

3 基本操作 III

1 コンピュータ入門.....1

1.1 化学とコンピュータ1

化学とコンピュータのフィットネス (1)

コンピュータの発達 (4)

身近なコンピュータ (10)

ファジィコンピュータとニューラルネットワーク (12)

ネットワークと分散処理 (16)

化学とコンピュータ (18)

1.2 オペレーティングシステム, 言語21

オペレーティングシステム (21)

パソコンと MS-DOS (25)

EWS と UNIX (30)

その他のオペレーティングシステム (34)

言語 (36)

1.3 研究事務の計算機化41

はじめに (41)

研究事務の機械化のために (42)

機能は多いほどいい? (47)

研究事務の計算機化の実例 (55)

I 編 実験室自動化

2 化学実験における計算機の利用

.....65

2.1 実験室内での計算機利用の考え方

.....65

はじめに (65)

コンピュータ利用の目的 (66)

実現方法 (67)

計算機システムに要求される性能 (69)

2.2 実験制御のためのオペレーティングシステム, 言語71

オペレーティングシステムの役割 (71)

ミニコンピュータのオペレーティングシステム (72)

パーソナルコンピュータのオペレーティングシステム (73)

プログラミング言語 (75)

プログラム開発のための道具 (77)

プログラミング言語あれこれ (78)

2.3 制御ソフトウェアの書き方82

- はじめに (82)
- 入出力の処理 (83)
- 割込み処理 (89)
- グラフィック出力 (92)
- マンマシンインターフェイス (95)
- ソフトウェアのモジュール化 (97)
- 2・4 市販ライブラリの使用法98
- ラボラトリオートメーション用市販ライブラリの種類と動向 (98)
- GP-IB および汎用入出力ライブラリの使用法 (100)
- データ解析およびレポート作成用ライブラリの使用法 (103)
- 3 実験データの取込みと機器の制御111**
- 3・1 データ取込みと機器の制御111
- コンピュータの入出力の速さ (112)
- インターフェイス (113)
- 3・2 バスラインと入出力機器の接続115
- バスライン (115)
- データ出力のインターフェイス (116)
- データ入力インターフェイス (118)
- 一般的な機器のインターフェイス (119)
- インターフェイスボード (拡張ボード) とバスラインの拡張 (121)
- 入出力のための汎用なバスライン (123)
- 3・3 汎用バスの利用124
- GP-IB インターフェイスの規格 (124)
- 機器と GP-IB との接続法 (129)
- RS-232C インターフェイスの規格 (137)
- 機器と RS-232C との接続法 (141)
- CAMAC システム (143)
- 4 実験データの処理147**
- 4・1 基本的なデータ処理148
- 波形データの性質とその表示法 (149)
- 雑音処理 (160)
- 分解能向上処理 (166)
- フーリエ変換処理 (170)
- 4・2 進んだデータ処理175
- 波形分離処理 (176)
- ブラインドディコンボリューション (180)
- 4・3 画像データ処理188
- 画像データのデジタル収集 (189)
- 雑音処理 (191)
- 分解能向上処理 (192)
- フーリエ変換処理 (195)

5 コンピュータ間の接続とネットワーク197

- 5.1 はじめに197
- 5.2 マルチプロセッサシステム201
- 5.3 コンピュータネットワーク203
 コンピュータの相互接続 (204)
 コンピュータネットワークの基本的機能 (205)
- 5.4 実際のコンピュータ相互接続210
 コンピュータシステム間のデータ伝送 (211)
 非同期調歩同期式通信 (213)
 ローカルエリアネットワークの通信 (214)
- 5.5 ネットワークの設置218
- 5.6 個々の問題224
- 5.7 実験装置とコンピュータネットワーク227
- 5.8 ソフトウェア230
- 5.9 コンピュータネットワークの安全性231

6 ラボラトリオートメーションの実例233

- 6.1 X線分光器234
- 6.2 液体ヘリウム自動充填装置238
- 6.3 時間分解半導体レーザ分光法240
 測定法の原理 (241)
 高速データ転送 (243)
 実時間処理 (244)
 実時間処理システムの設計のためのガイドライン (245)

- 6.4 光源変調マイクロ波吸収分光装置
 ——繰返しデータの積算246

- 6.5 グラフィック端末としてのパーソナルコンピュータの利用254

II編 計算機化学

7 分子軌道法267

- 7.1 分子軌道法概説と半経験的分子軌道法267

Hartree-Fock-Roothaan SCF-MO法の基本方程式 (267)

LCAO近似の導入 (270)

軌道エネルギー ϵ_i と Koopmansの定理・Walsh ダイアグラム (272)

Mullikenの population analysis (273)

分子の反応性とフロンティア軌道理論 (275)

単純 Hückel MO法 (277)

拡張 Hückel MO法 (278)

Pariser-Parr-Pople SCF-MO-CI法 (281)

CNDO/I, IIおよび INDO/II法 (283)

CNDO/Sおよび INDO/S MO法 (286)

MINDO/3, MNDO, MNDOC, AM1 MO法 (288)

- 7.2 *ab initio*法297

基底関数系 (297)

有効内殻ポテンシャル法 (305)

開殻系の分子軌道法 (306)	
多配置 SCF 法 (308)	
SCF 法の実際 (309)	
軌道理論による励起状態・イオン 化状態の記述 (310)	
電子相関 (313)	
配置間相互作用法 (314)	
CI 法による励起状態の記述 (316)	
クラスター展開法 (319)	
励起状態の SAC-CI 法 (325)	
摂動法 (328)	
原子核に働く力とエネルギー勾配 法 (331)	
<i>ab initio</i> 計算の実際 (336)	
7・3 $X\alpha$ 法 341	
Hartree-Fock-Slater 法と $X\alpha$ ポテンシャル (341)	
$X\alpha$ 法の理論 (342)	
$X\alpha$ 分子軌道法 (344)	
$X\alpha$ 分子軌道法の応用 (347)	
おわりに (352)	
7・4 分子軌道法におけるコンピュータグ ラフィックス 354	
イメージ処理能力の拡大 (354)	
グラフィックスのためのハードウ ェアとソフトウェア (354)	
分子と広がり表現法 (356)	
等値表面のレンダリング (360)	
コンピュータグラフィックスの今 後 (362)	

8 分子力学法 365	
8・1 基礎知識 366	
分子力場 (366)	
構造最適化 (368)	
分子力学法の特徴と問題点 (369)	
8・2 ハードウェアとソフトウェア 370	
コンピュータは何を使うか？ (370)	
プログラムを入手するには？ (371)	
代表的な分子力学計算プログラム (372)	
8・3 計算の仕方 375	
入力ファイルの作成および計算の 実行 (376)	
計算結果の解釈 (378)	
分子力学計算では他に何ができ るか？ (380)	
8・4 む す び 381	
9 シミュレーション 385	
9・1 衝突動力学 385	
はじめに (385)	
ポテンシャル関数 (386)	
古典トラジェクトリー法 (391)	
半古典的トラジェクトリー法 (397)	
遷移状態理論 (401)	
9・2 液 体 406	
はじめに (406)	
統計力学的アンサンブルと分子間 相互作用 (408)	

分子動力学法 (412)

モンテカルロ法 (419)

MD・MC計算で得られる情報
(423)

おわりに (427)

9・3 高分子, タンパク質……………428

生体高分子と非生体高分子 (428)

生体高分子関連のデータベース
(429)

配列データの解析 (430)

タンパク質立体構造要素データ
ベース (430)分子グラフィックスとモデリング
(431)

立体構造解析の計算手法 (434)

10 大規模データベースの利用

……………449

10・1 データベースとは……………449

10・2 文献データベース……………450

文献データベース前史 (451)

バッチ検索とオンライン検索
(452)

転置ファイルの利用 (453)

実際の利用例 (453)

検索語, キーワードとストップ
ワード (457)ディスプレイ方式のいくつか
(458)

リニアサーチ (458)

検索プロファイル, オンライン利
用と SDI サービス (459)結果の評価, 再現率と精度, シン
ーラス (459)

三次情報のデータベース (461)

文献データベース利用のための
ガイド, 参考文献, 紹介先など
(462)

10・3 化合物辞書データベース ……463

CAS REGISTRY (463)

SANSS (466)

JICST 日本語化合物辞書デー
タベース (467)

10・4 物性データベース……………470

BEILSTEIN (471)

JICST 熱物性データベース
(472)

RTECS (475)

LOGP (475)

KASHIN (479)

10・5 反応データベース CASREACT
……………479

10・6 スペクトルデータベース ……481

SDBS (482)

C13 NMR DATA BANK (482)

MS ONLINE (487)

JICST 質量スペクトルデー
タベース (489)

10・7 おわりに……………491