

化学物質辞書・CAS 登録番号の話

愛知大学 文学部 図書館情報学専攻

教授 時実 象一

1 化学物質の辞書

「日本」という国の名前も、古くは「倭」,「大和」,「大日本帝国」,さらには「日本国」など時と場合によりさまざまな呼び方があります。さらに外国では言語ごとに Japan, Japon, あるいは Nippon などと使い分けられます。これがすべて「日本」であることは経験で知っているわけですが,「ハボン」などといわれると辞書が必要となります。

化学物質にもさまざまな名前があります。たとえば「ビタミン C」は正式な名前をアスコルビン酸といいます。薬になると製薬会社ごとに名前をつけるので,非常に多くの名前があります。たとえば,解熱鎮痛剤として有名なアスピリンを PubChem という辞書で検索してみると 287 個の名前が登録されています。Acylpyrin や Colfarit が同じアスピリンだということを知るには辞書が必要です。

化合物にはこのように多数の名前があるということから,化合物の辞書は大変発達しています。中でも前回で説明した CAS が作成している CAS 登録システムは世界最大の化学物質辞書ということができます。そのほかにもいくつかの化学物質辞書があります。主なものを以下に紹介します。

表 1. 主な化学物質辞書

名称	料金	対象とする化学物質	化学物質数
CAS Registry (化学物質登録システム) (SciFinder)	有料	CAPLUS の化学文献から索引した化学物質, GENBANK 由来の配列や各国の既存化学物質リストに収録された化合物等	有機 6,400 万 配列* 6,200 万
Reaxys	有料	Beilstein/Gmelin/Patent Chemistry Database に収録された有機化学物質	1,000 万
日本語化合物辞書 (日化辞) Web	無料	文献から索引した有機化合物およびその混合物	281 万
化学物質総合情報提供システム (CHRIP)	無料	国内及び海外の法規制の対象となる化学物質	17 万
化学品製品情報データベース	無料	国内化学関連企業が製造・輸入・販売する化学製品	
PubChem	無料	NIH 研究機関, 試薬メーカー等から情報提供された低分子化合物	2,670 万
ChemBioFinder.com	無料	CambridgeSoft 社が集めた化学物質情報	
ChemSpider	無料	各種情報源から集めた化学物質情報	2,500 万
ChemIDplus Lite	無料	毒性情報を持つ化学物質	39 万

* 核酸・たんぱく質配列

多くの場合, 検索結果には化学構造がついているので, それが見つめているものかどうか簡単にわかります。また多くの場合, 最初の例にあるように関連するデータや文献を探すためのリンクがついています。

19

SciFinder は有料データベースですが、無料の「日化辞 Web」で調べると、次のような情報が表示されます。

化学物質情報詳細

化学構造図 3D MOL 3D ダウンロード

日化辞番号 J. 368D

物質タイプ 構造情報あり

分子式 $C_{19}H_{15}ClNO_4$

分子量 357.769

CAS登録番号 53-06-1

法規制番号 00-361 8-01-1071 8-01-1081 ENCS200885 TSCA53-06-1

体系名
1-(4-クロロベンゾイル)-2-メチル-3-キニ-1H-インドール-3-酢酸
1-(4-クロロベンゾイル)-2-メチル-3-キニ-1H-インドール-3-イル 酢酸
1-(4-クロロベンゾイル)-2-メチル-3-キニ-1H-インドール-3-酢酸
1-(4-クロロベンゾイル)-2-メチル-3-キニ-1H-インドール-3-酢酸
2-メチル-1-(4-クロロベンゾイル)-2-メチル-3-キニ-1H-インドール-3-酢酸

インダベン
インドメタシン
Indetan
Indomethacin
1-(4-Chlorobenzoyl)-2-methyl-3-methyl-1H-indole-3-acetic acid

(中略)

成分日化辞番号 -

用途語 解熱鎮痛薬 解熱剤 抗リウマチ薬 酵素阻害剤 循環器系作用薬 非ステロイド系消炎薬

リンク先機関名 03産業技術総合研究所・SDBS

図 3. インドメタシン (Indomethacin) の日化辞 Web 検索結果

さらに一番下の行には「(独) 産業技術総合研究所：スペクトル」とあるのでこれをクリックすると、同研究所が収集したスペクトル・データ、たとえば ^{13}C NMR のデータを見ることができます。このように「SciFinder」や「日化辞 Web」などの辞書を使うと、詳細で確実な情報が得られます。

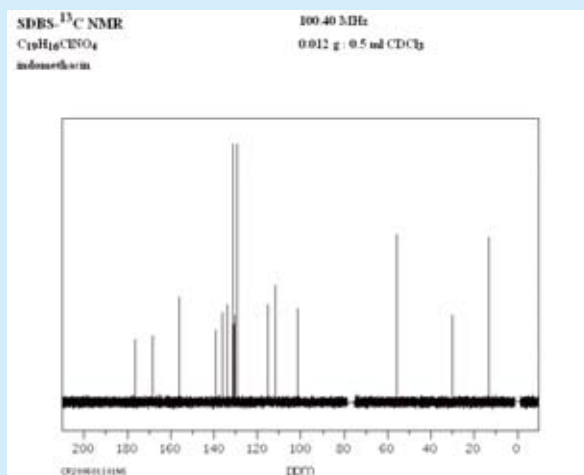


図 4. 産業技術総合研究所提供の有機化合物のスペクトルデータベース「SDBS」より

3 CAS 登録番号の話

今調べた SciFinder の CAS Registry には「CAS Registry Number 53-86-1」と記載されています。また、日化辞 Web には「CAS 登録番号 53-86-1」と書かれています。

CAS とはケミカル・アブストラクト・サービス (Chemical Abstracts Service) のことで、100 年以上にわたって世界中の化学の情報を集めて研究者に提供している情報サービス機関のことで、CAS ではこの世の中に知られているすべての化学物質を CAS 登録システムという台帳に登録し、番号を振っています。すなわち CAS 登録番号とは化学物質の背番号とすることができます。この番号は xxxxx-xx-x のように、右から 2 桁目、4 桁目の前にハイフンが入っていますが、これは単に形を整えるためで、何の化学的な意味もありません。化合物の名前は大変複雑で、正確に書くのは難しいですが、この番号であれば間違いずにその情報にたどり着くことができます。この CAS 登録システムをオンラインで検索できるようにしたのが、先ほどの SciFinder の Registry です。

CAS 登録番号は化合物のこまかい形態を区別しています。たとえば調味料として有名なグルタミン酸ソーダはグルタミン酸のナトリウム塩ですが、この物質の CAS 登録番号 [142-47-2] と、塩でないグルタミン酸の CAS 登録番号 [617-65-2] は異なっています。塩でないグルタミン酸は調味料にならないことを考えれば、区別するのが当然です。また、最近問題となっている放射性元素の多くは放射性を持たない元素の同位体 (元素の性質は同じだが、重さが違う) です。たとえば原発事故で問題となっている放射性セシウム (たとえばセシウム 137)、放射性ヨウ素 (ヨウ素 131) の CAS 登録番号 (それぞれ [10045-97-3], [24267-56-9]) は通常のセシウム、ヨウ素の CAS 登録番号 (それぞれ [7440-46-2], [7553-56-2]) とは異なっています。

CAS 登録番号を調べるには前項で説明した化合物辞書を使います。ただし信頼できるデータが必要なときは必ず CAS Registry を使ってください。辞書によっては、前述の削除された番号などを間違えて使っている場合があります。

弊社 TCI オンラインカタログでも、インドメタシンの参考物性値・各種リファレンスや利用例などの最新情報をご覧いただけます。

詳細はコチラ：<http://www.tcichemicals.com/eshop/ja/jp/commodity/I0655/>

執筆者紹介

時実 象一 (Soichi Tokizane) 愛知大学 文学部 図書館情報学専攻 教授

[ご経歴] 1968 年 東京大学大学院理学系研究科化学専門課程 (修士課程) 修了, 1968 年 東洋レーヨン株式会社 (現 東レ) 研究員, 1976 年 社団法人 化学情報協会 (現 化学情報協会), 1995 年 Chemical Abstract Service (CAS) アジア太平洋地区責任者, その後科学技術振興事業団などを経て 2005 年 愛知大学文学部教授, 現在に至る。国立国会図書館 科学技術関係資料整備審議会委員ほか各種委員。主な著書「インターネット時代の化学文献とデータベースの活用法」化学同人, 「SciFinder 活用法―買い化学情報検索のために」サイエンスハウス, 「理系のためのインターネット検索術―ホンモノ情報を早くみつける」講談社。

[専門分野] 化学情報学, 図書館情報学