

結晶構造データベースシステムXDTの使用法(暫定版 第2報)

河野, 重昭
九州大学教養部物理学

高木, 利久
九州大学工学部情報工学科

松尾, 文碩
九州大学大型計算機センター研究開発部

二村, 祥一
九州大学大型計算機センター研究開発部

他

<https://doi.org/10.15017/1468079>

出版情報 : 九州大学大型計算機センター広報. 16 (4), pp.362-378, 1983-07-25. 九州大学大型計算機センター
バージョン :
権利関係 :

結晶構造データベースシステム XDT の使用法 (暫定版第 2 報)

河野 重昭*, 高木 利久**, 松尾 文碩***, 二村 祥一***, 鬼塚 千代子***

1. XDT の改訂

今回, XDT [1] に下記の変更ならびに機能強化を行ったので, これについて報告する.

データベースの変更 4月から1983年版のデータ(結晶解析数35,256; 化合物数31,982; 1982年度版よりそれぞれ3,625, 3,009個増加)を使っているが, 今回はデータベースの定義を多少変更し, 新たに作り直した. 新版のデータベースは8月1日から利用可能となる. これに伴い現行のものは廃棄する. 変更点と新しい定義については2節で述べる.

情報検索機能の強化 書誌ファイル(BIB)関係のデータの検索機能を強化し, ほぼXDCBIB [3]並みの機能をもつようにした. また, このデータに対しては通常の情報検索システムのコマンドによって検索できるようにした. この種のコマンドを**情報検索型コマンド**と呼ぶ. これについては3節で述べる.

応用プログラムの強化 応用プログラムとしてUNICSのほか, ケンブリッジ結晶データセンターが開発したPLUTO78(結晶構造図示プログラム)が使えるようになった. また, UNICS IIIに含まれているSTR80(結晶構造のステレオ図示プログラム)を使用できるようにした. これについては, 4節と5節で述べる.

2. XDT のデータベース定義の変更

今回, 変更したのは下記の7点である.

- 1) 情報検索型コマンドのためにBIBファイル関係を中心に, 次の9個の領域名(変数)を下記のように変更した.

旧	新
AUTH	AU
BIBLI	BI
CNAME	CN
CODEN	CO
CREF	RF
KEYW	KW
MFORM	MF
REF	ID
YEAR	YR

* 九州大学教養部物理学

** 九州大学工学部情報工学科

*** 九州大学大型計算機センター研究開発部

2) (1)に伴い、次の2個の関係名を下記のように変更した。

旧	新
AU	AUTH
REFC	REF

3) 関数MULTを消去した。これに伴い領域VMULTを消去した。

4) 関数DATAのコドメインの直積中からDFLAG, ZZ, TOLを除いた。これらの領域も消去した。

5) ATOMPは、関数から関係に定義を大幅に変えた。これに伴い((3)と合せて)、領域RESN, NH, NCHが消去され、APNが追加された。

6) BONDは、関数から関係に定義を大幅に変更した。これに伴い、領域CAT, NBが消去され、BPNが追加された。

7) 関数BIBのコドメインの直積中にYR(旧名YEAR)を入れた。YRは、インバース項目とした。

以下に、データベースの定義を示す。この見方は、文献[1]のp.53をみていただきたい。

```

DEF(REF < ID*RF)
  L('REFERENCE CODE')
  U(PUBDB)
*
DEF(DATA : ID -> SYS*YR*INTF*CENT*TD*PD*DM*DX*NSPG*RFAC)
  L('DATA DIRECTORY')
  I(SYS,YR,INTF,CENT,TD,PD,NSPG)
  U(PUBDB)
*
DEF(CELL : ID -> A*B*C*ALF*BET*GAM*P1*P2*P3*P4*P5*P6*SA*SB*SC*SALF*SBET
  *SGAM)
  L('UNIT CELL PARAMETERS')
  U(PUBDB)
*
DEF(SYMM : ID*OPER -> COMPO)
  L('SYMMETRY POSITION')
  U(PUBDB)
*
DEF(ATOMC : ID*COORD -> ELEM*ALAB1*ALAB2*X*Y*Z)
  L('ATOMIC COORDINATE')
  U(PUBDB)
*
DEF(ATOMP < ID*ATOM*APN)
  L('ATOM PROPERTIES')
  U(PUBDB)
*
DEF(BOND < ID*BPN)
  L('BOND PROPERTIES')
  U(PUBDB)
*
DEF(BIB : ID -> CN*MF*BI*CO*YR)
  L('BIBLIOGRAPHIC INFORMATION')
  I(CO,YR)
  U(PUBDB)
*
DEF(CLASS < ID*CL)
  L('CHEMICAL CLASSIFICATION')
  U(PUBDB)
*
DEF(KY < ID*KW)
  L('KEYWORD')
  U(PUBDB)
*
DEF(AUTH < ID*AU)
  L('AUTHOR')
  U(PUBDB)
*
DEF(ID)      KEY
              T(I4)   L('ID. CODE')
DEF(RF)      T(C8)   L('CAMBRIDGE FEFERENCE CODE')
*
DEF(SYS)     T(I2)   L('CRYSTAL SYSTEM') D(/0,6/)

```

研究開発

```
DEF(YR)      T(I2)  L('PUBLICATION YEAR')
DEF(INTF)    T(I2)  L('INTENSITY MEASUREMENT TYPE') D(/0,3/)
DEF(CENT)    T(I2)  L('CENTRE OF SYSTEM AT ORIGIN') D(/0,2/)
DEF(TD)      T(I2)  L('TOTAL DISORDER') D(0,1)
DEF(PD)      T(I2)  L('PARTIAL DISORDER') D(0,1)
DEF(DM)      T(I2)  L('100 DM')
DEF(DX)      T(I2)  L('100 DX')
DEF(NSPG)    T(I2)  L('SPACE GROUP NUMBER')
*
DEF(A)       T(I4)  L('A X 10**P1')
DEF(B)       T(I4)  L('B X 10**P2')
DEF(C)       T(I4)  L('C X 10**P3')
DEF(ALF)     T(I4)  L('ALPHA X 10**P4')
DEF(BET)     T(I4)  L('BETA X 10**P5')
DEF(GAM)     T(I4)  L('GAMMA X 10**P6')
DEF(P1)      T(I2)  L('PRECISION DIGIT P1')
DEF(P2)      T(I2)  L('PRECISION DIGIT P2')
DEF(P3)      T(I2)  L('PRECISION DIGIT P3')
DEF(P4)      T(I2)  L('PRECISION DIGIT P4')
DEF(P5)      T(I2)  L('PRECISION DIGIT P5')
DEF(P6)      T(I2)  L('PRECISION DIGIT P6')
DEF(SA)      T(I2)  L('SIGMA(A) X 10**P1')
DEF(SB)      T(I2)  L('SIGMA(B) X 10**P2')
DEF(SC)      T(I2)  L('SIGMA(C) X 10**P3')
DEF(SALF)    T(I2)  L('SIGMA(ALPHA) X 10**P4')
DEF(SBET)    T(I2)  L('SIGMA(BETA) X 10**P5')
DEF(SGAM)    T(I2)  L('SIGMA(GAMMA) X 10**P6')
*
DEF(RFAC)    T(I2)  L('R-FACTOR X 1000')
*
DEF(OPER)    T(I2)  L('NTH SYMMETRY OPERATOR')
DEF(COMPO)   T(I4)  L('COMPONENTS OF NTH SYMMETRY OPERATOR')
*
DEF(COORD)   T(I2)  L('NTH COORDINATE')
DEF(ATOM)    T(I2)  L('NUMBER OF ATOM')
DEF(ELEM)    T(I2)  L('ATOMIC NUMBER OF ELEMENT')
DEF(ALAB1)   T(I2)  L('NUMERAL PART OF ATOM LABEL')
DEF(ALAB2)   T(I2)  L('SYMMETRY OPERATION PART OF ATOM LABEL')
DEF(X)       T(I4)  L('X/A X 100000')
DEF(Y)       T(I4)  L('Y/B X 100000')
DEF(Z)       T(I4)  L('Z/C X 100000')
*
DEF(APN)     T(I4)  L('10000*ELEM+1000*NCA+100*NH+NCH+50')
DEF(BPN)     T(I4)  L('(10**6)*(50+NB)+(10**3)*ELEM1+ELEM2')
*
DEF(CL)      T(I2)  L('CHEMICAL CLASSIFICATION')
DEF(CO)      T(I2)  L('JOURNAL CODEN')
DEF(CN)      T(C400) L('COMPOUND NAME')
DEF(MF)      T(C160) L('MOLECULAR FORMULA')
DEF(BI)      T(C400) L('AUTHOR, JOURNAL, VOL., PAGE, YEAR, MSD')
DEF(KW)      T(C50)  L('KEYWORD FROM COMPOUND NAME')
DEF(AU)      T(C30)  L('AUTHOR'S NAME')
```

この定義は、一応最終的なもので、当分変更されることはないであろう。ここで定義した関係、関数、領域については、いずれ詳しく解説するつもりである。

3. 情報検索型コマンドを用いたXDTの検索

3.1 情報検索型コマンドと検索処理

XDTで利用できる情報検索型コマンドとその入力形式を表1に示す。

表1. 情報検索型コマンド一覧

コマンド名	オペランド	機能
F[IND] ^{*1}	^{*2} △項目名=値 [△項目名=値] [△項目名=値]……	データベースを検索し、オペランドで指定された条件を満足する(項目が=の右側の値をとるような)エントリの集合を求める。なお、複数の条件が指定されたときは、それらすべてを満足するものを求める。
A[ND]	△項目名=値 [△項目名=値]…… ^{*3} [△SET = 集合名]	FINDコマンドと全く同じような検索をしたあとその結果集合とSET=以下で指定した集合との間で集合積をとる。
O[R]	△項目名=値 [△項目名=値]…… [△SET = 集合名]	FINDコマンドと全く同じような検索をしたあとその結果集合とSET=以下で指定した集合の和をとる。
N[OT]	△項目名=値 [△項目名=値]…… [△SET = 集合名]	FINDコマンドと全く同じような検索をしたあとその結果集合とSET=以下で指定した集合の差をとる。
D[ISP]	△項目名 [△項目名] [△項目名]…… [△SET = 集合名]	SET=で指定したエントリの集合に対してオペランドで指定した項目の値を出力する。
S[AVE]	△集合名	現集合にオペランドで指定した名前をつけて保存する。
E[XPAND]	△項目名=値 [△SPAN = 件数]	キーワードの通覧、指定した値に近い値をSPANで指定した件数だけ表示する。

* 1. [,] で囲まれた部分は、省略してもよいことを示す。

* 2. △は1個以上の空白を表わす。

* 3. 英字で始まる8文字以内の英数字列。

表1において項目名とは2節のデータベース定義における領域名のことであり、値とは検索者が検索条件として指定する値のことである。FINDコマンドなどを用いて検索を行うと、エントリ参照番号(XDTがエントリを一意に識別するために付けた番号)の集合が求まる。ここで、エントリとは[1]でも述べたように"一つの化合物の一つの解析結果"に対応している。この集合を現集合と呼

研究開発

ぶ。この集合はSAVEコマンドを用いて保存することができる。上の表のオペランドにある集合名とはSAVEのときに付けた名前のことである。各コマンドにおいてSET=集合名を省略するとその直前に検索した集合つまり現集合が指定されたものとみなされる。

以下に簡単な検索例を示す。(検索者の入力する部分を下線で示す。)

```
① LOGON TSS F1234/PASSWORD
   KDS70001I F0195 LAST ACCESS AT 20.40.05 ON 83.150
   KEQ56455I F0195 LOGON IN PROGRESS AT 10:10:10 ON MAY 20,1983
   JOB NO = TSU2999 CN(01)
   KEQ5695I NO BROADCAST MESSAGES
② READY
③ XDT
④ =T
⑤ .FIND KW=XYLITOL
⑥ =2
⑦ .AND AU=KIM?
⑧ =1
⑨ .DISP CN MF YR
⑩ =1
⑪ CN=XYITOL (ORTHORHOMBIC FORM)
⑫ MF=C5 H12 05
⑬ YR=69
⑭ .END
⑮ READY
```

①はTSSのセッションを開始するLOGONコマンドを入力したものである。

③のXDTコマンドの入力により⑤で・(ピリオド)が出力される。ここまでは従来と全く同じである。

⑤KY(ID,▼XYLITOL▼) → \$A(ID)

と入力したのに相当する。つまり、KYという関係を検索しXYLITOLというキーワード(KW)を持つ参照番号(ID)を求めるものである。このとき、"FIND"は単に"F"でもよい。

⑥で検索条件に該当するものが2件見つかったことがわかる。この参照番号の集合は現集合として保存される。

⑦は著者名の頭の文字列(プレフィックス)がKIM(?は任意の文字列を示す)であるような参照番号の集合を求め、それと⑥で得られた現集合との積集合をとることを示している。その結果1つの参照番号が求まった(⑧)。このとき、"AND"は"A"でもよい。

なお、⑤と⑦の代りに

```
FIND KW = XYLITOL AU = KIM?
```

と入力しても同じ結果が得られる。

⑨は⑧で求まった参照番号に対応する化合物のCN(化合物名)、MF(分子式)、YR(文献の発行年)を出力することを指示したものである。これは集合名を指定していないので、現集合に対して出力が行われる。このとき、"DISP"は"D"だけでよい。

⑩~⑬は出力。

⑭はXDTの処理を終了するためENDコマンドを入力したものである。

なお、表1の情報検索型コマンドはXDTの通常のコマンド(関係名を用いた検索)に翻訳されてその処理が行われる。そのため翻訳の制約上FIND,AND,OR,NOT,EXPANDコマンドのオペランドとして書ける項目名はKW,AU,RFに限られる。また、同じ理由からDISPコマンドのオペランドの項目名は、関係BIB,DATA,CELLで定義されているものに限られる。それ以外の項目による検索

は従来通りの方法を用いなければならない。

3.2 検索例

検索例 1

```

XDT
=T
① .EXPAND KW=XYLI
  1 XYLENOLATO
  1 XYLENOXYDIPHENYLBUTADIYNE
  1 XYLENYLIDENE
  1 XYLERYTHRIN
② { 1 XYLERYTHRININ
    3 XYLIDEDE
    1 XYLIDIDE
    1 XYLITANYLIDENE
    2 XYLITOL
   12 XYLO
    1 XYLOBIOSE
③ .FIND KW=XYLI?
④ =7
⑤ .SAVE XYLI
⑥ .AND KW=ANHYDRO SET=XYLI
⑦ =1
⑧ .OR KW=BENZOYL
⑨ =456
⑩ .NOT KW=BENZOYL SET=XYLI
⑪ =6
⑫ .AND AU=KIM?
⑬ =1
⑭ .DISP CN BI MF
⑮ =1

```

- ①ではキーワードの綴りがXYLIに近いものの表示を要求した。このとき、"EXPAND"の代わりに"E"としてもよい。
- ②は、"XYLI"の前後のキーワードの表示。①でSPANオペランドを省略したため、11個のキーワードが表示された。キーワードの前の数字は、そのキーワードをもつエントリの件数を示している。
- ③は、キーワードのプレフィックスがXYLIであるエントリの検索であり、その結果7エントリ見つかった(④)。
- ⑤は、その7件の参照番号の集合(現集合)をXYLIという名前で保存することを指示。
- ⑥は、ANHYDROというキーワードを持つエントリを検索し、その結果と⑤で保存した検索結果集合と集合積をとることを示している。その結果1件求まった。(⑦)
- ⑧は、BENZOYLというキーワードを持つエントリを検索し、それと現集合(⑦で求まったもの)との集合和を求めたものである。
- ⑩は、⑤で求めたものの中で、キーワードがBENZOYLでないものを検索したものである。
- ⑫は、⑪で求めたものの中で、著者のプレフィックスがKIMであるものを検索。
- ⑭は出力の指示。
- ⑮は出力。

研究開発

検索例 2

```
.EXPAND RF=AACANI10 SPAN=1  
1 AABHTZ  
1 AACANI10  
1 AACFAZ  
.FIND RF=AABHTZ  
=1  
.DISP BI_YR  
=1
```

この例はケンブリッジ参照コードの綴りを EXPAND コマンドで調べ、それにより検索した例である。

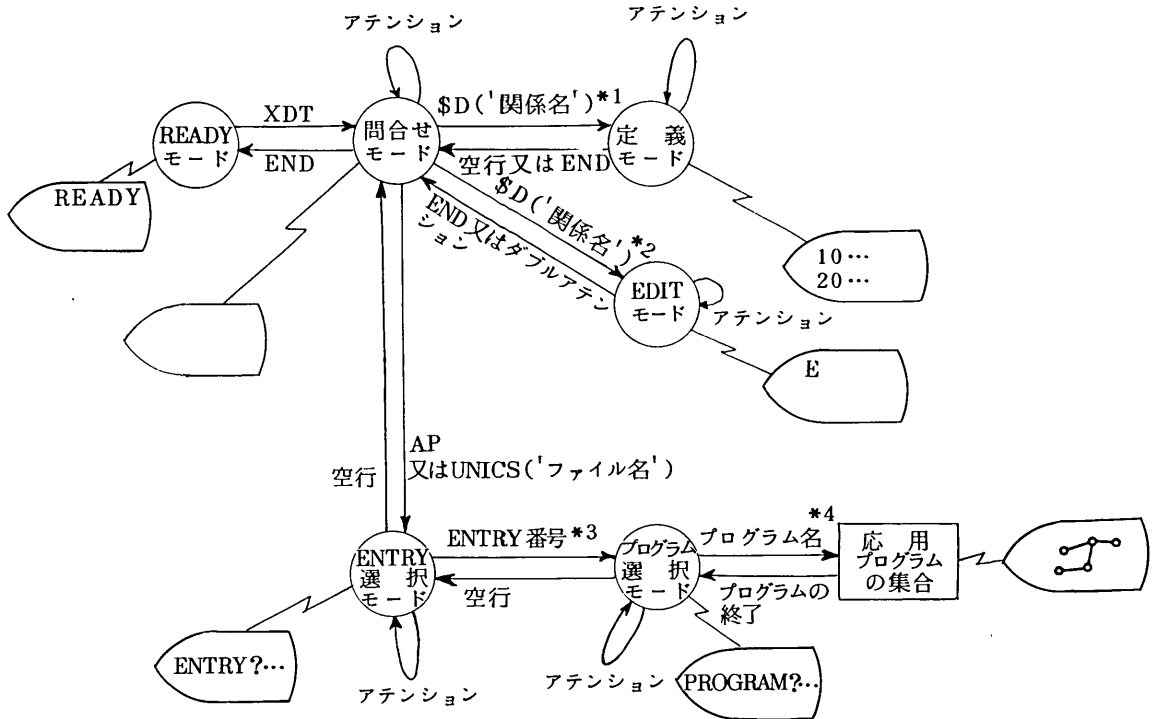
検索例 3

化合物のケンブリッジ参照番号がわかっていて、そのすべての解析結果を求めたい場合は以下のようにすればよい。(ケンブリッジ参照番号は最初の 6 文字で化合物を表わし、同一化合物について複数の解析結果がある場合はそのあとの 2 桁の数字でそれぞれの解析結果を識別するようになってい

```
.F RF=FEROCE?  
=16
```

4. 応用プログラムの起動

XDT の応用プログラムを起動するには、まず、3 節で述べたように FIND などの情報検索型コマンドを用いて検索を行い、その後に応用プログラムを起動するためのコマンド AP を入力する。この場合、応用プログラムはその直前に求められた参照番号の集合(現集合)に対して実行される。検索から応用プログラム実行までの過程を例 1, 2 に示す。応用プログラム起動後(A P 入力以降)の端末のやりとりは、従来と同じである。図 1 に XDT と応用プログラムの状態遷移図を示す。なお、従来通り UNICS コマンドを用いて応用プログラムを起動することもできる。



- * 1. 新規の関係名の場合
- * 2. 既存の関係名の場合
- * 3. 検索した参照番号が複数存在する場合, その何番目について応用プログラムを起動するか指定する.
- * 4. 起動すべき応用のプログラム名

図1. XDTと応用プログラムの状態遷移図

研究開発

例1 キーワードによる検索から応用プログラムへ

```
XDT  
=T  
.FIND KW=XYLITOL  
=2  
.AP  
ENTRY?1  
PROGRAM?PLUTO  
OUTPUT DEVICE? (TERMINAL(T)/LASER-PRINTER(L))T  
SHAPE OF ATOM? (POINT(P)/CIRCLE(C)/SPHERE(S))C  
DRAW H-ATOMS? (YES(Y)/NO(N))Y  
DRAW STEREO? (YES(Y)/NO(N))N  
PROJECTION AXIS? (X/Y/Z/S/M)M  
START OF TAPE  
MODE/OPTION?2  
OPTION?E  
OPTION?C
```

[図2を作図]

```
OPTION?Q  
SHAPE OF ATOM? (POINT(P)/CIRCLE(C)/SPHERE(S))  
PROGRAM?  
ENTRY?  
=T  
.END
```

XYLTOL

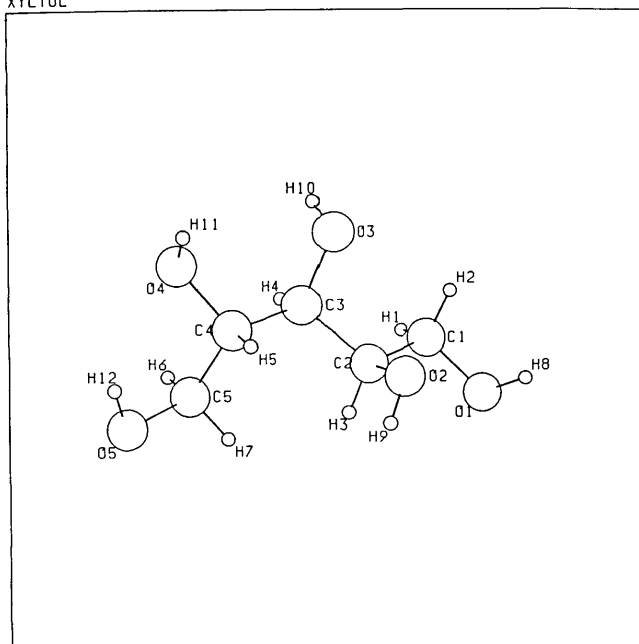


図2. XYLTOL (原子を円で表示)

例2 ケンブリッジ参照コードから応用プログラムへ

東大大型計算機センターのTOOL-IRや京大・名大大型計算機センターのFAIRSの検索により、ケンブリッジ参照コードが既知である場合には、次のようにすればよい。

ケンブリッジ参照コードを" AABHTZ "として、例を示す。

```

XDT
=T
.FIND RF=AABHTZ
=1
.AP
ENTRY?1
PROGRAM?PLUTO
OUTPUT DEVICE? (TERMINAL(T)/LASER-PRINTER(L))T
SHAPE OF ATOM? (POINT(P)/CIRCLE(C)/SPHERE(S))C
DRAW H-ATOMS? (YES(Y)/NO(N))Y
DRAW STEREO? (YES(Y)/NO(N))N
PROJECTION AXIS? (X/Y/Z/S/M)M
START OF TAPE
MODE/OPTION?2
OPTION?E
OPTION?C

```

[図3 を作図]

OPTION?E
OPTION?C
SHAPE OF ATOM? (POINT(P)/CIRCLE(C)/SPHERE(S))S
DRAW H-ATOMS? (YES(Y)/NO(N))Y
DRAW STEREO? (YES(Y)/NO(N))N
PROJECTION AXIS? (X/Y/Z/S/M)M
OPTION?E
OPTION?C

[図4 を作図]

OPTION?Q
SHAPE OF ATOM? (POINT(P)/CIRCLE(C)/SPHERE(S))
PROGRAM?
ENTRY?

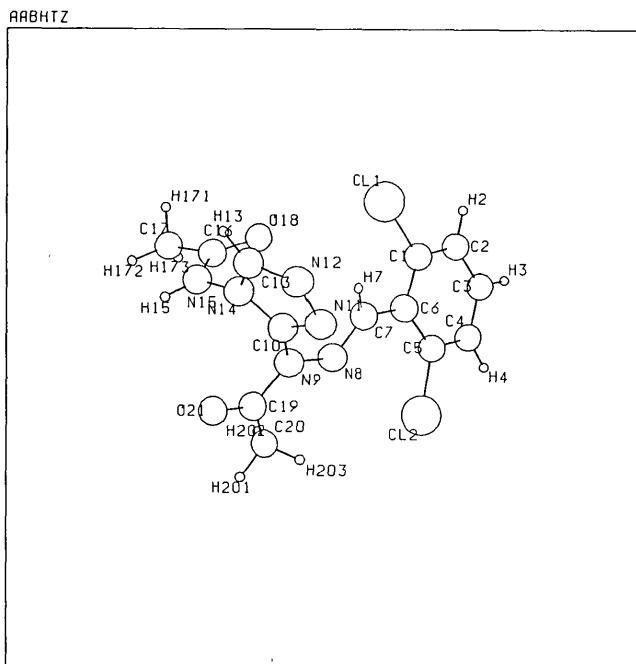


図3. AABHTZ (原子を円で表示)

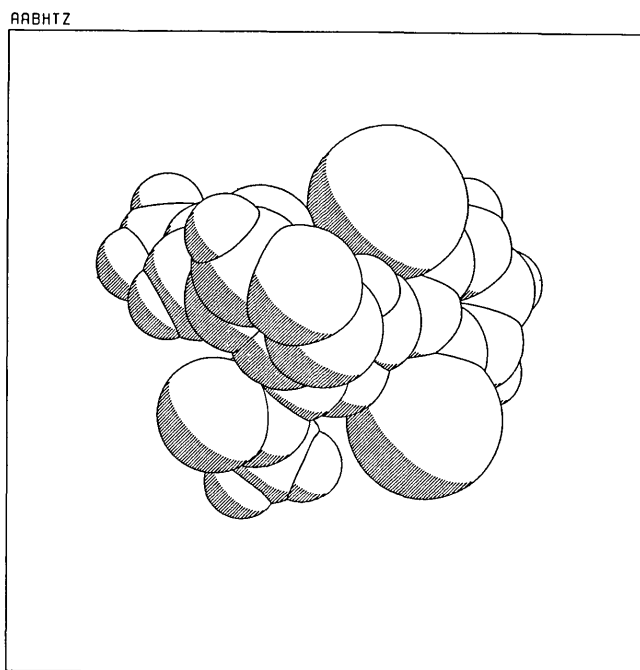


図4. AABHTZ (原子を球で表示)

5. 新しい応用プログラムの使用法

[1] で述べたXDT用UNICS(OUT, DA80, PLOTP, PLOTDW, PLOT80, ORT80)の他に、UNICSⅢに含まれているSTR80(結晶図のステレオ図を作図する)[2]が使用できるようになった。さらに、ケンブリッジ結晶データセンターが開発した作図用のプログラムPLUTO78を使用できるように書き直したので、ここではこれの使用法について述べておく。

研究開発

```
XDT
=T
.FIND KW=XYLITOL
=2
.AP
ENTRY?2
PROGRAM?PLUTO
OUTPUT DEVICE? (TERMINAL(T)/LASER-PRINTER(L))L*
SHAPE OF ATOM? (POINT(P)/CIRCLE(C)/SPHERE(S))P**
DRAW H-ATOMS? (YES(Y)/NO(N))Y***
DRAW STEREO? (YES(Y)/NO(N))N****
PROJECTION AXIS? (X/Y/Z/S/M)M*****
SHAPE OF ATOM? (POINT(P)/CIRCLE(C)/SPHERE(S))C
DRAW H-ATOMS? (YES(Y)/NO(N))Y
DRAW STEREO? (YES(Y)/NO(N))N
PROJECTION AXIS? (X/Y/Z/S/M)M
SHAPE OF ATOM? (POINT(P)/CIRCLE(C)/SPHERE(S))C
DRAW H-ATOMS? (YES(Y)/NO(N))N
DRAW STEREO? (YES(Y)/NO(N))N
PROJECTION AXIS? (X/Y/Z/S/M)M
SHAPE OF ATOM? (POINT(P)/CIRCLE(C)/SPHERE(S))S
DRAW H-ATOMS? (YES(Y)/NO(N))Y
DRAW STEREO? (YES(Y)/NO(N))N
PROJECTION AXIS? (X/Y/Z/S/M)M
SHAPE OF ATOM? (POINT(P)/CIRCLE(C)/SPHERE(S))C
DRAW H-ATOMS? (YES(Y)/NO(N))N
DRAW STEREO? (YES(Y)/NO(N))Y
PROJECTION AXIS? (X/Y/Z/S/M)M
*** NPLOT START ***
```

-
- * 'T' と入力すると、グラフィック端末に作図される。
 - 'L' と入力すると、レーザー・プリンターに出力される。
 - ** 'P' と入力すると、原子が点で表示される。
 - 'C' と入力すると、原子が円で表示される。
 - 'S' と入力すると、原子が球で表示される。
 - *** 'Y' と入力すると、水素原子が画かれる。
 - 'N' と入力すると、水素原子が画されない。
 - **** 'Y' と入力すると、ステレオ図が作図される。
 - 'N' と入力すると、ステレオ図が作図されない。
 - ***** 'X' と入力すると、 x 軸投影図が画かれる。
 - 'Y' と入力すると、 y 軸投影図が画かれる。
 - 'Z' と入力すると、 z 軸投影図が画かれる。
 - 'S' と入力すると、最も短い軸の投影図が画かれる。
 - 'M' と入力すると、原子の重なりが最も少ない方向への投影図が画かれる。

```

*** N PLOT NORMAL END ***
KQC0550I ENTRY (A) F1234.##HCBS## DELETED
PROGRAM?
ENTRY?
=T
.END
    
```

以上の例により、図5～図9がレーザー・プリンターに出力される。

しかし、レーザー・プリンターに出力する前に、4の例のように、Tektronix 4010シリーズ・グラフィック端末に作図し、必要な図のみをレーザー・プリンターに出力させる方がよい。

図5は、原子を点で表示した図であり、原子名の位置に工夫がなされていて見易くなっている。PLOTDW, PLOTPと同等なものである。

図2, 3, 6, 7は、原子を結合半径に比例した半径の円で表示した図である。原子数が多い場合は、図7のように水素原子を除いた方が見易くなる。PLOT80, ORT80と同等のものである。

図4, 8は、原子を結合半径に比例した半径の球で表示した図であるが、水素原子はやや大きく表示されている。これにより、分子のどこが密に詰まっておき、またどこに空隙があるかがわかる。これは、PLUTO78だけにしかないものである。

図9は、図7をステレオ図にしたものであり、ORT80と同等なものである。

ただし、PLUTO78には、結晶図を画く機能はない。

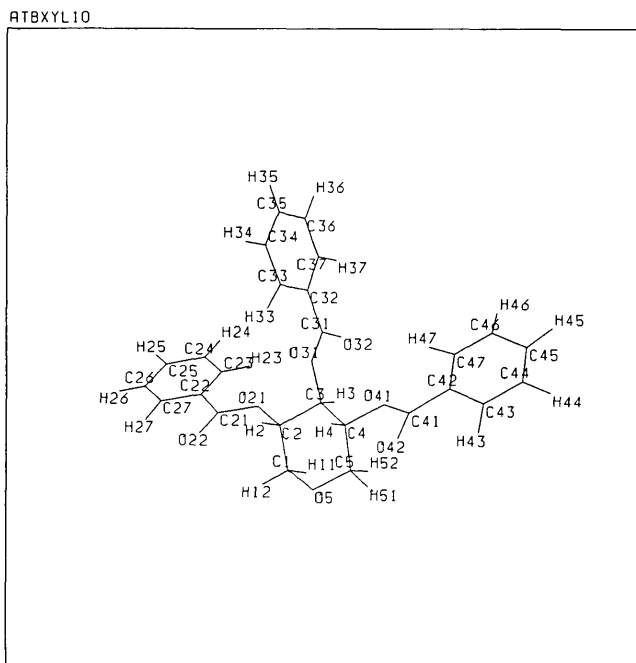


図5. 原子を点で表示した図

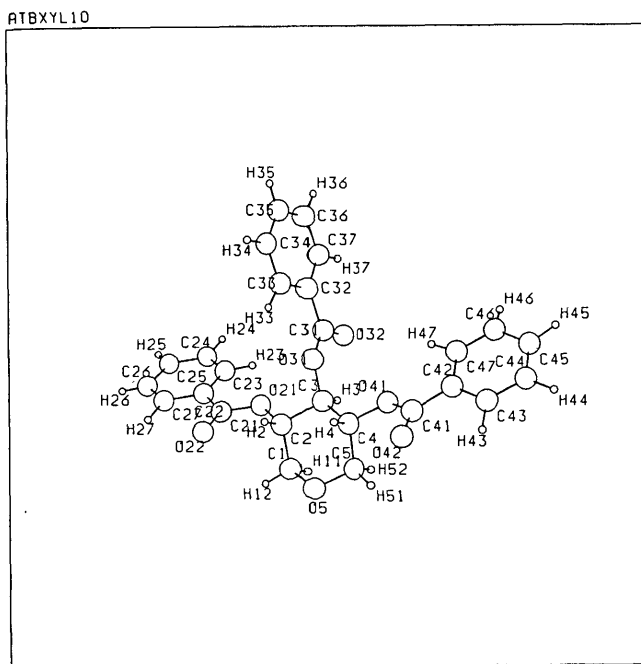


図6. 原子を円で表示した図

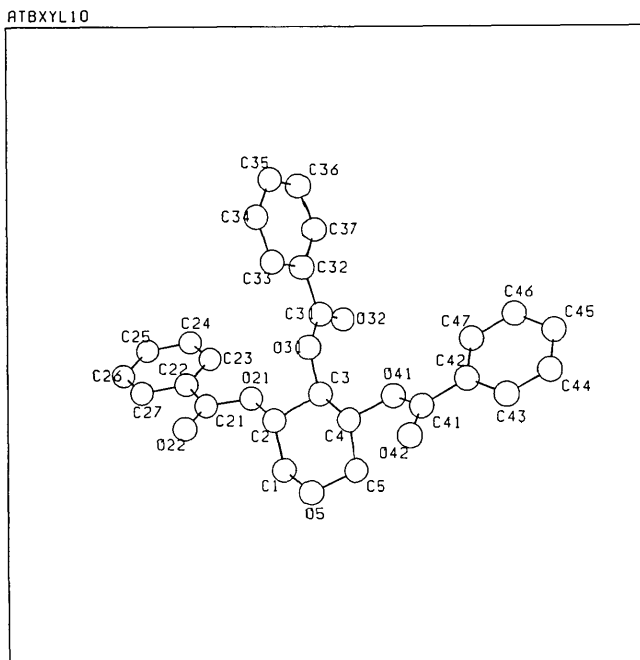


図7. 原子を円で表示し、水素原子を除いた図

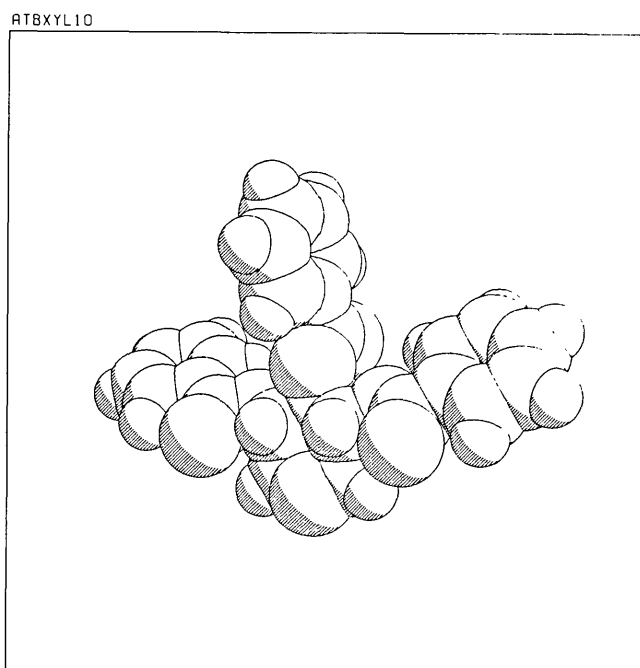


図8. 原子を球で表示した図

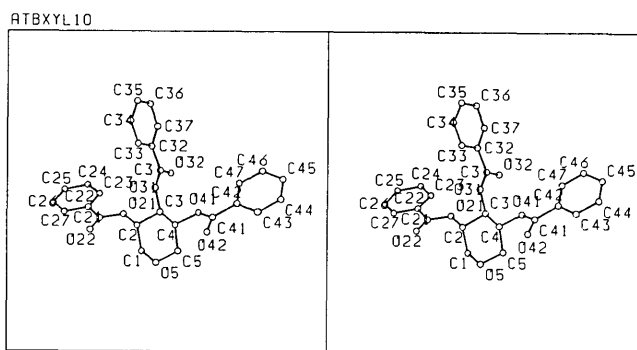


図9. 原子を円で表示し、水素原子を除いたステレオ図

6. 今後の計画

ケンブリッジ結晶データベースには、書誌ファイル(BIB)、化学結合ファイル(CONN)、構造データファイル(DATA)の3個のファイルがあるが、今回の改訂により書誌ファイル(BIB)の検索については、FAIRS-I[3]と同等のレベルに達したので、FAIRS-Iによる検索サービスは、9月1日より廃止する。

化学結合ファイル(CONN)の検索については、重原子の場合に可能であるが、まだ検索機能が充分でないので、検索用応用プログラムを現在開発中である。このプログラムが完成すれば、ケンブリッジ結晶データ・ファイルに付属している化学結合ファイル用検索プログラムCONNSEと同等のレ

研究開発

ベルに達する予定である。

構造データファイル (DATA) の検索については、今回の改訂で充分と思われる。また、そのための応用プログラムもほぼ完備してきたが、東大大型計算機センターでは、POWD5 [4] と結合して、X線粉末パターンのシミュレーションに利用しているので、POWD5 の移植を行いたいと思っている。

なお、構造データファイル (DATA) について、Adbis を用いることにより、結晶学上の統計情報を得ることができるし、その情報を SAS/GRAPH によりグラフに示すこともできる。現在そのための応用プログラムを開発中であるので、完成したら報告したい。

参考文献

1. 河野, 高木, 松尾, 二村, 鬼塚 結晶構造データベースシステム XDT の使用方法 (暫定版第 1 報), 九大大型計算機センター広報, **16**, 1, 1983, 32-53.
2. 河野 UNICS III の使用方法について, 同上, **16**, 2, 1983, 113-154.
3. 河野 FAIRS によるケンブリッジ結晶データ・ファイルの検索, 同上, **15**, 3, 1982, 296-311.
4. 山中 粉末回折図形作製のプログラム, 日本結晶学会誌, **22**, 1980, 226-230.