

目 次

1. X線構造解析の基礎知識	1
1.1 分子構造の決定	1
1.2 X線	2
1.2.1 X線の発生	2
1.2.2 X線と物質の相互作用	3
1.3 X線の散乱と回折	4
1.4 結晶	8
1.4.1 結晶格子と単位格子	8
1.4.2 空間群	11
1.5 単結晶 X線回折	16
1.5.1 結晶による X線の散乱	16
1.5.2 逆格子	18
1.5.3 結晶構造因子	21
1.5.4 熱振動の表し方	22
1.5.5 測定操作との対応	24
1.5.6 電子密度	25
2. 有機化合物や金属錯体の構造解析	28
2.1 構造解析の手順	28
2.2 単結晶の作成	29
2.3 回折データの収集	31
2.3.1 四軸型 X線回折計	31
2.3.2 結晶のマウントとセンタリング	33
2.3.3 ピークサーチと結晶の良否の判定	35
2.3.4 単純格子の組み立て	37
2.3.5 晶系と空間格子の決定	38

2.3.6	測定条件の決定	41
2.3.7	自動測定 (回折強度のデータの収集)	45
2.3.8	格子定数の精密決定	48
2.3.9	測定データの補正	49
2.3.10	測定例 (理学電機 AFC7R による)	51
2.4	データ解析	69
2.4.1	構造解析プログラム	69
2.4.2	直接法	69
2.4.3	重原子法とベクトルサーチ法	73
2.4.4	構造の精密化	75
2.4.5	解析結果のまとめ	79
2.4.6	作図	80
2.4.7	teXsan による解析例	80
2.5	論文投稿のために必要なことから	88
2.6	結晶構造データベースの利用	89
3.	タンパク質の X 線構造解析	91
3.1	生物科学における立体構造の重要性	91
3.2	タンパク質結晶構造解析の道すじ	92
3.3	タンパク質結晶の作成	94
3.3.1	タンパク質試料の調製	94
3.3.2	タンパク質の結晶化	95
3.3.3	重原子誘導体結晶の調製	101
3.4	X 線回折強度の測定	101
3.4.1	回折強度測定の準備	102
3.4.2	実験室系 X 線での測定	104
3.4.3	シンクロトロン放射光を使う測定	107
3.4.4	回折強度データの処理	111
3.5	解析の方法	113
3.5.1	重原子同形置換法	115
3.5.2	多波長異常分散法	117

3.5.3	分子置換法	120
3.6	分子モデルの作成と修正	122
3.6.1	グラフィックスの利用	122
3.6.2	電子密度の改良	124
3.7	タンパク質分子の構造精密化	131
3.7.1	構造精密化の原理	131
3.7.2	プログラムの例	133
3.8	分子構造の表示	136
4.	トラブルシューティング	140
4.1	測定がうまくいかない	140
4.2	構造が解けない	142
4.3	R 因子が下がらない	145
4.4	Q & A	146
4.5	学会発表などにみられる間違い	150
付 録	CIF ファイル	152
索 引		172