

らせん状高分子のパッキングを考慮したフーリエ変換のための
BASIC 言語によるパーソナル・コンピュータ用ソフトの作成

武 田 泰 宏

Summary

A Personal Computer Program in BASIC for the Fourier Transform of Packed Helical Polymers

Yasuhiro Takeda

A personal computer program in BASIC has been further developed to calculate the cylindrically averaged Fourier transform at the reciprocal lattice points of packed helical polymers in any crystal systems, taking into consideration the translational, rotational displacements and the directional reverse of polar chain molecules. By using this software, the averaged structure factors on the principal layers of the α -heix form of poly-L-alanine were computed as an example and compared with the observed scattering amplitudes, in which two possible packing models were used with the statistical arrangements of up-chain and down-chain, randomly or regularly shifted along and turned around the helix axis in a virtual unit cell.

(1) 目的

前報のラセン分子のフーリエ変換用ソフトは1本の鎖状高分子についての動径角平均した分子フーリエ変換 (molecular transform) を計算するためのもので、その集合状態や晶系、つまり分子のパッキングの仕方や単位格子の形は問題にしなかった⁽¹⁾。実際には繊維構造は準結晶 (paracrystal) とはいえ、分子はある一定の様式でパッキングし、A型のDNA-Naのようにその単位格子には複数個の分子が詰っていたり、合成ポリペプチドのようにup鎖とdown鎖が統計的に分布していたりする場合がある^(2,3)。また結晶に於ては分子のラセン対称性は空間群に於て許される特定の整数ラセン対称性に同調するが、分子間相互作用が弱い場合のパラクリスタルに於ては、13回転-47残基の少し変形した α -ラセンの場合のように長い繊維周期中に多数の残基を含んだ非整数ラセン対称性をとることがある^(4,20-21)。この場合の結晶構造因子の計算は余りにも繁雑でやりにくいので、 α -ラセンの変形の影響や方向性のある分子鎖のパッキングの仕方などを解析することが難しい。

上述のような性質の問題に対処すべく、今度作成したBASIC言語によるプログラムは単位格子内の複数個のラセン分子の干渉性を考慮した単位胞フーリエ変換 (cellular transform)、つまり平均構造因子をパーソナル・コンピューターを用いて簡便に計算するためのものである。

(2) 計算式

ラセン分子の非対称単位 (アミノ酸残基など) 中の j 番目の原子の円筒座標を (r_j, φ_j, z_j) とし、これが t 回転- u 残基で繊維周期 c をなすものとする。このような分子が単位胞内に v 含まれ、各々の代表点は各晶系に応じた斜交座標系の分率座標で (x_v, y_v, z_v) に位置し、ラジアンで φ_v だけ回転した位置にあるものとする。逆格子の (hkl) 点の繊維軸からの距離を R_{hk} とすると、逆空間のある点 $(R_{hk}, \phi, l/c)$ に於ける単位胞当りのフーリエ変換は次式のようになる⁽⁹⁻¹²⁾。

$$F(R_{hk}, \phi, l/c) = \sum_n F_{n,l}(R_{hk}, l/c) \exp in\phi \quad (1)$$

$$F_{n,l}(R_{hk}, l/c) = \sum_v \sum_j f_j \exp\left(-B \frac{\sin^2\theta}{\lambda^2}\right) J_n(2\pi R_{hk} r_j) \\ \times \exp\left\{i\left\{n\left(\frac{\pi}{2} - \varphi_j\right) + \frac{2\pi lz_j}{c} + \delta_{n,v}\right\}\right\} \\ = A_n(hkl) + iB_n(hkl) \quad (2)$$

$$\exp i \delta_{n,v} = \exp(-in\varphi_v) \cdot \exp 2\pi i(hx_v + ky_v + lz_v) \quad (3)$$

ここで f_j は j 番目の原子散乱因子、 B は温度因子、 θ は各回折斑点のブラッグ角、 λ は単色 X 線の波長、 $\delta_{n,v}$ は単位胞内の同価分子の位相に対する寄与を表わす。 A_n と B_n は各々、複素表示の実数項と虚数項を表わす。また J_n は n 次のベッセル関数で、回折写真の層線 l に寄与する次数

n は m を整数として次の選択律を満たす。

$$l = t \cdot n + u \cdot m \quad (4)$$

繊維中の高分子の集合状態は繊維軸の回りの回転の乱れを伴い、かつ繊維写真では各層線上の R_{hk} の等しい反射は重なりその強度を分離することが難しいので、一般に動径角平均の散乱振幅又は散乱強度を計算して観測値と比較することが行われる。そこで①式を ϕ について平均すると次のようになる。

$$\begin{aligned} |F(hkl)|_{\phi}^2 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F(R_{hk}, \phi, l/c) \cdot F^*(R_{hk}, \phi, l/c) d\phi \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sum_n F_{n,l} \exp(in\phi) \sum_{n'} F_{n',l}^* \exp(-in'\phi) d\phi \\ &= \sum_n (A_n^2(hkl) + B_n^2(hkl)) \quad (5) \end{aligned}$$

ラセン分子が結晶格子をつくった場合、格子の周期性による干渉作用のため (hkl) 点に於てのみ回折斑点が生じる。ここで n と n' の異なる交差項 $A_n \cdot A_{n'}$ などはずべて 0 となる。⑤式はラセン分子の分子間の干渉作用を考慮した単位胞当りの平均散乱強度を表わす。

今回完成したパーソナル・コンピューター用ソフト FT5 は⑤式に従って $|F(hkl)|_{\phi}^2$ 又は散乱振幅 $|F(hkl)|_{\phi}$ を計算するための BASIC 言語によるプログラムであるが、以下にその要点を述べる。

(3) ソフト FT5 の概要

このソフト FT5 はメイン・プログラムとサブルーチン GAB3, PAK1, PAK2 及び前報の BESN などから成っている。

計算の骨子はベッセル関数を用いた平均の分子散乱振幅とその位相項に対する単位胞内の同価分子の寄与を算出することにある。前者についてはラセン分子の非対称単位中の原子座標として円筒座標を用いる。後者については分子鎖の方向転換 (up-down 変換) と分子鎖の並進・回転操作で関係づけられる同価点を晶系に応じた斜交座標系の分率座標 (fractional coordinates) で表わし、その寄与は散乱振幅の位相項に含めて計算する。

GAB3 は同価分子ごとの単位残基中の各原子による散乱振幅の求和を複素表示の実数項と虚数項に分けて行う。これは前報の分子フーリエ変換用ソフトのサブルーチン GAB2 を改造し、同価分子の位相項に対する寄与をとり入れたものである。原子散乱因子はメインで算出した (hkl) 点の $\sin\theta/\lambda$ の値に基づいて、5 個ずつ配列として読み込んだ f_j 値の表より引出し、その端数は比例配分して求める⁽¹³⁾。温度因子は準結晶性の繊維試料の場合、原則として等方性のものを使用するが、単結晶用に転用する場合を考え異方性の温度因子も入力できるようにした。

PAK は分子鎖全体に対する上述の対称操作を行った上、繊維軸を c 軸 (unique axis) とした時の分子の位置を表わす直交座標から三斜晶系 (PAK2) 又は単斜晶系 (PAK1) の斜交座標への変換を必要に応じて行う。各分子の同価点を与える対称操作は分子鎖の方向性を指示する

ための“+”又は“-”を表わす配列変数 PM と分子の並進・回転操作を指示する配列変数 TR に従って行うようにした。この方式は FORTRAN による結晶構造因子の計算ソフトに順じたものである。尚、PAK1 はメインに於て入力する格子定数の角度 γ の値 (90° ; 120° ; それ以外) に応じて他の晶系 (立方晶系, 正方晶系, 斜方晶系; 六方晶系, 三方晶系; 単斜晶系) の計算にも対応するように一般化した。

メイン・プログラムでは格子定数に基づき単斜晶系又は三斜晶系の面間隔を与える一般式⁽¹⁴⁾に従って逆格子の (hkl) 点における $\sin\theta$ 及び面間隔 d を算出し、非対称単位中の原子座標に基づき $|F|_d$ の計算を行う。これらについては実際の繊維写真の特徴に即して特定の層線を選択して行えるようにした。また各晶系の逆格子網面の独立な部分の (hkl) 点について各層線における h と k の最大値を指定して計算を行うようにした。その際、角度 β と γ の値により晶系を区別した。即ち三斜晶系は $\beta \neq 90^\circ$, 単斜晶系以上の点群対称の晶系は $\beta = 90^\circ$ として分け、後者の場合、更に $\gamma = 90^\circ, 120^\circ$ か否かにより単位格子の形を区別した。但し、三斜晶系は a^*b^* 面が繊維軸に直交している特殊な場合のみを対象にした。また三方晶系は六方晶系として扱うことにした。 $|F|_d$ の計算に於て、ベッセル関数の次数 n に関する求和を同価分子の番号 v に関する求和のループの中に置き、各分子の散乱振幅を求めてこれらを積算した後に複素数を二乗した場合には、 $(\sum_n A_n)^2$ などを計算することになり交差項 $A_n \cdot A_{n'}$ などの寄与が入り込み間違った結果を与えるので、演算の順序に注意する必要がある。全反射についての散乱振幅の観測値と計算値の一致の程度を示す R-因子の計算は各々のスケール因子を考慮して行うようにした。

出力は前報の FT2 と同じく 1 行 80 字表示のディスプレイに表示するか (FT5), 又は 1 行 80 字印刷の 10 インチ幅連続紙に印刷する (FT6)。ミラー指数 (hkl) , 面間隔 d , 散乱振幅 $|F|_d$ 及び見かけの位相を計算した後、これらを逐次的に印刷するが、R-因子を計算するために散乱振幅の観測値 $|F_o|$ を読み込んだ場合には、 d の代りに $|F_o|$ を印刷する。ミラー指数の印刷は選択した層線ごとに、まず k の値を固定し、 h の値を 0 又は“-”側から“+”側へ変えながら行い、その後 k の値を 1 ずつ変えていく。全ての (hkl) 反射の散乱振幅を小数点以下 1 桁まで印刷した後、R-因子を計算し印刷する。

(4) 応用

具体的な例として 13 回転-47 残基の α -ポリ-L-アラニンの平均構造因子を試算した。このパラクリスタルの結晶構造は $a = 8.55 \text{ \AA}$, $c = 70.3 \text{ \AA}$ の六方格子で、その単位胞には 1 本の右巻き α -ラセン (残基並進距離 $p = 1.495 \text{ \AA}$, 残基回転角 $\theta_r = 99.58^\circ$) が詰っている^(4,8)。回折写真上の層線ストリーク状反射の存在は、この微結晶中には up 鎖と down 鎖が共存していることを示唆している。そこでまず、この α -ラセン中のアラニン残基の原子座標をラセン定数 (p, θ_r), 標準結合長と結合角 ($C_\alpha - C' = 1.53 \text{ \AA}$, $C' - N = 1.32 \text{ \AA}$, $N - C_\alpha = 1.47 \text{ \AA}$, $C' = O = 1.24 \text{ \AA}$, $N - H = 1.00 \text{ \AA}$, $C_\alpha - C_\beta = 1.52 \text{ \AA}$; $\angle NC_\alpha C' = 110^\circ$, $\angle C_\alpha C' N = 114^\circ$, $\angle C' N C_\alpha = 123^\circ$, $\angle C_\alpha C' O = 121^\circ$, $\angle C' N H = 123^\circ$, $\angle N C_\alpha C_\beta = 109.47^\circ$) を用い宮沢の式に従って算出した (表 1)^(15,16)。この α -ラセンの水素結合長 ($N \cdots O$) は 2.881 \AA , 水素結合角 ($\angle HNO$) は 12.06° であった。

表1 ポリ-L-アラニンの右巻き α -ラセンの原子座標^a

| | $r(\text{\AA})$ | $\varphi(^{\circ})$ | $z(\text{\AA})$ |
|--------------|-----------------|---------------------|-----------------|
| C_{α} | 2.288 | 0.00 | 0.000 |
| C' | 1.687 | 26.38 | 1.085 |
| N | 1.542 | -28.40 | -0.869 |
| O | 1.959 | 19.96 | 2.277 |
| H^b | 1.525 | -19.32 | -1.839 |
| H_{α} | 3.064 | -13.39 | 0.476 |
| C_{β} | 3.234 | 17.99 | -0.831 |

^a $d=1.495\text{\AA}$, $\theta_r=99.58^{\circ}$, ^b $N-H=1.0\text{\AA}$,
 $C_{\alpha}-H=1.1\text{\AA}$, $C_{\alpha}-C_{\beta}=1.52\text{\AA}$, $\angle NC_{\alpha}C_{\beta}=109.47^{\circ}$

表2 13回転-47残基の α -ポリ-L-アラニンの観測層線強度とベッセル関数の寄与次数

| l | 0 | 5 | 8 | 13 | 18 | 21 | 47 |
|-------|-------|---|----|----|-----|----|----|
| n | 0 | 4 | -3 | 1 | 5 | -2 | 0 |
| l_0 | v.v.s | w | w | s | v.w | m | m |

この構造のフーリエ変換の計算に於てベッセル関数は最大10次まで考慮したが、表2に主要な層線に寄与する次数を定性的な観測強度と共に示した^(17,18)。計算には水素原子を除く主鎖原子と側鎖 C_{β} を考慮して行い、温度因子は便宜的に全て5.0とした。down鎖は表1のup鎖について x 軸の回りに方向転換の操作を行った後、必要な並進・回転の操作(Δz_v , $\Delta\varphi_v$)を行って得た。

表3は逆空間の動径距離の異なる真に独立な反射の $|F|_{\varphi}$ の計算値を示したものである。(a)は1本の分子鎖が独立的に各単位胞に詰っている場合であるが、(b)のup鎖-up鎖の重ね合せ、(c)のup鎖-down鎖の重ね合せの場合と比較するためにスケール因子を2.0として調整した。(a)の場合の主要な層線反射についての計算時間は日立のパーソナル・コンピューターMB16001を用いた場合、1点当たり平均8.26秒、独立でない反射を含む106点で14分35秒要した。最小単位胞(virtual unit cell)内における分子鎖の重ね合せは分子鎖の方向性に関する統計的構造の近似であるが、隣接する分子鎖の相対的位置(Δz_v , $\Delta\varphi_v$)が全く無秩序ならば、これらの干渉性はなくなり、赤道線を除き単一分子鎖のフーリエ変換とほぼ同等になる。しかし α -ラセンのパッキングに際して隣接分子の側鎖メチル基間の(特にup鎖-down鎖における約3.36 \AA と3.57 \AA)立体障害が生じる位置関係があり、これを避けるためには一方の分子を少し変位させる必要がある⁽⁴⁻⁸⁾。up鎖-up鎖の場合には $\Delta\varphi_v=+10^{\circ}\sim+20^{\circ}$ 、up鎖-down鎖の場合には $\Delta\varphi_v=-10^{\circ}\sim-20^{\circ}$ 回転させ、 Δz_v を少し変位させると近接メチル基間の距離は少なくとも約3.95 \AA になり適正なファン・デア・ワールス接触距離になる⁽¹⁹⁾。表3の(b)と(c)は各々、上述の場合の代表的な1例である。

この過程で次のことが確認された。(i) $l=0$ (赤道線)に対しては $n=0$ が寄与するが、 $|F|_{\varphi}$ は各原子の r_j 座標のみに依存するので、up鎖とdown鎖の重ね合せによる影響は見られ

表3 α -ポリ-L-アラニンの平均構造因子の計算値*

| h | k | l | up鎖 ^a | u-u鎖 ^b | u-d鎖 ^c | h | k | l | up鎖 | u-u鎖 | u-d鎖 |
|----------|-----|-----|------------------|-------------------|-------------------|----------|-----|-----|-----|------|------|
| $(l=0)$ | | | | | | | | | | | |
| 1 | 0 | 0 | 21.1 | 21.1 | 21.1 | 1 | 1 | 13 | 7.8 | 7.5 | 4.8 |
| 2 | 0 | 0 | 10.6 | 10.6 | 10.6 | 2 | 1 | 13 | 2.3 | 2.2 | 0.6 |
| 3 | 0 | 0 | 5.5 | 5.5 | 5.5 | 3 | 1 | 13 | 2.2 | 2.1 | 0.8 |
| 4 | 0 | 0 | 1.7 | 1.7 | 1.7 | 4 | 1 | 13 | 1.6 | 1.5 | 1.1 |
| 5 | 0 | 0 | 2.0 | 2.0 | 2.0 | 2 | 2 | 13 | 2.8 | 2.7 | 0.6 |
| 1 | 1 | 0 | 7.9 | 7.9 | 7.9 | 3 | 2 | 13 | 1.6 | 1.5 | 1.3 |
| 2 | 1 | 0 | 8.3 | 8.3 | 8.3 | 4 | 2 | 13 | 0.6 | 0.6 | 0.4 |
| 3 | 1 | 0 | 0.8 | 0.8 | 0.8 | $(l=18)$ | | | | | |
| 4 | 1 | 0 | 2.9 | 2.9 | 2.9 | 0 | 0 | 18 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 5 | 1 | 0 | 0.1 | 0.1 | 0.1 | 1 | 0 | 18 | 0.2 | 0.1 | 0.2 |
| 2 | 2 | 0 | 1.8 | 1.8 | 1.8 | 2 | 0 | 18 | 1.2 | 0.9 | 1.1 |
| 3 | 2 | 0 | 2.8 | 2.8 | 2.8 | 3 | 0 | 18 | 2.4 | 1.8 | 1.7 |
| 4 | 2 | 0 | 0.9 | 0.9 | 0.9 | 4 | 0 | 18 | 3.4 | 2.7 | 2.8 |
| 5 | 2 | 0 | 0.6 | 0.6 | 0.6 | 1 | 1 | 18 | 1.0 | 0.8 | 1.0 |
| 3 | 3 | 0 | 1.3 | 1.3 | 1.3 | 2 | 1 | 18 | 1.2 | 0.9 | 0.3 |
| 4 | 3 | 0 | 0.6 | 0.6 | 0.6 | 3 | 1 | 18 | 3.8 | 3.0 | 3.2 |
| 5 | 3 | 0 | 0.1 | 0.1 | 0.1 | 4 | 1 | 18 | 1.7 | 1.4 | 1.1 |
| $(l=5)$ | | | | | | 2 | 2 | 18 | 3.7 | 2.9 | 3.1 |
| 0 | 0 | 5 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 3 | 2 | 18 | 2.4 | 1.9 | 1.8 |
| 1 | 0 | 5 | 1.3 | 1.2 | 0.2 | 4 | 2 | 18 | 0.4 | 0.3 | 0.1 |
| 2 | 0 | 5 | 5.8 | 5.3 | 2.8 | 3 | 3 | 18 | 0.5 | 0.4 | 0.1 |
| 3 | 0 | 5 | 5.8 | 5.3 | 5.5 | 4 | 3 | 18 | 0.5 | 0.4 | 0.4 |
| $(l=8)$ | | | | | | $(l=21)$ | | | | | |
| 1 | 1 | 5 | 4.9 | 4.5 | 1.7 | 0 | 0 | 21 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 2 | 1 | 5 | 6.3 | 5.7 | 5.3 | 1 | 0 | 21 | 6.6 | 6.5 | 4.8 |
| 3 | 1 | 5 | 3.5 | 3.2 | 3.5 | 2 | 0 | 21 | 5.6 | 5.6 | 0.3 |
| 2 | 2 | 5 | 4.2 | 3.9 | 4.2 | 3 | 0 | 21 | 4.1 | 4.1 | 3.1 |
| 3 | 2 | 5 | 0.2 | 0.1 | 0.1 | 1 | 1 | 21 | 6.4 | 6.3 | 2.0 |
| $(l=8)$ | | | | | | 2 | 1 | 21 | 5.1 | 5.1 | 3.5 |
| 0 | 0 | 8 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 3 | 1 | 21 | 1.4 | 1.4 | 1.4 |
| 1 | 0 | 8 | 2.6 | 2.5 | 1.5 | 2 | 2 | 21 | 2.0 | 2.0 | 1.8 |
| 2 | 0 | 8 | 2.7 | 2.6 | 1.8 | 3 | 2 | 21 | 1.7 | 1.7 | 0.1 |
| 3 | 0 | 8 | 6.3 | 6.2 | 6.0 | $(l=47)$ | | | | | |
| 1 | 1 | 8 | 3.0 | 3.0 | 0.2 | 0 | 0 | 47 | 7.3 | 5.9 | 5.5 |
| 2 | 1 | 8 | 6.0 | 6.0 | 5.9 | 1 | 0 | 47 | 2.7 | 2.2 | 1.6 |
| 3 | 1 | 8 | 3.3 | 3.3 | 3.0 | 2 | 0 | 47 | 0.8 | 0.7 | 0.3 |
| 2 | 2 | 8 | 4.2 | 4.2 | 3.8 | 3 | 0 | 47 | 1.5 | 1.2 | 0.9 |
| 3 | 2 | 8 | 0.9 | 0.9 | 0.6 | 1 | 1 | 47 | 0.4 | 0.3 | 0.2 |
| $(l=13)$ | | | | | | 2 | 1 | 47 | 1.4 | 1.1 | 0.6 |
| 0 | 0 | 13 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 3 | 1 | 47 | 1.0 | 0.8 | 0.9 |
| 1 | 0 | 13 | 10.4 | 10.0 | 9.8 | 2 | 2 | 47 | 1.2 | 1.0 | 1.1 |
| 2 | 0 | 13 | 5.2 | 5.0 | 2.9 | 3 | 2 | 47 | 0.8 | 0.6 | 0.4 |
| 3 | 0 | 13 | 3.8 | 3.7 | 0.1 | | | | | | |
| 4 | 0 | 13 | 1.2 | 1.2 | 1.2 | | | | | | |

u: up-chain, d: down-chain, B=5.0 a) SC=2.0 b) SC=1.0, $\Delta z_v = -0.30A$
 $\Delta\phi_v = +10^\circ$ c) SC=1.0, $\Delta z_v = -0.30A$, $\Delta\phi_v = -10^\circ$

なかった。(ii) Δz_v の値は $l=13$, $l=21$, $l=47$ の強い層線反射の強度に著しく影響を与え、極端な場合、ピッチ層線の (1013), ペルツ線の (0047) の強度が 0 になる相対位置があった。(iii) (b) の場合, $\Delta\phi_v$ の符号の違いの影響はないが, (c) の場合, $\Delta\phi_v$ の値とその符号は $l=5$, $l=8$ の弱い層線反射の強度に敏感に影響した。その結果, 表 3 に示した 3 つのモデルは, (a), (b) の (2021), (1121) 反射, (c) の (115), (118) 反射などを除けば, いずれも回折写真の強度分布を定性的によく説明していると思われる。しかし, 実際には上述のように分子鎖の回

転の自由度が存在しうることを考慮すると、一定の位置関係をもった up 鎖-up 鎖又は up 鎖-down 鎖の重ね合せというよりも、単独分子鎖の場合と上述の一定の位置関係をもった分子鎖の重ね合せの中間の状態にあると考えた方がよいと思われる。但し、 α -ポリ-L-アラニンの回折写真の観測強度は 2 つの文献^(6,7)に於てかなりくい違いがあり信頼度が十分ではないので、R-因子の算出は行わなかった。

尚、前報⁽¹⁾の p66, (4) 式の 2 行目に於て、積分記号の後の $F_{n,l}(R, l/c)$ と $F_{n,l}^*(R, l/c)$ は印刷所の校正ミスで、各々、添字を削除し $F(R, l/c)$ と $F^*(R, l/c)$ に訂正します。この $F(R, l/c)$ の表示法は $\sum_n F_{n,l}(R, l/c)$ と同等の意味をもっている⁽¹²⁾。

本稿のソフトウェア開発については塩野義研究所の佐藤友宏氏より有益な助言をいただいた。本研究は神戸女学院大学研究所の1998年度の研究補助費及び同大学の個人研究費の援助を受けたことを付記します。

参考文献

- (1) 武田泰宏 (1996) 神戸女学院大学論集 Vol.43, No 1, 63-72.
- (2) Fuller, W., Wilkins, M. H. F., Wilson, H. R. and Hamilton, L. D. (1965) *J. Mol. Biol.* 12, 60-80.
- (3) Bradbury, E.M., Brown, L., Downie, A. R., Elliott, A., Fraser, R. D. B. and Hanby, W. E. (1962) *J. Mol. Biol.* 5, 230-247.
- (4) Bamford, C.H., Brown, L., Elliott, A., Hanby, W.E. and Trotter, I.F. (1954) *Nature* 173, 27-29.
- (5) Brown, L. and Trotter, I. F. (1956) *Trans. Faraday Soc.* 52, 537-548.
- (6) Elliott, A. and Malcolm, B. R. (1959) *Proc. Roy. Soc. A*249, 30-41.
- (7) Arnott, S. and Wonacott, A. J. (1966) *J. Mol. Biol.* 21, 371-383.
- (8) Arnott, S. and Dover, S. D. (1967) *J. Mol. Biol.* 30, 209-212.
- (9) Cochran, W., Crick, F. H. C. and Vand, V. (1952) *Acta Cryst.* 5, 581-586.
- (10) Davies, D.R. and Rich, A. (1959) *Acta Cryst.* 12, 97-101.
- (11) 角戸正夫 (1964) 「実験化学講座 続10 回折結晶学」, 日本化学会編, 10章-2, p508-509, 丸善.
- (12) Vainstein, B.K. (1966) "Diffraction of X-rays by Chain Molecules" Chapter 3, p113-172, Elsevier Pub., Amsterdam.
- (13) Macgillavry, C.H., Rieck, G. D. and Lonsdale, K. (1968) "International Tables for X-ray Crystallography" Vol. 3, p201-203, Kynoch Press, Birmingham.
- (14) Stout, G. H and Jensen, L. H. (1972) "X-ray Structure Determination" Chapter 2, p19-39, Mcmillan Co., New York, 飯高洋一邦訳.
- (15) Pauling, L., Corey, R. B. and Branson, H. R. (1951) *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.* 37, 205-211.
- (16) Miyazawa, T. (1961) *J. Polymer Sci.* 55, 215-229.
- (17) Bamford, C. H., Elliott, A. and Hanby, W. E. (1956) "Synthetic Polypeptides", Academic Press, New York.
- (18) Walton, A. G. and Blackwell, J. (1973) "Biopolymers" Chapter 3, p84-125, Academic Press, New York.
- (19) Barrow, G. N. (1979) "Physical Chemistry" 4th ed., p528-529, McGraw-Hill, New York.
- (20) 武田泰宏 (1980) 神戸女学院大学論集 Vol. 27, No 1, 27-52.
- (21) Klug, A., Crick, F. H. C. and Wyckoff, H. W. (1958) *Acta Cryst.* 11, 199-213.

(原稿受理1998年4月17日)