

# 有機低分子結晶粉末構造解析

利用者 中井宗紀  
所属 富士フィルム(株)

## 1. はじめに

X線および中性子の粉末回折により、銅フタロシアニンの結晶構造を決定した。

## 2. 実験目的

有機低分子材料の機能発現には、単分子の形状のみならず、水素結合など分子間相互作用が重要であることが多い。単結晶試料を得ることが困難な場合、粉末回折による結晶構造解析が不可欠となるが、水素位置の情報を得たい場合は、X線よりも中性子が有利である。さらに、粉末は単結晶よりはるかに短時間で測定できるため、とくに中性子回折では粉末の有効性が大きい。本課題では、種々の機能性材料の骨格として利用される銅フタロシアニン(市販品)を標準試料として結晶構造を決定した。

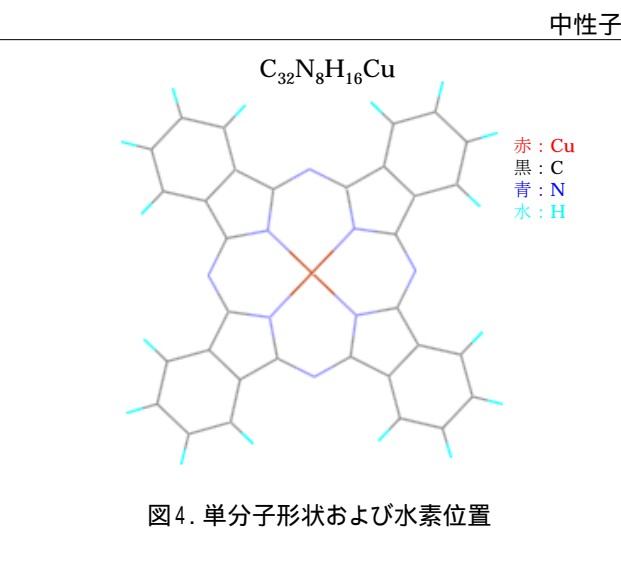
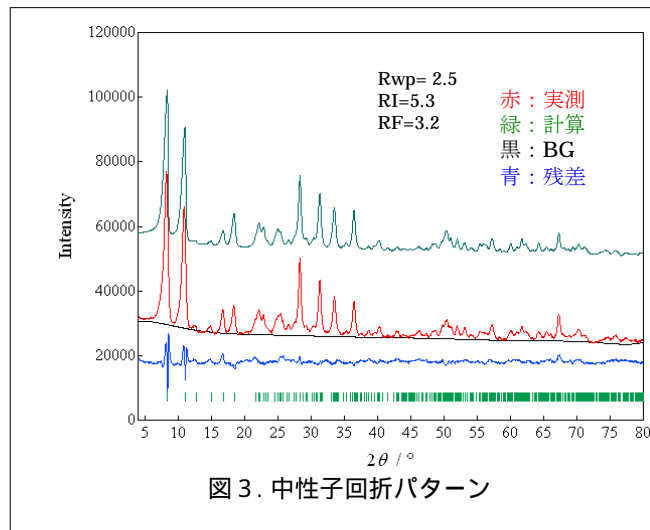
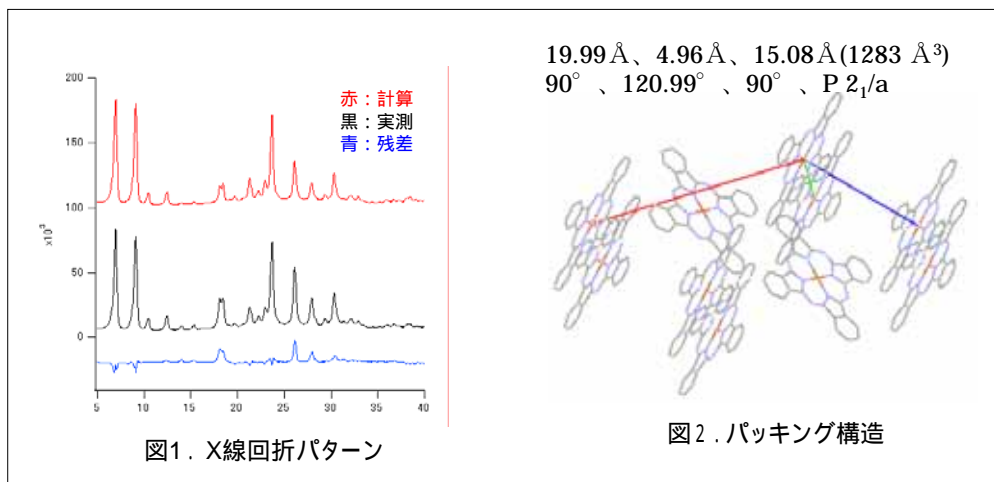
## 3. 実験方法

基本骨格をX線回折で、水素位置を中性子回折で決定した。パターン法でCuの位置を決定した後、実空間法でパッキングを決定した。また、水素位置は最小二乗法で決定した。

## 4. 研究成果

粉末X線回折によりパターン法で重原子の位置を決定し、それをもとに実空間法でパッキングを決定した。文献値と同様の妥当な結果が得られた。[1]

これを基に、粉末中性子回折により最小二乗法で水素位置を決定し、妥当な最終構造を得た。[2]



## 5. 結論・考察

一般にD置換なしではバックグラウンドが大きいですが、D置換なしでも水素の情報を反映した回折パターンが得られた。これは手間の軽減の点で、企業による実用にとって極めて大きな意味をもつ。

## 6. 引用(参照)文献等

[1] Altomare, et al., J. Appl. Cryst. (2009). 42, 1197-1202.

[2] F. Izumi and T. Ikeda, Mater. Sci. Forum, 321-324 (2000) 198.

