

目次

1.	学術情報ネットワークの運用停止について	1
2.	Cコンパイラのバージョンアップについて (No. 442-3の追補)	1
3.	ケンブリッジ結晶構造データベースの更新と機能追加について	2
4.	平成3年度後期プログラム相談員の募集について	4

1. 学術情報ネットワークの運用停止について

学術情報ネットワーク機器の整備及び定期保守等のため、学術情報ネットワークによる大学間ネットワーク及びMHS電子メールサービスを下記のとおり停止します。

記

期 間 平成3年8月29日(木) 13:00~17:00

(ネットワーク掛 内線2543)

2. Cコンパイラのバージョンアップについて (No. 442-3の追補)

8/5(月)より、MSPにおけるCコンパイラを従来のバージョン10からバージョン11に上げて運用しています(センターニュースNo. 442-3参照)。これにともない、CCコマンドで起動されるCコンパイラのバージョンも11になります。さらにPFD内からCC, FCC, RCC各コマンドで起動されるCコンパイラのバージョンも11になります。

3. ケンブリッジ結晶構造データベースの更新と機能追加について

8月2日に標記データベースのデータを8,522件追加し、総件数が113,922件になりました。

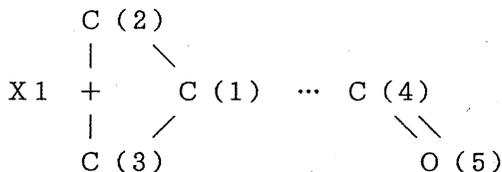
なお、QUEST88の使用法において、古いデータベースを使用するようになっていたことをお詫びいたします。また、検索件数の制限が100件になっていたのを、10000件に変更しましたので、次のようにコピーして使用してください。

```
COPY 'A70140B.QUEST88.CLIST' QUEST88.CLIST
EX QUEST88
```

GSTAT88が使用できるようになりましたので、次のようにコピーして使用してください。

```
COPY 'A70140B.GSTAT88.CLIST' GSTAT88.CLIST
EX GSTAT88
```

使用例



1. まず、QUEST88を使用して、上図の構造の結晶を10件検索 (STOP 10) し、GSTAT88用のファイル (FDAT.DATA) を作成 (SAVE 3) します。

```
>T1 *CONN
>>AT1 C 3
>>AT2 C 2
>>AT3 C 2
>>AT4 C 2
>>AT5 O 1
>>BO 1 2
>>BO 2 3
>>BO 1 3
>>BO 1 4
>>BO 4 5
>>END
>QUES T1
>SAVE 3
>STOP 10
>
```

2. 次に, GSTAT88を使用して, 条件にあった構造の統計情報を表示させます.

```
>FRAG CYCLOPROPYL-CARBONYLS
>>AT1 C 3
>>AT2 C 2
>>AT3 C 2
>>AT4 C 2
>>AT5 O 1
>>BO 1 2
>>BO 2 3
>>BO 1 3
>>BO 1 4
>>BO 4 5
>>C ENSURE 4 5 IS C=O
>>TEST DIST 4 5 1.15 1.25
>>END
>C GET MID-POINT OF C2-C3 BOND
>SETUP X1 2 3
>C DEFINE FRAGMENT GEOMETRY
>DEF D1 1 2
>DEF D2 1 3
>DEF D3 2 3
>DEF TAU 5 4 1 X1
>C TRANSFORM SOME PARAMETERS
>TRA #INT1 = D1 + D2
>TRA D12M = #INT1 / 2.0
>TRA DIFF = D12M - D3
>TRA PTAU = ABS (TAU)
>SEL D12M 1.45 1.55
>
```

QUEST88の使用法については, 文献(1)を参照してください. GSTAT88の使用法については, 広報に掲載する予定です.

なお, 「結晶構造データベースXDT」の再構築については, 10月末までに完成させる予定です.

質問, その他は, メールで, A70140BまたはA70140Cをお願いします.

参考文献

1. 河野重明, ケンブリッジ結晶構造データベース用プログラムQUEST88の使用法, 九州大学大型計算機センター広報, Vol.23, No.3, pp.186-202, 1990年5月.

(データベース室 内線2510)

4. 平成3年度後期プログラム相談員の募集について

当センターでは、下記の要領でプログラム相談員を若干名募集していますので、意欲のある方は、どしどし応募ください。また、留学生の方も歓迎いたします。

なお、詳細については、共同利用掛にお尋ねください。

記

- | | |
|---------|------------------------------------|
| 1. 応募資格 | センター利用有資格者 |
| 2. 内 容 | ユーザに対する助言，技術指導等 |
| 3. 担当時間 | 週1回（2時間） |
| 4. 任 期 | 平成3年10月 ～ 平成4年3月 |
| 5. 特 典 | 指導用計算時間（60分）
富士通マニュアル一定限度まで無償配付 |
| 6. 申込期限 | 9月21日（土） |
| 7. 申込み先 | 九州大学大型計算機センター 共同利用掛（内線2532） |