

XtaLAB Synergy-EDによる結晶構造解析

関連製品：電子回折装置

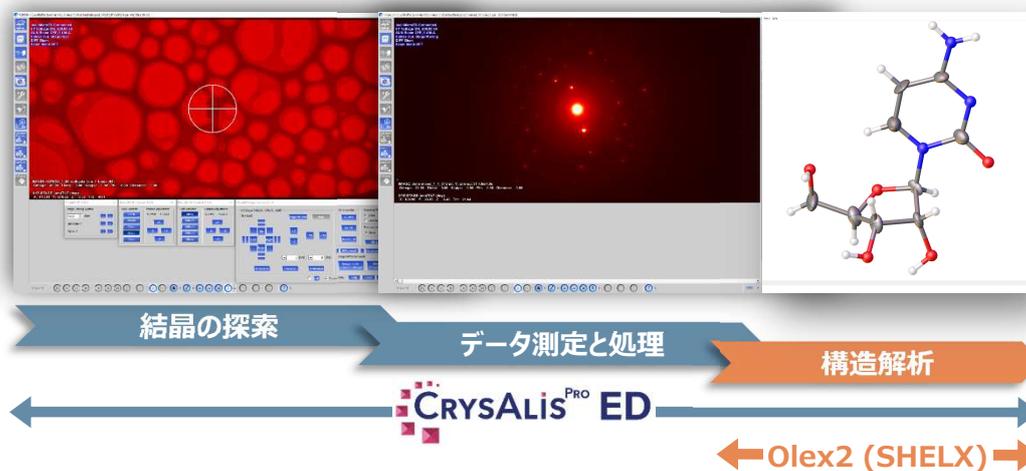
サブミクロン結晶の構造解析に革新的なXtaLAB Synergy-ED



左：JCM-7000 NeoScope™によるDiflubenzuronの低真空モード反射電子像
 右：XtaLAB Synergy-EDによるDiflubenzuronの電子回折構造解析結果

XtaLAB Synergy-EDは、株式会社リガクおよび日本電子の共同開発による微小結晶の電子回折図形の取得に最適化された電子回折装置です。超高感度高速検出器「HyPix-ED」および測定から構造解析まで包括する3D ED/MicroED用ソフトウェア「CrysAlisPro for ED」が搭載され、誰もが容易により良い単結晶電子回折構造解析を行うことが可能です。

上図は、Diflubenzuron ($C_{14}H_9ClF_2N_2O_2$)の微小結晶をそのままSynergy-EDで構造解析した結果です。



簡単な試料調整

XtaLAB Synergy-EDでは、TEM観察用のグリッドを使用します。以下のような簡単な手順で試料の準備が可能です。試料の粒子が大きい場合は、ガラスプレートやスパチュラなどで試料を磨り潰して使用します。



ガラスプレートに試料を少量乗せます。

グリッドに直接試料を付着させます
 余分な試料を払い落とします。

試料ホルダーにセットします。

容易な電子回折測定

試料の観察と電子回折測定は、CrysAlis^{Pro} for EDのシームレスなvisual modeとdiffraction modeの切り替えで迅速に行うことが可能です。測定したい粒子をマウスクリックしMicroED Stage ControlメニューのDiff.expボタンをクリックすると、diffraction modeに切り替わります。MicroED/3D ED DCウィンドウのStart experiment ボタンをクリックすると、電子回折の自動測定が始まります。主な測定は、-60~+60度のステージ傾斜において行われます。



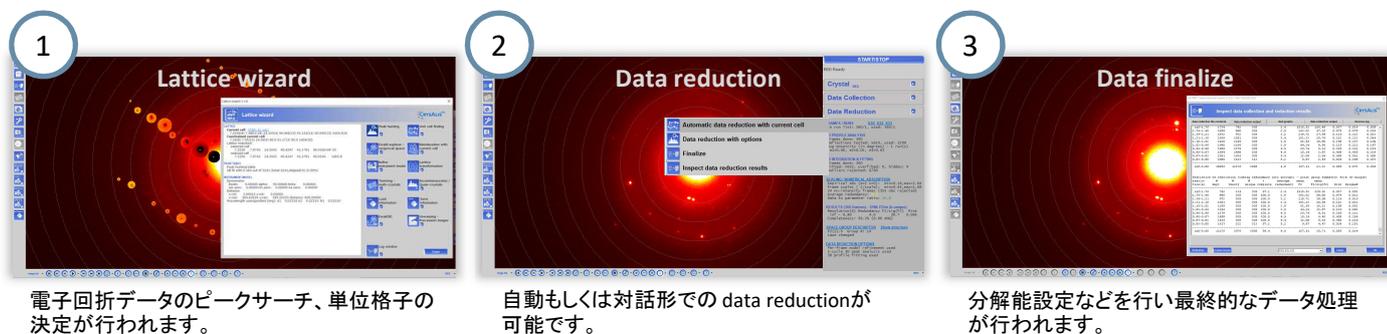
1 visual modeで適当な粒子を探します。

2 Start experimentボタンをクリックします。

3 電子回折の自動測定が開始されます。

堅牢な電子回折データ解析

CrysAlis^{Pro} for EDは、AutoChemによる電子回折データの自動解析までサポートします。また以下のように、手動での解析も簡便なメニューで確実に効率良く行えます。幾つかの測定データをマージして解析することも容易です。



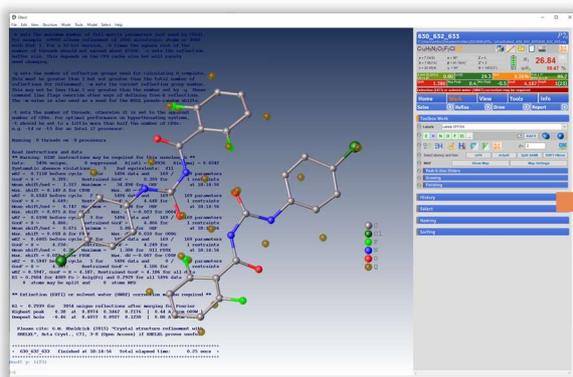
1 電子回折データのピークサーチ、単位格子の決定が行われます。

2 自動もしくは対話形での data reductionが可能。

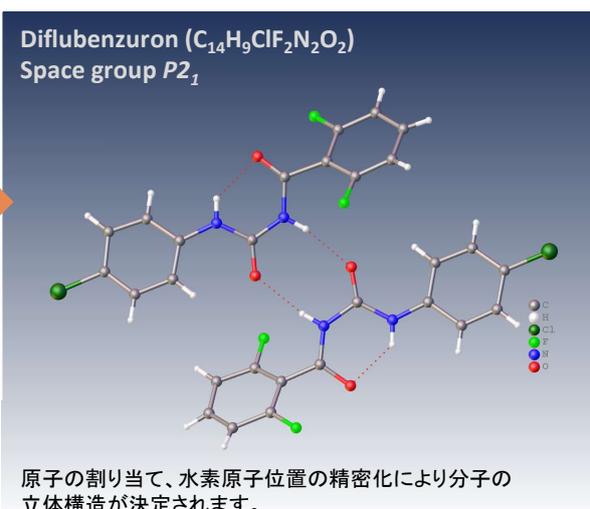
3 分解能設定などを行い最終的なデータ処理が行われます。

最良の分子構造モデルを構築

CrysAlis^{Pro} for EDは、Olex2での構造解析へシームレスに移行できます。直感的なユーザインターフェースを使用して、分子の立体構造を精密化することが可能です。



電子密度ピークから分子の初期構造が解析されます。



このカタログに掲載した商品は、外国為替及び外国貿易法の安全輸出管理の規制品に該当する場合がありますので、輸出するとき、または日本国外に持ち出すときは当社までお問い合わせください。 Copyright © 2022 JEOL Ltd.

