

14 研究者のアクセス手法 I

化学情報と図書館

筑波大学大学院数理物質科学研究科化学専攻 木越英夫

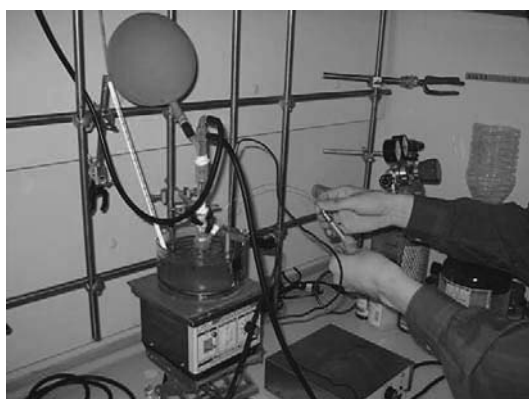
はじめに

私にとって、研究に携わるまでの「図書館」は、本棚としての利用がほとんどでした。読みたい本を借りて、読んで返す。例えば、中学生の頃に推理小説にはまった時は、「朝1冊借りて、その日のうちに読んで返し、夕方別の本を借りて、自宅で読んで朝返す」という生活をしばらく続けました。

そんな中高生の頃も、夏休みの課題研究などでは、学校ばかりではなく、地元の公立図書館で郷土史など調べたこともありましたが、このような利用は一時的なものでした。

しかし、大学生になってからは、授業の補助資料などを漁りこいようになりました。当然ですが、教科書、参考図書の充実は、大学図書館の一つの重要な課題だと思います。

化学情報



濃縮

抽出

ある化学実験室の風景

大学4年生になり、研究室に配属されて、研究活動の手ほどきを受けました。日々、化学物質の取り扱い法、実験方法を教えられました。化学物質には、様々な顔があります。名前(日英)、構造式、反応性(危険物)、毒性(劇毒物)などを理解することから、研究の第一歩が始まります。それまでの講義で勉強していたことに加え、実際に自分で取り扱うことにより、非常に多くの情報を習得していったと思います。

さらに、化学実験に関する実験技術のほかに、関連する文献情報の検索が重要であることを知りました。

ある化学物質を反応させて、目的とする別の化学物質に変換したい場合、様々な情報が必要になります。まず、出発原料となる化学物質が、既に知られているかどうかです。既知物質でしたら、その合成法が報告されているはずです。あるいは、どこかの試薬会社で市販されているかもしれません。また、目的物質にも同じ情報が必要となります。目的物質は、全く別の方法でも合成できるかもしれません。ひょっとすると、簡単に買えるかもしれません。

かつては、専門的な辞書、ハンドブックとともに、研究者個人の日常的な論文検索(ブラウジング)によるデータベースによって、研究活動が行われていました。しかし、それは世界中で発信される雑誌数も情報量も少なかったから、可能だったといえます。その頃は、国際雑誌を船便で買うか、航空便にするかを議論していたくらいでしたから。



堂々たる存在感の Chemical Abstract

しかし、情報量が爆発的に増え、研究の速度が上がるに従って、個人の努力では、とても化学情報を網羅できなくなってきました。上記のような化学物質に関する情報を網羅的に調査するためには、強力なデータベースが必須となりました。かつては、化学物質に関するいくつかのデータベースがありましたが、現在は、Chemical Abstract (以下 CA)に集約されたと言っても問題ないと思います。CA はアメリカ化学会の一部門である Chemical Abstract

Service(以下 CAS)により作成されており、化学物質の構造、性質、出典など化学者に有用な情報が1907年から収集されています。昨年末には、その収録化学物質の数が4000万になったと報告されています。

ケミカルアブストラクツサービス

http://www.cas-japan.jp/

CAS
A Division of the American Chemical Society

ホーム | CAS 会社紹介 | 私たちの専門分野 | ソリューション | 製品&サービス | サポート&トレーニング | ニュース&イベント

解決方法：

- ▶ 研究者
- ▶ IP 専門家
- ▶ 情報専門家
- ▶ 研究活動

検索代行サービス>>

高い充実度 信頼できる。。。信頼性の高い

化学情報に関する最大手にして全米化学学会の一部門であるCASは、世界最大の収録数を誇る物質情報を含む、科学と関連した科学において発表済みの研究をもも広範囲にわたって収録したデータベースであるCASレジストリSMを提供します。

CASは、SciFinderとSTNという、科学者と情報専門家の方々にとって最高の検索と収集ツールを通して、リサーチするユーザーがこの情報をご利用いただけるようにしています。

CAS 4,000万番目の物質を登録

11月21日 CASレジストリ番号1073662-18-6を新種有機物アズレノベンゾフラン誘導体に割り当て。世界で最も信頼されている発表済み化学物質情報のデータベースであるCASレジストリは、現在4,000万種の有機及び無機物を収録しています。

CAS SciFinderポッドキャストを配信開始

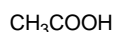
ポッドキャスト上のSciFinderシリーズは、21^{世紀}における様々な種類の興味深い最新トピックや新発見を検索し、SciFinderが科学の進歩のためにソリューションを提供する上でどのように重要な役割を果たすことができるかについて紹介しています。

よく尋ねられる質問 | お問い合わせ | American Chemical Society
CAS についての日本語の情報 | CAS 化学文摘中文网站 | CAS 인포메이션 한글판

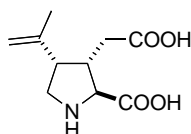
著作権所有 © 2009 American Chemical Society

CAS のホームページ(日本語版)

CASでは、世の中に存在する一つ一つの化学物質に、対応する番号(CASレジストリ番号)を割り振り、整理しています。その際に、彼らは構造式を計算機で処理できるように、命名法の工夫をしています。一般に、化学物質の名前は、発見者が命名します。主に、その化学物質を発見した源(動植物、地名など)に由来した名前を付けます。例えば、酢(ラテン語でacetum)に含まれている酸性成分は、「酢酸(acetic acid)」と命名されました。海藻のカイニンソウ(海人草)から発見された虫下し成分は、「カイニン酸(kainic acid)」と命名されました。私自身も、いくつかの化学物質について、名前を付けています。自分の子供の名前を付けるようで、楽しいですが、出自などを考えて真剣に命名します。

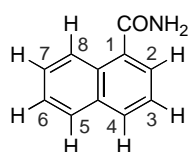


酢酸

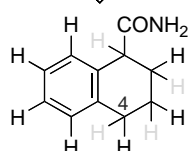


カイニン酸

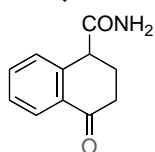
しかし、これらの化学物質の名前は、その化学物質のある面を語っていますが、その構造を表してはいません。当然ですが、人の名前と同じように、会ったことがない人の名前を見ても、その顔を想像できないのと同じです。一つの化学物質に一つの名前を振ることにより、認識番号として利用できますが、それ以上の情報を名前から汲み取ることはできません。



1-naphthalenecarboxamide



1-naphthalenecarboxamide, 1,2,3,4-tetrahydro-



1-naphthalenecarboxamide, 1,2,3,4-tetrahydro-4-oxo-

CAS 命名法の例

そこで、CAS では、数式化しやすい系統的な命名法を開発しました。「CAS 名」と呼ばれています。すでに、系統的な名前の重要性が認識されており、国際純正応用化学連合(International Union of Pure and Applied Chemistry, IUPAC)で化学物質に対する命名法が整理されていました。しかし、既にそれまでに一般的になっていた命名法や慣用名にとらわれているために、人間にとっては何れに分かりやすいものになっていますが、計算機がその名称から構造式を理解するためには、いくつかの問題があったようです。そこで、CAS では、IUPAC 命名法を改良し、化学物質情報を整理しやすい命名法を築きました。こうして、CAS は、前述のように膨大な化学情報を整理できるようになりました。ここに、CAS 名の例を示します。1番上の化合物は、ナフタレン骨格の1位に $-\text{CONH}_2$ 基が結合しています。この化合物の1,2,3,4位に4個のHが結合すると、2番目の化合物となります。この化合物の4位にOが結合すると、3番目の化合物となります。このような操作を化合物名に反映したのが、CAS 名(それぞれに化合物に付記してある)であり、複雑な化合物も系統的に命名できます。

私が学生の頃は、自分にとって新しい化学物質を取り扱う前には、図書館にこもってCA冊子体で調査しました。CAでは、化学物質の名称(CA名)、分子式、環式などを使って検索できるので、網羅的な検索が可能です。し

かし、同じ分子式の化学物質はごまんとありますし、複雑な化合物の命名法は、それなりに複雑で、構造式から命名することも、名前から構造式を想像することも大変です。10巻ごとに Cumulative Index がありますが、過去の CA を一つの化合物について調査するだけでも、なれない学生にとっては、1日単位の時間がかかかかる作業です。いくつかの類縁化合物を検索すると、数日はあつという間につぶれます。そして、得られる結果は、「載っていない」という場合もありました。

さらに、この「載っていない」という判断は、非常に難しいものです。私の経験でも、一連の類似した化合物を調べていると、前日調べて発見できなかった抄録が、次の日に別の類縁化合物の検索中に見つけて、びっくりしたことがあります。このことは、例えば、新規化合物を発見したと思った時に、死活問題となります。自分が発見した化合物が、未知物質でしたら、新発見として発表できますが、既知でしたら、何もなりません。よって、自信を持って「未知である」と判断するためには、非常に気を使いました。また、新規化合物を命名する時には、その名前が既に使われていないかを調べる必要があります。今日では、下記の SciFinder 調べれば一瞬で分かるようになりました。便利な時代です。

この問題をはじめに解決してくれたのが、CAS online です。手元のコンピュータから、STN などのデータ通信を経由して、CAS データベース本体にアクセスして、情報を検索できるようになりました。コマンド入力により構造式を指定できるシステムも斬新でした。これにより、短時間で、網羅的に、最新の情報まで検索できるようになりました。しかし、そのコマンドには慣れが必要で、接続速度は遅く、接続料も高いため、よく図書館の職員にお願いして検索していただきました。その後ソフトが改良されて、構造式の入力にグラフィック端末が使えるようになり、インターネット回線による接続など接続が容易になって、教員や学生までが自分で検索できるようになりました。この頃の後期のソフトとしては、STN Express などがありました。

そして、いよいよ SciFinder の時代となりました。一般的な化学構造式作画ソフトと同じように構造式を描くことにより、構造式検索が行えるため、予備知識がなくとも化学者が直感的に使用できます。また、CAS online のころは、各研究室などの単位の契約で、接続時間を気にしながら利用していましたが、SciFinder の契約により接続時間を気にする必要はなくなりました。学生にも、思う存分使ってもらえます。また、構造式検索の充実、出力結果と電子ジャーナルのリンクにより、一層便利になりました。

こうして、元情報にたどり着きます。以前は、この段階で図書館に行き、文献を探して、複写したわけですが、現在では、電子ジャーナルで論文を入手します。だんだん図書館に行く機会が減っていますね。

The screenshot shows the SciFinder web interface. The main window displays a list of substances with their CAS numbers and chemical structures. A detailed view of one substance is shown in a pop-up window, including its name, molecular formula, and a drawing tool for the structure. The interface includes navigation menus, search filters, and a sidebar with search options like 'Exact search', 'Substructure search', and 'Similarity search'.

SciFinder での構造式検索の様子

ここまで、化学物質の情報検索について述べましたが、CAS では、反応のデータベース(CASREACT)も提供しています。ここでは、ある化合物から別の化合物への変換反応が検索できます。出発物と目的物の構造式を描けば、それに関連する論文が表示されます。これは、冊子体の頃の CA にはなかったサービスで、大いに役立っています。

紹介しましたこれらの化学情報は、第一線で化学物質を扱う研究を進めるためには、必須のアイテムです。この情報戦略では、日本は大きく遅れを取っており、逆にアメリカ化学会の先見の明とそれに対する努力には感心します。

とはいえ、このような、最先端の研究情報ばかりではなく、研究者にとってはある程度一般的になってはきたが、まだ学生が使用する教科書には載っていない情報を学生(特に大学院生)に伝えることは重要な課題です。各分野の専門的な辞書、総説本などの充実は、大学院生の教育に必要なと思います。氾濫する情報をいかに消化するかは、それを十分に評価できる基礎知識が必要であり、図書館には、その教育を行うための知的財産を蓄えていただきたいと思います。

The screenshot shows the SciFinder web interface. The main window displays a list of reactions with chemical structures and reagents. An inset window shows a detailed view of a reaction, including the chemical structures of the reactant and product, and a list of reagents and conditions. The interface includes navigation buttons, a search bar, and a sidebar with analysis options.

SciFinder での反応検索の様子

おわりに

かつては、図書館と研究室は、別々の場所にあり、教員や学生はそれらを行き来して教育と研究を進めてきました。しかし、現在では、電子ジャーナル、電子的データベースの配備により、その使用形態は大いに変わってきました。理工系の大学院生は、研究のためにはほとんど図書館に行く必要がなくなっています。しかし、決して図書館を利用していないのではなく、図書館という存在がハード(建物)からソフト(収蔵情報)に移行している最中と感じられます。今後、このシームレス化はいつそう進んでいくとともに、文系の分野にも広がっていくと予想できます。図書館職員の方々には、このような使用形態を理解していただき、見えない利用者の存在にご配慮いただければ幸いです。

平成22年度大学図書館職員長期研修
平成22年7月13日

化学情報と図書館

筑波大学大学院数理物質科学研究科
化学専攻
木越英夫

化学

- 電子、原子、分子レベルで物質の構造、性質および化学反応のメカニズムなどを実験的・理論的に解明する学問である。
- 世の中に存在しているすべてのものは化学物質である。
紙、インク、タンパク質、DNA、生物、地球医薬品、電導性樹脂@携帯、蛍の光

有機化学

- 炭素を含む化合物＝有機化合物
- かつては、有機化合物は自然＝神のみが合成できると考えられていた。
- 自然界に存在する有機化合物(例えば、薬草の成分)の調べる研究
- Millerの実験(1953年)以降、有機合成が可能となり、現在の化学工業へとつながった。

生物有機化学・天然物化学

- 有機化学の根源
 - 一 かつては有機合成は自然界のみ
- 生命現象を有機化学の目で見る
- 生物活性天然有機化合物の単離
構造決定
合成
活性発現機構

2008年ノーベル化学賞(下村ら)

著作権に配慮し、公開資料からは削除します。

オワンクラゲ

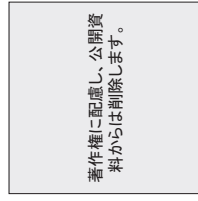


GFP

生物現象

著作権に配慮し、公開資料からは削除します。

生物発光



バイオイメーjing

化学物質

医学
生理学
生物学

著作権に配慮し、公開資料からは削除します。

生物の樹形図

海洋生物

- 成育環境
- 多様性
- 生物活性
- 未知

P. J. Scheuer,
"Chemistry of
Marine Natural
Products,"
Academic Press
(1973)より引用

アマフラシ



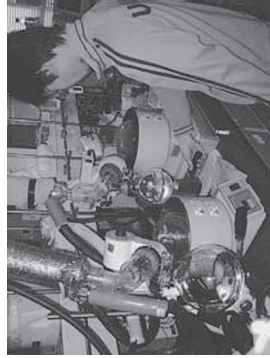
研究の進め方

- 抽出: 生物試料から、有用な物質を取り出す。
- 分離・精製: エキス(混合物)から純粋な成分を分けとる。
- 構造決定: 機器分析(スペクトル)や化学反応により、化学構造を決める。
- 化学合成: 有用物質を市販の簡単な化合物より作る。
- 生物活性: 天然品や合成品の生物に対する働きを調べる。

抽出



低温室に保管してある生物試料



マムシ酒、梅酒のように、アルコールに溶かして、濃縮する。

分離・精製

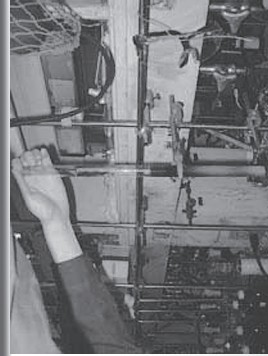


溶媒に対する溶けやすさによって分ける(水と油による分配)。



また、濃縮する。

分離・精製



吸着剤(この場合は、シリカゲル)に対する吸着性を利用して、成分を分ける。



分かれ具合を調べる
(薄層クロマトグラフィー)

分離・精製

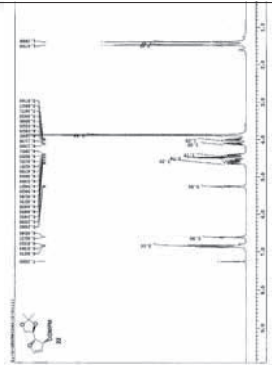


高性能の分離装置 HPLC
High-Performance Liquid Chromatography
High-Pressure Liquid Chromatography
High-Price Liquid Chromatography

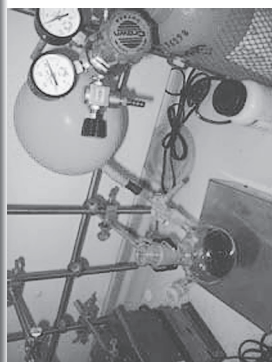
構造決定



核磁気共鳴装置
どんな核(原子)があるかが分
かる。



化学合成



化学反応
窒素雰囲気下
(水や酸素に不安定な試薬)



注射器を使って、試薬を加える。

生物活性



クリーンベンチ
雑菌のない条件で、細胞を扱う。

不安定な試料を保存する。



化学情報

化学研究に必要な情報

- 化学物質の構造
- 化学物質の性質(沸点、生物活性・・・)
- 化学物質の製法
- 化学物質を用いた反応例

特に化学者にとって重要な雑誌

J. Am. Chem. Soc. J. Organomet. Chem. Inorg. Chem. Acta
 J. Org. Chem. Chem. Lett. Chem. Soc. Rev.

Org. L.
 Acc. C.
 Angew.
 Chem.
 Tetrah.
 Tetrahedron
 Organometallics Org. Biomol. Chem. J. Chem. Phys.
 J. Med. Chem. Bull. Chem. Soc. Jpn. J. Appl. Phys.

化学分野は、大部分が電子ジャーナル化されている。
 実験室で、実験の待ち時間等に読んでいい。
 図書館に行って読むことは、少ない(過去の雑誌のみ)

化学文献の調べ方



参考図書

- 用語辞典
学術用語集など
- 事項辞典
化学大辞典など
- 物質辞典
Merck Index, Heilbronなど
- 便覧
化学便覧、化学ハンドブックなど
- 実験書
実験化学講座など

そんなに高価ではなく、
 常時必要なので、多くの
 実験室に配置してある。

参考図書

- バイルシュタイン
Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie
1881年創刊
有機化合物の研究報告からその製法と性状などを精選して
収録したもの
- グメリン
Gmelin's Handbuch der Anorganischen Chemie
1817年出版
元素、金属、無機化合物、有機金属化合物などについて、元
素の存在、発見の歴史、性質、構造、合成法、分析法などが
原報を示して要約されている
- Reaxys

抄録

Chemisches Zentralblatt (1830-1969)

British Abstracts (1871-1953)

Chemical Abstracts (1907-)

Current Contents (1961-)

Science Citation Index (1961-)

Chemical Abstracts (CA)



Chemical Abstract Service (CAS)

アメリカ化学会
の1部門



CAの構成

26号で1巻
1年間に2巻
5年ごとにCollective Index

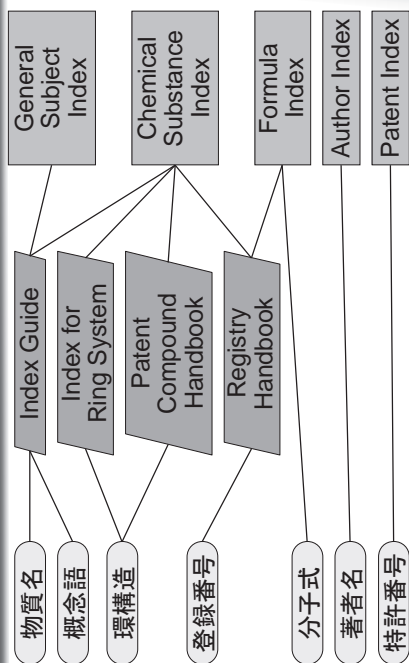
索引

- Keyword Index
- Author Index
- General Subject Index
- Chemical Substance Index
- Formula Index
- Patent Index

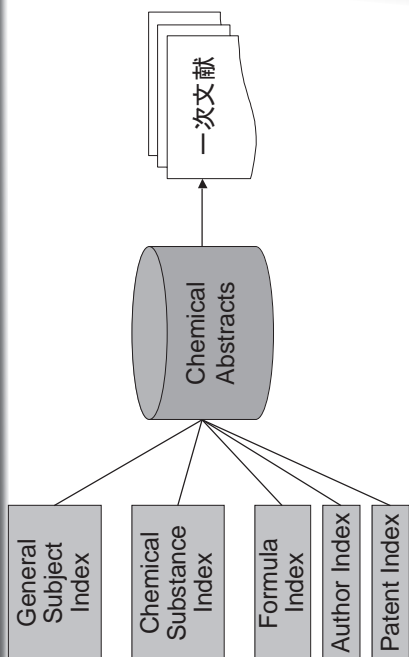
検索資料

- Index Guide
- Index of Ring System
- Patent Compound Handbook
- CAS Source Index

CA利用の手順



CA利用の手順



網羅的調査は、どのような場合に必要か？

新規物質を発見したかも？

- 本場に新規？
- 類似の化合物は報告されていないの？

市販されていない化合物が研究のために必要な場合

- ひよっとすると、世界のどこかで売っているかも？
- どうやって合成できる？
- どうやって精製できる？

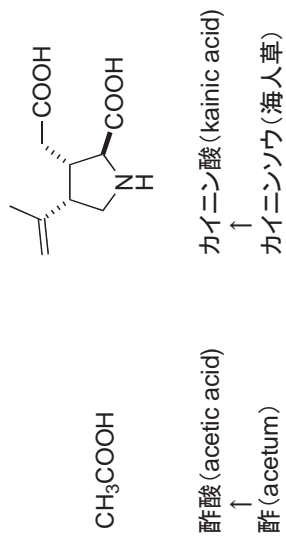
CA使ってみると...

世界中のほとんどの文献が網羅しており、膨大な情報量を誇る。

しかし

一次文献にたどり着くまでに、かなりの時間がかかる。
既に100巻以上、Collective Indexも10個以上ある。
生物と異なり、化学では古い論文情報も重要。
化学構造を文字で表すために、直感的には探せない。
命名法...

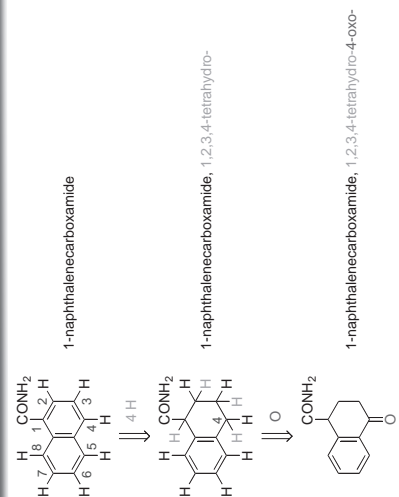
命名法



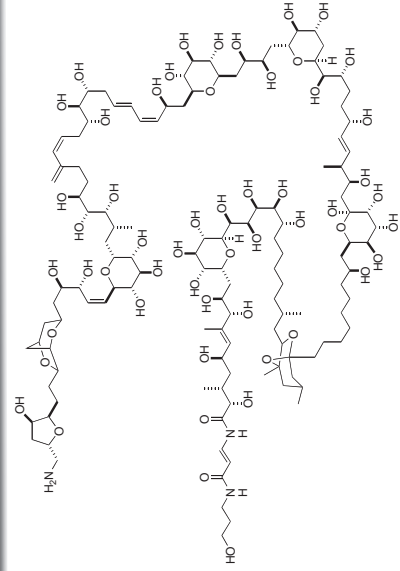
系統的命名法

1. Mono	モノール	CH_4	Methane
2. Di	ジレンマ	C_2H_6	Ethane
3. Tri	トライアングル	C_3H_8	Propane
4. Tetra	テトラポット	C_4H_{10}	Butane
5. Penta	ペンタゴン	C_5H_{12}	Pentane
6. Hexa	ヘキサゴン	C_6H_{14}	Hexane
7. Hepta	オクトパス	C_7H_{16}	Heptane
8. Octa	November	C_8H_{18}	Octane
9. Nona	December	C_9H_{20}	Nonane
10. Deca		$\text{C}_{10}\text{H}_{22}$	Decane

系統的命名法




こんな化合物の名前って??




SciFinder

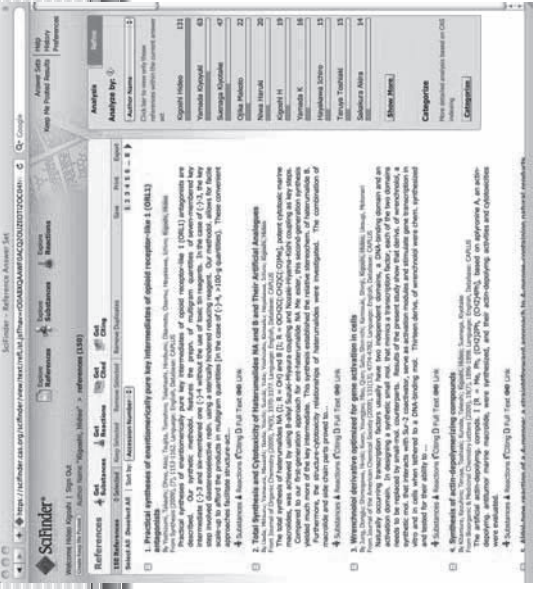
- 化学研究者の必須アイテム
- だいたい使用法は、化学研究者が使っている他のソフト (ChemDrawなど)の使用法から類推できる。
- しかし、普段使っている機能しか分かっていないかもしれない。講習会をするならば、便利な機能の紹介等を重点的に。
- 研究室に所属している4年生、大学院生は、先輩や教員から使い方を習う。学部生対象の講習会は、効果があるかも (Web of Scienceなども)。




(この使用法は、Web of Scienceなどと重複)
研究の開始時: 関連情報を検索する。
研究の途中: 実験方法等の具体的な情報を検索する。
新しい論文の確認(競争相手)
研究の取りまとめ: 論文作成のために参考文献を検索する。
論文を書くために、英語表現を検索する。



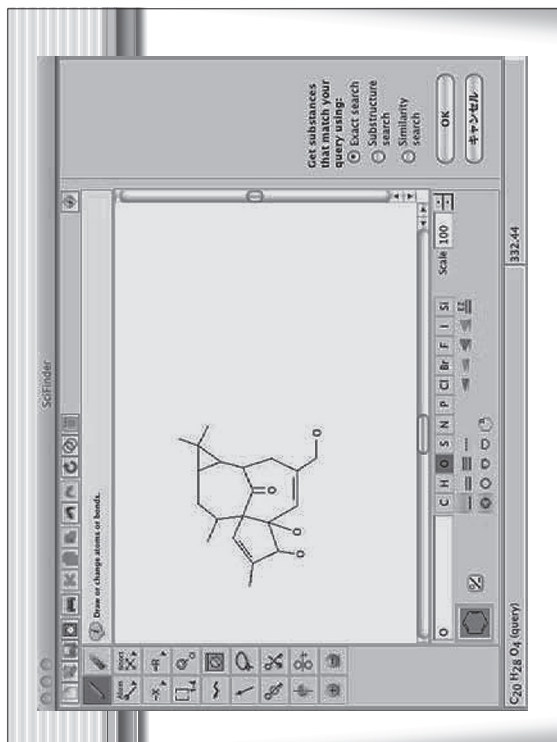
自分の論文の整理、被引用回数
(Web of Science)の調査
注目している研究者(競争相手)の論文の調査
人事に係る研究者の業績調査





目的の化合物が記載してある全ての論文が見つられる。

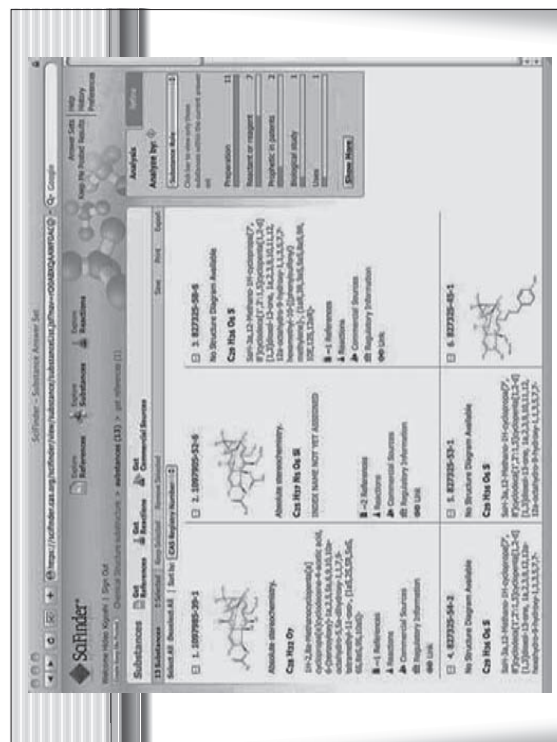
- 化合物の新規／既知
- 合成方法
- 性質（沸点、融点、スペクトルなど）
- 反応での使用例



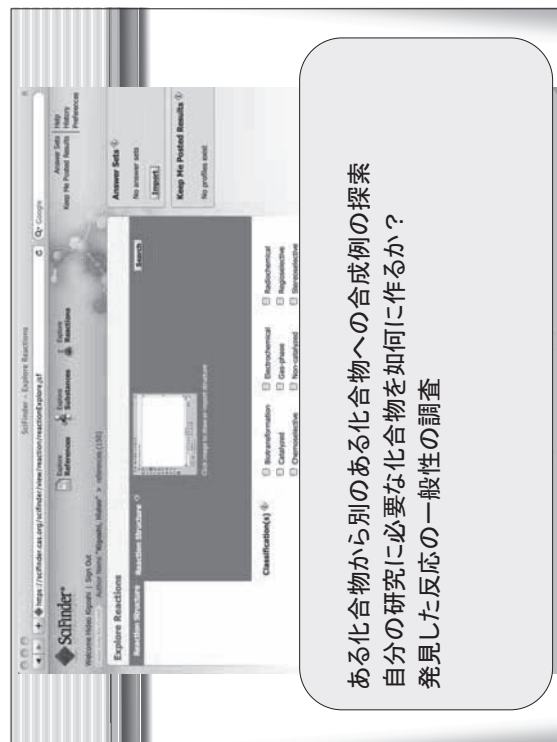
Get substructures that match your query using:

- Exact search
- Substructure search
- Similarity search

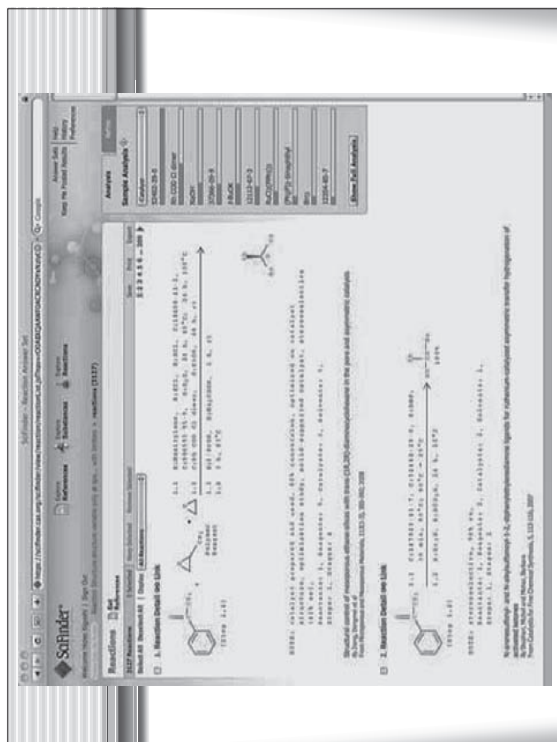
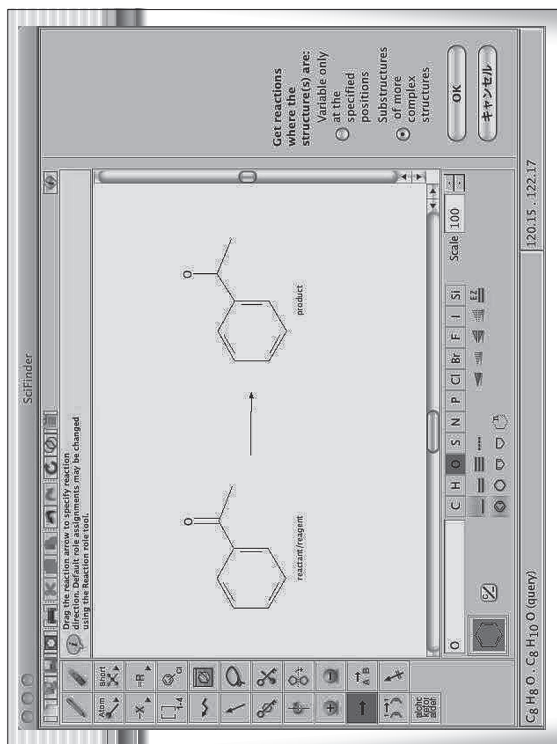
OK キャンセル



Pub No.	Title	Chemical Structure
1. 837735-30-1	ANILINE DERIVATIVES. Car NIt O	<chem>Nc1ccc(O)cc1</chem>
1. 837735-24-4	ANILINE DERIVATIVES. Car NIt O	<chem>Nc1ccc(O)cc1</chem>
1. 837735-30-4	ANILINE DERIVATIVES. Car NIt O	<chem>Nc1ccc(O)cc1</chem>
1. 837735-53-1	ANILINE DERIVATIVES. Car NIt O	<chem>Nc1ccc(O)cc1</chem>
1. 837735-45-1	ANILINE DERIVATIVES. Car NIt O	<chem>Nc1ccc(O)cc1</chem>



ある化合物から別の化合物への合成例の探索
自分の研究に必要な化合物を如何に作るか？
発見した反応の一般性の調査



化学研究者が図書館に望むこと(私見)

- (化学分野の) 学術情報の充実
- 教科書、参考書、実験指導書などの配備
- 学外の情報への窓口
- 情報リテラシー教育への協力
- 学部学生 = 情報の集め方等の指導
- 大学院生 = 研究推進への協力
- 研究者 = 研究推進への協力
- 新しいデータベース等の情報
- 新規購入は難しくなっていますが。