OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	データベースNQR（核四極共鳴スペクトル）検索の手引き（第４版）
Author(s)	
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1989, 73, p. 71-83
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65834
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

データベースＮＱＲ（核四極共鳴スペクトル）

検索の手引き（第４版）

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データベースの更新が進み、平成元年 1月末現在、8914件のデータが蓄積されたので、その後検索システムを手直しした部分をふくめ、あらためて検索の手引を作成した。核四極共鳴スペクトルは、結晶の同定、物性研究、化学結合研究に有力なデータであり、ＮＭＲスペクトルの四極子分裂の解析にも使われているデータです。はじめて使う人を想定して使い方を説明します。

Ｉ．データベースの呼び出しかた

１．大阪大学大型計算機センターへの利用申請

すで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の共同利用係で申請して、利用者番号(USERID)とパスワードをもらってください。他のセンターの利用者はオンラインで申請することもできます。

２．直接阪大センターへアクセスする場合（電話回線）

詳しい電話番号表はセンターニュースの表紙３ページに載っていますが、一番よく使われる番号だけここにあげておきます。

	電話番号		回線速度	モデム仕様
阪大吹田構内	2931	レベル0（無手順）	1200BPS	VADIC VA3400J
阪大豊中構内	2178	レベル0（無手順）	1200BPS	VADIC VA3400J
阪大外線電話	06-876-3145	レベル0（無手順）	1200BPS	V22,V22 bis

外線電話経由のときは、電話が通じたら、キャリッジリターン（ＣＲ）を打つ。モデムの種類によってＣＲだけでは接続しないので、その場合は、ＧＯとタイプしてからＣＲをうつ。システムから伝送速度を質問してくるので、数字でそれに返事をするとシステムから”ＧＯ”がもどるから、

$$ＳＳＣＯＮ，ＴＳＳ，，ＡＳＣ$$

と打って ＣＲ ．これによって小文字出力ができる設定になる。

３．国立大学大型センター間のネットワーク経由の場合

まずそれぞれのセンターのコンピュータに接続する。その後ネットワーク接続を要求する。以下の手続きで阪大センターに接続されるので、そこでＣＲを打つと阪大センターからのメッセージが来る。あとは上の２．の手続きでよい。

（ａ）北海道大学経由

READY のシステムメッセージのあとに NTSS を入力する。その後、WHICH HOST ? の問い合せに対して、OSAKA を入力する。

（ｂ）東北大学経由

SYSTEM ? のあとに、NTSS OSAKA で大阪に接続される。

（ｃ）東京大学経由

プロンプト >> のあとに NTSS 、さらに WHICH HOST ? のあとに OSAKA 。

（ｄ）名古屋大学経由

READY のシステムメッセージのあとに NVT を入れる。さらにシステムから NVT というメッセージが来たら OPEN OSAKA と入力する。

（e）京都大学経由
プロンプト ＃ のあとに、 NVT OSAKA を入れる。
（f）九州大学経由
READY のシステムメッセージのあとに NVT OSAKA を入れる。

II. 検索手順

阪大センターにつながったら、ＮＱＲデータベースを呼び出す。以下、システムからのメッセージに返事をする形で検索をすすめていく。ユーザが入力する部分を太字で書くことにする。 CR はキャリッジリターンを表す。

```
SYSTEM ?NQR
*** Welcome to NQR Database ***
This is Version 3.2, released on January 10, 1989
 Data updated on January 31, 1989
 ---------------------------------

*** Copyright Japan Assocn. for International Chem. Info. (JAICI) ****

Type in ?, NEWS, EXAMPLE, or SEARCH after MODULE?
MODULE? Type in ?, NEWS, EXAM, SEAR, or END.
=SEAR
=== Search Started ===
MODE?; Type in ? for Help.
=
```

によって検索の準備ができる。＊ ここでどんなコマンドが使えるかわからないときは ？ を入力すれば案内がでる。

```
MODE?; Type in ? for Help.
=?
--- Type in one of following modes ---
   Mode      : To search in terms of
-------------------------------------
   REG       : CAS Registry number.
   FOR       : Molecular formula.
   NAM       : Substance name.
   REC       : Record number.
   AUT       : Author name.
   COD       : CODEN, Journal identification.
   YEA       : Publication year.
   KEY       : Keyword or keyphrase.
   SEL       : Any data field other than REC,
                    YEA, & FRE.
   FRE       : Nuclear mass and/or freq. range
. . . . . .
   AND       : Conjunction between two set numbers.
   OR        : Disjunction between two set numbers.
   NOT       : Difference between two set numbers.
   DIS       : Data display in formats,
                    ( Format ; A, B, C, D, E, F, G, H.)
   SOR       : Sorting the retrieved data in terms of
                    FOR or REG.
   RES       : Erase all sets and restart the
```

```
                searching of NQR data.
------------------------------------
MODE?; Type in ? for Help.
=
```

MODE? に対して３文字の命令を入れる（ORは２文字）。いま分子式をキーとして化合物を探す場合を例として説明しよう。

```
MODE?; Type in ? for Help.
=FOR
Type in Molecular Formula
=C7H15CL3N1P1
FOR=C7H15CL3N1P1
         Set No:   1            2 Records

Type in Molecular Formula
=
```

２件のヒットがえられ、それを番号１のセットに一時保存した。もしこの分子式をもつ物質が見つからなければ、No Data というメッセージがもどってくる。
ここでさらにべつの分子式を質問として入力してもよいし、べつの MODE を入力してもよい。
分子式検索では前方一致と中間一致が許される。たとえば、分子式が C7H15 で始まる有機化合物を全部拾いだす（他にどんな元素が含まれていてもよいとする）には、

```
Type in Molecular Formula
=C7H15$
```

のように $ 記号をつけると、$ のところは何でもよいという命令になる。つまり前方一致である。これは塩の水和物と無水物との両方をいちどに探すときや、分子間化合物の成分を探すときなどに便利である。ただし分子間化合物の場合にはどの成分が最初に書いてあるかわからないから、つぎのように中間一致を使うほうがよい。

```
Type in Molecular Formula
=$C7H15$
```

と入力すると、C7H15 が分子式のあたまのところだけでなく、どこにあってもよいという検索条件になる。これを中間一致といっている。$ 記号の部分に何もなくてもよい。分子内に塩素がすくなくとも１個ある物質なら CL、窒素が３個ある物質なら $N3$ のように入力すればよい。ただし検索語はすべて大文字なので、N とすると、ネオジム（Nd）を含む物質もヒットする。これを避けるためには NOT を使うのも一法であるが、これにはあとで説明するような危険をともなう。

ヒットした解答のセットの内容をみたいときは、出力命令 DIS を使う。

```
MODE?; Type in ? for Help.
=DIS 1

Format ? Type in ? for help.
=
```

Format ? は出力形式の質問である。ここで ? を入力すると出力形式の一覧がでてくる。

```
Format ? Type in ? for help.
```

```
=?
Format       To print data for
A      : FOR + NAM + MOD + FRE
B      : FOR + NAM + MOD + FRE + REM
C      : FOR + NAM + MOD + FRE + AUT + JRN
D      : FOR + NAM + MOD + FRE + AUT + JRN + REM
E      : All fields of the record
F      : FOR + NAM
G      : Record number only
H      : Registry number only

Format ? Type in ? for help.
=
```

ここで Format C を選ぶと、つぎのように、データベースの内容が表示される。

```
Format ? Type in ? for help.
=C
DIS  1 C
--------------------
(   1)  Record number;     1
FOR  67564-76-5 C7H15Cl3NP
NAM Phosphorimidic trichloride, 1-propylbutyl-;
AUT Kozlov E S; Gaidamaka S N; Povolotskii M I; Kyuntsel' I A; Mokeev1
AUT a V A; Soifer G B;                                                1
JRN Zh Obshch Khim; 48; 6; 1978; 1263; 1266;                          1
 . . . . . .
        Nucl.
 Method Mass Temp/K   Ref                Freq/MHz
   X       35   77.     1   28.332  27.808   27.732
--------------------
(   2)  Record number;  5920
FOR  67564-75-4 C7H15Cl3NP
NAM Phosphorimidic trichloride, (1,1-diethylpropyl)-;
AUT Kozlov E S; Gaidamaka S N; Povolotskii M I; Kyuntsel I A; Mokeeva1
AUT  V A; Soifer G B;                                                 1
JRN Zh Obshch Khim; 48; 6; 1978; 1263; 1266;                          1
 . . . . . .
        Nucl.
 Method Mass Temp/K   Ref                Freq/MHz
   X       35     77.   1   29.738   27.748   27.515
--------------------
    End of output
```

解答セットのなかの一部だけを出力させることもできる。

III. 検索キーの説明

MODE ? のところで使える検索キーについてすこし詳しく説明する。

REG　　ＣＡＳ登録番号をハイフンを含めて１１桁までの文字として入力する。
　　［例］　37338-95-7
　　１１桁に満たない場合は左へつめて入力してもよいが、あたまにゼロを入力する必要は

ない。あたまにゼロがあっても検索には差し支えない。

FOR　分子式をＨｉｌｌの方式で入力する。Ｈｉｌｌの方式については X. データベースの内容を参照されたい。

NAM　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、置換位置をしめ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。上つき文字は前後を # で挟む。下つき文字 は前後を ? で挟む。

［例］ BENZENAMINE,△2,6-DICHLORO-4-NITRO-

［例］ COPPER,△DI-.MU.-IODOTRIS(TRIPHENYLPHOSPHORINE)DI-

［例］ ANTIMONY△CHLORIDE (SBCL?3?)

物質名は７２文字で切断される（空白も文字として数える）。７２文字よりも少ない入力に対しては、前方一致指定の場合を除いて完全一致検索である。

REC　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。REC については範囲指定（2632-2854）もできる。

AUT　著者名による検索用。姓、名の順で、名はイニシアルのみ。イニシアルが不明の場合は姓のうしろに $ 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］ CHIHARA△H

［例］ CHIHARA$

COD　雑誌同定用のＣＯＤＥＮを６文字入力する。

［例］ JACSAT

YEA　論文の発行年を４桁入力する。範囲検索（1975-1982）もできる。

KEY　キーワードまたはキーフレーズを５６文字以内入力する。途中に空白があってもよいが、空白が２つ以上つづくと、そこで終りとみなされる。

［例］ ELECTRONIC STRUCTURE

SEL　これは REC,YEA,FRE 以外のすべてのデータを種類によらず一挙にさがしてくれる便利な MODE である。７２文字まで入力できる。

［例］ CHIHARA△H

［例］ PHASE△TRANSITION

［例］ JACSAT

FRE　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(MHz単位）の下限と上限をハイフンでつないで入力する。

［例］ FRE 35 24.2-26.3

この例では、塩素核について、共鳴周波数が 24.2≦ｆ≦26.3 の範囲が検索できる。周波数は実数として扱うので、ちょうど 24 MHz 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］ 35△-26.3

［例］ 14△24.2-

核種を限定しないときは、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が必要になる。かりに、24.2±0.2 MHz というデータがデータベースのなかにあったとして、検索命令を 24.3-25.1 のようにすると、このデータは除外されてしまう。安全のためには 24.2-25.2 のようにすこし広く検索するのがよい。

ブール演算子、AND, OR, NOT

(a) ブール演算子は MODE ? に対して、すでにできているセット間で使うことができる。

［例］MODE ? Type in ? for Help.

=AND 2 3

これによって、セット２とセット３に共通に含まれているレコードが探せる。

OR についても同様に、

［例］MODE ? Type in ? for Help.

=OR 2 3

セット２とセット３の全体から重複をのぞいた集合がえられる。

NOT については慎重な配慮が必要である。

［例］NOT 2 3
とすると、セット２のなかからセット３に含まれているレコードを除外した残りを求めることになる。これは集合２から集合３を引くことに相当する。したがって、逆に NOT 3 2 とすると、結果は全くちがうものになる。もう一つ重要な注意は、NOT はセット間の差をつくる命令だという点である。たとえば、

```
［例］
FOR $N$
FOR=$N$
          Set No      1          4058 Records

Type in Molecular Formula
=$ND$
FOR=$ND$
          Set No      2             9 Records

Type in Molecular Formula
=NOT 1 2

(Set # 3 created for Negative of Set # 2)

          Set No      4          4049 Records

MODE?; Type in ? for Help.
=
```

とすると、かりに、窒素とネオジムの両方の元素を含んだ物質があったら、それは窒素を含んでいるのにセット４にははいっていないことになる。これを回復するのは難かしいが、
［例］FOR $N1$ OR $N2$ OR $N3$ OR $N4$
のようにしてセット２との間で OR の操作をすれば、ある程度回復できるが、検索にはかなりの時間がかかる。
(b) AND, OR はひとつの MODE 命令のなかで組合せ可能である。
［例］KEY PHASE AND TRANSITION
［例］AUT KUBO M OR NAKAMURA D
［例］SEL ZEEMAN AND KUBO M AND STRUCTURE
ただし、論理式のなかで（ ）は使えない。たとえば
［例］SEL (KUBO M OR NAKAMURA D) AND STRUCTURE
とするとエラーとなる。この質問は

```
［例］SEL KUBO M OR NAKAMURA D
      SEL STRUCTURE
      AND 1 2
```

のように三つの質問式に分割する。AND と OR を混合してもよいがその場合は AND が優先的に処理される。MODE を混合して AND, OR でつなぐことはできない。たとえば、
［例］AUT KUBO M AND KEY QCC
とすると、KEY という人名を探すことになる。この場合も質問を分割しなければならない。

IV. 表　示

表示形式は全部で８種類用意した。このうちＣＡＳ登録番号だけを出力する Format H は、他の文献データベース（ＣＡ Ｆｉｌｅ）などで文献リストを求めるときの便宜を考えたものである。この出力形式の時は登録番号の昇順に出力される。ほかの Format の出力では、レコード番号（REC）の 昇順である。もし、これを登録番号や分子式の昇順にしたいときは、表示のコマンド DIS をかける前に SOR （ソートコマンド）で並べかえておく。

[例]

```
MODE?; Type in ? for Help.
=SEL WEISS A
SEL=WEISS A
         Set No:   2          543 Records

Type in Search term.
=SOR
Type in Set number.
=2
Type in sort key (REG or FOR)
=FOR
SORT KEY=FOR
         Set No:   3          543 Records
```

ヒット数が多いときは、セットのなかの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しめす。

```
MODE?; Type in ? for Help.
=DIS

Set number ?
=3
Format ? Type in ? for help.
=C 23-25
DIS  3 C   23-  25
--------------------
(  23)  Record number;   512
FOR  58839-16-0 AlBr3.C13H8Cl2O
NAM Aluminum, [bis[4-chlorophenyl]methanone]tribromo-, (T-4)-; Alumin
NAM um bromide, compd. with 4,4'-dichlorobenzophenone;
AUT Deeg T; Weiss A;                                                  1
JRN Ber Bunsenges Phys Chem; 80; 1; 1976; 2; 11;                      1
 . . . . . .
        Nucl.
 Method Mass Temp/K   Ref                Freq/MHz
   C      79     77.   1  101.800  97.840   96.900
   C      79    295.   1   98.744  96.210   95.933
   C      81     77.   1   85.038  81.736   80.946
   C      81   295.5   1   82.493  80.376   80.145
   C      35     77.   1   35.285  34.939
   C      35    307.   1   34.740  34.520
--------------------
(  24)  Record number;   490
FOR  58839-15-9 AlBr3.C13H9BrO
NAM Aluminum bromide, compd. with 4-bromobenzophenone; Aluminum, trib
NAM romo[(4-bromophenyl)phenylmethanone]-, (T-4)-;
AUT Deeg T; Weiss A;                                                  1
JRN Ber Bunsenges Phys Chem; 80; 1; 1976; 2; 11;                      1
 . . . . . .
        Nucl.
 Method Mass Temp/K   Ref                Freq/MHz
   C      79     77.   1  103.744  101.480  97.692
   C      79    295.   1  101.272
```

```
   C      79   296.5   1  99.704
   C      79    297.   1  96.108
   C      81     77.   1  86.666   84.786   81.618
   C      81    294.   1  84.584
   C      81    297.   1  83.277   80.270
-------------------
(  25)  Record number;   489
FOR  58839-14-8 AlBr3.C13H9ClO
NAM Aluminum bromide, compd. with 4-chlorobenzophenone; Aluminum, tri
NAM bromo[(4-chlorophenyl)phenylmethanone]-, (T-4)-;
AUT Deeg T; Weiss A;                                                  1
JRN Ber Bunsenges Phys Chem; 80; 1; 1976; 2; 11;                      1
 . . . . . .
       Nucl.
 Method Mass Temp/K   Ref                 Freq/MHz
   C      79     77.   1  103.344  102.616  97.888
   C      79    296.   1  100.707  100.572
   C      79    297.   1  96.244
   C      81     77.   1  86.164   85.738   81.784
   C      81   295.5   1  84.148
   C      81    296.   1  84.025   80.394
   C      35     77.   1  35.340
   C      35    307.   1  34.888
-------------------
    End of output

MODE?; Type in ? for Help.
=
```

共鳴周波数のデータの表示のうち、測定法の記号はつぎの意味をもつ。

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	原報に方法の記載がない

1982年に入力したデータからは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（K）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つぎ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。

V. 積み重ねコマンド（stacked command）

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］KEY CRYSTAL STRUCTURE
　　AUT CHIHARA$ （前方一致）
　　NAM HYDROCHLORIC ACID
　　YEA 1973
じつは、積み重ねコマンド波、検索そのものの初めでも使える。
［例］ MODULE? TYPE IN ?,NEWS,EXAM,SEAR, OR END
　　=SEAR AUT CHIHARA H
のようにすれば一度で終る。DIS コマンドでも
［例］DIS 3 D 35-37
のように積み重ねてよい。

VI. 前方一致と中間一致

検索語のおわりに $ 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］YEA 197$
とする。著者のイニシアルがわからないとき
［例］AUT STEVENS$
とすると何人もの STEVENS さんがみつかるが、じつは STEVENSON さんもヒットとなってしまう。
こんな可能性があるときは、
［例］ AUT STEVENS $
のように空白を入れればよい。
化合物名に対して前方一致を使えば同族体や重水素置換体をまとめて検索できる。
［例］NAM BENZENAMINE $
ただしこの場合は BENZENAMINE 自身はヒットしない。後方一致機能はないが、中間一致で代用できる。
［例］NAM $IC ACID$
とすれば、鉱酸をかなりよく探せるが、完全ではないし BENZOIC ACID などもヒットする。

VII. SEL の活用

MODE ? で SEL (SELECT) を使うといろいろなデータのうち、
　　REG, FOR, NAM, AUT, COD, KEY
のどこにはいっているかを問わず全部を検索の対象にできるから、多少のノイズを覚悟すれば、非常に便利である。SEL 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。
MODE レベルに戻したいときは、プロンプト記号（=）のつぎになにもタイプせずに CR キーをたたけばよい。いつも = のあと単に CR だけすれば、一つ上のレベルにもどる。これを繰返せば MODULE から SYSTEM ? までもどる。

VIII. 検索の終了

プロンプト記号（=）のあと何も入力しないで CR すれば一つ上位のレベルにもどるからこれを続けて行なえば、 SYSTEM ? までいく。ここで BYE を入力すれば課金額などが出力されてコンピュータとの接続が切れ、検索が終了する。

IX. 検索例

つぎに二つの検索例をしめす。はじめのはコマンドなどを一つずつ入力した場合、第２例はまったく同じ検索を積み重ねコマンドで行なった場合である。

[例１]

```
SYSTEM ?NQR
*** Welcome to NQR Database ***
This is Version 3.2, released on January 10, 1989
 Data updated on January 31, 1989
 ----------------------------------

*** Copyright Japan Assocn. for International Chem. Info. (JAICI) ****

Type in ?, NEWS, EXAMPLE, or SEARCH after MODULE?
MODULE? Type in ?, NEWS, EXAM, SEAR, or END.
=SEAR
=== Search Started ===
MODE?; Type in ? for Help.
=NAM
Type in substance name.
=BENZENE$
NAM=BENZENE$
          Set No:   1           767 Records

Type in substance name.
=FRE
Type in Frequency conditions.
=35 31.1-32.5
FRE=35 31.1-32.5
          Set No:   2           159 Records

Type in Frequency conditions.
=AND 1 2

          Set No:   3            26 Records

MODE?; Type in ? for Help.
=DIS

Set number ?
=3
Format ? Type in ? for help.
=A
DIS  3 A
--------------------
(   1)  Record number;   500
FOR    100-44-7 C7H7Cl
NAM Benzene, (chloromethyl)-; Benzyl chloride; .ALPHA.-Chlorotoluene;
NAM  .OMEGA.-Chlorotoluene;
 . . . . . .
        Nucl.
 Method Mass Temp/K   Ref                Freq/MHz
   C      35   77.     1  33.630
   C      35   196.    1  32.417
--------------------
(   2)  Record number;  2958
FOR   42254-11-5 C14HClF10O
NAM Benzeneacetyl chloride, 2,3,4,5,6-pentafluoro-.ALPHA.-(pentafluor
```

```
NAM ophenyl)-;
 . . . . . .
       Nucl.
 Method Mass Temp/K   Ref                Freq/MHz
          35  77.      1  31.288
-------------------
(   3)  Record number;  4906
FOR  10477-40-4 C8H9ClO
NAM Benzene, (1-chloroethoxy)-;
 . . . . . .
       Nucl.
 Method Mass Temp/K   Ref                Freq/MHz
   X      35  77.      1  31.856   31.696
-------------------
    End of output

MODE?; Type in ? for Help.
=
* End of search *

MODULE? Type in ?, NEWS, EXAM, SEAR, or END.
=
Goodbye
```

[例2]

```
SYSTEM ?NQR SEAR NAM BENZENE$
*** Welcome to NQR Database ***
This is Version 3.2, released on January 10, 1989
 Data updated on January 31, 1989
 ----------------------------------

*** Copyright Japan Assocn. for International Chem. Info. (JAICI) ****

Type in ?, NEWS, EXAMPLE, or SEARCH after MODULE?
=== Search Started ===
NAM=BENZENE$
          Set No:   1          767 Records

Type in substance name.
=FRE 35 31.1-32.5
FRE=35 31.1-32.5
          Set No:   2          159 Records

Type in Frequency conditions.
=AND 1 2

          Set No:   3           26 Records

MODE?; Type in ? for Help.
=DIS 3 A 1-3

DIS  3 A    1-   3
-------------------
(   1)  Record number;   500
```

```
FOR    100-44-7 C7H7Cl
NAM Benzene, (chloromethyl)-; Benzyl chloride; .ALPHA.-Chlorotoluene;
NAM  .OMEGA.-Chlorotoluene;
 . . . . . .
        Nucl.
 Method Mass Temp/K   Ref                Freq/MHz
   C      35   77.     1  33.630
   C      35   196.    1  32.417
-------------------
(   2)  Record number;  2958
FOR  42254-11-5 C14HClF10O
NAM Benzeneacetyl chloride, 2,3,4,5,6-pentafluoro-.ALPHA.-(pentafluor
NAM ophenyl)-;
 . . . . . .
        Nucl.
 Method Mass Temp/K   Red                Freq/MHz
          35  77.     1  31.288
-------------------
(   3)  Record number;  4906
FOR  10477-40-4 C8H9ClO
NAM Benzene, (1-chloroethoxy)-;
 . . . . . .
        Nucl.
 Method Mass Temp/K   Ref                Freq/MHz
   X      35  77.     1  31.856   31.696
-------------------
    End of output

MODE?; Type in ? for Help.
=
* End of search *

MODULE? Type in ?, NEWS, EXAM, SEAR, or END.
=
Goodbye
```

X. データベースの内容に関する注

ＮＱＲデータベースに収容されている情報はつぎのとおり。

1．ＣＡＳ登録番号：化学物質を同定するための一義的な脊番号。123456-78-9 のように、ハイフンを含めて 11桁。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 を見ればよい。逆に、CAS の系統的な名称から登録番号を知るためには、Chemical Abstracts, Chemical Substance Index がよい。慣用名から登録番号を見つけるには、CAS Registry Handbook, Common Names （マイクロフィッシュ）がある。オンラインでこれらの相互参照をするサービスとして、STN International のなかの REGISTRY FILE を呼出せばよい。これによれば、構造式からの検索もできる。

2．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の場合には、Ｃ６Ｈ３ＣＬ９０３ のように、ＣとＨをまずかき、その他の原子はABC順に並べる。それ以外の場合は全元素をABC順にかく。このデータベースでは、原子数が１のとき元素記号の後に１を付ける。たとえば、塩化水素は ＣＬ１Ｈ１ である。水和物の水は分かち書きとする。また分子間化合物も原則として、分かち書きとし成分間にピリオドをいれている。

3．物質名：IUPAC 命名法、慣用名などいろいろな名称。上つき文字を示すにはその文字の前後

に#記号をいれてある。同様に下つき文字については？記号を使う。またギリシャ文字は英語で綴って（ALPHA,BETAのように）それをピリオドではさむ。

4．結晶系：Form 1, Phase I, .ALPHA. Phase のように、もとの著者が使っている書き方にしたがう。

5．共鳴周波数：測定法（1982年入力分から）、核種の質量数、測定温度、共鳴周波数（MHz）。文献番号。

6．文献：著者名（姓、名の順、ピリオドなし、名はイニシアルのみ）、雑誌の CODEN（同定記号）6文字、雑誌名、巻、号、年、はじめのページ、おわりのページ。文献番号は共鳴周波数の欄の文献番号に対応している。

7．備考：文献ごとにその文献に記載のある関連事項を収容した。

XI. 問い合せ先

質問や検索システムの不工合などは下記までお知らせください。

〒560　豊中市待兼山１－１　大阪大学理学部　千原　秀昭
TEL 06-844-1151 EXT 4210