

# 文献情報とスペクトル図形情報を併用する 濃縮データベースの作成

西岡 篤夫・石田 利之

## A Condensed Database using Bibliographic Informations and Spectral Figures

Astuo NISHIOKA and Toshiyuki ISHIDA

### Synopsis

A small database for personal use in the field of carbon-13 NMR of polymers was set up on personal computer with 20 MB hard disk.

The original master file, PCMRDB, was rearranged into a condensed form with seven typical bibliographic items, and then converted into a relational database. Another function of this system is to retrieve NMR spectral charts stored in the hard disk. An image scanning technique was used to read the original spectra, which were then compressed into the hard disk. These condensed data can be easily reproduced in the spectral figures. Both of the relational database and the spectral database are connected with common keys.

### 概 要

高分子の Carbon-13 NMR データベース PCMR-DB のマスターファイルをハードディスクを内蔵するパーソナルコンピュータに移植して研究用小型データベースを作成した。

このシステムは二つの内容から成り、一つはマスターファイルから書誌事項を濃縮してリレーショナルデータベースに変換したもので、他の一つはスペクトル図をイメージスキャナーにより読取り、これをハードディスクに圧縮格納したもので容易に復元して利用することができ、両者はキーにより相互利用ができる。

### 1. 結 言

最近における電子計算機に関する製造技術の進歩は極めて急速であり、特に VLSI の登場は汎用機のパフォーマンスを高める一方、小型機の大幅な普及を促進し、個々の研究者のパソコン利用を日常化しつつある。他方情報処理技術の進歩も著しく、データベースの利用が大

型機からパソコンレベルまで拡大している。しかもデータの対象が数値、文字から図形、画像その他各種の情報にまで及んで居り、マルチメディアデータベースの時代を迎えているのが現状である。

著者等は文部省の特定研究「情報システムの形成過程と学術情報の組織化」を契機として昭和 51 年度から高分子データベース研究会（代表者 筑波大学 藤原譲 教授）を組織し、高分子の Carbon-13 核磁気共鳴 (NMR) データベース「PCMRDB」<sup>1,2)</sup> を作成する作業を始め、現在までに登録されたレコード数は 2500 件をこえ、ファイル容量は 15 MB に達し、なお構築は継続中である。

一方その公開利用については著者の一人（西岡）が福井工業大学に在職中、所属地区の京都大学大型計算機センターの FAIRS システムにこのファイルに移植する計画を実施し、昭和 58 年 10 月から「CNMRP」の名で N1 システムを通じて全国的に TSS による検索が実現している<sup>3)</sup>。

このデータベースは一文献毎に書誌情報と主として化学シフトから成る物性数値情報を複合した形式に設計されて居り、いわゆる BIBDB と FACTDB の統合型で、このため一文献当りの容量は平均 6 KB とかな

り大きくなって居る。その後化学シフトデータの高度利用の見地から、化合物別に化学シフトとその帰属情報を再編集して新しいファイルを作り、これを京大の AIM/RDB に移植して「SHIFT」の名で昭和 61 年 5 月から公開利用を実現した<sup>4)</sup>。

さらにその後イメージスキャナー技術を応用した電子ファイルシステム(ELF)により、NMR スペクトル図の一部ファイル化を実現したが、これは FAIRS のサブシステムであり、同センター内の指定端末でしか利用できない不便さがある<sup>5)</sup>。

以上に述べたデータベースの構築と検索利用に関するわれわれの研究は専ら大型計算機センターのシステムに依存してきたものであるが、はじめに指摘したように最近のパソコンは低価格で高性能の製品が多く市販され、容量 20 MB のハードディスク (HD) を内蔵するものを研究室単位で購入することも比較的容易である。このような現状を考えると PCMRDB をパソコンに移植することも可能であり、このデータベースが元来個人研究者用に役立つことを目的として設計されていることから、一層利用し易くなる。

また画像処理技術の普及によりパソコンで利用可能なイメージスキャナーも市販されて居るので、C-13 NMR のスペクトル図のパソコンによるデータベース化を実現し、前記文献情報と併用すれば研究用小型データベースとして便利なシステムがえられよう。

本研究は以上の観点から大型機で稼働中のデータベースをパソコンに移植する試みとして行なったもので現在継続中であるが、今回は PCMRDB の原ファイルをパソコン用に簡易書誌情報の形式に濃縮したものと、スペクトル図データをイメージスキャナーによりパソコンのディスクにファイル化して利用する方法の二者を併用するシステムについて報告する。

## 2. 装 置

データベースの編集、検索等に利用するパソコンとして先ず必要なのはファイル容量であり、本研究で対象とする既述の PCMRDB のそれが 15 MB 以上であることを考えると最低 20 MB のハードディスクをもつ必要がある。次にスペクトル図のデータベース化に必要なイメージスキャナーの利用が可能な事が条件となる。

本研究で使用するパソコンとして以上の観点から日本電気 ㈱ 製 PC9801VX4 を選定した。本機は 20 MB

の HD 内蔵のほか 5.25 吋 FDD 2 台付である。

スペクトル図入力処理用イメージスキャナーは I・O データ機器 ㈱ 製の PIS-30 型を用いた。最大原稿サイズは A4 版、読取密度は 180, 200, 240, 300 ドット/吋 (dpi) の 4 段階で、1 ドットの分解能はこれに対応して 0.14~0.08 mm となる。一般に C-13 NMR スペクトル図は線スペクトル群から成り、強度の大小に応じて線巾も微妙に変化するので、イメージスキャナーにより処理された線スペクトルの再現性は本研究で重要な関心事の一つである。

なおイメージスキャナーをパソコンに接続時必要な RAM ディスク 2MB ボードとデータ圧縮復元ボード (PIO-9210) を増設した。スペクトル図をデータベース化する場合ディスクスペースの有効利用にこの圧縮操作は不可欠であるが、PIS-30 の場合圧縮率は CCITT 標準チャートで平均 1/9 という仕様になっている。C13NMR スペクトル図は線スペクトル状を示すのが普通で、原図の構成は単純な方である。圧縮率の実測結果は後述するが、凡ね上記仕様に近い。

## 3. 簡易書誌型リレーショナルデータベース

### 3.1. 簡易書誌情報ファイルの設計

PCMRDB は大型機の DBMS で大容量ファイル領域の割当下で動いているが、パソコンのディスクスペースは可及的に有効利用を図る必要があり、スペクトル図 DB の格納も考慮すると原ファイル容量をそのまま移すことはできず、何らかの濃縮を行うことが不可避となる。そこで今回は原ファイルの項目中で使用頻度の高い書誌事項を抽出し、簡易書誌情報ファイルを作成することにした。

PCMRDB のデータ項目は表 1 に示す如く 18 個あるが、この中中使用頻度の高い書誌項目として HEAD, COMPND, FORMLA, AUTHOR, JOURNL, TITLE, KEYWRD の 7 項目を選んだ。物性数値情報として重要な化学シフト値を含む SPECTR 項目は別途再編集して表形式の RDB とする予定である。

原ファイルは DB 原稿作成と入力作業の容易さから 1 行 80 バイトのカードイメージを採用して居り、各レコードの最初に識別キーとなる HEAD カードがある。この 1 行には表 2 に示す如く HEAD に続き 8 項目の有用な情報が記載されているが、このうちユーザにとって直接必要でない情報を除き、IDNO, REF-COD, EDYR, CANO, CODEN, AUTHOR の 6 項目

表 1. PCMRDB のデータ項目

データ項目	内 容
HEAD	レコードの見出し行
COMPND	化 合 物 名
REGNO	化合物登録番号
FORMLA	分 子 式
AUTHOR	著 者 名
JOURNL	雑誌名, 巻, ページ, 年
CLASS	化合物のクラス
TITLE	表 題
ADDRES	勤務先名, 住所
CANO	抄 録 番 号
SECTNO	研究分野番号
ABSTRT	抄 録
SAMPLE	試 料
SOLVNT	NMR 溶媒
MEASMT	測 定 条 件
SPECTR	化学シフト等数値データ
COMMNT	編集者の註釈
KEYWRD	キーワード句

を用いることにした。その他の項目については大項目名を HEAD にあわせて 4 バイトとしたほか, 7~12 カラムにある空白部を削除した。

一方この濃縮ファイルを検索利用するソフトウェアとしては表形式の RDB が便利なので, データ操作言語として標準的とされている SQL を採用している“10BASEIII”を用いた。これは個人用の RDB として安価である。原データファイルのデータ項目について数値と文字部を区切り分離した後, MS-DOS ファイルに変換すれば, この書式に一致した RDB ファイルを作成できる。

### 3.2. 簡易書誌テーブル CMR の作成

前項で述べた設計方針に基づき, MT に格納された PCMRDB の原ファイルから以下の手順で濃縮ファイルを作成した。

東京大学大型計算機センターで 15MB のマスターファイルから, 7 項目切出し, HEAD 部の濃縮, その他 6 項目の濃縮を行なった。RDB にする場合は 1 行毎に独立したレコードとなるので, 一意キーとして 5 桁の行番号 CMRNO を各行の先頭に附加し, さらに検索の際 IDNO 毎にまとめて出力する必要があるので

表 2. HEAD 項目の書式と濃縮

濃縮前			濃縮後	例
小項目名		長さ (B)	長さ (B)	
HEAD	見 出 し	4	4	HEAD
IDNO	レコード番号	4	4	1705
空 白		1	0	
REFCOD	化合物略号	8	8	PBD
空 白		1	0	
EDYRNO	編集者年別番号	8	4	YT89002S
空 白		1	0	
DATE	入力年月日	8	0	31/03/84
空 白		1	0	
空 白	作成者頭字	2	0	HS
空 白		1	0	
CANO	文献抄録番号	14	14	99/14/106038 C
空 白		1	0	
CODEN	雑 誌 略 号	6	6	JPLCAT
空 白		2	0	
AUTHOR	筆頭著者名	10	10	ASHITAKA
REFCOD	化合物略号	8	0	

```

00265,"HEAD"," 50 PVAC      KM74 82/02/004720A MAMOBX TING K WU      ", 50
00266,"COMP","1 POLY(VINYL ACETATE); POLY(1-ACETOXY ETHYLENE);", 50
00267,"FORM","1 (C4H6O2); (CH2CH(OCOCH3));", 50
00268,"AUTH","TING KAI WU/DERICK W. OVENALL/", 50
00269,"JOUR","MACROMOLECULES, V:7 P:776-779 Y:74 C:MAMOBX(J)", 50
00270,"TITL","PROTON AND CARBON-13 NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE", 50
00271,"TITL","STUDIES OF POLY(VINYL ACETATE)", 50
00272,"KEYW","POLY(VINYL ACETATE)/PMR VINYL ACETATE POLYMER/NMR VINYL", 50
00273,"KEYW","ACETATE POLYMER/VINYL ACETATE POLYMER TACTICITY", 50

```

図1. RDB変換用濃縮ファイルの例

item1	content1	idno1
HEAD	50 PVAC KM74 82/02/004720A MAMOBX TING K WU	50
COMP	1 POLY(VINYL ACETATE); POLY(1-ACETOXY ETHYLENE);	50
FORM	1 (C4H6O2); (CH2CH(OCOCH3));	50
AUTH	TING KAI WU/DERICK W. OVENALL/	50
JOUR	MACROMOLECULES, V:7 P:776-779 Y:74 C:MAMOBX(J)	50
TITL	PROTON AND CARBON-13 NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE	50
TITL	STUDIES OF POLY(VINYL ACETATE)	50
KEYW	POLY(VINYL ACETATE)/PMR VINYL ACETATE POLYMER/NMR VINYL	50
KEYW	ACETATE POLYMER/VINYL ACETATE POLYMER TACTICITY	50

図2. 濃縮書誌テーブルの検索出力例

各行の最後に該当する IDNO をベタ書きにした。このようにして作成された RDB への変換用濃縮ファイルの一部を図1に示す。1行の長さは行番号(5), 項目名(4), データ部(58), IDNO(4)計71バイトに区切り記号7バイトを加えて78バイトである。原MT中の最高のIDNO 2220までの内容を濃縮した結果は19596行であり、約1.53 MBとなった。パソコンに移植する際フロッピーディスクを用いるので5"2HDのFDに入るようにこれを2個のファイルに分割した(12002+7594行)。このファイルをMSDOSファイルに転送する場合合同センター内の日立製パソコン2020のIFITユーティリティのホスト→端末間転送機能を用いた。

以上の操作で作成したFDを研究室のパソコンVX4のHDに転送して一つのマスターファイルとする。その後10BASE IIIを起動し、この書式と同形式のテーブルを作成し、これにマスターファイルを転送すると目的のリレーショナルデータベースが作成される。

検索はSQLコマンドにより容易に行うことができる。検索結果の一例を図2に示す。

#### 4. イメージスキャナーによるNMRスペクトル図のデータベース化

##### 4.1. スペクトル図データベースの意義と問題点

一般にスペクトル図は物質の構造に関する一次情報として重要視され、専門分野別にスペクトル図集が書籍の形で多く利用されている。しかし研究者個人についての専門分野はかなり狭く、自分の必要とする範囲のデータだけを集めて利用できる方が便利である。

一方電算機によるスペクトル図のデータベース化は多くの研究者から望まれながら、記憶容量等の点で実現が遅れていた。最近画像処理技術の進歩によりイメージスキャナーによる図形の読み込みとデータ圧縮技術によりこれが実現可能となってきた。またCD-ROMによるデータ読み込みの高密度化により5吋ディスク1枚で約500 MBの記憶容量をもつことが可能となっているが、書換え可能な光磁気ディスクも最近市販されるようになった。

われわれは今まで高分子のNMRの分野の研究に役立てるためC-13 NMRのデータベースを構築してきたが、その内容は公刊文献に基づいて編集されたものであり、原文中に化学シフト値の記載が不十分の場合、編集委員が原論文のスペクトル図からデータを読み取ってDB原稿を作成することもあった。スペクトルの研究においては専門家になるほど未加工の原スペク

トル図が一次情報として欠かさない重要性を有している。このような観点からあまり広範囲でなく個人研究用として必要な程度のスペクトル図をデータベース化することの意義は充分あると考えられる。本研究における第2の方法としてイメージスキャナーによるパソコン用スペクトル図データベースの作成を試みたのはこの理由による。

#### 4.2. NMR スペクトル図の選定

スペクトル図データベース作成における第一の問題は原図の選定である。著者は PCMRDB の出典を成す諸雑誌につき、スペクトル図を通覧したが論文数の増加の傾向から多くの雑誌は図の大きさをかなり制限して居り、投稿時のサイズより縮小されるため、細部の

表3. C-13NMR スペクトルの図番号とファイル名および保存容量

図番号	ファイル名	容 量	図番号	ファイル名	容 量
120	PEHD	8056	154	PET	9956
121	PELD	15210	155	PBT	10458
122	CEP	10144	156	PESTER-A	12648
123	CBUTE	9990	157	PESTER-B	14686
124	CEHXE	11706	158	PESTER-C	13728
125	CEPNE	10424	159	PURETH-A	14460
126	CEOCE	11288	160	PURETH-B	12702
127	CEVAC	11000	161	PFAPHL-A	15150
128	PP-ISOT	8082	162	PFAPHL-B	15204
129	PP-SYND	9492	163	PFAPHL-C	16846
130	CEP-RAN	10158	164	PFAUR-A	15124
131	CEP-BLK	11522	165	PFAUR-B	10786
132	CBUTP	10008	166	PFAMEL-A	11574
133	PBUT	8318	167	PFAMEL-B	10922
134	PPNE	8236	168	PEPOX	12852
135	PBD-S	10546	169	NCELN2	12588
136	PST	9828	170	PSIOX	7454
137	CANST	10612	171	CSIOX	9694
138	CMMAST	12110	172	PIMDAMD	15658
139	CMALHST	10772	173	PIMDETH	13632
140	PVC	10014	174	PIMDAMN	11732
141	CVCVDC	9898	175	PIMDTRZ	9380
142	PVDF	10572	176	PSO2	10660
143	PVAC	8934	177	PSO2ETH	9314
144	PVA	10590	178	PIP-N	10496
145	PVBUTL	10558	179	PIP-S	9902
146	PMA	8746	180	PBD-C14	8100
147	PEA	9086	181	SBR	11460
148	PMMA	9562	182	CEPR-V	11914
149	PAN	9046	183	CEPR-T1	12230
150	NYLON6	9806	184	CEPT	12874
151	NYLON66	10344	185	CIBIP	10842
152	PPHNO	9096	186	PCP	9408
153	PCARBNT	10528	187	NBR	11956

点で見にくいものが多い。従って学会誌等のスペクトル図をそのままデータベース化するには問題がある。またイメージスキャナーを利用する場合原図のコピーを用いると鮮明度が低下するので、当然のことながらできるだけ鮮明な原図を用いることが望ましい。

われわれは以上の観点から高分子の C-13 NMR スペクトル図データベースに入力するのに適当な原著として「高分子分析ハンドブック」<sup>6)</sup>に記載の 68 図を選定した。これは同書の編集委員である藤原教授の御骨折により出版社の了解がえられたものである。これらのスペクトル図は四十数種類の代表的な合成高分子試料につき超伝導 NMR 分光器により殆んど同じ条件で測定されたもので、スペクトル図のほか主要ピークの帰属とそのシフト値に加えて分子構造図があり、帰属記号も併記されて居るのでいづれも非常に利用し易く編集されている。研究者としてスペクトル図を画面で見える場合、細部をかなり注視することが多いので一画面内に必要十分な情報をコンパクトに表現することは望ましいことで、これらの原図はそのモデルとして高い評価を与えることができる。

これら 68 図のスペクトルの図番号と試料名は表 3 の如くである。京大で稼動中の ELF システムは CNMRP を経由しないとアクセスできない不便さがあるが、本研究では前述の RDB による CMR テーブルと独立にスペクトル図を検索できるようにしてある。このためメニュー画面に試料名一覧を出力し、これにより検索する。表中にあるファイル名(化合物コード)はその略号である。

#### 4.3. イメージスキャナーの操作

PIS-30 を VX4 に接続後、スペクトル図のディスクへの入力とその後の検索、出力等の操作は主要図 3 の流れによる。最初は試行的に FD への入力を行なった。なお増設 RAM ボードを使用するため Dip SW. 2-5 と 3-6 を予め ON (↓) にしておく。

サポートソフトで立上げると初期化の Y/N が問われるのでデータ入力の場合 Y ↓ でメニューが出る。ここで原図の大きさに合ったサイズを入力する。使用した原図は B5 版の原著から複写したもので、1 ページに 2 図記載されているので、1 図 B6 版として入力した(図 4 参照)。次に読取密度の選択を行うわけであるが、180 dpi と 300 dpi の二通りを比較した結果、画面上の見易さと FD に格納後の読出し時間の両者を総合して 180 dpi を主に用いることにした。プリンター (PR-

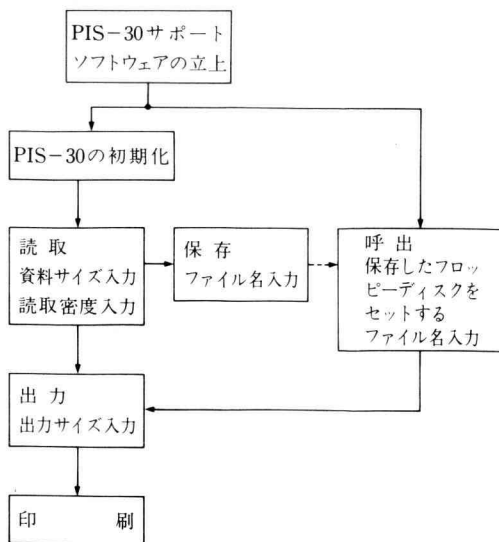


図 3. 検索手順

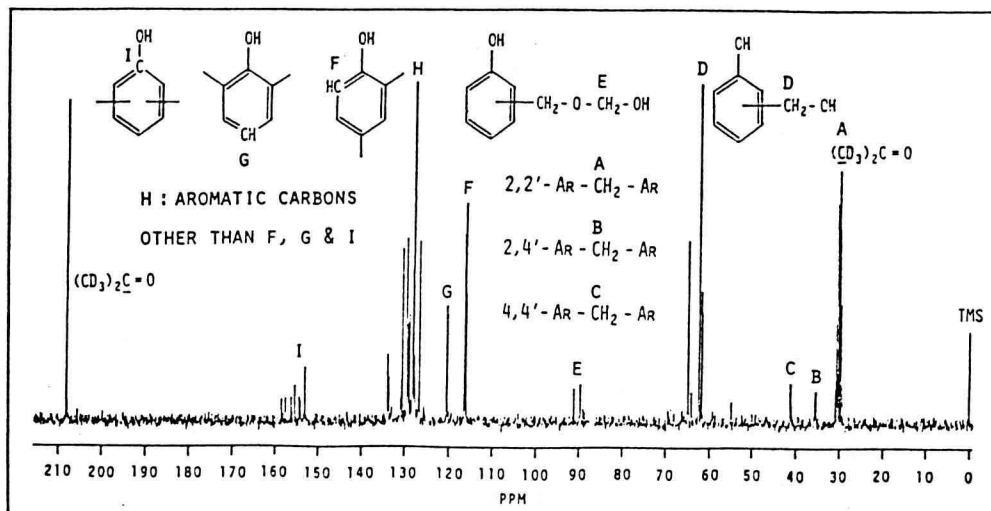
201V) への出力サイズは 1/1 と 1/2 (面積で 1/4) の 2 種類あるが後者は小さ過ぎて実用的でなく、1/1 を標準とした。なおレーザプリンターを用いれば拡大もできる。

次に格納操作であるが、先ず 68 図を 5"2HD 1 枚(約 1.2MB)に入れることを考えた。この場合平均すると 1 図 15 KB 以内にしなければならない。かなり複雑なスペクトル図の場合 B6 版、300 dpi で非圧縮で 390 KB を要した。180dpi でもこの半分以上になるから通常のスペクトル図でも 100 KB 以上になる。従って非圧縮では FD 1 枚に 10 図位しか入らず実用的でない。これに対し圧縮を行なった場合 180dpi で B6 の容量は 8~17 KB の範囲にあり平均して  $11039 \pm 2057$  B で約 11 KB となった。この方法で入力した結果は合計 750.652 KB であり、1 枚の FD でまだかなり余裕があった。68 図のすべてについて測定した圧縮後の容量を表 3 に示す。

次に呼出操作であるが、呼出キーを押してからファイル名として表 3 に示した化合物の略号を入力するとメニューが出るので確認後終了キーを押すとスペクトル図が画面に出る。これは原図の面積の 4 倍以上に拡大されたものでカーソルの移動により必要な位置に設定するようになって居り、1 図を画面内に表示することはできない。プリンターへの出力は出力サイズを決定して行なう(表 4 参照)。

検索時のスペクトル図呼出時間は約 10 秒で FD で

## 163. フェノールホルムアルデヒド樹脂 (レゾール, 初期縮合物50%メタノール溶液)



溶媒:  $(\text{CD}_3)_2\text{CO}$ , 温度:  $23^\circ\text{C}$ , 周波数: 62.8MHz, 積算: 5,000回

信号 (PPM) A: 29.84, B: 35.25, C: 41.02, D: 62.05, E: 89.33, F: 115.70, G: 119.96, H: 127.54, I: 152.61

図4. イメージスキャナー入力原図

表4. 原図と読取密度・プリンタ出力サイズの関係 (単位 mm)

出力サイズ 読取密度 dpi	1/2	1/1
180	38×75	76×149
200	42×83	85×165
240	50×99	101×199
300	64×125	127×248
原図のスペクトル図枠の寸法		67×132

表5. スペクトル図データベース作成時の操作と検索時間 (秒) (FD の場合)

	読取・保存 呼出・印刷	呼出・印刷
PIS-30サポートソフトウェアの立上	25	
PIS-30の初期化	5	
読取	20~30	
保存	20~30	
呼出・出力	20~30	
印刷	90	
計	180~210	135~145

も特に不便を感じることはない。

以上 FD への入力時の諸操作を述べたが, 最初の立上げからスペクトル図の読取, 格納後検索, 出力を続けて行なった場合の所要時間は1図につき約3分強であり, 単に呼出と印刷を行う場合は2分余であった。この程度の時間はスペクトル図を画面上で注視観察する時間を考えればあまり問題にならぬであろう (表5参照)。

#### 4.4. ハードディスクへの格納

イメージスキャナーによる  $^{13}\text{C}$  NMR スペクトル図の読取, 格納, 呼出等の諸機能は FD の場合前述の如く実用的には特に遅いと感じることはないが, 比較のた

表 6. 保存, 呼出および読取の所要時間 (秒)

操 作		保 存		呼 出		読 取	
読取密度 (dpi)		180	300	180	300	180	300
図番 170	ハードディスク 容量 9404B	4	9	4	7	11	21
	フロッピーディスク 容量 7454B	10	14	9	9		
図番 163	ハードディスク 容量 16714B	4	8	4	8		
	フロッピーディスク 容量 16846B	10	25	10	10		

めつぎに HD の場合について格納と呼出時間を測定し, その結果を表 6 に示す。

容量の小さい 7.4 KB の No. 170 図と最も容量の大きい 16.7 KB の No. 163 図の二つの場合, 読取密度 180 dpi と 300 dpi について比較すると HD の場合殆んど同じで, dpi による差が 2 倍出ているが, FD に対してはかなり短縮されていることが分る。読取, 保存, 呼出等の諸操作を頻繁に行う場合は総合的にみて HD の方が有利である。ただしこれらの各操作には条件選択のキー操作のためそれぞれ 10 秒程度必要である。

なお 68 図全部の説憶容量は HD の場合圧縮により 747.68 KB, 平均 10.995 KB であった。

#### 4.5. 復元スペクトル

呼出し操作によりディスクから復元されたスペクトルを画面又はプリンターにより観察した結果と問題点について述べる。

ディスプレイ画面に復元されたスペクトル図を全部見るにはカーソルにより上下, 左右に動かす必要がある。300 dpi の場合コの字型に移動して見るのに約 3 分, 180 dpi でも 2 分を要する。拡大図を見るにはこれでもよいが, 一画面で全体図を出せないのは不便であり, ソフトウェアを改善する必要がある。これについては今後アセンブラにより見易くすることを検討中である。

C13NMR スペクトル図は主として複数の線スペクトル群から成り, 強度の大小により線幅が微妙に変化する。専門的には一部の微弱なスペクトルの帰属も重要であり, この点でスペクトル原図の復元性の良否が問題となる。画面出力を 180, 300 dpi の二つの読取密度で比較した結果では復元図の大きさは大差がない

にも拘らず後者の方に微細な点で粗さが目立った。これは尖锐なスペクトル程その差が生じた。またスペクトル図において各線スペクトルは基線に対し垂直なので, スキャナーの走査方向とこれが平行な場合と垂直な場合の二つの入力方向が可能でこれについても比較を行なった。両者に著しい差はないが走査方向とスペクトルが平行な場合の方が若干よいように思われた。スペクトル図において比較的密集した部分の微妙な細部の観察は復元図では原図の場合より明らかに鮮明度が低下している。これには原著からの複写によって得られたコピー紙の紙質と黒地を構成する粒子の粗さのほか, 走査線密度の大きさや圧縮時の白黒各部の分解能等が複雑に関係していると考えられ, 今後なお検討を要する問題であろう。プリンターによる印刷出力では低強度の細いスペクトルに若干断続部が認められるほかは凡ね原スペクトル図を再現して居り, 実用上特に支障はないと思われる (図 5 参照)。

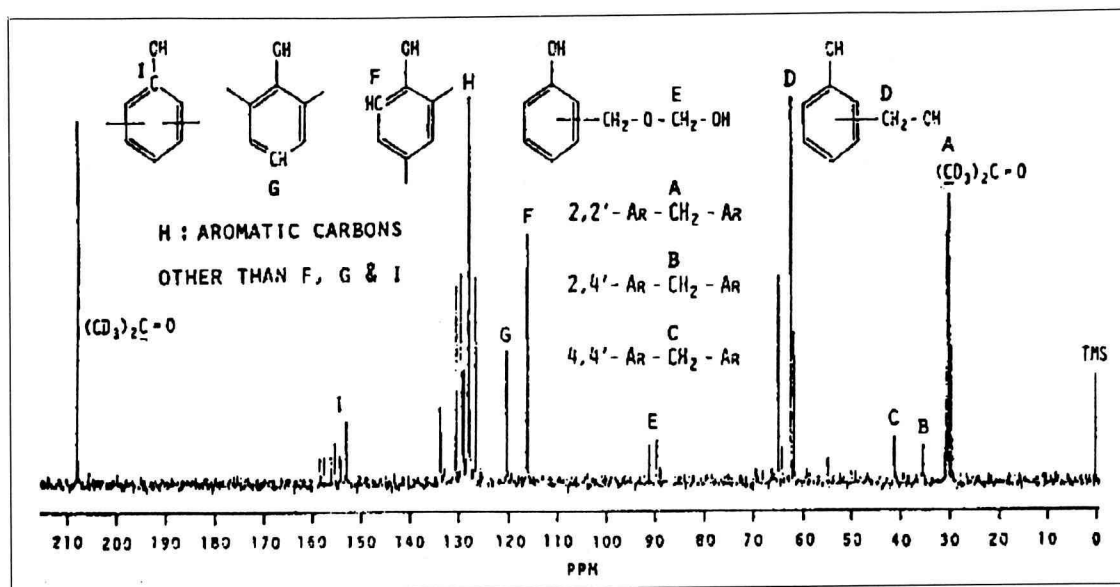
なおこのスペクトル図データベースと前節で述べた CMR テーブル間の相互引用を可能にするため, 原図を 46 種の高分子種に分け, これに IDNO を 2175~2220 の範囲で与え, その書誌情報を CMR テーブルに入力してある。また化学シフトのデータも含めたマスターファイルは ELF テーブルとして別個に作成してある。

## 5. 結 言

以上に述べた如く, 高分子の C-13 NMR データベースについて, マスターファイルを濃縮して簡易書誌情報ファイルを作成し, これを SQL 型のリレーショナルデータベースのテーブルに変換してパソコン



## 163. フェノールホルムアルデヒド樹脂 (レゾール, 初期縮合物50%メタノール溶液)



溶媒: (CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO, 温度: 23°C, 周波数: 62.8MHz, 積算: 5,000回

信号 (PPM) A: 29.84, B: 35.25, C: 41.02, D: 62.05, E: 89.33, F: 115.70,

G: 119.96, H: 127.54, I: 152.61

図5. 復元スペクトル図出力 (180 dpi, 1/1)

で検索利用すると共に、代表的な高分子化合物の C-13 NMR スペクトル図をイメージスキャナーによりパソコンのディスクに格納し、画面メニューより直接検索できるシステムを作成した。

小規模であるが個人研究用データベースとして利用価値があると思われる。パソコンに内蔵の 20 MB の HD にはまだ余裕があるので今後化学シフトを主体とする数値情報を利用できるようにすると共に、スペクトルの帰属について知識ベースを作成し、一層の高度利用の可能なシステムに発展させたいと考えている。

終りに本研究の素材を成す PCMRDB の構築に関し、当初から絶大な御協力を載っている筑波大学 藤原 謙 教授と高分子データベース研究会の諸氏に深く感謝すると共に、本研究が文部省科学研究費補助金の交付により実施されたことを付記し、併せて謝意を表す。

## 参考文献

- 1) Y. Fujiwara, K. Hatada, T. Hirano, T. Kawamura, S. Kondo, K. Matsuzaki, A. Nishioka, Y. Tanaka, and B. Tomita, A Carbon-13 NMR Database for Advanced Research in Polymers, Codata Bulletin, No. 40, 35-38 (1981)
- 2) Y. Fujiwara, T. Nakayama, A. Amada, K. Iida, K. Hatada, Y. Hirose, A. Nishioka, N. Ohobo, I. Suzuki, T. Yasugahira and S. Fujiwara, Data for Science and Technology, pp. 150-153, P.S. Glaeser (ed.), North-Holland Publ. Co. (1983)
- 3) 西岡篤夫, 「高分子の Carbon-13 核磁気共鳴データベース CNMRP」, 京都大学型計算機センター広報, Vol. 16, No. 5, pp. 253-265 (1983)
- 4) 西岡篤夫, 畑田耕一, 藤原 謙, 末広祥二, 「高分子の Carbon-13 NMR リレーショナルデータベース SHIFT」, 京都大学大型計算機センター広報, Vol. 19, No. 2, pp. 54-66 (1986)
- 5) 西岡篤夫, 藤原 謙, 高分子の Carbon-13 NMR

スペクトル図形のデータベース化とその検索, 京都大学大型計算機センター広報, VI. 19, No. 4, pp. 269-275 (1986)

6) 日本分析化学会 高分子分析ハンドブック編集委員会編, 高分子分析ハンドブック, 朝倉書店, 1985