

# サイ・テラ知と技の発信

## 埼玉大学・理工学研究の現場

【62】



# 埼玉経済

多くの物質は凝固点以下で「結晶」になります。結晶とは原子や分子が三次元に周期的に積み重なったもので、周期性の最小単位は10億分の1程度の大さき。仮想的な箱(単位格子)を入れ物として考え、箱中に原子はきちんと決まった位置関係で配置し、それを「結晶構造」といいます。物質の結晶構造は実験で調べます。

その一つ、X線回折現象を使った実験法がある「X線結晶構造解析」について述べます。

■構造と性質  
物質はそれぞれ固有の結晶構造を持ちます。物質が結晶となったとき、それを構成する原子や分子がどのような集まり方をしているかを、われわれは知りたくなります。なぜ結晶構造を調べる必要があるのでしょうか。

物質の構成分子が分かっているものの様な配置になるかが、まずはほとんどの場合には、完全に予測することはできないからです。

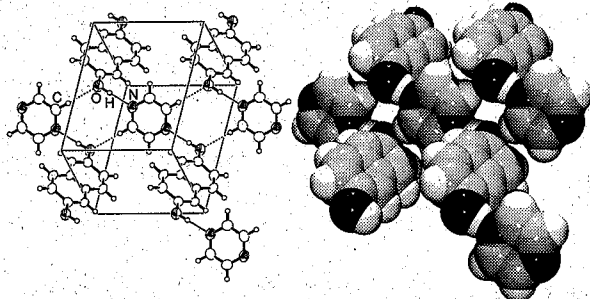
そして結晶の性質はその構造と密接に関係があるので、物性等の研究をしていくときに構造が基礎的知見として必要になります。

この実験法は、平均構造として

多くの物質は凝固点以下で「結晶」になります。結晶とは原子や分子が三次元に周期的に積み重なったもので、周期性の最小単位は10億分の1程度の大さき。仮想的な箱(単位格子)を入れ物として考え、箱中に原子はきちんと決まった位置関係で配置し、それを「結晶構造」といいます。物質の結晶構造は実験で調べます。

# 結晶の中の分子を見る

齋藤 英樹 大学院理工学部 教授



てですが、単位格子中の原子位置を決定するので、結晶構造を見ていることと大体同じです。熱振動する原子の中心位置をかなり高い精度で求めることができます。

解析結果から原子の位置とともに、各原子の熱振動の様子が分かります。図(左)では、各原子(H原子を除く)の熱振動の様子(大きさや方向)を楕円で表しています。

■水素結合の見え方  
結晶中に2種以上の分子が分子間力で集合した物質もあります。単に分子が置き換えられ混ざったものではなく、決まった組成比で固有の結晶構造をもつ純物質としての多成分結晶を「共結晶」と呼びます。

結晶構造解析の一例を示します。図は「ナフタレン-2,6-ジオール」と「ピラジン」という分子の共結晶の構造ですが、分子間の原子接触(距離)から、この結晶は水素結合で構造が組み立てられていることが分かりました。

図左の細線はO-H...N水素結合で、点線のO-H...Oの弱い水素結合もあることが確認できます。原子の大きさを使って構造を描くと右側の図のようになります。

O-H...Nの距離が分子間としては特異に短いことが良く見取れます。

子振動や格子振動があり、場合によっては分子配向等が乱れた状態も見つかります。

温度を変えると結晶中の分子の位置や形などの特徴が変わる構造相転移現象などは興味深い研究対象です。

また、少し工夫した測定・解析を行えば、結晶構造を電子密度の分布として表すことも可能です。X線回折は元来電子密度分布を観測しているものなので。

当研究室では主に分子結晶の興味深い構造や固体物性に関する結晶学的研究に取り組んでいます。また、分子結晶のX線電子密度解析の研究や結晶の構造予測への貢献も目指しています。

◇ ◇ ◇  
齋藤 英樹氏(さとう ひでき) 64年生まれ。東京都立大学大学院理学研究科博士課程修了。博士(理学)。埼玉大学理学部助手、科学分析支援センター講師を経て、07年より現職。専門は分子結晶の構造の研究。

企業、団体商店街などの話題や情報をお寄せ下さい  
TEL 048・795・9161 FAX 048・653・9040