
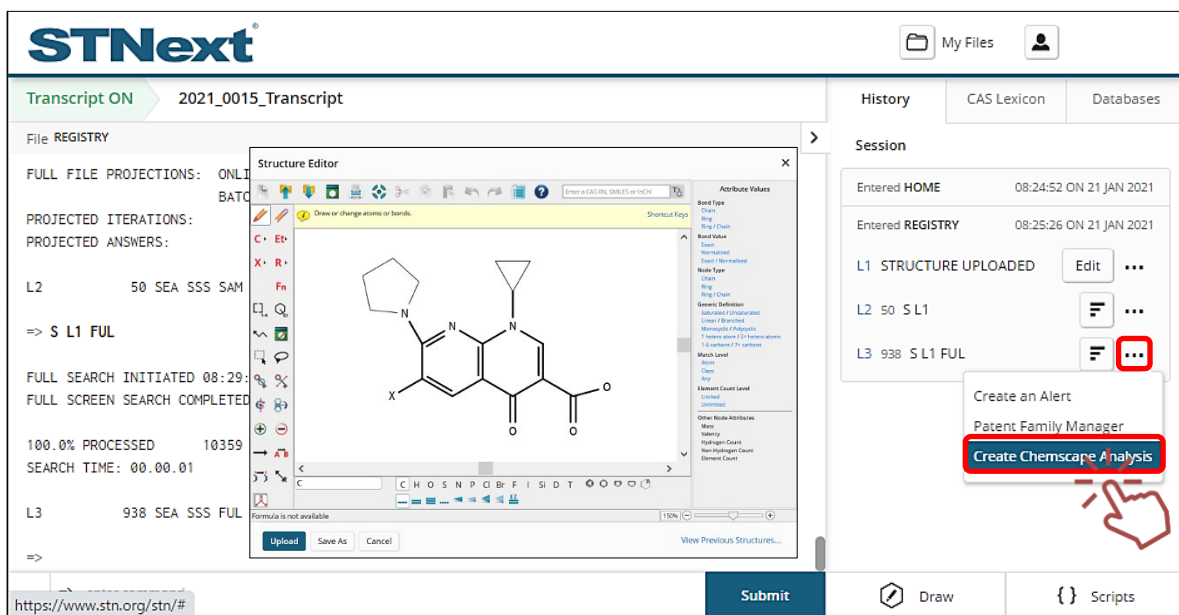


Chemscape Analysis (構造類似性 × 特許の解析)

■ Chemscape Analysis (ケムスケープ アナリシス) は構造検索で得られた化学物質の集合から、構造の類似性により解析したマップを作成する機能です。マップ内には関連特許の件数が 3D で示されるため化学関連特許を視覚的に分かりやすく解析することができます。

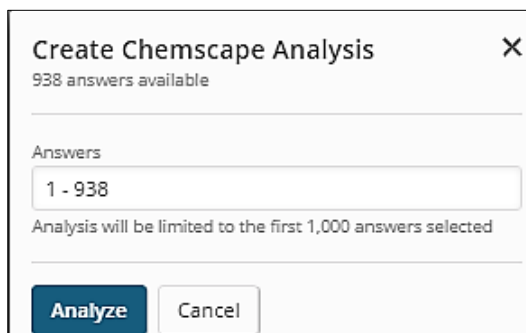
■ Chemscape Analysis 解析マップ作成手順

1. REGISTRY ファイルで構造検索を実行します。
2. 画面右の History タブで、構造検索結果の L 番号の  アイコンから Create Chemscape Analysis をクリックします。



The screenshot shows the STNnext web interface. On the left, there is a search transcript for '2021_0015_Transcript'. The main area displays a chemical structure in the 'Structure Editor'. On the right, the 'History' tab is active, showing a list of search results. The third result, 'L3 938 S L1 FUL', has a three-dot menu icon next to it. A red box highlights this icon, and a red arrow points to a dropdown menu that contains the option 'Create Chemscape Analysis', which is also highlighted with a red box.

3. 解析する回答番号の範囲を指定し、Analyze をクリックします。1,000 件以内を指定してください。



The dialog box titled 'Create Chemscape Analysis' shows '938 answers available'. There is a text input field for 'Answers' containing '1 - 938'. Below the input field, it states 'Analysis will be limited to the first 1,000 answers selected'. At the bottom, there are two buttons: 'Analyze' and 'Cancel'.

4. Chemscape Analysis 画面が表示されます。

■ Chemscape Analysis の解析結果画面

Chemscape Analysis 実行直後は、Substance - Structural Similarity で解析した化学構造の類似性によるマップが表示されます。検索に用いた構造質問式が水色のドットです。その周囲に構造類似性が高い物質が赤色で、類似性が低い物質は黄色で示されます。

3D マップのバーの高さは、特許の件数を表しています。バーをクリックすると、該当する化学物質のモーダルウィンドウが表示されます。モーダルウィンドウ中の Patent Count (特許数) をクリックし、検索を実行するファイルにチェックを入れて Continue をクリックするとオンラインセッション画面に戻り、関連特許を検索できます。

化合物情報へのリンク

特許情報へのリンク

Get Structures from STN File

STN File

REGISTRY ZREGISTRY

Save Script

Each request is limited to 5000 structures.

Get Patents from STN File





STN File

<input type="radio"/> ALPFULL	<input type="radio"/> GBFULL	<input type="radio"/> PCTFULL
<input type="radio"/> CANPFULL	<input type="radio"/> HCAPLUS	<input type="radio"/> PCTGEN
<input checked="" type="radio"/> CAPLUS	<input type="radio"/> IFIALL	<input type="radio"/> USGENE
<input type="radio"/> CNFULL	<input type="radio"/> INFULL	<input type="radio"/> USPATFULL
<input type="radio"/> DEFULL	<input type="radio"/> INPADOCDB	<input type="radio"/> WPINDEK
<input type="radio"/> DGENE	<input type="radio"/> INPAFAMDB	<input type="radio"/> WPIX
<input type="radio"/> EPFULL	<input type="radio"/> JPFULL	<input type="radio"/> ZCAPLUS
<input type="radio"/> FRFULL	<input type="radio"/> KRFULL	

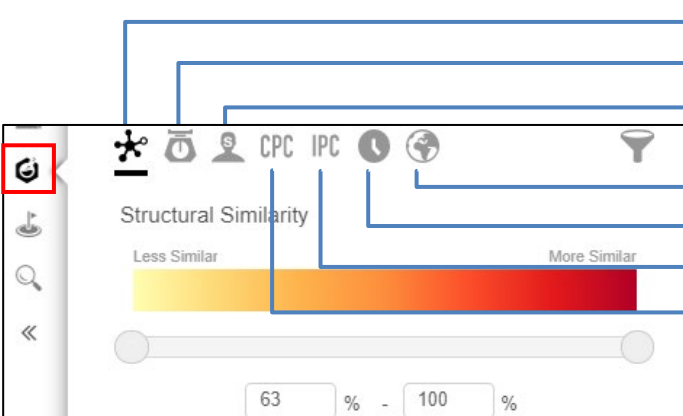
Save Script

Each request is limited to 5000 patents.

【コントロールパネル】画面左にはコントロールパネルが表示され、下記の操作を実行できます。

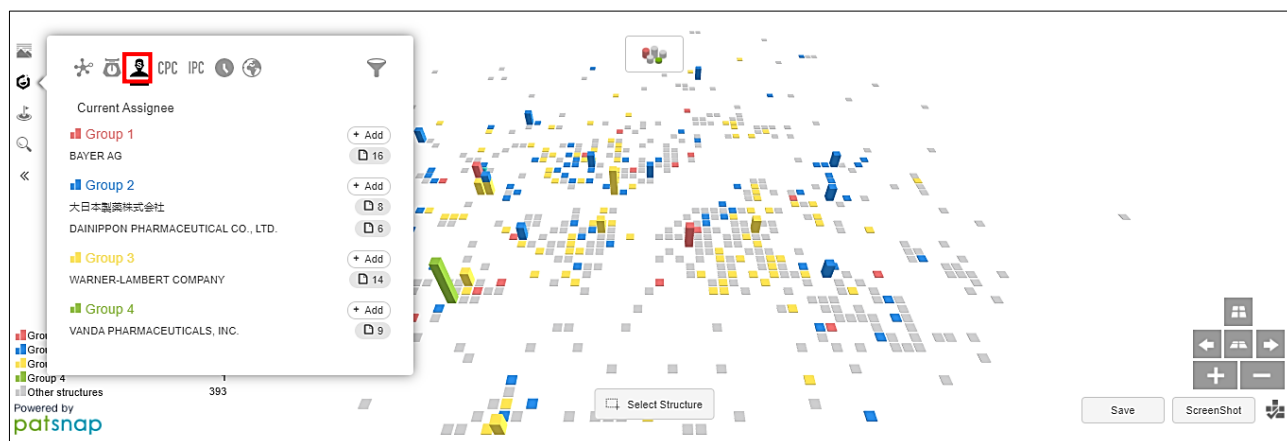
-  **My Chemscape** 保存した解析結果の呼び出し
-  **Substance** 分類表示設定, フィルタ (絞込み)
-  **Add Structures** 構造, 名称, CAS RN®, SMILES などから探した物質にフラグを付与
-  **Search** キーワード, 特許情報, 構造などから解析結果内の該当物質を検索

【Substance パネル】 Chemscape Analysis のマップは、構造類似性、分子量、特許出願人、特許分類、発行年、発行国を反映させた表示に変更することができます。

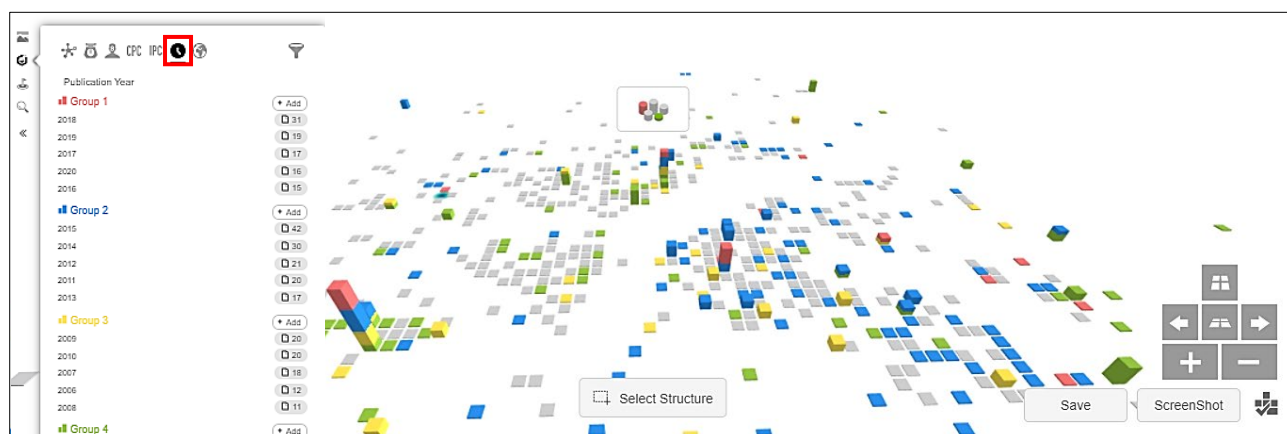


* 多成分物質など分子量が未収録の物質は分子量 0 とみなされる

例: 特許出願人による解析を反映させたマップ

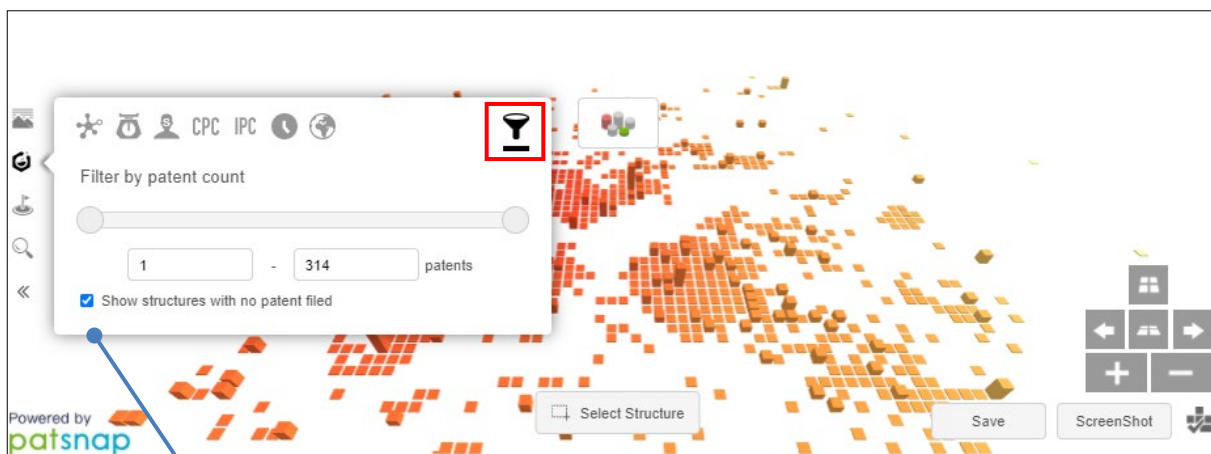


例: 発行年による解析を反映させたマップ



【絞り込み】 特許件数で絞り込みたい場合は、Substance パネル内にあるフィルタを使用します。

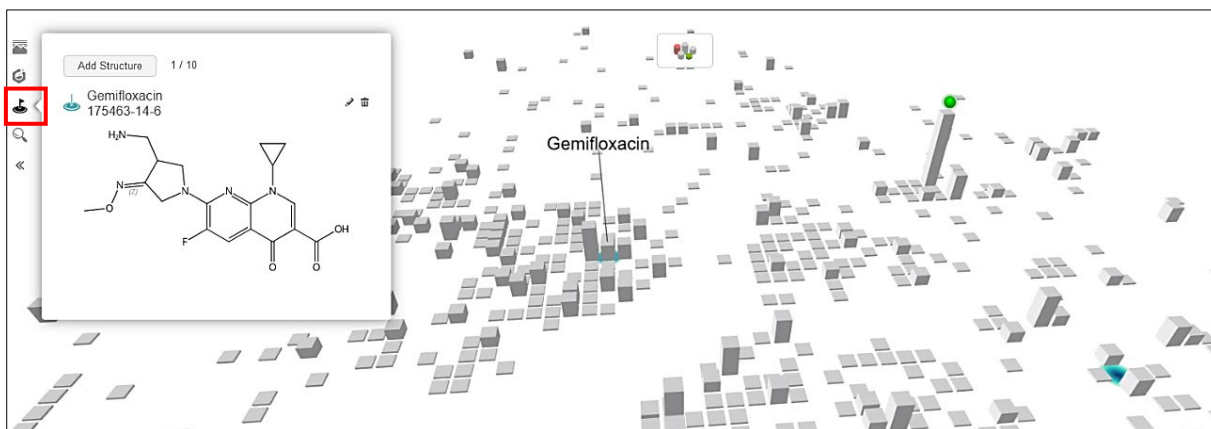
また、この画面で Show structures with no patent filed にチェックを入れると、非特許文献の記載物質も含めた解析結果を表示することができます。



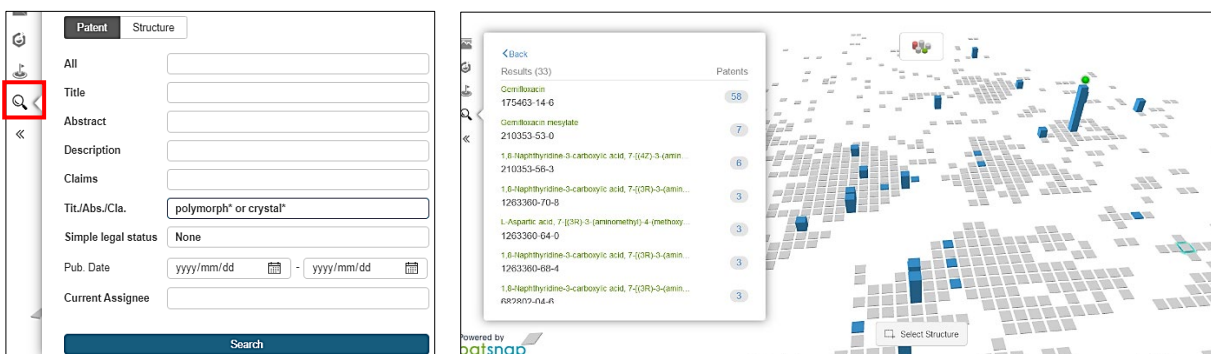
非特許文献の記載物質表示について

Show structures with no patent field にチェックをつけると、非特許文献の分布も表示されます。ただし、該当物質のモーダルウィンドウ内には非特許文献へのリンクは表示されず、収録文献数は 0 件と表示されます。

【Add Structures パネル】 構造、名称、CAS RN®, SMILES などから探した物質にフラグを付与することができます。



【Search パネル】 キーワード、特許情報、構造などから解析結果内の該当物質を検索できます。



【範囲の選択】

中央下部にある Select Structure をクリックすると、ポインタが範囲指定用のツールに変わり、マウスをドラッグすることでその範囲に含まれる物質をまとめて選択することができます。選択された物質と関連特許の件数が左のボックス内に表示されます。

また、画面右下には New Chemscape と View Structures のリンクも表示されます。これらのリンクから、選択した物質のみの Chemscape Analysis の実行や、Substance 検索の集合を作成することができます。

範囲選択を終了するには Exit をクリックします。

STNext My Files JAICI

Return to Session

Selected (6)

- 210353-53-0 43
- 210353-56-3 12
- 175462-36-9 3
- 175462-37-0 3
- 175462-23-4 3
- 144172-90-7 1

興味のある範囲を選択

Drag to Select
Right Mouse Drag to Rotate

Exit

6 Selected Clear

New Chemscape
View Structures

STNext 関連特許

Transcript ON 2021_0018_Transcript

File CAPLUS

- 1 WO/2001/018992 A1/PNK
- 2 TR2017095742/PK
- 3 US2017095857 A1/PNK
- 4 WO/2008/053244/1/PK
- 5 WO/2008/053324 A1/PNK
- 6 US20110210371 A1/PNK
- 7 US20110210371 A1/PNK
- 8 US20080895627 A1/PNK

L14 ANOTHER 1 OF 39 CAPLUS COPYRIGHT 2021 ACS ON STN
PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive
AN 2020-094134 CAPLUS Full-text
DN 1:22:19:52:9
I1 Dosage forms comprising active pharmaceutical ingredients
IN Tabouret, Herriet
PA Actone Therapeutics, Inc., USA
SD _PCT_Int_Appl., 23Sep.
Submit

STNext 選択した物質のみの解析

Selected Substance

STNext 化学物質

Transcript ON 2021_0018_T

REGISTRY

MF C16 H19 F N3 O3

1,4-dihydro-4-oxo-1H-cyclohexa[1,4-c]pyridine-1-carboxylic acid

1:14 6 ANEMERS RECESSITY COPYRIGHT 2021 ACS ON STN
TN 1,4-dihydro-4-oxo-1H-cyclohexa[1,4-c]pyridine-1-carboxylic acid
MF C21 H26 F N3 O4



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
E-mail: support@jaici.or.jp