X線解析結果の考察支援機能

東京工業大学生命理工学部 竹 中 章 郎

X線解析の途中および終了時に構造パラメーターとして計算されるのが、原子間距離、原子価角、ねじれ角、平面性、二面角、結合と平面のなす角などである。構造決定という単純な目的に限れば、これらのリストから必要なものを拾い出すだけで用は足りるであろう。しかし、構造を基にして反応性や物性、生物学的機能などを究明しようとするとき、目的に応じて特定の構造パラメーターを

集めたり、考察を発展させ、仮説を保障するための種々の計算が必要になる。第1図に示すように、必要と思われる種々の機能を体系化し、構造パラメーターの計算ルーチンを組み込むことにより、広範な目的に対応することが可能となる。このような思想で作成したプログラムがLISTUPである。

LISTUPの特徴 このプログラムでは一度構造パラメーターを計算すると、①分子内を一次情報、

第1図 考察支援ソフトLISTUPの基本構成。

分子間を二次情報として分類し、その索引ファイルIAIを作り、保存する。必要に応じて、たとえば原子座標を一部変更したときなどはコマンドNEWによってIAIを更新できる。このIAIを参照して、構造パラメーター（たとえばコマンドがDISであれば距離、ANGならば角度、TORならばねじれ角）の一次情報、または二次情報、あるいはスポット情報を計算する。このとき、②特定の原子または原子種を指定しておけば、抽出機能によってそれらを含む集合、あるいは含まない集合が作られる。③分子間相互作用では、第2図に示すように、相互作用の幾何学的構造¹⁾を記述するための原子間距離、原子価角、ねじれ角を集める。この機能は水素結合だけを集めたり、分子間の異常な接触について、あるいは着目する原子または原子種の相互作用に関する詳細な構造情報を与えてくれる。④作表機能では論文用の表を作成するが、抽出機能を併用することにより種々の集合を表形式で出力することができる。⑤水素原子座標の発生機能に加えて、⑥任意の位置に原子や原子団を付加するモデリング機能がある²⁾。付加する原子の位置は、第3図に示す3点セットで指定する。これを繰り返すことにより、どのような骨格の原子団でも構築することができる。またすでに解析した、あるいは論文やデータベースから入手した原子集団（座標系が異なってもよい）を付加するときは6点セ

ットで指定する。これらの機能により原子や原子団の導入、置換、重ね合わせなどによる構造の変形や新しい分子構造の作製が容易にできる。したがって結晶内での分子の反応性や構造の乱れの考察、さらに結晶場を離れた計算、たとえば分子軌道、表面露出度、コンホメーション解析、分子設計や高分子とのドッキングなどへの移行が簡単に行える。⑦プロットは単純な構造表示用であって、モデリングの操作を確認する上で不可欠である。なお種々の表示方法による図の清書には高度な分子および結晶構造表示用プログラムDCMS82が使われる。⑧分子の重ね合わせ機能は同一分子または類似分子の構造の一致度または類似度を求めるのに便利である。非対称単位に複数個の同一分子が存在するときは、それらに関係づける回転行列と並進ベクトルを調べて、結晶学的対称との関係を検討する必要がある。この機能によって空間群が訂正された例（たとえば $P1 \rightarrow \bar{P}1$ など）もある。⑨LISTUPはX線解析を含む構造研究用総合プログラムシステムXSENの中の一つのプログラムとして開発されたもので、原子座標や標準偏差の入力ファイルは最小二乗法による構造精密化プログラムLSAP80のX1フォーマットに統一されている。編集機能では、X1ファイルを作成したり、対称操作による原子パラメーターの変換、原子の追加、原子団の併合、原子名の変更、並べ変

第3図 原子または原子団の付加に必要な構造パラメーター。アルゴリズムについては文献2)を見よ。

第2図 相互作用を記述する構造パラメーター。

えなどを行う。

X線解析ではプログラムのシステム化や自動化によって解析にかかる手間や時間は大幅に削減できたけれども、結果の考察に必要な計算に移る段階で大きな障壁があった。上に述べた考察用支援機能の導入によってこのギャップは現在ではかなり解消されている。これらは今さら新しいアイデアではないが、考察段階でこずらされている研究者が多いと聞くので、この記事がプログラムの改良に役立てば幸いである。また、転送媒体としてMS-DOS下でのFORMAT済みディスク（5インチ）1枚と返信用切手および宛て先記入済みA4封筒を同封のうえ、下記宛に請求いた

ければ、ソースコード（FORTRAN）をお送りします。

連絡先：〒227横浜市緑区長津田町4259

東京工業大学生命理工学部生命理学科

TEL 045-922-1111（内線2399）

竹 中 章 郎

文 献

- 1) A. Takenaka, M. Ohki and Y. Sanada : Bull. Chem. Soc. Jpn. **53**, 2724 (1980).
- 2) 竹中章郎, 笹田義夫 : 日本結晶学会誌 **22**, 214 (1980).