

## 単結晶X線構造解析装置の新コンピューター・システムについて

理学部基礎化学科 齋藤 英樹, 藤原 隆司

平成 11 年度末に, 分析センターに設置されている単結晶 X 線構造解析装置に付属の SUN ワークステーション 2 台が, DOS/V パーソナル・コンピューターに更新された. 単結晶X線構造解析装置は, 平成 5 年度に設置されてから今日までに多くのユーザーに利用され, 数多くの成果を出してきた. しかし, 測定装置の制御を行いつつその上で結晶構造解析プログラムも稼動させるワークステーションは, 老朽化が進んでいて今後の維持・保守の面が懸念されていた. また, その計算処理能力の面でも今日ではパーソナル・コンピューターにもかなり見劣りするものとなってしまうていた. 分析センターでは, 2 台の四軸型回折計(MXC18KHF, MXC3KHF)の制御・解析用コンピューターを Linux-OS のパーソナル・コンピューターに入れ替え, 更にそこに結晶構造解析プログラムとして新しく maXus (MAC Science)を導入した. また, 新たに迅速 IP 型回折計(DIP3000)のデータ処理プログラム Denzo 用に, 同じく Linux-OS のパーソナル・コンピューターを導入し, 最新版 Denzo へのバージョンアップを行った. 同時にカラー・レーザープリンター (リコー ipsio) を導入した. この新コンピューター・システムへの変更内容と, それによる X 線結晶構造解析の計算処理面での改善についてここで紹介する.

合計 3 台の Dell 社製パーソナル・コンピューター(PC)が導入されたが, いずれも CPU は Pentium III 450 MHz, OS は Linux (Red Hat 6.0 英語版) である. ディスプレイは 17 インチで, SUN の 20 インチより小さくなってしまった. 3 台の PC には外部記憶装置として 640MB の MO ドライブが付属し, 更にプログラム Denzo 専用に導入された PC には CD-R が装備された. 単結晶X線構造解析室装置間の LAN は 100BASE-T となって高速化され, またこの機会に学内 LAN にも接続された. 印刷は室内 LAN 経由で 1 台のカラー・レーザープリンターで行われる.

実験面では, 今回のコンピューター・システムの更新による特別な手順の変更などはない. 2 台の四軸型回折計はこの Linux-PC で制御される. 従来のワークステーション(WS)と同じく X-Window System 上で今までと同じように測定操作を行えるので, 英語表示であることをのぞけば新しいシステムをそれほど意識することなく実験ができる. また, PC-Linux であるからといって, 特にシステムの安定性が低くなったということは感じられない. 逆に WS という「敷居の高さ」が, 少しは低くなったようにも思われる. なお, DIP3000 制御・測定用のコンピューターは従来の SUN のままであり, DIP3000 の測定(回折画像データ収集まで)に関しては今までと全く同じで変更はない.

利用者が最も恩恵を感じるのは処理速度の向上であろう. 回折計の制御ではそれはほとんど感じられないが, 解析を行い始めるとその速さは驚くほどである. 新しい結晶構造解析プログラム maXus は, 見かけ上はほとんど従来の CRYSTAN-GM と変わらないので, 前システムの利用者であれば使用するのに特別に新たな知識は必要としない. しかしコンピューターの処理速度が大幅に上がったので, すべての解析処理が体感で従来の 20 ~ 30 %程度の時間で終わる. 直接法の計算で試行回数が多くてもそれほど待たされているとは感じなくなった. 最小 2 乗計算も著しく高速化しており, 金属イオンを含む化合物や大きな分子の結晶構造解析では従来 20 ~ 30 分かかっていた計算が 3 分の 1 程度の時間で済んでしまう. 大きな単位格子をもつ原子パラメーター数と反射データ数が多い結晶構造では, この処理速度向上の効果は非常に大きい. また, 解析後の分子を作画するプログラムである ORTEP も, ディスプレイ上に表示された分子構造をそのまま描画しながら回転することができるようになったので, 利用者は描きた

い図を素早く作成でき便利になった。ポストスクリプトのカラー・レーザープリンタも処理が高速であり、ORTEP 図の出力で以前のシステムのように長い間待たされることがなくなったことはありがたい。

そして今までとの大きな違いとして、迅速 IP 型回折計のデータによる結晶構造解析において、新バージョンの処理プログラム Denzo と新しい結晶構造解析プログラム maXus の組み合わせによって回折強度データの吸収補正が可能となった。これによって、金属イオンなどの重原子を含む「吸収の大きな結晶」の構造解析では、その解析の信頼性を向上させることができるようになり、DIP3000 がもっていた一つの弱点が克服された。

プログラム Denzo 用に新たにコンピューターを用意したことにより、迅速 IP 型回折計データの Denzo 処理が格段に速くなった。従来、回折画像データ処理には 2 ～ 3 時間も必要であったが、新しい PC では 20 分ほどで終了する。また、従来は回折データ測定終了後直ちにデータ処理をして測定用 WS のハード・ディスク容量を空けなければならなかったが、新システムでは Denzo 処理用 PC は DIP3000 の制御用とは独立しているので、測定データを Denzo 用 PC に転送してしまえば測定用 WS のハード・ディスクを空けることができ、すぐに次の試料の測定に取りかかることができる。Denzo 用 PC は 7 GB のハード・ディスクを備えているので複数のデータ・セットを置くことができるため利便性が上がった。また WS と違って PC なのでハード・ディスクの増設も安価かつ簡単である。DIP3000 では 1 サンプル測定するごとに膨大な量のデータが蓄積されるが、これらのデータの保存に対して新たに導入された CD-R や MO は従来の DAT テープに比べてメディアの取り扱いや書き込み速度の面からは大きく優位であり、価格も同程度か安価である。もちろん、測定用 SUN 上で以前のように DAT テープに保存することも可能である。

学内 LAN に接続されたことにより、小さな容量のファイルであれば FTP プロトコルによって研究室のコンピュータへデータを直接転送できるようになった点も、利用者にとってはありがたいサービスであると言える。

ざっと使用してみての感想であるが、解析がはやくできるので利用者にとってはありがたいが、測定用の試料を作成したり、解析中にいろいろ考えながら実験するのが大変になってしまった。うれしいような困ったような現象である。以上、簡単に新システムの紹介をさせていただいたが、利用者の方々にはまずはこの新システムを使ってみていただきたい。まだ、プログラムにはいくつか不具合が存在しているがメーカーにより順次改善されていく予定であるので、利用者の方々にも不具合の発見等の点でご協力を願いたい。