COMPUTER と 結晶学

岡谷美治 YOSHI OKAYA

CHEMISTRY DEPARTMENT

STATE UNIVERSITY OF NEW

YORK

STONY BROOK, N. Y., USA, 11794.

コンピュータは過去約25年間にわたって、結晶学の進歩に重要な役割をはたして来た。一例をあげると、MUL-TANで代表される直接位相決定法と、セツトリはや、最少二乗法と、FOURIERとの交互使用によって、重原子を含まない複雑な分子の構造が、次世代へと解析されている。

最近のコンピュータの技術の進歩、特にmini- & micro コンピューターの普及、ならびに大容量のメモリーを、小さなchipの中に入れる可能性によって、結晶学に対する応用はますます便利になると思われる。

いはゆる“RESOURCE-SHARING”のミニコンピュータを中心とした、“ネットワーク”にもとづく結晶研究グループを設立すると、構造解析だけでなく、長時間にわたったり、あるいは無限につづくMONTE-CARLO式の計算等を、フライオリティー方式(ROUND-ROBIN方式を加味して)で割り振りをして計算して行くことが出来るであろう。SYNCHROTRONを使う実験や、二次元のディスプレイの使用等も、ネットワークの中に入れて行くことになるであろうと思われる。

最近のよる二ばしい傾向は、コンピュータと実験との間のいはゆる“INTERFACE”が多くの会社によって作られて、丁度shimada, cosine, 等がサバルティーンとしてフロタラムの中に直接つかへるやうに、SCALER等のいろいろな役割がほとんど直接にコンピュータの、I/Oバス(I/O-BUS)につなげるやうになって来た。特によみつかはれる、PDP11, LSI11 (DIGITAL EQUIPMENT CORPORATION)にはほとんど直接に外部のDATAが出入り出来るやうな、ロジックカードを、買うことが出来るやうになって来ている。

結晶学を30年記念のいま、過去の発展から、未来への新しい応用へと、クリスタルボウリンクをして見るのに、丁度よい時季に達していると思われる。

* このネットワークは、おそらく“HIERARCHICAL方式”でいろいろなサイズのコンピュータが、上下及び左右につながっているであろう。特にCPUとMEMORYのコストが、急速に下つて来たことは大いに助けになると思われる。