



A division of the American Chemical Society

【プレスリリース】  
報道関係者各位

2015年7月9日

## 米国ケミカル・アブストラクト・サービス

# CAS登録番号1億件目として骨髄性白血病治療薬向け物質を登録

～ 化学物質データベース構築 50周年の節目に～

【オハイオ州コロンバス】米国化学会(American Chemical Society)の情報部門で、化学情報の世界的権威であるケミカル・アブストラクト・サービス(Cheical Abstracts Service=CAS、米国オハイオ州コロンバス)はこのほど、化学物質データベース「CAS REGISTRY<sup>SM</sup>」に、1億件目となる化学物質が登録されたことを発表しました。CAS REGISTRY<sup>SM</sup>は、CASが構築・管理を行い、網羅する物質数や信頼性の観点から世界中の化学・製薬企業および大学、政府機関、特許発行機関に認められた世界最大の化学物質データベースで、構築から今年で50周年の節目を迎えます。

世界各地で特許登録が盛んに行われていることを裏付けるように、1億件目の登録となった低分子化合物は、米Coferon Inc.社(米国ニューヨーク州ストーンブルック)が世界知的所有権機関(WIPO)に出願した特許(WO2015081280)に報告されている物質で、同社が急性骨髄性白血病の治療薬を目的に設計したものでした。今回、CAS登録番号1786400-23-4が付与され、CASが提供するSciFinder<sup>®</sup>およびSTN<sup>®</sup>でも関連情報を閲覧することが可能です。

Coferon 事業開発担当副社長の Maneesh Pingle 博士は、「Coferon では様々な治療法を目指して独自の生体直交性リンカーを開発しており、最近登録され CAS登録番号1786400-23-4が付与された物質のようなケイ素ベースの新たなリンカーに注目しています。CAS REGISTRY<sup>SM</sup>は、大学や産業界双方の研究者にとり非常に貴重な情報源のため、当社が開発した低分子が記念すべき CAS登録番号1億件目となったことを大変光栄に思います」とコメントしています。

CAS REGISTRY<sup>SM</sup>システムは、1965年、化学物質に関する情報を識別、追跡するためのプロジェクトとしてスタートし、現在では、学術出版物やその他の権威ある情報源に公表されたあらゆる有機、無機物質を網羅する識別番号であるCAS登録番号を正確に知ることのできる、世界で唯一の情報源となっています。とりわけ、世界中の研究者、知財専門家やコンプライアンススペシャリスト等が、自社の研究、安全性の確認、またコンプライアンスの観点から、必要な物質に関する情報の検索・同定にCAS登録番号を利用しています。



A division of the American Chemical Society

1960年代後半にCAS REGISTRY<sup>SM</sup>が開発されたことにより、化学に関する情報、研究は飛躍的に変化しました。とりわけ、CAS登録番号は社会生活のあらゆる場面で利用され、例えば、米国環境保護局や韓国の有害化学物質管理法に基づく規制機関をはじめとする各国の規制機関では製造・輸入されるあらゆる新規化学物質の識別にCAS登録番号の届け出を義務付けており、また、化学物質の安全な取扱い・輸送を担保するため、各国で物質安全データシート(MSDS)へのCAS登録番号の記載が求められています。さらに、ペンキやシャンプーのラベルなど日用品にも広く利用され、化学品販売会社のウェブサイト、Wikipedia、PubChem、ChemSpiderといった様々な閲覧サイトでも、化学物質を紐づける唯一のID情報として使用されています。

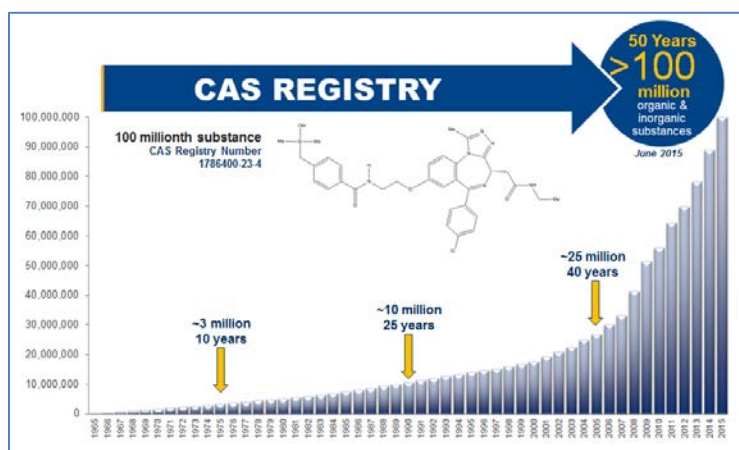
右図【図1】のCAS REGISTRY<sup>SM</sup>の伸びを見ますと、過去10年間に化学関連の発見が急増していることが分かります。全物質の累計データからは、CAS REGISTRY登録1億件の物質のうち約7500万件が過去10年間に新たに追加されたものであり、平均すると2分30秒ごとに1件の物質が新たに登録されている計算になります。

CASの製品・コンテンツ事業責任者のMatthew J. Toussant博士は、「過去50年にわたり化学分野の情報提供の分野においてCASが業界をリードし続けていること理由の一つは開発投資です。初期の数年間には物質情報をインデックスカードに記録、その後パンチカード記録システムを経て、現在は完全に電子化したシステムを用いています。システムの最適化を重ねることで、登録数の急増に対応したスピードで情報を分析、公開できる体制になっています」と話しています。

化学における技術革新はとどまるところを知らず、現在のペースが続けば、次の50年の間に新たに6億5000万件以上の新化学物質が追加されることになり、これまでの成長カーブを考えると、伸び率はさらに大きなものになることが予想されています。

## CAS REGISTRY<sup>SM</sup>について

CAS REGISTRYデータベースは、網羅する物質数や信頼性の観点から世界中の化学・製薬企業および大学、政府機関、特許発行機関に認められた世界最大の化学物質データベースで、化学物質のID番号のデファクトスタンダードとして広く利用されています。有機、無機物質1億件を収録しており、その中には合金・配位化合物・鉱物・混合物・ポリマー・塩なども含まれます。また、この1億件とは別に6600万件のタンパク質や核酸などの配列情報も収録されています。



【図1】CAS REGISTRY<sup>SM</sup>の50年間の伸び



A division of the American Chemical Society

## CAS について

米国化学会(ACS)の情報部門であるケミカル・アブストラクツ・サービス(CAS)は、化学情報の権威として世界に知られ、物質に関する世界中の公開情報をすべて収集し組織化することを目的としている世界で唯一の機関です。CAS に所属する科学者が構築・管理を行っている CAS データベースは、最も網羅的で信頼性の高いデータベースとして世界の化学・製薬企業、大学、政府機関、特許発行機関等に認められています。CAS では、これらのデータベースと最新の検索・解析技術を組み合わせた、SciFinder®や STN®といった検索ツール製品・サービスなど、科学的な発見をサポートする最新で網羅的なデジタル情報環境を提供しています。

## 化学情報協会(JAICI)について

化学情報協会(東京都文京区、小沼和彦理事長)は、科学技術情報の流通を図るため 1971 年に設立されました。米国をはじめ世界各国の情報機関等と協力関係を築き、日本の研究者をサポートする情報センターとして大学・企業などの情報取得、分析、研究までを支援するほか、CAS の日本総代理店として日本の化学情報を必要とする方々に CAS 製品を提供し、サポートしています。

## 【本件に関する報道関係のお問い合わせ先】

ケミカル・アブストラクツ・サービス(CAS) 広報代理

株式会社トレイントラックス

担当: 遠藤 玲奈、小牧 圭市

TEL: 03-5738-4177

Mail: [cas@traintracks.jp](mailto:cas@traintracks.jp)

化学情報協会 総務部 広報グループ

担当: 古高 誠也

TEL: 03-5978-3608

Mail: [s-furutaka@jaici.or.jp](mailto:s-furutaka@jaici.or.jp)