

## SDBS 収録化合物の構造式にもとづく索引の実現

渡邊 宏

産業技術総合研究所（〒305-8565 つくば市東 1-1-1 中央第5）

### 【緒言】

有機化合物のスペクトルデータベース（SDBS）[1, 2]は構造式検索機能を持たないため、これまで利用者が類似化合物の情報を得にくい不便があった。この不便を解消するため、収録された化合物の構造式情報をもとに整理してWeb サイトとして表現した。Web サイトは、リアルタイムの構造式検索に代わり、SDBS 収録化合物の索引機能を提供している。索引機能の背景にあるアイデア、機能の概要について述べる。

### 【SDBS のサービスと機能と課題】

SDBS は産総研が独自に測定・評価した3万4千化合物のNMR, IR及びMSの標準的な高精度スペクトルをデータベース化し、一般に公開しているWeb アプリケーションである。データベース化の活動自体は1980年代から30年以上にわたり継続しており、これまでの数十万個のスペクトルを収集した。利用者は企業等の研究開発、品質管理の現場から高等教育機関での研究教育現場まで幅広く存在する。日本国内だけでなく世界中から年間5000万PVを超えるアクセスがある。

SDBS の機能を簡単に述べる。検索画面から検索キーを入力して検索を実行すると、化合物とスペクトルコードのリストが検索結果として返される。ユーザは検索結果のリストの中から見たいスペクトルあるいは化合物情報を選んで閲覧できる。

SDBS の検索キーは化合物名（慣用名）、IUPAC 名、CAS 番号、構成元素数、分子量、スペクトルの種類、ピーク情報などからなる。協力関係にある日化辞 Web[4]上で SDBS 収録化合物の構造式検索を行うことはできるが、SDBS 自前の構造式検索はない。そのため、類似構造を持つ化合物一覧を示す機能は持たない。したがって、SDBS には例えばベンゼンと構造的に近いトルエンの情報も収録されているが、利用者がベンゼンのスペクトル表示画面へたどり着いたとしても、トルエンの情報も収録されていることに気付かないこともおこる。

近年、化学物質を扱うデータベースでは構造式検索機能を持つのが当たり前になってきているので SDBS でも導入の検討はしてきたが、安定的にサービスを継続する点で導入規模の見積りが難しく、導入およびライセンスなどの運用コスト増など解決できないため導入を見送ってきた。

そこで、このような状況とそれから起こる不便を少しでも解消することを目指して、Web サイト「SDBS 構造式 Web[3]」の試作に取り組んだ。

### 【方法】

SDBS に収録された化合物の構造式情報を整理し新たに Web サイトを生成して、さらに SDBS と Web サイトを連携させて SDBS の索引機能を実現させることにした。

### 【結果】

SDBS 収録化合物のうち、28800 化合物それぞれについて次のような情報から構成される Web ページを作成し、それらを集めた Web サイトを試作した。

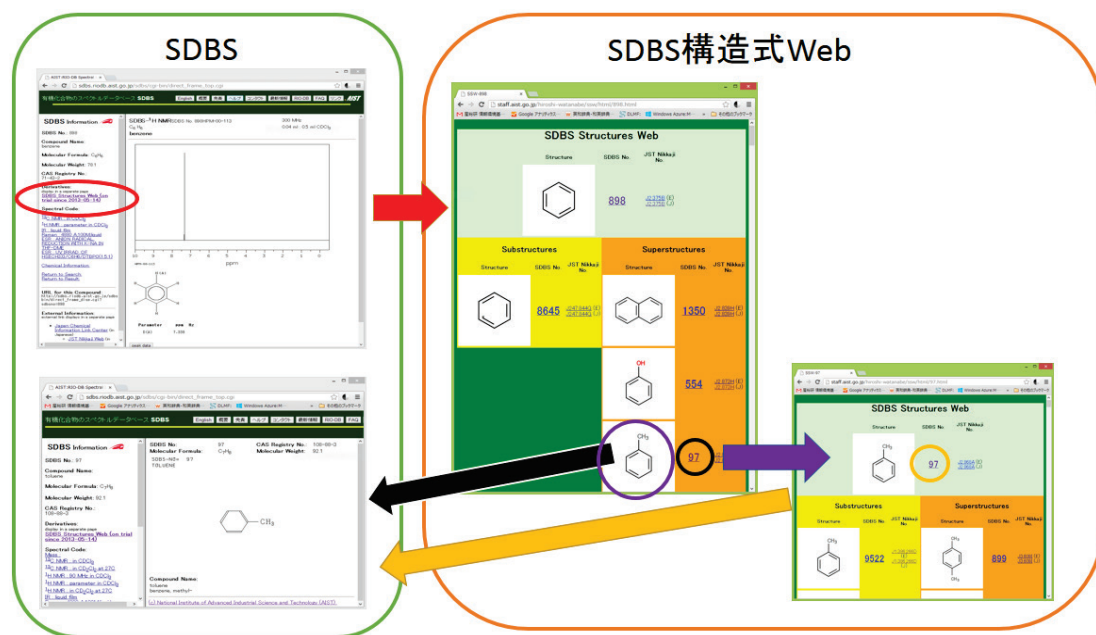


Figure 1 SDBS と SDBS 構造式 Web の間のページ遷移

1. 化学構造式画像
2. SDBS 番号および該当する SDBS の辞書情報ページの URL
3. 部分構造および超構造の関係にある化合物のリスト、化合物ページの URL

それぞれの URL はハイパーリンクに Web サイト内および SDBS へのページ遷移を可能にするとともに、SDBS の辞書情報のページから SDBS 構造式 Web へ遷移可能なハイパーリンクを作成し、SDBS と SDBS 構造式 Web の間でページを連携させるようにした (Figure 1 参照)。その結果、新たに次のような SDBS の索引機能を実現できた。

- 各化合物の部分構造、超構造の関係にある類似化合物の一覧表示機能
- 類似化合物のハイパーリンクを使った SDBS 収録化合物の横断的探索機能

特に、静的な Web サイトなので応答時間が速く、SDBS の従来の検索機能を補完する効果があった。試作した Web サイト SDBS 構造式 Web は 2013 年 5 月 14 日より試験的に公開した [3]。

#### 【課題と今後、謝辞】

Web ページの管理方法、例えば化合物を追加、削除する場合の保守方法、コンテンツの充実など課題がある。また今回の試作品はスペクトルを探すための索引という観点まで考慮していないので、さらに工夫が必要かもしれない。試作した Web サイトは今後 SDBS に統合する予定である。

本研究を実施するにあたり、JST より構造式情報の提供を受けた。記して感謝する。

#### Web ページ・参考文献

- [1] 有機化合物のスペクトルデータベース (SDBS), <http://sdb.s.riodb.aist.go.jp/>
- [2] 齋藤剛, 衣笠晋一, 有機化合物のスペクトルデータベースの開発と公開サービス—大規模データベースの運用の継続と成功の秘訣—, シンセシオロジー, Vol. 4 (2011) No. 1 P26-35, <http://dx.doi.org/10.5571/synth.4.26>
- [3] SDBS 構造式 Web, <http://staff.aist.go.jp/hiroschi-watanabe/ssw/>
- [4] JST 日化辞 Web, [http://nikkajiweb.jst.go.jp/nikkaji\\_web/pages/top.html](http://nikkajiweb.jst.go.jp/nikkaji_web/pages/top.html)