

## CAS Registry Number и справочник Common Chemistry

### Что такое CAS Registry Number

**CAS Registry Number** (*CASRN*, *CAS RN*, *CAS Number*, *CAS#*) — это номер, под которым химическое вещество (или смесь веществ) зарегистрировано в *Chemical Abstracts Service* (CAS).

Формат записи *CASRN*: группа из трех чисел, объединенных дефисами; в этом наборе последнее число обязательно состоит из одной цифры, а предпоследнее — из двух.

*Примеры CASRN*: 7732-18-5 (вода); 548491-80-1 ( $ZnFe_2O_4$ ).

В тексте код *CASRN* нередко заключают в квадратные скобки, например: [7647-14-5].

Сотрудники *Chemical Abstracts Service*, просматривающие свежую научную литературу, регистрируют каждый химический объект, обнаруженный в публикациях. Номера при этом присваиваются веществам простым и сложным, органическим, неорганическим и элементоорганическим, координационным, низкомолекулярным и высокомолекулярным (в том числе, белкам), ионам, минералам, сплавам, характерным смесям (в том числе, смесям неопределенного состава).

Присвоение номеров идет в хронологическом порядке, по мере обнаружения объектов, поэтому в сам номер никакой **химический смысл не закладывается**.

Ценность *CASRN* заключается в том, что регистрационный номер позволяет лаконично и **однозначно** указать на некое вещество, которое может иметь множество названий и состав которого может быть отображен несколькими способами.

*Пример: Na<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub>.*

В литературе это вещество называют по-разному: гидроортофосфат натрия, натрий-гидрофосфат, кислый фосфат натрия двузамещенный, динатрийгидротетраоксофосфат(V), гидрофосфат натрию, disodium orthophosphate, DSP, hidrogenoortofosfato de disodio и т. д.

В зависимостей от целей, его химическую формулу иногда записывают, например, так:  $HNa_2O_4P$ ;  $Na_2O \cdot 0,5H_2O \cdot 0,5P_2O_5$ ;  $2Na^+ HPO_4^{2-}$ .

Количество вариантов графических изображений структуры вообще неисчислимо.

*CASRN* данного вещества однозначен: **7558-79-4**.

*Chemical Abstracts Service* занимается систематическим учетом веществ с 1957 года; ежедневно количество присвоенных номеров возрастает на 12 тыс. Сведения о числе зарегистрированных химических объектов CAS публикует на веб-странице:

<http://www.cas.org/cgi-bin/cas/regreport.pl>

The Latest CAS Registry Number® and Substance Count	
Date	04/7/2009 05:51:21 EST
Count	45,563,463 organic and inorganic substances
	60,839,906 sequences
CAS RN 1132745-38-0 is the most recent CAS Registry Number	

Долгое время коды *CASRN* выполняли функции неофициальных стандартных идентификаторов химических веществ. Их можно встретить в научных статьях, технических спецификациях, каталогах реактивов:

**Sodium chloride, crystalline powder, PDV, 99+%  
CINa FW 58.44 [7647-14-5] mp 802° bp 1413° RTECS  
EINECS 231-598-3 TSCA Fieser 6,285 Merck 12,8742**

Поскольку коды *CASRN* интенсивно используются в химической литературе, их применяют в качестве поисковых терминов в информационном поиске, и не только в специализированных базах данных.

*Пример.* Необходимо найти "сертификаты безопасности материала" (*Material Safety Data Sheet, MSDS*) для  $Na_2HPO_4$ .

Универсальная поисковая система *Google* успешно справляется с этой задачей, причем запрос "["7558-79-4" msds](#)" оказывается более эффективным, чем текстовые запросы, такие как "["disodium orthophosphate" msds](#)".

Повсеместное распространение *CASRN* сдерживается двумя причинами: (1) в этом коде нет информации о составе и структуре вещества; (2) регистрационная система является коммерческой.

Исчерпывающий список всех CASRN содержится в CAS REGISTRY — платной базе данных. Chemical Abstracts Service разрешает некоммерческое использование CASRN — но при условии, что в информационный источник будет включено менее 10 тыс. регистрационных номеров. В результате такой политики в печатной литературе (особенно в каталогах реактивов) и в онлайн-справочных базах данных накопилось значительное количество кодов CASRN, однако это лишь мизерная доля той информации, которой владеет CAS.

Для широкой научной аудитории доступ к первоисточнику (CAS REGISTRY) затруднен, поэтому она склонна пользоваться вторичными документами. В результате в онлайн-литературе из одного документа в другой копируются коды с опечатками и отмененные коды, а главное, нередко встречается некорректное соотнесение CASRN и вещества.

Правильное соотнесение CASRN и вещества — задача не такая простая, какой она кажется при беглом взгляде на проблему. CAS присваивает регистрационные номера не только химическим веществам в строгом понимании этого термина, но и в нестрогом, и даже смесям.

*Пример 1.* Цис-1,2-дихлорэтен, транс-1,2-дихлорэтен и 1,2-дихлорэтен (т. е. без указания взаимного расположения атомов хлора) имеют три разных регистрационных номера. Если в молекуле атомы  $^1\text{H}$  заменять на атомы  $^2\text{H}$ , получаются новые объекты, которые тоже будут иметь свои уникальные номера.

*Пример 2.* Одно-, двух-, трехзамещенные ортофосфаты натрия, как и следовало ожидать, имеют три уникальных регистрационных номера. Оказывается, свой номер есть и у "замещенного фосфата натрия" (т.е. смеси веществ, состав которой можно описать брутто-формулой  $\text{Na}_x\text{H}_y\text{PO}_4$ , где  $x+y=3$ ). Кроме того, регистрационные номера присвоены каждому обнаруженному кристаллогидрату ( $\text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  и т. д.).

С точки зрения регистрации реальных химических объектов, о которых имеются сведения в научной литературе, такой подход вполне логичен.

Трудности возникают у авторов документов и у составителей справочных баз данных, вознамеривших дополнить свои материалы кодами CASRN. Для правильного выбора кода необходимо профессионально ориентироваться в регистрационной системе и иметь доступ к первоисточнику CAS REGISTRY. Как показывает анализ качества бесплатных веб-ресурсов, эти условия выполняются далеко не всегда.

Трудности возникают у пользователей, намеревающихся найти в Интернете информацию о веществе по коду CASRN. Пользователь должен знать "правильный" код, да к тому же еще и уметь предвидеть, какие "частично правильные" коды могут встретиться в онлайн-литературе (присвоение кристаллогидрату регистрационного номера безводной соли — самый безобидный пример).

Так имеет ли смысл использовать CASRN в информационном поиске? Конечно же, да.

Во-первых, без оговорок эффективен поиск по CASRN в тех источниках, для которых эти коды изначально были предназначены — в базах данных Chemical Abstracts Service (увы, платных).

Во-вторых, в бесплатном Интернете имеется значительный информационный пласт, где CAS Registry Numbers применяются издавна и в основном выверены. Это каталоги реактивов ведущих химических компаний, сертификаты безопасности материалов (MSDS), базы данных National Institute of Standards and Technology (NIST), указатели к печатным справочникам по свойствам веществ. (Именно здесь пользователю целесообразно решать проблему соотнесения "вещество ↔ CASRN", по крайней мере, для более-менее распространенных веществ).

Неплохими стартовыми точками для поиска кодов CASRN являются базы данных, в которых собрана информация из каталогов разных производителей химреактивов, например:

ChemExper (<http://www.chemexper.com/>), BuyersGuideChem (<http://www.buyersguidechem.de/>).

В тех случаях, когда требуется расшифровать серию кодов CASRN, удобен указатель справочника Landolt Börnstein (<http://lb.chemie.uni-hamburg.de/static/RN/>).

*Chemical Abstracts Service* до недавних пор был монопольным держателем первичной информации о *CASRN*. В конце 2008 года он сделал первый шаг в предоставлении свободного доступа к этому типу своих ресурсов и разместил официальную выборку из *CAS REGISTRY* на специальном сайте **Common Chemistry**.

### Common Chemistry (<http://www.commonchemistry.org/>)

Бета-версия *Common Chemistry* содержит сведения (*CASRN*, названия, молекулярные и структурные формулы) примерно о 8 тыс. химических веществ — таких, которые не менее тысячи раз упоминаются в базах данных *CAS*.

Предполагается, что сайт должен служить инструментом поиска названий и регистрационных номеров важнейших химических товаров.

Поисковый бланк, находящийся на Главной странице, состоит из двух граф:

**Chemical Name** — здесь запросом может быть полное название вещества или фрагмент названия;

**CAS Registry Number** — здесь запросом может быть только полный код *CASRN*, но не его фрагмент.

*Пример.* По запросу **sodium phosphate** в список результатов поиска попадают одно-, двух-, трех-замещенные ортофосфаты, их смесь неопределенного состава, один ортофосфат-кристаллогидрат, ди-, мета-, полифосфаты, гипофосфит и соль с фосфорорганическим анионом.

По запросу **disodium phosphate** извлекается только запись, касающаяся вещества  $\text{Na}_2\text{HPO}_4$ .

Принимая во внимание небольшой объем базы данных, результат можно считать удовлетворительным.

При работе с базой данных следует учитывать некоторые принятые здесь условности, на первый (да и на второй) взгляд кажущиеся химику весьма странными.

You Searched: sodium phosphate  
11 results found  
1 2

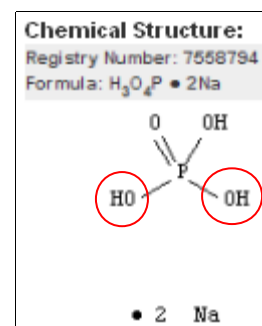
---

**Registry Number: 7558-79-4**  
Molecular Formula:  $\text{H}_3\text{O}_4\text{P}\cdot 2\text{Na}$   
Chemical Name: Phosphoric acid, disodium salt  
[Show Synonyms](#)

---

**Registry Number: 7558-80-7**  
Molecular Formula:  $\text{H}_3\text{O}_4\text{P}\cdot \text{Na}$   
Chemical Name: Phosphoric acid, monosodium salt  
[Show Synonyms](#)

(1) Химическую формулу соли и в символьной ("*Molecular Formula*"), и в графической ("*Chemical Structure*") записях отображают как некий комплекс кислоты и атомов металла, *например*,  $\text{H}_3\text{O}_4\text{P}\cdot 2\text{Na}$ , а не  $\text{HNa}_2\text{O}_4\text{P}$  (химические символы приведены в алфавитном порядке).



Печально, что эту особенность записей, принятую в регистрационной системе *CAS*, бездумно тиражируют авторы веб-сайтов, действующие по принципу *Copy&Paste*. В итоге в некоторых онлайн-справочных базах данных появляются необычные объекты типа  $\text{H}_3\text{Na}_2\text{O}_4\text{P}$ , для которых там же приводятся "молекулярные веса" и даже физико-химические характеристики.

(2) Все названия, под которыми данное вещество было обнаружено в литературе, *CAS* перечисляет в рубрике, неудачно поименованной "Синонимы".

Некритично настроенный пользователь, подавленный авторитетом *Chemical Abstracts Service*, может и на самом деле поверить, что "двунариевая соль фосфорной кислоты" и "кислый фосфат натрия" — синонимы.

Кстати, и этот термин, именно с таким искаженным смыслом, бродит по Интернету.

**CAS Registry Number: 7558-79-4**  
CA Index Name: Phosphoric acid, disodium salt

**Synonyms:**

- Acetest
- Anhydrous sodium acid phosphate
- Dibasic sodium phosphate

Можно предположить, что "антихимические" условности были временно внесены программистами *CAS* на заре компьютеризации, да так и остались в базах данных. (Нет ничего более постоянного, чем временное?)

Абстагируясь же от терминологических вопросов, следует признать, что сайт *Common Chemistry* как первичный источник информации о *CASRN* является ценным и перспективным онлайн-ресурсом.