

## IUCrXVIII に参加して

理学電機・X線研究所 東常行

7月の終わりに坂部先生から IUCr に行くなら「構造生物」に原稿を書くよう依頼された時、筆者の興味は構造生物学的でないからとお断りしたのですが、それでもかまわないとの御返事だったので承知しました。案に相違せず、蛋白結晶学や放射光とは無縁のセッションを聞き歩いていたので、この雑誌の編集方針に合わないかもしれません。

IUCrXVIII は、8月4日から10日間にわたってグラスゴーで開催され、アブストラクトの総数が2500余り、参加者は2000人を越した巨大な学会でした。朝夕2時間半のマイクロシンポジウムが平行に6本走り、昼間はポスターや展示会があり、この上、早朝8時半からと夕方5時半から各々1時間のキーノート・レクチャーがあるというのが1日のプログラムで、これらに全部つき合っていれば身が持たないと思われる強行スケジュールでした。そのかわり、気温が20°Cを越えることが無く、むしろ肌寒い日もあったというのは、避暑地にでも来ている気分ではありました。

素朴に感心したのはコンピュータの活用です。各自のメールを見るためインターネット・カフェに毎日長い列が出来ていたのは、前回のシアトルでも見慣れた風景ですが、大半のプレゼンテーションはPower Pointで行われ、綺麗なだけでなく、効果的にアニメーションを駆使した演出は、なかなか楽しいものでした。講演スライドや開発したソフトウェアをホームページに置いてあるので、自由に取って行って下さいと言う講演者もありました。ソフトウェアのデモ会場だけでなく、ポスター会場でもPCを使った説明がそここで行われていました。コンファレンス・バッグには、CDROM化したアブストラクトが入っていました。それに、昨年がIUCrが出来てから50周年に当たることを記念して、学会終了後にIUCrが発行する全ての雑誌(Acta Cryst., J. Appl. Cryst., J. Synchrotron Radiation)がWeb上で公開されることになりました(<http://journals.iucr.org/>)、少なくとも今年中は無料だそうです。

進歩しているなと感じたのはRietveld法を使う粉末構造解析です。マイクロシンポジウムでも、50 Years of Rietveld Refinement, Challenging Rietveld Refinement, Structure Solution from Powder Data-Inorganic Materials, Structure Solution from Powder Data-Molecular Compoundsをテーマとした4つのセッションが開かれ、キーノート・レクチャーでは、C. GiacovazzoによるStructure Solution from Powdersが印象的でした。放射光で実験した粉末パターンを元にして、指数付け・空間群を決め、パターンをデコンボリュートして反射データを取り出し、直接法(例えばSirPow等)かGlobal Optimizationを使ってモデル構造を組み上げ、Rietveld法で精密化するのがその道筋です。Global Optimizationというのは、GA (Genetic Algorithm)かSA (Simulated Annealing)を使って、

コスト関数の極値を探し出すという方法であり、コスト関数としては  $F_0, F_c$  だけでは巧く収束しないので、原子間ポテンシャルや原子配列のトポロジー等の拘束条件と組み合わせで使うようです。構造パラメータも、無機物では原子座標ですが、有機物では分子の重心・回転に加えて、自由度のある結合の回りの2面体角を使うのが普通のようなようです。もっとも、定法に従ってというわけにいかず、解くべき構造の特徴によって様々な関数を利用しているというのが現状です。空間群の決定が難しいので、全て  $P1$  を仮定して解き、得られた構造から空間群を割り当てるといった画期的な方法も試みられていました。重なりが分離出来そうもない粉末パターンから、次から次へと、ずいぶん複雑な構造が解けることが示されると、素直に感動してしまいました。もっとも、放射光や挿入光源、光学系等の発達により、単結晶として扱える結晶のサイズが段々小さくなってくると、苦労して粉末法で解析する意味が無くなるのでは？と質問する人もありました。変わった所では、卵白リゾチーム等、蛋白結晶での Rietveld 法の報告があり、単結晶構造から出発しても発散しないそうです。この場合は、Ramachandran plot の コリレーションをポテンシャル化して束縛条件に入れていました。

妙に気に入ってしまった講演が二つありました。一つは T. Wessels のもので、粉末パターンを反射に分けるときに選択配向を利用しようというのです。常識では、粉末法での選択配向は妨害因子なので、試料作成や光学系の工夫で出来るだけ取り除こうとするものですが、これに反して試料調整を工夫してより選択配向の高い試料を作り、極点図形を取って結晶方位の分布関数を求めておき、異なる方向の粉末パターンと分布関数とを組み合わせで実際に反射強度を分離していました。もう一つは K. Cowtan の講演で、蛋白結晶を凍らせるとしばしば格子定数が僅かに変化して同型性に問題が生じることがあるが、これを逆に利用して位相情報を得ようとする試みです。結晶の回折データは、分子の molecular transform を結晶の格子関数でサンプリングしているのだから、格子が変化することはそのサンプリングの場所が変わることなので、molecular transform の性質を巧く使えば位相が求まるかも知れないという問題提起です。同様の意味で、結晶多形や非結晶学的対称があればこれらも使えるはずですが、低分子結晶ではあるものの、非対称単位内に2分子を持つ3つの多形から、このアイデアを使って構造が解けることを示していました。いずれの講演も、常識では困難を生じる現象を逆に使って有用な情報を取り出す所が気に入りました。

坂部先生が気に入ったのは、振動写真を使って3反射の位相関係を実験的に測定するという Q. Shen の講演です。この手の実験は、普通4軸回折計を使って azimuth スキャン法（スキャン法）で測定します。最近の Acta Cryst. D に卵白リゾチームを使った論文があったように記憶しています。講演の主旨は、4軸回折計では時間がかかるので、振動写真で実験するというもので、精度的にもそれほど見劣りがしないそうです。カメラに  $\mu$  回転機構があれば撮影出来、幸いにも今開発中のカメラは  $2^\circ$  位  $\mu$  回転が可能なので、一度試してみると話しておられました。

筆者が講演をした吸収補正のセッションでは、マイナーな話題にも拘わらず 100 人くら

いの聴衆が居て安心しました。主に低分子結晶に関する補正ですが、補正法を比較した講演では、普通よく行われる スキャン法は逆空間内のサンプリングが限られているので余り良い方法ではないとのことでした。2件は経験的な方法に分類される、transmission surface を調和関数で近似する講演で、結晶のマウントに使う接着剤やガラス棒による吸収もうまく補正できるとの話でした。これは、冗長度の高い測定をしてやれば蛋白結晶でも使える方法です。残念に思ったのは、吸収効果を関数で近似する経験的方法の論文が1979年に片山、坂部、坂部によって初めて提出され、最初に調和関数を使ったのも片山さんであるにも拘わらず、講演者はそれらを引用しなかったという点です。筆者の話は、CCDカメラで撮影した結晶の写真から結晶の外形を3次的に求め、それを元に吸収効果を積分で評価するものでした。

最後に、Data Accuracy and Detectors のセッションでの、Z. Dautar の講演が印象的でした。卵白リゾチームのような結晶を、放射光を使って波長 1.5 Å で丁寧に測定し（分解能は 2 - 3 Å 位）、異常分散データを SHELX や MULTAN のような標準の直接法で扱ってやると、S の位置が定まり、それを重原子として構造が解けてしまうというものでした。

粉末法以外に目を見張る進歩や問題提起が感じられなかったのは筆者の浅学非才の故ですが、それにしても「結晶学」という学問が、方法論としての越えるべきハードルを次々に跳び越してきて、この先の大きなハードルがもはや見えないような気がします。「結晶学」が成熟して「学問」から「技術」に変貌しつつあると言い換えてもいいのかも知れませんが、如何にして構造に到達するかがもはや問題ではなく、どのような物質の構造の何を説明するために解析するのが問われる時代になったのだと感じました。