

# 特許文書からの化学物質情報の抽出

Recognizing Chemical Information in Patent Documents

株式会社富士通研究所 **池田 紀子**

**PROFILE** R&Dマネジメント本部 企画部、技術士（応用理学部門 物理及び化学）、材料の設計及び分析・分子モデリングの研究に従事。

株式会社富士通研究所 **田中 一成**

**PROFILE** 知識情報処理研究所 データアナリティクス PJ、特許情報の分析・読解支援の研究に従事。

## 1 はじめに

化学分野の特許文書には、化学物質に関する多様・膨大な情報が蓄積されている。特許を理解するために、web やデータベースの化学物質データから重要な洞察を引き出すためには、予想以上に高度なスキルと多大な労力が必要である。特許出願にあたっては、従来技術との差を明確に特定しなければならない。複数の特許から化学物質の構成上の差や効果の差を明確に特定することは、さらに難しい。化学物質データを検索し、その特徴を把握することには労力を要する。このため、化学物質データを効果的・効率的に収集・集約し、分析することにより知識の発見や新たな価値を創造することの重要性が認識されてきている。本稿では、化学分野の特許理解を支援する目的で、化学物質名と化学式の対応関係を抽出し、可視化する手法について考案し、実証実験を行ったので報告する。

## 2 化学物質名と化学式の特徴と課題

### 2.1 特徴

化学物質は、様々な規則が用いられて、構造の表記や名称の命名が行われている。よって、一つの化学物質に

対して、構造や名称の表記の記載が多様で表記方法が数多く存在する。化学の学問分野は、有機化学、無機化学、高分子化学などを始めとし、多くの専門分野が存在する。同じ化学物質であっても、専門分野や着目する性質などによって、様々な命名法や表記法が使われており、名称が異なったり、表記が異なったりする。このため、化学分野の専門家であっても、技術文書中の化学物質名から、異表記を同定し、その構造を示す化学式を認識することが難しく、全ての名称や表記を把握することは容易ではない。

例えば、有機化合物の「1-メトキシ-2-プロパノール」という化学物質名については、以下のような命名法による名称や慣用名と表記法による化学式や登録番号等がある。

#### (1) 名称

##### ①命名法 [1,2]

・置換命名法（構造を表現する体系名）：

1-メトキシ-2-プロパノール

・付加命名法（体系名）：

1-メトキシ-2-ヒドロキシプロパン

・基官能命名法（構造を表現しない慣用名）：

プロピレングリコールモノメチルエーテル、（原子団が1個存在することを表現するモノは省略可）プロピレングリコールメチルエーテル

## ②慣用名 [3] や商品名

ダウテルム 209、ダウサム 209、ドワノール 33B、  
BYK-4510、NSC-2409

## (2) 表記

## ①化学式 (元素構成を表現)

- ・組成式 (元素組成を表現) :  $C_4H_{10}O_2$
- ・示性式 (基を連結して分子構造を表現) :  
 $CH_3OCH_2CH(OH)CH_3$   
(特徴ある基を強調する目的で、略号を使って分子構造を表現、 $CH_3=Me$ ) :  $MeOCH_2CH(OH)Me$
- ・構造式 (トポロジ的な関係を維持して分子構造を表現) を図 1 に示す。炭素や水素は、省略されている場合がある。

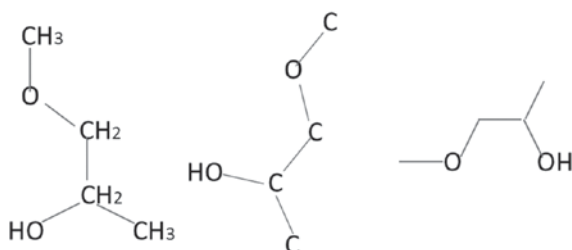


図 1 1-メトキシ-2-プロパノールの 3 種の構造式例

## ②登録番号

- ・CAS 登録番号 : 107-98-2[4]

## ③整理番号

- ・官報公示整理番号 (化審法 : 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律・安衛法 : 労働安全衛生法) : 2-404[5]
- ・労働安全衛生法 (通知対象物質) : 第 496 号 プロピレングリコールモノメチルエーテル [6]

## 2.2 課題

化学物質名の異表記問題を辞書で対処しようとした場合、次のような限界が指摘されている [7]。

- ・日々、新しい物質が誕生 [8] するため、辞書の作成には労力が必要
- ・表記に関する基準や方針が時代とともに変化 [9]
- ・後発医薬品などにより慣用名 (商品名) が増加
- ・表記法に自由度があるために、書き手が勝手に作成
- ・誤名称が発生 [10]

さらに、同一の化学物質以外にも、同じ元素組成でも、

構造が異なる異性体が、複数存在する。また、人手で作られた辞書は高額な使用料がかかる場合もあり、調査や分析の支援として商用利用するには、知的財産権の問題が大きな障壁となる。

上記のような背景は、特許や論文の調査を行う際、さらに、大きな障壁となる。特に、研究領域の拡大から、他分野の技術を調査する研究者や、専門知識の十分でない知財部門の担当者にとっては、コストや品質に影響する大問題である。これまでに、化学物質情報の理解を支援する目的で、化学物質名と化学式の対応関係を抽出する手法について考案し、実証実験を行ってきた [11]。技術文書の調査や分析を行う場合、化学物質名に対応する化学式の対応関係を得ることができれば、異命名や異表記を同定でき、たいへん有用な情報源となる。

## 3 化学物質名と化学式の集約

特許文書をコーパスとして用いて、有機化合物の化学物質名に対応する化学式を抽出し、データベースを作成した。さらに、有機化合物の命名規則を用いて、得られた化学物質名と化学式の対応関係を部品化し、データベースに蓄積した。それらの部品を組み合わせることで、特許文書から化学式を直接抽出できなかった化学物質名について、新たに化学式を生成する手法を考案した [11]。

## 3.1 特許文書から直接抽出

特許庁は 1993 年以降の特許文書を電子化して発行している。この特許文書をコーパスとして用いて、化学物質名と化学式の対応関係の抽出を試みた。特許文書中には、図 2 に示すように、化学物質名と化学式を対応づけられて記載されることがある。化学物質の中から、炭素 (C) 骨格に水素 (H) が結合した構造を基本構成とする有機化合物を選択した。

有機化合物について、化学物質名と化学式の対応関係を次のルールを用いて抽出した。

- (1) 片仮名、英数、「酸」などの一部の漢字、括弧が連続して並ぶ文字列を化学物質名の候補として抽出
- (2) 括弧書きを利用して、化学物質名と化学式の対応関



[0103]

適切な溶剤のうち、  
メタノール (CH<sub>3</sub>OH, Carlo Erba)、  
1-プロパノール (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OH, VWR International)、  
1-メトキシ-2-プロパノール (CH<sub>3</sub>CH(OH)CH<sub>2</sub>OCH<sub>3</sub>, Sigma Aldrich)、  
4-ヒドロキシ-4-メチル-2-ペンタノン (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>C(OH)CH<sub>2</sub>COCH<sub>3</sub>, VWR International)、  
2-メチル-2-ブタノール ((CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>C(OH)CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, Sigma Aldrich)、  
トキシエタノール (CH<sub>3</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OH, Sigma Aldrich)、…

図2 特許明細書からの抜粋例：1-メトキシ-2-プロパノール

[0034]

…Xは、メトキシ基 (CH<sub>3</sub>O) やエトキシ基 (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>O) 等のアルコキシ基 (加水分解性基)、…

[0023]

アルコール系化合物としては、メタノール (CH<sub>3</sub>OH)、…1-プロパノール (CH<sub>2</sub>(OH)CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)、2-プロパノール (CH<sub>3</sub>CH(OH)CH<sub>3</sub>)、1, 1-プロパジオール (CH(OH)<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)、1, 2-プロパジオール (CH<sub>2</sub>(OH)CH(OH)CH<sub>3</sub>)、1, 3-プロパジオール (CH<sub>2</sub>(OH)CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>(OH))、2, 2-プロパジオール (CH<sub>3</sub>C(OH)<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)、…1-ブタノール (CH<sub>2</sub>(OH)CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)、2-ブタノール (CH<sub>3</sub>CH(OH)CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)、…等を挙げることができる。

図3 特許明細書からの抜粋例：メトキシ基、2-ブタノール

係の候補を抽出

- (3) 化学式を英数文字と括弧のみと限定して、炭素 (C) と水素 (H) を含む場合のみを抽出
- (4) 候補の中から開き括弧と閉じ括弧の数が合わないものを削除
- (5) 候補の中から数字+単位のみものを削除
- (6) 化学物質名と化学式の両方の候補が英数字のみものを削除

上記の抽出ルールを用いたところ、9630の化学物質名と化学式の対応関係が抽出できたので、化学式の部品データベースに蓄積した。なお、前述した、「1-メトキシ-2-プロパノール」に対応する化学式も図2に示すように、抽出できた。

### 3.2 化学式の部品化

命名規則を用いて、化学的に意味を持つように、化学物質名を化学式と対応付けて分割する。たとえば、「1-メトキシ-2-ブタノール」を分割すると、「1-メトキシ」と「2-ブタノール」に部品化できる。部品化した化学物質名に対応づけて、部品の化学式を蓄積する。蓄積した部品の組み合わせで、新しい化学式を作ることができた。たとえば、図3に示すように、各々抽出できた「メトキシ基」CH<sub>3</sub>Oと「2-ブタノール」CH<sub>3</sub>CH(OH)CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>の化学式の部品を組み合わせることによって、「1-メトキシ-2-ブタノール」と化学式の対応関係を生成できると考えた。なお、化学物質名は、主骨格の母核と枝の置換基の構造を示す命名法を用いることが多い。

### 3.3 部品から生成する化学式

元素は、原子価 (ある原子が何個の他の原子と結合するかを表す数) を持っており、炭素 (C) は4、水素 (H) は1、酸素 (O) は2である。例えば、「1-メトキシ」CH<sub>3</sub>Oと「2-プロパノール」CH<sub>3</sub>CH(OH)CH<sub>3</sub>から、1-メトキシ-2-プロパノール CH<sub>3</sub>OCH<sub>2</sub>CH(OH)CH<sub>3</sub>の化学式を生成する場合を考える。単純に足し合わせた場合、CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>CH(OH)CH<sub>3</sub>となり、誤りである。実際に結合する場合、原子価による制約で、プロパノールの水素が1つ引き抜かれて結合するので、CH<sub>3</sub>OCH<sub>2</sub>CH(OH)CH<sub>3</sub>となる。化学物質の構造を理解しやすいように、1-メトキシ-2-プロパノール (1) と1-メトキシ-2-ブタノール (2) について、部品から生成する構造式 (化学式) を図4に示す。

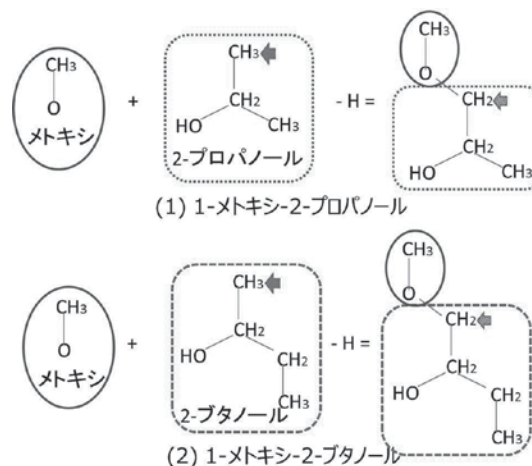


図4 部品から生成する構造式

### 3.4 化学式の部品データベースの作成

化学物質名と化学式の対応関係を増やすために、有機化合物の命名規則などを化学式の部品生成ルールとして利用することにした。下記にその一例を示す。

- ・原子価を考慮
- ・水素 1 個を削除し、部分名の語尾を「タン (アン)」から「チル (イル)」に変換
- ・水素を「水酸基、ヒドロキシ基」(OH) に置き換える場合、部分名の語尾を「ン」から「ノール (オール)」に変換
- ・水素 1 個をハロゲン (塩素、フッ素…) 1 個に置き換える場合、「クロロ、塩化」、「フルオロ、フッ化」…を付加
- ・同じ基が 2 個では「ジ」、3 個では「トリ」に置き換えなど

これらのルールを再帰的に適用することで、大量の部品を生成することができる。ルールを適用する再帰回数の限度を 3 回と設定して部品を作成すると、特許文書

から抽出できた 9630 の対応関係から、約 20 倍近くの 178838 の化学物質名と化学式の対応関係が生成できた。これらを化学式の部品データベースに蓄積した。ルールの再帰的適用例として、メタンの化学物質名と示性式の対応関係から部品を生成した例を図 5 に示す。

ただし、上記の部品化ルールでは、未知部品の抽出を想定していない。そこで、差分から部品のバリエーションを増やす方法を考案した。差分は、化学物質名と化学式の対応関係の既知部分を再帰的に削除した残りとした。この差分の化学物質名と化学式の対応関係も、化学式の部品データベースに蓄積した。差分から未知部品を抽出した例として、チオール部品の生成を図 6 に示す。図 6 に示すように、抽出された化学物質名と化学式の対応関係から、既知部分の部分名と化学式を引いていき、最後に残った部分の部分名「チオール」と化学式 SH を対応付けて、化学式の部品データベースに登録し、さらに、部品のバリエーションを増やした。

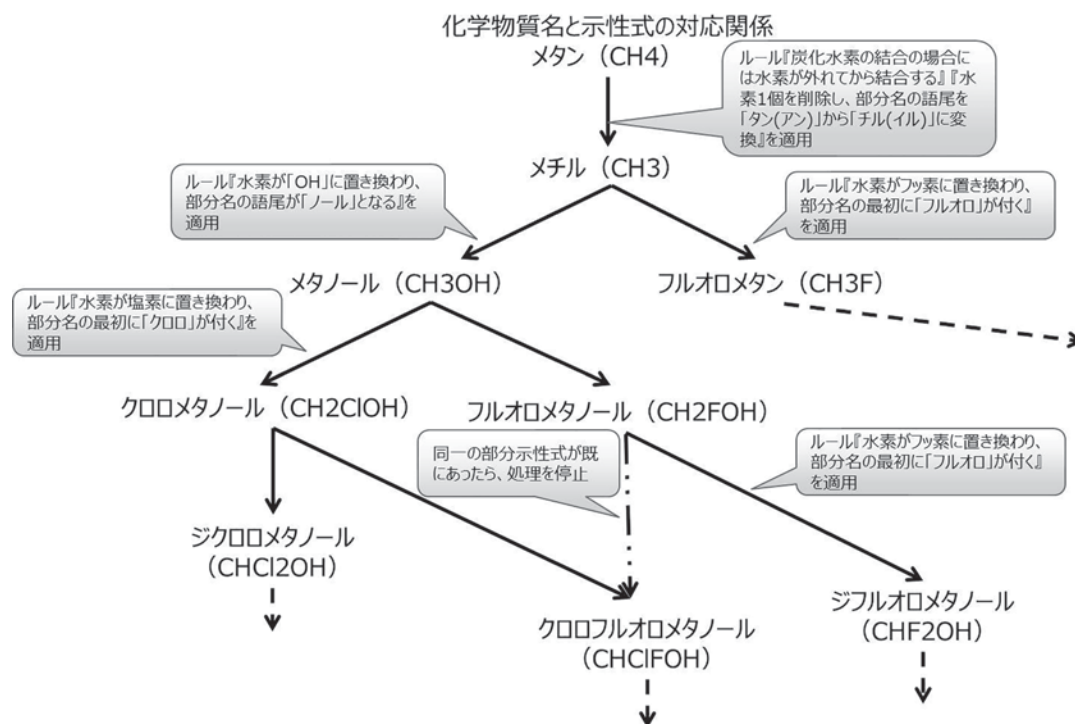


図5 メタンの化学物質名と示性式の対応関係から部品生成

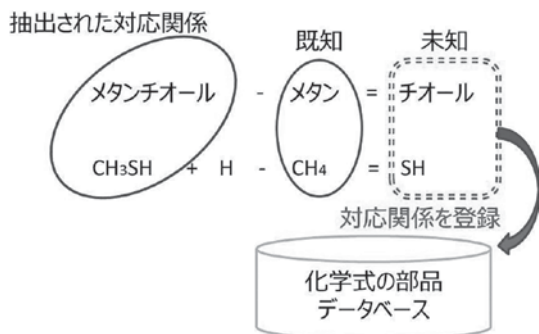


図6 差分による部品化例

表1 実証実験の結果

対応関係作成手法	手法ごと		手法の累計	
	正解数[個]	正解率[%]	正解数[個]	正解率[%]
①特許文書から直接抽出	14	20	14	20
②基本の部品化ルール	12	17	26	37
③オプションの部品化ルール	3	4	29	41
④差分	8	11	37	52

次に、化学物質の大きさの違いによる正解率を比較した。表1の結果から、炭素数が10個未満の化学物質41個を対象とした場合と、炭素数が10～14個の化学物質20個を対象とした場合を抽出して、正解率の比較を行った結果を表2に示す。

表2 化学物質の大きさによる実証実験の結果比較

対応関係作成手法	炭素10個未満の41個			炭素10～14個の20個		
	正解数[個]	手法ごと正解率[%]	手法の累計正解率[%]	正解数[個]	手法ごと正解率[%]	手法の累計正解率[%]
①特許文書から直接抽出	13	32	32	1	5	5
②基本の部品化ルール	10	24	56	2	10	15
③オプションの部品化ルール	3	7	63	0	0	15
④差分	2	5	68	6	30	45

炭素数が10個未満の小さい方の化学物質を対象とした場合、特許データから直接抽出の手法では、約3割の化学物質で正解の化学式が得られた。①～④までの手法を全て用いると、約7割の化学物質で正解の化学式が得られた。一方、炭素数が10～14個の大きい方の化学物質を対象とした場合、①～④までの手法を全て用いると、5割弱の化学物質で正解の化学式が得られた。大きい方の化学物質では、④の差分による部品化による効果が高かった。全体として、小さい方の化学物質の方が、正解の化学式が得られた。

## 4 化学式生成

新たな化学式を得ようとする時は、目的とする化学物質名の文字列と前方一致で一致する部分名を探索する。なお、文字列では、化学式特有の括弧やカンマなどの記載を解析する。一致する部分名が見つかった場合、一致する文字列を目的とする化学物質名から削除する。残りの文字列と前方一致する部分名を繰り返し探索する。体系的名称を用いて、見つかった部分名に対応する部分化学式をつなげることで、化学式を生成する。

### 4.1 実証実験

この手法について実証実験を行ったので報告する。入力データは、「特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律の別表第一」[12]から、有機化合物以外の化学物質名や慣用名を除いた、化学物質名71個を用いた。出力データと比較する正解データは、日本化学物質辞書Web[3]やWikipediaから引用した化学式を用いた。

複数の候補を出力した時、正解が含まれていれば、正解と評価した。正解の化学式が得られた化学物質名の数とその割合を、表1に示す。①特許文書から直接抽出できた情報では、約2割の化学物質で正解の化学式が得られた。次に、②部品化ルールを追加して用いると、約4割近くの化学物質で正解の化学式が得られた。さらに、③オプションの部品化ルールを追加し、④差分による部品を使うと、約5割の化学物質で正解の化学式が得られた。

## 5 可視化

化学物質情報の理解を支援できるように、化学物質名と化学式の対応関係を可視化し、ツール化した[13]。例として選択した特許明細書から、化学物質名を622個抽出した。その中から重複を削除したところ、355個であった。この355個に番号付けした。化学物質名を抽出して番号付けすることで、同一の化学物質名を確認し易くした。特許明細書中の重要な情報を含む文脈を探す場合、「中でも」や「優れる」、「好ましい」等を含

む部分を目安として用いることができる。図7に、「中でも」や「優れる」、「好ましい」を含む特許明細書に、《28》や《18》等ナンバー付けした表示例を示す。表3に、図7に出現する化合物名と各部品を主骨格の母核と枝の置換基の構造に整理してリスト化した表示例を示す。部品のデータベースを利用することで、化学物質名を意味ある単位に分割できるようになった。表3から、置換基のバリエーションは、ほぼ2パターン、母核のバリエーションはアダマンタンとその他と多様である。表3のように、物質の構造を整理することで、一目瞭然に、特許中の化合物群の特徴を把握できる。さらに、抜けや誤りも発見可能になる。

次に、化学物質の効果を抽出した。特許明細書中の機能や用途の情報を含む文脈を探す場合、「〇〇剤」や「XX材」等を含む部分を目安として用いることができる。図

8に、「安定剤」を含む特許明細書からの抜粋例を示す。図8のトリメチルホスフェートに着目し、表4に、「安定剤」をはじめとする機能や用途を示す。化学物質名と化学式の対応関係を用いて化学式を表示している。さらに、各機能や用途で出現頻度数の多い3つの化合物も代替物質として表示している。表4のように、物質の機能や用途を整理することで、一目瞭然に、特許中の化合物群の効果を把握できる。さらに、出願範囲の拡大や不足部分の確認も可能になる。

本手法により、元データを損なうことなく視覚化でき、大量の化合物群のグループ分けが自動化でき、類型化と比較を行う読解作業の効率向上に繋がることがわかった。今後の課題は、化合物名DBの拡充、物性値や単位を含む化合物名の読解、別称DB作成、化学式との連携等が挙げられる。

【0074】

中でも、1, 1-ビス(4-ヒドロキシフェニル)シクロペンタン《28》、1, 1-ビス(3-メチル-4-ヒドロキシフェニル)シクロペンタン《18》、1, 1-ビス(4-ヒドロキシフェニル)シクロヘキサン《26》、1, 1-ビス(4-ヒドロキシフェニル)-3, 3, 5-トリメチルシクロヘキサン《19》、2, 2-ビス(4-ヒドロキシフェニル)アダマンタン《42》、2, 2-ビス(3-メチル-4-ヒドロキシフェニル)アダマンタン《41》、1, 3-ビス(4-ヒドロキシフェニル)アダマンタン《34》、1, 3-ビス(3-メチル-4-ヒドロキシフェニル)アダマンタン《33》、1, 1-ビス(3-メチル-4-ヒドロキシフェニル)シクロヘキサン《16》、1, 1-ビス(4-ヒドロキシフェニル)シクロデカン《24》、1, 1-ビス(3-メチル-4-ヒドロキシフェニル)シクロデカン《14》が溶解性に優れるPC共重合体を与えるという点で好ましい。

図7 特許明細書にナンバー付けした表示例

【0125】

安定剤の例としては、2-(2'-ヒドロキシ-5'-メチルフェニル)ベンゾトリアゾール《335》を含むベンゾトリアゾール系化合物、ならびに2, 4-ジヒドロキシベンゾフェノン《337》のようなベンゾフェノン系化合物、モノ《338》またはジステアリルホスフェート《339》、トリメチルホスフェート《340》などのリン酸エステル《341》などを挙げるができる。

図8 特許明細書からの抜粋例：安定剤

表3 化学物名と部品リスト

化合物名	母核	結合位置	置換基数	母核炭素数	第1の置換基			第2の置換基			第3の置換基	第4の置換基	第5の置換基
					母核	置換基1	置換基2	母核	置換基1	置換基2			
1,3-ビス(3-メチル-4-ヒドロキシフェニル)アダマンタン	アダマンタン	1-,3-,	2	9	フェニル	3-メチル	4-ヒドロキシ	フェニル	3-メチル	4-ヒドロキシ			
2,2-ビス(3-メチル-4-ヒドロキシフェニル)アダマンタン	アダマンタン	2-,2-,	2	9	フェニル	3-メチル	4-ヒドロキシ	フェニル	3-メチル	4-ヒドロキシ			
1,1-ビス(3-メチル-4-ヒドロキシフェニル)シクロデカン	シクロデカン	1-,1-,	2	12	フェニル	3-メチル	4-ヒドロキシ	フェニル	3-メチル	4-ヒドロキシ			
1,1-ビス(3-メチル-4-ヒドロキシフェニル)シクロヘキサン	シクロヘキサン	1-,1-,	2	6	フェニル	3-メチル	4-ヒドロキシ	フェニル	3-メチル	4-ヒドロキシ			
1,1-ビス(3-メチル-4-ヒドロキシフェニル)シクロペンタン	シクロペンタン	1-,1-,	2	5	フェニル	3-メチル	4-ヒドロキシ	フェニル	3-メチル	4-ヒドロキシ			
1,3-ビス(4-ヒドロキシフェニル)アダマンタン	アダマンタン	1-,3-,	2	9	フェニル	4-ヒドロキシ		フェニル	4-ヒドロキシ				
2,2-ビス(4-ヒドロキシフェニル)アダマンタン	アダマンタン	2-,2-,	2	9	フェニル	4-ヒドロキシ		フェニル	4-ヒドロキシ				
1-ビス(4-ヒドロキシフェニル)シクロデカン	シクロデカン	1-,1-,	2	12	フェニル	4-ヒドロキシ		フェニル	4-ヒドロキシ				
1,1-ビス(4-ヒドロキシフェニル)シクロヘキサン	シクロヘキサン	1-,1-,	2	6	フェニル	4-ヒドロキシ		フェニル	4-ヒドロキシ				
1,1-ビス(4-ヒドロキシフェニル)シクロペンタン	シクロペンタン	1-,1-,	2	5	フェニル	4-ヒドロキシ		フェニル	4-ヒドロキシ				
1,1-ビス(4-ヒドロキシフェニル)-3,3,5-トリメチルシクロヘキサン	シクロヘキサン	1-,1-, 3-,3-, 5-,	5	6	フェニル	4-ヒドロキシ		フェニル	4-ヒドロキシ		3-メチル	3-メチル	5-メチル

表4 機能や用途と代替物質

トリメチルホスフェート C3H9O4P	
機能や用途	代替物質
安定剤	リン酸エステル トリエチルホスフェート トリフェニルホスフェート
難燃剤	トリエチルホスフェート トリクレジルホスフェート トリフェニルホスフェート
可塑剤	トリエチルホスフェート トリクレジルホスフェート トリフェニルホスフェート
リン酸エステル系難燃剤	トリエチルホスフェート トリクレジルホスフェート トリフェニルホスフェート

## 6 おわりに

特許文書をコーパスとして用いることで、有機化合物の化学物質名と化学式の対応関係を抽出できた。また、化学物質の命名規則を元に作成した部品化ルールによって、化学物質名と化学式の対応関係を増やすことができた。部品のデータベースを利用することで化学物質名を意味ある単位に分割できるようになった。実証実験

の結果、これらの手法を組み合わせることで、実験データの半分程度までカバーできるようになった。よって、化学物質名と化学式の対応関係の抽出には、本手法が有効だと考える。本手法は発展途上であり、正解率向上には、専門分野ごとのカスタマイズが必須と考える。また、Linked Open Data (LOD) の発展などが、化学情報（製造方法、化学反応、パラメータ、用途など）抽出のブレイクスルーを生み出す可能性になりそうだと考える。

## 参考文献

- [1] 国際純正および応用化学連合 International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) で制定した化合物の命名法規則  
<<http://www.iupac.org/nc/home/publications/technical-reports/guidelines-for-drafting-reports/4-nomencl.html>>
- [2] 日本化学会命名法専門委員会編, 化合物命名法— IUPAC 勧告に準拠, 東京化学同人 (2011)
- [3] 日化辞 Web <[http://nikkajiweb.jst.go.jp/nikkaji\\_web](http://nikkajiweb.jst.go.jp/nikkaji_web)>
- [4] Chemical Abstracts Service A division of the American Chemical Society <<http://www.cas.org/>>
- [5] 化学物質総合情報提供システム (CHRIP)  
<<http://www.safe.nite.go.jp/japan/db.html>>
- [6] 安衛法における表示・文書交付制度 p.44 (2014)  
<<http://www.mhlw.go.jp/new-info/kobetu/roudou/gyousei/anzen/dl/130813-01-02.pdf>>
- [7] 藤井敦, 田中るみ子: 特許検索における化学物質名の異表記同定に向けた考察, Japio YEAR BOOK 2010, p.182-187 (2010)
- [8] Chemical Abstracts Service <<https://www.cas.org/>>
- [9] 新しい IUPAC 有機化合物命名法 2013 勧告における主要な変更, 化学と工業 Vol.68-4 April(2015)
- [10] 労働安全衛生法の新規化学物質名称公表告示の改正について (お知らせ)  
<<http://www.mhlw.go.jp/bunya/roudoukijun/anzeneisei06/20120313.html>>
- [11] 池田紀子, 田中一成: 特許文書からの化学物質情報の抽出, 第3回特許情報シンポジウム, p.119-124 (2014)
- [12] 特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律施行令 <<http://law.e-gov.go.jp/htmldata/H12/H12SE138.html>>
- [13] 池田紀子, 田中一成: 化学系特許の読解支援, 第61回高分子討論会, 3Pd042 (2012)