

化學分野에 있어서 펀치 카아드 시스템의 利用

李 顯 一
KORSTIC 情報處理部

I. 序 文

情報의 洪水 事態下에서 신속하고 효과적으로 정보를 검색한다는 것은 과학분야에서 당면하고 있는 문제이다. 그 중에서도 文獻檢索의 電算化 方法은 先進 諸國에서 많이 연구되어 왔고, 이미 실용화되고 있으나, 현재 우리나라에서는 이와 같은 방법이 실용면에 있어서 여러 가지 문제점에 봉착하고 있는 실정이다.

여기에서 기술하고자 하는 펀치·카아드 시스템은 약간 원시적이기는 하나 소규모의 정보를 다루는 국내기관으로서 바람직한 것으로 생각된다. 이 시스템은 각 기업체나 연구기관에서 특수한 분야의 문헌정보를 집중적으로 체계있게 정리, 검색할 수 있다. 이 카아드는 小城의 4인치×6인치의 국제표준규격으로 從來의 문헌 카아드와 같은 크기이다.

II. 구멍의 種類

용법과 목적에 따라 구멍을 세 종류로 나누어 보면

(1) 네 모퉁이에 각각 두 개의 구멍(오른쪽 上端은 한 개의 구멍(Fig.1(1))은 분류에 사용하는 것이 아니고, 카아드의 특수한 선택방법에 이용한다.

(2) 左邊上方의 3, 4번째와 右邊 3, 2번째의 구멍(Fig.1의 (2), 1, 2, 4, 8이라고 인쇄됨)은 카아드를 다른 목적으로 사용할 때에 카아드가 혼동되는 것을 방지하기 위하여 사용한다.

(3) 나머지 106개의 구멍은 일반적으로 분류에 사용한다.

III. 펀칭方法 및 選出方法

A. 펀칭方法

분류는 각 카아드의 적당한 구멍에 해당하는 項目을 펀칭하고, 필요한 카아드를 선택할 때에는 적당한 구멍에 選出針(sorter)을 넣고 카아드를 흔들어 떨어지게 한다. 이러한 펀칭방법에는

(가) 四邊의 구멍을 外向으로 잘라낸다. (Fig.1의 가)

(나) 中邊의 구멍(카아드의 위쪽으로부터 두번째 구

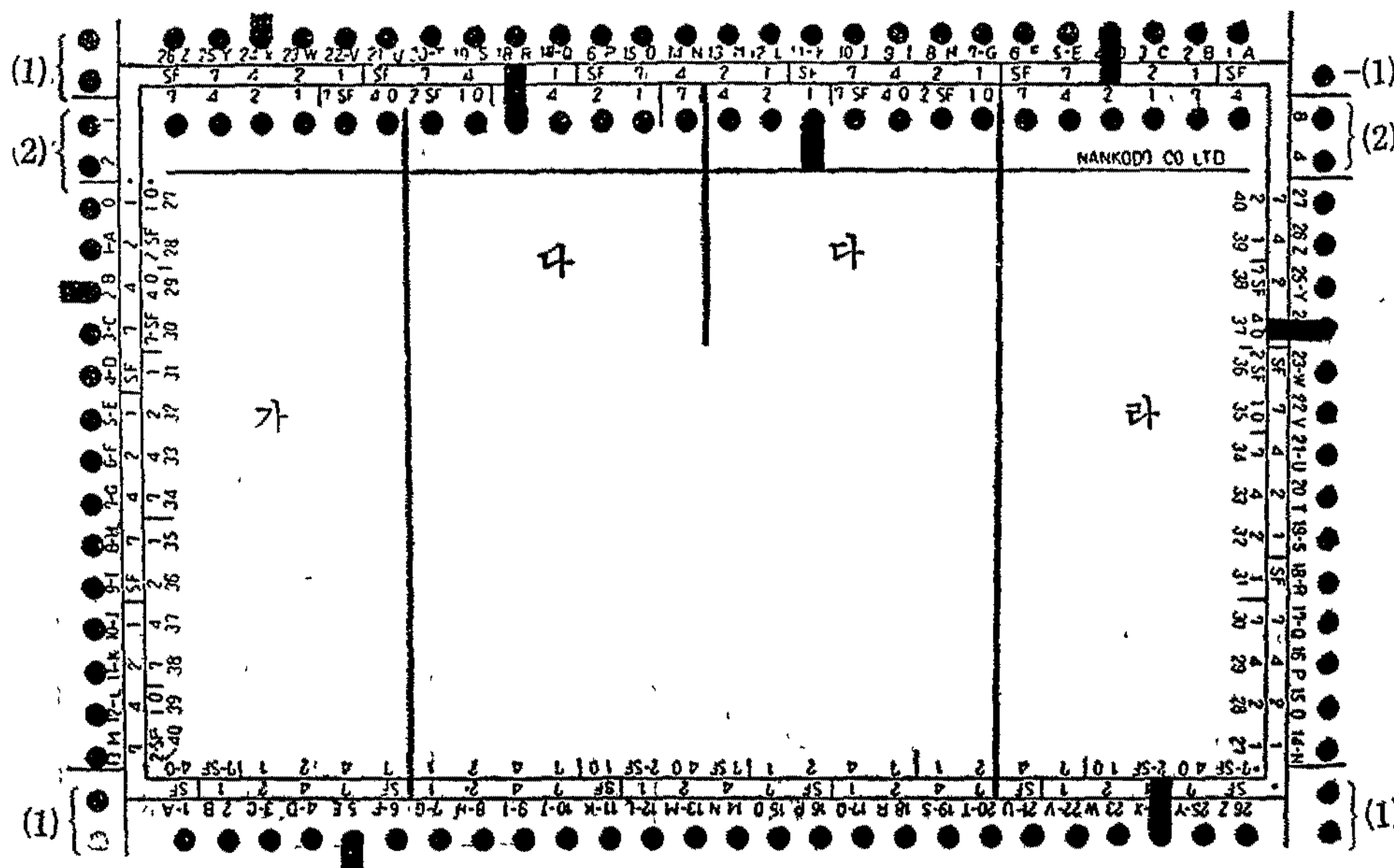


Fig. 1

멍)을 外向으로 잘라낸다.(Fig.1의 나)

(다) 四邊의 구멍을 内向으로 잘라낸다.(Fig.1의 다)

(라) 中邊의 구멍을 内向으로 잘라낸다(Fig.1의 라)
4 가지가 있다.

그러나 위에서 기술한 바와 같이 카아드의 선택이 쉬운 것은 (가)(나)(다)(라)의 순서이다. 특히 (가)(나)가 쉽기 때문에 중요한 분류나 大分類에는 (가)(나)를 사용하고, (다)(라)는 補助分類나 小分類에 사용한다.

B. 카아드의 選出方法(sorting)

原理는 카아드를 묶어서 필요한 구멍에 選出針을 끼워 흔들면 펀칭된 카아드만 떨어진다((가)의 구멍). 역시 아래로 떨어질 (나) (다) (라)의 구멍으로부터 차례로 선택하는 것이다. 그러나 이 선택을 완전하게 하는 것은 약간 어렵다.

IV. 카아드의 印刷와 그 意味

카아드의 구멍 곁에는 많은 숫자와 알파벳이 인쇄되어 있어, 이 문자가 각각의 구멍이 갖는 의의를 대표하고 있다. 이 문자는 上邊 및 下邊의 구멍 곁에 3列, 左右 兩邊에는 4列로 인쇄되어 한 개의 구멍이 몇 개의 의미를 갖는다.

예를 들면 左邊 아래로부터 세번째 구멍에는 13-M, 7, 2-SF, 40이 인쇄되어 있는 것과 같이 13, M, 7, 2, SF, 40의 의미를 갖고 있다. 또한 中邊은 대응하고 있는 上邊의 구멍과 각각 같은 뜻을 갖고 있다. 이 인쇄의 系列은 다음과 같이 여섯 가지가 있다.

① 1~26: 最外側의 인쇄

上邊과 下邊은 右로부터 左로 인쇄되어 있고, 左邊

은 上로부터 아래로(0~13) 향하고, 계속해서 右邊 아래로부터 위로 향하여 인쇄되어 있다. 3組

② 1~40:

上記 ①의 上邊에 연속으로 左邊 最內側의 上로부터 아래로 인쇄되어 있고, ①의 下邊에 계속하여 右邊 最內側의 아래로부터 위로 인쇄되어 있다. 2組

③ A~Z: ①과 같음

④ 7-4-2-1: 第3列의 인쇄

上邊의 左端으로부터 右側으로 한 바퀴 돈다.(도중에 7-SF 4-0 2-SF 1-0이 있는 곳은 단순히 7-4-2-1로 생각한다). 20組

⑤ SF-7-4-2-1: 第2列의 인쇄

上邊 左端으로부터 右側으로 한 바퀴 돈다. 16組

⑥ 7-4-2-1-1-SF-0 또는 SF-0-7-4-2-1: 第3列의 인쇄

上邊 左端으로부터 右側으로 한 바퀴 돈다. 도중에 있는 7-SF 4-0 2-SF 1-0은 가운데를 잘라서 -SF-0, SF-0-로 생각한다. 14組

이 가운데 ①②③은 각각의 구멍이 순서적으로 1, 2, 3, 또는 A, B, C,를 표시하고 있어서 한 개의 구멍에 펀칭을 함으로써 한 項目을 나타내기에 족하고, 선택할 경우에도 한 개의 구멍에 대하여 행하면 된다(P=1, S=1*). 그 외에 여러 개의 항목을 표시할 수 있는 것도 특징이다.

Fig.2에서 ①의 예를 들면 7, 8, 12, 14, 17, 20, 22, 26의 8개 항목을 나타내고 있다(③의 예로는 G, H, L, N, Q, T, V, Z이다). 그러나 이 방법으로는 分類項目의 數 만큼 구멍數가 있는 것이 결점이다(10개 항목의 분류에는 H=10*)

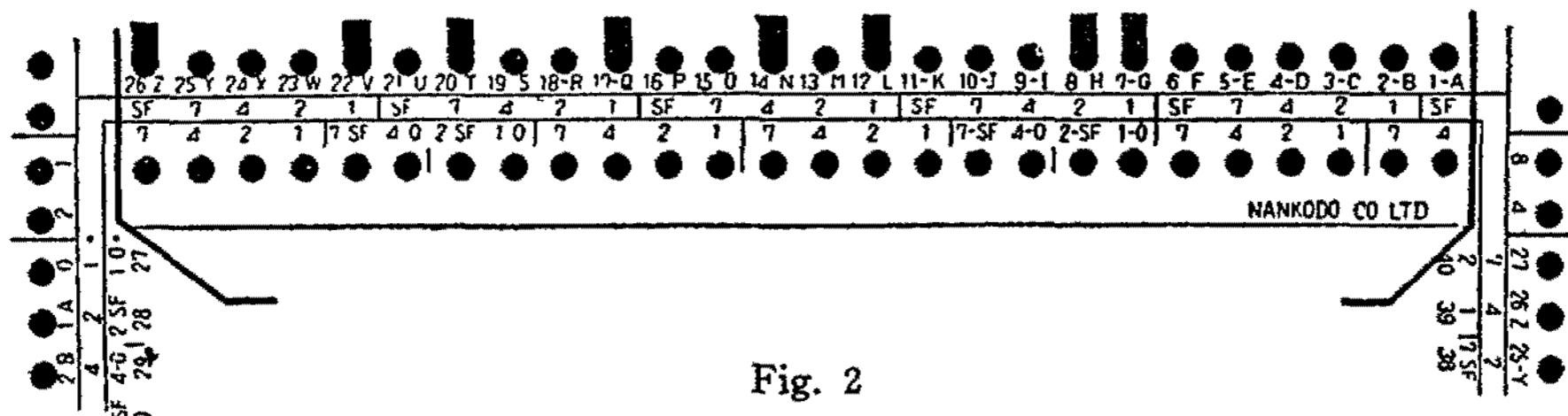


Fig. 2

④는 네 개의 구멍이 한 組를 이루고, 각각 7, 4, 2, 1의 수를 표시하는 것으로서 펀칭한 구멍이 표시하는 수의 和(和)를 사용하여 0~9의 구멍을 표시하는 방법이다. 즉 7, 4, 2, 1은 각각 한 개의 구멍으로 代表되지만 기타의 수는 9=7+2, 8=7+1, 6=4+2, 5=4+1, 3=2+1의 두 개의 구멍으로 표시된다. 0은 펀칭하지 않는 경우와 7+4의 두 개의 구멍으로 표시하는 경우가 있다. 그러나 0은 특히 7+4의 두 개의 구멍으로 代表되는 것이 많다. 이렇게 하면 10개의 항목을 분

류하는데 H=4, P=1~2, S=2, 4가 된다. 여기에서는 H는 적고, S가 많다. 또한 동시에 2項目 이상을 표시할 수 없다는 단점이 있다.

⑤는 5개의 구멍을 사용해서 上記 ④와 같이 행하는 것이지만 각 수에 대하여 펀칭한 구멍을 2개 만으로 하기 위하여 SF(Single Figure)라고 하는 구멍을 추가하여 SF-7-4-2-1을 1組로 한 것이다(H=5, P=2,

*P는 한 개의 항목을 표시하기 위하여 펀칭을 한 구멍의 수; S는 한 개의 항목을 선택하기 위하여 조작하여야만 하는 구멍의 수, H는 분류에 필요한 구멍의 수.

S=2). 즉 $1=1+SF$, $2=2+SF$, $4=4+SF$, $7=7+SF$ 와 같이 두 개의 구멍으로 편칭을 하고, 이외의 수는 ④와 같다.(Fig.3)

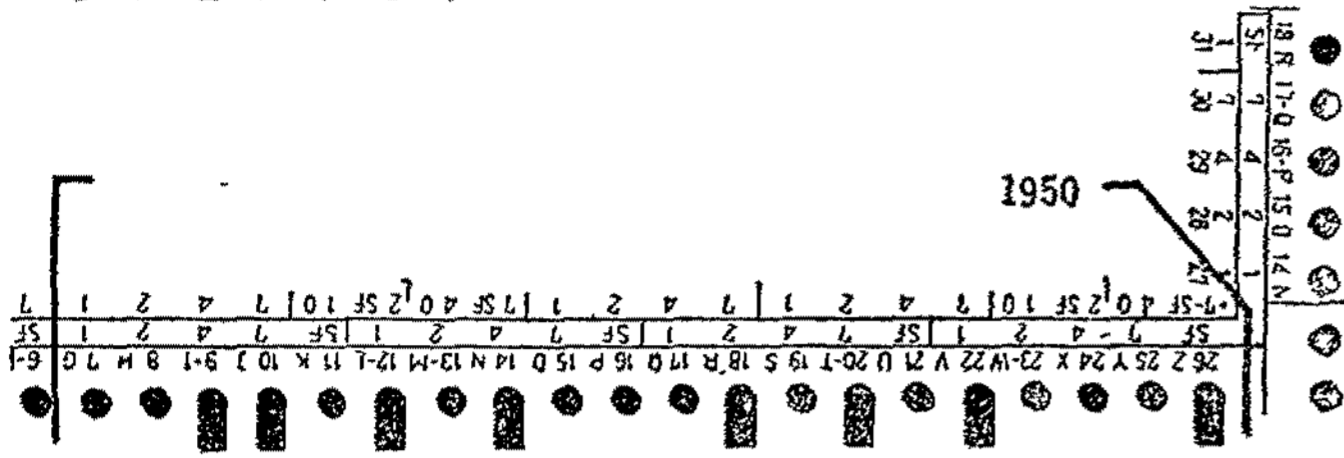


Fig. 3

⑥은 ⑤와 같이 하는 것이지만 특히 0의 구멍을 설정하여 $0=0+SF$ 로 표시한 것.(H=6, P=2, S=2)

그리고 펀치·카드법에서 가장 중요한 “分類項目과 구멍과의 대응시키는 방법”을 여러 가지 實例를 들어 다음에 설명하겠다. 그때 구멍 옆의 어느 인쇄를 사용하는가는上記 ①~⑥의 번호로 표시한다. 역시 카드의 편칭은 특별한 것을 제외하고 四邊의 外向편칭으로 表示하지만, 內向편칭 또는 中邊의 편칭으로도 할 수 있다. 예를 들면 ④에 의하여 1950의 外向편칭은 Fig.4와 같이 되고, 中邊의 內向편칭은 Fig.5와 같다.

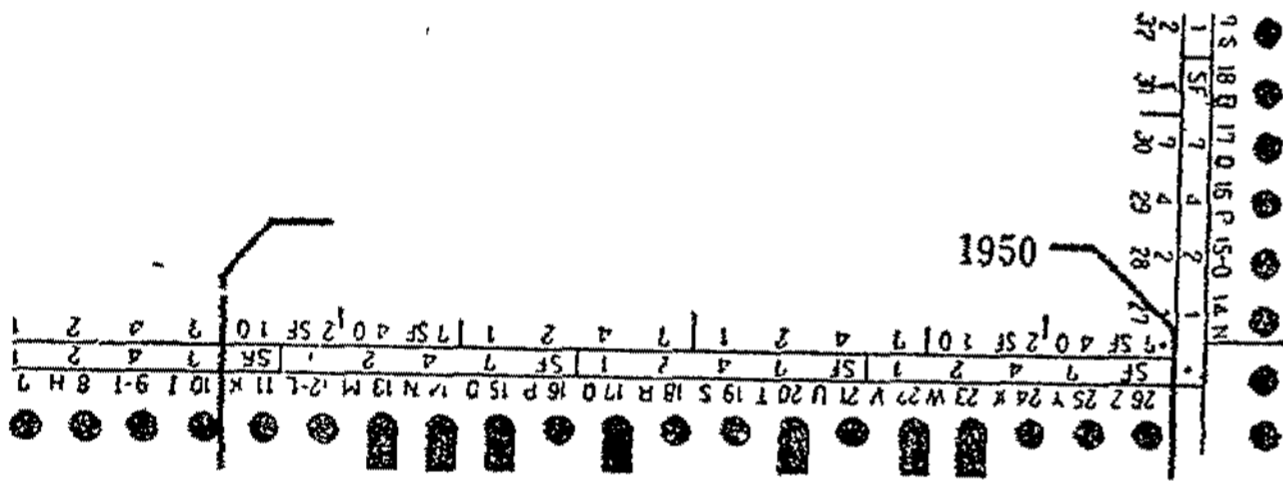


Fig. 4

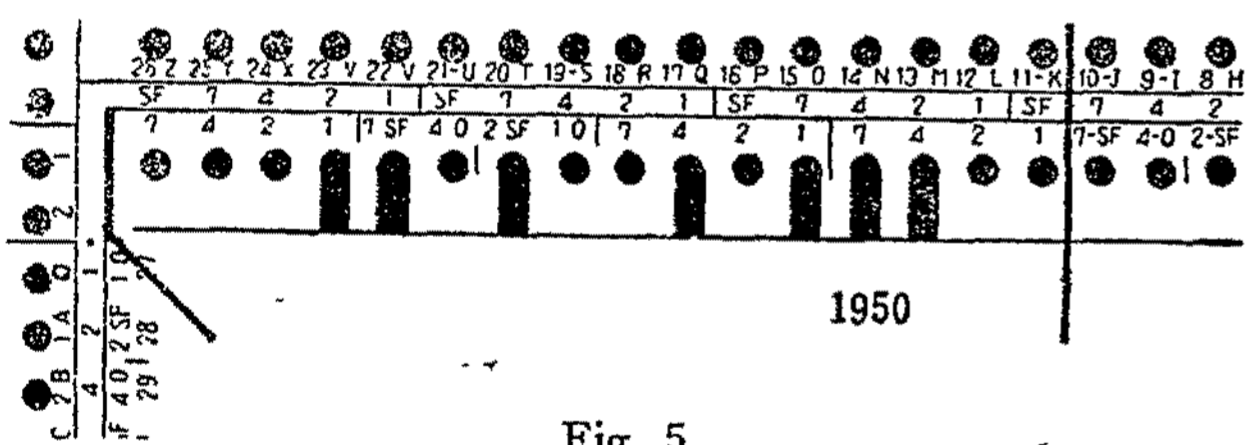


Fig. 5

V. 분류항목과 구멍과의 대응시키는 방법

여러 개의 분류항목을 어떻게 인쇄와 대응시키는가를 數와 알파벳 및 그 응용으로 나누어 설명하고자 한다.

A. 수(數)

분류한 각 항목에 1, 2, 3, …과 같이 번호를 붙인 것은 그 번호를 카드에 편칭하면 되고, 수치, 연호 등도 같이 취급할 수 있다. 여기에서 單記라고 하는 것

은 한 개의 필드(예로서 ①이면 1~26의 1組, ⑤이면 SF-7-4-2-1의 1組)에 한 개의 항목을 편칭하는 경우, 併記라고 하는 것은 한 개의 필드에 여러 개의 항목을 편칭하는 경우이다.

1. 併記

(a) 가장 간단한 방법으로 한 항목에 한 구멍을 부합시킨다.

항목이 26개 이하일 때는 ①에 의하고, 40항목 이하일 때는 ②에 의한다. 즉 上邊은 ①에 의하여 26개의 항목을 나타내고, 上邊과 左邊과를 한 개의 필드로 하는 ②에 의하면 40개의 항목을 표시할 수 있다. 항목이 40을 초과할 때 ②의 上邊→左邊에 의하여 1~40, 下邊과 上邊에 40~80(인쇄 숫자에 40을 더한다), 中邊에 81~106(80을 더함)을 표시하게 한다면 外向편칭만으로써 106개의 항목을 분류할 수 있다. 또한 內向편칭을 포함시키면 분류항목수는 두배로 늘어난다. 이 방법은 P=S=1로 간편하지만 分類項目數 만큼의 구멍數를 필요로 하는 것이 단점이다.

(b) 0~9의 10개 구멍으로 된 필드를 組로 하여 자리수를 정하는 방법으로 併記를 한다면, 선출(sort)할 때 필요한 카드 이외에 약간의 불필요한 카드도 섞여서 떨어진다.

예로서 한 때의 카드에 두 자리의 숫자를 두 개씩 併記하자. 즉 59와 46을 併記한다면 Fig.6과 같이 된다. 이 카드는 59를 선출할 때에도, 46을 선출할 때에도 떨어져서 적합하지 않은 것 같이 보인다. 그렇지만 천매의 카드가 있고, 그 중에 있는 필요한 번호를 가진 카드가 2매인데도 불구하고 그 번호를 선출할 때에 총 7매가 떨어진다면, 그 7매로부터 2매를 분류한다는 것은 극히 쉽다. 이러할 때에는, 이 방법으로 목적을 충분히 달성할 수 있다. 만일 두 개의 수를 다른 필드에 편칭한다면 바라는 카드만을 선출할 수 있지만, 그 때문에 필드수는 2배가 필요하므로 선택하기에 복잡하다.

그러나 카드 전체의 수가 십만매로 될 때를 생각해 보면, 필요한 카드 200매에 대하여 700매이어서 이것을 눈으로 분류한다는 것은 간단치 않다. 이럴 때 어느 방법이 좋은가를 판단하는 확률계산 방법이 있다.

다음 표 1은 어느 카드에도 일정한 자리수의 번호를 일정한 개수만을 併記할 때, 어느 번호가 기재되어 있는 카드의 存在確率을 분모로 표시하고, 그 번호의 카드를 선출할 때에 전체 카드 매수에 대한 떨어지는 카드매수의 비율을 분자로 표시한다.

예로서 각 카드에 네 자리의 번호를 네 개씩 併記할 때의 확률의 비율은 $\frac{0.005.394\cdots}{0.000.300\cdots}$ 이므로, 천매의

카아드 가운데 특정 번호가 기재되어 있는 카아드는 1매 미만이지만, 선출할 때에 떨어지는 것은 5매이어서, 이 방법은 충분히 사용할 수 있다. 그러나 카아드 매수가 십만매라고 가정한다면, 떨어지는 카아드는 500매이므로 이 방법은 그다지 좋은 방법이라고 할 수 없다.

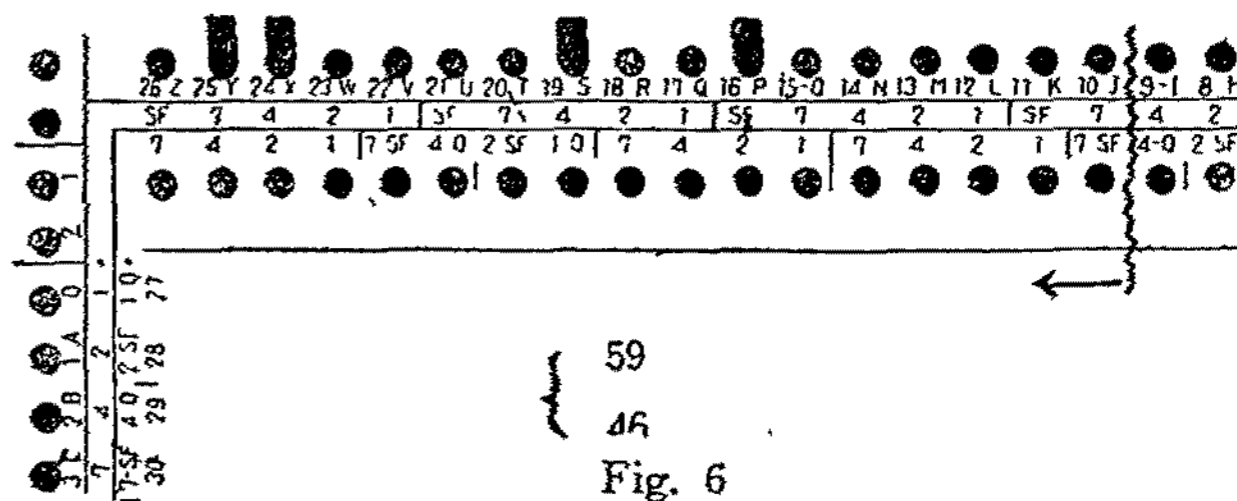


表 1¹⁾

자리수 (L)	併記數 (M)	2	3	4	5	6
1		0.19.....	0.271	0.343,9	0.409,51.....	0.468,559
		0.19.....	0.271	0.343,9	0.409,51.....	0.468,559
2		0.036,1	0.073,441	0.118,267	0.167,693	0.219,548
		0.019,1	0.029,701	0.039,404	0.049,010	0.058,530
3		0.006,859	0.019,903	0.040,672	0.068,674	0.102,871
		0.000,999	0.002,997	0.003,994	0.004,990	0.005,985
4		0.001,303	0.005,394	0.013,987	0.028,123	0.048,201
		0.000,200	0.000,300	0.000,400	0.000,500	0.000,600
5		0.000,248	0.001,462	0.004,810	0.011,517	0.022,585
		0.000,020	0.000,030	0.000,040	0.000,050	0.000,060
6		0.000,047	0.000,396	0.001,654	0.004,716	0.010,582
		0.000,002	0.000,003	0.000,004	0.000,005	0.000,006
7		0.000,008	0.000,107	0.000,569	0.001,931	0.004,958
		0.000,000,2 ...	0.000,000,3 ...	0.000,000,4 ...	0.000,000,5 ...	0.000,000,6 ...
8		0.000,001,7 ...	0.000,029	0.000,196	0.000,791	0.002,323
		0.000,000,02...	0.000,000,03...	0.000,000,04...	0.000,000,05...	0.000,000,06...

2. 單 記

(a) 0~9의 10개 구멍으로 된 필드를 組로 하여 자리수를 정하는 방법이다. 예를 들면 10~19에서 한 자리의 0~9, 20~29에서 십 자리의 0~9, 30~39에서 백 자리의 0~9와 40~49에서 천 자리의 0~9를 표시하는 것이다.

비교적 적은 수의 구멍으로 상당히 많은 수의 분류가 가능하고, 선택할 때의 조작도 간편하지만 併記할 수 없는 단점이 있다.

(b) ⑤ 즉 SF-7-4-2-1의 양식은 0~9까지의 수를 어느 것이나 두 개의 구멍만으로 펀칭하여 표시하는 방법이다. 즉 두 개의 구멍만의 선출로 선택하는 방법이다.

7, 4, 2, 1 이외의 수는 和가 각각의 수에 상당하는 두 개의 구멍(예 9=7+2)을 자르고, 7, 4, 2, 1은 각각의 수와 SF의 구멍을 펀칭한다. 단 0은 7+4로 대응한다.

Fig.7은 1950을 표시하고 있다. 이 방법에서는 만개의 항목을 분류하기 위하여는 H=20, P=S=8이어서 카아드의 四邊의 外向펀칭만으로 10¹⁶에 해당하는 항목을 분류할 수 있다.

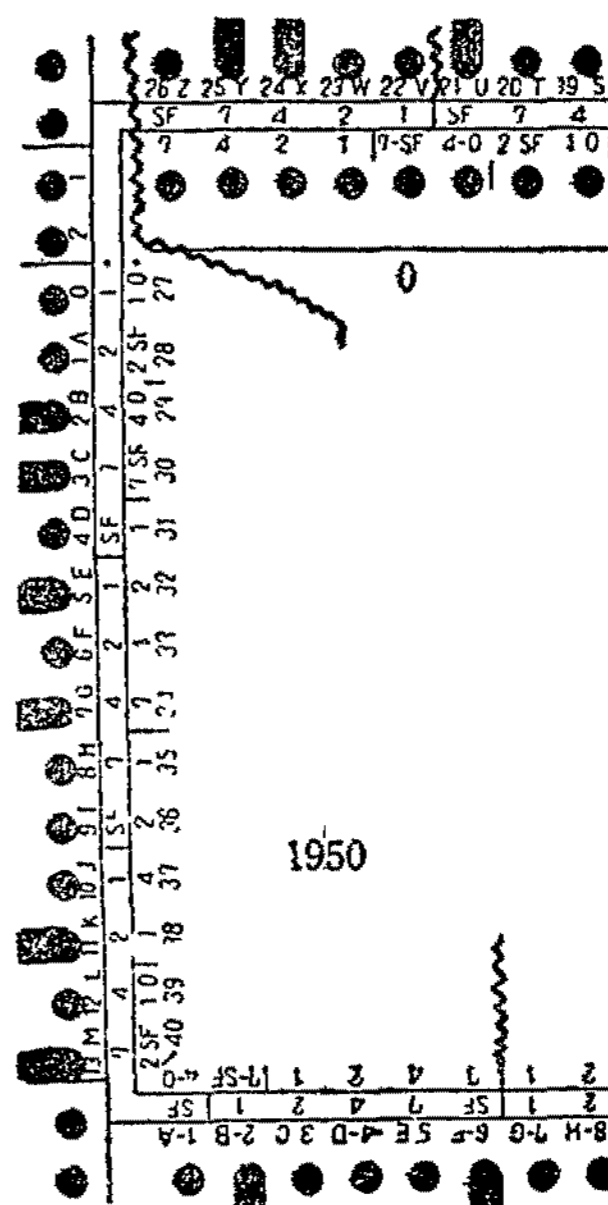


Fig. 7

B. 알파벳

항목을 표시하는 것으로 수(數) 이외로 많은 것은 알파벳이다. 인명(人名), 지명(地名) 등 기타 분류항목의 명칭에 사용한다.

1. 單 記

(a) 가장 간단한 방법으로 A~Z로 된 각 필드에 한 개의 문자씩 순차적으로 편칭한다. A~Z의 필드는 8組이지만 6組를 사용하는 것이 편리하다. 즉 필드의 순서를 上邊外向, 中邊外向, 下邊內向, 下邊外向, 中邊內向, 上邊內向으로 한다면 처음 세 개의 문자는 한번으로 선출할 수 있고, 다음 세 개의 문자도 한번으로 가능하다.

예를 들면 Daniel이 편칭된 카아드에서는 上邊 d, 中邊 a, 下邊 n에선' 출침을 끼우고 흔들면 dan의 편칭구멍이있는 카아드만 약간씩 아래로 내려오므로, 이 카아드만 가지고서 다시 카아드를 반대로 쥐고 iel을 선택하면 된다.

그러나 이 경우에서 필드수 이상의 문자를 편칭할 수 없어서 Danielson의 여섯번째 문자까지만 편칭할 때에는 Daniel과 같이 된다. 이것을 피하기 위하여 문자수를 표시하는 필드를 만들어 사용한다.

이렇게 해서 6문자 이하의 Dan과 Daniel을 구별하고, 6문자 이상의 Daniel...도 구별할 수 있다. 또한 글자수를 표시하는 구멍을 윗 방향으로 편칭한다면 dan을 선출할 때에 글자수도 동시에 선출할 수 있다.

(b) A~Z를 1~26의 숫자로 나타내고, 그 수를 13-7-4-2-1의 基數에 의하여 표시한다(13=SF)

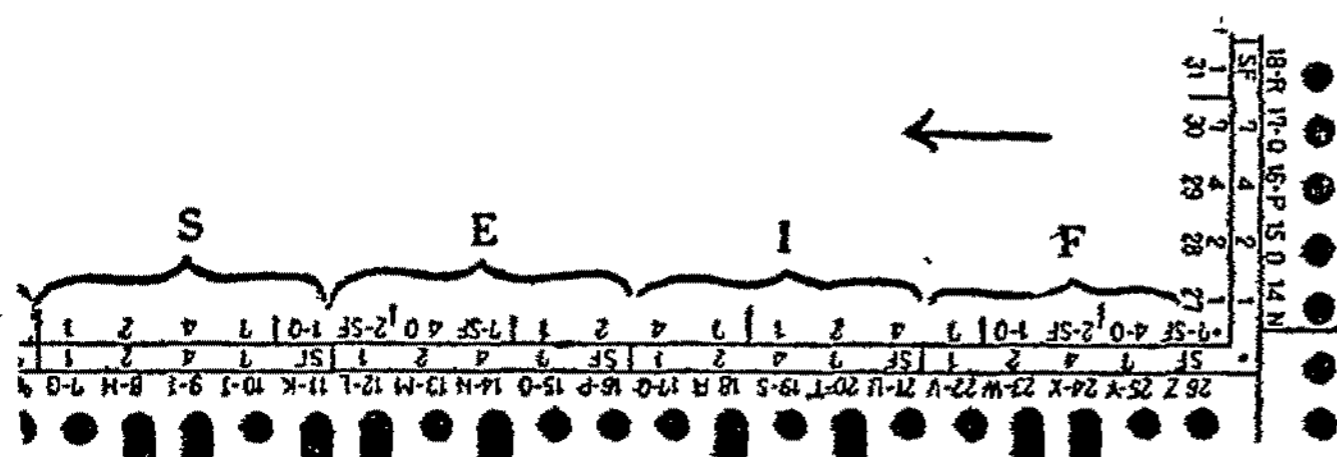


Fig. 8

편 칭 구 멍	편 칭 구 멍
A 1=1	N 14=SF+1
B 2=2	O 15=SF+2
C 3=2+1	P 16=SF+2+1
D 4=4	Q 17=SF+4
E 5=4+1	R 18=SF+4+1
F 6=4+2	S 19=SF+4+2
G 7=7	T 20=SF+7
H 8=7+1	U 21=SF+7+1
I 9=7+2	V 22=SF+7+2
J 10=7+2+1	W 23=SF+7+2+1
K 11=7+4	X 24=SF+7+4
L 12=7+4+1	Y 25=SF+7+4+1
M 13=7+4+2(또는 SF)	Z 26=SF+7+4+2

Fig.8은 이 방법에 의하여 Fieso를 표시한 것이다. 이 방법에 의하면 필요한 구멍수는 적고, 희망하는 카아드만이 얻어지지만, 전체의 구멍에 대하여 선출하여야만 한다.

즉 7로 떨어지는 것은 G만이 아니고 H~M, T~Z가 있기 때문에 G를 선출할 때에는 7로 떨어지는 카아드 가운데 1, 2, 4, SF로 떨어지지 않는 것을 선택하여야 한다. 따라서 이 방법은 그다지 편리한 방법은 아니다. 그러나 조합이 간단한 단어를 표시할 때에는 선출하는 구멍도 적으므로 실용적이다.

2. 併 記

Fig 9은 Oparin과 Salkowsky를 併記한 것이지만, 이 경우에는 문자수를 표시하는 필드의 효과는 그다지 크지 않다.

예에서는 6과 9가 편칭되어 있기 때문에 Salkow라고 하는 6문자의 단어를 선출할 때에도 이 카아드가 일제히 떨어진다. 또한 併記한 문자가 組合할 수 있는 다른 단어(Fig.9에서는 Opakaw)도 떨어질 수 있지만, 그 비율은 실제로 극히 작다. 즉 그 여분으로 떨어질 수 있는 비율은 다음 표 2와 같다.

表 2²⁾

M (併 記 數)	2	3	4
(존재하는 비율)×10 ⁶	0.1844	1.8707	9.3694
(추출되는 비율)×10 ⁶	0.0065	0.0097	0.0129
M (併 記 數)	5	6	
(존재하는 비율)×10 ⁶	31.8841	84.9973	
(추출되는 비율)×10 ⁶	0.0162	0.0193	

이러한 수치는 A~Z의 총 문자의 분포가 균일하다고 가정해서 얻어진 것이지만, 실제로는 문자에 따라서 출현 빈도가 다르고 문자의 순서는 숫자의 경우와 같이 완전하게 자유스럽지는 않다. 그러나 표 2는 한눈으로 볼 수 있겠끔 구한 것이다.

만일 여섯 개의 단어를 併記할 경우에 대하여 생각해 보면, 1만(萬)개의 카아드 중에 어느 임의의 단어를 기입한 카아드는 평균 1매도 존재하지 않으므로, 그 단어를 선출할 때 떨어지는 카아드 수도 1매 미만이다.

그러므로 이 경우에 있어서 걱정할 정도의 여분의 카아드는 떨어지지 않는다.

이상으로 숫자 및 알파벳을 표시하는 기본형을 대체로 기술하였지만, 이와 같은 방법을 고려하는 것은 다른 방법의 기본이 되므로, 방법 그 자체보다도 고려하는 방법에 주의를 기울여야 한다.

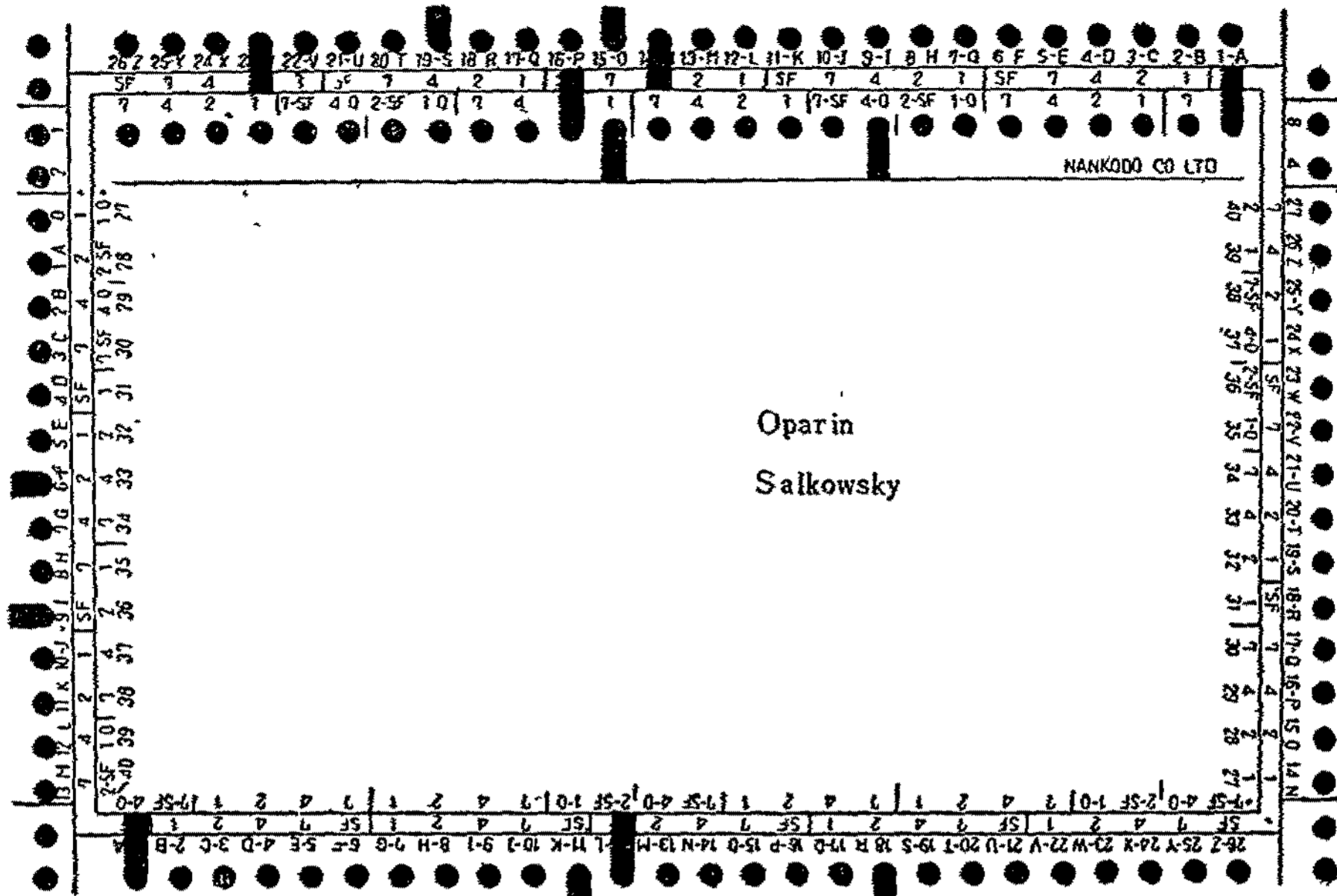


Fig. 9

C. 分子式

1. 주요 元素의 原子數를 지시한 필드에 각각 正해 놓는 방법.

Fig.10에서 보는 바와 같이 上向外向, 왼쪽으로부터

C(10개의 구멍), H(10), O(5); 中邊外向, '왼쪽으로 부터 N(5), S(5), Cl(5), Br(5), 기타(5)로 약속한다. 이것을 ⑤의 方法으로 절단하면 C와 H는 1~99개를 나타내고, O, N, S, Cl, Br, 기타는 각각 1~9개를 나타낼 수 있다.

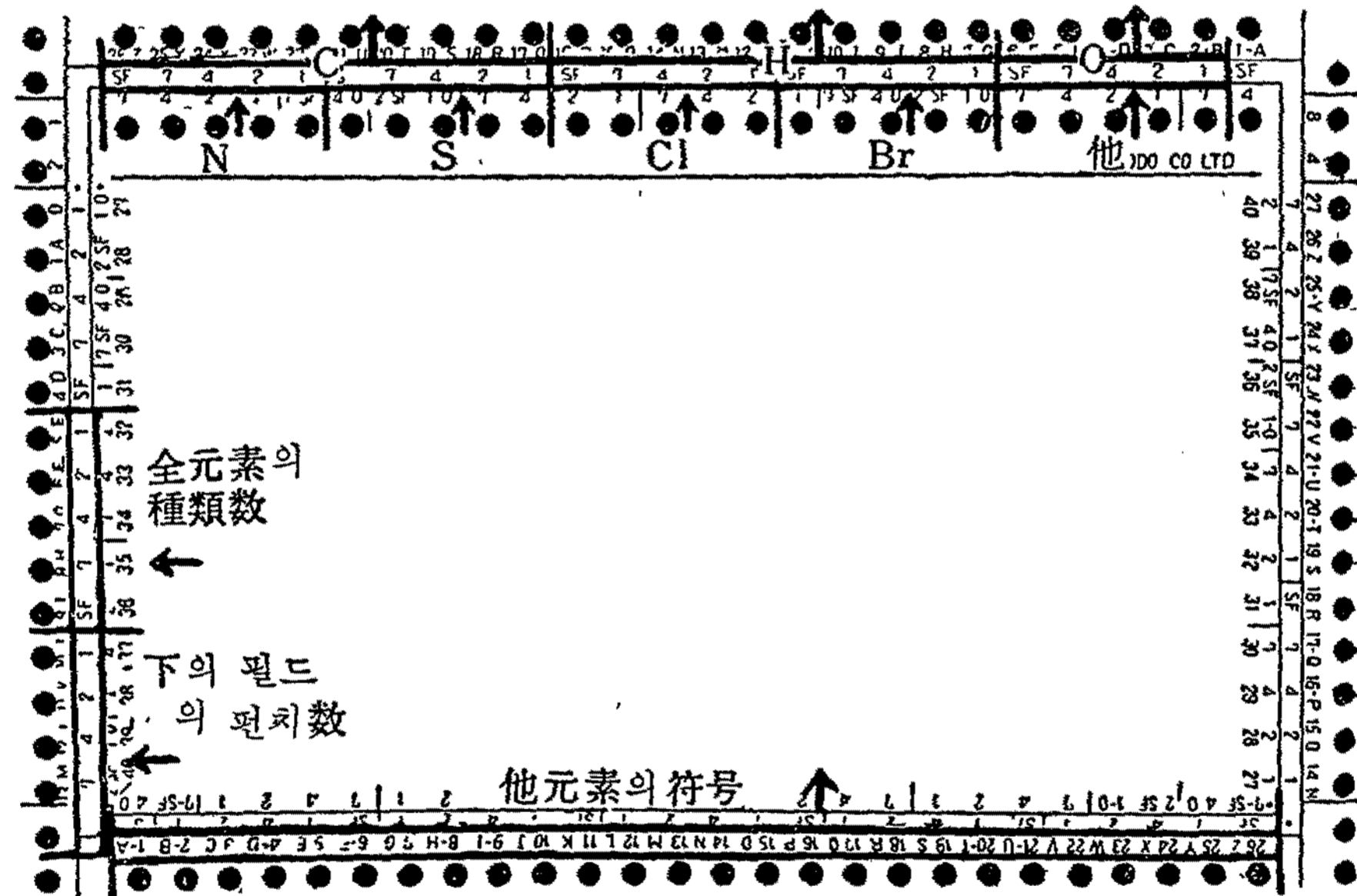


Fig. 10

원자수가 이 값들 보다 클 때에는 위에서 기술한 최대수 즉 C와 H는 99, 0이하는 9로 代用하여도 그다지 지장이 없음을 다음 설명에서 알 수 있다. 平山健三³⁾이 조사한 Beilsteins Handbuch의 分子式索引의 統計를 보면 全體가 약 2500페이지 중에서 C 또는 H가 99개 이상으로 형성된 분자는 약 1.5페이지(0.06%)이고, 또 C₁₈化合物(총 6500개) 중에서 C, H 이외의 原子가 9개 이상으로 형성된 분자는 99개(전체의 1.5%)

에 불과하였다.

本論에 돌아가서 C, H, O, N, S, Cl, Br의 原子數를 끊는 필드는 위에서 말한 것과 같이 정해져 있지만 그 외의 元素의 原子數는 일괄하여 표시하기로 되어 있다. 그래서 그 元素의 種類는 下邊上向의 펀치로 ③에 의해 표시한다.

예를 들면 Na는 N와 A를 끊게 되는 것이다. 이렇게 하는 경우에 일어나는 문제는

(a) Ac와 Ca, Ag와 Ga, Al과 La, At와 Ta, Br과 Rb, Cs와 Sc, Er과 Re, In과 Ni이며 원래 符號가 반대 원소인 경우에도 생각되는 점이지만, 다행한 일은 正逆 어느 경우에도 有機化合物中에 잘 나타나는 원소가 없는 것이다. 또한 원자의 제한이 있으므로 逆符號의 원소에 자리바꿈된 화합물이 언제나 존재될 수는 없다.

(b) Pb로 알고 P와 B를 절단한 것이 B(硼素)로 생각될 가능성이 있다.

이와 같은 것을 방지하기 위해 이것에 편칭한 구멍의 수를 왼쪽 아래의 5개의 구멍에 ⑤를 이용하여 표시한다. 이 경우 아래로부터 두번째 구멍을 SF로 한다.

(c) Ca와 Be를 편칭할 경우 Ba와 Ce로 선출된다. 그러나 실제로 Beilsteins Handbuch의 索引에 의하면 2種 이상의 元素符號를 편칭하지 않으면 10種 화합물은 10種 밖에 없다.

이상에서 필요한 필드는 上邊外向, 中邊外向, 下邊內向, 左邊外向 이므로 전체의 약 반이다. 그리고 선출할 때에는 左邊 이외의 3列을 한번에 선출하여 얻어지는 카야드에 대하여 左邊을 선출해도 좋고 이와 반대의 순서로 해도 좋다. 또한 左邊을 上向으로 자르면 全필드가 한번에 선출되지만, 이러한 경우에는 잘라낸 가장자리가 약하고, 선출하기에도 어려우므로 들레를 잘라버리는 것이 좋다. 그렇게 하면 左邊만을 먼저 外向으로 선출할 수도 있다.

2. 前項의 방법은 유기화합물에 좋고, 여기에 기술하는 것은 선택의 능률이 그다지 좋지 않지만, 원소 종류의 제한이 없기 때문에 무기화합물에 사용하는 방법이다. Fig.11이 그 예로서 ③에 의해 上邊外向필드에 각 원소부호의 大文字(즉 第一文字), 中邊外向에 小文字(第二文字), 下邊上向에 각 원소의 원자수를 편칭한다.(단 26 이상은 26으로 한다)

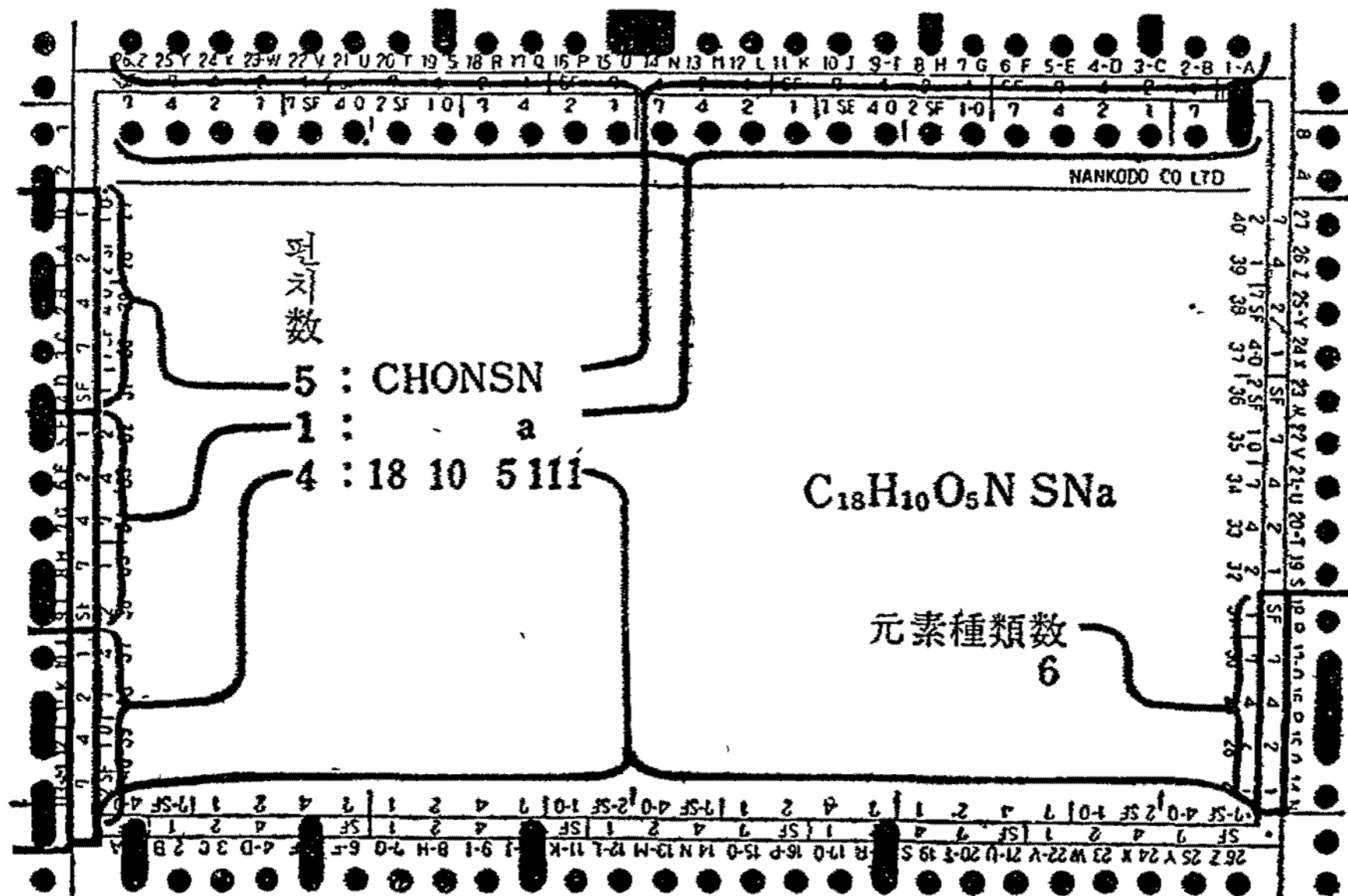


Fig. 11

이와 같이 분자식을 편칭할 수 있지만, 선출할 때 불편이 많으므로 보조적인 편칭을 다음과 같이 한다.

右邊 아래의 5개 구멍을 ⑤에 의해 원소의 種類數를 자른다. 이에 따른 예를 들면 $C_{18}H_{10}O_5NSNa$ 를 선출할 때에 $C_{18}H_{10}O_5NSCaNa$ 가 混合되는 것이 방지된다. 즉 前分子는 이 필드에 6, 後分子는 7이 편칭되어 있기 때문이다.

左邊上의 5개의 구멍은 ⑤에 의해 上邊外向필드의 편칭數를 표시한다. 예를 들면 $C_{18}H_{10}O_5NSNa$ 를 선출할 때 $C_{18}H_{10}O_5NSNaP$ 가 섞이는 것을 방지할 수 있다(前分子의 편칭數는 5, 後分子는 6).

左邊中の 5개의 구멍은 ⑤에 의해 中邊外向필드의 편칭數를 표시하면, $C_{18}H_{10}O_5NSNa$ 를 선출할 경우 C_{18}

$H_{10}NSiNa$ 가 섞이지 않는다.(이 필드의 편칭數가 前分子는 1, 後分子는 2)

左邊下의 5개의 구멍을 ⑤에 의해 下邊內向필드의 편칭數를 표시한다. 이렇게 하면 $C_{18}H_{10}O_5NSNa$ 를 선출할 때 $C_{18}H_{10}O_5N_2SNa$ 가 섞이지 않는다(前分子는 4, 後分子는 5).

이것으로 6種의 원소로 이루어진 분자의 카야드에서 上中下의 3邊에 C, H, N, O, S, a, 1, 5, 10, 18이 편칭되어 있으므로 카야드를 선출할 때 Fig.11의 카야드만이 얻어진다. 그러나 이 방법에 있어서 최대의 결점은 上邊, 中邊, 下邊의 편칭 순서를 표시할 수 없으므로 원자가가 잘 맞는 다른 분자가 섞여오는 수가 있다. 즉 $C_4H_8O_3$ 를 선출할 때 $C_3H_8O_4$ 와 섞일 위험성이 있음.

D. 反 應

지금까지 기술한 것은 모두 數字 또는 알파벳으로 표시되어 있는 항목의 코오드 決定方法으로서 비교적 간단하였다. 그러나 반응의 경우는 그 간단한 記號的 표현방법 및 분류가 정해 있지 않으므로 反應의 표현방법으로서 W. Theilheimer의 Synthetische Methoden der Organischen Chemie에서 사용되고 있는 방법을 써서 코오드化를 생각해 보려한다. 우선 그의 記號法을 略述하여 보면



의 반응은 NC↓O로 표기된다. 이 기호는 NC, ↓, O의 3가지 부분으로 형성되어 있다.

(1) 第一의 기호 NC는 生成結合符號로서 반응에 의해 새로 만들어진 結合(bond)으로 結合되어 있는 2개의 원자를 元素符號로 표시한다. 단 그 元素符號는 C, H, O, N, S의 5가지로 하고, 할로젠原子는 일괄하여 Hal, 그 밖의 원자는 Ü(또는 Ue, 英譯版은 R 또는 Rem)로 한다. 그리고 그 記載의 우선순위는 H, O, N, Hal, S, Ü, C이다. 따라서 反應(1)은 C—O 結合이 C—N 結合으로 되어 있으므로 生成結合符號는 NC이다.

(2) 第二의 記號는 反應樣式을 다음 4개의 어느 것에 넣어 각각 부호로 표시한다.

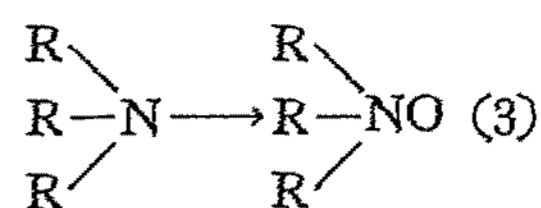
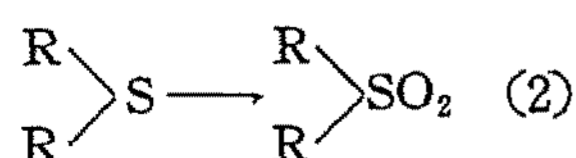
反應樣式의 分類	反應樣式符號
附加反應	↓
轉位反應	↷
交換反應	↕
離脫反應	

그리고 上記 反應으로 분류되지 않은 反應은 S₀로 한다.

(3) 第三의 기호 O는 消滅結合符號이며 반응에 의해 잘라지는 結合(bond)으로 열결되는 2개의 원자 또는 그 중 1개의 원자의 生成결합을 표시하는데 사용된 것과 같은 부호로 표시한다. 이 부호는 附加反應 또는 轉位反應일 때는 2개의 원자로 표시하지만, 交換反應 또는 離脫反應의 경우는 1개의 원자로 표시한다.

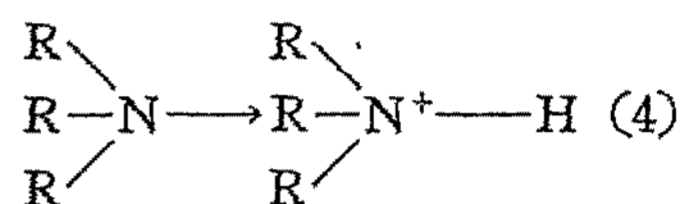
반응 (1)에서는 C—O 結合이 끊기므로 消滅結合符號는 O이다. 더우기 이 외의 특별한 반응은 다음 여러가지 방법이 사용되고 있다.

Lone Pair의 附加反應: 附加反應에 관계없이 消滅結合符號는 Lone Pair를 갖고 있던 원자의 부호만으로 표시한다. 예를 들면



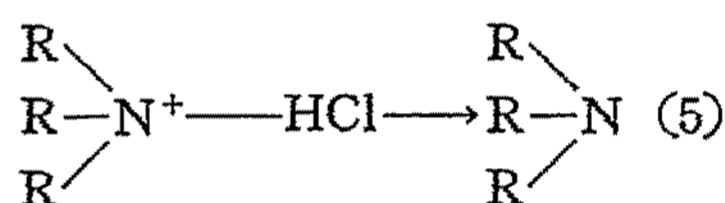
이는 각각 OS↓S, ON↓N로 표시한다.

Heteropolar bond를 만드는 附加反應: 이것은 上記 形式中の 하나의 경우이지만, 이 경우 生成結合符號로서는 Heteropolar bond를 의미하는 Het로만 기재하며, 消滅結合符號로서는 前記反應과 같이 Lone Pair를 가지고 있던 원자의 원소부호를 쓴다. 예를 들면



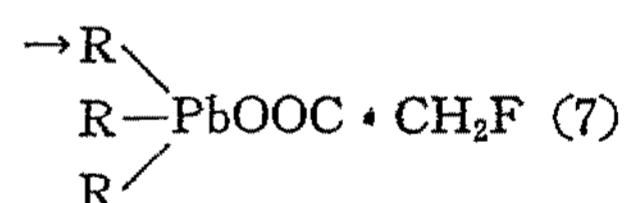
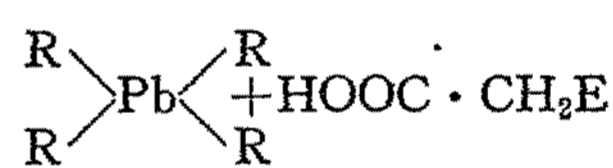
는 Het↓N로 표시한다.

Lone Pair를 생성하는 離脫反應: 上記 反應과 반대 의 반응으로서 生成結合符號는 Lone Pair가 생긴 원자의 元素符號 앞에 electron pair를 표시하는 E1을 사용한다. 消滅結合符號는 離脫原子의 부호를 쓴다. 예를 들면



의 반응은 E1N↑H이다.

Heteropolar bond를 생성하는 交換反應: 이런 경우는 消滅結合, 生成結合의 종류에 관계없이 단지 Het↕로 표시하고 消滅結合의 符號는 쓰지 않는다. 이에 속하는 반응에는 다음과 같은 것이 있다.

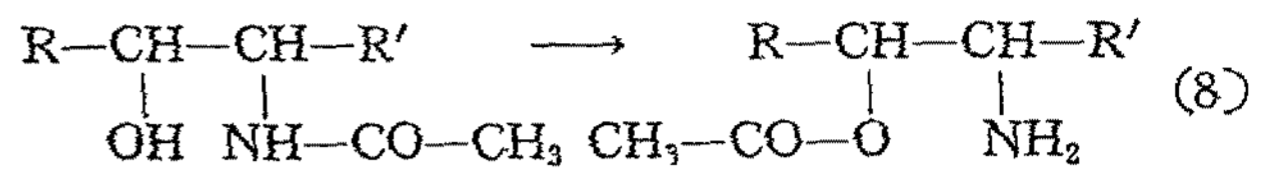


그 외의 반응은 SO로 표시한다. W. Theilheimer의 방법은 위에서 말한 것과 같이 간단하지만 몇 가지의 특별한 예가 있어 그 점이 불편하다.

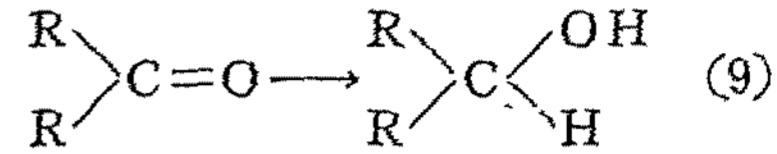
生成結合符號 및 消滅結合符號는 어느 것이나 문제로 하는 結合兩端의 원자(또는 electron pair)를 표시하는 2개의 부호를 사용한다. 그 부호는 W. Theilheimer의 방법과 같이 E1, H, O, N, Hal, S, R, C로 한다. Het는 生成 또는 소멸결합부호에는 사용하지 않고 별도로 보조부호로서 사용한다. 예를 들면 다음비교표로 되어 교환반응 및 이탈반응의 경우 소멸결합부호에 어느 원자를 선택하는가에 관계없이 분류가 상세하게 된다. 특히 (Het)는 보조부호이다. 轉位反應 및 前記 以外の 附加反應도 本法에서는 모두 같은 방법으로 취급하면 좋고 이때 반응 부호는 Theilheimer 법과 같다. 예를

	本 法	Theilheimer 법
交換反應은 (1)은	NC↑OC	NC↑O
Lone Pair의 附加反應 (2)는 (3)은	OS↓EIS ON↓EIS	OS↓S ON↓N
Heteropolar bond를 생성하는 附加反應 (4)는	HN↓EIN(Het)	Het↓N
Lone Pair를 생성하는 離脫反應 (5)는	EIN↑HN	EIN↑H
Heteropolar bond를 생성하는 交換反應 (6)은 (7)은	OR↑↑OR(Het) OR↑↑RC(Het)	Het↑↑ Het↑↑

들면



은 OC↓NC이며



는 HC↑OC이다. 이것을 편치카야드에 적합하도록 한 예가 Fig.12이며 카야드의 인쇄를 무시하고 기입한 기호의 의미에 구멍을 사용한다.

왼쪽의 10개의 구멍(제 1 필드)은 생성결합부호, 오른쪽의 10개의 구멍(제 3 필드)은 소멸결합부호로 하고 그 사이의 6개의 구멍(제 2 필드)은 反應樣式符號(그 중 오른쪽의 1개의 구멍은 Het에 대한 보조부호)로 한다

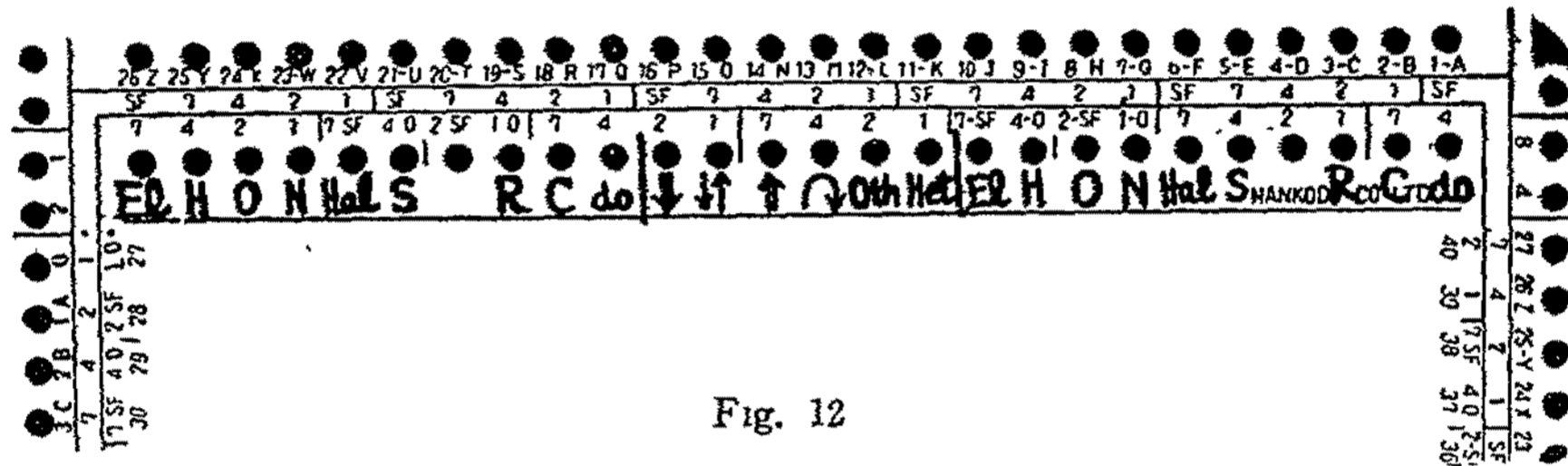
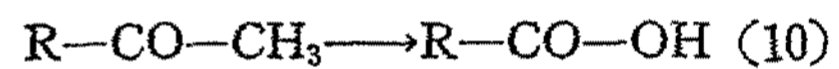


Fig. 12

편칭방법은 (1) 생성결합부호는 2개의 기호로 표시되고 있지만 제 1 필드에 편칭한다. (2) 反應樣式符號는 제 2 필드에 편칭되지만, (Het)가 있을 때는 오른쪽의 Het 구멍도 자른다. (3) 소멸결합부호도 (1)과 같이 제 3 필드에 2개를 편칭한다.

제 1 및 제 3 필드의 S와 R의 사이에 공백은 豫備이

고, do(ditto)는 결합부호가 CC와 같은 것이 두 개로 될 때 자른다. 예를 들면



은 OC↓CC(Theilheimer 법에서는 OC↓)이므로 Fig 13과 같이 된다.

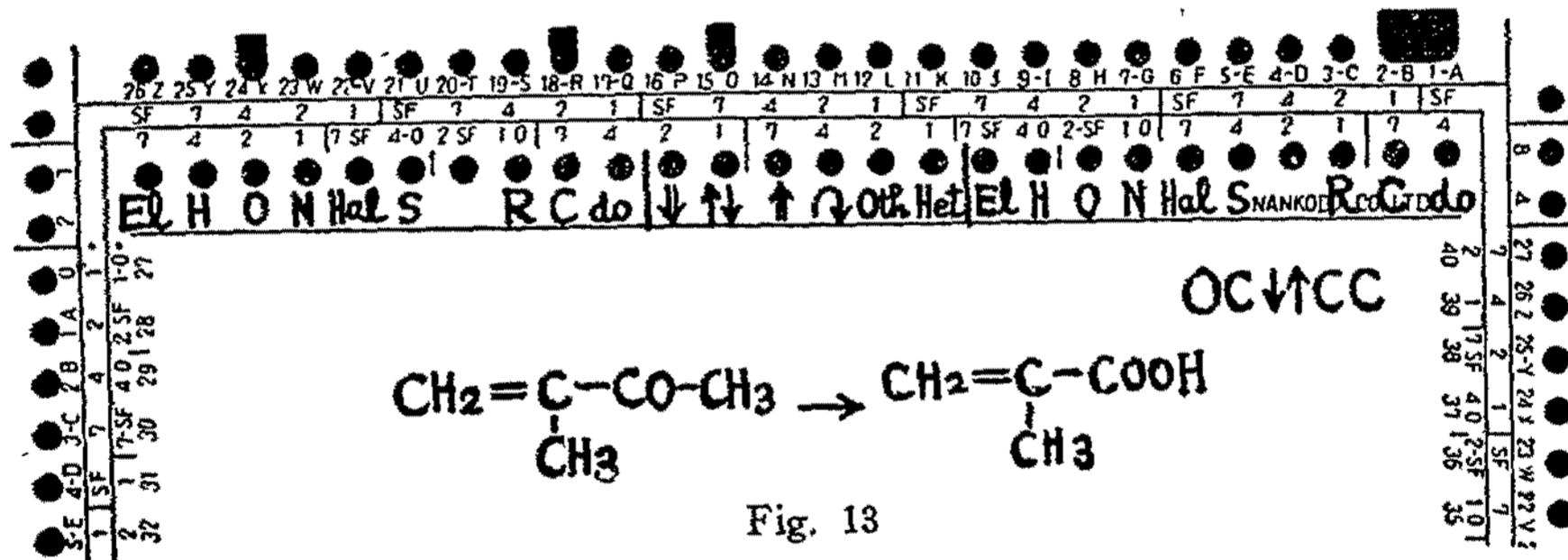


Fig. 13

E. U.D.C.

U.D.C.(國際十進分類法)라고 하는 것은 人智의 모든 개념을 十進法的 數字로 표기하는 분류법으로서 보통의 十進分類法은 1, 2, …… 10, 11, …… 100, 101, …… 과 같이 자리수를 위로 불러가고 있지만 U.D.C.의 특징은 모든 개념을 0.1, 0.2, 0.3, ……0.9로 大別하고 다음 小分類 0.5는 0.51, 0.52, ……0.59로 나누고, 그 이하도 같은 방법으로 하는 것이다. 따라서 어떠한 개념도 1 이하의 小數로 표시되는 것이지만 이러한 番號(主標數라고 함)에는 모두 0.이 붙는다. 실제로는 0.을

생략해서 더욱 수를 보기 쉽게 하기 위해 세자리마다 .를 붙인다.

예를 들면 54는

- 54 化學
- 541 理論化學
- 542 實驗化學
- 543 分析化學一般
- 544 定性分析
- 545 定量分析
- 546 無機化學各論
- 547 有機化學各論

548 結晶學

549 鑛物學

이와 같이 분류되었지만 細分類는 자리수를 늘일수록 理論的으로 얼마든지 상세하게 할 수 있다.

541 理論化學

541.6 物質의 性質과 化學構造와의 關係

541.65 光學的 性質과 構造의 關係

541.651 吸收와 化學構造의 關係

그리고 並列하는 항목은 十로, 相關關係가 있는 항목은 :로 연결, 수개의 並列하는 항목과 他項目의 상관계는 :[로 표시한다. 예를 들면

4,4'-디하이드록시스티렌 $\text{HO} \cdot \text{C}_6\text{H}_4 \cdot \text{CH} : \text{CH} \cdot \text{C}_6\text{H}_4 \cdot \text{OH}$ 는 547.636.5, 1,4-비스(P-하이드록시페닐)-1,3-4-부타디엔 $\text{HO} \cdot \text{C}_6\text{H}_4 \cdot (\text{CH} : \text{CH})_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_4 \cdot \text{OH}$ 는 547.638.4 또한 페닐기가 분리되어 있는 α, ω -비스(P-하이드록시페닐)폴리엔 $\text{HO} \cdot \text{C}_6\text{H}_4 \cdot (\text{CH} : \text{CH})_n \cdot \text{C}_6\text{H}_4 \cdot \text{OH}$ 는 547.638.6 이므로 α, ω -비스-(P-하이드록시페닐)폴리엔의 構造와 吸收스펙트럼은

541.651 : [547.636.5+547.638.4+547.638.6으로 표기된다. 유기화합물을 주로 하는 文獻의 정리를 U.D.C.에 의해 편치카아드로 하는 방법의 예가 Fig. 14이다. 이런 경우 분야가 유기화학에 한정되어 있으므로 실제로 잘 나오는 標數는 541/547(541부터 547까지를 말함)이 주가 되는 것으로 기타 관련이 많은 부분으로는 53(物理學)과 66(化學工業)이 있다. 이러한 出現率이 많은 標數는 생략 혹은 단축해서 표기하는 것이 좋으므로 上邊外向으로 1~9를 편칭하여 사용한다. 즉 53을 3, 54를 4, 54中 특히 546을 6, 547을 7로 하고 66은 8의 구멍으로 표기하며 이 이외의 標數는 생략치 않고 있는 것을 표시하기 위해 9의 구멍을 사용한다. 그리고 다음 자리의 숫자 0~9를 10~19의 구멍으로 표시하고, 이하의 자리를 20~29, 30~39, 40과 下邊 1~9, 10~19,로 표시한다. 예를 들면 547.636.5는 7, 16, 23, 36, 45(下邊의 5)의 구멍으로 표시되므로 Fig. 14는 上向의 편칭으로 이 표수를 표시한 것이다.

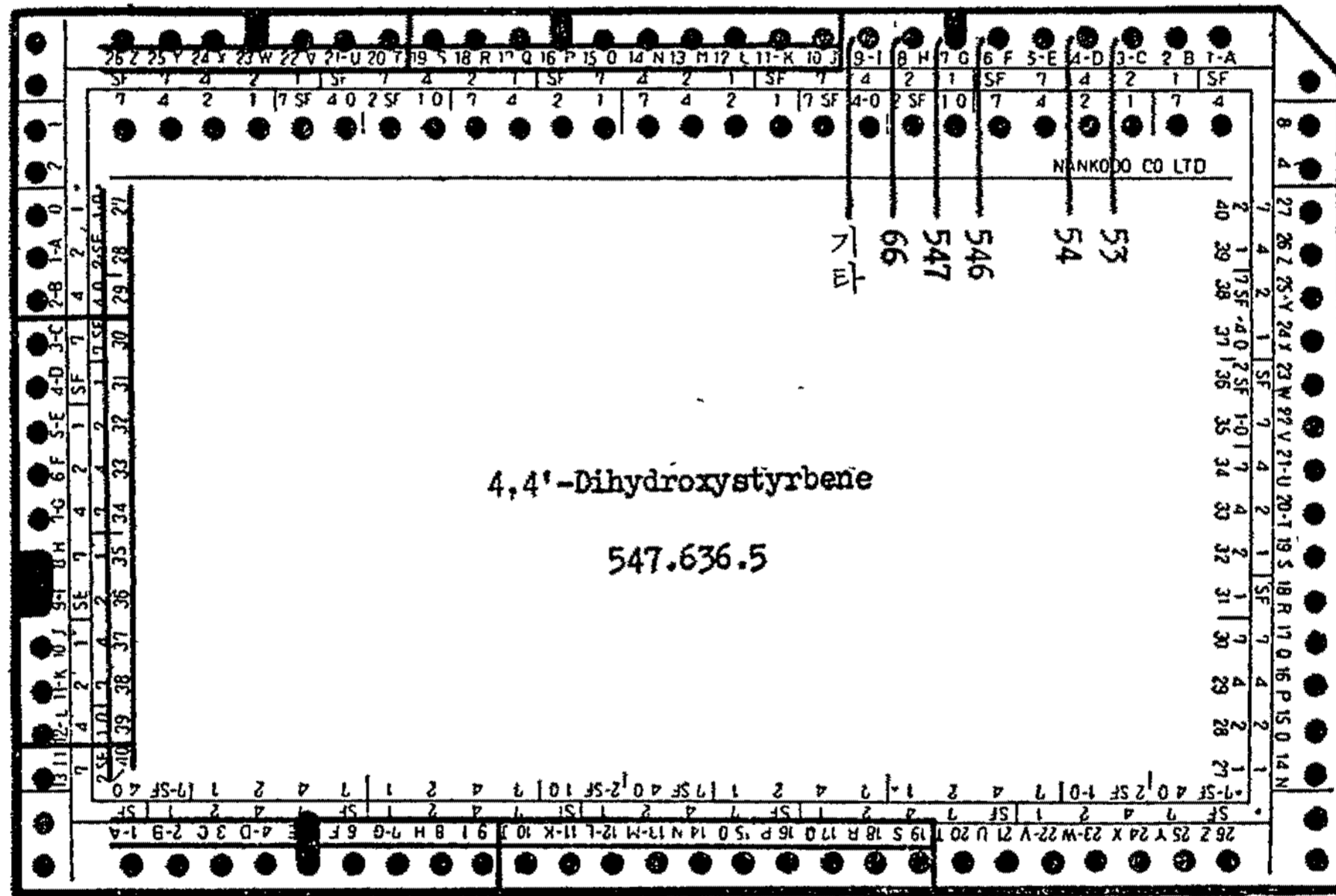


Fig. 14

이와 같이 해서 네 변의 구멍 80이 外向 또는 上向의 편칭만으로 546과 547은 10자리, 54의 기타 部門과 66은 9자리, 그 외의 部門은 7자리까지 표기할 수가 있다. 그러나 실제로는 이와 같이 多數의 자리수를 표시할 필요가 있는 것은 드문 일이며 적당한 자리수에서 끊고, 나머지의 구멍은 다른 分類에 사용하는 것이 좋다. 또한 主標數가 1매의 카아드에 대해서 한 개인 사실은 극히 드물고 多數의 標數가 표기되는 일이 많다. 예를 들면 「 α, ω -비스-(P-하이드록시페닐)폴리엔의 構造와 吸收스펙트럼」 541.651:[547.636.5+547.638.4+547.638.6은 多標數를 중복하여 편칭한다.

이와 같이 하면 어떤 하나의 항목, 즉 4,4'-디하이드록시스티렌에 대하여 기재된 카아드를 수집할 때에도 이 카아드가 얻어지며, 관련된 항목에도 한번에 선출할 수 있는 利點이 있다.

U.D.C의 표수에는 主標數 외에 固有補助標數라는 것이 있고, 이것은 主標數에 붙여서 그것을 修飾하는데 사용한다. 化學에 사용되는 고유보조표수에는 .01, .02,09, -1, -2,-9, '1, '2,'9가 있다. .0과 -로 표시되는 것은 한자리 내지 세자리다. 그의 大分類는 다음과 같다.

54.01 相

- 54.02 組織, 化學構造, 同位元素
- 54.03 物理的 性質 및 影響
- 54.04 化學的 性質, 特性 反應
- 54.05 分離, 抽出, 精製
- 54.07 合成
- 54.08 測定, 單位, 式
- 54.09 應用, 用途
- 54-1 物質의 狀態, 例: 54-145 溶液
- 54-3 化合物의 型
- 54-4 化學藥品, 試藥

이 있다. 그 사용법은 「4,4'-디하이드록시스티렌의 溶液」은 547.636.5 : 54-145로 해도 좋지만 간략해서 547.636.5-145라고 표기하도록 되어 있다. 그러나 「合成法」이라든지 「精製」라고 하는 것 같이 固有補助標數로부터 카아드를 찾을 필요가 있을 때도 있으므로 편

치카아드에서는 元來形의 54-145를 생각하는 것이 좋다. Fig.15는 이것을 고려한 코오드이다.

이것은 Fig.14에 약간 추가한 것으로 上邊 우측의 1, 2, 5를 각각 .0, -, 로 代用하고, 中邊은 固有補助標數의 .0와 -의 다음자리를 표시한다. 즉 .0와 -다음의 1~9는 標數의 1부터 9까지(固有補助標數는 .00, -0이 없으므로 0의 구멍은 없어도 좋다), 10~19는 다음자리의 0부터 9까지를 表記하는 데 사용하고, 그 이하의 자리는 主標數에 사용한 外邊의 20~29를 사용한다.

Fig.15의 편칭은 547.636.5-145를 표시한 것이다. 또한 ,는 誘導體를 표시할 때 보조표수의 기호이며 4,4'-디하이드록시스티렌 547.636.5와 醋酸 547.292로부터 前者의 diacetate 즉 4,4'-디아세톡시스티렌을 547.636.5'292와 같이 해서 표시한다.

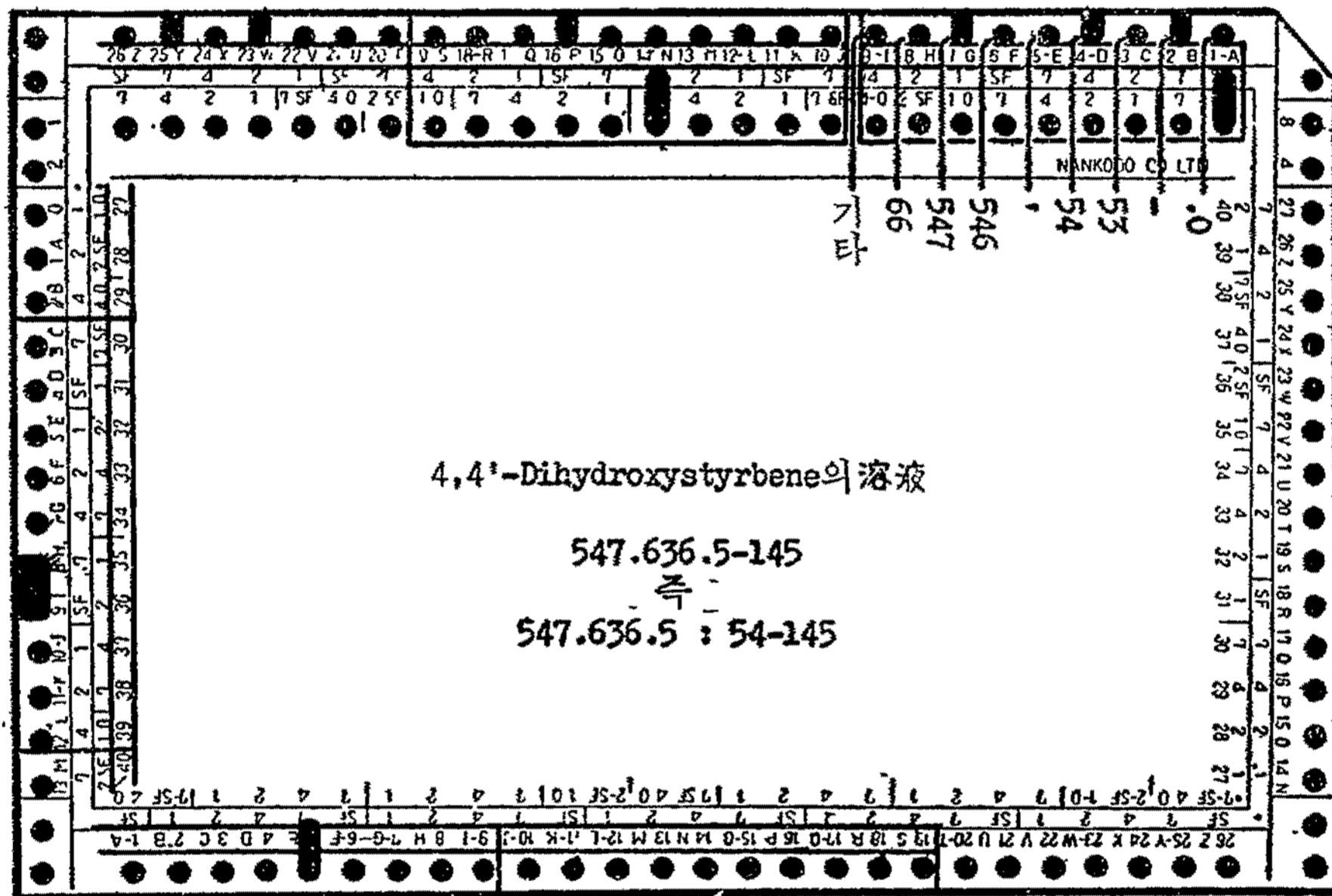


Fig. 15

이것은 큰 표수에 '를 붙이고, 다음에 작은 표수의 '7을 제외한 것을 붙이기 때문이다. 그러나 이것을 편치카아드로 표시할 때는 4,4'-디하이드록시스티렌誘導體라고 해도, 醋酸誘導體로 해도 얻어지는 것이 바람직하므로 하나로 한 표수 547.636.5'292보다 원래의 표수의 결합 547.635' : 547.292'로 환원해서 편칭한다. 이와 같이 하여 「4,4'-디아세톡시스티렌의 溶液」을 표시하는 카아드는 4,4'-디하이드록시스티렌誘導體 547.635.5', 錯酸誘導體 547.292', 4,4'-디아세톡시스티렌 547.635.5'292, 4,4'-디아실옥시스티렌 547.635.5'29, 非縮合多環芳香族化合物의 아세테이트 547.6'292, 非縮合多環芳香族化合物의 아실레이트 547.6'29, 上記諸化合物의 溶液 547.6……-145, 溶液 54-145 등의 각종 사실로부터 선출할 때에도 반드시 떨어져 오므로 多

目的으로 利用할 수 있다.

VII. 結 論

이상에서 기술한 것을 집약한다면 편치카아드의 원리와 化學分野에 대한 정보를 Punched card로 파일해 놓는 방법 및 그 축적 카아드를 선출(검색)하는 기술을 설명하였다. 그러나 설명 자체의 복잡성으로 인하여 불충분한 점이 있을 줄로 알지만 실제로 사용하는데 있어서 참고가 되기를 바란다.

참 고 문 헌

- 1) 平山健三. 化學の領域, 10, 2, pp. 153~159, 1956
- 2) 平山健三. 化學の領域, 10, 3, pp. 245~248, 1956
- 3) 平山健三. 化學の領域, 10, 5, pp. 450~453, 1956