## 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

: 🚛 💰 🚔 4日 1日 (木) 午後 3:40 (小) code

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

🥂 アプリケーション 提所 システル 📦 🕥

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。

Control				- 1 × 0-	(N) 1 B 3.45 0 ccuc
3個のアイテム、419.2 68 空き	wint y wint y w w w w w w w w w w w w w		data - ファイル・ブラウザ 表示(Y) 移動(G) ブックマーク(B) タブ(I) ヘルブ( ・ 企 ② C 函 通 Q cdc/デスクトップ/data fujiwara ono	(世) (世) (世) (田) (田) (田) (田) (田) (田) (田) (田	
■ ■ ccdc@csd: ~ ■ data - ファイル・ブラ…		3個のアイテム、419.2 ( 3個のアイテム、419.2 (	B 空き		

この"ccdc"というアカウントは共用のものですので、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 のメインウインドウが開きます。

0	CCDC ConQu	uest (1)	[	- • ×
<u>File E</u> dit <u>O</u> ptions <u>V</u> iew Data	ıbases <u>R</u> esults <u>H</u> elp			
Build Queries Combine	Queries Manage Hitlists View I	Results		
Draw				
Peptide				
Author/Journal				
Name/Class	Cor	QUEST	<u> </u>	
Elements	9	•	<u> </u>	
Formula	•- <u>\$</u> _\$-\$-\$- <b>\$</b> *	VERSION	6	
Space Group		1.12		
Unit Cell	PLEASE WAIT			
Z/Density				
Experimental				
All Text				
Refcode (entry ID)				
Search Reset				

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。 メインウイ 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。

0					Dra	w (1)	) - New								×
<u>F</u> ile <u>E</u>	Edit <u>A</u>	toms <u>B</u> ond	; <u>3</u> D	<u>O</u> ptions	<u>H</u> elp										
	C. C	Click and dr Drag to an e	ag to cr xisting	reate a bond atom to mak	e a connection.					Next Ator Next Bon	n: S d: Single		3D	Parameters:	
DRA	AW														
EDI	IT	1													
ERA	SE	1			S		R	_							Ļ
ADD	3D	1		с ~ П			15							Options	
CONT	FACT	[			ic =		c'							Delete	
				° ~			\	c				-	Con	tacts:	- 13
					Ū		-								Ĩ
$\triangle$	$\cap$	1											_	Options	_
	$\sim$	1											_	Delete	
$\underline{\bigcirc}$	0														
RingM	laker	ATOM: EI	o modif ement (	y properties											
				-								V	_	Search	
			N N II		CI Daniel Mari		Cround		Bondi	Qinala		1		Store	
Templa	ates			SPF	u Any Mor	e	Groups	6	Bona:	Single				Cancel	

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 **ひ ccdc** メニューから "ログアウト..."を選んでください。

## <u>リモートログインについて</u>

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

と入力してください ("-し"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ください。

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。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。

## <u>ファイル共有について</u>

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。

0 0	サーバへ接続
サーバアドレス:	
afp://csd.ims.ac.jp	+ 0-
よく使うサーバ:	
🔤 smb://csd.ims.ac.jp	
? 取り除く	ブラウズ 接続

(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。

Home Directory of ccdc		53A
10 項目、450.07 G8 空き	-0	_
	dava-K	Home Directory of code
Gata	5556-1	
テンプレート	ドキュメント	
ビデオ	ミュージック	
		1
	Home Directory of ccdc 10 第日. 450.07 C8 堂巻 data data アンブレート ビデオ	Home Directory of code       10 Я.В. 450.07 СВ 28       data       group - K       PyyTu       FyyTu       Kan-       FyyTu       Kan-       Kan-       SyyTu       Kan-

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。

Windows セキュリティ
ネットワーク パスワードの入力 次に接続するためのパスワードを入力してください: csd.ims.ac.jp
ccdc       ・・・・・・・       ドメイン: WIN-C7I67EJHCUB       資格情報を記憶する
🐼 アクセスが拒否されました。
<b>OK</b> キャンセル

(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。

