

ケンブリッジ結晶構造データベース(CSD)の使い方

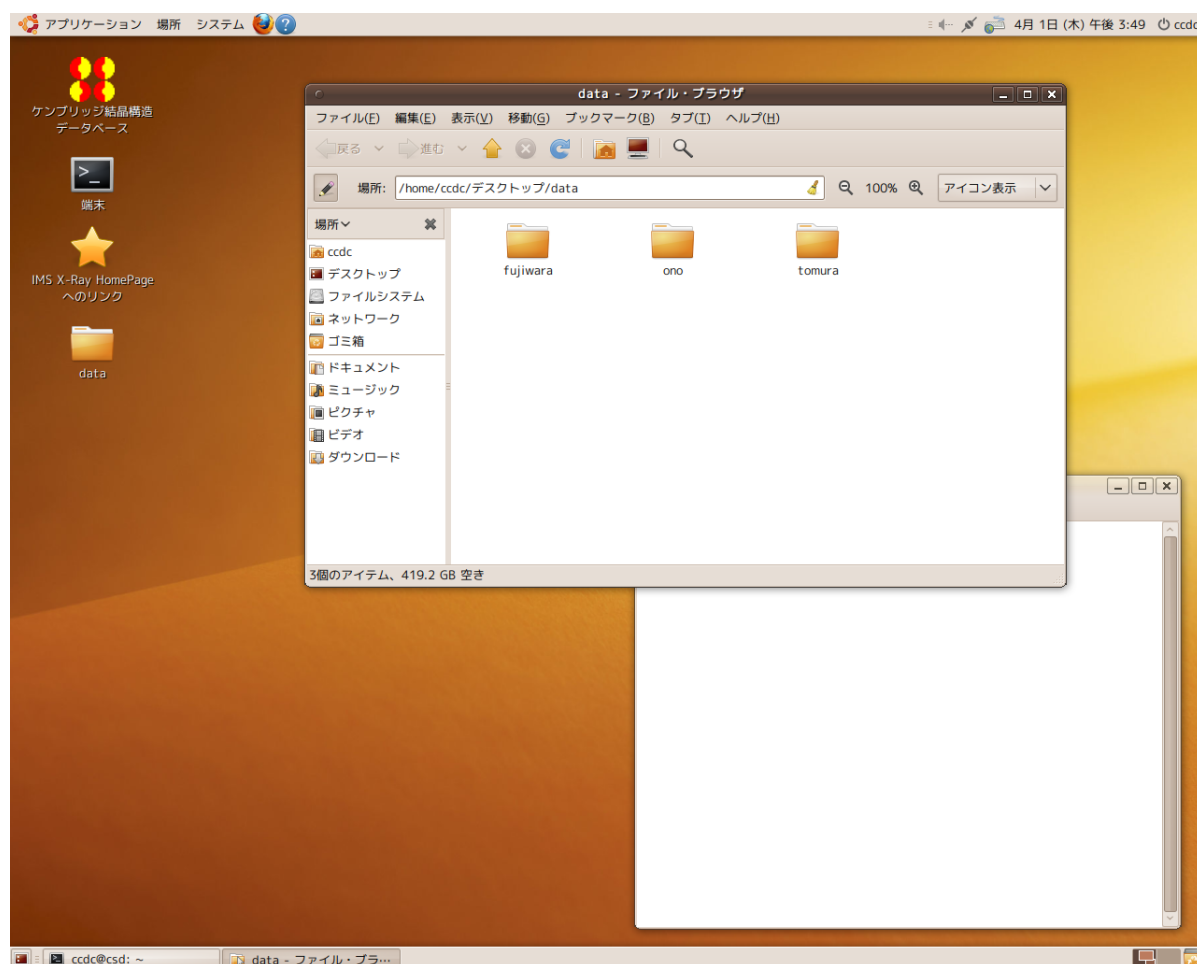
2010年4月

このサーバマシンは、ホスト名csd.ims.ac.jpで、OSはUbuntu 9.10というLinuxです。分子研の外からはアクセスできませんが、中からはsshとftpによるアクセスが可能です。さらに、MacやWindowsからファイル共有することもできます。まず、ログインしてください。

ユーザー名: ccdc

パスワード: お問い合わせください (前のサーバと同じです)

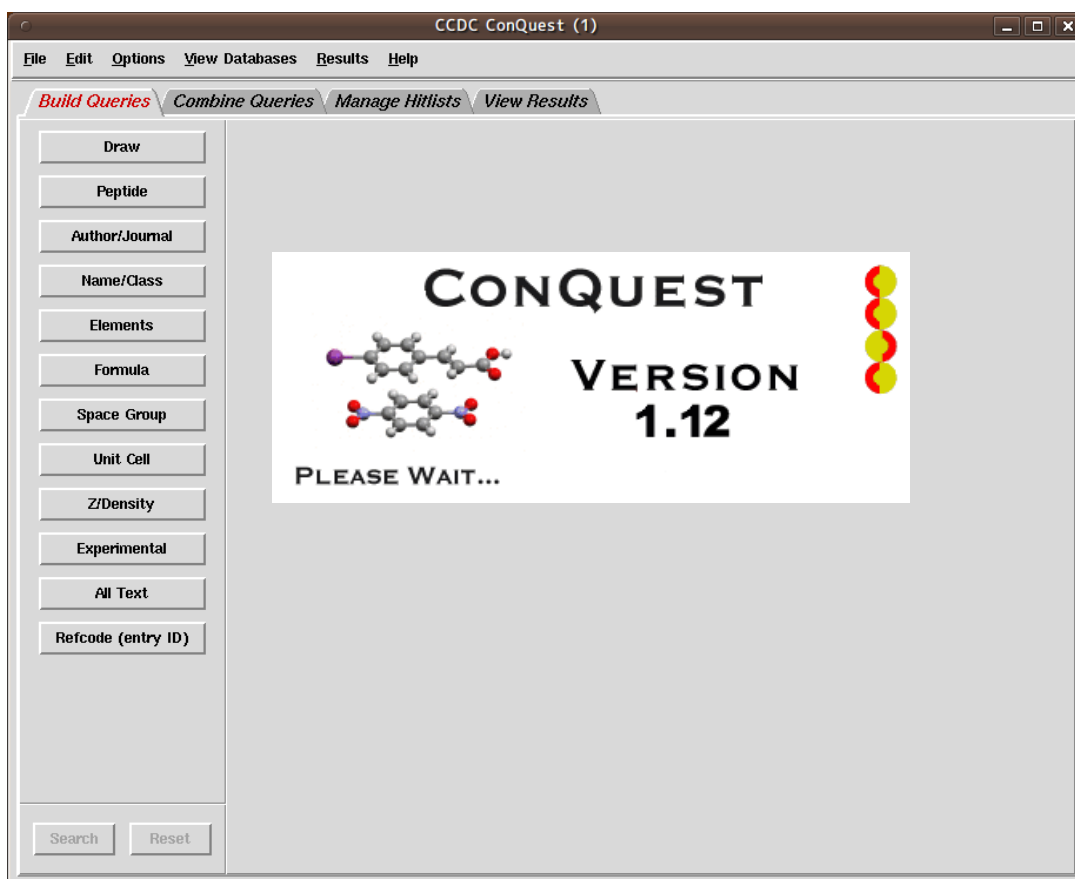
ログインするとデスクトップ画面が表示されます。



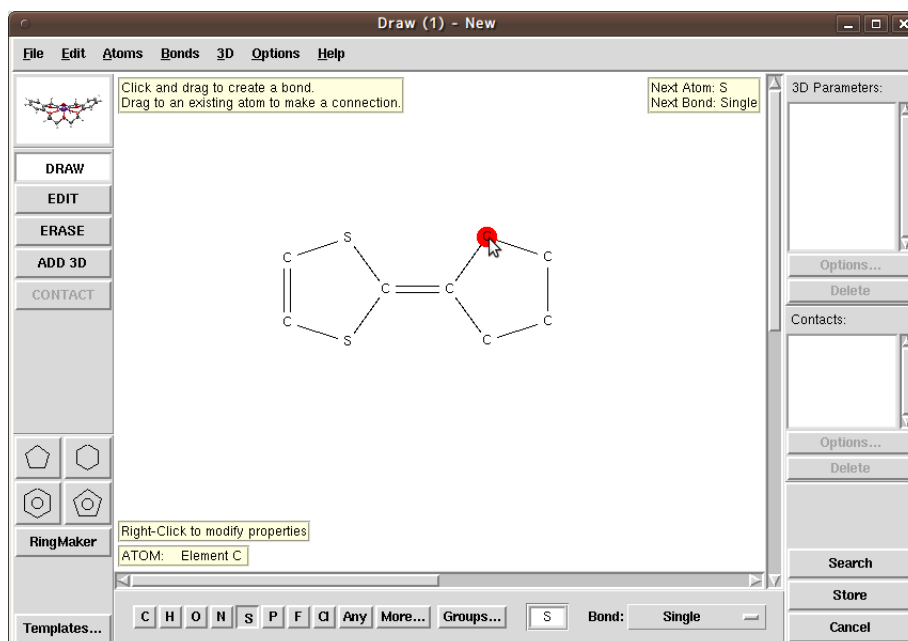
この"ccdc"というアカウントは共用のもので、各自のファイル等は必ず自分のフォルダに入れてください。個人用のフォルダはデスクトップ左側にある data フォルダを開いてその中に作ってください (Windows のように、ファイルブラウザの中で「マウス右クリック-フォルダの生成」により新しいフォルダが作れます)。


ConQuest という CSD のグラフィカル検索ソフトを開いて検索を開始します。デスクトップ左上にある「ケンブリッジ結晶構造データベース」のアイコンをダブルクリックするとアバウト画面に続き、

ConQuest のメインウィンドウが開きます。



ConQuest による検索の方法は至って簡単で、初めての人でも直感的に使えるでしょう。メインウィンドウ左側の"Draw"(構造式検索・下図)や"Formula"などが検索の種類を表すボタンになっていますので、これらを押していろいろと試してみてください。ConQuest の Help メニューからリファレンスマニュアル(Help Index)やチュートリアル(Tutorials)をブラウザで参照することができます。検索結果は CIF、PDB、あるいは PDF などいろいろなフォーマットのファイルで保存できます。



PDF等の印刷には OKI のレーザープリンタが利用できます。ConQuest の終了は File メニューから Exit を選んでください。マシンからのログアウトは、デスクトップ画面右上の  メニューから "ログアウト..." を選んでください。

リモートログインについて

Linux マシンや Mac OS X 10.3 以上の Macintosh、あるいは Windows マシンでも X サーバソフトがあれば、所内の離れたところからログインし、CSD を使うことができます。ここでは一例として Macintosh (Mac OS X 10.5) の場合を示します。

まず、Macintosh マシンの移動メニューのユーティリティを選んで開いたウインドウの中の "X11" をダブルクリックして下さい。しばらくすると端末が開きますから、

```
ssh -Y -l ccdc csd.ims.ac.jp
```

と入力して下さい ("-l" はエルです)。

```
ccdc@csd.ims.ac.jp's password:
```

と表示されたら上記のパスワードを入力します。なお、そのマシンからの最初のアクセス時のみ、

```
The authenticity of host 'csd.ims.ac.jp (133.48.163.171)' can't be established.
```

```
RSA key fingerprint is 02:48:f6:ce:5f:54:6e:47:8d:6f:17:b9:f5:74:e1:7a.
```

```
Are you sure you want to continue connecting (yes/no)?
```

のようなメッセージが現れますが、これには "yes" を入力して下さい。CSD サーバにログインできれば以下のようなプロンプトが表示されます。

```
ccdc@csd:~$
```

まず個人用ディレクトリを作成して下さい。

```
ccdc@csd:~$ cd data (共用データディレクトリに入る)
```

```
ccdc@csd:~/data$ mkdir tanaka (その中に個人用ディレクトリを作る)
```

```
ccdc@csd:~/data$ cd tanaka (作った個人用ディレクトリに入る)
```

```
ccdc@csd:~/data/tanaka$ cq (個人用ディレクトリの中から ConQuest を起動する)
```

これで自分のマシンの画面上に ConQuest のウインドウが表示されるはずですが、CSD サーバからログアウトするのは、ConQuest を終了させた後、

```
ccdc@csd:~/data/tanaka$ exit
```

```
logout
```

```
Connection to csd.ims.ac.jp closed.
```

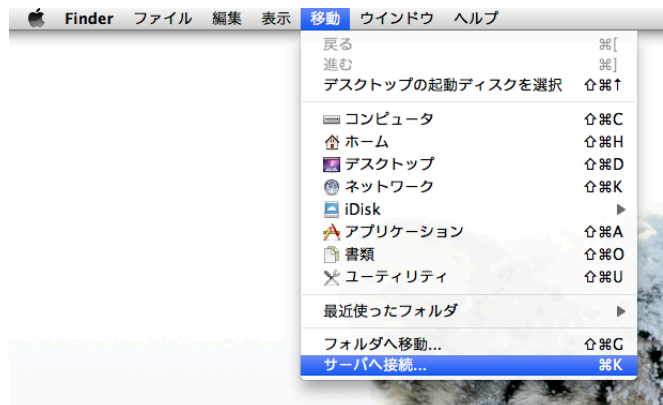
と入力して下さい。最後に Macintosh の X11 アプリケーションを終了させます。なお、セキュリティ上の観点から telnet によるアクセスはできません。

ファイル共有について

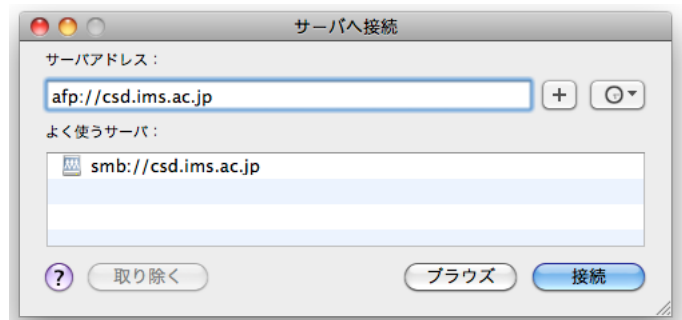
このサーバマシン `csd.ims.ac.jp` は、Macintosh や Windows マシンからファイル共有することができます。ここでは Snow Leopard (Mac OS X 10.6) と Windows 7 からのファイル共有の例を示します。

Snow Leopard の場合：

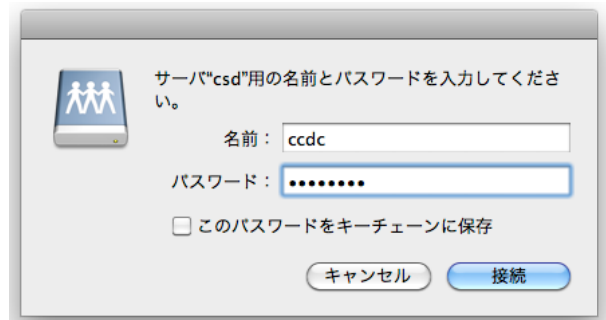
(1) Finder の「移動」メニューの「サーバへ接続...」を選びます。



(2) 「サーバへ接続」ウインドウでサーバアドレスに”`afp://csd.ims.ac.jp`”と入力して「接続」ボタンを押します。サーバアドレスはWindowsのファイル共有プロトコルである”`smb://csd.ims.ac.jp`”でも構いません。



(3) 開いた認証用ウインドウでユーザー名”`ccdc`”とパスワードを入力して「接続」ボタンを押します。

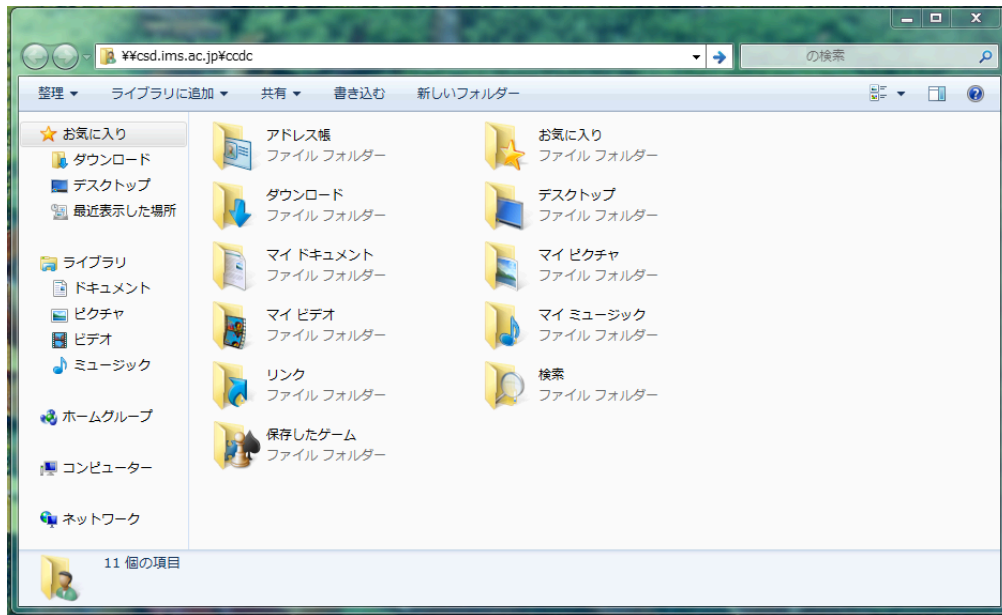


(4) ユーザー”`ccdc`”のホームディレクトリが自分の Macintosh マシンにマウントされます。

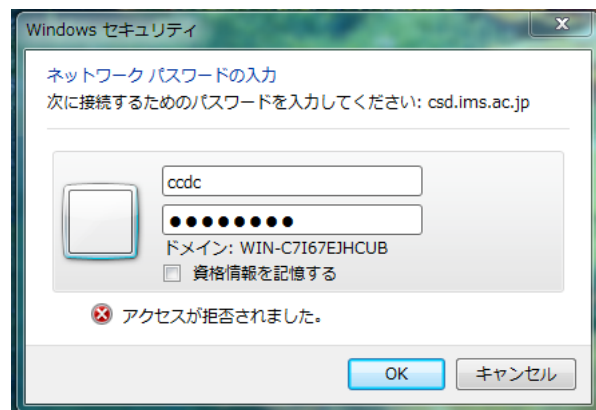


Windows 7 の場合：

(1) エクスプローラーウインドウのアドレスバーに”¥¥csd.ims.ac.jp¥ccdc”と入力してアドレスバー右端の矢印キー（またはリターンキー）を押します。



(2)開いた Windows セキュリティウインドウでユーザー名”ccdc”とパスワードを入力して「OK」ボタンを押します。



(3) 自分の Windows マシンから、ユーザー”ccdc”の共有フォルダを見ることができるようになります。

