JICSTファクトデータベース JICST結晶構造データベース

早瀬修一*1, 岡野恵子*2

JICST Factual Database JICST Crystal Structure Database

HAYASE Shuichi, OKANO Keiko

〔著者抄録〕 平成2年1月よりJOIS-Fの新しいデータベースとしてJICST結晶構造データベースのサービスが開始された。本データベースは、結晶の三次元構造を表すデータ、ならびにそれに付随する様々な情報を提供するものである。本データベースの内容について、掲載されているデータの側面とシステムの側面から解説する。

〔著者付与キーワード〕 JICST, JOIS-F, ファクトデータベース, オンライン検索システム, 結晶構造

〔Author Abstract〕 Japan Information Center of Science and Technology(JICST) has started the on-line service of JICST Crystal Structure Database(JICST CR) in this January(1990). This database provides the information of atomic positions in a crystal and related informations of the crystal. The database system and the crystal data in JICST CR are outlined in this manuscript.

〔Keywords by Author〕 JICST, JOIS-F, Factual database, on-line information retrieval system, Crystal structure

-
- * 1 JICST 資料部ファクトデータベース部門 (〒100 千代田区永田町2-5-2) Tel. 03(581)6411
 - * 2 JICST 電子計算機部システム課 (同上)
 - * 1 JICST, Information Resources Department Factual Database Division
(5-2, Nagatacho 2-chome, Chiyoda-ku, 100)
 - * 2 JICST, Electronic Data Processing Div. Systems Development Sec.

1. はじめに

平成2年1月よりオンラインサービスを開始したJICST結晶構造データベース(以下JICST CRと略記する)は、無機物・有機物を問わず、あらゆる種類の物質について、結晶の三次元構造を表すデータ、ならびにそれに付随する様々な情報を提供するものである。JICST CRのシステム設計およびデータ作成は、(社)日本結晶学会、(特)理化学研究所および科技厅・無機材質研究所に所属する研究者の方々の協力を得てなされている。

我々を取り巻く日常製品には、多くの結晶性材料が使用されている。各種の全自動家電製品に組み込まれているマイクロプロセッサに使われているシリコンの単結晶、時計には欠かせない水晶、ガスコンロの点火装置に使用される圧電結晶、ドライヤーの温度調節に使用されているセラミックス等、まさに生活に密着している。

また、医薬品の成分の多くは分子性結晶である。医薬品の効能はその成分分子の立体特異性に依存する場合が多く、その分子設計において、成分分子を構成する原子の絶対配置の情報は重要な役割を果たす。

これらの材料の特性は、単結晶としての物性あるいは生理活性そのものを利用しているものが多い。したがってこれらの材料の改良、さらには新しい材料、新しい物性の開発には、結晶構造に関する系統的な情報、しかも物性的な情報とリンクさせることのできる情報が必要である。結晶構造データベースは、このような要求に答える道具になることを目指して作られたものである。

本報では、JICST CRのシステムとそれに登録されているデータについて解説する。

2. JICST 結晶構造データベースの取り扱いデータ

2.1 結晶構造データ

結晶構造に関するデータは、原論文中の記述を見ただけでは、その意味を読み取ることが困難であることが多い。それは本来三次元の図形情報で

ある結晶構造データが、ある種の約束に従って最小限の数値情報に圧縮されているからである。この節では、この圧縮された結晶構造データの読み方について考える。

2.1.1 結晶構造データによる原子配列の再構成

普通、結晶と言えば、水晶やダイヤモンドのような宝石を思い浮かべる人が多いのではなかろうか。これらに特徴的なのは、美しい輝きと幾何学的な形であろう。この「幾何学的な形」という言葉が暗示し、今日では実験によって証明されている結晶の特徴が、「規則的な原子の配列を持つ」ということである。

具体的には、図1の(B)に示した単位となる構造(図形)を、隙間なく敷き詰めた(C)に示したようなイメージを持って頂きたい。図1の(C)に示した図は(2次元投影にして簡略化はしているものの)、現実の結晶中の原子配列を模式的に表現している。この図1の(C)のような構造図を描くためには、以下の3種類のデータが必要である。

データ① 非対称単位中の原子座標(数値データ)

データ② 格子パラメータ(数値データ)

データ③ 対称操作(文字データ。機械処理により数値データ化される)

以上3種類のデータから結晶中の原子配列を再現する手順を大まかに追っていく。

まず、データ①と②を使って、結晶中の原子配列の最も基本的な構造の単位である非対称単位¹⁾の中に原子を置く。すると図1の(A)のような図ができる。次にデータ②を使って、図1の(A)から図1の(B)に示した単位格子中の原子を発生させる。これに並進操作を施せば図1の(C)ができあがる。

JICST CRにおいても、基本的にはこのような手順で、データ①②③から結晶中の原子位置を発生させている。この2.1.1に書いた内容については、参考文献の3)および4)に詳しい解説がある。

2.1.2 回答出力中のデータ

結晶構造に関するデータのなかで、システムの

に発生させないものについて抜粋して個別にコメントする。

(1) 格子定数

(2) 対称操作

① 空間群

② 対称心および対称軸

(3) 原子リスト

① 元素記号

結晶中にある原子の元素記号

② ワイコフ記号

原子が占める位置に、結晶の対称性のどのような要素が存在するかを示す記号。この記号を使って International Tables for Crystallography²⁾などの参考文献を見ると、その原子位置が

取り得る座標のパターンを知ることができる。

ここで言う座標のパターンとは、 (x, y, z) , $(0, 0, 0.5)$, $(x, -x, 0)$ 等の座標の形式を意味する。

③ 原子座標

通常表現されるのと同様に、JICST CRでも分率座標で表現してある。分率座標とは単位格子の一边の長さを1としたときの座標である。

④ 占有率

一つの座標で指定された原子位置をある特定の原子が占有する確率。時間平均の値と空間平均の値があるが、平均構造のみを対象としている JICST CR では、その差は現れない。

(4) 温度因子

等方性温度因子と異方性温度因子が表示され

ハッチを付けた円は原子を表す。ここに取り上げた例は、対称性として2回軸を含む単斜晶系である。図中の●は2回軸の位置を表す；A) 非対称単位：原子座標 (x, y, z) と格子パラメータ (x, y, z, a, b, c) を使って非対称単位中の原子位置を決定する。図中の例では、 c 面投影であるため z と c は見えない。また $\alpha = \gamma = 90^\circ$ となっている。B) 単位格子：その結晶の空間群に含まれている対称操作を使って、単位格子中の全ての原子位置を決める。C) 結晶：単位格子に並進操作を作用させて結晶中の任意の位置の原子を発生させる。

図 1 結晶中の原子位置の発生

る。どちらか一方しか表示されないエントリーや、両方とも表示されるエントリーもある。

2.2 実験および解析法に関するデータ

2.2.1 結晶構造を知るための実験とデータの解析

具体的な項目の説明に入る前に、結晶構造解析がどのように行われているのかを簡単に述べる。結晶の構造を決めるためには、結晶中の原子間隔程度の波長を持つ波動である X 線、中性子線、または電子線を結晶に当て、結晶によって散乱される波の強度を、通常は検出装置の位置と結晶の向

きを変化させながら測定する（ただし測定法によっては、検出器を固定して測定を行う手法もある）。

検出装置の位置と結晶の向きは、三つの整数の組 $(1, m, n)$ で指定される。測定が終わった時点で各 $(1, m, n)$ に対する強度 $I(1, m, n)$ が得られる。このような一連の手順を行うために現在使用されている実験装置が回折計である。図 2 にその模式図を示す。JICST CR の実験・解析法に関するフィールドに書かれた内容は、試料・結晶作成法とデータ解析法を除いて、この散乱強度測定系の仕様を記述している。

図中の結晶は、カウンターが行う 2θ 回転の中心に置く。またこの結晶の実際の大きさは入射ビームの直径よりも小さい。

図 2 回折計の模式図

2. 2. 2 回答出力中のデータ

実験・解析法のフィールドには、以下のようなデータ項目が表示される。

(1)実験条件

①強度測定に使用する結晶の形態

単結晶 (Single Crystal)か多結晶 (Powder)か

②散乱強度の測定法

次の5形態中から選ぶ。

- 1…X線回折 (角度分散)
- 2…中性子回折 (角度分散)
- 3…X線回折 (エネルギー分散)
- 4…中性子回折 (TOF)
- 5…電子線回折 (顕微鏡法を含む)

ここで各回折法の名称は、それに使用する波が何の波であるかを指定したものである。1と2には角度分散という指定がついている。これは、大ざっぱに言えば、検出器の位置を変えながら強度測定をするやり方である。3と4 (TOFは飛行時間法の略称。エネルギー分散の一種である) については、検出器の位置を固定して測定をするやり方である。

③散乱波の検出法

計数管を使用する方法か、フィルムを使う方法かを表示する。

④X線種類 (RADIATION)

ここには測定に使用されたX線 (他の場合は空白となる) の種類が表示される。具体的には、

1…MoK α	4…FeK α
2…AgK α	9…その他
3…CuK α	

1から4はよく使用される特性X線である。9は1から4以外の特性X線かシンクロトロン光をさす。

⑤測定波長 (W)

測定に使用されたX線・中性子線、または電子線の波長がオングストローム単位で表示される。

⑥測定温度

強度測定をした温度が表示される。

⑦圧力値

強度測定をした圧力が表示される。

⑧走査角度 ($2\theta_{\min}$ と $2\theta_{\max}$)

強度測定を行った 2θ (図2参照) の範囲。

⑨反射の数

強度測定を行ったブラッグ反射^{3) 4)}の数または構造解析の計算に使用した反射の数。データ解析時に精密化を行ってれば、精密化に使用した反射の数。

⑩吸収補正の有無

得られた強度データに吸収補正⁴⁾がなされているか否か。

⑪消衰補正の有無

得られた強度データに消衰補正⁴⁾がなされているか否か。

⑫吸収計数の値

実験に使用した結晶の吸収計数を cm^{-1} 単位で表示。

⑬測定装置

強度測定に使用した測定装置のシステムを作った会社の名前。コメント欄には装置の名称もしくは装置の商品名が表示される。

⑭モノクロメータ

特定の範囲の波長を持つX線、中性子線を取り出す道具。回折計の場合には、グラファイト等の単結晶が使用される。

⑮解析法

強度データから原子の位置を決定する計算法。詳細については、参考文献3)および4)を参照されたい。

(2)試料

①試料出所、入手先、合成法

構造解析に使用した単結晶の原料となる物質の入手法を表示してある。

②結晶作成法

構造解析に使用する単結晶の作成法を表示してある。

(3)R因子 (信頼度因子)

構造解析計算によって決められた原子の位置から計算される、X線 (中性子線) 散乱強度と実測値とのずれの程度を表す数値。値が小さいほど決定された原子位置の信頼度は高い。現在の回折計

で集めた強度データを正しく解釈すれば、ほとんどの場合 R 因子は 5 % 以下 (3 % 程度) になる。

ただし最近のデータでも特殊条件下 (例えば、サンプルをダイヤモンドアンビル中で加圧したり、液体ヘリウムで 10 K 以下に冷却したりして作り出した条件を意味する) で行われた構造解析では、R 因子を下げるのが通常の実験よりも困難となることが多い。

2.3 構造および物性的特徴に関するデータ

ここに示されたデータ項目は、結晶構造のデータと他の様々なデータ、特に固体物性データからの検索をするために用意されたものである。

(1) 物質タイプ

JICST CR で用意した物質分類のコードデータ。

(2) 構造タイプ

JICST CR で用意した構造分類用のコードデータ。

(3) 物質の特性

結晶の持つ物性の中から 10 項目を選び出し、分類しているコードデータ。

(4) 物性データの記載

結晶データが記載されていた文献に同時に記載されていた物性データを 20 項目に分類したコード。

2.4 物質情報

(1) 日化辞番号

当該エントリーで扱われている物質の日化辞番号。JOIS-F 掲載の他のデータベースとの渡り検索のキーとなる。

(2) CAS レジストリー番号

(3) 化学式

回答ヘッダー MF のフィールドには Hill 方式で、化学式に関するコメント欄には通常使用される形式の化学式が表示される。

2.5 書誌事項

(1) JICST 記事番号

結晶構造データを採択した JICST 科学技術文献ファイル中のエントリーの記事番号。その結晶構造データが掲載されていた原論文を調べたい場合には、JOIS を使って抄録や原論文のコピーを取り寄せることができる。

(2) ISSN 番号, 資料番号, 資料名, 巻, 号, 頁

これらについては、JOIS-III のマニュアルを参照されたい。

(3) 言語コード

構造データを採択した文献が記述されている言語。

(4) 著者, 著者所属機関

(5) タイトル

3. JICST 結晶構造データベースシステム

3.1 システム構成

本システムは、他の JOIS-F データベースシステム同様、HITAC-660 D 下で稼働する。オンラインファイルは ADABAS により管理されている。

システム構成を図 3 に示す。データベース作成・更新部では、数個のサブファイルを使って入力データをチェックし、データの加工を行い、データベースを作成する。オンライン部では、端末を介してユーザと会話をを行い、データベース検索や回答出力を行う。以下に各々の概要を記す。

3.1.1 データベース作成・更新

ここは大きく分けて二つの段階からなる。第一段階では原データのフォーマットチェック、値の範囲チェック等の予備チェックを行う。第二段階では矛盾のない構造図を作成するために必要な項目のチェックを行った後、単位格子内の結合を判定して構造図を作成し、さらに各種の値を算出し、マスターファイルを作成する。チェックをはじかれたレコードは、校正処理の後再入力する。ここで言う原データとは、JICST CR の入力用に採択された論文から抽出され、機械可読形態となったものを指す。

第二段階において計算機内で行われている処理を以下に記す。記載は概念的なものであり、実際

図 3 JICST結晶構造データベースシステム構成

のフローとは異なる。

(1)原データ中の非対称単位原子座標、占有率、空間群記号、対称心軸、格子パラメータを入力して、以下の処理を行う。

①単位格子内の全原子の発生

2・1・1で説明のように、原データの非対称単位原子座標に対して空間群記号から得られる対称操作を行って、単位格子内全原子を発生する。

②多重度の算出

対称操作によって得られた単位格子内に、等価な座標が何個存在するかを算出する。

③Zの計算および論文記載データとの整合性チェック

対称操作によって得られた単位格子内に何分子存在するかを算出する。

④単位格子体積の算出

⑤密度の計算および論文記載データとの整合性チェック

(2)上で得られた単位格子内全原子を基に全原子間の距離を算出し、結合の判定を行う。判定する結合は共有結合、配位結合、水素結合の3種である。判定処理は全元素について元素—結合探索半径(共有結合半径を基にしたもの)—ファンデルワール

ルス半径—金属性種別*の対応テーブルを参照して行われる。

(*金属性を“0”，“1”，“2”，“3”の4種に大別して全元素にセットする)

結合判定の前処理として、注目する原子が金属性を有する環境にあるかを、以下の方法で判定し、処理を行う。

①注目する原子の金属性種別が“2”で、3以内に“0”，“1”に分類された原子が二つ以上ある。

②注目する原子の金属性種別が“2”で、3以内に炭素原子および“0”，“1”に分類された原子が六つ以上ある。

①，②のいずれかを満たす場合、その注目する原子の金属性種別を“3”に繰り上げ、以降の処理にはその値を考慮し、金属性原子として扱う。

こうした前処理の後、表1に示す方法で結合を判定し、結晶構造図が完成する。結合の判定過程で2原子間が不自然な距離の隔たりである場合、そのレコードはエラーとしてはじき、校正処理に回す。オンライン上では共有結合は実線、配位結合および水素結合は破線で表示する。

(3)上記(2)で作成した単位格子内の結合情報をもとに、以下の値を算出する。

表 1 結合判定基準

結合種	基準概要
共有結合	<p>1) 2 原子間の距離 (D_{ij}) が以下の範囲内である。 結合探索半径* - 許容値(1)* < D_{ij} ≤ 結合探索半径* + 許容値(2)* の和 の和</p> <p>2) 2 原子とも金属性元素でない。</p>
水素結合	<p>1) 2 原子間の距離 (D_{ij}) が以下の範囲内である。 結合探索半径* + 許容値(3)* < D_{ij} ≤ ファンデルワールス半径* - 許容値(4)* の和 の和</p> <p>2) 2 原子間に別の 1 原子あるいは 2 原子を経由する共有結合がない。</p> <p>3) 2 原子の組合せが別に定める元素の組合せ*と一致する。</p> <p>4) 化学式に水素がある。</p>
配位結合	<p>1) 2 原子間の距離 (D_{ij}) が以下の範囲内である。 結合探索半径* + 許容値(5)* < D_{ij} < 配位結合 MAX 値* の和</p> <p>2) 2 原子の内的一方が金属性元素であり、他方が陰性元素である。</p> <p>3) 中心となる金属性元素の周囲に存在する陰性原子との距離は許容値(6)*以内のばらつきである。</p>

〔配位数〕；金属性原子と配位結合をなすとみなされた配位子の数を、その金属性原子の配位数とする。

[酸化数]，金属性原子についてのみ算出する。配位結合をなすとみなされた中心の金属性原子 i について，各配位原子 j との距離 (D_{ij}) と結合次数パラメータ ρ^1 と ρ^2 (元素の組み合わせで別に定める) により，下式に当てはめて算出した値を酸化数とする。算出式の別は元素の組み合わせに依存する⁵⁾。

金属性原子 i の酸化数 (i)

$$i) \text{酸化数}(i) = \sum_j [(D_{ij} / \rho^1) \rho^2]$$

$$\text{ii) 酸化数(i)} = \sum_j \exp [(\rho^1 - D_{ij}) / \rho^2]$$

[結合水素数]：元素が B, C, N, O についてのみ算出する。共有結合をなすとみなされた相手原子との間の距離 (D_{ij}) と結合次数パラメータ A, B, C により結合欠損 (DV) を算出し、別に算出した補充すべき水素原子数総和 (MHA) までを結合欠損の降順に割り当て、結合水素数とする。

$$D_{ij} = AX^2 + BX + C \quad X: \text{結合次数}$$

$$DV = (\text{標準原子価} - X \text{ の総和}) \times \text{多重度}$$

$$\text{MHA} = \left(\frac{\text{化学式中の水素数} \times Z}{\text{水素数} \times Z} \right) - \left(\frac{\text{非対称単位の水素の多重度} \times \text{占有率}}{\text{の総和}} \right)$$

(4)前述の(2)で得られた共有結合情報をもとに分子構造を組み立てる。分子構造図は現在、共有結合で結ばれた一連の原子群とその結合を1分子としている。さらに原データ中の非対称単位原子の中で組み立てた分子の原子群に含まれないものがあれば、別分子として新たに結合を追う(対称操作によって発生した等価な原子も含む)。したがって一般の分子の概念とは若干異なる点が生じる。分子の組み立ての際、結合を追うのは格子周囲に各方向一並進までにしている。また周期構造が発見された際は分子の拡張処理を停止する。

こうしてマスターファイルが作成され、日化辞番号の取得等の処理を経て、オンラインファイルが作成される。

3. 1. 2 オンラインシステム

オンラインシステム機能は基本的に JICST 金属材料強度データベースと同じである。回答項目概要を表 2 に、検索項目を表 3 に、オンライン機能概要を図 4 に示す。

構造図は分子構造図、結晶構造図をユーザが選

択して表示することができる。表示した構造図はサブコマンドによって原子間距離の算出、角度の算出、回転、拡大・縮小、移動等ができる。

日化辞番号を付与しているレコードは、他の JOIS-F 内のデータベースと渡り検索が可能である。会話例を図 5 に示す。

表 2 JICST結晶構造データベース回答項目概要

	項 目	ヘッダー	¥ P					¥ GRA
			B	C	D	E	A	
1	著 作 権	—	*	*	*	*	*	*
2	A N	AN	*	*	*	*	*	*
3	日 化 辞 番 号	SN	*	*			*	
4	CAS レジストリ番号	RN	*	*			*	
5	化 学 式	MF	*	*			*	
6	化 学 式 量	MW	*	*			*	
7	物 質 名	NM		*	*	*	*	*
8	タ イ プ	TY		*			*	
9	JICST 記 事 番 号	CN	*	*			*	
10	英 文 タ イ ト ル	TI	*	*			*	
11	著 者	AU	*	*			*	
12	資 料 番 号 ・ 名 等	JN	*	*			*	
13	年 , 号 , page , 言 語	VN	*	*			*	
14	格 子 定 数	CL		*	*		*	
15	対 称 操 作	SY		*	*		*	
16	同 価 点 座 標	EP					*	
17	R	RV		*			*	
18	実 験 条 件	EX				*	*	
19	粉 末 デ ー タ	PW				*	*	
20	試 料 デ ー タ	SA				*	*	
21	デ ー タ 評 価 フ ラ グ	CO		*			*	
22	原 子 リ ス ト	—*			*		*	
23	等 方 性 温 度 因 子	ITF*				*	*	
24	異 方 性 温 度 因 子	ATF*				*	*	
1) ヘッダーは編集グループIDと一致する								
2) *原子リスト, 等方性温度因子, 異方性温度因子のグループIDは HA, HB HCである。								

表 3 JICST結晶構造データベース検索項目

検索タグ	タグコード	検索タグ	タグコード	検索タグ	タグコード
AN番号	AN(C)	化学式	MF(N)	日化辞番号	SN(C)
元素記号と酸化数	EO(NC)	元素記号と個数	EL(NC)	CASレジストリー番号	RN(C)
元素種別数	NE(N)	元素記号と配位数	EC(NC)	元素族, グループ	EG(C)
化学式量	MW(N)	物質名	NM(C)	物質名フラグメント	FR(C)
物質タイプ	TA(C)	構造タイプ	TB(C)	構造の特徴	TC(C)
物質の特性	TD(C)	物性データの記載	TE(C)	記事番号	CN(C)
英文タイトル	TI(C)	著者	AU(C)	著者所属機関	AA(C)
資料番号	JN(C)	資料名	JT(C)	論文発行年	PD(N)
格子定数 長さ	CL(N)	格子定数 角度	CC(N)	空間群記号, 晶系	SY(C)
空間群番号	NS(N)	Rの値	RV(N)	強度測定 単・粉	IS(C)
強度測定回折法	IM(C)	強度測定法	IC(C)	強度測定温度	IT(N)
強度測定圧力	IP(N)	解析法	AM(C)	結晶作成法	CG(C)
共有結合距離	DB(NC)	水素結合	HB(C)	キーワード	KW(C)
作成年月	DT(N)				

()中は C…文字型検索タグ NC…文字+数値型検索タグ N…数値型検索タグ

図 4 JICST結晶構造データベースオンライン機能概要

JICST NETWORK
PLEASE ENTER (JOIS,STN,JOISF):JOISF
CONNECTED..

ENTER TERMINAL ID

ENTER TERMINAL TYPE

TYPE G07,K

_____ 端末種別 (グラフィック)、メッセージ種 (漢字) の指定

S: ユーザ ID をどうぞ

U: \$\$\$\$\$\$,サーチ

_____ 利用者番号、サーチ名の指定

S: パスワードをどうぞ

U: #####

_____ パスワードの指定

S: 総合ファクトシステムのサービスを開始します 1990.04.05 15:41:21

U: YCSTR CR

_____ 会話の開始

S: 結晶構造データベースシステム 90.04.05 15:41:30

会話を開始します。(23:44:00 まで)

このデータベースは日本結晶学会会員の協力の下に
作成されたものです

JICST COPYRIGHT

[1] U: TB:4

_____ タグコード T B による検索

S: 20件

[2] U: YGRA C/1

_____ グラフィック画面に変わる

S: サブコマンドをどうぞ (ROT,DIST,ANG,TRAN,SC,D,MOV,END)

U: ROT 0,30,30

_____ 構造図の回転

S: サブコマンドをどうぞ (ROT,DIST,ANG,TRAN,SC,D,MOV,END)

U: D 1

_____ 表示形式の変更

#000001 AN:CR860209 CRYSTAL STRUCTURE
NM:SODIUM NICKEL TRIFLOURIDE

JICST COPYRIGHT

1 ANGSTROM SCALE _____

S: サブコマンドをどうぞ (ROT,DIST,ANG,TRAN,SC,D,MOV,END)

U: END

~~~~~ キャラクタ画面に変わる ~~~~~

S: 次をどうぞ

```

[ 2] U: AA:HOKKAIDO          著者所属機関名による検索
S:      . 15件

[ 3] U: 1*2                  論理演算 (SSNO*SSNO)
S:      5件

[ 4] U: ¥HELP TA            物質タイプの検索キーを参照
TA : 物質タイプ : 文字型 検索タグ: 該当項目を最大5個コードで検索する
      回答ヘッダ : TY= (該当項目の英語表記)

コード  **** 項目  ****      コード  **** 項目  ****
  1      :      :      8 3  複素環式化合物 (ビリジン)
  :      :      :      :
  5      :      :      8 6  アミノ酸, ペプチド
      分子化合物 (水素結合化合物,      8 7  ヌクレオシド, ヌクレオチド
      電荷移動錯体など)      :
  :      :      :      :
  8 2    :      :      9 3  その他の天然物質
      炭素環式化合物 (ベンゼン,      (合成物を除く)
      ナフタレンやその誘導体など)      9 9  その他

会話 例 => U: TA: 9 2
S:      5 6 件

S: 出力終了しました
[ 4] U: TA=5                直前集合を物質タイプ=分子化合物で絞る: 制限式検索
S:      1件

[ 5] U: ¥P A                回答出力
#000001                    JICST COPYRIGHT
AN = CR861904, 89.10
SN = J47.334K(C)
MF = C15H26Br2O2
MW = 398.18
NM = (10R)-10-BROMO-10-DEOXYHEXAHYDROLAUREFUCIN
TY = SUBSTANCE; Molecular Compound, Organic Compound
CN = J84040614
TI = X-ray structure of (10R)-10-bromo-10-deoxyhexahydrolaurefucin.
AU = FURUSAKI A (HOKKAIDO UNIV.)
      MATSUMOTO T (HOKKAIDO UNIV.)
      KUROSAWA E (HOKKAIDO UNIV.) et al.
JN = G0450A (0009-2673), BULL CHEM SOC JPN
VN = Vol. 56, No. 8, Page. 2523, - 2524, 1983, (EN)
CL = a= 10.924(4), b= 17.642(7), c= 9.143(3),
      al= 90, be= 90, ga= 90,
      V= 1762.05, Z= 4, Ds= 1.50149
SY = P 21 21 21, NS= 19, ORT
EP = ( X      Y      Z); (1/2+X      1/2-Y      -Z);
      (-X      1/2+Y      1/2-Z); (1/2-X      -Y      1/2+Z)
RV = RW: 0.069
EX = Single Crystal, Xray Diffraction (Energy Dispersion), Counter Data, RADI
      ATION; CuKalpha, W= 1.54178Å,
      2TTA= (MAX= 120), RF= 1354,
      EQUIP: RIGAKU,
      MONOCHRO: Monochromator,
      STR DETERMINAT: Direct Method, (MONTE CARLO DIRECT METHOD),
      (THETA-2THETA SCAN METHOD)
SA = SD= 0.3X0.4X0.4 (MM3)
CO = (No check was made on cell constants, due to lack of density data)
AT NUB  OX H MLT W  ---X-----Y-----Z-----OCCP----MAS CO
Br 1      4      0.5196(1)  0.15500(7)  0.7641(2)  1.0
Br 2      4      0.9511(1)  0.05497(6)  0.5297(2)  1.0
O 3      0 4      0.4704(5)  0.2310(3)  0.4124(6)  1.0
O 4      0 4      0.6765(5)  0.1477(3)  0.2838(6)  1.0
C 5      3 4      0.1577(11)  0.0035(7)  -0.011(2)  1.0
:      :      :      :      :      :
C 18     2 4      0.8505(8)  0.0763(4)  0.198(1)  1.0
C 19     3 4      0.8462(9)  0.1178(6)  0.040(1)  1.0
AT NUB  ITF  --- (U,B) ---
Br 1 Ueq  8.41
Br 2 Ueq  7.34
O 3 Ueq  4.83
:      :      :
C 18 Ueq  5.52
C 19 Ueq  7.95
S: 出力終了しました

[ 5] U: ¥CEND              会話の終了
      下記の料金に消費税が加算されます
*** データベース 料 金 接続時間 マシン回答 マシン回答 有料コメント ***
*** CR ¥900 5 (G) 1 ***
*** 合 計 ¥930 5 ***

```

図 5 結晶構造データベースの会話例

4. おわりに

以上その概要を解説した JICST CR は、現在約 1,500 件のデータが収録されている。しかし、この数は、実際に処理した件数の約 50 % であり、残りはエラーとしてはじかれ、校正処理に回っており 3. 1. 1 で述べたデータベース作成・更新がいかに困難なものであるかを物語っている。このよう

な状況下ではあるが、今後も当データベースの充実を目指して努力を続けていく所存である。

最後に当データベースの構築に際しご指導いただいた大崎健次先生、丸茂文幸委員長ほか結晶構造データベース委員会のメンバー、また実際にデータ作成にご協力を頂いたデータ記入者の方々に心から感謝の意を表する。

参 照 文 献

- 1) 岡村富士夫. 無機結晶構造データベースとその応用. 情報管理. 28.1.50-58. (1985)
- 2) Edited by Hahn T. International Tables for Crystallography Vol. A. 2nd edition. D. Reidel Publishing Company. 1987
- 3) 仁田勇編. X 線結晶学 (上, 下). 第 4 版. 丸善. 1983
- 4) 桜井敏雄. X 線結晶解析の手引き. 第 2 版. 裳華房. 1986
- 5) Altermatt D and Brown ID. The automatic Searching for chemical Bonds in Inorganic Crystal Structure. Acta Crystallogr. Sect.. 41. 4. 240-244.