

結晶構造データベースシステムXDTについて(総合版)

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/10.15017/1468089>

出版情報：九州大学大型計算機センター広報. 16 (6), pp.556-604, 1983-11-25. 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について(総合版)

河野重昭*, 高木利久**, 松尾文碩***, 二村祥一***, 鬼塚千代子***

1. はじめに

結晶構造データを扱うデータベースシステムXDT (CRYStallographic DaTa system)は、1982年度の本センター公用データベースの開発課題[1]により開発中のシステムである。XDTのデータは、英国のCambridge Crystallographic Data Centre, University Chemical Laboratory (1965年設立、以下“CCDC.”と略す)が全世界的規模で集積・配布を行っている結晶構造データ(以下“CCDCデータベース”と呼ぶ)である。CCDCデータベースの情報は、X線又は中性子の回折強度測定による結晶構造解析を報告した論文からとられており、対象となる化合物は蛋白質と高分子化合物を除く有機化合物、有機金属化合物及び金属間化合物である。情報は、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個のファイルに蓄積されている。これらのファイルの内容は次のとおりである。

BIB …… 化合物とその別名、分子式などのほか、著者名、雑誌コードなどの書誌的事項。ただし、文献の標題、抄録は含んでいない。

CONN … 結晶単位各残基についての原子間結合情報。

DATA … 単位セルのパラメータ、空間群、対称性、単位セル中の原子座標、結合の距離、精度[R因子、平均 $\sigma(C-C)$]など。

データは、1935年の文献のものまでさかのぼって収録され、現在、37,367文献による33,794種の化合物についての情報を含んでいる。BIBとDATAのデータは文献単位であるが、CONNは化合物単位でデータが入っている。CCDCデータベースはIBMカードイメージのデータであり、1982年までの量は95万枚のカードに相当する。このうち最も大きいのはDATAであり60.7%を占める。最小がBIBで11.6%、残り27.7%がCONNである。CCDCは、データの検査、集積、配布だけでなく、検索プログラムを作成し提供している。

我が国では、このデータベースは大阪大学蛋白質研究所を通じて東京大学、京都大学、名古屋大学の各大型計算機センターに導入されている。しかし、CCDCの検索プログラムはバッチ処理モードで走る順編成ファイル探索ルーチンであるため、そのままの形ではあまり使用されていない。各大型計算機センターでは、一応オンライン文献検索システムが整備されているので、BIBに対しては会話型の検索手段を有するが、他のファイルについてはそれがなく、したがってそれらのファイルはほとんど利用されていないかあるいは変則的な検索方式によって利用されているかであって、いずれにしても十分に活用されているとは言い難い。XDTは、CCDCデータベースの3つのファイルをデータベース管理システム(DBMS) Adbisによって結合したデータベースシステムであり、このデータベースを扱う最初の本格的データベースシステムである。Adbisは、本センターにおいて開発された数値・

* 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

文字データ用DBMSであり、CCDCデータベースのような科学技術データの管理に特に適している [2-5]。

XDTは、Adbisによって推論機能を持つ関係型データベースシステムとして機能し、大きな潜在的能力を持っているが、開発経験がなく、その能力を十分に活かしきっていない。しかし、BIBやDATAの検索に関しては、一応実用的段階に達したと思われる本年1月に暫定版第1報 [6] を公表し、さらに利用者の意見を大幅に取り入れ、7月に暫定版第2報 [7] を公表した。その結果、FAIRS-Iと同等のレベルに達したので、9月からFAIRS-Iによる検索 [8] を中止した。

今回、CONNの検索も一応実用的段階に達し、システムとしては所期の目的に達したので、暫定版第1報と第2報を含め、総合版として公表することにした。

2. XDTの構築

XDTのデータベースをAdbisの定義に従い、付録1のように関係を定義し構築した。以下、各関係ごとに説明しよう。

2.1 REF(Reference Code)

項目	属性	検索	説明
ID	I4	○	XDT用の参照番号
RF	C8	○	CCDCデータベース用の参照コード(ケンブリッジ参照コード)

表1. REF

項目IDは4バイト整数型であり、IDを指定するとRFの検索ができる。また、項目RFは8バイトの文字型であり、RFを指定するとIDの検索ができる。

例1. RFよりIDを求める。(式の説明は4.2にある)

```
.REF(ID,'AABHTZ')$A(ID)*
=1
ID=32768
.
```

例2. IDよりRFを求める。

```
.REF(32768,RF)$A(RF)
=1
RF=AABHTZ
.
```

* アンダーラインは利用者が入力する部分である。

2.2 DATA(Data Directory)

項目	属性	検索	説明
ID	I 4	○	XDT用の参照番号
SYS	I 2	○	結晶系(1:三斜, 2:単斜, 3:斜方, 4:正方, 5:六方, 6:立方)
YR	I 2	○	論文発表年(下2桁のみ)
INTF	I 2	○	強度測定法(1:目測, 2:光度計, 3:回折計)
CENT	I 2	○	対称中心(1:あり, 2:なし)
TD	I 2	○	全体的 Disorder(0:なし, 1:あり)
PD	I 2	○	部分的 Disorder(0:なし, 1:あり)
DM	I 2	×	密度の測定値(100倍し, 整数化している)
DX	I 2	×	密度の計算値(100倍し, 整数化している)
NSPG	I 2	○	空間群の番号(International Tables, Vol. Iによる)
RFAC	I 2	×	R-Factor(1000倍し, 整数化している)

表2. DATA

検索の所の○は, その項目を指定すると, 他の項目の検索ができるが, ×はそれができないことを示している. 各項目の説明については, 参考文献[10, 11]がくわしい.

例3. IDを指定して, 他の項目全部を求める.

```
.DATA(32768,SYS,YR,INTF,CENT,TD,PD,DM,DX,NSPG,RFAC) $A(SYS,YR,INTF,CENT,TD,PD,DM,DX,NSPG,RFAC)
=1
SYS=1
YR=76
INTF=3
CENT=1
TD=0
PD=0
DM=0
DX=0
NSPG=2
RFAC=41
.
```

2.3 CELL (Unit Cell Parameters)

項目	属性	検索	説明
ID	I4	○	XDT用の参照番号
A	I4	×	$a \times 10^{P1}$ を整数化
B	I4	×	$b \times 10^{P2}$ を整数化
C	I4	×	$c \times 10^{P3}$ を整数化
ALF	I4	×	$\alpha \times 10^{P4}$ を整数化
BET	I4	×	$\beta \times 10^{P5}$ を整数化
GAM	I4	×	$r \times 10^{P6}$ を整数化
P1	I2	×	$a, \sigma(a)$ の指数
P2	I2	×	$b, \sigma(b)$ の指数
P3	I2	×	$c, \sigma(c)$ の指数
P4	I2	×	$\alpha, \sigma(\alpha)$ の指数
P5	I2	×	$\beta, \sigma(\beta)$ の指数
P6	I2	×	$r, \sigma(r)$ の指数
SA	I2	×	$\sigma(a) \times 10^{P1}$ を整数化
SB	I2	×	$\sigma(b) \times 10^{P2}$ を整数化
SC	I2	×	$\sigma(c) \times 10^{P3}$ を整数化
SALF	I2	×	$\sigma(\alpha) \times 10^{P4}$ を整数化
SBET	I2	×	$\sigma(\beta) \times 10^{P5}$ を整数化
SGAM	I2	×	$\sigma(r) \times 10^{P6}$ を整数化

表3. CELL

これは、IDからの検索しかできない。

例4. IDを指定して、他の項目全部を求める。

```
.CELL(32768,A,B,C,ALF,BET,GAM,P1,P2,P3,P4,P5,P6,SA,SB,SC,SALF,SBET,SGAM)
$A(A,B,C,ALF,BET,GAM,P1,P2,P3,P4,P5,P6,SA,SB,SC,SALF,SBET,SGAM)
-1
A=11372
B=10272
C=7359
ALF=10875
BET=7107
GAM=9616
P1=3
P2=3
P3=3
P4=2
P5=2
P6=2
SA=9
SB=5
SC=9
SALF=6
SBET=4
SGAM=8
.
```

2.4 SYMM (Symmetry Position)

項目	属性	検索	説明
ID	I4	○	XDT用の参照番号
OPER	I2	×	i 番目
COMPO	I4	×	i 番目の対称操作 ($r_{i1} + 1, r_{i2} + 1, r_{i3} + 1, t_i \times 12$ の整数化)

表4. SYMM

これも、IDからの検索しかできない。

例5. IDを指定して、他の項目を求める。

```
.SYMM(32768,OPER,COMPO)$A(OPER,COMPO)
=1
OPER=1
COMPO=621166944
```

2.5 ATOMC (Atomic Coordinate)

項目	属性	検索	説明
ID	I4	○	XDT用の参照番号
COORD	I2	×	i 番目
ELEM	I2	×	元素の原子番号 (例. C12AのCの原子番号6)
ALAB1	I2	×	例. C12Aの12 (数値)の部分
ALAB2	I2	×	例. C12AのA (数値の後の文字)の部分
X	I4	×	$x/a \times 100000$ の整数化
Y	I4	×	$y/b \times 100000$ の整数化
Z	I4	×	$z/c \times 100000$ の整数化

表5. ATOMC

これも、IDからの検索しかできない。

例6. IDを指定して、他の項目を求める。

```
.ATOMC(32768,COORD,ELEM,ALAB1,ALAB2,X,Y,Z)$A(COORD,ELEM,ALAB1,ALAB2,X,Y,Z)
=1
COORD=35
ELEM=1
ALAB1=203
ALAB2=16448
X=-41300
Y=-52500
Z=24300
=2
COORD=34
ELEM=1
ALAB1=202
ALAB2=16448
X=-32900
Y=-45100
Z=37400
```

(中 略)

```

=34
COORD=2
ELEM=17
ALAB1=2
ALAB2=16448
X=-64070
Y=-30840
Z=32700
=35
COORD=1
ELEM=17
ALAB1=1
ALAB2=16448
X=-33550
Y=9980
Z=10610
.
    
```

2.6 ATOMP (Atom Properties)

項目	属性	検索	説明
ID	I 4	○	XDT用の参照番号
ATOM	I 2	○	原子の数
APN	I 4	○	$ELEM \times 10^4 + NCA \times 10^3 + NH \times 10^2 + NCH + 50$

表 6. ATOMP

APNの説明の式の中で、ELEMは原子番号、NCAは水素以外の結合原子数、NHは結合水素原子数、NCHはイオン化の程度（0は中性、-1は-1価、+2は+2価のイオン等）を表わしている。

$>C-N^+H_3$ の場合は、ELEM=7、NCA=1、NH=3、NCH=+1であるので、APN=71351となる。

例 7. IDを指定して、他の項目を求める。

```

.ATOMP(32768,ATOM,APN)$A(ATOM,APN)
=1
ATOM=23
APN=62150
=2
ATOM=22
APN=171050
=3
ATOM=21
APN=62150
    
```

（中 略）

```

=21
ATOM=3
APN=73050
=22
ATOM=2
APN=73050
=23
ATOM=1
APN=63050
.
    
```

2.7 BOND(Bond Properties)

項目	属性	検索	説明
ID	I4	○	XDT用の参照番号
BPN	I4	○	$(NB+50) \times 10^6 + ELEM1 \times 10^3 + ELEM2$

表7. BOND

BPNの説明の式の中で、ELEM1、ELEM2は結合している原子の通し番号であり、NBは結合状態を表わしている。

$$NB = \begin{cases} \pm 1 & \text{single bond or metal-ligand } \sigma\text{-bond} \\ \pm 2 & \text{double bond} \\ \pm 3 & \text{triple bond} \\ - 5 & \text{aromatic bond} \\ \pm 7 & \text{delocalised double bond} \\ + 9 & \text{metal-ligand } \pi\text{-bond} \end{cases}$$

ただし、+ は acyclic bond であり、
- は cyclic bond である。

$>C-N^+H_3$ で、Cの通し番号が1、Nの通し番号が8であれば、ELEM1=1、ELEM2=8、NB=1であるので、BPN=51001008となる。

例8. IDを指定して、BPNを求める。

```
.BOND(32768,BPN) $A(BPN)
=1
BPN=52010014
=2
BPN=52008012
=3
BPN=52007011
=4
BPN=51018022
```

(中 略)

```
=21
BPN=45018021
=22
BPN=45017019
=23
BPN=45016018
=24
BPN=45016017
.
```

2.8 BIB(Bibliographic Information)

項目	属性	検索	説明
ID	I 4	○	XDT用の参照番号
CN	C 4 0 0	×	化合物名
MF	C 1 6 0	×	分子式
BI	C 4 0 0	×	書誌情報
CO	I 2	○	誌名コード(付録2,3)
YR	I 2	○	論文発表年(下2桁のみ)

表8. BIB

CO, YRは検索に, CN, MF, BIは出力に使用される.

例9. IDを指定し, 他の項目を求める.

```
.BIB(32768,CN,MF,BI,CO,YR)$A(CN,MF,BI,CO,YR)
=1
CN=4-ACETOAMIDO-3-(1-ACETYL-2-(2,6-DICHLOROBENZYLIDENE)HYDRAZINE)-1,2,3-TRIAZOLE
MF=C13 H12 CL2 N6 O2
BI=P.-E.WERNER: CRYST.STRUCT.COMMUN.,5,873,1976,9.32.43
CO=189
YR=76
.
```

2.9 CLASS(Chemical Classification)

項目	属性	検索	説明
ID	I 4	○	XDT用の参照番号
CL	I 2	○	化合物クラス(付録4)

表9. CLASS

CLは検索に使用される.

例10. IDを指定して, CLを求める.

```
.CLASS(32768,CL)$A(CL)
=1
CL=32
=2
CL=9
.
```

2.10 KY(Keyword)

項目	属性	検索	説明
ID	I 4	○	XDT用の参照番号
KW	C 5 0	○	化合物名のキーワード

表10. KY

研究開発

KWは非常に良く検索に使用される。

例 11. IDを指定して、KWを求める。

```
.KY(32768,KW) $A(KW)
=1
KW=YLIDENE
=2
KW=YLIDE
=3
KW=YL
=4
KW=TRIAZOLE
=5
KW=NE
=6
KW=IDE
=7
KW=HYDRAZINE
=8
KW=ET
=9
KW=DICHLOROBENZYLIDENE
=10
KW=DICHLORO
=11
KW=DI
=12
KW=CHLOROBENZ
=13
KW=CHLORO
=14
KW=BENZYL
=15
KW=BENZ
=16
KW=AMIDO
=17
KW=ACETYL
=18
KW=ACETOAMIDO
=19
KW=ACETO
=20
KW=ACET
=21
KW=AC
.
```

例 11 を見れば、化合物名をどのようなキーワードに分割されているかが、理解されるであろう。

XDTではキーワードによって化合物が検索できるように表 11 のような KY という名前の表がつくられている。表を構成する第 1 番目の項目は参照番号と呼ばれるもので、これは CDCC データベースに登録されているデータを一意に識別するために、XDT 内部でつけた番号である。なお、CDCC データベースにおけるデータの登録は物質単位ではなく、“1つの物質の1つの解析結果”を単位としている。この単位をエントリと呼ぶ。参照番号とエントリは 1 対 1 に対応している。表 KY の 2 番目の要素は化合物のキーワードである。化合物の名称は、検索者が化合物の正式名を完全に知ってなくても検索できるように、一式の方式に従っていくつかの断片に分割されている。この断片のことを化合物のキーワード、又は単にキーワードという。そのため、1つのエントリ(参照番号)に対して一般には複数のキーワードが対応する。

参 照 番 号	キ ー ワ ー ド
7 1 2 7 0 4 0 0	ANHYDRO
7 1 2 7 0 4 0 0	BENZOYL
⋮	⋮
7 1 2 7 0 4 0 0	XYLITOL
⋮	⋮
9 4 3 5 5 4 5 6 0	XYLITOL
9 4 3 5 5 4 5 6 0	ORTHORHOMBIC
9 4 3 5 5 4 5 6 0	FORM
⋮	⋮

表 11. キーワード

2.11 AUTH(Author)

項 目	属 性	検 索	説 明
ID	I 4	○	XDT用の参照番号
AU	C 3 0	○	著者名

表 12. AUTH

AUは検索に用いられる。

例 12. IDを指定して，AUを求める。

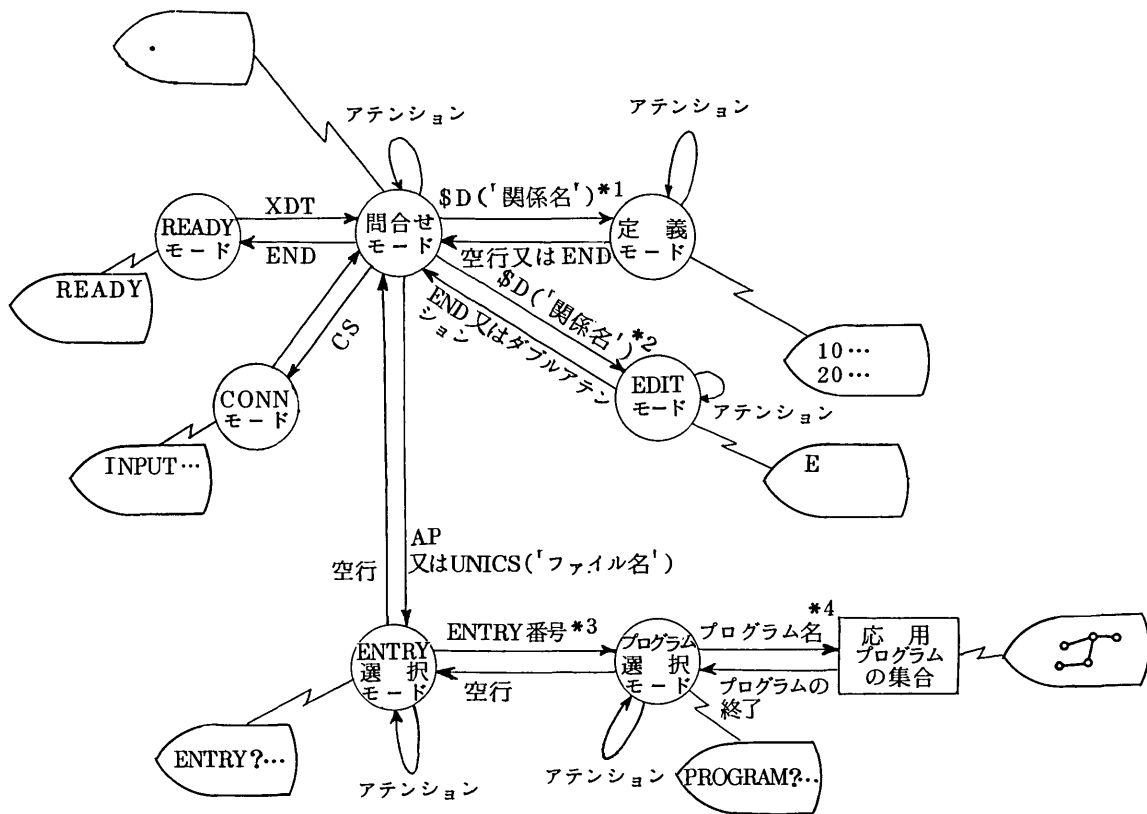
```
.AUTH(32768,AU)$A(AU)
=1
AU=WERNER,P.-E.
```

表 13にあるように著者名についても化合物名と同じような関係(表)AUがXDTの中につくられている。表 11の説明のキーワードを著者名と置き換えればよい。

参 照 番 号	著 者 名
7 1 2 7 0 4 0 0	LUGER, P.
7 1 2 7 0 4 0 0	KOTHE, E.
⋮	⋮
9 4 3 5 5 4 5 6 0	KIM, H. S.
9 4 3 5 5 4 5 6 0	JEFFREY, G. A.
⋮	⋮

表 13. 著 者 名

3. XDTのモード



- * 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のモード

3.1 READYモード

XDTを起動するためには、まずTSSのセッションを開始するLOGONコマンドを入力してREADYモードにしなければならない。

```
LOGON TSS F0564
+ PASSWORD ?
#####
KDS70001I F0564      LAST ACCESS AT 16:43:17 ON 83.259
KEQ56455I F0564 LOGON IN PROGRESS AT 10:10:53 ON SEPTEMBER 24, 1983
JOB NO = TSU9367 CN(01)
KEQ56951I NO BROADCAST MESSAGES
READY
```

そして、XDTを終り、TSSのセッションを終了するためには、LOGOFFコマンドを入力しなければならない。

```
LOGOFF
RETURN CODE : 0000
THE 100 PERCENT OF YOUR INITIAL FUND( 150,000YEN) IS USED UP
KEQ56470I F0564 LOGGED OFF AT 11:29:06 ON SEPTEMBER 24, 1983+
KEQ54100I SESSION ENDED
```

3.2 問合せモード

READYモードからXDTコマンドを入力すると、問合せモードとなり、促進記号として、.(ピリオド)が出る。

```
READY
XDT
=T
.
```

そして、ENDコマンドを入力すると、XDTを終り、READYモードになる。

```
.END
READY
```

3.3 定義モード

問合せモードで\$D(▼関係名▼)を入力すると、新規の関係名の場合は、定義モードとなり、行番号が出る。そこで、次のような仮想関係を定義することができる。そして、空行を入力するとEDITモードとなり、END Sを入力すると問合せモードとなる。

```
.$D('PREKY')
=T
INPUT
00010 GLOBAL REF
00020 $PR('KY',PREFIX,ID),REF(ID,RF)->PREKY(PREFIX,RF)
00030 _ *
E
END S
KEQ52460I SAVED IN DATA SET 'F0564.$$$TSUNO.TEXT(PREKY)'
```

* _ は空行入力を示している。

研究開発

3.4 EDITモード

問合せモードで\$D(▼関係名▼)を入力すると、既存の関係名の場合は、EDITモードとなり、Eが出る。そこで、次のようにして仮想関係を修正することができる。そして、END Sを入力すると、問合せモードとなる。

```
.$D('PREKY')
=T
E
C 10 /REF/BIB/
E
C 20 /REF(ID,RF)/BIB(ID,CN,MF,BI,CO,YR)/
E
C 20 /RF/MF/
E
L
00010 GLOBAL BIB
00020 $PR('KY',PREFIX,ID),BIB(ID,CN,MF,BI,CO,YR)->PREKY(PREFIX,MF)
REQ52500I END OF DATA SET
E
END S
REQ52460I SAVED IN DATA SET 'F0564.$$$TSUNO.TEXT(PREKY)'
```

3.5 ENTRY選択モード

問合せモードで、AP又はUNICS(▼ファイル名▼)を入力すると、ENTRY選択モードとなり、ENTRY?が出る。

```
.AP
ENTRY?
```

そして、ENTRY選択モードで、空行を入力すると問合せモードとなる。

```
ENTRY? __
=T
.
```

3.6 プログラム選択モード

ENTRY選択モードで、希望するエントリ番号を入力すると、プログラム選択モードとなり、PROGRAM?が出る。そこで、OUT、DA80、PLUTO等の応用プログラムを起動できる状態となる。

```
ENTRY?1
PROGRAM?
```

そして、プログラム選択モードで、空行を入力するとENTRY選択モードとなる。

```
PROGRAM? __
ENTRY?
```

3.7 CONNモード

問合せモードで、CSを入力すると、CONNモードとなり、化学結合ファイル（CONN）の検索用プログラムCONNSEERが起動することになる。このCONNSEERは、CCDCデータベース付属のCONNSEERを書き直したのではなく、新規に河野が開発したものである。

```
•CS  
*** CONNSEER START ***
```

（ 中 略 ）

```
*** CONNSEER NORMAL END ***  
.
```

4. XDTの検索

4.1 情報検索型コマンドを用いた検索

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14に示す。

表14において項目名とは2.節のXDTの構築の表1～表12（表11を除く）の項目のことであり、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2.10でも求べたように“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。表14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。

なお、表14の情報検索型コマンドは4.2で述べる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。

表 14. 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]…… [△SET=集合名] ^{*3}	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。SETオペランドだけを指定すると現集合とSET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。SETオペランドだけを指定すると現集合とSETで指定した集合との間で集合和をとる。
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。SETオペランドだけを指定すると現集合とSETで指定した集合との間で集合差をとる。
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。

例 13. キーワードと著者名の頭の文字列（プレフィックス）からの検索

```
.FIND KW=XYLITOL
=2
.AND AU=KIM?
=1
.DISP CN MF BI
=1
CN=XYLITOL (ORTHORHOMBIC FORM)
MF=C5 H12 O5
BI=H.S.KIM,G.A.JEFFREY: ACTA CRYSTALLOGR.,SECT.B,25,2607,1969,1.45.16
.
```

例 14. キーワードの綴りを EXPAND コマンドで調べ、キーワードだけによる検索

```
.EXPAND KW=XYLI
1 XYLENOLATO
1 XYLENOXYDIPHENYLBUTADIYNE
1 XYLENYLIDENE
1 XYLERYTHRIN
1 XYLERYTHRININ
4 XYLIDENE
1 XYLIDIDE
1 XYLITANYLIDENE
2 XYLITOL
14 KYLO
1 XYLOBIOSE
.FIND KW=XYLI?
=8
.SAVE XYLI
.AND KW=ANHYDRO SET=XYLI
=1
.DISP CN MF BI
=1
CN=1,5-ANHYDRO-2,3,4-TRI-O-BENZOYL-XYLITOL
MF=C26 H22 O7
BI=P.LUGER,G.KOTHE,K.VANGEHR,H.PAULSEN,F.R.HEIKER: CARBOHYDR.RES.,68,207,1979,12.45.53
.
```

例 15. ケンブリッジ参照コードの綴りを EXPAND コマンドで調べ、ケンブリッジ参照コードだけによる検索

```
.EXPAND RF=AACANI10 SPAN=1
1 AABHTZ
1 AACANI10
1 AACFAZ
.FIND RF=AABHTZ
=1
.DISP CN MF BI
=1
CN=4-ACETOAMIDO-3-(1-ACETYL-2-(2,6-DICHLOROBENZYLIDENE)HYDRAZINE)-1,2,3-TRIAZOLE
MF=C13 H12 CL2 N6 O2
BI=P.-E.WERNER: CRYST.STRUCT.COMMUN.,5,873,1976,9.32.43
.
```

例 16. 化合物のケンブリッジ参照コードより、その化合物のすべての解析結果を求めた例

```
.FIND RF=FEROCE?
=17
.
```


MF=C13 H12 CL2 N6 O2
BI=P.-E.WERNER: CRYST.STRUCT.COMMUN.,5,873,1976,9.32.43

例 20. キーワードと化合物クラス(9)による検索

```
.KY(ID,'TRIAZOLE')CLASS(ID,9)BIB(ID,CN,MF,BI,CO,YR)$A(CN,MF,BI)
=1
CN=4-AMINO-3-(2,6-DICHLOROBENZYLIDENEHYDRAZINO)-5-METHYL-1,2,4-TRIAZOLE HYDROCHL
ORIDE
MF=C10 H11 CL2 N6 +, CL1 -
BI=P.-E.WERNER: CRYST.STRUCT.COMMUN.,6,69,1977,9.32.33
=2
CN=5-AMINO-1-BUTYL-3-(N-BUTYL-N',N'-DIBENZOYLHYDRAZINO)-1,2,4-TRIAZOLE
MF=C24 H30 N6 O2
BI=G.RECK,M.CZUGLER,L.PARKANYI,E.SAUER: CRYST.STRUCT.COMMUN.,10,565,1981,13.32.5
1
=3
CN=4-AMINO-3-(BETA-BENZOYLHYDRAZINO)-5-MERCAPTO-1,2,4-TRIAZOLE
MF=C9 H10 N6 O1 S1
BI=R.C.SECCOMBE,C.H.L.KENNARD:+J.CHEM.SOC.,PERKIN 2,,4,1973,5.32.11
=4
CN=4-ACETOAMIDO-3-(1-ACETYL-2-(2,6-DICHLOROBENZYLIDENE)HYDRAZINE)-1,2,3-TRIAZOLE
MF=C13 H12 CL2 N6 O2
BI=P.-E.WERNER: CRYST.STRUCT.COMMUN.,5,873,1976,9.32.43
```

例 21. キーワードと誌名コード(189)による検索

```
.KY(ID,'TRIAZOLE')BIB(ID,CN,MF,BI,189,YR)$A(CN,MF,BI)
=1
CN=SPIRO-(N-1--PHENYL-1,2,3-TRIAZOLE-5-ONE-4,9'-BICYCLO(6.1.0)NONANE)
MF=C16 H19 N3 O1
BI=C16 H20 N2, C6 CL4 O2
=2
CN=1-(2-MORPHOLINOETHYL)-1,2,4-TRIAZOLE DIHYDROCHLORIDE
MF=C8 H16 N4 O1 ++, 2(CL1 -)
BI=F.BAERT,L.DEVOS,J.-P.HENICHART,R.HOUSSIN,B.LABLANCHE: CRYST.STRUCT.COMMUN.,6,
511,1977,9.40.10
=3
CN=DICHLORO-BIS(1-ETHYL-1,2,4-TRIAZOLE)-COPPER(II)
MF=C8 H14 CL2 CU1 N6
BI=YU.L.SLOVOKHOTOV,YU.T.STRUCHKOV,A.S.POLINSKY,V.S.PSHEZHETSKY,T.G.ERMAKOVA: CR
YST.STRUCT.COMMUN.,10,577,1981,13.83.29
=4
CN=4-AMINO-3-(2,6-DICHLOROBENZYLIDENE-HYDRAZINO)-1,2,4-TRIAZOLE HYDROCHLORIDE TR
IHYDRATE
MF=C9 H9 CL2 N6 +, CL1 -, 3(H2 O1)
BI=L.GOTHE,S.SALOME,P.-E.WERNER: CRYST.STRUCT.COMMUN.,8,1,1979,11.32.10
=5
CN=4-AMINO-3-(2,6-DICHLOROBENZYLIDENEHYDRAZINO)-5-METHYL-1,2,4-TRIAZOLE HYDROCHL
ORIDE
MF=C10 H11 CL2 N6 +, CL1 -
BI=P.-E.WERNER: CRYST.STRUCT.COMMUN.,6,69,1977,9.32.33
=6
CN=5-AMINO-1-BUTYL-3-(N-BUTYL-N',N'-DIBENZOYLHYDRAZINO)-1,2,4-TRIAZOLE
MF=C24 H30 N6 O2
BI=G.RECK,M.CZUGLER,L.PARKANYI,E.SAUER: CRYST.STRUCT.COMMUN.,10,565,1981,13.32.5
1
=7
CN=4-ACETOAMIDO-3-(1-ACETYL-2-(2,6-DICHLOROBENZYLIDENE)HYDRAZINE)-1,2,3-TRIAZOLE
MF=C13 H12 CL2 N6 O2
BI=P.-E.WERNER: CRYST.STRUCT.COMMUN.,5,873,1976,9.32.43
```

例 2.2. キーワードと論文発表年(1976)による検索

```

.KY(ID,'TRIAZOLE')BIB(ID,CN,MF,BI,CO,76)$A(CN,MF,BI)
=1
CN=VIRAZOLE (FORM V2)
MF=C8 H12 N4 O5
BI=P.PRUSINER,M.SUNDARALINGAM: ACTA CRYSTALLOGR.,SECT.B,32,419,1976,8.47.2
=2
CN=VIRAZOLE (FORM V1)
MF=C8 H12 N4 O5
BI=P.PRUSINER,M.SUNDARALINGAM: ACTA CRYSTALLOGR.,SECT.B,32,419,1976,8.47.1
=3
CN=5-PHENYL-1,2,3,4-THIATRIAZOLE 3-OXIDE (AT -165 DEG.C)
MF=C7 H5 N3 O1 S1
BI=T.OTTERSEN: ACTA CHEM.SCAND.SER.A,30,351,1976,9.41.10
=4
CN=2-(3',4'-DI-O-ACETYL-2'-DEOXY-BETA-L-ERYTHRO-PENTAPYRANOSYL)-5,6-DIMETHYLBENZ
OTRIAZOLE
MF=C17 H21 N3 O5
BI=J.LOPEZ DE LERMA,F.H.CANO,S.GARCIA-BLANCO,M.MARTINEZ-RIPOLL: ACTA CRYSTALLOGR
.,SECT.B,32,3019,1976,9.47.36
=5
CN=5-PHENYL-1,2,3,4-THIATRIAZOLE
MF=C7 H5 N3 S1
BI=T.OTTERSEN: ACTA CHEM.SCAND.SER.A,30,351,1976,9.41.11
=6
CN=5-MESYLAMINO-2H-1,2,3-TRIAZOLE-4-CARBONITRILE MONOHYDRATE
MF=C4 H5 N5 O2 S1, H2 O1
BI=A.KALMAN,L.PARKANYI,J.SCHAWARTZ,K.SIMON: ACTA CRYSTALLOGR.,SECT.B,32,2245,197
6,8.32.3
=7
CN=4-AMINO-3-(2-AMINOPHENYL)-4H-1,2,4-TRIAZOLE
MF=C8 H9 N5
BI=C.H.STAM,H.C.VAN DER PLAS: ACTA CRYSTALLOGR.,SECT.B,32,1288,1976,8.32.8
=8
CN=4-ACETOAMIDO-3-(1-ACETYL-2-(2,6-DICHLOROBENZYLIDENE)HYDRAZINE)-1,2,3-TRIAZOLE
MF=C13 H12 CL2 N6 O2
BI=P.-E.WERNER: CRYST.STRUCT.COMMUN.,5,873,1976,9.32.43
.

```

ここに示した例は、一部の例でしかなく、色々な関数名をうまく組み合わせることによって、もっと複雑な検索も可能であると思われる。

4.3 プレフィックス関係名(\$PR)を用いた検索

4.1 情報検索型コマンドを用いた検索では、プレフィックス(著者名等の頭の文字列)であることを示すために、KIM?やXYLI?のように?をつけた。しかし、関係名を用いた検索ではプレフィックス関係名\$PRが用意されている。以下に、その例を示す。

```
$PR('AUTH','KIM',ID)
```

関係名 KIM? 参照番号

(AUの値)

この関係は、関係名AUTHの項目AUの値KIMがプレフィックスであり、それから項目IDを検索することを表わしている。

例 2.3. 例 1.3 を \$PR を用いて実行した例

```
. $PR('AUTH','KIM',ID)KY(ID,'XYLITOL')BIB(ID,CN,MF,BI,CO,YR)$A(CN,MF,BI)
=1
CN=XYLITOL (ORTHORHOMBIC FORM)
MF=C5 H12 O5
BI=H.S.KIM,G.A.JEFFREY: ACTA CRYSTALLOGR., SECT.B, 25, 2607, 1969, 1.45.16
.
```

例 2.4. 例 1.4 の EXPAND 後を, \$PR を用いて実行した例

```
. $PR('KY','XYLI',ID)KY(ID,'ANHYDRO')BIB(ID,CN,MF,BI,CO,YR)$A(CN,MF,BI)
=1
CN=1, 5-ANHYDRO-2, 3, 4-TRI-O-BENZOYL-XYLITOL
MF=C26 H22 O7
BI=P.LUGER,G.KOTHE,K.VANGEHR,H.PAULSEN,F.R.HEIKER: CARBOHYDR.RES., 68, 207, 1979, 12.45.53
.
```

4.4 仮想関係名を用いた検索

3.3 定義モードで仮想関係 PREKY を定義したが, これを実行すると次の結果が得られる.

```
. PREKY('XYLI',RF)$A(RF)
=1
RF=XYLTOL
=2
RF=OXYWGM
=3
RF=OXYLDW
=4
RF=MSXYNI
=5
RF=LIPFAZ
=6
RF=EAPMXY10
=7
RF=BINHEL
=8
RF=ATBXYL10
.
```

これは, 次のことと同じである.

```
. $PR('KY','XYLI',ID)REF(ID,RF)$A(RF)
=1
RF=XYLTOL
=2
RF=OXYWGM
=3
RF=OXYLDW
=4
RF=MSXYNI
=5
RF=LIPFAZ
=6
RF=EAPMXY10
=7
RF=BINHEL
=8
RF=ATBXYL10
.
```

つまり, \$PR と REF という 2 つの関係名との関係式を, PREKY という 1 つの仮想関係名に置きかえたのである. GLOBAL REF というのは, すでに定義済みの関係 REF であることを示している.

3.4 EDITモードで修正定義された仮想関係PREKYを実行すると、次の結果が得られる。

```
.PREKY('XYLI',MF)$A(MF)
=1
MF=C5 H12 O5
=2
MF=C48 H64 MG1 O6 W2
=3
MF=C24 H24 W1
=4
MF=C24 H34 NB1 SI2
=5
MF=C30 H35 F2 N3 O1
=6
MF=C10 H20 N1 O5 P1
=7
MF=C56 H96 SI8 SN4
=8
MF=C26 H22 O7
.
```

これは、次のことと同じである。

```
.$PR('KY','XYLI',ID)BIB(ID,CN,MF,BI,CO,YR)$A(MF)
=1
MF=C5 H12 O5
=2
MF=C48 H64 MG1 O6 W2
=3
MF=C24 H24 W1
=4
MF=C24 H34 NB1 SI2
=5
MF=C30 H35 F2 N3 O1
=6
MF=C10 H20 N1 O5 P1
=7
MF=C56 H96 SI8 SN4
=8
MF=C26 H22 O7
.
```

このように、仮想関係を用いるとプレフィックスの取扱いや多くの関係名を用いた複雑な検索が容易になる。

なお、仮想関係を保存するには `.$S(▼SAVE. DATA▼)` とし、それを復元して使用するには `.$L(▼SAVE. DATA▼)` とすればよい。

4.5 CONNモードを用いた検索

4.5.1 プログラムCONNSEERの概要

プログラムは次の5つの検索より構成されている。

(1) 第1次検索

入力データのAPNと同種のAPNを持つものを選び出す。ただし、検索途中で件数が5個以下になったら、検索結果を出力して終る。また、件数が100個以下になったら、第2次検索に進む。

(2) 第2次検索

入力データのAPNと同種のAPNを、入力データ以上に含み、そして入力データのBPNと同種のBPNを、入力データ以上に含むものを選び出す。ただし、検索件数が0の場合は、第1次検索の結果の中から最初の10個を出力して終る。また、件数が5個以下になったら検索結果を出力

して終る。

(3) 第3次検索

入力データの結合している APN_i-APN_j の組と同じ組(APN_i-APN_j 又は APN_j-APN_i)を持つものを選び出す。ただし、検索件数が0の場合は、第2次検索の結果の中から始めの10個を出力して終る。また、件数が5個以下になったら、検索結果を出力して終る。

(4) 第4次検索

入力データより、次の結合マトリックス[9]を作る。

表15. 結合マトリックス

	APN_1	APN_2	APN_n
APN_1	0	NB_{12}	NB_{1n}
APN_2	NB_{21}	0	NB_{2n}
\vdots	\vdots	\vdots	0	\vdots
APN_n	NB_{n1}	NB_{n2}	0

$$NB_{ij} = \begin{cases} 0 \dots \text{結合していない.} \\ 1 \dots \text{結合している.} \end{cases}$$

ただし、 $NB_{ij} = NB_{ji}$

この結合マトリックスと同じマトリックスを持つものを選び出す。ただし、検索件数が0の場合は、第3次検索の結果の中から始めの10個を出力して終る。また、件数が10個以下になったら、検索結果を出力して終る。

(5) 第5次検索

第4次検索の結合マトリックスの NB_{ij} に、入力したBPNのNBを使用し、この結合マトリックスと同じマトリックスを持つものを選び出す。ただし、検索件数が0の場合は、第4次検索の結果の中から始めの10個を出力して終る。また、検索件数が20個以下のときは全部出力し、20個以上の場合は始めの20個を出力して終る。

4.5.2 入力データ

(1) ATOM, NCA, NH, NCH (A2, 3I2)

ATOM : 原子名 (C, N, O, H, NA等)

NCA : 結合している原子の数 (水素を除く)

NH : 結合している水素原子の数

NCH : イオン化の程度 (0 : 中性, -1 : -1価イオン, +2 : +2価イオン等)

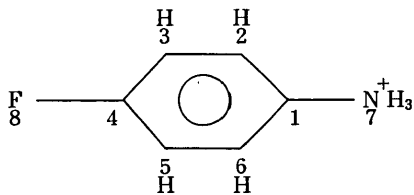
(2) IAT, JAT, NB (3I2)

IAT, JAT : IAT番目とJAT番目の原子が結合している

NB : 結合状態 (2.7 BOND 参照)

4.5.3 検索例

(1) PARA-HALLOGENO(F) ANILINES



原子に図のような通し番号を適当につけ，次のような入力データを作成する [10, 11] .

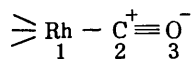
AT1	C	3	0	0	BO1	1	2-5
AT2	C	2	1	0	BO2	2	3-5
AT3	C	2	1	0	BO3	3	4-5
AT4	C	3	0	0	BO4	4	5-5
AT5	C	2	1	0	BO5	5	6-5
AT6	C	2	1	0	BO6	6	1-5
AT7	N	1	3	1	BO7	1	7 1
AT8	F	1	0	0	BO8	4	8 1
		0	0	0		0	0 0

次に、データを見ながら、端末よりデータを入力し、検索を行う。

```
.CS
*** CONNSER START ***
INPUT FROM TERMINAL? (YES/NO)Y
OUTPUT TO PRINTER? (YES/NO)N
INPUT ATOM,NCA,NH,NCH
C 3 0 0
INPUT ATOM,NCA,NH,NCH
C 2 1 0
INPUT ATOM,NCA,NH,NCH
C 2 1 0
INPUT ATOM,NCA,NH,NCH
C 3 0 0
INPUT ATOM,NCA,NH,NCH
C 2 1 0
INPUT ATOM,NCA,NH,NCH
C 2 1 0
INPUT ATOM,NCA,NH,NCH
N 1 3 1
INPUT ATOM,NCA,NH,NCH
F 1 0 0
INPUT ATOM,NCA,NH,NCH
0 0 0
INPUT IAT,JAT,NB
1 2-5
INPUT IAT,JAT,NB
2 3-5
INPUT IAT,JAT,NB
3 4-5
INPUT IAT,JAT,NB
4 5-5
INPUT IAT,JAT,NB
5 6-5
INPUT IAT,JAT,NB
6 1-5
INPUT IAT,JAT,NB
1 7 1
INPUT IAT,JAT,NB
4 8 1
INPUT IAT,JAT,NB
0 0 0
** 1ST RETRIEVE **
NO. 1: APN= 91050
1906 COMPOUND(S) FOUND
NO. 2: APN= 71351
704 COMPOUND(S) FOUND
** MEET **
18 COMPOUND(S) FOUND
** 2ND RETRIEVE **
10 COMPOUND(S) FOUND
** 3RD RETRIEVE **
1 COMPOUND(S) FOUND
N= 1
ID NUMBER= 57573376
REF. CODE=ANLCLA
*** CONNSER NORMAL END ***
```

研究開発

(2) RH CARBONYLS (BRIDGED)



原子に適当な通し番号をつけ，次のような入力データを作成する。

AT1	RH	4*	0	0	BO1	1	2	1
AT2	C	2	0	1	BO2	2	3	3
AT3	O	1	0-1			0	0	0
		0	0	0				

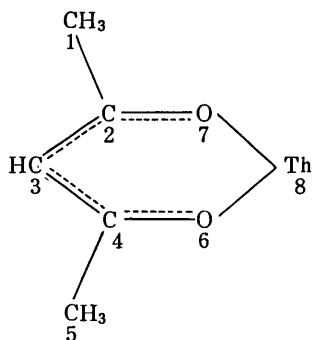
次に，データを見ながら，端末よりデータを入力し，検索を行う。

```
.CS
*** CONNSER START ***
INPUT FROM TERMINAL? (YES/NO) Y
OUTPUT TO PRINTER? (YES/NO) N
INPUT ATOM,NCA,NH,NCH
RH 4 0 0
INPUT ATOM,NCA,NH,NCH
C 2 0 1
INPUT ATOM,NCA,NH,NCH
O 1 0-1
INPUT ATOM,NCA,NH,NCH

INPUT IAT,JAT,NB
1 2 1
INPUT IAT,JAT,NB
2 3 3
INPUT IAT,JAT,NB
0 0 0
** 1ST RETRIEVE **
NO. 1: APN= 454050
      129 COMPOUND(S) FOUND
NO. 2: APN= 81049
      3502 COMPOUND(S) FOUND
** MEET **
      7 COMPOUND(S) FOUND
** 2ND RETRIEVE **
      5 COMPOUND(S) FOUND
N= 1
ID NUMBER= 260014080
REF. CODE=CCAPRH
N= 2
ID NUMBER= 389087232
REF. CODE=DCPDRH
N= 3
ID NUMBER= 390103040
REF. CODE=DCRHPA
N= 4
ID NUMBER= 574783488
REF. CODE=ICPFRH10
N= 5
ID NUMBER= 801472512
REF. CODE=PASMRH
*** CONNSER NORMAL END ***
```

* 結合原子数が不明なときは，値を色々変えて検索する必要がある。

(3) ACETYLACETONATES OF TH



原子に適当な通し番号をつけ，次のような入力データを作成する。

AT1	C	1	3	0	BO1	1	2	1
AT2	C	3	0	0	BO2	2	3-7	
AT3	C	2	1	0	BO3	3	4-7	
AT4	C	3	0	0	BO4	4	5	1
AT5	C	1	3	0	BO5	4	6-7	
AT6	O	2	0	0	BO6	6	8-1	
AT7	O	2	0	0	BO7	2	7-7	
AT8	TH	8	0	0	BO8	7	8-1	
		0	0	0		0	0	0

研究開発

次に、PO. DATA (CONN) に入力データを入力する。

```
E PO(CONN) NEW DATA
INPUT
00010 C 1 3 0
00020 C 3 0 0
00030 C 2 1 0
00040 C 3 0 0
00050 C 1 3 0
00060 O 2 0 0
00070 O 2 0 0
00080 TH 8 0 0
00090 0 0 0
00100 1 2 1
00110 2 3-7
00120 3 4-7
00130 4 5 1
00140 4 6-7
00150 6 8-1
00160 2 7-7
00170 7 8-1
00180 0 0 0
00190 -
E
END S
KEQ52460I SAVED IN DATA SET 'F0564.PO.DATA(CONN)'
READY
```

そして、検索する。

```
.CS
*** CONNSER START ***
INPUT FROM TERMINAL? (YES/NO)N *
OUTPUT TO PRINTER? (YES/NO)N
** 1ST RETRIEVE **
NO. 1: APN= 908050
13 COMPOUND(S) FOUND
** 2ND RETRIEVE **
2 COMPOUND(S) FOUND
N= 1
ID NUMBER= 5341184
REF. CODE=ACACTH
N= 2
ID NUMBER= 933953536
REF. CODE=TACTHB
*** CONNSER NORMAL END ***
```

* Nを入力すると、入力データをPO. DATA (CONN) よりよみこむ。

5. XDTの出力

5.1 情報検索型コマンドを用いた出力

4.1 情報検索型コマンドを用いた検索の例にあるように、DISPコマンドが出力のためのコマンドであり、そのオペランドの項目名として使用されるのは、関係BIB、DATA、CELLの中にある項目名に限られる。

例 2.5. 関係BIBの場合

```
.F RF=AABHTZ
=1
.D CN MF BI CO
=1
CN=4-ACETOAMIDO-3-(1-ACETYL-2-(2,6-DICHLORO BENZYLIDENE) HYDRAZINE)-1,2,3-TRIAZOLE

MF=C13 H12 CL2 N6 O2
BI=P.-E.WERNER: CRYST.STRUCT.COMMUN.,5,873,1976,9.32.43
CO=189
.
```

例 2.6. 関係DATAの場合

```
.F RF=AABHTZ
=1
.D SYS INTF CENT DM DX NSPG RFAC
=1
SYS=1
INTF=3
CENT=1
DM=0
DX=0
NSPG=2
RFAC=41
.
```

例 2.7. 関係CELLの場合

```
.F RF=AABHTZ
=1
.D A B C ALF BET GAM
=1
A=11372
B=10272
C=7359
ALF=10875
BET=7107
GAM=9616
.
```

5.2 関係名を用いた出力

4.2 関係名を用いた検索, 4.3 プレフィックスを用いた検索, 4.4 仮想関係名を用いた検索の例にあるように, 関係名 \$A が出力のための関係名であり, すべての関係名と共に使用することができる. 情報検索型コマンド DISP で出力できない例を示しておく.

例 28. 関係 ATOMC の場合

```
.REF (ID, 'AABHTZ') ATOMC (ID, COORD, ELEM, ALAB1, ALAB2, X, Y, Z) $A (ELEM, ALAB1, X, Y, Z)
=1
ELEM=1
ALAB1=203
X=-41300
Y=-52500
Z=24300
=2
ELEM=1
ALAB1=202
X=-32900
Y=-45100
Z=37400
=3
ELEM=1
ALAB1=201
X=-31300
Y=-59800
Z=27500
```

[中 略]

```
=34
ELEM=17
ALAB1=2
X=-64070
Y=-30840
Z=32700
=35
ELEM=17
ALAB1=1
X=-33550
Y=9980
Z=10610
.
```

6. XDTの応用プログラム

6.1 応用プログラムの起動

3.5 プログラム選択モードで、応用プログラム名を入力すると、その応用プログラムが起動しその応用プログラムが終了したら、プログラム選択モードになる。

例 29. 応用プログラム OUT を実行した例

```
PROGRAM?OUT
OUTPUT DEVICE? (TERMINAL(T)/PRINTER(P)) T
OUT=0 : JOB IS OVER
OUT=1 : REFERENCE CODE
OUT=2 : SPACE GROUP
OUT=3 : LATTICE CONSTANT
OUT=4 : NUMBER OF EACH ATOM
OUT=5 : ATOMIC PARAMETERS
OUT=6 : INFORMATIONS (EXCLUDED ATOMIC PARAMETERS)
OUT=7 : ALL INFORMATIONS
OUT=8 : EXCLUDE H-ATOMS
OUT = 5
  N ATOM      ISF      X      Y      Z
  1 CL 1      1 -0.3355  0.0998  0.1061
  2 CL 2      1 -0.6407  -0.3084  0.3270
  3 C 1       2 -0.4775  0.0388  0.2307
  4 C 2       2 -0.5727  0.1337  0.3424
  5 C 3       2 -0.6845  0.0916  0.4483
  6 C 4       2 -0.7021  -0.0445  0.4447
  7 C 5       2 -0.6069  -0.1387  0.3295
  8 C 6       2 -0.4904  -0.1007  0.2181
  9 C 7       2 -0.3844  -0.1938  0.0886
 10 N 8       3 -0.3668  -0.2977  0.1351
 11 N 9       3 -0.2629  -0.3800  0.0099
 12 C 10      2 -0.1857  -0.3653  -0.1752
 13 N 11      3 -0.2196  -0.3859  -0.3347
 14 N 12      3 -0.1148  -0.3604  -0.4843
 15 C 13      2 -0.0254  -0.3256  -0.4060
 16 N 14      3 -0.0642  -0.3268  -0.2104
 17 N 15      3  0.0023  -0.2837  -0.0741
 18 C 16      2 -0.0305  -0.1606  0.0744
 19 C 17      2  0.0405  -0.1244  0.2215
 20 O 18      4 -0.1102  -0.0883  0.0793
 21 C 19      2 -0.2394  -0.4860  0.0718
 22 C 20      2 -0.3307  -0.5093  0.2548
 23 O 21      4 -0.1454  -0.5542  -0.0296
 24 H 2       5 -0.5580  0.2320  0.3470
 25 H 3       5 -0.7520  0.1570  0.5310
 26 H 4       5 -0.7840  -0.0780  0.5300
 27 H 7       5 -0.3260  -0.1750  -0.0320
 28 H 13      5  0.0570  -0.2960  -0.4690
 29 H 15      5  0.0460  -0.3400  -0.0570
 30 H 171     5  0.0810  -0.0360  0.2170
 31 H 172     5  0.1050  -0.1980  0.1890
 32 H 173     5 -0.0060  -0.1070  0.3330
 33 H 201     5 -0.3130  -0.5980  0.2750
 34 H 202     5 -0.3290  -0.4510  0.3740
 35 H 203     5 -0.4130  -0.5250  0.2430
OUT=0 : JOB IS OVER
OUT=1 : REFERENCE CODE
OUT=2 : SPACE GROUP
OUT=3 : LATTICE CONSTANT
OUT=4 : NUMBER OF EACH ATOM
OUT=5 : ATOMIC PARAMETERS
OUT=6 : INFORMATIONS (EXCLUDED ATOMIC PARAMETERS)
OUT=7 : ALL INFORMATIONS
OUT=8 : EXCLUDE H-ATOMS
OUT = 0
PROGRAM?
```

6.2 応用プログラムの説明

表16. 応用プログラム

プログラム名	内 容	Tektronix 4010
OUT	ケンブリッジ参照コード, 空間群, 格子定数, 各原子種の数, 原子座標の出力, 及び水素原子の削除	×
DA80	分子内の原子の結合距離と結合角, 結晶内の原子の結合距離及びねじれ角の計算	×
PLUTO	原子を点や円や球で表示した分子図やステレオ図の作図 (PLUTO78を書き直したプログラム)	○
PLOTP	原子を点で表示した分子図 (元素名付) やステレオ図 (元素名なし) の A, B, C 軸投影図の作図	○
PLOTDW	原子を点で表示した分子図 (元素名付) やステレオ図 (元素名なし) の特定な軸の投影図の作図 (画面の水平軸や垂直軸のまわりで回転可能)	○
PLOT80	原子を円で表示した結晶図 (A, B, C 軸投影) や分子図 (慣性モーメントの主軸 a, b, c 場投影) の作図	○
ORT80	原子を円で表示した結晶図 (A か B か C 軸投影) や分子図・ステレオ図 (a か b か c 軸投影) の作図	○
STR80	結晶図のステレオ図の作図	○

○…… 必要
×…… 不必要

応用プログラムは会話形式になっているので, コンピュータの指示通り入力すればよい。

Tektronix 4010 の欄が○のプログラムの場合は, 端末機として Tektronix 4010 シリーズグラフィック端末を使用し, 端末に作図させたり, またその図をレーザー・プリンタに出力させることができる。それらのプログラムはHCBSを使用しているので, 参考文献[15]を, またレーザー・プリンタへの出力はNLPを使用しているので, 参考文献[16]を参照していただきたい。

6.3 応用プログラムの使用例

OUTの使用例は, 例29にあるので, その他の代表的なプログラムDA80とPLUTOの使用例を以下に示す。

例30. DA80の使用例(分子内の結合距離と結合角)

PROGRAM?DA80
 OUTPUT DEVICE? (TERMINAL(T)/PRINTER(P)) T
 ANY CALCULATION? (MOLECULE(M)/XTAL(X)/TORSION ANGLE(T)) M
 <<< INTERATOMIC DISTANCES WITHIN A MOLECULE >>>

ATOM 1	ATOM 2	SYM	DIST
CL 1	- C 1	(1)	1.74
CL 2	- C 5	(1)	1.74
C 1	- CL 1	(1)	1.74
C 1	- C 2	(1)	1.39
C 1	- C 6	(1)	1.40
C 2	- C 1	(1)	1.39
C 2	- C 3	(1)	1.36
C 3	- C 2	(1)	1.36
C 3	- C 4	(1)	1.38
C 4	- C 3	(1)	1.38
C 4	- C 5	(1)	1.38
C 5	- CL 2	(1)	1.74
C 5	- C 4	(1)	1.38
C 5	- C 6	(1)	1.40
C 6	- C 1	(1)	1.40
C 6	- C 5	(1)	1.40
C 6	- C 7	(1)	1.48
C 7	- C 6	(1)	1.48
C 7	- N 8	(1)	1.27
N 8	- C 7	(1)	1.27
N 8	- N 9	(1)	1.40
N 9	- N 8	(1)	1.40
N 9	- C 10	(1)	1.40
N 9	- C 19	(1)	1.38
C 10	- N 9	(1)	1.40
C 10	- N 11	(1)	1.29
C 10	- N 14	(1)	1.36
N 11	- C 10	(1)	1.29
N 11	- N 12	(1)	1.40
N 12	- N 11	(1)	1.40
N 12	- C 13	(1)	1.29
C 13	- N 12	(1)	1.29
C 13	- N 14	(1)	1.36
N 14	- C 10	(1)	1.36
N 14	- C 13	(1)	1.36
N 14	- N 15	(1)	1.38
N 15	- N 14	(1)	1.38
N 15	- C 16	(1)	1.37
C 16	- N 15	(1)	1.37
C 16	- C 17	(1)	1.48
C 16	- O 18	(1)	1.21
C 17	- C 16	(1)	1.48
O 18	- C 16	(1)	1.21
C 19	- N 9	(1)	1.38
C 19	- C 20	(1)	1.48
C 19	- O 21	(1)	1.22
C 20	- C 19	(1)	1.48
O 21	- C 19	(1)	1.22

ATOM 2 (SM)	-	ATOM 1	-	ATOM 3 (SM)	ANGLE
CL 1	(1)	- C 1	-	C 2 (1)	117.37
CL 1	(1)	- C 1	-	C 6 (1)	119.48
C 2	(1)	- C 1	-	C 6 (1)	123.14
C 1	(1)	- C 2	-	C 3 (1)	119.52
C 2	(1)	- C 3	-	C 4 (1)	120.00
C 3	(1)	- C 4	-	C 5 (1)	119.85
CL 2	(1)	- C 5	-	C 4 (1)	116.21
CL 2	(1)	- C 5	-	C 6 (1)	121.43
C 4	(1)	- C 5	-	C 6 (1)	122.35
C 1	(1)	- C 6	-	C 5 (1)	115.12
C 1	(1)	- C 6	-	C 7 (1)	118.64
C 5	(1)	- C 6	-	C 7 (1)	126.22
C 6	(1)	- C 7	-	N 8 (1)	120.07
C 7	(1)	- N 8	-	N 9 (1)	117.52
N 8	(1)	- N 9	-	C 10 (1)	124.44
N 8	(1)	- N 9	-	C 19 (1)	116.72
C 10	(1)	- N 9	-	C 19 (1)	118.78
N 9	(1)	- C 10	-	N 11 (1)	125.28
N 9	(1)	- C 10	-	N 14 (1)	123.94
N 11	(1)	- C 10	-	N 14 (1)	110.78
C 10	(1)	- N 11	-	N 12 (1)	106.68

研究 開 発

```

N 11 ( 1)- N 12 - C 13 ( 1) 107.18
N 12 ( 1)- C 13 - N 14 ( 1) 110.75
C 10 ( 1)- N 14 - C 13 ( 1) 104.62
C 10 ( 1)- N 14 - N 15 ( 1) 128.05
C 13 ( 1)- N 14 - N 15 ( 1) 126.99
N 14 ( 1)- N 15 - C 16 ( 1) 117.42
N 15 ( 1)- C 16 - C 17 ( 1) 114.42
N 15 ( 1)- C 16 - O 18 ( 1) 121.35
C 17 ( 1)- C 16 - O 18 ( 1) 124.22
N 9 ( 1)- C 19 - C 20 ( 1) 117.58
N 9 ( 1)- C 19 - O 21 ( 1) 117.66
C 20 ( 1)- C 19 - O 21 ( 1) 124.75
PROGRAM?

```

例 31. DA80 の使用例 (ねじれ角)

```

PROGRAM?DA80
OUTPUT DEVICE? (TERMINAL(T)/PRINTER(P)) T
ANY CALCULATION? (MOLECULE(M)/XTAL(X)/TORSION ANGLE(T)) T
<<< INTERATOMIC DISTANCES IN THE CRYSTAL >>>
TORSION ANGLES IN DEGREES
LOOKING FROM ATOM 2 TO ATOM 3
THE CLOCKWISE ROTATION OF BOND 3-4
WITH REFERENCE FOR BOND 2-1 IS GIVEN
CL 1 - C 1 - C 2 - C 3 -177.812
C 6 - C 1 - C 2 - C 3 0.883
CL 1 - C 1 - C 6 - C 5 177.815
CL 1 - C 1 - C 6 - C 7 -3.571
C 2 - C 1 - C 6 - C 5 -0.855
C 2 - C 1 - C 6 - C 7 177.759
C 1 - C 2 - C 3 - C 4 0.339
C 2 - C 3 - C 4 - C 5 -1.510
C 3 - C 4 - C 5 - CL 2 -177.408
C 3 - C 4 - C 5 - C 6 1.539
CL 2 - C 5 - C 6 - C 1 178.532
CL 2 - C 5 - C 6 - C 7 0.040
C 4 - C 5 - C 6 - C 1 -0.360
C 4 - C 5 - C 6 - C 7 -178.853
C 1 - C 6 - C 7 - N 8 148.701
C 5 - C 6 - C 7 - N 8 -32.854
C 6 - C 7 - N 8 - N 9 -178.243
C 7 - N 8 - N 9 - C 10 -7.880
C 7 - N 8 - N 9 - C 19 174.856
N 8 - N 9 - C 10 - N 11 -65.184
N 8 - N 9 - C 10 - N 14 114.660
C 19 - N 9 - C 10 - N 11 112.027
C 19 - N 9 - C 10 - N 14 -68.129
N 8 - N 9 - C 19 - C 20 4.521
N 8 - N 9 - C 19 - O 21 -176.099
C 10 - N 9 - C 19 - C 20 -172.904
C 10 - N 9 - C 19 - O 21 6.476
N 9 - C 10 - N 11 - N 12 -179.825
N 14 - C 10 - N 11 - N 12 0.313
N 9 - C 10 - N 14 - C 13 179.986
N 9 - C 10 - N 14 - N 15 -6.430
N 11 - C 10 - N 14 - C 13 -0.150
N 11 - C 10 - N 14 - N 15 173.434
C 10 - N 11 - N 12 - C 13 -0.364
N 11 - N 12 - C 13 - N 14 0.278
N 12 - C 13 - N 14 - C 10 -0.092
N 12 - C 13 - N 14 - N 15 -173.766
C 10 - N 14 - N 15 - C 16 -66.886
C 13 - N 14 - N 15 - C 16 105.333
N 14 - N 15 - C 16 - C 17 176.973
N 14 - N 15 - C 16 - O 18 -4.119
PROGRAM?

```

例 3.2. PLUTO の使用例 (端末への出力)

READY モードから全部示しておく。

```

READY
XDT
=T
.F RF=AABHTZ
=1
.AP
ENTRY?1
PROGRAM?PLUTO
OUTPUT DEVICE? (TERMINAL(T)/LASER-PRINTER(L))T
START OF TAPE
MODE/OPTION?2
OPTION?E
OPTION?C
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
OPTION?E
OPTION?C
    
```

[図 2 を表示]

```

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 3 を表示]

```

OPTION?Q
SHAPE OF ATOM? (POINT(P)/CIRCLE(C)/SPHERE(S))_
*** NPLT START ***
*** NPLT NOMAL END ***
PROGRAM? _
ENTRY? _
=T
.END
READY
    
```

AABHTZ

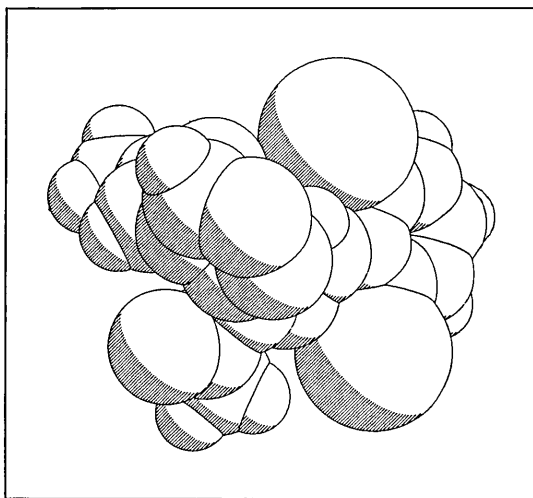


図 3. AABHTZ (原子を球で表示)

AABHTZ

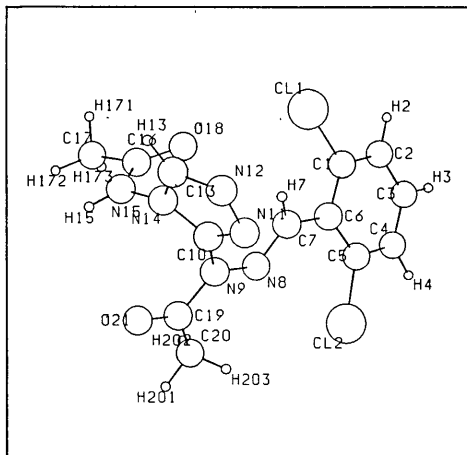


図 2. AABHTZ (原子を円で表示)

例 3.3. PLUTO の使用例 (レーザー・プリンタへの出力)

READY モードから全部示しておく。

```

READY
XDT
=T
.F KW=XYLITOL
=2
.AP
ENTRY?_
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))_
*** NPLOT START ***
*** NPLOT NOMAL END ***
PROGRAM? _
ENTRY? _
=T
.END
READY
    
```

これで、図 4～図 8 がレーザー・プリンタへ出力される。

-
- * 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、水素原子が画かれない。
 - **** 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。

ATBXYL10

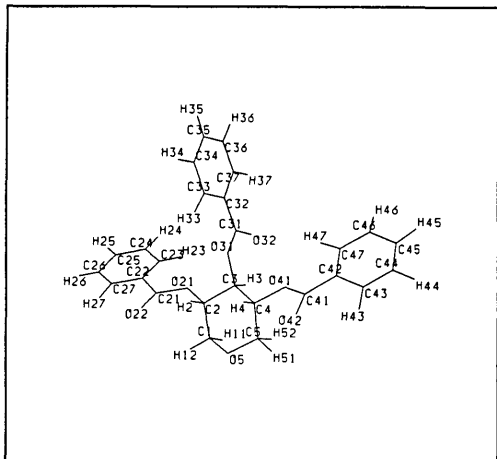


図4. 原子を点で表示した図

ATBXYL10

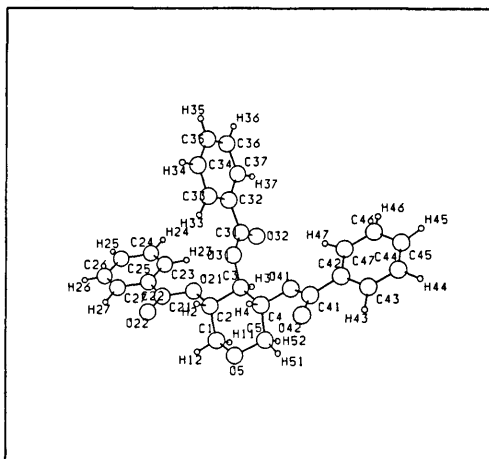


図5. 原子を円で表示した図

ATBXYL10

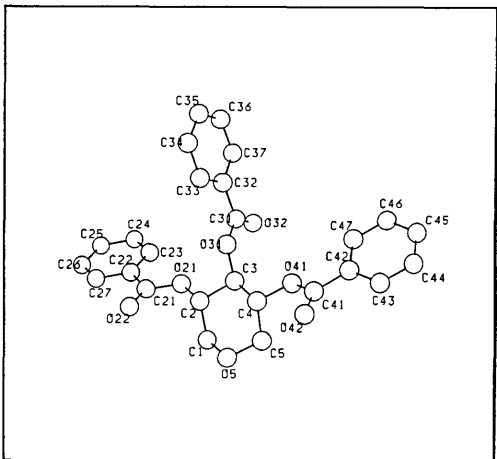


図6. 原子を円で表示し、水素原子を除いた図

ATBXYL10

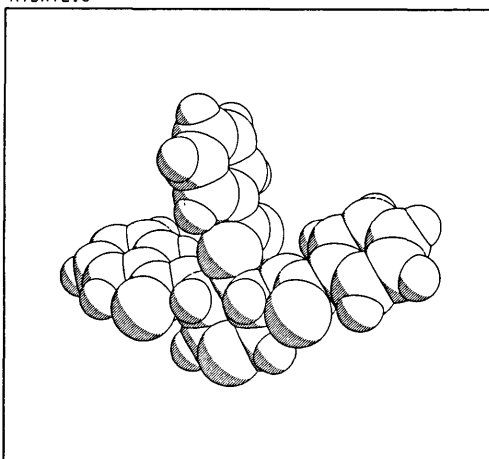


図7. 原子を球で表示した図

ATBXYL10

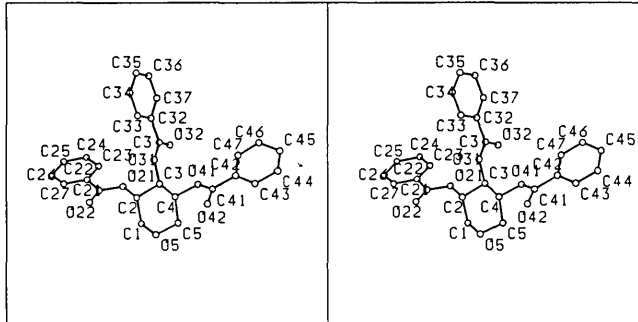


図8. 原子を円で表示し、水素原子を除いたステレオ図

7. おわりに

XDTがシステムとしてはほぼ完成し、BIBファイルについてはFAIRS-Iと同等のレベルに達し、またDATAファイルについては応用プログラムの手直し程度で十分であると判断される。

しかし、CONNファイルについては、CDCC 付属のプログラム CONNSERのレベルに達していないが、これはシステムの変更を必要とせずに、プログラムの改良だけですむ問題である。CONNSERの方式は検索に時間がかかるために、大崎教授等[12]は索引ファイルSBI(部分構造検索項目約280について、各エントリごとに含んでいるかを0または1で表わしたもの)を用いるRTSBシステムを開発して使用している。

また、CCDCを統一的なシステムで検索している例は世界でも見当たらない[13]。しかし、DARC[14]のように、構造式を図で表示する方式は有効なので、プログラムに組み込むことが今後の課題の1つであろう。

CDCCの使用を許可して頂いた前大阪大学蛋白質研究所長の角戸正夫教授および同所付属結晶解析センターの安岡剛武助教授、CDCCの使用法に関して色々助言して頂いた大崎健次教授(京大・薬)および佐々木教祐助教授(名大・医短)、そしてXDTを公用データベースとして認めて頂き、色々を便を計って頂いた九州大学大型計算機センターの関係者の方々に謝意を表します。

参考文献

1. 松尾, 二村, 高木 公用データベースについて, 九州大学大型計算機センター広報, 15, 2, 1982, 222 - 227.
2. 松尾, 二村, 高木 データベース統合支援システム Adbis (1) - Adbis の概要と DMP の仕様一, 同上, 14, 2, 1981, 172 - 217.
3. 二村, 松尾, 高木 同(2) - DMP のユーティリティプログラムと機能追加一, 同上, 14, 3, 1981, 388 - 398.
4. 松尾, 高木, 二村 同(3) - ホーン集合と HSI の仕様一, 同上, 14, 4, 1981, 525 - 549.
5. 松尾, 二村, 高木 同(4) - ホーン集合についての補足一, 同上, 15, 1, 1982, 146 - 153.
6. 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 の使用法 (暫定版第 1 報), 同上, 16, 1, 1983, 32 - 53.
7. 河野, 高木, 松尾, 二村, 鬼塚 同 (暫定版第 2 報), 同上, 16, 4, 1983, 362 - 378.
8. 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.
9. C. H. Davis & J. E. Rush Information Retrieval and Documentation in Chemistry, Greenwood Press, Westport, Connecticut, U. S. A. (1974)
10. CAMBRIDGE CRYSTALLOGRAPHIC DATABASE USER MANUAL, Crystallographic Data Centre, University Chemical Laboratory, Lensfield Road, Cambridge CB2 1EW, England (April 1978).
11. CAMBRIDGE CRYSTALLOGRAPHIC DATABASE Practical Guide to Search Retrieval Analysis and Display, Cambridge Crystallographic Data Centre, University Chemical

Laboratory, Lensfield Road, Cambridge CB2 1EW, England (July 1979)

12. 大崎, 多賀, 東 結晶構造データの利用, 京都大学大型計算機センター広報, 16, 4, 1983, 186 - 204.
13. I. D. Brown The Design of Crystallographic Databases, International Summer School on Crystallographic Computing, Kyoto, Japan, August 18 - 27, 1983.
14. 原, 小野 DARC 化学構造検索システム, ドクメン ケンキュウ, 32(12), 627 - 637, 1982.
15. 松尾, 二村, 末永, 高木, 古城, 石田, 鬼塚 センターのプロッタシステム - Calcomp HCBS と Tektronix CPR の使用法 -, 九州大学大型計算機センター広報, 12, 3, 1979, 171 - 209.
16. 武富, 高木, 川崎, 富山, 柳池, 原田, 関, 末永, 清水 日本語情報システムJEFの使用法, 九州大学大型計算機センター広報, 13, 4, 1980, 406 - 468.

研究 開 発

付録1. XDTのデータベース(関係)定義

```
DATABASE(CXDB)
  L('THE CAMBRIDGE CRYSTALLOGRAPHIC DATABASE')
  A(P0564) M(CRYS) W(TALL) U(PUBDB)
*
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 REFERENCE CODE')
*
DEF(SYS)     T(I2)  L('CRYSTAL SYSTEM') D(/0,6/)
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')

```

付録2. 誌名コード表(番号順)

雑 誌 名	コード 番号
Acta Cryst.	001
J. Chem. Soc.	002
Acta Chem. Scand.	003
J. Amer. Chem. Soc.	004
Z. Kristallogr.	005
Nature	006
Bull. Chem. Soc. Jap.	007
J. Chem. Phys.	008
Inorg. Chem.	009
Helv. Chim. Acta	010
Gazz. Chim. Ital.	011
Proc. Chem. Soc.	012
C. R. Acad. Sci., Fr	013
Proc. R. Soc., A	014
Canad. J. Chem.	015
Tetrahedron	016
Chimia	017
Experientia	018
Makromol. Chem.	019
Ark. Kemi	020
Rocz. Chem.	021
Chem. Zvesti	022
Bull. Acad. Polon. Sci., Ser. Sci. Chim.	023
Tetrahedron Letters	024
Bull. Soc. Chim. Fr.	025
J. Chim. Phys. Phys. -Chim. Biol.	026
Ann. Chim.	027
Bull. Soc. Fr. Mineral. Cristallogr.	028
Z. Anorg. Allg. Chem.	029
Biophys. J.	030
Adv. Chem. Ser.	031
Amer. Chem. Soc., Abstr. Papers	032
Biochemistry	033
J. Heterocycl. Chem.	034
J. Org. Chem.	035
J. Organometal. Chem.	036
J. Phys. Chem.	037
Science	038
J. Polym. Sci., B	039
Proc. Nation. Acad. Sci. U. S. A.	040
Kristallografija	041
J. Inorg. Nucl. Chem.	042
Biochem. J.	043
Chem. and Industry	044
J. Appl. Chem.	045
Molec. Phys.	046
Spectrochim. Acta	047
Chem. Ber.	048
Naturwissenschaften	049
Z. Elektrochem.	050
Z. Chem.	051
Fortschr. d. Mineral.	052
Ber. Busengesellsch. Phys. Chem.	053
Bull. Soc. Chim. Belges	054
Rec. Trav. Chim. Pays-Bas	055
Atti Accad. Nazion. Lincei, R. C., Cl. Sci. Fis. Mat. Nat.	056
Ric. Sci., 2, A	057
Atti Accad. Sci. Torino, Cl. Sci. Fis. Mat. Nat.	058
Chim. e Industr.	059
Chem. Pharm. Bull., Jap.	060
J. Phys. Soc. Jap.	061

雑 誌 名	コード 番号
J. Chem. U. A. R.	062
J. Korean Chem. Soc.	063
Curr. Sci.	064
Indian J. Pure Appl. Phys.	065
Chem. Communic.	066
Indian J. Phys.	067
Z. Naturforsch., A	068
Angew. Chem.	069
J. Molec. Biol.	070
J. Biol. Chem.	071
Bull. Soc. R. Sci. Liege	072
Rev. Portug. Quim.	073
Kkl. Nederl. Akad. Wetensch., Proc., B	074
Chemotherapia	075
Nuovo Cimento	076
Jap. J. Appl. Phys.	077
Bull. Amer. Phys. Soc.	078
J. Antibiot., A, Jap.	079
Dissert. Abstr.	080
Mem. Osaka Gakugei Univ.	081
Zh. Strukt. Khim.	082
J. Pharm. Sci.	083
J. Chem. Soc. Jap., Pure Chem. Sect.	084
Inorg. Nucl. Chem. Letters	085
Dissert. Math. Naturwissensch. Fak. Wilhelms Univ. Munster	086
J. Chem. Soc. (C)	087
J. Chem. Soc. (B)	088
J. Chem. Soc. (A)	089
Z. Naturforsch., B	090
Ric. Sci., 2, B	091
Ric. Sci., 1	092
Dokl. Akad. Nauk S. S. S. R.	093
Sci. Sinica	094
Izvest. Akad. Nauk S. S. S. R., Ser. Khim.	095
Vest. Moskov. Univ., 2	096
C. R. Acad. Sci., Fr., C	097
Collect. Czechosl. Chem. Communic.	098
Ric. Sci.	099
Monatsber. Dtsch. Akad. Wissensch. Berlin	100
Dissert. Abstr. (B)	101
Suomen Kemistil. (B)	102
Acta Chim. Acad. Sci. Hungar.	103
Ann. Acad. Sci. Fenn., A2	104
Coordin. Chem. Rev.	105
Theor. Chim. Acta	106
Acta Cryst. (B)	107
Acta Cryst. (A)	108
Croat. Chem. Acta	109
Acta Phys. Polon.	110
Appl. Opt.	111
Select. Top. Struct. Chem.	112
Biochim. Biophys. Acta	113
Acta Phys. Sinica	114
Zh. Fiz. Khim.	115
X-Rays	116
Sci. Rep. Res. Inst. Tohoku Univ. (A)	117
Zh. Eksper. Teor. Fiz.	118
J. Molec. Struct.	119
J. Chem. Soc. (D)	120
Proc. 10th Internat. Conf. Coord. Chem. Tokyo	121

雑誌名	コード番号
Khim. Geterocikl. Svedn. Latv., S. S. S. R.	122
Amer. Cryst. Assoc., Abstr. Papers (Winter meeting)	123
Amer. Cryst. Assoc., Abstr. Papers (Summer meeting)	124
Molec. Cryst.	125
Ric. Sci. Suppl.	126
Acta Chim. Sinica	127
Proc. Indian Acad. Sci., A	128
Ann. Phys., Dtsch.	129
Trudy Inst. Kristallogr., S. S. S. R.	130
Z. Kristallogr. (A)	131
Arh. Kem.	132
Acta Phys. -Chim. U. R. S. S.	133
The Chemistry of Penicillin, Princeton Univ. Press	134
J. Phys. Chem. Solids	135
R. C. Ist. Lombardo Sci. A	136
Agric. Biol. Chem., Jap.	137
Proefschr. Doct. Wiskde. Naturwet., Utrecht	138
Thesis, New York	139
Thesis, Munster	140
Adv. Chem. Coord. Compounds, Proc. 6th Internat. Conf., Detroit	141
These Doct. Sci. Phys. -Paris	142
Univ. Calif., Thesis No. 8225	143
Proc. Math. Phys. Soc. U. A. R.	144
Phys. Rev.	145
Biochem. Biophys. Res. Comm.	146
Bull. Soc. Chim. Beograd	147
Bergakademie	148
Mem. Osaka Kyoiku Univ.	149
Z. Phys. Chem. (Frankfurt)	150
J. Medicin. Chem., U. S. A.	151
Phil. Trans. R. Soc., A	152
Boll. Scient. Fac. Chim. Ind. Univ. Bologna	153
Aust. J. Chem.	154
Inorg. Chim. Acta	155
Carbohydr. Res.	156
Mem. Def. Acad. Jap.	157
Arch. Biochem. Biophys., U. S. A.	158
Czechosl. J. Phys.	159
Indian J. Chem.	160
Biopolymers, U. S. A.	161
Bull. Soc. Pharm., Bordeaux	162
Sci. Papers Inst. Phys. Chem. Res., Jap.	163
Soc. Sci. Lodz. Acta Chim.	164
Fed. Eur. Biochem. Soc.	165
Nat. Bur. Stand. Spec. Publ.	166
Ann. Chem.	167
Dansk T. Farm.	168
J. Chinese Chem. Soc.	169
Philips Res. Rep., Netherl.	170
Thesis, UCLA	171
Macromolecules	172
J. Res. Nation. Bur. Stand. Phys. Chem.	173
Talanta	174
Daehan Hwahak Hwojee	175
Physica, Pays-Bas	176
Nat. Proprietes Liason Coordin. Coll. Internation. Paris	177
Ann. Rep. Scient. Works Fac. Sci. Osaka	178
Angew. Chem. Int. Ed.	179
J. Prakt. Chem.	180
An. R. Soc. Esp. Fis. Quim., A	181
J. C. S. Chem. Comm.	182
Thesis, Bordeaux	183

雑誌名	コード番号
Chem. Scr.	184
Nature Phys. Sci.	185
J. C. S. Dalton	186
Anal. Chim. Acta	187
J. C. S. Perkin II	188
Cryst. Struct. Comm.	189
Rev. Acad. Ciencias Exact. Fis. -Quim.	190
Chem. Phys. Letters	191
Nature New Biology	192
Sci. Papers Coll. Gen. Educ., Univ. Tokyo	193
Chem. Pharm. Bull.	194
J. Cryst. Mol. Struct.	195
Anal. Chem.	196
Molec. Pharm.	197
J. Fluorine Chem.	198
Phys. Status Solidi	199
Steroids	200
ARM. CHEM. ZH.	201
J. LESS-COMMON METALS, NETHERL.	202
J. S. AFR. CHEM. INST.	203
ISRAEL J. CHEM.	204
KO HSUEH TUNG PAO	205
SYNTHETIC COMM.	206
J. CHEM. SOC., PERKIN TRANS. 1	207
J. SOLID STATE CHEM.	208
MOLEC. CRYST. LIQ. CRYST.	209
PHOSPHORUS	210
J. COORD. CHEM.	211
C. R. ACAD. SCI., FR., B	212
REV. CHIM. MINER., FR.	213
MONATSH. CHEM.	214
INT. J. PEPTIDE PROT. RES.	215
PRAMANA	220
KWANSEI GAKUIN UNIV. ANN. STUDIES	224
EUROP. POLYMER J.	225
PHYS. LETT., A	226
ZH. NEORG. KHIM.	233
JAP. J. BAIN PHYSIOL.	236
PAKISTAN J. SCI. IND. RES.	237
FERROELECTRICS	238
J. PHYS. CHEM. SOLIDS, C	240
CHEM. LETT.	241
VEST. MOSK. UNIV., KHIM.	243
EUR. CRYST. MEETING	245
ABSTR. ITAL. -YUG. CONGR.	246
STOCKHOLM SYMP. BIOL. STRUCT.	247
CHEM. THER.	259
KRISTALL UND TECHNIK	260
EUR. J. BIOCHEM.	262
FINN. CHEM. LETT.	274
TECHNOL. REP. OSAKA UNIV.	283
TRANS. AMER. CRYST. ASSOC.	285
AB. PR. CHEMICKOTECHNOL. FAK. SVST	288
FARMACO, ED. SCI., ITAL.	289
LATV. P. S. R. ZINAT. AKAD.	292
VEST. KIM. SER.	305
ACTA CHEM. SCAND. SER. A	306
ACTA CHEM. SCAND. SER. B	307
MEM. CHUBU INST. OF TECHNOLOGY	308
CHEM. ENNGG.	309
AMER. CRYST. ASSOC., ABSTR. PRPERS (SPRING MEETING)	321
ORG. MAGN. RESONANCE	322
IZV. AKAD. NAUK S. S. S. R., OTD.	322
KHIM. NAUK.	322
PHYS. REV. B	323

研究開発

雑誌名	コード番号
YEREVAN UNIV. TRANS.	334
SOLID STATE COMM.	335
Z. NATURFORSCH., C	336
BIOINORG. CHEM	337
PROC. R. SOC. LONDON, SER. B	338
J. KOREAN PHYS. SOC.	344
IZV. AKAD. NAUK MOLD. SSR	346
ANNU. REP. RES. REACT. INST., KYOTO UNIV.	347
RECHERCHES	348
VESTN. SLOV. KEM. DRUS.	350
PROC. SEMIN. CRYSTALLOCHEM. COORD. METALLOG. COMPOUNDS	351

(以下略)

付録3. 誌名コード表(アルファベット順)

雑 誌 名	コード 番号
*A.C.A. (SPRING)	309
*A.C.A. (SUMMER)	124
*A.C.A. (WINTER)	123
*A.C.S. ABSTH. PAPERS	32
*A.C.S. T.G. 172, INDRG.	407
AMSTN, ITAL. -YUG. CHIM.	246
ACAD. R. BELG. HILL. CL. SCI.	489
ACC. CHEM. RES.	411
ACTA CHEM. SCAND.	3
ACTA CHEM. SCAND. SEH. A	305
ACTA CHEM. SCAND. SEH. B	306
ACTA CHIM. ACAD. SCI. HUNG.	103
ACTA CHIM. SINICA	127
ACTA CIENC. INDICA. SEH. CHEM.	506
ACTA CRYSTALLINOR.	1
ACTA CRYSTALLINOR. SECT. A	108
ACTA CRYSTALLINOR. SECT. B	107
ACTA FAC. IEN. NAT. U. COM. CHIM.	339
ACTA GEOL. HISP.	310
ACTA PHARM. SUPC.	443
ACTA PHYS. POL.	110
ACTA PHYS. SIN.	114
ACTA PHYSICOCHEM. U. R. S. S.	133
*ACTA U. NATISLAVA. MAT. F. AS.	450
ACTA UNIV. PALACKI. ULOMUC.	320
ADV. CHEM. CUORD. CPES. 6TH I. C.	141
ADV. CHEM. SER.	31
ADV. EXP. MED. BIOL.	412
*ADV. MUL. RELAX. INT. PROC.	500
ADV. MUL. SPECTRUSC.	254
ADV. PRUTEIN CHEM.	433
AGRIC. BIOL. CHEM.	137
*AK. NAUK SSSR. UHAL. NAUK TS.	445
*AKAD. NAUK SSSR. SVY. ZVNI	401
AM. CRYST. ASSOC. SEH. 2	395
AM. INST. PHYS. CHEM. PROC.	501
AM. J. CHEM.	373
AN. ASS. QUIM. ARGENT.	516
*AN. FAC. QUIM. FAHN. U. CHILE	263
AN. FIS.	430
AN. QUIM.	277
*AN. H. SOC. ESP. FIS. QUIM. A	181
ANAL. CHEM.	196
ANAL. CHIM. ACTA	187
ANGEW. CHEM.	69
ANGEW. CHEM., INT. ED. ENGL.	179
ANN. ACAD. HUS. CIENC.	244
ANN. ACAD. SCI. FENN. SEH. A2	104
ANN. CHIM. (PARIS)	27
ANN. N. Y. ACAD. SCI.	332
ANN. PHARM. FR.	402
ANN. PHYS. (LEIPZIG)	129
*ANN. REP. FAC. SCI. OSAKA U.	178
*ANN. REP. RES. R. I. KYOTO U.	347
*ANN. REP. SHIONOGI RES. LAB.	304
ANN. REV. BIOCHEM.	419
ANN. SOC. SCI. BRUX. SER. 1	288
*ANOM. SCATTERING IUCR CONF.	383
APPL. OPT.	111
ARCH. BIOCHEM. BIOPHYS.	158
ARCH. PHARM.	524
ARCH. KEM.	132
ARK. FYS.	303
ARK. KEMI	20
ARK. KHM. ZH.	201
ASSOC. ITAL. CRIST. ABSTR.	355
*ATLAS MACR. STRUC. MICROFICHE	434
*ATLAS PROTEIN SEB. STRUCT.	435
ATLAS STEROIDS STRUCT.	382
*ATTI ACCAD. NAZ. LINCET	56
*ATTI ACCAD. SCI. IST. BOLOGNA	341
*ATTI ACCAD. SCI. TORINO	58
*ATTI SOC. TOSC. SCI. NAT. PISA	318
AUST. J. CHEM.	134
AZERB. KHM. ZH.	363
BER. BUNSENSES. PHYS. CHEM.	33
BERGAKADEMIE	148
BIOCHEM. BIOPHYS. RES. COMMUN.	146
BIOCHEM. J.	43
BIOCHEMISTRY	33
BIOCHIM.	466
BIOCHIM. BIOPHYS. ACTA	113
BIODIURG. CHEM.	337
BICDRG. CHEM.	368
BICDRG. KHM.	364
BICPHYS. J.	30
BIPHYS. STRUCT. MECH.	414
BIPOLYMERS	261
BULL. CHIM. FARM.	479
*BULL. SC. FAC. CHIM. IND. BOLOGNA	153
BROKHAVEN NAT. LAB. REP.	454
*BUL. TEH. INST. SER. CHIM.	390
*BULL. ACAD. POL. SCI. SCI. CHIM.	23
BULL. AM. PHYS. SOC.	7
BULL. CHEM. SOC. JPN.	78
BULL. CL. SCI. ACAD. R. BELG.	238
BULL. FAC. ENG. HOKKAIDO UNIV.	399
BULL. INST. CHEM. RES. KYOTO	360
BULL. SOC. CHIM. BELG.	34
PULL. SOC. CHIM. BEOGRAD	147

雑 誌 名	コード 番号
BULL. SOC. CHIM. FR.	25
*BULL. SOC. FR. MINER. CRIST.	28
BULL. SOC. PHARM. BORDEAUX	162
BULL. SOC. R. SCI. LIÈGE	72
C.R. ACAD. SCI.	13
C.R. ACAD. SCI. SER. B	212
C.R. ACAD. SCI. SER. C	97
CAN. J. BIOCHEM.	415
CAN. J. CHEM.	15
CAN. J. PHYS.	253
CAN. MINERAL.	461
CANCER BIOPHYS. BIOPHYS.	175
CANCER RES.	400
CARBONHYDR. RES.	126
CARBON	248
CHEM. BER.	48
CHEM. COMMUN.	66
CHEM. COMMUN. UNIV. STOCKHOLM	409
CHEM. ERA	482
CHEM. IND. (LONDON)	44
CHEM. LETT.	241
CHEM. PHARM. BULL.	194
CHEM. PHYS.	316
CHEM. PHYS. LETT.	317
CHEM. PHYS. LIPIDS	184
CHEM. SCR.	503
CHEM. ZEIT.	22
CHEM. ZVESTI	75
CHEMOTHERAPIA	59
CHIM. IND. (MILAN)	259
CHIM. THER.	17
CHIMIA	370
*CHIM. J. PHYS. (ENG. TRANS.)	421
*COLD SPRING H. S. 0. BIOL.	521
COLL. LECT. INT. S. FURAN	98
COLLECT. CZECH. CHEM. COMMUN.	490
COLLOB. INT. C. N. R. S.	105
COORD. CHEM. REV.	109
CROAT. CHEM. ACTA	189
CRYST. STRUCT. COMMUN.	64
CURR. SCI.	159
CZECH. J. PHYS.	168
DAN. TIDSSKR. FARM.	476
DER. BIOCHEM.	222
DISCUSS. FARADAY SOC.	302
DISS. UNIV. FREIBURG	300
DISS. UNIV. ULM	80
DISS. ABSTR. B	101
*DISS. MATH. NAT. FAK. MUNSTER	86
DISS. UNIV. TUBINGEN	378
DOC. CHEM. YUG.	397
DOKL. AKAD. NAUK AZ. SSR	93
DOKL. AKAD. NAUK SSSR	311
DOKL. AKAD. NAUK TADZH. SSR	519
EGYPT. J. PHYS.	508
ENERGY RES. ABSTR.	416
ESSAYS BIOCHEM.	471
ESTERVOISPYT	385
ESTUD. GEOL. (MADRID)	245
EUR. CRYST. MEETING	262
EUR. J. BIOCHEM.	225
EUR. POLYM. J.	18
EXPERIENTIA	249
EXPLOSIVSTOFFE	520
FARBE LACK	342
FARMACO. ED. PRAT.	289
FARMACO. ED. SCI.	165
FED. EUR. BIOCHEM. SOC.	448
*FED. PRIC. FED. AM. S. EX. BIOL.	238
FERROELECTRICS	403
FETTE SEIFEN	274
FINN. CHEM. LETT.	324
FIZ. HIZK. TEMP.	481
FIZ. TVERO. TELA (LENINGRAD)	52
FORTSCHR. MINERAL.	11
GAZZ. CHIM. ITAL.	488
GLASN. KHEM. DRAUMTVA BEOGRAD	356
GOVT. REP. ANNOUNCE. (U.S.)	10
HELV. CHIM. ACTA	392
HETEROCYCLES	330
HIGH TEMP. SCI.	363
HUNG. DIFF. CONF.	513
I. S. CHYSTCHEM. CUORD. DRGHET.	465
IND. J. PHYS. A	426
*IND. NAT. CONF. CRYST.	180
INDIAN J. CHEM.	67
INDIAN J. PHYS.	63
INDIAN J. PURE APPL. PHYS.	9
INDRG. CHEM.	135
INDRG. CHIM. ACTA	85
INDRG. NUCL. CHEM. LETT.	257
INST. PHYS. CHEM. RES. TOKYO	215
INT. CONGR. ESSENT. OILS	204
INT. J. PEPT. PROTEIN PES.	492
ISH. J. CHEM.	204
*IZV. AN. N. SSSR. MEUPG. MATER.	322
*IZV. AKAD. SSSR. IUD. KHM. NAUK	314
IZV. AKAD. NAUK AZ. SSR	387
*IZV. AKAD. NAUK KAZ. SSR. KHM.	387

雑誌名	コード番号
I.Z.V. AKAD. NAUK MOLD. SSR	346
I.Z.V. AKAD. NAUK SSSR. SER. KHIM.	95
*I.Z.V. JUG. CENT. KRIST., SER. A	379
*I.Z.V. SIB. OTD. AKAD. NAUK SSSR	313
*I.Z.V. VISSH. UCHEBN. IZVED.	331
*IUPAC INT. SYMP. NAT. PRDD.	496
J. AGRIC. FOOD CHEM.	96
J. AM. CHEM. SOC.	4
J. AM. OIL CHEM. SOC.	359
J. ANNAHALAI UNIV., PART B	796
J. ANTIBIOT.	296
J. APPL. CHEM.	45
J. APPL. CRYSTALLOGR.	228
J. APPL. PHYS.	463
J. BIOCHEM.	418
J. BIOL. CHEM.	71
*J. CARB. NUCL. NUCLT.	474
J. CHEM. ENG. DATA	250
J. CHEM. PHYS.	8
J. CHEM. RES.	423
J. CHEM. SOC.	2
*J. CHEM. SOC., CHEM. COMM.	182
*J. CHEM. SOC., DALTON	186
*J. CHEM. SOC., FARADAY 2	236
*J. CHEM. SOC., PERRIN 1	207
*J. CHEM. SOC., PERRIN 2	180
J. CHEM. SOC. A	89
J. CHEM. SOC. B	88
J. CHEM. SOC. C	87
J. CHEM. SOC. D	120
*J. CHEM. SOC. JPN., PURE CHEM.	84
J. CHEM. U. A. R.	62
J. CHIM. PHYS.	491
J. CHIM. PHYS. PHYS. - CHIM. BIOL.	26
J. CHIM. CHEM.	169
J. CLIN. NEPHROL. ONCOL.	449
J. COORD. CHEM.	231
J. CRYST. GROWTH	229
J. CRYST. MOL. STRUCT.	195
J. CYCL. NUCL. RES.	405
J. ELECTRON MICROSC.	231
J. FLUORINE CHEM.	198
J. HETEROCYCL. CHEM.	34
J. INORG. BIOCHEM.	325
J. INORG. NUCL. CHEM.	42
*J. KOREAN CHEM. SOC.	443
J. KOREAN PHYS. SOC.	34
J. LABELLED COMP. RADIOPHARM.	512
J. LESS-COMMON MET.	202
J. LIPID RES.	484
J. MACROMOL. SCI., PHYS.	264
J. MATER. SCI.	242
J. MED. CHEM.	151
J. MOL. BIOL.	478
J. MOL. CATAL.	292
J. MOL. SPECTROSC.	119
J. MOL. STRUCT.	469
J. NAT. PROD.	324
J. OPT. SOC. AM.	35
J. ORG. CHEM.	36
J. ORGANOMET. CHEM.	357
J. PHARM. PHARMACOL.	83
J. PHARM. SCI.	265
J. PHARM. SOC. JPN.	404
J. PHARM. SOC. KOREA	297
J. PHYS. (PARIS)	246
J. PHYS. (PARIS), COLLOID.	240
J. PHYS. C	37
J. PHYS. CHEM.	381
J. PHYS. CHEM. REF. DATA	135
J. PHYS. CHEM. SOLIDS	494
J. PHYS. LETT.	61
J. PHYS. SOC. JPN.	234
*J. PHYS. SOC. JPN., SUP. B-11	468
J. POLYM. SCI.	343
J. POLYM. SCI., PART A	458
*J. POLYM. SCI., POL. PHYS. ED.	485
J. POLYM. SCI., POLYM. CHEM. ED.	39
J. POLYM. SCI., POLYM. LETT. ED.	180
J. PRAKT. CHEM.	380
J. R. NETH. CHEM. SOC.	378
J. RAMAN SPECTROSC.	122
*J. RES. NAT. BUR. STAND., A	203
J. S. AFR. CHEM. INST.	340
J. SCI. HIROSHIMA UNIV. A	208
J. SCI. SOC. THAILAND	410
J. SOLID STATE CHEM.	372
J. STEROID BIOCHEM.	267
J. TAKEDA RES. LAB.	216
J. THERM. ANAL.	27
J.ENER RUNDSCH.	236
JPN. J. APPL. PHYS.	147
JPN. J. BRAIN PHYSIOL.	294
JUSTUS LIEBIGS ANM. CHEM.	217
K. IND. VIDENSK. SELSK. SKR.	473
KEM. KUIZ.	122
*KERNF. ZENT. KARLSRUHE	371
*KHIM. GET. SOEDIN., SSSR	391
KHIM. PAIR. SOEDIN.	522
*KIEL. MILCH. FDRSCH.	205
KINET. KATAL.	248
KO HSUEH TUNG PAO	367
KOLLOID Z. Z. POLYM.	
KOORD. KHIM.	

雑誌名	コード番号
KRAT. SOOB.	467
KRIST. TECH.	260
KRISTALLOGRAFIYA	41
KRISTALLOKHIM. MOORG. SOEDIN	428
*KWANSEI GAKUUN U. ANN. STUD.	224
*LATV. PSR ZIN. AKAD. VEST. KHIM.	292
LECT. NOTES PHYS.	498
LIBYAN J. SCI.	483
LIFE SCI.	470
MACROMOLECULES	172
MAGY. CHEM. FDLY.	221
MAKROMOL. CHEM.	19
*MAT. DOBL. NAUK. TECH. KONF. KIZ.	374
MAT. KONF. MOLOD. UCH. ASPIR.	518
MATER. RES. BULL.	247
MATER. SCI.	460
*MEM. CHUBU INST. TECHNOL.	307
*MEM. DEF. ACAD., YOKOSUKA, JPN.	157
*MEM. FAC. SCI. KYUSHU U. SER. C	480
*MEM. OSAKA GAKUUGEI UNIV.	149
*MEM. OSAKA KYOIKU UNIV.	270
MICROSCOPE	355
MICROWAVE SPECTROSC.	422
MIKROCHIM. ACTA	269
MIKROSKOPIE	451
MOL. BIOL. (MOSCOW)	125
MOL. CRYST.	209
MOL. CRYST. IB. CRYST.	197
MOL. PHARMACOL.	46
MOL. PHYS.	291
MOL. STRUCT. VIBRATIONS	100
*MONATS. DTSCH. AKAD. WISS. BER.	214
*MONATSH. CHEM.	438
*N. B. S. (U. S.), MONOGRAPH	166
*N. B. S. (U. S.), SPEC. PUBL.	437
NAT. INST. METALL.	177
*NAT. PROP. LIAIS. COORD. PARIS	192
NATURE (LONDON)	185
NATURE (LONDON), NEW BIOL.	49
NATURE (LONDON), PHYS. SCI.	271
NATURWISSENSCHAFTEN	487
NETH. MILK DAIRY J.	361
NEW J. CHIM.	295
NIPPON KAGAKU KAISHI	440
*NOBLE-GAS CPDS., U. CHICAGO	389
NOUV. J. CHIM.	76
NUCLEIC ACIDS RES.	510
*NUOVO CIMENTO	499
NATO CONF. SER. 6	472
*ONK. DDS. K. KOM. BIO. N. POL. A. N.	235
OPPI BRIEFS	321
OPT. SPEKTROSK.	358
ORG. MAGN. RESON.	237
*P. S. T. YUN'GU PDGO. CH. KWAAK	398
PAK. J. SCI. IND. RES.	308
PERIOD. MINER.	327
PERIOD. POLYTECH. CHEM. ENG.	324
PH. D. THESIS UNIV. MICHIGAN	504
PH. D. THESIS UNIV. TEXAS	441
PHARMAZIE	152
*PHIL. TR. R. SOC. LOND., SER. B.	170
*PHIL. TRANS. R. SOC., SER. A	319
PHILIPS RES. REP.	419
PHILOS. MAG.	210
*PHOSPH. AND SULPH. RELAT. ELEM.	423
PHOSPHORUS	399
PHOSPHORUS AND SULFUR	226
PHOTOGR. SCI. ENG.	145
PHYS. LETT. A	329
PHYS. REV.	323
PHYS. REV. A	199
PHYS. REV. B	176
PHYS. STATUS SOLIDI	376
PHYSICA-PAYS-BAS	377
PHYTOCHEMISTRY	377
PIS'MA ZH. EKSP. TEOR. FIZ.	456
POL. J. CHEM.	220
PRAMANA	509
PROC. BULL. J. PHARMACOL.	12
PROC. CHEM. SOC., LONDON	128
*PHOC. IND. ACAD. SCI., A	272
PHOC. IDMA ACAD. SCI.	74
PHOC. K. HEU. ACAD. WET., B	144
PHOC. MATH. PHYS. SOC. U. A. R.	307
PHUC. N. D. ACAD. SCI.	144
PHUC. NAT. ACAD. SCI. U. S. A.	40
PHUC. PHYS. SOC. SOLID	273
PHUC. R. IR. ACAD. SECT. B	457
PHUC. R. SIIC. LONDON. SER. A	14
PHUC. R. SIIC. LONDON. SER. B	338
PHUC. RARE EARTH RES. CONF.	384
*PHUC. SEM. CRYST. CHIMD. CPDS.	511
*PHUC. 10 I. C. COORD. CHEM. TOKYO	121
*PHUC. 16 I. C. COORD. CHEM.	106
*PREFS. DUC. WIS. NAT. UTRECHT	158
PROG. STEREOCHEM.	419
PROPEL. AND EXPLOS.	477
PROSTAGLANDINS	284
PURE APPL. CHEM.	511
RUIM. IND. (MADRID)	230
R. C. ACAD. SCI. FIS. MAT.	486
RADIOKHIMIA	513
*REC. J. R. NETH. CHEM. SOC.	426
REC. TRAV. CHIM. PAYS-BAS	95

雑誌名	コード番号
RECHERCHES	348
*REND. IST. LOHB. ACC. SCI. LETT. A	136
*REND. SEM. FAC. SCI. U. CAGLIARI	286
*REP. A. F. S. R., AFOSR-77-3276	303
*REP. FAC. ENG., TOTTORI UNIV.	429
REP. FAC. SCI. SHIZUOKA UNIV.	352
*REP. R. L. SURF. SCI., OKAYAMA U.	439
*REV. ACAD. CIENC. EX., ZARAGOZA	190
REV. CHIM. MINER.	213
REV. LATINDAM OUIH.	75
REV. PORT. OUIH.	73
REV. ROUM. CHIM.	231
RIC. SCI.	99
RIC. SCI., PARTE 1	92
RIC. SCI., PARTE 2, SEZ. A	57
RIC. SCI., PARTE 2, SEZ. B	91
RIC. SCI., SUPPL.	126
ROZL. CHEM.	21
RCM-REP.	373
S. AFR. J. CHEM.	464
S. AFR. J. SCI.	408
SCAND. J. CLIN. LAB. INVEST.	452
*SCHWEIZ. MINER. PETROGR. MITT.	273
SCI. AM.	420
SCI. CULT.	276
*SCI. PAP. C. GEN. EDUC., U. TOKYO	193
*SCI. PAP. INST. P. C. R. (JPN.)	163
*SCI. R. RES. INST. TOHOKU U. (A)	117
SCI. SIN.	94
SCIENCE	38
SEL. TOP. STRUCT. CHEM.	112
SEP. SCI.	227
SOC. SCI., LODZ., ACTA CHIM.	164
SOLID STATE COMMUN.	339
SODBSCH. AKAD. NAUK GRUZH. SSR	366
SPECTROCHIM. ACTA	47
SPECTROCHIM. ACTA, PART A	313
STEREODYN. MOL. SYS. P. S.	517
STEROIDS	200
STOCKHOLM SYMP. BIOL. STRUCT.	247
STRUCT. CHEM. MOL. BIOL.	293
STRUKT. SVOISTVA KRIST.	431
SUDM. KEMISTIL. A	239
SUDM. KEMISTIL. B	102
*SYMP. MOL. STR. SPEC. DHIO ST. U.	299
SYNTH. COMMUN.	206
TAKEDA KENKYUSHO	499
TALANTA	174
TECHNOL. REP. OSAKA UNIV.	283
TECHNOLOGY (SINDRI, INDIA)	278
TEPLOFIZ. VYS. TEMP.	232
TETRAHEDRON	16
TETRAHEDRON LETT.	24
*TEZ. DOK. V. C. SOV. KHIM. K. SOED.	427
*THE CHEMISTRY OF PENICILLIN	134
*THE ENZYMES., ACAD. P., N. Y.	436
THEOR. CHIM. ACTA	106
THERMOCHIM. ACTA	279
THESE DOCT. SCI. PHYS., PARIS	142
THESES, BORDEAUX	183
THESES, GEORGETOWN UNIV.	417
THESES, MUNSTER	140
THESES, NEW YORK	139
*THESES, RIJKSUNIV., UTRECHT	301
THESES, TRONDHEIM	290
THESES, UCLA	171
TO BE PUBLISHED	333
*TR. INST. KRIST. AKAD. NAUK SSSR	130
*TRANS. A. C. A.	285
TRANS. FARADAY SOC.	219
TRANS. NAT. INST. MET.	425
TRANSITION MET. CHEM.	369
TRAV. SOC. PHARM., MONTPELLIER	386
*UCH. ZAP. AZERB. GOS. UNIV.	349
UKR. FIZ. KH. (RUSS. ED.)	280
UKR. KHIM. KH. (RUSS. ED.)	462
UNIV. CALIF., THESIS NO. 8225	143
UNIV. INDORE RES. J. SCI.	497
UNIV. MICROFILM INC.	312
UZB. KHIM. KH.	447
*VER. SCHWEIZ. NATURFORSCH. GES.	261
*VEST. LENINGR. U., FIZ. KHIM.	459
VESTN. MOSK. UNIV., KHIM.	243
*VESTN. MOSK. UNIV., SER. MAT.	282
VESTN. SLOV. KEM. DRUS.	350
VIGNANA BHARATHI	396
VINITI	432
VYSK. SKDLY CHEM.-TECHN. PR.	446
*WISS. Z. MARTIN-LUTHER-UNIV.	281
X-RAYS	116
YAKUGAKU ZASSHI	433
YEREVAN UNIV. TRANS.	334
YUKAGAKU	362
Z. ANORG. ALLG. CHEM.	29
Z. CHEM.	51
Z. ELEKTROCHEM.	30
Z. KRISTALLOGR.	5
Z. KRISTALLOGR. (A)	131
Z. NATURFORSCH., TEIL A	68
Z. NATURFORSCH., TEIL B	90
Z. NATURFORSCH., TEIL C	336
Z. PHYS.	253
*Z. PHYS. CHEM. (FRANKFURT MAIN)	130
Z. PHYS. CHEM. (LEIPZIG)	343

雑誌名	コード番号
*ZB. PR. CHEMTECH. FAK. SVST	288
*ZESZ. NAUK. POL. LODZ. CHEM.	442
ZH. EKSP. TEOR. FIZ.	118
ZH. FIZ. KHIM.	113
ZH. NEORG. KHIM.	233
ZH. OBSHCH. KHIM.	444
ZH. ORG. KHIM.	388
ZH. STRUKT. KHIM.	82
*2. AUSTIN SYMP. GAS PHASE	354
*3. AUSTIN SYMP. GAS PHASE	223
*4. AUSTIN SYMP. GAS PHASE	218
*5. AUSTIN SYMP. GAS PHASE	323
*6. AUSTIN SYMP. GAS PHASE	393

付録4. 化合物クラス表

番号	内 容
1	Aliphatic Carboxylic Acid Derivatives
2	Aliphatic Carboxylic Acid Salts (Ammonium, IA, IIA Metals)
3	Aliphatic Amines
4	Aliphatic (N and S) Compounds
5	Aliphatic Miscellaneous
6	Enolates (Aliphatic and Aromatic)
7	Nitriles (Aliphatic and Aromatic)
8	Urea Compounds (Aliphatic and Aromatic)
9	Nitrogen-Nitrogen Compounds (Aliphatic and Aromatic)
10	Nitrogen-Oxygen Compounds (Aliphatic and Aromatic)
11	Sulphur and Selenium Compounds
12	Carbonium Ions, Carbanions, Radicals
13	Benzoic Acid Derivatives
14	Benzoic Acid Salts (Ammonium, IA, IIA Metals)
15	Benzene Nitro Compounds
16	Anilines
17	Phenols and Ethers
18	Benzoquinones
19	Benzene Miscellaneous
20	Monocyclic Hydrocarbons (3, 4, 5-Membered Rings)
21	Monocyclic Hydrocarbons (6-Membered Rings)
22	Monocyclic Hydrocarbons (7, 8-Membered Rings)
23	Monocyclic Hydrocarbons (9- and Higher-Membered Rings)
24	Naphthalene Compounds
25	Naphthoquinones
26	Anthracene Compounds
27	Hydrocarbons (2 Fused Rings)
28	Hydrocarbons (3 Fused Rings)
29	Hydrocarbons (4 Fused Rings)
30	Hydrocarbons (5 or More Fused Rings)
31	Bridged Ring Hydrocarbons
32	Hetero-Nitrogen (3, 4, 5-Membered Monocyclic)
33	Hetero-Nitrogen (6-Membered Monocyclic)
34	Hetero-Nitrogen (7- and Higher-Membered Monocyclic)
35	Hetero-Nitrogen (2 Fused Rings)
36	Hetero-Nitrogen (More than 2 Fused Rings)
37	Hetero-Nitrogen (Bridged Ring Systems)
38	Hetero-Oxygen
39	Hetero-Sulphur and Hetero-Selenium
40	Hetero-(Nitrogen and Oxygen)
41	Hetero-(Nitrogen and Sulphur)
42	Hetero-Mixed Miscellaneous
43	Barbiturates
44	Pyrimidines and Purines
45	Carbohydrates
46	Phosphates
47	Nucleosides and Nucleotides
48	Amino-Acids and Peptides
49	Porphyryns and Corrins
50	Antibiotics
51	Steroids
52	Monoterpenes
53	Sequiterpenes
54	Diterpenes
55	Sesterpenes
56	Triterpenes
57	Tetraterpenes
58	Alkaloids
59	Miscellaneous Natural Products
60	Molecular Complexes
61	Clastrates
62	Boron Compounds
63	Silicon Compounds
64	Phosphorus Compounds
65	Arsenic Compounds
66	Antimony and Bismuth Compounds
67	Group IA and IIA Compounds
68	Group III Compounds
69	Germanium, Tin, Lead Compounds
70	Tellurium Compounds
71	Transition Metal-C Compounds
72	Metal π -Complexes (Open-Chain)
73	Metal π -Complexes (Cyclopentadiene)
74	Metal π -Complexes (Arene)
75	Metal π -Complexes (Miscellaneous Ring Systems)
76	Metal Complexes (Ethylenediamine)
77	Metal Complexes (Acetylaceton)
78	Metal Complexes (Salicylic Derivatives)
79	Metal Complexes (Thiourea)

番号	内 容
80	Metal Complexes (Thiocarbamate or Xanthate)
81	Metal Complexes (Carboxylic Acid)
82	Metal Complexes (Amino-Acid)
83	Metal Complexes (Nitrogen Ligand)
84	Metal Complexes (Oxygen Ligand)
85	Metal Complexes (Sulphur or Selenium Ligand)
86	Metal Complexes (P, As, Sb Ligand)

付録5. C, N, OのAPNとエントリー数 (1983年1月現在)

ATOM	NCA	NH	NCN	APN	エントリー数
C	1	0	0	6 1 0 5 0	1 8
N	1	1	0	7 1 1 5 0	6 1
C	1	1	0	6 1 1 5 0	9 0
C	1	2	0	6 1 2 5 0	7 6 9
N	1	0	0	7 1 0 5 0	1,2 7 1
N	1	2	0	7 1 2 5 0	1,9 4 6
N	2	1	0	7 2 1 5 0	3,9 6 0
C	2	0	0	6 2 0 5 0	4,3 4 8
N	2	0	0	7 2 0 5 0	4,9 2 9
O	1	1	0	8 1 1 5 0	6,1 5 8
C	4	0	0	6 4 0 5 0	7,7 7 5
N	3	0	0	7 3 0 5 0	9,6 0 4
C	3	1	0	6 3 1 5 0	1 1,6 9 2
O	2	0	0	8 2 0 5 0	1 2,1 2 8
C	2	2	0	6 2 2 5 0	1 7,3 3 6
O	1	0	0	8 1 0 5 0	1 7,8 4 1
C	1	3	0	6 1 3 5 0	1 8,5 1 7
C	2	1	0	6 2 1 5 0	2 1,1 3 4
C	3	0	0	6 3 0 5 0	2 5,7 2 0

(注) エントリー数が多いAPNだけの場合は, CONNモードによる検索の場合検索時間がかかりすぎて, time over になるおそれがある. 特に, 第2次検索は1,000個以下にすることが望ましい.

研究開発

付録6. C, N, O以外の元素とエントリー数 (1983年1月現在)

No.	元 素	エントリー数	No.	元 素	エントリー数
1	CL	7,225	23	SN	467
2	S	6,730	24	RU	416
3	P	4,871	25	ZN	388
4	BR	2,991	26	W	353
5	CU	1,894	27	SE	281
6	F	1,583	28	RE	275
7	CO	1,567	29	AG	260
8	FE	1,562	20	IR	254
9	I	1,345	31	SB	251
10	NI	1,334	32	OS	246
11	B	1,036	33	CD	233
12	MO	1,020	34	TI	216
13	PT	960	35	AL	207
14	SI	627	36	LI	195
15	CR	612	37	TE	189
16	RH	568	38	CA	184
17	AS	537	39	V	160
18	MN	535	40	AU	156
19	PD	525	41	GE	142
20	K	494	42	NB	123
21	NA	482	43	MG	119
22	HG	479	44	RB	110

(以下略)