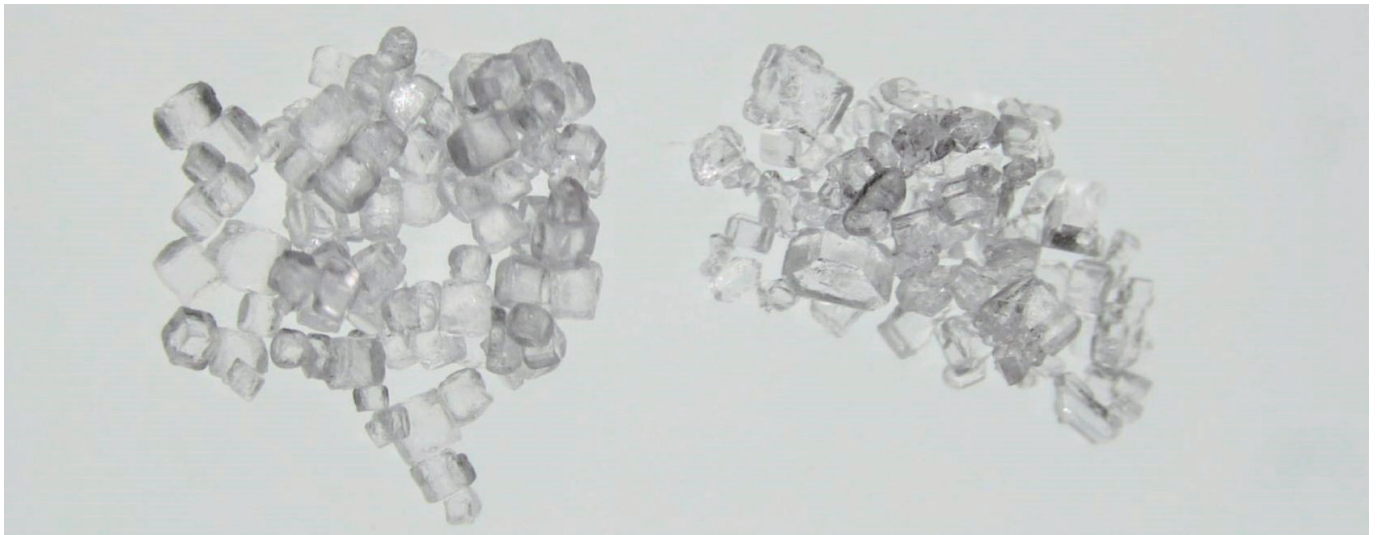


# 傻傻分不清 – 糖和鹽

## TPS 15A微米單晶繞射 – 晶體結構之美

吳來錦 博士

國家同步輻射研究中心 X 光散射小組



圖一 鹽晶體(左)、蔗糖晶體(右)

如果在顯微鏡下觀察蔗糖和鹽晶體，兩者的外觀都是無色透明的，雖然在形狀上略有不同，但很難直接區分出來，如圖一。最簡單而直接的分辨方式是用舌頭(味覺)嘗嘗看味道，但這兩種物質的化學組成和結構截然不同。蔗糖是一種有機物，是一個雙糖分子，分子式： $C_{12}H_{22}O_{11}$ ，組成元素為碳、氫、氧原子；結構上，蔗糖屬於單斜晶系(monoclinic)，空間群為 $P2_1$ 。鹽的分子式則是 $NaCl$ ，由一個鈉離子和一個氯離子所組成；結構上，屬於面心立方(face-centered cubic)，空間群則為 $Fm-3m$ 。

結晶學，正是一門以「X 光單晶繞射結構解析技術」探討原子或分子在晶體中排列方式的結構科學，並用以探討物理、化學性質和生物體各種反應作用間的關聯性，對於物理、化學和生物醫學等領域都至關重要。因此，了解和認識結構，就好比擁有調控物理、化學性質，甚至生物機能的鑰匙。早期比較著名和重要的結構包括六角的苯環(benzene)、二維的碳結構(graphite)、盤尼西林(penicillin 青黴素)、維他命 B12 (vitamin B-12)、肌紅素 / 肌紅蛋白(myoglobin)、血紅素(hemoglobin)，乃至於遺傳物質去氧核糖核酸(DNA)的雙股螺旋結構。隨著機械、電腦、軟體等的進步，現代的數據收集和結構已變得相對容易許多。

### X 光單晶繞射現象

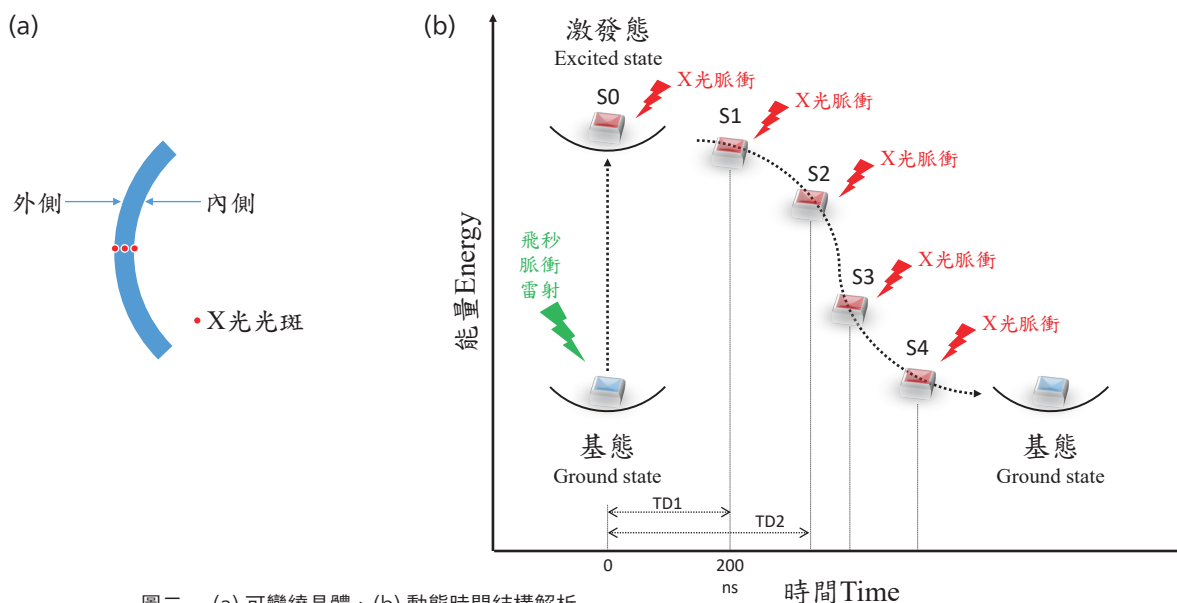
當 X 光通過晶體樣品，由於 X 光波長和晶體的三維晶格面間距(或原子間距離)相近( $1 \sim$  數個 $\text{\AA}$ ,  $1 \text{\AA} = 10^{-10} \text{ m}$ )，會發生干涉現象，而產生建設性或破壞性干涉，如布拉格定律所描述，此即為 X 光繞射現象。

TPS 15A 微米單晶光束線(micro-crystal X-ray diffraction)[1]，是本中心第一條專為化學、材料等單晶樣品(非生物蛋白質樣品)所建造的 X 光單晶繞射結構解析光束線。此光束線使用低溫聚頻磁鐵(CUT18)為光源，X 光能量範圍為 9 - 35 keV，透過三面聚焦鏡可以將 X 光光斑聚焦至  $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ ，另有 X 光光圈可獲得  $5 \times 5 \mu\text{m}^2$  的光斑。

該光束線的應用除了常溫、低溫(利用液態氮 $\sim 100 \text{ K}$ 、液態氫 $\sim 10 - 20 \text{ K}$ 降溫)的結構解析外，還可進行：(1) 可彎繞晶體的微米結構解析、(2) 高壓晶體結構解析、(3) 照光激發態結構解析和動態時間結構解析等，分列介紹如下。

#### • 可彎繞晶體的微米結構解析 (bending crystal structure mapping)

由於 TPS 15A 的微米級光斑 ( $5 - 10 \mu\text{m}^2$ )，可收集同一顆晶體上不同位置的 X 光繞射訊號，以獲得不同位置的



圖二 (a) 可彎繞晶體、(b) 動態時間結構解析

### 參考文獻：

1. L. C. Wu, J. J. Lee, S. H. Chang, M. H. Lee, B. Y. Liao, AIP Conf. Proc. **060029**, 2054 (2019).
2. A. Worthy, A. Grosjean, M. C. Pfrunder, Y. Xu, C. Yan, G. Edwards, J. K. Clegg, J. C. McMurtrie, Nat. Chem. **65**, 10 (2018).

結構變化，如圖二 (a)。X 光沿著可彎繞晶體的垂直彎曲方向連續收集多組數據，即可觀察晶體內、外側不同彎曲程度的結構變化 [2]。

### • 高、低溫之高壓晶體結構解析 (high pressure crystallography)

地質學家為了了解礦物在地底下的高壓環境中，礦物的形成、結構相變等資訊，可透過高壓鑽石砧加壓樣品，以便模擬礦物在地底下的環境。近年來，科學家發現材料在高壓環境下，物理性質亦會發生變化，因此也被廣泛用於材料相關的研發。

### • 照光激發態結構 (photocrystallography) 和動態時間結構解析 (pump-probe/time-resolved structure)

在 TPS 15A 是利用固態雷射當作激發光源照射處於低溫 (以液態氦降溫) 的樣品，使樣品處於激發態，再以 X 光收集樣品處於激發態的繞射數據，獲得樣品的激發態結構。

動態時間結構解析的樣品在室溫環境下，以「脈衝飛秒雷射」當作激發光源照射樣品，使樣品從基態被激發至激發態，再以 X 光收集樣品被激發後，回到基態前，不同時間點的 X 光繞射訊號，如圖二 (b)。

X 光單晶繞射對於新穎材料的開發與研究、生物醫學的蛋白質結構等的研究扮演著極為重要的角色。認識結構，有助於設計、調控物理和化學性質，亦可幫助了解複雜生物體內的各種反應如何進行、疾病如何發生等等，以便研究製造出適合治療疾病的藥物，對症下藥。本中心 TPS 已有兩座生物蛋白質結構光束線 (TPS 05A、TPS 07A)，近期 TPS 15A 也將加入「晶體結構解析」的行列，以彌補「小分子單晶結構解析」(所有非生物蛋白質類的分子結構) 的技術空缺。

## 會議/課程

- 112 年度先進光源暑期科學實習 (7 月 31 日至 8 月 30 日)
- 2023 年薄膜 X 光散射訓練課程 (8 月 8 日至 9 日)
- 2023 年 TPS 21A - X 光奈米繞射暨數據分析訓練課程 (8 月 18 日)
- 微光束線數據收集及處理研討會 (9 月 12 日)
- 2023 台灣創新技術博覽會 - 未來科技館 (實體：10 月 12 日至 14 日 / 線上：10 月 6 日至次年 3 月 6 日)
- 第二十九屆用戶年會暨研討會 (10 月 24 日至 26 日)
- 光源啟用三十週年 (10 月 24 日)
- TPS Open House (11 月 12 日)
- 2023 JACoW Team Meeting (JTM2023) (11 月 26 日至 12 月 1 日)