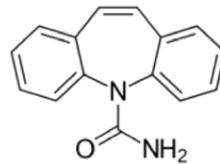
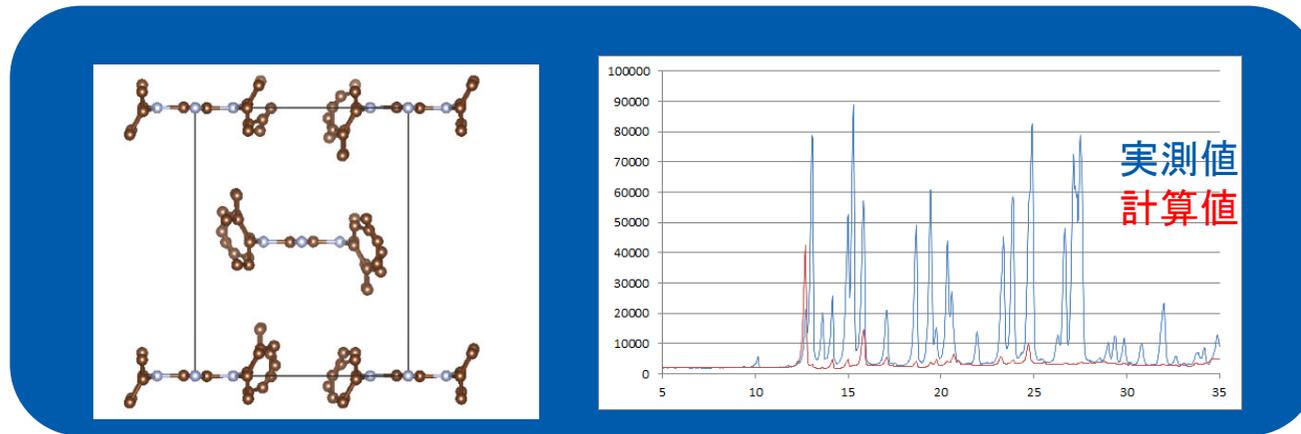


粉末X線回折による構造物性解明

解析例) 原薬カルバマゼピン



Simulated Annealing解析前



粉末X線構造解析のメリット

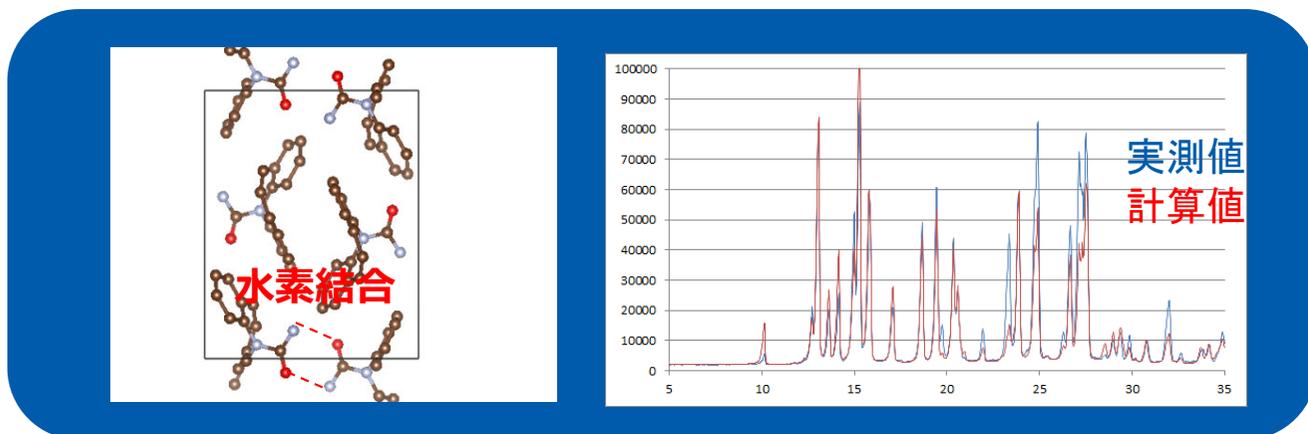
(1) 単結晶化できなかったサンプルでも解析可能 (サンプルの幅が広がる)。

(2) 結晶構造と物性の関係性が解明可能。

(3) in-situ測定 (温度・湿度・不活性ガス下) ができ、構造相転移の解析が可能。

応用例: 原薬、有機低分子、MOF、電池材料など

Simulated Annealing解析後



粉末パターンと計算値が一致するように分子を動かし構造解析の解を得た。(水素結合している事が判明)