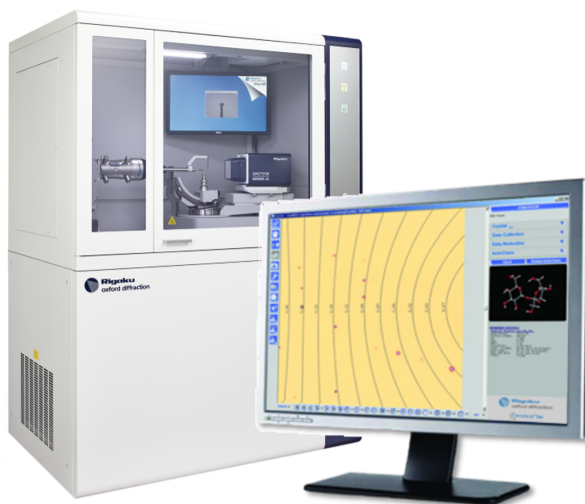


単結晶構造解析 統合プラットフォーム

CRYALIS^{PRO}



1. はじめに

CrysAlis^{Pro}は、無機・有機化合物、蛋白質、すべての試料において、同じプラットフォームを提供するX線回折データ測定・処理ソフトウェアです。使い勝手のよさを追求したユーザーフレンドリーなインターフェースを搭載し、完全自動処理のほか、インタラクティブ処理や完全マニュアル処理にも対応します。さらに、オプションの自動構造解析プラグインAutoChemを使用することで、測定から構造解析まで、完全自動化を実現します。以下に、CrysAlis^{Pro}の特長を紹介します。

2. 主な特徴

2.1. ユーザーフレンドリー

どなたでも簡単かつ直感的に操作できるユーザーインターフェースを搭載しています。GUI上でクリックするだけで、“Small molecule (SM)”モードと“Protein (PX)”モードの切り替えが可能です(図1)。それぞれのモードに最適なワークフローとツール構成に速やかに切り替わるため、試料によらず、同じ操作感でデータ測定および処理ができます。

構造解析用の外部プログラムとの連携もとれており、“SM”モードではCrystalStructureのほか、Olex²、WinGX、Janaなどの多彩なプログラムに対応します。“PX”モードでは、CCP4を起動することができます。

また、mtz形式での出力もできます。

2.2. 洗練されたワークフロー

結晶のマウントからスクリーニングや予備測定、最適条件の決定、X線強度データの収集、データ処理まで、シームレスに、無駄なく無理なく流れるワークフローをご提供します。また、それぞれのステップにおいて、結果の善し悪しを左右する要因を自動で判断・排除します(図2)。

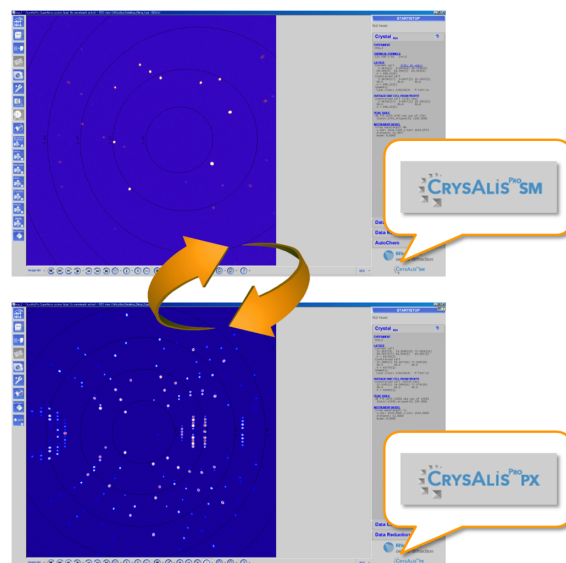


図1. CrysAlis^{Pro}のGUIとモードの切り替え。

2.3. 完全自動化

無機・有機化合物の構造解析では、自動構造解析プラグイン AutoChemと組み合わせることにより、X線強度データ収集と同時進行でデータ処理と構造決定・精密化を自動で実行できます (図3)。全データの収集終了を待たずに、測定中の試料の分子構造を視覚化できるため、時間を無駄にしません。また、化学組成の情報がない場合でも、自動で解析ができます。CrysAlis^{Pro}は、高度な自己最適化アルゴリズムを採用し、特別な操作を必要とせずに、迅速に高品質なデータを提供いたします。

2.4. 充実機能

2.4.1 パワーツール

インタラクティブ処理による単位格子決定のためのツールが充実しています (格子ウィザード)。逆格子空間での処理をユーザーフレンドリーかつ強力にサポートする Ewald Explorer (逆格子ビューアー：図4)は、逆格子の表示のみならず、ビューアー上での指数

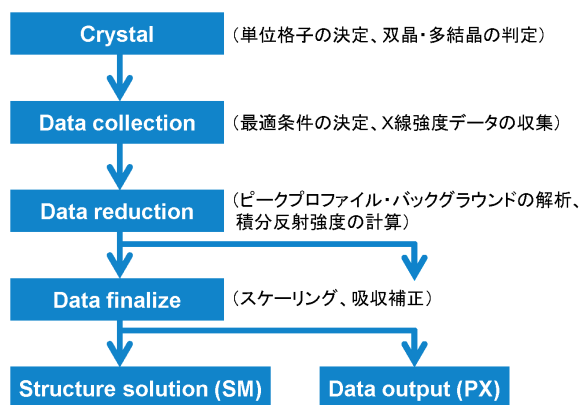


図2. 一般的な実験の流れ。

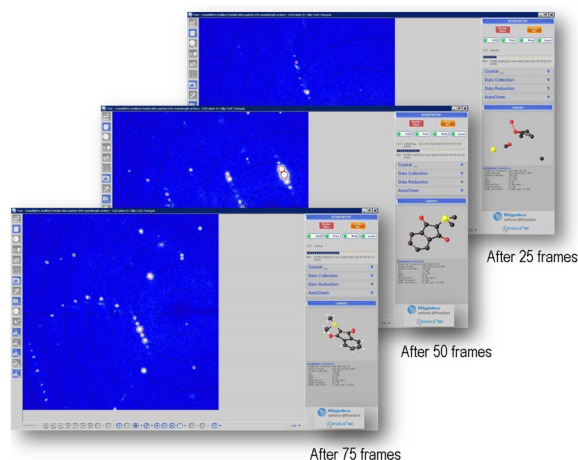


図3. AutoChemによる解析結果の表示例。

オンラインモードでは、指定したフレーム数が得られるごとに、データ処理と各種ファイルの更新が行われ、構造決定と精密化が自動で実行されます。

付けや強度・d値を閾値とした回折スポットのフィルタリングも可能で、アイスリングやアーチファクトを容易に除去できます。回折スポットのグループ分けや回折格子の格子周期の判定もできるため、双晶や多結晶、不整合結晶、準結晶など、自動処理では対応が難しいデータの取り扱いに威力を発揮します (図5)。

また、結晶外形と面指数の関連づけ、ダイヤモンドアンビルセル (DAC) を用いた高圧条件下での測定、温度・波長可変測定、粉末回折実験 (図6)、単結晶試料の回折データに基づく粉末回折パターンのシミュレーション、プリセッション写真のシミュレーションや結晶の軸立て条件の計算など、特殊な測定や解析にも対応します。

さらに、CrysAlis^{Pro}には種々の補正機能が搭載されており、X線強度データ収集でしばしば直面する問題に対応します。測定中に結晶がずれた場合には、それを判断して補正することができます。また、マウントの仕方が原因で、あるいは試料特有の性質により、バックグラウンドが高くなる場合がありますが、そのような場合にも、高度なバックグラウンド処理により、構造解析に見合った強度データを得ることができ

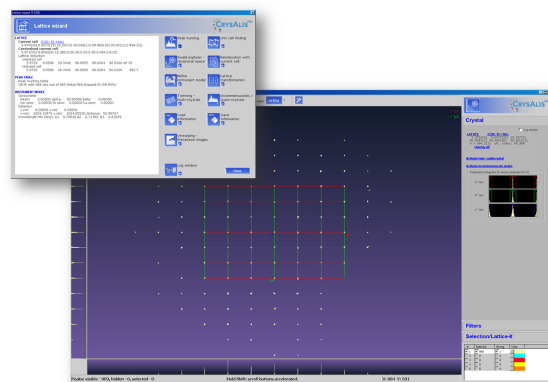


図4. 格子ウィザード (Lattice wizard) と逆格子ビューアー (Ewald Explorer)。

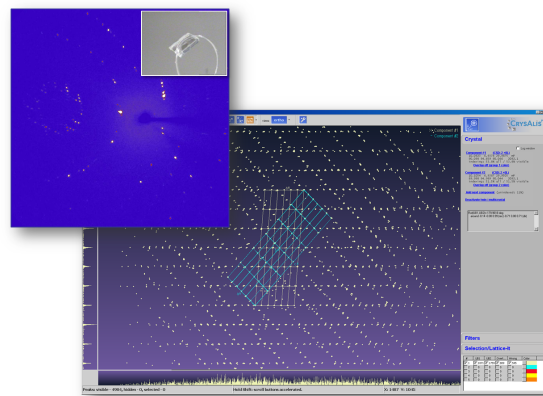


図5. Ewald Explorerを用いた双晶のデータ処理。

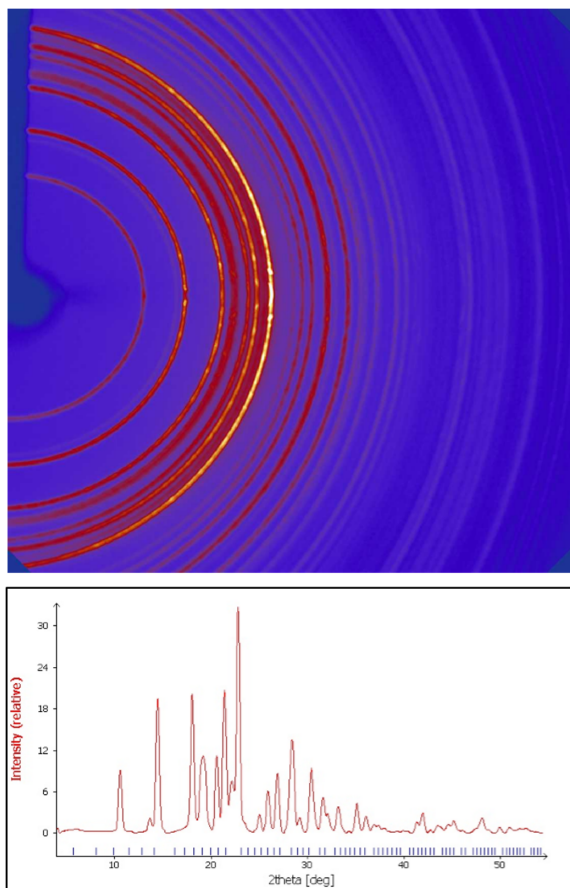


図6. 粉末試料の測定例 (上: 2次元回折像, 下: X線回折パターン).

ます.

2.4.2. CellCheckCSD

通常のX線構造解析装置では、最終的に構造を得るまで、測定しようとしている結晶が目的化合物の結晶なのか、原料の結晶なのか、あるいは構造既知の結晶なのかを知ることができません。データベースインターフェースCellCheckCSDは、Cambridge Structure Database (CSD) に自動でリンクし、“リアルタイム”な格子定数の情報に基づき、予備測定中あるいは測定後にデータベース検索を実行することができます(図7)。特別なライセンスは不要です。ヒットした構造は、MercuryもしくはWebCSDで即座に表示することも可能です(ライセンス必要)。また、解析した構造を“ローカルデータベース”に登録し、今後の検索対象に含めることも可能です。

2.4.3. “What is this?” テスト

スクリーニング測定の際に単位格子が見つかったりすれば、従来の予備測定の代わりに“What is this?”テストを実行できます。“What is this?”テストでは、非常に短時間で目的化合物の構造情報を推定することができます。得られた情報は、X線強度データ収集のための最適条件の決定に使用できます。

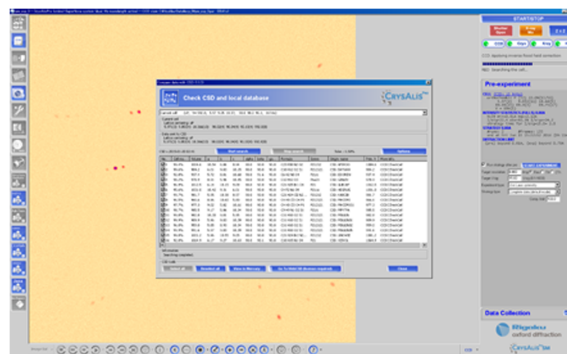


図7. CellCheckCSD.

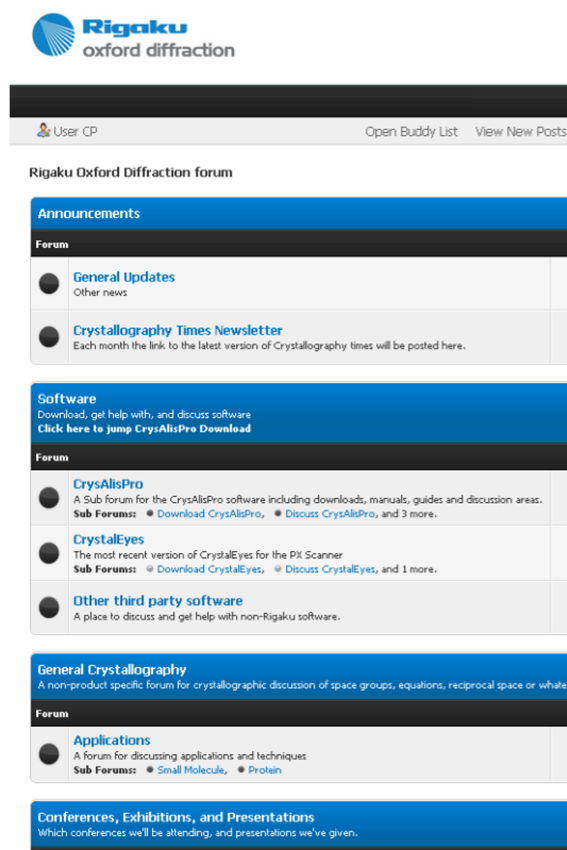


図8. Rigaku Oxford Diffraction フォーラムの画面.

2.5. ユーザーフォーラム

Rigaku Oxford Diffractionでは、ユーザーコミュニケーションの場としてフォーラムを開設し、現在、世界各国1,750名以上のユーザーのみならずご利用いただいております(図8)。フォーラムでは、ソフトウェアや構造解析法に関する質問を投稿したり、他のユーザーと知識を共有したり、既存の解決方法を参照したりすることができます。また、最新版CrysAlis^{Pro}に関する情報や、機能の詳細についてのプレゼンテーション資料・動画の提供も行っております。

CrysAlis^{Pro}は、フォーラムからダウンロードしてお使いいただけます。フォーラムのご利用にはユーザー登録が必要です。フォーラムを初めてご利用される方

は、下記QRコードを読み込むか、下記URLにアクセスし、ユーザー登録をお願いします。



<http://www.rigakuxrayforum.com/>

3. おわりに

CrysAlis^{Pro}は、旧アジレント・テクノロジー社製単結晶構造解析装置に付属のソフトウェアとして高い評価をいただいておりますが、このたび、XtaLAB PROシリーズの装置制御・データ処理ソフトウェアとしてご使用いただけるようになりました^{*1}。また、オフラインのデータ処理機能は、リガク単結晶製品をお使いいただいているみなさまに、追加費用なしで提供しております^{*2}。

CrysAlis^{Pro}は、多様なユーザーニーズに応え、常に進化し続けるソフトウェアです。これまで処理がうまくいかず、構造解析をあきらめてしまったデータがありましたら、ぜひ一度、CrysAlis^{Pro}をお試しいただければと思います。

^{*1} 現時点では、XtaLAB PROのみ対応しています。

^{*2} IP製品（R-AXIS IV/IV⁺/VII/RAPID）のデータには、現時点では未対応です。