

Chemscape Analysis を利用した 新たな視点からの特許解析

化学情報協会 情報事業部

2021 年 10 月 1 日

目次

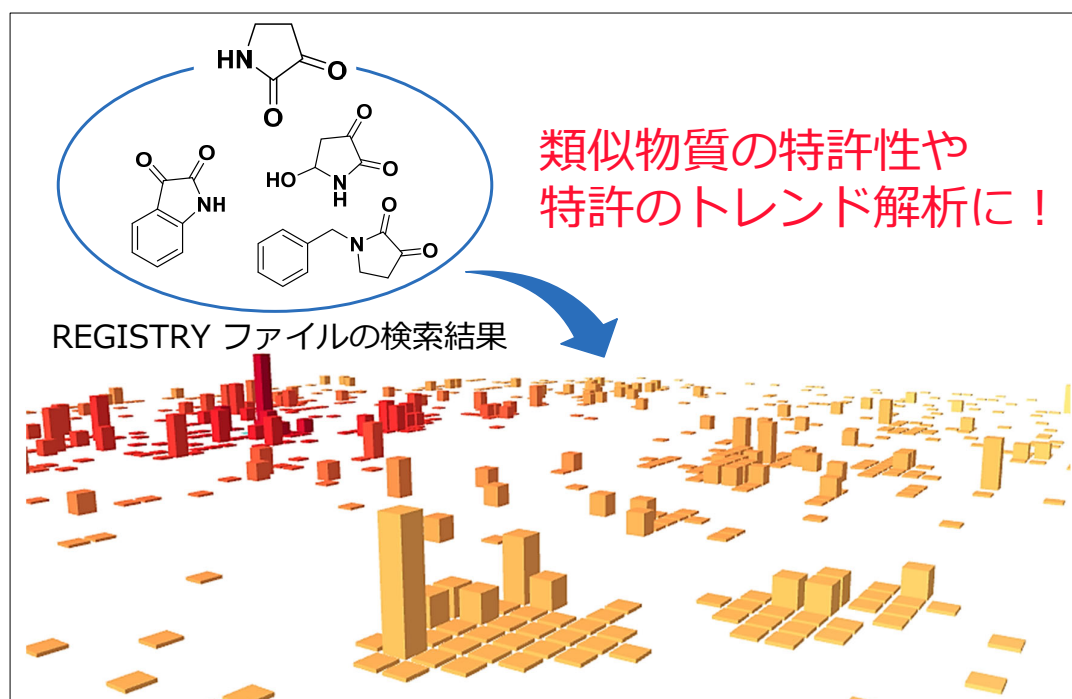
1. Chemscape Analysis リリース
2. Chemscape Analysis の機能
3. デモンストレーション

Chemscape Analysis リリース

Chemscape Analysis とは

3

REGISTRY ファイルで構造検索した結果を，特許の数と構造の類似性をもとにマッピングする機能



CAS RN [®]	特許件数	発行国
992-04-1	69	WO, JP, CN
19057-50-2	8	WO, JP, CN
3364-01-0	4	JP
22932-53-2	3	WO
136118-19-9	4	WO, CN

従来にはない**新しい視点**で
化学物質関連の特許を解析！



© 2021 化学情報協会

収録情報

	STNext				
	CAplus	WPI	INPADOCDB/ INPAFAMDB	特許全文データ ベース	Chemscape Analysis の 特許情報
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)	△ (化学特許に CAS が保有 するデータを付与)
特許全文	△* ²	△* ²	×	○	約 60* ³
法的状況	○	×	○	○ INPADOC 由来	○
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"> ● 構造の類似性と関連特許の数をもとにマップを作成 ● 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

Chemscape Analysis の機能

Chemscape Analysis 作成の流れ

7

REGISTRY ファイルで構造検索を実行し、ヒストリータブの L 番号から Create Chemscape Analysis をクリックする

The image illustrates the process of creating a Chemscape Analysis. On the left, the 'History' tab is active, showing a list of search results. The third result, 'L3 938 S L1 FUL', is selected, and a context menu is open with 'Create Chemscape Analysis' highlighted. On the right, the 'Create Chemscape Analysis' dialog box is shown, with the 'Answers' field set to '1 - 938' and the 'Analyze' button highlighted. A red arrow points from the 'Create Chemscape Analysis' option in the context menu to the 'Analyze' button in the dialog box.

History CAS Lexicon Databases

Session

Entered HOME	14:13:22 ON 30 MAR 2021
Entered REGISTRY	14:14:14 ON 30 MAR 2021
L1 STRUCTURE UPLOADED	Edit ...
L2 50 S L1	☰ ...
L3 938 S L1 FUL	☰ ...

Create an Alert
Patent Family Manager
Create Chemscape Analysis

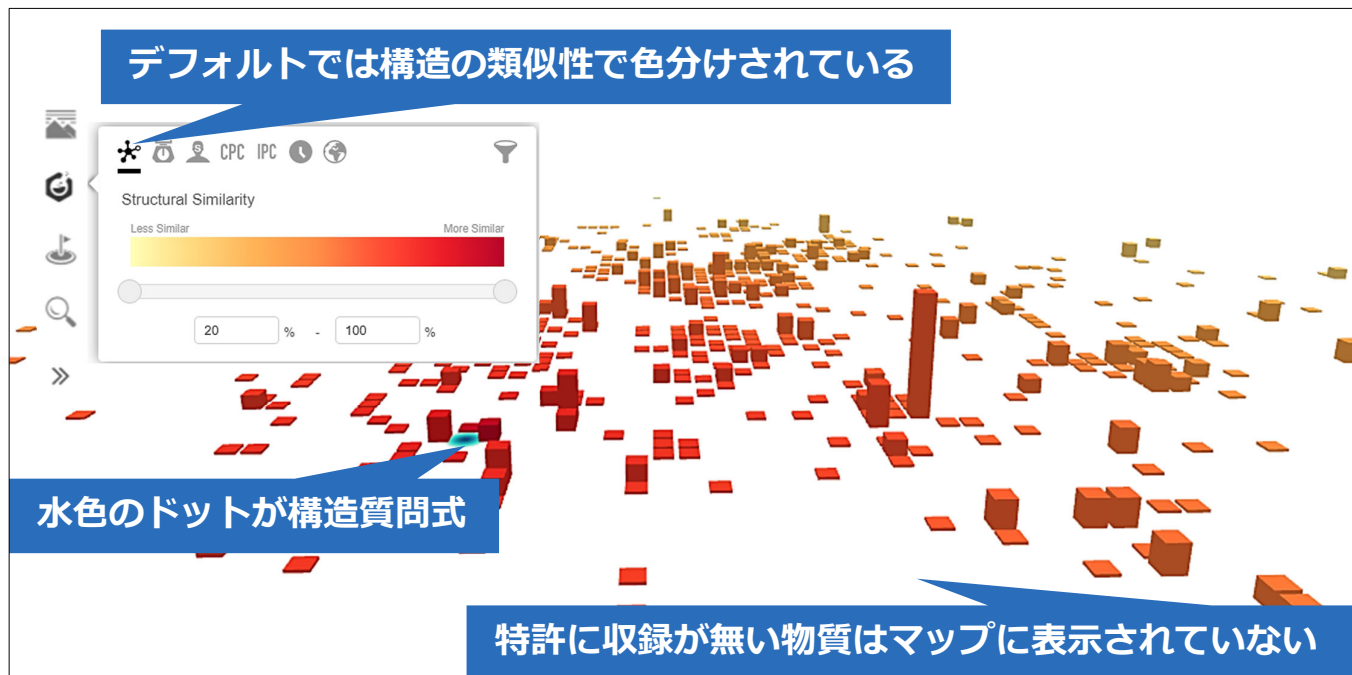
Create Chemscape Analysis ×
938 answers available

Answers
1 - 938
Analysis will be limited to the first 1,000 answers selected

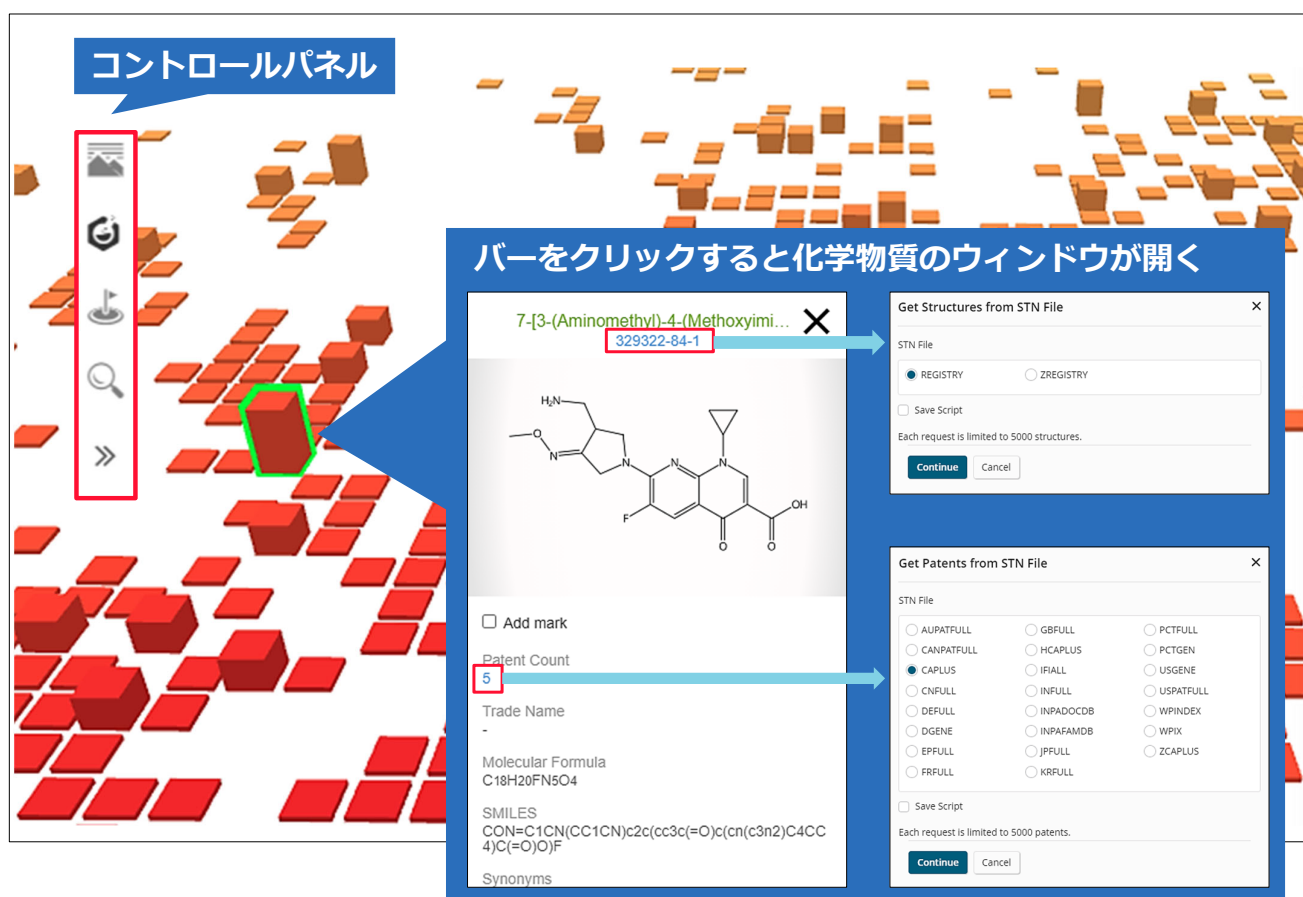
Analyze Cancel

解析する回答番号の範囲 (1,000 件以内) を指定し Analyze をクリック

- 化学構造の類似性をもとにしたマップが作成される
- バーの高さは関連特許の数を示している



© 2021 化学情報協会



© 2021 化学情報協会

Substance パネルでは様々な項目からマップのバーの解析ができる

My Chemscape
Substance
Add Structure
Search

Structural Similarity
Less Similar
More Similar
33 % - 100 %

- 構造類似性
- 分子量
- 特許出願人
- 特許発行国
- 特許発行年
- 国際特許分類
- 共通特許分類

© 2021 化学情報協会

Substance パネルのフィルターでは関連特許の数で表示するバーを限定したり, 文献のない物質をマップに追加できる

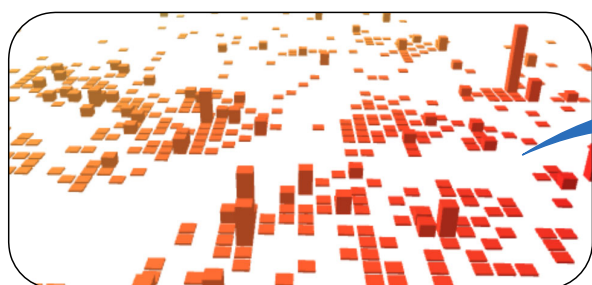
特許件数の数で表示するバーを限定

チェックを付けるとマップ作成時に指定したすべての物質を表示できる

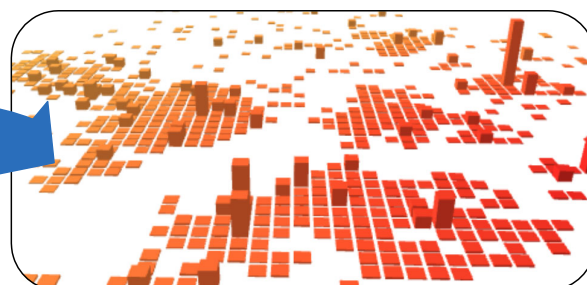
Filter by patent count

1 - 329 patents

Show structures with no patent filed



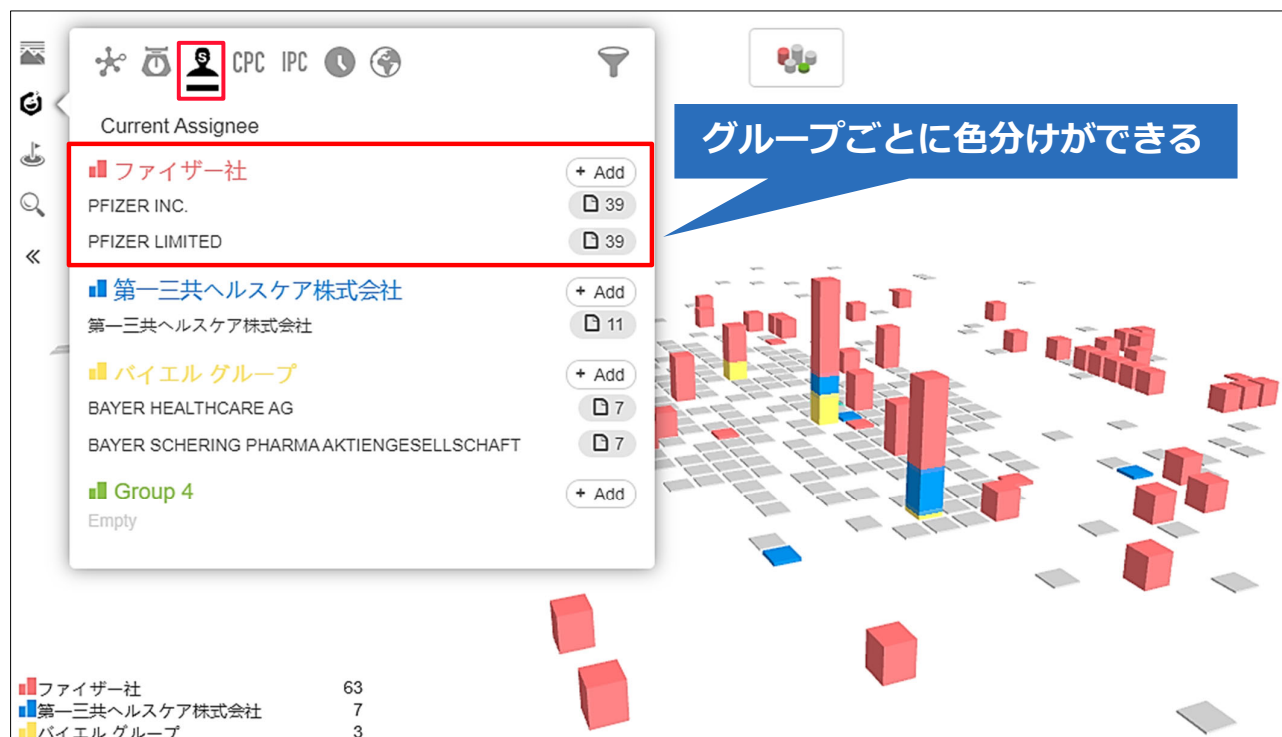
Show structures with no patent filed : チェックなし



Show structures with no patent filed : チェックあり

© 2021 化学情報協会

特許出願人で解析をしたマップの例



© 2021 化学情報協会

Add Structure パネル

マップ内に新たな化学物質のフラグを追加できる

フラグは名称, CAS RN®, 構造から検索して追加する

Add Structure

Zabofloxacin

Find

CASDraw

Synonyms (optional)

Custom Color

Add Cancel

Zabofloxacin

マップにはない物質のフラグ

© 2021 化学情報協会

キーワードや書誌情報でマップ内の該当物質の検索ができる

構造からも検索できる

用途や生死情報でヒットする物質を表示

全文
 標題
 抄録
 詳細な説明
 クレーム
 法的状況
 発行日
 出願人

Patent Structure

All
 Title
 Abstract
 Description
 Claims
 Tit./Abs./Cla.
 Simple legal status
 Pub. Date
 Current Assignee

Antibiotics

Active

年/月/日 - 年/月/日

2021年(令和3年)4月

日 月 火 水 木 金 土

28 29 30 31 1 2 3
 4 5 6 7 8 9 10
 11 12 13 14 15 16 17
 18 19 20 21 22 23 24
 25 26 27 28 29 30 1
 2 3 4 5 6 7 8

今日

Inactive
 Active
 Pending
 PCT designated stage expired
 PCT designated stage
 Undetermined

Search

© 2021 化学情報協会

Select Structure

選択した領域の新たなマップの作成や、選択した物質と関連特許情報を STN で検索ができる

Selected (99)

Zabofloxacin
 219680-11-2

Ethyl 7-[3-(acetylamino)-1-pyrrolidinyl]-1-cyclopro...
 96568-31-9

7-[(3R)-3-(Aminomethyl)-4-(methoxyimino)-3-met...
 769920-77-6

1,8-Naphthyridine-3-carboxylic acid, 1-cycloprop...
 151095-98-6

L-Aspartic acid, 7-[(3R)-3-(aminomethyl)-4-(meth...
 1263360-64-0

D-Aspartic acid, 7-[(3R)-3-(aminomethyl)-4-(meth...
 1263360-65-1

rel-1-Cyclopropyl-6-fluoro-1,4-dihydro-4-oxo-7-[(3...
 1107611-26-6

1,8-Naphthyridine-3-carboxylic acid, 1-cycloprop...
 1825361-06-5

D-Aspartic acid, 1-cyclopropyl-6-fluoro-1,4-dihydr...
 1808295-62-6

選択した物質の特許情報は STN で検索できる

Drag to Select
 Mouse Drag to Rotate

Select Structure

99 Selected Clear

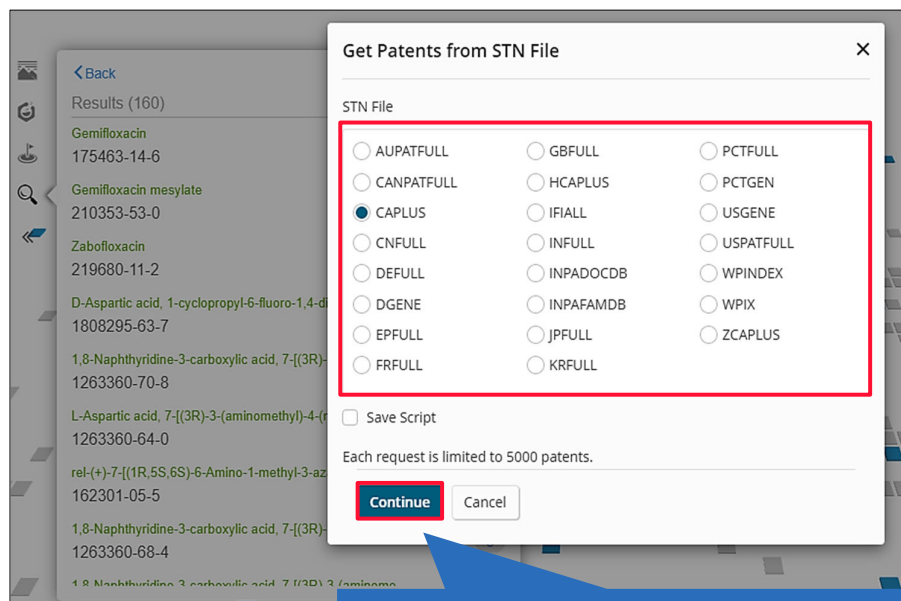
新たなマップの作成

REGISTRY 検索

New Chemscape
 View Structures

© 2021 化学情報協会

モーダルウィンドウや Search パネル, Select Structure で
選択した特許情報は STN で検索できる

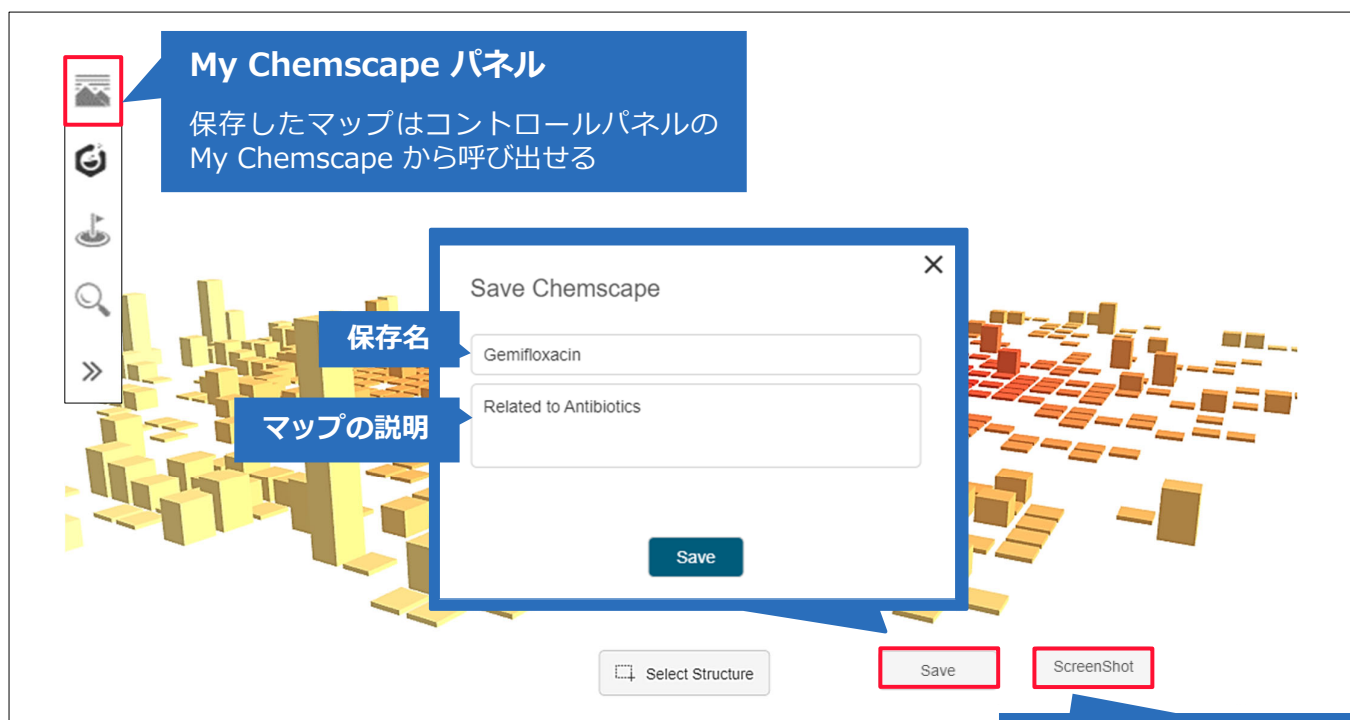


選択したデータベースで特許情報を検索
(物質に紐づいた特許番号による検索 (上限 5,000 件))

© 2021 化学情報協会

Chemscape Analysis の保存とダウンロード

Save ボタンから作成した Chemscape Analysis を保存できる



作成したマップの画像 (PNG 形式) をダウンロードできる

© 2021 化学情報協会

デモンストレーション

- Chemscape Analysis は**構造の類似性**と**関連特許の件数**で 3D マップを作成する機能
- 特許情報の解析機能による**トレンドの解析**、**権利化されていない物質調査**などに活用できる
- マップ内で特許情報を検索できるだけでなく、文献のデータベースに**クロスオーバー**できる