

# NEWSLETTER

Division of Chemical Information and Computer Science  
The Chemical Society of Japan

日本化学会  
情報化学部会

Vol. 3

No. 1

## 目次

PAC-CHEM' 84に参加して .....	藤原 譲	1
第7回情報化学討論会を振り返って .....	富田 研一	2
部会行事		
日本化学会第50春季年会プログラム .....		3
図書紹介		
計算機化学関係図書の紹介 .....	大沢 映二	4
情報化学雑学講座		
「情報」とはなんだろう? II. 雑誌の表紙 .....	細矢 治夫	5
海外ニュース .....		6
部会員名簿 .....		7
事務局だより .....		7

# PAC-CHEM '84に参加して

筑波大学電子情報工学系 藤原 謙

忙しい年の瀬12月に暖いハワイでのんびりできるのは、何とも嬉しいことで、おまけに団体大幅割引で気軽に参加できそうだったのは筆者だけではないことは日本からの参加者が千数百名であり、全体では6千名を越えたということにも示されている。

PAC-CHEM '84すなわちThe 1984 International Chemical Congress of Pacific Basin Societiesは去る12月16日から21日までホノルルで開催された。この国際会議は日、米、加の化学会が中心となり太平洋を取り巻く24ヶ国の化学会によって長期間にわたって準備、連絡されて初めて実現にいたったものである。75のシンポジウムと16の一般部門にわたり、2,500以上の論文と多くのポスター発表からも会議の盛大さがうかがわれる。

情報化学に関する発表は、3つのシンポジウムと一般講演およびポスターが各1セッションで以下にその概要を述べる。

まずChemical Information ScienceのシンポジウムはH.Skolnik (米), K.L.Loening (米), L.W.Shemilt (加) および佐々木 (豊橋技科大) (日)によって計画され、3セッションからなり第一のCommunicating Chemical Informationのセッションで化学の雑誌編集について加のJ.A.Simon, D.Dewer, L.W.Shemiltが現状と今後の問題点について経験に基づく意見が出され、編集の意義が情報流通の改革の中で改めて確認された。つづいてACSのS.W.Terrantが一次情報のオンライン化、おなじくACSのD.H.M.Bowenが抄録と一次情報の変化、CASのD.B.Bakerが化学情報の国際化についてそれぞれの立場から現在の変革の方向を多様化、広域化、国際化などの面からとり上げた。第二セッションはInternational Solutions to Problems of Nomenclatureで米のK.L.Loeningが概要を述べ、各分野毎の発表があった。物理化学は朽津 (東大)、無機化学は山崎 (名大)、有機化学はR.Shoenfeld (豪)、高分子は鶴田 (理科大)、生化学はE.C.Webb (豪)、臨床化学はH.P.Lehman (米)、分析科学はG.G.Guilbault, USAN CouncilからD.O.Schiffman (米)、農業はN.Donaldson (米)、総括はW.C.Fernelius (米)であった。情報流通のため極めて重要であるが多くの未解決の問題が指摘された。第3のセッションはComputer Manipulation of Chemical Informationで佐々木のイントロダクションに続いて米田 (東海大) の特別講演があり、今後の計算機の発展も含めた化学の予測の論理についてユーモアを交えた格調の高い内容で、参加者の関心を集めた。さらに平山 (サントリー) から新しい命名法HIRNの提案があり、I.D.Brown (加) は結

晶構造の検索、W.T.Thompsonは熱力学推薦のデータベース、A.Gelernter (米) はSynchom2のミニコン版、吉田 (住化) は薬品設計システムACACSについての発表を行った。

Non-Numerical Computation: Its Role in Scientific Problem SolvingのシンポジウムはS.Johnson (米), P.Lykos (米) および筆者によって計画され、W.T.Wipke (米) がこの分野の展望を行い続いて反応設計の改訂版QEDの発表を行い、佐藤 (群馬大) は4結合ネットワークで3次元構造のトポロジカルな取扱い、J.W.Kennedy (米) は流体学へのランダムグラムの適用、佐々木 (豊橋技科大) はCHEMICSの原子種拡張、M.E.Munkはスペクトルからの自動構造解析、内野 (東工大) は化学構造と反応の高速コーディングシステム、C.M.Wongは三重Qポール質量分析計の調整を人工知能の応用として行うこと、鈴木 (都臨床医総研) は分子の形状分析システムMOSA、M.Evens (米) は合成設計を行うオンラインDBから知識を獲得するエキスパートシステムSYNLMA、朝永 (クレハ化) は薬品設計におけるコンホーメーション解析についてそれぞれ発表を行い活発な討論が行われた。

Computer一般講演としては工藤 (山形大) の総称表現の一般的処理法、中山 (国際科学振興財団) の材料に対する総称表現、荒木 (JICST) の体系名から立体化学情報を含めた結合表自動生成システムSTARS、D.Lunney (米) の視覚障害者のためのポータブルで音声によるデータ収集マイコン、小沢 (東大) のオンライン化合物辞書システム、阿部 (豊橋技科大) 一代理佐々木) の結合表から標準名 (HIRN名) 生成するシステム、広田 (化情協) の化学構造表示システム、高山 (住化) のHanch-Fujita法による生理活性の予測、江崎 (名大) の薬品設計用グラフィックシステムGPQDD、神沼 (都臨床医総研一代理鈴木) の発ガン物質のシミュレーションがあった。

さらに一般のポスターセッションでH.W.K.Ongのシンガポールの化学情報、I.Singh (加) のRS-232Cを用いたマイコンインタフェース、前田 (電総研) の光ディスクを用いた質量分析のDB、叫田 (衛研) のプロトンNMRのマイコン用DB、M.Hawtonのアルキルの配向を密度から予測するシミュレーション、中野 (姫工大) パソコンモデリング、高橋 (豊橋技科大) の会話型グラフィックス表示、R.C.Movison (米) の視覚障害者用赤外スペクトルの音響への変換、T.O.Groeger (米) の核酸モデル、B.H.Ragaty (米) のヘマトロジー教育、A.Mihkelson (豪) の教養の化学用CAI、J.E.Burcusa (米) の薬学研究開発用情報システムの展示、説明が行

われた。

以上はInformation Transfer/Computationの部門のもので佐々木(豊橋技科大)およびSkolnik(米)によって組織されたものであるが別にAnalytical/Clinical/Environmental/Healthの部門に、Computers and Electronics in Chemical Analysisのシンポジウムがあり、G.Horlick(加)、T.Isenhour(米)および藤原(千葉大)によって計画された。G.Horlick(加)の化学計測におけるマイコンシステム、C.H.Lockmuller(米)の実験室用ロボット、G.D.Dwensの分析用ロボット、C.L.Wilkins(米)の化学構造解析システム、J.

F.Karnicky(米)の液クロ分析条件設定用エキスパートシステムについて発表が行われた。

全体を通じ計算機の高度利用、とくに知識工学や、ロボットのような最新の技術が積極的にかつ、多彩な分野、方式で実用化されようとしている傾向がよく現れており、発表に熱が入り質疑も活発であり、今後この分野の急速な発展を感じさせられた。

講演会場以外の催しも種々あり個人的な交流や、さらには南国の自然を大いにエンジョイされた人も多かったようであった。

## 第7回情報化学討論会を振り返って

大阪大学薬学部 富田 研一

表題の第7回情報化学討論会の世話人としての感想なり反省すべき点などいろいろ思い出すままに記してみたいと思う。

一昨年12月6-7日に京大薬学部および京大会館で開かれた第6回情報化学討論会には世話人の大崎健次教授(京大・薬)からの座長の依頼を受けて出席した。休憩時間に、当情報化学会長の佐々木慎一教授(豊橋科学大・工)と久し振りにお会いしたところ、たまたま次回情報化学討論会の世話人を誰にしようかという話が始まり、佐々木教授には25年前MITに同時期に留学し大変お世話になった誼みから、とうとう私が世話人を引受けることになってしまった。幹事の方々からは、できるだけのお手伝いをしますという力強い応援を受け、その時はまあ1年先のことだし何とかなるだろうと高をくくっていたのが裏目に出て、何度か準備の段階で大慌てをした思い出がある。会場として予約をしていた大阪科学技術センターが昨年春に大阪新空港反対グループによって火災を起こしたときには、テレビで黒煙をさかんにあげて炎上する同センターの建物をみながら一瞬しまった!会場をどうしよう!と暗たんたる気分になったこともあった。幸いにこの火災の修復は早く終り、当討論会の開催された時は、全く旧状に復して何の支障もなく、討論会に出席された方々もこの火災のことは全然御存知なかったのではな

いかと思う。さて、主催の日本化学会、共催の日本薬学会、日本分析化学会、日本農芸化学会の各学会誌の6月号に会告を掲載してもらい、また前回の討論会に演題を発表された方々には今回もぜひ参加して下さいという手紙を送ったのは、たしか昨年7月の始めだったと思う。この時点で前回のように一般講演の申込みが30題もあるかどうか全く予想もできなかったし、前回程度の申込みがあれば上出来だけどなあと心配しながら申込締切日を迎えたが、結果的には予想を大きく上回り一般講演48題の申込みを受けた。それに「化学情報サービ

スの最近の情勢」という特別講演を千原秀昭教授(阪大・薬)にお願いしたが、これだけの数の演題発表を2日間で消化するためには、前回のように討論を含めて1題20分の講演時間を割当てることは到底不可能で、結局1題15分に短縮せざるを得ず、講演された方々に時間的な大きな制約を課したことになり、大変御迷惑をおかけしたことを今でも申し訳なく思っている。今後ますます演題数が増えてゆき本討論会の会期が2日では足りなくなるのではないかと思うし、少なくとも各演題の発表時間は討論を含めて20分は欲しいところであらう。

いよいよ昨年11月19日午前9時から大阪科学技術センター8F大ホールで第1日目の講演発表が始まったが、要旨集の搬入に手間どり受付の前に参加者の長い列ができ、前途多難な幕開けとなってしまった。それに、座長交代の時間をできるだけ節約して2日間ですべての演題を消化しようとしたために、座長1人当りの分担時間が1時間30分から長い人で2時間にもなり座長をお引受け下さった先生方には大変お疲れになったのではないかと、ここに改めてお詫びとお礼を申し上げたいと思う。さらに第2日目には、構造活性相関シンポジウムが本討論会と平行して8F大ホールで開催されたため、本討論会は会場を4F401号室に移して午前9時から始まった。この401号室は収容人員が160名程度で、予想としてはまあまあ適当な大きさの部屋だと思っていたのが、現実には予想をはるかに上回る参加者数のために、多くの方々には部屋の後や横の通路に立って講演を聞いていただかねばならなくなった。この点からも私は世話人として正に失格であったと思うが、参加された方々が皆紳士であり、文句一つおっしゃらないことを良いことにして、とうとう本討論会の会場を最後までそのまま401号室で押し通してしま

った。全般的にみると、今回の討論会で発表された一般講演の内容は前回よりさらに多岐にわたっていたし、い

くつかの特徴があったように思う。たとえば、第1日目の前半は種々の分野でのデータベースの構築、設計に関する講演で占められたが、これらの研究に対して科学技術庁など日本における公共機関からのバックアップも得られ、現時点での情報化学の最重要課題の1つといえるであろう。また第2日目では、コンピュータグラフィックスによる分子設計や分子構造表示などに関する発表が多く、時代のニーズもこのあたりにあるのではないかと思わせる発表が目立ったのも今回の大きな特徴であろう。今回試みとして、16mm映写機を第2日目だけ使用できるようにしたが、講演の内容によってはスライドのように静止した図表で説明するだけでなく、動く画面によって聴衆にうったえ印象づけることも大切なものだとすることを痛感した。とくに3次元表示のコンピュータグラフィックスでは、

映画によるデモンストレーションが今後ますます重要になり、ひんぱんに利用されるようになるであろう。いづれにしても、年々膨大な量の情報量が蓄積されてゆくと同時に、大人から子供まで日常生活に深く浸透してゆくコンピュータの止まるところを知らない大きな流れを冷静に受けとめ、情報化学の正しい発展への努力をこの討論会を通じて地道に続けてゆくことが大切であろうというのが、私の本討論会から得た最大の印象であった。

なお次回は日本化学会秋季連合討論会の一環として今年10月に金沢市において開催されることになっているが、本情報部会会員の皆様の御協力によって、より活発な、より盛大な討論会が開かれることを心から祈念しながらこの報告を終ることにする。

## 部 会 行 事

### 日本化学会第50春季年会

#### 化学情報・計算機化学プログラム

会 期 昭和60年4月1日(月)～4日(木)  
会 場 明治大学神田校舎(東京都千代田区神田駿河台1-1)

H 会 場  
5号館541教室  
(化学情報・計算機化学)  
(分子設計・データベース)

- 4月1日午前 座長 飯塚 健(9:50～11:00)
- 1H06 分子設計用ソーラスの構成(国際科学振興財団・筑波大)○中山 堯・藤原 譲
- 1H07 分子設計のためのコンピューターソフトウェアシステム“TUTORS”の開発(豊橋技科大・K・I研・日本農薬)○佐々木慎一・高橋由雅・宮下芳勝・流石 正・田丸雅敏・吉田文隆・尾崎正美・吉田正徳・阿部英次
- 1H09 <sup>1</sup>H-NMRデータベースの作成(豊橋技科大・旭リサーチセ)阿部英次・竹沢幹人・佐々木慎一・田中一雄・山口 晃
- 1H10 コンピューターによる<sup>1</sup>Hおよび<sup>13</sup>C-NMRスペクトルの相互照合解析(豊橋技科大)○船津公人・阿部英次・佐々木慎一
- 1H11 <sup>13</sup>C-NMRスペクトルのコンピューター解析による混合物の組成分析(鐘紡化粧品研)○本田計一・菊池 源・望月章代・本間順子・米谷 融
- 1H12 8bitパーソナルコンピューターによるX線粉末回析データの検索(2)(明治大工)○清水康裕・中村利廣  
(計算機化学一般)  
座長 阿部 英次(11:00～12:00)
- 1H13 BASIC言語による測定器の自動制御—ラマンスペクトルの自動測定(北大理)○福士顯士・小林節郎・木村雅男
- 1H14 生物組織処理用コンピューター・プログラムの作製と計算結果の検討(サクラ精機研)岩垂 司

1H15 材料開発向けのパソコン用熱力学データベースMALTの作成(東大工・お茶女大理・化技研)○山内 繁・藤枝修子・横川晴美

1H16 実験データ解析のための最小二乗計算における初期値の推定(阪電通大)藤田岩男

1H17 有機リン化合物の構造活性相関—毒性(住友化学宝塚総研)○斉藤昇二・田上 昭・松田 正

1H18 4結合三次元ネットワーク上の置換分配(群馬大工)佐藤満雄

(命名・グラフィックス)

4月1日午後 座長 山内 繁(13:00～14:00)

1H25 放射状命名法に基づく有機化合物命名システムHI-RN—TUTの開発(豊橋技科大・サントリー)○細川和好・宮下芳勝・阿部英次・佐々木慎一・平山健三

1H26 MOLST命名法による多岐状スピロ脂環系多環炭化水素の命名(群馬大教育・学習院大計セ・学習院大理)○飯塚 健・田中伸英・今井 賢・菅 忠義・三浦 均

1H27 ダイヤモンド格子探索法によるケミカルトポロジー構造をもつ最小規模分子構造推定(学習院大計セ・学習院大理・群馬大教育)○今井 賢・田中伸英・菅 忠義・飯塚 健

1H28 結晶構造における充填断面図の表示(東大教養・ポーランド科学アカデミー)○岩本振武・Janusz Lipkowski

1H29 インターカレーション・シミュレーションにおけるコンピューターグラフィックスの利用(臨床研・東理大・お茶女大・フジミック)鈴木 勇○太田佳伸・伊藤由美子・栗原章浩・神沼二真

1H30 分子設計のための人工知能システムの設計(2)マンマシン系のインターフェイスとしての画像表示法(東農工大工)川原淳治○安川民男

講演終了後、日本化学会情報化学部総会をこの会場にて行ないます。部会員の方は是非ご参加下さい。

## 図 書 紹 介

この欄は、新刊紹介ではなく、手近に使用しておられる単行本・雑誌などの書評です。お役にいただければ幸いです。

会員の皆様からも、原稿を募ります。体裁は問いません。部会事務局までお送り下さい。

### 計算機化学関係図書の紹介

北海道大学理学部 大沢 映二

「情報化学に関する単行本」を紹介するよにこの御連絡を頂いたので、今回は情報化学の一部門としての「計算機化学」つまり理論化学計算と密接に関連した分野 (R. W. Counts, QCPE Bull. 1984, 4, 1) を対象とすることをお許し頂きたい。とり敢えず手元にある本を与えられた紙面の中でできるだけ沢山とり上げてみた。

#### (1) 計算技術

1. A.C.Norris, "Computational Chemistry, An Introduction to Numerical Methods", John Wiley & Sons: Chichester, 1981年, 454頁

2. W.J.Thompson, "Computing in Applied Science" John Wiley & Sons: New York, 1984年, 325頁

いずれも数学者の手による計算機用数学入門書。1の題名は明らかに不適当である。中味を見て計算機化学とはこのような技術に過ぎないのかと誤解されるのではないかと心配である。しかし良心的な教科書でイギリスのNAG (Numerical Algorithms Group) のサブルーチンライブラリーから選んだFORTRANプログラムを中心としてこん切ていねいな記述で練習問題も豊富。2は多分に1の影響を受けているがずっと高級で研究者向きである。

#### (2) ソフトウェア、ハードウェア

3. G. Beech, "FORTRAN IV in Chemistry, An Introduction to Computer-Assisted Methods", John Wiley & Sons: London, 1975年, 303頁

や古いが理論化学、実験データの処理、教育など巾広いトピックスについての入門的解説とFORTRANコンプリートプログラムの例がつけてある。かつて化学用のFORTRANプログラムのソースだけを再録したDetarの本があったが、それに比べると読み易く書かれていて今でも時々役に立っている。

4. W.M.Newman, R.F.Sproull, "Principles of Interactive Computer Graphics", McGraw-Hill: 東京(アジア版, 第2版), 1979年, 541頁

5. J.D.Foley, A. Van Dam, "Fundamentals of Interactive Computer Graphics", Addison-Wesley: Reading, 1982年, 664頁

研究室にグラフィック端末が入ることになった時、偶々カリフォルニア大学のWipke教授に会ったので何か良いグラフィックスの教科書はないかと訊ねたところ即座に4と5を推薦してくれた。同じような話が日経バイト昭59年10月号(創刊号)の295頁にも載っているところからみると有名な本であるらしい。何れも言語としてPASCALを採用している。

#### (3) 応用

6. W.G.Richards, "Quantum Pharmacology", 第2版, Butterworths: London, 1983年, 273頁

北大薬学部で行っている授業で大いに参考にしている。中味は必要最小限度のabinitio法の解説とMolecular pharma-

cologyをミックスしたものである。Richardsは今年から唯一の化学グラフィックス雑誌Journal of Molecular Graphicsの編集者になり、専門の分野でも電荷密度分布を中心とする独特なdrug designの手法で活躍している。

7. W.J.Jorgensen, L.Salem, "The Organic Chemists Book of Orbitals", Academic Press: New York, 1973年,

8. R.F.Hont, Jr., W.J.Pietro, W.J.Hehre, "A Pictorial Approach to Molecular Structure and Reactivity", John Wiley & Sons: New York, 1984年, 403頁

7は古いが余りにも有名なのであらためて解説する必要もないであろう。持っているコピーはSchleyer先生が使った署名入りのを頂いたもので自慢の種の一つである。8も分子軌道の図式表現を主目的としたもので期待して購入したがCRT画面を白黒写真にとったためか図としての出来栄は余り感心しない。7の図の方が遙かに見易く迫力があると感じるのは見慣れているせいだろうか?

9. S.R.Heller, R.Potenzzone, Jr. 編, "Computer Applications in Chemistry", Elsevier: Amsterdam, 1983年, 394頁

10. J.Bargon編, "Computational Methods in Chemistry", Plenum Press: New York, 1980年, 331頁

11. I.G.Csizmadia, "Computational Theoretical Organic Chemistry", D.Reidel: Dordrecht, 1981年, 426頁

9-11は題名だけから判断すると実に立派で、11などは個人的には振いつきたい程の魅力があるが、中味は同名のシンポジウムやセミナーのプロシーディングである。とくに10, 11についてはその大部分はほぼ同時に論文として専門誌にさらにくわしい内容が印刷されているので、本としての価値は低い。明らかに二重出版の弊害が現われている。プロシーディングを本に見せかけて販売するのは止めてもらいたいものである。

#### (4) 理論計算法

12. E.Clementi, "Computational Aspects for Large Chemical Systems", Lecture Notes in Chemistry シリーズNo.19, Springer-Verlag: Berlin, 1980年, 184頁

13. U.Burkert, N.L.Allinger, "Molecular Mechanics", ACSモノグラフシリーズNo.177, アメリカ化学会: Washington, D.C., 1982年, 339頁

分子軌道法に関する本の紹介は他の機会に専門の方に行って頂くとしてここでは12だけを挙げた。13はモレキュラーメカニクス計算法に関して今のところ唯一の成書で、しかも力作である。BurkertはAllinger先生の数多いお弟子さんのうちで最も優れた才能を持つ人であったが、この本を完成した直後に自動車事故で不慮の死を遂げた。この本の日本語版を出したいものと出版直後から考えているがやや程度が高いためかまだもって引き受けてくれる出版社がない。モレキュラーメカニクス法は計算機支援ドラッグデザインにおける中心的手法の一つなので需要は極めて高いし、原出版元のACSは非営利団体で著作権は低い筈だし、図版を譲渡してくれるということなので是非実現したいと願っている。

#### (5) 教育

14. 菊池 修「BASICによる化学」共立出版社: 東京, 昭和59年, 211頁

15. P.Lykos編, "Computer Education of Chemists", John Wiley & Sons: New York, 1982年, 223頁

14はマイコンを用いる化学教育のためのプログラム集である。物理化学の比重が高いがトピックス毎に化学の副読本的解説がついていて甚だ有用であると思われる。プログラムはFMシリーズのマイコン用フロッピーディスクに入れて別売

されている。15はアメリカ化学会の1982年度年会における同名のシンポジウムのプロシーディングであるが、この中身は専門誌に発表されたとしても一般の眼に触れにくいと思われるのではなはだ有用である。大学における教官、学生にたいするコンピュータ教育に関して幅広い話題が扱われている。

#### (6) 情報

16. C.J.Sindermann, "Winning the Games Scientists Play", Plenum Press: New York, 1982年, 頁

これは化学書ではないが、非常に面白いので蛇足ながらつけ加えさせて頂く。科学者を科学界という人間社会におけるゲームプレイヤーに見立てて守るべきルール、活用すべきルールなどを説いてsurvivalのためのアドバイスを与えることを目的としている。如何にもアメリカ人好みの本であるが、有益ことが多い。たとえば投稿論文へのレフェリーのコメント(とくに手厳しいもの)にたいしてどのような態度で接したらよいか、学会の聞き方、女性科学者の利点と欠点等々。このような解説が目新しく映るのは、我国にこのような精神的習慣が浸透していないためであろうか?

## 情報化学雑学講座

### 「情報」とはなんだろう?

お茶の水女子大学理学部 細矢 治夫

#### II. 雑誌の表紙

昔、ある大学の化学科の試験で、学術雑誌の表紙の色を答させる問題が出たそうである。僕も時々学生に同じことを聞いてにやにやしている。自分もやっている、という人は案外多いことと思う。最近ではこれにCODENがついている。CODENを知らない人は本部会には恐らくないと思う。しかしBCSJASの末尾の8や、JACSATのTが何なのかは、知らない人の方が多いだろう。これはエラーチェックのコードである。それはともかく、化学の雑誌の表紙については僕がここでくどくどいうことはない。今回は主に化学以外の雑誌の表紙についての雑学と提案を書いてみたい。

週刊誌の表紙が女性の顔一辺だから何とか脱皮できないかと編集者があれもこれもがいて面白い。しかしそれは別にして理学関係の学術雑誌の表紙を眺めてみよう。実は工学関係(建築や工芸)のデータがあればもっと面白いはずなのだが、一寸守備範囲でないので、後日どなたかにお教え願いたいと思っている。

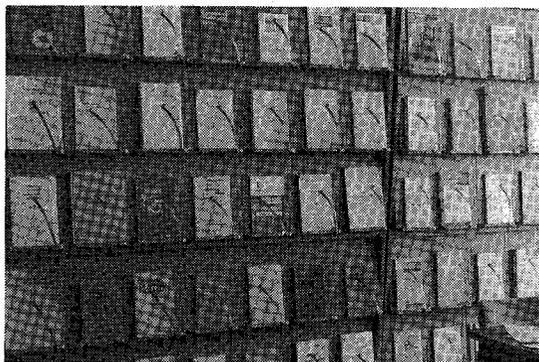


写真 1

写真1は数学科の図書室の新着雑誌の棚を写したものである。少しも面白くない。そこで物理科の関係の雑誌を見る。おなじみJ. Chem. Phys. は米国物理学会(AIP)発行だが、中

身はほとんどDepartment of Chemistryが占めている。こんな雑誌はもうやめてしまえと決議した某大学の物理教室もあると聞く。この表紙は昔から変らぬ特徴のある青一色である。僕が大学院生のとき、ある先生がこの雑誌の表紙は青いが中身は赤外が一杯占めているのとたまわれてぎょっとした。僕は紫外の方をやっていたのだ。この表紙も面白くない。

一つの学会や出版社が何種類かの雑誌をまとめて出している場合、表紙の色で内容別の分類をしているものがある。Royal Society of ChemistryのDalton, Perkin I, IIなどの類である。J. of PhysicsというのはAのMathematical and GeneralからのNuclear Physicsまで、表紙の色は同じだが、題字の色を変え、その色が背表紙の下の方にベロッと、しかし体裁よく塗ってあるから、未製本ものの整理が楽になっている。1798年から続いている由緒あるPhilosophical Magazine(物理の雑誌ですぞ)は、Aが全面青、Bが緑で塗り分けられている。イタリアのIl Nuovo Cimentoも、ABCを紫、だいたい、赤紫とどぎつく塗り分けてある。

カラーコードで一番有名なのはBBA(Biophysica et Biochimica Acta)ではないだろうか。オランダの出版社(Elsevier)らしく、センスの良い色で7, 8種類の分類をしている。しかも背表紙の下を見ると○印が2つあって、それが白白とか黒白とか黒黒というように分けられている。詳しくはわからないが、オリジナルペーパーとレビューの分類記号らしい。



写真 2

少しわき道へそれたが、また物理の方へ戻ってみよう。写真2の左上にあるのは、Review of Modern Physics, Review of Scientific Instrument, J. of Applied Physics, J. of Mathematical Physics, Solid State Physics, Soviet Physics JETPの面々である。全部AIPの出版である。表紙の中で黒く塗った場所が、そのVolumeの中のNumberを表わし、それが背表紙に続いているものもある。模様は続いていなくても、背表紙のマークはNumberごとにずれているから、未製本の雑誌を書棚に順序通りに並べると、写真3のようにきれいに斜めの筋が見える趣向である。この写真でも1号欠けているのがわかるだろう。化学でもACSのChemical Titlesの背表紙はさすがにそうなっている。Accounts of Chemical Researchは昨年からのマーキングを始めたが、気がついた人もあるであろう。ところが情報化学の本家本元のJ. of Chemical Information and Computer Scienceには何の趣向もない。Physical Reviewは何年か前から背表紙のマーキングを始めた。Physical Review Lettersのように一冊が薄いものは、巻の終りの号だけ巻の数字をコード化している(写真3参照)。Physics Lettersも背表紙に巻数のコード化をしていたが最近どういうわけかやめてしまった。

Canadian J. Physicsの表紙は、Can. J. Chem.の表紙と同じデザインである。Can. J. Zoologyなども同じで、これらは

全部National Research Councilおしきせのユニフォームである。デザインが同じで、わずかに違う同系統の色で区別してあるだけだから、これは機能的にはゼロに等しい。

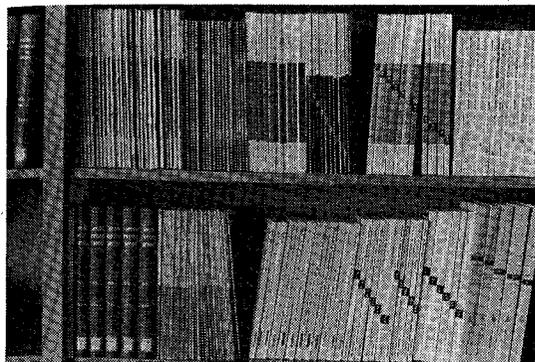


写真 3

それでは日本の物理の雑誌はどうだろうか。J. Phys. Soc. Jpn. は表紙に12個の黒丸が打っており、号(月)ごとにそのどれか1つの丸のそばに英語の月の名が書かれ、それ以前の月の場所は2重丸になっている。背表紙の月の数字の位置が6ヶ月を単位としてだんだん下になぜか行く(写真3を参照)。

## 海外ニュース

### Mathematical Chemistry 関係のポスドク募集

つい最近米国ジョージア大学のR. B. KingのグループのD. H. Rouvrayから、グラフ理論関係のポスドクを推薦してほしい旨の手紙をもらいました。この方面のポストとしてはかなり耳よりの話です。御関心のある方はお茶大の細矢まで至急連絡して下さい。

Dear Professor Hosoya:

At the beginning of this year the Office of Naval Research awarded our institution a grant totalling over \$1 million for the purpose of carrying out research in the area of mathematical chemistry. The award was made to Professor R. B. King of the chemistry department for research into chemical topology, graph theory and combinatorics. I joined the group recently to continue my earlier work in this general area.

A position has now become available for a post-doctoral fellow or a person of similar standing to work with me in the area of chemical graph theory. I should prefer that the person concerned has an interest either in topological indices or the theory of cluster compounds.

We believe that you may be in a position to help us in our search and, if any suitable candidates suggest themselves to you, we would be most grateful to hear about them. The position would be initially for one year, but could probably be renewed on an annual basis.

Thanking you for your kind attention, I am,

Yours sincerely,

Dr. Dennis H. Rouvray

一方Progress of Theoretical Physicsの方は何のコード化もしていないかったが、全く偶然にAccounts Chem. Res. と同じ昨年から背表紙のマーキングを始めたことは面白い。これは余談だが、日本物理学会誌のButsuriは、昔はButuriだった。訓令式ローマ字の信奉者が時代とともに減ってきた現われである。年輩の人の中には、自分の名前のローマ字つづりを訓令式からヘップバーン(ヘボン)式に変えたという人がかなりいるはずである。

このように理学系の学術雑誌の中で表紙のコード化の一番進んでいるのが物理である。しかし表紙のコード化は物理の専売特許ではない。もう30年以上も前の建築の雑誌で見たことがある。一方数学では写真1にあるように全く遅れている。J. of Combinatorial TheoryのA, Bの表紙が赤と青に塗り分けてあるぐらいである。数学セミナーという啓蒙誌の背表紙には月別コード化が見られる。生物関係もBBA以外は目ぼしいのが見当たらない。

そこでつぶやきが出るのだが、雑誌の表紙は所詮製本までのはかない命ではあるが、化学の方でももう少し遊びや機能をもたせたものが出てよいのではないだろうか。ここに紹介したようなものでなく、もっと面白いアイデアが沢山あるはずである。

(なお本文では、読みやすいことを目的としたので、雑誌名の省略形は標準のものに従わないものもある。)

## 事務局だより

### 昭和60年度情報化学部会役員

部会長	米田 幸夫	東海大学開発技術研究所
副部会長	飯塚 健	群馬大学教育学部
	藤原 譲	筑波大学電子情報工学系
幹事	阿部 英次	豊橋技術科学大学分析計測センター
	石田 嘉明	宇部興産㈱中央研究所
	岩本 振武	東京大学教養学部
	内野 正弘	東京工業大学資源化学研究所
	大沢 映二	北海道大学理学部
	工藤 喜弘	山形大学工学部
	鈴木 功	筑波大学電子情報工学系
	田辺 和俊	化学技術研究所
	中野 英彦	姫路工業大学応用化学教室
	花井 荘輔	富士写真フィルム㈱足柄研究所
	安岡 則武	大阪大学蛋白質研究所
監査	佐藤公太郎	富士写真フィルム㈱
	山本 修	化学技術研究所
顧問	佐々木慎一	豊橋技術科学大学第5工学系
	田中 信行	
	藤原 鎮男	千葉大学理学部
	湯川 泰秀	

### ニュースレター Vol.3, No.1

1985年3月20日 発行

事務局：101 東京都千代田区神田駿河台1-5, 日本化学会情報化学部会 (略号 DCICS/CSJ)

Office of the Secretary: The Chemical Society of Japan, 1-5, Kanda-Surugadai, Chiyoda-ku, Tokyo 101, Japan

# NEWSLETTER

Division of Chemical Information and Computer Science  
The Chemical Society of Japan

日本化学会  
情報化学部会

Vol. 3  
No. 2

(May 1985)

## 目 次

情報化学部会の大きいなる発展を目指して .....	米 田 幸 夫	1
<b>関連行事</b>		
第8回情報化学討論会 .....		2
第13回構造活性相関シンポジウム .....		2
<b>海外の動き</b>		
ACS 春季年会プログラム・アブストラクト .....		3
ICCCRE プログラム .....		13
1985 ACM SIGMOD CONFERENCE プログラム .....		15
<b>文献紹介</b>		
Journal of Chemical Education .....		17
Computer Handling of Generic Chemical Structures .....		19
構造表現と構造処理に関する文献 .....		21
<b>情報化学雑学講座</b>		
「情報」とはなんだろう？ Ⅲ. 論文誌の活字 .....	細 矢 治 夫	22
<b>機関利用案内</b>		
AICHE .....		24
<b>国際会議開催案内</b>		
INT'L OTTAWA CODATA CONFERENCE .....		25

# 情報化学部会の大いなる発展を目指して

部会長 米田 幸夫

(東海大学教授, 東京大学名誉教授)

日本化学会の情報化学部会が発足してから、ほぼ2年経過しました。この間の、化学情報、計算機化学などの情報化学の発展・普及には目覚ましいものがあります。我が国においても、若干、後発ながらも、年会・討論会では、企業も含めて、活発に発表されております。また、大学、企業体では、いくつかの大型システムが作成され、国外から化学情報管理システムが導入されるようになりました。一方、通産省工業技術院、科学技術庁では、国費によって情報化学関連のシステム、またはデータベースの育成を行い、或いは企画中であります。

眼を国外に移すと、アメリカ化学会では、CINF (Chemical Information)とCOMP (Computer in Chemistry)の二つの部会(Division)が活躍しておりますが、これに加えて、本年からCSEC (Computer Secretariat)が新たに発足しました。このほか、パソコンの活用に関しての大規模のシンポジウムも開催されております。CINF、COMPの部会員の数は、約3,000人と推定され、その会員総数が約10万人ですから、3%に当たります。また、我が国では殆ど開発されていない反応設計支援システムが、大学を中心として十数種も開発されております。

我々の部会は、「・・・情報化学の進歩発展のために、研究者の研究の促進と情報の交換を行い、・・・」(部会内規 5)の為に設立されたものです。情報化学の第2世代の開幕の時点で、一人でも多くの研究者が部会に参加し、その間で十分な情報の交換を行なう事が、其の使命達成の第一歩でしょう。

この3月に役員が交替した機会に、役員会で相談し、次の方針を決定しました。まず、部会員の増加です。日本化学会は会員が3万人ですから、その3%として約1000人が対応する部会員数になります。現在は200人にも達していませんので、当面は、部会員を500人に増加したいと考えております。周辺の方々のご勧誘を切望致します。

一方、我々の部会の情報交換媒体である、NEWSLETTERは、部会財政上の制約もあり、年4回、1号当り10ページ前後に止まっておりました。これを取敢えず、年6回発行、毎号のページ数も大幅に拡張し、記事の鮮度の向上と情報量の増加を図る事と致しました。

その編集方針は、まだ流動的ではありますが、我が「情報化学村」のタウン誌ともいうべき、日常的な情報の収集・伝達に役立つよう、幹事全員が取材に当る事と致しました。速報性と経費の関係から、紙面が若干は見苦しく成るでしょうが、ご理解を戴きたく存じます。

この部会に参加するにはそれなりの魅力が必要です。これには上記のNEWSLETTERの充実の他に、秋の情報化学討論会の参加費の割引とか、資料の頒布なども検討中で、近くその魅力点をお知らせいたします。また、分科会活動・講習会開催なども部会の充実と共に実施したいと考えております。NEWSLETTERの内容を始めとして、部会の活動方針の決定については、部会員の皆様の積極的なご意見を是非伺いたいものです。

NEWSLETTERの拡充などにはかなりの経費が必要ですが、当面は正部会員の会費は据置き、法人部会員のお願や、資料広告の掲載で賄う予定であります。近く、関係各社にお願い致しますので、我が国の情報化学の発展のために、是非、ご協力を戴きたく存じます。

## 関 連 行 事

### 第8回情報化学討論会

共催 日本化学会ほか

日 時 10月6日(日), 7日(月)  
会 場 石川県社会福祉会館4階中ホール(金沢市本多町3-1-10, 電話(0762)63-4181)

本討論会は日本化学会第51秋季年会の連合討論会として行なわれます。また同じ会場で第13回構造活性相関シンポジウム(10月7日(月), 8日(火), p.17参照)が一部重複して開催されます。

討論主題 1) 化学におけるコンピューターの利用一般, 2) 化学情報システム, 3) 情報化学一般。

講演申込締切 5月31日(金)

B5判用紙に次の事項を横書きで記載してお申し込み下さい。

1) 題目, 2) 発表者氏名(所属機関略名, 講演者に○印), 3) 討論主題(上記3主題のうちいずれか1主題を指定), 4) 連絡先(郵便番号, 勤務先, 氏名, 電話番号), 5) 講演内容の要約(100字程度)。

講演にはOHPまたはスライドプロジェクターの使用を予定しておりますが, 詳細はのちほどお知らせします。

講演要旨原稿締切 8月3日(土)

講演1件につき図表を含めて4枚以内とします。講演申込者には所定の原稿用紙(1320字詰)をお送りします。

懇親会 10月7日(月)18時から, 金沢市観光会館地下グリル(金沢市本多町6-27, 電話(0762)62-3401, 討論会場向い)で, 第13回構造活性相関シンポジウムと合同で行ないます。会費は4,000円の予定です。当日受付でお支払い下さい。

参加登録方法 日本化学会第51秋季年会への参加登録をお願いします。なお第13回構造活性相関シンポジウムに同時参加される方は, 当日同シンポジウム会場受付で追加登録費1,000円をお支払い下さい。

申込・連絡先 920 金沢市丸の内1-1 金沢大学教養部 関崎正夫(電話(0762)62-4281, 内線650)

### 第13回構造活性相関シンポジウム

共催 日本化学会・日本薬学会・日本農芸化学会ほか

日 時 10月7日(月), 8日(火)  
会 場 石川県社会福祉会館4階大ホール(金沢市本多町3-1-10, 電話(0762)63-4181)

本シンポジウムは, 日本化学会第51秋季年会の連合討論会(第8回情報化学討論会:10月6日(日), 7日(月)と一部重複して, 上記会場で開催されます。

討論主題 生理活性の解析ならびに関連事項に関する定量的取り扱い。

講演申込締切 5月31日(金)

B5判用紙に次の事項を横書きで記載してお申し込み下さい。

1) 題目, 2) 発表者氏名(所属機関略名, 講演者に○印), 3) 連絡先(郵便番号, 勤務先, 氏名, 電話番号), 4) 講演内容の要約(100字程度)。

講演要旨原稿締切 8月3日(土)

講演1件につき図表を含めて4枚以内とします。講演申込者には所定の原稿用紙(1,320字詰)をお送りします。

懇親会 10月7日(月)18時から, 金沢市観光会館地下グリル(金沢市本多町6-27, 電話(0762)62-3401, シンポジウム会場向い)で, 第8回情報化学討論会と合同で行ないます。会費は4,000円の予定です。当日受付でお支払い下さい。

参加登録費 要旨集代を含めて4,500円(要旨集郵送料を含む)を郵便振込(金沢5-3918)でご送金下さい。ただし, 第8回情報化学討論会に同時参加を希望される方は, あらかじめ日本化学会第51秋季年会の登録をすませ, 当日シンポジウム会場受付で追加登録料1,000円をお支払い下さい。

参加予約登録申込方法 葉書大の用紙の上半分に, 情報化学討論会, 懇親会への参加希望の有無を記載し, 下半分に氏名, 連絡先を記載して8月31日(土)までにお申し込み下さい。なお, 要旨集送付に必要ですので, 宛名を書いた葉書大の用紙を同封して下さい。当日の受付事務の混乱を避けるため, なるべく予約申込みをお願いします。

交通費特別割引および宿泊 シンポジウム参加者の便宜を図るため, 交通費(航空券, 国鉄券)の特別割引および宿泊の斡旋を(株)近畿日本ツーリストに依頼しました。希望の方は直接, 電話または葉書で近畿日本ツーリスト金沢営業所, 第13回構造活性相関シンポジウム担当(920 金沢市庁町1-1-34, 第一生命ビル, 電話(0762)32-0571)までお申し込み下さい。

申込・連絡先 920 金沢市宝町13-1 金沢大学薬学部 辻彰(電話(0762)62-8151, 内線4409)

### ご注意

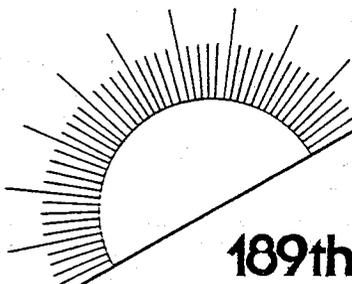
10月4日(金)から金沢大学で開催される日本化学会第51秋季年会(含連合討論会)化学関係学協会連合協議会研究発表会合同大会の一般研究発表講演申込分類に“21. 化学情報・計算機化学”がありますが, これにお申し込みの方の発表は, 上記情報化学討論会での発表となります。

「情報化学」発表題目—アメリカ化学会

1985年春季年会 [C & E NEWS MARCH 18, 1985]

FINAL PROGRAM

MIAMI BEACH



189th ACS  
National Meeting

April 28-May 3

CHED

DIVISION OF CHEMICAL  
EDUCATION, INC.

W. F. Coleman, *Program  
Chairman*

Section B

- Doral, Regency Room (Lobby Level)  
**Symposium on Museums and Chemistry**  
G. L. Gilbert, *Organizer, Presiding*
- 8:30—Introductory Remarks.  
8:35—92. NSF Programs in Informal Science  
Education, B. Z. Shakhshiri, G. W.  
Tressel.  
9:00—93. Programs for Workshops and  
Outreach in Chemistry, V. Wilcox.  
9:25—94. Chemistry Through Classes and  
Workshops, J. S. Paschal.  
9:50—95. Everyday Chemistry—The Devel-  
opment of a Permanent Museum Exhibit, D.  
A. Ucko.  
10:15—Intermission.  
10:25—96. Exhibits and Demonstrations: An  
Exciting Partnership, J. Fowles.  
10:50—97. Developing Demonstration Pro-  
grams in Chemistry, V. A. Santo Pietro.  
11:15—98. Training Demonstrators for  
Changing Programs, M. C. Stanley.  
11:40—99. Role of Science Museums in  
Chemical Education, M. Gardner.

CINF

DIVISION OF CHEMICAL  
INFORMATION

D. K. Johnson, *Program Chair*

**COSPONSORED SYMPOSIUM:**  
Use of Computers in Chemistry: *Computer  
Secretariat Inaugural cosponsored  
with Computer Secretariat*, (Tu, see page  
85)

**OTHER DIVISIONS' SYMPOSIA OF  
INTEREST:**  
History of Chemical Nomenclature *see  
Division of the History of Chemistry*, (Tu,  
page 60)  
Museums and Chemistry *(see Division  
of Chemical Education, Inc., W, page  
49)*

SUNDAY AFTERNOON

- Fontainebleau Hilton, French Room (Gallerie  
Level)
- Training Session for the National Library of  
Medicine's Chemical and Toxicological  
Online Databases  
M. Perkins, *Presiding*
- 2:00—Introductory Remarks.  
2:10—1. Training Session for Chemline,  
Toxline RTECS, and TDB, M. Perkins.  
5:00—Concluding Remarks.

MONDAY MORNING

- Miami Beach Convention Center, Room #154  
(1st Floor)  
**Symposium on Scientific Communication  
Pathways**  
W. V. Metanomski, *Presiding*
- 9:00—Introductory Remarks.  
9:05—2. History and Overview of Scientific  
Communication, D. F. Zaye, W. V. Meta-  
nomski.  
9:30—3. Primary Journals Today and To-  
morrow, D. H. M. Bowen.  
10:00—4. Scientometrics with Some Em-  
phasis on Communication at Scientific  
Meetings and through the "Invisible Col-  
lege," W. S. Lyon.  
10:30—5. Mapping the World of Chemistry,  
E. Garfield.  
11:00—6. Two Programs Directed Toward  
Technical Literacy, C. F. Aten.  
11:30—7. Scientific Communication through  
the General Journals and Its Translation for  
the Public Media, W. W. Greaves.

MONDAY AFTERNOON

- Miami Beach Convention Center, Room #154  
(1st Floor)  
**General**  
D. K. Johnson, *Presiding*
- 1:30—8. An Overview of Crown (Macrocyclic)  
Ethers for Potential Decontamination Ap-  
plications, R. C. Mason, C. R. Schmitt.  
2:00—9. A Review of the Patent Literature  
Relating to Decontamination, C. R.  
Schmitt.  
2:30—10. Supplementary Chemical Records  
in Medical Subject Headings (MeSH) and  
Their Retrieval in MEDLINE, R. L. Stander,  
M. G. Roney.  
3:00—11. Tagging of Scientific and Techno-  
logical Quantities in the Energy Data Base,  
G. Gorin, C. E. Stuber, B. C. Carroll.  
3:30—12. Electronic Publishing and Delivery  
of German Patent Information, G. Tit-  
lbach.  
4:00—13. ISTAR—A User-Developed Infor-  
mation Storage and Retrieval System, H. A.  
Kahn, H. Leffin, W. C. Schreiner.  
4:30—Divisional Business Meeting.

TUESDAY MORNING

- Miami Beach Convention Center, Room #154  
(1st Floor)  
**Symposium on the Impact of Online Data-  
bases on Patent Searching**  
S. M. Kaback, *Presiding*
- 9:00—Introductory Remarks.  
9:05—14. Impact of Online Databases on  
Patent Searching in a Pharmaceutical  
Company, E. S. Simmons.  
9:35—15. Effect of Online Searching on  
Patent Searches in a Broad-Based Chemi-  
cal Company, J. P. Daniszewski.  
10:05—16. Impact of Online Searching on  
Traditional Patent Searches in the Patent  
and Trademark Office, J. F. Terapane, E.  
D. Lewis.

- 10:35—17. New Vistas in Patent Information via Online Databases. S. M. Kaback, S. Pagnucco.  
 11:05—18. Challenge of the Future: An Open Forum on Online Databases and Patent Searching. S. M. Kaback.  
 12:00—Divisional Luncheon, joint with Division of Computers in Chemistry, (see Social Events, Ticket #109).

## TUESDAY AFTERNOON

5:00—Divisional Social Hour, DiLido, Roma Room.

## WEDNESDAY MORNING

Miami Beach Convention Center, Room #154 (1st Floor)

Symposium on Electronic Publishing  
 E. W. Johnson, *Presiding*

- 9:00—Introductory Remarks.  
 9:05—19. Electronic Publishing Using MACCS/DATAACS and REACS—Chemical and Reaction Storage and Retrieval. S. A. Marson.  
 9:30—20. Doc 5 and Related Publications—A Flexible Computer Databank. J. Buckingham.  
 10:00—21. Digital Production Tools. M. E. Jones.  
 10:30—22. Wiley Author's Guide to Word Processing and Generic Coding. R. Christopher.  
 11:00—23. An Overview of ICC's Electronic Systems for Book and Journal Publishers. J. R. Stephenson.  
 11:30—24. Impact of Electronic Publishing on Primary Delivery of Information. M. Kutz.

## WEDNESDAY AFTERNOON

Miami Beach Convention Center, Room #154 (1st Floor)

Symposium on Full-Text Files and Their Use  
 B. G. Wood, *Presiding*

- 2:00—Introductory Remarks.  
 2:10—25. Quick Answers to Difficult Questions: Full-Text Searching of ACS Journals. B. I. Feuer.  
 2:30—26. Full Text and Free Text: A Study of the Benefits. J. B. Becker.  
 2:50—27. Full Text Searching of U.S. Patents. J. F. Terapanne, R. J. Tansey.  
 3:10—28. Full Text Chemical Economics Handbook (CEH) Online: Coming Soon to a Terminal Near You. S. F. Read.  
 3:30—29. How We Use NEWSNET for Fun and Profit. F. H. Owens.  
 3:50—30. Experiences at General Electric Company. M. F. Kling.  
 4:10—31. MHS-Based Full Text Search/Retrieval System. B. M. Vasta, S. M. Casey, N. S. Johnson.  
 4:30—Discussion.

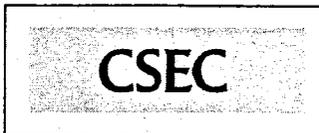
## THURSDAY MORNING

Miami Beach Convention Center, Room #201 (2nd Floor)

CINF Vendor Symposium: Questel, Inc.  
 N. R. Schmuft, *Presiding*

- 9:00—Introductory Remarks.  
 9:05—32. DARC System—A Retrospective View. J-P. Gay, M. P. O'Hara.  
 9:25—33. End-User Chemists—Experiences and Perspective. R. J. Manfre.  
 9:50—34. Computer Access to Chemical Information: The Information Specialist Perspective. M. B. Lavagnino.

- 10:15—Intermission.  
 10:30—35. Generic Structures and Chemical Patents. E. S. Simmons.  
 10:55—Panel Discussion: Questel/DARC—The User's Point of View. N. R. Schmuft, moderator.  
 11:45—36. Questel/DARC—A Prospective View. J. Michel, M. P. O'Hara.  
 12:00—Closing Remarks.



## COMPUTER SECRETARIAT

R. J. Marcus, *Program Chairman*

## TUESDAY MORNING AND AFTERNOON

Miami Beach Convention Center, Room #201 (2nd Floor)

Symposium on the Use of Computers in Chemistry: Computer Secretariat Inaugural, cosponsored with the Divisions of Analytical Chemistry, Chemical Education, Chemical Information, Computers in Chemistry, and Physical Chemistry

R. J. Marcus, *Presiding*

- 9:00—Introductory Remarks  
 9:10—1. Electronic Laboratory. R. E. Dessy.  
 9:50—2. Computer Assisted Studies of Molecular Structure-Biological Activity Relationships. P. C. Jurs.  
 10:30—Intermission  
 10:40—3. Molecular Graphics: Computer-Assisted Insight and Reasoning in Three Dimensions. R. Langridge.  
 11:20—4. Computer-Assisted Design in Organic Synthesis. W. T. Wipke, M. Hahn.  
 2:00—5. Computers in Theoretical Chemistry. B. Alder.  
 2:40—6. Mainframes Here, Minis There, Micros Everywhere! Computers in the Chemistry Curriculum. J. W. Moore, E. A. Moore.  
 3:20—7. Computer Aided Instruction of the Future. W. M. Butler.  
 4:00—8. Path of Computerized Chemical Information. A. K. Valicenti, R. E. Buntrock.  
 4:40—9. Computer Hardware and Software in Chemical Information Processing. J. E. Rush.



## DIVISION OF THE HISTORY OF CHEMISTRY

M. V. Orna, *Program Chairman*

## TUESDAY AFTERNOON

Fontainebleau Hilton, Beach Club Building, Bonaparte A Room (Lobby Level)

Symposium on the History of Chemical Nomenclature

J. G. Traynham, *Organizer, Presiding*

- 2:00—Introductory Remarks.  
 2:10—25. Development of Inorganic Nomenclature. W. C. Fernellus.  
 2:45—26. Official Rules for Organic Chemical Nomenclature: Emergence, Evolution, Emphases, and Errors. J. G. Traynham.  
 3:20—27. History of Carbohydrate Nomenclature. R. L. Whistler.  
 3:50—28. Ewens-Bassett Notation for Inorganic Compounds. M. V. Orna for G. B. Kauffman, C. K. Jorgensen.  
 4:20—29. ACS Committee on Nomenclature: 100 Years of Contributions to the Language of Chemistry. K. L. Loening.



## DIVISION OF INDUSTRIAL AND ENGINEERING CHEMISTRY, INC.

C. A. Audeh, *Program Chairman*

### Section B

Marriott Biscayne Bay, Lummus Island Room (Third Floor)

Symposium on Applications of Personal Computers in R&D

F. Kayihan, R. Khanna, *Organizers*

F. Kayihan, *Presiding*

- 1:55—Introductory Remarks.  
 2:00—59. Case Histories and an Evaluation of Personal Computer Applications. J. A. Llewellyn.  
 2:20—60. Philosophy of Laboratory Automation. D. W. Clary, M. Frenklach, D. L. Miller.  
 2:40—61. Apple IIe/ISAAC Model 91A System in University Laboratories. M. Ashrafkhorassani, R. D. Braun, R. Brunel, S. Lanoux, R. S. Perkins, K. J. Wiechelmann.  
 3:00—62. Using the IBM-PC in the Laboratory. S. C. Gates.  
 3:20—63. Interactive Simulated Calorimetry. L. M. Julien.  
 3:40—64. Analysis of Group Frequencies in IR by Computer. S. Gould.  
 4:00—65. A Transport and Thermodynamic Properties Package for Personal Computers. A. K. Shyu, D. H. Chen.  
 4:20—66. Automated Continuous Flow Analysis in High-Volume Testing Laboratories Using Personal Workstations. D. Strand, R. Munter.

### Section B

Marriott Biscayne Bay, Salon B (Third Floor)

Symposium on Applications of Personal Computers in R&D

R. Khanna, *Presiding*

- 8:55—Introductory Remarks.  
 9:00—89. Personal Computer Application for Catalyst Life Study. O. Bahn, W-P. Tai, D. W. Brinkman.

- 9:20—90. Use of a Personal Computer for On-Line Simultaneous Determination of Water, Carbon, and Sulfur by Infrared Absorption Spectroscopy. D. P. Smith, H. H. Sandling.
- 9:40—91. Heat Integration of Distillation Sequences Using Microcomputers. C. F. Chen, M. R. Chen, G. J. Prokopakis.
- 10:00—92. Optimization of Waste Heat Recovery Systems. D. Karman, S. Sundarajan.
- 10:20—93. Data Acquisition and Control of a Continuous Fermentation Unit. G. Traugh, M. N. Karim.
- 10:40—94. Development of a Computer Coupled Fermentation System. P. J. Allsop, M. Moo-Young, G. R. Sullivan, J. M. Scharer.
- 11:00—95. Retrofitting Computer Control on a Pilot Scale Fermentor. S. W. McInnis, P. J. Allsop, M. A. Boudreau, M. Moo-Young, G. R. Sullivan, B. Stickney.
- 11:20—96. Implementing Forest Growth and Yield Models on a Spreadsheet. D. L. Lee, S. D. Grisilis, B. S. Chou.

Section B

Marriott Biscayne Bay, Salon B (Third Floor)  
 Symposium on Applications of Personal Computers in R&D  
 R. Khanna, *Presiding*

- 1:55—Introductory Remarks.
- 2:00—114. Microcomputer for Simple Process Control. N. K. Kim.
- 2:20—115. Process Control by Small Personal Computers. G. L. Hayward.
- 2:40—116. Fermentor Automation. A. V. Forster.
- 3:00—117. Process Control for Heavy Oil Upgrading. F. T. T. Ng, D. J. Patmore.
- 3:20—118. Acquisition and Analysis of Rheometer Data Using an Apple II+ Microcomputer. R. J. Akers, G. P. Roberts.
- 3:40—119. Automation of Stirred Tank Heat Transfer Experiment with an Apple II+ Personal Computer. G. L. Koestel, W. L. S. Laukhuf.
- 4:00—120. Use of a Commercially Available Microcomputer for Electrochemical Experimentation. A. Duffield, P. J. Mitchell.
- 4:20—121. Control, Data Acquisition and Analysis of Catalytic Gas-Liquid Mini Slurry Reactors Using a Personal Computer. N. A. Mohammadi, G. L. Rempel.

Section B

Marriott Biscayne Bay, Salon B (Third Floor)  
 Symposium on Applications of Personal Computers in R&D  
 F. Kayihan, *Presiding*  
 8:55—Introductory Remarks.

- 9:00—135. Interfacing an Apple to Instrumentation for Residual Gas Analysis and High Pressure DTA. G. A. Otten, J. M. Longo, W. L. Huang.
- 9:20—136. Automated Kinetic Studies in a Methanation Catalyst Screening Reactor Using a Microcomputer. D. Strand, J. H. Seinfeld.
- 9:40—137. A Data Acquisition and Reduction System for Measurement of High Precision Solvolytic Isotope Effects and Kinetics Implemented on an IBM-PC. V. J. Shiner, M. J. Tomasik.
- 10:00—138. High Precision Solvolytic Isotope Effects and Kinetics Utilizing a Pulsed Bipolar Conductivity Apparatus. V. J. Shiner, M. J. Tomasik, F. P. Wilgus.
- 10:20—139. Computer-Assisted Data Acquisition and Analysis of HPLC Data in Coronary Autoregulation Study. P. R. Brown, M. J. Wojtusik.
- 10:40—140. Computerized Measurement of Potassium Flux from Human Erythrocytes. W. D. Hobey, D. A. Gouin, W-H. Shen.
- 11:00—141. An On-Line Method for the *In Vitro* Evaluation of Prosthetic Heart Valves. Y-R. Woo, A. P. Yoganathan.
- 11:20—142. Isolation and Purification of Interleukin-1 from Blood Serum Using a Microcomputer-Based HPLC Workstation. M. Heaton, J. Massoni, R. Khanna.

情報の提供・寄稿のお願い

本ニュースレターでは、部会員の方々からの投稿をお待ちしております。

大小にかかわらず海外で開催されるシンポジウム等のニュース・概要を部会までお知らせ下さい。

そして予稿集や参考となる印刷物をお持ちである旨のアナウンスでも結構ですし、またはそれらのコピーなどをお送りいただければ、部会員がそれを利用できますよう当部会で取り計らいます。国際会議とまでいかなくともご出席の海外の会議の様子や御感想をお差し支えない程度に部会員にご披露いただければ幸いです。

オリジナリティの主張ということではなく、研究途上でさして体裁はととのわなくても大方の関心に訴えたい情報化学関連の研究テーマをお持ちの場合や、自分では遂行する時間等の余裕がないので何方かに協力をお願いしたいような時に公募をしたい場合がありますら、ニュースレターの紙面をご利用下さい。

情報・原稿の送付先    ☎101 東京都千代田区神田駿河台 1-5  
 社団法人 日本化学会 情報化学部会 事務局  
 電話 (03) 292-6162

American Chemical Society  
**DIVISION OF COMPUTERS IN CHEMISTRY**

189th ACS National Meeting

Miami Beach, Florida  
April 28-May 3, 1985

K.L. Ratzlaff, Chairman  
T.H. Ridgway, Secretary

- MONDAY MORNING - SYMPOSIUM ON ACADEMIC PROGRAMS IN COMPUTATIONAL CHEMISTRY - P. Lykos, Presiding

1. A BACHELOR'S DEGREE PROGRAM IN COMPUTATIONAL CHEMISTRY. Peter Lykos, Chemistry Department, I.I.T., Chgo 60616.

The flexibility inherent in a generic bachelor of arts degree at IIT makes it possible for a student to develop a unique program of study building on an already in-place major-field curriculum as the primary focus and selecting from a wide variety of secondary focusses so long as certain constraints are adhered to. Within that framework a fairly comprehensive bachelor's degree in computational chemistry has been defined which prepares a student for postgraduate work in chemistry or computer science - or - enables a student with only a bachelor's degree to enter the job-market with competency in a demanding substantive discipline as well as with considerable range and depth in current computer systems and their evolution.

2. PROPOSAL FOR A CHEMISTRY/COMPUTER INFORMATION SCIENCE OPTION AT SOUTHEASTERN MASSACHUSETTS UNIVERSITY. Donald W. Boerth, Michele I. Scullane and Timothy C.K. Su, Chemistry Department, Southeastern Massachusetts University, N. Dartmouth, MA 02747.

The Chemistry Department at SMU, with the cooperation of the Department of Computer Information Sciences, is in the process of developing a Chemistry/CIS option. Presently two computer courses are taught by the Chemistry Department: a freshman introductory Fortran course which is associated with the freshman lab topics, and a junior-level advanced Fortran/applied math course which is tied into the second semester of Physical Chemistry. In addition, experiments involving microcomputer interfacing are being introduced in both the Physical and Analytical Chemistry labs.

In the proposed curriculum, students taking the Chemistry/CIS option will forgo a sophomore course in descriptive inorganic chemistry and one advanced chemistry elective in order to allow time for introductory CIS courses. It is hoped that students will be able to complete approximately the first three years of the courses required for a CIS major during their four years of college. Because of the demanding nature of this program, it is anticipated that a minimum grade point average will be required for admission into the option after completion of the freshman year.

3. COMPUTER SCIENCE CONCENTRATION AT ROANOKE COLLEGE; B. P. Huddle; Department of Chemistry, Roanoke College, Salem, Virginia 24153.

Roanoke College, like many other small liberal arts colleges, has found it impossible to offer a degree in Computer Science. Faced with our students' need for certification of some kind of competency with computers, Roanoke College's approach was to develop a "Concentration" in computer Science. A description of the Concentration will be presented, and its impact on the College and on the Chemistry Department will be discussed.

4. MAJOR OPTION IN COMPUTATIONAL CHEMISTRY. K. Krogh-Jespersen, Department of Chemistry, Rutgers, The State University of New Jersey, New Brunswick, NJ 08903

The rationale behind establishing a major option in computational chemistry within the baccalaureate chemistry program at Rutgers will be outlined. Our current plans, methods of implementation, acquired equipment (minicomputer, graphics), physical set-up, and the people involved will be briefly described. The contents of our Introduction to Computational Chemistry course will be discussed along with the reactions to and lessons learned from offering and teaching this course. Our progress on establishing additional courses in computational chemistry and incorporating the usage of a minicomputer into already established courses will be mentioned. Finally, an attempt will be made to assess the overall impact on the chemistry program from having a minicomputer dedicated to educational purposes.

5. COMPUTER SCIENCE OPTION CAN ENHANCE TEACHING CHEMICAL CONCEPTS. K. J. Miller. Department of Chemistry, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, New York 12181.

An ACS accredited Computer Science Option in Chemistry has been formalized at RPI. It entails a combination of courses which may be characterized as Computer Science (Languages, Data Structures, etc. 12 cr. hrs.), Applied Mathematics (6 cr. hrs.) and Experimental and Theoretical Chemistry (8 cr. hrs.). Of special interest is the enhancement of the teaching of Chemistry. Experimental work with mini computers emphasizing BASIC, interfacing to monitor experiments, data analysis and graphics constitutes one 2 cr. hr. laboratory as well as portions of the remaining advanced level laboratory courses (2 cr. hrs.). The ease of performing complicated experiments allows the student to obtain results quickly for interpretation. Theoretical Chemistry entails computer graphics, conformational analysis with emphasis on menu oriented computational procedures. Molecule building, energy optimization with quantum mechanical and molecular mechanics fitting procedures relate chemistry to computing through applied mathematics. Graphics with stereographic viewing permit interactive work in problem solving and research oriented projects. A summary of our program at RPI with stereographic projections on slides will be presented.

6. A COURSE IN APPLICATION OF MICROCOMPUTERS IN CHEMISTRY, Chung Chieh, Department of Chemistry, University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada N2L 3G1

Since the successful networking of IBM Personal Computers by the Department of Computing Services at this University, these systems have been employed in various disciplines for teaching. These low cost networks are attractive in both pure and applied sciences because of the color graphics output. A network is provided for all chemistry students for any legitimate application. We start the course 'Introduction to chemical problem solving by computer' in year two. Topics include: simulation of reactions, numerical solutions of rate problems, numerical methods applied to harmonic motions and Schrodinger equations, Fourier series, chemical information storage and retrieval, data analysis and manipulation, regressions, application of matrices to chemical problems. Students are asked to do a major project in addition to the weekly assignments. Some of the projects are: simple Huckel molecular orbital calculations, simulations of microwave spectra of diatomic molecules, simulations of titrations, management of mass spectra, display the rotation of molecules, etc. Course material will be available for inspection at the conference.

7. COMPUTATIONAL CHEMISTRY MINORS IN CHEMISTRY DEPARTMENT. Joseph F. Chiang, Department of Chemistry, State University of New York College at Oneonta, Oneonta, New York 13820

One of the most important tasks a chemist faces is to treat the numerical data correctly and efficiently in the laboratory. Due to technological advances and availability of less expensive and powerful computers, it is highly desirable to train a chemist in this direction. A minor in computational chemistry is proposed for our chem-

istry majors. Such BA/BS graduates could enter the professional job market immediately after graduation. Graduates of this program could also continue their advanced degree in chemistry, computer science or a combination of both. A list of suggested courses can be offered to any chemistry major who is interested in this program. Only one new course will be proposed for this program which is parallel to CS 231 (Numerical Computing): Computational Chemistry. This course will cover topics such as experimental errors and their statistical treatment, computational errors and their treatment, solutions of non-linear equations and simultaneous linear equations, numerical solutions differential equations, interpolation and approximation.

- TUESDAY MORNING AND AFTERNOON - SYMPOSIUM ON THE USE OF COMPUTERS IN CHEMISTRY: COMPUTER SECRETARIAT INAUGURAL - COSPONSORED WITH THE DIVISIONS OF ANALYTICAL CHEMISTRY, CHEMICAL EDUCATION, CHEMICAL INFORMATION, COMPUTERS IN CHEMISTRY, AND PHYSICAL CHEMISTRY - ABSTRACTS IN SECTION CSEC

- WEDNESDAY MORNING - GENERAL - R.J. Marcus, Presiding

8. INTRODUCING USE OF MICROCOMPUTERS IN UNDERGRADUATE PHYSICAL CHEMISTRY  
R.J. Hanrahan, Chemistry Dept. Univ. of Florida, Gainesville FL 32611

A program was recently begun to introduce use of microcomputers in the undergraduate physical chemistry lecture course at the University of Florida. Equipment selected for a pilot section of 20 students consists of six dual-drive Sanyo MBC 555 microcomputers with 256 K ram, Intel 8088 and 8087 processors running generic MS-DOS, monochrome monitors, and printers with graphics mode. System software available includes FORTRAN, BASIC, and Pascal along with word processing and data base software. The major applications software currently being used is "Computer Based Studies in Physical Chemistry", a series of about 80 programs by G. Barrow which feature typewriter-graphics output. Locally written software includes packages for statistical thermodynamics and enthalpy of formation estimation by Benson's group additivity method. Efforts are in progress to bring up a CNDO program and a Gear integrator for chemical kinetics. Funding from the Dreyfus Foundation and contribution of 8087 chips by Intel Corporation are gratefully acknowledged.

9. NONLINEAR REGRESSION AND MULTI-STEP CHEMICAL EQUILIBRIA.  
Milton D. Johnston, Jr., Department of Chemistry, University of South Florida, Tampa, Florida 33620

In many types of chemical investigations involving complex chemical equilibria, nonlinear systems are often encountered. It will be the purpose of this presentation to illustrate how study of such systems is facilitated by computer methods.

In particular, an examination will be made of the most efficient algorithms for the calculation of species concentrations (given equilibrium constants and formalities) and for seeking best-fit values of chemically relevant parameters such as equilibrium constants. The primary examples to be studied here will be those of acid-base titrations and of the analysis of NMR fast-exchange equilibria.

10. A NUMERICAL INVERSE LAPLACE TRANSFORM TECHNIQUE FOR XPS DEPTH PROFILING DATA ANALYSIS, P. C. McCaslin and V. Y. Young, Dept. of Chemistry, University of Florida, Gainesville, FL 32611.

In the course of XPS (X-ray Photoelectron Spectroscopy) studies of lead ion-selective electrodes, a need to perform non-destructive depth profiling of the surface concentrations of identifiable species has arisen. Variable angle XPS, a method whereby photoelectron peak intensity data is obtained as a function of the angle of photoelectron escape with respect to the surface plane, has been developed for this purpose. Concentration profiles for a surface layer of thickness roughly equivalent to the photoelectron mean free path can be obtained by performing an inverse Laplace transform on this data. Rather than using a limited number of functional forms for the concentration profiles and performing an analytic inverse Laplace transform, a method described in the published literature, we have attempted a numerical approach. This method avoids the limiting assumptions of the functional form approach, but it also introduces several unexpected problems. These problems will be discussed, along with their effect on the nature of the data collection process.

11. QUANTITATIVE PEAK AREAS OF OVERLAPPING CHROMATOGRAPHIC PEAKS USING TARGET TRANSFORMATION FACTOR ANALYSIS WITH LINEAR INEQUALITY CONSTRAINTS. Paul J. Gemperline, Department of Chemistry, East Carolina University, Greenville, North Carolina 27834.

The traditional method of target transformation factor analysis (TTFA) is used to develop models of factors which describe experimental data. In certain cases, equations describing a system of linear inequality constraints can be used to augment and reformulate the method of TTFA. One application of TTFA with linear inequality constraints has recently been developed to deconvolve overlapping chromatographic peaks. The method produces estimates of the deconvolved elution profiles, estimates of the spectra of the individual components, and quantitative peak areas. In this paper, simulated data is used to test the effect of random noise, chromatographic resolution, and peak skew on the accuracy of the quantitative results. Preliminary results showing the deconvolution of a real mixture will also be given.

12. AN INEXPENSIVE, PORTABLE DATA ACQUISITION SYSTEM USED IN FRICTION REDUCTION STUDIES. R. D. Hester, R. A. Campbell, Department of Polymer Science, Univ. of Southern Miss., Hattiesburg, MS 39406.

An inexpensive data acquisition system has been developed which records the friction reduction existing when dilute polymer solutions experience turbulent flow. The system consists of a Hewlett Packard 41CX handheld computer connected by a Hewlett Packard HP-IL interface loop module to an Interface Instrument ADC41 analog to digital interface. The loop also allows the 41CX to transfer data to a Hewlett Packard HP 85 micromputer. The HP 85 is used for extensive data manipulation and graphical presentation. The 41CX handheld computer has a built-in timer which allows true, time-based data acquisition. The ADC 41 interface is an 8-channel, 4½ digit interface with input ranges from 0.2 to 200 volts. The system is inexpensive, portable, user friendly, and sufficiently flexible to fill the data acquisition needs of numerous experimental systems. Use of the system to collect friction reduction data will be presented.

13. A COMPUTER-CONTROLLED PRESSURE REACTOR FOR KINETIC STUDIES. L.D. Martin, Division of Science & Mathematics, University of Tampa, Tampa, FL 33606.

A low pressure ( 100 psig) reactor system has been connected to a Radio Shack TRS80 Model 4 computer for pressure measurement and control. The computer monitors the pressure of the system and controls a solenoid valve that allows more reaction gas to enter the reactor. This system has been used to study the kinetics of hydrogenation reactions. The structure of the system and some examples of its use will be discussed.

**JOINT SYMPOSIA**  
**DIVISION OF COMPUTERS IN CHEMISTRY**  
**AND RELATED ABSTRACTS FROM**  
**COMPUTER SECRETARIAT**  
**(DIVISIONS OF ANALYTICAL CHEMISTRY, CHEMICAL**  
**EDUCATION, CHEMICAL INFORMATION, COMPUTERS**  
**IN CHEMISTRY and PHYSICAL CHEMISTRY)**

● TUESDAY MORNING AND AFTERNOON - SYMPOSIUM ON THE USE OF COMPUTERS IN CHEMISTRY:  
COMPUTER SECRETARIAT INAUGURAL - COSPONSORED WITH THE DIVISIONS OF ANALYTICAL  
CHEMISTRY, CHEMICAL EDUCATION, CHEMICAL INFORMATION, COMPUTERS IN CHEMISTRY, AND  
PHYSICAL CHEMISTRY - R.J. Marcus, Presiding

1. THE ELECTRONIC LABORATORY. Raymond E. Dessy, Virginia Polytechnic Institute and State University, Chemistry Department, Blacksburg, Virginia 24061

Computer technology has given chemistry a number of powerful tools that can provide leverage directed toward a more efficient use of time, and an expansion of our imagination. These include: Laboratory Workstations, Laboratory Information Management Systems, Local Area Networks, Graphics, Robots, and Expert Systems. Coordinated use of these tools requires both careful implementation, and a willingness to adopt new work habits. We owe it to ourselves to pursue these goals. Managers must provide these tools to effectively use the skills of their work force. Those in the teaching environment have an obligation to encourage students to incorporate these strategies into their professional armamentarium as early as possible. Some successful applications of these new tools that support the electronic laboratory will be reviewed. The problems associated with introduction and education in industrial and academic environments will be explored.

2. COMPUTER ASSISTED STUDIES OF MOLECULAR STRUCTURE-BIOLOGICAL ACTIVITY RELATIONSHIPS. F. C. Jurs, Department of Chemistry, 152 Davey Laboratory, The Pennsylvania State University, University Park, PA 16802.

The relationships between molecular structure and biological activity can be investigated for large sets of organic compounds using computer-assisted methods. Complementary approaches to SAR include: (a) the correlative approach of Hansch and coworkers, which involves building linear models for congeneric series of compounds using regression analysis of substituent constants, (b) methods that rely on conformational analysis with graphical display for the intensive study of a few molecules, (c) quantum mechanical methods that focus on electronic properties, and (d) qualitative methods that use multivariate statistics and pattern recognition to develop discriminants. These methods will be reviewed briefly, and recent example studies will be cited. One approach involves the combination of chemical structure information handling, force-field molecular modeling, substructure searching, and related methods with pattern recognition and statistical analysis. An interactive computer software system, ADAPT, has been implemented to automate this approach to SAR studies and to allow its application to large sets of organic compounds. Results obtained in several current investigations will be presented to illustrate its applicability. The overall goal of these SAR studies is to draw generalizations out of a large set of detailed observations, and to generate the capability to predict the biological activities of new compounds from their molecular structure.

3. COMPUTERS IN THEORETICAL CHEMISTRY. B. Alder, Physics Department, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA 94550.

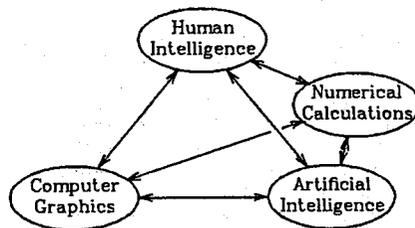
Numerical computations have led to enormous progress in theoretical chemistry. Through the Monte Carlo method both the classical and quantum many-body problems have been treated. Results will be discussed for the structure of classical liquids and quantum solids, and for the correlation energies and potential energy surfaces of chemical molecules. Through the molecular dynamics method many time-dependent properties have been investigated. Results will be given for transport coefficients, for Brownian motion, for hydrodynamic phenomena, and for chemical reaction rates.

4. COMPUTER-ASSISTED DESIGN IN ORGANIC SYNTHESIS, W. Todd Wipke and Matt Hahn, Department of Chemistry, University of California, Santa Cruz, CA 95064

Application of computers to the design of organic syntheses has made great progress since it began in 1969. The methodology has been adopted successfully by some industrial laboratories, but is still being studied by others. This paper reviews the accomplishments and difficulties in this methodology and previews some future developments.

5. MOLECULAR GRAPHICS: COMPUTER-ASSISTED INSIGHT AND REASONING IN THREE DIMENSIONS. Robert Langridge, Computer Graphics Laboratory, University of California, San Francisco.

We are combining interactive three dimensional computer graphics with numerical calculations and the methods of artificial intelligence into the integrated system visualised schematically below. I describe the realisation of the inanimate portions of this concept in silicon, copper and code.



6. MAINFRAMES HERE, MINIS THERE, MICROS EVERYWHERE! COMPUTERS IN THE CHEMISTRY CURRICULUM. John W. Moore and Elizabeth A. Moore, Department of Chemistry, Eastern Michigan University, Ypsilanti, MI 48197.

The ACS Committee on Professional Training's latest guidelines for undergraduate programs specify that chemical applications of computers ought to be included at all levels of the curriculum. In general CPT suggests that such applications be incorporated into existing courses rather than constituting a separate, required course. This is a tall order considering the myriad of applications and many faculty members' lack of computer literacy. I will discuss examples of incorporating computers effectively, without displacing chemical subject matter, and indeed enhancing the latter. Many of these involve Project SERAPHIM. Sponsored by NSF Science Education, SERAPHIM is a clearinghouse for information about microcomputer-related instruction in chemistry. Many of its activities and materials will be helpful to persons seeking to include computer topics in their curricula. Examples range from a database of interfaced experiments and plans for inexpensive interfaces through a variety of instruction-related programs from freshman through graduate level, to suggestions and directions for effective use of general-purpose business-oriented software such as spreadsheets, wordprocessors, and databases.

7. COMPUTER AIDED INSTRUCTION OF THE FUTURE. William M. Butler, Department of Chemistry, University of Michigan, Ann Arbor, MI 48109.

The slow acceptance of CAI in chemistry has been partially caused by the failure of software to match the high expectations and potential most educators feel computers are capable of if programmed properly. Micros have been around more than seven years and we are still using them mostly for drill and practice. Better software would have more graphics, more help for the bottom as well as the top student, and would have a higher "entertainment value" to attract students. Great software would also have integrated video images and sound. Arcade games have shown that it is possible to develop such software but it is very expensive in time and talent to do so. For example, the game "Dungeons and Dragons" demonstrated the use of videodisc/computer potential for CAI. I am not sure we were watching. The new generation of hardware offers potential we can only hope we will understand and use wisely. I will discuss the future of CAI in chemistry including specific properties a CAI machine of the future might have.

8. THE PATH OF COMPUTERIZED CHEMICAL INFORMATION. A. K. Valicenti, Standard Oil Co. (Indiana), Chicago, IL 60601, and R. E. Buntrock, Amoco Research Center, Naperville, IL 60566.

The history of computerized chemical information will be presented in terms of milestones along the path of progress through three decades. The significant advances to be discussed will be initial computerization by a few government, industrial, and scientific organizations, the transition from batch to online systems, the impact of graphics capabilities, and the integration of recent advances in computer technology towards the total chemical information processing spectrum. These milestones will also be examined in terms of the participants: specialists, intermediaries, and end-users. The progress to expand the number of key players parallels the improvements in man-machine interfaces. End-user participation is attributed to these advances, which will be examined. A future milestone for chemical information will be examined in terms of value-added processing. Some examples include use of expert systems, automatic indexing, and computer aided translation.

9. COMPUTER HARDWARE AND SOFTWARE IN CHEMICAL INFORMATION PROCESSING. James E. Rush, James E. Rush Associates, Powell, Ohio 43065.

Chemists seem always to be in the van in respect to application and use of modern technologies to problems of chemistry and chemical information. This paper takes a look at the progress of chemists in using computer systems (hardware and software) to sustain, expand and manage what is perhaps the world's most successful information distribution system, albeit one of many parts. Beginning with the days before stored-program computers--the "mechanization" era--this paper presents an overview of developments in the application of computer and related technology to the handling of chemical information. Among the topics covered are chemical structure representation, nomenclature manipulation, vocabulary control, electronic publishing, photocomposition, graphics, and artificial intelligence.



# VIIth International Conference on Computers in Chemical Research and Education

Garmisch-Partenkirchen

Federal Republic of Germany

June 10-14, 1985

## Plenary Lectures

**From Dirty Data to Clean Information: Multivariate Calibration  
in Analysis of Intact Samples**  
H. Martens, Aas-NLH (Norwegen)

**Multivariate Analysis: Converting Chemical Data Tables to Plots**  
S. Wold, Umeå (Schweden)

**Research and Activities in the Area of Statistical Methods**  
W. G. Hunter, Madison (USA)

**Computer-Aided Decision Making in Laboratory Management**  
B. G. M. Vandeginste, Nijmegen (Niederlande)

**Artificial Intelligence in Chemistry, Present Status and  
Future Goals**  
Z. Hippe, Rzeszów (Polen)

**Structural Organic Chemistry Revisited - Reasoning with  
Topology and Informatics**  
J.-E. Dubois, Paris (Frankreich)

**Some Aspects of Computerized Handling of Structural and  
Graphical Information in Solution of Chemical Problems**  
V. A. Koptlyug, Nowosibirsk (UdSSR)

**Reciprocal Interactions of Non-Numerical Data Processing  
and the Information Needs of Chemistry**  
E. Meyer, Ludwigshafen (Deutschland)

**Similarities as an Organizing Principle of a "Knowledge Base"  
for Organic Chemistry**  
Horst W. J. Rittel, Berkeley (USA)

**Computational Chemistry in Industrial Research**  
W. Donner, Leverkusen (Deutschland)

**Research on the System for Molecular Design, TUTORs**  
Shin-ichi Sasaki, Tempaku (Japan)

**Aspects of Searching Generic Chemical Structures**  
M. F. Lynch, Sheffield (Großbritannien)

**Supercomputer for Chemical Research and Development**  
E. Clementi, Kingston (USA)

**State of Scientific Chemical Information Activities with an  
Emphasis on Numeric Data Base Activities**  
S. R. Heller, Silver Spring (USA)

**Computer management of Factual and Structural  
Data Bases: A Case Study**  
C. Jochum, Frankfurt (Deutschland)

**Computational Quantum Chemistry: Potential Energy Surfaces  
for Chemical and Photochemical Reactions and Calculation  
of Lifetimes of Radicals**  
S. D. Peyerimhoff, Bonn 1 (Deutschland)

**The "E" in ICCCRE**  
P. Lykos, Chicago (USA)

Panel Discussion

Will Computers Change the Role of Chemists?

## Posters

- 01 **Mutual Retrieval System for Two Kinds of NMR Spectral Data  
and Substructures of Organic Compounds**  
H. Abe, Toyohashi (Japan)
- 02 **Use of C-13 NMR Chemical Shift/Charge Density Linear  
Relationship for Ranking Chemical Structures**  
I. Bangov, Sofia (Bulgarien)
- 03 **Use of Partial Least Squares Analysis in Food Chemistry:  
Relationship between Sensory Scores and Chemical  
Composition of Italian Wines**  
M. Bertuccioli, Perugia (Italien)
- 04 **A Fast Algorithm for the Calculation of Reaction Entropies in  
Synthesis Design**  
E. Caglioti, Roma (Italien)
- 05 **Partial Least Squares Analysis in Drug Design: The Problem  
of Structural Descriptors in QSAR**  
S. Clementi, Perugia (Italien)

- 06 **A Microcomputer Program for the Semi-Quantitative Con-  
formational Evaluation of Polycyclic Systems**  
P. J. De Clercq, Gent (Belgien)
- 07 **Examples of Computer-Aided Instruction in Chromatography**  
F. Dondi, Ferrara (Italien)
- 08 **Computation of Equilibria and Chemical Speciation in Natural  
Water Systems**  
E.-Ch. Hennes, Karlsruhe (Deutschland)
- 09 **Creating 3D-Molecular Models from Constitutional Information  
and Stereochemical Descriptors**  
C. Hiller, Garching (Deutschland)
- 10 **From the Collagenous Amino Acid Sequences to a Detailed  
Model of the Stem Region of the C1q Flower Bouquet ...**  
H. Holmann, Martinsried (Deutschland)

- 11 **Application of Multivariate Statistical Analysis for Source Identification of Air Pollutants**  
P. K. Hopke, Brüssel (Belgien)
- 12 **Interactive Software System for the Simulation of <sup>13</sup>C-NMR Chemical Shifts**  
P. Jurs, University Park (USA)
- 13 **Multi-Scanning Chromatography (MSC): A New Dimension in Chromatography By Computer-Aided Data Processing**  
B. Koppenhoefer, Tübingen (Deutschland)
- 14 **RINGS – A General Program for Building Ring Systems**  
C.-W. von der Lieth, Heidelberg (Deutschland)
- 15 **Use of Numeric Deductive Systems for Designing Experiments and Processing Data**  
P. A. D. DeMaine, Auburn (USA)
- 16 **Investigation of Molecular Structural Properties with the DRACO System**  
M. Marsili, Roma (Italien)
- 17 **The Feedback Search in Hierarchical Tree-Based Retrieval System**  
M. E. Munk, Ljubljana (Jugoslawien)
- 18 **Hierarchical Organization of <sup>13</sup>C-NMR Spectral Data Base**  
M. Novič, Ljubljana (Jugoslawien)
- 19 **Structural Fragment Elucidation from Spectral Data**  
M. Penca, Ljubljana (Jugoslawien)
- 20 **A New Very Efficient Fragmental Screen for Substructure Search**  
C. Qian, Shanghai (China)
- 21 **Algorithms Used by Micro-Computer for the Automatic Digitization of IR Spectra on Papers**  
C. Qian, Shanghai (China)
- 22 **A New Topological Descriptor of Chemical Structure**  
M. Razinger, Ljubljana (Jugoslawien)
- 23 **Recognizing Chromatographic Peaks with Pattern Recognition Methods: Selection of the Optimal Classifier**  
G. Reich, Wien (Österreich)
- 24 **The Use of Pattern Recognition Methods for Predicting Chemical Reactivity**  
H. Saller, Garching (Deutschland)
- 25 **TOSCA: A Topological Synthesis Design by Computer Application**  
J. Sander, Frankfurt/M. (Deutschland)
- 26 **The Model of Permutation Isomerism as a Basis for a General Description of the Stereochemistry of Reactions**  
H. Schönmann, Garching (Deutschland)
- 27 **IR-Spectra Interpretation Based on Statistical Approaches**  
J. Seil, Heidelberg (Deutschland)
- 28 **A Parameter-Driven Recursive Reaction Generator**  
K. Stadler, Garching (Deutschland)
- 29 **"PROTEIN" – A Comprehensive Program System for the Structure Analysis of Macromolecules**  
W. Steigemann, Martinsried (Deutschland)
- 30 **Computational Methods for Ground- and Excited-State Properties of Polymers**  
S. Suhai, Heidelberg (Deutschland)
- 31 **A Computer Program for the Automatic Recognition of the Maximal Common Substructure Among Drug Molecules**  
Y. Takahashi, Tempaku (Japan)
- 32 **A Computer System for Drug Design: ACACS**  
C. Takayama, Takatsukasa (Japan)
- 33 **Development of a New Computer-Assisted Molecular Design System**  
K. Tanabe, Yatabe, Tsukuba, Ibaraki (Japan)
- 34 **Computer Model for Tubular High-Pressure Polyethylene Reactors**  
B. Tilger, Darmstadt (Deutschland)
- 35 **Selective Detection of Chemical Classes by Gas Chromatography/Mass Spectrometry/Pattern Recognition (A Chemometric GC-Detector)**  
K. Varmuza, Wien (Österreich)
- 36 **The "Sumpf" Algorithm Reduces the Size of the Matching Problem in Computer Coding of Chemical Reaction Equations**  
M. Wochner, Garching (Deutschland)
- 37 **Raman Spectrometer Control with the Commodore C64**  
E.-J. Zehnder, Frankfurt/M. (Deutschland)

# 1985 ACM SIGMOD CONFERENCE

The Association for Computing Machinery  
International Conference on Management of Data®  
May 28-31, 1985 Austin, Texas

## 1A: STATISTICAL AND PICTORIAL DATABASES

*"A Language and a Physical Organization Technique for  
Summary Tables"*

G. Ozsoyoglu, Z.M. Ozsoyoglu, F. Mata

*"Direct Spatial Search on Pictorial Databases using Packed  
R-Trees"*

Nick Roussopoulos

## 1B: OFFICE SYSTEMS

*"Issues in the Architecture of a Document Archiver using  
Optical Disk Technology"*

S. Christodoulakis

*"Time Modeling in Office Information Systems"*

F. Barbic, B. Pernici

*"Signature Files: Design and Performance Comparison of  
Some Signature Extraction Methods"*

C. Faloutsos

## 1C: KNOWLEDGE BASE DESIGN

*"Acquisition of Terminological Knowledge Using Database  
Design Techniques"*

C.F. Eick, P. Lockemann

*"Knowledge-Based Distributed Database System Design"*

D.G. Shin, K.B. Irani

## 1D: CONCURRENCY CONTROL AND RECOVERY

*"Models for Studying Concurrency Control Performance:  
Alternatives and Implications"*

R. Agrawal, M.J. Carey, M. Livny

*"A Fast General-Purpose Hardware Synchronization  
Mechanism"*

John T. Robinson

*"Recovery Architectures for Multiprocessor Database  
Machines"*

R. Agrawal, D.J. DeWitt

## IDP Panel: DATABASE DESIGN: METHODOLOGIES, TOOLS, ENVIRONMENTS

## 2A: DATABASE THEORY

*"Integrity Checking for Multiple Updates"*

A. Hsu, T. Imielinski

*"On Verification of Database Temporal Constraints"*

C. H. Kung

*"On the Expressive Power of the Logical Data Model"*

G. M. Kuper, M.Y. Vardi

## 2B: HASHING TECHNIQUES

*"External Perfect Hashing"*

P. Larson, M.V. Ramakrishna

*"Modified Dynamic Hashing"*

K. Kawagoe

*"A Multidimensional Digital Hashing Scheme for Files  
with Composite Keys"*

E. Otoo

## 2BP Panel: THE PRAGMATICS OF DATABASE MANAGEMENT

## 2C: TEMPORAL DATA MODELS

*"A Taxonomy of Time in Databases"*

R. Snodgrass, I. Ahn

*"On an Algebra for Historical Relational Databases:  
Two Views"*

J. Clifford, A. Tansel

## 2D: PHYSICAL DESIGN AND EVALUATION

*"A Decomposition Storage Model"*

G. Copeland, S. Khoshafian

*"Adaptive Information System Design: One Query"  
at a Time"*

C.T. Yu, C.H. Chen

*"Multikey Retrieval from K-d Trees and Quad-Trees"*

D.A. Beckley, M.W. Evans, V.K. Raman

## 2DP Panel: MULTIMEDIA DATABASE MANAGEMENT

### 3A: QUERY OPTIMIZATION

*"Algorithm and Performance Evaluation of Adaptive Multidimensional Clustering Technique"*  
S. Fushimi, M. Kitsuregawa, M. Nakayama,  
H. Tanaka, T. Moto-oka

*"A Model of Data Distribution Based on Texture Analysis"*  
N. Kamel, R. King

### 3B: INTERFACES AND MODELS

*"ISIS: Interface for a Semantic Information System"*  
K.J. Goldman, S.A. Goldman, P.C. Kanellakis,  
S.B. Zdonik

*"A High-Level User Interface for Update and Retrieval in Relational Databases"*  
G. Vossen, V. Brosda

*"Modelling the CODASYL DML Execution Context Dependency for Application Program Conversion"*  
B. Demo, S. Kundu

### 3C: DISTRIBUTED DATABASES AND TRANSACTION PROCESSING

*"Transaction Restarts in Prolog Database Systems"*  
S. Acharya, G. Buckley

*"Genesis: A Distributed Database Operating System"*  
T. W. Page, Jr., M. J. Weinstein, G. J. Popek

*"A Transaction Model Supporting Complex Applications in Integrated Information Systems"*  
P. Klahold, G. Schlageter, R. Unland, W. Wilkes

*"Timestamp Based Certification Schemes for Transactions in Distributed Database Systems"*  
M.K. Sinha, P.D. Nandikar, S.L. Mehandiratta

3DP1 Panel: EXPERT DATABASE SYSTEMS  
(WORKSHOP REVIEW)  
Chairperson: Larry Kerschberg

3DP2 Panel: RELIABILITY IN DISTRIBUTED  
DATABASE SYSTEMS  
Chairperson: Bharat Bhargava

### 4A: IMPLEMENTATION OF QUERY LANGUAGES

*"Optimization of Extended Database Query Languages"*  
T.K. Sellis, L. Shapiro

*"Efficient Prolog Access to CODASYL and FDM Databases"*  
P.M.D. Gray

*"Implementation of Logical Query Languages for Databases"*  
J. D. Ullman

### 4B: CAD/CAM DATABASES

*"Modeling Concepts for VLSI CAD Objects"*  
D.S. Batory, W. Kim

*"Managing the Printed Circuit Board Design Process"*  
T. Blain, M. Dohler, R. Michaelis, E. Qureshi

## 文 献 紹 介

Journal of Chemical Education に掲載されたコンピュータ関連記事

アメリカ化学会の化学教育部会が発行しているこの雑誌には、Computer Series としてほぼ毎号コンピュータに関連した記事が掲載されています。マイコンに関するものがほとんどですが、CAI だけではなく LA やデータ処理に関する記事もあり、化学におけるマイコンの利用について参考になると思われます。1984年1月号から1985年2月号までの関連記事の目次を下記に示します。

\*\*\* Journal of Chemical Education, Volume 61 (1984), No. 1--12 \*\*\*

Page

26	Computer Series, 48: Will Computers Replace TA's? Professors? Labs? Should They? - A Symposium Report	edited by J. W. Moore
	Introduction	J. W. Moore and E. A. Moore
	Teaching with a Microcomputer: The Current Status and What's in Store for the Future	S. G. Smith
	Suppose Every General Chemistry Student had a Microcomputer...	A. L. Smith
	Improving Undergraduate Experiments with On-Line Microcomputers	S. L. Burden
	Let the Medium Fit the Message	J. C. Davis, Jr
	Exploring Chemistry's Mathematical Models with Computer Simulations	J. W. Moore
	Computers in the Freshman Course; Where Do They Perform Best?	J. J. Lagowski
	Of Babbages and Strings	D. A. Davenport
	Summary and Conclusions	J. W. Moore
164	Computer Series, 49: Bits and Pieces, 19	edited by J. W. Moore
	POLYMERLAB	F. D. Williams
	Comments on Reviews of GASLAWS	R. D. Allendoerfer
	Computer-Simulated Distributions of Molecular Speeds	S. E. Gier and M. A. Wartell
	Interfacing Microcomputers through Joystick Inputs	E. Hughes, Jr
	Measuring and Calculating Energetics of an Electrochemical Cell	A. D. Salt and F. M. Etzler
	One-Semester Microcomputer/Instrument Interfacing Course	R. Soltero and A. T. Poulos

- 440 Computer Series, 50: Choosing an Appropriate Computer Language  
G. S. Owen
- 524 Computer Series, 51: Bits and Pieces, 20 edited by J. W. Moore  
R/S: Apple Stereochemistry Program  
R. Barone, R. Meyer, and M. Arbelot  
CNDO/2-INDO Calculations on a Mini-Computer  
E. Longo, A. N. Senapeschi, R. Longo and D. Milani  
Enzyme Kinetics Calculations-The Direct Linear Plot Procedure  
K. A. H. Adams, A. C. Storer, and A. Cornish-Bowden  
Constructing Nonlinear Scatchard Plots G. W. Dombi  
Computer Simulation of Mass Spectral Envelopes of Polyisotopic  
Elements R. A. Geanangel  
The MINC Computer in the Physical Chemistry Laboratory  
G. S. Waldo, C. A. Schulze, and R. Battino  
Graphics with a Dot-Matrix Printer B. R. Sundheim  
MINI CAI: A Hallway Display  
K. N. Carter, E. M. Gouge, and R. B. Huff  
A One-Chip Interface between a Digital Panel Meter and a  
Microcomputer H. F. Blanck
- 627 Computer Series, 52 edited by J. W. Moore  
Scientific Exploration with a Microcomputer: Simulations for  
Nonscientist D. M. Whisnant  
Algebraic Programming Languages: A Scientific Tool for Chemists  
T. E. Raidy
- 699 Computer Series, 53: Looking Back and Moving Ahead in Computer-  
Related Learning J. W. Moore and E. A. Moore
- 786 Computer Series, 54: Bits and Pieces, 21 edited by J. W. Moore  
Graphical Solution of Equations for Stirred-Tank Reactors in  
Series P. Chaignon, J.-P. Caire, P. Ozil  
Employing Data Management Software for the Production and  
Searching of Customized Mass Spectral Libraries E. M. Gouge  
LINGEN-A General Linear Least Squares Program  
S. D. Christian and E. E. Tucker  
A Low-Cost Data Acquisition System for the Apple II+ Computer  
W. S. Wagner, C. D. Slater, and A. S. Ambrose  
Nuclear Magnetic Resonance Interpretation with Graphics  
R. D. Draper and B. R. Penfold  
Chromatography: Use of a Microcomputer to Introduce Laboratory  
Techniques D. K. Holdsworth

- Chemical Bonding Simulation B. J. Pankuch  
 A Machine Language Subroutine for Automatic Intermixing of  
 Commodore 64 and PET Programs L. J. Kleinsmith
- 864 Computer-Assisted Instruction on a Microcomputer S. G. Smith
- 1003 Computer Series, 56: Powwow: The Future of Microcomputers in  
 Chemical Education J. W. Moore, E. A. Moore, and J. J. Lagowski
- \*\*\* Journal of Chemical Education, Volume 62 (1985), No. 1-- 2 \*\*\*
- 62 Computer Series, 57: Bits and Pieces, 22 edited by J. W. Moore  
 Interfacing the Commodore VIC-20 Using Joystick Game Ports  
 H. F. Blanck  
 Chromatographic Integrator for the TRS-80 J. K. Hardy  
 Upgrading the Input and Output Capabilities of the TRS-80 Color  
 Computer E. Hughes, Jr., and A. J. Cox, Jr.  
 IBM PC Interfaced to a Perkin-Elmer DSC-1 Differential Scanning  
 Calorimeter B. Miller, M. Van Oort, and M. A. White  
 The Design of a Computer-Controlled Flow-Injection Analyzer:  
 An Undergraduate Experiment  
 S. A. McClintock, J. R. Weber, and W. C. Purdy
- 139 Computer Series, 58: edited by J. W. Moore  
 VisiCalc for the Teacher G. Sparrow  
 The Spreadsheet R. M. Rosenberg  
 The Equilibrium pH of a Cloud or Rain Drop: A Computer-Based  
 Solution for a Six-Component System  
 R. J. Vong and R. J. Charlson

#### Computer Handling of Generic Chemical Structures

Proceedings of a Conference organized by the Chemical Structure Association at the  
 University of Sheffield, England, 26-29 March 1984

Edited by Jhon M. Barnard, Gower Publishing Company Limited, England (1984)

昨年(1984)の3月に英国で開催されたいわゆるMarkush構造のコンピューター処理に関する  
 国際会議の報告である。日本からの寄与がなかったのはさびしいが、Lynch, Kaback,  
 Fisanic, Wipkeらが現状と将来について詳しく論じており、この分野に関心をも  
 つ者には必読の論文集である。

#### 1. INTRODUCTION M.F. Lynch

2. THE UK PATENT OFFICE SEARCH SYSTEM  
K.E.Milne
3. INTERPRETATION OF PATENT SPECIFICATIONS FOR CHEMICAL INVENTIONS  
J.G.Drysdale
4. EXPERIENCES OF A PATENT SEARCHER  
S.E.Jackson
5. THE API CHEMICAL INDEXING SYSTEM  
S.M.Kaback
6. THE IFI/PLENUM CHEMICAL INDEXING SYSTEM  
S.M.Kaback
7. GENERIC FORMULA SEARCHING WITH DARC: A USER VIEW  
H.Ascherl
8. USING CAS ONLINE TO SEARCH FOR PATENTS  
J.R.Waterman
9. EXPERIENCES WITH INPUT, TRANSLATION AND SEARCH IN FILES CONTAINING  
MARKUSH FORMULAE  
E.Meyer, P.Schilling and E.Sens
10. DERWENT'S CPI AND IDC'S GREMAS: Remarks on their Relative  
Retrieval Power with Regard to Markush Structures  
C.Suhr, E.von Harsdorf and W.Dethlefsen
11. REQUIREMENTS FOR A SYSTEM FOR STORAGE AND SEARCH OF MARKUSH  
STRUCTURES  
W.Fisanick
12. THE SHEFFIELD UNIVERSITY GENERIC CHEMICAL STRUCTURES RESEARCH  
PROJECT  
S.M.Welford, S.Ash, J.M.Barnard, L.Carruthers, M.F.Lynch and  
A.von Scholley
13. COMPUTER GRAPHICS BASED DEFINITION OF GENERIC CHEMICAL STRUCTURES  
T.R.Hagadone
14. GOING TO AN ACTUAL CHEMICAL PATENT MANAGEMENT SYSTEM WITH DARC  
J.-C.Bonnet
15. GENERIC QUERIES IN THE MACCS SYSTEM  
W.T.Wipke, J.G.Nourse and T.Moock
16. CHEMICAL DATABASE AND DATA ACCESS STANDARDS FOR THE PATENT SEARCH  
FILE  
J.F.Terapane and L.A.Wolfe
17. MULTILEVEL OF NEW PATENT COMPOUNDS  
M.Hyams
18. INFLUENCE OF EXPERT SYSTEMS  
P.Bamfield
19. SUMMARY AND CONCLUSIONS  
M.Elder

構造表現と構造処理：今回は，初回であるので，構造表現と構造処理に関する基本的な技法，基本的な概念，問題点などを理解するうえで適当と思われる文献を厳選してみた。

1. Graph を計算機上で処理する基本的な技法：

- \* BAASE, S. "COMPUTER ALGORITHMS Introduction to Design and Analysis", ADDISON-WESLEY, 1978. 内容例：Graphs and Digraphs. Definition and Representation, Minimal Spanning Tree Algorithm, Shortest Path Algorithm, Traversing Graphs and Digraphs (Depth-First and Breadth-First Search, Depth-First Search and Recursion, Finding Connected Components of a Graph), Biconnected Components of a Graph, Strongly Connected Components of a Graph, etc. その他に，String Matching の章もある。アルゴリズムの記述は明解である。
- \* NIJENHUIS, A.; WILF, H.S. "COMBINATORIAL ALGORITHM", ACADEMIC PRESS, 1975. 内容例：The Backtrack Method, Coloring Vertices of a Graph, Euler Circuits Hamilton Circuits, Spanning Tree, etc. すべて Fortran Subroutine が与えられており，バックトラック法をマスターするには，最適である。
- \* HELLERMAN, H. "DIGITAL COMPUTER SYSTEM PRINCIPLES", MC-GRAW-HILL, TMH EDITION 1974. 内容例：List Maintenance Using a Single Storage Pool. Initialize List Structure Using Parameters Supplied by the User Specifying the Total Number of Items and Number of Lists. Enter Item Value X into List J. Delete the First Item having Value X from List J. Determine the Index of the First Occurrence of X in List J. Determine the Index of the pth Item in List J. Move down a Specified Chain by one Item; Check for end of Chain. Test for whether requested List J is illegal or empty. すべて APL関数で与えられており，LIST 処理の技法をマスターすることができる。

2. 化学構造を数学的に扱うための基本概念

- \* BROCAS, J.; GIELEN, M.; 他 "THE PERMUTATIONAL APPROACH TO DYNAMIC STEREOCHEMISTRY", MC-GRAW-HILL, 1983. 内容例：Double Cosets, Number of Elements in a Double Coset, Number of Double Cosets, Symmetrical Double Cosets, Direct Product, Semidirect Product, Use of Permutation in Stereochemistry, Important Groups in Stereochemistry, Classification and Counting of Pairs of Enantiomeric Configurations, Classification and Counting of Permutational Isomers in Particular Ligand Partition, Counting Configurations of a Permutational Isomer in Particular Ligand Partition, etc. 本書は 712 ページの力作であり，ヨーロッパ風を感じさせる名著である。練習問題が各所に用意されており，理解を助けている。RUCH/UGIの難解で部厚い論文を読まずにすませることができそうなのはとりわけ有難い。

3. Brute Force 法 でもよいからとりあえず構造表現の一技法をマスターし，問題点を考察したい人のための文献。

- \* WIPKE, W.T.; DYOTT, T.M. "STEREOCHEMICALLY UNIQUE NAMING ALGORITHM", J. AM. CHEM. SOC. 1974, 96, 4834. モーガン名を基本にして，シス-トランス異性や，Asymmetric Carbon による光学異性をとりあつかえるアルゴリズムが述べられている。二重結合に対しても，四面体炭素に対するパリティ-と類似したパラメータを導入しているが，このままでは，アレンのような偶数個の二重結合連鎖をもつものには使用できない。なぜなら，アレン置換体は，シス-トランス異性ではなく光学異性であるからである。
- \* CHOPLIN, F.; MARC, R.; 他 "COMPUTER DESIGN OF SYNTHESIS IN PHOSPHORUS CHEMISTRY: AUTOMATIC TREATMENT OF STEREOCHEMISTRY", J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 1978, 18, 110. 五配位化合物の異性体を区別できる構造表現法が述べられている。
- \* FELLA, A.; NOURSE, J.G.; 他 "CONFORMATIONAL SPECIFICATION OF CHEMICAL STRUCTURES IN COMPUTER PROGRAMS". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI., 1983, 23, 43. SP2-SP2 BOND, SP3-SP3 BOND, SP3-SP2 BOND の回転角を幾つかに分類しておき，三次元座標から適当な離散モデルをえらぶ方法のようである。すっきりしない方法であるが，現状を知り，問題点を考察する材料にはなる。(東工大資源研 内野正弘)

## 「情報」とはなんだろう？

お茶の水女子大学理学部 細矢治夫

## Ⅲ. 論文誌の活字

前回は論文誌の表紙と背表紙の話をしたので、今回はその中をのぞいてみよう。といっても論文の内容を見るのではなく、英語の活字を拝見することにする。

昨年からわが日化のBulletinの活字が少し変わったのを御存知だろうか。図の1)にその一部をコピーしてある。以前の2)と比較すればその違いがわかる。3)は最近のJACS、4)はJCSのPerkin I、5)はChemical Reviewsの最近のもの、6)はそれの5年前のもの、最後の7)はルーマニアのRev. Roum. Chim.である。なお左半分が電子式複写機で原本をそのままコピーしたもの、右半分の方はそのコピーを次々に転写して5回目に得られたものだから当然薄くかすれて見難くなっている。

著作権法やかましい今日だから、個人的な使用の範囲を越えたコピーをすると1論文当りいくらか著作権者に払いなさいという指示が各論文の最初のページの一番下に出ている。因みに日化は・・・奥床しいから書いてない。こんなのは別にアメリカの真似をしてつけることもないだろう。現状で可。JACS、JOC、JPCなどのアメリカ化学会は\$1.50、ヨーロッパへ行くと\$2.00から\$3.00とやや高くなり、Tetrahedronは\$5.00もする。でも最高はChem.Revs.の\$6.50である。

本題に戻ろう。一番下のルーマニアは論外で、現在のBull.が最も読みづらいと感じるのは私だけだろうか。5回連続コピーというのは現実的でない実験であるが、これは読み易さ、読み難さの違いを増幅させるための手段である。

図の1)から7)までを較べて各人各様の感想があろうが、僕の“解析結果”を以下に簡単に述べる。Bull.の新旧を較べると、字の大きさと行間隔は変わっていないから、鮮明度の違いだけでもこれは明らかに改悪である。では何が悪いのか。Bull.の新字体は活字の太い部分と細い部分のコントラストが強過ぎ、かつ細い部分が極端に細いので見づらいのである。コピー機にかける度に細い所が消えて行く。特にtかfが見難い。m, n, p, d, hなどもあわれだ。

僕は印刷には素人だが、活字の読みやすさは一字一字のデザインではなく、単語や文章になったときのまとまりと白黒の面積比(コントラスト)によると思う。だからJACSやJCSの活字はBull.の古い方の活字とほとんど変わらないが、前者の方が読みやすいのは字間の詰まり方が原因だと思う。英文印刷に関しては、英語国民の真似をしても少しもはずかしいことではない。日本人の眼は漢字できたえられているのだから、英字はもっと小さく詰めて印刷しても充分読めると思う。皮肉な見方をすると、こんな間のびした印刷をしているのは、日本人の老眼度が欧米に抜きん出ているためだと勘繰られても仕方あるまい。更に情報科学的に言えば、Bull.は過去も今もハードコピーに大変無駄な情報の詰め方をしているわけである。しかも別刷代などは猛烈に高くなっている。

今回の調査で感心したのはChem.Rev.である。1980年までは、学会誌では珍しくボールドフェイス(またはサンセリフ)の字体を使っていたが、現在の字体の鮮明度は抜群である。幅広い読者層を想定してか字体はBull.並みだが、行間はBull.より15%弱狭くなっている。旧字体6)の5回目のコピーも抜群の鮮明度がある。この雑誌の編集の段階で、活字についてのかかなり激しい論議があったのではないだろうか。

情報の伝達ということを考えると、単位面積当たりの情報量だけでなく、読みやすさという因子も見逃せない。この2つの相反する因子を如何にして最適化するか。この小論のデータをもとに識者の間で前向きな議論の進められることを期待する。

### Effect of Isoquinoline *N*-Oxide

- 1) Nuclear Polarization),<sup>2,3a)</sup> Lawler and Evans (the influence of a magnetic field on radical ions in solution.<sup>4)</sup> In 1972 and later, as derived from the radical-pair model, the magnetic field

### Chemically Polymerized

- 2) composed of TiO<sub>2</sub>, CdS, GaP, GaAs, Si, and other chemical photocells.<sup>1-7)</sup> Thin-layer-coated semiconductor electrodes, dyes,<sup>8,9)</sup> metal complexes,<sup>10-12)</sup> and

© 1985 American Chemical Society

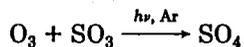
### Studies on the Photochemistry

- 3) The photochemistry of transition-metal complexes, structure and reactivity of the coordinatively unsaturated complexes derived from these species have been the subject of recent investigations.<sup>1-5</sup> This interest is due in part to

### Reaction of 3-Phenylglycidic

- 4) The reactions of epoxides have been widely explored from the synthetic and the biochemical aspects.<sup>2,3</sup> The mechanism of oxirane ring-opening has not been fully elucidated, especially in terms of the stereochemistry.

- 5) reagent (e.g., ozone) generates an atom which reacts with a second reagent both embedded in a reaction section VB) e.g.:<sup>6)</sup>



- 6) liquids following the decision of the U.S. Air Force to use liquid nitrogen oxides as the oxidizer component in liquid propellant systems. Liquid N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> alone is well established as an efficient liquid oxidizer in rocket propulsion, e.g.

- 7) features of chromium (III) chemistry in coordination compounds. Some of these compounds

### Effect of Isoquinoline *N*-Oxide

- 1) Nuclear Polarization),<sup>2,3a)</sup> Lawler and Evans (the influence of a magnetic field on radical ions in solution.<sup>4)</sup> In 1972 and later, as derived from the radical-pair model, the magnetic field

### Chemically Polymerized

- 2) composed of TiO<sub>2</sub>, CdS, GaP, GaAs, Si, and other chemical photocells.<sup>1-7)</sup> Thin-layer-coated semiconductor electrodes, dyes,<sup>8,9)</sup> metal complexes,<sup>10-12)</sup> and

© 1985 American Chemical Society

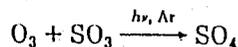
### Studies on the Photochemistry

- 3) The photochemistry of transition-metal complexes, structure and reactivity of the coordinatively unsaturated complexes derived from these species have been the subject of recent investigations.<sup>1-5</sup> This interest is due in part to

### Reaction of 3-Phenylglycidic

- 4) The reactions of epoxides have been widely explored from the synthetic and the biochemical aspects.<sup>2,3</sup> The mechanism of oxirane ring-opening has not been fully elucidated, especially in terms of the stereochemistry.

- 5) reagent (e.g., ozone) generates an atom which reacts with a second reagent both embedded in a reaction section VB) e.g.:<sup>6)</sup>



- 6) liquids following the decision of the U.S. Air Force to use liquid nitrogen oxides as the oxidizer component in liquid propellant systems. Liquid N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> alone is well established as an efficient liquid oxidizer in rocket propulsion, e.g.

- 7) features of chromium (III) chemistry in coordination compounds. Some of these compounds

A I C h E ' s          D I P P R  
D a t a   P r e d i c t i o n   M a n u a l

アメリカ化学工学協会 (AIChE) では、1978年から The Design Institute for Physical Property Data (DIPPR) というグループで化学工学 (我が国よりも広い意味の) の為の物性値の推算方法を研究・検討してきた。その成果は、スポンサー (45社と政府機関) に先ず報告され、その1年後に一般に公開された。下記の要領で購入する事ができる (Chem. Eng. Progr., Jan. 1985, p.16-21)。

## Manual for Predicting Chemical Process Design Data

AICHE DESIGN INSTITUTE FOR PHYSICAL  
PROPERTY DATA

DATA PREDICTION MANUAL

Ronald P. Danner and Thomas E. Daubert, Editors

Recommended methods which require simple input parameters for predicting physical and thermodynamic properties of chemicals are presented. Concentration is entirely on nonhydrocarbon materials. When feasible, requisite equations and procedures for calculation using a pocket calculator are provided. When more accuracy is required, alternate procedures for using a large computer are given. In most cases, property estimation methods are provided for pure compounds and mixtures of defined composition.

Contents:

Chapter 1. GENERAL DATA. Introduction. Units and Conversion Factors. Chemical Engineering Symbols. Miscellaneous Characterizing Parameters. General and Specific Property References.

Chapter 2. CRITICAL PROPERTIES. The Critical State of a Pure Compound. The Critical State of Mixtures. The Critical Locus. Excess Critical Properties. Pseudocritical Properties. References. Procedures.

Chapter 3. VAPOR PRESSURE. Procedures.

Chapter 4. DENSITY. Procedures.

Chapter 12. MEASURES OF ENVIRONMENTAL IMPACT. Procedures.

NOTE: Loose-leaf 7 hold binder is included with the above chapters.

Pub.# X98

Chapters 1, 2, 3, 4, 12.

(ISBN 0-8169-0233-X LC83-3898)

Sponsor: \$75

AIChE Members: \$125

Others: \$150

(U.S. Postage is prepaid. Foreign orders add \$10 to cover postage and handling)

ADDITIONAL CHAPTERS NOW AVAILABLE

Chapter 5: THERMAL PROPERTIES. Covers: Instructions for Use of the Manual in the Calculation of Thermal Properties of Pure Compounds and Defined Mixtures. Ideal Gas Properties. Enthalpy. Heat Capacity. Entropy. Fugacities. Flowcharts for Evaluation of Heat of Vaporization, Enthalpy, Heat Capacity. And 16 procedures.

Pub.# X98A.

(ISBN 0-8169-0329-8)

Sponsors: \$12.50. AIChE Members: \$18. Others: \$25.

Foreign Postage Extra: \$2.

Chapter 8: VISCOSITY. Covers: Instructions for Use of the Manual in the Calculation of Viscosity. Viscosity of Nonhydrocarbon Gases at High Pressures. Viscosity of Pure Nonhydrocarbon Vapors at Low Pressures, Nonhydrocarbon Vapor Mixtures at Low and High Pressures, Pure Nonhydrocarbon Liquids, Liquid Mixtures. And 8 procedures.

Pub.# X98B.

(ISBN 0-8169-0330-1)

Sponsors: \$12.50. AIChE Members: \$18. Others: \$25.

Foreign Postage Extra: \$2.

NEW DOCUMENTATION MANUALS to supplement chapters published in AIChE's Design Institute for Physical Property Data's MANUAL FOR PREDICTING CHEMICAL PROCESS DESIGN DATA are now available. These publications are backup for the material presented in the data prediction manual.

DOCUMENTATION OF THE BASIS FOR SELECTION OF THE CONTENTS OF CHAPTER 2-CRITICAL PROPERTIES.

(ISBN 0-8169-0312-3)

Pub.# X-99

Sponsors: \$50 AIChE Members: \$70

102 pp.

Others: \$90 Foreign Postage Extra: \$2

DOCUMENTATION OF THE BASIS FOR SELECTION OF THE CONTENTS OF CHAPTER 3-VAPOR PRESSURE.

(ISBN 0-8169-0313-1)

Pub.#X-100  
130 pp.

Sponsors: \$50 AIChE Members: \$70  
Others: \$90 *Foreign Postage Extra: \$2*

DOCUMENTATION OF THE BASIS FOR SELECTION OF THE  
CONTENTS OF CHAPTER 4-DENSITY.

(ISBN 0-8169-0314-X)

Pub.# X-101  
87 pp.

Sponsors: \$50 AIChE Members: \$70  
Others: \$90 *Foreign Postage Extra: \$2*

SEND YOUR BOOK ORDERS TO: Publications Sales Dept. A,  
American Institute of Chemical Engineers, 345 E. 47 St., New  
York, NY 10017. All orders must be accompanied by check or  
money order in U.S. dollars. All books will be shipped bookrate.  
All sales are final. (*Prices are subject to change*)

#### REMAINING CHAPTERS TO BE PUBLISHED

- Chapter 6. PHASE EQUILIBRIA.
- Chapter 7. SURFACE TENSION.
- Chapter 9. THERMAL CONDUCTIVITY.
- Chapter 10. DIFFUSIVITY.
- Chapter 11. COMBUSTION.

These chapters will be available on a Standing Order basis. Standing Order Customers will automatically receive each chapter as soon as it becomes available, and will be billed with shipment. All will be seven-hole punched for easy insertion into materials previously received. Prices will vary according to length and complexity.

## 国際会議開催案内

### INT'L OTTAWA CODATA CONFERENCE

On CODATA's 20th anniversary (1966-1986), its Tenth International Conference will be held in Ottawa, Canada. The theme of the 14-17 July 1986 Conference is "Computer Handling and Dissemination of Data."

The conference will be organized around four multidisciplinary aspects:

- computerized databases--technology and management;
- computer techniques in data and systems analysis;
- international aspects--data needs and flow across national boundaries;
- data structures, validation, robustness, graphics, etc.,

and a dozen more definitively focussed symposia involving:

- numerical information systems in materials science, technology, and industry (biotechnology, resources, process control);
- numerical information processing in the biosciences (epidemiology, toxicology, etc.);
- numerical data processing and dissemination in the geosciences (space- and time-dependent data, modeling, exploration, resources);
- artificial intelligence, expert systems;
- data for advanced technology;
- environmental impact;
- trade-offs (mainframe, networking, PC's, etc.).

#### Call for Papers

Users of data, as well as those involved in data compilation, data evaluation, and data handling are invited to submit contributions on subjects within the scope of the Conference. To facilitate discussion and interchange of ideas, all contributed papers will be presented as posters. In addition to the presentation of posters, workshops will be organized in which groups of related posters will be discussed with an appointed chairman after the poster sessions.

The titles of proposed posters should be submitted as soon as possible to the Program Committee Chairman, Prof. C.B. Alcock (Dept. of Metallurgy and Materials Science, University of Toronto, Toronto, Ontario, Canada M5S 1A4).

Abstracts will be required by December 15, 1985. Authors will be notified before February 1, 1986 about the acceptance of their contribution and will receive instructions on providing the full text at that time.

#### Database Demonstrations and Exhibitions

Facilities for scientific and technical source database producers to give demonstrations during the afternoon of each day of the conference will include use of a terminal and data networks for access to a host mainframe computer or, for micro-computer databases, table space and power. Those who wish to participate in such online demonstrations or provide commercial displays of relevant equipment and would like to receive further information should so indicate to the Conference Secretary.

#### Intent to Attend the Conference

Persons who wish to receive the second circular and/or additional information are requested to contact: Mrs. Lois Baignée, Executive Secretary CODATA '86  
Conference Services, National Research Council of Canada  
Montreal Road Ottawa, Canada K1A 0R6

#### Conference Hosts

The Conference will be hosted by The National Research Council of Canada (NRC) with the collaboration of The Royal Society of Canada, and the Ministry of Industry and Trade of the Government of Ontario.

The Scientific Program Committee is chairman of the Canadian National Committee for CODATA. Dr. G.H. Wood of NRC (Ottawa) chairs the local organizing committee.

The Westin Hotel at Ottawa will be the site of the Conference.

#### Accommodations

Blocks of rooms have been reserved at the Westin Hotel and the University of Ottawa. Several other hotels are within easy walking distance.

---

## 情報化学部会について

情報化学部会の分野は、計算機化学、化学情報を含み次のように分類できる。

1. 文献検索に代表される化学関係の書誌情報を対象とする研究
  2. 化学の理論または統計に関連してとくに大量、多様な数値情報を対象とする研究
  3. 測定、分析装置からのデータの取得、処理と装置、測定条件の制御を含むラボラトリオートメーション関係の研究
  4. 化学物質の示す物性、反応性、スペクトル、生理活性等のいわゆる事象情報（ファクトデータ）を集積し、各種の応用に便益を供し得るような化学物質データベース構築のための研究
  5. 物質の物性、特性値からその化学構造を予測する、また化学構造から生理作用をも含めた物性を予測する等予測、予知にかかわる研究
  6. 化学情報の高度利用による薬品設計、反応設計など分子設計に関する研究
- 以上を総合して情報化学の目的は情報科学の手法を科学研究に移植し今までにない独自の学問分野の形成展開を図る所にある。

# 情報化学部会申込みカード

(19 年 月 日記入)

フリガナ			部会員種別(○で囲む)
氏名 または 団体名			1 正部会員(会員番号) )
	生年月日(西暦)		2 法人部会員( )
現住所	〒		(電話) )
所属機関 名称			(電話) )
	所在地	〒	
学歴	大学 学校	学部	科・修士課程(西暦) 卒業年 卒業見込
今後の通信先は (○で囲む)	1 現住所宛	担当者	
	2 所属機関宛		
現在加入の 化学系学協会名			部会費は 年 月 日 に 円送金いたしました。

(きりとり線)

(きりとり線)

## 記入方法など

- 正部会員に申込みされる方：氏名、会員番号（部会員種別欄内 日本化学会個人会員の会員番号）、現住所、所属機関（学生は在学校等）、学歴、今後の通信先、現在加入の化学関係学協会名欄に記入して下さい。
- 法人部会員に申込みされる方：団体名、所属機関の所在地、および今後本会との連絡に当られる方の氏名と部課名を担当者欄に記入して下さい。
- 部会員原簿として保存いたしますので、ていねいにご記入ください。
- 部会費は郵便振替用紙によりご納入ください。  
(口座番号 東京7-6058, 加入者名 社団法人 日本化学会)
- 部会費(年額) (昭和60年度)  
正部会員 2,000円  
法人部会員 1口 30,000円(一口以上)
- 部会員には、ニュースレターを年6回配布し、情報を伝達したり、部会関係の種々の催しの案内などをいたします。部会員には討論会などについて割引があります。ふるってご入会ください。
- 申込書送付先  
〒101 東京都千代田区神田駿河台1-5  
社団法人 日本化学会 会員部  
電話(03)292-6160〔直通〕

以上

## ニュースレター Vol.3, No.2

1985年5月30日 発行

事務局：101 東京都千代田区神田駿河台1-5, 日本化学会情報化学部会(略号 DCICS/CSJ)  
Office of the Secretary: The Chemical Society of Japan, 1-5, Kanda-Surugadai, Chiyoda-ku, Tokyo 101, Japan

# NEWSLETTER

日本化学会  
情報化学部会

Division of Chemical Information and Computer Science  
The Chemical Society of Japan

Vol. 3  
No. 3

(July 1985)

## 目 次

情報化学と情報学 .....	湯川泰秀	1
関連行事		
第8回情報化学討論会プログラム .....		3
第13回構造活性相関シンポジウムプログラム .....		4
海外の動き		
7th ICCCRE に出席して .....	阿部英次	6
文献紹介		
米国化学会化学情報誌最近号の紹介 .....		7
有機合成の設計 (有機合成経路探索) .....		12
国際会議案内		
12th International Conference on Very Large Data Bases .....		13
COBAC IV .....		14
機関利用案内		
QCPE について .....		15
化学 PC 研究会について .....		23

# 情報化学と情報学

湯川 泰秀

情報化学部会が設立されて3年, news letterも7号を数えることになった。米国化学会のdivision, 英国化学会のsectionともにchemical informationと名乗っているが, 有機化学などの部会と異なりいずれもnews letterを出しているのは情報分野らしく有難い。もっとも多くの情報関係の研究会では資料の印刷物やコピーが他の分野にくらべて何時も大量なのに閉口しているのであるが。

日本化学会で初めて化学情報という語が組織名に使われたのは1969年に化学情報特別委員会(委員長 小寺明氏)が設置された時である。これは米国化学会からCASへの協力を求められた為もあるが赤堀四郎会長が世界化学会会長会議に出席されて日本の化学界が化学情報に対処する方策を講じなければならないと痛感されたからである。当時千原秀昭君や平山健三君らとともにあれこれと話しあったのが思い出される。これと前後して日本学術会議では学術情報研究連絡委員会(研連と略称)で日本の学術情報システムが検討されていた

71年同委員会は化学情報-問題点の現状と将来-を刊行し, 国, 公共機関, 学協会への勧告を行った。これを受けて化学情報協議会が発足し, これは現在の化学情報協会となった。二次情報についてCASへの協力という形で始まったが今では世界のネットワーク形成が実現しつつある。これはひとえに赤堀四郎先生の粘り強い御配慮と初代協会長を引き受けて下さった故加藤弁三郎先生の無私の御奉仕に千原教授の寝食を忘れた努力のお陰であり, これが成功していなかったら国際的に日本の化学界は肩身の狭い思いをしたであろう。

さらに日本化学会では一次情報, 三次(集約)情報について78-79年化学情報特別委員会を設けて検討を行い将来への方策を纏めたが, 同年日米合同年会開催のため当時の会長であった小生がアフターケヤーを十分出来なかったのが残念である。そのときの報告は将来必ず有用であろうと信じている。

これと前後して化学会の年会の講演分類に化学情報, 計算機化学が現われ, 情報化学討論会, 情報化学部会へと発展したことは御存じの通りである。

さて情報化学とはどういう内容であろうか。勿論名前が内容を指定すべきではなく, 名前を冠せられた内容は何であり, 何を指向するかである。先日, 仁田勇先生の遺稿集-化学のいろいろな横顔-を拝読していると, 3. 8に化学とコンピューターの一章があり, コンピューターと化学計測, 化学情報とコンピューター, コンピューターと人の知能の三節に分けて述べておられる。第一はこれまでの計算機化学であり, 第二は先生が化学情報

処理学と呼んでおられる。第三は計算機利用への多少の反省と人間の脳神経系の活動機作の解明への可能性である。今更ながら80歳代も半ばだった先生の瑞々しいお考えに感嘆した次第である。情報化学は正にこの化学情報処理学と計算機化学を内包している。

話は変わるが、学術情報という語が国の組織名に用いられたのは1949年文部省に学術情報所設置の提案があったのが始めであろう。これは1952年学術情報室（現情報図書館課）の設置となったが学術情報所は運営費の要求に止まってしまったのは残念である。科学技術庁では1956年審議会に科学技術情報部会、1957年JICSTが設立された。日本学術会議は1961年情報流通の促進と強化の勧告、1965年情報科学の研究機関設立の要望を行っている。

今年学術会議の改組に伴って、従来の学術情報研連は情報学研連、学術文献資料研連、学術データ研連と三つの研連に発展した。ここで情報学と言う語が公式に使われたのである。情報工学、情報処理学にはそれぞれ研連があり学会もあるが情報学という学会は出来ていない。学術情報研連では従来情報学シンポジウムを開いており、その関係者が中心となって、これに既存の日本コデータ協会を合せて情報知識学会を設立する計画が進められている。

情報のフローを考えると、人間の考えや知識を記号信号や図形などによって他の人間に伝えてその人の知識になり知恵の糧とならねばならない。その伝達の為のハードやソフトが必要であるが同時に、内容が理解され知識を伝えることが大切である。情報学という語も耳新しく広義から狭義まで種々に解されるであろうが指向する方向は自ずから一致している。

情報化学も耳障りのない即ち音感がよい語であるが未だ種々に解されるであろう。しかし目差す方向に変わりはないと思われる。私なりにいえば化学と情報学の重なりあった分野で化学会の情報化学部会はまた情報知識学会の化学部会でもあると思っている。

哲学には論理学が柱であり、これはまた言語学が基礎になっている。新しい言語学、新しい論理学から新しい哲学が生れるかもしれないように、情報化学が化学に役立つという以上に化学それ自身を変革する可能性を信ずるものである。例えば三次元の化学構造式を入力するに当ってtree構造のアルゴリズムを考えたとすると、従来のホモログがメタン、エタン、プロパン、 $n$ -ブタン、 $n$ -ペンタンであるのに対して、メタン、エタン、プロパン、 $t$ -ブタン、ネオペンタン（メチル置換ホモログ）やメタン、ネオペンタン、3,3-ジエチルペンタン系列、またエタン、2,3-テトラメチルブタン系列（立体対称ホモログ）となる。前者はHの反応性系列、後者は立体均等性に一致し平面構造式上に過ぎない従来のホモログとは異なった視点の化学が生れるであろう。些細なことであるがこうして新しい化学が生れるのではなからうか。情報化学の発展を期待する次第である。

# 第 8 回 情報化学討 論会

共催 日本化学会・日本分析化学会  
日本薬学会・日本農芸化学会

F<sub>1</sub> 会場 (石川県社会福祉会館 4 階中ホール)

(10月 6 日 (日), 7 日 (月))

講演時間 15分 (講演12分, 討論3分)

10月 6 日 午前

(9:00~)

- 3F<sub>1,01</sub> スーパーコンピューター版 NUMPAC (名大大計セ・中部大経営情報) ○秦野甯世・二宮市三
- 3F<sub>1,02</sub> 高速符号化法の最適化 (東工大資源研) 内野正弘
- 3F<sub>1,03</sub> 三次元符号化理論と立体化学 (東工大資源研) 内野正弘
- 3F<sub>1,04</sub> 分子科学計算のためのパソコンによるグラフィックインターフェース (東大教養・東大理・姫路工大) ○小川桂一郎・吉田 弘・鈴木 弘・中野英彦・三軒 齋
- 3F<sub>1,05</sub> パーソナルコンピューターによる分子構造模型表示プログラム MODRAST 機能拡張 (姫路工大) ○中野英彦・三軒 齋
- 3F<sub>1,06</sub> パソコンによる本格的分子計算 (北大理) ○望月裕志・大沢映二
- 3F<sub>1,07</sub> 有機化学の教育においてマイクロコンピューターはどのように役立つか (3) 立体充てん模型の高速表示 (埼玉大工) ○時田澄男・杉山孝雄
- 3F<sub>1,08</sub> グラフ構造の入力-分子図と 3 次元座標 (学習院大理・群馬大教育) ○田中伸英・菅 忠義・飯塚 健
- 3F<sub>1,09</sub> パーソナルコンピューターによるダイヤモンド格子探索法 (学習院大計セ・学習院大理・群馬大教育) ○今井 賢・菅 忠義・飯塚 健
- 3F<sub>1,10</sub> コンピューターグラフィックスによる KCl 結晶のらせん転位の構造表示 (東工大総理工) 山崎陽太郎
- 3F<sub>1,11</sub> 新しい分子構造の発見法“デシメトリゼーション” (群馬大教育) 飯塚 健
- 3F<sub>1,12</sub> 帰納型反応設計支援システムの構築 (中外製薬) 松浦育敏

10月 6 日 午後

(13:20~)

特別講演 数え上げ多項式とトポロジカルインデックス (お茶女大理) 細矢治夫

(14:30~)

- 3F<sub>1,13</sub> 分子情報の新しい記述フォーマット (FLEXS) の開発 (東大工) ○山崎俊夫・中村春木
- 3F<sub>1,14</sub> 原子軌道データベースの開発—分子軌道計算の知識ベース (北大理・北大触媒研・慶大理工・東大理・阪市大理・分子研) 富樫雅文・館脇 洋・岩田末廣・小杉信博・北浦和夫・山本茂義○柏木 浩

3F<sub>1,15</sub> 自動構造推定システム, CHEMICS における最近のスペクトル解析 (豊橋技科大) 佐々木慎一○阿部英次・船津公人・Carlos A. Del Carpio・太田好人・江口晃史

3F<sub>1,16</sub> 固体表面の吸着種による IR スペクトルの対話型波形解析 (阪府大工) ○乾 哲・宮田 寿・窪川 裕

3F<sub>1,17</sub> C<sub>n</sub>H<sub>m</sub>, C<sub>n</sub>H<sub>m</sub>O<sub>z</sub> 化合物の質量スペクトルデータベース—全  $m/z$  ピークの統計的処理 (6) (電総研) 小山保二・前田浩五郎

3F<sub>1,18</sub> ストカスチック・シュミレーションによる高分子のコンホメーション転移 (阪工試) 福見俊夫

3F<sub>1,19</sub> 数式微分を含んだ非線形最小二乗計算システム (大阪電通大) ○藤田岩男・対馬勝英

3F<sub>1,20</sub> 大次元格子の特性量の解析 (2) (お茶女大理) ○細矢治夫・内山厚子・木下美子

3F<sub>1,21</sub> スーパーコンピューター (FACOM VP-200) による GAUSSIAN-80 プログラムの実行 (三菱化成総研・富士通) 八尾 徹・川北栄継○湯田浩太郎・大久保顕・戸村伸男

3F<sub>1,22</sub> 高分子の<sup>13</sup>C-NMR リレーションデータベース (福井工大・阪大基礎工・筑波大・京大工) ○西岡篤夫・畑田耕一・藤原 譲・末広祥二

10月 7 日 午前

(9:00~)

- 4F<sub>1,01</sub> 特許に現われる生体化学物質用データベースの開発 (化情協・阪大理) ○門條 司・時実象一・千原秀昭
- 4F<sub>1,02</sub> IBM5080 グラフィックシステムのモレキュラーグラフィックスへの応用 (日本 IBM・エーザイ筑波研) ○沢 恒雄・保谷克典・藤田忠男
- 4F<sub>1,03</sub> 3次元ラスタグラフィックスによる分子モデリングシステム (システム・阪大蛋白研) 伊賀祐一・楠木正巳・安岡則武
- 4F<sub>1,04</sub> 分子設計のためのコンピューターソフトウェアシステム “TUTORS” の開発 (1) 化学構造式のグラフィック入力 (豊橋技科大・ケイアイ研) ○尾崎正美・高橋由雅・宮下芳勝・阿部英次・佐々木慎一
- 4F<sub>1,05</sub> 分子設計のためのコンピューターソフトウェアシステム “TUTORS” の開発 (2) 3次元分子モデリング (豊橋技科大・ケイアイ研) ○吉田文隆・高橋由雅・宮下芳勝・阿部英次・佐々木慎一
- 4F<sub>1,06</sub> 分子設計のためのコンピューターソフトウェアシステム “TUTORS” の開発 (3) 全体システムと構造検索 (豊橋技科大・ケイアイ研・日本農薬) ○高橋由雅・細川和好・宮下芳勝・阿部英次・流石 正・田丸雅敏・吉田文隆・尾崎正美・吉田正徳・佐々木慎一
- 4F<sub>1,07</sub> 最大共通部分構造の自動認識—MAXFIT プログラムの開発 (豊橋技科大) 高橋由雅○佐藤 譲・前田重徳・阿部英次・佐々木慎一
- 4F<sub>1,08</sub> 分子設計のためのコンピューターシステム ACACS (2) (住友化学・住友製薬・日本電気) 吉田元二・高山千代蔵・本木隆夫・上田 明・菊園康雄・金岡昌治・諸岡茂昭・横田彰男○曾根田雄一

- 4F<sub>109</sub> 分子設計支援総合システムの開発(富士通・呉羽化学) 松浦幸男・朝永 惇・笠井健二・面川浩身
- 4F<sub>110</sub> 有機合成経路設計プログラム(SECS)とそのデータベース構築(呉羽化学・UCSC) ○谷中幹郎・朝永惇・W. Todd Wipke
- 4F<sub>111</sub> 不均一系触媒反応設計支援データベース(CATDB)の形成(2)構成・構築・検索と評価(東海大開発技研・東大計セ) ○米田幸夫・小澤 宏
- 4F<sub>112</sub> デジタイザーによるプロトンNMRスペクトルデータベースの作製(国立衛試) 叶多謙蔵

### 10月7日 午後

(13:20~)

**特別講演** 計算機化学研究の开花をもとめて(豊橋技科大) 佐々木慎一

(14:30~)

- 4F<sub>113</sub> マイクロコンピューターによる化合物名読み取り(3) $C_mH_nO_r$ 化合物の取扱い(東京高専・電総研) ○佐藤真一・六車裕孝・前田浩五郎
- 4F<sub>114</sub> マイクロコンピューター中の全NBS MSDBの任意ピークによる高速検索(電総研) 六車裕孝・前田浩五郎
- 4F<sub>115</sub> 化学情報処理システム(山形大工) 工藤喜弘
- 4F<sub>116</sub> 分子設計のための人工知能の設計(3)不確実情報による推測(東農工大工・東大理) 川原淳次・藤井良彦・安川民男・岡崎廉治
- 4F<sub>117</sub> COMPAR-ADAPTによる化合物重ね合せ実験(富士通・富士通京葉システム) ○湯田浩太郎・河村伴子
- 4F<sub>118</sub> 4結合三次元ネットワーク上の置換分配(2)二次ネットワーク上の分配問題(群馬大工) 佐藤満雄
- 4F<sub>119</sub> 遊歩道と距離行列を用いた自己同型分割と結合スタック法との併用による化学構造の規範化とその応用(豊橋技科大) ○奥山 徹・阿部英次・佐々木慎一
- 4F<sub>120</sub> 官能基により分類したマススペクトルデータの特徴(2)(阪府公害監視セ・国立公害研) ○今村 清・葉山幸雄・奥村為男・林 秀夫・溝口次夫
- 4F<sub>121</sub> 分子力場パラメーターの最適化—最小二乗法によるパラメーターの決定(化技研・北大理) ○田辺和俊・都築誠二・大沢映二・山本 修
- 4F<sub>122</sub> Full Digitized DBによる赤外スペクトル検索システム(日本電子) ○森井正夫・落合周吉

**懇親会** 10月7日(月)18時から金沢市観光会館地下グリル(金沢市下本多町6-27, 電話(0762)62-3401, 討論会場向け)で, 第13回構造活性相関シンポジウムと合同で行ないます。会費4,000円(予定)は当日受付でお支払い下さい。

**参加登録方法** 日本化学会第51秋季年会への参加登録をお願いします。なお第13回構造活性相関シンポジウムへ同時に参加される場合は, 同シンポジウム受付で秋季年会の参加登録票を呈示のうえ, 追加登録料1,000円をお支払い下さい。詳細は同シンポジウム予告をご覧ください。

**連絡先** 920 金沢市丸の内1-1 金沢大学教養部 関崎正夫(電話(0762)62-4281, 内線650)

## 第13回構造活性相関シンポジウム

共催 日本化学会・日本薬学会・日本農芸化学会

**日時** 10月7日(月), 8日(火)9時から  
**会場** 石川県社会福祉会館4階大ホール(金沢市本多町3-1-10, 電話(0762)63-4181)  
 [交通] 金沢駅前1番乗場から北鉄バス路線番号18, 19に乗車, 本多町で下車すぐ。その他の路線利用の場合は, 県庁前下車, 徒歩6分。

本シンポジウムは, 日本化学会第51秋季年会の連合討論会(第8回情報化学討論会:10月6日(日), 7日(月))と一部重複して上記会場で開催されます。

(講演20分, 討論10分)

**第1日**(10月7日) —(9時から)—

1. パターン認識法による殺菌剤メブロニル類縁化合物の構造と抗イネ紋枯病活性相関(ケイアイ研, クミアイ化学) ○田丸雅敏・嶋崎 功・伊東茂寿・川田晴郷
2. 除草活性を有する3,6-ジクロロ-1,2,4-トリアジン類の構造活性相関解析(住友総研・住友計数センター) ○中山佳則・高山千代蔵・実光 穰・吉田元二
3. 置換ベンジル菊酸ピレスロイドの神経活性における定量的構造活性相関(京大農・住友化学) ○尾松正人・西村勤一郎・藤田稔夫・高山千代蔵・吉田元二
4. アミノ酸およびペプチドの分配係数の測定と定量的構造活性相関への応用(京大農) ○赤松美紀・朝尾正昭・岩村 倅・藤田稔夫
5. アミノ酸およびペプチド類の苦味活性の定量的構造活性相関(京大農) ○朝尾正昭・岩村 倅・赤松美紀・藤田稔夫
6. フロ [3,2-b] インドール-2-カルボン酸アミド誘導体の構造活性相関(大正製薬総研・北里大薬) ○川島 豊・天沼二三雄・中島由茂之・曾田 馨・森口郁生

—(13時20分から)—

**特別講演** 薬物組織分布における構造活性相関(東大薬) 花野 學

7. 薬物-受容体相互作用のグラフィック表現—solvent accessibilityを考慮した静電的構造活性相関(北里大薬) ○小松克一郎・中川節子・梅山英明
8. 薬物-受容体間の疎水相互作用—分子表面を考慮した疎水相互作用の新しい評価法と構造活性相関への応用(北里大薬) ○赤羽健司・小松克一郎・梅山英明
9. 三次元グラフィックディスプレイを利用したリセプター・マッピング(東大薬) ○板井昭子・加藤祐一・富岡伸夫・飯高洋一
10. Trypsin-MQPA(Trombin Inhibitor)の結合部位の構造(京大薬・神戸大医・神戸大医療短大・阪医大) ○松本 治・増田秀樹・多賀 徹・町田勝之輔・岡本彰祐・奥宮明子・松島正明
11. アンジオテンシン変換酵素阻害剤のコンホメーション解析と構造活性相関(北里大薬) ○広野修一・森口郁生
12. 血液凝固系酵素と阻害剤の立体構造に基づく構造活性相関(三菱化成総研・北里大薬) ○松崎尹雄・梅山英明

**第2日**(10月8日) —(9時から)—

13. フラグメント溶解度係数の算出とその利用(三共化研) 吉本昌文・脇田佳子・宮本秀一・渡辺英俊
14. オルソ置換ベンズアミドの酸加水分解反応速度定数による立体効果の解析(京大農) ○外松朋子・藤田稔夫
15. 置換ジアジン類における疎水パラメーターの解析(神戸薬大・京大農) ○山上知佐子・高尾楯雄・藤田稔夫
16. 高速液体クロマトグラフから得られたパラメーターのQSARへの応用(武庫川女大薬・徳島大薬) ○三宅噉司郎・北浦富貴子・水野亘恭・寺田 弘

17. マイクロコンピュータによる分子力場計算と生物活性の解析 (徳島文理大業・徳島大業) ○平良全栄・篠原康雄・寺田 弘
18. 分子力場開発と構造活性相関への応用—ab initio 法に基づいた静電的パラメーター (北里大業) ○久保寺英夫・中川節子・梅山英明

—(13時から)—

19. 生理活性の解析に用いる分配係数の理論的考察—分子表面の静電ポテンシャルによる表現 (呉羽化学・北里大業) ○笠井健二・朝永 惇・梅山英明
20. よわい分子間相互作用の取扱い (阪大業・国立衛試) ○佐々木喜男・高木達也・中村恵三
21. 多変量解析分配系プログラムパッケージ MVA の開発とその QSAR への応用 (阪大業) ○高木達也・丹下浩一・進藤洋子・片山朋子・岩田昭裕・佐々木喜男

特別講演 ドラッグデザイン—方法と将来展望 (北里大業) 森口郁生

懇親会 10月7日(月)18時から金沢市観光会館地下グリル(金沢市本多町6-27, 電話(0762)62-3401, シンポジウム会場向い)で, 第8回情報化学討論会と合同で催します。会費4,000円(予定)は, 当日受付でお支払い下さい。

**参加登録費・講演要旨集代**

- 1) 「構造」のみに参加の場合: 予約・当日共4,500円(登録費2,500円, 要旨集代2,000円)。予約は, 郵便振込(金沢5-3918, 名義: 第13回構造活性相関シンポジウム)で8月31日(土)までに申し込む。当日は, 会場を受付。

- 2) 「情報」のみに参加の場合: 予約5,000円(登録費3,000円, 要旨集代2,000円), 当日5,500円(登録費500円増)。予約は, 日本化学会へ8月20日(火)までに申し込む(詳細は6月号会告参照)。当日は, 会場を受付。

- 3) 「構造・情報」共に参加の場合: 予約6,000円(登録費3,000円, 要旨集代2,000円, 追加料\*1,000円), 当日6,500円(登録費500円増)。予約・当日共申込方法は情報のみに参加の場合と同じ。ただし, いずれも会場受付で追加料\*をお支払い下さい。

(注)構造活性相関シンポジウムのみに参加される方は日本化学会第51秋季年会および連合討論会に参加できませんのでご了承下さい。

**参加予約登録申込方法** 葉書大の用紙の上半分に, 構造活性相関シンポジウム, 情報化学討論会, 懇親会への参加希望の有無を記載し, 下半分に氏名, 連絡先を記載して8月31日(土)までにお申し込み下さい。なお, 要旨集送付に必要ですので, 宛名を書いた葉書大の用紙を同封して下さい。当日の受付事務の混乱を避けるため, なるべく予約申込みをお願いします。

**交通費特別割引・宿泊** シンポジウム参加者へ便宜を計るため, 交通費(航空券・国鉄券)の特別割引および宿泊の斡旋を(株)近畿日本ツーリストに依頼しました。希望の方は直接, 電話または葉書で近畿日本ツーリスト金沢営業所 第13回構造活性相関シンポジウム担当(920 金沢市片町1-1-34 第一生命ビル内, 電話(0762)32-0571)あてお申し込み下さい。

**申込・連絡先** 920 金沢市宝町13-1 金沢大学薬学部 辻 彰 (電話(0762)62-8151, 内線4409)

\*\*\*\*\*

\* \* \* \* \*

**情報の提供・寄稿のお願い**

\* 本ニュースレターでは, 部会員の方々からの投稿をお待ちしております。 \*

\* 大小にかかわらず海外で開催されるシンポジウム等のニュース・概要を部会までお知らせ下さい。 \*

\* そして予稿集や参考となる印刷物をお持ちである旨のアナウンスでも結構ですし, またはそれらの \*

\* コピーなどをお送りいただければ, 部会員がそれを利用できますよう当部会で取り計らいます。国 \*

\* 際会議とまでいかなくともご出席の海外の会議の様子やら御感想をお差し支えない程度に部会員に \*

\* ご披露いただければ幸いです。 \*

\* オリジナリティの主張ということではなく, 研究途上でさして体裁はととのわなくても大方の関 \*

\* 心に訴えたい情報化学関連の研究テーマをお持ちの場合や, 自分では遂行する時間等の余裕がない \*

\* ので何方かに協力をお願いしたいような時に公募をした場合がありましたら, ニュースレターの \*

\* 紙面をご利用下さい。 \*

\* \* \* \* \*

情報・原稿の送付先 ☎101 東京都千代田区神田駿河台 1-5

社団法人 日本化学会 情報化学部会 事務局

電話 (03) 292-6162

\* \* \* \* \*

\*\*\*\*\*

### 7th International Conference on Computers in Chemical Research and Education に出席して

通称ICCCRE (イクレ) と呼ばれている標記の国際会議が西独ババリア地方の小都市ガルミッシュェーバルテンキルヘンで6月10日から14日の間行われた。この会議の第5回が1982年に豊橋で行われたことをご記憶の方もあろう。情報化学の分野ではもっとも規模の大きい国際会議である。

今回は21ヶ国から二百数十名の人々が参加し、17件の招待講演に加えポスターセッションが45件であった日本からも10名の参加者があり、5件の発表(招待講演1件、ポスター4件。但しポスターのうち1件は主催者への連絡なしに不参加であったことは残念であった。)が行われた。また、12社に及ぶ展示があり、西独におけるこの分野への関心の高さをうかがわせた。

招待講演17件を分類すると、統合化システム(分子設計など)に関するものが4件、ケモトリックス(パターン認識を含む)が3件、数値計算(スーパーコンピュータ)、データベース、人工知能(知識工学)がそれぞれ2件、その他が4件といった割合になる。主催国である西独からの招待講演では、Beilstein InstitutのJochumによるBeilstein-Online計画に関するものが印象的であった。1987年サービス開始を目指して現在、システム解析を終え、データ入力を行っているとのことである。これによって有機化合物の評価された情報が提供されることの意義は非常に大きいものであろう。日本からは豊橋技術科学大学の佐々木が分子設計支援システムTUTORS開発の現状を報告した。

ポスターセッションには45件の参加があったが、今回はそのうち15件について、短時間の口頭発表も行われ、日本からの3件がすべてそれに指定された。この45件を内容でおおまかに分類すると、スペクトルデータ処理(構造推定を含む)と分子モデリング(高分子の配座解析など)に関するものが各8件、ケモトリックス(方法論、応用)、構造式処理(部分構造検索を含む)が各7件、合成デザインに関するものが5件といったところが目立った。その他データベース(3)、数値計算(2)、教育(2)などがあり非常にバラエティに富んでいた。時間的にも5日間の会期中、毎日1~2時間がポスターの時間にあてられており、それ以外にも食事、休憩時間などにもポスター会場では熱心な議論が行われていた。

この他、12社(内7社はアメリカの会社の西独支社)のデモンストレーションを含む展示があり、それぞれ多くの観衆をあつめていた。

(豊橋技術科学大学 阿部 英次)

米国化学会化学情報誌 最近号の紹介

*J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1985, 25, 1-4

**Born-Again FORTRAN: FORTRAN 77**

RICHARD E. BLOSS

Research Division, U.S. Industrial Chemicals Company, Cincinnati, Ohio 45237

Computer programming has become an important part of chemists' activities, both in the laboratory and in the office. A common topic of debate is which programming language is most suitable for chemical applications. Most chemists who program computers learned the FORTRAN IV language first and have continued to use it. Now that the number of available programming languages has grown, the perennial choice of the past, FORTRAN IV, has been the subject of some criticism. This paper suggests that the newer FORTRAN 77 should be recognized for its own merits as a powerful and flexible language and not passed over because of the shortcomings of earlier versions of FORTRAN.

*J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1985, 25, 5-8

**Keeping Up with Japanese Chemical Technology at Chemical Abstracts Service<sup>1</sup>**

GERARD O. PLATAU

Chemical Abstracts Service, Columbus, Ohio 43210

Chemical Abstracts Service (CAS) has been covering the complete Japanese chemical science and technology literature in a consistent, accurate, and timely manner since 1907. During the past 2 decades, Japanese contributions to chemical technology have increased steadily and rapidly so that today nearly 11% of the world's journal literature cited by CAS originates in Japan. In addition, 50.5% of all basic chemical patent disclosures abstracted and indexed by CAS in 1983 represent the results of research performed in Japan. Editorial processing for CAS is handled both in Japan and in the Columbus offices by subject experts proficient in the Japanese language. Lack of familiarity with the Japanese language is not only the scientific community's prime constraint in utilizing the original information but also the challenge to CAS in covering the Japanese journal and patent literature.

## Productivity and Its Measurement at Chemical Abstracts Service<sup>†</sup>

GERARD O. PLATAU\* and WLADYSLAW V. METANOMSKI

Chemical Abstracts Service, Columbus, Ohio 43210

The unprecedented growth of scientific literature and the availability of computers have led Chemical Abstracts Service (CAS) to new modes of information processing and delivery based on the best utilization and interaction of intellectual effort and computer support. In order to survive economically and better serve the growing number of information users, CAS introduced far-reaching innovations, all directed toward increased productivity of professional analysis, clerical tasks, and machine support. Examples of such innovations are unified intellectual document analysis, online editing, more efficient keyboarding techniques, and machine edits such as spelling-error detection and author-name verification programs. A unique approach to the measurement of productivity in the "knowledge industry", based on the classification of staff into measurable and nonmeasurable categories, is detailed. Productivity, defined as the ratio of outputs to inputs, is measured at CAS by revenue per employee, sales per employee, value added per employee, and value added per salary dollar and equipment dollar. The goal of the organization remains that of producing publications and services on the basis of the triad of completeness, timeliness, and quality.

*J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1985, 25, 11-16

## Effect of Taxonomy Class and Spanning Set on Identifying and Counting Rings in a Compound

SEYMOUR B. ELK

Computer Science Department, William Paterson College, Wayne, New Jersey 07470

The word "ring" in chemical literature is, at best, ill-defined and, at worst, a constant source of ambiguity. In order to better understand the problem, different meanings for this word in current chemistry usage are examined, as well as a concomitant evaluation of the number of faces that a mathematical model of a chemical molecule will have. Of specific interest is the use (abuse) of projection. Fundamental mathematical differences that arise due to different size embedding spaces are shown to be the cause of an inherent inconsistency in presently used systems of chemical taxonomy generally and in systems of nomenclature, in particular.

*J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1985, 25, 17-22

## Topologically Different Models To Be Used as the Basis for Ring Compound Taxonomy

SEYMOUR B. ELK

Computer Science Department, William Paterson College, Wayne, New Jersey 07470

This paper describes topologically distinct models that can be used for subdividing the class of ring compounds and illustrates why a selected taxonomy is chemically more relevant or efficient for one type of compound than for another. Four topologically disjoint sets—based on point, linear, planar, and solid modules—are described. This taxonomy scheme produces a delineation between alicyclic and aromatic in organic compounds that is based strictly on the intrinsic geometry of the module being used. Furthermore, the extra stability of the compounds being modeled with trigonal bonding to form a planar module and tetrahedral bonding to form a solid module corresponds to the demarcation lines that separate disjoint taxonomy classes.

## Structural Selectivity of Topological Indexes in Alkane Series

M. RAZINGER\*

Boris Kidrič Institute of Chemistry, YU-61115 Ljubljana, Yugoslavia

J. R. CHRÉTIEN and J. E. DUBOIS

Institut de Topologie et de Dynamique des Systèmes, Université Paris VII, associé au C.N.R.S.,  
75005 Paris, France

A study of the structural selectivity of six topological indexes is presented. The structural population on which the index values are calculated is the set of all alkane isomers up to dodecane and all possible monocyclic and bicyclic saturated hydrocarbons with four to eight carbon atoms (663 and 376 structures, respectively). The selectivities of indexes for the given population are quantified, compared, and discussed. The connection between selectivity and structure-property correlation performance is discussed also.

## Optimization of a Similarity Metric for Library Searching of Highly Compressed Vapor-Phase Infrared Spectra

MICHAEL F. DELANEY,\* JOHN R. HALLOWELL, JR., and F. VINCENT WARREN, JR.†

Department of Chemistry, Boston University, Boston, Massachusetts 02215

Compound identification by library searching of experimental spectra using instruments based on small computer systems is becoming increasingly common. For successful searching performance, large libraries are needed. Compressed spectra are typically used to increase both the number of spectra that can be stored on a small computer and the search speed. In this study, a similarity metric for matching highly compressed binary intensity vapor-phase infrared spectra is optimized with three distinct approaches. Two of the approaches are generally applicable for library searching performance evaluation. The results of all three approaches are in excellent mutual agreement.

## Chemical Toxicology Searching: A Comparative Study of Online Data-Bases

DAVID BAWDEN\*

Pfizer Central Research, Sandwich, England

ALISON M. BROCK

ICI Central Toxicology Laboratory, Alderley Park, Macclesfield, Cheshire, England

A collaborative project to compare and evaluate information resources and searching techniques for the retrieval of chemical toxicology information has been carried out by 14 organizations. The project involved independent searching of test queries, with subsequent extensive evaluation of results and failure analysis. The results relating particularly to online searching are presented and discussed.

## A Note on Measures of Screening Effectiveness in Chemical Substructure Searching

DAVID BAWDEN\* and JEREMY D. FISHER

Pfizer Central Research, Sandwich, Kent, CT13 9NJ England

A novel measure of the effectiveness of screen set performance for chemical substructure searching is described. It has advantages over the generally used screen-out measure, particularly for evaluating the performance of operational systems, and is unaffected by changes of file size and composition. It has been applied in screen-set design and is suitable for long-term monitoring of system performance and for comparison of screening performance in different searching systems.

## Combinatorial Problems in Computer-Assisted Structural Interpretation of Carbon-13 NMR Spectra

ALAN H. LIPKUS and MORTON E. MUNK\*

Department of Chemistry, Arizona State University, Tempe, Arizona 85287

Combinatorial problems posed by a method for computer-assisted structural interpretation of  $^{13}\text{C}$  NMR spectra based upon fragments consisting of a carbon atom and its  $\alpha$  neighbors are discussed. The basic problem of generating all structures consistent with a set of inferred fragments that contains mutually exclusive alternatives is divided into two parts: generation of combinations of fragments and exhaustive assembly of each combination into molecules. Algorithmic solutions to both of these problems are presented in detail.

## Monte Carlo Studies of the Classifications Made by Nonparametric Linear Discriminant Functions

TERRY R. STOUCH and PETER C. JURIS\*

The Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania 16802

Chance factors in pattern recognition studies utilizing nonparametric linear discriminant functions are examined. The relationship between complete linear separation of a data set and the dimensionality of the study is well-known. Also, due to the nature of the inequalities from which these numerical techniques are derived, 50% separation is always assured. This paper investigates the probability of achieving less than 100% but greater than 50% chance separations as a function of the dimensionality and class membership distribution. It is shown that the fraction of correct classifications due to chance factors increases dramatically as the dimensionality of the study increases. These results serve to redefine the level of expected chance classifications as a function of the number of observations, the dimensionality, and the class membership distributions. The results can be used to assess the classification results obtained with a given linear discriminant function.

## Substructure Searching of Heterocycles by Computer Generation of Potential Aliphatic Precursors

RICHARD L. M. SYNGE

School of Chemical Sciences, University of East Anglia, Norwich, NR4 7TJ, England

Heterocyclic structures, in natural and synthetic organic compounds, are mostly formed by cyclizations of aliphatic precursors. Computer programs have been written that notionally reverse this process. By breaking, in turn, one of the heterobonds in each ring of each heterocyclic region of a molecule, a permuted set of aliphatic tree structures is generated. Exhaustive search of the "bonded-atom" strings present in such a set of trees can reveal unsuspected structural and biosynthetic aspects of a molecule. Some current methods of substructure searching, by over-emphasizing cyclic structures, fail to detect these relationships.

## Structured Biological Data in the Molecular Access System

SANDOR BARCZA,\* LAWRENCE A. KELLY, SIEGFRIED S. WAHRMAN, and  
RICHARD E. KIRSCHENBAUM

Preclinical Research, Sandoz Research Institute, East Hanover, New Jersey 07936

Chemical, administrative, and biological information at Sandoz Inc. Research and Development was put into a database created with the MACCS program.<sup>1,2</sup> The configuration of the database and of the "datatypes" in it was done in a way that made the essentially "flat" original design of the database hierarchically structured and searchable. This was accomplished by two devices: (1) The biological activity datatypes were given structured names. The characters went from left (broadest category) to right (most specific category), expressing the major disease goal, then the subgoal, and finally the actual test name. (2) The data within the datatypes were structured into zones and subzones of columns, corresponding to species, dose, effect, direction, date, etc., for each line, while the rows of entry were successive instances of testing. This additional organization of the data offered significant advantages in economy of storage, coherence (interrelatedness) of data, searching, user comprehension, and overview. The orderly entry of data into this system was assured through a data entry interface to the MACCS program. It is the purpose of this paper to describe the innovative adaptation of MACCS to the handling of pharmacologic data, as well as some associated problems and solutions.

## 有機合成の設計（有機合成経路探索）

化学と工業、38（4）、（1985）：計算”器”化学

化学と工業、35（1）、（1982）：コンピューターによる分子・反応のデザイン

化学と工業、36（2）、（1983）：有機合成化学

これらの特集号から引用文献をたどるだけで、関連文献の大部分は揃う。コンピューターの有無で合成設計の本質が変わる訳ではないが、紙と鉛筆だけの時代には実現しなかったであろうと思われる方法でもコンピュータ利用により可能になることがある。3番目のものはコンピュータは直接は関係がないが、参考までに加えた。

工技院化技研：分子設計・反応設計CADシステム技術に関する調査研究（昭和59。3）

（財）日本産業技術振興協会：化学工業の技術開発の情報化に関する調査（昭和60。3）

この2冊は広い内容の中で合成設計も扱っている。前者の文献リストは圧巻であるが、本文とは編集が別々になっているのが惜まれる。

田辺和俊、”化合物設計のためのCAD技術”、化学工業資料、19,158-165(1985)

A. P. Johnson, "Computer aids to synthesis planning", Chem. Britain, Jan. 1985, 59-67

E. J. Corey, A. K. Long, S. D. Rubenstein,  
"Computer-assisted analysis in organic synthesis", Science, 228,408-418(1985)

合成設計プログラムを導入した企業連合（コンソーシアム）の動きなどが断片的ではあるがわかる。ただし事態はかなり流動的であるらしい。 （工藤喜弘）

# Twelfth International Conference on Very Large Data Bases

August 25-28, 1986

Kyoto, Japan

## THE CONFERENCE

VLDB Conferences are intended to identify and encourage research, development and applications of database systems. The Twelfth VLDB Conference will bring together researchers and practitioners to exchange ideas. We are eager for papers on new concepts, new ideas and new research results having to do with databases and knowledge bases. We not only solicit, but seek and encourage, papers describing work in which an implemented system embodies a new concept. All submitted papers will be read by the Program Committee.

## TOPICS

Major topics of interest include, but are not limited to:

Data Models	Data Organization
Database Theory	Performance
Database Design Methodology and Tools	Security Integration of Logic and Database
Distributed Databases	Knowledge-Base System
Query Optimization	Object-Model Representation
Concurrency Control	Engineering Databases
User Interfaces	Office Information Systems
Database Hardware	Multi-media Databases

## TO SUBMIT YOUR PAPERS

Five copies of double-spaced manuscript in English up to 5000 words should be submitted by February 15, 1986 to one of the Program Committee Chairpersons.

Setsuo Ohsuga  
University of Tokyo  
4-6-1, Komaba, Meguro-ku  
Japan

SPONSORS: Very Large Data Base Endowment  
IFIP  
INRIA  
Information Processing Society of Japan

## IMPORTANT DATES

PAPERS DUE:	FEBRUARY 15, 1986
NOTIFICATION OF ACCEPTANCE:	APRIL 30, 1986
CAMERA READY COPIES DUE:	MAY 30, 1986

# COBAC IV

Computer Based Methods in Analytical Chemistry

September 15—19, 1986

Graz, Austria

## DATE AND LOCATION

COBAC IV will be held from Monday, September 15, to Friday, September 19, 1986 at the Conference Center Raiffeisenhof, Graz. This Conference is one in a series started in 1979 in Portoroz (Yugoslavia) and held successively in Munich (FRG) and Cracow (Poland).

## TOPICS

- |   |                               |
|---|-------------------------------|
| 1) Laboratory Networks                              | 7) Data Management Systems    |
| 2) Robotics and Automation                          | 8) Expert Information Systems |
| 3) Quality Control                                  | 9) Artificial Intelligence    |
| 4) Spectral Library Search                          | 10) Graphics                  |
| 5) Multivariate Data Analysis                       | 11) Miscellaneous Topics      |
| 6) Laboratory Organization and Methods Optimization |                               |

## PLENARY LECTURES

It is planned to organize plenary lectures, special sessions and discussions on the above listed topics.

## CONTRIBUTED PAPERS

Contributed papers will be accepted either for a poster session or for a short oral presentation. Ample time will be given for the display and discussion of posters. All those planning to participate in the Conference are invited to submit papers to be included in the scientific program. It is intended to publish the full text of the papers in Proceedings to be issued several months after the Conference.

## REGISTRATION FEE

The registration fee which includes a copy of the booklet of abstracts will be Austrian Schilling 2000 (app. US\$100, DM280) if paid before July 1, 1986. Scientific contributions will only be accepted from registered participants.

## ORGANIZATION

The Conference is organized jointly by the Austrian Society for Microchemistry and Analytical Chemistry and the Working Group Computers in Chemistry of the Austrian Chemical Society in cooperation with an International Scientific Committee.

COBAC IV

c/o Institut für Analytische Chemie,  
Mikro- und Radiochemie  
Technische Universität Graz  
A-8010 Graz ----- Austria

## 機関利用案内

### Q C P E に つ い て

米国インディアナ大学のQCPE (Quantum Chemistry Program Exchange) は化学における計算機利用のほとんど全てを網羅しており、情報を得るだけでなく、プログラム入手の方法としても便利かつ格安であるので、プログラムのカタログと収録対象および会員申し込み用紙を以下に示す。申し込み用紙はコピーでも受け付けられます。

#### CONSOLIDATED INDEX TO QCPE CATALOG VOLUME XV

The complete QCPE Catalog consists of the following ten sections:

- I. Numerical Methods
- II. Integrals
- III. Ab Initio Systems
- IV. Semi-Empirical MO-SCF Methods
- V. Approximate MO Methods
- VI. Scattering & Crystallography
- VII. Spectroscopy
- VIII. NMR/ESR/EPR Systems
- IX. Chemical Reactions
- X. Systems for Education, General Utility and Computer Graphics

This index is organized by section, each one of which consists of one or more interest areas.

One first consults the index to get some idea of the type of systems which are available. The complete descriptions of the systems listed in the index can be obtained by ordering that section of the QCPE catalog corresponding to the section in the index in which the relevant program is found.

To facilitate this ordinarizing process, we include a card with the index. Simply indicate which section(s) you wish to receive and return the card to QCPE.

QCPE MEMBERSHIP ENROLLMENT CARD

NAME \_\_\_\_\_

ADDRESS \_\_\_\_\_

TELEPHONE (IN FULL) \_\_\_\_\_

Please enroll me as a member in QCPE. Annual Membership fees: Domestic (U.S., Canada, Mexico), \$10.00; Europe, \$16.00; other foreign, \$22.00; supporting membership, \$100.00. (Supporting membership is an organizational or group membership, as opposed to an individual membership, which entitle a group to designate up to ten individual recipients of QCPE materials.)

Payment is enclosed.

Please bill me.



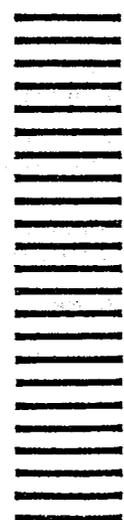
No Postage  
Stamp Necessary  
if Mailed in the  
United States

**BUSINESS REPLY CARD**

FIRST CLASS PERMIT NO. 126 Bloomington, Ind.

POSTAGE WILL BE PAID BY

Quantum Chemistry Program Exchange  
Chemistry Department, Room 204  
Indiana University  
Bloomington, Indiana 47401



QCPE FEE SCHEDULE

July 1, 1985, to June 30, 1986

A. Programs:	Tape, 2000 cards or fewer	\$45.00	PER PROGRAM
	Tape, 2001 to 6000 cards	85.00	" "
	Tape, 6001 cards or more	95.00	" "
	Listings, 2000 cards or fewer	17.00	" "
	Listings, 2001 to 6000 cards	30.00	" "
	Listings, 6001 to 15,000 cards*	45.00	" "

\*Listings are not available for programs longer than 15,000 cards.

B. Documentations			\$ 5.00 PER PROGRAM
Exceptions:	#199--\$12.50	#327--\$7.00	#426--\$7.00
	#238-- 12.50	#328-- 7.00	#437-- 7.00
	#244-- 12.50	#342-- 7.00	#446--12.50
	#263-- 12.50	#368-- 7.00	#447-- 7.00

C. Handling \$12.00 PER ORDER  
 Exception: If you order listing ONLY, handling is reduced to \$2.50. Postage is negligible in the U.S. but will be charged elsewhere.

D. Preparation and shipping \$ 7.50 PER ORDER  
 Orders going outside North America will be charged the EXACT AMOUNT of postage.

E. Tapes: If you order programs in tape format, the tape costs are as follows:  
 2400 ft. tape = \$14.75  
 1200 ft. tape = 11.15  
 600 ft. tape = 10.00  
 Each client will receive the smallest size suitable to his order.

F. Annual QCPE membership rates:  
 Domestic (includes Canada and Mexico), \$10.00; KLM distribution (Europe), \$16.00; other foreign, \$22.00; supporting, \$100.00.

G. Annual subscription rates for QCPE Standard Profile on Quantum Chemistry:  
 Domestic, \$50.00; foreign, \$80.00

10のセクションのうちIXとXの内容を紹介します。

それ以外のセクションの内容については、部会事務局にご請求下さい。コピーをお送りします。

#### SECTION IX: CHEMICAL REACTIONS

##### A. Rate Constants, Kinetics and Related Programs

QCPE NUMBER	NAME	FUNCTION
433		Delta H Versus K
416	SOGEQ	A General Computer Program for the Calculation of Chemical Equilibria Including Activities in Multicomponent Condensed Phases
343	NIKE	Numerical Integration of Kinetic Equations
293	MSIM4	Stochastic Mechanism Simulator
291	MINI-RRKM	Minicomputer-Adapted Version of QCPE 234
282	KUNI	Calculation of Unimolecular Rate Constants by Optional Use of the Kassel, Slater or RRKM Integrals
244	TGAP	Estimation of Gas-Phase Thermokinetic Parameters
234	RRKM	General Program for Unimolecular Rate Constants
195		Subroutine FIRST and SECOND for Rate Constant Evaluation
179	ACTEN	Arrhenius Activation Energies and Frequency Factors
168	PARACT	Rate Constant Calculations from Differential Scanning Calorimetric Thermograms by the Bernoulli Equations
162	DATAR	Rate Parameters from Differential Scanning Calorimetric Thermograms
80	LSKIN1	Least-Squares Treatment of First-Order Rate Data
79	ACTENG	Activation Energy Calculation

##### B. Calculation of Cartesian Coordinates of Atoms in Molecules

419	COORD	Interconversion of Cartesian and Internal Coordinates
363	CYCORD	Programs for Calculating the Coordinates of Atoms in Mono- and Polycyclic Molecules When the Dihedral Angles Are Not Known
332	CAFT	Molecular Geometry Generator

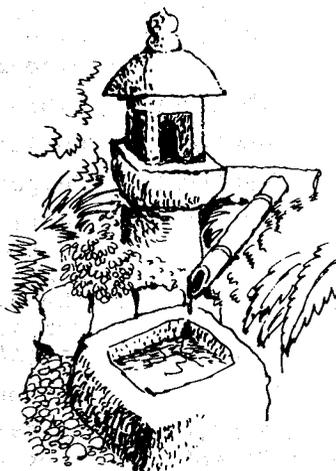
QCPE NUMBER	NAME	FUNCTION
292	ATCOOR2	Modification of ATCOOR (QCPE 250)
250	ATCOOR	Calculation of Cartesian Coordinates
226	COORD/1130	Calculations of Atomic Coordinates of Molecular Systems
186	COORD	Time-Sharing Version of QCPE 136
169	VARCOR	Calculate Cartesian Coordinates for All Atoms in a Molecule
136	COORD	Atomic Cartesian Coordinates for Molecules
135	MLBD	Standard Geometric Models and Cartesian Coordinates of Molecules
130	CORCAL	Molecular Atomic Coordinates from Bond Lengths and Bond Angles
94	PROXYZ	Cartesian Coordinates for Atoms in Molecules

C. Isotope Effects, Normal Coordinate Analysis and Related Program

447		Polymer Analysis Program
430	ISOCAL	A System of Interactive Computer Programs for Vibrational Modeling of Equilibrium and Kinetic Isotope Effect
342		General Vibrational Analysis Programs Utilizing the Wilson GF Matrix Method for a General Unsymmetrized Molecule
339	NCRDWC	A Program to Determine Vibration Frequencies and Normal Models of Vibration
337	REBOVIB-IV	Isotope Effects Computational System
275	MODFOR	Normal Coordinate Analysis Solution by a Systematic Variation in the Wilson F-Matrix
258		Isotope Effects V-I
208	COMPLY	Least-Squares Refinement of a Compliant Field
178	XYZ	Geometry of Molecules
177	NORCRD	Long XYZ Version
176	NORCRD	Short XYZ Version
78	GF MATRIX	Secular Determinant Solution in Normal Coordinates Analysis
57	GNTCP	General Normal Coordinates Treatment

D. Molecular Mechanics and Semi-Empirical Force-Field Calculations

<i>QCPE NUMBER</i>	<i>NAME</i>	<i>FUNCTION</i>
448	MM2	Special 32-Bit Minicomputer Version
423	MM2	CDC Version of QCPE 395
410	BIGSTRN-2	Empirical Force-Field Calculation
404	MMI/MMPI	UNIVAC Version of QCPE 318
400	MMI/MMPI	VAX Version of QCPE 318
395	MM2	Molecular Mechanics II
348	BIGSTRN	Empirical Force-Field Calculations
325	MCA	A General Program for Molecular Crystals Analysis
318	MMI/MMPI	Calculations by the Method of Molecular Mechanics
247	QCFF/PI	Quantum Mechanical Extension of the Consistent Force-Field Method (1982 Contribution)



SECTION X: SYSTEM FOR EDUCATION, GENERAL UTILITY AND  
COMPUTER GRAPHICS

A. Programs Developed to be Used as Educational Tools

QCPE NUMBER	NAME	FUNCTION
343	NIKE	Numerical Integration of Kinetic Equations
213	HYDRGN	Quantum Mechanical Bonding in the Hydrogen Molecule
196	TITRATE	A Program for Titration Simulation
182	DIATH2	A Computer Aid for Studying the Quantum Mechanics of the Chemical Bond

B. Programs of General Utility

445	RISMIX	An Extension of Lowden's Program (QCPE 306) to Solve the RISM Equation for Multicomponent Molecular Fluids
444	MATH	Math Processing Facility
429		Molecular Surface Program
420	BTERM	Subroutine to Computer the Faraday MCD B-Terms for Planar $\pi$ Systems with Non-Degenerate States
413	SAREA	Van der Waals (and Accessible) Surface Area of Molecules
405		FF (Flexible Formatting) Package
384	MICHEN	Michaelis-Menten Enzyme Kienetics
374	PFORT	Verifier
364	OSCILL	IBM Version of QCPE 319
362	DIAGRAM	Generation of Goldstone and Bloch-Brandow Diagrams to 5th Order
357	LINEAR & NONLINEAR	A Set of Programs to Calculate the Classical Pressure Second Virial of Linear and Nonlinear Molecules
322	1D/2D/3D	Cubic Spline Interpolation Package
321	NLCAL	Nonlinear Calibration
320	FACTANAL	Target-Transformation Factor Analysis
319	OSCILL	Matrix Elements of Powers of the Dimensionless Coordinate for the Nondegenerate Simple Harmonic Oscillators and of Powers of the Dimensionless Radial Coordinate for the 2-Fold or 3-Fold Isotropic Harmonic Oscillator
317		Subroutine to Handle Format Free Input
306	RISM,RISMGR, RISMSK	A Set of Programs to Solve the RISM Equation for the Pair Correlation Functions and Molecule Structure Factors of Molecular Liquids

QCPE NUMBER	NAME	FUNCTION
303	ENERGY	Atomic Energy Levels by Screenig Parameter Formalism
302		Dynamic Array Assignment in FORTRAN
289	FORCE-2	Address, Storage and Module Management Subroutines
231	NEPROP	Subroutines for Numerical Propagation of Uncertainties
230	FITIT	Non-Linear Least-Squares Fit
225	MOLAREA	Calculation of the Surface Area of a Non-Spherical Molecule or Molecular Cavity in a Fluid from the van der Waals' Radii of Component Atoms
206	SUPERCIS	Urey-Bradly Five-Atom Configuration
194	CONVERT	IBM 360 FORTRAN Programs to CDC 6600 FORTRAN Conversion
193		Self-Consistent Charge and Configuration Calculations on Inorganic Compounds
190	APER	Seventh-Order Nondegenerate Double Perturbation Calculations
155	AFIT	Molecular Orbital Calculations by the Jacobi Method
147	FRS3	FORTRAN Real Sort Version 3
139		Perturbation calculations
115		Linear Least-Squares Fitting of Weighted Data

### C. Computer Graphics

418	ZMAT	Interactive Stereo Graphics Program
412	GPORT	Generation, Enumeration and Plottings of Rooted Trees
396	ELPO	Electrostatic Isopotential Maps and Interaction Energies from Localized Orbital Configurations
375	MMAP	Contour Mapping by Interpolative Methods (Version B)
370	NAMOD	A Computer Program for Drawing Perspective Diagrams of Molecules
369	APLPLOT	Computer Plotting System
219	PRINT	Plotting and Representation in Three Dimensions by Line Printer
175	PLOT	Printer Plotting Subroutine

## 「化学PC研究会」について

標記の研究会が1982年1月に発足して四年を迎え、種々の活動を行っている。本会をまだご存じない方のためにご入会のお誘いも兼ねて紹介したい。

近年、パーソナルコンピュータ（PC）の普及には目覚ましいものがあり、化学の分野でよい道具として定着しつつあります。その中で、学問的には化学を専門とする理工から医薬に至るまで広い範囲で、職業的には学校の先生から一般企業の方々までいろいろなジャンルの方々がPCを活用しようとする際の情報交換の場です。1985年4月現在で約450名の会員が登録されています。主な活動は機関誌の発行で年4回（季刊）会報JAPC（英名：Journal of the Association of Personal Computer for Chemists）を刊行し、化学に関したパソコン用ソフトが論文として収録され、そのプログラムのリストは原則としてその中で公開されています。この会報JAPCは国立国会図書館によって登録され、国際標準逐次刊行物番号ISSN 0289-8497が割り当てられており、さらに、Chemical Abstracts Serviceの雑誌コードCODEN：KKPKDIが付けられ抄録されています。国内はもとより国際的にも評価を受けています。バックナンバーも多少ありますので希望の方は事務局までご連絡下さい。

この他の事業としては、PC用のソフトが各開発者の手元にとどまっているのを発掘し、より有益なソフトが広く活用されるように、ソフトの調査表（カタログ）を募集し、ソフトのカタログ化を実施していますので、勇気をふるって参加下さい。

会費は正会員4,000円、学生会員2,500円、法人会員10,000円、賛助会員30,000円の年額で会報JAPCが4冊配布されます。同好の士はご入会下さい。大歓迎です。気軽にご投稿も下さい。

ところで、本会の事務局は吉村忠与志がやらせてもらっていますが、本人が福井高専より豊橋技術科学大学へ8月1日付で出向することになりましたので、事務局も下記に移転することになりました。

化学PC研究会（事務局）の連絡先：〒440 豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1  
豊橋技術科学大学物質工学系化学情報処理研究室気付  
電（0532）47-0111

### ニュースレター Vol.3, No.3

1985年7月31日 発行

事務局：101 東京都千代田区神田駿河台1-5, 日本化学会情報化学部会（略号 DCICS/CSJ）

Office of the Secretary: The Chemical Society of Japan, 1-5, Kanda-Surugadai, Chiyoda-ku, Tokyo 101, Japan

# NEWSLETTER

Division of Chemical Information and Computer Science  
The Chemical Society of Japan

日本化学会  
情報化学部会

Vol. 3

No. 4

(September 1985)

## 目 次

情報化学のはじまり .....	藤原 鎮 男	1
データベースに関する著作権問題 .....	文化庁著作権課	3
関連行事		
第2回コンピュータ化学に関する日本・ソビエト合同 シンポジウムの開催のお知らせ .....		8
海外動向		
米国化学会秋季年会 CINF, COMP プログラム .....		9
文献紹介		
ラボラトリー・オートメーション .....		13
Journal of Chemical Information and Computer Science 25周年記念号目次 .....		14
Journal of Computational Chemistry 1984年目次 .....		16
情報化学雑学講座		
CAS レポート No. 18 (春季号) より .....		22

# 情報化学のはじまり

千葉大学理学部 藤原 鎮男

前々号で部会長の米田さんは、「情報化学部会の更なる発展を」と述べられたが、今年の情報化学討論会のプログラムを見ると、情報化学は発展期に入ったとの感を懐かせる。そこで、本稿では、この発展に至る経過を順不同、大小の別を考えないでふりかえってみたい。

## 始まり（胎動期）

最初に些か憚りではあるが、私と「情報」の接触の始まりを述べさせて頂くことにする。

太平洋戦争の初期に当る昭和17年4月、東京帝国大学理学部に入学した私達は、当時の理学部長の寺澤寛一先生から「戦時下で、諸外国との学問の交流は断絶した。我々はこの条件の下で研究を進めねばならない。それを肝に銘じて勉学に励むよう」という式辞を頂いた。当時の華々しい緒戦の戦況報道の中で伺った寺澤先生のこの言葉に、私は一種沈痛な響きを感じた。

戦争末期から戦後にかけて、私達は資材の乏しい研究室で、仕事を悪戦苦闘して続けた。それでもなかなか思うように仕事が出来ないので、私はInternational Critical Tablesとか、いろいろの数値表を渉猟し、特に溶解度と融点の値を集めた。その結果は小報文になった<sup>1,2</sup>が、この間に数値データの集積と整備の意義を実感した。特にSmithsonian InstituteのPhysical Tablesには感服した。((1), 日化誌70, 174(1949), (2)J.Chem. Phys., 20, 1338(1952))。

研究室が混乱期を脱し、昭和35年頃から私達は国際会議に出、諸外国の研究室を回る機会が多くなった。それは多くの場合、専ら目と耳による直接的な情報流通であった。ところが、昭和45年頃北欧の研究室を訪れると、大学院の学生が、最新の報文の要旨を計算機のプリントアウトの形で利用しているのを見るようになった。彼らの大学はまだ設備も貧弱で、大型の計算機センターは勿論なく、研究室の装置すら貧弱の時代だったので、これは驚きであった。聞いても、学生自身どこでこのサービスをやっているのか知らず、どこかの国からというのみで、私自身、日本で誰かこういうことをやってくれないかなと思ったものである。その頃から世界全体は、計算機を根幹にすえた情報流通の時代に入っていったのである。

## 幼年期と成長期

戦中および戦後の小時期、我が国の科学者の海外の研究情報への飢えは、今日の我々の到底想像し得ぬものがあつた。その渇きを癒すべく科学新聞、化学の領域、物理学論文選集などが刊行された。東北大学の藤瀬新一郎教授らの努力で、日本化学総覧の刊行も再開された。

これらは、研究者のレベルの活動であるが、この頃から世界各国が、科学技術情報の流通網の整備を国の方策として採り上げるようになり、国を超えた連盟組織も同様にこの問題に取り組み始めた。

この前後の我が国の状況を順不同、大小の別を考えずに記すとつぎのようなことが思い起される。

世界各国が科学技術情報の流通を目指し、科学技術情報センターを設立したのに対応し、我が国にもJICSTが設立され、化学総覧の刊行は発展的にJICSTにより継承されることとなった。八木秀次博士ら

は、日本学術会議の国際ドクメンテーション連盟(FID)への参加を推進し、国としての文献情報の分類コードであるUDCの普及とその改訂作業への協力体制の確立を図り、この種の事業の実施のため、浜田成徳氏らと協力して日本ドクメンテーション協会を設立した。FIDにはその後、小谷正雄、大塚明郎氏が理事となり筆者も副会長として参画している。近年は活動の対象が拡大され、情報流通のネットワーク形成、科学技術基本用語の確立などに取り組んでいる。数値情報の整備流通についてCODATAの設立の動きは、小谷正雄氏がIUPAPを通じて知られ、我が国の対応を進められた。CODATAの執行部には小谷、島内、益子、大杉の諸氏が参画され、小谷先生は会長を、島内氏は我が国で総会を開くなどの寄与をされた。千原秀昭氏は戦後いち早く本邦の化学研究報文の要旨をCASのために作製する労をとられ、この努力は日本化学情報協会(JAICI)の活動に発展して今日に至っている。この間の溝口歌子、平山健三氏らの寄与は没すべからざるものがある。

研究者レベルでいうと、島内武彦、益子洋一郎、荒木 峻、中西香爾(順不同)の諸氏が、赤外線吸収スペクトルのデータベース作製を早くから意図され、委員会組織でカードイメージのデータ集の刊行を続けた。これは我が国におけるCODATA活動の基盤になった。これに類するものは、その後、プロトンNMR(藤原鎮男、湯川泰秀、山本 修、通 和夫氏ら)、高分子 $C^{13}$ -NMR(藤原 譲、西岡篤夫氏ら)、質量分析(佐々木慎一、山本 修氏ら)、高圧化学データ(大杉治郎氏ら)、などのデータ集積活動がつぎつぎに起るに至った。

以上はデータ集積の活動である。計算機利用に立脚した情報活動としては、佐々木慎一氏が多元のスペクトルデータを物質の同定に同時利用しようとする試みを、昭和35年前後から始められた。筆者も、NMRのスペクトル解析とデータ処理から進んでデータ集積に向かい、その間、冒頭に述べたような文献情報処理システムの出現を待ちつつあったが、一向に進まないのを意を決して、昭和44年末、国井利泰、山本毅雄氏らと関係論文の輪講を始め、さらに科研費の援助、高橋秀俊氏らの後援を得て、CA磁気テープを対象とするオンライン検索システムTOOL-IR、日本分析化学会誌要旨全文を対象とするTSIRシステムを完成した。島内氏も続いてケンブリッジ大のデータを利用するXDCをつくり、しだいに、我が国にも大型計算機を基盤にする情報処理システムが稼動し、研究者はその恩恵を享けうるに至った。

### 発展期

かくて、現在我々は各種のデータベースを活用して個々の研究を進めうるに至ったわけであり、情報化学の発展期に入ったと思うのである。そう思うとき、データベースの高次利用の先がけをし、今も内容の更新を続けられる米田幸夫氏の研究は、特記すべきであろう。本部会の一層の発展を祈ってやまない。

なお、本稿の執筆後、このニュースレターの前号で湯川泰秀氏による情報化学の初期の記事を拝見した。本稿にあわせご参照いただければ幸いである。

(1985.8.15)

# データベースに関する著作権問題

——著作権審議会第7小委員会データベース分科会中間報告の概要——

文化庁文化部著作権課

## I. はじめに

多様な情報が大量に供給される現代においては、流通する膨大な情報のなかから必要な情報を効率よく、的確に得ることが求められている。このような要求にこたえるのが、大量の情報を集約化し、コンピュータによって検索できる形に蓄積したデータベースである。データベースは、近年の情報処理技術や通信技術の発達に伴い、急速に開発、普及が進んでいる。

データベースと著作権制度とは、

- ① 学術論文や新聞記事の全文、抄録などのデータベースとして著積される著作物の著作権の問題、
- ② データベース自体が著作物として著作権法による保護を受けるかどうか、

という問題との二面で深くかかわっている。したがって、今後のデータベースの保護とその円滑な利用を図り、データベースの発達を更に促進させるため、データベースの著作権制度上の取扱いをよりの確にすることが現在強く要請されるところとなっている。

このような状況を踏まえ、著作権審議会（稲田清助会長）は、昭和59年1月の総会においてニューメディア及びデータベースに関する著作権問題についての検討を開始することを決定し、そのために第7小委員会（林修三主査）を設置した。第7小委員会は、更にデータベースとニューメディアの問題のそれぞれを専門的に審議するために、データベース分科会（阿部浩二分科会長）及びニューメディア分科会（安藤良雄分科会長、昭和60年1月まで、安立健二分科会長、昭和60年1月から）を設置した。

データベース分科会は、昭和59年3月から、ニューメディア分科会は昭和59年4月から審議を開始したが、データベースがCATVやキャプテン・システムなどをはじめとするニューメディアを通じて利用されることも考えられるため、両分科会は必要に応じ連絡を取りつつ審議を進めることとした。

データベース分科会は3月から12月までに15回にわたる審議を行い、その審議結果を中間的に取りまとめ、昭和59年12月15日に著作権審議会総会に報告した。また、データベース分科会は、昭和60年1月から2月に掛けて中間報告に対する関係団体の意見聴取を行った。今後、これらの意見及び現在、審議が進められているニューメディア分科会の審議を踏まえて引き続き検討を行い、今秋を目途に最終的なまとめを行う予定である。

## II. 中間報告の概要

### A. データベースの現状

データベースという用語については、日常、多義的に用いられているが、当分科会においては、データベースを「多数の情報を体系的に整理統合し、コンピュータによって検索し得るところの機械可読形態にした情報の集合体」と定義した。なお、コンピュータ・ソフトウェアを含めたデータベース・シス

テム全体を指していわれることもあるが、当分科会ではコンピュータ・ソフトウェアを含めないこととした。

これを前提としてデータベースの種類、作成の過程、開発の現状、利用の現状、サービス機関、契約の現状を検討した。

## B. 各国及び国際機関におけるデータベースに関する著作権問題の検討状況

アメリカ、イギリス等の各国及びユネスコ、WIPO(世界知的所有権機関)のような国際機関においてもデータベースに関する著作権問題について検討が行われており、データベースの著作権法による保護が肯定されている。

## C. 著作権法による保護

### 1. データベースの作成と著作権

データベースとして蓄積される情報の著作物性については、例えば、学術論文や新聞記事の全文や抄録は著作物であるが、個々の書誌事項(題号、著者名等)や数値データは、通常、著作物とは認められない。

また、学術論文等の抄録がデータベースとして蓄積されることがしばしばあるので、その作成について原文献の著作権が及ぶかどうかが問題となるが、データベースのために作成される抄録については原文献の内容の骨格をごく簡潔に示すにとどまり原文献の著作権は及ばないものが多いと考えられる。

さらに、コンピュータの記憶装置への著作物の蓄積については、内部記憶装置と外部記憶装置を区別せず、インプットした情報を直ちに処理して消去する場合は別として、複製に該当し、その著作物の著作者の権利が及ぶと考えられる。

### 2. データベース及びその関連資料の著作物性

データベースの著作物性は、従来、情報の選択、配列という行為に着目し、編集著作物(第12条第1項)の観点から認められてきた。データベースの作成過程においては、通常、創作性があると評価される情報の選択、配列があり、データベースはおおむね編集著作者として著作権法による保護を受けるものであると考えられる。

このような考え方は、データベースの作成過程における情報の選択又は配列という行為に着目しているが、データベースの作成には、データの体系付けやキーワードの選定・付与など従来の編集著作物とは異なった創作的行為と評価し得るような知的作業が重要な要素をなしている。したがって、「素材の選択又は配列」という点からのみデータベースの創作性を考えることは必ずしも十分ではなく、「思想又は感情を創作的に表現したものであって、文芸、学術、美術又は音楽の範囲に属するもの」という著作物の定義(第2条第1項第1号)に立ち返って、その創作性を考える必要がある。

このような観点から、データベース作成における個々の過程を吟味し、これらを総合した結果、原資料の収集、選定、データベースの体系の設定、情報の分析、加工、キーワードの選定・付与、ファイルの作成という一連の過程には、通常、創作的行為と評価し得るような知的な活動が含まれており、データベースは、著作物として著作権法による保護を受けると考えられる。

このことを著作権法上より明確にするために、著作物の例示規定（第10条）にデータベースを明示する等の措置を講ずることが望ましい。

なお、データベースの作成、利用に伴い、キーワードとして使用される言葉を体系的に整理したソースや利用者のためのマニュアル、検索のためのコンピュータ・ソフトウェアなどの関連資料が作成されるが、これらはデータベースとは独立した著作物として保護されると考えられる。

### 3. データベースの著作者

データベースの著作者は、情報の収集、選定、分析、加工、蓄積等データベースを作成する一連の作業のなかで創作的な行為を行った者である。

企業等がデータベースを作成した場合は、法人著作（第15条）の規定により企業等が著作者となるが、その際に部外者が参加し、単なる機械的作業を行ったにとどまらず、創作的な行為を行ったといえるような場合には、企業と部外者が共同著作者となる。

### 4. データベースの利用と著作権

著作権法は、複製権その他の支分権を規定しているが、データベースの作成及び利用については、複製権（第21条）、放送権、有線放送権（第23条）、翻案権（第27条）が特に関連が深いと考えられる。

#### (1) 複製に関する権利

著作権が及ぶ複製には、機械可読形態での複製、ハードコピーのプリントアウトの形式での複製のいずれもが含まれる。

個々の情報が著作物であれば、その情報が蓄積されているデータベースが複製される場合には、その個々の情報の著作者の複製権が及ぶ。

また、データベース自体の著作者の複製権については、データベース全体の複製について権利が及ぶことは当然であるが、データベースの一部分の複製であっても、著作物としての価値を持ち得るような形で、情報ある程度まとまりで複製することについては、権利が及ぶと考えられる。

データベースから情報を引き出し、再利用可能な形式で端末機に蓄積する、いわゆるダウンロードは、通常、データベースの著作者の複製権が及ぶ行為であると考えられる。

#### (2) 送信に関する権利

データベースを公衆に対して無線又は有線によって送信することについては、データベースの著作者及び個々の情報の著作者の放送権、有線放送権が及ぶ。

個々の利用者の求めに応じて情報を送信するデータベースのオンライン・サービスについても、送信を総体としてみると一般の有線放送と同様に考えられるところから有線放送権が及ぶと考えられる。これに対し、実態に即した新たな権利を考えるべきであるという意見もあった。

なお、著作物を送信する権利については、ニューメディア分科会の審議ともかかわるものであり、引き続き検討を要すると思われる。

#### (3) 改変に関する権利

情報やキーワードの追加、更新、フォーマットの変更、複数のデータベースの併合等のデータベースを改変する行為については、それが単なる修正増減の範囲を超え、創作的行為と評価し得るような場合は、翻案に該当し、データベースの著作者の翻案権が及ぶと考えられる。

そのような場合には、改変して作成されたデータベースは元のデータベースの二次的著作物として保護されることになる。

#### (4) 音声、映像形式によるアウトプットに関する権利

データベースの著作者及び蓄積されている個々の著作物の著作者は、データベースを音声形式で公衆に対してアウトプットする行為について口述権（第24条）、場合によっては上演権・演奏権（第22条）を有し、また、データベースを映像形式で公衆に対してアウトプットする行為については、現在、上映権（第26条）が映画の著作物に関して認められている。

なお、音声、映像形式によるアウトプットに関する権利については、新たな権利を設定すべきであるという意見もあり、また、ニューメディア分科会の審議ともかかわるところを、引き続き検討を要すると思われる。

#### (5) その他

データベースから情報を検索する行為について何らかの新たな権利の設定を考慮すべきかどうかについては、現在、データベースの著作者は個々の利用者との契約により利益を確保することが可能であり、直ちにこのような新しい権利を設定する必要は乏しいものの、引き続き検討することが必要であると考えられる。

### 5. 権利の制限

著作権法では、著作物の公正な利用を図るという観点から、一定の場合に著作権を制限し、著作物の自由な利用を認めているが、データベースにかかわる制限として、第30条（私的使用のための複製）、第31条（図書館等における複製）、第32条（引用）、第35条（学校その他の教育機関における複製）、第38条（営利を目的としない上演等）、第42条（裁判手続等における複製）等に挙げることができる。これらの規定の適用によりデータベースの作成、利用が許される場合は限定的なものであり、データベースにかかわる権利保護の面で特段の支障は生じないと考えられる。ただし、第38条により、データベースのオンライン・サービスを非営利かつ無料の場合に行い得ることとするとデータベースの著作権者等の利益を不当に害するおそれ強いことから、このようにデータベースのオンライン・サービスを行うことについては、データベースに関する権利者の利益を害しないよう何らかの手当を施すことが望ましい。

また、第67条から第70条に定められている強制許諾制度についてもデータベース固有の問題は生じないと考えられる。なお、現行の規定のほかに新たな制限規定又は強制許諾制度を設ける必要性は乏しいと考えられる。

### 6. 著作者人格権

著作権法は、公表権その他の著作者人格権を規定しており、データベース及び蓄積される個々の情報についてもこれらの権利が認められる。

公表権の適用を考えるに当たって問題となる「公表」の概念については、データベース・サービスが開始されたときを公表ととらえるのが妥当であると考えられる。

また、データベースは情報の追加、更新を必要とするので、これらの行為に同一性保持権が及ぶこととなるかが問題となるが、情報の追加、更新は第20条第2項第3号の「やむを得ない改変」に該当し、同一性保持権が及ばないと考えられる。

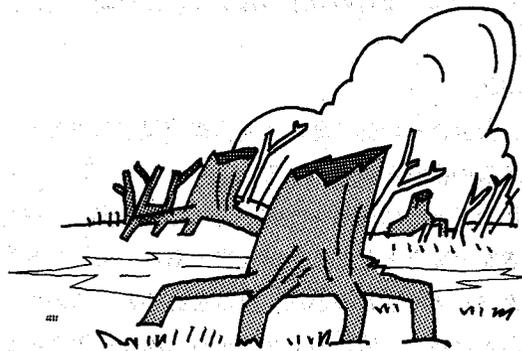
## 7. 保護期間

保護期間については、現行の保護期間(著作者の死後50年、団体名義の著作物等の場合は公表後50年)で特に支障がないと考えられる。なお、ベルヌ条約との関係からも保護期間の短縮は現在のところできないので、この問題は国際的な枠組みのなかで考えるべき問題であると考えられる。

## 8. その他の問題点

ディストリビューター等データベースの流通にかかわる者について放送事業者のような著作隣接権的な保護を考えるべきかどうかという問題については、著作隣接権制度によって現在保護されていない有線放送事業者や出版者等他の著作物伝達に携わる者の取扱いの問題とも関係し、広範な権討を要すると考えられる。

また、データベースの作成、利用に関する権利処理の在り方については、データベースから個々の著作物をアウトプットする場合に、個々のアウトプットごとに許諾を求めることは実際上困難であることから、データベースとして著作物を蓄積する段階で事後のアウトプットを含めて包括的な契約を結ぶことが合理的であると考えられる。さらに、データベースとして蓄積される著作物が多種多様であることから、集中的な権利処理方式が必要かどうかの問題となるが、少なくとも著作物の蓄積については個々の権利者との間で処理する従来の方式を変えねばならない事情は現在のところ生じていないと考えられる。



## 関 連 行 事

### 第2回コンピュータ化学に関する日本・ソビエト 合同シンポジウムの開催のお知らせ

ソビエトのノボシビルスク科学アカデミーの提案で、1983年5月ノボシビルスクのアカデムゴルトクで第1回のコンピュータ化学に関する日ソ合同シンポジウムが開催された。本年11月27日(水)~29日(金)開催の中部化学関係学協会支部連合秋季大会中に、第2回のシンポジウムが下記のプログラムで豊橋技術科学大学で開催される。お問い合わせは豊橋技科大の阿部英次まで。

11月27日(水) 9時~16時30分

Opening Address , *Sasaki*  
Multi-computer System for the Chemical Database , *Ulyanov*  
Computer Processing of Chemical Nomenclature , *Iizuka*  
Chemical Information Processing Systems , *Kudo*  
Technological Aspects of the Chemical Database Preparation and Information Support , *Podogornaya*  
Construction of NMR Database and Its Application to Structure Elucidation System , *Abe*

11月28日(木) 9時~12時

Computer-Assisted Structure-Taste Studies on Sulfamates by Pattern Recognition , *Miyashita*  
Optimization of Molecular Mechanics Parameters - Principle and Application , *Tanabe*  
Molecular Design of Mixed Solvents based on Lennard-Jones Model , *Nakanishi*  
Molecular Design of Polymer Materials , *Kuroda*  
A Review of Scientific Achievements of the Molecular Spectroscopy , *Koptyug*

11月29日(金) 9時~17時

High Speed Treatment of 40,000 Mass Spectra in a Microcomputer System , *Maeda*  
Prediction of Molecular Weight and Elementary Composition of Unknown Compounds by Use of Mass Spectrometry Computer Library Search System , *Lebedev*  
Information Retrieval System for Organic Compounds , *Smirnov*  
Computer Software System for Molecular Design - TUTERS , *Takahashi*  
Evaluation of Predicted Chemical Reactions in the Synthesis Design System , *Piottukh-Peletsy*  
Database System for Organic Synthesis Design , *Fujiwara*  
Closing Address , *Koptyug*

## 海外の動き

米国化学会秋季年会在、シカゴで9月8日から13日に開催された。

Division of Chemical InformationおよびDivision of Computer in Chemistry で発表されたものを以下に掲載する。

### DIVISION OF CHEMICAL INFORMATION

#### Symposium on Toxicological and Occupational and Environmental Health Information

An Overview of Electronic Sources of Toxicological and Environmental Health Information , *K.S.Deck*

Reaching a Concerned Public: Development of a Resource Center on Occupational and Environmental Health Issues , *A.R.Gotsch , A.L.Erhardt , M.M.Demak*

Use of a Private Database of Occupational Health Literature within Exxon , *J.R.Seager , R.Parker*

Evaluation of Occupational Health Management Systems: A Case Study , *M.L.Fitzgibbon*

Worldwide Hazard Communication System , *K.J.Murray , T.J.Gellrich*

The Society Committee on Publications- Its Missions: Open Meeting of the Committee on Publications , *B.G.Wood , D.H.M.Bowen , J.G.Verkaide*  
Open Committee Meeting of the Society Committee on Chemical Abstracts Service , *G.L.Nelson*

#### Symposium on the Design, Construction, Maintenance, Operation, and Use of In-House Databases

Building In-House Chemical Databases , *J.R.Rumble, Jr.*

Total Document Control in a Specialized Information Center , *F.G.Belli , J.H.Bement , M.D.Majcher , A.A.Neal*

Multiuser, Multiaccess INQUIRE Databases in a Research Information Center , *B.C.Stryck , R.H.Freysinger*

A New Dow Proprietary Information System Using an IBM PCNetwork and Mainframe , *W.W.Meyer , S.A.Buck , H.C.Swoverland*

MASQUERADE Subject Specialty Databases , *M.D.Baughman*

One-Stop Integrated Chemical-Biological Preclinical Database , *S.Barza , H.W.Mah , M.H.Myers , S.S.Wahrman*

In-House Chemical Databases at Imperial Chemical Industries , *W.A.Warr*

#### Symposium on Interactions--Scientific Information and Office Automation

Integration of PROFS and Technical Searching at the Amoco Research Center , *R.N.Wilke*

Automation in Producing the Institute for Scientific Information Database ,  
*J.M.Hinkle, Jr.*

Multifaceted Processing of Technical Information , *M.I.Eiss , S.A.Riley*  
Interactions Among Chemical Abstracts Database Building, Software Development,  
and Office Automation at Chemical Abstracts Service , *D.L.Dayton*  
Office Automation and Gateways to Chemical Information , *J.E.Rush*

How to Access Databases Using Your Micro: A Day of Demonstrations,  
Presentations, and Critical Examinations of Online Searching  
Packages for PCs

BIOSIS B-I-T-S and BioSuperfile Presentation. Bioscience Information Service  
BIOSIS B-I-T-S and BioSuperfile Demonstrations

ERIC MICROsearch Presentation. Educational Resources Information Center,  
National Institute of Education, U.S.Department of Education

ERIC MICROsearch Demonstrations

In-Search Presentation. Menlo Corporation

In-Search Demonstrations

KTALK Presentation. KTALK Inc.

KTALK Demonstrations

Symposium on The Computer-Based Calculation and Estimation of  
Chemical and Physical Properties

Validation of Structure-Activity (and Other) Models , *K.Enslein*

Calculation of Partition Coefficients and Molar Refractivity from Structure ,  
*A.J.Leo*

CHEMEST-A Program for Chemical Property Estimation , *W.J.Lyman , R.G.Potts*

Estimation of Physical Properties of Chemical Compounds ,

*G.R.Famini , P.A.Coon , W.P.Ashman , R.F.Hons*

Synthetic and Analytical Approaches for the <sup>13</sup>-C NMR Characterization of  
Copolymers , *H.N.Cheng*

A Methodology for Predicting Polymer Structure to Meet a Specific Property  
Profile , *R.L.Markham , G.C.Derringer*

Polymer Property Estimation--Hydrodynamic Properties of Hyaluronic Acid ,  
*R.Potenzzone, Jr. , D.C.Doherty*

CINF Vendor Symposium: DIALOG Information Service, Inc.

DIALOG Information Services--An Overview of our Recent Contributions to  
Chemical Information , *P.F.Rusch , M.A.S.Palma*

Chemical Searching on DIALOG at the Amoco Research Center , *M.L.Winzenbrug*

Patent Searching on DIALOG , *S.R.Crowley*

How Business Information Databases on DIALOG Can Benefit a Chemical Company ,  
*R.E.Kass*

Instruction of Undergraduate/Graduate Students in Chemistry Database

Searching on DIALOG , *O.B.Ramsay*

## DIVISION OF COMPUTERS IN CHEMISTRY

### Symposium on Applications of Artificial Intelligence in Chemistry

- Impact of AI on Industrial Control and Automation , *Sam Bansal*  
Expert Systems : Description and Applications , *Dennis Smith*  
Interpretation and Design of Chemically Based Experiments with Expert  
Systems , *David Garfinkel , L.Garfinkel , V.W.Soo , C.A.Kulikowski*  
A Chemical Reaction Interpreter for Simulation of Complex Kinetics ,  
*David Edelson*  
An Intelligent Sketchpad as a Medium for Chemical Information ,  
*Carl Trindle*

#### I. General AI

- EP-X: A Knowledge-Based System to Aid in Bibliographic Searchers of the  
Environmental Pollution Literature , *Phillip J.Smith , D.A.Krawczak ,*  
*S.Shute*  
Applications of MACSYMA to Problems in Science and Engineering ,  
*Richard Pavelle*  
Group Theory Using Symbolic Computer Programs , *Gordon D.Renkes*  
An Intelligent Data Analysis Interpreter Which Reports in Natural Language ,  
*Alvin J.Surkan , O.Pin-Ngern*  
Soft Relational Database for CAD/CAE , *Eitan Avni , A.Kandel*  
The Rulemaster Knowledge Engineering Facility , *Charles E.Riese , J.D.Stuart*

#### II. Expert Systems

- An Expert System for the Formulation of Agricultural Chemicals ,  
*Bruce A.Hohne , R.Houghton*  
Expert System for Materials Selection ,  
*Alvin J.Surkan , N.Sherwani , R.Sherwani*  
Chemistry Diagnostic System for Steam Power Plants , *James C.Bellows*  
A Real-time Expert System for Process Control ,  
*Robert L.Moore , C.G.Knickerbocker , L.B.Hawkinson*  
GloveAid-A RuleMaster Expert System to Choose Gloves for Protection  
Against Hazardous Chemicals , *L.H.Keith , J.D.Stuart , S.K.Mounce ,*  
*D.B.Walters , A.T.Prokopetz*  
Computer-Based Expert System for Optimizing Ultracentrifugation Runs ,  
*Philip Martz , M.Heffron , O.M.Griffith*  
QualAid-A RuleMaster Expert System to Advise QA/QC Requirements for Analysis  
of Pollutants , *L.H.Keith*  
ECAT-An Expert System for HPLC Methods Development ,  
*Joe Karnicky , R.Bach , S.Abbott*

#### III. Reaction Synthesis

- A Self-Organizing Knowledge Base for Recall, Design, and Discovery in  
Organic Chemistry , *G.A.Wilcox , Robert A.Levinson*  
Using a Theorem Prover in the Design of Organic Synthesis ,  
*Tungwa Wang , I.Burnstein , S.Ehrlich , M.Evens , A.Gough , P.Y.Johnson*  
Expert System Rules for Diels-Alder Reactions ,  
*C.W.Mosely , C.T.Hemphill , William D.LaRoe*  
A Multivalued Logic Predicate Calculus Approach to Synthesis Planning ,  
*Johann Gasteiger , M.G.Hutchings , P.Low , H.Saller*  
CAMEO: An Interactive Computer Program for Predicting Products of Organic  
Reactions , *William J.Jorgensen*

#### IV. AI Applications to Molecular Structure

On the Similarity of Graphs and Molecules ,

*Steven H. Bertz , W.C. Herndon , G. Dabbab*

Intelligence in Constructing Molecular Models , *Todd W. Wipke , M. Hahn*

Computer Assisted Drug Receptor Mapping Analysis ,

*Teri E. Klein , C. Huang , R. Langridge , C. Hansch*

Application of Artificial Intelligence to the Design of Proteins ,

*Michael N. Liebman , H. Weinstein*

Elucidation of Structural Fragments by Computer-assisted Interpretation

of IR Spectra , *Hugh B. Woodruff , S.A. Tomellini , G.M. Smith*

Chance Factors in Pattern Recognition. Monte Carlo Studies of Classifications

Made by Nonparametric Linear Discriminants , *T.R. Stouch , P.C. Jurs*

#### VI. AI Applications to Molecular Structure

An Expert System for Organic Structure Elucidation ,

*Bo Curry , J.A. Michnowicz*

An Automated Structure Determination System for MS/MS Data ,

*Kelvin Cross , A.B. Giordani , H.R. Gregg , P.A. Hoffman , C.F. Beckner , C.G. Enke*

Concerted Organic Analysis of Materials and Expert System Development ,

*Shirley Liebman , K.D. Fickie , P.J. Duff , R.A. Fifer , A.M. Harper*

Computer-Assisted Structure Elucidation Using 2-Dimensional NMR Data ,

*Bradley D. Christie , M.E. Munk*

AI and Logic Programming in Magnetic Resonance Spectroscopy and Imaging

Methods Research , *Teresa J. Harner , F. Ddelaglio , E.J. Dudewicz , G.C. Levy*

Concept Learning in C-13 NMR Spectra Analysis ,

*Saddek Belaid , H. Solaano , J. Sallantin*



ラボラトリー・オートメーション

—— 分析ロボットの精度評価 ——

1985年の新刊雑誌(分析関係)を見ている限りでは、“automation”, “automated”あるいは“computer controlled”などをタイトル中に含む報文が Anal.Chem. や Anal.Chim.Acta などに散見されるが、イオン選択性電極の為の data acquisition, measurements, plotting が主である。また、熱分解GC/MSへの“pattern recognition”の応用も盛んで(Anal.Chem.)あるが、これは人間のパターン識別能力では見分けられそうにない分類作業を自動化するもので、“実験室の自動化”とは少し意味が異なる。

このような中で、A.N.Papas らの報文(Anal.Chem., 57, 1408-1411, 1985)は、薬物の溶解性の測定をロボット化した場合と人間が測定した場合を比較評価しており、異色のものと言える。特に、今後増加するであろう実験ロボットの測定精度をいかに評価し人力と置き換えていけばよいか、一つの実際モデルを提示している点に注目したい。このロボットは、Zymark社が市販している Z100 (Zymate laboratory robot system) の 13 種の standard option 部品を組み合わせたもののようで(残念ながら各パーツの構成概念図や写真は載っていない)、測定器には Varian 社または Beckman 社の UV-Vis. spectrophotometer を使用している模様である。ロボットと人間の比較は、約 30 回の繰返し実験(おそらく 1hr/回の実験)の平均値、標準偏差などで示され、分析精度の比較結果はかなり良く一致しており、このロボットの信頼度は高い。

LAシステム化推進協議会主催、第2回技術セミナー「LAはどこまで進んだか」(1985年 4月23日~26日)に於いても、最終日のパネルディスカッションの中で参加者の多くは、(1)分析機器の自動化、(2)データ・ベースの構築・管理などの問題と肩を並べて(3)化学的な前処理実験の自動化を真剣に討議している。実験室にロボットを導入する際の技術的評価は、Papas らの報告と同様、その実験を人間が実施する場合とロボットとの精度比較で進められよう。これに経済性と安全性の評価が加わることは言うまでもない。

最後に、日工マテリアル、Vol.2, No.12, pp10-13 (1984)の室氏のレポートは、LAの進む方向を社会的背景から考察し、実験室の将来像を予測しているので、一読を勧める。

石田 嘉明(宇部興産)

米国化学会は1961年に、Journal of Chemical Documentation というタイトルで化学情報の機械処理を目指した論文誌を発刊した。途中1975年に、Journal of Chemical Information and Computer Sciences に発展的改称を行なって、今年25年をむかえた。以下は25周年記念号 (silver anniversary issue) の目次内容である。

論文題目、著者、頁

The Journal for Chemical Information and Computer Scientists:  
A 25-Year Perspective, *Herman Skolnik*, p.137

Computer Hardware and Software in Chemical Information Processing,  
*James E. Rush*, p.140

Publishing of Primary Information,  
*Joseph H. Kuney*, p.149

Copyright: Past, Present, and Future,  
*Barbara Friedman Polansky and Ben H. Weil*, p.153

Abstracts and Other Information Filters,  
*Russell J. Rowlett, Jr.*, p.159

Development of Indexing and Indexes,  
*Charles L. Bernier*, p.164

History of Citation Indexes for Chemistry: A Brief Review,  
*Eugene Garfield*, p.170

Peculiarities of Chemical Information from a Theoretical Viewpoint,  
*Robert Fugmann*, p.174

Principles for the Continuing Development of Organic Nomenclature,  
*N. Lozac'h*, p.180

Chemical Abstracts Service's Secondary Chemical Information Services,  
*Dale B. Baker*, p.186

Chemical Information from DIALOG Information Services,  
*Peter F. Rusch*, p.192

Evolution of Industrial Chemical Information Systems,  
*Carlos M. Bowman and Paula B. Moses*, p.197

End-Users and Chemical Information,  
*Robert E. Buntrock and Aldona K. Valicenti*, p.203

Information Chemistry in Japan,  
*Shizuo Fujiwara*, p.207

Toxicology Information Systems: A Historical Perspective,  
*Henry M. Kissman and Philip Wexler*, p.212

A Drug Is Born: Its Information Facets in Pharmaceutical Research and  
Development, *Horace D. Brown*, p.218

- The Chemical Information System and Spectral Databases ,  
*Stephen R.Heller* , p.224
- Chemical and Spectral Databases: A Look into the Future ,  
*John R.Rumble,Jr. , and David R.Lide,Jr. ;* p.231
- Data Base Development and Search Algorithms for Automated Infrared Spectral  
Identification , *S.R.Lowry , D.A.Huppler , and C.R.Anderson* , p.235
- Performance Analysis of a Simple Infrared Library Search System ,  
*Martin Ruprecht and Jean T.Clerc* , p.241
- Retrieval and Interpretative Computer Programs for Mass Spectrometry ,  
*Fred W.McLafferty and Douglas B.Stauffer* , p.245
- Structure Elucidation System Using Structural Information from Multisources:  
CHEMICS , *Shin-Ichi Sasaki and Yoshihiro Kudo* , p.252
- Historic Development of Chemical Notations ,  
*William J.Wiswesser* , p.258
- Generic Structure Storage and Retrieval ,  
*Michael F.Lynch , John M.Barnard , and Stephen M.Welford* , p.264
- Chemical Substructure Searching ,  
*Robert E.Stobaugh* , p.271
- Digital Computers in Electrochemistry ,  
*Feixin He and Larry R.Faulkner* , p.275
- Microelectronics in Analytical Chemistry ,  
*Raymond E.Dessy* , p.282
- Laboratory Automation ,  
*Joseph G.Liscouski* , p.288
- Robotics in the Laboratory ,  
*T.L.Isenhour* , p.292
- Computer-Assisted Studies of Molecular Structure-Biological Activity  
Relationships , *Peter C.Jurs , Terry R.Stouch , Maria Czerwinski , and  
Javier N.narvaez* , p.296
- Chemometrics and Distributed Software ,  
*D.L.Massart and P.K.Hopke* , p.308
- Chemical Information Instruction of the Undergraduate: A Review and Analysis ,  
*Arleen N.Somervill* , p.314
- Teaching of Chemical Information Science to Graduates ,  
*Charles H.Davis* , 323
- DARC System for Documentation and Artificial Intelligence in Chemistry ,  
*Jacques-Emile Dubois and Yves Sobel* , p.326

Applications of Graph Theory in Chemistry ,  
*Alexandru T. Balaban* , p.334

Problem-Solving Methods in Computer-Aided Organic Structure Determination ,  
*Zdzislaw Hippe* , 344

Computer Systems for Laboratory Networks and High-Performance NMR ,  
*George C. Levy and John H. Begemann* , p.350

---

1980年に、Wiley-Interscience PublicationからJournal of Computational Chemistryが  
刊行された。以下は1984年の四季分の目次内容である。

1984年第5巻第1号(2月)            論文題目、著者、頁

*Ab Initio* Calculations on the Effect of Different Basis Sets and Electron  
Correlation on the Transition State for the Reactions  $\text{HNC} \rightleftharpoons \text{HCN}$  and  
 $\text{BCN} \rightleftharpoons \text{BNC}$  , *C. Glidewell and C. Thomson* , p.1

*Ab Initio* Studies on Polymers. VI. Torsional Potential in Regular  
Polyethylene Chains , *A. Karpfen and A. Beyer* , p.11

*Ab Initio* Studies on Polymers. VII. Polyoxymethylene ,  
*A. Karpfen and A. Beyer* , p.19

A Combinatorial Algorithm for Calculating Ligand Binding ,  
*F.S. Kuhl , G.M. Crippen , and D.K. Friesen* , p.24

MNDO Study of Catenated Sulfur: The Molecules and Ions  $\text{S}_2$  to  $\text{S}_8$  ,  
*N.C. Baird* , p.35

Quantum Chemistry with an Attached Processor ,  
*R.A. Bair and T.H. Dunning, Jr.* , p.44

Solvent Dielectric Attenuation of Substituent Effects. Dependence on  
Boundary Representation in Prolate Spheroidal Cavity Models ,  
*S. Ehrenson* , p.56

Theoretical Analysis of Gramicidin A Transmembrane Channel. II.  
Energetics of Helical Librational States of the Channel ,  
*C.M. Venkatachalam and D.W. Urry* , p.64

Calculating the Electrostatic Potential of Molecular Models with Separate  
Evaluations by Conventional, Vector, and Array Processors ,  
*J.T. Egan and R.D. MacElroy* , p.72

Geometry Optimization Using Symmetry Coordinates ,  
*H. Kondo , H.H. Jaffe , H.Y. Lee , and W.J. Welsh* , p.84

Interactions of Molecules with Nucleic Acids. IX. Evaluation and  
Presentation of Electrostatic Contours on a Steric Surface with  
the Removal of Hidden Lines , *K.J. Miller and P.J. Kowalczyk* , p.89

On Computationally Adjusting the Hill Equation of Adsorption ,  
*J.Cortes , H.Puschmann , and E.Valencia , p.104*

1984年第5卷第2号(4月)

Theoretical Development of Gaussian Potential Function in the Description  
of the Radial Portion of Isotropic Bending Vibrations ,  
*S.G.Lieb , W.L.Perry , and J.W.Bevan , p.115*

*Ab Initio* Studies of Structural Features Not Easily Amenable to Experiment.  
30. Conformational Analysis and Molecular Structures of Propanal and  
Butanal , *V.J.Klimkowski , P.Van Nuffel , L.Van Den Enden , C.Van Alsenoy ,  
H.J.Geise , J.N.Scarsdale , and L.Schäfer , p.122*

An Approach to Computing Electrostatic Charges for Molecules ,  
*U.C.Singh and P.A.Kollman , p.129*

Compact Contracted Gaussian-Type Basis Sets for Halogen Atoms.  
Basis-Set Superposition Effects on Molecular Properties ,  
*J.Andzelm , Klobukowski , and E.Radzio-Andzelm , p.146*

Microcomputer-Aided Instruction and Research in Group Theory ,  
*C.Trindle , p.162*

Initial Conformations of Macrocyclic Compounds with Rotation Symmetry  
Generated from a Molecular Fragment , *C.E.Felder , A.Shanzer , and  
S.Lifson , p.170*

*Ab Initio* Studies of Structural Features Not Easily Amenable to Experiment.  
32. Conformational Analysis and Molecular Structures of Isopropyl and  
Ethyl Formate and Comparison with Spectroscopic Data , *V.J.Klimkowski ,  
L.Schäfer , and R.K.Bohn , p.175*

Treatment of Multiexponential Decay Data by the Method of Zero Determinants ,  
*J.Szamosi and Z.A.Schelly , p.182*

Experimental Mathematics. I. Computational Study of the Limit Cycle  
Behavior of a Two-Dimensional Chemical Oscillator , *J.Szamosi and  
Sandor Kristyan , p.186*

A Theoretical Study on the Protonation of Cycloalkanes  $C_nH_{2n}$  ( $n=3$  to 6) ,  
*C.C.Lee , E.C.Hass , C.A.Obafemi , and P.G.Mesey , p.190*

Group Equivalents for Converting *Ab Initio* Energies to Enthalpies of  
Formation , *K.B.Wiberg , p.197*

Conformational Analysis of Allymine. An *Ab Initio* Molecular Orbital Study ,  
*J.Kao and J.L.Seeman , p.200*

Comparison of the RHF, NDDO, and MOM Molecular One-Electron Expectation  
Values Calculated Using Minimum Basis Sets with Slater, Burns, Clementi,  
and BLMO Exponents , *G.D.Zeiss and M.A.Whitehead , p.207*

1984年第5卷第3号(6月)

Determination of Reactivity by MO Theory. 27. Molecular Orbital Study of the Gas-Phase Decarboxylation of But-3-enoic Acid , *I.Lee , J.K.Cho , and B.-S.Lee* , p.217

A Directing Effect of  $n-\pi^*$  Transitions on Electronic Charges ,  
*R.D.Tewari and P.C.Mishra* , p.225

Evaluation of MNDO Calculated Proton Affinities ,  
*S.Olivella , F.Urpi , and J.Vilarrasa* , p.230

A Computational Study of the Reaction of Methane with Methyl Radical ,  
*R.D.Gilliom* , p.237

Molecular Mechanics Assessment of the Configurational Statistics of Polyoxyethylene , *D.T.Baldwin , W.L.Mattice , and R.D.Gandour* , p.241

A Quantum Mechanical Study of the Equilibrium Between 1,4- and 1,6-Dialkylcyclooctatetraenes , *C.Tosi* , p.248

A Program for Calculation of Crystal Conformations of Flexible Molecules Using Convergence Acceleration , *L.-O.Pietilä and K.Rasmussen* , p.252

Molecular Associations: Values of the Expansion Parameters for New Classes of Atoms , *S.H.M.Nilar and S.Fraga* , p.261

Electron Correlation and Relative Energetic Characteristics of Complex Hydrides of Light Elements. I. Beryllhydrides , *R.Cimiraglia , M.Persico , J.Tomasi , and O.P.Charkin* , p.263

On Searching Neighbors in Computer Simulations of Macromolecular Systems ,  
*W.F.van Gunsteren , H.J.C.Berendsen , F.Colonna , D.Perahia , J.P.Hollenberg , and D.Lellouch* , p.272

Use of Molecular Symmetry in Two-Electron Integral Transformation: An MP2 Program Compatible with HONDO 5 , *P.Carsky , B.A.Hess,Jr. , and L.J.Schaad* , p.280

1984年第5卷第4号(8月)

Molecular Mechanics Symposium

Conformational Properties of  $\alpha$ - and  $\beta$ - Azabicyclane Opiates. The Effect of Conformation on Pharmacological Activity , *M.Froimowitz , P.Salva , G.J.Hite , G.Gianutsos , P.Suzdak , and R.Heyman* , p.291

Remarks on the Molecular Mechanical Calculations of Functionalized Hydrocarbons , *A.Y.Meyer* , p.299

Remarks on the Analysis of Torsional Energy Surfaces of Cycloheptane and Cyclooctane by Molecular Mechanics , *P.M.Ivanov and E.Osawa* , p.307

The Lagrange Multiplier Method for Manipulating Geometries. Implementation and Applications in Molecular Mechanics , *B.van de Graaf and J.M.A.Baas* , p.314

Vibrational Predissociation of the van der Waals Complex Ne...I<sub>2</sub>(B). A Quasiclassical Approach , *G.Delgado-Barrío , P.Villarreal , P.Mareca , and J.A.Beswick* , p.322

A Molecular Mechanics Treatment of the Anomeric Effect , *L.Nørskov-Lauritsen and N.L.Allinger* , p.326

The Molecular Mechanics of Valinomycin. I. Energy Minimization Calculations on the Uncomplexed Ionophore , *R.A.Masut and J.N.Kushick* , p.336

Conformational Studies of Octalene and Its Benzo-Derivatives , *G.Favini , G.Moro , R.Todeschini , and M.Simonetta* , p.343

Electron Density and Related Properties in Stereoregular Polymers and Biopolymers , *J.-M.André , D.P.Vercauteren , and J.G.Fripiat* , p.349

A Monotone Iterative Technique for Solution of  $p$ th Order ( $p < 0$ ) Reaction-Diffusion Problems in Permeable Catalysis , *W.L.Perry* , p.353

Ground States of Molecules. 67. MNDO Calculations for Compounds Containing Iodine , *M.J.S.Dewar , E.F.Healy , and J.J.P.Stewart* , p.358

Optimized Monopole Expansions for the Representation of the Electrostatic Properties of the Nucleic Acids , *R.Lavery , K.Zakrzewska , and A.Pullman* , p.363

*Ab Initio* MO Calculations on the Acidities of Water and Methanol, and Hydrogen Bond Energies of the Conjugate Ions with a Water Molecule , *S.Ikuta* , p.374

Geometry , Basis Set , and Correlation Energy Dependence of Computed Protonation Energies of Imino Bases , *J.E.Del Bene* , p.381

Computer Generation of the Characteristic Polynomials of Chemical Graphs , *K.Balasubramanian* , p.387

Rotation About the C - N Bond in 2-Aza-1,3-Butadiene and N - N Bond in 2,3-Diaza-1,3-Butadiene : A Molecular Orbital Study , *C.W.Bock , P.George , and M.Trachtman* , p.395

1984年第5卷第5号 (10月)

The Value of the  $\pi$ -Bond Order-Bond Length Relationship in Geometry Prediction and Chemical Bonding Interpretation , *J.E.Gready* , p.411

Molecular Vibrational Constants of Some Simple Polyatomic Molecules. Methyl, Silyl, and Germyl Halides , *N.Mercau , R.Aroca , E.A.Robinson , J.Aron , J.Bunnell , and T.A.Ford* , p.427

An Appraisal of Molecular Force Fields for the Representation of Polypeptides , *D.Hall and N.Pavitt* , p.441

*Ab Initio* Studies of Structural Features not Easily Amenable to Experiment.  
38. Structural and Conformational Investigation of Propanoic ,  
2-Methylpropanoic , and Butanoic Acid , *K.Siam , V.J.Klimkowski ,*  
*J.D.Ewbank , L.Schafer , and C.Van Alsenoy ,* p.451

A Rotation-Torsion Vibronic Contour Program ,  
*M.A.Leugers and C.J.Seliskar ,* p.457

Examination of Formamide , Formamidic Acid , Amidine Dimers , and the Double  
Proton Transfer Transition States Involving These Dimers ,  
*T.J.Zielinski and R.A.Poirer ,* p.466

Vectorization of Quantum Chemical Algorithms : MC-SCF Procedures ,  
*A.K.Rappe ,* p.471

Calculation of Energies of Excited States Using MNDO ,  
*M.J.S.Dewar , M.A.Fox , K.A.Campbell , C.-C.Chen , J.E.Friedheim ,*  
*M.K.Holloway , S.C.Kim , P.B.Ltescheski , A.M.Pakiari , T.-P.Tien ,*  
*and E.Zoebisch ,* p.480

Molecular Mechanics Force-Field Parameterization Procedures ,  
*A.J.Hopfinger and R.A.Pearlstein ,* p.486

On the Calculation of Transition Moments Between States Described in  
Different Orbital Basis , *C.W.Bauschlicher ,* p.500

1984年第5卷第6号 (12月)

A Study of the Biologically Active Conformers for Proline Opiates and their  
Derivatives , *M.Froimowitz and P.Kollman ,* p.507

Critical Comparison of the *Ab Initio* and Spectroscopic Methyl- C-H Bond  
Length Difference in Acetyl Compounds ,  $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})\text{X}$  , *V.J.Klimkowski ,*  
*P.Pulay , and J.D.Ewbank , D.C.McKean , and L.Schafer ,* p.517

Generic Solvent Sites in a Crystal ,  
*M.Mezei and D.L.Beveridge ,* p.523

The Ground State Potential Energy Surface of Methyl Fluoride Dimer ,  
*A.A.Hasanein ,* p.528

*Ab Initio* Calculations of the Electronic Structure of Helical Polymers ,  
*J.M.André , D.P.Vercauteren , V.P.Bodart , and J.G.Fripat ,* p.535

Conformational Analysis by Scaled Energy Embedding ,  
*G.M.Crippen ,* p.548

A Unified Treatment of Valence and Bond Order from Density Operators ,  
*K.Jug ,* p.555

Approaches to Charge Calculations in Molecular Mechanics. 2\* Resonance  
Effects in Conjugated Systems , *R.J.Abraham and B.Hudson ,* p.562

Classical Conformational Analysis of Strained Organic Molecules. I.

[ $l,m,n$ ] Propellanes with  $l,m,n$  Equal to 2,3, and 4 , *H.Dodziuk* , p.571

On the Diatomic Vibration-Rotation Eigenvalue Equation : Highly Accurate Results for High Levels , *M.Dagher and H.Kobeissi* , p.576

Discrimination of Isometric Structures Using Information Theoretic Topological Indices , *C.Raychaudhury , S.K.Ray , J.J.Ghosh , A.B.Roy , and S.C.Basak* , p.581

Analytical MCSCF Energy Gradients : Treatment of Symmetry and CASSCF Applications to Propadienone , *P.R.Taylor* , p.589

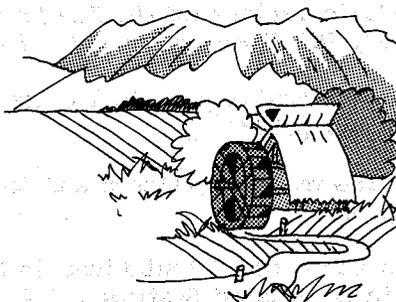
MNDO Study of Reaction Pathways for  $S_N2$  Reactions. Menschutkin Reaction Reaction Potential Energy Surfaces , *J.W.Viers , J.C.Schug , M.D.Stovall , J.I.Seeman* , p.598

A MINDO/3 Study of the Hetero-Diels-Alder Reaction , *I.Lee , E.S.Han , and J.Y.Choi* , p.606

Substituent Effects in Second-Row Molecules : Basis Set Performance in Calculations of Normal of Valency Phosphorus and Sulfur Compounds , *E.Magnusson* , p.612

Unique Description of Chemical Structures Based on Hierarchically Ordered Extended Connectivities (HOC Procedures). V. New Topological Indices, Ordering of Graphs, and Recognition of Graph Similarity , *O.Mekenyan , D.Bonchev , A.T.Balaban* , p.629

Application of an Ion-Fitted Pseudopotential to HF , H<sub>2</sub>O , NH<sub>3</sub> , BeO , and HCl in a Gaussian Lobe Basis , *T.T.Nguyen , P.N.Raychowdhury , D.D.Shillady* , p.640



CASレポートNo.18 (春季号) より

本年2月25日に、CASの化学登録システム 700万番目の化学物質が記録された。これは1965年1月開始以来である。1965年以前にCAに索引された物質も化学登録システムに登録が開始され、目下1962—1966の巻の分が行われており、176,000の物質が登録されている。

“プレ1965年登録計画”が、米国内外の約100の会社や組織団体によって行われており、これに360万ドルが用意されているが、1920年までさかのぼる登録にはおよそ500万ドルが必要である。これによって、約100万の物質がCAS登録システムに加えられる。

CASで一日約3,000の物質の同定が行われ、昨年は563,000の物質が登録された。登録された700万の物質のうち97%が全構造による同定が可能であり、残りの3%は分子式、名前などで同定される。成分で記録されている物質は合金、高分子、混合物、複塩など、登録の12%に達している。700万の物質は1,060万以上の名前で登録システムに入っている。一番多いのは、ポリエチレンで1,400もの名前で同定される。

登録されている物質の75%以上が、少なくとも一個は環をもったものである。およそ24%の物質は立体化学が記されている。立体異性体は二次元構造は同じでも別の登録番号が与えられている。

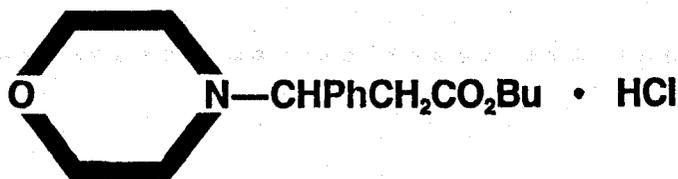
およそ42万の新物質が、全世界の科学雑誌中に毎年報告されるが、そのうちわずか部分の物質が研究に活用されたり、一般の使用に利用されているにすぎない。登録された700万の物質のおよそ75%が1965年以来、たった一度文献に記述されただけである。

CASの7,000,000番目の登録物質

登録番号：95022-15-4

抄録番号：58:7934b

名 前：Butyl- $\beta$ -phenyl-4-morpholinepropionatehydrochloride



(群馬大学 飯塚 健)

# NEWSLETTER

Division of Chemical Information and Computer Science  
The Chemical Society of Japan

日本化学会  
情報化学部会

Vol. 3  
No. 5

(November 1985)

## 目次

情報化学の進路 .....	千原秀昭	1
情報化学討論会を振り返って .....	関崎正夫	3
関連行事		
情報学シンポジウム .....		7
海外動向		
シンポジウム：人工知能の化学への応用に参加して .....		9
文献紹介		
Journal of Molecular Graphics (Vol.1, No.1~Vol.3, No.3) .....		13
Computers & Chemistry (Vol.7, No.1~Vol.9, No.3) .....		16
会員の広場 .....		22
情報化学雑学講座		
An, Cb, Em, Fl, Il, Ma, Tn... ..	細矢治夫	23

# 情報化学の進路

大阪大学理学部 千原秀昭

日本の情報活動は勉強期から発展期にかけている。これはNo.4で藤原鎮男先生が指摘しておられるとおりだと思う。部会も討論会もいよいよ活発で、将来への基礎がほぼ固まったように思われるのは誠に同慶の至りである。これからの問題の一つは、ではどの方向に発展するのがよいかということではないだろうか。

## 国際的な地位の確立へ

Purdue大学のThermophysical Properties Research Center を作りその活動を指導した故Y.S.Touloukian氏は日米セミナーの席上で、「日本は外国の情報を利用するばかりで、国際社会に貢献しようとしな」と誠に率直に苦情を表明したことがある。この言葉は20年間以上も私の耳にこびりついて離れない。これは第2回の日米セミナー情報部会（科技厅とNSF）のときであったと思うが、当時はたしかに指摘されるとおりの状況で、日本には国際的に通用するような、見るべき情報活動はほとんどなかった。1984年1月以降2回にわたって米国議会上院で、日本の科学技術情報に関する公聴会が開かれたが、そこで証言を求められた国立医学図書館（NLM）、国立技術情報サービス（NTIS）、ケミカル・アブストラクツ（CAS）の責任者はいずれも、「日本の科学技術情報が日本以外に流通しないように人為的な操作が加えられていることは全くない。その多くは日本語であるとしても、利用しようと思えばいつでも利用できる。それを使おうとしないのはアメリカ側の問題である。」と述べている。公聴会を企画した一部の人の意図とは違う結論になってしまったようだ。われわれ日本人は奈良時代（あるいは古代史の時代）から外国の文物をとり入れるのに非常に熱心で、それには非常に成功を収めたが、日本の文化の輸出については全く消極的であった。国際的な情報の社会で日本の発言力を高めるためには、情報の内容の水準が高いことと同時に、それが利用しやすい状況を作ることが近道である。化学情報の分野でCASの情報がわれわれにとって不可欠になっており、その価格や、安定した利用の保証を心配する人がいるほどであるが、そうになっている大きな理由は、これまで日本でCAS情報を最大限に利用してきているからである。使えない情報システムはどんなに優れたものでも、存在しないと同じで、それが中止されようが断絶されようが、何の心配もないことはソ連の情報システムを考えれば明白であろう。フランスの国策は大きな政府助成のもとに、フランスの情報システムを世界中で使ってもらおうという方向に向いている。

日本にも世界が使いたがっているデータベースがあるし、これからデータベースの構築や利用技術の開発は一層はずみがつくと思われるが、その利用を国立大学だけに限ったり、日本人だけに限定したりするのは、時代に逆行することになる。また、既に外国に大きな優れたデータベースが存在する領域で、日本製の同じものを作ろうとする動きも、外国から見れば日本は鎖国の準備をしているとしか見えないだろう。

問題はデータベースの後発メーカーとして国際的に“なくてはならない”情報を日本が提供できるかどうかにかかっている。

## これからの化学情報システム

化学研究の中心的な課題は、新物質の発見・合成、新反応の発見・創出、新しい性質や法則の発見であ

ろうが、化学情報システムはこれと対比して考えれば、研究の効率化や、新しい研究手段の提供など、いわば研究支援を目的とする。これはデータベースサービスには限らない。分子モデリングや自動分析、構造決定などのソフトウェア群もこの範疇にはいる。その対象は有機化学とか無機化学とかの領域にとらわれず、非常に広く、化学と化学工学全般にわたるといってよい。情報化学部会が発足するとき、私が情報化学という名称にこだわったのは、有機化学などと並ぶ化学の一分野のような印象を与えて、狭くみえる心配があったためであった（もっとも入試化学などという“化学”もあるが）。

さて、これからの化学情報システムとして私が抱いているイメージはほかの方々とは違うわけではない。要するにファクトデータのサービスを中心とし、文献情報や所在情報の応用プログラムのサービスをその背後においた総合的な (integrated) システムである。ファクトだけでなく、アイデアのデータベースや研究手段、装置、測定サービスなどの案内情報を組込むこともできよう。CASが開発中の化学反応検索システムは、既知の反応を探すのだが、未知反応の予測も研究支援の重要な一環であり、この場合は予想される中間体とか、活性錯体を含めた反応座標の方法による量子力学計算も動員されよう。計算結果の精度の評価も考慮に入れて、総合的なシステムの構築には、いろいろな化学の分野の人々の協力が必要で、その線に沿った量子化学の研究は「情報化学」である。もちろんプロセス設計やシミュレーションなど他の面も必要になる。要するに、情報化学は名前がややもすれば示唆するような、化学の一分野でなく、化学そのものであり、研究者から見て、頼りになる道具をめざすべきものと思う。

このようなシステムは一夜でできるわけではなく、情報屋だけが頑張ってもできるものではない。第一線の化学者が使わなければ存在理由がないことになる。実験室の化学者との密接な協同作業が必要であるし、情報検索専門家が関与できる面としては、現在の役割を大きく越える可能性はあまりない。

ファクトデータベースが次第に重要性を増し、究極的にはそれが化学情報システムの中心を形成することは既に予見できる。幸か不幸か、世界的に見て、ファクトデータベースは文献データベースにくらべて整備が非常におくれている。その大きな理由は、構築のための人的資源に対する要求が桁ちがいにきびしいことと、維持のために文献データベースよりもはるかに大きな努力がいくところにある。しかも専門分野ごとに作成されるので、一つ一つを取り上げてみれば小規模で、ユーザーも比較的小数であるなど、経済的にもむずかしい問題が多い。しかし、多くのファクトデータベースを集めて統合すれば相乗効果も現われる。またソフトウェアの開発にはない蓄積効果が大きい。

日本として後発の不利をカバーし、国際的な貢献をすることによって地位の向上をはかるには、ファクトデータベースの構築とその利用ソフトウェア群の開発がほとんど唯一の道のように思われる。データベース構築は外国と同じものを重複して作るのではなく、分担協力ないしは日本が中心になって、国際的なデータ蒐集を呼びかけ、データベースの共同利用をはかりたいものだ。日本からの入力が止まることを諸外国が心配するくらいの寄与をすることが、ひいてはわが国の情報活動の一層の発展につながる。分担入力の場合にも政府資金の助成ができることが望ましいし、個別的には利用者が少なくても統合効果や波及効果が大きいことを行財政当局が認識しなければ、データベース構築はスタートしにくい。著作権問題に一応の見通しがたったことは、障害が一つ取除かれたものということができよう。

(1985年11月11日)

## 第 8 回情報化学討論会を振り返って

金沢大学教養部 関崎正夫

私が第 8 回情報化学討論会のお世話の依頼を受けたのは、昭和 59 年の 10 月 31 日のことで、前回お世話された阪大富田研一教授から金沢大学薬学部の山内脩教授を通じてであった。そのお話しによれば、昭和 60 年には日本化学会の秋季年会が金沢で開かれるので、その連合討論会として開催したいとのことであった。既に秋季年会に向けて会場確保等の準備を進めていたので、ものにはついでと安易に引き受けてしまったが、よく考えてみると、私は今迄に一度もこの討論会に出席したことがない。いくら計算機を知っているとはいえ、この討論会に関してはズブの素人がはたしてできるかしらと不安になってきた。そういう気持を吹き飛ばしてくれたのが、豊橋技術科学大学の佐々木慎一先生からのご丁寧な依頼のお手紙と、姉妹学会ともいうべき構造活性相関シンポジウムのお世話を薬学部の辻彰教授が引き受けられたことであった。辻教授は私と年齢が接近しており、これまでもいろいろと御厄介になった人である。さらに今回は連合討論会だから、登録業務、会場設営、運営等の細かいことはすべて化学会と契約した日本コンベンションサービス (JCS) がやってくれるから、煩わしい心配をしなくてもすむということも私を気楽にさせた。

しかしこれは気楽どころかかえって厄介であることが後になってわかってきた。さらに構造活性相関シンポジウムが連合討論会には加入せず独自に進めることが決定されたこともそのことを増強させた。加入しなかった理由は、構造活性の参加者の大部分が日本化学会員でないので、連合討論会とした場合、化学会の非会員扱いとなって高い登録費を収めなければならないこともあったようである。しかしその後の阪大千原実行委員長の御配慮でその心配はなくなったが、その時はもうおそかった。

姉妹学会でありながら一方が連合討論会に入り、他方が入らないということはいくつかの問題点を起こした。中でも特に参加登録の方法が従来とは変わったために、多くの方々に御迷惑をおかけしてしまったことである。

情報のみに参加する場合は、日本化学会秋季年会の登録をして下さい、ということであっさりしていたが、構造活性にも同時登録をする場合、またあらかじめ構造活性に予約登録し、当日情報へも参

加したい場合どうするか、等々——世話人一同散々悩んだ結果、御存じのようなややこしい登録方法をとることになった次第である。私の方へも何人かの方から問い合わせがあったが、構造活性の方は大変だったようである。登録申し込み方法をいくつかの共催学会誌に載せただけではわからなかったらしく、問い合わせが相次いだので、辻教授はある会合にでかけて行って説明したそうである。

会場については、構造活性との関係もあって完全にJCSに任せるわけにも行かず、結局構造活性を通じて金沢コンベンションビュロー（金沢を学会都市にしようとする石川県、金沢市の後押しで最近作られた組織）に依頼して、石川県社会福祉会館の割当を受け、それを化学会に申し伝えることにした。

講演予稿集については、従来通り構造活性との合本にし、印刷製本は化学会に任せ、その費用の一部を構造活性が負担するという事になった。この時予稿集に両世話人代表の名前を記録しておくことにした。それは、今回の準備の段階で、過去の討論会について調べたいことがあったが、手許にある予稿集だけではどこの誰がお世話されたのか全くわからず、参加された方に問い合わせその記憶に頼るということがあったからである。これではいけない、どこかに記録しておく必要がある、と判断し、化学会もそれを了解してくれた。今後お世話される方々には、このような措置をおとりいただければ便利ではないかと思う。

さて、北陸は多くの会員がいる地区から離れているので、講演申し込みが少ないのではないかと懸念したが、それでも40件の申し込みがあった。また秋季年会の一般講演の化学情報・計算機化学のジャンルへの申し込みが4件あり、これを討論会に吸収させたいという要望が情報化学部会からあったので、これを含めれば44件となり、ほぼ昨年並となる。後でわかったが、この吸収により、年会の計算機関係のジャンルがなくなってしまうのではないかという心配もあったようである。

会場の設営、当日の運営は、情報の分についてはJCSがすべて行うことになっていたが、日が迫るにつれて不安が次第に大きくなってきた。それはJCSは必要最低限のことしかしないことが既にわかっていたからである。たとえば会場のアルバイトは一名しか用意しない。発表にはOHPを用いる。止むを得ずスライドを用いる場合は、プロジェクターの設置だけはするが、操作は講演者が自分で適当に人手をさがしてきて行う。——しかし情報の場合、OHPでは会場が広すぎて見難いからプロジェクター一本にしぼった方が良いという判断があり、それに基づいて、講演予定者には必ずス

ライドを用意していただくようお願いした以上、こんなやりかたでは参加者からのお叱りを受けることは必至である。化学会にも相談の上了解してもらったつもりだったが、人手までは考えてくれなかったようである。

一方構造活性の方は、化学会の方針とは何の関係もないから、払い込まれる参加登録費の胸算用、そして何人ものアルバイトの雇傭、特別講演の垂れ幕の用意など、実に景気の良い話をしている。同時開催の学会でありながら、それはまるで同じ駅の国鉄と私鉄の状況だ。情報を国鉄にしてはならない。だからといって化学会から付与された事務費だけでは到底当日の人権費は出ない。あちこちきき廻った末、やっとのことで、化学会から一名追加してもらい、情報化学部会から足りない分を補ってもらうことになり、ひとまず安心することができた。

安心したせいか、肝心の人手の確保でまたもやもたつた。それは主だった学生は皆早々と秋季年会にとられて誰も残っていない。きく所によるとJCSも人手が予定の6割しか集まらず、やっきになっているとのこと。年会というマンモス学会がいかに地方都市では開催し難いかを身をもって体験したことになる。それでも直前になってなんとか予定の人数を確保することができた。

ここまできても、まだうまくいくかどうか心配になることは、世話する人誰もが感ずることである。

通常の学会ならこれでもかこれでもかと徹底的にチェックし用意することになるが、そういうことはJCSがやってくれる。会場設営、道具類搬入、立看板の用意等いわゆる直前の目のまわる忙しさが一切ないので、暇をもてあましたのがかえっていけなかった。何もせず、JCSと構造活性の両方を見ながらハラハラするのは精神衛生上実に悪いことを改めて認識した。

さて第1日目(10月6日)は、午前9時から主としてソフトの開発、化学構造等22件の講演が行われた。また2日目は分子設計、データベース等21件(1件中止)が発表された。またこの日は会場が別の狭い部屋になってしまい、座れない方が若干あったことを申し訳なく思っている。

特別講演は御茶の水女子大の細矢治夫先生(1日目)と豊橋技科大の佐々木慎一先生(2日目)にお願いしたが、両先生とも御快諾下さり、演題も3月中に既に決っていたことは世話人にとってまことに好都合であった。

ところで第1日目は猛烈な暑さが金沢を襲った。最高気温が31℃になったとのことである。これは

日本海に低気圧が入った時に起きるフェーン現象である。会場は蒸風呂のような状態になった。JCSと連絡を取り、エアコンをいれるよう会場の管理者にかけあおうとしたが、当日は日曜日で宿直者の判断では何ともならないとのこと。窓を開けて部屋の空気を入換えることが関の山であった。

2日目は前日ほど暑くはなかったが、やはりエアコンの交渉を今度は本当の管理責任者にしたところ、10月はエアコンを入れないことになっている、とのつれない返事。県営で使用料無料の会場であるから、無理をいえずにごすごとひき返さざるを得なかった。

このようにいろいろなトラブルがあったが、ともかく世話人代表としては未経験の私が、これといった批判を受けることもなく、なんとか無事に2日間の日程を済ませることができたのは、多くの方々からの御助力があったからである。特に豊橋技科大の佐々木先生からは有益なアドバイスをいただいた。また金沢大の辻先生には構造活性相関シンポジウムとのからみで随分御迷惑をおかけしてしまった。そして当日までの間、部会長の米田先生をはじめとする情報化学部会にはいろいろとお世話になった。更にこの討論会の期間中、様々な人々とのふれあいがあり、これも忘れることができない。

来年は名古屋で、佐々木先生のお世話で、やはり日本化学会秋季年会の連合討論会として開催されることになっている。金沢とは異なり、地の利のよいことから、さらに多くの参加者が期待される。より活発な討論が展開されることを願ってペンを置くことにする。



# 関連行事

## 情報学シンポジウム

日時 1月8日(水)～9日(木)

場所 日本学術会議(東京都港区六本木7-22-34)

1月8日

(午前・前半)

(組織委員長挨拶) (京大工) 坂井利之

(招待講演1)

・データベース権(阪大理) 千原秀昭

(午前・後半)

(情報管理・データベース管理)

・学術情報の高機能・高能率管理について(九大計算セ) 松尾文碩

・データベース管理・利用情報の統一管理システム(京大計算セ) 渡辺豊英

・ネットワークデータベースにおける時間情報の管理(九大工) 古川哲也、上林弥彦

・データベースに対する擬似自然言語インターフェース(九大工) 上林弥彦

・京都大学大型計算機センターにおけるデータベースサービス(京大計算セ) 渡辺豊英、村尾義和、  
堀池博巳

(午後・前半)

(招待講演2)

・類推の理論とその応用(九大理) 有川節夫

(用語・シソーラス)

・多用語シソーラスのための学術用語集の解析(筑波大電子情報) 伊藤俊男、大保信夫、藤原 譲  
(千葉大理) 藤原鎮男

・実証的手法による科学技術基本用語の階層化(千葉大理) 藤原鎮男

(筑波大電子情報) 藤原 譲

(慶応大文) 佐藤智範、岡千穂子、倉田敬子、杉本由利子、  
真弓育子

・国語辞典における単語間の階層付けについて(長崎大工) 鶴丸弘昭

・科学技術書のための日本語の規格化(九大工) 吉田 将

・医学医療用語 標準化データベースの基本方針と構築作業進捗状況(日本医学会) 伊藤隆太、阿部正信、  
太田方夫

(午後・後半)

(用語・検索)

- ・コンピュータ時代に適した化学の命名法を開発する際の問題点 (群馬大教育) 飯塚 健
- ・固体物理学における新合成物質の命名・用語の情報検索のための標準化 (金沢工大) 三嶋昭臣
- ・文献キーワードに対する重ね合わせ符号について (九大理) 松本一教、篠原 武、有川節夫
- ・機関データベースと文献データベースの検索用語に関する比較 (公害研環境情報) 春山暎美
- ・環境分野における複合的情報検索 (公害研環境情報) 土屋 徹

1月9日

(午前・前半)

(招待講演3)

- ・広域経済情報 (OECD) Allan Swtwart
- (統計情報)
- ・統計情報システムの課題—データ解析への道標 (国際情報社会科学研) 北川敏男
- ・統計情報資源の多様化の現状と将来展望推定の変数選択法 (一橋大経済研) 松田芳郎、周防節雄  
(筑波大社会工) 大西治男

(午前・後半)

(招待講演4)

- ・脳の情報処理とコンピュータ (東大工) 甘利俊一

(午後・前半)

(情報知識)

- ・スーパーコンピュータを用いた重ね合わせによる手書き漢字識別能力の基礎的検証  
(岡大電子理学) 塩野 充
- ・物理現象解析用データベース・システムの基礎概念とプロトタイプ・システム (都航空高専) 畠山正行
- ・歴史学研究支援情報システムの構築と応用 (歴史民族博) 八重樫純樹
- ・時空間世界の多面的観測による客観的知識の生成 (都臨床研) 倉科周介
- ・癌研究を支援する知識生成システムについて (都臨床研) 神沼二真

(午後・後半)

(データの収集・評価・利用)

- ・続日本天文資料の蒐集 (東大天文台) 古川一郎
- ・データの収集 (自動車研) 五十嵐照
- ・中国語漢字フォントデータベースの作成 (早大理工) 木村淳一、富永英義
- ・文章図形情報のデータ構造について (早大理工) 富永英義
- ・核融合に必要な原子分子データの評価 (名大プラズマ研) 加藤隆子、俵 博之、小西 修
- ・核融合研究における研究努力曲線 (名大プラズマ研) 小西 修、灘波忠晴

(総括)

## シンポジウム：人工知能の化学への応用に参加して

California大学Santa Cruz校 岡田 孝  
(関西学院大学 情報センター)

本年のアメリカ化学会秋季年会は9月8日から13日にかけてシカゴで開催され、その際 Computers in Chemistry の分科会で標記のシンポジウムが3日間にわたって実施された。筆者は人工知能 (Artificial Intelligence: AI) に興味を持っており、たまたま米国に滞在中でこれに参加する機会を得たので簡単に紹介をしてみたい。ただ要旨はニュースレターに掲載された単行本も近く出版されると思うので正確な所はそちらを参照して頂くとし、本稿は独断と偏見に満ちたものであることをお断わりする。

シンポジウムはRohm & Haas社のPierceとHolme によって企画され35件の発表 (23, 48) はキャンセル; ( ) 内の数字は以下アブストラクト中の講演番号を示す) が行われた。参加者は時により 100名を越えることもあったが、平均して50~60人であった。AIの分野は最近非常に注目を集めているがどこまでをAIと呼ぶかは定説がなく、本シンポジウムでもまさにAI的なものから単に数値処理でないというものまで多岐にわたる研究成果が発表された。利用する計算機も8bitマイコンからLispマシン、3次元グラフィックステーション、汎用計算機を組合せたものまで、また言語もFortran, C, Pascal, Lispやエキスパートシステム開発ツールに至るまで、まさに多様であったといえる。しかし内容的に分類するならば (1) 化学構造には立ち入らないで、エキスパートシステムの枠組みを使い実験室やプラント運転の効率化を狙ったもの; (2) 化学反応系への応用; (3) 化学構造の推定; (4) その他; に分けられるであろう。以下この順に紹介することとする。

まず化学構造に立ち入らずにエキスパートシステムを作ったものとして7件の発表が行われた。対象は実験用手袋や材料物質の選択 (27, 24)、汚染物質の測定法 (29) やBeckman 社の超遠心分離法 (28)、Varian社のHPLC法 (30) のためのアドバイス生成、それに各種プラントの診断 (22, 25, 26) が取り上げられた。エキスパートシステムの対象が化学以外の分野でも診断や計画に集中していることとよく符号している。手法はすべてプロダクション・システム型のルールにより知識を表現したものであったが、その規模はパーソナルコンピュータ上で Radin社のRulemaster (エキスパートシステムの開発ツール) を使い (22, 27, 29) AIの門外漢が数週間で作り上げたものから、Lispマシンを使って数年がかりのもの (28, 30) まで色々であった。これは各領域の複雑さの違いを反映しているであろう。なおRulemasterは抽象化した例からルールを導出する簡単なinduction 機能を有していたが、これはルールの考え方に慣れない人が自分でシステムを作る時は有用と思われた。

化学反応系への応用では6件の内3件までがProlog風の論理型表現を採用しており〔32,33,34〕、またEROS〔35〕,CAMBO〔36〕システムの紹介もなされた。しかしもっとも興味を覚えたのはWilcox, Levinsonによるもの〔31〕である。反応の前後を1つの結合表で表現するのも目新しかったが、specificな反応例を入力としてMaximum Common Subgraphの手法でgenericな反応タイプをネットワークへ自動的に組織していくという研究は、実用的レベルには未だ遠いものの今後の知識獲得の自動化の重要性を示唆するともいえよう。化学構造をとり扱った分野ではやはりスペクトルからの構造推定に関連するものが多数を占めた〔11, 41, 43~46〕。Hewlett-Packard社のシステム〔43〕が、およそ900の部分構造をその間の包含関係によってネットワーク型に組織し、その上でPathを辿りながら複数のスペクトル詳細を利用して構造をしばって行く方法は自然に思えた。このシステムはH-P社のワークステーション上に実現されていたが(今回でなく8月ロスアンジェルス的人工知能国際会議で展示)、ビットマップディスプレイでのウィンドウとマウスによる操作はやはり素晴らしいユーザインターフェースを提供しているように感じられた。その他ではプロテインの高次構造の理解にエキスパートシステムの枠組を使おうとする発表が2件あり、〔39, 40〕今後の成果が期待される。また分子のトポロジカルな情報から出発して3次元構造を推定する分野では、Trindleが距離幾何行列に基く数学的手法〔16〕、Wipke, Halmはケンブリッジ結晶データファイルから出発するデータintensiveな手法〔38〕と対照的なアプローチであった。

その他シンボジウム以外も含めて関連する発表としては、知的文献検索〔17〕、統計処理結果表示用の自然言語フロントエンド〔20〕、方程式解法T K-solver〔6〕数式処理Macsyma〔18〕等既存パッケージの利用、次元解析による化学の問題解決〔10〕、実験計画用エキスパートシステム〔14〕、対称群のプログラム〔19〕、ファジィ理論を応用したCAD/CAE用関係データベース〔21〕、化学グラフ間の数値的類似性尺度〔37〕などがあげられる。またQSARの結果に対する統計学的立場からの反省がADAPTの本家のJurs研から発表された〔42〕のは面白かった。

筆者なりに感じたことをまとめるなら、化学の内容に立ち入る場合単にAIの枠組を持ってくるだけでは良い結果を上げるのは難しいこと;しかし一方でAIで開発されたテクニックや計算環境は今後ますます重要になってくることである。今後の方向としてはスペシフィックなデータベースからジェネリックあるいは抽象的レベルの知識ベースまでの階層を統一的にとらえて行こうとするいくつかの研究が突破口を示唆するように思えた。なお展示でAIに関係したせのは、Zerox社のLispマシンとRadian社のRulemasterのみであった。また一般的ソフトウェアとしてはパーソナルコンピュータ用の部分構造検索可能な化学構造データベース管理システムが、来年2社から発表予定というのが注目された。

日本でもAIをはじめとするハイテク研究が脚光を浴びていると思われるが、今後情報化学分野の研究も本部会員の皆様が中心となり一層発展されることを祈ってこの報告を終ることにする。

12. Impact of AI of Industrial Control and Automation., S. Bansal.

13. Expert Systems: Description and Applications., D. W. Smith.

14. Interpretation and Design of Chemically Based Experiments with Expert Systems., D. Garfinkel, L. Garfinkel, V-W. Soo, C. A. Kulikowski.

15. A Chemical Reaction Interpreter for Simulation of Complex Kinetics., *D. Edelson.*
16. An Intelligent Sketchpad as a Medium for Chemical Information., *C. Trindle.*
17. EP-X: A Knowledge-Based System to Aid in Bibliographic Searches of the Environmental Pollution Literature., *P. J. Smith, D. A. Krawczak, S. Shute.*
18. Application of MACSYMA to Problems in Science and Engineering., *R. Pavelle.*
19. Group Therapy using Symbolic Computer Programs., *G. D. Renkes.*
20. An Intelligent Data Analysis Interpreter Which Reports in Natural Language., *A. J. Surkan, O. Pin-Negern.*
21. Soft Relational Database for CAD/CAE., *E. Avni, A. Kandel.*
22. RuleMaster Knowledge Engineering Facility., *C. E. Rlese, J. D. Stuart.*
23. An Expert System for the Formulation of Agricultural Chemicals., *B. A. Hohne, R. Houghton.*
24. Expert System for Materials Selection., *A. J. Surkan, N. Sherwani, R. Sherwani.*
25. Chemistry Diagnostic System for Steam Power Plants., *J. C. Bellows.*
26. A Real-Time Expert System for Process Control., *R. L. Moore, C. G. Knickerbocker, L. B. Hawkinson.*
27. Gloveaid-A RuleMaster Expert System to Choose Gloves for protection Against Hazardous Chemicals., *L. H. Keith, J. D. Stuart, S. K. Mounce, D. B. Walters, A. T. Prokopetz.*
28. Computer-Based Expert System for Optimizing Ultracentrifugation Runs., *P. R. Martz, M. Heffron, O. M. Griffith.*
29. QualAid- A RuleMaster Expert System to Advise QA/QC Requirements for Analysis of Pollutants., *L. H. Keith.*
30. ECAT-An Expert System for HPLC Methods Development., *J. Karmicky, R. Bach, S. Abbott.*
31. A Self-Organizing Knowledge Base for Recall, Design, and Discovery in Organic Chemistry., *R. A. Levinson, C. S. Wilcox.*
32. Using a Theorem Prover in the Design of Organic Synthesis., *T. Wang, I. Burnstein, S. Erhlich, M. Evens, A. Gough, P. Y. Johnson.*
33. Expert System Rules for DielsAlder Reactions., *W. D. Laroe, C. W. Moseley, C. T. Hemphill.*

34. A Multi-valued Logic Predicate Calculus Approach Synthesis Planning., *W. T. Wipke, D. P. Dolata.*
35. A General Approach to Mechanistic Evaluation in Synthesis Design., *J. Gastelger, M. G. Hutchings, P. Low, H. Saller.*
36. CAMEO: An Interactive Computer Program for Predicting products of Organic Reactions., *W. L. Jorgensen.*
37. On the Similarity of Graphs and Molecules., *S. H. Bertz, W. C. Herndon, G. Dabbagh.*
38. Intelligence in Constructing Molecular Models., *W. T. Wipke, M. Hahn.*
39. Computer Assisted Drug Receptor Mapping Analysis., *T. E. Klein, C. Huang, R. Langridge, C. Hansch.*
40. Application of Artificial Intelligence to the Design of Proteins., *M. N. Llebman, H. Weinstein.*
41. Elucidation of Structural Fragments by Computer-assisted Interpretation of IR Spectra., *H. B. Woodruff, S. A. Tomellini, G. M. Smith.*
42. Chance Factors in Pattern Recognition. Monte Carlo Studies of Classifications Made by Nonparametric Linear Discriminants., *T. R. Stouch, P. C. Jurs.*
43. An Expert System for Organic Structure Elucidation., *B. Curry, J. A. Michnowicz.*
44. An Automated Structure Determination System for MS/MS Data., *K. P. Cross, A. B. Giordani, H. R. Gregg, P. A. Hoffman, C. F. Beckner, C. G. Enke.*
45. Concerted Organic Analysis of Materials and Expert System Development., *S. A. Llebman, K. D. Fickie, P. J. Duff, R. A. Fiter, A. M. Harper.*
46. Computer-Assisted Structure Elucidation Using 2-Dimensional NMR Data., *B. D. Christie, M. E. Munk.*
47. A I and Logic Programming in Magnetic Resonance Spectroscopy and Imaging Methods Research., *T. J. Harner, F. Delaglio, E. J. Dudewicz, G. C. Levy.*
48. Concept Learning in NMR Spectra Analysis., *S. Belaid, H. Soldano, J. Sallatin.*

## 文 献 紹 介

### JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

1983年第1卷第1号 (3月) 論文題目、著者、頁

FITZ:interactive graphics tool for the investigation of molecular symmetry and homology, *G Taylor*, p.5

Generation of molecular surfaces for graphic displays, *L H Pearl and A Honegger*, p.9

Colour molecular surfaces for graphics on a microcomputer, *R E Hubbard*, p.13

Bibliography for molecular graphics, *A J Morffew*, p.17

Display of red/green stereo images using a raster colour display, *P H Jackson*, p.24

1983年第1卷第2号 (6月)

An ellipsoidal approximation of protein shape, *W R Taylor, J M Thornton and W G Turnell*, p.30

Animation in the Winchester Graphics System, *S Todd and J Gillett*, p.39

The uses of animated difference matrices for analysing protein molecular dynamics simulation data, *A J Morffew*, p.43

1983年第1卷第3号 (9月)

Shaded surfaces in molecular raster graphics, *J Brickmann*, p.62

Colour stereo space-filling representation of Ribonuclease-monomonucleotide interactions, *I J Tickle, N Borkakoti, D S Moss and R A Palmer*, p.68

The determination of biomolecular charge distributions using interactive computer graphics, *A N Barrett*, p.71

A colour editor for use in molecular raster graphics, *J Brickmann and H U Raab*, p.78

Short communication:where do we go from here?, *A J Morffew*, p.83

1983年第1卷第4号 (12月)

Acetylcholine receptor site:a proposed model, *R A Palmer, J H Tickle*, p.94

A Character set for molecular structure display, *J D Rayner, S Milward and G H Kirby*, p.107

Molbuild - an interactive computer graphics interface to molecular mechanics, *T Liljefors*, p.111

Short communication:A toolkit for molecular biology I:packing and unpacking of protein coordinate sets, *A M Lesk*, p.118

1984年第2卷第1号 (3月)

Display of quantum mechanical properties on van der Waals surfaces,  
*P Quarendon, C B Naylor and W G Richards*, p.4

Computer representation of molecular surfaces, *N L Max*, p.8

A new approach to illustrating electrostatic molecular surfaces,  
*H Nakamura, M Kusunoki and N Yasuoka*, p.14

Short communication: the use of Balsubramanian plots in the analysis  
of protein dynamics data, *A J Morffew and S J P Todd*, p.18

1984年第2卷第2号 (6月)

Use of random-dot displays in the study of biomolecular conformation,  
*C A Pickover*, p.35

MATCHMOL, an interactive computer graphics procedure for super-  
position of molecular models, *M Cory and J Bentley*, p.39

Mapping the atomic environment of functional groups: turning 3D  
scatter plots into pseudo-density contours, *R E Rosenfield, Jr, S  
M Swanson, E F Meyer, Jr, H L Carrell and P Murray-Rust*, p.43

A fast computer algorithm for finding an optimum geometrical inter-  
action of two macromolecules, *M Santavy and J Kypr*, p.47

Frequency spectra of DNA sequences: application to a human bladder  
cancer gene, *C A Pickover*, p.50

1984年第2卷第3号 (9月)

CDA: an interactive program for the comparative analysis of crystal  
structure coordinate data, *M Elder, P Machin, and S E Hull*, p.70

VENUS-a program to display protein structure using raster colour  
graphics, *Y Iga and N Yasuoka*, p.79

Graphical representation of molecules and substructure search queries  
in MACCS<sup>TM</sup>, *S Anderson*, p.83

A general approach to surface modelling applied to molecular graphics  
*P Quarendon*, p.91

1984年第2卷第4号 (12月)

Interactive computer animation of macromolecules, *P Delhaise, M  
Bardiaux and S Wodak*, p.103

Computer-drawn faces characterizing nucleic acid sequences, *C A  
Pickover*, p.107

Simple and efficient approach to preparation of molecular drawings,  
*U Shmueli*, p.111

GRIMM-an interactive personal-computer graphics interface to  
molecular mechanics, *K Ogawa, H Yoshida and H Suzuki*, p.113

RINGS-a general program to build ring systems, *C W vd Lieth, R E  
Carter, D P Dolata and T Lijefors*, p.117

Bibliography for molecular graphics 1983/84, *A J Morffew*, p.124

1985年第3卷第1号 (3月)

Visualization of electrostatic recognition by enzymes for their ligands and cofactors, *H Nakamura, K Komatsu, S Nakagawa and H Umeyama*, p.2

Shaded molecular surface graphics on a highly parallel computer, *R E Hubbard and D Fincham*, p.12

Depth-buffer algorithms for molecular modelling, *M L Connolly*, p.19

Programming the Evans & Sutherland PS300: I.A preprocessor with macro facilities, *A M Lesk*, p.25

1985年第3卷第2号 (6月)

Interactive design and manipulation of macromolecular architecture utilizing nucleic acid junctions, *N C Seeman*, p.34

Computer analysis of molecular geometry, Part VI: Classification of differences in conformation, *P Murray-Rust and J Raftery*, p.50

Computer analysis of molecular geometry, Part VII: The identification of chemical fragments in the Cambridge Structural Data File, *P Murray-Rust and J Raftery*, p.60

1985年第3卷第3号 (9月)

Use of graphics to study structural models of amorphous semi-conductors, *K Winer and F Wooten*, p.76

Interactive program for investigation of protein structures based on <sup>1</sup>H NMR experiments, *M Engeli and K Wuthrich*, p.79

Computer-assisted investigation of structure-activity relationships in serotonin-uptake blockers, *L G Humber, D Lee, S Rakhit and A M Treasurywala*, p.84

Computer graphic tool for colour structure display on personal computers, *P Cozzini, P Pavesi and G D Andreetti*, p.90

Models of hypothetical recombination junctions, *S Megavin*, p.93



## COMPUTERS & CHEMISTRY

1983年第7卷第1号 論文題目、著者、頁

A technique for generating initial main-chain atom positions in protein crystallography, using a restrained least squares refinement program, *A. J. Morffew*, p.1

The use of a relational data base for holding molecule data in a molecular graphics systems, *A. J. Morffew, S. J. P. Todd and M. J. Snelgrove*, p.9

A calculator program for computing the equivalent isotropic thermal parameter and *E. S. D., Mario Nardelli*, p.17

Solution of simultaneous equilibria, *David D. Clark and Seldon M. Schuster*, p.25

An algorithm for the estimation of anharmonicity from a Morse potential, *R. L. Odeurs, B. J. Van der Veken and M. A. Herman*, p.31

Auxiliary programs for operating with large matrices-I. Data processing in sequential order, *I. Bálint and M. I. Bán*, p.37

Auxiliary programs for operating with large matrices-II. Random data processing, *I. Bálint and M. I. Bán*, p.41

Kinetic Data Analysis. Design and Analysis of Enzyme and Pharmacokinetic Experiments, *D. F. Detar*, p.45

Data Processing in Chemistry, *D. F. Detar*, p.45

1983年第7卷第2号

Inter-processor communications software for a hierarchical system of intelligent laboratory instrumentation, *P. A. Hoffman and C. G. Enke*, p.47

An efficient algorithm for the computation of the canonical numbering of reaction matrices, *Joseph Brandt and Annette von Scholley*, p.51

Computer modeling of molecular structures, *Johannes Bauer and Wolfgang Schubert*, p.61

Proteins and polypeptides. Computer graphics for space-filling model representations, *Gary P. Zientara and Janice A. Nagy*, p.67

Calculator programs for predicting PR and QQ branch separations of linear, spherical, symmetric and asymmetric top molecules, *W. A. Seth-Paul*, p.75

Aspects of FT-ICR software-III. Chirp excitation, *A. J. Noest and C. W. F. Kort*, p.81

The use of a small computer with a BASIC interpreter as an aid to Hückel calculations on conjugated systems, *E. C. Kirby*, p.87

1983年第7卷第3号

PARST: a system of FORTRAN routines for calculating molecular structure parameters from results of crystal structure analyses, *M. Nardelli*, p.95

Calculation of bond angles, lengths, and dihedral on a pocket calculator, *G. Herbert Caines and Milton D. Johnston, Jr.*, p.99

A microcomputer based UCSD Pascal/Z80 graphics system, *Kalle Gehring and John W. Moore*, p.103

Modifications to program SPACEFIL TO produce shaded space-filling molecular models with perspective, *Douglas R. Henry*, p.119

Cooperative programming in crystallography, *Richard A. Alden, Gerard Bricogne, Stephan T. Freer, Sid R. Hall, Wayne A. Hendrickson, Pella A. Machin, Robert J. Munn, Arthur J. Olson, George N. Reeke, Jr., Steven Sheriff, James M. Stewart, Jurgen Sygusch, Lynn F. TenEyck and Keith D. Watenpaugh*, p.137

FANTASIA-a program for target transformation factor analysis to apportion sources in environment samples, *Philip K. Hopke, Daniel J. Alpert and Bradley A. Roscoe*, p.149

Nonlinear Optimization 1981 edited by *M. J. D. Powell, D. F. DeTar*, p.157

1983年第7卷第4号

A method for the determination of the activation energy for a reaction from a single kinetic run, *Timothy J. Mason and John P. Lorimer*, p.159

Viewing the energy optimization of chemical models with computer animation, *John T. Egan, Stanley K. Burt and Robert D. Mac Elroy*, p.165

Generation and comparison of space-filling molecular models, *Mario Marsili, Philipp Floersheim and Andre S. Dreiding*, p.175

Procedures for processing spectroscopic dispersion vs absorption (DISPA) line shapes, *Tao-Chin Lin Wang, Charles E. Cotterll and Alan G. Marshall*, p.183

Program for generating directed hybrid atomic orbitals to facilitate Fock matrix transference in SAMO-type procedures, *I. Bálint and M. I. Bán*, p.199

Software interface Raman-spectrometer/mini-computer, *Hans Mikosch*, p. 203

A calculator program for the optimization of physico-chemical parameters by unidimensional search, *J. Casado, M. Mosquera, A. Rivas, M.F. Rodríguez Prieto and J. A. Santaballa*, p.209

1984年第8卷第1号

Interactive modeling of enzyme-inhibitor complexes at Merck macromolecular modeling graphics facility, *Bruce L. Bush*, p.1

Chemical symbols and special characters on the Apple microcomputer, *S. Scott Zimmerman and Mark A. Larson*, p.13

Parameter and state estimation of kinetic and non-linear dynamic systems, *Takashi Okada*, p.29

Test of Simonds' method in factor analysis by digital simulation models, *U. Haldna and A. Murshak*, p.39

G Matrix assembly and SCF iteration damping, *Patrick Redington*, p.43

INTMOL: Minimization of long range interactions as a function of intermolecular angular parameters, *J. J. Esperilla, A. Lopez Piñeiro and F. J. Olivares del Valle*, p.49

Numerical analysis of one-dimensional and cylindrical diffusion systems using a programmable calculator, *W. Linert, K. J. Stiglbrunner and P. Rechberger*, p.59

Computer analysis and manipulation of DNA sequences, *Gary R. Day and R. D. Blake*, p.67

An account of two computer programs for the simulation of magnetic resonance spectra by the fast Fourier transform method, *Steven Brumby*, 75

1984年第8卷第2号

Analysis of residuals from multidimensional model fitting, *Aivars Celminš*, p.81

DEC FAM-A new computer oriented algorithm for the determination of equilibrium constants from potentiometric and/or spectrophotometric measurements-I. Basic principles of the method and calculations of equilibrium concentrations, *J. Kostrowicki and A. Liwo*, p.91

DEC FAM-A new computer oriented algorithm for the determination of equilibrium constants from potentiometric and/or spectrophotometric measurements-II. Methods based on analytical expressions, *J. Kostrowicki and A. Liwo*, p.101

Computer enumeration of substituted polyhexes, *J. V. Knop, K. Szymanski, L. Klasinc and N. Trinajstić*, 107

Using an HP-1000 computer to calculate the conformational energy of molecules by Boyd's algorithm, *Roberto Alfredo Moré*, p.117

An algorithm for computing dimerization constants for polar molecules, *J. E. House, Jr.*, p.123

A fast computer program for conformational analysis, *Giorgio Castellani and Raimondo Scordamaglia*, p.127

A computerized electrochemical data acquisition and control system, *R. Dorin*, p.133

Modeling of axially symmetric flow reactors, *R. L. Brown*, p.139

Conformational energy calculation on a microcomputer, *Karl Lintner and Serge Fermandjian*, p.147

Effective programming for research: development of software for KINDSIP, *Takashi Okada*, p.151

An improved computer program for eigenvectors and eigenvalues of large configuration interaction matrices using the algorithm of Davidson, *Gerardo Cisneros and Carlos F. Bunge*, p.157

1984年第8卷第3号

Organometallic chemometrics-I. A minicomputer implementation of abstract factor analysis, *Paolo Uguagliati, Alvise Benedetti, Stefano Enzo and Liliana Schiffrini*, p.161

A fast, low cost data acquisition system, *T. G. M. van den Belt and H. Erkelens*, p.169

Applications of computers in the study of solution equilibria-I. LEHENA, a program for polynomial data fitting, *Juan Manuel Madariaga and Adolfo Garcia*, p.175

Application of computers in the study of solution equilibria-II. Complex-80, a program for known ionic equilibria, *Juan Manuel Madariaga and Adolfo Garcia*, p. 187

Applications of computers in the study of solution equilibria-III. Evaluation of some programs for known ionic equilibria, *Adolf Garcia and Juan Manuel Madariaga*, p.193

Estimation of the basicity constants of weak bases by the target testing method of factor analysis, *U. Haldna and A. Murshak*, p.201

A Monte-Carlo approach to error propagation, *J. F. Ogilvie*, p.205

A new hierarchical notation system and its application to the estimation of the standard enthalpy of formation, *Takahiro Suzuki and Masaru Ishida*, p.209

A generalized calculation for preparation of buffer solutions of known ionic strength, *C. Mongay and V. Cerdá*, p.213

Desk top microcomputer evaluation of the rate constants of two competitive parallel second order reactions, *Pierre Cayzergues, Constantin Georgoulis and Gilles Mathieu*, p.217

Voronoi polyhedra and cleft recognition in aquated macromolecules, *Carl W. David*, p.225

Comment on "HQRII: a fast diagonalization subroutine", *Michael Ramek*, p.227

Progress in Modelling and Simulation, *Delos F. DeTar*, p.231

1984年第8卷第4号

A linear chemical notation, *G. M. Côme, C. Muller, P. Y. Cunin and M. Griffiths*, p.233

Rapid calculation of first and second derivatives of conformational energy with respect to dihedral angles for proteins. General recurrent equations, *H. Abe, W. Braun, T. Noguti and N. Gō*, 239

An algorithm for computing the Madelung constant for the sodium chloride lattice, *Michael D. Lowery and J. E. House, Jr.*, p.249

An extended ode solver for sensitivity calculations, *P. Valko and S. Vajda*, p.255

Programmable calculator section-Calculator programs for NMR ABX analysis, *Raymond M. Carman*, p.273

Calculation of molecular inertial moments in an infrared data station, *E. L. Varetta*, p.277

Ligand-receptor interactions, *B. L. Tembe and J. A. McCammon*, p.281

Application of nonlinear least squares analysis on three different consecutive, irreversible first order kinetic processes, *W. O. Milligan, D. F. Mullica, D. E. Pennington, C. K. C. Lok and D. W. J. Kwong*, p.285

Evaluation of the Teller-Redlich product rule for non-linear x-y-z molecules by a programmable calculator, *Yoshiyuki Hase*, p.299

An algorithm to study the evolution and selection of auto replicative molecules, *Federico Moran and Francisco Montero*, p.303

On-line processing of stopped-flow data for multiple kinetic reactions using a microprocessor-based system, *T. S. Hassan, A. H. G. El-Dhaheer, H. Maarafie, H. Abou Soud and M. S. El-Ezaby*, p.309

1985年第8卷第1号

GRANNY, a companion to GRAMPS for the real-time manipulation of macromolecular models, *Michael L. Connolly and Arthur J. Olson*, p.1

A procedure for the analysis of gas adsorption measurements, *J. Morales and J. L. Tirado*, p.7

Microcomputer automation of the determination of activation energy, *R. S. Tse*, p.11

An iterative method for Franck-Condon factor calculations with the use of the Morse potential function to estimate equilibrium bond lengths of diatomic molecules in excited states, *Foo Tim Chau*, p.19

Nonlinear least-squares fitting of first-order rate coefficients (comparison between the Gauss-Seidel method and Swains' KORE program), *Joseph W. Hovanec and J. Richard Ward*, p.23

An algorithm for determining possible empirical formulae of chemical compounds, *Robin A. Gordon and Andreas Muller*, p.27

A fast algorithm to calculate shortest distances between linear segments and angular averages for soft repulsive potentials depending on shortest distance, *P. Sevilla and S. Lago*, p.39

Computer-assisted enumeration of walks and self-returning walks on chemical graphs, *K. Balasubramanian*, p.43

Unlimited data acquisition at moderately high sampling frequencies with a microcomputer, *J.G. Balz, R. A. Bernheim, L. P. Gold and T. Linn*, p.53

A calculator program for computing quantities of solvents required when changing percentages in solvent systems, *Ross C. Beier*, p.57

1985年第8卷第2号

The characteristic polynomial: evaluation as a function of X and as a function of the characteristic polynomials of linear polyenes using a small computer, *E. C. Kirby*, p.79

A small laboratory data system, *D. D. Clark and S. M. Schuster*, p.85

A microcomputer/Hall probe data acquisition system for a magnetic sector mass spectrometer, *T. N. Gallaher, F. A. Palocsay and J. S. Phillips*, p.99

Three-dimensional description of molecular normal vibrations, *A. Kuwae, S. Obata and K. Hanai*, p.109

Calculation of the absolute infrared frequencies and intensities of a diatomic molecule or of local diatomic groups, *F. J. Olivares del Valle, A. López Piñero, and A. Requena*, p.115

The placement of the outer sphere in muffin tin X $\alpha$  calculations, *P. Senn*, p.121

SHQR11: an improved, fast, portable diagonalization routine, *Z. A. Tomasić*, p.123

Improvements in the computer enumeration of permutation isomers, *J. S. Garavelli and J. E. Leonard*, p.133

Solving simultaneous ordinary first-order differential equations using a programmable calculator, *D. Jutras, W. I. Patterson, M. Perrier and C. Chavarie*, p.149

A general method for finding principal resonance structures for conjugated systems by semi-random searching of an adjacency matrix, *E. C. Kirby*, p.155

1985年第8卷第3号

Demarcation and integration of gridded data, *R. S. McDowell, D. L. Grier and A. Stretwieser, Jr.*, p.165

A work station for laboratory data acquisition: fluorescence lifetime apparatus, *J. Federici, W. P. Helman, G. L. Hug, C. Kane and L. K. Patterson*, p.171

Program for assigning molecular orbitals to irreducible representations of symmetry groups, *Gy. Dömötör and M. I. Bán*, p.179

Assembling coordinates of individual helices into collagen-like aggregates, *E. Katz and C. W. David*, p.183

IONPIT: a full implementation of Pitzer's ion interaction treatment, *R. Andreu, J. A. Cejudo and E. Sánchez Marcos*, p.185

Numerical methods: an implementation of DIFSUB on an IBM-PC, *K. E. Gilbert and J. J. Gajewski*, p.191

MOLTW: a program for conformational studies using empirical functions -I. Description and general evaluation, *F. J. Bermejo, M. Rico, T. Ryhänen, E. Martinez, J. Garcia and J. Santoro*, p.195

Determination of the first order reaction rate constant by weighted linear regression, *J. D. Bossaerts, G. L. Lemièrre and F. C. Alderweireldt*, p.203

ATCOOR: a program for calculation and utilization of molecular atomic coordinates from bond parameters. *J. E. Nordlander. A. F. Bond. IV and M. Bader*. p.209

Normal coordinate calculations on a microcomputer, *B. Weiss-Lopez, W. H. Fink and C. P. Nash*, p.237

## 会員の広場

小生、IBM 5100の発売以来、APL言語の魅力にとりつかれ、その後に出された名機IBM 5100を使って多くのAPLプログラムを書いて来ました。その後、アメリカにおいて、IBM PCの出現があり、5100--5110--5120とつづいたAPLマシンは、製造中止となった様子で、残念に思っております。そこでIBM 5550のAPLに期待をしていたのですが、なぜかこのAPLは、日本/スペイン合作のもので、5110シリーズのAPLを更に発展させたものではなかったことは、たいへん失望しました。暴走はするし、また暴走かなと誤認するほど遅かったりします。IBM 5550は、i-8086を使っており、5110より断然高速と思ったのですが、右に示すように、そのようにはならないのです。(東工大資源研 内野正弘)

演算	IBM5550	IBM5110	SW-1 (APL68K)
1000?10000	1min 41.7sec	9.9sec	7sec
2000?10000	6min 54sec	13 sec	14sec
3000?10000	16min 29sec	20 sec	32sec
4000?10000	31min 6sec	27 sec	59sec

An, Cb, Em, Fl, Il, Ma, Tn .....

細矢 治夫

これが何であるか、全部わかったら、あなたも相当な物知りか物好きといえよう。これらは元素記号で、その読み方ははじめから、actinium, columbium, emanation (エマナチオン)、florencium, illinium, masurium (マズリウム)、thoron (トロン) となっており、それぞれ、Rn, Nb, Rn, Pm, Pm, Tc, Rnに当たる。

コロンビウムがニオブのアメリカ名として使われたことのあることは有名である。コロンブ石 (columbite) という鉱石の中にはニオブとタンタルが多量に含まれている。マズリウムという名は東プロシヤの Masuren という地名から来ているそうである。1925年にベルリンのJ.及びW. Noddack が白金鉱の中からReとともに発見したのだそうであるが、人工的に最初につくられた元素を記念して technetium という名に変えられてしまった。

イリニウムはイリノイからとられた名であるが、これは1926年アメリカのHopkins が、60番元素のNdと62番元素のSmの中間の性質をもった固有X線を出す元素として報告し、Ilという元素記号も与えたのだがその後うやむやになってしまった。そこへイタリアのプロレンツエ大学のRolla が、1924年にすでに見つけていたと主張し、Flと書いたが泥試合。現在このプロメチウムには安定な核種は存在しないと考えられるから、Hopkins とRolla のどちらの仕事もあやしい。

残りの3つAn, Tn, Emはそれぞれ、 $^{219}\text{Rn}$ ,  $^{220}\text{Rn}$ ,  $^{222}\text{Rn}$ というラドンの放射性同位体である。一般に放射性物質から放出される気体の総称としてエマナチオという言葉が使われている。An, Tn, Enはそれぞれ、アクチニウム、トリウム、ラジウムの崩壊によって生じるラドンの同位体である。今は全国的に、ラドン温泉と呼ばれる「にわか温泉」がはやっているが、岡山大学の地球内部研究所 (もとの温泉研究所) のある鳥取県三朝 (みささ) 温泉はラドンの含量が多いので有名だそうである。なお中国では全国的に、井戸などから発生するラドンの量の変化を測定集計して地震予知に成功をおさめている。トロン (Tn) の、英語読みが *thoron* というのもふるっている。

ここまで知ったかぶりをして書いてきたが、こんなことを前から知っていたわけではない。理化学辞典の古いもの (昭和20年の増補改訂版) と研究社の新英和中辞典に、あと若干は井口洋夫「元素と周期律」で補足しただけである。何より驚いたことは、この新しい英和の中辞典に、Cb, Em, Il, Ma, Tnの元素記号とそのフルネームが載っていることである。他の辞書については調べてないが、調べたらおもしろいと思う。物好きと自負する人は調べてみるとよい。

これと同じように、専門分野ではとくに死んでしまった言葉が、見当違いの場所に無駄な情報として巣くっていることが案外あるようである。いや専門のところでも無駄な情報が大事な情報を覆い隠しているのである。

ニュースレター Vol.3, No.5

1985年11月30日 発行

事務局: 101 東京都千代田区神田駿河台1-5, 日本化学会情報化学部会 (略号 DCICS/CSJ)

Office of the Secretary: The Chemical Society of Japan, 1-5, Kanda-Surugadai, Chiyoda-ku, Tokyo 101, Japan