

センター所有機器 (7)
単結晶 X 線構造解析装置
(X R D)

茨城大学における X 線構造解析法の今昔

自然機能科学科 仲野 義晴

20 世紀半ばの Bragg 父子の大発見後、多くの大先生の工夫を基に今日の単結晶 X 線構造解析法が確立された。(メーカー

の努力・コンピュータの進歩もあって) 結晶学の専門家でなくても好結果が得られることから、この研究法は分子の世界を眺める手段として自然科学の色々な分野にひろまった。

茨城大学にも 6 年前、リガク電機社製単結晶 X 線自動回折計が豪邸一軒建つくらいの費用をかけて機器分析センターに設置された。これまで年平均 30 件位測定され、分子構造に関する有用な情報が得られている。回折測定の方は順調に働いてくれているので満足であるが、解析コンピュータ(シリコングラフィックス)が時代遅れになっていららさせられることが多くなった。恐らく年々進歩し巨大化する解析プログラムの成長に 6 年前の解析コンピュータの能力が追従できなくなったと思われる。シリコングラフィックスは別の目的で情報処理センターにも設置されているのでご存知の方も居られるだろうが、その斬新なデザインと格好良さで人気が高い。値段もその格好良さに比例して維持費や部品なども高いので、名機には違いないが容易には更新できない。

他方パソコンの高速化、性能の高さ、将来性に目をつけたリガクはパソコン用解析プログラムを開発し、発売した(80 万円)。リガクは X 線構造解析を志す研究者にパソコンでも遜色無く解析を行なえるから、シリコングラフィックスからパソコンに乗り換えなさいと勧めているのである。Pentium 4(1.5 GHz)もメモリー増設も手が届く範囲になった。従ってシリコングラフィックスを離れて手元で解析を進めることができる状態にあり、志のある研究者の出現が待たれる。上をみるときりが無いが、30 万円あれば十分快適に解析を進められる(勿論解析ソフトが高い)。

そもそも X 線構造解析法は約 0.5 mm 角位のきれいな結晶さえ得られれば十分可能な研究方法である。綺麗な新物質を入手したら顕微鏡で 40 倍くらいにして眺めてみることです。地球科学教室の御好意によりセンターで 30 倍の顕微鏡が使えます。綿状とか細かい松葉状ではだめ。熟練者は空気中で不安定な物質でもキャピラリーに封入して測定する。キャピラリーにつめるのは実際やって見ると難しい。不安定物質でも接着剤でコーティングしてみると測定できることが多いのでとにかくやってみることで。分子の形がディスプレイにいきなり現れるのを見るのは感激です。この経験を一度味わうと X 線構造解析に病み付きになります。私がはじめたのは 25 年前でこれまで何回もその感激を経験したが、今でもその瞬間に新たな感激を覚え、うっとりしてしまいます。測定と解析はちょっと練習すればこなせますので、皆さんもやって見ませんか。

平成 13 年度から X 線回折計の専門委員が泉岡先生に替わりしました。泉岡新専門委員も INDY から離れるのもやむを得ないと判断しているらしい。パソコンのほうが小回りが利いて自由度があり、よいと思われる。

以上 6 年間専門委員を務めたこれまでをおさらいしてみました。まとまりが無いトーク調になりました。今後更にユーザーが増えることを期待しております。



全自動単結晶X線構造解析装置

R A S A - 7 R (理学電機)

線源：通常 MoK α 線 最大出力：8kW

室温～77Kで測定可