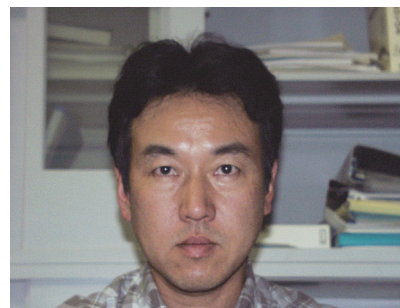


齋藤英樹研究室（結晶化学・物理化学）

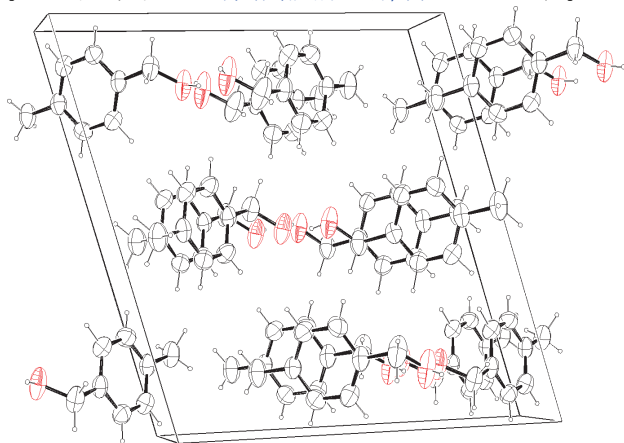
物質は凝固点以下で固体になりますが、多くのものは結晶になります。ガラスなど非晶質固体になる方が普通のものもあります。

結晶とは、原子や分子が3次元方向(上下・左右・前後)に周期的に規則正しく積み重なったもので、その最小の単位構造は 10^{-9}m 程の仮想的な小さな箱(単位格子)で考えます。この小さな箱の中に原子や分子はきちんと決まった位置関係で配置していて、それを結晶構造と言います。その箱と同じものが3次元に非常に多数積み重なって出来たものが結晶です。物質はそれぞれ固有の結晶構造をもっています。

物質の結晶構造は、X線回折という現象を使って実験で調べます。この実験法をX線結晶構造解析と言います。

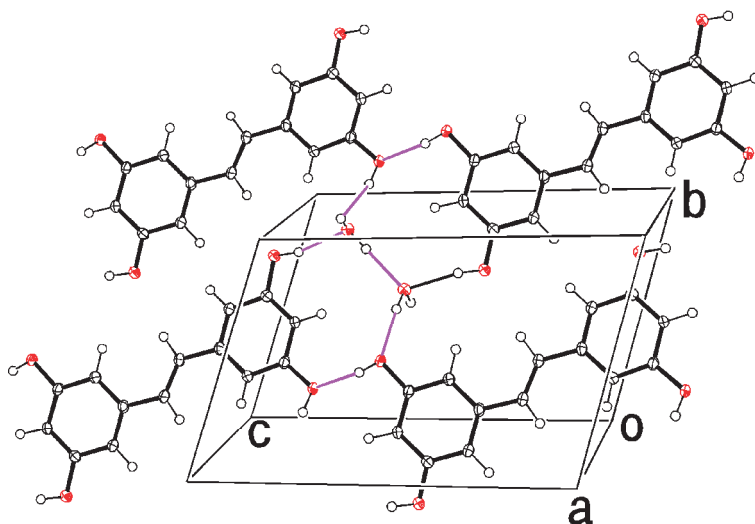


齋藤 英樹 講師



X線結晶構造解析によって物質の結晶構造が決まると、単位格子中の原子・分子の配置が分かり左のような図が描けます。配置と共に各原子の熱振動の様子も分かります。この絵では、原子の熱振動の様子(大きさと方向)を回転楕円体で表しています。左の図の物質は、*p*-メチルベンジルアルコールですが、赤色で描いてあるOH基の酸素原子の熱振動が一方向に大きいことが分かります。

右の図は、スチルベンの4カ所をOH基で置換した分子の結晶です。メタノールから結晶化させたこの結晶は、分子1分子当たり2分子の水を含んでいました。X線結晶構造解析によって水素原子の位置も決めることが出来て、ピンクの線で示したところに分子間の水素結合を確認することが出来ます。この測定は、100Kで行ったので熱振動を示す回転楕円体の大きさが小さく描かれます。温度を下げると熱振動が小さくなることが良く分かります。



なぜ物質の結晶構造を調べる必要があるのでしょうか。物質の結晶構造は、分子が分かっているにもかかわらずに積み重なって結晶になるかは先ずほとんどの場合に完全には予測が出来ないからです。そして、固体(結晶)のいろいろな性質は、その結晶構造と関係があるからで、光学的な性質・電気的性質・熱的性質などさらには生命科学的な性質を研究していくときに、その構造の情報から議論することが必要になったりするので、科学的に重要な知見であるのです。