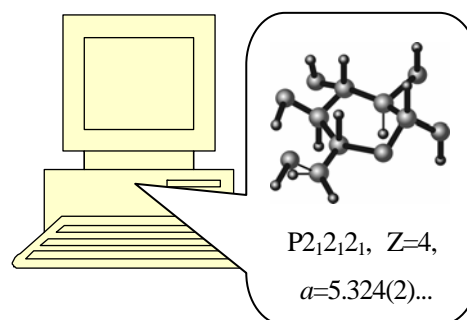


ディビジョン番号	16
ディビジョン名	有機結晶

大項目	1. 構造
中項目	1-2. 構造情報
小項目	1-2-1. 結晶構造情報

概要（200字以内）

結晶構造解析からは結晶の対称性や単位胞内の原子座標、原子の熱振動の大きさなどの情報が得られる。原子座標から構築される分子構造の情報、および結晶内の分子配置情報はそれぞれ分子内、分子間相互作用や固体の物性を理解する上で重要である。そこで、これらの結晶構造情報は巨大なデータベースに集積され、分子・結晶構造の検索や比較が容易になっている。結晶構造データベースの使いこなしは新しい化学の展開に重要である。



結晶構造データベース

現状と最前線

単結晶によるX線・中性子線結晶構造解析から、さまざまな結晶構造情報が得られる。特に結晶の対称性、単位胞の大きさ（格子定数）、含まれるすべての原子の座標は、結晶構造を構築するための最も重要な情報である。分子構造の作図、分子内の結合長、結合角、ねじれ角の計算には原子座標を用い、さらに結晶の対称性を用いれば結晶内の分子配置および分子間の距離・角度を知ることが出来る。このように結晶構造情報から計算される分子内、分子間の距離・角度は分子構造や分子間相互作用を理解する基本的な情報であり、例えば物質の性質を調べるために欠かせない重要な情報である。

このため、発表された結晶構造情報をデータベースに蓄積し、容易に利用することが出来るようにする活動が1960年代から始まっている。有機化合物、金属錯体の結晶構造データベースである、Cambridge Structural Database (CSD) は現在約40万件以上の結晶構造データを収録しているが、近年のX線結晶解析技術の発展により年間約3万件ずつ加速度的にデータ数が増加している。CSD以外にも蛋白質 (Protein Data Bank; 約4万件) や無機物 (Inorganic Crystal Structure Database; 約9万件)、金属結晶構造 (CRYSTMET; 約10万件) の各データベースがよく知られている。データベースには、発表された論文などから編集グループによるチェックを経て、信頼性のある構造情報が収録されるが、データの質と同様に検索技術やソフトウェアの開発もデータベースを生かすために重要である。

CSD を例にとると、データベースには書誌情報と化合物情報（一次元情報）、分子の平面構造（二次元情報）、分子の立体構造（三次元構造）が収録されており、それぞれの情報を使って結晶構造の検索が可能である。例えば、著者名や化合物名、分子の結合情報（部分構造）、分子内・分子間の距離や角度を使った検索、およびこれらの組み合わせが例としてあげられる。検索ソフトウェアだけでなく、分子構造の描画や結果を統計処理するソフトウェアも提供され、結果の解釈の助けとなっている。検索では特定の結晶構造を探すだけでなく、類似構造をまとめて調べることで一般的な構造の傾向を調べることも出来る。例えば特定の部分構造に対する周囲の原子の立体的な配置をCSDで検索し、まとめたデータベースが提供されており、結晶内の分子間相互作用の研究に役立っている。

このようなデータベースの利用は物質科学のすべての分野で欠かせないものであるが、利用件数は必ずしも多くない。積極的なデータベースの利用は今後の課題であり、また、利用者として、さらに積極的に構造データを寄託する立場での協力も必要である。

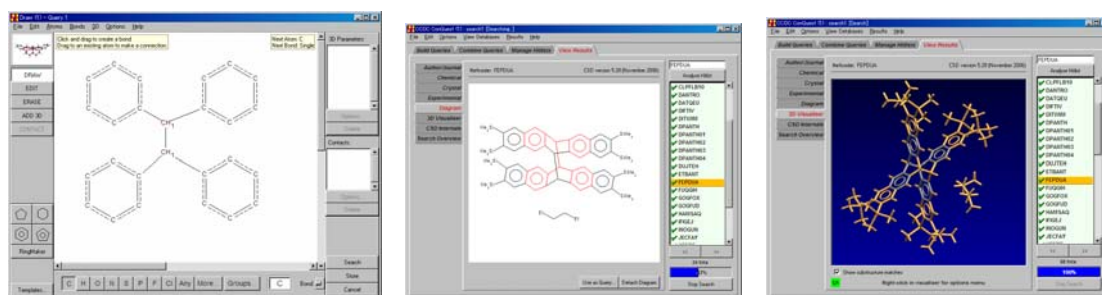


図 CSD の検索画面と検索結果の2D, 3D表示画面

将来予測と方向性

- ・ 加速度的に増える結晶構造データの信頼性の確保が必要となる
- ・ より幅広い種類の構造データを収録することが必要となる
- ・ 構造データと物性データを結びつけるデータベースまたはデータ構造が重要となる
- ・ データベース内の既知の構造情報から、新規な構造や物性の予測が可能になるだろう

キーワード

構造情報・データベース・X線回折・結晶構造解析・分子構造

(執筆: 植草 秀裕)