



智慧芽化学数据库快速入门指南

智慧芽化学数据库

目录

1. 简介.....	1
2. 化合物搜索.....	1
2.1 结构式绘制.....	1
2.2 添加搜索条件.....	1
2.3 搜索方式.....	3
3. 搜索结果页及功能.....	3
3.1 结果页功能概览.....	3
3.2 过滤搜索结果.....	4
3.3 邮件监控化合物.....	5
3.4 化合物检索结果导出.....	5
3.5 化合物检索结果保存到 LabBench.....	6
4. 专利中化合物高亮与提取.....	7
4.1 化合物检索结果页跳转专利.....	7
4.2 从专利中提取化合物并跳转到化合物检索结果页.....	8
5. 多化学物质联合搜索.....	9
5.1 搜索两个化合物集合的交集.....	9
5.2 用多个化合物搜索专利及专利中的其他化合物.....	9
6. 搜索结果分析.....	10
6.1 化合物搜索结果关联专利分析.....	10
6.2 化合物地图分析.....	10
7. 性质搜索.....	11

1. 简介

智慧芽化学数据库 (Patsnap Chemical) 是智慧芽旗下化学领域垂直产品, 于 2017 年 3 月份正式上线。Chemical 数据库收录了超过 1 亿个有机和无机化学物质, 包括小分子有机物、聚合物、盐、混合物及配位化合物等; 另外还收录了近 2 万条的药品批准信息及 8 万余条临床实验数据。Chemical 数据库将上述收录数据与智慧芽的上亿条专利数据进行了打通, 并提供基于化学物质与专利的可视化分析图表, 为化学知识产权及研发工作提供全流程解决方案。

2. 化合物搜索

2.1 结构式绘制

利用截图中的四种方式可以在化学结构编辑框中绘制结构式。

The screenshot displays the Patsnap Chemical software interface. On the left, a chemical structure editor is shown with a complex organic molecule. Four red annotations with circled numbers point to different drawing methods: ① '手动绘制化学结构式' (Manual drawing of chemical structure), ② '上传化学结构式图片' (Upload chemical structure image), ③ '输入化学物质名称或别名' (Enter chemical name or alias), and ④ '导入化学结构式的其他文件数据' (Import other file data for chemical structure). The right sidebar shows search results for 'OSIMERTINIB', listing its CAS number (1421373-65-0), synonyms (azd-9291, osimertinib, tagrisso, mereletinib, azd9291), and a '化合物预览' (Compound preview) toggle.

2.2 添加搜索条件

- (1) 选择专利来源及专利文献范围

化学 搜索 LabBench 邮件提醒

普通绘制界面 结构式搜索 组合结构式搜索 关键词搜索 性质搜索 批量搜索

选择数据库

全部数据库

欧洲专利局	WIPO/PCT	美国	中国	日本	英国
法国	德国	俄罗斯	瑞士	韩国	中国台湾
澳大利亚	加拿大	中国香港	芬兰	印度	意大利
中国澳门	荷兰	挪威	新西兰		
新加坡	DOCDB				

① 化合物相关专利来源范围的选择

选择专利文献范围

专利名称 摘要

权利要求 说明书

选中 全部 数据库 专利名称/摘要/权利要求/说明书 + 添加过滤条件 全局设置

② 化学物质所在专利文献范围

精确搜索 相似搜索

(2) 添加专利字段及检索设置

专利名称/摘要/权利要求 说明书 邮件提醒

普通绘制界面 结构式搜索 关键词搜索 性质搜索 批量搜索

说明书
标准化申请人
分子量
法律状态
专利信息
结构信息
药物批准信息
临床试验信息

专利名称/摘要/权利要求

AND 专利名称/摘要/权利要求

+ 添加过滤条件

删除过滤条件

通过专利文献关键词及化合物信息获得更准确的搜索结果 ③

④ 设置搜索条件

搜索全局设置

搜索全局设置 ①

允许立体异构体

允许替代的原子质量 (同位素)

允许替代的原子电荷

允许互变 (异构) 体

相似搜索 (Tanimoto) 0.8

每页显示数目 50

选中 全部 数据库 专利名称/摘要/权利要求/说明书 + 添加过滤条件 全局设置

精确搜索 相似搜索

2.3 搜索方式

The screenshot shows the PatSnap search interface with a chemical structure editor. The editor contains a complex organic molecule. Below the editor, there are search options: ① 精确搜索 (Exact Search), ② 相似搜索 (Similar Search), ③ 子结构搜索 (Substructure Search), ④ 超结构搜索 (Superstructure Search), ⑤ 配方搜索 (Recipe Search), and ⑥ 专利搜索 (Patent Search). A dropdown menu is open, showing options: 选择一种搜索方式 (Select a search method), 相似结果分析 (Similarity analysis), 子结构搜索 (Substructure search), 超结构搜索 (Superstructure search), 配方搜索 (Recipe search), and 专利搜索 (Patent search). Red annotations explain the search methods: ③ 子结构搜索 (Substructure search), ④ 超结构搜索 (Superstructure search), ⑤ 配方搜索 (Recipe search), and ⑥ 专利搜索 (Patent search) are based on the current structure. ⑤ 配方搜索 (Recipe search) searches for the current compound and other compounds in patents. ⑥ 专利搜索 (Patent search) searches for patents containing the current compound.

上述⑤和⑥是基于精确结构进行的搜索。

3. 搜索结果页及功能

3.1 结果页功能概览

The screenshot shows the PatSnap search results page. The page displays search results for a chemical structure. The results are filtered by 941 items. The page includes a search bar, a filter panel on the left, and a list of results. Annotations explain the search results page features: ① 结果数目 (Result count), ② 通过结构式过滤搜索结果 (Filter search results by structure), ③ 选择固定条件过滤搜索结果 (Filter search results by fixed conditions), ④ 通过关键词、临床信息等过滤搜索结果 (Filter search results by keywords, clinical information, etc.), ⑤ 邮件监控化合物 (Email monitoring compounds), ⑥ 邮件监控化合物 (Email monitoring compounds), ⑦ 管理搜索结果 (Manage search results), ⑧ 搜索结果关联专利分析 (Search results associated patent analysis), ⑨ 搜索结果三维分析视图 (3D analysis view of search results), and ⑩ 修改相似度过滤搜索结果 (Modify similarity filter search results).

3.2 过滤搜索结果

(1) 用结构式过滤

在结果中添加结构式过滤

添加一个结构式过滤

精确搜索
相似搜索
子结构搜索
超结构搜索

添加结构式，通过精确、相似搜索对搜索结果进行过滤

保存 取消

(2) 通过关键词、临床信息等过滤搜索结果

通过技术或创新关键词、临床信息、批准信息、结构式信息进行二次搜索 ① 点击

② AND 摘要 选择过滤项

③ 添加过滤内容

④ 点击

⑤ 点击提交

提交 取消

申请(专利权)人: 阿斯利康(瑞典)有限公司
别名: 3-methoxy-N2-methyl- 显示全部

3.3 邮件监控化合物

化合物邮件监控可以跟踪化合物的专利信息、相似结构信息批准数据等数据的变化。

邮件提醒

OSIMERTINIB

修改邮件标题

标题 * ① OSIMERTINIB 邮件提醒

类型 * ② 全部 **选择邮件提醒内容**

- 新专利 (名称/摘要/权利要求)
- 新的相似化合物 (> 相似分数) 0.9
- 新的子结构
- 新的超结构
- 批准信息更新
- 临床信息更新

添加收件邮箱

发送到 * ③ sunxingrong@patsnap.com(我自己)

输入对方邮箱, 多个地址用';'分隔。

勾选此框, 确认您已获得您输入邮箱用户的同意。

发送频率 每周 周一

没有更新也发送提醒

应用 取消

3.4 化合物检索结果导出

可将需要的化合物导出到本地。

导出

选择搜索结果的导出范围

已勾选的化学结构 (1 个化学结构)

从第 1 至第 941 (总共941 个化学结构)

选择导出文件格式

Excel (*.xlsx)

Excel (*.xlsx)

CSV (*.csv)

SD (*.sdf)

选择导出内容

物质基本信息

物质基本信息

化学名称, InChIKey, 别名, IUPAC 名称, Standard InChI, Canonica

包含化学结构式图片

完成后邮件通知我

导出

物质基本信息

- 默认模板
- 物质基本信息
- 物质性质信息
- 临床试验信息
- 药物批准信息
- 药物批准信息及参考文献信息
- 自定义模板

3.5 化合物检索结果保存到 LabBench

LabBench 是 Chemical 一个线上工作空间，用户可利用 LabBench 进行本地及线上化学物质的管理。

The screenshot illustrates the process of saving search results to LabBench. It shows a search result for 10-(3-chloropropyl)-2-(methylsulphonyl)-10h-phenothiazine with 8 patents. A '保存到LabBench' (Save to LabBench) button is highlighted with a red circle ①. A modal window titled '保存到LabBench' is open, showing a list of folders including 'SIMVASTATIN', '对甲苯磺酰氨基脒', and '新建LabBench-1'. A red circle ② points to the '新建LabBench-1' folder. Below the folder list, there are options to '保存所有物质结构信息 (1)', '从 1 至 1', and '收录以后更新的物质结构信息结果'. A '保存到LabBench' button is visible. A red circle ③ points to the '高级选项' (Advanced Options) link. Below the modal, a 'New Folder (0)' button is shown. The main interface also shows a '我的LabBench' (My LabBench) section with a grid of folders, including '新建LabBench' (highlighted with a red circle ④) and '演示案例' (highlighted with a red circle ⑤). A '来自分享的LabBenches' (LabBenches shared by others) section shows a folder 'jijie' shared by 'jijie@patsnap.com' (highlighted with a red circle ⑥).





打开文件夹详情页面。

chemical by patSnap > LabBench > skr

搜索 LabBench 邮件提醒

Chemscap 自定义字段

1-20 个化学物质, 共 131 个化学物质

#	化合物名称	物质结构	分子式	分子量	专利总数	注释
1	TETRAFLUOROETHYLENE		C2F4	100.016	242035	
2	LOVASTATIN		C24H36O5	404.547	97441	
3	PRAVASTATIN		C23H36O7	424.534	72946	
4	disiloxane, hexamethyl-		C6H18OSi2	162.379	64757	

4. 专利中化合物高亮与提取

首先在化学数据库中绘制结构式搜索，找到相应专利，再利用化学物质高亮与定位功能迅速找到专利中难以发现的化学物质信息。

4.1 化合物检索结果页跳转专利

编辑 精确搜索 > 搜索结果

通过技术或创新关键词、临床信息、批准信息、结构式信息进行二次搜索

共 1 个结果 [创建邮件提醒](#) [导出](#) [保存到LabBench](#) [分析视图](#) [化合物三维分析](#)

勾选当前页

#1



10-(3-chloropropyl)-2-(methylsulphonyl)-10h-phenothiazine

专利数 [8 \(100%\) / 8](#) [① 点击专利数目跳转到结果页面](#)

申请 (专利权) 人: TYCHE INDS

别名 10-(3-chloropropyl)-2-(methylsulphonyl)-10h-phenothiazine | 40051-30-7 | 10-(3-chloropropyl)-2-(met

[通过该结构式搜索](#) [创建邮件提醒](#)

分析 3D专利地图分析 策略

7组扩展代表: 共8条 复制检索式

申请日从新到旧 50 保存到我的工作空间

公开(公告)号	法律状态/事件	化学结构式	标题	申请专利权人	发明人	申请日	公开(公告)日
IN201641043070A			A NOVEL PROCESS FOR THE PREPARATION OF METOPIMAZINE	SURANA COLLEGE MICRO LABS LIMITED	SAMUELSON, SAKUNTALA PLAKKALA, JEEVITHA KESHAV KUMAR, PRAMOD #2	2016-12-16	2017-02-03
CH105837528B	授权		一种2-(甲基磺酰基)-10H-吩噻嗪的制备方法	大连理工大学	张华 孟海霞	2016-05-30	2018-04-27
IN4431CHE2014A			PROCESS FOR THE PREPARATION OF PHENOTHIAZINE DERIVATIVES	TYCHE INDUSTRIES LIMITED	NARAYANA RAO MUTYALA RAMADAS CHAVAKULA VIJAYA RAJU MADDALA #1	2014-09-10	2016-07-01
IN367CHE2014A			IDENTIFICATION, SYNTHESIS AND STRUCTURAL STUDIES OF NEW REARRANGED IMPURITY IN METOPIMAZINE	TYCHE INDUSTRIES LIMITED	NARAYANA RAO MUTYALA RAMADAS CHAVAKULA VIJAYA RAJU MADDALA #1	2014-01-28	2016-08-31
IN5689CHE2013A			NOVEL POLYMORPH OF METOPIMAZINE	MSN LABORATORIES PRIVATE LIMITED	SRINIVASAN THIRUMALAI RAJANI SAJJA ESWARAAH MUMMADI VENKATESH	2013-12-10	2015-06-12
IN361CHE2013A			NOVEL CRYSTALLINE FORM OF AN ANTI-EMETIC DRUG	TYCHE INDUSTRIES LIMITED	NARAYANA RAO MUTYALA RAMADAS CHAVAKULA VIJAYA RAJU MADDALA #1	2013-01-29	2015-02-13
IN360CHE2010A			PROCESS FOR THE PREPARATION OF METOPIMAZINE	MSN LABORATORIES LIMITED	MANNE SATYANARAYANA REDDY SAJJA ESWARAAH KOMATI SATYANARAYANA	2010-02-15	2011-08-19

② 点击专利标题进入当前专利详情页

④ 光标浮在高亮物质显示化学结构

4.2 从专利中提取化合物并跳转到化合物检索结果页

IN201641043070A A NOVEL PROCESS FOR THE PREPARATION OF METOPIMAZINE

专利详情 全文对照 引用信息 同族专利 法律信息

专利名称: 权利要求书

权利要求书

Claims:WE CLAIM:
1) A process for the preparation of **Metopimazine** which comprises:
a) oxidising compound of Formula Ia wherein R1 = Methyl and R2 = NH pr
b) reacting compound of Formula II w wherein X, Y are may be same or diffe
c) optionally converting compound of
d) oxidising the compound of Formul wherein R1, X, Y have same meanings as described above;
e) reacting compound of Formula IV with **piperidine-4-carboxamide** to yield **Metopimazine**.
Claim 2) The process according to claim 1, wherein step a) is carried out in the presence of oxidising agent, optionally in presence of oxidative catalyst.
Claim 3) The process according to claim 2, wherein oxidising agent is selected from oxone, **manganese dioxide**, **potassium permanganate** or **hydrogen peroxide** and oxidative catalyst is selected from Lewis acid.
Claim 4) A process of preparing **Metopimazine** comprising:
a) oxidising the compound of Formula III to yield compound of Formula IV wherein R1 = Methyl and X, Y are leaving groups;
b) reacting compound of Formula IV with **piperidine-4-carboxamide** to yield **Metopimazine**.
Claim 5) The process according to claim 4, wherein step a) is carried out in presence of oxidising agent and organic solvent.
Claim 6) The process according to claim 5, wherein oxidising agent used is selected from oxone, **manganese dioxide**, **potassium permanganate** or **hydrogen peroxide** and organic solvent used is selected from ketone solvents such as **acetone**, **methyl ethyl ketone** or **methyl isobutyl ketone**.

化合物名称: 124 个结构式

- 1 METOPIMA... 45 次提及 2 次提及 18 次提及
- 2 toluene 18 次提及 0 次提及 1 次提及
- 3 METHYL AL... 14 次提及 0 次提及 1 次提及

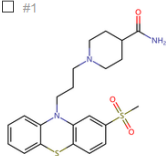
提取化合物跳转到化合物结果页面, 可进行该化合物的专利分析

(INCHI_KEY:((BQDBKDMTJBJLA-UHFFFAOYSA-N))) AND (PN:(IN201641043070A))

共 1 个结果 创建邮件提醒 导出 保存到LabBench 分析视图 化合物三维分析 关键化合物分析

勾选当前页

#1



METOPIMAZINE

专利数 1 (1%) / 3,836

申请 (专利权) 人: SURANA COLLEGE

别名 METOPIMAZINE | 14008-44-7 | 14170-03-7 | exp-999 | metopimazine | vogalene | nortrip | exp 9 显示全部 >

通过该结构式搜索 创建邮件提醒

5. 多化学物质联合搜索

5.1 搜索两个化合物集合的交集

组合结构式搜索 关键词搜索 性质搜索 批量搜索

添加多个结构进行相似/子结构/配方搜索；或者搜索包含所添加结构的专利。

① 绘制结构式，只能绘制2个

OSIMERTINIB AND INDOLE

② 选择搜索方式，只支持相似、子结构和超结构

子结构 子结构 子结构

精确 相似 子结构 超结构

数据库 专利名称/摘要/权利要求/说明书 + 添加过滤条件 全局设置

③ 点击搜索上述两个化合物相似/子结构/超结构集合中的公共化合物

搜索专利 搜索配方 搜索化合物

5.2 用多个化合物搜索专利及专利中的其他化合物

组合结构式搜索 关键词搜索 性质搜索 批量搜索

添加多个结构进行相似/子结构/配方搜索；或者搜索包含所添加结构的专利。

① 绘制结构式，可绘制最多5个

GEFITINIB AND OSIMERTINIB

② 选择搜索方式

精确 精确

精确 相似 子结构 超结构

数据库 专利名称/摘要/权利要求/说明书 + 添加过滤条件 全局设置

③ 点击搜索同时包括上面化合物的专利

搜索专利 搜索配方 搜索化合物

④ 点击搜索包括上述两个化合物专利中的其他化合物

② 分子量分析
③ 专利权人分析
④ CPC分类法分析
⑤ CPC分类法分析
⑥ 化合物关联专利申请年分析
⑦ 化合物关联专利申请地域分析
⑧ 药物批准信息分析
⑨ 药物临床实验阶段分析

每个长方体柱子代表一个化学物质
① 点击柱子，右边显示化合物

Select Structure

OSIMERTINIB
DUYJMQONPNNFPI-UHFFFAOYSA-N

Patent Count
397

Trade Name
TAGRISSO

Molecular Formula
C28H33N7O2

SMILES
CN1C=C(C2=CC=CC=C2)C3=NC(=NC=C3)N
C4=C(C=C(C=C4)NC(=O)C)N(C)C(C)(C)O

Synonyms

7. 性质搜索

搜索 LabBench 邮件提醒

结构式搜索 组合结构式搜索 关键词搜索 性质搜索 批量搜索

① 通过专利数据搜索化合物

专利特征

- AND 专利名称
- AND 申请 (专利权) 人
- AND 申请日 TO
- AND IPC 分类号

② 通过结构特征搜索

结构特征 (1)

- AND 分子式 C4H6O6
- AND 酸碱性
- AND 分子量 TO

③ 通过药物批准特征搜索

批准特征

- AND USFDA 申请公司/机构
- AND USFDA 批准日期 TO
- AND USFDA 当前临床阶段

④ 通过药物临床试验数据搜索

临床试验性能

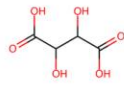
- AND 主要责任人
- AND 首次收到日期 TO
- AND 研究对象最小年龄 TO
- AND 临床研究阶段

共 123 个结果 [创建邮件提醒](#) [导出](#) [保存到LabBench](#) [分析视图](#) [化合物三维分析](#)

专利数 语言 设置

勾选当前页

#1



CADAVERINE TARTRATE

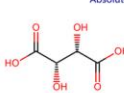
专利数 764,905 (100%) / 764,905

申请 (专利权) 人 诺夫曼-拉罗奇有限公司

别名 CADAVERINE TARTRATE | 147-73-9 | 868-14-4 | 87-69-4 | 133-37-9 | 526-83-0 | di-tartaric acid 显示全部 -

[通过该结构式搜索](#) [创建邮件提醒](#)

#2



Absolute

TARTARIC ACID

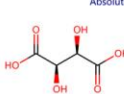
专利数 9,383 (100%) / 9,383

申请 (专利权) 人 默克专利股份有限公司

别名 TARTARIC ACID | 147-71-7 | 1150316-16-7 | e334 | tartaric acid | d-(-)-tartaric acid | d-tartaric acid 显示全部 -

[通过该结构式搜索](#) [创建邮件提醒](#)

#3



Absolute

TARTRATE

专利数 9,159 (100%) / 9,159

申请 (专利权) 人 德森药业有限公司

别名 TARTRATE | 87-69-4 | 133-37-9 | 138508-61-9 | 1039646-76-8 | 1334703-49-9 | 1336-18-1 | 显示全部 -

[通过该结构式搜索](#) [创建邮件提醒](#)

Tartaric Acid Derivatives
Organic Solvent D-(-)-tartaric acid 成本低
D-tartaric Acid 酒精酸
L-tartaric Acid 酒石酸
Tartaric Acid Raw Material 酒石酸卡巴拉打
Tartaric Salts
Hydrogen Tartrate

查看 764,905 条相关专利 (100%)

Pharmaceutical Compositions Containing
Salt Form Selective Crystallization
Process for Preparation
Nucleic Acid Tartaric Acid 2-thienyl
Amine D-tartaric Acid D-酒石酸
L-tartaric Acid Novel Salts L-tartaric
Crystalline Compound

查看 9,383 条相关专利 (100%)

Glass Composition 化合物
Oral Care Composition 有乳剂
L-tartaric Acid Formulations
Process for Preparation
Pharmaceutical Compositions Containing
Personal Breathing Zone

查看 9,159 条相关专利 (100%)

通过分子式搜索可以查到化合物全部的构型与异构体，其他信息可以对检索结果进行排除。