

九州大学 大学院理学研究院 化学部門 CSD (Cambridge Structural Database) 利用マニュアル
管理責任者 大学院理学研究院化学部門教授 酒井 健(内 2 5 9 6)

【警告】CSDデータベース検索システムは、利用登録者ならびにそこで研究に従事する学生を含むスタッフによってのみ使用することができます。本システムを営利団体に所属する部外者の目的のために使用したり、そのような営利団体に所属する方による検索のほう助を行うことは、契約違反となります。そして、それをほう助した研究グループのリーダー（利用登録者）には、多額の損害賠償金が請求されることとなりますので、そのような事態をまねかないよう、くれぐれもご注意ください。すなわち、この規約に従う方のみが本システムを利用することができるものとご理解ください。従って、メモランダムにて誓約書にサインをして、管理責任者である酒井に提出した方のみが使用することができます。また、使用の際には、CSD検索以外の目的でコンピューターを利用したり、占有したりしないようにして下さい。ご理解とご協力をお願いします。

【LAN 環境】

プログラム本体はワークステーションにインストールされています。OS は Digital Unix です。

novel2 account: csd ----- novel2 (WS 本体) で利用

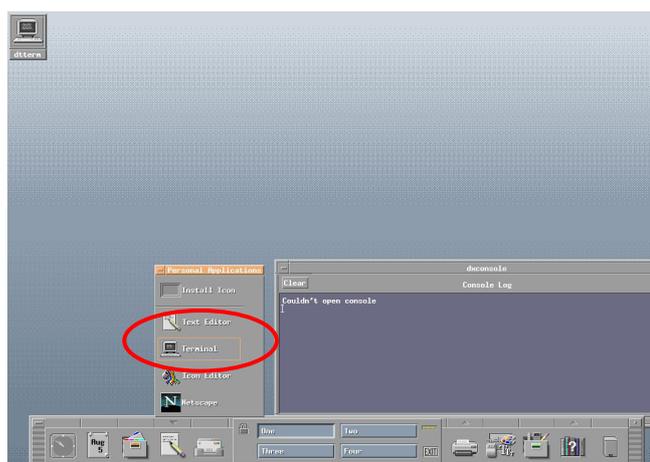
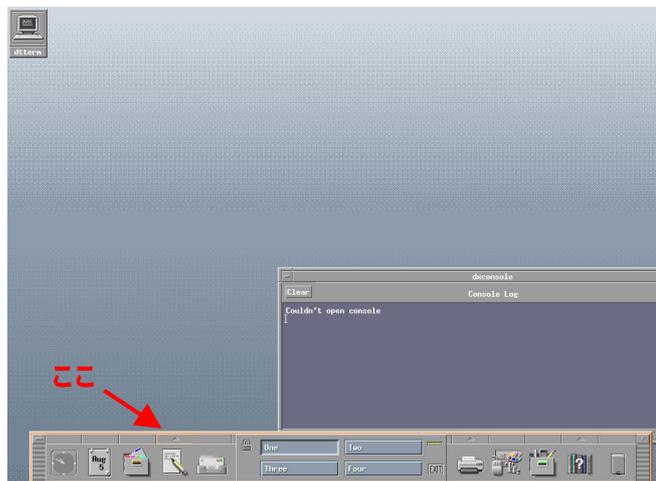
通常利用するアカウントは、以下のものです。

novel2 account: csd2 ----- Cambridge1 (Windows Machine) から利用

- (1) 上記のように、利用できる環境は、基本を「Cambridge1」とします。
- (2) そこが、占有されている場合には、「novel2」(本体)にて検索のみ行い、後でデータの転送のみ Cambridge1 で行うこと。
- (3) どうしても急ぎの場合で、上記2つのコンピューターが使えない場合には、錯体化学研究室(学生部屋: 2598、又は酒井2596)までご連絡下さい。その場合、2号館5Fにてご使用いただくことを検討します。
- (4) X線装置制御用のPCでの検索はできませんのであらかじめご了承ください。
- (5) 無関係なPCへの不正アクセスは絶対に行わないこと。良識ある行動をお願いします。
- (6) 無関係なHPの閲覧なども極力ご遠慮ください。

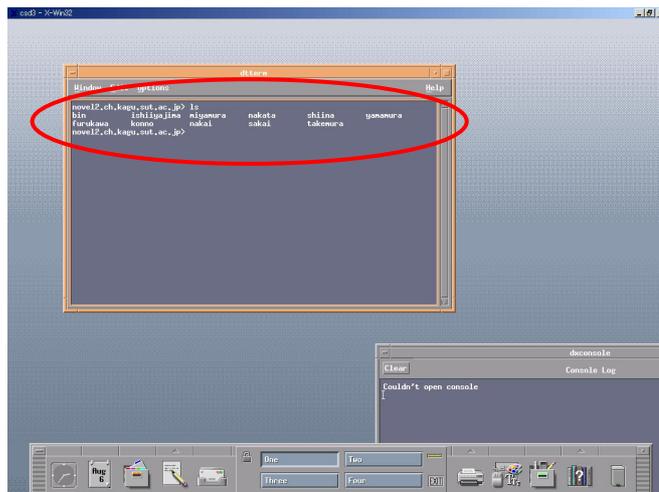
ケンブリッジデータベース検索 X-WIN32による操作

- 1) 用いるPCディスプレイ部または本体の表示を確認し、どのアカウントで利用すべきかを確認する
(この場合に、csd2であると仮定する)。
- 2) PCの電源を入れWindowsを起動する(Unixマシンは常時ONなので、触れなくて良い)。
- 3) スタート - プログラム X-Win32 を起動。
- 4) 画面右下に表示されている青い X マークの付いたアイテム上にカーソルを移動し、右クリックでポップアップを表示させ、セッションから csd2 という項目を選択する。
- 5) Digital Unix, Welcome to novel2 が表示されるので、以下を入力してログインする。
user name csd2 passwd ***** (パスワードは直接酒井にご確認下さい)
- 6) 画面左下 personal application の矢印(赤矢印のところ)をクリックし、terminal でシェルを起動。
(シェルを移動すると X-Win32 が Freeze することがある。その場合、ウィンドウを閉じてやり直す。)

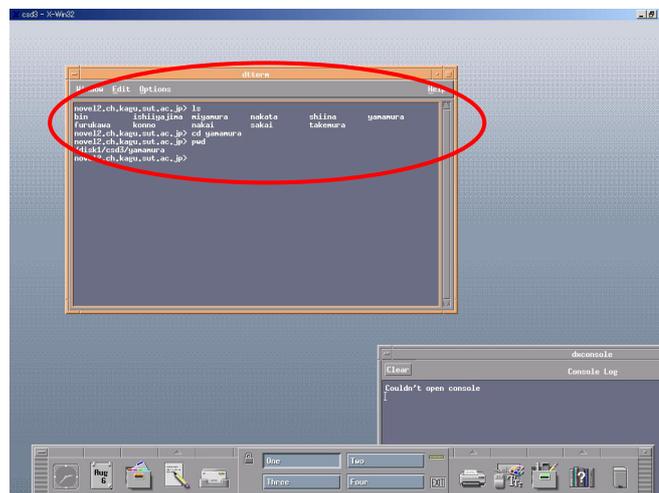


コマンドを入力するプロンプトが表示される (novel2> など)。

ls と入力すると研究室名のフォルダが表示される（なければ、mkdir sakai などを入し作成）。



cd labname (sakai 等) と入力し、フォルダを移動する。その下にさらにジョブごとに異なるフォル



ダを作成し、その中で仕事をするのが良い。すなわち、mkdir test[return]と入力し、cd test[return]を入力し、以下の操作に移行する。ここで test としたところを、各自望みの名前に指定すること。

questv5 -j jobname [return] （ここで、jobname の部分には自分の好きな名前を入れる）
（この名前で検索結果が保存されることにも注意せよ）

（シェルでプログラムが起動した後、下記の通り入力する）

term X [return]

menu [return]

（問題なくジョブがアクセプトされると別画面が提供され、CSD 検索ソフトが起動する）

CSD ソフトの画面をシングルクリックする。

- 7) まず、右上の小さな四角枠中の T0-SEARCH をクリックし、
右枠三段目の SAVE ウィンドウ中の FDAT、MOL2 を選択し、赤い枠をつけた状態にする。
また、検索結果の構造を打ち出したい場合には、POSTSCRIPT も選ぶと便利。
画面下で、形式を聞かれるので、
2d/3d [return]
8 [return]
と入力する。
(他のフォーマットで保存したい場合には、CIF 等も選択しておく。)
上方小四角枠の TO-BUILD を選択し、最初の画面に戻る。
- 8) 次に、右枠の上から 2 段目の ANY ----- というアイテムを結合様式として選択。
これで、いかなる結合様式も含む広義な検索条件が設定される。これをやっておかないと、単結合と二重結合を区別して表記しなければならず、面倒であり、かつ、適切な検索結果が得られないことになるので、注意を要する。
- 9) 錯体の場合、右枠最上段から OTHER を選び、周期表を表示させ、そこからシングルクリックで中心金属の元素名を選択する。
- 10) 画面中央をシングルクリックすると、赤い+マークが現れる。
原子を置く作業では、シングルクリックで場所が決まり、そこをもう一度クリックすると、赤い+マークは消える。赤い+マークは次に指定する原子との間に結合を描く場合に用いる。そうではないときには、もう一度その箇所をクリックして赤+マークを消しておく必要がある。なお、ここでは、赤+をつけたまま操作することにする。
- 9) 先の最上段元素指定ボックスで配位原子を選択する。ここでは、N を選択することにする。
エチレンジアミン骨格を描いてみることにしよう。
- 10) 先に置いた金属イオンの横 2 - 3 cm のところをクリックする。
N が金属に-----で結合し、N が赤+マークとなった。
- 11) 次に C を選択し、N に対して結合するように C を置く。そして同様の操作で 2 つめの C も置く。
- 12) 元素を N に変更し、さらに N を置く。ここで M----N----C----C----N と書けたはず。
そして、最後に書いた N は赤+マークとなっている。
- 13) 最後に、そのまま元素を変更しないで、最初の M の位置をクリックする。
そうすると赤マークが消え、M(en) による 5 員環ができたであろうか？
- 14) 上記定義の断片構造を持つ化合物を全てケンブリッジ結晶構造データベースにて検索する。

その方法は、下から四枠目の際下段 FIND STRUCTURE をクリックするだけである。

15) 検索中、ヒットがあれば構造が表示される。ただし、構造が表示できないものもある。

表示の分子は青い時計のようなところで上下左右矢印を押すと回転して構造を吟味することができる。一回のクリックによる回転角度を変更したいときは、その左上の 2.00 というデフォルト値の表示部分をクリックし、ウィンドウ最下段のコマンド入力部分から数値を入力し、リターンを入れる。構造学データは F D T A と呼ばれる C S D 特有の形式にて格子定数と原子座標の形でセーブし、後に自分のコンピューターに転送して利用することも可能である。そのために行ったのが、操作 7) で行った TO-SEARCH / FDAT の指定である。しかし、注意しなければならぬことが二つある。検索中のヒットに対して KEEP と REJECT の二つの回答形式がある。通常いずれかを選択することにより次の検索へ移行する。構造データを FDAT として保存したい場合には KEEP を選択し、保存しない場合には REJECT を選択する。もう一つ重要なことは、検索終了時にきかれる C S D を抜けるか否かの質問に対し、必ず Y E S と答えなければならないことである。構造検索終了時にこの問いに N O を返すと、引き続き構造検索を行うことができる。しかし、その場合、そこまでに一時保管されている情報は全て白紙に戻され、失われることとなる。これは、C S D に入る前に指定した jobname を保存ファイル名として用いるからである。つまり、C S D を一回起動した際に保存するファイル名は一つしか指定できないということである。

ファイルには以下のものがある。

jobname.jnl	発表論文名著者等の情報
jobnam.dat	FDAT 形式の構造学データ (格子定数と座標データ)
jobname.ins	検索時に描いた断片構造の定義に関する情報 (おそらく再利用可)
jobname.ps	ポストスクリプト形式の構造図
jobname.mol2	Mercury という優れたフリーソフト (後述) によって読み込み、構造の可視化を行うことのできる格子定数と座標データ

16) とにかく、必要な場合、KEEP、不要な場合 REJECT を繰り返しながら構造を吟味する。

終わると最下段に終わりました、これで C S D をやめますかと聞かれるので、

Y [return] を返す。

17) もとの白いシェル画面に戻り、ls[return] を入れ、ファイルの生成を確認する。

もう一度別の検索を行う場合には、4) の questv5 -j jobname2 [return] からやり直す。

勿論、ファイル名の変更をお忘れなく！

18) dtterm のシェルの外で右クリック、logout ... を選ぶ。

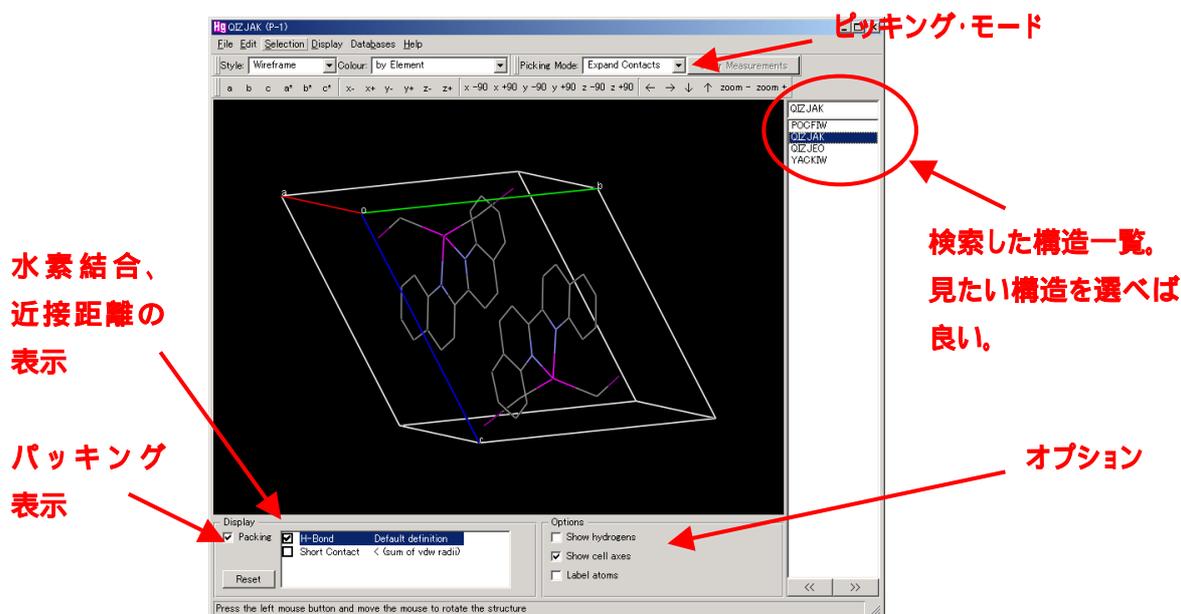
Continue logout と表記されたボタンをクリックして、終了する。

ファイルの転送

FTP ソフトを用いて、Windows マシンから、ワークステーションにログインし、先に保存した各種ファイルを Windows マシン上の作業フォルダー内に転送し、整理して保管する。転送し終わったら適宜ワークステーション側のファイルは削除する。

検索した構造を見る

- 1) デスクトップにリンクしている Mercury を起動する。
- 2) file - open で、先に転送した .mol2 のファイルを開く。
- 3) 検索したすべての構造は、6文字のアルファベットで左の枠内に表示される。
見たい構造をそれぞれ選ぶことができる。



- 4) 以下のような操作で分子を見ることができる。
マウスの左ボタンで、回転。右で、拡大/縮小。Ctl + 左ボタンで、上下左右の移動。
Shift + 左ボタンで、画面に垂直な軸に、回転。
- 5) 左下のパッキングをチェックすると、パッキング構造を表示できる。
パッキングの範囲は、メニューバーの Display - Packing / Slicing で設定する。
- 6) 水素結合や、近接距離も下の枠内で、表示の選択ができる。
- 7) ウィンドウ右上の picking mode を、measure distance, measure angle, measure torsion に変更して
原子を2、3、4つ選べば、距離、角度、torsion 角を表示することができる。
- 8) 他にも、スタイルや、オプションを変更できる。
- 9) file - save as で、.mry で保存しておけば、そのままの表示を残すことができる。
また、同様に、.bmp 等のフォーマットで画像を保存できる。

(自分の PC で結果を見たい場合は、Mercury を ccdc の HP から download して用いること)

(Mercury のダウンロードはこちらから：<http://www.ccdc.cam.ac.uk/prods/mercury/>)

UNIX コマンド

UNIX のコマンドで基本的なものを示します。

pwd (カレントディレクトリの表示。今、どこのフォルダにいるのかを表示。)

```
pwd [return]          入力すると、
/disk1/csd2           と表示される。(disk1 ディレクトリの下、
                      csd2 ディレクトリにいるということを意味する。)
```

ls (カレントディレクトリ内にあるファイルやフォルダの表示)

```
ls [return]
ls -la [return]
```

cd (指定するフォルダへ移動する)

```
cd sakai (sakai フォルダへ移動)
cd ..    (一つ上のフォルダへ移動)
```

mkdir (ディレクトリの作成)

```
mkdir sakai (カレントディレクトリに、sakai ディレクトリを作成)
```

rm (ファイルの削除。Windows のように、ゴミ箱に移動するのではなく、ハードディスクから完全に消えるので注意。)

```
rm jobname.ps (カレントディレクトリにある jobname.ps ファイルを削除)
rm jobname.*  (カレントディレクトリにある jobname. を含むすべてを削除)
rm -r test    (test フォルダとその中のファイルの削除)
```

国立大学法人 九州大学
大学院理学研究院 化学部門
教授 酒井 健

〒812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1
電話 / Fax: 092-642-2596
E-mail: ksakaiscc@mbox.nc.kyushu-u.ac.jp