

# Datorer och program för kristallografiska beräkningar 1950 – 1980

Rune Liminga och Ivar Olovsson



Facit kalkylator från 50-talet



IBM 1800 från 60-talet



IBM persondator från 80-talet

# Datorer och program för kristallografiska beräkningar 1950 – 1980

Rune Liminga och Ivar Olovsson  
Kemiska institutionen, Uppsala universitet

## Inledning

Den röntgenkristallografiska forskningen initierades i Uppsala 1937 av Gunnar Hägg då han tillträdde professuren i oorganisk kemi. Denna forskning kräver omfattande databearbetning och innan datorer blev mera allmänt använda även inom andra forskningsområden var kristallograferna i Stockholm och Uppsala bland de flitigaste användarna av datorer. Datorutvecklingen har spelat en utomordentligt viktig och i många fall avgörande roll för de fantastiska framsteg som gjorts inom den kristallografiska forskningen under 1900-talet. I det följande skisseras dator- och programutvecklingen vid den oorganiska avdelningen vid Kemiska institutionen i Uppsala.

## Strukturbestämning före datorernas intåg

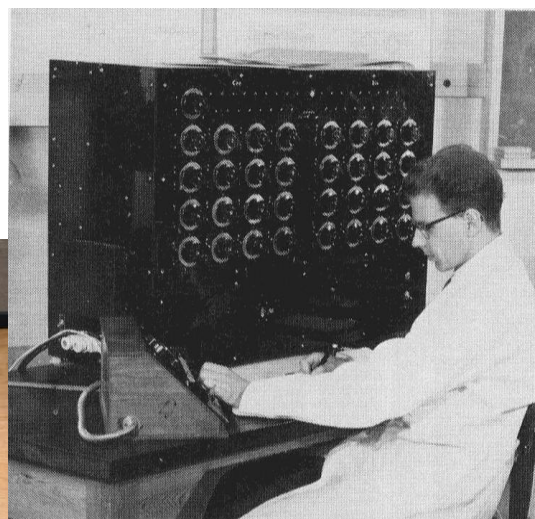
Bräkningsbehoven vid bestämning av strukturer från röntgenkristallografiska data är omfattande. Före introduktionen av elektroniska 'matematikmaskiner' (datorer) fanns olika hjälpmedel utöver mekaniska räknesnurror för att underlätta räknearbetet. Det trigonometriska bidraget till strukturfaktorn för varje oberoende reflex beräknades genom att summera värdena för sinus- och cosinusfunktionerna, som beräknats och listats på s.k. Beevers-Lipson strips (bilaga 1). Summering av Fourier-serier för elektrontätheter eller Patterson-funktioner utfördes på en analog maskin, konstruerad av Gunnar Hägg och Torbern Laurent på 1940-talet. En uppdaterad version av denna maskin utvecklades vid Kemiska Institutionen mot slutet av 1950-talet av Torsten Lundström och Vladimir Klimecki och användes under några år. Ungefär samtidigt arbetade Johannes Bäcklund också vid Kemiska Institutionen med ett projekt att bygga en digital datamaskin, som dock lades ner. Utvecklingen inom datamaskinområdet, särskilt i USA, gick mycket snabbt och olika alternativ blev tillgängliga kommersiellt.



Beevers-Lipson strips



Facit kalkylator



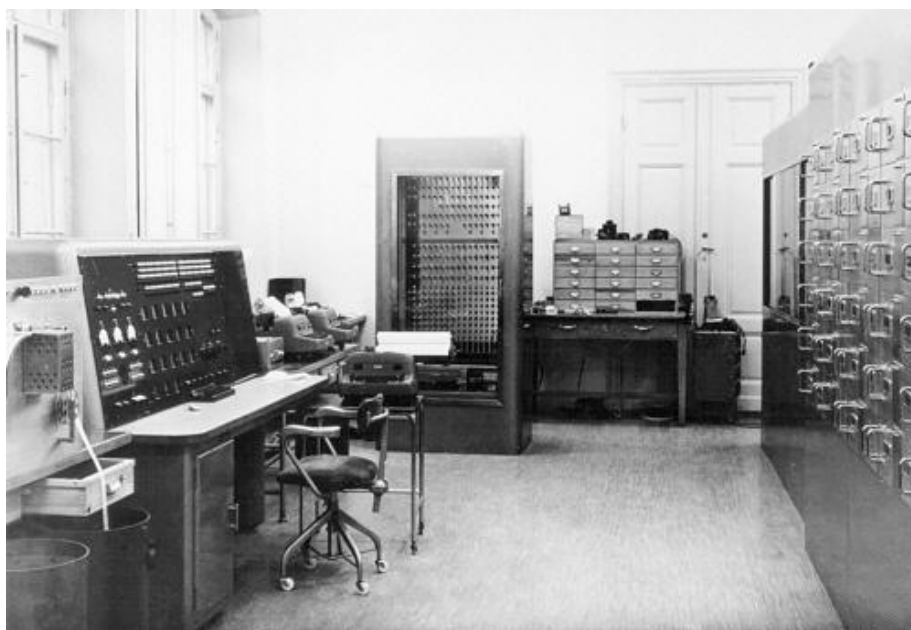
Hägg-Laurent maskinen  
Operatör: Carl-Ivar Brändén

Referenser:

- Beevers, C. A. and Lipson, H. (1936). *Proc. Phys. Soc.* **48**, 772.
- Hägg, G. and Laurent, T. J. (1946). A machine for the summation of Fourier series. *J. Sci. Instr.* **23**, 155. (<http://www.iop.org/EJ/toc/0950-7671/23/7>)
- Lundström, T. and Klimecki, V. (1961). Analogue computer for the summation of Fourier series with digital recording of the results. *J. Sci. Instr.* **38**, 424. (<http://www.iop.org/EJ/toc/0950-7671/38/11>)

### Datorer på Matematikmaskinnämnden, Stockholm

Den första datamaskinen **BESK** (Binär Elektronisk Sekvens Kalkylator) var lokaliserad till Drottninggatan 95A i gamla KTH:s lokaler och var i drift 1954 – 1966. Den sorterades under Matematikmaskinnämnden (MMN), en statlig myndighet som omfattade en arbetsgrupp på totalt 40 personer (MMN:s engelska namn: *the Swedish Board of Computing Machinery*). Den hade ansvar att följa utvecklingen av elektroniska matematikmaskiner utomlands och att köpa eller bygga sådana i Sverige. MMN sattes upp 1948 och var verksam fram till 1963 då MMN:s ansvar togs över av the Computer Division, National Swedish Office for Administrative Rationalization and Economy. MMN introducerade ordet "dator"; vid tidpunkten då nämnden inrättades benämndes datorer "matematikmaskiner" i facktext och "elektronhjärnor" i populär press.



BESK (under en kort period den snabbaste datorn i världen)

MMNs tekniker och forskare ville fortsätta utvecklingen av en betydligt större och kraftfullare version av BESK. De statliga anslagen var emellertid alltför knappa och myndigheterna ställde sig avvisande till MMN:s planer. Detta ledde till att ett antal av MMN:s nyckelpersoner anställdes vid Åtvidabergs Industrier, som fortsatte utvecklingen av BESK och som resulterade i en serie av FACIT EDB elektroniska datamaskiner. Den första var en regelrätt kopia av BESK (1957), men utvecklades till mer kraftfulla versioner, t. ex. FACIT EDB 3. En sådan version installerades 1959 på MMN, och kom även att användas av kristallograferna. Program utarbetade för BESK kunde även köras på FACIT EDB. Den senare hade större minneskapacitet än BESK, in och utmatning via hållremsa men även magnetband, och kunde programmeras i Algol. Två intressanta artiklar som behandlar utvecklingen av de första svenska datorerna finns i *Forskning och Framsteg* (2000) Nr 5, sid. 8-13 och 14-17

(Datorernas verkliga pionjärer resp. Första svenska datorn världsbäst). Se länkarna tre och fyra nedan.

Länkar:

- [http://www.idt.mdh.se/kurser/ct3620/ht03/vetenskap%20inlup%204/1\\_BESK-fundberg\\_gustavsson\\_final.pdf](http://www.idt.mdh.se/kurser/ct3620/ht03/vetenskap%20inlup%204/1_BESK-fundberg_gustavsson_final.pdf)
- <http://www.treinno.se/pers/okq/index.htm>
- <http://fof.se/skrivUtArtikel.lasso?id=00508>
- <http://fof.se/skrivUtArtikel.lasso?id=00514>

## **Program för kristallografiska beräkningar på BESK och FACIT EDB: strukturfaktorer och summering av Fourier-serier**

### **De tidigaste programmen.**

De första programmen för kristallografiska beräkningar på BESK utarbetades av kristallograferna i Stockholm. Maja Edstrand var pionjären och skrev 1956 det allra första programmet, **S 1**, för beräkning av projektioner av elektrontätheter och Patterson funktioner. Programmet kunde endast hantera centrosymmetriska fall. Sven Westman, Göran Blomqvist och Stig Åsbrink, Stockholms universitet, utarbetade mer generella program (i drift 1958) för beräkning av strukturfaktorer och tredimensionella Fourier- och Patterson-synteser för både centro- och icke centro-symmetriska fall:

- SNUSKMUS: Sekvens för Numerisk Uträkning av Strukturfaktorer i Kristallstrukturer Med och Utan Symmetricentrum (Arkiv för Kemi (1959). 14, 545).
- SUPERMUS: Sekvens för Uträkning av Patterson- och Elektrontäthetsfunktioner i Rymden Med och Utan Symmetricentrum (Arkiv för Kemi (1959). 14, 535).

Länkar:

- <http://ithistoria.se/node/61> (Artikel av Sven Westman sist på sidan)
- <http://ithistoria.se/sites/default/files/SNUSKMUS.pdf>
- <http://ithistoria.se/sites/default/files/SUPERMUS.pdf>

Dessa program användes under flera år av kristallograferna i Stockholm och Uppsala men även från andra håll och utgjorde ett välkommet tillskott för förstärkning av beräkningskapaciteten vid kristallografiska studier. Programmen hade dock sina begränsningar, bl.a. på grund av att de (särskilt SUPERMUS) krävde stansning av data för hand för varje beräkningscykel.

### **Vidareutveckling av program.**

Det fanns ett behov att få tillgång till ett mera generellt och användarvänligt Fouriersummeringsprogram för BESK. Det visade sig då nödvändigt att skriva ett nytt strukturfaktorprogram för att förbereda data för Fourier-programmet. Arbetet på Kemiska institutionen vid Uppsala universitet med att utveckla dessa program påbörjades 1960. All programmering gjordes i direkt maskinkod. Detta tillsammans med maskinens begränsade kapacitet ställde till problem och ledde till att programmerings- och testningsarbetet blev mycket tidskrävande. Programmen började fungera hösten 1961 och blev tillgängliga för allmän användning i början av 1962:

- STRIX: Beräkning av strukturfaktorer
- PROFFS: Summering av Fourier serier
- VINTER: Interatomära avstånd och vinklar
- TRANSFORM: Transformeringsprogram av indices, skalning av data



Dessa program kunde hantera praktiskt taget alla rymdgrupper utan problem eller krav på speciella åtgärder. De oberoende reflexerna kunde matas in i valfri ordning och ingen sortering krävdes vid ändring av summeringsordningen. Intervallen för summering var helt valfria. Stor omsorg lades ned för att göra programmen så användarvänliga som möjligt.

Referens:

Rune Liminga and Ivar Olovsson (1964). Some Crystallographic Programs for the Computers BESK and FACIT EDB. Acta Polytechnica Scandinavica, Mathematics and Computing Machinery Series 10 (Uppsala)12pp.

### **Minsta-kvadrat förfiningsprogram för FACIT EDB**

Stig Åsbrink och Carl-Ivar Brändén skrev ett minsta-kvadrat förfiningsprogram, SFLS, för FACIT EDB, som togs i bruk ungefär samtidigt som Uppsala programmen STRIX/PROFFS. SFLS använde sig av block-diagonal approximation för atomlägen (3x3 matriser) och diagonal approximation för isotropa temperaturfaktorer. Samma hållremsa för inmatning av instansade oberoende reflexer kunde användas för SFLS som för STRIX/PROFFS. De nya atomlägena som resulterade efter förfiningen i SFLS kunde lagras på magnetband på FACIT EDB och matas in direkt i avstånds/vinkelprogrammet VINTER.

Referens till SFLS:

- Stig Åsbrink och Carl-Ivar Brändén (1962). IUCR World List of Crystallographic Computer Programs, No 6023, FACIT EDB.

En kort sammanfattning av programmet SFLS presenteras i följande publikationer:

- Carl-Ivar Brändén och Ingvar Lindqvist (1963). Acta Chemica Scandinavica 17, 353-361. <http://actachemscand.dk/author.php?aid=1188>
- Länk till nekrolog för Carl-Ivar Brändén i Nature, skriven av S. Zhang, A. Rich, J. L. Sussman, och A.- R. Fersht. På första sidan av artikeln ges en sammanfattning av arbetet med programmeringen av SFLS.  
[http://scholar.google.se/scholar?hl=sv&lr=&cluster=13611636018376095861&um=1&ie=UTF-8&sa=X&oi=science\\_links&resnum=1&ct=sl-allversions](http://scholar.google.se/scholar?hl=sv&lr=&cluster=13611636018376095861&um=1&ie=UTF-8&sa=X&oi=science_links&resnum=1&ct=sl-allversions)

### **Vidareutveckling av kristallografiska program för BESK/FACIT EDB**

Med tiden utvecklades ytterligare program för kristallografiska tillämpningar för BESK och FACIT EDB, och som även Uppsalaforskarna använde. Här följer några exempel på sådana program:

- BAS: Minsta-kvadrat förfining av skalfaktorer mellan oberoende reflexer, observerade från olika skikt (olika set av filmer). (Per Erik Werner, Stockholms Universitet).
- ABS-EXT: Flera program för korrektion av Lorentz/polarisations-, absorptions- och extinktions-effekter (Per Erik Werner).
- Enkristall-diffraktometrar; diverse beräkningar (ALGOL) (Rolf Norrestam, Stockholms Universitet).
- LOKE: Lokalisering av elektrontäthets maxima (Bruno Lundberg och Ivar Olovsson).
- Länk till World list of Computer Programs:  
<http://ww1.iucr.org/comm/ccom/archive/worldlistcrystallographiccomputerprogramse/d2.pdf>

## Andra datorer under BESK/FACIT-perioden fram till 1965 och åren närmast därefter

**TRASK:** Teknikerna på Matematikmaskinnämnden (MMN) ville utveckla en mer avancerad BESK, en transistoriserad SUPERBESK, men fick inget stöd för dessa planer från staten. De fick dock tillstånd att bygga en transistoriserad kopia av BESK, som fick namnet TRASK. När MMN avvecklades överläts projektet på TRASK till Datakonsult AB, som byggde maskinen färdig för Nobelinstitutets för Fysik räkning. Program skrivna för BESK/FACIT EDB kunde även köras på TRASK, och den maskinen kom till användning även för kristallografiska beräkningar. <http://fof.se/skrivUtArtikel.lasso?id=00759a>

**IBM 7090:** Bland kunderna på BESK/FACIT var FOA, som fick alltmer ökande beräkningsbehov mot slutet av 1950-talet för militära ändamål. Behoven på FOA ledde till att en IBM 7090 inköptes och installerades på FOA 1961 och var då Europas kraftfullaste dator. Det fanns personer som tyckte att datorn var alltför kraftfull och att Sverige inte skulle kunna fylla den med uppgifter. Det dröjde dock inte länge förrän kunder strömmade in; bl. a. universiteten började köpa datortid på maskinen.

Kristallograferna i Uppsala och Stockholm gjorde beräkningar på FOA:s IBM 7090 med program som importerades från USA, skrivna i FORTRAN. Detta pågick fram till 1965, då Uppsala Universitets Data Central, UDAC, kom i drift. Exempel på program som användes på IBM 7090 för kristallografiska tillämpningar:

- ERPLA: Lorentz/polarisations/absorptions korrektioner (1962). Van den Hende, J.H. Esso Research and Engineering Company, CBRL-27 M-62.
- ORFLS: Fullmatris minsta-kvadrat förfining (1962). Busing, W. R., Martin, K. O. and Levy, H. A. ORNL-TM-305, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- ORFFE: Interatomära avstånd/vinklar med standard-avvikelser (1964). Busing, W. R., Martin, K. O. and Levy, H. A. ORNL-TM-305, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.

**IBM 1620:** En IBM 1620 installerades på Institutionen för Fysik, Uppsala universitet 1963. Werner Schneider var ansvarig för driften. Den användes av kristallograferna på Kemiska institutionen för mindre krävande beräkningar. Exempel på program för denna maskin:

- CELSIUS: Minsta-kvadrat förfining av celldimensioner (Jörgen Tegenfeldt)
- KOORDINAT: Beräkning av koordinaterna för en väteatom, när koordinaterna för dess grannar är kända (Jan Lindgren och Jan-Olof Lundgren)

## Introduktion av kristallografiska beräkningar på datorer vid Kemiska institutionen, Uppsala universitet

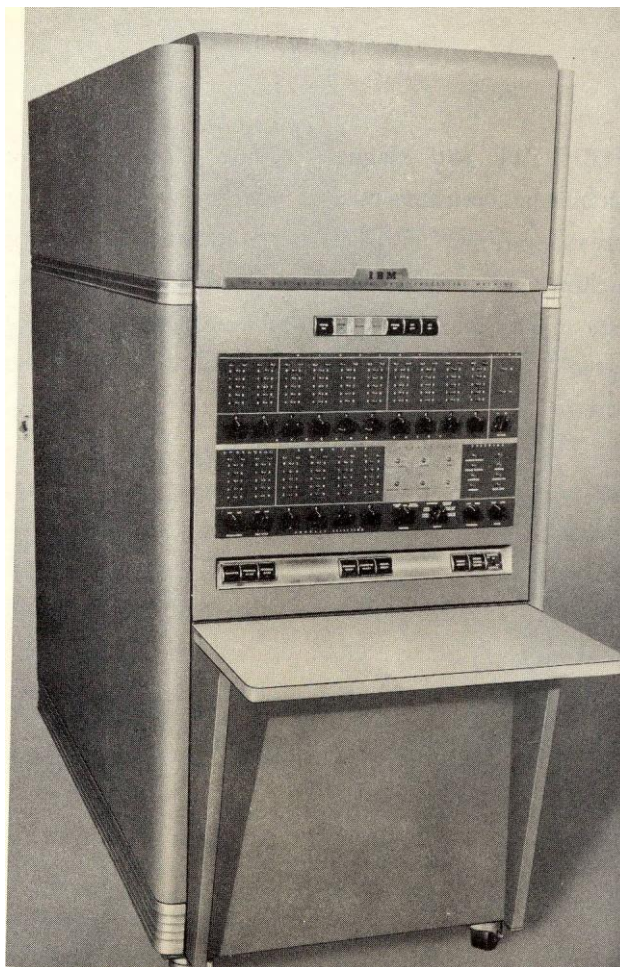
Fram mot slutet av 1950-talet var strukturbestämningar vanligtvis baserade på beräkningar utförda med Beevers-Lipson strips och Hägg-Laurent maskinen eller den av Lundström-Klimecki uppdaterade versionen. Som exempel kan tas en serie publikationer av Stig Rundqvist et al. i Acta Chem. Scand. (<http://actachemscand.dk/author.php?aid=1126>). Beräkningarna t.o.m. 1959 var gjorda med dessa ”manuella” metoder. Ganska snart efter det att de första programmen för BESK blivit tillgängliga i Stockholm, togs dessa i bruk av kristallograferna i Uppsala. Programmen SNUSKMUS/SUPERMUS för BESK publicerades 1959 och var troligen tillgängliga något tidigare. Beräkningarna fr.o.m. 1960 i publikationerna av Rundqvist et al. är baserade på dessa program.

De nya möjligheterna för beräkningar utnyttjades omgående av forskarna i Uppsala, och nya program för BESK/FACIT EDB togs i bruk allteftersom de blev tillgängliga. Uppsala Datacentral (UDAC) kom igång 1965 och beräkningarna i publikationer från 1966 utfördes på CDC 3600 vid UDAC (se vidare nedan).

Utvecklingen av beräkningsmetoderna gick mycket snabbt vid den här perioden. Som ett exempel kan tas två arbeten publicerade av Yngve Hermodsson i Acta. Chem. Scand. (<http://actachemscand.dk/author.php?aid=3272>). Strukturerna i båda dessa fall bestämdes med hjälp av Beevers-Lipson strips och Hägg-Laurent eller Lundström-Klimecki maskinen, konfirmerades och förfinades med programmen på BESK/FACIT EDB, och avslutades i det ena fallet med full-matris minsta-kvadrat förfining på IBM 7090 på FOA i Stockholm, i det andra fallet på CDC 3600 vid UDAC för att slutligen publiceras 1967. Hela serien av faser i utvecklingen av beräkningsmetoder kom till användning i dessa två arbeten.

Sammanfattningsvis kan noteras att kristallograferna i Uppsala tog tillvara alla de nya möjligheterna för beräkningar på olika datorer så snart dessa blev tillgängliga. Däremot gick det något långsammare med programutvecklingen. Ivar Olovsson påbörjade insamling av röntgendata för vätebundna strukturer vid mitten av 50-talet. Rune Liminga deltog i detta projekt under läsåret 1956/57 som ”fyra-betygs” student med insamling av lågtemperaturdata och preliminär strukturbestämning med Beevers-Lipson strips och Hägg-Laurent maskinen. Olovsson åkte till Berkeley i USA och forskade där läsåren 1957/58 och 1958/59. När Olovsson kom tillbaka hade Liminga avlagt grundexamen och var tillbaka på avdelningen, anställd som assistent. Han återgick till Olovssons projekt för studier av vätebundna strukturer. Under tiden i Berkeley fick Olovsson god erfarenhet av kristallografiska beräkningar på datorer (IBM 650 och IBM 701) och kunde också förfina de strukturer för vilka data insamlats i Uppsala. Några av dessa arbeten publicerades i Acta. Chem. Scand. efter hemkomsten (<http://actachemscand.dk/author.php?aid=1577>). Olovsson var angelägen att få igång programmeringsverksamheten på institutionen och tog initiativet till att Liminga deltog i en kurs för programmering av BESK i november 1959. Liminga fortsatte sedan med utveckling av program för BESK som resulterade bl. a. i STRIX/PROFFS och VINTER (se ovan).

I den nekrolog för Carl-Ivar Brändén, som referats till tidigare, beskrivs hur han inspirerades att utveckla ett minsta-kvadrat förfiningsprogram för FACIT EDB. År 1960 deltog Brändén i en sommarskola i Manchester med temat *Modern Methods of X-ray Crystallography*, organiserad av D. W. J. Cruickshank. Den senare höll också en serie föreläsningar om hur minsta-kvadrat metoden skulle kunna tillämpas för förfining av kristallstrukturer baserade på röntgendata. Vidare beskrev Cruickshank sitt datorprogram för detta ändamål, som han skrivit för den första datorn i England. Dessa föreläsningar inspirerade Brändén att söka samarbete med Stig Åsbrink vid Stockholms Universitet, som redan hade god erfarenhet av programmering för BESK/FACIT EDB, och de skrev tillsammans ett minsta-kvadrat förfiningsprogram SFLS (se ovan).



IBM 650

Från början var det ett fåtal personer som ägnade sig åt programmering på BESK/FACIT EDB. Datorer var något helt nytt och det tog tid innan förståelsen för deras potential blev mera allmänt utbredd. Dessutom var det mycket tidskrävande att skriva program i maskinkod och särskilt att testa dem. Som nämnts tidigare gick utvecklingen mycket snabbt, kraftfullare maskiner blev tillgängliga, samtidigt som programmeringsspråk, t.ex. FORTRAN, blev vanliga. Detta ledde till att fler och fler ägnade tid åt programmering, som resulterade i program för det flesta tänkbara behoven i samband med kristallografiska studier.

### **Tekniska Museet: IT-minnen ”från matematikmaskin till IT”**

Under sommaren och hösten 2007 gick Tekniska Museet ut med ett uppdrag i massmedierna där en efterlysning gjordes av svenska folkets nedtecknade IT-minnen från perioden 1950 – 1980. Uppdraget gjordes inom ramen för ett projekt *Från matematikmaskin till IT*, med syftet att dokumentera erfarenheterna hos de människor som arbetat med IT-teknikens utveckling innan de försvinner för alltid. Uppdraget fick ett gott gensvar, och resulterade i ett stort antal berättelser. Ett urval av dessa är publicerade i PDF-format och kan nås via följande länk: <http://www.tekniskamuseet.se/templates/Page.aspx?id=22750>.

**Lars Kihlberg** var en av dem som skickade in en artikel om sina IT-minnen till Tekniska Museet, men som tyvärr inte valdes ut för publicering. Kihlberg läste kemi m.m. i början av 1950-talet i Uppsala och blev tidigt rekryterad för forskarutbildning vid den oorganiska avdelningen. Han disputerade för doktorsgraden 1963 och flyttade därefter till Stockholms



Universitet. Kihlberg var verksam vid Kemiska institutionen under den period då datorerna gjorde sitt intåg. Han har skrivit en informativ artikel om hur det gick till att bestämma strukturer under perioden före datorerna och vilken betydelse deras intåg hade för utvecklingen av den kristallografiska forskningen. Artikeln, *Lars Kihlberg: IT-minnen*, bifogas som bilaga 3 nedan.

**Hans-Åke Ramdén** har i sina IT-minnen publicerade på Tekniska Museet gett en utmärkt exposé över Uppsala Universitets Datacentral (UDAC) och dess utveckling, från starten 1965 fram till 1986 då han lämnade UDAC. Före den anställningen arbetade han på FOA:s datacentral och inkluderar i sin berättelse även information om IBM 7090, som kristallograferna använde en tid för sina beräkningar (se ovan). Länk till Ramdéns artikel: [http://www.tekniskamuseet.se/upload/Dokochforskning/161\\_Hans-Åke\\_Ramdén.pdf](http://www.tekniskamuseet.se/upload/Dokochforskning/161_Hans-Åke_Ramdén.pdf)

### UDAC – Uppsala Universitets Datacentral

Sveriges Riksdag fattade 1964 beslut om att inrätta fem universitetsdatacentraler. Uppsala blev den första av dessa datacentraler, som fick sin utrustning och kom i drift 1965. UDAC skulle erbjuda service till övriga universitet fram till dess att dessa fick sina datorer. Fyra platser utanför UDAC utrustades med s.k. ”remote-batch”-anläggningar, som via telefonlinjer kunde läsa in jobb för bearbetning på CDC 3600 vid UDAC varefter resultaten skickades tillbaka. Under olika skeden var universiteten i Stockholm, Lund, Umeå, KTH i Stockholm och SLU på Ultuna samt Kvantkemiska Institutionen i Uppsala uppkopplade mot UDAC. Programbiblioteket som utarbetats i Uppsala för kristallografiska beräkningar kunde då utnyttjas av forskare utanför Uppsala tills deras egna datacentraler kom igång. Bilder på olika CDC-datorer och samtidigt en intressant historik över datorutvecklingen vid denna tid lämnas i följande länk (se även Wikipedia):

<http://research.microsoft.com/en-us/um/people/gbell/craytalk/sld028.htm>



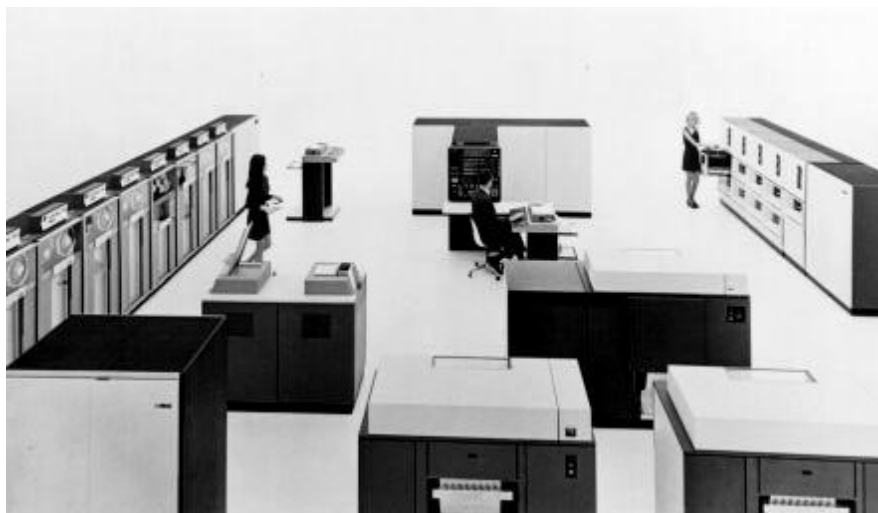
Control Data Corporation (CDC) 3600

Generösa forskare, främst i USA men även från andra länder, ställde välvilligt sina program (skrivna i FORTRAN) till förfogande för kollegerna i Uppsala. Programmen modifierades i Uppsala för att passa för den lokala situationen och knyta ihop dem med andra program skrivna här eller på annat håll. De vanligaste programmen som var tillgängliga för kristallografiska beräkningar på CDC 3600 vid UDAC var följande:

- CELSIUS: Minsta-kvadratförfining av celldimensioner (Jörgen Tegenfeldt, Uppsala)
- DATAPH: Korrektion för Lorentz-polarisations/Absorptions/ Extinktions-effekter (P. Coppens, L. Leiserowitz and D. Rabinovich, Rehovoth, Israel, modifierat av O. Olofsson och M. Elfström, Uppsala och B. Brandt och S. Åsbrink, Stockholm)
- DRF: Beräkning av strukturfaktorer och summering av Fourierserier (A. Zalkin, Berkeley, USA, modifierat av R. Liminga och J.-O. Lundgren, Uppsala)
- LALS: Fullmatris minsta-kvadratförfining av lägesparametrar och temperaturfaktorer (P. K. Gantzel, R. A. Sparks och K. N. Trueblood, UCLA, USA, modifierat av A. Zalkin, Berkeley, USA, och av C.-I. Brändén, R. Liminga, och J.-O. Lundgren, Uppsala)
- DISTAN: Interatomära avstånd och vinklar med uppskattade standaravvikelser (A. Zalkin, Berkeley, USA)
- ORFFE: Interatomära avstånd/vinklar och korrektion för temperatureffekter med standardavvikelser (W. R. Busing, K. O. Martin and H. A. Levy. *ORNL-TM-305*, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, 1964)
- ORTEP: Program för plottning av kristallstrukturer med atomerna illustrerade som ellipsoider (C. K. Johnson. *ORNL-3794*, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, 1965)
- LINUS: Full-matris minsta-kvadrat förfining av lägesparametrar/temperaturfaktorer samt isotropa/anisotropa extinktionseffekter (ursprungligen ORFLS skrivet av Busing, W. R., Martin, K. O. and Levy, H. A. *ORNL-TM-305*, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, 1962, modifierat av P. Coppens och W. C. Hamilton, Brookhaven National Laboratory, USA)
- WAL: Analys av viktningsschema efter en minsta-kvadrat förfining (P. G. Jönsson, Uppsala)
- FORDAP: Summering av Fourierserier; plottning av elektrontätheter (Brookhaven National Laboratory Crystallographic Program Library 1972; P. G. Jönsson)

CDC 3600 var en för sin tid kraftfull dator men utvecklingen av mer avancerade maskiner gick snabbt, och CDC-maskinen ersattes 1972 med en IBM 370/155. Teknisk information om datorerna finns i Ramdén's artikel eller på Wikipedia (<http://www.wikipedia.org/>) och Google ([www.google.se](http://www.google.se)). Forskarna på Kemiska institutionen med bidrag från kolleger på Stockholms universitet utarbetade snabbt ett bibliotek av program för kristallografiska tillämpningar. Programbiblioteket för CDC 3600 överfördes till IBM 370/155 med några ändringar och tillägg. Jan-Olof Lundgren gjorde en omfattande städning av LALS, som genomgått ett antal tidigare modifieringar från sin ursprungsversion och var i behov av en uppdatering. Ett nytt program för strukturbestämning med direkta metoder installerades.

- UPALS: Full-matris minsta-kvadrat förfining; alla tänkbara parametrar kunde förfinas (baserad på LALS med omfattande modifiering av J.-O. Lundgren, Uppsala; UIIC-B13-3, 1972)
- MULTAN: Strukturbestämning med direkta metoder (P. Main, M. M. Woolfson and G. German; Univ. of York, England, 1971)



## IBM 370/155

### Datorer på oorganiska avdelningen vid Kemiska institutionen

Utvecklingen av datorer gick mycket snabbt på 1960-talet. Stora maskiner av den typ som t.ex. fanns på UDAC, blev allt vanligare och installerades på många datacentraler. Samtidigt pågick en utveckling av mindre maskiner (minidatorer), som kunde köpas för ett rimligt pris. Redan mot slutet av 1960-talet blev det allt vanligare att institutioner på universiteten fick anslag för inköp av minidatorer för både insamling av data och för beräkningar. Detta ledde till att många forskare fick direkt personlig kontakt med datorer och vidare till att allt fler ägnade tid åt programmering och därigenom förbättrade kvaliteten på sina beräkningar och resultat.

**IBM 1800:** Ivar Olovsson fick vid slutet av 1960-talet anslag för inköp av en dator till den oorganiska avdelningen. Valet föll på en IBM 1800 som kom i drift 1970. IBM 1800 var en maskin främst avsedd för processkontroll men var också väl lämpad för beräkningar (mera teknisk information via [www.google.se](http://www.google.se)). Den hade för den tiden en hygglig minneskapacitet (64K bytes), magnetbandsstation, skrivminnsenhet med två diskar, vardera med 7.25 milj. bytes, hålkortsläsare/stans, radskrivare, FORTRAN-kompilator mm. Till datorn var kopplad en Varian wide-line NMR-spektrometer, en far-infrared Fourier-spektrometer och en SAAB filmdensitometer (film scanner) för mätning av intensitetsdata från Weissenberg-, precessions- och pulverfilmer.

Så snart maskinen var i drift började arbetet med att bygga upp ett programbibliotek för kristallografiska beräkningar. Många av de program som fanns i motsvarande bibliotek på UDAC modifierades för IBM 1800 och nya program införskaffades eller skrevs. Maskinen användes flitigt inte bara av kristallograferna på avdelningen men även av forskare med andra inriktningar, som utarbetade program för sina ändamål.



### IBM 1800 (Jan-Olof Lundgren, Rune Liminga, Ivar Olovsson, /1969)

Vid sidan av tidigare nämnda datorer, som främst var avsedda för beräkningar, var ett antal mindre datorer kopplade direkt till olika experimentella utrustningar: en DEC PDP-8/I styrde en Stoe-Philips 4-cirkeldiffraktometer och en PDP-8/A en NONIUS CAD-4F diffraktometer.



**PDP- 8 /I**



**NORD-10:** Med den snabba datorutvecklingen blev det angeläget att uppgradera IBM 1800 efter ett antal år. Valet denna gång föll på en produkt från Norsk Data, NORD 10, som installerades 1978 (teknisk information via [www.google.se](http://www.google.se)). Kapaciteten på avdelningens dator ökade härigenom signifikant. Som i fallet med IBM 1800 utarbetades nu för NORD 10 ett omfattande programbibliotek för kristallografiska beräkningar, och som var baserat på det som fanns på UDAC. Ytterligare program anskaffades och nya skrevs så att programbiblioteket blev komplett.



**NORD-10 (två hopkopplade)**

**NORD-100:** En bit in på 80-talet var det åter dags att uppdatera datorsystemet. NORD-10 maskinen ersattes med en NORD-100 och en NORD-100 COMPACT. Nu fanns inte längre behov av IBM 1800 och den stängdes omkring 1981.

Under senare delen av 70-talet utvecklades terminalsystemet på UDAC, vilket ledde till ökade möjligheter att koppla upp sig mot UDAC (se Ramdén's IT-minnen). Denna utveckling ledde först till terminalnätverket UPNET, som kopplade ihop universitetsanvändare i Uppsala, därefter SUNET som kopplade ihop universiteten i Sverige, och så småningom kom Internet. Redan på NORD-10 tiden utrustades Kemiska institutionen med terminalväxlar, som byggdes ut ytterligare vid installationen av NORD-100 datorerna till ett mycket omfattande system. En översikt över datorsituationen på Kemikum 1986 lämnas i bilaga 2.

Bland forskarna uppkom efter hand missnöje med den service som erbjöds vid UDAC och den matematisk-naturvetenskapliga fakulteten beslöt att skaffa en egen 'main frame' dator och en VAX 780 installerades på Fysikum omkring 1985. De tyngre kristallografiska beräkningarna överfördes då till denna dator. Den systemansvarige "sys-Hans" (Hans Olofsson) var alltid till hands vid behov av hjälp.

Omkring 1980 introducerades s.k. persondatorer av IBM och allt flera av forskarna inköpte egna PC-datorer. Många importerades av Bengt Noläng som också själv byggde en del av dem. Konkurrenter till IBM dök snabbt upp och detta märke blev inte länge dominerande. Den tekniska utvecklingen på datorområdet medförde att kapaciteten hos PC-datorerna ökade mycket snabbt och vid början av 2000-talet kunde många av de kristallografiska beräkningarna utföras på PC-datorer på det egna skrivbordet. Behovet av datorkraft ökade även inom många andra forskningsområden och kraftfulla nationella datorer anskaffades, som bl. a. installerades i Linköping. I datorernas barndom var kristallograferna några av de flitigaste användarna men idag dominerar teoretiska beräkningar och tillämpningar inom många andra forskningsområden.



Vax 11-780 introducerades 1975 och var efterföljare till PDP-11.

En VAX 780 installerades på Fysikum omkring 1985.



**IBM 5155 Portable PC**  
 Detta var IBM's första "bärbara" dator

Den första persondatorn Atair 8800 kom 1975 men det var först med IBM:s PC, som kom omkring 1981, som den fick en mera allmän spridning.

### **Bistånd till kristallografi vid Chulalongkorn University, Bangkok**

En betydande insats gjordes från den oorganiska avdelningens sida på 1960- och 1970-talet för att stödja kristallografin vid Chulalongkorn University; dels genom att utbilda unga forskare som hade stipendier från Internationella Seminarierna i Fysik och Kemi vid Uppsala Universitet, dels genom en omfattande insats för att förse dem med program för kristallografiska beräkningar. Syftet med denna verksamhet var att stödja universitetet i Bangkok med att bygga upp forskningsverksamhet i fasta tillståndets fysik och kemi.

Följande insatser gjordes för databehandling vid Chulalongkorn University:

Rune Liminga installerade december 1972 - januari 1973 ett antal IBM 1800 program på ett CDC 3100 system vid Bangkoks Royal Turf Club.

Stig Rundqvist medförde ytterligare IBM 1800 program i januari 1974. Därmed hade de tillgång till ett ganska komplett programbibliotek för kristallografiska tillämpningar i Bangkok. Främsta syftet med Rundqvists besök var dock föreläsningar och handledning av tidigare stipendiater som fått utbildning i hans grupp i Uppsala.

Jan-Olof Lundgren åkte januari 1979 till Bangkok med ett ”fullständigt” programbibliotek utvecklat för NORD 10; en omfattande arbetsinsats. Programbiblioteket kördes igång där på ett IBM 370/138 system.

### **Acknowledgements**

Tack till Jan-Olof Lundgren för värdefull information om dator- och programutveckling och till Lars Kihlberg för personliga minnen om datorhanteringen vid institutionen.

## Bilaga 1

***The Mechanism of Beevers-Lipson Strips***

Today, when Fourier transforms on several thousand data items for large, three dimensional unit cells at a resolution of about 0.3 Å require less time than it takes to gulp down a cup of coffee, it is difficult to imagine the size of the task confronting early crystallographers, where this operation was almost unthinkable. After all, even a two dimensional summation of:

$$\Sigma ( A \cos 2\pi (hx+ky) + B \sin 2\pi (hx+ky)$$

for 500 data items into 2000 points requires  $10^6$  summations, let alone any work required to calculate the trigonometric functions! The great contribution of Beevers and Lipson in 1936 was twofold: to simplify the calculations greatly by factorising the trigonometric expressions to reduce the two dimensional calculations to many fewer one dimensional ones, and to provide a convenient technique for carrying out the summations - the strips themselves. The factorisation technique is still at the heart of many computer programs. The expression given above expands to:

$$\Sigma \{ A (\cos 2\pi hx \cos 2\pi ky - \sin 2\pi hx \sin 2\pi ky) + B (\sin 2\pi hx \cos 2\pi ky + \cos 2\pi hx \sin 2\pi ky) \}$$

That may hardly seem an advantage! However, in the centrosymmetric plane group  $p2mm$ , for example, with equivalent reflections  $F(h,k) = F(-h,-k) = F(-h,k) = F(h,-k)$  and no phase shift among equivalent data, combination of these reflections causes all terms involving sines to disappear, leaving

$$\Sigma 4F (\cos 2\pi hx \cos 2\pi ky)$$

The data were sorted to minimise the number of changes in  $h$ . Thus a set of summations for each  $ky$  need only be followed by a single summation for that  $hx$ .

The boxes of strips themselves have virtually disappeared although they were once almost universal in the crystallographic community.

Over 500 sets were sold between 1948 and 1970, and a photograph of Arnold Beevers and Henry Lipson in bathing attire with the caption "Beevers and Lipson stripped" was an instant hit in an informal precursor of 'Crystallography News'!

I am most grateful to Richard Glazer of Oxford Cryosystems, who kindly photographed this handsome boxed set which still survives in the Clarendon Laboratory at Oxford University in 1998.

You can see that the strips themselves (4000 of them in the final version!) were handsomely boxed for convenient use.

The original version had strips representing  $F\cos 2\pi hx$  and  $F\sin 2\pi hx$  corresponding to amplitudes from 1 to 99 and from  $h = 0$  to 20. Later ones doubled the resolution by printing the even values on one side of the strip and the odd ones on the other.





The actual strip illustrated below is a cosine (C) strip, for  $F = 19$  and  $h = 3$ , giving values of  $F\cos 2\pi hx$  for  $2\pi x$  from 0 to  $90^\circ$ , i.e.  $x$  from 0 to 0.25. Suitable reversing of direction and sign enabled other parts of the range to be studied.

$2\pi x$  ( $^\circ$ ) -->      0   6 12 18 24 30 36 42 48 54 60 66 72 78 84 90  
 F      h

19	C	3		19	18	15	13	6	0	6	13	15	18	19	18	15	13	6	0
----	---	---	--	----	----	----	----	---	---	---	----	----	----	----	----	----	----	---	---

For a one dimensional sum, the appropriate strips were arranged one under the other and the columns summed: The following shows the start of an array of cosine strips, here for  $h = 0, 1, 2,$  and  $3$  and  $F = 46, -35, 28$  and  $-19$ .

46	C	0		46	46	46	46	46	46	46	46	46	46	46	46	46	46	46	46
----	---	---	--	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----

35	C	1		35	35	34	33	32	29	27	26	23	21	17	14	11	7	4	0
----	---	---	--	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	---	---	---

28	C	2		28	27	26	23	19	14	9	3	3	9	14	19	23	26	27	28
----	---	---	--	----	----	----	----	----	----	---	---	---	---	----	----	----	----	----	----

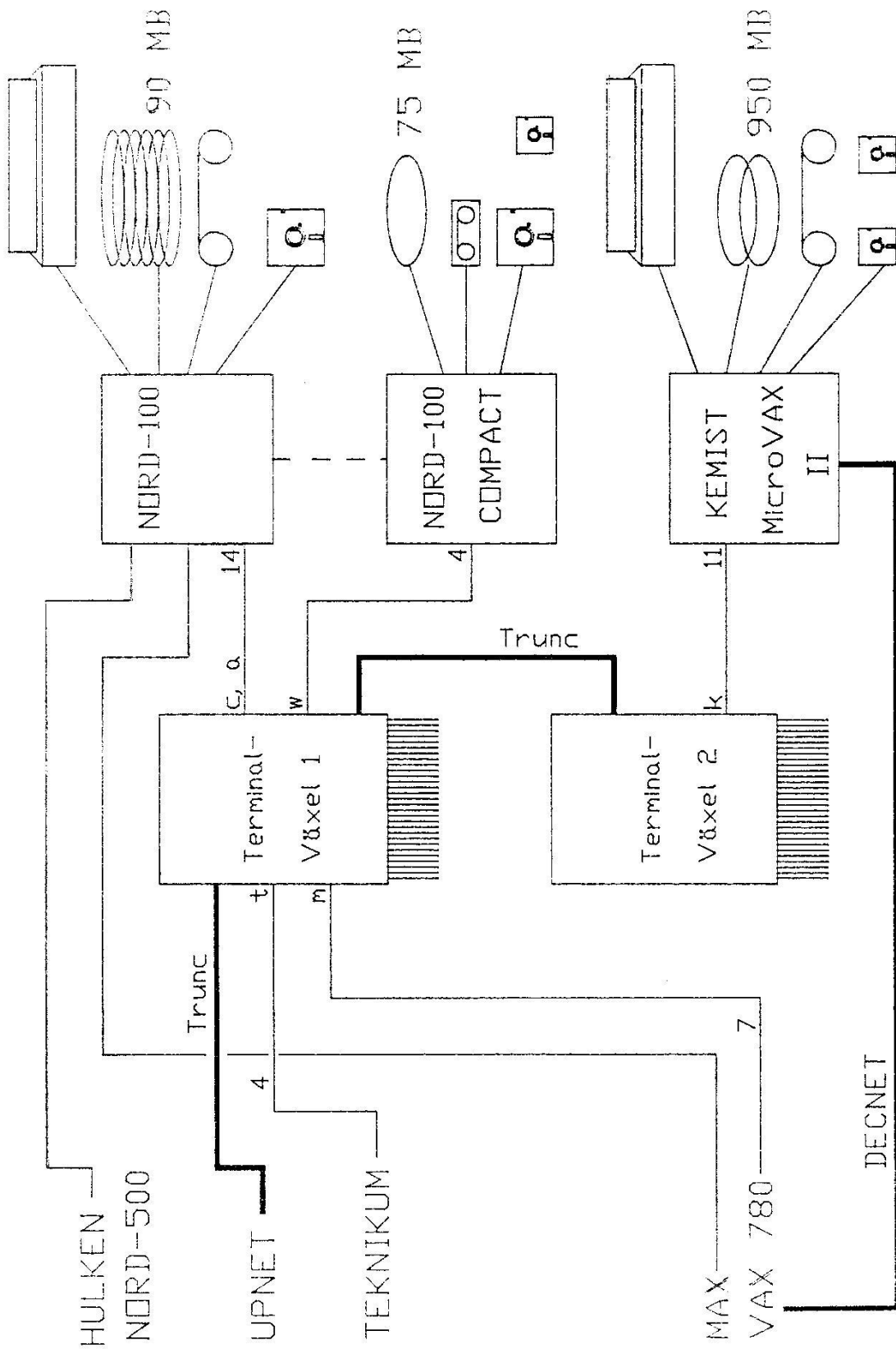
19	C	3		19	18	15	13	6	0	6	13	15	18	19	18	15	13	6	0
----	---	---	--	----	----	----	----	---	---	---	----	----	----	----	----	----	----	---	---

sum:                      20 20 23 23 27 30 33 36 35 34 33 31 27 25 21 18

Some people used mechanical calculators for the sums, but most found it far quicker and more accurate to use mental arithmetic, a skill more widely found then than now. In fact a BBC documentary of a few years ago showing Rosalind Franklin with a box of strips laboriously cranking them into a mechanical calculator was almost certainly apocryphal. She would not have wasted time on that!

*Bob Gould*  
*University of Edinburgh*

(Reprinted with permission from *Crystallography News*, the newsletter of the British Crystallographic Association, No. 67, December 1998. This article can be found on the web at <http://gordon.cryst.bbk.ac.uk/BCA/CNews/Dec98/strips.html>.)



## Lars Kihlberg: IT-minnen

### *Personligt*

Jag är född och uppväxt i Uddevalla, där jag också gick i folkskola och läroverk. Min far var adjunkt i matematik och fysik vid läroverket och han underblåste mitt naturvetenskapliga intresse. Han tog ofta med mej till fysikinstitutionen vid skolan när han skulle förbereda lektioner. Mitt intresse kom dock att koncentreras på kemi. Jag minns att jag hade inrättat ett gammalt dockskåp för kemiska experiment med en glasskiva på ovansidan. Jag kommer också ihåg hur det knastrade när man gick på golvet efter mina lyckade(!) försök att framställa 'jodkväve', och hur den rostfria diskbänken till min förvåning blev anfrätt när jag gjorde experiment med starka syror. Efter studentexamen 1949 flyttade jag till Uppsala och efter inträdesprov på 'Kemikum' fick jag lära mej kemin från grunden i två år: ett års laborationer och ett års tentamensläsning. Det fanns de som gjorde färdigt 2 betyg i kemi ( $\approx 40$  poäng) på ett år men jag tog det lite lugnare. Det var kurser i oorganisk kemi, organisk kemi och fysikalisk kemi, däremot ingen analytisk kemi eller biokemi i grundkursen på den tiden!

Matematik (2 betyg) och fysik (2 betyg) följde och efter en kortare kurs (med många tjocka böcker!) i pedagogik kunde jag avlägga fil.mag.-examen. Militärtjänstgöring upptog praktiskt taget hela 1955. Därefter återvände jag till Uppsala för att 'lica' i kemi för Gunnar Hägg, professor i allmän och oorganisk kemi. Jag hade redan under grundutbildningen blivit 'haffad' av en lärare i oorganisk kemi, Arne Magnéli, som övertalade mej att börja forska. Han anvisade också ett problem, som innefattade noggrann fasanalys och kristallografiskt arbete i systemet molybden-syre. Detta ledde till en fil.lic.-examen i kemi 1959 och så småningom disputation för doktorsgraden 1963.

Arne Magnéli hade emellertid redan 1953 fått en laboratorstjänst i Stockholm men bodde kvar i Uppsala och följde mitt forskningsarbete ganska noga. Efter disputationen var jag ett tag betänkt på att ta anställning i industrin, men Arne erbjöd mej att börja som lärare i Stockholm. Under 60-talet skedde en våldsam expansion av de naturvetenskapliga institutionerna vid universiteten och bristen på lärare var stor. Så jag flyttade till Stockholm och blev universitetet där troget till min pensionering 1996. Arne Magnéli hade blivit professor 1961 och jag efterträdde honom vid hans pensionering 1980.

### *Datorer och kristallografiska beräkningar*

Det numeriska räknearbetet har en avgörande betydelse vid bestämningen av kristallstrukturer. De fundamentala beräkningarna omfattar dels summation av Fourierserier med termer, som motsvarar upp till de högsta indices på uppmätta röntgenreflexer, dels den motsatta operationen: beräkning av strukturfaktorer ur ett antaget strukturförslag. Före datorernas era användes mest olika tabeller, s k strips, tillsammans med mekaniska bordsräknemaskiner och dessa manuella beräkningar kunde bli mycket tidsödande. I Uppsala hade Gunnar Hägg tillsammans med Torbern Laurent vid KTH i mitten av 40-talet byggt en elektrisk analogmaskin för summation av en-dimensionella Fourierserier, som i hög grad underlättade sådana beräkningar, men den var begränsad till termer (indices) upp till 16. Två-dimensionella kartor fick man göra genom att dela upp den två-dimensionella Fourierserien, som då erfordrades, i ett antal en-dimensionella. Tre-dimensionella funktioner var i allmänhet inte att tänka på. Det var med de digitala datorerna som genombrottet kom. I Sverige var det den i dåtida jämförelse mycket kraftfulla datamaskinen BESK, färdig 1953, som först kom att användas för kristallografiska beräkningar. Men dessförinnan fanns i USA åtminstone *en*

elektronisk matematikmaskin speciellt avsedd för kristallografiska beräkningar: Ray Pepinskys 'X-Rac' från slutet av 1940-talet vid Pennsylvania State University. Kanske fanns det flera.

Lars-Gunnar Silléns elev Maja Edstrand gjorde ett doktorsarbete över antimonföreningar, som hon disputerade på vid Stockholms universitet 1960 med Ingvar Lindqvist från Uppsala som fakultetsopponent. Hon gjorde dessutom en pionjärinsats för den kristallografiska forskningen i Sverige, när hon kring 1956 programmerade (i maskinkod!) BESK för summation av Fourierserier (programmet 'S1'). Sillén var bland de första att inse datorernas potentiella betydelse inom kemin, och det är troligt att det var han som 'övertalat' Maja att göra den här betydelsefulla insatsen. Sillén var ung och energisk professor vid KTH sedan 1950 men hade tidigare varit bl.a. laborator vid Stockholms högskola.

Jag var alltså i Uppsala då och i mitten av 50-talet hade vi flyttat in i en tillbyggnad av 'Kemikum'. Där hade iordningställts ett stort 'räknerum', där räknebiträden, gemenligen kallade 'räkneslavar', jobbade med mekaniska räknemaskiner. Det blev dock snart allt färre räknebiträden i och med att BESK började användas. Johannes Bäcklund höll under många år på att bygga en digital maskin för strukturfaktorberäkningar, med ett trumminne av den typ som användes i BESK. Jag tror knappast att den blev färdig – den blev snart omsprungnen av den kommersiella datorutvecklingen. Likaså byggde Torsten Lundström en Fouriermaskin av Hägg-Laurent-typ fast med modernare in- och utmatning av data och ett fördubblat antal termer. Den blev så småningom färdig men även i det fallet hade dock datorutvecklingen då sprungit förbi.

BESK och FACIT, som var och en upptog en stor sal, hade in- och utmatning av data i form av hållremсор av oljat papper. Före en beräkning skulle därför dataremсорna stansas och ett fel då kunde betyda att hela remsan fick stansas om! Man hade visserligen möjligheten att 'F:a över' (för 'F' var de fem hålen genomtryckta - det var hexadecimal kodning som användes) det man skrivit fel, men det kunde för det mesta bara ske om man upptäckte felet med detsamma. Efter en körning skulle resultaten skrivas ut, vilket skedde med remsläsare kopplade till elektriska skrivmaskiner, som kunde stå och smattra dagarna i ända. Det är inte underligt att de ofta gick sönder. Det var mest elektriska Facit-skrivmaskiner, som försetts med en remsstans och remsläsare, som användes.

BESK var placerad i KTHs gamla hus vid Drottninggatan 95. Lokaliseringen var naturligtvis förmånlig för strukturforskarna vid Stockholms universitet på Kungstensgatan 45, som i stor utsträckning kom att utnyttja denna maskin, och dess något yngre syster FACIT-EDB, placerad i samma hus. Detta fick mest ske nattetid eftersom dagarna var reserverade för mer inflytelserika kunder. Uppsalaforskarna kunde resa ned och köra och hoppas att maskinerna skulle fungera den natten. Stansning av indata och utskrift av resultaten fick i stor utsträckning ske 'hemma'. Räknebiträdena hade i stor utsträckning ersatts av stans- och utskriftsmaskiner.

Jag minns hur jag tillbringade nätter hos BESK eller FACIT (en trappa upp). Då och då såg jag Lars-Gunnar Sillén och Nils Ingri springa förbi; förmodligen testade och körde dom programmet 'LETAGROP', som blev mycket använt för lösningsjämvikter. In- och utmatningen av remsorna gick snabbt och jag minns hur vi stod och förundrat tittade på utmatningen av remsan ned i stora remskorgar, vilket skedde med fantastisk hastighet – tyckte vi på den tiden. Efter körningen var det bara att sätta sig på ett av de första morgontågen hem till Uppsala. I början fick vi forskare resa ned till Stockholm och köra själva, men så



småningom anställdes ett biträde, som reste ned och körde en eller två nätter i veckan åt alla som lämnat honom dataremsor.

En yngre generation forskare, speciellt Stig Åsbrink, Sven Westman och G. Blomqvist från Stockholm, utvecklade i slutet av 50-talet förbättrade och mer användarvänliga program för Fouriersynteser och dessutom för strukturfaktorberäkningar. Strukturlösningen gick ofta via 'vektorkartor', som man kunde beräkna direkt ur röntgenintensiteterna, och det gällde att gissa atomlägen som gav upphov till dessa vektorer. Reflexernas faser, som inte kunde bestämmas experimentellt, erhöll man sedan ur strukturfaktorerna. Till att börja med fick man göra strukturförfining genom en 'back-shift' metod, vilket innebar upprepade Fouriersynteser och strukturfaktorberäkningar, så datorer av ett eller annat slag var nästan nödvändiga.

Ganska snart, kring 1960, blev emellertid ett 'minsta-kvadrat-program' för BESK/FACIT klart genom ett samarbete mellan Carl-Ivar Brändén från Uppsala och Stig Åsbrink från Stockholm. Det var ett s k block-diagonal-program med  $3 \times 3$  matriser utefter diagonalen, eftersom maskinerna inte kunde klara större matriser. Detta blev mycket använt ända tills fullmatris program blev tillgängliga, då för andra datorer. Nu kunde man göra förfiningar av strukturmodeller direkt, men eftersom funktionerna inte är linjära fick man oftast köra flera förfiningscykler.

Rune Liminga, Ivar Olovsson och Bruno Lundberg från Uppsala, samt Per-Erik Werner och Rolf Norrestam från Stockholm utvecklade under de kommande åren en rad nya program för olika kristallografiska beräkningar på dessa maskiner, bl a för Lorentz-polarisation- och absorptions-korrektion av indata, liksom för beräkning av atom-avstånd och d:o -vinklar för den resulterande strukturen.

Från mitten av 60-talet fick kristallograferna möjlighet att utnyttja olika kommersiella maskiner av typ IBM och CDC på FOA, KTH, hos Statistiska centralbyrån, och vid Stockholms datamaskincentral (QZ) på Linnégatan, – ja t o m TRASK ('transistoriserad BESK') vid Nobelinstitutet för fysik användes – och då var det slut på pappersremsorna; det var hålkort som gällde för inmatning och resultaten kom ut direkt på papper. Då kunde också kristallografiska program som utvecklats utomlands börja användas. I slutet av 60-talet och början av 70-talet fanns en terminal på Drottninggatan till QZs stordator på Linnégatan, vilket underlättade utnyttjandet väsentligt, särskilt för dem som arbetade på Kungstensgatan 45.

Ett tag fanns också den kraftfullaste stordatorn, jag tror en CDC3600, i Uppsala – den hade skaffats av Per-Olov Löwdin huvudsakligen för kvantkemiska beräkningar – och då fick stockholmarna ett tag skicka sina körningar dit i stället.

Tack vare anslag från Riksbankens jubileumsfond fick institutionen 1967 möjlighet att anskaffa en egen, mindre 'stordator' av typ IBM 1800, som sedan i åtskilliga år var till mycket stor hjälp i forskningen. Många av forskarna deltog i utveckling av program för denna maskin, som var placerad i Frescati.

Jag var alltså inte direkt inblandad i den tidiga programutvecklingen utan fastmer en flitig användare av programmen. Fortran-språket lärde jag mig dock behärska och jag gjorde många program för IBM1800 och senare datorer. Men denna lilla redogörelse visar dock på datorernas intåg på den vetenskapliga arenan under det sena 50-talet. Deras betydelse för utvecklingen av den kristallografiska forskningen kan inte överskattas.