Osaka University Knowledge Archive

Title	データベース NQR 検索の手引（第2版）
Author(s)	千原, 秀昭
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1982, 47, p. 49-57
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65546
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

Osaka University

データベース　NQR　検索の手引（第2版）

大阪大学理学部　千　原　秀　昭

昭和56年12月からサービスにのせている、核四極共鳴スペクトルのオンラインデータベースは昭和57年8月に2000件が集積されたのを機会に、検索システムの一部を改良した。

1. 主な改良点

これまでのコマンドのレベルが、検索項目によって深いものと浅いものがあったのを単純化し統一をはかった。

キーワードとキーフレーズのどちらでも検索できるようにした。

新しくNOT論理を導入した。

積み重ねコマンド(stacked commands)を使えるようにした。

検索フィールドを指定しない検索を可能とした。

以下にこれらの変更点を含めて、検索法全体を説明する。データ内容については、大阪大学大型計算機センターニュース Vol. 11, No. 4, p. 39 (1982年2月) を参照されたい。以下アンダーラインはユーザーの入力する部分を示す。

2. 検索の開始

阪大センターに接続した後

SYSTEM ? NQR (C/R)

*** WELCOME TO NQR ***

THIS IS VERSION 2, UPDATED AUGUST, 1982

MODULE ? TYPE IN SEAR OR END.

=SEAR (C/R)

=== SEARCH STARTED ===

MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.

=

によって検索開始の準備ができる。SEAR のかわりに、stacked commands を入力してもよいが、stacked commands についてはあとで説明する。

はじめて利用するときは、MODE ? に対して?を入力してみれば、どんなコマンドが使えるかがわかる。コマンド(MODE)指定ははじめの4文字を入力すれば十分である(AND、NOT、OR はこの文字数を入力する)。著者名をキーとするときは AUTH の4文字を入れればよい。

```
MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.
=?

--- TYPE IN ONE OF FOLLOWING MODES ---
    MODE          TO SEARCH IN TERMS OF
. . . . . . . . . . . . . . . . . . . . .
   REGISTRY   : CAS REGISTRY NUMBER.
   FORMULA    : MOLECULAR FORMULA.
   NAME       : SUBSTANCE NAME.
   RECNO      : RECORD NUMBER.
   AUTHOR     : AUTHOR NAME.
   CODEN      : JOURNAL IDENTIFICATION.
   YEAR       : PUBLICATION YEAR.
   KEYWORD    : KEYWORD.
   KEYPHRASE  : KEY PHRASE.
   SELECT     : ANY DATA FIELD OTHER THAN RECNO,
                YEAR, & FREQ.
   FREQUENCY  : NUCLEAR MASS AND/OR FREQ. RANGE
. . . . . . . . . . . . . . . . . . . . .
   AND        : CONJUNCTION BETWEEN TWO SET NUMBERS.
   OR         : DISJUNCTION BETWEEN TWO SET NUMBERS.
   NOT        : DIFFERENCE BETWEEN TWO SET NUMBERS.
   DISPLAY    : DATA DISPLAY IN FORMATS,
                ( FORMAT ; A, B, C, D, E.)
   RESTART    : ERASE ALL SETS AND RESTART THE
                RETRIEVAL OF NQR DATA.
----------------------------------------

MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.
=
```

3. 検索キーの説明

REGI　CAS登録番号をハイフンを含めて10桁までの文字として入力する。

〔例〕　37338－95－7

10桁に満たない場合も左へつめて入力してもよいが、頭にゼロを入力する必要はない。もし頭にゼロがあっても検索には差支えない。

FORM　分子式をHill システムで入力する。ただし原子数が1のとき1をつける。

〔例〕　H2O1、H3N1

NAME　物質名を入力する。コンマのあとに空白(△で示す)を一つ入れる。ただし、置換位置を示すコンマの場合は空白を入れない。ギリシャ文字は前後にピリオドを入れる。

〔例1〕　BENZENAMINE, △2, 6－DICHLORO－4－NITRO－

〔例2〕　COPPER, △D1－. MU. －IODOTRIS(TRIPHENYLPHOSPHINE)DI－

〔例3〕　P－DINITROBENZENE

物質名は72文字(空白を数える)で切断される。72文字より少ない入力に対しては、

あとで説明する前方一致指定の場合を除いて、完全一致検索である。

RECN　これはデータベース管理用のキーで、各論理レコード固有のレコード番号(6桁まで)による検索ができる。

AUTH　著者名による検索用。姓、名の順で、名はイニシァルのみ。イニシァル不明のときは姓のうしろに$を入れれば前方一致になる。姓だけの入力では NO DATA の返事がもどる。

〔例1〕 CHIHARA△H

〔例2〕 CHIHARA$

CODE　雑誌同定用の CODEN を6文字入力する。

〔例〕 JACSAT

YEAR　報文の発行年を4桁入力する。

〔例〕 1978

KEYW　キーワードを40文字以内入力する。途中に空白があると、そこで終りとみなされる。

〔例〕 ELECTRONIC

KEYP　キーフレーズを56文字以内入力する。途中に空白が1個あってもよいが、空白が2個連続するとそこで終りとみなされる。キーワードもこのMODE で探すことができる。

〔例〕 ELECTRONIC△STRUCTURE

〔例〕 OPTICAL△HOLE△BURNING

ただし上の例で HOLE という語をキーとするときなどは KEYW のモードを使わなければならない。これを一度にするためにはつぎの SELE が便利である。

SELE　これは RECN、YEAR、FREQ以外のすべてのデータをその種類によらず、一気に探してくれる。

〔例〕 CHIHARA△H

〔例〕 STRUCTURE

〔例〕 JACSAT

〔例〕 OPTICAL△HOLE△BURNING

72文字まで入力できる。

FREQ　周波数の値による検索では、核種は質量数によって指定する。これは3桁までの整数で入力する。そのあとに、周波数の下限と上限をハイフンでつないで入力する。

〔例1〕 35△24.2－26.3

この例では $24.2 \leqq f \leqq 26.3$ の範囲にある塩素核35の共鳴データが検索できる。

周波数は実数型なので、ちょうど24MHz でも 24.0 と入力する。上限のみまたは下限のみを指定してもよい。

〔例2〕 35△－26.3

〔例3〕 35△24.2－

核種を限定したくないときは、質量数を省略してもよい。

4. ブールオペレーター、AND、OR、NOT

ブールオペレーターは MODE ? に対して、既に作ってあるセット間で使うことができる。

〔例〕 MODE ? TYPE IN? FOR HELP.

=AND (C/R)

SET NUMBERS ?

=1△2 (C/R)

OR についても同様であるが、NOT についてはすこし説明を要する。

〔例〕 =NOT (C/R)

SET NUMBERS ?

=1△2 (C/R)

とすると、セット1の中から、セット2に含まれているものを除外した残りを求めることになる。これは集合1から集合2を引くことに相当する。したがって逆に 2△1 とすると結果は異なる。

この検索システムではNOT論理に対して内部ではAND△NOTと2段階操作をしている。そのためNOT△1△2の場合セット2の否定集合をまず作り、これを新しいセットに入れる。この否定セットはあとで再使用できる。たとえば、まず NOT△1△2 をとると新しいセット5ができたとする。あとで NOT△3△2 がほしいときは、NOT△3△2 のかわりに AND△3△5 とする方が速いし、セット数を一つ節約できる。

5. 表　　示

MODE レベルで DISP を入力すると出力形式を問合わせてくるから、五つの形式から選んで入力する。セット3の内容を表示させたいとき、

〔例1〕 MODE ? TYPE IN? FOR HELP.

=DISP△3 (C/R)

=FORMAT ? TYPE IN? FOR HELP.

=? (C/R)

によってつぎのように形式の説明が出る。

```
FORMAT        TO PRINT DATA FOR
A      : FORM + NAME + MODF + FREQ
B      : FORM + NAME + MODF + FREQ + REMK
C      : FORM + NAME + MODF + FREQ + AUTH + JRNL
D      : FORM + NAME + MODF + FREQ + AUTH + JRNL + REMK
E      : ALL FIELDS OF THE RECORD

FORMAT ? TYPE IN ? FOR HELP.
=
```

共鳴周波数データの表示のうち、測定法の記号は次の意味をもつ。

C …… 連続波の方法

P …… パルス法

D …… 二重共鳴法

M …… NMR法

E …… その他の方法

X …… 原報に記載がない

1982年に入力したデータからこれらの記号がはいっているが、それ以前の入力の分は空白である。

測定温度はケルビン単位であるが、原報に温度の数値が与えられていない場合は次のダミーが出力される。

5000. …… 液体窒素温度

6000. …… 液体空気温度

7000. …… ドライアイス温度

8000. …… 室温

9000. …… 測定温度の記載がない

REF(文献)は著者、引用雑誌欄の右端の数字と対応している。

6. 積み重ねコマンド(stacked commands)

手間と時間の節約のために質問を一度に並べて入力してもよい。このときは各要素間に空白を1個おく。

〔例〕 KEYP△CRYSTAL△STRUCTURE

AUTH△CHIHARA $ (前方一致)

NAME△HYDROCHLORIC△ACID

YEAR△1973

実は積み重ねコマンドは、検索のそもそもの初めでも使える。

〔例〕 MODULE? TYPE IN SEAR OR END.

=SEAR△AUTH△CHIHARA△H (C/R)

のようにすれば一度で終る。

DISPコマンドについても

〔例〕 DISP△3△D

のように積み重ねてよい。

7. 前方一致（left－hand truncation）

検索語の終りに$記号をつけると、その$の位置およびそれ以降はどんな文字でもよいという指定になる。

たとえば1970年代に発表されたデータを探すには

〔例〕 YEAR△197$

とする。著者のイニシャルがわからないときの$の使用については既に述べた。

CAS登録番号は、置換分子が並んでいることが多いので

〔例〕 REGI△6643－$

REGI△12444－1$

のようにすると、類似物質を探すことができるが、ノイズは避けられない。

化合物名に対して前方一致を使っても同族体や重水素置換体をまとめて探し出せる。

〔例〕 NAME△BENZENAMINE$

ただしこの場合はBENZENAMINE自身はヒットしない。

ブールオペレーターのパラメータに対しては$は使えない。

8. SELEの活用

MODEとしてSELECT(SELE)を使うとデータのうち、

REGI、FORM、NAME、AUTH、CODE、KEYW、KEYP

のどこにはいっているかを問わず全部を検索の対象とできるから、多少のノイズを覚悟すれば、非常に便利である。SELEコマンドによってヒットがあってもなくても、一つの検索が終っても、MODEレベルに戻らないから、続けて検索語を入力できる。

〔例〕 MODE? TYPE IN? FOR HELP.

=SELE△NAKAMURA$ (C/R)

RECORD COUNT ; 57

SET NUMBER ; 1

TYPE IN SEARCH TERM.

=NAKAMURA△D (C/R)

RECORD COUNT ; 51

SET NUMBER ; 2

TYPE IN SEARCH TERM.

=NAKAMURA△N (C/R)

RECORD COUNT ; 5

SET NUMBER ; 3

のように速く検索ができる。一度 SELE のモードにすれば、異種のデータの検索語をつぎつぎに入力できる。

これを MODE レベルへ戻したいときは、プロンプト記号(=)の次に何もタイプせずに (C/R) キーを押せばよい。いつも=記号のあと単に (C/R) だけすれば、一つ上のレベルへもどる。これをくり返せば MODULE? までもどる。

9. 検索の終了

プロンプト記号(=)の次に何も入力しないで (C/R) すれば、一つ上位のレベルへ戻るから、これを繰返せば、MODULE? からさらに SYSTEM? までもどる。コンピュータとの接続を断つ(LOGOFF)ときは、ここで BYE (C/R) を入力すれば、アカウント情報が出力されて、切断される。

10. 検索例

つぎに二つの検索例を示す。第一は、コマンドなどを一つずつ入力した場合、第二例は全く同じ検索を積み重ねコマンドで行った場合である。

〔例1〕

```
SYSTEM ?NQR

*** WELCOME TO NQR ***
THIS IS VERSION 2, UPDATED AUGUST, 1982

MODULE? TYPE IN SEAR OR END.
=SEAR

=== SEARCH STARTED ===

MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.
=NAME

TYPE IN SUBSTANCE NAME.
=BENZENE$
```

```
RECORD COUNT ; 189
  SET NUMBER ;   1

MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.
=FREQ

TYPE IN RETRIEVAL CONDITIONS.
=35 31.1-32.5

RECORD COUNT ;  27
  SET NUMBER ;   2

TYPE IN RETRIEVAL CONDITIONS.
=14 2.1-2.4

RECORD COUNT ;  54
  SET NUMBER ;   3

TYPE IN RETRIEVAL CONDITIONS.
=

MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.
=AND 1 2

RECORD COUNT ;   1
  SET NUMBER ;   4

MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.
=AND 3 4

NO DATA

MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.
=DISP 4

FORMAT ? TYPE IN ? FOR HELP.
=C
     --------------------
(   500)
FORM 100-44-7   C7H7CL1
NAME .ALPHA.-CHLOROTOLUENE; BENZYL CHLORIDE; BENZENE, (CHLOROMETHYL)-;
NAME  .OMEGA.-CHLOROTOLUENE;
AUTH MEAL H C;                                                          1
JRNL J AM CHEM SOC; 74; ; 1952; 6121; 6122;                             1
AUTH LIVINGSTON R;                                                      2
JRNL J PHYS CHEM; 57; ; 1953; 496; 501;                                 2
     . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . .
     METHOD  NUC.MASS    TEMP/K   REF          FREQ/MHZ
FREQ            35         77.     1           33.630
FREQ            35         196.    1           32.417
--------------------
    END OF OUTPUT
    ASTERISK BEFORE MOLECULAR FORMULA, IF ANY, INDICATES THAT THERE
    ARE OTHER RECORDS FOR THE SAME SUBSTANCE.

MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.
=

* END OF SEARCH *
```

〔例2〕

```
MODULE? TYPE IN SEAR OR END.
=SEAR NAME BENZENE$

=== SEARCH STARTED ===
RECORD COUNT ; 189
  SET NUMBER ;   1

MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.
=FREQ 35 31.1-32.5

RECORD COUNT ;  27
  SET NUMBER ;   2

TYPE IN RETRIEVAL CONDITIONS.
=14 2.1-2.4

RECORD COUNT ;  54
  SET NUMBER ;   3

TYPE IN RETRIEVAL CONDITIONS.
=

MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.
=AND 1 2

RECORD COUNT ;   1
  SET NUMBER ;   4

MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.
=AND 3 4

NO DATA

MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.
=DISP 4 C

     --------------------
(   500)
FORM 100-44-7   C7H7CL1
NAME .ALPHA.-CHLOROTOLUENE; BENZYL CHLORIDE; BENZENE, (CHLOROMETHYL)-;
NAME  .OMEGA.-CHLOROTOLUENE;
AUTH MEAL H C;                                                          1
JRNL J AM CHEM SOC; 74; ; 1952; 6121; 6122;                             1
AUTH LIVINGSTON R;                                                      2
JRNL J PHYS CHEM; 57; ; 1953; 496; 501;                                 2
     . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . .
     METHOD  NUC.MASS    TEMP/K   REF          FREQ/MHZ
FREQ            35         77.     1           33.630
FREQ            35         196.    1           32.417
--------------------
    END OF OUTPUT
    ASTERISK BEFORE MOLECULAR FORMULA, IF ANY, INDICATES THAT THERE
    ARE OTHER RECORDS FOR THE SAME SUBSTANCE.

MODE ? TYPE IN ? FOR HELP.
=

* END OF SEARCH *

MODULE? TYPE IN SEAR OR END.
=
```