

高分解能分子スペクトル文献データベース: HRMSDB の開発

廣田 栄治^a, 及川 昭文^a, 金森 英人^b, 福田 朋子^c, 長嶋 雲兵^{c*}

^a 総合研究大学院大学葉山高等研究センター, 〒 240-0193 神奈川県三浦郡葉山町

^b 東京工業大学理学部物理学科, 〒 152-8551 東京都目黒区大岡山 2-12-1

^c 産業技術総合研究所計算化学研究部門, 〒 305-8568 つくば市梅園 1-1-1

*e-mail: u.nagashima@aist.go.jp

(Received: March 24, 2005; Accepted for publication: January 6, 2006; Published on Web: April 3, 2006)

高分解能分子スペクトルデータベース HRMSDB の開発を開始した。一部を産業技術総合研究所 RIODB(<http://www.aist.go.jp/RIODB/hrmsdb/index.html>) で公開したので概要を報告する。

HRMSDB は、高分解能分子スペクトルから得られる分子の構造、回転定数等をデータベースとして公開することを目的とした文献データベースであり、著者のひとりである廣田栄治が 1950 年から 2004 年までに収集した、高精度な実験的・理論的スペクトルに関する約 20,000 の論文をそれぞれノート 1 ページほどに要約し、データベースとしてまとめた物である。

キーワード: 高分解能分子スペクトル, 分子定数, 文献データベース

1 はじめに

我々は、高分解能分子スペクトルデータベース (HRMSDB) の開発を開始した。2004 年 1 月に試験的に産業技術総合研究所先端情報計算センター RIODB[1] で公開を開始したので概要を報告する。URL は <http://www.aist.go.jp/RIODB/hrmsdb/index.html> である。

HRMSDB は、高分解能分子スペクトルから得られる分子の構造、回転定数等を報告した文献をデータベースとして公開することを目的とした文献データベースであり、著者の一人の廣田が 1950 年から 2004 年までに選択収集した、高精度な実験的・理論的スペクトルに関する約 20,000 の論文をそれぞれノート 1 ページほどに要約し、データベースとしてまとめた物である。試験公開版では 2000 年までのデータが公開されている。

これは、網羅的な大規模データベースに見られるような玉石混淆の多量のデータを保持するより、当該分野の専門的な観点から評価と再編集を行うことで、よ

り信頼性の高いデータを提供するという最近の世界的なデータベース構築の傾向に沿ったものであり、学術的に意義が高い。また論文の詳細がノート 1 ページに要約されているために、ユーザが原著論文を詳しく読む労力を軽減する。

本データベースは、電波天文学における分子の同定や超高精度分子軌道計算の参照データとして、また高エネルギープラズマ物理などの参照データとしてのマイクロ波分光、レーザー分光などの測定結果の文献を与え、広範囲な応用分野を持つ。本データベースの特徴は、高分解能分子スペクトル情報が広範囲に収録されているばかりでなく、廣田の作成したノートが画像としてリンクされており、廣田による要約情報を見ることができる点にある。いいかえると、本データベースの有用性は、各年度の多くの論文の中から、専門的な視点と学識的知見からみて信頼性が高いと判断した論文が収録されていることにある。そのためユーザは玉石混淆である多くの結果から価値のあるものを評価し選択するために多くの論文に当たる必要が無く、研究における情報検索の時間を大幅に減少できる。

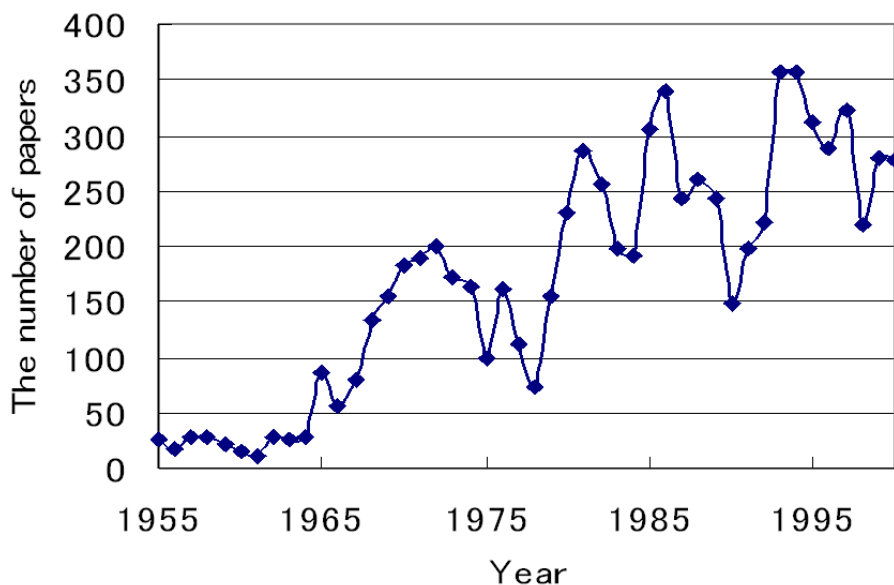


Figure 1. The Number of Collected Papers during 1950-2000

Please input search condition. The results include all words of input.
limit of 125 characters.

Document Search

Search New Search

Display rows per page. Sort

Figure 2. Window for Retrieval

現在のデータ公開件数は 7849 件であり、1950 年から 2000 年までの収録データの変化を Figure 1 に示した。ばらつきがあるとはいえ 1960 年から急速に論文数が増加し、大まかに 10 年で 100 報の割合で収録論文数が増加している。

2 検索

トップページ上に青色で表示された Search page をクリックすると、検索画面 (Figure 2) に移動する。HRMSDB のそれぞれのレコードは、12 項目からなっており、それぞれ No.、ID、構造式 (Molecule)、論文題目 (Title)、著者名 (Authors)、論文誌名 (Journal)、巻 (Vol.)、ページ (Page)、発行年 (Year)、キーワード (Key word)、廣田の該当ノートへのリンク (Graphic

file)、論文のエラーの報告がある場合の ID (Errata ID) である。

検索画面の Document Search (日本語版では全文検索) のボタンを選択すると、12 の項目のリストがポップアップする。このリストから各項目を選択し、その項目だけでの検索が可能であるが、ここで何も選択しなければ全ての項目で入力ボックスに入力されたキーワードを一括で検索することができる。(全文検索) このとき入力ボックスの単語間のスペースは、「 AND 」として検索される。入力ボックスへの最大入力文字数は、半角文字で 125 文字 (全角文字で 62 文字) である。英数字 (A-Z, 0-9 等) と、空白文字、「 ., ' - = () : / 」の入力がゆるされる。ここで検索実行ボタンをクリックすると入力された単語で検索を実行し、検索結果一覧を表示する。検索結果一覧は新しい画面に表示される。またこの検索画面では画面の広さにあわせるため

No.	ID	Molecule	Title	Authors	Journal	Vol.	Page	Year	Key word	Graphic file	Errata ID
1	117106	CIS	Observation of the SCI Radical by Resonance-enhanced Multiphoton Ionisation Spectroscopy	Jonathan D. Howe, Michael N. R. Ashfold, Ross A. Morgan, Colin M. Western, Wybren Jan Buma, Jolanda B. Milan and Cornelis A. de Lange	J. Chem. Soc. Faraday Trans.	91	773 - 780	1995		17106	
2	117105	CIS	Infrared Diode Laser Spectroscopy of SCI Generated by the Photolysis of S ₂ Cl ₂ and SCI ₂	Eberhard Tiemann, Hideto Kanamori, and Eizi Hirota	J. Mol. Spectrosc.	137	278 - 285	1989		17105	

Figure 3. The result of Search for “CIS”

CIS 17106

Observation of the SCI Radical by Resonance-enhanced Multiphoton Ionisation Spectroscopy

Jonathan D. Howe, Michael N. R. Ashfold, Ross A. Morgan, Colin M. Western, Wybren Jan Buma, Jolanda B. Milan, and Cornelis A. de Lange, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **91**, 773-780 (1995)

$SCl_2 \xrightarrow[293nm]{h\nu} SCl$

MPI,

$^2\Pi$ ν_0 $5821.6 \pm 2.2 \text{ cm}^{-1}$
 ν_1 $9.57 \pm 0.01 \text{ eV}$

δ' $0.273 \pm 0.002 \text{ cm}^{-1}$

Figure 4. A display of Hirota's Note for literature 117106. The first digit 1 of 117106 was removed in the figure to give 17106

に検索結果の表示行数を選択できる。もちろん検索結果の表示順をキー、ソート順で選択することもできる。Figure 3に“ CIS ”をキーワードとして検索した結果の一覧画面を示す。

先にも述べたが検索画面の入力ボックスに表示された単語間の空白は AND である。この場合 4 件ヒットしたことが報告され、その一覧が示される。ヒット件数が多い場合は、検索画面で指定した件数ごとの表示が表示方法に従って行われる。再度検索をする場合は、Input Page をクリックして先に説明した検索画面に戻る。

また Graphic file (本例では 17106) をクリックする事で、廣田直筆のノートが画像表示される。廣田のノートは、著者名、論文タイトル、雑誌情報に加え、内容をコンパクトにまとめたコメントが加えられている。それを損なうことなくユーザに提供するために、ノートを画像で表示する。このようなデジタルデータと画像データの混合も本データベースの特徴となっている。この画像も新しい画面に表示される。Figure 4 に本例 17106 のノートを示した。この画面の図では Figure 4 にある文献番号 (17106) の最初の 1 がなく 17106 と表示されている。これは、すべてのレコードに対して同様である。

Figure 5 に 2004 年と 2005 年の月ごとのアクセス件数を示した。公開から 2004 年 10 月まではほぼ 500 件であったが、11 月から上昇し 12 月に 1000 件を越えた。2005 年は 3 月には 2300 件を越えたが、現在、減少傾向にある。

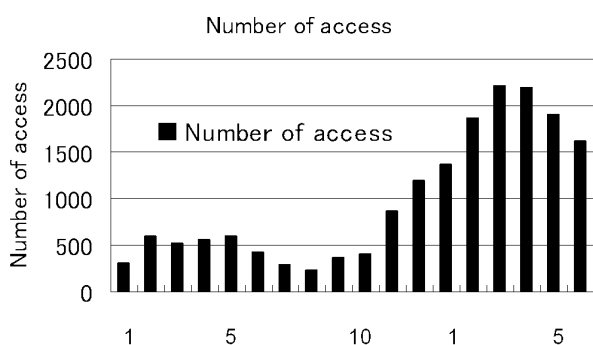


Figure 5. The monthly access number from January 2004 to June 2005

3 終わりに

HRMSDB は気体のマイクロ波分光、レーザー分光など高分解能分光法を用いた研究の成果を集めたものである。現在も世界各地で行われている最新の高品質な研究成果を網羅すべく開発を継続している。分子分光は他に例をみないほどの高分解能であるので、一本の吸収線から分子を同定することも可能であり、実験室内での複雑な反応系の中に存在する分子種の同定のみならず宇宙空間の分子雲からの電波を解析して宇宙空間の分子種の分布を調べることも可能である。本データベースは、電波天文学における分子の同定や超高精度分子軌道計算の参照データとして、また高エネルギープラズマ物理などの参照データとしてのマイクロ波分光測定結果の高品質な文献を与え、広範囲な応用分野を持つ。

本データベースがそういった研究に広く役立つよう、今後とも開発を継続していく。

今後の課題として、ピーク位置からの候補分子検索があげられる。ピーク位置を入力すると候補分子がリストされるというものである。残念ながら、本データベースでは、今のところ、分子種からの検索は可能であるが、ピーク位置からの検索は不能である。分子種と測定結果との関係をより明確に示すためには、双方向の検索が必要である。測定結果からの検索の実現は本データベース開発の今後の課題である。

本研究の一部は 産総研先端情報計算センター研究情報公開データベース RIODB 開発プロジェクトの支援を受けている。

参考文献

- [1] <http://www.aist.go.jp/RIODB/riohomej.htm>

Development of a High Resolution Molecular Spectroscopy Literature DataBase: HRMSDB

Eizi HIROTA^a, Akifumi OIKAWA^a, Hideto KANAMORI^b, Tomoko FUKUDA^c and Umpei NAGASHIMA^{c*}

^aHayama Center of Advanced Studies, The Graduate University for Advanced Studies
Shonan Village, Hayama, Kanagawa 240-0193, Japan

^bDepartment of Physics, Tokyo Institute of Technology
2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo 152-8551, Japan

^cResearch Institute for Computational Science, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology
1-1-1 Umezono, Tsukuba, Ibaraki 305-8568, Japan

**e-mail: u.nagashima@aist.go.jp*

We have started to develop a High Resolution Molecular Spectroscopy literature DataBase: HRMSDB. A part of the HRMSDB has been opened to the public at RIO-DB (Research Information Database) of the National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Tsukuba from January 2005. (<http://www.aist.go.jp/RIODB/hrmsdb/index.html>)

HRMSDB comprises references which report the results of high resolution molecular spectroscopic studies and also of some from related areas such as reaction dynamics, astronomy, atmospheric chemistry, plasma science, and ab initio calculations. High resolution means that the rotational structure is resolved, but the actual coverage of the data is somewhat broader. About 20,000 references published since the early 1950's are collected by one of the authors (EH), and the acquisition of new publications will continuously be made to update the database from time to time. Each record in this database includes the following items: the record identification number, the chemical formula of the molecule (or atom) under consideration, the title and the author(s) of the paper, the name of the journal where it was published, along with the volume number, page(s), and year, and a few keywords. The users can retrieve any word(s) in these items and also derive a KWIC list. Some principal molecular constants, the spectroscopic methods employed, and others worth mentioning are available.

Keywords: High Resolution Molecular Spectroscopy, Molecular Constant, Literature Data Base

