

初めに結晶格子一般の示す非調和現象である熱膨張と融解を論じる。融解に伴う膨張率の異常ならびに半無限結晶に於ける表面効果の異常侵入を詳しく議論する。一方、有限系としての微粒子の融解をも我々の理論の枠内で厳密に取り扱い、その融点の粒径依存性を考察する。次に、“秩序の融解”という立場から配向一回転系の相転移理論を提案する。そのような観点から簡単な模型について導出された結果は、いわゆる整合相ばかりでなく、不整合相に対応する解をも含むものとなる。

5. 分子性結晶に於ける配向構造相転移の理論的研究

Alkali superoxides 系の相転移

楠 田 幸 久

本講演では、高温相（I相）でNaCl型の構造を持ち、多くの逐次相転移を起こす Alkali superoxides : XO_2 ($X=Na, K, Rb, Cs$) のI相からII相への相転移に対する理論的考察を行う。II相構造は、固体水素型の配向をとる NaO_2 と、結晶軸方向に O_2 分子がそろった $K(Rb, Cs)O_2$ の両型に分けられる。高温構造を基礎にして、 X^+ ion を点電荷、 O_2^- 分子を両端に反撥中心を持つ垂鈴状分子と看做し、静電相互作用と最近接 $X^+ - O_2^-$ 間の短距離反撥力を考慮する。これらの相互作用のもとでの最安定配向を調べ、有効電荷と短距離反撥力のパラメータの変化によって、 KO_2 型、 NaO_2 型の配向が、エネルギー的に安定になることを示す。

6. 水・アルコール類二成分系結晶の研究

山 本 重 和

アルコール類水溶液を冷却した時に析出する結晶は、六角形結晶（構成要素は水）と立方晶形結晶の二種に大別できる。後者は、ethanol, 1-propanol, 2-propanol の水溶液中に析出する。立方晶形結晶の中でも 2-propanol 水溶液に析出するものだけが、 $-51^\circ C \sim -52^\circ C$ で相転移を起こし、低温相では複屈折を呈することが知られている。またこの結晶中の 2-propanol と水とのモル比は、ほぼ 1 : 3 である。ethanol と 1-propanol の場合の結晶の組成を

調べたところ、アルコールと水とのモル比はそれぞれ、ほぼ 2 : 3 および 3 : 2 とされる。これら三種の立方晶系結晶の構造を解明する手がかりとして結晶の誘電率の温度および周波数による変化を測定した。その結果、2-propanol の場合の転移点付近での誘電率の変化の他にいくつかの変化が観測された。

7. リゾチーム分子の動的過程の研究

中山 正 昭

球状蛋白質であるリゾチーム分子の動的過程について、ストップフロー法を用いて、3つの観点から実験を行なった。

まず、鎖状基質分子(エチレングリコールキチン)との相互作用の研究を行ない、活性をもった intact なリゾチームの結合過程は、酵素基質複合体を形成する分子反応の後に、2つの異性化過程が存在するのに対して、化学修飾を加えて活性をなくした 108-エステルリゾチームでは、2分子反応の過程しか存在しないことを見出した。

次に、リゾチーム分子の立体構造の転移過程(変性、再生)を基質との相互作用という立場から研究を行なった。その結果、変性過程では、基質が存在することによって変性速度が遅くなり、このことから nature 状態のリゾチームが基質と相互作用することにより、安定化されていると考えられる。ところが再生過程においては、基質の影響はまったくなく、分子内相互作用にひじょうに特異的な過程と考えられる。

最後に、Trp の NH の H-D 変換反応を用いて、熱変性領域においてリゾチーム分子のゆらぎの研究を行なった。その結果、変換反応の最も遅い過程が分子のゆらぎの速さを反映していることを見出した。また、1つ共有結合の増えた 108-エステルリゾチームに比べて 20°C 程度高温側にずれているが、intact なリゾチームの変性領域で、表面構造がかなりゆらいでいるという結果を得た。