

# 米国国立医学図書館 NLM(National Library of Medicine) の

## 化学物質検索サイトの利用ガイドンス

国立医学図書館(National Library of Medicine (以下 NLM))は、米国保健福祉省(U.S. Department of Health and Human Services, HHS)、国立衛生研究所(National Institute of Health, NIH)に所属する機関です。莫大な量のデータを数百万のユーザーに配信するサービスを開発しており、米国の科学者、医療従事者、一般人のみならず、世界中の人々から、オンライン情報へ毎年十億回ものアクセスを受ける世界最大のライブラリーです。

### 1 はじめに

米国国立図書館(NLM)の「ChemID plus」(<http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/>)を利用すると、入力したキーワード、毒性値、物性値などの条件で、化学物質を検索しそのデータを保有する化学物質データベースへのリンクの一覧が表示されます。従って、対象化学物質に関するデータが存在するかを簡単に知ることができます。

### 2 検索方法

以下に示す 6 つの検索項目から一つまたはいくつか入力して検索することができます。複数入力した場合、対象のデータベースや物性等の条件付き検索となります。

図 1 検索ページの全体画面

**Substance Identification** : 物質名、CAS 番号、分子式、クラス分類、データベース名などを入力します。

**Toxicity** : LD50 のような毒性データを条件に加えます。

**Chemical Properties** : 融点等の物理化学的な条件を入力します。

**Locator Codes** : 検索するデータベースを指定します。

**Structure** : 化学構造を入力します。

**Molecular Weight** : 分子量の範囲を入力します。

ここでは、「**Substance Identification**」、「**Toxicity**」、および「**Chemical Properties**」からの検索方法について説明します。

## 2.1 物質名からの検索 (Substance Identification)

物質名、CAS 番号、分子式などから検索する場合、こちらから検索します。最も簡単な検索方法です。

The screenshot shows the 'Substance Identification' search interface. It features a dropdown menu for 'Name/Synonym' and a search operator dropdown set to 'Equals'. A red box highlights the input field for the keyword, with the text 'キーワードの入力欄' (Keyword input field) below it. Below the input field, it says 'Data is available for 387,042 records.' To the right, a green callout box titled '《条件設定》' (Condition Setting) explains the search operators: 'Equals: キーワードと一致するもの' (Matches keyword), 'Starts with: キーワードで始まるもの' (Starts with keyword), and 'Contains: キーワードを含むもの' (Contains keyword). Below the interface, a blue callout box titled '《検索項目の選択》' (Search Item Selection) lists the search criteria: 'Name/Synonym: 物質名から検索します (例: Methanol, Benzene, HBCD) アセトンを検索する場合、Acetone, 2-Propanone, Dimethyl ketone のようにいずれの物質名でも検索できます。' (Search by substance name); 'CAS RN: CAS 番号から検索します (例: メタン⇒74-82-8)' (Search by CAS number); 'Molecular Formula: 分子式から検索します (例: アセトン⇒C3H6O)' (Search by molecular formula); 'Classification Code: クラス分類から検索します' (Search by class); and 'Locator: 検索対象とするデータベースを指定します' (Specify the database to search).

**Substance Identification** ⓘ

Name/Synonym ▾ Equals ▾

キーワードの入力欄

Data is available for 387,042 records.

《条件設定》

**Equals:** キーワードと一致するもの

**Starts with:** キーワードで始まるもの

**Contains:** キーワードを含むもの

《検索項目の選択》

**Name/Synonym** : 物質名から検索します (例 : Methanol, Benzene, HBCD)  
アセトンを検索する場合、Acetone, 2-Propanone, Dimethyl ketone のようにいずれの物質名でも検索できます。

**CAS RN** : CAS 番号から検索します (例 : メタン⇒74-82-8)

**Molecular Formula** : 分子式から検索します (例 : アセトン⇒C3H6O)

**Classification Code** : クラス分類から検索します

**Locator** : 検索対象とするデータベースを指定します

常の検索では、物質名、CAS 番号、分子式による検索が最も簡単です。「**Classification Code**」および「**Locator**」は特殊な場合のみ選択します。

## 2.2 毒性の基準値を指定して検索 (Toxicity)

毒性の基準値(LD<sub>50</sub>、LC<sub>50</sub>など)を条件に設定する場合、こちらから検索します。

**Toxicity** ⓘ

Test: (any) between (mg/kg or ppm)

Species: (any)

Route: (any)

Effect: (any)

Toxicity data is available for 139,354 records.

「条件値の入力欄」  
between の場合は 2 つ値をスペースで空けて入力

「Species」  
試験体の指定

「Effect」  
影響の種類を選択します

「Test」  
毒性の基準値の種類を選択  
[LD(all), LD50, LC(all), LC50, TDLo, TCLo]

「Route」  
曝露経路の指定

「条件設定」  
between: 値の範囲を指定します  
less than: 指定の値より低いもの  
greater than: 指定の値より高いもの  
equals: 指定の値と一致するもの  
less than or equal: 指定の値以下  
greater than or equal: 指定の値以上

## 2.3 物性値の条件を指定して検索 (Physical Properties)

物性値の条件を指定する場合、こちらから検索します。

**Physical Properties** ⓘ

Melting Point

between

Either Measurement Type

Physical property data was provided by Syracuse Research Corporation and is available for 25,461 records.

「物性値の条件指定」  
検索の条件とする沸点、融点、log Pow、蒸気圧等の物性値を選択します

「条件値の入力欄」  
between の場合は 2 つ値をスペースで空けて入力

「値の条件設定」  
between: 値の範囲を指定します  
less than: 指定の値より低いもの  
greater than: 指定の値より高いもの  
equals: 指定の値と一致するもの  
less than or equal: 指定の値以下  
greater than or equal: 指定の値以上

「物性値が得られた条件の指定」  
Experimental: 実験的に得られた値  
Estimated: 推定により得られた値  
Either: 両方

### 3 ペルフルオロオクタンスルホン酸塩(PFOS)の検索例

The screenshot shows the ChemIDplus Advanced search interface. At the top, there is a header for the United States National Library of Medicine (NLM) and ChemIDplus Advanced. Below the header, there are navigation links for News, SIS Home, Site, About Us, Contact, and Help. There are also links for Env. Health & Toxicology, TOXNET, ChemIDplus Lite, and Advanced.

The main search area is titled "Substance Identification" and includes a search bar with the text "PFOS". The search criteria are set to "Name/Synonym" and "Equals". The search results show "Data is available for 387,042 records.".

Annotations on the screenshot provide instructions for the search process:

- ① 物質名で検索するため、「Name/Synonym」を選択
- ② キーワードと一致するものを検索するため「Equals(一致)」を選択
- ③ 物質名「PFOS」もしくは「Perfluorooctane sulfonic acid」を入力する
- ④ 「Search」をクリックする

Other sections visible on the page include "Physical Properties" (Melting Point, Measurement Type), "Locator Codes", "Structure Search Options" (Substructure Search, Similarity Search, Exact, Flex, Flexplus), "Display structures using" (Marvin, Chime), and "Molecular Weight".

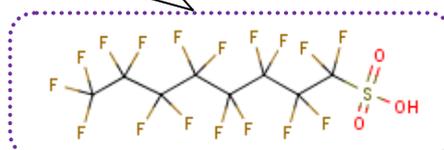
#### 4 ペルフルオロオクタンスルホン酸塩(PFOS)の検索結果

United States National Library of Medicine  
**ChemIDplus Advanced**  
 News SIS Home | Site | About Us | Contact | Help  
 ▶ Env. Health & Toxicology ▶ TOXNET ▶ ChemIDplus Lite ▶ Advanced

物質名と CAS 番号(RN)

**NAME: Perfluorooctane sulfonic acid**  
**RN: 1763-23-1**

物質の構造式



基本情報として、構造、物質名、同義語、化学式、クラス分類、CAS 番号などの情報が得られます

MW: 500.125

[Enlarge Structure](#)

<p><b>Basic Information</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Full Record</li> <li>Structure</li> <li>Names &amp; Synonyms</li> <li>Formulas</li> <li>Classification Codes</li> <li>Registry Numbers</li> </ul>	<p>For more information about this substance, you may select from the the links below.</p>	<p><b>Search Navigation</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Start New Query</li> <li>Modify Query</li> <li>Show Query</li> <li>Search History</li> <li>Structure Similarity Search</li> <li>Structure Salt/Parent Search</li> <li>Transfer Structure</li> <li>Basic ChemIDplus Search</li> </ul>
	<p><b>File Locator</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li><a href="#">DART</a></li> <li><a href="#">EINECS</a></li> <li><a href="#">HSDB</a></li> <li><a href="#">MeSH</a></li> <li><a href="#">PubChem</a></li> <li><a href="#">PubMed</a></li> <li><a href="#">PubMed AIDS</a></li> <li><a href="#">PubMed Cancer</a></li> <li><a href="#">PubMed Toxicology</a></li> <li><a href="#">TOXLINE</a></li> </ul> <p><b>Internet Locator</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li><a href="#">CTD</a></li> <li><a href="#">EPA SRS</a></li> <li><a href="#">SRC DATALOG</a></li> <li><a href="#">USA.gov</a></li> </ul> <p><b>Superlist Locator</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li><a href="#">TSCAINV</a></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li><a href="#">Developmental and Reprod.Tox.</a></li> <li><a href="#">EU Inv of Exist. Comm. Chem Sub</a></li> <li><a href="#">Hazardous Substances Data Bank</a></li> <li><a href="#">Medical Subject Headings File</a></li> <li><a href="#">PubChem</a></li> <li><a href="#">Biomedical Citations From PubMed</a></li> <li><a href="#">AIDS Citations from PubMed</a></li> <li><a href="#">Cancer Citations from PubMed</a></li> <li><a href="#">Toxicology Citations From PubMed</a></li> <li><a href="#">NLM TOXLINE on TOXNET</a></li> <li><a href="#">Comparative Toxicogenomics Database</a></li> <li><a href="#">EPA Substance Registry System</a></li> <li><a href="#">Syracuse Res. Corp. DATALOG</a></li> <li><a href="#">USA.gov Search Engine</a></li> <li><a href="#">EPA Chem. Sub. Inventory</a></li> </ul>

検索した物質の情報を有する各種データベースへ直接リンクが表示されます。「**File Locator**」は、NLM 内の他のデータベース、「**Internet Locator**」は、外部のデータベース、「**Superlist Locator**」は、関連する法規制のリストへそれぞれリンクします。