SHELXL-93 のグラフィック・ユーザ・インターフェース

上野剛、山野昭人、東常行、Paul N. Swepston*
(理学電機 (株) X線研究所、Molecular Structure Corporation*)

構造精密化プログラム、SHELXL-93[1]をより使いやすくするために、グラフィック・ユーザ・インターフェース (GUI) を開発した。SHELXL-93 は、様々なコンストレインやリストレイン機能を備え、困難な分子構造の精密化に大きな力を発揮するが、それ故に入力コマンドのバラエティーも多く、複雑になっている。GUI の開発によってそれら多数のコマンドから成る入力ファイルの作成を自動的に行い、プログラムの使用手順を簡便なものにするのが開発の目的である。

GUI は構造解析ソフトウェア・パッケージ、teXsan[2]のオプション・ユーティリティーとして、シリコン・グラフィックス社のワークステーション上で、Xライブラリと Motif ツールキットを使って作成した。メイン・ウィンドウはグラフィックス領域とメニュー領域に分かれている。グラフィックス領域では分子モデルの回転、拡大、縮小、移動をマウス操作によって行うことが出来る。メニュー領域では、コンストレインやリストレインの種類の選択とパラメータ設定を行う。

GUI を使用したリストレイン設定の一例として、原子間の距離を一定に保つ束縛条件を設定する手順は次のようになる。まず、メニュー領域にある 'fix distance' と書かれたボタンをクリックし、グラフィックス領域で二つの原子をクリックする。再びメニューで原子間距離とリストレインの重みを入力する。GUI はそのようにして登録された束縛条件を SHELXL-93 のコマンドに翻訳し、適切な入力ファイルを自動的に作成する。

その他のリストレイン機能として、以下のものがメニューに用意されている。幾つかの原子対の原子間距離を全て同じ値にする機能、複数の原子の占有率を同一の値にする機能、同じサイトを占める異種原子に対する束縛条件、原子を平面上に束縛する機能他。

メニュー領域では、サイクル数や重み付けのパラメータ設定、各原子の精密化フラグの変更などの精密化の条件を入力することもできる。精密化は 'RUN' ボタンを押す事により実行され、計算が終了した後に R 値等の結果がウィンドウに表示される。

[1] Sheldrick, G. M. (1993) Program for the Refinement of Crystal Structures. University of Goettingen, Germany.

[2] Molecular Structure Corporation, Rigaku Corporation (1997). Single Crystal Structure Analysis Software. Version 1.8.