

ナノバイオ・フォトニクス実験室

X線構造解析装置

～結晶構造と分子構造を計測～

装置の概略

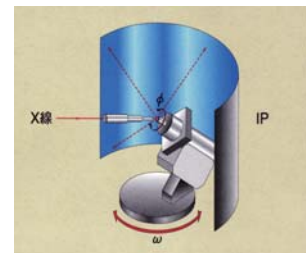
右図が、理学電気社製のイメージングプレート単結晶自動X線構造解析装置 R-AXIS RAPID II です。結晶性物質のナノレベルの構造を知るには、単結晶X線構造解析装置は必須の測定装置です。連続的に動かした単結晶に単色化されたX線を当て、そのブラッグ反射をIP（イメージングプレート）で2次元的なスポットとして観測します。複数枚にまたがるスポットを積分し、指数付けを行います。得られたデータを付属の構造解析ソフトにかけると、結晶構造と分子構造が得られます。詳細な結合距離や結合角によりその電子状態や安定性が評価できます。



単結晶X線回折装置

仕様

X線発生部	3 kW封入管 (Mo)
ゴニオメータ一部	χ , ϕ , ω 軸可変
検出器部	カメラ長 127.4mm : IPサイズ 460×256mm
制御・解析装置部	RAPID AUTO : CrystalStructure
吹き付け低温装置	窒素ガス抽出型



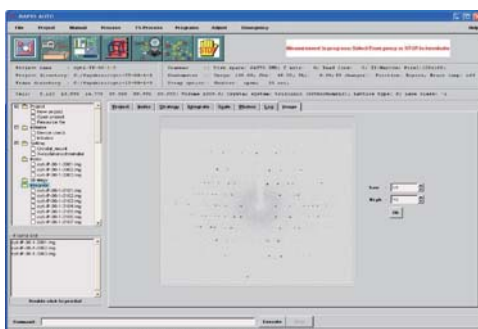
測定概念図

測定の流れ

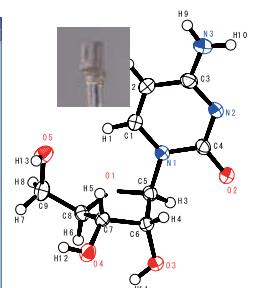
0.1~0.3mm角の単結晶をクライオループを用いて急速冷凍。
 試料をゴニオメータヘッドに取り付け。
 結晶はCCDカメラを通してセンタリング。
 露光→読み取り→指数付け→積分強度計算を実行。
 スケーリングやラウエ対称の決定。
 回折強度や結晶学的データのファイルを出力。
 構造解析の手順に対応したフローバーを順に実行。
 空間群の決定、初期位相の計算、モデルを構築。
 精密化後、解析結果の記述、レポートを作成する。



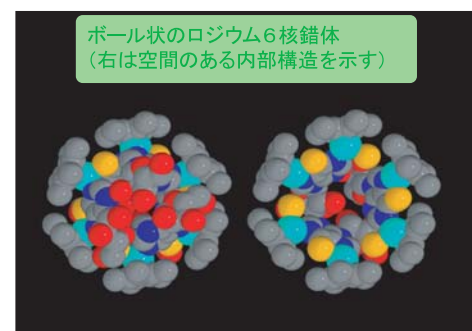
冷窒素ガス吹き付け装置



解析画面



シチジン(写真)の
解析結果



環状ロジウム錯体の解析結果