

REGISTRAČNÍ ČÍSLA CHEMICAL ABSTRACTS PŘEKONÁVAJÍ DALŠÍ MEZNÍK

Rychle se rozvíjející chemická legislativa přináší stále nové a nové požadavky na registrace chemických látek a s tím související jednoznačnou identifikaci látek. Ve většině systémů, např. REACH, GHS (CLP) – a s nimi spojených softwarových nástrojích (IUCALID, REACH-IT...) se ve stále větší míře setkáváme s registračním číslem CAS, jež je jednoznačným číselným identifikátorem, používaným v chemii. Ačkoli o jednoznačnosti registračních čísel CAS bychom po několika desítkách let práce s nimi raději nemluvíli, jedná se každopádně o naprosto unikátní výborně propracovaný systém evidence látek, zavedený službou Chemical Abstracts Service (CAS), Columbus, Ohio, USA v roce 1967 (dodatečně byly přidány publikované látky od roku 1957).

Nedá se říci, že by Chemical Abstracts Service přišlo na něco převratného – jejich čísla jsou v podstatě pořadová čísla látek, nevytvářejí nic o struktuře (jako např. novější kódy SMILES, InCHI atd.) a i jiné databáze mají své kódy (jmenujme např. Beilstein, toxikologickou bázi RTECS a mnoho dalších), nicméně žádný z těchto systémů nenabyl lety takového rozsahu co do počtu indexovaných látek i oblastí využití. A právě tím, jak se pole působnosti registračních čísel rozšiřuje, jsou indexovány i látky, pro které neexistuje žádný záznam v bázi Chemical Abstracts. Své číslo tak mají všechny látky ze seznamu EINECS (European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances), o přidělení čísla pro novou látku žádají organizace typu World Health Organization, US Environment Protection Agency aj. a lze dokonce vznést požadavek přes CAS Client Service. Také nové látky, které se objeví v některém z obchodních katalogů zařazených v bázi CHEMCATS, dostanou registrační číslo a od roku 2008 jsou zařazovány i látky z některých webových kolekcí (např. ChemSpider aj.).

Všechny registrované látky jsou zahrnuty do databáze **REGISTRY**, jež je přístupná v síti STN International a umožňuje vyhledání registračního čísla podle názvu nebo chemického vzorce a poskytuje navíc informaci, ve kterých ze dvou stovek různých databází sítě STN International se daná látka vyskytuje. Každý záznam zahrnuje registrační číslo, rejstříkové jméno, synonyma, obchodní názvy, strukturní a sumární vzorec (pokud je znám). U části látek jsou navíc přítomné i informace o vlastnostech, získané buď experimentálně nebo vypočítané.

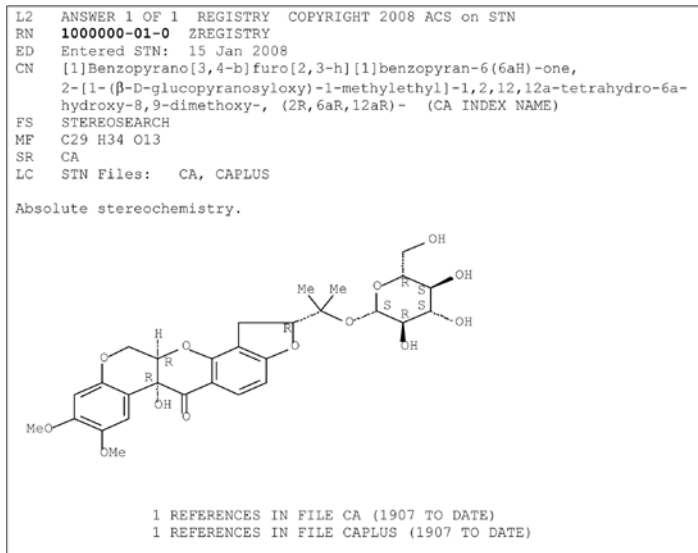
Ještě nedávno bylo deklarováno, že každý den jsou v systému CAS přiděleny čtyři tisíce nových registračních čísel. Tempo se však stále zrychluje, denně je přidělováno již více než dvanáct tisíc nových registračních čísel a na **7. září 2009** bylo ohlášeno překonání

hranice padesátimiliontého registračního čísla CAS pro organické a anorganické látky. Toto číslo se netýká biosekvencí, těm jich bylo přiděleno již více než 61 milionů! Historicky prvním a tedy nejnižším přiděleným registračním číslem CAS je dosud platné číslo 50-00-0 pro formaldehyd. V době zpracování tohoto příspěvku, 24. srpna 2009 v 10:13 SELČ, byl průběžný stav 49.433.930 organických a anorganických látek a 61.188.491 biosekvencí, přičemž nejvyšší přidělené registrační číslo CAS bylo 1175001-45-2. Máloco ovšem zastarává tak rychle, jako údaje o počtu registrovaných látek.

Dávno pryč jsou doby, kdy v osmdesátých letech byl „slavnostně“ vyhlášován každý milion přidělených registračních čísel – tímto způsobem bychom dnes z oslav nevyšli. Přesto o slavné okamžiky v systému **REGISTRY** není nouze. Registrační číslo je pomlčkami rozděleno na tři části, z nichž první má proměnný počet číslic, další má vždy právě dvě číslice a za druhou pomlčkou je jediná číslice, která je konstruována jako kontrolní pro umožnění automatické kontroly správnosti zápisu registračního čísla. Až do začátku roku 2008 stačilo šest číslic před první pomlčkou (tedy celkem devět). **15. ledna 2008 byla zaregistrována látka s desetimístním registračním číslem CAS 1000000-01-0** se strukturou a záznamem v databázi Registry – viz Obr. 1.

Zajímavostí je, že bylo přiděleno též číslo 1000000-00-9, avšak dodatečně bylo zjištěno, že daná látka s názvem Furo[3',4':6,7]naphtho[2,3-d]-1,3-dioxol-6(5aH)-one, 5,8,8a,9-tetrahydro-9-hydroxy-10-methoxy-5-(3,4,5-trimethoxyphenyl)-, (5R,5aR,8aR,9R)- byla již dříve zaregistrována, takže jí bylo zachováno původní číslo 128443-52-7 z roku 1990 a historicky první desetimístné regis-

Obr. 1



trační číslo CAS proto bylo zrušeno jako tzv. deleted number (DR).

Při rostoucím počtu publikací i požadavků chemické legislativy v Evropě a ve světě lze očekávat, že nasazené tempo registrací se v blízké budoucnosti nezpomalí. Registrační čísla CAS totiž nedostávají jen základní sloučeniny, ale i **radikály** jako např. 52145-98-9 = fenyldiazonylový radikál (Ph-N=N), **stereoizomery**, např. 4221-99-2 = (S)-butan-2-ol nebo 14898-79-4 (R)-butan-2-ol), **slitiny**, včetně slitin obsahujících nekovy (např. 828259-00-3 = slitina železa Fe 98%, Mn 1,5%, Si 0,5%, C 0,1%), **elementární částice** jako jsou bosony, fermiony, hadrony, mezon, kvarky atd., např. 12586-01-5 = meson, dále **izotopy** (7782-39-0 = deuterium), ionty (17341-25-2 = sodný kationt), **směsi dvou a více chemických individuí, připravené pro konkrétní použití** (9006-50-2 = vaječný bílek, 132259-10-0 = vzduch atd.), **polymery** (např. 25038-57-7 = poly(methylen)) aj. Pokud je ve sloučenině nahrazen atom konkrétním izotopem, tyto modifikace mají rovněž svá registrační čísla CAS.

S látkami, které mají přidělené registrační číslo CAS, se však nesetkávají jen chemici, ale prakticky každý (i když to asi netuší). Registrační číslo tak na základě zdrojů z evropské legislativy má např. pivo (CN Beer): 8029-31-0, margarín (CN Butter substitutes, margarine): 8029-82-1, mléko (CN Cow milk): 8049-98-7, káva (CN Coffee Arabica, extract): 84650-00-0, apod.

Můžeme se tedy jistě těšit ještě na řadu milníků. Databáze **REGISTRY** v **STN International** je všechny zaznamenaná.

J. HORKÝ, B. BOČEK, L. ŠERÁ, Medistyl, Středoevropské informační středisko, Praha, jaroslav.horky@medistyl.info