

平成22年4月27日現在

研究種目：基盤研究 (B)

研究期間：2007～2009

課題番号：19350014

研究課題名 (和文) 自発的発展可能な新量子化学文献データベースシステムの構築

研究課題名 (英文) Spontaneous and Perpetual Development of a New Quantum-Chemistry Data Base System

研究代表者

波田 雅彦 (HADA MASAHIKO)

首都大学東京・理工学研究科・教授

研究者番号：20228480

研究成果の概要 (和文) : 本プロジェクトでは、20年以上に渡って構築され続けてきた量子化学文献データベース(QCLDB)システムのデータ収集作業を実施するとともに、このデータベースシステムが継続的に発展を続けることが可能となるような施策を検討することを目的としている。本プロジェクトの最大の特徴は、データベースの収集活動が量子化学者の日々の研究活動の一環として実施されることにあり、研究活動とデータ収集活動の調和を重視しつつ収集雑誌の選択や収集ソフトウェアの改良を行っている。具体的には以下の項目を実施した。(1)2006, 2007, 2008年の量子化学文献データの収集・精製作業を実施した。2007年版までを公開した。(2)QCLDBの収集作業に協力する研究者への説明会を年1回実施した。(3)収集作業をサーバー・クライアント方式のソフトウェアに変更し、その改良作業を行った。

研究成果の概要 (英文) : In our project, we carried out the collection and refinement of ab initiation quantum-chemistry literature data base (QCLDB), which has been renewed for 20 years or more, and employed several measures to make this QCLDB grow spontaneously and perpetually. The most important point in our project is an effort balance between the collection of data and the daily work of quantum-chemists. Actual terms are as follow. (1)The collection of data was carried out for the literatures of 2006, 2007, and 2008 and The data of 2006 and 2007 were exhibited through the computer network. (2) The meeting were held every year to explain the QCLDB to many co-workers. (3) The server-client software was introduced to make the collection of data easy and we improved this software continuously.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	6,200,000	1,860,000	8,060,000
2008年度	5,100,000	1,530,000	6,630,000
2009年度	3,900,000	1,170,000	5,070,000
年度			
年度			
総計	15,200,000	4,560,000	19,760,000

研究分野：化学

科研費の分科・細目：基礎化学・物理化学

キーワード：量子化学、文献データベース、計算化学、収集・査読、システム開発

1. 研究開始当初の背景

量子化学文献データベース (Quantum Chemistry Literature Data Base ; QCLDB) は国内外の主要な学術雑誌に発表された非経験的量子化学計算及び計算方法に関する文献を収録した文献データベースである。1976年にデータベースの構築が立案されて以来、多数の研究者の地道な文献調査活動に支えられて、25年以上にわたって文献収録が続けられ、現在の文献収録論文数は7万件に達している。Chemical Abstracts on line (CAS on line) など商用の汎用データベースでは得られない、量子化学計算に特化した豊富な情報の有用性から、化学だけでなく、物理、生物、天文など幅広い分野の世界中の研究者に利用されてきた。量子化学の専門家だけでなく、非専門家が理論研究の現状を把握するためにも使われている。その学術的貢献は、本研究を追行する母体である量子化学データベース研究会が、科学技術振興事業団から「量子化学文献データベース (QCLDB) の開発・構築への貢献」による功労賞を受けるなど、高く評価されている。継続的な発展により、QCLDB の価値は今後ますます増加するであろう。

一方、QCLDB 発足以来25年以上の歴史の間に量子化学計算自体も質的な変化を遂げた。即ち、非経験的量子化学計算は精密な実験と対等な立場で分子科学の発展を相補的に支えるまでに大きく成長し、実験化学者の重要な道具へと進化した。その結果、QCLDB に採録する論文は多様化し、その数も激的に増加した。これらの状況の変化に対応するため、われわれはデータベース作成のポリシーと細かな仕様の変化を絶えず行ってきた。しかし、システム全体を早急に見直さなければ、質の高いデータベースを恒常的に提供できない危機的な状況が予測されたため、蓄積されたデータとの継続性を保ちつつ、今後の計算化学の研究手法の浸透と対象文献の増加に対応できる新しいデータベースのあり方

を検討し、新しいデータベース (QCLDB II) の活動指針を実施するに至った。

2. 研究の目的

本研究では、この量子化学文献データベースシステムを継承する中で、従来との整合性を考慮しつつ、(1)データの質的向上と文献収集機能の自動化の両立を模索し、(2)検索機能の拡張やデータベース間の多様な連携による利便性の向上を図り、(3)若手研究者育成によるQCLDB活動の拡大を図ることによって自律的・自発的に発展することが可能なシステムの構築を目指す。このための技術的検討と試行実験を実施する。

3. 研究の方法

研究目的を達成するために以下の方策を検討・実施する。

- (1) 収集対象雑誌の厳選：収集対象論文数は毎年4-500件ずつ増加するのに対して、収集担当者の増加はそれほど見込めず負担が増加するばかりである状況の改善を図る。
- (2) 収集支援体制の継続的確立：主要大学など多数の量子化学研究者、企業や外国の研究者の参加を促す方策をとる。収集・査読マニュアルの作成。新規な参加者のための講習会を定期的に開く。
- (3) 新収集・査読システムの利用支援を図る。
- (4) 自動収集システムを実験的に検討する。

4. 研究成果

- (1)2006, 2007, 2008年の量子化学文献データの収集・精製作業を実施した。2007年版までを公開した。2008年度までのデータは完全に精製作業が完了せず、一部の積み残しがあったものの、2009年度に新規登録されたデータ一件数は5282件となった。
- (2)QCLDBの収集作業に協力する研究者への説明会を毎年1回実施した。2007年度は東北大学にて、2008年度は福岡国際会議

場、2009年度は名古屋大学にて、いずれも分子科学討論会の開催に合わせて説明会を開催し、QC LDBの普及、収集・査読方法の講習を行い、合わせて、QC LDBに関する意見交換を実施した。

(3) コアジャーナルの取捨選択を実施した。化学を主体としない、つまり、分子を露に取り扱わない雑誌に関してはコアジャーナルから外した。これによって収集件数の増大を抑えて、収集を分担する教官・学生の研究活動と収集活動のバランスをとるようにした。収集者の人数確保が大きな課題であったが、新たな収集メンバーを開拓することができた。

(4) 収集作業をサーバー・クライアント方式のソフトウェアの改良作業を行った。収集や査読を担当している教官や学生に、(2)の説明会で意見交換した際に指摘のあった点を主として改良した。概ねは操作性の向上に関することであった。これらの指摘に関しては順次に改良を進めた。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計2件)

(1) K. Takano, N. Koga, T. Matsushita, K. Hashimoto, H. Hosoya, H. Matsuzawa, U. Nagashima, T. Nishikawa, H. Wasada, S. Yamabe, M. Tachikawa, M. Hada, " A Hybrid-Type Data Base: Quantum Chemistry Literature Data Base II- New Concept and New Methodology -", 査読有り、*Bull. Chem. Soc. Japan*, in press.

(2) N. Koga, T. Matsushita, K. Takano, K. Hashimoto, M. Hada, H. Hosoya, H. Matsuzawa, U. Nagashima, H. Wasada, S. Yamabe, "Quantum Chemistry Literature Data Base II Bibliography of Ab Initio Calculations for 2005", 査読有り、*J. Comp. Chem. Japan*, **5**(5), 231-655, 2006.

[学会発表] (計1件)

(1) 第13回理論化学討論会(北海道大学)「A hybrid-type Data Base: Quantum Chemistry Literature Data Base II - New Concept and New Methodology -、Keiko Takano, Nobuaki Koga, Toshio Matsushita, Kenro Hashimoto, Haruo Hosoya, Hidenori Matsuzawa, Umpei Nagashima, Takeshi Nishikawa, Hiroaki Wasada, Shinichi Yamabe, Masanori Tachikawa, Masahiro Ehara, Masahiko Hada, Sapporo, May 23-25 2010.

[その他]

ホームページ等

<http://qcldb2.ims.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

波田 雅彦 (HADA MASAHIKO)
首都大学東京・理工学研究科・教授
研究者番号：20228480

(2) 研究分担者

鷹野 景子 (TAKANO KEIKO)
お茶の水女子大学・人間文化創成科学研究科・教授
研究者番号：00143701

(3) 連携研究者

山邊 信一 (YAMABE SHINICHI)
奈良教育大学・教育学部・教授
研究者番号：00109117

永瀬 茂 (NAGASE SHIGERU)
自然科学研究機構・分子科学研究所・教授
研究者番号：30134901

松下 淑夫 (MATSUSHITA TOSHIO)
大阪市立大学・理学研究科・准教授
研究者番号：80229468

長嶋雲兵 (NAGASHIMA UMPEI)
独立行政法人産業技術総合研究所・計算科

学研究部門・総括研究員

研究者番号：90164417

岡崎 進 (OKAZAKI SUSUMU)

自然科学研究機構・分子科学研究所・教授

研究者番号：70194339

古賀 伸明 (KOGA NOBUAKI)

名古屋大学・情報科学研究科・教授

研究者番号：80186650

青柳 睦 (AOYAGI MUTSUMI)

九州大学・情報基盤研究開発センター・教授

研究者番号：00260026

松澤 秀則 (MATSUZAWA HIDENORI)

千葉工業大学・工学部・教授

研究者番号：30260847

和佐田 裕昭 (WASADA HIROAKI)

岐阜大学・地球科学部・准教授

研究者番号：90240796

橋本 健朗 (HASHIMOTO KENRO)

首都大学東京・理工学研究科・准教授

研究者番号：40202254

南部 伸考 (NANBU SHINKOU)

上智大学・理工学部・教授

研究者番号：00249955

立川 仁典 (TACHIKAWA MASANORI)

横浜市立大学・国際総合科学研究科・教授

研究者番号：00267410

西川 武志 (NISHIKAWA TAKESHI)

東京工業大学・学術国際情報センター・准教授

研究者番号：50357703