

CICSJ Bulletin

Published Bimonthly by Division of
Chemical Information and Computer Sciences
The Chemical Society of Japan

日本化学会
情報化学部会
Volume 5, Number 1
January 1987

目 次

部会記事

第9回情報化学討論会総括 1

年会プログラム 7

国際会議

Supercomputation in Chemistry and Chemical Engineering 9

International Conference on Japanese Information 10

VIII th ICCRE '87 における招待講演及び基調講演 11

1st International Workshop on Data Banks in
Occupational Health 12

文献紹介

本号迄の紹介文献一覧 13

Quantitative Structure-Activity Relationships 14

Journal of Chemical Information and Computer Sciences 15

関連行事

Journal of Computer-Aided Molecular Design 発刊のお知らせ 17

ゴードン会議「計算化学」についてのお知らせ 19

1987 American Conference on Theoretical Chemistry 19

1987 QCPE Workshop on Semi-Empirical and AB Initio
Techniques 20

部会員名簿 24

第 9 回 情報化学討論会 総括

座長による講演総括

特別講演 I

現在ブームとなっている人工知能、エキスパートシステムについて研究の第一線にある講演者からの率直な意見が貴重であった。特に「現在のエキスパートシステムはそれを売り込んでいる人々の役に立っているだけである」というコメントは他山の石とすべきであろう。

特別講演 II

斯界の第一人者による判り易い研究の現在の水準の解説で意義深いものであった。タンパク質の立体構造決定およびその情報の活用は、共催の両討論会の重要な接点であり、講演者からのコメントにもあったように関連した研究の活性化が期待される場所である。

2連J01～2連J03

今年で9回を数えた本討論会は、初日の早朝にも拘らず1番目の講演から既に席が無くなる程の盛会であった。その1番目の「三次元分子構造間の共通幾何パターンの自動認識に関する研究」(2連01)は、類似薬理作用を有する化合物間の最大共通部分立体構造の自動認識についての報告である。分子の三次元構造表現として距離行列を採用している。これら完全グラフのドッキンググラフを生成し、このグラフのクリークを探索することにより、最大共通部分グラフを決定するという方法論を展開し、その適用例を示した。質疑討論の内容は、原子の幾何学的位置の許容度に関するもの等であった。本報のアプローチは、今後の構造活性相関の研究において有用な手法の1つに成り得るものと期待される。

「モンテカルロ法による分子容積、分子表面積の計算」(2連02)は、乱数を用いた化合物容積および表面積の算出についての報告である。分子容積、表面積を求めることは、従来の幾つかの方法で十分に可能であるため、この方法論の主旨を疑問視するむきが多かった。乱数を用いるというユニークさ及び、同時に分子モデリング表示が可能であること、乱数発生に極座標を用いる工夫がなされていることなど評価できる点があるにも拘らず、質疑討論が疑似乱数の周期等の質問に終始したのは、発表者にとって不本意であったことと思う。数値解析の立場からみれば、この発表内容はモンテカルロ法による重積分の話である。

「オクタノール/水 分配係数自動推算システム (CPAC) の開発」(2連03)は、構造活性相関を検討する際に重要な物理量の1つである $\log P$ を化学構造から予測するシステムの報告である。パラメータの決定は、とすれば単なる数値の当てはめに終わってしまうので、化学的フィロソフィを見失わないことが大切である。その点、本報は、推定値と実測値との誤差の化学的要因を明らかにしている等評価できよう。質疑討論は、パラメータの具体的な値等詳細に渡っておこなわれた。

(学習院大学計算機センター 今井 賢)

2連J04~2連J07

2連J04 薬物-受容体間の疎水相関等の評価;均一素面モデル (キッセイコムテック) 永野ら

分子の表面積を精度良く計算できる手法の報告。疎水相関インデックスを用いて分子間の疎水的相互作用を評価・図示できる。

2連J05 蛋白質モデリングプログラム-ALPHA-の構築 (旭化成) 戸潤

Evans & Sutherland PS340 という高価なハードを用いるアミノ酸配列解析システムの報告である。親水性・塩基性等のグループ分けとその色表示の発想はおもしろい。研究者個人の発想を簡単にシステム化できる環境の整備が今後重要になってこよう。

2連J06 ペプチド、蛋白質のエキスパートシステムPREXの開発 (蛋白質研究奨励会) 瀬戸ら

蛋白質の配列と物性に関するデータベースの現状の報告。データベース構築にまつわる諸問題は重要であり、研究者と百姓の關係に絞って論じて欲しかった。こういったシステムをあえてエキスパートシステムと呼ぶ必要はないと思う。

2連J07 Laboratory Computer Network System の試み (I) (福井大工) 神藤ら

ケストラーのホロンの思想をコンピュータネットワークに応用すると良いという主張を述べた。システム構築の前提に明確な哲学が必要であることを強調する意図は理解できるが、4ページの予稿のうち1.5ページがケストラーの紹介とはもったいない。システムの機能を定量的に評価できたらおもしろいと思う。

(富士写真フィルム(株) 足柄研 花井荘輔)

3連J01~3連J03

私が座長を担当した3件の講演のうち2件は分子力学に関するものであった。最近、分子力学はコンピュータの発達と普及によって分子の配座解析のための有力な方法として使われるようになってきている。最初の講演は分子力学の解析システムをパーソナルコンピュータに組み込んだというものであり、もう1件は配座解析がきめ細かく可能なシステムの紹介であった。今後これらのシステムの実際の利用が期待される。残る一件は分子に関する3次元データの蓄積と検索に関するものであった。これについては化合物の登録法と検索に工夫が欲しいと感じた。

(豊橋技術科学大学 宮下芳勝)

3連J04~3連J07

筆者が担当したセッションは、まわりの世間でも最近次第にかまびすしくなってきた「AI」即ち人工知能を中心とした部分である。もっともしばらく以前の本部会のNEWSLETTERがいみじくも人「口」知能の特集を組んだくらいであり、まだまだ緒口の段階といえようが、逆に言えばそれだけ将来性のある分野であるとも見なせる。分子設計やスペクトルの同定・解析などが取り上げられていたのであるが、このような比較的限定された範囲ですら、前途はまだ遠慮であると言う感を深くした。以前に比べてコンピュータの性能は格段に向上してきたとはいうものの、科学者の手足(知能に対して「手足」という表現は必ずしも妥当とは思えないが)とまで成長してくるには、ハード面とソフト面の両方に一層の進歩が望まれるし、コンピュータ界に対するケミストからのフィードバックももっと必要なのではないだろうかとの感を抱かされた。

(電気通信大学 山崎 昶)

3連J08～3連J10

近年、日本においても有機合成化学の分野での計算機利用に関する研究が行なわれる様になってきた。たとえば本討論会での「パーソナルコンピュータ制御による金属錯化合物の合成の試み：(電気通信大学) 國分信英・山崎 利・白木洋也」は実際の実験の場で各種実験操作の制御を計算機に管理させる場合である。現在対象とする反応は限られているとはいえ、危険な反応、あるいは時間、温度等の制御が比較的厳しく要求される反応を行う場合には計算機による制御は重要な問題となってくるであろう。しかしながら、類似の反応であってもその反応条件はそれぞれ異なる場合が多く、それらの条件の自動設定の手法あるいは設定条件が不適切だった場合の判断とそれに対する処置等、本格的な制御システムとなるまでに克服すべき課題は多い様に思われる。

また、「虚遷移構造における三節および四節部分グラフ-有機反応の新しい記述子-：(富士写真フィルム足柄研) 藤田真作」は計算機による有機合成経路探索のために必要な機能の一つであるデータベース上での有機化学反応の記述に関する報告であった。有機電子論にその着想を得たと思われる虚遷移構造(ITS)を中心に構築された反応の一元的記述法とそれを基にした反応の分類体系は独創的と言ってよい。しかしながら、最近手法は異なるものの同様に反応の一元的記述を目指したWilcoxらの研究が計算機上でかなり実現されているようである事を考え合わせる時、ITSの自動生成をはじめその規範化、分類等をどこまで計算機上で実現出来るかが次の報告に対する興味として浮かび上がってこよう。

- 1) C.S.Wilcox, R.A.Levinson, "A Self-Organized Knowledge Base for Recall, Design, and Discovery in Organic Chemistry" in Artificial Intelligence Applications in Chemistry, ACS Symposium Series 306, 209 (1986).

(豊橋技術科学大学 船津公人)

3連J11～3連J13

3連J11では、C3植物の光呼吸におけるグリコール酸経路を連立常微分方程式モデルとして表現し、各種酵素に係わるパラメータを変化させてシミュレーションを行った結果が報告された。かなり粗い実験データしか利用できない場合であるが、主たる炭酸ガス放出部位や物質移動に関する推測が得られている。

3連J12では、大学の機器分析センターにおいて研究者による試料分析の依頼からオンラインによるデータ受信、個別分析結果の出力とデータベース化、さらにはCHEMICSシステム等による総合解析に到るまでの過程を一貫して実行しうるシステムTASMACの構築が報告された。今後の発展とこのようなシステムの一般化が期待される。

3連J13では、化合物名から構造式を発生させてパソコン上のディスプレイに表示するプログラムについての報告がなされた。内蔵する辞書のサイズと表示成功率の低さに関して議論が行われたが、当面パソコン用のMSデータベース内の化合物表示を目標として改善するとの説明があった。

(関西学院大学 岡田 孝)

4連J01~4連J03

内野(4連J01)は、化学構造の立体化学を表現するために導入した剛性ユニットの数をふやし、axial chiralityとplanar chiralityの記述にも拡張できることを述べた。聴衆のひとりとしては「剛性ユニットの系統的設定法」、「絶対配置への二元的番号付対応という点では同じ他の方法に対する優位性」などがもっと明確に説明されればもっと共鳴できたであろう。

岡田ら(4連J02)は化学構造のgeneric表現の系統的処理を検討し、結合表の有限の数の組で置換できる場合の記述法を誘導した。現場ではその壮事を喜ぶと共に今回は対象外となった範囲へすみやかに拡充発展することも切望するにちがいない。

両者の研究は情報化学の最先端への飛躍の準備として既存の概念を自分流に整理や言直しをしている段階であること、理論の説明に数学的表現を駆使して本質的理解と厳密な記述には望ましい傾向であること(しかしそれはそれとして講演での説明では具体例をもっと豊富にしていなければありがたい)、などと理解し感想を抱いた。

(山形大学工学部 工藤喜弘)

4連J04~4連J07

最終日午前の後半のセッションでは4件の講演があり、その内の3件がデータベース関連であった。まず化技研の山本修氏が「化技研スペクトルデータベース(SDBS)のトータルシステム」と題して山本グループの多年に渡る努力の集大成ともいべき総合データベースの話がされた。既に識者の間では良く知られている仕事であるが、主として有機分子を対象として良質な質量、赤外、ラマン、NMR、ESRの各スペクトルが集積されていて表示、検索、同定およびシミュレーションの各機能を漏れなく備えている。公的研究機関においてこのような汎用性の高いデータベースが管理されているのは一般ユーザーの立場からすると非常に安心である。この席で間もなく公開される事が発表された。

ついで国立衛生試験所の叶多謙蔵氏の「マイクロコンピュータによるプロトンNMRデータの蓄積と検索」と題する講演があった。個人所有が可能な16ビット型パソコンに個人用のデータベースを入れて好きなように使ってみたいと誰れしも願っている為であろうか、多くの聴衆を集めた。このデータベースは40MBのハードディスクを使い、本格的な研究の場で役に立つ堂々たる構成を持つものであった。

住友化学の増井秀行氏は「スペクトルデータベース作成用チャートリーダーの開発」と題して、良く準備された資料を駆使して明快な講演がされた。日本電気との共同研究で、同社の16ビットパソコンと特殊カメラを組み合わせたデジタルカメラの製作に関するものであり、既に完成度は相当に高いように見受けられた。

市販されればかなり応用範囲の広い有用な商品となるように思われる。

最後の都立大、生田茂氏の「パソコンによる情報化学教育用ネットワークシステム」も熱の籠った好演であった。最近ではほとんどの大学で情報教育用計算機センターを設置しているが、責任者が情報工学関係であることが多く、情報化学の立場からみると必ずしも望ましい状況にあるとは限らない。幸いなことに都立大の場合、理論化学のバックグラウンドを持つ方が指導の任に当たったため、甚「化学的」に特徴あるシステムが出来たようである。しかも16ビットパソコンをローカルエリアネットワークの端末に用いると言う、理想的な構成になっている。従来の超大型計算センターの体制を踏襲せざるをえなかった我々と比べて、むしろ羨ましいような出来ばえであった。(北海道大学理学部 大沢映二)

4連J08～4連J10, 2連K15

◎ 4連 J08 では、化審法ハンドブックのポリマ-検索システムが報告された。実用的意義はすくなくないと思われるが、この種のデータベースがその本来の目的から、どうあるべきかについて、もっと科学的な切込みがのぞまれる。

4連 J09では、モレキュラ-メカニクスに関する報告がなされた。前回の討論会では、4F121にモレキュラ-メカニクスのパラメータ決定システムが見られるが、ここでは、普通の重み付き最小自乗法が使用されている。

$$\Delta P = (J'WJ)^{-1}J'W(Y_{obs} - Y_{calc})$$

今回の報告では、次の式を使用している。

$$\delta P = -(Z'WWZ + \lambda I)^{-1}Z'W\Delta Y$$

これは、記号のちがいをのぞけば、符号と $+\lambda I$ がことなるだけと思われ、会場からの質問として、ちがいの説明をもとめるものがあつた。 $\delta p' \delta p = \text{const}$ におさえて、数値的安定性を狙ったものと思われるが、数値的安定性に関する説明は、聞かれなかつた。せめて、原報を引用文献としてもらえれば、もっと活発な討論がもてたと思う。

4連 J10 は、configuration interaction の計算と分子軌道の最適化を収束するまで、交互にくりかえすMCSCF法が実用段階に到達したと云う報告である。Active space とよぶ特別な領域を設けて、その部分の計算は、特に精密におこなうようである。近いうちに、パソコンでも可能とのことであつた。

2連K15 は、ポスターセッションから変更された。水に物質をとかした時の水の状態を計算機実験により予測するものである。水集団による分子認識として現象を捉えると云う立場をとっている。そのような立場をとった場合とそうでない場合とのちがいがどこにあるのかをもうすこし説明していただきたいかつた。(東工大資源研 内野 正弘)



ポスターセッションの様子

*
* 情報化学部会部会員増加にご協力を! *
*
*
*
* 【昭和62年部会費】 正部会員 (日本化学会会員) 2,000円 *
* 準部会員 (日本化学会非会員) 3,000円 *
* 法人部会員 一口 30,000円 (一口以上) *
*
* ※ご入会を希望される方は、下記あてご連絡下さい。 *
* ㊞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) *
*

年会プログラム

第54春季年会 化学情報・計算機化学プログラム

日時 4月1日(水)～4日(土)

場所 日本大学文理学部(東京都世田谷区桜上水)

IVA会場 (4号館431教室)

4月3日(金)〔化学情報・計算機化学〕

(10:00～10:40)

3IVA07* 学術雑誌の著者付与キーワードの検討・再びChem. Pharm. Bull.について(北里大薬・電通大) 木下俊夫・平賀弥生・井出千重・鈴木理恵・○山崎 昶

3IVA09* 拡張SPIRESの開発(3) オンライン構造検索のための端末プログラムの試作(豊橋技科大) ○奥山 徹・吉田浩二・阿部英次・佐々木慎一

(10:40～12:00)

3IVA11* 分子力場パラメータの最適化(第7報) ニトロ基用パラメータの決定(化技研) ○田辺和俊・都築誠二・(北大理) 大沢映二

3IVA13* 炭素原子クラスター(C60)の異性体構造の導出(群大教育・学習院大計セ・北大理) ○飯塚 健・今井 賢・J.Rudzinski・大沢映二

3IVA15* コンピュータグラフィックスによる三次元置換フレームワークの構築(群馬大工) ○佐藤満雄・鈴木 淳

3IVA17* 節点照明関数の最適化(東工大資源研) ○内野正弘

(13:00～14:20)

3IVA25* 計算機支援による有機合成設計・反応予測システムの開発(豊橋技科大) ○船津公人・遠藤智明・C.A.Del Carpio・阿部英次・小寺範生・西沢吉彦・佐々木慎一

3IVA27* 反応設計システムEROSの開発と反応予測への利用(住友化学) ○幸 一美・上田明・山近 洋(Tu Munich) J.Gasteiger

3IVA29* 有機合成設計システムCASINOの開発(1) システムの基本構成(化技研) ○田辺和俊・林 輝幸・大内秋比古・山本 修(東薬大) 内丸忠文(富士通) 湯田浩太郎・有賀妙子・永井利枝子

3IVA31* 有機合成経路設計における多数のジェネリック表現の併用(山形大工) ○工藤喜弘・鈴木孝弘

(14:20～15:40)

3IVA33* 液晶分子設計支援システム(2) (東芝総研) ○前田真理子・宮村雅隆

3IVA35* パソコン画面立体視システムの開発と蛋白質結晶学への応用(北大理) ○田中 勲・山崎千春・引地邦男

3IVA37* 受容サイトでの分子識別機構の解析(1) パパイン—阻害剤複合系(農工大工) ○山本康哲・尾崎一男・村上憲明・片岡良一・安川民男

3IVA39* 分子設計のための人工知能システムANALOGSの試作(4) レセプター・マッピ

ング(東京農工大工・東大理) 藤井良彦・後藤教彰・岡崎秀美・村上憲明・○安川民男
岡崎廉治

(15:40~16:20)

3 IVA 4 1 * 分子構造の形状記述表現: Shape Vector(豊橋技科大) ○尾崎正美・高橋由雅・佐々木慎一

3 IVA 4 3 * パターン認識を用いた C-NMRスペクトルデータベースによる定性分析の試み(2) 高分子化合物混合物の成分の同定への拡張(日立計測・日立那珂) ○田中保子・橋本正雄・服部忠鐵

注: 講演時間は1件あたり講演14分討論6分です。

※16:20より情報化学部会の総会をこの会場にて行います。皆様ご出席下さい。

第54春季年会特別講演

特定テーマ「情報と化学」

4月2日(木) 特5会場 (4号館421 教室)

(10:00~11:00)

特5 2 0 1 地球環境情報と化学反応(国立公害研) 秋元 肇

(11:00~12:00)

特5 2 0 2 宇宙からの地球観測情報(東海大工) 坂田俊文

(13:00~14:00)

特5 2 0 3 計算化学—計算機で作る分子の情報(慶大理工) 岩田末廣

(14:00~15:00)

特5 2 0 4 コンピュータにも適した論理的有機化学命名法HIRN(サントリー) 平山健三

(15:00~16:00)

特5 2 0 5 遺伝情報の解析(京大化研) 金久 實



SUPERCOMPUTATION IN CHEMISTRY AND CHEMICAL ENGINEERING

PRESENT TECHNOLOGY AND FUTURE TRENDS

TALLAHASSEE, FLORIDA

FEBRUARY 23-25, 1987

sponsored by the Supercomputer Computations Research Institute
Florida State University

Organizing Committee:

Franklin B. Brown, Dept. of Chemistry, FSU;
Delos F. DeTar, Dept of Chemistry, FSU;
David Edelson, Dept. of Chemical Engineering, FAMU/FSU.

Topics and Invited Speakers (partial list): Contributed Poster Sessions

Molecular Mechanics and Dynamics	Informal Conferences
Ronald M Levy, Rutgers	
Ab Initio Calculations	
Donald G. Truhlar, Minnesota	Reception, Sunday Feb 22
Simulation of Large Scale Systems	
Elaine Oran, NRL	Conference Dinner and
Advanced in Supercomputation	Excursion

Since 1985, FSU has operated a CYBER 205 Supercomputer on a national and international network.

The first ETA¹⁰ is scheduled to be installed in 1987.

PLACE: Tallahassee, the capital city of Florida, is situated in the Big Bend area of North Florida and its municipal airport is served by Eastern and Delta airlines, as well as a number of smaller carriers. All sessions will be held at the Florida State Conference Center, located on the campus of Florida State University.

FEES: Conference Registration will be \$170 per person, including reception, continental breakfasts 3 days, lunches 2 days, coffee breaks, excursion and conference dinner at Wakulla Springs Lodge.

HOUSING: A block of rooms has been reserved at the Tallahassee Hilton Hotel, 101 South Adams St., PO Box 1569, Tallahassee, FL 32303; (904)224-5000, at a conference rate of \$49 single or double. Participants should make their own reservations directly with the hotel. Mention Supercomputation in Chemistry to obtain the conference rate.

CONTRIBUTED PAPERS: Submit a 200-word camera-ready abstract, on 8 1/2x11 paper, to DeLos F. DeTar, Department of Chemistry, Florida State University, Tallahassee, FL 32306-3006, (904)644-3810, by January 15.

INTERNATIONAL CONFERENCE ON JAPANESE INFORMATION

IN SCIENCE, TECHNOLOGY AND COMMERCE

UNIVERSITY OF WARWICK, UK

SEPTEMBER 1-4, 1987

Held by The British Library Japanese Information Service
The University of Warwick Japanese Business Policy Unit

With the support of the
United States National Technical Information Service (NTIS)
(and other sponsors to be announced)

The aims of the conference are:

- To exchange experience and to review existing information and problems in accessing it, as well as existing solutions.
- To identify trends, and, with an eye to the future, identify the chief outstanding problems and possible solutions, with emphasis on international cooperation.

The final session will seek to pinpoint what action is required and how it can be implemented.

This Conference is a unique opportunity for everyone interested in the problems of access to Japanese science and technology.

BACKGROUND TO THE CONFERENCE

Ever since the 1983 US Congressional hearings there has been a surge of interest in Japanese information, which initiatives such as the EEC Japinfo project to access grey literature, and a plethora of courses and seminars on all aspects of Japanese information. Almost every month sees the launch of another newsletter. Several Japanese online databases are now available in the West, some translated into English, but there are still some valuable ones inaccessible outside Japan.

The sheer complexity and overwhelming importance of Japanese information today is the reason for the Conference.

CONFERENCE PAPERS

In their written form, papers can be any length up to approximately six thousand words.

On the other hand, in their spoken form, at the Conference, we are anxious to keep them unusually short - we have found that limiting talks to 15 minutes maximum is much appreciated by the audience, and holds their attention much better than a longer talk ever can. Separate handouts to supplement the printed paper can be very helpful. It is not necessary to repeat in the talk all the detail of the written paper or handouts.

If you would like to submit a paper, please write to:

The British Library
Japanese Information Service
25 Southampton Buildings
London WC2A 1AW U.K.

as soon as possible, and by 5 February 1987 at the latest, giving details of the proposed paper, including title and abstract of at least 100 words.

If your abstract is accepted you will be asked to submit a complete typescript by 15 April 1987 for refereeing. Accepted papers will be published in the Conference Proceedings.

EIGHTH INTERNATIONAL CONFERENCE
OF COMPUTER ON
CHEMICAL RESEARCH AND EDUCATION (VIIITH ICCRE '87)

BEIJING, CHINA

JUNE 15-20, 1987

VIIIth ICCRE '87における招待講演及び基調講演

PLENARY LECTURES AND TOPICS

Dr.W.Bremser	G	From Spectroscopic Data Bases to Artificial Intelligence
Prof.R.Dessy	USA	Intelligent Instruments and Laboratory Automation
Dr.R.Feldmann	USA	Computer Graphics for Chemistry
Prof.D.Garfinkel	USA	Expert Systems in Chemistry and Modeling of Chemistry Systems
Prof.N.B.Gray	Aus	Artificial Intelligence in Chemistry
Dr.T.Isenhour	USA	Robotics and Laboratory Automation
Prof.G.Kateman	H	Sampling Strategies in Analytical Chemistry
Prof.V.A.Koptyug	USSR	Computers in Chemistry in USSR
Prof.D.L.Massart	B	Advances in Chemometries
Prof.J.W.Moore	USA	Computers and the Chemistry Curriculum
Prof.E.Osawa	J	Merits of High Preeision Calculation of Molecular Properties in Chemical Research
Prof.A.Panaye	F	Structural Representation and RetrienvaI of Generic Reactions
Prof.D.Petkovski	YOG.	The Role of Computers in Simulation, Control and Optimization
Dr.R.Potenzzone	USA	Computer Aided Polymer Design
Prof.Y.Takahashi	J	A Strategy for Computer Aided Molecular Design in TUTORS
Dr.P.Willet	E	Use of Cluster Analysis Methods in Chemical Information Systems
Prof.T.Wipke	USA	Commercial Software and Computer Applications in Chemistry
Prof.Y.C.Tang	CN	The Computer Chemistry in Chinese Universities
Prof.Z.H.Xu	CN	Engineering Chemistry Data Base
Prof.Y.Z.Hui	CN	Intelligence System for Infra-red Spectrum Analysis
Prof. Y.S.Jiang	CN	to be determined

FOCUSED DISCUSSIONS AND KEY-NOTE SPEAKERS

For some fast-growing sub-fields, focused discussion sessions will encourage attendants to interact with people from different disciplines and to exchange ideas. Each session, devoted to a specific subject, will have talks by key-note speakers and related poster discussions. The suggested subjects are:

- A. Advances in Chemometrics
-- Prof.N.Y.Chen, Prof.P.Jurs, Prof.B.R.Kowalski
- B. Advances in Computer-aided Process Design
-- Prof.L.T.Biegler, Dr.T.Umeda
- C. Applications of Personal Computers and Scientific Workstations in Laboratory
-- Prof.X.Y.Liang, Dr.S.Lowry, Dr.E.Ziegler
- D. Computer Aided Synthesis Design
--Dr.J.Gasteiger, Prof.P.Johnson
- E. Computer-enhanced Spectroscopies
--Prof.T.Clere, Dr.J.Zupan
- F. Expert System in Chemistry
-- Prof.H.Gelernter, Prof.M.Marsili
- G. Molecular Design of Drugs and Compounds with Desired Properties
-- Prof.G.Marshall, Dr.E.Meyer, Prof.S.Sasaki
- H. Numerical Data Acquisition, Evaluation, Dissemination and Retrieval System
-- Prof.T.E.Daubert, Prof.P.A.de Maine, Dr.S.Heller
- I. Representation and Retrieving of Chemical Structures: Generic Chemicals and Common Data Structures
-- Dr.W.T.Donner, Prof.J.E.Dubois, Prof.M.F.Lynch

It will be possible for poster authors to talk to the audience the background and main results of their work on the focused discussion session with relevant subject. Addition of new subjects may also be possible.

連絡先 Prof. C.Z.Zheng
Shanghai Institute of Organic Chemistry,
345 Lingling Road, Shanghai, China

1ST INTERNATIONAL WORKSHOP ON DATA BANKS IN OCCUPATIONAL HEALTH

VILLA PONTI, VARESE, ITALY

OCTOBER 30/31, 1986

Organized by : International Commission on Occupational Health
Commission of the European Communities
Joint Research Centre
Ispra Establishment

資料は下記にお問い合わせ下さい。

〒105 港区虎ノ門1-13-41(宝寿ビル4F) 社団法人日本化学物質安全・情報センター
大島 輝夫 電話03-593-1190

文献紹介

本号迄の紹介文献一覧

ニュースレター

紹介文献

Vol.3, No.2

Journal of Chemical Education

Vol.61(1984) No.1~No.12

p.26, p.164, p.440, p.524, p.627, p.699, p.786
p.864, p.1003

Vol.62(1985) No.1~No.2

p.62, p.139

Vol.3, No.3

Journal of Chemical Information and Computer Sciences

1985 Vol.25, 1 ~59 25周年記念号

Vol.3, No.4

Journal of Computational Chemistry

1984 Vol.5 No.1~No.6

Vol.3, No.5

Computers & Chemistry

1983 Vol.7 No.1~No.4

1984 Vol.8 No.1~No.4

1985 Vol.9 No.1~No.3

Journal of Molecular Graphics

1983 Vol.1 No.1~No.4

1984 Vol.2 No.1~No.4

1985 Vol.3 No.1~No.3

Vo.4, No.1

Computer Enhanced Spectroscopy

1983 Vol.1 No.1~No.4

1984 Vol.2 No.1~No.4

Vo.4, No.2

Quantitative Structure-Activity Relationships

1982 Vol.1, No.1

1983 Vol.2 No.1~No.4

1984 Vol.3 No.1~No.4

1985 Vol.4 No.1~No.3

- Journal of Chemical Information and Computer Sciences
 1985 Vol.25, No.2
 1985 Vol.25, No.4
 1986 Vol.26, No.1
- Vo.4, No.3 Computers & Chemistry
 Vol.9 No.4 ~Vol.10 No.1
- Journal of Molecular Graphics
 Vol.4, No.1
- Vol.4, No.5 Journal of Chemical Information and Computer Sciences
 1986 Vol.26, No.2
- Computers & Chemistry
 Vol.10 No.2~No.3
- Journal of Chemical Education
 Vol.62(1985) No.1~No.12
 p.236, p.309, p.315, p.410, p.687, p.791,
 p.866, p.1024
- Vol.5, No.1 Quantitative Structure-Activity Relationships
 1985 Vol.4 No.4
 1986 Vol.5 No.1~No.2
- Journal of Chemical Information and Computer Sciences
 1986 Vol.26, No.3~4

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

1985年 第4卷4号 発表題目、著者、頁

QSAR Analysis of the Subtilisin Hydrolysis of X-Phenyl Hippurates, *A.Carotti, C.Raguseo, and C.Hansch*, p.145

Effects of Structure on 1-Octanol/Water Partitioning Behavior of Aliphatic Amines and Ammonium Ions, *C. Takayama, M. Akamatsu, and T. Fujita*, p.149

Synthesis and Quantitative Structure-Activity Relationship(QSAR) Analysis of Some Novel Yanthine Oxidase Inhibitors: 6-(para-substituted phenyl)-pteridine-4-ones, *H.S.D.Naeff, H.C.van der Plas, J. Tramper, and F. Müller*, p.166

QSAR for Cholinesterase Inhibition by Organophosphorus Esters and CNDO/2 Calculations for Organophosphorus Ester Hydrolysis, *H.Johnson, R.A.Kenley, C. Rynard, and M.A.Golub*, p.172

1986年 第5卷1号 发表题目、著者、頁

Shape Indexes of Orders One and Three from Molecular Graphs,
L.B.Kier, p.1

Distinguishing Atom Differences in a Molecular Graph Shape Index,
L.B.Kier, p.7

Physical Factors Contributing to Hydrophobic Constant π , *G.Yang*,
E.J.Lien, and *Z. Guo*, p.12

A Comparison of some Measures for the Determination of Inter-
Molecular Structural Similarity--Measures of Inter-Molecular
Structural Similarity, *P.Willett* and *V. Winterman*, p.18

1986年 第5卷2号 发表题目、著者、頁

Comparison between X-Ray Crystallographic Data and Physicochemical
Parameters with Respect to their Information about the Calcium
Channel Antagonist Activity of 4-Phenyl-1, 4-dihydropyridines,
P.Berntsson and *W. Sold*, p.45

QSAR of 1,4-Naphthoquinones as Inhibitors of Photosystem II
Electron Transport, *W.Oettmeier*, *C.Dierig*, and *K. Masson*, p.50

Quantitative Structure-Activity Relationships on MAO Substrates
by Means of Quantum Chemical Properties, *F.Sanz*, *M.Martín*, *F.*
Lapeña, and *F. Manaut*, p.54

Chance Factors in Nonparametric Linear Discriminant Studies,
T.R.Stouch and *P.C.Jurs*, p.57

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

1986年8月 第26卷第3号 发表题目、著者、頁

Microcomputer Software. 2. Scientific and Technical Word Processing
on a Personal Computer: Has the Time Come?, *John C. Marshall*, p.87

Development of a Novel Weighting Scheme for the *k*-Nearest-Neighbor
Algorithm, *R.A.Forbes*, *E.C.Tews*, *B.S.Freiser*, *M.B.Wise*, and *S.P.*
Perone, p.93

Development and Use of Numeric Database for Properties of Metastable
Chemical Species in Solution, *W.P.Helman*, *G.L.Hug*, *Ian Carmichael*,
and *A.B.Ross*, p.99

A Microcomputer-Based System for Chemical Information and Molecular
Structure Search, *M.Lenor Contreas*, *Mauricio Deliz*, *Antonio Galaz*,
Roberto Rozas, and *Nelson Sepulveda*, p.105

Implementation of Nonhierarchical Cluster Analysis Methods in Chemical
Information System: Selection of Compounds for Biological Testing
and Clustering Substructure Search Output, *Peter Willet*, *Vivienne*
Winterman, and *David Bawden*, p.109

Computer Storage and Retrieval of Generic Chemical Structure in
Patents. 7. Parallel Simulation of a Relaxation Algorithm for Chemical
Substructure Search, *Valerie J. Gillet*, *Stephen M. Welford*, *Michael*
F. Lynch, *Peter Willet*, *John M. Barnard*, *Geoff M. Downs*, *Gordon*
Manson, and *John Thompson*, p.118

Logical Extension of an Isomeric Pseudoconversion of Polycyclic
Aromatic Hydrocarbons into Acyclic Polyenyne, *Seymour B. Elk*, p.126

Heuristic Approaches to the Design of a Cybernetic Electroanalytical
Instrument, *Hari Gunasingham*, p.130

Molecular ID Numbers: By Design, *Milan Randić*, p.134

Compact Molecular Codes, *Milan Randić*, p.136

1986年11月 第26卷第4号 发表题目、著者、頁

The NCI Drug Information System. 1. System Overview, *G.W.A.Milne, and J.A.Miller*, p.154

The NCI Drug Information System. 2. DIS Pre-Registry, *G.W.Milne, Alfred Feldman, J.A.Miller, G.P.Daly, and M.J.Hammel*, p.159

The NCI Drug Information System. 3. The DIS Chemistry Module, *G.W.Milne, Alfred Feldman, J.A.Miller, and G.P.Daly*, p.168

The NCI Drug Information System. 4. Inventory and Shipping Modules, *G.W.A.Milne, J.A.Miller, and J.R.Hoover*, p.179

The NCI Drug Information System. 5. DIS Biology Module, *M.T.Zehnacker, R.H.Brennan, G.W.A.Milne, J.A.Miller, and M.J.Hammel*, p.186

The NCI Drug Information System. 6. System Maintenance, *M.T.Zehnacker, R.H.Brennan, G.W.A.Milne, J.A.Miller, and M.J.Hammel*, p.193

Integrated Chemical-Biological-Spectroscopy-Inventory-Reactions
Preclinical Database, *Sandor Barcza, Henry W.Mah, Mirinisa H.Myers, and Siegfried S. Wahrman*, p.198

Description of Organic Reactions Based on Imaginary Transition
Structures. 1. Introduction of New Concepts, *Shinsaku Fujita*, p.205

Description of Organic Reactions Based on Imaginary Transition
Structures. 2. Classification of One-String Reactions Having an
Even-Membered Cyclic Reaction Graph, *Shinsaku Fujita*, p.212

Description of Organic Reactions Based on Imaginary Transition
Structures. 3. Classification of One-String Reactions Having an Odd-
Membered Cyclic Reaction Graph, *Shinsaku Fujita*, p.224

Description of Organic Reactions Based on Imaginary Transition
Structures. 4. Three-Nodal and Four-Nodal Subgraphs for a Systematic
Characterization of Reactions, *Shinsaku Fujita*, p.231

Description of Organic Reactions Based on Imaginary Transition
Structures. 5. Recombination of Reaction Strings in a Synthesis
Space and Its Application to the Description of Synthetic Pathways,
Shinsaku Fujita, p.238

Coding of Relational Descriptions of Molecular Structures, *Karl Wirth*,
p.242

BOOK REVIEWS

Chemometrics. By *Muhammad A. Sharaf, Deborah L. Illman, and Bruce R. Kowalski* Reviewed by *Donald R. Scott*, p.249

Author Index to Volume 26, 1986, p.250

Keyword Index to Volume 26, 1986, p.253

関 連 行 事

JOURNAL OF COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN 発刊のお知らせ

Papers Invited

Authors are invited to consider the Journal of Computer-Aided Molecular Design as their next medium for publication. The first issue is April 1987. Full instructions to authors are provided in this brochure.

Aims and Scope

The Journal of Computer-Aided Molecular Design has been established to provide a forum for disseminating information on both the theory and the application of computer-based methods in the analysis and design of molecules. It is intended that the journal should become a premier source for reporting computer simulations in chemistry, physics and biology. The scope of the journal encompasses papers which report new and original research and applications in the following areas:

- theoretical chemistry
- computational chemistry
- computer and molecular graphics
- molecular modeling
- protein engineering
- drug design
- expert systems
- general structure-property relationships
- molecular dynamics
- chemical database development and usage

Contribution on computer-aided molecular modeling studies in polymer materials and surface sciences as well as other molecular based disciplines, are particularly welcome to complement contributions from the pharmaceutical sciences. It is intended that the Journal of Computer-Aided Molecular Design will communicate original research and applications in the use of computers in the analysis and design of molecular structure. Authors reporting the results of applications are encouraged to include predictions of structures and/or properties which can be computationally verified and experimentally tested. Submissions about new methods and/or theoretical formalisms should include discussion of the need for, and utility of, such approaches.

Perspectives

The Journal of Computer-Aided Molecular Design will include a feature section entitled Perspectives, where experts will be invited to comment on developments in various aspects of the fields covered by the scope of the journal.

Perspectives topics and review subjects currently under consideration by the Editors-in Chief are:

Molecular dynamics - Cosmic force fields and electrostatic interaction - Dielectric issue - Surface tension - Expert systems - Conformation of sulfur - Protein modeling - Hardware development

- Protein folding - Zeolites - Force fields - Agonists vs. antagonists - Array processors - Graphics hardware - QSAR: new perspectives - Connectivity indices - Protein engineering - New software

Color

The use of color is encouraged, particularly for the reproduction of computer graphics displays. A minimum charge is levied on authors from commercial organizations but which may be reduced for those in academic institutions.

Subscription Information

The subscription price for 1987, Volume 1(4 issues) is : Dfl.325.00/US\$141.50 plus Df. 24.00/US\$10.50 for postage and handling.

INSTRUCTIONS TO AUTHORS

A broad spectrum of papers dealing with all aspects of computer-aided molecular design is welcomed. Full-length papers, short communications, perspectives and review articles are accepted. Only unpublished contributions, not under consideration elsewhere, are accepted.

The manuscript (original plus three copies) should be submitted to the appropriate Editor-in-Chief:

For the Americas and Australia:

Prof. G.R.Marshall,
Department of Pharmacology
Washington University
School of Medicine
St. Louis, Missouri 63110
USA Tel:(314)362-2516

For the UK:

Dr. J.G.Vinter
Smith Kline & French
Research Limited
The Frythe
Welwyn, Herts AL6 9AR
UK Tel:(07073)25111

For Continental Europe, the Middle East and Africa:

Prof. H.D.Höltje
Department of Pharmacy
Free University of Berlin
D-1000 Berlin 33
W. Germany Tel:(030)83 83 274/5

ゴードン会議「計算化学」についてのお知らせ

A steering committee for the 1988 conference was appointed--Ken Lipkowitz (IUPUI), John McKelvey (Eastman Kodak Company), Leland Allen (Princeton University) and N. L. Allinger (University of Georgia). The purpose of the steering committee is to advise and assist the co-chairmen and to provide guidance on the mission of the conference. In future, the immediate past co-chairmen will serve on this committee. Suggestions for speakers and topics for the next conference may be sent either to members of the committee or to the co-chairmen.

(QCPE Bulletinより)

ゴードン会議「計算化学」については、NEWSLETTER Vol.4, No.6, p.23を御参照下さい。

1987 AMERICAN CONFERENCE ON THEORETICAL CHEMISTRY

This is a second reminder that the 1987 conference will take place July 26-31, 1987, at Gull Lake, Minnesota.

Additional information may be obtained from:

Prof. Donald G. Truhlar
Department of Chemistry
University of Minnesota
207 Pleasant Street, S.E.
Minneapolis, Minnesota 55455

1987 QCPE WORKSHOP
on
SEMI-EMPIRICAL AND AB INITIO TECHNIQUES

June 21-26, 1987

San Diego Supercomputer Center
La Jolla, California

A New Approach--For the first time, we are offering a combination of what had previously been two separate QCPE Workshops. We are giving the Semi-Empirical and Ab Initio Workshops during this single week.

As with past Workshops, our purpose is two-fold. The participant will be provided with a clear presentation of the nature and quality of the techniques and/or approximations being considered. The methods of attack which can be used for computational problems will be discussed; and special emphasis will be placed on the interpretation of results.

Each participant will be able to develop some facility in using all of the basic techniques being featured and will receive individual assistance during the computational laboratory sessions.

We shall adhere to our previous policy of providing each participant with source copies of each system with which he works.

Workshop Format--We shall be repeating the "Gordon Conference" format that proved so successful at the 1986 Workshop. There will be lectures in the morning. Afternoons will be free, with one exception: Monday, June 22, during which there will be an additional lecture after lunch. This is necessary in order to accommodate the additional material we are including and to permit a thorough introduction to SDSC and the computing environment in which participants will be working. (SDSC offers a CRAY 1-XMP/48 operating under CTSS (Cray Time Sharing System).) Computational work will take place in the evening.

Social Evening--Preceding the actual Workshop, there will be a social evening on Sunday, June 21. Details of this event will be sent out with Workshop registration materials.

Cost--The Workshop tuition will be \$625.00 per person. Each participant will be responsible for his own housing and meals.

The following refund policy will be in effect. For any request for a refund made up to May 15, 1987, a 10% charge (\$62.50) will be assessed. After this date, no refunds can be made, but the substitution of one individual for another will always be permitted.

Housing--Arrangements for a block of rooms have been made with the Torrey Pines Inn which is adjacent to the Torrey Pines golf course and is located on the Pacific Ocean. Rates are nominal, and adequate food service is available.

Administrative Details--Because of limited facilities, we are holding attendance at this Workshop to twenty-five individuals. We will fill the available slots on a first-come, first-served basis. Those applications which are accompanied by advance tuition payment will be given priority. A prompt notification of acceptance will be sent out on or before March 1, 1987.

Tuition checks should be made payable to the Quantum Chemistry Program Exchange.

*
* ニュースレターの新名称について *
*
* Vo.4, No.3にて募集致しましたニュースレターの新名称は拡大編集小委員会(昭和61年11月29日) *
* で検討の結果、CICSJ Bulletin (情報化学部会ブレットン) に決定しました。 *
* 尚、CICSJは、 *
*
* Chemical Information and Computer Sciences *
* The Chemical Society of Japan です。 *
*

1987 WORKSHOP CURRICULUM

This Workshop will focus on the computational chemistry techniques most widely used today.

Presentations on and calculations using the following systems will be made:

1. Extended Hueckel Theory
2. MOPAC/AMPAC (Modified Neglect of Differential Overlap)
3. Molecular Mechanics
4. Gaussian-Based Ab Initio Systems

QCPE WORKSHOP FACULTY

N. L. Allinger--Department of Chemistry, The University of Georgia, Athens, Georgia

Richard Hilderbrandt--San Diego Supercomputer Center, La Jolla, CA

John McKelvey--Eastman Kodak Company, Rochester New York

Sid Topiol--Berlex Laboratories, Cedar Knolls, New Jersey

*
* 本誌への寄稿のお願い *
*
*
*
* 本ニュースレターでは、部会員の方々の寄稿をお待ちしております。 *
* 本誌に相当と思われる原稿を出来ればワープロ原稿（A4またはB5）にてお送り下さい。 *
* 会員広場への投稿或いは海外で開催されるシンポジウム等のニュース・予告などでも結構です。 *
*
* 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 *
*

Tentative Schedule: 1987 Workshop
June 21-26, 1987

	Mon. June 22	Tues. June 23	Wed. June 24	Thurs. June 25	Fri. June 26
9:00 AM	General Overview of Computational Chemistry	MNDO and AM1 Formalism	Molecular Mechanics Foundation	Ab Initio Computations	Computer Graphics
10:15 AM	Break	Break	Break	Break	Break
10:45 AM	Experiment and Calculation. Extended Hueckel Theory Result. Input Preparation	Results, Interpretation and Use of the System	Results, Interpretation and Use of the System	Results, Interpretation and Use of the Gaussian-Based System	Summary and Closing
12:00 PM	Lunch	Free Time	Free Time	Free Time	
2:00 PM	Introduction to SDSC Facilities				
3:30 PM	Free Time				
7:00 PM	CTSS Introduction and Extended Hueckel Calculations	MOPAC Lab Session	Molecular Mechanics Lab Session	Ab Initio Lab Session	
10:00 PM					

CICSJ Bulletin

Published Bimonthly by Division of
Chemical Information and Computer Sciences
The Chemical Society of Japan

日本化学会
情報化学部会

Volume 5, Number 2
March 1987

目 次

部会行事

- 第10回情報化学討論会(発表募集) 1

部会記事

- 昭和62年度部会役員 2
「化学者のためのパソコン入門講習会」報告 3

関連行事

- 第15回構造活性相関シンポジウム 5

国内の動き

- 「異機種コンピュータの接続による化合物総合データベースシステム」の
一般公開実験おこなわる 田 辺 和 俊 6
スペクトルデータベース(SDBS)の公開デモをふりかえって
..... 平 泉 紀久子 9

海外動向

- 国際会議一覧 14
1987 Pittsburgh Conference & Exposition on Analytical
Chemistry & Applied Spectroscopy 15

国際会議

- Journal of Molecular Graphics (Vol.4, No.2~Vol.4, No.4) 16
Journal of Computational Chemistry (Vol.6, No.1~Vol.7, No.6) 18
Computers And Chemistry (Vol.10, No.4~Vol.11, No.1) 29
Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol.5, No.3) 30

文献紹介

- CHEMNET™ 30

部 会 行 事

第 10 回 情 報 化 学 討 論 会 (発 表 募 集)

共 催 日 本 化 学 会、日 本 薬 学 会、日 本 分 析 化 学 会
日 本 農 芸 化 学 会、情 報 科 学 技 術 協 会

日 時 昭和 62 年 11 月 6 日 (金) -- 8 日 (日)
会 場 北里大学白金キャンパス (東京都港区白金 5-9-1)
交 通 渋谷駅東口、恵比寿駅東口から都営バス「田 87」系統田町駅行、あるいは田町駅西口、都営地下鉄線三田駅より同じく「田 87」系統渋谷駅行にて「北里研究所前」下車すぐ。

なお同期間中に同じく北里大学白金キャンパスにおいて、第 15 回構造活性相関シンポジウムが一部重複して開催されます。

討 論 主 題 1) 化学情報システムとデータベース、設計、製作と利用
2) 化学におけるコンピュータの利用
3) そのほか情報化学一般

講 演 申 込 締 切 昭和 62 年 6 月 30 日 (火)
1 件ごとに B5 版の用紙に次の事項を横書きで記入の上、下記あてお送りください。

- a) 講演題目
- b) 発表者と所属 (講演者に丸印)
- c) 連絡先
- d) 討論主題 (上記の 3 主題のうち一つを記入)
- e) 講演内容の要約 (150-250 字程度)
- f) ポスター発表の可否 (発表件数が多い場合には、一部を掲示発表に願うこととなると思いますので。)

講 演 要 旨 締 切 昭和 62 年 9 月 10 日 (木)

講演 1 件について所定の原稿用紙 4 枚まで。他に半ページ大の英文のタイトル、氏名、要旨を記入したものを添付のこと。(用紙は申込を受理次第送付いたします。)

なお今回の会場では OHP では鮮明な画像が得られませんので、通常の発表に際してはスライドのみに限らせて頂きます。

講 演 申 込 先 〒 182 東京都調布市調布ヶ丘 1-5-1、電気通信大学応用化学教室
山崎 昶 (電話 0424-83-2161 内線 4425、4426)

懇 親 会 昭和 62 年 11 月 7 日 (土) 北里会館ホールにて第 15 回構造活性相関シンポジウムと合同で開催の予定。

* 本討論会に先だって、日本化学会第 55 秋季年会が開催されますが、秋季年会での発表内容を含めて、より広い立場からの研究発表を歓迎致します。

部 会 記 事

昭和62年度部会役員

[部会長]	米 田 幸 夫	東海大学開発技術研究所
[副部会長]	佐々木 慎 一	豊橋技術科学大学
[幹 事]	阿 部 英 次	豊橋技術科学大学
	安 藤 勲	東京工業大学工学部
	飯 塚 健	群馬大学教育学部
	石 田 嘉 明	旭硝子(株)研究開発部
	石 塚 英 弘	図書館情報大学
	岩 沢 まり子	(株)紀伊国屋書店
	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	北海道大学工学部
	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
	高 橋 由 雅	豊橋技術科学大学
	高 山 千代蔵	住友化学工業(株)総合研究所
	田 辺 和 俊	化学技術研究所
	中 野 英 俊	姫路工業大学
	花 井 荘 輔	富士写真フィルム(株)
	広 田 勇 二	(社)化学情報協会
	藤 枝 修 子	お茶の水女子大学理学部
	藤 原 諒	筑波大学電子情報工学系
	船 津 公 人	豊橋技術科学大学
	松 浦 育 敏	中外製薬(株)研究所
	宮 原 是 中	三井東圧化学(株)システム部
	安 岡 則 武	姫路工業大学
	山 口 静 子	味の素(株)中央研究所
	山 崎 昶	電気通信大学
[監 査]	佐 藤 公太郎	富士写真フィルム(株)
	山 本 修	化学技術研究所

「化学者のためのパソコン入門講習会」報告

情報化学部会では61年度の活動の一つとして、「化学者のためのパソコン入門講習会」を企画し、62年1月22日（木）、23日（金）の両日、日本化学会2階会議室において開催した。

民間、大学を問わず、化学関係の部門、研究室へのパソコン導入台数は、数年前に比べて激増し、今では、1人当たり何台かを保有しつつあるように思われる。その使い方も、人それぞれ、各種各様であろうが、情報化学部会へは初心者向けの講習会を開催して欲しいと言う希望が寄せられ、日本化学会へのサービスも含めて今回の開催の運びになった。従って、内容も、パソコンメーカーやカルチャーセンターなどが主催する一般的な講習会とは違って当然ながら化学関係に限定し、1日コースを2日続けて行った。その内容を簡単にご紹介しよう。

まず、電総研前田浩五郎氏に「化学とパソコン」と題して約1時間で概論をお願いした。

I.化学は基本的には個別科学である、II.コンピューターへ至る道とこれから--コンピューターの利用は避けて通れなくなっている、III.コンピューターは今どう変りつつあるか--ハードの話とソフト、利用の面での変化、IV.コンピューターで何が出来るか、V.その1つの例--小型コンピューターによる大容量データベースの高速操作（質量スペクトルデータベースによる場合）、--小型システムでも使い方次第で充分大型機並に利用できるの項目にわけ、ご経験をまじえて話され、聞く耳に説得力があった。そして、「化学はかつて物理学の力をかりて変身出来たように、やがて来るべき日に情報科学の力をベースに大きな転身を遂げるであろう」と結ばれた。

次いで、まず簡単な実習でパソコンに慣れることを目的とし「化学者のためのワープロ」を藤枝が担当した。時間の関係で、残念ながら欧文ワープロは全て省略し、管理工学研究所のご好意によって松86を拝借し、化学式などを含む文章作成の練習を行った。

昼食のあと、東京工業大学大学院高分子工学専攻博士課程1年安藤慎治氏により「化合物3次元構造グラフィックス」と題して、分子グラフィックスの解説、既に公開され、入手可能なソフトの紹介があった。ご専門がNMRの化学シフトを分子の電子構造と結びつけるための半経験的分子軌道法及び非経験的分子軌道法による量子化学計算ということで、支援プログラムとして中野英彦氏と共同開発された”ごんのすけ”（彼の愛犬の名前だそうです）を使った実習があった。目の前のCRTに展開する3次元グラフィックスの見事な画面に参加者一同しばしうっとりし、ヤングパワーに敬意を表した。

続いて、（株）ソフトサイエンス島山純一、高野博両氏による「化学構造式などの作図」では、サイエンスグラフによる化学構造式をキーボードから入力する実習があった。要領よく、わかりやすい説明があり、XYプロッターへの出力のデモもお願いした。

ここまでは、既成のソフトウェアの使い方が主であったが、はじめてパソコンに触れた人も少し慣れて来たので最後に、中外製薬(株)松浦育敏氏の「化学計算用プログラム-実例と実習」で、OS、言語、BASICによるプログラミングの簡単な説明と、C、H、Nの元素分析値とCの最大数をキー入力して可能性のある化合物をCRTに表示するプログラムを実例にした解説があり、BASICのプログラムの様子もある程度は理解してもらえたであろう。

昼の休憩時間中に、管理工学研究所のグラフ作成ソフト樞とリレーショナルデータベース桐のデモをお願いし、個人、研究室単位の文献データベースでは使い易さと高速を誇る検索、並べかえなどの実演紹介があった。(株)メディアの化学教育用ソフト(蒸留、電子の発見、電子雲、分子振動、周期表、元素名・元素記号の演習など)の実演紹介、松浦氏の自作プログラム、安藤氏の非線形最小2乗計算のプログラムの実演紹介なども、全部同時に走らせた。化学者向けパソコン関連の図書も展示し、参考に供した。

本講習会で実習に使ったパソコンは、RAMボードで250KBを追加したNEC PC-9801F2とカラーモニターを各20セット、2台に1台ずつのプリンターPC-PR201である。実習には1人1台使用を原則としたが、2人1台を希望する時は連名で参加申込みを受けたので、出席者は2日間で計54名になった。

この講習会に参加された方々にご協力をいただいたアンケートの中からいくつか紹介しておきたい。東京都からの参加者は13名、近郊から24名で、あとは、北海道勇払郡、九州飯塚市、高知県などを初めとする遠方からの参加者である。民間に勤務される方の参加が約70%をしめ、年齢別では、20代、30代が多く、ほぼ同数であったが、50代以上の方が約1割になり、停年退官された先生方が大変熱心に参加実習して下さったことには胸をうたれた。講習会の内容、テキスト、参加してどうでしたかと言う質問では、ほぼご満足いただけたようである。今後への希望のなかに、分野別、程度別の講習会を開催して欲しい、プログラミングを覚えたい、機器とパソコンとの接続、LAなど、いろいろなご意見をいただいた。

本講習会の開催に不可欠のご援助をいただいた日本電気(株)、(株)管理工学研究所、(株)ソフトサイエンス、(株)メディアの各社ご関係各位に、心から御礼を申し上げ、さらに、ハードウェア、ソフトウェアなど全て必要なものは、無償にてご提供、ご協力下さったことを、この紙面をかりて、謝意を表したい。

事務局の石鍋、田辺両氏のこまやかな気配りをはじめ、ご援助下さった部会長並びに部会の先生方、老(若?)若男女の講師、お茶の水女子大学学生2名のアシスタントと世話係がよく連携し、盛りだくさんで、ちょびり忙しくはあったが、大寒中の寒い日にもかかわらず気持ちの上ではとても暖かい2日間を閉じた。

(お茶の水女子大学理学部化学教室 藤枝 修子)

関連行事

第15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
日本農薬学会、構造活性相関懇談会

日 時 昭和62年11月6日(金) -- 8日(日)

会 場 北里大学白金キャンパス(東京都港区白金5-9-1)

交 通 渋谷駅東口、恵比寿駅東口から都営バス「田87」系統田町駅行、あるいは田町駅西口、都営地下鉄線三田駅より同じく「田87」系統渋谷駅行にて「北里研究所前」下車すぐ。

なお同期間中に同じく北里大学白金キャンパスにおいて、第10回情報化学討論会が一部重複して開催されます。

討論主題 医薬、農薬などを含む天然、あるいは合成生理活性物質の構造と活性の相関関係の解析、および定量的ドラッグデザイン

講演申込締切 昭和62年6月30日(火)

1件ごとにB5版の用紙に次の事項を横書きで記入の上、下記あてお送りください。

- a) 講演題目
- b) 発表者と所属 (講演者に丸印)
- c) 連絡先
- d) 講演内容の要約(150-250字程度)

講演要旨締切 昭和62年9月10日(木)

講演1件について所定の原稿用紙4枚まで。他に半ページ大の英文のタイトル、氏名、要旨を記入したものを添付のこと。(用紙は申込を受理次第送付いたします。)

講演申込先 〒108 東京都港区白金5-9-1、北里大学薬学部製剤学教室
森口郁生 (電話 03-444-6161 内線3290)

懇親会 昭和62年11月7日(土) 北里会館ホールにて第10回情報化学討論会と合同で開催の予定。

国内の動き

「異機種コンピュータの接続による化合物総合データベースシステム」の 一般公開実験おこなわる

さる2月18,19日の両日、科学技術庁の科学技術振興調整費による「ネットワーク共用による化合物等の利用高度化に関する研究」の総合評価試験の一環として、一般公開実験が日本科学技術情報センター（JICST）において行われた。この研究では各種の化合物DBを構築し、7つのコンピュータセンターを相互に接続することによって、複数のDBの有機的、横断的な検索を可能とする総合的なシステムの実現をめざしているが、一般公開実験は研究に参加している全機関が一堂に会して、各種DBの検索実演等が行われた。

本システムの構成概念図を図1に示す。本システムでは化合物に関する各種のDBが各コンピュータに接続された端末から利用できるようになっており、端末の操作には各センターのDBシステムが提供するセンター固有の検索コマンドを利用する方法と、各DBに共通の検索コマンドを利用する方法とがあり、一般公開ではこれらのコマンドを利用して複数のDBを対象にネットワークを介して連続的にまたは同時に検索が行われた。

また日本語化合物辞書システムでは化合物体系名に基づいて立体構造まで識別可能な原子結合表を自動作成することに成功し、数百万にのぼる化合物の識別や正確で効率のよい化合物辞書DBの構築が可能となった。そこで一般公開では化合物の名称や構造による検索等が実演された。

さらに各省庁の試験研究機関等に所在する重要なファクトデータであるスペクトル、バイオリジカル、安全性、化合物環境、熱物性、バイオケミカル、農業、医薬品、急性中毒の各種DB（表1参照）が整備されたので、これらに蓄積されている特色のある化合物について検索が実施された。また共通的な化合物番号をキーとして化合物辞書を中心に複数のDBを有機的に検索することもあわせて実演された。

このように本研究プロジェクトではDB検索を目的とした異機種コンピュータの相互接続が実現され、日本語検索や構造検索の可能な化合物辞書を中心とした化合物総合DBが開発されたが、これらの技術はいずれも世界的に最先端のものである。

（資料提供：科学技術庁情報課）
（文責：田辺和俊）

図1 システム構成の概念図

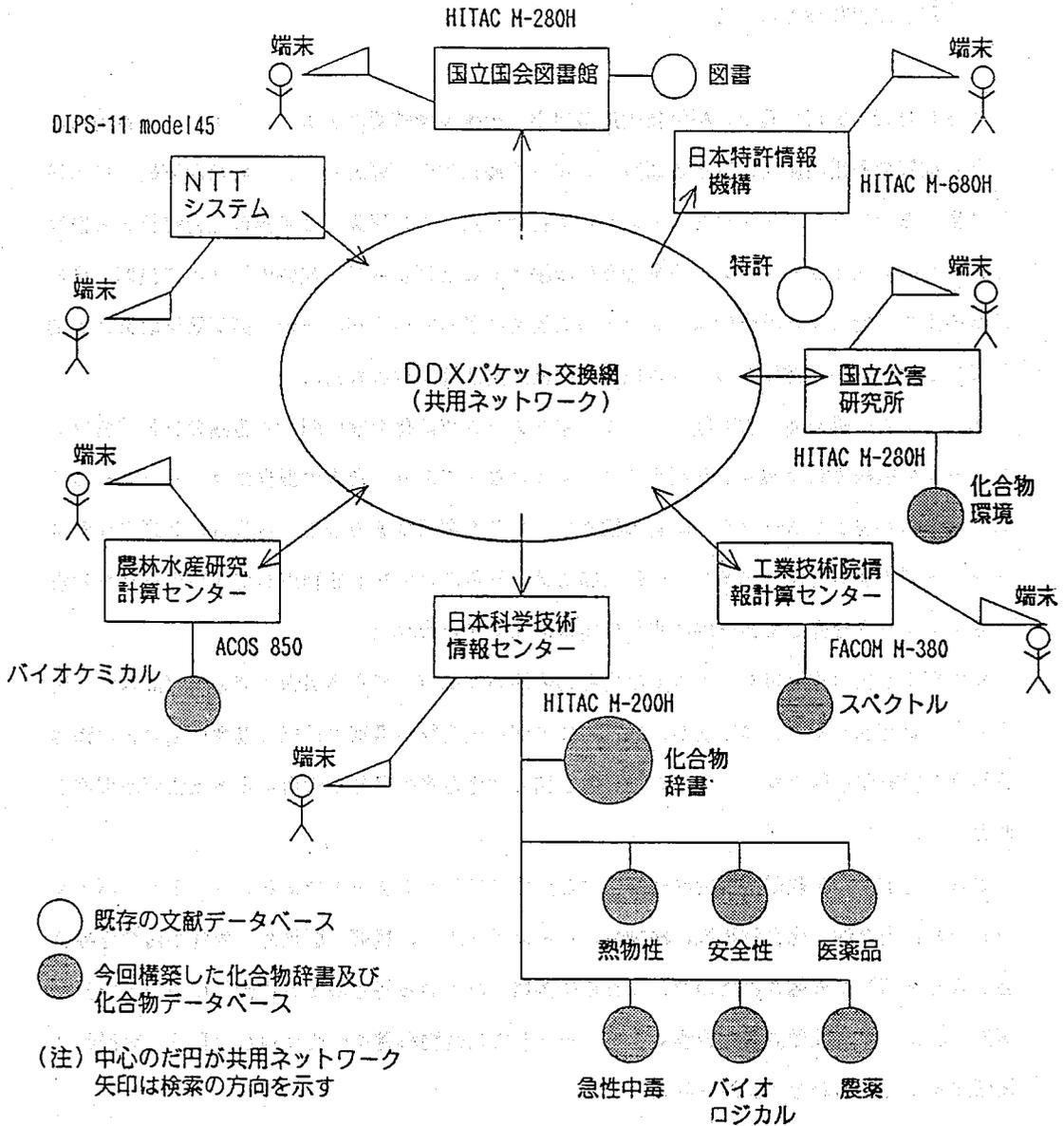


表1 構築したデータベースの概要

データベース名称	データの概要	実施機関
①化合物辞書	各化合物データベースが取り扱う物質を登録し、立体構造まで識別可能な日本語化合物辞書	日本科学技術情報センター 化学情報協会
②スペクトル	純物質を対象とした赤外、 $^1\text{H-NMR}$ 、 $^{13}\text{C-NMR}$ 等のスペクトルデータ	工業技術院化学技術研究所
③バイオリジカル	元素、無機化合物、有機化合物、天然物等の広範な化学物質を対象とした発癌性、変異原性及び催奇形性についての試験データ	国立衛生試験所
④安全性	化学物質の安全及び衛生に関する国内の法令、規制に含まれる化学物質を対象とした情報	日本化学物質安全・情報センター
⑤化合物環境	環境中に存在する有害な化学物質を対象とした物性、化学構造、環境中での測定値、分析法等の情報	国立公害研究所
⑥熱物性	元素、無機化合物、低分子有機化合物の一、二、三成分系の化学物質を対象とした熱力学、熱化学、相平衡、燃焼、爆発等の物性データ	日本科学技術情報センター
⑦バイオケミカル	肥料、飼料、食品添加物等の物質を対象とした物理化学的性質、生化学的性質、生産量規制等の情報	食品総合研究所 農業環境技術研究所
⑧農薬	我が国で登録されている農薬の名称、有効成分、使用方法、分類、統計等に関する情報	農薬工業会
⑨医薬品	国内に流通している医薬品の商品名、有効成分名、含量、製造・発売者名、薬剤の形態・コード、薬効分類番号等の情報	日本医薬情報センター
⑩急性中毒	急性中毒を引き起す可能性のある商品を対象とした有効成分、症状、処置例等の情報	同上

科学技術庁振興調整費による「ネットワーク共用による化合物情報等の利用高度化に関する研究」の成果として、化技研のスペクトルデータバンクシステム (SDBS) の公開デモンストレーションが他のDBと共にわれ、共用ネットワークにサポートされて十分に機能することが確認できた。ただしSDBSの特徴である図形情報をネットワークにのせることができないので、会場の東京都千代田区永田町のJICSTから筑波の工業技術院のコンピュータセンターRIPSのM380に一般公衆回線で接続しグラフィック端末を用いて、ローカルアクセスによる公開デモを行った。

SDBSではMS, ^{13}C NMR, ^1H NMR, IR, ラマン, ESRの6種のスペクトルが化合物辞書システムの配下に収録されており、現在2つのサブシステムが工技院内で公開されている。1つは化合物辞書システムにアクセスして化合物を検索し、スペクトルを表示させるLOOKシステムであり、もう1つはスペクトルデータを入力して化合物あるいは部分構造を出力し、同時にスペクトルパターンも出力可能なSEARCHシステムである。適当なエミュレータを塔載したパソコン端末からもTSS方式によるアクセスが可能である。

公開デモの際にはLOOK, SEARCHの両システムを実演し、種々の反響があった。それらを整理して主なものを列挙し、同時にSDBSのフィロソフィーを明らかにしたい。

1. SDBSの公開の時期, 方法, 料金

SDBSは基盤技術研究促進センターから62年度中にオンラインでのサービスが開始される予定であるが、料金、契約その他については現在未定である。グラフィック端末やパソコン端末からのアクセスを計画しているが、詳細がきまるまでにはまだ時間がかかる様子である。

2. 収録されている化合物

SDBSでは化学構造式が書ける純粋な有機化合物が主な対象であり、サンプルは原則として市販品である。純度は試薬会社の表示を信用しているが、NMRで帰属をつける時に不純物が多い場合、あるいはMSで不純物ピークが強い場合には除外している。現在のところ医薬品などに関しては純粋な試料が入手できればスペクトルを測定しデータを収録する。ポリマーや無機化合物などは別個のDBを構築すべきであろう。

3. スペクトルデータのオリジン

SDBSのほとんどのスペクトルは化技研で測定している。1HNMRのパラメータの多くは文献から収録しているが、スペクトルパターンは化技研で創成している。ESRのデータは文献から得ているものが多い。これらの点に関しては関係各方面のご協力をお願いしたい。今後ともESRを除き、文献からのデータを収録する計画はない。試薬の入手方法については検討の余地がある。データ集積、更新等の作業は今後とも継続する予定である。

4. 検索の機能

未知化合物のスペクトルから化学構造を決める時のデータの入力方法について質問が集中した。IR, MS, ^{13}C NMRのデータを組合わせて検索できるCS (Combined Search)を主に実演したが、パターンマッチの方法では収録されていない化合物は検索できないという声に対しては、NMRの検索システムNMRSで化学シフト値から部分構造の推定、逆に部分構造から化学シフト値の算出ができることを示した。また測定機に付属のミニコンから出力されるピークの位置と強度のデータをそのまま自動的に入力して検索するシステムの開発はできないかというような建設的な提案もあった。

5. パソコン化の可能性

SDBSのデータの精度は1HNMRでは0.0625Hz/point(90MHz)ないし0.125Hz/point(400MHz)であり、MSでは0.5質量単位/point、IRでは0.25-0.5 cm^{-1} /pointである。このような精密なオリジナルデータから間引いたデータを作成するのは容易であり、パソコンにデータを搭載することは近い将来の計画となっている。パソコンベースでパーソナルDBを構築し、その中にSDBSのデータもあわせて収録したいがどうであろうかという質問もあった。これは技術的には可能であるが、手続き的にはそれほど容易でないであろう。

6. 他のDBとの関連

SDBSは化技研で独自に開発されたものであり、現在のところ他のDBとの直接的なつながりは存在しない。IRDCのDBはカード形式のデータが現在はMTに収録され市販されているが、スペクトルは分散型の装置で測定されたものばかりである。これに対しSDBSのIRはすべてFT装置で測定されている。SDBSではCASのRegistry番号を可能な限りつけることにより、他のDBとの接続の準備はできている。またJICSTの日本語化合物辞書との相互登録のテストランも行い、今後も継続してゆく予定である。

以上、参覧者の主要な質問をまとめてみたが、我が国独自で開発された国際的にも通用するDBという応援の声もあった。DBを充実するためには一般からの協力が必要であることを痛感している昨今であり、これらの声を力強く感じた。

193RD ACS NATIONAL MEETING

DENVER, COLORADO

APRIL 5-10, 1987

DIVISION OF CHEMICAL INFORMATION

Symposium on End User's Reflections on End User Searching

Introductory Remarks.

1. On-line Information Retrieval at a Specialty Chemical Company, *R.E.Kass*
2. Let your Fingers Do the Searching--End Users at Cyanamid, *R.J. Manfre*
3. End User Limit? Applications-Oriented Databases, *J.K.Borchardt*
4. Frontiers of Technology with a PC and an Information Specialist, *A.R.Zigman*
5. Information Searching by the Academic Scientist, *A.S.Kende*
6. Information Retrieval by the Lone Consultant, *E.M.Beavers*

Symposium on Data/Information Resource Management (DRM/IRM)

Introductory Remarks.

7. Information Resources Management: Challenge and Opportunity, *G.Levin*
8. Environmental Data Resource Management, *M.E.Courain*
9. Information Resource Management in Industry and its Implications to Research and Development Organizations, *F.H.Bishop*
10. Data Management in a Large Organization, *D.C.Wigley*
11. Dealing with the Information Explosion at General Foods, *D. Rothkopt*
12. Managing the Data Resource, *A. Rigby*
13. Some Observations on Chemical Information Activities and Instruction in the People's Republic of China, *O.B.Ramsay*
14. Structure Registration and Retrieval in Beilstein Online System, *C.Jochum, S.M.Welford*
15. Applying Expert Systems to Environmental Problems, *J.M.Hushon*
16. Envirotrends: The Subject and people in the Field of Environmental Sciences, *S.S.Miller*

Microcomputer Information Handling Software Demonstration

17. Software Demonstration: Microcomputer Information Handling, *J.L.Cahpman*

Symposium on Small Computer Systems--Software for Chemists--I

Introductory Remarks.

10. Improving the Quality of Technical Publications, *E. Byer*
19. Improving Technical Writing with the Unix Writer's Workbench Software, *C.R. Smith, K.E. Kiefer*
20. Desktop Technical Manuscript Preparation for Scientific Writers, *R.A. Love, C.K. Gerson*
21. Approaches to Chemical Text Processing, *R.S. Hong*
22. Chemical Structure Management Software: A Comparison of Microcomputer-Based Programs, *D.E. Meyer*
23. Text Management Software for Chemists, *C.C. Mundy*
24. A Comparative Investigation of PC-Based Text Retrieval Software, *J.L. Chapman*
25. Seraphim: A Software Clearinghouse for Chemists, *J.W. Moore, E.A. Moore*
26. Computers Aid Learning--for Chemists as Well as Students, *K.M. Chapman*
27. Local Area Networks with Laboratory Information Management Systems, *R. Megargle*
28. LIMS: What are the Choices?, *G.A. Gibbon*
29. An Expert System for Choosing Appropriate Experimental Designs, *S.N. Deming*

DIVISION OF COMPUTERS IN CHEMISTRY

1. Fourier Encoded Templates for an Optic RAM Proximity Computer Lab Robot Eye, *W.E. Pettit, M.A. Smith*
2. Information Flow in the Automated Laboratory, *B.C. Schaeffer, F.L. Tobin*
3. Computer Animation of an Atom-Molecule Chemical Reaction, *C.L. Duncan, L.D. Foust, H.D. Kutz*
4. MMIO: A PC-Based Front End for Molecular Modeling, *K.E. Gilbert, J.J. Gajewski*
5. A Complete Algorithm for the Computer-Assisted Modeling of the Active Receptor Site, *A.K. Ghose, G.M. Crippen*
6. QSAR Chemical Assessment System--A Status Report, *R.H. Hunter, F.D. Culver, J.R. Hil III, A. Fitzgerald*
7. Evaluating Published Data on Selenium in Food Using an Expert System, *S.R. Heller, D. Bigwood, A. Schubert, W.R. Wolf, J.M. Holden, G.R. Beecher*
8. Development and Operation of an Electronic Coal Properties Database with Real-Time Plotting and Cartographic Capability, *W.C. Peters, R.R. DeSantis, T.C. Ruppel*
9. Use of Computers for Studying Galenic Forms Able to Control the Drug Delivery, *J.L. Taverdet, J. Bouzon, J. Rollet, J.M. Vergraud*

Division of Computers in Chemistry Award Honoring *W.T. Wipke*:
Recent Computer Applications of Symbolic Methods in Structural Studies

Introductory Remarks.

10. Application of Artificial Intelligence to Modeling of Drugs, Enzymes, and Receptors, *M.N. Liebman*

11. Assignment of Protein Three-Dimensional Structure, *R.M.Abarbanel, F.E.Cohen, I.D.Kuntz*
12. Symbolic Reasoning in Conformation Analysis, *D.P.Dolata, C.K.Prout*
13. Award Address (ACS Award in Computers in Chemistry sponsored by Digital Equipment Corp.). Analogy and Intelligence in Model Building (AIMB), *W.T.Wipke, M.A.Hahn*

Computer-Assisted Analysis of Motion in Larger Molecules

Introductory Remarks

14. Capsid Dynamics of the Rhinovirus, *B.M.Pettit, W.F.Lau*
15. Multiple Conformational States of Proteins: A Molecular Dynamics Analysis, *R.Eiber, M.Karplus*
16. Applications of Molecular Dynamics for Conformational Exploration, *B.R.Brooks*
17. Molecular Dynamics Simulation of a Myoglobin-Xenon Complex, *R.F.Tilton, C.Singh, P.A.Kollman, I.D.Kuntz*
18. Design and Synthesis of Inhibitors of Aspartic Proteinases Based on X-Ray Crystal Structures, *D.H.Rich*
19. Protein-Ligand Docking Simulations, *J.M.Blaney*
20. Drug Design via Receptor Docking, *J.S.Dixon, R.Desjarlais, I.D.Kuntz, R.Sheridan*

関連発表 DIVISION OF PHYSICAL CHEMISTRY

Symposium on Chemistry on Minisupercomputers and Supercomputers cosponsored with Division of Computers in Chemistry

1. Molecular Dynamics of Diffusion in Fluids of Rod-Like Particles, *H.T.Davis, J.J.Magda, M.V.Tirrell*
2. Molecular Dynamics with Nonadditive Interactions, *F.Stillinger*
3. Supercomputer Simulations of Heterogeneous Kinetics: Low-Dimensional Bimolecular Reactions, *R.Kopelman, L.W.Anacker*
4. Simulations of Chemical Dynamics in Condensed Media, *D.Chandler*
5. Materials-by-Design, *R.Eades, R.W.Broach, J.J.Low, T.L.Barr, J.W.Frazer, H.J.Robota*
6. Molecular Dynamics of Chemical Reactions in Solution, *K.R.Wilson*
7. Simulation of Chemical Reaction Dynamics in Liquids, *B.J.Berne*

関連発表 DIVISION OF INDUSTRIAL AND ENGINEERING CHEMISTRY

Symposium on Robotics in the Industrial Laboratory cosponsored with Division of Computers in Chemistry

1. Present and Future Promise of Laboratory Robotics, *G.D.Owens, R.J.Eckstein*
2. Why Implement Robotics--A Manager's Perspective, *F.E.Gainer*
3. Laboratory Robotics, Making Them Work: Or the Crate is Here, Now What Do I Do?, *J.B.Cross*
4. Reality of Robot Applications in Environmental and Industrial Laboratories, *M.Markelov, M.F.Antloga, B.R.Seitz, J.L.Buteyn*

国際会議一覽

会議名、開催日時、場所、主催者または連絡者住所の順に掲載

Expert Systems and the Leading Edge in Production Planning and Control
 10-13 May, 1987
 Onmi Hotel at Charleston Place, Charlestone, South Carolina
 Ms. Libby Shropshier, Conference Manager
 Institute of Information Management
 College of Business Administration
 University of South Carolina
 Columbia, SC 29208, U.S.A.

Expert Systems and their Applications
 13-15 May, 1987: Avignon, France
 Jean-Claude Rault
 Agence de l'Informatique
 Tour Flat Cedex 16
 92084 Paris-La Defense, France

First Pacific Conference New Information Technology
 For Library & Information Professionals
 16-18 June 1987: Hyatt Central Park, Bangkok
 Dr. Ching-chih Chen
 c/o Pacific Conference on New Information Technology
 1400 Commonwealth Avenue
 West Newton, MA 02165, U.S.A.

IEEE First Annual International Conference on Neural Networks
 21-24 June 1987: San Diego, California
 Nomi Feldman, Conference Coordinator
 3770 Tansy Street
 San Diego, CA 92121, U.S.A.

8th National Educational Computing Conference (NECC'87)
 24-26 June, 1987: Philadelphia, Pennsylvania
 Laurie Schteir
 Department of Computer and Info. Sciences
 Computer Activities Building
 Temple University
 Philadelphia, PA 19122, U.S.A.

Second International Conference on Applications of Artificial
Intelligence in Engineering

4-7 August 1987: Boston Massachusetts

Dr. R. Adey

Computational Mechanics, Inc.,
Suite 6200, 400 West Cummings Park,
Woburn, MA 01801, U.S.A.

1987 IEEE Region 10 Conference "Computers and Communication"

26-28 Aug. 1987: Sheraton Walker Hill Hotel Seoul, Korea

Prof. C. K. Un

Department of Electrical Engineering
Korea Advanced Institute of Science & Technology
P.O. Box 150 Chongyangni, Seoul 131, Korea

Thirteenth International Conference on Very Large Data Bases

1-4 September 1987: Brighton, England

Miss Christine Edginton, Conference Manager

The British Computer Society

13 Mansfield Street, London W1M 0BP

Fifth International Symposium "Data Analysis and Informatics"

29 Sept.-2 Oct. 1987 Versailles.

Service des Relations Exterieures

Bureau des Colloques

Domaine de Voluceau-B.P. 105

78153 Le Chesnay, Cedex-France

1987 PITTSBURGH CONFERENCE & EXPOSITION ON ANALYTICAL CHEMISTRY

& APPLIED SPECTROSCOPY

ATLANTIC CITY, N.J.

MARCH 9-12, 1987

COMPUTER-AIDED MICROSCOPY AND ANALYSIS

Microbean Analysis: Historical Development of Compositional Mapping
Techniques, *D.E. Newbury*

Quantitative Compositional Mapping by Electron Probe Microanalysis
with Digital Imaging, *R.L. Myklebust*

Compositional Mapping in Secondary Ion Mass Spectroscopy with
Direct Digitization Using the Resistive Anode Encoder, *D.A. Reed*

New Electron Microscopy: Imaging the Chemistry of Nature, *C.E.
Flori*

Nanometer Ion Imaging, *M.T. Bernius, Y.C. Ling, G.H. Morrison*

Advanced Image Processing Techniques for Computer-Aided Microscopy,
D.B. right

CHEMOMETRICS IN THE COMPUTER-INTEGRATED LABORATORY

Self-Optimizing Instruments and Data Compression, *R.E.Dessy, J. Currie, F.Ishihara*

Automated Method Selection, *D.L.Massart*

A Chemometric Tool for Computer-Aided Decision Making in Analytical Laboratory Management, *B.Vandeginste*

Chemical measurement and Data Reduction from a Systems Analysis Prespective, *S.D.Brown*

文献紹介

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

1986年 第4卷2号(6月) 論文題目、著者、頁

Dynamics of orientationally disordered crystals, *M T Dove, D. Fincham and R E Hubbard*, p.79

Interactive program for visualization and modelling of proteins, nucleic acids and small molecules, *H E Dayringer, A. Tramontano, S R Sprang and R J Fletterick*, p.82

On the graphical display of molecular electrostatic force-fields and gradients of the electron density, *G D Purvis and C Culberson*, p.88

Plotter protein surfaces, *M L Connolly*, p.93

Interactive map projection algorithm for illustrating protein surfaces, *D J Barlow and J M Thornton*, p.97

Display algorithm for space-filling molecular models using a video array processor, *P Schultze and K Wüthrich*, p.108

Computational conformational analysis of cyclohexaglylcyl, *D N J White and D H Kitson*, p.112

Theoretical analysis of membrane molecular organization, *R Brasseur*, p.117

Algorithm for ribbon models of proteins, *M Carson and C E Bugg*, p.121

The Cambridge Structural Database in molecular graphics: techniques for the rapid identification of conformational minima, *R Taylor*, p.123

1986年 第4卷3号(9月) 論文題目、著者、頁

Comprehensive molecular modelling system, *D N J White and J E Pearson*, p.134

Holographic superposition of molecular models, *U R Joss and H Spahní*, p.143

Computer graphics applications of electron deformation densities and electrostatic potentials in coordination chemistry, *J Weber and M Roch*, p.145

Polyhedral approximation approach to molecular orbital graphics, *A Koide, A Doi and K Kajioka*, p.149

Multiangular method for analysing molecular geometry from nuclear Overhauser effect results, *H Nakamura and S Yokoyama*, p.161

In-house chemical database at Imperial Chemical Industries, *G W Adamson, J M Bird, G Palmer and W A Warr*, p.165

Current trends in computing: hardware, software and nuclear magnetic resonance research, *G C Levy*, p.170

Abstracts from the joint meeting of the Group Graphique Moleculaire and the Molecular Graphics Society, Part I, p.178

1986年 第4卷4号(12月) 論文題目、著者、頁

Assigning the 625cm^{-1} and other high frequency Raman bands of the Z₁ form of DNA using a normal modes analysis and computer graphics, *G Vergoten, P Lagant, N L Peticcoals, Y Moschetto, I Moritz, M C Vaney and J P Mornon*, p.187

Easy projection of stereo movies, *N Bartlett, G A Erikson, D H J Mackay and K R Wilson*, p.190

Interactive flexible molecular fitting program to be integrated into computer-aided molecular modelling systems, *J Lejeune, A G Michel and D P Vercauteren*, p.194

Substrate steering by electrostatic fields of enzymes: Visualization by computer graphics, *G Ganti and J A McCammon*, p.200

Visualization energetics and conformations from molecular computer simulations, *P K Weiner, S L Gallion, E Westhof and R M Levy*, p.203

Intermolecular enzyme-ligand animation in the active site of porcine pancreatic elastase with acetyl-alanine-proline-alanine by means of molecular dynamics calculation, *T Fujita, S M Swanson and E F Mayer, Jr*, p.208

Program for the visualization and interactive study of molecules on a calligraphic display system, *B Chevrier and R Ripp*, p.217

Protein secondary structural representations using real-time interactive computer graphics, *J M B urridge and S J P Todd*, p.220

Abstracts from the joint meeting of the Group Graphique Moleculaire and the Molecular Graphics Society, Part II, p.223

Bibliography of theoretical calculations in molecular pharmacology, *G J Smith, C F Macrae and P M King*, p.238

- Towards the Convergence of Molecular-Mechanical Force Fields
A. Y. Meyer and F. R. F. Meyer , p. 1
- Energy Component Analysis Calculations on Neutral Atom ... Base Interactions
U. C. Singh and P. Kollman , p. 5
- Studies of a Proposed Mechanism for the Reaction Between 2H-Pyran-2-Ones and Organomagnesium Compounds
J. Dreux, P. Lhoste, M. Moreau, and J. Royer , p. 9
- Polyatomic, Anharmonic, Vibrational-Rotational Analysis. Application to Accurate *Ab Initio* Results for Formaldehyde
L. B. Harding and W. C. Ermler , p. 13
- Simple Method of Computing the Partition Coefficient
G. Klopman, K. Namboodiri, and M. Schochet , p. 28
- Ab Initio* Calculations of Intermolecular Potentials. The Ground State of the Ar-H₂ van der Waals Molecule
F. J. Olivares del Valle, S. Tolosa, A. L. Piñeiro, and A. Requena , p. 39
- Ab Initio* Calculation of Amine Out-of-Plane Angles
J. E. Boggs and Z. Niu , p. 46
- The α^{HF} and α^{HF} Parameters for Spin Polarized Hartree-Fock-Slater Calculations
W. Lees, S. Manoli, and M. A. Whitehead , p. 56
- Ab Initio* Studies of Structural Features Not Easily Amenable to Experiment. 42. Molecular Geometries and Conformational Analysis of Methylbutanoate
L. Schafer, V. J. Klimkowski, C. Van Alsenoy, J. D. Ewbank, and J. N. Scarsdale , p. 61
- Ab Initio* SCF MO Calculations on the Reactions of Hydroxyl Radical with Imidazole and Monoprotonated Imidazole
B. G. Eatock, W. L. Waltz, and P. G. Mezey , p. 68

- Theoretical Study of the Gas-Phase Reaction of Hydrogen Isocyanate with Water
I. Lee, B.-S. Lee, and J. Y. Choi , p. 79
- On the Use of Perturbation Theory Corrections to Numerically Selected MRDCI Calculations
P. J. A. Ruttink and M. M. M. van Schaik , p. 88
- Potential Functions for Alkali Halide Molecules
B. Thimme Gowda, B. S. Sherigara, and S. W. Benson , p. 93

- A Generalized Formalism of the Quantum Theory of Valence and Bonding
M. A. Natielo, H. F. Reale, and J. A. Medrano , p. 108
- Theoretical Study of the Relative Stabilities of $H^+(X)_2$ and $H^+(X)$,
 Conformers and Their Clustering Energies: $X=CO$ and N_2
S. Ikuta , p. 116
- Computer Generation of Matching Polynomials of Chemical Graphs and
 Lattices
R. Ramaraj and K. Balasubramanian , p. 122
- Localized Molecular Orbital Studies of Transition Metal Complexes. II:
 Simple α -Accepting Ligands
C. M. Kirkpatrick and D. S. Marynick , p. 142
- The Molecular Mechanics of Valinomycin. II: Comparative Studies of
 Alkali Ion Binding
R. A. Masut and J. N. Kushick , p. 148

Volume 6 Number 3 June 1985

- Atom Equivalents for Relating *Ab Initio* Energies to Enthalpies of
 Formation
M. R. Ibrahim and P. von Ragué Schleyer , p. 157
- Effects of Alkylation upon the Proton Affinities of Nitrogen and Oxygen
 Bases
P. Redfern and S. Scheiner , p. 168
- Charge Calculations in Molecular Mechanics. III: Amino Acids and
 Peptides
R. J. Abraham and B. Hudson , p. 173
- An Investigation of NO_3 as a Possible Intermediate in the Oxidation of
 Nitric Oxide
P. E. M. Siegbahn , p. 182
- Ab Initio* Investigation of the Potential Energy Surfaces of $C_2H_2F_2$
 and $C_2H_2F_2^+$
G. Frenking, W. Koch, and M. Schaale , p. 189
- Implementation of an Electronic Structure Program System on the
 Cyber 205
*R. Ahlrichs, H.-J. Böhm, C. Ehrhardt, P. Scharf, H. Schiffer,
 H. Lischka, and M. Schindler* , p. 200
- Pictorial Representation of Three-Dimensional Electron Distributions
 through a Perspective View of Contour Diagrams in a Set of Parallel
 Planes
*M. M. Gilbert, J. J. Donn, M. Peirce, K. R. Sundberg,
 and K. Ruedenberg* , p. 209
- Cluster Analysis of Periodic Distributions; Application to Conformational
 Analysis
L. Nørskov-Lauritsen and H. B. Burgi , p. 216
- Operational Method of Data Treatment
G. L. Silver , p. 229
- A Systematic Preparation of New Contracted Gaussian-Type Orbitals. IX
 [54/5], [64/5], [64/6], [74/6], [74/7], and MAXI-1—MAXI-5 from Li to Ne
H. Tatewaki , p. 237

- Stereodynamics of Triethylamine: Molecular Mechanics Calculations on the Direct Rotational Racemization of the C_3 -Symmetric Conformers
S. H. Fleischman, E. E. Weltin, and C. H. Bushweller , p. 249
- Microscopic Effect of an Applied Voltage on the Solvated Gramicidin A Transmembrane Channel in the Presence of Na^+ and K^+ Cations
K. S. Kim , p. 256

Volume 6 Number 4 August 1985

- Optimized Monopole Expansions for the Representation of the Electrostatic Properties of Polypeptides and Proteins
K. Zakrzewska and A. Pullman , p. 265
- A Theoretical Study of α -Substituted Cyclopropyl and Isopropyl Radicals
M. H. Lien and A. C. Hopkinson , p. 274
- Orbital Relaxation in the Rydberg Series of the He Atom
T. C. Chang, C. H. Pao, and C.-S. Hsue , p. 282
- Relativistic Effective Potential SCF Calculations of AgH and AuH
M. Krauss, W. J. Stevens, and Harold Basch , p. 287
- Basis Set and Correlation Effects on Computed Proton Affinities of Some Oxygen and Nitrogen Bases
Janet E. Del Bene , p. 296
- Molecular Mechanics Calculations on Cyclopentenyl Compounds, Products Obtained by Olefin Metathesis of Norbornadiene Derivatives
Cristof Graimann, Helmut Hönig, Klaus Hummel, and Franz Stelzer , p. 302
- Comparison Between 6-31 + Bond Functions and 6-31G* Basis Sets in UMP Calculations of Dissociation Energies of the First Row Element Compounds. I.
P. Mach and O. Kysel , p. 312
- Computer Program for Finding All Possible Cycles in Graphs
Alexandru T. Balaban, Petru Filip, and Teodor-Silviu Balaban p. 316
- Pseudopotential Calculations on Si_2H_6 and Si_2H_4
Alexander F. Sax , p. 469
- A Note on Torsional Force Constants in Molecular Mechanics for a Methyl Group Attached to a Conjugated System
Tommy Liljefors and Norman L. Allinger , p. 478
- Solvent-Effect Investigations through the Use of an Extended Born Equation
Joel I. Gersten and Anne Marie Sapse , p. 481
- Theoretical Studies on the Hydrogen Atom Transfer Reaction
Bon-Su Lee, Ikchoon Lee, Chang Hyun Song, and Jae Young Choi p. 486
- Causality in Structure-Activity Studies
Gilles Klopman and Alexander N. Kalos , p. 492

- The Effect of Electronegative Atoms on the Structures of Hydrocarbons.
Ab Initio Calculations on Molecules Containing Fluorine or (Carbonyl) Oxygen
Norman Allinger, Lothar Schäfer, K. Siam, V. J. Klimkowski, and C. Van Alsenoy , p. 331
- General Expressions for Monocenter Repulsion Integrals in a Basis of Real Atomic Orbitals
J. P. François, R. Voets, and L. C. Van Poucke , p. 343
- Geometrically Feasible Binding Modes of a Flexible Ligand Molecule at the Receptor Site
A. K. Ghose and G. M. Crippen , p. 350
- Highly Accurate Vibration-Rotation Franck-Condon Factors for High Levels
Mounzer Dagher and Hafez Kobeissi , p. 360
- Ab Initio* STO-3G Optimization of Planar, Perpendicular, and Twisted Molecular Structures of Biphenyl
Gunter Hafelinger and Claus Regelman , p. 368
- Theoretical Studies on Pteridines. 2. Geometries, Tautomer, Ionization, and Reduction Energies of Substrates and Inhibitors of Dihydrofolate Reductase
Jill E. Gready , p. 377
- Conformational Properties of Permethylcyclonexane as Compared to Cyclohexane: A Force Field Study
Otto Ermer, Petko M. Ivanov, and Eiji Osawa , p. 401
- An Efficient UMP2 Program
P. Čársky, J. Fabian, B. A. Hess, Jr., and L. J. Schaad , p. 429
- Computer Graphics in Real-time Docking with Energy Calculation and Minimization
N. Pattabiraman, M. Levitt, T. E. Ferrin, and R. Langridge
- An MNDO Treatment of Sigma Values
Richard D. Gilliom, Jean-Paul Beck, and William P. Purcell , p. 437
- Study of A Medium-Size Biological Molecular Association by Means of a Pair Potential Semiempirical Approach: β -Carboline-Lumimflavin
J. Sánchez-Marin, E. Ortí, and F. Tomás , p. 441
- Computer Generation of King and Color Polynomials of Graphs and Lattices and their Applications to Statistical Mechanics
K. Balasubramanian and R. Ramaraj , p. 447
- Computational Aspects of Laplace Transform Inversion of Thermal Unimolecular Rate Constant
Christian Schoenenberger and Wendell Forst , p. 455
- Usefulness of Modified Virtual Orbitals in Multireference CI Procedure Illustrated by Calculations on Lithium Clusters
P. Fantucci, V. Bonatić-Koutecký, and J. Koutecký , p. 462

- Comparative Studies on the Reactivity of Molecules by Atomic Variances
Karl Jug and Sabine Buss , p. 507
- Computation of Reequilibrium Data in Solids
François Morin , p. 514
- Compact Basis Sets for LCAO-LSD Calculations. Part Method and Bases for Sc to Zn
J. Andzelm, E. Radzio, and D. R. Salahub , p. 520
- Compact Basis Sets for LCAO-LSD Calculations. Part II: Tests for Cr₂ and Ni₄
E. Radzio, J. Andzelm, and D. R. Salahub , p. 533
- Unique Description of Chemical Structures Based on Hierarchically Ordered Extended Connectivities (HOC Procedures). I. Algorithms for Finding Graph Orbits and Canonical Numbering of Atoms
Alexandru T. Balaban, Ovanes Mekenyan, and Danail Bonchev , p. 538
- Unique Description of Chemical Structures Based on Hierarchically Ordered Extended Connectivities (HOC Procedures). II. Mathematical Proofs for the HOC Algorithm
Ovanes Mekenyan, Danail Bonchev, and Alexandru T. Balaban , p. 552
- Unique Description of Chemical Structures Based on Hierarchically Ordered Extended Connectivities (HOC Procedures). III. Topological, Chemical, and Stereochemical Coding of Molecular Structures
Alexandru T. Balaban, Ovanes Menkenyan, and Danail Bonchev , p. 562
- Molecular Structures and Intramolecular Interactions in Dimethyl Cyclohexane Isomers
V. J. Klimkowski, J. P. Manning, and Lothar Schäfer , p. 570
- Computational Schemes for Modeling Proton Transfer in Biological Systems: Calculations on the Hydrogen Bonded Complex [CH₃OH·H·NH₃]⁺
S. Topiol, G. Mercier, R. Osman, and H. Weinstein , p. 581
- Unique Description of Chemical Structures Based on Hierarchically Ordered Extended Connectivities (HOC Procedures). VIII. General Principles for Computer Implementation
Nikolai Ralev, Stoyan Karabunarliev, Ovanes Menkenyan, Danail Bonchev, and Alexandru T. Balaban , p. 587
- The Effect of Including Polarization Functions on the Geometrical Parameters Calculated for Benzene, Fluorobenzene, and Cyanobenzene
Charles W. Bock, Mendel Trachtman, and Philip George , p. 592
- Determination of the Wiener Molecular Branching Index for the General Tree
E. R. Canfield, R. W. Robinson, and D. H. Rouvray , p. 593
- ISHTAR: An Interactive System for Quantitative Investigation on Dipolar and Quadrupolar Spin-Lattice Relaxation
A. Allouche and G. Pouzard , p. 610

- Theoretically Derived Absorption and MCD Spectral Data for the Cellular Species Produced in the Hydrolysis of Cis-diamminedichloroplatinum(II)
Mary-Beth Krough-Jespersen , p. 614
- Conformational Analysis of Some Dimethylheptanes with the Aid of Normal Coordinate Calculations
G. A. Crowder and Lorelei Lynch , p. 625
- A Parallel Molecular Dynamics Strategy
H. L. Nguyen, H. Khanmohammadbaigi, and E. Clementi , p. 634
- The Through-Space Transmission of ^{31}P - ^{31}P Coupling Constants
A. C. Diz, R. H. Contreras, M. A. Natiello, and H. O. Gavarini , p. 647
- Systematic Errors in the Total Energy of Molecular Wave Functions Calculated Within the PRDDO Approximations
Linda Throckmorton and Dennis S. Marynick , p. 652
- Characteristic Polynomials of Organic Polymers and Periodic Structures
K. Balasubramanian , p. 656
- Structural Features of Benzylic Carbanions: A Theoretical Study
K. B. Lipkowitz, C. Uhegbu, A. M. Taylor, and R. Vance , p. 662

Volume 7 Number 1 February 1986

- The Effects of Vinylic and Allylic Fluorine Substitution in *Iso*-Butylene
James P. Ritchie , p. 1
- Interaction Energy Studies of Pyrrolopyrimidine Nucleoside Antibiotics: Toyocamycin
Nitish K. Sanyal, Rajendra Prasad Ojha, and M. Roychoudhury , p. 13
- Interaction Energy Studies of Pyrrolopyrimidine Nucleoside Antibiotics: Tubercidin
Nitish K. Sanyal, Rajendra Prasad Ojha, and M. Roychoudhury , p. 20
- Interaction Energy Studies of Pyrrolopyrimidine Nucleoside Antibiotics: Sangivamycin
Nitish K. Sanyal, Rajendra Prasad Ojha, M. Roychoudhury, and S. N. Tiwari , p. 30
- Symmetry Properties of Chemical Graphs. IX. The Valance Tautomerism in the P_7^{3-} Skeleton
Milan Randić, David O. Oakland, and Douglas J. Klein , p. 35
- Molecular Associations: Values of the Expansion Parameters for New Classes of Atoms
J. A. Sordo and S. Fraga , p. 55
- Vectorizing a General Purpose Molecular Dynamics Simulation Program
Olle Teleman and Bo Jönsson , p. 58
- Spatial Geometric Arrangements of Disulfide-Crossedlinked Loops in Proteins
Takeshi Kikuchi, George Némethy, and Harold A. Scheraga , p. 67

- MINDO/3 and MNDO Calculations of Closed- and Open-Shell Cations Containing C, H, N, and O
Herman Halim, Niklaus Heinrich, Wolfram Koch, Jochen Schmidt, and Gernot Frenking , p.93
- A Force-Field Study of the Conformational Characteristics of the Iduronate Ring
Massimo Ragazzi, Dino R. Ferro, and Augusto Provasoli , p.105
- A Fast Algorithm for the Interactive Docking Maneuver with Flexible Macromolecules and Probes
H. R. Karfunkel , p.113
- A Method for the Machine Detection of Near Equivalence of Major Substructures in a Molecule
Malcolm Bersohn, Shizuo Fujiwara, and Yuzuru Fujiwara , p.129
- An Improved Set of MNDO Parameters for Sulfur
Michael J. S. Dewar and Charles H. Reynolds , p.140
- Molecular Mechanics and Molecular Shape. III. Surface Area and Cross-Sectional Areas of Organic Molecules
A. Y. Meyer , p.144
- The Effect of Including Polarization Functions on the Geometrical Parameters Calculated for Pyridine
Charles W. Bock, Mendel Trachtman, and Philip George , p.153
- The Computed Force Constants and Vibrational Spectra of Toluene
Yaoming Xie and James E. Boggs , p.158
- Spatially Constrained Minimization of Macromolecules
Robert E. Bruccoleri and Martin Karplus , p.165
- Comparison of Sequences as a Method for Evaluation of Molecular Similarity
B. Jerman-Blažič, I. Fabič, and M. Randić , p.176
- Conformational Study of the Trinucleotide CpGpCp-Pentapeptide Gly₅ Complex: Important Role of Bridging Water in the Complex Formation
Chang No Yoon and Mu Shik Jhon , p.189
- A Minimal Multiconfigurational Technique
J. Fernández Rico, M. Paniagua, J. M. García De La Vega, J. I. Fernández-Alonso, and P. Fantucci , p.201
- Matrix Elements for Anharmonic Potentials: Application to I₂ Morse Oscillator
G. Delgado-Barrio, A. M. Cortina, A. Varadé, P. Mareca, P. Villarreal, and S. Miret-Artés p.208
- Reference Energies in Semiempirical Parametizations
Martin G. Hicks and Walter Thiel , p.213
- Vectorization of a Classical Trajectory Code on a Floating Point Systems, Inc. Model 164 Attached Processor
Wayne A. Krause and Albert F. Wagner , p.219
- An All Atom Force Field for Simulations of Proteins and Nucleic Acids
Scott J. Weiner, Peter J. Kollman, Dzung T. Nguyen, and David A. Case , p.230

Dedication

Paul von R. Schleyer , p. 257

Basis Set and Correlation Effects on Computed Lithium Ion Affinities of Some Oxygen and Nitrogen Bases

Janet E. Del Bene , p. 259

Gas-Phase Nitrosation of Benzene: Theoretical Investigations

Krishnan Raghavachari, W. D. Reents, Jr., and R. C. Haddon , p. 265

An Unconventional SCF Method for Calculations on Large Molecules

Dieter Cremer and Jürgen Gauss , p. 274

Reactions Involving CO₂, H₂O, and NH₃: The Formation of (i) Carbamic Acid, (ii) Urea, and (iii) Carbonic Acid

A. D. Buckingham, N. C. Handy, J. E. Rice, K. Somasundram, and C. Dijkgraaf , p. 283

Theoretical Studies of O₂⁻: (H₂O)_n Clusters

Larry A. Curtiss, Carlos A. Melendres, Alan E. Reed, and Frank Weinhold , p. 294

Ab Initio Studies of H₂PXYH Molecules (X, Y = O, S)

Jerry A. Boatz and Mark S. Gordon , p. 306

Ab Initio Determination of the Proton Affinities of Small Neutral and Anionic Molecules

D. J. DeFrees and A. D. McLean , p. 321

The Remarkably Invariant Solvation Energies of Lithium First-Row Compounds with Water and with Ammonia

Elmar Kaufmann, Bruce Tidor, and Paul von Ragué Schleyer , p. 334

Conformational Stability and Flexibility of the Ala Peptide in Free Space and Water: Monte Carlo Computer Simulation Studies

G. Ravishankar, M. Mezei, and D. L. Beveridge , p. 345

The Evaluation of Molecular Electron Affinities

Jon Baker, Ross H. Nobes, and Leo Radom , p. 349

Molecular Orbital Theory of the Properties of Inorganic and

Organometallic Compounds. 4. Extended Basis Sets for Third- and Fourth-Row, Main Group Elements

K. D. Dobbs and W. J. Hehre , p. 359

An Algorithm for the Location of Transition States

Jon Baker , p. 385

Energy-Optimized GTO Basis Sets for LCAO Calculations. A Gradient Approach

Knut Faegri, Jr. and Jan Almlöf , p. 396

Theoretical Investigations on Fluorine-Substituted Ethylene Dications

$C_2H_nF_{4-n}^{2+}$ ($n = 0 - 4$)
Gernot Frenking, Wolfram Koch, and Helmut Schwarz , p. 406

MINDO/3 Study of the Rearrangement of 1-Methylcyclohexyl Cation to 1,2-Dimethylcyclopentyl Cation

P. M. Viruela-Martín, I. Nebot-Gil, F. Tomás, and R. Viruela-Martín , p. 417

- Substituent Effects on the Low-Lying Singlet and Triplet States of Methylene
Jaume Farràs, Santiago Olivella, Albert Solé, and Juame Vilarrasa , p. 428
- Transfer-Matrix Method for Subgraph Enumeration: Applications to Polypyrene Fusènes
D. J. Klein, G. E. Hite, and T. G. Schmalz , p. 443
- Transport Properties of Macromolecules by Brownian Dynamics Simulation: Vectorization of Brownian Dynamics on the Cyber-205
Girija Ganti and J. Andrew McCammon , p. 457
- An SCF and CI Study of the 1,3 shift in the $HX-CH=Y=X-CH-YH$ Isoelectric Series: $X, Y=CH_2, NH$, and O
Raymond A. Poirier, Dariush Majlessi, and Theresa J. Zielinski , p. 464
- On the Use of Constraints in Molecular Mechanics. Rigid Group Refinement
Jan L. M. Dillen , p. 476
- Conformational Dynamics of 9,9-Dimethyl-1,5-Dihetero-Spiro [5,5] Undecanes by Molecular Mechanics Calculations: a Three-Dimensional Topological Approach
P. Iratçabal and D. Liotard , p. 482
- An Efficient Method for Using Molecular Symmetry. In Advance of Zero Integrals
C. Kozumutza and Zs. Ozoróczy , p. 494
- Optimization of the Generalized Valence Bond Method for Vector Processors
Raymond A. Bair , p. 500
- Conformational Properties of 3-Phenylpiperidine and 3-Phenylpyrrolidine Opioid Analgesics
Mark Froimowitz , p. 513
- Atomic Charges in the Quadrupole Solvation Energy Calculations
Ljiljana Dösen-Mićović , p. 523
- A Comparison of the Rotational Potential Functions in Butane, Propylsilane, Ethylmethylsilane, and 1,2-Disilylthane: *Ab Initio* and MM2 results
Salvatore Profeta, Jr., Raymond J. Unwalla, Binh T. Nguyen, and Frank K. Cartledge , p. 528
- A Strategy for the Regional Characterization of Potential Energy Surfaces
You-Hsing Yeh and William H. Fink , p. 539
- On the Enumeration of 2-Factors of Polyhexes
J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski, and N. Trinajstić , p. 547
- Atomic Physicochemical Parameters for Three-Dimensional Structure-Directed Quantitative Structure-Activity Relationships. I. Partition Coefficients as a Measure of Hydrophobicity
Arup K. Ghose and Gordon M. Crippen , p. 565
- A New Method for Molecular Mechanics
Martin Saunders and Ronald M. Jarret , p. 578

- Empirical Energy Functions for Energy Minimization and Dynamics of Nucleic Acids
Lennart Nilsson and Martin Karplus , p. 591
- Rapid Location of the Preferred Interaction Sites between Small Polar Molecules and Macromolecules. I. Binding of Water to the Component Units of Nucleic Acids
Marçal de Oliveira de Neto , p. 617
- Rapid Location of the Preferred Interaction Sites between Small Polar Molecules and Macromolecules. II. Binding of Water to a Model Segment of B-DNA
Marçal de Oliveira Neto , p. 629
- The Computer System GRAPH: A Useful Tool in Chemistry Graph Theory
Dragoš Cvetković and Ivan Gutman , p. 640
- The Treatment of Rotational Motion in Molecular Dynamics
Roland Sonnenschein, Aatto Laaksonen, and Enrico Clementi , p. 645
- Offcenter Molecular Charge Distribution Corrections to Born Equation Electrostatic Solvation Energies
S. Ehrenson , p. 648
- Computer Simulation of Metabolic Transformation
John F. Tinker and Herbert Gelernter , p. 657
- The Remarkable Structure of Lithium Cyanide/Isocyanide
Paul von Rague Schleyer, Andrzej Sawaryn, Alan E. Reed, and Pavel Hobza , p. 666
- Optimized Structures and Relative Stabilities of the Carboranes from *Ab Initio* Calculations
Jane J. Ott and Benjamin M. Gimarc . p. 673
- Nonempirical Atom-Atom Potentials for Main Components of Intermolecular Interaction Energy
W. A. Sokalski, A. H. Lowry, S. Roszak, V. Lewchenko, J. Blaisdell, P. C. Hariharan, and Joyce J. Kaufman , p. 693

- An Empirical Potential Function for Metal Centers: Application to Molecular Mechanics Calculations on Metalloproteins
Angelo Vedani, Max Dobler, and Jack D. Dunitz , p. 701
- Conformational Analysis of the Sixteen C(4)-C(6) and C(4)-C(8) Linked Dimers of (+)-Catechin and (-)-Epicatechin
V. N. Viswanadhan and Wayne L. Mattice , p. 711
- A Combined *Ab Initio* Quantum Mechanical and Molecular Mechanical Method for Carrying out Simulations on Complex Molecular Systems: Applications to the $\text{CH}_3\text{Cl} + \text{Cl}^-$ Exchange Reaction and Gas Phase Protonation of Polyethers
U. Chandra Singh and Peter A. Kollman , p. 718
- On Calculations of Intermolecular Potentials
K. Bhanuprakash, G. V. Kulkarni, and Asish K. Chandra , p. 731

Improving the Flexible Molecular Fitting Technique Using Distance Matrices

J. Lejeune, A. Michel, and V. P. Vercauteren , p.739

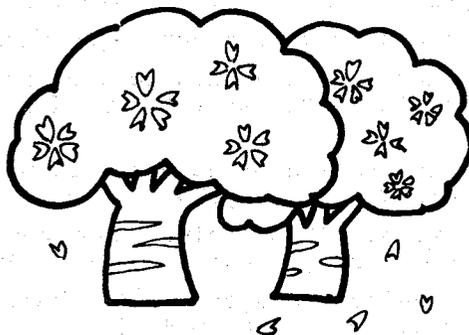
Structural Features of Organic Anions: 7-Norbornadienyllithium

Kenny Lipkowitz and Anthony Burkett , p.745

Calculations of First- and Second-Order Nonlinear Molecular

Hyperpolarizabilities by Perturbation Methods: I. An Efficient Method for
Evaluating Time-Independent Hyperpolarizabilities

J. G. Fripiat, C. Barbier, V. P. Bodart, and J. M. André , p.756



COMPUTERS AND CHEMISTRY

1986年 第10卷4号 論文題目、著者、頁

Derivation and implementation of an Efficient Fast Fourier Transform algorithm (EFFT), *R. Skarjune*, p.241

Density matrix calculations using formal language. I: simulation of NMR pulse sequences, *J.M. Bernassau, F. Boissiere and J.F. Thomas*, p.253

HQR11: an accurate, portable and fast diagonalization routine, *A.V. Bunge and C.F. Bunge*, p.259

VHQR11: an accurate, modular and fast diagonalization routine for vector processors, *M. Berrondo, A.V. Bunge and C.F. Bunge*, p.269

DVDSON: a subroutine to evaluate selected sets of eigenvalues and eigenvectors of large symmetric matrices, *G. Cisneros, M. Berrondo and C.F. Bunge*, p.281

A comparative study of different methods for the analysis of TGA curves, *P.S. Dhar*, p.293

Depth cueing on monochrome raster scan terminals for small molecule modeling, *C.W. von der Lieth, R.E. Carter, D.P. Dolata and T. Liljefors*, p.299

Comment on HQR11: a fast diagonalization sub-routine, *A.K. Wisor*, p.307

Three dimensional description of molecular normal vibrations, *K. Rasmunssen*, p.309

1987年 第11卷1号 論文題目、著者、頁

An algorithm to determine the electrical double-layer parameters for the simultaneous adsorption of two anions at the mercury electrode-solution interface, *R.C. Rocha-Filho*, p.1

Signal averaging computer system for Perkin-Elmer 577 infrared spectrophotometer, *L.S. Cornish, Y.P. Ma, S.C. Chan, T.T. Wong, C.F. Ng, and C.K. Chan*, p.7

MOLTW: a program for conformational studies using potential functions--II. Algorithms for molecular coordinates and topology manipulation, *T. Ryhänen, F.J. Bermejo, J. Santoro and M. Rico*, p.13

MPEC2: a code for multi-phase chemical equilibria, *M. Uchida*, p.19

A Microcomputer-based data acquisition and analysis system. Application to EPR, *M. Carlier, P. Devolder, J.F. Pauwels and L.R. Sochet*, p.25

Computer generation of generalized Wheland polynomials, *K.J. Kopecky and M. Randić*, p.29

Program system SIDYS: simulation and parameter identification of dynamic systems, *J. Benz, J. Polster, R. Bär and G. Gauglitz*, p.41

Automatic deductive systems--I. Chemical reaction models, *P.A.D. de Maine and M.M. de Maine*, p.49

A matrix method for partitioning the atoms of a molecule into equivalence classes, *M. Bersohn*, p.67

Computer-Aided chemistry--II. A spectral database management program for use with microcomputers, *W.R. Browett and M.J. Stillman*, p.73

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

1986年 第5巻3号 発表題目、著者、頁

Determination of LogP_{od} by High-Performance Liquid Chromatography, and Its Application in the Study of Quantitative Structure-Activity Relationships, *H. Terada*, p.81

Distribution Coefficients by Curve Fitting: Application to Ionogenic Nonsteroidal Antiinflammatory Drugs, *F. Barbato, G. Caliendo, M.I. La Rotonda, C. Silipo, G. Toraldo, and A. Vittoria*, p.88

Structure-Molar Refraction Relationships of Alkylsilanes Using Empirically Modified First Order Molecular Connectivity Indices, *E.J. Kupchik*, p.95

Three-Dimensional Quantitative Structure-Activity Relationships. I. General Approach to the Pharmacophore Model Validation, *I. Motoc, R.A. Dammkoehler, D. Mayer, and J. Labanowski*, p.99

最近のニュースから

CHEMNET™

"CHEMNET™" は米国の化学者間の効率的な情報交換を目的とする電子会議・電子メール用のネットワーク・システムであるが、いまやこれが構想の段階から、実現への一步をふみだしたようである。米国化学会のCOMP（計算機化学部会）ニュース1986年12月15日号によれば、シカゴのイリノイ工科大学ライコス教授はDECからPDP-11の供与をうけ、これを最初の親局として、1週7日・1日24時間のサービスを開始したと伝えられる。これで、端末機またはパソコンを用いてこのシステムに接続することが可能となった。この局には12回線の電話が確保されており、(312) 567-6774~83 は 300ボー、(312) 567-6796~7 は 1200 ボー用とのことである。

接続方法は簡単で、交信が開始されると、USERNAME:というプロンプト（入力促進記号）が表示されるので、CHEMIST_USER と入力する。以下は出力される指示に従って交信すればよい。なお、接続条件は、全二重、パリティなし、7ビット、1ストップ・ビットである。国際電話でもよし、そこまでしなくても、近く米国へ行かれる方は試されてみては如何であろうか？（更に、結果を当プレタンに知らせて頂けるとなお有難い）。

CICSJ Bulletin

Published Bimonthly by Division of
 Chemical Information and Computer Sciences
 The Chemical Society of Japan

日本化学会
 情報化学部会

Volume 5, Number 3
 May 1987

目 次

年会報告	1
部会記事	4
関連行事	5
国内の動き	
学術情報センターと学術情報システム	根岸 正光 7
CD-ROM フェア	鈴木 功 12
国際会議	
MATH/CHEM/COMP 1987	14
Eleventh British Combinatorial Conference	14
文献紹介	
Journal of Computational Chemistry (Vol.8, No.1~No.3)	15
Journal of Chemical Education	17
Journal of Molecular Graphics (Vol.5, No.1)	20
Journal of Chemical Information and Computer Sciences	20
Computers & Chemistry (Vol.11, No.2)	21

第54春季年会 報告

3TVA07-3TVA09 最初の講演から多数の出席者があり、討論も活発であった。

A07 学術雑誌の著者付与キーワードの検討、再びChem. Pharm. Bull.について

(電通大) 山崎ら

以前から著者付与キーワードの検討を行なっている演者が、標記の雑誌のそれについて再び調査し、1978, 79年の結果と比較検討した報告である。前回見いだされた20項目の問題点のうち11項目がほぼ改善されたが、これはその後作成されたキーワード付与ガイドの影響と言えらるゝこと。著者付与キーワードを向上させるには地道な努力が必要と思われる。化学会でも年会にキーワード付与を導入する話もあり、興味深い発表であった。

A09 拡張SPIRESの開発(III).オンライン構造検索のための端末プログラムの試作

(豊橋技科大) 奥山ら

端末プログラムは、1)化学構造入力用エディタ、2)ホストコンピュータとのデータ転送部、3)検索結果表示用構造表示部の3つから構成されている。たとえば、端末に入力した構造式から骨格レベル、結合表レベル、BCT など異なったquery を生成してホストに送り、検索して得られた化合物の座標を端末に転送し、端末側で構造表示することができる。この発表に対し、立体構造の絶対配置について質問があり、今後実現する予定との答えがあった。パソコンを用いる分散処理は今後の方向であり、一層の発展が期待される。

(情報大 石塚英弘)

3IVA11では、分子力場計算プログラムMMAの、ニトロ基用のパラメータを、基本的なニトロ化合物の構造、生成熱、双極子モーメントなどの実測値に合うように最小二乗法で求めたという報告がなされた。

3IVA13では、最近Smalley らが報告しているC60クラスターの構造として、サッカーボール状構造以外の可能な構造を、分子グラフ理論的に導出したとの報告があった。

3IVA15では、ある与えられたAl/Si に対して出現可能な置換クラスターの導き方と並進対称要素を付加した場合の三次元置換フレームワーク構築法についての報告がなされた。

3IVA17では、節点照明関数のパラメータ値と不変性質算出方法を選択することによる節点照明関数の最適化についての報告があった。

(北海道大学理学部 田中 勲)

3 I V A 2 5 では、新しい反応設計・予測システムの報告がなされた。CHEM I C S の制約条件付き構造発生機能を多分子系に拡張して、考えられる反応を徹底的に列挙し、その後で原系生成系間の反応中心認識を行なうというユニークな方法を採用している。知識ベースの構成や適用範囲に関して、従来の方法との利害得失が今後明らかになってくると思われるが、新しい方法だけにこれからの成果が楽しみである。

3 I V A 2 7 では、反応設計システム E R O S の反応評価法に対する改良が報告された。これまで独立に用いられてきた反応性指数と反応熱による基準の線形結合をとることにより、フランカルピノールの異性化機構を適切に予測出来ることが判明した。線形結合の係数や反応熱による反応評価の内容をいかに改良するかについて、議論がなされた。

3 I V A 2 9 では、合成経路の予測と検索を目的とする C A S I N O システムの基本構想が発表された。データベースと知識ベースの双方を利用可能にさせようとしている。出発物質の選択を最初に行なうという考え方について議論がなされた。この点をふくめ、システム全体にわたって仕様の詳細化が期待される。

3 I V A 3 1 では、化学反応を各種の観点からジェネリック表現としてコード化し、これをもとに有機合成経路設計の支援を行なうシステムの構想が報告された。スペシフィックな反応のデータベースから自動的に知識ベースが生成でき、また利用時にデータベースへのアクセスもできるため、実用性は基本的に高いと思われる。ジェネリック表現種類の決定を含めて、今後の進展が期待される。

(関西学院大学 岡田 孝)

3 I V A 3 3 液晶分子設計支援システムでの経験的知識の表現法及び思考開始時の要求具体化の試みについて報告があった。ここでの分子構造表現にはリスト記述表現が用いられていたが、液晶化合物という限られた範囲を対象としていることから部分構造単位での取扱が行われているにも関わらず、その単位化の規則及びそれに伴う利点・欠点が必ずしも明確でなかったのが残念である。

3 I V A 3 5 市販の立体ビデオ用液晶偏光眼鏡を利用したパーソナルコンピュータ画面立体視システムの開発について報告があった。x線結晶解析での電子密度図からの構造モデル構築への応用に効果を上げたとの報告に対し、静的画面への適用というパソコンでの限界から、real timeでの三次元回転機能の必要性についてのコメントがあった。

3 I V A 3 7 分子力学計算プログラム AMBER の HITAC M-682 への移植に伴う改良と、同プログラムに基づき、各種オリゴペプチドを例にパパイニン-阻害剤複合系での相互作用成分の比較から、その受容サイトでの分子認識機構が検討された。AMBER の改良に伴う速度改善は約 5.2 倍との報告があった。また、後者については (A l m 2 1 6, C y s 2 5), (A l m 2 1 6, A s p 1 5 8), (P h e 2 1 5, A s p 1 5 8) の強い引力、(A l a 2 1 4, A s p 1 5 8) の反発力及び原子レベルではペプチド結合部での N, O 間の大きな寄与が示唆されるとの報告があった。

3 I V A 3 9 分子構造を三角形要素の集合として取り扱い、適当な許容範囲のもとに分子間の共通パターンを探し出そうとすることを基本としたANALOGSシステムの機能拡張として、同方法によって獲られた結果をもとに分子間の共通座標系を設定し、分子表面上での官能性分布を考慮した形状比較にもとづくレセプターマッピングの方法について報告があった。

(豊橋技科大学 高橋由雅)

3 I V A 41では構造活性相関の研究に用いられるパラメータとして、分子の形状を表現するShape Vectorを定義し、これに基づく分子の形状記述表現と形状類似性の評価法について行われた検討の結果が発表された。形状パラメータとしてはSterimolパラメータがよく用いられているが、演者らのShape Vectorを用いれば、Sterimolパラメータでは区別できないような場合にも区別が可能となり、分子構造の形状記述表現としての有用性が報告された。

3 I V A 43では ^{13}C NMRのデータベースを用いた定性分析の試みとして、高分子化合物の混合物試料の成分同定を検討した結果が報告された。未知試料とデータベース中の標準化合物とのスペクトルの類似性は、ピークの分布パターンの類似度、化学シフトの平均偏差、および両者のピーク本数の比を用いて数値的に表され、実際の試料についても良い結果を与えるようなアルゴリズムが開発された。

(化学技術研究所 田辺和俊)

部 会 記 事

情報化学部会収支報告書

(昭和61年3月1日～昭和62年2月28日)

(収入の部)

(単位：円)

科 目	予 算 額	実 績 額	差 異
部 会 費	700,000	2,333,666	1,633,666
正部会員費	(400,000)	(559,166)	(159,166)
準部会員費	(0)	(14,500)	(14,500)
法人部会員費	(300,000)	(1,760,000)	(1,460,000)
講 習 会 費	200,000	520,500	320,500
討 論 会 分 担 金	1,000,000	0	△ 1,000,000
広 告 掲 載 料	720,000	270,000	△ 450,000
合 計	2,620,000	3,124,166	504,166

(支出の部)

(単位：円)

科 目	予 算 額	実 績 額	差 異
ニュースレター費	1,140,000	1,252,612	△ 112,612
講 習 会 費	200,000	470,568	△ 270,568
討 論 会 分 担 金	1,000,000	100,000	900,000
会 議 費	180,000	167,795	12,205
事 務 費	100,000	224,296	△ 124,296
合 計	2,620,000	2,215,271	404,729

収 支 差 額	0	908,895	908,895
---------	---	---------	---------

関 連 行 事

昭和62年度人工知能学会全国大会（第1回）

昭和62年度人工知能学会全国大会（第1回）はつぎのような内容で開催される。

- (1) 会長記念講演
- (2) 特別講演
- (3) パネルディスカッション
- (4) 一般応募講演
- (5) チュートリアル講演

期 日：昭和62年6月30日（火）9：00～17：00
7月 1日（水）9：00～17：00
7月 2日（木）9：00～17：00

場 所：学習院大学・記念会館

東京都豊島区目白町1-5-1

☎03-986-0221

大会参加費（3日間）：

会 員 8,000円
非会員 12,000円
学生会員 4,000円

* 論文集代を含みます。

チュートリアル参加費（1日分、但し〔 〕内は7月1日分）：

会 員 6,000円〔4,000円〕
非会員 12,000円〔8,000円〕
学生会員 3,000円〔2,000円〕

* テキスト代を含みます。

詳細は下記の「大会専用事務局」まで

東京都港区芝大門2-3-14 一松ビル1号館402 〒105

人工知能学会全国大会事務局

☎03-433-2544

チュートリアルの定員は先着100名（1日につき）です。

論文集：

論文集のみご希望のかた：会 員 8,000円
（大会終了後郵送します）非会員 12,000円

主 催：J S A I人工知能学会

事務局 東京都渋谷区上原 1-32-19-201〒151 ☎03-485-6641

協賛学会：オフィスオートメーション学会、化学工学協会、画像電子学会、計測自動制御学会、C A I学会、情報処理学会、精密工学会、石油学会、テレビジョン学会、電気学会、電子情報通信学会、土木学会、日本医療情報学会、日本ME学会、日本化学会、日本機械学会、日本金属学会、日本経営工学会、日本建築学会、日本自動制御協会、日本ソフトウェア科学会、日本認知科学会、日本ロボット学会。

概 要

◎特別講演

(1) 会長記念講演 6月30日(火) 9:10~10:00 A会場
 「これからの日本の人工知能研究」 福村 晃夫会長(名大教授)

(2) 特別招待者講演 7月 1日(水) 13:00~15:00 A会場
 「これからのA Iとロボティクス」 金出 武雄教授(カーネギーメロン大学)

◎パネルディスカッション 7月 2日(木) 15:10~17:00 A会場
 「人工知能の展望」 司会 野口 正一教授(東北大学)

◎応募による一般講演(合計127講演) 6月30日~7月2日 A~C会場

◎チュートリアル講演(合計8講演) 6月30日~7月2日 D会場

体 概 要

	A 会 場	B 会 場	C 会 場	D 会 場
6月30日 午前	1. 会長記念講演	—————	—————	(チュートリアル専用)
6月30日 午後	2. エキスパートS(1) 6.1~6.6	11. A I 言語 3.1~3.5	—————	T1. 論理と推論
7月1日 午前	3. エキスパートS(2) 6.7~6.11	12. 自然言語処理(1) 7.1~7.5	18. 基礎・理論(1) 1.1~1.5	T2. 知識表現
7月1日 午後	4. エキスパートS(3) 6.12~6.17	13. 自然言語処理(2) 7.6~7.11	19. 基礎・理論(2) 1.6~1.11	T3. A I 言語
7月2日 午前	5. エキスパートS(4) 6.18~6.25	14. 知識表現(1) 2.1~2.9	20. A I アーキテクチャ 4.1~4.9	T4. 画像理解
7月2日 午後	6. 特別招待者講演 7. A I 応用(1) 9.1~9.6	15. 知識表現(2) 2.10~2.15	21. 基礎・理論(3) 1.12~1.17	T5. 自然言語処理
7月3日 午前	8. A I 応用(2) 9.7~9.15	16. パターン理解 8.1~8.9	22. 基礎・理論(4) 1.18~1.26	T6. A I アーキテクチャ
7月3日 午後	9. A I 応用(3) 9.16~9.21	17. 研究開発環境 5.1~5.6	—————	T7. 知的CA I
7月3日 午後	10. パネルディスカッション	—————	—————	T8. 設計エキスパートS

学術情報センターと学術情報システム

根岸正光（学術情報センター）

1. はじめに

「学術情報センター」は昭和61年4月に設立された国立大学共同利用機関である。つまり制度上は、岡崎国立共同研究機構、国立民族学博物館など同種の機関であって、大学研究者全体のための共同利用研究施設という位置づけである。本センターを加えて現在この種の機関が12設置されている。各機関各々の特徴ある活動が展開されていることは周知の通りであるが、学術情報センターは「学術情報システム」なる大掛かりな構想のもとに、特定の専門分野を対象とするのではなく、「学術情報」一般に関わって活動するという点で、他機関と性格的に異なるところ大である。また、学術情報ということからして、研究者のみならず学術情報の蓄積、流通を担当する機関としての大学図書館を、センター利用者の重要部分に位置づけて、図書館向けのサービスも提供するが、これも特色の一つといえよう。

「学術情報システム」なる考え方が公式的に示されたのは、学術審議会の昭和55年1月の文部大臣への答申「今後における学術情報システムの在り方について」においてであって、以後「学術情報システム」は固有名詞として使われるようになった。そこでは同システムについて、当面の関連機関・施設として大学図書館と計算機センターが掲げられ、同時にシステムをシステムたらしめるための中央機構として学術情報センターの設立が提起された。このような各種機関の相互協力体制を確立することによって、研究者全体に対して学術情報が効果的に供給され、いわゆる情報化時代における学術研究のさらなる進展が企図される。具体的な項目としては、(1)図書・雑誌等一次資料の体系的収集、(2)これら資料の所在情報のデータベース化、(3)文献抄録等二次情報のための情報検索サービスの拡大、(4)学術情報のデータベース化の促進、といったことが掲げられている。まず(1)は大学図書館の本来的機能の充実をいみするが、そうして収集された資料もその所在が明確になっていなければ意味がない。そこで(2)において全国総合目録のデータベース構築をめざすことになる。(3)は当時各大学の計算機センターである程度行われるようになっていたオンライン情報検索サービスを、全国的、組織的かつ大規模に展開することを提言したものである。(4)のデータベース化に関しても、研究者間で先導的な試みが行われつつあったが大規模なデータベースの継続的作成維持となると、それなりの担当機関による事業的な取り組みが必要である。このようなことから(2)、(3)、(4)に関して学術情報センターに相応の役割期待がかけられることになる。

現学術情報センターは、昭和51年に東京大学の学内共同利用研究施設として設立された情報図書館学研究センターを母体としている。このセンターでは設立以来、「学術雑誌総合目録」と称して全国大学図書館での雑誌の所蔵状況のデータベース化事業を行っており、現在では洋雑誌9万タイトルの所蔵62万件、和雑誌4万タイトルの所蔵100万件が集積されるに至っている。この雑誌所在データベース事業を図書の方へも拡張すると同時に、大学図書館をオンライン結合して、網羅的な全国総合目録データベースの構築を行うべく、昭和58年に情報図書館学研究センターは改組拡充されて東京大学文献情報センターとなった。ここまですべて上記(2)にあたるわけである。そこで(3)と(4)についても事業的

展開を図り、学術情報システム構想を一通りカバーできるよう、文献情報センターを独立、拡大して、学術情報センターが設置されたのが既述のとおり昭和61年4月のことである。以下、本稿では学術情報センターの現況全般に互って紹介してみることしたい。

2. 学術情報センターの諸事業

学術情報センターの事業全般を図示するとおおよそ図1のようになる。つまり、(1)オンライン共同分担目録システムの開発・運用による全国総合目録データベースの構築、(2)オンライン情報検索システムの運用による情報検索サービス、(3)センターでの学術情報データベース形成事業、(4)学術情報流通効率化の基盤となる大学間データ通信ネットワークの整備、の4項である。(1)が図書館向け、(2)は研究者と図書館参考係向けのサービス、(3)はセンター側でのデータベースづくり、そして(4)が情報流通の基盤整備ということになる。

3. オンライン共同分担目録システム

図書館では従来目録カードを作って図書・雑誌検索の用に供してきた。これの電算化、データベース化は誰しも考えるところであるが、書誌データというのは文章型データであって、その入力の手間やその後の処理を考えると簡単に手が出せるようなものではない。図書館では原則的に1点買い、単品管理だから、データの繰り返し利用といった電算化のメリットが出しにくい。また蔵書はたまる一方だからこれに応じて電算機システムの方も拡張してゆかなければならない。こうしたわけで、図書館では電算化効果の著しい貸出管理、つまり利用者にカードを配り、本にバーコードを貼付けてPOS端末で貸出、返却の処理を行うシステムだけが普及した。結局目録データは各館個別に入力していたのではコスト面での効果が出ず、何らかの共同利用的仕掛が必要である。新刊の書籍については、発行と同時にどこかの機関で目録データも入力しておいてくれればさらに好都合である。各国中央図書館では納本制度によって出版者から納入される図書の目録作業を電算化し、その結果得られる目録データを磁気テープで頒布するようになっており、これをMARC (Machine Readable Catalog) と称する。米国議会図書館のMARCを導入して、大部分の書誌データはこれへのオンライン検索から得 (MARCの共同利用)、これに収録されていない図書についてのみ図書館がオンラインデータ入力を行う。しかも、こうしてある図書館から入力されたデータはただちに他館からも利用可能にする (分担目録)。このような仕組みのオンライン共同分担目録システムは、1971年、米国のOCLC社が始めたもので、今では全米から欧州にも進出して (最近は我国へも)、北米の各図書館を中心に1万端末がこれを接続利用するに至っている。同種の事業体にはカナダのUtlas、米国のRLG、WLNがあり、これらを総称してBibliographic Utility (書誌共用事業体) というようになっている。

学術情報センターによるオンライン共同分担目録は、遅まきながら我国初のBU事業であり、昭和60年4月東京工業大学図書館を接続第1号として稼動に入った。現状では北大、東大、名大、京大、阪大、成蹊大、慶大等32大学が加盟し、参加館は逐次拡大しつつある。この目録システムにより構築されるデータベースは、全国大学図書館での図書・雑誌の所在を集中した「全国総合目録」になり、研究者からの資料探索要求に的確に応じるための有力な情報源となる。もちろん図書館における目録作業自体の効率化も図られる。とはいえ、この種のシステムは一定のデータ集積が実現されるとその後急激に効用性が高まるという性格のもので、その「臨界量」に早期に到達することが肝心である。そのため

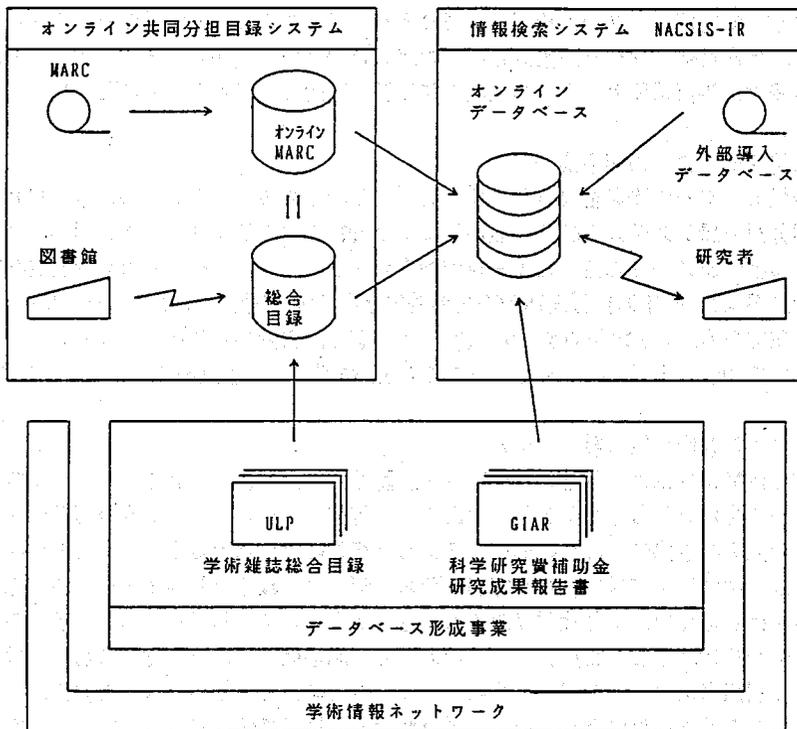


図 1. 学術情報センターの諸事業

データベース		内 容	件数
目録 D B	和雑誌総合目録	学術雑誌総合目録和文編 1986年版	4万誌 100万所蔵
	洋雑誌総合目録	学術雑誌総合目録欧文編 1979, 1980, 1982年版	9万誌 62万所蔵
	Japan MARC	国会図書館全国書誌	6万件/年
	LC MARC(Books) LC MARC(Serials)	米国議会図書館 (図書) 全国書誌 (雑誌)	28万件/年 11万件/年
セ ン タ ー DB	科研費補助金研究成果報告	文部省科学研究費補助金 研究成果報告概要	1.6万件/年
	学位論文索引	博士學位論文索引	2500件/年
導 入 D B	Life Sciences Collection	CSA社 生命科学文献抄録	12万件/年
	MathSci	米国数学会 数学文献抄録	3.5万件/年
	COMPENDEX	Ei社 工学文献抄録	11万件/年
	EI ENGINEERING MEETINGS	Ei社 工学会議録文献抄録	10万件/年
	Harvard Business Review ISTP & B	HBR誌 掲載論文全文 ISI社科学技術会議録・図書目次	120件/年 11万件/年

表 1 学術情報センター・オンライン情報検索システム NACSIS-IR
データベース一覧 (昭和62年4月)

の第一の方策は、全大学図書館の本システムへの接続であることはいうまでもなく、この点を含め種々努力を行っているところである。

4. データベース形成事業

雑誌については先にもふれたとおり、従前から全国大学図書館の参加を得た一斉調査方式により、「学術雑誌総合目録」データベース編集事業を行ってきた。これは、上述のオンライン目録システムのめざすところをバッチ処理形態で先行的に実現してきたものと考えられる。学術雑誌については全国総合目録への需要がことさら強いので、全大学図書館のオンライン・ネットワーク化実現に至る過程でこしほらくはこの事業も継続される。現在は昭和60年10月の洋雑誌一斉調査結果のとりまとめ、編集を行っており、10万タイトル、80万所蔵の規模になる見込みで、63年3月完成予定である。この学術雑誌総合目録事業はセンターにおけるデータベース形成事業としては最大のものであるだけでなく、国際的にも類を見ぬ程の規模になっている。

昭和61年度の学術情報センター発足以降に開始されたデータベース形成事業には、文部省科学研究費補助金による研究成果報告書のデータベース化がある。年間1万6千件程の研究に対して補助が行われており、その公式報告が年度末に提出されるのであるが、これまでこれらは必ずしも研究者間での参照に適した形態で集積されてはいなかった。この際この報告書をオンライン・データベース化して全国研究者からの検索に応じられるようにすれば、研究成果の流通や研究動向の把握など、大きな効果が期待される。昭和61年度は試験的に約3000件の報告を入力し、またこのための日本語対応の処理システム、検索システムを開発して、本年度から公開サービスを開始した。その他学位論文索引データベース、学会研究発表データベース、データベース・ディレクトリーなど数種のデータベースについて、その作成事業を展開しつつあり、欧米に比して立遅れの目だった我が国独自のデータベース形成について積極的取り組みを行っている。

5. オンライン情報検索サービス

我が国における実用的オンライン文献情報検索システムは、昭和49年に東大大型計算機センターにおいてCAコンデンセーツ・データベースを対象として運用されたTOOL-IRをはじめとする。その後各大学でも情報検索システムの開発と運用が進められ現在に至っている。先の答申には、こうした情報検索サービスをより一層普及発展させようとの趣旨が盛られ、学術情報センターには、いわばデータベース専業の機関として、この面でも相当の役割期待が寄せられている。文献情報センター当時の昭和60年度後半から、情報検索サービスの開始に向けて当初のデータベースの選定、購入、検索システムの開発等に着手し、61年度いっぱい利用者登録等周辺システムの整備をも含めて作業を継続し、62年4月から表1の13種のデータベースについてオンライン検索サービスを開始した（なお、COMPENDEX, Ei ENGINEERING MEETINGS, 洋雑誌総合目録<TOOL-ULP>は、従来東大大型計算機センターを通じて運用していたもので、今般本センターで直接運用することになったもの）。これらは、目録システムに密接に関連したMARCや和洋の学術雑誌総合目録、海外のデータベース作成機関から導入した文献データベース6種、科学研究費研究報告書などデータベース形成事業によるものといった区分がある。文献データベースについては、購入可能なバック・ファイルは原則的に総てオンライン化する方針である。検索システムは永年実績のあるTOOL-IRを基本としたものである。データベースは各々

特徴のある項目内容をもっており、これらを生かしつつユーザーからみた時にどのデータベースも同様の考え方で検索できることが望ましい。このためにはデータベースごとに味付けの異なったシステムを用意する必要があり、こうしたシステムに向けての設計と開発を行った。なお今年度以降もデータベースの種類を逐時拡大し、全国研究者からの要望に応じてゆく予定である。

なお前出(4)に関連して、各大学の研究室等において作成されたデータベースについて、その維持、拡大や流通について各般の支援を行うことも本センターの役割である。例えば全国配信の便宜を考え、データベースを本センター・システムに収容するなどのことであり、今年度以降具体的事例の積み重ねを通じて逐時実現してゆくこととなる。

6. 学術情報ネットワーク

研究者間での全国的情報流通を促進するには、機能面、コスト面で使い易い通信回線網の整備が有効である。これまでも全国7大型計算機センター間では、NTTのDDX網を用いた大学間コンピュータ・ネットワークN-1が運用されていた。学術情報センターでは、こうしたネットワークをより拡充し、また使い出のあるものとするべく、専用デジタル回線による自営網構築の事業を進めている。昭和61年度は東京・大阪間に回線を設置し、東大、名大、京大、阪大をノードとし、センターにはパケット交換機を置いてノード間の相互高速通信を可能にした。この網には大型計算機センターと図書館が接続され、本センターの目録システム、情報検索システムの利用や、計算機センター間の相互利用が行われる。62年度には北海道と九州方面へ回線を延長する他、さらに網の拡張が企画されている。

7. 利用体系

学術情報センターの諸サービスは、大学等の研究者と図書館員を対象とするもので、いわば学術情報コミュニティのための基盤サービスである。従って利用手続き、利用料についてもそれなりの体系が必要である。とくに料金面で利用者に過度の負担とならぬようにすべきは当然である。このような考え方から、まず学術情報ネットワークについては、情報流通の基盤施設として無料になっている。目録システムは、図書館という機関利用者を対象とし、また分担目録であるからデータの投入、利用とも図書館側で行われる点に鑑み、これも無償利用にした。情報検索サービスについては、大学図書館は無料公開であるが文献複写は有料であるとか、民間の情報検索サービスは法人利用者を主体とするせいか相当高価格であるなど、事情が複雑である。ともあれこの際、研究者の期待が極力低廉なサービスにあることを勘案し、MARC、総合目録は1セッションあたり30円、その他のデータベースは接続1分あたり50円、出力1件あたり13円の均一料金という体系になった。

学術情報センターは現員44名の機関である。上記の諸事業やこれを先導すべき研究開発など、なすべき仕事の大きさからみて当面手の回り兼ねるところもあるが、今後とも各々の支援を仰ぎつつ、学術情報システムの整備・発展の一翼を担ってゆくことになろう。

CD-ROMフェア

昭和62年度科学技術週間の一環として、4月17日-18日の両日、JICST(日本科学技術情報センター)筑波支部とTRIS(筑波研究情報セミナー)の共催により、我が国で最初のCD-ROMフェアが開催された。CD-ROMは巨大なオーディオ市場を背景に生まれ育ち、低価格、高密度、コンパクトで大容量(550MB)、非接触再生による高信頼性、など優れた特性を持つ新しい情報流通媒体として注目されている。登場してからの日は浅いが、既に実用システムも現れ始め、さらに今後急激に普及が予想され、近い将来データベース作成・利用等に大きな影響を与えることはほぼ間違いないと思われる。この点で、本企画は非常に良いタイミングで実施されたといえよう。本フェアは展示実演会、概要説明会、パネルディスカッションの3部から構成されている。展示実演会は18社が参加した。現在国内で利用可能なCD-ROMシステムの殆どが集まったものと見られるので、参考のためここに各社の展示内容の一覧を挙げておく。(当日配付のガイドブックより集録1社1行に限定)

エクセプタ・メディカ	I	EMBASE™ (生物医学・医薬品関連のデータベース)
紀伊国屋書店	I	COMPACT DISCLOSURE, Books in Print Plus, EMBASE
三修社	N	CD-WORD 辞書検索ソフト(8か国語対訳辞書)
三洋電気	S	三洋パソコン+CDシステム
ゼンリン	I'	ZMAP-PC(電子地図)
ソフトウェア開発	N'	GENETYX 遺伝情報処理ソフトウェア
ダイケイ		CD-住所・本・洋書システム
大日本印刷	O	広辞苑 CD-ROM 版
東京出版販売	N	東販 CD-ROM システム(出版情報+発注機能)
東芝	T	J3100 + XM2100A
凸版印刷	N	サンケイ日本紳士年鑑/CORES(有機反応情報)
日外アソシエーツ		電子書齋バイブルズ
日本出版販売		CD-NOCS(45万点の出版物情報)
日本電信電話	N	CD タウンページ
日立製作所	H	特許情報
日立SE(*)	H'	DNA, タンパクデータベース光ディスク検索システム
丸善	I, N	DIALOG OnDisk(ERIC), Dissertation Abs. MAPLAN他
ユサコ	I	COMPACT CAMBRIDGE(Life Sci. Coll. MEDLINE 他)

(*)ソフトウェア・エンジニアリング

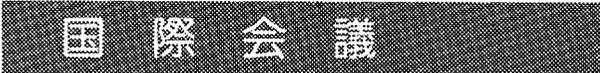
I: IBM-PC	I': IBM-5560K	S: SANYOU
N: NEC9801	N': PC-98XL	T: 東芝J3100
H: 日立2020	H': 日立B-16EX	O: OASYS

一方、17日にはCD-ROM概要説明会と”ニューメディアCD-ROMで情報の流通は変わるか”というテーマでパネルディスカッションがおこなわれた。前者ではハードウェアの概要（三瓶徹氏：日立製作所）と入力と使用方法（山崎清一氏：大日本印刷）が述べられ、後者では、藤原譲（筑波大学）前田完治（三修社）西村昌能（日本電信電話）川島順（日本特許情報機構）寺村謙一（丸善）黒澤慎治（JICST）以上6氏をパネリストとして討論が行われた。会場の座席の関係で入場は当初170名に制限されていたが、実際には、立ち見でもという参加者が多く、最終的には約200名という盛況であり、この問題への関心が非常に高まっていることを示すものといえよう。

CD-ROMは巨大なデータベースをパーソナルに利用できる糸口を開いた点でも、注目される。また、追記型も実用化が進んでいるようで、更に多方面への応用が期待される。しかし、この様な急速な発展のため、必ずしも使い勝手のよいシステムばかりが流通しているとは限らないようだし、ハード・ソフトウェア両面での標準化が追い付かず、使用者側にはその点での戸惑いも感じられる。このあたりの改善が早急に望まれる。

（文責：鈴木 功）

 *
 * 本誌への寄稿のお願い *
 *
 *
 * 本CICSJ Bulletinでは、部会員の方々の寄稿をお待ちしております。 *
 * 本誌に適当と思われる原稿を出来ればワープロ原稿（A4またはB5）にてお送り下さい。 *
 * 会員広場への投稿或いは海外で開催されるシンポジウム等のニュース・予告などでも結構です。 *
 *
 * 情報・原稿の送付先 ㉔101 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 *
 *



MATH/CHEM/COMP 1987

DUBROVNIK, YUGOSLAVIA

22-26 JUNE, 1987

The meeting is a gathering that is oriented towards longitudinal study of a modest number of topics in an informal atmosphere. Sponsored jointly by the University of Zagreb and Florida State University, the conference is organized in two parts: The post-graduate course is designed to introduce scientifically mature students and established researchers to various specialized bodies of knowledge; the research conference offers a forum for the exchange of knowledge among experts in the field. Registration fee is only \$10. The conference proceedings will be published by Elsevier Science Publishers, Amsterdam. For registration and other information contact

Prof. A. Graovac
Rugjer Boskovic Institute
P.O. Box 1016
41001 ZAGREB, Yugoslavia

ELEVENTH BRITISH COMBINATORICAL CONFERENCE

UNIVERSITY OF LONDON
GOLDSMITHS' COLLEGE

13-17 JULY, 1987

The conference is organized jointly by the British Combinatorial Committee and the Department of Mathematical Sciences, University of London Goldsmiths' College. Invited lecture by P. Erdos, A. Barlotti, P. J. Cameron, V. Chvatal, P. Frankl, E. C. Milner, V. Rodl, A. Thomason and P. Winkler will be published in advance by Cambridge University Press in the L. M. S. Lecture Note Series. For information contact

Mrs. C. Whitehead
Dept. of Mathematical Sciences University of London
GOLDSMITHS' COLLEGE
London SE14 6NW
England

Journal of Computational Chemistry

Volume 8 Number 1 January/February 1987

- Recursion Formulae for Calculation of Overlap Integrals
N. C. Datta and B. Sen , p. 1
- The Role of *d* Functions in *AB-INITIO* Calculations. II. The Deformation Densities of SO₂, NO₂, and Their Ions
D. W. J. Cruickshank and M. Eisenstein , p. 6
- Molecular Modeling of Polymers: I. Correct and Efficient Enumeration of Intrachain Conformational Energetics
B. J. Orchard, S. K. Tripathy, R. A. Pearlstein, and A. J. Hopfinger , p. 28
- Recent Advances in Multireference Second Order Perturbation CI: The CIPSI Method Revisited
R. Cimiraglia and M. Persico , p. 39
- On The Importance of Size-Consistency Corrections in Semiempirical MNDOC Calculations
D. Cremer and W. Thiel , p. 48
- Ab Initio* Studies on Van Der Waals Molecules. A Comparative Study with Several Basis Sets of the C_{2v} HeLi₂ System
M. Matias, L. M. Tel, and J. J. Novoa , p. 51
- Hydration Structures and Energetics of Phospholipid
K. S. Kim and E. Clementi , p. 57
- Theoretical Study of Water-Pyridine Complexes Using Intermolecular Potentials
M. Genest , p. 67
- Polarization Counterpoise Corrections to Correlated Hydrogen Bond Interaction Energies
S. K. Loushin and C. E. Dykstra , p. 81
- Ab Initio* Calculations on the Effect of Polarization Functions on Disiloxane
S. Grigoras and T. H. Lane , p. 84

Volume 8 Number 2 March 1987

- Optimized Method for the Evaluation of the Convolutionally Distorted Decay Curves
J. Szöke , p. 95
- Combination of MOMM and VEH Methods to Calculate Electronic Properties of Polymers
L. A. Burke, J. Kao, and A. C. Lilly, Jr. , p. 107
- Reliable Gaussian Basis Sets for Closed-Shell Atoms
E. Radzio and J. Andzelm p. 117

- The Ellipsoid Algorithm as a Method for the Determination of Polypeptide Conformations from Experimental Distance Constraints and Energy Minimization
M. Billeter, T. F. Havel, and K. Wüthrich , p.132
- Comparison of the Use of the MNDO and MINDO/3 Methods with *Ab Initio* Methods to Study Tautomerism in Histamine, 2- and 4-Methylhistamine
S. Topiol , p.142
- Quantum Mechanical Modeling of a Transannular Interaction in a Bicyclic Amidinium Ion
W. D. Edwards and G. R. Weisman , p.149
- Theoretical Study on the Mechanism of the Thermal Decarboxylation of Acrylic and Benzoic Acids. Models for Aqueous Solution
P. Ruelle , p.158
- An Algorithm for Construction of the Molecular Distance Matrix
W. R. Müller, K. Szymanski, J. V. Knop, and N. Trinajstić , p.170
- Molecular Mechanics and the Deformation of Macromolecules: The Use of a Very Short Cutoff Combined with a Quadratic Approximation
H. R. Karfunkel , p.174

Volume 8 Number 3 April/May 1987

- Enumeration and Classification of Benzenoid Hydrocarbons
J. Brunvoll, S. J. Cyvin, and B. N. Cyvin , p.189
- Electronic Structure of Clusters Modeling Silica
J. P. Lopez, C. Y. Yang, and C. R. Helms , p.198
- Small Imines and Oximes as Model Compounds in the Optimization of a Consistent Force Field Potential Energy Function
C. J. M. Huige, A. M. F. Hezemans, and K. Rasmussen , p.204
- Model Potentials for Molecular Calculations. I. The *sd*-MP Set for Transition Metal Atoms Sc through Hg
Y. Sakai, E. Miyoshi, M. Klobukowski, and S. Huzinaga , p.226
- Model Potentials for Molecular Calculations. II. The *spd*-MP Set for Transition Metal Atoms Sc through Hg
Y. Sakai, E. Miyoshi, M. Klobukowski, and S. Huzinaga , p.256
- The Through-Space Transmission of ^{77}Se — ^{77}Se Coupling Constants
R. H. Contreras, H. O. Gavarini, and M. A. Natiello , p.265
- Interaction Energy Studies of 8-Azapurine during Transcription
N. K. Sanyal, R. P. Ojha, and M. Roychoudhury , p.272

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

- Computer Series, 67: Bits and Pieces, 27, p.70 edited by John W. Moore
A Computer Interfacing Course Using the Commodore 64, *Bright Lowry and Howard Thomas*
Growth and Decay: A Computer Program for Radioactive Equilibrium, *Daniel M. Downey and E.P. Quarantillo, III*
Analysis of Near-IR Spectrum of HCl Molecule Using Apple II, *M. Armanious, M. Shoja*
Formulation of Mathematical Expressions to Avoid Inaccuracies in Computation, *Shyam S. Shukla and Alka Shukla¹*
Analog Signals for Digitization from Spectrophotometers with Special Emphasis on a Cary 14, *Donald E. Jones*
Conductivity Titrations--A Microcomputer Approach, *David K. Holdsworth*
Balancing Chemical Equations with a Commodore 64, *William Loercher*

Computer Series, 68:

A Different kind of Language: Prolog, Programming in Logic, *D. Cabrol*, and *T.P. Forrest*, P.131

Computer Series, 69:

Quality Control: Another Step in the Maturation of Computer Use, *John W. Moore and Elizabeth A. Moore*, P.248

Computer Series, 70: Bits and Pieces, 28, p.321 edited by John W. Moore

Visichem, *G.L. Breneman*
VisiCalcTM in the General Chemistry Laboratory, *Sami I. Ibrahim*
Event-Driven Data Acquisition: Using ADALAB with an Accuiab Infrared Spectrometer, *George C. Lisensky and Bryan A. Mehlhaff*
Microcomputer-Controlled Cyclic Voltammetry, *Robin J. Ontko, Raymond N. Russel, and Paul J. Ongren⁵*
MOLDOT: Space-Filling Perspective Diagrams of Molecules, *Steven Brumby*
Inexpensive Computerized Experiments, *John W. Moore and Paula Miles, Malcom Rasmussen, Kenneth Hartman, Patricia Barker*
Exploring Chemistry by COMPUTER: KC? Discoverer, *Aw Feng and John W. Moore*

Computer Series, 71:

System Theory as a Conceptual and Organizational Framework for Computational and

Interferential Chemistry, *Mark E. Lacy*

Computer Series, 72: edited by John W. Moore

Features Associated with Chemical Elements (Faces) , *Russell D. Larsen*

Computerized Grading of Freshman Chemistry Laboratory Experiments, *Robert L. Myers*

Relative Activating Ability of Various Ortho, Para-Directors, *Norbert M. Zaczek and Robert B. Tyszkiewicz*

Stress the Twofold Axis of the Threo Isomer, *D.Tavernier*

Computer Series, 73: Bits and Pieces, 29 edited by John W. Moore

Computer-Assisted Organic Synthesis: An Undergraduate Experiment, *M. P. Bertland, H.Monti, and R. Barone*

Synthetic Design on a Pocket Computer, *Patrick Pollet*

NMR Simulation Program for the ZX81 Computer, *Ronald Starkey*

Find-the-Pairs, *Jack Ryan*

Information Storage and Retrieval Using a Microcomputer, *James A. Wood*

An XY Plotter-MINC 11/23 Computer Interface, *Donald F. Averill, Gary Beatty,*

Fu-Chou A. Cheng, and April Hauser

Analysis of the Band Spectrum of I₂ Using Apple II, *M.Armanious and M. Shoja*

NUDRAW Construction Set, *Patrick Flash*

Computer Series, 74: edited by John W. Moore

The ASYST Language for the IBM PC: An Application to Flow Injection Analysis,

John W. Keller, Timothy F. Gould, and Keri T. Aubert

A Microcomputer-Controlled T-60 NMR Emulator, *Gary D. Howard and Thomas D.*

DuBois

Computer Series, 75: Bits and Pieces, 30, p.800 edited by John W. Moore

Applications of Computer Graphics in the Study of Polymer Configurations, *Marvin Bishop, Sharon Frinks, and AnnMarie M. Meier*

Basic Programs for Calculating Overlap Integrals, *R.Geanangel and J. Beneke*

Stepper Motor Interfacing to the Apple Game Port, *Edward W. Vitz*

An Apple-Computer-Controlled Autosyringe, *Edward W. Vitz*

A Microcomputer-Interfaced Kinetic Spectrophotometry Experiment, *J.V.Badding,*

R.C.Barile. and L.P.Michiels⁵

Computer Series, 76: Bits and Pieces, 31, p.836 edited by John W. Moore
The Periodic Table as a Data Base, *George W. Goth*
Individualized Exercises in Information Retrieval for High Enrollment Courses:
Use of the CRC Handbook, *J. Diehl and D. Onwood*
"QUIZMAKER"--A Versatile Program for Chemistry Exams, *T.R. Shepherd and B.M.
Mattson*
Laboratory Report Writing in General Chemistry Using Computer-Assited Instruct-
ion, *J. Charles Templeton and Carmen M. Lorenz*
Calculation of Madelung Constants in the First Year Chemistry Course, *Mark
Elert and Edward Koubek*
Master Variable Diagrams for Acid-Base Systems from an IBM Personal Computer,
George F. Atkinson, Edward G. Doadt, and Chris Reil
Displaying Custom Designed Characters from BASIC on the IBM PC, *T. Cassen*

Computer Series, 77, p.966 edited by John W. Moore
Simulation of Two-Dimensional, Jahn-Teller Phase-Transitions in Solids, *W.J.A.
Maaskant and R.A.G. Graaff*

Computer Series, 78: Bits and Pieces, 32, p.1070 edited by John W. Moore
Protein Graphics on the Commodore 64 Microcomputer, *Gale Rhodes*
Computer Simulated Metabolism: A Student-Interactive Program, *Lawrence J. Tirri
and Peter W. Jurutka*
Interfacing an EM-360 NMR with an Apple IIe Computer, *James C. Swartz and John T.
Creed*
Perkin-Elmer Model 337 Infrared Spectrophotometer Interfaced to an IBM PC, *Myran
S. Pearson and Salvatore J. Tuzzo*
UV Spectral Data Acquisition, Spectral Search, and Library Softward Package for
the IBM 9420 Spectrophotometer, *David A. Jencen and James K. Hardy*
A BASIC Program for the Calculation of Elemental Compositions from Structural
Formulas,² *Roger A. Smith and Robin W. Spencer*

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

SPECIAL ISSUE: PROTEIN ENGINEERING

1987年第5卷第1号(3月) 論文題目、著者、頁

Comparison of protein structural profiles by interactive computer graphics, *S.H. Bryant and M.J.E. Sternberg*, p.4

Expert system for protein engineering: its application in the study of chloramphenicol acetyltransferase and avian pancreatic polypeptide, *B. Robson, E. Platt, R. V. Fishleigh, A. Marsden and P. Millard*, p.8

Structure--activity relationships of methionyl-tRNA synthetase: graphics modelling and genetic engineering, *S. Brunie, P. Mellot, C. Zelwer, J-L Risler, S. Blanquet and G. Fayat*, p.18

Symmetry control in reactions in molecular cavities, *A. Guarino*, p.22

Surface fractality as a guide for studying protein--protein interactions, *J. Åqvist and O. Tapia*, p.30

Design and synthesis of bioactive cyclic peptides, AM-toxin I and gramicidin S, *H. Aoyagi, S. Lee and N. Izumiya*, p.35

Pharmacophoric pattern matching in files of 3D chemical structure: evaluation of search performance, *S.E. Jakes, N. Watts, P. Willet, D. Bowden and J.D. Fisher*, p.41

Pharmacophoric pattern matching in files of 3D chemical structures: comparison of geometric searching algorithms, *A.T. Brint and P. Willett*, p.49

International electronic mail, *J.M. Hutson*, p.57

Journal of Chemical Information and Computer Sciences

1987年2月 第27卷第1号 發表題目、著者、頁

Chemical Information Science Coverage in *Chemical Abstracts*, *Gary Wiggins*, p.1

Computer as a Versatile Research Assistant, *V. Zitko*, p.3

Computerized Model Fitting Approach for the NMR Analysis of Polymers, *H.N. Cheng*, p.8

Enumeration and Classification of Coronoid Hydrocarbons, *J. Brunvoll, B.N. Cyvin, and S.J. Cyvin*, p.14

Atomic Physicochemical Parameters for Three-Dimensional-Structure-Directed Quantitative Structure-Activity Relationships. 2. Modeling Dispersive and Hydrophobic Interactions, *Arup K. Ghose and Gordon M. Crippen*, p.21

wizard: Applications of Expert System Techniques to Conformational Analysis. I. The Basic Algorithms Exemplified on Simple Hydrocarbons, *Daniel P. Dolata and Robert E. Carter*, p.36

COMPUTERS & CHEMISTRY

1987年第11卷第2号 論文題目、著者、頁

A system for automation of kinetic computations, *G.M.Ostrovskii, A.G.Zyskin and Yu. S.Snagovskii*, p.85

Microcomputer-assisted surface area determination, *W.F.Tong, C.M.Y.Lee, C.P.Luk, F. Lam and R.S.Tse*, p.97

ABSORB: a computer program for correcting observed structure factors from absorption effects in crystal structure analysis, *F.Ugozzoli*, p.109

A comparative study of new truncation error estimates and intrinsic accuracies of some higher order Runge-Kutta Algorithms, *M.Bader*, p.121

A general fitting program for resolution of complex profiles, *M.A.Raso, J.Tortajada, D.Escolar and F. Accion*, p.125

Numerical inversion of z-transforms with application to polymerization kinetics, *P.L. Mills*, p.137

* * * * *

情報化学部会部会員増加にご協力を!

* * * * *

* * * * *

* **【昭和62年部会費】** 正部会員 (日本化学会会員) 2,000円 *

* 準部会員 (日本化学会非会員) 3,000円 *

* 法人部会員 一口 30,000円 (一口以上) *

* * * * *

* ※ご入会を希望される方は、下記あてご連絡下さい。 *

* ㉞101 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) *

* * * * *

CICSJ Bulletin Volume 5, Number 3

1987年5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

Telephone 03-292-6161 FAX 03-292-6087 Telex 2226198 CSJ J

CICSJ Bulletin

Published Bimonthly by Division of
 Chemical Information and Computer Sciences
 The Chemical Society of Japan

ネットワーク 特集号

日本化学会
 情報化学部会

Volume 5, Number 5
 September 1987

目 次

ネットワーク特集

化学研究者コンピュータネットワーク.....	藤原 譲	1
	相曾 益雄	
	岩田 修一	
	小沢 宏	
	宮原 昱中	

海外動向

194th ACS National Meeting	13
Meetings	17

文献紹介

Journal of Chemical Education (Vol. 64, No. 1~No. 6)	18
Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol. 27, No. 2)	19
Journal of Computational Chemistry (Vol. 8, No. 1~No. 6)	22
Journal of Molecular Graphics (Vol. 5, No. 2)	24
Computers & Chemistry (Vol. 11, No. 3)	24
Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol. 5, No. 4~Vol. 6, No. 1)	25

関連行事	26
------------	----

「計算化学特集」原稿公募	27
--------------------	----

化学研究者コンピュータネットワーク

筑波大学 藤原 譲
IBM 相曽益雄
東京大学 岩田修一
東京大学 小沢 宏
三井東庄 宮原是中

1. まえがき

通信技術の進歩と回線の自由化および計算機の普及によって我が国も遅ればせながらネットワークを通して計算機やデータベースの遠隔利用が急速に進みつつある。特にデータベースについては分散しているデータベースの統合利用、すなわち渡り検索までがルーチンに使用されている。また大型計算機の高速処理やソフトウェアの共用ため、コンピュータネットワークが容易に使えるようになってきている。このような利用法は改めて説明するまでもなく既に定着しているが、研究者間の直接コミュニケーションの手段としての利用は、欧米に比して大きく立ち遅れているので、ここでは代表的な使い方である電子メールを中心に現状について、参考文献として末尾に挙げた解説記事[1]-[13]および各種のデータ・資料を調査した結果を報告し、情報化学部会会員のためのシステム利用法について提案を行うことにする。

2. 電子メールの機能

通信連絡の手段として手紙は記録された文字を媒体として古くから、現在に至

るまで非常によく利用されているが、時間がかかるために、返答を要するとき、または交渉のように対話型メッセージ交換の必要なときには不向きである。それには直接面談が最適である。しかし交通が進歩したとは言え人間の活動範囲の拡大によって連絡すべき相手も地球的規模で分散しているので、時間的にも経済的にも大きな制約がある。この点は電話回線の発達により、大幅に代替できるようになっているが、面談と電話はどちらも当事者双方すなわちメッセージの送り手と受け手を同時に拘束することを前提としている。この同時性の拘束は実際上しばしば対話のメリットを相殺しかねないほど非常に大きな制約になっており、とりわけ時差の大きな地域間では顕著になる。これを通信ネットワークから解決する1つの方法にはよく知られたFAXであり、急速に普及しつつあり、また機能的にも種々の要求に応え向上の一途を辿っているが、ここでは主題から外れるので、これ以上言及しないことにする。

一方電子計算機の機能の向上によって、多数の利用者がTSS方式で計算機能のみならず、データやプログラムも共用す

るようになるとともにメールボックスを計算機のメモリー内に設置して計算機管理者と利用者間および利用者相互間のメッセージ交換が行われるようになった。さらに計算機同士が通信回線を通して結合されるようになると電子メールの利用者とその範囲は急激に拡大されるようになって来た。電子メールは同時性の制約からの解放はあるが、それがメッセージ交換の即時性、同時性を損なうことにはならないことも大きな特長であり、同時に2人またはそれ以上多数の利用者がメッセージ交換が行える。

このような技術的背景と、利用者の要求から電子メールはほぼ自然発生的に生まれたと言っても良いが、我が国に於いては通信制度上の制約からTSSや電子メールを含め計算機関係のネットワーク化が、通信網や計算機の発達、普及に比して遅れていた。しかし一昨年より通信回線は民営化とともに基本的に自由化されたので今後は急速な展開が期待され、現実にもそのようになっている。

電子メールの機能については図1に示すように個人から個人宛にメールボックスに配達するのが基本であり、プライバシー保護のため親展メールも可能である。また共通の目的のためにあるグループに同一内容のメッセージを送る同文通信は計算機のメモリー活用で手紙に於けるよりはるかに簡便に利用できる。もちろんグループは送者がメイリングリストの中に適宜指定できるものである。これを更に双方向化したのが電子フォーラムまたは電子会議と呼ばれるもので同時性は文字通りのこともあり、ある期間を指定してのごともある。国際的電子メールでは共同案作成、標準化のような多数意見の

図1 電子メールの機能

1対1	メールボックス配達
	親展メール
1対グループ	同文通信
グループ内	フォーラム(電子会議)
公開	掲示板

集約、国際会議の準備などには特に有効であり多くの国際機関、たとえばCODATA、IUPACなど情報化学に関係の深い機関もそれぞれのシステムを採用しており、米国の学会、組織は更に日常的業務や連絡に活用している。さらに特定個人やグループを超えて広く呼びかける機能は掲示板と呼ばれ、利用者が増加すると共に急速にその利用価値が上がっている。以上述べた電子メールの機能は利用目的から見た機能であって、メールを送るために、メッセージの入力、編集、保存、表示、印字出力、各種のファイル管理、検索などの機能が整備されている。また郵便と同じように配達時刻の指定や締切時刻の指定と催促、配達の確認、メッセージ受信の優先度指定、受信代行者への転送、回答請求、テキストデータのメディア変換など多くの補助機能があるがこれらは全てのシステムに備っているとは限らない。これらの機能は通信プロトコルにも関係しているが詳細は末尾の文献を参照されたい。

3. 電子メールシステムの例

1969年に米国のDARPA(Defense Advanced Research Projects Agency)によって高度ネットワーク・プロトコル開発実験の意味を持つARPANETのプロジェクトが開発された[4,5]。この種のプロジェクトとしては代表的なものであり、通常のコンピュータネットワークのプロトコルのみならず異種技術と異種接続プロトコルを有する異種ネットワーク間の相互接続のためにインターネットワークプロトコルの概念が導入されている。またコンピュータの計算機能の利用のみでなく、ファイル転送や電子メー

ルのサービスも行っている。ARPANETは図2[4]に示すように米国内に多数のノードを持つだけでなく、我が国も東北大学を中心に研究に参加している。

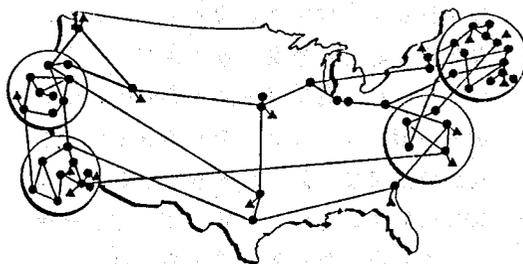


図2 Defense Advanced Research Projects Agency(DARPA)ネットワーク, ARPANETの1985年の構成図。ARPANETはDARPAのための高度ネットワーク研究開発用試験台であるとともに、大学、国立研究所、民間企業内のDARPA基金を交付された多数の研究者を支援するネットワークとして稼働している。1985年10月にNSFはNSF基金によるスーパーコンピュータ・ユーザが使用できるようにARPANETを約40サイト分拡大することでDARPAと合意に達した。ARPANETは、ホストコンピュータが接続されるインタフェース・メッセージ・プロセッサ(IMP, ●)と端末アクセス・コントローラ(TAC, ▲)とを結ぶ56 Kbpsリンクによって構築されている。サービスには、遠隔端末アクセス、ファイル転送、電子メールなどがある。ホスト接続が集まっている地域は、Boston, Washington DC, San Francisco, および Los Angeles である。[DARPA提供][4]

ARPANETは技術的にも大きな成果を挙げたが、大型研究用ネットワークの始まりとしての意義も大きく、NSFによるNSFNETの構築に大きな貢献をし、また主要な要素となっている[4]。NSFNETはスーパーコンピュータの共同利用を主要な目的とする全分野の学術研究者および関連企業研究者のための汎用コンピュータコミュニケーション・ネットワークとして1984年より開発されている。大規模計算に対して研究者がアクセスすることの意義の大ききの認識が基礎となっているが、研究者間のコミュニケーションのためにも充分配慮されており、電子メール等の機能も備っている。NSFNETへの加入を計画している機関のリストを表1に示す[4]。

表 1 NSF ネット。計画中の加盟機関のリスト。鍵：ARPANET, 既設あるいは計画中の ARPANET サイト。SDSC, San Diego 共同体ネットワーク・サイト。JVNC, Princeton (JVNC) 共同体ネットワーク・サイト。NCAR, National Center for Atmospheric Research (NCAR) 衛星通信ネットワーク・サイト。Illinois, Illinois スーパーコンピュータ・センタへの 56 Kbps による直接リンク。backbone, NSF ネットのバックボーン・ネットワーク上のスーパーコンピュータ・センタ。[4]

機 関	ネットワーク	機 関	ネットワーク
Agouron Institute	SDSC	University of North Carolina	ARPANET
University of Arizona	JVNC	North Carolina State University	ARPANET
AT&T Bell Labs, New Jersey	ARPANET	Northwestern University	ARPANET, Illinois
University of California, Berkeley	ARPANET, SDSC	Ohio State University	ARPANET
Boeing Computer Services	ARPANET	Oregon State University	NCAR
Brown University	JVNC	University of Pennsylvania	ARPANET, JVNC
California Institute of Technology	ARPANET, SDSC	Pennsylvania State University	JVNC
Carnegie-Mellon University	ARPANET	University of Pittsburgh	ARPANET
University of Chicago	Illinois	Princeton University	JVNC
Colorado State University	ARPANET, NCAR	Purdue University	ARPANET
University of Colorado	JVNC, NCAR	Rice University	ARPANET
Columbia University	ARPANET, JVNC	University of Rochester	ARPANET, JVNC
Cornell University	ARPANET, backbone	Rutgers University	ARPANET, JVNC
City University of New York	ARPANET	Salk Institute	SDSC
University of Delaware	ARPANET	San Diego Supercomputer Center	ARPANET, SDSC, backbone
Duke University	ARPANET	University of California, San Diego	SDSC
Harvard University	ARPANET, JVNC	San Diego State University	SDSC
University of Hawaii	SDSC	University of California, San Francisco	SDSC
Institute for Advanced Studies, at Princeton University	JVNC	University of California, Santa Barbara	ARPANET
University of Illinois, Urbana	ARPANET, NCAR, backbone, Illinois	Scripps Clinic and Research Foundation	SDSC
University of Illinois, Chicago	Illinois	Scripps Institute of Oceanography	SDSC
Indiana University	ARPANET, Illinois	Southwest Fisheries	SDSC
John von Neuman Center	ARPANET, JVNC, backbone	Stanford University	ARPANET, SDSC
Kitt Peak Observatory	SDSC	State University of New York, Stony Brook	ARPANET
Lawrence Berkeley Laboratory	ARPANET	University of California, Los Angeles	ARPANET, SDSC
University of Maryland	ARPANET, SDSC, NCAR	University of Texas, Austin	ARPANET
University of Miami	NCAR	University of Utah	ARPANET, SDSC
University of Michigan	ARPANET, SDSC, NCAR	University of Washington	ARPANET, SDSC, NCAR
University of Minnesota	ARPANET	Westinghouse (Pittsburgh)	ARPANET, backbone
Massachusetts Institute of Technology	ARPANET, JVNC	University of Wisconsin	ARPANET, SDSC, NCAR
National Center for Atmospheric Research	ARPANET, NCAR, backbone	Woods Hole Oceanographic Institution	NCAR
National Science Foundation	ARPANET	Yale University	ARPANET
New York University	JVNC		

NSF はまたコンピュータ科学研究用ネットワークの構築することにより、比較的小規模の大学の研究者をも含めてこの分野の支援を図ることが既に1974年に第一段階の諮問委員会への答申がなされ、ネットワーク開発は1980年に開始されているのがCSNET (Computer Science Network) である。CSNETの大きな特長はARPANETやNSFNETが政府の資金によるため利用者資格が限定されるのに対し、独立採算性を目指して、

産学官の研究者に広く解放されていることである。CSNETの主要な構成要素はARPANET、電話網によるメッセージの一型サービスをするPHONENET、X25による公衆データネットワーク上でインタネットワーク・プロトコル群を提供するX25NET、集約型メール、サービスをする公衆ホストおよびメールサービスを提供するためのCSNETユーザのオンラインデータベースである名前サーバであり、図3[4]に示すようなネットワークの現状である。

研究者用として別の展開をしたのがBITNETである。1981年 New York 市立大学(CUNY)が大学間のコミュニケーションネットワーク構築に対する意識調査を行い、それに基づきYale大学との間にリンクが設置されたのが始まりで、現在では図4[4]および表2[7]に

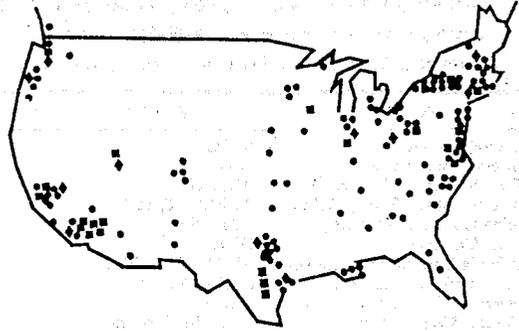


図3 コンピュータ科学研究ネットワーク、CSNETの1985年の構成図。CSNETは主に3種類に分けられる。ARPANETサイト(■)、X25サイト(◆)、公衆X.25データネットワークであるTelenetおよびUNINETに接続。Phonenetサイト(●)はBolt, Beranek and Newman(BBN)が運営するCSNET Coordination and Information Center(CIC)に設置された中央メール・リレー・サービスにダイヤル・アップで接続。

[CSNET CIC 提供]

(訳注) 海外には、カナダ、英国、フランス、西独、スウェーデン、フィンランド、オーストラリア、イスラエル、ニュージーランド、スイス、韓国、日本に延長されている。日本のサイトは東京大学大型計算機センターとICOTが加盟している。[4]

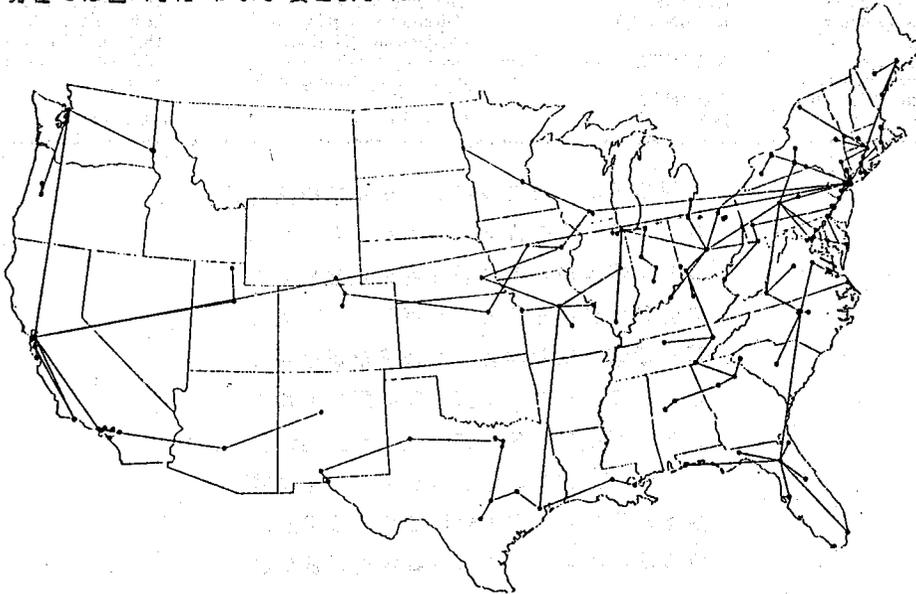


図4 1985年のBITNET構成図。BITNETは蓄積転送型ネットワークであり、ファイルとメッセージはホスト・コンピュータからホスト・コンピュータへと渡され、ネットワークの中を送られる。サービスには電子メール、ファイル転送、遠隔ジョブ・エントリなどがある。標準的なBITNETリンクは9600 bps専用電話回線である。California大学Berkeley校およびWisconsin大学Madison校に設置された電子メール・リレーによってBITNETとARPANET、CSNETユーザは交信を行なうことができる。[Texas A&M 大学 提供]

(訳注) 日本のBITNETサイトは、東京理科大学神楽坂校舎および野田校舎、東京経済大学、日本IBM基礎研究所(旧サイエンス・インスティテュート)、早稲田大学、名古屋商科大学、大阪工業大学、金沢工業大学、京都大学(情報工学科)、東北大学、東京大学(産業機械工学科)、高エネルギー研究所などである。[4]

示すように我が国を含め国際的に広域ネットワークを形成している。BITNETは始め、"Because It's Time Network" (ネットワークの機は熟せり) からとられたのであるが、今はその広汎な普及から、"Because It's There Network" (そこにあるネットワークだから) とも言われるとのことである。またBITNETはIBMが部分的にサポートしているので、IBMコンピュータ上で使用可能なソフトウェアRSCSによって初期のホストマシンは全てIBM製であったが、IBMマシン専用ネットワークというわけではなくRSCSエミュレータを有するコンピュータはBITNETに接続できる。現在DEC製、CDC製等IBM製以外のマシンが3分の1以上に達しているとのことである。

我が国の研究用ネットワークとしてはJUNETがあり、CSNETとも接続出来ることになっている。JUNETにはネットワーク用日本語メッセージの取り扱い、階層的なドメイン式のアドレス、ゲートウェイ機能などが含まれている。運用は完全にボランティアによって行なわれており、1984年に実験開始以来、図5[7]に示すように急速に参加者が増加し、1987年5月時点で参加組織73、参加ホスト200システムになっている。実験への新規加入は、既に参加している組織との接続によって行われる。通信費は自己負担となるので、近接したホストに接続するのが一般的である。用意するゲートウェイの最小設備はUUCPの稼働するシステムに電話回線とV21, V22, V22 bis のいずれかのモデムが接続されていればよい。アドレス管理用とニュースのソフトウェアは原則として接続先の組織から入手することになっている。

表2 新しい BITNET 数

ホスト数(87年2月)	ホスト数(86年5月)	(省略形)	国
BITNET			
1093	844	(USA)	アメリカ
2	1	(MEX)	メキシコ
1	-	(?)	アルゼンチン
1096	845	合計	3
NETNORTH			
125	91	(CAN)	カナダ
Asianet			
15	7	(JPN)	日本
1	-	(?)	シンガポール
EARN			
8	6	(A)	オーストリア
15	13	(B)	ベルギー
43	38	(IL)	イスラエル
32	22	(CH)	スイス
152	130	(D)	西ドイツ
14	13	(DK)	デンマーク
44	31	(I)	イタリア
10	8	(E)	スペイン
61	39	(F)	フランス
47	39	(NL)	オランダ
9	7	(SF)	フィンランド
2	2	(GR)	ギリシャ
3	4	(IRL)	アイルランド
4	1	(N)	ノルウェー
1	1	(P)	ポルトガル
17	8	(S)	スウェーデン
1	1	(GB)	イギリス
1	-	(?)	アイスランド
1	-	(?)	ルクセンブルグ
7	-	(?)	トルコ
472	363	合計	20
BITNET としての総合計			
1709	1306	総合計	26

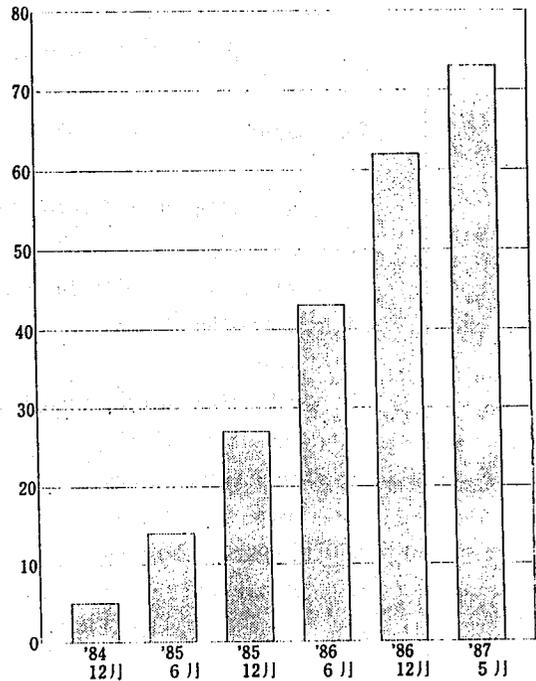


図5 JUNET への参加組織の推移

一方純粹に營業的な大規模ネットワークの例として CompuServe を紹介する [14]。ニュース、経済、統計などのデータベース 800種を中心に30万人の会員がパソコン通信、特に電子メール、電子掲示板、オンライン会議などを利用している。我が国にも代理店（N I F）があり、申込みれば即日から利用できる。營業用であるから利用に応じた料金の支払いが必要であり、その手続き以外に利用資格や制限のないのが産学官にわたる研究者のコミュニケーションの道具としては大きな利点である。CompuServeへの登録手順は国際電信電話株式会社と国際通信回線 VENUS-P の利用契約を結びユーザ ID を取得することが前提となり、これには約2週間を要する。CompuServe 料金を決済を個人の場合クレジットカードで行うので提供カードである V I S A または

MASTER CARD が必要である。法人として加入する場合は請求書に応じた支払いもできる。端末にはパソコンでも可能であり、特殊な機能は必要ではないが図6に通信条件を示す。

図6 CompuServeの通信条件

通信手順	TTY 手順（無手順）
通信速度	300 bps または 1200bps
通信モード	全二重
文字	7 bit
パリティ	Even
Start/Stop	1 bit

4. 電子メール使用法

実際に電子メールの使用について CompuServe を例として説明する。図7は Compu

図7 Compu Serve の全体メニュー

CompuServe	TOP
1 Instructions/User Information	
2 Find a Topic	
3 Communications/Bulletin Bds	
4 News/Weather/Sports	
5 Travel	
6 The Electronic MALL/Shopping	
7 Money Matters/Markets	
8 Entertainment/Games	
9 Home/Health/Family	
10 Reference/Education	
11 Computers/Technology	
12 Business/Other Interests	
Enter choice number ! GO EASY	

Easyplex サービスに行く方法としてはメニューから3を選んで入力する方法と、GO コマンドを使って行く方法があります

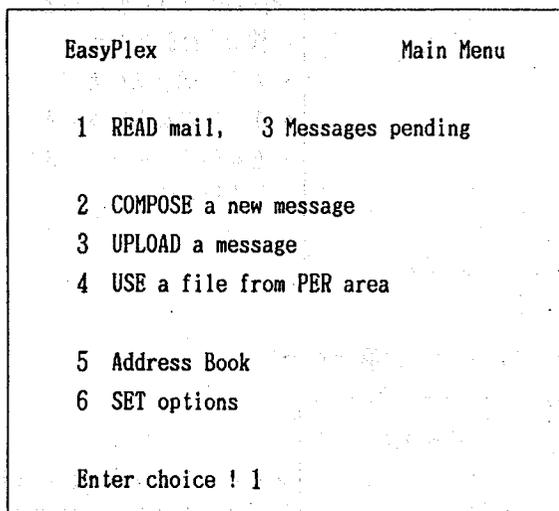
GO コマンドを使って見ます。

← GO EASY 入力しました

uServeに入ると最初に表示される画面でメニュー方式で選択するようになっている。

電子メール EasyPlex は3.のCommunications/Bulletin Bdsに属するので3.経由でも良いが直接 EasyPlexを指定する方法もあり、ここでは短縮経路(Quick Reference)を取っている。図8は EasyPlexの主たる機能を示しており図9から14までにそれぞれの機能に対するメニューと枠外に説明がついているので、これ以上の解説は省略するが、他のメールシステムもほぼ同様で、とくにマニュアルを参照しなくても使えるようになっている。

図8 EasyPlexのMain Menu



EasyPlexサービスの最初の画面が表示されました

あなたへのメールが入っている時には、"1" READ・・・が表示されます、メールが無い時は"2"COMPOSE...から表示が始まります。

← 1のREADを選んで、読んで見ましょう。

図9 EasyPlexのRead Menu

```

EasyPlex                                Read Menu

1 Don/Hello to you
2 Sandy/Will you be at the party
3 Bill/What your schedule on sunday

0 READ ALL 3 messages

Enter choice! 1
    
```

読む方法としては、1,2,3の内一つの数字を入れて1通ずつ読む方法
1,2 の様に","で続けて入力して任意の複数を読む方法
"0"を入れて全部読む方法が選べます。

図10 EasyPlexのAction Menu

```

EasyPlex                                Action Menu

** Don/Hello to you **

1 DELETE this message
2 FILE in PER area
3 FORWARD
4 REREAD message
5 REPLY
6 SAVE in mailbox

Enter choice! 1
    
```

←読んだメールを削除します
←PERSONAL FILE にしまう
←他の人に転送します
←もう一度表示します
←すぐに返事を書きます
←もとのメールボックスにしまいます。

図11 EasyPlexによるX-11 作成Compose

```

EasyPlex                                Compose

Enter message. (/EXIT when done)

1: TO: Miss Agree
2: SUBJECT: INFORMATION
3: Will you join my party at next
4: sunday??
5: please reply as soon as possible
6: /EXIT
    
```

メールの作成画面が表示されます。入力の終わりには/EXITを入力します。
←入力終了すれば、/EXITを入れます。

図12 EasyPlexによるX-M の編集Edit

```
EasyPlex          Edit Menu

1 CHANGE characters in line
2 REPLACE line
3 DELETE line
4 INSERT new line(s)
5 TYPE all lines

0 SEND message

Enter choice!
```

図13 EasyPlexによるX-M 発送Send

```
EasyPlex          Send Menu

For current message

1 SEND
2 EDIT
3 TYPE
4 FILE DRAFT copy
5 TYPE all lines

0 SEND message

Enter choice!
```

図14 EasyPlexのAddress Book

```
EasyPlex          Address Book

1 INSERT an entry
2 CHANGE an entry
3 DELETE an entry
4 LIST Address Book
5 Enter/Change your NAME

Enter choice! 5
```

←5 のEnter/Change your NAME
を選んで、何が出て来るか見て
見ましょう。

5. 情報化学研究ネットワークのすすめ

電子メールを中心に研究者用コミュニケーション・ネットワークの現状について概観をしてみ、機能的にも、設備的にも、またあまり触れなかった経済的側面も含めて、より効率の良いコミュニケーションを考えるべき環境は十分に整っており、一部では既に活用されているのでこの際もう少し、組織的に利用を進め研究者の交流と、研究開発の効率化促進に役立たせるべきであろう。

ネットワークとしての意義は関係者ができるだけ多数参加し、できるだけ活用を図るのが何より重要である。そこで化学ネットワークを目指して2段階のステップが実現を容易にすると思われる。

第一ステップ：大学関係者と企業関係者はそれぞれ身近なネットワーク上でグループ化を行う。両者の間も可能なパスでつなぐ。

第二ステップ：国際化学ネットワークの中心ホストを設置し、既に発足しているCHEMNET[15]、CODATANET、ASTMNET、IUPAC-C CDB（現在 CompuServeを利用）などとも連絡をとれるような管理機能ができることが望ましい。

第二ステップは国内レベルで調整してから、国際レベルに拡張する方式も考えられるが、いずれにしても予算的裏付けも必要となるので第一ステップを個別に開始するとともに第二ステップの実現法を検討するのが現実的な手法と思われる。望むらくは第二ステップへの準備に対して第一ステップでのネットワークが有効に機能するであろうことを期待している。

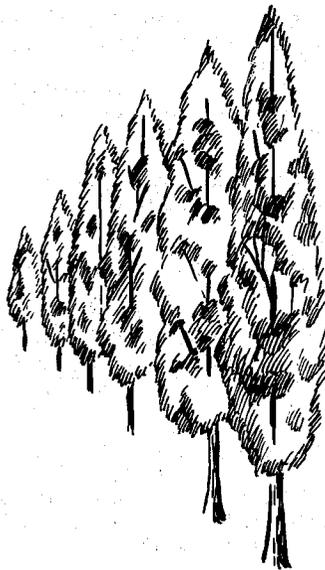
6. むすび

研究開発に於ける情報流通の重要性は言うまでもないが、情報に係わりの深い当部会こそ、率先垂範すべきときと思われる。化学ネットワーク早期実現のため、出来るだけ多くの方々の関心と今後に向けての共同作業への積極的参加を切望する次第である。

《参考文献》

- 1) 小野欽司：メールサービス 電子通信学会誌 69 (7) 675-681 (1986)
- 2) 斉藤忠夫：パーソナルコンピュータ向け電子メール通信方式の動向 電子通信学会誌 69 (7) 716-721 (1986)
- 3) 石田晴久：電子メールと国際コンピュータ・ネットワーク 名古屋大学大型計算機センターニュース 17 (4) 407-415 (1986)
- 4) D.M.Jennings, L.H.Landweber, I.H.Fuchs, D.J.Farber and W.R. Adrion (訳) 奥乃 博：科学者のためのコンピュータネットワーク bit 12 (2) 110-124 (1987)
- 5) J.S.Quarterman and J.C.Hoskins (訳) 村井 純：世界のコンピュータネットワーク bit 12 (3) 284-296, (4) 419-433, (5) 581-592, (7) 989-1001 (1987)
- 6) 東大大型計算機センター：国際電子メール(CSNET経由)の暫定サービス開始について 東大大型計算機センターニュース 19 (7,8) 49-55 (1987)
- 7) 村井 純：世界のコンピュータネッ

- トワークとJUNET bit 12 (8)
1083-1086 (1987)
- 8) 斉藤忠夫：電子メールとグループ通信 情報処理 28 (8) 1015-1020 (1987)
- 9) 村井 純：研究ネットワーク 情報処理 28 (8) 1021-1029 (1987)
- 10) 板倉節男：LANとワークステーションを用いた電子メール通信 情報処理 28 (8) 1030-1037 (1987)
- 11) 井田昌之：電子メール討論—Common Lispにおける実例— 情報処理 28 (8) 1038-1043 (1987)
- 12) 公文俊平：グループ通信—社会システムへの影響と課題 情報処理 28 (8) 1044-1051 (1987)
- 13) 中島健造、後藤浩一：企業システムへの影響と課題 情報処理 28 (8) 1052-1059 (1987)
- 14) N I F : CompuServe へのアクセスガイド (株)エヌ・アイ・エフ (1987)
- 15) P. Lykos : CHEMNET COMP News 11 (3) 114 (1986)



194TH ACS NATINAL MEETING, DIVISION OF COMPUTERS IN CHEMISTRY, NEW ORLEANS, LOUISIANA, AUGUTST 30-SEPTEMBER 4, 1987 の要約。頁数の関係から, TECHNICAL WORD PROCESSOR や ELECTRONIC PUBLISHING 関係の発表については, 次号以降で折をみて紹介の予定です。

MOLECULAR MECHANICS PARAMETERS FOR ORGANOSILICON COMPOUNDS FROM AB INITIO COMPUTATION. S. GRIGORAS DOW CORNING CORP. FRPI RESEARCH, MIDLAND, MICHIGAN 48640

HAVE BEEN CALCULATED(THE PARAMETERS FOR MM2, ORGANOSILICON MOLECULAR STRUCTURE). OPTIMIZED(MOLECULAR STRUCTURES OF 26 ORGANOSILICON, BY AB INITIO CALCULATION OF THE 3-21G* LEVEL). ANALYZED(PARAMETERS FOR STRETCHING AND BENDING DEFORMATIONS). INCLUDED(THE BENDING POTENTIAL FOR THE SI-O-SI BOND OF AN UNUSUAL FLEXIBILITY). DESCRIBED(NONBONDING INTERACTIONS, IN TERMS OF STERIC AND ELECTROSTATIC POTENTIALS). TORSIONAL BEHAVIOR OF SYSTEMS NOT INCLUDING RESONANCE EFFECTS WELL DESCRIBED BY(STERIC POTENTIALS WITH VAN DER WAALS RADII 20 % LARGER THAN THE PREVIOUS VALUES AND SIMPLE ELECTROSTATIC POTENTIAL WITH NET ATOMIC CHARGES OBTAINED FROM AB INITIO OR EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS). THE NONBONDING POTENTIALS DESCRIBED HAVE THE ADVANTAGE IN (ALLOWING THE COMPUTATION OF TORSIONAL BARRIERS WITHOUT TORSIONAL POTENTIALS FOR SINGLE BONDS).

APPLICATION OF MOLECULAR MODELING TO SHAPE/SIZE SELECTIVE SEPARATIONS. C. H. REYNOLDS, COMPUTER APPLICATIONS RESEARCH, ROHM AND HAAS COMPANY, 727 NORRIS-TOWN RD., SPRING HOUSE, PA 19477

BECOMING INCREASINGLY IMPORTANT(MOLECULAR SIEVE TECHNOLOGY, AS A METHOD OF ALTERING THE COURSE OF A CHEMICAL REACTION, OR PURIFYING THE PRODUCTS). THE SELECTIVITY OF A MOLECULAR SIEVE IS DUE TO(ITS ABILITY TO ADSORB ONLY MOLECULES OF A CERTAIN SIZE AND/OR SHAPE). UNDERSTANDING THE SEPARATION PROCESS DEPENDS ON(UNDERSTANDING THE STRUCTURE AND CONFORMATION SPACE OF THE MOLECULES TO BE SEPARATED). FOUND TO BE USEFUL(MOLECULAR GRAPHICS, MOLECULAR MECHANICS, QUANTUM THEORY, IN DESIGNING SIZE AND SHAPE SELECTIVE SEPARATIONS USING POLYMER CARBON ADSORBENTS). HOW RATIONAL COMPUTER GENERATED MODELS CAN BE USED TO(PREDICT THE AFFINITIES OF DIFFERENT MOLECULES FOR A MOLECULAR SIEVE OF GIVEN DIMENSIONS).

THE USE OF CHEMBASE TO MANAGE AN ACADEMIC-INDUSTRIAL COOPERATIVE RESEARCH PROGRAM. R. HARMON, DEPARTMENT OF CHEMISTRY, WESTERN MICHIGAN UNIVERSITY, KALAMAZOO, MI 49008

CHEMBASE HAS BEEN USED TO ORGANIZE(15000 COMPOUNDS OF RESEARCH SAMPLES). COULD SEARCH(SIMILAR STRUCTURE TYPES IF A PARTICULAR STRUCTURE TYPE SHOWED SOME BIOLOGICAL ACTIVITY).

COMPUTER PROGRAMMING ASSIGNMENT IN A SENIOR LEVEL CHEMISTRY CLASS. S. S. ZIMMERMAN, DEPARTMENT OF CHEMISTRY, BRIGHAM YOUNG UNIVERSITY, PROVO, UT 84602

BECAUSE OF THE ACCESSIBILITY OF COMPUTERS TO CHEMISTRY STUDENTS AND THE CURRENT REQUIREMENT OF COMPUTER SCIENCE BY ALL CHEMISTRY MAJORS(SENIOR LEVEL CHEMISTRY COURSE INSTRUCTORS NEEDN'T HESITATE ASSIGNING HOMEWORK PROBLEMS INVOLVING COMPUTER PROGRAMMING). I ASSIGN(COMPUTER PROGRAMS TO DETERMINE GIBBS FREE ENERGY OF METABOLIC REACTIONS, TO CALCULATE THE ENERGIES OF A PARTICLE IN A BOX, TO COMPUTE THE CONFORMATIONAL ENERGIES AND AVERAGE END-TO-END DISTANCES OF SIMPLE PEPTIDE MOLECULES).

ALGORITHMS FOR REAL-TIME DATA ACQUISITION FOR A TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETER. R. P. MATTIE II, TOFTEC, P. O. BOX 12877, GAINESVILLE, FL 32604

IBM PC REAL-TIME CONSTRAINTS FOR DATA ACQUISITION. ALGORITHMS FOR PEAK FINDING, DATA REDUCTION MASS FITTING, AND SCAN TERMINATION. DATA ACQUISITION RATES OF UP TO 10 KHZ ARE POSSIBLE.

MASSPEC: AN IBM PC/XT BASED INTERACTIVE DATA ACQUISITION PROGRAM FOR A VELOCITY COMPACTION TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETER. R. P. MATTIE II, TOFTEC, P. O. BOX 12877, GAINESVILLE, FL 32604
MASSPEC(AN INTERACTIVE REAL-TIME DATA ACQUISITION PROGRAM FOR A VELOCITY COMPACTION (VC) TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETER). ARE SUPPORTED(ALL POPULAR HIGH RESOLUTION PC GRAPHICS MODES, BOTH COLOR AND MONOCHROME).

AN INEXPENSIVE DEVELOPMENT SYSTEM FOR DEDICATED INSTRUMENT CONTROLLERS. K. L. RATZLAFF, INSTRUMENTATION DESIGN LABORATORY, UNIVERSITY OF KANSAS, LAWRENCE, KANSAS 66045
PRESENTED(A METHOD OF BUILDING INEXPENSIVE SINGLE-BOARD CONTROLLERS, BASED ON PC CLONE MOTHER-BOARDS BUT WITH SOFTWARE IN ROM). ALLOWS(PROGRAMMING IN HIGH-LEVEL LANGUAGE AND LESS EXPENSIVE).

COMPLEX CHEMICAL EQUILIBRIA CALCULATIONS APPLIED TO THE SYNTHESIS OF INORGANIC SUPERCONDUCTOR PRECURSORS. D. H. DOUGHTY, SANDIA NATIONAL LABORATORIES, ALBUQUERQUE, NM 87185 P.O. BOX 5800, DIV 1846
OFFERS SEVERAL ADVANTAGES OVER(SUPERCONDUCTORS FROM PRECIPITATED POWDERS, SUPERCONDUCTOR FROM THE METAL OXIDE ROUTE, HOMOGENEITY, STOICHIOMETRY CONTROL, EASE OF SUBSEQUENT PROCESSING). CONTROLLED PRECIPITATION OF PRECURSOR POWDER IS NOT STRAIGHTFORWARD(BECAUSE OF POSSIBLE FORMATION OF SOLUBLE METAL COMPLEXES AND AMPHOTERIC NATURE OF HYDROLYSIS PRODUCTS). DEVELOPED(SOFTWARE TO PERFORM COMPLEX CHEMICAL EQUILIBRIUM CALCULATIONS TO GUIDE THE SYNTHESIS). PROGRAM IS WRITTEN FOR(LOTUS 1-2-3 SPREADSHEET). DESCRIBED(THE USE OF THE PROGRAM TO PREPARE INORGANIC SUPERCONDUCTORS IN THE LaSiCuO AND YBaCuO SYSTEMS).

MOLECULAR GRAPHICS ON THE IBM PC USING THE ASYST PROGRAMMING ENVIRONMENT. R. W. KREILICK, DEPARTMENT OF CHEMISTRY, UNIVERSITY OF ROCHESTER, ROCHESTER, NEW YORK 14627

WRITTEN USING ASYST PROGRAMMING LANGUAGE(A MOLECULAR GRAPHICS PROGRAM). THIS PROGRAM ALLOWS(INPUT ATOMIC COORDINATES FROM X-RAY CRYSTALLOGRAPHIC DATA TO GENERATE 3-D IMAGES OF MOLECULES). POSSIBLE(ROTATE AND TRANSLATE). THE PROGRAM CAN WORK WITH(TWO STRUCTURES AND ROTATE ONE MOLECULE WITH RESPECT TO A SECOND MOLECULE). STUDIED STRUCTURE OF COMPLEXES BETWEEN(DNA AND PORPHIRIN).

CHEMICAL APPLICATION OF LOTUS 1-2-3:

MONITORING INSTRUMENT OR PRODUCT QUALITY USING LOTUS 1-2-3. G. I. OUCHI, LABORATORY PC USERS GROUP, 5989 VISTA LOOP, SAN JOSE, CA 95124
TEL:(408)723-0947

THE QUALITY OF THE DATA IS INSURED BY (LOTUS 1-2-3, WITH ITS INTEGRATED SPREADSHEET, DATA MANAGEMENT AND GRAPHICS).

CONNECTING LOTUS 1-2-3 DIRECTLY TO ANALYTICAL INSTRUMENTATION WITH LOTUS MEASURE. J. TUNG, LOTUS DEVELOPMENT CORP., 55 CAMBRIDGE PARKWAY, CAMBRIDGE PARKWAY, CAMBRIDGE, MA 02142

LOTUS MEASURE IS DESIGNED FOR(COMPATIBILITY WITH A WIDE RANGE OF INSTRUMENTATION, ABLE TO SEND OUT SETUP AND CONTROL COMMANDS AND THEN STORE THE INCOMING DATA DIRECTLY INTO LOTUS 1-2-3 FOR ANALYSIS AND DISPLAY).

ICP-AES DATA REDUCTION USING LOTUS 1-2-3. J. M. CANNON, MIDWEST RESEARCH INSTITUTE, 425 VOLKER BOULVARD, KANSAS CITY, MISSOURI 64110

HAVE BEEN QUICKLY REDUCED TO FINAL REPORT FORM(THE DATA GENERATED FROM AN MULTIELEMENT/MULTISAMPLE INDUCTIVELY COUPLED PLASMA ATOMIC EMISSION SPECTROSCOPY ANALYSES, USING THE LOTUS 1-2-3).

DECONVOLUTION OF F19 NMR SPIN LATTICE RELAXATION DATA FOR COMPRESSED CF4 USING LOTUS 1-2-3. J. W. ROOT, LOS ALAMOS COMPUTING SERVICES, P.O. BOX 986, LOS ALAMOS, NEW MEXICO 87544-0986

LOTUS 1-2-3 HAS BEEN USED TO(DECONVOLUTE THE NET RELAXATION DATA FOR COMPRESSED CF4 AT 298 K, AND DEVELOP A NEW EMPIRICAL KINETIC MODEL FOR REPRESENTING THE RELAXATION BEHAVIOR OF THE SYSTEM).

SIMULATION OF ROTATIONAL SPECTRA USING LOTUS 1-2-3. I. J. LEVY, DEPARTMENT OF CHEMISTRY, GORDON COLLEGE, WENHAM, MASSACHUSETTS 01984

ROTATIONAL SPECTRA OF DIATOMIC MOLECULES ARE GENERATED (BY THE LOTUS 1-2-3 MACRO FACILITY). THE POWERFUL GRAPHICS CAPABILITY IS USED TO(DISPLAY SPECTRA).

USES OF LOTUS TO ANALYZE DATA OF A COLLEGE BIOCHEMISTRY LABORATORY.
P. WITONSKY, DEPARTMENT OF CHEMISTRY, WEST CHESTER UNIVERSITY, WEST CHESTER,
PA 19383

THE LOTUS HAS BEEN INTEGRATED INTO THE BIOCHEMISTRY LAB(GRAPHING ABSORBANCE
VS. AMOUNT OF PROTEIN, ABSORBANCE VS. AMOUNT OF PROTEIN IN ENZYME KINETICS,
LINEWEAVER-BURK DOUBLE RECIPROCAL PLOTS, %INHIBITION VS. SUBSTRATE CONCENTRA-
TION, DETERMINATION OF THE RADIOPURITY OF ATP BY COUNTING DIFFERENT AREAS OF A
THIN LAYER CHROMATOGRAM)

THE USE OF LOTUS 1-2-3 IN CHEMICAL EDUCATION. J.S. LEVKOV, DEPARTMENT OF
CHEMISTRY, IONA COLLEGE, 715 NORTH AVENUE , NEW ROCHELLE, N. Y. 10801
STUDENTS HAVE USED THE LOTUS 1-2-3 FOR PRODUCING LABORATORY REPORTS AND
SOLVING HOMEWORK PROBLEMS.

THE PC-PANDIT: A LOTUS 1-2-3 DATABASE FOR PROBLEM SOLVING IN PHYSICAL
CHEMISTRY. B. D. JOSHI, DEPARTMENT OF CHEMISTRY, STATE UNIVERSITY OF NEW YORK,
GENESECO, NEW YORK 14454
SET_UP(PHYSICAL CHEMISTRY DATABASE CALLED THE PC-PANDIT WITHIN THE LOTUS
1-2-3 ENVIRONMENT, IBM PC/XT). THE PANDIT(CAN BE SEARCHED FOR THE NEEDED DATA
DURING A PROBLEM SOLVING SESSION., 1. GENERAL PHYSICAL CHEMISTRY DATA, 2.
EQUILIBRIUM RELATED DATA, 3. STRUCTURE RELATED DATA, 4. DYNAMICS RELATED
DATA.)

CONSIDERATION OF THE NEED FOR CUSTOM DATA ACQUISITION SOFTWARE.
K. L. RATZLAFF, INSTRUMENTATION DESIGN LABORATORY, UNIVERSITY OF KANSAS,
LAWRENCE, KANSAS 6605
PRESENTED(A GENERAL APPROACH TO THE APPLICATIONS OF REAL-TIME PROCESSING
AND/OR REAL-TIME CONTROL, USING HIGH-LEVEL LANGUAGE TO IMPLEMENT CONCURRENCY)
. EXAMPLES(PHYSIOLOGY, CHROMATOGRAPH, PICOSECOND LASER SPECTROSCOPY).

INTERFACING INFRA-RED SPECTROMETERS. F. A. BRAND, CHEMISTRY DEPARTMENT,
TRENTON STATE COLLEGE, PENNINGTON ROAD, CN 4700, TRENTON, NEW JERSEY 08650.
DEVELOPED(A SOFTWARE SYSTEM FOR INFRA-RED SPECTROSCOPY, FOR IBM PC OR
COMPATIBLE INTERFACED VIA A 12-BIT AD CONVERTER). SEARCHED(THE ALDRICH-NICOLET
IR PC-BASED DATABASE, AFTER PICKING CHARACTERISTIC ABSORPTIONS, TO FIND POSSI-
BLE MATCHING SPECTRA). DISCUSSED(DIFFERENT APPROACHES AND TRADE-OFFS IN
DATA SAMPLING, SPECTRAL CALIBRATION, BAND SELECTION AND DATABASE SEARCHING,
IN TERMS OF EFFECTIVE USER INTERACTION AND INSTRUMENT CONTROL).

INTEGRATED SOFTWARE: THE USE OF THE ASYST PROGRAMMING ENVIRONMENT FOR EPR
AND ENDOR SPECTROSCOPY. R. W. KREILICK, DEPARTMENT OF CHEMISTRY, UNIVERSITY OF
ROCHESTER, ROCHESTER, NEW YORK 14627

THE ASYST PROGRAMMING LANGUAGE INTEGRATES(DATA ACQUISITION, APPLIED
NUMERICAL ANALYSIS, GRAPHICS). COMPUTATIONAL SPEED OF THE LANGUAGE RUNNING ON
AN IBM PC IS COMPARABLE(FORTRAN ROUTINES RUNNING ON MINICOMPUTERS).
THE ANALOG DATA FROM A BRUKER ER2000 EPR SPECTROMETER DIGITIZED(METRABYTE
DAS-16 BOARD, READ INTO ASYST ARRAY). THE MAGNETIC FIELD IS READ(A BRUKER
GAUSSMETER, RS-232C LINE). THE RF FREQUENCY SWEEP FOR ENDOR SPECTROMETER
PRODUCED(PTS FREQUENCY SYNTHESIZER, ASYST ROUTINES CONTROLLING INTEL 8255)
THE SPECTRA ARE TRANSFERRED VIA LAN(SERVER DISK FOR SUBSEQUENT ANALYSIS WITH
SIMULATION SOFTWARE WRITTEN WITH ASYST).

USING ASYST FOR DATA ACQUISITION OF PULSE OUTPUT. G. ABRAHAM, FOOD AND
FEED PROCESSING UNIT, SOUTHERN REGIONAL RESEARCH CENTER, USDA, ARS, 1100
ROBERT E. LEE BLVD., NEW ORLEANS, LA 70124

DEVELOPED(A PROCEDURE FOR READING A PULSE COUNTER, USING ASYST). A 5-VOLT
PULSE IS SENT OUT FROM A TITRATOR(FOR EACH 0.005ML OF TITRANT DELIVERED,
ACCUMULATED BY A DATA ACQUISITION UNIT CONTAINING A 16-BIT COUNTER). THE
ASYST ROUTINE PERIODICALLY READS(THE COUNTER TO CONVERT THE PULSES TO VOLUME
UNITS AND GIVES THE REAL-TIME PLOT).

INTERFACING WITH LABTECH NOTEBOOK. F. A. BRAND, CHEMISTRY DEPARTMENT,
TRENTON STATE COLLEGE, PENNINGTON ROAD, CN4700, TRENTON, NEW JERSEY 08650
LABTECH NOTEBOOK(AN INTEGRATED GENERAL PURPOSE SOFTWARE SYSTEM FOR DATA
ACQUISITION, ANALYSIS AND PROCESS CONTROL ON THE IBM PC AND COMPATIBLES
, CAN BE MENU OR COMMAND DRIVEN). TRANSFER OF THE DATA TO OTHER SOFTWARES
SUCH AS(LOTUS, RS-1, CHEMTEXT).

DATA ACQUISITION USING THE MICROVAX VAXLAB SYSTEM. R. L. DEMING, DEPARTMENT OF CHEMISTRY AND BIOCHEMISTRY, CALIFORNIA STATE UNIVERSITY, FULLERTON CA 92634.

THE SYSTEM USES(STANDARD OPERATING SYSTEM, HIGH LEVEL AND WELL INTEGRATED LANGUAGES/FORTRAN, BASIC, C, PASCAL/, A HOST OF SUBROUTINE CALLS FOR DATA ACQUISITION DEVICES/AD,DA,PARALLEL, IEEE-488/, SIGNAL PROCESSING AND GRAPHICS)

COMPUTER SIMULATED CHROMATOGRAMS FOR THE EVALUATION OF ELECTRONIC INTEGRATORS. A. N. PAPAS, U.S. FOOD & DRUG ADMINISTRATION, 109 HOLTON ST., WINCHESTER, MASS., 01890

MATHEMATICALLY MODELLED AND COMPUTER SIMULATED CHROMATOGRAMS IS USED(TO OBJECTIVELY EVALUATE THE QUANTITATION OF SEVERAL INTEGRATORS)

A PROGRAMMER'S VIEW OF CHROMATOGRAPHIC DATA PROCESSING. J. H. NICKEL, ABI ANALYTICAL, BROWNLEE DIVISION, 2045 MARTIN AVENUE, SUITE 204, SANTA CLARA, CA 95050.

DISCUSSED(THE DEVELOPMENT OF A CHROMATOGRAPHIC SOFTWARE PACKAGE ON A MS-DOS, HOW DOES THE AUDIENCE, FEATURE SET, ALGORITHMS, DEVELOPMENT LANGUAGE TO PRODUCE A VIABLE PRODUCT).

A REAL-TIME CHROMATOGRAPHIC DATA ACQUISITION AND PROCESSING SYSTEM FOR THE APPLE MACINTOSH COMPUTER. R. F. BENSON, RAININ INSTRUMENT COMPANY, INC., 1780 FOURTH STREET, BERKELEY, CALIFORNIA 94710

A SYSTEM FOR THE MACINTOSH COMPUTER(FOR THE REAL-TIME COLLECTION AND PROCESSING OF CHROMATOGRAPHIC DATA). DISCUSSED(PEAK DETECTION ALGORITHMS, WINDOWS, HIERARCHICAL MENUS, CALCULATION IN REAL TIME, THE SWITCHER, PRINTER SELECTION)

THE USE OF MINITAB STATISTICAL PROGRAM TO CALCULATE CHROMATOGRAPHIC CALIBRATION, ITS CONFIDENCE INTERVAL, RESPONSE ERROR BOUNDS, ESTIMATED AMOUNTS AND ESTIMATED AMOUNT INTERVALS. D. A. KURTZ, PESTICIDE RESEARCH LABORATORY, DEPARTMENT OF ENTOMOLOGY, PENNSYLVANIA STATE UNIVERSITY, UNIVERSITY PARK, PA 16802

MINITAB(A PROGRAM TO CALCULATE REGRESSION EQUATIONS AND FUNCTIONS ASSOCIATED WITH CHROMATOGRAPHIC CALIBRATION CALCULATION). EXAMPLES DESCRIBED(SHOW THE TRANSFORMATION OF RESPONSE DATA TO CONSTANT VARIANCE ACROSS THE GRAPH AND THE TRANSFORMATION OF AMOUNT DATA TO CONFORM TO THE GIVEN MODEL REGRESSION EQUATION).

COMPILATION OF A CAPILLARY GAS CHROMATOGRAPHIC DATA BASE BY THE TOTAL CHROMATOGRAM METHOD. I. H. (MEL) SUFFET, DEPARTMENT OF CHEMISTRY, DREXEL UNIVERSITY, PHILADELPHIA, PA, 19104

A METHOD DEVELOPPED(TO COMPARE THE CHROMATOGRAPHIC PEAKS OF A NUMBER OF CAPILLARY GC CHROMATOGRAMS /OF 300 PEAKS EACH/ BY COMPILING A TOTAL CHROMATOGRAM DATA BASE). THE COMPILED CHROMATOGRAM CONTAINS(THE PEAK AREAS AND RETENTION TIMES OF THE IDENTICAL PEAKS IN ALL THE SAMPLES). RETENTION TIME NORMALISATION AND RUBBERBAND INDEXING UTILIZED(TO REDUCE RETENTION TIME ERRORS BETWEEN CHROMATOGRAMS, TO ESTIMATE PEAK MATCHING INTERVAL FOR RECOGNITION OF IDENTICAL PEAKS AMONG CHROMATOGRAMS). THE STUDY INDICATES(THE RETENTION TIME DEVIATIONS OF THE CHROMATOGRAPHIC INTERNAL STANDARDS MAY BE USED TO SCREEN OUT CHROMATOGRAPHIC DATA FOR QUALITY ASSURANCE APPLICATION).

CALIBRATION AT THE LIMIT: A COMPARISON OF PRACTICAL METHODS FOR ESTIMATING DETECTION LIMITS. S. L. MORGAN, DEPARTMENT OF CHEMISTRY, UNIVERSITY OF SOUTH CAROLINA, COLUMBIA, SC 29208

PRESENTED(METHODS FOR ESTIMATING DETECTION LIMITS USING CALIBRATION DATA AND ESTIMATED BASELINE NOISE LEVELS). ESTIMATION OF DETECTION LIMIT AND ITS ASSOCIATED UNCERTAINTY INFLUENCED BY(THE CHOICE OF EXPERIMENTAL DESIGN, THE CHOICE OF MODEL, THE LEVEL OF BASELINE NOISE).

(文責 内野 正弘)

MEETINGS

8-9 October 1987

Fourth European Seminar and Exhibition on Computer-Aided Molecular Design.

Helsingor, DENMARK

Contact Penny Robinson, IBC Technical Services, Ltd., Bath House, 56 Holborn Viaduct, London EC1A 2EX, ENGLAND. 01-236-4080.

Telex: 888870 IBC G.

8-11 November 1987.

Chemical Information Symposium.

Contact Arleen Somerville, Chemistry Librarian, Rush Rhees Library, University of Rochester, Rochester, NY 14627. 716-275-4495 or 275-4487

1-4, December 1987.

Third SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing. Los Angeles, CA.

Contact SIAM Conference Coordinator, Suite 1400, Architects Building, 117S. 17th Street, Philadelphia, Pa 19103-5052. 215-564-2929.

4-7 April 1988.

SCRI-Chemistry Workshop Molecular Mechanics and Molecular Dynamics. Tallahassee, FL.

Contact Delos F. DeTar, Department of Chemistry, Florida State University, Tallahassee, FL 32306-3006.

8-10 August 1988.

The Seventh Annual Molecular Graphics Society Meeting.

San Francisco, CA.

Contact Dr. T. Ferring, University of California, San Francisco, CA 94143.

*
* 本誌への寄稿のお願い *
* *
* *
* *
* *
* 本CICSJ Bulletinでは、部会員の方々の寄稿をお待ちしております。 *
* 本誌に相当と思われる原稿を出来ればワープロ原稿（A4またはB5）にてお送り下さい。 *
* 会員広場への投稿或いは海外で開催されるシンポジウム等のニュース・予告などでも結構です。 *
* *
* 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 *
* *

文 献 紹 介

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

JANUARY 1987 Vol. 64, No.1

Searching Chemical Abstracts Online in Undergraduate Chemistry: Part 1. CA File, Boolean, and Proximity Operators, *Miroslav Krumpoic, Diana Trimakas, and Connie Miller* Computer Series, 79

Using "Electron Laboratory Notebook" Software in the Instrumental Analysis Course, *Michael F. Delaney*, p.29

The Use of Commercial Spreadsheet Programs in the Science Laboratory, *Jerome S. Levkov*, p.29

FEBRUARY 1987 Vol.64, No.2

Computer Series, 80

ChemPlate and Hopkins, a Template and Font for Drawing Molecular Structures with the Macintosh Computer, *Jin Ru Hwu, John M. Wetzel, and Jeffrey A. Robl*, p.135

Using a Spreadsheet To Calculate the Fugacity of a van der Waals Gas, *Douglas A. Coe*, p.137

March 1987 Vol. 64, No.3

Computer Series, 81

A Programming Utility for Animation, *Victor I. Bendall*, p.236

An Organic Synthesis Program for Allied Health Chemistry, *Patrick Flash*, p.238

Computer Program for Allocation of Organic Quantitative Analysis Unknowns, *Ann L. Pontius and Michael E. Kurz*, p.239

Color Images of Molecules, *John J. Farrel*, p.240

A Commodore Microcomputer/Mettler 440, Balance Interface, *Harvey F. Blanck*, p.240

Enhance Your Spreadsheet Capabilities: Frequency Distribution Plots and Sorting, *Richard T. Luibrand and Varon Smith*, p.241

APRIL 1987 Vol. 64, No.4

Computer Series, 82

The Application of Expert Systems in the General Chemistry Laboratory, *Frank A. Settle, Jr.* p.340

Topics in Chemical Instrumentation

Computer Interfacing to Laboratory Instruments: How to Minimize Noise Interferences, *Mary Karpinski*

JUNE 1987 Vol. 64, No.6

Computer Series, 83

A three-Dimensional Computer Animation of a Potential Energy Surface, *Philip G. Butcher and Michael Mortimer, Barrie G. Whatley*, p.495

Numerical Solutions of Kinetic Equations on a Spreadsheet, *Douglas A. Coe*, p.496

Huckel MO and Theory Electron Spin Resonance in the Spectroscopy Course, *Ronald D. Mckelvey* p.497

Molecular Orbital Calculation Using the Simple Huckel Method, *Jonathan H. Reeder*, p. 499

The Thin/Lead Solid/Liquid Phase Diagram: A Computer-Controlled Experiment, *Kathryn R. Williams, John R. Eyley, and Samuel O. Colgate*, p.499

An Inexpensive Linear Thermistor Thermometer for Cryoscopic and Calorimeter Measurements and Lecture Demonstrations, *James W. Beatty and Todd B. Colin*, p.500

Microcomputers and Chemical Education: A Compilation of References, *James A. Wood*, p. 501

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

1987年(5月) 第27卷第2号 发表题目、著者、頁

Evolution of Information Technology and Its Impacts on Chemical Information, *Ronald L. Wigington*, p.51

Chemical Information Flow across International Chemical Information Activities: Present Status and Prospect, *Hideaki Chihara*, p.59

Molecular Complexity: A Simplified Formula Adapted to Individual Atoms, *James B. Hendrickson, Ping Huang, and Glenn Toczko*, p.63

An Algorithm To Identify and Count Coplanar Isomeric Molecules Formed by the Linear Fusion of Cyclopentane Modules, *Seymour B. Elk*, p.67

Topological Considerations Subtly Inherent in the Formation and Subdivision of Fused vs. Bridged Ring Compounds, *Seymour B. Elk*, p.70

DARC System: Notions of Defined and Generic Substructures. Filation and Coding of FREL Substructure (SS) Classes, *Jacques-Emile Dubois, Annick Panaye, and Roger Attias*, p.74

Topological Torsion: A New Molecular Descriptor for SAR Applications. Comparison with Other Descriptors, *Ramaswamy Nilakantan, Norman Bauman, J.Scott Dixton, and R. Venkataraghavan*, p.82

SIMIPS: Secondary Ion Mass Image Processing System, *Yong-Chien Ling, Mark T. Bernius, and George H. Morrison*, p.86

JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Volume 8, Number 4 June 1987

Converged Calculation of Rotational Energy Transfer in HF-HF Collisions, *D. W. Schwenke and D. G. Truhlar*, p.282

On Madelung's Contact, *K. F. Taylor*, p.291

Transition Structure in a Diabatic Surface Formalism, *F. Bernardi, J. J. W. McDouall, and M. A. Robb*, p.296

Centrifugal Distortions in Molecules: An Ab Initio Approach with Application to Ozone, *L. L. Lohr and A. J. Helman*, p.307

Coupled Equations Approach to Multiphoton Molecular Processes, *A. D. Bandrauk and N. Gélinas*, p.313

Implementation and Applications of Gaussian 82 on a CDC Cyber 205, *A. Rauk and R. Dutler*, p.324

Simulation Studies of Branched Polymer Molecules, *J. E. G. Lipson*, p.333

Chemical Applications of Topology and Group Theory. 23. A Comparison of Graph-Theoretical and Extended Huckel Methods for Study of Bonding in Octahedral and Icosahedral Boranes, *R. B. King*, p.341

Generalized Potential Surfaces under Inclusion of Nuclear Motion, *T. Krüger and K. Jug*, p.350

Analysis of the π -Electronic Structure of Infinitely Large Networks. I. Some Remarks on the Characteristic Polynomial and Density of States of Large Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, *H. Hosoya, M. Aida, R. Kumagai, and K. Watanabe*, p.358

Linear Notations and Molecular Graph Similarity, *W. C. Herndon and S. H. Bertz*, p.367

The Density Amplitude $p^{1/2}$ and the Potential which Generates It, *N. H. March*, p.375

Character Tables and Symmetry Eigenvectors for Two C_{3v} -Rotor Molecular Systems, *Y. G. Smeyers and A. Niño*, p.380

Computational Studies of 1,2-Dithiete and Dithioglyoxal, *J. D. Goddard*, p.389

PERTURB: A Special-Purpose Algebraic Manipulation Program for Classical Perturbation Theory, *L. E. Fried and G. S. Ezra*, p.397

Time Step Error in Diffusion Monte Carlo Simulations: An Empirical Study, *S. M. Rothstein, N. Patil, and J. Vrbik*, p.412

Computational Aspects of Master Equation Transformation in Terms of Moments, *G. Gidiotis and W. Forst*, p.420

Discrete Models of Growth and Dynamical Percolation in Chemistry, *S. J. Fraser*, p.428

The application of Strictly Localized Geminals to the Description of Chemical Bonds, *R. A. Poirier and P. R. Surján*, p.436

Application of the MuMATH Computer Algebra System to Sets of First Order Kinetic Equations of Significance in Chemistry, *C. Trindle*, p.442

- Open-Shell Coupled-Cluster Method: Electron Affinities of Li and Na^{*}, *U. Kaldor*, p. 448
- On the SCF Calculation of Excited States: Singlet States in the Two-Electron Problem, *M. McCourt and J. W. Iver, Jr.*, p. 454
- Numerical Calculation of Eigenvalues for the Schrodinger Equation. III, *J. W. Neuberger and D. W. Noid*, p. 459
- The Shape of Molecular Charge Distributions: Group Theory without Symmetry, *P. G. Mezey*, p. 462
- The Modeling of Chemical Phenomena Using Topological Indices, *D. H. Rouvray*, p. 470
- Theoretical Study of the Addition of Hydrogen Halides to Olefins: A Comparison between (HCL) and (HF) Additions to Ethylene, *C. Clavero, M. Duran, A. Lledós, O. N. Ventura, and J. Bertran*, p. 481
- Bond Critical Points in the Electronic Structures of the Main Group Diatomic Hydrides of Lithium through Bromine, *R. J. Boyd and K. E. Edgecombe*, p. 489
- Some Methods and Applications of Electron Density Distribution Analysis, *J. P. Ritchie, and S. M. Bachrach*, p. 499
- Quasiperiodization in Classical Hyperchaos, *O. E. Rössler and M. Hoffmann*, p. 510
- Innate Degree of Freedom of a Graph, *D. J. Klein and M. Randić*, p. 516
- Graph Generators, *M. Randić, W. L. Woodworth, A. F. Kleiner, and H. Hosoya*, p. 522
- Stereotopological Indices for a Family of Chemical Graphs, *K. C. Millett*, p. 536
- Computer Enumeration and Generation of Physical Trees, *J. V. Knop, W. R. Muller, K. Szymanski, H. W. Kroto, and N. Trinajstić*, p. 549
- Towards a Quantum Chemical Software Package Utilizing Transferable Fragments as Molecular Building Blocks, *G. Nāray-Szabó, G. Kramer, P. Nagy, S. Kugler*, p. 555

Volume 8 Number 5 July/August 1987

- An Algorithm for Geometry Optimization Without Analytical Gradients
Jon Baker, p. 563
- An Objective Computer-Oriented Method for the Calculation of Formation Constants from the Formation Function. A Weighted Least-Squares Curve Fitting
Yousry L. Sidrak and A. Aboul-Seoud, p. 575
- The MMP2 Computational Method
Joseph T. Sprague, Julia C. Tai, Young Yuh, and Norman L. Allinger, p. 581
- Configurational Specificity of Stacking Interactions in DNA Base Pairs: A Computational Analysis
Nitisch K. Sanyal, M. Roychoudhury, (Kim) Kavita R. Ruhela, and Sugriya Nath Tivari, p. 604
- Fast Vector-Scalar-Multiply-and-Add Subroutines for VAX Computers
Gerardo Cisneros, Carlos F. Bunge, and C. C. J. Roothaan, p. 618
- Algorithm for Rapid Calculation of Hessian of Conformational Energy Function of Proteins by Supercomputer
Hiroshi Wako and Nobuhiro Go, p. 625

- Strategies for Vectorizing the Sparse Matrix Vector Product on CRAY XMP, CRAY 2, and CYBER 205
Charles W. Bauschlicher, Jr. and Harry Partridge , p. 636
- A Specific Inhibitor Design Approach by Means of Molecular Dynamics Calculation for Porcine Pancreatic Elastase
T. Fujita , p. 645
- Strain Energy Minimization Study of the Mechanism of, and the Barrier to, Conformational Interconversion in Five-Membered Diamine Chelate Rings
Trevor W. Hambley , p. 651
- Molecular Valence Calculations of Cyclohexasulfur, Cycloheptasulfur, and Cyclooctasulfur
Risto S. Laitinen, Bruce Randolph, and Tapani A. Pakkanen , p. 658
- Basis Sets for Molecular Interactions. 1. Construction and Tests on (HF)₂ and (H₂O)₂
Zdzislaw Latajka and Steve Scheiner , p. 663
- Basis Sets for Molecular Interactions. 2. Application to H₃N—HF, H₃N—HOH, H₂O—HF, (NH₃)₂, and H₃CH—OH₂
Zdzislaw Latajka and Steve Scheiner , p. 674
- Two Approaches to the Calculation of Molecular Resonance States: Solution of Scattering Equations and Matrix Diagonalization
M. V. Basilevsky and V. M. Ryaboy , p. 683
- The Inverse Problem of Isomer Enumeration
Werner Hässelbarth , p. 700
- Molecular Graphs as Topological Objects in Space
Jonathon Simon , p. 718
- Hartree Fock Instabilities of Sulfur-Nitrogen Systems: S₂N₂
W. G. Laidlaw and M. Benard , p. 727
- Ab-Initio* MRD-CI Calculations on >A—NO₂ Decomposition Pathway of Nitrobenzene
Joyce J. Kaufman, P. C. Hariharan, Szczepan Roszak, and Marc van Hemert , p. 736
- Hamiltonian Dynamics of Chemical Reactions. Consecutive First-Order Reactions and Reactions Possessing One Autocatalytic Intermediate
T. Georgian, J. M. Halpin, and G. L. Findley , p. 744

Volume 8 Number 6 September 1987

- Column Design. 3. Theoretical Studies of a Chiral Stationary Phase Used in Column Chromatography
K. B. Lipkowitz, D. A. Demeter, C. A. Parish, and J. M. Landwer , p. 753
- Ab initio* Study of the He(¹S)—Li₂(³Σ_g⁺) Interaction by the SCF and MP2 Methods
M. A. Matias and A. J. C. Varandas , p. 761
- CNDO Force Constants for Glucose
D. M. Back and P. L. Polavarapu , p. 772
- Electrostatic Interaction of a Solute with a Continuum. Improved Description of the Cavity and of the Surface Cavity Bound Charge Distribution
J. L. Pascual-Ahuir, E. Silla, J. Tomasi, and R. Bonaccorsi , p. 778
- A Study of Basis Set Effects on Structures and Electronic Structures of Phosphine Oxide and Fluorophosphine Oxide
A. Streitwieser, Jr., R. S. McDowell, and R. Glaser , p. 788

- Theoretical Studies on the Acid Hydrolysis of Methyl Carbamate
I. Lee, C. K. Kim, and B. C. Lee, p. 794
- Molecular Dynamics Simulation of the 1:1 Enzyme-Ligand Complex between
 Porcine Pancreatic Elastase and Acetyl-Alanine-Proline-Alanine
T. Fujita and E. F. Meyer, Jr., p. 801
- Basis Set and Correlation Effects on Computed Positive Ion Hydrogen Bond
 Energies of the Complexes $AH_n \cdot AH_{n+1}^{+1}$: $AH_n = NH_3, OH_2,$ and FH
J. E. Del Bene, p. 810
- Towards a Valence-Orbital/Bond-Orbital Description of Biochemical H-
 Bonds from *Ab Initio* Calculations
F. Zuccarello and G. Del Re, p. 816
- Revised Algorithms for the Build-Up Procedure for Predicting Protein
 Conformations by Energy Minimization
K. D. Gibson and H. A. Scheraga, p. 826
- Improvement of the Hydrogen Bonding Correction to MNDO for Calculations
 of Biochemical Interest
A. Goldblum, p. 835
- Topology of Conical Intersections and Jahn-Teller Crossing: Application to
 the Standard Model for XY_4 Molecules in T_2 Ground States
D. Liotard and M. Roche, p. 850
- Molecular Orbital Theory of the Properties of Inorganic and Organometallic
 Compounds. 5. Extended Basis Sets for First-Row Transition Metals
K. D. Dobbs and W. J. Hehre, p. 861
- Molecular Orbital Theory of the Properties of Inorganic and Organometallic
 Compounds. 6. Extended Basis Sets for Second-Row Transition Metals
K. D. Dobbs and W. J. Hehre, p. 880
- Atomic Charges Derived from Electrostatic Potentials: A Detailed Study
L. E. Chirlian and M. M. Francl, p. 894
- Computer Enumeration of Polyhexes Using the Compact Naming Approach
J. Cioslowski, p. 906

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

1987年第5卷第2号(6月) 論文題目、著者、頁

Perq interactive molecular modelling system, *D. M. Ricketts*, p.63

CCP5: a collaborative computational project for the computer simulation of condensed phase, *W. Smith*, p.71

3D Docking device for molecular modelling, *T. J. O'Donnell and K. D. Mitchell*, p.75

Computer program suite for the calculation, storage and manipulation of molecular property and activity descriptors, *R. C. Glen and V. S. Rose*, p.79

Colour Plates, p.88

Electrostatic potentials of tumour promoters, *A. F. Cuthbertson and C. Thompson*, p.92

Molecular recognition: 3D surface structure comparison by gnomonic projection, *P. L. Chau and P. M. Dean*, p.97

Simple protein model building tool, *K. Toma*, p.101

Ribbon models of macromolecules, *M. Carson*

COMPUTERS & CHEMISTRY

1987年 第11卷第3号 論文題目、著者、頁

Data processing system for the management of experiments on electrochemical generators, *A. Mendiboure and C. Delmas*, p.153

An expert-system for the computer-assisted selection of bacterial strains for bioconversions, *Dan Lerner, Philippe Pingand, Christian Federighi, Claude Maudelonde and Pascal Meriaux*, p.159

Direct analysis of chemical relaxation signals by a method based on the combination of laplace transform and Padé approximants, *J. Aubard, P. Levoir, A. Denis and P. Claverie*, p.163

An algorithm for the numerical evaluation of the reversible Randles-Sevcik function, *F. G. Lether and P. R. Wenston*, p.179

A nonlinear curve fitting program for functions with separable parameters, *Fernando J. Vega-Catalan*, p.185

A general method for the determination of the stoichiometry of unknown species in multicomponent systems from physicochemical measurements, *Jaroslav Kostrowicki and Adam Liwo*, p.195

A microcomputer based system for the collection and processing of multidimensional fluorescence data, *Karen Wiechelman and Roberto Brunel*, p.211

A method for analyzing exponential decays, *Paul Marshall*, p.219

A faster SPACFIL, *J. Palm and A. P. Sundin*, p.223

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

- 1986年 第5卷 第4号 发表题目、著者、頁
- QSAR of Steroids, *F. J. Zeelen*, p.131
- Three-Dimensional Quantitative Structure-Activity Relationships. 2. Conformational Mimicry and Topographical Similarity of Flexible Molecules, *J. Labonowski, I. Motoc, C. B. Naylor, D. Mayer and R. A. Dammkoehler*, p.138
- Electronic Structure and Serotonin Receptor Binding Affinity of 7-Substituted Tryptamimes, *J. S. Gomez-Jerica, D. Morales-Lagos, B. K. Cassels and J. C. Saavedra-Aguilar*, p.153
- Analysis of Binding Energetics in Paper and Thin-Layer Chromatography, *P. S. Magee*, p.158

- 1987年 第6卷 第1号 发表题目、著者、頁
- Polychlorinated Dibenzofuran (PCDF) Binding to the Ah Receptor(s) and Associated Enzyme Induction. Theoretical Model Based on Molecular Parameters, *G. Long, J. McKinney and L. Pedersen*, p.1
- Inclusion of Symmetry as a Shape Attribute in Kappa Index Analysis, *L. B. Kler*, p.8
- Hydrophobic Properties of Chromones and Flavones. Relationships between Octanol/Water Partition Coefficients and RP-HPLC Capacity Factors, *M. Recanatini*, p.12
- Application of the ORMUCS Method to Structure-Activity Studies on the Fungicidal Activity of Mepronil Derivatives, *Y. Takahashi, S. Sasaki, M. Tmaru, I. Shimazaki, S. Ito, S. Kawada and Y. Suda*, p.17
- Effect of Substituents at Position 2 on the ¹H NMR Chemical Shift of Protons of 2-Methylbenzimidazole Derivatives, *A. Nasal, R. Kaliszan, and W. Kuzmierkiewicz*, p.22

関 連 行 事

1988年 情報学シンポジウム

- 目 的** 科学における情報の円滑な流通と高度利用を促進するため、データ・知識に関する基本的問題とその整備・利用に関する討議を行い、研究交流をはかることを目的とする。本シンポジウムは1984年以来毎年開催されているものである。
- 内 容** データ・知識に関する課題を具体化し、その理論化と体系化をめざした下記のような論文を募集する。
1. データ・知識の整備：記述、表現、評価、識別、蓄積など
 2. データ・知識の流通：標準化、媒体変換、分類など
 3. 基礎理論：管理・処理方式、組織化、推論、モデリングなど
 4. 応用：個別的な専門研究、開発用データ・知識統合システム構築法など
- 共同主催** 日本学術会議 学術データ情報研究連絡委員会
学術文献情報研究連絡委員会
情報学研究連絡委員会
情報工学研究連絡委員会
情報処理学会、人工知能学会、日本医学会、日本化学会、
日本数学会、日本地理学会、日本物理学会、
- 後 援** 学術情報センター、計測自動制御学会、国際電信電話株式会社、
情報科学技術協会、情報通信学会、電子情報通信学会、
日本医療情報学会、日本科学技術情報センター、日本機械学会、
日本金属学会、日本原子力学会、日本材料科学会、日本材料学会、
日本生化学会、日本電信電話株式会社、日本動物学会、
日本農学会、日本分子生物学会、日本分析化学会、日本薬学会、
- 日 時** 1988年 1月19日(火)～20日(水) 9:30～17:00
- 場 所** 日本学術会議(地下鉄千代田線 乃木坂駅下車)
- 参加申込み** 氏名、連絡先、職名、資料必要の有無を葉書に記入し下記に申し込む。
(当日受付もあるが資料不足の際は事前登録者を優先する)
- 参加費** 共催学協会員 5,000円 学生 1,500円 一般 7,000円(資料代として)
- 宛 先** 情報処理学会 シンポジウム担当
〒106 東京都港区麻布台 2-4-2 保科ビル 3F TEL 03-505-0505
木村保明

特別企画「計算化学特集」原稿公募

昭和63年度1月号に「計算化学特集」を組むことになりました。今回は計算化学関連のQCPEプログラムをできるだけ沢山紹介したいと思います。長さは1件について刷り上がり1～2頁程度、非経験的、半経験的および経験的分子軌道法、分子力学法、分子動力学法または分子モデリング関連のQCPEプログラムを実際に自ら使った体験をまとめて頂きたい。

御寄稿希望者は10月31日(土)までにプログラム名、QCPE番号を担当者までお知らせ下さい。

尚、今回は原稿は不要です。整理の後、原稿締切期日などについてはあらためて御通知します。

担当 〒060 札幌市北区北10条西8丁目 北海道大学理学部 大沢 映二
電話 011-716-2111 (内線3563) FAX 011-716-9611

情報化学部会部会員増加にご協力を！

【昭和62年部会費】	正部会員 (日本化学会会員)	2,000円
	準部会員 (日本化学会非会員)	3,000円
	法人部会員	一口 30,000円 (一口以上)

※ご入会を希望される方は、下記までご連絡下さい。

〒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)

CICSJ Bulletin

Published Bimonthly by Division of
 Chemical Information and Computer Sciences
 The Chemical Society of Japan

日本化学会
 情報化学部会
 Volume 5, Number 6
 November 1987

目 次

部会記事

- 第10回情報化学討論会総括..... 1
 情報化学部会内規..... 14

年会報告 18

会員の広場 19

国際会議

- Pacificchem '89..... 22

海外動向

- Workshop on Molecular Mechanics and Molecular Dynamics 29
 Meetings 30
 Computational Chemistry Gordon Research Conference 30

文献紹介

- Computers & Chemistry (Vol. 11, No. 4) 31
 Quantitative Structure-Activity Relationships
 (Vol. 6, No. 2) 31
 Journal of Computational Chemistry (Vol. 8, No. 7) 32
 Journal of Mathematical Chemistry (Vol. 1, No. 2~No. 3) 33
 Journal of Chemical Information and Computer
 Sciences (Vol. 27, No. 3) 33
 Journal of Molecular Graphics (Vol. 5, No. 3) 34

部会員名簿 35

第10回情報化学討論会 総括

世話人による報告

第10回情報化学討論会が11月6日(金)から8日(日)までの3日間、東京都港区白金5丁目の北里大学白金キャンパスで開催された。同時に開催された第15回構造活性相関シンポジウムと参加登録、懇親会、特別講演(2件)は共通としたが、情報化学討論会の一般講演(34件)とポスターセッション(20件)は北里会館地下の北里ホール、構造活性相関シンポジウムはH号館6階の視聴覚教室を使って行われた。登録者数は全部で600名強となり、近年にない盛会であった。初日の午前中出席者数(情報化学討論会のみ)がおよそ350名、最終日の中野 馨先生の特別講演の聴衆も300名強であった。7日の松井孝司先生の特別講演の折には、用意した550脚の椅子が不足気味となるほどであった。この討論会のますます隆盛となることを望みたいが、だんだん会場の設営やお世話が大変となるであろうことも想像に難くない。

なお本年より講演要旨集の末尾に1件当り半ページの英文概要をつけることとした。また計時用のタイマープログラムは、お茶の水女子大学の藤枝修子先生から頂戴し、一部を書き直して使用した。また、米田部会長の御指示に従い、部会入会申込書(個人用および法人会員用)を受付に置いて頂いたが、ほとんど残らぬほどの好評であった。

討論会当日は元より、ほぼ丸一年間に亘って実際に種々の雑用を巧みにこなして下さった北里大学薬学部の森口郁生教授以下の製剤学教室のスタッフ各位と、薬品分析化学教室の木下俊夫教授、平賀やよい博士ほかの皆様には感謝の言葉もない。

明年の第11回の討論会は京都大学薬学部の町田勝之輔教授がお世話下さることとなり、同じく京都大学農学部の藤田稔夫教授の主催される第16回構造活性相関シンポジウムと同時に京都で行うこととなった。多数の参加を望みたい。

(電気通信大学・山崎 昶)

座長による講演総括

6I01~6I04

6I01(川原ら)「分子設計のための人工知能システムANALGOSの試作」は内容の話題性と聴衆の関心の高さにもかかわらず討論に至らなかった。スライド不調(他山の石としたい)の事態などを座長は早めに察知して適切な処置をとるべきであった。

6I02(樋口ら)「受容サイトの分子認識機構(第2報)」はプログラムAMBERを用いてバインと3種の阻害剤の相互作用の差を説明した。会場からの「疎水性の影響の解釈」、「他の研究者の成果との関連性」に関する質問の指摘内容の当否は別にして、研究発表の価値や倫理にかかわる問題であるから座長は議論を盛上げるべきであった。

6103 (藤原ら)「エキスパートシステムによるケミカルヒートポンプサイクルの探索」はエキスパートシステムの一つの新しい用途を示した。ソルベイ法のように正味の反応が熱力学的検討では進まないことになる場合の対策に関して質問があった。強調点がヒートポンプ設計なのかエキスパートシステムなのか、がよく汲み取れなかった。

6104 (鬼頭ら)「触媒設計支援エキスパートシステムの試作」は、システムに予測させたスチレン合成用触媒5種の内3種は既知であったという見事な発表であった。残りの2種が新触媒発見につながったのか否かは聞き漏らした。また、まずシステムの粹ありき、という方針であるかのような印象も受けないではなかったが、確認を忘れた。とにかく降壇後の雑談の内容からはいよいよ飛躍段階突入かという感じであった。

今後の情報化学討論会ではこの種のテーマの研究発表がますます増えるのは確実である。そうして人工知能やエキスパートシステム技術自体、適用のしかた自体、扱われた化学の内容自体も討論の対象になるにちがいない。

(山形大学 工藤喜弘)

6105~6107

人工知能、知識ベース等々、現在これらの言葉は聊か流行の感があり、今回も6件程の報告があった。そのうち、私は後半の3件を担当させて戴くことになった。その最初は“合成経路選定における動的仮説設定について”と云うタイトルの報告であった。実は有機合成経路の選定に関する知識ベースシステムは依然として処理速度の向上、対象の拡大と云う基本的な問題をかかえている。これらの問題を合成経路の検索空間のしぼり込みの効率、さらには記述空間の拡大の問題としてとらえ、transform の概念をベースにおいて、それらの問題を、まず前者については知識ベースの構造化を進めること、後者については必要に応じて適用すべきtransformを自動的に抽出、生成する3機能を実現することによって進展させ得る、と本件の報告者達は考えて、いろいろ吟味を重ねた、と云う。

そのためまず、transform の適用妥当性を検討し、反応性の類似性を関与する分子間の共通部分の構造のサイズや、組成原子や組成部分構造の反応性の共通性と云う観点から評価することにした。但し、このとき通常の構造表現のみではなく、人間の行う抽象化や特性化の操作も反映した構造表現とし、かつその操作を実現することによりデータベースに用意されていないtransformを動的に生成することにし、これが仮説の設定が動的に行われた事に他ならないと云う立場をとる、と云うのが本報告の趣旨のようである。

その実現法については基礎となる数式を使った説明及びそれをベースにした報告がなされたが、具体的な成果の説明がもう少しほしいようで、これについてはこれからと云う処であろうか。今後の進展を待つことにしよう。

続く“ヒト発癌物質の知識データベース”ではIARCモノグラフの第1巻から31巻迄に掲載されている物質から495物質を選び、それぞれについて物質名、分子式分子量などの基礎的

な項目については基礎事項ファイルとしてすでに構成されているが、構造に関する事項については分子内原子の結合表と三次元座標と、Molecular Modeling法によって作製したP-file、非経験的分子軌道法によって計算したG-file、それにX線結晶解析によるX-fileの三つにまとめたが、P-fileについては122物質、G-fileは34物質、X-fileでは10物質について登録されている、と云うのが現状のようで、本データベースで最も重要と思われる発癌性評価についてはデータの収集の段階で今後の努力にまつことになるようである。

こうした発癌物質の分子レベルでのカタログ化には、それらが化学物質として単一ではなく、分子としての登録がむづかしいこと、命名法が統一化されていないこと、それにCAS番号の変更問題など、いろいろ問題がある。これらのうち後三者は一般にデータベース構成の根幹にかかわる問題ではあるが、これらも含めて今後この種のデータベースをどのようにして知識ベースにして行くのか、と云う事項に関して明確な視点の説明がなかったのは残念であった。

云うまでもない事だが、知識ベースの構成では知識をどのようにしてとりこむか、が大きな問題で、対象分野の専門系とナレッジエンジニアとの協力を必要とし、それ自体労働集約的とならざるを得ない。

もう一つの“CAからの知識ベースの生成”ではかかる視点から自動的に知識ベースを構成し得る事を目指して、CA Search データベースを対象とし、その中の或る特定の項目に関する小さな部分集合をとり上げ、その中に含まれる情報をデータ要素間の関係のみならず、その内容を解析してその知識を充分反映する知識ベースに変換するシステムを目指し、そのための知識ベースの構造を検討した、と云うのが本報告の内容と云えようか。今回の知識ベースはフレームシステムで構成され、対象の情報を各種のフレーム群に分解して記憶するが、CA Searchで一番問題になるのはCSI情報に含まれる説明文の取扱いで、もともと人間相手の表現であるため本質的にアイマイなためにどうしても人間の介入を必要とす事である。

今の処手作業によるローディングを一部行い、文献レコード解析プログラムのプロトタイプを作った段階の由ではあるが、普通のデータベースとどう違うのか、と云うあたりの説明が充分でなく、これが何故に知識ベースなのか、今後これからどう云うメリットが取出されるのか、具体的な説明のほしい処のようであった。

何分にも大きい問題との取組みの割りには極めて短い時間の発表なので意をつくせない点が残ったし、聞く方も正直仲々に理解の行きとどきにくい憾の残る三件ではあった。

(電総研 前田 浩五郎)

6I10. スペクトル情報管理システム-SPECTRA-の開発

ACACSのサブシステムとしてのスペクトル情報の統合システムについて報告された。特徴として、

- (1) MS, IR, $^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$ の各種スペクトルの複合検索が可能
- (2) 上記スペクトルデータベースをホストコンピュータに統合管理し、オンライン検索が可能
- (3) ユーザによるスペクトルデータの登録が可能
- (4) 市販スペクトルデータベースの融合が可能
- (5) 未知スペクトルデータ・波形からの類似スペクトルの検索が可能
- (6) 化合物はグラフィック画面からの構造入力が可能

などの点が強調された。

ユーザによるデータ登録機能は、次の3通りの方式でフロッピディスク(FD)を作成することにより実現されている。

- (1) 分析機器からの出力データを直接FDに書き込む
- (2) 分析機器から通信回線でパソコンに送信し、パソコンによるデータ加工を行った後、FDに書き込む
- (3) チャートリーダーにより記録紙の波形データを読み取り、データ加工を行った後、FDに書き込む

データ登録自体は、それらのFDを経由して行われる。この登録機能は有用であるが、ユーザの測定したデータをどのように評価するかという問題が残されており、他の評価済みのデータと混在させて管理する場合には、注意が必要であることが指摘された。

市販スペクトルデータベースの融合のためには、それぞれのデータベースに対してデータフォーマット変換用のプログラムを開発・準備することで対応している。

6111. イオンクロマトグラフィーデータベースの設計、構築およびその利用

測定イオン種、溶媒液、カラム、検出器、サプレッサー等をデータ項目としたイオンクロマトグラフィーデータベースの構築について報告された。設計方針としては、

- (1) 技術資料作成、市場動向調査に役立てる。
- (2) 装置導入の際の装置概要、分離検出可能物質の調査、あるいは顧客に対する技術サポートに用いる。

などであるとしている。

パソコンデータベースであるため、DBMSとしてはdBASEⅢを使用している。これにより、次のような点の取扱いに対応できたとしている。

- (1) 検索キー項目が多いこと
- (2) データによって、項目数が変化すること
- (3) 構築段階での構造変更
- (4) 分類コードの追加設定
- (5) 情報量の変化に応じたデータファイルの分割、など

データベースの操作のアプリケーションプログラムとして次のものを作成している。

- (1) データの修正・追加
- (2) データの検索・印字
- (3) 統計処理

設計方針に於ける市場動向調査などはこの統計処理プログラムを用いて実現される。

単純検索で3分、統計処理で5分程度の所要時間である。

データベース設計・構築の所要期間は6ヶ月程度である。

クロマトグラフィーのデータ自体の入力が重要であるが、メモリ制約等のために現時点では行っていない。しかしこれに対しては、CD-ROMの利用その他で十分対応出来るのではないかと指摘がなされた。

(国際科学振興財団 中山 堯)

6 I 1 2 ~ 6 I 1 4

6 I 1 2 TOOL-IR 化学文献データベース検索システム (第3版) の開発

(東大大型計セ) 小沢 宏

昭和49年に始まったTOOL-IRによるCAS文献データベース検索システムの最新版が紹介された。著者名からの検索の改良、研究場所からの検索、化合物辞書検索で得られたレジストリ番号の集合を自動的にCASearchの検索入力とするなど、より一層きめの細かい検索機能が用意された。

6 I 1 3 薬学関連学術雑誌の著者付与キーワードと二次情報のキーワードとの比較

(北里大薬) 木下俊夫、平賀やよい、(電通大) 山崎

春季年会の発表では触れられなかった雑誌も含めての発表であった。悪いキーワードを分類すると、多義語、長すぎるもの(15語からなるキーワード・フレーズ)など26種になるという。著者付与キーワードを改善するには、本報告のような調査に基づいた案内手引きが必要であろう。手引きに示す例としては、良い例よりもむしろ悪い例の方が有効とのことであった。

6 I 1 4 化学ドライラボ教育における学習記録と管理

(豊橋技科大) 吉村忠与志ほか

パソコンを使ったCAIシステムの発表である。グラフィクスを使った目からの理解をねらっている点が興味深い。従来の勉強方式であるノートに書いて覚えるやり方と、どのようにマッチングをとっていくかを含めて、発展のために種々の試みがなされることを期待したい。

(情報大 石塚英弘)

7 I 1 5 ~ 7 I 1 7

7 I 1 5 アミノ酸対の出現頻度によるタンパク質分類の方法 (図書館情報大) 中山伸一、吉田政幸

この講演は蛋白質分類のための新しい方法の提案である。一つ目の方法は隣接するアミノ酸対の出現頻度を求め、アミノ酸対の総数400を次元とし、頻度を長さとする空間における蛋白質の位置から近縁関係を分類しようとするものである。この他に蛋白質の鎖長に依存しない改良法も提案され、Dayhoffの分類法とほぼ同じ結果を与えることが実例によって示された。

7 I 1 6 蛋白質立体構造要素データベースとコンピュータグラフィックスとの接続 (旭化成・CS室) 戸潤一孔、田頭瑞加、渡辺博明

Protein Data Bankを元に生成されたりレシヨナルデータベースの構造データをコンピュータグラフィックスで表示するシステムの報告である。データベース中のアミノ酸残基を一つの球としてCPKモデルで表現する。また残基の特性値を色で表現することにより、蛋白質中のある特性を持った残基の分布などを明示することができる。蛋白質の構造と機能の関連を調べるのに有用であると指摘された。

7117 コンピュータグラフィックスによる蛋白質分子間および分子内相互作用の検討 (旭化成・CS室) 戸潤一孔

前講演の延長として、蛋白質分子間の相互作用、分子内の相互作用を考察しながら蛋白質の立体構造を推定するためのグラフィックツールの報告。このツールはVAX-11/730とEvans & Sutherlaend PS 340の上で実現されており、CPKモデルとワイヤーモデルの表現ができる。全体の回転、並進、拡大、縮小がダイヤルを用いて行なえるだけでなく、部分構造の同様の操作も行なうことができ、相互作用のシミュレーションや蛋白質分子のモデリングを可能にしている。

(分子研電子計算機センター 柏木 浩)

7122~7124

このセッションはグラフィックスに関連した3つの発表があった。

分子研の柏木他による「電子構造を映像化するプログラムKORINの開発」は超大型計算機を活用して得られた結果、とくに分子の構造や電子状態をより理解し易くするためにカラーグラフィック表示を行うシステムの紹介であった。1280×1024の高精細の画像が素晴らしかった。

ついで阪大産研の田中他による「材料解析のためのTASMACシステムにおけるIRおよびMCPD-UVの機能と特徴」はNMR、MS、CHN、IR、MCPD-UV等の装置に対するラボラトリーオートメーションシステムのうち赤外、紫外についてデータ収集、解析、および化学構造創生の機能を紹介したものである。ここで取扱っている解析は信号処理の段階のものである。LA関係の発表がいつも少ないが、今後も重要な方向の一つである。

3番目は京大薬の町田他による「分子力学計算による飽和炭化水素の赤外、ラマンスペクトルのシミュレーション」である。赤外、ラマンは汎用の分光手段であるが、NMRなどに比し、シミュレーションの精度が低いのか実用上の問題であるかこの研究では構造、エネルギー、基準振動を統一的に計算できる力場を推定し、それを用いて実測値と一致の良い結果の得られることが報告された。

(筑波大 電子・情報工学系 藤原 謙)

特別講演 I

構造活性相関理論について、ハシシュ-藤田法とALS法を中心に紹介した。

次いで、薬物-受容体相互作用と知識データベースの利用について触れ、コンピュータの役割について説明した。

(北里大学 梅山 秀明)

8125 化学における類推の基礎としての弁別ネット

人工知能の研究の中で「類推」は非常に困難な課題として知られておる。本報告では化学における類推として、分子の構造と性質との間の関係を認め、構造に基づいて性質を推論すること、また逆に与えられた性質を満たすような分子構造を設計することを目標に、anchor (推論対象となる性質発現のもととなる部分構造) をもった化学構造をリンクした弁別ネットの中で類推をしようとするもので期待がある。実施例として質問および検索された構造から酸性度を推論する過程が報告された。しかし課題毎に弁別ネットを組むことになり統一的な議論ができないのが難点であろう。

8126 ACACSにおける高活性化化合物デザイン機能について

分子設計のための統合コンピュータ・システムACACSの中の五つのサブシステムの内の一つSQUAREの報告である。このサブシステムには分子力場計算・量子化学計算を行う部分と構造活性相関解析を行う部分(QSAR)とからなる。本報告では、QSAR部のデータ等の画面入力化されておって容易であり、かつ三種類の解析に共通して使用できることや、実際の予測例が示された。より実用化を目指すのに脂肪族の二置換体以上を考慮するようなシステムへの拡張が期待される。

8127 分子設計支援システムTUTORSにおける候補構造の創出

CASTというプログラムの開発により、構造フラグメント・セットが与えられればそれらを組合わせて、論理的に可能な構造を漏れなく重複なく創り出されることが可能となった。仮に、ある分子機能が複数の構造フラグメントの集合により発現されることが予想される時、これらの構造フラグメントから問題の機能を有する候補構造を総て創出することが出来る。しかし妥当な構造フラグメント・セットの推論や抽出、さらに創出された多数の候補構造から可能性の高い候補構造に絞りこんで行く範疇の研究が今後必要であるが、その困難さはこれまでのものに比較できない位大変なものではないだろうか。

8128 有機合成設計・反応予測システム"AI PHOS"の開発

本報告はこのシステム名が"Artificial Intelligence for Planning and Handling Organic Synthesis"のアクロニムで現されているように人工知能を目指しているものである。この報告で私一番興味があったところは、例題の合成反応における有機化学の常識である反応試薬の選択性が、反応データベース(7112でその管理システムが報告された)と知識ベースとからどのように引出されたのかであったが、それに関する報告がなかったのは残念である。

今回、可成りの予稿集原稿に先を急ぎすぎたような表現が目についた。夢と気負いは研究者にとって大きな推進力であるけれども、報告を聴く者に誤解を招くようであってはならない。それにつけてO先生の回顧談を思い出す。O先生の初めての研究発表が師のN先生によって発表されたとき、ネガティブなデータだけが発表されてポジティブな結果はさして話されなかったので、不満ながらその理由を伺ったところ、この様な発表が次の研究の進展に大切であるとN先生は言われたそうである。討論会で何を討論されてもらいたのかを考える時の参考にされては如何であると思ひ付け加えた。。

8 I 2 9 ~ 8 I 3 1

本セッションではつぎの三件の講演が行われた：

1. 「立体化学的接点照明関数について」(東工大資源研) 内野忠弘
2. 「飽和炭化水素の熱力学的性質と種々のトポロジカルインデックスの間の相関係数の解析」(お茶大理) 高瀬多・細矢治夫
3. 「最大隣接マトリックス法による4結合Concentric Clusterのナンバリングとそれらの系統的誘導」(群馬大工) 佐藤満雄・(ブランデイス大) J. B. ヘンドリックソン

1、3はグラフ理論に関する高度に専門的な研究であって一般化学者にとっては必ずしもよく理解できるものではなかったが、何れも活発な議論を喚起し、熱のこもった討議が行われた。

2はトポロジーで飽和炭化水素同族体の系列を表現しつつ物理的な性質との関連を調べてゆくとトポロジーでカバーできない構造化学的な特徴が顕在している場合、それがあらわになるという事実を述べたもので、化学的内容が極めて明快である為に参加者の興味をそそったと思われる。見出された事実の中で最も重要なのは発表者らの謂う所の「十十」配座が異常な挙動の共通な要因であるという発見であった。立体化学一般に価値の高い成果であると思われる。

(北海道大学理学部 大沢 映二)

8 I 3 2 ~ 8 I 3 4

第3日目午後の講演は、[DV-X α 法による原子分子特性解析手法の開発](日立エネルギー研・田子一農氏ほか)「数式処理を利用した非線形最小二乗計算の自動化」(大阪電気通信大・藤田岩男氏)「プロトンNMRスペクトルデータベースによる定性分析の試み。その1。アルゴリズム」(日立計測・田中保子氏外)の3件であった。それぞれ、スーパーコンピュータ利用のためのベクトル処理アルゴリズムを用いた高速計算プログラムの開発、あるいはパラメータの設定に人手を煩わさずに行える最小二乗法、また、以前報告された炭素-13 NMRのスペクトル検索システムの拡張版ともいえるプロトンNMRスペクトルの検索システムの作成など、極めて興味ある報告であり、午前の部より多少数は減ったものの、最後までほとんど席を立つ聴衆もないほどの密度の高いセッションであった。

(電気通信大学・山崎 純)

特別講演II 中野 馨 「脳の機能を実現する機械」

ハイテク産業の生産の現場で多くのロボットが活躍しているが、それらは人が全ての命令をインプットし、その通りの行動を繰り返すだけである。ところが中野氏が1969年頃から開発を続けているアソシアトロンは、神経回路網のはたらきを真似た学習する機械である。最も素朴な機械は、動いている物体を追う視覚センサーに学習機能をもたせ、常に視野の中央にその物体がとらえられるように視覚センサーを動かす装置や、円運動や直線運動を何回も視覚センサーにフォローさせ、そのセンサーのとらえた動きが円か直線かを答える装置などである。

通常のマイコンの半分位の容量のコンピュータにいろいろな行動ボタンを記憶させ、与えられた任意のボタンの一部からその全体を想起する機能は、自己相関行列という数字的処理を利用して実現しているという。もちろんそれに多数の精密なモーター、種々のセンサー、動作を受けもつ精巧なメカニック部分が有機的に組み合わせられていなければならない。

中野氏は今までに作り上げた多数の頭脳つき機械の学習する様子を、8mmの映画を使って正

味1時間半実に印象深く紹介してくれた。カニとゲタの合いの子のような歩行学習機械は、最初はバタバタと意味のない運動を繰り返しているが、一定方向へ歩くことができたときの行動形態だけを記憶に残すようにしこまれているので、その中何となくある方向に歩き始める。ある実験では、どんな動物でもやらないような新しいがこっけいな歩き方を突然発見して、見ている人を笑わせるだけでなく、何かを教えてくれる。

今までの機械の中で最も頭のよいものは、合目的行動を自己形成するロボットである。外見はオモチャのロボットと同じような形をしているが、近くにいるターゲットに自分から近づいて行き、視覚センサーで相手を識別し、相手次第では帽子をとったり、横に倒して得意になったりする実にユーモラスだが利口な奴である。このような情報処理方式が何かの役に立てば幸いであると中野氏は結んでいるが、確かに情報化学屋にとって新しい眼を開き、発想の転換を示唆してくれる熱演であった。

(お茶の水女子大学理学部 細矢 治夫)

ポスターセッション報告

7P01~7P04

7P01の分子力場パラメータ最適化に関する報告はすでに第12報となる。分子力場法は有機反応の理解にとって有効かつ実用的な手法として注目されているが、この報告に関する仕事はその基礎に相当するものとして評価されてよいであろう。7P02は有機合成設計システムの開発に関するものである。合成標的と出発物の構造をあらかじめ規定しておいて、その間の経路を探索する手法を採用している。問題はいろいろあるが、この手法をとる場合の重要な課題の一つが、出発物の合理的な設定ではなからうか。7P03の合成反応(特に還元反応の選択性)の理解あるいは予測への計算機利用の報告は、実験と計算機の関わりを示す一つの例として興味深い。

(豊橋技術科学大学 船津 公人)

7P05~7P08

7P05は、MM2計算を利用して分子中の歪エネルギーの分布を計算し、パソコン画面にグラフィック表示する試みに関するものである。静的歪を個々の原子に分配する方法や、動的歪の計算法についてまだ解決すべき問題点はあるが、分子力学計算結果を視覚化して、その本質を把握しやすくする試みの1つとして、有効な方法であると感じた。

7P06では、パソコンでMM2を実行するための初期座標作成プログラム、三次元構造のグラフィック表示プログラム、および改良されたMM2プログラムの発表がなされた。初期座標作成プログラムは、グラフィック画面上にカーソルを動かしながら構造を作成していくもので、X、Y方向だけでなくZ方向の指定も可能なように工夫がなされていた。MM2プログラムは、オリジナルのプログラムに対して、エネルギー極小化のための繰り返し計算途中の構造が、画面上にグラフィック表示される等の改良が加えられていた。

7P07および7P08は、パソコンを用いたNIH/EPAの質量スペクトルデータベースの検索システムに関する発表である。前者は、検索のためのインデックスファイルをRAMディスク上に置くことによって、検索を高速にするというもので、プログラミング言語はMS-DOS版のN88-BASICコンパイラが使用されていた。16ビット機で大量のデータ

を処理するための工夫がなされているため、処理能力の向上が実現される反面システムの拡張性等の点で制約があるのではないかと感じた。後者は、同じハードウェア構成のもとで、汎用データベース処理ソフトウェアのdBASE-IIIを利用したものである。そのため、検索プログラムの開発はかなり容易になるが、質量スペクトルデータベースのような極端にレコード長に差があるデータの処理には、dBASE-IIIは必ずしも適していない等の理由で、処理能力は前者には及ばないとのことであった。

(姫路工大 中野 英彦)

7P09~7P12

7P09 コンピュータ・グラフィックスによる結晶面の表示 (東工大) 山崎

無機結晶の複雑な原子配置を結晶学の既成概念にとらわれず、化学的な立場から見易い原子配置をパソコン上に表示する報告。超伝導セラミックスを初めとする材料化学が急速な伸展を示している現在、蛋白質モデリングと同様に重要な研究領域であると考えられる。操作性、理解しやすい画面表示等について一層の発展が望まれる。

7P10 パーソナルコンピュータによる分子グラフィックスの最近の進歩

(姫路工大) 中野ら

発表者等による従来の分子構造及び蛋白質立体構造表示プログラムMODRASTシステム改良の報告である。フレームバッファをPC-9801システムに付加することにより、表示がより美しくなり、また擬似3次元表示・重ね合わせ表示が可能となっている。高性能グラフィックスと比べての費用効果比を考えさせられた。

7P11 マイクロコンピュータによる分子設計システムMMHS.

MS-DOS版の開発 (群馬大) 中田ら

70原子までの分子を扱える分子設計システムの報告である。分子構造の入出力、グラフィック表示、MM・MO計算等CHEMLABに近い機能をPC-9801で可能としている。化学PC研究会報でソースリストが公開されるそうである。

7P12 有機合成設計・反応予測システム"AI PHOS"における

反応データベース管理システムの開発 (豊橋技科大) 遠藤ら

AI PHOSシステムに於ける個別反応登録システムと反応中心・反応部位の認識を中心とした報告である。登録用のグラフィックス・プログラムは印象的であった。知識ベースとしての利用法の開発報告が期待される。

(関西学院大学 岡田孝)

7P13~7P16

化学物質の特徴認識法(7P13), 検索の高速化(7P14), CAへの採録状況(7P15)および疎水・親水性の推算法(7P16)に関する発表があった。

わが国で毎年出版される化学関係の単行本類は年間700冊程度と見積れるがCAへの採録状況は400件強であり, この中には一般向け解説書や Proceedingsが含まれているから満足すべき状況とは言えない。多重採録, 拙劣なインデクシング, 著者名の誤読などは化学情報協会が採録を始めてから急速に改善されてきてはいるが, さらに誤りや洩れのない二次情報の抄録や索引を作るために十分なサポートが必要であるとの意見が述べられた。最近の本邦刊行書籍類のCA採録数が表で示された。

複雑な化合物について, 疎水・親水性を表す1-オクタノール/水の分配係数を求める計算法が提案された。分配係数について加生成が良く成立することを利用して, 構成原子からの寄与を加算する方法と, 原子団ごとに加算する方法とを試み, 実測値や他の推定法との比較から, 後者が優れていることが示された。実測値と推定値の良い一致を示す相関図と, 各原子団の分配係数を記した長大なリストが掲示された。

有機化合物の部分構造検索を高速化するため, 指定原子とその隣接原子および結合によってスクリーンを行う方法と, 環情報, 骨格情報をもとにスクリーンを行う方法が示され, 効果が検討された。また反応設計と予測を目的として, 分子中の各原子について12項目の性質を調べ数値化し, 特徴認識を行う方法と, その結果を用いた官能基の認識法が提案された。

(東工大総合理工 山崎 陽太郎)

7P17~7P20

7P17 昨年本討論会で報告されたCLUSMOLは、それ自身画期的なシステムであり、その健全な発展を期待していた。今回オブジェクトモデルを用いたCLUSMOL2の開発現況に接し、さらにその期待を新たにした。但し、どうやって組合せ論的爆発をうまく回避しているかの論理的な説明があればより良かったと思う。

7P18 人間の感覚のなかでも、パターン認識のアプリケーションが大変興味深かった。「匂い」についての研究では詳しく述べたが、clusteringの手法(距離の選択等)や結果の整合性等をもう少しこ

7P19 本報告はミニコン上の合成支援システムをpc9801に移植したという報告である。移植はそれなりに意味があると思えるが、この種のシステムをfortranでつくるというのはいささか同意しかねる。

7P20 構造活性相関のための部分構造記述子の自动生成に関する報告である。本方式は今後の期待も含めて評価できると思われる。次回は是非QSARへの応用結果を期待したい。

7P17-20 印象記 (日電セキュリティシステム株 鈴木 勇)

昭和62年第2回情報化学部会総会

日時 昭和62年11月6日(金) 17:30 ~17:50

場所 情報化学討論会(北里大学)会場

1. 米田部会長挨拶

正会員約 300名 法人会員47社54口 準部会員17名

活性化努力中

2. 報告

総務(藤原) 会員増強への協力要請、役員改選、部会活動への積極参加提案要望

編集(鈴木) 投稿依頼、次回特集号(担当:大沢、田辺)、特集号のテーマ歓迎

[阿部:特集号賛成、他にtutorialなど新設]

企画(飯塚) 研究会、Workshop、講習会、講演会など、担当者を決め推進

Floor の意見

前田:大型のコンピュータから小型に移行していることに対応したやり方を検討すべきである。

細矢:会員増強についてはQ SARグループからの導入も図る。

佐々木:パソコン講習会を来年計画

(文責:藤原)

* * * * *

情報化学部会部会員増加にご協力を!

* * * * *

* * * * *

* **【昭和63年部会費】** 正部会員(日本化学会会員) 2,000円 *

* 準部会員(日本化学会非会員) 3,000円 *

* 法人部会員 一口 30,000円(一口以上) *

* * * * *

* ※ご入会を希望される方は、下記までご連絡下さい。 *

* ☎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) *

* * * * *

情報化学部会内規

(昭和57年12月6日 第427回理事会承認)

(昭和60年12月2日 第451回理事会変更承認)

(昭和62年2月16日 第460回理事会変更承認)

社団法人 日本化学会

(総則)

1. 本部会は、日本化学会情報化学部会 (Division of Chemical Information and Computer Science , The Chemical Society of Japan) と称する。
2. 日本化学会情報化学部会 (以下部会という) の運営については、日本化学会定款、部会規程ならびに部会規程内規によるほか、この内規に定めるところによる。
3. 部会は、事務所を〒101 東京都千代田区神田駿河台1-5 社団法人 日本化学会 (電話03-292-6161 (代)) 内に置く。
4. 部会は、必要に応じて支部を置くことができる。支部に関する規程は、別に定める。
(目的および事業)
5. 部会は、化学情報、計算機化学など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、もって社会の発展、人類の幸福に寄与することを目的とする。
6. 部会は、その目的を達成するために、つぎの事業を行う。
 - 1) 日本化学会における情報化学に関する行事の分担
 - 2) 研究発表会、討論会、講演会、講習会等の企画と実施
 - 3) 部会関係の情報の収集とその記録の配布
 - 4) わが国内外の関連学協会等の関連部門との連絡と交流
 - 5) その他目的達成に必要と認められる事業

(部会員)

7. 部会員は、正部会員、準部会員および法人部会員の三種とする。
8. 日本化学会会員が部会に入会しようとするときは、入会の意志表示とともに1年分の正部会員会費を納めなければならない。
9. 日本化学会非会員が部会に入会しようとするときは、所定の入会申込書に1年分の準部会員会費を添えて申し込み、部会役員会の承認を得なければならない。
10. 法人が部会に入会しようとするときは、所定の入会申込書に1年分の法人部会員会費を添えて申し込み、部会役員会の承認を得なければならない。
11. 正部会員、準部会員および法人部会員の会費は別に定める。
12. 部会員が2年分の部会費を滞納したときは、部会から除籍する。

(総会)

13. 総会は、日本化学会春季年会および情報化学討論会会期中に開催する。

(運営)

14. 部会には、部会長1名、副部会長若干名、幹事若干名および監査2名 (以下部会役員という) を置く。
15. 部会役員をもって部会役員会を構成し、部会の運営にあたる。
16. 部会役員会は、部会運営のため年2回以上開催する。

(役員を選出および任期)

17. 部会役員は、部会役員会において正部会員の中から選出し、部会長は日本化学会会長が委嘱し、副部会長、幹事および監査は部会長が委嘱する。
18. 部会役員を選出方法は別に定める。
19. 部会役員の任期は、委嘱のあった年の3月1日から翌々年の2月末日までの2カ年とする。ただし、重任を妨げない。
20. 部会役員が欠け、部会の運営に支障を来す恐れがあるときは、部会役員会において後任の部会役員を選出する。ただし、後任者の任期は、前任者の残存期間とする。

(部会顧問)

21. 部会には、必要に応じ部会顧問若干名を置くことができる。
22. 部会顧問は、部会役員会において選出し、部会長が委嘱する。
23. 部会顧問は、部会役員会の諮問に応じ、また部会役員会の要請があるときはこれに出席し、意見を述べるができる。
24. 部会顧問の任期は、特に定めない。

(分科会および委員会)

25. 部会には、必要に応じ分科会および委員会を置くことができる。

(内規の変更)

26. この内規の変更は、部会役員会の議決により部会審議委員会および理事会の承認を得て行うものとする。

付 則

1. この内規は、理事会の承認があった日から施行する。

次期役員選出方法

日本化学会情報化学部会

(役員の数)

1. 役員の数、部会長1名、副部会長2名、幹事20名以内、監査2名とする。

(役員の任期)

2. 役員の任期は、委嘱のあった年の3月1日から翌々年の2月末日までの2年とし、同一区分内の重任は2期までとする。ただし、部会長以外の役員の再任は妨げない。

(役員の選出)

3. 次期役員の選出は、役員会において行うものとする。

(部会長)

4. 部会長の選出は、部会員から文書にて推薦された候補者および役員会席上推薦された候補者を対象に、役員の投票により行うものとする。

5. 投票方法は、日本化学会の役員等選考方法に準じて行うものとする。

(副部会長)

6. 副部会長の選出は、部会員から文書にて推薦された候補者および役員会席上推薦された候補者を対象に、役員の投票により行うものとする。

7. 投票方法は、日本化学会の役員等選考方法に準じて行うものとする。

(幹事)

8. 幹事の選出は、下記の事項を配慮して役員の協議により行うものとする。

1) 次年度情報化学討論会の開催地世話人は幹事とする。

2) 日本化学会の支部区分よりなるべく1名の役員がいるよう幹事を選出する。

3) 分野間の均衡をはかるよう幹事を選出する。

4) 幹事のうち、2名は次年度部会長推薦により選出する。

(監査)

9. 監査の選出は、部会長経験者および副部会長経験者等の中から役員の協議により行うものとする。

(次期役員の内諾交渉)

10. 部会長は、上記により選出された候補者に対し内諾交渉を行う。辞退された場合は、部会長、副部会長については、得票数順(同点の場合は日本化学会会員歴順)に次点者以下を順次繰り上げ、幹事、監査については、改めて役員会を開き協議により候補者を選出し内諾交渉を行うものとする。

付 則

1. 支部役員もこの申し合わせに準じて選出するものとする。

2. 本選出方法は、昭和62年3月1日より発効するものとする。

3. 昭和63年度の役員選出の際は、1年任期の役員を半数選出するものとする。

4. 監査の選出は、当面の間、上記方法によらないものとする。

役員等選考方法

委員会における次々期会長ならびに次期の副会長、理事および監事の各候補者の選考方法は、原則としてつぎの方法により1名ずつ順次に選考する。

- (1) 委員は資料に記載された候補者の中から、所定の数を必ず記し、無記名投票を行なう。この所定の数は、候補者数が6名以上のときは3名、5～4名のときは2名、3名以下のときは単記とする。
 - ② 投票結果を得票順に列記し、各候補者につき本人を含めて下位および同位の得票数を合計する。その合計数が1位の得票数に及ばぬ候補者を除外する。
 - ③ 所定の数を記していない投票および同一人を連記した投票は無効とする。
- (2) (1)でしぼられた候補者を対象とし、(1)の方法を繰り返して、順次候補者数を低減させ、1名を選考する。
- (3) (1)、(2)の方法により候補者を低減する過程において、3名の候補者に対して単記投票を行った結果、2位得票者が2名となりこの2名の得票数の合計が1位の得票数以上の場合、この2名の候補者について決選投票を行い1名をしぼり、この候補者と1位得票者をつぎの投票の対象とする。
- (4) (1)の単記投票および(3)の決選投票において、得票数が同点となった場合は、入会の順位により、先順位者を優先する。
- (5) (1)の連記投票の結果の際にも最下位得票者が2名となり、この得票数の合計が1位の得票数以上となって(1)の②が適用できない場合は(3)の方法に準ずる。
- (6) 投票の開票立合いは、委員長および副委員長が行う。
- (7) 以上の方法で確定候補者の決定困難に至った場合は、決定方法を改めて協議する。
- (8) 本内規第8項の内諾交渉の結果、内諾を得られない場合を考慮して、必要に応じて次位者を決めておく。

以上

第55秋季年会 報告

4K01~4K04

4K02で報告された立体化学的節点照明関数について実用的利用の観点から何があげられるかの問いに対し、データベース検索の高速化に役立つ旨の回答があった。また4K04では有機合成設計システムCASINOの現状についての報告があったが第10回情報化学討論会ポスターセッション(7P02)への印象記事と重複するのでそちらをお読み下さい。

(豊橋技術科学大学 船津 公人)

4K05~4K08

4K05では有機合成・反応予測システムAIPHOSの中心機能の一つである反応発生部についてその概要ならびに実行例が報告された。AIPHOSにおいては標的化合物の構造上の様々な特徴からDisconnection siteが認識され、あらかじめシステムに登録されている前駆体に要求される構造条件をもとに可能な前駆体が提示される。提示される前駆体中のカチオン、アニオンとしての属性を持つダミー原子X、Yの解釈について討論がなされた。AIPHOSの他のモジュール部分を含め、システムの完成が待たれる。

4K06ではスペクトルデータベースシステムSPIRESの部分構造検索機能の拡張について報告があった。SussenguthのSet Reductionをもとにした従来の検索アルゴリズムに加え、拡張結合表の活用およびPartitioningにおける制約条件の追加がなされた。今回の拡張によって、より柔軟な構造検索が可能になるものと期待される。

4K07では有機化合物の自動構造推定システムCHEMICSのマクロコンポーネント処理における拡張について報告がなされた。従来確定できない構造単位を含む構造情報の取扱が困難であったが今回の拡張によって可能になったことにより使用者の知見が今まで以上に生かされるようになり、それとともに従来の線形入力にかわりグラフィックターミナル上での構造式入力に変更されたのでより一層使いやすいシステムになったものと思われる。

4K08では薬物の吸収、分布、代謝、排泄に関する試験結果のパソコンによる処理システム"ADMEデータ処理システム"について報告がなされた。本システムではパソコンと液体シンチレーションカウンターおよび天秤がオンライン化されており、直接データがパソコンに取り込まれデータの集計がなされる。本システムに多少の変更を加えることにより、他の機器とのオンライン化による別の新たな処理システムの開発も可能と思われ、その際の問題点などについても討論がなされた。

(化学技術研究所 内丸忠文)

会員の広場

第2回化学PCソフトウェア研究討論会を終えて

11月4日(水)と5日(木)の二日間にわたり、第2回化学PCソフトウェア研究討論会(化学PC研究会主催、下沢隆実行委員長)が、埼玉大学大学会館3階大集会室と政策科学研究科棟7階大会議室において開催された。参加人数は191名であり、特別講演2件のほか、一般発表39件があり、ソフトのデモンストレーション&ポスターの発表が、それぞれのセッションで活発に行われた。一般発表の進め方は、参加者一堂に会して2時間のデモンストレーション&ポスター・セッションをとった。デモ会場にはパソコン25台を設備し、各所にポスター掲示用のパネル板を設置した。これらのパソコンは会場となった埼玉大学の有志の方々や実行委員からの借用によるもので、この寛大な協力にたいへん感謝している。そして、苛酷な運転をしたにも拘らず、1台もトラブルことなく、参加者は化学ソフトのデモンストレーションを十分に堪能し、マンツーマン討論に花を咲かせていたようである。

会社からの協賛は、展示が9社で、広告11社であった。学会の主催は、日本化学会化学教育部会、情報化学部会、日本分析化学会中部支部、日本科学教育学会、日本教育工学会、化学工学協会、日本農芸化学会、高分子学会、日本ポーラログラフ学会である。関係各位に対して感謝している。

一般発表の前後に、特別講演が2件行われた。初日は、「化学におけるパソコンの利用—とくに教育に対する応用例」と題して下沢隆先生(埼玉大学理学部教授)によって行われた。二日目は、「パソコンと研究レベルの分子計算」と題して大沢映二先生(北海道大学理学部助教授)によって行われた。

本討論会のプログラム締切日を遅くしたため、学会等への会誌発表はできなかった。参加しなかった方で本討論会での発表に興味のある方は、発表要旨集の残部が多少ありますので、豊橋技術科学大学(豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1)化学PC研究会あて葉書でご連絡下さい。

毎年、このようなデモンストレーション中心の催しを開いてほしいという要請が多かったので、次年度(1988年秋)は、姫路工業大学(世話人:中野英彦先生)で第3回討論会を開催する予定である。

(豊橋技術科学大学 吉村 忠与志)

第2回化学PCソフトウェア研究討論会に出席して

姫路工業大学 中野英彦

去る11月4日と5日の両日にわたって、埼玉大学の久保キャンパスにおいて、第2回化学PCソフトウェア研究討論会が開催された。この討論会の第1回は、昨年京都工芸繊維大学において、「化学パソコンソフトウェア懇談会」という名称で開催されたが、今回前記の名称に変更されたものである。

化学分野において、研究ならびに教育用のパーソナルコンピュータのソフトウェアの開発を行なっている研究者が集まって、情報を交換し討論を行なうことが本討論会の目的である。主催団体は化学PC研究会であり、今回の共催団体としては、日本化学会情報化学部会を始めとして、日本化学会化学教育部会、日本科学教育学会、日本教育工学会、日本分析化学会中部支部、化学工学協会、日本農芸化学会、高分子学会、日本ポーラログラフ学会が名を連ねている。

11月4日は、天候があいにくの雨となり参加者の減少が心配されたが、関係者の御努力の甲斐あって、200人近い参加者となり盛会であった。討論会の演題数は、特別講演が2件、一般発表が39件であり、その他にソフトウェアおよびハードウェア業者による展示があった。

最初の特別講演は、埼玉大学理学部の下沢隆先生による「化学におけるパソコンの利用—とくに教育に対する応用例—」と題するもので、第1日目の冒頭に行なわれた。ハードウェアの未発達な時期より、化学教育にコンピュータを応用する試みをしてこられた先生の初期の苦心談を交じえて、優れたグラフィックス機能をもつ現在の16ビットパソコンの、化学教育における有用性について強調された。

もう1つの特別講演は、第2日目の最後に「パソコンと研究レベルの分子計算」と題して、北海道大学理学部の大沢映二先生により行なわれた。パソコンによる分子力学計算や分子軌道計算の世界（特にアメリカ）および日本における現状と問題点について話され、さらに現在先生が中心となって計画されている、日本における分子化学計算プログラムの流通のための機構の、理念、組織、事業内容等の構想について述べられた。

一般発表は、学生会館の3階大集会室を会場にして、1日目午後、2日目午前、同午後の3セッションに分けて行なわれた。本討論会の特徴は、一般発表を全て実際のパソコンを使って行なう、演示形式としている点である。つまりポスターセッションのポスターの前に、1台ずつパソコンが並んでいるという会場を想像していただければよい。昨年の第1回では、口頭発表と演示を組み合わせで行なわれたが、今回は演示発表に統一された。パソコンのソフトウェアの場合には、動きのある画面表示など

1989 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies

December 17-22, 1989

筑波大学 藤原 譲

Pacificchem '89と略称される環太平洋国際化学会議が1989年12月17日～22日にホノルルで開催されることと、提案されているシンポジウムの題目については既に報告しました。今回第一次の採択シンポジウムが決まりましたので、不採択、および未定の題目と共にお知らせします。未定および新規は来年3月31日までに第二次提案の機会がありますので是非積極的に提案されますようお願いいたします。

提案は3ヶ国以上のChairmanの住所、氏名とシンポジウムの題目と時間（半日単位）および簡単な計画を記入して、学会または筆者（〒305 茨城県つくば市 筑波大学電子情報工学系 電話 0298-53-5530 FAX 0298-53-5206）に送付して下さい。Chairmanが見付からない時も御連絡下さい。

AREA NO-06.
INFORMATION TRANSFER

TITLE PROPOSED	COUNTRY PROPOSED	ORGANIZER	OTHERS
	U.S.A.	JAPAN	
		CANADA	

* Accepted by Organizing Committee of PACIFICHEM '89

AREA NO-06 CODE NO - 88
A Look Back at the
Turbulent 80's Perspectives
for the 1990's
U.S.A. Howard M. Peters,
Esq.

AREA NO-06 CODE NO - 89
Character Representation/
Recognition U.S.A.

AREA NO-06 CODE NO - 90
Chemical Information
Needs in the 21st Century U.S.A.

AREA NO-06 CODE NO - 91
Chemical Information
Knowledge Japan

AREA NO-06 CODE NO - 92
Chemical Information and
End-Users U.S.A.

Eiji Ohsawa
(Hokkaido Univ.)

- * AREA NO-06 CODE NO - 93
 Chemical and Safety in
 Laboratories and Indus-
 trial Establishments
 Australia
 R. J. Breakspere
 C. W. Peterson
 Australia
 Y. Fujiwara
 (Tsukuba Univ.)
- AREA NO-06 CODE NO - 94
 Chemist's Workstations
 U.S.A.
- AREA NO-06 CODE NO - 95
 Chemistry and the Law
 cf. Intellectual Property
 of Law
 U.S.A.
 Rod S. Berman
- * AREA NO-06 CODE NO - 96
 Chemistry in the
 Elementary Science
 Curriculum
 U.S.A.
 Richard P. Steiner
 (Univ. of Utah)
 John T. Shimozawa
 (Saitama Univ.)
 Reginald Friesen
 (Univ. of Waterloo)
- AREA NO-06 CODE NO - 97
 Chemistry in the Elemen-
 tary School
 U.S.A.
 Japan
 Richard Steiner
 John T. Shimozawa
 (Saitama Univ.)
- AREA NO-06 CODE NO - 98
 Computation-oriented
 Theoretical Chemistry
 Japan
 Eiji Ohsawa
 (Hokkaido Univ.)
- * AREA NO-06 CODE NO - 99
 Computers in Chemical
 Education
 U.S.A.
 John W. Moore
 (Eastern Michigan
 Univ.)
 John T. Shimozawa
 (Saitama Univ.)
 Xin Xinquan
 (Nanjing Univ.,
 China)

AREA NO-06 CODE NO -100
Data, Knowledge and Soft-
wares for Practical Use
of Molecular Design

AREA NO-06 CODE NO -101
Expert Systems for Spec-
tral Interpretation U.S.A.

C. Z. Zheng
(Shanghai Inst.
Org. Chem.
China)

S. Sasaki
(Toyoohashi U. Tech.)

Stephen R. Heller
(Bellsville Agricul.
Res. Ctr., USDA)

* AREA NO-06 CODE NO -102
Chemical Business R & D
in Pacific Basin: For-
casting Chemical Markets
in Pacific Basin
(Combine 107, 114, 119)

J. Kenneth Craver

* AREA NO-06 CODE NO -103
WORKSHOP TOPIC (120-122) U.S.A.
The R & D Cycle - From
Res. to Market to Res.:
How to Bring the Needs of
the Market to the Atten-
tion of Researcher

J. Kenneth Craver

AREA NO-06 CODE NO -104
Information on Natural
Disasters (Earthquake,
Volcano, etc.) U.S.A.

AREA NO-06 CODE NO -105
Information's Role in
Chemical Business Manage-
ment U.S.A.

* AREA NO-06 CODE NO -106
International Develop-
ments in Chemical Educa-
tion U.S.A.

Marjorie Gardner
(U.C., Berkley)

John T. Shimozawa
(Saitama Univ.)

Peter Fenshaw
(Monash Univ.,
Australia)

<p>(*) AREA NO-06 CODE NO -107 Chemical Business R & D U.S.A. in the Pacific Basin: J. Kenneth Craver Long-Range Planning in the Pacific Basin Chemi- cal Industries (Combine with 102)</p>	<p>Stanley Kirschner (Wayne State Univ.)</p>	<p>Shoichiro Yamada (Osaka Univ.)</p> <p>Guang-Xian Xu (Peking Univ., China)</p>
<p>* AREA NO-06 CODE NO -108 New Ideas in Chemical U.S.A. Education</p>	<p>John W. Moore (Eastern Michigan Univ.)</p>	<p>John T. Shimozawa (Saitama Univ.)</p>
<p>AREA NO-06 CODE NO -109 New Trends in Chemical Japan Education U.S.A.</p>		
<p>AREA NO-06 CODE NO -110 Office Automation U.S.A.</p>		
<p>AREA NO-06 CODE NO -111 Patent Information U.S.A.</p>		
<p>AREA NO-06 CODE NO -112 Perspectives in Molecular Japan Mechanics</p>		<p>Eiji Ohsawa (Hokkaido Univ.)</p>
<p>* AREA NO-06 CODE NO -113 Progress in Mathematical Japan Modelling in Chemistry U.S.A.</p>	<p>Milan Rendric (Drake Univ.)</p> <p>Paul Meczy (U. of Saskatchewan)</p>	<p>Haruo Hosoya (Ochanomizu Univ.)</p>

- (*) AREA NO-06 CODE NO -114 U.S.A. J. Kenneth Craver
 Chemical Business R & D
 in the Pacific Basin:
 Special Markets for Chem-
 icals in the Pacific
 Basin Countries
 (Combine with 102)
- AREA NO-06 CODE NO -115 U.S.A. Peter G. Lykos
 Supercomputers in (Illinois Inst.Tech)
 Chemistry
- AREA NO-06 CODE NO -116 U.S.A. Kenneth L. Ratzlaff
 Symbolic Reasoning and (U. of Kansas)
 Expert Systems Applica-
 tions in Chemistry
- AREA NO-06 CODE NO -117 U.S.A. Howard M. Peters
 Symposium on the Latest Phillip Moore
 Patent Laws of the
 Pacific Basin Countries -
- AREA NO-06 CODE NO -118 Japan
 System Sophistication
- (*) AREA NO-06 CODE NO -119 U.S.A. J. Kenneth Craver
 Chemical Business R & D
 in the Pacific Basin:
 The Development of Chemi-
 cal Markets with the
 Pacific Basin Countries
 (Combine with 102)
- (*) AREA NO-06 CODE NO -120 U.S.A. J. Kenneth Craver
 WORKSHOP TOPIC (to 103)
 The R & D Cycle - From
 Res. to Market to Res.:
 Inventor and Entrepreneur
 ; Personality Profiles of
 Researchers & Developers

Yuzuru Fujiwara
 (Tsukuba Univ.)
 [tentative]

(*) AREA NO-06 CODE NO -121 U.S.A. J. Kenneth Craver
WORKSHOP TOPIC (to 103)
The R & D Cycle - From
Res. to Market to Res.:
What It Takes to Move
from Research to Sales

(*) AREA NO-06 CODE NO -122 U.S.A. J. Kenneth Craver
WORKSHOP TOPIC (to 103)
The R & D Cycle - From
Res. to Market to Res.:
What is Your Research
Idea Worth ?

Workshop on
Molecular Mechanics and Molecular Dynamics

sponsored by the
Supercomputer Computations Research Institute, Florida State University,
Tallahassee, Florida
Tuesday through Friday, APRIL 5-8, 1988

Organizing Committee:

DeLos F. DeTar, Chair
Franklin B. Brown

David Edelson
Edwin F. Hillinski

Plenary Speakers:

Richard Counts
Peter Kollman
Eiji Osawa

Wilfred F. van Gunsteren
David J. White
Carlos F. Bunge

Invited Talks:

Frank Allen, Cambridge Crystallographic Data Ctr
Cornelius Altona, Leiden
Hans-Dieter Beckhaus, Freiburg, i. Br.
Charles Brooks, Carnegie-Mellon
Arnold T. Hagler, Agouron Institute
Reginald C. Haines, *Chemical Abstracts*

James W. H. Kao, Philip Morris
I. Michael Navon, SCRI/FSU
Harold A. Scheraga, Cornell
Arieh Warshell, U. So. Cal.
Donald E. Williams, U. Louisville
Speaker on Applications of AI

PURPOSE: To bring together individuals active in developing programs, force fields, and new methodology for molecular mechanics and molecular dynamics in order to encourage development of standards for exchange of force fields and of results and to facilitate the development of more powerful and more convenient programs. Participants are encouraged to bring slides and hand-outs to contribute to discussion sessions. Participants are expected to make available algorithms and other material that may be discussed.

PROGRAM: Monday evening: Reception.
Tuesday and Wednesday: Treatment of molecular geometry and of force fields.
Thursday and Friday morning: Computational methods.

CONTRIBUTED POSTERS: There will be an emphasis on posters. Contributors will be allowed a brief presentation to introduce the subject treated in the poster. There will be round table discussions. Extended abstracts are encouraged. The poster, including title, must fit within a display area of approximately 45 inches high by 34 inches wide. The topic should be within the scope of the workshop.

ABSTRACT: Submit an informative camera-ready abstract including key references within a text area of 16 by 24 cm, 2 pages maximum, to DeLos F. DeTar, Dept. of Chemistry, Florida State University, Tallahassee, FL 32306-3006, Tel: (904) 644-3709. Acceptance cannot be guaranteed. Deadline is Feb. 1, 1988.

PUBLICATION: All participants are invited to prepare appropriate manuscripts for one or more special issues of *Computers and Chemistry*. Deadline for the special issue is April 5, 1988. Manuscripts will be refereed.

PLACE: Tallahassee, the capital city of Florida, is situated in the Big Bend area of North Florida and its municipal airport is served by Eastern and Delta airlines, as well as a number of smaller carriers. All sessions will be held at the Florida State Conference Center, located on the campus of Florida State University.

FEES: The workshop fee is \$290. For those whose posters are accepted, the fee will be \$170. Registration may have to be limited. The workshop fee will cover the reception on April 4, continental breakfasts 4 days, lunches 3 days, coffee breaks, excursion and conference dinner at Wakulla Springs.

INFORMATION: Tel. Nos: DeTar & Hillinski (904) 644-3709; Brown (904) 644-2492; Edelson (904) 644-5062.

MEETINGS

June, 1988: MATH/CHEM/COMP '88 is planned in Dubrovnik (Croatia-Yugoslavia) at the Inter-University Centre organized by Dr. Ante Graovac, Institute Rugjer Boskovic, P. O. Box 1016, 41001, Zagreb, Yugoslavia. Please contact him for further information.

Sept. 25-30, 1988: ACS National Meeting, Los Angeles, CA. For information contact American Chemical Society, 1155 Sixteen St. NW. Washington, DC 20036. Two symposia may be of interest to society members, "Molecular Similarity" organized by Mark Johnson, The Upjohn Company, mail stop 7247-267-1, Kalamazoo, MI 49001 and "Computational Chemistry Graph Theory" organized by Milan Randic and Dennis Rouvray. You may contact Dr. Rouvray at Dept. of Chemistry, University of Georgia, Athens, GA USA

March 1989: Third International Conference on Graph Theory and Topology in Chemistry Galveston, TX. At this conference there will be a meeting of the Society of Mathematical Chemistry. For information contact Dr. Douglas J. Klein, Theoretical Chemical-Physics Group, Texas A&M University at Galveston, Galveston, TX 77553-1675.

Computational Chemistry Gordon Research Conference--A tentative date and location for the second Computational Chemistry Gordon Conference have been announced. The conference will take place the week of July 4-8, 1988, at Plymouth, New Hampshire. The program will focus on macromolecular simulations of proteins, protein folding, molecular graphics, molecular mechanics of organic molecules, distance geometry, semiempirical and ab initio quantum mechanics, polymers, and inorganic compounds. Poster sessions will be scheduled for contributed papers.

For more information, please contact:

Dr. Donald B. Boyd
Lilly Research Laboratories
Eli Lilly and Company
Indianapolis, IN 46285
Telephone: (317) 276-4232

文 献 紹 介

COMPUTERS & CHEMISTRY

1987年 第11卷第4号 論文題目、著者、頁

An algorithm for evaluation of the exact partition function of free internal rotation and other quantal systems having quadratically dependent energy levels, *Zdenek Slanina*, p.231

An expert system for selecting liquid chromatographic separation methods, *Marc A. Tischler and Edward A. Fox*, p.235

Computer aided chemistry--III. Spectral envelope deconvolution based on a Simplex optimization procedure, *W. R. Browett and M. J. Stillman*, p.241

Typesetting chemical structure formulas with the text formatter TeX/LaTeX, *Roswitha T. Haas and Kevin C. O'Kane*, p.251

A Great Iterator, *F. J. Weigert*, p.273

CHEM--a program for phototypesetting chemical structure diagrams, *John L. Bentley, Lynn W. Jelinski, and Brian W. Kernighan*, p.281

A simple algorithm for determining total electronic energy by the Extended Hückel Molecular Orbital Method, *Masao Masamura*, p.299

Further modifications to program Spacefli to produce three-dimensional color molecular graphics, *Marvin Bishop, Sharon Frinks and AnnMarie M. Meier*, p.301

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

1987年 第6卷第2号 發表題目、著者、頁

A Quantum Chemical QSAR Analysis of Carbonic Anhydrase Inhibition by Heterocyclic Sulfonamids. Sulfonamide Carbonic Anhydrase Inhibitors: Quantum Chemical QSAR, *P. G. De Benedetti, M. C. Menziani, M. Cocchi and C. Frassinetti*, p.51

A Molecular Modelling Based upon an X-Ray Crystal Structure: The EnzymeLigand Complexes between Porcine Pancreatic Elastase and Acetyl-Alanine-Alanine (Glycine)-Alanine, *T. Fujita*, p.54

A Quantitative Stereo-Structure Activity Relationship Analysis of the Binding of Promiscuous Chiral Ligands to Different Receptors, *P. A. Lehmann F.*, P.57

Determination of Octanol/Water Partition Coefficients of Certain Organophosphorus Compounds Using High-Performance Liquid Chromatography, *S. E. Krikorian, T. A. Chorn and J. W. King*, p.65

Design of a New Substituted 2,4-Diamino-5-benzylphrimidine as Inhibitor of Bacterial Dihydrofolate Reductase Assisted by Molecular Graphics, *K. -H. Czaplinsky, M. Kansy, J. K. Seydel and R. Haller*, p.70

Monte Carlo Study of the Aqueous Hydration of Dimethylphosphate Conformations

B. Jayaram, M. Mezei, and D. L. Beveridge , p.917

Voronoi Binding Site Models

Gordon M. Crippen , p.943

On Color Polynomials of Fibonacci Graphs

Sherif El-Basil , p.956

Fast Matrix Multiplication

Carlos F. Bunge and Gerardo Cisneros , p.960

A Note on the Efficient and Accurate Computation of the Phase Functions ϕ and χ in Semiclassical Approximations

Peter Senn , p.965

Determination of an Empirical Energy Function for Protein Conformational Analysis by Energy Embedding

Gordon M. Crippen and P. K. Ponnuswamy , p.972

Gaussian Basis Sets for the Fifth Row Elements, Mo-Cd, and the Sixth Row Elements W-RN

Odd Gropen , p.982

Application of SINDO1 to Sulphur Compounds

Karl Jug and Rüdiger Iffert , p.1004

An Efficient Newton-like Method for Molecular Mechanics Energy Minimization of Large Molecules

Jay W. Ponder and Frederic M. Richards , p.1016

A Powerful Truncated Newton Method for Potential Energy Minimization

Tamar Schlick and Michael Overton , p.1025

Application of SINDO1 to Chlorine and Sodium Compounds

Kari Jug and Joachim Schulz , p.1040

On the Out-of-Plane Deformation of Aromatic Rings, and Its Representation by Molecular Mechanics

Tommy Liljefors, Julia C. Tai, Shusen Li, and Norman L. Allinger , p.1051

Refined ab initio 6-31G Split-Valence Basis Set Optimization of the Molecular Structures of Biphenyl in Twisted, Planar, and Perpendicular Conformations

Günter Häfelinger and Claus Regelmann , p.1057

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

1987年第1卷第2号(7月) 发表题目、著者、頁

Applications of caterpillar trees in chemistry and physics (Review), *S. EL-Basil*, p.153

The factorisation of chemical graphs and their polynomials: A systematic study of certain trees, *E. C. Kirby*, p.175

Qualitative analysis of a model for synaptic slow waves, *K. R. Schneider, B. Wegner and J. Toth*, p.219

A Mathematical analysis of the Bjerrum function for the stepwise equilibrium, *E. R. Birnbaum and E. A. Walker*, p.235

1987年第1卷第3号(9月) 发表题目、著者、頁

The dimensionality and topology of chemical bonding manifolds in metal clusters and related compounds (Review), *R. Bruce King*, p.249

Critical parameters from series expansions, *F. M. Fernandez, G. A. Arteca and E. A. Castro*, p.267

On global and local properties of Clar pi-electron sextets, *S. EL-Basil and M. Randic*, p.281

Resonance in random π -network polymers, *D. J. Klein, T. P. Zivkovic and N. Tribnjastic*, p.309

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

1987年 第27卷 第3号(8月) 发表题目、著者、頁

Artificial Intelligence Used for the Interpretation of Combined Spectral Data. 3. Automated Generation of Interpretation Rules for Infrared Spectral Data, *Hendrik J. Luinge, Gerald J. Kleywegt, Henk A van't Klooster, and John H. van der Maas*, p.95

Description of Organic Reactions Based on Imaginary Transition Structures. 6. Classification and Enumeration of Two-String Reactions with One Common Node, *Shinsaku Fujita*, p.99

Description of Organic Reaction Based on Imaginary Transition Structures. 7. Classification and Enumeration of Two-String Reactions with Two or More Common Nodes, *Shisaku Fujita*, p.104

Description of Organic Reactions Based on Imaginary Transition Structures. 8. Synthesis Space Attached by a Charge Space and Three-Dimensional Imaginary Transition Structures with Charges, *Shinsaku Fujita*, p.111

Description of Organic Reactions Based on Imaginary Transition Structures. 9. Single - Access Perception of Rearrangement Reactions, *Shinsaku Fujita*, p.115

"Structure-Reaction Type" Paradigm in the Conventional Methods of Describing Organic Reactions and the Concept of Imaginary Transition Structures Overcoming This Paradigm, *Shinsaku Fujita*, p.120

Computers Storage and Retrieval of Generic Chemical Structures in Patents. 8.

Reduced Chemical Graphs and Their Applications in Generic Chemical Structure Retrieval, *Valerie J. Gillet, Geoffrey M. Downs, Ai Ling, Michael F. Lynch, Pallapa Venkataram, Jennifer V. Wood, and Winfried Dethlefsen*, p.126

Arts: A Flexible Laboratory Instrument Control Language, *W. A. Schlieper, T. L. Isenhour, and J. C. Marshall*, p.137

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

1987年第5卷第3号(9月) 論文題目、著者、頁

PEPCRE: an interactive program to create, manipulate and display oligopeptides, *C.W. v.d.Lieth, J. Palm, A. Sundin, R. E. Carter and T. Liljefors*, p.119

Dynamic modeling of chemical reactions: the Diels-Alder cycloaddition, *J. Webber, D. Mottier, P.-A. Carrupt and P. Vogel*, p.126

Molecular graphics and the classical adiabatic and nonadiabatic dynamics of small polyatomic reactions, *L. J. Dunne and N. L. Bournier*, p.129

Prediction of the structure of proteins using related structures, energy minimization and computer graphics, *D. E. Stewart, P. K. Weiner and J. E. Wampler*, p.133

Investigation of protein inter- and intramolecular interactions with a simple graphics tool, *K. Toma*, p.149

Molecular recognition: optimized searching through rotational 3-space for pattern matches on molecular surfaces, *P. M. Dean and P. -L. Chau*, p.152

Molecular recognition: identification of local minima for matching in rotational 3-space by cluster analysis, *P. M. Dean and P. Callow*, p.159

Electrostatic potential and binding of drugs to the minor groove of DNA. *J. M. Burridge, P. Quarendon, C. A. Reynolds and P. J. Goodford*, p.165

MSURF: a rapid and general program for the representation of molecular surfaces, *B. A. Johnson*, p.167