

CSD (Cambridge Structural Database)利用マニュアル ネットワーク編

文責 溶液錯体化学 神崎 亮 (内線 2583)

violascc@mbox.nc.kyushu-u.ac.jp

1.マシン・ネットワーク環境

CSD 検索サーバーは、理学部 2 号館 1 階の X 線共通実験室に設置してあります。検索は、端末マシンから CSD サーバーに接続し、操作します。

端末マシンは、X線共通実験室に 1 台設置してあります。通常はこのマシンを利用してください。このマシンが空いていない場合は、*csdserver* を直接利用してください。外部 および研究室 LAN から *csdserver* には接続できません。研究室の PC から接続したい場合は直接 (物理的に) CSD サーバーの LAN に接続してください。

CSD 本体



写真下右 (机の下の白い筐体)

ホスト名 *csdserver*

IP アドレス :192.168.1.199

OS RedHat 8.0

CSD 端末



写真下左 (机の下の白い筐体)

OS: Windows 2000

2.アカウント情報

通常は、アカウント「*csd2*」を利用してください。パスワードは酒井先生にお問い合わせください。

各ユーザー用のディレクトリを */home* 以下に用意していますので、作業、ファイルの保存はそのディレクトリで行ってください。現在、アカウントを共通にしていますので、誤って他のユーザーのファイルを上書き、消去しないようにお願いします。

それ以外 (*/home/username* 以外)の場所にあるファイルは予告なく消去される場合がありますのでご

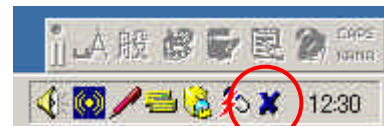
ご注意ください(所定の位置にないファイルは作成者以外は把握できません)。特に、/home に置かないように気を付けて下さい。検索終了後はなるべく早くデータを回収し、csdserver 本体には残さないようにすると良いかと思います。

3.接続と利用方法

結晶構造の検索は、ConQuest というソフトを使用します。ConQuest は csdserver にインストールされていますので、端末から csdserver へ接続し、仮想的に端末上に csdserver の画面を表示してから、その画面内で操作します。X線共通実験室のクライアントには、Windows 上で動作する接続ソフト(Xサーバー)「X-Win32」がインストールされています。研究室のWindows マシンから利用する場合は、各自でXサーバーを用意してください。

3-1.X サーバーの起動

X-Win32 が起動していなければ(右下のタスクトレイに X-Win32 のアイコンがなければ)、**スタート**「プログラム(P)」「X-Win32 5.4」「X-Win32」を選択し、X-Win32 を立ち上げます。



X-Win32 のアイコン

3-2.csdserver へ接続

タスクトレイのX-Win32 のアイコンをクリックすると接続先一覧が出るので、そこから「csdserver」を選択します。csdserverへ接続できると、ユーザー名入力画面が出ますので、アカウント名を入力、次いでパスワードを入力します。



接続先一覧

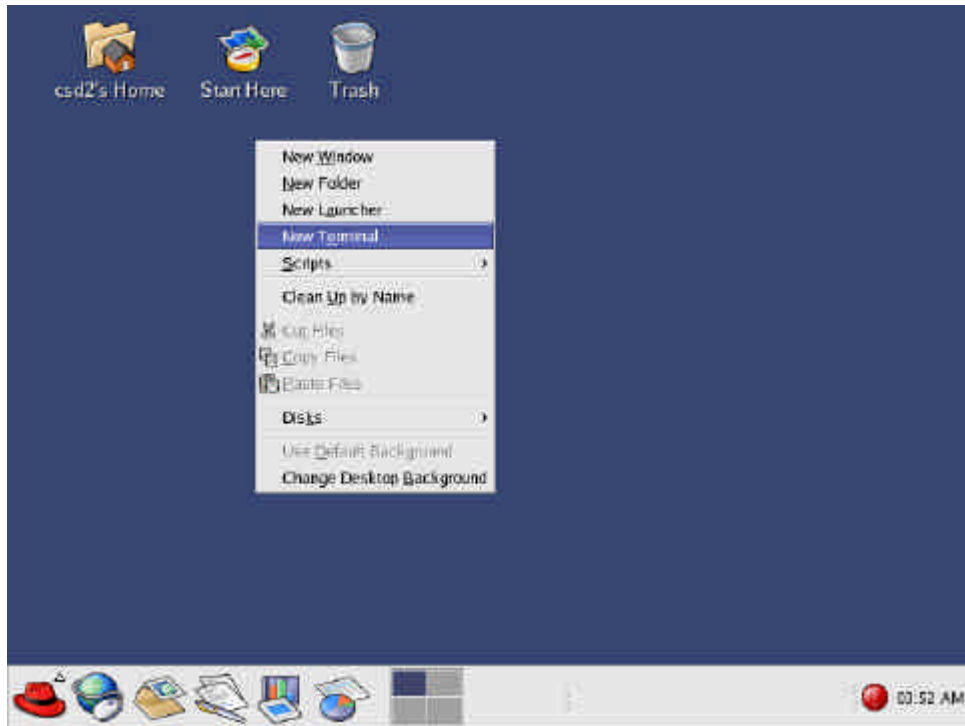


csdserver の接続画面

3-3.ターミナルからConQuest を起動

これ以降は、csdserver 画面での操作です

ログインできたら RedHat Linux 8.0 の GNOME (デスクトップ環境)が立ち上がりますので、しばらく待ちます。起動が完了し、画面への書き込みがなくなったら、デスクトップの何も無い部分(アイコンやタスクバーではない部分)で右クリックし、メニューを呼び出します。



Red Hat Linux 8.0 起動画面と右クリックメニュー

右クリックメニューから「New Terminal」を選択すると、コマンド画面が作成されますので、

```
[csd@csdserver /csd2]$ cd username
```

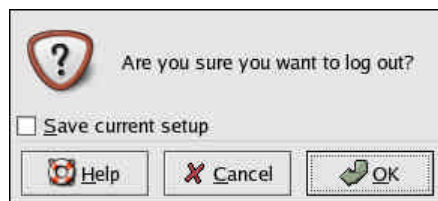
と入力して作業ディレクトリをユーザーディレクトリに設定してから、

```
[csd@csdserver /username]$ cg
```

と入力し、ConQuest を起動します。結晶構造を検索したら、必要なファイルはこのユーザーディレクトリ(/home/username)に保存して下さい。

3-4. ログアウト

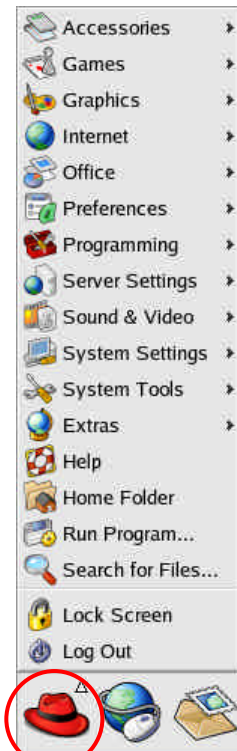
検索が終了したら、ConQuestを終了し、左下の'Red Hat'アイコンからLog Outを選択してください。切断されると同時に自動的にXサーバーが終了し、Windowsの画面に戻ってきます。



ログアウトダイアログ

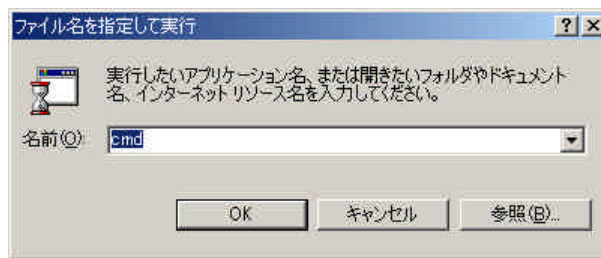
4. ファイル転送

端末 Windows マシンにファイルを転送するには、端末マシンから csdserver に FTP 接続してダウンロードします。現在、X 線共通実験室の CSD 端末には



'RedHat' アイコン

GUI ベースの FTP クライアントがインストールされていないので、コマンドベースで操作してください。まず、**スタート** 「ファイル名を指定して実行(R)」で「cmd」と入力します。



Windows のコマンドプロンプトが表示されるので、カレントフォルダを一時保存フォルダ「C:¥TEMP」に変更し、FTP を起動します。

```
C:¥Windows>cd C:¥Temp
```

```
C:¥Temp>ftp 192.168.1.199
```

csdserver に接続できたら、ユーザー名とパスワードを入力します。

```
Connected to 192.168.1.199.
```

```
220 ready, dude (vsFTPD 1.1.0: best me, break me)
```

```
User (192.168.1.199:(none)): csd2
```

```
331 Please specify the password.
```

```
Password: _____ (実際には表示されません)
```

ログインできたら、カレントディレクトリをユーザーディレクトリに移動します。

```
ftp> cd username
```

```
250 Directory successfully changed.
```

バイナリモードにし、必要なファイルをダウンロードします。サーバー側のファイル一覧は ls コマンドで取得することができます。

```
ftp> bin
```

```
200 Binary it is, then.
```

```
ftp> ls
```

```
200 PORT command successful. Consider using PASV.
```

```
150 Here comes the directory listing.
```

```
filename
```

```
:
```

```
:
```

```
226 Directory send OK.
```

```
ftp: xx bytes received in x.xxSeconds x.xxKbytes/sec.
```

```
ftp> get filename
```

```
200 PORT command successful. Consider using PASV.
```

```
150 Opening BINARY mode data connection for filename (xxxx bytes).
```

```
226 File send OK.
```

```
ftp: xxxx bytes received in x.xxSeconds xxx.xxKbytes/sec.
```

必要なファイルのダウンロードが終わったら、quit コマンドで終了します。

```
ftp> quit
```

```
221 Goodbye.
```

その後エクスプローラーなどで C:¥Temp を開き、必要なファイルがダウンロードできていることを確認してください。