

サリドマイド湾曲薄膜結晶の放射光マイクロビーム自動測定/処理による構造解析

(東大院工¹・早稲田大学先進理工学部²・早稲田理工学術院³・早稲田大学ナノ・ライフ創新研究機構⁴・JASRI⁵・分子研⁶) ○吉田 知史¹・吉良 美月²・寺澤 有果菜²・朝日 透^{3,4}・馬場 清喜⁵・仲村 勇樹⁵・佐藤 宗太¹・藤田 誠^{1,6}

Structure analysis of the thalidomide distorted thin film crystal by automated synchrotron microbeam measurement/processing (1. School of Engineering, The Univ. of Tokyo, 2. School of Advanced Science and Engineering, Waseda Univ., 3. Faculty of Science and Engineering, Waseda Univ., 4. Research Organization for Nano & Life innovation, Waseda Univ., 5. JASRI, 6. IMS) ○Satoshi Yoshida¹, Mizuki Kira², Yukana Terasawa², Toru Asahi^{3,4}, Seiki Baba⁵, Yuki Nakamura⁵, Sota Sato¹, Makoto Fujita^{1,6}

Distorted film crystals are not suitable for single crystal x-ray diffraction studies due to weak diffraction and disorder of periodic arrangement. In this research, we picked up thalidomide distorted thin film crystals, focused on the fact that the distortion can be regarded as a plane in the microscopic view and acquired good diffraction by irradiating high-flux synchrotron x-ray beam of 5 μm size on an automated system. After splitting the data into 30 oscillation degree processing and merging the partial data by the data processing software, KAMO^[1], to correct the influence of the distortion, we successfully acquired the structure of thalidomide.

Keywords : single crystal X-ray diffraction, structural determination, thalidomide, thin film crystal, automatic measurement

薄膜結晶は高い光透過性を示す重要な試料形態であるが、薄さゆえに回折能が弱く、また湾曲しやすいために周期配列が乱れ、単結晶 X 線構造解析が難しい。

本研究ではサリドマイドの薄膜結晶を対象として、SPring-8 における ZOO システム^[1]を使い自動測定を行った。すなわち、5 μm サイズの高輝度放射光 X 線源を、結晶を動かしながら照射することで、放射線損傷を避けながら S/N 比の良い回折像を得た。しかし、湾曲によるデータの欠落・乱れにより、得られた全データを一括して解析することはできなかった。そこで、曲面は微視的に平面とみなせることに着目し、データ処理ソフトウェア KAMO^[1]を用い、30 度の振動角ごとのコンプリートネスの低いデータに分割処理し、再統合することでデータの欠落・乱れを排して、構造解析が可能であることを見出した (図 1)。

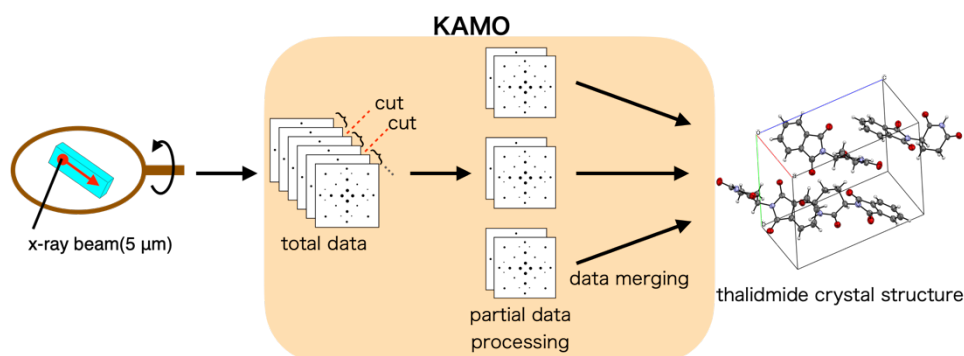


図 1. サリドマイド薄片結晶測定/解析の概要

[1] K. Yamashita, K. Hirata, and M. Yamamoto, *Acta Cryst.* **2018**, D74, 441-449.