



Title	学外利用者から見た阪大大型計算機センター効用について
Author(s)	村上, 益美
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1983, 50, p. 23-43
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/65574">https://hdl.handle.net/11094/65574</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

# 学外利用者から見た阪大大型計算機 センターの効用について

大阪市立大学工学部 村 上 益 美

## 1. は じ め に

学外利用者として阪大の大型計算機を使い始めて5年目になろうとしている。市立大学にも計算機センターがあるのになぜといわれると困りますが、大型計算機センターを使い始めた動機としては、以下の事柄が挙げられます。

- (1) 計算機の処理速度が早かったこと。
- (2) 公衆回線によるTSSのサービスが行なわれていたこと。
- (3) 距離的に近いので、公衆回線によるTSSのサービスが容易に受けられたこと。
- (4) 計算結果のリストが連絡便によって翌日に入手できたこと。

このような動機から始まった阪大の大型計算機利用であるが、現在使用している端末機器のシステム構成を紹介し、学外利用者の立場から見た大型計算機センターの効用、大型計算機センターに対する要望等について述べたいと思います。

## 2. 大型計算機の利用方法

デバッグの段階ではTSSを使い、CPU時間が5分を超えた時に、TSSによるバッチ処理を利用している。ともかく、大型計算機センターの利用方法は、端末のシステム構成によると思われるので、端末のシステム構成について述べる。

端末のシステム構成を右図に示す。

300BPS端末としてのシステムは、パソコン本体のほかに、CRTディスプレイ、フロッピーディスク、プリンター、音響カップラー、データ2次処理用のX-Yプロッターである。端末の機能としては、センターニュース(1,2)に既に発表されたソフトを用いた結果、次の5つの事が可能である。

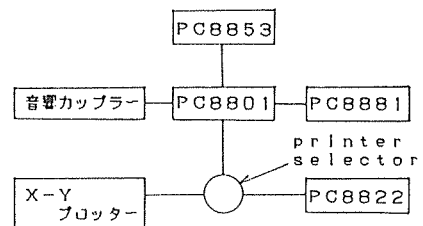


図-1 システム構成

- (1) Character Display Terminal
- (2) 80ないし、132桁でハードコピーがとれること。
- (3) センターからの送信データをフロッピーディスクに書き込めること。
- (4) オフライン状態でフロッピーディスクに打ち込んだデータ、ならびにプログラムをセンター

に送信できること。

- (5) センターからの受信データを、数値データに変換し、X-Yプロッターを用いて図表を作成すること。

### 3. 学外利用者から見た大型計算機センターの効用、ならびに要望

学外利用者から見た大型計算センターの効用のうち、長所としては、

- (1) 処理速度が早いので、演算費用の軽減につながること。
- (2) 自動運転によってサービス時間が延長されていること。

短所としては、

- (1) データの送受信中に文字ばけがおきること。
- (2) 計算結果のリストの入手に、一週間程度かかること。

学外利用者から大型計算機センターへの要望としては、

- (1) スーパーコンピュータの導入など、システムの更新をすみやかに行なうこと。
- (2) 学外公衆回線用の送信信号のレベルを現在の値より少し増加させ、文字ばけの起こる可能性をなるべく減らすこと。
- (3) 計算結果のリストの入手に要する日数を減らすこと。

### 4. お わ り に

学外利用者としての立場から、大型計算センターの利用方法、大型計算センターへの要望について述べた。学外利用者特有の困難さ、例えば文字ばけなどが伴うけれど、経済的な面、利用時間などの長所を考えると、阪大の大型計算機センターを使うことの効用は大であるといえる。

### 参 考 文 献

- 1) 多田元英：マイコンを用いたTSSインテリジェンス端末；大阪大学大型計算機センターニュース、Vol. 11, No. 2, 1981-8
- 2) 藤井 博：パーソナルコンピュータPC8801を用いたインテリジェントターミナル、大阪大学大型計算機センターニュース、Vol. 12, No. 2, 1982-8

### 〔センターからのコメント〕

記事中の、学外利用者から大型計算機センターへの要望に対してのコメントとして、

- (1)については、センターで概算要求中であること。
- (2)については、公衆回線の場合伝送経路等によっては、古い型の交換機を通ることもあるので、

ノイズが入ったり、文字ばけが起る可能性がある。また専用線とは違いレベルを調整することは無理である。ただ、プッシュホンは、新しい交換機を通るので比較的ノイズが入ったり、文字ばけが起る率は少ないと思われる。

(3)については、計算結果をセンターに出力して、利用者の手元に送る場合のことと思うが、過去にはコンテナ便といって、大型計算機センターの経費で、大阪府立大学、大阪市立大学、関西大学に連絡便を走らせていたが、オンライン化が進むにつれてコンテナ便で空箱を運ぶことが多くなり、経費も高額になってきましたので、やもなくコンテナ便から郵送にきりかえたため一週間程度かかるものと思われます。センターでも出来るだけ早く郵送する様に心がけますので、御了承下さい。

# データベース N Q R (核四極共鳴スペクトル) 検索の手引き (第3版)

大阪大学理学部 千原秀昭

昭和56年12月からサービスをしている、核四極共鳴スペクトルのオンライン検索システムの現状を総括的に紹介する。

## I. 核四極共鳴スペクトル (Nuclear Quadrupole Resonance Spectrum)

核四極共鳴スペクトル (略称 N Q R) は結晶性物質を対象とするラジオ波分光学の一分野である。固体物性の重要な研究手段であると同時に、分子構造の研究、化学結合の研究、結晶物質の同定などに幅広い応用をもつ。高い分解能 ( $10^{-7}$ ) を利用して、精密な温度計としての用途も開発され、実用的な機器が市販されている。

核四極共鳴スペクトルの原理と測定方法について簡単に述べる。核スピンの  $1/2$  より大きい原子核は核内の電荷分布が四極子 (quadrupole) をもつことが知られている。この四極子の大きさを  $eQ$  は、核の中心に原点をおき、位置ベクトルを  $\vec{r}_i$  で表わすと、

$$eQ = \int \rho_i r_i^2 (3 \cos^2 \theta_i - 1) d\tau_i \quad (1)$$

で定義される。 $\rho_i$  は点  $\vec{r}_i$  の位置の体積素片  $d\tau_i$  の中の電荷密度、 $\theta_i$  は  $\vec{r}_i$  とスピンの間の角である。この核が結晶内のある点に存在するとき、その点における結晶電場の勾配は9個の成分をもつテンソルで規定される。

$$V_{ij} = \partial^2 V / \partial x_i \partial x_j \quad (x_i, x_j = x, y, z)$$

この電場の原因が全く核外から由来するもの場合には、このテンソルは対角化できて、次の3つの主軸成分で表わされる。

$$\left. \begin{aligned} V_{ZZ} &= \partial^2 V / \partial z^2 \\ V_{YY} &= \partial^2 V / \partial y^2 \\ V_{XX} &= \partial^2 V / \partial x^2 \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

ここで

$$|V_{XX}| < |V_{YY}| < |V_{ZZ}| \quad (4)$$

となるように主軸を選ぶ。z 主軸のまわりに  $V''$  が対称でないとき、

$$\eta = |V_{XX} - V_{YY}| / |V_{ZZ}| \quad (5)$$

によって電場勾配の非対称性を表わす。 $\eta$  を非対称性定数 (asymmetry parameter) という。

$\eta = 0$  のときは電場勾配が軸対称性をもち

$$\left. \begin{aligned} V_{XX} &= V_{YY} = (1/2) e q \\ V_{ZZ} &= e q \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

の関係がある。さて、核の四極子と電場勾配の相互作用の結果、核スピン  $I$  のエネルギーは

$$\left. \begin{aligned} E_m &= A [3m^2 - I(I+1)] \\ A &= e^2 q Q / [4I(2I-1)] \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

で与えられる量子準位を構成する。これらの準位間の遷移は  $\Delta m = \pm 1$  の選択律に従うから、遷移振動数は

$$\nu = (3A/h) (2|m|+1) \quad (8)$$

で与えられる。つまり式(8)の周波数の電波がこの結晶によって吸収され、 $m$ の異なる準位への遷移が起る。これが核四極共鳴スペクトルである。これを観測するには、ふつうは超再生型の発振・検出器を用いるが、最近はパルス法や核磁気共鳴(プロトン)との二重共鳴などの方法も使われるようになった。

結晶内の原子核は分子やイオンの一部をなしており、電場勾配の大きさ  $q$  はその電子状態を反映する。NaCl における  $\text{Cl}^-$  イオンのようにほぼ球対称の電荷分布の中に Cl 核がおかれていると、 $q \doteq 0$  である。また HCl 結晶の高温相のように分子回転が速く起っているときも Cl 核のまわりの電荷分布が平均され、 $q \doteq 0$  となる。しかし固定した C-Cl 結合のように Cl の  $p$  電子が結合に使われると  $q$  が大きくなり、式(8)の  $\nu$  は 30 - 40 MHz になる。

結晶内に等価でない位置を占める同種の核が、単位胞あたり  $n$  個あるとき、共鳴線の数  $n$  の倍数になる。これらの帰属の決定には、小さな外部磁場のもとでおこる単結晶のゼーマン効果を利用する。

$I = 3/2$  のときはゼーマン効果を利用して  $e^2 q Q$  (核四極結合定数) と  $\eta$  を決定する。 $I = 1$ ,  $I > 3/2$  のときは 2 本以上のスペクトル線が期待できるので、外部磁場なしに粉末試料で  $e^2 q Q$  と  $\eta$  を決定できる。

核四極共鳴の周波数は温度や圧力の関数である。一般に温度の上昇とともに周波数が下がる。また圧力の上昇とともに周波数は上昇する。もし結晶に構造の異なる多形があったり、ある温度を境として構造が変化する多形(相転移)が存在すると、共鳴周波数もそれに伴って変化する。

この共鳴周波数は物質に固有なので、物理学や化学のいろいろの分野の研究のためにこのデータベースが利用できる。

- a. 固体物質の分析。試料の中に共鳴しうる核があれば、NQR 周波数はその物質同定のための決定的なデータである。測定には NMR の測定装置を使ってもよく、NQR 用の分光器を使ってもよい。大きな電磁石を必要としないので、手製の装置で簡単に測定できる。
- b. 分子の電子状態の研究。原子核の位置での電場勾配の大きさがわかるので、電子の波動関数

- の正しさの検証のために核四極結合定数の値を理論計算して、このデータベースの中のデータと比較すればよい。また化学結合に参加する $\pi$ 電子の挙動を知るのにも有力である。
- c. 固体物性の研究。相転移や固体内の分子間力などはNQR周波数に鋭敏に反映する。X線回折では検出困難な、僅かの対称性変化もNQRには大きな変化として現われることが多い。

## II. データベースの呼び出し方

1. 大阪大学大型計算機センターへの利用申請：既に阪大センターを利用しておられる方以外は阪大センター共同利用掛で申請して、課題番号（USERID）とパスワードをもらって下さい。  
このための申請書は各大型計算機センターにあります。
2. 直接阪大センターへアクセスする場合（電話回線）：

交換回線種別	電 話 番 号	伝送速度(BSP)	回 線 数
阪大吹田構内電話	2901(2931)	300(1200)	30(20)
阪大豊中構内電話	2172(2178)	300(1200)	12(1)
センター外線（局線）	(06)876-3241	300	16
	(06)876-5001	1200	10

- (a) 上記電話番号のどれかを呼び、ピーという発信音が聞こえたら送受信器を音響カップラーにセットする。端末機はHALF DUPLEX, EVEN PARITY, 英数字、大文字、リモートにセットしておく。
- (b) CTRLキーを押さえながらAを打つ。または\$\$\$CON, TSSとタイプして、キャリッジリターン（以下 C/R と表示する）。これによって阪大センターからのメッセージが出るから、要求に応じてUSERIDとPASSWORDを入力すると、
- SYSTEM?            で止まるから、
- NQR (C/R)            と入力する。
- 以下、端末機から入力する部分はアンダーラインで示す。これによってNQRデータベースとその検索システムを呼び出すことができる。
3. 国立大学大型センター間ネットワーク（N1ネット）経由の場合：
- まず、それぞれのセンターに端末機を接続するが、これにはそのセンターの利用者課題番号とパスワードが必要である。その後ネットワークを開く。

- (a) 北海道大学センター経由

READYのシステムメッセージのあとにNTSS (C/R) を入力する。WHICH HOST?のメッセージのあとにOSAKA (C/R) を入力するとJCJ652I\*\* OSAKA CONNECTEDのメッセージが出て阪大センターにつながる。その後は阪大システムからの要

求に応じて、USERIDとPASSWORDを入力し、SYSTEM?に対して、NQR (C/R) を入力すればよい。

終了時には阪大センターの終了コマンド BYE (C/R) を入力すると阪大の終了メッセージが出る。そこで割り込みキー (BREAK) を押すと、次のメッセージが出力されるので、END (C/R) を入力する。

!

NTSS> END (C/R)

JCJ 653 I\*\*OSAKA DISCONNECTED

READY

となって、北大センターのREADYレベルへもどる。

(b) 東北大学センター経由

SOH信号あるいはCTRL+Aのかわりに、いきなり \$\$\$CON, NETWK, ASC (C/R) を入力すると、東北大センターのUSERIDとPASSWORDを尋ねられ、これに返事するとメッセージのあとに

HOST ? OSAKA (C/R)

となる。これによって阪大センターにつながる。

\*\* CONNECTED TO OSAKA \*\*

このあとは阪大センターのメッセージが出るのは(a)と同じ。

終了させるには、阪大センターへのコマンド BYE (C/R) によって阪大から切り離され、その後 HOST ? レベルへもどる。

(c) 東京大学センター経由

まず東大センターのTSSジョブを開始した後

>> NTSS (C/R)

によってネットワークが開かれる。

WHICH HOST ? OSAKA (C/R)

OSAKA CONNECTED

によって阪大センターにつながる。

終了させるには、阪大センターのコマンド BYE C/R によって阪大センターを終了させ、割り込みキーを押す (東大センターのNTSSレベルに割り込みをかける) と

NTSS> END (C/R)

によって>>レベルへもどる。



(d) 京都大学センターおよび名古屋大学センター経由

まず自己センターのTSSを開始する。その後プロンプト記号(@)が出たら、

@ NVT (C/R)

によってネットワークを開く。阪大を呼ぶにはOPENコマンドを使う。

@ OPEN OSAKA (C/R)

終了させるには、阪大センターをBYE (C/R) で終了させた後

@ CLOSE (C/R) で阪大側のネットワークサービスを切り

@ END (C/R) で自己側を終了させる。

(e) 九州大学センター経由

まず九大センターのTSSを開始する。READYメッセージのあと

READY

NVT (C/R)

でネットワークが開かれ、メッセージが出る。プロンプト記号のあと

@ OPEN OSAKA (C/R)

で阪大につながる。

終了手続きは京大と同様で

@ CLOSE (C/R)

@ END (C/R) でREADYレベルへもどる。

### Ⅲ. 検 索 手 順

阪大センターに接続ののち、NQRデータベースを呼ぶには、

SYSTEM ?NQR (C/R)

\*\*\* WELCOME TO NQR \*\*\*

THIS IS VERSION 3, UPDATED MARCH 8, 1983

TYPE IN ?, NEWS, EXAMPLE, OR SEARCH AFTER MODULE?

MODULE? TYPE IN ?, NEWS, EXAM, 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。<sup>\*</sup> SEAR のかわりに、stacked commandsを入力し

\*MODULE?に対してNEWSを入力すると、このデータベースの最近のニュースが、新しいものから古い方へ、順に出力される。またEXAMを入力するとコマンドのタイプの仕方のいろいろな例が見られる。

でもよいが、stacked commands についてはあとで説明する。何もタイプしないで C/R だけすると一つ上のレベルにもどる。MODE ? に対して? C/R によって案内メッセー

ジが出力される。以下にいろいろな検索例を示す。

まず、MODE ? に対して? C/R を入力すると、つぎの案内が出る。

```
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, F, G, H.)
  SORT          : SORTING THE RETRIEVED DATA IN TERMS OF
                  FORM OR REGI.
  RESTART       : ERASE ALL SETS AND RESTART THE
                  RETRIEVAL OF NQR DATA.
.
.
.
-----
```

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

MODE ? に対して入力する文字は頭の4文字でよい。たとえば著者名で探すときはAUTH

C/Rとすればよい。いま分子式で探す場合を例として説明しよう。

```
MODE?; TYPE IN ? FOR HELP
=FORM C/R
TYPE IN MOLECULAR FORMULA
=C7H15CL3N1P1
FORM=C7H15CL3N1P1 C/R
      SET NO:      1
                                     } まとめて=FORM C7H15CL3N1P1
                                     } としてもよい。
                                     }
                                     } 2 RECORDS

TYPE IN MOLECULAR FORMULA
=
```

この分子式を持つ物質がなくて、ヒットがなければ、すぐべつの分子式をタイプ入力してもよい（FORMをタイプする必要がない）。もしここで C/R だけするとMODEレベルへ戻る。または、ほかの命令（AUTHなど）をタイプしてもよい。

分子式検索では前方一致および中間一致が許される。たとえば分子式が“C7H15”で始まるもの全部を探す（あとどんな元素が何個あってもよい）とか、分子内にC1がすくなくとも1個あるものとか、N原子がちょうど3個あるものとかを探すことができる。これは分子式をHill方式で書いてあることの利点である（XI 参照）。

（例） MODE ?

=FORM C7H15\$ C/R

のように\$記号をつけると、\$のところが何でもよいことになる。これは塩の無水物と水和物の両方探すときや、分子間化合物の一方だけ指定するときに使うと便利である。ただし分子間化合物の場合はどちらの成分が前に書かれているかわからないから注意がいる。

そのようなとき、可能性を並べて、あとでOR論理を用いるとよい。また、

=FORM \$CL\$ C/R

とすれば、塩素原子を含んだ物質すべてを選び出すことができる。

ヒットした内容を出力させたいときは

（例） MODE?; TYPE IN ? FOR HELP.

==DISP 1 C/R

FORMAT ? TYPE IN ? FOR HELP.

==

FORMAT ? は出力形式の問合せである。ここで ? を入力すると

FORMAT ? TYPE IN ? FOR HELP.

==? C/R

出力形式の選び方のリストが出て再びFORMATを問合わせて来る。

```
FORMAT          TO PRINT DATA FOR
A      : FORM + NAME + MODE + FREQ
B      : FORM + NAME + MODE + FREQ + REMK
C      : FORM + NAME + MODE + FREQ + AUTH + JRNL
D      : FORM + NAME + MODE + FREQ + AUTH + JRNL + REMK
E      : ALL FIELDS OF THE RECORD
F      : FORM + NAME
G      : RECORD NUMBER ONLY
H      : REGISTRY NUMBER ONLY
```

ここでFORMAT Cを選ぶと、

FORMAT ? TYPE IN ? FOR HELP.

=C

DISP 1 C

( 1 ) RECORD NUMBER; 1

FORM 67564-76-5 C7H15CL3N1P1

NAME PHOSPHORIMIDIC TRICHLORIDE, (1-PROPYLBUTHYL)-;

AUTH KOZLOV E S; GAIDAMAKA S N; POVOLOTSKII M I; KYUNTSEL I A; MOKEEVA1

AUTH V A; SOIFER G B;

JRNL ZH OBSSHCH KHIM; 48; ; 1978; 1263; 1266;

1

1

NUCL.

METHOD	MASS	TEMP/K	REF	FREQ/MHZ
	35	77.	1	28.332 27.808 27.732

( 2 ) RECORD NUMBER; 2

FORM 67564-75-4 C7H15CL3N1P1

NAME PHOSPHORIMIDIC TRICHLORIDE, (1,1-DIETHYLPROPYL)-;

AUTH KOZLOV E S; GAIDAMAKA S N; POVOLOTSKII M I; KYUNTSEL I A; MOKEEVA1

AUTH V A; SOIFER G B;

JRNL ZH OBSSHCH KHIM; 48; ; 1978; 1263; 1266;

1

1

NUCL.

METHOD	MASS	TEMP/K	REF	FREQ/MHZ
	35	77.	1	29.738 27.748 27.515

END OF OUTPUT

のようにデータを出力する。

#### Ⅳ. 検索キーの説明

REG I 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,△DI- . 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。

REC N 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、名はイニシャルのみ。イニシャ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。途中で空白があると、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。途中で空白が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REC N、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  $\triangle$  24.2 - 26.3

この例では  $24.2 \leq f \leq 26.3$  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  $\triangle$  - 26.3

〔例3〕 35  $\triangle$  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。

周波数の値で検索するときは誤差に注意しなければならない。24.2 $\pm$ 0.2MHzというデータがデータベースの中にあったとして、検索命令を24.3-25.1のようにすると、このデータが除外されてしまう。安全のためには24.2-25.2のように許容誤差を考えて、すこし広く検索するのがよい。

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  $\triangle$  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  $\triangle$  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  $\triangle$  1とすると結果は異なる。

NOTはセットとセットの間でのみ使える。

ANDとORは一つのMODE命令の中で組み合わせ可能である。

〔例〕 KEYW PHASE AND TRANSITION  
AUTH KUBO M OR NAKAMURA D

```
SELE ZEEMAN AND KUBO M AND STRUCTURE
```

ただし、論理式に ( ) は使えないから、分割した命令とする。たとえば

```
SELE (KUBO M OR NAKAMURA D) AND STRUCTURE
```

とするとエラーとなる。このような質問は

```
SELE KUBO M OR NAKAMURA D
```

```
SELE STRUCURE
```

```
AND 1 2
```

のように分割する。AND と OR を混合してもよいが、その場合は AND が先に処理される。コマンドを混合して AND、OR でつなぐことはできない。たとえば、

```
AUTH KUBO M AND KEYW QCC
```

とすると、KEYW QCC という人名を探すことになり、“NO DATA” の答が出る。この場合も質問を分割して、あとでセット間の AND を求める。

## V. 表 示

表示形式 (FORMAT) は全部で 8 種用意した。このうち、CAS 登録番号だけを出力する (FORMAT H) のは、他の文献データベース (CA SEARCH) などでも文献リストを求めるときの便宜を考えたものである。この出力形式のときは登録番号の昇順に出力される。ほかの FORMAT での出力では、レコード番号 (RECN) の昇順である。これを登録番号の昇順にしたいときは、表示のコマンド DISP をかける前に、SORT コマンドで並べかえておく。

[例]

```
MODE?; TYPE IN ? FOR HELP.
=SELE WEISS A (C/R)
SELE=WEISS A
          SET NO:    2                248 RECORDS

TYPE IN SEARCH TERM.
=SORT (C/R)
TYPE IN SET NUMBER.
=2 (C/R)
TYPE IN SORT KEY (REGI OR FORM)
=FORM (C/R)
SORT KEY=FORM
          SET NO:    3                248 RECORDS
```

ヒット数が多いときは、任意の部分だけを表示することもできる。つぎに表示の実例を示す。

```

MODE?, TYPE IN ? FOR HELP.
=DISP

SET NUMBER ?
=3
FORMAT ? TYPE IN ? FOR HELP.
=C 23-25
DISP 3 C 23- 25
-----
( 23) RECORD NUMBER;1257
FORM 50328-30-8 BR4GA1K1
NAME GALLATE(1-), TETRABROMO-, POTASSIUM, (T-4)-;
AUTH FICHTNER W; WEISS A;
JRNL Z NATURFORSCH B ANORG CHEM ORG CHEM; 35; 2; 1980; 170; 181
JRNL ;
1
1
1
-----
NUCL.
METHOD MASS TEMP/K REF FREQ/MHZ
79 77. 1 138.46 132.87 131.11 127.03
81 77. 1 115.69 110.99 109.55 106.14
79 298. 1 132.43 131.39 128.02 125.53
81 298. 1 110.66 109.78 106.96 104.88
-----
( 24) RECORD NUMBER;1259
FORM 30487-88-8 BR4GA1NA1
NAME GALLATE(1-), TETRABROMO-, SODIUM, (T-4)-;
AUTH FICHTNER W; WEISS A;
JRNL Z NATURFORSCH B ANORG CHEM ORG CHEM; 35; 2; 1980; 170; 181
JRNL ;
1
1
1
-----
NUCL.
METHOD MASS TEMP/K REF FREQ/MHZ
79 77. 1 141.41 127.28 126.79
81 77. 1 118.13 106.32 105.92
79 304. 1 138.01 124.34 123.43
81 304. 1 115.30 103.87 103.13
-----
( 25) RECORD NUMBER;1262
FORM 52582-08-8 BR4GA1RE1
NAME GALLATE(1-), TETRABROMO-, RUBIDIUM, (T-4)-;
AUTH FICHTNER W; WEISS A;
JRNL Z NATURFORSCH B ANORG CHEM ORG CHEM; 35; 2; 1980; 170; 181
JRNL ;
1
1
1
-----
NUCL.
METHOD MASS TEMP/K REF FREQ/MHZ
79 77. 1 137.54 136.30 135.05 132.65 130.09
79 77. 1 128.30
79 77. 1 127.29 125.68
81 77. 1 114.90 113.87 112.82 110.84 108.66
81 77. 1 107.18
81 77 1 106.35 104.99
-----
END OF OUTPUT

```

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。

## Ⅵ. 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?, NEWS, EXAM, 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。

## Ⅶ. 前方一致と中間一致

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。

ブールオペレータのパラメータに対しては\$は使えない。

\$ではさめば中間一致になる。著者のイニシャルがわからないとき

〔例〕 STEVENS \$

とすれば、STEVENS NでもSTEVENS Pでもすべてのイニシャルの人がヒットするが、同時に、STEVENSONもヒットしてしまう。これを避けるにはSTEVENS \$とすればよい。

## VIII. 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、一つの検索が終わっても、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。

## IX. 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。

## X. 検 策 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 3. UPDATED MARCH 8, 1983
TYPE IN ?, NEWS, EXAMPLE, OR SEARCH AFTER MODULE?

MODULE? TYPE IN ?, NEWS, EXAM, SEAR, OR END.
=SEAR

=== SEARCH STARTED ===
MODE?; TYPE IN ? FOR HELP.
=NAME
TYPE IN SUBSTANCE NAME.
=BENZENE$
NAME=BENZENE$
      SET NO:   1              256 RECORDS

TYPE IN SUBSTANCE NAME.
=FREQ
TYPE IN FREQUENCY CONDITIONS.
=35 31.1-32.5
FREQ=35 31.1-32.5
      SET NO:   2              39 RECORDS

TYPE IN FREQUENCY CONDITIONS.
=AND 1 2
      SET NO:   3              2 RECORDS

MODE?; TYPE IN ? FOR HELP.
=DISP

SET NUMBER ?
=3
FORMAT ? TYPE IN ? FOR HELP.
=A
DISP 3 A
-----
( 1) RECORD NUMBER; 500
FORM 100-44-7 C7H7CL1
NAME .ALPHA.-CHLOROTOLUENE; BENZYL CHLORIDE; BENZENE, (CHLOROMETHYL)-;
NAME .OMEGA.-CHLOROTOLUENE;
. . . . .
      NUCL.
METHOD MASS TEMP/K REF FREQ/MHZ
      35 77. 1 33.630
      35 196. 1 32.417
-----
( 2) RECORD NUMBER; 2958
FORM 42254-11-5 C14H1CL1F10O1
NAME BENZENEACETYL CHLORIDE, 2,3,4,5,6-PENTAFLUORO-.ALPHA.-(PENTAFLUOR
NAME OPHENYL)-;
. . . . .
      NUCL.
METHOD MASS TEMP/K REF FREQ/MHZ
      35 77. 1 31.288
-----
END OF OUTPUT

MODE?; TYPE IN ? FOR HELP.
=
* END OF SEARCH *
```

## [例 2]

```

MODE?, TYPE IN ? FOR HELP.
=NAME
TYPE IN SUBSTANCE NAME.
=KENZENE$
NAME=KENZENE$
      SET NO:    4              256 RECORDS

TYPE IN SUBSTANCE NAME.
=FREQ
TYPE IN FREQUENCY CONDITIONS.
=35 31.1-32.5
FREQ=35 31.1-32.5
      SET NO:    5              39 RECORDS

TYPE IN FREQUENCY CONDITIONS.
=14 2.1-2.4
FREQ=14 2.1-2.4
      SET NO:    6              61 RECORDS

TYPE IN FREQUENCY CONDITIONS.
=AND 1 2

NO DATA
MODE?, TYPE IN ? FOR HELP.
=AND 4 5
      SET NO:    7              2 RECORDS

MODE?, TYPE IN ? FOR HELP.
=AND 6 7

NO DATA
MODE?, TYPE IN ? FOR HELP.
=DISP

SET NUMBER ?
=7
FORMAT ? TYPE IN ? FOR HELP.
=A
DISP 7 A
-----
( 1 ) RECORD NUMBER, 500
FORM 100-44-7 C7H7CL1
NAME .ALPHA.-CHLOROTOLUENE, BENZYL CHLORIDE, KENZENE, (CHLOROMETHYL)-,
NAME .OMEGA.-CHLOROTOLUENE,
.
.
.
      NUCLE
METHOD MASS TEMP/K REF FREQ/MHZ
      35 77 1 33.630
      35 196 1 32.417
-----
( 2 ) RECORD NUMBER, 2956
FORM 42254-11-5 C14H1CL1F100
NAME BENZENEACETYL CHLORIDE, 2,3,4,5,6-PENTAFLUORO-.ALPHA.-(PENTAFLUOR
NAME OPHENYL)-,
.
.
.
      NUCLE
METHOD MASS TEMP/K REF FREQ/MHZ
      35 77 1 31.286
-----
END OF OUTPUT

MODE?, TYPE IN ? FOR HELP.

```

## XI. データベースの内容

結晶の核四極共鳴スペクトルおよび関連情報を物質ごとに 1 レコードとして収容している。結晶形が異なる場合は同一組成でも、べつの物質として扱う。収容しているデータ要素はつぎのとおりである。

1. CAS 登録番号：化学物質を登録するための一義的な背番号。67564-76-5 のようにハイフンを含め、現在は 10 ケタ。この番号から物質名と分子式を知るためには、CAS Registry Handbook, Number Section を見よ。また系統名から登録番号を知るためには、Chemical Abstracts, Chemical Substance Index を見よ。慣用名から登録番号を知るためには、

CAS Registry Handbook, Common Names(マイクロフィッシュ)

を見よ。登録番号↔構造式の相互対照のためには、

CAS Online サービスを利用すればよい。

- 分子式：Hill システムによる。すなわち、CとHがともに含まれている物質については、 $C_6H_3Cl_9O_3$ のようにまずCとHをかき、その他の元素はa b c順に並べる。それ以外の場合は全元素をa b c順に並べる。原子数が1のとき元素記号のうしろに1をかく。たとえば塩化水素は $CL_1H_1$ である。水和物の水は分ち書きとする。また分子間化合物も分ち書きとし、成分間にピリオドを入れる。原則として、観測している核種を含む成分を先に書く。

例  $Asl, C_2H_1CL_3O_1. 1/2(D_2O_1)$

- 物質名：IUPAC命名法、CAS命名法、慣用名等の異名(synonym)を含む。ギリシャ文字は英語で綴ってある。原則としてアメリカ綴りによる。ギリシャ文字を指定するため、前後にピリオドを置く。コンマのうしろはスペース一つあける。ただし置換位置番号を区切るコンマのときはスペースはあけない。

例 3-CHLORO-. ALPHA...ALPHA...ALPHA... TRIFLUOROTOLUENE  
 $\Delta CUPRATE(3-), \Delta TETRAKIS(CYANO-C)-, \Delta TRIPOTASSIUM,$   
 $\Delta(T-4)-$

- 共鳴周波数：共鳴核の質量数、測定温度、周波数(MHz単位)がはいっている。1982年入力の中から、測定方法を追加する。測定温度と周波数は実数として扱う(32MHzは32. MHzと書く)。質量数は整数である。
- 結晶形：PHASE I, ALPHA FORM など原報での記載にしたがう。
- 文献：著者名は姓、名のイニシャルをコンマ、ピリオドなしで記す。

例  $CHIHARA\Delta H, BROWN\Delta T\Delta L$

雑誌名はCODEN(6字)、略誌名、巻号年、ページの順に収容してある。

- キーワード：文献データベースとしても使えるようにキーワード語句を与えてある。
- 備考：文献ごとに、その文献に記載のある関連事項をREMKのフィールドに記載した。

## XII. データベース作成組織

このNQRデータベースは当初は科学技術庁の委託費によって、物性データ蒐集・評価法の研究として開始し、昭和57年度からは(社)化学情報協会の事業として、同協会にNQRデータ委員会を設け、継続的に作業を行ってきた。データ蒐集にあたっている委員のメンバーは次のとおりである。

千 原 秀 昭      阪大理(委員長)

中 村 大 雄	名大理
奥 田 勉	広大理
中 村 亘 男	阪大理
橋 本 真佐男	神大理
須 原 正 彦	金沢大理
浅 井 彪	阪大産研

データの蒐集は国際核四極共鳴委員会の協力を得て全世界的規模で行い、データの所在の組織的調査のためには、C A S が作成し、化学情報協会が運用しているCRA I S ファイルによる、C A C U S T O M サービスを利用している。1983年5月現在約2,800件のデータが収容されている。最終的には約1万件ですべての既発表データを網羅できる予定である。

本システム構築にあたり、大阪大学大型計算機センター磯本征雄講師、大阪大学蛋白質研究所安岡則武助教授にはデータ設計、I N Q の使い方など一方ならぬご援助を頂いた。厚く御礼申上げる。

### XIII. お わ り に

このシステムはまだ初期の段階であるが、日本電気のD B M S であるI N Q を基礎とする限りほぼ最終的な形になっている。物質名の表示、特に異名の収容や、物質辞書とのリンクなど重要な開発が残っており、さらに種々の計算機能の追加が考えられる。今後とも改良を重ねていく予定である。データ作成など、縁の下の支援をして頂いている大阪大学理学部中村亘男助教授には厚く謝意を表したい。