

CICSJ Bulletin Vol.14, No.4, Aug, 1996

このページは「日本化学会・情報化学部会」の責任において運営されています。

目次

- [巻頭言 第19回情報化学討論会の開催に当たって](#) 吉田 元二
- [第19回情報化学討論会 プログラム](#)
- [アブストラクト](#)
- [特別講演 自然界・生物界における「Complex Dynamics」の役割を探る](#) .. 奈良 重俊
- [第24回構造活性相関シンポジウム プログラム](#)
- [第3回計算化学セミナーを終えて](#) 松岡 俊和

- [CICSJ INDEX にもどる](#)

第3回計算化学セミナーを終えて

熊本大学薬学部 松岡俊和

日本化学会情報化学部会九州支部では、昨年度から分子設計・反応設計、反応機構解析、構造決定等の分野でのコンピュータ利用の普及と研究者相互の交流を促す目的で、計算化学セミナーを企画してきた。第3回目のセミナーを本年7月12日、熊本大学薬学部において開催した。薬学は、化学から、生命科学までをカバーする学際領域であること、また工学部・理学部等の他の理系学部に比べて、研究にコンピュータを利用することには、ごく一部を除いては、やや遅れをとっている感があることから、計算のみにかたよらず、有機化学・生物有機化学の領域で、コンピュータを実際に研究へ有効に利用されておられる方々に、できるだけわかりやすく講演していただくようお願いした。講演題目等は以下の通りであった。

1. 不飽和ジチオ炭酸エステル類の連続ペリ環状反応における分子軌道法の適用
(熊本大学薬学部) ○衛藤 仁、原野一誠
2. 熊本大学情報ネットワークにおける計算機化学環境
(熊本大学総合情報処理センター) 武蔵泰雄
3. 非天然アミノ酸を導入した機能性ペプチドの分子設計
ー分子力学ならびに分子動力学計算の利用ー
(熊本大学工学部・物質生命化学科) 石田 齊
4. 含フッ素テトラアリアルールホウ酸イオンの化学
ー耐酸性の実験化学的・計算化学的評価ー
(九州大学機能物質科学研究所) 園田高明
5. 有機反応に及ぼす溶媒効果の理論的取り扱い
(九州大学有機化学基礎研究センター) 堀 憲次
6. 光環化付加反応における配向選択性等のFrontier MOからの理解
(鹿児島大学工学部・応用化学工学科) ○水主高昭、下茂徹朗、染川賢一
7. 有機化学における高度知識情報処理
ー合成経路設計と自動構造解析を例としてー
(豊橋技術科学大学・知識情報工学系) 船津公人
8. 【特別講演】薬物の構造活性相関とドラッグデザイン
(京都大学名誉教授、富士通関西システムラボラトリ) 藤田稔夫

熊本の地で、どれほどの参加者を得ることができるか幹事としてはいささか心配であったが、皆様のご協力のお陰で、九州一円から80名を越す参加者があった。参加者からも、「コンピュータを研究に活用したくても、何から始めれば良いのかわからない」との声もあり、このようなセミナーに対する潜在的な需要があることを痛感した。今後、実習を中心としたワークショップの開催を含め、支部活動をさらに活性化していくつもりである。また情報化学部会の会員増も図りたいと思う。なお今回のセミナーの講演要旨は、九州・山口CCSネットワークホームページ (<http://sparklx.chem.yamaguchi-u.ac.jp/>) に掲載している。

CICSJ Bulletin Vol.14, No.5, October 1997

このページは「日本化学会・情報化学部会」の責任において運営されています。

目次

特集記事

- [特集を組むにあたって](#) 木村美実子
- [物質の同定と表現の諸問題](#) 花井 莊輔
- [書く人と読む人のための化合物－情報検索に備えて](#) 畑 一夫
- [SDBS \(スペクトルデータベースシステム\) における化合物の考え方](#) 早水紀久子
- [CAデータベースにおける化学物質の認識](#) 井上 直己
- [Internet時代の有機化合物の表現法雑感](#) 阿部 英次
- [WWW上の化学関連サイト](#) 嶋 裕

部会行事

- 情報化学部会 総会

[編集後記](#)

[CICSJ INDEX にもどる](#)

物質の同定と表現の諸問題

(社) 日本化学工業協会 花井 荘輔

jcia@highway.or.jp

1. はじめに

「物質の同定と表現の問題でなにか考えていることを」という編集委員会の依頼を受け、いろいろと考えてみました。「化学研究における情報の有効利用」という立場で長く仕事をしてきた経験で考えてみると、次のような問題があることに気がつきます。

情報発信の立場：自分の得た情報を正しく発信するために、物質を正しく認識し表現すること
 情報集積の立場：同じ物質に関する情報を1か所に集めるために、物質の異同（アイデンティティ）を（できれば自動的に）正しく判断できる表現法を利用すること
 情報利用の立場：物質の同定と表現にはいろいろな問題が存在し、情報システムにはそれぞれの特徴があることを理解し賢く利用すること
 まだ完全に整理できたわけではないのですが、問題提起という意味でまとめてみました。

2. 基本的な問題

まず物質の同定や表現に関してどのような問題があり得るのかを、図1で考えてみます。

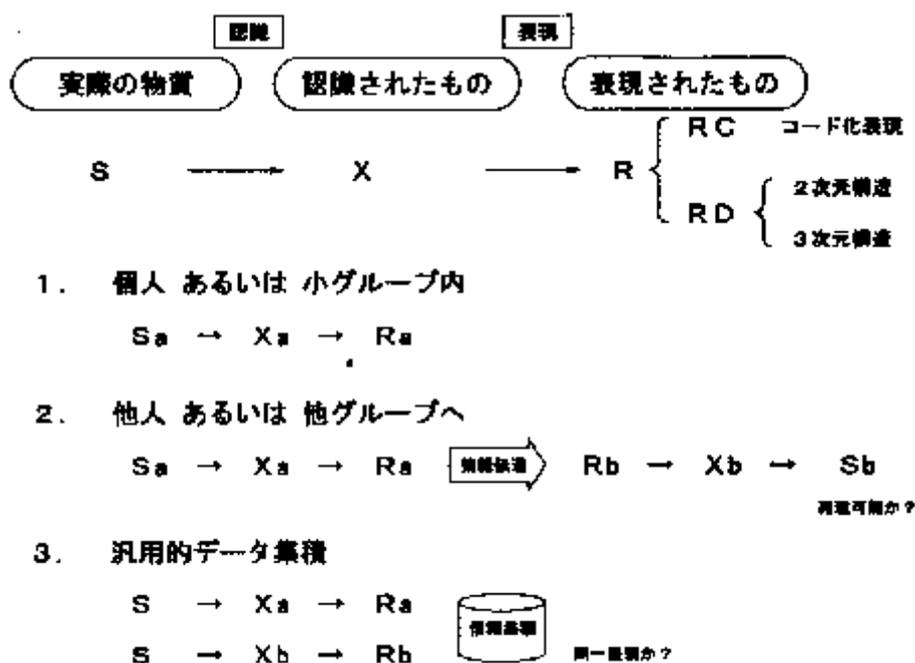


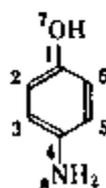
図1. 認識と表現に関する問題

自分で新しい物質を合成したり購入したりしてなにか物質 (S) が現実存在するものとします。スペクトルや物性を測定して、「この物質はこういう構造でこういう性質だ」と認識した時に、自分の頭の中に存在するものを X としましょう。形は問いません。それをある形に（主として視覚に訴える構造図や名称文字、音でもいいとしましょう）表現することが、人間社会で仕事をしていく立場では必要になります。表現されたものを R とします。物質の場合 2次元あるいは 3次元の構造図 (RD) か文字等のコード化されたもの (RC) で書かれることが多いようです。コード表現には、番号・名称・分子式・記号系などいろいろあります (図2)。それぞれには特徴がありますが、そのことは別に (花井(1986)) 書きましたのでここでは省略します。

登録番号	CAS登録番号	123-30-8
	Aldrich 銘柄番号	A7,132-8
組成式	分子式	C ₆ H ₇ N ₁ O ₁
	示性式	HQ-C ₆ H ₄ -NH ₂
名称	商品名	Rodinal など
	CA索引名	Phenol, 4-amino
記号表記	URLN	ZR DQ
	SMILES	Nc1ccc(O)cc1

結合表

構造式



— 省略 —

図2 代表的な化合物表現法

人間にわかりやすいのは2次元構造図による表現ですが、Hoffmannら(1991)がおもしろい観点でこの問題を論じています。2次元構造表記は実体の本質を抽象して伝えるためにいろいろ工夫されてきたという意味でArtであるというその主張がわかる気がします。この際Artはやはり芸術と読むべきでしょう。さらに「化学者は3次元で構造を表現すべきであり、2次元構造図に留まるかぎり、その世界は錬金術に終わる」という恐い主張(P-L Luisiら(1990)があることも紹介しておきます。

さて、自分個人だけの場合(1)は認識X_aで留まっても問題はないかもしれませんが、ノートには自分だけが知る符号でもいいわけです。身内のグループでもどうい表現をとるかはあまり問題になりません。「あれ」とか「0157」のような他人には実体がなにもわからない符丁で表現してもわかる人にはわかるわけです。

問題は他の個人あるいはグループに情報を伝達する時(2)に生じ得ます。研究者個人aから表現R_aを伝達された研究者bが物質S_bを再現できなければいけないからです。表現R_aが正しく伝達されX_bで再現されるには記号変換の規則が正しく用いられる必要があります。もちろんそのためには、X_a・R_aが正しく認識され表現されていることが大前提です。ここでミスが発生などの問題(後述)があることとなります。発信者aで記号変換の規則が正しく理解・運用されていなければなりませんし、伝達の過程でノイズが混入することも許されません。

汎用的なデータベースに情報を蓄積する時(3)には、同じ物質Sに関する情報は1か所に集まる必要があります。この仕事は、対象とする物質が少数の場合は個人でも可能ですが、多数の物質に関する情報を自動的に処理する時には、ある物質についての各種の表現がシステム内では一致したものになる仕組みをつくる必要があります。いわゆる正準表現(Canonical representation)の問題です。

Unique-unambiguous(1元1項対応表現)の問題といえばハムンと思われるかたが多いと思います。最近の若い方はなんのことかと思われるかもしれません。データベースでの問題はひとが判断するという逃げ手もありますが、スペクトル情報などから化学構造を自動決定しようというCHEMICSのようなシステムでは、ある条件に合致する構造を網羅的に列挙するためには構造と表現の1:1対応を完全に保障するシステムが必要になります。1960年代から1970年代にかけて化合物の構造処理システムが広く研究されている時には大問題でした。いろいろなアルゴリズムが提案されましたが、すぐその反例が見つかるという状況でした。Morganのアルゴリズムの展開が主流でしたが、あらゆる対象構造に対し完全無欠であることの証明は難しいようです。

実体と記号表現システムとの対応関係には図3のようなものがあります。IUPAC命名法はひとつの物質に複数の命名を許しますからnon-uniqueであり、分子式表現はエタノールとエチルエーテルに同じ表現C₂H₆O1を与えますからambiguousということになります。正準表現は構造と記号の間に1:1(unique-unambiguous)の関係が存在するものをいいます。

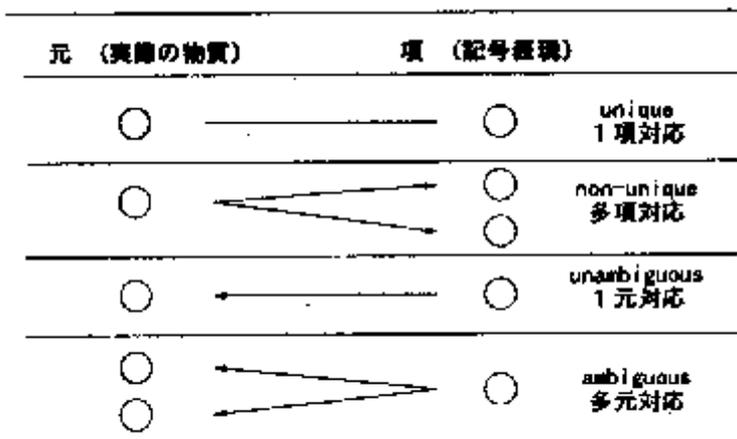


図3 元と項の対応関係

3. 実際の問題

認識や表現に関してこれらの基本問題はどのような形をとるのでしょうか（図4）。

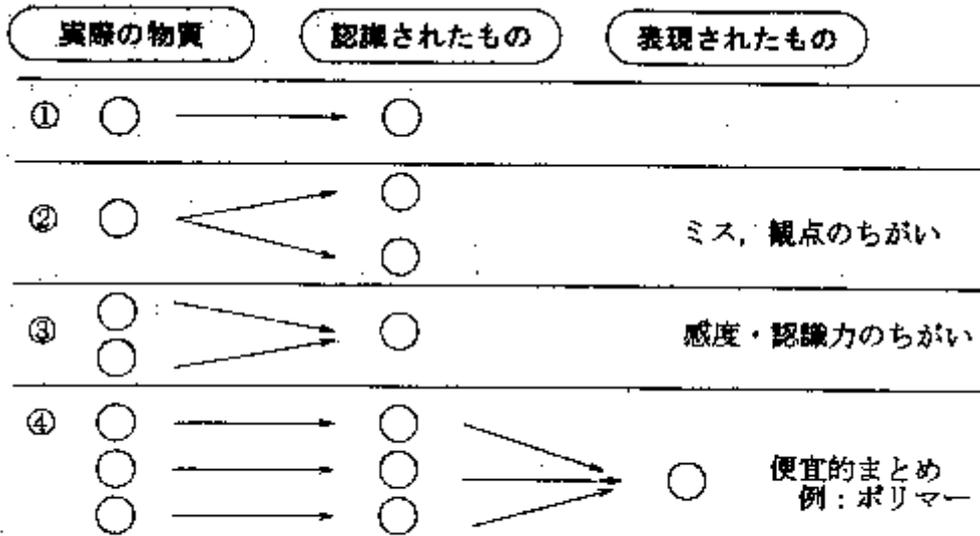


図4. 実際の問題

1は問題ありません。ただ認識が正しくても、表現をミスしては元も子もありません。命名法の適用が不完全であるために、まちがった表現やあいまいな表現になる例は本特集の他所で議論されると思います。また分子式ではCAS登録システムで登録番号を調べるための重要な出発点ですが、構造図から分子式を正しく計算するのも簡単ではありません。私の経験では、合成化学者で約5%、私みたいなふつうの化学屋で約10%の計算ミスが発生します。ご用心あれ。

2はあるものを違って認識する場合です。例えば、文献で物質Aと表記されていても物性をよく見ると物質Bであるように思われることなどです。その由来は不注意による単なる転記ミスから勘違いなどいろいろあるでしょう。図2のフェノールを、ある人は芳香族化合物とし、ある人は1級アミン、別の人はアルカリ可溶性物質と認識・表現して満足するかも知れません。群盲象を撫でるの場合です。部分を正しく認識しても全体を正しく認識していないわけです。

3は感度や解像力の不足のために異なる物を区別できない場合です。これはミスのひとつですが、目的によっては主成分のみ正しく認識できればそれ以外の区別する必要がない場合もあり得るわけですね。例えばアミンの対塩の硫酸でも塩酸でも同じアミンだよという認識が必要十分の場合もあるでしょう。同じことはカルボン酸の金属塩（例：EDTAのNa塩）でもあります。置換金属数がちがえば物質としてみればちがうわけですが、現実には問題にしなくてもよい場合が多いかも知れません。データベースの編集作業の過程では、安易に最初に目にした近縁物質の番号をアイデンティティの確認なしに使ってしまうというケースもあるようです。

表現システムの問題もからんでやや複雑なのが④の場合です。例としてCAS登録システムでのポリマーの扱いを考えています。②と③の問題はいわば個としての単一物質のアイデンティティが明確な実体Sが完全に正しくは認識されないことに問題がありました。はっきりしたアイデンティティを明確に規定することが困難であるために問題となるのが④です。

有機低分子化合物では純品がとれやすく構造決定も簡単だから問題なしとしましようか。しかし、原理的に連続的に幅があるものが対象となると問題が生じます。有機低分子でも不純物のある程度含むとなると、どこまでを他と異なる単一物質というかというアイデンティティの問題が生じます。

高分子化合物では問題がもっと明確だと思います。ホモポリマーにしても重合度分布が大幅にちがうものを同一物質とすることには多くの高分子研究者は同意しないでしょう。コポリマーになればさらにモノマー比の問題があり、かつ同じ比率でも共重合の仕方できたものはちがうよということになるでしょう。

しかし現実の問題としてCASの登録システムでは、これらが基本的には同一の番号を与えられています。Exxon社のKabakさんが特に特許検索の点から、長くこの問題を取り上げていました。CASでもいろいろと工夫改良を重ねていますが、専門研究者と化学一般のデータベース作成者との立場の差は大きいと思います。ポリマーに関する数多くのDR (Deleted Registry Number)の存在がこの問題の深刻さを伺わせます。ここにも9対1の法則が成立しそうです。「9割の単純な物質を処理するには全体の1割の労力で済むが、1割の複雑な物質（ポリマー・錯体・合金・混合物など）を処理するのに労力の9割が必要となる」。

この種の問題は、研究者個人あるいはその分野の専門家の間では問題にならないのでしょうか。本人にとっては、自分の世界がすべてです。こういったことを問題視する必要がないくらいわかっているのが専門家だからです。こういう問題はこれらの情報を一般的に利用できるようにまとめる時におこります。個別に発生する情報が正しいとしても、その間の関連をどうつけるか。いわば天空の高みから、各情報の関連を判断しなければならないデータベース作成者が悩む問題です。

世はインターネットに代表される分散化の時代です。すべてが発信者となり、表現もより自由になります。コンピュータシステムでの表現には、大文字・小文字の区別、かっこのつけかた、長音とハイフンの区別、ブランクの入れかたなど人間系では問題にならないことで全くちがった結果になるという問題があります。ますます増大するエントロピーをシステムがどうコントロールできるのか、あるいはその必要はないのか、しっかり考える時期かも知れません。

4. おわりにーどう対処するのか

まずこういう問題が存在することを良く認識する必要があります。情報発信者としての論文・特許の著者は、ミスが無いようにすべきなのは当然として、利用者がその物質を必要に応じて正しくかつできるだけ限定してアイデンティファイできるように物性データなどをできるだけ詳しく提供すべきです。

システムで表現する際には、番号・名称・構造式だけでなく物性値もつけて表現する必要があるかもしれません。例えば、有機低分子でも番号＋融点／対イオン／分子量の記述とか。

しかし、システムのありかたが一般的である場合は、かえって複雑になるだけかもしれません。とすればシステムを利用する場合には、ミスやあいまいさが避けられない現状と問題をよくとらえて、必要に応じて番号と構造の関係をCAS登録ファイルなどで確認する習慣をつけるとか、検索時にはずばりのヒットだけを求めるのではなく、広めに検索し（単一観点・単一検索語だけでなく複数でカバーする）その出力から求める情報を取り出すという態度が賢いやりかただと思います。

引用資料

花井(1986) 小野修一郎編：コンピュータケミストリー 第4章 「化学構造処理」 丸善
Hoffmannら(1991) R.Hoffmann & P.Laszlo, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* Vol.30, 1-16
P.-L. Luisiら(1990) P.-L. Luisi & R.M.Thomas, *Naturwissenschaften*, Vol.77, 67

はない そうすけ HANAI, Sohsuke

しばらく企業の化学研究における情報の有効利用という立場で仕事をしてきましたが、昨年6月から業界団体に出向し、「化学物質のリスクアセスメントシステムの構築」という仕事をしています。趣味はテニスとスライド写真（特に花）。

連絡先 〒100 東京都千代田区霞が関3-2-6 (社) 日本化学工業協会 電話 03-3580-1381

書く人と読む人のための化合物名—情報検索に備えて—

日本化学会化合物命名法校閲委員 畑 一 夫

化学の論文や報告書などの文書を作って、その内容を正しく伝えるためには、化合物名や化学用語が標準化された正しいものでなければならぬし、またそれらの文書を読んで情報を理解するには書かれてある化合物名や化学用語が正しいものである事が前提となる。筆者は長年これらの標準化の仕事に関与するとともに、日本化学会への投稿論文を査読し用語の正誤訂正に携わってきた経験から、論文の執筆者はどんな所に気をつければよいかを、思いつくままに列記してみよう。

化合物の基準名として国際的に通用するのは IUPAC 名 および Chemical Abstracts Index Names の両者がある。歴史的には研究者によって勝手につけられた有機化合物の名前をなるべく化学構造がわかるような国際的な名称に統一しようという意向で 1892 年に提案された Geneva 命名法が原典で、その後国際的な IUPAC 名として広く普及し、現在でも論文などを書くのに最も広く使われているのはご承知のとおり。しかし、古くから知られた化合物に対しては慣用名のほか ethyl alcohol, ethanol など複数の名称を認めているので、一つの化合物に関する情報検索の目的で使うのには不適當である。Chemical Abstracts では IUPAC 名を根源として独自の命名指針を定め、すべての化合物に対して化学構造と化合物名とが 1:1 になるようなシステムを確立し、1972 年以降 現在に至るまでこのシステムを厳守している。

1. IUPAC 命名法— 論文を書く人のための命名法 —

◆有機化学命名法は 1947 年初版以来何回かの小改訂が加えられて現在の 1979 Edition に至ったもので、全世界の化学者に普及して命名規則自体に問題点はない。しかし執筆者が文書を作成するにあたって、規則書自体を見て化合物名を書くという事はまずないので、書かれた文書に間違った名前が出てくるのは毎度のことである。

日本化学会では IUPAC 命名法の要点をまとめた解説書『化合物命名法』を刊行し、毎年かなりの部数が売れているが、初心学生の教育用が多いようで、実際の論文執筆者はこんなものを見ないで自分なりに覚えた化合物名を疑念もなく書いているのが実情と思われる。投稿論文によく見掛ける誤りの幾つかを挙げてみよう。

◇置換命名法と基官能命名法との混同

アルコールの名称：置換名（炭化水素名 + -ol）、基官能名（基名 + alcohol）を混同する。C₃H₇O₂ は 2-propanol, isopropyl alcohol が正しく、isopropanol は誤名（isopropane という炭化水素は存在しない）。命名規則を知らないで、類例からの見様見真似で yl alcohol は何でも ol としてしまう。

カルボン酸、スルホン酸から導かれる酸基の名称：基官能名では benzenesulfonyl chloride のようになるが、同じ基が化合物内の置換基となるときは phenylsulfonyl と命名される。

単純な化合物名の誤りは、このように命名法規則によらないで自己流に書くという原因によるものと言っても過言ではない。

◇縮合環の名称が正しく書けない執筆者が多い。ちょっと複雑な縮合環の命名は規則を見ても炭素環と複素環とが別々に書いてあって、理解困難である。多くの執筆者は類似例から見様見真似で名称を作ったり、あるいは他の文献に書いてある名前（意外に間違いが多い）をそのまま失敬したと思われる名称が多い。日本化学会の『化合物命名法』には、炭素環と複素環に共用できるようにアレンジして執筆向けにかなり丁寧に解説してあるので活用していただきたい。

◇環状ケトンの名称が正しく書けない執筆者が多い。指示水素 2H と付加水素 (2H) の表示を意識して、1(2H)-naphthalenone, 2H-cyclohepta [b] furan-2-one のような名称の構築には気をつけていただきたい。これも上記『化合物命名法』に初心者向けの解説がある。

以上の 2 項は、論文執筆者に望ましい心掛けであるが、これは出版物から情報を得ようとする読者にとっても必要なことである。出版物に正しい化合物名が書いてあっても、それがどんな化学構造を表わすかという事が正確に読み取れなくては役に立たない。読者も命名法を心得ておく必要がある。

◇IUPAC 有機化学命名法は 50 年の歴史を経てすっかり定着したと思われていたが、最近出版された次の “Guide” によって思わぬ異変がもたらされた。

A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds

Recommendations 1993 ◆B 1993 by IUPAC (Blackwell)

この “Guide” には従来の “Nomenclature” 1979 Edition の使用上の解説とともに幾つかの補足修正があるが、最大の異変は接尾語で表記される -ol, -one, -carboxylic acid など、および不飽和語尾 -ene, -yne の位置番号はこれらの接尾語の直前に置くこと指定されたことである。

例： but-2-ene pentane-2,4-dione naphthalene-2-sulfonic acid

従来の “Nomenclature” 1979 Edition までの序文には「化合物名は異なる言語に適応できるもの」を旨とすると書いてあって、位置番号をどこに置くかはどこにも書いてなかった。例えば、1940 年代英国では but-2-ene、米国では 2-butene、ドイツでは Buten-(2) と書くのが普通だったが、“IUPAC Nomenclature” では各国の事情によりどちらでもよいことにして、規則書に出る化合物名の例としては Chemical Abstracts 方式で位置番号は母体化合物名の前に書いてある。

“Guide 1993” の前書きには ‘unique’ name のために IUPAC English style によると書いてあるが、そうなることからは IUPAC 名と CA 名がことごとく異なることになり、迷惑な話である。

日本でこれまで使われてきた化合物名は IUPAC 1979 年規則あるいは CA 方式によるものがほぼ定着しているので、投稿論文を査読する立場では今回の “IUPAC Guide” の処置に難渋している。命名法にそれほど関心のある人でも “Guide 1993” が出たことを知る人は極めて少ない。長い伝統のある化合物名をいまさら改めようとしてもまず不可能とあきらめるしかないだろう。

英語の論文なら but-2-ene と書いてあっても戸惑う人はあまりないだろうが、日本語では「ブト-2-エン」ではまず理解できないだろう。「2-ブテン」という日本語名を捨てるわけにはいかない。

◆無機化学命名法は歴史が新しく、IUPAC の初版が 1971 年版、改訂されて現在は 1990 年版が使用されている。古くから知られていた無機化合物は比較的組成の簡単なもので、初期の慣用名がそのまま使われていたものが多い。近代的研究によって化学構造が解明されるに及び、有機化合物と同様に化学構造を明示する体系的命名法が必要となり、体系名を基本とする IUPAC 命名法が確立された。しかし体系名を使うような教育が極めて不十分なため、いまだに古い名前が横行している。年配の化学者、化学工業系の技術者などには未だに古い名前が浸透していて、容易には改められない。

それでも、新しい IUPAC 名が高校教科書に採用され、また日本化学会編集の論文誌その他の出版物で IUPAC 名に改めるよう努力した結果、炭酸ガス、重炭酸ソーダ、塩化第二鉄などの名前は殆ど見掛けなくなり、二酸化炭素、炭酸水素ナトリウム、塩化鉄(III)などに改められた。

IUPAC 無機化学命名規則は 1990 年版で古来の慣用名を捨てて体系名に改める方向で改訂されているので、 HClO は hypochlorous acid でよいが、 HBrO は hydrogen monooxobromate とするというような行き過ぎた勧告まであって、当分の間混乱は免れないだろう。

IUPAC 1990 年規則で非常に便利になったのは錯体の命名法である。金属錯体は無機化学でも有機化学でも広範な研究対象となり、その名称の標準化は情報検索の観点からも必要だったが、かなり複雑な構造の錯体でも 1990 年規則によって体系名として命名可能となった。体系名を書いたり読んだりするには η , κ , μ などの記号を理解する必要があるが、初心者にとって必要最小限のことは日本化学会編の『化合物命名法』に解説してあるので利用していただきたい。

2. Chemical Abstracts Index Names - 情報検索のための命名法

Chemical Abstracts では既知の化合物に関する情報を検索するのを目的として、化合物には化学構造と名称とが 1:1 に対応するような命名システムが作られている。‘unique name’ 構成の方針としては IUPAC の基本体系名を極端なまでに採用している。

単純な化合物についても isobutane, toluene は使わないで 2-methylpropane, methylbenzene とする。t-butyl は使わないで 1,1-dimethylethyl とする。カルボン酸も古来の名称としては formic acid, acetic acid, benzoic acid だけを残してその外はすべて体系名 propanoic acid, 2-propenoic acid などとする。アミンは methylamine, aniline でなく methanamine, benzenamine となる。

◆ IUPAC 名と CA 名との使い分け: CA では一つの化合物は一つの名前に統一されているので、一つの化合物についての情報を引出すためのデータベースを構築するには絶対必要な命名法であるが、体系名はどうしても長い名前となるので、論文その他の文書を書く場合にはとても使えないので、比較的簡単な化合物に対しては IUPAC 名や慣用名・通俗名を使うことが多い。

IUPAC 命名法の制定は歴史が古いが、新しいタイプの化合物が開発された場合、現行の命名規則では対応できないことが多い。例えば、硫黄、リン、ゲルマニウムなどを含む化合物の研究領域では命名が困難な場合が多い。リン化合物などの命名には CA 方式を利用しないと適切な命名ができない。挿入辞 (infix) を使う phosphonothioic acid, phosphinimidic acid 方式の命名法は IUPAC 無機化学命名法には採用されたが、有機化学命名法には出ていない。

IUPAC 命名法では体系名のほかにも別種の命名法や古来の慣用名が認められ、過去の文献や化学工業系の文献には様々の通俗名が出てくる。これらの化合物は CA ではどういう名前で記載されているかを調べるには “Chemical Abstracts Index Guide” が便利で、日本化学会図書室などには備えられているが、どこでも簡単に見られるものではない。

CA では Vol. 76 (1972) で定めた命名システムを改変することなく、新しいタイプの化合物の命名にも規定通りに適用しているが、それでも続々新型化合物が出現すると追従できない場合があり、結局は CAS Registry Numbers に頼らざるをえないことになるように見受けられる。

3. 日本語による化合物命名法

日本語による化合物名には昔からの伝統名のほか、IUPAC 命名法の翻訳書などがよく利用されていたが、『文部省学術用語集 化学編』増訂版の編集にあたって、日本語で化合物名を書く場合の命名法の大綱を決めておく必要が議題になった。そこで 1967 年日本化学会に化合物命名法委員会が設置され、審議の結果定められたのが、現在の日本化学会編『化合物命名法』である。

従来文部省学術用語集に採用されていた既定用語、従来広く慣用されてきた日本語名は、なるべく変えないようにするが、原則としては仮名書きの通則をきめて、全体的に統一をはかるようにした。命名法委員会では日本語による命名法の問題点を慎重に審議した結果「化合物名日本語表記の原則」をまとめ、その原案を日本中の主要研究者 230 人にアンケートとして送り、103 人からの回答を整理検討し、原案にいくつかの修正を加えた結果、情報検索の要諦として当分の間変更しない見通しのもとに、1971 年 12 月にこの原則を制定し、日本化学会編『化合物命名法』の巻頭に解説した。

◆ 「日本語表記の原則」で一番議論になったのは片仮名書きの方法であった。一般に外国語は原語の発音に近い「音訳」として片仮名で書かれることが多いが、この方法では同じ化合物でも発音が違っていると異なる化合物名となり、原語の発音がわからなければ化合物名を正しく書くことができない。これでは一貫性のある規則的な命名法を作ることが不可能である。

「日本語表記の原則」では、原語の発音とは関係なく、原語の綴字が機械的に仮名書きに移されるような「字訳」(transliteration)の方法をとることになった。これはロシア語のキリル文字を機械的にラテン文字に移しかえるのと同様である。

この「日本語表記の原則」で規定されているのは「書くための化合物名であって、口頭で話すための化合物名ではない」ということである。この点は原典になる IUPAC 命名法でも、緒言で「この命名法は教科書、論文誌、報告書その他の文書に書くためのもので、会話や講義・講演など口頭で発表するためには必ずしも適当なものではない」と記されている。

字訳の基本となる「字訳規準表」を定めるにあたって、当時多くの有機化学者はドイツ語による教育を受けて来たので a → ア, er → エル などドイツ語の発音に近い字訳が規準表に多く採用される結果になった。現代は英語が主流になったので、アセタート、ペルオキシドなどの字訳名に違和感をもつ化学者が増えたのは当然のことであろう。

「化合物名字訳規準」には、慣例として定着しているものには例外を認めるという項目があって、ase → アーゼ, ate → アートなどと定めてある。「字訳規準表」を定めるためのアンケートではアート、エートが伯仲し僅差でアートが優勢だったので、アートが採用されたが、あの時、字訳の例外項目で ate → エートとしておけば、現代にも通用したので残念に思っている。

peroxide も英語ではパーオキサイドと発音されるので er → アーとしておけばよかったかもしれない。当時は、それでは terpene はターペンとなり、ergosterol はアーゴステロールとなるという反論があつて、機械的に er → エルに決まった。

◆ IUPAC 命名法による体系名では、接頭語基名を英語のアルファベット順に書く規定になっている。片仮名に字訳した基名を使って化合物名を構成するとき、接頭語基名を五十音順に並べたのでは英語名とはずいぶん違った名前になってしまう。そこで、日本語による命名法では、英語名をそのまま字訳してしまう。日本語名だけを見ると、接頭語基名がどういう順序に並べてあるのか見当がつかないが、やむをえない便法であろう。

IUPAC の有機化学命名部門でも、今年の Praha 会議でこの順序について、英語圏以外の委員からの提

案が議題となり、コンピューターによる情報検索の立場から検討を始めようという話になったとのことである（IUPAC命名法委員会の日本代表池上四郎委員からの情報）。

◆日本化学会で「化合物名の日本語表記の原則」を定めたのは、各種化合物のデータベース化を念頭において、コンピューターによる情報処理のためには化合物名を統一して機械的に処理できる命名法を確立しておく必要があるとの見通しからであった。

現在はまさにコンピューター情報の時代になったが、ひとつ見通しから外れた点は、国際的な化学情報検索は殆どすべて英語名によるという現実である。当時の委員会が苦勞して日本語による化合物名を機械的に処理して情報化しようとした結果は、多くの化学者にはあまり有効に利用されず、多くの情報は英語名に頼られているということである。

日本化学会で制定した日本語による化合物命名法が忠実に守られているのは、皮肉にも官庁で新しく公布された化学物質に関する法令などである。

この起りは、1977年に労働省で労働安全衛生法に基づく化学物質の有害性調査を行うにあたり、化学物質の命名法等検討委員会が設けられ、筆者（畑一夫）と中原勝儼氏が委員に選ばれ、法令に使う化合物の日本語名をどうするかを審議した。その結果、IUPAC命名法による化合物名を原則とし、日本語名の片仮名書きは日本化学会制定の字訳方式を採用することに決まり、この方式に従って1980年に『労働安全衛生法化学物質総覧』が発行された。

この委員会で、日本化学会論文誌でもIUPAC規則どおり馬鹿正直に化合物名を書いてくる投稿者はいませんよとコメントしたが、これは法律だから厳重に守ってもらいますとの返事だった。まさかと思っていたが、現実にはそのとおり。その後労働省から出る法令はずっとIUPAC命名法による日本化学会方式が厳守されている。最近複雑な構造の化合物が問題になるので、若干のミスと思われる場合もあるが---

厚生省も化合物命名については、労働省と同じ方針で化合物名を法令化している。例えば『日本薬局方』では、旧来の名称が定着していて改名すれば混乱を起こすようなものは別として、一般的には極力IUPAC名を採用するようになった。

◆化学用語の標準化については『文部省学術用語集 化学編』があり、戦前の用語が現代の常用漢字に改められた。現代の用語は現代の化合物名とともに教科書を通して普及してきたが、まだまだ古い用語が使われている。

一方漢字制限により無理に「改悪」された用語もある。現在ではワープロの普及で常用漢字表にない漢字もJIS漢字として容易に利用できるようになり、また新しい概念のもとに取入れられた用語は英語を原語とした片仮名語が多いので、やや年配の化学者には理解しかねる用語が増えてきた。情報検索のためには日本語による学術用語も見直す時期にきているように思われる。

畑 一夫 HATA, Kazuo

東京都立大学名誉教授, 1967~1991 日本化学会化合物命名委員会委員長

SDBS (スペクトルデータベースシステム) における化合物の考え方

物質工学工業技術研究所 早水紀久子

hayamizu@nimc.go.jp

化学のデータベースを考えた場合、化合物名、分子式、化学構造式の取り扱いが基本的かつ共通の問題になり、CAS登録番号が連動する。この問題はJICSTを中心にして1981年から5年計画(昭和61年度終了)で行った「ネットワーク共用による化合物情報等の利用高度化に関する研究」で、化合物の相互認識という点で問題になった。当時、CAS登録番号あるいはJICSTの日本語化合物辞書(日化辞)の物質番号を検索キーにして「わたり検索」を行い、1987年に公開実験を行った。その後各データベースの化合物を日化辞に登録する作業を数年にわたって行い、その時点で数々の問題点が浮かび上がった。その詳細は日化辞のサイドでまとめられると思うので、ここではSDBSでの作業と方針について例を挙げて述べ参考に供したい。

1. SDBSの概要

SDBSは有機化合物を対象にして、IR、MS、 ^{13}C NMR、 ^1H NMR、ラマン、ESRの6種のスペクトルデータベース(DB)を共通の化合物辞書の下で統括した総合的なデータベースシステムである。各スペクトルDBは独立したシステムであり、化合物辞書と各スペクトルDBで完結したシステムにする事もできる。IR、MS、 ^{13}C NMRスペクトルの全部、および ^1H NMRパラメータDBの一部(文献データを収録)を除くパラメータDBとパターンDBの全スペクトルを当研究所で測定し集積している。DBの規模を1996年3月末現在で述べておこう。化合物辞書に登録されている有機化合物は約29,000件、IR約47,000件、MS約18,000件、 ^1H NMR約9,700件、 ^{13}C NMR約9,400件、ラマン約3,500件、ESR約1,300件である。

試薬の入手先は一元的ではなく、予算の豊富であった時期に購入した試薬、東京化成工業の提供試薬、赤外データ委員会の残存している薬品、また散発的ではあるが、関東化学⑭、塩野義研究所(医薬品の純品)、チッソ⑭(液晶化合物)、また研究者個人からの提供を受けてきているが、最近では東京化成工業の好意による試薬提供と、所内あるいは縁故のある研究者の好意による化合物提供に頼っている。

2. SDBSの化合物辞書作成の手順

試薬瓶(あるいは試薬)と化合物名(あるいは化学構造式)の入手がスタートであり、最初に化合物辞書の作成、入力を行う。辞書の原稿には一つの化合物に対して、SDBS番号、分子式、原子数、CAS登録番号(ほとんどが既知化合物である)、化合物名(原則としてIUPAC名を最初を書く、慣用名を含めて複数個)、構造因子(全部で18種類)、コメントが書かれ、化学構造式が作図される。SDBSは汎用大型コンピュータで構築され、そのDBMSであるFAIRSを利用しているので、当然のことながら、大文字小文字の区別はなく、化合物名の中に含まれる特殊記号も含まれていない。この段階では化合物に関する情報は試薬瓶のラベルに基づいた情報がすべてである。この時、例えば二重結合のcis、transの問題がある。試薬瓶のなかみはtrans体、cis体、あるいは混合物のいずれかであるが、記述がなければ平面構造で書き、それに対応するCAS登録番号を与えておく。立体構造等についても記述されている通りに化合物辞書を作成する。

3. 各スペクトルDBと化合物辞書の関係

試薬を用いてデータを作成する場合には、試薬の信頼性と純度が重要な問題である。SDBSの活動は既に15年近くの歳月が経過している。初期の頃には化合物の認識に種々の混乱があり、その修正に時間がかかったことも確かである。また希には試薬瓶の試薬とラベルの不一致、側鎖の枝分かれについての記述不十分などということがない訳ではない。このような場合は当然のことながら、個々の試薬について提供元へ照会し、相互に確認をとって信頼性を高める努力を行っている。

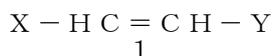
純度については難しい問題を含んでいる。化合物が安定ならば問題は少ないが、試薬瓶を開封して時間が経過すれば分解する可能性が常に存在する。現在測定しているスペクトルのうちIRはヌジョール、液膜、KBr錠剤など複数のサンプル状態で測定しているが、一番短時間で測定できるので、多くの場合試薬瓶を最初に開封して測定し、IR-DBとして登録している。次にMSの測定がなされるが、この場合は測定者がスペクトルパターンを監視していて、パターンが変化しなくなってからデータを取得するという方法でできるだけ不純物を除去する方式をとっている。分子量とMSスペクトルの検証をしたうえで、化合物辞書にMSのスペクトルキーを登録しMS-DBの収録は完了する。

最後に測定するのがNMRである。NMRは測定時間が長いこと、およびその後の作業に手間暇をかけているために、測定が行われてのは開封してから数年が経過していることもある。望ましくは試薬瓶の開封直後に測定すべきことを重々承知した上でのことである。NMRではスペクトルの帰属をつけているので、試薬が分解していることがわかれば不採用であり、その化合物が基本的かつ重要であれば、新たに購入して測定している場合もある。スペクトルが化学構造式で説明できない場合も不採用である。 ^{13}C NMRではピーク位置、強度、線幅、多重度(何個のプロトンが結合しているか)、帰属、測定条件、サンプル条件、帰属のついた化学構造式がDBの内容である。明確に不純物であることがわかれば、そのシグナルのデータを入力しないことにより、純度は保証される。 ^1H NMR-DBはスペクトルパターンDBとパラメータDBから構成されている。不純物が多くても解析計算や目視から化学シフトと結合定数が抽出できれば、パラメータDBに収録する。パターンDBではスペクトル解析をして化学シフト値の抽出と帰属を行う過程で明らかに不純物と認められるシグナルは削除している。このような作業が不可能な場合は、そのスペクトルは原則不採用である。 ^1H NMRでも帰属の入った化学構造式を収録しているが、炭素骨格に水素をつけるので、 ^{13}C NMRと比べると遙かに複雑な記述が必要である。 ^1H NMRでも測定条件とサンプル条件を付加している。NMRでは純粋な化合物のスペクトルだけを収録することを原則としているが、立体異性体については現実に即した考え方を採用している。化合物辞書へコメントをつけるのはほとんどがNMRの帰属の結果であり、その点について詳しく述べたい。

4. NMRの帰属のついた化学構造式と化合物辞書の化学構造式

純粋な化合物とは単純に物理的に分離できない化合物としておく。cis体とtrans体の混合系は不純物であるが、keto-enol互変異性体は混合物ではない。もっともMSではcis体とtrans体のスペクトルはほとんど同じであるので、極端に言えばMSではどちらでもよい。同じことがNMRでもいえる。例えば、D-Alanine、L-AlanineとDL-Alanineは¹H NMRでも¹³C NMRでも全く同じスペクトルパターンを示すので、化学構造の確認に対してNMRから寄与できない。

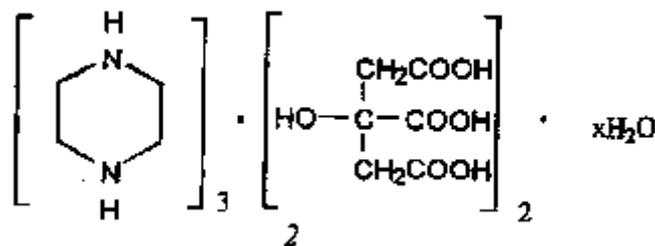
¹H NMRではの両側に水素が結合している二重結合化合物 (SDBSではcis、transで記述、水素が1個あるいは0個の場合には E、Z で記述)



ではXとYがともに長鎖のCH₂でない場合には多くの場合スピン結合定数の大きさからcis体とtrans体の判別が可能である。試薬瓶にcis、transが不記述の時、¹H NMRを登録する時点で、IR、MSのスペクトルの試薬瓶がNMRの試薬瓶と同じことを確認して化合物辞書を修正する。もし試薬瓶が異なれば、新たにcisあるいはtransを明記した化合物のSDBS番号を起こしてNMRのスペクトルを登録する。

また試薬瓶のなかみがcis、transの混合物であることがわかったら化合物辞書のコメント欄にその旨記述する。試薬がたとえ混合物であってもNMRスペクトルが分離できる時には、化合物辞書にcis体とtrans体の化合物用にSDBS番号を新規に起こし、NMRスペクトルを登録する。E、Zで記述されるような化合物群に対しては、NMRから確信をもって立体構造を明言できる例は限られているので、NMRの帰属付き化学構造式も平面構造になる。オキシム類のsyn、antiについても同様である。NMRの化学シフト値は両異性体で異なるので、できるだけ明確な構造式を描くように心がけている。

多糖類の中にはα、βの混合系の場合がある。NMRの原則からいえばα体とβ体は別個のSDBS番号に収録すべきである。しかしながら、¹³C NMRでは大多数の場合、分離したシグナルと重なるシグナルが混在し、スペクトル分離は不自然であるので、α体とβ体の化学構造式を併記して帰属をつけて1件のデータとして登録している。¹H NMRでも分離不可能なので、化学シフト値を範囲として記述している。もし化学的に純粋なことにごだわれば、糖類のNMRデータ数は減少するので、α、β混合系であることが確かなら、スペクトルはないよりはましと考えている。純粋なα体あるいはβ体の化合物が入手できた場合は更新している。化合物辞書ではコメント欄の混合系であることが記述されている。結晶水や付加塩も難しい問題を含んでいる。SDBSで最も問題になったことは分子式の表し方である。様々な議論の後で、分子式を複数個書くことに問題を解決した。例としてPiperazine Citrateを示す。



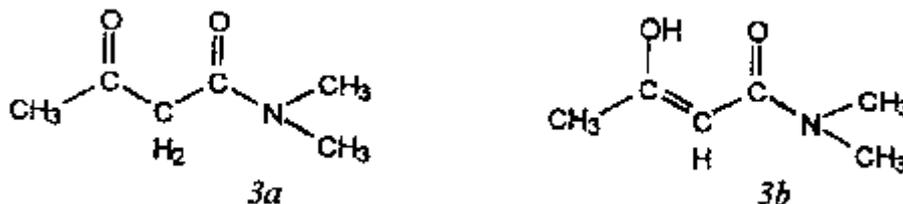
この化合物の場合、次のような4通りの分子式が入力されている。

C4H10N2 2/3C6H8O7 (H2O)
3/2C4H10N2 C6H8O7 (H2O)
3C4H10N2 2C6H8O7 (H2O)
C24H46N6O14 (H2O)

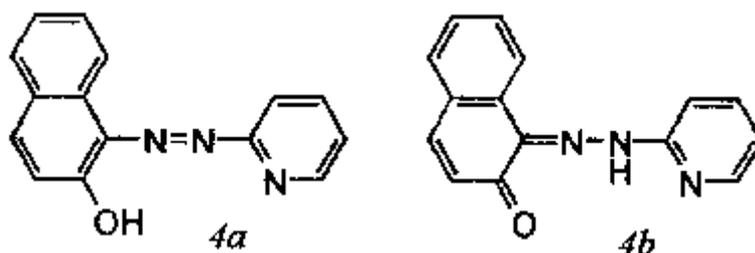
我々のSDBSではスペースで区切ったデータはすべて検索されるので、検索効率は確保してある。

辞書では以上のような扱いであるが、例えばアミンにHClが付加している場合に、N⁺とCl⁻になっていることがNMRで明確な場合には、NMRの化学構造式では荷電した構造で書いている。結晶水は¹³C NMRでは見えないし、¹H NMRでもD₂O溶媒で測定した場合など結晶水を記述する意味がない時には書いていない。しかし濃度は結晶水も考慮しなければならないので、辞書部の記述は重要である。

keto、enol互変異性体の時には次のようにする。化合物辞書は試薬瓶のラベルにある化合物名と化学構造式でスタートする。keto型の名前の時もenol型の名前の時もある。実際にNMRを測定した場合には3つの可能性がある。100% keto型、100% enol型、keto-enolの平衡状態である。NMRの帰属付き化学構造式では実際に測定した通りの構造式で描く。互変異性の平衡状態では次に示すように両方の構造式(3a、3b)を並列して書く。

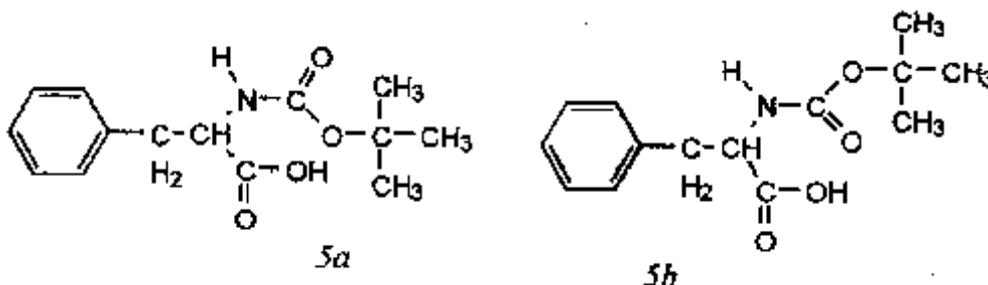


もう一つの例を示す。試薬瓶記載の命名からは4aの構造式になり、辞書にはそのように記述してある。一方NMRのスペクトルでは4bの化学構造式でないと¹³C NMRの2位の炭素シグナルの化学シフト値と¹H NMRの3、4位のH、Hのスピン結合定数が説明できない。従ってNMRでは4bの化学構造式を採用している。



この互変異性体は溶媒、温度、pHなどの条件で変化するので、サンプルの状態を記述することによって、化学構造式とスペクトルの整合性を保証する。NMRから辞書の方へ報告すれば、化合物名に *ket*o型あるいは *en*ol型の名前を追記するが、辞書部の化学構造式は変えない。サンプルの状態で変化する可能性があるからである。

束縛された分子内回転がある場合には2つのコンフォーマーが別々のシグナルを与えることがある。化合物辞書では特別な記述はしていないが、NMRでは2つの化学構造式を併記する。例を示す。

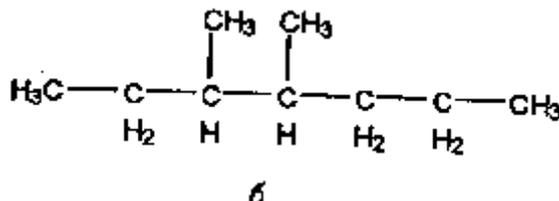


この場合は安定なコンフォーマーがわかっているので、シグナルの相対強度から帰属を確定できる。しかしながら、それらが不明な場合にはNMRのコメント欄に記述する。アミド類では非常に例が多い。コンフォーマーに対する考え方は *ket*o-*en*ol互変異性と同一考え方である。

シクロヘキサン環の *axial*, *equatorial* はできるだけ記述するようにしているが、特定できない場合は平面型の6員環を描いている。

化学交換によって線幅が広がったり平均化している場合には、平均化された化学構造式を描くことにしている。室温ではシグナルがブロードで観測できない時には、高い測定温度とし、化学構造に対応するすべてのシグナルが存在することを確認してデータとして採用することもあるが、これは化学交換による平均値を収録していることになる。化学交換のある系では、測定温度、測定周波数、濃度、溶媒などにスペクトルパターンが大きく依存するので、化合物の記述だけではなく多くの記述を伴わないと、そのスペクトルは意味を持たない。

光学異性体の問題は複雑である。立体的に込み合わない化合物では上述のように、D、L、ラセミ体のいずれも全く同じNMRスペクトルを示すので、あまり注意せずに化学構造式を書いている。しかしながら不斉炭素の周りが込み合ってくると状況は変化する。例えば、6のような化合物の¹³C NMRでは、

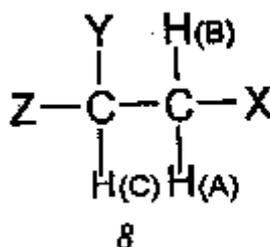


末端のメチル炭素以外の炭素はそれぞれ等強度の2本のシグナルを与え、光学異性体の等量混合物であることはわかるが、これ以上の解析はできない。実際には一つの化学構造式に対して重複してスペクトルを帰属している。この化合物の¹H NMRは複雑なパターンとなり、なおさらのこと化学構造についての詳しい知見を得ることはできない。しかし将来1,000 MHz以上などという超高磁場の¹H NMRが測定できるようになったら、状況は変化するであろう。官能基が結合し、¹H化学シフトが広がり二次元NMRから化学シフトが抽出できた場合には¹³C NMRと同じ方式をとっている。

¹H NMRでは別の問題がある。SDBS-NMRでは90 MHzのスペクトルの収録からスタートしているが、NMRの分野での高磁場化に伴って最近では400 MHzのスペクトルを収録している。超高磁場といわないまでもシグナルの分離はよくなり、従来は等価な水素と考えられた、例えばCH₂の2個の水素が分離して測定されるようになった。例として簡単な場合のNewman投影図を描けば、A、B、Cの3ヶの水素は



になる。配座異性体を考えても、立体的に安定な3ヶの水素の位置関係が¹H NMRスペクトルからわかるのだが、その時の化学構造式の記述が確定していない。便宜的には次のように描いているが、これが上の投影図に対応しているというルールはまだ作成していない。



ある試薬瓶の純度90%以上の化合物のNMRスペクトルから、確信をもって化学構造式を描き、帰属するのがSDBS-NMRの基本的な考え方である。しかし、種々の手段を講じても正確な化学構造式の作図と帰属の付加に限界を感じることもある。この時スペクトルがまさしくその化合物(不十分な記述であっても)の示すスペクトルであるという確信がもてる場合には、100%ではなくてもわかる範囲を記述し、不明点をコメント欄に書いてデータを収録してゆく方針をNMR-DBではとっている。

NMRでは帰属のついた化学構造式からコネクションテーブルを発生し、化学シフトとの部分構造式との知識ベースを作成している。しかしすべての化合物からこの知識ベースを作成しているわけではない。

個々のスペクトルには化学者が納得できる形での化学構造式が付加してあるが、例えばフェロセンのようにコネクションテーブルを作成していない化合物もある。この場合はデータ入力の際に例外化合物の印をつけている。

SDBSはいわゆる“手作り”のデータベースであり、専門家が深く関与して作成しているシステムである。IR、MS、NMRなどの測定手段によって見えてくる化合物の特性等は異なり、化学構造のどこに重要性を見いだすかも異なっている。従って同じ化合物であってもスペクトルの特質から多様な化学構造式を描く可能性がある。当然のことながら、それらすべてに整合性があり、コネクションテーブルまで分解したら同じでなければいけないはずである。また立体的な位置関係が空間的な効果を及ぼしていることは多々あり、NMRのデータからそのような効果が明確にわかる時にはそれらしく化学構造式を描いているが、コネクションテーブルに落とせば現段階では何ら識別できる方法はない。一方、知識ベースの部分構造と化学シフトの関連という視点からみると、大きな偏差を与える原因となり、化学構造からシフト値を推算する場合には確度の低下に至る。

化学は多様性の学問であり、そのためにコンピュータが有効に機能している面があるが、他方では多様性の記述をコンピュータが追いかけて続けている。このような状況下で胸がわくわくするような新規な化学現象をコンピュータを利用して見つけようとするのは永遠に不可能であるというのが、NMR-DBの構築に携わってきた著者の偽らざる見解である。

最後に、SDBSの化合物辞書の原稿作成を全面的に行い、化合物に関する様々な問題を具体的かつ責任をもって対処して下さる有馬美和子氏に深く感謝する。

はやみず きくこ HAYAMIZU Kikuko

私は、NMR spectroscopistであり、データベースはその研究活動の一部と考えている。データベースの構築という仕事は若い研究者には不向きの仕事であり、研究経験を積んだ研究者が取り組んで初めて質の高いデータベースが作成できるというのが私の持論である。

連絡先 305 つくば市東1-1 物質工学工業技術研究所 Tel & Fax 0298-54-4525

C Aデータベースにおける化学物質の認識 原著者が与える化学物質の記述とデータベース作成との間

(社) 化学情報協会 情報分析部 井上 直巳

nakamura@beri.co.jp

原著者が文献上で表現する化学物質は、一次情報としてそのまま読者へ伝えられる。これに対して、二次情報としてのケミカルアブストラクト（以下C Aと略す）の化合物データベースの Registry file は、約1500万のレコードから構成される。この中で、各物質は文献に登場するとおりではなく、ある程度交通整理された形でデータベースを構成している。C A索引作業現場で感じられる、原著者とデータベースの中における化学物質の認識の差異について述べる。

1. はじめに

化学情報、特に化学物質が何であるかを文献中で伝える手段には、物質名、化学式、構造式、等がある。原著者は場合に依りてこれらを使い分け、有効にかつ正確に情報を伝えようとする。C Aに収録される文献における化学物質の索引は、あくまでも文献に報告されたことを基本としている。C A（冊子体、オンライン、CD-R OM）を既に活用されている方々のご存じと思うが、受け皿であるRegistry file中で各化合物は、個別的に認識されている。立体異性体（D, L, cis-, trans-, 等）や同位体にも別々なC A S登録番号が付与される。また、文献に登場する商品名がポリエチレンに対応していれば、その商品名にはポリエチレンの登録番号が付与される。このように、Registry fileでは、情報の個別化と集約化とが同時に行われている。

二次情報は、一次情報と独立して作成される。したがって、文献の著者が、C Aデータベースの構成の詳細やC Aの索引方針を知っている必要はないし、データベースを作成する側も、原著者に書き方についてあれこれ口を出すこともない。このことは、化学物質が、原著者の意図しない形でデータベースに存在している可能性を示唆している。そこで本稿では、文献中のどんな記述が情報伝達を曖昧にしまうかを、比較的単純な物質を例にとって報告したい。

2. 文献にはこんな記述が

C Aには原著論文以外に、総説や特許も収録される。このうち原著論文ではおおむね化学物質を特定化するための情報が十分記述されている。標題で充分でなければ、実験の項目を読めば必要な情報にたどりつく。一方、総説の場合、これらの情報が不十分なことが多く、また特許では戦略上化学物質の記述を意図的に曖昧にすることもある。以下に原著者の記述と、それから発生する索引上の問題点をいくつかの物質を例にとって示す。

2.1 石膏

建材関連の特許でよく出てくる石膏である。成分はもちろん硫酸カルシウムであるが、学術的な興味でなく工業材料としてC Aに索引する場合、実際には天然鉱物でなく合成品であっても以下の三つの鉱物から選ばれる。

表1 Registry file中の硫酸カルシウムの鉱物名

名称	化学式	C A S登録番号
gypsum	CaSO ₄ ·2H ₂ O	13397-24-5
plaster of Paris	CaSO ₄ ·1/2H ₂ O	26499-65-0
anhydrite	CaSO ₄	14798-04-0

このうち、鉱物としての石膏に相当するのは、gypsum だけであるが、石膏業界では他の二つの鉱物名をそれぞれ半水石膏、無水石膏として使う。そこで原著者が、単に「石膏」とだけ記述した場合、gypsum（二水石膏）を索引することになる。幸いにして原著者が二水石膏を意図していたのであればよいが、他の石膏を意図していた原著者は自分の報告が二水石膏の索引項目に載ることになってしまう。

先の三種の硫酸カルシウム鉱物のデータベースにおける定義はC Aの索引作業で使われているものである。念のため工業材料としての石膏を記述するときに水和に関する情報を付記しておくこと、誤解や誤登録を防げる。

また、参考までに鉱物とは別に化合物としての硫酸カルシウムの登録もある。このうち、上記三種の鉱物の化学式に対応する例を表2に示す。

表2 Registry file中の硫酸カルシウム

化学式	C A S登録番号
CaSO ₄ ·2H ₂ O	10101-41-4
CaSO ₄ ·1/2H ₂ O	10034-76-1
CaSO ₄	7778-18-9

例えば、材料中の石膏分（CaSO₄·2H₂O）の定量など、化合物自身に主題がある場合についての報告からは、gypsum（13397-24-5）ではなく表2にあるcalcium sulfate（10101-41-4）が索引される。

2.2 窒化けい素

電子部品材料や半導体プロセスの特許でよくでてくる。「... SiNをHFでエッチングして...」のような記述がよく見られる。HFは化学的に問題ないが、どうもこの業界ではSiNを一对一の特定の化合物ではなく、Si₃N₄や不定比の窒化けい素も含めた広義の窒化けい素の記述に使っている。

文献中にSiNとしか書かれていなければ、CAでは窒化けい素をSi₃N₄に一義的に索引する。CAのインデックスガイドには、化合物の索引に関する方針ノートがある。

Silicon nitride (Si₃N₄) [12033-89-5]

Studies of unspecified silicon nitrides are also indexed at this heading. Species with other molecular formulas are indexed at their own headings.

CAでは、約800の単純な無機化合物に関して詳細な記述がないかぎり安定な化学量論組成のもののみとして索引を行っている。Si₃N₄以外に具体的にその化学式が特定された場合のみ、Si₃N₄とは別の登録となる。いずれにしても、物質名と化学式とを両方書いておいたほうが誤解をまねかずにすむ。

2.3 炭素の七変化

単純な炭素も、Registry fileには種々の登録がある。一例は次のようである。

表3 Registry file中の炭素の例

名称	CAS登録番号
carbon	7440-44-0
graphite	7782-42-5
diamond	7782-40-3
fullerite	131159-39-2
fullerene (C ₆₀)	99685-96-8

ダイヤモンド様炭素はダイヤモンド(7782-40-3)でなく炭素(7440-44-0)として索引される。カーボンブラックは化合物としてではなく、一般事物(統制語)として索引される。なるべく多くの記述があれば、より正確な索引ができるし、誤解が減るのも前例と同様である。

興味深いのは、C₆₀/C₇₀の混合物で、混合物としての反応や性質や生成について報告されていればfullerite(131159-39-2)として索引される。フラーレンは基本的に炭素数別に索引される。

2.4 周期表の族の記述

化合物群を表すのに周期表の族を使うことがある。現在最も曖昧さのない形式は18族系(亜族A、Bなし)である。これに対し、A、Bの亜族を伴うヨーロッパ系(Bが典型元素)とデミング/US系(Aが典型元素)もいまだよく使われている。問題は原著者がどの形式で周期表を表現しているかである。従って、「第IIB族元素」という記述だけでは、典型元素なのか遷移金属かわからない場合もある。こんな場合、「第IIB族元素(Ca, Mg, Sr等)」のような記述があると明確になる。また、亜族なしで、「第II族元素」という記述では、遷移金属および/または典型元素に決めざるを得ないが、原著者の意図と違ってしまふ確率が高い。

3. おわりに

正しい物質名や化学式を文献に報告することは、一次情報作成者である原著者の義務である。かなり複雑な化合物を記述するときには比較的丁寧になされているが、例に挙げたようなケースでは、情報の正確さだけでなく親切さも求められる。二次情報は一次情報にもとづいている。それはちょうど、資源のリサイクルに似ていて、発生源でよく手をかければ後の処理の誤りが少ない。原著者も二次情報を利用し、また新たに論文を書く。その意味では化学情報はめぐりめぐっている。これを、化学情報サイクルと呼ぶならば、原著者もこのサイクルを構成している。この意識にもとづいて十分に情報を伝えて頂きたい。

例にでてきたCAの索引事情はインデックスガイドに詳しく書かれているので参照していただければ幸いである。CAデータベースに関する事、索引に関する事、そして化学情報については、なんでも化学情報協会に問い合わせいただければ幸いである。さらに今後も化学情報サイクルをより円滑にしていくようお役に立ちたいと思っている。

いのうえ なおみ INOUE, Naomi

日本の化学文献のCA英文抄録および索引作成をしています。文献からデータベースへの情報変換は大変な仕事ですが、皆様のお役に立つよう頑張ります。

連絡先 〒113 東京都文京区本駒込 6-25-4 中居ビル (社) 化学情報協会 情報分析部 電話 03-5978-3607

Internet時代の有機化合物の表現法雑感

豊橋技術科学大学・知識情報工学系
阿部 英次

(abe@cilab.tutkie.tut.ac.jp)

Internet、WWWが日常的(ファッション?)になって来た今日、有機化合物の表現法(名称や構造式)はどうあるべきかが改めて問われているような気がする。ドイツのErlangen-Nuernberg大学のGasteiger教授のグループが最近、彼らのInternet serverの名前をEROS1からTORVSに変更した。元の名前では誤解に基づいた(と思われる)アクセスが異常に多くなったからというのが理由である。この事からも判るように、誰でも、何処からでも簡単に世界中のあらゆるホームページにアクセス出来る現在では、化学情報はもはや閉じたコミュニティだけの占有物ではなくなっている。化学者だけに通用する暗黙の了解を極力排除しなければ、思わぬところで思わぬ誤解を生ずることになるだろう。

物質の名称について言うなら「IUPAC命名法に従った正しい名称だけを使い、それ以外の慣用名などは排除しなければならない」などと頑ななことばかりを言っただけでは居れない時代になっているのではないだろうか? 「ガリウムヒ素」と言う言葉は明らかに間違いで、正しく「ヒ化ガリウム」と呼びなさいといったところで、日本の半導体のコミュニティでは圧倒的に「ガリウムヒ素」、ひどいときには「ガリヒソ」であろう。したがって、この物質に関して流通している日本語の情報を集めようとするれば、化学者といえども不本意ながらこの言葉を使わざるをえまい。

一方で、化学を学んだものにとっては、例えば「サリン」などという慣用名よりは構造式か、せめて「isopropyl methylfluorophosphonate²」というIUPAC名を書いてもらった方がその実体が判ったような気になる。

この実体が分かったような気になるというのが問題なのである。つまり、構造式、あるいはそれを文字列に変換した体系的名称は化学の知識の裏付け無しには意味を持たない表現法なのである。それを一般の人々に押し付けようとするとうまく無理が生ずる。彼らにとってはワードプロセッサで変換すると「磯プロピルメチル風呂呂干す洞巢」となったりする、舌を噛みそうだし、しかも無意味(?)な名前よりは「サリン」という短くて歯切れが良く何となくもっともらしい名前の方が遥かにマシであることは言うまでもない。

構造式は化学者にとっては多くの事を語ってくれる誠に貴重な表現法であるが、一般の人々にとっては依然として「分けの判らない亀の甲の集まり」なのである。従って、データベースの物質の索引としての名前はこのような時代になって、益々その重要性を増してきている。それも慣用名、商品名、INN一般名、通称等可能な全ての名前が好むと好まざるとに関わらず流通していくことを止めることは出来まい。情報の正確な流通を図る上で一つの物質が様々な名前と呼ばれる事は好ましくないが、時代の波はそれを少数意見にしてしまっている。しかし、明らかに間違った名前が広く使われる事を容認したのでは、混乱を生ずる元となり大袈裟に言えば後世に禍根を残す事になる。せめて、化学者だけは正しい名称の重要性を忘れて欲しくないものである。

しかも、われわれにとっては日本語表記と言う別の問題もある。アセテートとアセタート(acetate)、ナイトライトとニトリット(nitrite)、アイオダイドとヨージド(iodide)などはいずれも後の方が正しい表記法ということになっていることをどれだけ多くの化学者が意識しているだろうか? カタカナ表記はすべて止めて原語で表記すればこのような問題はなくなるが、高校以下の教育の現場にこれを強制することは出来まい。

構造式をコンピュータ向けにどう表現するかというテーマはWLN線形表記法やMorganの結合表に始まる長い歴史を持っている。しかし今や、構造式がコンピュータファイルにどんな形で納められているのかについては情報化学分野の研究者以外にはあまり関心を持たれない事柄であろう。コンピュータのGUIのハードウェア・ソフトウェアの進歩によって、グラフィック画面上で構造式を入力する事が誰にでもいとも簡単に行えるようになってきている。その意味では長い文字列の入力を強制される名称よりも、構造式の方がデータベースの索引としては使い易くなっているかもしれない。

しかし、中には単純な結合表ではその構造を表現できない化合物がある。例えば、分子化合物、最近olympiadane、別名[5]catenaneが合成されたことが報じられたcatenane類の様に結合が明示的に描けない化合物、sydnoneなどメゾイオン化合物、metallocene類等がこの範疇に入る。これらはいずれも共有結合だけでは表記できないので、構造式を結合表に変換する際に何らかの便法(convention)を必要とする。ソフトウェアやデータベースシステムの毎のこの便法の違いもまた混乱の原因となる。

この種のソフトウェアが十分な化学の知識無しに使われると別種の問題を引き起こすことになる。すなわち、これまで化学者は平面構造式を描き慣わしている。つまり、実際の物質の構造がそこに描かれているような平面的なものでは無いということを百も承知で描いているわけである。これは一種の抽象化であり、化学者の間ではほとんど障害とはならないばかりか、効率的なコミュニケーションには欠かせない。また、立体化学が必要なときには「楔と点線」の2次元構造式で間に合わせている。多くの場合この「楔と点線」を描いた化学者は相対立体配置を表したつもりである。ところがアプリケーションプログラムの中にはdefaultが三次元表示になっていると、平面あるいは2次元構造式から勝手に三次元座標を生成してしまうようなものがある。もちろんこれは、正確なものではないということを化学者であれば誰でも暗黙のうちに了解しているし、そのプログラムからもその旨のメッセージは出るが、えてして無視されてしまう。

結果として、大変尤もらしいが何の根拠も無い三次元モデルが罷り通ることになる。また、相対立体配置だったはずが、いつのまにか絶対配置になってしまうなどということも起こることになる。少し前までは、三次元モデルは単に画でしかなかったのが、Internet上で構造式が共通フォーマット³)で流通するようになってきている。この共通フォーマットのお蔭で何処かのデータベースにある構造式ファイルを何処かにある三次元モデリングシステムで変換して自分のコンピュータの画面上に描くなどということが化学者でなくとも簡単に出来るようになった。途中経過は全てブラックボックスである。このような事態は、有機化合物という実体をどのように表現すれば情報が正しく伝達できるかという事に日夜腐心している「化学ドキュメンテーション屋さん」に取っては悪夢になりかねない。

References

- 1) Elaboration of Reactions for Organic SynthesisのAchronimである。
- 2) IUPAC命名法では他に isopropyl methylphosphonofluoridate と fluoro(isopropoxo)methyloxophosphorous と 言う 2つの名称がいずれも正しいものとされている。
- 3) a) SMD format: J. M. Barnard, J. Chem. Inf. Comput. Sci, 1990, 30, 81-96
b) JCAMP-CS format: J. Gasteiger, B. M. P. Hendriks, P. Hoever, C. Jochum, and H. Somberg, Appl. Spectrosc., 1991, 45, 4-11
c) CXF: T. Steckert, Chemical Abstracts Service, e-mail: tsteckert@cas.org
d) MOLfile: A. Dalby, J. G. Nourse, W. D. Hounshell, A. K. I. Gushurst, D. L. Grier, B. A. Leland, and J. Laufer, J. Chem. Inf. Compt. Sci., 1992, 32, 244-255

WWW上の化学関連サイト

嶋 裕

shima@nisiq.net

インターネットのWWW上の化学関連サイトは、1995年頃より、急激に増加しており、サイトを集めたリンク集も多い。個別サイトでは、従来の商用データベースサービスでは得られない情報を提供するものも多く、有用な新しい情報源として注目される。ここでは、代表的なものを紹介する。

1. はじめに

インターネットは化学に携わる者にとって、コミュニケーションの手段として、また、ソフトウェアやデータの共有、共同作業、教育システムなど多方面への利用形態がある一方、新しい情報源として注目されている。ここでは、WWW (World Wide Web) 上に現在どのような化学に関連するサイト (ホームページ) があるか、その一端を紹介したい。

紙面の関係もあり、化学の一般的情報の中で、代表的と思われるもの、人気の高いもの、最近登場したものなどに重点をおいた。

(注) 記載中、URL (アドレス) 中の数字はアルファベットと区別するため、若干ために印字した。上につくハイフンはティルダ (俗称、上ヨロ) である。また、カッコ内の数字は、そのサイトからリンクしているサイトの概数を示す。例えば ChemDex→Conferences(33)とあるのは、リンク集の ChemDex の画面から Conferences をクリックしてそのリンク集に移った場合、そこでは33のサイトにリンクが張られていることを示す。これらの数字はすべて1996年8月ー10月にアクセスした時の数字である。

2. サーチエンジンによる化学関連サイトの探索

一般にインターネット上の情報を探索するためには、俗にサーチエンジンと呼ぶ検索サービスが知られている。これには、キーワード検索によるもの、分野別に分類された階層構造のカテゴリをたどるもの (ディレクトリサービス)、これらを併用するものなどがある。キーワードを入力するものは、あまねく情報を収集するには有効な場合が多いが、得られる情報量が膨大になったり、適切な情報が得られにくく、効率的でないなどのデメリットも指摘されている。

ここでは具体的なサイトの紹介に重点をおくため、カテゴリをたどる代表的なディレクトリサービスの名称とURLを記載するとどめる。

- Yahoo! <http://www.yahoo.com/>
- Infoseek Guide <http://guide.infoseek.com/>
- The TradeWave Galaxy <http://www.einet.net/>
- Magella <http://www.mckinley.com/>
- WWW Virtual Library <http://www.w3.org/pub/DataSources/bySubject/Overview2.html>

3. 総合リンク集

化学情報に関係するサイトを化学分野全般にわたって集めたもので、いくつかのカテゴリに分類されている。各サイトにリンクされており、他のサイトに飛ぶ出発点になるものである。

- Sheffield ChemDex : Mark Winter-University of Sheffield (England)
 フレーム画面 <http://www.shef.ac.uk/~chem/chemdex/>
 非フレーム画面 <http://www.shef.ac.uk/~chem/chemdex/index-nofr.html>
 収録サイトは1996年6月には1,628サイトであったが、10月には2,183サイトに増加している。主なものは大学(834)、学会(97)、ジャーナル(84)、政府機関(85)、企業等(286)、コンファレンス(33)、など。
- Chempointers (UCLA): Dr. Max Kopelevich-University California-Los Angeles
<http://www.chem.ucla.edu/chempointers.html>
 (790), Academic Institutions (40カ国, 485), Commercial Organizations(128), ほか。
- CIS-IU : Dr. Gary Wiggins-Indiana University
<http://www.indiana.edu:80/~cheminfo/>
<http://www.indiana.edu/~cheminfo/cis.ca.html> (Table of Contents)
 このリンク集のフルテキストサーチ, abcインデックス, 分類別 Table of Contents, Beilstein & CAS, 化学教育, Molecular Visualization, Usenet Groups など。
- Galaxy→Science→Chemistry(139)
<http://www.einet.net/galaxy/Science/Chemistry.html>
- 化学の部屋: 小林 隆, 高橋 純, 森山 和道 - 横浜国立大学
<http://www.physics.ed.ynu.ac.jp/rika/url/kagaku.html>
 メタインデックス, 団体・組織・研究所・大学・企業, 周期表, 分子モデル, ポリマー・プラスチック, 結晶, 酸と塩基, 炭素・フラーレンなど, 有機化学, 化学ソフトウェア, ほか。・化学関連サイトへのリンク (Nifty Serve, FCHEM 収集)
<http://www.niftyserve.or.jp/forum/fchem/link.htm>
 組織別 (日本の大学等の化学科, 研究機関, 企業, 世界のwwwページ), ジャンル別など。
- Chemistry Information on the Internet :Dr. Steven Bachrach-Northern Illinois University (NIU)
<http://hackberry.chem.niu.edu/cheminf.html>
- Internet Chemistry Resources :Dr. Joseph Warden-Rensselaer Polytechnic Institute
<http://www.rpi.edu/dept/chem/cheminfo/chmres.html>
- Internet Resources-Chemistry: Prof. Tom O'Haver-University of Maryland
<http://www.wam.umd.edu/~toh/Chemistry.html>

- Internet Chemistry Index: Burkhand Kirste-Freie Universitaet Berlin (英・独語)
<http://www.chemie.fu-berlin.de/chemistry/index/>
 分析・無機・有機・物理化学等の各種化学分野
- その他: OzChemnet (Australian chemistry Network), WWW Chemistry Resources, The Learning Matters of Chemistry (Dr. Yue-Ling Wong), Internet Resources (Beilstein)

4. 分野別・項目別のリンク集および個別サイト

政府機関・学術関係機関・大学等

- ChemDex→Government Sites (85)
- Links to Government Agencies (米国の政府機関)
<http://www1.whitehouse.gov/WH/html/handbook.html>
- 学術情報センター (NACSIS) <http://nacsis.ac.jp/nacsis.index.html>
- 工業技術院・研究情報公開データベース <http://www.aist.go.jp/RIODB/>
- JST-科学技術振興事業団 (日本科学技術情報センターと新技術事業団の統合により発足)
<http://www.jst-c.go.jp>
- 科学技術振興事業団・科学技術情報事業本部 (JICST, 旧日本科学技術情報センター)
<http://www.jicst.go.jp/index-jis.html> (注) 「WWWホームサーバーガイド in Japan」 「Internet Starting Point 集」は、 本年9月30日でサービスが終了した。(行政改革の余波?)

学会・協会

- ChemDex→Learned Societies(97)
- 日本化学会 (日本語版・英語版) <http://wwwsoc.nacsis.ac.jp/csaj>
- 日本化学会/情報化学部会 (CICSJ) <http://alain.gen-info.osaka-u.ac.jp/>
- The American Chemical Society (ACSWeb) <http://www.acs.org>
- ChemCenter (新登場, ACS作成のリンク集) <http://www.chemcenter.org>
- The Royal Society of Chemistry <http://chemistry.rsc.org/rsc>

コンファレンス

- ChemDex→Conferences(33)
- Third Electronic Computational Chemistry Conference-ECCC-3
http://hackberry_chem.niu.edu/ECCC3/ 日程 (Nov. 1-30, 1996) および詳細な情報

化学教育・オンライントレーニング

- Chemistry Teaching Resources - Umea University (Sweden) <http://www.anachem.umu.se/cgi-bin/pointer.exe?ResourceLists> 化学教育のリンク集 (52)
- STN International (General Information on Computer Searching)
http://www.indiana.edu/~cheminfo/ca_gics.html
- Beilstein CrossFireplus : Commander-General Guide
http://gservidl.ac.uk/CDS/Beilstein/general_guide.html

DB集・総合リンク集

- Databases and Data Collections (Internet Chemistry Resources_Databases)-Rensselaer
http://www.rpi.edu/dept/chem/cheminfo/chemres/chemres_03.html 約45の化学関連データベースにリンク。各々に数行の解説とURLがある。
- ChemDex→List of Lists (Super List) (103)

ソフトウェア

- ChemDex→Software and Software Archives (188)

個人情報・雇用

- Chemists Address/Phone Book (NIU ChemDir Search)
<http://hackberry.chem.niu.edu:70/0/ChemDir/index.html>
- ChemDex→Other Interesting Sites (Employment) (8)

データベースプロデューサ・ベンダー

- Knight-Ridder <http://www.krinfo.com/>
- Beilstein <http://www.beilstein.com>
- CAS <http://info.cas.org/welcome.html>
- STN International <http://info.cas.org/stn.html>

出版社・刊行物・ドキュメントデリバリー

- ChemDex→Journals(84)
- (株) 紀伊国屋書店 <http://www.kinokuniya.co.jp>
- 紀伊国屋インターネット店 <http://bookweb.kinokuniya.co.jp>
- 丸善 (株) <http://www.maruzen.co.jp>
- John Wiley & Sons, Inc. Publishers <http://www.wiley.com>
- Wiley Online <http://www.wiley.com:80/Online.html>
- Elsevier Science <http://www.elsevier.nl>

- SilverPlatter(WebSPIRS) <http://www.silverplatter.com/sampler/webspirs.html>
- OCLC <http://www.oclc.org>
- UnCover <http://www.carl.org/uncover/unchome.html>
- Document Derivery Sources:(CIS-IU) http://www.indiana.edu/~cheminfo/ca_carbr.html UnCover, KR SourceOne, Einet など (12)。

エレクトロニック・ジャーナル

- Electronic Journals: <http://www-sul.stanford.edu/collect/ejournals.html> 電子ジャーナルの解説付きリンク集(92)。米 Stanford 大学図書館作成。
- Searching E-Journal <http://www.4mesa.com/jrl-bin/search?words=chemistry>
- Online Journal-東京工業大学図書館 <http://www.libra.titech.ac.jp/online.html>
- The Journal of Chemical Physics-Express: <http://jcp.uchicago.edu/>
- Journal of Computer-Aided Molecular Design: <http://wucmd.wustl.edu/jcamd.html>

データベース検索システム (有料)

- KR ScienceBase for the World Wide Web Home Page: <http://krscience.dialog.com> Chemistry: <http://krscience.dialog.com/ScienceBase/htmls/Chemistry.html> Dialog のユーザーインターフェースをWWWにして、エンドユーザー向きにしたもの。 主題別カテゴリ, サブカテゴリを選んだのち, キーワードを入力する。
- Chemical Patent Plus: <http://casweb.cas.org/chempatplus>

化学特許

(注) インターネット上の特許情報については, 参考資料 6), 情報検索のためのインターネット活用術 p.182-197 に詳しい。

- Chemical Patent Searching (CIS-IU): http://www.indiana.edu/~cheminfo/ca_cps.html 各種の特許関連サイト(16)
- Patent Coverage in Chemical Abstracts: <http://www.cas.org/E0/caspat.html>

Usenet, Newsgroup, Mailing List

- ChemDex→Chemical Usenet Newsgroups (31)
- ChemDex→Chemistry Mailing Lists(Listservs)(29)
- Overview of chemical mailing lists(67) <http://bionmr1.rug.ac.be/chemistry/overview.html>
- CHMINF-L (Index of/cdept.docs/CHMINF) <http://atlas.chemistry.uakron.edu:8080/cdept.docs/CHMINF/> STN のような化学情報源に関する話題が中心のML。CIS-IU で有名な Indiana 大学の Dr. Gary Wiggins が主催している。年・月ごとにまとめられており, そのタイトルを選んだのち, 全文を読むことが出来る。

元素・周期表

- Web Elements <http://www2.shef.ac.uk/chemistry/web-elements/web-elements-home.html> Sheffield 大学(英)が最初開発し, その後各国の大学からも提供されている。ディスプレイ上の元素の周期表の元素をクリックすることにより, その元素の情報が出力する。
- Periodic Table of the Elements at Los Alamos National Laboratory <http://mwanal.lanl.gov/CST/imagemap/periodic/periodic.html> 5色の周期表上の元素をクリックすると, その元素の歴史, 性質, 資源, 取扱い, 生産, 用途などの情報が出る。

物理化学的性質

- Physical Property Information (CIS-IU) http://www.indiana.edu/~cheminfo/ca_ppi.html 元素のデータ, 周期表, バイオケミカルデータ, 各種定数など(34)。
- Physical and Chemical Property Data Sources (CIS-IU) <http://www.indiana.edu/~cheminfo/10-06.html> 辞典類, ハンドブック, 文献ガイド等のリスト。

分析・無機・物理・有機化学

- The Analytical Chemistry Springboard (36) <http://www.anachem.umu.se/jumpstation.htm>
- Galaxy→Science→Chemistry→Inorganic Chemistry (7)
- Galaxy→Science→Chemistry→Physical Chemistry (7)
- Infoseek→Science→Natural Science→Chemistry(2,361)→Electrochemistry(189)
- Computational Chemistry List :Dr. Jan Labanowski-Ohio State University(OSC) <http://www.osc.edu/chemistry.html> The Computational Chemistry Archive(11), Other Sites of Interest(8), The Ohio Super computer Center
- Other Theoretical Chemistry Servers <http://biblio.edu.uy/others-tchem.html> Crystallography(9), Molecular Model(1)ing(72), Software(25), Hardware(6), Miscellanea (13)
- Organic Chemistry Resources Worldwide http://131.96.145.20/post_docs/koen/worgche.html 96年8月登場の有機化学全般にわたるリンク集。検索も可能。化合物の性質, カタログ, 学協会, 精製・分析, ソフト, Literature (各種データベース, 特許, 図書, Uncover, Online-Journal など)
- ChemFinder Searching (CambridgeSoft Corp.) <http://chemfinder.camsoft.com> 化学名(または化学式, CAS RN, MW など)を入力すると, その化合物の各種のデータが出力する。さらに, その化学物質を規制する法規などの, その化合物のページにリンクする。
- Sussex Fullerene Group Home Page - University of Sussex <http://www.susx.ac.uk/Users/kroto/> フラーレンの研究者, 研究グループ, 関連サイトなど (40)。

反応・合成・試薬

- Chemical Synthesis or Reaction Information (8) http://www.indiana.edu/~cheminfo/ca_csri.html

- SOURCES FOR THE SYNTHESIS OR REACTIONS OF COMPOUNDS
<http://www.lib.uchicago.edu/~atbrooks/beilstein/11-08.html>
- Sigma Browsable On-line Catalog <http://www.sigma.sial.com/sigma/catalog.htm>

ポリマー

- Polymers (Virtual Library:chemical...) <http://128.227.121.101/WWW-CHE/topics/polymers.html>
- Polymers DotCom <http://www.polymers.com/dotcom/home.html>

バイオ・農学・医薬

- Biological, Agricultural & Medical INFOMINE - The Regents of the University of California
<http://logic17.ucr.edu/bioag/> 包括的かつ膨大なリンク集 (Aの項のみで 559)
- GenoBase Database Gateway <http://specter.dcrf.nih.gov:8004/> Ron Taylor および Adam Ginsburg による Molecular Biology Collection

化学工学

- Chemical Engineering URL's Directory <http://www.ciw.uni-karlsruhe.de/chem.eng.html> 化学工学の総合的コレクション。ドイツなどヨーロッパ関係の情報も多い。(約200)
- Chemical Engineering resources available on the net <http://158.130.12.3/~vinson/cheme.html>
- Virtual Library→Chemical Engineering→Databases(45)
- Virtual Library→Chemical Engineering→Standards(6)

化学工業

- The chemical Industry <http://www.neis.com> 化学工業の総合的コレクション (化学・プロセス工学, 市場情報, 環境情報, 分析化学, 企業, ほか)
- ThisWeeksQuotes <http://hackberry.chem.niu.edu/StockPrices/> 米国の主要化学会社の毎日の株価 (終値)。
- Chemical Marketing Online (CHEMON) <http://www.chemon.com/chemon.htm>
- ChemExpo Virtual Trade Show <http://www.chemexpo.com/chemexpo2/index.shtml>
- Standard Industrial Classification (SIC) Codes 完全な S I C コード表。
<http://weber.u.washington.edu/~dev/sic.html>

化学会社・化学製品

- ChemDex→Commercial(286),
- Yahoo!→Business and Economy→Companies→Scientific→Chemistry または Yahoo!
→Science→Chemistry→Companies
- Chemical Companies on the Web (90) <http://pages.prodigy.com/NTNA27A/chemcomp.htm>
- ChemConnect:Chemical Suppliers Directory and Exchange <http://www.chemconnect.com/> 化学品取引およびサプライヤのディレクトリ。(ヒット数約100万)
- Fisher Scientific <http://fisher1.com/>
- ChemExper <http://www.chemexper.com>

環境

- Infoseek→Environment(13)
- EPA <http://www.epa.gov/>
- NIEHS <http://niehs.nih.gov/>

安全性・危険性・毒性

- 国際化学物質安全性カード (I C S C) - 日本語版 - <http://www.nihs.go.jp/ICSC> 化学物質の重要データ, 危険性, 毒性, 包装, 表示など。(1996年8月現在525物質を収録。日本語)
- MSDS (物質安全性データシート) MSDS は, いくつかの機関から提供されているが, ここではユタ大学のものを示す。 [gopher://atlas.chem.utah.edu/11/MSDS/](http://atlas.chem.utah.edu/11/MSDS/) 化合物はまずアルファベットの頭文字を選び, 示されるリストの中から選択する。
- EXTTOXNET - The EXTention TOXicology NETwork: <http://ace.orst.edu/info/exttoxnet/>
- ATSDR <http://atsdr1.atsdr.cdc.gov:8080/atsdrhome.html>
- CDC <http://www.cdc.gov/>
- NIOSH <http://www.cdc.gov/niosh/homepage.html>
- CIIT <http://www.ciit.org/>
- OSHA <http://www.osha.gov/>

その他

- Chemistry on the Internet:The best of the Web 1995. <http://www.ch.ic.ac.uk/infobahn/boc.html>
投票による人気の高い化学サイト集 (1995年版) (約70)。
- Chemist's Art Gallery <http://www.csc.fi/lul/chem/graphics.html> Leif Laaksonen 収集の化学アート集。分子活動のカラー動画, アニメなど (60)。
- The Chemical MIME Project and Discussions (Standard) <http://www.ch.ic.ac.uk/hypermail/chemime>
archive by thread (Chemical Internet Standard Project)

5. おわりに (所見)

1. WWW上の化学関連サイトの数は1995年より急増しており, 現在その数は何千(万?) あるか見当もつかない。ここに挙げたものはその膨大なサイトのうちのごく一部で, たまたま 私が出会ったものにと過ぎない。日本からの英語の化学関連サイトはきわめて少ないようだ。

- WWW上の化学関連サイトで目につくものとしては、大学・学協会・化学会社・データベース関連企業などのホームページ、教育関係、Eジャーナル、News Group のリストなど、また化学の各分野・項目については元素・化合物のデータ、環境関連、危険性・毒性データ、ならびに以上の総合的あるいは分野・項目別リンク集が挙げられる。
- リンク集によって新しく関連サイトを発見することが多い。また、Infoseek などのディレクトリサービスで、階層カテゴリをたどって絞ったのち、キーワード検索をすることは、ノイズも減り、探索に有効である。
- WWW上の化学関連サイトでは、STN, DIALOG などの従来の商用オンラインデータベースサービスでは入手できない情報を得ることができる。両者の使い分けが必要となる。
- JICST のサービスが一部終了したように、一般にインターネット上の情報は流動的で、サイトの出現・消滅やURLの変更も少なくない。ブラウザのブックマーク（お気に入りのページ）のメンテナンスにも配慮すべきである。

参考文献

- James H. Krieger: Chemistry Sites Proliferate On The Internet's World Wide Web. C&EN, Nov. 13, p35-46 (1995)
- 'Best-of-theWeb' list underscores growth in chemical Sites.
<http://pubs.acs.org/hotartcl/cenear/951113/pg2.html>
- Oyvind Edvardsen: Using the World-Wide Computer Network, Internet, in Chemical Sciences. Acta Chemica Scandinavica, Vol. 49, p344-350 (1995)
- Stephen R. Heller: Chemistry on the Internet-the Road to Everywhere and Nowhere. J. Chem. Inf. Comput. Sci., Vol. 36, No. 2, p205-213 (1996)
- P. Gayle Alston: Environment Online-Update '95. DATABASE, February/March p32-38 (1996)
- (社) 情報科学技術協会編集: 情報検索のためのインターネット活用術. 東京, 日外アソシエーツ(株), (1996)
- 時実 象一: WWW上の科学技術データベース. 情報管理 Vol. 38, No. 12, p1112-1122 (1996)
- 時実 象一: 化学の世界のWWW. 現代化学, 1996年3月, p61-64

しま ゆたか SHIMA, Yutaka

もと化学会社勤務, 現在, 嶋DB情報研究所(代表), データベース検索技術者1級。

趣味は写真, 湘南の海沿いの散歩。1926年生れ

連絡先: 嶋DB情報研究所(自宅と同じ)

〒248 神奈川県鎌倉市西鎌倉 3-3-34 電話 0467-32-1722 F A X 0467-32-8137□

日本化学会／情報化学部会

CICSJ Bulletin Vol.14, No.6, December, 1996

このページは「日本化学会・情報化学部会」の責任において運営されています。

目次

特集：先導研究「計算機材料設計」

- 先導研究「計算機材料設計」の目指すもの・・・・・・・・・・平石 次郎 p2
- [Ab initioケミストリー・・・・・・・・・・山下 晃一 p4](#)

部会記事

- [総会報告・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ p1](#)
- [第19回情報化学討論会を終えて・・・・・・・・・・藤原 英明 p10](#)
- [第19回情報化学討論会ポスター賞について・・・・・・・・ p12](#)
- [第18回ケモメトリックス・ワークショップ・・・・・・・・相島 鐵郎 p14](#)

関連記事

- [インターネット上の電子学会・・・・・・・・・・米谷 慎 p6](#)

部会行事

- [第8回情報化学講習会 インターネットにおける情報発信と情報収集](#)
・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 表2,15
- [第1回分析化学のためのケモメトリックス討論会](#)・・・・・・・・ p18

関連行事

- Combinatorial Chemistry & High Throughput Screening - Theory to Practice -
・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ p16

編集後記・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 表3

[CICSJ INDEX にもどる](#)

Ab initio ケミストリー

東京大学大学院工学系研究科 山下晃一

yamasita@qcl.t.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

平成8年4月から「計算機材料設計」の課題で通産省の先導研究がスタートした。10年後には理論化学、計算化学を新しい産業技術へ育て上げようとする国家プロジェクトである。成功すれば、実験の相当部分が計算で置き換えられることになる。まさに“ab initio ケミストリー”の時代到来である。来年度からの本格的プロジェクトの立ち上げを目指して、産官学のメンバーで目下プロジェクト内容の調査研究を行っている。筆者も企画委員の一人として参加することとなった。学生時代から理論化学、計算化学の分野にどっぷり浸かり、日頃「できるだけ役に立たないことを研究しよう」と痩せ我慢を言ってきた筆者にとっても、ようやく「少しは社会のお役に立てるのかな」と感慨深い。ただ理論化学、計算化学といってもカバーする研究分野は相当に広く、プロジェクトを成功させるためには、慎重な研究内容の選択が不可欠であろう。この場をお借りして筆者の考えを述べさせていただく。ただ東京ドームの5万人を熱狂させたマイケル・ジャクソンのおかげで家族共々興奮覚めやらぬ状況で原稿を書いているので、たんなる筆者の研究分野の宣伝と押し売りになってしまっているのだが。

2 理論化学、計算化学とは

もう20年程前になるが、米国で「Theoretical Chemistry」と言う理論化学教程のシリーズ本8冊が出版された。その内容は、電子状態理論、反応動力学理論、化学統計力学の3つに大別される。筆者もこれこそ理論化学の基礎と信じて、当時は洋書がまだ高価だったので、少しずつコピーして全て読破しようと計画した（当然計画倒れ）。その後、コンピュータの飛躍的な高速化と伴って電子状態理論、化学統計力学は「役に立つ学問」として大いに発展し、現在「計算機材料設計」の中心研究内容として考えられている。特に電子状態理論すなわち量子化学の分野はこれまで国内での研究活動も活発で、この間かなり世界をリードしてきたといえる。研究者人口も理論化学、計算化学のなかでは多く、理論化学者イコール量子化学者と思われていた時代もあった程である。また現在では研究室の学生諸君は数百の基底関数を使った計算や、数千万次元のCI計算を日常行っており、筆者が学生時代、ホルムアルデヒドのSTO-3GのHF計算を、一週間に一度走る大型計算機センターの特殊ジョブで計算していた当時とは隔世の感がある。一週後にインプット・エラーで“ぱらっ”と一ページのアウトプットが出てきた時のショックを2度と味わいたくないために、インプット・カードを先輩と穴のあくほどチェックしたことが懐かしく思い出される。確かにこのスピードで進歩すれば、10年後の電子状態計算の可能性は測り知れない。コンピュータの高速化が過去20年間と同様に伸びるのは難しいとしても、5年後には1,000原子10,000基底関数の超並列計算が可能になるだろう。量子化学計算に先導された材料設計や反応設計が新しい産業技術となることは疑いの余地はない。より高度な電子状態理論の開発とユーザーフレンドリーなソフトウェアの開発を「計算機材料設計」の中心研究とすることは大賛成である。また化学統計力学は現在、分子動力学計算、モンテカルロ計算として発展し、既に産業界にも十分浸透し、実際的なシミュレーション法として力を発揮している。より強力なシミュ

レータをめざして、この方面も産業技術として順調に発展していくであろう。さて残ったのが反応動力学理論である。反応動力学理論が将来の産業技術になると考えておられる方は少ないのではないだろうか。実は反応動力学理論は電子状態理論、化学統計力学と比較して応用と言う面では10年遅れているのである。特に日本での研究者人口は電子状態理論、化学統計力学と比較して非常に少ない。ところが筆者は反応動力学理論の進歩なしには“ab initio ケミストリー”は実現できないと考えている。

3 反応制御

弾道計算の目的から発展した反応動力学理論が応用面で遅れているというのもおかしな話である。ただその古典論的な計算技術は分子動力学計算、モンテカルロ計算に十分に反映されている。応用面で遅れている理由は、現在の反応動力学理論の主な目的が厳密な量子力学的計算手法の確率を目指しているからであろう。特殊な環境下や極低温で起こる量子現象に対して、応用面からのニーズはないのであろうか。反応制御という立場から考えて見よう。新奇な機能を発現する材料を設計するためには、当然その材料の電子構造、物性を理論的に解明することが最重要であるが、そのような材料を創る反応を制御できないのでは何にもならない。これまで反応制御としては、熱、圧力、置換基効果などであった。しかしこれだけで本当に欲しいものができるのだろうか。微妙なエネルギー安定性の違いを制御する必要があるであろう。また単にエネルギー差の議論、すなわち熱平衡論的な考えだけで反応が制御できるのであろうか。さらに相当過激な反応条件が必要となるかも知れない。そこで量子現象の登場である。極低温域でのトンネル現象を利用して微妙なエネルギー安定性の違いを制御する。励起された非平衡分子を利用する。高出力のレーザーを利用する。さらには超流動ヘリウム流体を溶媒として利用する。このような条件下での反応制御の理解には反応動力学理論とその計算手法の開発が不可欠である。10年後、応用面でのポテンシャルティニーは相当高いと確信しているのだが。夢のような話で、説得力が全く不足しているかも知れないが、電子状態理論、反応動力学理論、化学統計力学は理論化学、計算化学の基礎として、どの一つが欠けても、真の意味での“ab initio ケミストリー”に先導された材料設計は達成できないのではないかと考えている。ただ繰り返すようであるが、やはり総花的なプロジェクト内容では、特徴が出ない。またそれぞれを大きく成功させるのは無理であろう。企画委員会での工夫が成功の鍵を握っている。

やました こういち YAMASHITA, Koichi

最近の大学は超多忙である。ゆっくり読書をし、また山歩きを楽しむなどというのはもう夢なのか。

如何に有効に時間を使えるか真剣に考えよう。できるだけ原稿はお断わりしよう、、、と言ってマイケル・ジャクソンでは叱られそうだが。

連絡先 113 東京都文京区本郷 7-3-1 東京大学大学院工学系研究科 電話 03-3812-2111(内7228)

[目次へ戻る](#)

総会報告

第19回情報化学討論会の初日(11/12)、一般講演終了後に、会場の大阪大学銀杏会館で情報化学部会総会が開かれました。

この数年赤字が続いていた部会会計に関して、日本化学会の他の3つの部会に比べ低かった法人会費(3万円)を同じ金額(5万円)に値上げすることが決定されました。法人会員の皆様何卒ご理解願います。また、部会設立からの永年に渡る多大な貢献により今日の部会活動の基礎を築き上げて頂きました、米田幸夫先生、並びに佐々木慎一先生を名誉会員とすることが決められ、部会からの感謝状と副賞の贈呈が行われました(下の写真は贈呈後行われたスピーチの様子)。

(吉田元二)



[目次へ戻る](#)

第19回情報化学討論会を終えて

大阪大学医学部保健学科 藤原英明

a62242a@center.osaka-u.ac.jp

1996年度の標記討論会を大阪で開くようにとの指名を受けたのがちょうど1年前の本討論会でした。当時の細矢部会長の笑顔での指名に、大阪で開催する特徴を出して参加者の記憶に残る討論会にしようと、夢と期待を胸一杯に感じながらお引き受けした次第です。

本討論会は最近、構造活性相関シンポジウムと併催されており、第24回構造活性相関シンポジウムもお世話することとなりましたが、大阪大学吹田キャンパスには遺伝情報に高木達也講師が情報化学の若手研究者として活躍しており、また、この2、3年環境整備が進み、構内道路の美化から始まり、新しい建物が次々と建設されつつあり、それらの御披露目も兼ねて両学会・シンポジウムを併催するには絶好の条件が揃っていると感じました。最初に考えたのは特別講演のことです。情報化学における基本的な考え方として、これまで、量子化学計算、パターン認識、人工知能、グラフ理論、ニューラルネットワーク、遺伝的アルゴリズム、データベース、Internetなど、様々な概念が採り上げられてきましたが、未導入（未紹介）のものとしてカオスがあるので、これを専門の先生に紹介していただくこととしました。カオスは、私流の解釈を述べれば「一見ランダムと見える現象の中に規則性を見出し予測可能とするもの」ですが、自動制御などの分野ではかなり研究が進んでいます。これが、情報化学あるいは構造活性相関に使えるかどうかはこれからの問題ですが、多様性や複雑性を如何にコンピューターで取り扱うかが注目されている現在、一考する価値は十分あると考え、広島大学の奈良重俊先生に御講演をお願いしたわけです。

もう一つの特別講演は、構造活性相関に関する話題として、生理活性物質特に生理活性ペプチドの発見と構造決定に国際的に活躍されている松尾壽之国立循環器病センター研究所長にお願いしました。先生は、読者の中にもご存じの方が多いと思いますが、LH-RHの構造決定やナトリウム利尿ペプチドの発見で著名な方で日本学士院賞受賞者でもあります。講演後の談話ですが、アッセイ系が重要な役割を果たしたことを教えて頂きました。

今回は、討論会の活性化のため、情報化学部会の役員の皆様のご意見並びにご協力を受け、様々な試みを新たに導入しました。その1つが、発表分野を化学情報学、計算化学・理論化学、知識情報学・ケモメトリックスの3つのセッションに分類したことです。そして、各セッション（口頭発表の場合）の冒頭には、キーノートレクチャーを設けて、そのセッションの総合的な或いは特徴的な講演をお願いしました。各セッションの講演申し込み件数は、以下のようです（キーノートレクチャーを含む）。

第19回情報化学討論会における一般講演・キーノートレクチャーのセッション別件数

	情報学・ケモメトリックス	理論化学・計算化学	化学情報学	計
口頭発表	9	6	6	21
ポスターセッション	9	11	14	34
計	18	17	20	55

特別講演2件をあわせると、合計57件の講演件数となり、なかなかの盛況となりました。また、各セッションの講演件数も、口頭発表、ポスターセッション共に極めてバランスがとれたものとなり、討論も活発に行われ、この試みは一定の成果を収めたのではないかと考えております。プログラムの編成上、ごくわずかの方に、希望セッションの変更をお願いしました。御協力を感謝申し上げます。この他、新たな試みとして、300-400字程度の講演概要を、討論会に先駆けて部会誌で公開すると同時に、テスト運用中の情報化学部会のホームページにも掲載しました。この間、ホームページのアクセス件数も増大しているようですので、この試みも、少なくない効果を持ち得たのではないかと思います。

今回は、大阪大学吹田キャンパスに昨年新たに建設された、コンベンションセンターならびに銀杏会館が利用できたため、会場に関しては、比較的恵まれていました。参加者は構造活性相関シンポジウムと併せて402名と、バブルの頃の500人近い人数を考えるとやや寂しい気もしますが、先述のように、討論はなかなか活発で、7分の討論時間が短く感じられることも多かったです。もっとも、情報化学討論会の「潜在能力」とでも言うべきパワーはまだまだ埋もれていると思われるので、今後も引き続き、情報化学討論会の活性化を目指して、様々な試みが行われることを期待します。

情報化学討論会と構造活性相関シンポジウムは、共同開催の形式をとって10年以上の実績を積み上げ、ますます連携を深めつつあります。さらに、今年Combinatorial Chemistry 研究会の発表会とも同一会場で時期を継続して開催することが出来ました。最近、生化学会と分子生物学会の例を挙げるまでもなく、共同開催の試みが他にも増えつつあります。各学会や主催団体の縦割りの発想を捨てて関連学会が学術発展のために連携することは、学会や参加者に新鮮な刺激を与えるとともに、学会の成功を左右する非常に重要なドライビングフォースとなるはずです。

本年は2つの会場が別々の建物にあり、会場の広さと自主性を尊重する上では大変好都合でしたが、両会場が少し離れている不便さを感じた方もおられるのではないのでしょうか？現在、大阪大学でも準備が進められていますが、SCS (Space Collaboration System) の環境が整えば、離れた会場での発表にも生で傍聴し質疑に参加でき、必要に応じ中心的に参加する会場を選択することが可能となります。近い将来そのような共同開催が実現することを期待しています。

Internetの時代ということで、今回も、昨年同様、電子メールでの講演申し込みを受け付けましたが、郵送による申し込みは2件だけで、あとはすべて電子メールによる申し込みでした。これも時代の流れを感じさせると同時に、今後の情報化学討論会のあり方にヒントと示唆を与えているように思います。

以上のように、吉田元二部会長はじめ、情報化学部会幹事の皆様と大阪大学の関係者の方々の多大のご支援を受けて、無事会期の3日間を終えることが出来ました。御協力を心から感謝申し上げます。また、参加していただいた皆様には、こちらの気付かなかった不行き届きの点多々あったかと思いますが、素人の運営であることに免じてお許しをお願いします。最後になりましたが、超多忙な中を会場設営や運営までもご協力いただいた高木達也氏に心から御礼申し上げます。

来年は、熊本大学で10月20日から22日まで、薬学部の松岡俊和先生のお世話で開催されます。どうぞ奮って御参加下さい。

[目次へ戻る](#)

第19回情報化学討論会ポスター賞について

昨年度、豊橋で行われた第18回情報化学討論会で、初めてポスター賞が設けられました。昨年度の場合は、ポスターセッションの発表者の方は、ポスター賞の存在を知らずに準備をされていたはずですから、今回で2回目になる同賞ですが、ポスター賞の存在を意識して準備される可能性のある、初めての討論会ということになります。そのためかどうかはわかりませんが、全体として、ひょっとしたらこの賞を狙っておられるのではないかと思わせるくらい、わかりやすく、かつ、冗長でないようにまとめられた、優れたポスターが多く目に付いたように思われます。或いは、今回、昨年度に比べてポスターセッションの数が比率的にやや多かった（昨年度56%、今年度62%）のも、ポスター賞の存在がなせる技だったかもしれません。まだ2回目ですから、結論を下すのは早すぎるかもしれませんが、少なくともこの2年間をみる限り、ポスター賞の設置は、当初の目標を達成しつつあるのではないのでしょうか。

もちろん、今後、狭義の「ポスター」の概念は大きく変化することも予想されます。例えば、the internetに接続されたグラフィックワークステーションやパーソナルコンピューターを用いての発表は、急速に普遍化しつつありますし、それだけでなく、WWWを利用して、発表者は各研究室からアクセスすることにより、発表者や参加者が一堂に会することなく学会を行うことも珍しい試みではなくなってきました。こうした場合、狭義の「ポスター」は、ディスプレイ画面を含めた、広義の「ポスター」へと、漸次、移行していくことになるのでしょうか。しかしながら、ポスター賞の重要性は、何ら変わることがないことは、付け加えるまでもないと思われます。

前置きが長くなってしまいました。本年度のポスター賞の選考も、昨年度と同様、情報化学部会役員（ポスター発表者をのぞく）の1人3件連記制投票によって、選考されました。票はかなり割れましたが、この結果、特に決選投票などをすることなく、以下の3件のポスター発表が選ばれました。選ばれたポスター発表には、吉田部会長によりポスターの上部にピンクのバラが飾られ、また、懇親会の席上、壇上にて賞状と副賞が授与されました。今後とも、このポスター賞は、情報化学討論会の発展に大きく貢献するものと思われまますし、また、そうなることを願っております。

13IP26 Kohonenネットワークを用いた反応部位構造変化の分類－その手法と活用について（豊橋技科大・理化研）○西口大介・木村敏郎・佐藤寛子・船津公人



13IP30 有機反応の分類－反応部位原子の電子的特性の変化の類似性と反応タイプとの相関（理
化研・豊橋技科大）○佐藤寛子・西口大介・木村俊郎・中田 忠・船津公人



13IP34 ニューラルネットによるタンパク質アミノ酸残基の配座パターン予測（豊橋技科大）○
横田由起子・高橋由雅



（文責・高木達也）

[目次へ戻る](#)

第8回ケモメトリックス・ワークショップ

キッコーマン（株） 相島鐵郎

LDH00052@niftyserve.or.jp

ノルウェーのCAMO社が80年代から販売しているUnscramblerは、最も強力な多変量回帰分析と言われるPLS(partial least square)法を含むことから、ケモメトリックス分野では昨年、本ワークショップで紹介したPirouetteと共に世界中で広く利用されているソフトウェアである。Unscramblerは当時、オスロの国立食品研究所の研究者であったDr. Martensが近赤外分光(NIR) データ解析用に開発したこともあり、食品の研究開発を強く意識した構成となっている。旧バージョンのUnscramblerは必ずしもユーザーフレンドリーとは言えない向きもあったが、現今のVer. 6 からWindows 3.1及び95対応となり、格段に使いやすくなった。このソフトウェアは検量法としてはPLSと主成分回帰分析、応答曲面法を含む実験計画法及びパターン認識法のSIMCA (soft independent modeling of class analogy) からなる。

日本化学会館7階会議室において11月22日、お茶の水女子大学・藤枝修子教授の開会の挨拶に続き、CAMO社から招いたケモメトリシャン、Ms. Dominique Guyotが主として食品開発を例に、多変量解析法と実験計画法について下記のプログラムに従い講演した。

1. 多変量解析法

- 多変量手法の概説
- 投影的手法の原理-主成分分析 (PCA)
- 回帰手法 (MLR, PCR, PLSI, PLS2)
- 分類手法 (SIMCA, PLS-DA)
- 多変量解析データ解析戦略
- 前処理とバリデーション
- 外れ値・外れ試料の検出と取り扱い法

2. 実験計画法

- 従来の実験戦略とそのブラックボックス領域
- 実り豊かな実験戦略へのアウトライン
- 問題の公式化
- 要因選択的な実験計画の構築と解析
- 混合計画法と"頑丈な"計画法

3. 多変量的なアプローチ法の構築

- 多変量手法を補完する実験計画法
- 計画的なデータ取り扱いにおける多変量手法の有利性

ケモメトリックス手法で扱う対象は多次元に分布する試料のため、それら手法の基礎概念を図示したり言葉で表すことは必ずしも簡単ではない。しかしPowerPointで作製したカラフルな図表

と、Unscramblerを実際に用いながらのケース・スタディーは非常に分かりやすいと好評であった。また本来フランス人のMs. Guyotにとって英語は母国語ではない生もあり、比較的ゆっくり分かりやすく話してくれたことも手伝い、会場から多数の質問も寄せられ、活気あるワークショップとなった。日本たばこ産業・榎 武志氏による閉会の挨拶に続く、約30名の参加者による講師を囲む5時~7時の懇親会も盛会であった。

67名の参加者中、約半数が食品関連であり分析機器、製薬メーカーがこれに続いた一方、大学からの参加者は今回も非常に少なかった。欧米でもケモメトリックス手法がR&D部門で広く利用されるようになってきていることから企業での関心は高い。しかし、手法開発などの基礎的な面でリードしているのは大学の研究者であることから見れば、わが国との違いは大きい。

[目次へ戻る](#)

インターネット上の電子学会

日立製作所 日立研究所 米谷 慎
yoneya@hrl.hitachi.co.jp

インターネットの広範な応用の一つに、ネットワーク上の仮想的な会議場において議論をおこなう電子会議がある。本稿では参加者の立場から、具体的な例を基にインターネット上の電子学会がどのように開催され、またどのような可能性と問題点をもっているかを私見を交えて述べたい。

はじめに

日本の大学においては、主に欧米で開催されることの多い国際学会への参加が、経済的な理由から容易ではないことは以前から言われている。また企業においても、近年の基礎研究のスリム化基調により、バブル期に較べるとその機会はかなり制限されてきている。このような現状を踏まえると、表記のインターネット上の電子会議は空間的な移動を伴わないことから、参加に係る費用および時間の点で非常に魅力的である。更に、インターネットの持つ特徴を活かしたマルチメディア機能などの、従来の学会発表では困難であった要素が容易に実現できる点に、単なる置換えではない新たな可能性があると考えられる。

本稿では電子会議の具体例として、筆者の参加した ECCC-2 (2nd. Electronic Computational Chemistry Conference) と、MGMS-EC1 (The first Electric Molecular Graphics and Modelling Society Conference) について、特に後者を中心に説明することとする。より広範な化学一般の電子学会の動向については、[文献\[1\]](#)を参照されたい。

ECCC-2

本会議は、1994年の第1回目から毎年 Northern Illinois Univ. のSteven Bachrachを中心に開催されている計算化学についての電子会議である。インターネットの成長期にこの分野での先駆者として始まったこの電子会議はすでに3回目 ([ECCC3](#)) となり、老舗と言えるかも知れない。

開催形式としては、インターネット上の電子会議の基本形式である電子会議サーバー上に実ファイルあるいはリンクとして集められたHTML (Hypertext Markup Language[\[1\]](#)) で書かれた (図、動画、分子モデルなどを含む) 発表内容を、Netscape (Netscape NavigatorはNetscape Communications Corp.の商標です。) 等のブラウザにより参加者が閲覧し、同サーバー上のセクション分けされたディスカッションスペースに電子メールの形で議論を投稿、掲示するものである (詳細は[文献\[2\]](#)を参照)。この電子メールと掲示板により議論をすすめる方式は、各自の自由な時間に参加することが出来ると言う点ですぐれているが、必然的に議論にある程度の時間を要しECCCの開催期間も1か月となっている。

ECCCは、次に説明するMGMS-EC1と比較すると、大学関係者を中心に非営利に開催されているためか、その運営がかなりコンパクトであり参加費用も無料である。また、会議サーバーの負荷

を分散することもあるのか、発表内容は発表元のサーバーへのリンクによる提供が基本となっている。筆者はECCC-2に参加、発表した。上記の電子メールにより議論を進める形式がそのインタラクティブ性の点でものたりなさを感じた。同様に1か月と言う開催期間も、議論の集中性という点で間延びした感が否めなかった。

MGMS-EC1

一方、[MGMS-EC1](#)は、その名のようにMolecular Graphics and Modelling Societyが主催する計算化学、情報化学の電子学会で、まだ開催1回の新しい電子学会である。先のECCCと対比的にMGMS-EC1は参加費（£35）が必要で、また、専門の電子会議システムプロバイダー（[Greenlea Communications Ltd.](#)）が会議システムをデザインし、ElsevierやSpringerなどのスポンサーが積極的にその運営をバックアップするより組織化された電子会議であった。

会議システムは、図1に示す電子会議場のクリッカブルマップに示されるように、より仮想的な会議場（コーヒーショップやバー、ホテルまである）を意識したものとなっている。

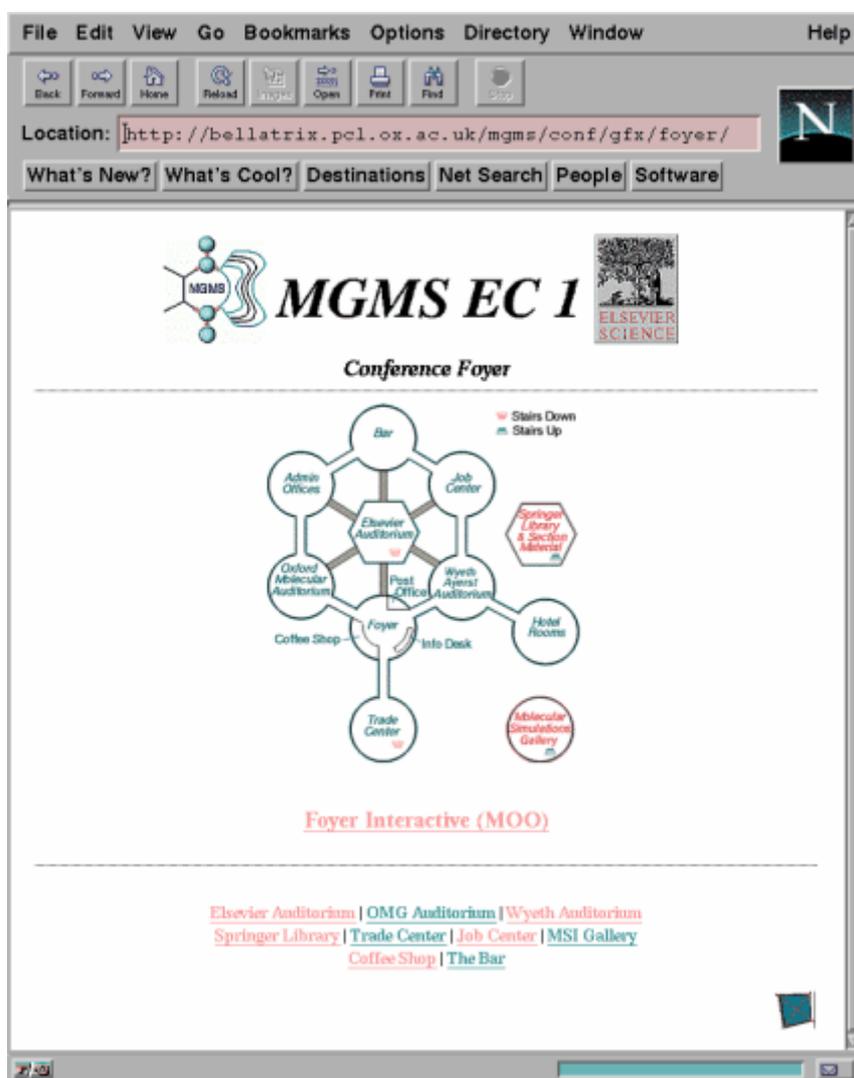


図1 MGMS-EC1電子会議場

参加者の発表内容は、この会場のライブラリーにHTMLファイルとして用意され、それをブラウザで閲覧するという点はECCCと同様である。ECCCと最も異なる点は、デスクッションが電子メールと掲示板（補助的には用いられている）ではなく、MOO（[Multi user dimension, Object-](#)

[Oriented](#)) と呼ばれるインタラクティブかつリアルタイムな環境を主に用いて行なう点である。具体的には、図2に示される様なブラウザ上のフォームに発言を書き込み、"Say"と表示されたボタンをクリックすると自分の発言がフォーム下のディスカッションボードに他の参加者の発言とともに表示されるという形で（テキストベースで）やりとりが行なわれる。

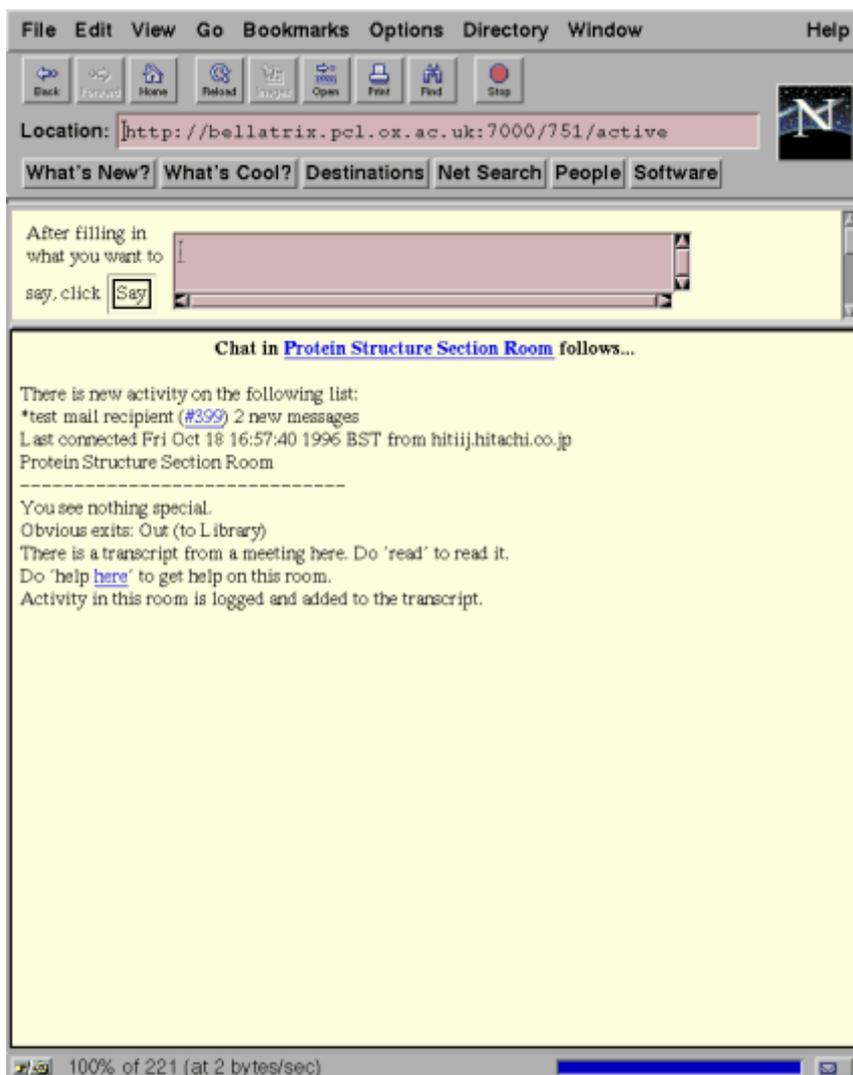


図2 Listen&Talk画面

この様なディスカッションは、セクションごとに図3のような形でその記録が公開される。

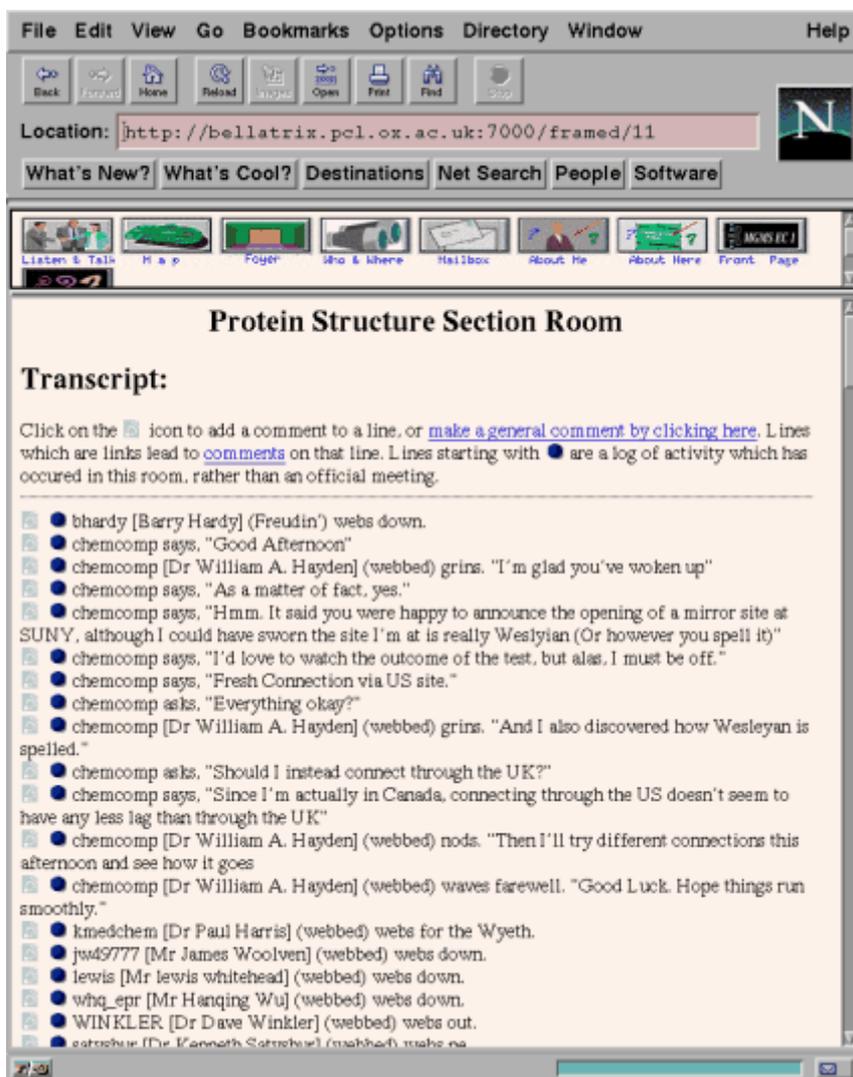


図3 Transcript画面

実際に使ってみた印象では、会議サーバーが英国にあったにも関わらず、そのレスポンスはディスカッションを進める上で大きな支障がなかった。MGMS-EC1ではこのような形式を用いたため、ECCCより短い2週間の会期中に各セクション毎にこのようなリアルタイムディスカッション（約2時間）のスケジュールが組まれていた。この形式では、そのリアルタイム性からより活気あるディスカッションが可能となるが、一方で同時刻にそのセクションの参加者はコンピューターと相対する必要があり、電子メールによるやりとりのような参加時間の自由度はなくなってしまう。

MGMS-EC1には、発表者として日本から北里大の米田先生と筆者が、また、その他の参加者として主に製薬メーカーの研究者が数名参加していた。これらの参加者にとっておそらく最も問題であったのは、前述のリアルタイムミーティングの開催時刻が欧米の参加者を基準に決められていたため、日本から参加しようと思うと真夜中に起きていなければならなかったことであろう。米田先生はこのために大学に寝袋持参で泊り込み、また筆者は連日の夜更かしで肝心の自分のセクションのミーティングを寝過ごしてしまった。このような問題はあっても、筆者の感想では、やはりリアルタイムな議論というのはエキサイティングで魅力的であった。MGMS-EC1ではまた、前述のMOOという環境以外にも、図4に示す様な、誰がこの電子会議サーバーにアクセス（MOOに接続中か、ブラウザで閲覧中かを別表示）していて、さらに仮想的な会議場のどこにいるのかが判る様になっていた（図4中のLocation欄）、参加者の、この会議用のホームページを写真

入りで作れるようになっていたりなどの、お互いを知り合う仕組みが考えられていた点がきめの細かさを感じさせた。

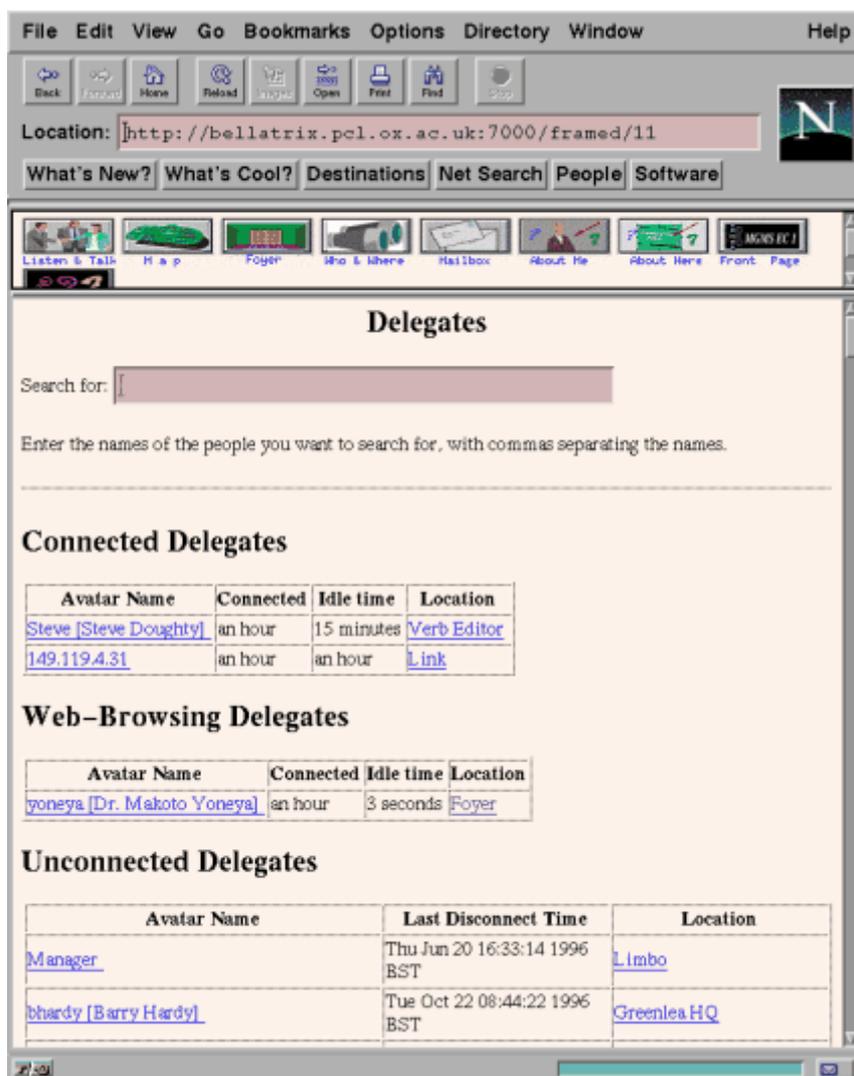


図4 Who&Where画面

このように、MGMS-EC1の電子会議システムは、現時点でもかなりの完成度を持っていたと思う。しかし、逆に浮き彫りになった電子会議自身の問題点として、参加者の参加意識にかなりのばらつきがあることがあげられる。具体的には、必ずしも多くない前述のリアルタイムミーティングへの参加状況や、少なからずあったエントリーしていて事実上キャンセルとなった発表などにそれが端的に現れていたように思われる。この様な問題の解決には、ある程度参加者層に厚みができるのを待たなければならないと思われる。

最後に

インターネットによって、情報の入手、発信において、地理的、経済的ハンデイキャップが大幅に解消され水平化されつつある（結果として発信する情報の質がますます重要になる）。インターネット上の電子会議は、研究活動におけるこの様な流れを最も端的に示す例と考えられる。しかしながら、現状ではこの様な電子学会への日本からの参加はあまり活発とは言えない。その理由が、この様な電子学会についての（特に日本語で書かれた）情報が欠如していることであるならば、本稿がその一助となれば幸である。

最後に、本稿を書く機会を与えて下さった北里大の米田先生と、本稿に掲載されている画面イメージの転載を快く許可頂いた、Greenlea Communications Ltd.に感謝致します。また、筆者の所属する日立研究所の情報システムを管理運営している、情報ネットワーク室の皆様はこの場をお借りして感謝致します。

参考文献

- [1] Krieger, J.H., Illman, D.L.:
"Internet Offers Alternative Ways For Chemists to Hold Conferences", C&EN,
Dec.12, 29 (1994).
- [2] Bachrach, S.M.:
"Electronic Conferencing on the Internet: The First Electronic Computational
Chemistry Conference", J. Chem. Inf. Comput. Sci., **35**, 431 (1995).

よねや まこと [YONEYA, Makoto](#)

連絡先 〒319-12 日立市大みか町7-1-1 日立研究所エネルギー第1部

代表電話 0294-52-5111

[目次へ戻る](#)

第8回情報化学講習会

インターネットにおける情報発信と情報収集

主催 日本化学会情報化学部会
会期 3月1日(土) 10時～16時
会場 日本化学会会議室(千代田区神田駿河台1-5)
参加申込締切 定員(40名)になり次第

最近のインターネットの急速な普及に伴い、化学情報のあり方が変わりつつあります。本講習会では、インターネットを使った化学情報発信の方法とインターネットにおける化学情報の収集について、具体的例を交えて分かりやすく解説していただきます。

情報発信をしたいのだが、どうすれば良いのか分からない。すでにホームページを開いているのだが今一つ思ったように作れないという方々。また、インターネットに接続したがどうすれば情報を集められるのか分からない。また、どのような情報があるのかを知りたいという方々、是非、本講習会にご参加ください。

1. 10:00-12:00 インターネットにおける化学情報発信
(国立衛生試験所) 中野達也
2. 12:00-12:30 質疑、情報交換
3. 13:30-15:30 インターネットにおける化学情報収集
(嶋DB研究所) 嶋裕
4. 15:30-16:30 質疑、情報交換

参加費 部会員 5,000円、日化会員 7,500円、非会員 10,000円、
学生 3,000円

(勤務先法人会員の場合は会員扱いとします)

参加申し込み方法 「情報化学講習会申込書」と記し、参加者氏名、年齢、勤務先、連絡先(所在地・郵便番号・電話番号・FAX番号)、会員種別・参加費を明記のうえ、FAXもしくはE-mailにてお申し込み下さい。

申込先 101 東京都千代田区神田駿河台1-5 日本化学会情報化学部会
電話(03)3292-6163 FAX(03)3292-6318
E-mail: cicsj@chemistry.or.jp

第1回

分析化学のためのケモメトリックス討論会

主催 日本化学会情報化学部会

共催 日本分析化学会中部支部

CACフォーラム

第1回分析化学のためのケモメトリックス討論会は、70名を超える皆様にご参加頂き、盛会のうちに終わることができました。どうも有り難うございました。

なお、第2回は、来春、同じく名古屋にて開催される予定です。皆様のご参加をお待ち申し上げております。