

学外研修報告

X線回折セミナー「単結晶 X線構造解析の基礎と応用」へ参加して

共通機器部門 共通利用機器管理班 河田 尚美

1. はじめに（目的等）

単結晶 X線構造解析は新規物質の構造決定だけでなく、その物性や機能を考察するうえでも不可欠な技術である。広島大学保有の装置は Bruker 社製でありその装置のデータを用いた講習会には複数回参加している。本セミナーではリガク社製の装置で得たデータでの解説となるため、新しい視点での気付きがあるのではと考え参加した。

2. 期間・場所

期間：平成 30 年 6 月 19 日

場所：大阪大学 吹田キャンパス

3. 参加者等

大学技術職員等 約 20 人

4. 研修内容

原理編：単結晶 X線構造解析の原理, 結晶の対称, 絶対構造の決定と評価

測定編：単結晶 X線構造解析の流れ～回折データの測定から構造解析まで～, 結晶の選択とマウント, センタリング,

測定・データ処理ソフト CrystalClear, RAPID-AUTO について, 精度の良い測定には

解析編：精密化と解析結果, checkCIF とそのアラート対策について, Olex2 について

5. まとめと感想

開催地の大阪大学では地震発生直後であったため、開催も危ぶまれたが、幸い開催予定の建屋は被害が少なく交通機関も一部運転を再開し始めたため開催が決定した。

リガクの最新の測定ソフトでは測定を行いながら荒く初期位相を計算させるプログラムが導入されていた。Agilent の装置で同様の機能を見たことがあったが、Agilent の単結晶 X 線をリガクが吸収したとの話だったので納得した。非常に目を引く機能で見学等にも向いている。

変わったところでは、水のりやサボテンの針をサンプリングに用いることができるとコメントがあり、精度を上げるためには固定観念にとらわれない柔軟な発想も必要であると感じた。

最後にフリー解析ソフト Olex2 の紹介があった。近年主流になりつつあるソフトで評判も良いが、従来の解析ソフトと表示が大きく変わっており、取り付きにくいところがあった。正確な手順やコツを教えていただけたことで、新機能を活かし解析の幅が広がる可能性が見出せた。