

有機化合物の自動構造
推定システムの開発

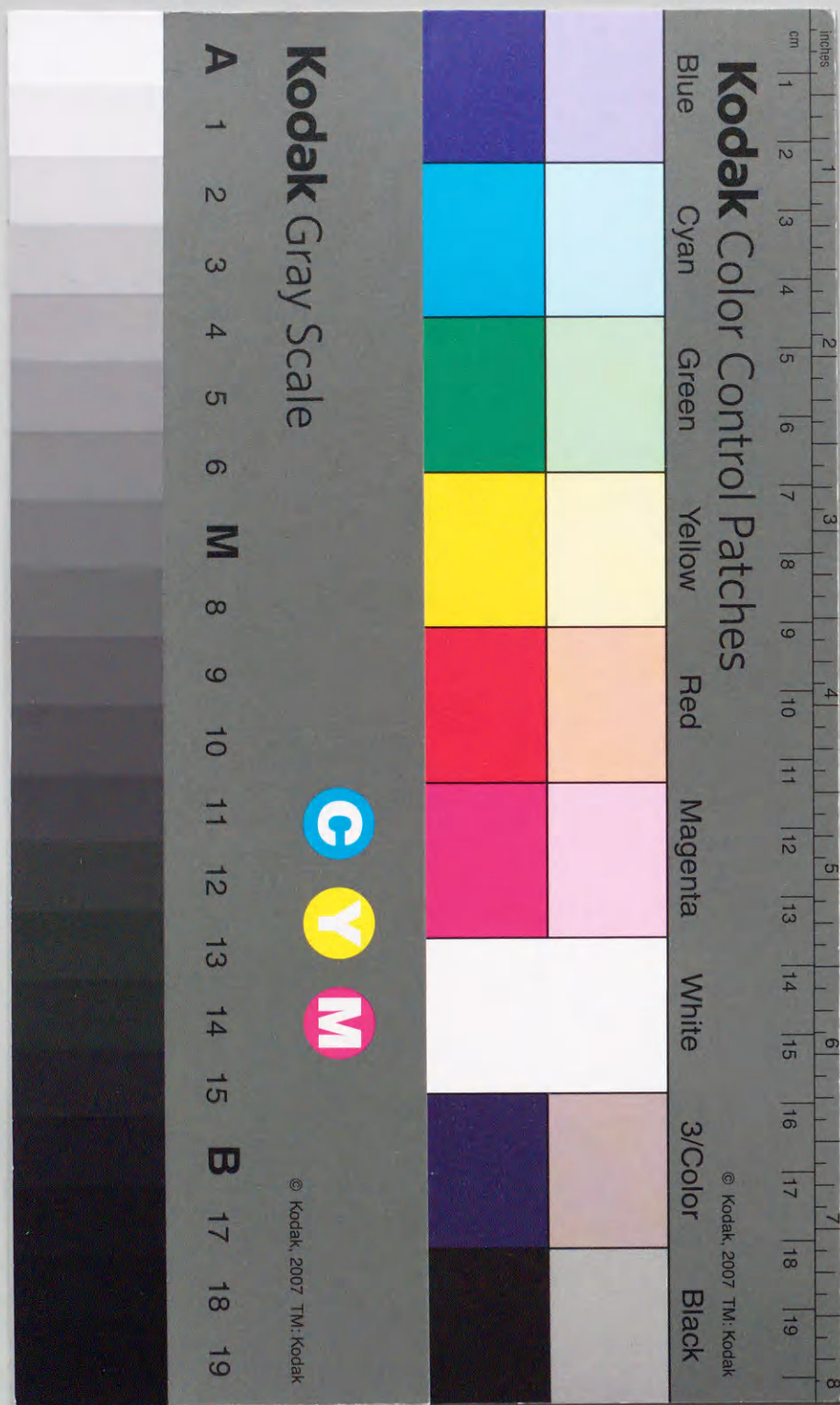
—構造発生法に関する研究—

1994年1月

博士(工学)

速水 健一

豊橋技術科学大学



有機化合物の自動構造
推定システムの開発
— 構造発生法に関する研究 —

1 9 9 4 年 1 月

博士 (工学)

速 水 健 一

豊 橋 技 術 科 学 大 学

登録商標の適合判断
関関のシステムと環境
一実務を関する実務的考察一

目 次

(学工) 士研

一 種 本 版

学 大 学 林 南 海 關 豊

要 旨

登録商標の適合判断システムと環境
一実務を関する実務的考察一

登録商標の適合判断システムと環境の構築過程では、三次元図形描画の技術に代表されるように新しい技術手段により得られる各種情報処理を利用可能とした。また一方で、データベースなどの新たなデータベースの導入も図られてきた。これらによる情報の増大を実現するために、本稿では、その手段による効果を最大限に生かすために多くのサブプログラムが開発されてきた。しかし、様々な情報を取り扱うことができるようになったとはいえ、データベースに入力可能なデータの種類に関する情報を十分に得ていなかったり、データ量が大きいといった現象から平面的な処理能力が低下するという問題が露れていた。また、その平面的な入力が必要条件であることは、時としてデータベースの処理を困難にした。

これらの問題に対処するため、最初の開発に対しては、従来のような処理能力から高に強さを求めるようにデータベースの改良を行った。この結果は、データベースから、従来のような処理能力に対して別なサブプログラムによりランクアップを行うという形ではなくデータベースの処理能力アルゴリズムを改良することにより増大された。すなわち、まず、従来のような単位として扱っている各部分要素（一次、二次、三次、四次、五次）に対する

和文要旨

有機化合物の自動構造推定システムの開発

— 構造発生法に関する研究 —

有機化合物の自動構造推定システムCHEMICSの開発過程では、2次元NMR情報の活用によって新しい分析手法により得られる各種構造情報を利用可能としてきた。また一方で、Counterpart推定などの新たな解析手法の導入も図られてきた。これらによる機能の向上を実現するためにCHEMICS本体の改良や、その手法による効果を最大限に生かすために多くのオプションプログラムが開発されてきた。しかし、様々な情報を取り扱うことができるようになったとはいえ、CHEMICSに入力可能な未知試料に関する情報を十分に持っていなかったり、分子量が大きいといった理由から多数の候補構造が提示されるという問題が残っていた。また、分子式の入力が必要条件であることは、時としてCHEMICSの利用を困難にした。

これらの問題に対処するために、最初の問題に対しては、確度の高い候補構造から順に提示させるようにCHEMICSの改良を行った。この機能は、CHEMICSから一度、提示された候補構造に対して別なオプションプログラムによりランク付けを行うという形ではなくCHEMICS本体の構造発生アルゴリズムを改良することにより実現された。すなわち、まず、構造組立ての単位として用いている各部分構造（2次、3次コンポーネント）に対する

^{13}C -, ^1H -NMR化学シフト出現頻度分布関数を新たに作成した。その上で、利用者の入力した ^{13}C -, ^1H -NMRデータをもとに、この関数を参照して各部分構造にもっともらしさの序列を付け、このもっともらしい部分構造から順に用いて候補構造を組み立て、正解構造を含む確度の高い候補構造を短時間内に発生するというものである。そして、この改良の有効性は、実行例を通して確認された。

残りの問題に対しては、CHEMICS 本体とは別なプログラムとして、未知試料についていくつかの部分構造情報が得られている場合に、これらの部分構造をつなぎ合わせてより大きな部分構造を、そして場合によっては未知化合物全体を推定するプログラムを作成した。本プログラムを使用するに当たり部分構造情報は欠かせないものであるが、一方で一般の構造推定プログラムでは欠かせない分子式に関する情報が曖昧もしくは欠けていても使用できるようになった。また、部分構造を獲得する手段として、すでに開発されているIRスペクトル解析から部分構造を提案するプログラムを用いることもできる。本プログラムから提示される候補構造は全構造のみならず部分構造フラグメントをも含んでいるが、同じく開発済みの ^{13}C -, ^1H -NMRやMSスペクトルの予測と評価プログラムは部分構造をも取り扱うことができ、本プログラムにより提示される候補構造の妥当性評価が可能である。

今回、構造発生法に注目することにより、先に挙げた問題の解決を図ることができ、構造推定へのコンピュータ利用の新たな方策を提案することができた。

ABSTRACT

Development of an automated structure elucidation system for organic compounds

— The study of further improvement to the structure generation —

CHEMICS (*Combined Handling of Elucidation Methods for Interpretable Chemical Structures*) has been developed to be able to utilize many kinds of informations from several analytical instruments like two-dimensional NMR spectrometer etc., while it has been developed by introduction of a new analytical method in CHEMICS as counterpart elucidation etc.. During the developments, CHEMICS program has been expanded and independent programs as the sub-system supporting CHEMICS functions also have been prepared to realize the new method and to utilize useful spectral information. As a result, CHEMICS became more powerful and useful to the users. But, in most of cases only one candidate structure is not always outputted from CHEMICS. Many candidates will be outputted from CHEMICS, especially when the quantity and quality of the observed data from unknown compound is insufficient or unknown has large molecular weight. Incidentally, molecular formula was essential information to execute CHEMICS.

At the first stage in this study, it was described that CHEMICS was improved so as to generate more plausible candidate structures at the initial stage of the generation of candidates by modifying the structure-generation procedure. As a result, it became possible to regard the candidate structures which were generated at the initial stage, as probable candidates. Several kinds of ranking system have been already developed as sub-systems of CHEMICS; i.e., mass spectral prediction of the candidate structures generated from CHEMICS and comparison of the predicted spectra with the observed one. The systems for examination of candidates are

prepared for ^{13}C -, ^1H -NMR and MS spectra. In the present study, the realization of the ranking ability within CHEMICS itself was intended without using these sub-systems. Candidate structures generated by CHEMICS consist of some substructures (called components) established in CHEMICS. In order to realize the above efficiency, functions for obtaining plausibilities of each component during structure generation were derived from a large amount of observed ^{13}C - and ^1H -NMR data. A new correlation table containing the functions was introduced into CHEMICS. The plausibility of a component is calculated by the function and the chemical shifts of the observed signals by ^{13}C - and ^1H -NMR from an unknown compound. And, the candidate structures including the more plausible components were generated at the initial stage of structure generation. Several examples were tested for proving the usefulness.

At the next stage in this study, the different type of program from CHEMICS was created to elucidate the candidate structures without the information of molecular formula. The new program can build up more larger substructural fragments from several fragments as the input information. Some of the larger fragments may be whole structures, and one of them may be correct solution. Input of fragment information is indispensable for the running of this program. On the other hand, it is worth while executing the program for the compound of which molecular formula is unknown or uncertain. Useful fragment information can be proposed by the sub-system for IR spectra and so on. Then, this program can output not only whole structures but also substructural fragments as the candidates and these candidates can be examined by ^{13}C -, ^1H -NMR and MS spectral prediction and evaluation program.

Further improvement to the structure generation in CHEMICS and the new program with the original generator was studied and the methods for the structure generation were proposed for the development of an automated structure elucidation system.

目 次

1. 緒言	1
1-1. 有機化合物の構造推定	1
1-1-1. 構造解析システム	1
1-1-2. これまでに開発されてきた自動構造解析システム	2
1-2. 有機化合物の自動構造推定システムCHEMICS	3
1-2-1. CHEMICS の発展とその方向性	4
1-2-2. CHEMICS への取り組み	4
1-3. 参考文献	5
2. CHEMICS における構造発生効率化	8
2-1. 序論	8
2-2. 実験と方法	12
2-2-1. 頻度分布関数の作成	13
2-2-2. 優先順位の決定	14
2-2-3. 構造発生制御	15
2-2-4. 装置	15
2-3. 実行結果と考察	15
2-4. まとめ	22
2-5. 参考文献	22
3. 部分構造情報をもとにした構造発生プログラムの開発	23
3-1. 序論	23
3-1-1. プログラムの構成とCHEMICS との関係	23
3-1-2. CHEMICS との比較においてのこの研究の特色	25
3-2. 実験と方法	25
3-2-1. フラグメントのつなぎ合わせ	25
3-2-2. つなぎ合わせを行う際の制約	27
1) 常に適用可能な制約	28
2) 情報を与えることにより適用可能な制約	29
2-1) 部分構造フラグメント情報	29
2-2) 分子式、分子量情報	30
2-3) マクロコンポーネント情報	31
2-4) ^{13}C -NMR スペクトル情報	39

2-5) $^1\text{H-NMR}$ スペクトル情報	44
2-6) 2次元NMRスペクトルなどによるシグナル結合情報	44
3-2-3. 重複検査	51
1) セットリダクションプログラム	51
2) 入力フラグメント間での重なり	51
2-1) 候補構造を組み立てるのに余りある部分構造の受け	51
2-2) フラグメントの等価性検査	51
2-3) 生き残りコンポーネント情報からのフラグメント間の重なり 部分の予測	51
3) 候補構造間での重複検査	52
3-1) セットリダクションを行う前の予備検査	52
3-2) フラグメントの等価性検査	52
3-2-4. 本プログラムでの試み	56
3-2-5. 装置	58
3-3. 実行結果と考察	58
3-4. まとめ	68
3-5. 参考文献	68
4. 総括	69
4-1. 序論	69
4-2. 実行結果の総括	69
4-3. 限界と今後の課題	69
4-4. 参考文献	70
謝辞	71
付録	72
付録-1. 2.、3. のプログラムで用いたCOMPONENT-NMR相関表 (従来からCHEMICS で用いられているもの)	72
付録-2. 2. のプログラムで用いたCOMPONENT-NMR相関表 (新たに作成した化学シフト出現頻度分布関数のパラメータ)	84
付録-3. 3. のプログラムで用いた各種データ	101
付録-4. 2.、3. の実行例で用いた各種入力データ	106
付録-5. 略語一覧	113
付録-6. 参考文献	113

本文

1. 緒言

1-1. 有機化合物の構造推定¹⁻⁵⁾

コンピュータによる有機化合物の構造推定の研究は、既に30年以上の歴史がある。UVやIRに始まり、MSやNMRスペクトルが有機化学の分野で使われだし、科学技術計算用の言語であるFORTRANが普及し始まった時期に、その研究は始まった。これらのスペクトルは、それ以外の物理定数である融点、沸点、屈折率や旋光度などに比べて構造に関する豊富な情報をもっている。

構造推定は、まず「ファイル検索システム」から始まった。IRスペクトルでの指紋領域のように一般に構造が異なればスペクトルも異なる。そこで、多数の既知化合物のスペクトルを集積したデータベースを構築して、これに対して未知化合物のスペクトルを照合するシステムが作られた。従ってこの方法は問題の未知化合物のスペクトルが新規のものであったり、そのスペクトルがデータベース中に登録されていない場合には無力に近い。一方、試料の分離とスペクトル測定が同時に行われるようになり、このような系から抽出される有機化合物の多くは既知化合物であった。従って試料の分離と共に、これらを迅速に同定できれば、より多くの時間を新規化合物の研究に当てることができることになり、ここにファイル検索システムの利点がある。方法としてはデータベースと検索プログラムから成り、未知化合物のスペクトルと同じもの、あるいは似たものをデータベース中から探し出すことになる。従ってデータベース中の参照データの質と量がこのシステムの性能に大きく影響する。

一方、スペクトルの各シグナルはそれぞれ特定の原子(団)や結合に起因していることから、個々の原子や結合とそれに起因するシグナルとの間の相関関係をもとにして構造推定を行うシステムがある。有機化学者は理論的あるいは経験的な知識をもとにして相関関係を解析し、未知化合物のスペクトルからその構造を推定する。この知的な作業をコンピュータに行わせるものが「構造解析システム」である。

1-1-1. 構造解析システム

未知化合物のスペクトルを解析して、その構造を推定するコンピュータプログラムの開発は1960年代に始められた。化学者が未知化合物のスペクトルデータから構造を推定するときの手続きとして「部分構造推定」、「構造組立て」と「構造検定」の3つの段階が考えられる。

部分構造推定では、存在し得る部分構造を推定する。この部分構造は、CHEMICSのように予め内部で定義した部分構造の中から存在し得るものを選択する場合と、定義しない任意のものを用いる場合がある。この任意の部分構造を推定し、これらの推定された部分構造をつなぎ合わせて候補構造を作ること、化学者が行う作業に近いものである。また、その任意の部分構造が大きくそれらをつなぎ合わせるだけで候補構造を作り出すことができるとすれば、原子単位の部分構造や予め定義した小さな部分構造を用いて構造組立てを行うより高速かつ少ない数の候補構造を作り出すことができるかもしれない。しかし、任意の部分構造を用いて構造組立てを行うと、発生する候補構造間で重複が生じてしまうことがあるといった問題などによりコンピュータ上での負担は大きい。この問題は、3.の内容に関係する。部分構造推定の方法にはプログラム中にその推定のアルゴリズムを組み込む方法、部分構造として予め定義したものがスペクトル上でどの範囲にシグナルを与えるかを記述した部分構造-部分スペクトル相関表を内蔵させる方法⁶⁻⁸⁾、宣言型言語によってこの関係を記述する方法⁹⁾やデータベースから直接推定する方法¹⁰⁻¹¹⁾などがある。

構造組立てでは、先の部分構造推定により存在し得るとされた部分構造をつ

なぎ合わせて完全な構造式である候補構造を組み立てる。化学構造をグラフと考え、推定された部分構造の集まりから化学グラフの創出により候補構造を作り出すには、原子もしくは原子団を節（ノード）としてその結合関係で化学グラフを作るとした場合に、与えられた節について考えられるすべての化学グラフが漏れなく創出され…(1)、こうして作られた化学グラフの間で重複が生じないようにする必要がある…(2)。この問題は、それぞれのシステムで、結合行列による創出^{6, 12)}、グラフ理論による創出¹³⁾、結合表による創出¹⁴⁾など、方法は異なるが独自にこの2つの問題を解決している。

構造検定では、組み立てられた候補構造式が利用者により入力された未知化合物のスペクトルと矛盾しないものであるかどうかを検討する。部分構造推定により推定された部分構造一つ一つは妥当なものであっても、構造組立てによりこれらの部分構造をつなぎ合わせて行くと、構造全体としては妥当でないものも生成することがある。すなわち、つなぎ方によりスペクトルと矛盾する構造が生成する。そのため、構造検定を行うことによってこれらの矛盾する構造をさらにふるい落とすことができる。構造組立ての際に、その組み立てようとするものが有機化合物であると考えただけでも多くの構造をふるい落とすことができる。たとえば、与えられた分子式を満足するものであるのか、芳香属性を満足しているか、分離構造（分離グラフ）を発生していないか、全構造を推定しようとしているのなら不要な自由結合手を持った構造でない（完全グラフ）かなどである。構造組立てを行う前に構造を組み立てるための部分構造とスペクトルのシグナルとの対応関係が一对一になるように、そして分子式を満足するように部分構造集合を作り、この一つ一つの集合内での組合せでしか構造組立てが行われないようにすることもできる。また、部分構造間のつながりが明確になった時点で改めてスペクトルを調べる方法もある。発生した候補構造一つ一つに対してスペクトルを予測して、入力スペクトルと比較¹⁵⁻¹⁹⁾したり、候補構造式をKeyとしてデータベースを検索することによって検定する方法^{20, 21)}、環歪エネルギーの近似計算を行ってそのエネルギーの大きさを見積もるか、エネルギー的に不利な部分構造をカタログとして用意してたりして、このような部分構造を含んだ構造が発生していないかを調べる方法²²⁾がある。また、検定により候補構造の妥当性評価としてランク付けを行うことも行われている^{15, 18, 19)}。

1-1-2. これまでに開発されてきた自動構造解析システム

自動構造解析システムは、MSスペクトルを対象としたものが最初に作られた。オリゴペプチドのアミノ酸配列推定のためのプログラム^{23, 24)}。特定の化合物群にみられる一連の特徴的なシグナル強度比をみることによって構造を推定するプログラム²⁵⁾。スペクトルから部分構造を推定し、それらをつなぎ合わせて候補構造を作るシステム²⁶⁾。部分構造推定、構造組立て、構造検定の三段階を始めて明確に意識して、取り扱い対象化合物に一般性を持たせたもの heuristic DENDRAL⁹⁾がある。このシステムは部分構造推定の部分に人工知能の手法を使用したことからエキスパートシステムの最初の成功例とされている。構造組立ての部分はまず DENDRAL²⁷⁾といものが開発された。取り扱える範囲を環式化合物にも広げて汎用性を持たせた CONGEN²⁸⁾を、そして入力する部分構造どうしの重複を許し、立体化学も扱えるようにした GENOA²⁹⁾へと発展している。部分構造推定については別にシステムを開発して全体として構造推定ができるようになっている³⁰⁾。

IRスペクトルを対象としたものとしては、部分構造推定に形式論理を使用したシステム STRECが開発されている⁸⁾。また、IRスペクトルから部分構造推定を行う PAIRS⁷⁾に構造組立てを行う ASSEMBLE³¹⁾を加え CASEシステム³²⁾

が作られている。これは、その後さらに SESAMI^{33, 34)}というシステムに発展している。

その後、NMRの普及につれて、NMRスペクトルを対象としたものが作られ出した³⁵⁾。また、スペクトルデータベースにもとづいた構造推定システム ACCESS³⁶⁾というのも開発されている。このデータベースは部分構造推定のために利用される。

1-2. 有機化合物の自動構造推定システム CHEMICS

CHEMICS は1966年に開発が始められ、CHEMICS 6²²⁾では完成の域に達している⁵⁾。CHEMICS 7³⁷⁾では取扱い元素種を水素、炭素と酸素に加えて、窒素、硫黄及び四種のハロゲン（フッ素、塩素、臭素、ヨウ素）を加え、より汎用性が高まった。これによってCHEMICS 中で一貫して取り扱っているコンポーネント（部分構造）も現在使用しているものと同じ種類のものが使用されるようになった。

これらのコンポーネントはスペクトルデータからその存在が推定できること、互いに重複する部分がないこと、先に述べた元素から構成される化合物であればそのつなぎ合わせによってどのようなものでも組み立てることができるという条件のもとに設定されたものである。CHEMICS での部分構造推定は、このコンポーネントを選び出す作業である。この作業は分子式やスペクトルと矛盾するコンポーネントをふるい落としてそれぞれの存在し得る最大、最小数を推定することである。CHEMICS では、各コンポーネントについてそのシグナルが出現する ¹³C-NMR や ¹H-NMRの化学シフトの範囲を部分構造一部分スペクトル相関表として用意し、この相関表を参照することによりコンポーネントがふるい落とされる。そして、ここで生き残ったコンポーネントを用いて構造組立てを行い候補構造を発生させる。この構造組立ての際にはこれによって発生する候補構造間で重複が生じないように結合スタック法^{38, 39)}という方法が用いられている。また、この際に芳香族性検査、MC検査₁やNM行列検査₂などの構造検定が行われ、それと矛盾する構造はふるい落とされる。

MC検査₁：MC（マクロコンポーネント）とは、予め CHEMICSの利用者が特定の部分構造の存否に関する情報を持っている場合に、その存否を指定する部分構造である。CHEMICSでの構造組立てによって発生した構造に対して、この検査を行うことによって、MCを部分的に含んでいるもの（ポジティブ）、あるいはいないもの（ネガティブ）のみを最終候補構造として提示させることができる²¹⁾。

NM行列検査₂：NM行列は、利用者の入力した ¹³C-NMR、¹H-NMRの各シグナルがどのコンポーネントに割り付けることが可能であるのかを行列としてまとめたものである。構造がある程度組み立てられることによりシグナルとコンポーネントの関係がより明確になる。組み立てられている構造について、この行列の情報に矛盾しているかどうかを検査することにより不都合な候補構造をふるい落とすことができる²¹⁾。

1-2-1. CHEMICS の発展とその方向性

CHEMICS 6 では入力できる情報源は、分子式、 ^{13}C -NMR、 ^1H -NMR、IRスペクトル、そしてMCであったが、さらに、IRスペクトル専用解析プログラムの開発⁴⁰⁻⁴²⁾、2次元NMRによる ^{13}C - ^{13}C 、 ^{13}C - ^1H 、 ^1H - ^1H シグナル結合情報の活用⁴³⁻⁴⁸⁾、NOE情報の活用⁴⁹⁾、ドイツBASF社のデータベースSpecInfoとの結合⁵⁰⁾、HMBC法により得られた情報の活用、Counterpart 推定機能の開発^{51, 52)}、部分構造間での包含関係を考慮したMC処理の拡張^{51, 52)}、専用解析プログラムによるMC処理の論理演算機能の開発^{51, 52)}、CHEMICS 候補構造のMSスペクトルの予測とその評価プログラムの開発^{18, 19)}、 ^{13}C -NMR スペクトルの予測と評価プログラムの開発^{53, 54)}、 ^1H -NMRスペクトルの予測と評価プログラムの開発^{55, 56)}が行われ現在もなお発展を続けている⁵⁷⁾。

CHEMICS の発展は、第一に分析技術の進歩に伴って各種分析手法により得られる情報を活用できるようにしてきたことである。たとえば、その代表例が2次元NMRによるシグナル結合情報の活用である。第二に構造推定における様々な手法を取り入れてきたことである。この例としては、Counterpart 推定、データベースとの結合やCHEMICS 候補構造のMSスペクトルの予測とその評価プログラムの開発(ただし、この場合にはCHEMICS へのMSスペクトル活用と候補構造の検定や順位付けという2つの面も持っていた。)などである。このような場合には、第一の場合と同様にCHEMICS 本体にて実現されたもの(たとえばCounterpart 推定)もあるが、その手法による効果を最大限に生かせるようにするために独立したオプションプログラムとして実現されたものがある。

1-2-2. CHEMICS への取り組み

このようにCHEMICS では様々な情報を取り扱うことができるようになったが、CHEMICS に入力可能な未知試料に関する情報を十分に持っていなかったり、分子量が大きいといった理由から多数の候補構造が提示されることがある。このことに対して、MSスペクトルの予測とその評価プログラムの開発などによりCHEMICS から一度提示された候補構造の検定や順位付けを行えるようにはなったが、CHEMICS から候補構造を提示させる場合に、直接もっともらしいものから提示させるといったことはできなかった。また、分子式の入力が必要条件であることは、時としてCHEMICS の利用を困難にした。さらには、構造全体を推定するのに十分な情報を持っていないが、部分的な構造でも構わないから何らかの解答を出せないかということがある。CHEMICS にはCounterpart 推定という部分構造推定機能はある。しかし、これには未知化合物全体の分子式やHost partというすでに解っている部分構造を与えなければならず、この機能は全体からHost partを除いたCounterpart 部分を推定するものである。よって、CHEMICS は基本的に全構造推定を行うものであるといえる。

本博士論文では、構造発生法に関する点に注目することにより、これらの問題解決に取り組んだ。2. CHEMICS における構造発生効率化では、CHEMICS より提示される候補構造が多数である場合への対処方法としてCHEMICS の構造発生処理の改良により、これらの候補構造をもっともらしいものから提示することについて述べる。そして3. 部分構造情報をもとにした構造発生プログラムの開発では、分子式が不明もしくは曖昧であった場合や部分的な構造の推定について述べる。最後の4. 総括では、これらの結果をまとめ、限界と今後の課題についても触れる。

1-3. 参考文献

- 1) 佐々木慎一, 石田嘉明,
化学の領域増刊98号 化学・生物学のためのコンピュータ
(第4章有機質量分析とコンピュータ), 南江堂, 43-62 (1972).
- 2) 工藤喜弘, 化学の領域増刊98号 化学・生物学のためのコンピュータ
(第8章有機化合物の自動構造解析), 南江堂, 115-134 (1972).
- 3) 山崎徹, 佐々木慎一, 化学総説No. 18 情報化学(9有機化合物の構造解析),
日本化学会編, 学科出版センター, 135-154 (1978).
- 4) 大木道則, 佐々木慎一, 千原秀昭,
岩波講座現代化学15 化学と情報(第5章構造の予測),
岩波書店, 127-151 (1981).
- 5) 阿部英次, 材料工学編コンピュータケミストリー(6構造推定),
丸善株式会社, 113-142 (1988).
- 6) H. Abe, I. Fujiwara, T. Nishimura, T. Okuyama, T. Kida, S. Sasaki,
Comput. Enhanced Spectroscopy, **1**, 55 (1983).
- 7) H. B. Woodruff, G. M. Smith, *Anal. Chem.*, **52**, 2321 (1980).
- 8) L. A. Gribov, M. E. Elyashberg, V. Serov,
Anal. Chem. Acta, **95**, 75 (1977).
- 9) A. M. Duffield, A. V. Robertson, C. Djerassi, B. G. Buchanan,
G. L. Sutherland, E. A. Feigenbaum, J. Lederberg,
J. Amer. Chem. Soc., **91**, 2977 (1969).
- 10) K. S. Kwok, R. Venkataraghavan, F. W. McLafferty,
J. Amer. Chem. Soc., **95**, 4185 (1973).
- 11) J. Zupan, D. Hadzi, M. Penca, *Comput. Chem.*, **1**, 71 (1976).
- 12) L. A. Gribov et al., *J. Mol. Structure*, **31**, 381 (1976).
- 13) L. M. Masinter, N. S. Sridharan, J. Lederberg, D. H. Smith,
J. Amer. Chem. Soc., **96**, 7703-7706, (1974).
- 14) C. A. Shelly, M. E. Munk, *Anal. Chim. Acta*, **103**, 127 (1978).
- 15) N. A. B. Gray, R. E. Carhart, A. Lavanchy, D. H. Smith, T. Varkony,
B. G. Buchanan, W. C. White, L. Creary,
Anal. Chem., **52**, 1095 (1980).
- 16) C. A. Shelley, M. E. Munk, *Anal. Chem.*, **50**, 1522 (1978).
- 17) I. Fujiwara, T. Okuyama, T. Yamasaki, H. Abe, S. Sasaki,
Anal. Chim. Acta, **133**, 527 (1981).
- 18) 速水健一, 船津公人, 佐々木慎一,
第13回情報化学討論会講演要旨集29P17, 157-160 (1990).
- 19) 速水健一, 1990年度豊橋技術科学大学修士論文, (1991).
- 20) N. A. B. Gray, C. W. Crandell, J. G. Nourse, D. H. Smith,
M. L. Dageforde, C. Djerassi, *J. Org. Chem.*, **46**, 703 (1981).
- 21) S. Sasaki, H. Abe, Y. Hirota, Y. Ishida, Y. Kudo, S. Ochiai,
K. Saito, T. Yamasaki, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **18**, 211 (1978).
- 22) H. Abe, I. Fujiwara, T. Nishimura, T. Okuyama, T. Kida, S. Sasaki,
Comput. Enhanced Spectroscopy, **1**, 55 (1983).
- 23) K. Biemann, C. Cone, B. R. Webster, G. P. Arsenaut,
J. Amer. Chem. Soc., **88**, 5598 (1966).
- 24) M. Senn, R. Venkataraghavan, F. W. McLafferty,
J. Amer. Chem. Soc., **88**, 5593 (1966).
- 25) B. Pettersson, R. Ryhage, *Anal. Chem.*, **39**, 790 (1967).
- 26) L. A. Crawford, J. D. Morrison, *Anal. Chem.*, **43**, 1790 (1971).

- 27) J. Lederberg, G. L. Sutherland, B. G. Buchanan, E. A. Feigenbaum, A. V. Robertson, A. M. Duffield, C. Djerassi, *J. Amer. Chem. Soc.*, **91**, 2973 (1969).
- 28) R. E. Carhart, D. H. Smith, H. Brown, C. Dejerassi, *J. Amer. Chem. Soc.*, **97**, 5755 (1975).
- 29) R. E. Carhart, D. H. Smith, N. A. B. Gray, J. G. Nourse, C. Djerassi, *J. Org. Chem.*, **46**, 1708 (1981).
- 30) D. H. Smith, N. A. B. Gray, J. G. Nourse, C. Djerassi, *Anal. Chim. Acta*, **133**, 471 (1981).
- 31) C. A. Shelly, T. R. Hays, M. E. Munk, R. V. Roman, *Anal. Chim. Acta*, **103**, 121 (1978).
- 32) C. A. Shelly, M. E. Munk, *Anal. Chim. Acta*, **133**, 507 (1981).
- 33) M. E. Munk, C. A. Shelly, H. Woodruff, M. Trulson, *Fresenius' Z. Anal. Chem.*, **313**, 473 (1982).
- 34) B. D. Christie, M. E. Munk, *J. Amer. Chem. Soc.*, **113**, 3750 (1991).
- 35) G. Beech, R. T. Jones, K. Miller, *Anal. Chem.*, **46**, 714 (1974).
- 36) W. Bremser, W. Fachinger, *Magn. Reson. Chem.*, **23**, 1056 (1985).
- 37) K. Funatsu, N. Miyabayashi, S. Sasaki, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **28**, 18-28 (1988).
- 38) Y. Kudo, S. Sasaki, *J. Chem. Doc.*, **14**, 200 (1974).
- 39) Y. Kudo, S. Sasaki, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **16**, 43 (1976).
- 40) 須々田寛, 1986年度豊橋技術科学大学修士論文, (1987).
- 41) 宮下芳勝, 船津公人, 須々田寛, 佐々木慎一, *化学と教育*, **35**, 60-65 (1987).
- 42) K. Funatsu, Y. Susuta, S. Sasaki, *Anal. Chim. Acta*, **220**, 155-165 (1989).
- 43) 須々田寛, 船津公人, 佐々木慎一, *日本化学会第56回春季年会講演予稿集I*, 671 (1988).
- 44) K. Funatsu, Y. Susuta, S. Sasaki, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **29**, 6-11 (1989).
- 45) K. Funatsu, Y. Susuta, S. Sasaki, *Pure & Appl. Chem.*, **61**, 609-612 (1989).
- 46) 船津公人, 須々田寛, 佐々木慎一, *第11回情報化学討論会講演要旨集6P10*, 162-165 (1988).
- 47) 須々田寛, 船津公人, 佐々木慎一, *第12回情報化学討論会講演要旨集9P20*, 156-159 (1989).
- 48) 須々田寛, 1989年度豊橋技術科学大学博士論文, (1990).
- 49) 西崎稔, 船津公人, 佐々木慎一, *第13回情報化学討論会講演要旨集29P16*, 153-156 (1990).
- 50) 船津公人, 佐々木慎一, W. Fachinger, R. Neudert, *第14回情報化学討論会講演要旨集28P11*, 130-133 (1991).
- 51) 原藤寛, 船津公人, 佐々木慎一, *第13回情報化学討論会29P18*, 161-164 (1990).
- 52) 原藤寛, 1990年度豊橋技術科学大学博士論文, (1991).
- 53) K. Funatsu, H. Katsumi, S. Sasaki, *Computer Enhanced Spectroscopy*, **3**, 87-90 (1986).
- 54) 船津公人, 江口晃史, 佐々木慎一, *第16回情報化学討論会講演要旨集25P02*, 81-84 (1993).
- 55) 船津公人, B. P. Acharya, 佐々木慎一, *第16回情報化学討論会講演要旨集25P03*, 85-88 (1993).

- 56) 近藤勝, 1993年度豊橋技術科学大学卒業論文, (1994). [予定]
- 57) 船津公人, *有機合成化学協会誌*, **51**, 516-528 (1993).

2. CHEMICS における構造発生の効率化^{1, 2)}

2-1. 序論

本研究室で開発が進められてきた有機化合物の自動構造推定システム CHEMICS は、利用者が入力したスペクトルデータなどの各種情報に矛盾しない全ての候補構造を重複なく提示するシステムである³⁻⁶⁾。これを実現する方策の一つとして、1次、2次、3次と階層的に設定された部分構造（コンポーネントと呼んでいる⁷⁾ Table 2-1, 2-2, 2-3, 付録-1.）を用いている。以下、2次コンポーネントをSC、3次コンポーネントをTCと略す。

Table 2-1. Primary components

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
CH ₃	CH ₂	CH	C	OH	O	NH ₂	NH	N	SH	S	F	Cl	Br	I

Table 2-2. Secondary and tertiary components

Tertiary components

No.	Secondary Components	Afferent nature
1	(CH ₃) ₃ C-	S ND N O Y CD CT CS
2	(CH ₃) ₂ CH-	S ND N O Y CD CT CS
3	(CH ₃) ₂ C<	I Br Cl F S ND N O Y CD CT CS
4	(CH ₃) ₂ N-	S ND N O Y CD CT CS
5	(CH ₃) ₂ N(→O)-	S ND N O Y CD CT CS
6	(CH ₃) ₂ C=	^a
7	CH ₃ CH ₂ -	S ND N O Y CD CT CS
8	CH ₃ CH<	I Br Cl F S ND N O Y CD CT CS
9	-CH ₃ C<	I Br Cl F S ND N O Y CD CT CS
10	CH ₃ -	ND Y CT
89	-D- ^b	^a

^a:implies linkage with a double bond; ^b:dummy double bond.
The descriptors given in Table 2-3 are added to the secondary components to provide 639 tertiary components, making it possible to identify the attributes of the bonding partners with the bonds of tertiary components (referred to as afferent natures and abbreviated as AN's).

Table 2-3. Attributes of components

Priority	Symbol	Meanings
1	I	iodine
2	Br	bromine
3	Cl	chlorine
4	F	fluorine
5	S	center atom [‡] is sulfur
6	ND	center atom is nitrogen that has double bond
7	N	center atom is nitrogen that has only single bonds
8	O	center atom is oxygen
9	Y	center atom is aromatic carbon, nitrogen or sulfur
10	CD	center atom is carbon that has double bond
11	CT	center atom is carbon that has triple bond
12	CS	center atom is carbon that has only single bonds

center atom[‡]:The atom that has free bond in a component, as underlined; (CH₃)2CH-; CH₃-S-; -C=C-.

Figure 2-1 に CHEMICS の概念図を示す。入力データは分子式、¹³C-NMR（化学シフト値、強度、多重度）、¹H-NMR（化学シフト値、強度）およびIR（波数、T%）スペクトルデータである [Data]。これらの中で分子式は必須である。次のスペクトル解析 [Data Analysis] の段階で、入力データと CHEMICS 中で予め設定されている 639個のコンポーネントが照合され、データに矛盾しないコンポーネントが選出される。これが生き残りコンポーネント [Surviving Components] である。この生き残りコンポーネントを使って構造が組み立てられ（構造発生） [Structure Generation]、候補構造 [Candidate Structure(s)] が提示される。

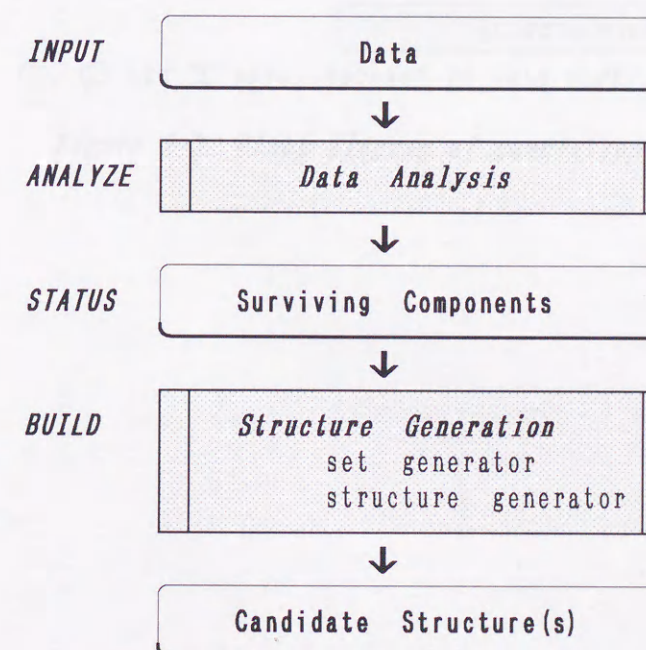


Figure 2-1. Overview of CHEMICS

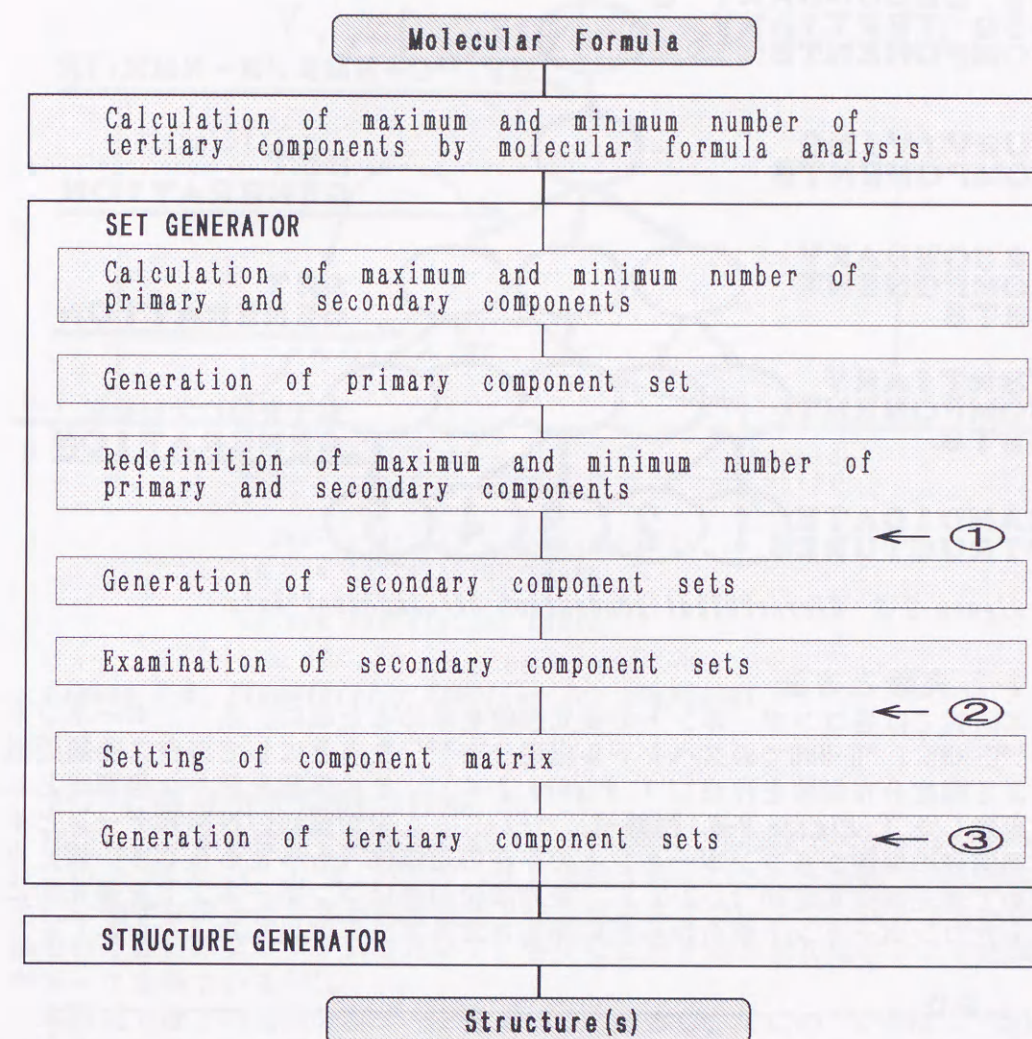
構造発生の仕組みを *Figure 2-2, 2-3* に示した。生き残りコンポーネントを参照しながら、1次、2次、3次とコンポーネント集合を階層的に発生させ、最終的に発生したTC集合（候補構造を組み立てるのに必要と考えられるTCを要素としてもつ）から、結合スタック法⁹⁾を用いて候補構造が組み立てられる。

候補構造の組立てに際して、従来のCHEMICSでは各コンポーネントに与えられている背番号（コンポーネント番号）の小さいものから順に組み合わせることにより、コンポーネント集合が作られていた。そのため、CHEMICSより提示される各候補構造の正当性や提示順位については考慮されておらず、正解構造が候補構造の最後に提示されたり、入力データの種類が限られている場合や未知構造の分子式が大きい場合に候補構造が多くなり、全候補構造を提示するまでに多大な時間を要することもあった。

本研究では、構造発生の段階において使用するコンポーネントの順序を後述する経験的観点から定め、比較的ありそうなコンポーネントを優先的に用いて構造組立てを行うように改良した。これにより、可能性の高いコンポーネントを含んだ候補構造から順に提示することができるようになった。

CHEMICSにより提示される候補構造中には、必ず正解構造が含まれていることを前提に構造組立てを行っているので最後に提示された候補構造でも、まったく意味がないわけではないが、利用者は先に提示された候補構造から順に確度が高いとして検討でき、場合によっては全候補構造を提示させずに途中でCHEMICSの実行を停止して、それまでに提示された候補構造を選択的に検討することもできる。

構造推定において一度提示された候補構造に対して順位を付けることは、従来のCHEMICSやその他のシステムですで行われている⁹⁻¹¹⁾。しかし、CHEMICSの構造発生の仕組みに着目し、構造発生の段階で可能性の高い候補構造から順に提示するようにしたのは今回がはじめてである。



①, ② and ③ were improved in this work.

Figure 2-2. Block diagram of generation of component sets

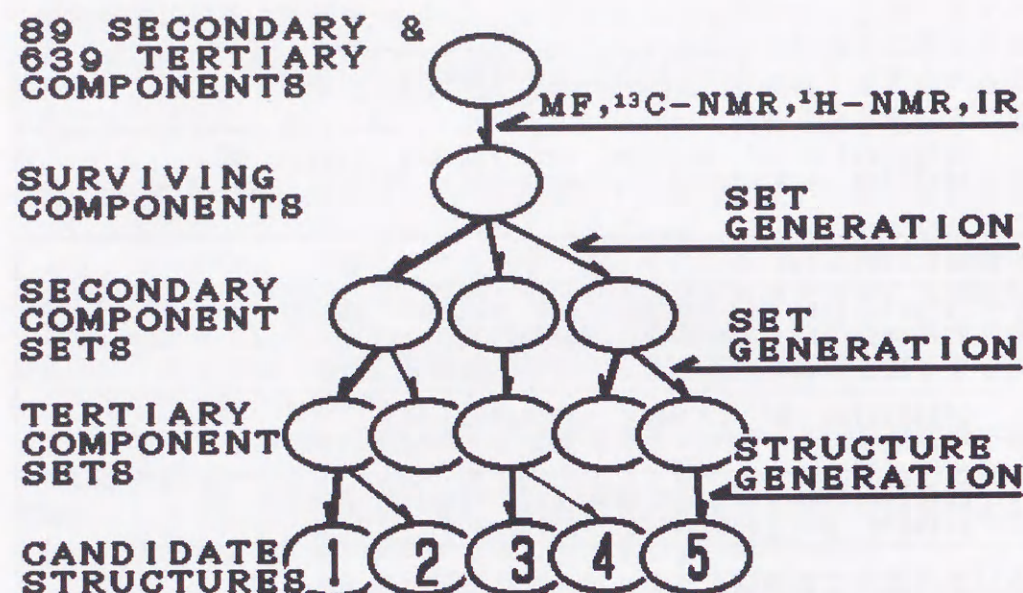


Figure 2-3. Hierarchical generation of component sets

2-2. 実験と方法

本研究では各コンポーネントの優先順位を求めるために、各コンポーネントの ^{13}C -NMR、 ^1H -NMRでのスペクトル出現分布¹²⁾をもとにしてガウス曲線近似による頻度分布関数を作成し (Figure 2-4)、その係数を新たな相関表として用意した (Figure 2-5, 付録-2., 2-2-1.)。未知試料のNMRデータとその相関表の係数からコンポーネントの存在の可能性 (もっともらしさの値) を求めて優先順位を定め (2-2-2.)、優先順位の高いコンポーネントを優先的に含んだコンポーネント集合から先に発生させるように改良した (2-2-3.)。

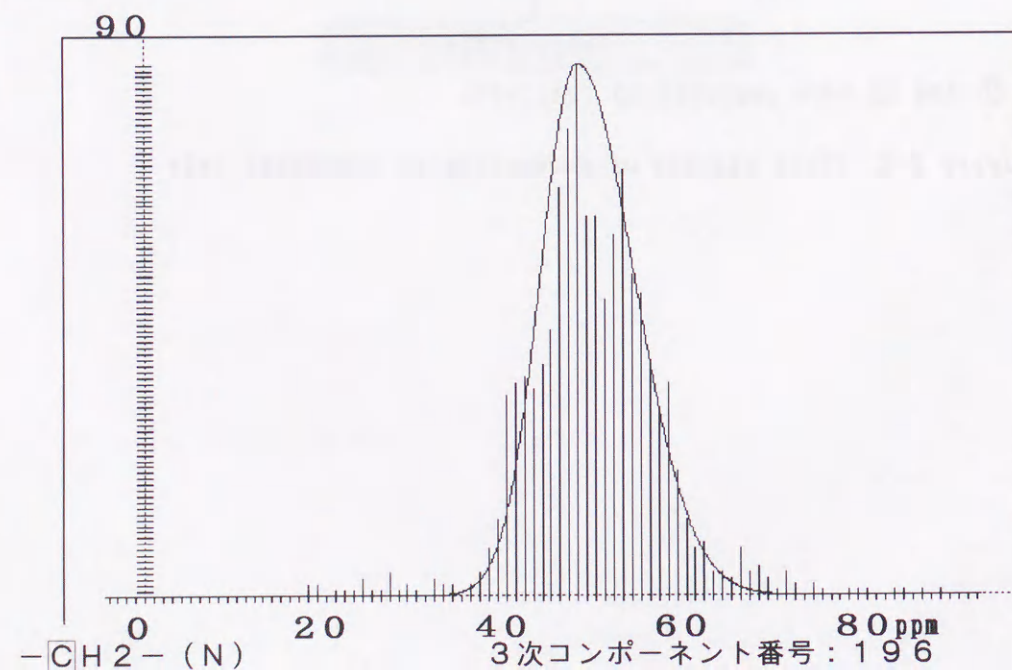


Figure 2-4. The number of observed ^{13}C -NMR data and the induced plausibility function for component $-\text{CH}_2-(\text{N})$

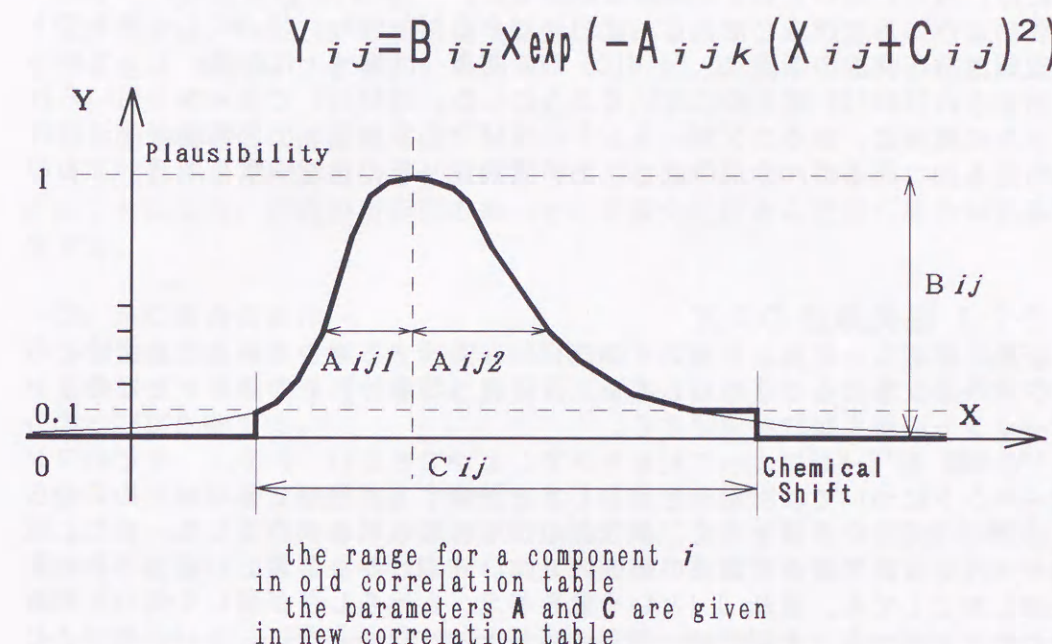


Figure 2-5. Plausibility function for component

2-2-1. 頻度分布関数の作成

江口らは、本研究室で構築されている ^{13}C -NMR、 ^1H -NMRスペクトルデータベース中の H, C, N, O, S, ハロゲンより構成されている化合物約 6,300件をもとに、化学シフト及び部分構造抽出とCANOSTコード¹³⁾からTCへの変換を行う独自のプログラムを用いて、各TCに対するNMR化学シフト出現分布データを得ている¹²⁾。

本研究ではこの出現分布データを用いて、各SC、TCの ^{13}C -NMR、 ^1H -NMRでの化学シフト出現頻度分布関数を作成した。SCについては、より環境が限定された部分構造であるTCのデータを集めることにより作成した。

このデータは、以下の式 (1) で近似した。

$$Y_{ij} = B_{ij} \times \exp(-A_{ijk} (X_{ij} - C_{ij})^2) \quad (1)$$

i は、コンポーネントの種類 (SC $i=1, 89$ 、TC $i=1, 639$) を表し、 j は、NMRの種類 (^{13}C -NMR $j=1$ 、 ^1H -NMR $j=2$) を表す。

Y_{ij} は、求められるもっともらしさ (0 (有り得ない) から 1) であり、 X_{ij} は、 i に割り付けられたシグナルの化学シフト (ppm) である。

定数 A_{ijk} は、 i のNMR化学シフト頻度分布関数の広がりを表す。これは、江口らにより作成されたデータから求めた定数で、Y軸方向 (もっともらしさ) について求める関数とデータとの差の2乗和が最小となるように決定した。定数 B_{ij} は、この関数の頂点のY値であり、本研究では関数より得られるもっともらしさが0から1であることから常に1とした。定数 C_{ij} は、この関数の頂点のX値であり、データ中、最大のY値をもつもの (シグナルの出現頻度がもっとも高いところ) としたが、求める関数とデータとの差が大きい場合には平均をとってC値を決定した。また、多くの場合、データのばらつきがX軸方向に対し非対称的であったので $X = C_{ij}$ を中心に左右 (高磁場側 $k=1$ 、低磁場側 $k=2$) で異なる2つのガウス曲線で近似した。1つのガウス曲線で近似した場

合には、 $A_{ij2} = 0$ として相関表に記述した。

このようにして作成したSC、TCに対する ^{13}C -NMR、 ^1H -NMRの化学シフト出現頻度分布関数の係数は、CHEMICSの相関表(付録-2.に記載)として新しく追加されCHEMICS実行時に用いるようにした。CHEMICSで従来から用いられてきた相関表は、あるコンポーネントのNMR化学シフト出現範囲が記述されているものであるが、今回作成された相関表は、その出現頻度を記述したものである。

2-2-2. 優先順位の設定

新規に作成した相関表を用いてCHEMICSを実行する場合、構造組立て時に各コンポーネントのもっともらしさを以下に従って求め、その値をもとに各コンポーネントの優先順位を設定する。

^{13}C -NMRや ^1H -NMRによって判断を下すことができない-OやFなどのコンポーネントについては、もっともらしさを計算することができないため0から1の間の0.5という値を与え、優先順位が中程度となるようにした。また、従来から用いられてきた相関表の範囲内では、式(1)がたとえ0.1より小さい値を示したとしても、最低0.1という値を与え、もったらしさが著しく低いと判断されたコンポーネント間では、無理に格差を付けないようにした。当然のことながら範囲外では、常に0となる(Figure 2-5)。

MC入力でポジティブ指定 \mathbf{F}_1 (1-2.の注釈¹⁴⁾)されたことにより必ず含まれなければならないとされたコンポーネントについては、そのまま常にコンポーネント集合中に要素として含まれ、今まで通り優先順位が1位になる。

1つのコンポーネントに対応するNMRシグナルが複数個考えられる場合(たとえば、 $(\text{CH}_3)_2\text{CH}$ というコンポーネントでは、 CH_3 基が2つの別なシグナルに割り付けられることもある。)には、それぞれの場合のもっともらしさがこの相関表で表わされる関数にもとづいて計算され、その平均値がこのコンポーネントのもっともらしさとして用いられる。Figure 2-6の例の場合、シグナルへの割り付けの組合せが3通り(1:シグナル1に CH , シグナル2に $\text{CH}_3 \times 2$, 2:シグナル1に CH , シグナル3に $\text{CH}_3 \times 2$, 3:シグナル1に CH , シグナル2に CH_3 , シグナル3に CH_3)考えられる。

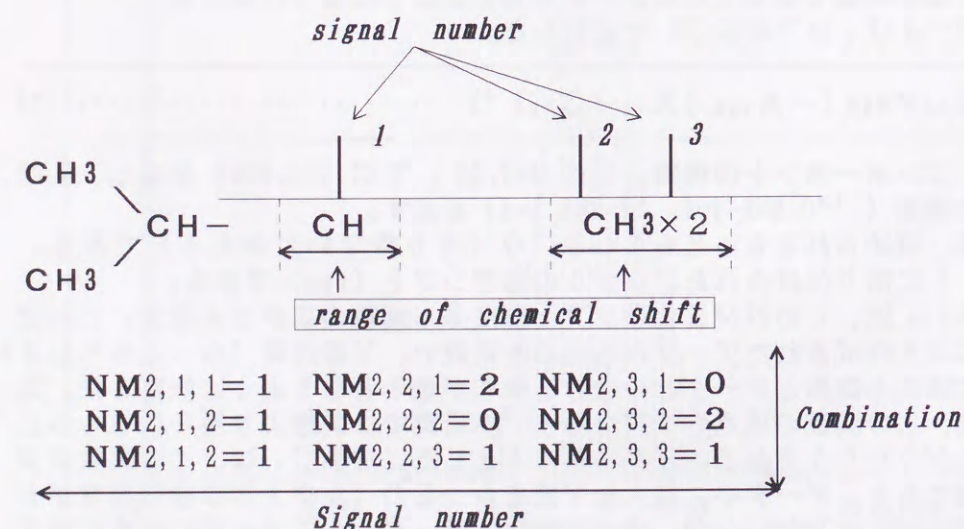


Figure 2-6. Assignment of signals to a component

2-2-3. 構造発生制御

本研究では、CHEMICSの構造発生部分における以下3つの操作について改良を行った(Figure 2-2)。

①. 生き残りSCの操作

生き残りSCを相関表にもとづいてもっともらしいものから順に並べ直す。このことにより、存在の可能性の高いものを優先的に含んだSC集合が先に発生する。

②. SC集合の操作

SC集合中の要素をもっともらしいものから順に並べ直す。これは、次に述べるコンポーネント行列(SCとAN \mathbf{F}_3)により表わされる2次元配列のSCの並びに影響する。

③. コンポーネント行列より発生するTC集合の操作

コンポーネント行列のSCの並びについて先に並んでいるものから、そしてそのSCにとって最ももらしいANをもつものから発生させる。

AN \mathbf{F}_3 : TCは、SCにその結合相手の種類に関する制限を加えたものである。この結合相手属性をAfferent Natureと呼んでいる⁶⁾。

2-2-4. 装置

使用した言語はAOS/VS Data General FORTRANで、実験は日本データゼネラル社製スーパーミニコンピュータECLIPSE MV/10000上で行った。また、頻度分布関数の誘導にはNEC(日本電気)社製N88-日本語BASIC(86)(MS-DOS版)で作成したプログラムを用いてNEC PC-9801上で行った。

2-3. 実行結果と考察

N-ビニル-2-ピロリドン($\text{C}_6\text{H}_9\text{NO}$ n-vinyl-2-pyrrolidone)を未知試料の例として、分子式および ^{13}C -NMR、 ^1H -NMRデータを入力しCHEMICSを実行させた場合に、21個の候補構造が得られる。従来のCHEMICSでは、正しい構造は、21番目に提示された構造であった(Figure 2-7)。これは、この候補構造が他の候補構造に比べてコンポーネント番号の大きいものをより多く含んでいたからである。

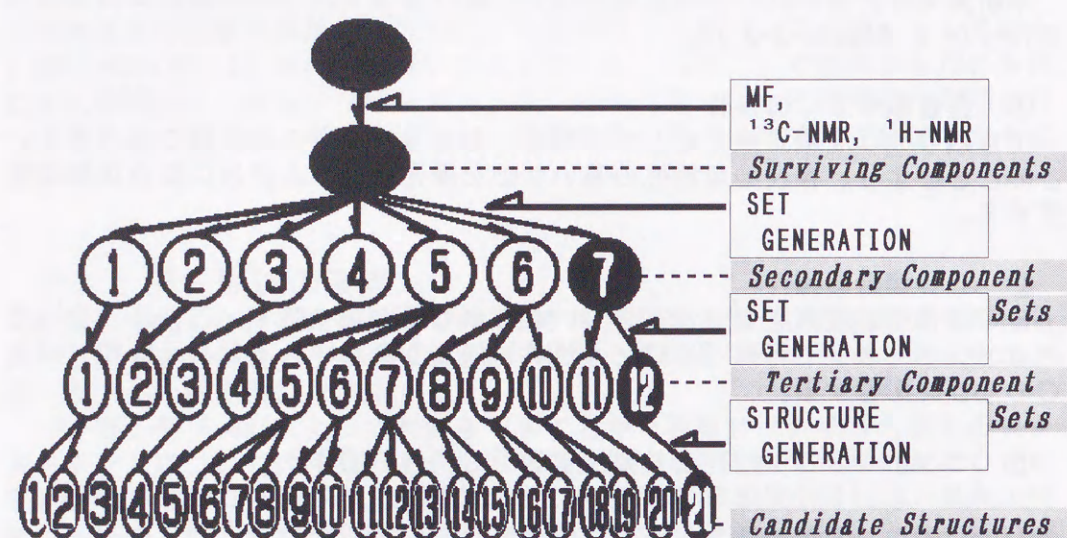


Figure 2-7. Generation of component sets (befor improvement);
in the case of *N*-vinyl-2-pyrrolidone

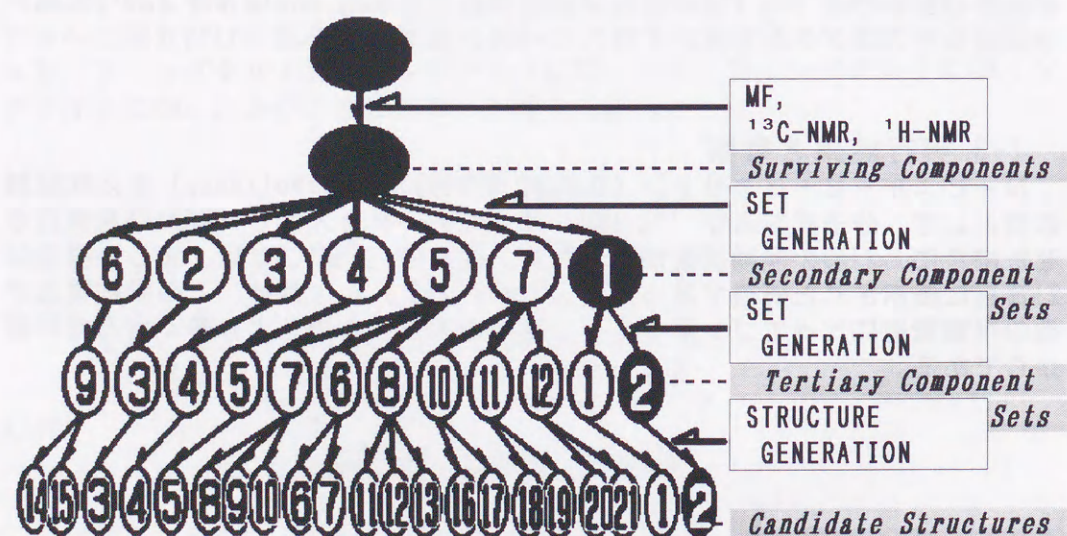


Figure 2-8. Generation of component sets (after improvement);
in the case of *N*-vinyl-2-pyrrolidone

¹³C-NMR

ppm	Int.	Mult.
17.3	50	t
31.2	51	t
44.4	52	t
93.9	57	t
129.3	60	d
170.3	16	s

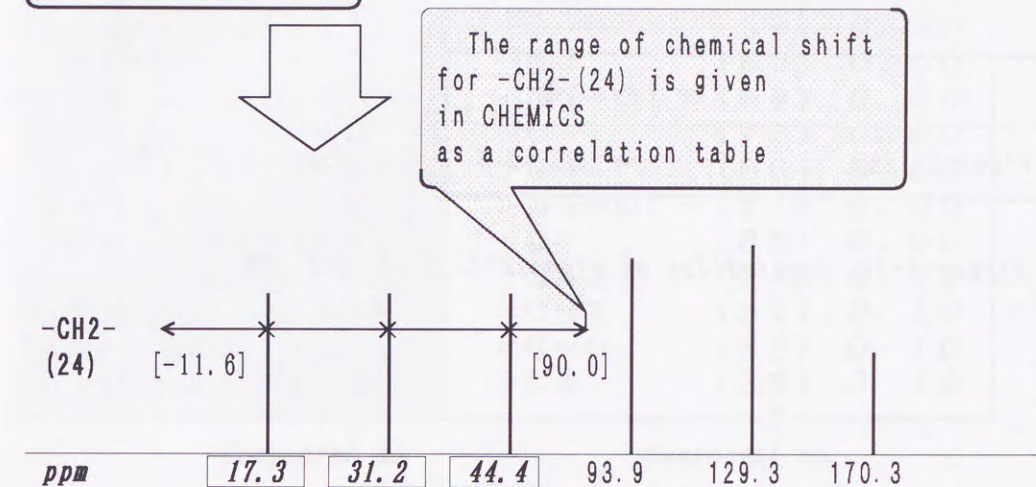


Figure 2-9. Acquisition of signals (17.3, 31.2, 44.4 ppm)
from secondary component (-CH₂-(24))

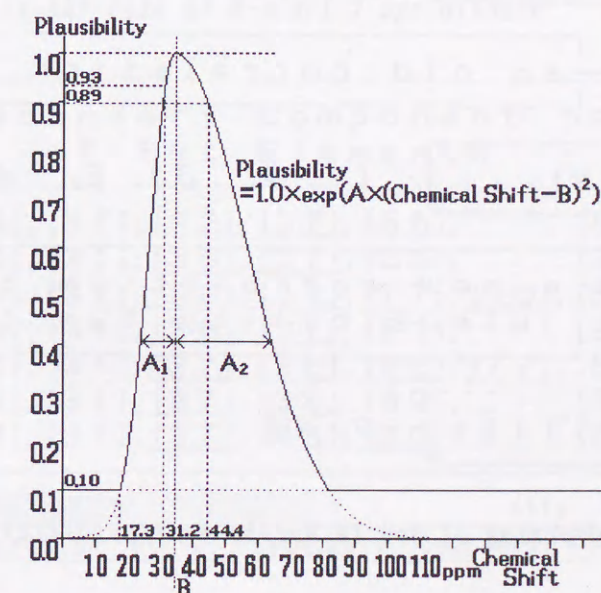
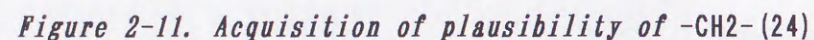


Figure 2-10. Acquisition of plausibility (0.10, 0.93, 0.89)
from signals (17.3, 31.2, 44.4 ppm)



Before Improvement		After Improvement		Plausibility
-CH ₂ -	(24)	>C=O	(43)	0.92
=CH ₂	(31)	=C=	(36)	0.89
=C=O	(32)	-CH=	(37)	0.69
=C=	(36)	-O=N	(59)	0.50
-CH=	(37)	-N=	(68)	0.50
>C=	(38)	-N(→O)=	(69)	0.50
>C=O	(43)	-O-	(77)	0.50
-O=N	(59)	>N-	(80)	0.50
-N=	(68)	>N(→O)-	(81)	0.50
-N(→O)=	(69)	-D-	(88)	0.50
-O-	(77)	-CH ₂ -	(24)	0.44
>N-	(80)	=CH ₂	(31)	0.10
>N(→O)-	(81)	=C=O	(32)	0.10
-D-	(88)	>C=	(38)	0.10

Set no.	Secondary Component of Set Elements	Set no.
1	(24), (31), (32), (37), (68), (88)	1
2	(24), (31), (36), (37), (59), (88)	2
3	(24), (31), (36), (37), (77), (80), (88)	3
4	(24), (31), (36), (37), (81), (88)	4
5	(24), (31), (37), (38), (68), (77), (88)	5
6	(24), (31), (37), (38), (69), (88)	6
7	(24), (31), (37), (43), (80), (88)	7

↑

Before Improvement

↑

After Improvement

Generation no. of Secondary Component Sets

今回、改良を加えることにより、Figure 2-8, Table 2-4, 2-5 のように、SC集合とTC集合発生順番が改善され、この例では、2番目に正解構造を提示させることができた。従来の場合、発生したSC集合7個中7番目の集合より正解構造が発生していたが、改良の結果、この集合は1番目に発生された。Figure 2-9 から 2-12 と Table 2-4, 2-5 には、この処理過程を示した。まず、-CH₂- というSCに割り付けることが可能な¹³C-NMR シグナル (17.3, 31.2, 44.4ppm) を従来から用いられている相関表を利用して求める (Figure 2-9)。これらのシグナルの化学シフトと今回新たに作成した頻度分布関数を用いて、それぞれのもっともらしさ (0.10, 0.93, 0.89) を求める (Figure 2-10)。これらの平均をとって¹³C-NMR における-CH₂- のもっともらしさを0.64と求める。同様に、¹H-NMRにおいては0.23と求められ、これらの平均から-CH₂- のもっともらしさを0.44と決定した (Figure 2-11)。ここまでの手順を Figure 2-12 にまとめた。このようにして、その他のSCについて求めたもっともらしさを Table 2-4 の右に示す。この図の左には従来通りSC番号の小さいものを上方から並べてあり、この上方のSCを積極的に含んだSC集合から発生していた (Figure 2-7, Table 2-5)。改良後は Table 2-4 の右の上方のSC (もっともらしいもの) を含んだSC集合から発生し Table 2-4 の右に示す番号順に発生するようになった。

TC集合についても同様な手順で処理され、正解構造を発生するものになった集合発生は2番目となった。但し、1番目に発生したTC集合を構成する各要素に対して求められたもっともらしさの合計をこの集合の要素数で割った値は、2番目の集合に対する値より小さい値であった。これは、1番目の集合には2番目のどの要素よりももっともらしさの高い要素を含む一方でもっともらしさの低い要素も持っていたからである。

この例の場合、構造発生に要する時間は、おおよそ80秒であったが、その半分の40秒以内には、21個の全ての構造が提示されていた。また、候補構造の提示順位が21番から2番になることにより3秒で正解構造を提示することができた。可能性の高いコンポーネントを含む集合から発生させることによって、発生した集合が適切なものであるかという整合性検査に通り易い集合が先に発生することとなり、この例のように、候補構造を発生しない無駄な集合が最後に発生し全候補構造提示までに要する時間の短縮が観測された例もあった (Figure 2-13)。

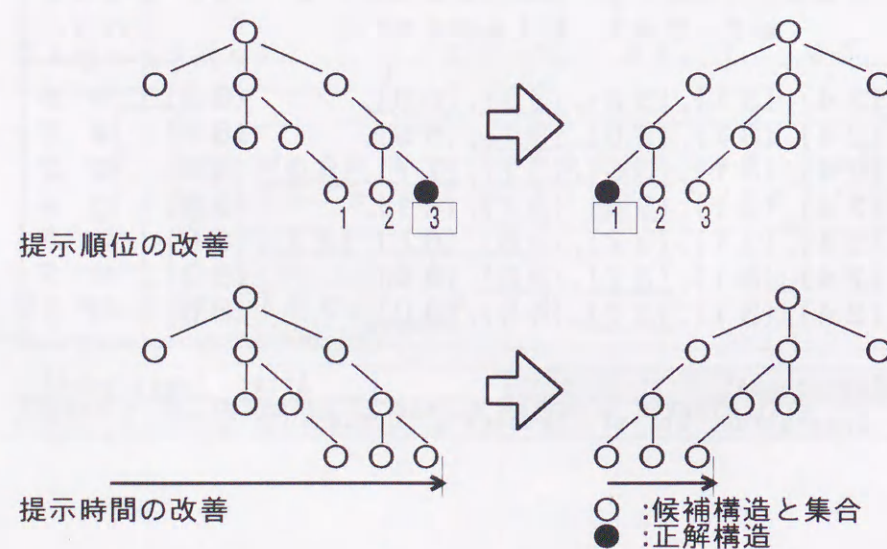
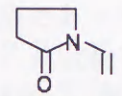
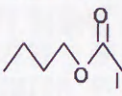
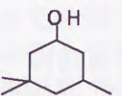
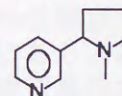
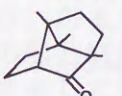
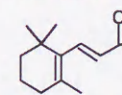
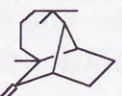


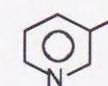
Figure 2-13. The effects by the improvement of structure generation

今回の改良により、コンポーネントの優先順位を決定するために僅かな時間を要するものの、一方で可能性の高い構造から順に提示することが可能となり Table 2-6 に見られるような正解構造の提示順位の改善がなされると共に、正解構造提示までの時間の短縮が図られた。この結果、CHEMICS において構造発生効率化がなされた。

Table 2-6. The results of test samples

molecular formula	input data	output no. of the true structure	the number of candidate structures
 C ₆ H ₉ NO	MF, C, H n-vinyl-2-pyrrolidone	21 → 2	21
 C ₈ H ₁₄ O ₂	MF, C n-butylmethacrylate	13 → 8	17
 C ₉ H ₁₈ O	MF, C, H 3,3,5-trimethylcyclohexanol	33 → 13	38
 C ₁₀ H ₁₄ N ₂	MF, C, H, IR, MP nicotine	7 → 5	7
 C ₁₂ H ₁₈ O	MF, C, 2D 2-brexanone	4 → 1	4
 C ₁₃ H ₂₀ O	MF, C, H, 2D β-ionone	5 → 1	6
 C ₁₅ H ₂₄	MF, C, 2D longifolene	5 → 1	13

MF: Molecular Formula, C: ¹³C-NMR, H: ¹H-NMR, 2D: 2D-NMR
MP: POSITIVE Macrocomponent
(*: Free Bond)
Cf. 付録-5. for spectral data



2-4. まとめ

有機化合物の自動構造推定システムCHEMICS に可能性の高い候補構造から順に提示させるために、構造発生部の機能の拡張を試みた。このために、構造組立ての単位として用いている各部分構造に対する ^{13}C -NMR、 ^1H -NMR化学シフト出現頻度分布関数を作成した。これを用いることにより、可能性の高い部分構造から順に用いて候補構造を組み立て、正解構造を含む確度の高い構造を短時間内に発生することができた。CHEMICS における候補構造発生に関する改良の有効性が、実行例を通して確認できた。

2-5. 参考文献

- 1) 速水健一, 船津公人, 佐々木慎一, *日本化学会第63春季年会講演予稿集 I* 1B438, 7 (1992).
- 2) 速水健一, 船津公人, 佐々木慎一, *分析化学*, **42**, 369-374 (1993).
- 3) H. Abe, I. Fujiwara, T. Nishimura, T. Okuyama, T. Kida, S. Sasaki, *Computer Enhanced Spectroscopy*, **1**, 55 (1983).
- 4) S. Sasaki, Y. Kudo, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **25**, 252 (1985).
- 5) 佐々木慎一, *現代化学*, **2**, 19-25 (1991).
- 6) 船津公人, *ぶんせき*, **7**, 50 (1992).
- 7) K. Funatsu, N. Miyabayashi, S. Sasaki, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **28**, 18-28 (1988).
- 8) Y. Kudo, S. Sasaki, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **16**, 43 (1976).
- 9) N. A. B. Gray, R. E. Carhart, A. Lavanchy, D. H. Smith, T. Varkony, B. G. Buchanan, W. C. White, L. Creary, *Anal. Chem.*, **52**, 1095-1102 (1980).
- 10) 速水健一, 船津公人, 佐々木慎一, *第13回情報化学討論会講演要旨集* 29P17, 157-160 (1990).
- 11) 速水健一, *1990年度豊橋技術科学大学修士論文*, (1991).
- 12) 江口晃史, *1985年度豊橋技術科学大学卒業論文*, (1986).
- 13) H. Abe, Y. Kudo, T. Yamasaki, K. Tanaka, M. Sasaki, S. Sasaki, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **24**, 212 (1984).
- 14) S. Sasaki, I. Fujiwara, H. Abe, T. Yamasaki, *Anal. Chim. Acta*, **122**, 87 (1980).

3. 部分構造情報をもとにした構造発生プログラムの開発¹⁾

3-1. 序論

本研究室で開発が行われているCHEMICS は全構造推定を行うことを目的としている。これによって、自由結合手(まだつながっていない結合手)を持った不完全な候補構造は認めないという条件を課することができる。これは構造を組み立てて行く際に非常に有用な条件である。候補構造を最後まで組み立てることなくしてこれを予知することによって多くの無駄な構造発生樹を切り落とせるからである。たとえばノード1とノード2をつなげる際に、同じ候補構造を組み立てることがないように小さい番号のノードからそれより大きい番号のノードへしかつながらないと決め、さらに、そのノード1と2は同じ種類の部分構造であったとすると、ノード1が持つ全ての自由結合手を用いることなくノード2の持つ全ての自由結合手を用いて構造を組み立ててしまった(もうノード1につなげるべきものがないとしてノード2を組立てに用いる)場合には、それから先、構造組立てが進んでもノード1には自由結合手が残ることとなり、如何なる構造発生樹を進んでも不完全な候補構造が発生することになる。この樹の枝を早期に切り落とすことによって構造発生は効率よく行える。また、CHEMICS やその他の全構造推定プログラムはその実行に分子式を必要とする。分子式は分子量、その組成元素や不飽和度など多くの有力な情報を持っている。よって全構造推定に解析的を絞り、そして分子式が与えられた場合には、多くのことが限定化できる。

本研究では、これらの有力な情報を持っていなかったり、その情報に不安がある場合でも考えられる範囲で未知構造に関する回答を出せないものだろうかという視点で問題解決を図った。また、本研究室にはCHEMICS というものがすでにあり、あえてこれと同じようなものを作る必要はない。本研究は必ずしも全構造推定を目指しているのではなく、不完全な部分構造の生成も可能としていて、CHEMICS などその他のシステムと共存し得るものと考えている。この目的は、ある未知化合物について分子式が不明であるが何んらかの形で、いくつかの部分構造が得られている場合に、それらの部分構造からより大きな部分構造をそして場合によっては未知構造全体を推定するプログラムを新たに開発することである。

3-1-1. プログラムの構成とCHEMICS との関係

プログラムの構成とCHEMICS との関係を以下 *Figure 3-1* に示す。*Figure 3-1* の——線内が本研究開発部分で、その部分の詳細を *Figure 3-2* に示す。また、必要に応じてその都度 *Figure 3-9*, *3-12*, *3-13*, *3-18* でも示す。

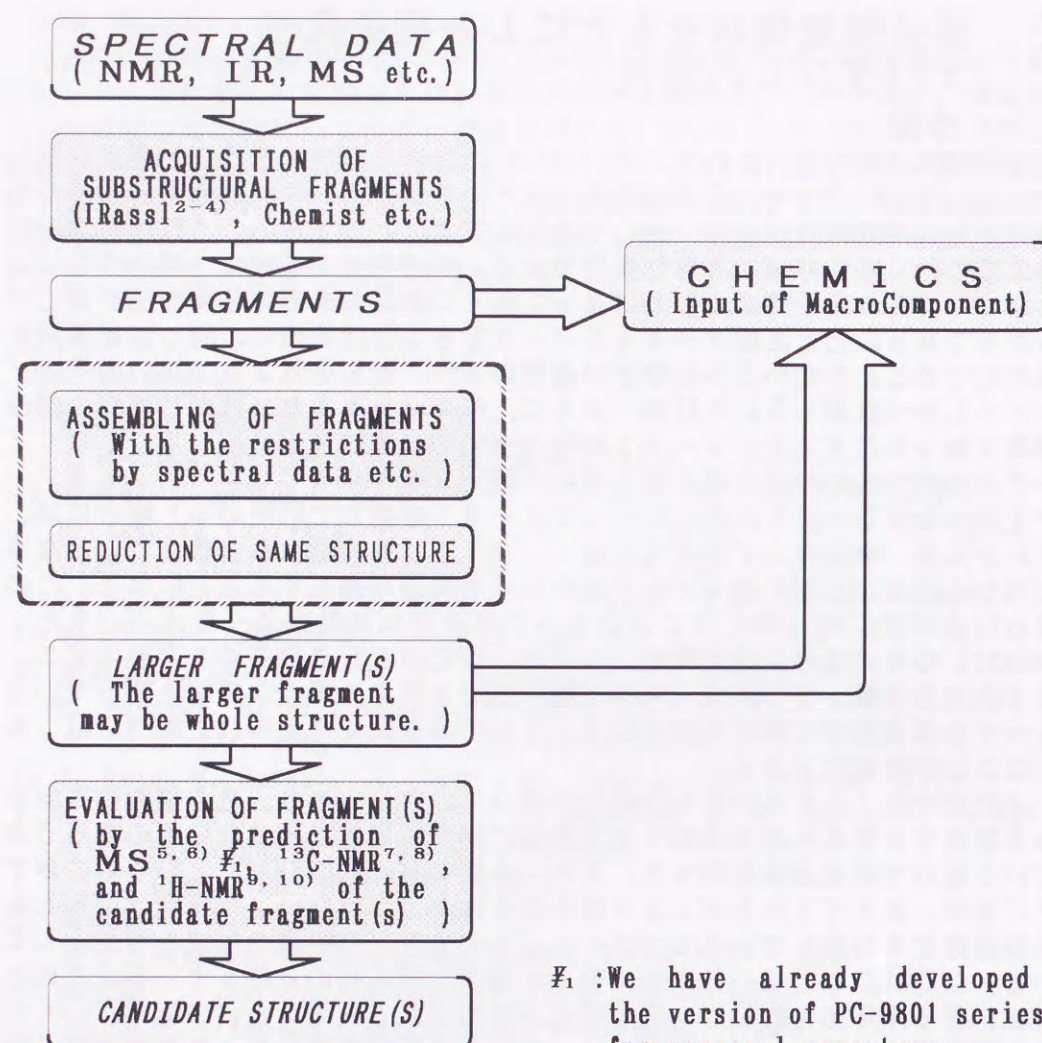
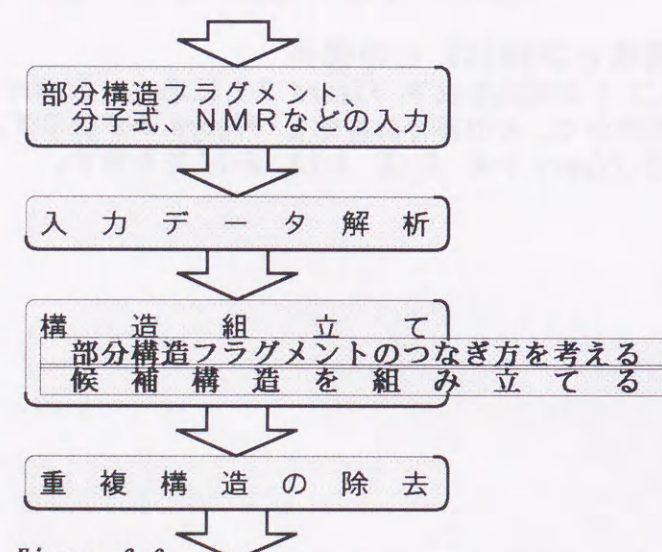


Fig. 1: We have already developed the version of PC-9801 series for personal computer.



3-1-2. CHEMICS との比較においてのこの研究の特色

①. 分子式が不明でも使用可能

CHEMICS を使用するには、推定しようとしている化合物の分子式が解っていないなければならない。本研究では、分子式を与えなくても使用でき、分子式の代わりに分子量でもかまわない。また、分子式や分子量の曖昧入力も可能である。

②. 未知構造の部分的な推定が可能

CHEMICS には、現在のところ Counterpart 推定という機能がある^{13, 14)}。これは全体の分子式が解っていて、そのうち Host part (解っている部分) を除いた部分の構造推定を行うものである。本プログラムでは、全体の分子式が不明でも構わない、また Host part も必要としないものである。

③. 大きな分子式を持った化合物の取り扱いへの期待

CHEMICS の場合、入力情報の質や量にもよるが炭素数がおおよそ15を超える化合物を取り扱うと構造組立てに要する時間が急速に大きくなる。この問題への解決方法の一つとして取り扱っているコンポーネントをもっと豊富にそして大きな部分構造として構造組立ての組合わせ数を減らしてやることが考えられる。本プログラムでは任意の部分構造を構造組立ての単位としているので、この部分構造が大きく、かつ、部分構造の持つ自由結合手が限られたものであれば、たとえ分子式が大きな化合物であっても時間的に容易に処理できる。また、部分的な構造推定が可能であるので、たとえ全体が大きな未知化合物でも解析対象部分を絞れば負担は少ない。

3-2. 実験と方法

本研究で用いた方法は、利用者から与えられた部分構造フラグメント (以下、フラグメントと呼ぶ) を直接つなぐ方法である。フラグメントのつなぎ合わせ手順を Figure 3-3 に示す。CHEMICS では、候補構造を組み立てるための単位として部分構造 (コンポーネント、2. の Table 2-1 や付録-1.) を用意している。予め、これらのコンポーネント間では重複が生じないように設定されている... (1)。同じ種類のコンポーネントを複数個使用する場合には、同じ種類のコンポーネント間ではノード番号の小さいものを優先することで同じ構造を組み立てないよう工夫されている... (2)。(1) と (2) によって候補構造間で重複構造が生成されるのを防いでいる。これに必須条件である分子式を構造組立ての枠組みとして候補構造が作り出される。本研究では候補構造を組み立てる基本単位は利用者より与えられる任意のフラグメントとし、分子式がなくても構造推定を可能とするために、構造を組み立てる単位であるフラグメントを全て使用するまで行われるとした。このフラグメントは大きなものである可能性もあるので組立ての際の組み合わせ方が単純になる場合もある。しかし一方で、フラグメント間で重複している部分がある可能性が高まり候補構造間での重複検査が必要となる。重複検査の手順を Figure 3-4 に示す。

本来なら CHEMICS のように、なるべく構造を組み立てる前に重複する構造を発生しない方が好ましい。本研究では導入可能な (2) の考え方を検討した。この制約により -CH₂- というような同じフラグメントを5、6個与えても本プログラムは構造組立ての段階で多数の重複構造が発生することはない。

3-2-1. フラグメントのつなぎ合わせ

構造組立てを効率よく行うためにフラグメントのつなぎ合わせ処理は明確に

2つの段階に分けて行っている。

- ①. フラグメント間のつなぎ方を考える。この段階で不合理なつなぎ方は排除し、フラグメントを表現する結合行列は一切取り扱わない (Figure 3-3 中の [1 a])。
- ②. ①で合格したつなぎ方の候補構造を組み立てる (Figure 3-3 中の [1 b])。

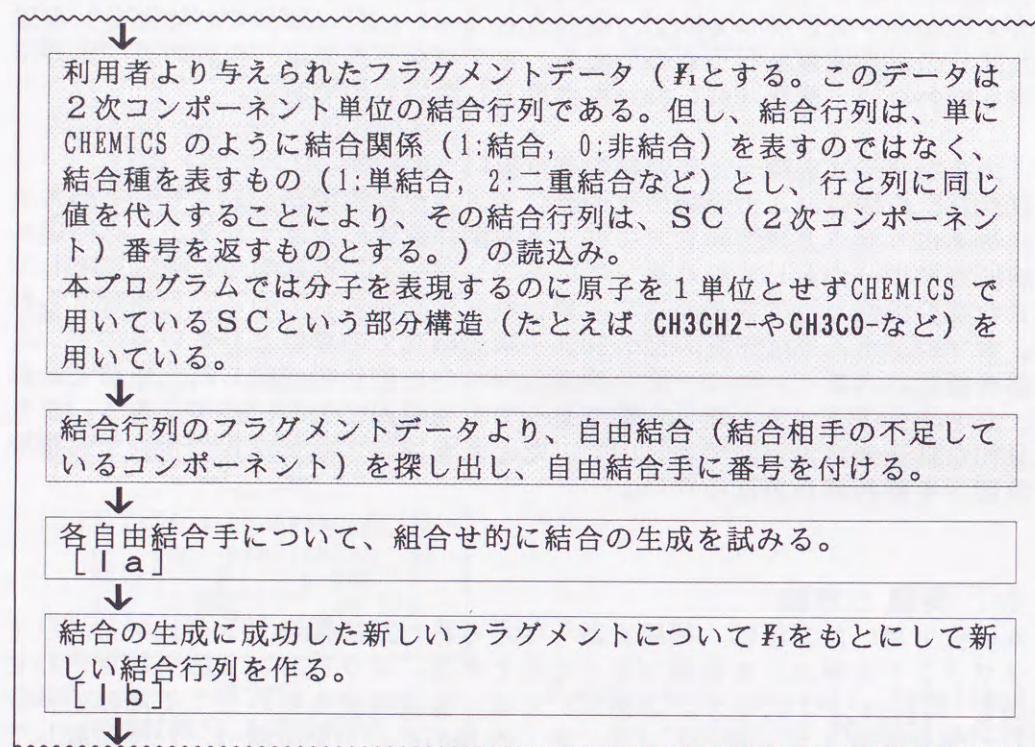


Figure 3-3. Assembling of inputted fragments

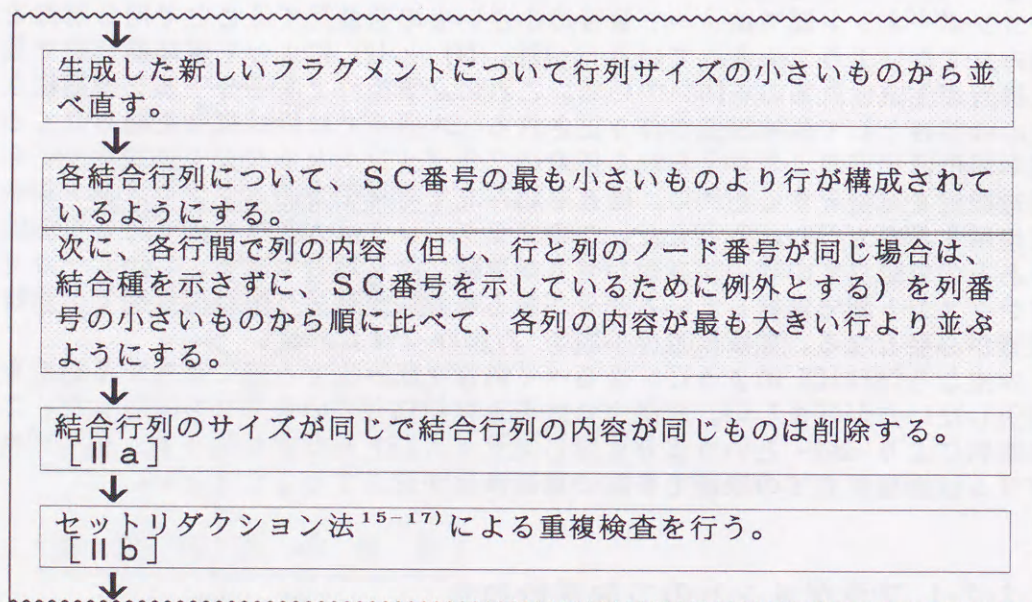


Figure 3-4. Reduction of the same structure between candidates

3-2-2. つなぎ合わせを行う際の制約

フラグメントの自由結合手のつなぎ合わせ方は Table 3-1 に示すように自由結合手の数が増えると、そのつなぎ方、すなわちそれによって組み立てられる候補構造の数も大幅に増大する。本プログラムでは、利用者により入力されたフラグメントをつなぎ合わせて組み立てられる構造の数を減らすのに、以下に述べる制約条件が役立っている。1) 常に適用可能な制約(基本的な制約, 取り扱っているものが化学構造であることから適用可能な制約)と2) 情報を与えることにより適用可能な制約(スペクトル情報などによりフラグメントのつなぎ合わせに課す制約)がある。これらの制約がプログラムのどの部分で利用されているのかを Table 3-2 にまとめた。

Table 3-1.
The number of the combination to join free bonds on fragments

FREE BONDS	THE COMBINATION TO JOIN FREE BONDS	
2	1 = 1* 1	1-2 (←結合1と2をつなぐ),
3	3 = 1* 1 + 2* 1	1-2, 1-3, 2-3,
4	9 = 1* 1 + 2* 1 + 3* (1+1)	1-2, 1-3, 1-4, 2-3, 2-4, 3-4, 1-2 & 3-4, 1-3 & 2-4, 1-4 & 2-3,
5	25 = 1* 1 + 2* 1 + 3* (1+1) + 4* (1+1+2)	
6	75 = 1* 1 + 2* 1 + 3* (1+1) + 4* (1+1+2) + 5* (1+1+2+3* (1+1))	
7	231 = 1* 1 + 2* 1 + 3* (1+1) + 4* (1+1+2) + 5* (1+1+2+3* (1+1)) + 6* (1+1+2+3* (1+1) + 4* (1+1+2))	
8	763 = 1* 1 + 2* 1 + 3* (1+1) + 4* (1+1+2) + 5* (1+1+2+3* (1+1)) + 6* (1+1+2+3* (1+1) + 4* (1+1+2)) + 7* (1+1+2+3* (1+1) + 4* (1+1+2) + 5* (1+1+2+3* (1+1)))	

The number of free bonds = n
The number of combination = X(n)
X(0) = 0 n=0
X(1) = 0 n=1
X(n) = X(n-1) + (n-1) × (X(n-2) + 1) n>1

Table 3-2. Application of restrictions (constraints) to the program

入力データ解析部 F_1

分子量, 分子式, ^{13}C -NMR, ^1H -NMR \rightarrow 生き残り SC

構造組立て部 F_2

部分構造フラグメントのつなぎ方を考える部分 [I a] F_2
分子量, 分子式, 生き残り SC, 基本的な制約 F_3

候補構造を組み立てる部分 [I b] F_2
NMR シグナル割付検査 F_4 , F_5 , 基本的な制約 F_3

組み立てられた構造に対して

マクロコンポーネント検査, シグナル結合情報検査,
NMR シグナル割付検査 F_4 , F_5 , 基本的な制約 F_3

F_1 : Figure 3-2 を参照, F_2 : Figure 3-3 を参照
 F_3 : 3-2-2. 1) の①, ②, ③, ④, ⑤, ⑥, ⑦にて解説
 F_4 : 3-2-2. 1) の⑧にて解説, F_5 : 3-2-2. 1) の⑨にて解説
 F_3 , F_4 , F_5 の基本的な制約は RESTRICTION コマンドにより変更可能
 F_4 : ^{13}C -NMRの入力と入力データ解析 (ANALYZE コマンド) が行われた場合に有効
 F_5 : ^1H -NMRの入力と入力データ解析が行われた場合に有効

1) 常に適用可能な制約

以下に本プログラムで導入した制約条件をまとめた。これらの条件を課すかどうかは利用者の希望により指定できる。

①. つなぎ合わせる結合種の検査

[I a (Figure 3-3, 3-4, Table 3-2), 枝刈り]

互いに結合種が同じもの、あるいは、単結合と芳香族結合（この場合は単結合に）、単結合と配位結合（この場合は配位結合に）の関係にない結合間の結合生成を排除する検査。

②. 各フラグメント自身内での結合生成の検査

[I a, 枝刈り]

③. 同じ原子間での複数の結合生成の検査

[I a, 枝刈り]

④. 自由結合手の等価性検査

[I a, 枝刈り]

同じ原子上にある等価な結合手間で結合に付けられた番号の小さいものが自由なまま、番号の大きいものを先につなごうとしないかを調べる検査。

⑤. 分離構造の検査

[I a]

⑥. 全ての入力フラグメントを用いていない完全構造の生成検査

[I a, 枝刈り]

完全構造（自由結合手を持たない完成された形の構造）が生成した場合で、かつ、始めに与えられた全てのフラグメントを構成要素としない構造が生成していないかを調べる検査。

⑦. 完全構造生成の検査

[I a, 枝刈り]

自由結合手を持たない完成された形の構造のみを合格とするかどうかの検査。

⑧. 芳香族性コンポーネントの検査

[I b]

フラグメントをつなぎ合わせて、新しいフラグメントを発生させるときに、芳香族性コンポーネントの持つ結合が、最低2つ以上の芳香族性結合あるいは、自由結合手を持っているかを調べる検査。

⑨. 重複構造の排除

[II a と II b]

2) 情報を与えることにより適用可能な制約

現在利用可能な情報と、その情報の本論文での記載場所を Table 3-3 に示す。

Table 3-3. Input information to the program

入力の取り扱い情報	記載場所
部分構造フラグメント情報 (必須)	2-1)
分子量情報	2-2)
分子式情報	2-2)
マクロコンポーネント情報	2-3)
^{13}C -NMR スペクトル情報	2-4)
^1H -NMR スペクトル情報	2-5)
2次元NMRスペクトルなどによるシグナル結合情報	2-6)

2-1) フラグメント情報

本プログラムでは、分子式を必ずしも必要とはしないものであるが、その一方でフラグメントを幾つか入力してもらわないと役に立たない。





データの入力仕様はMCの入力と共通なものである。入力形態を Table 3-4 にまとめた。また、その入力例を Table 3-5 に示す。プログラム中で線形入力によりフラグメント情報を獲得する方法 [1] [2] と、予めファイル中に情報として与えるフラグメントの結合行列を記述して置き、このファイルをプログラム中から読み込みフラグメント情報を獲得する方法 [3] がある。この線形入力はSCキャラクタ (付録-3, Table A-3-1) を用いて記述する方法とSCキャラクタのかわりにその部分構造に相当するSC番号を用いた方法がある。また、線形入力を用いた場合には、その入力したデータを、ファイルからの読み込み形式に対応した結合行列に変換し、自動的にファイルに保存するようにしたので、次回にまた同じデータを用いる場合にはそのファイルを読み込むだけ

でフラグメント情報が獲得できる。

Table 3-4. The way for input & output of fragment and input of MC to the program

フラグメントの入力	
[1] 線形入力による方法	CHEMICS のMC入力に準じた方法でSCキャラクタを用いる方法。 この場合 \mathbb{F}_1 の方法で読み込み可能なファイルを自動生成する。
[2] 線形入力による方法	SC番号を用いる方法。 この場合 \mathbb{F}_1 の方法で読み込み可能なファイルを自動生成する。
[3] ファイルからの読み込みによる方法	フラグメントの結合行列を記したもの (Figure 3-2, Table 3-5) で、 先の [1] [2] により生成されたファイルと同じ形式 \mathbb{F}_1 とCHEMICS のZZKTMP形式 \mathbb{F}_2 のファイルが読み込み可能である。
MCの入力	
上記のフラグメントの入力と同じ。	
フラグメント (候補構造) の出力	
[1] \mathbb{F}_1 の形式	
[2] \mathbb{F}_2 の形式	
出力するフラグメントに自由結合手がある場合に、[-*]や[=*]のダミー コンポーネントを付けて出力するか、しないのかを選択可能。	

Table 3-5. Examples of input of fragment and MC information

入力 フラグメント	線形入力 [1] SCキャラクタ	線形入力 [2] SC番号	ファイル入力 [3] (結合行列)				
CH_3 / $-\text{O}-\text{C}=\text{O}$	<u>CH3CO-0</u> 	<u>16-77</u> 	<table><tr><td>2</td><td rowspan="3">←マトリクス サイズ*</td></tr><tr><td>16 1</td></tr><tr><td>1 77</td></tr></table>	2	←マトリクス サイズ*	16 1	1 77
2	←マトリクス サイズ*						
16 1							
1 77							
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2-$	<u>C2H5-CH2</u> 	<u>7-24</u> 	<table><tr><td>2</td></tr><tr><td>7 1</td></tr><tr><td>1 24</td></tr></table>	2	7 1	1 24	
2							
7 1							
1 24							

ファイルからの入力の際にはここに示したものの他にCHEMICS で従来から用いられているZZKTMP形式のファイルにも対応している。

①. CHEMICS との互換性

SC単位で線形入力が行え、入力に用いる記号すなわち、ノードに相当する1から85の各SCに対して定められているSCキャラクタ表記と、エッジに相当する[-]や[=]、そして架橋を意味する[*n] (nは、1から99) による結合表記は、同じものが使用できる。

②. 拡張された機能

入力方法 [1] [2] の場合は、従来通り二重結合の省略はできず、単結合のみ省略可能である。このため、[C-C] と入力した場合には [26-26(>C<)] を意味し、この場合の [C] は [>C=(38)] や [=C=(36)] を意味するものではない。また、入力方法 [2] により [38-38] と入力した場合には [26-26] に修正され [26=26] と入力した場合にはエラーとなる。入力方法 [3] の場合には、このような検査は行われない。

結合表記の方法としては、単結合 (省略可能) [-]、二重結合 [=]、の他に、三重結合 [#]、芳香族結合 [\$] を用意した。さらに、CHEMICS では [*n] を用いた架橋の表記は単結合しか表現できないため次のような表記を本プログラムでは可能とした。単結合は [*n] あるいは [*Sn] によって、二重結合は [**n] あるいは [*Dn] によって、三重結合は [*Tn] によって、そして芳香族結合は [*An] によって表す。これによって、たとえば [C**1=C=C**1] という表記が可能となった。

また、入力に際して [*n] によりマークされたノード間での結合生成の条件として、同じ番号 n が他に 1 つ以上であればよいこととした。これによって、たとえば [C*1 C*1 C*1] という表記が可能となった。これは [C*1-C-C*1] と同じである。CHEMICS では、この点に関する検査を行っていないため [*n] の相手が無くとも、あるいは複数あると受け付けてしまう。[C*1 C*1 C*1] と入力した場合には、[C-C-C] となってしまう。

本プログラムでは、[*n] において n は 0 でもよい。また [*n] と [*Sn] により表記されていても、これらは同じ単結合の架橋を指すので n 値は共通であるがたとえば、他の架橋を意味する [*Dn] などに対して与えられた n とは、n の値が [*n] の値と同じものでも区別される。

CHEMICS では、個別に入力された複数のMCについては互いの結果が論理積の関係にあるものが候補構造として提示されるが、本プログラムでは論理積の他に論理和も用意した (2-3) の②を参照)。近年、CHEMICS で構造発生後、改めて論理和などの各種演算処理を施す機能は原藤らにより追加されている^{13, 14)}。

③. CHEMICS との非互換性

本プログラムでは、結合はその種類毎に異なった表記をとっている。そのため、CHEMICS のように芳香族結合を単結合表記することは許されない。たとえば、[AC] (芳香族炭素) と [AC] の結合を [-] をもってつなぐことはできない。この場合には、芳香族結合を表す [\$] によって結合を表記しなければならない。

④. 本プログラムで取り扱っている部分構造フラグメントデータと

CHEMICS で取り扱っているZZKTMP形式データとの変換について

本プログラムでは、構造を表現する最小単位はCHEMICS のSCを採用しているのでデータ形式は、基本的にほぼ同質なものである。ただし、MCでの包含関係の考慮を行ったり (2-3) の③, Figure 3-5, 3-6, 3-7, 3-8)、候補フラグメント間で重複検査を行う (Figure 3-4 や 3-2-3. の 3)) ために、最終的に生成するフラグメントを構成するコンポーネントの用い方はCHEMICS とは異なる点がある。また、フラグメント間のつなぎ合わせを考えるために結合行列中では結合しているのか、いないのかだけではなく、どんな結合種であるのかを記述し (Figure 3-3)、[-D-] (二重結合を意味するダミー原子)、[-*] (単結合の自由結合手に付加するダミー原子)、[=*] (二重結合の自由結合手に付加するダミー原子) を取り外している。フラグメントのあるノードはどんなコンポーネントであるのかは、結合行列上で結合情報と一緒に取り扱っている (Figure 3-3) などの違いがある。以下 Table 3-6 に、これらの違い

による本プログラムとZZ (CHEMICS で従来から用いられているZZKTM形式) のデータの変換点についてまとめた。

フラグメントデータの入力部ではZZを読み込むことができ、出力部については逆にZZに変換できる。これによって、CHEMICS とのデータのやり取りや本研究室で開発されているMACIN (分子構造入力プログラム)、MACOUT (分子構造表示プログラム)¹¹⁾ とのデータのやり取りを行うことが可能である。入力部においては、本プログラムの形式とZZのファイルを自動判別により獲得できる。

Table 3-6. Conversion for the format of molecular data between this program and ZZKTM file in CHEMICS

	THIS PROGRAM to ZZ	ZZ to THIS PROGRAM
C O M P O N E N T	<p>※CH3 処理 1 から23番のSCに相当する部分構造がある場合には1 から23番のSCを復活させる</p> <p>※TPL 処理 トロボンを復活させる</p> <p>※MDO 処理 メレンゾ オキサドを復活させる</p>	<p>※変換した形式、しない形式 双方に対応しているので変換しない</p>
B O N D	<p>※ダミー原子を付加する (= → -D-)</p> <p>※結合種を1に変換する (=, \$ → -)</p>	<p>※-#, =# の処理 ダミー自由結合手を除去する</p> <p>※ダミー原子を除去する (-D- → =)</p> <p>※結合種を発生させる (A-A → ASA)</p>
CONNECT- IVITY MATRIX	<p>※対角要素は 0 (ゼロ)とし、SCを別な変数に取り出す</p>	<p>※対角要素に SCを保持させる</p>
AFFERENT NATURE #	<p>※各ノードについてAN #を求めて付加する</p>	<p>※ANを必要としない</p>

注) - :single bond, = :duble bond, ≡ :triple bond, \$:aromatic bond
A :aromatic atom, # :1-2.の脚注参照
SC:Secondary Component

2-2) 分子量、分子式情報

本プログラムは先に述べたように分子式の入力には必須条件ではないが、この情報は有力な制約条件として活用できる。本制約は、構造発生を行う前に入力データ解析を施すことにより生き残りSC情報に反映させることができる (Table 3-2) とともに、フラグメント間のつなぎ方を考える段階で制約条件

として導入することができた。

分子式が解らないが、分子量なら解るという場合には、分子量に関する情報だけでも受け付けることとした。分子式が解る場合には、分子式のみを入力してもらい、分子量は、分子式より自動的に求められるようにした。また、今回は分子量を正確に (小数点以下まで) 計算することとした。分子式、分子量が不明確な場合には、おおよそでも構わない。CHEMICS では、その分子式を満たさないものは候補構造として失格であるが、この場合には未知構造全体でなくとも候補構造として成立するので、ある値以下の候補構造は全て提示することもある。Table 3-7 に入力方法についてまとめた。

Table 3-7. The format for input of Molecular Weight or Formula

- ①. 利用者が入力した値あるいは、式と等しいもののみ合格とする。
(prompt> [分子量あるいは分子式] [Q])
- ②. 利用者が入力した値あるいは、式、以下のものを合格とする。
(prompt> [分子量あるいは分子式] [X] [Q]) あるいは
(prompt> [X] [分子量あるいは分子式] [Q])
- ③. 利用者が入力した値あるいは、式、以上のものを合格とする。
(prompt> [X] [分子量あるいは分子式] [Q]) あるいは
(prompt> [分子量あるいは分子式] [X] [Q])
- ④. 利用者が入力した値あるいは、式の範囲内のものを合格とする。
(prompt> [分子量あるいは分子式] [-] [分子量あるいは分子式] [Q])

2-3) マクロコンポーネント情報

CHEMICS でいうところのMCと同質の機能である (1-2.の注釈¹²⁾)。

本プログラムでは部分構造フラグメント情報を入力した上に、さらに部分構造情報であるMCを入力することができる。この2つの情報の違いは、フラグメント情報は必要であるがMC情報はなくても構わない。また、フラグメント情報は仮に間違いがあっても構わないがMC情報は確実なものでなければならない。

MC検査はフラグメント間の重複検査後に行われる。CHEMICS の場合は、さらに構造発生に先だって生き残りSC情報にMC情報が反映される。たとえば、CH3-CH2-CH2-という構造がポジティブでMC入力されたとすると CH3CH2- と -CH2- というコンポーネントが最低1つつ存在しなければならないとなる。しかし、本プログラムではMC間での論理演算を可能としたので、MC情報は生き残りSC情報には反映されない。

その他、機能的には Table 3-8 に示す対策を行った。以下に、その各論について述べる。

Table 3-8. MC procedure of the program

MC情報の取り扱い処理	記載場所
個々のMCに対するポジティブ/ネガティブ指定 ¹²⁾	①
MC間での論理積/論理和 ^{13, 14)}	②
包含関係を考慮したMC処理 ^{13, 14)}	③
MCの入力方法の拡張 (フラグメントの入力方法に同じ)	④

①. 本プログラムでもCHEMICSと同様にポジティブ(MC入力された部分構造が存在する候補構造を合格とする)／ネガティブ(存在しない候補構造を合格とする)入力が可能である。

②. また、さらに原藤らによりCHEMICSにMC処理の拡張として入力MC間での論理演算機能の追加が行われている^{13, 14)}。この機能は複雑な論理演算も行えるようになっているが、CHEMICS本体とは独立したものでCHEMICSより一度提示された候補構造に対して行うものである。本プログラムではMC間での論理積(AND:全てが満たされたときのみで、本来CHEMICS本体で行える機能)／論理和(OR:どれかが満たされたとき)による検査を行えるようにした。

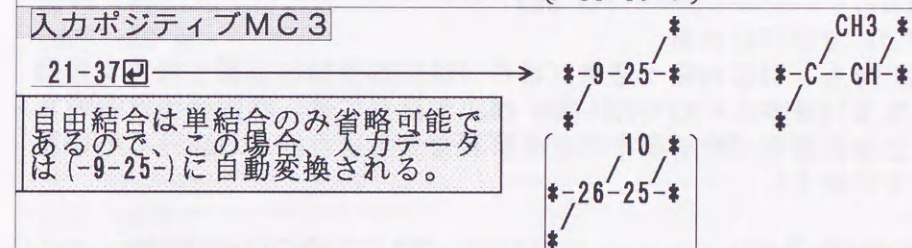
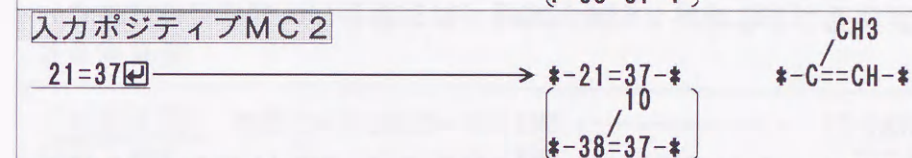
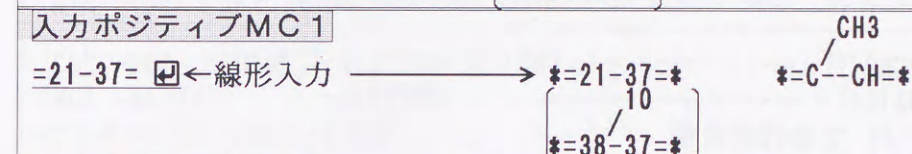
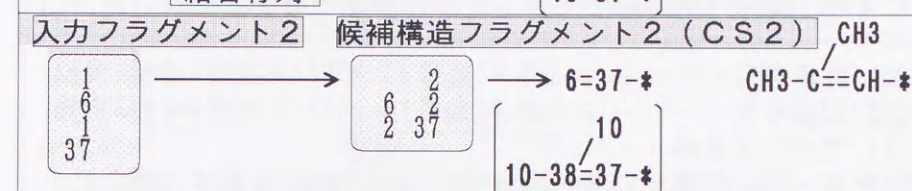
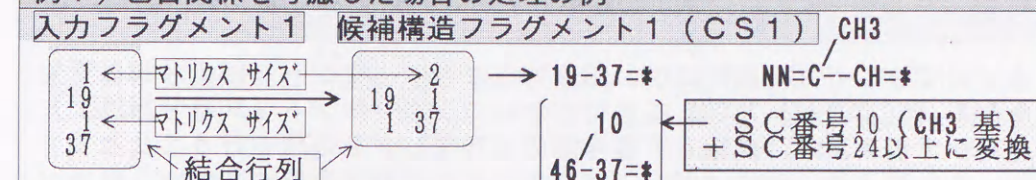
③. コンポーネント間の包含関係を考慮したMC検査^{13, 14)}という考え方も導入した。包含関係を考慮することにより可能となったものを例1(Figure 3-5)に示す。CS1(Candidate Structure(s))に対してMC1が部分構造として存在するのかを調べたとき、包含関係を考慮しない場合にはCS1のNN=C(CH3)-(SC番号19)とMC1の=C(CH3)-(21)のSC番号の違いからMC1をCS1中に見い出すことができない。しかし、包含関係を考慮することによりMC1をCS1中に見い出すことができる。

CHEMICSではCS側のコンポーネントを可能な、より小さい部分構造に変換(ブロックデータを用意)し、それがMCと同じものであるのかを調べていた。一方、本プログラムでは、包含関係を考慮したMC処理を行う場合には、予め、CS、MC双方のSC番号23以下のコンポーネント(CH3基を部分構造として含むSC)、-TPL-(49)、-MDO-(50)を別なSCの組合せにより表現するようプログラム内で変換しておくこととした。たとえばNN=C(CH3)-(19)をNN=C<(46)と-CH3(10)で、=C(CH3)-(21)を=C<(38)と-CH3(10)で表現して、各コンポーネントについて'SCIC.DAT'というファイル(付録-3. Table A-3-7)上に記載した情報に従ってCHEMICSとは、逆にMC側のコンポーネントを可能な、より大きい部分構造に変換(=C<(38)→>C=NN(46), >C=NH(45), >C=S(44), >C=O(43))して調べることとした。なぜなら、MCの方がCSより構造が小さく(変換する部分が少ない)変換に係る処理を軽減できるからである。

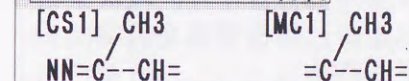
また、このCH3基を構造内に含む部分構造、-TPL-, -MDO-についての変換処理を行うことにより従来の方での不具合例を解決した。これを例2(Figure 3-6, 3-7, 3-8)に示す。たとえば、CS CH3CH2(7)-O(77)-中にMC CH3-(10)と-O(77)の双方が含まれているかという問題に対してCHEMICSではCSをより小さいものに(CH3CH2-O→-CH2(24)-O(77)-)という変換を試みる。結果としてCS中にMCは見つからないのでCSは失格となってしまう。一方、本プログラムではCSをCH3(10)-CH2(24)-O(77)-に変換するため、この構造中にMCを見い出すことができる。

HについてはCHEMICS同様、包含関係を考慮しないものとする。たとえば、(CH3)2CH-に(CH3)2C<は含まれない。

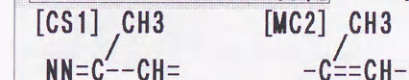
例1) 包含関係を考慮した場合の処理の例



CS1にMC1の制約 ☑ 合格(包含関係を考慮), 不合格(通常)



CS1にMC2の制約 ☑ 不合格(包含関係を考慮), 不合格(通常)



本プログラムでは、二重結合を表現するのにダミー[-D-]を用いていないが、本プログラムのセットリダクションでは、結合種を考慮しているので正しく判定される。

CS2にMC1の制約 ☑ 不合格(包含関係を考慮), 不合格(通常)



CS2にMC2の制約 ☑ 合格(包含関係を考慮), 不合格(通常)



CS : Candidate Structure - : single bond ≡ : triple bond
 MC : MacroComponent = : double bond \$: aromatic bond
 SC : Secondary Component

Figure 3-5.
 Examples of MC check by implication between candidate and MC

例 2-1) 包含関係を考慮した場合のCH3- (SC番号10) 処理の例
本プログラムでは構造内にCH3 基を持つコンポーネント (SC番号23以下) をCH3 (SC番号10) とCH3 基を持たないコンポーネント (SC番号24以上) を用いて表すように変換して包含関係を考慮したMC処理を行うこととした。これにより、従来 CHEMICSでできなかった問題を解決した。
[CS] CH3CH2 (SC番号7) - -----> CH3 (SC番号10) -CH2 (SC番号24) -に変換 [MC] CH3CH2 (SC番号7) - -----> CH3 (SC番号10) -CH2 (SC番号24) -に変換 本プログラム ではCSは合格 (CHEMICS でも CSは合格: CSのSC番号7とMCのSC番号7を直に比較)
[CS] CH3CH2 (7) - -----> CH3 (10) -CH2 (24) -に変換 [MC] -CH2 (24) - -----> -CH2 (24) - 本プログラム ではCSは合格 (CHEMICS でも CSは合格: CSのSC番号 7はSC番号24に変換可能であることから)
[CS] CH3CH2 (7) - -----> CH3 (10) -CH2 (24) -に変換 [MC] CH3 (10) - -----> CH3 (10) - 本プログラム ではCSは合格 (CHEMICS でも CSは合格: 通常SC番号 7はSC番号24との置き換えが可能であるとしているが、MCのマトリクス サイズが1の場合には、参照データを変えることによりSC番号 7をSC番号10とも解釈できるようにさせて、この問題を解決していた)
[CS] CH3CH2 (7) -O (77) - -----> CH3 (10) -CH2 (24) -O (77) -に変換 [MC] CH3 (10) -O (77) - -----> CH3 (10) -O (77) - 本プログラム ではCSは不合格: MCはCSに含まれるが、結合関係が異なるのセットリダクションプログラムでは正しく却下される (CHEMICS でも CSは不合格: CSのSC番号 7はこの場合にはSC番号24にしか変換できないため)
不具合例 [CS] CH3CH2 (7) -O (77) - -----> CH3 (10) -CH2 (24) -O (77) -に変換 [MC] CH3 (10) -O (77) - -----> CH3 (10) -O (77) - 本プログラム ではCSは合格 (CHEMICS では CSは不合格: MCのマトリクス サイズが1でないために、CSのSC番号 7は、この場合にはSC番号24にしか変換できない (表1の文を参照) ためMCのSC番号10をCS中に見いだすことができない)

Figure 3-6.
Examples of MC check by implication between candidate and MC

例 2-2) 包含関係を考慮した場合の-MDO- (SC番号50) 処理の例
本プログラムでは、-MDO- (50) をCS、MC共に-AC (47) -O (77) -CH2 (24) / -AC (47) -O (77) に変換しMC検査を行うこととした。
[CS] -MDO- (50) [MC] -MDO- (50) 本プログラム ではCSは合格 (CHEMICS でも CSは合格: CSの-MDO- (50) とMCの-MDO- を直に比較)
[CS] -MDO- (50) [MC] -AC- (47) 本プログラム ではCSは合格 (CHEMICS でも CSは合格: CSの-MDO- (50) は-AC<(47)に変換可能であることから)
不具合例 [CS] -MDO- [MC] -AC-AC- 本プログラム ではCSは合格 (CHEMICS では CSは不合格: CSの-MDO- (50) は -AC<(47) に変換可能であるが -AC-AC-を部分構造に含んでいながら -AC-AC-には対応できない)
[CS] -MDO- [MC] -O- (77) 本プログラム ではCSは合格 (CHEMICS でも CSは合格: CSの-MDO- (50) は-O- (77) に変換可能であることから)
不具合例 [CS] -MDO- [MC] -O-CH2- 本プログラム ではCSは合格 (CHEMICS では CSは不合格: CSの-MDO- (50) は-O- (77), -CH2- (24) それぞれに変換可能であるが、-O-CH2-には対応できない)
不具合例 [CS] HO-AC-MDO-AC-OH [MC] HO-AC-AC-AC-OH 本プログラム ではCSは不合格 (CHEMICS では CSは合格: CSの-MDO- (50) は-AC<(47)に変換可能であることから)

Figure 3-7.
Examples of MC check by implication between candidate and MC

例2-3) 包含関係を考慮した場合の-TPL-(SC番号49) 処理の例	
本プログラムでは -TPL-(49) をCS、MC共に	\$AC(47) \$X(255)
	\$AC(47) \$X(255)
に変換しMC検査を行うこととした。	
本来は	*1\$AC(47) =0 (SC番号?)
	*2\$AC(47) -OH(74)
とでもすべきだが、これには2つの問題がある。この	
1つは-AC=0あるいは、=0をどう扱うべきか。2つ目の問題として、この	
ような考え方をすると-TPL-は-MDO-と異なり自由結合手(*1, *2)が同	
等でないために*1と*2のどちら側をOH基としたら良いのか定まらない問題	
がある。本来、=0, -OHは、互いに中間的な状態にあると考えるべきである	
から、片方を-OH(74)としてしまうのも問題である。よって、カルボニル	
基でも水酸基でもないものとして扱った。しかし、これによって、MCで	
-OH が指定されても -TPL-は、検出できない。	
[CS] -TPL-(49)	
[MC] -TPL-(49)	
本プログラムではCSは合格	
(CHEMICSでも CSは合格: CSの-TPL-(49) とMCの-TPL- を直に比較)	
[CS] -TPL-	
[MC] -AC-	
本プログラムではCSは合格	
(CHEMICSでも CSは合格: CSの-TPL-(49) は-AC<(47)に変換可能である	
ことから)	
不具合例	
[CS] -TPL-	
[MC] -AC-AC-	
本プログラムではCSは合格	
(CHEMICSでは CSは不合格: CSの-TPL-(49) は-AC<(47)に変換可能であ	
るが -AC-AC-を部分構造に含んでいながら -AC-AC-には、対応できない)	
不具合例	
[CS] -TPL-	
[MC] -OH	
本プログラムではCSは不合格: CSの-TPL-(49) は -OH(74) に変換可能と	
していないため	
(CHEMICSでは CSは合格: CSの-TPL-(49) は -OH(74) に変換可能と	
しているため)	
[CS] -TPL-	
[MC] >C=O	
本プログラムではCSは不合格	
(CHEMICSでも CSは不合格)	
[CS] -TPL-	
[MC] -AC-OH	
本プログラムではCSは不合格: CSの-TPL-(49) は -OH(74) に変換可能と	
していないため	
(CHEMICSでも CSは不合格: CSの-TPL-(49) は -AC<(47), -OH(74) それ	
ぞれに変換可能であるが -AC-OH には対応できない)	
不具合例	
[CS] HO-AC-TPL-AC-OH	
[MC] HO-AC-AC-AC-OH	
本プログラムではCSは不合格	
(CHEMICSでは CSは合格: CSの-TPL-(49) は -AC<(47) に変換可能であ	
ることから)	

Figure 3-8.
Examples of MC check by implication between candidate and MC

④. MC入力の方法は、従来のCHEMICSの方法に改良を施してたものを採用している。また、この方法はフラグメント情報の入力方法と統一してある。入力方法 (Table 3-4)、入力例 (Table 3-5) については、すでに2-1) フラグメント情報のところで述べた。

2-4) ¹³C-NMR スペクトル情報

入力情報は、*Chemical Shift (ppm), Intensity, Multiplicity* である。

入力方法は、コマンドライン上からの入力または、予め作成して置いたファイルからの読込みによるデータの獲得が可能である。

入力書式は CHEMICSに準じたものとなっている。

利用方法は、まず、入力スペクトルから各SCの存在の有無と、もし存在する可能性があるなら最大で幾つまで存在が可能であるかという情報を得て、この情報を利用者より与えられた各フラグメントのつなぎ合わせの際の制約として、矛盾するフラグメントのつなぎ合わせを抑制するものである。発生した構造に対するシグナルの割付け検査も行う。CHEMICSでいうところのNM行列

(1-2.の脚注)を簡略化したNMRシグナル一部分構造対応表を「入力データ解析」時にファイル上に作成 (Figure 3-9のF₁, Table 3-9) し、「構造組立て」時にシグナルの割付け検査 (Figure 3-9の(C1))を行う。また、最終候補構造に対しては(C1)から(C5)の検査を行う。この表はファイル上に書き出されるためメモリ内に記憶して置くのに比べて実行速度が劣るが、その反面、メモリを多量消費しないで済ませることができた。

検査方法について以下にまとめた。

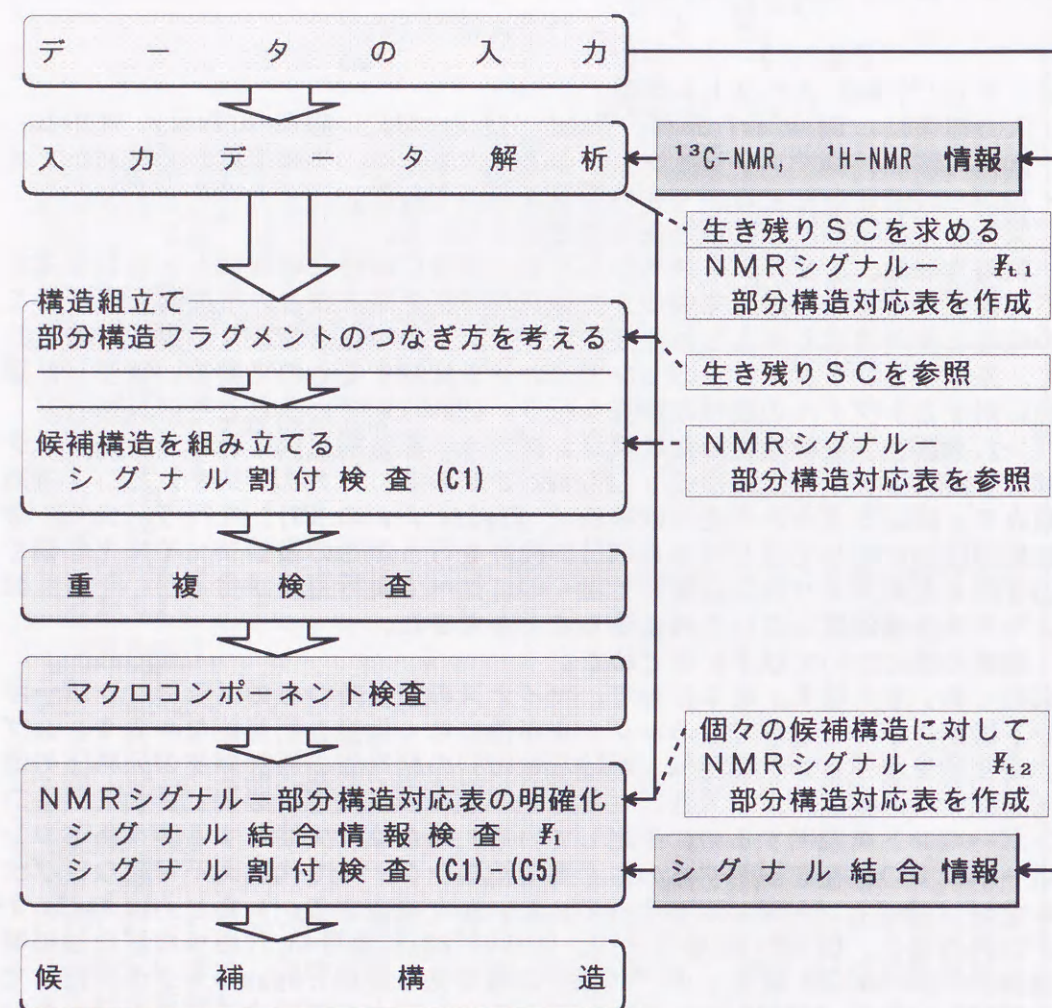
(C1): F₁ または F₂ を↓にみて、マイナスの値を持つもの (そのコンポーネントに割付けることができるシグナルが他になく代換え不可能なものや、シグナルとコンポーネントの関係が明確なもの) の絶対値の合計がその列の上の値 (シグナルの強度) より大きい (そのシグナルの強度では必要とされているコンポーネントを説明するのに不足している) 場合は、失格とする。 (あるコンポーネントの存在を説明するのに必要で他のシグナルで代換え不可能なシグナルをコンポーネント間で取り合っていないかを検査する。) たとえば Table 3-9の例の場合、CH₃CO- (SC番号16) と-CO-CH₂CH₃ (SC番号43, 7)をつなげた候補構造CH₃CO-CO-CH₂CH₃はF₁の¹³C-NMRの表を見ると207.6ppmのシグナルだけではCH₃CO-(16)と-CH₂CH₃(43)のコンポーネント両方を説明するのに十分でないことから、このような構造は組み立てられない。

(C2): F₂ を→にみて、全ての値が0 (そのコンポーネントに割付けることができるシグナルが1つも無い) でありながら、その行の右の値が0でない (そのコンポーネントは存在しなければならない) 場合は、失格とする。

(C3): F₂ を→にみて、全ての値の絶対値の合計がその行の右の値 (そのコンポーネントを説明するのに必要な核種数) より小さい場合は、失格とする。

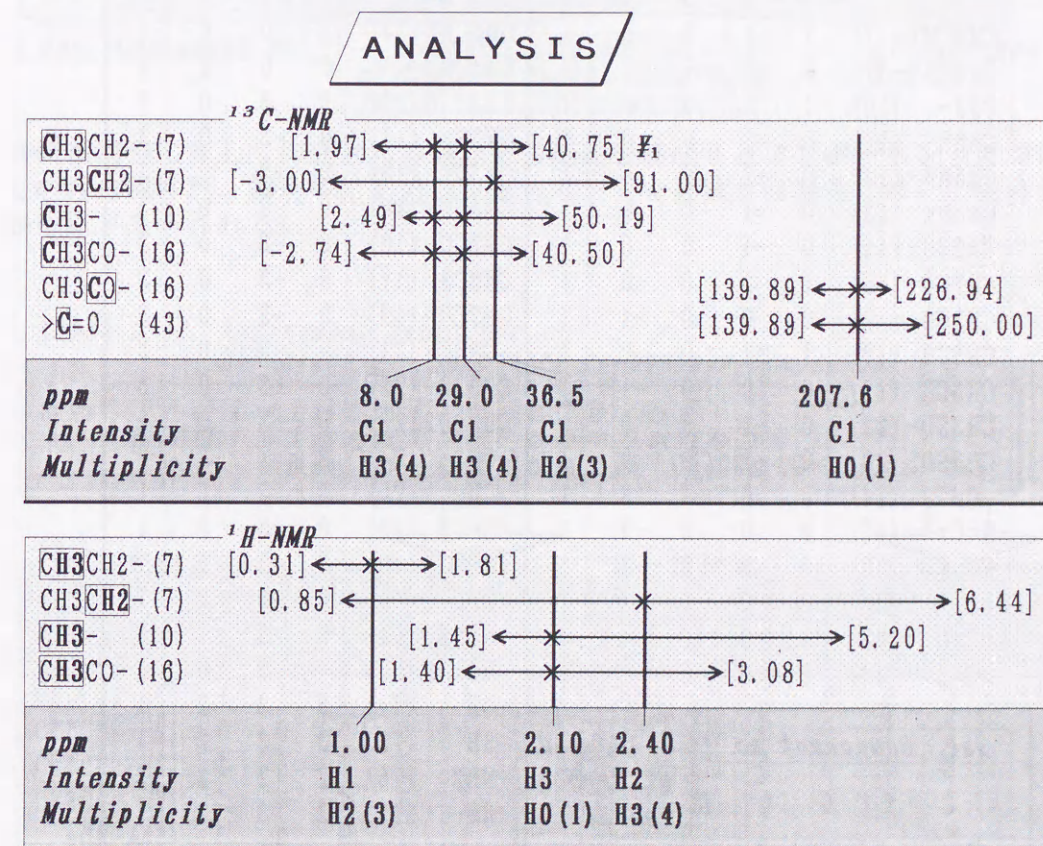
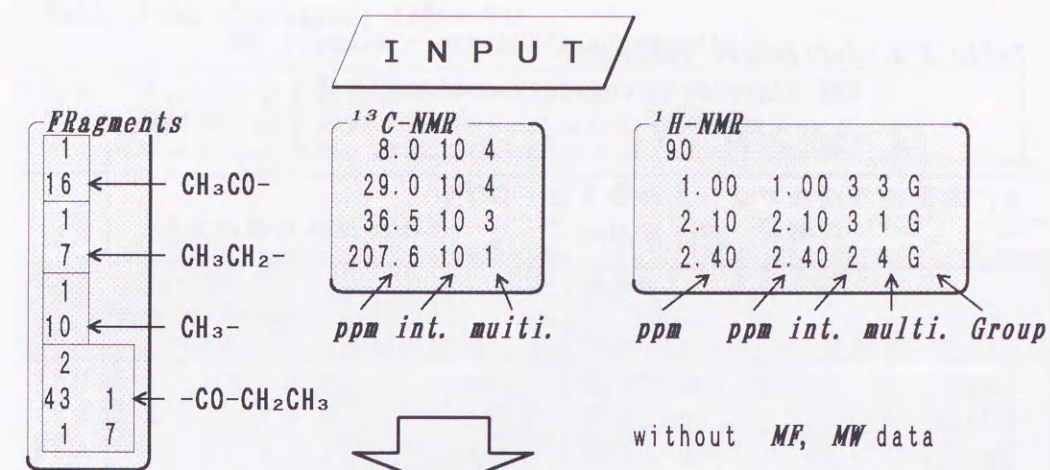
(C4): F₂ を↓にみて、全ての値が0 (そのシグナルに割付けることができるコンポーネントが1つも無い) であり、かつ、その候補構造が完全構造である場合は、失格とする。

(C5): F₂ を↓にみて、全ての値の絶対値の合計がその列の上の値 (シグナルの強度) より小さい (そのシグナルの強度では必要とされているコンポーネントを説明するのに余りある)、かつ、その候補構造が完全構造である場合は、失格とする



\mathbb{F}_{t1} : Table 3-9 に記載
 \mathbb{F}_{t2} : Table 3-10, 3-11 に記載
 \mathbb{F}_1 : Figure 3-12, 3-13, 3-14 に詳細を記載

Figure 3-9. Assignment check of NMR signals to substructures (secondary components)



各コンポーネントのNMR化学シフト出現範囲（この図の \mathbb{F}_1 ）データは付録-1. に示してある。このデータはCHEMICS で用いられているもので、今回は本プログラムでもこのデータを利用し、NMRシグナル-部分構造対応表 \mathbb{F}_{t1} (Table 3-9) を獲得している。

Figure 3-10. Acquisition of assignment table for NMR signals - secondary components \mathbb{F}_{t1}

Table 3-9. Assignment table for
NMR signals - secondary components $\mathbb{F}_{t,1}$

a standard table of
NMR signal - component $\mathbb{F}_{t,1}$

^{13}C -NMR					^1H -NMR				
ppm	8, 29, 36, 207,				ppm	1. 0, 2. 1, 2. 4,			
Int.	1 1 1 1				Int.	3 3 2			
Multi.	q q t s				Multi.	t s q			
Sig. no.	1 2 3 4				Sig. no.	1 2 3			
CH ₃ CH ₂ - (7)	1 1 0 0	1			CH ₃ CH ₂ - (7)	-3 0 0	3		
CH ₃ CH ₂ - (7)	0 0 -1 0	1			CH ₃ CH ₂ - (7)	0 0 -2	2		
CH ₃ - (10)	1 1 0 0	1			CH ₃ - (10)	0 -3 0	3		
CH ₃ S- (11)	0 -1 0 0	1			CH ₃ S- (11)	0 -3 0	3		
CH ₃ NH- (12)	0 -1 0 0	1			CH ₃ N< (13)	0 -3 0	3		
CH ₃ N< (13)	0 -1 0 0	1			CH ₃ NO- (14)	0 -3 0	3		
CH ₃ NO- (14)	0 -1 0 0	1			CH ₃ CO- (16)	0 -3 0	3		
CH ₃ CO- (16)	1 1 0 0	1			CH ₃ CS- (17)	0 -3 0	3		
CH ₃ CO- (16)	0 0 0 -1	1			CH ₃ CO- (19)	0 -3 0	3		
CH ₃ CS- (17)	1 1 0 0	1			-CH ₃ C= (21)	0 -3 0	3		
CH ₃ CS- (17)	0 0 0 -1	1			CH ₃ SO- (22)	0 -3 0	3		
CH ₃ SO- (22)	0 -1 0 0	1			CH ₃ SO ₂ (23)	0 -3 0	3		
CH ₃ SO ₂ (23)	0 -1 0 0	1			-CH ₂ - (24)	2 2 2	2		
-CH ₂ - (24)	0 0 -1 0	1			>CH- (25)	3 3 2	1		
S=C= (33)	0 0 0 -1	1			-C≡CH (28)	0 -3 0	1		
NN=C= (35)	0 0 0 -1	1			-CHS (40)	3 3 2	1		
=C= (36)	0 0 0 -1	1			-TPL- (49)	0 -3 0	1		
>C=O (43)	0 0 0 -1	1			-N=NH (64)	0 -3 0	1		
>C=S (44)	0 0 0 -1	1			-NO=NH (65)	0 -3 0	1		
					-OH (74)	3 3 2	1		
					-SH (75)	3 3 2	1		
					-NH ₂ (76)	2 2 2	2		
					-NH- (79)	3 3 2	1		

Sec. Component no.

Demand
of Carbon
for SC

^{13}C -NMR				
ppm	8, 29, 36, 207,			
Int.	1 1 1 1			
Multi.	q q t s			
Sig. no.	1 2 3 4			
CH ₃ CH ₂ - (7)	1 1 0 0	1		
CH ₃ CH ₂ - (7)	0 0 -1 0	1		

Demand
of Hydrogen
for SC

CH₃の部分のCは8ppmあるいは29ppmのシグナルに割り付けることが可能であることを表し、CH₂の部分のCは36ppmのシグナルにしか割り付けられない（-（マイナス）で表現）ことを表している。

Table 3-10. Assignment table for
NMR signals - secondary components $\mathbb{F}_{t,2}$

an individual table of
NMR signal - component
for the candidate " $\text{CH}_3\text{CO}-\text{CH}_2\text{CH}_3$ " $\mathbb{F}_{t,2}$

^{13}C -NMR					^1H -NMR				
ppm	8, 29, 36, 207,				ppm	1. 0, 2. 1, 2. 4,			
Int.	1 1 1 1				Int.	3 3 2			
Multi.	q q t s				Multi.	t s q			
Sig. no.	1 2 3 4				Sig. no.	1 2 3			
CH ₃ CH ₂ - (7)	1 1 0 0	1			CH ₃ CH ₂ - (7)	-3 0 0	3	1	
CH ₃ CH ₂ - (7)	0 0 -1 0	1			CH ₃ CH ₂ - (7)	0 0 -2	2	1	
CH ₃ CO- (16)	1 1 0 0	1			CH ₃ CO- (16)	0 -3 0	3	2	
CH ₃ CO- (16)	0 0 0 -1	1							

Sec. Component no.

Demand
of Carbon
for SC

Node no.
on the Candidate
Structure

Demand
of Hydrogen
for SC

各候補構造に対して作成される表はその構造を構成するコンポーネントについてのみ作成され、構造中にそのコンポーネントを複数含む場合にはその数分が表中にリストされる。

Table 3-11. Assignment table for
NMR signals - secondary components $\mathbb{F}_{t,2}$

an individual table of
NMR signal - component
for the candidate " $\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_2\text{CH}_3$ " $\mathbb{F}_{t,2}$

^{13}C -NMR					^1H -NMR				
ppm	8, 29, 36, 207,				ppm	1. 0, 2. 1, 2. 4,			
Int.	1 1 1 1				Int.	3 3 2			
Multi.	q q t s				Multi.	t s q			
Sig. no.	1 2 3 4				Sig. no.	1 2 3			
CH ₃ CH ₂ - (7)	1 1 0 0	1			CH ₃ CH ₂ - (7)	-3 0 0	3	1	
CH ₃ CH ₂ - (7)	0 0 -1 0	1			CH ₃ CH ₂ - (7)	0 0 -2	2	1	
CH ₃ CH ₂ - (7)	1 1 0 0	1			CH ₃ CH ₂ - (7)	-3 0 0	3	2	
CH ₃ CH ₂ - (7)	0 0 -1 0	1			CH ₃ CH ₂ - (7)	0 0 -2	2	2	
-CO- (43)	0 0 0 -1	1							

Sec. Component no.

Demand
of Carbon
for SC

Node no.
on the Candidate
Structure

Demand
of Hydrogen
for SC

^{13}C -NMR の場合36ppmのシグナル強度がCH₃CH₂-のCH₂を説明するのに不足している。

^1H -NMR の場合1.0ppmや2.4ppmのシグナル強度が不足している。また、この構造は完全な構造であるのに関わらず2.1ppmのシグナルに相当する部分構造が存在していないという矛盾があることが読みとれる。

結局、CH₃-CO-CH₃、CH₃-CH₂-CH₃、CH₃CH₂-CO-COCH₃、CH₃CH₂-CO-CH₂CH₃の構造は構造組立て時のシグナルの割り付け検査、あるいはその後の検査で棄却され、CH₃CH₂-COCH₃という構造のみが候補として残る。

2-5) ¹H-NMRスペクトル情報

入力情報は、測定周波数(MHz), Chemical Shift (ppm), Intensity, Multiplicity, Group化の有無である。

入力方法は、コマンドライン上からの入力または、予め作成して置いたファイルからの読み込みによるデータの獲得が可能である。

入力書式は¹³C-NMR同様CHEMICSに準じたものとなっているが、CHEMICSではそのファイルに測定周波数まで情報として記述することはできなかった。そこで、¹H-NMRデータファイルの1行目に測定周波数を記述してもらうこととした。この情報の入力を省略したい場合には、この行に'0'あるいは'?'を記述してもらうこととした。メインのプロンプト状態から以下のような1回の操作を行うだけで、¹H-NMR情報を獲得できるようになった。

例) prompt>HMR FILE [file name of ¹H-NMR data]

拡張子を省略した場合には[*.HMR]となる。

利用方法と発生した構造に対するシグナルの割付検査は¹³C-NMRと同様である。

また、CHEMICSでは入力情報の信頼性から¹H-NMRの多重度情報の活用を行っていない。しかし、本プログラムでは¹H-NMRの多重度情報の活用も試みた。多重度情報の活用が図られた場合には隣接した原子に関する情報が得られることになる。その場合に、コンポーネント内のみ、その隣接原子が存在する場合(たとえばCH₃-CH₂-というコンポーネントのCH₃からみた隣接原子は同じコンポーネント内のCH₂だけである(1))と隣接原子がコンポーネント内外にあり、容易に隣接原子がどれか判断できない場合(たとえばCH₃-CH₂-というコンポーネントのCH₂からみた隣接原子である(2))とに分類でき、(2)の場合には隣接原子が複数あり、各隣接原子の環境が等価でないとカップリングも複雑になってしまう。そこで、今回は(1)の場合についてのみ情報を利用した。

2-6) 2次元NMRスペクトルなどによるシグナル結合情報

入力情報は、シグナルの位置関係, NMRの核種(CあるいはH), ¹³C-NMRや¹H-NMRでのシグナル番号である。これらは、Figure 3-11でのA, B, Cにあたる。

入力方法は、¹³C-NMRや¹H-NMRと同様にキーボードとファイルからの入力が可能である。CHEMICSでは¹³C-¹³C cosy, ¹³C-¹H cosy, ¹H-¹H cosy, Long range ¹³C-¹H cosy (HMBC)それぞれ別々な入力形態をとっているが、これらはシグナルの結合情報を入力するという点においては同じであり入力簡便化を考えて、今回はこれらの情報をまとめて入力できる方法を検討し導入した(Figure 3-11, 付録-4のTable A-4-11)。今回、HMBC法から得られる情報も取り扱えるよう考慮したので、たとえば、あるシグナルに起因すると考えられる原子とあるシグナルに起因すると考えられる原子が分子構造上2あるいは3パスの関係にあるといった曖昧な情報も取り扱える。また、入力はシグナルの結合関係であるので、2次元NMR以外による情報でも構わない。

入力書式) A1B1C1 A2B2C2 (A3B3C3 ... AnBnCn) <input type="checkbox"/>	
A: Position(s) (A1=[1] (Alpha))	Alpha <input type="checkbox"/> [1], Beta <input type="checkbox"/> [2], Gamma <input type="checkbox"/> [3], ..., Between Beta and Gamma <input type="checkbox"/> [2-3]
B: Type	Carbon-13 <input type="checkbox"/> [C], Proton <input type="checkbox"/> [H]
C: Signal no. on 1D-NMR (on ¹³ C-NMR or ¹ H-NMR)	Signal no. 1 <input type="checkbox"/> [1], Signal no. 2 <input type="checkbox"/> [2], ...
$\begin{array}{c} \text{Ha} \quad \text{Hb} \quad \text{Hg} \\ \quad \quad \\ -\text{Ca}-\text{Cb}-\text{Cg}- \end{array}$ Ha: Alpha Proton, Hb: Beta Proton, Hg: Gamma Proton Ca: Alpha Carbon-13, Cb: Beta Carbon, Cg: Gamma Carbon	
例1) 入力書式 prompt>1H1 1C2 <input type="checkbox"/>	Hs1-Cs2
意味	¹ H-NMRのシグナル1 (Hs1)に起因する水素(Ha)とHa-Ca ¹³ C-NMRのシグナル2 (Cs2)に起因する炭素(Ca)は隣合っている(1パス)
例2) 入力書式 prompt>1C1 2C2 <input type="checkbox"/>	Cs1-Cs2
意味	¹³ C-NMRのシグナル1 (Cs1)に起因する炭素(Ca)とCa-Cb ¹³ C-NMRのシグナル2 (Cs2)に起因する炭素(Cb)は隣合っている(1パス)
例3) 入力書式 prompt>1H2 2-3C1 2-3C2 <input type="checkbox"/>	Hs2----Cs1
意味	¹ H-NMRのシグナル2 (Hs2)に起因する水素とHa-Ca-Cb-Cg ¹³ C-NMRのシグナル1 (Cs1)に起因する炭素は2あるいは3パス そして、 ¹ H-NMRのシグナル2 (Hs2)に起因する水素とHa-Ca-Cb-Cg ¹³ C-NMRのシグナル2 (Cs2)に起因する炭素は2あるいは3パス
例4) 入力書式 prompt> <input type="checkbox"/>	
意味	何も入力しないと入力の終了

Figure 3-11. Format for input of signal connectivity information

利用方法は、①候補構造についての検定と②NMRシグナルー部分構造対応表 \mathbb{F}_{k2} の明確化である(Figure 3-12)。候補構造の検定方法は、個々の候補構造に対してNMRシグナルー部分構造対応表(Figure 3-9の \mathbb{F}_{k2} , Table 3-10, 3-11)を作成し、これが入力されたシグナルの結合情報を満たしているのかを検定する(Figure 3-9, 3-13, 3-14)。また、このシグナル結合情報を用いてNMRシグナルー部分構造対応表を明確化し、さらに候補構造を絞り込むことのできる例を3-3の実行例4)を用いてFigure 3-15, 3-16, 3-17に示す。

Figure 3-15の上方には3-3の実行例4)の候補構造 ☐ を示してある。下方のNMRシグナルー部分構造対応表も候補構造 ☐ に対して作成されたもので、対応表中 ☐ で囲んである箇所は、Figure 3-14の対応表を見直すことにより対応関係が明確化された箇所である。たとえば、シグナル番号15は、部分構造>C=O(43)(ノード番号12)との対応関係が1対1であり、またこの候補構造は(完)全構造である。よって、この部分構造を別なシグナル番号13や14に割り付けてしまう訳には行かないので、☐ で囲んだ値に対応表を明確化できる。Figure 3-16, 3-17では、シグナル結合情報を用いて、この対応表をさらに明確化して行く。たとえば、シグナル番号14に対応する部分構造の候補としてノード番号3と11がある(Figure 3-16)。シグナル結合情報(付録-4のTable A-4-11も参照)によりシグナル番号12と14に対応する部分構造は隣り合っていないから、この条件を満たしたノード番号として

は11でなければならないことが解る。その結果この場合にはシグナル番号14はノード番号11にのみ割り付けられ、シグナル番号14と部分構造 >C=(38) (ノード番号11) の対応関係が明確化された。このような操作を繰り返すことにより、この場合シグナルと部分構造の間の対応関係を全て1対1に明確化することができた。

Figure 3-16 での明確化の結果を用いて、シグナルに割り付けることが可能であると考えられる部分構造 (ノード番号) 間の結合関係をこの構造 [2] は全て満たしている (Figure 3-17) ので、この構造は最終候補として残った。一方、その他の候補構造について作成された対応表は、シグナル結合情報を満足しないために不合格となった。この例の場合、シグナル結合情報を単に用いた場合には6個の候補構造が残ったが、シグナル結合情報を用いてシグナルと部分構造の間の明確化を行うことによって、1つの候補構造に絞り込むことができた。



Figure 3-12. Application of signal connectivity information

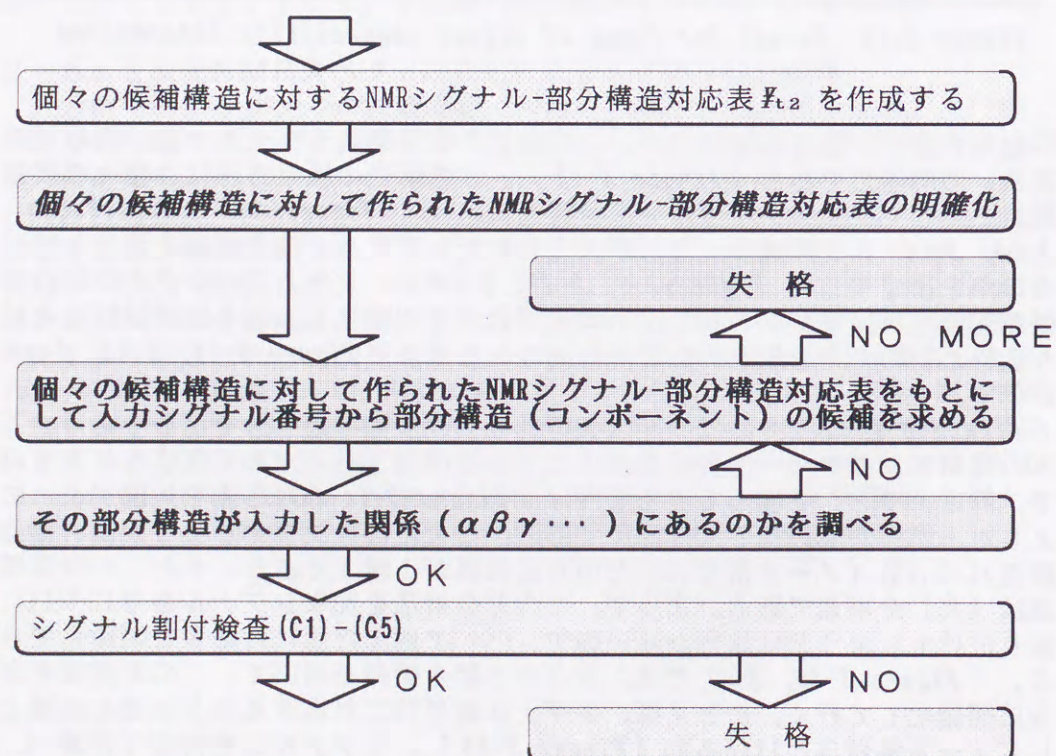


Figure 3-13. Signal connectivity check

NMRシグナル-部分構造対応表 (3-3. の実行例4) の場合)

¹³ C-NMR		ppm														
		14, 16, 20, 31, 32, 39, 40, 40, 42, 44, 109, 124, 149, 168, 196,														
Int.		1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1														
Multi.		q q q t t s d d t t t d s s s														
Sig. no.		1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15														
CH ₃ CH< (8)		1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH ₃ CH< (8)		0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0
-CH ₃ C< (9)		1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
-CH ₃ C< (9)		0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
-CH ₃ C= (21)		1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
-CH ₃ C= (21)		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0
-CH ₂ - (24)		0	0	0	1	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
-CH ₂ - (24)		0	0	0	1	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
-CH ₂ - (24)		0	0	0	1	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
-CH ₂ - (24)		0	0	0	1	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
-CH< (25)		0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	1	0	0	0
CH ₂ = (31)		0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0
-CH= (37)		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0
>C= (38)		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0
>C=O (43)		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1

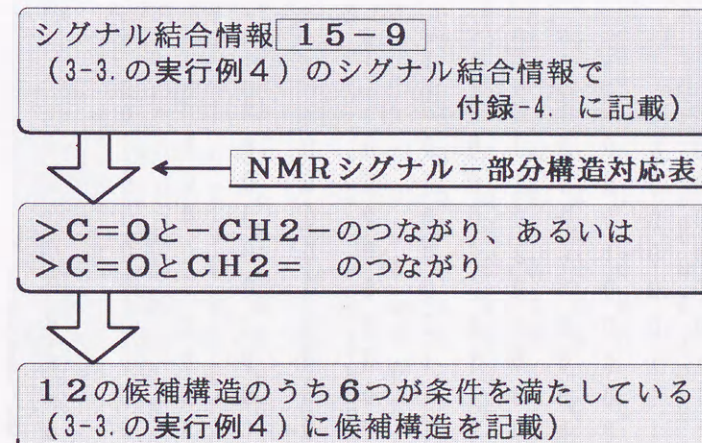
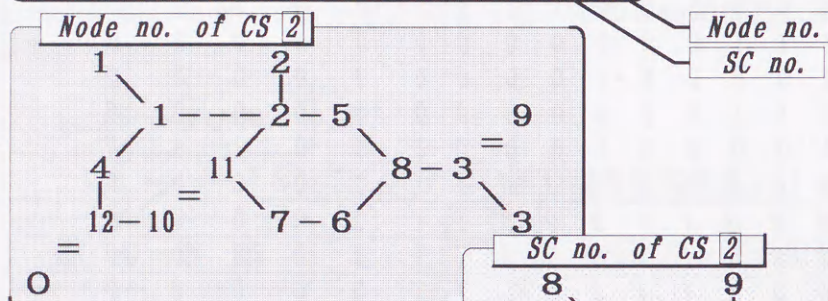


Figure 3-14. Signal connectivity check

(8)	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	(9)	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	2
0	0	(21)	0	0	0	0	1	2	0	0	0	3
1	0	0	(24)	0	0	0	0	0	0	0	1	4
0	1	0	0	(24)	0	0	1	0	0	0	0	5
0	0	0	0	0	(24)	1	1	0	0	0	0	6
0	0	0	0	0	1	(24)	0	0	0	1	0	7
0	0	1	0	1	1	0	(25)	0	0	0	0	8
0	0	2	0	0	0	0	0	(31)	0	0	0	9
0	0	0	0	0	0	0	0	0	(37)	2	1	10
0	1	0	0	0	0	1	0	0	2	(38)	0	11
0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	(43)	1	12



3-3. の実行例 4) の候補構造 **2** を示してある。シグナル一部構造対応表も候補構造 **2** に対して作成されたもので *Figure 3-14* の対応表から作成されたものである。

13C - NMR	ppm	Int.	Mult.	Sig. no.	14,	16,	20,	31,	32,	39,	40,	40,	42,	44,	109,	124,	149,	168,	196	
		f	g	t	s	d	d	t	q	s	s	s	s	s	s	s	s	s	s	
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15				
-CH ₃ C< (8)		1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
-CH ₃ C< (8)		0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
-CH ₃ C< (9)		1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2
-CH ₃ C< (9)		0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2
-CH ₃ C= (21)		1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3
-CH ₃ C= (21)		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	3
-CH ₂ - (24)		0	0	0	1	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	4
-CH ₂ - (24)		0	0	0	1	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	5
-CH ₂ - (24)		0	0	0	1	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	6
-CH ₂ - (24)		0	0	0	1	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	7
-CH< (25)		0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	8
-CH ₂ = (31)		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	9
-CH= (37)		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	10
>C= (38)		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	11
>C=O (43)		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	12

Figure 3-15. Unambiguous assignment of a NMR signal to a secondary component

[illegible]

^{13}C -NMR																	
ppm	14	16	20	31	32	39	40	40	42	44	109	124	149	168	196		
Int.	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		
Mult.	q	q	q	t	t	s	d	d	t	t	t	d	s	s	s		
Sig. no.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15		
$\text{CH}_3\text{CH}<$ (8)	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		1
$\text{CH}_3\text{CH}<$ (8)	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0		1
$-\text{CH}_3\text{C}<$ (9)	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		2
$-\text{CH}_3\text{C}<$ (9)	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0		2
$-\text{CH}_3\text{C}=\text{(21)}$	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		3
$-\text{CH}_3\text{C}=\text{(21)}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0		3
$-\text{CH}_2-$ (24)	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0		4
$-\text{CH}_2-$ (24)	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0		5
$-\text{CH}_2-$ (24)	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		6
$-\text{CH}_2-$ (24)	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		7
$-\text{CH}<$ (25)	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0		8
$\text{CH}_2=\text{(31)}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0		9
$-\text{CH}=\text{(37)}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0		10
$>\text{C}=\text{(38)}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0		11
$>\text{C}=\text{(43)}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1		12

Node no. on SC 2

Figure 3-16. Unambiguous assignment of a NMR signal to a secondary component by signal connectivity information

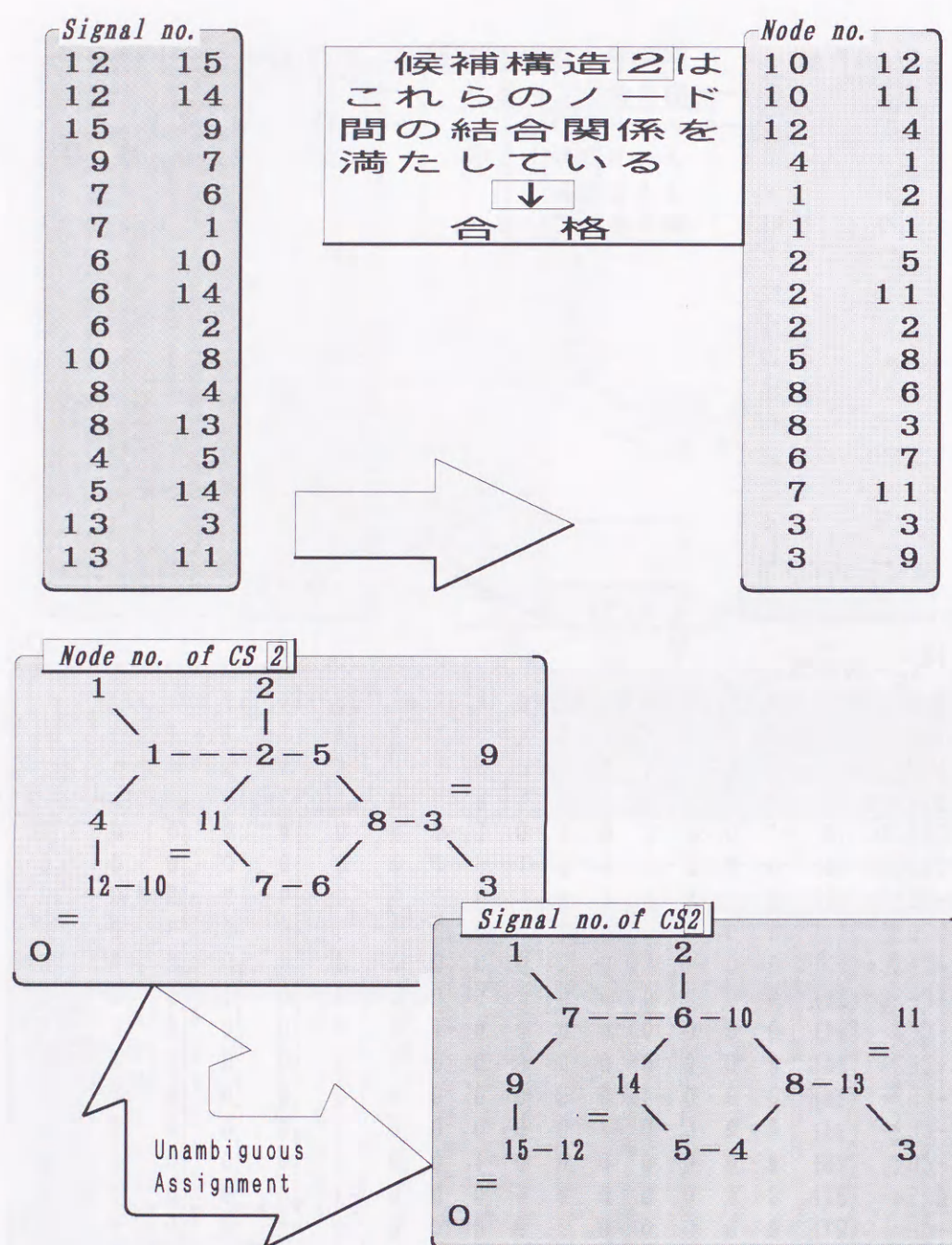


Figure 3-17. Unambiguous assignment of a NMR signal to a secondary component by signal connectivity information

3-2-3. 重複検査

本プログラムで生じる構造重複の問題は、入力フラグメント間、出力候補構造間と、MCと候補構造間に存在する。また、重複構造の回避は基本的にセットリダクション法にもとづいた方法により解決している。

1) セットリダクションプログラム¹⁵⁾

CHEMICS では発生する候補構造間では重複が生じないが、MC 処理や Counterpart 推定を行う場合には重複検査の必要がある。その解決にセットリダクション法を改良したものを用いている^{16, 17)}。

本来のセットリダクションプログラムとCHEMICS でのセットリダクションプログラムの違いは、CHEMICS では $\text{C}=\text{C}$ と $\text{C}=\text{C}^{\cdot}$ や $\text{C}=\text{C}^{\cdot}$ と $\text{C}=\text{C}^{\cdot}$ が区別できるようにしたこと、 $\text{HO}-\text{C}-\text{OH}$ が $\text{HO}-\text{CH}_2-\text{N}(-\text{CH}_3)-\text{CH}_2-\text{OH}$ に含まれないように問題を修正したこと、NODE VALUEの集合は非水素原子に変えてSCを用いて発生させること、BRANCH VALUEの集合は発生させないこと (CHEMICS では結合手が1種類であるため)、環員数による集合を発生させないこと、結合による集合を発生させないことである。

本プログラムで用いているセットリダクションプログラムはCHEMICS で用いられているアルゴリズムを参考に新たに作成したものである。本プログラムではBRANCH VALUEの集合を発生させ、結合による集合も発生する点がCHEMICS と異なる。

2) 入力フラグメント間での重なり

任意の大きさの部分構造を構造組立ての単位として用い、その部分構造間で重なる部分がある場合には、その部分構造によって組み立てられた候補構造間で重複するものが現れる可能性がある。構造組立ての前に共通部分構造の認識処理を行い、そのような重なる部分を発見するというのも重複構造発生を解決する一つの手段である。これはフラグメントどうしの重なりを許した組立てを可能にするということである。しかし、共通部分構造の認識の処理には時間や手軽さの面で本目的には実用上問題がある。また、フラグメントの組立ての場でさらに、この重複部分を考慮した処理も実現させるためには、実用的に工夫が求められるところである。現在の対策を以下に述べる。

2-1) 候補構造を組み立てるのに余りある部分構造の受け付け

求める候補構造全体を構成するのに余りあるフラグメントを与える (与えるフラグメント間で部分的な重なりがあっても構わない) ことにより新しい候補構造の生成を試みる手法がある。この場合には、「与えられた全てのフラグメントを用いることなしに、自由結合手を持たない完全構造の発生を認めない」という制約条件は無効と設定して解析を行うことにより、直ちに実戦可能な方法である。たとえば、3-3. の実行例 1) (Figure 3-22) は、この例といえる。

2-2) フラグメントの等価性検査

同じフラグメントが複数与えられているかを調べる検査である。この検査の結果は構造組立て時に利用され重複した候補構造が生成するのを回避する対策に利用される。その詳細については、この後 3-2) で述べる。

2-3) 生き残りコンポーネント情報からのフラグメント間の重なり部分の予測

全入力部分構造フラグメントを構成しているSCが入力データ解析の結果として得られた生き残りSCの数を超えていた場合には、フラグメント間で重なっている部分があることが予想される。そこで、そのような場合にはどの入力フラグメントについてどのような部分がSC単位で他のものと重なる可能性が

あるのかを提示することができる (Figure 3-18)。現在はここまでだが、今後はこの重なり部分を自動的に考慮した処理をする必要がある。

また、このことは逆に今後、生き残りSC情報を用いて不足している部分構造フラグメントを追加できるようにすることへの糸口でもある。

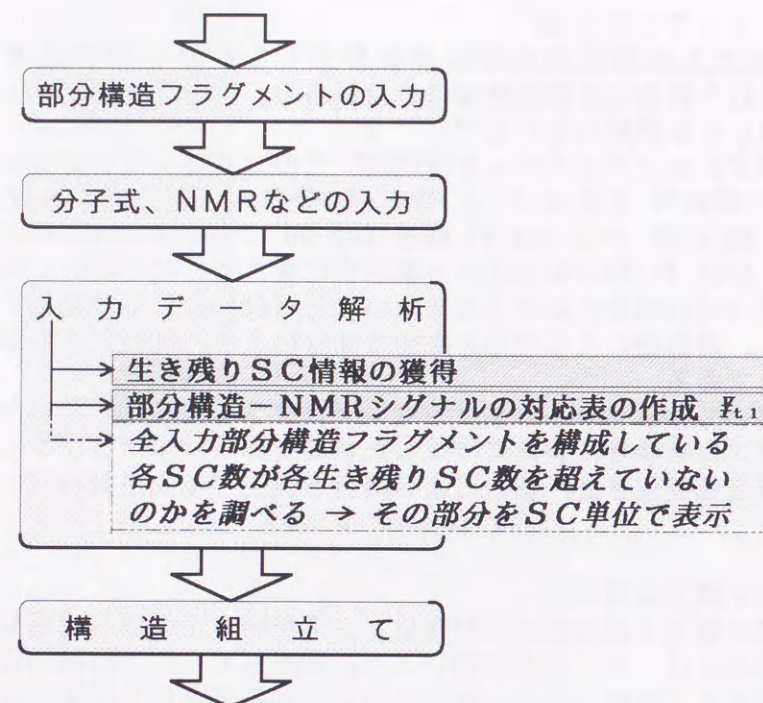


Figure 3-18. Overlapping check for inputted fragments

3) 候補構造間での重複検査

この候補構造間での重複構造の除去は基本的にセットリダクション法を用いることにより解決されているが、この方法によらず、もっと高速に重複構造を発見し除去したり「3-1)」、なるべく構造組立てにより重複構造が発生しないように工夫した「3-2)」。

3-1) セットリダクションを行う前の予備検査

新たに組み立てられた候補構造の重複検査の手順を Figure 3-4 に示した。結合行列のサイズを比較したり完全ではないが簡単な規範化を施すことによりこの時点で多くの重複構造を発見し除去できる。この予備検査はセットリダクション法に比べて処理が速い。また、この時点で候補構造の数を極力減らしておくことにより、この後セットリダクション法により比較する組み合わせ回数を大きく減らすことができる。

たとえば、Figure 3-19 の例に示す比較結果2の場合、この予備検査の段階で、発生した 384個の候補構造中2番目から 384番目の構造は、全て1番目の構造と同じであることを識別し取り除くことができた。

3-2) フラグメントの等価性検査

基本的な制約である3-2-2. 1) の④. 自由結合手の等価性検査と共にフラグメント間での等価性検査も有効である。ここで述べる方法は、フラグメントの入力直後にセットリダクションを行いフラグメント間で同じものがあるかどうかを調べる。同じフラグメントには同じ番号を、違うものには違う番号を与え

る。これをフラグメント番号…(*1) とし、各フラグメントに固有に与えられる番号…(*2) と区別する。フラグメントのつなぎ合わせを考える際に、(*1) が同じものでありながらつなごうとしているフラグメントの(*2)より小さい(*2)のものがまだ自由である場合にはそれ以降のフラグメントをつなぎ合わせて行く枝を切り落とす。この方法により多くの重複構造の発生を防止できる。以下、Figure 3-19, 3-20, 3-21 に例を示す。

問題 1	
①: (B1)*-CH2-(B2), ②: (B3)*-CH2-(B4), ③: (B5)*-CH2-(B6), ④: (B7)*-CH2-(B8), ⑤: (B9)*-CH2-(B10)	の5つのフラグメントを与える
-, -	自由結合手
(B1), (B2), (B3), ...	自由結合手を区別するための番号
①, ②, ③, ...	フラグメントを区別するための番号
(B1)→(B2)	(B1)から(B2)への結合の生成を意味する
比較結果 1	
1)	+ 2-2) 分子式 (C5 H10) あるいは + ⑥ 全ての入力フラグメントを用いていない完全構造の生成検査 + ④ 自由結合手の等価性検査 + ⑦ 完全構造生成の検査 (フラグメントのつなぎ合わせを考えたときの候補数) ... 1 (重複検査後の最終候補構造) ... 1 → ⑤←③←①→②→④ という環状の構造が生成
2)	+ 2-2) 分子式 (C5 H10) あるいは + ⑥ 全ての入力フラグメントを用いていない完全構造の生成検査 - ④ 自由結合手の等価性検査 + ⑦ 完全構造生成の検査 (フラグメントのつなぎ合わせを考えたときの候補数) ... 384 (重複検査後の最終候補構造) ... 1 → ⑤←③←①→②→④ という環状の構造が生成
3)	+ 2-2) 分子式 (C5 H10) + ④ 自由結合手の等価性検査 - ⑦ 完全構造生成の検査 (フラグメントのつなぎ合わせを考えたときの候補数) ... 5 (重複検査後の最終候補構造) ... 2 - ⑤←③←①→②→④ という線形の構造と → ⑤←③←①→②→④ という環状の構造が生成 + ⑥ 全ての入力フラグメントを用いていない完全構造の生成検査 + ④ 自由結合手の等価性検査 - ⑦ 完全構造生成の検査 (フラグメントのつなぎ合わせを考えたときの候補数) ... 13 (重複検査後の最終候補構造) ... 7
注) +はその制約条件が有効。-は無効。 その他の基本的制約は+で行った。	

①: 3-2-2. の 1), 2)

Figure 3-19. Effect by equivalency check of free bonds and of fragments not to generate the same structures

考 察 1				
ステップ1☞ $-(B2) \textcircled{1}(B1) \rightarrow (B3) \textcircled{2}(B4)-$				
※④. 自由結合手の等価性検査が有効であると (B2) $\textcircled{1}(B1) \rightarrow (B4) \textcircled{2}(B3)$ は行われない。これは、結合 (B3) (B4) が等価とみなされ (B4) に対して (B3) が優先的に結合を作らなければならないからである。				
※ (B1) $\textcircled{1}(B2) \rightarrow (B3) \textcircled{2}(B4)$ の場合は (B1) を飛ばして (B2) がつながっているのでこれから先 (B1) がつながることはない。また、自由結合手の等価性検査が有効な場合には、このようなことは認められない。				
※ (B2) $\textcircled{1}(B1) \rightarrow (B5) \textcircled{3}(B6)$ など①が②以外とつながらない理由は、フラグメントの等価性検査の制約条件による。もし③が②と異なる構造をしたものであるのならこの構造組立ては可能である。				
ステップ2☞ $-(B6) \textcircled{3}(B5) \leftarrow (B2) \textcircled{1}(B1) \rightarrow (B3) \textcircled{2}(B4)-$				
※ (B2) $\textcircled{1}(B1) \rightarrow (B3) \textcircled{2}(B4) \rightarrow (B5) \textcircled{3}(B6)$ の場合は、これから先、処理を継続しても (B2) がつながることはない。最終的に (B2) が自由な直鎖の構造も候補として発生するが⑦. 完全構造生成の検査により除くことが可能である。				
ステップ3☞ $-(B6) \textcircled{3}(B5) \leftarrow (B2) \textcircled{1}(B1) \rightarrow (B3) \textcircled{2}(B4) \rightarrow (B7) \textcircled{4}(B8)-$				
ステップ4☞ $-(B10) \textcircled{5}(B9) \leftarrow (B6) \textcircled{3}(B5) \leftarrow (B2) \textcircled{1}(B1) \rightarrow (B3) \textcircled{2}(B4) \rightarrow (B7) \textcircled{4}(B8)-$				
ステップ5☞ $\rightarrow (B10) \textcircled{5}(B9) \leftarrow (B6) \textcircled{3}(B5) \leftarrow (B2) \textcircled{1}(B1) \rightarrow (B3) \textcircled{2}(B4) \rightarrow (B7) \textcircled{4}(B8) \rightarrow$				
※候補構造はステップ5の構造しか発生せず、候補構造間で重複検査を行う必要はない。				
		C4H8	C5H10	重複検査
1	$-\textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2}-$			○
2	$-\textcircled{3} \leftarrow \textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2}-$			○
3	$\rightarrow \textcircled{3} \leftarrow \textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \rightarrow$			○
4	$-\textcircled{3} \leftarrow \textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \rightarrow \textcircled{4}-$	○鎖		○
5	$\leftarrow \textcircled{3} \leftarrow \textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \rightarrow \textcircled{4} \leftarrow$	○環		○
6	$-\textcircled{5} \leftarrow \textcircled{3} \leftarrow \textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \rightarrow \textcircled{4}-$		①鎖	①
7	$\rightarrow \textcircled{5} \leftarrow \textcircled{3} \leftarrow \textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \rightarrow \textcircled{4} \rightarrow$		②環	②
8	$-\textcircled{3} \leftarrow \textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \rightarrow \textcircled{4} \rightarrow \textcircled{5}-$		③鎖	×
9	$-\textcircled{4} \leftarrow \textcircled{3} \leftarrow \textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2}-$	○鎖		×
10	$-\textcircled{5} \leftarrow \textcircled{4} \leftarrow \textcircled{3} \leftarrow \textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2}-$		④鎖	×
11	$-\textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \rightarrow \textcircled{3}-$			×
12	$-\textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \rightarrow \textcircled{3} \rightarrow \textcircled{4}-$	○鎖		×
13	$-\textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \rightarrow \textcircled{3} \rightarrow \textcircled{4} \rightarrow \textcircled{5}-$		⑤鎖	×
候補構造数→	13	4	5	2

Figure 3-20. Effect by equivalency check of free bonds and of fragments not to generate the same structures

問 題 2	
①: (B1) * -CH2-* (B2), ②: (B3) * -CH2-* (B4), ③: (B5) * -CH2-* (B6), ④: (B7) * -CH2-* (B8), ⑤: (B9) * -CH2-* (B10), ⑥: (B11) * -CH2-* (B12) の6つのフラグメントを与える	
比較結果 2	
1)	+ 2-2) 分子式 (C6 H12) あるいは + ⑥. 全ての入力フラグメントを用いていない完全構造の生成検査 + ④. 自由結合手の等価性検査 + ⑦. 完全構造生成の検査 (フラグメントのつなぎ合わせを考えたときの候補数) ... ☞ 1 (重複検査後の最終候補構造) ... ☞ 1 $\leftarrow \textcircled{5} \leftarrow \textcircled{3} \leftarrow \textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \rightarrow \textcircled{4} \rightarrow \textcircled{6} \leftarrow$ という環状の構造が生成
2)	+ 2-2) 分子式 (C6 H12) あるいは + ⑥. 全ての入力フラグメントを用いていない完全構造の生成検査 - ④. 自由結合手の等価性検査 + ⑦. 完全構造生成の検査 (フラグメントのつなぎ合わせを考えたときの候補数) ... ☞ 3840 (重複検査後の最終候補構造) ... ☞ 1 $\leftarrow \textcircled{5} \leftarrow \textcircled{3} \leftarrow \textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \rightarrow \textcircled{4} \rightarrow \textcircled{6} \leftarrow$ という環状の構造が生成
3)	+ 2-2) 分子式 (C6 H12) + ④. 自由結合手の等価性検査 - ⑦. 完全構造生成の検査 (フラグメントのつなぎ合わせを考えたときの候補数) ... ☞ 6 (重複検査後の最終候補構造) ... ☞ 2 $-\textcircled{5} \leftarrow \textcircled{3} \leftarrow \textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \rightarrow \textcircled{4} \rightarrow \textcircled{6}-$ という線形の構造と $\leftarrow \textcircled{5} \leftarrow \textcircled{3} \leftarrow \textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \rightarrow \textcircled{4} \rightarrow \textcircled{6} \leftarrow$ という環状の構造が生成 + ⑥. 全ての入力フラグメントを用いていない完全構造の生成検査 + ④. 自由結合手の等価性検査 - ⑦. 完全構造生成の検査 (フラグメントのつなぎ合わせを考えたときの候補数) ... ☞ 16 (重複検査後の最終候補構造) ... ☞ 6

Figure 3-21. Effect by equivalency check of free bonds and of fragments not to generate the same structures

3-2-4. 本プログラムでの試み

本プログラムはCHEMICSとは独立したものとして開発した。これによって比較的自由に新たな試みを行うことができた。すでに述べた 3-1. 序論、3-1-2. CHEMICS との比較においてのこの研究の特色がその中心になる。また、CHEMICS で従来から用いられてきたMCの線形入力の方法以外にも入力方法を用意してみたこと(3-2-2. の2-3) ④) や、¹H-NMRスペクトルでの多重度の利用(3-2-2. の2-5)) も新たな試みといえる。その他CHEMICSで行っていないことを試みた点としては以下のものがある。

①. パーソナルコンピュータ上でのフレキシブルな環境で稼動

本プログラムはパーソナルコンピュータ(PC)上で開発され、稼動するように作成した。近年、PCは高速になり、多くの研究室にあり、誰でも手軽に使用可能である。本プログラムは現在のところPC-9801 シリーズとその互換機上で稼動する。また、ハイレゾリューションモードでもプログラムを変更することなくそのまま使用できる。グラフィックスなど特別な機能が必要としないのでMS-DOSが走る環境ならもちろんのこと移植は容易と考えられる。CHEMICSもPC上で稼動できるバージョンが開発されているが、この場合にはメモリーを増設しなければならなかったり、使用機種も制限される。

②. テキストの彩色

CHEMICSでは現在、X-Window上でのバージョンを開発中であるが、現在のところ表示はモノクロである。本プログラムでは互換性のことも考えMS-DOSのエスケープシーケンスによりテキストに彩色を施してみた。

③. 下層コマンドを含めたコマンド入力

本プログラムもCHEMICSと同様、コマンドライン入力形式の操作方法を採用している。この方法の操作性の改善について、先に述べたようにCHEMICSでは、X-Window上でのバージョンを開発するというのが一つの方策である。こうしたマウスを用いたウインドウ表示形式の方法は今の流行のスタイルかもしれないが、この場合、初心者にとっては親切でもキー操作と併用のものでないと、そのプログラムに馴れた早く操作したいと思う者には不便なものと思われる。また、他機種への移植性に大きな問題がある。

本プログラムでは、従来のコマンドライン入力の方法は踏襲しつつ下層コマンドまで含めたコマンド入力を可能としてみた。また、ヘルプなどによる案内表示テキストも充実させた。もし、初心者でコマンドが解らなければ従来どうり一つ一つコマンドを入力して行けばよい。一方コマンドを覚えてきたら、スペースで区切ってまとめてコマンドを入力することができる。Table 3-12 に比較例を示す。また、コマンド一覧を付録-3. のTable A-3-8 に示す。

Table 3-12. Example of command input with sub-commands and the procedures

CHEMICS	This program (step by step)	This program (with sub-commands)
prompt1>INPUT MF molecular formula ? prompt2>C6 H6	prompt1>MF molecular formula ? prompt2>C6 H6	prompt1>MF C6 H6 molecular formula ? prompt1>HMR Hz ? prompt2>90 from file ? prompt3>Y file name ? prompt4>???
		prompt1>HMR FILE ??? from file ? prompt2>FILE file name ? prompt3>???

注) 本プログラムでは INPUTとすると [INPUT コマンド] の案内が表示される。

④. プログラムでの表示テキストの一部分離

これは生成コードの縮小化対策の1つとして行ったものである。一部テキストを別な'BL.TXT'というファイルに記述して、テキスト別にKeyを設定する。現在はシーケンシャルファイルである。このKeyをもとにテキストを拾い上げてプログラムで表示する方法である。これによって生成コードの大幅な縮小とプログラムの表示テキストを修正する労力の軽減が図られた。すなわちプログラムを書き換えてコンパイルし直す必要がない。このようにテキストを本体プログラムから分離することは市販のソフトウェアでは一般的に行われている。

⑤. 定義ファイル'BL.DEF'を用意

もし、このファイルが見つからなくてもプログラム起動時にデフォルト値が設定される。CHEMICSのようにプログラムを走らせてから[INTERFACE コマンド]により基本設定しないと使用できないということはない。このファイルでの記述内容を以下に示す。

[1] 基本制約 (RESTRICTION コマンド) でも変更可能) の定義
基本制約の内容については常に適用可能な制約(3-2-2. の1)) を参照

[2] トレースレベル (TRACE コマンド) でも変更可能) の定義

[3] サブデータファイル (*.DAT) のディレクトリ指定

[4] テンポラリファイル (*.00?) とログファイル (BL.LOG) のディレクトリ指定

これによってプログラムの基本的なカスタマイズが行え、プログラム起動時にいつも設定を変更することなしに使用できる。これも市販のソフトウェアで通常行われていることである。

3-2-5. 装置

3-2-4. の①で、すでに本プログラムの稼動条件について触れた。使用した言語はマイクロソフト社製のMS-FORTRAN Ver. 4.1 で、実験はセイコーエプソン社製EPSON PC-486 (日本電気社製 PC-9801シリーズの互換機) 上で行った。

3-3. 実行結果と考察

これらの実行例に対する入力データは付録-4. にまとめた。まず、簡単なものを実行例1, 2) として示す。

実行例1) *Figure 3-22* のようにフラグメント、 ^{13}C -NMR、 ^1H -NMRを入力すると図右に示す1つ構造のみが提示される。その処理過程については、すでに *Figure 3-10*, *Table 3-9*, *3-10*, *3-11* で示したように、NMRシグナルと部分構造との対応関係を見ることにより候補構造を絞り込むことができる。

実行例2) *Figure 3-23* のようにある範囲内の分子式を満たすもののみを提示することもできる。本プログラムでは F_3 や F_4 のような不完全な構造も提案させることができる。不完全な候補構造は発生させないという制約条件 (3-2-2. 1) ⑦) を与えれば F_1 と F_2 の2つの候補構造しか発生しない。また、これら6つのフラグメントが未知試料中に互いに独立に存在するという確信がある場合には、与えたフラグメントは全て使用しなければならない (3-2-2. 1) ⑥) とすれば F_2 と F_4 の2つの候補構造が発生する。この両方の制約条件を課すと結果として F_2 の構造しか発生させないことも可能である。また、この例は *Figure 3-21* で示したように重複構造の発生に対処した結果を示すものでもある。

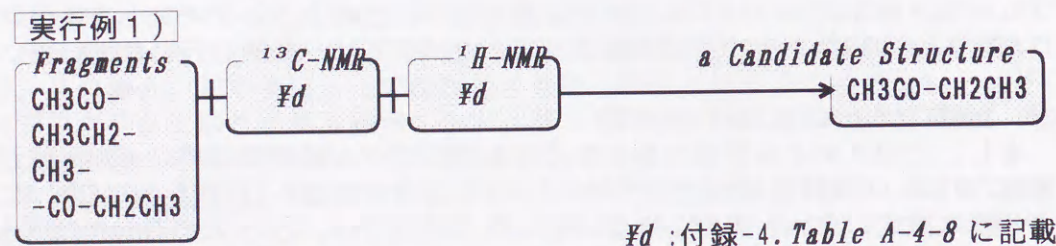


Figure 3-22. Example 1

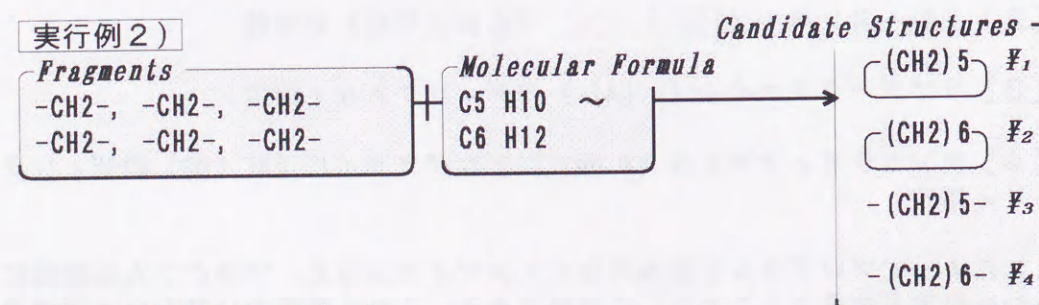
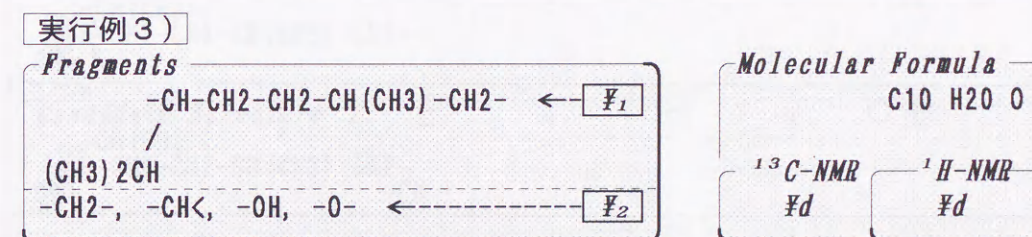


Figure 3-23. Example 2

実行例3) *Figure 3-24*, *3-25*, *Table 3-13*, *3-14* では、各種制約条件の導入の効果 (*Table 3-13*) により最終的に、1つの候補構造に絞り込むことができた。構造発生を (完) 全構造に限らず、分子式は少なくともフラグメント F_1 (*Figure 3-24*) 以上の C₉ H₁₈ 以上であるとし、 ^{13}C -NMR、 ^1H -NMR情報は与えずに実行すると 216個もの候補構造が発生してしまう。しかし、たとえば ^{13}C -NMR、 ^1H -NMR情報を与えると 43個まで候補構造を減らすことができる。また、本プログラムでは上記のように分子式の曖昧指定を行ったり、不完全な構造も候補として提示することができるが、このことは候補構造の数が多くなってしまうことにもなる。同様な条件下で分子式を C₁₀ H₂₀ O に限ったり、完全構造のみ発生させる条件下では候補構造数も減少する。この例からも、構造組立てのいわゆる組み合わせの爆発を防ぐのに各種制約を課することが重要であることが解る。



F₁: 2次元NMR Fd を検討することにより獲得できる部分構造フラグメント¹⁸⁾
 F₂: 分子式 (C₁₀ H₂₀ O) から F₁ (C₉ H₁₈) を差し引いた分子式 (C H₂ O) と生き残り S C から見積もった部分構造
 Fd: 付録-4. Table A-4-10 に記載

Figure 3-24. Input data for example 3

Table 3-13. The results of example 3

分子式を与える (C10 H20 O)	分子式を与える (C9 H18以上)	完全構造のみ 発生させる	¹³ C-NMR と ¹ H-NMR を与える
☐	+	☐	☐
(フラグメントのつながり合わせを考えたときの候補数) ... 280 (重複検査後の最終候補構造) ... 216			
☐	+	☐	+
			49 43
☐	+	+	☐
			40 25
☐	+	+	+
			7 5
+	☐	☐	☐
			13 13
+	☐	☐	+
			5 5
+	☐	+	☐
			3 3
+	☐	+	+
			1 1

注) +はその制約条件が有効。☐は無効。

この例の場合、候補構造を組み立てるのに有り余るフラグメントを与えているので、3-2-2.の1)⑥。全ての入力フラグメントを用いていない完全構造の生成検査は☐で行い、その他の基本的制約は+で行った結果である。

Table 3-14. The results of example 3

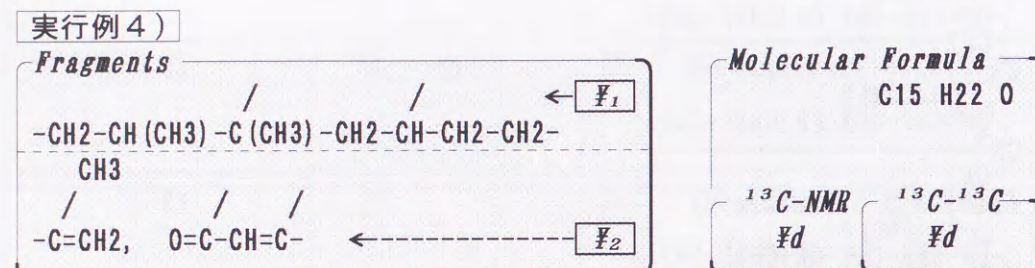
分子式	☐ 13個 (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13)
分子式, ¹³ C-NMR, ¹ H-NMR	☐ 5個 (4, 5, 6, 7, 12)
分子式, 完全構造のみ発生	☐ 3個 (2, 4, 9)
分子式, 完全構造のみ発生, ¹³ C-NMR, ¹ H-NMR	☐ 1個 (4)

Candidate Structures

分子式を与える (C10 H20 O)	完全構造のみ 発生させる	¹³ C-NMR と ¹ H-NMR を与える
Candidate Structure 1 CH(CH3)2 CH-CH2-CH2-CH(CH3)-CH2- CH2-O		
Candidate Structure 2 CH(CH3)2 CH-CH2-CH2-CH(CH3)-CH2- CH2-O	○	
Candidate Structure 3 CH(CH3)2 CH-CH2-CH2-CH(CH3)-CH2- CH2-O		
Candidate Structure 4 CH(CH3)2 CH-CH2-CH2-CH(CH3)-CH2- CH-OH	○	○
Candidate Structure 5 CH(CH3)2 CH-CH2-CH2-CH(CH3)-CH2- CH-OH		○
Candidate Structure 6 CH(CH3)2 CH-CH2-CH2-CH(CH3)-CH2- CH-OH		○
Candidate Structure 7 CH(CH3)2 CH-CH2-CH2-CH(CH3)-CH2- OH-CH		○
Candidate Structure 8 CH(CH3)2 CH-CH2-CH2-CH(CH3)-CH2- O-CH2		
Candidate Structure 9 CH(CH3)2 CH-CH2-CH2-CH(CH3)-CH2- O-CH2	○	
Candidate Structure 10 CH(CH3)2 CH-CH2-CH2-CH(CH3)-CH2- O-CH2		
Candidate Structure 11 CH(CH3)2 CH-CH2-CH2-CH(CH3)-CH2- O-CH2		
Candidate Structure 12 CH(CH3)2 CH-CH2-CH2-CH(CH3)-CH2- HO-CH		○
Candidate Structure 13 CH(CH3)2 CH-CH2-CH2-CH(CH3)-CH2- CH2-O	3	5

Figure 3-25. The results of example 3

実行例4) Figure 3-26, 3-27, Table 3-15 にはシグナル結合情報を用いた例を示す。また、NMRシグナルと部分構造との対応関係を明確化することも重要で、この明確化にもシグナル結合情報を利用することができる。この処理過程については、すでに3-2-2.の2-6), Figure 3-15, 3-16, 3-17 で述べた。この例の場合、この明確化により最終的に1つの候補構造に絞り込むことができた。



F_1 : 2次元NMR F_d を検討することにより獲得できる部分構造フラグメント¹⁸⁾
 F_2 : 分子式 ($\text{C}_{15}\text{H}_{22}\text{O}$) から F_1 (C_9H_{16}) を差し引いた分子式 ($\text{C}_6\text{H}_6\text{O}$) と生き残りSCなどからイソプロペニル基と $\alpha\beta$ 不飽和カルボニル基と見積もった部分構造
 F_d : 付録-4. Table A-4-11 に記載

Figure 3-26. Input data for example 4

Table 3-15. The results of example 4

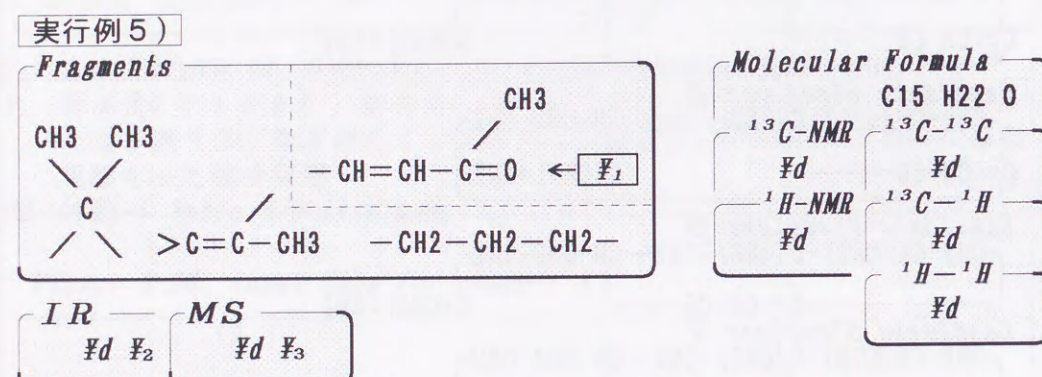
分子式, 完全構造のみ, ^{13}C -NMR	12個 (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12)
分子式, 完全構造のみ, ^{13}C -NMR, シグナル結合情報	6個 (1, 2, 3, 7, 9, 12)
分子式, 完全構造のみ, ^{13}C -NMR, シグナル結合情報, NMRシグナル-部分構造対応表の明確化	1個 (2)

注) この例の場合には、分子式の代わりに、与えた全てのフラグメントを用いたもののみ提示させるという条件で実行しても結果は同じ

さらに、シグナル結合情報を用いてNMRシグナル-部分構造対応表 F_{12} の明確化を行う			
Candidate Structures 分子式を与える ($\text{C}_{15}\text{H}_{22}\text{O}$)	完全構造のみ 発生させる ^{13}C -NMR & ^1H -NMR を与える	シグナル結合情報 (^{13}C - ^{13}C) を与える	
Candidate Structure 1 $\text{CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-C(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ CO-CH=C $\text{C(CH}_3\text{)=CH}_2$			○
Candidate Structure 2 $\text{CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-C(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ CO-CH=C $\text{C(CH}_3\text{)=CH}_2$		○	○
Candidate Structure 3 $\text{CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-C(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ $\text{C(CH}_3\text{)=CH}_2$ CO-CH=C		○	
Candidate Structure 4 $\text{CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-C(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ C=CH-CO $\text{C(CH}_3\text{)=CH}_2$			
Candidate Structure 5 $\text{CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-C(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ C=CH-CO $\text{C(CH}_3\text{)=CH}_2$			
Candidate Structure 6 $\text{CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-C(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ C=CH-CO $\text{C(CH}_3\text{)=CH}_2$		○	
Candidate Structure 7 $\text{CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-C(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ C=CH-CO $\text{C(CH}_3\text{)=CH}_2$			
Candidate Structure 8 $\text{CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-C(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ $\text{C(CH}_3\text{)=CH}_2$ CO-CH=C			
Candidate Structure 9 $\text{CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-C(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ $\text{C(CH}_3\text{)=CH}_2$ C=CH-CO		○	
Candidate Structure 10 $\text{CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-C(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ $\text{C(CH}_3\text{)=CH}_2$ CO-CH=C			
Candidate Structure 11 $\text{CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-C(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ $\text{C(CH}_3\text{)=CH}_2$ C=CH-CO			
Candidate Structure 12 $\text{CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-C(CH}_3\text{)-CH}_2\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ $\text{C(CH}_3\text{)=CH}_2$ C=CH-CO		○	
	12	6	1

Figure 3-27. The results of example 4

実行例5) Figure 3-28, 3-29, 3-30, 3-31, Table 3-16, 3-17 もシグナル結合情報を利用した例である。ここでは、Figure 3-1 で示した他のプログラムとの連携を示す (Figure 3-29)。まず、フラグメント \mathbb{F}_1 は、IRASSL²⁻⁴⁾ を用いることによって獲得できる部分構造フラグメント¹⁸⁾ である。また、利用者が付録-4. Table A-4-6 に記載したシグナル結合情報²⁾ \mathbb{F}_2 を読みとれない場合には候補構造が6つ提示されてしまう。この場合さらに、MS情報を用いてMSの予測と評価プログラム^{5, 6)} を使用して6つの候補構造を評価してもよい。その結果を Figure 3-31, Table 3-17 に示す。この結果から6つの候補構造の中、構造 \mathbb{Z} が最終予測構造であると判断できるであろう。



\mathbb{F}_1 : IRASSL²⁻⁴⁾ を用いることによって獲得できる部分構造フラグメント¹⁸⁾
 \mathbb{F}_2 : IRASSLの実行に用いた情報
 \mathbb{F}_3 : 6つの候補構造それぞれに対して予測したMSとの比較評価に用いた情報
 \mathbb{F}_d : 付録-4. Table A-4-6 に記載

Figure 3-28. Input data for example 5

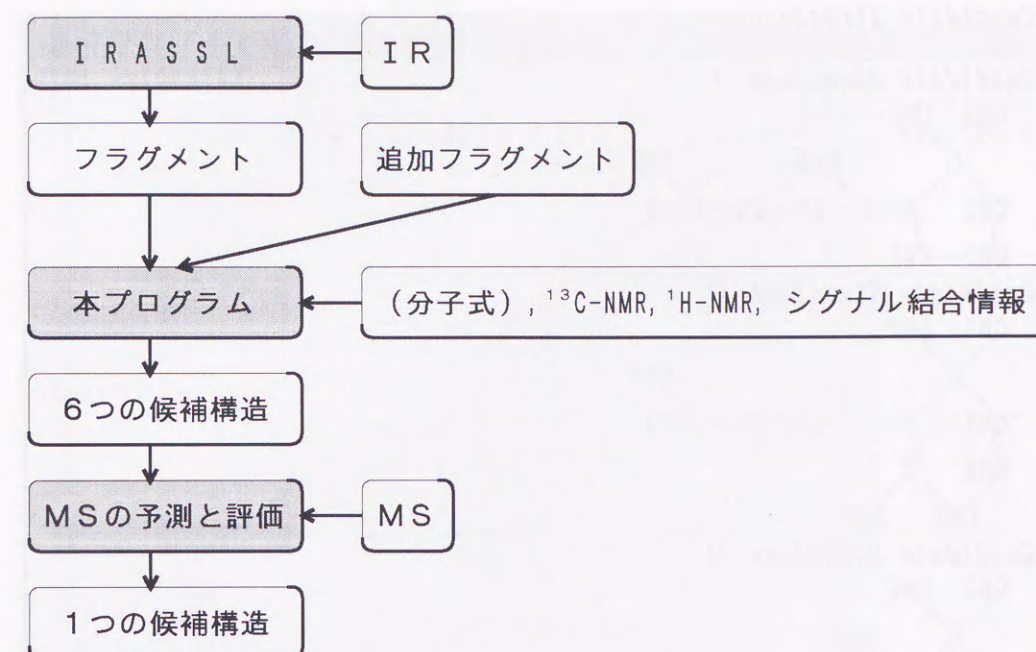


Figure 3-29. Overview of the procedure for example 5

Table 3-16. The results of example 5

分子式, 完全構造のみ, ¹³C-NMR, ¹H-NMR, シグナル結合情報
 6個 (1, \mathbb{Z} , 3, 4, 5, 6)
 分子式, 完全構造のみ, ¹³C-NMR, ¹H-NMR, シグナル結合情報,
 NMRシグナル-部分構造対応表の明確化, シグナル結合情報 \mathbb{F}_4
 1個 (\mathbb{Z})

\mathbb{F}_4 : 付録-4. Table A-4-6 に記載

注) この例の場合には、分子式の代わりに、与えた全てのフラグメントを用いたもののみ提示させるという条件で実行しても結果は同じ

Candidate Structures	シグナル結合情報 2
<p>Candidate Structure 1</p> <chem>CC(C)C(C)C(=C)C(=O)C</chem>	
<p>Candidate Structure 2</p> <chem>CC(C)C(C)C(=C)C(=O)C</chem>	○
<p>Candidate Structure 3</p> <chem>CC(C)C(C)C(=C)C(=O)C</chem>	
<p>Candidate Structure 4</p> <chem>CC(C)C(C)C(=C)C(=O)C</chem>	
<p>Candidate Structure 5</p> <chem>CC(C)C(C)C(=C)C(=O)C</chem>	
<p>Candidate Structure 6</p> <chem>CC(C)C(C)C(=C)C(=O)C</chem>	
6	1

Figure 3-30. The results of example 5

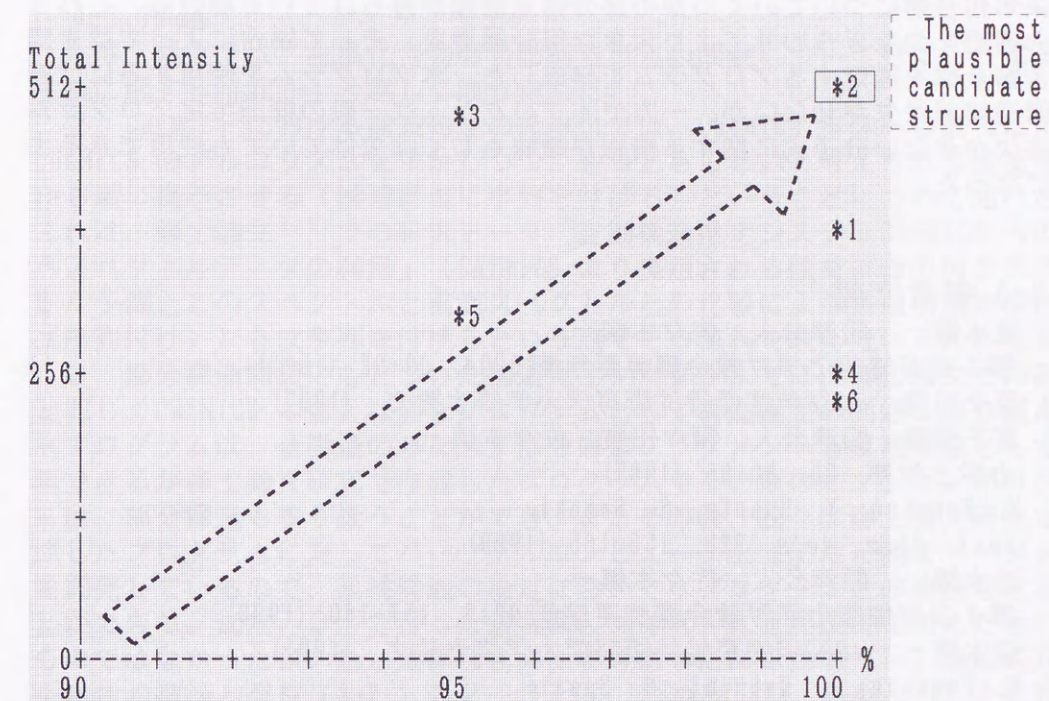


Figure 3-31. The results of example 5 by MS prediction and evaluation

Table 3-17. The results of example 5 by MS prediction and evaluation

Candidate Structure no.	Hit	Miss	%	Total Intensit
	of Prediction			
1	14	0	100	372
<div>2</div>	23	0	100	512
3	21	1	95	499
4	18	0	100	268
5	20	1	95	329
6	10	0	100	254

3-4. まとめ

未知化合物についていくつかの部分構造情報が得られている場合に、これら部分構造をつなぎ合わせてより大きな部分構造を、そして場合によっては未知化合物全体を推定するプログラムを作成した。本プログラムを使用するには部分構造情報は欠かせないが、一方で本プログラムは一般の構造推定プログラムでは欠かせない分子式に関する情報が曖昧もしくは欠けていても使用できるようになった。

3-5. 参考文献

- 1) 速水健一, 船津公人, 佐々木慎一,
第16回情報化学討論会講演要旨集25P04, 89-92 (1993).
- 2) 須々田寛, 1986年度豊橋技術科学大学修士論文, (1987).
- 3) 宮下芳勝, 船津公人, 須々田寛, 佐々木慎一,
化学と教育, 35, 60-65 (1987).
- 4) K. Funatsu, Y. Susuta, S. Sasaki,
Anal. Chim. Acta, 220, 155-165 (1989).
- 5) 速水健一, 船津公人, 佐々木慎一,
第13回情報化学討論会講演要旨集29P17, 157-160 (1990).
- 6) 速水健一, 1990年度豊橋技術科学大学修士論文, (1991).
- 7) K. Funatsu, H. Katsumi, S. Sasaki,
Computer Enhanced Spectroscopy, 3, 87-90 (1986).
- 8) 船津公人, 江口晃史, 佐々木慎一
第16回情報化学討論会講演要旨集25P02, 81-84 (1993).
- 9) 船津公人, B. P. Acharya, 佐々木慎一
第16回情報化学討論会講演要旨集25P03, 85-88 (1993).
- 10) 近藤勝, 1993年度豊橋技術科学大学卒業論文, (1994). [予定]
- 11) 仁保勉, 1992年度豊橋技術科学大学卒業論文, (1993).
- 12) S. Sasaki, H. Abe, Y. Hirota, Y. Ishida, Y. Kudo, S. Ochiai,
K. Saito, T. Yamasaki, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 18, 211 (1978).
- 13) 原藤寛, 船津公人, 佐々木慎一,
第13回情報化学討論会講演要旨集29P18, 161-164 (1990).
- 14) 原藤寛, 1990年度豊橋技術科学大学博士論文, (1991).
- 15) E. H. Sussengh, *J. Chem. Doc.*, 5, 36 (1965).
- 16) J. Figueras, *J. Chem. Doc.*, 11, 47 (1971).
- 17) 宮林延良, 1982年度豊橋技術科学大学修士論文, (1983).
- 18) 須々田寛, 1989年度豊橋技術科学大学博士論文, (1990).

4. 総括

4-1. 序論

本博士論文では、有機化合物の自動構造推定の問題について特に「一構造発生法に関する研究」と題して取り組んだ。

2. CHEMICS における構造発生効率化では、CHEMICS 本体への改良によりCHEMICS のアルゴリズムを生かしつつ、もっともらしいと考えられる候補構造から順に提示させる(候補構造に序列を付ける)ということについて述べた。これは、修士論文^{1, 2)}での研究テーマ「自動構造推定システムCHEMICS へのMSスペクトルデータの利用」(CHEMICS より提示される候補構造のMSスペクトル予測とこのスペクトルと実測スペクトルとの比較による候補構造の検定(序列付け))とは序列を付けるという点でその流れを組んでいるといえる。

3. 部分構造情報にもとづいた構造発生プログラムでは、修士論文での研究と同じくCHEMICS 本体とは別なプログラムとして構造推定の問題に取り組んだ。本プログラムは、全構造のみならず部分構造フラグメントも候補構造として提示できるが修士論文研究で作成したプログラムやその他のオプションプログラムは、部分構造も取り扱うことができ、またその後、我々は修士論文研究で作成したプログラムに対してパーソナルコンピュータ上で使用可能なバージョンを開発しているので、候補構造の検定において本プログラムとの連携をとることができる。また、3.で行った研究は、CHEMICS に直接改良を加えたというものではなかったが、たとえば包含関係を考慮したMC処理(1-2.脚注¹⁾の不具合の指摘と改良(3-2-2.の2-3)③, *Figure 3-5, 3-6, 3-7, 3-8*)、線形入力された構造情報の獲得処理の不具合の指摘と改良(3-2-2.の2-3)④, 2-1)②)や¹H-NMRでの多重度の利用の試み(3-2-2.の2-5))など、今後のCHEMICS の改良と発展において、直接応用可能な提案も行うことができた。

4-2. 実行結果の総括

各章での「実行結果と考察」、そして「まとめ」でその詳細について述べた。これらのことから、1-2-2.で述べた問題を解決することができ、構造発生への新たな方策を提案することができたと考える。

4-3. 限界と今後の課題

2.の研究では、まず、頻度分布関数の作成に時間をかけた。この関数は、CHEMICS における構造発生効率化のために作成したものであるが、部分構造とNMRスペクトルとの相関を示すデータとして、その他の目的に対しても利用できるであろう。

この頻度分布関数を作成するのに今回は江口らのデータ³⁾を用いた。このデータは、従来からCHEMICS 中で用いられてきた相関表の再検討のためにデータベース中より抽出したデータであり、今回、頻度分布関数を記述した新たな相関表を作成するためにこのデータを利用したことは妥当といえる。一方で、この相関表の質により実行結果が変わることも容易に想像できる。本研究では、この相関表が絶対的なものとは考えていない。そして、このことは本質的にこの研究の意味や価値が変わることにはならない。

今回、各コンポーネントについての頻度分布関数を作成するに当たってデータベース中に存在しない部分構造や存在してもその件数の少ないものについては頻度分布関数の作成を無理に行わなかった。それは、化学シフトの違いによってそのようなコンポーネントの存在価値が大きく変わらないようにするため

である。今後、より多くのデータによりそのコンポーネントのもつ化学シフト出現分布が明らかになり、今回、頻度分布関数の作成を行わなかったコンポーネントについてもその関数が作成されれば、より良い結果が得られると考えられる。

また、今回作成した頻度分布関数は一般の有機化合物を対象としているが特定の化合物を解析対象としてCHEMICS を使用する場合には、それに対応した頻度分布関数を作成してこの相関表を用いるとよりよい結果が得られるであろう。その際には、相関表を変えるだけでCHEMICS 自体を改良する必要はないのでCHEMICS 利用者はある意味でのカスタマイズが比較的簡単に行える。

本研究では従来からCHEMICS 中で用いられてきた相関表と新たに作成した相関表を併用する方法をとったが、この従来からの相関表は一切使用せずに、新しい頻度分布関数のみを使用することも構想としてはあった。それは、生き残りコンポーネントを求める部分構造解析の部分では利用者が0から1の閾値を入力することにより頻度分布関数の値が閾値より大きいコンポーネントのみを生き残らせてこのコンポーネントを用いて構造発生を行う方法である。この場合、候補構造中に必ず正解構造を含むというCHEMICS の大原則を満足しない恐れが生じるが、利用者が可能性の高いものだけに絞ってCHEMICS に候補構造を提示させたい場合には、この閾値を上下させることによって実現できる。

次に、3. での研究について述べる。

本プログラムには部分構造推定の部分が無い。この部分構造フラグメント情報の獲得には現在3-1-1. の *Figure 3-1* で示した形を提案しているが、今後の開発においては、本プログラムに与えられるフラグメント情報が不足している場合にNMRなどの情報を用いて不足部分の構造を補うことが考えられる。また、2次元NMR情報が完全なものである場合には、この情報からMC等の部分構造情報を提案できるよう改良を施すこともできるのではないかと考える。

また、2次元NMRから得られるシグナル結合情報を用いて与えられたフラグメント間での重複部分を考慮した構造組立てへの検討も必要と思われる。

本プログラムに、部分構造フラグメントを入力する場合に、NMRシグナルの割付け情報も同時に入力できるとよい。これによって、部分構造とNMRシグナルとの対応関係がより明確になりシグナルの割付け検査の効果が向上する。たとえば、 ^1H - ^1H cosyなどから利用者が部分構造を推定しフラグメントを入力する場合には、そのフラグメントへのシグナルの帰属が利用者により明らかにされているからである。そしてさらに、これらのフラグメントをどのようにつなげたらよいのかというときに、これらのシグナルの帰属付きフラグメントとHMBC法などの long range なデータを用いて本プログラムで候補を絞り込むといった利用ができるであろう。

4-4. 参考文献

- 1) 速水健一, 船津公人, 佐々木慎一,
第13回情報化学討論会講演要旨集29P17, 157-160 (1990).
- 2) 速水健一, 1990年度豊橋技術科学大学修士論文, (1991).
- 3) 江口晃史, 1985年度豊橋技術科学大学卒業論文, (1986).

謝辞

現在、本学、豊橋技術科学大学長でいらっしゃる佐々木慎一先生により有機化合物構造解析の自動化 (CHEMICS の開発) が始められて30年になろうとしている。この間に、非常に多くの諸先輩方が、この研究に携わってこれられた。この壮大な計画に参加させて戴けたとは、誠に縁は異なるもの味なものである。今回、このような研究が行えたのも、これらの諸先輩方により築き上げられたものの上に成し得たものと恐縮し、まず始めに感謝の意を表したい。そして「一期一会」、本学位論文の研究テーマに取り組む機会を与えて下さった、佐々木慎一先生に感謝申し上げたい。現在も尚、著者がCHEMICS の研究に携われたことの一つに、CHEMICS の発展の一方で化学や計算機分野での発達があるからではないだろうか。これにより、CHEMICS に求められるものも、より多く、そして少しずつ変化してきた。このことは、当初の諸先輩方のお考えと異なったり、その想像を超えたものであったかもしれない。どうか、この研究に対しても温かい目で、ご高庇を賜りたく存じます。また、時間をこれとは逆に未来に向けて考えてみると、今後CHEMICS がどのようなものになっているのかが楽しみですである。

2. の研究テーマについては、本学修了生である唐沢肇博士に特に熱心な議論を戴いた。その時の議論は、CHEMICS に用いられている相関表をファジーな形のもので表せないのかというものであった。その後、CHEMICS にもこれと似た構想があることを知り、この研究を行う機会を得た。元弘前大学教養部の松枝澄先生、同現職の長岐正彦先生には、私がこのような道を歩むきっかけと、現在に至るまでの間に、特に精神的な面から弛まないご支援を戴いた。また、私が学生生活を送ることを理解し、長い間、援助してくれた両親に感謝したい。

その他、この研究を行うにあたり、著者が本学に來た当時に所属していた物質(第5)工学系の旧化学情報学研究室、ならびに当時の分析計測センターの教職員、事務職員の方々、また、現在この論文の作成を行っている場所である知識情報(第7)工学系の方々にも様々な面からお世話になった。具体的な姓名は割愛させて戴くが、特に、旧化情研、知識情報棟3階の化学系の研究室の学友、学兄、学弟、そして企業からの研究生仲間には研究を通しての議論を戴いたり、また彼らにより有意義な学生生活を送ることができた。

阿部英次先生、神野清勝先生、宮下芳勝先生、西山久雄先生、船津公人先生には、審査委員として予備審査の段階からお世話になりました。旧化情研時代から助言などを戴いた阿部英次先生、宮下芳勝先生、高橋由雅先生、そして最後に、指導教官で直接御教授戴いた船津公人先生に厚く御礼申し上げます。

付録

付録-1. 2.、3. のプログラムで用いたCOMPONENT-NMR相関表
(従来からCHEMICS で用いられているもの)

Table A-1-1. A correlation data between primary components and chemical shift of NMR

no. 1*	component	chemical shift (ppm)			
		¹ H-NMR		¹³ C-NMR	
1	CH3	0.31...	5.21	-2.74...	65.00
2	CH2	0.85...	7.08	-11.60...	160.13
3	CH	-10.00...	12.59	-33.60...	240.00
4	C	0.00...	0.00	0.00...	250.00
5	OH	-10.00...	17.30	0.00...	0.00
6	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00
7	NH2	-2.59...	17.21	0.00...	0.00
8	NH	-10.00...	19.69	0.00...	0.00
9	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00
10	SH	-2.62...	16.24	0.00...	0.00
11	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00
12	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00
13	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00
14	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00
15	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00

Table A-1-2. A correlation data between secondary components and chemical shift of NMR

no. 2*	component	chemical shift (ppm)							
		¹ H-NMR				¹³ C-NMR			
		part A		part B		part A		part B	
1	(CH3) 3C-	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75	20.00...	90.00
2	(CH3) 2CH-	0.31...	1.81	0.96...	8.30	1.97...	40.75	11.75...	89.75
3	-(CH3) 2C-	0.20...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75	19.70...	140.00
4	(CH3) 2N-	1.33...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19	0.00...	0.00
5	(CH3) 2NO-	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19	0.00...	0.00
6	(CH3) 2C=	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	81.08...	194.37
7	CH3CH2-	0.31...	1.81	0.85...	6.44	1.97...	40.75	-3.00...	91.80
8	-(CH3) CH-	0.31...	1.81	0.96...	8.30	1.97...	40.75	10.00...	108.00
9	-(CH3) C<	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75	17.77...	135.10
10	CH3-	1.45...	5.21	0.00...	0.00	-2.49...	50.19	0.00...	0.00
11	CH3S-	1.34...	3.98	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00
12	CH3NH-	1.44...	4.56	-5.37...	19.69	20.04...	50.19	0.00...	0.00
13	CH3N<	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19	0.00...	0.00
14	CH3NO<	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19	0.00...	0.00
15	CH3O-	2.95...	4.53	0.00...	0.00	51.00...	65.00	0.00...	0.00
16	CH3CO-	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	139.89...	226.94
17	CH3CS-	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	180.00...	240.00
18	CH3C (=NH) -	1.40...	3.08	3.35...	12.59	-2.74...	40.50	130.00...	190.00
19	CH3C (=NN) -	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	113.40...	175.84
20	CH3CH=	1.40...	3.08	3.56...	10.52	-2.74...	40.50	70.69...	175.54
21	-(CH3) C=	1.00...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	70.69...	175.54
22	CH3SO-	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00
23	CH3SO2-	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00
24	-CH2-	0.40...	6.44	0.00...	0.00	-11.60...	90.00	0.00...	0.00
25	>CH-	0.96...	8.30	0.00...	0.00	-33.60...	126.44	0.00...	0.00
26	>C<	0.00...	0.00	0.00...	0.00	11.89...	135.10	0.00...	0.00
27	-C=C-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	150.00	0.00...	0.00
28	-C=CH	-1.56...	5.75	0.00...	0.00	50.00...	86.00	65.00...	95.00
29	-C=N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	103.00...	131.62	0.00...	0.00
30	-N=C	0.00...	0.00	0.00...	0.00	140.00...	180.00	0.00...	0.00

Table A-1-2. (Continued)

31	=CH2	3.66...	7.08	0.00...	0.00	36.99...	160.13	0.00...	0.00
32	=C=O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	118.53...	195.42	0.00...	0.00
33	=C=S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	119.00...	250.00	0.00...	0.00
34	=C=NH	3.35...	12.59	0.00...	0.00	150.00...	250.00	0.00...	0.00
35	=C=NN	0.00...	0.00	0.00...	0.00	129.12...	250.00	0.00...	0.00
36	=C=	0.00...	0.00	0.00...	0.00	129.12...	250.00	0.00...	0.00
37	-CH=	3.56...	10.52	0.00...	0.00	70.69...	175.54	0.00...	0.00
38	>C=	0.00...	0.00	0.00...	0.00	81.08...	194.37	0.00...	0.00
39	-CH=O	5.99...	12.39	0.00...	0.00	75.34...	222.90	0.00...	0.00
40	-CH=S	-10.00...	10.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
41	-CH=NH	3.56...	10.52	3.35...	12.59	140.00...	180.00	0.00...	0.00
42	-CH=NN	5.97...	10.17	0.00...	0.00	127.95...	175.54	0.00...	0.00
43	>C=O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	139.89...	250.00	0.00...	0.00
44	>C=S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
45	>C=NH	3.35...	12.59	0.00...	0.00	130.00...	190.00	0.00...	0.00
46	>C=NN	0.00...	0.00	0.00...	0.00	113.40...	175.84	0.00...	0.00
47	>AC-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	69.73...	181.71	0.00...	0.00
48	-ACH-	5.85...	9.57	0.00...	0.00	76.81...	157.84	0.00...	0.00
49	-TPL-	-0.10...	17.30	0.00...	0.00	136.65...	168.30	0.00...	0.00
50	-MDO-	5.36...	6.50	0.00...	0.00	136.65...	168.30	86.80...	118.30
51	-AO-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
52	-AS-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
53	-AN-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
54	-ANH-	2.53...	15.25	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
55	>AN-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
56	-ANO-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
57	-ASO-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
58	-ASO2-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
59	-N=O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
60	-NO2	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
61	-N=S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
62	-NSO	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
63	-N=SO	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
64	-N=NH	-10.00...	10.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
65	-NO=NH	-10.00...	10.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
66	-N=NN	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
67	-NO=NN	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
68	-N=	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
69	-NO=	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
70	-SO2H	7.08...	12.28	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
71	-SO3H	5.41...	11.29	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
72	-SO-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
73	-SO2-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
74	-OH	-10.00...	17.30	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
75	-SH	-2.62...	16.24	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
76	-NH2	-2.59...	17.21	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
77	-O-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
78	-S-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
79	-NH-	-5.37...	19.69	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
80	-N<	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
81	-NO<	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
82	-F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
83	-Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
84	-Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
85	-I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
86	-*	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
87	=*	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
88	-D-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
89	-T-	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00

1	(CH3) 3C-	part A ---> (CH3) 3 (attached atom),	part B ---> C- (center atom)
2	(CH3) 2CH-	part A ---> (CH3) 2 (attached atom),	part B ---> CH- (center atom)
18	CH3C (=NH) -	part A ---> CH3 (attached atom),	
		part B ---> =NH (attached atom in the case of ¹ H-NMR)	
		part B ---> C (center atom in the case of ¹³ C-NMR)	
29	-C=N	part A ---> -C≡ (center atom)	
30	-N=C	part A ---> ≡C (attached atom)	
34	=C=NH	part A ---> =NH (attached atom in the case of ¹ H-NMR)	
		part A ---> =C= (center atom in the case of ¹³ C-NMR)	

Table A-1-3. A correlation data between tertiary components and chemical shift of NMR

no. 3' (2')	component affluent nature	part A	chemical shift (ppm)		¹³ C-NMR	part A	part B
			¹ H-NMR				
1 (1)	(CH ₃) 3C- S	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
2 (1)	(CH ₃) 3C- ND	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
3 (1)	(CH ₃) 3C- N	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
4 (1)	(CH ₃) 3C- O	0.31...	1.81	0.00...	0.00	26.02...	32.20
5 (1)	(CH ₃) 3C- Y	0.31...	1.81	0.00...	0.00	24.47...	33.57
6 (1)	(CH ₃) 3C- CD	0.31...	1.81	0.00...	0.00	25.48...	36.78
7 (1)	(CH ₃) 3C- CT	0.31...	1.81	0.00...	0.00	25.48...	34.04
8 (1)	(CH ₃) 3C- CS	0.31...	1.81	0.00...	0.00	23.65...	32.97
9 (2)	(CH ₃) 2CH- S	0.31...	1.81	1.87...	5.12	1.97...	40.75
10 (2)	(CH ₃) 2CH- ND	0.31...	1.81	2.55...	5.74	1.97...	40.74
11 (2)	(CH ₃) 2CH- N	0.31...	1.81	1.22...	6.97	21.90...	23.70
12 (2)	(CH ₃) 2CH- O	0.31...	1.81	2.04...	8.30	15.09...	25.83
13 (2)	(CH ₃) 2CH- Y	0.31...	1.81	1.88...	7.46	20.95...	25.45
14 (2)	(CH ₃) 2CH- CD	0.31...	1.81	1.48...	5.36	15.09...	25.83
15 (2)	(CH ₃) 2CH- CT	0.31...	1.81	0.96...	8.30	15.09...	25.83
16 (2)	(CH ₃) 2CH- CS	0.31...	1.81	0.96...	2.82	16.00...	24.44
17 (3)	-(CH ₃) 2C- I	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
18 (3)	-(CH ₃) 2C- Br	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
19 (3)	-(CH ₃) 2C- Cl	0.31...	1.81	0.00...	0.00	29.60...	36.80
20 (3)	-(CH ₃) 2C- F	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
21 (3)	-(CH ₃) 2C- S	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
22 (3)	-(CH ₃) 2C- ND	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
23 (3)	-(CH ₃) 2C- N	0.31...	1.81	0.00...	0.00	20.60...	38.90
24 (3)	-(CH ₃) 2C- O	0.31...	1.81	0.00...	0.00	27.42...	32.95
25 (3)	-(CH ₃) 2C- Y	0.31...	1.81	0.00...	0.00	10.72...	36.27
26 (3)	-(CH ₃) 2C- CD	0.31...	1.81	0.00...	0.00	10.72...	36.27
27 (3)	-(CH ₃) 2C- CT	0.31...	1.81	0.00...	0.00	10.72...	36.27
28 (3)	-(CH ₃) 2C- CS	0.20...	1.81	0.00...	0.00	6.80...	32.61
29 (4)	(CH ₃) 2N- S	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
30 (4)	(CH ₃) 2N- ND	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
31 (4)	(CH ₃) 2N- N	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
32 (4)	(CH ₃) 2N- O	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
33 (4)	(CH ₃) 2N- Y	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
34 (4)	(CH ₃) 2N- CD	1.33...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
35 (4)	(CH ₃) 2N- CT	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
36 (4)	(CH ₃) 2N- CS	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
37 (5)	(CH ₃) 2NO- S	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
38 (5)	(CH ₃) 2NO- ND	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
39 (5)	(CH ₃) 2NO- N	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
40 (5)	(CH ₃) 2NO- O	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
41 (5)	(CH ₃) 2NO- Y	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
42 (5)	(CH ₃) 2NO- CD	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
43 (5)	(CH ₃) 2NO- CT	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
44 (5)	(CH ₃) 2NO- CS	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
45 (6)	(CH ₃) 2C- *	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50
46 (7)	CH ₃ CH ₂ - S	0.31...	1.81	1.59...	5.97	2.80...	21.70
47 (7)	CH ₃ CH ₂ - ND	0.31...	1.81	3.35...	6.44	1.97...	40.75
48 (7)	CH ₃ CH ₂ - N	0.31...	1.81	1.85...	6.44	8.23...	19.80
49 (7)	CH ₃ CH ₂ - O	0.31...	1.81	3.03...	5.90	11.31...	16.01
50 (7)	CH ₃ CH ₂ - Y	0.31...	1.81	2.03...	4.70	9.88...	16.89
51 (7)	CH ₃ CH ₂ - CD	0.31...	1.81	1.20...	4.80	2.35...	18.92
52 (7)	CH ₃ CH ₂ - CT	0.31...	1.81	1.53...	3.57	4.83...	18.92
53 (7)	CH ₃ CH ₂ - CS	0.31...	1.81	0.85...	2.47	6.58...	18.31
54 (8)	-(CH ₃) CH- I	0.31...	1.81	0.96...	8.30	1.97...	40.75
55 (8)	-(CH ₃) CH- Br	0.31...	1.81	3.18...	7.93	1.97...	40.75
56 (8)	-(CH ₃) CH- Cl	0.31...	1.81	3.57...	7.64	19.80...	27.60
57 (8)	-(CH ₃) CH- F	0.31...	1.81	3.86...	7.60	1.97...	40.75
58 (8)	-(CH ₃) CH- S	0.31...	1.81	1.87...	5.12	1.97...	40.75
59 (8)	-(CH ₃) CH- ND	0.31...	1.81	2.55...	5.74	1.97...	40.75
60 (8)	-(CH ₃) CH- N	0.31...	1.81	1.22...	6.97	14.54...	28.69

Table A-1-3. (Continued)

61 (8)	-(CH ₃) CH- O	0.31...	1.81	2.04...	8.30	13.64...	27.34
62 (8)	-(CH ₃) CH- Y	0.31...	1.81	1.88...	7.46	13.64...	28.94
63 (8)	-(CH ₃) CH- CD	0.31...	1.81	1.48...	5.36	11.00...	27.54
64 (8)	-(CH ₃) CH- CT	0.31...	1.81	0.96...	8.30	13.64...	25.51
65 (8)	-(CH ₃) CH- CS	0.31...	1.81	0.96...	3.00	13.00...	24.86
66 (9)	-(CH ₃) C< I	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
67 (9)	-(CH ₃) C< Br	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
68 (9)	-(CH ₃) C< Cl	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
69 (9)	-(CH ₃) C< F	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
70 (9)	-(CH ₃) C< S	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
71 (9)	-(CH ₃) C< ND	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
72 (9)	-(CH ₃) C< N	0.31...	1.81	0.00...	0.00	1.97...	40.75
73 (9)	-(CH ₃) C< O	0.31...	1.81	0.00...	0.00	4.58...	32.01
74 (9)	-(CH ₃) C< Y	0.31...	1.81	0.00...	0.00	4.58...	32.01
75 (9)	-(CH ₃) C< CD	0.31...	1.81	0.00...	0.00	5.25...	25.00
76 (9)	-(CH ₃) C< CT	0.31...	1.81	0.00...	0.00	4.58...	32.01
77 (9)	-(CH ₃) C< CS	0.31...	1.81	0.00...	0.00	9.92...	21.00
78 (10)	CH ₃ - ND	2.03...	5.21	0.00...	0.00	20.04...	50.19
79 (10)	CH ₃ - Y	1.82...	2.90	0.00...	0.00	7.89...	28.99
80 (10)	CH ₃ - CT	1.45...	2.23	0.00...	0.00	-2.49...	8.49
81 (11)	CH ₃ S- S	1.34...	3.98	0.00...	0.00	10.00...	30.00
82 (11)	CH ₃ S- ND	1.34...	3.98	0.00...	0.00	10.00...	30.00
83 (11)	CH ₃ S- N	1.34...	3.98	0.00...	0.00	10.00...	30.00
84 (11)	CH ₃ S- O	1.34...	3.98	0.00...	0.00	10.00...	30.00
85 (11)	CH ₃ S- Y	1.34...	3.98	0.00...	0.00	10.00...	30.00
86 (11)	CH ₃ S- CD	1.34...	3.98	0.00...	0.00	10.00...	30.00
87 (11)	CH ₃ S- CT	1.34...	3.98	0.00...	0.00	10.00...	30.00
88 (11)	CH ₃ S- CS	1.34...	3.98	0.00...	0.00	10.00...	30.00
89 (12)	CH ₃ NH- S	1.44...	4.56	1.26...	13.26	20.04...	50.19
90 (12)	CH ₃ NH- ND	1.44...	4.56	4.15...	19.69	20.04...	50.19
91 (12)	CH ₃ NH- N	1.44...	4.56	3.61...	12.31	20.04...	50.19
92 (12)	CH ₃ NH- O	1.44...	4.56	5.99...	10.31	20.04...	50.19
93 (12)	CH ₃ NH- Y	1.44...	4.56	1.51...	15.38	20.04...	50.19
94 (12)	CH ₃ NH- CD	1.44...	4.56	2.86...	13.97	20.04...	50.19
95 (12)	CH ₃ NH- CT	1.44...	4.56	-5.37...	19.69	20.04...	50.19
96 (12)	CH ₃ NH- CS	1.44...	4.56	-5.37...	11.57	20.04...	50.19
97 (13)	CH ₃ N< I	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
98 (13)	CH ₃ N< Br	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
99 (13)	CH ₃ N< Cl	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
100 (13)	CH ₃ N< F	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
101 (13)	CH ₃ N< S	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
102 (13)	CH ₃ N< ND	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
103 (13)	CH ₃ N< N	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
104 (13)	CH ₃ N< O	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
105 (13)	CH ₃ N< Y	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
106 (13)	CH ₃ N< CD	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
107 (13)	CH ₃ N< CT	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
108 (13)	CH ₃ N< CS	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
109 (14)	CH ₃ NO< I	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
110 (14)	CH ₃ NO< Br	1.46...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
111 (14)	CH ₃ NO< Cl	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
112 (14)	CH ₃ NO< F	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
113 (14)	CH ₃ NO< S	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
114 (14)	CH ₃ NO< ND	1.46...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
115 (14)	CH ₃ NO< N	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
116 (14)	CH ₃ NO< O	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
117 (14)	CH ₃ NO< Y	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
118 (14)	CH ₃ NO< CD	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
119 (14)	CH ₃ NO< CT	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
120 (14)	CH ₃ NO< CS	1.44...	4.56	0.00...	0.00	20.04...	50.19
121 (15)	CH ₃ O- S	2.95...	4.53	0.00...	0.00	51.00...	65.00
122 (15)	CH ₃ O- ND	2.95...	4.53	0.00...	0.00	51.00...	65.00
123 (15)	CH ₃ O- N	2.95...	4.53	0.00...	0.00	51.00...	65.00
124 (15)	CH ₃ O- O	2.95...	4.53	0.00...	0.00	51.00...	65.00
125 (15)	CH ₃ O- Y	2.95...	4.53	0.00...	0.00	51.00...	65.00
126 (15)	CH ₃ O- CD	2.95...	4.53	0.00...	0.00	51.00...	65.00
127 (15)	CH ₃ O- CT	2.95...	4.53	0.00...	0.00	51.00...	65.00
128 (15)	CH ₃ O- CS	2.95...	4.53	0.00...	0.00	51.00...	65.00
129 (16)	CH ₃ CO- S	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50
130 (16)	CH ₃ CO- ND	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50

Table A-1-3. (Continued)

131 (16)	CH3CO-	N	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	139.89...	195.92				
132 (16)	CH3CO-	O	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	146.11...	188.69				
133 (16)	CH3CO-	Y	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	194.50...	197.50				
134 (16)	CH3CO-	CD	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	173.57...	226.94				
135 (16)	CH3CO-	CT	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	187.07...	226.94				
136 (16)	CH3CO-	CS	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	195.42...	219.12				
137 (17)	CH3CS-	S	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	180.00...	240.00				
138 (17)	CH3CS-	ND	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	180.00...	240.00				
139 (17)	CH3CS-	N	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	180.00...	240.00				
140 (17)	CH3CS-	O	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	180.00...	240.00				
141 (17)	CH3CS-	Y	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	180.00...	240.00				
142 (17)	CH3CS-	CD	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	180.00...	240.00				
143 (17)	CH3CS-	CT	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	180.00...	240.00				
144 (17)	CH3CS-	CS	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	180.00...	240.00				
145 (18)	CH3C (=NH)-	S	1.40...	3.08	3.35...	12.59	-2.74...	40.50	130.00...	190.00				
146 (18)	CH3C (=NH)-	ND	1.40...	3.08	3.35...	12.59	-2.74...	40.50	130.00...	190.00				
147 (18)	CH3C (=NH)-	N	1.40...	3.08	3.35...	12.59	-2.74...	40.50	130.00...	190.00				
148 (18)	CH3C (=NH)-	O	1.40...	3.08	3.35...	12.59	-2.74...	40.50	130.00...	190.00				
149 (18)	CH3C (=NH)-	Y	1.40...	3.08	3.35...	12.59	-2.74...	40.50	130.00...	190.00				
150 (18)	CH3C (=NH)-	CD	1.40...	3.08	3.35...	12.59	-2.74...	40.50	130.00...	190.00				
151 (18)	CH3C (=NH)-	CT	1.40...	3.08	3.35...	12.59	-2.74...	40.50	130.00...	190.00				
152 (18)	CH3C (=NH)-	CS	1.40...	3.08	3.35...	12.59	-2.74...	40.50	130.00...	190.00				
153 (19)	CH3C (=NN)-	S	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	113.40...	175.84				
154 (19)	CH3C (=NN)-	ND	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	113.40...	175.84				
155 (19)	CH3C (=NN)-	N	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	113.40...	175.84				
156 (19)	CH3C (=NN)-	O	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	113.40...	175.84				
157 (19)	CH3C (=NN)-	Y	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	113.40...	175.84				
158 (19)	CH3C (=NN)-	CD	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	113.40...	175.84				
159 (19)	CH3C (=NN)-	CT	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	113.40...	175.84				
160 (19)	CH3C (=NN)-	CS	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	113.40...	175.84				
161 (20)	CH3CH=	*	1.40...	3.08	3.56...	10.52	-2.74...	40.50	70.69...	175.54				
162 (21)	-(CH3)C=	I	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	70.69...	175.54				
163 (21)	-(CH3)C=	Br	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	70.69...	175.54				
164 (21)	-(CH3)C=	Cl	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	70.69...	175.54				
165 (21)	-(CH3)C=	F	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	70.69...	175.54				
166 (21)	-(CH3)C=	S	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	70.69...	175.54				
167 (21)	-(CH3)C=	ND	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	70.69...	175.54				
168 (21)	-(CH3)C=	N	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	70.69...	175.54				
169 (21)	-(CH3)C=	O	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	70.69...	175.54				
170 (21)	-(CH3)C=	Y	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	70.69...	175.54				
171 (21)	-(CH3)C=	CD	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	70.69...	175.54				
172 (21)	-(CH3)C=	CT	1.40...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	70.69...	175.54				
173 (21)	-(CH3)C=	CS	1.00...	3.08	0.00...	0.00	-2.74...	40.50	70.69...	175.54				
174 (22)	CH3SO-	S	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
175 (22)	CH3SO-	ND	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
176 (22)	CH3SO-	N	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
177 (22)	CH3SO-	O	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
178 (22)	CH3SO-	Y	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
179 (22)	CH3SO-	CD	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
180 (22)	CH3SO-	CT	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
181 (22)	CH3SO-	CS	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
182 (23)	CH2SO2-	S	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
183 (23)	CH2SO2-	ND	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
184 (23)	CH2SO2-	N	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
185 (23)	CH2SO2-	O	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
186 (23)	CH2SO2-	Y	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
187 (23)	CH2SO2-	CD	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
188 (23)	CH2SO2-	CT	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
189 (23)	CH2SO2-	CS	1.34...	3.89	0.00...	0.00	10.00...	30.00	0.00...	0.00				
190 (24)	-CH2-	I	2.78...	4.31	0.00...	0.00	-11.60...	19.60	0.00...	0.00				
191 (24)	-CH2-	Br	2.83...	5.22	0.00...	0.00	21.06...	66.42	0.00...	0.00				
192 (24)	-CH2-	Cl	3.09...	6.22	0.00...	0.00	39.46...	56.67	0.00...	0.00				
193 (24)	-CH2-	F	4.23...	5.32	0.00...	0.00	70.00...	90.00	0.00...	0.00				
194 (24)	-CH2-	S	1.59...	5.97	0.00...	0.00	10.24...	88.94	0.00...	0.00				
195 (24)	-CH2-	ND	3.35...	6.44	0.00...	0.00	26.70...	80.24	0.00...	0.00				
196 (24)	-CH2-	N	1.85...	6.44	0.00...	0.00	26.70...	80.42	0.00...	0.00				
197 (24)	-CH2-	O	3.03...	5.90	0.00...	0.00	46.30...	80.59	0.00...	0.00				
198 (24)	-CH2-	Y	2.03...	4.70	0.00...	0.00	-1.67...	53.11	0.00...	0.00				
199 (24)	-CH2-	CD	1.20...	4.80	0.00...	0.00	19.11...	56.40	0.00...	0.00				
200 (24)	-CH2-	CT	1.53...	3.57	0.00...	0.00	-4.91...	44.76	0.00...	0.00				

Table A-1-3. (Continued)

201	(24)	-CH2-	CS	0.40...	2.47	0.00...	0.00		9.41...	57.70	0.00...	0.00
202	(25)	>CH-	I	0.96...	8.30	0.00...	0.00		10.00...	30.00	0.00...	0.00
203	(25)	>CH-	Br	3.18...	7.93	0.00...	0.00		29.92...	67.78	0.00...	0.00
204	(25)	>CH-	Cl	3.57...	7.64	0.00...	0.00		46.35...	88.55	0.00...	0.00
205	(25)	>CH-	F	3.86...	7.60	0.00...	0.00		88.00...	108.00	0.00...	0.00
206	(25)	>CH-	S	1.87...	5.12	0.00...	0.00		28.60...	53.50	0.00...	0.00
207	(25)	>CH-	ND	2.55...	5.74	0.00...	0.00		40.00...	70.00	0.00...	0.00
208	(25)	>CH-	N	1.22...	6.97	0.00...	0.00		39.24...	126.44	0.00...	0.00
209	(25)	>CH-	O	2.04...	8.30	0.00...	0.00		36.42...	98.00	0.00...	0.00
210	(25)	>CH-	Y	1.88...	7.46	0.00...	0.00		11.39...	80.89	0.00...	0.00
211	(25)	>CH-	CD	1.48...	5.36	0.00...	0.00		-33.60...	101.43	0.00...	0.00
212	(25)	>CH-	CT	0.96...	8.30	0.00...	0.00		11.39...	72.78	0.00...	0.00
213	(25)	>CH-	CS	0.96...	2.82	0.00...	0.00		14.45...	97.79	0.00...	0.00
214	(26)	>C<	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00		20.00...	60.00	0.00...	0.00
215	(26)	>C<	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00		61.30...	63.50	0.00...	0.00
216	(26)	>C<	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00		17.77...	127.65	0.00...	0.00
217	(26)	>C<	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00		105.89...	135.10	0.00...	0.00
218	(26)	>C<	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00		20.00...	90.00	0.00...	0.00
219	(26)	>C<	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00		30.00...	90.00	0.00...	0.00
220	(26)	>C<	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00		41.20...	71.97	0.00...	0.00
221	(26)	>C<	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00		51.54...	104.82	0.00...	0.00
222	(26)	>C<	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00		12.99...	46.50	0.00...	0.00
223	(26)	>C<	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00		11.89...	72.57	0.00...	0.00
224	(26)	>C<	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00		30.02...	49.12	0.00...	0.00
225	(26)	>C<	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00		11.89...	56.82	0.00...	0.00
226	(27)	-C=C-	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00		0.00...	150.00	0.00...	0.00
227	(27)	-C=C-	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00		0.00...	150.00	0.00...	0.00
228	(27)	-C=C-	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00		0.00...	150.00	0.00...	0.00
229	(27)	-C=C-	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00		0.00...	150.00	0.00...	0.00
230	(27)	-C=C-	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00		0.00...	150.00	0.00...	0.00
231	(27)	-C=C-	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00		0.00...	150.00	0.00...	0.00
232	(27)	-C=C-	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00		0.00...	150.00	0.00...	0.00
233	(27)	-C=C-	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00		75.00...	90.39	0.00...	0.00
234	(27)	-C=C-	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00		75.00...	90.39	0.00...	0.00
235	(27)	-C=C-	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00		75.00...	90.39	0.00...	0.00
236	(27)	-C=C-	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00		75.00...	90.39	0.00...	0.00
237	(27)	-C=C-	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00		73.00...	90.39	0.00...	0.00
238	(28)	-C=CH	S	-1.56...	5.75	0.00...	0.00		50.00...	86.00	65.00...	95.00
239	(28)	-C=CH	ND	-1.56...	5.75	0.00...	0.00		50.00...	86.00	65.00...	95.00
240	(28)	-C=CH	N	-1.56...	5.75	0.00...	0.00		50.00...	86.00	65.00...	95.00
241	(28)	-C=CH	O	-1.56...	5.75	0.00...	0.00		57.70...	76.07	75.00...	90.39
242	(28)	-C=CH	Y	-1.56...	5.75	0.00...	0.00		57.70...	76.07	75.00...	90.39
243	(28)	-C=CH	CD	-1.56...	5.75	0.00...	0.00		57.70...	76.07	75.00...	90.39
244	(28)	-C=CH	CT	-1.56...	5.75	0.00...	0.00		57.70...	76.07	75.00...	90.39
245	(28)	-C=CH	CS	-1.56...	5.75	0.00...	0.00		57.70...	76.07	75.00...	90.39
246	(29)	-C=N	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00		109.00...	119.00	0.00...	0.00
247	(29)	-C=N	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00		103.00...	123.00	0.00...	0.00
248	(29)	-C=N	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00		103.00...	123.00	0.00...	0.00
249	(29)	-C=N	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00		103.00...	120.00	0.00...	0.00
250	(29)	-C=N	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00		116.90...	119.60	0.00...	0.00
251	(29)	-C=N	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00		110.34...	121.36	0.00...	0.00
252	(29)	-C=N	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00		110.34...	131.62	0.00...	0.00
253	(29)	-C=N	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00		113.60...	131.62	0.00...	0.00
254	(30)	-N=C	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00		140.00...	180.00	0.00...	0.00
255	(30)	-N=C	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00		140.00...	180.00	0.00...	0.00
256	(30)	-N=C	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00		140.00...	180.00	0.00...	0.00
257	(30)	-N=C	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00		140.00...	180.00	0.00...	0.00
258	(30)	-N=C	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00		140.00...	180.00	0.00...	0.00
259	(30)	-N=C	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00		140.00...	180.00	0.00...	0.00
260	(30)	-N=C	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00		140.00...	180.00	0.00...	0.00
261	(30)	-N=C	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00		140.00...	180.00	0.00...	0.00
262	(31)	=CH2	*	3.86...	7.08	0.00...	0.00		36.99...	160.13	0.00...	0.00
263	(32)	=C=O	*	0.00...	0.00	0.00...	0.00		118.53...	195.42	0.00...	0.00
264	(33)	=C-S	*	0.00...	0.00	0.00...	0.00		119.00...	250.00	0.00...	0.00
265	(34)	=C-NH	*	3.35...	12.59	0.00...	0.00		150.00...	250.00	0.00...	0.00
266	(35)	=C=NN	*	0.00...	0.00	0.00...	0.00		129.12...	250.00	0.00...	0.00
267	(36)	=C=	*	0.00...	0.00	0.00...	0.00		129.12...	250.00	0.00...	0.00
268	(37)	-CH=	I	3.56...	10.52	0.00...	0.00		70.69...	175.54	0.00...	0.00
269	(37)	-CH=	Br	3.56...	10.52	0.00...	0.00		70.69...	175.54	0.00...	0.00
270	(37)	-CH=	Cl	3.56...	10.52	0.00...	0.00		70.69...	175.54	0.00...	0.00

Table A-1-3. (Continued)

271 (37)	-CH=	F	3.56...	10.52	0.00...	0.00	70.69...	175.54	0.00...	0.00
272 (37)	-CH=	S	3.56...	10.52	0.00...	0.00	70.69...	175.54	0.00...	0.00
273 (37)	-CH=	ND	3.56...	10.52	0.00...	0.00	70.69...	175.54	0.00...	0.00
274 (37)	-CH=	N	3.56...	10.52	0.00...	0.00	70.69...	175.54	0.00...	0.00
275 (37)	-CH=	O	3.56...	10.52	0.00...	0.00	70.69...	175.54	0.00...	0.00
276 (37)	-CH=	Y	3.56...	10.52	0.00...	0.00	70.69...	175.54	0.00...	0.00
277 (37)	-CH=	CD	3.56...	10.52	0.00...	0.00	70.69...	175.54	0.00...	0.00
278 (37)	-CH=	CT	3.56...	10.52	0.00...	0.00	70.69...	175.54	0.00...	0.00
279 (37)	-CH=	CS	3.56...	10.52	0.00...	0.00	70.69...	175.54	0.00...	0.00
280 (38)	>C=	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	81.08...	194.37	0.00...	0.00
281 (38)	>C=	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	81.08...	194.37	0.00...	0.00
282 (38)	>C=	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	81.08...	194.37	0.00...	0.00
283 (38)	>C=	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	81.08...	194.37	0.00...	0.00
284 (38)	>C=	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	81.08...	194.37	0.00...	0.00
285 (38)	>C=	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	81.08...	194.37	0.00...	0.00
286 (38)	>C=	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	81.08...	194.37	0.00...	0.00
287 (38)	>C=	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	81.08...	194.37	0.00...	0.00
288 (38)	>C=	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	81.08...	194.37	0.00...	0.00
289 (38)	>C=	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	81.08...	194.37	0.00...	0.00
290 (38)	>C=	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	81.08...	194.37	0.00...	0.00
291 (38)	>C=	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	81.08...	194.37	0.00...	0.00
292 (39)	-CH=O	S	5.99...	12.39	0.00...	0.00	180.00...	200.00	0.00...	0.00
293 (39)	-CH=O	ND	5.99...	12.39	0.00...	0.00	140.00...	180.00	0.00...	0.00
294 (39)	-CH=O	N	7.56...	8.64	0.00...	0.00	140.00...	180.00	0.00...	0.00
295 (39)	-CH=O	O	7.70...	8.17	0.00...	0.00	138.35...	183.05	0.00...	0.00
296 (39)	-CH=O	Y	8.41...	11.79	0.00...	0.00	177.20...	191.10	0.00...	0.00
297 (39)	-CH=O	CD	5.99...	12.39	0.00...	0.00	175.34...	211.15	0.00...	0.00
298 (39)	-CH=O	CT	5.99...	12.39	0.00...	0.00	75.34...	211.13	0.00...	0.00
299 (39)	-CH=O	CS	8.70...	10.54	0.00...	0.00	183.78...	222.90	0.00...	0.00
300 (40)	-CH=S	S	-10.00...	10.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
301 (40)	-CH=S	ND	-10.00...	10.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
302 (40)	-CH=S	N	-10.00...	10.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
303 (40)	-CH=S	O	-10.00...	10.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
304 (40)	-CH=S	Y	-10.00...	10.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
305 (40)	-CH=S	CD	-10.00...	10.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
306 (40)	-CH=S	CT	-10.00...	10.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
307 (40)	-CH=S	CS	-10.00...	10.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
308 (41)	-CH=NH	S	3.56...	10.52	3.35...	12.59	140.00...	180.00	0.00...	0.00
309 (41)	-CH=NH	ND	3.56...	10.52	3.35...	12.59	140.00...	180.00	0.00...	0.00
310 (41)	-CH=NH	N	3.56...	10.52	3.35...	12.59	140.00...	180.00	0.00...	0.00
311 (41)	-CH=NH	O	3.56...	10.52	3.35...	12.59	140.00...	180.00	0.00...	0.00
312 (41)	-CH=NH	Y	3.56...	10.52	3.35...	12.59	140.00...	180.00	0.00...	0.00
313 (41)	-CH=NH	CD	3.56...	10.52	3.35...	12.59	140.00...	180.00	0.00...	0.00
314 (41)	-CH=NH	CT	3.56...	10.52	3.35...	12.59	140.00...	180.00	0.00...	0.00
315 (41)	-CH=NH	CS	3.56...	10.52	3.35...	12.59	140.00...	180.00	0.00...	0.00
316 (42)	-CH=NN	S	5.97...	10.17	0.00...	0.00	127.95...	175.54	0.00...	0.00
317 (42)	-CH=NN	ND	5.97...	10.17	0.00...	0.00	127.95...	175.54	0.00...	0.00
318 (42)	-CH=NN	N	5.97...	10.17	0.00...	0.00	127.95...	175.54	0.00...	0.00
319 (42)	-CH=NN	O	5.97...	10.17	0.00...	0.00	127.95...	175.54	0.00...	0.00
320 (42)	-CH=NN	Y	5.97...	10.17	0.00...	0.00	127.95...	175.54	0.00...	0.00
321 (42)	-CH=NN	CD	5.97...	10.17	0.00...	0.00	127.95...	175.54	0.00...	0.00
322 (42)	-CH=NN	CT	5.97...	10.17	0.00...	0.00	127.95...	175.54	0.00...	0.00
323 (42)	-CH=NN	CS	5.97...	10.17	0.00...	0.00	127.95...	175.54	0.00...	0.00
324 (43)	>C=O	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	150.00...	170.00	0.00...	0.00
325 (43)	>C=O	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	160.00...	170.00	0.00...	0.00
326 (43)	>C=O	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	162.80...	178.40	0.00...	0.00
327 (43)	>C=O	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	150.00...	250.00	0.00...	0.00
328 (43)	>C=O	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	193.70...	194.90	0.00...	0.00
329 (43)	>C=O	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	140.00...	200.00	0.00...	0.00
330 (43)	>C=O	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	139.89...	195.92	0.00...	0.00
331 (43)	>C=O	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	146.11...	188.69	0.00...	0.00
332 (43)	>C=O	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	188.00...	197.50	0.00...	0.00
333 (43)	>C=O	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	173.57...	226.94	0.00...	0.00
334 (43)	>C=O	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	187.07...	226.94	0.00...	0.00
335 (43)	>C=O	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	195.42...	219.12	0.00...	0.00
336 (44)	>C=S	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
337 (44)	>C=S	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
338 (44)	>C=S	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
339 (44)	>C=S	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
340 (44)	>C=S	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00

Table A-1-3. (Continued)

341 (44)	>C=S	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
342 (44)	>C=S	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
343 (44)	>C=S	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
344 (44)	>C=S	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
345 (44)	>C=S	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
346 (44)	>C=S	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
347 (44)	>C=S	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	180.00...	240.00	0.00...	0.00
348 (45)	>C=NH	I	3.35...	12.59	0.00...	0.00	130.00...	190.00	0.00...	0.00
349 (45)	>C=NH	Br	3.35...	12.59	0.00...	0.00	130.00...	190.00	0.00...	0.00
350 (45)	>C=NH	Cl	3.35...	12.59	0.00...	0.00	130.00...	190.00	0.00...	0.00
351 (45)	>C=NH	F	3.35...	12.59	0.00...	0.00	130.00...	190.00	0.00...	0.00
352 (45)	>C=NH	S	3.35...	12.59	0.00...	0.00	130.00...	190.00	0.00...	0.00
353 (45)	>C=NH	ND	3.35...	12.59	0.00...	0.00	130.00...	190.00	0.00...	0.00
354 (45)	>C=NH	N	3.35...	12.59	0.00...	0.00	130.00...	190.00	0.00...	0.00
355 (45)	>C=NH	O	3.35...	12.59	0.00...	0.00	130.00...	190.00	0.00...	0.00
356 (45)	>C=NH	Y	3.35...	12.59	0.00...	0.00	130.00...	190.00	0.00...	0.00
357 (45)	>C=NH	CD	3.35...	12.59	0.00...	0.00	130.00...	190.00	0.00...	0.00
358 (45)	>C=NH	CT	3.35...	12.59	0.00...	0.00	130.00...	190.00	0.00...	0.00
359 (45)	>C=NH	CS	3.35...	12.59	0.00...	0.00	130.00...	190.00	0.00...	0.00
360 (46)	>C=NN	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	113.40...	175.84	0.00...	0.00
361 (46)	>C=NN	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	113.40...	175.84	0.00...	0.00
362 (46)	>C=NN	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	113.40...	175.84	0.00...	0.00
363 (46)	>C=NN	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	113.40...	175.84	0.00...	0.00
364 (46)	>C=NN	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	113.40...	175.84	0.00...	0.00
365 (46)	>C=NN	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	113.40...	175.84	0.00...	0.00
366 (46)	>C=NN	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	113.40...	175.84	0.00...	0.00
367 (46)	>C=NN	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	113.40...	175.84	0.00...	0.00
368 (46)	>C=NN	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	113.40...	175.84	0.00...	0.00
369 (46)	>C=NN	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	113.40...	175.84	0.00...	0.00
370 (46)	>C=NN	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	113.40...	175.84	0.00...	0.00
371 (46)	>C=NN	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	113.40...	175.84	0.00...	0.00
372 (47)	>AC ^{-a}	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	69.73...	105.45	0.00...	0.00
373 (47)	>AC	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	96.64...	142.36	0.00...	0.00
374 (47)	>AC	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	94.00...	157.36	0.00...	0.00
375 (47)	>AC	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	139.68...	175.76	0.00...	0.00
376 (47)	>AC	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	120.88...	161.22	0.00...	0.00
377 (47)	>AC	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	95.97...	165.31	0.00...	0.00
378 (47)	>AC	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	117.85...	164.37	0.00...	0.00
379 (47)	>AC	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	137.86...	173.38	0.00...	0.00
380 (47)	>AC	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	117.25...	157.51	0.00...	0.00
381 (47)	>AC	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	95.39...	140.63	0.00...	0.00
382 (47)	>AC	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	110.10...	113.40	0.00...	0.00
383 (47)	>AC	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	104.00...	181.71	0.00...	0.00
384 (48)	-ACH ^{-b}	Y	5.85...	9.57	0.00...	0.00	76.81...	157.84	0.00...	0.00
385 (49)	-TPL ^{-c}	Y	-0.10...	17.30	0.00...	0.00	136.65...	168.30		
386 (50)	-MDO ^{-d}	Y	5.36...	6.50	0.00...	0.00	136.65...	168.30	86.80...	118.30
387 (51)	-AO ^{-e}	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
388 (52)	-AS ^{-f}	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
389 (53)	-AN ^{-g}	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
390 (54)	-ANH ^{-h}	Y	2.53...	15.25	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
391 (55)	>AN ^{-g}	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
392 (55)	>AN	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
393 (55)	>AN	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
394 (55)	>AN	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
395 (55)	>AN	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
396 (55)	>AN	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
397 (55)	>AN	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
398 (55)	>AN	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
399 (55)	>AN	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
400 (55)	>AN	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
401 (55)	>AN	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
402 (55)	>AN	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
403 (56)	-ANO-	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
404 (57)	-ASO-	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
405 (58)	-ASO2-	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
406 (59)	-N=O	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
407 (59)	-N=O	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
408 (59)	-N=O	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
409 (59)	-N=O	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
410 (59)	-N=O	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00

Table A-1-3. (Continued)

[illegible]

Table A-1-3. (Continued)

481 (68)	-N=	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
482 (68)	-N=	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
483 (68)	-N=	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
484 (68)	-N=	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
485 (68)	-N=	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
486 (68)	-N=	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
487 (68)	-N=	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
488 (68)	-N=	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
489 (68)	-N=	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
490 (69)	-NO=	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
491 (69)	-NO=	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
492 (69)	-NO=	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
493 (69)	-NO=	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
494 (69)	-NO=	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
495 (69)	-NO=	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
496 (69)	-NO=	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
497 (69)	-NO=	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
498 (69)	-NO=	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
499 (69)	-NO=	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
500 (69)	-NO=	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
501 (69)	-NO=	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
502 (70)	-SO2H	S	7.08...	12.28	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
503 (70)	-SO2H	ND	7.08...	12.28	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
504 (70)	-SO2H	N	7.08...	12.28	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
505 (70)	-SO2H	O	7.08...	12.28	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
506 (70)	-SO2H	Y	7.08...	12.28	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
507 (70)	-SO2H	CD	7.08...	12.28	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
508 (70)	-SO2H	CT	7.08...	12.28	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
509 (70)	-SO2H	CS	7.08...	12.28	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
510 (71)	-SO3H	S	5.41...	11.29	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
511 (71)	-SO3H	ND	5.41...	11.29	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
512 (71)	-SO3H	N	5.41...	11.29	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
513 (71)	-SO3H	O	5.41...	11.29	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
514 (71)	-SO3H	Y	5.41...	11.29	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
515 (71)	-SO3H	CD	5.41...	11.29	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
516 (71)	-SO3H	CT	5.41...	11.29	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
517 (71)	-SO3H	CS	5.41...	11.29	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
518 (72)	-SO-	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
519 (72)	-SO-	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
520 (72)	-SO-	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
521 (72)	-SO-	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
522 (72)	-SO-	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
523 (72)	-SO-	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
524 (72)	-SO-	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
525 (72)	-SO-	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
526 (72)	-SO-	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
527 (72)	-SO-	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
528 (72)	-SO-	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
529 (72)	-SO-	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
530 (73)	-SO2-	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
531 (73)	-SO2-	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
532 (73)	-SO2-	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
533 (73)	-SO2-	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
534 (73)	-SO2-	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
535 (73)	-SO2-	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
536 (73)	-SO2-	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
537 (73)	-SO2-	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
538 (73)	-SO2-	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
539 (73)	-SO2-	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
540 (73)	-SO2-	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
541 (73)	-SO2-	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
542 (74)	-OH	S	5.39...	12.17	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
543 (74)	-OH	ND	2.53...	15.25	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
544 (74)	-OH	N	-0.08...	15.64	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
545 (74)	-OH	O	-10.00...	10.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
546 (74)	-OH	Y	-0.10...	17.30	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
547 (74)	-OH	CD	3.30...	16.44	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
548 (74)	-OH	CT	-1.72...	17.30	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
549 (74)	-OH	CS	-1.72...	8.42	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
550 (75)	-SH	S	-2.62...	16.24	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00

Table A-1-3. (Continued)

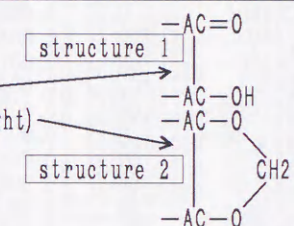
551 (75)	-SH	ND	2.53...	15.25	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
552 (75)	-SH	N	-1.82...	16.24	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
553 (75)	-SH	O	-2.62...	16.24	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
554 (75)	-SH	Y	-1.39...	16.13	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
555 (75)	-SH	CD	3.24...	16.20	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
556 (75)	-SH	CT	-2.62...	16.24	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
557 (75)	-SH	CS	-2.62...	8.24	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
558 (76)	-NH2	S	4.40...	9.38	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
559 (76)	-NH2	ND	-2.59...	17.21	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
560 (76)	-NH2	N	0.27...	8.91	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
561 (76)	-NH2	O	3.25...	14.89	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
562 (76)	-NH2	Y	0.14...	10.04	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
563 (76)	-NH2	CD	2.23...	10.63	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
564 (76)	-NH2	CT	-2.56...	17.21	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
565 (76)	-NH2	CS	-0.34...	9.46	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
566 (77)	-O-	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
567 (77)	-O-	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
568 (77)	-O-	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
569 (77)	-O-	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
570 (77)	-O-	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
571 (77)	-O-	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
572 (77)	-O-	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
573 (77)	-O-	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
574 (77)	-O-	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
575 (77)	-O-	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
576 (77)	-O-	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
577 (77)	-O-	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
578 (78)	-S-	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
579 (78)	-S-	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
580 (78)	-S-	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
581 (78)	-S-	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
582 (78)	-S-	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
583 (78)	-S-	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
584 (78)	-S-	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
585 (78)	-S-	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
586 (78)	-S-	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
587 (78)	-S-	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
588 (78)	-S-	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
589 (78)	-S-	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
590 (79)	-NH-	I	-5.37...	19.69	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
591 (79)	-NH-	Br	-5.37...	19.69	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
592 (79)	-NH-	Cl	-5.37...	19.69	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
593 (79)	-NH-	F	-5.37...	19.69	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
594 (79)	-NH-	S	1.26...	13.26	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
595 (79)	-NH-	ND	4.15...	19.69	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
596 (79)	-NH-	N	3.61...	12.31	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
597 (79)	-NH-	O	5.99...	10.31	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
598 (79)	-NH-	Y	1.51...	15.38	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
599 (79)	-NH-	CD	2.86...	13.97	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
600 (79)	-NH-	CT	-5.37...	19.69	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
601 (79)	-NH-	CS	-5.37...	11.57	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
602 (80)	-N<	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
603 (80)	-N<	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
604 (80)	-N<	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
605 (80)	-N<	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
606 (80)	-N<	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
607 (80)	-N<	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
608 (80)	-N<	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
609 (80)	-N<	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
610 (80)	-N<	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
611 (80)	-N<	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
612 (80)	-N<	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
613 (80)	-N<	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
614 (81)	-NO<	I	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
615 (81)	-NO<	Br	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
616 (81)	-NO<	Cl	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
617 (81)	-NO<	F	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
618 (81)	-NO<	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
619 (81)	-NO<	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
620 (81)	-NO<	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00

Table A-1-3. (Continued)

621 (81)	-NO<	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
622 (81)	-NO<	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
623 (81)	-NO<	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
624 (81)	-NO<	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
625 (81)	-NO<	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
626 (82)	-F	**	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
627 (83)	-Cl	**	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
628 (84)	-Br	**	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
629 (85)	-I	**	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
630 (86)	-* ⁱ	S	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
631 (86)	-*	ND	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
632 (86)	-*	N	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
633 (86)	-*	O	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
634 (86)	-*	Y	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
635 (86)	-*	CD	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
636 (86)	-*	CT	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
637 (86)	-*	CS	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
638 (87)	=* ^j	*	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
639 (88)	-D ^k		0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00
640 (89)	-T ^l		0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00	0.00...	0.00

>AC^a :Aromatic Carbon
 -ACH^b :Aromatic Carbon with a Hydrogen
 -TPL^c :TroPolon, denotes structure 1 right
 -MDO^d :Methylene Di Oxyside (denotes structure 2 right)
 -AO^e :Aromatic Oxygen
 -AS^f :Aromatic Sulfur
 -AN^g >AN^g :Aromatic Nitrogen
 -ANH^h :Aromatic Nitrogen with a Hydrogen
 -*ⁱ :free single bond
 =*^j :free double bond
 -D^k :Dummy Double bond
 -T^l :dummy Triple bond

Cf. Table 2-3. Attributes of components in Chapter 2.



付録-2. 2. のプログラムで用いたCOMPONENT-NMR相関表
(新たに作成した化学シフト出現頻度分布関数のパラメータ)

Table A-2-1.
A correlation data between secondary components and chemical shift of Proton-NMR

no. 2'	component	D	A1	C (ppm)	A2	Y = B*exp (-A (D*X+C) ^ 2) C (ppm)
1	(CH3) 3C-	100	0.0040111600	-140.00000	0.0421481000	-140.00000
2	(CH3) 2CH-	100	0.0016145000	-107.90400	0.0025995700	-107.90400
3	(CH3) 2C-	100	0.0021334700	-126.82800	0.0000000000	0.00000
4	(CH3) 2N-	100	0.0020889899	-287.18543	0.0000000000	0.00000
5	(CH3) 2NO-	100	0.0017000000	-307.00000	0.0021000000	-307.00000
6	(CH3) 2C=	100	0.0229394000	-169.00000	0.0000000000	0.00000
7	CH3CH2-	100	2.4648300000	-88.00000	0.1022560000	-88.00000
8	(CH3) CH-	100	0.0007871260	-120.00000	0.0011523600	-120.00000
9	(CH3) C<	100	0.0009316740	-124.69900	0.0000000000	0.00000
10	CH3-	100	0.0100570000	-230.00000	0.0032139600	-230.00000
11	CH3S-	100	0.0015763900	-236.84600	0.0042204900	-236.84600
12	CH3NH-	100	0.0019887600	-290.64500	0.0030547600	-290.64500
13	CH3N<	100	0.0009104240	-320.00000	0.0004420220	-320.00000
14	CH3NO<	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
15	CH3O-	100	0.0062802800	-390.00000	0.0240365000	-390.00000
16	CH3CO-	100	0.0076251800	-210.00000	0.0009077870	-210.00000
17	CH3CS-	100	0.0001960450	-258.33300	0.0008532700	-258.33300
18	CH3C (=NH) -	100	0.0061000000	-225.00000	0.0064000000	-225.00000
19	CH3C (=NN) -	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
20	CH3CH=	100	0.0040685800	-182.18700	0.0000000000	0.00000
21	(CH3) C=	100	0.0005365090	-216.48600	0.0006954720	-216.48600
22	CH3SO-	100	0.0015717600	-262.00000	0.0062749200	-262.00000
23	CH3SO2-	100	0.0097549300	-312.83300	0.0000000000	0.00000
24	-CH2-	100	0.0039029117	-130.00000	0.0000964135	-130.00000
25	>CH-	100	0.0000331893	-410.00000	0.0000662771	-410.00000
26	>C<	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
27	-C=C-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
28	-C=CH	100	0.0001104720	-252.68700	0.0000000000	0.00000
29	-C=N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
30	-N=C	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
31	=CH2	100	0.0022470100	-486.91300	0.0007775140	-486.91300
32	=C=O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
33	=C=S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
34	=C=NH	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
35	=C=NN	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
36	=C-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
37	-CH=	100	0.0000482389	-690.06500	0.0000501608	-690.06500
38	>C=	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
39	-CH=O	10	0.1068058170	-98.00000	0.0000000000	0.00000
40	-CH=S	10	0.0005130440	-62.10000	0.0074424800	-62.10000
41	-CH=NH	10	0.0044875800	-78.60000	0.0104517000	-78.60000
42	-CH=NN	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
43	>C=O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
44	>C=S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
45	>C=NH	10	0.0003150080	-84.21670	0.0006417670	-84.21670
46	>C=NN	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
47	>AC-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
48	-ACH-	100	0.0009584640	-730.00000	0.0003644110	-730.00000
49	-TPL-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
50	-MDO-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
51	-AO-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
52	-AS-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
53	-AN-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
54	-ANH-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
55	>AN-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
56	-ANO-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
57	-ASO-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
58	-ASO2-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
59	-N=O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
60	-NO2	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000

Table A-2-1. (Continued)

61	-N=S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
62	-NSO	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
63	-N=SO	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
64	-N=NH	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
65	-NO=NH	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
66	-N=NN	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
67	-NO=NN	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
68	-N=	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
69	-NO=	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
70	-SO2H	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
71	-SO3H	10	0.0008732250	-97.21110	0.0019350500	-97.21110
72	-SO-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
73	-SO2-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
74	-OH	10	0.0002479890	-77.96020	0.0002992080	-77.96020
75	-SH	10	0.0585413000	-16.80000	0.0028272700	-16.80000
76	-NH2	10	0.0019674100	-46.60960	0.0019144200	-46.60960
77	-O-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
78	-S-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
79	-NH-	10	0.0012164500	-80.00000	0.0007873030	-80.00000
80	-N<	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
81	-NO<	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
82	-F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
83	-Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
84	-Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
85	-I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
86	-*	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
87	=*	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
88	-D-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
89	-T-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000

Table A-2-2.
A correlation data between secondary components and chemical shift of Carbon13-NMR

no. 2'	component	D	A1	C (ppm)	A2	Y = B*exp (-A (D*X+C)^2) C (ppm)
1	(CH3) 3C-	1	0.0889068000	-34.00000	0.3092140000	-34.00000
2	(CH3) 2CH-	1	0.0324636000	-30.00000	0.0264784000	-30.00000
3	-(CH3) 2C-	1	0.0823084000	-35.00000	0.0305867000	-35.00000
4	(CH3) 2N-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
5	(CH3) 2NO-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
6	(CH3) 2C=	1	0.0530638000	-130.00000	0.0442098000	-130.00000
7	CH3CH2-	1	0.0253026000	-25.00000	0.0452795000	-25.00000
8	-(CH3) CH-	1	0.0043527600	-40.00000	0.0081641000	-40.00000
9	-(CH3) C<	1	0.0198737000	-43.00000	0.1850740000	-43.00000
10	CH3-	1	0.0380605000	-20.00000	0.0553595000	-20.00000
11	CH3S-	10	0.0009337270	-144.21900	0.0000000000	0.00000
12	CH3NH-	10	0.0000904222	-380.00000	0.0004293980	-380.00000
13	CH3N<	10	0.0000652021	-410.00000	0.0000324373	-410.00000
14	CH3NO<	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
15	CH3O-	10	0.0007706470	-540.34000	0.0010572500	-540.34000
16	CH3CO-	1	0.7887070000	-170.00000	0.8280900000	-170.00000
17	CH3CS-	1	0.0024756500	-213.00000	0.0032715500	-213.00000
18	CH3C (=NH) -	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
19	CH3C (=NN) -	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
20	CH3CH=	1	0.0445323000	-125.00000	0.0552467000	-125.00000
21	-(CH3) C=	1	0.0182716000	-136.00000	0.0139683000	-136.00000
22	CH3SO-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
23	CH3SO2-	10	0.0032766700	-390.00000	0.0006096040	-390.00000
24	-CH2-	1	0.0087311000	-34.00000	0.0010078200	-34.00000
25	>CH-	1	0.0017946300	-70.00000	0.0047461300	-70.00000
26	>C<	1	0.0014709500	-75.10760	0.0000000000	0.00000
27	-C=C-	1	0.0136162000	-80.00000	0.0768672000	-80.00000
28	-C=CH	10	0.0000368589	-786.95700	0.0000806449	-786.95700
29	-C=N	1	0.3856190000	-118.00000	0.1404130000	-118.00000
30	-N=C	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
31	=CH2	1	0.0411805000	-114.00000	0.0580927000	-114.00000
32	=C=O	1	1.7917500000	-123.00000	0.2810600000	-123.00000
33	=C=S	1	0.0028855400	-135.57100	0.0002782390	-135.57100
34	=C=NH	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
35	=C=NN	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
36	=C=	1	0.0011216000	-160.68600	0.0000000000	0.00000
37	-CH=	1	0.0153671000	-130.00000	0.0154666000	-130.00000
38	>C=	1	0.0031483014	-140.00000	0.0159130302	-140.00000
39	-CH=O	1	0.0609376000	-190.00000	0.0104440000	-190.00000
40	-CH=S	1	0.0224644000	-189.42900	0.0022449700	-189.42900
41	-CH=NH	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
42	-CH=NN	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
43	>C=O	1	0.0110833000	-173.00000	0.0500770000	-173.00000
44	>C=S	1	0.0376533000	-180.00000	0.0199650000	-180.00000
45	>C=NH	1	0.0035728600	-161.66700	0.0032557500	-161.66700
46	>C=NN	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
47	>AC-	1	0.0127192889	-134.00000	0.0030998351	-134.00000
48	-ACH-	1	0.0846644000	-129.00000	0.4386400000	-129.00000
49	-TPL-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
50	-MDO-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
51	-AO-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
52	-AS-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
53	-AN-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
54	-ANH-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
55	>AN-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
56	-ANO-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
57	-ASO-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
58	-ASO2-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
59	-N=O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
60	-NO2	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000

Table A-2-2. (Continued)

61	-N=S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
62	-NSO	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
63	-N=SO	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
64	-N=NH	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
65	-NO=NH	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
66	-N=NN	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
67	-NO=NN	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
68	-N=	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
69	-NO=	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
70	-SO2H	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
71	-SO3H	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
72	-SO-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
73	-SO2-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
74	-OH	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
75	-SH	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
76	-NH2	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
77	-O-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
78	-S-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
79	-NH-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
80	-N<	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
81	-NO<	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
82	-F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
83	-Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
84	-Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
85	-I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
86	-*	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
87	=*	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
88	-D-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
89	-T-	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000

Table A-2-3.

A correlation data between tertiary components and chemical shift of Proton-NMR

no. 3' (2')	component afferent nature D	Y = B*exp (-A(D*X+C) ^ 2)			
		A1	C (ppm)	A2	C (ppm)
1 (1)	(CH3) 3C- S 100	0.0003306120	-141.50000	0.0015043000	-141.50000
2 (1)	(CH3) 3C- ND 100	0.0041000000	-136.00000	0.0222000000	-136.00000
3 (1)	(CH3) 3C- N 100	0.0140204000	-130.78900	0.0000000000	0.00000
4 (1)	(CH3) 3C- O 100	0.0007148340	-145.40700	0.0027126100	-145.40700
5 (1)	(CH3) 3C- Y 100	0.0113014000	-140.00000	0.0681106000	-140.00000
6 (1)	(CH3) 3C- CD 100	0.0069869200	-138.00000	0.1927330000	-138.00000
7 (1)	(CH3) 3C- CT 100	0.0040000000	-137.00000	0.0232000000	-137.00000
8 (1)	(CH3) 3C- CS 100	0.0302926000	-92.00000	0.0072558000	-92.00000
9 (2)	(CH3) 2CH- S 100	0.0523186000	-128.66700	0.0000000000	0.00000
10 (2)	(CH3) 2CH- ND 100	0.0022795900	-129.00000	0.0008873740	-129.00000
11 (2)	(CH3) 2CH- N 100	0.0192778000	-121.44000	0.0000000000	0.00000
12 (2)	(CH3) 2CH- O 100	0.0282994000	-128.29300	0.0193203000	-128.29300
13 (2)	(CH3) 2CH- Y 100	0.0128148000	-133.79800	0.2341080000	-133.79800
14 (2)	(CH3) 2CH- CD 100	0.0575053000	-118.42600	0.0000000000	0.00000
15 (2)	(CH3) 2CH- CT 100	0.0042000000	-134.00000	0.0201000000	-134.00000
16 (2)	(CH3) 2CH- CS 100	0.0392207000	-91.00000	0.0324569000	-91.00000
17 (2)	(CH3) 2CH- I 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
18 (2)	(CH3) 2CH- Br 100	0.0005972501	-207.80000	0.0000000000	0.00000
19 (2)	(CH3) 2CH- Cl 100	0.0004011482	-182.00000	0.0000000000	0.00000
20 (2)	(CH3) 2CH- F 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
21 (3)	(CH3) 2C- S 100	0.0011699100	-138.75000	0.0000000000	0.00000
22 (3)	(CH3) 2C- ND 100	0.0000380586	-156.00000	0.0000000000	0.00000
23 (3)	(CH3) 2C- N 100	0.0014660600	-131.64300	0.0012850100	-131.64300
24 (3)	(CH3) 2C- O 100	0.0013294300	-140.00000	0.0051322100	-140.00000
25 (3)	(CH3) 2C- Y 100	0.0172557000	-137.37000	0.0000000000	0.00000
26 (3)	(CH3) 2C- CD 100	0.0002738280	-119.66700	0.0004174190	-119.66700
27 (3)	(CH3) 2C- CT 100	0.0004687650	-139.50000	0.0022111700	-139.50000
28 (3)	(CH3) 2C- CS 100	0.0008816820	-110.00000	0.0090739600	-110.00000
29 (4)	(CH3) 2N- S 100	0.0003017400	-280.33300	0.0001758200	-280.33300
30 (4)	(CH3) 2N- ND 100	0.0000703036	-349.00000	0.0001713420	-349.00000
31 (4)	(CH3) 2N- N 100	0.0042000000	-248.00000	0.0011000000	-248.00000
32 (4)	(CH3) 2N- O 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
33 (4)	(CH3) 2N- Y 100	0.1436220000	-290.00000	0.0041772000	-290.00000
34 (4)	(CH3) 2N- CD 100	0.0003783110	-330.00000	0.0081864600	-330.00000
35 (4)	(CH3) 2N- CT 100	0.0022000000	-287.00000	0.0016000000	-287.00000
36 (4)	(CH3) 2N- CS 100	0.0021212900	-242.92900	0.0012836400	-242.92900
37 (5)	(CH3) 2NO- S 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
38 (5)	(CH3) 2NO- ND 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
39 (5)	(CH3) 2NO- N 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
40 (5)	(CH3) 2NO- O 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
41 (5)	(CH3) 2NO- Y 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
42 (5)	(CH3) 2NO- CD 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
43 (5)	(CH3) 2NO- CT 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
44 (5)	(CH3) 2NO- CS 100	0.0017000000	-307.00000	0.0021000000	-307.00000
45 (6)	(CH3) 2C- * 100	0.0229394000	-169.00000	0.0000000000	0.00000
46 (7)	(CH3) 2CH2- S 100	0.0275805000	-131.00000	0.0042717200	-131.00000
47 (7)	(CH3) 2CH2- ND 100	0.0003042330	-147.50000	0.0018737000	-147.50000
48 (7)	(CH3) 2CH2- N 100	0.0405843000	-114.81200	0.0275695000	-114.81200
49 (7)	(CH3) 2CH2- O 100	0.0202799000	-131.00000	0.0138406000	-131.00000
50 (7)	(CH3) 2CH2- Y 100	0.1507710000	-121.97400	0.0376481000	-121.97400
51 (7)	(CH3) 2CH2- CD 100	0.0217722000	-112.55500	0.0000000000	0.00000
52 (7)	(CH3) 2CH2- CT 100	0.0274243000	-114.88900	0.0222909000	-114.88900
53 (7)	(CH3) 2CH2- CS 100	0.1361740000	-90.72260	0.0000000000	0.00000
54 (8)	(CH3) CH- I 100	0.0100000000	-194.00000	0.0000000000	0.00000
55 (8)	(CH3) CH- Br 100	0.0080107400	-184.00000	0.0014882100	-184.00000
56 (8)	(CH3) CH- Cl 100	0.0029190500	-172.35700	0.0008966530	-172.35700
57 (8)	(CH3) CH- F 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
58 (8)	(CH3) CH- S 100	0.0057978600	-140.14300	0.0045698700	-140.14300
59 (8)	(CH3) CH- ND 100	0.0038000000	-139.00000	0.0248000000	-139.00000
60 (8)	(CH3) CH- N 100	0.0017229900	-135.75000	0.0031417900	-135.75000

Table A-2-3. (Continued)

61 (8)	(CH3) CH- O 100	0.0118926000	-135.01200	0.0000000000	0.00000
62 (8)	(CH3) CH- Y 100	0.0050439300	-128.80600	0.0167177000	-128.80600
63 (8)	(CH3) CH- CD 100	0.0111569000	-115.75000	0.0000000000	0.00000
64 (8)	(CH3) CH- CT 100	0.0004912140	-136.50000	0.0019839700	-136.50000
65 (8)	(CH3) CH- CS 100	0.0387213000	-87.00000	0.0000000000	0.00000
66 (9)	(CH3) C< I 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
67 (9)	(CH3) C< Br 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
68 (9)	(CH3) C< Cl 100	0.0437123009	-273.00000	0.0000000000	0.00000
69 (9)	(CH3) C< F 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
70 (9)	(CH3) C< S 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
71 (9)	(CH3) C< ND 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
72 (9)	(CH3) C< N 100	0.0003030830	-166.00000	0.0006175250	-166.00000
73 (9)	(CH3) C< O 100	0.0181474000	-130.00000	0.0026079600	-130.00000
74 (9)	(CH3) C< Y 100	0.0004771990	-168.69200	0.0005731770	-168.69200
75 (9)	(CH3) C< CD 100	0.0027153500	-115.37700	0.0059979000	-115.37700
76 (9)	(CH3) C< CT 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
77 (9)	(CH3) C< CS 100	0.6618550000	-70.00000	2.3025900000	-70.00000
78 (10)	CH3- ND 100	0.0009000000	-434.00000	0.0058000000	-434.00000
79 (10)	CH3- Y 100	0.0049248100	-230.00000	0.0050162200	-230.00000
80 (10)	CH3- CT 100	0.0111803000	-185.61500	0.0036414600	-185.61500
81 (11)	CH3S- S 100	0.0038000000	-243.00000	0.0019000000	-243.00000
82 (11)	CH3S- ND 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
83 (11)	CH3S- N 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
84 (11)	CH3S- O 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
85 (11)	CH3S- Y 100	0.0002534190	-241.55600	0.0001745360	-241.55600
86 (11)	CH3S- CD 100	0.0110838000	-249.29400	0.0019651200	-249.29400
87 (11)	CH3S- CT 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
88 (11)	CH3S- CS 100	0.2558500000	-213.05000	0.0000000000	0.00000
89 (12)	CH3NH- S 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
90 (12)	CH3NH- ND 100	0.0014000000	-327.00000	0.0027000000	-327.00000
91 (12)	CH3NH- N 100	0.0046044500	-275.33300	0.0000000000	0.00000
92 (12)	CH3NH- O 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
93 (12)	CH3NH- Y 100	0.0076177800	-298.00000	0.0232197000	-298.00000
94 (12)	CH3NH- CD 100	0.0027175800	-290.06200	0.0037073300	-290.06200
95 (12)	CH3NH- CT 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
96 (12)	CH3NH- CS 100	0.0004211140	-289.00000	0.0010000000	-289.00000
97 (13)	CH3N< I 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
98 (13)	CH3N< Br 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
99 (13)	CH3N< Cl 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
100 (13)	CH3N< F 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
101 (13)	CH3N< S 100	0.0001684250	-320.50000	0.0002598350	-320.50000
102 (13)	CH3N< ND 100	0.0000615513	-365.75000	0.0001551890	-365.75000
103 (13)	CH3N< N 100	0.0009140260	-321.00000	0.0079695800	-321.00000
104 (13)	CH3N< O 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
105 (13)	CH3N< Y 100	0.0001544100	-367.00000	0.0050459200	-367.00000
106 (13)	CH3N< CD 100	0.0032116600	-328.01500	0.0014788600	-328.01500
107 (13)	CH3N< CT 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
108 (13)	CH3N< CS 100	0.0103031000	-235.00000	0.0325179000	-235.00000
109 (14)	CH3NO< I 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
110 (14)	CH3NO< Br 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
111 (14)	CH3NO< Cl 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
112 (14)	CH3NO< F 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
113 (14)	CH3NO< S 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
114 (14)	CH3NO< ND 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
115 (14)	CH3NO< N 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
116 (14)	CH3NO< O 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
117 (14)	CH3NO< Y 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
118 (14)	CH3NO< CD 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
119 (14)	CH3NO< CT 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
120 (14)	CH3NO< CS 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
121 (15)	CH3O- S 100	0.0008991440	-381.88900	0.0007495490	-381.88900
122 (15)	CH3O- ND 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
123 (15)	CH3O- N 100	0.0048000000	-391.00000	0.0104000000	-391.00000
124 (15)	CH3O- O 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
125 (15)	CH3O- Y 100	0.0098832400	-390.00000	0.0406967000	-390.00000
126 (15)	CH3O- CD 100	0.0050019000	-383.44300	0.0064029100	-383.44300
127 (15)	CH3O- CT 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
128 (15)	CH3O- CS 100	0.0089677700	-340.00000	0.0094071100	-340.00000
129 (16)	CH3CO- S 100	0.0004850380	-240.00000	0.0009010140	-240.00000
130 (16)	CH3CO- ND 0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000

Table A-2-3. (Continued)

131 (16)	CH3CO-	N	100	0.0029347900	-220.00000	0.0025979900	-220.00000
132 (16)	CH3CO-	O	100	0.0092451700	-210.00000	0.0021023000	-210.00000
133 (16)	CH3CO-	Y	100	0.0812675000	-261.00000	0.1590070000	-261.00000
134 (16)	CH3CO-	CD	100	0.0021649600	-240.00000	0.0012734600	-240.00000
135 (16)	CH3CO-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
136 (16)	CH3CO-	CS	100	0.0580747000	-215.78300	0.0360385000	-215.78300
137 (17)	CH3CS-	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
138 (17)	CH3CS-	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
139 (17)	CH3CS-	N	100	0.0001960450	-258.33300	0.0008532700	-258.33300
140 (17)	CH3CS-	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
141 (17)	CH3CS-	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
142 (17)	CH3CS-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
143 (17)	CH3CS-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
144 (17)	CH3CS-	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
145 (18)	CH3C (=NH)-	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
146 (18)	CH3C (=NH)-	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
147 (18)	CH3C (=NH)-	N	100	0.0061000000	-225.00000	0.0054000000	-225.00000
148 (18)	CH3C (=NH)-	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
149 (18)	CH3C (=NH)-	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
150 (18)	CH3C (=NH)-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
151 (18)	CH3C (=NH)-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
152 (18)	CH3C (=NH)-	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
153 (19)	CH3C (=NN)-	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
154 (19)	CH3C (=NN)-	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
155 (19)	CH3C (=NN)-	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
156 (19)	CH3C (=NN)-	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
157 (19)	CH3C (=NN)-	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
158 (19)	CH3C (=NN)-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
159 (19)	CH3C (=NN)-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
160 (19)	CH3C (=NN)-	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
161 (20)	CH3CH=	*	100	0.0040885800	-182.18700	0.0000000000	0.00000
162 (21)	-(CH3)C=	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
163 (21)	-(CH3)C=	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
164 (21)	-(CH3)C=	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
165 (21)	-(CH3)C=	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
166 (21)	-(CH3)C=	S	100	0.0019510800	-242.00000	0.0000000000	0.00000
167 (21)	-(CH3)C=	ND	100	0.0050505000	-222.64800	0.0074749900	-222.64800
168 (21)	-(CH3)C=	N	100	0.0035954500	-233.94600	0.0349559000	-233.94600
169 (21)	-(CH3)C=	O	100	0.0012036600	-230.00000	0.0073647000	-230.00000
170 (21)	-(CH3)C=	Y	100	0.0001880970	-228.25000	0.0002367250	-228.25000
171 (21)	-(CH3)C=	CD	100	0.0013333300	-195.76600	0.0030393200	-195.76600
172 (21)	-(CH3)C=	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
173 (21)	-(CH3)C=	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
174 (22)	CH3SO-	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
175 (22)	CH3SO-	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
176 (22)	CH3SO-	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
177 (22)	CH3SO-	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
178 (22)	CH3SO-	Y	100	0.0005261240	-272.50000	0.0007193290	-272.50000
179 (22)	CH3SO-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
180 (22)	CH3SO-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
181 (22)	CH3SO-	CS	100	0.0030174300	-255.00000	0.0000000000	0.00000
182 (23)	CH3SO2-	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
183 (23)	CH2SO2-	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
184 (23)	CH3SO2-	N	100	0.0001832740	-290.50000	0.0003794340	-290.50000
185 (23)	CH2SO2-	O	100	0.0049197100	-318.75000	0.0000000000	0.00000
186 (23)	CH3SO2-	Y	100	0.0002534130	-305.50000	0.0008771610	-305.50000
187 (23)	CH2SO2-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
188 (23)	CH3SO2-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
189 (23)	CH2SO2-	CS	100	0.0014321200	-300.00000	0.0016893700	-300.00000
190 (24)	-CH2-	I	100	0.0008479910	-360.96700	0.0009787400	-360.96700
191 (24)	-CH2-	Br	100	0.0008883060	-370.00000	0.0000551854	-370.00000
192 (24)	-CH2-	Cl	100	0.0009913250	-380.00000	0.0000549509	-380.00000
193 (24)	-CH2-	F	100	2.0794400000	-492.00000	0.3465740000	-492.00000
194 (24)	-CH2-	S	100	0.0010630900	-290.00000	0.0000612817	-290.00000
195 (24)	-CH2-	ND	100	0.0632996000	-332.00000	0.0004786260	-332.00000
196 (24)	-CH2-	N	100	0.0013113400	-240.00000	0.0000613727	-240.00000
197 (24)	-CH2-	O	100	0.0001593040	-330.00000	0.0000720339	-330.00000
198 (24)	-CH2-	Y	100	0.0009257680	-270.00000	0.0014292600	-270.00000
199 (24)	-CH2-	CD	100	0.0008205850	-240.00000	0.0031028600	-240.00000
200 (24)	-CH2-	CT	100	0.0025131400	-220.00000	0.0007248280	-220.00000

Table A-2-3. (Continued)

201	(24)	-CH2-	CS	100	1.8883600000	-127.00000	0.3398200000	-127.00000
202	(25)	>CH-	I	100	0.0000507613	-429.00000	0.0000412367	-429.00000
203	(25)	>CH-	Br	100	0.0000355758	-608.00000	0.0002619240	-608.00000
204	(25)	>CH-	Cl	100	0.0001652047	-507.01493	0.0000610179	-507.01493
205	(25)	>CH-	F	100	0.0000486442	-567.00000	0.0000450576	-567.00000
206	(25)	>CH-	S	100	0.0000180743	-474.00000	0.0000256464	-474.00000
207	(25)	>CH-	ND	100	0.0002576070	-388.28600	0.0001619880	-388.28600
208	(25)	>CH-	N	100	0.0007430630	-440.00000	0.0002979290	-440.00000
209	(25)	>CH-	O	100	0.0007776360	-440.00000	0.0002948850	-440.00000
210	(25)	>CH-	Y	100	0.0004495650	-420.00000	0.0002233270	-420.00000
211	(25)	>CH-	CD	100	0.0021004500	-292.99600	0.0007277160	-292.99600
212	(25)	>CH-	CT	100	0.0001251500	-272.25000	0.0003166390	-272.25000
213	(25)	>CH-	CS	100	0.0008420160	-270.00000	0.0006256950	-270.00000
214	(26)	>C<	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
215	(26)	>C<	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
216	(26)	>C<	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
217	(26)	>C<	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
218	(26)	>C<	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
219	(26)	>C<	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
220	(26)	>C<	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
221	(26)	>C<	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
222	(26)	>C<	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
223	(26)	>C<	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
224	(26)	>C<	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
225	(26)	>C<	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
226	(27)	-C=C-	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
227	(27)	-C=C-	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
228	(27)	-C=C-	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
229	(27)	-C=C-	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
230	(27)	-C=C-	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
231	(27)	-C=C-	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
232	(27)	-C=C-	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
233	(27)	-C=C-	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
234	(27)	-C=C-	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
235	(27)	-C=C-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
236	(27)	-C=C-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
237	(27)	-C=C-	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
238	(28)	-C=CH	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
239	(28)	-C=CH	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
240	(28)	-C=CH	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
241	(28)	-C=CH	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
242	(28)	-C=CH	Y	100	0.0012731800	-341.00000	0.0260251000	-341.00000
243	(28)	-C=CH	CD	100	0.0000363606	-294.66700	0.0000729621	-294.66700
244	(28)	-C=CH	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
245	(28)	-C=CH	CS	100	0.0010452500	-223.79600	0.0025594900	-223.79600
246	(29)	-C=N	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
247	(29)	-C=N	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
248	(29)	-C=N	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
249	(29)	-C=N	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
250	(29)	-C=N	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
251	(29)	-C=N	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
252	(29)	-C=N	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
253	(29)	-C=N	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
254	(30)	-N=C	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
255	(30)	-N=C	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
256	(30)	-N=C	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
257	(30)	-N=C	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
258	(30)	-N=C	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
259	(30)	-N=C	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
260	(30)	-N=C	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
261	(30)	-N=C	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
262	(31)	=CH2	*	100	0.0022470100	-486.91300	0.0007775140	-486.91300
263	(32)	=C=O	*	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
264	(33)	=C=S	*	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
265	(34)	=C=NH	*	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
266	(35)	=C=NN	*	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
267	(36)	=C=	*	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
268	(37)	-CH=	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
269	(37)	-CH=	Br	10	0.0042981000	-64.40000	0.0025028200	-64.40000
270	(37)	-CH=	Cl	100	0.0002614710	-628.40000	0.0000000000	0.00000

Table A-2-3. (Continued)

271 (37)	-CH=	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
272 (37)	-CH=	S	100	0.0008559140	-750.43100	0.0013228000	-750.43100
273 (37)	-CH=	ND	100	0.0042335400	-808.58400	0.0005706360	-808.58400
274 (37)	-CH=	N	100	0.0002987240	-785.69400	0.0003599720	-785.69400
275 (37)	-CH=	O	100	0.0005877160	-850.00000	0.0100000000	-850.00000
276 (37)	-CH=	Y	100	0.0010867600	-735.09900	0.0004413370	-735.09900
277 (37)	-CH=	CD	100	0.0008722880	-630.00000	0.0003172250	-630.00000
278 (37)	-CH=	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
279 (37)	-CH=	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
280 (38)	>C=	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
281 (38)	>C=	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
282 (38)	>C=	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
283 (38)	>C=	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
284 (38)	>C=	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
285 (38)	>C=	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
286 (38)	>C=	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
287 (38)	>C=	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
288 (38)	>C=	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
289 (38)	>C=	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
290 (38)	>C=	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
291 (38)	>C=	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
292 (39)	-CH=O	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
293 (39)	-CH=O	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
294 (39)	-CH=O	N	100	0.0032214100	-820.18800	0.0008781400	-820.18800
295 (39)	-CH=O	O	100	0.0361015000	-808.22200	0.0289345000	-808.22200
296 (39)	-CH=O	Y	10	0.4611960000	-99.00000	0.0502997000	-99.00000
297 (39)	-CH=O	CD	100	0.0023892500	-965.25000	0.0022312700	-965.25000
298 (39)	-CH=O	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
299 (39)	-CH=O	CS	100	0.0090389300	-980.00000	0.0100000000	-980.00000
300 (40)	-CH=S	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
301 (40)	-CH=S	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
302 (40)	-CH=S	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
303 (40)	-CH=S	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
304 (40)	-CH=S	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
305 (40)	-CH=S	CD	10	0.0005130440	-62.10000	0.0074424800	-62.10000
306 (40)	-CH=S	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
307 (40)	-CH=S	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
308 (41)	-CH=NH	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
309 (41)	-CH=NH	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
310 (41)	-CH=NH	N	10	0.0044875800	-78.60000	0.0104517000	-78.60000
311 (41)	-CH=NH	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
312 (41)	-CH=NH	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
313 (41)	-CH=NH	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
314 (41)	-CH=NH	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
315 (41)	-CH=NH	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
316 (42)	-CH=NN	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
317 (42)	-CH=NN	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
318 (42)	-CH=NN	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
319 (42)	-CH=NN	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
320 (42)	-CH=NN	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
321 (42)	-CH=NN	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
322 (42)	-CH=NN	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
323 (42)	-CH=NN	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
324 (43)	>C=O	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
325 (43)	>C=O	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
326 (43)	>C=O	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
327 (43)	>C=O	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
328 (43)	>C=O	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
329 (43)	>C=O	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
330 (43)	>C=O	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
331 (43)	>C=O	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
332 (43)	>C=O	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
333 (43)	>C=O	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
334 (43)	>C=O	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
335 (43)	>C=O	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
336 (44)	>C=S	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
337 (44)	>C=S	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
338 (44)	>C=S	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
339 (44)	>C=S	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
340 (44)	>C=S	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000

Table A-2-3. (Continued)

341	(44)	>C=S	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
342	(44)	>C=S	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
343	(44)	>C=S	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
344	(44)	>C=S	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
345	(44)	>C=S	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
346	(44)	>C=S	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
347	(44)	>C=S	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
348	(45)	>C=NH	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
349	(45)	>C=NH	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
350	(45)	>C=NH	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
351	(45)	>C=NH	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
352	(45)	>C=NH	S	10	0.0120000000	-94.00000	0.0430000000	-94.00000
353	(45)	>C=NH	ND	10	0.0033498800	-83.45000	0.0044680400	-83.45000
354	(45)	>C=NH	N	10	0.0003310130	-83.30000	0.0006034790	-83.30000
355	(45)	>C=NH	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
356	(45)	>C=NH	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
357	(45)	>C=NH	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
358	(45)	>C=NH	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
359	(45)	>C=NH	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
360	(46)	>C=NN	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
361	(46)	>C=NN	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
362	(46)	>C=NN	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
363	(46)	>C=NN	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
364	(46)	>C=NN	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
365	(46)	>C=NN	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
366	(46)	>C=NN	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
367	(46)	>C=NN	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
368	(46)	>C=NN	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
369	(46)	>C=NN	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
370	(46)	>C=NN	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
371	(46)	>C=NN	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
372	(47)	>AC- ^a	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
373	(47)	>AC-	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
374	(47)	>AC-	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
375	(47)	>AC-	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
376	(47)	>AC-	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
377	(47)	>AC-	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
378	(47)	>AC-	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
379	(47)	>AC-	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
380	(47)	>AC-	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
381	(47)	>AC-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
382	(47)	>AC-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
383	(47)	>AC-	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
384	(48)	-ACH- ^b	Y	100	0.0009584640	-730.00000	0.0003644110	-730.00000
385	(49)	-TPL- ^c	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
386	(50)	-MDO- ^d	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
387	(51)	-AO- ^e	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
388	(52)	-AS- ^f	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
389	(53)	-AN- ^g	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
390	(54)	-ANH- ^h	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
391	(55)	>AN- ^g	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
392	(55)	>AN-	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
393	(55)	>AN-	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
394	(55)	>AN-	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
395	(55)	>AN-	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
396	(55)	>AN-	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
397	(55)	>AN-	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
398	(55)	>AN-	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
399	(55)	>AN-	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
400	(55)	>AN-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
401	(55)	>AN-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
402	(55)	>AN-	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000

Table A-2-3. (Continued)

510 (71)	-SO3H	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
511 (71)	-SO3H	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
512 (71)	-SO3H	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
513 (71)	-SO3H	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
514 (71)	-SO3H	Y	10	0.0014940500	-91.56670	0.0019606000	-91.56670
515 (71)	-SO3H	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
516 (71)	-SO3H	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
517 (71)	-SO3H	CS	10	0.0018529000	-108.50000	0.0728961000	-108.50000
518 (72)	-SO-	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
519 (72)	-SO-	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
520 (72)	-SO-	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
521 (72)	-SO-	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
522 (72)	-SO-	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
523 (72)	-SO-	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
524 (72)	-SO-	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
525 (72)	-SO-	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
526 (72)	-SO-	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
527 (72)	-SO-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
528 (72)	-SO-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
529 (72)	-SO-	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
530 (73)	-SO2-	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
531 (73)	-SO2-	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
532 (73)	-SO2-	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
533 (73)	-SO2-	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
534 (73)	-SO2-	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
535 (73)	-SO2-	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
536 (73)	-SO2-	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
537 (73)	-SO2-	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
538 (73)	-SO2-	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
539 (73)	-SO2-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
540 (73)	-SO2-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
541 (73)	-SO2-	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
542 (74)	-OH	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
543 (74)	-OH	ND	10	0.0087175400	-97.47380	0.0033292600	-97.47380
544 (74)	-OH	N	10	0.0004903940	-84.13530	0.0023116200	-84.13530
545 (74)	-OH	O	10	0.0020000000	-94.50000	1.4440000000	-94.50000
546 (74)	-OH	Y	10	0.0399214000	-46.00000	0.0005930020	-46.00000
547 (74)	-OH	CD	10	0.0014227947	-119.00000	0.0077407408	-119.00000
548 (74)	-OH	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
549 (74)	-OH	CS	100	0.0014789200	-160.00000	0.0000377717	-160.00000
550 (75)	-SH	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
551 (75)	-SH	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
552 (75)	-SH	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
553 (75)	-SH	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
554 (75)	-SH	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
555 (75)	-SH	CD	10	0.0001116370	-120.06000	0.0007466570	-120.06000
556 (75)	-SH	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
557 (75)	-SH	CS	100	0.0223871000	-134.00000	0.0004185690	-134.00000
558 (76)	-NH2	S	100	0.0000663079	-648.84600	0.0000000000	0.00000
559 (76)	-NH2	ND	10	0.0003127620	-56.47500	0.0002935010	-56.47500
560 (76)	-NH2	N	10	0.0038591400	-49.10910	0.0002623220	-49.10910
561 (76)	-NH2	O	10	0.0070000000	-112.00000	0.0321000000	-112.00000
562 (76)	-NH2	Y	10	0.0984258750	-36.00000	0.0031532505	-36.00000
563 (76)	-NH2	CD	10	0.1083140000	-56.00000	0.0138700000	-56.00000
564 (76)	-NH2	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
565 (76)	-NH2	CS	100	0.0003180188	-151.00000	0.0000000000	0.00000
566 (77)	-O-	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
567 (77)	-O-	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
568 (77)	-O-	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
569 (77)	-O-	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
570 (77)	-O-	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000

Table A-2-3. (Continued)

571 (77)	-O-	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
572 (77)	-O-	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
573 (77)	-O-	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
574 (77)	-O-	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
575 (77)	-O-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
576 (77)	-O-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
577 (77)	-O-	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
578 (78)	-S-	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
579 (78)	-S-	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
580 (78)	-S-	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
581 (78)	-S-	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
582 (78)	-S-	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
583 (78)	-S-	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
584 (78)	-S-	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
585 (78)	-S-	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
586 (78)	-S-	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
587 (78)	-S-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
588 (78)	-S-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
589 (78)	-S-	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
590 (79)	-NH-	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
591 (79)	-NH-	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
592 (79)	-NH-	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
593 (79)	-NH-	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
594 (79)	-NH-	S	10	0.0009462340	-100.90000	0.0060690400	-100.90000
595 (79)	-NH-	ND	10	0.0016312800	-120.00000	0.0244147000	-120.00000
596 (79)	-NH-	N	10	0.0050714900	-86.84930	0.0071452400	-86.84930
597 (79)	-NH-	O	10	0.0062397700	-93.52220	0.0000000000	0.00000
598 (79)	-NH-	Y	10	0.0084325700	-87.09450	0.0064635200	-87.09450
599 (79)	-NH-	CD	10	0.0139197000	-60.00000	0.0029179200	-60.00000
600 (79)	-NH-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
601 (79)	-NH-	CS	100	0.0050828500	-130.00000	0.0004496560	-130.00000
602 (80)	-N<	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
603 (80)	-N<	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
604 (80)	-N<	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
605 (80)	-N<	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
606 (80)	-N<	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
607 (80)	-N<	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
608 (80)	-N<	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
609 (80)	-N<	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
610 (80)	-N<	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
611 (80)	-N<	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
612 (80)	-N<	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
613 (80)	-N<	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
614 (81)	-NO<	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
615 (81)	-NO<	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
616 (81)	-NO<	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
617 (81)	-NO<	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
618 (81)	-NO<	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
619 (81)	-NO<	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
620 (81)	-NO<	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
621 (81)	-NO<	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
622 (81)	-NO<	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
623 (81)	-NO<	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
624 (81)	-NO<	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
625 (81)	-NO<	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
626 (82)	-F	**	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
627 (83)	-Cl	**	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
628 (84)	-Br	**	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
629 (85)	-I	**	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
630 (86)	-*	ⁱ S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
631 (86)	-*	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
632 (86)	-*	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
633 (86)	-*	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
634 (86)	-*	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
635 (86)	-*	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
636 (86)	-*	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
637 (86)	-*	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
638 (87)	-*	^j *	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
639 (88)	-D- ^k	0	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
640 (89)	-T- ^l	0	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000

Table A-2-4.
A correlation data between tertiary components and chemical shift of Carbon13-NMR

no. 3' (2')	component	affluent nature D	Y = B*exp (-A (D*X+C) ^2)			
			A1	C (ppm)	A2	C (ppm)
1 (1)	(CH3) 3C- S	10	0.0001842230	-470.00000	0.0000000000	0.00000
2 (1)	(CH3) 3C- ND	10	0.0004160000	-572.85700	0.0000000000	0.00000
3 (1)	(CH3) 3C- N	10	0.0005015090	-530.00000	0.0004514030	-530.00000
4 (1)	(CH3) 3C- O	10	0.0183511000	-800.00000	0.0061661500	-800.00000
5 (1)	(CH3) 3C- Y	1	0.5915000000	-34.00000	0.9564980000	-34.00000
6 (1)	(CH3) 3C- CD	10	0.0003347244	-375.18519	0.0000000000	0.00000
7 (1)	(CH3) 3C- CT	10	0.0133069000	-286.66700	0.0000000000	0.00000
8 (1)	(CH3) 3C- CS	10	0.0080469100	-320.00000	0.0028154100	-320.00000
9 (2)	(CH3) 2CH- S	10	0.0000139448	-404.28600	0.0000000000	0.00000
10 (2)	(CH3) 2CH- ND	10	0.0000058215	-602.50000	0.0000000000	0.00000
11 (2)	(CH3) 2CH- N	10	0.0064024800	-490.00000	0.0054657400	-490.00000
12 (2)	(CH3) 2CH- O	10	0.0085851700	-690.00000	0.0020797800	-690.00000
13 (2)	(CH3) 2CH- Y	10	0.0009379920	-306.66700	0.0000000000	0.00000
14 (2)	(CH3) 2CH- CD	10	0.0001672130	-350.00000	0.0003578310	-350.00000
15 (2)	(CH3) 2CH- CT	10	0.0190000000	-200.00000	0.0130000000	-200.00000
16 (2)	(CH3) 2CH- CS	1	0.0379216000	-30.00000	0.0447225000	-30.00000
17 (2)	(CH3) 2CH- I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
18 (2)	(CH3) 2CH- Br	10	0.0000750070	-600.00000	0.0000000000	0.00000
19 (2)	(CH3) 2CH- Cl	10	0.0000111405	-703.33333	0.0000000000	0.00000
20 (2)	(CH3) 2CH- F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
21 (3)	(CH3) 2C- S	10	0.0000468373	-580.00000	0.0000731783	-580.00000
22 (3)	(CH3) 2C- ND	1	0.0066381392	-89.00000	0.0000000000	0.00000
23 (3)	(CH3) 2C- N	10	0.0004380120	-514.81500	0.0001089990	-514.81500
24 (3)	(CH3) 2C- O	1	1.3862900000	-71.00000	0.0253898000	-71.00000
25 (3)	(CH3) 2C- Y	10	0.0034657400	-370.00000	0.0002503030	-370.00000
26 (3)	(CH3) 2C- CD	10	0.0283294000	-340.00000	0.0172725000	-340.00000
27 (3)	(CH3) 2C- CT	10	0.0010000000	-350.00000	0.2760000000	-350.00000
28 (3)	(CH3) 2C- CS	10	0.0207285000	-330.00000	0.0087642500	-330.00000
45 (6)	(CH3) 2C= *	1	0.1010506080	-129.56522	0.0000000000	0.00000
46 (7)	CH3CH2- S	10	0.0038955000	-260.00000	0.0017580400	-260.00000
47 (7)	CH3CH2- ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
48 (7)	CH3CH2- N	10	0.0009646630	-470.00000	0.0052671900	-470.00000
49 (7)	CH3CH2- O	1	0.4037900000	-61.00000	0.2891420000	-61.00000
50 (7)	CH3CH2- Y	10	0.0016958800	-258.09500	0.0008445000	-258.09500
51 (7)	CH3CH2- CD	10	0.0002131759	-263.56164	0.0000000000	0.00000
52 (7)	CH3CH2- CT	10	0.0035945900	-127.50000	0.0014450600	-127.50000
53 (7)	CH3CH2- CS	10	0.0148072000	-230.00000	0.0229772000	-230.00000
54 (8)	(CH3) CH- I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
55 (8)	(CH3) CH- Br	10	0.0003051280	-492.50000	0.0000000000	0.00000
56 (8)	(CH3) CH- Cl	10	0.0006053050	-563.63600	0.0007504910	-563.63600
57 (8)	(CH3) CH- F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
58 (8)	(CH3) CH- S	10	0.0008096900	-420.00000	0.0179175000	-420.00000
59 (8)	(CH3) CH- ND	10	0.0001150560	-544.00000	0.0000000000	0.00000
60 (8)	(CH3) CH- N	1	1.5617100000	-47.00000	0.0180748000	-47.00000
61 (8)	(CH3) CH- O	1	0.0180272000	-72.59790	0.0677645000	-72.59790
62 (8)	(CH3) CH- Y	1	0.0658671000	-42.00000	0.2086390000	-42.00000
63 (8)	(CH3) CH- CD	1	0.0324904000	-41.51590	0.0376585000	-41.51590
64 (8)	(CH3) CH- CT	10	0.0000090993	-236.00000	0.0000622653	-236.00000
65 (8)	(CH3) CH- CS	1	0.0468789000	-35.43030	0.1756830000	-35.43030
66 (9)	(CH3) C< I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
67 (9)	(CH3) C< Br	10	0.0074869742	-630.00000	0.0000000000	0.00000
68 (9)	(CH3) C< Cl	10	0.0000368338	-850.83300	0.0003161890	-850.83300
69 (9)	(CH3) C< F	1	0.1340000000	-124.00000	0.3550000000	-124.00000
70 (9)	(CH3) C< S	10	0.0037035200	-490.00000	0.0029372800	-490.00000
71 (9)	(CH3) C< ND	1	0.0011589955	-62.75000	0.0000000000	0.00000
72 (9)	(CH3) C< N	1	0.0840756000	-39.00000	0.0100770000	-39.00000
73 (9)	(CH3) C< O	1	0.0218246000	-77.64140	0.0342245000	-77.64140
74 (9)	(CH3) C< Y	10	0.0014462700	-390.00000	0.0014586400	-390.00000
75 (9)	(CH3) C< CD	1	0.0488280000	-40.00000	0.0037742000	-40.00000
76 (9)	(CH3) C< CT	10	0.0050000000	-150.00000	0.0020000000	-150.00000
77 (9)	(CH3) C< CS	10	0.0004385090	-406.42100	0.0005661930	-406.42100
78 (10)	CH3- ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
79 (10)	CH3- Y	1	0.1579660000	-21.00000	0.7101500000	-21.00000
80 (10)	CH3- CT	10	0.0097690000	-40.00000	0.0150408000	-40.00000

Table A-2-4. (Continued)

81 (11)	CH3S- S	10	0.0180000000	-150.00000	0.0020000000	-150.00000
82 (11)	CH3S- ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
83 (11)	CH3S- N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
84 (11)	CH3S- O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
85 (11)	CH3S- Y	10	0.0022510900	-170.76900	0.0049840500	-170.76900
86 (11)	CH3S- CD	10	0.0040546500	-130.00000	0.0007440780	-130.00000
87 (11)	CH3S- CT	10	0.0090000000	-170.00000	0.0030000000	-170.00000
88 (11)	CH3S- CS	10	0.0018549900	-133.68400	0.0000000000	0.00000
89 (12)	CH3NH- S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
90 (12)	CH3NH- ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
91 (12)	CH3NH- N	10	0.0005322750	-396.66700	0.0000000000	0.00000
92 (12)	CH3NH- O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
93 (12)	CH3NH- Y	10	0.0133069000	-296.66700	0.0000000000	0.00000
94 (12)	CH3NH- CD	10	0.0000489849	-297.36800	0.0000914920	-297.36800
95 (12)	CH3NH- CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
96 (12)	CH3NH- CS	10	0.0002278200	-380.00000	0.0001394650	-380.00000
97 (13)	CH3N< I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
98 (13)	CH3N< Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
99 (13)	CH3N< Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
100 (13)	CH3N< F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
101 (13)	CH3N< S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
102 (13)	CH3N< ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
103 (13)	CH3N< N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
104 (13)	CH3N< O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
105 (13)	CH3N< Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
106 (13)	CH3N< CD	10	0.0000300943	-460.00000	0.0000000000	0.00000
107 (13)	CH3N< CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
108 (13)	CH3N< CS	10	0.0010000000	-410.00000	0.0060000000	-410.00000
121 (15)	CH3O- S	10	0.0001070190	-607.50000	0.0000000000	0.00000
122 (15)	CH3O- ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
123 (15)	CH3O- N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
124 (15)	CH3O- O	10	0.0175000000	-560.00000	0.0054000000	-560.00000
125 (15)	CH3O- Y	10	0.0052537200	-560.00000	0.0175820000	-560.00000
126 (15)	CH3O- CD	10	0.0044937800	-520.00000	0.0089979700	-520.00000
127 (15)	CH3O- CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
128 (15)	CH3O- CS	10	0.0002031280	-590.00000	0.0051300400	-590.00000
129 (16)	CH3CO- S	1	0.6303840000	-195.40000	0.0000000000	0.00000
130 (16)	CH3CO- ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
131 (16)	CH3CO- N	1	0.1553100000	-170.91900	0.3110480000	-170.91900
132 (16)	CH3CO- O	1	0.8065330000	-170.00000	0.8122810000	-170.00000
133 (16)	CH3CO- Y	1	0.1477930000	-196.08200	0.0290343000	-196.08200
134 (16)	CH3CO- CD	1	0.2181780000	-198.00000	0.3550110000	-198.00000
135 (16)	CH3CO- CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
136 (16)	CH3CO- CS	1	0.1596080000	-209.00000	0.4488220000	-209.00000
137 (17)	CH3CS- S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
138 (17)	CH3CS- ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
139 (17)	CH3CS- N	1	0.0850000000	-206.00000	0.0380000000	-206.00000
140 (17)	CH3CS- O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
141 (17)	CH3CS- Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
142 (17)	CH3CS- CD	1	0.0280000000	-220.00000	0.1100000000	-220.00000
143 (17)	CH3CS- CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
144 (17)	CH3CS- CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
161 (20)	CH3CH= *	1	0.0445323000	-125.00000	0.0552467000	-125.00000
162 (21)	(CH3) C= I	1	0.0740000000	-95.00000	0.0070000000	-95.00000
163 (21)	(CH3) C= Br	1	0.0009444110	-129.00000	0.0013126800	-129.00000
164 (21)	(CH3) C= Cl	1	0.0045343300	-137.20000	0.0000000000	0.00000
165 (21)	(CH3) C= F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
166 (21)	(CH3) C= S	1	0.0007092540	-142.50000	0.0021950200	-142.50000
167 (21)	(CH3) C= ND	1	0.0088049300	-158.00000	0.0179314000	-158.00000
168 (21)	(CH3) C= N	1	0.0064017400	-145.39500	0.0048317700	-145.39500
169 (21)	(CH3) C= O	1	0.0014050400	-165.00000	0.0026183800	-165.00000
170 (21)	(CH3) C= Y	1	0.0010530600	-136.05600	0.0021042000	-136.05600
171 (21)	(CH3) C= CD	1	0.0175339000	-136.00000	0.0244147000	-136.00000
172 (21)	(CH3) C= CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
173 (21)	(CH3) C= CS	1	0.0008249450	-144.25000	0.0029584800	-144.25000

Table A-2-4. (Continued)

184	(23)	CH3SO2-	N	10	0.0001351230	-355.00000	0.0000000000	0.00000
185	(23)	CH2SO2-	O	10	0.0069314700	-380.00000	0.0069314700	-380.00000
186	(23)	CH3SO2-	Y	10	0.0001287173	-378.00000	0.0000000000	0.00000
187	(23)	CH2SO2-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
188	(23)	CH3SO2-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
189	(23)	CH2SO2-	CS	10	0.0030890700	-400.00000	0.0007697910	-400.00000
190	(24)	-CH2-	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
191	(24)	-CH2-	Br	10	0.0049311100	-330.00000	0.0059576800	-330.00000
192	(24)	-CH2-	Cl	10	0.0008048590	-440.69900	0.0023120400	-440.69900
193	(24)	-CH2-	F	1	0.0081504900	-90.75000	0.0020811300	-90.75000
194	(24)	-CH2-	S	10	0.0002970410	-300.00000	0.0000569280	-300.00000
195	(24)	-CH2-	ND	1	0.0372502000	-50.00000	0.0386956000	-50.00000
196	(24)	-CH2-	N	10	0.0002905190	-480.00000	0.0001290130	-480.00000
197	(24)	-CH2-	O	1	0.0417826000	-65.00000	0.0231473000	-65.00000
198	(24)	-CH2-	Y	1	0.0297483000	-34.40180	0.1686520000	-34.40180
199	(24)	-CH2-	CD	1	0.0372285000	-34.00000	0.0759040000	-34.00000
200	(24)	-CH2-	CT	10	0.0024548600	-190.00000	0.0104049000	-190.00000
201	(24)	-CH2-	CS	10	0.0000284089	-350.00000	0.0000000000	0.00000
202	(25)	>CH-	I	1	0.0059601900	-31.00000	0.0000000000	0.00000
203	(25)	>CH-	Br	1	0.0670566000	-53.00000	0.0699986000	-53.00000
204	(25)	>CH-	Cl	1	0.0080332500	-67.75590	0.0092149300	-67.75590
205	(25)	>CH-	F	1	0.1442540000	-102.61800	0.0460886000	-102.61800
206	(25)	>CH-	S	10	0.0003343940	-510.95700	0.0000000000	0.00000
207	(25)	>CH-	ND	10	0.0000491217	-670.00000	0.0004331960	-670.00000
208	(25)	>CH-	N	1	0.0237518000	-60.00000	0.0381465000	-60.00000
209	(25)	>CH-	O	1	0.3014034800	-72.00000	0.1046742610	-72.00000
210	(25)	>CH-	Y	1	0.5959980000	-44.00000	0.4662050000	-44.00000
211	(25)	>CH-	CD	1	0.0125656000	-45.93350	0.0097879000	-45.93350
212	(25)	>CH-	CT	10	0.0000390420	-330.00000	0.0000000000	0.00000
213	(25)	>CH-	CS	100	0.0000068187	-506.66700	0.0000000000	0.00000
214	(26)	>C<	I	10	0.0001380010	-391.81800	0.0000000000	0.00000
215	(26)	>C<	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
216	(26)	>C<	Cl	1	0.0028362500	-92.00000	0.0080904200	-92.00000
217	(26)	>C<	F	1	0.4163090000	-124.00000	1.2651300000	-124.00000
218	(26)	>C<	S	1	0.0008623580	-89.05000	0.0009629630	-89.05000
219	(26)	>C<	ND	1	0.0001816430	-91.08330	0.0000000000	0.00000
220	(26)	>C<	N	1	0.0015585000	-76.60000	0.0020107100	-76.60000
221	(26)	>C<	O	1	0.0043068199	-80.00000	0.0018666172	-80.00000
222	(26)	>C<	Y	10	0.0002112640	-518.37200	0.0004685870	-518.37200
223	(26)	>C<	CD	1	0.0115670000	-49.06980	0.0154523000	-49.06980
224	(26)	>C<	CT	10	0.0000039477	-260.00000	0.0000000000	0.00000
225	(26)	>C<	CS	1	0.0135218000	-47.50260	0.0616270000	-47.50260
226	(27)	-C=C-	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
227	(27)	-C=C-	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
228	(27)	-C=C-	Cl	1	0.0007265120	-72.00000	0.0006417270	-72.00000
229	(27)	-C=C-	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
230	(27)	-C=C-	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
231	(27)	-C=C-	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
232	(27)	-C=C-	N	1	0.0007296300	-70.50000	0.0006063760	-70.50000
233	(27)	-C=C-	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
234	(27)	-C=C-	Y	10	0.0000573134	-840.00000	0.0000000000	0.00000
235	(27)	-C=C-	CD	1	0.0034657900	-85.45000	0.0021971400	-85.45000
236	(27)	-C=C-	CT	10	0.0001793860	-720.17500	0.0002896710	-720.17500
237	(27)	-C=C-	CS	1	0.7890470000	-80.00000	0.9650810000	-80.00000
238	(28)	-C=CH	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
239	(28)	-C=CH	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
240	(28)	-C=CH	N	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
241	(28)	-C=CH	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
242	(28)	-C=CH	Y	10	0.0002951770	-805.00000	0.0002951770	-805.00000
243	(28)	-C=CH	CD	10	0.0000943629	-808.75000	0.0000785404	-808.75000
244	(28)	-C=CH	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
245	(28)	-C=CH	CS	10	0.0000626627	-780.76900	0.0000000000	0.00000
246	(29)	-C=N	S	1	0.2025210000	-112.00000	1.0986100000	-112.00000
247	(29)	-C=N	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
248	(29)	-C=N	N	1	0.0498322190	-117.33333	0.0000000000	0.00000
249	(29)	-C=N	O	1	0.0856789000	-109.00000	0.0340005000	-109.00000
250	(29)	-C=N	Y	1	0.1765080000	-118.00000	0.1926670000	-118.00000
251	(29)	-C=N	CD	1	0.0463430000	-114.84200	0.0571147000	-114.84200
252	(29)	-C=N	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
253	(29)	-C=N	CS	1	0.7913360000	-118.23400	0.1195540000	-118.23400

Table A-2-4. (Continued)

262	(31)	=CH2	*	1	0.0411805000	-114.00000	0.0580927000	-114.00000
263	(32)	=C=O	*	1	0.0031830707	-140.77777	0.0000000000	0.00000
264	(33)	=C=S	*	1	0.0028855400	-135.57100	0.0002782390	-135.57100
265	(34)	=C=NH	*	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
266	(35)	=C=NN	*	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
267	(36)	=C=	*	1	0.0012090997	-163.84000	0.0000000000	0.00000
268	(37)	-CH=	I	10	0.0000269984	-877.14300	0.0000000000	0.00000
269	(37)	-CH=	Br	1	0.0119191000	-113.54500	0.0048497300	-113.54500
270	(37)	-CH=	Cl	1	0.0130027000	-123.90500	0.0122038000	-123.90500
271	(37)	-CH=	F	1	0.0080000000	-148.00000	0.0580000000	-148.00000
272	(37)	-CH=	S	1	0.0035101100	-134.00000	0.0143010000	-134.00000
273	(37)	-CH=	ND	1	0.0313998000	-147.00000	0.0081235200	-147.00000
274	(37)	-CH=	N	1	0.0013985800	-136.37900	0.0013511900	-136.37900
275	(37)	-CH=	O	1	0.0551423000	-143.00000	0.0080118000	-143.00000
276	(37)	-CH=	Y	1	0.0027449500	-129.25100	0.0000000000	0.00000
277	(37)	-CH=	CD	1	0.0173104000	-130.00000	0.0228748000	-130.00000
278	(37)	-CH=	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
279	(37)	-CH=	CS	1	0.0012837679	-191.84666	0.0000000000	0.00000
280	(38)	>C=	I	10	0.0000284824	-856.00000	0.0001760340	-856.00000
281	(38)	>C=	Br	1	0.0042070000	-123.00000	0.0193767000	-123.00000
282	(38)	>C=	Cl	1	0.0725695000	-133.08700	0.0721826000	-133.08700
283	(38)	>C=	F	1	0.0080000000	-157.00000	0.0320000000	-157.00000
284	(38)	>C=	S	1	0.0040531500	-150.00000	0.0020835600	-150.00000
285	(38)	>C=	ND	1	0.0087865100	-160.00000	0.0336763000	-160.00000
286	(38)	>C=	N	1	0.0183648000	-142.75000	0.0000000000	0.00000
287	(38)	>C=	O	1	0.0058088000	-160.66300	0.0145433000	-160.66300
288	(38)	>C=	Y	1	0.0038902700	-129.80000	0.0081587900	-129.80000
289	(38)	>C=	CD	1	0.0107494000	-140.00000	0.0049055700	-140.00000
290	(38)	>C=	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
291	(38)	>C=	CS	1	0.0009595740	-211.00000	0.0214334000	-211.00000
292	(39)	-CH=O	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
293	(39)	-CH=O	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
294	(39)	-CH=O	N	1	1.3862900000	-161.00000	0.0665465000	-161.00000
295	(39)	-CH=O	O	1	0.0842711000	-161.46200	0.0000000000	0.00000
296	(39)	-CH=O	Y	1	0.7491640000	-191.00000	0.0809952000	-191.00000
297	(39)	-CH=O	CD	1	1.4498800000	-191.00000	0.1546390000	-191.00000
298	(39)	-CH=O	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
299	(39)	-CH=O	CS	1	0.2215350000	-201.35300	0.0000000000	0.00000
300	(40)	-CH=S	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
301	(40)	-CH=S	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
302	(40)	-CH=S	N	1	0.0681608000	-187.00000	0.0024818500	-187.00000
303	(40)	-CH=S	O	1	2.7300000000	-184.00000	0.0140000000	-184.00000
304	(40)	-CH=S	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
305	(40)	-CH=S	CD	1	0.0600000000	-207.00000	0.0410000000	-207.00000
306	(40)	-CH=S	CT	1	0.1281610000	-167.93300	0.0549180000	-167.93300
307	(40)	-CH=S	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
324	(43)	>C=O	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
325	(43)	>C=O	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
326	(43)	>C=O	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
327	(43)	>C=O	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
328	(43)	>C=O	S	1	0.0072295500	-177.48400	0.0021174700	-177.48400
329	(43)	>C=O	ND	1	0.0565246000	-158.00000	0.0514749000	-158.00000
330	(43)	>C=O	N	1	0.0095115200	-164.17000	0.0093808800	-164.17000
331	(43)	>C=O	O	1	0.0287307000	-170.31700	0.0219991000	-170.31700
332	(43)	>C=O	Y	1	0.0109525000	-190.00000	0.0138744000	-190.00000
333	(43)	>C=O	CD	1	0.0037803200	-200.00000	0.0134303000	-200.00000
334	(43)	>C=O	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
335	(43)	>C=O	CS	1	0.0840208000	-211.00000	0.0542637000	-211.00000
336	(44)	>C=S	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
337	(44)	>C=S	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
338	(44)	>C=S	Cl	1	0.1950000000	-195.00000	0.0220000000	-195.00000
339	(44)	>C=S	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
340	(44)	>C=S	S	1	0.0534515000	-187.00000	0.0274962000	-187.00000

Table A-2-4. (Continued)

341 (44)	>C=S	ND	1	0.0305170000	-180.00000	0.1906350000	-180.00000
342 (44)	>C=S	N	1	0.0068036400	-178.76800	0.0000000000	0.00000
343 (44)	>C=S	O	1	0.0015822700	-203.33300	0.0000000000	0.00000
344 (44)	>C=S	Y	1	0.0008073039	-203.00000	0.0000000000	0.00000
345 (44)	>C=S	CD	1	0.0027030000	-191.92300	0.0008030390	-191.92300
346 (44)	>C=S	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
347 (44)	>C=S	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
348 (45)	>C=NH	I	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
349 (45)	>C=NH	Br	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
350 (45)	>C=NH	Cl	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
351 (45)	>C=NH	F	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
352 (45)	>C=NH	S	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
353 (45)	>C=NH	ND	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
354 (45)	>C=NH	N	1	0.0035728600	-161.66700	0.0032557500	-161.66700
355 (45)	>C=NH	O	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
356 (45)	>C=NH	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
357 (45)	>C=NH	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
358 (45)	>C=NH	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
359 (45)	>C=NH	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
<hr/>							
372 (47)	>AC- ^a	I	1	0.0314251000	-91.00000	0.0336184000	-91.00000
373 (47)	>AC-	Br	1	0.0096258000	-122.00000	0.0221236000	-122.00000
374 (47)	>AC-	Cl	1	0.0593917000	-134.00000	0.3545450000	-134.00000
375 (47)	>AC-	F	1	3.7246900000	-158.73500	0.0308749000	-158.73500
376 (47)	>AC-	S	1	0.0583038000	-138.60500	0.0494741000	-138.60500
377 (47)	>AC-	ND	1	0.0068728800	-150.00000	0.0223684000	-150.00000
378 (47)	>AC-	N	1	0.0099592500	-142.57100	0.0124979000	-142.57100
379 (47)	>AC-	O	1	0.0131592000	-153.20600	0.0102524000	-153.20600
380 (47)	>AC-	Y	1	0.0124865000	-133.59800	0.0087244700	-133.59800
381 (47)	>AC-	CD	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
382 (47)	>AC-	CT	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
383 (47)	>AC-	CS	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
384 (48)	-ACH- ^b	Y	1	0.0846644000	-129.00000	0.4386400000	-129.00000
385 (49)	-TPL- ^c	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000
386 (50)	-MDO- ^d	Y	0	0.0000000000	0.00000	0.0000000000	0.00000

付録-3. 3. のプログラムで用いた各種データ

Table A-3-1.
The character data
for secondary componentTable A-3-2.
The number of atom
on secondary componentTable A-3-3.
The number of carbon
and hydrogen on center
and attached atom of
secondary componentTable A-3-4.
The free bond data
of secondary component

file name [SCMC.DAT] file name [SCMW.DAT] file name [SCCH.DAT] file name [SCFB.DAT]

'C (CH3) 3'	1	9 4 0 0 0 0 0 0 0	1	1 0 3 9 0 0	1	1 0 0 0 0 0	1
'CH (CH3) 2'	2	7 3 0 0 0 0 0 0 0	2	1 1 2 6 0 0	2	1 0 0 0 0 0	2
'C (CH3) 2'	3	6 3 0 0 0 0 0 0 0	3	1 0 2 6 0 0	3	1 1 0 0 0 0	3
'N (CH3) 2'	4	6 2 1 0 0 0 0 0 0	4	0 0 2 6 0 0	4	1 0 0 0 0 0	4
'NO (CH3) 2'	5	6 2 1 1 0 0 0 0 0	5	0 0 2 6 0 0	5	1 0 0 0 0 0	5
'C (CH3) 2'	6	6 2 0 0 0 0 0 0 0	6	1 0 2 6 0 0	6	2 0 0 0 0 0	6
'C2H5'	7	5 2 0 0 0 0 0 0 0	7	1 2 1 3 0 0	7	1 0 0 0 0 0	7
'CHCH3'	8	4 2 0 0 0 0 0 0 0	8	1 1 1 3 0 0	8	1 1 0 0 0 0	8
'CCH3'	9	3 2 0 0 0 0 0 0 0	9	1 0 1 3 0 0	9	1 1 1 0 0 0	9
'CH3'	10	3 1 0 0 0 0 0 0 0	10	1 3 0 0 0 0	10	1 0 0 0 0 0	10
'SCH3'	11	3 1 0 0 1 0 0 0 0	11	0 0 1 3 0 0	11	1 0 0 0 0 0	11
'NHCH3'	12	4 1 1 0 0 0 0 0 0	12	0 1 1 3 0 0	12	1 0 0 0 0 0	12
'NCH3'	13	3 1 1 0 0 0 0 0 0	13	0 0 1 3 0 0	13	1 1 0 0 0 0	13
'N (O) CH3'	14	3 1 1 1 0 0 0 0 0	14	0 0 1 3 0 0	14	1 1 0 0 0 0	14
'OCH3'	15	3 1 0 1 0 0 0 0 0	15	0 0 1 3 0 0	15	1 0 0 0 0 0	15
'COCH3'	16	3 2 0 1 0 0 0 0 0	16	1 0 1 3 0 0	16	1 0 0 0 0 0	16
'CSCH3'	17	3 2 0 0 1 0 0 0 0	17	1 0 1 3 0 0	17	1 0 0 0 0 0	17
'CNHCH3'	18	4 2 1 0 0 0 0 0 0	18	1 0 1 3 0 1	18	1 0 0 0 0 0	18
'CNNCH3'	19	3 1 2 0 0 0 0 0 0	19	1 0 1 3 0 0	19	1 0 0 0 0 0	19
'CHCH3'	20	4 2 0 0 0 0 0 0 0	20	1 1 1 3 0 0	20	2 0 0 0 0 0	20
'CCH3'	21	3 2 0 0 0 0 0 0 0	21	1 0 1 3 0 0	21	1 2 0 0 0 0	21
'SOCH3'	22	3 1 0 1 1 0 0 0 0	22	0 0 1 3 0 0	22	1 0 0 0 0 0	22
'SO2CH3'	23	3 1 0 2 1 0 0 0 0	23	0 0 1 3 0 0	23	1 0 0 0 0 0	23
'CH2'	24	2 1 0 0 0 0 0 0 0	24	1 2 0 0 0 0	24	1 1 0 0 0 0	24
'CH'	25	1 1 0 0 0 0 0 0 0	25	1 1 0 0 0 0	25	1 1 1 0 0 0	25
'C'	26	0 1 0 0 0 0 0 0 0	26	1 0 0 0 0 0	26	1 1 1 1 0 0	26
'C=C'	27	0 2 0 0 0 0 0 0 0	27	2 0 0 0 0 0	27	1 1 0 0 0 0	27
'C=CH'	28	1 2 0 0 0 0 0 0 0	28	1 0 1 1 0 0	28	1 0 0 0 0 0	28
'C=N'	29	0 1 1 0 0 0 0 0 0	29	1 0 0 0 0 0	29	1 0 0 0 0 0	29
'N=C'	30	0 1 1 0 0 0 0 0 0	30	0 0 1 0 0 0	30	1 0 0 0 0 0	30
'CH2'	31	2 1 0 0 0 0 0 0 0	31	1 2 0 0 0 0	31	2 0 0 0 0 0	31
'CO'	32	0 1 0 1 0 0 0 0 0	32	1 0 0 0 0 0	32	2 0 0 0 0 0	32
'CS'	33	0 1 0 0 1 0 0 0 0	33	1 0 0 0 0 0	33	2 0 0 0 0 0	33
'CNH'	34	1 1 1 0 0 0 0 0 0	34	1 0 0 1 0 0	34	2 0 0 0 0 0	34
'CNN'	35	0 1 2 0 0 0 0 0 0	35	1 0 0 0 0 0	35	2 0 0 0 0 0	35
'C'	36	0 1 0 0 0 0 0 0 0	36	1 0 0 0 0 0	36	2 2 0 0 0 0	36
'CH'	37	1 1 0 0 0 0 0 0 0	37	1 1 0 0 0 0	37	1 2 0 0 0 0	37
'C'	38	0 1 0 0 0 0 0 0 0	38	1 0 0 0 0 0	38	1 1 2 0 0 0	38
'CHO'	39	1 1 0 1 0 0 0 0 0	39	1 1 0 0 0 0	39	1 0 0 0 0 0	39
'CHS'	40	1 1 0 0 1 0 0 0 0	40	1 1 0 0 0 0	40	1 0 0 0 0 0	40

Secondary component no. H, C, N, O, S, F, Cl, Br, I

C, H, C, H, C, H,

↑ ↑
center attached

Table A-3-1.
(Continued)

' CHNH	41
' CHNN	42
' CO	43
' CS	44
' CNH	45
' CNN	46
' AC	47
' ACH	48
' TPL	49
' MDO	50
' AO	51
' AS	52
' AN	53
' ANH	54
' ANX	55
' ANO	56
' ASO	57
' ASO2	58
' NO	59
' NO2	60
' NS	61
' N (O) S	62
' NS (O)	63
' NNH	64
' N (O) NH	65
' NNN	66
' N (O) NN	67
' N	68
' N (O)	69
' SO2H	70
' SO3H	71
' SO	72
' SO2	73
' OH	74
' SH	75
' NH2	76
' O	77
' S	78
' NH	79
' N	80
' N (O)	81
' F	82
' CL	83
' BR	84
' I	85
' *	86
' **	87
' D	88
' T	89
' ?	90

Table A-3-2.
(Continued)

[illegible]

Table A-3-3.
(Continued)

41	1	1	0	1	0	0	41
42	1	1	0	0	0	0	42
43	1	0	0	0	0	0	43
44	1	0	0	0	0	0	44
45	1	0	0	1	0	0	45
46	1	0	0	0	0	0	46
47	1	0	0	0	0	0	47
48	1	1	0	0	0	0	48
49	2	0	0	1	0	0	49
50	2	0	1	2	0	0	50
51	0	0	0	0	0	0	51
52	0	0	0	0	0	0	52
53	0	0	0	0	0	0	53
54	0	1	0	0	0	0	54
55	0	0	0	0	0	0	55
56	0	0	0	0	0	0	56
57	0	0	0	0	0	0	57
58	0	0	0	0	0	0	58
59	0	0	0	0	0	0	59
60	0	0	0	0	0	0	60
61	0	0	0	0	0	0	61
62	0	0	0	0	0	0	62
63	0	0	0	0	0	0	63
64	0	0	0	1	0	0	64
65	0	0	0	1	0	0	65
66	0	0	0	0	0	0	66
67	0	0	0	0	0	0	67
68	0	0	0	0	0	0	68
69	0	0	0	0	0	0	69
70	0	0	0	1	0	0	70
71	0	0	0	1	0	0	71
72	0	0	0	0	0	0	72
73	0	0	0	0	0	0	73
74	0	1	0	0	0	0	74
75	0	1	0	0	0	0	75
76	0	2	0	0	0	0	76
77	0	0	0	0	0	0	77
78	0	0	0	0	0	0	78
79	0	1	0	0	0	0	79
80	0	0	0	0	0	0	80
81	0	0	0	0	0	0	81
82	0	0	0	0	0	0	82
83	0	0	0	0	0	0	83
84	0	0	0	0	0	0	84
85	0	0	0	0	0	0	85
86	0	0	0	0	0	0	86
87	0	0	0	0	0	0	87
88	0	0	0	0	0	0	88
89	0	0	0	0	0	0	89
90	0	0	0	0	0	0	90

Table A-3-4.
(Continued)

1	0	0	0	0	0	41
1	0	0	0	0	0	42
1	1	0	0	0	0	43
1	1	0	0	0	0	44
1	1	0	0	0	0	45
1	1	0	0	0	0	46
4	4	4	0	0	0	47
4	4	0	0	0	0	48
4	4	0	0	0	0	49
4	4	0	0	0	0	50
4	4	0	0	0	0	51
4	4	0	0	0	0	52
4	4	0	0	0	0	53
4	4	0	0	0	0	54
4	4	4	0	0	0	55
4	4	0	0	0	0	56
4	4	0	0	0	0	57
4	4	0	0	0	0	58
1	0	0	0	0	0	59
1	0	0	0	0	0	60
1	0	0	0	0	0	61
1	0	0	0	0	0	62
1	0	0	0	0	0	63
1	0	0	0	0	0	64
1	0	0	0	0	0	65
1	0	0	0	0	0	66
1	0	0	0	0	0	67
1	2	0	0	0	0	68
1	2	0	0	0	0	69
1	0	0	0	0	0	70
1	0	0	0	0	0	71
1	1	0	0	0	0	72
1	1	0	0	0	0	73
1	0	0	0	0	0	74
1	0	0	0	0	0	75
1	0	0	0	0	0	76
1	1	0	0	0	0	77
1	1	0	0	0	0	78
1	1	0	0	0	0	79
1	1	1	0	0	0	80
1	1	1	0	0	0	81
1	0	0	0	0	0	82
1	0	0	0	0	0	83
1	0	0	0	0	0	84
1	0	0	0	0	0	85
1	0	0	0	0	0	86
2	0	0	0	0	0	87
2	2	0	0	0	0	88
3	3	0	0	0	0	89
0	0	0	0	0	0	90

Table A-3-6.
Substructural implication
of secondary component
for CH3-group
file name [SC23.DAT]

26	3	26:>C< ,	1: (CH3) 3C-
25	2	25:>CH-	2: (CH3) 2CH-
26	2	26:>C< ,	3:-(CH3) 2C-
80	2	80:-N< ,	4: (CH3) 2N-
81	2	81:-NO< ,	5: (CH3) 2NO-
38	2	38:>C= ,	6: (CH3) 2C=
24	1	24:-CH2-,	7: CH3CH2-
25	1	25:>CH-,	8:-(CH3) CH-
26	1	26:>C< ,	9:-(CH3) C<
00	1		10: CH3-
78	1	78:-S- ,	11: CH3S-
79	1	79:-NH-,	12: CH3NH-
80	1	80:-N< ,	13: CH3N<
81	1	81:-NO< ,	14: CH3NO<
77	1	77:-O- ,	15: CH3O-
43	1	43:>C=O ,	16: CH3CO-
44	1	44:>C=S ,	17: CH3CS-
45	1	45:>C=NH, 18:CH3C(=NH)-	
46	1	46:>C=NN, 19:CH3C(=NN)-	
37	1	37:-CH= ,	20: CH3CH=
38	1	38:>C= ,	21:-(CH3) C=
72	1	72:-SO- ,	22: CH3SO-
73	1	73:-SO2-,	23: CH3SO2-

Table A-3-7.
Substructural imp.
of secondary component
for the others
file name [SCIC.DAT]

36	04	=C=
35		=C=NN
34		=C=NH
33		=C=S
32		=C=O
37	04	-CH=
42		-CH=NN
41		-CH=NH
40		-CH=S
39		-CH=O
38	04	>C=
46		>C=NN
45		>C=NH
44		>C=S
43		>C=O
68	05	-N=
66		-N=NN
64		-N=NH
63		-N=SO
61		-N=S
59		-N=O
69	04	-NO=
67		-NO=NN
65		-NO=NH
62		-NSO
60		-NO2
72	01	-SO-
70		-SO2H
73	01	-SO2-
71		-SO3H
74	02	-OH
71		-SO3H
70		-SO2H

Table A-3-5.
For acquisition of
afferent nature
file name [SCAN.DAT]

12	12	12	07	07	10	12	12	12	12	0
05	07	07	07	08	10	10	10	10	10	10
10	05	05	12	12	12	11	11	11	06	20
10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	30
10	10	10	10	10	10	09	09	09	09	40
09	09	09	09	09	09	09	09	06	06	50
06	06	06	06	06	06	06	06	06	05	60
05	05	05	08	05	07	08	05	07	07	70
07	04	03	02	01	13	13	13	13	00	80

1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10,

↑フラグメント情報や
マクロコンポーネント情報
を線形入力する場合に部分
構造キーとして用いる

H, C, N, O, S, F, Cl, Br, I

C, H, C, H, C, H,

1, 2, 3, 4, 5, 6,

center attached

Table A-3-8. Command reference

[ADVICE]	助言の表示
[ANALYZE]	入力データから生き残り2次コンポーネントを求める
[BYE]	終了
[CLEAR]	再設定
[CONDITIO]	設定状態の表示
[DATE]	年月日の表示
[DISPLAY]	表示に関する命令の表示
[END]	終了 (BYE と同じ)
[EXECUTE]	構造発生の実行
[FR]	フラグメントの入力
[C]	2次コンポーネントキャラクタを用いた方法で入力
[N]	2次コンポーネント番号を用いた方法で入力
[FILE]	ファイルからの読み込み
[名前]	ファイル [名前] からの読み込み
[GENERATE]	構造発生の実行
[HELP]	ヘルプの表示
[HELLO]	ハロー、ハロー！！
[INPUT]	入力に関する命令の表示
[IR]	***現在無効***
[MC]	マクロコンポーネントの入力など
[POSITIVE]	ポジティブなマクロコンポーネントの入力
[C]	2次コンポーネントキャラクタを用いた方法で入力
[N]	2次コンポーネント番号を用いた方法で入力
[FILE]	ファイルからの読み込み
[NEGATIVE]	ネガティブなマクロコンポーネントの入力
[C]	2次コンポーネントキャラクタを用いた方法で入力
[N]	2次コンポーネント番号を用いた方法で入力
[FILE]	ファイルからの読み込み
[MODE]	入力マクロコンポーネント間で論理積をとるか論理和をとるかの指定を変更
[SHOW]	入力マクロコンポーネントの表示
[HELP]	マクロコンポーネント入力関係のヘルプの表示
[MF]	分子式の入力
[MM]	分子量または分子式の表示
[MS]	***現在無効***
[MASS]	***現在無効***
[MW]	分子量の入力
[CMR]	¹³ C-NMR の入力
[FILE]	ファイルからの読み込み
[SORT]	入力後、化学シフト値の小さいデータからソート
[名前]	ファイル [名前] からの読み込み
[SORT]	入力後、化学シフト値の小さいデータからソート
[HMR]	¹ H-NMR の入力
[FILE]	ファイルからの読み込み
[SORT]	入力後、化学シフト値の小さいデータからソート
[名前]	ファイル [名前] からの読み込み
[SORT]	入力後、化学シフト値の小さいデータからソート
[2MR]	シグナル結合情報の入力
[FILE]	ファイルからの読み込み
[名前]	ファイル [名前] からの読み込み
[HELP]	シグナル結合情報の入力関係のヘルプの表示
[RESET]	再設定
[RESTRICT]	制約条件の変更

Table A-3-8. (Continued)

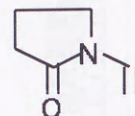
[SHOW]	表示に関する命令の表示あるいは指定項目の表示
[MF]	入力分子式の表示
[MW]	入力分子量の表示
[MC]	入力マクロコンポーネントの表示
[CMR]	入力 ¹³ C-NMRの表示
[HMR]	入力 ¹ H-NMRの表示
[2MR]	シグナル結合情報入力の表示
[SC]	生き残り2次コンポーネントの表示
[CM]	結合行列の表示
[STATUS]	生き残り2次コンポーネントの表示
[TIME]	時分秒の表示
[TRACE]	トレースレベルの変更
[?]	ヘルプの表示 (HELPと同じ)
最後に [FILE]	で画面に出力 (表示) するテキストをファイルに出力

第1キーワードはフルスペルで入力しなくても構いまない。

たとえば、**B** で始まる単語は **BYE** しかないので、**B** や **BY** と入力しても **BYE** と推定できる。

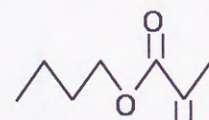
一方、**A** で始まる単語は **ADVICE** と **ANALYZE** があるので、**A** と入力した場合にはどちらの単語か推定できない。この場合は、**AD** と2文字目まで入力すると **ADVICE** と判断できることになる。

Table A-4-1. *N*-vinyl-2-pyrrolidone



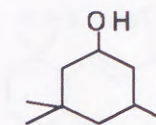
MF C6 H9 N O							
¹³ C-NMR				¹ H-NMR			
signal no.	ppm	Intensity	Multiplicity	signal no.	ppm	Intensity	
1	17.3	50	3	1	2.00-2.30 (2.150)	70	
2	31.2	51	3	2	2.40-2.70 (2.550)	70	
3	44.4	52	3	3	3.45-3.70 (3.575)	65	
4	93.9	57	3	4	4.30-4.60 (4.450)	65	
5	129.3	60	2	5	6.95-7.30 (7.125)	30	
6	170.3	16	1				

Table A-4-2. *n*-butylmethacrylate



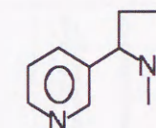
MF C8 H14 O2			
¹³ C-NMR			
signal no.	ppm	Intensity	Multiplicity
1	13.9	40	4
2	18.3	37	4
3	19.7	43	3
4	31.3	39	3
5	64.4	40	3
6	124.4	40	3
7	137.2	34	1
8	166.7	31	1

Table A-4-3. 3,3,5-trimethylcyclohexanol



MF C9 H18 O							
¹³ C-NMR				¹ H-NMR			
signal no.	ppm	Intensity	Multiplicity	signal no.	ppm	Intensity	Grouping
1	22.3	81	4	1	0.89-0.89	30	G
2	25.7	79	4	2	0.90-0.90	30	G
3	27.2	73	2	3	0.98-2.20	70	G
4	32.2	47	1	4	1.11-1.11	40	G
5	33.1	92	4	5	4.16-4.16	20	G
6	44.6	78	3				
7	47.7	87	3				
8	48.1	93	3				
9	67.5	82	2				

Table A-4-4. nicotine



MF C10 H14 N2							
¹³ C-NMR				¹ H-NMR			
signal no.	ppm	Intensity	Multiplicity	signal no.	ppm	Intensity	
1	22.6	28	3	1	1.80	53	
2	35.3	32	3	2	1.90	21	
3	40.2	32	4	3	2.00	19	
4	56.9	40	3	4	2.10	114	
5	68.3	36	2	5	2.30	41	
6	123.4	32	2	6	2.40	28	
7	134.8	33	2	7	2.50	13	
8	138.8	9	1	8	3.00	6	
9	148.4	25	2	9	3.10	20	
10	149.4	25	2	10	3.20	16	
IR							
cm ⁻¹	Intensity	cm ⁻¹	Intensity				
2900	56	1260	11	11	3.30	19	
1690	1	1230	50	12	7.10	17	
1620	3	1170	69	13	7.20	25	
1480	48	1040	54	14	7.60	25	
1450	40	1030	66	15	7.70	18	
1420	21	1000	69	16	8.40	38	
1380	6	980	40	17	8.50	46	
1330	16	930	74	MacroComponent (positive)			
1300	35	845	36				
1280	5	745	85				

* (Pyridine)

→ AC*1-ACH-AN-ACH-ACH-ACH*1

The formula of MC by liner input

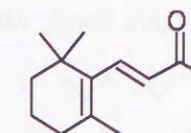
* :free bond

#1 :bridge

Table A-4-5. 2-brexanone



MF C12 H18 O				$^{13}\text{C}-^{13}\text{C}$ signal connectivity	
^{13}C -NMR signal no.	ppm	Intensity	Multiplicity	$^{13}\text{C}-^{13}\text{C}$	
1	61.9	10	1	3	4
2	221.5	10	1	3	7
3	61.4	10	2	4	5
4	25.0	10	3	5	6
5	27.1	10	3	6	11
6	53.9	10	1	7	8
7	55.8	10	1	7	12
8	28.8	10	3	8	9
9	31.6	10	3	1	9
10	9.2	10	4	1	10
11	11.2	10	4		
12	13.6	10	4		

Table A-4-6. β -ionone

MF C13 H20 O				^1H -NMR		
^{13}C -NMR signal no.	ppm	Intensity	Multiplicity	signal no.	ppm	Intensity
1	18.3	10	3	1	1.10	24
2	21.3	10	4	2	1.50	8
3	26.8	10	4	3	1.70	8
4	28.3	20	4	4	1.80	12
5	33.1	10	3	5	2.10	8
6	33.7	10	1	6	2.30	12
7	39.4	10	3	7	6.20	4
8	131.2	10	2	8	7.30	4
9	135.2	10	1			
10	135.7	10	1			
11	142.3	10	2			
12	197.6	10	1			
$^{13}\text{C}-^{13}\text{C}$ signal connectivity				$^{13}\text{C}-^1\text{H}$ signal connectivity		
$^{13}\text{C}-^{13}\text{C}$	$^1\text{H}-^1\text{H}$	$^{13}\text{C}-^1\text{H}$	$^{13}\text{C}-^1\text{H}$	$^{13}\text{C}-^1\text{H}$	$^{13}\text{C}-^1\text{H}$	$^{13}\text{C}-^1\text{H}$
12 3	2 3	4 1	2 4	6 7		
9 2	3 5	7 2	5 5	5 8		
6 4	7 8	1 3	7 6			

$^{13}\text{C}-^{13}\text{C}$ signal connectivity 2 須々田³⁾のD-typeの入力データで、チャートから利用者が見積もることのできる情報である。これは、3. の実行例で使用した。本論文ではシグナル番号を化学シフトの小さい値のものから付けている点に注意。

IR cm ⁻¹ Intensity		MS m/z Int.		51	4	91	18	131	2	171	0
2931	M	52	11	92	4	132	1	172	0		
1673	S	53	2	93	12	133	9	173	0		
1607	M	54	10	94	3	134	2	174	0		
1459	M	55	2	95	9	135	15	175	2		
1361	M	56	2	96	2	136	7	176	1		
1254	M	57	2	97	2	137	2	177	100		
1179	M	58	0	98	0	138	0	178	12		
980	M	59	0	99	0	139	0	179	2		
586	M	60	0	100	0	140	0	180	0		
Fragments		61	0	101	0	141	0	181	0		
-CH=CH-C(=O)CH ₃		62	2	102	1	142	0	182	0		
CH ₃ CH ₃		63	5	103	3	143	0	183	0		
C		64	2	104	2	144	2	184	0		
>C=C-CH ₃		65	9	105	10	145	1	185	0		
-CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -		66	3	106	2	146	0	186	0		
		67	6	107	10	147	2	187	0		
		68	2	108	2	148	1	188	0		
		69	7	109	9	149	11	189	0		
		70	0	110	2	150	2	190	0		
		71	3	111	2	151	1	191	1		
		72	0	112	0	152	0	192	10		
		73	0	113	0	153	0				
		74	2	114	0	154	0				
		75	1	115	3	155	0				
		76	1	116	2	156	0				
		77	13	117	3	157	0				
		78	5	118	2	158	0				
		79	11	119	8	159	6				
		80	2	120	2	160	1				
		81	9	121	10	161	2				
		82	2	122	18	162	2				
		83	2	123	9	163	2				
		84	1	124	0	164	1				
		85	0	125	0	165	1				
		86	0	126	0	166	0				
		87	0	127	2	167	0				
		88	0	128	1	168	0				
		89	2	129	0	169	0				
		90	1	130	0	170	0				

Table A-4-7. longifolene

MF C ₁₅ H ₂₄ O					¹³ C- ¹³ C signal connectivity	
¹³ C-NMR					¹³ C- ¹³ C	
signal no.	ppm	Intensity	Multiplicity			
1	167.58	10	1		3	4
2	99.80	10	3		3	5
3	62.67	10	2		3	9
4	48.49	10	2		5	6
5	45.67	10	2		4	13
6	44.38	10	1		5	14
7	43.85	10	3		8	9
8	36.99	10	3		7	15
9	33.94	10	1		9	10
10	30.85	10	4		9	11
11	30.91	10	4		8	15
12	30.42	10	4		13	14
13	30.19	10	3			
14	26.00	10	3			
15	21.67	10	3			

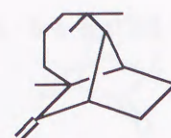


Table A-4-8. methylethylketone

MF C ₄ H ₈ O					¹ H-NMR			
¹³ C-NMR								
signal no.	ppm	Intensity	Multiplicity		signal no.	ppm	Intensity	Multiplicity
1	8.0	10	4		1	1.00	3	3
2	29.0	10	4		2	2.10	3	1
3	36.5	10	3		3	2.40	2	4
4	207.6	10	1					

Fragments		→	The formula of sub-structural fragments information by liner input
CH ₃ CO-,	CH ₃ CH ₂ -,		
CH ₃ -,	CH ₃ CH ₂ -CO-		

CH ₃ CO	<input checked="" type="checkbox"/>
C ₂ H ₅	<input checked="" type="checkbox"/>
CH ₃	<input checked="" type="checkbox"/>
CH ₂ H ₅ -CO	<input checked="" type="checkbox"/>

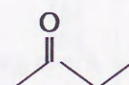


Table A-4-9. hydrocarbon

MF C ₅ H ₁₀ ~ C ₆ H ₁₂		
Fragments		
-CH ₂ -,	-CH ₂ -,	-CH ₂ -,
-CH ₂ -,	-CH ₂ -,	-CH ₂ -

CH ₂	<input checked="" type="checkbox"/>
CH ₂	<input checked="" type="checkbox"/>
CH ₂	<input checked="" type="checkbox"/>
CH ₂	<input checked="" type="checkbox"/>
CH ₂	<input checked="" type="checkbox"/>
CH ₂	<input checked="" type="checkbox"/>

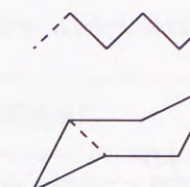
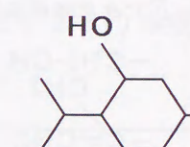


Table A-4-10. L-menthol

MF C ₁₀ H ₂₀ O					¹ H-NMR			
¹³ C-NMR								
signal no.	ppm	Intensity	Multiplicity		signal no.	ppm	Intensity	Grouping
1	16.1	10	2		1	0.80	16	G
2	21.0	10	2		2	0.90	16	G
3	22.2	10	2		3	0.93	16	G
4	23.2	10	3		4	1.10	4	G
5	25.8	10	2		5	1.30	4	G
6	31.7	10	2		6	1.55	8	G
7	34.6	10	3		7	1.95	4	G
8	45.1	10	3		8	2.31	4	G
9	50.1	10	2		9	3.28	4	G
10	71.3	10	2		10	4.46	4	G

Fragments		¹³ C- ¹ H signal connectivity			
-CH-CH ₂ -CH ₂ -CH (CH ₃)-CH ₂ -	# ₁	¹³ C- ¹³ C	¹³ C- ¹³ C	¹³ C- ¹ H	¹³ C- ¹ H
(CH ₃) ₂ CH					
-CH ₂ -, -CH<, -OH, -O-	# ₂				

(CH ₃) ₂ CH-CH-CH ₂ -CH ₂ -CH (CH ₃)-CH ₂	<input checked="" type="checkbox"/>
CH ₂	<input checked="" type="checkbox"/>
CH	<input checked="" type="checkbox"/>
OH	<input checked="" type="checkbox"/>
O	<input checked="" type="checkbox"/>



#₁: 2次元NMRを検討することにより獲得できる部分構造フラグメント³⁾
 #₂: 分子式 (C₁₀ H₂₀ O) から #₁ (C₉ H₁₈) を差し引いた分子式 (C₁ H₂ O) と生き残り SC から見積もった部分構造

Table A-4-11. nootkatone

MF				^{13}C - ^{13}C signal connectivity	
C ₁₅ H ₂₂ O					
^{13}C -NMR	ppm	Intensity	Multiplicity	^{13}C - ^{13}C	
1	14.8	10	4	12 15	1C12 2C15 2C14
2	16.7	10	4	12 14	
3	20.8	10	4	15 9	1C15 2C9
4	31.9	10	3	9 7	1C9 2C7
5	32.9	10	3	7 6	1C7 2C6 2C1
6	39.3	10	1	7 1	
7	40.4	10	2	6 10	1C6 2C10 2C14 2C2
8	40.6	10	2	6 14	
9	42.2	10	3	6 2	
10	44.2	10	3	10 8	1C10 2C8
11	109.2	10	3	8 4	1C8 2C4 2C13
12	124.9	10	2	8 13	
13	149.0	10	1	4 5	1C4 2C5
14	168.2	10	1	5 14	1C5 2C14
15	196.9	10	1	13 3	1C13 2C3 2C11
				13 11	

Fragments	
-CH ₂ -CH(CH ₃)-C(CH ₃)-CH ₂ -CH-CH ₂ -CH ₂ -	$\#_1$
-C=CH ₂ ,	
O=C-CH=C-	$\#_2$

CH ₂ -CH(CH ₃)-C(CH ₃)-CH ₂ -CH-CH ₂ -CH ₂ -
C(CH ₃)=CH ₂ -
CO-CH=C-

The input format for signal connectivity information

$\#_1$: 2次元NMRを検討することにより獲得できる部分構造フラグメント³⁾
 $\#_2$: 分子式(C₁₅H₂₂O)から $\#_1$ (C₉H₁₆)を差し引いた分子式(C₆H₆O)と生き残りSCなどからイソプロペニル基と $\alpha\beta$ 不飽和カルボニル基と見積もった部分構造

付録-5. 略語一覧

Table A-5. Abbreviations and the meanings

略語	意味	(日本語)	(参照箇所)
AN	Afferent Nature	(アフェレントネイチャー)	(1-2. 脚注にて解説)
CHEMICS	Combined Handling of Elucidation Methods for Interpretable Chemical Structures		
CMR	Carbon-13 NMR (^{13}C -NMR)	(^{13}C -核磁気共鳴スペクトル)	
CS	Candidate Structure(s)	(候補構造)	
CS	symbol of component attribute ; center atom is Carbon with only Single bonds		(1-2. Table 1-3 参照)
HMR	Proton NMR (^1H -NMR)	(^1H -核磁気共鳴スペクトル)	
IR	Infra Red rays spectra	(赤外スペクトル)	
MC	MacroComponent	(マクロコンポーネント)	(2-2-3. 脚注にて解説)
MS	Mass spectra	(質量スペクトル)	
NMR	Nuclear Magnetic Resonance spectra		
PC	Personal Computer	(パーソナル コンピュータ)	(3-2-4. 1) 参照)
SC	Secondary Component	(2次コンポーネント)	(2-1. にて解説)
UV	Ultra Violet rays spectra	(紫外スペクトル)	
ZZ	ZZKTMP format	(ZZKTMP形式)	(3-2-2. 2-1) 参照)
2MR	signal connectivity information by 2 dimensional NMR		
フラグメント	substructural fragment	(部分構造フラグメント)	

付録-6. 参考文献

- 1) S. Sasaki, *Handbook of Proton-NMR Spectra and Data*, Asahi Research Center Co., Ltd., (1968).
- 2) LeRoy F. Johnson, William C. Jankowski, *Carbon-13 NMR Spectra*, John Wiley & Sons, Inc., (1972).
- 3) 須々田寛, 1989年度豊橋技術科学大学博士論文, (1990).
- 4) S. R. Heller, G. W. A. Milne, *EPA/NIH Mass Spectral Data Base*, 2, 1070 (1978).

