

単結晶 X 線構造解析講習会

— 「Yadokari-XG 2009」を使った disorder 構造解析—

主 催：東北大学グローバル COE プログラム「分子系高次構造体化学国際教育研究拠点」

共 催：日本化学会

会 期：3月19日（金）

会 場：東北大学大学院理学研究科化学教室

参加申込方法：ホームページの申込用紙にて

締 切：3月1日（月）

結晶構造解析フリーソフトウェア「Yadokari-XG 2009」を一般公開後、全国の多数の方々から利用申請を頂きました（2010年2月10日現在、87グループ、342名）。

本ソフトは「SHELX」の「disorder 解析」に必要な命令を GUI で可視的に入力することを目的に開発し、旧バージョンから機能とインターフェイス両面で大幅な改善を達成しました。

本講習会では開発者の一人、根本隆先生の講演と共に「温度変化による結晶相転移」を伴う「disorder 回折データ」を用いて「論文用 CIF 作成まで」の実習を行います。

本ソフトの「裏技」や「新機能」を学習するためにも、是非ご参加下さい。

プログラム

1. 講 演「Yadokari による X 線構造解析 --- できること、できないこと」

講 師：根本隆（京都大学化学研究所）：11:00～12:00

対 象：特に制限無し、80名程度

場 所：東北大学大学院理学研究科化学専攻第4講義室（化学棟後方：別棟）

2. 実 習「disorder 構造解析」甲千寿子、権根相（東北大学）：13:00～15:30

対 象：「Yadokari-XG 2009」利用申請者、40名で締切。

20台の講習会用パソコンを準備しますが、最新 Revision「Yadokari-XG 2009」をインストールした手持のパソコンでの実習をお勧めします。なお、実習用データ・マニュアルはホームページ(<http://www.xray.chem.tohoku.ac.jp/user/other/download.html>)よりダウンロードし、データはパソコンに保存し、マニュアルを印刷してご参加下さい。

（マニュアルの完成品は2月末に掲載予定ですが事前に必要な方は申込用紙の要望箇所
に書いて頂ければメールにて送付致します）

場 所：東北大学大学院理学研究科化学専攻メディア実習室（実験室2階）

3. 懇談会「根本隆先生」を囲んで：15:50～17:00

実際のプログラム開発者です。「ソフトウェア」だけでなく、現在遭遇している「結晶構造解析のトラブル解決」の相談等も可能です。

場 所：東北大学大学院理学研究科化学専攻大会議室（化学棟3階）

参加費 無料

申込先・問合先 〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3-07 東北大学大学院工学研究科
化学バイオ系 GCOE 支援室 担当 甲千寿子 電話/ファックス(022)795-4132

Email: ckabuto@m.tains.tohoku.ac.jp

Disorderの解析例

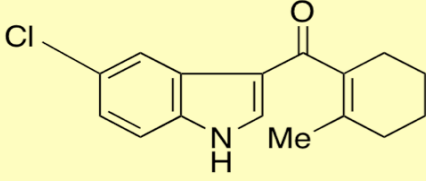
最近の構造解析の中に結晶中でdisorderで配置されている化合物の例がありました。
さらにこの結晶は「温度変化」による結晶の「相転移」を起こしています。

Yadokariソフトの「裏技」や「新機能」を紹介します。

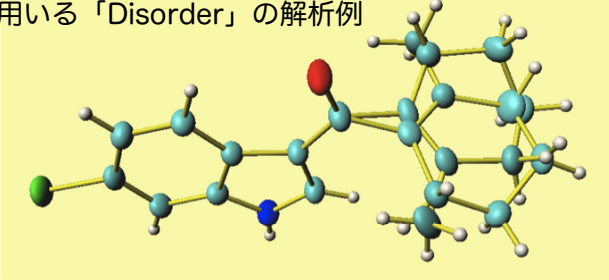
現時点で「Yadokari-XG 2009」は「X線結晶構造解析」に必要なほとんどの機能を追加したと思っております。

なお、ソフトは頻繁に更新していますので最新Revisionをお使い下さい。

実習で用いる「Disorder」の解析例



Chemical Formula
 $C_{16}H_{16}NOCl$



(例1) 測定温度 : $-173^{\circ}C$	空間群 : $P2_1/n$
(例2) 測定温度 : $-100^{\circ}C$	空間群 : $Pna2_1$
(例3) 測定温度 : $-50^{\circ}C$	空間群 : $Pnma$

実習では

(例1) を使って以下の項目を学習します。

- 1) 回折データから「Yadokari-XG 2009」へのデータ転送
- 2) 初期構造解析 (SHELXS, SHELX, SIR2004, DIRDIF2008 などのソフトで)
- 3) 原子の帰属、初期構造精密化
- 4) 「disorder」の原子への分離
- 5) 原子名、並びなどの整理
- 6) 非水素原子の温度因子の精密化
- 7) 水素原子の付加
- 8) 最終精密化まで
- 9) 論文用CIF作成
- 10) 外部作図プログラムの使用法 (Ortep3, ORTEP II, Mercury, POV-Ray)
- 11) 各種geometry (分子間相互作用、水素結合など) の計算
- 12) 論文に使用する結晶解析結果の表 (MSWORD形式) の作成

(例2)、(例3) では「微妙な空間群の決定に関する注意と処理法」の他に

(例2) では精密化の段階で「disorder」部分の構造、異方性温度因子に「SHELX-Restraint(拘束)」命令が必要です。その入力方法を学習します。

(例3) では対称操作による「disorder」が存在します。

この場合には、原子番号付けや水素原子付加のための特殊操作が必要です。その入力方法を学習します。

従って、初心者(例1)でも熟練者(例2と例3)でも受講できます。