

# 目 次

まえがき	佐々木 慎一	i
------	--------	---

1 化学情報の現状と動向	島内 武彦	1	
1 化学の現状	1	展	2
2 コンピュータの進歩と情報学の発展	3	3 化学者の当面の目標	3

## 化学情報の表現と検索

2 化学構造の線型表記法	平山 健三	9	
1 概説	9	4.1 非環系	21
2 有機化合物の IUPAC 表記法	12	4.2 環系	22
2.1 非環系	12	5 SKOLNIK 表記法	22
2.2 環系	15	5.1 非環系	23
3 WISWESSER 線型表記法	16	5.2 環系	24
3.1 非環系	17	6 GREMAS 法	24
3.2 環系	19	7 あとがき	25
4 HAYWARD 表記法	21	文献	26

3 化学構造表現の数式的手法	細矢 治夫	27	
1 化学構造式とは何か	27	7 高次グラフと高次トポロジカル・インデックス	39
2 数式的表現とその必要性	28	8 立体配座の数式的表現	40
3 特性多項式	29	9 異性体の数え上げ	43
4 距離多項式	31	10 残された問題	44
5 距離行列から得られる種々の特性量	33	文献	44
6 トポロジカル・インデックス	36		

4 構造化と処理法	内野 正弘	47	
1 基礎的演算系の構造化	48	2.4 群作用下の map を同値類の数え上げ	53
2 Algorithm のトポロジー的および群論的構造化	50	3 構造生成理論	56
2.1 Tree 構造と Table	50	3.1 基礎原理	57
2.2 Mapword と mapword tree	51	3.2 ある骨格を有する化学構造の生成	57
2.3 Word group とその性質	53	3.3 化学構造組立生成法	59

3.4 構造の unique code.....	60	4 Bibliographical remarks .....	61
3.5 有機合成デザイン.....	61	文 献 .....	62
<b>5 化学構造表現法 .....</b>	<b>工藤 喜弘</b> .....	<b>63</b>	
1 はじめに .....	63	4 表現法で問題が生ずる理由 .....	71
2 概 説 .....	65	5 表現法の種類と分類 .....	73
3 化合物の表現と構造の表現 .....	67	文 献 .....	87
<b>6 構造情報とデータベース .....</b>	<b>石塚 英弘, 藤原 鎮男</b> .....	<b>91</b>	
1 CAS レジストリシステムの概略 .....	91	6 検索システムとその応用 .....	97
2 レジストリ・ナンバー .....	91	7 文献検索との関連——CASIA .....	98
3 化合物の同定基準 .....	93	8 今後の展望 .....	98
4 構造データ .....	94	文 献 .....	99
5 化合物名データ.....	95		

### 化学情報の収集と処理, 予測と設計

<b>7 データ収集.....</b>	<b>竹内 誠</b> .....	<b>103</b>	
1 はじめに .....	103	4.2 システム構成とその機能.....	110
2 データ取得 .....	104	4.3 データサンプリングの詳細.....	111
2.1 情報のデジタル化.....	104	4.4 AD 変換器のダイナミックレンジ と FID.....	112
2.1.1 縦軸情報のデジタル化.....	104	4.5 FTNMR データの一次処理 .....	113
2.1.2 横軸情報のデジタル化.....	105	4.6 周波数スペクトルでの一次処理.....	114
2.2 情報取得速度.....	105	5 GCMS データ処理システム .....	114
2.3 情報量と取得方法.....	106	5.1 システム構成とその機能.....	115
3 分析機器と計算機オンラインにお ける諸問題 .....	107	5.2 GCMS データ取得 .....	115
4 Pulse-Fourier 変換 NMR-データ 処理システム.....	109	6 コンピュータの能力とその活用度.....	116
4.1 FTNMR のデータ取得.....	109	文 献 .....	118
<b>8 データの解析と処理.....</b>	<b>阿部 英次</b> .....	<b>119</b>	
1 経験的手法 .....	119	2.2.3 階層的 Q モードクラスター化法.....	125
2 統計的手法 .....	120	2.2.4 Shortest Spanning Path (SSP) 法.....	126
2.1 因子分析法によるスペクトルデー タ解析.....	120	3 パターン認識.....	127
2.2 クラスタ分析.....	122	3.1 学習機械 (Learning Machine) .....	129
2.2.1 類似度, 距離について.....	122	3.2 K-Nearest Neighbor (KNN) およ び類似の手法.....	131
2.2.2 線型識別関数によるクラスタ 分析.....	122	文 献 .....	133

<b>9 有機化合物の自動構造解析</b> .....山崎 徹, 佐々木慎一	135		
1 はじめに	135	4 構造解析のシステム	144
2 自動化の目的	136	4.1 自動構造解析システム	144
2.1 構造解析の工程	136	4.2 Stanfordグループのシステム	145
2.2 Man-machine システム	137	4.3 CHEMICS-F システム	146
3 自動化の方法	138	4.3.1 システムの構成	147
3.1 スペクトル情報の解析	138	4.3.2 部分構造の推定	147
3.1.1 スペクトルの照合	138	4.3.3 全構造の創出	150
3.1.2 スペクトルの予測	139	5 おわりに	152
3.1.3 スペクトルの解析	139	文献	152
3.2 構造の列挙	141		
<b>10 高分子構造の予測</b> .....長野 晃三	155		
1 高分子の一次構造と三次元構造	155	5.3 Lim の方法	166
2 生体高分子と合成高分子	156	5.4 Burgess, Ponnuswamy, Scheraga の方法	167
3 タンパク質の一次構造と高次構造	157	5.5 長野の方法と諸方法の比較テスト	169
4 タンパク質の折り畳み順序と階層 性	159	6 タンパク質の超二次構造予測法	173
5 タンパク質の二次構造予測法	160	7 エネルギー計算によるタンパク質 構造の予測法	174
5.1 Chou-Fasman の方法	161	文献	176
5.2 Robson の方法	164		
<b>11 有機合成デザイン</b> .....岩村 秀, 丸山 和博	179		
1 はじめに	179	3.2 Corey-Wipke の方法とHendrickson の方法の特徴	189
2 有機合成デザインの方法	180	3.3 有機合成デザインの試みを通して 得られる興味深い諸問題	193
2.1 Bersohn の有機合成デザイン	181	3.3.1 Corey の方法から	193
2.2 Corey の有機合成デザイン	184	3.3.2 Hendrickson の方法から	199
2.3 その他の有機合成デザインの考え方	186	文献	201
3 有機合成デザインに対する種々の とりくみ方	188		
3.1 有機合成デザインの特質	188		