

(様式 1-1)

提出日：2025 年 5 月 12 日

2024 年度 大阪大学蛋白質研究所 拠点事業

研究成果報告書

(1) 事業名

MicroED

(2) 研究代表者

氏名：林正太郎

所属機関名・部局名・職名：高知工科大学 理工学群 教授

(3) 研究課題名

単結晶と超分子ポリマーの中間に位置する未知結晶形態の構造解析

(4) 蛋白質研究所受入担当教員

教員名：栗栖 源嗣（研究室名：蛋白質結晶学研究室）

(5) 研究成果の概要

背景：

有機単結晶は比較的熱力学的な状態（安定状態または準安定状態）であるが、その分子構造におけるコンフォメーション変化を伴う場合、その構造がゆらぐ。したがって、任意の刺激（熱や光、溶媒環境）によって相転移が起こることがある。これに基づき、物性変化を調査する研究領域は非常に注目されている。我々は剛直なアントラセン分子を軸とし、置換基の構造が低いエネルギーで配座変換する分子系を提案してきた。その中で、様々な2置換アントラセンを設計し、ブロック状から柔らかな繊維状へ転移する分子を発見した。また、溶媒を含むアントラセン結晶が昇温によってピーリングする現象も発見しており、このような現象によって微細になってしまった結晶の構造決定を行う必要が生じた。この結晶構造を決定するために MicroED による解析が有用であると考えた。

目的：

本研究では、細く構造解析が難しい繊維状結晶やピーリングした結晶の電子線回折による結晶構造解析を行なうことで、単結晶性を維持していることや相転移後の結晶状態との違いについて調べることにした。

方法：

溶液成長法によって作製した結晶を任意の条件位で相転移させた。それぞれの結晶を細かく粉砕し、TEM グリッド状に物理的に乗せることで電子線回折によって構造解析を行った。構造データを相転移前の結晶構造と比較した。

結果：

電子線回折をもとに、繊維状結晶の単結晶構造解析が行えた。繊維状結晶は相転移前後のバルク結晶と異なる分子コンフォメーションを示していた。一方、ピーリングした結晶は脱溶媒過程に伴う構造変化は見られたものの、分子構造やパッキングに大きな変化は見られなかった。