

# 小さな結晶で素早く分子構造を見る化 分子のリアルな姿かたちや配列が導く機能の開発を支援

- 全国公設試で唯一、単結晶構造解析の試験分析業務を実施
- NMR が複雑な化合物の同定、結晶多型の解析、結晶方位の決定などが可能
- 測定に要する時間は最短で5分程度

## 研究目的・内容

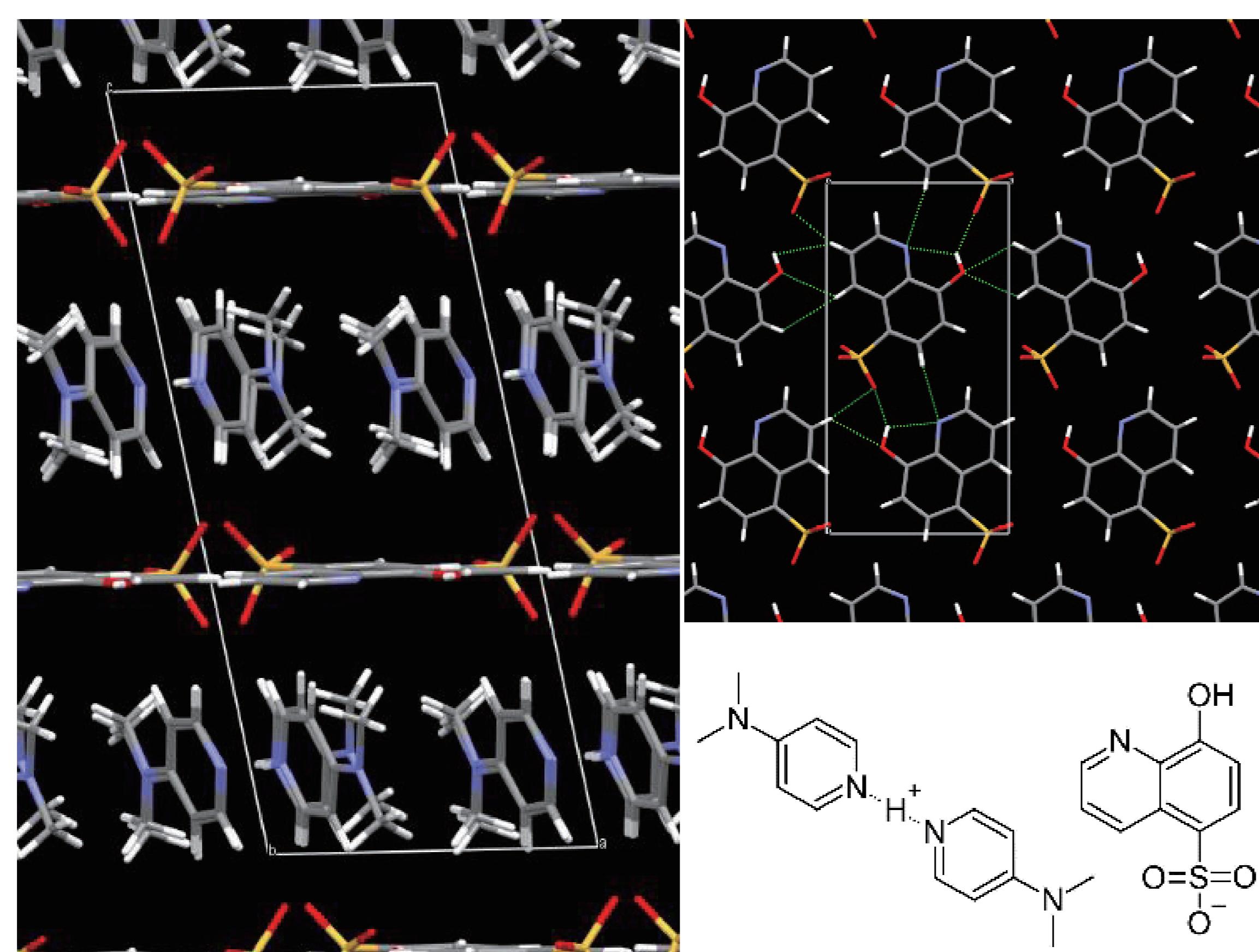
単結晶構造解析とは、ひとつの単結晶試料(50μm～)にX線を照射し、原子の周期配列による回折現象を利用して、分子構造、パッキング構造、絶対構造を決定する、つまりは分子の構造そのものを見える化できる、きわめて強力な手法です。

単結晶構造解析は測定時間が長く、解析が煩雑なため、企業支援プログラムの提供が難しい分析法でした。しかし、最新装置の登場によって測定の大幅な高速化が達成されました。大阪技術研では、全国公設試で唯一となる、単結晶構造解析の試験分析業務を2023年度から行っています。

## 期待される用途

結晶性化合物の構造同定、特にNMRによる同定が難しい多環芳香族化合物、金属錯体、多核金属クラスターには力を発揮します。分子間相互作用や結晶多型の解析、無機化合物の結晶方位の決定、医薬品中間体などのキラリティの決定も可能です。測定経験のない方も、お気軽にご相談ください。

※この機器は競輪の補助により整備しました。



モジメチルアミノピリジンースルホキノリノール塩の層状結晶構造  
(右上はスルホキノリノール層内のパッキング)



リガク製 XtaLAB Synergy-S  
測定時間は最短5分程度

## キーワード

先端計測、構造同定、ナノカーボン、金属クラスター、多孔性材料

## 大阪産業技術研究所

電子材料研究部・有機材料研究部（森之宮センター）  
柏木 行康、中村 優志、中尾 秀一  
連絡先：柏木 kasiwagi@orist.jp

