

CAS SciFinder[®] の 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. Search 画面で「Substances」を選択し、構造検索を実行します。

2. 構造検索結果が表示されたら、左側に表示される「Create Chemscape Analysis」ボタンをクリックします。

Item ID	Chemical Name	Formula	Components	Component RN	References	Reactions	Suppliers
104866-20-8	1-Cyclopropyl-6-fluoro-1,4-dihydro-4-oxo-7-(1-pyrrolidinyl)-1,8-naphthyridine-3-carboxylic acid	C ₁₆ H ₁₆ FN ₃ O ₃	2	104866-20-8	5	65	1
108108-46-9	1,8-Naphthyridine-3-carboxylic acid, 1-cyclopropyl-6-fluoro-1,4-dihydro-4-oxo-7-...	C ₁₆ H ₁₆ FN ₃ O ₃ ·CH	2	104866-20-8	1	1	0
114171-65-2	1-Cyclopropyl-6-fluoro-1,4-dihydro-4-oxo-7-(1-piperidinyl)-1,8-naphthyridine-3-carboxylic acid	C ₁₇ H ₁₈ FN ₃ O ₃	2	104866-20-8	4	65	0

3. 解析結果がブラウザの新規タブに表示されます。

* 新規タブが表示されない場合は、ポップアップブロックを解除してください

■ 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, その中の Patent Count (特許数) をクリックすると特許を表示することができます.

化学物質のモーダルウィンドウ (ドットをクリックすると表示される)

水色のドット: 構造質問式

クリックすると特許が表示される

【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 (絞り込み)
	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

* 下記 URL から直接 Chemscape にアクセスできる
<https://scifinder-n.cas.org/chemscape/>

【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.

非特許文献の記載物質表示

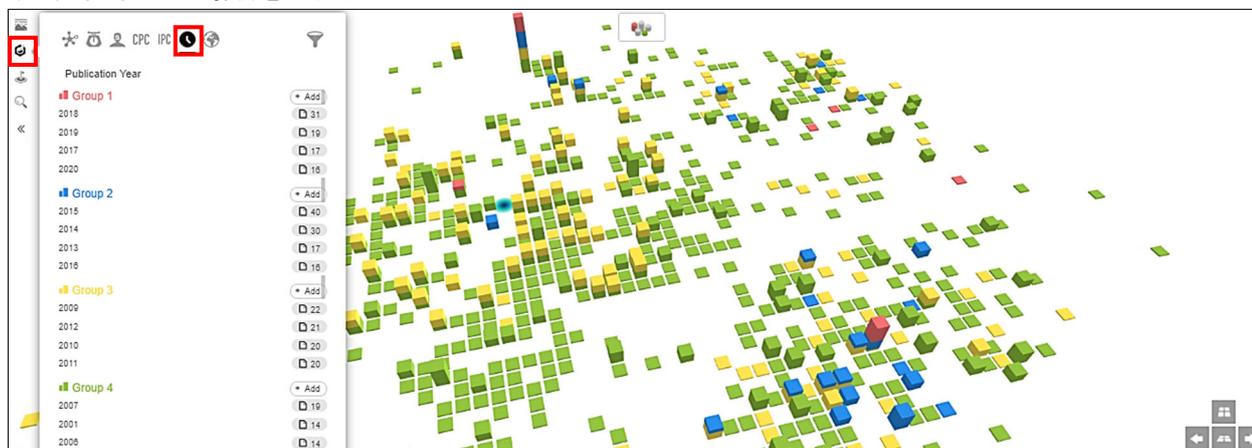
チェックをつけると, 非特許文献の分布も含めた結果を表示できます.
※該当物質のモーダルウィンドウ内には非特許文献へのリンクは表示されず, 収録文献数は 0 件と表示されます.

【Substance パネル】 Chemscape Analysis のマップは、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。

化学構造の類似性
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

* 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：発行年による解析を反映させたマップ



【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解析の実行や、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。

Selected (6)

- 1,8-Naphthyridine-3-carboxylic acid, 7-[4-...
878586-62-0 3
- 1,8-Naphthyridine-3-carboxylic acid, 7-[3-...
105439-24-5 2
- 1,8-Naphthyridine-3-carboxylic acid, 7-[3-...
105439-23-4 1
- 1,8-Naphthyridine-3-carboxylic acid, 7-[4-...
869292-30-8 1
- 7-[3-[2-(Aminomethyl)phenyl]-1-pyrrolidin...
150281-52-0 1
- 1,8-Naphthyridine-3-carboxylic acid, 7-[3-...
438237-91-3 1

興味のある範囲を選択

Select Structure

Exit

6 Selected Clear

New Chemscape

View Structures

Help Contact Us Legal

References (2)

関連特許

該当範囲の解析結果

Substances (6)

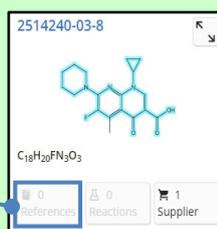
化学物質



Chemscape Analysis で解析できない物質

解析対象は文献で報告された物質です。
文献で報告が無い物質は解析できません。

文献が 0 件の物質



JAICI
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

E-mail: support@jaici.or.jp