
まえがき

化学およびその関連分野において、化合物の立体構造決定のためにX線結晶構造解析が広く行われている。そして低分子の構造精密化には、プログラム *SHELXL* が数十年に渡って世界中で標準的に使用されてきた。X線回折計のメーカー提供のパッケージプログラムでも、その背後で *SHELXL* が動いている。ただし、構造解析を行っているとき、10件中に1回位は構造の乱れ（ディスオーダー）に遭遇する。構造が乱れているときに、*SHELXL* のコマンドを使って構造モデルを構築するには、少なからず手間と労力がかかる。しかも、それをわかりやすくサポートしてくれる情報が、これまであまりなかった。*SHELXL* についての詳しいマニュアルや説明資料が *SHELX* のホームページ (<http://shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX/>) で公開されているとはいえ、英文だということもありわかりにくい。付録のCDにテストデータを入れた実践的な解説書 (P. Müller ed.: *Crystal Structure Refinement, A Crystallographer's Guide to SHELXL*, Oxford University Press, 2006) も出版されたが、プログラムの入力マニュアルを別途参照する形をとっているため、この本だけではコマンドを使いこなすのは難しい。

日本では、*SHELXL93* のマニュアルの翻訳が当時東工大の大橋裕二研究室で行われ、結晶学会主催の講習会資料として1995年に発行された。その後、プログラムが改良されたこともあり、2015年に筆者が日本結晶学会誌に *SHELXL* の解説を書き、その機会にこの本を企画した。その目的は、*SHELXL* を使わざるを得ない多くのユーザーに対して、コマンドの使い方をわかりやすくサポートする資料を提供することである。なお、読者対象は主に低分子のX線構造解析を行う学生や研究者を想定した。ただし、中性子回折や高分子に関するコマンドの説明も全てカバーしているので、それらの構造精密化にも役立つはずである。

第1章は *SHELXL* の概要であり、コマンドの入力ファイル (ins ファイル) の説明から始まって、どのようなコマンドがあるのかを簡単に紹介する。このプログラムを初めて使う人は、是非ここから読んでほしい。それ以降は実際的なプログラムの使い方についてであり、2章では水素原子の扱い方、ならびに構造が乱れているときに使う束縛のコマンドを解説する。3章では、わかりにくいコマンドの使い方やトラブルへの対処法を、Q&Aの形式で示す。そして4章がコマンドの入力マニュアルである。これは、*SHELX* のホームページで公開されている Alphabetical list of *SHELXL* instructions にもとづいて作成した。ただし、コマンドの説明は理解しやすくなるように編集し、理論的な背景などは次の5章を参照する形にした。6章には、計算過程を記録した *lst* ファイルの見方を示した。また、理解を助けるために、章末にスペースが許す範囲で演習問題を加えた。これはテキスト中の説明を補う意味も含まれている。付録には、結晶溶媒のアセトンなどが乱れているときのコマンドリストの例や、残基番号の参照の仕方など、個別の場合に必要な情報をまとめた。なお、全体を通して大場が原稿の大部分を用意し、その不足分を

植草が補った。

本書のカバーデザインに使用した図は結晶相光反応の例であり、フタル酸に水素結合した桂皮酸アミドが二量化してシクロブタン環を形成している様子が示されている（白抜きの結合で表している部分が生成物であり、その占有率は13.2(3) %）[S. Ohba *et al.*: *J. Am. Chem. Soc.* **123**, 6349 (2001)]。このように結晶中の乱れた構造を解析する際に、*SHELXL*が非常に頼りになる。なお、1章での*SHELXL*の概説や2章で紹介した乱れの解析例は、筆者が書いた構造解析の本の内容と重なる部分も多い（大場茂・植草秀裕『X線結晶構造解析—強度測定からCIF投稿まで—』化学同人，2014）。その点，ご了承願いたい。図や表の一部は許諾を受けて同書から転載した。また，学会誌に掲載した*SHELXL*に関する解説（大場茂：日本結晶学会誌**57**, 87, 147, 211 (2015)）の大部分も，結晶学会の許諾を得て（図表も含めて）転用した。本書の内容は十分に注意して作成したつもりであるが，不備な点や誤りがあるかもしれない。もし，お気付きの点などがあれば，是非ご指摘願いたい。また，プログラム*SHELXL*は継続して改良がなされているので，細部については執筆時点の説明から多少とも変更が生じている場合がある。このため，*SHELX*のホームページに公開されている改訂情報も参照していただきたい。

*SHELXL*も含めて*SHELX*プログラムシステムの作者はドイツのGeorge M. Sheldrick（現在はゲッティンゲン大学名誉教授）であり，40年以上に渡ってプログラムの作成および開発改良が続けられてきた。構造解析の分野における，この偉大な貢献に対して敬意を表したい。また，本書を作成するにあたり，*SHELX*ホームページで公開している英文マニュアルの使用（つまりコマンドの説明の翻訳や適用例の引用）を快諾していただいたことに感謝する。

最後に，本の企画で相談にのっていただいた三共出版の秀島 功氏，および編集で大変お世話になった飯野久子氏に深く感謝する。

2016年2月

大場 茂