

特集

有害化学物質

第2編

インターネットによる化学物質の検索

## インターネット時代の情報検索および情報提供\*

岡 敬 一\*\*

キーワード ①化学物質 ②インターネット ③MSDS ④CAS ⑤情報検索

### 要 旨

法規制によるMSDS交付の義務づけ、ISO14001取得事業所による化学物質の安全管理対策などにより、化学物質情報の需要と情報発信が増加してきている。神奈川県は、全国に先駆けて化学物質環境安全管理指針を制定し、化学物質データベースを構築して情報を提供してきた。システムは現在、インターネット版となり全国で利用されており、運用管理の経験を基に化学物質情報の検索や情報発信について事例をあげて留意点、データベース維持管理上の問題点等を報告する。

### 1. はじめに

PRTR制度(Pollutant Release and Transfer Register)が始まり、事業所は、取り扱っている化学物質を把握するため、メーカーや販売店から入手したMSDS(Material Safety Data Sheet)だけではなく、独自に化学物質情報を収集しデータベースを構築して管理を行うなど、化学物質情報に対する需要は増えてきている。

神奈川県は、化学物質による環境汚染、災害事故等を未然に防止し、良好な地域環境の確保を図ることを目的として、1991年4月1日に「神奈川県化学物質環境安全管理指針」を施行し、指針は1998年4月1日施行の「神奈川県生活環境の保全等に関する条例」に組み込まれた。

指針施行当時、化学物質の管理に関する情報は化学辞典やハンドブックなどに断片的に記載されており、中小の事業所が情報を収集し管理に利用するには困難が見込まれた<sup>1)</sup>。

そこで、化学物質の管理に必要な情報をデータベース化し事業所に提供するとともに、行政でも活用できるようにパソコン通信システムを構築し、1991年7月から「化学物質安全情報提供システム(kis-net)」として公開した。

システムは、インターネットの普及に伴い1999年にインターネット版kis-netを公開した。インターネット版kis-netでは、インターネットの特性を活かし、他のデータベースとリンクすることによってより多くの化学物質を検索できるようにするとともに、利用者が相互の情報を比較することで情報の信頼性を確認できるように配慮している。

ここでは、kis-net運用の経験から化学物質情報の検索や情報提供方法について紹介する。

### 2. 化学物質情報サイト増加の背景

表1にインターネットが普及し始めた1996年

\* Information Retrieval of Chemical and Construction of a Database in the Internet

\*\*Keiichi OKA(神奈川県環境科学センター)Kanagawa Environmental Research Center

表1 検索件数の違い

キーワード	1996年	2003年
化学	100	413万
MSDS	44	31万7千

と現在のインターネットにおける化学物質情報を検索した結果を比較した<sup>2,3)</sup>。

最近の化学物質情報の増加の背景として、次のことが考えられる。

#### ① 法規制等による事業者の情報発信

PRTR法、労働安全衛生法、毒物および劇物取締法によりMSDSの提供が義務づけられ、かつ情報の内容に変更があった場合には速やかに通知することが求められているため、メーカーや販売店が自社のホームページでMSDSを公開している。また、化学物質を使用している事業所では、PRTRにおける使用量の把握に加えISO14001で環境方針を定め、有害性の高い物質の使用量の削減と管理を行う必要があることから、自社のホームページでISO14001の達成状況とともに化学物質情報の公開を行っている。

#### ② 情報公開や説明責任による官公庁の情報発信

近年、審議会の配付資料や議事録が省庁のホームページで公開されている。資料にはCAS番号がついた法規制対象物質リストもあり、法規制の内容を周知する際にも利用されている。また、既存化学物質の分解性・濃縮性の安全性点検結果や安全性(ハザード)の評価結果も国民の安全性に関わる情報として積極的に公開されている。研究機関も、研究成果である化学物質情報やデータベースを積極的に公開している。地方自治体は、環境ホルモンやダイオキシンなど県民向けに化学物質の解説ページを作成し、情報を提供している。

#### ③ ハードウェア、ソフトウェアおよびインフラ整備の進展

パソコンの基板上にネットワークコントローラが標準装備され、基本ソフトのOSもネットワーク接続を標準でサポートし、インターネット閲覧ソフトが無料で配布されている。さらに、接続業者間の競争が進み、安価で高速なインターネット接続が実現した。その上、インターネット利用環

境があれば、無料でホームページを開設できるため個人の情報発信が盛んになった。

### 3. 化学物質情報の検索

インターネットで化学物質情報を検索する場合、データの公開方法によって2つの検索がある。

1つは、インターネット検索サイトの利用。もう1つは、個別に作成されたデータベースの検索である。検索サイトは日常的に使用しているのですが、すぐに使うことができるが、個別データベースは公開しているサイトに接続しないと利用できないため、化学物質情報のリンク集を使いデータベースの所在を知ることになる。

インターネットを利用するメリットは、いつでも、どこからでも情報が無料で入手できることにある。さらに、探している情報を部分的なキーワードで検索でき、また結果を電子データとして2次利用することもできる。

#### 3.1 検索サイトの利用

事件や事故が起きた時、断片的な情報が入り、化学物質の毒性等の情報をすぐに知りたいことがある。化学物質情報は、何を知りたいかによって求める項目が異なってくる。たとえば化学物質による汚染が見つかった場合、まず毒性が問題となり、交通事故で積み荷がこぼれた場合は、火災・爆発の危険性情報が必要となってくる。時間が経ち、続報が入ると、詳細な情報や処理方法等の別な情報が必要となる。報告書をまとめる段階では、特定の情報が必要となり、信頼できる情報、評価された情報や何らかの知見が得られている情報を求められる。

詳細が不明な段階で、名称などから化学物質情報を求められた場合、まず初めにインターネットの検索サイトで検索し、MSDS情報を入手して概要を把握する。その上でMSDSに含まれている物質を特定する情報、たとえばCAS番号を使って個別のデータベースを検索すると詳細な情報を入手することができる。

##### 3.1.1 CASを使った情報の絞り込み方法

インターネットには、次のような検索サイトがある。

goo: <http://www.goo.ne.jp/>

google: <http://www.google.co.jp/>

表 2 ベンゼンの検索結果

キーワード	Go	Google
ベンゼン	16,448	48,900
ベンゼン+MSDS	263	1,650
ベンゼン+CAS	310	2,780
ベンゼン+MSDS+CAS	55	735
ベンゼン+MSDS+CAS+71-43-2	10	42
CAS+71-43-2	66	355
ベンゼン+CAS+71-43-2	57	295

最初に入手できる情報は、名称と考えられ、各検索サイトで使用量も多く、よく知られているベンゼンを検索した結果を表 2 に示す。

ベンゼンは、置換基のついた化学物質、たとえば「クロロベンゼン」等が検索され、さらに、「ベンゼン環」等も検索されるため、名称だけでは検索結果が多くなってしまい、絞込みを行う必要がある。物質を特定する情報が得られない段階で絞込みを行うには、化学物質情報のページによく使われている単語をキーワードに追加する必要がある。現在、化学物質の情報で入手できるものとしては MSDS が一番まとまった情報と考えられる。MSDS には名称、化学式、官報公示整理番号、CAS 番号、危険性や有害性などに関する情報も記載されており、製造・販売時に提供が義務づけられているためインターネットで公開している事業者が多い。

そこで、MSDS によく使用されている単語で化学物質情報に関係が深い単語を抽出すると、「MSDS」と「CAS」となる。物質を特定する情報がなく検索数が多い時は、有効な絞込み方法である。

検索結果はヒット率順に表示されるので、ある程度情報を絞り込んだ段階で先頭から 50 件程度の概要を目視で確認し、アドレス情報と組み合わせると目的とする情報を探することができる。アドレス情報には会社の「co」、官公庁の「go」や大学の「ac」等があり、製造会社の情報がほしいのか法規制情報がほしいのか、目的によって情報がありそうなアドレスを別画面に表示する。

次に、検索したページから CAS 番号を知ることが重要となる。CAS 番号がわかれば、検索サイトの結果から置換基がついた物質等を排除するこ

ともでき、個別のデータベースで検索する際、完全に一致する物質を検索でき、また名称検索で長い名称を入力することによる入力間違いは少なくなる。

名称と「MSDS」、 「CAS」 および CAS 番号で検索すると MSDS 情報を検索する確率が高くなるが、MSDS はデータシートに MSDS と記載していない場合もあり、また CAS 番号が記載されていない場合もあるので、厳密に絞込みを行うとデータを取りこぼすことが考えられる。

### 3.1.2 CAS 番号利用上の注意

CAS 番号は、CAS (Chemical Abstract Service) が付けている番号 (CAS Registry Numbers) で、CAS RN, CAS No. や CAS 番号と表記されるため、共通する CAS をキーワードとすることですべての表記に対応することができる。ここでわざわざ「CAS」を入れているのは、CAS 番号が日付と間違われて検索されることがあるからである。

CAS は化学文献の抄録をデータベース化し、文献に登場した CAS 未登録と考えられる化学物質に連番をつけている。最小の番号は、50-00-0 (ホルムアルデヒド) で、最大の番号は、594810-89-6 (2003年9月29日現在) となっている。また、データベースに登録された世界各国の法規制既存化学物質の総数は、22万9,843 となっている (<http://www.cas.org/cgi-bin/regreport.pl>)。

ちなみに、日本における化学物質審査規制法の既存化学物質は、約 2 万 6,000 種で、経済産業省が行った約 1 万 6,000 事業所に対するアンケート調査では、2001 年度で約 6,400 物質の使用報告があった ([http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/sitei/kakuhou.htm](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/sitei/kakuhou.htm))。

CAS 番号には規則性があり、一番右の 1 桁が全体の数字を検証する数字となっている。

途中のハイフン (-) は、数字を見やすくする区切りであり、一番右を除いて右から順に 1 桁目、2 桁目と数え、数字と桁数を掛け合わせた総和の 1 桁目が一番右の数字となっている。

ベンゼンでは、次のように計算できる。  
 $7 \times 4$  (桁目) +  $1 \times 3$  (桁目) +  $4 \times 2$  (桁目) +  $3 \times 1$  (桁目) = 42 (一番右の 2 と一致する)

CAS 番号で検索できない場合は、念のため確認した方がよい。

### 3.2 データベースへのアクセス

個別のデータベースは、検索エンジンから絞り込んで見つけることは難しい。そこで、いくつかのデータベースと最初にアクセスするとよいリンク集を紹介する。

#### ① リンク集

・国立医薬品食品衛生研究所「個々の化学物質の情報検索」：目的別にデータベースサイトを紹介

<http://www.nihs.go.jp/cheminfo/webguide.html>

・同「化学物質関連情報源のリスト」

<http://www.nihs.go.jp/cheminfo/kensaku/index.html>

・エコケミストリー研究会：日本の化学物質関連リンク集を紹介

<http://env.safetyeng.bsk.ynu.ac.jp/ecochemi/>

・化学物質リスク管理研究センター：化学物質のリスクに関連する新規情報をピックアップして紹介。化学物質情報リンク集を公開

<http://unit.aist.go.jp/crm/index.html>

#### ② データベース

・国立医薬品食品衛生研究所「ICSC(国際化学物質安全性カード)」：物性値、許容濃度、火災爆発、人体影響症状、予防、応急措置、出典

<http://www.nihs.go.jp/ICSC/>

・独立行政法人製品評価技術基盤機構「化学物質総合情報提供システム」

<http://www.safe.nite.go.jp/japan/db.html>

・「化学物質総合検索システム」：MSDS、法規制対象物質や評価物質リスト

「化学物質管理情報」：PRTRの集計結果、各国のPRTR対象物質を紹介

「既存化学物質安全性点検データ」：分解性・濃縮性の安全性点検結果

財団法人化学物質評価研究機構「公開情報データ」：生分解性の試験結果、ハザード評価シート

[http://www.cerij.or.jp/ceri\\_jp/koukai/koukai\\_menu.html](http://www.cerij.or.jp/ceri_jp/koukai/koukai_menu.html)

#### ③ 翻訳

・国立医薬品食品衛生研究所「ICSC標準語句・日英対照表」：ICSCを作成する際の対照表

<http://www.nihs.go.jp/ICSC/web-sp.html>

・特許翻訳の世界「化合物名データベース」：翻

訳者が翻訳する際の参考に化学物質名をデータベース化し公開

<http://www.monjunet.ne.jp/PT/chemical/>

### 4. 化学物質情報の発信

インターネットの検索サイトを使って化学物質情報が検索できることは前段で述べたが、それでは情報発信に必要なことは何だろうか。

検索には、「CAS」と個別のCAS番号をキーワードに用いると絞り込みができることを述べた。逆に考えると、化学物質に関する情報発信の際に、情報の中に「CAS番号：\*\*\*.\*\*.\*」とCAS番号を入れておくことで検索エンジンで検索できることになる。国が法規制対象の化学物質リストに名称とCAS番号を入れ、地方自治体は化学物質の測定結果を公開する際にCAS番号を入れ、製造業者が製品の成分名とCAS番号を公開する等、情報の発信者が検索情報をつけることで、インターネット全体を化学物質情報のデータベースとすることができる<sup>4)</sup>。

しかし、CAS番号を使う場合にも問題点がある。1つは、ダイオキシン類のように異性体が多い場合、すべてのCAS番号を情報として付加することは現実的ではないということである。対策としては、測定結果を毒性等量(TEQ)で表わしている2, 3, 7, 8-TCDDのCAS番号を代表として記入することが考えられる。もう1つは、法規制項目の定義が広い場合である。たとえばカドミウムおよびその化合物という場合、化学物質の分子式にCdを含む物質がすべて対象となるが、CAS番号を列挙することは困難であり、代表としてカドミウムのCAS番号を記載することが考えられる。

1つの化学物質情報をすべて集めて表示するならば共通項目としてCAS番号を用いる方法でよいが、特定の情報を表示するためにはさらに項目名を付加する必要がある。たとえば総合的なデータシートならば「MSDS」であり、「毒性」「法規制」や「測定結果」である。

データベースを構築するには、文献値等の情報の収集、評価、入力、更新等、労力と費用を要し、転記ミスも発生するおそれがあり、情報公開までの時間もかかる。法律等を作成した機関、毒性を試験した機関等、情報を作成した機関がそれぞれ

責任を持って情報を発信することでインターネット全体を化学物質情報のデータベースとすることができ、引用によるミスもなく、曖昧な解釈が入り込む余地もなくなり、結果として正しい情報が素早く伝わることにもなる。

## 5. CAS 番号でリンクしたデータベース

個別の情報発信は、個々のページに CAS 番号を埋込むことでインターネットデータベースに参加できるが、データベースを構築した時はどうすればよいだろうか。

1 つは、データベースの登録物質を名称と CAS 番号のリストにして公開し、検索エンジンに収集させることである。さらに、リスト中の CAS 番号にデータベースの検索をリンクとしてつけておき、CAS 番号をクリックするとその物質の情報を表示するようにしておく。

CAS 番号リンクは外部から直接データベースを検索できる機能なので、アクセス方法を公開しリンクを歓迎することでデータベース相互の連携が可能となる。

日本化学工業協会の化学製品情報データベースには、商品名から検索できる「製品データベース」と化学物質を検索できる「物質データベース」があり、製品データベースで検索した結果、商品に含まれている化学物質を物質データベースで表示することができる (<http://61.204.48.89/jciadb/dbmenu.html>)。

物質データベースの検索結果は、他のデータベースに CAS 番号でリンクしており、kis-net にもリンクしている。kis-net の検索結果からは、国立環境研究所の WebKis-Plus と国立医薬品食品衛生研究所の ICSC データにリンクしている。1 つのデータベースで検索すると、次々と情報が表示できることになり、別なデータベースにアクセスして再度検索する必要はない。当然、相手方のデータベースに CAS 番号を渡す際、CAS 番号が登録されているか判定した上で渡している。リンクを歓迎する際に CAS 番号リストを公開しておく、登録されていない CAS 番号はリンクを表示しないようにできる。

kis-net の CAS 番号リンクは、次のようにする。

<http://www.k-erc.pref.kanagawa.jp/kisnet/>

### code.asp?code=50-00-0

=の後ろに CAS 番号を付けて実行すると、kis-net の検索結果画面となる。

他のデータベースとリンクすることで情報を補完することができ、双方の情報を比較することで情報の間違いを減らすことができる。

CAS 番号リンクは、化学物質測定結果の公表等の情報発信の際にも利用することができ、特別にページを作成せずに利用者に化学物質の情報を提供することができる。

## 6. 今後の情報発信における問題点

### 6.1 データの出典

インターネットは、誰でも情報発信ができるためデータの信頼性(出典等)が問題となる。最近では出典を明記したデータベースが増えてきているが、kie-net は設計時にデータベース処理能力およびハードディスク容量の関係で出典情報を持たないデータベースとして設計・構築したため、出典の不明なデータベースとなっている。

kis-net への問合せでもっとも多いのが出典に対するものである。PRTR の関係で事業者は、有害な化学物質を使わない方向に進んでいる。その際、神奈川県データベースに有害情報が登録されていないことを条件にしている事業者もある。販売業者にとっては死活問題にもなるため、出典情報やデータの確認を求める問合せが多くなっている。出典情報の問合せについては、当時の書籍に当たり、毒性情報については RTECS 等のデータベースを検索して回答している。

### 6.2 毒性情報の解説

毒性情報で問題なのは、データベースが提供している毒性情報は、2種類あることである。1 つは実験結果であり、もう1つは実験結果を評価した結果である。実験結果は毒性情報が存在するということであり、毒性情報の存在する化学物質が有害だということではない。毒性情報が存在する≠毒性がある。

毒性があるかどうかは、実験結果の毒性情報を評価して決まる。たとえば毒物および劇物取締法の「毒物」であり、各種の「許容濃度」であり、発がん性評価の「人に対する発がん性がある」になる。急性毒性や変異原性の毒性データは、文献

に記載された有害作用の発生する濃度や変化の有無であり、データベースに登録すると結果として毒性情報が存在することになる。

また、個人から商品に対しての毒性情報を質問されることがあるが、化学物質個々のデータベースということを説明して含まれている成分について回答している。同じような質問に対し、情報の解説やQ&Aの充実が必要であると感じている。

### 6.3 法規制対象物質の選定

法規制で決められたコード番号の充実を求める要望も多い。国の各省庁が法規制物質の名前とコード番号を公開する例が多くなってきているが、データベースとリンクしていることが少ないため、利用者からはkis-netを法規制コード番号で検索したいとの要望が出されている。

CAS番号の例でも述べたが、規制項目のカドミウムおよびその化合物は化学物質の分子式にCdを含む物質がすべて対象となるが、ふつ素およびその化合物は、定められた分析法では分子式にFを含む物質がすべて対象とはならないので法規制対象物質か否か判定することが難しい<sup>5)</sup>。

県が化学物質の管理指針を制定した際は、対象物質リストをCAS番号つきで公表し、周知した。情報発信元が解釈も含めた情報を発信することで第三者の曖昧な解釈による間違いがなくなり、化学物質管理が推進されるものと考えられる。

## 7. おわりに

インターネットでは利用者が協力して作業することがある。kis-netでも法規制のコード番号充実を求められた際、利用者が独自にまとめた資料をいただき、労働安全衛生法施行令CAS番号対照表を共同作業で作成し、公開できている。使いたい人が共同して作成する手法は、インターネッ

トならではの情報発信・更新のあり方ではないだろうか。

インターネットにおける化学物質情報の収集および提供に関してまとめると、次のようになる。

- ・化学物質情報はインターネットの検索サイトで名称を入力し、検索数が多い場合は「CAS」や「MSDS」で絞り込むことでデータシート情報を検索することができる。
- ・日本語情報が得られない場合は英語名で検索するが、翻訳サイトを利用し検索エンジンだけでなく個別のサイトでデータベースを検索することも必要になる。
- ・情報発信の際は、他の情報と同時に検索されるようにCAS番号や項目名を情報として付加することでインターネット全体をデータベースとして利用することができる。また、情報発信元が情報を発信するとデータ更新が早くなり、データの引用による間違いも曖昧な解釈による間違いもなくなる。
- ・データベースを構築する際は外部からのCAS番号リンクを作成して公開し、データベースが相互につながりを持つことで情報の充実を図ることができる。

### — 参考文献 —

- 1) 都田光彦, 岡敬一, 吉見洋, 松本徹, 西村明夫: 事業所における化学物質情報のニーズ, 資源環境対策, **28**, 697-703, 1992
- 2) 岡敬一, 大道章一, 吉見洋: インターネットを利用した化学物質情報の収集, 安全工学シンポジウム講演予稿集, 171-172, 1997
- 3) 岡敬一, 大道章一: インターネットを利用したMSDS情報の収集, 安全工学, **36**, 22-27, 1997
- 4) 岡敬一, 化学物質の安全情報提供システム, 安全工学, **40**, 148-152, 2001
- 5) 岡敬一, 吉見洋, 油井秀人, 時田泰久: 法規制化学物質の検索法, 安全工学, **33**, 311-322, 1994