

# 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 7, Number 1  
January 1989

## 目 次

### 部 会 記 事

- 第11回情報化学討論会総括..... 1  
 第12回情報化学討論会(予告)..... 11  
 「有機化学者のためのパソコン利用講習会」開催報告.....大澤 映二 12

### 年 会 プ ロ グ ラ ム

..... 13

### 関 連 行 事

- 第3回化学PCソフトウェア研究討論会を終えて.....吉村 忠与志 15

### 国 内 の 動 き

- 日本化学プログラム交換機構(JCPE)発足のお知らせと  
 入会のご案内..... 16

### 国 際 会 議

- PACIFICHEM '89 ..... 17

### 文 献 紹 介

- Journal of Chemical Education(Vol.65, No.5~No.9)..... 19  
 Journal of Molecular Graphics(Vol.6, No.4)..... 20  
 Quantitative Structure-Activity Relationships(Vol.7, No.3) ..... 20  
 Journal of Mathematical Chemistry(Vol.2, No.3) ..... 21  
 Journal of Computer-Aided Molecular Design(Vol.2, No.3) ..... 21  
 Computers & Chemistry(Vol.13, No.1) ..... 22  
 Journal of Chemical Information and Computer Sciences  
 (Vol.28, No.4)..... 22  
 Journal of Computational Chemistry(Vol.9, No.6~Vol.10, No.1)..... 24

### 部 会 員 異 動

..... 27

## 部 会 記 事

### 第11回情報化学討論会総括

世話人による報告

第11回情報化学討論会が12月5日(月)から7日(日)までの3日間、京都市左京区の京都大学薬学部および京都教育文化センターで開催された。並行して開催された第16回構造活性相関シンポジウムと参加登録、懇親会および特別講演(2件)は共通としたが、情報化学討論会の一般講演(30件)は京都大学薬学部記念講堂、ポスターセッション(20件)は京都教育文化センター202~204号室、構造活性相関シンポジウム一般講演(34件)および両者共通の特別講演は京都教育文化センターホールを使って行われた。初日の情報化学討論会一般講演会場の登録者は予約、当日併せて172名とやや少なかったが、両会場3日間の全登録者数では予定の500名を越えることができた。一方、懇親会参加者数は昨年度の実績を基に計画を立てたが、予想をはるかに上回る申込があり、当日申込を受け付ける余裕がなくなって、多くの方々にご迷惑をお掛けする結果となった。東京開催と地方開催では懇親会参加希望者数の推定基準を変える必要があることが判った。ちなみに今回希望者をすべて受け付けたとすれば、170名以上の懇親会参加者があったと思われる。ほかにも京都大学薬学部のボイラー故障による記念講堂の暖房不能の事態や講演予稿集の編集ミスなど多くの不手際があった。本欄を借りて深くお詫び申し上げたい。しかし、全体を通じて突っ込んだ討論が行われ、討論会のあり方そのものを問い直すような意見も交換されたことは収穫であった。最終日の金久実先生の特別講演には収容人員468名の京都教育文化センターホールが満席近くなり、終了後の質疑応答も活発に行われた。

今回は情報化学討論会一般講演では、最初の計画を変更して講演者によるOHPの使用を受け付けることとしたが、後方の座席から眺めた場合の鮮明度はやはりスライドに比べて不十分であった。OHPには二重写しができるなどスライドに無い利点があり、使用希望者も多いので、鮮明度の向上は今後の課題とすべきであろう。残り時間表示のタイムプログラムは昨年と同じくお茶の水女子大学理学部の藤枝修子先生原作、電気通信大学応用化学教室の山崎昶先生改訂のものを使用させていただいた。なお討論会の準備万端および開催当日の運営は、第16回構造活性相関シンポジウムのお世話を担当された京都大学農学部農芸化学教室の藤田稔夫、岩村俣両先生を始めとするスタッフ各位の絶大なご協力があって初めて可能になったことを付記し、あわせて謝意を表したい。

明年の第12回の討論会は姫路工業大学工学基礎研究所の安岡則武先生がお世話下さることとなり、大阪大学産業科学研究所の植田育男先生の主催される第17回構造活性相関シンポジウムと合同で大阪で開催されることとなった。多数参加されて、本討論会が一層発展することを期待している。  
(京都大学薬学部・町田勝之輔)

座長による報告

5101~5102

5101 膜タンパクのモデリング法の開発

(北里大・薬) 春日、梅山

電子顕微鏡等による二次構造の空間配置に関する情報及びアミノ酸残基の疎水性指標を基にした、膜タンパク質の一次配列からのモデリング法及びシステムが提案された。このシステムは、バクテリオロドプシンに適用され、モデリング後の立体構造がカラーグラフィックスによって表示された。膜タンパク質は結晶化が困難であり、一般的にはX線解析を行って精密な構造を得ることは出来ないために、本研究のように限られた情報を基にラフな構造を推定せざるを得ない。このモデリング法はまだ初歩的な段階にあり、方法論及び推定した構造を利用した構造機能相関についての発展が大いに期待される。

5102 アミノ酸対空間における確率距離を用いた類似タンパク質検索システム

(図書館情報大) 中山、吉田

一次配列上のアミノ酸対の出現頻度を基に、類似タンパク質を高速に検索する方法及びシステムが報告された。ここでは、近似的に平均値と標準偏差を求めて、検索タンパク質の鎖長を補正する方法が考案されている。本研究は、もともと一次配列が持つ情報のうち配列情報は使用せずに、アミノ酸対を数量化することによって検索速度を高めているところに特徴がある。類似タンパク質の詳細な配列解析の前処理としてこのシステムを役立てることが可能であると思われる。

(北里大薬 中川 節子)

5103~5104

5103 蛋白質立体構造要素データベースとエキスパートシステム構築用ツールによる立体構造予測へのアプローチ (旭化成) 田頭、戸潤、渡辺

タンパク質の一次構造より立体構造を予測する試みとして、立体構造要素データベースとエキスパートシステム構築用ツールを組み合わせるアプローチについて報告された。

構造予測を行なおうとするタンパク質の一次構造を、5残基をフラグメント長としてN末端より順次採りだし、立体要素データベースを検索し類似する構造を選び出す。次に、選び出された候補構造の中から最有力構造を選択するルールの記述に、エキスパートシステム構築用ツール(OPS5)を用いるというものである。

5104 受容サイトにおける分子認識機構(第3報)バインの光学異性体認識機構(東京農工大) 樋口、佐藤、安川

バインの活性部位における光学異性体の認識機構を解明するため、分子動力学計算プログラム(AMBER)を用いて、酵素リガンド間の相互作用エネルギーを計算した結果について報告された。

その結果、L体とD体では全体として約10 kcalほどL体の方が安定な複合体を作るが、3点認識モデルが予想するような、特定部分に相互作用の差が生じるのではなく、全体にひずみが分散し、全体として系のエネルギーに差が生じると結論している。

(姫路工大 中野英彦)

#### 5105~5107

##### 5105 水中の有機化合物のpKa差の計算 (蛋白工学研) 田中康正、他

ハードウェアの性質の著しい向上を背景に、これまでほとんど取り上げられていなかった複合系の自由エネルギー問題を取り扱ったもので、計算化学がますます実用に近くなってきていると感じさせた。しかしMOやMDによるエネルギー計算等にくらべ、方法論的にもまた得られた計算結果の解析等にも多くの問題点が残っているとの印象が強かった。

5106 溶液中におけるLi<sup>+</sup>とクラウンエーテルとの鎖形成反応 (阪大薬) 前崎博信、他  
現実の化学反応のほとんどが溶液中で行われていることから、溶媒効果をどのように取り扱うかが計算化学の重要な課題の一つとなっているが、本研究は主として溶液構造についてCGを利用して直観的理解を助けながら議論を進めたもので、今後の溶液化学研究の一つの方向を示すものといえよう。

##### 5107 分子力場パラメータの最適化 (第21報) (化技研) 都築誠二、他

分子力場計算は精度や計算効率についてのコストパフォーマンスの高さから今後もますます広い分野で利用されていくことは疑いないが、このために必要となるパラメータを高精度のab initio 計算をもとに評価しようとする一連の研究の一環をなすもので今後の一層の発展が期待される。  
(東京農工大 安川 民男)

#### 5108~5109

##### 5108:

5107に引き続いての力場パラメータの決定に関する講演であるが、いずれも ab initio 計算により得られた、シフトランスのエネルギー差や内部回転障壁等を使用しているのが特徴的である。分子研の柏木氏から、サドルポイントの再現にはMR-CIレベルの計算が必要であるとのコメントが出されたが、現状ではHFレベルで最適化を行い、MP摂動計算によりエネルギーを求める今回の手法が限界であるようにも思われる。しかし、CI計算でのエネルギー勾配法も実用化の段階に入っており、そう遠くない将来に、実現可能であろう。筆者もかつて、半経験的MO法における、パラメータ推定に取り組んだ事があり、このようなパラメータの設定が、いかに大変かを少しは心得ているつもりであるので、演者らのようにアカデミックレベルでこうした仕事に取り組んでおられる研究者には、心から敬意を表したい。いずれにしろ、液相中のデータを使用していた従来の方法よりは、一歩突っ込んだ方法であることは確実であり、今後の発展が期待される。

## 5110

筆者は、筆者自身の所属する学部において、従来より再三にわたり、計算化学の重要性をといってきたのだが、その反応が必ずしも良好でなく、無力感を感じていた。この原因は、計算化学が、実験化学を専攻してきた人々にとって、素直に入りにくいという性質によるものであろう。この講演のようなエキスパートシステムが一般的に使用されるようになれば、筆者のような悩みの大部分は解決されるものと思われる。今後の問題としては、初期構造推定の際の人工知能的手法の応用があろう。構造最適化の際には、大きな分子ではへたな  $Z$ -matrix を生成すると収束しない場合があり、計算機の高速度化、大型化が進むにつれ、重要な問題になってくると考えられる。又、学習機能が付加されれば、もっと有用なシステムになるものと思う。適用プログラムの一般化等、まだまだ多くの問題が残されているようが、AI時代への突入を迎えて、ますます重要性が増してくる分野でもあり、その完成が、強く望まれる。

(阪大薬 高木達也)

## 5110~5111

### 5110 分子設計におけるエキスパートシステムに関する研究(1) —“LEAD EVOLUTION”への適用の試み—

化学向けエキスパートシステム構築のための基本プログラムの開発の報告である。主な部分がLISP言語で書かれていることに特徴があり、化合物コードのLISP表現について発表の重点が置かれた。化学構造式をFORTRANで表現するときは結合表を用いることが多いが、発表者はLISP理論に適した結合リストと呼ぶ表現を考案した。この表現によってLISPの世界で化合物を扱うことが容易になった。結合表と結合リストとの優劣には議論の余地があるようである。

### 5111 化学構造式についての種々の数え上げ多項式の間の数学的関係の解析

化学構造式のようなグラフの数学的特徴を代数的に表現したものを数え上多項式と呼ぶ。これらは化合物の分類や構造活性相関を扱うのに応用価値が高い。この発表では特性多項式、距離多項式、スッチング多項式と $Z$ -数え上げ多項式の間の数学的関係が示された。例えば、芳香族性の議論の有力なマッチング多項式の算出は原子数の階乗に比例するので計算が困難であるが、特性多項式から求めれば比較的容易である。マッチング多項式を特性多項式から導く方法などが報告された。

(分子研 柏木 浩)

## 5112~5114

情報化学における研究対象は、文献・数値・図形の三つに大きく分かれる、と漠然と思っていたのだが、情報化学討論会も11回を数えるようになると、その範疇に入らなくなる色々な研究の発表が出てくる。また図形情報に限っても、きれいなカラーグラフィックスを見せるだけでなく、膨大な図形処理演算をいかに迅速に処理できるようにしたかという発表も現われてくる。その意味でも、分子研と中部システムズの共同研究による「スーパーコンピュータによる分子グラフィックス」(5I13) (発表は分子研の柏木浩, 4月からは九州工業大学) の発表は迫力もあり、おもしろかった。その一つ前の中京大の泰野富世の「静電ポテンシャルの図形表現」(5I12) の発表でも、柏木グループのグラフィックスシステムを使って描かれた図のカラーズライドが紹介された。この二つの研究は、精密な非経

験的分子軌道法によって得られた波動関数の複雑な構造を、如何に視覚的に分かりやすく、表示し、かつ如何に効率よく分子のレベルでの理解を進めるかを追及しているものであって、情報化学を離れた量子化学の分野においても注目されている。柏木グループの画像処理プログラム K O R I N では、3次元等値面の計算をベクトル化によって高速化をはかった結果、HITAC M-680H で72分かかっていた計算が、スーパーコンピュータ HITAC S820/80 では実に 59秒でできてしまったと報告された。

カラーグラフィックスによる見事な結果が多数スライドで示され、聴衆から感嘆のため息がもれたが、米田教授も指摘されたように、問題はこの大きなシステムが現在のところ他の金物に移植できないことである。

(お茶大理 細矢治夫)

#### 6 I 1 5 ~ 6 I 1 7

6 I 1 5 : 化学教育あるいは学習にとって効果的なパーソナルコンピュータソフトウェアの紹介と実際の教育現場でのその活用の効果が報告された。

6 I 1 6 : 複数種半導体ガスセンサー系を用いて混合気体中の特性成分を認識する基礎的手法の開発とその結果の報告があった。

6 I 1 7 : SECS にとって重要な反応知識ベースを個別反応から ALCHEM format に自動変換する手続きとこの知識ベースを利用した SECS の実行例が報告された。

(豊橋技科大 船津 公人)

#### 6 I 1 8 ~ 6 I 2 0

6 I 1 8 の発表「EXAPL を用いた chemometrics プログラム ARTHUR の会話的利用」では、もともと FORTRAN 言語で作成されているケモメトリックス用のプログラムパッケージ ARTHUR の対話型の利用を可能とするためエキスパートシステムツールを開発して、実際に系統定性分析や天然水（海水・河川水）の分析結果の処理に応用した例の紹介があった。

6 I 1 9 「有機合成設計支援システム ALPHOS の開発」は、昨年の討論会であった前回の報告内容を土台として、目的とする有機化合物を合成する際の原料・反応経路・可能性のある中間体・反応部位の認識など、われわれの考慮の及ばない反応パスの可能性などをコンピュータに追跡させるなど、地道ながら将来の発展性を窺わせる興味ある講演であった。

6 I 2 0 「母核の幾何の変形と合成 - CHEMOGRAM STERIC1 と結合関係表入力」は米田教授のケモグラム大システムの一つで任意の有機化合物の三次元幾何（原子配置）を示性式入力から計算する CHEMOGRAM STERIC1 と、結合関係表から立体化学表示と置換位置などを記述できるサブシステムの ENCODE とを統合一体化する試みである。JICST の日本語化合物辞書のなかから無作為抽出した標本に対して、かなりの高速度で処理することが可能となった旨の報告があった。ただ、多環・大員環のものにはまだ結合の多重度などの処理の問題が残されているという。

(電通大 山崎 利)

本セッションではNMRデータベースの話題を中心にしているが、対象は全く異なっている。6 I 2 1では「化学構造とNMRスペクトルのデータ処理統合システムCIMSの開発(1) - システム設計と統合化環境の概要」(豊橋技科大)奥山らはデータベースの拡充・機能向上・有効利用のために、データ測定、収集からデータ管理及びデータベース公開のための統合的なシステムを設計した。これらの機能を実現するためには異なった規模のコンピュータをネットワークによって結合する必要がある、種々のソフトウェアを設計し、開発を行っている。現在はハードウェアが特定され開発途上であるが、真に有効に稼働するようにするためには、まだ試行錯誤が必要と思われる。

6 I 2 2は「コバルト-59 NMRスペクトルデータのパーソナルコンピュータによるデータベース化(続報)」(電気通信大)山崎 であり、限定されたユーザを想定した場合のデータベースの構築である。NMRのなかではコバルト-59は一般的ではないためにデータの精度や信頼性が明確でないうえに、基準物質など確立していない。一方装置上の進歩は著しいが、サンプルの性格上古いデータでも貴重なものがある。データベースを作成したために問題点を明確にできた面もある。論点を明らかにしてゆく過程でデータの取舍選択が可能になるように思われる。

(化技研 早水紀久子)

特別講演 I QSAR パラメータ  $\sigma^0$ 、及び  $\mu^2/\alpha$  の設定とその有効性 (阪大薬) 佐々木 喜男

従来、定量的構造活性相関分野においては、化合物の物性を表現するパラメータとして、 $\sigma$ 、 $\pi$ 、 $E_s$  など、自由エネルギー関係パラメータを用いることが多かったが、演者は、薬物と生体との間の相互作用が、投与されてから排泄にいたるまで、すべて弱い分子間相互作用の支配下にあることに留意し、弱い相互作用系における分子間力について熱力学的検討を加えた。そしてLennard-Jones 12, 6 ポテンシャル式を、多数の脂肪族・芳香族置換化合物に適用して求められた力の定数から、置換基の弱い分子間力に対する寄与を示すパラメータとして  $\sigma^0$  をあらたに定義した。 $\sigma^0$  パラメータは、分子間引力のみならず斥力に対しても良好な指標となり得ることが確かめられている。また、極性分子については、 $\mu^2/\alpha$  ( $\mu$  は双極能率、 $\alpha$  は分極率) が、配向力および誘致力を表す良好なパラメータとして機能することも実証した。これらのパラメータが、実際、QSARや溶液および表面物性のように強固な化学結合を伴わない相互作用の解析や環境化学の領域など、広い範囲にわたり有効に活用され得ることが認められている。

(京大農化 藤田 稔夫)

7123~7125

## 分子の全体構造と部分構造の数値化

三共研究企画部

田村 千 尋

Tautomer部分構造検索方式を発展させた当方式は原子間の単純な結合概念からなる部分構造の数値化および全体構造の数値化にもとづく検索手法を採用したものである。構造式と全体構造データとは1対1対応があり、検索に要する時間は短いとされる。部分構造の注出についてもこの方式の有効性はきわめて高い。当検索方式の今後の発展を期待したい。

## 一般式を検索キーとしたSet Reduction法による部分構造検索の試み

富士通株式会社

樋高 透

湯田 浩太郎

部分構造検索において広範囲にまたがる検索方式（Set Reduction, Tautomer, Markush, Xnなど）を採用したシステムを構築、おもに小中規模の化合物データベースに適用される。当システムの主検索方式として採用したSet Reduction法について率直な討論が展開され、部分構造検索について関心の高いのが注目された。今後さらに各検索方式の高度化およびヒューマンインタフェースの充実とともに構造検索システムの普及が期待される。

## ヒト発癌物質の分子知識データベース

都臨床医学総研

大上 徳 子

日本女子大

大内 香

国立がんセンター研

相田 美砂子

都臨床医学総研

神沼 二 真

化学発癌物質および抗癌剤データベースについて報告がされた。

化学発癌物質について登録物質数514。評価項目はIARCモノグラフのものを採用、synonymはRegister of Toxic Effects of Chemical Substances (NIH)を追加している。抗癌剤は厚生省認可の薬剤56物質について発癌物質と同様な項目で登録している。当データベースはパーソナルコンピュータへの移植性も考慮されておりデータの汎用性がきわめて高い。物質の構造についてはX線結晶解析、分子軌道計算に基づく構造の最適化計算データが収録されている。

(電総研 川口勝久)

7126~7127

7126: 赤外・ラマン分光学文献データベース

全国の大学、国公研、民間企業等の約20機関の70名にのぼる研究者が118に及ぶ関係の論文誌を手分けして調査し、それらのデータを一括して東大計算センターにまとめたもので、それらを整理、編集し、今の処一年毎に印刷物として約200名の会員に配付している、と云う現状報告。

コンピュータ化については物質名索引を附加したり、電子メールによる集積の方向を検討中との由である。

7127: Smalltalk/Vによる文献検索システムの試作

植物化学上の文献データを対象に標題の言語を使って、データ収納のための枠造りからはじめてデータの入力、検索等の一連の操作をこのシステムで実行出来る、と云う椅子の報告。

今回はPlant, Molecule, Literatureの三つのインスタンス変数を設定したが、実際のデータ入力はプロンプターなるウィンドウを介して実行出来、操作性は良好との事である。しかしデータのシステムからの独立性は今後の検討課題として残るよう。

(筑波研究学園 前田浩五郎)

特別講演II タンパク質・核酸の生理機能データベースと分子設計

(京大化研) 金久 實

標題中「タンパク質・核酸の生理機能データベース」とは生理機能といっても扱う対象は配列データ上の機能部位に関する情報であるから具体的には「機能部位データベース」の意である。このデータベースはまさにタンパク質の一次構造と生理機能の間の経験則を見出すためのものである。たとえばこのデータベースの中の抗原性決定部位データベースは合成ペプチドを抗原として産出させた抗体を用いてもとのタンパク質を認識させようとして場合、どこのペプチド断片を選べばよいかの解析に利用される。この延長線上にタンパク質の分子設計があることは自明である。目下のところ、新規な機能を示すような立体構造を自由に設計できるというものではないが、まづは天然のタンパク質を出発点として研究を行い究極の目標に近づこうとしている。データベース作成はどの分野のものもそうであるように質の高いデータをいかに数多く集めるか苦心の存するところと承った。

医農薬の分野で分子設計を試みる筆者らにとって身につまされる話であったのは当然として、多く聴衆に深い感銘を与えた名レクチャーであった。

(豊橋技科大 佐々木慎一)

## ポスターセッション報告

### 6P03 タンパク質のアミノ酸配列と局所三次元構造 (豊橋技科大) 唐澤、高橋、佐々木

タンパク質の一次構造より立体構造を予測するための予備段階として、Protein Data Bank の構造データを基にして、アミノ酸配列と二次構造および二面角との関係について解析した結果について報告された。

アミノ酸配列上の識別目標とするアミノ酸の前後5残基に着目し、分子量、 $pK1$ 、 $pK2$ 、等電点、側鎖の疎水性パラメータ ( $\pi$ ) の5種の物理化学的特性値を25次元のベクトルとして記述し、構造既知の97タンパクについて、ヘリックスとシートの構造群について判別分析を行なった結果、比較的高い識別率が得られることを明らかにしている。

(姫路工大 中野英彦)

### 6P04

「赤外、ラマンスペクトルのシミュレーションを含めた脂肪族エーテルの分子力学計算」(京大 薬) 三輪らは直鎖のアルキル鎖をもつエーテル類の赤外及びラマンスペクトルのパターンを推定することを試みた。既知の各種のパラメータを組み合わせて計算した結果実測スペクトルを再現しているが、その一致が十分かどうかについては議論のあるところであろう。

(化技研 早水紀久子)

### 6P05~6P07

ポスターの会場では、分子構造式の処理に関する発表が当然のこととして多く見られたが、学習院の田中伸英等と群馬大の飯塚健の共同研究による「パソコンによる分子座標の手書き入力システム」が注目を集めている。複数の環が立体的に縮合した分子の構造式を手書きしたものをイメージスキャナによってパソコンに入力し、その初期座標を導出するシステムを開発してきた田中等の研究も実用化にかなり近づいてきたことが感じられた。このように地道ではあるが、ユニークな研究の萌芽と発展を期待したい。

(お茶大理 細矢治夫)

6P09: 弁別ネットにおける類推に必要な構造差異ベクトルの表現と演算に関する理論が報告された。この理論は化学構造変換に関する代数的取扱いを連想させ興味深い。

(豊橋技科大 船津 公人)

6 P 1 0 「有機化合物の自動構造推定システム CHEMICS の開発—天然有機化合物の構造推定—」

6 P 1 1 「化学構造と NMR スペクトルのデータ処理統合システム CIMS の開発 (II) プロトン NMR スペクトル帰属支援システムの開発」

6 P 1 2 「NMR スペクトルデータベースのパーソナルコンピュータ化 (I) C-13 スペクトルデータベース」

この三発表は何れも NMR スペクトルデータを処理して、データベース化や自動解析、構造推定に役立てようという共通点をもっている。6P10 は、二次元 NMR のチャートから得られる炭素鎖の結合情報 (CCCP) や C-H 結合情報の処理機能をを以前から存在している CHEMICS システムに付加化した例の紹介である。6P11 は口頭発表の 6121 と関連した発表であるが、プロトンの NMR スペクトルのデータ処理と帰属支援を対話型処理で行なうプログラムの紹介である。6P12 は化技研で作成されている総合スペクトルデータベース SDBS の一部をパーソナルコンピュータでも利用できるようにと考えられたものであり、ハードディスクの利用による新たなデータベース利用の可能性を示している。興味あるものとして化学シフト値の頻度表が提示されたが、これは自動解析などの折りに高い価値を示すものと考えられる

(山崎 昶)

6 P 1 3 : ワークステーションを利用した化学構造式の図形入力、結合表作成、立体構造編集の機能の開発、および STERIC1/ENCODE との連携によって化学構造式から直接その三次元座標を算出するシステムの開発についての報告があった。

(豊橋技科大 船津 公人)

6 P 1 4 : オーバラップ係数を用いた有機化合物の匂い記述子間の包含関係の検討 : Arclander の著書に収録されている 1710 種の化合物について、匂いの記述子、Sweet、Floral、Fruity など 155 種を対象にそれらの相互類似性、包含関係を標題の係数を定義してデンドログラムを画きクラスター分析を行った結果の報告。

匂いと分子構造との相関を求めてのこれらの努力はこれからも長い道程にはなるのであろうが、今後の進展を期待したい。

6 P 1 5 : 高温超伝導体の結晶構造データの構造表示

M-660K をホストとして従来迄構築して来た固体構造表示プログラム・ライブラリ (MGC-85) をベースに Net-One を通した PC-9801 VM を端末に継いで、端末用プリンターで 8 色のカラーを用いた Te 系化合物の高温超伝導体の構造表示の結果報告、透視図法を使って構成の各原子をカラーの大小の球で表現しているので見易い。超伝導体の今後の研究に有用と思われる。今後小型のハードシステムでの使用可能化が課題か。

(筑波研究学園 前田浩五郎)

#### 6 P 1 8 :

演者らの一連の研究に関しては、本シンポジウム以外においても、聞かせて頂いたことがあるが、着実に発展させておられるとの感が強い。今回は、前報 (第 4 回ソフトウェアコンファレンス) の時のシステムに加え、パラメーターの初期値を推定する機能が加わっており、より一層の自動化が計られている。このようなシステムが、パソコンレベルで作成されたことは、ある意味で、大変な驚きですらある。只、薬学分野のデータのように、ばらつきが非常に大きな場合には、ロバスト推定法が重要な役割を果たすようになってくる場合もある。今後、単純最小自乗法だけでなく、ロバスト推定法やリッジ推定法等のメニューが加われば、より一相応用範囲が広まるのではないかと考えている。いずれにしろ、大変興味深い内容であった。

(阪大薬 高木達也)

6P19 分子設計におけるエキスパートシステムに関する研究(富士通)馬場雅浩、他  
新規活性物質の開発は現状ではカンとか経験に依存するところが多く、その過程をアルゴリズムとして記述することは困難である。本研究は種々の経験的知識や判断規準をルールの集合体として運用しようとする一つの試みとして評価できる。

6P20 Log P データベースを利用した疎水性置換基定数 $\pi$ の算出(三共)宮本秀一、他  
部分構造の疎水性置換基定数 $\pi$ を脂肪族系化合物について評価しようとしたもので、芳香族の骨格を有する場合にくらべ部分構造の範囲を特定しにくい点を近傍基効果として補正することで精度を高くしようと試みている点は共感できる。

(東京農工大 安川 民男)

## 第12回情報化学討論会(予告)

日時:1989年11月8日(水)~10日(金)

会場:千里協栄生命ホール(〒565 豊中市新千里西町1-1-10 協栄生命ビル内 ☎06-834-6555)

交通 JR 新大阪駅より地下鉄御堂筋線(北大阪急行)にて10分 千里中央駅下車、徒歩5分

一般講演は上記3日間とし、ポスターセッションを9日に、特別講演を9、10日の両日に、また懇親会は9日夕に予定しております。

構造活性相関シンポジウムは同じ日程ですが、会場はつぎのとおりで、両会場は徒歩5分程度です。

構造活性相関シンポジウムおよび特別講演会場:

よみうり文化ホール(〒565 豊中市新千里東町1-1-3 よみうり文化センター内

☎06-833-5031)

## 「有機化学者のためのパソコン利用講習会」開催報告

北大理 大澤映二

昭和63年11月30日(水)に豊橋技術科学大学において標記の講習会を行った。主催は本情報化学部会と新世代研究所で、後者については本部会会員の方々には馴染みが薄いと思われるので始めに一言紹介させて頂きたい。これはセイコー電子工業(株)がスポンサーとなって設立した研究所でお茶の水に本拠がある。事業の一つに先端科学技術に関する委員会、研究会の開催が唱われており、その中に分子設計研究会があって、佐々木慎一先生が委員長を勤めておられる。

さて、この講習会は「化学と工業」に案内を出したところ、有料(2千円~3万円)であったにも拘らず、旬日を経ずして予定の定員35名を越す応募があり、計算化学に対する関心の厚いことに改めて驚かされた。

当日は満員の会場で早朝9時から夕方まで殆ど休みもなく次のスケジュールで講義と実習が行われた。

- |                     |             |
|---------------------|-------------|
| 1. 反応検索             | (東洋情報) 三枝利隆 |
| 2. 人工知能的分子表示        | (IBM) 小出昭夫  |
| 3. 分子力学計算法入門        | (北大理) 大澤映二  |
| 4. 分子軌道計算法入門        | (東大工) 平野恒夫  |
| 5. 立体配座解析           | (東工大) 中浜精一  |
| 6. 反応選択性の予測         | (東工大) 高橋孝志  |
| 7. ペプチド、ポリペプチドの分子設計 | (東工大) 宍戸昌彦  |

講師は1と2を除いて全員が新世代研究所分子設計研究会のメンバーである。

1は主としてSynlibの紹介であった。2は日本IBMのユニークな分子表示プログラムMolworldの紹介とその背景となっている化学人工知能の話であった。3以下はすべて講師自身の研究テーマに関連していかにパソコンと計算化学的手法を活用しているかの体験談であった。全セッションにわたって熱心な質疑応答が行われた。少し残念だったのはたまたま同大学に新設の知識情報工学教室の計算機室が未完成でしかもパソコンの入れ替え時期と重なり、一人一台づつを使う実習を行うという公約が完全に果たせなかったことであった。しかし、佐々木先生を始めとする技科大のスタッフの方々の献身的なご協力のおかげでなんとか無事に終わることが出来た。

散会の際に受講者の方々に(1)パソコンが揃った時にもう一度講習会を行う、(2)配布できるプログラムを後でお送りするという2点を約束したが、(2)はまもなく実施できる見込みである。最後にお世話になった新世代研究所、技科大の職員の方々に厚く御礼申し上げる。

# 年会プログラム

## 第58春季年会 化学情報・計算機化学プログラム

日時 4月1日(日)～4日(水)

場所 同志社大学田辺校舎(京都府綴喜郡田辺町)

IE会場(知真館1号館232教室)

4月1日(日)(化学情報・計算機化学)

(9:20～10:20) (座長 工藤喜弘)

1IE03\* NMRスペクトル・データベースのパーソナル・コンピュータ化(II) H1スペクトルのピーク情報化(神田外語大、化技研、日本電子) ○山本 修・早水紀久子・中川恵策・官林延良

1IE05\* 化学構造とNMRスペクトルのデータ処理統合システムCIMSの開発(3) —  
1 H-NMRスペクトル検索システムの開発(豊橋技科大) ○奥山 徹・吉田浩二・阿部英次・佐々木慎一

1IE07\* グラフ理論によるアルカン類のC-13NMR化学シフト総和の解析(豊橋技科大)  
宮下芳勝・大迫広征・奥山 徹・佐々木慎一

(10:20～11:00) (座長 阿部英次)

1IE09\* 最大共通部分構造自動認識システム“MAXFIT”の改良(豊橋技科大) ○高橋由雅・赤木俊夫・佐々木慎一

1IE11\* 水溶解度・分配係数等の自動推算システムの開発(山形大工) 鈴木孝弘・○工藤喜弘

(11:00～12:00) (座長 飯塚 健)

1IE13 ミニフォーラム 化学物質の安全情報の現状(日本化学物質安全・情報センター)  
大島輝夫

1IE16 ミニフォーラム 化学における電子出版の活用—反応設計の場合(中外製薬) 松浦育敏

(13:00～14:00) (座長 藤田眞作)

1IE25\* 分子模型を化学式から構築する試み(1) 分子式から鎖状分子(電通大電子物性) 平 清・○林 茂雄

1IE27\* コンピュータによる分子構造模型の表示:切断図形表示機能の拡張(姫路工大) 張 金碯・○中野英彦・山名一成・三軒 齊

1IE29\* 3Dグラフィックス装置を用いた波動関数の簡易表示プログラムの開発(阪大薬) 高木達也・○永井伸二・前嶋博信・谷 美香・藤原英明・佐々木喜男

(14:00～15:00) (座長 田辺和俊)

1IE31\* 有機化合物の自動構造推定システムCHEMICSの32ビットパーソナルコンピュータへの移植(豊橋技科大) ○船津公人・佐々木慎一

1IE33\* 剰余類表現による異性体の数え上げ(富士写真フィルム足柄研) 藤田眞作

1 I E 3 5\* アミノ酸配列に対する概念的クラスタリングシステムの構築 (関学大理・関学大  
情報処理研究センター) ○中川博之・小山 泰・河井俊一・岡田 孝

(15:00~16:00) (座長 宮下芳勝)

1 I E 3 7\* 受容サイトにおける分子認識機構 (4) パパイソ—オリゴペプチド系の分子動力  
学 (東京農工大工・化技研) 樋口俊章・佐藤克則・片岡良一・○安川民男・田辺和俊

1 I E 3 9\* オーバーラップ係数を用いた有機化合物の匂い記述子間の包含関係の検討 (2)  
(豊橋技科大) ○小向隆夫・金谷重彦・高橋由雅・阿部英次・佐々木慎一

1 I E 4 1\* 有機合成設計システムとCASINOの開発(10)合成経路探索における合成反応、  
化合物の抽象化 (化技研・東京薬大・富士通) ○内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古・林 輝  
幸・原 昭二・湯田浩太郎・樋高 透・矢幡史子

(16:00~17:00) (座長 安川民男)

1 I E 4 3 ミニフォーラム 化合物の体系名の計算機処理—その現状と将来 (日本科学技術  
情報センター) 荒木啓介

1 I E 4 6 ミニフォーラム 計算化学におけるスーパーコンピュータ (リクルート) ○原  
典行・諫田克也

※注：講演時間はB講演 (\*印) 1件20分 (講演14分、討論6分) です。尚、ミニフォーラム  
(1 I E 1 3、1 I E 1 6、1 I E 4 3、1 I E 4 6) は1件30分です。

★講演終了後、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。

\*\*\*\*\*  
\*  
\* 情報化学部会部会員増加にご協力を! \*  
\*  
\*  
\*  
\* 【平成元年部会費】 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) \*  
\*  
\*\*\*\*\*

## 第3回化学PCソフトウェア研究討論会を終えて

11月14日(月)と15日(火)の二日間にわたり、第3回化学PCソフトウェア研究討論会(化学PC研究会主催、三軒齊実行委員長)が、姫路工業大学4号教育棟3階講義室と4階講義室において開催された。参加人員は約160名であり、特別講演1件のほか、一般発表35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1時間の口頭発表のあと、1時間半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14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。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。

討論会の開催は、本会主催の催しであっても第1回目から事業独立採算制を採っている。そのような事情もあって開催・実行委員会のご苦勞は計り知れないものがあった。三軒齊実行委員長を始め、中野英彦委員、中野修委員、および熊谷哲委員にはたいへんお世話になり感謝している。今回使用したパソコンは、後援していただいた日本電気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。特に、日本電気の本橋正美嬢の献身的な助力には深謝している。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、化学ソフトのデモンストレーションとマンツーマン討論ができた。関係者には、重ねて感謝申し上げたい。

会社からの協賛は、今回展示が少なく2社で、広告12社であった。学会の共催は、日本化学会、日本化学会情報化学部会、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、日本薬学会近畿支部、CAI学会、日本ポーラログラフ学会である。関係各位に対して深謝している。後援は、姫路市教育委員会、播磨ケミカルサロン、および日本電気㈱であった。

第1日目の一般発表後に、特別講演が行われた。それは、「CD-ROMからCD-Iへ:CAIシステムの現状」と題して西田英郎先生(姫路独協大学教授)によって行われた。先生によって作成されたCD-ROMによるCAIシステムのデモンストレーションも行われ、討論に花を添えた。特別講演の後、大学会議室にて懇親会が行われた。参加人員は44名であった。第2日目の一般発表後に、シンポジウム「化学パソコンソフトウェアの流通と化学PC研究会の役割」が行われた。その中で無償利用ソフトの頒布の状況説明と今後の方針が事務局よりあった。

今回の討論会のプログラムは締切日を守ったため、共催の学会等への会誌発表ができた。参加しなかった方で本討論会での発表に興味を持たれた方は、発表要旨集の残部が多少ありますので、本会事務局あて葉書でご注文ください。有料(送料込みで1200円、後払い)で配布します。

毎年、このようなデモンストレーション中心の研究討論会を開いてほしいという要請が多かったので、次年度(1989年秋)は、事務局のある福井工業高等専門学校(世話人:吉村忠与志、実行委員長:埜村守先生)で第4回研究討論会を開催する予定である。

(福井工業高等専門学校 吉村 忠与志)

## 国内の動き

### 日本化学プログラム交換機構 (J C P E) 発足のお知らせと入会のご案内

発起人代表 大沢映二 (北大理)

#### 1. 設立趣旨

近年コンピュータ支援ドラッグデザインをはじめとして、計算機化学的手法の化学研究への応用が産業界、学会をとわず急速に普及し、化学研究における思考方法の変革をもたらしつつある。これにともなって計算機化学関連のプログラムに対する需要が増大し、今後もふえ続ける見込みである。

しかしこの分野における基本的なプログラムがすべて国外で作られたためもあり、わが国のユーザーはプログラムの入手を欧米のプログラム提供機関に完全に依存している。その結果として種々の不便が生じており、国内に米国のQ C P Eのようなプログラム交換機構の設立を望む声強い。

そこでQ C P Eをモデルとして、このたび、少数の計算機化学者のボランティア活動を基盤とする「日本化学プログラム交換機構 (J C P E)」を発足させることにした。

#### 2. 目的

本機構は、日本における計算機化学関連のプログラム (オリジナル、公開を原則とする) の交換機構 (非営利) として、学会、産業界の研究者、技術者に広く計算機化学を普及させることを目的として設立する。

#### 3. 事業

- (1) 国産の化学関連のプログラムの交換
- (2) MM2、MOPAC等の重要公開プログラムの頒布
- (3) ニュースレター (季刊) の発行
- (4) プログラムの使用法に関する講演会、講習会等の開催

#### 4. 会費

- (1) 年会費 ①個人会員 (大学、公的研究機関等の個人研究者) : 一人 2,000 円  
②団体会員 (一般企業等の事業所単位) : 一口 20,000 円  
③賛助会員 (一般企業等) : 一口 50,000 円
- (2) 講演会・講習会参加費 : 別途徴収 (会員は割引)
- (3) プログラム頒布費 : 実費程度を別途徴収

#### 5. 発起人 (アイウエオ順)

岩田末広 (慶大理工)、大沢映二 (北大理)、柏木 浩 (分子研)、佐々木慎一 (豊橋技科大)、田辺和俊 (化技研)、中西浩一郎 (京大工)、平野恒夫 (東大工)、細矢治夫 (お茶大理)

#### 6. 照会先

〒305 つくば市東1-1 化学技術研究所 田辺和俊 気付 J C P E 事務局  
電話 0298-54-4522 (直通)

CALL FOR POSTER PAPERS

PACIFICHEM '89

Progress in Mathematical Modelling in Chemistry

1989環太平洋国際化学会議が本年12月17日(日)~22日(金)ホノルルで開催されます。会議全体については「化学と工業」1月号に掲載されてありますが、Information transfer 部門の中に Progress in Mathematical Modelling というシンポジウムを計画しました。これは更に、

Enumeration

Characterization

Algebra (and Numeric Methods)

Geometry

Modelling (Simulation)

という5つのミニシンポジウム(1会場半日)と2つのポスターセッションに分かれます。前者は、招待講演だけに限られますが、上の5つのテーマに関するポスターによる発表を募集しています。奮って御応募下さい。

なお、招待講演者の一部を以下に記します。

N.L. Allinger, K. Balasubramanian, S.C. Basak, F. Harary,  
 W.C. Herndon, L.B. Kier, R.B. King, D.J. Klein, G.M. Maggiora,  
 P.G. Mezey, M. Randić, R.C. Read, W.A. Seitz, V.H. Smith,  
 相原惇一、内野正弘、大沢映二、大峯 巖、片岡洋右、  
 佐々木慎一、佐藤満雄、立花明知、藤田真作、宮下芳勝、 etc.

です。

1989 1 11

お茶の水女子大学

細矢 治夫

Drake Univ., Des Moines, Iowa

Milan Randić

Univ. of Saskatchewan, Saskatoon, CANADA

Paul G. Mezey

シンポジウム参加募集

P A C I F I C H E M ' 8 9

----Advances in Computational Chemistry----

「化学と工業」 本年1月号の会告でご承知のように1989環太平洋国際化学会議が本年12月17日(日)～22日(金)ホノルルにて開催されます。Information Transfer部門の中に「計算化学の進歩」というシンポジウムを企画しました。このシンポジウムは次のような3セッション

- (1) Large-Scale Chemical Computations (スーパーコンピュータ等)
- (2) Development of Molecular Mechanics Force-Fields for Novel Structural and Reactivity Applications (分子力学等)
- (3) New Techniques in Computational Theoretical Chemistry (量子化学、分子動力学、ドラッグデザイン等)

に分かれていて、丸二日間を予定しています。口頭発表およびポスターセッションを公募しますので奮って御応募願います。(申し込み方法は「化学と工業」1月号14頁参照)

現在のところ次の招待講演者が決定しています: 郷 信宏、西本吉助、深沢義正、山口兆(内定)、D. Dixon, E. Clementi, M. Karplus, N. L. Allinger, P. Kollman, D. Weaver, K. Steliou, D. Salahub, J. A. Pople, L. Radom, H. Schaefer, III

平成元年1月18日

世話人

北海道大学

大澤映二

U. C. L. A.

K. N. Houk

University of Guelph

J. D. Goddard

University of South Wales M. N. Paddon-Row

# 文 献 紹 介

## JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

May 1988 Vol. 65, No.5

Journal of Chemical Education: Software Introduction and Abstracts for First Issue.

Introduction to *Journal of Chemical Education: Software*, John W. Moore, Editor, p. 8

About This Issue: The "One-Computer-Classroom", Tamar Y. Susskind, Issue Editor, p. 388

Alpha Scatter, Robert C. Rittenhouse, p.388

Wave, James R. Hutchison and Martin Rose, p.388

Sum of Two Waves, Robert H. Good, p.389

Aufbau, Dale L. Jensen, p.389

Periodic TableWorks, John L. Holmes, p.389

Vol. 65, No.6 JUNE 1988

Computer Series: 92

edited by John W. Moore

Evolution of the Computer Series, John W. Morre, p.524

When Versa... Goes Apple...for a Blind Chemist!, Jean-Piere Carties and Peter Jones, p.525

Vol. 65, No.7 JULY 1988

Computer Series: 93

Computers in Schools

John W. Moore and Elizabeth A. Moore

Interactive program System for Integration of Reaction Rate Equations, John P. Chesick, p.597

Vol. 65, No.8 AUGUST 1988

Computer Series 94: Programming Style

G. Scott Owen

Journal of Chemical Education Software Abstract for Volume 1B, Number 1

KC? Discover: Exploring the Properties of Chemical Elements, Aw Feng, John W. Moore, William Harwood, and Robert Gayhart, p.695

About This Issue: "KC? Discover", John W. Moore, Issue Editor, p.695

Vol. 65, No.9 SEPTEMBER 1988

Computer Series, 95: Bits and Pieces, 38

edited by John W. Moore

The "Chemical Pursuit" Tournament, John C. Stenz, p.791

A Computer-Simulated Experiment on Vapor-Liquid Phase Equilibrium, Norman C. Craig, Brian J. Brown, William S. Chamness, and Elaine B. Mulvey, p.792

The van der Waals Equation and Vapor Pressure of Liquids, Herbert R. Ellison, p.793

Error Analysis for Multicomponent System, J. H. Kalivas and C. W. Blount, p.794

Polymerization Distribution Experiment Simulation, L. Oliver Smith, p.795

Spreadsheet Graphics in the Organic Laboratory: Providing Students with Feedback on their Data, Jeffrey E. Keiser, p.796

Use of an 8087 Co-Processor Chip to Speed up MOLDOT, Steven Brumby, p.797

PKIND: An Acid-Base Indicator Simulation for Apple II Microcomputers, Darnell Salyer, p.798

他の文献紹介の記事と異なり、本誌では、全体の内容ではなく"Computer Serie"を中心に紹介を行っていましたが、今回からは新たに企画加された"The Computer Bulletin Board"および"JCE: Software"に付いての記事の紹介を加えることにします。前者は主として計算機ハ

ードウェアおよび商業ベースのソフトウェアの化学教育への応用を、後者は“JCE: Software isn't about software, it is software.”と紹介されているように、シリーズAはApple II、シリーズBはMS-DOS(IBM compatible)、シリーズC(まだ予定のみ)はMacintosh ディスケット版のシリーズであり、その紹介記事が本誌の方へ掲載されるので、これを加えることにしました。  
(編集委員)

## JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

第6巻4号(12月) 論文題目、著者、頁

3D molecular lipophilicity potential profiles: a new tool in molecular modeling, P. Furet, A. Sele and N. C. Cohen, p.182

LOPAL and SCAMP: techniques for the comparison and display of protein structures, G. J. Barton and M. J. E. Sternberg, p.190

Color illustration, P.197

Estimating and representing hydrophobicity potential, J. -L. Fauchère, P. Quarnedon and L. Kaetterer, p.203

## QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

1988年第7巻3号 発表題目、著者、頁

Corwin Hansch, The Pioneer of QSAR, E. Coats, J. Seydel and A. Leo, p.119

Free Wilson Analysis. Theory, Applications and its Relationship to Hansch Analysis, H. Kubinyi, p.121

The Measurement of Partition Coefficients, J. C. Dearden and G. M. Bresnen, p.133

Multivariate Parametrization of Amino Acid Properties by Thin Layer Chromatography, L. Eriksson, J. Jonsson, M. Sjostrom and S. Woid, p.144

The Relationship Between Chemical Structure and the Logarithm of the Partition Coefficient, M. G. Koehler, S. Grigoras and W. J. Dunn III, p.150

A Free-Wilson Analysis of 5 $\beta$ , 14 $\beta$ -Androstane Derivatives Inhibiting the Na/K-ATPase from Human Heart, W. Schonefeld and K. R. H. Repke, p.160

Multivariate Data Analysis of Various Biological Test Systems Used for the Quantification of Ecotoxic Compounds, M. Nendza and J. K. Seydel, p.165

Quantitative and Qualitative Structure-Activity Relationships for Calcium Channel Modulating 1,4-Dihydropyridine Derivatives: A Hypothetical Molecular Receptor Model, H. -D. Hoitje and S. Marrer, p.174

<sup>13</sup>C-NMR and <sup>1</sup>H-NMR Chemical Shifts in a Correlation Analysis of Benzotriazole Derivatives Active as Plant Growth Regulators, F. Sparatore, G. Caliendo, M. I. La Rotonda, E. Noveellino, C. Sillpo and A. Vittoria, p.178

## JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

1988年第2卷3号(7月) 論文題目、著者、頁

### Review

The characteristic polynomial of a chemical graph, *N. Trinajstić*, p.197

### Papers

Approximate polynomial expressions for Rydberg-Klein-Rees curves of diatomic covalent molecules, *J. L. Viollaveces C., G. A. Arteca, F. M. Fernández and E. A. Castro*, p.217

New method for confluent singularity analysis of power series, *G. A. Arteca, F. M. Fernández and E. A. Castro*, p.227

### Notes

A Pascal-type triangle for the number of topologically distinct many-electron Feynman graphs, *F. Battaglia and T. F. George*, p.241

Isospectral Multitrees, *M. Randić and B. Baker*, p.249

How to compute the Wiener index of a graph, *B. Mohar and T. Pisanski*, p.267

Eigenvalues of large even annulenes in terms of  $K_3$ ,  $S_4$ , and  $S_5$ , *A. K. Mukherjee*, p.279

Numbers of Kekulé structures of hexagon-shaped benzenoids, *O. Bondrožá, I. Gutman, S. J. Cyvin and R. Tošić*, p.287

## JOURNAL OF COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN

1988年第2卷3号(10月) 論文題目、著者、頁

Symposium Overview. The Shell Conference on Computer-Aided Molecular Modelling, *G. R. Hays and D. P. de Bruijn*, p.165

Computer-Aided Molecular Modelling: Research study or research tool?, *A. Dearing*, p.179

Molecular Modelling in design of crop protection chemicals, *Barbara Odell*, p.191

Dynamic simulation as an essential tool in molecular modelling, *H. J. C. Berendsen*, p.217

Application of semi-empirical and ab initio quantum mechanical calculations, *Paul von Rague Schleyer*, p.223

Crystallographic modelling, *R. A. J. Druessen, B. O. Loopstra, D. P. de Bruijn, H. P. C. E. Kuipers and H. Schenk*, p.225

The modelling of nucleophilic and electrophilic additions to organometallic complexes using molecular graphics techniques, *Jacques Weber, Peter Fluekiger, Pierre-Yves Morgantini, Olivier Schaad, Annick Goursoot and Claude Daul*, p.235

Strategies for Modelling of Catalysis, *C. P. A. Catlow*, p.255

## COMPUTERS & CHEMISTRY

1989年第13卷第1号 論文題目、著者、頁

Softstrip® data strip containing the table of contents for this issue

A Self-consistent semi-empirical absorption correction technique, *L. L. Miler and R. A. Jacobson*, p.1

A fast system for the best matching of two sets of atomic coordinates, *Zong Jie Liu and Roland Van Rapenbusch*, p.5

Monte-Carlo simulation of surface reactions (Revisited), *Pierre Dufour, Martine Dumont, Vincent Chabart and Jacquess Lion*, p.25

A simple, performant diode array spectrophotometer, *Macro S. Caceci*, p.33

Factor analysis using column cross-validation, *Marius D'Amoiboise and Benoit Lagarde*, p.39

A simulation program for investigating substitution in polyalkenylenes coupled with double bond shifts, *Michael G. Martl and Klaus Hummel*, p.45

Dynamic level-shifting, *Gy. Domötör and M. I. Ban*, p.53

Polymer dynamics movies generated by program spacefil, *Marvin Bishop and Michael Csontos Jr*, p.59

An automated integration routine for FT-IR spectrometers, *S. Wade Sheen and Randy W. Snyder*, p.61

Computer controlled testing of batteries, *A. C. J. Kuiper, R. E. F. Einerhand and W. Visscher*, p.69

Data acquisition with the IBM PC/XT/AT family-I. A. medium speed system for the XT or AT, *Denis K. C. Leung and R. S. Tse*, p.75

Microcomputer automation of coulometric titration, *S. Q. Lew and R. S. Tse*, p.89

New version of NAMOD (Nagoya Molecular Display) program, *Yoshitake Beppu*, p.101

## JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

第28卷4号 (11月) 論文題目、著者、頁

Chemical Abstracts Service Chemical Registry System. 10. Registration of Substances from Pre-1965 Indexes of Chemical Abstracts, *Karen A. Hamill, R. David Nelson, Gerald G. Vander Stow, and Robert E. Stobaugh*, p.175

Chemical Abstracts Service Chemical Registry System. II. Substance-Related Statistics: Update and Additions, *Robert E. Stobaugh*, p.180

Problems of Molecular Design and the Computer. II. The FLAMINGOES Program System for the Nonempirical Solution of Structural Problems of Organic Chemistry. The BASIC Program Oriented for Microcomputer, *Nikola S. Zefirov, Ekaterina V. Gordeeva, and Serge S. Tratch*, p.193

Heuristic Refinement Method for the Derivation of Protein Solution Structures: Validation on Cytochrome b562, *James F. Brinkley, Russ B. Altman, Bruce S. Duncan, Bruce G. Bunchanan, and Oleg Jardetzky*, p.194

Deterministic Control in knowledge-Based Systems: Application to the Development of a Cybernetic Analytical Instrument, *Hari Gunasingham, and M. L. Wong*, p.211

TORTS: An Expert System for Temporal Optimization of Robotic Procedures, *T. L. Isenhour and P. B. Harrington*, p.215

An Efficient Graph Approach to Matching Chemical Structures, *O. Owolabi*, p.221

<sup>13</sup>C NMR Assignments of the Basin in Oligodeoxynucleotides: An Automated Procedure Using Bayesian Statistics, *Timothy J. Hyman, Eilis A. Boudreau, Gilles G. Martin, Be at M. Jucker, Philip N. Boyer, and George C. Levy*, p.226

#### COMPUTER SOFTWARE REVIEWS

T<sup>3</sup> Scientific Word Processing System, *Reviewed by M. Novic and J. Zupan*, p.231

NMR Simulation and IR Simulator, *Reviewed by Gary W. Small*, p.232

Microsoft Word, Version 4.0, *Reviewed by Gary W. Small*, p.234

\*\*\*\*\*  
\*  
\* 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。 \*  
\* 尚、原稿締切日は発行月（奇数月）の10日です。 \*  
\* 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 \*  
\*  
\*\*\*\*\*

- Hydrogen Bonding in MM2  
*Norman L. Allinger, Randall A. Kok, and Mita R. Imam* , p. 591
- A Fast, Direct, Algorithm for the Least-Squares Fitting of Two Sets of Atomic Coordinates of Macromolecular Structures  
*Zong Jie Liu and Roland Van Rapenbusch* , p. 596
- Ab Initio* Studies of the Ground-State Potential Energy Surface of Formamide  
*Gregory M. Wright, Richard J. Simmonds, and David E. Parry* , p. 600
- Treatment of Symmetry in MO Calculations. II. Numerical Projection Operators for Molecular Orbitals  
*H. H. Jaffe* , p. 604
- Shape Group Studies of Molecular Similarity and Regioselectivity in Chemical Reactions  
*Gustavo A. Arteca, Victoria B. Jammal, and Paul G. Mezey* , p. 608
- Ab Initio* Calculations on Large Molecules: The Multiplicative Integral Approximation  
*C. Van Alsenoy* , p. 620
- Development of a Program for MCSCF Calculations with Large Basis Sets  
*Shigeyoshi Yamamoto, Umpei Nagashima, Tomoo Aoyama, and Hiroshi Kashiwagi* , p. 627
- Computer Assisted Structure—Taste Studies on Sulfamates by Pattern Recognition Method Using Graph Theoretical Invariants  
*Yohru Okuyama, Yoshikatsu Miyashita, Shigehiko Kanaya, Hiroyuki Katsumi, Shin-ichi Sasaki, and Milan Randic* , p. 636
- Vibrational Eigenvalues for all Levels for the Lennard-Jones Potential  
*Mounzer Dagher and Hafez Kobeissi* , p. 647
- A Stable, Rapidly Converging Conjugate Gradient Method for Energy Minimization  
*Stanley J. Watowich, Eric S. Meyer, Ray Hagstrom, and Robert Josephs* , p. 650
- Toward Automating the Process of Determining Polypeptide Secondary Structure from <sup>1</sup>H NMR Data  
*John A. Brugge, Bruce G. Buchanan, and Oleg Jardetzky* , p. 662
- Analytic Solutions to Sets of First-Order Rate Equations with up to Six Rate Constants Using a Symbolic Computer Language SMP and Application to Biochemical Kinetics  
*W. C. Kreye, Prem Batra, and Gordon Skinner* , p. 674
- Conformational Energetics of 1,3-Dichloropropane as Predicted by Several Calculations Methods  
*Andrew J. Holder and David L. Wertz* , p. 684
- Simulation of Wave-Propagation in Three Dimensions Using Fortran of the CYBER 205  
*Erzsebet Lugosi and Arthur T. Winfree* , p. 689
- Comparison of Semiempirical MO Methods for Open-Shell Systems  
*Derek Higgins, Collin Thomson, and Walter Thiel* , p. 702

Volume 9 Number 7 October/November 1988

- A Molecular Mechanics Study of the Si—O Bond and Alkyl-Silanes  
*Raymond J. Abraham and G. H. Grant* , p. 709
- Applications of the Model Potential Method to Transition Metal Compounds  
*Eisaku Miyoshi and Yoshiko Sakai* , p. 719
- Validity of the Hammond Postulate and Constraints on General One-Dimensional Reaction Barriers  
*Gustavo A. Arteca and Paul G. Mezey* , p. 728
- Representation of the Molecular Electrostatic Potential by Atomic Multipole and Bond Dipole Models  
*Donald E. Williams* , p. 745
- A Simple Method for Calculating Reliable Atomic Charges in Large Molecules  
*John Mullay* , p. 764
- Computation of One and Two Electron Spin-Orbit Integrals  
*Harry F. King and Thomas R. Furlani* , p. 771
- Ab Initio* Calculations Relevant to the Mechanism of Chemical Carcinogenesis by *N*-Nitrosamines. VIII. Effects of Hydration on Various Reactions Involved in the Formation and Metabolism of *N*-Nitrosamines  
*Rosanna Bonaccorsi, Jocopo Tomasi, Christopher A. Reynolds, and C. Thomson* , p. 779
- Theoretical Calculations of Proton Affinities of Azines. Prediction of the Relative Basicities and Preferred Protonation Sites  
*Javier Fernández Sanz, Julio Anguiano, and Jaume Vilarrasa* , p. 784
- Calculation of the One-Electron Two-Center Integrals with STOs Using Recurrence-Based Algorithms  
*J. Fernández Rico, R. López, and G. Ramírez* , p. 790
- Book Reviews , p. 798

Volume 9 Number 8 December 1988

- Structure and Properties of Small Silicon and Aluminum Clusters  
*Karl Jug, Hans-Peter Schluff, Hans Kupka, and Rüdiger Iffert* , p. 803
- On the Computation of Stationary Points on Potential Energy Hypersurfaces  
*Wolfgang Kliesch, Klaus Schenk, Dietmar Heidrich, and Holger Dachsel* , p. 810
- Hydration of Fe<sup>+</sup>: A Monte Carlo Simulation of Water Clusters and of a Dilute Aqueous Solution  
*A. González-Lafont, J. M. Lluch, A. Oliva, and J. Bertrán* , p. 819
- Application of the Higher Order Finite-Element Method to One-Dimensional Schrödinger Equation  
*Toshiyasu Kimura, Nobuyuki Sato, and Suehiro Iwata* , p. 827
- Doublet Instability and the Molecular Structure of AlO<sub>2</sub>  
*J. Rubio, J. M. Ricart, and F. Illas* , p. 836
- On Testing Difference Equations for the Diatomic Eigenvalue Problem  
*Hafez Kobeissi and Majida Kobeissi* , p. 844
- Molecular Mechanics of Peroxides. I. Parametrization and Conformational Analysis of Linear Compounds  
*Luis Carballeira, Ricardo A. Mosquera, and Miguel A. Ríos* , p. 851

A Modular Strategy for Generating Starting Conformations and Data Structures of Polynucleotide Helices for Potential Energy Calculations  
*Tamar Schlick*, p. 861

The MT-MSX $\alpha$ (R) Method: Applications to Li<sub>2</sub>, F<sub>2</sub>, and N<sub>2</sub> Molecules  
*S. C. Kao and T. J. Tseng*, p. 890

A New Tool for the Rapid Estimation of Charge Distribution  
*John J. Houser and Gilles Klopman*, p. 893

Theoretical Studies of Conjugated Systems Containing C=C and C=N Fragments and Their Alkyl and Amino Derivatives  
*J. Kao*, p. 905

Note on the Role of Vibrational Modes in Molecular Electronic Transitions  
*R. L. Gordon*, p. 924

Volume 10 Number 1 January/February 1989

Computer Generation of Edge Groups and Edge Colorings of Graphs  
*Xiaoyu Liu and K. Balasubramanian*, p. 1

*Ab Initio* SCF MO Results for the Carborane Isomers 3,5-C<sub>2</sub>B<sub>5</sub>H<sub>8</sub>, 1,7-C<sub>2</sub>B<sub>7</sub>H<sub>9</sub>, and 1,2-C<sub>2</sub>B<sub>7</sub>H<sub>9</sub>  
*Benjamin M. Gimarc, Baiching Dai, and Jane J. Ott*, p. 14

Deorthogonalization of Atomic Orbitals in the CNDO Approach  
*Alice Chung-Phillips*, p. 17

Guanidinium-Type Resonance Stabilization and Its Biological Implications. I. The Guanidine and Extended-Guanidine Series  
*Martin L. Williams and Jill E. Gready*, p. 35

Stationary Points on the Potential Energy Surface of O<sub>2</sub><sup>-</sup>HF and O<sub>2</sub><sup>-</sup>H<sub>2</sub>O  
*Jesus P. Lopez*, p. 55

First and Second Derivative Matrix Elements for the Stretching, Bending, and Torsional Energy  
*Kenneth J. Miller, Robert J. Hinde, and Janet Anderson*, p. 63

Continuum Radial Dielectric Functions for Ion and Dipole Solution Systems  
*S. Ehrenson*, p. 77

Correlation Analysis of Substituent Effects on the Acidity of Benzoic Acids by the AM1 Method  
*Tomoko Sotomatsu, Yoshiyuki Murata, and Toshio Fujita*, p. 94

Simple Alkyldisilanes: MM2 and *Ab Initio* Studies of Their Structures and Barriers to Rotation  
*Salvatore Profeta, Jr., Raymond J. Unwalla, and Frank K. Cartledge*, p. 99

Improvements on the Direct SCF Method  
*Marco Häser and Reinhart Ahlrichs*, p. 104

Basis Set Selections for Relativistic Self-Consistent Field Calculations  
*Yoon Sup Lee, Kyoung Koo Baeck, and A. D. McLean*, p. 112

The Density Integration Approach to Populations. A Critical Comparison of Projection Populations to Populations Defined by the Theory of Atoms in Molecules  
*Rainer Glaser*, p. 118

# 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 7, Number 2  
March 1989

## 目 次

### 部会行事

- 第12回情報化学討論会 ..... 1

### 部会記事

- 平成元年度部会役員 ..... 2

### 関連行事

- 第17回構造活性相関シンポジウム ..... 3

### 学会報告

- 1989 情報学シンポジウム ..... 石塚英弘 4

### 海外動向

- 「Tetrahedron Computer Methodology」について ..... 高橋由雅 7  
Meetings ..... 11

### 国内の動き

- 量子化学文献データベース(QCLDB)および会話的検索  
ソフトウェアの磁気テープによる頒布について ..... 13

### 文献紹介

- 本号迄の紹介文献一覧 ..... 14  
Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol. 2, No.4) ..... 16  
Journal of Chemical Information and Computer Sciences  
(Vol. 29, No. 1) ..... 17  
Journal of Mathematical Chemistry (Vol. 2, No. 4) ..... 17  
Journal of Computational Chemistry (Vol. 9, No. 7) ..... 18  
Journal of Chemical Education (Vol. 65, No. 10~No. 11) ..... 18

- 部会員名簿 ..... 19

## 部 会 行 事

### 第 1 2 回 情 報 化 学 討 論 会

共催 日本化学会、日本薬学会、日本農芸化学会、日本分析化学会  
情報科学技術協会

日時 1989年11月8、9、10日(水、木、金)

会場 千里協栄生命ホール(一般講演、ポスター発表)

565 豊中市新千里西町1-1-10 協栄生命ビル内  
よみうり文化ホール(特別講演)

565 豊中市新千里東町1-1-3 よみうり文化セン  
ター内

交通 JR 新大阪駅より地下鉄御堂筋線(北大阪急行)にて  
15分 千里中央駅下車 徒歩5分

なお 同じ会期で 第17回構造活性相関シンポジウムがよみ  
うり文化ホールで開催されます。

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ーの利用、3) そのほか情報化  
学一般

講演申込締切 7月31日(月)

1件ごとにB5判の用紙に次の事項を記入のうえ、下記あてお送  
り下さい。a) 講演題目、b) 発表者と所属(講演者に○印)、c) 連絡  
先、d) 討論主題(上記の3主題の1つを記入)、e) ポスター発表の  
可否(申込件数が多い場合には、ポスター発表に切りかえてくださ  
るようお願いすることがあります)。

講演要旨締切 9月30日(土)

講演1件について所定の用紙4枚まで。他に半ページの英文要旨  
を添付すること。(用紙や記入要領は申し込みを受理したのち送付  
します)。

懇親会 11月9日(木) 18時 第16回構造活性相関シン  
ポジウムと合同で開催します。

申込先 671-22 姫路市書写2167 姫路工業大学工学基礎研究所  
安岡 則武

# 部 会 記 事

## 平成元年度部会役員

(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	豊橋技術科学大学副学長
(幹 事)	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	図書館情報大学図書館情報学部
	今 井 賢	立正大学教養部
	岩 沢 まり子	(株)紀伊國屋書店
	大 澤 映 二	北海道大学理学部
	岡 田 孝	関西学院大学情報処理研究センター
	工 藤 喜 弘	山形大学工学部
	小 出 昭 夫	IBMリサーチインスティテュート
	板 井 昭 子	東京大学薬学部
	高 橋 由 雅	豊橋技術科学大学第7工学系
	高 山 千代蔵	住友化学工業(株)宝塚総合研究所
	中 野 英 彦	姫路工業大学工学部
	橋 本 正 雄	日立計測エンジニアリング(株)
	広 田 勇 二	(社)化学情報協会
	深 沢 義 正	広島大学理学部
	藤 枝 修 子	お茶の水女子大学理学部
	藤 原 讓	筑波大学電子情報工学系
	船 津 公 人	豊橋技術科学大学知識情報工学系
	町 田 勝之輔	京都大学薬学部
	松 浦 育 敏	中外製薬(株)富士御殿場研究所
	安 岡 則 武	姫路工業大学工学基礎研究所
	山 口 静 子	味の素(株)中央研究所
(監 査)	佐 藤 公太郎	富士写真フィルム(株)
	山 本 修	神田外語大学



### 1. はじめに

今年の1月17・18日の両日、日本学術会議講堂で1989年の情報学シンポジウムが開催された。これは、コンピュータを使って情報や知識を処理している色々な分野の人が一堂に会して、それぞれの成果や問題点を報告・議論するシンポジウムであり、毎年この時期に行われている。主催は、日本学術会議の情報関連の四つの研究連絡委員会と、情報処理学会、日本化学会など計7つの学会の共同で行われ、また、後援は21学協会と幅広い学問分野をカバーしている。

このようにシンポジウムの対象分野は様々であるが、講演の中には情報化学やそれに関連する興味深い発表もあったので、紹介の文を書くこととなった。読者の参考になれば幸いである。

### 2. シンポジウムの概要

プログラムは次の頁に示すとおりであり、発表は色々な分野にわたっているが、本稿では情報化学に関連した発表を中心に紹介することとした。

まず、JICSTの理事長下邨昭三氏による基調講演があった。ここでは、科学技術情報の国際流通をめぐる動きの中で、日本で生産される文献情報を利用したいという期待が強くなってきたこと、これに対してJICSTは、海外へのサービスや英文データベースの提供、また日米欧3極の連携による国際情報ネットワーク(STN International)への参加などを行っていること、さらに技術的課題について研究開発を行っていることなどが述べられた。

特別講演の2では、日本特許情報機構の最新のサービス状況が報告された。特に注目された点として、特許公報全文のイメージ情報データベースが光ディスクを使って作られており、それをCD-ROMでサービスするようになったこと、さらに1990年10月からは特許出願をフロッピー・ディスクやオンラインによって行うことを目指して準備を進めていること、それが実現すると特許公報全文データベースは文字や表をコード・データとして、図や数式などをイメージ・データとして収録する統合データベースとなり、分類やキーワードだけでなく文字検索も可能となることなどが挙げられる。

セッション2の2番目は最近注目されているハイパーメディアに関する発表であった。このシステムによって、文章や図だけでなく、音声情報(たとえば、重要語の発音)や動画も入れておいて自由かつ有機的に検索・出力することができるので、たとえばコンピュータを使った百科辞典のシステムが実現できるとのことであった。

同じセッションの3番目は、CA Search データベースの内容、特に一般事項索引の部分を自然言語処理の手法を適用して解析し、知識ベース化した研究である。知識表現形式はフレームを用いている。知識ベースの作成は人手が掛かることが問題であるが、この研究は文献データベースから自動的に知識ベースを作成しようとする点が特徴である。

同じく4番目は、科学技術用語集にある日本語と英語の対訳関係から、同義語・上位語・下位語を自動抽出することによって、シソーラスを作ろうとする報告であり、このシステムによって専門家による知識投入の手間を最小限に留めることができるとのことであった。

## 第1日 プログラム

### 基調講演

科学技術情報と国際コミュニケーション

下邨昭三 (日本科学技術情報センター)

### 特別講演 1

投資情報データベースの構築と資金運用における応用 松本盛廣 (山一証券)

セッション 1 時間依存の情報の取り扱い

培養生物に関するデータセンターの運営に関する問題点

菅原秀明, 鶴川義弘 (理研)

原子炉圧力容器鋼の疲労亀裂成長挙動評価のためのデータベース構築

中島 甫, 横山憲夫 (原研), 庄子哲雄 (東北大)

### 特別講演 2

特許情報における最近の諸問題 長野雄治 (日本特許情報機構)

セッション 2 新しい技術, その基礎と応用

代数的仕様記述と図式仕様記述の相補的役割について——複眼的システムモデル

古川忠始, 津田淳一郎, 本位田真一 (東芝)

音声, 動画を含むハイパーメディア作成支援システム

小川隆一, 佐原信幸, 金子朝男 (日電)

化学文献情報データベースの知識ベースシステム化——設計と試作

石塚英弘, 王 忠清, 山本毅雄 (情報大)

科学技術用語集に基づくシソーラスの自動作成

藤原 謙, 李 元揆, 張 曉冬, 北川博之, 大保信夫 (筑波大)

日本医学用語データベースの構築と辞典編集への手順と実践

阿部正信, 伊藤隆太, 太田邦夫 (日本医学会医学用語委員会)

セッション 2 の 5 番目は, 医学用語データベース作成の報告であった。この中には日本語, 英語, ラテン語, ドイツ語が収録されている。

二日目の村上氏の特別講演は, 新理論の出現とデータの関係に関するユニークな視点を提出した。通常, 新理論はそれに先立つ新しいデータの入手が必然的に必要であるとされているが, 歴史的にはケプラーの惑星の運動の 3 法則の発見にも見られるように, それ以前と同じデータを相手にしながら, 異なった枠組みの中に眺め直すという営みが顕著であるとのことであった。

セッション 3 の松田氏の発表は, 情報処理システムの階層化, 複合化, 多様化が進むなかで, コンピュータ専門家ではないユーザに使いやすい環境を提供しようとするものである。「分厚く読みにくいマニュアル」と「利用経験の情報交換の不足」に起因する不都合を解決する目的で, 利用統合エキスパートシステムを設計している。

セッション 4 の最後の発表では, 日本語キーワード自動抽出ソフトを使用した経験から, その問題点が報告された。

第2日 プログラム

特別講演3

新しい発想と情報

村上陽一郎 (東大)

セッション3 発想、情報の創世

人間と計算機の融合による創造情報処理

山口徹郎 (熊本県工業技術センター), 青山 宏, 河越正弘 (電総研)

コンピュータシステムの知的統合対話系の設計

松田孝子 (東北大)

特別講演4

地理情報とその処理システム

野上道男 (都立大)

セッション4 情報の抽出—地理、歴史情報の場合

歴史的事象データの基本構造に関する研究—地理的空間データの問題

八重樫純樹 (歴史民俗博物館)

(DANJURO) の開発「宗門改帳」データベース

川口 洋, 中山和彦 (筑波大)

日本語キーワード自動抽出ソフトに関する問題点

——地理学文献情報データベースを例として——

戸祭由純夫 (奈良女子大)

特別講演5

テキスト・データベースについて

樋口忠治 (九大)

総括

米田幸夫 (東海大)

〔追記〕

このシンポジウムの講演論文集は、残部があれば有料で情報処理学会から手に入れることができる。興味のある方は下記に連絡されたい。

情報処理学会 シンポジウム係

〒106 港区麻布台2-4-2 仁科ビル

TEL (03) 505-0505

## 海外動向

「Tetrahedron Computer Methodology」について

豊橋技科大 高橋由雅

Tetrahedron Computer Methodology (TCM) は化学分野では世界初の電子出版による定期刊行学術雑誌として昨年発刊 (1988年、Pergamon Pressより発刊) された国際誌である<sup>1)</sup>。TCMがcover する対象分野は次のように記されている。

- Chemical Information Science
- Application of Artificial Intelligence in Chemistry
- Chemical Simulation Methods
- Storage/Retrieval System
- Synthesis Planning
- Structure Elucidation
- Chemical Pattern Recognition
- Scientific Document Production

本誌はタイトルが示すようにTetrahedron, 並びにTetrahedron Lettersの姉妹誌としての位置づけにあるが、その対象分野は上に示したようにまさにコンピュータケミストリーそのものである。こうした雑誌の発刊は関連分野に身をおくものの一人として大きな喜びを感じると同時に当部会員を十分に勇気づけるものであると考える。発刊に寄せての編者の言葉を借りれば、「本誌がその発刊に際し、化学学術雑誌として著名なTetrahedron出版実行委員会の刊行物の一員に加わることができたことは極めて意義深いものがある。このことは"Computer Chemistry"が少なくとも興味ある関連の実験化学者によって認知されるまでに成熟するに至ったことを意味し・・・」<sup>2)</sup>とすることになる。

ところで、本誌の特色はなんと言ってもその編集並びに出版形態にあらう。まず投稿規定に目を向けると、計算機可読磁気媒体 (以下ファイルと呼ぶ) での原稿投稿が基本となっている (但し、この場合にもハードコピー原稿も添える)。もちろん通常のハードコピー原稿のみによる投稿も可能である。前者の場合はChemTextファイル、ASCIIファイル、Macintosh Microsoft Wordファイルでの投稿が可能であり、メディアはIBMフォーマット (360kバイト、倍密、5.25インチフロッピーディスク) あるいは、Macintoshフォーマット (3.5インチフロッピーディスク) に指定される。これは、本誌自身がChemTextを用いた高機能グラフィックスでのtypesetを基本にし、編集・校正を通じて処理の効率化を目指しており、「受理可能な投稿論文についての90日以内の出版を保証する」と言った本誌のキャッチ

フレーズの一つを支えるものでもある。これに対し、ハードコピー原稿のみによる投稿の場合は前者の場合より多くの時間を要するとの記載がある。

本誌のもう一つの特徴は、雑誌そのものが冊子体の他に電子体（現在は、磁気媒体としてフロッピーディスクのみ）で同時出版されると言う点にある<sup>3)</sup>。後者にはComplete Text, Supplementary Materialsが含まれ、さらには著者らによってIBM-PC実行形式プログラム、ソースコード、マクロ、分子モデル等を含むことができる。本誌1巻1号（創刊号）にも一部プログラムのソースコードや実行形式およびマニュアル等が含まれている。これについては、知的所有権の問題も有り、Editorも触れているように購読者の良識ある対応が必要であり、本誌の発展のカギを握る部分でもあると筆者は考える。

ところで、電子投稿の場合にはChemTextファイルでの投稿が推奨されており、これ以外のファイルの場合（通常は電子原稿としてはテキストファイルのみが対象となる）にはより多くの編集時間を要すると同時に、複雑な図表については出版時にも電子体（フロッピー版）には含まれない場合があるとのことである。そこで、次にChemTextについて筆者の調べた範囲で簡単に述べる<sup>4)</sup>。

すでにご承知の読者も多いことと思うが、ChemTextは”化学文書作成プログラム”として米国Molecular Design社(MDL)が開発・販売している化学用ワープロソフトである。主な機能としては、通常のワープロ機能の他に化学関係文書の作成に不可欠な化学構造式の作画機能や、フローチャートなどその他の作図機能、数式記述のための積分記号等各種シンボルも利用することができるとのことである<sup>5)</sup>（同ソフトが筆者の手元にないためこの様な表現にならざるを得ないことを御容赦願いたい）。主な実行ハードウェア環境を以下に示す。尚、詳細は資料6)を参照されたい。

ChemTextの主な実行環境（1988年3月31日現在）

- ・ハードウェア： IBM-PC, XT, AT, PS/2 (Model 50-80), その他100%互換機
- ・PC DOS： PC, XT (Release 2.0-3.2)  
AT (Release 3.0-3.3)  
PS/2 (Release 3.3)
- ・グラフィックインタフェース：  
Hercules Graphic Card,  
IBM/CGA,  
IBM/EGA+128KBグラフィックメモリ,  
IBM/VGA
- ・メモリ： 640KB
- ・ハードディスク： 10MB以上

ここで、筆者も含め多くの読者が気になるのは日本の購読者に対するNEC-PC対応ソフトの可能性であろう。そこで本誌出版元の日本法人であるPergamon Press Japan(東京)の担当者に問い合わせたところ、「本誌を刊行する時点でPergamon自身も対日本についてはNEC対応以外のソフトのdistributeには多くの困難があることを承知しており、現在でもPergamonグループ傘下のMDL社が鋭意、研究・開発に努めている(但し、未だ解決のメドは立っていない)」<sup>7)</sup>とのことであった。

TCMについても一つ筆者の目を引いたのは表紙タイトルの添え書き文である。そこには、「The International Electric Journal for Rapid Publication of Original Research in Computer Chemistry」とある。この最後の"Computer Chemistry"の文字が筆者の目にはひととき大きく映った。前述のEditorの言葉からもこれには特別な意味が込められているような気がしてならない。言い替えれば、本誌のEditor-in-ChiefであるW. T. Wipke教授(カリフォルニア大)を始めとする関係編集委員がもたらした「Computer Chemistry」の新たな人権宣言であるかのようにも感じられるというのは言い過ぎであろうか?

最後に話は少し横道にそれるが、論文原稿の投稿に限って言えば米国化学会においても研究開発部を中心に電子原稿による投稿問題の検討が進められており<sup>8)</sup>、すでにbook部門での一部試みにおいては一応の成果を収めている旨の報告が出されていることを付記して本稿を終える。

尚、拙文をまとめるにあたり、資料等を御提供下さいましたPergamon Press Japanの豊増氏をはじめ、伊藤忠テクノサイエンス(株)、富士通(株)の関係各位に紙面を借りて御礼申し上げます。

#### [参考資料]

- 1) Pergamon Pressによれば、現時点では他分野においても電子出版による定期刊行学術雑誌の例は確認していないとのことである。
- 2) W.T.Wipke, TCM, 1988, vol.1, No.1, pp1-2.
- 3) TCM購読者には冊子体並びに電子体の両方が配布される。
- 4) 国内では伊藤忠テクノサイエンス(株)より販売されている。(価格は40万円)
- 5) ChemText資料, MDL, 1988.
- 6) Hardware Requirement Data Sheet for ChemText 1.2, MDL, 1988.
- 7) 豊増, Pergamon Press Japan : 私信.
- 8) COMP NEWS, vol.13, No.1, pp10-11

## 編集者付記

※※ 読者が最も関心のある点は、『図や表をどのように入れれば良いのか』という問題であろう。高橋先生も書いておられるが、あえて補足することでTCM誌の投稿規定をまだご覧になっておられない方の御参考となれば幸いである。※※

Chem Text は英文ワープロの一種であるから、そこで作成されるファイルはすべて画像イメージで記録される。但し画像と言っても写真のように高い分解能を持ったものや光ディスクメモリーのような高密度記憶を利用するものではない。つまりテキスト文を書き込むための、ある程度限定された行空間の中に、図表や数式を挿入することが出来、テキスト文中のイタリック文字、大文字または倍角文字、上付き、下付き文字、特殊文字などと同じように扱われて記録される。

Chem Text はワープロの機能と共に簡単な”お絵描きソフト”の機能を合わせ持っているものと考えることができる。横 18.75cm 縦 26cm の紙の空間に、作図機能を利用して図やグラフや化学構造式を描くことが出来る。構造式は標準の結合長で描くのでどんな構造式も同じ大きさでかける。・・・逆に言えば、電子投稿する場合には Chem Text の作図、作表、作画、数式表示の方法を上手に活用して、限定されている空間に、レタリングセットに替わる表示機能を選びながら描けるようになるまで慣れることが必要である。

投稿規定に示されている図と表の例を下に引用しておく。

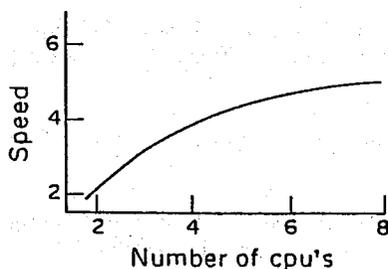


Fig. 1. Relative speed factor as a function of the number of processors

Table 1. This is a Sample Table.

Structure	Cpu Time	New Structures
Cholesterol	123.5 sec	143 *
Morphine	130.0	312
Nicotine	15.1	32

\*These structures were not reported in the literature.

## Meetings

14-19 April 1989.

Computer Modeling of Carbohydrates.  
Dallas, TX.

Contact: Dr. Alfred D. Frehch, Southern Regional Research Center, U. S. Department of Agriculture, P. O. Box 19687, New Orleans, LA 70179 (504-286-4250).

24-26 April 1989.

Supercomputing by University Persons in Education and Research.  
Lexington, KY.

Contact: Sandy Leachman, SUPER!, Center for Computational Sciences, 325 McVey Hall, University of Kentucky, Lexington, KY 40506 (606-257-8737; FAX: 606-257-4000; BITNET: sandy@ukcc).

24-29 April 1989.

1989 Spring Meeting of the Materials Research Society. (Symposium G: Growth, Characterization and Properties of Ultrathin Magnetic Films and Multilayers.)  
San Diego, CA.

Contact: Ernesto E. Marinero, IBM Almaden Research Center, 650 Harry Road, San Jose, CA 95120-6099 (408-927-2016).

21-23 May 1989.

Symposium on New Directions in Protein Folding, Structure & Design.  
St. Louis, MO.

Contact: Sherin S. Adel-Meguid, Monsanto Co., 700 Chesterfield Village Pkwy., St. Louis, MO (314-537-6395) or Jeffrey Skolnick, Institute of Macromolecular Chemistry, Dept. of Chemistry, Washington University, St. Louis MO 63130 (314-889-4521).

28 May-2 June 1989.

IXth International Conference on Computers in Chemical Education and Research (ICCCRE).

Riva del Garda, Italy.

Contact: Dr. Mario Marsili, IXth ICCCRE, Piazza Gondar, 14, 00199 Rome, ITALY or Dr. Peter Lykos, Illinois Institute of Technology, Chicago, IL 60616.

26 June-1 July 1989.

Fourth Annual Conference on the Interface between Mathematics, Chemistry and Computer Science.

Dubrovnik, YUGOSLAVIA.

Contact: Dr. David Edelson, Department of Chemical Engineering, FAMU/FSU College of Engineering, P. O. Box 2175, Tallahassee, FL 32316-2175.

26 June-1 July 1989.

Environmental Effects on Molecular Structure and Chemical Reactivity.

St. Johns, Newfoundland, CANADA.

Contact: TOC&MUN, c/o Department of Chemistry, Memorial University of Newfoundland, St. John's Newfoundland, A1B 3X7 CANADA.

23-29 July 1989.

American Crystallographic Association Annual Meeting.

Seattle, WA.

Contact: Dr. Elinor T. Adman, Department of Biological Structure-SM20, University of Washington, Seattle, WA 98115 (206-543-6589; BITNET: ADMAN@UWALOCKE) (includes special workshop on Molecular Dynamics in Simulation and Crystallography-Terry Stouch).

10-15 September 1989.

198th ACS National Meeting.

Miami, FL.  
Contact: B. R. Pruitt, 1155 16th St., NW, Washington, DC 200036. (202-872-4396)

11-15 September 1989.  
Modeling of Molecular Structure and Properties of Physical Chemistry and Biophysics.

Nancy, FRANCE.  
Contact: Division de Chimie Physique, 10 rue Vauquelin, 75005 Paris, FRANCE  
(EARN/BITNET: RIVAIL@FRACTIN 11)

16-26 September 1989.  
X-Ray Crystallography and Drug Action.  
Erice, ITALY  
Contact: Prof. L. Riva di Sanseverino, Piazza Porta San Donato 1, 40127 Bologna, ITALY.

\*\*\*\*\*

\* \* \* \* \*

情報化学部会部会員増加にご協力を！

\* \* \* \* \*

\* \* \* \* \*

* 【平成元年部会費】	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） \* \* \* \* \*

\* \* \* \* \*

\*\*\*\*\*

## 国内の動き

# 量子化学文献データベース(QCLDB) および会話的検索ソフトウェア の磁気テープによる頒布について

企業研究所や各省庁研究所  
でも使えるようになりました

QCLDB は、ab initio 量子化学の方法と計算の文献データベースで、現在、1978-1987の文献約13,000件をカバーしており、年一回更新されます。このデータベースよりの出力は1982年に本として出版され、以後J.Mol. Str. (Theochem) に補遺が毎年出版されています。

QCLDB と会話的検索ソフトウェアをコンピュータ上で動かせば、上記の文献の全てを著者、誌名、化合物、方法、物性およびその他沢山のキーワードによって会話的に検索することができます。

QCLDB と会話的検索ソフトウェアは従来、大学と国立大学共同研究機関においてのみ使用可能でしたが、今回、著作権の帰属等が決着したことにより、企業や各省庁の研究所など、どこでも使用できるようになりました。

QCLDB とFORTRAN で書かれた検索プログラムはスーパーコンピュータからパソコンまで各種コンピュータで使用可能です。IBM (VM/CMS)、VAX (VMS)、HITAC (VOS3)、FACOM (OS IV)、NEC (ACOS)、Apple Macintosh II など実際動いています。

QCLDB の頒布については、社団法人化学情報協会（〒113 東京都文京区弥生2-4-16、学会センタービル、電話03-816-3462）に御問い合わせ下さい。

QCLDB の著作権は量子化学データベース研究会、分子科学研究所および学術情報センターに帰属しています。

1989年1月

# 文 献 紹 介

## 本号迄の紹介文献一覧

- | CICSJ Bulletin | 紹介文献  |
|----------------|---|
| Vol.6, No.3    | Tetrahedron Computer Methodology 発刊のお知らせ<br>Quantitative Structure-Activity Relationships<br>1987 Vol. 6, No.3~1988 Vol.7, No.1<br>Journal of Mathematical Chemistry<br>1988 Vol.2, No.1<br>Computers & Chemistry<br>1988 Vol.12, No.2  |
| Vol.6, No.4    | Journal of Chemical Education<br>1988 Vol.65, No.1~No.4<br>Computers & Chemistry<br>1988 Vol.12, No.3<br>Journal of Molecular Graphics<br>1988 Vol.6, No.1 ~No.2<br>Journal of Computer-Aided Molecular Design<br>1987 Vol.1, No.3<br>Journal of Mathematical Chemistry<br>1988 Vol. 2, No.2<br>Journal of Computational Chemistry<br>1988 Vol.9, No.2 ~ No.5<br>Journal of Chemical Information and Computer Sciences<br>1988 Vol.28, No.2 |
| Vol. 6, No.5   | Tetrahedron Computer Methodology<br>1988 Vol.1, No.1<br>Quantitative Structure-Activity Relationships<br>1988 Vol.7, No.2<br>Journal of Computer-Aided Molecular Design<br>1988 Vol.1, No.4, ~1988 Vol. 2, No.1   |
| Vol. 6, No.6   | Journal of Chemical Information and Computer Sciences<br>1988 Vol.28, No.3  |

- Journal of Computer-Aided Molecular Design  
1988 Vol. 2, No.2
- Journal of Molecular Graphics  
1988 Vol.6, No.3
- Computers & Chemistry  
1988 Vol.12, No.4
- Vol. 7, No. 1
- Journal of Chemical Education  
1988 Vol.65, No.5~No.9
- Journal of Molecular Graphics  
1988 Vol.6, No.4
- Quantitative Structure-Activity Relationships  
1988 Vol.7, No.3
- Journal of Mathematical Chemistry  
1988 Vol. 2, No.3
- Journal of Computer-Aided Molecular Design  
1988 Vol. 2, No.3
- Computers & Chemistry  
1989 Vol.13, No.1
- Journal of Chemical Information and Computer Sciences  
1988 Vol.28, No.4
- Journal of Computational Chemistry  
1988 Vol.9, No.6 ~ 1988 Vol.10, No.1
- 本 号
- Journal of Computer-Aided Molecular Design  
1989 Vol. 2, No.4
- Journal of Chemical Information and Computer Sciences  
1989 Vol.29, No.1
- Journal of Mathematical Chemistry  
1988 Vol. 2, No.4
- Journal of Computational Chemistry  
1988 Vol.9, No.7
- Journal of Chemical Education  
1988 Vol.65, No.10 ~No.11

1989年第2卷4号(1月) 論文題目、著者、頁

Computer simulation study of the binding of an antiviral agent to a sensitive and a resistant human rhinovirus, *Terry P. Lybrand and J. Andrew McCammon*, p.259

A theoretical study of the Si-O bond in disiloxane and related molecules, *Raymond J. Abraham and Guy H. Grant*, p.267

Molecular mechanics calculations on deaminoxytocin and on deamino-arginine-vasopressin and its analogues, *A. Liwo, A. Tempczyk and Z. Grzonka*, p.281

Upperbound procedures for the identification of similar three-dimensional chemical structures, *Andrew T. Brint and Peter Willet*, p.311

Crystallographic studies and semi-empirical MNDO calculations on quisqualic acid and its analogues: Systems containing unusual pyramidal heterocyclic ring nitrogens, *David E. Jackson, Barrie W. Bycroft and Trevor J. King*, p.321

MACHINE-READABLE DATA FROM VOLUME 1  
NOW AVAILABLE ON PC DISK

As a service to the molecular modeling community, Dr. James B. Dunbar Jr. of the Center for Molecular Design at Washington University has collected molecular modeling information from journal articles appearing in the first volume of the Journal for Computer-Aided Molecular Design. All of the authors in the first three issues of the journal were requested to submit their information in machine-readable form to Dr. Dunbar. The information was reformatted where necessary to be compatible with the Brookhaven PDB file format for macromolecules and the MOL file format (SYBYL) for small molecules.

The resulting ASCII files are available on either IBM pc diskettes (5.25 in) or Macintosh diskettes (3.5 in). For those wishing to receive either type of diskette, please send a check for \$25 payable to Dr. James B. Dunbar Jr., Center for Molecular Design, Department of Pharmacology, Washington University School of Medicine, St. Louis, MO 63110, and specify which type of diskette you wish.

Information from the following articles is available on the diskette:

1. A unique geometry of the active site of angiotensin-converting enzyme consistent with structure-activity studies. *D. Mayer, C. B. Naylor, I. Motoc and G. R. Marshall*. (Volume 1, Issue 1)
2. Modelling of  $\alpha$ -lactalbumin from the known structure of hen egg white lysozyme using molecular dynamics. *B. Robson and E. Platt*. (Volume 1, Issue 1)
3. A Molecular graphics study on structure-action relationships of calcium-antagonistic and agonistic 1,4-dihydropyridines. *H.-D. Höltje and S. Marrer*. (Volume 1, Issue 1)
4. Computer-aided molecular modeling of a  $D_2$ -agonist dopamine pharmacophore. *R. Tonani, J. B. Dunbar Jr., B. Edmonston and G. R. Marshall*. (Volume 1, Issue 2)
5. Designing novel nicotinic agonists by searching a database of molecular shapes. *R. P. Sheridan and R. Venkataraghavan*. (Volume 1, Issue 3)

## JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

第29卷1号 (2月) 論文題目、著者、頁

The Standard Molecular Data Format (SMD Format) as an Integration Tool in Computer Chemistry, *H. Bebak, C. Buse, W. T. Donner, P. Hoever, H. Jacob, H. Klaus, J. Pesch, J. Roemelt, P. Schilling, B. Woost, and C. Zirz*, p.1

Introduction of Two-Dimensional NMR Spectral Information to an Automated Structure Elucidation System, CHEMICS. Utilization of 2D-INADEQUATE Information, *Kimito Funatsu, Yutaka Susuta, and Shin-ichi Sasaki*, p.6

An Expert-Database System for Sample Preparation by Microwave Dissolution. 1. Selection of Analytical Descriptors, *F. A. Settle, Jr., B. I. Diamondston, H. M. Kingston, and M. A. Pleva*, p.11

Automation of Numerical Data Complications, *Randolph C. Wilhoit and Kenneth N. Marsh*, p.17

Formulation of Isomeric Reaction Types and Systematic Enumeration of Six-Electron Pericyclic Reaction, *Shinsaku Fujita*, p.22

A Database and Retrieval System for the NBS Tables of Chemical Thermodynamic Properties, *Peiming Wang and David B. Neuman*, p.31

### COMPUTER SOFTWARE REVIEWS

Xerox Desktop Publishing Series-Ventura Publisher Edition (Versio 1.1), Reviewed by *Joseph Hilsenrath*, p.39

Pagemaker, Reviewed by *Clemens Jochum*, p.40

STN Express, Reviewed by *Yecheskel Wolman*, p.42

### BOOK REVIEWS

Chemistry by Computer: An Overview of the Applications of Computers in Chemistry. By Stephn Wilson, Reviewed by *Richard L. Deming*, p.43

Chemometrics: A Textbook. By D. L. Massart, B. G. M. Vandeginste, S. N. Deming, Y. Michotte, and L. Kaufman, Reviewed by *M. Otto*, p.44

## JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

第2卷4号 (10月) 論文題目、著者、頁

Shape group studies of molecular similarity: Shape groups and shape graphs of molecular contour surfaces, *P. G. Mezey*, p.299

Global and local relative convexity and oriented relative convexity; application to molecular shapes in external fields, *P. G. Mezey*, p.325

Topological indices for molecular fragements and new graph invariants, *O. Mekinyan, D. Bonchev and A. Balaban*, p.347

Graphical shapes: Seeing graphs of chemical curves and molecular surfaces, *F. Harary and P. G. Mezey*, p.377

### Notes

Molar volumes of alkanes and topological indices, *T. P. Radhakrishnan and W. C. Hern*

don, p.391

The Method of quasi-stationary sensitivity analysis, *T. Turanyi, T. Berces and J. Tolh*, p.401

## Journal of Computational Chemistry

---

Volume 9 Number 7 Oct/Nov 1988

- A Molecular Mechanics Study of the Si—O Bond and Alkyl-Silanes  
*Raymond J. Abraham and G. H. Grant*, p. 709
- Applications of the Model Potential Method to Transition Metal Compounds  
*Eisaku Miyoshi and Yoshiko Sakai*, p. 719
- Validity of the Hammond Postulate and Constraints on General One-Dimensional Reaction Barriers  
*Gustavo A. Arteca and Paul G. Mezey*, p. 728
- Representation of the Molecular Electrostatic Potential by Atomic Multipole and Bond Dipole Models  
*Donald E. Williams*, p. 745
- A Simple Method for Calculating Reliable Atomic Charges in Large Molecules  
*John Mullay*, p. 764
- Computation of One and Two Electron Spin-Orbit Integrals  
*Harry F. King and Thomas R. Furlani*, p. 771
- Ab Initio* Calculations Relevant to the Mechanism of Chemical Carcinogenesis by *N*-Nitrosamines. VIII. Effects of Hydration on Various Reactions Involved in the Formation and Metabolism of *N*-Nitrosamines  
*Rosanna Bonaccorsi, Jocopo Tomasi, Christopher A. Reynolds, and C. Thomson*, p. 779
- Theoretical Calculations of Proton Affinities of Azines. Prediction of the Relative Basicities and Preferred Protonation Sites  
*Javier Fernández Sanz, Julio Anguiano, and Jaume Vilarrasa*, p. 784
- Calculation of the One-Electron Two-Center Integrals with STOs Using Recurrence-Based Algorithms  
*J. Fernández Rico, R. López, and G. Ramírez*, p. 790

## JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

Vol. 65, No.10 OCTOBER 1988

Computer Series: 96

edited by John W. Moore

A Direct Method for the Propagation of Error Using a Personal Computer Spreadsheet Program, *Henry Donato, Jr., and Clyde Metz*, p.867

A Simple Numerical Method for Solving Complex Equilibria, *Jerald A. Devore*, p.868

JCE: Software: Abstract of "The Computer-Based Laboratory", *Daniel C. Krause*, p.875

Vol. 65, No.11 NOVEMBER 1988

Computer Series: 97

edited by John W. Moore

Bateman Equation Simplified for Computer Usage, *Jack G. Kay*, p.970

Monte Carlo Simulations of Polymer Configurations with a Personal Computer, *Sven Engstrom and Maria Lindberg*, p.973

# 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 7, Number 3  
May 1989

## 目 次

### 部会行事

第2回情報化学夏期セミナー ..... 1

年会報告 ..... 2

部会記事 ..... 6

### 関連行事

第4回化学PCソフトウェア研究討論会 ..... 8

「1990年情報学シンポジウム」論文募集 ..... 9

### 国内の動き

コンピュータケミストリーシステム一覧 ..... 11

### CCSの紹介

SYNLIBについて ..... 三枝利隆 16

### 海外動向

Meetings ..... 21

### 文献紹介

Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol. 7, No. 4) ..... 23

Journal of Chemical Education (Vol. 65, No. 12~Vol. 66, No. 2) ..... 23

Journal of Computational Chemistry (Vol. 10, No. 2) ..... 24

Journal of Molecular Structure (194 ('89) P2~1) ..... 25

## 第2回情報化学夏期セミナー

### — 情報化学入門 —

主催 日本化学会情報化学部会

日時 8月24日(木) 13時-8月25日(金) 11時 (1泊2日)

会場 YMCA六甲研修センター(神戸市灘区六甲山町北六甲875)

参加申込締切 7月26日(水)、定員(40名)になり次第

#### 話題提供

第1日(8月24日)

- 1) 企業における計算機化学 利用の現状(住友化学) 吉田元二
- 2) 化学構造表現法入門(関学大) 岡田孝
- 3) 自動構造推定システムはどこまで来たか(豊橋技科大) 船津公人
- 4) フリートーキング(夕食後)

第2日(8月25日)

- 5) 分子軌道法とどうつきあうか(阪大理) 巽和行
- 6) これからの構造活性相関 -蛋白質分子- (京大化研) 西岡孝明

参加費(資料代および24日夕食から宿泊、25日朝食までを含む)

部会員(法人会員の場合2名までを部会員扱いとする) 18,000円

一般 25,000円、学生 10,000円

参加申込方法 葉書等に「第2回情報化学夏期セミナー申込」と題記し、①氏名、年令  
②勤務先、職名③会員資格④連絡先、電話番号を明記して、下記までお送りください。  
会場の詳細な案内などは申込締切後お知らせします。

申込先 662 西宮市上ヶ原1-1-155 関西学院大学 情報処理研究センター  
岡田孝、河井俊一  
電話 (0798)53-6111 内線3200、3206

第58春季年会報告

11E03 各ピークの表現にパラメータ数個を用いるだけで、ほぼ満足すべき結果を得たという。この方法で95%以上の化合物のスペクトルが処理できようということであった。シグナルがLorentz 曲線で近似できない場合の対処法は今後の問題のひとつらしい。このテーマは広い一般性をもっているから、完成すれば波及効果は大きい。

11E05 H-NMR スペクトルの検索の手がかりのひとつとしてシグナルパターンが加えられた。パターンが明確でないときでも、質問パターンを必要条件とみなして処理するので問題はないという。検索効率がどれくらい上がったかが知りたいところである。なお講演で強調された部分が講演要旨でもう少し記述されていればもっとありがたかった。

11E07 あるトポロジカル指数と $C^{13}$ -NMRの化学シフトの総和との間の線形相関が見出された。研究目的はNMRの本質解明よりはグラフ理論の有用性を論じるところにあるという。今回のようにあまりによく合ってしまうとどのように解釈すべきであろうか。なお、関連研究として触れるべき研究が言及されなかったのではという疑問が出された。今回の当否はともかく、一般的に他山の石とすべきやりとりであった。

山形大学工学部情報工学科 工藤喜弘

11E09 最大共通部分構造自動認識システム"MAXFIT"の改良

(豊橋技科大) 高橋由雅、赤城俊夫、佐々木慎一

構造活性相関研究のためのTOOLの一つとして演者らによって開発されたプログラムの機能強化についての報告であった。このプログラムは二個以上の構造式を与えると、それらのトポロジカルな最大共通部分構造を探索するものである。今回はこれに新たな機能として官能性に注目した重み付けが出来るようになったとのことである。

11E11 水溶解度・分配係数等の自動推算システムの開発

(山形大・工) 鈴木孝弘、工藤喜弘

有機化合物の構造式から水溶解度と分配係数を、各種の方法で推算するパーソナルコンピュータシステムの報告であった。演者らが開発した推算法を含めこれまでに開発された各種の推算式を組み込んであり、実用性は高いとの印象を受けた。講演では、これらの推算式によって得られた値の比較がなされ、これについての質疑が行われた。

豊橋技科大 阿部英次

(1IE25) 分子模型を化学式から構築する試み (1) 分子式から鎖状分子 (電通大電子物性) 平 清、林 茂雄。この種のシステムはすでに報告があり市販もされているという指摘が講演後にあった。発表に際しては、これまでの知見のレビューを行い、どこが新しいかを述べるべきだと思う。

(1IE27) コンピュータによる分子構造模型表示一切断図形表示機能の拡張 (姫路工大) 張 金 碁、中野英彦、山名一成、三軒 齊。パソコンによる分子構造表示システム (MOD RAST) の機能アップに関する発表。

(1IE29) 3Dグラフィックス装置を用いた波動関数の簡易表示プログラムの開発 (阪大薬) 高木達也、永井伸二、前崎博信、谷 美香、藤原英明、佐々木喜男。GUMOCシステム (名前の響きが良くないと指摘が会場よりあった) に関する発表。MO計算はMOPACを使用 (非経験的MO計算は未だ使用できない)。計算結果を三次立方格子上的等値点を結んで表示する。

(付記) コンピュータシステムの学会発表について、どのような規準で許可するのか、考える時期に来ているのではないかと感じた。もちろん基準は、研究が独創的であるということだけにこだわる必要はなく、複数ありうる。根本は、聴衆にとってメリットがあるか否かである。

富士写真フィルム脚足柄研 藤田 真作

1IE31 有機化合物の自動構造推定システムCHEMICSの32ビットパーソナルコンピュータへの移植 (豊橋技科大) 船津公人、佐々木慎一

これまで大型あるいはスーパーミニコン上で開発されてきたCHEMICSを、32ビットパーソナルコンピュータ (日本IBMのPS/5571) に移植したという報告である。パソコン環境下でのコンパイラの制約等に伴う問題点と、その克服法について述べるとともに、実行試験においてCHEMICSの機能が正常に実行されることを確認し、その処理速度は1MIPS程度の計算機に相当すると報告された。

1IE33 剰余類表現による異性体の数え上げ (富士フィルム足柄研) 藤田真作

従来、異性体の数え上げのために広く用いられてきたPolyaの定理に代わる、新しい数え上げ定理について提案された。定理の数学的証明に続いて、いくつかの分子に対する適用例が示された。この方法ではPolyaの方法と同じ結果を与えるが、より便利に用いられるという事である。

1IE35 アミノ酸配列に対する概念的クラスタリングシステムの構築 (関学大理・情報センター) 中川博之、小山 泰、河井俊一、岡田 孝

先に演者らによって提案された、分子構造に対する概念的クラスタリングシステムCLUSMOL2と同様の手法をアミノ酸配列に適用する、CLUSMOL/Sについての報告である。2個のアミノ酸配列間の一般化表現と、その表現の簡潔性に基礎をおいたスコアを定義し、これに基づいて複数個のアミノ酸配列間の分類樹を、もっとも高スコアになるように決めるという方法である。

姫路工大 中野英彦

1 I E 3 7 · 受容サイトにおける分子認識機構 (第4報)

パイン-オリゴペプチド系の動力学

(東京農工大, 化技研) 樋口俊章・佐藤克則・片岡良一・○安川民男・  
田辺和俊

酵素と基質の相互作用を明らかにする目的で、Kollmanによって開発されたAMBERを利用してパインとオリゴペプチドの複合体について分子力学と分子動力学の計算をおこなった。ペプチドはAAFA, AAAA, および残基の一部をD体と置換したAA(d)FAとAA(d)AAをとりあげた。水分子の影響についても検討がなされた。ペプチドは多様な生理活性を示すことから、ペプチドが受容サイトにおいてどのような挙動をするかを明らかにするこの様な研究は、新しいペプチドのデザインに重要な知見を与えると考えられる。今後ペプチドの阻害定数と計算量との比較の結果が期待される。

1 I E 3 9 · オーバーラップ係数を用いた有機化合物の匂い記述子間の包含関係の検討 (2)

(豊橋技科大) ○阿部英次・小向隆夫・金谷重彦・高橋由雅・  
佐々木慎一

匂いの記述は言葉で表現される。Arctanderの著書より1573化合物について126種の匂いの表現を匂い記述子として集め、この匂い記述子同士の関係をクラスター分析を用いて解析した。記述子間の類似度を表すために、オーバーラップ係数を用いた。その結果これらの記述子を19のクラスターに分けることができた。またこのうち基本的な匂いについて、構造との関係が報告された。本報告は匂いセンサーとの関連で基礎的な研究であり、今後の進展が期待される。

1 I E 4 1 · 有機合成設計システムCASINOの開発 (10) 合成経路探索における合成反応、化合物の抽象化

(化技研) ○内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古・林 輝幸  
(東京薬大) 原 昭二 (富士通) 湯田浩太郎・樋高 透・矢幡史子

合成経路探索のためにCASINOシステムに、抽象化した逆合成パターンおよび既存の合成戦略に基づく経路探索の2つの機能を付け加えた。electronegative および electropositive な原子 (団) に分けて反応を8つのパターンに分類し登録した。これによって90%程度の反応はあつかうことが可能となるという。データベースの作成はかなり進んでおり有機合成システムとして実用に一步近づいたという感を持った。

豊橋技科大 宮下 芳勝

ミニフォーラム 1IE43・1IE44

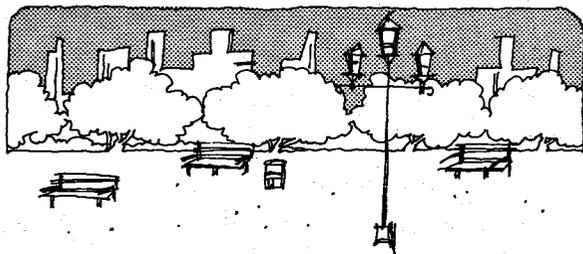
1IE43 「化合物の体系名の計算機処理」科学技術情報センター 荒木啓介

分子構造を計算機で取り扱うのに、WLN、IUPAC等の記号化線形表示および結合表による方法が利用されてきているが、自然言語処理技術の進歩に伴い計算処理になじみ易い化合物命名法が再検討されるようになってきた。日本語における命名法の問題として、多義語、慣用名、IUPACやCAの命名規則自体のあいまいさ、計算機アルゴリズム化の困難さ等について具体例をあげながら説明があり、その解決法が提示された。しかしこれは一方では国際的な汎用性を失うことにもつながり、この処理システムの東南アジア等への輸出をする際の問題点の一つとなるとの説明があった。

1IE44 「計算化学とスーパーコンピュータ」リクルート 原 典行、諫田克也

計算機のハードウェア、グラフィックス等の周辺技術およびソフトウェアの整備により計算化学の適用範囲および得られる結果の精度の向上には著しいものがある。特に近年スーパーコンピュータの導入が海外化学系企業で進んでいる現状から大規模、高速計算の化学の分野での意義を確認しておくことは意義がある。その方向としては、1) 高精度非経験的分子軌道計算による実験的検証困難な現象の解析、2) 比較的低精度の分子軌道計算による定性的議論や予測、3) 生体高分子や結晶、液晶等のダイナミックスがあり、今後のハードウェアの進歩と計算アルゴリズムの改良によりますます利用分野が広まるであろうとの見通しが示された。

(東京農工大 安川 民男)



# 部 会 記 事

## 情報化学部会収支報告

(昭和63年3月1日～平成元年2月29日)

(収入の部)

(単位：円)

	予 算 額	実 績 額	差 異
部 会 費	2,050,000	3,376,575	1,326,575
正部会員費	( 520,000)	( 686,325)	
準部会員費	( 30,000)	( 82,750)	
法人部会員費	(1,500,000)	(2,607,500)	
事業参加費	750,000	0	△ 750,000
広告掲載料	490,000	252,300	△ 237,700
合 計	3,290,000	3,628,875	338,875

(支出の部)

(単位：円)

	予 算 額	実 績 額	差 異
Bulletin費	1,248,000	2,080,318	△ 832,318
事業費	580,000	187,574	392,426
会議費	944,000	425,650	518,350
事務費	138,000	224,038	△ 86,038
事務負担金	380,000	380,000	0
合 計	3,290,000	3,297,580	△ 7,580

収 支 差 額	0	331,295	331,295
---------	---	---------	---------

## 情報化学部会総会報告

総務担当幹事 藤原 讓

日時 平成元年4月1日(土) 16:30~17:30

場所 同志社大学田辺校舎知真館1号館232教室

### 議事概要:

日本化学会第58春季年会の化学情報、計算機化学の研究発表に引き続き、同じ会場で本年度第1回の総会が開催された。

まず米田部会長より、挨拶と、会員の拡充運動が効を奏し、正部会員339名順部会員30名、法人部会員82社89口会計442会員となり、活動および財政の基盤が整備されることが報告され、関係者への謝意とともに、今後一層の協力が要請された。

また幹事の毎年半数交代制も確立したこと、編集、企画、総務等それぞれ新しい方針で活動を展開することが述べられた。

続いて編集担当の石塚幹事よりCICSJ Bulletinの発行が軌道に乗っており、特集と一般編集とを織り混ぜてより充実した紙面の提供をする方策と、部会員の積極的貢献が要請された。

またシンポジウムオーガナイザーの細矢教授より今年末にハワイで行われるPacificchem 89関連特別企画についても述べられた。

次に企画担当の飯塚幹事より、年会におけるミニフォーラム、夏の若手の会、ミニコンなどの講習、会員相互啓蒙のためのワークショップ、その他講演会などを企画している旨の報告がなされた。

また検討会担当の安岡幹事より11月8,9,10の3日間千里中央で行われること、申込の〆切は7月、原稿は9月〆切の予定であることが報告された。

最後に総務担当の藤原幹事により、情報化学部会の活動活性化のために行ったアンケートの結果が紹介され、化学会の新館建設の機会にOA化が進められており、会員の増強と、財政および、役員体制の整備と併せて新しい活動の見通しが得られたので、会員の活動への積極的参加と提案が要請された。会員との質疑応答も行われ幕を閉じた。

## 第4回化学PCソフトウェア研究討論会

- 主 題 化学の研究・教育におけるパソコンの利用  
 主 催 化学PC研究会  
 共 催 日本化学会，日本化学会情報化学部会，日本  
 (予定) 科学教育会，日本教育工学会，化学工学協会，  
 高分子学会，日本農芸化学会，日本CAI学  
 会，日本ポーラグラフ学会，日本薬学会近  
 畿支部，日本分析化学会中部支部
- 後 援 N E C  
 日 時 11月10日(金)～11月11日(土)  
 会 場 福井工業高等専門学校(鯖江市下司町  
 TEL0778-62-111)視聴覚ホール  
 [交通]JR鯖江駅前よりタクシー5分
- 一般講演 11月10日(金) 午後1時～3時30分  
 (メモ付) 11月11日(土) 午前9時30分～5時  
 講演申込締切 7月31日(月)  
 特別講演 11月10日(金) 午後3時40分～5時  
 メモリボードの変遷および周辺ボードによる  
 システム化  
 懇親会 細野昭雄(㈱I・Oデータ機器代表取締役)  
 11月10日(金) 午後5時30分～7時  
 当会場会議室
- 会 費 参加登録費 3,000円(一般)，1,500円(学生)  
 懇親会費 4,000円
- 見学会 11月11日(土)午後5時30分～11月12日(日)午  
 後4時  
 カニ料理を食べ，越前海岸，東尋坊，永平寺  
 を見学する予定。  
 見学会の会費は，未定(高額ではない)。
- 連絡先 〒916 鯖江市下司町 福井工業高等専門学校  
 工業化学科  
 第4回化学PCソフトウェア研究討論会実行  
 委員会  
 世話人：吉村忠与志 (TEL0778-62-1111ex.607)

## 「1990年情報学シンポジウム」論文募集

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ない、研究交流をはかる。本シンポジウムは1984年以来毎年開催されている。

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：アルゴリズム（並列・分散コンピューティング，データ構造，分類，暗号理論），推論，モデリングなど
4. 応用：情報工学の枠にとらわれない個別的な専門研究，データベース，AI，言語処理，ソフトウェア工学での応用（分散データベース，オブジェクトデータベース，ハイパーメディア），統合システム構築法

共同主催（予定）：

日本学術会議 情報学研究連絡委員会  
学術文献情報研究連絡委員会  
学術データ情報研究連絡委員会  
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，情報知識学会

後援（予定）：学術情報センター，計測自動制御学会，国際電信電話（株），  
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），  
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，化学情報協会

日時：1990年1月17日（水）～18日（木） 9：30～17：00

場所：日本学会議講堂（地下鉄千代田線、及木坂駅下車）

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12月20日  
までに下記に申し込む（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（資料代として）：共催学協会員5，000円 学生1，500円  
一般7，000円

講演申込方法：ワープロ使用でA4用紙4～10枚の論文と題目，氏名連絡先，  
職名を記入した別紙を添えて下記宛に申し込む。

講演申込締切：1989年9月16日（土）必着

採否通知：プログラム委員会で審査し、採否は1989年10月1日までに通知  
する。

最終原稿締切：1989年11月30日（木）必着

宛先：情報処理学会 シンポジウム担当 木村保明

〒106東京都港区麻布台2-4-2 保科ビル3F

Te l . 03 ( 505 ) 0505

# 国内の動き

## コンピューターケミストリーシステム一覧

(平成元年4月現在)

\*この表は平成元年4月24日(月)の化学工業日報に掲載されたものを、ご好意で転載したものです。

商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
ACACS	日本電気	日本電気、住友化学工業、キッセイ薬品工業など	データベースからの三次元グラフィックス、理屈計算までの統合型分子設計支援システム。未知たん白質のモザイクと、ACACSと連動した薬物-受容体の相互作用研究が可能	ACOS-4系	6,500万円	85年12月	
BIOCES	"	"	薬物-受容体理論にもとづくたん白工学と医薬品設計のコンピュータ支援システム。EWS4800シリーズと3次元グラフィックスシステムを構築可能	EWS4800シリーズ+P S39Q (E&S社)	2,000万円	86年10月	
BIOCES(E)	"	"	薬物-受容体理論にもとづくたん白工学と医薬品設計のコンピュータ支援システム。EWS4800シリーズと3次元グラフィックスシステムを構築可能	EWS4800シリーズ PC-9801シリーズ N5200シリーズ	1,600万円(ソフトのみ)	89年2月	
micro-RESEARCHER	"	日本電気	薬物-受容体理論にもとづくたん白工学と医薬品設計のコンピュータ支援システム。EWS4800シリーズと3次元グラフィックスシステムを構築可能	EWS4800シリーズ PC-9801シリーズ N5200シリーズ	150万円 35万円 35万円	86年9月 86年7月 85年4月	約700本
ANCHOR	富士通	富士通、呉羽化学工業	理論化学計算をベースにした分子設計支援システム	FACOM M.Aシリーズ	2,900万円	86年6月	
MACCS	"	米モレキュラーデザイン	ANCHORと連動する分子情報/反応	"	3,500万円	83年11月	
REACCS	"	"	情報データベースマネージメントシステム	"	2,300万円	85年5月	
ADAPT	"	"	構造活性相関QSAR	"	1,200万円	86年7月	
CHEMTERM-BM	"	富士通	ANCHORの機能をパソコンに移植した分子設計支援システムの入門ソフト	FMR-60, 70	30万円	86年5月	
CHEMTERM-E	"	"	パソコンをANCHOR、MACCSなどの端末として利用するエミューションソフト	"	20万円	87年1月	
MODEL MATE	日立製作所	日立製作所、クラレ	汎用型分子設計支援システム。高度なデータベースを利用してあらゆる材料設計に対応。低価格EWS版との組み合わせなど独自性に富むシステムの構築が可能	HITACSシリーズ M-640以上のMシリーズ 2050G、2050/32ワークステーション型	約2,000万円 ~(ホスト型)、 800万円(EWS型)	89年6月	10システム
MOL-GRAPH	ダイキン工業	ダイキン工業	低分子、薬材、合成高分子、生体高分子解析に活用されたシステムを提供。エンタープライズから総合的な解析までニーズ別に選択可能	IRIS-4D/GTシリーズ、 VAXシリーズ、 FACOM、IBM、HITACの汎用コンピュータ	700万円~	87年7月	
INTERMOL	分子	分子	分子力場および分子動力学法を背景としたエンタープライズ型分子設計支援システム。或る分子設計支援システム。酵素阻害剤、プロテイン、超電導物質などの設計に最適。対話型3次元グラフィックスによるソリッドモデルのリアルタイム操作を実現	SUN-3、SUN-4、 P4H9000シリーズ、 G、PRIME、VAX	600万~3,000万円	87年7月	20セット
CHEM-X	理研	英ケミカルデザイン	有機低分子から生体高分子、ポリマー等まで対応出来る汎用型分子設計支援システム。或る分子設計支援システム。酵素阻害剤、プロテイン、超電導物質などの設計に最適。対話型3次元グラフィックスによるソリッドモデルのリアルタイム操作を実現	VAXシリーズ、PS 300、MAC	1,100万円~	86年3月	
BIOGRAF	"	米バイオデザイン	有機低分子から生体高分子、ポリマー等まで対応出来る汎用型分子設計支援システム。或る分子設計支援システム。酵素阻害剤、プロテイン、超電導物質などの設計に最適。対話型3次元グラフィックスによるソリッドモデルのリアルタイム操作を実現	VAXシリーズ、SUN -3、4、ALLIANT FXシリーズ、IRIS 4D/GT	750万円~	86年2月	
POLYGRAF	"	"	有機低分子から生体高分子、ポリマー等まで対応出来る汎用型分子設計支援システム。或る分子設計支援システム。酵素阻害剤、プロテイン、超電導物質などの設計に最適。対話型3次元グラフィックスによるソリッドモデルのリアルタイム操作を実現	"	750万円~		
CONCORD	"	米エバンス&サザランド	有機低分子から生体高分子、ポリマー等まで対応出来る汎用型分子設計支援システム。或る分子設計支援システム。酵素阻害剤、プロテイン、超電導物質などの設計に最適。対話型3次元グラフィックスによるソリッドモデルのリアルタイム操作を実現	VAXシリーズ	400万円~	88年4月	
ALCHEMY	"	米トリボス	有機低分子から生体高分子、ポリマー等まで対応出来る汎用型分子設計支援システム。或る分子設計支援システム。酵素阻害剤、プロテイン、超電導物質などの設計に最適。対話型3次元グラフィックスによるソリッドモデルのリアルタイム操作を実現	IBM-PC/AT	20万円~	88年	
MACCS-II	伊藤忠テクノサイエンス	米モレキュラーデザイン	統合化合物情報管理システム 医薬情報データベース管理システム 分子設計支援システム。約100本のプログラムで構成。分析化学問題の処理も追加 構造活性解析システム。自動的に三次元配座計算。パターン認識によるQSAR	ホスト...VAXおよび IBMX ディスプレイ...テクトロ ニクス、PC-9801	2,200万円~ソフト価格で大幅に異なる	85年7月	
REACCS	"	"	統合化合物情報管理システム 医薬情報データベース管理システム 分子設計支援システム。約100本のプログラムで構成。分析化学問題の処理も追加 構造活性解析システム。自動的に三次元配座計算。パターン認識によるQSAR	"			

CHEMLAB-II	"	"	"	"	遺伝子情報解析システム。ワークステーションはミニコンベースの高性能特徴。研究実験データの管理、解析システム。分子動力学法を用いたたんぱく分子設計システム	VAXシリーズ、SUNシリーズ	約1,200万円～(ソフト価格)	85年1月 86年4月 87年3月	9システム
ADAPT	"	"	"	"	結晶構造解析支援システム 三次元表示グラフィックソフト	IRISシリーズ、SUNシリーズ	2,600万円～(ハード含むシステム価格) 88年2月	87年3月	
IGSUITE	"	"	"	"	低分子、たんぱく、DNA、炭水化物、脂質について専用ビルダーを持つ表示&解析一体型の分子設計システム。グラフィックスパーバコンビーター-TITANとの組込みを併せて、計算&表示のリアルタイムなシミュレーション環境を構築する。その他各種データベース、QCPEプログラムへのインターフェイスを完備	TITAN	3,000万円(ハード含む)	88年9月	
RS/1	"	"	"	"	ポリマー専用ビルダー (アモルファス、スタバースト、ブロック状ポリマー等) を備えた表示&解析一体型の分子設計システム。その他周囲環境条件を用いた解析、一定圧力下での運動シミュレーションが可能			89年4月	
CHARMM	"	"	"	"	超電導・ゼオライト触媒の取り扱				
X-PLOR	"	"	"	"	基本的な分子モデリング、データベース、エネルギー計算等	VAXシリーズ、IRIS S4D/GTシリーズ、SUN-4、コンパックス、クレイなど	約800万円(2ユーザ一限定)より	88年5月	9システム
QUANTA	"	"	"	"	立体配座解析、量子力学計算、分子動力学計算等	"	"	"	8システム
BIOGRAF	クボタコンピュータ	クボタコンピュータ	クボタコンピュータ	クボタコンピュータ	定量的構造活性相関操作	"	"	"	6システム
POLYGRAF	"	"	"	"	合成ポリマー専用モデリング操作	IBM PC/AT、PS2、マッキントッシュII	30万円	89年2月 89年2月 88年5月	2システム 1システム 15システム
XTALGRAF	"	"	"	"	パリティ用分子設計支援システム	VAXシリーズ、IRIS S4D/GTシリーズ	約270万円(SYBYLユーザー専用)(非SYBYLユーザー)	88年10月 88年2月	約30システム
SYBYL	三井物産	三井物産	三井物産	三井物産	変更スマイル表記法を利用した簡易三次元分子組立システム				
Advanced Computation モジュール	"	"	"	"	分子エネルギー極小化、ダイオミツク手法を用いた分子設計シミュレーションプログラム。コンバージョンで加場パラメータを意味する生体高分子の内部及び周辺外部の静電ポテンシャルの計算プログラム。分子・溶媒のイオン強度、誘電率を考慮した計算が可能	IRIS、VAX、CRAY、CONVEX、ALLIANT、IBM、IRIS、VAX、COINVENT、CRAY	1,600万～2,300万円 (INSI GHIとセット)未定	87年9月 89年4月	
Biopolymer モジュール	"	"	"	"	局所密度汎関数法によるab-initio分子軌道法プログラム。50から100原子程度までの分子の構性計算によって得られる生体高分子から一般有機分子を対象とする分子設計用3次元グラフィックスプログラム。分子の構造、表示、解析のための機能を併せて	CRAY、IRIS、SUN、VAX	1,000万～2,000万円	89年3月	
QSAAR モジュール	"	"	"	"	有機構成反応のライブラリーとデータベース管理システム。55,000件の反応を収録	IRIS、VAX	1,600万～2,300万円 (DISCOVERとセット)	87年9月	約10システム
Polymer モジュール	"	"	"	"		VAXシリーズ、EWS 4800シリーズ	1,400万円	87年	
NITRO	"	"	"	"					
ALCHEMY II	"	"	"	"					
CONCORD	"	"	"	"					
DISCOVER	三菱商事、薬化システム	三菱商事、薬化システム	三菱商事、薬化システム	三菱商事、薬化システム					
Delphi	"	"	"	"					
Dmoi	"	"	"	"					
INSIGHT	"	"	"	"					
SYNLIB	東洋情報システム、チミアイエイジシステム	東洋情報システム、チミアイエイジシステム	東洋情報システム、チミアイエイジシステム	東洋情報システム、チミアイエイジシステム					

商 品 名	国内販売会社	開発会社	機 能 特 徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
SPARTAN	センチュリリサーチセンター	カリフォルニア大学アーバイン校、イリノイ州立大学	非経軌分子軌道法GAUSSIAN85のグレードアップ版。化学者が手元で適用できるよう、列挙型のデータ入力環境と計算結果のグラフアイコン表示機能を備えた	マッキントッシュ IRIS-4D	100万円 300万円	89年6月 89年秋	
TBO/CHEMICAL	日本データゼネラル、東瀬産業	豊橋技術科学大学	リードセパレーション志向の分子設計支援システム。データベース管理からモデリング、理論解析、グラフィックスなどEWSで実行	DS/7500シリーズ	950万円~(ハード含む)	88年4月	
P/COMPOSITE	サイバネットシステム	米PDAエンジニアリング	三次元結合材の材料と構造の詳細な定義、温度依存性を伴った材料構造特性の線形、非線形解析、各種ごとの破壊評価を行う有限要素法プログラム	APOLLO、CRAY、VAX、IBM、SUN など	480万円(年間ライセンス料)	87年	
SAVVY/FT-IR	日経情報システム	米エクスカリバータテクノロジ	ニューラルネットを応用し、赤外線スペクトルのデータベースから未知試料の類似スペクトルを高速に検索する。スピードは10,000件/データから約10秒	VAX/VMSシリーズ	約500万円	88年8月	
PRODO	住電気システム	カリフォルニア大学サンディエゴ校	又編結晶構造解析の結果を表示できる分子グラフィックスシステム。外部計算用の分子グラフィックスシステムも採用	IRISシリーズ	600万円 850万円	87年 87年	
MMS	"	"	洗剤の分子グラフィックスシステム。外部計算プログラムとのインターフェースも採用	"	60万円	83年	
GEM	グラフィカ	グラフィカ	ユーザーが解析したりプログラム処理して、異なる分子構造に関するデータから、三次元の分子モデルを作成する	ホスト各機種+自社製グラフィックディスプレイ、MSシリーズ			
サイエンスグラフ	ソフトサイエンス	日産化学工業	化学構造式をはじめ、様々な図画ができるグラフィックエディタ。マウスをサポート。データフォーマットを公開	PC-9801シリーズ他	7万5千円	85年2月	1,500本
オルガノグラフ	"	東京薬科大学 小杉義幸	化学反応式を作成するソフト。専門家が特別にデザインしたアイコンをもとに、高品位の反応式をプリンター出力できる	"	3万5千円	86年8月	150本
"C-NMR化学ソフト カリキュレーター MG P98/EX	"	東京大学 吉田弘	PC-NMRの化学シフトを計算する。入力方式が簡単に使い易い	"	3万5千円	87年3月	60本
MG P98/DG	"	北里大学 広野修一	座標入力により、分子構造を3次元表示し、分子表面の静電ポテンシャル分布もカラー表示。EWS用はPDBファイルが読み込める	PC-9801シリーズ他 EWS 4800、HP 9000、NEWS	9万8千円 未定	86年7月	110本
結晶パッキング表示プログラム	"	北里大学 広野修一	MG P98/EX用の入力ファイルを作成	PC-9801シリーズ	3万3千円	88年12月	20本
パソコン統計解析	"	英波大学 加藤克己	結晶構造における原子のパッキングの状態を単位細胞内の任意の断面で観察。結晶構造の決定に必要な最小限のデータと原子半径を入力し、切断面を定義する	PC-9801シリーズ他	4万5千円	85年10月	110本
化学マイコン入門	"	岡山大学 田中善正	医学・生物学・化学・薬学などの分野で多用されるプログラム16本を収録	"	5万円	85年3月	320本
薬物運動論入門	"	京都大学 山岡清	統計処理から元素含有率算定、重量分析、吸光度測定などの応用プログラム23本	"	5万円	84年12月	100本
薬物体内動態解析法	"	清、谷川原裕介	薬物濃度の時間変化と体内動態をプロットプログラム。非線形最小二乗、モーメント解析法などに分けて、2本のプログラムで説明	"	5万円	85年10月	140本
MOLDA&GRIMM 5.1	サイエンスハウス	京都大学 吉田弘ほか	薬物濃度の定置、反応域と時間のシミュレーション、体内動態パラメータの推定、薬物の特性分類などプログラム22本収録	"	7万円	84年4月	280本
3D-MoImaster	"	山形大学 阿部昭吉	パソコン用分子設計支援システム。1985年以前の高い実績。ディスプレイ上で簡単に分子を組み立て、MM2とのリンクも可能。FM R版も発売	"	5万2千円(英日版)、5万8千円(日本語版)	89年2月	150本
			化学者が使い慣れた2マトリックス座標系を用いて入力。原子数の多い分子向けの分子設計支援システム。MM2とのリンク可能	"	7万8千円	89年5月	

MODRAST-E	"	経路工科大学 中野英彦	上記2種の分子設計支援システムをもとに、高精度分子グラフィックスを行う。上位システム並みのスペースフリー図表表示可能。3次元ソフトモデラーをクラフティング表示する。リファクトモテラなどで、たん白質を任意断面で切断できる。多様な表示機能をもつ。PDBを収録した専用データベース(別売)が提供される。パソコン用MM2計算プログラム。MOLDA&GRIMMおよび3D-Molmasterから利用できる。	5万8千円	87年8月	60本
MODRAST-P	"	"	大沢隆二北大助教開発のプログラムをベースに、共役電子系を含む分子も扱えるよう機能を拡張した。パソコン用の3次元分子モデリングシステム。MM2 P Pキットとの組み合わせで、パソコン上で柔軟的な分子設計が可能。半経験的分子軌道計算プログラムとして世界的に有名なMO P A C (V3.1)を、パソコンに移植したプログラム。	7万8千円	87年11月	15本
P C版MM2	"	東京大学 吉村伸	高橋坂の分子モデリングソフト。高校、専門学校向け教育用ソフトとして最適。	2万8千円(民間)、9万8千円(公衆)	86年6月	75本
MOLDA-S	"	東京大学 吉田弘、サイエンスハウス	三次元分子構造表示ソフト	1万8千円	89年6月	
MM2 P Pキット	東レシステムセンター	東レシステムセンター	三次元分子構造表示ソフト	6万円~50万円	88年7月	
3D-MOL	"	"	三次元分子構造表示ソフト	25万円~19万円	88年7月	
パソコンMOPAC	"	"	三次元分子構造表示ソフト	9万円	88年10月	
MM2KIT	帝人システムテクノロジ	帝人システムテクノロジ	三次元分子構造表示ソフト	12万円	86年8月	約250本
MATERIA	"	"	三次元分子構造表示ソフト	400万円	88年11月	
MODEL-3	大日本コンピュータシステム	大日本コンピュータシステム	三次元分子構造表示ソフト	35万円	88年4月	
PREMAT/POSTMAT	"	くわいと	三次元分子構造表示ソフト	400万円~	89年6月	
MoWorld	日本アイ・ビー・エム	日本アイ・ビー・エム	三次元分子構造表示ソフト	8万円	87年11月	
LABSWARE	フジシステムリソース	ハンガリー・コンピュータラッグ	三次元分子構造表示ソフト	78万円	85年4月	
GDPS98Mini	日興通信	東京大学 磯島二郎	三次元分子構造表示ソフト	5万8千円	89年4月	
GDPS98	"	"	三次元分子構造表示ソフト	17万円	86年5月	
GDPS98pro	"	"	三次元分子構造表示ソフト	35万円	87年11月	
MOL	ミタスタジオ	"	三次元分子構造表示ソフト	5万円		
化学ライブラリー1-13	IBC	IBC	三次元分子構造表示ソフト	1万円		
BIOCHEM	大久保マイコン	大久保マイコン	三次元分子構造表示ソフト	12万8千円		
サーチマック	サーチマック	サーチマック	三次元分子構造表示ソフト	9万8千円		



# CCSの紹介

\*

## SYNLIBについて

株式会社 東洋情報システム  
三 枝 利 隆

### 1. はじめに

SYNLIBは、米国コロンビア大学 W. Clark Still教授の研究を基に Distributed Chemical Graphics, Inc. (以下「DCG」という)で開発、メンテナンスされている、反応データベースと検索表示機能をもつ有機合成反応検索システムです。

反応データベースには各種文献から厳選された約53,000件の有機合成反応が登録されており、化学構造、部分構造を表示画面で指定して検索します。対象とする構造あるいは反応条件等を化学者自身が簡単な操作で、ダイナミックに変更しながら検索を展開していくことができるようになっており、角度を変えながら、合成反応を考えることのできる化学者の研究支援システムとなっています。

以下、機能の概要と特徴を紹介致します。

### 2. SYNLIBの機能

SYNLIBシステムは、三つの主要機能で構成されています。

- (1) 情報やアイデアを容易にやりとりできるユーザインタフェース
- (2) ユーザからの情報を解釈し、知識データからの解を探し出すコントロールエンジン
- (3) 化学者の解釈を付加した化学合成情報の収集

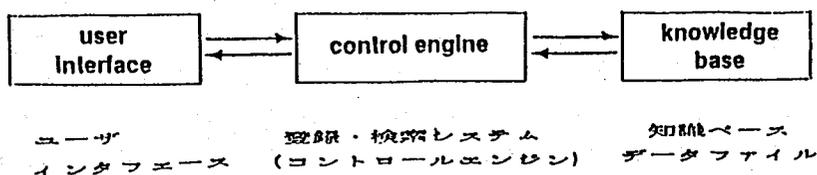


図-1

\*編集者付記: CCSとは Computer Chemistry Systemの略です。

## 2. 1 ユーザーインターフェイス

ユーザとSYNLIBの間のやりとりは、化学構造図で行うことができるようになってきました。構造図はペンで紙にスケッチするのと似た方法でマウスを使いスクリーン上に書いていきます。条件の設定や作業指示は、スクリーン上に表示される選択枝を選べばよい様になっています。端末も化学者が手許において手軽に操作することができる様、パソコン等が使用できる様になっています。(但し、データベース等を保有する共用のホストとしてVAXかNEC4800が別途必要です。)

## 2. 2 知識データベース

- (1) SYNLIBの反応情報データベースは単純に登録件数を増すのではなく、内容そのものの充実を重視しています。真に役立つ知識データベースとして、合成化学の最新情報の中から重要且つ有用な反応のみを登録した質の高いデータベースの構築を目指しています。
- (2) このようなデータベース構築を支援するために、システムの開発と同時に各国の合成化学研究者よりなる国際的なコンソーシアムが設立され、そのメンバーによって学術文献の調査・反応の評価がなされ編集されて知識ベースに登録されてきました。  
とくにひとつの文献をいくつかのグループで調査する方式は有機反応の利用性評価に際し、ひとつのグループだけによる調査が、広い分野のうちほんの一部分しかカバーできないのに対し、各グループが異なった研究方向をもち且つそれぞれの分野における専門家であるため、質・量バランスのとれた価値のある知識ベースの構築を可能にしました。  
このコンソーシアムには、現在では各国大学、企業の80近い研究機関より120人余りの研究者が参加しています。
- (3) SYNLIBのデータベースには現在刊行されている文献や過去の文献から、このコンソーシアムによって約50,000件の合成反応情報が厳選され登録されていて、現在年間9,000件(過去の文献より6,000件、現在の文献3,000件)の割合で増加しています。  
マスターファイルとして提供するデータベース以外にユーザが独自に反応情報データベースを構築することも可能です。

## 2. 3 検索方法

SYNLIBの特徴は、研究者自身が検索の条件を変更しながら、早い検索スピードで目的とする反応データあるいは類似のデータを効率よく見つけたせるところにあります。

SYNLIBでは、化学反応ライブラリーの検索に化学構造と反応条件などの構造以外の条件を組み合わせることでできる独特の方法をとっています。化学構造による検索は、反応条件、合成ステップ数、収率、結合の生成/切断、あるいは原子の付加/削除などの制約条件と組み合わせることができると同時に反応部位に焦点を絞り、目標とする合成反応に厳密に合致する反応情報だけを抽出したり、広く全体構造を対象とすることができます。

### 3. SYNLIBによる検索

#### SYNLIBの構成

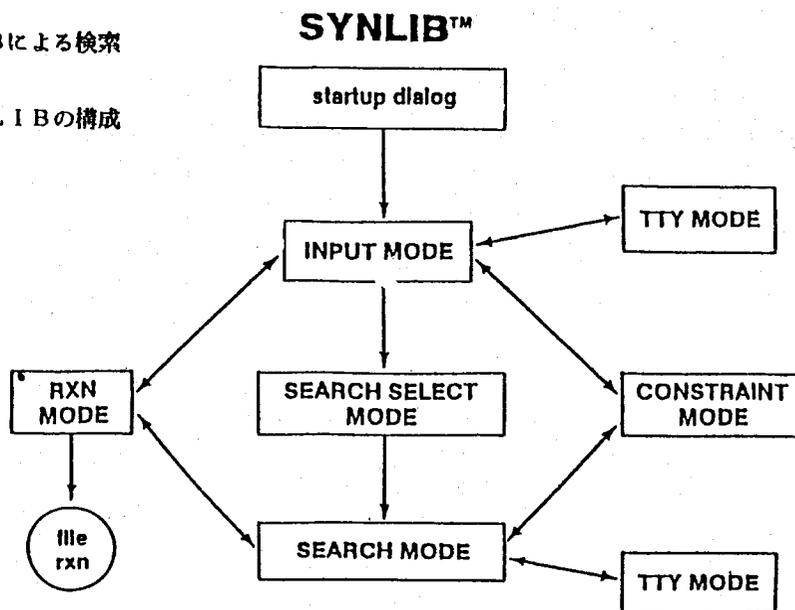


図-2

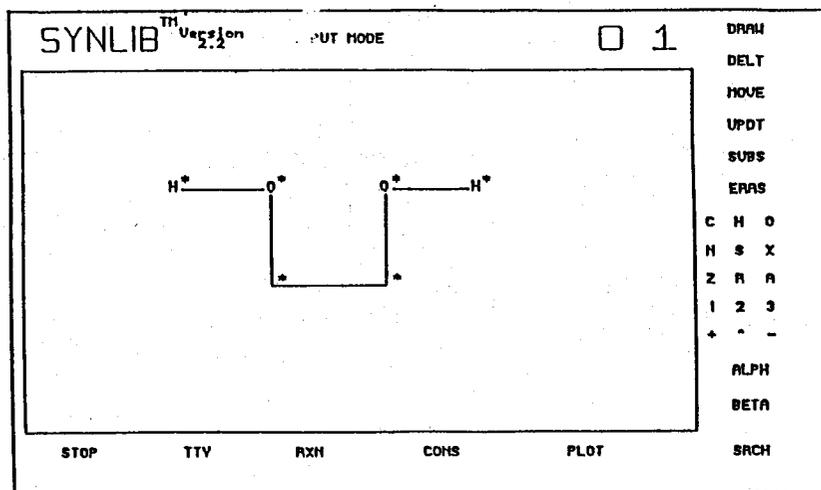
- INPUT MODE** : ターゲットを描く。  
反応サイトや、立体異性の指定を行います。
- SEARCH SELECT MODE** : 検索方法を指定する。
- SEARCH MODE** : 検索を行ない、反応データを表示する。  
データの件数を知ることもできます。
- CONSTRAINT MODE** : 検索条件を設定する。  
反応条件、最低収率、最大反応ステップなど色々な指定が行えます。
- REACTION MODE** : INPUT MODEから入った時は、出発物質の制限や、データの作成を行う。  
SEARCH MODEから入った時は、既にあるデータの編集を行う。
- TELETYPE MODE** : ユーティリティ。プロットアウトデータを作成したり、画面に表示している構造データの取込み、書出しをしたり、データベース同志のマージなどデータベースの編集も行えます。

### 3.1 INPUT MODE (入力モード)

化学構造図は入力モードで作成する。

構造図作成を容易にするため、構造の「テンプレートファイル」があらかじめ準備されている。

またユーザは独自の「ローカルテンプレートファイル」を作成することもできる。



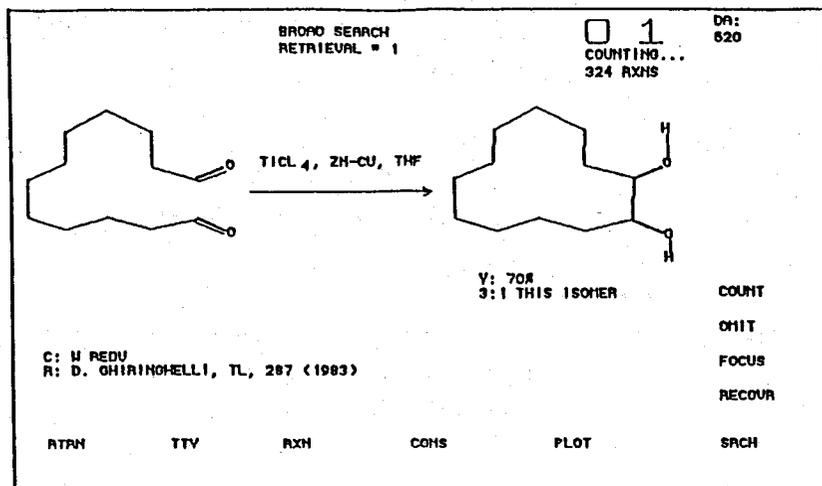
### 3.2 SEARCHモード

順次適合する反応を選び出して生きます。

COUNT ヒットする反応の数を示す。

OMIT 反応による変化が同種のを排除する。

FOCUS 反応による変化が同種のを選択的に選ぶ。



#### 4. ハードウェア環境

SYNLIBを使用するには以下のようなハードウェアの構成が必要となります。

- ・ ホスト : DEC VAX あるいはNEC4800
- ・ 端末 : NEC PC9800シリーズパソコン (エミュレータ使用)

#### 5. 今後の展開

SYNLIBは今後もデータベースの拡張、検索機能の強化等が予定されています。

現在計画中の主なものは次の通りです。

- ・ 現在の機能は生成物をターゲットとする検索が主であるが、出発物質からの検索機能の追加及び強化
- ・ データベースの構造の改良による、より効率的な構造選別手法の適用による検索のスピードアップ
- ・ 化学変化の特徴に基づいた絞り込み機能の強化
- ・ SYNLIBコンソーシアムの拡大と反応データベースの充実

SYNLIBは登録機能も備えており、ユーザ自身の反応データベースを構築することも可能です。SYNLIBの反応データベースは充実を目指していますが網羅性を目指したのではなく、CAS ONLINE等とは用途が異なってきます。

特定の物質あるいは、特定の合成反応を目指すゴールであるなら、CAS ONLINEのようなシステムがより適している場合が多いと考えます。

SYNLIBは合成反応のエッセンスをデータベースとして登録し、合成コンセプトを次々として出てくる制約条件をもち込みながらターゲットにむけて、動的に検索し、いろいろ思索するのに適した研究用ツールと考えられます。

SYNLIBに関するより詳しい情報は長瀬産業株式会社 開発室 (TEL: 03-665-3854) までお問い合わせ下さい。

MEETINGS

26 June-1 July 1989.

Fourth Annual Conference on the Interface between Mathematics, Chemistry and Computer Science.

Dubrovnik, YUGOSLAVIA.

Contact: Dr. David Edelson, Department of Chemical Engineering, FAMU/FSU College of Engineering, P. O. Box 2175, Tallahassee, FL 32316-2175.

26 June-1 July 1989.

Environmental Effects on Molecular Structure and Chemical Reactivity.

St. Johns, Newfoundland, CANADA.

Contact: TOC@MUN, c/o Department of Chemistry, Memorial University of Newfoundland, St. John's Newfoundland, A1B3X7 CANADA.

10-14 July 1989.

QCPE Workshop on Computational Chemistry. Marboro, MA.

Contact: Richard Counts, QCPE, Department of Chemistry, Indiana University, Bloomington, IN 47405 (812-335-5678).

23-29 July 1989.

American Crystallographic Association Annual Meeting.

Seattle, WA.

Contact: Dr. Elinor T. Adman, Department of Biological Structure-SM20, University of Washington, Seattle, WA 98115 (206-543-6589; BITNET: ADMAN@UWALOCKE) (includes special workshop on Molecular Dynamics in Simulation and Crystallography—Terry Stouch).

14-18 August 1989.

Gordon Research Conference on Quantitative Structure Activity Relationships.

Tilton, NH.

Contact: Dr. Alexander Cruickshank, Gordon Research Center, 3071 Route 138, Kingston, RI 02881 (401-783-4011; FAX: 401-783-7644).

7-8 September 1989.

*Ab Initio* Quantum Chemical Software for Supercomputers.

Columbus, OH.

Contact: Quantum Chemical Symposium, Ohio Supercomputer Center, 1224 Kinnear Road, Columbus, OH 43212-1154.

10-15 September 1989.

198th ACS National Meeting.

Miami, FL.

Contact: B. R. Pruitt, 1155 16th St., NW Washington, DC 20036. (202-872-4396).

11-15 September 1989.

Modeling of Molecular Structure and Properties of Physical Chemistry and Biophysics. Nancy, FRANCE.

Contact: Division de Chimie Physique, 10 rue Vauquelin 75005 Paris, FRANCE (EARN/BITNET: RIVAIL@FRCTN11).

3-4 October 1989.

Computer Simulation of New Materials.

Ithaca, NY.

Contact: A. Redelfs, Cornell Theory Center, 265 Olin Hall, Ithaca, NY 14853-5201

(607-255-7157).

16-19 October 1989.

Forty Years of Quantum Chemistry.

Athens, GA.

Contact: Prof. Henry F. Schaefer III. Center for Computational Quantum Chemistry,  
The University of Georgia, Athens, GA 30602.

9-12 November 1989.

Symposium on Biomedical Supercomputing '89 (IEEE Engineering in Medicine and Biology  
Society, 11th Annual International Conference).

Seattle, WA.

Contact: Dr. J. Yadv, University of Medicine and Dentistry of New Jersey, Dept. of  
ISTI, 185 S. Orange Avenue., Newark, NJ 07103 (201-456-6789).

8-14 July 1990.

World Association of Theoretical Organic Chemists.

Toronto, Ontario, CANADA.

Contact: WATOC Congress 1990, c/o Department of Chemistry, University of Toronto,  
Toronto, Ontario, CANADA M5S 1A1.

\*\*\*\*\*  
\*  
\* 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。 \*  
\* 本誌に適切と思われる原稿を出来ればワープロ原稿 (A 4 または B 5) 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。 \*  
\* 尚、原稿締切日は発行月 (奇数月) の10日です。 \*  
\* 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

### QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIOPS

1988年第7卷4号 論文題目、著者、頁

Model-Based Relation between Physicochemical Properties, Uptake and Uncoupling Effect of Carbonylcyanide Phenylhydrazones on Oxidative Phosphorylation at Cellutar Level, *Sturdik, E. Balaz, S. Durcova, E., Sturdikova, M., Sulo, O., Antalík, M., Mikes, V. and Dadak, V.*, p.221

Computer-Assisted Structure-Activity Relationship Analysis: Pattern Recognition Studies on Hypolipidemic Arylpropionic Acid Derivatives, *Gombar, v.k., Jaeger, E. P. and Jurs P. C.*, P.225

The Effect of Molecular Structure on the Distribution and Elimination of Some Organic Acids in Rats, *Laznicek, M. and Kvetina, J.*, P.234

Modeling the Interaction of Small Organic Molecules with Biomacromolecules (the Oasis Approach). V. Toxicity of Phenois to Algae "Lemna Minor", *Mekenyán, O. G., Bonchev, D. G. and Enchev, V. G.*, P.240

Viscosimetric Evaluation of Solvent Effect. II. Determination of the Range of the Applicability of the Method, *Balko, A., Mazurkiewicz, J. and Tomasiak, P.*, P.245

### JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

Vol. 65, No. 12 DECEMBER

JCE: Software: Abstract of "HPLC: A Computer Simulation of High-Performance Liquid Chromatography", *Robert C. Rittenhouse*, p.1050

Computer Series 98:

Electronics for Scientists: A Computer-Intensive Approach, *Alexander Scheeline and Brian J. Work*, p.1079

Vol. 66, No. 1 JANUARY

Aids for Teaching Online Searching of the Chemical Literature, *Carol Carr*, p.21

Independent Student Searching of the Chemical Abstracts Files, *James M. Miller*, p.24

Searching Chemical Abstracts Online in Undergraduate Chemistry: Part 2. Registry (Structure) File: Molecular Formulas, Names, and Name Fragments, *Miroslav Krumpolc, Diana Trimakas, and Connie Miller*, p.26

Semiempirical and ab initio Calculations of Charged Species Used in the Physical Organic Chemistry Course, *Richard D. Gilliom*, p.47

Journal of Chemical Education: Software: Abstract of "The Periodic Table Videodisc, *Alton J. Banks*, p.19

Computer Series 99: Bits and Pieces, 39

edited by John W. Moore

Accurate Numerical Solutions of the One-Dimensional Schrödinger Equation, *Joel Tellinghuisen*, p.51

NMR Simulation and Interactive Drill/Interpretation, *Robert Badger, Joseph Lesniak*,

and Stephen Rutta, p.52

A Simple Computer Program for the Calculation of  $^{13}\text{C}$ -NMR Chemical Shifts, *Alejandro C. Olivieri and Teodoro S. Kaufman*, p.53

Constants of 1:1 Complexes from NMR or Spectrophotometric Measurements, *Valeria Nurchi and Guido Crisponyl*, p.54

Saturation Properties at a Given Temperature from Cubic Equations of State, p.54

Topics in Chemical Instrumentation edited by Frank A. Settle, Jr.  
Robots in the Laboratory—An Overview, *Janet R. Strimaitis*, p. A8

Vol. 66, No. 2 FEBRUARY

Computer Series 100:

Collisional Relaxation via Eigenfunction-Eigenvalue Expansion: Analysis of a Simple Case, *Wendell Forst*, p.142

## Journal of Computational Chemistry

---

Volume 10 Number 2 March 1989

The Calculation of Molar Polarizabilities by the CNDO/2 Method:

Correlation with the Hydrophobic Parameter, Log P

*David F. V. Lewis*, p.145

Combined Bond Polarization Function Basis Sets for Accurate *Ab Initio*

Calculation of the Dissociation Energies of  $\text{AH}_n$  Molecules (A = Li to F)

*J. M. L. Martin, J. P. François, and R. Gijbels*, p.152

AM1 Studies on the Potential Energy Surface for the Proton Transfer in

Protonated Water Clusters,  $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$

*Jaе Young Choi, Ernest R. Davidson, and Ikchoon Lee*, p.163

Extrapolation of the Time-Step Bias in Diffusion Quantum Monte Carlo by  
a Differential Sampling Technique

*David R. Garmer*, p.176

Guanidinium-Type Resonance Stabilization and Its Biological Implications.

2. The Doubly-Extended-Guanidine Series

*Meredith J. Jordan and Jill E. Gready*, p.186

Stochastic Search for the Conformations of Bicyclic Hydrocarbons

*Martin Saunders*, p.203

Optimization of Parameters for Semiempirical Methods I. Method

*James J. P. Stewart*, p.209

Optimization of Parameters for Semiempirical Methods II. Applications

*James J. P. Stewart*, p.221

Probing the Anomeric Effect. The Diaminomethylene Group: Calculations  
of  $\text{N}-\text{C}-\text{N}$ -Containing Molecular Systems<sup>1</sup>

*Pinchas Aped, Leah Schleifer, Benzion Fuchs, and Saul Wolfe*, p.265

194('89)P2-1

*Special Issue: Spectroscopy, Theoretical Chemistry and Molecular Structure, A Collection of Invited Papers in Honour of Professor K.S. Pitzer*

*Dedication to K.S. Pitzer*, p. ix

- Molecular mechanics calculations (MM2) on organometallanes of germanium, tin, and lead  
N.L. Allinger, M.I. Quinn, K. Chen, B. Thompson and M.R. Frierson (Athens, GA, U.S.A.), p.1
- Conformational studies of bacterial peptidoglycan: structure and stereochemistry of *N*-acetyl- $\beta$ -D-glucosamine and *N*-acetyl- $\beta$ -D-muramic acid  
P.N.S. Yadav and D.K. Rai (Varanasi, India) and J.S. Yadav (Newark, NJ, U.S.A.), p.19
- Computer simulation of the cross peak patterns in NOESY spectra of oligonucleotides: an aid to accurate structure determination in aqueous solution  
A. Sheth, R.V. Hosur and G. Govil (Bombay, India), p.33
- Ab initio study of interactions between methanol and nitrogen or carbon monoxide  
Z. Latajka and H. Ratajczak (Wroclaw, Poland), J. Murto (Helsinki, Finland) and W.J. Orville-Thomas (Salford, Gt. Britain), p.45
- An ab-initio study of the proton affinity of conjugated Schiff-base and related nitrogen compounds: an analysis of the triggering site of bacteriorhodopsin  
N. Sreerama and S. Vishveshwara (Bangalore, India), p.61
- Raman spectral studies on interactions of Br<sup>-</sup> ions with CD<sub>3</sub> group of acetonitrile, nitromethane and dimethyl sulfoxide  
K. Venkata Ramana and S. Singh (Madras, India), p.73
- Calculations for CH<sub>4</sub> in a tetrahedral site in an Xe matrix  
M.P. Roberts and H.L. Strauss (Berkeley, CA, U.S.A.), p.83
- On the reliability of SCF ab initio calculations of vibrational frequencies and intensities of hydrogen-bonded systems  
Z. Latajka and H. Ratajczak (Wroclaw, Poland) and W.B. Person (Gainesville, FL, U.S.A.), p.89
- Raman spectroscopic studies of substituted bipyridines, their ruthenium(II) complexes and surface-derivatized TiO<sub>2</sub>  
S. Umapathy, G. Lee-Son and R.E. Hester (York, Gt. Britain), p.107
- Infrared diode laser absorption study of free jets of NH<sub>3</sub>  
P.N. Bajaj, R.K. Talukdar, P.K. Chakraborti and V.B. Kartha (Bombay, India), p.117
- Geometry changes induced by negative hyperconjugative interactions involving carbonyl and thiocarbonyl groups  
P.V. Sudhakar and J. Chandrasekhar (Bangalore, India), p.135
- Effects of electron correlations in conjugated organic molecules and solids  
S. Ramasesha (Bangalore, India), p.149
- A study of the electronic structures of *n*- $\nu$  addition compounds of BH<sub>3</sub> by a combined use of UPS and EELS  
T. Pradeep, C.S. Sreekanth, M.S. Hegde and C.N.R. Rao (Bangalore, India), p.163
- On the generalized continuum model of dipolar solvation dynamics  
B. Bagchi (Bangalore, India), E.W. Castner and G.R. Fleming (Chicago, IL, U.S.A.), p.171
- Theoretical studies on the stabilities of 1,2- and 1,3- isomers of cyclic H<sub>4</sub>A<sub>2</sub>X<sub>2</sub> (A=C,Si, X=O,S,CH<sub>2</sub>): the anomeric effect at silicon  
P.N.V. Pavan Kumar (Hyderabad, India), D.-X. Wang, B. Lam and T.A. Albright (Houston, TX, U.S.A.) and E.D. Jemmis (Hyderabad, India), p.183
- Ab-initio calculations on the protonation of simple amides by H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> Effects of discrete hydration and solvent cavity  
M. Hodošček, V. Harb and D. Hadži (Ljubljana, Yugoslavia), p.191

- Computer simulation of protein-carbohydrate complexes: application to arabinose-binding protein and pea lectin  
V.S.R. Rao, M. Biswas, C. Mukhopadhyay and P.V. Balaji (Bangalore, India) , p.203
- Photolysis of allene-ozone mixtures at 647 nm in cryogenic matrices. Part 1. Formation of allene oxide  
K.A. Singmaster and G.C. Pimentel (Berkeley, CA, U.S.A.) , p.215
- Tautomerism of nucleic acid bases and the effect of molecular interactions on tautomeric equilibria  
W.B. Person, K. Szczepaniak, M. Szczesniak, J.S. Kwiatkowski, L. Hernandez and R. Czerminski (Gainesville, FL, U.S.A.) , p.239
- Conformational analysis from low-frequency vibrational data and ab initio calculations for 3-chloropropene  
J.R. Durig, D.T. Durig, M.R. Jalilian, M. Zhen and T.S. Little (Columbia, SC, U.S.A.) , p.259
- Structural studies and vibrational analyses of stable and less stable conformers of 1,3,5-hexatriene based on ab initio MO calculations  
H. Yoshida, Y. Furukawa and M. Tasumi (Tokyo, Japan) , p.279
- Inversion and torsional motions of methylhydrazine studied by microwave and far-infrared spectroscopy and ab initio calculation  
N. Murase, K. Yamanouchi (Tokyo, Japan), M. Sugie, H. Takeo and C. Matsumura (Ibaraki, Japan), Y. Hamada, MN. Tsuboi and M. Kuchitsu (Tokyo, Japan) , p.301

\*\*\*\*\*

\* 情報化学部会部会員増加にご協力を! \*

\* **【平成元年部会費】**      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)                      \*

\*      \*

\*\*\*\*\*

# 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 7, Number 4  
July 1989

## 目 次

### 国際会議

PACIFICHEM '89..... 1

部会だより ..... 2

### 関連行事

近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会  
「化学におけるコンピュータの役割」 ..... 5

### CCSの紹介

The Molecular Simulator ..... クボタ・コンピュータ(株) 6

### 情報化学雑考

List についての雑感 ..... 小 出 昭 夫 12

### 海外動向

Meetings ..... 13

### 文献紹介

Tetrahedron Computer Methodology (Vol. 1, No. 2) ..... 15

Journal of Computational Chemistry (Vol. 10, No. 3~No. 4) ..... 16

Journal of Molecular Structure (No. 195~196) ..... 18

Journal of Chemical Information and Computer Sciences  
(Vol. 29, No. 2) ..... 22

Computers & Chemistry (Vol. 13, No. 3) ..... 23

Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol. 3, No. 1~No. 2) ..... 24

Journal of Chemical Education (Vol. 66, No. 3~No. 5) ..... 25

Journal of Molecular Graphics (Vol. 7, No. 1) ..... 25

Journal of Mathematical Chemistry (Vol. 3, No. 1) ..... 26



# 際 会 議

## 1 9 8 9 環太平洋国際化学会議

(PACIFICHEM '89)

Area & Title of Symposium		Coordinator Organizer	所 属	Schedule* (Sheraton Waikiki)
06 Information Transfer (General) (情報伝達化学)		Coordinator 藤原 護	筑波大電子情報工学	12/21 am 12/22 am (p)
B	Chemistry in the Elementary Science Curriculum	Organizer 下沢 隆	埼玉大理	12/21 pm, 12/22 am
C	Computers in Chemical Education	荻野 和子	東北大医療技術短大	12/19, 12/20 am(p)
D	Expert Systems of Spectral Interpretation	佐々木慎一	豊橋技科大	12/18
E	Chemical Business Research and Development in the Pacific Basin	依田 直也	東レ	12/19 pm, 12/20
<i>Subsymposia</i>				
a	Long-Range Planning in the Pacific Basin Chemical Industries			
b	Special Markets for Chemicals in the Pacific Basin Countries			
c	The Development of Chemical Markets within the Pacific Basin Countries			
F	International Development in Chemical Education	下沢 隆	埼玉大理	12/20
G	New Idea in Chemical Education	山田祥一郎	阪大名誉	12/18, 12/20 am(p)
H	Progress in Mathematical Modelling in Chemistry	細矢 治夫	お茶大理	12/18 pm(p) 12/19, 20 12/21 am
<i>Subsymposia</i>				
a	Enumeration			
b	Characterization			
c	Geometry			
d	Algebra			
e	Modelling			
J	Advances in Computational Chemistry	大沢 映二	北大理	12/18 pm(p), 12/21 pm, 12/22
K	New Technologies in Pacific Basin Countries	Organizer J. R. Norell	U.S.A.	12/18, 12/19 am

\* 日付のみは1日中開催を、また日付の後に a m とあるのは午前のみ、p m は午後をのみ開催を表す。  
また、(p) はポスターセッションを示す。会場は総て Sheraton Waikiki。  
尚、06-A、06-I はとりやめになりました。

## 部会だより

「情報化学基礎・入門 必読文献・単行本リスト」(仮称)の原稿募集

情報化学は誕生してからの日も浅く、この分野の研究者の努力により順調な発展をとげてはいるものの、まだまだ全貌が見えにくい分野のように思えます。というのは、広がりや既に確立している訳ではなく、日進月歩で発展しているためと言えるかも知れません。

情報化学を始めたいが、どんな領域があつて、何をどう勉強したらよいのか困っている方、始めてはみたが、思うように進まないと感じている方なども、新しい分野だけに少なからずあろうかと想像されます。そこで、情報化学学習の基礎・入門で、必読・必修と思われる文献や単行本などについて、すぐ役に立つ情報があれば、独学をしようとしている人や、それを余儀なくされている人にも有益であろうし、情報化学を志向する学徒の裾野を広げるためにも、また情報化学のアイデンティティーを確立して行くためにも有意義であろうという提案が、情報化学部会常任幹事会で企画担当幹事からありました。

つきましては、このような趣旨で、ご自分の貴重な経験を通してえられた情報化学に関する文献、単行本などの推薦をお願いします。内容の簡単な説明が付けてあればなおわかり易いと思います。大学や民間企業を問わず、情報化学関連の講義などを担当されている方で、学生や後輩に推薦される単行本や文献のリスト、または、その講義の大項目、小項目のリストも大歓迎します。

書式：A4版用紙に簡条書きで、簡単な内容と難易度(初心者向け、中級、専門家向け位に分ける)を付記してください。

論文は著者名、掲載誌名、巻、号、頁(始め～終わり)(年号)。

単行本は著者名、表題、(必要なら章、節)頁(始め～終わり)出版社名、年号(出来れば、価格、ISSN、全頁数なども)。

送付先：日本化学会情報化学部会事務局(住所を確認してください)宛に郵送してください。

締切：平成元年12月20日

推薦していただいた結果は、ワープロ編集し、本の体裁にして実費で頒布する予定です。また、推薦して下さった方には無料で差し上げる予定です。どうぞ、ご協力をお願いいたします。

(総務担当幹事・お茶の水女大理 藤枝修子)

## お願い (常任幹事会から)

情報化学部会が発足してから6年半が経過し、7月17日現在で、個人部会員のうち正部会員382名、準部会員(日化 非会員)32名、法人部会員95社103口で構成しています。部会員名簿は CIGSJ Bulletin (1) を参照して下さい。

情報化社会、情報過剰時代などの言葉も耳慣れた表現になり、化学情報、計算機化学など情報化学に関心をもつ潜在的人口は、この数年来急増していると見られます。情報化学部会として、研究活動と情報交換の範囲をさらに広げ、内容もより充実させるために、会員増加をはかりたいと願っています。お知合いの方々をぜひお誘い下さい。お問合わせ、ご連絡は事務局までどうぞ。

情報化学部会の活動について、化学と工業 (2) に本会だよりとして報告しましたが、当部会事業は表1のように分類され、予算は独立採算で、補助金の援助が行われています。部会活動の実質的な充実をはかるためにも、ワークショップ、シンポジウム、フォーラムなど(形式・名称は問わず)を積極的に提案し、実施して下さるよう個人会員の方々にぜひお願いいたします。

開催予告記事の原稿: CIGSJ Bulletin は奇数月に発刊されますので、2カ月前の奇数月10日までに事務局へ郵送して下さい。

原稿形式: ワープロによるA4版用紙の版下原稿で、プリンタ打出しに際し、上下・左右とも2.5 cm 程度の空白を作して下さい。

出席できなかった会員のために、開催後 CIGSJ Bulletin に少なくとも1頁以上の報告記事を出すことを厳守して下さい。

さらに表1には含まれていませんが、米田幸夫部会長から、3カ月に1度位の頻度で、地域ごとに情報交換の場を持つてはどうだろうかという提案がありました。誰か1人が30分位で話題提供をしてから、老若男女をまじえて自由な懇談をしながら、夕方から夜のひとときを過ごすのも、有意義で、楽しく面白い発想を生み出す源になるでしょう。

日本化学会では、3つの部会共通の問題として、正部会員・準部会員の区別を止めるとともに、学生部会員を新しく設ける検討が進められています。若い世代のエネルギーも加わって、活発な活動が期待されるでしょう。

注 (1) CIGSJ Bulletin, 7 (No.2, March), 19-31 (1989).

(2) 化学と工業, 42(4), 663 (1989).

(総務担当幹事・お茶の水女大理 藤枝修子)

表1 情報化学部会事業分類

名 称	回数/年	対象および性格	予 算	補助金/円
講習会	1～2回	初心者を対象とする。 入門的内容を主とし、情報化学の分野への関心を深めることで部会員の増強につなげる。	独立採算 但し、できれば黒字を期待	30,000
講演会	1～2回	中堅研究者を対象にする。 講習会より程度が高く、啓蒙的内容を主とする。	独立採算 但し、収支が合う程度	30,000
work shop	5回程度	専門家のみ 専門性が高く、全員が話に加わり徹底的に討議。少人数で良い。	独立採算 補助金を中心	20,000
若手の会 夏季セミナーなど	1回	若手研究者 気楽に参加し討論ができるもの。 但し、研究分野の確立も目指す。	独立採算 補助金が多い	100,000
討論会	1回		独立採算 前年からの引継金で賄う。	

## 関 連 行 事

### 近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会 「化学におけるコンピュータの役割」

主催：近畿化学協会コンピュータ化学部会

共催：日本化学会・日本化学会情報化学部会

日時：平成元年9月18日（月）

会場：大阪科学技術センター8階中ホール（大阪市西区靱本町1-8-4，電話(06)443-5321）

〔交通〕地下鉄四ツ橋線本町駅28番出口より、北へ徒歩5分、うつば公園北詰。

参加申込締切：9月8日（金）、定員（100名）になり次第。

（9時30分～）

1. タンパク質の構造研究とコンピュータグラフィックス（姫路工大・工学基礎研）安岡則武氏
2. 企業におけるコンピュータ化学（住友化学・大阪研）吉田元二氏
3. 化学反応と分子軌道計算（京大・分子工学）藤本 博氏
4. アルミナの表面酸性点構造（京大・工）吉田郷弘氏

懇親会：講演終了後、講師の先生方を囲み、アフターディスカッションを兼ねた懇親パーティーを開催致します。

（於同センター8階小ホール）

参加費（テキスト代を含む）：近畿化学協会コンピュータ化学部会員：無料、近畿化学協会・日本化学会会員および学生：3,000円、非会員：10,000円

懇親会費：2,000円（当日会場にてお支払い下さい）

参加申込方法：用箋に“近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会参加申込”と題記して、

①氏名、②勤務先・職名、③連絡先（〒・電話も）、④会員資格を明記のうえ、下記あてにお申込下さい。

参加費は現金書留または銀行振込（協和銀行京町堀支店普通預金・（社）近畿化学協会（No. 230040））で送金下さい。

申込・問い合わせ先：550 大阪市西区靱本町1-8-4（大阪科学技術センター内）社団法人近畿化学協会コンピュータ化学部会 電話(06)441-5531、ファクシミリ(06)443-6685

# CCSの紹介

## The Molecular Simulator

クボタ・コンピュータ㈱

### 1. はじめに

The Molecular Simulator (以下 TMS と称す) とは、クボタ・コンピュータ㈱と米国アーデント社が共同開発したグラフィックス・スーパーコンピュータ TITAN に計算化学及び分子シミュレーション ソフトウェアを統合したシステムの総称です。

今や、化学研究における一つのアプローチとして、計算機を用いた事前のシミュレーションは実用の域となりつつあります。従来、実験に頼っていた研究環境を計算機により理論的にシミュレートし、いち早くその可能性を推測する事により大幅な研究時間の短縮と経費の軽減を実現することが出来ます。

しかし計算機に求められるものは、より大きな系で、より高速に、より正確に、とその要望はとどまることはありません。現在これらの要求に応じるための新しいハードウェア及びソフトウェア開発の為に多大な努力が払われています。

我々クボタ・コンピュータ㈱は、これらの要望に答えるべく、米国アーデント社と新しいコンセプト：ベクトル・パラレルアーキテクチャを備えるコンピュータと高度な3次元グラフィックス機能を結合させたコンピュータ、TITANを開発しました。

TITANは、高速に計算を処理するだけでなく、その高度な3次元グラフィックス機能を駆使することにより、計算結果のリアルタイムな視覚化を実現します。視覚化することにより、解析時間の大幅な短縮が実現されます。

我々クボタコンピュータ㈱は、ここでTMSの第一弾として米国バイオデザイン社により開発された、バイオグラフとポリグラフをTITAN上に移植しました。そして更にQCPEソフトウェア等の移植も積極的に行ない、現在あわせてご紹介しております。バイオグラフは有機低分子、タンパク質、核酸、脂質、炭水化物等を扱い、農薬、医薬等の開発、及びタンパク質工学などにご利用頂けるソフトウェアです。ポリグラフは、合成高分子などを扱い素材開発などにご利用頂けるソフトウェアです。

一般に理論化学計算としては、分子力学による3次元構造の解析や分子動力学による分子の熱運動シミュレーション、又、量子化学計算を通して活性を予測する方法が上げられますが、これらのアプローチが、新しいコンセプトのコンピュータTITANと組み合わせられることにより、どの様な効果が得られるのかを示しながら以下にTMSの紹介をします。

## 2. TMS ハードウェア

### 2-1. 分子力学と分子動力学におけるベクトル化とパラレル化の有用性

近年、生体高分子の構造活性相関の研究分野において、分子力学、分子動力学の利用が提唱されており、合成高分子の分野に於いても利用の傾向が高まっています。

分子動力学におけるエネルギー計算は、原子間の結合エネルギーに加え、結合していない原子との相互作用（非結合エネルギー：Non-bonded interaction）の計算が全体の計算時間の約90%を占めています。

N個の原子からなる分子において非結合エネルギーの計算は $N(N-1)/2$ 個必要となり、これは系が大きくなるにつれ、計算量が指数関数的に増加する事を示しています。従来のスカラ計算機においては、全ての非結合エネルギーを計算することは計算時間の問題より不可能であり、計算時間短縮のための近似手法の研究がされ、現在では特定の原子より一定距離以内（一般には10オングストローム程度）に存在する原子のみを計算の対象とするカットオフ手法がとられています。

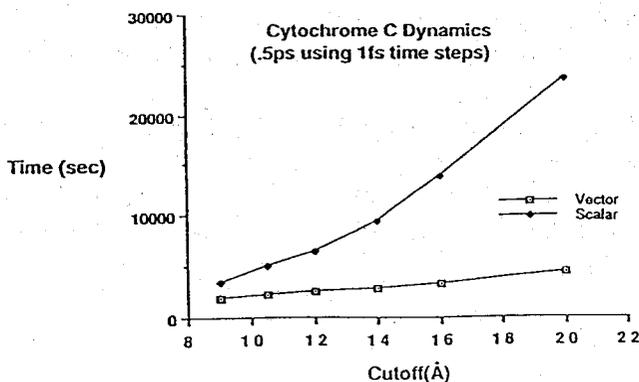
カットオフ手法の提案により、計算時間に対する問題は克服されましたが、ここで新たに指摘されるのは、カットオフ値の設定によるエネルギー精度の問題です。最近の研究では、このカットオフ値を15オングストローム以上とすると飛躍的に計算精度が向上することが報告されていますが、カットオフ値を上げることにより、必要となる非結合エネルギーの計算量も指数関数的に増加します。

ここでベクトル計算機TITANにより、非結合エネルギー計算を実行させますと、この計算は大規模なマトリクス演算ですので、ベクトル化による効果が顕著にあらわれます。図1に分子動力学計算ソフトウェアAMBERを用いてチトクロームCを例にカットオフ値とベクトル化による計算時間の関係について調査した結果を示します。

ベクトル処理された場合、カットオフ値の増加による計算時間の増加は、より緩やかになっています。

又このカットオフ値の問題は、非結合エネルギーのみならず静電相互エネルギー及び自由エネルギーにも顕著に影響を及ぼすことが報告されています。

図1



## 2-2. ベクトル化とパラレル化の分子の量子化学計算に対する有用性

量子化学計算では、分子力学計算及び分子動力学計算に比べ少ない原子しか扱えません、より多くの化学的、物理的性質情報を得ることが出来ます。これまで量子化学計算においては、ベクトル・パラレル化の効果は少ないと考えられていましたが、最近、計算の効率化の為の研究が進められ、いくつかの手法が見いだされました。

非経験的量子化学計算 (ab-initio) では、メモリ上にマトリクスを展開させる手法が開発され、計算時間の短縮に貢献することが期待されています。この手法に対し従来ディスク上にマトリクスを展開させる手法では、ハミルトニアン演算子に対する全ての2電子間積分の計算と、その結果をディスクへ保存し、そしてSelf-consistentなエネルギーを得るためのマトリクスを生成させます。しかし、この際の2電子積分の計算量は原子数の4乗に比例して増大するため、ディスクへのアクセスもこれにしたがって増加します。このため、積分計算、及びマトリクス計算に対するベクトル化の効果が期待されるのに対し、ディスクI/Oネックとなり、ベクトル化の効果が充分には発揮されませんでした。

新しい手法では、2電子積分をインタラクティブに計算しながらFockマトリクスを生成し、従来、高速化のためのネックとなっていたディスクI/Oの問題を解消し、ベクトル・パラレル計算機の性能を最大限発揮することができます。

TITANに移植されたab-initio計算 Gaussian'88はこのメモリ上にマトリクスを展開させる手法により最適化されています。

また、ab-initio計算に対しAMPAC, MOPACに代表される半経験的量子化学計算においては、そのマトリクス計算速度が処理速度を決定づけています。このためマトリクス演算の新しい手法としてLapackが開発されました。

Lapackにおいては、マトリクスにおけるいくつかの行列の行を一度に処理するアルゴリズムや、TITANにおけるベクトルレジスタのような階層型のメモリを効率的に使う事により高速化を実現しています。

アーデント社では、このLapackのテスト・サイトとなっており、現在AMPACへのインプリメント作業を行っています。

### 3. TMSソフトウェア

#### 3-1. BioGraf

米国バイオデザイン社により開発された、業界初の計算とグラフィックス機能が一体化されたソフトウェアです。主に、たんぱく質、核酸等ライフサイエンス分野における研究者の方々にご利用頂けるソフトウェアです。

有機低分子、タンパク質、核酸、脂質、炭水化物について専用のモデリング機能を持ち、モデリングされた分子について分子力学、分子動力学計算の実行が可能です。又、PDBなど各種データベースとのインターフェイスも完備されており、これらのデータについて表示、修正、エネルギー計算を行うことができます。

分子力学計算としてConjugate Gradient, Fletcher Powell, Steepest Descents, Newton Raphson、分子動力学計算としてStraight, Quenched, Annealed, impulseなど豊富な計算手法を揃えています。また力場のパラメータとしてAmber, Charmm, MM2, Dreidingが用意されています。

TITANと組み合わせることにより、ドッキングシミュレーション時の、リアルタイムな相互作用エネルギー計算とその表示、又同様にしてファンデルワールス半径を基準にした、リアルタイムな衝突チェックなどが可能となります。

#### 3-2. PolyGraf

BioGrafと同様、米国バイオデザイン社により開発された業界初の合成高分子（ポリマー）を対象としたソフトウェアです。BioGrafが、主にライフサイエンス分野を対象としているのに対し、PolyGrafは、素材開発研究者にご利用頂けるソフトウェアです。

有機低分子、アモルファス、スターバースト、ブロック状ポリマーなどのビルダーを持ち、BioGrafと同様にリアルタイムな分子力学、分子動力学計算を行うことができます。

分子力学、分子動力学、コンフォメーション検索、モンテカルロ法などを使うことにより、高分子表面及び接触面、結晶あるいは無結晶系の微細構造、構造緩和現象などのシミュレーションが可能となります。

又、一定圧力下における分子動力学シミュレーションが可能であり、これにより弾性率など物性の予測が可能となります。

バイオデザイン社では、こうした合成高分子を扱うにあたり、当初より力場パラメータの開発に力を入れており、Dreidingではフッ素、シリコン、鉄、ナトリウム等のパラメータが既にサポートされています。

### 3-3. Gaussian' 88

Dr. Popleのグループにより開発された、非経験的量子化学計算(ad-initio)代表的コードです。入力が容易であるほか、HF計算、エネルギー勾配法、MP摂動法、CI計算など機能も充実しています。このソフトウェアは、Gaussian Inc. より供給されます。

### 3-4. AMPAC MOPAC

QCPEに登録されている、もっとも利用されている半経験的量子化学計算ソフトウェアです。

### 3-5. AMBER

UCSDのDr. Kollmanにより開発された、主にタンパク質の構造推定用のソフトウェアです。分子力学計算、分子動力学計算、自由エネルギー摂動法がこのソフトウェアの中核をめています。

### 3-6. Chemistry Viwer

Chemistry Viwerとは、分子力学&分子動力学、量子化学計算等の化学計算による計算結果を、TITAN上でビジュアル化するためのアーデント社で開発されたソフトウェアツールです。

AMPAC, MOPAC, Gaussian等量子化学計算では、物理的、化学的に有益な情報が得られるのに対し、計算結果を表示するためのグラフィックスがサポートされていないため、さらに膨大な時間を費やして、計算結果の解析を行っているのが現状です。また、AMBER等分子力学&分子動力学計算についても有益な情報が得られるのに対し、ビジュアル化の為のサポートは遅れています。

Chemistry Viwerはこうしたソフトウェアをお使いの方々に、計算結果のビジュアル化のための環境を提供するものです。量子化学計算の結果における電子密度、電子雲、Homo及びLumo表示、また、分子動力学計算結果におけるアニメーション表示等、ビジュアル化のための基本機能がChemistry Viwerに含まれています。

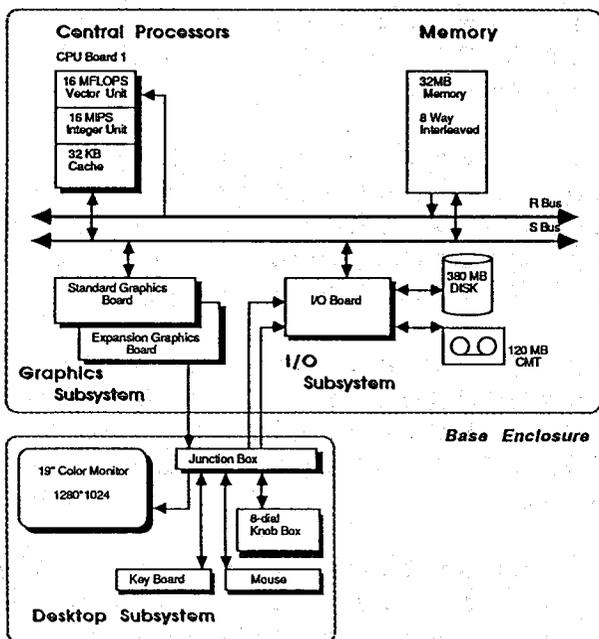
プログラムはソースで提供されますので、ユーザサイドで既にお持ちのデータ・ベース、またはプログラムなどのインターフェイスも可能です。このChemistry Viwerは、TITANにバンドルされているグラフィックスライブラリ: DOREを用いて書かれていますのでTITANの持つ機能を最大限発揮することができます。

MS-1/32EGシステム

¥30、480、000-

- ・ 1 CPU
- ・ 32MBメモリ
- ・ 380MB固定ディスク (アンフォーマット時)
- ・ 120MBストリーマテープ
- ・ 標準グラフィックスボード (1620万色表示)
- ・ 拡張グラフィックスボード (1620万色ダブルバッファ表示)
- ・ 19" カラーモニター (1280X1024)、キーボード、マウス
- ・ 8ダイヤルノブボックス
- ・ UNIX
- ・ 自動ベクトル・パラレル化Cコンパイラ
- ・ Doréグラフィックスツールキット
- ・ BiografまたはPolygraf

MS-1/32EG System Configuration Chart



御連絡先

クボタコンピュータ株式会社 営業部 大越、宇佐  
〒160 新宿区新宿2-8-8 03-225-0741

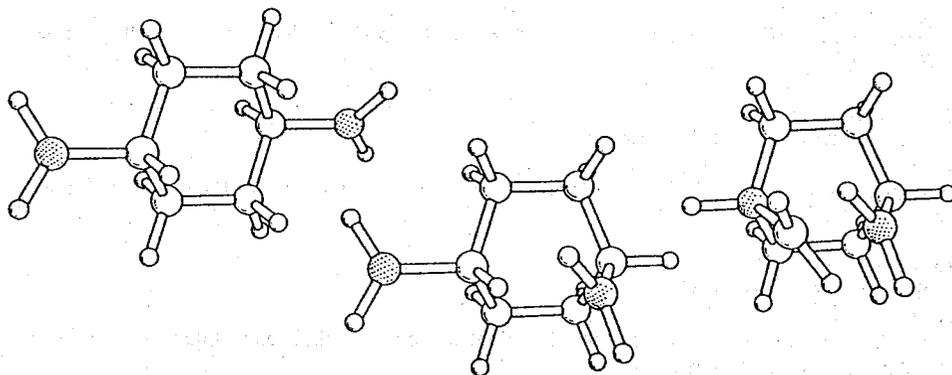
## List についての雑感

コンピュータに関係する会社に入社して、しばらく、意味の使い分けに悩んだ英単語にListとTableがある。私自身は情報処理の正規の教育を受けてはいないので、その道の専門家に教えをこうてまわったが、聞いても理解できない。そうこうする内に、その差が感覚的につかめてきた。どうも、Listは様式の定まらない箇条書のようなものであるらしい。コンピュータの出力もListだし、買物に行くときのメモも (shopping) listである。広範囲のことに使用できる。それに対し、Table (表) は、タテヨコに整然と数字や文字が並んだものである。

さて、このCICSJ Bulletinに、一度、化学グラフ (結合関係) をList構造に表現するかどうかの議論が紹介されていた。List構造とは、keyで読みだし書きこみが指定できるデータ (箇条書) の集まりだが、各項目に書かれる情報のタイプやデータの長さがプログラムの実行段階で変わることのできるものを言う。そのプログラムでの実現方法には多種のものがあ、リンク構造法に限ってもいろいろなものがある。化学グラフの処理における私の経験から言うと、任意の指定した原子に結合している原子をすべて簡単に取り出せるようにプログラムを書くとき、その結合原子の数が会話的プログラムでは動的に変わるので、リスト構造になる。原子を指定してそれに結合する原子が即座に取り出せることは、化学グラフの特徴を抽出する上で、Depth-First-SearchやBreadth-First-Searchなどのアルゴリズムと相性が良く、非常に便利である。ただし、このためのList構造ならFORTRANの配列を使っても、慣れれば、簡単にプログラム化できる。

しかしながら、もっと複雑なデータ構造を表現したいとき、List構造が最初からサポートされているプログラミング言語を使えば良かったかなと、FORTRANプログラムを書きながら悩む今日このごろである。

(日本アイ・ビー・エム(株) 小出 昭夫)



MEETINGS

13-18 August 1989.

MacroMolecules, Genes and Computers: Chapter Two.

Waterville Valley, NH.

Contact: Temple Smith, MBCRR-- J815, Dana-Farber Cancer Institute, 44 Binney St., Boston, MA 02115.

14-18 August 1989.

Gordon Research Conference on Quantitative Structure Activity Relationships.

Tilton, NH.

Contact: Dr. Alexander Cruickshank, Gordon Research Center, 3071 Route 138, Kingston, RI 02881 (401-783-4011; FAX: 401-783-7644).

7-8 September 1989.

*Ab Initio* Quantum Chemical Software for Supercomputers.

Columbus, OH.

Contact: Quantum Chemical Symposium, Ohio Supercomputer Center, 1224 Kinnear Road, Columbus, OH 43212-1154.

10-15 September 1989.

198th ACS National Meeting.

Miami, FL.

Contact: B. R. Pruitt, 1155 16th St., NW Washington, DC 20036. (202-872-4396).

11-12 September 1989.

Molecular Graphics Society, Second Oxford Conference on Applications of Molecular Orbital Methods to Chemistry and Biology.

Oxford, ENGLAND.

Contact: Dr. F. Blaney, Beecham Pharmaceuticals, Coldharbour Road, Harlow, Essex CM19 5AD, ENGLAND.

11-15 September 1989.

Modeling of Molecular Structure and Properties of Physical Chemistry and Biophysics. Nancy, FRANCE.

Contact: Division de Chimie Physique, 10 rue Vauquelin 75005 Paris, FRANCE (EARN/BITNET: RIVAIL@FRCTN11).

2-4 October 1989.

Colloquium on Computer Simulations in Protein Engineering and Drug Design: Theory Meets Experiment.

Tokyo, Japan.

連絡先: 〒102 千代田区一番町9 ノザビル9F 日本アライアントコンピュータ(株)ソフトウェア部 小室 ☎03-222-0750

3-4 October 1989.

Computer Simulation of New Materials.

Ithaca, NY.

Contact: A. Redelfs, Cornell Theory Center, 265 Olin Hall, Ithaca, NY 14853-5201 (607-255-7157).

16-19 October 1989.

Forty Years of Quantum Chemistry.

Athens, GA.

Contact: Prof. Henry F. Schaefer III, Center for Computational Quantum Chemistry, The University of Georgia, Athens, GA 30602.

9-12 November 1989.

Symposium on Biomedical Supercomputing '89 (IEEE Engineering in Medicine and Biology Society, 11th Annual International Conference).

Seattle, WA.

Contact: Dr. J. Yadv, University of Medicine and Dentistry of New Jersey, Dept. of IST, 185 S. Orange Avenue., Newark, NU 07103 (201-456-6789).

4-6 December 1989.

Workshop on Aspects of Molecular Graphics.

Pisa. ITALY.

Contact: Secretariat Molecular Graphics, c/o ICQEM, Via Risorgimento, 35, 1-56125 Pisa, ITALY.

Spring, 1990.

American Crystallographic Association Annual Meeting.

New Orleans, LA.

Contact: Cheryl Klein, Department of Chemistry, Xavier University, 7325 Palmetto Street, New Orleans, LA 70125 (504-486-7411; BITNET: CLKCM@UNO).

8-14 July 1990.

World Association of Theoretical Organic Chemists.

Toronto, Ontario, CANADA.

Contact: WATOC Congress 1990, c/o Department of Chemistry, University of Toronto, Toronto, Ontario, CANADA M5S 1A1.

23-27 JULY 1990.

Expanding Frontiers in Polypeptide and Protein Structural Research.

Whistler, British Columbia, CANADA.

Contact: Dr. V. Renugopalakrishnan. Harvard Medical School, Department of Orthopedic Surgery, 300 Longwood Avenue, Boston, MA 02115 (617-735-8413).

30 May-9 June 1991.

Static, Kinematic and Dynamic Aspects of Crystal and Molecular Structure.

Erice. Trapani, ITALY.

Contact: Prof. L. Riva Di Sanseverino, Dipartimento de Scienze Mineralogiche, Piazza Porta San Donato 1, 40126 Bologna, ITALY.

July, 1991.

American Crystallographic Association Annual Meeting.

Toledo, OH.

Contact: Alan Pinkerton, Dept. of Chemistry, Univ. of Toledo, Toledo, OH 43606 (419-537-4568).

## 文 献 紹 介

### TETRAHEDRON COMPUTER METHODOLOGY

1988年第1卷2号 发表题目、著者、頁

A history of *ab initio* computational quantum chemistry: 1950-1960, *Henry F. Schaefer, III*, P.97

A rapid approximation to the solvent accessible surface areas of atoms, *Winnfried Hasel, Thomas F. Hendrickson and W. Clark Still*, p.103

Similarity searching in the organic reactions domain, *Thomas E. Moock, David L. Grier, W. Douglas Hounshell, Guenter Grethe, Kevin Cronin, James G. Nourse and Jason Theodosiou*, p.117

Interactive generation of Organic reactions by IGOR 2 and the PC-assisted discovery of a new reaction, *Johannes Bauer, Eric Fontain, Dietmar Forstmeyer and Ivar Ugi*, p. 129

Unusual *cis* ring junction stereochemistry in a lactol derived from photo-oxygenation of abietic acid: an NMR and molecular modeling study, *Barbara Gigante, Ana M. Lobo, M. Joao Marcelo-Curto, Sundaresan Prabhakar and Henry S. Rzepa*, p.133

AIMB: analogy and intelligence in model building. System description and performance characteristics, *W. Todd Wipke and Mathew A. Hahn*, p.141

An organic inference program for IBM personal computers, *F. R. Burden*, p.169

A Computer-interfaced stepper-motor device for measurement of changing gas volumes at constant pressure, *David Jordan*, p.177

Ecode/decode: electronic mailing of complex files, *W. Todd Wipke*, p.181

Contents of Disk 1 to 4

Disk 1: ASCII files of each manuscript by author program name (\*ASC); bibliography files (\*BIB); LCMANUAL.ASC manual for LogiChem program.

Disk 2: ChemText document files (only readable with ChemText); MOOCK.DOC Moock paper (Chem Text 1.2); Still.DOC Still paper (ChemText 1.1); READ, ME describes files.

Disk 3: Burden's LogiChem executable program, read LCMANUAL.ASC on Disk 1 first; READ, ME describes files.

Disk 4: STILL subdirectory: ATAREA.FOR, CKSURF.FOR and MacroModel Molecule files (\*MMO); AIMB subdirectory: MolFiles for models built by AIMB and crystal structures; ENCODE subdirectory; ENCODE/DECODE programs for mailing complex documents, ARC EXE for data compression/expansion, and sample files; RZEPA subdirectory: MacroModel molecule files, AMPAC.LOG computational history; REFFORM subdirectory: update for REFFORM system.

Spatial Geometric Arrangements of Disulfide-Crosslinked Loops in Nonplanar Proteins  
*Takeshi Kikuchi, George Némethy, and Harold A. Scheraga* , p. 287

Multiple Solutions of Unrestricted Hartree-Fock Equations: The  $\text{SNH}^+$  Radical as an Example  
*P. Redondo, J. R. Flores, and J. Largo-Cabrerizo* , p. 295

The Gradient-Optimized Geometry of Haloperidol at the 4-21G Level  
*C. Van Alsenoy, A. T. H. Lenstra, and H. J. Geise* , p. 302

MC-SCF and CI Calculations on the  $\text{Si}_4\text{H}_4$  System  
*Alexander F. Sax and Josef Kalcher* , p. 309

Basis Set Dependence, Precision, and Accuracy of Full *Ab Initio* Gradient Optimizations of Molecular Structures of Nonstrained Hydrocarbons. I. CC Bond Lengths  
*Günter Häfelinger, Claus Ulrich Regelman, Tadeusz Marek Krygowski, and Krzysztof Wozniak* , p. 329

A Submatrix Algorithm for the Matrix-Vector Multiplication of Very Large Matrices  
*Roland Lindh and Per-Åke Malmquist* , p. 344

*Ab Initio* Study of the Proton Affinity of a Number of Ortho-Substituted Pyridines  
*J. M. L. Martin, J. P. François, and R. Gijbels* , p. 346

On the Computation of Matrix Elements between Numerical Wave Functions: The Canonical Functions Method  
*H. Kobeissi, M. Dagher, A. El-Hajj, and M. Kobeissi* , p. 358

The Effect of Electron Correlation on the Topological and Atomic Properties of the Electron Density Distributions of Molecules  
*Russell J. Boyd and Liang-Chen Wang* , p. 367

Algorithm for Rapid Calculation of Excluded Volume of Large Molecules  
*Jun'ichi Higo and Nobuhiro Gō* , p. 376

Prolog Program for Subgraph Enumeration and Calculation of Molecular Connectivity Indexes  
*Kei Takeuchi, Chiaki Kuroda, and Masaru Ishida* , p. 380

Solving the Finite Difference Linearized Poisson-Boltzmann Equation: A Comparison of Relaxation and Conjugate Gradient Methods  
*M. E. Davis and J. A. McCammon* , p. 386

Topological Electron Density Analysis of Phosphines, Phosphaalkenes and Phosphaalkynes  
*Steven M. Bachrach* , p. 392

Conformational Analysis. 48. A Molecular Mechanics (MMP2) Approach to the Conformational Analysis of Methyl-, Dimethyl- and Trimethylisochromanes  
*Edward M. Olefirowicz and Ernest L. Eliel* , p. 407

The Rate of Convergence of the S Matrix for the Renormalized Numerov and Log-Derivative Methods  
*J. P. Braga* , p. 413

Computer Generation of the Character Tables of the Symmetric Groups ( $S_n$ )

*Xiaoyu Liu and K. Balasubramanian* , p. 417

The Tautomerism of 1,2,3-Triazole, 3(5)-Methylpyrazole and Their Cations

*Javier Catalán, Marta Sánchez-Cabezudo, José Luis G. de Paz, José Elguero, Robert W. Taft, and Frederick Anvia* , p. 426

Volume 10 Number 4 June 1989

Degenerate Lithium-Hydrogen Exchange Reactions: *Ab Initio* Models for Metallation Mechanisms Involving  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $NH_3$ ,  $H_2O$ , and  $HF$

*Elmar Kaufmann and Paul von Ragué Schleyer* , p. 437

Theoretical Study of the Proton Affinities of 2-, 3-, and 4- Monosubstituted Pyridines in the Gas Phase by Means of MINDO/3, MNDO, and AM1

*R. Voets, J.-P. François, J. M. L. Martin, J. Mullens, J. Yperman, and L. C. Van Poucke* , p. 449

Nitrogen Inversion Barriers in Three-Membered Rings. An *Ab Initio* Molecular Orbital Study

*M. Alcamí, J. L. G. de Paz, and M. Yáñez* , p. 468

Atomic Charge Models for Polypeptides Derived from *Ab Initio* Calculations

*M. N. Bellido and J. A. C. Rullmann* , p. 479

Monte Carlo Simulations for the Study of Hemoglobin-Fragment Conformations

*R. S. Chen* , p. 488

Basis Set Quality versus Size II. Approximate GTO Wave Functions for Second Row Transition Metal Atoms

*Knut Faegri, Jr. and Gil Biran* , p. 495

Molecular Mechanics (MM2) Calculations on Peptides and on the Protein Crambin Using the Cyber 205

*Jenn-Huei Lii, Steven Gallion, Charles Bender, Håkan Wikström, Norman L. Allinger, Kenneth M. Flurchick, and M. M. Teeter* , p. 503

Application of Various Population Methods to Some Oxygenated Compounds

*Steven M. Bachrach and Andrew Streitwieser* , p. 514

Calculation of Number and Free Energy of the Conformers of Linear Alkanes with Medium and Long Chains. Implications for Catalysis

*Dan Fărcașiu, Patrick Walter, and Kelly Sheils* , p. 520

A Method for Fitting a Smooth Ribbon to Curved DNA

*Tom Darden* , p. 529

An *Ab Initio* Distributed Multipole Study of the Electrostatic Potential Around an Undecapeptide Cyclosporin Derivative and a Comparison with Point Charge Electrostatic Models

*S. L. Price, R. J. Harrison, and M. F. Guest* , p. 552

An MNDO Molecular Orbital Study of the Reactions of Protonated Oxirane Derivatives ( $X\overline{C}H_2OH^+$ ,  $X = CN, Cl, CH_3, PH$ ) with Simple Nucleophiles. Implications for Regioselectivity in the Reactions of Electrophiles with Nucleic Acid Bases

*George P. Ford and Christopher T. Smith* , p. 568

Number 195, 1989

- Crystal structure and spectroscopic behaviour of the 1:2 complex of *N, N, N', N'*-tetraethylphthaldiamide with pentachlorophenol  
E. Gréch and J. Nowicka-Scheibe (Szczecin, Poland), T. Lis and Z. Malarski (Wrocław, Poland), p. 1
- Spermidine-linked cyclophosphazenes: new SPIRANSA configurations  
G. Guerch and J.-F. Labarre (Toulouse, France), p. 11
- An answer to the SPIRO versus ANSA dilemma in cyclophosphazenes. Part XI. The first macro-SPIRO and macro-ANSA species from dioxodiamines  
A. El Bakili, P. Castera, J.-P. Faucher, F. Sournies and J.-F. Labarre (Toulouse, France), p. 21
- The hydrogen bond in 2-(*N, N*-dimethylamino-*N*-oxymethyl)-4, 6-dimethylphenol  
M. Rospenk, A. Koll, T. Glowiak and L. Sobczyk (Wrocław, Poland), p. 33
- Determination of the structure of (i,o)-bicyclo[6.2.2] dodeca-1,11-ene-2,3-anhydride by X-ray crystallography and molecular mechanics  
N.L. Allinger and K. Chen (Athens, GA, U.S.A.), P.G. Gassman, R.C. Hoye and L.B. Fertel (Minneapolis, MN, U.S.A.), p. 43
- Crystal and molecular structure of cytosine trichloroacetate  
M. Gdaniec, B. Brycki and M. Szafran (Poznan, Poland), p. 57
- Electronic and structural features of  $\gamma$ -aminobutyric acid (GABA) and four of its direct agonists  
K.B. Lipkowitz (Indianapolis, IN, U.S.A.), R.D. Gilardi (Washington, DC, U.S.A.) and M.H. Aprison (Indianapolis, IN, U.S.A.), p. 65
- Calculation of the effect of shock and temperature on hydrogen bonding in water  
F.J. Owens (Dover, NJ, U.S.A.), p. 79
- Conformational analysis of polyfunctional amino compounds by molecular mechanics. Part III. 1,3,5-Triazacyclohexanes, 2,5,7,10-tetrazabicyclo[4.4.0]decanes and 1,3,5,7-tetrazabicyclo[3.3.1]nonanes  
L. Carballeira, R.A. Mosquera and M.A. Ríos (Galicia, Spain), p. 89
- Empirical force field calculations (MM2-V4) on biphenyl and 2,2'-bipyridine  
C. Jaime and J. Font (Bellatera, Spain), p. 103
- Molecular mechanics and force field calculations in vibrational spectroscopy  
L.-O. Pietilä (Helsinki, Finland), p. 111
- Molecular-dynamics simulations of  $\beta$ -D-ribose and  $\beta$ -D-deoxyribose solutions  
B.P. van Eijck and J. Kroon (Utrecht, The Netherlands), p. 133
- Molecular mechanics and molecular shape. Part VII. Structural factors in the estimation of solvation energies  
A.Y. Meyer (Jerusalem, Israel), p. 147
- Structure and polarized IR spectra of the  $K_2HPO_4 \cdot 3H_2O$  crystal  
J. Baran, T. Lis and H. Ratajczak (Wrocław, Poland), p. 159
- Rydberg series in the near-UV vapour-phase absorption spectra of ( $\eta^6$ -arene) $_2$ Cr(0) and ( $\eta^6$ -arene) $_2$ V(0) complexes  
S. Yu. Ketkov, G.A. Domrachev and G.A. Razuvaev (Gorky, U.S.S.R.), p. 175
- Structure of electrolyte solutions in aliphatic amines. Part III. Infrared study of trifluoroacetates in ethylenediamine  
P. Dryjanski (Warsaw, Poland), p. 189
- Interaction of guanine with oxygen and further evidence for its asymmetric double-well potential surfaces  
P.C. Mishra (Varanasi, India), p. 201

- Infrared spectrum of the complex of formaldehyde with carbon dioxide in argon and nitrogen matrices  
G.P. van der Zwet, L.J. Allamandola, F. Baas and J.M. Greenberg (Leiden, The Netherlands), p. 123
- Methyl vinyl ketone in the gas phase, investigated by electron diffraction, infrared band contour analysis and microwave spectroscopy, supplemented with ab-initio calculations of geometries and force fields  
J. de Smedt, F. Vanhoutegem, C. van Alsenoy and H.J. Geise (Wilrijk, Belgium), B. van der Veken and P. Coppens (Antwerp, Belgium), p. 227
- The molecular structure of t-butyltrimethylsilyl chloride in the gas phase, determined by electron diffraction  
D.G. Anderson, D.W.H. Rankin and H.E. Robertson (Edinburgh, Gt. Britain), p. 253
- Determination of the gas-phase molecular structures of methyltrisilylamine and ethyldisilylamine by electron diffraction  
D.G. Anderson and D.W.H. Rankin (Edinburgh, Gt. Britain), p. 261
- Conformation-determining factors for complexes of 18-crown-6 cations  
M. Miyazawa, K. Fukushima and S. Oe (Shizuoka, Japan), p. 271
- Incoherent inelastic neutron scattering studies of proton conducting materials trivalent metal acid sulphate hydrates. Part I. The vibrational spectrum of  $H_5O_2^+$   
D.J. Jones and J. Roziere (Montpellier, France), J. Penfold and J. Tomkinson (Didcot, Gt. Britain), p. 283
- Dynamic aspects of a fast protonic conductor: oxonium perchlorate. Part I. Raman and inelastic neutron scattering spectra  
M. Pham Thi, J.F. Herzog, M.H. Herzog-Cance and A. Potier (Montpellier, France) and C. Poinson (Grenoble, France), p. 293
- Magnetic interactions in Mn(II)-methylpyrazole complexes  
R. Stösser and R. Kalähne (Berlin, G.D.R.), K. Möckel and E. Backhaus (Schillerweg, G.D.R.), p. 311
- $^{35}\text{Cl}$  NQR study of 2,6-dichlorotoluene  
J.L. Caccia, D.J. Pusiol and A.H. Brunetti (Córdoba, Argentina), p. 319
- A study of the molecular structure of cocaine using molecular mechanics and NMR  
R.A. Mosquera and E. Uriarte (Galicia, Spain), p. 325
- Physical properties and structure of 2-nitro-2-nitrosopropane and its dimer  
O. Exner, P. Fiedler and D. Šaman (Prague, Czechoslovakia) and B. Tinant (Louvain-la-Neuve, Belgium), p. 335
- Mutual influence of two intramolecular hydrogen bonds in 1,3,5-triketones  
D.Kh. Zheglova and I.K. Kavrakova (Sofia, Bulgaria), A.I. Kol'tsov (Leningrad, U.S.S.R.) and Yu.A. Ustynyuk (Moscow, U.S.S.R.), p. 343
- The determination of long-range (C,H) coupling constants by one- and two-dimensional NMR experiments  
R. Pachter and P.L. Wessels (Pretoria, South Africa), p. 351
- Ligand ENDOR study of Cu(II)-doped L-histidine deuteriochloride monodeuterohydrate single crystals at 4.2 K  
C.A. McDowell, A. Naito, D.L. Sastry, Y.U. Cui, K. Sha and S.X. Yu (Vancouver, B.C., Canada), p. 361

Number 196, 1989

- Molecular structure of furan, determined by combined analyses of data obtained by electron diffraction, rotational spectroscopy and liquid crystal NMR spectroscopy  
P.B. Liescheski and D.W.H. Rankin (Edinburgh, Gt. Britain), p. 1
- Determination of the gas-phase molecular structure of tris(trimethylsilyl)(trichlorosilyl)methane by electron diffraction  
D.G. Anderson, D.W.H. Rankin and H.E. Robertson (Edinburgh, Gt. Britain), A.H. Cowley and M. Pakulski (Austin, TX, U.S.A.), p. 21
- Mise en évidence par spectrométries optiques de formes tautomères caractéristiques du (bromo-5 pyridyl-2 azo)-2 diéthylamino-5 phenol (bromo PADAP)  
T. Delatour et A. Burneau (Vandoeuvre-les-Nancy, France), p. 31
- Infrared spectroscopic investigation of complexes of ClF and Cl<sub>2</sub> with crown ethers and related cyclic polyethers in argon matrices  
H. Bai and B.S. Ault (Cincinnati, OH, U.S.A.), p. 47
- Gas-phase structures of perfluorotetrahydrothiophene c-C<sub>4</sub>F<sub>8</sub>S, tetrahydrothiophene-1-oxide, c-C<sub>4</sub>F<sub>8</sub>SO, and tetrahydrothiophene-1, 1-dioxide, c-C<sub>4</sub>F<sub>8</sub>SO<sub>2</sub>  
H.-G. Mack and H. Oberhammer (Tübingen, F.R.G.) and J.M. Shreeve and X.-B. Xia (Moscow, ID, U.S.A.), p. 57
- The conformational equilibrium of CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>NH<sub>3</sub><sup>+</sup>: Raman study in solution and ab initio calculations  
H. Hagemann, H. Bill and J. Mareda (Geneva, Switzerland), p. 69
- Rotational isomerism, structure and vibrational assignment of methoxyallene: joint IR and Raman investigation and non-empirical MO-SCF and valence force field calculations  
A. Rastelli and E. Gallinella (Modena, Italy) and M. Burdisso (Pavia, Italy), p. 79
- Torsional transitions and barrier to internal rotation of 1-butyne  
G.A. Guirgis and J.R. Durig (Columbia, SC, U.S.A.) and S. Bell (Dundee, Gt. Britain), p. 101
- Reorientational motion of hydroxide ions in solid RbOH and CsOH  
J. Henning and M.D. Lutz (Siegen, F.R.G.), H. Jacobs and B. Mach (Dortmund, F.R.G.), p. 113
- Conformational and vibrational analysis of 2-pentyne and 2-hexyne  
G.A. Crowder and P. Blankenship (Canyon, TX, U.S.A.), p. 125
- On the correlation between conformational parameters and deformation energies in *syn*-1,6:8,13-diimino[14]annulenes with connected bridges  
R. Destro, F. Merati, E. Ortoleva and T. Pilati (Milan, Italy), p. 133
- Molecular structure of cycloheptene, C<sub>7</sub>H<sub>12</sub>, as determined by electron diffraction and molecular mechanics calculations  
L.I. Ermolaeva and V.S. Mastryukov (Moscow, U.S.S.R.), N.L. Allinger (Athens, GA, U.S.A.) and A. Almenningen (Oslo, Norway), p. 151
- Crystal structures of the diastereomeric salt pair of the prostaglandin intermediate 1*R*, 2*S*(+)-*cis*-2-hydroxycyclopent-4-enylacetic acid with *S*- and *R*-1-phenylethylamine  
M. Czugler and I. Csöregi (Stockholm, Sweden), A. Kálmán, F. Faigl and M. Acs (Budapest, Hungary), p. 157
- Crystal structures of 4,4'-dimethoxydithiophene and comparison with quantum mechanical calculations  
E.F. Paulus (Frankfurt, F.R.G.), K. Siam, K. Wolinski and L. Schäfer (Fayetteville, AR, U.S.A.), p. 171
- Electronic structure and conformational properties of the amide linkage. Part 7. Photoelectron spectroscopic and quantum chemical studies of some cyclic ureas and thioureas  
G. Irsch and P. Rademacher (Essen, F.R.G.), p. 181
- Electronic absorption spectra of cryogenic systems with hydrogen bonds  
T.G. Meister, G.Ya. Zelikina and O.M. Artamonova (Leningrad, U.S.S.R.), p. 193
- An answer to the SPIRO versus ANSA dilemma in cyclophosphazenes. Part XII. the first MEGA-SPIRO and MEGA-ANSA species from trioxodiamines  
F. Sournies, A. El Bakili, J.-F. Labarre and B. Perly (Toulouse, France), p. 201

- Crystal and molecular structure of the first MACRO-ANSA and MACRO-SPIRO isomeric cyclophosphazenes  $N_3P_3Cl_4$  (HN-(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-NH)  
R. Enjalbert, J. Galy, A. El Bakili, P. Castera, J.-P. Faucher, F. Sournies and J.-F. Labarre (Toulouse, France), p. 207
- Spermine-linked cyclophosphazenes: new DISPIRANSA configurations  
G. Guerch, J.-P. Bonnet and J.-F. Labarre (Toulouse, France), p. 221
- An experimental and theoretical study on 2-formyl- and 2,5-diformylfuran  
H. Lumbroso and J. Curé (Paris, France), G. Descotes (Villeurbanne, France) and A. Grassi (Catania, Italy), p. 227
- The crystal structure of an incomplete cubane-like trinuclear tungsten cluster  
{[W<sub>3</sub>S<sub>4</sub>] $\cdot$ [S<sub>2</sub>P(OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>]<sub>3</sub> $\cdot$  $\mu_2$ -CH<sub>3</sub>COO $\cdot$ C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>N} $\cdot$ D $\cdot$ 5HCON(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>  
H.-O. Zhan, Y.-F. Zheng, X.-T. Wu and J.-X. Lu (Fujian, People's Republic of China), p. 241
- $\beta$ -Diketone interactions. Part 9. The X-ray crystal structure of 2,2-difluoro-4,6-dimethyl-5-(4'-nitrophenyl)-1,3,2-dioxaborinane (C<sub>11</sub>H<sub>10</sub>BF<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)  
J. Emsley, N.J. Freeman, P.A. Bates and M.B. Hursthouse (London, Gt. Britain), p. 249
- Conformational structures and torsional potentials in 1,1,2,3-tetrahalogen (F, Cl, Br) propanes  
R. Stølevik and P. Bakken (Dragvoll, Norway), p. 257
- Conformational analysis of 4-chlorobutanenitrile and 4-bromobutanenitrile using gas-phase electron diffraction and molecular mechanics calculations  
P.J. Stavnebrekk and R. Stølevik (Dragvoll, Norway), p. 269
- Conformational analysis of the halomethyl cyclopropanes and the halosilyl cyclopropanes by molecular mechanics calculations  
R. Stølevik and P. Bakken (Dragvoll, Norway), p. 285
- Dynamical aspects of a fast protonic conductor: oxonium perchlorate. Part II. <sup>1</sup>H NMR spin-lattice relaxation  
M.H. Herzog-Cance, M. Pham Thi and A. Potier (Montpellier, France), p. 291
- Structural and spectroscopic study of condensed piperidine bicyclanol: 3-Phenethyl-3-azabicyclo[3.2.1]octan-8- $\alpha$ -ol  
E. Galvez, M.S. Arias, I. Ardid, F. Florencio, J. Sanz-Aparicio, J. Bellanato and J.V. Garcia-Ramos (Madrid, Spain), p. 307
- The <sup>13</sup>C-NMR chemical shift and the higher order structure of L-alanine residues in tropomyosin in the solid state and in solution  
S. Tuzi and I. Ando (Tokyo, Japan), p. 317
- Structural studies of mesogenic orthopalladated imine derivatives  
M.A. Ciriano (Zaragoza, Spain), P. Espinet (Valladolid, Spain), E. Lalinde, M.B. Ros and J.L. Serrano (Zaragoza, Spain), p. 327
- Lupin alkaloids. Part II. Some stereochemical aspects of multiflorine and seco(11,12)-12-dehydromultiflorine previously named N-methylalbine  
T. Brukwicki and W. Wysocka (Poznan, Poland), p. 343
- The electrooptical parameters of aniline and its halogeno derivatives in hydrogen bonded complexes  
V.E. Borisenko and A.I. Filarovski (Tyumen, U.S.S.R.), p. 353

#### Short communications

- The use of constraints in molecular mechanics calculations of medium-sized molecules  
A. Beyer, P. Wolschann, A. Becker and G. Buchbauer (Wien, Austria), p. 371
- Electron diffraction study of the molecular structure of tert-butylamine  
S. Konaka and N. Yanagihara (Sapporo, Japan), p. 375

注) 文献コピー依頼の際は、J. Molec. Struct., [年号] [番号] [頁]の順です。

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

1989年第29卷2号(5月) 論文題目、著者、頁

Clustering Multidisciplinary Chemical Papers To Provide New Tools for Research management and Trends. Application to Coal and Organic Matter Oxidation, *Henri Dou, Parina Hassanaly, Luc Quoniam, and Jacky Kister*, p.45

Representation and Matching of Chemical Structures by a Prolog Program, *Joseph L. Armstrong and D. Brynn Hibbert*, p.51

PAD Programming and Its Application in Chemistry, *Zheng Xianmin*, p.60

Clustering a Large Number of Compounds. 1. Establishing the Method on an Initial Sample, *Louis Hodes*, p.66

Documentation and Indexing of C<sub>4</sub> Compounds: Pathways and Pitfalls, *Robert E. Bunrock*, p.72

Distribution of  $K$ , the Number of Kekulé Structures, in Benzenoid Hydrocarbons: Normal Benzenoids with  $K$  to 110, *S. J. Cyvin, J. Brunvoll, and B. N. Cyvin*, p.79

Iterative Procedure for the Generalized Graph Center in Polycyclic Graphs, *Danail Bonchev, Ovanes Mekenyan, and Alexandru T. Balaban*, p.91

SMILES. 2. Algorithm for Generation of Unique SMILES Notation, *David Weininger, Arthur Weininger, and Joseph L. Weininger*, p.97

Computer Translation of IUPAC Systematic Organic Chemical Nomenclature. 1. Introduction and Background to a Grammar-Based Approach, *D. I. Cooke-Fox, G. H. Kirby, and J. D. Rayner*, p.101

Computer Translation of IUPAC Systematic Organic Chemical Nomenclature. 2. Development of a Formal Grammar, *D. I. Cooke-Fox, G. H. Kirby, and J. D. Rayner*, p.106

Computer Translation of IUPAC Systematic Organic Chemical Nomenclature. 3. Syntax Analysis and Semantic Processing, *D. I. Cooke-Fox, G. H. Kirby, and J. D. Rayner*, p.112

Canadian Scientific Numeric Database Service, *Gordon H. Wood, John R. Rodgers, and S. Roger Gough*, p. 118

ACS Committee on Nomenclature: Annual Report for 1988, *Kurt L. Loening*, p.124

COMPUTER SOFTWARE REVIEWS

WordPerfect for the Macintosh, Reviewed by *Mary Acock*, p.127

ASYST 2.1, Reviewed by *Kenneth L. Ratzlaff*, p.128

Norton Utilities—Advanced Edition, Version 4.5, Reviewed by *R. Heller*, p.130

## COMPUTERS & CHEMISTRY

1989年第13卷第3号 論文題目、著者、頁

A Matrix series method for the integration of rate equations in a reaction network. An alternative to Runge-Kutta Methods, *Thomas M. Zamis, Lawrence J. Parkhurst and Gordon A. Gallup*, p.165

Multi-variant kinetic analyses on a microcomputer, *Michael Albin and Harry B. Gray*, p.173

Optimization of NMR data processing with coarsegrain parallel computers, *R. E. Hoffman, and G. C. Levy*, p.179

Defining the axis of a helix, *Peter C. Kahn*, p.185

Simple methods for computing the least squares line in three dimensions, *Peter C. Kahn*, p.191

Resolution of absorption spectra, *J. M. Sevilla, M. Dominguez, F. Garcia-Blanco and M. Blazquez*, p.197

Symmetry-eigenfunctions for many-electron atoms and molecules: a unified and friendly approach for frontier research and student training, *Annik Vivier Bunge, Carlos F. Bunge, Rocio Jáuregui and Gerardo Cisneros*, p.201

Angular momentum eigenfunctions for many-electron calculations, *Rocio Jáuregui, Carlos F. Bunge, Annik Vivier Bunge and Gerardo Cisneros*, p.223

Spin eigenfunctions for many-electron calculations, *Annik Vivier Bunge, Rocio Jáuregui and Gerardo Cisneros*, p.239

Molecular symmetry eigenfunctions for many-electron calculations, *Gerardo Cisneros, Rocio Jauregui, Carlos F. Bunge and Annik Vivier Bunge*, p.255

Schmidt orthonormalization of a basis expressible both as linear combinations and as projections of orthonormal primitive functions, *Carlos F. Bunge*, p.271

Writing friendly programs in modular form, *Carlos F. Bunge, Rocio Jauregui and Gerardo Cisneros*, p.277

Magnitude-Lorentzian interpolation of discrete, absorption-mode Fourier transform spectra, *Kim H. Chow and Melvin B. Comisarow*, p.291

### Book Reviews

Computational Chemistry, by M. D. Johnston Jr, *Delos F. DeTar*, p.297

Expert Systems 85. Edited by Martin Merry, *Delos F. DeTar*, p.297

Numerical Recipes, by William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky and William T. Vetterling, *Delos F. DeTar*, p.297

Computational of Solution Equilibria, by M. Melhoun, J. Havel and E. Höffeldt, *Delos F. DeTar*, p.298

JOURNAL OF COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN

1989年第3卷1号(3月) 論文題目、著者、頁

Impediments to the scientific method, p.1

Constrained search of conformational hyperspace, *Richard A. Dammkoehler, Steven F. Karasek, E. F. Berkley Shands and Garland R. Marshall*, p.3

A theoretical study of Zn<sup>++</sup> interacting with models of ligands present at the thermolysin active site, *Claude Giessner-Prettre and Olivier Jacob*, p.23

Structural requirements of Na<sup>+</sup>-dependent antidopaminergic agents: Tropicamide, Piquindone, Zetidoline, and Metoclopramide. Comparison with Na<sup>+</sup>-independent ligands, *Sonia Collin, Daniel P. Vercauteren Didier Vanderveken, Guy Evard and Francois Durant*, p.39

Pattern recognition display methods for the analysis of computed molecular properties, *Brian Hudson, David J. Livingstone and Elizabeth Rahr*, p.55

Geometries of functional group interactions in enzymeligand complexes: Guides for receptor modelling, *Marina Tintelnot and Peter Andrews*, p.67

Computer simulation of the conformational behavior of cholecystokinin fragments: Conformational families of sulfated CCK8, *M. Kreissler, M. Pequer, B. Maigret, M. C. Founie-Zaluski and B. P. Roques*, p.85

The educational foundation of computational chemistry, *Richard W. Counts*, p.95

1989年第3卷2号(6月) 論文題目、著者、頁

A molecular modeling study on binding of drugs to calmodulin, *H.-D. Holtje and M. Hense*, p.101

Pattern recognition study of QSAR substituent descriptors, *Han van de Waterbeemd, Nabil El Tayar, Pierre-Alain Carrupt and Bernard Testa*, p.111

Determination of clefs in receptor structures, *Richard A. Lewis*, p.133

Highlyconformationally constrained halogenated 6-spiroepoxyenicillins as probes for the bioactive side-chain conformation of benzylpenicillin, *Richard E. Shute, David E. Jackson and Barrie W. Bycroft*, p.149

Molecular modeling of putative antagonist binding site of helix III of the  $\beta$ -adrenoceptor, *H. W. Th. van Vlijmen and A. P. Ijzerman*, p.165

Charge calculations in molecular mechanics 7: Application to polar  $\pi$  systems incorporating nitro, cyano, amino, C=S and thio substituents, *Raymond J. Abraham and Paul E. Smith*, p.175

The COMPUTATIONAL PERSPECTIVE

New products and rumors of new products, *Richard W. Counts*, p. 189

## JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

MARCH 1989 Volume 66, Number 3

Computer Series, 101: Accurate Equations of State in Computational Chemistry Projects, *David Albee and Edward Jones*, p.226

May 1989 Volume 66, Number 5

Journal of Chemical Education: Software. Abstract of "Spreadsheets in Physical Chemistry", *David M. Whisnant*, p.405

Computer Series, 102: Bits and Pieces, 40

Molecular Mechanics/Computer Graphics Experiment for the Undergraduate Organic Chemistry Laboratory, *John M. Simpson*, p.406

edited by James P. Birk

Laboratory Simulations—Gel Filtration, *Thomas W. Griffith*, p. 407

Bond's Algorithm: Judging Correctness of Spelling, *Douglas Bond*, p.408

Interfacing the TLC548 Analogue-to-Digital Converter, *Bruce D. Westling, Allan K. Seidel, and Margaret E. Bahe*, p.409

Digitizing Circuit for Measuring Voltage with the Apple II Game Port, *Tong B. Tang, Albert W. M. Lee and Sebastian H. T. Chan*, p.410

Application of Microcomputers in Chemical Education: An Information Base, *James A. Wood*, p.412

PC Abstracts: A Database of IBM PC Articles, *G. Scott Owen*, p. 412

## JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

1989年第7卷1号(3月) 論文題目、著者、頁

### CONFERENCE PAPERS

from the Symposium on Molecular Recognition: Its Role in Chemistry and Biochemistry—Sopron, Hungary 24-27 August 1988

The use of solid-state NMR and X-ray crystallography as complementary tools for studying molecular recognition, *M. C. Etter and G. M. Vojta*, p.3

Molecular recognition: designed crystalline inclusion complexes of carboxylic hosts, *E. Webber*, p.12

### REGULAR PAPERS

An application of the SCF, MBPT and CC correlated densities: a graphical display along the potential energy surface of  $\text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}$ , *C. Sosa, G. W. Trucks, G. D. Purvis III and R. J. Bartlett*, P.28

Color illustrations, p.33

Rendering volumetric data in molecular systems, *D. S. Goodsell, I. S. Mian and A. J. Olson*, p.41

Rapid geometric searching in protein structures, *A. T. Brint, H. M. Davies, E. M. Mitchell and P. Willett*, p.48

Atoms with shadows—an area-based algorithm for cast shadows on space-filling

molecular models, *M. Gwilliam and N. Max*, p.54

Protein-protein interactions on the surface of immunoglobulin molecules, *W. Ito, H. Nakamura and Y. Arata*, p.60

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

1989年第3卷1号(1月) 論文題目、著者、頁

Review

Fibonacci numbers in the topological theory of benzenoid hydrocarbons and related graphs, *S. El-Basil and D. J. Klein*, p.1

Papers

A Generalization of Wegscheiders's condition. Implications for properties of steady states and for quasi-steady-state approximation, *S. Schuster and R. Schuster*, p.25

Shape group theory of van der Waals surfaces, *G. A. Arteca and P. G. Mezey*, p.43

A mathematical model of realistic constitutional chemistry. A synthon approach. I: An algebraic model of a synthon, *J. Koča*, p.73

A mathematical model of realistic constitutional chemistry. A synthon approach II: The model and organic synthesis, *J. Koča*, p.91

## 日本化学会事務局移転のお知らせ

日本化学会事務局は、現在の場所に化学会館を建設する為、下記の住所に平成元年9月25日(月)より、移転致します。

移転先：〒101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル6、7階

尚、電話番号も変わりますが、8月中旬に決まりますので、次号でお知らせ申し上げます。又、9月21日(木)、22日(金)は引越しの為、事務局はお休みさせていただきます。

## 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。

尚、原稿締切日は発行月(奇数月)の10日です。

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

## 情報化学部会部会員増加にご協力を!

【平成元年部会費】	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)

# 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 7, Number 5  
September 1989

## 目 次

### 部 会 行 事

第12回情報化学討論会プログラム .....	1
化学物質名の機械処理に関する研究会 .....	5
「ミニフォーラムのテーマを募集します」 .....	6
第2回情報化学夏期セミナーを省みて .....	岡 田 孝 7
	河 井 俊 一

### 国 際 会 議

PACIFICHEM '89 情報化学関係プログラム .....	8
コンピュータの材料科学・工学への応用国際会議・展示会 .....	26

### 関 連 行 事

第17回構造活性相関シンポジウムプログラム .....	28
第4回 PC ソフトウェア研究討論会 .....	30

### CCS の 紹 介

分子設計支援システム "MATERIA" について .....	(株) 帝人システムテクノロジー 34
---------------------------------	---------------------

### 国 内 の 動 き

情報学基礎研究会報告 .....	廣 田 勇 二 38
日本化学プログラム交換機構(JCPE)について .....	田 辺 和 俊 41

### 海 外 動 向

Meetings .....	42
----------------	----

### 文 献 紹 介

Journal of Computational Chemistry (Vol. 10, No. 5) .....	44
Journal of Molecular Structure (No. 197) .....	45
Journal of Mathematical Chemistry (Vol. 3, No. 2) .....	47
Journal of Chemical Education (Vol. 66, No. 6) .....	47
Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol. 8, No. 1) .....	47

# 部 会 行 事

## 第12回情報化学討論会プログラム

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 1989年11月8、9、10日(水、木、金)

会場 千里協栄生命ホール(一般講演、ポスター発表)

565 豊中市新千里西町1-1-10 協栄生命ビル内

よみうり文化ホール(特別講演)

565 豊中市新千里東町1-1-3 よみうり文化センター内

交通 JR 新大阪駅より地下鉄御堂筋線(北大阪急行)にて15分、千里中央駅下車、徒歩5分。

なお、同じ会期で、第17回構造活性相関シンポジウムがよみうり文化ホールで開催されます。

講演時間 25分(講演18分、討論7分)

第1日(11月8日)

一般講演

座長 佐藤 満雄(10:00-10:50)

8I01 DNET/MSシステムによる酸性度の類推(関学大情報セ)○岡田 孝、河井俊一

8I02 官能基を中心とした構造縮約表現にもとづく共通構造特徴の自動認識(豊橋技科大)○助川正之、高橋由雅、佐々木慎一

座長 岡田 孝(10:50-11:40)

8I03 高次対称カゴ型炭化水素の分子設計(群馬大教育、立正大教養※)○飯塚健、今井 賢※

8I04 ゼオライト系三次元フレームワーク上でのSi, Al分配 --最近接Al-Al対排除条件下での可能な分配の系統的誘導(群馬大工)○佐藤満雄

休憩 -----11:40-13:00-----

座長 飯塚 健(13:00-13:50)

8I05 「分析化学」誌のキーワード・キーワードフレーズの変遷状況とCAsEaRcHのキーワードフレーズとの比較(北里大薬、電通大※)木下俊夫、平賀やよい、岡村里恵、今野 恵、○山崎 昶※、梶川博司※

8I06 有機化合物のIUPAC命名支援システム I. 非環式化合物(豊橋技科大)○阿部英次、高橋佐江、佐々木慎一

座長 山崎 昶(13:50-14:40)

8I07 電気伝導度データベース及び数値データベース利用支援システム(横浜国大工、名古屋市大計セ※)○石田卓也、佐藤寿邦、仁木克己、磯本征雄※

8I08  $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ -NMRスペクトルデータベースによる検索同定システムの開発(3) --データベースの質への依存性の検討(日立計測、日立那珂※)○橋本

正雄、笹淵 仁※

座長 阿部 英次 (14:40-15:30)

8 I 0 9 動く組合せ画像 --分子モデリングシステム KORIN/IRIS (分子研、九工大情報工※) ○伊奈 諭、柏木 浩※

8 I 1 0 知的な分子モデリングシステムの構築 (日本IBM) 小出昭夫

座長 中野 英彦 (15:30-16:20)

8 I 1 1 MMHS (Molecular Model Handling System) Ver. 3.1 (群馬大教養、神戸製鋼筑波研※) ○中田吉郎、藤沼一信※

8 I 1 2 有機分子の三次元構造の経験的推算法

--STERIC/ENCODE (東海大開発技研) 米田幸夫

特別講演 I

座長 神谷 和秀 (17:00-18:00)

企業における情報化学の現状と展望 (住友化学高槻研) 吉田 元二

第2日 (11月9日)

一般講演

座長 船津 公人 (9:30-10:45)

9 I 1 3 有機反応シミュレーション (電気化学総研) ○折田政寛、増田隆仁、杉本勲、岡本彰夫

9 I 1 4 知識ベースシステムによる触媒反応機構創出システムの開発 (愛知工大、名大工※、東海大開発技研※※) ○藤 至陽、鬼頭繁治、服部 忠※、村上雄一※、米田幸夫※※

9 I 1 5 直接キー入力した化学反応式をParse (識別、解読) するプログラムEX APLおよびAPL2データ構造による取扱い (化技研) 西川利男

座長 藤井 敏 (10:45-11:35)

9 I 1 6 赤外・ラマンスペクトルのシミュレーションを含めたギ酸および酢酸単量体および二量体の分子力学計算 (京大薬) ○横山 勲、三輪嘉尚、町田勝之輔

9 I 1 7 分子軌道計算を用いない静電ポテンシャル図の作成 (筑波大化学) ○堀越和彦、高橋央宣、菊池 修

休憩 -----11:35-13:00-----

座長 柏木 浩 (13:00-13:50)

9 I 1 8 化学相互作用をあらわす軌道対 (Paired Interacting Orbitals)の理論に基づく分子間相互作用解析システムの開発 (住友化学、京大工※) ○勝見広幸、菊園康雄、吉田元二、志賀昭信、藤本博※

9 I 1 9 ミセル内反応のモンテカルロ・シミュレーション (千葉衛生短大) 林 誠人

ポスターセッション

第2日 (11月9日) 14:00-16:10

9 P 0 1 情報処理教育としての計算機化学講義・演習における試み (お茶の水女子大理) ○藤枝修子、丹波裕子

9 P 0 2 線形ギャップ重み関数による多重アライメント (富士通国際研) 田嶋耕治

9 P 0 3 NMRスペクトル・データベースのパーソナルコンピュータ化(3) <sup>1</sup>Hスペ

- クトルの表示 (神田外大、化技研※、日本電子※※) 山本 修、○早水紀久子※、中川恵策※※、宮林延良※※
- 9 P 0 4 農業安全性評価情報データベースの構築と利用 (国立衛試) 関沢 純
- 9 P 0 5 ヒト発癌物質の分子知識データベース III (都臨床研、国立衛試※) ○大上徳子、神沼二真※
- 9 P 0 6 CONFLEX 2による中ないし大環式分子の配座発生 (北大理) ○後藤仁志、大澤映二
- 9 P 0 7 分子力学計算、基準振動解析および振動スペクトルシミュレーションのための自動化プログラム RISEの開発 (京大薬) 三輪嘉尚、○町田勝之輔
- 9 P 0 8 立体選択的反応とMM2計算値の関係 1. アルドール型反応によるアセトフェノンからの 2-ヒドロキシエステルの不斉合成 (山形大工) 工藤喜弘
- 9 P 0 9 有機合成設計支援システム“AIPHOS”における知識ベースシステムの開発 (豊橋技科大) ○渡辺和夫、船津公人、佐々木慎一
- 9 P 1 0 有機合成設計システムCASINOの開発 (11) キラルシントロン認識モジュールにおける考え方、および実行検証例について (化技研・富士通※) ○内丸忠文、田辺和俊、大内秋比古※、湯田浩太郎※、桶高 透※、矢幡史子※
- 9 P 1 1 タンパク質構造表示プログラムMODRAST-Pの切断図形表示機能の拡張 (姫路工大、中国南開大※) ○中野英彦、張 金培※、山名一成、三軒 斉
- 9 P 1 2 3Dグラフィック装置を用いた波動関数の簡易表示プログラムの有機化学への応用 (阪大薬) ○永井伸二、高木達也、田中明人、野田昭宏、藤原英明、佐々木喜男
- 9 P 1 3 分子内原子の図形表現 (中京大教養) 泰野甯世
- 9 P 1 4 分子性結晶の構造表示 -- 分子の断片を除去するアルゴリズムの開発 (東工大総理工) ○山崎陽太郎
- 9 P 1 5 アミノ酸性質を考慮した蛋白質一次構造の概念的クラスタリングシステム (関学大理、情報セ) ○中川博之、小山 泰、河井俊一、岡田 孝
- 9 P 1 6 パターン認識法によるタンパク質二次構造の二段階識別 (豊橋技科大) ○唐沢 肇、高橋由雅、佐々木慎一
- 9 P 1 7 デカルト座標をコンホメーション解析に適した内部座標に変換するプログラム (II) (ゼリア新薬、北里大薬※) ○平野弘之、広野修一※、森口郁生※
- 9 P 1 8 分子設計支援システムTUTORSの開発: 構造特徴制約下での構造組立て (豊橋技科大) ○山本和義、高橋由雅、佐々木慎一
- 9 P 1 9 CLUSMOL 2システムの拡張と農薬の分類 (関学大情報セ) ○河井俊一、岡田 孝
- 9 P 2 0 有機化合物の自動構造推定システム CHEMICSの開発 -- H-H COSY (vicinal proton) の解析、および帰属付部分構造情報処理 (豊橋技科大) 船津公人、○須々田 寛、佐々木慎一

## 特別講演 II

座長 森口 郁生 (16:30-17:30)

構造活性相関と分子設計 (京大・農) 藤田 稔夫

第3日 (11月10日)

一般講演

座長 高橋 由雅 (9:30-10:20)

10I20 ニューラルネットワークを用いたタンパク質の二次構造予測 (図書館情報大) ○中山伸一、木村祥子、吉田政幸

10I21 ニューラルネットワークによる類似化合物の分類 (富士通) ○湯田浩太郎、井関京子、中山唯男、樋高 透

座長 高山 千代蔵 (10:20-11:35)

10I22 複合半導体ガスセンサーシステムによる有機化合物の匂い識別の試み III (豊橋技科大) ○金谷重彦、阿部英次、小向隆夫、高橋由雅、佐々木慎一

10I23 受容サイトにおける分子認識機構(第5報) (東京農工大工、化技研※) ○樋口敏幸、佐藤克則、安川民男、田辺和俊※

10I24 ANALOGSによるレセプター・リガンド間相互作用の解析(第2報) (東京農工大工、大正製薬総研※、大阪薬大※) ○佐藤克則、安川民男、角谷重幸※、北村一泰※、石田寿昌※※

休憩 ----- 11:35-13:00 -----

座長 安川 民男 (13:00-13:50)

10I25 核酸高次構造の構造特性パラメータの動的挙動と表示 (阪大・薬) ○藤井 敏、富田研一

10I26 パターンマッチ法による蛋白質一次構造マルチマッチングとその応用 (北里大薬) ○菰岡仁志、梅山秀明

座長 梅山 秀明 (13:50-15:05)

10I27 溶液中の分子動力学計算に基づいたLogPの推算法 (東大薬) ○富岡伸夫、清水敏之、板井昭子

10I28 分子動力学計算による環状化合物のコンホメーション解析 (東大薬、エーザイ※) ○堀江多鶴子、河合隆利※、板井昭子

10I29 キモトリプシン-リガンド系の分子動力学計算による解析 (東大薬) ○飯野 稔、富岡伸夫、板井昭子

参加登録予約締切 10月25日(水)

参加登録費 予約 5,000円、当日 6,000円(要旨集を含む)

懇親会 11月9日18時から 月華殿において(講演会場のすぐそばです) 第17回構造活性相関シンポジウムと合同で行います。会費 4,000円は参加登録時にお払い込み下さい。

参加登録方法 本討論会または第17回構造活性相関シンポジウムのいずれか一方に登録して下さい(両方に参加できます)。

予約参加登録には1人あたり1枚の郵便振替用紙(郵便局備え付け)を使用して、5,000円(登録のみ)、または9,000円(懇親会を含む)を 口座番号 大阪 4-93997 情報化学構造活性相関シンポジウム委員会あてお送り下さい。なお 講演要旨集は当日お渡しします。

連絡先 671-22 姫路市書写2167 姫路工業大学工学基礎研究所 安岡則武

tel 0792-66-1661 ext 401, fax 0792-66-8868

# 化学物質名の機械処理に関する研究会

第1回 開催のお知らせ

日時 平成元年10月27日(金)

9時~17時

場所 中央大学駿河台記念館  
千代田区神田駿河台 3-11-5

電話 03-292-3111

(右の地図を参照下さい)

主催 日本化学会情報化学部会  
世話人 飯塚健(群馬大)

話題提供者(五十音順、敬称略)  
阿部英次(豊橋技科大)  
荒木啓介(科学技術情報セ)  
上野京子(化学情報協会)  
長谷川正好(帝人技術情報KK)  
畑一夫(日本化学会)  
山崎昶(電気通信大)

予定されている話題

化学物質名の機械処理に関して化合物辞書の構築、化合物名の人工知能的処理、化合物検索名の構造化、特許情報処理における化学物質名、化学会誌等の編集と化学物質名、化学教育における命名処理など種々の観点から話題の提供をうけて、どのような問題点があるのかを参加者と議論する。

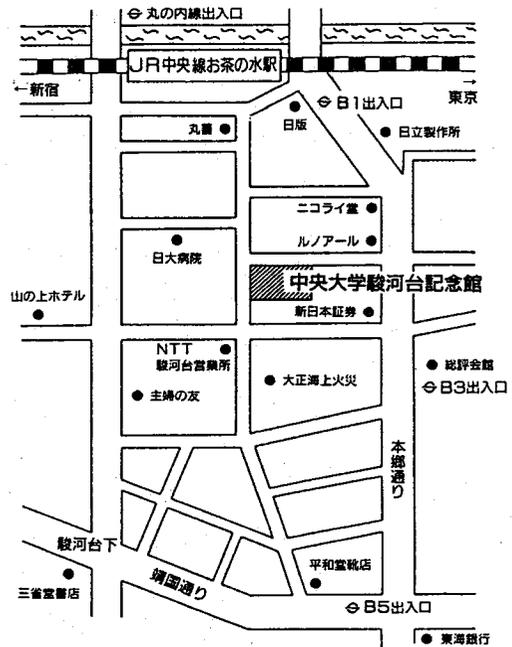
参加費は無料ですが、会場の都合で参加者は30名とします。電話でお申し込み下さい:

電話(03)258-9813

日本化学会 情報化学部会

記念館案内図

東京都千代田区神田駿河台3丁目11番5 ☎03(292)3111



【最寄駅】

- JR中央線「お茶の水駅」徒歩3分
- 地下鉄千代田線「新お茶の水駅」B1・B3徒歩3分
- 地下鉄丸の内線「お茶の水駅」徒歩6分
- 地下鉄都営新宿線「小川町駅」B5徒歩5分

# 「ミニフォーラムのテーマを募集します」

化学情報部会では過去二年の日本化学会春季年会において、化学情報・計算機化学の会場で、ミニフォーラムを開催してきました。平成二年の春季年会においても開催を予定しておりますので、部会員よりご希望のテーマを募ります。参考までに過去二回のテーマと講演者のリストを掲げておきます。その後の進展もありますので、これらのテーマと重複しても一向に構いません。

1988年

- (1) 化学におけるエキスパートシステムとファジイ理論 (旭硝子) 石田嘉明
- (2) ワークステーションで何ができるか?  
化学研究を支援するために (富士ゼロックス) 神保旭
- (3) 化学のためのプログラミング言語 (図書館情報大) 石塚英弘
- (4) 化学者のためのネットワーク作り (東大教養) 竹内敬人・吉村伸

1989年

- (1) 化学物質の安全情報の現状 (日本化学物質安全情報セ) 大島輝夫
- (2) 化学における電子出版の活用－反応設計の場合 (中外製薬) 松浦育敏
- (3) 化合物の体系名の計算機処理－その現状と将来 (日本科学技術情報セ) 荒木啓介
- (4) 化学におけるスーパーコンピュータ (リクルート) 原典行・諫田克也

募集期限 平成元年11月15日 (水)

宛先 〒371 前橋市荒牧町4-2 群馬大学教育学部 化学教室 飯塚 健

TEL 0272-32-1611 内線 475 FAX 0272-33-9231

11月14日 (火) 「生理活性－化粧品の化学と情報化学 (講演と見学会)」が、主催 日本化学会東海支部、共催 日本化学会情報化学部会にて開催されます。詳細は「化学と工業」10月号をご覧ください。

## 第2回情報化学夏期セミナーを省みて

関西学院大学  
岡田孝、河井俊一

残暑の続く8月24・25の両日、今回で2度目となる夏期セミナーを、神戸市の六甲山上で開催した(後記プログラム参照)。ちょうど30名の参加者が、六甲山の涼しさを味わいながら、2日間を過ごすことができた。

参加者は若手主体ではあったものの、中堅クラスの方も多く参加して頂いた。またその内訳は、所属する企業・学科名称から判断して8割が化学系、2割が情報系であり、また大学関係者が3割であった(いずれも講師を含めた計算による)。

今回のセミナーでは、昨年の経験をふまえて引き続きそのタイトルを「情報化学入門」とし、講師の方々にもその内容が余り専門的にならないように、事務局からお願いした。質問時間を長めに設定したこともあり、活発な質疑応答が交わされて、入門としての意味は十分に果たされたと感じた。一方参加者中の経験を積んだ方々には、既知の内容もあったと思われるが、セミナー自体の内容が多岐に亘っていたため、それなりの意義を持って頂けたのではないかと思っている。事務局の依頼に快く応じて頂いた講師の方々には、この場をかりて改めて感謝する次第です。

夜のフリートーキングの時間には、急に百万ドルの夜景散策を組み込んだため、全員での自己紹介は行なわなかった。しかし、いくつかのグループに分かれて非常に活発な議論が交わされていた。アルコールが入った状態で持ち込んだパソコンを動かし、リラックスしてソフトの品評を行なっていると、日頃は聞けない本音も飛び出し、なかなか有意義な時間であったと思われる。

この夏期セミナーのような泊り込みの会は、色々な意味で非常に有益であり、今後とも継続できればよいと思われる。但し、参加者の中には、「若手中心や入門主体の色彩を薄めた方がよいのではないか。」というような意見もあった。本誌前号4ページの分類に従えば、work shop的な色彩を強めることかとも思われる。

最後になったが、本セミナー開催にあたりご援助頂いた多くの方々に感謝するとともに、不慣れな事務局にもかかわらず、ご協力頂いた講師並びに参加者の方々にお礼を申し上げる次第です。

### プログラム

8月24日(木)

- 12:00-13:00 受付、昼食  
13:00-14:30 企業における計算機化学 利用の現状 (住友化学) 吉田元二  
14:40-16:10 化学構造表現法入門 (関学大) 岡田 孝  
16:20-18:00 自動構造推定システムはどこまで来たか (豊橋技科大) 船津公人  
18:00- 夕食、夜景探訪、フリートーキング

8月25日(金)

- 8:00- 9:00 朝食  
9:00-10:25 これからの構造活性相関 -蛋白質分子- (京大化研) 西岡孝明  
10:35-12:00 分子軌道法とどうつきあうか (阪大理) 巽 和行  
12:00 解散



1 9 8 9 環太平洋国際化学会議  
(PACIFICHEM '89)  
情報化学関係プログラム

Honolulu, Hawaii, U.S.A.  
December 17-22, 1989

06-B SYMPOSIUM ON CHEMISTRY IN THE ELEMENTARY SCHOOL CURRICULUM

Thursday Afternoon

6-B Symposium on Chemistry in the Elementary School Curriculum

R.P. Steiner (ACS), Organizer, Presiding

- 1:00- Importance of Context and Approach in Achieving High Quality Learning  
J. Burns (NZIC)
- 1:30- Realities of Classroom Science. B. Schollum (NZIC)
- 2:00- On Understandings of Carbon Dioxide in Secondary Education  
K. Mayama (CSJ)
- 2:30- Discussion
- 2:35- Hands on Science Activities. S.J. Baum (ACS)
- 3:05- Development of Teaching and Learning Equipment in Chemical Education  
K. Ikeo (CSJ)
- 3:35- Some Experiments in the Elementary Science Curriculum. K. Ogino (CSJ)
- 4:05 Preparing Minds for Chance's Favouring. J.B. Endacott (RACI)

FRIDAY MORNING

6-B Symposium on Chemistry in the Elementary School Curriculum

R.P. Steiner (ACS), Organizer  
K. Ogino (CSJ), Presiding

- 8:00- Toys, Partners and Fun - The Keys to Successful Chemistry in the  
Elementary School. M. Sarquis, J. Sarquis, J.P. Williams (ACS)
- 8:30- Chemical Cookies and other Elementary Delights. J. Allan (CIC)

- 9:00- The Use of Ion Exchange Resins for Understanding Electrolytes.  
H. Ogino, Y. Kikuchi, K. Ogino (CSJ)
- 9:30- Discussion
- 9:35 Chemistry Supplements for Pre-High School Classes. J. Sarquis  
M. Sarquis (ACS)
- 10:05- New Course of Study In Japan. K. Watanuki (CSJ)
- 10:35- Chemistry in the DASH Curriculum. F.M. Pottenger III (ACS)
- 11:05- Chemical Education in the Elementary Science Curriculum  
Z. Chen (CCS)

## 0:5: C SYMPOSIUM ON COMPUTERS IN CHEMICAL EDUCATION

### TUESDAY MORNING

#### 6-C Computers in Chemical Education

John W. Moore (ACS), Co-organizer  
Edward V. Blackburn (CIC), Co-organizer  
John T. Shimozawa (CSJ), Co-organizer  
Xin Xinquan (CCS), Co-organizer

John W. Moore (ACS), Presiding

- 8:30 Introductory Remarks
- 8:40 Developing a Full Course Computer Curriculum in General Chemistry. J.D. Spain (ACS)
- 9:00 Comparison Between CAI and Traditional Teaching Method in China's Chemistry. D. Tingzhen, W. Yan. (CCS)
- 9:20 Spectral Interpretation CAL. T.P. Forrest. (CIC)
- 9:40 A Tool Producing Basic Programs. M. Watabe, H. Yano. (CSJ)
- 10:00 Interactive Access to the Atomic Orbitals of Hydrogen: A Thousand Points of Light. M. Hanson, R. Paselk. (ACS)
- 10:20 Break
- 10:40 Computer in Quantum-Chemical Education. X. Herning. (CCS)
- 11:00 Macfourier and Markov. B. Selinger. (RACI)
- 11:20 Chemistry, Technology, and Curricular Change. J.L. Lagowski. (ACS).
- 11:40 Activity of the Committee on Educational Technology in the Chemical Society of Japan. J.T. Shimozawa. (CSJ)

TUESDAY AFTERNOON

6-C Computers in Chemical Education

John W. Moore (ACS), Co-Organizer  
Edward V. Blackburn (CIC), Co-organizer  
John T. Shimozawa (CSJ), Co-organizer  
Xin Xinquan (CCS), Co-organizer

John T. Shimozawa (CSJ), Presiding

- 1:30 Introductory Remarks
- 1:40 Teaching Chemistry with the Interactive Videodisc. S. G. Smith, L. L. Jones. (ACS)
- 2:00 Computer-Assisted Instruction in Analytical Chemistry: The SSMA Series. G. Luo, Y. Wang. (CCS)
- 2:20 A Network Based Introductory Chemistry Curriculum. E. V. Blackburn, J. S. Martin. (CIC)
- 2:40 Teaching Organic Chemistry with Computers. A. W. M. Lee. (ACS)
- 3:00 The Application of Microcomputer in Teaching of Structural Chemistry. Y. Cao, Y-L. Wang, P. Cheng. (CCS)
- 3:20 Break
- 3:40 Using Computers in the Teaching of Spectroscopy. P. F. Schatz. (ACS)
- 4:00 Making Computers Make a Difference in the Undergraduate Curriculum. S. K. Lower. (ACS)
- 4:20 Computers in Chemical Education in China. X. Xinquan. (CCS)
- 4:40 International Activities of Project SERAPHIM. J. W. Moore. (ACS)

WEDNESDAY MORNING

6-C Computers in Chemical Education. Poster Session.

Edward V. Blackburn (CIC) and Xin Xinquan (CCS), Presiding

Strategies for the Microcomputer Software Developments in Chemical Education. Y. Kuroishi,  
J. T. Shimozawa. (CSJ)

Microcomputer Software Developments for the Use of Structural Chemistry. T. Yano, S. Ozaki, J. T.  
Shimozawa, Y. Kuroishi. (CSJ)

A New Chemical Experiment Program for Pre-Service Students in Teachers College—Evaluation  
and Analysis of "Reaction Rate" Experiment. S. Teratani, E. Iwatoh, H. Kodera, K. Morita, H.  
Ogawa, K. Taya, N. Enuma. (CSJ)

The Dynamic Representation of Organic Chemical Reactions by Mipp. Y. Sasamura, K. Yamaguchi,  
M. Nakatsu, B. T. Newbold. (CSJ)

- A Real-Time Microcomputer Animation of Ball-and-Stick Molecular Models. S. Tokita, T. Sugiyama. (CSJ)
- PPP MO Calculations for Classroom Demonstration. H. Kihara, S. Tokita. (CSJ)
- Display for Real Color of Chemical Substances. T. Yoshida, M. Ashida. (CSJ)
- Science Teachers Electronic Bulletin Board System. L. A. Hull, A. Rauch. (ACS)
- Animation of Chemical Concepts on the Apple IIGS. L. M. Julien. (ACS)
- Simulated Inorganic Qualitative Analysis. D. King, G. Gerhold, L. Crook, J. Weyh. (ACS)
- Computer Algebra Applications in Physical Chemistry. M. Hanson. (ACS)
- The Joule-Thomson Coefficient for a Square Well Gas: A Computer Algebra Application in Physical Chemistry. M. Hanson. (ACS)
- Expert System in Chemical Experiment: 1. Distillation Experiment. C. Genghua. (CCS)
- Charge Behavior of Amino Acids and Polypeptides. S. E. Russo, W. P. Sadler. (ACS)

## 06:00 SYMPOSIUM ON EXPERT SYSTEMS IN CHEMISTRY

### MONDAY MORNING

S. R. Heller (ACS), Co-Organizer  
 S. Sasaki (CSJ), Co-Organizer  
 C. Zheng (CCS), Co-Organizer  
 G. Wood (CIC), Co-Organizer

S. Sasaki (CSJ), Presiding

- 8:00- SESAMI: Characterization of Structure by Computer. M. E. Munk, (ACS), V. K. Velu, M. Madison, B. D. Christie, M. Badertscher, and E. W. Robb.
- 8:35- The Importance of "Real" Intelligence in Developing Knowledge Bases for Expert Systems". H. B. Woodruff (ACS).
- 9:10- Creating a Multispectral-Structure Knowledge Base. M. Penca (ACS), S. R. Heller, and C. F. Hammer.
- 9:45- CISOC-SES, A Structure Elucidation SYSTEM via Multi-Spectra. C. Zheng (CCS).
- 10:20- Role of Knowledge Base in organic Synthesis Design. K. Funats (CSJ).
- 10:55- A General Predictor System for Organic Reactions. J. Gasteiger (ACS), and P. Rose.
- 11:30- Analogical Reasoning System for Organic Reactions. J. Gasteiger (ACS), and P. Rose.
- 11:50- Synergistic Use of Multisource Spectral Data for Structure Elucidation. C. Wilkins (ACS), and E. Baumeister.

MONDAY AFTERNOON

S. R. Heller (ACS), Co-Organizer  
S. Sasaki (CSJ), Co-Organizer  
C. Zheng (CCS), Co-Organizer  
G. Wood (CIC), Co-Organizer

C. Zheng (CCS), Presiding

- 1:15- The AUTONOM System. C. Jochum, A. Lawson, J. Wisniewski, and R. C. Badger (ACS).
- 1:50- Computerization of Structural Design in TUTORS. Y. Takahashi (CSJ) and S. Sasaki.
- 2:25- Personal Computer-Aided Proton NMR Spectral Data Processing System. H. Abe (CSJ), E. Kouno, K. Yoshida, T. Okuyama, and S. Sasaki.
- 2:45- Computer-Aided Structural and Spectral Information Management Systems, CIMS. T. Okuyama (CSJ), H. Abe, and S. Sasaki.
- 3:05- Expert System for Structural Interpretation of IR Spectra. C. Lingran (CCS) and Z. Maosen.
- 3:25- An Approach to the Perception of Synthons in the Process of Automatic Organic Synthesis Design. C. A. Delo Carpio (CSJ), K. Funatsu, and S. Sasaki.
- 3:45- Development of an Expert System for Selection of Chemical Protective Clothing. L. H. Keith (ACS), M. T. Johnson, C. E. Hudak, M. Conoley, D. B. Waters, and A. T. Prokopetz.
- 4:05- An Automated Proton NMR Spectra Image Processing Method for use as Fact Database. K. Kanohita (CSJ).
- 4:25- Protein Modeling and Drug Design Using BIOCES [E]. Y. Soneda (CSJ) and H. Umeyama.
- 4:45- Modeling of 3-D Structure of Proteins Based Upon Incomplete X-Ray Data. R. Tanimura (CSJ) and H. Umeyama.
- 5:05- Design of an Expert Systems for Automated Metal Analysis by Atomic Absorption Spectrometry. Z. Casyna and M. J. Stillman (CIC).

06E SYMPOSIUM ON CHEMICAL BUSINESS RESEARCH AND DEVELOPMENT  
IN THE PACIFIC BASIN

Tuesday afternoon

6E-102 SYMPOSIUM, "CHEMICAL BUSINESS RESEARCH  
AND DEVELOPMENT IN THE PACIFIC BASIN"

NAOYA YODA (CSJ), PRESIDING.

"Globalization and Management Strategy toward  
the 21st Century", Yoshikazu Ito (CSJ).

2:00 p.m. "R&D Management Strategy and Globalization in  
Chemitronics and Information Industry",  
Tsuneo Nakahara (CSJ).

2:45 p.m. "Technology Innovation and Public and Private  
Research Cooperation in the Japanese Material  
Industry - A Management Analysis",  
Naoya Yoda (CSJ).

3:30 p.m. "Industrial Technology, Policy and National R&D  
Projects in Japan", Masaru Sugiura (CSJ).

Wednesday morning

6E - 102 SYMPOSIUM, "CHEMICAL BUSINESS RESEARCH  
AND DEVELOPMENT IN THE PACIFIC BASIN"

J. KENNETH CRAVER (ACS) ORGANIZER, PRESIDING.

8:30 a.m. "The New Age of Chemicals in the Pacific",  
W.H.C. Simmonds (CIC).

9:05 a.m. "Chemical Markets in the 1990s",  
Arthur Cook (ACS).

9:40 a.m. "The Effective Management of R&D in the Nineties",  
Peter Lantos (ACS).

10:15 a.m. "International Industrial Market Research",  
Harold A. LeSieure (ACS).

Wednesday afternoon

6E-102 SYMPOSIUM, "CHEMICAL BUSINESS RESEARCH  
AND DEVELOPMENT IN THE PACIFIC BASIN"

RICK W. WONG (HKCS), PRESIDING.

- 1:30 p.m. "Patent Law in the USA and PRC",  
Rene Zentner (ACS).
- 2:15 p.m. "Developing Markets for the Hong Kong Chemical  
Industry", Hon. Wong Po-yan (HKCS).
- 3:00 p.m. "Industrial Development in Specialty and Petroleum-  
Based Chemicals in China and the Pacific Region",  
Tsai Kai-wei (CCS).
- 3:45 p.m. "University-Industry Alliances: The Bio-Technology  
Experience", Janet E. Forrest (CIC).

~~0 6 F SYMPOSIUM ON INTERNATIONAL DEVELOPMENTS IN CHEMICAL EDUCATION~~

WEDNESDAY MORNING

6-F International Developments in Chemical Education

Peter J. Fensham (RACI), Marjorie Gardner (ACS) and John T. Shimozawa (CSJ)  
Symposium Chairs

- 8:30- New Directions for Chemical Education in Australia. Peter J. Fensham (RACI)
- 9:00- International Developments in Chemical Education: The American Perspective.  
Marjorie Gardner (ACS)
- 9:30- The Revised Edition of the Course of Study for Japanese High School - Science  
Course. John T. Shimozawa (CSJ)
- 10:00- Developments in Chemical Education in Thailand. Nopapol Chaikum (CST)
- 10:30- Chemical Education in Singapore: Scope and Survey. Lawrence Chia,  
Ling-Lee Kim (SNIC)
- 11:00- Chemical Education in the Philippines. Ana Maria Javallana (ICP)

WEDNESDAY AFTERNOON

6-F International Developments in Chemical Education

Peter J. Fensham (RACI), Marjorie Gardner (ACS) and John T. Shimozawa (CSJ)  
Symposium Chairs

- 1:30- Approaches of Curriculum Change in Canadian Secondary School Chemistry.  
Heidi Kass (CIC)
- 2:00- Recent Developments in Chemical Education in Malaysia.  
A. Hamid Othman (IKM)
- 2:30- New Trends of Reform in China's Chemical Education. Chen Zufu (CCS)
- 3:00- Chemistry in the Marketplace. Ben Selinger (RACI)
- 3:30- What's the Use of Integrating Environmental Science into Chemistry Education  
in Indonesia? Ratna Wahjoeny Soeprajogo, Budi Wijanto (HKI)

~~0:6:00~~ G SYMPOSIUM ON NEW IDEAS IN CHEMICAL EDUCATION

MONDAY MORNING

S. Yamada and S. Kirschner, Presiding

- 9:00- Introduction. S. Kirschner
- 9:05- FT-NMR Problems: An Interactive Laser Videodisc Program. A. A. Russell,  
O.L. Chapman
- 9:30- Elucidating Chemical Phenomena Using Materials from Daily Life. A.  
Furuhashi.
- 9:55- Development of the Computer-Based ACS Examinations Program. I. D.  
Eubanks, J. C. Creever, L. T. Pryde.
- 10:20- Materialization of the Experiments Performed in the History of Chemistry,  
and of Chemical Magic. Y. Hayashi.
- 10:45- The Creation of Regional Newsletters in Chemical Education. S. Kirschner.
- 11:10- CHEMCOM Teacher Training - Past, Present, and Future. L. T. Pryde, I. D.  
Eubanks.
- 11:35- Some Problems in Textbooks of Japanese Secondary Schools. S. Yamada.

MONDAY AFTERNOON

G. -X. Xu and S. Kirschner, Presiding

- 2:00- New Definition of Valance and Coordination Number and Valance Rules in  
Chemical Education. G. -X. Xu.
- 2:25- The Fun and Challenge of a Chemistry Curriculum for Non-Science Majors. Z.  
M. Lerman.

- 2:50- The Spirit and Fruits of the Book "Five Minutes to Make Students Interested in Chemistry. T. Koide.
- 3:15- Is Writing an Effective Way to Learn Chemistry? N. VanOrden.
- 3:40- New Trends of Reform in China's Chemical Education. C. Zufu.
- 4:05- A Video Series That's More Than Video: The World of Chemistry Secondary School Project. M. E. Key, R. Crampton, E. Gibb, C. Goshorn, C. Schrader, P. Smith
- 4:30- Polarity Alternation Rule as a Mnemonic Aid to Learning Organic Chemistry. T. -L. Ho.
- 4:55- The Use of Videotapes and Computers in Pre- and Post-Laboratory Instruction. W. H. Breazeale, Jr., J. E. Dooley, T. R. Ragsdale.

#### POSTER PRESENTATIONS

Teaching Chemistry to the Public. D. B. Armitage, R. B. Bennett, E. F. Heald, G. R. K. Khalsa.

Curiosities, Tidbits, and Trivia as Chemistry and Chemical Engineering Learning Tools. J. D. Navratil, S. Tascher.

Reviews of Reagent Concentrations for Student Laboratory Work - Why Such Strong Reagent Solutions? M. Maruyama, S. Yamaguchi, K. Shoji, K. Sakurai.

How to Present Models in Your Chemistry Class. K. Katsura.

#### 06-H SYMPOSIUM ON PROGRESS IN MATHEMATICAL MODELLING IN CHEMISTRY

##### MONDAY AFTERNOON

6-H Symposium on Progress in Mathematical Modelling in Chemistry. Poster Session

M. Randić (ACS), Presiding

The Development and Application of a Novel Technique to Predictively Model Enzyme-Inhibitor Interactions: HASL, the Hypothetical Active Site Lattice. A. M. Doweyko (ACS)

The Efficient Drawing Sequence by Stepwise Clustering and Its Application for Molecular Graphics. M. Oyama, S.-I. Sasaki, and M. Yoshida (CSJ)

Analysis of the  $\pi$ -Electronic Structure of Infinitely Large Networks. Y.-D. Gao and H. Hosoya (CSJ)

Generalized Expressions for the Number of Perfect

Matchings of Polycube and Cyclic Graphs. H. Narumi and

H. Hosoya (CSJ)

Hückel and Möbius Cyclic Conjugated Molecules.

N. Mizoguchi (CSJ)

Computation of Geometries of Species Subject to Jahn-

Teller Distortions. C. Trindle and T. Wolfskill (ACS)

A Study on Similarities and Overlapping Relations of Odor

Description Words of Organic Compounds. H. Abe,

Y. Takahashi, S. Kanaya, T. Komukai, and S.-I. Sasaki

(CSJ)

Computational Approach to Designing of Birefringence Free

Materials. J. Washiyama and T. Ueda (CSJ)

Flexible Laboratory Automation System for Total Data

Processing of Tests and Analysis. S. Saito, M. Harada,

T. Furuya, K. Kitanishi, M. Hirota, A. Tanoue, and

T. Matsuda (JCS)

#### TUESDAY MORNING

6-H Symposium on Progress in Mathematical Modelling in  
Chemistry. (#1) Characterization

H. Hosoya (CSJ), Organizer  
P. G. Mezey (CIC), Presiding

8:30- Some Stereochemical and Conformational Extensions of  
Topological Molecular Similarity Analysis. M. Johnson,  
C.-C. Tsai, and V. Nicholson (ACS)

9:00- Characterization of Frameworks and Si, Al Ordering in  
Zeolite Structures. M. Sato (CSJ)

9:30- Use of Graph Theoretical Invariants in Structure-  
Activity Studies. S. C. Basak and G. J. Niemi (ACS)

10:00- Intermission

- 10:20- Computer Assisted Studies of Structure-Property and Structure-Activity Using Graph Invariants in Pattern Recognition. Y. Miyashita (CSJ)
- 10:50- Spatial Molecular Invariants. M. Randić (ACS)
- 11:20- Stereochemical Extension of the Illumination Functions for Unique Coding and Symmetry Perception of a Chemical Graph. M. Uchino (CSJ)

TUESDAY AFTERNOON

- 6-H Symposium on Progress in Mathematical Modelling in Chemistry. (#2) Modelling in Chemistry

H. Hosoya (CSJ), Organizer  
G. M. Maggiora (ACS), Presiding

- 1:00- Characterization of Molecular Shape in Terms of New Descriptors. L. B. Kier (ACS)
- 1:25- Distance Based Descriptors in Structure Activity Studies. G. Klopman and R. Henderson (ACS)
- 1:50- Prediction of Molecular Flexibility from Fractal Dimensionality. D. H. Rouvray and H. Kumazaki (ACS)
- 2:15- Computer-Aided Generation of IUPAC Nomenclatures for Acyclic Compounds. H. Abe (CSJ)
- 2:40- Intermission
- 3:00- Determination of the One-Matrix from Experimental Information. H. Schmider, V. H. Smith, Jr. and W. Weyrich (CIC)
- 3:25- Extension of Karplus Equation. E. Osawa and K. Imai (CSJ)
- 3:50- Microdynamical Simulations of Liquid Systems E. Clementi (ACS)
- 4:15- Semiempirical Extended Valence Bond Method. M. Berrondo (ACS)

TUESDAY EVENING

6-H Symposium on Progress in Mathematical Modelling in Chemistry. General Discussion followed by Reception

H. Hosoya (CSJ), Organizer  
M. Rancić (ACS), Organizer  
P. G. Mezey (CIC), Organizer

7:30- General Discussion on Mathematical Modelling

8:00- Discussion of the International Society for  
Mathematical Chemistry, followed by Reception

WEDNESDAY MORNING

6-H Symposium on Progress in Mathematical Modelling in Chemistry. (#3) Algebra and Enumeration

H. Hosoya (CSJ), Organizer  
D. J. Klein (ACS), Presiding

8:00- Enumeration of Organic Reactions by Counting Sub-  
structure of Imaginary Transition Structures. S. Fujita  
(CSJ)

8:30- Experimental Tests of Chirality Algebra. R. B. King  
(ACS)

9:00- Square Cell Animals as a Mathematical Model for  
Molecular Shapes. F. Harary (ACS)

9:30- Theory of Dilute Polymer Solutions: Rigorous Results on  
Self-Avoiding Walks and Lattice Animals. S. G.  
Whittington (CIC)

10:00- Intermission

10:20- Factorization of the Matching Polynomial of Large  
Periodic Lattices. H. Hosoya (CSJ)

10:50- Benzenoid Polymers. W. A. Seitz (ACS)

11:20- Applications of Graph Theoretical Technique to NMR and  
Molecular Spectroscopy. K. Balasubramanian (ACS)

WEDNESDAY AFTERNOON

6-H Symposium on Progress in Mathematical Modelling in Chemistry. (#4) Modelling in Biochemistry

H. Hosoya (CSJ), Organizer  
M. Randić (ACS), Presiding

1:00- Highly Charged Neurotransmitters: Explicit Receptor Models. J. P. Snyder and S. N. Rao (ACS)

1:30- Simulation of Molecular Mechanisms in Biological Systems: Calcium Binding Proteins. H. Weinstein, J. N. Kushick, and F. Sussman (ACS)

2:00- Mathematical Modelling and the Multiple-Minima Problem in Protein Folding. H. A. Scheraga (ACS)

2:30- Simulating the Spectroscopic Properties of Biomolecular Systems. J. D. Petke, P. H. Lee, and G. M. Maggiora (ACS)

3:00- Intermission

3:20- Molecular Modeling of Sigma Opiate Receptor Agonists and Differentiation between Sigma Opioid and PCP Receptor Ligands. T. M. Gund, K. Shukla, and T.-P. Su (ACS)

3:50- Computer-Assisted Studies of Molecular Structure-Biological Activity Relationship. P. C. Jurs and E. P. Jaeger (ACS)

4:20- On the Utility of Molecular Modeling for New Drug Discovery. P. Gund (ACS)

THURSDAY MORNING

6-H Symposium on Progress in Mathematical Modelling in Chemistry. (#5) Geometry

H. Hosoya (CSJ), Organizer  
H. Hosoya (CSJ), Presiding

8:00- Calculating Extrema on Molecular Electronic Potential

- Energy Surfaces. M. Zerner (ACS)
- 8:30- Topological Aspects of Chemically Significant Polyhedra.  
R. B. King (ACS)
- 9:00- Molecular Shape Analysis in Drug Design and Molecular  
Engineering. P. G. Mezey (CIC)
- 9:30- Intermission
- 9:50- Elemental Carbon Cages. D. J. Klein, T. G. Schmalz,  
and W. A. Seitz (ACS)
- 10:20- String Model of Chemical Reaction Coordinate.  
A. Tachibana (CSJ)
- 10:50- Synthetic Topological Stereochemistry and the Knot  
Theory of Molecular Graphs. D. M. Walba, Q. Y. Zeng,  
W.-L. Tsai, and J. Simon (ACS)
- 11:20- Spiral Waves in Excitable Media. D. W. Sumners (ACS)

~~06-J SYMPOSIUM ON ADVANCES IN COMPUTATIONAL CHEMISTRY~~

MONDAY AFTERNOON (POSTER SESSION)

Computer Simulation Pillared Clays. J. D. Gale, A. K. Cheetham, J. M. Thomas, R. A. Jackson, C. R. A. Cattow (RSC).

Refinement of v. d. W. parameters for MM2 force field of alkanes based on ab initio calculations. K. Tanabe, S. Tsuzuki, T. Uchimaru, T. Tamura, E. Osawa (CSJ).

A molecular graphic system with personal computers. H. Nakano, J. Zhang, K. Yamana, O. Sangen (CSJ).

Study on band structures of Polydiacetylene and its derivatives. Y. Cao, Y. -L. Wang, and B. Chen (CCS).

SCF Studies of Chemical Bonding Using the CSOV Method, T. E. Meehan. J. H. Heads (ACS).

New molecular orbital method based on Wigner-Seltz-type potential. Revision to Extended Huckel Theory. R. Irie (CSJ).

Computations on pentalene and Inorganic pentalene analogues. J. D. Goddard (CIC).

THURSDAY AFTERNOON

6-J Symposium on Advances in Computational Chemistry

Session #1, Development of Molecular Mechanics Force-Fields for Novel Structural and Reactivity Applications

E. Osawa (CSJ), Organizer

K. N. Houk (ACS), Presiding

- 1:30- Searching populated conformational space. K. Steliou (CIC)
- 2:10- Application of extended Karplus equation. K. Imai, E. Osawa (CSJ)
- 2:30- A molecular mechanics simulation of water vaporization: unexpectedly abundant clusters in the gas-phase. T. Hirano, S. Umeya (CSJ)
- 2:50- Molecular mechanics as a tool for conformational analysis of macrocyclic compounds. Y. Fukazawa (CSJ)
- 3:30- Refinement of v.d.W. parameters for MM2 force field of alkanes based on ab initio calculations. K. Tanabe, S. Tsuzuki, T. Uchimaru, T. Tamura E. Osawa (CSJ)
- 3:50- A new method to estimate the force constants of MM2 force field. K. Sakakibara, Y. Hase, M. Hirota (CSJ)

THURSDAY EVENING

6-J Symposium on Advances in Computational Chemistry

Session #2, Molecular Mechanics and Dynamics of Protein

T. Hirano(CSJ), Presiding

- 7:30- Investigation of conformational distributions of chemotactic peptides by molecular mechanics energy calculations. A. G. Michel, C. A. Hassani (CIC)
- 7:50- Design and discovery of an antiepileptic peptide through biologically driven molecular mechanical calculations. D. F. Weaver (CIC)

8:30- Protin dynamics simulated: harmonic and anharmonic aspects. N. Go  
(CSJ)

FRIDAY MORNING

6-J Symposium on Advances in Computational Chemistry

Session #3, Molecular Modelling and Applied Theoretical Calculations

J. D. Goddard (CIC), Presiding

8:30- A molecular graphic system with personal computers. H. Nakano, J. Zhang, K. Yamana, O. Sengen (CSJ)

8:50- Molecular similarity of bioactive molecules. Electrostatic similarity of histamine H2 antagonists. A. Nakayama (CSJ)

9:10- Application of computer graphics for the design of inorganic materials. A. Miyamoto, S. Iwamoto, K. Agusa, and T. Inui (CSJ)

9:30- Gauche effects in conformational energies of linear molecules: *ab initio* molecular orbital calculations. T. Hirano (CSJ)

10:10- *Ab initio* and semiempirical molecular orbital calculations on neutral organic phosphite and phosphate esters. J. A. Bentley, J. P. Bowen (ACS)

10:30- Study on band structures of polydiacetylene and its derivatives. Y. Cao, Y.-L. Wang, and B. Chen (CCS)

FRIDAY AFTERNOON

6-J Symposium on Advances in Computational Chemistry

Session #4, New Techniques in Computational Theoretical Chemistry

M. N. Paddon-Row (RACI), Presiding

1:30- Density functional theory as a practical tool in organometallic energetics and dynamics. T. Ziegler (CIC)

1:50- Density functional calculations with Gaussians. D. R. Salahub (CIC)

- 2:30- New molecular orbital method based on Wigner-Seitz-type potential.  
Revision to Extended Huckel Theory. R. Irie (CSJ)
- 2:50- Computations on pentalene and inorganic pentalene analogues. J. D. Goddard (CIC)
- 3:10- Monte Carlo simulation of liquid hydrogen fluoride. K. Honda, K. Kitaura,  
K. Nishimoto (CSJ)
- 3:50- A theoretical approach to ion-cluster chemistry. L. Radom (RACI)

0 6 K SYMPOSIUM ON NEW TECHNOLOGIES IN PACIFIC BASIN COUNTRIES

MONDAY MORNING

6K 999 New Technologies in Pacific Basin Countries

J.R. Norell, ACS, Chairman  
Y. Ito, (JCS), Honorary Chairman  
D.S. Sturmer (ACS), Presiding

- 8:25 Welcoming Remarks. J.R. Norell (ACS), D.S. Sturmer (ACS)
- 8:30 Globalization and Management Strategy of Chemical Industry  
Toward the 21st Century. Y. Ito (JCS)
- 9:10 International Cooperation on Superconductivity. E.J. Mead (ACS)
- 9:50 Processing Options for California Crudes. A. Aldag (ACS)
- 10:30 Break
- 10:50 Chemical Purity and Its Impact on Semiconductor Performance.  
K. Shimada (CSJ)
- 11:30 Improving the Quality of Food with Chemical Technology.  
I. Watson (NZIC)

MONDAY AFTERNOON

6K 999 New Technologies in Pacific Basin Countries

C. Sodano (ACS), Presiding

- 1:25 Introduction. C. Sodano (ACS)
- 1:30 Developments in Indonesian Rubber Technology. B. Hadayat
- 2:10 Overview of the Japanese Chemical Industry. S. Noquchi (CSJ)
- 2:50 Break
- 3:10 Non-Caloric Fat. R.J. Jandacek (ACS)

3:50 Use of Chemicals in Pineapple Culture at DMPI. S.P. Mendoza  
(ICP)

TUESDAY MORNING

6K 999 New Technologies in Pacific Basin Countries

R.M. Pariser, Organizer

8:30 Introduction: Science Cities in the Pacific Basin.  
R.M. Pariser (ACS)

8:40 Scientific Communication in Tsukuba Science City.  
T. Kawamoto (CSJ)

9:10 AIST and Tsukuba Science City. S. Okumura (CSJ)

9:40 The Research Triangle - A Case Study of a U.S. "Science City".  
W.F. Little (ACS)

10:10 Break

10:30 Hsinchu Science Based Industrial Park in the Republic of China.  
H.S. Hsieh (CSTS)

11:00 Daeduk Science Town in Korea. Y. Choi (KCS)

11:30 Academgorodok - History, the Present State, and Problems.  
F.A. Kuznetsov (MCS)

12:00 Panel Discussion (All speakers)

※編集委員会より：06 (General) は現在未着のため、次号に掲載します。

参加登録・団体旅行申込先：

近畿日本ツーリスト四谷支店 担当 中島・島

〒160 東京都新宿区四谷1-9 ☎03-355-6151

# コンピュータの材料科学・工学への応用 国際会議・展示会

会期：1990年8月28日(火)～31日(金)4日間

会場：サンシャインシティ・コンベンションセンター TOKYO (東京・池袋)

主催：コンピュータの材料科学・工学への応用国際会議組織委員会  
日刊工業新聞社

組織委員長 堂山昌男(東京大学名誉教授)

組織副委員長 山本全作(新日本製鐵)  
植之原道行(日本電気)

(実行委員)

相澤龍彦(東京大学)	大須賀節雄(東京大学)	権田俊一(大阪大学)
田中實(東北大学)	八尾徹(蛋白質工学研究所)	湯川夏夫(豊橋技術科学大学)
山崎道夫(金属材料技術研究所)	朝水惇(岩羽化学)	平野桓夫(東京大学)
宗像弘明(炭化システム)	浅井滋生(名古屋大学)	大中逸雄(大阪大学)
斎藤良行(川崎製鐵)	寺倉清之(東京大学)	矢川元基(東京大学)
吉田元二(住友化学)	吉井彰(NTT)	植西晃(日立製作所)
板井昭子(東京大学)	高橋山雅(豊橋技術科学大学)	岩田修一(東京大学)
木原諄二(東京大学)	鈴木朝夫(東京工業大学)	牧島亮男(東京大学)
山本良一(東京大学)	山日重裕(新日本製鐵)	村上茂三(住友電気)
花井莊輔(富士写真フイルム)	日崎令司(三菱化成)	

(順不同敬称略)

## 国際会議

〈スコープ〉

I. 計算機支援による材料設計

- セラミックス、ガラス、合金、ポリマー、有機化合物、薬品、蛋白質、生体材料、半導体、複合材料等；
- 可能な方法の総合(現象論的相関、物理に基づいた相関、ab initio 計算等)
- 材料設計の実用的観点(信頼性、寿命予測、毒性予測等)

II. 材料プロセスの診断、シミュレーション、総合

- 化学反応パス、輸送過程、反応速度論、有機反応機構、発光反応、精錬/鈍化、量子デバイス、デバイス/プロセス・シミュレーション、ULSIプロセス・デザイン、凝固/結晶成長、焼結、ニアネットシエッピング、ノベル・プロセス、合成デザイン、射出成形、流れ解析、熱応力解析

### III. 計算材料科学工学

#### III-1. 材料のための計算物理, 化学, 力学 (構造とその関連性質の理解のために)

- 電子, 原子, 分子, 微視的・巨視的見地, 格子欠陥等 ;
- バンド構造, 分子軌道法, 分子動力学, モンテカルロ・シミュレーション, 分子力学, ヘテロ構造, 状態図, 相安定性等 ;
- 精度, 予測 (寿命, 毒性等)

#### III-2. 手段/基盤構造

- データベース, 知識ベース, エキスパートシステム, 人工知能, グラフィックス, スーパーコンピュータ等 ;
- 発想支援, データのライフ・サイクル, 付加価値生成, データ及び知識の意味論等

〈使用言語〉	英語
〈応募論文〉	500件 (予定) 口頭発表・ポスター発表
〈参加者〉	1,000名 (予定)
〈登録料〉	1名当り (プロシーディングスを含む) 100,000円 (企業1事業所の最初の1名) 47,000円 (企業1事業所の2名目から) 47,000円 (大学, 官公立研究所) 21,000円 (1日論文発表出席, 但しプロシーディングスを含まない) 17,000円 (学生, 但しプロシーディングスを含まない)
〈懇親会費〉	10,000円

## 展 示 会

- 〈会場構成〉 ● 日本企業出展ゾーン  
● 海外企業出展ゾーン  
● 公的研究機関出展ゾーン  
のブロックを設け、全体をビジネスの場として構成する。
- 〈出品対象〉 ● 先端材料・コンピュータ (スーパーコンピュータからパーソナルコンピュータまで)  
および周辺機器, ソフト  
● 各種試験・測定・分析機器など
- 〈入場料金〉 500円

問い合わせ・資料請求先

CAMSE '90 事務局

日刊工業新聞事業局内

〒102 東京都千代田区九段北1-8-10 ☎03(222)7162 FAX 03(221)7137

## 関 連 行 事

### 第17回構造活性相関シンポジウムプログラム

共 催：日本農芸化学会・日本薬学会・日本化学会・他

日 時：11月8日(水)～10日(金)

会 場：よみうり文化ホール(大阪府豊中市新千里東町 1-1-3 よみうり文化センター)

[交通] JR新大阪駅から地下鉄御堂筋線(北大阪急行)で15分,千里中央駅下車,徒歩5分。なお同期間中,千里協栄生命ホールにおいて第12回情報化学討論会が一部重複して開催されます。

[講演時間 25分(講演 20分, 討論 5分)]

第1日 11月8日(水) ー10:00～11:40ー

8S01. 「滴定型カロリメトリーによる分配係数の熱化学側面の研究・ハロゲンを含む数種のアルコールについて」(阪大・薬)○吉川浩史, 栖川知子, 西岡由香子, 藤原英明

8S02. 「Scaled Particle 理論と分子間ポテンシャルに基づいた分配係数等の溶解特性の研究. P V補正を含めた非球状分子の計算」(阪大・薬)○藤原英明, 大宅郁治, 吉川浩史

8S03. 「水晶発振子を用いた薬物と脂質膜相互作用の解析」(東工大・工)○岡畑恵雄, 江波戸博, (クミアイ化学)北垣忠温, 菅井象一郎

8S04. 「多置換アセトアニリドの疎水性(log P)におよぼす置換基効果の定量的解析」(京大・農化)○中川好秋, 及川信宏, 泉 恵一, 外松朋子, 藤田稔夫

ー13:00～16:30ー

8S05. 「置換基エントロピー定数 $\sigma_s^\circ$ のガスクロマトグラフィーにおける役割」(近畿大・薬)○川木秀子, (阪大名誉)佐々木喜男, (阪大・薬)高木達也, 村上 享, 藤井志保, 升田史佳

8S06. 「構造キーワードを用いた化合物生分解性の予測」((社)日本化学物質安全・情報センター)○塚本烈史, 大島輝夫, (北里大・薬)劉 謙, 森口郁生

8S07. 「有機化合物の水棲生物毒性に関するQSAR研究」(北里大・薬)○劉 謙, 広野修一, 松下泰雄, 中川崇子, 森口郁生

8S08. 「数量化理論I類を用いたフェノールカルボン酸類の抗変異原性構造活性相関」(岐阜県衛研)○坂井至通, 河合 信, (岐阜女子短大)小瀬洋喜, (岐阜医療短大)吉岡義正, (岐阜薬大)鬼頭英明, 佐藤孝彦, 長谷川浩一, 水野瑞夫, (北里大・薬)森口郁生

8S09. 「PLS法によるN-ニトロソ化合物の構造-発ガン性相関」(豊橋技科大)○宮下芳勝, 大迫広征, 佐々木慎一

8S10. 「計算統計学的手法のQSARへの応用～シフト検定法の拡張と, ブートストラップ法の適用」(阪大・薬)○高木達也, 藤原英明, 佐々木喜男

8S11. 「構造-活性相関を意識した「超球法」の開発, 及び Fuzzy 理論導入による「傾斜超球法」への展開」(富士通)○湯田浩太郎, 井関京子, 中山唯男, 樋高 透

8S12. 「ニューラルネットワークによる構造-活性相関」(富士通)○湯田浩太郎, 井

関京子, 中山唯男, 樋高 透

—17:00-18:00—

特別講演Ⅰ「企業における情報化学の現状と展望」(住友化学・高槻研) 吉田元二

第2日 11月9日(木) —10:00~11:40—

9S13. 「除草活性を有する4-ピリドン-3-カルボン酸アニリド誘導体の構造活性相関(第一報) —アニリドのベンゼン環上置換基の定量的構造活性相関(QSAR)—」(ダイセル化学・総研) ○長部広和, 森島靖雄, 後藤幸久, 浜谷 武, (京大・農化) 藤田稔夫

9S14. 「合成ピレスロイドであるカデスリンおよび類縁化合物の殺虫活性に関する定量的解析と作用機構」(近大・農化) ○松田一彦, 浜田昌之, (京大・農化) 西村勤一郎, 藤田稔夫

9S15. 「抗アレルギー作用を有するピラジンカルボキサミド誘導体の構造活性相関」(北陸製薬・中研) ○牧野栄一, 見谷一也, 岩崎信彦, 加藤日出男, 伊藤安夫, (東京医歯大・医用研) 東 洋, (京大・農化) 藤田稔夫

9S16. 「非ステロイド性抗炎症剤の研究—ドラッグデザインと構造活性相関—」(藤沢薬品) 小西信清, (台糖ファイザー) 北浦良彦, (阪大・産研) ○植田育男

—13:00~16:00—

9S17. 「化合物の水棲生物毒性と疎水性の相関に対する生物活性と代謝の関与」(日本農薬・安全性研) ○池本祐志, 元場一彦, 鈴木 孝, 内田又左衛門

9S18. 「ロイコトリエンアンタゴニスト分子の動的構造と活性との相関」(徳島大・薬) ○後藤 了, 小池晴彦, 寺田 弘, (徳島大・工) 堀 均, (徳島文理大・薬) 平良全栄

9S19. 「フェンバレレートおよびエーテル型ピレスロイドの配座解析」(住友化学・農業科学研) ○栗田靖之, 対馬和礼, 松尾憲忠, 高山千代蔵

9S20. 「カテコールアミン類再取り込み阻害薬の構造活性相関」(名城大・薬) ○冨田辰也, 居波慶春, 寺田幸正

9S21. 「マイトマイシン類の構造活性相関 I. MNDO法による解析」(協和発酵・東京研) ○依田信幸, 平山令明

9S22. 「メタロセン型アルデヒド及びケトンの生物的還元反応による面性不斉認識」(工技院・微工研) ○上林正巳, 山崎幸苗, 細野邦昭, 染谷淳一郎

—16:30~17:30—

特別講演Ⅱ「構造活性相関と分子設計」(京大・農化) 藤田稔夫

第3日 11月10日(木) —10:00~12:05—

10S23. 「受容体-薬物相互作用に基づいた薬物の活性コンフォメーション推定の新しい方法の開発」(東大・薬) ○粕谷 敦, 富岡伸夫, 板井昭子

10S24. 「RECEPSプログラムの自動化機能の検証—発がんプロモーター化合物の水素結合性による自動的重ね合わせ—」(東大・薬) ○井上 篤, 加藤祐一, 板井昭子

10S25. 「RECEPSによるPDE阻害剤のレセプターマッピング」(三菱化成・総研) 関谷哲雄, ○菅原はるみ, 奥島弘巳, (東大・薬) 加藤祐一, 板井昭子

10S26. 「タンパク質モデリングのためのエキスパートシステムBIOCES [E]」 (北里大・薬) ○谷村隆次, 梅山秀明

10S27. 「DNAのモデリング法の開発」 (北里大・薬) ○四宮和子, 梅山秀明

参加登録予約締切: 10月25日

参加登録費: 予約 5,000円 当日 6,000円

懇親会: 11月9日(木) 18時00分から月華殿で, 第12回情報化学討論会と合同で行います。会費は予約, 当日とも 4,000円(当日は人数に余裕があれば受付けます)。

参加登録申込方法: 当シンポジウムまたは第12回情報化学討論会のどちらか一方に登録して下さい(両方に共通です)。予約参加登録は1人ごとに1枚の郵便振替用紙(郵便局に備え付け)を使い,

5,000円(登録のみ)または9,000円(懇親会を含む)を, 郵便振替口座番号 大阪4-93997 郵便振替口座名称 情報化学構造活性相関シンポジウム実行委員会の口座にお払い込み下さい。なお, 講演要旨集は当日渡しになります。

問い合わせ先: 567 大阪府茨木市美穂ヶ丘 8-1 (阪大吹田団地内) 大阪大学産業科学研究所 有機合成薬品部門 植田育男 (Tel. 06-877-5111 内線 3525)

## 第4回化学PCソフトウェア研究討論会

主 題 化学の研究・教育におけるパソコンの利用

主 催 化学PC研究会

共 催 日本化学会, 日本化学会情報化学部会, 日本科学教育会, 日本教育工学会, 化学工学会, 高分子学会, 日本農芸化学会, CAI学会, 日本ポーラログラフ学会, 日本薬学会近畿支部, 日本分析化学会中部支部

後 援 NEC

日 時 11月10日(金)~11月11日(土)

会 場 福井工業高等専門学校(鯖江市下司町 TEL0778-62-1111)  
視聴覚ホール

[交通]JR鯖江駅前よりタクシー5分

会 費 参加登録費 3,000円(一般), 1,500円(学生)

懇親会費 4,000円

見学会 11月11日(土)午後5時30分~11月12日(日)午後3時

カニ料理を食べ, 越前海岸, 東尋坊, 永平寺を見学する。

見学会会費 26,500円(カニ料理, 宿泊, 乗船, 入場等)

連絡先 〒916 鯖江市下司町 福井工業高等専門学校工業化学科

第4回化学PCソフトウェア研究討論会実行委員会

世話人: 吉村忠与志 (TEL0778-62-1111ex.607)

講演発表プログラム

第1日 [11月10日(金)] 午後1時～5時

実行委員長挨拶 埜村 守 (福井大・工) (13:00～13:05)

来賓挨拶 丹羽 義次 (福井高専・学校長) (13:05～13:15)

一般発表 五分間概要説明(口頭発表) (13:15～14:10)

デモンストレーション (14:10～15:40)

10P01 生物科学関連情報交換および研究支援システム「Bio-Net」の構築

(福井医大・生化I, 愛知コロニー・研・生化) ○渡辺良成, 正木茂夫

10P02 化学実験(比色分析)指導用ソフトウェアの開発

(東海大・理) ○及川義道, 北原滝男, 安達勲, 高野二郎, 光沢舜明

10P03 いろいろな関数( $y=f(x)$ )の自動グラフ化プログラム

(一橋大) ○矢野敬幸, 尾崎成子

10P04 化学教育の改善のためのソフトウェアの開発(4)CALソフトウェアの開発方略

(埼玉大・理) ○黒石佳伸, 下沢隆

10P05 分子模型の二枚の写真から三次元原子座標データを取得するシステム

(三菱化成・生命研) 永井右近

10P06 市販I/Oボードによる相関事象の連続測定とデータ解析

(新潟大・理) ○仲川隆夫, 久保田智明, 橋本哲夫

10P07 パーソナルコンピュータ版DV-X $\alpha$ 計算プログラム

(兵庫教育大) 木原寛, ○藤田正徳, 小和田善之, 足立裕彦

10P08 重畳波形の分離プログラム

(お茶の水女子大・理) 藤枝修子

10P09 15,16世紀の瓦質土器の蛍光X線分析法による産地同定

(京都工繊大・織・工, 大阪文化財セ) ○山田武, 山田悦, 田淵裕之, 佐藤昌憲, 鋤柄俊夫

10P10 パソコンによるガスセンサーのデータ解析

(東京高専) 西宮辰明

10P11 パソコンを用いた匂いセンサシステムの開発

(福井高専) ○酒野吉央, 吉村忠与志

特別講演 (15:40～17:00)

メモリボードの変遷および周辺ボードによるシステム化

(㈱I・Oデータ機器・代表取締役) 細野昭雄

懇親会 (17:30～19:00)

当会場会議室にて

第2日 [11月11日(土)] 午前9時~5時

- |       |   |               |
|-------|---|---------------|
| 一般発表  | 五分間概要説明(口頭発表)   | (9:00~10:10)  |
|       | デモンストレーション  | (10:10~12:00) |
| 11A01 | dBASEIIIによる図書館蔵書検索システム<br>(福井高専)○上島晃智, 藤田克志, 松田政信, 井上清一                           |               |
| 11A02 | 正多面体, 準正多面体の表示<br>(福井高専) 守川穰  |               |
| 11A03 | パソコンによる物理化学実験演習(その2)<br>(福井高専)○末本正樹, 吉村忠与志  |               |
| 11A04 | 化学工学CAIプログラム: 蒸留塔の設計<br>(長岡高専) 関沢恒男   |               |
| 11A05 | CAI教材製作用汎用ソフトの開発<br>(東京高専)○西宮辰明, 小林芳兼   |               |
| 11A06 | 立体化学の学習ソフトウェア(II)<br>(香川医大・化)○獅々堀壘, 倉橋研吾  |               |
| 11A07 | 溶解度積の測定<br>(京都工繊大・織, 立命館大・理)○山田武, 白石晴樹, 松田十四夫                                     |               |
| 11A08 | 化学構造式作画ソフトにおける作画自由度<br>(国際基督教大・理) 吉野輝雄  |               |
| 11A09 | 三角ダイヤグラムのX-Yプロット作図プログラム<br>(早稲田大・教) 木ノ内嗣郎   |               |
| 11A10 | CD-ROMを用いたタンパク質立体構造データベースの検索・図示システム<br>(姫路工大, 神戸学院女子短大)○中野英彦, 中野修, 川嶋剛, 山名一成, 三軒齊 |               |
| 11A11 | 質量分析実験支援のためのプログラム群<br>(国立衛試) 叶多謙蔵   |               |
| 11A12 | 3D-MoI master: $^{13}\text{C}$ -NMRの化学シフト値の推算<br>(山形大・教) 阿部昭吉                     |               |
| 11A13 | ミセル内反応のモンテカルロ・シミュレーション<br>(千葉県立衛生短大) 林誠人  |               |
| 11A14 | 日本化学プログラム交換機構(JCPE)の活動<br>(化技研) 田辺和俊  |               |
| 休憩    |   | (12:00~13:00) |
| 一般発表  | 五分間概要説明(口頭発表)   | (13:00~13:50) |
|       | デモンストレーション  | (13:50~15:30) |
| 11P15 | 細胞内カルシウムイオン濃度測定プログラム<br>(オリンパス光学工業(株)・BRC研)○牧野徹, 尾崎一穂, 宮川厚夫                       |               |

- 11P16 発汗マネキンを用いた衣服内気候のカラー表示  
(大阪工試) ○石川俊英, 片岡清一, 同前保彦
- 11P17 パソコンでのいくつかの分子体積・表面積計算ソフトの比較  
(函館高専) 長尾輝夫
- 11P18 立体視法による分子設計支援システム"MMSSS"  
(大阪市大・工) 真野倅一
- 11P19 分子設計支援システムMMHS Ver.3.1  
(群馬大・教, ㈱神戸製鋼・筑波研) ○中田吉郎, 藤沼一信
- 11P20 分子構造表示プログラムMODRAST-Eの切断図形表示機能の拡張  
(姫路工大) ○中野英彦, 張金碯, 山名一成, 三軒齊
- 11P21 パソコンによる化学教育用教材  
(苫小牧高専, 南陵高, 北海道大) ○笹村泰昭, 伊藤洋, 藤井清志, 山口和美
- 11P22 パソコンによるNMRスペクトル解析学習システムの開発  
(福井高専) ○鈴木久夫, 吉村忠与志
- 11P23 パソコンによる放射線化学実験演習  
(福井高専) ○垣内佳奈江, 佐々木与志実, 吉村忠与志
- 11P24 OM型レコーダの再生  
(福井高専, 京都大・防災研・北陸) ○岡本拓夫, 平野憲雄, 前沢広道

無償利用ソフトにおける表彰と特別講演

(15:30~17:00)

\*\*\*\*\*

\*  
\* 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。 \*  
\* 尚、原稿締切日は発行月(奇数月)の10日です。 \*  
\* 情報・原稿の送付先 〒101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル6階 \*  
\* 社団法人 日本化学会 情報化学部会 事務局 \*  
\* 電話 (03) 292-6162 \*  
\*  
\*\*\*\*\*

# CCSの紹介

## 分子設計支援システム "MATERIA" について

株式会社 帝人システムテクノロジー  
村井 俊彰

### 1. はじめに

"MATERIA" は近年目覚ましい進歩をとげているエンジニアリングワークステーション (EWS) 上で動く当社が開発した分子設計支援システムです。有機合成系化合物の分子力場計算や分子軌道計算を行うことが可能で、グラフィックスを用いて分子座標入力や計算結果の表示が簡単にできるようにインターフェースをとったシステムです。

以下に、機能、特徴などを紹介いたします。

### 2. "MATERIA" の機能

"MATERIA" は次の4つの主機能から構成されています。

・分子モデリング	---	分子構造の作成
・分子力場計算	---	分子力場計算とその入出力
・分子軌道計算	---	分子軌道計算とその入出力
・ファイルユーティリティ	--	ファイル操作に関連する機能

#### (1) 分子モデリング

分子モデリングでは解析対象となる化合物の構造をグラフィックスを用いて作成することができます。官能基や結合基及び通常よく利用される化合物 (ベンゼン環、シクロヘキサン環 等) が予め三次元部品として登録されており、これらの部品一覧表から、必要な部品を選びだします。選ばれた各種の部品を画面上でのグラフィック操作でそれらのボンドを順次結合していくことによって目的化合物を作り上げていきます。丁度、部品化された分子模型を結合していくイメージで操作できます。モデリング途中や既に作り上げられた化合物でも原子の種類の変更や結合種の変更 (一重結合から二重結合へ 等)、更に結合距離、結合角、二面角の変更が可能です。作成が終わった化合物は任意のファイル名を付けて登録します。

ユーザが作成した構造も部品として登録できるため、修飾基を少しずつ変えて一連の化合物を計算する場合なども簡単に分子構造を作成することができます。ここで作成された分子モデルの座標値が分子力場計算や分子軌道計算が必要とする分子の入力座標として保持されます。

又、このモデリング機能では複数の分子を重ね合わせて表示することができ、構造最適化の前後のコンフォーメーションの比較や異なる分子の形状比較ができるようになっています。

## (2) 分子力場計算

分子力場計算はMM2' (注1) の入力ファイル作成、計算実行及び出力結果のグラフィック表示の3つの機能からなっています。

入力ファイル作成は、対象となる化合物を選択した後、ファイル作成コマンドを選択すると分子図及びMM2' 計算オプションシートが表示されます。シートには極小化、ドライバーなど計算機能を示す項目、リスト出力量の大小を規定する項目、不足する力場パラメータ値の入力域、その他が設けてあります。分子図を見ながらそれらを選択又は入力できるようになっており、簡単に条件設定ができます。

分子の座標値や結合情報及び原子タイプの判定はすべて自動的に処理され、計算実行コマンドを選択するとMM2' が走ります。計算途中のリスト出力が画面に表示されるため、エネルギーの収束状況や計算の進行具合を確認することができます。

実行結果は極小化された構造や2面角の回転障壁のサーフェイスなどが描画でき、局所安定構造や最安定構造を視覚の上からも検討することができます。

## (3) 分子軌道計算

分子軌道計算はMOPAC (注2) について分子力場計算と同様の3つの機能からなっています。

入力ファイル作成では、MOPAC計算オプションシート上にMOPACが持つ計算キーワードが機能別に整理された形で記述されていて、それらを選択することで計算機能を指定します。又、Z-MATRIXも自動的に作成され、オプションシート上に表示されます。もし収束性や構造最適化などを考慮して、マトリクスの定義原子を任意的に決定したい場合はそれを変更することで簡単に対処できます。

実行はMM2' と同様の手順で操作でき、途中状況も知ることができます。

実行結果は局所安定構造を始め分子軌道図、電子密度図、静電ポテンシャル図が表示でき、それらについては3次元的に表現された立体図や任意平面上での等高線図そしてそれを高さ方向に値を当て嵌めた鳥瞰図のなど様々な形で見るができます。その他、簡易的な分子軌道図、Net Charge分布図、双極子モーメント図、振動解析を実行した時には振動モード図、更にはスペクトル図、分配関数、エンタルピー、エントロピー、比熱のチャート図を表示することができます。

## (4) ファイルユーティリティー

"MATERIA" ではモデリングで作成した分子ファイル、分子力場計算や分子軌道計算での結果ファイルが生成しますが、これらのファイルの整理のため、消去、リネーム、コピーができます。又、計算結果リストのプリンターへの出力ができます。

### 3. システムの構成

"MATERIA"はUNIXマシン上で動くX-WINDOWを利用して構築されています。

主機能はプライマリーメニューとして常時表示され、各々の下位レベルの機能はポップアップメニューとしてその時々に表示されます。その選択によって分子表示や計算結果の表示ができますが、それらの一つ一つの機能は画面上の一つ一つのウィンドウが対応します。プライマリーメニューは同時に複数のメニューが選択できるため、複数のウィンドウを画面上に展開することができます。この結果、分子軌道計算を走らせながら別の分子のモデリングを行ったり、入力構造と出力構造の比較や分子図と計算結果図の比較を行ったり、複数のタスクが可能であるという特長をもちております。

又、各機能は同一フォーマットの分子ファイルを経由して働くため、分子力場計算結果の構造をそのまま分子軌道計算にかけたりすることもできます。

( 図-1 にシステム機能図を示します。)

### 4. 今後の計画

"MATERIA"は真に研究者が使えるソフトであることを製品コンセプトとしています。一つは使いやすいこと、もう一つは真に有益な情報・知見を提供することです。操作性に関するきめの細かい対応をしており、更に機能面でのバージョンアップを以下のように計画しております。

- ・モデリング機能の強化
- ・DBとのインターフェース機能
- ・分子力場計算手法の拡充
- ・分子軌道計算手法の拡充

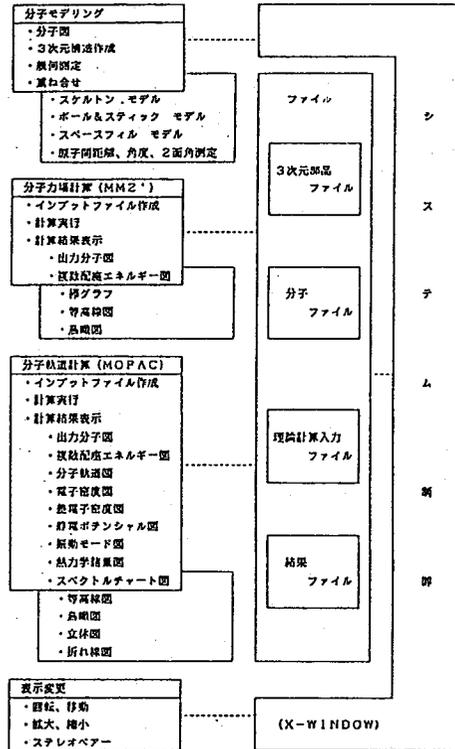


図-1 "MATERIA"システム機能図

5. その他

(1) ハード環境

下記のEWSで稼働します。

- |                    |            |
|--------------------|------------|
| ・SONY NEWS         | NWS-831以上  |
| ・YHP 9000シリーズ      | モデル319C+   |
|                    | モデル340以上   |
| ・SUN SUN-3シリーズ     | SUN-3/60以上 |
| SUN-4シリーズ          | 全機種        |
| (SPARCstation 全機種) |            |

(SUN版は1989年11月リリース予定)

(2) ソフト価格

400万円/セット

(3) "MATERIA"に関するより詳しい情報は下記にお問合せ下さい。

(株) 帝人システムテクノロジー

応用技術営業部 澤ノ井

Tel. 045-661-3310

(注1) QCPEのMM2を北大 大澤映二助教授が改良したもの

(注2) QCPEのMOPACを東大 平野恒夫助教授が改良したもの

## 国内の動き

### 情報学基礎研究会報告

(社)化学情報協会 廣田勇二

「フルテキストデータベースの御利益はどこにあるか?」と題する研究報告会が、7月27日国立教育会館にて行われた。報告は、1)公開されて一般に利用できるフルテキストデータベースの現状と今後、2)フルテキストデータベースの効率的な検索を目的としたハードウェア、及びソフトウェア開発の試み、3)フルテキストデータの標準化へむけての動きなどであった。ここでは、情報化学の観点から整理して報告することとしたい。

#### フルテキストデータベースとは?

フルテキストデータベースとは、文献抄録データベースとの対比において用いられる言葉であって、論文や各種文書情報の全体がデータベース化され、それらのデータがオンラインで検索、出力できるようにしたものである。現在公開サービスされているフルテキストデータベースには、新聞記事データベース、判例データベースのLEXIS, Westlaw、科学技術情報のCJACSなどがある。日本特許の電子出願に合わせて、特許情報のフルテキストデータベース化も計画されている。科学技術論文をはじめとする各種出版物の編集が電子化されるようになってから、大量のデータの全文をデータベース化することが比較的容易になってきたことが背景にある。また、増加する一方の社内情報の整理と高度利用のためにフルテキストデータベースの技術の効果的な応用が期待されている。

#### フルテキストデータベースの利益

##### 1) すべてのデータが検索出力可能

実験データなどのような詳細なデータそのものを検索して出力できるのがフルテキストデータベースの最大の特徴である。新しい概念の言葉であっても、著者の用いた用語を使って検索が可能である。

##### 2) データベース作成が容易

フルテキストデータベースの基になっているのは、印刷物を作成するとき用いたデータそのものである。全文が検索可能なので、時間と費用のかかる索引を手で追加しなくても十分な手がかりが利用できる。このため、データベース作成の費用を一定の水準に保つことが可能である。二次情報のデータベースにおいては索引の質がそのデータベースの使い勝手を左右するほど重要なものであるが、索引の作成には専門分野の知識と特別な訓練を受けた人材が必要であるため多額の費用と時間のかかるのが普通である。

##### 3) フルテキストデータベースの表示機能

大量のデータを頭から読んでいくのは不経済であるが、ヒットしたパラグラフ

だけを選択的に出力させることができるので、重要なパラグラフだけを読んで論文の大意をつかむことが容易である等の印刷体には無い特徴を備えている。図表データを端末上に表示させるようにすることが最大の課題であるといえる。

#### フルテキストデータベースの検索機能

雑誌の全文が収録されており、一文献当りのデータ量が二次情報データベースに比較して膨大なのと、著者の用いた用語がそのままデータベースに納められているため、有効な検索結果を得るには大量情報（一レコード当り）に向けた検索機能を備えていることが条件である。更に、検索に当たってはフルテキストデータベース用に用意された機能を有効に組み合わせて使うなど、特別な注意が必要である。STNの主な検索機能には普通オンライン検索において使われる論理演算子や文字マスクの他に次の様なものがあり、検索のノイズを除くのに役にたっている。全文データベースにおいては特に、1) 同一パラグラフに限定した検索、2) 同一文章内の検索、3) フレーズの検索、等を用いるのが重要である。著者の用いた用語を用いて検索するときには、中間一致検索の機能が便利である。報告の中では具体例を用いて説明がなされた。

#### 図表データの表示

化学文献の場合、化学反応の図や表にまとめられたデータは、論文の理解を助ける上で役に立つ。学術情報センターで開始したフルテキストデータベースでは、ファックスと連動させて図表データをユーザの手元に届けることが可能になっている。JAPIOでは、日本特許庁の電子出願の実施に合わせて、コードデータとイメージデータを組み合わせたフルテキストデータベースの開発が予定されている。CASではイメージデータをベクトルに変換して圧縮した後データベース化することを検討している。この方法によりイメージデータを文字データと共に公衆端末上で見ることが可能になる。

#### 社内データ管理へのフルテキストデータベースの応用

フルテキストデータベースの検索を経済的に高速化するようなハードウェア及び、ソフトウェア技術についての研究報告がなされた。社内文書の管理にフルテキストデータベースを活用すれば手間のかかる索引付与の作業が軽減される上に、新しい概念の用語や細かいデータも直接検索できるようになる。化合物情報を扱うシステムと結びつけて、化合物に関連したレポート類及び、測定データなどの全文が検索できるようになれば、化合物情報システム全体としての使い勝手も向上するであろう。ハードウェア及びソフトウェアの進歩とともに今後が期待される分野である。

以上研究会の概要を主観的にまとめてみた。

1989年7月27日

特集：フルテキストデータベースの御利益はどこにあるか？

14-1 フルテキストデータベースの実用化における諸問題

--- 学術情報センターでの事例を踏まえて ---

根岸正光（学術情報センター）

14-2 SGML と全文データベース

芝野耕司（東京国際大）

14-3 特許情報のフルテキストデータベース

大山勝弘（日本特許情報機構）

14-4 STN で利用できるフルテキストデータベースについて

廣田勇二（化学情報協会）

14-5 フルテキストサーチのハードウェア技術について

高橋恒介 他（日電）

14-6 大規模文書情報システム用テキストサーチマシンの研究

加藤寛次 他（日立）

14-7 テキストデータベース管理システム SIGMA とその利用

有川節夫 他（九大）

※編集委員注

情報学基礎研究会は情報処理学会の部会の1つです。当日の予稿集は残部があれば有料で手に入れることができます。

連絡先：〒106 港区麻布台2-4-2 保科ビル内 情報処理学会 研究会係 ☎03-505-0505

## 日本化学プログラム交換機構 ( J C P E ) について

田辺 和俊

日本化学プログラム交換機構(略称 J C P E)が発足しました。設立の趣旨などについては本誌の 7 ( 1 ) 1 6 ( 1 9 8 9 ) に紹介されていますので、その後の状況を記します。

本機構では幾つかの事業を行うことにしていますが、中心は機構の名前が示すとおりプログラム交換です。Q C P E と同じように、研究者が自作したプログラムを本機構に寄託してもらい、希望者に実費程度の金額で頒布します。6 月末に発行されたニュースレターの創刊号には M M 2 をはじめとして 1 1 本のプログラムが掲載されていますが、すでに総計で 7 0 本以上のプログラム頒布の申込がきています。また、9 月末発行のニュースレターの 2 号には半経験的分子軌道プログラム M O P A C の最新版が掲載される予定です。本機構が目的通りに機能できるか否かは化学関連のよいプログラムを多数収集できるかどうかにかかっています。そのためには国内の計算機化学研究者の協力が必要です。ぜひお手持ちの自作プログラムを寄託して下さい。

会員にはニュースレター(季刊)を配布するほか、本機構でプログラムの使用法や基礎原理などに関する講演会、講習会を開催する場合の参加費を割引します。ニュースレターにはプログラムの案内、学会カレンダー、内外情報などのほかに、この分野に関連した項目に関するレビューなども随時掲載されます。ニュースレターの 2 号には分子動力学プログラムの代表的な A M B E R の解説が掲載され、以降このようなプログラムの解説シリーズが連載される予定です。

本機構は本年 4 月 1 日から正式に発足し、活動を開始しました。現時点で会員は 3 0 0 口を越えています。本機構は学界、産業界からの会員の会費だけで運営されています。年会費は個人会員 2、0 0 0 円、団体会員 2 0、0 0 0 円、賛助会員(1 口) 5 0、0 0 0 円です。照会などは下記の事務局をお願いします。

本機構が Q C P E のように発展するために、皆様のご支援をお願いします。

事務局 〒 1 1 3 東京都文京区弥生 2-4-16 学会センタービル  
(社) 化学情報協会内 電話 0 3-8 1 6-3 5 8 1、3 5 8 2

# 海外動向

## MEETINGS

2-4 October 1989.

Colloquium on Computer Simulations in Protein Engineering and Drug Design: Theory Meets Experiment.

Tokyo, Japan.

連絡先: 〒102 千代田区一番町9 ノザビル9F 日本アライアントコンピュータ(株)ソフトウェア部 小室 ☎03-222-0750

3-4 October 1989.

Computer Simulation of New Materials.

Ithaca, NY.

Contact: A. Redelfs, Cornell Theory Center, 265 Olin Hall, Ithaca, NY 14853-5201 (607-255-7157).

16 October 1989.

Minnesota Supercomputer Institute

Symposium on Supercomputer Protein Chemistry.

Minneapolis, MN.

Contact: MSI Symposium Coordinator, 1200 Washington Ave., South, Minneapolis, MN 55415 (612-625-1818).

16-19 October 1989.

Forty Years of Quantum Chemistry.

Athens, GA.

Contact: Prof. Henry F. Schaefer III, Center for Computational Quantum Chemistry, The University of Georgia, Athens, GA 30602.

9-12 November 1989.

Symposium on Biomedical Supercomputing '89 (IEEE Engineering in Medicine and Biology Society, 11th Annual International Conference).

Seattle, WA.

Contact: Dr. J. Yadv, University of Medicine and Dentistry of New Jersey, Dept. of IST, 185 S. Orange Avenue., Newark, NJ 07103 (201-456-6789).

4-6 December 1989.

Workshop on Aspects of Molecular Graphics.

Pisa, ITALY.

Contact: Secretariat Molecular Graphics, c/o ICQEM, Via Risorgimento, 35, I-56125 Pisa, ITALY.

27-30 March 1990.

American Crystallographic Association Annual Meeting.

New Orleans, LA.

Contact: Cheryl Klein, Department of Chemistry, Xavier University, 7325 Palmetto Street, New Orleans, LA 70125 (504-486-7411; BITNET: CLKCM@UNO).

22-27 April 1990.

199th ACS National Meeting.

Boston, MA.

Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

7-9 May 1990.

21st European Congress on Computer Applications in the Chemical Industry.

Den Haag, THE NETHERLANDS.

Contact: Dr. J. M. van der Kamp, KIVI, 23 Prinsessegracht, 2500 GK Den Haag, THE NETHERLANDS.

1-16 July 1990.

9th Annual International Conference on the Molecular Graphics Society.  
Uppsala, SWEDEN.

Contact: Dr. B. Bywater, Molecular Biophysics Dept., Pharmacia AB, S-75182 Uppsala, SWEDEN.

8-14 July 1990.

World Association of Theoretical Organic Chemists.  
Toronto, Ontario, CANADA.

Contact: WATOC Congress 1990, c/o Department of Chemistry, University of Toronto, Toronto, Ontario, CANADA M5S 1A1.

23-27 JULY 1990.

Expanding Frontiers in Polypeptide and Protein Structural Research.  
Whistler, British Columbia, CANADA.

Contact: Dr. V. Renugopalakrishnan, Harvard Medical School, Department of Orthopedic Surgery, 300 Longwood Avenue, Boston, MA 02115 (617-735-8413).

11-15 August 1990.

The Fourth Protein Society Symposium.  
San Diego, CA.

Contact: Mark K. Woods, Dept. of Biochemistry, SJ-70, University of Washington, Seattle, WA 98195 (206-526-9936).

26-31 August 1990.

200TH ACS National Meeting.  
Washington, DC.

Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036. (202-872-4396).

14-19 April 1991.

201st ACS National Meeting.  
Atlanta, GA.

Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036. (202-872-4396).

30 May-9 June 1991.

Static, Kinematic and Dynamic Aspects of Crystal and Molecular Structure.  
Erice, Trapani, ITALY.

Contact: Prof. L. Riva Di Sanseverino, Dipartimento de Scienze Mineralogiche, Piazza Porta San Donato 1, 40126 Bologna, ITALY.

21-26 July 1991.

American Crystallographic Association Annual Meeting.  
Toledo, OH.

Contact: Alan Pinkerton, Dept. of Chemistry, Univ. of Toledo, Toledo, OH 43606 (419-537-4568).

25-30 August 1991.

201st ACS National Meeting and 4th Chemical Congress of North America.  
New York, NY.

Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036. (202-872-4396).

## Journal of Computational Chemistry

Volume 10 Number 5 July/Aug 1989

- Theoretical Studies in Molecular Recognition: Rebek's Cleft  
*Kenny B. Lipkowitz and Richard Zegarra*, p. 595
- An *Ab Initio* Molecular Orbital Study of the Structures and Energies  
of Neutral and Charged Bimolecular Complexes of  $\text{NH}_3$  with the  
Hydrides  $\text{AH}_n$  (A = N, O, F, P, S, and Cl)  
*Janet E. Del Bene*, p. 603
- Evaluation of the Dispersion Contribution to the Solvation Energy.  
A Simple Computational Model in the Continuum Approximation  
*F. Floris and J. Tomasi*, p. 616
- An Algorithm for the Representation and Computation of Supermolecular  
Surfaces and Volumes  
*Heinrich R. Karfunkel and Veronique Eyraud*, p. 628
- A Molecular Mechanics (MM2) Study of Furan, Thiophene, and Related  
Compounds  
*Julia C. Tai, Jenn-Huei Lii, and Norman L. Allinger*, p. 635
- Locally Dense Basis Sets for Chemical Shift Calculations  
*D.B. Chesnut and K.D. Moore*, p. 648
- 3s- Versus 1s-Type Gaussian Primitives: Modifications of the 3-21G(\*)  
Basis Set for the Sulfur Atom  
*Michael Sabio and Sid Topiol*, p. 660
- Veronoi Binding Site Models: Calculation of Binding Modes and  
Influence of Drug Binding Data Accuracy  
*Laurent G. Boulu and Gordon M. Crippen*, p. 673
- On the Construction of the Matching Polynomial for Unbranched  
Catacondensed Benzenoids  
*Milan Randić, Haruo Hosoya, and Oskar E. Polansky*, p. 683
- Computational Algorithms for Matching Polynomials of Graphs from the  
Characteristic Polynomials of Edge-Weighted Graphs  
*Haruo Hosoya and K. Balasubramanian*, p. 698
- Force Field Parameterization for the 4-Fluorophenyl Group  
*D.H. Gregory and J.T. Gerig*, p. 711
- Theoretical Studies in Molecular Recognition: Enantioselectivity  
in Chiral Chromatography  
*Kenny B. Lipkowitz, Brian Baker, and Richard Zegarra*, p. 718
- Methods for the Fourier-Series Expansion of Torsional Energies  
*Alice Chung-Phillips*, p. 733

Number 197, 1989

- The inversion of correlation between  $\gamma$ -effect values and dihedral angle: nontraditional chair-boat conformational equilibrium in seven- and eight-membered dithioacetals  
E.N. Klimovitskii, I. A. Litvinov, O.N. Kataeva, D. Yu. Strel'nik and G.N. Sergeeva (Kazan, U.S.S.R.), p. 1
- The synthesis and crystal structures of three Mo-Cu-S cubane-like clusters:  
[Mo<sub>3</sub>CuS<sub>4</sub>][S<sub>2</sub>P(OCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]<sub>3</sub>·l·(μ<sub>2</sub>-OOCCH<sub>3</sub>)·H<sub>2</sub>O, [Mo<sub>3</sub>CuS<sub>4</sub>][S<sub>2</sub>P(OCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]<sub>3</sub>·(μ<sub>2</sub>-OOCCH<sub>3</sub>)·(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>SO and [Mo<sub>3</sub>CuS<sub>4</sub>][S<sub>2</sub>P(OCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]<sub>3</sub>·l·(μ<sub>2</sub>-OOCCH<sub>3</sub>)·C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>N  
S.-F. Lu, N.-Y. Zhu, X.-T. Wu, Q.-J. Wu and J.-X. Lu (Fujian, People's Republic of China), p. 15
- The synthesis and crystal structure of a novel cubane-like tungsten copper sulfur cluster  
[W<sub>3</sub>CuS<sub>4</sub>][S<sub>2</sub>P(OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>]<sub>3</sub>·l·μ<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>COO·CH<sub>3</sub>CN  
X.-T. Wu, H.-Q. Zhan, Y.-F. Zheng and J.-X. Lu (Fujian, People's Republic of China), p. 33
- Crystal and molecular structure of the MEGA-SPIRO cyclophosphazenic species from diethylene glycol bis-(3-aminopropyl)-ether, N<sub>3</sub>P<sub>3</sub>Cl<sub>4</sub>{HN-(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-NH}  
T.S. Cameron and A. Linden (Halifax, N.S., Canada), F. Sournies, A. El Bakili and J.-F. Labarre (Toulouse, France), p. 41
- NQR study of complexes between *p*-dichlorobenzene and some aromatic  $\pi$  acceptors  
N. Subramani and K.V. Raman (Tiruchirapalli, India) and J. Ramakrishna (Bangalore, India), p. 53
- Synthesis and structural study of tropane benzamines. Part III. *N*-(8-Isopropyl-nortropan-3- $\beta$ -yl)-2-methoxy-4-amino-5-chlorobenzamide  
N. Cabezas, M. Martinez, E. Galvez, M.S. Arias, F. Florencio and J. Sanz-Aparicio (Madrid, Spain), p. 59
- Some effects of intramolecular hydrogen bonding on vibrational spectra  
V.M. Schreiber (Leningrad, U.S.S.R.), p. 73
- Vibrational spectrum and internal rotation in 2,6-dimethylpyrazine  
J.F. Arenas, J.T. Lopez-Navarrete, J.I. Marcos and J.C. Otero (Malaga, Spain), p. 87
- NH stretching vibrations and conformation of bis[2-(3-substituted ureido)phenyl] disulphides  
A.Ts. Antonova (Sofia, Bulgaria), p. 97
- Infrared, Raman and pre-resonance Raman spectroscopy of Rh<sub>2</sub>(O<sub>2</sub>CCH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(S(CH<sub>2</sub>Ph)<sub>2</sub>)<sub>2</sub>  
R.J.H. Clark and A.J. Hempleman (London, Gt. Britain), p. 105
- Incoherent inelastic neutron scattering studies of protonconducting materials:  
Sn(HPO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O and HM(SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O, M=Fe, In. Part II. The vibrational spectrum of H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>  
D.J. Jones (Montpellier, France), J. Penfold and J. Tomkinson (Didcot, Gt. Britain) and J. Rozière (Montpellier, France), p. 113
- Additional evidence concerning the conformational equilibrium of 2-aminoethanethiol from the microwave spectrum of the ND<sub>2</sub>-SD trideuterated species and ab initio calculations  
W. Caminati and B. Belino (Bologna, Italy), L. Schäfer and J.D. Ewbank (Fayetteville, AR, U.S.A.) and K. Siam (Pittsburg, KS, U.S.A.), p. 123
- Conformational analysis of 1,2-dihalotetramethylethanes and 1,2-dihalotetramethyldisilanes by molecular mechanics calculations  
R. Stølevik and P. Bakken (Dragvoll, Norway), p. 131
- Conformational analysis of *cis*, *cis*-2,2'- and 1,1'-halogensubstituted bicyclopropyl derivatives by molecular mechanics calculations  
R. Stølevik and P. Bakken (Dragvoll, Norway), p. 137
- Far-infrared spectra and conformational stability of the epihalohydrins  
J.R. Durig, S.E. Godbey and R.A. Larsen (Columbia, SC, U.S.A.), p. 143
- Thiocarbonyl spectroscopy: the infrared spectrum and ab initio vibrational frequencies of *cis*- and *trans*-dithioformic acid in the X<sup>1</sup>A' ground state  
F. Ioannoni and D.C. Moule (St. Catharines, Ont., Canada), J.D. Goddard (Guelph, Ont., Canada) and D.J. Clouthier (Lexington, KY, U.S.A.), p. 159
- Raman spectroscopic study of 1,2-ethanedithiol adsorbed on silver surface  
C.K. Kwon, K. Kim, M.S. Kim and Y.S. Lee (Seoul, Korea), p. 171

- Ground-state rotational spectrum of *t*-butyl isocyanide and an  $r_s$  geometry of its heavy-atom skeleton  
N.W. Howard, A.C. Legon, C.A. Rego and A.L. Wallwork (Exeter, Gt. Britain), p. 181
- Spectroscopic study of the conformational isomerism of 2-formylfuran derivatives  
A.I. Kiss and D. Machytka (Budapest, Hungary), J. Bánki (Bratislava, Czechoslovakia) and M. Gál (Budapest, Hungary), p. 193
- The vibrational spectrum of trimethylphosphine-silver iodide,  $[AgI \cdot P(CH_3)_3]_4$   
H.G.M. Edwards and D.W. Farwell (Bradford, Gt. Britain), p. 203
- A transferable general valence force field for oxalyl halides: Fourier transform infrared spectral analysis of oxalyl chloride isolated in cryogenic rare gas matrices  
G. Davidovics, M. Monnier, W. Schroeder, P. Verlaque, J. Pourcin and H. Bodot (Marseille, France), p. 213
- Ultraviolet photoisomerizations and FT-IR investigations of matrix isolated oxalyl halide conformers  
W. Schroeder, M. Monnier, G. Davidovics, A. Allouche, P. Verlaque, J. Pourcin and H. Bodot (Marseille, France), p. 227
- Dielectric relaxation mechanism and internal rotation in phenylpyridines  
H.A. Kolodziej and E. Harewski (Wroclaw, Poland), p. 243
- The relation of methoxy group CH bond lengths and stretching frequencies to the oxygen lone pair orientation  
I.S. Ignatyev (Leningrad, U.S.S.R.), p. 251
- Contributions to the chemistry of silicon-sulphur compounds. Part 54. Extension of the molecular mechanics parameterization to polyheteroatomic compounds  
Z. Pawelec, A. Herman and W. Wojnowski (Gdansk, Poland), p. 259
- Electronic and geometric structures of oligothiophenes  
U. Nagashima, H. Fujimoto and H. Inokuchi (Okazaki, Japan) and K. Seki (Hiroshima, Japan), p. 265
- Photoelectron spectra and electronic structure of some 1-substituted aziridines and of 1,1'-biaziridinyl  
P. Rademacher, G. Irsch and W. Sicking (Essen, F.R.G.) and E.-U. Würthwein (Münster, F.R.G.), p. 291
- Application of Schwinger perturbation theory in electron diffraction analysis. Part I. Linear  $XY_2$  type molecules  
K.V. Ermakov, B.S. Butayev and V.P. Spiridonov (Moscow, U.S.S.R.), p. 307
- The gas-phase structures of *trans*- and *cis*-perfluorodecalin  
H.-G. Mack and H. Oberhammer (Tübingen, F.R.G.), p. 321
- The gas-phase structures of perfluoroquinolizidine and perfluorotripropylamine  
H.-G. Mack and H. Oberhammer (Tübingen, F.R.G.), p. 329
- The molecular structure and conformational equilibrium of 1,2-diisocyano-ethane studied by gas-phase electron diffraction  
G. Schrupf (Göttingen, F.R.G.), M. Traetteberg and P. Bakken (Dragvoll, Norway) and R. Seip (Oslo, Norway), p. 339
- The molecular structure of trimethylantimony(V)dichloride as determined by gas-phase electron diffraction  
Q. Shen (Hamilton, NY, U.S.A.) and R.T. Hemmings (Mississauga, Ont., Canada), p. 349
- Short communication*
- An infrared and Raman spectroscopic study of transition metal(II)chloride 2,6-lutidine complexes  
S. Yurdakul (Ankara, Turkey), S. Akyuz (Samsun, Turkey) and J.E.D. Davies (Lancaster, Gt. Britain), p. 355
- Calculations of induced dipole moments: adamantane derivatives  
L. Došen-Mičović (Belgrade, Yugoslavia) and O. Exner (Prague, Czechoslovakia), p. 361
- Conformational analysis of 2-heptyne  
G.A. Crowder (Canyon, TX, U.S.A.), p. 367

## JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

1989年第3卷2号(4月) 論文題目、著者、頁

### Review

A Review and examination of the mathematical spaces underlying molecular similarity analysis, *M. A. Johnson*, p.117

### Papers

Characteristic polynomials of spirographs, *K. Balasubramanian*, p.147

Two Merits for a graph-theoretical model of organic chemistry, *V. Kvasnicka and J. Pospichal*, p.161

Embedding frequencies of trees, *R. D. Poskusta and M. C. McHughes*, p.193

### Notes

Symmetry and other properties of second-order phenomenological coefficients and their significance in a chemical system, *A. K. Das Gupta and C. Dutta*, p.217

Reduced cycle indices and their applications in enumeration of NMR signals and equivalence classes, *K. Balasubramanian*, p.227

## JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

JUNE 1989 Vol.66, No.6

Computer Series, 103

A Microcomputer Simulation of Fractal Electrodeposition, *F. Sagues and J. M. Costa*, p.502

Counters on Grids, *Ben Selinger and Ralph Sutherland*, p.502

## QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

第8卷第1号(3月) 論文題目、著者、頁

Inhibition of Carbonic Anhydrase by Substituted Benzenesulfonamides. A. Reinvestigation by QSAR and Molecular Graphics Analysis, *Carotti, A., Raguseo, C., Campagna, F., Langridge, R. and Kielsen, T. E.*, P.1

Calculation of Molecular Volumes from Molecular Fragments vis Valance Electron Indices, *Govers, H. and de Voogt, P.*, P.11

Model Solvent Systems for QSAR Part 1, Propylene Glycol Dipelargonate (PGDP). A new Standard Solvent for use in Partition Coefficient Determination, *Leahy, D. E., Taylor, P. J. and Walt, A. R.*, P.17

Principal Properties for Aromatic Substituents. A. Multivariate Approach for Deisgn in QSAR, *Skagerberg, B., Boneill, D., Clementi, S., Cruciani, G. and Ebert, C.*, P.32

On a Fragment Approach to Structure-activity Correlations, *Randic, M. and Jurs, P. C.*, P.39

A Pharmacophore Hydrothesis for Antidepressant Activity: Accomodation of Viloxazine, *Brown, G. R.*, P.49

## 学生部会員新設について（お知らせとお願い）

1990年1月より各部に学生部会員が新設されます。現在部会にご所属で、且つ学生でいらっしゃる方（1990年3月卒業予定も含む）はこれに該当します。この場合の「学生」は、国内在住の工高専、短大、大学学部、大学院の在学者に限ります。（研究生は正部会員扱いとなります。）1990年分会費等は1989年11月1日付で請求させていただきますが、学生部会員に該当される方は振替用紙裏面にその旨明記のうえ、会費の金額を訂正してご送金下さるようお願い申し上げます。学生部会費は下記の通りです。

### 記

コロイドおよび界面化学部会	1, 500円
情報化学部会	1, 000円
生体機能関連化学部会	2, 000円

また、これから新規に学生部会員として入部会をご希望の場合は、従来の申込書とは別に申込カードがございますので、下記宛てご請求下さい。

問合せ：〒101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル6階 （社）日本化学会会員部  
電話(03)258-9815

## 「準部会員」廃止について（お知らせ）

1990年1月以降従来の「準部会員」を廃止し、部会員で且つ日本化学会会員でない方は「正部会員（日本化学会非会員）」となります。

## 1990年分会費等の払い込みについて（お願い）

1990年分会費等は1989年11月上旬に会員各位へご請求申し上げますので、お早めにお払い込み下さるようお願いいたします。ご送金にあたっては、電算機入力原票を兼ねた会費等送金専用振替用紙をご利用下さい。

### 1990年分部会費

正部会員	日本化学会会員	2, 000円
	日本化学会非会員	3, 000円
学生部会員	日本化学会会員	1, 000円
	日本化学会非会員	1, 000円

## 日本化学会事務局 仮事務所のお知らせ

日本化学会事務局は新化学会館竣工までの間、下記において業務を行いますのでお知らせ致します。

何かとご不便、ご迷惑をおかけいたすと存じますが、何卒ご協力を賜りますようお願い申し上げます。

### 記

#### ①仮事務所住所

〒101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル 6, 7 階  
(郵便物は旧住所でも届きます)

#### ②電話番号

東京(03)258-9811 (代表)

総務部：(03)258-9812

業務部：(03)258-9813 (部会事業一般、部会誌編集)

経理部：(03)258-9814

会員部：(03)258-9815 (部会入退会、送本)

編集第一部：(03)258-9816

編集第二部：(03)258-9817

会館建設室：(03)258-9818

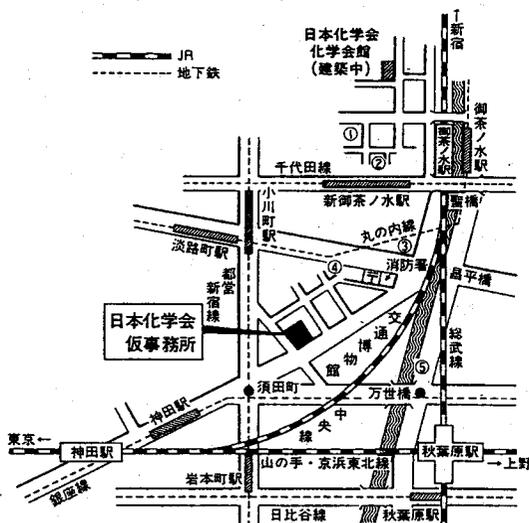
常務理事室：(03)258-9819

図書室関係：(03)258-9811

#### ②ファクシミリ番号

(03)258-9810

#### ②交通および略図



(駐車場はありません)

#### ■ 交通

・JR 総武線・中央線

御茶ノ水駅，神田駅，秋葉原駅からいずれも徒歩約6分。

・地下鉄

①千代田線 新御茶ノ水駅から徒歩約6分。

②銀座線 神田駅から徒歩約3分。

③丸の内線 淡路町駅から徒歩約3分。

④都営新宿線 小川町駅から徒歩約4分。

# 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 7, Number 6  
November 1989

## 目 次

<b>部 会 行 事</b>	
ワークショップ開催のお知らせ .....	1
化学命名法ワークショップ 第2回 .....	2
化学物質名の機械処理に関する研究会報告 .....	3
<b>部 会 記 事</b> .....	8
<b>関 連 行 事</b>	
シンポジウム「化学における情報の現状と将来」プログラム .....	9
「1990年情報学シンポジウム」開催案内 .....	10
<b>CCSの紹介</b>	
実験台付近での分子設計・スペクトル解析ツール .....	三 橋 一 夫 12
<b>国内の動き</b>	
化学企業におけるコンピュータ・ケミストリー .....	18
<b>国 際 会 議</b>	
第2回 日独スペクトルデータベースワークショップ報告 .....	阿 部 英 次 24
<b>海 外 動 向</b>	
Meetings .....	26
<b>文 献 紹 介</b>	
Journal of Molecular Structure (No. 156~192, No.198) .....	29
Tetrahedron Computer Methodology (Vol.1, No.3~Vol.2, No.1) .....	37
Journal of Molecular Graphics (Vol.7, No.2) .....	38
Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.29, No.3) .....	39
Journal of Chemical Education (Vol.66, No.7~No.8) .....	40
Journal of Computational Chemistry (Vol.10, No.6) .....	40
Computers & Chemistry (Vol.13, No.4~Vol.14, No.1) .....	41
Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol.8, No.2) .....	42

## 部 会 行 事

### ワークショップ開催のお知らせ

#### 「新しい領域としてのケモトリックスーその現状と将来展望」

数学、統計学、情報理論、コンピュータ科学などの各種手法を総合的に組み合わせて活用する新しい領域が生まれています。多方面への適用が可能であり、化学の中でも個別に研究活動が行われ、ケモトリックスとして共通の議論の場はまだあまりないようです。情報化学部会では、下記のワークショップを企画していますので、関心をお持ちの方々のご参集をお待ちします。

日 時：平成2年1月22日（月） 13：00～18：30

場 所：お茶の水女子大学 理学部1号館 化学第一講義室

講 演：

13:00-13:30 ケモトリックスの全体像と最適値自動選定制御による自動化  
(お茶の水女大 理学部化学教室) 藤枝修子

13:30-14:00 スペクトルデータ処理における自動化  
(科学警察研究所) 斉藤直樹

14:00-14:30 食品分野におけるケモトリックスの利用  
( (財)野田産業科学研究所) 相島鐵郎

14:30-15:00 化学パターン認識 (豊橋技科大 工学部知識情報工学系) 宮下芳勝

15:15-15:45 化学因子分析法で分析化学はどう変わるか？  
(兵庫教育大 自然系化学教室) 尾関 徹

15:45-16:15 ケモトリックスにおける多次元化によるデータ解析  
(東海大 海洋学部) 千賀康弘

16:15-16:45 ケモトリックスをこう考えるーChemologicを目指してー  
(通産省工業技術院化学技術研究所) 西川利男

懇親会：17:00-18:30 生協喫茶室リモーネ(会費1000円位)

参加ご希望の方は、会場準備の都合上、お手数ですが書面(葉書、ファクシミリなど)で、懇親会出席の有無を含めて12月25日迄にお知らせ下さい(参加無料)。

申込および問合せ先

〒112 東京都文京区大塚2-1-1

お茶の水女子大学理学部化学教室

藤枝修子

電話 03-943-3151 内線562

FAX 03-942-2815

# 化学命名法ワークショップ 第2回

## 命名の歴史から機械処理まで

日時 平成2年1月26日(金)  
9時30分より16時30分まで  
場所 日本科学技術情報センター会議室  
東京都千代田区永田町 2-5-2  
主催 日本化学会情報化学部会  
世話人 飯塚健(群馬大)

参加希望者は電話(03-258-9813)で  
日本化学会情報化学部会宛にお申し込み下さい。

今回の話題とその提供者は次の通りです:

- 「医薬品の命名の現状」竹中裕典(日本ルセルKK)
- 「日本の法令における化学物質名」大島輝夫(化学物質安全・情報センター)
- 「化学会誌編集における化学物質名・続き」畑一夫(日本化学会)
- 「化合物辞書作製における命名則・続き」荒木啓介(日本科学技術情報センター)

初回は「化学物質名の機械処理に関する研究会」として発足しましたが、機械処理に至るまでにクリアしなければならない種々の問題がディスカッションを通じて掘り起こされてきました。そこで上に見られるようなタイトルとサブタイトルとなりました。当面二ヶ月に一度のペースでこのワークショップを開催し、種々の角度からテーマを選択しディスカッションしていく予定です。

\*\*\*\*\*  
\*  
\* 本誌への寄稿のお願い \*  
\*  
\*  
\* 本CIGSJ 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。 \*  
\* 尚、原稿締切日は発行月(奇数月)の10日です。 \*  
\* 情報・原稿の送付先 〒101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル6階 \*  
\* 社団法人 日本化学会 情報化学部会 事務局 \*  
\* 電話 (03) 258-9813 \*  
\*  
\*\*\*\*\*

## 化学物質名の機械処理に関する研究会報告

当面の化学命名に関連する問題点を以下のような面で司会の始めと終わりで提示した：  
飯塚 健（群馬大）

- ① 情報化学の中に、命名に関連する研究をもっと盛んにする必要がある。
- ② 益々複雑化する化学物質へ、表現処理の面からどう対応したらよいか？
- ③ 化学物質の命名ルール作りは反例に挑戦するパッチワークでよいか。
- ④ 命名ルールの機械化の設計にはどんな基本コンセプトが必要か？
- ⑤ どのような入力物質名の自動創出化に間違いが少ないか？
- ⑥ 検索効率の向上には化学物質名がどのように組織化されればよいか？
- ⑦ 膨大な数の化学物質の情報処理に、慣用名は再評価されてきている。
- ⑧ 命名ルール・名前の普及は産学官の協力が必要だが、実施の手立ては？
- ⑨ 命名問題は物質群と人間群の関係の中に介在し、非常に多種多様である。

社団法人 化学情報協会  
上野京子

文献が発行されてから、Chemical Abstracts やそのオンラインサービスに載るまでの工程、特に索引された物質に CAS 登録番号 (Registry Number - RN) が付与されるまでの流れ、を解説した。また物質の RN 付与手段である 2 種のコンピュータシステム (Name-match System 及び Structure-match System) と Manual Registration について説明した。

日本科学技術情報センター 荒木 啓介

IUPAC 命名法に基づいた有機化合物体系名から、その分子構造に対応する原子結合表を、計算機により自動作成できる。しかし、主として以下のような点に問題があり、JICST は独自の工夫をしている。

① あいまいさの無い体系名を書く。

- (i) 特に、数字によって組み立てるテトラスピロ以上のスピロ化合物への工夫
- (ii) 数の対応をとること。エステル・塩、酸無水物。
- (iii) マルチプライヤが働く範囲のカッコによる明示。
- (iv) ロカントの不備の是正 (ステロイド、テルペン類)

② 文字列として入力できること。

特に、アミノ酸 3 文字記号で書くペプチドにおけるジスルフィド結合の表示には Cys(1)…… Cys(1)…… のように呼応させる書き方が必要。

大学の初年次、あるいは高等学校での化学の教育現場では、化学物質の名称付けにはきちんとしたルールが存在していることがとかくないがしろにされて、何がなんでも暗記すれば、期末試験はもとより大学入試や共通一次などの試験にいい点が取れるという信仰のようなものがある。そのためにカビの生えたような慣用名をひたすら覚えさせられて、苦勞しているケースは少くない。受験界の大権威どもが後述のようにまたこれに輪を掛けて超古風なシステムを愛用されていて、ある意味では不必要な害毒を流しているといえよう。海の彼方でも事情は似たものであるらしく、かの Davenport が "Silver chloride is a green gas. "-Syndrome といみじくも名付けた現象が、いくつか報告されている。化合物名

は、大事な情報を含んだものであり、うっかり間違えると時には命取りにもなりかねないほどの重要なものなのだが、この点を取り上げているテキスト類がきわめて少ないのが現状である。(数年前にフッ化水素酸とフッ化ナトリウムを間違えて患者をショック死させたヤブ医があった。)

筆者がここ数年ほど以前から試みている簡単な化合物名の知識の調査(実はこれは本学の開校当時に在職された藤原鎮男先生が昭和24年からしばらく継続して試みられたのが元であるが)の結果を調べてみると、いくつか特記すべき点がある。以下にいくつかの共通した点を紹介してみたい。これらは半ばマシン化した現代人頭脳の問題点なのかもしれないのだから。

### 1. ○○化物と○○酸塩の混同

まさかと思われるだろうが、硫化物と硫酸塩の区別が怪しい学生がかなり存在している。石膏の化学名は硫酸カルシウムではなくて硫化カルシウムであるとまじめに思っているのである。

### 2. 第一、第二方式の誤用(誤解)

以前(十九世紀)の金属元素の化学ではあまり多数の酸化状態の化合物が知られていなかったから、-ous, -icだけで用が足りた。これを訳したのが第一、第二方式に他ならない。従って第三以下はない。ところが第一○○はすべて二価の金属を含むと思っている学生がかなりあり、硫酸第一銅( $\text{CuSO}_4$ )とか酸化第一亜鉛( $\text{ZnO}$ )などと得々と記すものがある。(当然ながら昇汞と甘汞の区別が出来なくなる)また、第三マンガン塩などという奇妙な化合物を創作してみたりする。

なお誤用ではないが、 $PbO_2$ を「酸化第二鉛」と教わってきたという学生がかなりある。英語でも plumbic oxide とはもう言わなくなったし、ほとんどのテキストにも見あたらない。(共立出版の化学大辞典にだけはあったが、これはもう古く、昭和38年の初版である。)

### 3. 複合酸化物方式表現

塩素酸カリウムや過マンガン酸カリウムを「酸化塩素カリウム」とか「酸化マンガンカリウム」と書いて平然としているのだが、これはベルツェリウス時代ならともかく、誤解を招くだけだろう、なお物理学者にもこの方式で教授される方がいるらしい。(もっともこれは「ガリウム砒素」と同様のjargonだろうが。)

### 4. 誤った思い込み

フェロシアンカリとフェリシアンカリ、あるいは黄血カリと赤血カリは、実物を見たことのある人間には間違えられそうもないのだが、逆に覚えている学生はかなりある。このような間違いやすいところほど系統的命名法が活躍すべきなのである。ジスルファート酸ナトリウム(ハイポのこと)とかヘドロニウムイオンも教師からの刷り込みによるものらしい。

われわれにとって、近代的な化学が整理されるよりも前からすっかりおなじみであった物質名は、たとえ近代的な命名法が整理されてもいろいろな形で生き残る。これが「慣用名」の本体である。水だとかアンモニア、多くの元素名や有機化合物名、鉱物名などがこれに属する。この中のいくつかはもっと複雑な化合物の骨格、基本となるものであるから、たとえ近代的な命名法システムできちんと命名できたとしてもわざわざ変更するのはむしろ不便きわまりない。酸化二水素とか四水素化炭素(あるいは炭化四水素)などという名称はいくらシステムティックであろうとも実用にはほど遠いものである。(清代末期に外国の化学書が翻訳された折に、かの地では化合物名として化学式そのままの「輕<sup>A</sup>養」(二は下ツキ)のような方式が採用されたことがあるそうだ。輕は「輕氣(=水素)」、養は「養氣(=酸素)」を意味している。今日の中国新字体の元素記号によく気ガマエに変な字が使われているのはこれが元である。さすがに廃れてしまった。)そのためもあってか、大部分の生徒・学生諸君は卒業してもプロの化学者になるとは限らないから、無用な系統的命名方法よりも慣用名だけを使ったほうがタメになると言われる教育者の方々の数は決して少なくない。

だが、すべてを慣用名で押し切ろうとすると、現存の八百万から一千万におよぶ化合物名は、たとえプロフェッショナルでもその処理能力の遠く及ぶところではない。だから命名法規則がつくられて、何とか整理しようということになったのであるのだが、現実の教育現場では、教科書にこの利点が明記されていないためか、どうもここまでを理解して講義をされている教師方がまだまだ少ないよう

である。きちんとした化学式表現や系統的命名法を利用すれば、最近流行のネットワーク利用などで、地球の裏側までも共通語彙を使っての情報交換が可能なのであるのだが、肝心のこの点が全くないがしろにされたままというのはほめられたことではないだろう。

隋代から清時代まで一千年以上続いた「科挙」のために、受験生が暗記しなくてはならなかった四書五経と春秋左伝の文字数は、全部併せて四十万字ほどである。四書五経ならまだ以後の人生に活用できるところは多いのだが、この八百万の個々の化合物名は、プロの化学者以外にはほとんど役に立たない。だから以前はきわめて普通であった慣用名でも、不便となれば系統的命名法に置き換えられて容赦なく使われなくなる運命にある。「緑礬油」とか「硝石精」、「塩剝」など何のことも判らない化学者の方が多いはずである。

論語	11,705字
孟子	34,685字
詩経	24,107字
書経	25,700字
易経	37,234字
禮記	99,010字
春秋左伝	196,845字
合計	431,286字
(宮崎市定「科挙」より)	

筆者は以前「化学教育」に一年間にわたって簡単な命名法の手引を連載したことがある。この時に、「試験の答案を書くような時には、安全のために系統的命名法を使ってほしい。だが研究室なり工場現場なりでは慣用名を知っていれば、短くて有効な情報伝達ができるから、先輩どもに見直されるだろう。」ということを書いた。だが、世間ではどうもこれは逆になっているらしく、試験答案ではわざわざ間違いやすい慣用名（あるいは古くさい命名法）を使い、研究室や現場では反対に長たらくて面倒な系統的名称で押し切ろうという人間が増えているようである。（「化学と工業」、47(7) 1235(1989) (かんわじかん) 参照。もっともこれはSI単位系も同じような事情であるらしい。)

最近さるところで、受験界の神様とまでいわれる、名講義で名高い有名予備校の某講師の講義録（活字になったもの）を拝見する機会があった。確かに濃縮された情報が巧みにコンパクト化されていて、並の教科書よりも有益なことが数多く含まれているのには敬服したのだが、こともあろうに「プルブレオ塩」とか「プラセオ塩」なる大時代な錯塩名が登場し、「この位は名称と組成式が必ず書けるようにしておくこと」(!) という指示があったのには仰天させられた。筆者が関係している錯体化学の討論会（今年は九月末に水戸で開かれ、全国から一千名ちかい参加者があった）の出席者各位の中でも、この名称がすらりと理解できるのは高々数十名しかないだろう。この手のものの棒暗記に価値があったのは、Wernerが配位化学を集大成してノーベル賞を受けるよりも以前ならまだわかる。（つまり前世紀の遺物である。）

本研究会に参加されている方々の大部分もおなじみではなからうから、下に現代風命名法と式を掲げておく。

プルプレオ塩:

$[\text{CoCl}(\text{NH}_3)_5]\text{Cl}_2$  monochloropentamminecobalt(III) chloride

ブラセオ塩:

trans- $[\text{CoCl}_2(\text{NH}_3)_4]\text{Cl}$  trans-dichlorotetramminecobalt(III) chloride

特許における化学物質名の機械処理

長谷川 正好 榎帝人技術情報

- A. 特許においても文献同様の問題がある。即ち
1. 必ず日本語で書かねばならないので、英字→カナの書き換え時に、異なるカナに書かれてしまう。
  2. 公開制度のため、出願人の書いた文章が、そのまま発表され、間違いもある。
  3. 企業の多角化が進み、化学系会社以外からも化合物を含む出願が増えており、それに誤った名称のもの、が多いようである。
- B. これら化合物情報をデータベース化するとして、特許庁サイドは国際特許分類を用意しているが、体系的分類であり、部分構造検索ができない。それを可能にするデータベースとして、WPI等ではフラグメントコードを、STN等では原子結合表を用意している。
- C. 特許独特の問題として、Generic化合物の処理が必要である。  
Dr. Lynch (シェフィールド大) の開発したGENSAL (Generic Structure Language) 入力システムの紹介と併せて、各種レベルのGeneric化合物検索システムをIDGC (International Documentation for Chemistry) - GREMASデータベースの例で紹介した。

有機化合物のIUPAC命名支援システムの開発: 非環式化合物

豊橋技科大 阿部 英次

標題のシステムの開発の現状およびアルゴリズムの概略について報告した。プログラムは、  
1. 構造式入力 2. 原子団検索 3. 主原子団決定 4. 側鎖命名 5. 主鎖命名 6. 名称組立 の各モジュールから成り立っている。現状では非環式構造の命名しかできていないが、上記の各モジュールはそのまま環式構造の命名にも使用できる。環式構造の命名は脂環式と芳香族(ヘテロ環を含む)に分けて行なう予定であり、後者は環カタログを用意する予定である。

## 平成元年度総会の報告

例年通り、情報化学討論会の会場で、今年度総会が開催された。第1日目(11月8日)の最後の一般講演終了後、特別講演1が始まるまでの1時間たらずではあったが、藤原譲氏(総務担当幹事、筑波大)の議長で進められ、議事内容は次のようであった。

まず、米田幸夫部会長から挨拶があり、第12回討論会開催をお世話下さった方々に謝意を述べられた。会員数、法人部会員の現況、常任幹事会制度を作って実質的活動をはじめていること、次年度役員の件など、今年度活動の全般的な内容について報告された。そして、経済的な安定期になりつつあるので、事業(活動)を活発に行うよう協力してほしいというお話があった。

ついで、企画、編集、総務の各担当幹事(委員長)から、現在の活動状況の報告が行われた。

企画から：1)平成2年日本化学会春季年会の化学情報・計算機化学の会場で、例年通りミニフォーラムを開催予定。希望のテーマを11月15日までに企画担当幹事(飯塚健氏(群馬大)・松浦育敏氏(中外製薬(株))宛に提出されたい。

2)「化学物質名の機械処理に関する研究会」が10月27日に開催された報告。

3)企業の若手入門者トレーニング講習会を計画中。

4)日本学術会議化研連主催のシンポジウム「化学における情報の現状と将来」を共催。学術会議大会議室で、平成2年1月19日(金)開催。世話人米田幸夫先生(東海大)。

5)ワークショップ開催「新しい領域としてのケモメトリックスーその現状と将来展望」。お茶の水女子大で、平成2年1月22日(月)午後。世話人藤枝修子(お茶の水女大)。

編集から：今年度から編集担当幹事がほとんど交代したが、CICSJ Bull.の編集業務は軌道に乗っており、特集を検討中である。「21世紀の情報化学の重要テーマと実現時間」のテーマで、デルファイ方式のアンケートを行い、第1回は10月31日、第2回は11月末締切予定で回答用紙を送付中である。各位の協力を依頼された。

総務から：1)部会内規変更 部会員の種類を正部会員、学生部会員、法人部会員の3種にする。他の2部会(コロイドおよび界面化学部会、生体機能関連化学部会)と共通に、学生部会員を新設し、また、今までの「準部会員」を止める。正部会員の年会費は、日化会員と非会員の区別のみにする。

2)次年度の計画に関するアンケート用紙を配布・依頼中。会場でもお願いしている。内容は、(1)講演会・ワークショップほかの企画で、どんな内容、テーマを希望されますか。(2)幹事候補の推薦。(3)部会の新しい発展のために、次年度の活動についてのご意見。(4)部会についての一般的なご意見。

(総務担当幹事 藤枝修子(お茶女大))

# 関連行事

シンポジウム 「化学における情報の現状と将来」 プログラム

日 時：1990年1月19日(金) 10:00-17:00

会 場：日本学術会議 大会議室(2階)

東京都港区六本木 7-22-34 (03-403-6291) 営団地下鉄 千代田線 乃木坂 0分

主催：日本学術会議化学研究連絡委員会

共催：日本化学研究会・日本化学会情報化学部会・日本農芸化学会・日本薬学会・日本分析化学会・化学工学会・高分子学会・情報知識学会・化学情報協会・日本科学技術情報センター

趣旨：化学の全ての分野で、文献検索、事象検索、物性推算、図形処理、分子設計、反応設計などの各領域にわたって、化学に関する情報、特に計算機による情報処理が活用されている。しかしながら、その利用の基盤となる、知識ベース・システムなどの新しい情報の取扱方の発想、データベースの構築や計算機プログラム・システムの開発は、わが国においては諸外国、特にアメリカにくらべて、著しく遅れていると言わざるを得ない。

特に大学等で化学情報学、情報化学の各基礎的領域での発想の展開・構築・開発・流通を促進することが必要であると考えられるので、小規模なシンポジウムを開催して、これらを促進する方策を討論・検討したい。

## プログラム

10:00 開会の挨拶：田丸 謙二(東京理科大学・日本学術会議化学研究連絡委員会委員長)

はじめに：米田 幸夫(東海大学開発技術研究所)

10:20-12:40 講演：

- (1) 千原 秀昭(大阪大学理学部・化学情報協会)「化学における情報の役割」
- (2) 佐々木 慎一(豊橋技術科学大学副学長)「化学情報の研究促進と教育」
- (3) 吉田 元二(住友化学工業(株))「企業における化学情報と大学の研究・教育への要望」
- (4) 藤原 譲(筑波大学 電子・情報)「化学のデータベースと知識ベースの開発と普及」

13:30-15:20 講演：

- (5) 野依 良治(名古屋大学理学部)「有機合成化学の研究における諸問題」
- (6) 梅山 秀明(北里大学薬学部)「薬学における情報の諸問題」
- (7) 大島 栄次(東京工業大学資源化学研究所)「化学工学における情報の諸問題」
- (8) 太田 隆久(東京大学農学部)「農芸化学における最近の諸問題」

15:30-17:00 パネル：「化学における情報システムを発展させるには？」

パネリスト：千原 秀昭・佐々木 慎一・吉田 元二・藤原 譲・野依 良治・田中 信行(東北大名誉教授・日本事務器(株))・藤原 鎮男(神奈川大学)

コメンテータ：田隅 三生(東京大学理学部)・荒木 啓介(日本科学技術情報センター)

司会者：米田 幸夫(東海大学開発技術研究所)

17:00 閉会の挨拶 米田 幸夫(日本学術会議化学研究連絡委員会委員)

参加費：無料。 資料実費 1,000 円

なお準備の都合上、参加ご希望の方は1990年1月12日までに下記へ葉書でお申し込みください。

宛先：106 東京都港区六本木 7-22-34 日本学術会議事務局 化学研究連絡委員会

「1990年情報学シンポジウム」開催案内

名称：1990年情報学シンポジウム

期日：1990年1月17日(水)～18日(木) 9:45～17:00

会場：日本学術会議講堂

〒106 東京都港区六本木 7-22-34 (地下鉄千代田線乃木坂駅前)

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ない、研究交流をはかる。本シンポジウムは1984年以来毎年開催されている。

共同主催：日本学術会議 情報学研究連絡委員会・学術文献情報研究連絡委員会・  
学術データ情報研究連絡委員会・情報工学研究連絡委員会  
情報処理学会・情報知識学会・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(予定を含む)：化学情報協会・学術情報センター・計測自動制御学会・  
国際電信電話(株)・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)・  
日本動物学会・日本農学会・日本分子生物学会・日本分析学会・日本薬学会

参加申込：氏名、連絡先、職名、資料必要の有無を葉書に記入し、1989年12月20日までに  
下記に申し込む(当日受付可。ただし資料の不足の際は事前登録者を優先)

参加費(資料代として)：共催学協会員5,000円 学生1,500円 一般7,000円

申込先：情報処理学会 シンポジウム担当 木村保明

〒106 東京都港区麻布台2-4-2 保科ビル3F Tel 03(505)0505

プログラム：

1月17日(水)

開会(9:45)

《特別講演》(10:00-11:00)

情報学の現状と展望

藤原 譲(筑波大)

《マルチメディア情報》(11:00-12:20)

オブジェクトベース述語論理型言語とその処理系の開発

畑中正行、藤田岳久、杉本重雄、田畑孝一(図書館情報大)

光ディスクを中心とした音声データベースシステム

牧野正三、城風敏彦、城戸健一(東北大)

丸め併合法を用いた一般化Hough変換によるデジタル画像からの円図形の検出

塩野 充(岡山理大)

連続画像の因子分析による動態機能解析 —— 肺換気シンチグラムを例にして

立川 光、中原寿喜太、土井昭孚、田辺正忠(香川医大)

《生物・医学情報》(13:20-15:00)

解剖学における情報処理体系

養老孟司、増田弥生(東大)

英語医学文献の機械翻訳の研究

—— 辞書登録とそれによる翻訳レベルの向上の定量的評価

木内貴弘、開原成允(東大)

蛋白質の属性データベース

沖林文規、Carl S. Jone、近藤 淑、姥澤愛子、次田 皓 (東理大)

蛋白質のデータベースを活用して生物進化を探る 大塚仁也、ほか4名 (東理大)

コンピュータ解析による大腸菌遺伝子のゲノム上の位置と転写方向の決定

渡辺日出海、国沢 隆 (東理大)

《情報システムの開発に向けて》(15:20-17:00)

データベースの意味表現と知的アクセス

上原祐介、渡邊豊英、吉田雄二 (名大)、福村晃夫 (中京大)

LAシステム開発用言語

今村俊雄、小田健夫 (塩野義製薬)

データベースから応用プログラムへの数値データ引き渡しの自動化

数値情報データベースの新しいサービス方式をめざして 磯本征雄 (名古屋市大)

ニューラルネットワークの薬学への応用

青山智夫 (日立コンピュータエンジニアリング)、鈴木雄二、市川 紘 (星薬科大)

時間を含む情報に関する考察

幡鎌 博 (富士通)

1月18日 (木)

《人文・社会系データベース》(10:00-12:00)

日本語テキスト・データベースの作成・利用ツールについて

堀池博巳、星野 聰 (京大)

べた書き入力に適した平行型パーサによる中国語文解析

寺下陽一、二口邦夫、鈴木 悟 (金沢工大)

G. H. ミードのテキスト・データベース

— その紹介と若干の分析例

後藤将之 (東大)

アイヌ・データベース — 人文社会科学への応用

熊本 孝 (北大)

AI技術を応用した経済統計データベース利用支援システム

賀山茂子、高藤 淳、川崎浄正 (CSK総合研究所)

多部門産業モデル開発に関するデータベースのコンセプトとデザイン

鶴野公郎 (筑波大)

《特別講演》(13:00-14:00)

情報学に期待するもの

渡辺 茂 (都立科学技術大)

《環境系データベース》(14:00-15:00)

地球環境研究 (気候研究) のためのデータの整備に向けて

増田耕一 (東大)

学術研究用データベース作成上の問題

— 歴史天候データベースの作成を通して

吉村 稔 (山梨大)

地図情報処理の都市計画への応用

澤田順夫、沼上英雄、長尾真紀子 (東芝)

《理工系データベース》(15:20-16:20)

法律文書「既存化学物質名簿」の検索

工藤喜弘、境 修 (山形大)

腐食環境中の低歪速度引張試験に関する材料データベースの試用

塚田 隆、横山憲夫、中島 甫 (日本原子力研究所)

鉄道における故障・事故データベースの構築と安全性評価

福田久治 (鉄道総合技術研究所)

《総括》(16:20-17:00)

# CCSの紹介

実験台付近での分子設計・スペクトル解析ツール

長瀬産業開発室

三橋 一夫

今日、化学研究または新製品開発に有効な手段となって来たコンピュータケミストリーの分野に関して、化学企業の研究活動に役立つことが出来ればと考えて、長瀬産業が販売を担当しているソフトウェアを紹介する。(なお、東洋情報システム㈱より引き継ぎ総代理店となった化学反応データベースSYNLIBについては、本誌Vol. 7, No. 3のCCS紹介を参照されたい。)

## 1. TEO/CHEMICAL

豊橋技術科学大学で開発されたTUTORSを日本データゼネラル社がシステム化した。分子設計と化合物データベースの総合化システムである、2次元グラフィックスを用いた分子設計システムとして機能的に最高水準にあり、データベースはユーザーの実験室内データ(インハウスデータベース)を収納しやすい形にしてある特徴は唯一のものと言える。1989年内にUNIXバージョンを上布、ディスプレイ品質も飛躍的に向上の予定。

### (A) 機能

#### (a) 分子設計

分子設計の機能としては以下の6つのモジュールが用意してあります。

##### 1. MOLIN

分子構造(2次元分子構造式)を入力するモジュールで、グラフィック画面でテンプレートを縦横に使い、マウスを使って非常に簡単に入力ができるように工夫されています。

##### 2. MBUILD

MOLINで描かれた2次元構造から幾何学的なアルゴリズムか簡易力場計算を用いた2つの方法により3次元構造を自動的に発生させることができるモジュールです。この機能の正確さではNO. 1と言えます。

##### 3. EDITOR

MBUILDで発生させた3次元構造の分子構造を修正するためのモジュールで、分子内で異常接近している様な部分を見つけて結合長、結合角、二面角を修正することができます。また、分子と分子を結合させたり切断したりすることもできます。

##### 4. MOLEC

分子を種々のモデル型(ワイヤモデル、ボール&スティック、スペースフィリング等)で表示さ

せるモジュールです。また、分子構造の細部のズーム機能や2分子の重ね合わせも行なうことができます。

#### 5. MM O I

QCPEから供給されている計算ソフトとのインターフェースのモジュールです。MOPAC, MM2始めPPP, CNDO/S等のソフトについてのインターフェースをもっています。ここでは量子化学計算からの結果もグラフィック表示(静電ポテンシャル、分子軌道図、双極子モーメント等)できる様になっています。

#### 6. CONFO

分子のコンフォメーション解析を行なうモジュールで力場計算としてMM2または、MM2PPを用い、分子構造の変化と内部エネルギーの関係をエネルギー図として表示したり、エネルギー図の任意の点を指示することにより対応するコンフォメーションの構造を即座に表示することができます。

### (b) 化合物データベース

MOLINで作成した2次元構造に、その化合物の特性(USER側で自由に設定可能)を加えたものをデータベースに登録することができます。

#### 7. RETREIV

MOLINで登録された化合物の2次元の構造式、及び付随するその物性値等の文字情報から検索することをできる様にいたモジュールです。属性であるTEXT検索はもちろん、化合物の全構造、部分構造をグラフィック入力して検索し、統合された画面に表示できます。

### (c) 構造活性相関

#### 8. MAXFIT

同様の活性を持つ化合物の構造式をMOLINで入力しそれらの化合物群からそれらに共通する最大の部分構造をグラフ理論を用いて抽出し、活性と構造の相関の検討に役立てることのできるモジュールです。

構造と活性の相関を画面上で構造式を見ながら考察できる世界で唯一の機能です。

#### 9. PATTERN

各種の構造活性相関のための統計解析のプログラムを揃えたモジュールで重回帰分析、クラスター分析、主成分分析等のほか順序の付いた多クラスの解析ができるORMACS法というプログラムも含んでいます。

### (B) 価格

システム 1,000万円~2,000万円

## (2) MOL-G RAPH

ダイキン工業が開発し、3次元グラフィックスワークステーション上で稼動する低分子から高分子まで取り扱いが可能な分子設計システムで、日本で最高の納入実績を持つシステムです。機能としては、コマンドを機能別に11個のモジュールに分けて構成されており、GWSの機能をフルに生かせる作りになっています。

### (A) 機能

#### 1. FILE

分子データのファイル入出力と分子データの格納された表示ウィンドーの管理を行います。既に解析されている分子構造を外部のデータベースから入力したり、これからモデリングを行うために必要な骨格構造を入力します。またモデリング後の分子データを出力します。

#### 2. BUILD

分子構造のモデリングを行います。内蔵するフラグメント・ライブラリーから目的の構造を選び出し、モデリングを行います。また、構造式を2次元的にスケッチし、3次元構造を生成する機能も有します。また、ポリマーをはじめペプチド蛋白質・DNAなどの生体高分子のモデリングを行えます。

#### 3. DISPLAY

分子構造の様々な表示を行います。ワイヤ図・ボール&スティック図・スペースフィル図・分子表面トポ図や、生体高分子の特徴的な表現であるリボン図・チューブ図などを分子構造の持つ性質で色分けして表示することができます。さらに、蛋白質の活性部位などの部分的に注目したい領域を抽出する機能ももっています。

#### 4. EXAMINE

分子構造の各種の検証を行います。複数分子を重ね合わせ、その時の分子体積の重なりを表示したり、分子の大きさを測定したり、コンフォメーション解析で空間分布やマップ表示を行いエネルギー的な評価を実施することができます。また、蛋白質のコンフォメーション解析のための機能や2次構造予測のための機能ももっています。

#### 5. MONITOR

分子内および分子間の相互作用をリアルタイムにモニターします。結合距離・結合角・ねじれ角をはじめ、近傍原子・接触原子のチェックを点線表示などで視覚的に確認しながらリアルタイムに見ることができます。さらに、分子内および分子間相互作用エネルギーを評価しながら分子構造のモデリングを進めることも可能です。

#### 6. COLOR

分子モデルおよび分子表面の各種の色分けが設定できます。

#### 7. BOND ROT

ボンド回りの回転を設定したり、解除したり、座標を更新したりできます。

設定できるボンドの数は最大10個までで、これらは同時に自由に回転することができます。

#### 8. UTILITY

説明用の2次元図形やテキストを作画したり、ブック形式の環境設定機能を行ったり、分子データの内部情報をリストしたり、分子データの幾何学情報を出力する機能をもっています。

#### 9. VIEW

分子の回転中心を設定したり、ある特定の方向に分子の向きを変更したり、任意軸方向への動きを定義したりします。また、アニメーションのために分子を自動回転させたり、立体視アダプターReal Visionを用いて立体視できるようにしたりもできます。

#### 10. CALC I/F

分子力場法、分子軌道法、分子動力学法、配座解析法などのQCPEソフトウェアやAMBERなどの入力データを対話的に作成し、実行環境を定義し、バックグラウンドプロセスとして実行します。実行後、MOL-GRAPHの標準形式に自動的に変換されるので、その結果を容易に検証することが可能です。

#### 11. OPERATE

操作の対象となる分子の選択機能や回転・並進・スケール機能、クリップ・パースバクティブ機能、ステレオ表示機能などから成っています。

### (B) 価格

システム 2,000万円～

### (3) CHEMICS

CHEMICSは豊橋技術科学大学で、20年来研究されてきたプログラムであり、NMR, IR等のスペクトルデータと分子式やその他の情報を単独又は複数入力して目的の化合物の構造を予測するシステムです。

#### (A) 機能(CHEMICS Ver.1)

CHEMICSでは、C, H, N, D, S, ハロゲンの各元素から成る分子の取り扱いが可能になっています。データとしては、

(a) 分子式

(b)  $^1\text{H}$ -NMR、 $^{13}\text{C}$ -NMR スペクトルデータ

(c)  $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$ 、 $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$  シグナル結合情報

(d) 部分構造情報

(e) IRスペクトルデータ

以上が、入力可能です。CHEMICSはこれらの情報を解析し、考えられる候補構造を漏れなく提示します。部分構造の情報は、必ず存在するもの、

又、絶対に存在しない部分構造の両方を入力することができ、研究者のもつスペクトルデータ以外の情報も利用し、解析することが可能です。又、検定ルーチンでは、 $^{13}\text{C}$ -NMRのシグナル数を予測しさらに候補構造を絞り込むことができます。これらの操作はすべて対話形式でHELP機能も利用して簡単に実施でき、初心者、非専門家でも無理なく扱うことができます。

(B) ハードウェア環境

VAX (DEC)、PS 55 (IBH, OS/2) 始め、SUN (UNIX) 等多くの種類のハードウェア上で稼働させることができます。

(C) 今後のバージョンアップ

1.  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSYデータが入力可能
2.  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ 、 $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$  COSYデータから自動的にシグナル結合情報を獲得する。
3. 帰属情報付部分構造入力が可能
4. 分子の一部分だけの構造決定

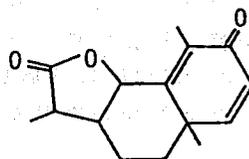
以上の様な機能が今年中に追加される予定になっています。

(D) 実施例

以下の分子式、 $^{13}\text{C}$ -NMRデータとC-Cシグナル結合情報から、原子のアサイメントも付け、候補構造が提示されました。



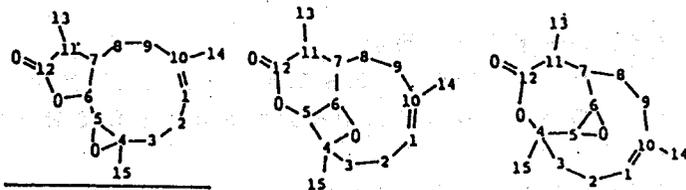
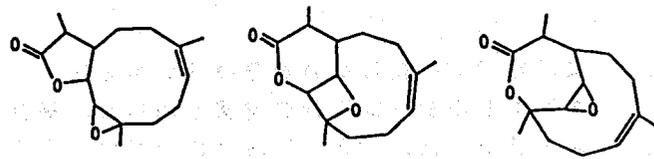
	$^{13}\text{C}$ -NMR		C-C SIGNAL	
	PPM	MULT.	CONNECTIVITY	
1.	185.7	1	1	5
2.	177.2	1	1	6
3.	155.0	2	3	6
4.	151.2	1	4	5
5.	127.6	1	4	7
6.	125.0	2	2	10
7.	80.9	2	3	9
8.	53.1	2	4	9
9.	41.0	1	5	15
10.	40.4	2	7	8
11.	37.2	3	8	10
12.	22.3	3	9	11
13.	24.6	4	8	12
14.	12.0	4	9	13
15.	10.2	4	11	12
			10	14



$C_{15}H_{22}O_3$  11,13-Dihydroparthenolide

	$^{13}C$ -NMR		C-C SIGNAL	
	PPH	MULT.	CONNECTIVITY	
1.	125.00	2	1	2
2.	24.00	3	1	10
3.	36.60	3	2	3
4.	61.30	1	3	4
5.	66.60	2	4	5
6.	82.00	2	4	15
7.	51.80	2	5	6
8.	29.70	3	6	7
9.	41.00	3	7	8
10.	134.40	1	7	11
11.	42.30	2	8	9
12.	177.20	1	9	10
13.	13.10	4	10	14
14.	16.70	4	11	12
15.	17.00	4	11	13

(F.J. Parodi et al., SPECTROSCOPY LETTERS, 20(1987)445)



#### (4) 3D-MOL, MM2PPキット, パソコンMOPAC

パソコン（主にNECの9800シリーズ）で動く本格的な分子設計支援ソフトとして、東レシステムセンターが開発したシステムです。手元で手軽に分子のモデリングから理論計算まで行なえ、現在までに200本以上の納入実績を持っています。

##### (A) 機能

###### 1. 3D-MOL

3次元の分子部品（官能基、環状物、アミノ酸残基または任意の分子の部分構造）を立体的に組合せていくことによって分子をモデリングしていくことができます。又、作成した分子構造の結合長、結合角、二面角の変更や原子、置換基の変更なども簡単に行なえます。理論計算プログラムとのインターフェースも力場計算としてはMM2'及びMM2PPと、軌道計算としてはMOPACとの入出力のインターフェースを持っています。

###### 2. MM2PPキット

$\pi$ 系共役系の分子も扱える力場計算プログラムとしてMM2'とMMPPIを組合せたものです。3D-MOLをお持ちでない方の為に入力ファイルを作成する支援ソフトも付いています。

###### 3. パソコンMOPAC

軌道計算プログラムとして、広く利用されているMOPACプログラムをNEC9800用に移植したものです。MM2PP同様、計算には数値演算プロセッサが必要です。

##### (B) 価格

3D-MOL 19万円

MM2PPキット 6万円

パソコンMOPAC 9万円

より詳しい内容は下記までお問い合わせ下さい。

長瀬産業株式会社 開発室 三橋、上田

〒103 中央区日本橋小舟町5-1 03-665-3861

化学企業における コンピュータ・ケミストリー

アンケート方式で調査されたコンピュータ・ケミストリーへの対応状況について、調査を実施された長瀬産業(株)開発室の御好意で転載させて戴くものである。

調査対象は下記の通り民間の化学系企業205社233研究所に及ぶもので、国内各社のこの分野への考え方の現状が伺える資料で、会員各位の今後の対応の一助になるものと思ひ、掲載させて頂いた。

(編集委員)

回答企業の業種

石油精製業	9社	10研究所
無機化学工業	13社	14研究所
有機化学工業	47社	60研究所
化学繊維工業	8社	11研究所
油化学工業	17社	22研究所
医・農薬工業	56社	60研究所
プラスチック工業	6社	6研究所
食品工業	16社	16研究所
その他	33社	34研究所
合計	205社	233研究所

アンケートの回答最終集計結果

1. コンピュータ・ケミストリーに対するイメージ 回答者数 227  
をお尋ねします。

  - (イ) 今後の研究に非常に役立つ。 ..... 53
  - (ロ) 今後の研究に役立つと思う。 ..... 156
  - (ハ) 今後の研究にあまり役立たないと思う。 ..... 19
  - (ニ) 今後の研究に全く役立たないと思う。 ..... 1
2. どんなものがコンピュータ・ケミストリーに入  
ると思われますか。 ..... コンピュータケミストリー 中でも  
データベース ..... に入るもの 重要だと思はる

  - 1. オンラインで提供されるもの (CAS, DIALOG, ..... 99 39  
JICST, etc.)

2. インハウス 化学反応データベース	120	17
3. インハウス 化合物データベース (構造式+特性, 用途等)	162	47
4. 外部機関から提供される化学反応データベース	129	33
5. 外部機関から提供される化合物データベース	129	20

分子モデリング	コンピューケミストリー に入るもの	中でも 重要だと思う
6. 分子の三次元表示 (グラフィック; ボールアンドスティック, スケルトン, スペースフィリング)	169	44
7. 量子化学計算 (MO法)	134	30
8. 分子力場計算 (MM法)	123	18
9. 量子化学計算結果のグラフィック表示 (電子密度, 最適構造, 静電ポテンHOMO・LUMO等分子軌道図等)	153	40
10. レセプター・リガンド理論のグラフィック表現による検討	130	39
11. 量子化学計算を利用した反応性, 安定性の評価	151	63

解析	コンピューケミストリー に入るもの	中でも 重要だと思う
12. 構造活性 (特性) 相関 (コンピュータによる統計手法を用いた解析)	172	73
13. コンピュータによる活性骨格構造の抽出	150	35
14. コンピュータによるターゲット化合物の自動創出	134	51
15. コンピュータによる化合物の構造決定	127	35

計測	コンピューケミストリー に入るもの	中でも 重要だと思う
16. コンピュータによる計測機器からの直接データ獲得	70	16
17. 計測データのコンピュータによる処理	94	18
18. データの統計的処理	92	22
3. コンピュータ・ケミストリーへの対応について	回答者数 224	
(イ) 各社導入に急なので積極的に導入しようと考えている。	7	
(ロ) 我社の研究に非常に役に立つので積極的に導入する。	73	

(ハ) 他社の状況を見ながらあまり遅れないよ うに対応したい。	98
(ニ) 他社の状況を見ながら対応するが積極的 に導入するつもりはない。	39
(ホ) 我社の研究には役に立たないので導入す るつもりはない。	10
4. コンピュータ・ケミストリーの役割について (実験研究と比較して)	回答者数 228
(イ) 将来実験研究より大きな比重を占めるよ うになると思う。	9
(ロ) 将来実験研究と対等の比重をもつよう になるだろう。	36
(ハ) 将来実験研究を強力に支援するものにな る。	146
(ニ) 実験研究のあくまで補助である。	39
(ホ) 実験研究が本筋でコンピュータ・ケミス トリーはほとんど役に立たないだろう。	1
5. コンピュータ・ケミストリーに対応する人材の 問題についてお尋ねします。	回答者数 228
(イ) コンピュータ・ケミストリーに対応する には専門家の養成が必須である。	59
(ロ) コンピュータ・ケミストリーに対応する には専門家は初期には必要だが一般研究 者(合成者など)もこの知識はもつべき だ。	144
(ハ) 専門家に任すのは良くなく、一般研究者 が積極的にやるべきだ。	31
6. 現在貴社の状況は	回答者数 218
(イ) すでにコンピュータ・ケミストリーに対 応する人材、ハード、ソフトとも十分に あり積極的に展開している。	16
(ロ) すでにコンピュータ・ケミストリーに対 応している人材が少数ではあるが居る、 しかしソフト、ハードは充分でない。	65
(ハ) コンピュータ・ケミストリーに興味を持 ってやっている人はいる。	73
(ニ) コンピュータ・ケミストリーに対応でき る人材はいない。	67

7. 人材の養成には	回答者数	214
(イ) 社外から知識のある人を確保すべきである。	.....	9
(ロ) 新規採用時に大学から素養のある学生を確保すべきである。	.....	59
(ハ) 社内の適当な人材を大学等で留学教育する。	.....	72
(ニ) 社内の適当な人材を講習会等で教育し、後は個人の努力に任せる。	.....	106
(ホ) 人材は養成せず、社外機関との契約で進めるべきだ。	.....	12

8. 人材の人員は何人ぐらいが適当だと思われますか。

当面	回答者数	193	将来	回答者数	191
(イ) 多い方がいい。	.....	5	(イ) 多い方がいい。	.....	37
(ロ) 10~15人	.....	5	(ロ) 10~15人	.....	31
(ハ) 5~6人	.....	34	(ハ) 5~6人	.....	67
(ニ) 2~3人	.....	66	(ニ) 2~3人	.....	39
(ホ) 1~2人	.....	83	(ホ) 1~2人	.....	20

9. 人材養成の為に講習会について

(イ) あれば是非参加させたい。	回答者数	206
希望される適当な内容は		
(A) 理論	.....	26
(B) 具体的使用方法のレクチャー	.....	50
(C) 実習	.....	38
(D) 全般	.....	48
(ロ) 積極的に行かせるつもりはないが希望者がいればやらせる。	.....	81
(ニ) 行かせるつもりはない。	.....	11

10. 人材の養成時期は

(イ) 既に養成済である。	回答者数	211
(ロ) 今すぐに養成にかかりたい。	.....	35
(ハ) あまりあせって養成する必要はない。	.....	55
(ニ) 当面養成するつもりはない。	.....	103
	.....	20

11. コンピュータ・ケミストリーを導入するにあたって人材の教育は

(イ) システム導入決定以前に充分にしておくべきだ。	回答者数	208
(ロ) システム導入決定以前に少し教育し、後は導入後実地で経験させる。	.....	60
	.....	122

(ハ) システム導入と同時に充分で、使用しながら進めていく。	26
15. 化学に関するデータ・ベースとしてどのようなものを御存知ですか。	回答者数 203
(イ) DIALOGの各種データ・ベース	183
(ロ) JICST	191
(ハ) PATOLIS	167
(ニ) MACCS	87
(ホ) REACCS	87
(ヘ) SYNLIB	71
(ト) その他	14
16. 外部からデータ・ベースを購入するのであればどのようなデータ・ベースを最優先されますか。	回答者数 194
(イ) 有機試薬的な全般的に利用度が高いと思われる化合物の構造、物性等の検索ができるデータ・ベース。	67
(ロ) 代表的な合成反応が検索できるデータ・ベース。	80
(ハ) 限定された分野での化合物情報、特許情報などのデータ・ベース。	82
17. 分子設計用ソフトとしてどんなものを御存じですか。	回答者数 145
(イ) TEO/CHEMICAL	56
(ロ) CHEMLAB-II	74
(ハ) Chem-X	62
(ニ) ANCHOR	96
(ホ) ACACS	75
(ヘ) MOL-GRAPH	74
(ト) BIOCES	54
(チ) ADAPT	62
(リ) MOGLI	43
(ヌ) SYBYL	55
(ル) MENDYL	37
(ヲ) MODEL-MATE	23
(ワ) その他	12

18. コンピュータ・ケミストリーに対する投資についてお尋ねします。	回答者数	182
投資の時期について		
(イ) 当分様子を見るつもりである。	.....	84
(ロ) 3～5年以内に投資を考えたい。	.....	66
(ハ) 来年度に投資を考えたい。	.....	17
(ニ) 今年度に投資する考えがある。	.....	17
(ホ) 既に導入済	.....	1
投資金額について		
(イ) パソコン及びパソコンソフトで当分やってみる。(30～100万円)	.....	67
(ロ) EWS (小型ミニコン) を購入して量子化学計算だけをする。(300～600万円)	.....	17
(ハ) EWSと少しアプリケーション ソフトウェアを購入して量子化学計算を利用した分子設計を行う。(1,000万円～2,000万円)	.....	41
(ニ) EWSと外国製ソフトを購入して分子設計やデータベース構築を行う。(3,000～6,000万円)	.....	35
(ホ) 汎用機に本格的パッケージソフトを導入する。(1億円～2億円)	.....	16
(ヘ) スーパーコンピュータを導入する。(2億～10億円)	.....	3
現状での投資の際の形態を強いて分類すると		
(イ) 担当者レベルからのボトムアップ。	.....	97
(ロ) 所長、室長等トップからの指示。	.....	35
(ハ) 委員会を設けて意思決定。	.....	35
(ニ) 個人に責任を持たせて調査、検討させる。	.....	22

第2回日独スペクトルデータベースワークショップ報告

豊橋技術科学大学 阿部英次

このワークショップは日独科学技術協力協定（所轄官庁：科学技術庁）に基づく情報・ドキュメンテーションパネルの一環として、第1回が1988年4月に筑波市で開催された。この第1回に続いて今回も参加の機会を得たので、その概要をご報告する。

場所： 西ベルリン、FachinformationsZentrum(FIZ) Chemie

日時： 1989年10月19, 20日

研究発表

日本側

田辺和俊（化学技術研究所）

An Overview on the Spectral Database Systems SDBS and the Current Status of the Infrared Spectral Database in NCL

藤原 譲（筑波大学）

NMR Database System on CD-ROM for Polymer Research

阿部英次（豊橋技術科学大学）

A Personal Computer Program System for NMR Database Construction

西独側：

P. Luksch(FIZ Karlsruhe)

Spectroscopic Databases Online: Experience and Perspectives

D. Henneberg(Max Plank Institute)

New Mass Spectroscopic Components

R. Neudert(BASF)

Recent Developments in the SPECINFO Project

J. Gasteiger(Technical University of Munchen)

The Simulation of Mass Spectra Based on Physicochemical Parameters

H. Somberg(Bruker)

The Role of Instrument Manufacturers in Database Development

その他4件のデモンストレーションが行なわれた。

当初予定されていたChemical Concepts社のM. Weller氏の発表は同氏の急病のため中止された。この会社は化学関連の出版社の老舗である VCH社とFIZ Chemieの共同出資で本年9月に創立されたもので、データベースと化学エキスパートシステムの開発と販売を行なうとのことであった。西独国内で開発されたソフトウェアやデータベースは今後すべて(?)この会社が扱うことになるだろうとの説明があった。また、会社が軌道に乗るまでは西独連邦政府および州政府からの援助が予定されているとのことであった。

二日目の午後は総合討論にあてられ、先ず日本側のキーパーソンである西島 敏氏(金属材料研究所)から日本におけるデータベースの開発およびサービスの現状調査の結果が報告された。続いて本ワークショップの今後の方向としてスペクトルデータベース関連の日独間共同研究を推進することが決議された。その際提案された研究テーマは以下の通りである。

#### Proposed Joint Projects by R. Neudert, BASF

1. Structure Elucidation System
2. 3D-Structure Representation for Spectral Database
3. Automatic Assignments of Spectral Data
4. Multidimensional Pattern Recognition on Spectral Data
5. Polymer Spectral Database
6. Structure Generation
7. 2D-NMR Database
8. Quality Control, Standard Exchange Format(JCAMP\*)
9. Structure - IUPAC Nomenclature Mutual Conversion
10. X-Windows
11. Reaction Prediction
12. MS Spectrum Prediction
13. Largest Common Substructures
14. GC/MS/IR Interpretation
15. IR Interpretation

\*JCAMP(Joint Committee on Atomic and Molecular Physical data)

此処に挙げられたテーマは現在の化学情報 (Chemical Information)分野の研究課題のほとんど全てを網羅しているものであり、些か総花的な感を否めない。しかしいずれも重要であることは否定できず日独双方からコンタクトパーソンを決めて情報交換を行なうこととなった。詳細についてはいずれNewsletterの形で出席者らに流されることになっているので、機会を改めて報告したい。

MEETINGS

4-6 December 1989.

Workshop on Aspects of Molecular Graphics.

Pisa. ITALY.

Contact: Secretariat Molecular Graphics, c/o ICQEM, Via Risorgimento, 35, I-56125 Pisa, ITALY.

17-22 December 1989.

1989環太平洋国際化学会議 (PACIFICHEM '89)

連絡先: 日本化学会 PACIFICHEM '89係 (TEL: 03-258-9812)

4-8 December 1989.

Interchimie '89.

Paris-Nord Villepinte, FRANCE.

Contact: Interchimie '89, 17, rue d'Uzès, 75002 Paris, FRANCE.

24 January 1990.

Teleconference on Molecular Modelling for Biological Systems.

Narrowcast from San Diego, CA.

Contact: Cyrelle Gerson, American Chemical Society, Videoconference Courses, Education Division, Room 809, 1155 Sixteenth St., NW, Washington, DC 20036 (Collect at 202-872-8728).

5-8 March 1990.

41st Pittsburgh Conference.

New York, NY.

Contact: Linda Briggs, c/o Pittsburgh Conference Office, 300 Penn Center Plaza, Suite 332, Pittsburgh, PA 15235 (412-825-3220; FAX: 412-825-3224)

27-29 March 1990.

Supercomputing Japan '90

場所: 豊島区東池袋サンシャインコンベンションセンター東京

連絡先: Supercomputing Japan '90事務局 〒108 港区三田1-2-22 東洋ビル3F (TEL 03-769-3050)

27-30 March 1990.

2nd Biennial Workshop on Molecular Mechanics & Molecular Dynamics.

Tallahassee, FL.

Contact: Pat Meredith, SCRI, Dirac Library, Florida State University, Tallahassee, FL 32306-4052 (904-644-1010; BITNET: meredith@fsu).

8-13 April 1990.

American Crystallographic Association Annual Meeting.

New Orleans, LA.

Contact: Cheryl Klein, Department of Chemistry, Xavier University, 7325 Palmetto Street, New Orleans, LA 70125 (504-486-7411; BITNET: CLKCM@UNO).

22-27 April 1990.

199th ACS National Meeting.

Boston, MA.

Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

7-9 May 1990.

21st European Congress on Computer Applications in the Chemical Industry.

Den Haag, THE NETHERLANDS.  
Contact: Dr. J. M. van der Kamp, KIVI, 23 Prinsessegracht, 2500 GK Den Haag, THE NETHERLANDS.

3-6 June 1990.  
26th Annual Meeting of the Drug Information Association.  
San Francisco, CA.  
Contact: Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002, (215-628-2288 FAX: 215-641-12299).

1-6 July 1990.  
9th Annual International Conference on the Molecular Graphics Society.  
Uppsala, SWEDEN.  
Contact: Dr. B. Bywater, Molecular Biophysics Dept., Pharmacia AB, S-75182 Uppsala, SWEDEN.

8-14 July 1990.  
World Association of Theoretical Organic Chemists.  
Toronto, Ontario, CANADA.  
Contact: WATOC Congress 1990, c/o Department of Chemistry, University of Toronto, Toronto, Ontario, CANADA M5S 1A1.

19-28 15th General Assembly and International Congress.  
Bordeaux, FRANCE.  
Contact: Prof. M. Hospital, Lab de Cristallografie, Université de Bordeaux 1, 351 Course de la Liberation, 33405 Talence, FRANCE.

23-27 JULY 1990.  
Expanding Frontiers in Polypeptide and Peptide Structural Research.  
Whistler, British Columbia, CANADA.  
Contact: Dr. V. Renugopalakrishnan Harvard Medical School, Department of Orthopedic Surgery, 300 Longwood Avenue, Boston, MA 02115 (617-735-8413).

29 July-3 August.  
10th International Biophysics Congress.  
Vancouver, CANADA.  
Contact: Mr. L. Forget, Congress Manager, 10th International Biophysics Congress, National Research Council Canada, Ottawa, Ontario, CANADA K1A 0R6.

11-15 August 1990.  
The Fourth Protein Society Symposium.  
San Diego, CA.  
Contact: Mark K. Woods, Dept. of Biochemistry, SJ-70, University of Washington, Seattle, WA 98195 (206-526-9936).

26-31 August 1990.  
200th ACS National Meeting.  
Washington, DC.  
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

28-31 August 1990.  
コンピュータの材料科学・工学への応用 国際会議・展示会(CAMSE '90)  
連絡先: CAMSE '90 事務局 〒101 千代田区九段北1-8-10 日刊工業新聞事業局内 (03-222-7162, FAX; 03-221-7137)

15-20 October 1990.  
ELMAU 3: Computational Methods in Chemical Design.  
Schlo ß Elmau, WEST GERMANY.  
Contact: K. Thewes, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Plantz 1, D-4330 Mülheim a.d. Ruhr, WEST GERMANY. (49-208-30-64-88; FAX: 49-208-30-46-07).

14-19 April 1991.

201st ACS National Meeting.

Atlanta, GA.

Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036. (202-872-4396).

30 May-9 June 1991.

Static, Kinematic and Dynamic Aspects of Crystal and Molecular Structure.

Erice. Trapani, ITALY.

Contact: Prof. L. Riva Di Sanseverino, Dipartimento de Scienze Mineralogiche, Piazza Porta San Donato 1, 40126 Bologna, ITALY.

21-26 July 1991.

American Crystallographic Association Annual Meeting.

Toledo, OH.

Contact: Alan Pinkerton, Dept. of Chemistry, Univ. of Toledo, Toledo, OH 43606 (419-537-4568).

25-30 August 1991.

201st ACS National Meeting and 4th Chemical Congress of North America.

New York. NY.

Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036. (202-872-4396).

### 日本化学会事務局 仮事務所のお知らせ

日本化学会事務局は新化学会館竣工までの間、下記において業務を行いますのでお知らせ致します。

何かとご不便、ご迷惑をおかけいたすと存じますが、何卒ご協力を賜りますようお願い申し上げます。

#### 記

#### ①仮事務所住所

〒101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル 6, 7 階

(郵便物は旧住所でも届きます)

#### ②電話番号

東京(03)258-9811 (代表)

総務部: (03)258-9812

業務部: (03)258-9813 (部会事業一般、部会誌編集)

経理部: (03)258-9814

会員部: (03)258-9815 (部会入退会、送本)

編集第一部: (03)258-9816

編集第二部: (03)258-9817

会館建設室: (03)258-9818

常務理事室: (03)258-9819

図書室関係: (03)258-9811

#### ②ファクシミリ番号

(03)258-9810

# 文献紹介

## JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

No. 156 (January 1987)から192 (Feb. 1989) までの抜粋

Number 156, 1987

Experimental and theoretical dipole moments of purines in their ground and lowest excited single states, *J.-J. Aaron, M. D. Gaye, C. Párkányo, Nam Sook Cho and L. von Szentpály*, p.119

Force constant calculations for Ni (PX<sub>3</sub>)<sub>4</sub> molecules, *H. G. M. Edwards*, p.137

Non-bonded potentials for the atom-atom interactions Cl...O=C and H...O=C as derived from gas-phase data using molecular-mechanics calculations, *G. O. Bøstrom, P. Bakken and R. Stølevik*, p.229

The molecular structure of pyridine in the gas phase determined from electron diffraction, microwave and infrared data and ab-initio force-field calculations, *W. Pyckhout, N. Horemans, C. van Alsenoy, H. J. Geise and D. W. H. Rankin*, p.315

Number 157, 1987

Quantitative prediction and interpretation of vibrational spectra of organo-phosphorous compounds, Part I. Phosphine oxide (H<sub>3</sub>PO) and phosphinous acid (H<sub>2</sub>POH), *W. B. Person, J. S. Kwiatowski and R. J. Barlett*, p.237

Interpretation of infrared intensities of some simple hydrides, *T. Dudev, B. Galabov and W. J. Orville-Thomas*, p.289

Number 158, 1987

Torsional potentials and conformational structures in the halogen substituted molecules HOC-CH<sub>2</sub>X, HOC-CHX<sub>2</sub>, XOC-CH<sub>2</sub>X, XOC-CHX<sub>2</sub>, XH<sub>2</sub>C-CO-CH<sub>3</sub>, X<sub>2</sub>HC-CO-CH<sub>3</sub>, (XH<sub>2</sub>C)<sub>2</sub>CO, (X<sub>2</sub>HC)<sub>2</sub>CO, and (X<sub>3</sub>C)<sub>2</sub>CO(X=Cl,Br) as determined by molecular-mechanics calculations, *G. O. Bostrom, P. Bakken and R. Stølevik*, p.23

A theoretical study of solven effects on molecular electronic properties, *M. Saunders, G. A. Webb and M. S. Tute*, p.69

Stereochemistry of organic sulfur compounds, Part 18. Configurational assignment of conformationally homogeneous β-Oxygenated acyclic sulfoxides, *E. Brunet, J. L. Garcia Ruano, M. A. Hoyos, J. H. Rodríguez and F. Alcludia*, p.79

Dihedral angle of biphenyl compounds studied by theoretical calculations (dipole induced dipole, molecular mechanics) and experimental methods (electro-optic measurements, infrared spectroscopy), *S. Charbonnier, S. T. Beguemi, Y. T. N'Guessan, D. Legoff, A. Proutiere and R. Viani*, p.109

Interpretation of the microwave spectrum of 2-methoxy ethylamine using its ab initio structures, *W. Caminati, K. Siam, J. D. Ewbank and L. Schäfer*, p.237

Number 159, 1987

Vibrational spectra of conformers and UV induced rotamerization of chloromethyl-formate: matrix isolation infrared studies and ab initio calculations, *M. Räsänen, H. Kunttu, J. Murto and M. Dahqvist*, p.65

Dynamic NMR: comparison of the experimental barriers to internal rotation in *N,N*-dimethylformamide with those calculated by the ab initio SCF MO method, *V. S. Dimitrov, and J. A. Ladd*, p.107

A combined ab initio and gas electron diffraction study of the molecular structure of 1,1-dicyanocyclobutane, *M. Dakkouri, H. Ephardt, K. Siam, L. Schäfer and C. van Alsenoy*, p.123

A molecular mechanics force field for conformational analysis of alkanethiols and thioethers, *R. Fausto, J. J. C. Teixeira-Dias and P. R. Carey*, p.137

Potentials for the non-bonded atom-atom interactions  $Cl \cdots C(sp^2)$  and  $C(sp^3) \cdots C(sp^2)$  as derived from gas-phase data on chloropropenes and butenes using molecular mechanics calculations, *P. J. Stavnebrekk and R. Stølevik*, p.153

$\beta$ -Diketone interactions. Part 3.4- *N*-pyrrolidyl-3-penten-2-one: X-ray structure and theoretical calculations, *J. Emsley, N. J. Freeman, R. J. Parker, R. E. Overill and R. Kuroda*, p.173

C=O stretch mode splitting in the formic acid dimer: electrostatic models of the intermonomer interaction, *J. Dybal, T. C. Cheam and S. Krimm*, p.183

Torsional potentials and conformational structures for 3-chloropropanal  $ClH_2C-CH_2-CHO$  and 3-chloropropanoyl chloride  $ClH_2C-CH_2-COCl$  and parameter values for the nonbonding interaction  $C(sp^3) \cdots O(\text{Carbonyl})$  as used in molecular-mechanics calculations, *R. Stølevik, and P. Bakken*, p.311

Determination of Structural and vibrational properties of some lead compounds by pseudo-potential methods, *M. Nizam, Y. Bouteiller and M. Allavena*, p.365

#### Short Communication

Force constants of sulphur (VI) oxide and selenium (VI) oxide, *H. G. M. Edwards and V. Fawcett*, p.371

Number 160, 1987

Orbital interactions in 1,3-dithiane derivatives studied by UV photoelectron and MNDO method, *T. Vondrák and Z. Bastl*, p.117

Force constant calculations for tetrakis-trichlorophosphinenickel (0),  $Ni(PCl_3)_4$ , *R. M. Bligh-Smith and H. G. M. Edwards*, p.135

Molecular mechanics calculations of conformational structures, energies and torsional force constants in some bromopropenes and bromobutenes, *P. J. Stavnebrekk and R. Stølevik*, p. 143

6,6-dimethyl-1-oxa-spiro [2.5]octane. Conformational equilibrium in the gas phase as studied by microwave spectroscopy and molecular mechanics calculations, *H. Boulebnane, G. Roussy and P. Irtacabal*, p.259

Conformational analysis of the methyl ester of alanine by gas electron diffraction and ab initio geometry optimization, *J. D. Ewbank, V. J. Klimkowski, K. Siam and L. Schafer*, p.275

Molecular determinants for drug-receptors, Part 11: The preferred conformation of *N*-(*p*-anisoyl)Pyrrolidin-2-one ("Aniracetam") in the solid and solution states as indicated by X-ray crystal structure analysis, dipole moment and theoretical calculations, *G. Bandoli, M. Nicolini, H. Lumbroso, A. Grassi and G. C. Pappalardo*, p.297

Use of ab initio computational results and experimental frequencies to construct the internal rotational potential function for acrolein, *G. R. de Maré, Yu. N. Panchenko and A. V. Abramnikov*, p.327

Ab initio structures and vibrational analysis of the isoprene conformers, *Ch. W. Bock, Yu. N. Panchenko, A. S. Kranoshchiokov and R. Aroca*, p.337

Studies in hydrogen bonding: simulation of the crystalline solids of ice, ammonia, and ammonia hydrate, *G. Brink and L. Glasser*, p.357

Number 161, 1987

Conformational enthalpy and volume changes in bromocyclohexane determined by Raman spectroscopy, *D. J. Gardiner and N. A. Walker*, p.55

Site selective thermal stereoisomerization of matrix isolated molecules: simulation by molecular mechanics, *S. Charbonnier, R. Viani, J. Pourcin and H. Bodot*, p.265

Molecular mechanics calculations for conformational energies and torsional force constants in fluoropropenes and butenes, *P. J. Stavnebrekk and R. Stølevik*, p.283

A re-interpretation of the uv-photoelectron spectra of Dewar benzene, norbornadiene and barrelene by ab initio configuration interaction calculations, *M. H. Palmer*, p.333

Number 162, 1987

Heavily halogenated (F,Cl, Br) Propenes: torsional potentials and conformational structures obtained by molecular mechanics calculations, *P. J. Stavnebrekk, P. Bakken and R. Stølevik*, p.101

Quantitative prediction of structure-conformation relations in isobutyl and neopentyl alcohol from ethanol and propanol, *K. Siam, J. D. Ewbank and L. Schafer*, p.117

Number 172, 1988

Calculation of the vibrational spectra of cytosine derivatives by the CNDO/2 force method. Part I. Planar vibrations of 1-methylcytosin, *K. Kuczera, M. Szczesniak and K. Szczesniak*, p.73

Calculation of the vibrational spectra of cytosine derivatives by the CNDO/2 force method. Part II. Planar vibrations of 5-fluorocytosine, *K. Kuczaera, M. Szczesniak and K. Szczesniak*, p.89

Calculation of the vibrational spectra of cytosine derivatives by the CNDO/2 force method. Part III. Planar vibrations of cytosin, *K. Kuczera, M. Szczesniak and K. Szczesniak*, p.89

The vibrational spectra, structure, and conformational behavior of dimethyl dicarbonate, *P. L. Lang and J. E. Katon*, p.113

The ab initio analysis of molecular geometry and force fields in  $H_3XOXH_3$  (X=C, Si)series, *I. S. Ignatyev*, p.139

Conformational behavior of 1-pentyne and 1-hexyne, *G. A. Crowder*, p.151

Formation of dimanganese heptoxide,  $Mn_2O_7$ , by photolysis of  $Mn_2(CO)_{10}$  in  $O_2$ -doped argon matrices, *M. J. Almond*, p.157

Vibrational assignment and conformational equilibrium for 3-fluoropropene based on ab initio calculations and high resolution far-infrared spectroscopy, *J. R. Durig, T. J. Geyer, T. S. Little and D. T. Durig*, p.165

Molecular structures of *trans* and *cis* 1,3-dimethylcyclobutane studies by gas electron diffraction, *T. Jonvik, K. Griesbaum*, p.203

Molecular structure and puckering potential of chlorocyclobutane studied by gas electron diffraction and Hartree-Fock calculations, *T. Jonvik*, p.213

Torsional potentials and conformational structures in chloro and bromo derivatives of propenal and propenoic acid obtained by molecular-mechanics calculations, *G. O. Bøstrom, P. Bakken and R. Stolevik*, p.227

Molecular structure and conformation and 2-acetyl-5-methyl-1,2,3-diazaphosphole: the use of ab initio calculations in an electron diffraction study, *L. S. Khaikin, L. V. Vilkov and J. E. Boggs*, p.241

The cumulant-method in diffraction analysis of polyatomic molecules, *A. A. Ischenko, V. P. Spiridonov, Yu. I. Tarasov and A. A. Stuchebryukhov*, p.255

Molecular structures of tert-butyl alcohol and tert-butyl methyl ether as studies by gas electron diffraction combined with vibrational spectroscopy, *A. Suwa, H. Ohta and S. Konaka*, p.275

Solid-State structure and conformation of the cognition activator 3-phenoxy pyridine sulphate: X-ray, two-dimensional  $^1\text{H}$  NMR and  $^{13}\text{C}$  NMR, and theoretical MO-MNDO studies, *G. Bandoli, A. Grassi, E. Montoneri, G. C. Pappalardo and B. Perly*, p.369

#### Short Communication

Molecular mechanics calculations for some dimethylalkanes, *G. A. Crowder*, p.433

Number 173, 1988

Computations in vibrational intensity spectroscopy, *B. Galabov, T. Dudev, J. R. Durig, and W. J. Orville-Thomas*, p.111

New aspects in force field calculations, *J. Mink*, p. 253

Fourier transform methods for spectral resolution enhancement, *H. H. Mantsch, D. J. Moffatt and H. L. Casal*, p:285

Matrix isolation infrared spectrum and ab initio calculations of the boron trifluoride dimer. Tentative assignments, *F. M. M. O'Neill, G. A. Yeo and T. A. Ford*, p.337

Number 174, 1988

Comparison of experimental and "ab initio" intensity parameters, *M. Gussoni, M. N. Ramos, C. Castiglioni and G. Zerbi*, p.47

Characterization of the "Surface Enhanced Raman Scattering" by use of Raman-Spectroscopic and quantum mechanical investigations of simple cluster compounds, *P. Bleckmann, M. Thibud and H. D. Trippe*, p.59

Theoretical investigation of adsorption of water dimers on a Ni(110) surface, *M. Grodzicki and O. Kühnholz*, p.65

The rapid differentiation and identification of pathogenic bacteria using Fourier transform infrared spectroscopic and multivariate statistical analysis, *D. Naumann, V. Fijala, H. Labischinski and P. Giesbrecht*, p.165

SCF-MO Calculations and NMR measurements for alkenylphosphonates, *Y. G. Smeyers, A. Hernandez-Languna, M. Fernandez-Ibanez, C. I. Sainz-Diaz, E. Galvez-Ruano and M. S. Arias-Perez*, p.267

Quantum chemical assessment of the structure of an oxygen radical adsorbed on titania and detected by ESR spectroscopy, *J. C. Canesa, M. T. Saintz and J. Sproa*, p.337

Number 175, 1988

Nonlinear optical properties of organic molecules: a theoretical study with semi-empirical methods, *J. Hutter and G. Wagnière*, p.159

Vibrational spectra of alkali metal cyclopentadienides and force field calculation of free cyclopentadienyl anion, *O. G. Garkusha, I. A. Garbuzova, B. V. Lokshin and J. Mink*, p.165

Vibrational analysis of propene adsorbed in zeolites *Y. H. Förster and O. Zakhariyeva-Pencheva*, p.189

Molecular orbital calculations and normal coordinate analysis of CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>O in Zeolites, *M. Grodzicki, H. Forster and O. Zakhariyeva-Pencheva*, p.195

Application of Wiberg indices to geometry optimization. C-C Distances, *J. M. Martin, M. Fernandez and J. Tortajada*, p.203

New self-consistent potentials for the X<sup>1</sup> Σ<sup>+</sup> and A<sup>1</sup> Σ<sup>+</sup> states of KH, *A. Pardo, J. J. Camacho, J. M. L. Poyato, E. Martin and D. Reyman*, p.209

MRD-CI Ground state geometry and vertical spectrum of N<sub>3</sub>, *C. Petrongolo*, p.215

Pattern recognition applied to vapour-phase infrared spectra: characteristic of νOH bands, *G. Jalsovsky and S. Holly*, p.263

An ab initio spectroscopic study of the HCN...HCN AND HCN...HNC linear complexes, *M. N. Ramos, C. A. Taft, J. G. R. Tostes and W. A. Lester Jr.*, p.303

Noise in FT-IR spectral data processing, *M. Gil, N. Iza and J. Morcillo*, p.329

Ab initio molecular orbital calculations of the polar tensors and vibrational intensities, of HC<sub>3</sub>N, *M. N. Ramos, B. B. Neto, A. M. Simas and R. E. Bruns*, p.355

UPS and quantum-chemical study of compounds containing SiNCX (X=O,S) groups, *T. Veszpremi, T. Pasinszki, L. Nyulaszi, G. Csoknka and I. Barta*, p.411

The influence of disorder on the group-theoretically derived selection rules in ammonium halides, *H. Yuritsev and W. F. Sherman*, p. 459

Number 176, 1988

The molecular structure of isothiazole from electron diffraction and ab initio calculations, *G. Schultz, I. Hargittai and P. Friedman*, p.61

The molecular structure of tetrakis (trimethylsilyl) methane studied by gas-phase electron diffraction molecular mechanics, *B. Beagley, R. G. Pritchard, and J. O. Titloye*, p.81

Conformational analysis of polyfunctional amimic compounds by molecular mechanics. Part I. Methanediamines and 1,3-diazacyclohexanes, *L. Carballeria, R. A. Mosquera and M. A. Rios*, p.89

Number 177, 1988

Ab initio SCF-SDCI prediction of type II spectra and geometry of hydrogen dichloride ion,  $(\text{ClHCl})^-$ , *T. Saitoh and R. Itoh*, p.449

Theoretical studies of water clusters and consequences for gas-phase and liquid water, *Z. Slanina*, p.459

Number 178, 1988

Green's functions and diagrammatic technique in the theory of gas-phase electron diffraction on vibrationally excited polyatomic molecules. Part I., *A. A. Stuchebrukhov*, p.261

Calculations of structures of biphenyl and alkylbiphenyls by molecular mechanics. *S. Tsuzuki, K. Tanabe, Y. Nagawa, H. Nakanishi and E. Osawa*, p.277

Molecular mechanics calculations for *dl*, *meso*-2,3-dichlorobutanes and 2-halopropionyl chlorides, *N. L. Borkar, C. A. Kingsbury and E. P. Rack*, p.287

Molecular mechanics and X-ray crystallographic analysis of bicuculline salt conformations, *K. B. Lipkowitz, M. H. Aprison and R. D. Gilardi*, p.305

#### Short Communications

Molecular mechanics calculations for some trimethylalkanes, *G. A. Crowder*, p.335

Number 189, 1988

The structures, dipole moments and relative energy of the conformers of cyclobutyl acetylene by microwave and ab initio methods, *R. J. Berry, M. D. Harmony, M. Dakkouri, K. Siam and L. Schafer*, p.11

The conformation of ethyleneurea from microwave spectroscopy and ab initio computations, *R. Cervellati, A. Degli Esposti, D. G. Lister and R. Palmieri*, p.81

Number 190, 1988

Conformational analysis of gaseous 1-oxa-spiro [2.5] octane by microwave spectroscopy and molecular mechanics calculations, *H. Boulebnane, G. Roussy and P. Iratcabal*, p.7

Microwave spectrum and molecular structure of vinyl isocyanide: experimental and theoretical evaluation of conjugation, *T. -A. Chang, M. D. Harmony and S. W. Staley*, p.17

NMR chemical shifts and intramolecular van der Waals interactions: carbonyl and ether systems, *D. B. Chesnut, D. W. Wright and B. A. Krizek*, p.99

A variational calculation of the rotation-vibration energies for  $\text{H}_2\text{O}$  From ab initio data, *P. Jensen*, p.149

Number 192, 1988

The role of bond centred function in calculation of nuclear quadrupole coupling constant of  $^{14}\text{N}$  and  $^2\text{H}$  nuclei in HCN and HNC molecules, *G. Prasad, V. Keshari and P. Chandra*, p.253

Ab initio MO calculation of nuclear quadrupole coupling constants of  $^2\text{H}$ ,  $^7\text{Li}$  and  $^{35}\text{Cl}$  in LiCl and HCl molecules, *A. Lal, V. Keshari and P. Chandra*, p.263

Ab initio MO calculation of nuclear quadrupole coupling constant of  $^2\text{H}$ , and  $^{17}\text{O}$  nuclei in water molecule, *V. Keshari, S. P. Karna and P. Chandra*, p.271

# JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Number 198, 1989

*Special Issue: Molecular Spectroscopy and Molecular Structure – A Collection of Invited Papers in Honour of Professor W.J. Orville-Thomas*

## *Dedication to Professor W.J. Orville-Thomas*

Gas-phase structures of di-*t*-butyl ether and *t*-butyl methyl ether

S. Liedle, H.-G. Mack and H. Oberhammer (Tübingen, F.R.G.), M.T. Imam and N.L. Allinger (Athens, GA, U.S.A.), p. 17

Potential energy surface for the HCN dimer and trimer hydrogen-bonded complexes

W.B. Almeida and A. Hinchliffe (Manchester, Gt. Britain), p. 17

Benzenoids with hexagonal symmetry, including the rare animals "all-fakes"

S.J. Cyvin, B.N. Cyvin and J. Brunvoll (Trondheim, Norway), p. 31

Force-field calculations on and the Raman spectra of  $\text{NH}_n\text{D}_{3-n}$  ( $0 \leq n \leq 3$ ) molecules trapped in solid nitrogen

A. Loutellier and J.-P. Perchard (Paris, France), p. 51

Analysis of the infrared absorption spectra of solutions of water in some organic solvents

S.P. Paul and T.A. Ford (Johannesburg, South Africa), p. 65

Triatomic model of hydrogen-bond stretching modes in hydrogen-bonded dimers  $\text{B} \cdots \text{HX}$

Z. Kisiel (Warsaw, Poland), A.C. Legon (Exeter, Gt. Britain) and D.J. Millen (London, Gt. Britain), p. 77

Anomalous double minima in the angular variation of ENDOR transitions

C.A. McDowell and D.L. Sastry (Vancouver, B.C., Canada), p. 85

The quantum theory, calculation method and properties of the electro-optical parameters

of some polyatomic organic compounds

L.A. Gribov and S.V. Kotov (Moscow, U.S.S.R.), p. 93

Differences in the structures of highly polar and hydrogen bonded liquids

P.L. Huyskens (Leuven, Belgium), p. 123

The basicity of the two carbonyl bonds in uracil derivatives

Th. Zeegers-Huyskens (Heverlee, Belgium), p. 135

Ab initio study of the effect of cation binding on the electronic structure of proteins

A.K. Bakhshi, J. Ladik and P. Otto (Erlangen, F.R.G.), p. 143

Bond-dissociation energies of organic compounds. A tentative rationalization based on the concept of stabilization energy

G. Leroy, M. Sana, C. Willante (Louvain-la-Neuve, Belgium) and R.M. Nemba (Youndé, Cameroun), p. 159

An MO study of the transferability of infrared intensity parameters in alkyl ethers

S. Ilieva and B. Galabov (Sofia, Bulgaria), p. 175

The quantitative prediction and interpretation of the vibrational spectra of organophosphorus compounds. Part II. Methylphosphonic difluoride  $\text{CH}_3(\text{PO})\text{F}_2$ , methylphosphonothioic difluoride  $\text{CH}_3(\text{PS})\text{F}_2$  and methylphosphonofluoric acid  $\text{CH}_3(\text{PO})\text{FOH}$

J.S. Kwiatkowski, K. Kubulat, W.B. Person and R.J. Bartlett (Gainesville, FL, U.S.A.) and J. Leszczynski (Birmingham, AL, U.S.A.), p. 187

The potential energy surface and equilibrium geometry of  $\text{Ar} \cdots \text{PH}_3$

Z. Latajka and S. Scheiner (Carbondale, IL, U.S.A.), p. 205

Electronic structure and bonding of transition metal complexes  $\text{MCO}$  ( $\text{M} = \text{Ru}, \text{Os}$ )

A. Daoudi, M. Suard (Palaiseau, France), J.C. Barthelat (Toulouse, France) and G. Berthier (Paris, France), p. 215

The conjugated-circuit model: application to benzenoid hydrocarbons

S. Nikolić (Galveston, TX, U.S.A.), M. Randić (Ames, IA, U.S.A.), D.J. Klein (Galveston, TX, U.S.A.), D. Plavšić (Croatia, Yugoslavia) and N. Trinajstić (Galveston, TX, U.S.A.), p. 223

Vibrational spectra and conformational analysis of chloromethylchloroformate

F. Daeyaert and B.J. van der Veken (Antwerpen, Belgium), p. 239

A study of orbital interactions in the reactions of bicyclo[1.1.0]butane

H. Fujimoto, T. Yabuki and K. Fukui (Kyoto, Japan), p. 267

Nature of the protonic species and the gel-crystal transition in hydrated zirconium phosphate

P. Colombar (Palaiseau, France) and A. Novak (Thiais, France), p. 277

- Quantum-mechanical studies of the structures of cytosine dimers and guanine-cytosine pairs  
R. Czerminski (Warsaw, Poland), J.S. Kwiatkowski (Torun, Poland), W.B. Person and K. Szczepaniak (Gainesville, FL, U.S.A.) , p. 297
- The electronic spectra of benzo[b]thiote and transient *o*-thiobenzoquinonemethide. Spectral assignments on the basis of the electronic spectra of aniline, thiophenol, thioanisole, *all-trans*-octatetraene and transient *o*-xylylene in conjunction with quantum-chemical calculations  
A. Schweig, F. Diehl, K. Kesper and H. Meyer (Marsburg, F.R.G.) , p. 307
- Complexation of guanine with dissolved oxygen in solution and study of excited-state lifetime  
C. Santhosh and P.C. Mishra (Varanasi, India) , p. 327
- Intramolecular sulphur-oxygen interaction in organosulphur compounds with different sulphur valence state: an X-ray study of methyl-2-nitrobenzene-sulphenate,-sulphinate,-sulphonate and 2-nitrobenzenesulphenyl chloride  
Á. Kucsman, I. Kapovits, M. Czugler, L. Párkányi and A. Kálmán (Budapest, Hungary) , p. 339
- Intramolecular sulphur(II)-oxygen interaction in acyl chlorides: an X-ray study of 2,2'-thiodibenzoyl chloride and 2,2'-dithiodibenzoyl chloride  
L. Párkányi, A. Kálmán, A. Kucsman and I. Kapovits (Budapest, Hungary) , p. 355
- Conformational stability, barriers to internal rotation, ab initio calculations and vibrational assignment of fluoroacetyl fluoride  
J.R. Durig, H.V. Phan, J.A. Hardin, R.J. Berry and T.S. Little (Columbia, SC, U.S.A.) , p. 365
- A theoretical study of the  $C_3H_4^{2+}$  potential energy surface  
M.W. Wong and L. Radom (Canberra, A.C.T., Australia) , p. 391
- Raman and infrared spectroscopic studies of the low- and high-temperature forms of octahalo cyclic phosphazene tetramers,  $P_4N_4Cl_8$  and  $P_4N_4F_8$   
V. Varma, J.R. Fernandes and C.N.R. Rao (Bangalore, India) , p. 403
- Bonded tableau method for many-electron systems  
Zhang Qianer and Li Xiangzhu (Fujian, People's Republic of China) , p. 413
- Critical appraisal of some current semiempirical methods in calculating ESCA chemical shifts  
Z.B. Maksić and S. Supek (Zagreb, Yugoslavia) , p. 427
- An infrared study of the effect of liquid ammonia on wood surfaces  
N.L. Owen and Z. Pawlak (Provo, UT, U.S.A.) , p. 435
- FTIR study of the protonation of a Schiff base in chloroform-methanol mixtures  
C. Rhofer, H. Le-Thanh, D. Vocelle and C. Sandorfy (Montreal, Que., Canada) , p. 451
- Proton transfer in the  $HCOOH-CH_3NH_2$  complex. Ab initio study with various basis sets and solvent reaction field  
M. Hodošček and D. Hadži (Ljubljana, Yugoslavia) , p. 461
- A simple way to obtain information on charge distribution in molecules directly from infrared spectra: the case of C-H bonds  
C. Castiglioni, M. Gussoni and G. Zerbi (Milan, Italy) , p. 475
- An ab-initio SCF-MO study of the solvent effect in  $\alpha$ -substituted carbanions  
F. Bernardi, G. S. Valli and A. Venturini (Bologna, Italy) , p. 489
- Reversible proton transfer in the 2,3,5,6-tetrachlorophenol-*N,N*-dimethylaniline hydrogen-bonded complex studied by low-temperature  $^1H$  NMR spectroscopy  
M. Ilczyszyn, H. Ratajczak (Wroclaw, Poland) and J.A. Ladd (Salford, Gt. Britain) , p. 499
- Polarized infrared and Raman spectra of caesium hydrogen succinate monohydrate single crystal  
M.M. Ilczyszyn, H. Ratajczak (Wroclaw, Poland) and A.J. Barnes (Salford, Gt. Britain) , p. 505
- Short Communication*
- Sulfur-edge X-ray absorption near edge spectra (XANES) of some thiometallates and thiometallato complexes  
V. Wittneben, A. Sprafke, E. Diemann, A. Muller (Bielefeld, West Germany), M. Kuetgens, R. Chauvistré and J. Hormes (Bonn, West Germany) , p. 525

## TETRAHEDRON COMPUTER METHODOLOGY

1989年第1卷第3号 发表题目、著者、页

Characterization and selection of atom-pair potential functions for conformational analysis, *R. J. Crawford, R. A. Pearlstein, M. Mabilia and A. J. Hopfinger*, p.185

Transputer implementations of chemical substructure searching algorithms, *Geoffrey M. Downs, Michael F. Lynch, Peter Willett, Gordon A. Manson and George A. Wilson*, p.207

Capturing chemical information in an extended relational database system, *Thomas R. Hagadone and Michael S. Lajiness*, p.231

A. BASIC program for HPGL plotting of chemical data, *Jose R. Escabi-Perez*, p. 231

Computer-assisted automated synthesis-I. Computer-controlled reaction of substituted N-(Carboxyalkyl)amino acids, *Nobuyuki Hayashi and Tohru Sugawara*, p.237

Desktop publishing for the chemist on an IBM PC: a middle of the road approach, *Hei-Wun Leung, Albert Wai-Ming Lee, Ching-Wan Yip, Kwok-Ming Tam and Hok-Kam Tse*, p.247

Contents of Disk 1 to 3

Disk 1: READ.ME describes contents of all disks. ASCII files of each manuscript by author, editorial, and ChemText™ document files (only readable with ChemText); HAGADONE.DOC and LEUNG.DOC for Hagadone and Leung papers, respectively.

Disk 2: ChemText document files (only readable with ChemText ); HAYASHI.DOC, PEREZ.DOC, and HOPFIING.DOC; READ.ME describes files.

Disk 3: HOPFINGE subdirectory: REFERENCE.CHM, a CHEMLAB™ molecule file of reference geometry; SCANRUN.LOG log of CHEMLAB modeling reported in paper; PLOTCHER subdirectory: PLOTCHER.BAS and PLOTCHER.EXE Basic source code and PC executable for Perez's paper, SAMPLE1.DAT data for PLOTCHER program, SAMPLE1.HGL HPGL plot instructions generated by PLOTCHER, PLOT.BAT startup for PLOTCHER, READ.ME describes files; TEMPLATE subdirectory:\* DRW Freelance™ template files for Leung's paper, READ.ME describes files.

1989年第2卷第1号 发表题目、著者、页

Simulation of <sup>13</sup>C NMR spectra, *Livija Lah, Marjan Tusar and Jure Zupan*, p.5

Prediction of gas chromatographic response factors by the PLS method, *Giuseppe Musumarra, Danilo Pisano, Alan R. Katritzky, Andrzej R. Lapucha, Franz J. Luxem, Ramiah Murugan, Michael Siskin and Glen Brons*, p.17

Residual chargers on atoms in organic structures: a new algorithm for their calculation, *Luca Bauner, Giordano Sala and Guido Sello*, p. 37

KC Expert-a knowledge-based tool for chemists, *G. Scott Owen and Taylor Binkley*, p.47

SESAMI: an expert system for bioassay-directed isolation of active compounds, *Yves Francois Pouchus, Abdel Fatah Benslimane and Jean-Francois Verbist*, p.55

MolDraw: molecular graphics for the Macintosh, *Jean Michel Cense*, p.65

Contents of Disk 1 to 5

Disk 1: ASCII files of each manuscript by author (\* ASC); Macintosh Instructions for Authors (AUTHOR, MAC); Chem Text file of Sello paper (SELLO.DOC); UTILITY subdirectory: MDLTOACR.EXE and FOR, conversion from MDL MolFile to AcroSpin data

file by Mike Pitman, MOLA.MOL sample MolFile.

Disk 2: SIMULA subdirectory: Zupan @+(13)C prediction program, READ.ME describes files; PREDICT SUBDIRECTORY: TABLE1.DAT raw data, PREDICT.FOR and PREDICT.EXE program for predicting gas chromatographic response factors.

Disk 3: RESCHA subdirectory: Sello residual charge calculation source and executable program (RESCHA. \* )and sample MolFile (PPROST.MOL); SESAME subdirectory: Pouchus bioassay system (SESAME.EXE)and data files, READ.ME describes files: ACROSPIN subdirectory: demo version of ACROSPIN program for 3-D rotation of models (see Smith review).

Disk 4: KCEXPRT.ARC Owen executable expert system in ARC format; KCSOURCE. ARC, Prolog source code (Disk 1 READ. ME lists contents); READ.ME describes searching and installation.

Disk 5: (Macintosh 3.5" double-sided format) ASCII text files of each manuscript by author name ( \* ASC); CENSE.MSW Microsoft Word version of Cense paper on MOLDRAW; AUTHOR.MAC addendum to Instructions for Authors for Macintosh; TCMFORMAT.MSW a shell paper in TCM FORMAT FOR Microsoft Word with style sheet; MolDrawfolder contains the Cense MolDraw executable program, Mld/Word User's manual in Word format, MolText editor, and sample molecule files; READ.ME describes files.

## JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

1989年第7卷2号(6月) 論文題目、著者、頁

### CONFERENCE PAPERS

from the Symposium on Molecular Recognition: Its Role in Chemistry and Biochemistry-Sopron, Hungary 24-27 August 1988

Applications of molecular graphics for the study of recognition, *A. C. T. North*, p.67

Polyamine interaction with Z-DNA, *K. Tomita, T. Hakoshima, K. Inubushi, S. Kunisawa, H. Ohishi, G. A. van der Marel, J. H. van Boom, A. H.-J. Wang and A. Rich*, p.71

Electrostatic complementarity in molecular associations, *G. Náráy-Szabó*, p.76

Molecular conformation and ion transport of cyclic and linear ionophores, *W. L. Duax, D. A. Langs, W. A. Pangborn, G. D. Smith, V. Z. Pletnev and V. T. Ivanov*, p.82

Studying enzyme- $\beta$ -lactam interactions using X-ray diffraction, *J. A. Kelly, J. R. Knox and H. Zhao*, p.87

Abstracts from the Symposium on Molecular recognition, p.93

Color illustrations, p.97

### REGULAR PAPERS

Identifying targets for bioreductive agents: using GRID to predict selective binding regions of proteins, *C. A. Reynolds, R. C. Wade, P. J. Goodford*, p.103

A fast algorithm for generating smooth molecular dot surface representations, *J. B. Moon and W. J. Howe*, p.109

A rapid method for the computation, comparison and display of molecular volumes, *R. S. Bohacek and W. C. Guida*, p.113

1989年第29卷3号(8月)論文題目、著者、頁

SYNGEN Program for Synthesis Design: Basic Computing Techniques, *James B. Hendrickson and A. Glenn Toczko*, p.137

Multiple Constructions in Synthesis Design, *James B. Hendrickson and Ping Huang*, p.145

An Improved IUPAC-Based Method for Identifying Alkanes, *Scott Davidson*, p.151

Bibliometric Study of the Application of Computers in Synthetic Organic, Physical, Inorganic, and Analytical Chemistry Literature. Abstracted by Chemical Abstracts in 1986, *Ming-yueh Tsay*, p. 156

The Need for Data Evaluation of Physical and Chemical Properties of Pesticides: The ARS Pesticide Properties Database, *Stephen R. Heller, Karen Scott, and Douglas W. Bigwood*, p.159

Atomic Physicochemical Parameters for Three Dimensional Structure Directed Quantitative Structure—Activity Relationships. 4. Additional Parameters for Hydrophobic and Dispersive Interactions and Their Application for an Automated Superposition of Certain Naturally Occurring Nucleoside Antibiotics, *Vellarkad, N. Viswanadhan, Arup K. Ghose, Ganapathi R. Revankar, and Roland K. Robins*, p.163

Review of Ring Perception Algorithms for Chemical Graphs, *Geoffrey M. Downs, Valerie J. Gillet, John D. Holliday, and Michael F. Lynch*, p. 172

Theoretical Aspects of Ring Perception and Development of the Extended Set of Smallest Rings Concept, *Geoffrey M. Downs, Valerie J. Gillet, John D. Holliday, and Michael F. Lynch*, p.187

Computer Storage and Retrieval of Generic Chemical Structures in Patents. 9. An Algorithm To Find the Extended Set of Smallest Rings in Structurally Explicit Generics, *Geoffrey M. Downs, Valerie J. Gillet, John D. Holliday, and Michael F. Lynch*, p.207

Computer Storage and Retrieval of Generic Chemical Structures in Patents. 10. Assignment and Logical Bubble-Up of Ring Screens for Structurally Explicit Generics, *Geoffrey M. Downs, Valerie J. Gillet, John D. Holliday, and Michael F. Lynch*, p.215

Molecular Identification Number for Substructure Searches, *Frank R. Burden*, p.225

Topological Organic Chemistry. 1. Graph Theory and Topological Indices of Alkanes, *Harry P. Schultz*, p.227

#### COMPUTER SOFTWARE REVIEWS

Aztec C Compiler for the Macintosh, Reviewed by *Zoltan M. Nagy*, p.229

TDS DIPPR: An Efficient, Helpful Tool, Reviewed by *J. David Chase*, p.230

# JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

JULY 1989 Vol.66, No.7

Journal of Chemical Education: Software. Abstract of "Evolution of Bonding Theory: The Werner-Jørgensen Controversy, *David M. Whisnant*, p.552

Computer Series, 104:

A Dedicated Educational Expert System Coupled to a Simulator in Chemical Kinetics, *C. Cachet, D. Cabrol, and A. Milleliri*, p.553

AUGUST 1989 Vol.66, No. 8

Computer Series, 105: Bits and Pieces, 41

edited by James P. Birk

Polymer Tacticity in Simulated NMR Spectra, *Christopher K. Ober*, p.645

Emergency Response Database, *J. Shofstahl, D. Jencen, D. Chansa, and J. Hardy*, p.648

## Journal of Computational Chemistry

---

Volume 10 Number 6 September 1989

Contraction of the Well-Tempered Gaussian Basis Sets: The First-Row Diatomic Molecules

*T.W. Dingle, S. Huzinaga, and M. Klobukowski*, p. 753

Pattern Recognition in the Prediction of Protein Structure.

I. Tripeptide Conformational Probabilities Calculated from the Amino Acid Sequence

*Millard H. Lambert and Harold A. Scheraga*, p. 770

Pattern Recognition in the Prediction of Protein Structure.

II. Chain Conformation from a Probability-Directed Search Procedure

*Millard H. Lambert and Harold A. Scheraga*, p. 798

Pattern Recognition in the Prediction of Protein Structure.

III. An Importance-Sampling Minimization Procedure

*Millard H. Lambert and Harold A. Scheraga*, p. 817

Chlorosilanes: Development and Application of MM2 Force Field Parameters

*Soo Gyeong Cho, Raymond J. Unwalla, Frank K. Cartledge, and Salvatore Profeta, Jr.*, p. 832

Polytapeptide of Elastin: Damping of Internal Chain Dynamics on Extension

*D.K. Chang and D.W. Urry*, p. 850

Analytical Energy Derivatives and Normal Modes in Force Fields Employing Lone-Pair Pseudoatoms

*Marvin Waldman and Brian B. Masek*, p. 856

## COMPUTERS & CHEMISTRY

1989年第13卷第4号 論文題目、著者、頁

Robust estimation of parameters: a simple modification to all non-linear fitting algorithms to convert from minimizing the sum of squares of deviations to minimizing the sum of the absolute deviations, *I. B. C. Matheson*, p.299

A program for determination of composition and thermodynamics of the ideal gas-phase equilibrium isometric mixtures, *Zdenek Slanina*, p.305

Polarizable water models: vectorization of energy calculations on the CYBER 205, *J. C. Sauniere, T. P. Lybrand, J. A. McCammon and L. D. Pyle*, p.313

Interface between a Nicolet FTMS/2000 and a Quantel Nd: YAG laser using an IBM PC-AT, *W. R. Creasy and J. T. Brenna*, p.319

KATCOM: a microcomputer program for the computation of stability constants from potentiometric titration data, *V. Gadjokov and H. Mihailova*, p.325

Conformational energy analysis of peptides using microcomputers: description of PepCAD™ and analysis of *N*-formyl-*N*'-methylalanineamide, *David C. Feller, Ernest F. Delmoe and S. Scott Zimmerman*, p.337

The calculation of equilibrium concentrations. ES4EC1: a FORTRAN program for computing distribution diagrams and titration curves, *Concetta De Stefano, Pietro Princi, Carmelo Rigano and Silvio Sammartano*, p.343

A procedure for the evaluation for the reduced moment of inertia for internal rotation, *Zdenek Slanina*, p.361

A microcomputer program for the analysis of gas chromatographic data, *Charles Brochu and Emilien Pelletier*, p. 367

The non-equivalence of Padé-Laplace and non-linear least squares data fitting: a Padé-Laplace bias towards slower processes, p.385

"CHOODRAW"—an interactive molecular graphics program (PC/XT/AT) to display small molecules complexed with protein fragments selected from the protein data bank, *Francois-Xavier Bon and Roland van Rabenbusch*, p.387

1990年第14卷第1号 論文題目、著者、頁

Digitally-controlled timing devices—a simple smoking machine, *Christian Jorde, Andreas Planitzer, Kurt Kalcher, Alfred Nitsch and Reinhold Pietsch*, p.1

A new theorem for the Wiener molecular branching index of trees with perfect matchings, *I. Gutman and D. H. Rouvray*, p.29

BRVCEL—a computer program for cell reduction and Bravais lattice determination, *Timothy Higgins, Rex Dark, Patrick McArdle and John Simmie*, p.33

An interface between the IBM PC/XT and the PAR model 273 Potentiostat/Galvanostat, *Alexis Carpenter, Jeffrey J. McCarthy and William C. Purdy*, p.37

A critical comparison of least absolute deviation fitting (robust) and least squares fitting: the importance of error distributions, *I. B. C. Matheson*, p.49

MVIB: a system of programs for treating normal coordinates of chain molecules, *Hiroatsu Matsuura*, p.59

A pH measuring system using Lotus Measure™, *F. T. Chau*, p.69

L'etude des signaux de <sup>13</sup>C par microordinateur un programme simple et rapide, *Jean Pierre Gastmans, Marcia Nasser Lopes, Maysa Furlan and Vincente de Paulo Emerenciano*, p.75

Data acquisition with the IBM PC/XT/AT family-II. An application in chromatography, *Denis K. C. Leung*, p. 79

#### *Book Reviews*

MINPACK1 - LIB, FITLIB, FFTLIB, SPARSGEM and QUADLIB, *DeLos F. Detar*, p.105

Image Analysis and Processing. Edited by V. Cantoni *et al.*, *De Witt Summers*, p.106

Graph Theory and Topology in Chemistry. Edited by R. B. King and D. H. Rouvray, *R. C. Luvher*, p.107

### QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHOPS

1989年第8卷2号(6月)論文題目、著者、頁

Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) Analysis Using the Partial Least Squares (PLS) Method: The Bindung of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAH) to the Rat Liver 2,3,7,8,-Tetrachlorodibenzo-P-Dioxin (TCDO) Receptors, *Johnels, D., Gillner, M., Norden, D. Toftgard, R. and Gustafsson, J.-A.*, P.83

Quantitative Structure-Activity Study of the Inhibition of Acetylcholinesterase with Aliphate Ammonium Ion, *Takayama, C., Akamatsu, M. and Fujita, T.*, p.90

General Treatment of Heteroatoms with the Randic Molecular Connectivity Index, *Kupchic, E. J.*, P.98

Corchopp - an Interactive Routine for the Dimension Reduction of Large QSAR Data Sets, *Livingstone, D. J., and Rahr, E.*, P.103

Theoretical Approximation to the Reaction Mechanisms of Adenosine Deaminase, *Orozco, M., Liuis, C., Mallot, J., Canela, E. I. and Franco, R.*, P.109

Comparison of Fragment Weighting Schemes for Substructural Analysis, *Ormerod, A., Willett, P. and Bowden, D.*, P.115

## 学生部会員新設について（お知らせとお願い）

1990年1月より各部会に学生部会員が新設されます。現在部会にご所属で、且つ学生でいらっしゃる方（1990年3月卒業予定も含む）はこれに該当します。この場合の「学生」は、国内在住の工高専、短大、大学学部、大学院の在学者に限ります。（研究生は正部会員扱いとなります。）1990年分会費等は1989年11月1日付で請求させていただきましたが、学生部会員に該当される方は振替用紙裏面にその旨明記のうえ、会費の金額を訂正してご送金下さるようお願い申し上げます。学生部会費は下記の通りです。

### 記

コロイドおよび界面化学部会	1, 500円
情報化学部会	1, 000円
生体機能関連化学部会	2, 000円

また、これから新規に学生部会員として入部会をご希望の場合は、従来の申込書とは別に申込カードがございますので、下記宛ご請求下さい。

問合先：〒101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル6階 （社）日本化学会会員部  
電話(03)258-9815

## 「準部会員」廃止について（お知らせ）

1990年1月以降従来の「準部会員」を廃止し、部会員で且つ日本化学会会員でない方は「正部会員（日本化学会非会員）」となります。

## 1990年分会費等の払い込みについて（お願い）

1990年分会費等は1989年11月上旬に会員各位あてご請求申し上げましたので、お早めにお払い込み下さるようお願いいたします。ご送金にあたっては、電算機入力原票を兼ねた会費等送金専用振替用紙をご利用下さい。

### 1990年分部会費

正部会員	日本化学会会員	2, 000円
	日本化学会非会員	3, 000円
学生部会員	日本化学会会員	1, 000円
	日本化学会非会員	1, 000円