

# Compostos Químicos

Módulo específico - Tutorial Avançado de Busca

Pesquisadores em PI  
DIESP / CEPIT / DIRPA

Rio de Janeiro, agosto de 2023

## ATENÇÃO:

Por ser continuação do Guia Básico, este guia exige conhecimentos apresentados anteriormente.

Caso ainda não tenha lido o Guia Básico, por favor acesse-o [aqui](#) antes de prosseguir.

## Sumário

### Introdução

#### Primeiro passo: *Busca de sinônimos*

- na base *PubChem*
- na base *ChemSpider*

#### Segundo passo: *Busca por compostos químicos*

- na base *Patentscope*
- na base *Espacenet*

### Conclusão

## Introdução

**Busca específica em documentos de patente relacionados a compostos químicos:**

- ✓ **não deve ser focada apenas nos nomes comerciais;**
- ✓ **é importante utilizar os nomes das substâncias químicas e seus sinônimos;**
- ✓ **portanto, antes de iniciar a busca, deve-se levantar os vários sinônimos do composto.**

## Primeiro passo: *Busca de sinônimos*

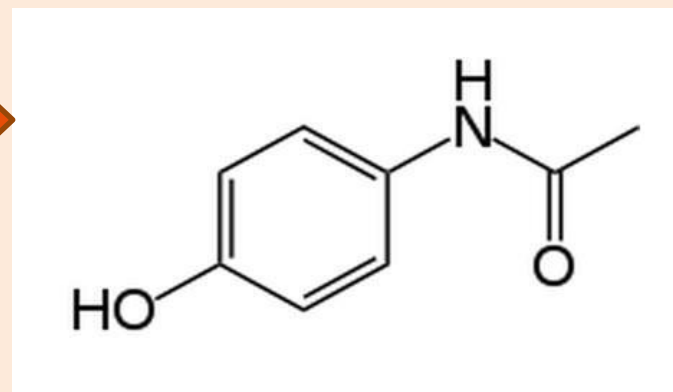
Existem diversas bases comerciais e gratuitas que podem ser consultadas para recuperar sinônimos.

Exemplos de bases gratuitas são:

The logo for PubChem, featuring the word 'Pub' in a grey sans-serif font, a blue hexagon containing a white 'C', and the word 'hem' in a grey sans-serif font.

The logo for ChemSpider, featuring the word 'ChemSpider' in a white sans-serif font on a blue rectangular background, with the tagline 'Search and share chemistry' in a smaller white font below it.

Para exemplificar, serão recuperados sinônimos para paracetamol, em duas bases gratuitas.



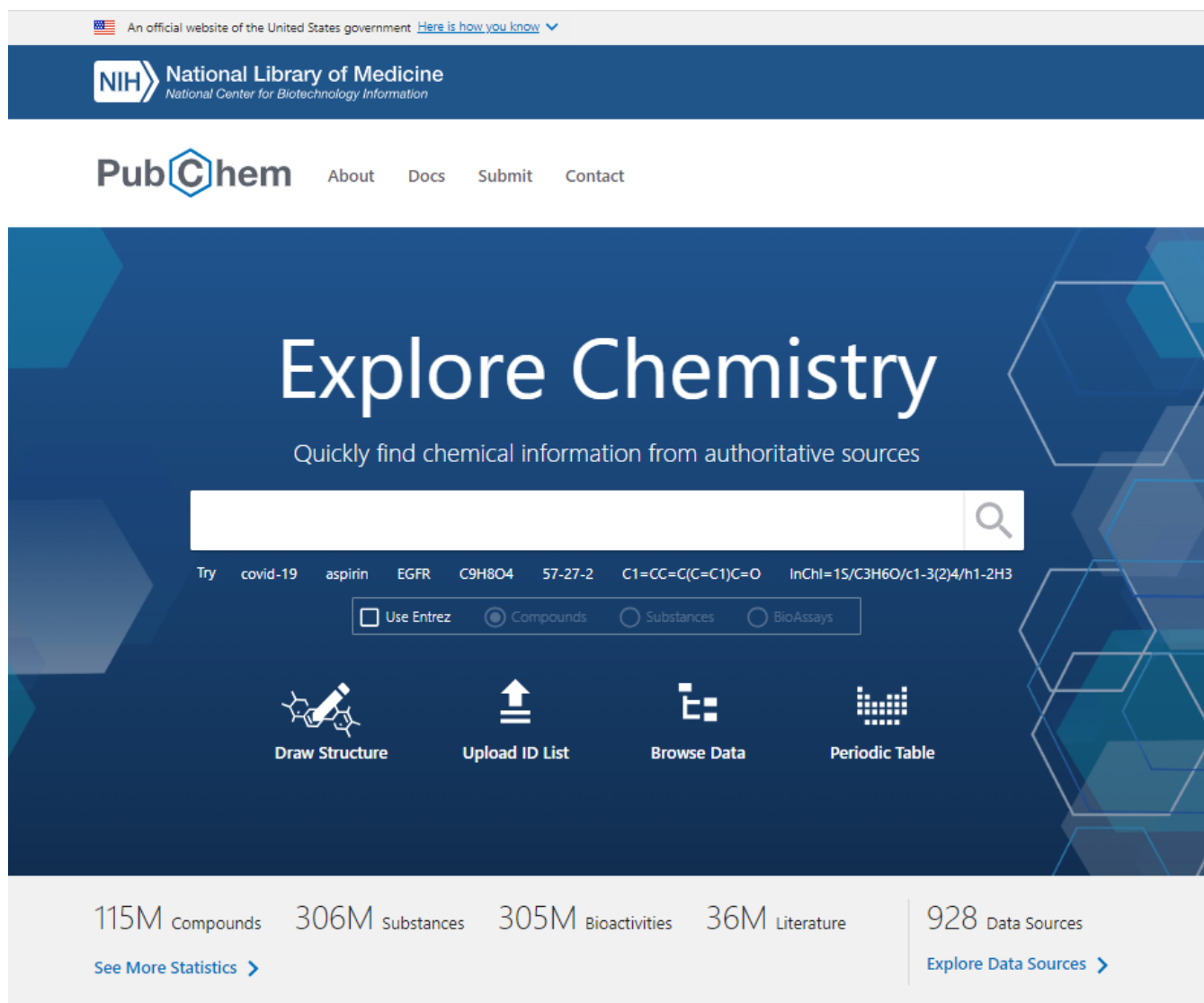
Fonte: <http://www.salud.es/paracetamol>

Busca de sinônimos na base *PubChem*

Pub  hem

Acessar <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

## Busca de sinônimos na base PubChem



An official website of the United States government [Here is how you know](#)

**NIH** National Library of Medicine  
National Center for Biotechnology Information





**PubChem** About Docs Submit Contact

# Explore Chemistry

Quickly find chemical information from authoritative sources

Try covid-19 aspirin EGFR C9H8O4 57-27-2 C1=CC=C(C=C1)C=O InChI=1S/C3H6O/c1-3(2)4/h1-2H3

Use Entrez  Compounds  Substances  BioAssays

 Draw Structure  Upload ID List  Browse Data  Periodic Table

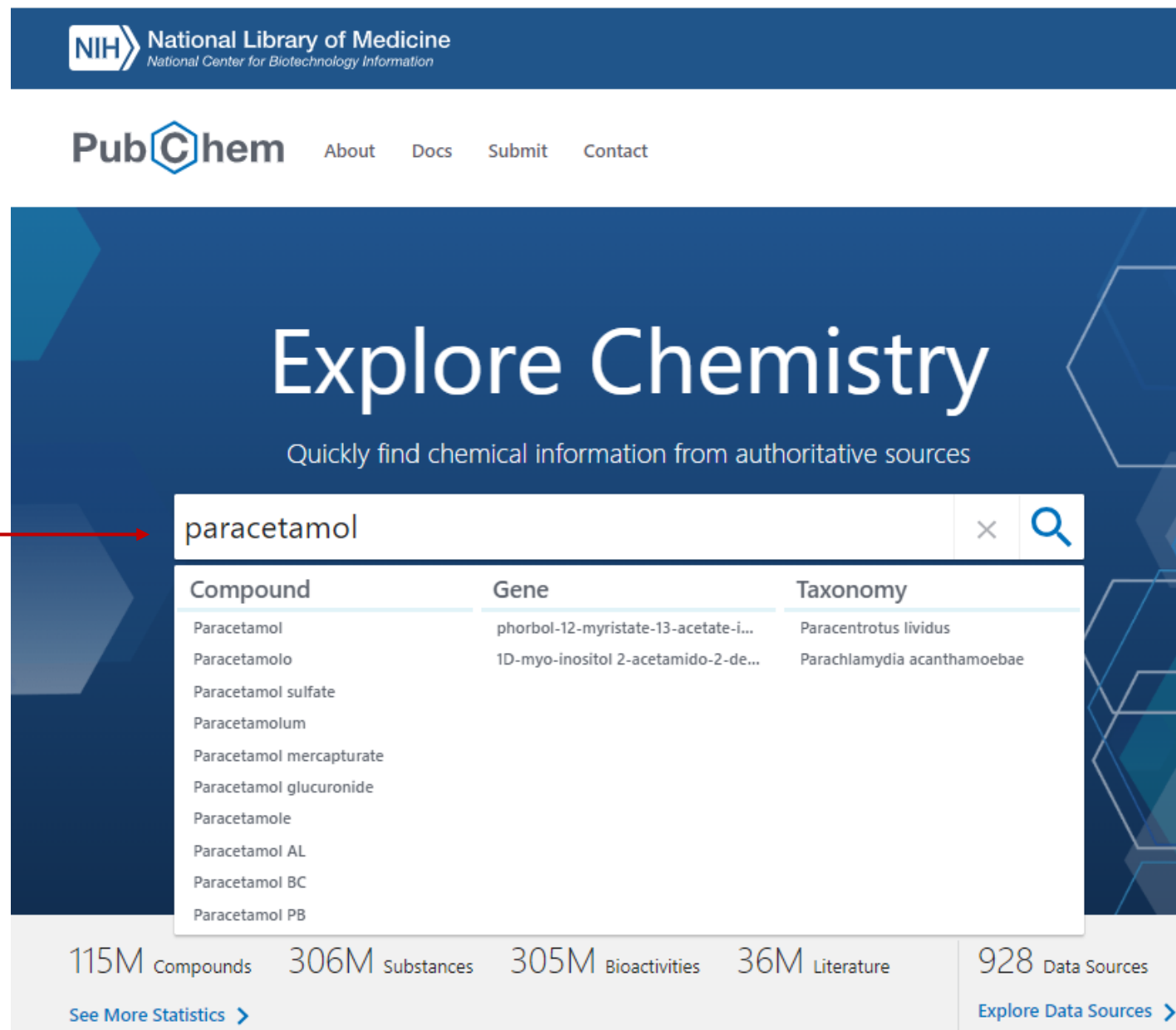
115M Compounds 306M Substances 305M Bioactivities 36M Literature 928 Data Sources

[See More Statistics >](#) [Explore Data Sources >](#)



## Busca de sinônimos na base *PubChem*

Realizar a pesquisa no campo “*Explore Chemistry*”, onde se encontra rapidamente informação química de fontes authoritative. Na aba “*Compound*”, aparece uma lista de nomes do composto ou o nome comercial, assim como os genes e a taxonomia.



NIH National Library of Medicine  
National Center for Biotechnology Information

PubChem About Docs Submit Contact

# Explore Chemistry

Quickly find chemical information from authoritative sources

paracetamol

Compound	Gene	Taxonomy
Paracetamol	phorbol-12-myristate-13-acetate-i...	Paracentrotus lividus
Paracetamolo	1D-myo-inositol 2-acetamido-2-de...	Parachlamydia acanthamoebae
Paracetamol sulfate		
Paracetamolium		
Paracetamol mercapturate		
Paracetamol glucuronide		
Paracetamole		
Paracetamol AL		
Paracetamol BC		
Paracetamol PB		

115M Compounds 306M Substances 305M Bioactivities 36M Literature 928 Data Sources

[See More Statistics >](#) [Explore Data Sources >](#)

## Busca de sinônimos na base PubChem

Os resultados podem ser apresentados em ordem de relevância (ou outras opções). Observar que o composto **paracetamol** aparece em primeiro lugar, seguido de seus derivados. Para acessar a ficha do composto, deve-se clicar no nome de interesse:

Foram encontrados 92 resultados.


PubChem About Docs Submit Contact

SEARCH FOR

Paracetamol

Treating this as a text search.

BEST MATCH

 **Acetaminophen; Paracetamol; 4-Acetamidophenol; 103-90-2; Tylenol; N-(4-Hydroxyphenyl)Acetamide; APAP; Panadol; ...**


Compound CID: 1983  
MF: C<sub>8</sub>H<sub>9</sub>NO<sub>2</sub> MW: 151.16g/mol  
IUPAC Name: N-(4-hydroxyphenyl)acetamide  
Isomeric SMILES: CC(=O)NC1=CC=C(C=C1)O  
InChIKey: RZVAJINKPMORJF-UHFFFAOYSA-N  
InChI: InChI=1S/C8H9NO2/c1-6(10)9-7-2-4-8(11)5-3-7/h2-5,11H,1H3,(H,9,10)  
Create Date: 2004-09-16

Summary Similar Structures Search Related Records PubMed (MeSH Keyword)

Compounds (92)	Substances (326)	BioAssays (411)	Literature (13,351)	Patents (1,652)
----------------	------------------	-----------------	---------------------	-----------------

Searching chemical names and synonyms including IUPAC names and InChIKeys across the compound collection. Note that annotations text from compound summary pages is not searched. [Read More...](#)

92 results Filters SORT BY Relevance

 **Acetaminophen; Paracetamol; 4-Acetamidophenol; 103-90-2; Tylenol; ...**

Compound CID: 1983  
MF: C<sub>8</sub>H<sub>9</sub>NO<sub>2</sub> MW: 151.16g/mol  
IUPAC Name: N-(4-hydroxyphenyl)acetamide  
Isomeric SMILES: CC(=O)NC1=CC=C(C=C1)O  
InChIKey: RZVAJINKPMORJF-UHFFFAOYSA-N  
InChI: InChI=1S/C8H9NO2/c1-6(10)9-7-2-4-8(11)5-3-7/h2-5,11H,1H3,(H,9,10)  
Create Date: 2004-09-16

Summary Similar Structures Search Related Records PubMed (MeSH Keyword)

Download

Search in Entrez

ACTIONS ON RESULTS WITH ID TYPE: Compounds

- Push to Entrez
- Save for Later
- Linked Data Sets

Outras informações deste composto: CID, nome IUPAC, SMILES isomérico, InChIKey, data da criação, etc.

## Busca de sinônimos na base PubChem

No sumário do composto **acetaminophen** (sinônimo do **paracetamol**), esta base disponibiliza diversas informações como: estrutura (2D, 3D ou Crystal), sinônimos, fórmula molecular, toxicidade, taxonomia, propriedades físico-químicas, descrição, informação espectral (etc) e até mesmo documentos de patente.

NIH National Library of Medicine  
National Center for Biotechnology Information

PubChem About Docs Submit Contact

Search PubChem

COMPOUND SUMMARY

### Acetaminophen

PubChem CID 1983

Structure

2D 3D Crystal

Chemical Safety

Irritant

Laboratory Chemical Safety Summary (LCSS) Datasheet

Molecular Formula

$C_8H_9NO_2$   
 $HOC_6H_4NHCOCH_3$

Synonyms

acetaminophen  
Paracetamol  
4-Acetamidophenol  
103-90-2  
Tylenol

View More...

Molecular Weight

151.16 g/mol  
Computed by PubChem 2.1 (PubChem release 2021.05.07)

Dates

Create: 2004-09-16 Modify: 2023-07-15

Description

4-hydroxyacetanilide is an odorless white crystalline solid. Bitter taste. pH (saturated aqueous solution) about 6. (NTP, 1992)

National Toxicology Program, Institute of Environmental Health Sciences, National Institutes of Health (NTP). 1992. National Toxicology Program Chemical Repository Database. Research Triangle Park, North Carolina.

CAMEO Chemicals

Paracetamol is a member of the class of phenols that is 4-aminophenol in which one of the hydrogens attached to the amino group has been replaced by an acetyl group. It has a role as a cyclooxygenase 2 inhibitor, a cyclooxygenase 1 inhibitor, a non-narcotic analgesic, an antipyretic, a non-steroidal anti-inflammatory drug, a cyclooxygenase 3 inhibitor, a xenobiotic, an environmental contaminant, a human blood serum metabolite, a hepatotoxic agent, a ferroptosis inducer and a geroprotector. It is a member of phenols and a member of acetamides. It is functionally related to a 4-aminophenol.

Cite Download

CONTENTS

- Title and Summary
- 1 Structures
- 2 Names and Identifiers
- 3 Chemical and Physical Properties
- 4 Spectral Information
- 5 Related Records
- 6 Chemical Vendors
- 7 Drug and Medication Information
- 8 Agrochemical Information
- 9 Pharmacology and Biochemistry
- 10 Use and Manufacturing
- 11 Identification
- 12 Safety and Hazards
- 13 Toxicity
- 14 Associated Disorders and Diseases
- 15 Literature
- 16 Patents
- 17 Interactions and Pathways
- 18 Biological Test Results
- 19 Taxonomy
- 20 Classification
- 21 Information Sources

## Busca de sinônimos na base PubChem

### 2.4.2 Depositor-Supplied Synonyms

acetaminophen	Acetaminofen	Acenol	Febrilix	Vermidon	Eneril	Tempra
Paracetamol	Datril	Anelix	Febrolin	Acephen	Fendon	Tralgon
4-Acetamidophenol	p-Hydroxyacetanilide	Multin	Gelocatil	Alpiny	Finimal	Valadol
103-90-2	Algotropyl	p-Acetaminophenol	Homoolan	Alvedon	Lestemp	Dirox
Tylenol	Lonarid	Abensanil	Liquagesic	Amadil	Lyteca	Hedex
N-(4-Hydroxyphenyl)acetamide	Naprinol	Acetagesic	Pyrinazine	Anaflon	Neopap	Tapar
APAP	p-Acetamidophenol	Acetalgin	Servigesic	Anhiba	Pacemo	Paracetamolo
Panadol	Doliprane	Biocetamol	Tabalgin	Apamide	Panets	Dafalgan
N-Acetyl-p-aminophenol	Injectapap	Clixodyne	Tussapap	Calpol	Paracet	Disprol
4'-Hydroxyacetanilide	Acamol	Febridol	Valgesic	Dymadon	Parmol	Dolprone

PubChem

Cite

Download

#### CONTENTS

Title and Summary

1 Structures

2 Names and Identifiers

3 Chemical and Physical Properties

4 Spectral Information

5 Related Records

6 Chemical Vendors

7 Drug and Medication Information

8 Agrochemical Information

No subitem 2.4.2 (*Depositor-Supplied Synonyms*) do conteúdo “*Nomes e Identificadores*” (nº 2), estão listados os sinônimos e outros descritores para o composto de interesse.

## Explore PubChem Documentation

Search Documents

### About

Learn about PubChem chemical database, browse or search the documentation and find PubChem staff contact information.

### Tutorials

This document provides step-by-step instructions on how to explore data contained in PubChem, along with examples of commonly requested tasks.

### COVID-19/SARS-CoV-2

A compiled list of PubChem data related to COVID-19 (Coronavirus Disease 2019) and SARS-CoV-2 (Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2).

### News

Recent news and announcements from PubChem.

### Publications

A list of recent publications by PubChem staff.

### Citation Guidelines

Learn how to cite PubChem database as well as individual records from PubChem.

### Data Organization

PubChem Data Organization: Data sources submit Substance and/or BioAssay records. PubChem derives Compound records from unique structures.

#### Compounds

PubChem Compound records are derived summaries that give users access to a rich set of related content. Compound records contain unique chemical structures extracted from contributed Substance records through standardization.

#### Compound vs Substance

PubChem users sometimes ask about the difference between a substance and a compound. The question is not surprising as the names "substance" and "compound" alone do not inherently convey the difference. In PubChem terminology, a substance is a chemical sample description provided by a single source and a compound is a normalized chemical structure representation found in one or more contributed substances.

#### Laboratory Chemical Safety Summary

The LCSS in PubChem contains pertinent chemical hazard and safety information. It is available when a GHS Classification (Globally Harmonized System of Classification and Labeling of Chemicals) is present for a given PubChem Compound record.

#### Substances

PubChem Substance is the primary archive for community-provided information about chemical entities. A Substance record can contain chemical structures, synonyms, registration IDs, descriptions, related URLs, patent identifiers, cross-references to PubMed, and biological screening results, etc.

Esta base disponibiliza tutoriais, clicando no menu superior "Docs".

## Busca de sinônimos na base ChemSpider



## ChemSpider

Search and share chemistry



For medical information relating to Covid-19, please consult the [World Health Organisation](#) or local healthcare provision.

Simple Structure Advanced History

## Search ChemSpider

Buscar o composto químico pelo nome, neste campo.

Matches any text strings used to describe a molecule.



Systematic Name, Synonym, Trade Name, Registry Number, SMILES, InChI or CSID ?

### What is ChemSpider?

ChemSpider is a free chemical structure database providing fast text and structure search access to over 100 million structures from hundreds of data sources.

### Search by chemical names

- Systematic names
- Synonyms
- Trade names
- Database identifiers

### Search by chemical structure

- Create structure-based queries
- Draw structures in the web page
- Use structure files from your computer

### Find important data

- Literature references
- Physical properties
- Interactive spectra
- Chemical suppliers



## Busca de sinônimos na base ChemSpider

Realizar a pesquisa na aba “Simple search”, utilizando o nome da substância, como abaixo, ou o nome comercial.



Home About us Web APIs Help Sign in

**ChemSpider**  
Search and share chemistry

Search ChemSpider

For medical information relating to Covid-19, please consult the [World Health Organisation](#) or local healthcare provision.

Simple Structure Advanced History

## Search ChemSpider



Matches any text strings used to describe a molecule.

paracetamol

- Paracetamol
- Paracetamol beta-D-glucuronide
- Paracetamol cysteine
- Paracetamol glucuronide

ChemSpider is a free chemical structure database providing fast text and structure search access to over 100 million structures from hundreds of data sources.

- Systematic names
- Synonyms
- Trade names
- Database identifiers

- Create structure-based queries
- Draw structures in the web page
- Use structure files from your computer

- Literature references
- Physical properties
- Interactive spectra
- Chemical suppliers



## Busca de sinônimos na base ChemSpider

Home About us Web APIs Help Sign in

**ChemSpider**  
Search and share chemistry

Search ChemSpider

Simple Structure Advanced History

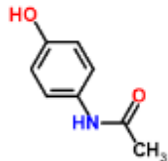
Matches any text strings used to describe a molecule.

Systematic Name, Synonym, Trade Name, Registry Number, SMILES, InChI or CSID ?

FILTER ▾ Search Hits Limit: 100 ▾

Found 1 result

Search term: Paracetamol (Found by approved synonym)

ID	Structure	Molecular Formula	Molecular Weight	# of Data Sources	# of References	# of PubMed	# of RSC
<a href="#">1906</a>		C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	151.1626	218	9539	14533	517

A ficha do composto contém diversas informações como: estrutura, fórmula molecular, etc.

Clicar para obter mais informações

## Busca de sinônimos na base ChemSpider

A ficha do composto contém diversas informações como: estrutura, fórmula molecular, nomes e sinônimos, propriedades físico-químicas, artigos, etc.

Home About us Web APIs Help Sign in

# ChemSpider

Search and share chemistry

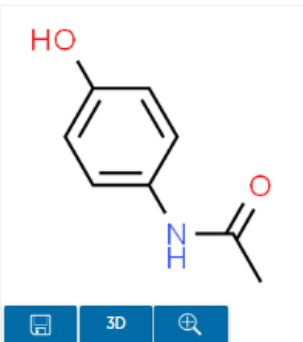
For medical information relating to Covid-19, please consult the [World Health Organisation](#) or local healthcare provision.

Simple Structure Advanced History

Found 1 result

Search term: **paracetamol** (Found by approved synonym)

[COMMENT ON THIS RECORD](#)



**Paracetamol**

Molecular Formula	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> NO
Average mass Da	151.163
Monoisotopic mass	151.063324 Da
ChemSpider ID	1906

[3D](#)

[More details:](#)

analgesic anti-inflammatory drug antipyretic [+ TAG](#)

[Names](#) [Properties](#) [Searches](#) [Spectra](#) [Vendors](#) [Articles](#) [More ▾](#)

- [Names and Synonyms](#)
- [Database ID\(s\)](#)

Validated by Experts, [Validated by Users](#), Non-Validated, [Removed by Users](#)

[Paracetamol](#) [\[BAN\]](#) [\[INN\]](#) [\[Wiki\]](#)

103-90-2 [\[RN\]](#)

200-659-6 [\[EINECS\]](#)

203-157-5 [\[EINECS\]](#)

[EDIT](#)

## Busca de sinônimos nas bases *PubChem* e *ChemSpider*

### Exemplos de sinônimos extraídos das bases *PubChem* e *ChemSpider*

- Paracetamol
- Tylenol
- Febrolin
- Dolgesic
- Nome IUPAC: N-(4-hydroxyphenyl)acetamide
- Acetamidophenol
- Acetaminophen
- Hydroxyacetanilide
- 4-(Acetylamino)phenol

## Segundo passo: *Busca por compostos químicos*

Existem diversas bases comerciais e gratuitas para a pesquisa de compostos químicos em documentos de patente.

Exemplos de bases de acesso gratuito:



## Busca por compostos químicos *na base Patentscope*



Recomenda-se consultar o tutorial específico (Módulo 4) desta base disponível no portal do INPI.

Acesso à base em <https://patentscope.wipo.int/search/pt/search.jsf>

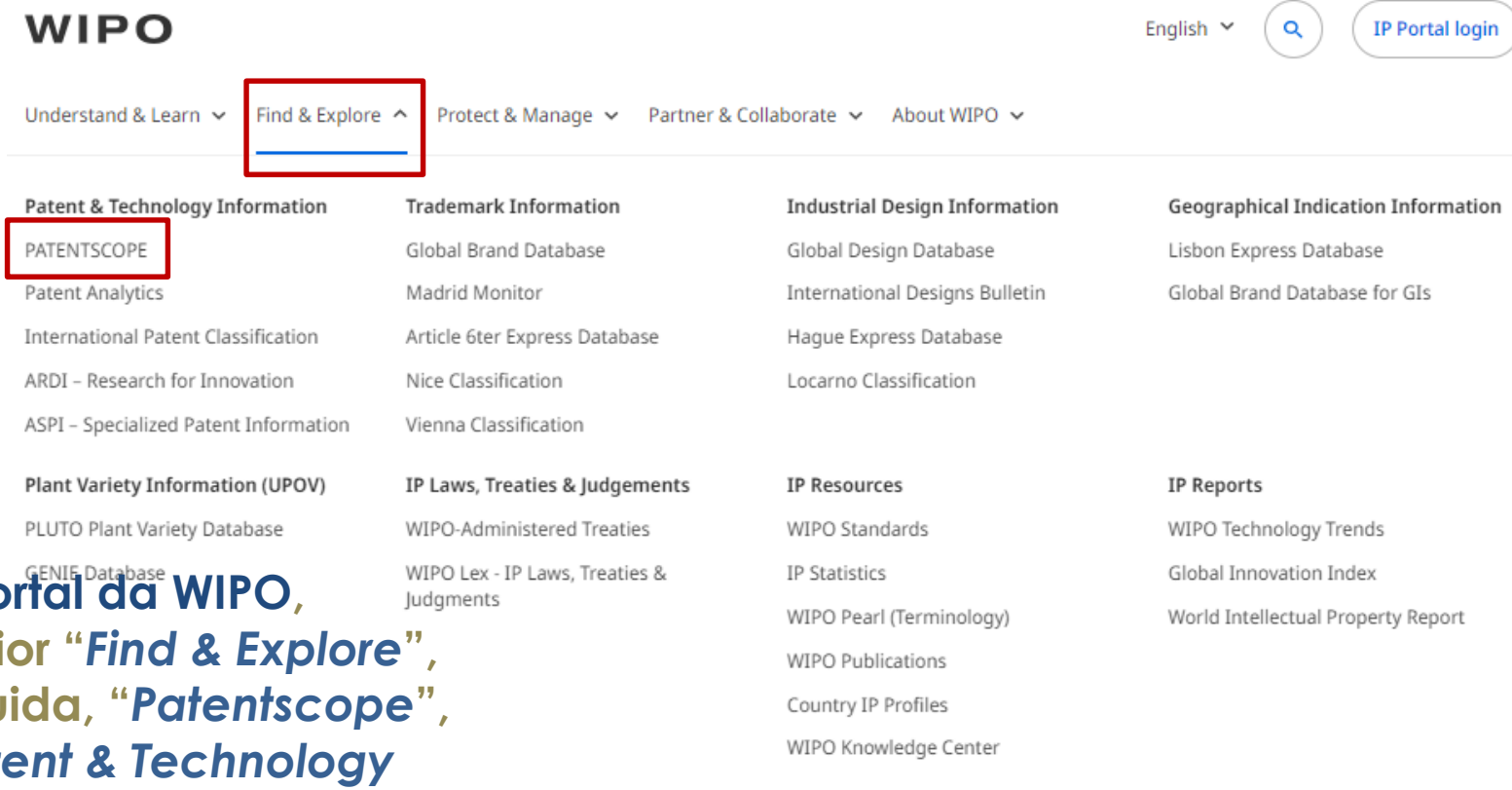
## Busca por compostos químicos na base *Patentscope*

A base *Patentscope* é administrada pela OMPI (Organização Mundial da Propriedade Intelectual ou WIPO, em inglês) e permite acesso gratuito a aproximadamente 112 milhões de documentos de patente das coleções de mais de 75 Estados-membros (países e organizações regionais), incluindo 4,7 milhões de pedidos de patente internacionais (PCT) publicados.

Na base *Patentscope*, a pesquisa pode ser feita em diversos campos, apresentação de resultados da busca em tabelas e elaboração de gráficos, permite a tradução do documento em diferentes línguas, fornece inventário de IPCs para tecnologias verdes, acesso à listagem de sequências dos pedidos via PCT, etc.

Um dos diferenciais desta base é permitir fazer a busca por compostos químicos (desde que logado na base).

## Busca por compostos químicos na base *Patentscope*



The screenshot shows the WIPO IP Portal homepage. At the top, the WIPO logo is on the left, and the language is set to English. A search icon and an 'IP Portal login' button are on the right. Below the header is a navigation bar with five main categories: 'Understand & Learn', 'Find & Explore', 'Protect & Manage', 'Partner & Collaborate', and 'About WIPO'. The 'Find & Explore' category is highlighted with a red box. Below this, a grid of sub-categories is displayed. The 'Patent & Technology Information' sub-category is highlighted with a red box, and a red arrow points to the 'PATENTSCOPE' link within it. Other sub-categories include Trademark Information, Industrial Design Information, Geographical Indication Information, Plant Variety Information (UPOV), IP Laws, Treaties & Judgements, IP Resources, and IP Reports.

Understand & Learn	Find & Explore	Protect & Manage	Partner & Collaborate	About WIPO
	<b>Patent &amp; Technology Information</b> <ul style="list-style-type: none"><li><b>PATENTSCOPE</b></li><li>Patent Analytics</li><li>International Patent Classification</li><li>ARDI – Research for Innovation</li><li>ASPI – Specialized Patent Information</li></ul>	<b>Trademark Information</b> <ul style="list-style-type: none"><li>Global Brand Database</li><li>Madrid Monitor</li><li>Article 6ter Express Database</li><li>Nice Classification</li><li>Vienna Classification</li></ul>	<b>Industrial Design Information</b> <ul style="list-style-type: none"><li>Global Design Database</li><li>International Designs Bulletin</li><li>Hague Express Database</li><li>Locarno Classification</li></ul>	<b>Geographical Indication Information</b> <ul style="list-style-type: none"><li>Lisbon Express Database</li><li>Global Brand Database for GIs</li></ul>
	<b>Plant Variety Information (UPOV)</b> <ul style="list-style-type: none"><li>PLUTO Plant Variety Database</li><li>GENIE Database</li></ul>	<b>IP Laws, Treaties &amp; Judgements</b> <ul style="list-style-type: none"><li>WIPO-Administered Treaties</li><li>WIPO Lex - IP Laws, Treaties &amp; Judgments</li></ul>	<b>IP Resources</b> <ul style="list-style-type: none"><li>WIPO Standards</li><li>IP Statistics</li><li>WIPO Pearl (Terminology)</li><li>WIPO Publications</li><li>Country IP Profiles</li><li>WIPO Knowledge Center</li></ul>	<b>IP Reports</b> <ul style="list-style-type: none"><li>WIPO Technology Trends</li><li>Global Innovation Index</li><li>World Intellectual Property Report</li></ul>

Na página inicial do portal da WIPO, procurar o menu superior “*Find & Explore*”, selecionando, em seguida, “*Patentscope*”, na lista de opções “*Patent & Technology Information*”.

[Find more IP tools in the IP Portal →](#)

Intellectual property is improving the lives of everyone, everywhere

Creators and innovators worldwide use IP to translate their ideas into assets. These properties create economic and social benefits that improve the lives of people everywhere.

## Busca por compostos químicos na base Patentscope

Acesso à base  
Patentscope

WIPO

English ▾



IP Portal login

Understand & Learn ▾ Find & Explore ▾ Protect & Manage ▾ Partner & Collaborate ▾ About WIPO ▾

Home > PATENTSCOPE

### PATENTSCOPE

The PATENTSCOPE database provides access to:

- published International PCT applications in full-text on the day of publication
- patent documents from participating national and regional offices
- non-patent literature

For your patent searches, you can use a variety of search criterias such as keywords, IPC, chemical compounds, numbers and many more in different languages. Find out more by:

- watching the short tips & tricks videos
- attending free of charge webinars
- doing practical exercises online and/or in the booklet [PDF](#) (check the answers [PDF](#))
- reading the User's Guide

[Access PATENTSCOPE](#)



## ÂMBITO DE APLICAÇÃO DAS PATENTES (wipo.int) ou OMPI - Pesquisa de Coleções Internacionais e Nacionais de Patentes (wipo.int)

### News

All news

[Polish Now Available in WIPO Translate in PATENTSCOPE!](#)

June 15, 2023

[Full-text Documents of the Philippines Now Searchable in PATENTSCOPE](#)

April 20, 2023

[Asian Language Translations in PATENTSCOPE](#)

April 5, 2023



### WIPO Translate – Instant Patent Translation

WIPO Translate uses cutting-edge translation technology to produce translations of patent documents with an unprecedented level of accuracy.



## Busca por compostos químicos na base Patentscope

WIPO

IP Portal

Ajuda ▾ Português ▾ [Conexão ao Portal de PI](#)

Página inicial > PATENTSCOPE > Pesquisa

Comentários **Pesquisa** ▾ Navegação ▾ Ferramentas ▾ Configurações

Pesquisa simples

Pesquisa avançada

Combinação de campos

Expansão multilíngue

**Compostos químicos [login necessário]**

PATENTSCOPE Pesquisa sim

O PATENTSCOPE permite fazer consultas em 112 milhões de documentos internacionais (PCT) publicados. [Informações pormenorizadas sobre](#)

A publicação do PCT 28/2023 (13.07.2023) já se encontra disponível a 20.07.2023. [Mais](#)

Confira as [últimas notícias e recursos do PATENTSCOPE](#)

Bate-papo ao vivo do PATENTSCOPE : toda Segunda-feira de 1:00 PM a 5:00 PM CET

Campo  
Página de cobertura ▾

Pesquisar termos... 🔍

Exemplos de consultas

Para fazer a “Busca por compostos químicos” é necessário estar logado, na base Patentscope.

## Busca por compostos químicos na base *Patentscope*

Ajuda ▾ Português ▾

Para isso, o usuário interessado deve se cadastrar gratuitamente na base, criando um login e senha de acesso.

Página inicial > Login

### Bem-vindo(a) à OMPI

Utilize o login da sua conta OMPI para ter acesso aos serviços de PI online

Nome de login  
CristianeGorgulho

Senha  
.....

Conectar

[Criar uma conta de usuário OMPI](#)

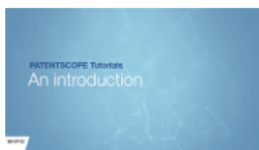
[Esqueceu seu nome de login?](#) [Esqueceu sua senha?](#)

## Busca por compostos químicos na base *Patentscope*

### TUTORIALS

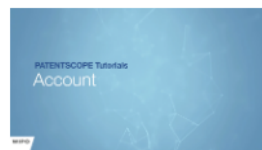
#### AN INTRODUCTION

What is PATENTSCOPE, what is included in its database and how to access it.



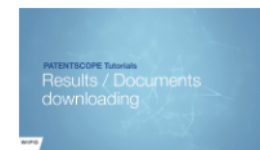
#### ACCOUNT

How to create a WIPO account and the benefits of such an account.



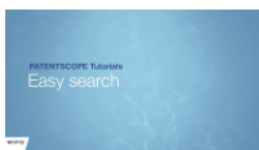
#### RESULTS / DOCUMENTS DOWNLOADING

How to download individual documents and the result list.



#### EASY SEARCH

Search by keyword, number, inventor/company name...



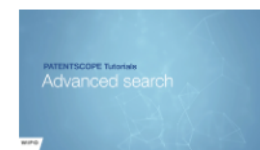
#### FIELD COMBINATION

How to use and combine many predefined fields to build more complex queries.



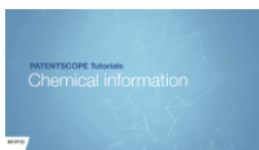
#### ADVANCED SEARCH

How to use search fields, operators and criteria to build advanced queries from scratch.



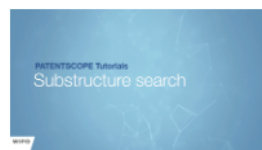
#### CHEMICAL INFORMATION

How to search for chemical information.



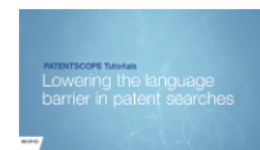
#### SUBSTRUCTURE SEARCH

How to use the chemical search feature to search for substructure information.



#### LOWERING THE LANGUAGE BARRIER IN PATENT SEARCHES

How to use CLIR to add synonyms and their translations to your query in order to search in collections disclosed in a foreign language.

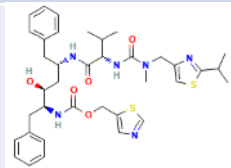


Esta base fornece tutoriais (em inglês), que mostram como fazer a **“Busca de informação química”** e a **“Busca de subestrutura”**.

## Busca por compostos químicos na base *Patentscope*

*A busca por compostos químicos pela base Patentscope possui parâmetros e algumas limitações, que são mostrados na tabela a seguir.*

**Tabela 1: Exemplos de parâmetros de busca para substâncias farmacêuticas**

Parâmetro de Busca	Exemplo	Explicação
Nome do Fabricante	Abbott Laboratories	Durante a etapa de pesquisa e desenvolvimento (P&D), uma substância é identificada no laboratório ou em publicações por um código (uma combinação de letras e números). Do Norvir é ABT-538.
INN (nome genérico)	<b>Ritonavir</b>	Cada substância farmacêutica é identificada por um nome designado único e universalmente disponível. É a Denominação Comum Internacional deste fármaco.
Marca	<b>Norvir®</b>	Uma vez que um fármaco recebe autorização para comercialização, ele é comercializado com a marca registrada.
Nome químico IUPAC	Ver <b>2</b> abaixo	A União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC) estabelece padrões para a denominação dos elementos e compostos químicos de uma maneira estruturada.
CAS Registry Number	155213-67-5	Após publicação de literaturas e patentes químicas, o Chemical Abstracts Service (CAS) atribui um único identificador numérico para um composto recém publicado. <sup>1</sup>
International Patent Classification (IPC)	A61P 31/18	Embora códigos IPC não identifiquem uma substância particular, um código pode ser usado com outros parâmetros de busca para reduzir o resultado da busca.
Fórmula molecular	C <sub>37</sub> H <sub>48</sub> N <sub>6</sub> O <sub>5</sub> S <sub>2</sub>	Essa fórmula química mostra o número e tipos de átomos na molécula.
Estrutura Química (fórmula gráfica)		Diversos serviços comerciais oferecem bases de patentes que permitem a busca de compostos pela estrutura química, além das palavras-chave (nomes) e códigos de classificação. Eles usam várias regras de indexação para poder buscar também compostos químicos descritos em uma Markush.

<sup>1</sup> Enquanto há outras organizações que atribuem identificadores para compostos químicos, o número de registro CAS é um dos códigos mais amplamente usados pelos experts no campo da química. Fonte: [http://www.wipo.int/wipo\\_magazine/en/2016/06/article\\_0005.html](http://www.wipo.int/wipo_magazine/en/2016/06/article_0005.html)

<sup>2</sup> Nome IUPAC: 1,3-thiazol-5-ylmethyl N-[(2S,3S,5S)-3-hydroxy-5-[[[(2S)-3-methyl-2-[[methyl-[(2-propan-2-yl-1,3-thiazol-4-yl)methyl]carbamoyl]amino]butanoyl]amino]-1,6-diphenylhexan-2-yl]carbamate

## Busca por compostos químicos na base Patentscope

The screenshot shows the WIPO Patentscope search interface. At the top, there is a navigation bar with the WIPO logo, an IP Portal button, and dropdown menus for Help, English, and user information (Cristiane Fernandes Gorgulho). Below this is a breadcrumb trail: Home > PATENTSCOPE > Search. The main search area features a large search bar containing the text "PATENTSCOPE Chemical compounds search". Below the search bar are two tabs: "Convertir a estrutura" and "Editor de estrutura". Under "Convertir a estrutura", there are buttons for "Convert structure", "Upload structure", and "Structure editor". Under "Editor de estrutura", there are buttons for "Found compounds" and "Found Markush Formulas". To the left of the search bar is a "Tipos de busca" section with a "Search type" dropdown menu set to "Compound name". Below this is a list of search criteria: "Compound name" (e.g., 4-[5-[Bis[2-chloroethyl]amino]-1-methyl-1H-benzimidazol-2-), "InChI" (e.g., InChI=1S/C18H15N2O.C1H/c1-20[2]13-8-9-15-17[11-13]21-16-10-7-12-5-3-4-6-), and "SMILES" (e.g., CC[=O]OC1=CC=CC=C1C[=O]O). A red arrow points from the search input field to a text box that says "Type an accepted name, commercial name, CAS name, IUPAC name". Below the search bar is a section for "Organizações de PI: todas" with a dropdown menu set to "Offices All". At the bottom of the interface are three buttons: "Reset", "Show in editor", and "Exact Structure Search".

**Convertir a estrutura**

**Editor de estrutura**

**Tipos de busca**

**Upload da estrutura**

**Organizações de PI: todas**

**Neste campo, deve-se inserir algum nome aceito para o fármaco (nome comercial, nome CAS ou o nome IUPAC), etc**

## Busca por compostos químicos na base Patentscope

### Exemplo de busca: Paracetamol

Feedback Search ▾ Browse ▾ Tools ▾ Settings

PATENTSCOPE Chemical compounds search ▾

Está assinalado **“Convert structure”**

**Convert structure** Upload structure Structure editor Found compounds Found Markush Formulas

Search type **“nome do composto”** Type an accepted name, commercial name, CAS name, IUPAC name

Compound name **paracetamol** **Inserir o nome do fármaco “Paracetamol”**

**É possível buscar pela estrutura, se desejar**

Search for scaffold **Também é possível incluir, na busca, as estruturas Markush enumeradas.**

Include enumerated Markush structures

Offices All

Reset Show in editor **Exact Structure Search**

**OBS:** Ao clicar nesta opção (*scaffold*), reduz a busca a uma parte fixa do composto químico.

Clicar em **“buscar estrutura exata”**



## Busca por compostos químicos na base Patentscope

WIPO

IP Portal

Help

English



Cristiane Fernandes Gorgulho

Home > PATENTSCOPE > Search

### Sintaxe de busca

CHEM:(RZVAJINKPMORJF-UHFFFAOYSA-N)

Se aparecer documentos em idiomas desconhecidos, pode usar a ferramenta de tradução da base.

Esta busca encontrou 94.031 documentos de patente, onde aparece o nome "paracetamol".

94,031 results

Offices all

Languages en

Stemming true

Single Family Member false

Include NPL false

Sort: Relevance

Per page: 10

View: All

1 / 9,404

Download

Machine translation

1. [2000510104](#) 味感遮蔽パラセタモール組成物

JP - 08.08.2000

Int.Class [A61K 31/165](#) Appl.No 1997537517 Applicant Inventor ルーカス, ステファン

2. [103012186](#) 一种用吸附树脂从精母液中回收扑热息痛的方法

CN - 03.04.2013

Int.Class [C07C 233/25](#) Appl.No 201210566903.7 Applicant 西安蓝晓科技新材料股份有限公司 Inventor 郭福民

本发明公开了一种用吸附树脂从生产扑热息痛精母液里回收扑热息痛的方法,包括下述步骤:a、扑热息痛精制工序中产生的精母液以0.1-30BV/h的速度通过大孔吸附树脂来富集精母液中的扑热息痛,直至吸附饱和;b、用醋酸溶液以0.1-30BV/h的流速对步骤a中吸附饱和的大孔吸附树脂进行解析;c、将步骤b中所得的解析液通过干燥、结晶后得到的白色固体即为扑热息痛。该方法具有降低能耗,工艺简单,操作容易,回收率高的优点。

3. [WO/1997/039747](#) TASTE MASKED **PARACETAMOL** COMPOSITIONS

WO - 30.10.1997

Int.Class [A61K 9/50](#) Appl.No PCT/AU1997/000248 Applicant F. H. FAULDING & CO. LIMITED Inventor LUKAS, Stefan

The present invention relates to a paracetamol composition, in particular to a taste masked paracetamol composition capable of sustained release or immediate release having improved release characteristics and coating characteristics, and having less than 23 % by weight ethyl cellulose. The present invention also includes a method of preparing such a composition preferably incorporating a spray drying technique. Accordingly, in a first aspect of the invention there is provided a taste masked paracetamol composition capable of sustained release and/or immediate release including a core element including paracetamol and a coating material including ethyl cellulose of less than 23 % by weight of the total weight of the composition wherein said ethyl cellulose provides a substantially continuous coating on the core element. In a further preferred aspect of the present invention, there is provided a taste masked paracetamol composition capable of sustained release and/or immediate release including a core element including paracetamol and a coating material including ethyl cellulose of less than 23 % by weight of the total weight of the composition, and wherein the core element is selected for a size in the range of 1 µm to 250 µm and shape having a low aspect ratio which facilitates coating and wherein said coating provides a continuous coating on the core element.

Lista de resultados desta busca



## Busca por compostos químicos na base Patentscope

Home > PATENTSCOPE > Search

**WIPO TRANSLATE** This text has been automatically translated using WIPO Translate© and is provided for convenience purposes only. Automated text translation may contain errors. WIPO bears no responsibility for the accuracy and quality of the translation provided. [SHOW ORIGINAL](#)

### Mensagem da tradução automática da base

CHEM:(RZVAJINKPMORJF-UHFFFAOYSA-N)

94,031 results Offices all Languages en Stemming true Single Family Member false Include NPL false

Sort: Relevance Per page: 10 View: All 1 / 9,404 Download

Na lista com dados bibliográficos traduzidos para o português, aparece "paracetamol", nos documentos encontrados nesta busca.

- 2000510104** COMPOSIÇÃO DE PARSETUOL DE BLINDAGEM SENSÍVEL AO SABOR JP - 08.08.2000  
Int.Class **A61K 31/185** Appl.No 1997537517 Applicant Inventor ルーカス, ステファン
- 103012186** DESCRIÇÃO "MÉTODO PARA A RECUPERAÇÃO DE PARACETAMOL A PARTIR DE LICOR-MÃE REFINADO UTILIZANDO RESINA DE ADSORÇÃO" A INVENÇÃO REFERE-SE A UM MÉTODO PARA A RECUPERAÇÃO DE PARACETAMOL A PARTIR DE LICOR-MÃE REFINADO USANDO RESINA DE ADSORÇÃO CN - 03.04.2013  
Int.Class **C07D 233/25** Appl.No 201210568903.7 Applicant 西安蓝晓科技新材料股份有限公司 Inventor 郭福民  
A invenção divulga o lote principal para a produção de paracetamol a partir da resina de adsorção líquida A invenção divulga um método para a recuperação de paracetamol pela recuperação de paracetamol o método compreende os seguintes passos e a, o licor-mãe refinado gerado no processo de refinação de paracetamol é 0,1-30 BV/h é enriquecido com resina através de resina de adsorção macroporosa; e realizar a saturação de adsorção até que a adsorção esteja saturada e b. utilizando uma solução de ácido acético para 0,1-30 BV/h, e a resina de adsorção macroporosa saturada de adsorção no passo a é analisada e c, secar a solução de desorção obtida no passo b através de secagem O sólido branco obtido após a cristalização é paracetamol o método tem as vantagens de redução do consumo de energia, processo simples, fácil operação e alta taxa de recuperação
- WO/1997/039747** COMPOSIÇÕES DE PARACETAMOL MASCARADAS COM SABOR WO - 30.10.1997  
Int.Class **A61K 9/50** Appl.No PCT/AU1997/000248 Applicant F. H. FAULDING & CO. LIMITED Inventor LUKAS, Stefan  
A presente invenção refere-se a uma composição de paracetamol, em particular a uma composição de paracetamol com gosto mascarado capaz de liberação prolongada ou liberação imediata tendo características de liberação e características de revestimento melhoradas tendo menos de 23% em peso de etilcelulose. A presente invenção também inclui um método de preparação de tal composição preferencialmente incorporando uma técnica de secagem por pulverização. Consequentemente, em um primeiro aspecto da invenção é apresentado um sabor mascarado de paracetamol capaz de liberação sustentada e/ou liberação imediata compreendendo um elemento de núcleo incluindo paracetamol e um material de revestimento incluindo etila celulose de menos de 23% em peso do peso total da composição em que a referida etilcelulose fornece um revestimento substancialmente contínuo no elemento de núcleo. Em um aspecto preferencial adicional da presente invenção, é provida uma composição de paracetamol com gosto mascarado capaz de liberação sustentada e/ou liberação imediata compreendendo um elemento de núcleo incluindo paracetamol e um material de revestimento incluindo etilcelulose de menos de 23% em peso do peso total da composição, e em que o elemento do núcleo é selecionado para tamanho na faixa de 1 µm a 250 µm e forma com baixa relação de aspeto que facilita o revestimento e em que o referido revestimento proporciona um revestimento contínuo no elemento de núcleo.
- 115844840** COMPRIMIDO PARACETAMOL E MÉTODO DE PREPARAÇÃO PARA O MESMO CN - 28.03.2023  
Int.Class **A61K 9/20** Appl.No 202211585180.1 Applicant 国药集团广东环球制药有限公司 Inventor 梁标志  
A invenção divulga um comprimido de acetaminofeno e um método de preparação do mesmo, e pertence ao campo técnico de preparação de preparações farmacêuticas O comprimido de acetaminofeno compreende 86,88 partes de acetaminofeno 4,52 partes de um adesivo, 2,90 partes de um agente desintegrante, 5,21 partes de uma carga e 0,49 parte de um lubrificante a fórmula do comprimido de acetaminofeno é melhorada e a variedade e dosagem de materiais auxiliares são reduzidas em combinação com um processo de preparação especial A proporção do fármaco principal é elevada, entretanto, o processo de preparação é simples, e o custo de produção é baixo A produção segura é conseguida, e a água em ebulição ou a suspensão de solvente orgânico não é necessária O grau mecânico é elevado, o método é adequado para a produção industrial, e o problema de que os comprimidos de acetaminofeno são fracos na compressibilidade são resolvidos O comprimido de acetaminofeno preparado é pequeno em peso, e o custo de gestão e inspeção de materiais auxiliares pode ser reduzido a extensão máxima A complacência da medicação para um paciente é melhorada, a qualidade do produto é estável, a dissolução está completa, e a qualidade é consistente com a de um agente de desenvolvimento original não contém um tensoativo, e de acordo com os requisitos da supervisão do fármaco nacional e da bureau de administração para avaliar a ausência da consistência da medicina de imitação

## Busca por compostos químicos na base *Patentscope*

Feedback Search ▾ Browse ▾ Tools ▾ Settings

**PATENTSCOPE Chemical compounds search** ▾

**Convert structure** Upload structure Structure editor Found compounds Found Markush Formulas

**Nome do composto** Search type  
Compound name

Type an accepted name, commercial name, CAS name, IUPAC name  
**paracetamol**

Search for scaffold

Include enumerated Markush structures

Offices  
All

Reset **Show in editor** Exact Structure Search


Clicar em “*mostrar no editor*”

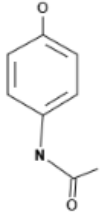
## Busca por compostos químicos na base Patentscope

Feedback Search Browse Tools Settings

PATENTSCOPE Chemical compounds search

Convert structure Upload structure **Structure editor** Found compounds Found Markush Formulas



 **Estrutura do paracetamol**

**Informações da molécula**

InChI: InChI=1S/C8H9NO2/c1-8[10]9-7-2-4-8(11)5-3-7/h2-5,11H,1H3,[H,9,10]  
InChiKey: RZVAJINKPMORJF-UHFFFAOYSA-N  
Molecular Formula: C8H9NO2  
Molecular Weight: 151.1649 g/mol

Search for scaffold

Include enumerated Markush structures

Offices  
All

**Clicar em "buscar subestrutura"**

Reset Markush Search **Substructure Search** Exact Structure Search Evaluate

## Busca por compostos químicos na base Patentscope

PATENTSCOPE Chemical compounds search

Convert structure Upload structure

Structure editor

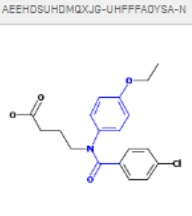
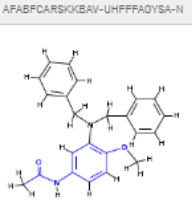
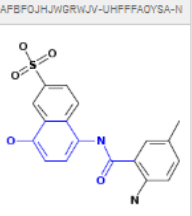
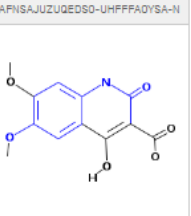
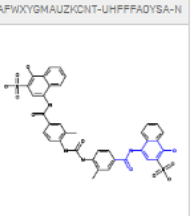
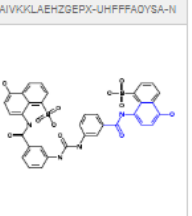
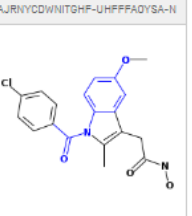
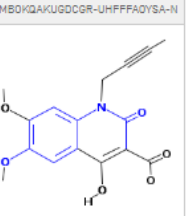
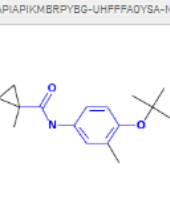
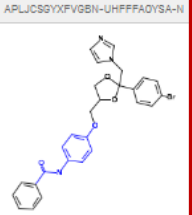
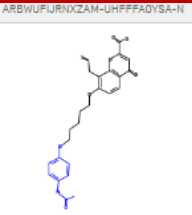
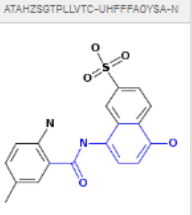
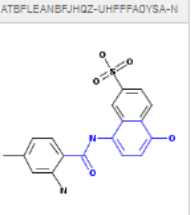
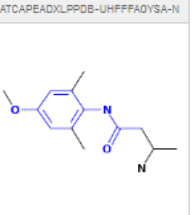
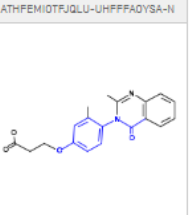
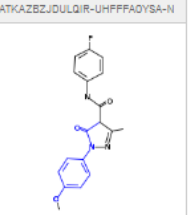
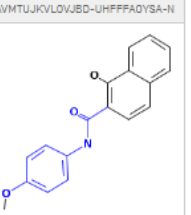
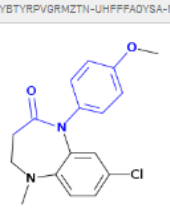
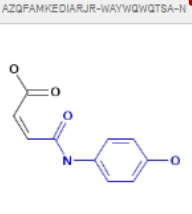
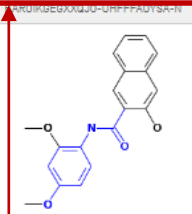
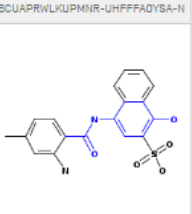
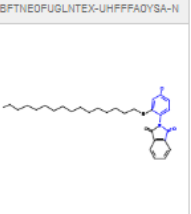
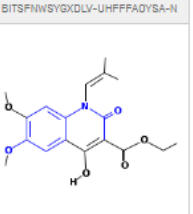
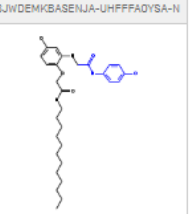



Found compounds

Find Markups Formulas

### Resultados da busca de subestruturas do paracetamol

Substructure search results [48222 + 27.0196]

[1 of 2010] 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 24

[1 of 2010] 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 24

Offices  
All

Ao clicar em uma das subestruturas...

Reset

Clear all

Select all

Search

## Busca por compostos químicos na base *Patentscope*

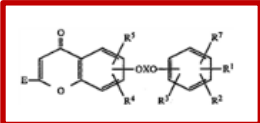
Home > PATENTSCOPE > Search

Feedback Search ▾ Browse ▾ Tools ▾ Settings

### 1. US4213903 - BASIC AMINO ACID SALTS OF CHROMONES

National Biblio. Data Description Claims Drawings Patent Family Compounds Markush Documents

PermaLink Machine translation ▾

<b>Office</b> United States of America	<b>Title</b> [EN] Basic amino acid salts of chromones	
<b>Application Number</b> 05889853	<b>Abstract</b> [EN] The present invention relates to salts with basic amino sugars or basic amino acids of certain 2-carboxy or 2-tetrazolo-chromones.	
<b>Application Date</b> 18.01.1978	<b>Related patent documents</b> <a href="#">CA1100952</a>	
<b>Publication Number</b> 4213903		
<b>Publication Date</b> 22.07.1980		
<b>Grant Number</b> 4213903		
<b>Grant Date</b> 22.07.1980		
<b>Publication Kind</b> A		
<b>IPC</b> <a href="#">C07D 311/00</a> <a href="#">C07D 311/28</a>		
<b>CPC</b> <a href="#">C07D 311/28</a>		
<b>Applicants</b> Fisons Limited		
<b>Inventors</b> Bantick John R. Hardern David N. Lee Thomas B.		
<b>Agents</b> Merriam, Marshall & Bicknell		
<b>Priority Data</b> <a href="#">308177.2B,01.1977.GB</a>		

Dados bibliográficos do documento US que contem a subestrutura selecionada, segundo a base.

## Busca por compostos químicos na base *Patentscope*

Busca que utiliza o nome IUPAC do paracetamol: *N-(4-hydroxyphenyl)acetamide*

Feedback Search ▾ Browse ▾ Tools ▾ Settings

PATENTSCOPE Chemical compounds search ▾

Convert structure Upload structure Structure editor Found compounds Found Markush Formulas

Search type  
Compound name

Type an accepted name, commercial name, CAS name, IUPAC name  
N-(4-hydroxyphenyl)acetamide

Search for scaffold

Include enumerated Markush structures

Offices  
All

Clicar em “*buscar estrutura exata*”

Reset Show in editor Exact Structure Search



## Busca por compostos químicos na base Patentscope

Foi feita a tradução dos dados bibliográficos dos documentos encontrados nesta busca

WIPO TRANSLATE This text has been automatically translated using WIPO Translate© and is provided for convenience purposes only. Automated text translation may contain errors. WIPO bears no responsibility for the accuracy and quality of the translation provided. SHOW ORIGINAL

Feedback Search Browse Tools Settings

CHEM:(RZVAJINKPMORJF-UHFFFAOYSA-N)

94,031 results Offices all Languages en Stemming true Single Family Member false Include NPL false

Sort: Relevance Per page: 10 View: All 1/9,404 Download

- 2000510104** COMPOSIÇÃO DE PARSETUOL DE BLINDAGEM SENSÍVEL AO SABOR JP - 08.08.2000  
Int.Class [A61K 31/165](#) Appl.No 1997537517 Applicant Inventor ルーカス, ステファン
- 103012186** DESCRIÇÃO "MÉTODO PARA A RECUPERAÇÃO DE PARACETAMOL A PARTIR DE LICOR-MÃE REFINADO UTILIZANDO RESINA DE ADSORÇÃO" A INVENÇÃO REFERE-SE A UM MÉTODO PARA A RECUPERAÇÃO DE PARACETAMOL A PARTIR DE LICOR-MÃE REFINADO USANDO RESINA DE ADSORÇÃO CN - 03.04.2013  
Int.Class [C07C 233/25](#) Appl.No 201210566903.7 Applicant 西安蓝晓科技新材料股份有限公司 Inventor 郭福民  
A invenção divulga o lote principal para a produção de paracetamol a partir da resina de adsorção líquida A invenção divulga um método para a recuperação de paracetamol pela recuperação de paracetamol o método compreende os seguintes passos e a, o licor-mãe refinado gerado no processo de refinação de paracetamol é 0,1-30 BV/h e enriquecido com resina através de resina de adsorção macroporosa; e realizar a saturação de adsorção até que a adsorção esteja saturada e b. utilizando uma solução de ácido acético para 0,1-30 BV/h, e a resina de adsorção macroporosa saturada de adsorção no passo a é analisada e c, secar a solução de dessorção obtida no passo b através de secagem O sólido branco obtido após a cristalização é paracetamol o método tem as vantagens de redução do consumo de energia, processo simples, fácil operação e alta taxa de recuperação
- WO/1997/039747** COMPOSIÇÕES DE PARACETAMOL MASCARADAS COM SABOR WO - 30.10.1997  
Int.Class [A61K 9/50](#) Appl.No PCT/AU1997/000248 Applicant F. H. FAULDING & CO. LIMITED Inventor LUKAS, Stefan  
A presente invenção refere-se a uma composição de paracetamol, em particular a uma composição de paracetamol com gosto mascarado capaz de liberação prolongada ou liberação imediata tendo características de liberação e características de revestimento melhoradas tendo menos de 23% em peso de etilcelulose. A presente invenção também inclui um método de preparação de tal composição preferencialmente incorporando uma técnica de secagem por pulverização. Consequentemente, em um primeiro aspecto da invenção é apresentado um sabor mascarado de paracetamol capaz de liberação sustentada e/ou liberação imediata compreendendo um elemento de núcleo incluindo paracetamol e um material de revestimento incluindo etila celulose de menos de 23% em peso do peso total da composição em que a referida etilcelulose fornece um revestimento substancialmente contínuo no elemento de núcleo. Em um aspecto preferencial adicional da presente invenção, é provida uma composição de paracetamol com gosto mascarado capaz de liberação sustentada e/ou liberação imediata compreendendo um elemento de núcleo incluindo paracetamol e um material de revestimento incluindo etilcelulose de menos de 23% em peso do peso total da composição, e em que o elemento do núcleo é selecionado para tamanho na faixa de 1 µm a 250 µm e forma com baixa relação de aspeto que facilita o revestimento e em que o referido o revestimento proporciona um revestimento contínuo no elemento de núcleo.

Foram encontrados **94.031 resultados**, fazendo a busca pelo nome IUPAC do **paracetamol**.

## Busca por compostos químicos *na base Espacenet*



Recomenda-se consultar o tutorial específico (Módulo 3) desta base disponível no portal do INPI para aprender a fazer busca com ela.



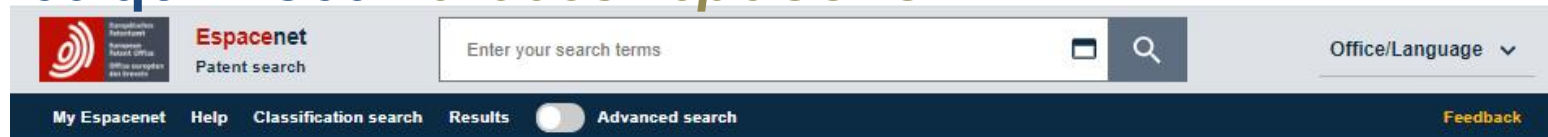
## *Busca por compostos químicos na base Espacenet*

A base *Espacenet* é administrada pelo EPO (*European Patent Office* ou Escritório Europeu de Patentes) e permite acesso gratuito a mais de 140 milhões de documentos de patente das coleções de mais de 100 Estados-membros (países e organizações regionais).

Na base *Espacenet* a pesquisa pode ser feita em diversos campos, pode apresentar os resultados da busca em gráficos, permite a tradução do documento de patente em diferentes línguas, fornece a situação legal dos pedidos de patente, permite baixar a lista de resultados encontrados na busca, fornece lista de documentos citados e citantes de documento, etc.

**OBS:** A base *Espacenet* não permite a busca por moléculas do composto químico ou de suas *subestruturas* ou das *estruturas Markush*.

## Busca por compostos químicos na base *Espacenet*



Espacenet: free access to over 140 million patent documents

A base *Espacenet* permite o acesso gratuito a mais de 140 milhões de documentos de patente de mais de 100 países, incluindo organizações regionais.



Quick access

Discussion forum

Pocket guide

Acesso ao breve guia desta base

Acessar <https://worldwide.espacenet.com/> e selecionar “Advanced search”.

## Busca por compostos químicos na base *Espacenet*

Realizar a pesquisa, preenchendo os campos de interesse com as palavras-chave selecionadas anteriormente, nas bases que fornecem sinônimos.

Exemplo: Inserir o nome comercial *Tylenol*, no campo “*título ou resumo*”.

The screenshot shows the Espacenet Patent search interface. The search bar contains the text "ta all \"Tylenol\"". The "Advanced search" toggle is turned on. The search criteria are set to "Title or abstract" and "all". The search term "Tylenol" is entered in the search field. The "Search" button is visible.

Busca no “Advanced Search” da base.

## Busca por compostos químicos na base *Espacenet*

The screenshot shows the Espacenet search interface. At the top, the search bar contains the text "ta all 'Tylenol'", which is highlighted with a red box. Below the search bar, there are navigation links: "My Espacenet", "Help", "Classification search", "Results", "Advanced search" (checked), "Filters", "Popup tips", and "Feedback".

Below the navigation bar, the breadcrumb "Home > Results" is visible. The query language is set to "en de fr". The search criteria are displayed as "AND" with a "+ Field" button. The search field contains "Tylenol" and is highlighted with a red box. The search results are displayed on the right side, with a red box around the text "15 results found".

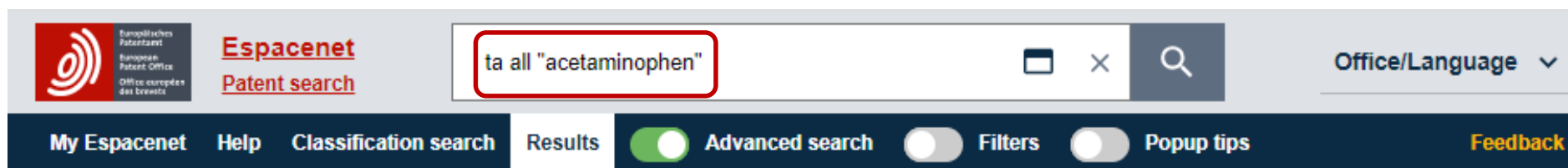
The search results are listed as follows:

- (0 patents selected) **Select the first 15 results**
- 1. **IN THE SOLVENTLESS REAC...**  
KR20140019712A • 2014-02-17 • LE...  
**Earliest priority: 2012-08-07 • Earliest...**  
...Through an experimental study, Tylenol is synthesized with an eco-friendly method by using a new method irradiating 4-
- 2. **A reation kettle is appeared to s...**  
CN207119359U • 2018-03-20 • JING...  
**Earliest priority: 2017-08-21 • Earliest...**  
...A reation kettle is appeared to secondary that is used for tylenol good fortune wei production line, it is appeared... that is used
- 3. **Distillation type reation kettle**  
CN207119156U • 2018-03-20 • JING...  
**Earliest priority: 2017-08-21 • Earliest...**  
... type reation kettle, structural design is reasonable, and the distillation reactor of tylenol good fortune wei semi -manufactured

Foram recuperados apenas 15 resultados, utilizando o termo *Tylenol*, na busca por palavras-chave.

## Busca por compostos químicos na base *Espacenet*

Portanto, devem ser feitas novas buscas, utilizando os nomes químicos da substância: por exemplo, **Acetaminophen**.



The image shows the top navigation bar of the Espacenet website. On the left is the Espacenet logo. In the center is a search bar containing the text "ta all "acetaminophen"". To the right of the search bar are icons for a calendar, a close button (X), and a search magnifying glass. Further right is a dropdown menu labeled "Office/Language". Below the search bar is a dark blue navigation bar with several menu items: "My Espacenet", "Help", "Classification search", "Results", "Advanced search" (with a green toggle switch), "Filters" (with a grey toggle switch), "Popup tips" (with a grey toggle switch), and "Feedback".

Home > Results

Query language: en de fr ▾

AND ▾ + Field

Title or abstract ▾ all ▾

acetaminophen

→ Group

Search

Reset

1 300 results found

(0 patents selected)

Select the first 20 results

1. DRUG PREPARATION OF TR...  
WO2008064854A1 • 2008-06-05 • G...  
Earliest priority: 2006-11-28 • Earliest...

...The invention relates to a pharmaceutical composition comprising acetaminophen and a tramadol component, where the solubility

2. Production of acetaminophen.  
EP0469742A2 (A3,B1) • 1992-02-05 ...  
Earliest priority: 1988-07-12 • Earliest...

N-acetyl-para-aminophenol is prepared by contacting 4-hydroxyacetophenone oxime with a Beckmann rearrangement catalyst in

Neste exemplo, foram recuperados 1.300 resultados, utilizando um dos nomes químicos da substância.

## Busca por compostos químicos na base *Espacenet*

The screenshot shows the Espacenet search interface. The search query is "ta all "N-(4-hydroxyphenyl)acetamide"". The search results show 73 results found. The first result is highlighted, showing the title "1. N-4-hydroxyphenyl acetamide deri..." and the abstract text: "Soluble derivatives of N-(4-hydroxy phenyl) acetamide, of formula (I) where R1 and R2 are various radicals, are prepd. by reaction of N-(4-...".

Observa-se que o resultado desta busca (73) é distinto dos resultados anteriores feitos com o nome comercial do fármaco ou com o nome químico da substância.

Porém, a busca na base *Espacenet*, pelo nome IUPAC **N-(4-hydroxyphenyl)acetamide**, não é considerada confiável, pois, ao analisar os resultados, observa-se que, o nome IUPAC tem partes separadas, no texto de alguns pedidos.

## Busca por compostos químicos na base *Espacenet*

Na tentativa de buscar pelo nome IUPAC na base *Espacenet*, uma alternativa possível é utilizar os termos deste nome, mas combinados com o operador booleano **AND**.

Nome IUPAC: ***N-(4-hydroxyphenyl)acetamide***

Exemplo: ***hydroxyphenyl AND acetamide*** no “*título ou resumo*”.



## Busca por compostos químicos na base Espacenet

The screenshot shows the Espacenet search interface. The search query is "ta all "hydroxyphenyl" AND ta all "acetamide"". The results page shows "116 results found". The search criteria are set to "AND" with "Title or abstract" selected for both terms. The results list includes:

- 1. - (4-CHLOROBENZYL)PIPERIDIN-4-... WO2008100202A1 • 2008-08-21 • ASTRAZ...  
Earliest priority: 2007-02-14 • Earliest public...  
...-[1-(4-chlorobenzyl)piperidin-4-yl]amino]-2-hydroxy-2-methylpropyl]oxy]-4-hydroxyphenyl]acetamide or a solvate and
- 2. N-4-hydroxyphenyl acetamide deriv. ... ES8305697A1 • 1983-05-01 • CUATRECAS...  
Earliest priority: 1982-08-10 • Earliest public...  
Soluble derivatives of N-(4-hydroxy phenyl) acetamide, of formula (I) where R1 and R2 are various radicals, are prepd. by reaction of N-(4-
- 3. Phenyl acetamide deriv. ES8604857A1 • 1986-03-01 • SERVICIOS ...  
Earliest priority: 1985-11-19 • Earliest public...  
2-(p-(2-hydroxy 3-isopropylamino propoxy) phenyl) acetamide of formula (I) and its acceptable salts are made by (a) reacting 4-hydroxyphenyl acetonitrile

Desta forma, foram recuperados **116 resultados**, utilizando os termos ("**hydroxyphenyl**" e "**acetamide**") do nome IUPAC conectados pelo operador **AND**.

Será que se trata da mesma substância do fármaco buscado ?

Porém, em alguns pedidos, os termos do nome IUPAC nem sempre são encontrados juntos no texto.



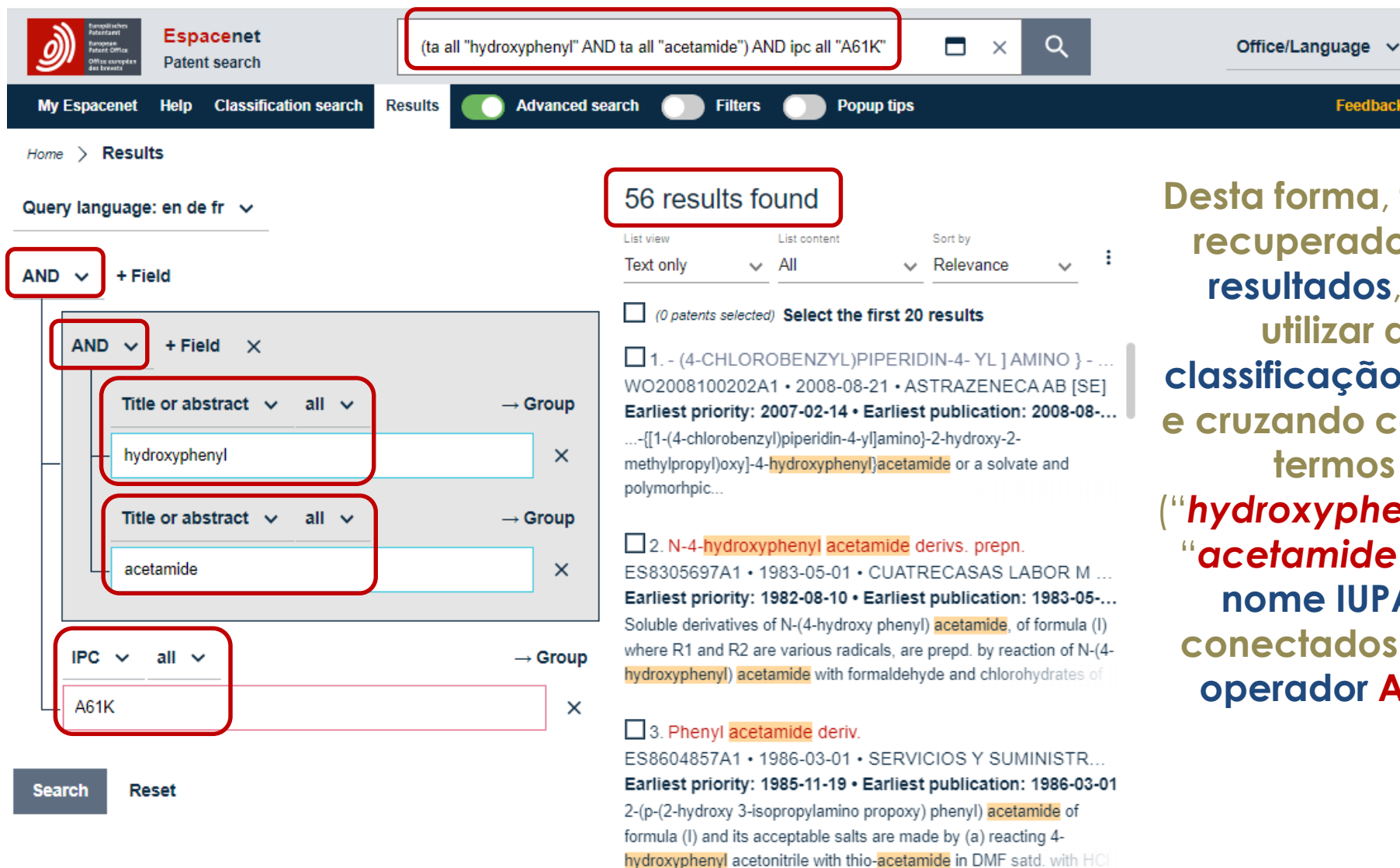
## Busca por compostos químicos na base *Espacenet*

Destaca-se que os resultados encontrados, nas buscas pelo nome IUPAC, podem ser não específicos. Em alguns resultados, mesmo com as palavras presentes no resumo, a substância de interesse não foi recuperada.

Para tornar mais específica a busca anterior, além das palavras-chave do nome IUPAC, pode ser utilizada a Classificação Internacional de Patentes (CIP ou IPC, em inglês) referente a *preparações para finalidades médicas*.

**A61K** - *Preparações para finalidades médicas, odontológicas ou higiênicas.*

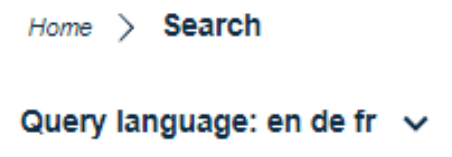
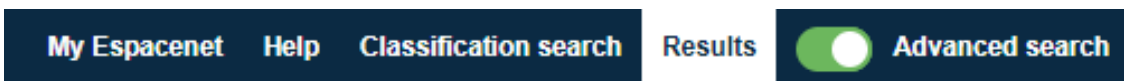
## Busca por compostos químicos na base Espacenet



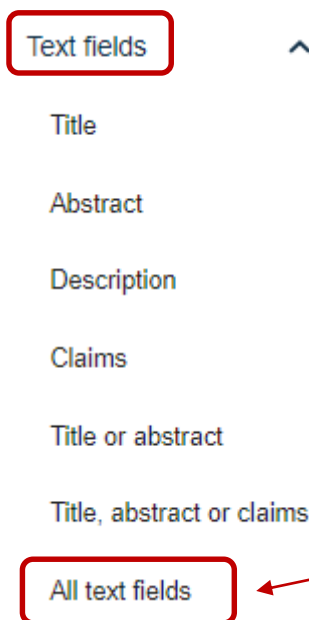
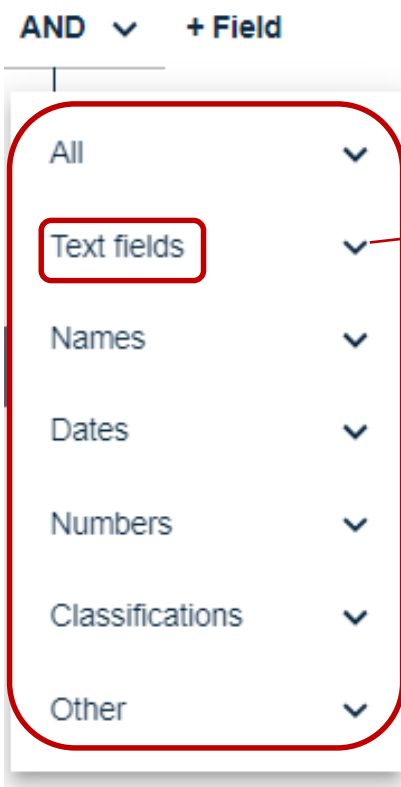
The screenshot shows the Espacenet search interface. At the top, the search query is displayed in a red box: `(ta all "hydroxyphenyl" AND ta all "acetamide") AND ipc all "A61K"`. Below the search bar, the results section shows "56 results found" in a red box. The search criteria are detailed in a red box on the left, showing three groups: "AND" with "Title or abstract" containing "hydroxyphenyl", "Title or abstract" containing "acetamide", and "IPC" containing "A61K". The results list includes three entries, with the first two highlighted in orange. The first entry is: "1. - (4-CHLOROBENZYL)PIPERIDIN-4- YL ] AMINO } - ... WO2008100202A1 • 2008-08-21 • ASTRAZENECA AB [SE] Earliest priority: 2007-02-14 • Earliest publication: 2008-08-...". The second entry is: "2. N-4-hydroxyphenyl acetamide derivs. prepn. ES8305697A1 • 1983-05-01 • CUATRECASAS LABOR M ... Earliest priority: 1982-08-10 • Earliest publication: 1983-05-...". The third entry is: "3. Phenyl acetamide deriv. ES8604857A1 • 1986-03-01 • SERVICIOS Y SUMINISTR... Earliest priority: 1985-11-19 • Earliest publication: 1986-03-01".

Desta forma, foram recuperados **56** resultados, ao utilizar a classificação **A61K** e cruzando com os termos (“**hydroxyphenyl**” e “**acetamide**”) do nome IUPAC conectados pelo operador **AND**.

## Busca por compostos químicos na base *Espacenet*

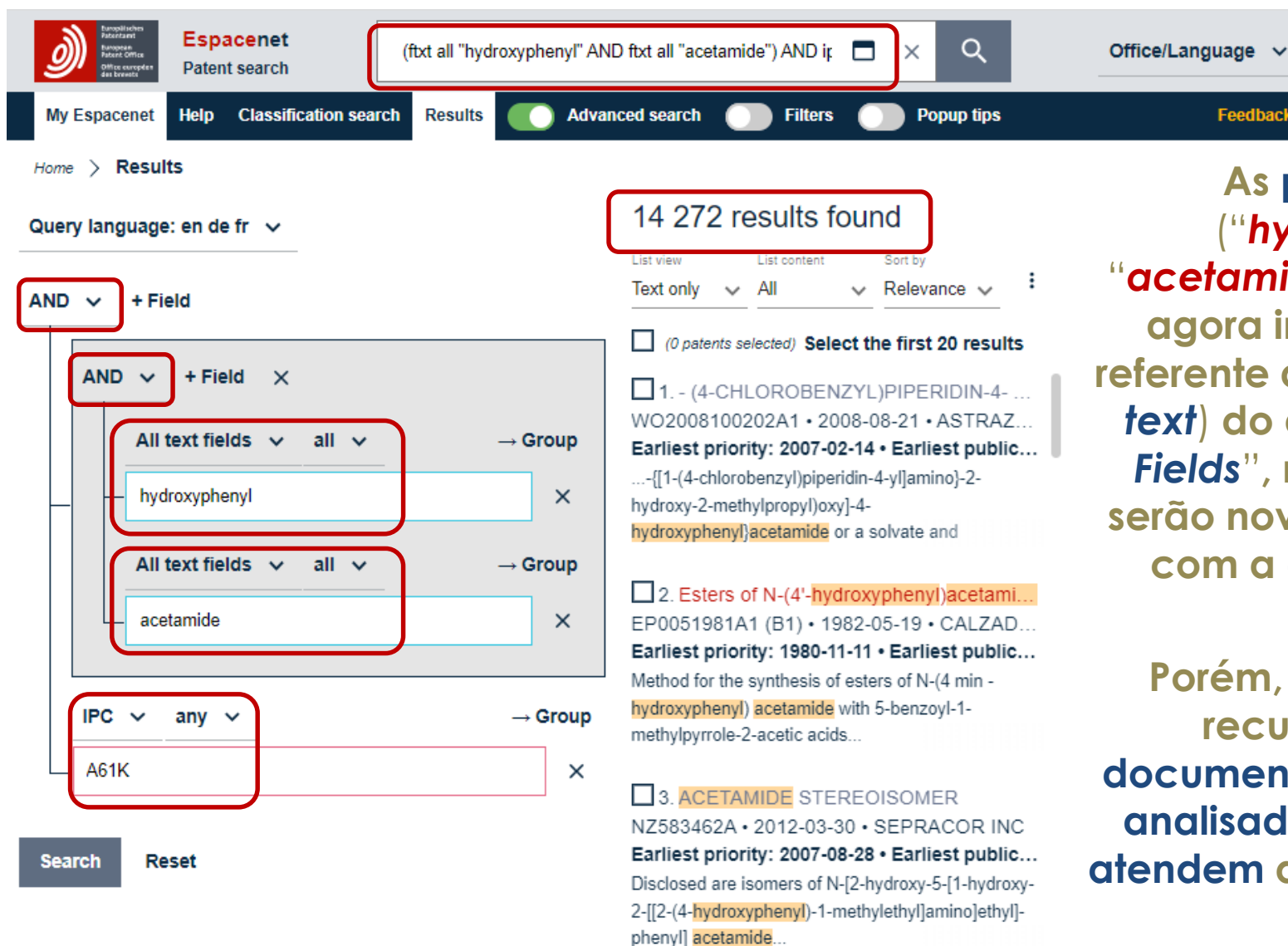


Frequentemente, o nome do composto químico não está presente no título ou no resumo, mas somente no relatório descritivo. Na base *Espacenet*, a busca em texto completo pode ser feita, em documentos EP (depositados no *Escritório Europeu de Patentes*) e WO (depósitos PCT).



Para buscar em todo texto do pedido, deve-se selecionar a "**Busca Avançada**" ("**Advanced Search**") e no menu dos campos de texto ("**Text Fields**"), selecionar "**All text fields**".

## Busca por compostos químicos na base Espacenet



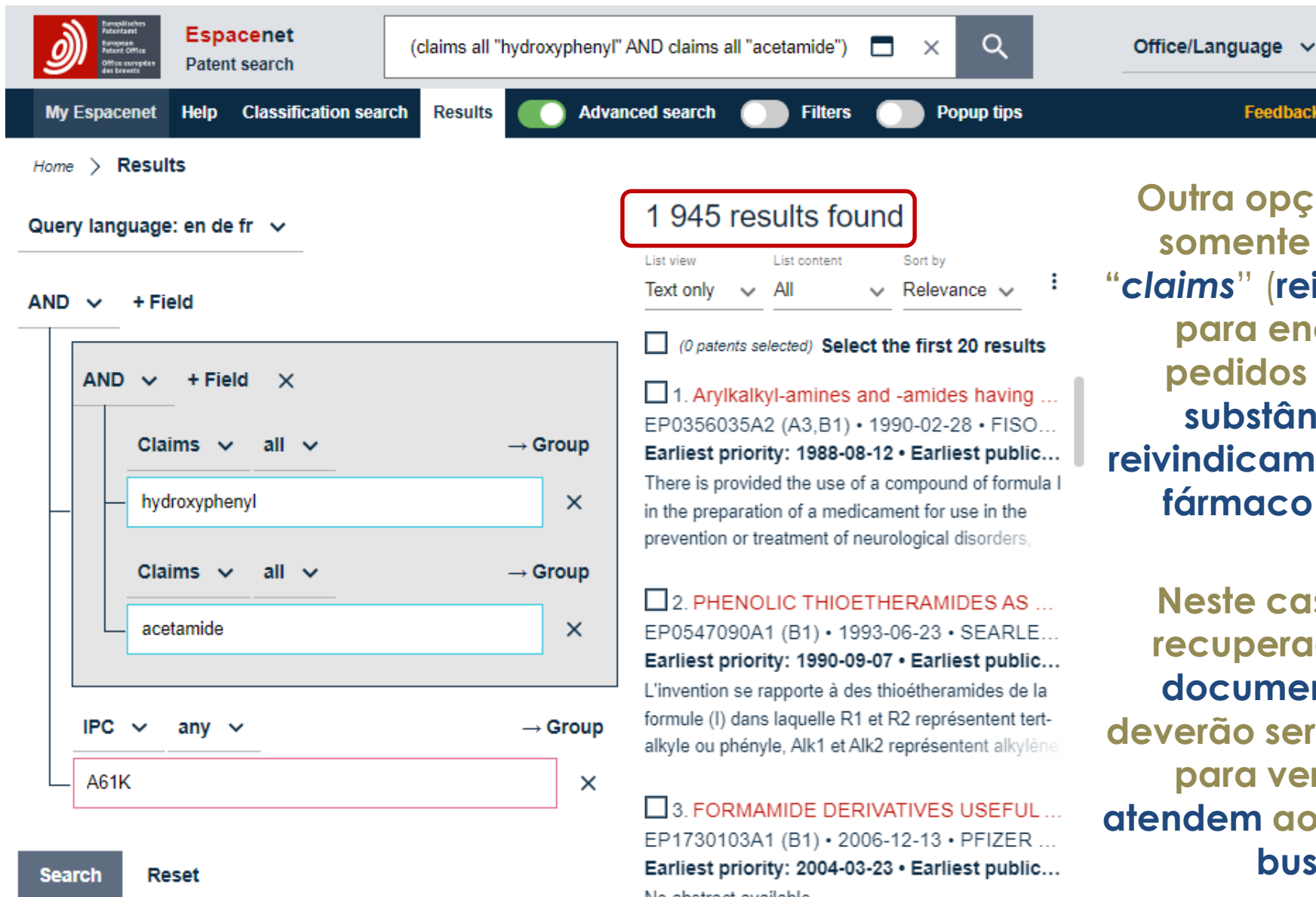
The screenshot shows the Espacenet search interface. At the top, the search query is entered in a red box: `(ftxt all "hydroxyphenyl" AND ftxt all "acetamide") AND ip: A61K`. Below the search bar, the results page shows "14 272 results found" in a red box. The search criteria are detailed in a red box: "AND" logic, "All text fields" for "hydroxyphenyl" and "acetamide", and "IPC" classification "any" for "A61K". The search results list includes:

- 1. - (4-CHLOROBENZYL)PIPERIDIN-4-... WO2008100202A1 • 2008-08-21 • ASTRAZ...  
Earliest priority: 2007-02-14 • Earliest public...  
...-[1-(4-chlorobenzyl)piperidin-4-yl]amino]-2-hydroxy-2-methylpropyl]oxy]-4-hydroxyphenyl]acetamide or a solvate and
- 2. Esters of N-(4'-hydroxyphenyl)acetami... EP0051981A1 (B1) • 1982-05-19 • CALZAD...  
Earliest priority: 1980-11-11 • Earliest public...  
Method for the synthesis of esters of N-(4-min - hydroxyphenyl) acetamide with 5-benzoyl-1-methylpyrrole-2-acetic acids...
- 3. ACETAMIDE STEREOISOMER NZ583462A • 2012-03-30 • SEPRACOR INC  
Earliest priority: 2007-08-28 • Earliest public...  
Disclosed are isomers of N-[2-hydroxy-5-[1-hydroxy-2-[[2-(4-hydroxyphenyl)-1-methylethyl]amino]ethyl]-phenyl] acetamide...

As palavras-chave (“hydroxyphenyl” e “acetamide”) do nome IUPAC, agora inseridas, no campo referente ao texto completo (*full text*) do documento (“All text Fields”, na base Espacenet), serão novamente combinadas com a classificação **A61K**.

Porém, neste caso, foram recuperados **14.272** documentos, que deverão ser analisados, para verificar se atendem ao objetivo da busca.

## Busca por compostos químicos na base Espacenet



The screenshot shows the Espacenet search interface. The search query is "(claims all 'hydroxyphenyl' AND claims all 'acetamide')". The search results show 1,945 results found. The search criteria are: AND, Claims, all, hydroxyphenyl, Claims, all, acetamide, and IPC class A61K. The search results list includes:

- 1. Arylkalkyl-amines and -amides having ... EP0356035A2 (A3,B1) • 1990-02-28 • FISO... Earliest priority: 1988-08-12 • Earliest public...
- 2. PHENOLIC THIOETHERAMIDES AS ... EP0547090A1 (B1) • 1993-06-23 • SEARLE... Earliest priority: 1990-09-07 • Earliest public...
- 3. FORMAMIDE DERIVATIVES USEFUL ... EP1730103A1 (B1) • 2006-12-13 • PFIZER ... Earliest priority: 2004-03-23 • Earliest public...

Outra opção é buscar somente no campo “**claims**” (reivindicações), para encontrar os pedidos com estas substâncias, que reivindicam a patente do fármaco desejado.

Neste caso, foram recuperados 1.945 documentos, que deverão ser analisados, para verificar se atendem ao objetivo da busca.

## Busca por compostos químicos na base *Espacenet*

### Atenção

A classificação específica de um composto pode ser utilizada no lugar do nome do composto em caso de buscas, nas quais se deseja encontrar diferentes formas de dosagem ou associações de substâncias, como:

**A61K 31/167** (específica para paracetamol) **AND** **ibuprofen**

Deve-se verificar ainda a possibilidade de adicionar à estratégia novas combinações de palavras-chave e classificações, como:

- ✓ **A61P** (aplicação terapêutica) **AND** **paracetamol**
- ✓ **C07** (métodos de síntese) **AND** **A61P** (aplicação terapêutica)
- ✓ **Dolgesic** **OR** **Hydroxyacetanilide**

## Conclusão

Como foi mostrado, a busca para substâncias químicas deve ser feita, utilizando diferentes estratégias e bases de dados.

Podem ser necessárias diversas tentativas para alcançar o resultado esperado, utilizando os nomes químicos, suas variações e as classificações de forma iterativa.

**OBS:** As buscas apresentadas, nos exemplos, foram realizadas em agosto de 2023.

# Obrigado!

*diesp@inpi.gov.br*  
*www.gov.br/INPI/pt-br*