



安井 正憲
Masanori YASUI

研究课题 分析物质的结晶结构，研究结构与物性的相关性

关键词 X 射线结晶结构分析，电子密度分布分析，分子间的相互作用，有机结晶的结构相变，蛋白质，蛋白质与色素分子的相互作用

所属专业	研究生院信息理工学研究科 先进理工学专业
研究成员	安井 正憲 副教授
所属学会	日本结晶学会，日本化学会
研究设备	IP 单结晶 X 射线衍射仪，4 轴单结晶 X 射线衍射仪，CCD 单结晶 X 射线衍射仪（附带超低温装置），粉末 X 射线衍射仪（差示扫描量热同步测量）、差示扫描量热仪、TG/DTA（热量·重量测量仪）

研究概要

用 X 射线衍射仪来分析作为物质基本信息的结晶结构

该研究室使用 X 射线衍射仪，主要从事物质结晶结构的分析。大的研究课题为「用 X 射线观察分子」，他们的目标则是通过分析原子与分子的排列以及分子间的相互作用来研究某种物质的结构与物性的相关性。

人眼无法直接看到原子、分子这种微小物质，即使用观察普通物质时使用的可视光来照射也是看不到的。因此用波长超短的 X 射线来照射试验样品，通过研究由此产生的散射（衍射）X 射线，这样就能间接地观察到原子及分子。能实现这种观察的就是 X 射线衍射仪。

X 射线衍射现象是 X 射线与电子相互作用产生的现象，在 X 射线结晶结构的分析中，最初得到的信息是结晶结构中电子是如何分布的（电子密度分布）。并且原子间（分子间）的相互作用必定是以电子为媒介，因此通过了解电子密度分布，就能定量地了解在 1 个分子内，什么力作用在原子间（分子内的相互作用），什么力作用在结晶中的 1 个分子与其他分子之间，这个力的强度大小是多少等这类信息。

这种结晶结构相关的信息可以说是与物质相关的基本信息。也就是说某种物质的性质（物性）是由它的物质结构来决定的，如果能了解物质结构，就能了解它的物性。

研究物性的显现机制

因此如果能够了解原子间（分子间）是否产生了物性（物性的显现机制），该物性又是什么样的相互作用产生的，反过来通过在结构中加强它的功能，就能使其呈现更大的物性，或者反过来还能控制它显现的物性等。

像这样分析物质结构，研讨物性的显现机制是该研究室的研究课题之一。总而言之就是从物质结构与物性相关的基础研究。

优势

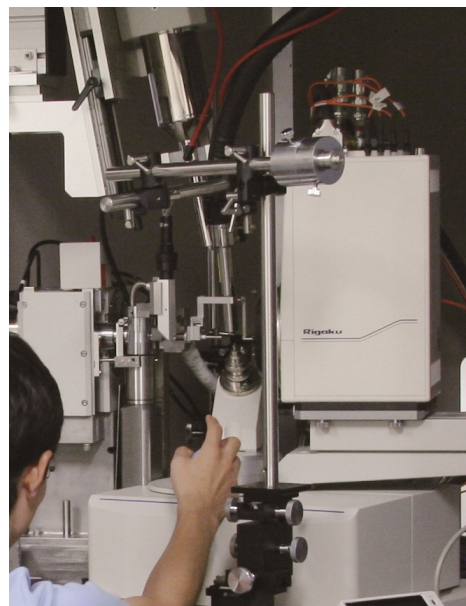
拥有世界最高水平的 X 射线衍射仪

该研究室在剖析有机结晶的结构方面经过长年的研究，积累了非常丰富的剖析技术和经验。

目前研究设备中心还拥有世界最高水平的 X 射线衍射仪。

采用他们拥有的技术、经验和最高级的设备，在研究室内就能进行各种 X 射线衍射实验，这是他们的一大优势。

可进行高速·高精度的结构解析



CCD 式单结晶 X 射线衍射仪



粉末 X 射线衍射仪（差示扫描量热同步测定）

如果使用他们的 X 射线衍射仪，有 0.2~0.3mm 角的较好的单结晶的话，在一两天内就能观察结晶结构。

只不过在 X 射线结晶结构解析过程中较难的事情就是在解析之前制作「较好的单结晶」。有关这

个制作方法还能有所建议。

有关某些功能性材料，如果企业为了进一步提高它的功能，提出想要了解它的结构等这类要求，

针对这些要求该研究室能够作出对应。

由于研究设备中心还拥有能够同步测量差示扫描热量和粉末 X 射线衍射的装置，采用这些设备，

还能更详细地研讨结构的温度变化。

未来展望

探明蛋白质与各种分子之间的相互作用

目前该研究室还首先开始了蛋白质结构的解析研究，特别是以蛋白质与各种分子之间相互作用为中心开展相关的研究。

首先是研究光学不活性的色素分子通过与蛋白质分子的相互作用而产生光学活性的现象。

如果能够探明色素分子与蛋白质分子之间相互作用的结构，除了蛋白质分子本来的酵素反应这种功能外，是不是还会发现蛋白质新的有用性。

由于蛋白质分子量很大，要制作出较好的结晶非常难，所以该研究室还在探索较好的方法使结构解析的前提—蛋白质产生结晶。

就各种分子进行高精度的电子密度分布解析

其次该研究室还就各种分子，尝试更加精密地进行电子密度的解析。由于在这个领域出现了非常好的结构解析软件，所以这 10 年来，世界上的研究人员增加，非常活跃积极。但遗憾的是

在我们日本国内，相关研究人员虽然没那么多，但尝试进行研究，发现还有很多趣的领域。最近该研究室导入了能将试验样品的温度降至摄氏-230 度的装置，因此使用这个装置，在原子振动较少的低温环境下就能解析电子的密度分布。我们期待着他们未来的研究成果。