

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

B-SCX1006 - 高圧下での結晶構造解析 ～加圧による結晶構造の変化～

はじめに

これまで高圧下における単結晶試料の測定・解析は、専門家による知識・技術を必要としてきました。CrysAlis^{Pro}は、高圧測定用のモジュールを標準搭載しており、お手持ちの高圧セル（DAC）の仕様に合わせた、最適な測定スケジュールを提案します。また、DAC専用の逆格子ビジュアライザーの表示、キュレットやガスケットに由来する不要な回折点や回折線の除去など、専門家の高度なご要望に応える機能を多数搭載しています。

測定・解析例

図1に測定の手順を示します。使用しているDACの開口角とサンプルの回折対称の情報から、カスタマイズされた最適な測定スケジュールを自動計算します。また、測定者の要望に応じ、スケジュールを変更することも可能です。

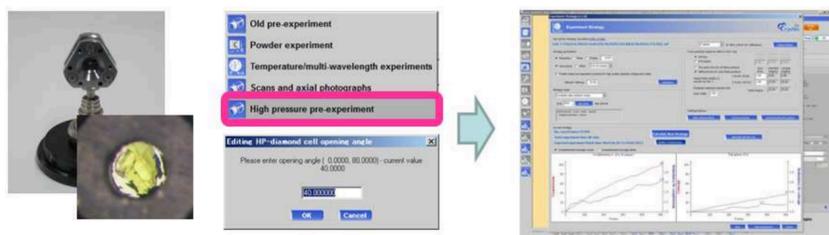


図1 CrysAlis^{Pro}による測定スケジュールの自動計算

図2に測定データから、DAC由来の不要な回折線を取り除く作業を示します。画面上で直感的に不要な回折線を確認し、マウスのドラッグ等で簡単に除去することが可能です。このようにして、サンプルからの回折線だけを取り出すことができれば、あとは通常の構造解析を行うことができます。図3に異なる圧力下における分子の立体構造の変化を示します(1)。

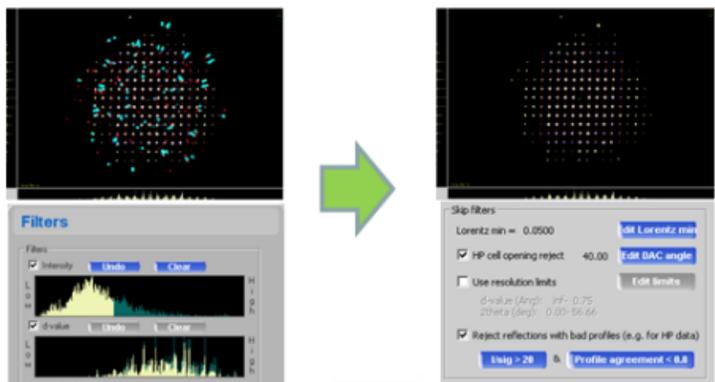


図2 不要な回折線の除去

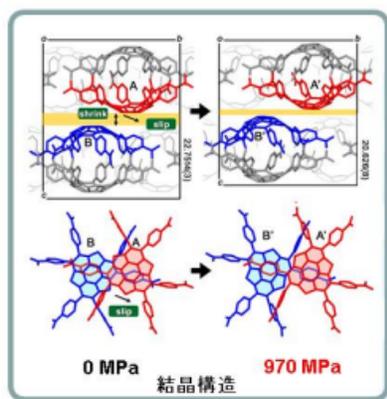


図3 高圧下による結晶構造解析結果

参考文献：(1) I. Hisaki, H. Toda, H. Sato, N. Tohnai, and H. Sakurai: *Angew. Chem. Int. Ed.*, 56 (2017) 15294-15298.

推奨装置

- 単結晶X線構造解析装置 XtaLAB Synergyシリーズ

おすすめの製品



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 VHF* 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-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。