CAS SciFinder®

CHEMSCAPE ANALYSIS

化学情報協会　情報事業部
202503

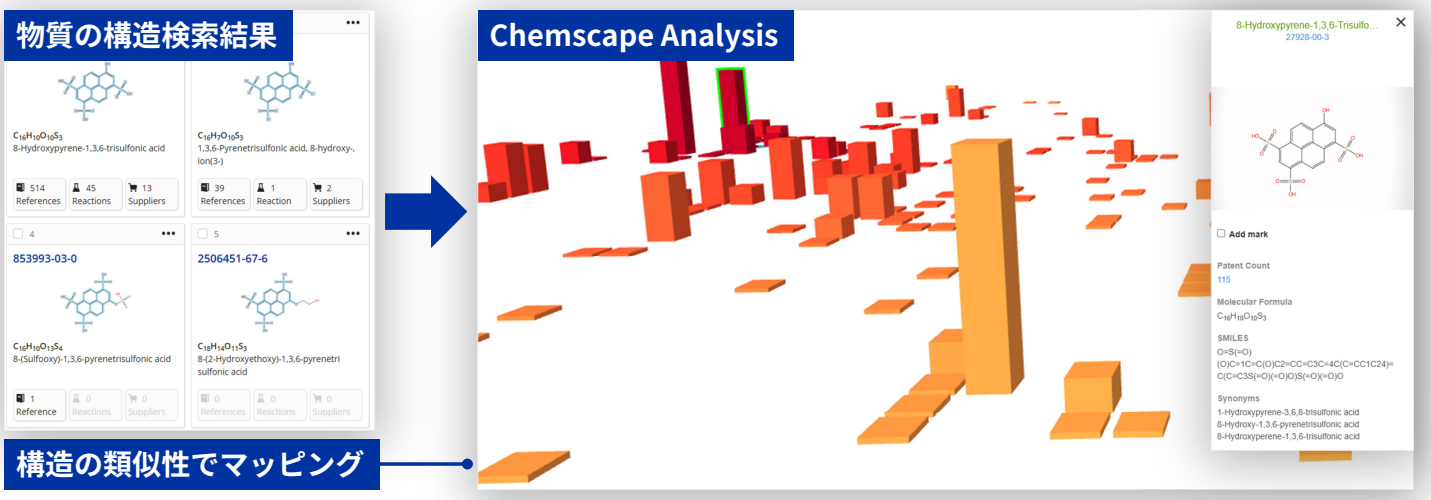
CAS
A division of the American Chemical Society

目次

CAS
A division of the American Chemical Society

Chemscape Analysis とは

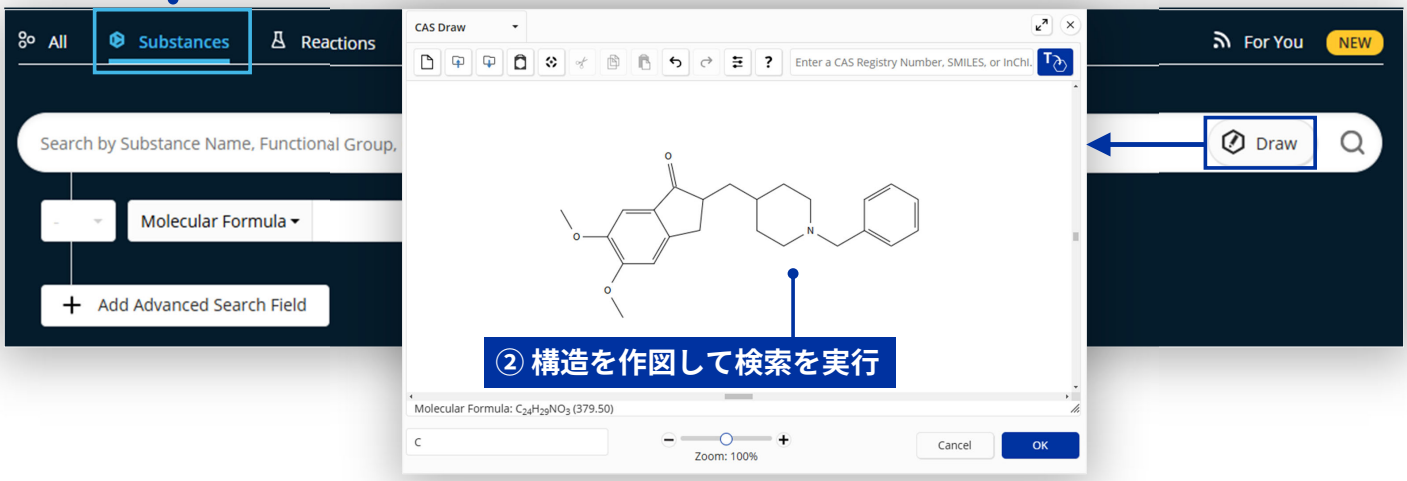
構造の類似性と物質関連特許の件数で 3D マップを作成する機能



物質構造と関連特許を紐づけることで物質関連の特許解析や物質の用途探索に利用できる

Chemscape Analysis 作成の流れ (1/2)

① Substances (物質検索) を選択



② 構造を作図して検索を実行

Chemscape Analysis 作成の流れ (2/2)

③ 目的に応じて
Structure Match を選択*

④ Create Chemscape Analysis をクリック
(上限 1,000 件)

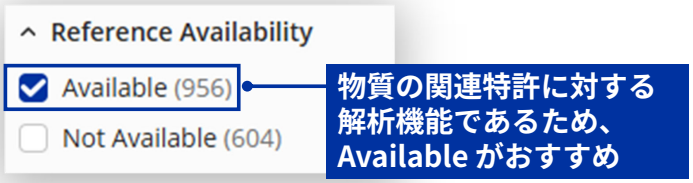
*Structure Match の詳細は CAS SciFinder 構造作図ガイド p.8-9 参照
https://seminar.jaici.or.jp/doc/sf_str.pdf

【参考】Chemscape Analysis での便利な絞り込み

解析上限 (1,000 件) を超える場合には適宜回答を絞り込む

Reference Availability フィルター

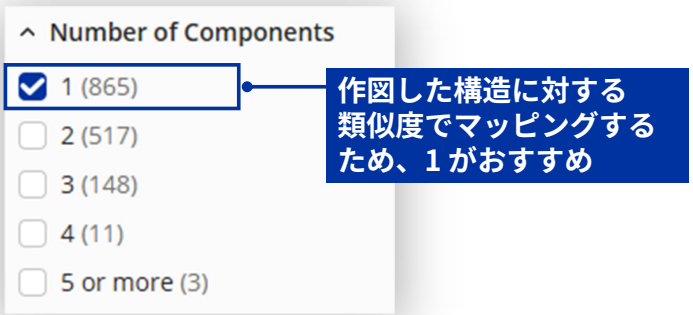
- 関連文献を持つ文献に限定する



物質の関連特許に対する解析機能であるため、Available がおすすめ

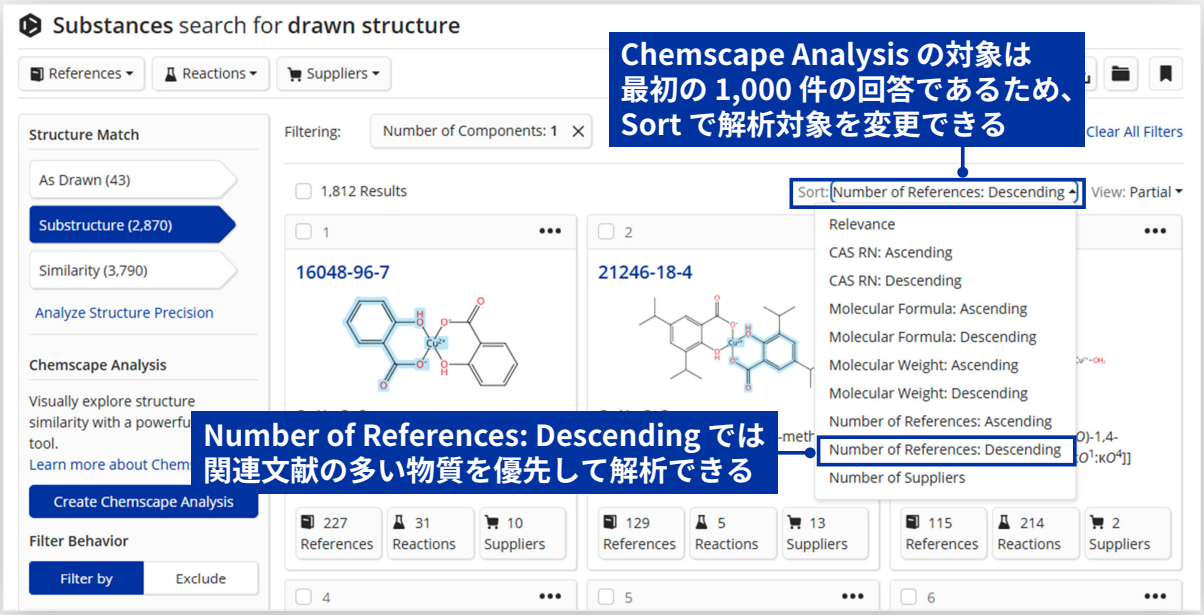
Number of Components フィルター

- 物質の成分数で限定する



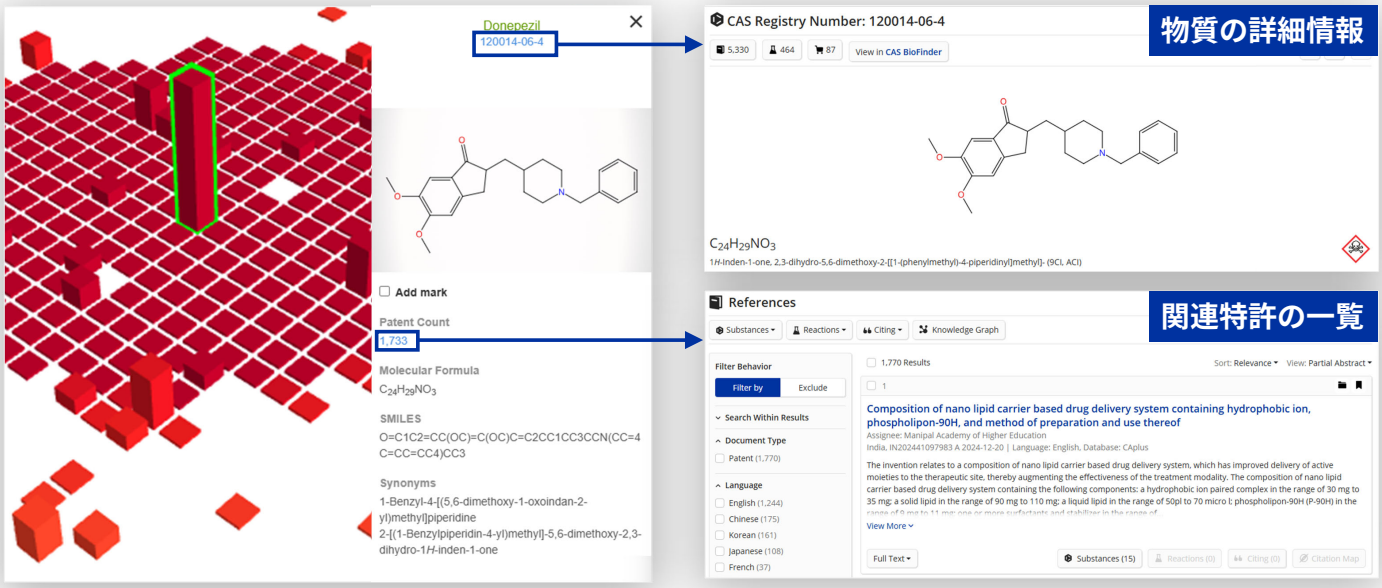
作図した構造に対する類似度でマッピングするため、1 がおすすめ

【参考】Chemscape Analysis での便利な並び順



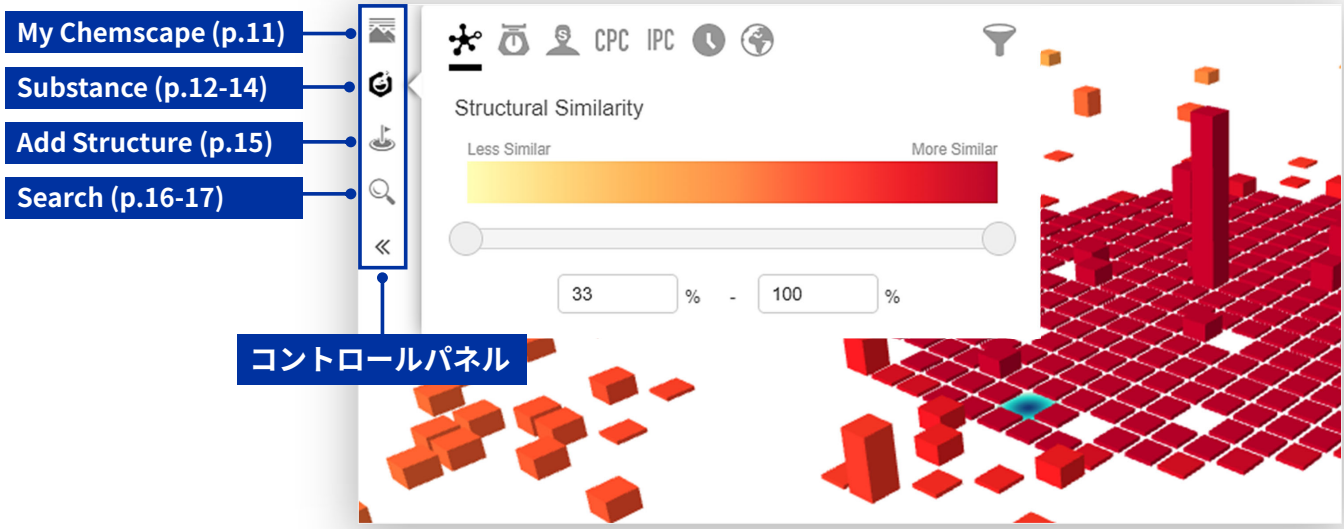
Chemscape Analysis の見方 (1/2)

Chemscape Analysis の見方 (2/2)



Chemscape Analysis の機能

Chemscape Analysis の機能はコントロールパネルで操作する



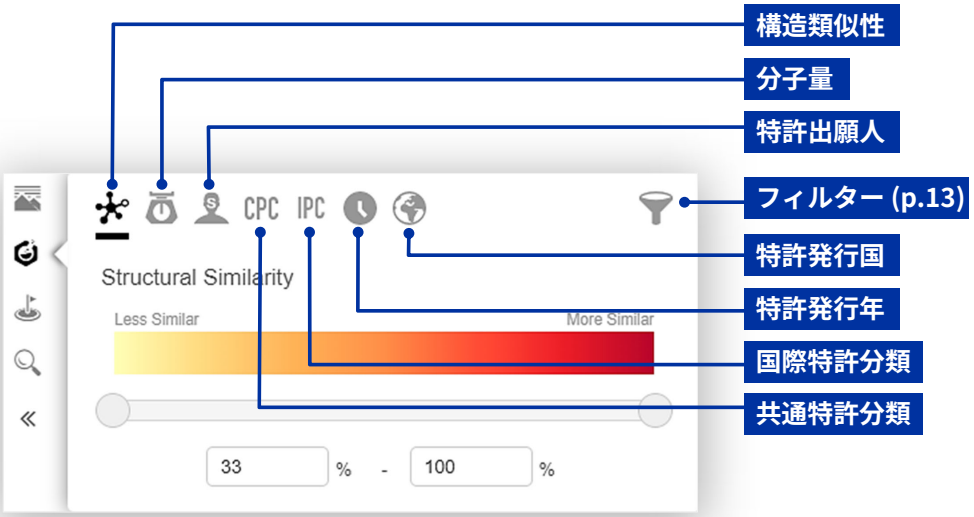
My Chemscape

保存したマップを呼び出す機能

Substance (1/3)

様々な解析項目でマップを解析できるSubstance の解析項目

Substance の解析項目

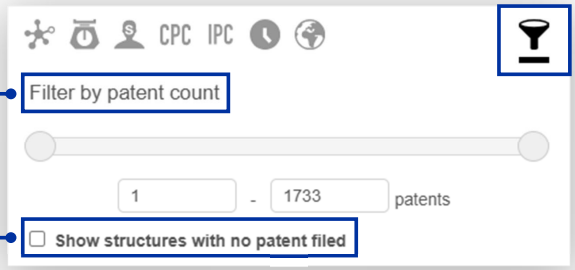


Substance (2/3)

Substance のフィルター機能

関連特許の数で表示するカラムを限定

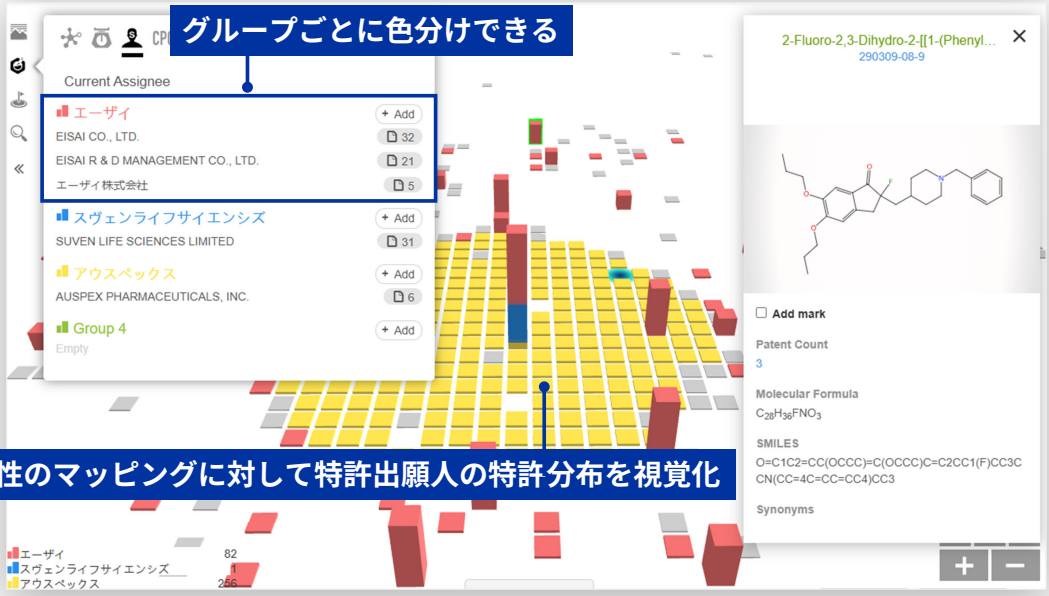
マップ上に関連特許を持たない物質を表示



Substance (3/3)

特許出願人での解析例

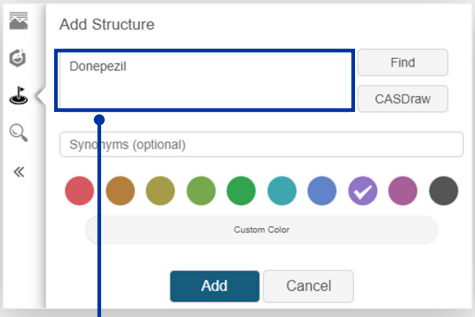
グループごとに色分けできる



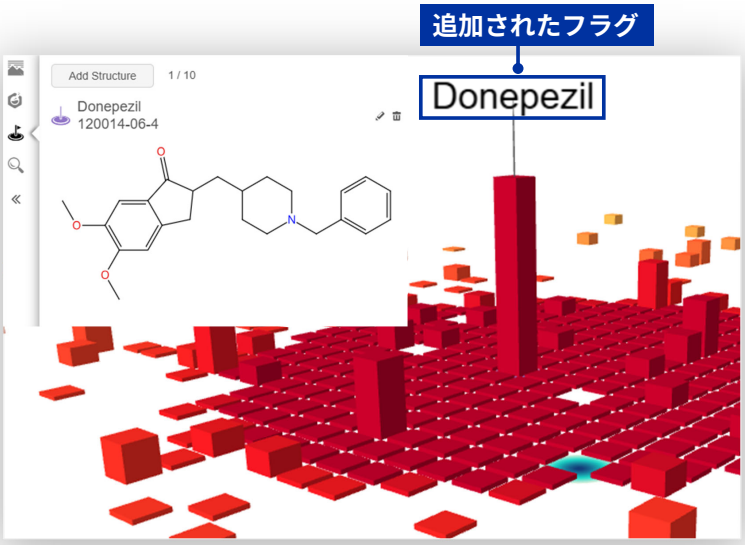
構造類似性のマッピングに対して特許出願人の特許分布を視覚化

Add Structure

マップ上に指定した化学物質のフラグを追加する機能



フラグを付与したい物質を名称、CAS 登録番号、構造から検索する

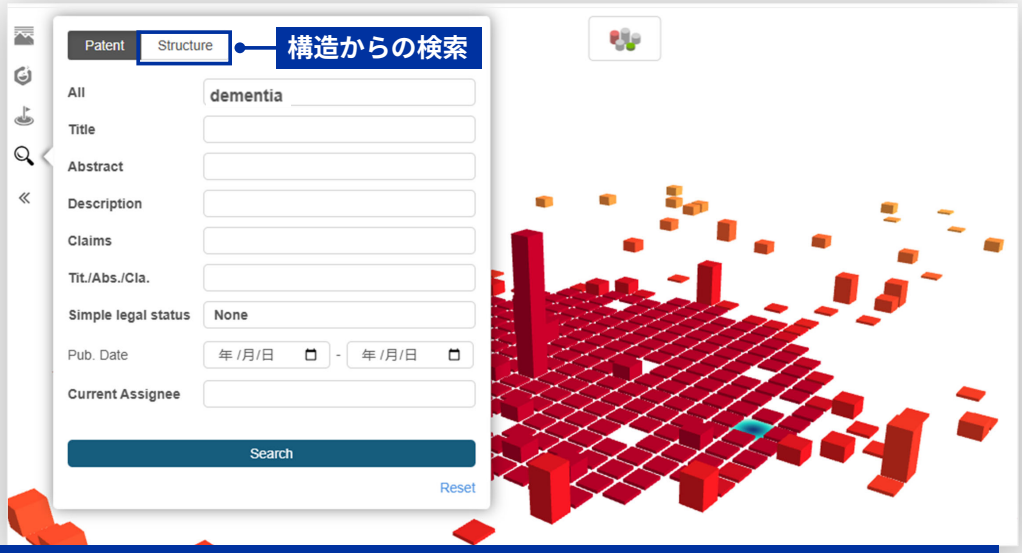


Search (1/2)

関連特許の全文情報または構造情報でマップを検索する機能

検索項目

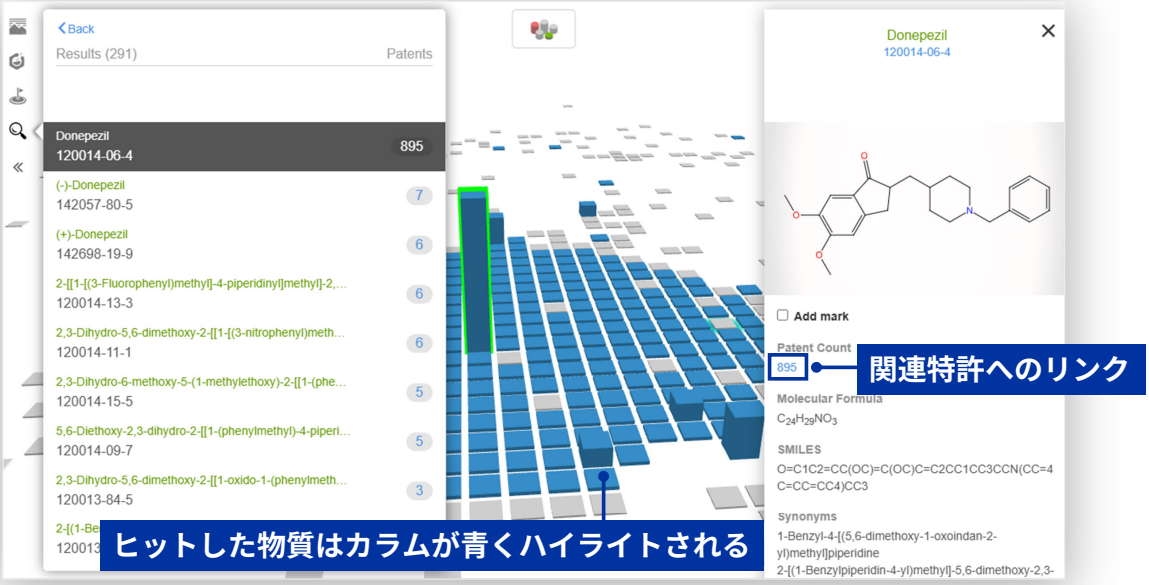
- 全文
- 標題
- 抄録
- 詳細な説明
- クレーム
- 標題/抄録/クレーム
- 法的状況
- 特許発行日
- 特許出願人



物質と関連特許を紐づけたキーワード検索により類似構造を含めた用途探索に活用できる

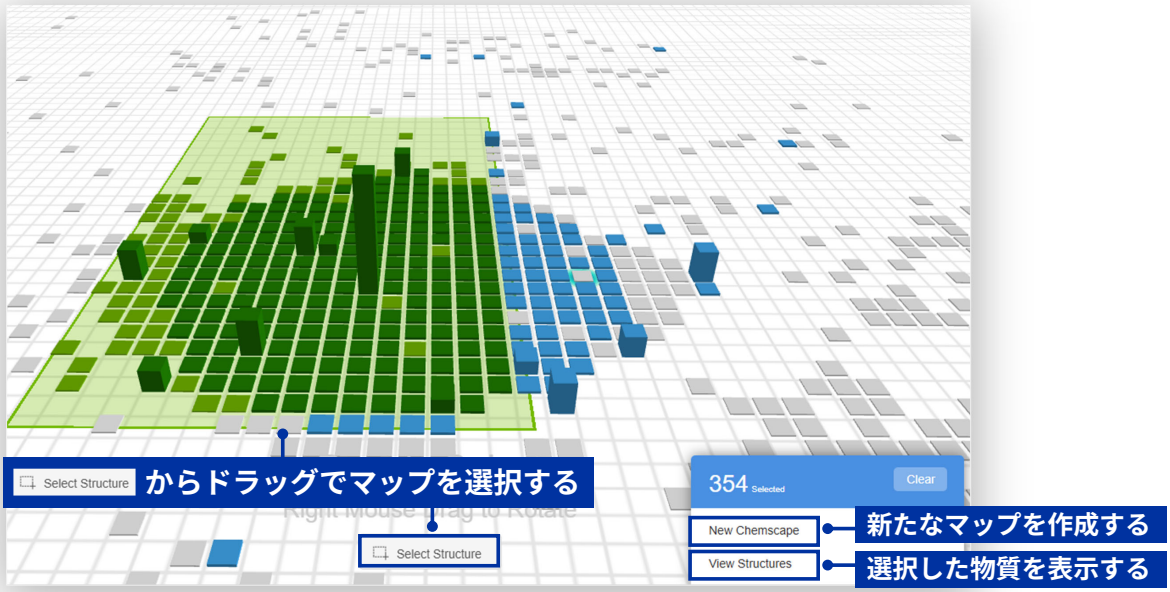
Search (2/2)

検索を実行すると物質とヒットした関連特許の数が一覧で表示される



Select Structure

選択した物質の表示と新たなマップの作成ができる



JAICI ヘルプデスク

0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

support@jaici.or.jp