

[rigaku.com](https://www.rigaku.com)で見る

B-SCX1003 - 自動構造解析プラグイン ~AutoChem~

はじめに

自動構造解析プラグインAutoChemを導入することにより、測定・データ処理・構造解析が同時進行する、構造解析パイプラインを構築することができます。25フレーム測定するごとにデータ処理を実行して構造解析用のファイルを更新し、構造決定と精密化を自動実行するというプロセスを繰り返します。測定を絶え間なく進める一方、分子構造をAutoChemタブに表示します。このため測定中でも、構造解析の結果を確認できます。直接法（SHELXT、SIR）やパターソン法、Charge Flipping法などの複数の位相決定プログラムを自動的に実行し、最適なソフトウェアを選択することにより、構造解析成功の可能性を最大化します。また、測定中でもOlex²を起動することができるため、ユーザーによるインタラクティブな操作がいつでも可能です。簡単操作でカスタマイズされた構造解析結果のレポートを作成する機能も用意されています。

測定・解析例

Ylideを用いた自動構造解析例を示します。測定初期はCompletenessが低く、初期構造が得られていませんが（図1）、測定が進みCompletenessが上昇するにつれて、徐々にターゲット化合物の構造が構築されていく様子を見ることができます（図2, 3）。図4に構造解析結果を示します。

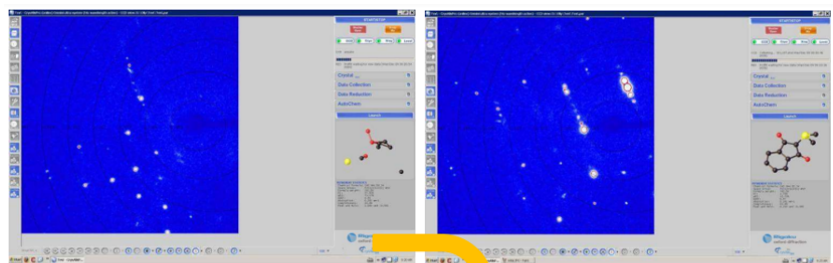


図 1 25 フレーム測定後

図 2 50 フレーム測定後

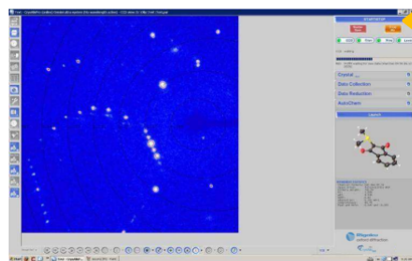


図 3 75 フレーム測定後

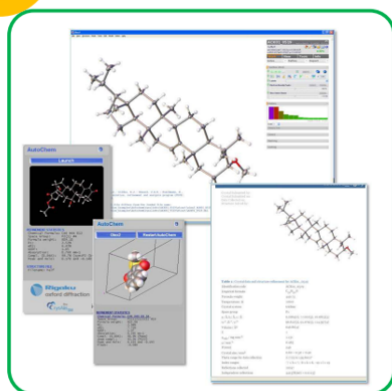


図 4 構造解析結果

推奨装置・ソフトウェア

- 単結晶X線構造解析装置 XtaLAB Synergyシリーズ
- デスクトップ単結晶X線構造解析装置 XtaLAB mini II
- 自動構造解析プラグイン AutoChem

おすすめの製品



XtaLAB mini II

デスクトップ単結晶X線構造解析装置 *XtaLAB mini II*
HPC X線検出器を搭載した世界最小の単結晶X線構造解析装置。



XtaLAB SynergyCustom

超高速・超高精度単結晶X線構造解析装置 *XtaLAB SynergyCustom*
現有システムのアップグレードや、ニーズに合わせたカスタムモデルを構築可能なシステム。



XtaLAB Synergy-DW

2波長搭載単結晶X線構造解析装置 *XtaLAB Synergy-DW V HF*
多用途性と組み合わせて驚異的なパフォーマンスを実現。



XtaLAB Synergy-ED

電子回折統合プラットフォーム
データ測定から結晶構造の決定まで、シームレスなワークフローを備えた唯一の単結晶電子回折装置。



XtaLAB Synergy-i

マイクロフォーカス封入管システム搭載単結晶X線構造解析装置 *XtaLAB Synergy-i*
 広範囲の低分子試料に対応可能な単結晶X線構造解析装置のエントリーモデル。



XtaLAB Synergy-R

回転対陰極線源搭載 単結晶X線構造解析装置 *XtaLAB Synergy-R*
 超高輝度X線発生装置を搭載した単結晶X線構造解析装置のフラッグシップモデル。



XtaLAB Synergy-S

超高速・超高精度 単結晶X線構造解析装置 *XtaLAB Synergy-S*
 高輝度マイクロフォーカス封入管線源を搭載し、回折データを精度よく、迅速かつ効率的に収集可能なX線構造解析装置。



CrysAlis^{Pro}

単結晶構造解析統合プラットフォーム *CrysAlis^{Pro}*
 データの収集と解析、高度な機能を備えた統合ソフトウェア。