

化合物の構造検索ツールの性能評価

PLASDOCオンライン研究会

1. PLASDOCオンライン研究会のご紹介

2. ワーキング活動例のご紹介

—化合物の構造検索ツールの機能比較—

- 1) 化合物構造検索の目的
- 2) ツールの機能比較の目的
- 3) ツールの比較例
- 4) まとめ

1. PLASDOCオンライン研究会のご紹介

□ 沿革・活動概要

- 1980年、主にポリマーに関する情報検索についての情報収集・情報交換・研鑽を目的として、わが国の化学メーカー(当初18社)の参加のもと、発足
- 会員全員が参加企業間の垣根を越えてノウハウを共有し合い、率直に意見交換
- 会員が希望するテーマについてグループ毎にワーキングを実施し、毎年6月の総会にて成果を発表

□ 現在の会員企業_12社(14名)

JSR、JNC石油化学、旭化成、出光興産、宇部興産、昭和電工、住友化学、ダイセル、東ソー、日本化薬、ブリヂストン、三菱ケミカル

ベンダー各社様より、試用IDやトレーニングのご提供等、ご協力いただいております。

□ 今年度のワーキングテーマ

- 特許価値評価ツールを事業ステップ毎に効果的に用いる検討
- 特許自動分類ツールの性能検証

1. PLASDOCオンライン研究会のご紹介

□ 最近のワーキングテーマ

- データベースの基本性能の検証
 - ・外国特許フルテキストDBの検証
 - ・化合物検索システムの比較・評価
 - ・DWPIMファイルの検証
 - ・各社特許DBにおける生死情報の検証
- 概念検索、AI関連ツールの活用検討
 - ・Patent Explorerの検証及び活用方法の検討
 - ・セマンティックサーチツールの整理・比較・活用検討
- 業務効率化、分析手法の活用など
 - ・特許解析手法を用いた技術予測の検討
 - ・エンドユーザー向け調査効率ツールの検討

□ 外部での発表:

- STNユーザーミーティング
- 情報プロフェッショナルシンポジウム_2013年
「グローバル特許検索における抄録系DBと全文系DBの検索比較」
- 情報の技術と科学(68巻、9号)
「人工知能(AI)を用いた化学分野における
無効資料調査・先行技術文献調査への活用検討」

1. PLASDOCオンライン研究会のご紹介

□ ご興味のある方はご連絡ください！

- ホームページ <http://www.geocities.jp/dbsstudy/>
- メールアドレス dbsstudy@yahoo.co.jp



2. ワーキング活動例のご紹介

化合物の構造検索ツールの機能比較

1) 化合物構造検索の目的

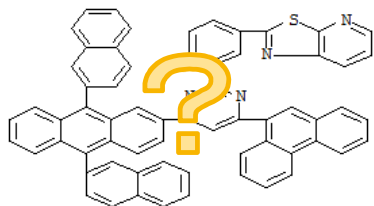
○ 構造検索ってなに？

検索式として**化学構造式**を用いる

キーワードだと…

化合物名称

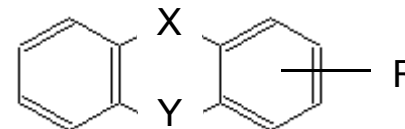
- 同意語がたくさんある
- 命名方法もたくさんある
- 複雑な構造だと、**名前が分からない**



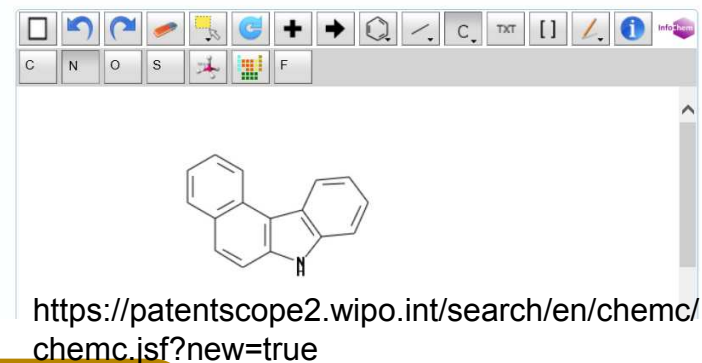
化合物の網羅的調査に 欠かせないツール

化合物の記載

- 効果部分のみクレームされ、ほかの部分が選択式
- …**名前がつけられない!**



作図画面の例 (PATENTSCOPE)



2. ワーキング活動例のご紹介

化合物の構造検索ツールの機能比較

2) ツールの機能比較の目的

つい最近まで。。

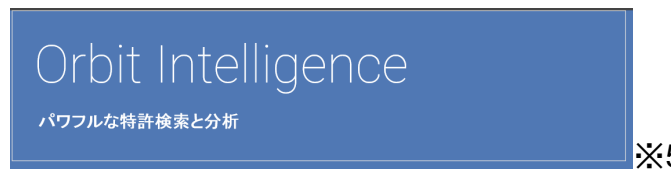


ここ最近



それぞれの特徴を知って
活用しよう！

新しい機能
も増えている...



などなど。。

※1 <https://www.jaici.or.jp/stn/index.php>
※2 <https://www.jaici.or.jp/SCIFINDER/index.php>
※3 <http://www.wipo.int/patentscope/en/>

※4 <https://minesoft.com/our-products/chemical-explorer/>
※5 <http://jp.questel.com/software/ipbi/orbit-intelligence/>
※6 <https://www.patsnap.com/chemical>

2. ワーキング活動例のご紹介

注：2018年5月
作成のデータです。

化合物の構造検索ツールの機能比較

3) ツールの比較例

ツール	REGISTRY	chemical explorer	Orbit Intellixir	PATENTSCOPE
メーカー	CAS	Minesoft	Questel	WIPO
料金	有料	有料 (PatBase のオプション)	有料 (Intellixirの オプション)	無料
期間	1800年初頭 ～	(別紙)	任意 (ユーザーが入力した 集合による)	WO: 1978～ (英,独) US: 1979～ ただし、OCRで 読み取れるもの。
国	CA収録対象国	索引方針が違う		WO, US (FR,CN,JP,KR,RU も対応計画あり)
化合物 索引	アナリスト(人) CAS No. ⇔ 文献	機械 SMILES ⇔ 文献	—	機械 InChiKey ⇔ 文献
索引 箇所	実施例 (一部、請求項)	特許全文 イメージ (USのみ)	—	特許全文、 イメージ (USのみ)
対象外 化合物		ポリマー、組成物	ポリマー、組成物	錯体、ポリマー、 組成物

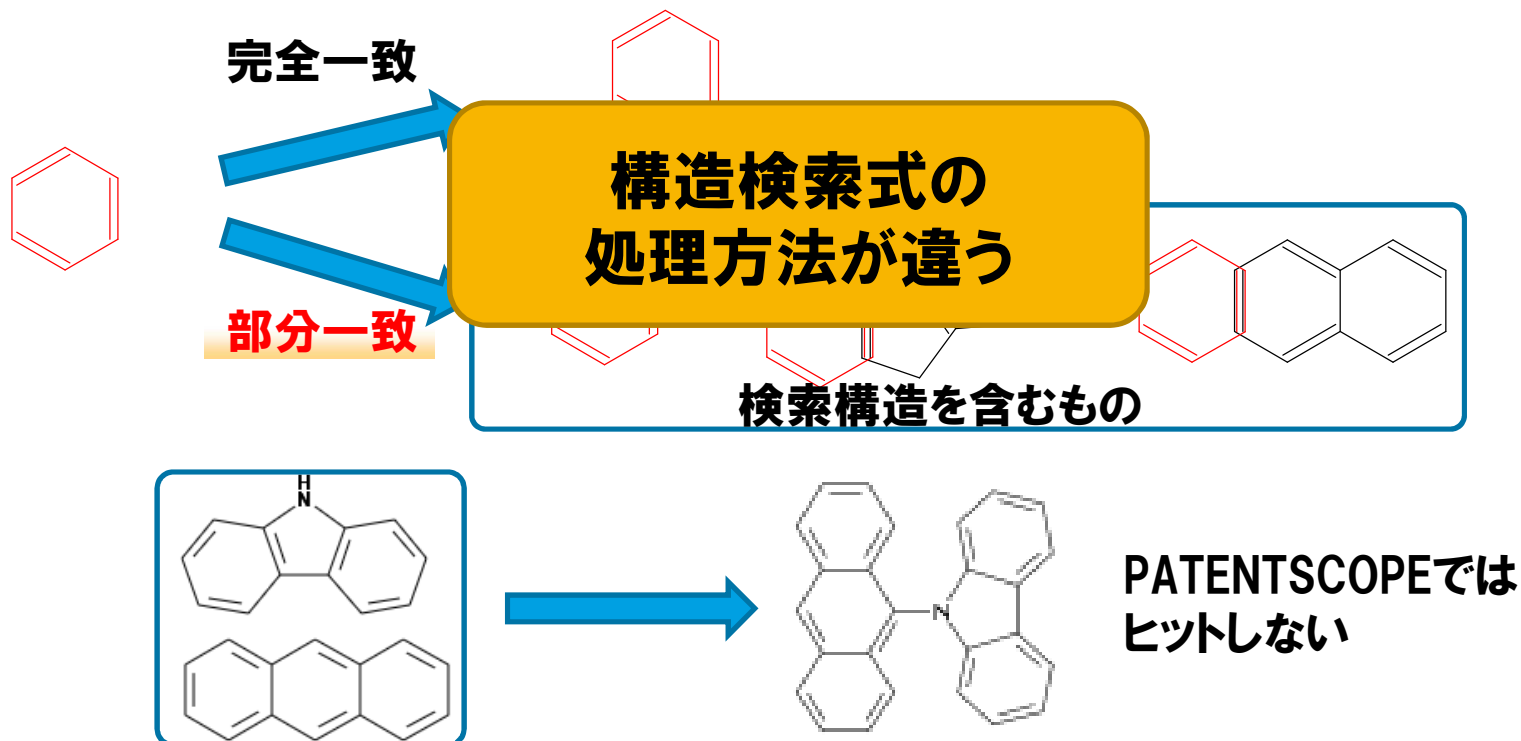
2. ワーキング活動例のご紹介

注：2018年5月
作成のデータです。

化合物の構造検索ツールの機能比較

3) ツールの比較例

ツール	REGISTRY	chemical explorer	Orbit Intellixir	PATENTSCOPE
完全一致	○	○	○	○
部分一致	○	○	○	×
その他	—	類似構造検索	—	—



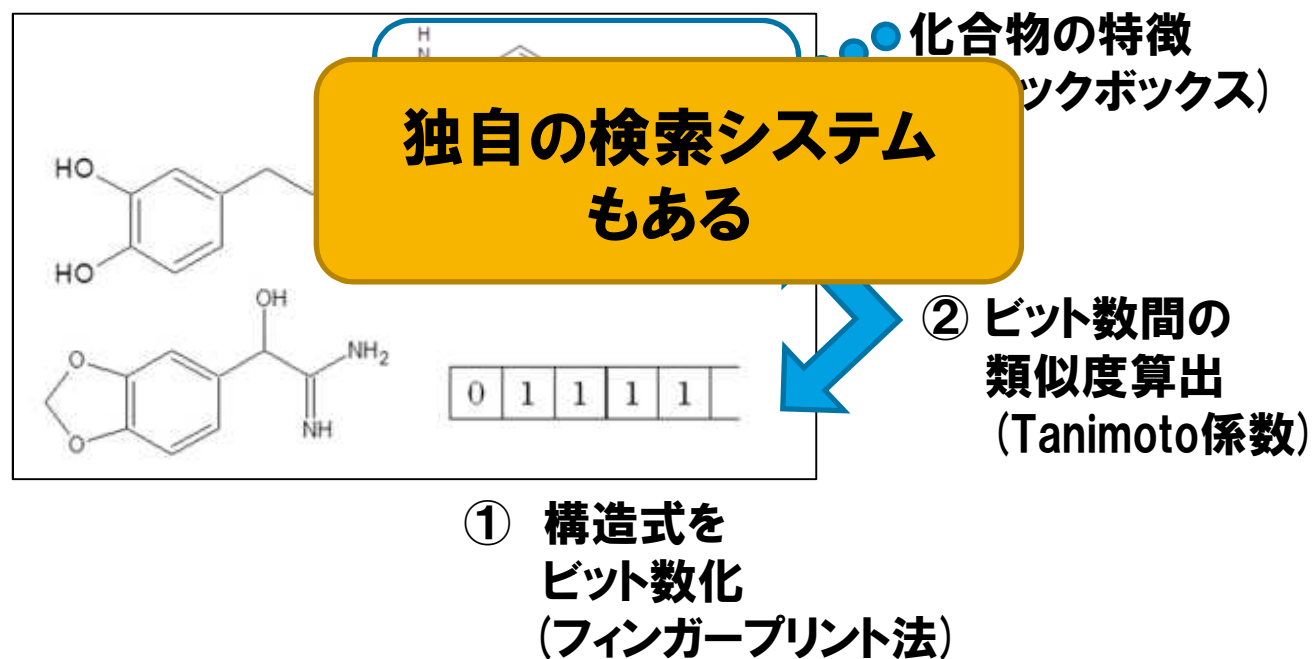
2. ワーキング活動例のご紹介

注：2018年5月
作成のデータです。

化合物の構造検索ツールの機能比較

3) ツールの比較例

ツール	REGISTRY	chemical explorer	Orbit Intellixir	PATENTSCOPE
完全一致	○	○	○	○
部分一致	○	○	○	×
その他	—	類似構造検索	—	—



引用：産総研HP

http://www.aist.go.jp/aist_j/press_release/pr2011/pr20111101/pr20111101.html

2. ワーキング活動例のご紹介

化合物の構造検索ツールの機能比較

4) まとめ

■ツール毎にそれぞれ特徴がある


○化合物の索引方針が異なる

- ・対象国、対象
- ・実施例中心
- ・図、表

各々の特徴を活かし
相互補完的に使うのが
ベスト

○作図した構造式の変換方式が異なる

- ・構造を離して作図した場合の処理が異なる
- ・フィルター機能の有無

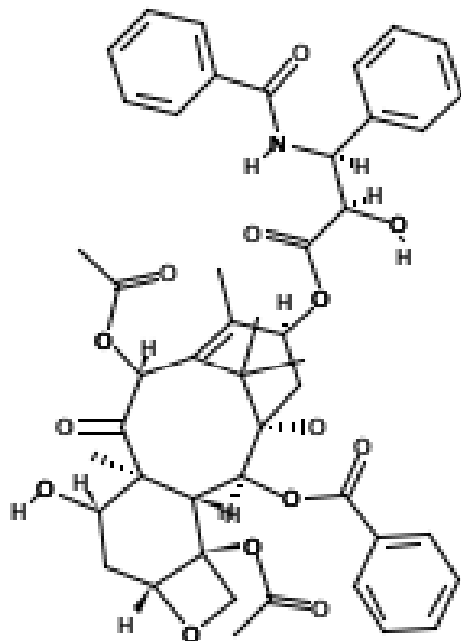
 でも、お金が。。。



ご清聴ありがとうございました。

化合物検索ツールの機能比較

■PATENTSCOPEの化合物検索例



Paclitaxel

※PATENTSCOPEの画像

番号	項目	件数	US限定
①	taxol (全文)	92,821	37,622
②	taxol or paclitaxel (全文)	153,852	61,264
③	化合物検索	155,324	53,139
④	taxol (発明名、要約、請求項)	8,864	2,584
⑤	taxol or paclitaxel (発明名、要約、請求項)	26,797	8,636
⑥	化合物検索 (before 10000 description)	27,641	7,947

化合物検索ツールの機能比較

■PATENTSCOPEの化合物検索例

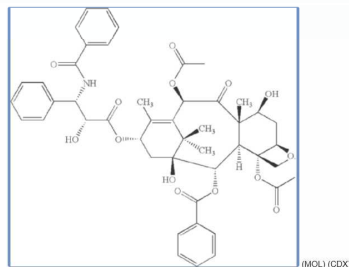
検索対象: Paclitaxel

⑥ not ⑤ ... 926件

番号	項目	件数 (US)
④	taxol (発明名、要約、請求項)	2,584
⑤	taxol or paclitaxel (発明名、要約、請求項)	8,636
⑥	化合物検索 (before 10000 description)	7,947

(US6649778) Methods of preparing amino acid taxane derivatives and polymer conjugates containing the same

2. The method of claim 1, wherein said taxane comprises the formula:



図面でヒット!

(US20090298926) Process for the purification 10-deacetylbaccatine III from 10-deacetyl-2-debenzoyl-2-pentenoylbaccatine III

9. A process for the preparation of **paclitaxel** which comprises the preparation of 10-deacetylbaccatine III according to claim 6 and its conversion into N-debenzoylpaclitaxel, followed by benzoylation...

(US20050070496) Semi-solid formulations for the oral administration of taxoids

