

学外研修報告

共通機器部門 共通利用機器管理班 河田 尚美

有機結晶シンポジウム及びプレシンポジウム参加報告

1. はじめに（目的等）

業務で担当している単結晶 X 線構造解析は新規物質の構造決定だけでなく、その物性や機能を考察するうえでも有用な分析手法である。結晶構造解析はおよそ 100 年前より鉱物や金属を対象として発展してきたが、近年では装置の高度化と有機化学の需要の高まりにより、有機結晶やタンパク質結晶への利用が大きくなウエイトを占めている。今回参加したシンポジウムは有機結晶に焦点を絞っており、報告の大多数で単結晶 X 線構造解析の測定データが用いられると予想された。最新の技術と研究内容を幅広く調査することを目的として参加した。

2. 期間・場所

期間：平成 30 年 10 月 26 日～28 日

場所：近畿大学 東大阪キャンパス

3. 参加者等

プレシンポジウム 約 100 人

シンポジウム 約 200 人

4. 研修内容

プレシンポジウム：結晶構造解析初心者から中級者向けの講習が行なわれた。具体的な内容としては測定のノウハウ、初期位相解析手法 SHELXT、結晶構造予測とキラル分子凝集体について各分野の専門家から解説があった。

シンポジウム：単結晶構造解析で有機分子の測定を行う場合、多くが分子構造の特定を目的としているが、有機結晶シンポジウムで議論される内容はそこから一步踏み込んで結晶内の分子間の相互作用、結晶状態での配座に注目されていた。発表内容の多くが、固体での光応答、多孔質有機結晶、磁性（スピントロニクス）、不斉合成に関わるものであった。

5. まとめと感想

プレシンポジウムでは SHELXT について詳細な解説があった。SHELXT には Dual Space Method が用いられており、広島大学でも多用されているが、非常に有用な解析手法である反面、日本語での解析書が非常に少なく計算プロセスを理解して使用している人は少ない。今回の講習で全てを理解することはできなかったが従来法との相違点を確認できた。

シンポジウムでは発表のほぼ全てに単結晶構造解析もしくは粉末 XRD のデータが用いられており、測定の意義を再認識した。広島大学では分子構造の議論に結晶構造解析を用いることは多いものの、結晶状態（パッキングした状態）での分子間相互作用には関心が薄いように感じる。今後測定をサポートするなかで分子間相互作用の検討についても提案を行なっていきたい。