

基于化学和专利数据
为医药、生物和化工企业打造的信息情报工具



chemical
by patsnap

让创新更早发生
Make Innovations Happen.

目录

P3 医药、化工和生物领域的研发趋势

P6 现有的问题和我们的解决方案

P7 什么是Chemical化学数据库

P8 适用行业和人群

P9 产品的五大特色功能

P20 我们的客户

医药、化工和生物行业的三大研发趋势

我们需要一款怎样的工具？

趋势一 研发投入大，周期长

- 以新药研发为例，需要历经8个阶段、耗费700万小时、6587个实验、423个研究者、和66亿人民币……

趋势二 结果不可预知，风险管控非常重要

- 平均每5000个临床前化合物，大约只有5个可以进入临床试验，只有一个才能被批准为真正的药物。

趋势三 高度依赖专利激励

- 若无专利保护，制药领域的技术创新只有63%，化学工业为38%，石油工业为25%。

加速研发效率

降低失败风险

保护创新成果

国内外的标杆企业都开始重视研发中对数据的应用



Atomwise – 药物挖掘

为制药企业、生物科技公司 and 研究机构提供候选药物而获取收入，可以预测哪些化合物真的有效哪些无效。已经和默克等众多药企开展合作。

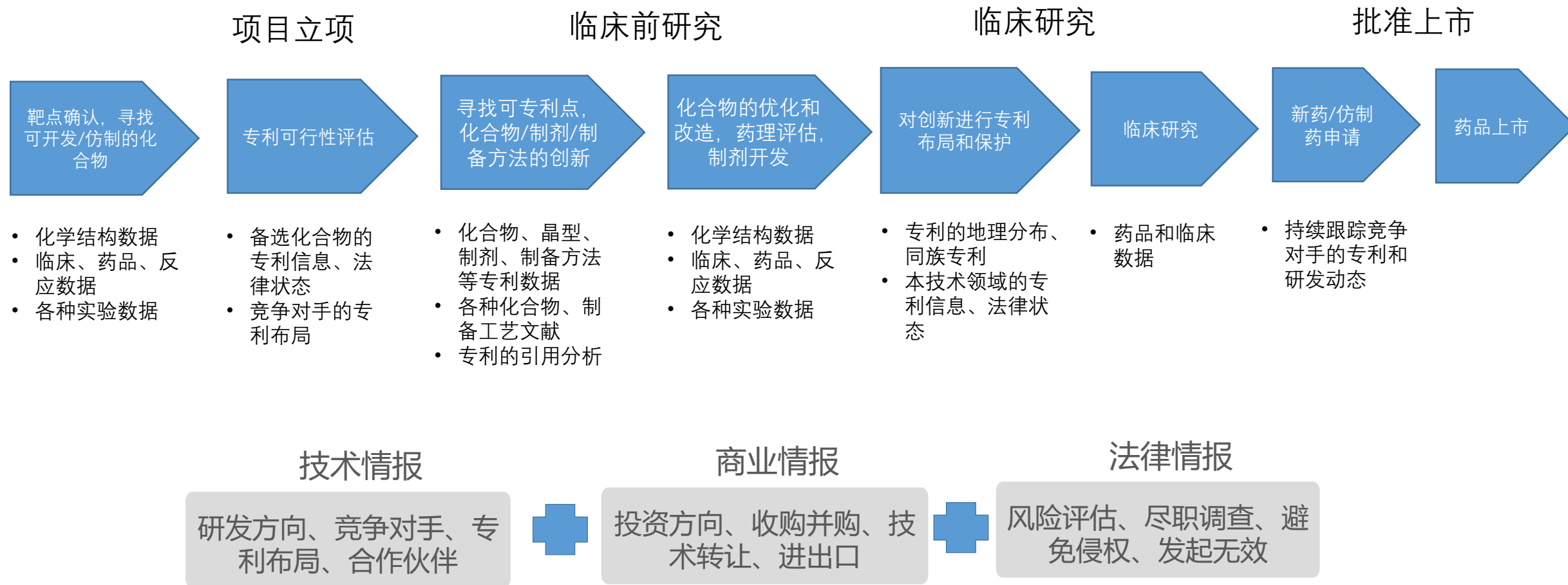


晶泰科技 – 药物晶型设计

为全球创新药企提供药物晶型设计服务的公司，主要提供药物晶型预测和晶型专利保护服务，帮助药企提高研发效率，降低药物的质量风险和专利风险。

对化学和专利数据的应用，贯穿研发全流程

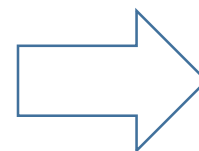
以医药行业为例



但是现有的化学和专利数据，在使用中存在诸多不便

问题

- 关于化学的专利数据不全，且没法根据结构式直接检索
- 研发中需要在不同平台间寻找专利、反应、临床数据，来回切换
- 数据零散，缺乏关联，需要人工进行分析
- 界面难操作，效率低下



研发效率低下

结果不可预期

专利保护不利

这是为什么智慧芽推出Chemical化学数据库



我们的解决方案

- 1.2亿化学结构数据，提供超结构、子结构等专业的查询入口
- 一站式整合专利和其他研发所需的临床、反应和药品数据，自由跳转
- 无缝衔接化学数据库和专利数据库
- 简洁直观的搜索和分析界面

适用的行业 and 人群

重点垂直行业



制药



食品饮料



化工/材料

相关职位

药物化学家
制剂研发科学家
法规事务协调员 (制药公司)
研究科学家
高级科学家
首席科学家
研究团队负责人
研发副总裁
合成化学家
知识产权副总裁
专利分析师
专利律师
工艺工程师
化学工程师
优化算法科学家负责人
高分子科学家
塑胶产品工程师

Chemical产品的主要特点

化学结构式检索

1.2亿化学结构式，相似结构、子结构、超结构、图片检索等多种专业检索入口

药品、临床、反应等非专利数据

一站整合药品、反应和临床数据，还原新药研发方法，为已有化合物找到新的适应症

从化学数据库一键跳转专利分析平台

一键跳转智慧芽专利数据库，对包含该结构式的专利进行分析
提供专利文献中的化合物高亮，帮你快速找到专利中的重要信息

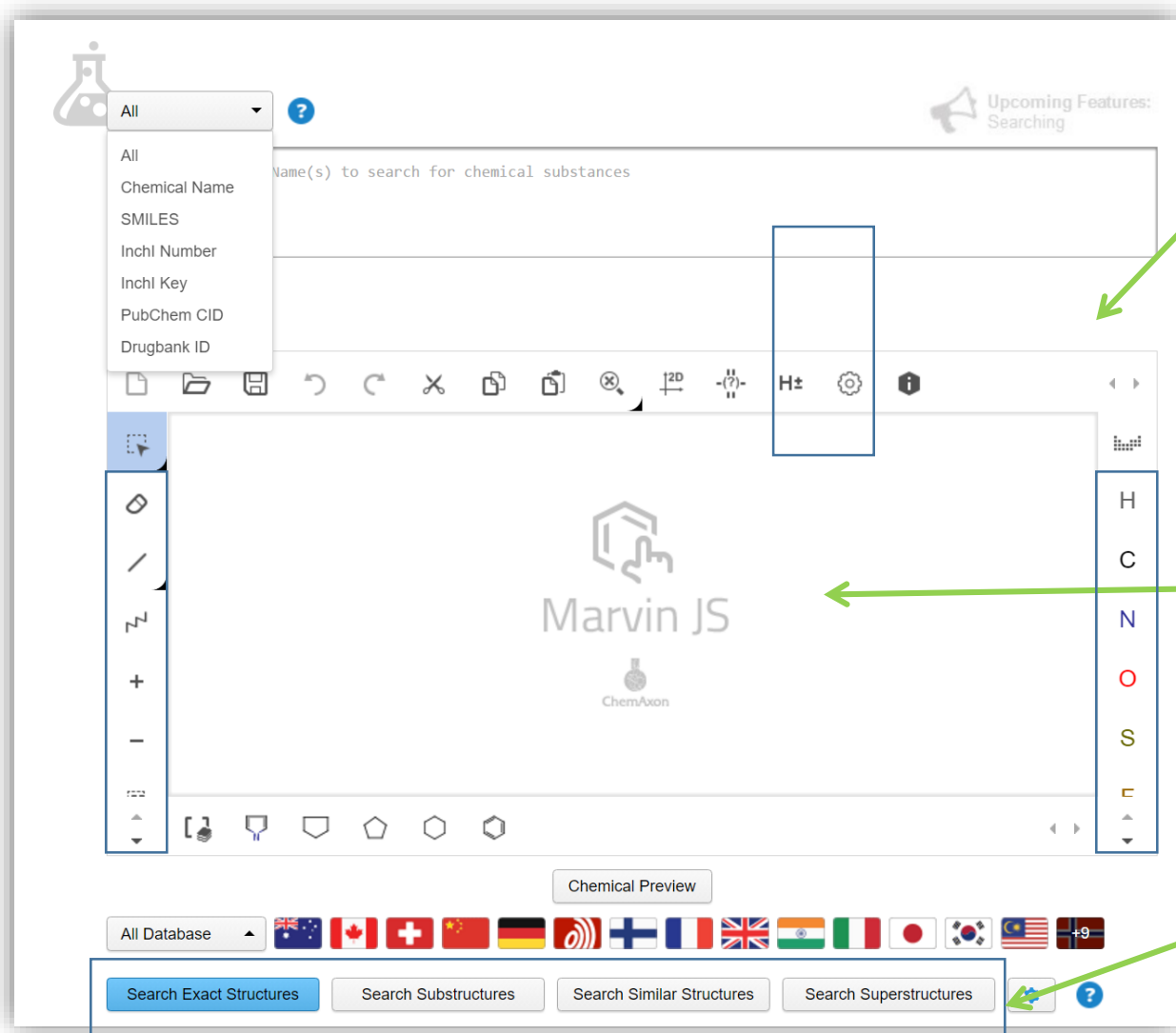
3D化学地图

可视化呈现化学结构之间的相似度以及对应的专利，快速找到相似结构，拓展研发灵感

企业/行业竞争情报分析

一键生成某种化合物的专利分析报告，即时评估竞争情报

特色功能1/ 1.2亿化学结构式检索，快速找到相似结构



化学结构式检索，覆盖1.2亿化学结构数据，适用于医药、石油化工、化妆品、材料科学在内的诸多领域。

可以通过绘制结构式或上传图片进行检索。

提供了子结构、超结构、相似结构、图片检索等多种专业检索入口。

某化药企业，觉得在某药物的化学结构上增加一个小结构，性能差不多，可以规避侵权风险，如何检索到这类化学结构相似的专利？

用智慧芽Chemical的化学结构检索可以轻松实现！

检索到与该结构相似的化合物

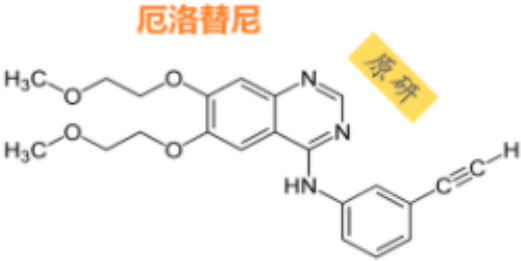
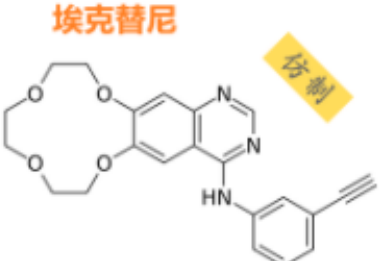
相似度评分为1分，说明该结构与检索的结构完全匹配。

信息框显示所检索结构的别名，以及其他标识信息。

此处还会显示复合物的结构属性信息。

The screenshot displays the PatSnap Chemical search results page. At the top, there are navigation options: Standard, Table, Analysis, Similarity, Email Alert, Chemscape, and Structures to Patents. The search results show 40,000 results. Three results are visible, each with a chemical structure, a similarity score of 1, and a molecular formula of C₂₅H₃₈O₅. The first result is SCHEMBL13297638; SCHEMBL13297638. The second result is SCHEMBL13297598; SCHEMBL13297598. The third result is SCHEMBL13297652; SCHEMBL13297652. Each result includes a 'Structures to Patents' button. On the left side, there is an information panel for the selected structure, showing its name (MK-733; Simvastatin; Simvastatin hydroxy acid; Synvinolin; Zocor), InChI Key (RYMZZMVNJR MUDD-HG QWONQESA-N), InChI string, and structural properties (Molecular Weight: 418.574 g/mol, Exact Mass: 418.272 g/mol, H-Bond Donors: 1).

案例：盐酸埃克替尼通过相似结构突破原研专利

分子结构		
治疗癌症	非小细胞肺癌	非小细胞肺癌
制药企业	罗氏制药	浙江贝达药业
价格	4300元人民币-5000元人民币/每周	2700元人民币-3500元人民币/每周

以著名的肺癌分子靶向药盐酸埃克替尼为例：

跨国药企在药物研发时，出于专利保护的考虑，会尽可能地覆盖将一个结构的改造空间。埃克替尼找到了一个巧妙的侧链成环结构，整个分子结构相似，风险较低，但差异合理，突破了专利。

站在研发厄洛替尼的罗氏的角度看，埃克替尼的专利突破使其收入减少，这也是类似的拥有较强原研能力的药企的痛点。

精准高效的二次过滤，快速找到你想要的

可以根据专利数、结构相似度、分子重等条件，对检索结果进行排序。

还可对检索结果进行过滤。例如，可以查看已投入市场的化学结构式应用，或将过滤条件设置为具体的公司。

The screenshot displays the PatSnap search results page. At the top, there are navigation tabs for 'Standard', 'Table', and 'Analysis'. A dropdown menu is open, showing sorting options: 'Number of Patents', 'Similarity', 'Compound Name', and 'Molecular Weight'. The main results list shows three entries:

- # 1 MEGESTROL ACETATE**: 110,003 Patents. Similarity Score: 0.6. Molecular Formula: C₂₂H₃₀O₄. SMILES: CC1=C[C@@H]2CC[C@@]3(C(=O)C)OC(=O)C)C[C@@]4(C1=CC(=O)CC4)C
- # 2 LOVASTATIN; Altoprev; Lovastatin; Mevacor; Mevinolin; MK-803**: 50,494 Patents. Similarity Score: 1. Molecular Formula: C₂₄H₃₆O₅. SMILES: CC[C@H](C)C(=O)O[C@H]1C[C@H](C=C2[C@H]1[C@H]([C@H](C=C2)C)CC[C@@H]3C[C@H](CC(=O)O3)O)C
- # 3 SIMVASTATIN; MK-733; Simvastatin; Simvastatin hydroxy acid; Synvinolin; Zocor**: 43,227 Patents. Similarity Score: 1. Molecular Formula: C₂₅H₃₈O₅. SMILES: CCC(C)(C)C(=O)O[C@H]1C[C@H](C=C2[C@H]1[C@H]([C@H](C=C2)C)CC[C@@H]3C[C@H](CC(=O)O3)O)C

On the left side, there is a 'Refine by' section with various filters such as 'Commercially Available', 'Chemical Properties', 'Isotope-Containing', 'Metal-Containing', and 'Regulatory Approvals'. A 'Refine' button is located at the bottom of this section.

特色功能2/ 一站整合药品、临床、反应等非专利数据

非专利数据源，一站式整合药品、反应和临床数据。

根据分子特性，进行多维条件限定，同时结合药品、临床和反应信息，多数据整合精准查找。

PCZOHLXUFIOCF-BXMDZJJMSA-N LOVASTATIN; Altoprev; Lovastatin; Mevacor; Mevinolin; MK-803

Overview Human Approvals Clinical Trial Data Sources

Source	Identifier
ChemSpider	ChemSpider:PCZOHLXUFIOCF-BXMDZJJMSA-N
DailyMed	LOVASTATIN
Wikipedia	LOVASTATIN
Atlas	LOVASTATIN
BindingDB	34168
ChEBI	40303
DrugBank	DB00227
eMolecules	591670
EPA CompTox Dashboard	DTXSID5020784
FDA SRS	9LHU78OQFD
Guide to Pharmacology	2739
Human Metabolome Database	HMDB14372
LINCS	LSM-2189
Mcule	MCULE-7087866108
NIH Clinical Collection	SAM002589963
Nikkaji	J22.276C
PharmGKB	PA450272
PubChem	53232
ZINC	ZINC03812841

Properties Bulk Patents

Structure Properties

- + AND Molecular Formula
- + AND Molecular Species
- + AND Molecular Weight TO

Patent Properties

- + AND Title
- + AND Assignee(s)
- + AND Application Date TO
- + AND IPC

Approval Properties

- + AND USFDA Applicant Company
- + AND USFDA Approval Date TO

ROZAXGRLVPAYTJ-GQFGMJRRSA-N MEGESTROL ACETATE; 5071; BDH-1298; Megace; Megace Es; Megestrol; Megestrol Acetate; Ovaban; SC-10363

Overview **Human Approvals** Clinical Trial Data Sources

FDA (USA) EMA (Europe) CFDA (China)

United States of America Food and Drug Administration
Total: (16)

BRISTOL MYERS SQUIBB

Approval Application Number [N016979](#)

001 MEGACE **Approved**

Approval Date 01 Jan 1982

Active Ingredients MEGESTROL ACETATE

Strength 20MG **Federal Register

Dosage Form TABLET,ORAL

AD Type DISCN

TE Code -

Marketing Status Discontinued

Patent	Expiration Date	Time until Expiry	Use Codes
US6592903	21 Sep 2020	44 MONTHS	- Drug Product
US7101576	22 Apr 2024	87 MONTHS	U-755
US9101540	22 Apr 2024	87 MONTHS	U-755 Drug Product
US9107827	22 Apr 2024	87 MONTHS	U-755
US9040088	22 Apr 2024	87 MONTHS	U-755
US9101549	22 Apr 2024	87 MONTHS	U-755

同步FDA、CFDA和EMA三大药监局数据，可链接至FDA等外部网站。以醋酸甲地孕酮为例，可以看到橙皮书里的信息，这里详述了专利的失效期。

临床数据，显示药品的研发进程。

ROZAXGRLVPAYTJ-GQFGMJRRSA-N MEGESTROL ACETATE; 5071; BDH-1298; Megace; Megace Es; Megestrol; Megestrol Acetate; Ovaban; SC-10363

Overview Human Approvals **Clinical Trial Data** Sources

Total (44)

National Institute of Allergy and Infectious Diseases (NIAID) **Completed** First received 02 Nov 1999 Last updated 22 Aug 2008

Collaborators
Roxane Laboratories
Bristol-Myers Squibb

Brief Title A Phase I/III Study to Evaluate Single Agent and Combination Therapy With Megestrol Acetate and Dronabinol for the Treatment of HIV-Wasting Syndrome

Conditions HIV Infections; Cachexia; HIV Wasting Syndrome;

Interventions Drug: Megestrol acetate;

CT.gov Identifier [NCT00000737](#)

Study Type Interventional

Study Phase Phase 1

Enrollment 56

Ages 18

Gender Both

National Institute of Allergy and Infectious Diseases (NIAID) **Completed** First received 02 Nov 1999 Last updated 26 Jul 2013

Collaborators

Brief Title A Study of Megestrol Acetate Alone or in Combination With Testosterone Enanthate Drug in the Treatment of HIV-Associated Weight Loss

Conditions HIV Infections; HIV Wasting Syndrome;

Interventions Drug: Testosterone enanthate;

特色功能3/ 从化学数据库，一键跳转到专利分析平台

筛选出想看的化学结构式后，一键跳转智慧芽专利数据库，对包含该结构式的专利进行分析。

The image displays two screenshots from a chemical database interface. The top screenshot shows search results for SIMVASTATIN, listing 40,000 results. It features chemical structures, a list of synonyms (e.g., MK-733, Simvastatin), and a 'Structures to Patents' button. The bottom screenshot shows the PatSnap interface with a table of patent records. The table includes columns for Publication Number, Title, Assignee Name, Application Date, Publication Date, Cited By Count, Standardized Assignee, and Cooperative Classification. The table lists 10 records, including patents from BERGENBIO AS, EMORY UNIVERSITY, and AURIGENE DISCOVERY TECHNOLOGIES LIMITED.

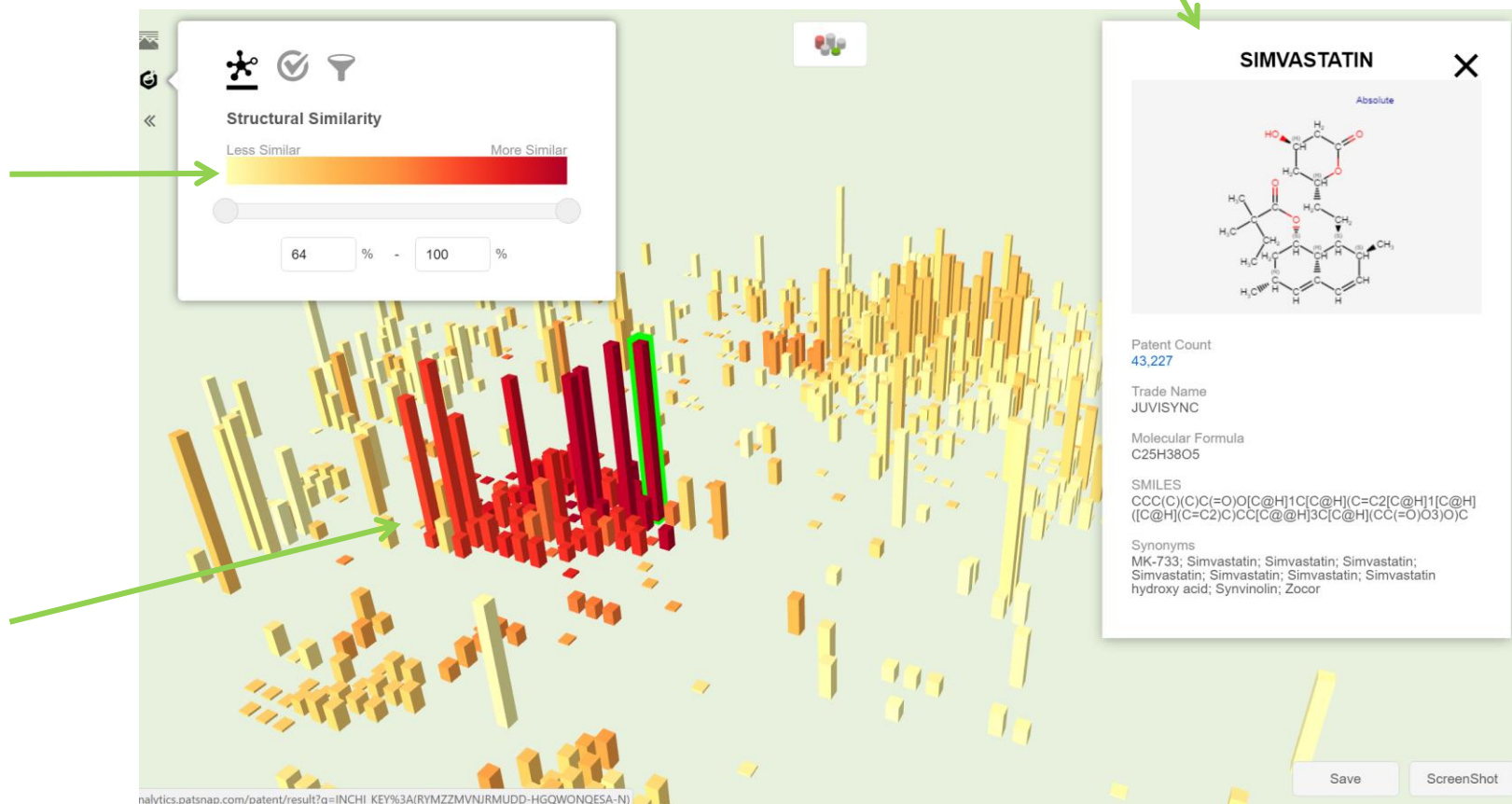
#	Publication Number	Title	Assignee Name	Application Date	Publication Date	Cited By Count	Standardized Assignee	Cooperative Classification
1	WO2017009261A1	BIOMARKERS FOR CANCER	BERGENBIO AS	06 Jul 2016	19 Jan 2017	-	BERGENBIO	C12Q1:6886 C12Q2600:106 C12Q2600:118 +1
2	JP6058211B2	化合物及び使用方法	ニシタライ スズキネルアブノルホウ ンパネーリニチヤド	12 Feb 2015	11 Jan 2017	-	ニシタライ スズキネルアブノ ルホウエチヤド ニリーニチヤド	A61K31:1437 A61K31:1444 A61K31:14709 +13
3	WO2017011517A1	BIS-AMINES, COMPOSITIONS, AND USES RELATED TO CXCR4 INHIBITION	EMORY UNIVERSITY GEORGIA STATE UNIVERSITY RESEARCH FOUNDATION, INC.	13 Jul 2016	19 Jan 2017	-	EMORY UNIVERSITY GEORGIA STATE UNIVERSITY	
4	WO2017011323A1	SMALL MOLECULE INHIBITORS OF THE MCL-1 ONCOPROTEIN AND USES THEREOF	UNIVERSITY OF MARYLAND, BALTIMORE	08 Jul 2016	19 Jan 2017	-	UNIVERSITY OF MARYLAND	
5	WO2017009806A1	SUBSTITUTED AZA COMPOUNDS AS IRAK-4 INHIBITORS	AURIGENE DISCOVERY TECHNOLOGIES LIMITED	15 Jul 2016	19 Jan 2017	-	AURIGENE DISCOVERY TECH	
6	WO2017011776A1	SUBSTITUTED PYRAZOLO[1,5-A]PYRIDINE COMPOUNDS AS RET KINASE INHIBITORS	ARRAY BIOPHARMA, INC.	15 Jul 2016	19 Jan 2017	-	ARRAY BIOPHARMA	G07D471:04
7	US20170021325A1	Preparation of Templates for Nucleic Acid Sequencing	ILLUMINA CAMBRIDGE LIMITED	06 Oct 2016	26 Jan 2017	-	ILLUMINA CAMBRIDGE	B01:19:0046 C12:01:0674 B01J22:19:0067 +3
8	US20170022149A1	EUMARATE COMPOUNDS, PHARMACEUTICAL COMPOSITIONS THEREOF, AND METHODS OF USE	NGUYEN, MARK QUANG	25 Jul 2015	26 Jan 2017	-	NGUYEN MARK QUANG	C07C233:85 C07C233:49 A61K45:06 +2
9	WO2000000239A1	MODULAR CYTOMIMETIC BIOMATERIALS, TRANSPORT STUDIES, PREPARATION AND UTILIZATION THEREOF	EMORY UNIVERSITY	30 Jun 1999	06 Jan 2000	8	EMORY UNIVERSITY	A61L33:0082 B52Y30:00 C08F30:02 +1
10	JP2010523693A	Thiazolyl compounds useful as kinase	ブリistol-ライヤーズ	09 Apr 2008	15 Jul 2010	1	BRISTOL-	G07D41:1714

特色功能4/ 化学地图，首创3D效果展示分子结构相似性

所见即所得，结构式信息、专利信息一览无遗。

根据结构相似度，将近似的结构式进行排布。可进行不同申请人的可视化分析，快速找寻近似、可替代化合物信息。

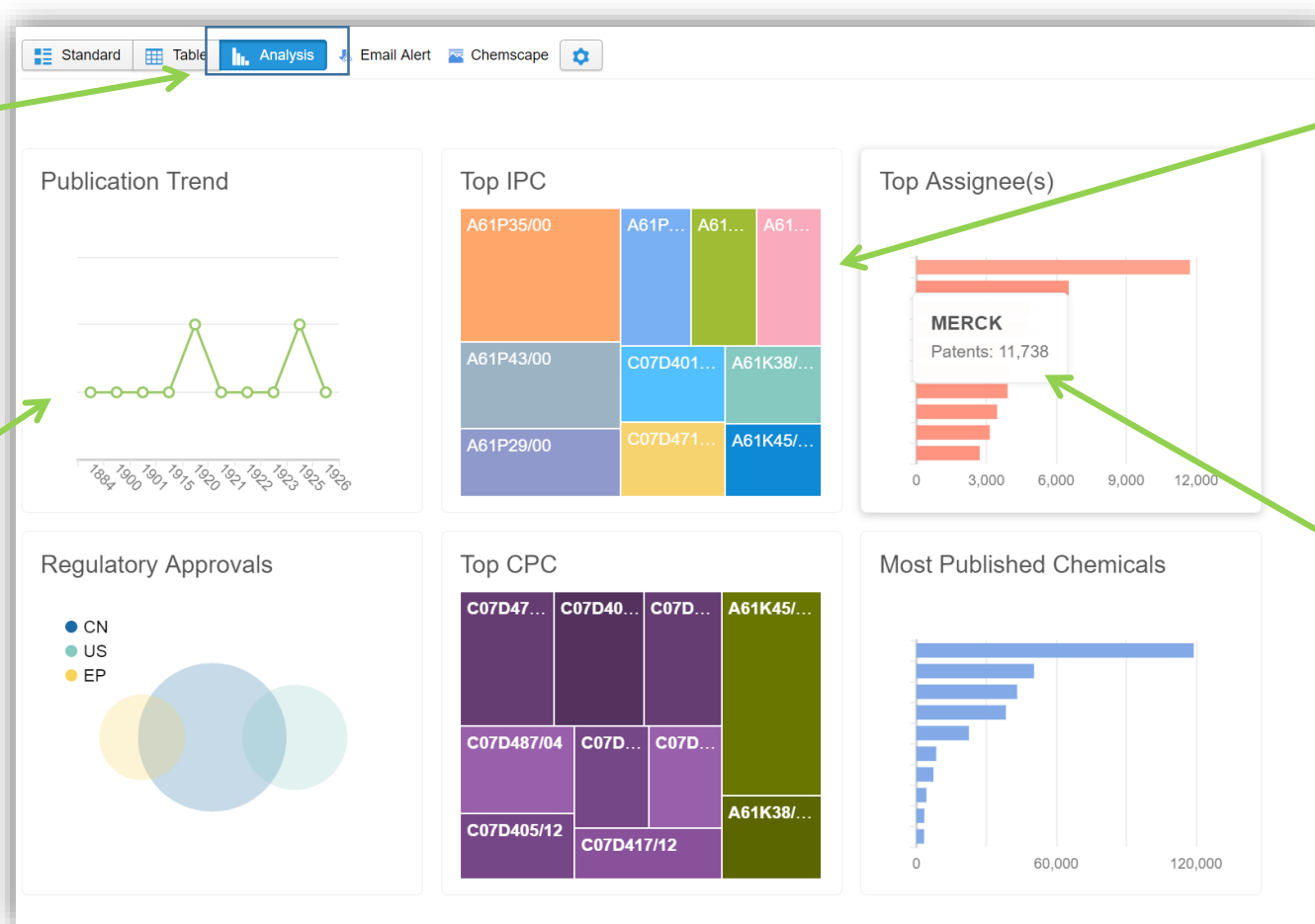
可视化呈现化学结构之间的相似性。柱状条的高度表示与某一化学结构相关的专利数量，距离表示结构的相似度。



特色功能5/ 一键生成行业分析，即时评估竞争现状

一键生成某种化合物的专利分析报告。

及时了解某种化合物的专利申请趋势。



某种化合物专利的IPC分类图，了解其应用领域。

行业的申请人列表，即时评估竞争情况。

全国前20大药企中，60%都已经成为智慧芽的客户



他们都是怎么用智慧芽的？（涉及到上市公司机密，这里不透露具体公司名字，以下为真实采访内容）

某华东药企上市公司
通过**智慧芽全球专利数据库**
绕开原研药的专利布局

“做仿制药往往会遇到原研药非常严密的专利布局，既有核心专利又有外围专利。”

智慧芽强大的检索和分析功能可以有效去除噪音，帮我快速找到竞争对手在药物晶型、化合物上的核心专利，进行有效规避，再从剂型、制备方法和合成工艺等角度寻求改良型的创新。”

——Aaron，专利总监

某原料中间体公司
通过**Chemical化学数据库**
找到了规避侵权的相似化学结构

“使用Chemical化学数据库，对我们化学结构、合成工艺等方面很大的启发，对我们做中间体的研发是个很好的补充。”

最值得一提的就是结构式检索，能快速找到相似结构绕开侵权专利，非常实用。”

——刘总，研发总监

国外某生物技术公司
通过**insights专利分析系统**
发现了潜在竞争对手

“本来是冲着专利检索用的智慧芽，没想到它在竞争情报上带给我很大惊喜。”

一直以为我们在行业里没什么对手，没想到通过智慧芽的专利地图，找出了在我们领域已经做了很多专利布局的另一家公司，并且很多都质量很高。为我们后续的竞争策略和风险规避提供了极大的帮助。”

——Jacky，CEO



了解更多

智慧芽官网: www.patSnap.cn

公众号: 智慧芽 (ID: Patsnap)

扫描右侧二维码, 申请试用**智慧芽Chemical化学数据库**

