Patsnap智慧芽

化学专利搜索系统用户手册

目录

Chapter 1

一/ 系统入门

一/ 系统入门

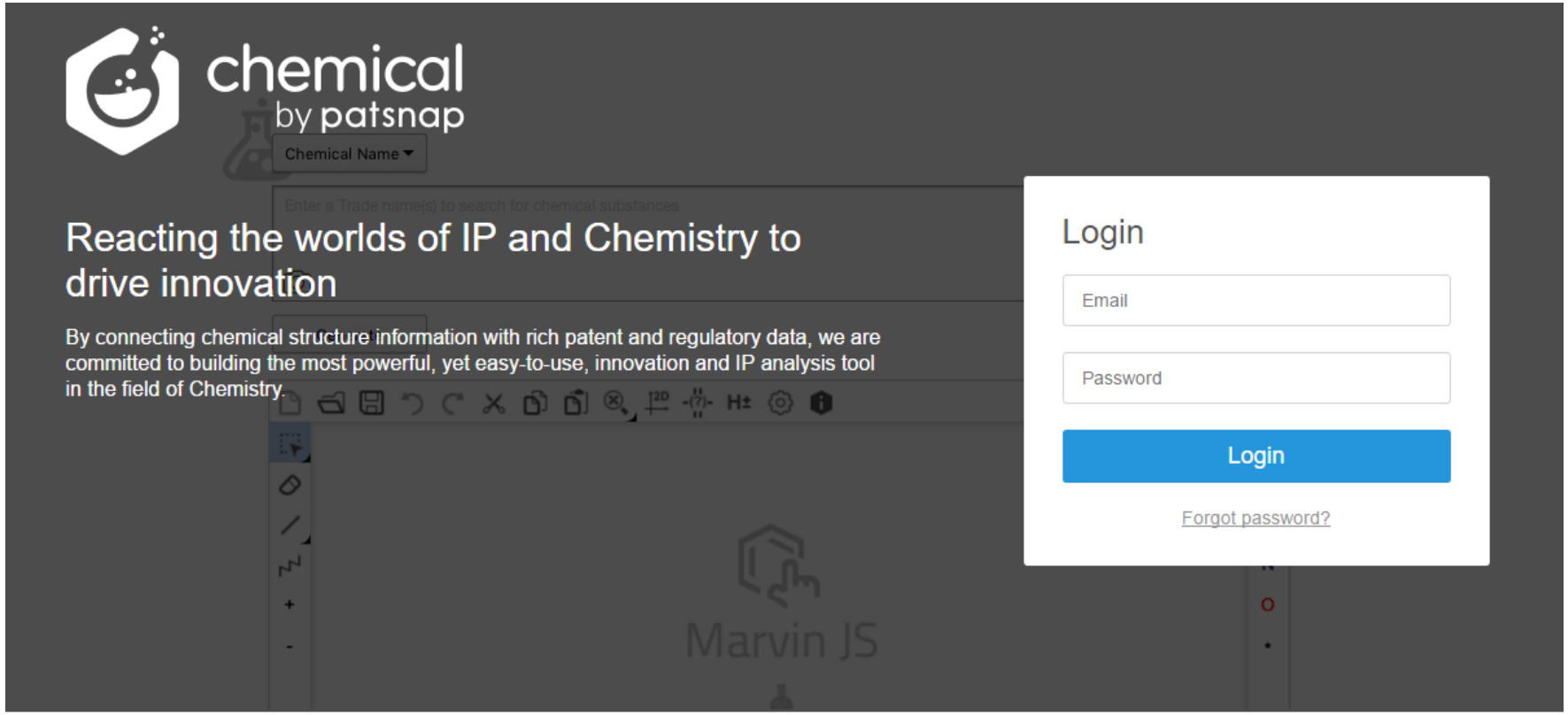
1.1 系统简介

- PatSnap Chemical 化学专利搜索为PatSnap旗下产品，历经多年精心打造和优化，成为众多企业 、律所、代理机构、大学、政府与科研院所研发人员的推荐工具。
- 专注于基础全面的化学专利信息。数据库涵盖欧专、世界知识产权组织、美国、中 国、德国、日本、台湾等7个地区或组织的全文以及100+个国家地区的摘要数据，总数超过1亿余条；支持英语全文搜索；根据用户使用习惯设计了 多种搜索方式和阅读模式，新用户可以快速掌握使用方法，得心应手。
- 追求于创新，借助于图形化分析作出最佳决策。首创3D专利地图显示专利关联度分布，专利分析可以如此简单而强大；将冗长的权利要求书自动整理出每个保护点 ，每个关键都不会被忽略；用图片搜索专利，为费尽心思收集关键词的您擦一把汗； 每个月至少有一次功能上新，我们在追求更好的路上一路奔跑。
- 更强调体验，易于上手，学习成本低。简单的功能界面配合细节设置的功能，能满足专业化的需求而不复杂；搜索结果多种图文方式呈现，贴合不同用户的习惯和需要；多处助手设置，完成一项操作无需跳转页面；零培训即能应用自如，任何疑问24小时内提供回复。
- 侧重于应用，是方便易用的协作工具。只要有网络，身处任何地方都可以随时搜索专利或查阅已保存的信息；集搜索和分析于一体，既纵览全局，预测趋势变化，又 不错过细节；多种搜索途径，无论您是资深的IP工程师，还是技术控，都会找到适合自己的使用方式。

一/ 系统入门

1.2 功能介绍

- 提供四种不同的化学检索入口：结构检索入口、属性检索入口、批量检索入口、专利检索入口
- 专业的化学结构式绘制插件，自带丰富的绘制及展示小功能
- 多种不同的检索结果展示视图：标准视图、网格视图、表格视图、高级分析视图
- 高级分析视图提供多维度的数据统计和趋势分析
- 提供全文检索，基于检索结果可进行二次多级过滤
- 专利分析检索系统和三维地图分析链接跳转
- 提供邮件提醒、历史记录操作，方便用户使用



1.3 浏览器推荐

支持火狐、谷歌和IE11以上版本浏览器，可保证更好的使用体验；

1.4 登录与登出

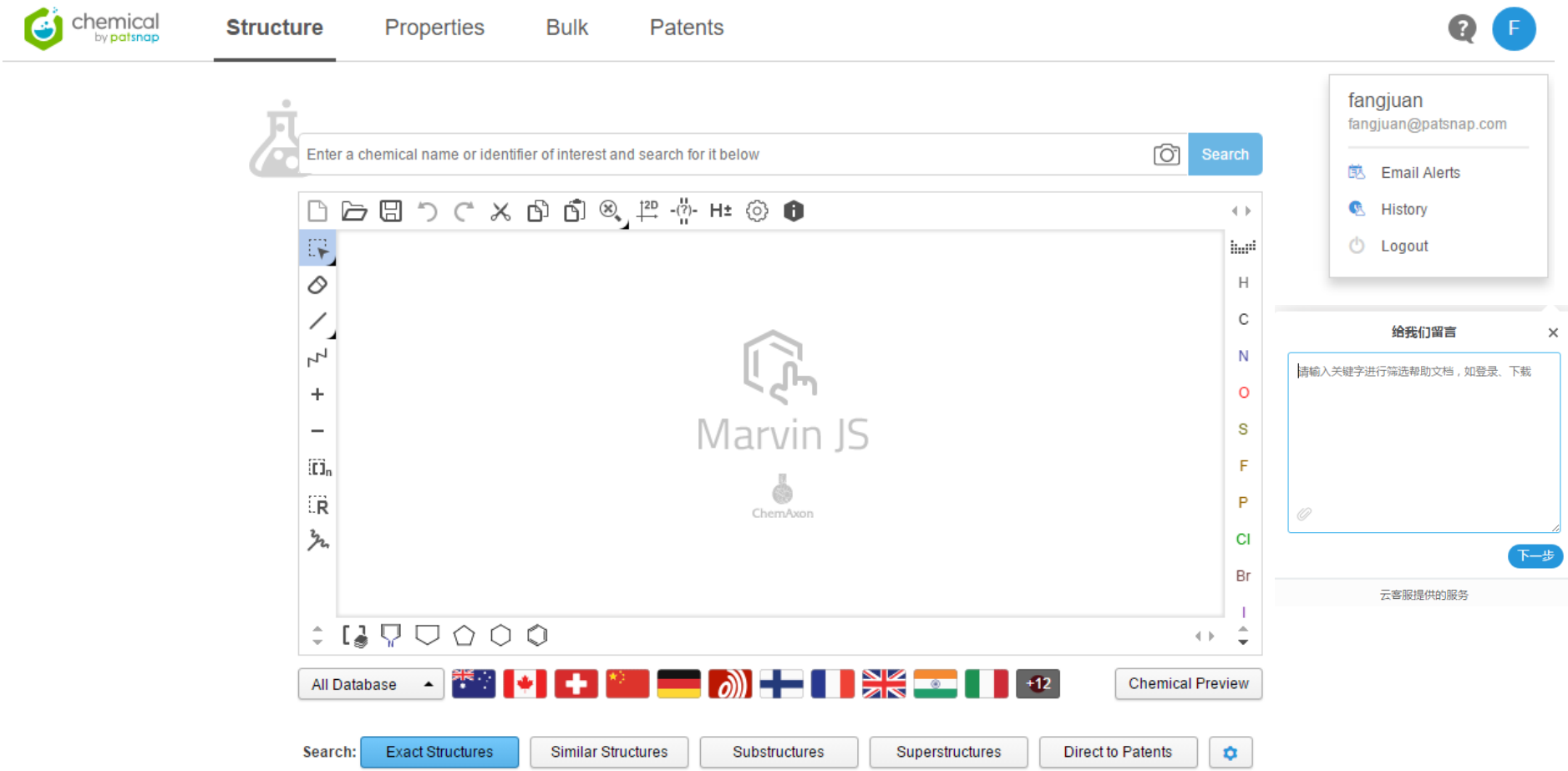
1.4.1 登陆网址：

https://chemical.zhihuiya.com/（中国）；

1.4.2 账号登录：

1）输入您的会员账号密码，即可登录系统；

2）如果忘记密码，可通过“忘记密码？”设置新的密码重新登录系统；



1.4.3 账号登出：

如图右上角 F 显示当前登录用户名的大写首字母，点击此按钮出现用户菜单，选择点击 Logout 即可登出；

1.5 联系客服

点击 ? 输入相应关键词筛选帮助文档，解答检索中遇到困惑；若无，可将疑问发送到智慧芽官方邮箱，有专门客服为您解答；

Chapter 2

二/ 检索结果入口

2.1 结构检索入口

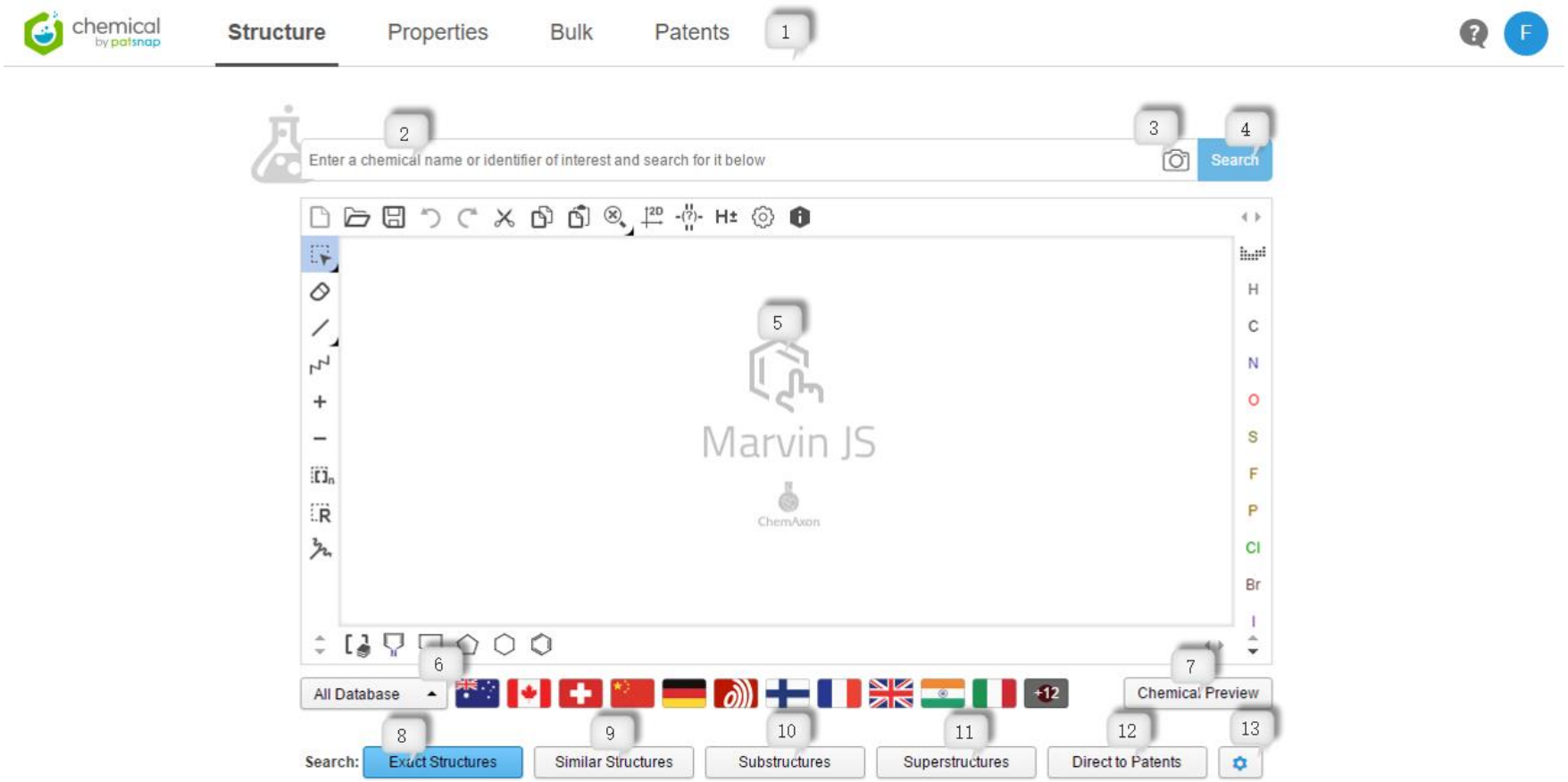
2.2 属性检索入口

2.3 InChl Keys批量检索入口

2.4 专利检索入口

二/ 检索结果入口

2.1 结构检索入口



此页面是登录系统成功显示的首页

【1】页面上方一级菜单是化学检索的四种入口（Structure、Properties、Bulk）以及专利检索入口（Patents）

【2】文本输入框：化合物名称、分子式 等任意属性值

【3】化合物图片上传

【4】搜索按钮

【5】化学绘制插件Marvin JS

【6】数据库选择器

【7】化合物预览

【8】结构精确检索入口

【9】结构相似度检索入口

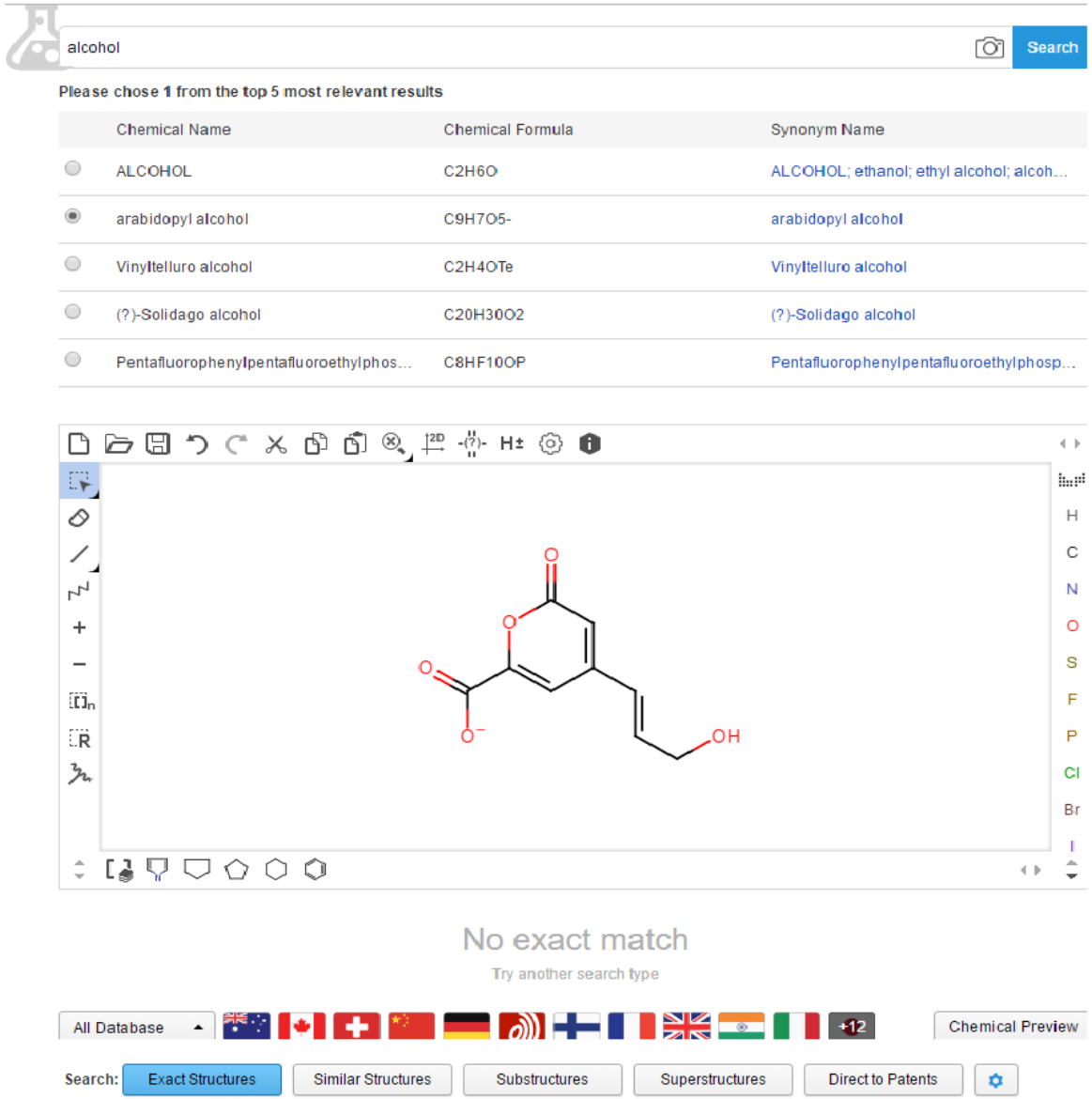
【10】子结构检索入口

【11】父结构检索入口

【12】专利分析检索系统入口

【13】检索相关设置

2.1.1 结构精确检索



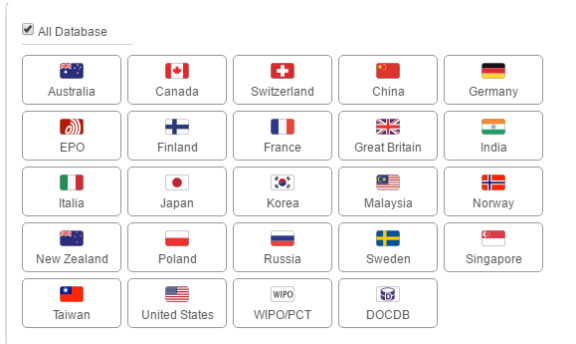
1. 这里以手动输入化合物信息为例，输入化合物的名称、分子式以及其他任一信息，例如： alcohol或C2H6O或InChl Key等，点击“Search”按钮；

2. 在显示的top5列表中选取一个化合物，Marvin JS面板中实时显示选取的化合物结构式；

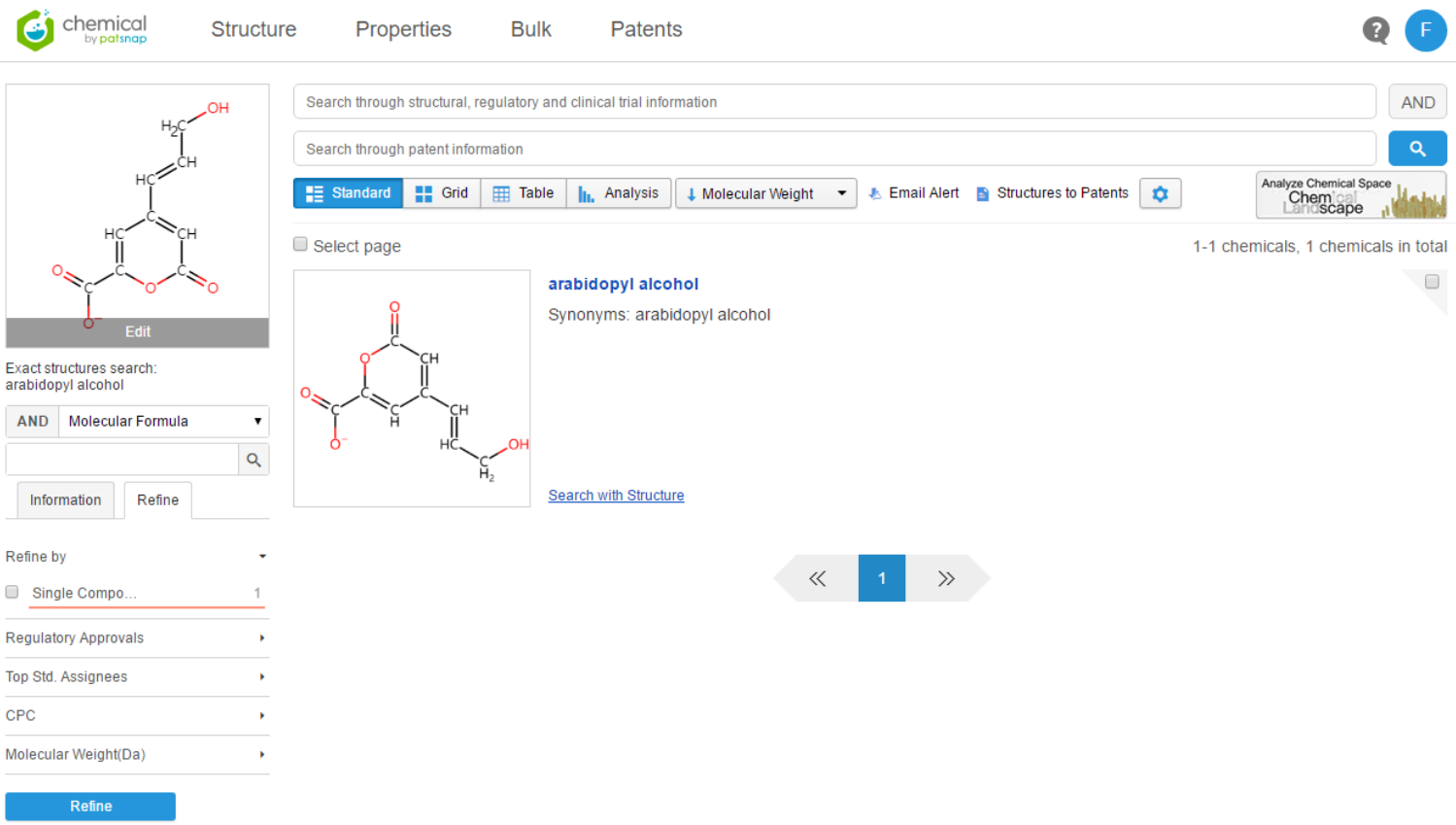
3. 点击“Chemical Preview”，预览化合物的信息；

4. 点击 进入全局设置，具体操作见章节3.3，这里的设置和检索结果页面的全局设置保持同步一致；

5. 点击数据库选择器“All Database”，选择数据库来源；



如果数据库选择其中未选择任何一个，底部五个Search入口



5. 点击检索入口，例如“Exact Structures”，以精确检索跳转至化学检索页面，也可以选择其他检索方式跳转。

6. 如图检索结果页面显示符合条件的结果；

2.1.2 结构相似度检索

1. 这里以手动绘制化合物为例，在Marvin JS面板中绘制化学结构式：在工具框中选择分子式点击在面板中，用线条加以连接，例如结果为甲苯C7H8；

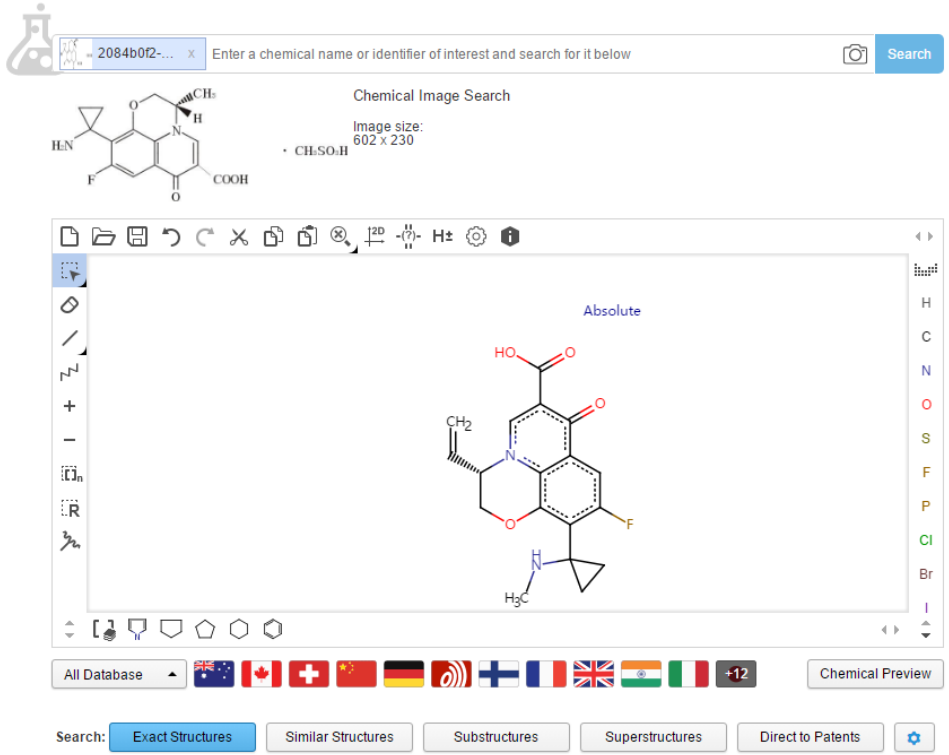
2. 点击“Chemical Preview”，预览化合物的信息；

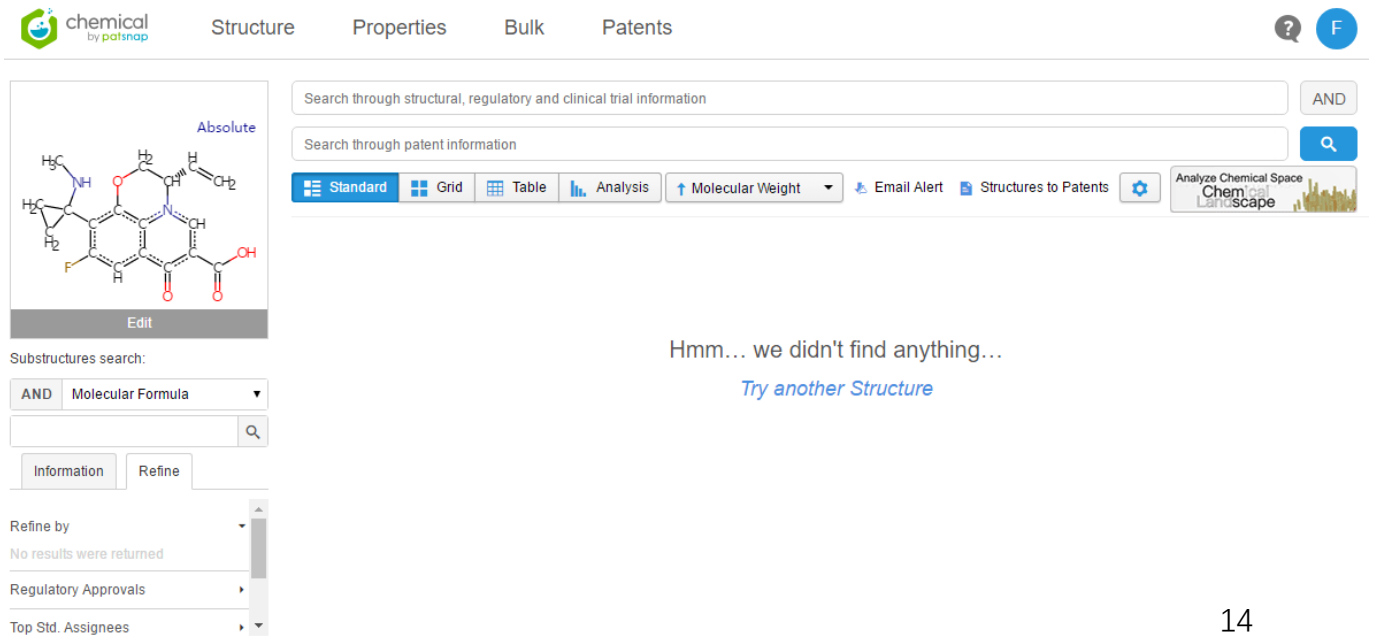
3. 点击检索入口，例如“Similar Structures”，以相似检索跳转至检索结果页面，例如当前的相似度为图中所示，相似度的具体设置将在章节3.3中讲述；

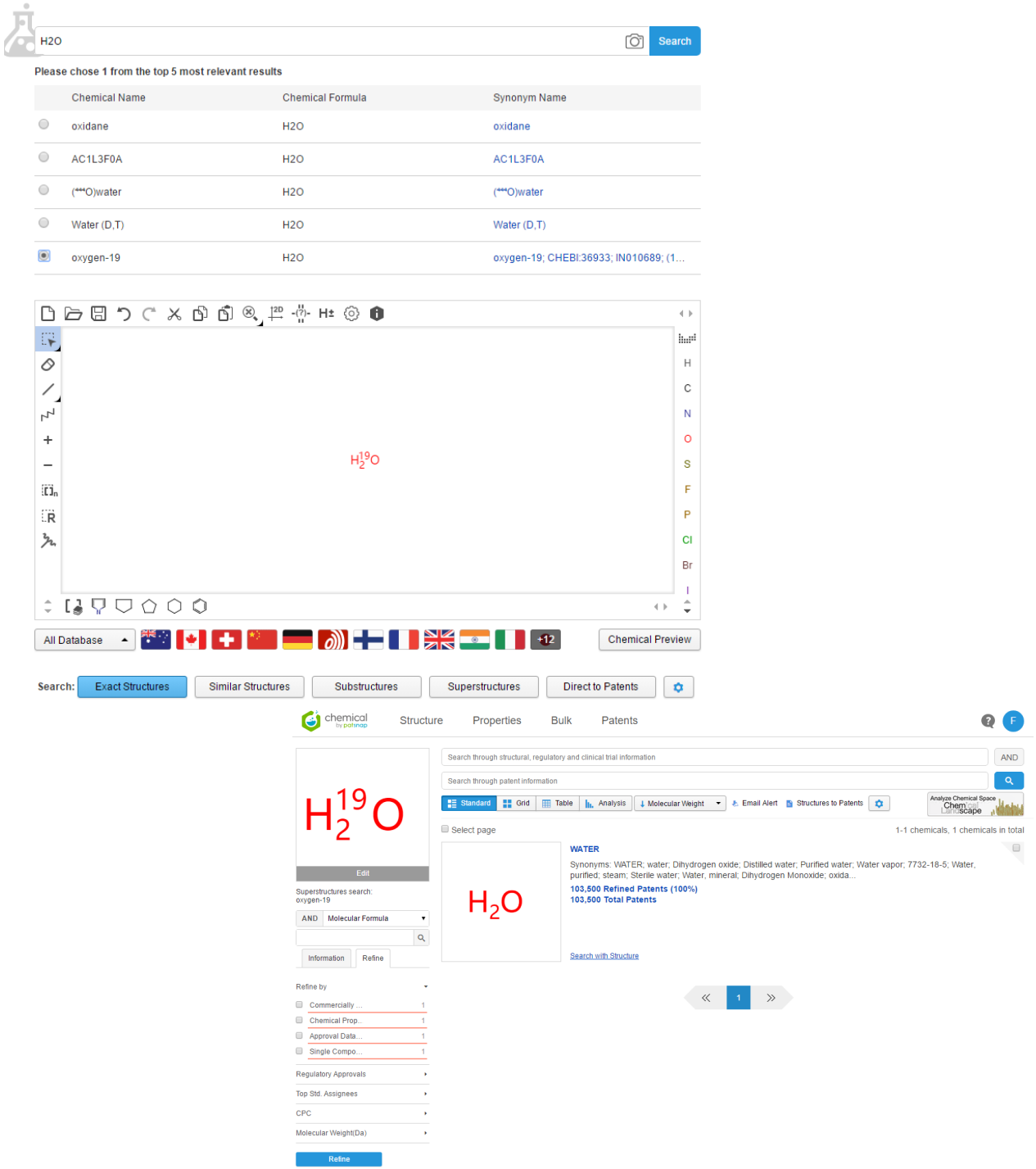
4. 如图检索结果页面显示符合条件的结果；

2.1.3 子结构检索

1. 这里以上传化合物图片为例，点击  ，从本地上传一个化合物图片（png/jpg/...etc.），下方显示该图片及其尺寸大小， Marvin JS面板中也该化合物结构式；
2. 点击“Chemical Preview”，预览化合物的信息；
3. 点击检索入口，例如“Substructures”，以子结构检索跳转至检索结果页面；
4. 如图检索结果页面显示符合条件的结果；





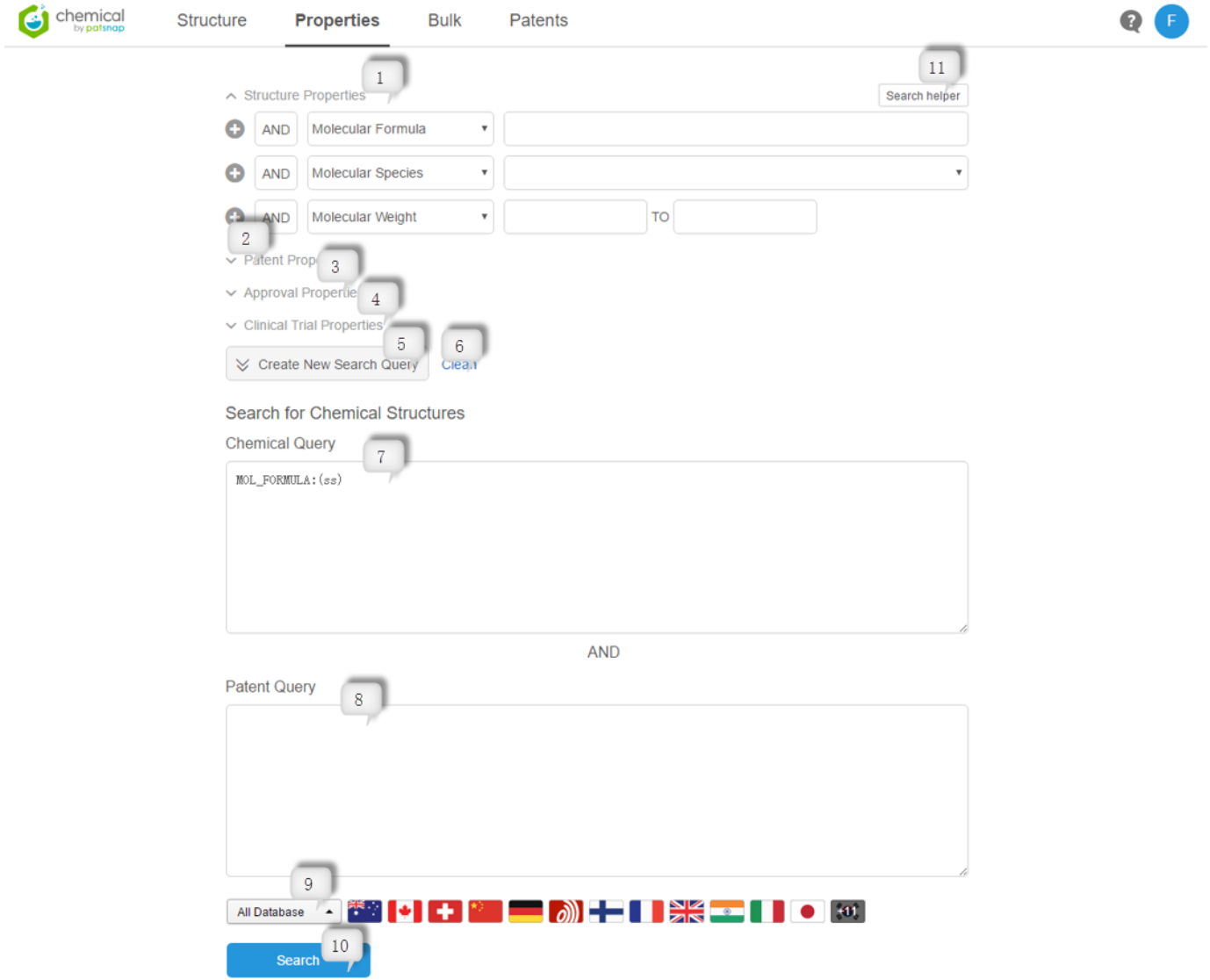


2.1.4 父结构检索

1. 这里以手动输入化合物信息为例，输入化合物的名称、分子式以及其他任一信息，例如： H2O，点击“Search”按钮；
2. 在显示的top5列表中选取一个化合物，Marvin JS面板中实时显示选取的化合物结构式；
3. 点击数据库选择器“All Database”，选择数据库源为“China”；
5. 点击检索入口，例如“Superstructures”，以父结构检索跳转至化学检索页面；
6. 如图检索结果页面显示符合条件的结果；

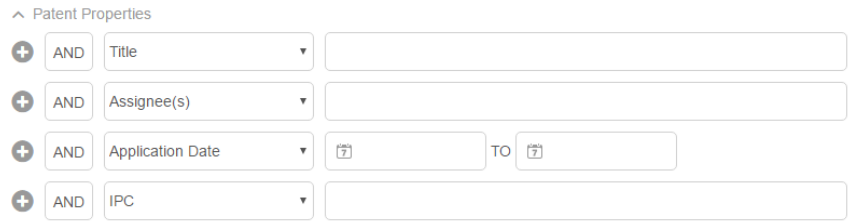
二/ 检索结果入口

2.2 属性检索入口



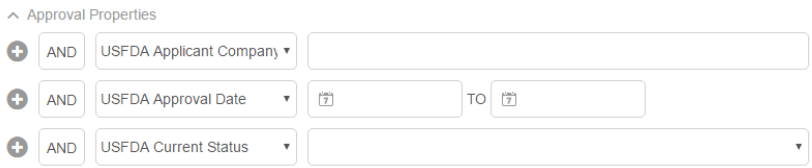
【1】结构属性栏：属性项默认有3个

【2】专利属性栏：属性项默认有4个



【3】审核属性栏：属性项默认有3个

【4】临床试验属性栏：属性项默认有4个



【5】生成Query按钮

【6】清除Qurey按钮

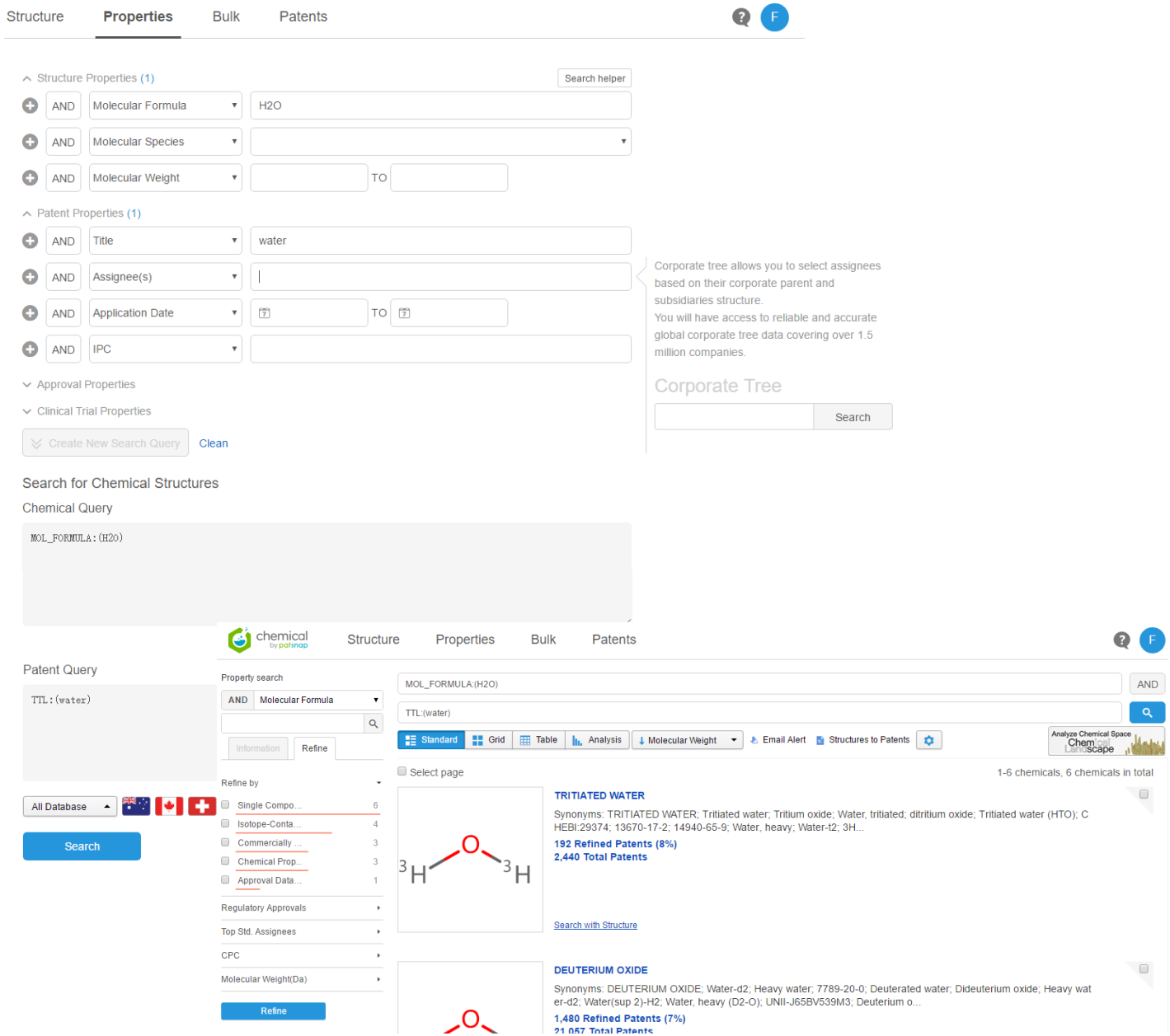
【7】化合物查询条件框

【8】专利查询条件框

【9】数据库选择器

【10】化学专利检索入口

【11】搜索帮助



1. 在页面上方一级菜单中点击“Properties”；

2. 在结构属性栏中输入需要检索的化合物的信息，如图C7H8，1）点击 增加属性项；2）点击 删除属性项；3）在下拉列表框里选择合适的属性；

只要有一个属性项输入值，下方的Chemical Query文本框就能生成query，也可手动输入查询条件的query；

2. 在专利属性栏输入专利相关信息，同样可以点击 和 增删属性项；

3. 输入专利属性栏某个属性值的时候，右边提供帮助窗口快速查询，只要有一个属性项输入值，下方的Patent Query文本框就能生成query，也可手动输入查询条件的query；

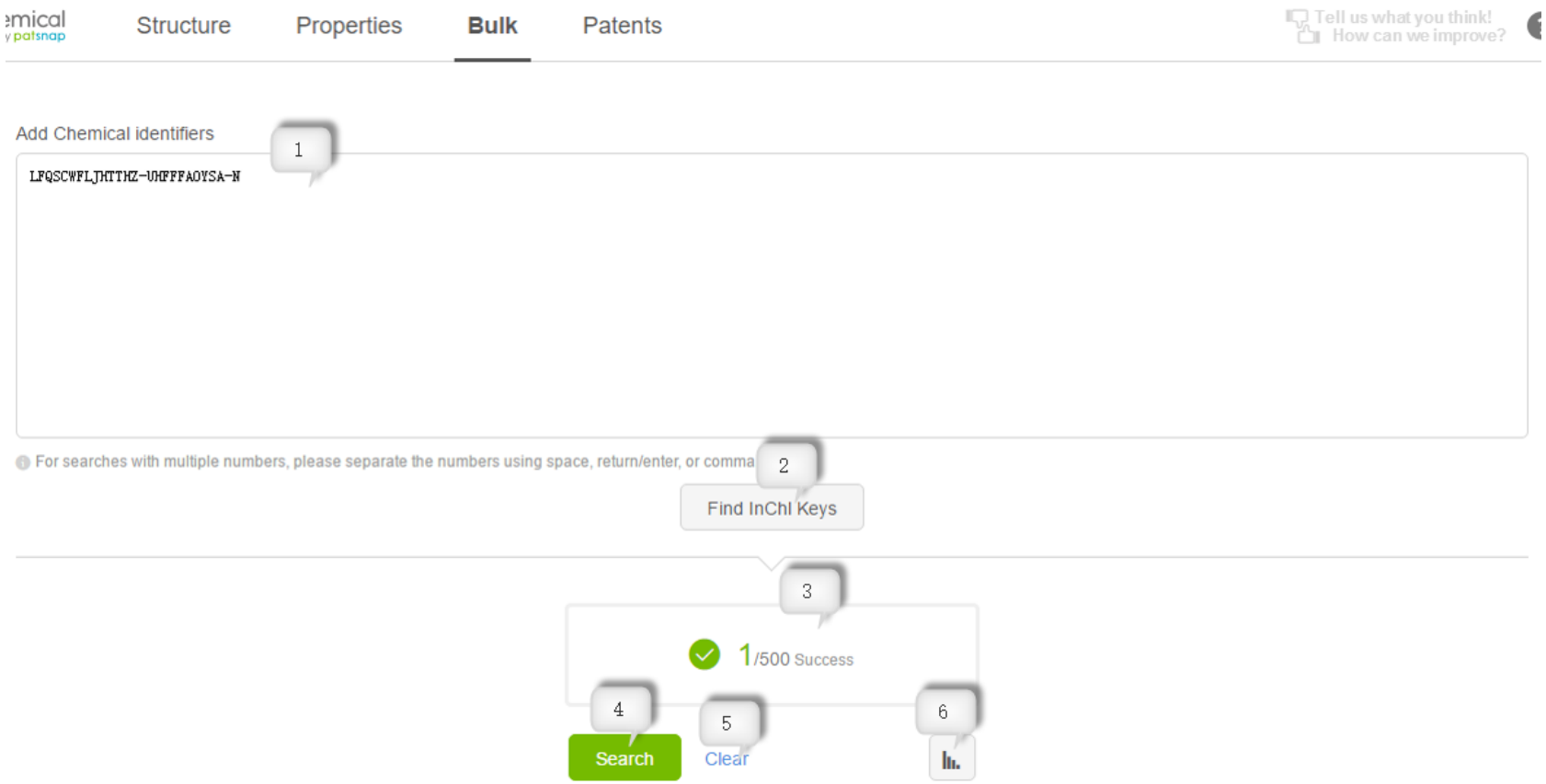
4. Chemical Query和Patent Query两个文本框中至少有一个有查询query语句，“Search”按钮即可高亮点击；

5. 点击数据库选择器“All Database”，选择数据库源；

6. 点击检索入口 “Search”按钮，跳转至检索结果页面；

二/ 检索结果入口

2.3 InChl Keys批量检索入口



【1】化合物Inchl Keys输入框：多个InChl Key之间以空格、逗号、回车为分隔符

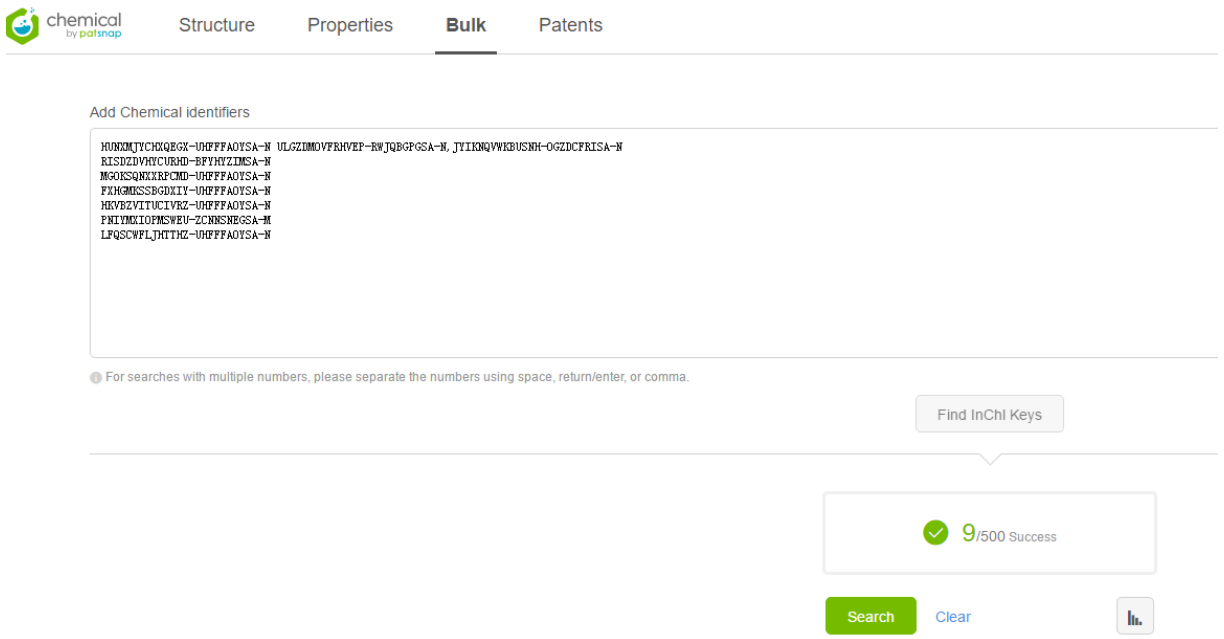
【2】Find InChl Keys 查询按钮：当【1】为空时被置灰不能使用

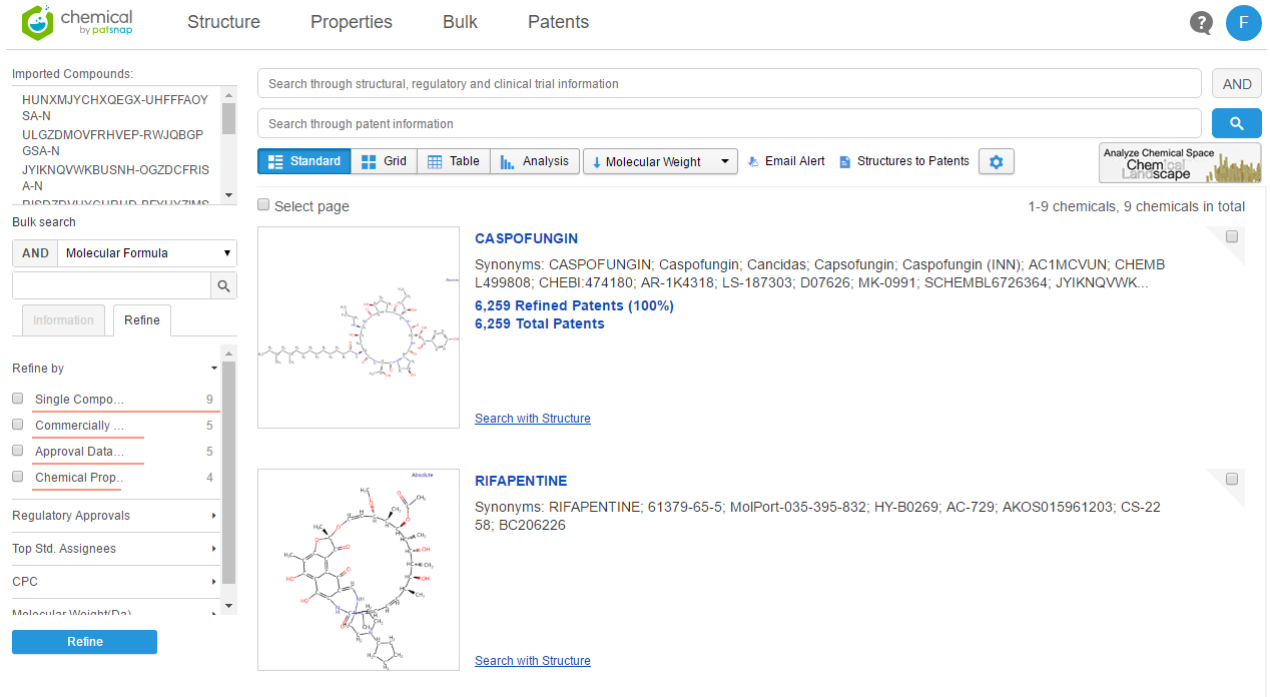
【3】查询结果数统计

【4】检索结果入口

【5】清除文本框所有Inchl Keys

【6】高级分析入口

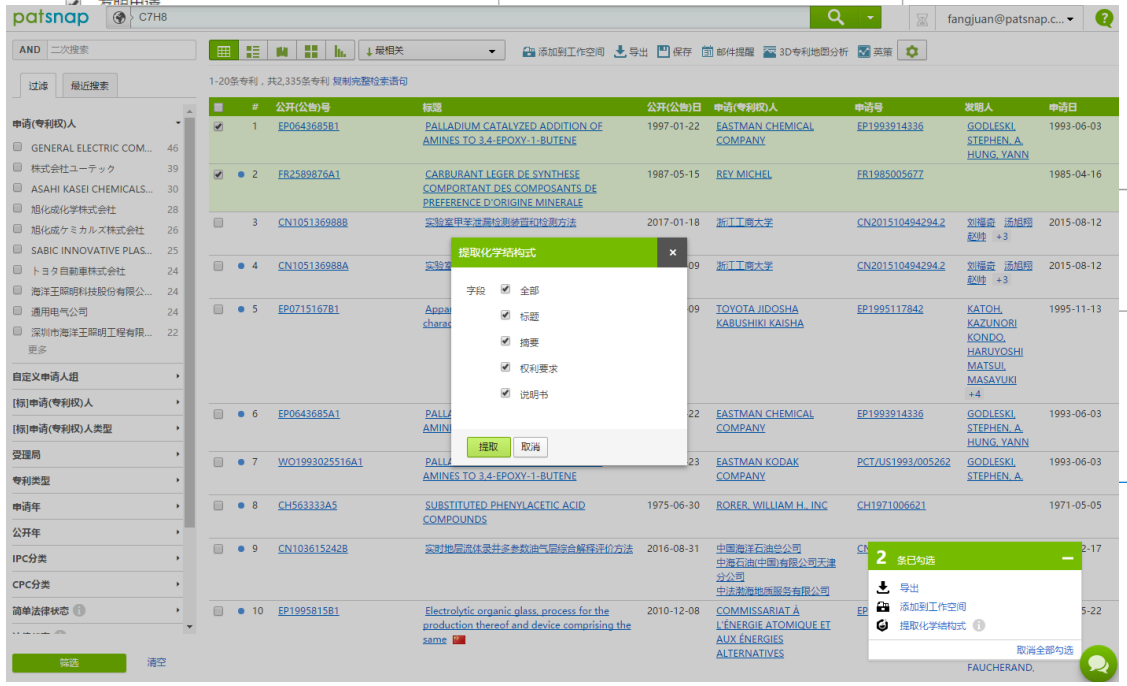


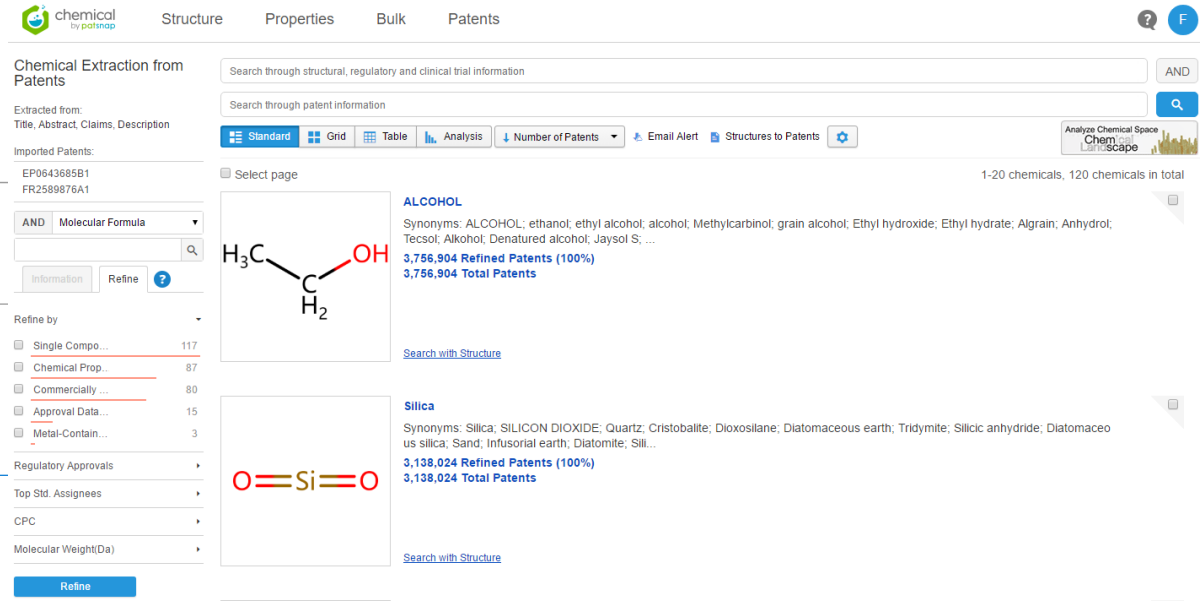


1. 在页面上方一级菜单中点击“Bulk”；
2. 在Bulk文本框中输入多个InChI Key，例如图中输入了9个InChI Key；
3. 点击“Find InChI Keys”,下方显示搜索到的符合输入InChI key的结果以及条目数；
4. 点击检索入口 “Search”按钮，跳转至检索结果页面；
5. 检索结果页面显示Bulk中输入的9个InChI Key关联的9个化合物信息；
6. 高级分析详见章节4；

二/ 检索结果入口

2.4 专利检索入口





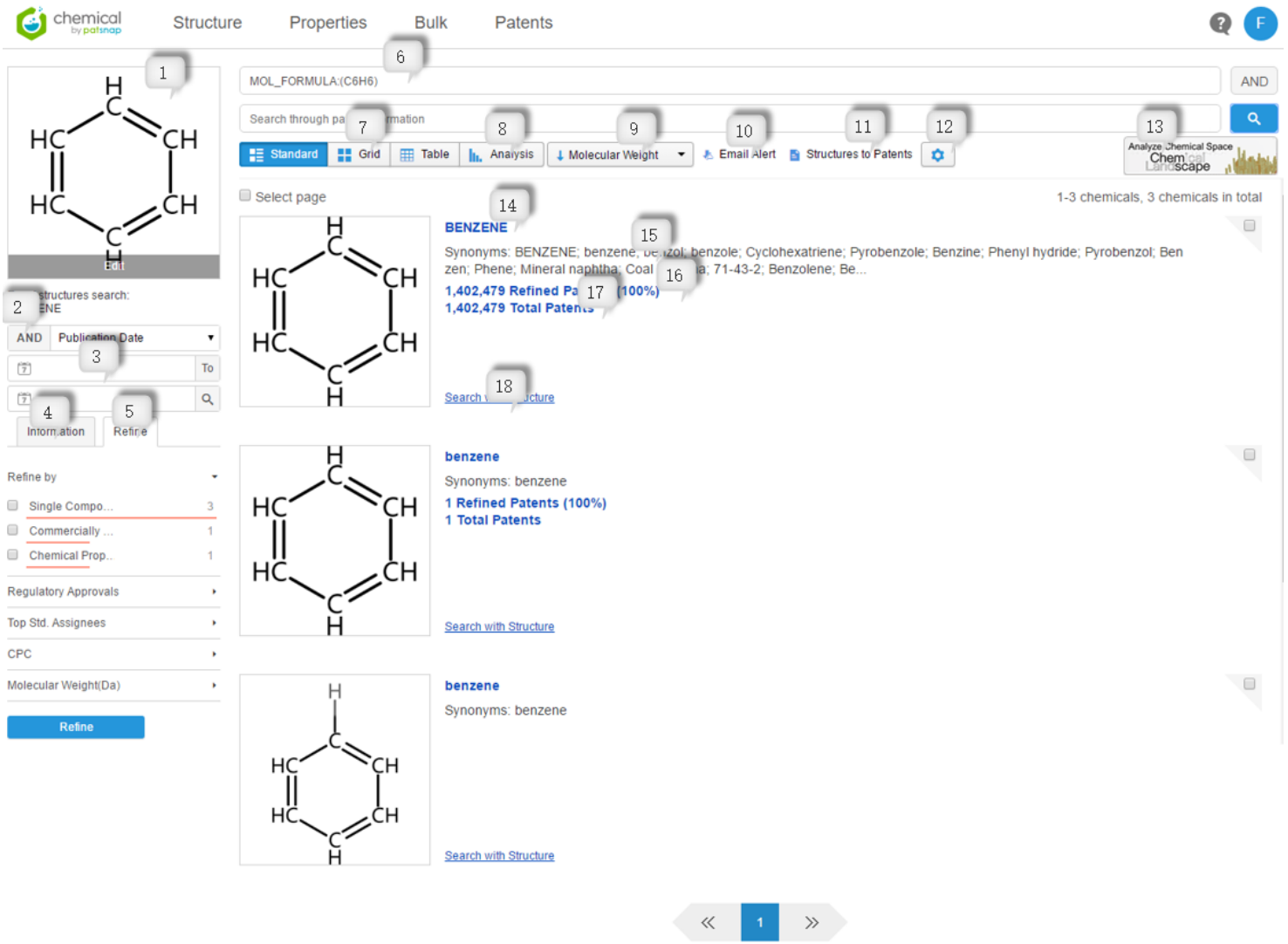
1. 在页面上方一级菜单中点击“Patents”；
2. 浏览器中打开一个新的窗口跳转至专利检索页面，在字段文本框中输入检索字段如“C7H8”，点击“搜索”；
3. 在检索结果页面中选择若干专利信息，右下角出现对话框，点击“提取化学结构式”，选择要显示的字段，点击“提取”， 跳转至检索结果页面，显示检索结果；

Chapter 3

三/ 检索结果展示

三/ 检索结果展示

3.1检索结果页面说明



此页面为检索结果的首页，文中提到的所有入口都将跳转至此页面

【1】检索入口信息

【2】自由组合逻辑运算符AND/OR/NOT

【3】二次过滤设置

【4】化合物信息

【5】二次过滤“Refine”设置

【6】二次过滤条件检索式

【7】视图选项：Standard、Grid、Table

【8】高级分析

【9】排序选项

【10】邮件提醒

【11】结构专利检索入口

【12】全局设置

【13】三维专利地图入口

【14】化合物信息-Compound Name

【15】化合物信息-Synonyms

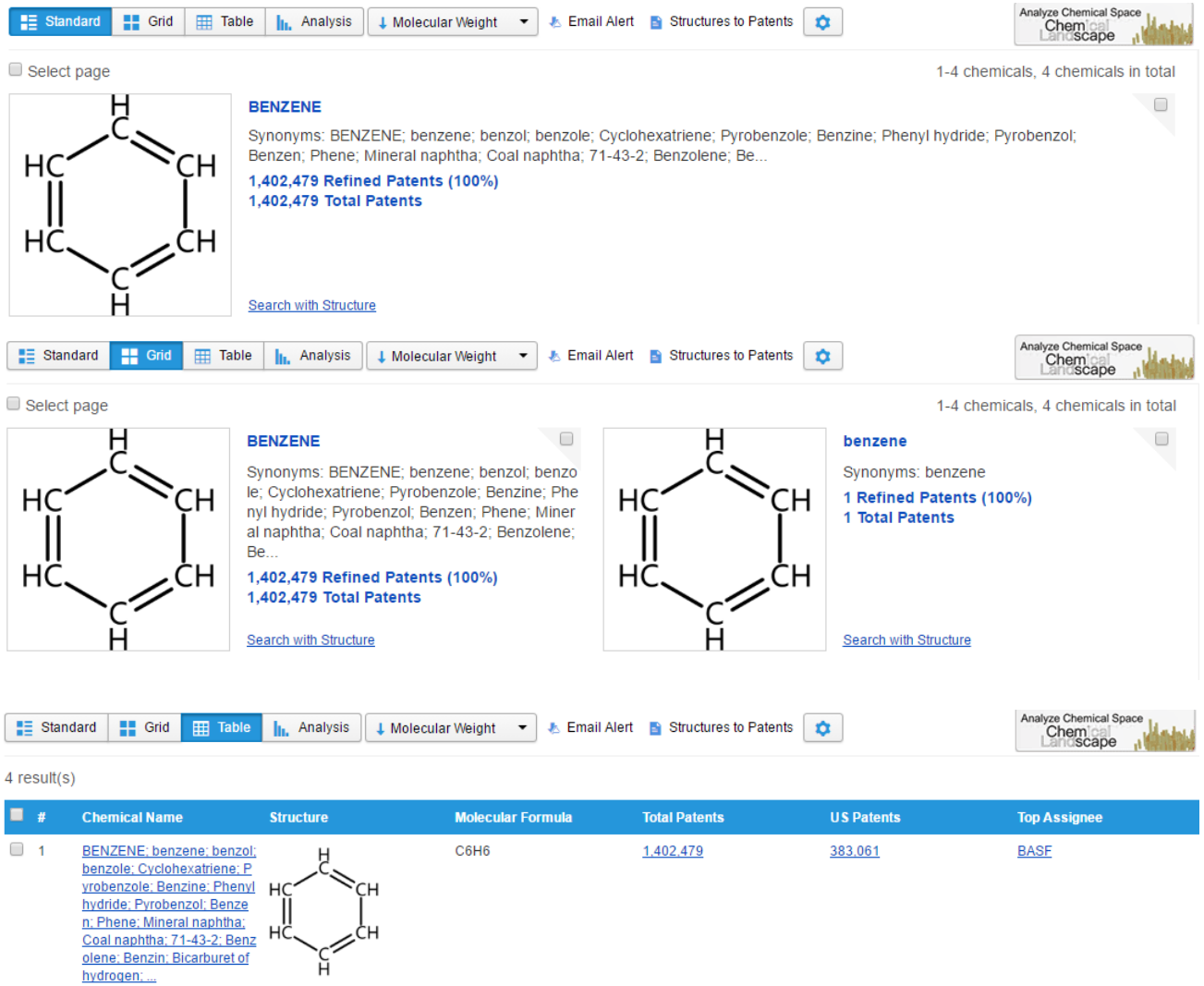
【16】化合物信息-关联专利数（百分比）

【17】化合物信息-专利总数

【18】结构检索入口返回

三/ 检索结果展示

3.2 检索结果视图模式



3.1.1 标准视图-Standard

1. 在检索结果首页中点击 Standard，检索结果以标准视图展示：每行显示一个化合物信息，方便用户查看

3.1.2 缩略视图-Grid

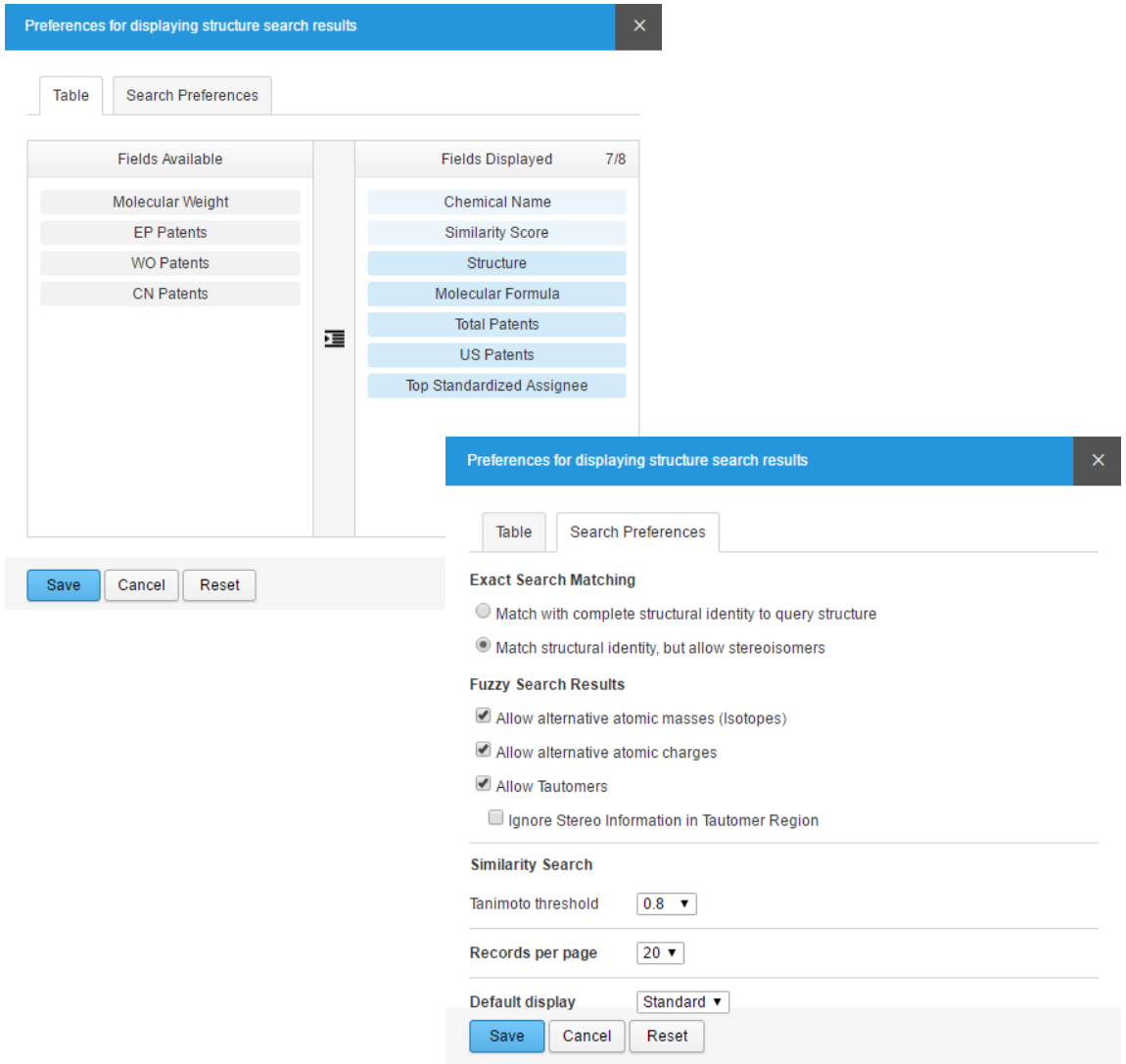
1. 在检索结果首页中点击 Grid，检索结果以缩略视图展示：每行显示两个化合物信息，方便用户查看进行对比；

3.1.3 表格视图-Table

1. 在检索结果首页中点击 Table，检索结果以缩略视图展示：每行显示两个化合物信息，方便用户查看；

三/ 检索结果展示

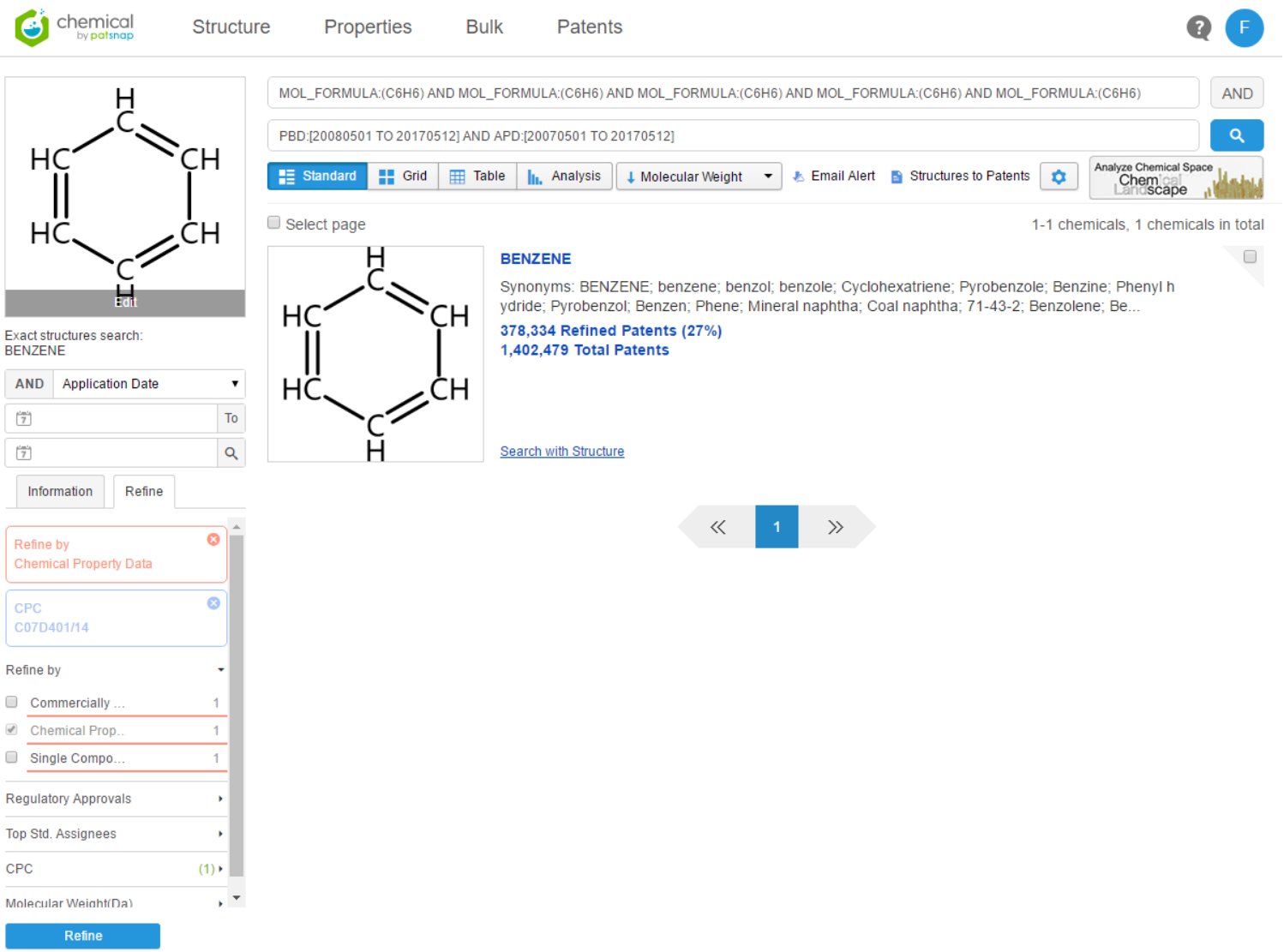
3.3 检索结果全局设置



1. 在检索结果首页中，点击  进入设置对话框；
2. 对话框默认显示“Table”设置框，所有字段支持用鼠标在两个选项框中往返拖拽以及排序；
3. 左侧“Fields Available”中显示可选化合物信息字段；
4. 右侧“Fields Displayed”中显示已选化合物信息字段（最多支持8个，右上角显示其个数），其中“Fields Displayed”中的“Chemical Name”和”Similarity Score”不可用鼠标操作；
5. 点击“Save”保存设置，设置在“Table”表格视图中立即生效：检索结果表格字段及顺序与上述设置一致；
6. 对话框点击选择“Search Preferences”设置框，在此设置框中设置检索匹配：精确检索匹配方式、模糊检索结果、相似度系数、每页显示数量、默认显示视图；

三/ 检索结果展示

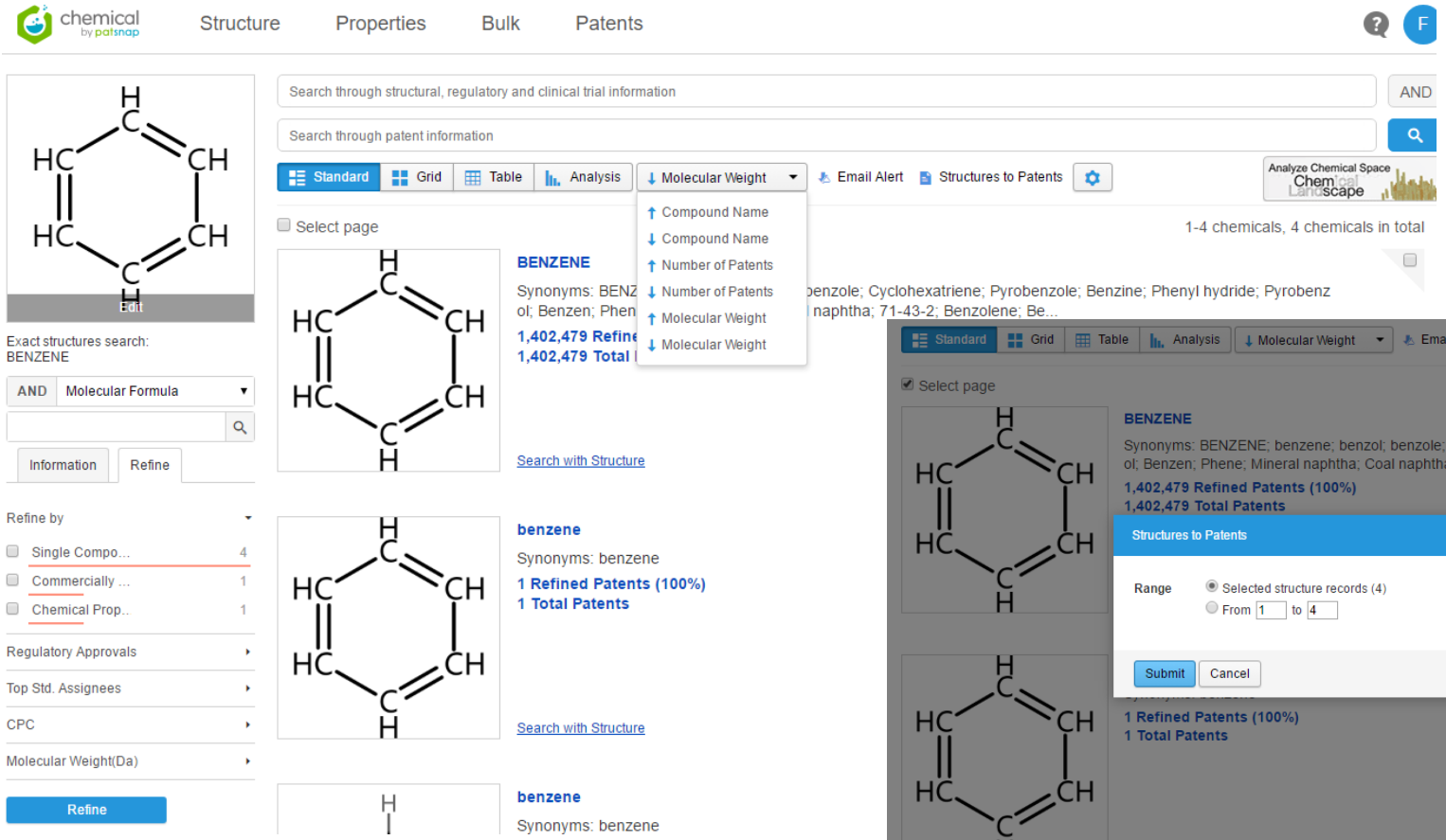
3.4 检索结果二次过滤



1. 以结构精确检索入口跳转到检索结果首页，可以看到左上角入口信息：结构式以及“Edit”，点击可以返回结构检索入口；
2. 在二次过滤条件中选择设置过滤条件，点击 AND ，选择“or”、“not”逻辑词，在方框内输入想过滤出来或者过滤出去的关键词，对检索结果页面进行过滤，可以多次点击 🔍 ，增加多个过滤条件；
3. 上述设置的过滤条件以检索式显示在页面上方文本框中，如图显示，上行是关于化合物的过滤条件，下行是关于专利的过滤条件，也可手动输入符合格式的检索式；
4. 在二次过滤“Refine”中设置过滤条件，设置结果显示在如图Refine框中，点击“Refine”按钮；
5. 页面按照检索式和Refine过滤条件显示符合条件的检索结果；

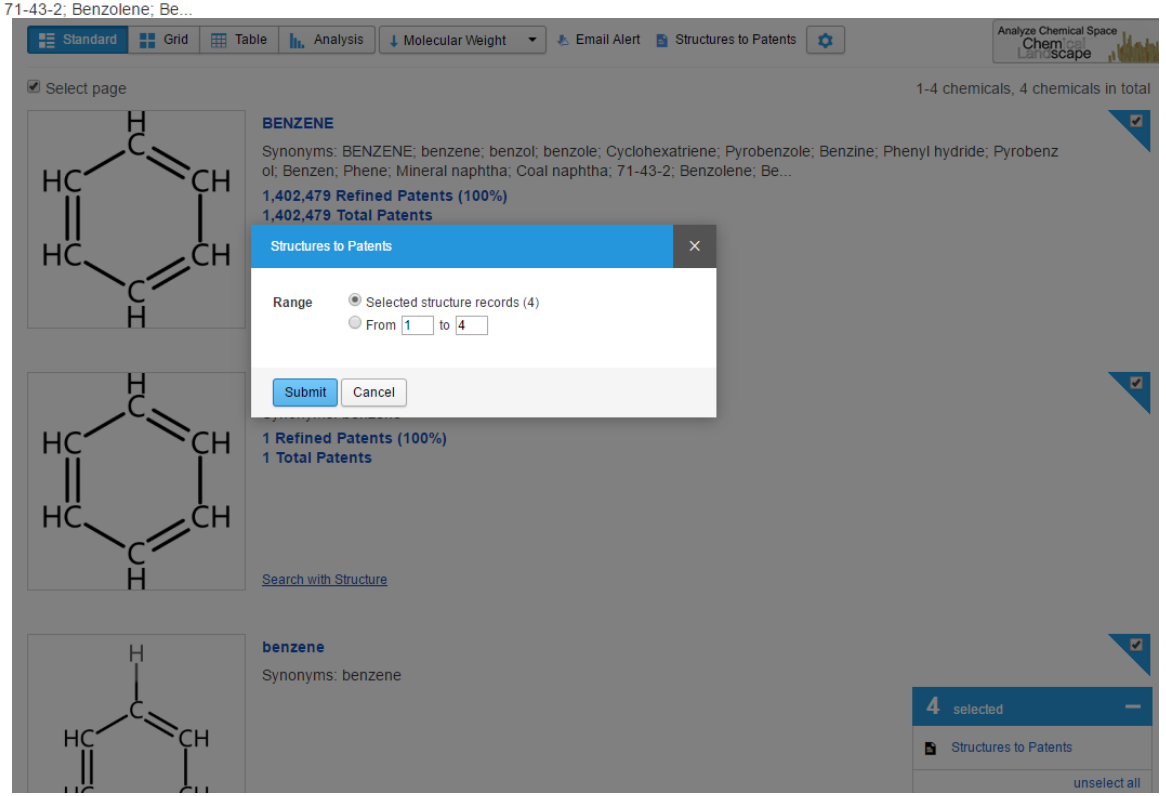
三/ 检索结果展示

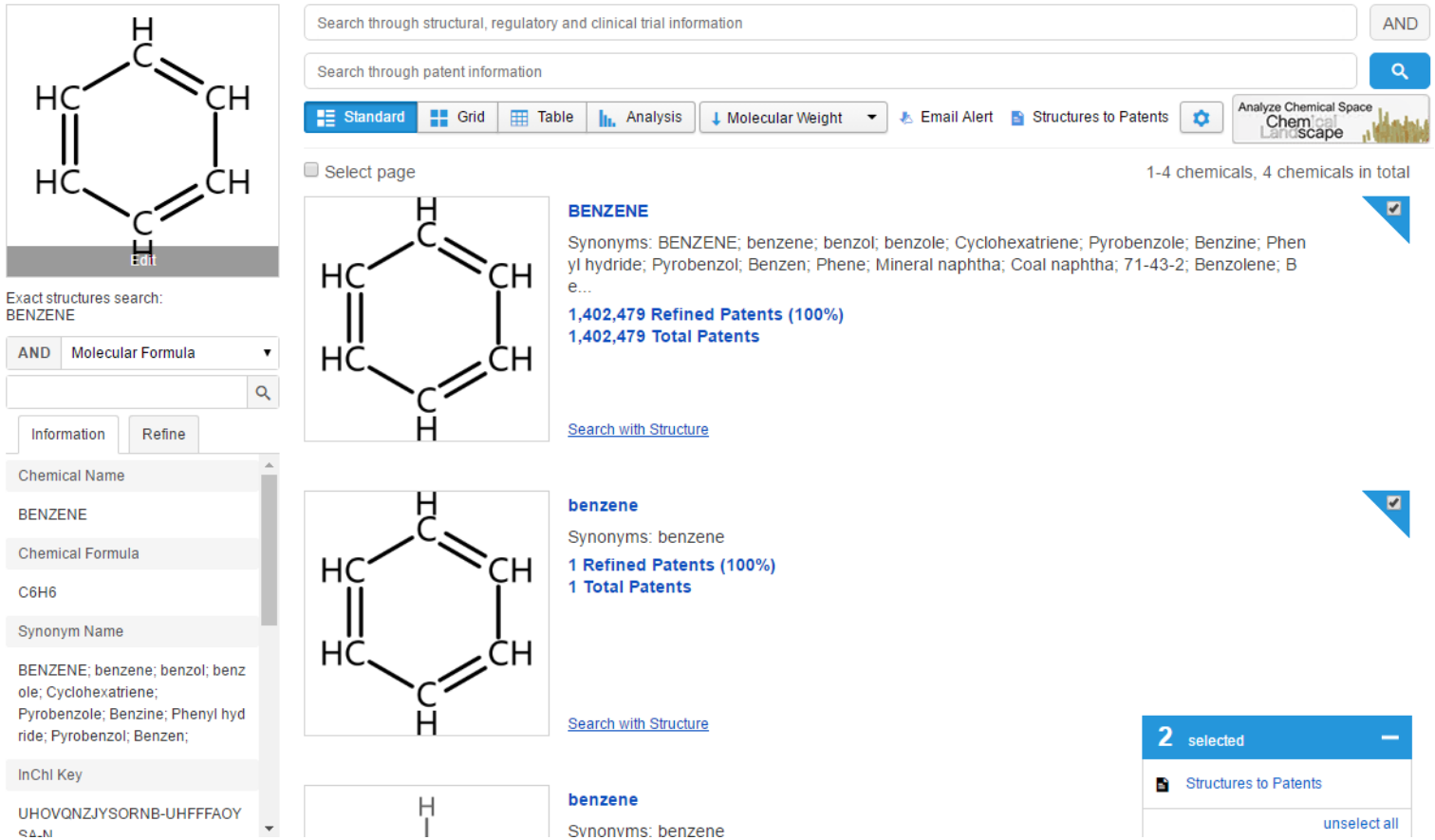
3.5 检索结果排序及跳转专利检索



1. 鼠标移动至 Molecular Weight，支持的排序字段和方式如图所示；

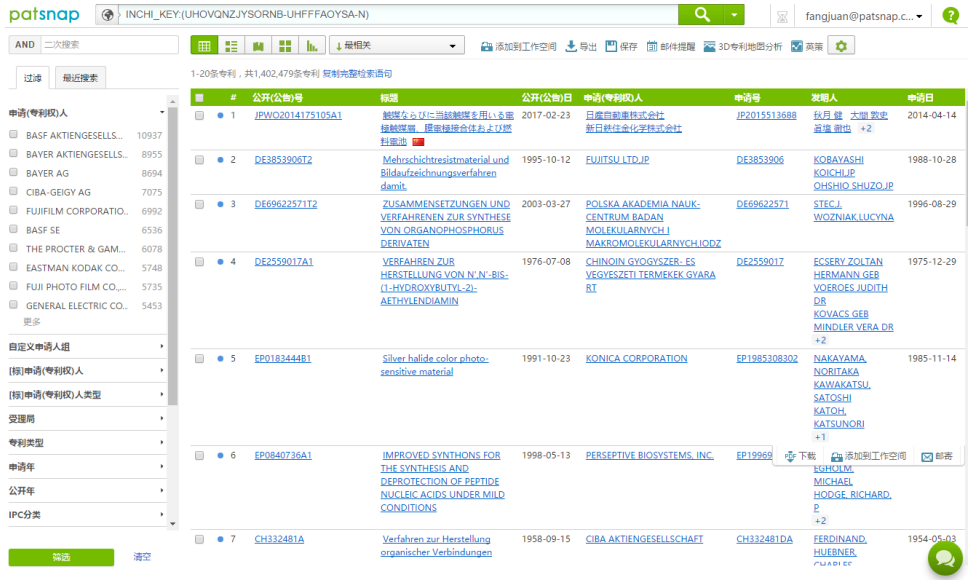
2. 点击“Structures to Patents”,在弹出的对话框中选择化合物的范围，点击“Submit”跳转至专利检索结果首页；





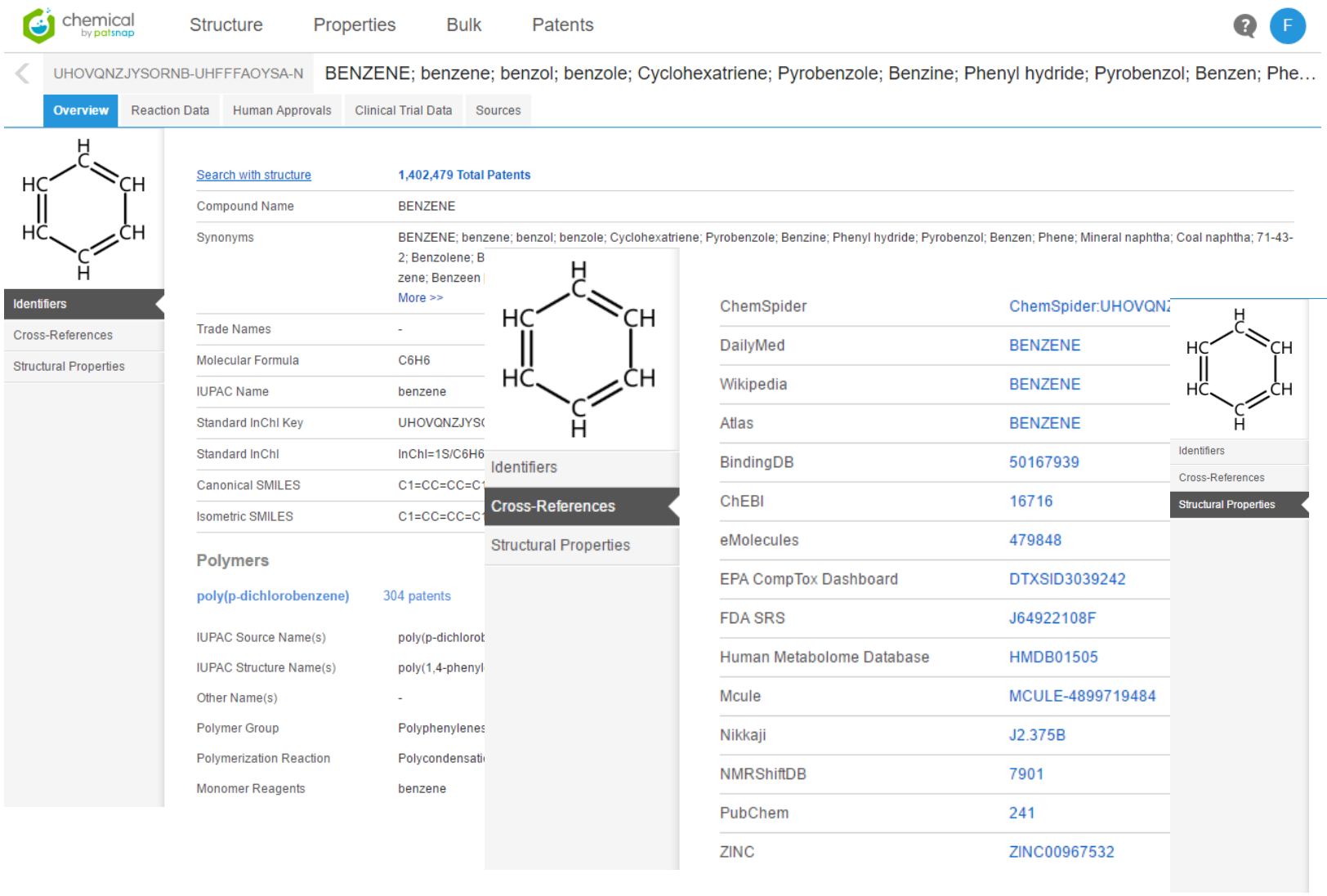
3. 也可选择某个化合物点击“Search with Structure”返回结构检索入口；

4. 选择其中若干个，右下角弹出selected对话框，点击“Structures to Patents”可跳转至专利检索结果首页；



三/ 检索结果展示

3.6 单个化合物信息详情



检索结果首页中点击某个化合物进入详情页面；

1. Overview信息:

1）Identifiers---唯一标识信息 2）Cross-References---参照信息 3）Structural Properties---结构属性；

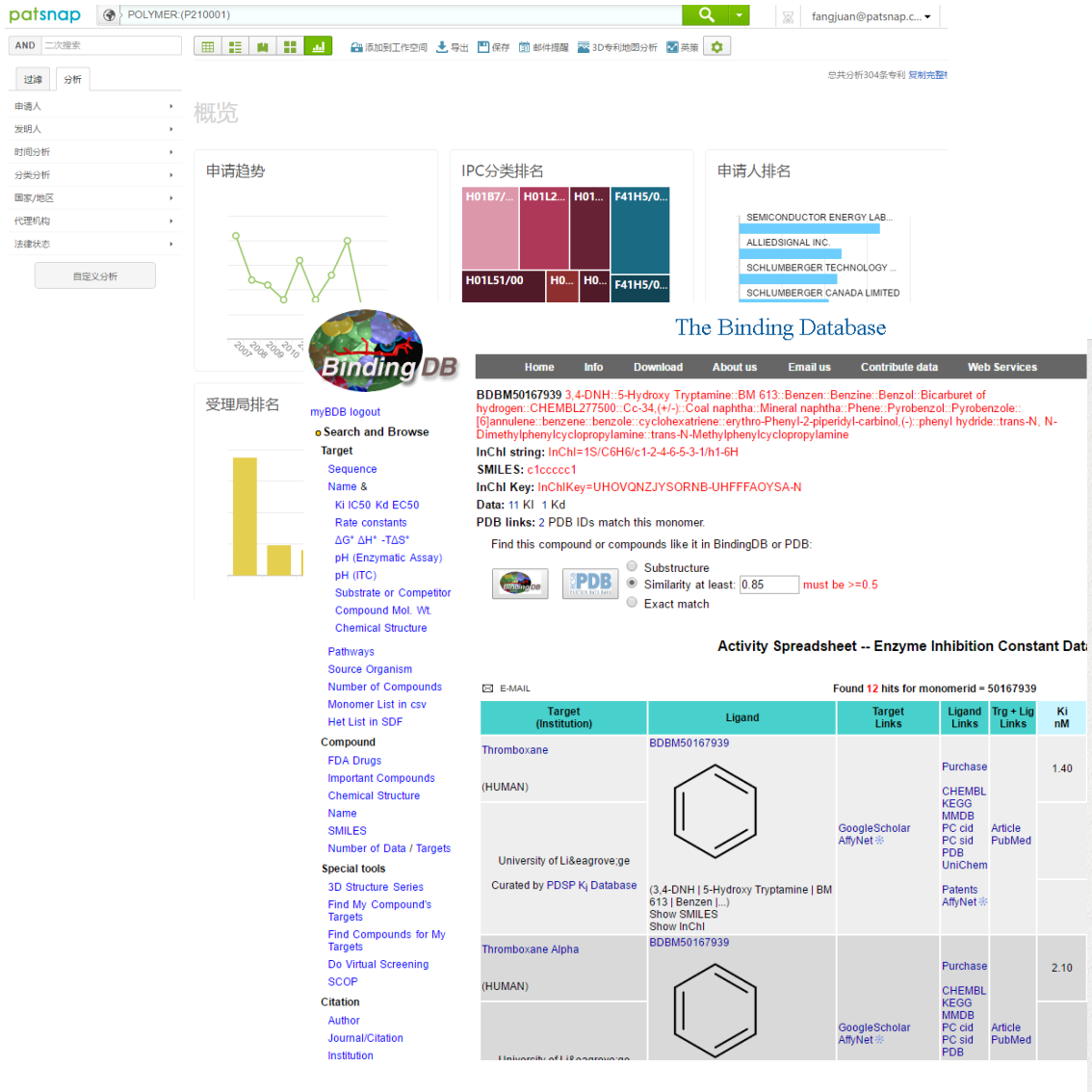
2. 点击“Search with Structure”可返回结构检索入口；

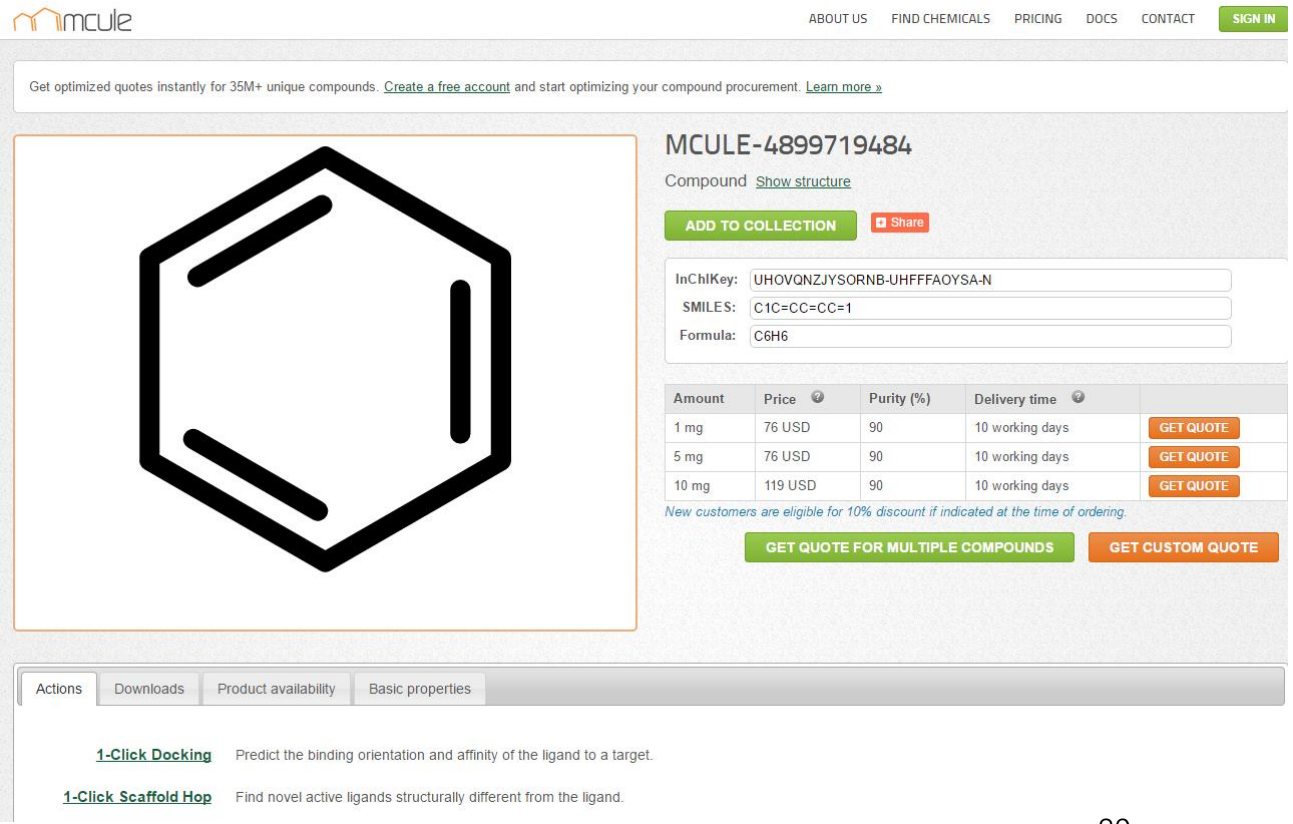
3. 所有标蓝色字体提供数据来源的官方链接，如图所示：

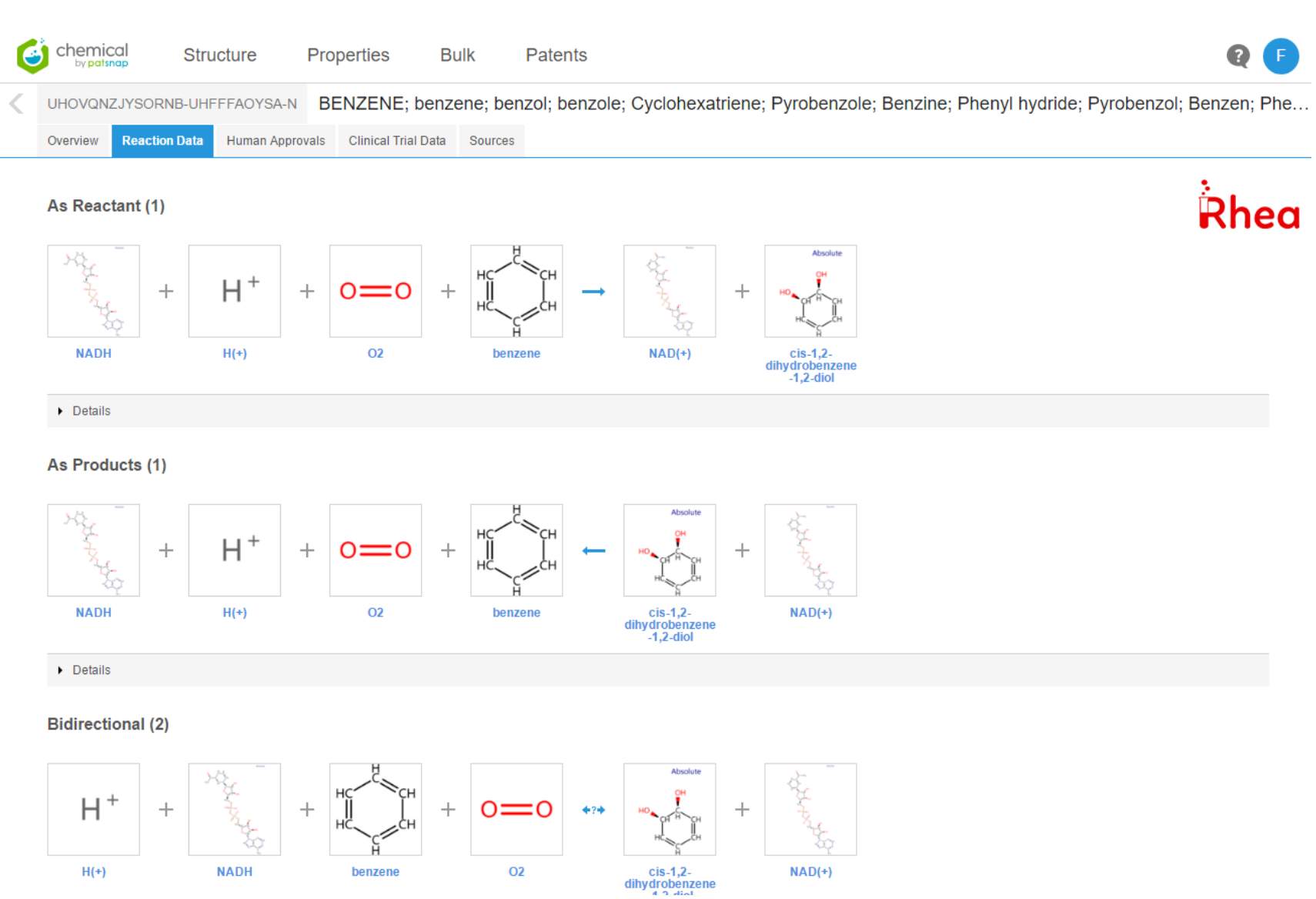
1）点击Overview-> poly(p-dichlorobenzene) 304 patents

2）点击Cross-References-> BindingDB 50167939

3）点击Cross-References-> Mcule MCULE-4899719484

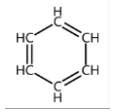






chemical by patsnap

1. Reaction Data 分别展示前面检索的“苯环”



在化学反应中三种不同角色的反应式信息：

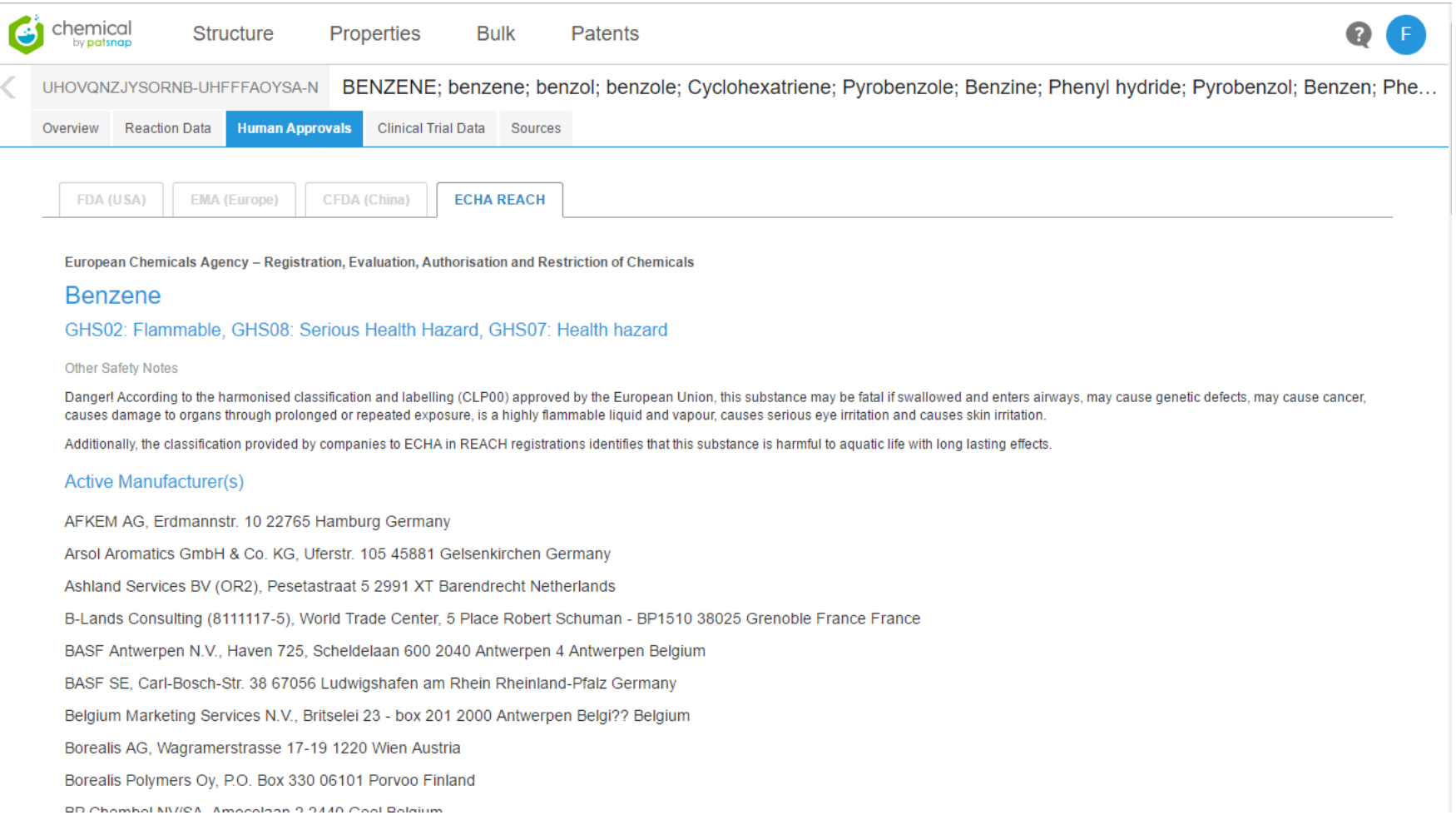
1）作为反应物；

2）作为生成物 ；

3）作为双向化合物；

2. 点击任一图片可跳转至结构检索入口；

3. 点击标蓝色的任一分子式可跳转至苯环的Overview信息；



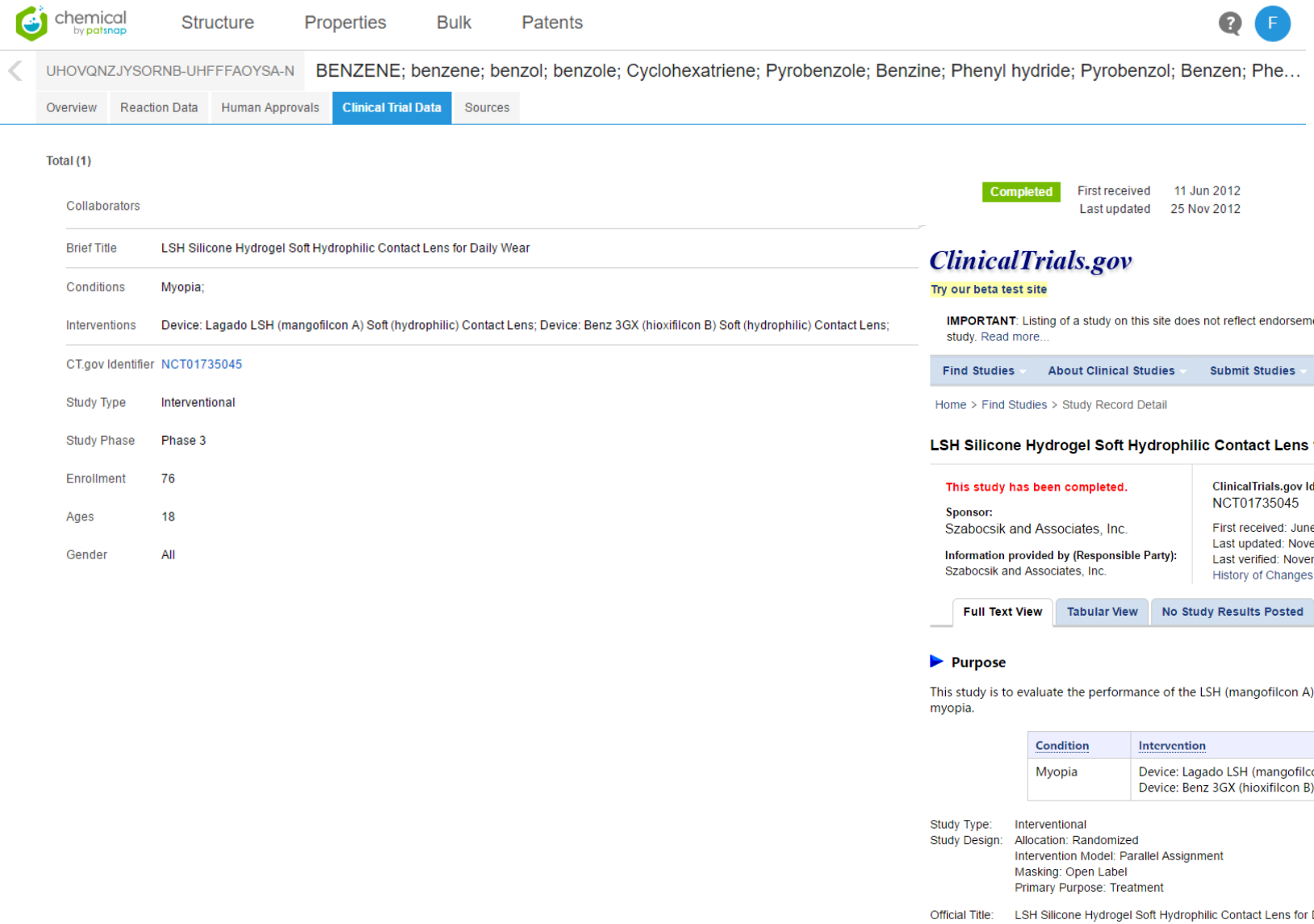
Human Approvals 展示不同国家监督管理机构的批准信息：

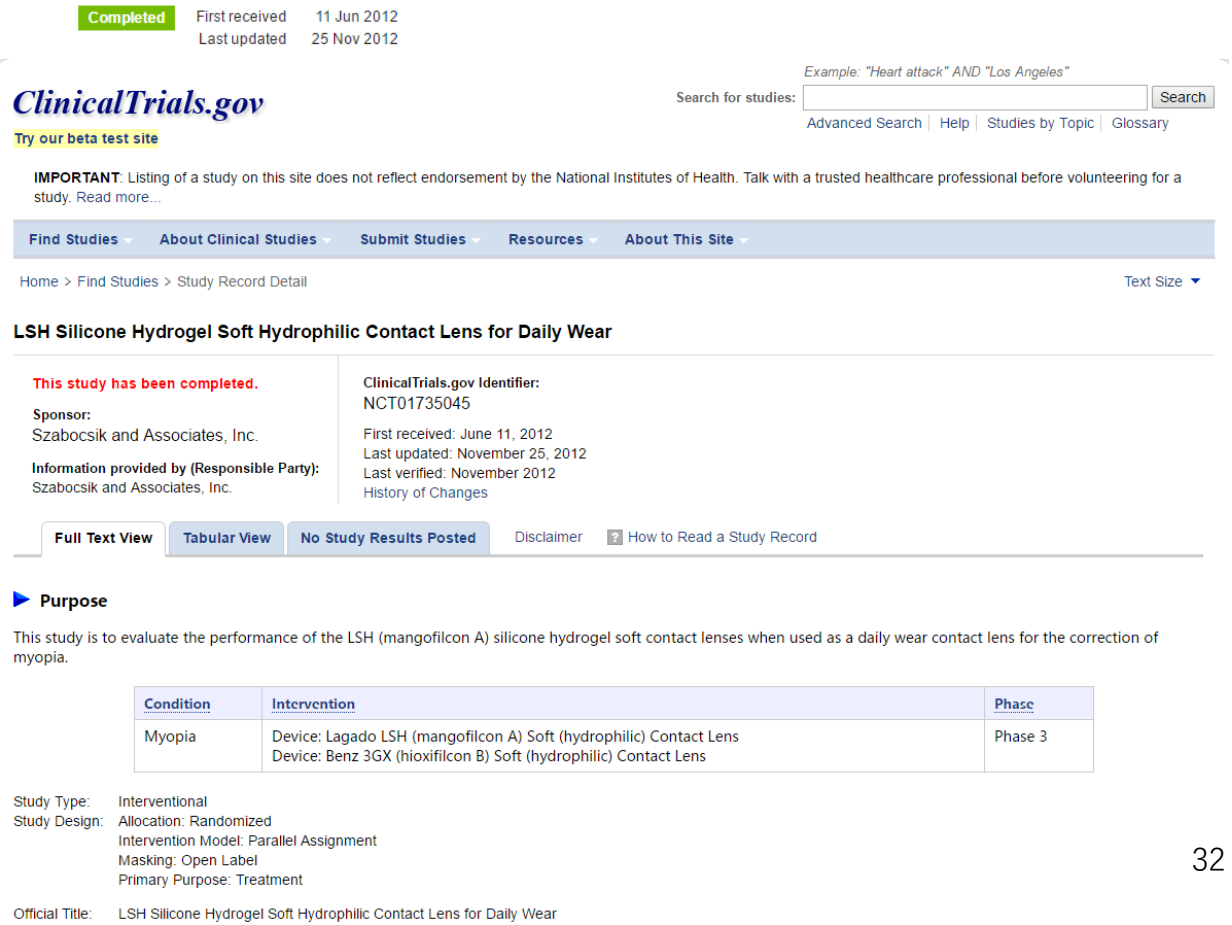
1） FDA(USA)---美国食品药品监督管理局

2) EMA(Europe)---欧洲药品管理局

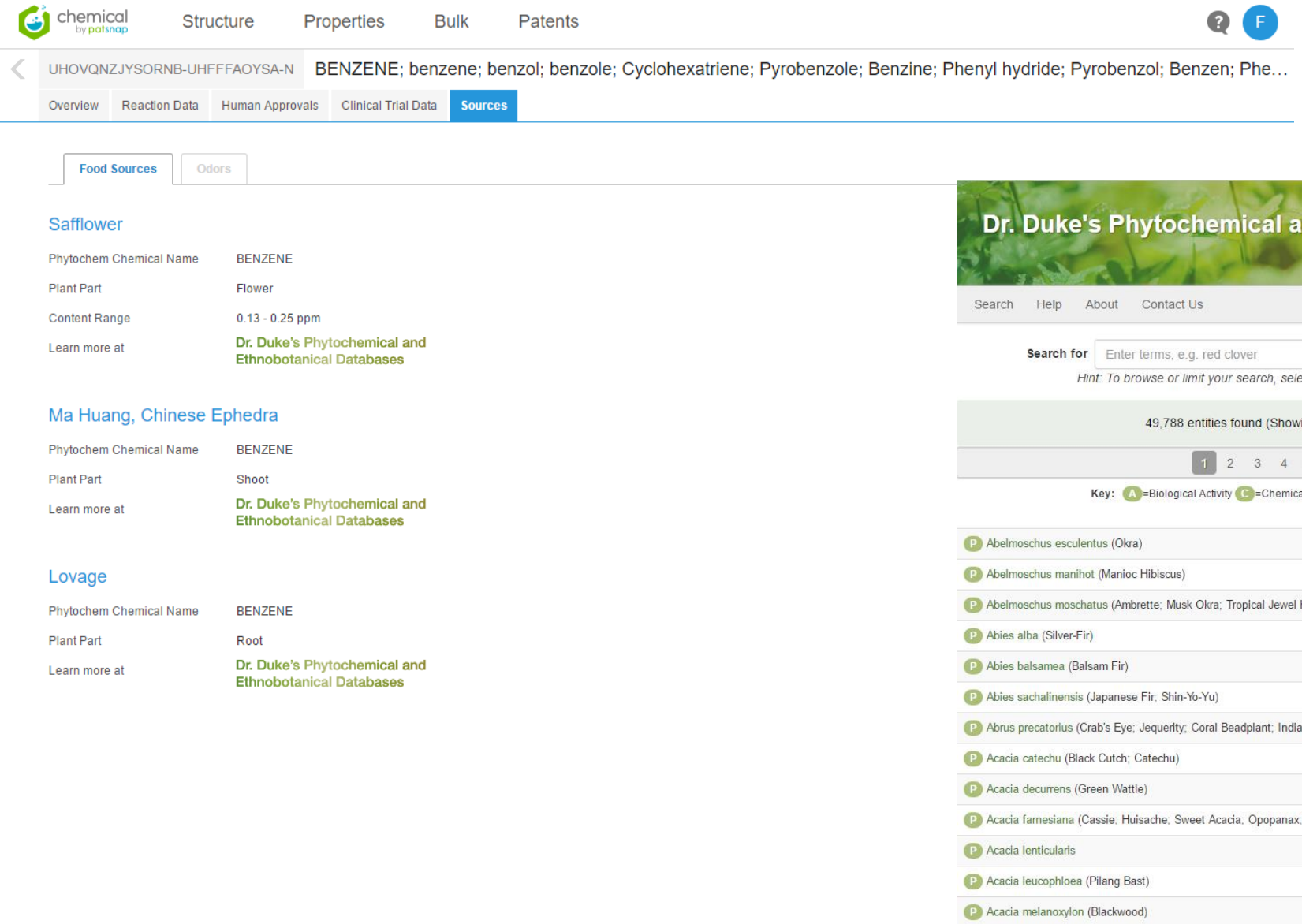
3) CFDA(China)---中国食品药品监督管理局

4) ECHA REACH---欧洲化学品管理署REACH检测

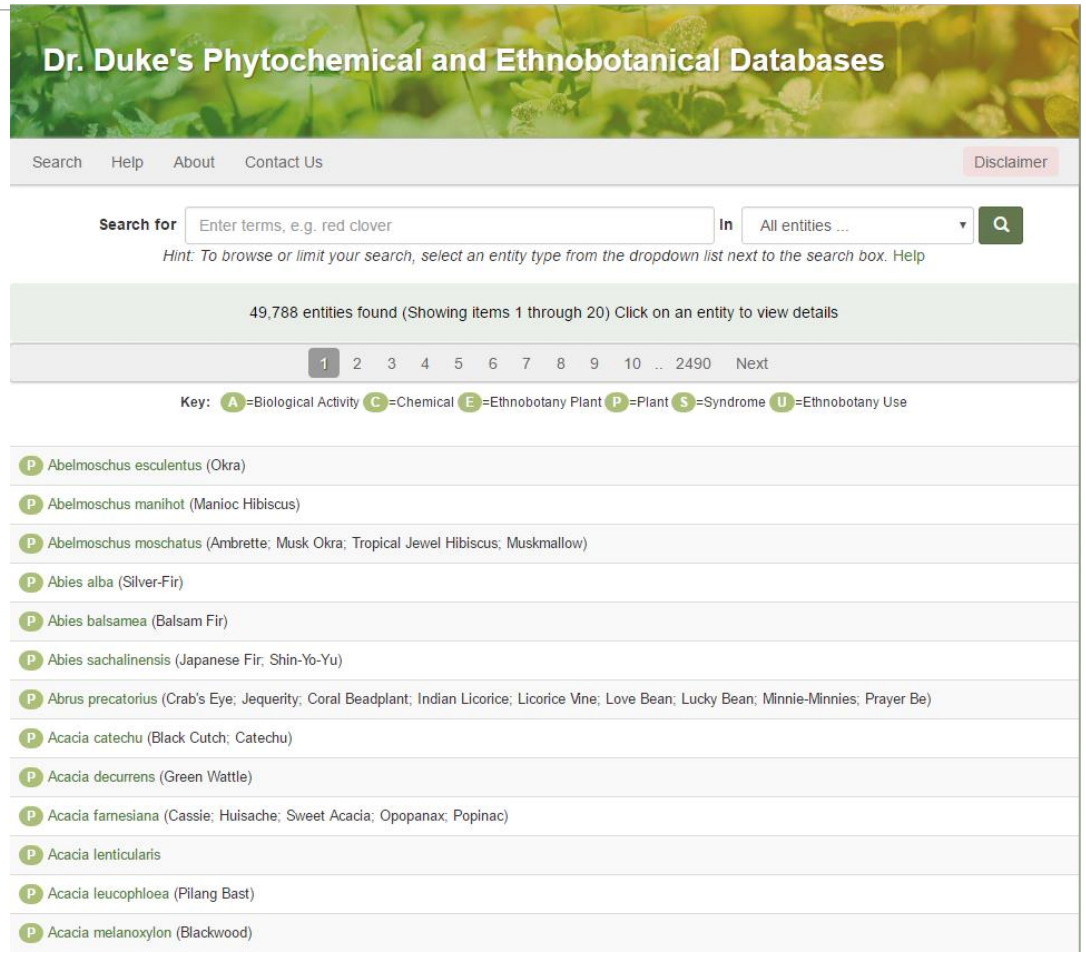




1. Clinical Trial Data 展示应用于临时试验的数据；
2. 点击标蓝色的字体 CT.gov Identifier NCT01735045可跳转至临床试验数据的来源官方链接；



1. Sources 展示检索化合物的食品来源以及气味；
2. 点击“Learn more at”标金色粗体字 Dr. Duke's Phytochemical and Ethnobotanical Databases 可跳转至数据的来源官方链接；

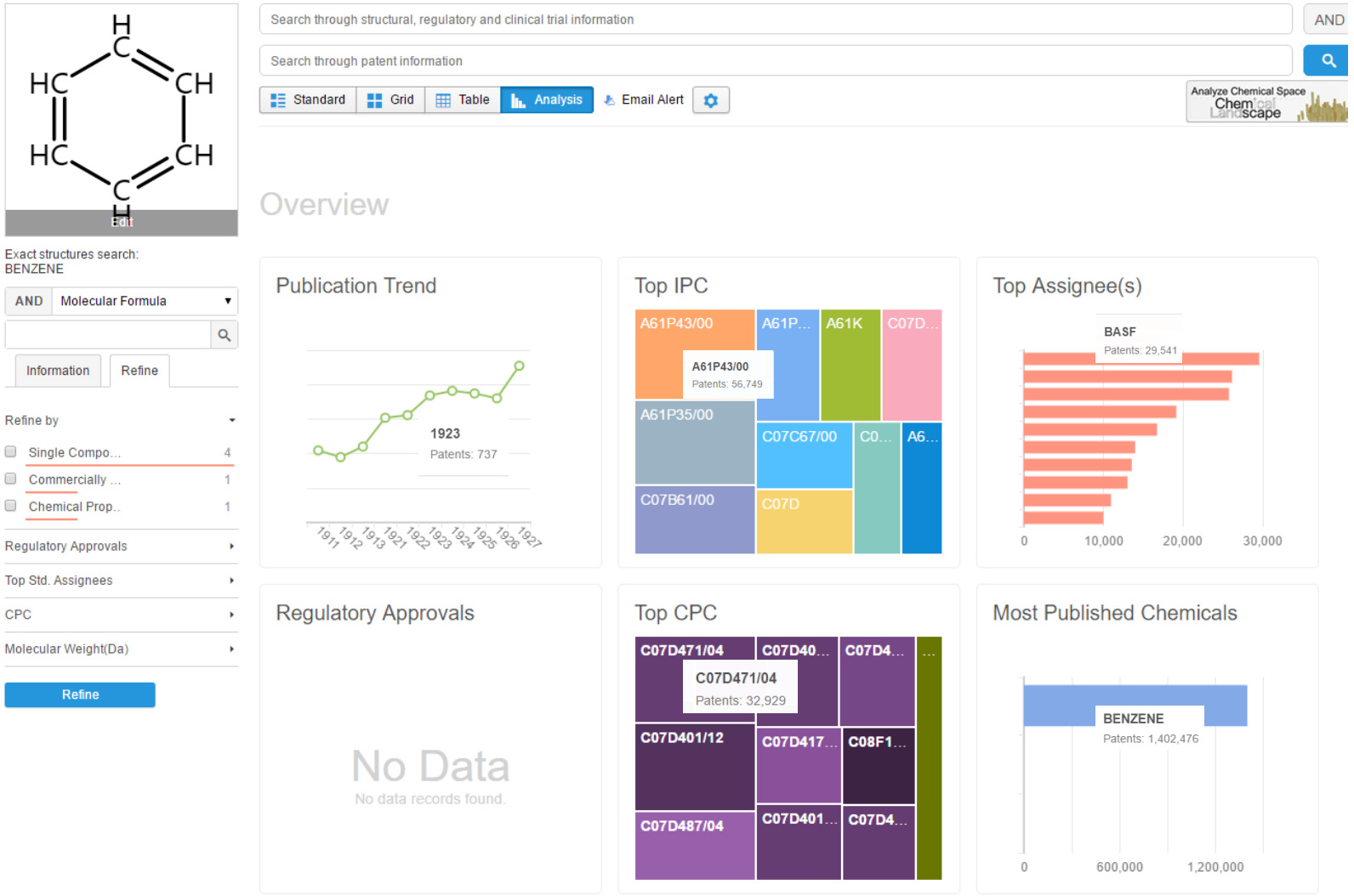


Chapter 4

四/ 高级分析

四/ 高级分析

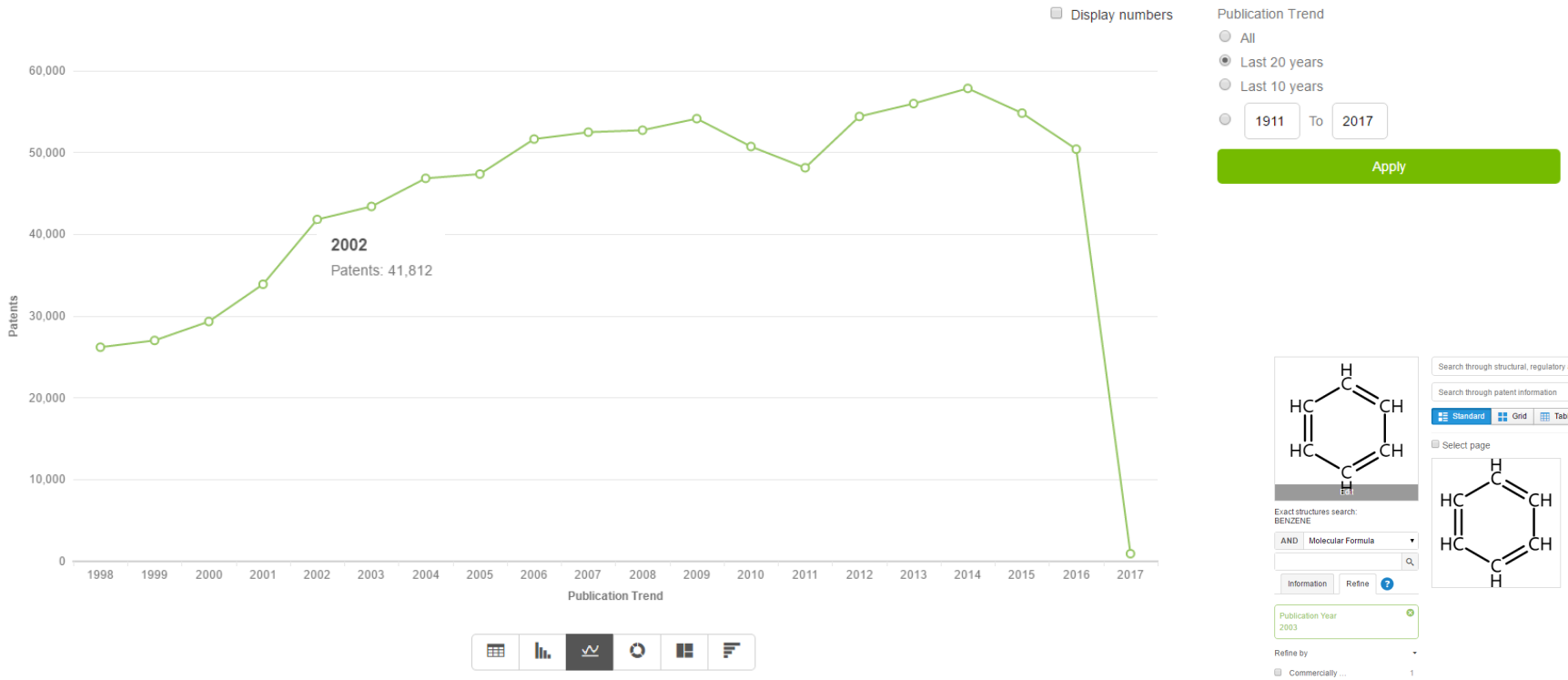
4.1 分析概览



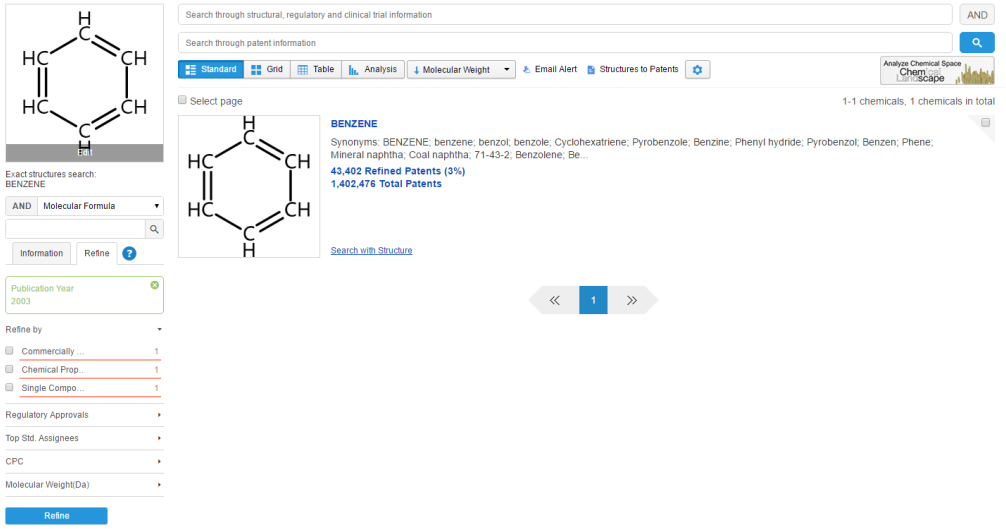
1. 点击 Analysis，进入高级分析页面，此分析为定量分析概览，主要数据来源为化合物相关的专利数据；
2. 同三种视图一样，支持左侧的二次过滤和“Refine”过滤；
3. 所有图表均以Top 10内 显示数据，点击其中任一分析统计图表头，可进入详情页面；
4. 矩形图表中，矩形面积表示关联专利数量大小，面积越大表示专利数越多，点击某个图表中的最小统计单位，如坐标点、矩形图、柱形图等，可进入单个化合物的检索结果页面。

四/ 高级分析

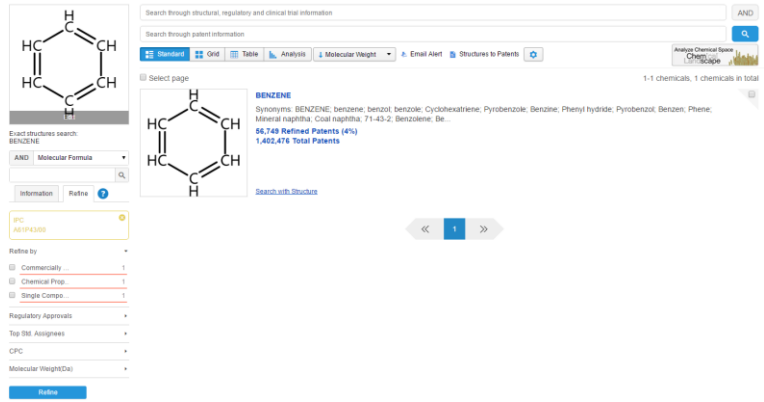
4.2 分析详情



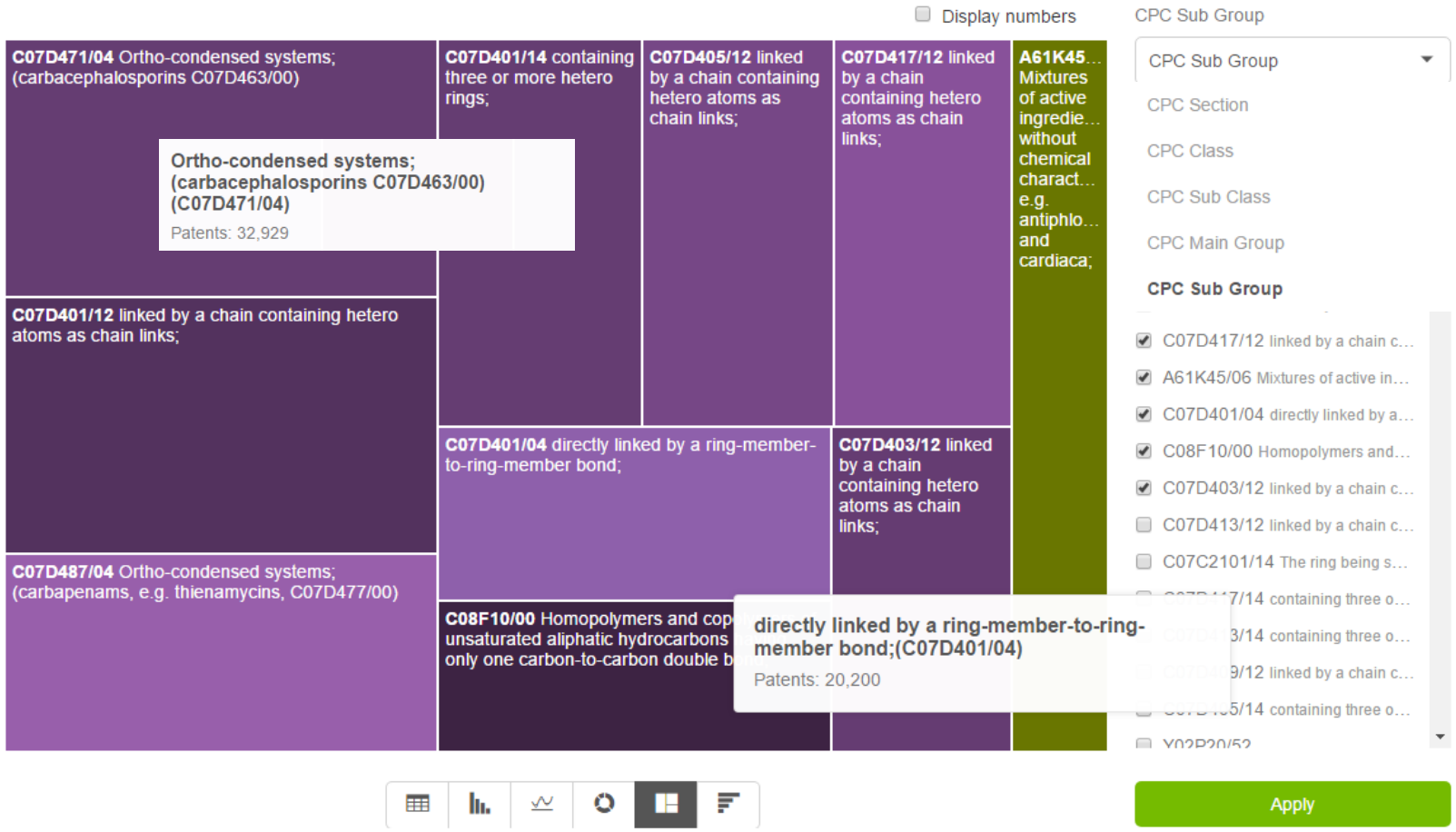
1. 点击分析图表“Publication Trend ”可进入详情页面；
2. 默认时间跨度为“Last 20 years”，可自定义时间跨度查看分析图表;
3. 下方底部显示默认图表类型，如图为曲线图，可以选择其他图表类型；



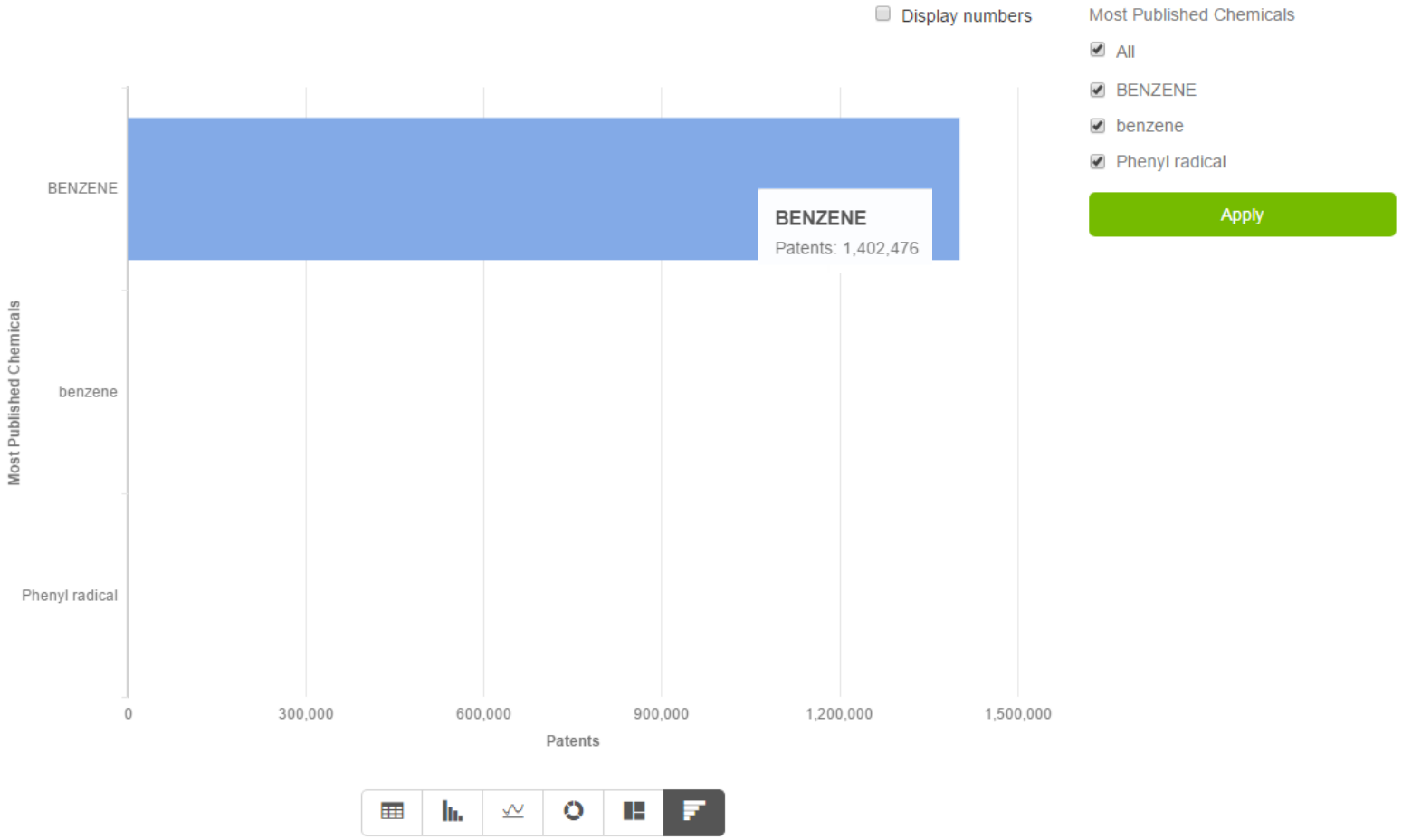
1. 点击分析图表“Top IPC” 可进入详情页面；
2. 右侧下拉列表框中可选择IPC分类级别，下面按级别显示该级别的具体分类；
3. 下方底部显示默认图表类型，如图为矩形图，可以选择其他图表类型；



Top CPC



1. 点击分析图表“Top CPC” 可进入详情页面；
2. 右侧下拉列表框中可选择CPC分类级别，下面按级别显示该级别的具体分类；
3. 下方底部显示默认图表类型，如图为矩形图，可以选择其他图表类型；



1. 点击分析图表“Most Published Chemicals”可进入详情页面；
2. 右侧选项可选择要显示的化合物；
3. 下方底部显示默认图表类型，如图为横向柱形图，可以选择其他图表类型；

Chapter 5

五/ 三维化学地图

5.1 生成三维化学地图

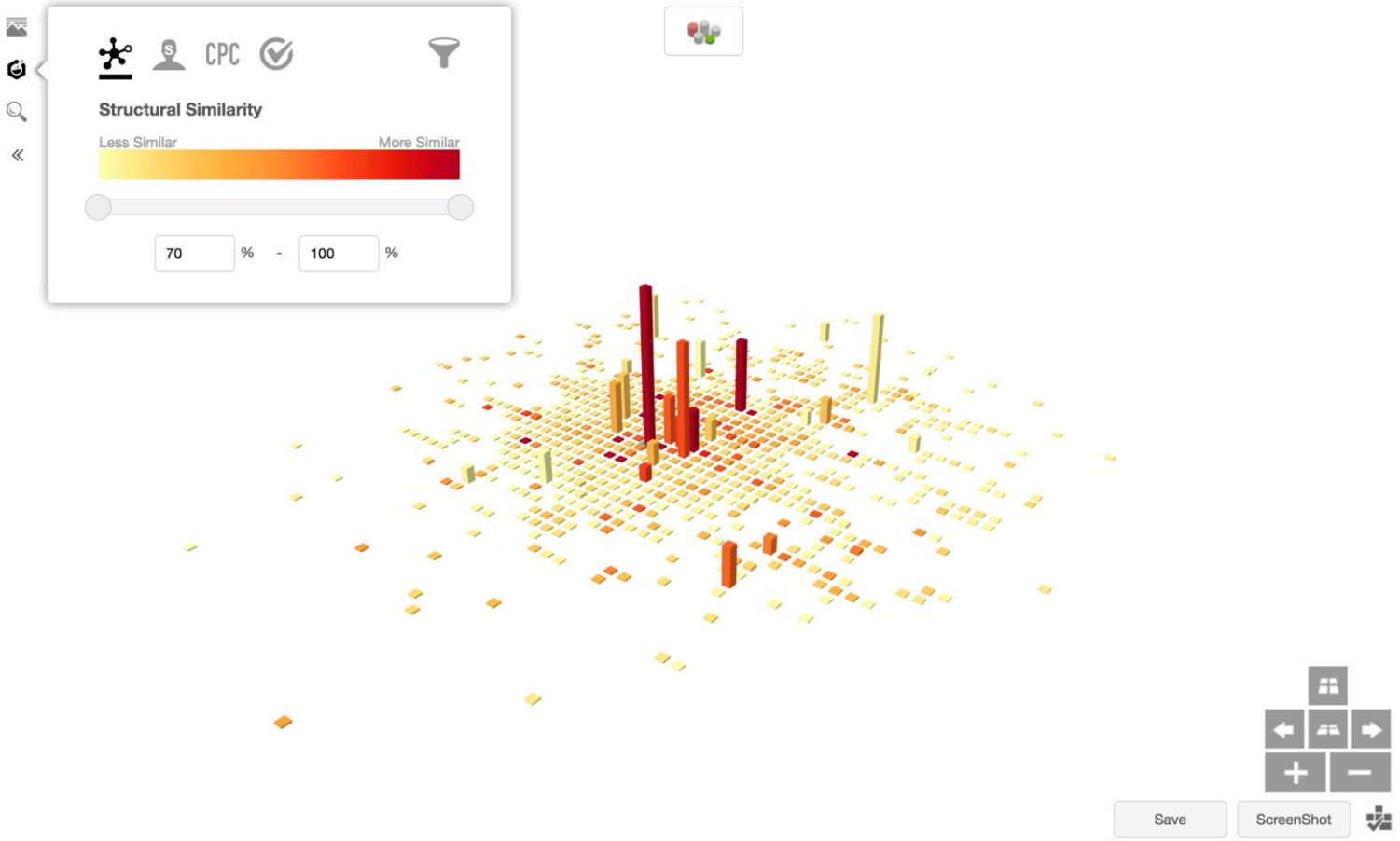
5.2 在三维化学地图中过滤

5.3 在三维化学地图中搜索

5.4 保存及恢复三维化学地图

五/ 三维专利地图

5.1 生成三维化学地图

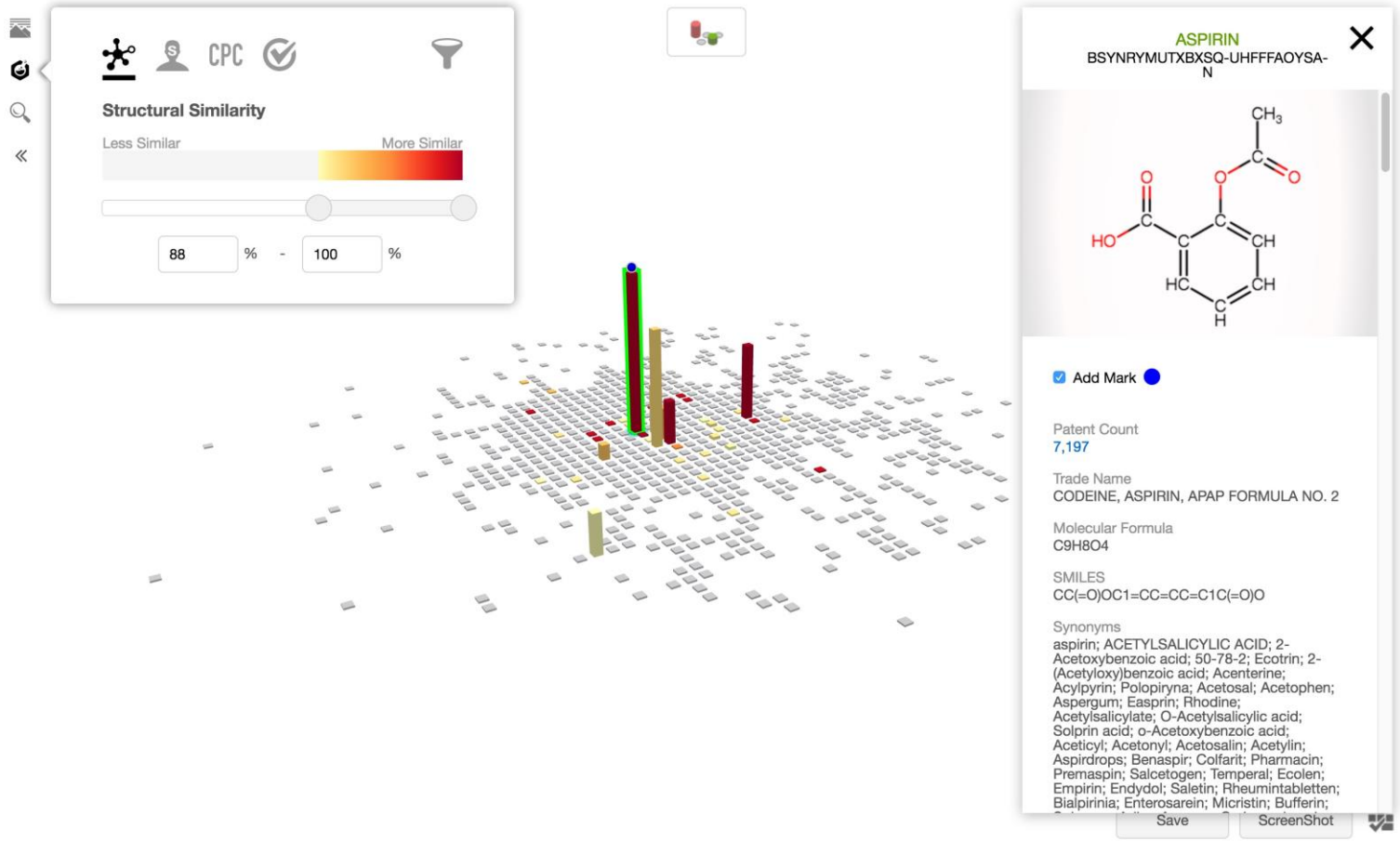


1. 在“Structure”入口中输入化合物名称，例如：simvastatin，选择一种搜索方式后跳转至检索结果页面；
2. 在检索结果页面点击 

，进入三维化学地图页面；
3. 等待分析完毕，分析结果显示出来。
4. 用户可以使用鼠标左右拖动，缩放三维化学地图。也可以使用右下角的控制方向面板进行操作。
5. 上方中央的  图标提供了几种显示方式，用户可以按自己的需求切换成自己喜欢的方式。

五/ 三维专利地图

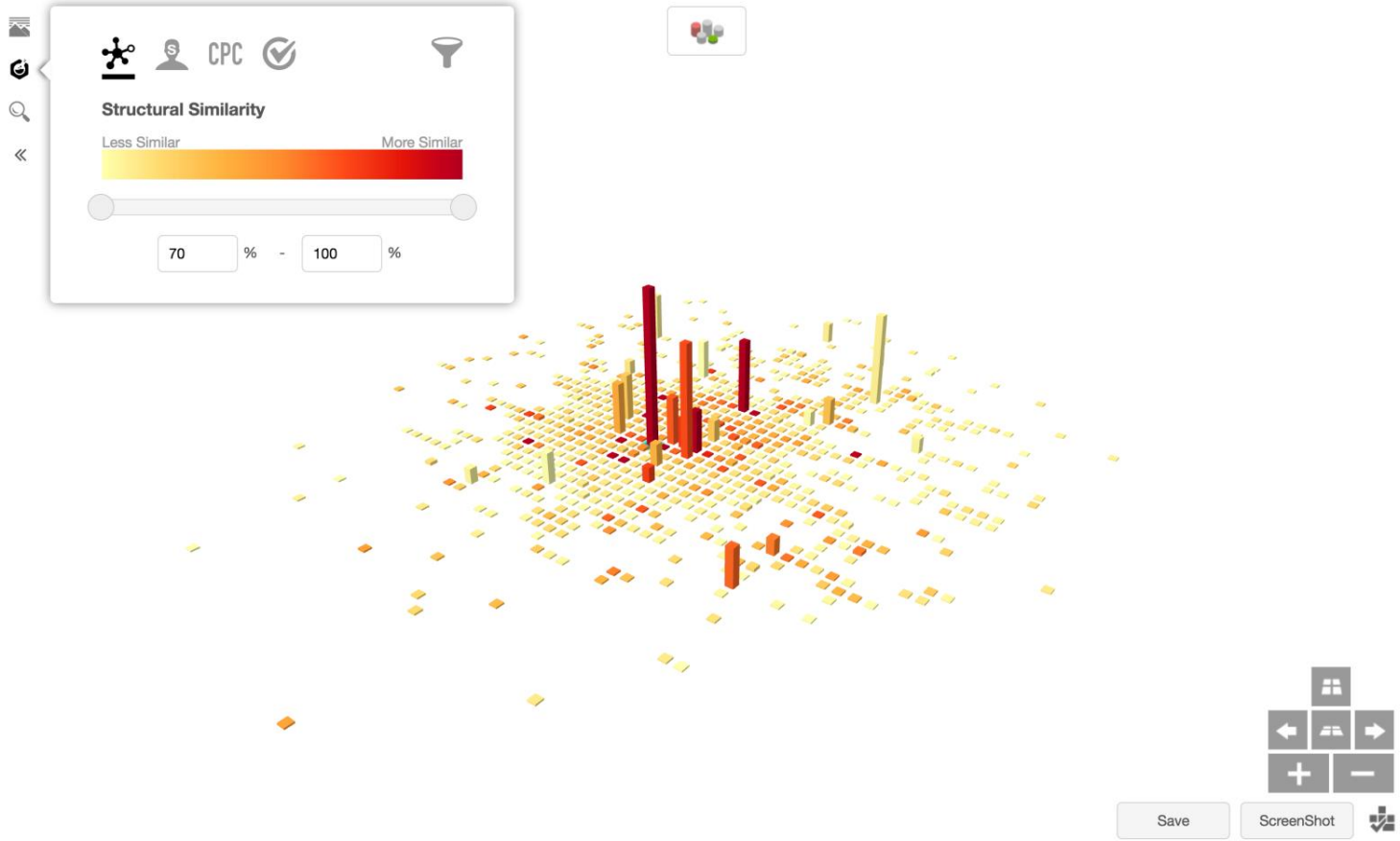
5.1 生成三维化学地图



1. 点击图中的每一个化学结构式可以查看该化学式的详细信息。
2. 在化学式详情面板用户可以勾选“Add Mark”给当前选中的化学结构式加上标记。
3. 点击”Patent Count”下面的数字链接，可以在智慧芽专利数据库中查看含有该化学结构式的相关专利。

五/ 三维化学地图

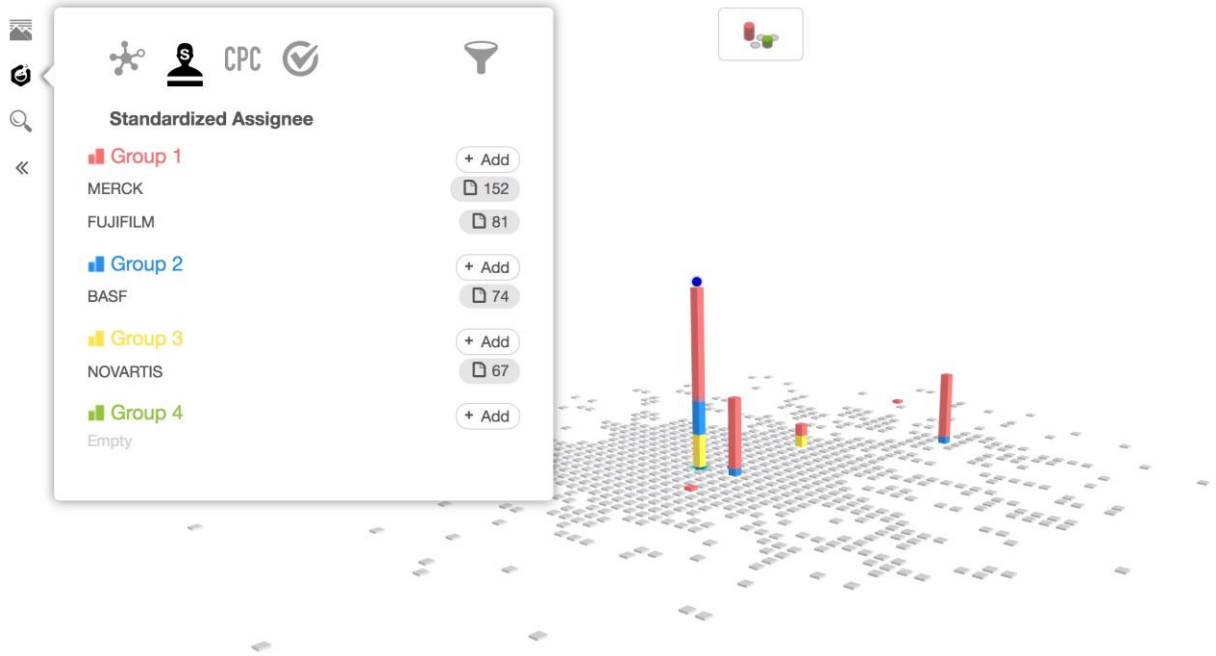
5.2 在三维化学地图中过滤

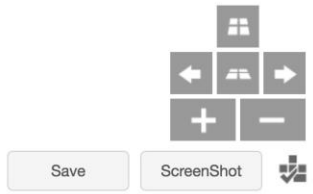


1. 三维化学地图提供了多种按化学式或相应专利属性进行过滤的功能，点击左侧 可以进入过滤功能面板。
2. 从左至右的过滤功能依次为：“结构式相似度”，“专利标准化申请人”，“专利联合分类号”和“药监局审核”过滤功能。
3. 最右侧的 提供了一个全局的按化学式对应的专利条目数过滤功能。

五/ 三维化学地图

5.2 在三维化学地图中过滤

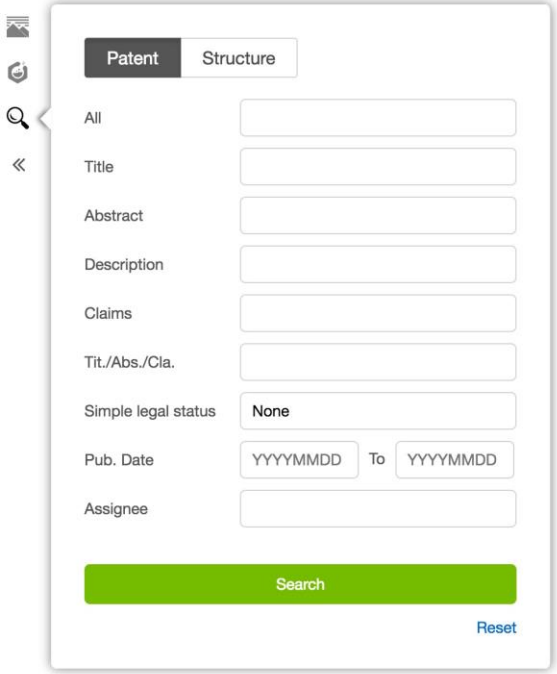


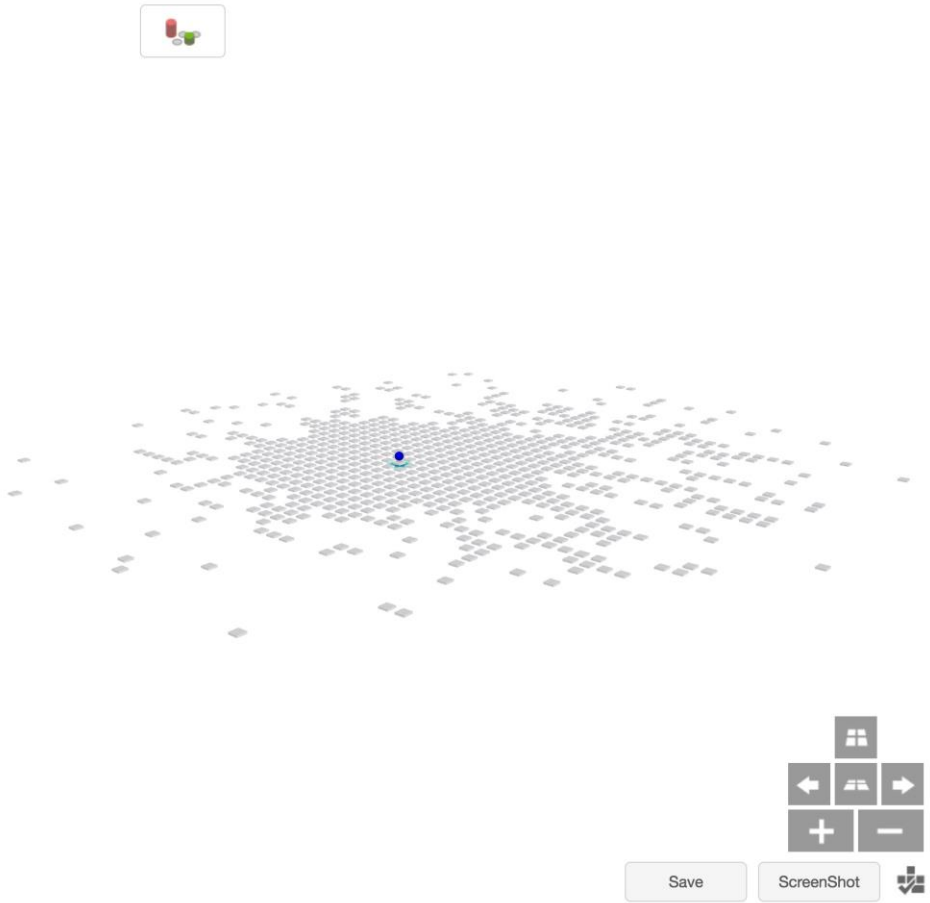


1. “专利标准化申请人”和“专利联合分类号”过滤功能允许用户将不同的申请人或分类号添加到预定义的分组中。分组的颜色将也会被标在相应的化学结构上对应的柱子上；
2. 当不同组内的数据对应相同的化学结构式时，柱子会按专利数量的比例染成多段颜色。

五/ 三维化学地图

5.3 在三维化学地图中搜索

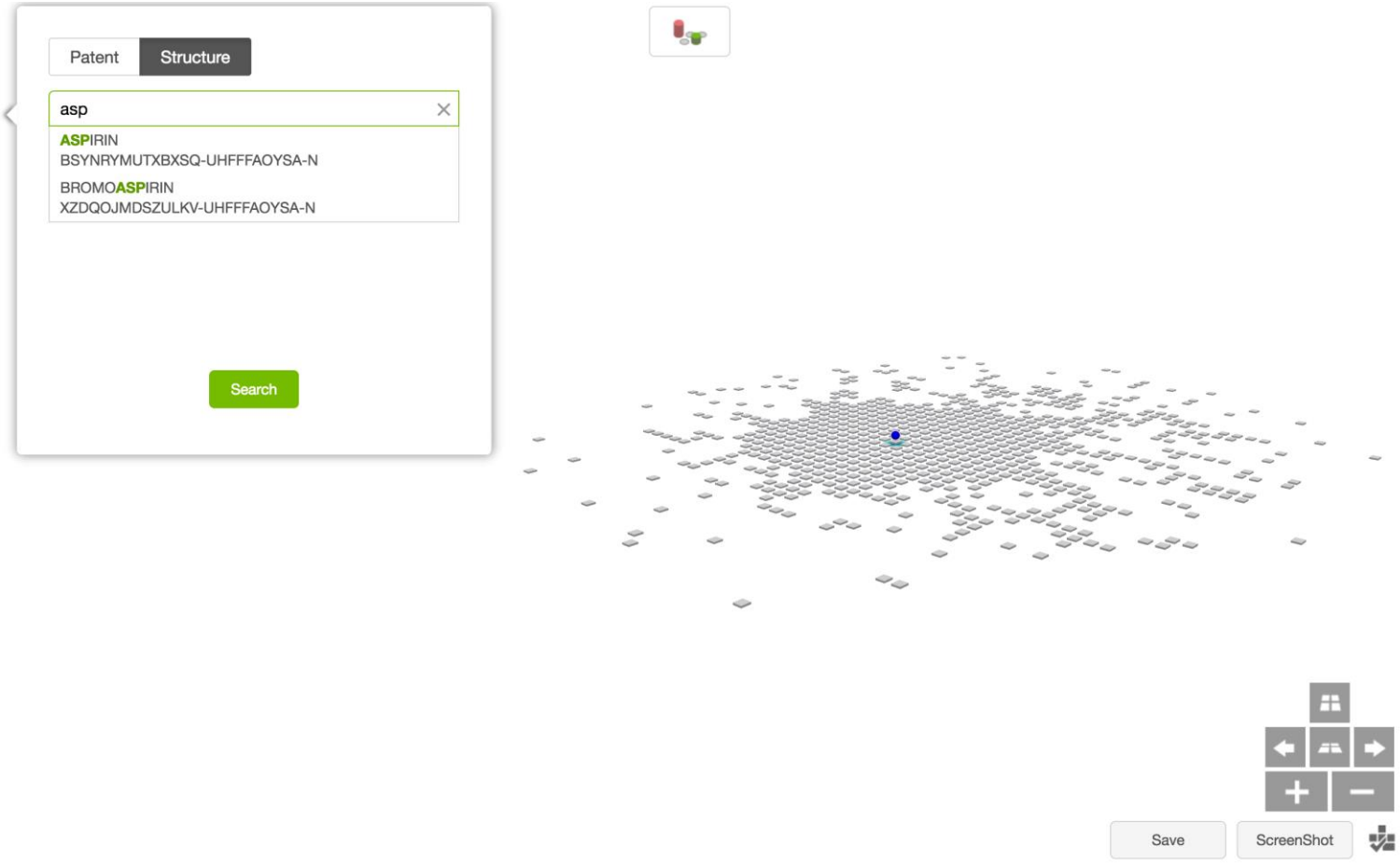




1. 三维化学地图提供了两种搜索方式，分别是“按专利字段搜索结构式”和“按结构式名称搜索结构式”；
2. 使用专利字段检索时，用户在希望搜索的字段输入框中填上期望搜索的内容，点击搜索按钮进行搜索；
3. 如果有匹配的结构式，相应的结构式会在地图上被高亮标示出来；

五/ 三维化学地图

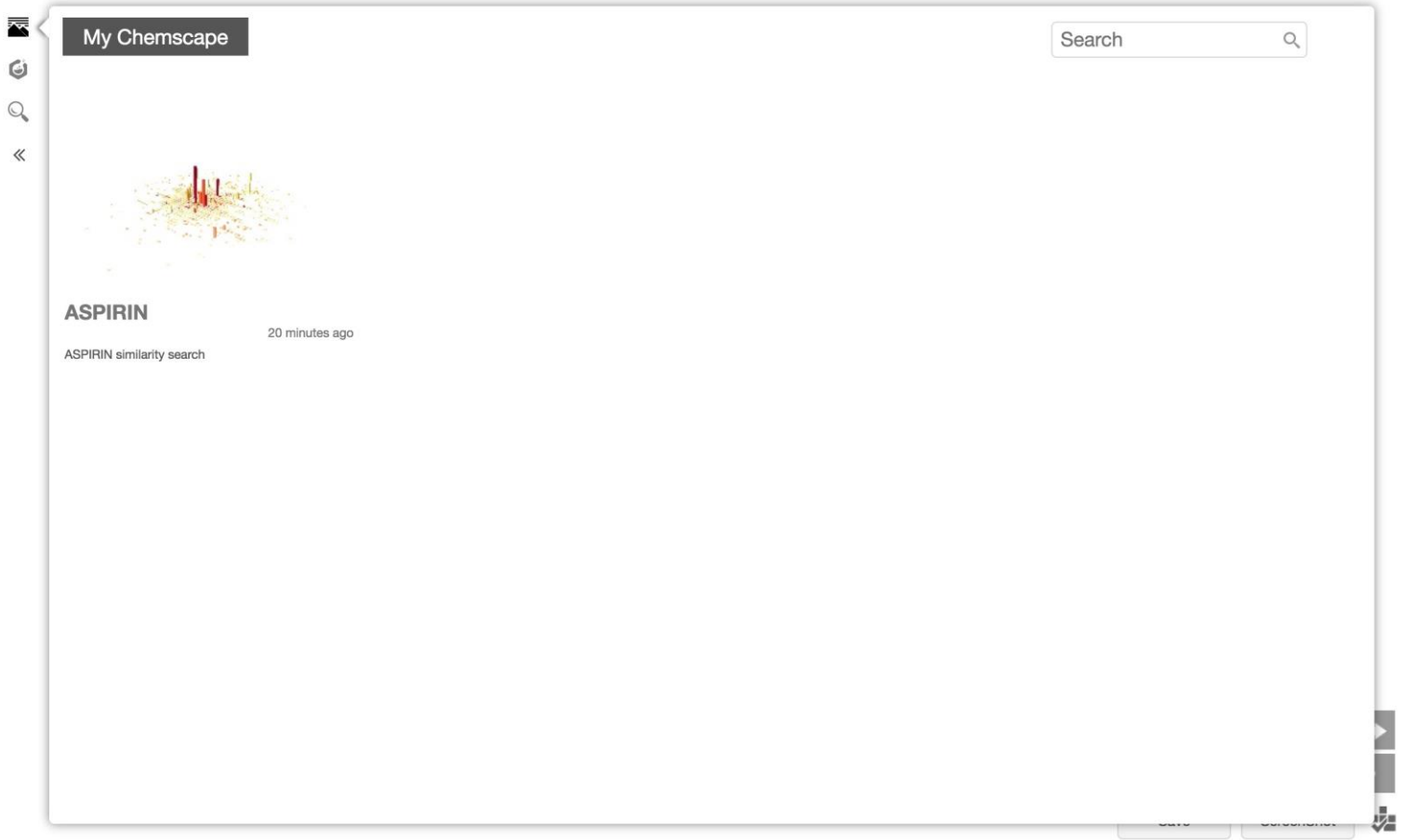
5.3 在三维化学地图中搜索



1. 用户点击“Structure”标签页可以切换到按化学式名称精确搜索功能；
2. 可以根据用户的输入提示在当前分析中存在的化学结构式；
3. 用户点击名称后，相应的结构式就会在三维地图上高亮显示出来；

五/ 三维化学地图

5.4 保存及恢复三维化学地图



1. 在三维化学地图上，点击左下角的Save按钮，输入标题和描述，就可以将当期的分析结果保存下来；
2. 点击左边栏的 图标可以进入我的化学地图页面，可以查看和搜索过往保存过的化学地图；
3. 点击任何一个地图可以恢复之前的分析结果；
4. 鼠标移至地图上，点击 出现的 按钮， 再选择 Confirm Delete ，可以删除该条已保存的记录；

Chapter 6

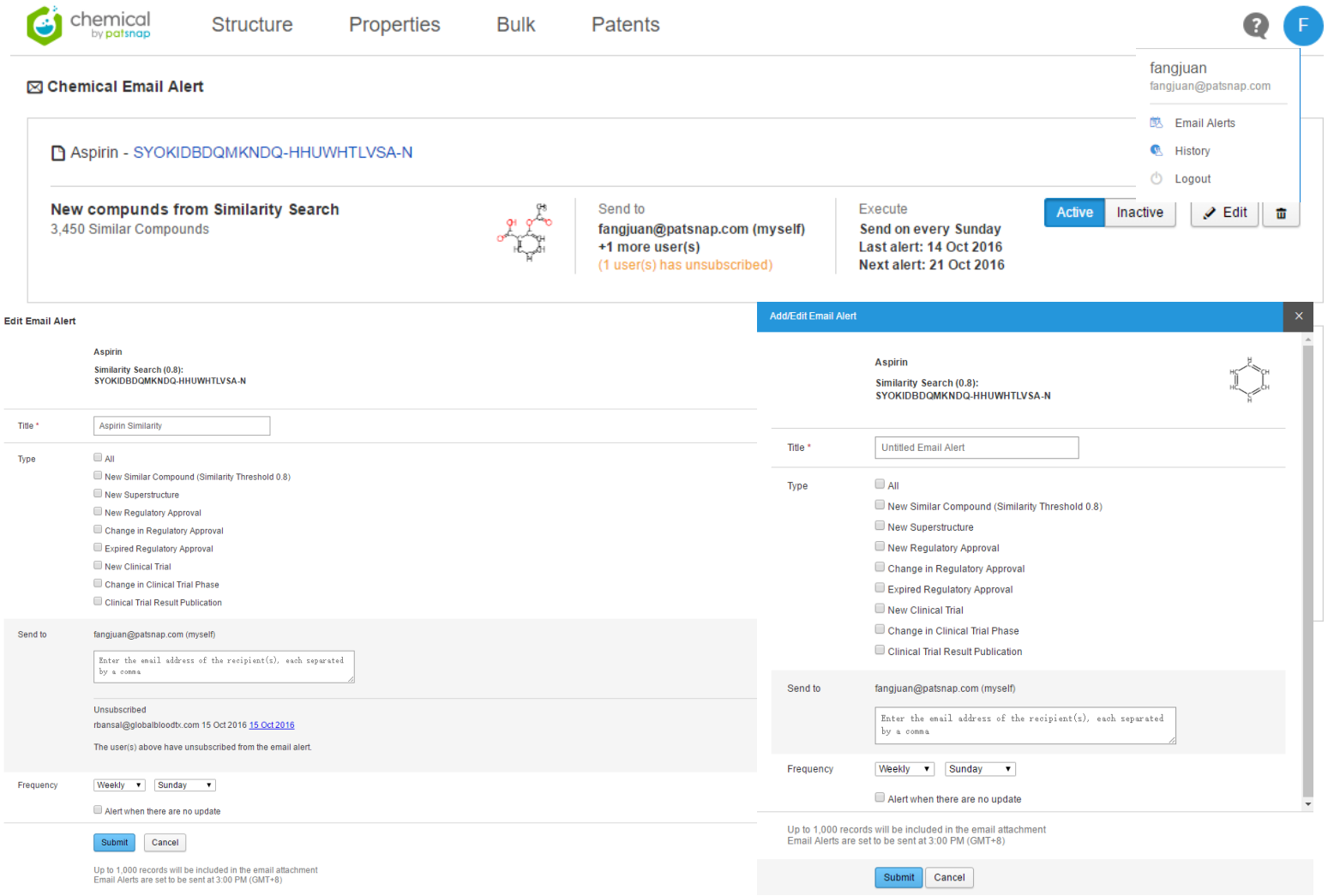
六/ 用户中心

6.1 邮件提醒设置

6.2 历史操作记录

五/ 用户中心

5.1 邮件提醒设置



1. 点击用户中心邮件提醒 Email Alerts 或者在检索结果首页点击 Email Alert

2. 邮件提醒操作：

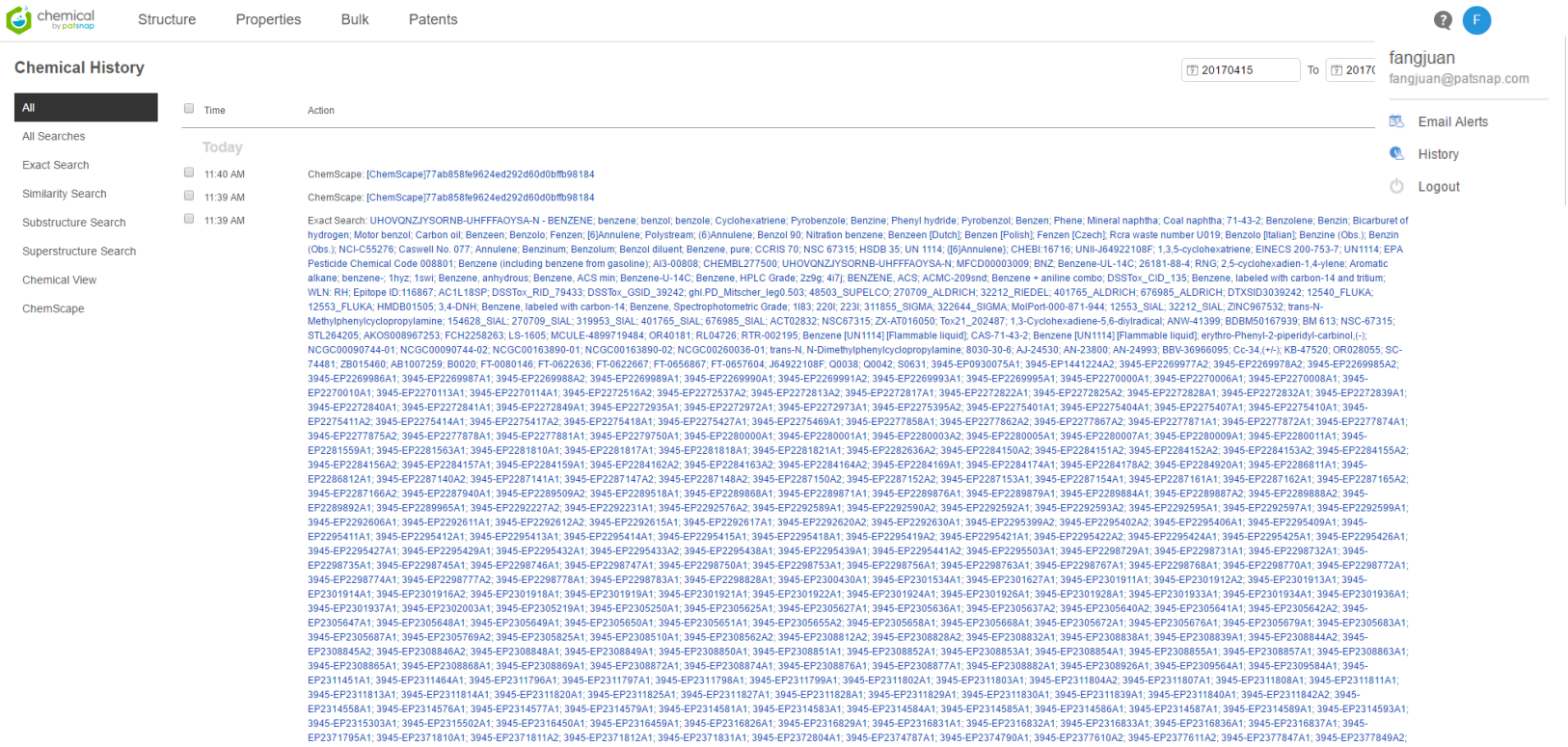
1）支持对邮件提醒的启动和暂停；

2）支持对邮件提醒的修改；

3）支持对邮件提醒的删除；

五/ 用户中心

5.2 历史操作记录



1. 点击用户中心历史操作记录 History

2. 历史操作记录的操作：

1）历史操作记录的分类查询；

2）历史操作记录的指定时间范围查询；

3）记录全部清空；