Application Note B-SCX1011

View on rigaku.com

B-SCX1010 - 使用最先进的实验室设备对超小晶体进行结构分析。

导言。

利用低温电子显微镜对极小的有机化合物晶体进行电子衍射（MicroED）最近成为人们关注的焦点，因为主要由于多重反射效应，MicroED 不适合测量和分析大于 1 μm 的晶体，但其优点是能够测量小于 1 μm 的微晶体。.然而，在一些论文和科学文章中，作为比较对象的单晶 X 射线结构分析的现状往往被认为需要几百微米的晶体才能进行结构分析，才能达到提交科学文献所要求的质量。为了验证这一说法的真实性，我们使用最先进的实验室仪器 XtaLAB Synergy 对商品药物胶囊中的细粉晶体进行了结构分析。

测量和分析示例

使用最新的实验室设备 XtaLAB SynergyCustom FR-X（带 HyPix-Arc 150°），在 "这是什么？"模式下对从非处方解热镇痛药胶囊中提取的超细晶体（3 × 2 × 1 μm）（图 1）进行自动测量和分析，以确定未知结构。结果，在大约 30 分钟内完成了自动测量和分析，并获得了对乙酰氨基酚分子的结构（图 2）。

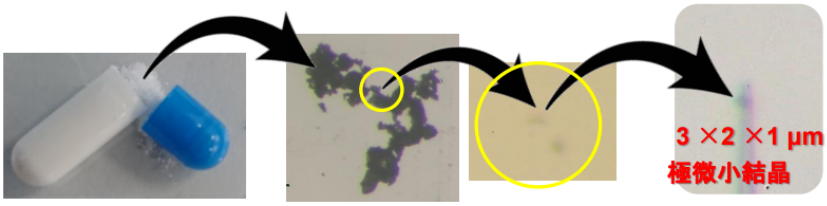

图 1 商用解热镇痛胶囊中的三子晶体

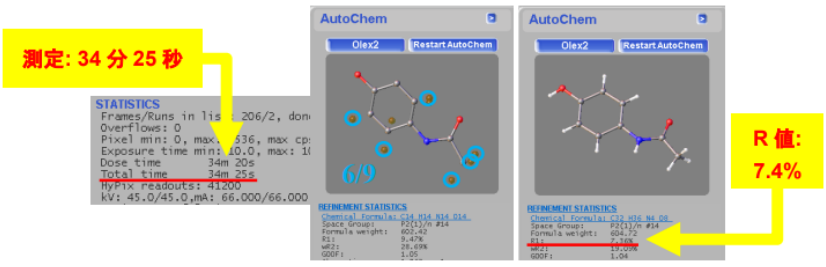

图 2 这是什么?

在对相同晶体进行测量和结构分析后，结构分析结果由 "checkCIF "服务进行验证，该服务可确定结构分析是否符合 IUCr 规定的标准。结构分析结果证实，没有严重缺陷（ALERT A）或严重问题（ALERT B），结构分析结果良好（表 1）。

表 1：三个子晶体的结构分析结果

系统	探测器	总时间	I/σ(I)	Rint （总时间/最后时间）	R1/wR	GooF
XtaLAB-SynergyCustom	HyPix-Arc150°	14 h 15 分钟	11.18	7.2%/33.2%	5.80%/14.30%	1.045

推荐设备和软件

- 单晶X 射线结构分析系统 XtaLAB SynergyCustom + 超亮X 射线发生器FR-X+ 曲面光子计数混合像素探测器 HyPix-Arc150°
- 单晶结构分析集成平台 CrysAlisPro

Related products

XtaLAB SynergyCustom

A bespoke, extremely high-flux diffractometer with custom enclosure and the flexibility to utilize both ports of the rotating anode X-ray source.