

Title	教育に情報ツールを活用する : 教育ツールとしての Reaxys
Author(s)	廣瀬, 敬治
Citation	薬学図書館. 58(1) P.62-P.72
Issue Date	2013-01-31
Text Version	publisher
URL	http://hdl.handle.net/11094/24930
DOI	
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/repo/ouka/all/>

教育に情報ツールを活用する —教育ツールとしての Reaxys—

Reaxys for Students —Applying E-Resources to Educational Settings—

廣瀬 敬治*

[抄録] 化学情報の重要性は今も昔も変わらずに高い。しかしながら、化学文献の取り扱い環境は大きな変貌を遂げているため、化学情報の検索方法は昔とは大きく変わった。化学情報の数の増加や多様性に対応することを考えると、今や情報ツールを使わないで文献調査をすることは不可能である。文献調査法の講義をするに際して Reaxys は非常に重要な教育ツールとなる。講義経験に基づいて、化学教育の視点から情報ツールの活用、特に教育ツールとしての Reaxys の意義と具体的な利用例について記す。

[キーワード] 教育, 情報検索, 文献検索, 検索ツール, 化学, 大学, 学生, 講義, 学習, データベース, Reaxys, リアクシス

[Author Abstract] The importance of information in chemistry literature is eternal. However, the search method and tools have diversified since the environment around chemistry literature has changed dramatically over the years. In order to keep up with the increased amount and diversity of chemical information, it is essential to utilize an information tool to find appropriate literature documentation. Nowadays, students are required to learn literature search methods before proceeding to a research field. Reaxys serves as a very important educational tool when giving a lecture on the literature search method in chemistry. This article describes the importance of practical information tool use, especially Reaxys as an educational tool at university level and gives a concrete example of its utilization from an educational point of view.

[Keywords by Author] education, information search, literature search, search tool, chemistry, university, student, lecture, learning, database, Reaxys

1. 化学情報の国際的な共有と活用の重要性

化学の分野においては戦前からすでに先端技術情報の国際的な共有環境が作られている。第二次世界大戦当時の日本では高周波電線の絶縁体としてステアタイトやポリスチレンが使われていたが、絶縁性能が不十分であるとともに壊れやすい

といった欠点があった。壊れやすい物は、無論移動体には搭載できない。一方連合軍側では、電気持性に優れしかも壊れにくいポリエチレンをレーダーのリード線被覆としていち早く利用していた。実は 1938 年にはイングランドの ICI 社で最初の 1 トンの高圧法低密度ポリエチレンが作られ、1941 年にはポリエチレンの製造法とレーダーケーブルの製造情報がアメリカ政府に伝達されている。奇しくもこの年に太平洋戦争が始まった。開戦後まもなく日本軍は撃ち落した連合軍の飛行機から高周波用電線の一部を入手した。元素

* Keiji HIROSE
大阪大学大学院基礎工学研究科
〒560-8531 豊中市待兼山町 1-3
E-mail: hirose@chem.es.osaka-u.ac.jp

分析を実施した結果と 1937 年 9 月の ICI の英国特許¹⁾ の高圧法ポリエチレンの合成法、およびポリエチレンの用途に高周波電線の絶縁体があるという別の特許情報²⁻⁵⁾ より、被覆材にポリエチレンが使用されていると判断できた。これをきっかけに日本でも高圧法ポリエチレンの合成研究が活発化した⁶⁾。必要な情報を得るといふことと、それを素早く活用するということの重要性を上記の例から感じとることができる。また、新規物質の物性(や用途の)情報の重要性を知ることできる。

戦時中の日本においてポリエチレンといえば軍事物質であり、その情報は軍事機密であり、無論とびっきりの貴重品であった。ところが世の位置づけは全く違っていた。1945 年の終戦後に日本にやってきた進駐軍は、ポリエチレン製の洗面器やバケツをつかっていた。ポリエチレンはすでに汎用樹脂となっていたのである。ポリエチレンを貴重品扱いして崇めていた日本人たちは、真に穴があったら入りたかったであろう。無論、時系列で技術開発と工業化の状況を知っている読者には当たり前であるのだが、必要な情報収集が満足にできていなかった当時の人々にとって大変な驚きであったであろうことは想像にかたくない。

2. 文献調査を取り巻く環境の変化と それに対応した教育

手元に終戦 3 年後に出版された(1948 年出版)薬学博士 中澤浩一著「有機化学文献の調べ方」⁷⁾がある。本書は 92 ページの本文と 40 ページの付録からなる。学術雑誌、特許文献、文献の解説、そして Beilstein 全書による有機化合物の検索法の 4 章構成である。本書はその後幾度も改訂が重ねられた書であり、特に薬学系の有機化学者にはよく知られた名著である。東京大学名誉教授薬学博士 朝比奈泰彦先生より教育の真髓に言及した序文をいただき、まえがきには、「総ての文献の調査は完全且迅速を本領とする。しかし有機化学の文献はその種類も分量もはなはだ多く、その大半が外国文献である等の理由からこれが調査には相当の時間と手間を要し、もし文献に関する知識が不十分な場合には、この主旨に沿うべき調査が

出来ないことになる。…」と記されている。既知化合物であるか否かの判定、同じテーマを研究している研究者に先を越されないか否かの判定が重要であり、迅速な調査と外国語の壁にも言及されている。化合物の数は、その後ずいぶんと増えた(当時は「数十萬の化合物」であったが、今は 6,922 万の有機および無機の化学構造が CAS REGISTRY に登録されている⁸⁾)。飛躍的な増加を見たというべきであろう。また、調べなければならない文献数も増えている。言語も増えている。このような状況を鑑みると、当時の人からは悲鳴を通り越して、絶望的なため息が聞こえてきそうである。「こんな状況に対応できるのであるか」と思われるのであるが、対応できるのである。ではどう対処すべきか。鍵になるのはコンピュータをうまく使うことができるか否かである。

図書の電子化が進み、その情報提供形態が大きく変化している。それに伴い図書館の利用法も大きく変わってきており、文献情報の収集の仕方も大きく変わっている。今では、薬学・理学・工学部の化学系学生に対する化学文献調査の講義をするにあたり、Reaxys⁹⁾、Scopus¹⁰⁾、SciFinder¹¹⁾、そして Web of Knowledge¹²⁾ は避けて通れない。これらは化学情報データベースにアクセスするためのマン-マシンインターフェースである。近年はインターフェース(以下、IF)が受け持つデータベースがあらかじめ決められているので、おのおのの使用法を別個に習得しなければいけない。どれか優秀な IF に集約して、その Brushup を競って頂きたいのだが、現実はそうっていない。今の人には iOS と Android (と i モードや Windows mobile)、あるいは MacOS と Windows (と Linux や TRON)、少し前にはブルーレイと HD DVD (とレーザーディスク)、年長者には VHS と β (あるいは VHS-C と 8 mm ビデオ) 等々規格の散逸した類似状況の例は数々ある。しかし、例えば 1970 年代に公害が深刻な社会問題となった時期に、排出する環境汚染物質の低減技術の向上が喫緊の至上命題とされたエンジン分野におけるレシプロエンジンとロータリーエンジンぐらゐの圧倒的な集約とそれに伴ってみんなで技

術改良をする開発環境の構築, その後の非常にクリーンなエンジン創出の実現例が IF の開発にも理想である。どの IF も一長一短, いや一癖も二癖もある。癖を知ると非常に便利に使えることもあるのだが, 教育の場では個々の IF のマニアの育成をするわけにはいかない。人を輩出し続ける教育的観点からは優秀な IF への大胆な集約が望ましい。

さて, 文献調査法を教授する王道は, 化学情報の歴史そして実用的重要性から説きはじめ, 二次文献, 三次文献のとらえ方とデータベースとのつきあい方に言及し, 有用な利用の仕方へと学生を導くものであろう。以下に, 「教育に情報ツールを活用する」というアプローチで記すことにする。

有機化学文献の調べ方を教授する上では絶対に避けて通れないといってもよいくらい, 歴史的に重要なデータベースである「Beilstein」由来のデータにアクセスすることのできる Reaxys は, 2009 年に CrossFire から移行した比較的新しい IF である。化学情報自体の意義も含めて, その集積体であるデータベースの意義や有用性を実感を伴って教えることのできる優れた IF になっている。著者は大学の講義で Reaxys を用いて授業を行っている。Reaxys は教育的に大切なデータベースを基盤としているだけでなく, 最先端の研究を推進する上においても利用しがいのある大変有用なツールになっているので, この使用法を習得しておくことは, 今や化学, 特に有機化学を志す者にとって必須であるといっても過言ではない。特に物性ファクトデータと化学反応データの検索に優れており, 学生にはファクトデータの取り出し経験を積んでもらっている。

3. 事実の把握—「ファクトデータ」の重要性—

科学の知識は年々増加しており, 常に新しい発見がある。その時点まで, 「未確認」であった物や「非常識」とされていたものである。その中で科学的に意味のあると認められるものが報文になり, 人類の新しい知識となる。得られた新しい知識を包含するように, その時点までの常識に若干の修正, 時には抜本的な統廃合が為されて新しい

常識が形作られてゆく。科学の世界では, その時点での「異常」を理解するのに必要な「知識」を掌握しておくことはその時代を創る化学者にとって重要なことである。

科学の知識は「事実」の集積である。科学的に重要な「事実」を適切にとらえられることは科学の進展に必須であり, 何にもまして重要である。たとえ「その事実がその時の人々に理解できない事象であっても」である。その結果「その時代の人々にはその事実によって変わるべき常識を変えることができなくても」である。事実には時間軸に依存しない価値がある。だからこそ, その事実の存在自体とその内容を人が知りうる状態にしておくこと, そしてその事実を事実として把握することの科学的な重要性がそこにある。

4. 事実の集積体

—化学情報データベースは永遠—

実験に基づく科学の事実は覆らない。過去の文献情報は, 間違いや誤魔化しなどがなく, 事実に基づく限り価値を失うことはない。したがって, 例えば多くのコンピュータ技術が時代に合わなくなったという理由で, 歴史的な意味合いはあるにしても, 実用性がないが故に限りなく無価値のものとなるような例とは対照的に, 化学の文献情報の集積体の価値は永遠である。歴史的にも実用的にも有用な人類の資産なのである。集積自体に善し悪しがあり, 情報のまとめ方でその価値に雲泥の差が生じる, そんな情報の塊がデータベースである。塊の形状は時代によって評価が変化する。時代時代に合わせて変幻自在に形を変えられることが大切である。そのような情報の塊は確かに作り甲斐がある。

5. 魔法の箱—人を感動させるデータベース—

Beilstein は優れたデータベースである。「有機化合物をあつかう研究者にとって Beilstein はどんな情報でも取り出すことの出来る魔法の箱であった」とは, 紙ベースのデータベースである Beilstein に与えられた最高の賛辞の一つである。「そこには有機化合物に関することなら何でも—合成法, 反応, 融点, 沸点からスペクトルまで—

書いてある」とは、ファクトデータベースの存在価値に感嘆する化学者の弁である。「有機化学の学生は Beilstein を通して Mischbarkeit, Identität, Schmelz, Äther 等のドイツ語を覚えたものがある」とは、この書物の影響力を示す現象について述べている。昔も今も「ドイツ語は難しい」^{注1)}ことで知られているにもかかわらずである。「何故そんな難しい言葉を勉強することにしたのですか」と聞けば、彼の人の貴重な経験を聞くことができるだろう。それが一つの書物との感動の出会いとパートナーシップだとしたら、「その書物をも私手にとって見てみたい」と感動の共有を期待するのであるが、残念ながら今では電子化されて直接触れることができないものになってしまっている。無論、博物館の展示物という意味では、この書物を図書館の書庫で見つけることはできるだろうが、現役でバリバリ使う書物ではなくなってしまったので、今まさに研究の最前線に身を置き、本書物の有り難みを実感し高揚感を体験できるとは思いにくい。現代版の電子化された Beilstein は実空間に存在するでもなく、したがって直接見たり触れたりすることができるでもないで、なかなか接する者の恋心を掴むことができない存在になってしまった。目の前に現れず、触ることもできないものに対して感動できる人はなかなかいない。時代はかわり、物体である書物に代わりコンピュータ上でデータベースと利用者の間を取り持つ IF^{注2)}があなたの目の前に現れる。

6. 事実の受渡—インターフェース—

化学の文献情報は化学の「常識」を形作る大本である。常に増え続ける文献情報は、それを必要とする人の元に、迅速に、確実に届けられるべきである。しかも情報の受け渡しは適切であるべきである。紙ベースで Beilstein はそれをやってのけた。素晴らしい情報収集の方法やシステムティックな分類、そしてその記録から必要な情報を巧く引き出すための Sachregister, Formelregister, General Register, Gesamt Register 等いくつものインデックスの作成や、それらの利用方法を丁寧に示したり、さらに Beilstein を使うためのドイツ語辞書まで作ったり (図1) と、その使

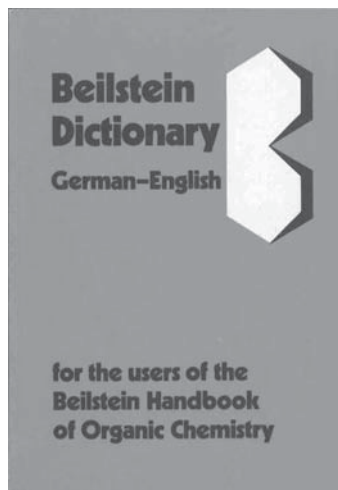


図1 独英辞書の表紙例

い方の徹底した啓蒙によって。

今の時代にはこれをどのように達成すべきか。時代に合った方法が有効であり、そのためには「事実」の受け渡し側と受け取り側の適切な関係の構築が必須である。データベースと研究者をつなぐ媒介、すなわち IF に優良な物を提供するとともに、その使用法を教授する優秀な者を遣わして、優秀なる研究者に当該 IF の素晴らしい機能と使い甲斐を感受させることが必要である。研究者に自発的に使いたいと思わせることが重要である。現代の研究者は研究室に居ながらにして世界中の研究者の発する情報を容易に目にする事ができ、「常識を変える」チャンスを手にすることができる。情報化社会発展の利益を享受することができるのである。無論、情報化社会への適切な対応が必要であって、それによって初めて、時々刻々と変化し、さまざまに発信されてくる世の中の有用情報に対して、迅速かつ適切な応答のできる研究体制が構築できるのである。

7. Reaxys は育て甲斐がある

書物の代わりに我々が触れることができるのがコンピュータであり、電子化された優れた書物 Beilstein と研究者をつなぐのがコンピュータ上で我々を迎えてくれる Reaxys インターフェースである。今は報文が発表されるとデータベースが

次々と更新される。同様に IF も変化する。常にアップデートされながら、データベースの魅力を引き出し易いように変わっていった。

Reaxys インターフェースは著者が認める優れた IF である。頼もしい文献情報通の相棒にもなるし、あなたの弟子にもなる。実は育て甲斐がある可愛いパートナーなのである。あなた色に染めることができるのである。研究体制を構築するのは研究の重要な点であり、研究者にとって大きな楽しみでもあるはずである。ならばあなたの研究に合わせた Reaxys を創って頂きたい。Reaxys とはそんな存在なのである。

8. 事実の展開の逸品

過去に名著と言われ、今も多くの化学者から愛用され続けている書籍がある。その中には、過去の実験結果の報告の中から有用な事実を取り出し、これに読者が利用しやすいような工夫を施してまとめたものがある。自身を振り返ってみると、Greene's 「Protective Groups in Organic Synthesis」や Fiesers' 「Reagents for Organic Synthesis」は全ての合成化学者に必須じゃないかとさえ感じられた。事実、よくお世話になった。有用な実験事実の選択・抽出と、その事実の整理・まとめ方が非常に優れている。データの信憑性が高く役に立つ。一度使えば必要不可欠の書物となる。

これらは現役の書物であるが、今となっては致命的な点もある。それは最新情報が入っているとは言いがたいのである。書籍であるが故にすぐには改訂版は出ない。折角時代が進み、新しい「事実」がオンラインで世界中に配信されているのである。迅速にとどけられるようになった新しい情報環境を利用しないと勿体ないことこの上ない。

新しい事実があればすぐに検討し、価値あるものであればすぐに自身の研究に活かそうではないか、今はそれができる時代なのだから。必要なときに必要な情報を、できるだけ容易に得て、迅速な検討をするために如何に貢献させるかが重要なのだ。迅速な対応のためには、情報は簡潔に整理されていることが必要である。少なくとも上記の

名著に対応する今の時代にあったものが必要である。

9. 必要は発明の母—こんな物がほしかった—

読者諸賢は、「研究」を行うにあたって、過去の実験事実情報を収集するためにどのようなツールを用意したいと思うだろうか。無論十人十色の道具があって良い。多くの人が共通して使うものであり、廉価に作れる道具なら販売もされるであろう。だが、買えない道具ならば作るしかあるまい。特注の手作りの道具には経験に裏打ちされた有用性が必ず秘められている。職人の工夫を探るようなもので、通常はそれが白日の下に曝されることはない。しかし確実に「何かの知恵」がその道具に含まれているのである。しかも何故か外観からしてキュートな物が多いように思われる。

「手作り情報ツール」を作るにあたって、多くの人が「必要性が高い」と感じられる反面、実現は「大変そう」と思うものが対象として適している。できあがれば、実用的に有用性が高く、他への応用がし易いものが多い。そんな物があれば皆すでにやっているはずであって、自分の周りの皆がやっていないので、そんな物は存在しないと判断する人が多いのだが、「そんな物」があってもよい。「こんな物がほしかった」といわれる「知恵」の伝授でもある。

10. 情報ツールの手作り講座

本手作り講座を「基礎的知識だけで」との制約をかける必要がなければ役に立つものができる。「少し面倒な設定をしてでも魅力的なツールをつくる」講座を目指せるわけである。やってみれば案外簡単な検索式であったり、思っていた以上に用途の広い方法であったりする。

「反応性の異なる官能基が複数入っている反応基質を出発物質として用いて、反応性の劣る置換基を試薬と反応させて他の基に変換し、反応性の高い置換基は元の形のまま残った生成物を作りたい！」という虫のいい話は如何であろうか。しかも時々刻々と変わるデータベースのアップデートを反映する情報検索ツールとする。すると「ホットな情報も集めるクールな情報ツールを作る」講

座となる。

11. 役に立つ「簡単ツール」の一番手

私の好きなアルコールとアミンのアシル化を例として取り上げる。教科書的解説では「エステル化よりもアミド化が優先されるので、ヒドロキシ基は反応せずにアミノ基のみ反応させることが出来るが、その逆は出来ない」となる。その「通常は出来ない」と言われるほうの生成物を合成する反応の検索を目的にする。このような場合には、上記名著の一つ「Protective Groups in Organic Synthesis」を登場させて、まず一旦アミノ基にアシル化反応に耐えうる保護基をつけて、その後ヒドロキシ基をアシル化させて目的のエステルに変換させる。最後にアミノ基の保護基を外してアミノ基を再生する、という3段階を経ることによって、全体的には「ヒドロキシ基とアミノ基を両方有する反応基質のヒドロキシ基のみにアシル化反応させること」を実現できる。これが一般的に常識といわれる解である。なんともごちゃごちゃとしている長い反応経路である。手間もかかるし時間もかかるだろう。いつまでも待てない時もある。そこで Reaxys の登場である。

コンピュータ技術者がコンピュータ言語を勉強して、プログラムを組んで簡単なソフトウェアツールを作るように、Reaxys インターフェースをコンピュータ言語のように捉えて、必要な検索式を作っておく。これを検索したい時期に稼働させれば、データベースのアップデート状況に応じた「最新情報も集める情報ツール」となり、それはそれは便利な情報収集パートナーの獲得である。

検索対象をより具体的かつ明確に決めておく。ここではアルキルアルコールとアルキルアミンを有している基質を対象にする。アルキルアミンは二級アミンにしよう。この基質のヒドロキシ基のみをアシル化する反応の情報を収集する。

上記の目標の文面だけに基づくると、2つの官能基をグループ化するテクニック(図2)を使って2つの官能基を一つのグループと指定したのち、図3(式①)の検索式を作成するだろう。このあと、置換基の発生を原則禁止する As Drawn

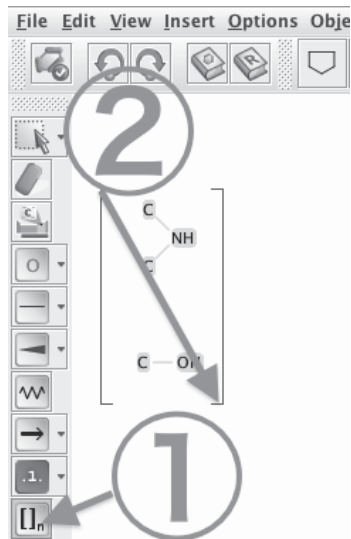


図2 グループ化

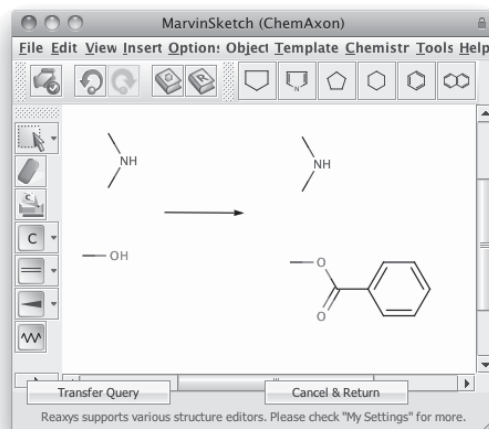


図3 ありそうな検索式(式①)

(AD)で検索するか、置換基の発生を原則許可する Substructure Search (SS) で検索したくなるのであるが、式①だと、As Drawn では何も Hit しないし、Substructure Search では 100 万件以上 Hit する！効果的な反応検索式の作成について勉強しておく必要があることが実感される。

図4は現バージョンの Reaxys でお薦めの検索式(式②)である。いくつかの簡単だが重要な味付けが施されている。手間はたいしたものではないが結果は大きく違う。使用環境に依存するいく

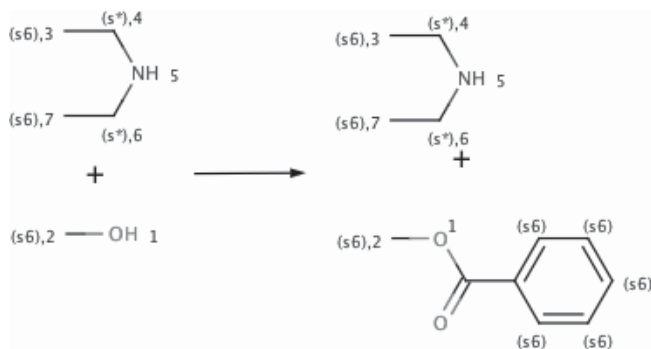


図4 お薦め検索式(式②)

つかの注意点も押さえておいていただきたい^{注3)}。反応検索で重要なことは、不必要な情報だけをことごとく排除することである。如何に排除するかを知っておくことが重要である。必要な反応は漏らさず集めつつも不要な反応を減らしてゆくという作業である。

まず「化学の知識に基づく限定や整理」を施すことが必須である。式①ではアルキルアルコールなのかフェノールなのか区別がつかない。官能基の反応性は、近傍の構造によって大きく変わる。したがって、近傍の構造と反応性に配慮した限定あるいは区別を行うことが大変有効である。本例における具体的な限定点は以下の点である。

1. ヒドロキシ基ではベンゼンオール（フェノール）とアルコールの反応性の違いは大きいので、両者を明確に区別する。
2. アミノ基の場合には、ベンゼンアミン（アニリン）とアルキルアミンの違いを区別する。
3. アミノ基の場合には、さらに一級アミン、二級アミン、三級アミンの違いも重要である。

そこで、検索対象をより具体的かつ明確に指示する必要がある。ここではアルキルアルコールとアルキルアミン、しかもアルキルアミンは二級を検索対象例と限定する。

すると

- ①官能基の隣がアルキルかアリールかの区別がつかない場合はメチレンを介して、ヒドロキシ基やアミノ基を結合させた記述に改める。
- ②メチレン部分に置換基がいくつ入れるかは、.s# で制限できる。検索式に画いたとおり

ならば描画領域の空白部分で[選択アイコン]+[.]+[s]+[*]とタイプしてから該当原子を次々とクリックして指示しておく。二置換までなら.s2。置換基の発生数に制限を設けないならば、.s6と指示しておく。

検索式を作る人は、ヒドロキシ基がエステルになっている反応式の該当部分のみが出発物の構造から変換された生成物を（無意識に）想定し、他の部分の構造は何も変わっていないと意図しているのであるが、作成者の意図を知らされないコンピュータは、その意図を無理矢理無視したかのような動きをとることがある。多くの場合に、違った当てはめをすれば検索式を満たしてしまうのである。例えばアルコールをエステル化する反応検索において、出発物質の部分構造にヒドロキシ基、アミノ基そしてエステル構造が入っていれば、出発物質のヒドロキシ基が反応しなくても生成物にアミノ基もエステル構造も存在する。すると「アルコールがエステルになる」という意図する反応が進行していなくても検索式が満たされてしまう。これでは検索者の意図が反映されない。そこで、出発物質と生成物の部分構造同士の対応関係について、対応する原子を明示的に指示しておく必要がある（マッピング：出発物質と生成物中の対応する原子を指定すること。画面上では対応する原子に同じ数字が付けられる）。また、反応に関与する結合を明示（結合の上で右クリックして指示）することも癖にしておくといい。そこで次の二つを励行する。

- ③出発物質と生成物とのおのおのの対応する原子

に番号を付ける (マッピング操作)。

- ④本反応で形成される結合部分に反応中心の指定をする。

以上のすべての点を考慮に入れた検索式ができると、その検索式を用い As Drawn (AD) (置換基の発生を原則禁止し、許可位置を明示するモード) で検索する。許可された置換基数を有する基質と生成物を有する反応がリストアップされてくる。

図5が得られたリストの例である。①②で多段階反応を除き (55の報文がHit)、文献検索が終わる。

次に文献中の情報の収集である。すなわち得られた検索結果を元に戦略会議に臨むため、例えば研究計画の策定と予想される問題点への理論武装に必要な資料の作成に駒を進める。無論、得られた55の報文のPDFファイルを印刷すれば、そこには必要な情報が入っているであろうが、必

要な情報がすぐ取り出せる資料であるとはいいがたい。そこで、例えば収集文献の反応情報の内容をまとめた資料を作っておく。おすすめは、③で表を作成しExcel形式で出力しておくことである。図6は作成表の例である。Excel表で出力すれば並べ替え等が簡便にできるので、資料作成に都合が良い。なんといっても、55報の原著論文から反応情報を読み取る必要がないので時間が節約できるし、原著があなたの精通していない言語で書かれてあっても大丈夫である。無論Reaxysの出した結果を無条件に信じていいとはいいがたいので、原著論文を無作為に抽出して確認をすることが必要である。データベースを信じ切らないことは重要である。また、この確認作業をすることによって、このデータベースの優秀さの程度を感じることができるであろう。自分の使う道具には信頼感を持つことが大事である。ただし盲目的ではなく、信憑性の程度に合わせた信頼感で臨むべきである。

The screenshot shows the Reaxys web interface. At the top, there's a search bar and navigation tabs. Below that, a search query is shown with a chemical structure. The main area displays search results for 65 reactions out of 41 citations. On the left, there are various filters such as 'Sub-structure', 'Yield', 'Record Type', 'Reagent/Catalyst', 'Solvent', 'Reaction type', 'No. of Steps', 'Product Availability', 'Reactant Availability', 'Document Type', 'Authors', 'Patent Assignee', 'Journal Title', and 'Publication Year'. The 'No. of Steps' filter is set to 1, and the 'by Group' section shows 55 results. The main results area shows two reaction examples. The first reaction is a synthesis of a complex molecule, with a '50%' yield and the condition 'With triethylamine in benzene'. The second reaction is a synthesis of a complex molecule, with a '77%' yield and the condition 'With tributylphosphine; diisopropylcarbodiimide in chloroform'. Each reaction entry includes a 'Synthesize' button and a 'References' section with citation information. Four numbered callouts are present: 1 points to the 'Reactions' tab, 2 points to the 'No. of Steps' filter, 3 points to the 'Output' button, and 4 points to the 'Create Alert' button.

図5 検索結果の例

①②：段階数の制限，③：検索結果の整理表作成，④：アラート作成


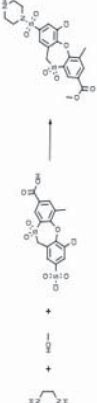

	A	H	R	S	T	AB	AE	AF	AI	AJ	AK	AL
	Reaxys®	Reaction	Time [h]	Temperature [°C]	Pressure [Torr]	Location	Yield	Yield (numerical)	Reagent	Catalyst	Solvent	References
1	(1 of 55) 29624800 View in Reaxys			85	760.051	Page/Page column 56	99 percent	99	triethylamine	1,1'-bis(diphenylphosphino)ferrocene palladium diacetate	methanol; dimethyl sulfoxide	Patent: BOEHRINGER INGELHEIM INTERNATIONAL, GMBH; US2010261714; A1; (2010); View in Reaxys
2	(2 of 55) 29668913 View in Reaxys			20		Page/Page column 125-126	35 percent	35	hydrogen chloride		ethyl acetate	Patent: NICHOLAS PIRAMAL INDIA LIMITED; WO200651476; A1; (2006); View in Reaxys
3	(3 of 55) 23154715 View in Reaxys			20		Page 32	74 percent	74	hydrogen chloride			Patent: Boehringer Ingelheim International GmbH; US2004192729; A1; (2004); View in Reaxys

図 6 出力の例

最後に資料作りである。検討すべき文献（最終的な Hit 文献）をどの程度まで絞るかによって次の対応が変わる。10 報以内ならすべての原報を用意して資料とすることもできる。20 報以内なら、すべての反応のデータ要素を盛り込んだ詳細な資料（Excel 表）の作成が可能である。原報をすべて用意することも可能かもしれない。50 報以上なら、原報をすべて用意することはかえって効率が悪い。対象文献の反応情報のデータ要素もある程度絞った表にして、収率順などでソートした資料とすると大変便利である。100 報以上なら、漏れを覚悟で対象文献をさらに絞ってゆくか、大きめの表の作成をおこなうかの決断をする。

このように Reaxys の検索機能と Excel 表への文献の情報出力機能を活用すれば、文献検索や資料作成の飛躍的な効率アップになる。優秀な資料が用意されれば、戦略会議が活発になり、多くの新しい閃きが生まれる素地になる。

12. アップデート対策とさらにその上をゆく お知らせ機能—これはもうパートナー—

検索式を保存しておいて、調査をするときに読み出して使うと検索式記述の手間が省ける。さらに作成した検索式を用いて再検索すれば、データベースのアップデートに応じて検索内容がその都度最新情報になっている。もっと便利なのは、データベースがアップデートし、該当反応が見いだされた場合に直ちに E メールで連絡が来るようにしておくこともできる。これはかなり便利である。このためには図 5 の④でアラートの登録をしておく。必要性の高い検索式をあらかじめ用意し、アラートに登録しておけば、これまでの書物形式ではできようのなかった「自動更新機能」を持ち、該当する反応だけの最新情報をあなたに届ける、ホットな情報をクールに届ける情報収集ツールの出来上がりである。

13. 最 後 に

文献調査に ICT (Information and Communication Technology) を利用するのは当たり前になってきている。使えて当たり前であり、使えな

ければ大きなハンデなのである。

教育に使う上において大変重要な点は、演習が気兼ねなくできるところである。Reaxys にはアクセス制限がないので接続数が多くても問題がない。そこで全学生に対して実習課題を出すことができている。実習でファクトデータの検索を課していると学生からは学生らしい質問^{注4,5)}や我々が予想しなかった随分とわがままな（高度な）要望があがってくる^{注6)}。このような演習によって、化学情報の信頼度に応じた対応の仕方をも身につけ、化学情報へのアクセスの抵抗感をなくし、更なる改良意見の考案と要望の提案により参加意識が生まれて親近感が醸成される等、教育上の効果が大きいと感じている。ファクトデータの取り出しに関して Reaxys は非常に良くできているのであるが、このような要望にも柔軟に対応していただき、より一層の改良を期待する。そして化学者の育成と研究の推進に貢献をしていただきたいと思う。

これまでに触れなかったが、Reaxys は反応経路を組み立てる場面での利用においての使い勝手も非常によい。しかも十分な練習ができるので、描画の操作に慣れて複雑な構造の化合物を扱う検索も比較的楽にできるようになれる。したがって研究利用に展開するにおいてもなら高いハードルを超えることなく、受講者が即戦力になることは特筆に値する。

注

- 注 1) Siedepunkt, Stunden, Erhalt, Inhalt, Dastellung, Isolierung, Möglichkeit 等々ドイツ語らしい単語が思い出される。水が Wasser で、水素が Wasserstoff. sauer が酸っぱいなら, Sauerstoff が酸素。そして Salzsäure が塩酸で、Milchsäure が乳酸ときて、最後に Eisessigsäure が氷酢酸と聞いて腰が抜けた。難しい言葉の学習も楽しめるものではある。
- 注 2) Reaxys に関しては、ファクトデータの集合体である Beilstein や Gmelin といったデータベースと、コンピュータ上でデータベースと利用者の間を取り持つ IF を合わせたデータベースシステムととらえるのが適切である。
- 注 3) 著者の環境ではブラウザーが Safari では、出力ファイルがちゃんとできなかつたりする。Firefox では化学式描画ウィンドウが出たままになるなど、好みの分かれる部分もある。が、出力は完璧である。Excel 表での資料作りには

欠かせない。

- 注4) 「外国語の壁」は中澤浩一先生も言及されている。その時代には Beilstein 全書を使いこなすことにより、ドイツ語以外の言語で書かれた原著文献の内容も把握できた。すると学生君曰く、「Beilstein の時代にはドイツ語が必須であったようですが Reaxys を使う時代になってもまだドイツ語は勉強しなければいけませんか」。
- 注5) 融点を調べていて、たくさんの文献がおのおのに異なる融点を報告しているのを見つけて学生君曰く、「融点の一つだと思っていたので、文献間で比べようと思うことすらありませんでした」「どれが本当の融点でしょうか」「本当の融点は最も高いチャンピオンデータですよ」「融点を多数決で決めていいですか」。
- 注6) スペクトルの検索をすると、どの文献に数値情報があるとか、どの文献の SI ファイルにスペクトルチャートがあるという情報を手に入れることができる。これだけでも我々には画期的なのだが、現状では該当のファイルを手に入れた後に掲載部分を探す必要がある。そこで学生君曰く、「掲載チャートを探すことなく、をクリック発で即表示ができませんか」。

参 考 文 献

- 1) Fawcett, E. et al. Ethylene polymers. GB471590, 1937.
- 2) Fawcett, E. et al. Ethylene polymers. GB499333, 1939.
- 3) Fawcett, E. et al. Ethylene polymers. GB492322, 1938.
- 4) Fawcett, E. et al. Ethylene polymers. GB481515, 1938.
- 5) Perrin, M. W. et al. Ethylene polymers. GB497643, 1938.
- 6) 寺田 裕. 高圧法ポリエチレン—その発見と開発の歴史—. 第1回技術史シリーズ. 化学史研究. 18(4), 1991, 221-231.
- 7) 中澤浩一. 有機化学文献の調べ方. 東京, 廣川書店, 1948, 143 p. (NII 書誌 ID: BN05303479)
- 8) CAS REGISTRY. "Predict the Date and Time for the 70 Millionth Substance Registration". (online), available from <http://www.cas.org/>, (accessed 2012-11-07).
- 9) Reaxys. (online), available from <http://www.reaxys.com>, (accessed 2012-11-05).
- 10) Scopus. (online), available from <http://www.scopus.com>, (accessed 2012-11-05).
- 11) SciFinder. (online), available from <http://scifinder.cas.org/scifinder/>, (accessed 2012-11-07).
- 12) Web of Knowledge. (online), available from <http://webofknowledge.com>, (accessed 2012-11-07).

(原稿受付け: 2012.11.9)