環式基を示し、そして
 R⁴ は、置換されていてもよいアルキル、置換されていてもよいシクロアルキル基、・・・

(JP2010-132583)

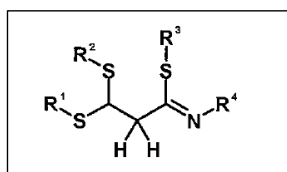
© 2021 化学情報協会

CAS の専門家が特許請求項や実施例中の化学物質を
人手で収集

- 特定化学物質
(CAS REGISTRY)



- マルクーシュ構造
(CAS Markush)



物質の記載方法によらず
特許中の化学物質を検索できる

© 2021 化学情報協会

Substances - 検索メニュー

39

2 つの検索メニューから化学物質を検索できる

- Structure Search
 - ✓ 構造質問式
- Text Search
 - ✓ CAS RN®
 - ✓ 化学物質名称 など

STNext, CAS SciFinder[®], 他の構造作図ツールで
作図した構造質問式も利用できる

© 2021 化学情報協会

構造質問式を使った検索

The screenshot shows the Structure Search interface with a chemical structure of cyclohexane-1,4-dione. The interface includes a toolbar on the left with drawing tools, a search bar at the top, and search options on the right. The search options are categorized into '検索対象' (Search Target) and '検索タイプ' (Search Type).

検索対象 (Search Target): Substances, Patents, Markush

検索タイプ (Search Type): As Drawn (selected), As Substructure, As Similarity

作図ツール (Drawing Tools): 柔軟な条件付けが可能 (Flexible conditions are possible)

© 2021 化学情報協会

Structure Search - 検索対象と検索タイプ

検索対象と検索タイプを指定できる

The diagram illustrates the search options and their corresponding results. The search options are categorized into '検索対象' (Search Target) and '検索タイプ' (Search Type).

検索対象 (Search Target): Substances, Patents, Markush

検索タイプ (Search Type): As Drawn, As Substructure, As Similarity

The results are categorized into three search targets:

- Substances**: 特定化学物質 (Specific chemical substances)
- Patents**: 化学物質関連特許 (Chemical substance related patents)
- Markush**: マルクーシュ構造 (Markush structure)

The search types and their corresponding hits are summarized in the following table:

| 検索タイプ | ヒットする構造 |
|--------------------------|--------------------------------------|
| As Drawn (完全一致検索) | 作図した構造どおりの物質 (ポリマーや塩, 同位体, 互変異性体を含む) |
| As Substructure (部分構造検索) | 作図した構造にあらゆる置換基を許容した物質 |
| As Similarity* (類似性構造検索) | 作図した構造どおりの物質, および作図した構造と類似する物質 |

* STNext にはない Substances 特有の検索タイプ

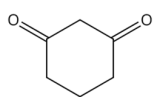
© 2021 化学情報協会

参考：検索タイプの違い

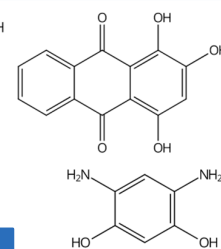
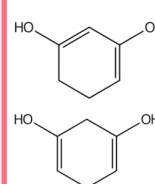
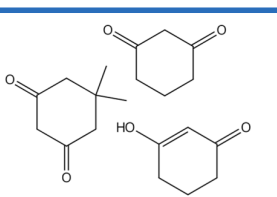
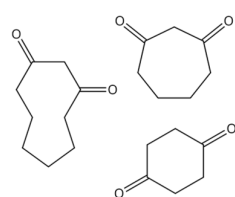
As Similarity では、As Substructure では得られない **作図した構造と類似する物質** も得られる

- 作図した元素の位置や種類が異なる物質
- 作図した構造を完全に含まない物質
- 作図した環構造と異なる物質

構造質問式



As Similarity : 1153 件 (類似度 65 以上)



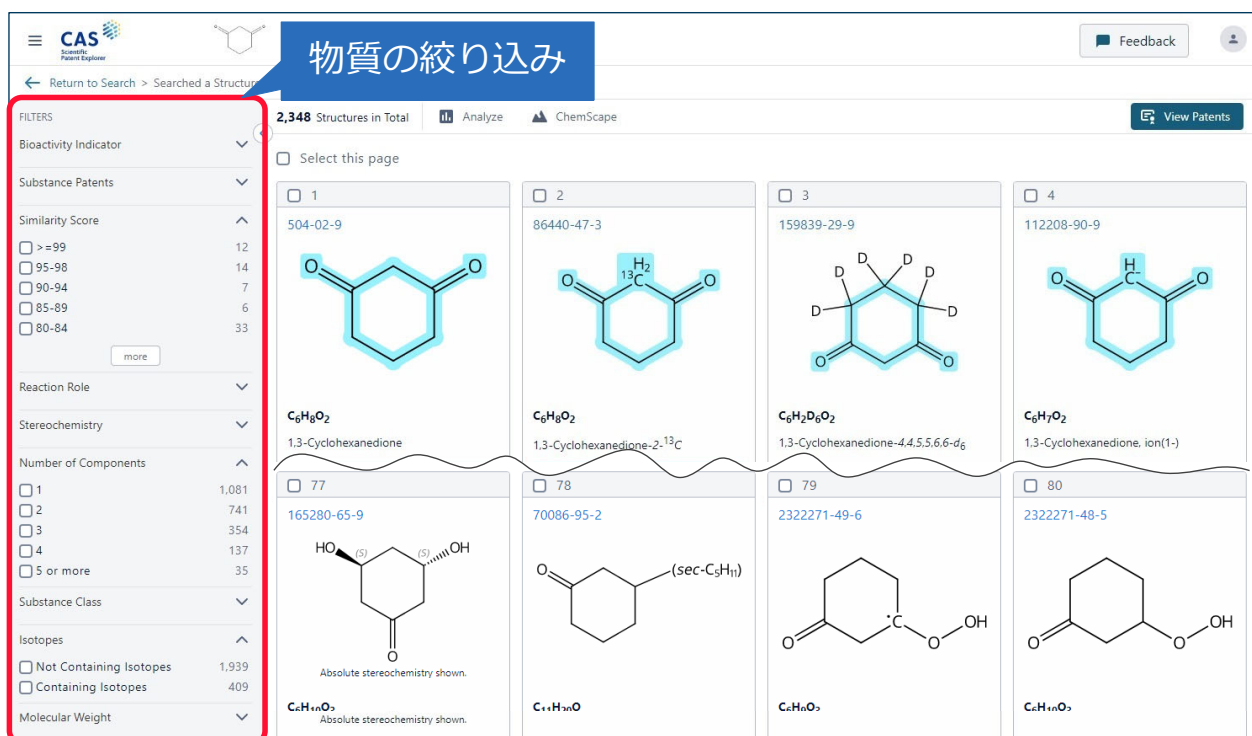
検索日：2021年7月29日

As Substructure : 83 万件以上

Substances - 物質検索の結果

43

化学物質の一覧が表示され、詳細を確認できる



物質の絞り込み

2,348 Structures in Total

Filters:

- Bioactivity Indicator
- Substance Patents
- Similarity Score
 - >=99 (12)
 - 95-98 (14)
 - 90-94 (7)
 - 85-89 (6)
 - 80-84 (33)
- Reaction Role
- Stereochemistry
- Number of Components
 - 1 (1,081)
 - 2 (741)
 - 3 (354)
 - 4 (137)
 - 5 or more (35)
- Substance Class
- Isotopes
 - Not Containing Isotopes (1,939)
 - Containing Isotopes (409)
- Molecular Weight

Results:

| Structure ID | Chemical Name | Formula |
|--------------|---|---|
| 504-02-9 | 1,3-Cyclohexanedione | C ₆ H ₈ O ₂ |
| 86440-47-3 | 1,3-Cyclohexanedione-2- ¹³ C | C ₆ H ₈ O ₂ |
| 159839-29-9 | 1,3-Cyclohexanedione-4,4,5,5,6,6-d ₆ | C ₆ H ₂ D ₆ O ₂ |
| 112208-90-9 | 1,3-Cyclohexanedione, ion(1-) | C ₆ H ₇ O ₂ |
| 165280-65-9 | Absolute stereochemistry shown. | C ₆ H ₁₀ O ₂ |
| 70086-95-2 | (sec-C ₃ H ₇) | C ₉ H ₁₆ O |
| 2322271-49-6 | Absolute stereochemistry shown. | C ₈ H ₁₆ O ₂ |
| 2322271-48-5 | Absolute stereochemistry shown. | C ₈ H ₁₆ O ₂ |

CAS RN® をクリックすると、物性情報や同義名を確認できる

基本的な物性情報

| Key Physical Properties | Value | Condition |
|-------------------------|--------------------------|--------------------------|
| Molecular Weight | 112.13 | - |
| Melting Point | 105.5 °C | - |
| Density | 1.0861 g/cm ³ | Temp: 91 °C |
| pKa (Predicted) | 5.26±0.20 | Most Acidic, Temp: 25 °C |

その他の物性情報

| Properties | Value | Condition | Source |
|------------|--------------------------|--------------|--------|
| Density | 1.0861 g/cm ³ | Temp: 91 °C | (1) CA |
| Density | 1.0466 g/cm ³ | Temp: 152 °C | (1) CA |
| Density | 1.0738 g/cm ³ | Temp: 110 °C | (1) CA |
| Density | 1.079 g/cm ³ | Temp: 102 °C | (1) CA |

同義名
IUPAC 名や慣用名、商品名など

© 2021 化学情報協会

View Patents をクリックすると、化学物質に関する特許情報を検索できる

特許をまとめて検索

この化学物質の特許を検索

© 2021 化学情報協会

Search For : Markush で特許請求項中の一般式 (マルクーシュ構造) を検索できる

特許中の記載位置

特許をまとめて検索

Patent claim 1

View Patents

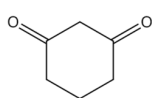
特許レコードを表示

© 2021 化学情報協会

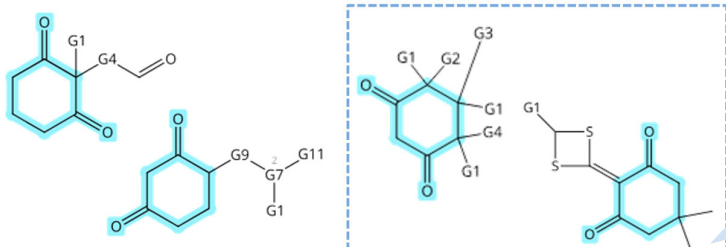
参考 : Substances/Patents と Markush の違い

化学物質の収録方針や検索機能が異なるため、回答となる特許に違いが生じる。目的に合わせて併用するとよい。

構造質問式

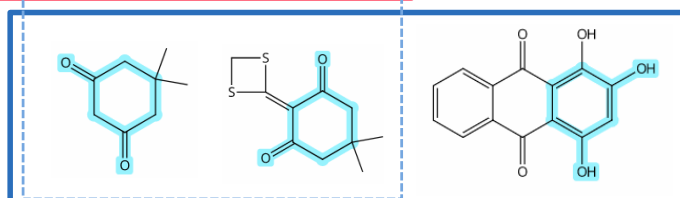


Markush 1831 物質 (688 特許)



同じ特許由来の化学物質

Markush では、置換基が一般式で記載されている場合や、多数の置換基の組み合わせがある物質もヒットする



Substances 83 万物質以上/Patents 2 万特許以上

検索日 : 2021 年 7 月 29 日
検索タイプ : As Substructure

Substances 検索の解析機能

Substances 検索の解析機能

49

化学物質に関する特許情報や構造の類似性を解析できる

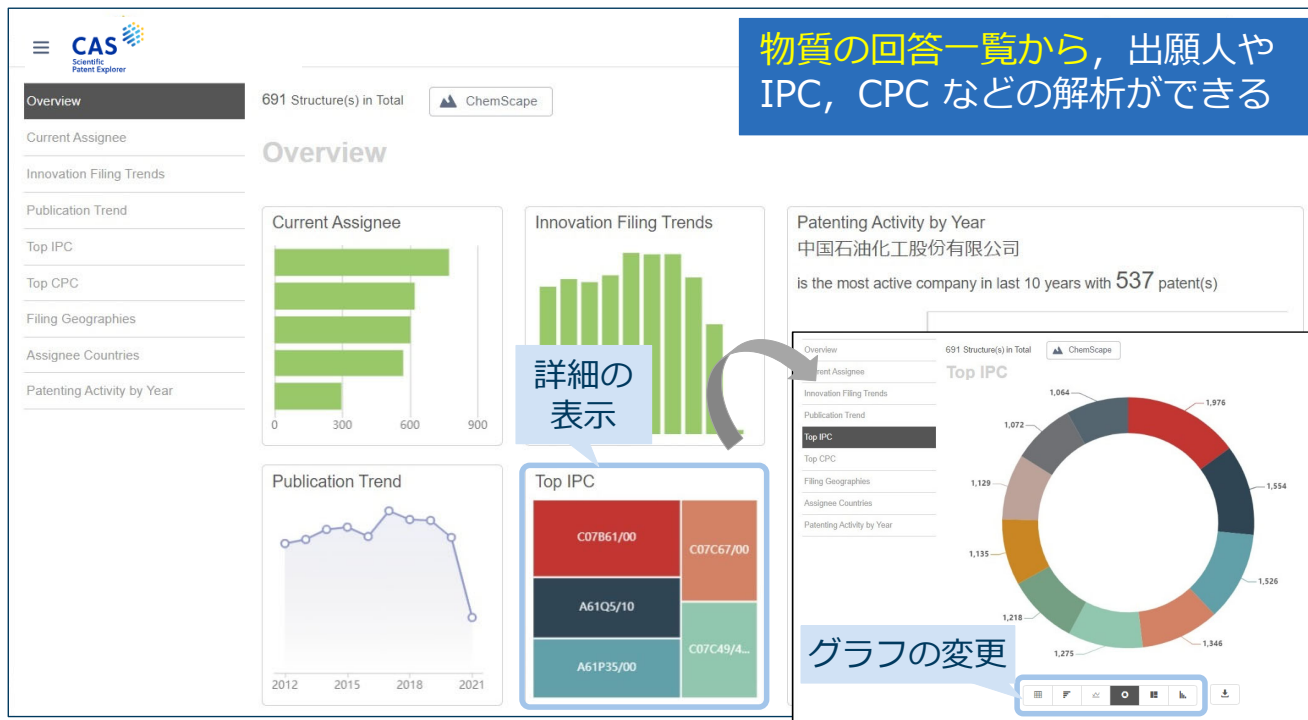
The screenshot displays the search results for a chemical structure, with 691 structures in total. The interface includes a sidebar with filters and a main results area. Two callout boxes highlight key features:

- Analyze:** 化学物質に関する特許情報の解析 (Analysis of patent information related to chemical substances).
- ChemScape:** 構造の類似性と特許情報を紐づけた解析 (Analysis linking structural similarity and patent information).

The results table shows the following entries:

| Structure ID | Chemical Name | Formula | Relevant Patents |
|--------------|---------------------------------------|-------------|-----------------------------|
| 32199-29-4 | 1,3-Cyclohexanedione | $C_6H_8O_2$ | View 1,295 Relevant Patents |
| 2582847-79-6 | 1,3-Cyclohexanedione, ion(1-) | $C_6H_7O_2$ | View 0 Relevant Patents |
| 73817-26-2 | 1,3-Cyclohexanedione, radical ion(1+) | $C_6H_8O_2$ | View 0 Relevant Patents |

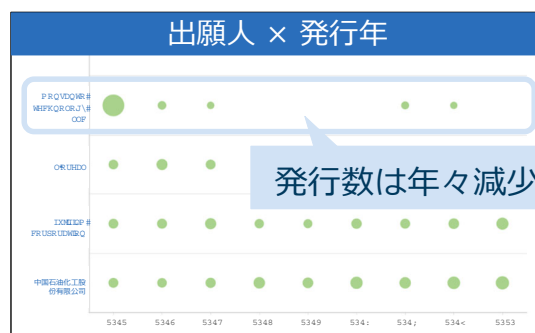
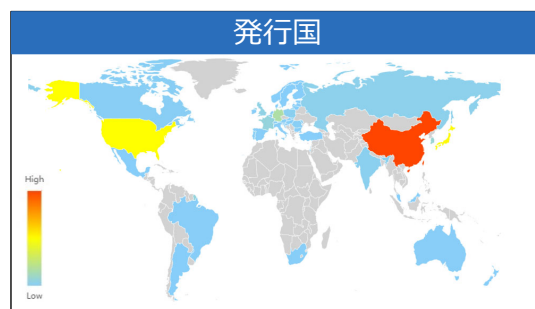
化学物質に関する特許情報の解析



© 2021 化学情報協会

特許を様々な観点から解析できる

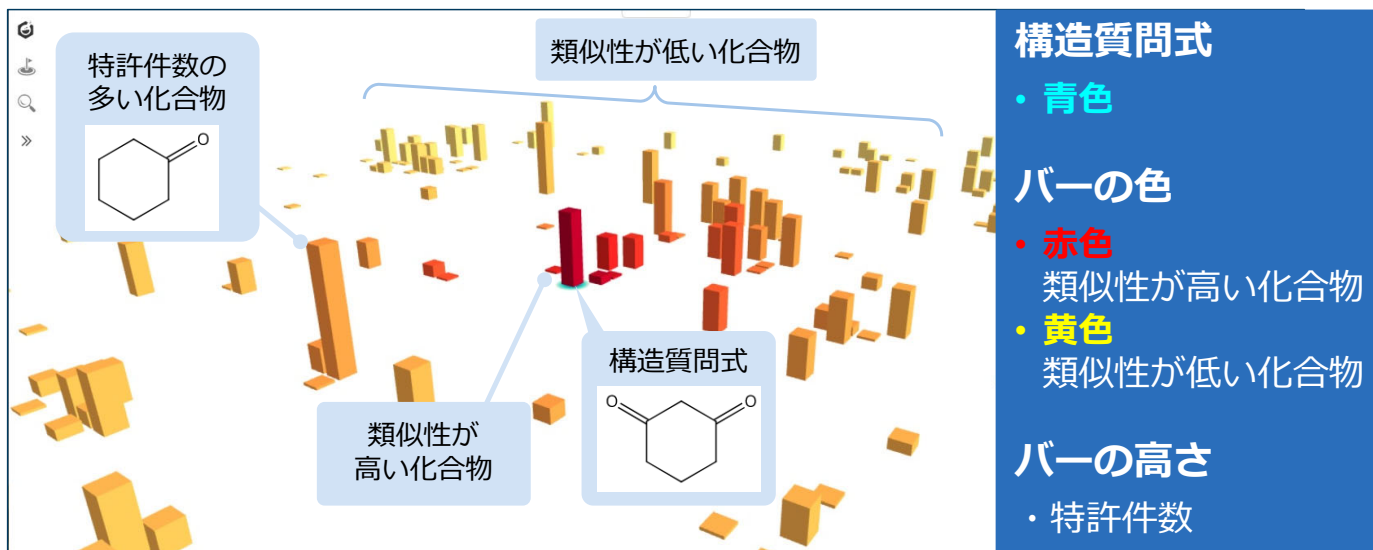
- 出願人
- 出願年
- 発行年
- 特許分類 (IPC, CPC)
- 特許発行国
- 出願人の所在地国
- 出願人×発行年



© 2021 化学情報協会

構造の類似性と特許情報を紐づけた解析

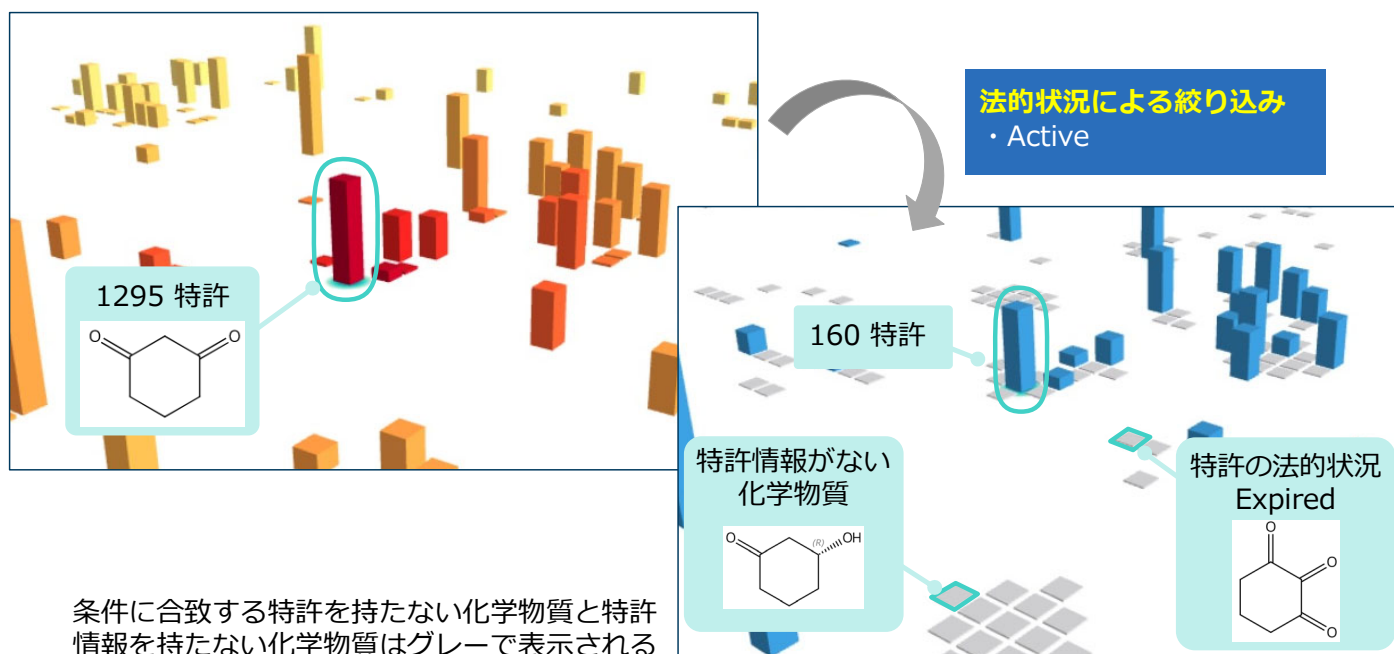
- バーの配置で構造の類似性，高さで特許件数を把握できる



© 2021 化学情報協会

特許中のキーワードや法的状況での絞り込みも可能

- 特許情報と関連付けて化学物質を確認できる



CAS Scientific Patent Explorer は直観的に特許調査できるツール

- キーワードや特許分類に加え，化学物質の構造質問式からも特許調査できる
- フィルターにより，得られた回答の絞り込みが容易
- 解析機能が充実
 - ✓ 複数の解析結果より特許の動向を様々な視点から捉えることができる
 - ✓ 特許情報と化学物質の類似性の相関を確認できる