

実験融合計算化学による X 線構造解析の新展開

Novel Structure Analysis Method by X-ray Diffraction Simulator

山下 格, 大沼宏彰, 芹澤和実, 鈴木 愛, Riadh Sahnoun, 古山通久, 坪井秀行, 畠山 望,
遠藤 明, 高羽洋充, Carlos A. Del Carpio, 久保百司, 宮本 明

Itaru Yamashita, Hiroaki Onuma, Kazumi Serizawa, Ai Suzuki, Riadh Sahnoun,
Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou,
Hiromitsu Takaba, Carlos A. Del Carpio, Momoji Kubo, Akira Miyamoto
(東北大学)

(Tohoku Univ.)

e-mail: itaru@aki.che.tohoku.ac.jp

X線回折を用いた構造解析では、より結晶性の高い試料を作成することが望ましい。しかし、タンパク質は大規模な単結晶が得にくいと、多結晶系材料を解析する手段が求められている。そこで我々は、計算化学を用いて先に構造を決定し、そこで得られた構造に対してX線回折シミュレーションを行い、その結果を実験の結果と比較することで、多結晶系のような複雑な構造の解析が可能であると考えた。本研究では、この解析手法の第一歩として、無機多結晶材料である $\text{BaMgAl}_{10}\text{O}_{17}:\text{Eu}^{2+}$ (BAM) の構造解析を行った。

BAM 中の Eu の位置として、図 1 に示す 3 種類のサイトが提唱されている。これらの各サイトに Eu を配置したモデルについて XRD シミュレーションを行った。図 2(a)に、Eu が BR サイトにある場合の計算結果を示す。計算で得られたパターンは実験値[1]の傾向とよく一致した。図 2(b)に、各サイトに Eu がある場合の計算結果のうち、実験で微小なピークが見られる 29.94° 周辺を拡大したもの示す。Eu が aBR、mO サイトに存在する場合、 29.94° のピークが大きく減少することが示された。これは Eu の位置がずれたことによって、(1 0 6)面内で負の干渉が起こったことに起因している。これらのことから、Eu の位置は BR サイトが支配的であることが示唆された。

以上より、原子のわずかな位置の違いによる XRD パターンの変化を、実験値と比較して帰属することで、材料の微細構造解析ができることが示された。今後、更なる発展として、この手法をタンパク質の多結晶体の構造解析に応用できると考えられる。

Reference

[1] K. B. Kim, Y. I. Kim, H. G. Chun, T. Y. Cho, J. S. Jung, and J. G. Kang, (2005) *Chem. Mater.*, **14**, 5045-5052

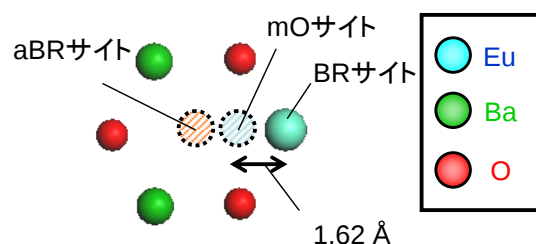


図1 各サイトの位置

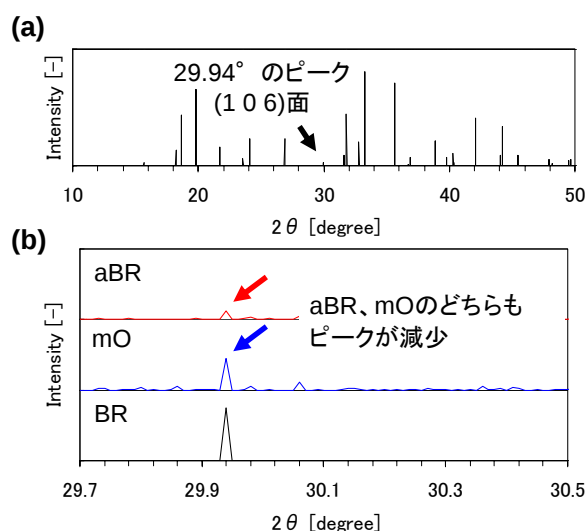


図2 (a)XRDパターンシミュレーションの結果
(b)29.94° 周辺の拡大図