

化学熱力学データベース作成の試み

千原 秀昭*

1. はじめに

大型コンピューター、特に記憶素子の発達によって大量の情報の蓄積と検索が急速に実用化しつつある。この分野では大別して文献情報データベースと数値・図形データベースの二つが対象となっているが、化学の分野では前者の代表としてChemical Abstracts Serviceのものがある。後者については質量分析、C13 NMRスペクトルなど数種が実用段階になっている。

化学熱力学データは基本的物性値として、単に熱研究者だけでなく、化学工学など応用化学から、物理学、地学、生物学等広い学問分野の研究者が必要とするデータであるから、これを収容した大型コンピューターファイルを作り、オンライン検索が可能となれば、需要は極めて多いと考えられる。ただしそのためには、すくなくとも10万の程度の物質についてのデータ収容が必要である。

今回試験的に、純物質の基本物性値データベースを作成し、大阪大学大型計算機センターのコンピューターによってオンライン会話型検索が可能なシステムを作成したので紹介する。現在は200物質程度しか収容されていないが、将来次第に拡充する計画である。阪大計算機の共同利用申請をすれば、公衆電話回線によるTSSで検索できるので、一度利用を試みられることをすすめたい。

2. データベース設計の方針

化学熱力学データは種類が非常に多い。しかもそれぞれが温度や圧力の関数になっているので、データベースにどのように取捨選択して含めるかはファイルの大きさやユーザーの利用法をどのように想定するかによってきまる。ここでは第三法則に関係したデータに限り、生成熱など反応系や多成分系データを除外した。これらは個別のファイルとする方が適当と考えられる。

検索モードとしては、物質名や化学式など物質を指定して数値データを出力させる場合だけでなく、特定の物理量の値を指定して物質名などを出力することもできるようにした。著者名や雑誌名からの検索もでき、文献ファイルとしても使えるように、かなり欲張った設計になっている。

3. 収容したデータ要素

Fig.1に代表的なレコードを示す。これはカードイメージで次のデータ要素を含んでいる。

(1) 分子内の原子種とその数

(2) 分子式 Hillのシステムに従った分子式になっている。(1)と(2)とは重複した情報であるが「分子・結晶データシステム」の仕様に従ったための冗長さである。分子式を一定の方式で入力しなければヒットしないのは当然であるが、数量データベースには屢々不統一なものが見うけられる。ここではHillシステムを採用したが、これでも必ずしも一義的ではない。Hillシステムでは、炭素原子を最初に書き、もし水素があればその次に、あとはアルファベット順に並べる。塩類や高分子、付加化合物などでは分ち書きすることになっているが、このための規則は必ずしも一義的でないので、ここでは分ち書きを一切やめた。この方式では元素記号が2文字の場合、たとえばSiと2原子SIの区別が心配されるが、SIはISと書くので混乱は生じない。混乱が懸念されるのはOSとO.Sであるが、化学の常織を働かせればよい。これを避けるには原子1個の場合に1を書けばよいが、いまはこの1を略してある。

(3) CAS登録番号 化学物質同定用にCAS (Chemical Abstracts Service)がつけている登録番号で、回転異性体などの区別はしていないが、複雑な有機化合物のように命名が一般の化学者にとって困難の場合にも誤りなく同定できるtoolである。すべての数量データベースにこの登録番号を含めておけば将来相互参照が極めて容易であるし、文献ファイルとのリンクも容易になる。物質辞書ファイルがべつに完成すれば、数量データベースには登録番号だけを入れておけば、分子式も物質名もいらぬことになるから、ファイルスペースをずっと小さくできる。

*大阪大学理学部：豊中市待兼山町1 〒560
(社)化学情報協会：東京都文京区弥生2-4-16
学会センタービル 〒113

Faculty of Science, Osaka University and Japan
Association for International Chemical Informa-
tion (JAICI)

```

NUMB      29
ATOM      H  I
ATMR      1  1
FORM      HI
REGN      10034-85-2
NAME      HYDROGEN IODIDE
NAME      HYPOIODIC ACID
TTPR      70.23
TTPR      125.60
STPR      3.76
STPR      7.54
TTRI      222.497
SFUS      12.33
TBLG      237.75
SVPN      83.14
SSTD      207.  298.1  5
GEFC      56.45  222.5  L
AUTH      INARA A
AUTH      CHIARRA H
AUTH      GIBBOUE W F
AUTH      MIERE R
JRN1      J CHEM THERMODYN      10      1978      45      64
JRN2      J AM CHEM SOC      51      1929      1441  1449
CODN      JCTDAF
CODN      JACSRT
REMK      THE DATA OF DI ARE ALSO GIVEN IN REFE-1.
REMK      STPR+SFUS WERE OBTAINED BY (ENTHALPY OF TRANS)/(TEMP OF TRANS).
REMK      SSTD REFERS TO THE IDEAL STATE.
COMT      0
CT007500
CT007500
CT007500
CT007500
CT007500
CT007500
CT007500
1CT007500
1CT007500
1CT007500
1CT007500
1CT007500
2CT007500
2CT007500
2CT007500
1CT007500
1CT007500
1CT007500
2CT007500
2CT007500
1CT007500
1CT007500
1CT007500
2CT007500
2CT007500
1CT007500
2CT007500
2CT007500
CT007500

```

Fig. 1. A typical data record.

(4) 物質名 物質名としてはCA Chemical Substance Indexに載っているCAS系統名を必ず入れ、そのほかに非系統名、慣用名、商品名も適当と思われるものを含めた。たとえば慣用名 aniline に対し系統名 benzenamine をも入れてある。

以上が物質同定用データ要素であるが、このほかに「分子・結晶データシステム」内での統一分子コードを使っている。Fig.1の右端のエントリーがそれである。これもCAS登録番号があれば、ほとんど冗長になるが、「分子・結晶データシステム」の分子コードはそれ以外のデータベースには通用しないので、止むを得ず登録番号と両方を含めた。化学熱力学データそのものとしてはつぎの要素をとり入れてある。

- (5) 転移温度 固相転移点をK単位で与える。
- (6) 転移エントロピー 固相転移に伴うエントロピー変化をJ/(K.MOL)単位で与える。転移点の値だけでエントロピー変化が未知の場合はREMARKにその旨を記載した。
- (7) 三重点 もし三重点でなく融点を与えられている場合はREMARKに記載した。
- (8) 融解エントロピー
- (9) 沸点 1気圧下の値を与えた。それ以外の圧力における値である場合はREMARKにその旨記載した。
- (10) 蒸発エントロピー 常圧沸点における値を記載した。それ以外の条件の場合はREMARKに記載した。
- (11) 標準エントロピー 温度と相の指定を含む。理想気体へ補正ずみの場合はREMARKに記載した。振動スペクトルファイルとのリンクができれば、将来は計算値と比較ができる。
- (12) ギブズエネルギー関数 $\{G(T)-H(0)\}/T$

値と温度と相の指定を含めた。 $H(0)$ のかわりに $H(298.15K)$ を採用する案もあったが低温データが主体なので今回は $H(0)$ を採用した。

文献データ要素としては、文献データファイルとしての利用や、コピーサービスの便も考えて、つぎの要素をとった。

(13) 著者名 9人までの共著者は全員採用、10人以上連名の場合は8人まで採り、9人目にet alを入れた。

(14) 雑誌名、巻、号、ページ、年 誌名としてはCA略記法によった。ただし単行本などで

非常に長いものは28字で切った。この場合は完全なタイトルをREMARKに記載した。ページについては、始まりと終りの両方を採用した。これは図書館などのコピーサービス利用のとき、終りのページが不明だと手間がかかるからである。

(15) International CODEN CODENは雑誌名などの同定記号で、誌名の略し方の個人差があるとヒットしない不便を解消し、図書館相互借借やコピーサービスするとき、よくいたべつの雑誌と混同しないために必要である。

(16) REMARK その物質に準安定相があるなどの付加的情報を記載した。

4. ファイル構成

データファイルは順編成カードイメージファイルとして大阪大学大型計算機センターの個人用ファイルとしてオンライン用ディスクに収容されており、Fig.2に掲げる200物質、約4000枚のカードに相当する。Fig.2では1物質につき1名称だけプリントしてあるが、§3で述べたように1物質あたり平均2以上の名称がはいっている。物質名の下は左側は分子コード、右側はCAS登録番号である。この分子コードには一部割当てミスがあるので、現在修正作業中である。

5. オンライン会話型検索の例

5.1 検索の開始

ファイルにアクセスする方法については、大阪大学大型計算機センター利用の手引きに説明がある。端末を電話で呼び出した計算機に接続し、\$CON, TSS, JISと入力すると、システムからUSER IDを問合わせて

DEUTERIUM CHLORIDE CT007451 7698-05-7	NITROGEN TRIFLUORIDE CT000094 7551-54-2	NITROGEN TETRACIDE CT007290 10544-72-8	RUBIDIUM CYANIDE CT008380 21846-93-5
DIBORANE CT000380 19297-45-7	CYCLOHEXANE CT001200 110-26-7	CARBON DIOXIDE CT000390 124-38-9	POTASSIUM NITRATE CT007670 7757-79-1
CYCLOPROPANE CT001050 75-19-4	IODINE CYANIDE CT007440 143-23-9	NICKEL HYDROXIDE CT007980 12054-48-7	PHENOL CT006580 108-95-2
DODECANE CT006220 112-40-3	ETHANE CT000870 74-84-0	TRIFLUOROMETHANE CT000550 75-46-7	NAPHTHALENE CT006460 91-20-3
HYDROGEN IODIDE CT007500 10094-85-2	FORMIC ACID, COPPER(2+) SALT (TETRAHYDRATE-DE) CT007298 14690-98-3	NITRIC ACID CT001866 7697-97-8	POTASSIUM EPONITE CT007410 7758-02-9
COPPER OXIDE CT007280 1344-70-3	DEUTERIUM CT007422 7782-39-0	DIMETHOXYMETHANE CT006646 109-87-5	POTASSIUM IODIDE CT007620 7681-11-0
TETRAMETHYL TILANE CT006860 75-76-3	HEXACHLOROETHANE CT000990 67-72-1	HYDROGEN-D2 SELENITE CT000072 1524-95-3	CHLOROTRIFLUOROMETHANE CT002260 75-77-9
HYDROGEN EPONIDE CT007430 10025-16-6	COPPER CT007270 7740-50-3	HYDROGEN-D2 SULFIDE CT000052 13576-94-9	BROMOTRIFLUOROMETHANE CT006370 75-43-8
CYCLOBUTANE CT001150 287-23-6	CYCLOHEXENE CT006350 110-33-4	HYDROGEN-D1 SULFIDE CT000051 13062-18-0	POTASSIUM HYDROGEN SULFATE CT007656 7644-33-7
ETHANE THIOLE CT006320 75-09-1	POTASSIUM CYANIDE CT007830 151-50-8	1,1,2-TRICHLOROETHANE CT006360 74-00-5	ACETONE CT006320 74-00-1
DEUTERIUM IODIDE CT007511 14104-45-1	DIBORON CT000380 7782-40-1	HEXACHLOROCYCLOTRIS(ETHYLENE) TRIMINE/TETRACHLOROTRIMINE TRISULFATE DECA CT008300 35705-97-4	PHOSPHORIC ACID CT006310 7723-14-0
1,2-DIBROMOETHANE CT000920 106-93-4	ETHYLENE CT000840 7782-40-1	ETHYLENE GLYCOL CT006420 107-21-1	PENTANE CT006150 109-66-0
1,2-DICHLOROETHANE CT000910 107-06-2	ETHYLENE CT000840 7782-40-1	ETHYL ACETATE CT006250 141-72-8	THYSON CT006320 7782-44-7
DECANE CT006200 124-18-5	1,1,1-TRIFLUOROETHANE CT006790 420-44-2	ETHYLENE OXIDE CT000530 75-21-8	PHOSPHORIC FLUORIDE CT001750 13478-30-1
HYDROGEN CHLORIDE CT007440 7647-01-0	HYDROGEN FLUORIDE CT000720 116-14-2	BROMOMETHANE CT000520 74-33-9	CARBONIC BICHLORIDE CT002120 75-44-5
TETRAFLUOROETHENE CT000720 116-14-2	DEUTERIUM BROMIDE CT007441 1353-99-9	CHLOROMETHANE CT000520 74-37-3	METHANETHIOLE CT006410 74-37-1
DIBROMO DICHLORO COPRIT CT007240 13945-03-8	DIAMMO DICHLORO COPRIT CT007240 13945-03-8	HEXANE CT006120 110-54-9	HYDROGEN SULFIDE CT000670 7782-07-5
TRI-,PI-,CYCLOPENTAFIENYL DI- -MUL,3-THIOOTRI-TRIPHSULO -CORAL CT007200 11105-79-6	IODINE CT007570 7553-54-2	FURAN CT001110 110-00-9	METHYL NITRATE CT006740 590-55-3
HEXAKIS(CYANO-)TETRAPOTA SIUM(OC-6-11)-FERRATE(4-) TRIHYDR CT007290 13942-58-3	IODINE CHLORIDE CT007590 7790-99-0	HYDROCYANIC ACID CT000420 74-90-2	TRIFLUOROMETHANETHIOLE CT007110 1493-15-9
TETRAOXYBIS(FORMATO-O)-COP PER CT007290 41677-27-4	AMMONIUM TRICHLOROMERCURATE (II) CT007990 13347-03-0	HEXAMMINO CYCL EPONIDE CT003000 12601-55-3	POTASSIUM THIOCYANATE CT007660 313-20-0
TIN CHLORIDE DIHYDRATE CT008200 10025-69-1	CYCLOPENTENE CT006380 628-92-2	TETRACHLOROETHYLENE CT000170 10026-04-7	EPONOTRIFLUOROMETHANE CT006580 75-42-7
CYCLOHEXANOL CT006590 108-93-0	HEXAKIS(CYANO-)FERRATE(4-) (TETRAPOTASSIUM TRI-HYDRA TE-DE) CT007298 42278-89-6	TETRACHLOROTANNANE CT000230 7646-78-6	TRIFLUORODIOMETHANE CT006270 2514-97-8
CYCLOHEPTANOL CT007160 502-41-0	LITHIUM CHLORIDE CT007720 7447-41-8	DUFENE CT006430 95-94-3	OXYGEN FLUORIDE CT007350 7782-44-0
CYCLOPENTENE CT006320 142-29-0	CARBON DISULFIDE CT000400 75-15-0	HYDRAZINE CT006390 302-01-2	NITROXYL FLUORIDE CT001320 7789-25-5
CARBONIC DIFLUORIDE CT002170 353-50-4	CARBONYL SULFIDE CT000410 463-58-1	COBALT HYDROXIDE CT007340 21041-93-0	NITROXYL CHLORIDE CT001330 2696-92-6
PHOSPHOROUS TRIFLUORIDE CT000110 7783-55-3	DINITROGEN OXIDE CT000010 10024-97-2	METHYLNITRILE CT006730 624-91-9	ODDNE CT001240 10028-15-8
	TETRAMETHYLGERMANE CT007400 865-52-1	ANTHRACENE CT006470 120-12-7	NITRIL FLUORIDE CT007810 10022-50-1
		NITROMETHANE CT003590 75-52-5	PHOSPHORUS CT008030 7723-14-0

Fig. 2. Substances in the file.

くるから、自分の課題番号とパスワードを入力する。それが正しければ、システムから SYSTEM? と質問してくるので、6096831124/CTDATA, R と入力すれば化学熱力学データファイルとその検索プログラムを呼び出すことができる。実行命令は RUN である。

最初のシステムメッセージはコマンド一覧表と利用法の説明である (Fig. 3)。入力・出力ともに Fig. 3 の 4 文字コマンドを使う。

検索にあたってはまず検索コマンド(タグ)をきめて入力する。つぎにそのタグに対するキーワードを入力する。タグとして物質名, 著者名, 誌を選んだときには, truncation (切り捨て) 技法を使うことができる。

5.2 truncation

いま飽和炭化水素とその誘導体のみを取出したいとき, NAME をコマンドとし, つぎにキーワードとして \$ANE を入力すると, 物質名の最後が ANE であるレコードが

拾い出される。\$ の記号はその部分に何があってもよいことを示す。いわゆる後方一致である。同様に, CHLOR\$ と入力すれば前方一致になる。前後を \$ ではさむと, はさまれた部分のストリングサーチとなり, それが名称のどの部分にあってもよいことを示す(前方一致, 後方一致を含む)。この技法は著者名にも使えるので, 姓はわかっているが, 名のイニシャルが不明の場合や, ドイツ・オランダの人名の VON, VAN が姓につくのかどうか不明のときなどに便利である。

VON HIPPEL G

とすべきか,

HIPPEL VON G

とすべきか迷うとき, \$HIPPEL\$ と入力すればよい。

5.3 数値の検索

Fig. 2 のコマンドの TTRA から GEFC までをタグとすると, 数値のはんいを問合わせてくる (Fig. 4)。これ

化学熱力学データベース作成の試み

POTASSIUM		TOLUENE		HEXADECANE	
CT007590	7440-09-7	CT006370	108-88-3	CT006260	544-76-3
METHOXY ETHANE		ETHYLENE		PENTADECANE	
CT006520	540-67-0	CT000710	74-85-1	CT006250	629-62-9
METHYL ALCOHOL		HYDROGEN-D SELENIDE		UBIDIUM HYDROGEN SULFATE	
CT000650	67-56-1	CT000070	13763-00-3	CT008120	15587-72-1
TIN CHLORIDE DI (HYDRATE-02)		HYDROGEN TELLURIDE		AMMONIUM NITRATE	
CT008204	29448-63-8	CT007520	7783-09-7	CT007850	6484-52-1
LITHIUM BROMIDE		TRICLOROMETHANE		TRANS-2-BUTENE	
CT007730	7550-35-3	CT007090	75-47-8	CT006120	107-01-7
LITHIUM IODIDE		TETRAMETHYLENE		CIS-2-BUTENE	
CT007740	10377-51-2	CT006770	509-14-8	CT006120	107-01-7
LITHIUM FLUORIDE		OCTADECANE		SILVER CHLORIDE	
CT007710	7789-24-4	CT006230	593-45-3	CT007010	7783-90-6
CYCLOHEPTANE		NONADECANE		CESIUM BROMIDE	
CT006390	291-64-5	CT006290	629-92-5	CT007210	7787-69-1
POTASSIUM FLUORIDE		HYDROGEN SULFIDE		CESIUM IODIDE	
CT007650	7789-23-7	CT001510	13465-07-1	CT007220	7799-17-5
T-BUTYL ALCOHOL		GERMANE		N-HEPTADECANE	
CT006550	75-65-0	CT006200	7782-65-2	CT006370	629-79-7
ETHYL ETHER		PROPANOL		UBIDIUM CHLORIDE	
CT006560	60-29-7	CT006510	71-23-8	CT008090	7791-11-9
BUTYL ALCOHOL		STYRENE		SODIUM FLUORIDE	
CT006540	71-36-3	CT003770	100-42-5	CT007890	7681-49-4
2,3-DIMETHYLPROPANE		CHLORODIFLUOROMETHANE		SULFUR	
CT006340	463-82-1	CT006680	75-45-6	CT009130	7704-34-9
OCTANE		SODIUM IODIDE		PROPIONIC ACID	
CT006120	111-65-9	CT007920	768-92-5	CT006330	79-09-4
NONANE		TEIDECAENE		SILVER IODIDE	
CT006190	111-84-2	CT006230	629-50-5	CT007030	7783-96-2
HEPTANE		THIOPHENE		SILICON	
CT006170	142-92-5	CT001120	110-02-1	CT009140	7440-21-2
1,2-BUTADIENE		THIOPYL FLUORIDE		METHYLPROPANE	
CT006060	590-19-2	CT001570	7783-42-6	CT006500	75-56-9
BENZENE		UNDECANE		VINYL CHLORIDE	
CT001190	71-43-2	CT006210	1120-21-4	CT006780	75-01-4
POTASSIUM CHLORIDE		SODIUM HYDROXIDE		HEXACETATOCHLORODIOTR	
CT007600	7447-40-7	CT007950	1316-77-2	ICHRONIUM NANOHYDRATE	
ETHANEDINITRILE		PROPANE		CT007310	32591-52-9
CT002420	460-19-5	CT001080	74-98-6	SODIUM	
1,1,2,2-TETRACHLORO-1,2-DIF		MERCURY		CT007280	7440-22-5
LUORIDE		CT007700	7439-97-6	UREA	
CT003410	76-12-0	1,1,1-TRICHLOROETHANE		CT006750	57-13-6
MAYERSTIC BLUE PERCHLORATE		CT006420	71-55-6	ISOBUTANE	
CT008290	17911-89-6	FLUORINE		CT006140	75-29-5
PROPANOIC ACID-CALCIUM STRO		CT007250	7782-41-4	STOP END OF FILE	
NIUM SALT (6:2:1)		FORMIC ACID			
CT008210	16674-79-6	CT006640	64-13-6		
TETRAFLUOROSILANE		HEXAFLUOROETHANE			
CT000160	7783-61-1	CT000380	76-16-4		
SODIUM CHLORIDE		DIMETHYL ETHER			
CT007900	7647-14-5	CT001000	115-10-6		
SODIUM SULFATE		ETHYL CHLORIDE			
CT007950	15124-09-1	CT000950	75-00-1		
SODIUM BROMIDE		TRIFLUOROCHLOROETHENE			
CT007910	7647-15-6	CT006700	79-32-9		
SULFURYL FLUORIDE		ARISINE			
CT001910	2699-79-8	CT000130	7784-42-1		
TETRADECANE		FLUOROTRICHLOROMETHANE			
CT006240	629-59-4	CT002290	75-69-4		

に対してはSI単位での数値を入力する。本来はファイル作成にあたって、データの評価をし、誤差のはんいを添えておくべきであるが、いまはその手続きをしていない。したがって、たとえば転移点が120Kと123Kの間にある物質を探すと、120、123と入力すると、転移点が119±1Kのものや126±4Kのものはヒットしない結果となる。この点は数値のはんいを指定するときに注意する必要がある。固相に相転移をもつものすべてを選び出したときは0、1000のように極端に広く指定すればよく、柔粘性結晶だけを拾い出したときはSFUSのタグで0、21と入力すればよい。

5.4 逐次検索

一つのタグを選び、キーワードを入力してレコードの集合を作った後、さらにべつのキーワードで対象をしぼるかどうかをシステムが質問してくる(Fig.4)。これに対してYESと入力すれば、はじめにもどって検索コマ

ンドの指定から始めるが、NOと返事すれば出力フォーマットを問わせてくる。この逐次検索は何回でも続けることができる。

もし、あるキーワードを使ったとき、ヒットが0になると、べつのキーワードと置きかえたいことがあるのでシステムから同じセットをもう一度使いたいかという問合わせがくる。NOと返事すればそのシリーズの検索は終了するが、YESと返事すれば再び逐次検索のラインにのせることができる。ヒットが1個になると出力形式の問合わせが出る。

逐次検索の各段階で独立にコマンドが選べるので、多種多様な組み合わせができ、適合率(relevancy)を向上させることができる。うまく組み合わせれば、NAMEコマンドのもとで、ある程度の部分構造検索も可能である。たとえば飽和炭化水素の塩素誘導体を拾い出すときには、\$CHLOR\$で一次検索し、そのセットについて\$ANE

```

$$$CON+TSS
ACCS-8 TSI(PS.2) ON 05/20/79 AT 13.887 CHANNEL 8811

USER ID -6096831122
PASSWORD--
#####

** YOSANAKU CHECK ON .. ZENJITSU DANAKU 132751
**12.217**TSS WILL SIGN OFF AT 19.000

SYSTEM REPORT 0 6096831124/OTDATA/R
*RUN

WELCOME TO CHEM. THERMODYN. DATA BANK.
DO YOU WANT THE LIST OF COMMANDS? PLEASE ENTER YES OR NO.
=YES

TRUNCATION TECHNIQUES MAY BE USED FOR SUBSTANCE AND AUTHOR NAME SEARCH.
USE THE SYMBOL $ TO INDICATE THE PORTION TO BE TRUNCATED AS IN THE
EXAMPLES SHOWN. IF AUTHOR'S INITIALS ARE UNKNOWN, ADD $ AT THE END
OF HIS/HER LAST NAME.

      RIGHT-HAND TRUNCATION      BENZ$
      LEFT-HAND TRUNCATION       $AMIDE
      BOTH-HAND TRUNCATION       $METHYL$

      *** LIST OF COMMANDS ***

-----
I  MNDS I      SIGNIFICANCE OF COMMANDS (IN-OUT)  I
-----
I  FORM I      MOLECULAR FORMULA                  I
I  REGN I      CAS REGISTRY NUMBER                I
I  NAME I      SUBSTANCE NAME                     I
I  TTRP I      TRANSITION POINT IN K              I
I  STPA I      ENTROPY OF TRANSITION IN JK/K MOL  I
I  TTRI I      TRIPLE POINT IN K                  I
I  SFUS I      ENTROPY OF FUSION IN JK/K MOL      I
I  TBLG I      BOILING POINT IN K                 I
I  SVPN I      ENTROPY OF VAPORIZATION IN JK/K MOL I
I  SSID I      STANDARD ENTROPY IN JK/K MOL      I
I  SEFC I      STEPS ENERGY FUNCTION IN JK/K MOL I
I  AUTH I      AUTHOR NAME (LAST NAME FOLLOWED BY INITIALS) I
I  JPNL I      JOURNAL NAME                       I
I  CODN I      CODEN                               I
I  NUMR I      MOLECULAR CODE                     I
I  REMK I      REMARK                              I
-----

      *** GENERAL OUTPUT COMMAND ***

      DUMP      ALL DATA RELEVANT TO THE SPECIFIED SUBSTANCE
      DISP     DATA DISPLAY IN CONDENSED FORM
      DATA    NUMERICAL DATA ONLY
      REFE     REFERENCE ONLY
      COMB     SPECIFIC DATA WITH REFERENCE

PLEASE ENTER COMMAND FOR KEYWORD DESIGNATION.
=REGN
PLEASE ENTER KEYWORD.
=7698-05-7
PLEASE ENTER OUTPUT COMMAND.
=DUMP

DO YOU CONTINUE SEARCHING ? PLEASE ENTER YES OR NO.
=YES
PLEASE ENTER COMMAND FOR KEYWORD DESIGNATION.
=NAME
PLEASE ENTER KEYWORD.
=$CHLOR$
A SET OF 32 SUBSTANCES HAVE BEEN RETRIEVED.

DO YOU WANT TO USE ANOTHER KEYWORD ON THIS SET? PLEASE ENTER YES OR NO.
=YES
PLEASE ENTER COMMAND FOR KEYWORD DESIGNATION.
=NAME
PLEASE ENTER KEYWORD.
=$ANE
A SET OF 13 SUBSTANCES HAVE BEEN RETRIEVED.

DO YOU WANT TO USE ANOTHER KEYWORD ON THIS SET? PLEASE ENTER YES OR NO.
=YES
PLEASE ENTER COMMAND FOR KEYWORD DESIGNATION.
=SFUC
PLEASE ENTER RANGE OF VALUES. (EX.) =7.65,7.83
=0+.21
A SET OF 2 SUBSTANCES HAVE BEEN RETRIEVED.

DO YOU WANT TO USE ANOTHER KEYWORD ON THIS SET? PLEASE ENTER YES OR NO.
=YES
PLEASE ENTER COMMAND FOR KEYWORD DESIGNATION.
=TBLG
PLEASE ENTER RANGE OF VALUES. (EX.) =7.65,7.83
=298,500
PLEASE ENTER OUTPUT COMMAND.
=DISP

```

Fig. 3. Commencing the search.

Fig. 4. Example of successive searches.

```
-----
MOLECULAR CODE= 7451
NUMB 25
ATOM CL 0
ATNE 1 1
FORM CLD
REFN 2689-05-2
NAME DEUTERIUM CHLORIDE
NAME H+DROCHLORIC ACID-D
TTPR 104.63
STPR 12.25
TTTR 158.410
CFUC 12.25
TBLG 191.5
DSTD 81.02 158.4 1
GEFC 30.25 158.4 1
AUTH CHIARA H
AUTH INARA A
AUTH CLUSIOT K
AUTH MOLE G
JURL J CHEM THERMODY 7 1978 915 934
JURL 7 NATURFORSCH 2A 1947 495 504
CODN ICTDAF
CODN DENRAU
REMK THE DATA OF CLH ARE ALSO GIVEN IN REF(1).
REMK CFUC IS OBTAINED BY ENTHALPY OF TRANS(1)T(1).
CONT 0
*** END OF OUTPUT ***
```

Fig. 5. Example of DUMP output.

```
-----
FORM C4H8 (CT 1150)
REFN 287-23-1
NAME=CYCLOHEPTANE
TRANSITION POINT 145.7 K 1)
ENTROPY OF TRANS. 39.15 J/K MOL 1)
TRIPLE POINT 182.43 K 1)
ENTROPY OF FUSION 5.97 J/K MOL 1)
BOILING POINT 335.67 K 1)
ENTROPY OF VAP. 34.67 J/K MOL 1)
STANDARD ENTROPY 145.288 J/K MOL @ 298.15 K 1)
1) AUTHOR =RATHEN G M, RATHEN G M,
JOURNAL= J AM CHEM SOC (PUBL) 75 (1953) 5689-5693
REMK 1) STD REFERS TO IDEAL GAS STATE
*** END OF OUTPUT ***
```

Fig. 6. Example of DISP output.

```
-----
FORM HI (CT 7500)
NAME=HYDROGEN IODIDE
TRANSITION POINT 70.23 K 1)
TRANSITION POINT 125.60 K 1)
ENTROPY OF TRANS. 3.76 J/K MOL 1)
ENTROPY OF TRANS. 7.54 J/K MOL 1)
TRIPLE POINT 222.497 K 1)
ENTROPY OF FUSION 12.83 J/K MOL 1)
BOILING POINT 237.75 K 2)
ENTROPY OF VAP. 23.14 J/K MOL 2)
STANDARD ENTROPY 166.289 J/K MOL @ 297.15 K 2)
GIBBS E FUNCTION -46.01-HY(0)-T=56.45 J/K MOL AT 222.5 K (CL 1)
*** END OF DATA *** (ONE SUBSTANCE )
```

Fig. 7. Example of DATA output.

```
-----
FORM C2H3CL (CT 6280)
NAME=VINYL CHLORIDE
1) AUTHOR =MCDONALD P A, THAYER J A, STULL G P,
JOURNAL= J CHEM ENG DATA (SERIAL) 4 (1959) 311-313
2) AUTHOR =DANOV D M, GOLUBEV YU G,
JOURNAL=TR KHIM KHIM TEKHNO (VKHIM) 1 (1967) 52-55
*** END OF DATA *** (ONE SUBSTANCE )
```

Fig. 8. Example of REFE output.

```
DO YOU CONTINUE SEARCHING ? PLEASE ENTER YES OR NO.
=YES
PLEASE ENTER COMMAND FOR KEYWORD DESIGNATION.
=NUMB
ENTER MOLECULAR CODE. EX: 123456
=007500
PLEASE ENTER OUTPUT COMMAND.
=COMB
PLEASE ENTER DATA DESIGNATION.
=SVRN
-----
FORM HI (CT 7500)
NAME=HYDROGEN IODIDE
ENTROPY OF VAP. 23.14 J/K MOL 2)
2) AUTHOR =STRAUME G F, MIEBE R,
JOURNAL= J AM CHEM SOC (PUBL) 51 (1929) 1441-1449
REMK 2) STD REFERS TO THE IDEAL STATE.
*** END OF DATA *** (ONE SUBSTANCE )
```

Fig. 9. Example of COMB output.

で二次検索すればよい。

コンピュータのCPU時間を短くするという見地から、逐次検索におけるコマンドやキーワードの入力の順序について、ある程度の工夫をすることができる。ディスクに入っているレコードを読み込むのに時間がかかること、後方一致は前方一致や中間一致よりも時間がかかることなどを考慮すれば、上の例では一次検索に\$ANE、二次検索に\$CHLOR\$を選ぶのはその逆よりもCPU時間が長い。

5.5 プリント出力の形式

出力形式としてはFig. 3の5種が選べる。DUMPコマンドではFig. 5のように、ほとんどカードイメージそのままの出力、DISPではレコード内容をコンパクトにまとめて全部プリントし(Fig. 6)、DATAコマンドでは物質同定と数値データ(Fig. 7)、REFEコマンドでは文献ファイル形式で(Fig. 8)、COMBコマンドでは指定した熱学量とそれに対する文献の組み合わせ(Fig. 9)がプリン

トされる。COMBコマンドの場合だけ、どの熱学量を指定するかの間合わせがある。

6. おわりに

このデータベースは僅か200物質の試験的なものである。またカードイメージなのでデータ移送にもあまり便利ではない。多くの利用が期待できれば、物質数を増し、フォーマットを改良していく意味があるので、建設的な意見を寄せられることを期待している。

数値データベース構築に際して最も基本的な問題であるデータ評価については今回は目をつぶっている。これを本格的にするには大きな研究者組織が必要であって、大学の一研究室でできる限度を越えている。

この作業にあたり、東大工学部高橋洋一、山内繁両氏に討議して頂き、また入力データの蒐集のため阪大理学部の熱グループの職員・学生諸君の協力を得た。ここに厚く謝意を表したい。本研究は文部省科研費によった。

熱・温度測定と熱分析シリーズ

編集 日本熱測定学会

* 1979年版

¥ 2300 (送料別)
(会員特価2000円)

1. 熱測定の技術移行 (東工大) 江原勝夫
 2. 固体の相変化と熱測定 (阪大) 千原秀昭
 3. The Thermochemistry of Organic Halogen Compounds (Moscow State Univ.) V. P. Kolesov
 4. 国際温度標準の実用的利用法 (計量研) 三井清人
 5. 高温における熱測定 (北大) 横川敏雄
 6. 蒸気圧および気相-固相系反応の平衡圧の測定 (東工大) 谷口雅男、脇原将孝
 7. 固体電池による熱力学測定 (東大) 笛木和雄
- 付. 熱温度測定および熱分析機器資料

* 1978年版

¥ 2300 (送料別)
(会員特価2000円)

1. 熱機械測定: 力学的性質の変化に基づく熱分析法に対する用語の提案 (東大) 神戸博太郎
 2. Historical Development and Recent Research in Thermal Analysis in Japan. (Waseda Univ.) Ryohei Otsuka
 3. Historical Development and Present Status of Calorimetry in Japan (Osaka Univ.) Syūzō Seki
 4. 生物熱力学入門 (東大) 古賀正三
 5. 生体機能素子の熱測定 (群馬大) 滝沢俊治
 6. 微生物反応の熱測定 (東大) 藤田暉通
- 付. 熱温度測定および熱分析機器資料

◎下記へお申し込み下さい。

<1970年版> ¥ 1500	<1974年版> ¥ 2300	} (送料別)
<1971年版> ¥ 1500	<1975年版> ¥ 2300	
<1972年版> ¥ 1500	<1976年版> ¥ 2300	
<1973年版> ¥ 1800	<1977年版> ¥ 2300	

科学技術社

〒113 東京都文京区湯島1-5-31 第一金森ビル
電話 03-815-8163(代) 振替 東京3-13592