

(様式 1-1)

提出日：2025 年 4 月 23 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（下記より該当事業名を選択し、ほかは削除してください。）

MicroED

(2) 研究代表者

氏名：佐々木 俊之

所属機関名・部局名・職名：高輝度光科学研究センター(JASRI)・回折・散乱推進室・テニユアトラック研究員

(3) 研究課題名（申請時に記載したものと同一課題名を記入してください。）

メカノケミカル法によって形成される特異な多成分結晶の合成と MicroED 結晶構造解析に基づく多成分化に伴う物理化学的特性変化の機構解明

(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）

(5) 研究成果の概要

*背景および目的、方法と結果について、公開して差し支えない範囲で記載。

【背景と目的】

多成分系による結晶化（共結晶化や塩形成など）は、結晶の物理化学的特性を改変する有効な手段として、医薬品のバイオアベイラビリティ向上といった応用例を持つ。本研究では、メカノケミカル合成により創製した多様な多成分結晶について、MicroED 法を用いた構造解析に基づき、その物理化学的特性変化の機構を解明することを目的とする。

【方法と結果】

測定試料は、少量の溶媒を用いた粉末混合法（LAG 法）により調製した。一部の試料については、比較のため溶液からの結晶化も試み、放射光 X 線回折による構造解析も実施した。LAG 法で得られた粉末試料に対し MicroED 測定を行った結果、目的とする多成分結晶の構造情報を取得することに成功した。この際、複数の結晶粒子からの回折データを収集したところ、多くの試料において目的物だけでなく、未反応の原料も共存していることが明らかになった。目的とする結晶構造の決定に加え、このような不純物の存在とその同定は、結晶性材料の品質管理において重要な情報となる。また、放射光 X 線回折で二量体構造が解析されていた試料については、MicroED を用いることで目的としていた共結晶の構造を特定できた。さらに注目すべき点として、特定の試料においては、粉末のすりつぶし前後で異なる結晶構造が観察されており、これらの構造解析結果はメカノケミカル合成における結晶構造変化の起源解明に重要な知見を与えると考えられる。現在、これらの構造解析データと別途実施した物理化学的特性評価の結果を統合的に解析し、論文発表に向けて準備を進めている。