

# CAS의 技術情報서비스

徐 弘 錫  
KORSTIC 情報處理部

## 1. 概 要

CAS(Cheical Abstracts Service)는 美國化學會(American Chemical Society)의 一部門으로서 化學 및 化學工學의 情報서비스를 世界에서 最初로 한 機關이며, 最大의 機關이다.

### 1.1. 設立目的 및 沿革

Chemical Abstracts(CA)의 發行 및 CA에 收錄된 文獻의 檢索서비스를 하기 위한 機關이다. 그러나 CAS는 1956년에 設立되었지만 CA는 1907년부터 美國化學會에 의해 發行되었다.

化學情報에 관한 Data Processing Technology의 研究開發은 1959년부터 National Science Foundation, National Institute of Health and Department of Defence의 財政的 援助와 더불어 開始되어 1961년에는 世界에서 最初로 電子計算機를 使用하여, 作成한 索引誌 Chemical Titles(CT)를 發行하는 데에 이르렀다. 더우기 1965년에는 이러한 研究成果를 土臺로 하여 Computer Based Information System 開發 5個年計劃을 세웠다.

이 5個年計劃의 目的은 抄錄, 索引誌의 電子計算機에 의한 編輯과 印刷 또는 機械檢索파일(Machine Searchable File) 등의 開發 및 提供에 있다. (CAS에서는 이 計劃을 Intergrated Man-Machine System이라고도 한다.) 그러나 이 計劃은 1969년에 完了되지 못하고 2~3年 늦어지게 되었다.

CA의 最近事業目標은 첫째 Data Processing Technology의 研究開發, 둘째 International Cooperation(所謂 Network를 말함)이다.

이미 英國, 西獨, 덴마크, 스웨덴 및 캐나다 등의 사이에 CA 情報의 Network가 完成되어 있다.

예를 들면 CAS의 Network에 들어 있는 美國內외의 Sub-Center(CA의 索引 또는 檢索을 行하는 Center)

로서는 다음과 같다.

#### ① 國內 :

Aerospace Research Application Center(Indiana)  
American Petroleum Institute(New York)  
Central Abstracting and Indexing Service(New York)  
Dow Chemical Company(Michigan)  
IIT Research Institute(Illinois)  
Intergrated Systems Incorporated(Maryland)  
Knowledge Availability Systems Center(Pennsylvania)  
Louisville Information Referral Center(Kentucky)  
3i Company Information Interscience Incorporated (California)  
University of California(California)  
University of Georgia(Georgia)  
University of Kansas(Kansas)  
University of Iowa(Iowa)

#### ② 國外 :

National Science Library(Canada)  
Chemopetrol(Czechoslovakia)  
Danish Technical Library(Denmark)  
United Kingdom Chemical Information Service(England)  
Chemie Informaton und Documentation(Germany)  
Veszpreemi Vegyipari(Hungary)  
Netherland Organization for Chemical Information (Netherland)  
Swedish Council for Scientific Information and Documentation(Sweden)  
Centre National d'Information Chimique(France)

CAS의 이 Network에 대한 構想의 底意는 이에 의해 各國에 있어서 化學情報의 處理體制를 調節하는 데에 있는 것이 아니라 어디까지나 International Cooperation의 強化 및 擴大에 있는 것이다. 그 때문에 Indexing Center(自國의 化學文獻을 CAS의 分類에 따라 Index-

ing 하여 그의 結果를 CAS에 보내 CAS 테이프의 檢索 서비스를 한다.)는 Indexing 能力이 있는 國家에만 設置하는 것으로 되어 있으며, Output Center(CAS의 테이프에 의해 檢索서비스를 한다.)는 可能한 限 많은 言語로 서비스를 하기 때문에 많이 設置하게 되어 있다.

한편 1972년에는 Plastic Industry Note(PIN)가 發行되기 始作했으며 1973년부터 Chemical Industry Note(CIN)이 發行될 豫定이다.

1.2. 機構 및 豫算

CAS의 시스템은 第1圖와 같으며 Research & Development 部門(以下 R & D 라 함)에는 System Analyst, Programmer 및 化學者로 構成되고 Operating 部門에는 Key Puncher, Key Boading 및 Data Processing Operator 가 있으며, 이들은 直接 電算機에 Input 를 行하는 人員으로서 70여명이 3組로 나누어 1日 8時間씩 2組가 作業을 한다. Abstracting 部門에서 하는 일은 記事의 選擇과 外部抄錄者의 選定이며, 일에 여유가 있을 때에는 Editor 의 일도 한다. Editor 의 作業은 外部抄錄者가 만든 抄錄의 Check, CA 의 各號에 掲載하는 Keyword 索引을 위한 Keyword의 抽出 및 CA의 編輯 등이다.

內部抄錄者는 主로 Basic Journal Abstract, Chemical-Biological Activities 및 Polymer Science & Technology 등에 掲載하는 抄錄을 製作하며, 이 抄錄誌에는 外部抄錄者가 쓴 抄錄은 掲載하지 않는다.

Indexing 部門에는 各種 索引카드를 ABC 順으로 排列하는 Alphabetizer 와 IBM 으로 Output 하는 文字를 Lettering 하는 사람들로 構成되어 있다.

以上과 같이 CAS에는 約 1,000 名의 職員이 있으며 그들은 다음과 같다.

Doctor degree 를 가진 者	100名
Master degree 를 가진 者	100名
Bachelor degree 를 가진 者	200名
其他	600名

以外에 CAS 內部에 抄錄者가 3,000名 있다.

CAS의 1970年度 豫算은 1,800萬弗이며, 그의 收入 內譯은 첫째 需要者로부터 85%, 둘째 政府로부터 15%이며, 上部團體인 美國化學會로부터의 財政的 援助는 없다.

前者는 通常業務經費(Computer 의 通常的 使用經費를 包含)이고, 後者는 研究開發費(Computer 의 새로운 導入經費 包含)이다. 그러나 CAS에서는 시스템開發費 및 Computer 買收費는 國庫補助에 의한다.

2. 業務內容

CAS의 業務內容은 다음과 같다.

2.1. Chemical Abstract 서비스(印刷物에 의한 것)

CA는 化學 및 化學工學에 關係되는 文獻의 英文抄錄誌로서 每週 1回 發行되며, 特히 1971年 12月에는 5百萬番號의 抄錄이 發行되었다.

CA의 情報源은 다음과 같다.

1972年 雜誌	12,000種
抄錄誌	200種
特許明細書(26個國)	13,000件
技術리포르트	5,500件
會議錄	600件
學位論文	3,400件
書籍	3,000種

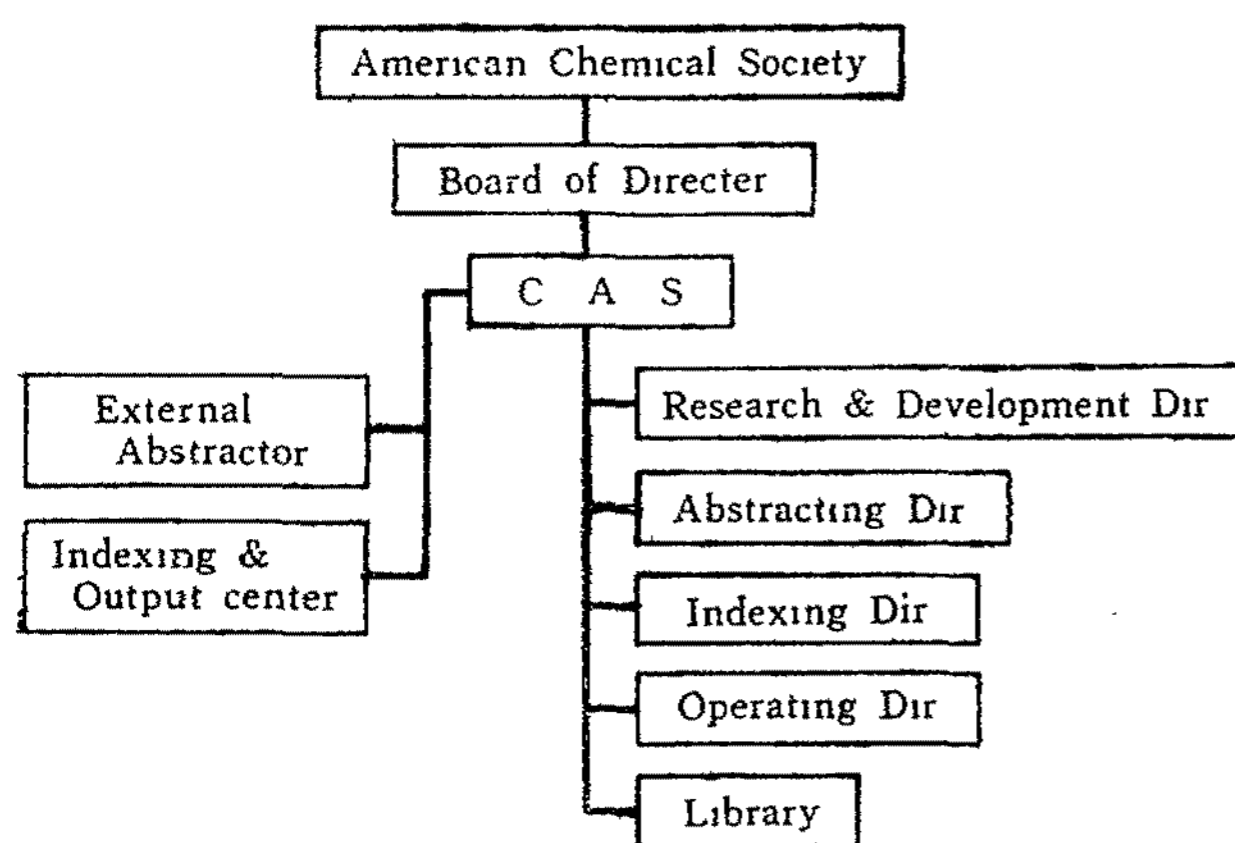
CA의 特徵은 著者索引, 主題索引(Keyword Index), Numerical Patent Index, Formula Index, Hetero-Atom-N-Context Index, Index Guide, Patent Concordance 및 6個月, 1年, 5年마다 發行하는 累積索引 등의 各種 索引이 完備되어 있는 點이다.

이 中에서 Patent Concordance는 CA에 抄錄된 特許에 對應하는 特許(Duplicate Patent)의 索引으로서 印刷物의 形態와 電子計算器로 利用할 수 있게 磁氣테이프로 提供하고 있다. CAS에서는 最初로 公開된 特許만을 抄錄하고, 그 以外의 特許는 特許番號와 國名만을 索引하고 있다.

Patent Concordance의 印刷는 Computer Printout의 形態로 하고 있으며, 그의 原稿作成은 사람이 各各의 明細書를 組合하여 行하고 있다.

Duplicate Patent는 반드시 發明의 技術的 內容이 같은 것이 아니며 發明의 名稱, 發明者, 出願人 등의

第 1 圖



Bibliography, 發明의 內容을 編輯者가 比較하여 對應關係를 만들고 있다. 이 경우 基準으로 하는 데이터는 最初의 出願日 또는 優先權 主張日이다.

Patent Concordance의 作成은 重複하여 抄錄을 作成하는 것을 避하기 위하여 또는 利用者의 便宜를 위하여 重要한 것이지만 대단히 어려운 作業이다. 그래서 Birpi가 提案하고 있는 第一國의 出願番號(Priority Number)를 基準으로 하여 Concordance를 作成하는 案(所謂 world Patent Index Plan)의 良否에 대한 것은 앞에서 말한 바와 같이 出願의 內容이 國家에 따라 다른 경우가 있으므로 반드시 Priority NO를 基準으로 할 수는 없는 것이다.

CAS에서는 情報源이 되는 約 12,000種의 雜誌 등에 실려 있는 論文에 눈을 돌려 그 中에서 約 409,000件의 抄錄을 作成하고 있으며, 內部抄錄者의 能力은 1人當(8時間 勤務) 8件/日이다.

2.2. CA-Section Grouping

CA의 內容을 살펴보면 모든 抄錄은 다음의 5個部門으로 分類되어 있다.

- ① Biochemistry Sections(CABS)
- ② Organic Chemistry Sections(CAOS)
- ③ Macromolecular Sections(CAMS)
- ④ Applied Chemistry and Chemical Engineering Sections(CAAS)
- ⑤ Physical and Analytical Chemistry Sections (CAPS)

以上の 5個部門은 다시 80個의 Subject Section으로 나누어진다. (第1表)

第 1 表

**CHEMICAL ABSTRACTS**  
**Biochemistry Sections (CABS)**

- 1. Pharmacodynamics
- 2. Hormone Pharmacology
- 3. Biochemical Interactions
- 4. Toxicology
- 5. Agrochemicals
- 6. General Biochemistry
- 7. Enzymes
- 8. Radiation Biochemistry
- 9. Biochemical Methods
- 10. Microbial Biochemistry
- 11. Plant Biochemistry
- 12. Nonmammalian Biochemistry

- 13. Mammalian Biochemistry
- 14. Mammalian Pathological Biochemistry
- 15. Immunochemistry
- 16. Fermentations
- 17. Foods
- 18. Animal Nutrition
- 19. Fertilizers, Soils, and Plant Nutrition
- 20. History, Education, and Documentation

**CHEMICAL ABSTRACTS**

**Organic Chemistry Sections(CAOS)**

- 21. General Organic Chemistry
- 22. Physical Organic Chemistry
- 23. Aliphatic Compounds
- 24. Alicyclic Compounds
- 25. Noncondensed Aromatic Compounds
- 26. Condensed Aromatic Compounds
- 27. Heterocyclic Compounds(One Hetero Atom)
- 28. Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom)
- 29. Organometallic and Organometalloidal Compounds
- 30. Terpenoids
- 31. Alkaloids
- 32. Steroids
- 33. Carbohydrates
- 34. Synthesis of Amino Acids, Peptides, and Proteins

**CHEMICAL ABSTRACTS**

**Macromolecular Sections(CAMS)**

- 35. Synthetic High Polymers
- 36. Plastics Manufacture and Processing
- 37. Plastics Fabrication and Uses
- 38. Elastomers, Including Natural Rubber
- 39. Textiles
- 40. Dyes, Fluorescent Whitening Agents, and Photosensitizers
- 41. Leather and Related Materials
- 42. Coatings, Inks, and Related Products
- 43. Cellulose, Lignin, Paper, and Other Wood Products
- 44. Industrial Carbohydrates
- 45. Fats and Waxes
- 46. Surface-Active Agents and Detergents

## CHEMICAL ABSTRACTS

Applied Chemistry and Chemical Engineering  
Sections (CAAS)

47. Apparatus and Plant Equipment
48. Unit Operations and Processes
49. Industrial Inorganic Chemicals
50. Propellants and Explosives
51. Petroleum, Petroleum Derivatives, and Related Products
52. Coal and Coal Derivatives
53. Mineralogical and Geological Chemistry
54. Extractive Metallurgy
55. Ferrous Metals and Alloys
56. Nonferrous Metals and Alloys
57. Ceramics
58. Cement and Concrete Products
59. Air Pollution and Industrial Hygiene
60. Sewage and Wastes
61. Water
62. Essential Oils and Cosmetics
63. Pharmaceuticals
64. Pharmaceutical Analysis

## CHEMICAL ABSTRACTS

## Physical and Analytical Chemistry Sections(CAPS)

65. General Physical Chemistry
66. Surface Chemistry and Colloids
67. Catalysis and Reaction Kinetics
68. Phase Equilibriums, Chemical Equilibriums, and Solutions
69. Thermodynamics, Thermochemistry, and Thermal Properties
70. Crystallization and Crystal Structure
71. Electric Phenomena
72. Magnetic Phenomena
73. Spectra by Absorption, Emission, Reflection, or Magnetic Resonance, and Other Optical Properties
74. Radiation Chemistry, Photochemistry, and Photographic Processes
75. Nuclear Phenomena
76. Nuclear Technology
77. Electrochemistry
78. Inorganic Chemicals and Reactions

79. Inorganic Analytical Chemistry

80. Organic Analytical Chemistry

1973년에 收錄될 抄錄은 約 409,000件으로서 部門別로 보면 다음과 같다.

CABS	114,000件
CAOS	42,000〃
CAMS	36,000〃
CAAS	60,000〃
CAPS	110,000〃

2.3. 速報서비스(印刷物과 磁氣테이프를 提供하는 것)

## 2.3.1. CBAC(Chemical-Biological Activities)

CBAC는 生化學分野의 雜誌, 特許, 리포르트 및 Conference Symposium Proceeding 으로부터의 最新技術記事의 Digest 로서 격주로 發行된다.

이 Digest 에는 KWIC 索引, 化學構造索引, 著者索引 및 化合物 登錄番號의 Crossreference 索引이 收錄되어 있다. 1973년에는 約 34,000個의 抄錄이 收錄될 것이다. 年間 取扱되는 雜誌는 550~600種, 磁氣테이프의 購入 價格은 年間 2,500\$이며 CAS에서는 CBAC의 檢索서비스(Current-Awareness)를 하고 있다.

## 2.3.2. CT(Chemical Titles)

세계에서 가장 重要한 最新 化學雜誌로부터 選擇된 論文의 題目을 報告하는 速報誌로서 年間 26回 發行되며, 每回 5,000個의 主題가 掲載된다.

主題와 著者索引, KWIC 索引, bibliography 와 關聯되어 있다. 年間 取扱되는 雜誌는 約 700種이며 1973년에는 約 112,000個의 主題가 收錄될 것이다.

印刷物の 價格은 60\$이며 磁氣테이프는 1,700\$이다.

## 2.3.3. Polymer Science &amp; Technology

POST(Polymer Science & Technology)는 高分子化學에 관한 雜誌 및 世界 26個國의 特許가 收錄된다.

POST誌가 對象으로 하는 것은 高分子化學 中에서 다음과 같다.

Synthetic Polymer  
Plastic Technology  
Elastomer  
Textile  
Coatings  
Cellulose  
Other Carbohydrates

POST誌에는 主題索引(Keyword Index), 著者索引, 化學構造索引 및 CA의 Keyword Index가 붙어 있다.

1973년에는 約 36,000個의 抄錄이 包含될 것이다. 磁氣 테이프의 年間 購入價格은 2,500 \$이다.

### 2.3.4. Plastics Industry Notes

Plastic Industry Notes(PIN)은 高分子 또는 플라스틱 分野에 있어서 Management, Marketing, Production responsibility 를 取扱하는 抄錄誌로서 年間 52回 發行 된다. 모든 抄錄은 다음의 11個 部門의 General Category 로 分類된다.

Production/Consumption	Government Action
Prices	Licensing/Patent Actions
Marketing/Sales	Plant Expansion
New Products/Uses	Management Changes
Corporate Transactions	Safety
State-of-the-Art Survey	

取扱되는 雜誌는 다음과 같다.

Adhesive Age	Modern Packaging
Business Week	New York Times
Chemical Engineering News	Oil, Paint & Drug Reporter
European Chemical News	Reinforced Plastics(London)
Japan Chemical Week	TAPPI
Wall Street Journal	

### 2.3.5. Chemical Industry Notes

Chemical Industry Notes(CIN)는 化學 및 化學工業 系의 새로운 情報서비스로서 美國化學會와 共同으로 發行하게 될 것이다.

第2表에 있는 43個의 重要雜誌로부터 抽出한 抽錄으로서 年間 52回 發行되며, 1회에 約 600~700個의 抽錄이 收錄될 것이다. 抽錄 1件은 25~50個의 單語로 構成되며 1973년에는 44,500個의 抽錄이 收錄될 것이다.

第 2 表

CIN regularly monitors these 43 key trade periodicals:

ADHESIVES AGE  
 APPLIED PLASTICS AND REINFORCED PLASTICS REVIEW  
 BRITISH PLASTICS  
 BUSINESS WEEK  
 CANADIAN CHEMICAL PROCESSING  
 THE CANADIAN TEXTILE JOURNAL  
 CHEMICAL AGE(London)

CHEMICAL ECONOMY & ENGINEERING REVIEW  
 CHEMICAL ENGINEERING(New York)  
 CHEMICAL & ENGINEERING NEWS  
 CHEMICAL INDUSTRY OF NEWZEALAND  
 CHEMICAL TECHNOLOGY CHEMICAL WEEK  
 CHEMISCHE INDUSTRIE(Duesseldorf)  
 CHEMISTRY AND INDUSTRY(London)  
 CHEMISTRY IN BRITAIN  
 CHIMIE ET INDUSTRIE, GENIE CHIMIQUE  
 COMMERCE TODAY  
 EUROPEAN CHEMICAL NEWS  
 FORBES  
 FORTUNE  
 JAPAN CHEMICAL WEEK  
 JAPANESE TEXTILE NEWS  
 JOURNAL OF COMMERCE  
 MANUFACTURING CHEMIST AND AEROSOL NEWS  
 MODERN PACKAGING  
 MODERN PLASTICS  
 NEW YORK TIMES  
 OIL & GAS JOURNAL  
 OIL, PAINT & DRUG REPORTER  
 PLASTICS, RUBBERS, TEXTILES  
 PLASTICS TECHNOLOGY  
 PLASTICS & RUBBER WEEKLY  
 PLASTICS WORLD  
 POLYMER AGE  
 PRODUCT ENGINEERING  
 REINFORCED PLASTICS(London)  
 RUBBER AGE(New York)  
 RUBBER JOURNAL  
 SCIENCE  
 TAPPI(Technical Association of the Pulp & Paper Industry)  
 WALL STREET JOURNAL, EASTERN EDITION  
 WESTERN PLASTICS

CIN 은 {11個의 General Category 로 되어 있으며, 그의 內容은 다음과 같다.

- 1) Production Trends
- 2) Pricing
- 3) Marketing & Sales
- 4) Processing Facilities
- 5) New Products & New Applications

- 6) Corporate Financial and Labor Activities
- 7) Government Action
- 8) Patent Litigation & Licensing
- 9) Conference, Manpower and Academic News
- 10) Executive Changes
- 11) Safety and Pollution Control

#### 2.4. 磁氣테이프를 提供하는 것

##### 2.4.1. BJA(Basic Journal Abstracts)

化學, 化學工學 關係雜誌中 重要な 49個의 雜誌로부터의 完全한 抄錄誌로서 年間 26回 發行된다.

主題, 著者, Bibliographic Citation 및 抄錄으로부터의(分子式 包含) 檢索이 可能하다.

取扱되는 雜誌는 第3表에 表示한 바와 같고 年間 磁氣테이프의 購入價格 및 檢索料金は 合計 4,100 \$이다.

#### 第 3 表

##### LIST OF PERIODICALS

---

Accounts of Chemical Research  
 Analytical Chemistry  
 Angewandte Chemie International Edition in English  
 Biochemistry  
 Canadian Journal of Chemistry  
 Chemical & Engineering News  
 Chemical Engineering Science  
 Chemical Reviews  
 Chemical Technology  
 Chemische Berichte  
 Chemistry  
 Collection of Czechoslovak Chemical Communications  
 Environmental Science and Technology  
 Helvetica Chimica Acta  
 Industrial and Engineering Chemistry, Fundamentals  
 Industrial and Engineering Chemistry, Process Design and Development  
 Industrial and Engineering Chemistry, Product Research and Development  
 Inorganic Chemistry  
 Journal of Agricultural and Food Chemistry  
 Journal of the American Chemical Society  
 Journal of Applied Chemistry(London)  
 Journal of Catalysis  
 Journal of Chemical Documentation  
 Journal of Chemical Education  
 Journal of Chemical and Engineering Data

Journal of Chemical Physics  
 Journal of Chemical Physics, Supplement  
 Journal of the Chemical Society, Section A  
 Journal of the Chemical Society, Section B  
 Journal of the Chemical Society, Section C  
 Journal of Heterocyclic Chemistry  
 Journal of Organic Chemistry  
 Journal of Physical Chemistry  
 Journal of Physics and Chemistry of Solids  
 Journal of Physics and Chemistry of Solids Supplement  
 Journal of Polymer Science, Part A-1  
 Journal of Polymer Science, Part A-2  
 Journal of Polymer Science, Part B  
 Journal of Polymer Science, Part C  
 Journal fuer Praktische Chemie  
 Justus Liebigs Annalen der Chemie  
 Monatshefte fuer Chemie  
 Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas  
 Tetrahedron  
 Tetrahedron, Supplement  
 Transactions of the Faraday Society  
 Zeitschrift fuer Anorganische und Allgemeine Chemie  
 Zeitschrift fuer Chemie  
 Zhurnal Organicheskoi Khimii  
**COMPANION SERVICES CHEMICAL ABSTRACTS SERVICE SOURCE INDEX**

---

##### 2.4.2. CA Condensates

CA에 掲載되어 있는 데이터 中에서 檢索 Key로 되어 있는 데이터를 蒐集한 것으로서, 이것에는 論文, 特許 및 리포오트의 主題와 著者 또는 Assignee, Bibliographic Citation 및 CA로부터 보낸 Keyword가 收錄되어 있다.

年間 26回 發行되며 1972년에는 340,000個의 主題가 실렸고, 1973년에는 360,000件이 收錄될 豫定이라 한다. 年間 磁氣테이프의 購入價格 및 檢索料金は 모두 4,400 \$이다.

##### 2.5. Retrospective Services

- 1) CA Intergrated Subject File
- 2) 8th Collective Index to Chemical Abstracts
- 3) 7th Collective Index to Chemical Abstracts
- 4) 6th Collective Index to Chemical Abstracts
- 5) 2nd through 5th Decennial Index to CA

- 6) 1st Decennial Index to CA
- 7) Special Collective Index
- 8) Patent Concordance in Computer-Readable Form

2.6. Reference Services

- 1) CA Service Source Index(印刷物)
- 2) CA Service Source Index(磁氣테이프)
- 3) CA Service Source Index Quarterly(磁氣테이프)
- 4) Ring Index, Second Edition
- 5) SOCMA Handbook
- 6) Steroid Conjugate

2.7. Special Services

Reproduction of Soviet Chemical Papers.

2.8. 마이크로화

CAS에서는 CA의 第1號誌(1907年)로부터 最近까지의 마이크로필름화를 完了하였다.

이 마이크로필름(16mm, roll film)에는

- 1) Binary Code
- 2) Image Code
- 3) Line Scale
- 4) Odorneter Code

가 붙어 있으므로 마이크로필름 Reader에 의한 自動檢索이 可能하다. 年間 購入價格은 다음과 같다.

初年度	2,200 \$
次年度以後	1,550 \$

CAS에는 以上과 같은 業務 以外에도 아래와 같은 서비스를 하고 있다.

- 1) Files Obtainable from the National Technical Information Service
- 2) Supplementary Publications
- 3) IUPAC Nomenclature Reports
- 4) ACS Nomenclature Committee Reports
- 5) CAS Reports

3. 電子計算機 利用

CAS의 情報全面 電算機處理計劃은 1965년에 立案되어 5個年計劃으로 實施되어 왔으나, 그의 最終年度인 1969년에 이를 完成하지 못하였다. 그러나 部分的으로 完成된 技術이 바로 實施되고 있으며 完成을 向하여 進行하고 있다.

3.1. 機械檢索

CAS에서는 컴퓨터(IBM S/360, 1401)를 使用하여 다

음과 같은 機械檢索서비스를 實施하고 있다.(但 磁氣테이프의 提供은 CAS本部에서 하며 檢索서비스는 各 sub-center가 擔當하고 있다.)

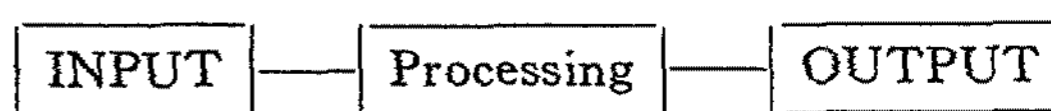
1) Current Awareness Service(磁氣테이프의 提供을 包含)

BJA, CA Condensate, CBAC 및 CT가 이에 屬한다.

2) Restrospective Service(磁氣테이프의 提供을 包含)

CAS의 機械檢索시스템 中에서 큰 位置를 占하고 있는 것은 化合物登錄시스템(Atom-by-atom topological technique)을 利用한 化合物登錄시스템이다. 이 시스템은 索引한 새로운 化合物에 그의 化合物만이 갖는 Address(登錄番號)를 割當하여, 이를 檢索할 때에 使用한다.

CAS에서는 컴퓨터를 利用한 Data Processing System (데이터處理시스템)에 대해서는 아래와 같은 基本的인 생각을 갖고 있다.(Data Directed라 부른다.)

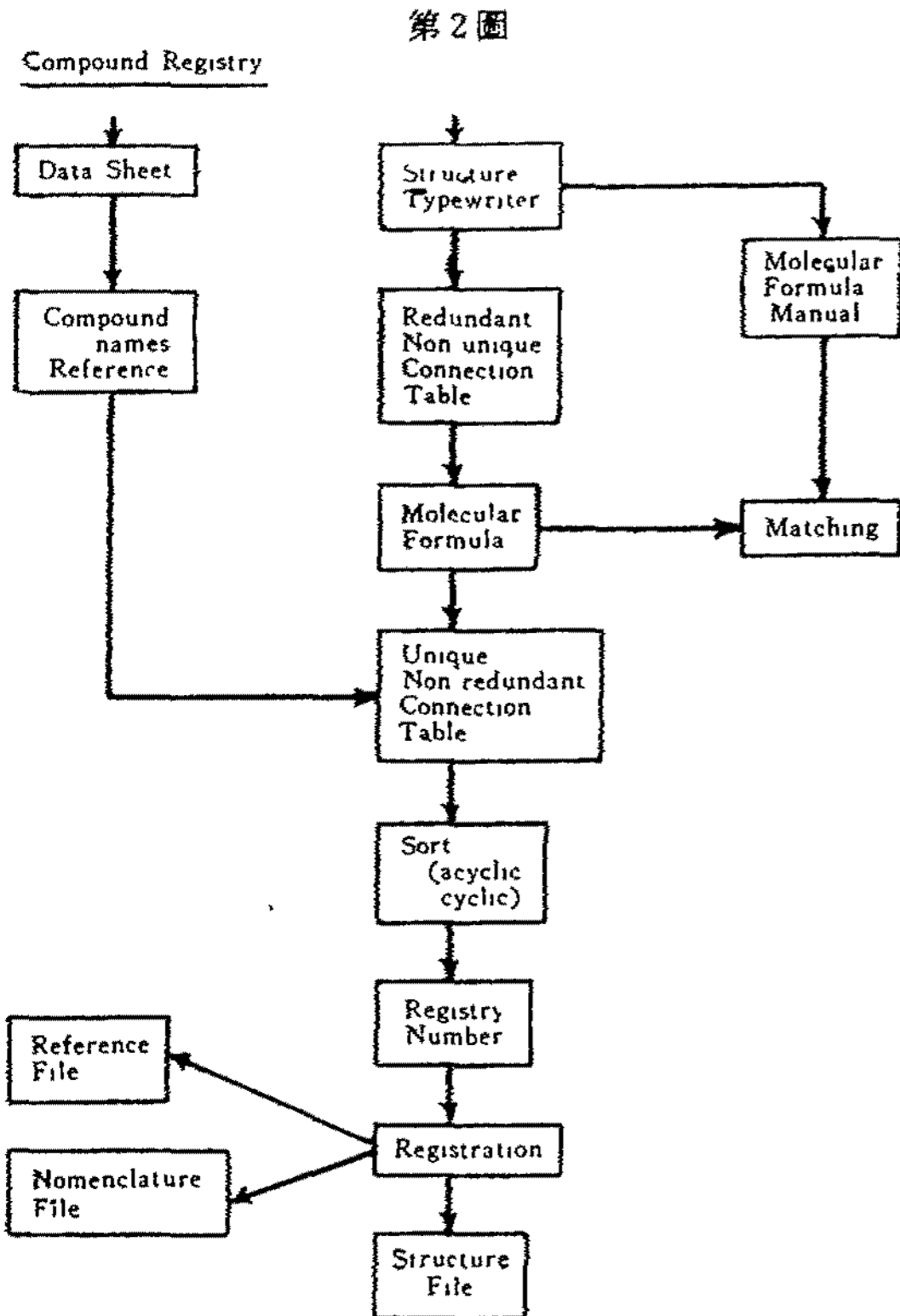


즉 CAS에서는 데이터의 處理過程을 그림과 같이 分解하여 特히 Input는 Output와 Processing을 全然考慮하지 않고 獨立的으로 하는 것을 原則으로 하고 있다. 그 理由는 시스템 全體를 融通性있게 하기 위한 것이며, 이에 의해 Input 以外의 部分에 變更(예를 들면 새로운 機械의 導入)이 있어도 Input에는 何等의 影響이 없게 되어 있다.

構造式打字機에 의해 化合物의 構造式을 磁氣테이프 상에 記錄하면 리넨단트로 논유니크한 코백션테이블이 形成된다(第2圖). 電算機는 이 表로부터 分子式을 計算하여 그래프理論에 따라 計算에 의해 유니크한 코백션테이블로 變換한다. 形成된 테이블은 그의 構造中에 環狀部分이 있는 것과 없는 것으로 나누어서 化合物파일 에 組合한다. 그의 化合物이 이미 파일되었으면 TID는 登錄番號로 變換되고 새로운 化合物이면 다음과 같이 새로운 登錄番號로 된다. 즉 Input 順番에 그의 各桁의 數字에 桁數를 곱하여 더하고 얻어진 數의 下一桁을 체크디지트로 한다. 예를 들면 1,571,406番의 化合物登錄番號는  $1 \times 7 + 5 \times 6 + 7 \times 5 + 1 \times 4 + 4 \times 3 + 0 \times 2 + 6 \times 1 = 94$ 의 4를 체크디지트로 하여 1,5914,046으로 決定한다. 登錄番號가 決定되면 레지스트리는 構造파일, 名命파일 및 文獻파일로 3分割하여 各各 檢索에 使用하며, 이 3種의 파일은 登錄番號에 의해 連結되어 있다.

3.2. 化合物의 檢索

以上과 같이 化合物레지스트리로부터 特定化合物을 檢



索할 때에는 化合物의 名稱으로 檢索하는 方法과 構造式으로 檢索하는 方法이 있으며, 前者는 名命파일을 後者는 構造파일을 使用한다.

### 3.2.1. 化合物名에 의한 檢索

特定化合物 및 特定要素를 가진 化合物集團을 名稱으로부터 檢索할 경우, 化合物의 名稱이 몇 개의 構成要素로 되어 있는 것을 活用한다. 이 方法은 化合物登錄의 名命파일 뿐만 아니라 抄錄테이프 등 文章을 記錄한 파일에도 적용된다.

이는 Term Truncation이라 하는 技法으로 어떤 單語의 Fragment를 指定하면, 그의 Fragment를 包含하는 모든 單語에 대하여 檢索이 된다. 예를 들면 Polymer라 하는 Fragment의 前後에 Truncation 指定을 하면 Polymer를 含有하는 情報는 勿論 그의 複數形 Polymers, Copolymer(共重合體), Polymerize(重合하다), Polymerization(重合), Copolymerization(共重合) 등을 包含하는 情報도 檢索된다. 또 檢索할 Keyword가 몇 개의 Factor로 分類될 수 있을 때에는 各 Factor 사이에 AND, OR 또는 NOT 論理를 適用하여 檢索한다.

예를 들면 Sodium Chloride(鹽化나트륨)과 Potassium Chloride(鹽化칼륨)을 含有하는 情報를 檢索할 경우 Sodium과 Potassium을 第1의 Factor로 하여 이들에 OR 論理를 適用하고 Chloride를 第2의 Factor로 하여 第1 Factor 사이에 AND 論理를 適用한다.

이와 같이 하면 그들의 組合에 의해 不必要한 情報도 檢

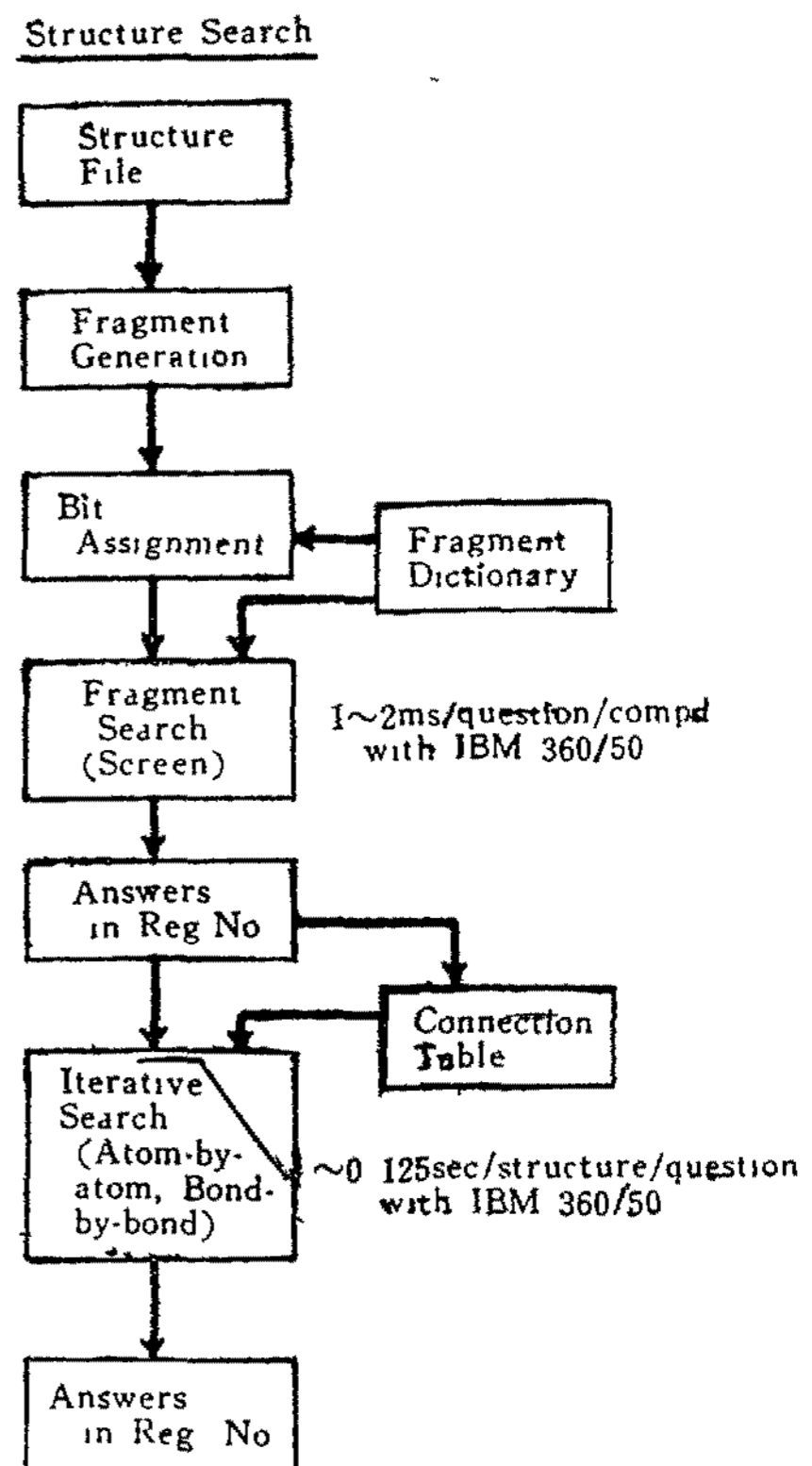
索되어 나온다. 이를 防止하기 위하여 Keyword의 質問에 應하는 重要도를 붙여 이 重要도의 合이 一定值以上인 情報만을 解答으로 하는 方法을 使用한다.

예를 들면 Sodium Chloride, Sodium Bromide 및 Potassium Chloride의 三者를 包含하는 情報를 檢索하는 경우 Sodium과 Potassium을 第1의 Factor, Chloride와 Bromide를 第2의 Factor로 하면, 이들 Factor의 組合으로 不必要한 Potassium Bromide도 檢索된다. 이를 防止하기 위하여 Sodium에 10, Potassium에 5, Chloride에 15, Bromide에 10의 重要도로 하고 質問重要도를 15以上으로 하면 Potassium과 Bromide의 重要도의 合은 15로 되어 解答으로부터 除外되고 그 外에 組合이 20以上인 것만 나온다. 여기에서 附與되는 重要도는 質問者에 의해 求해지기 때문에 같은 Keyword에도 質問이 틀리면 다른 解答을 얻게 된다.

### 3.2.2. 構造式으로부터의 檢索

特定한 構造式을 가진 化合物의 集團을 檢索할 때에는 構造파일을 使用하며 유니크코넥션테이블에 대해서 直接 Atom-by-atom 法을 適用하여 檢索하는 것은 時間이 많이 걸리며 電算機 使用上 非經濟的이므로 코넥션테이블로부터 다음 3種의 Fragment를 抽出하여 選擇한 後 解答으로 될 可能性이 있는 化合物에 대해서만 Atom-by-atom 法을 適用한다(第3圖).

第3圖





第1種의 Fragment는 (A)原子組成 (B)給合組成 (C)炭素以外の原子에 結合한 水素原子의 數 (D)環의 數 (E)互變異性末端 및 (F)그래프모디파이어이다. 이中 A와 B는 코넥션테이블로부터 計算된 것이며, D는 1個의 環에 대하여 1個의 閉環對가 있으므로 閉環對의 數와 같다. 그 外의 것은 코넥션테이블에 記載된 그대로 使用한다.

第2種의 Fragment는 코넥션테이블形成의 경우 注目하는 原子가 鎖의 末端에 있으면 1, 中途에 있으면 2, 分枝點에 있으면 3以上으로 되고 이 값의 上限은 原子의 種類와 狀態에 따라 決定된다. 예를 들면 電荷를 갖지 않은 狀態에서 窒素는 3, 炭素는 4지만 1電子單位의 正電荷를 가진 狀態에서는 窒素 4, 炭素는 5로 된다.

第3種의 Fragment는 (A)環의 크기, (B)環의 複素性 (C)置換基의 相對位置關係의 셋으로 分類되어 이들은 모두 環狀部分構造에 關係를 가지며, 電算機가 코넥션테이블로부터 새롭게 導出하지 않으면 안되는 것으로 모두 64種이다. A는 環을 構成하는 原子의 數로 表示되

며 3員環에서 20員環까지이다. B는 環이 炭素原子만으로 構成되었는가 또는 窒素, 酸素, 黃 등의 異種原子를 含有하는가를 表示하는 것으로 異種原子가 있으면 그의 個數, 種類 및 位置도 表示된다.

C는 1個의 環에 2個以上の 基(置環基)가 붙어 있는 경우, 環構成原子에 枝가 붙어있는 原子를 1番으로 하여 環에 따라 番號를 붙인다.

이들의 Fragment는 辭典에 의해 코오드化되어 스크린檢索에 使用한다. 이 方法으로 檢索한 경우 所要時間은 質問의 複雜性에 의한 것은 當然하며 1個의 質問만으로는 檢索을 하지 않고 多數의 質問에 대하여 解答을 同時에 Output 시킨다. 電算機를 使用하여 5萬個의 化合物을 包含하는 파일로부터 500個의 答을 얻는 경우 Fragment에 의한 스크린檢索으로는 1質問, 1化合物當 1~2msec, 코넥션테이블에 의한 Atom-by-atom 法으로는 1質問, 1化合物當 1/8 sec 所要된다.

CAS의 컴퓨터處理시스템은 第4圖와 같다.

第4圖

