

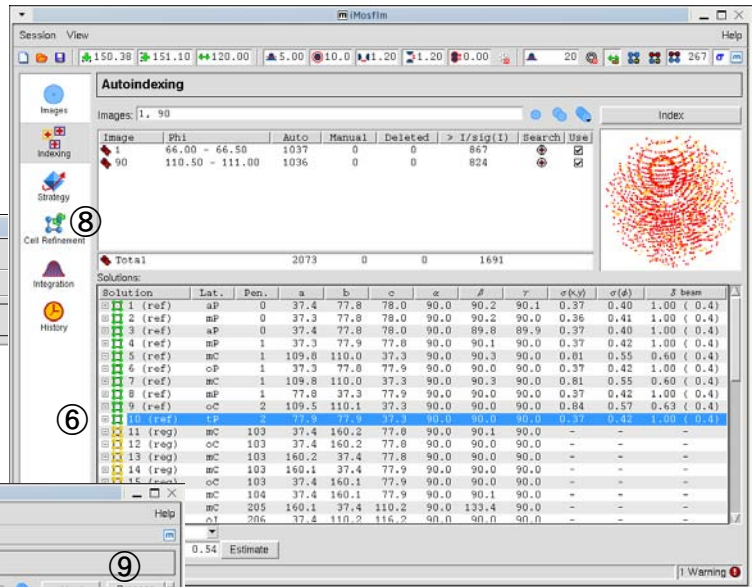
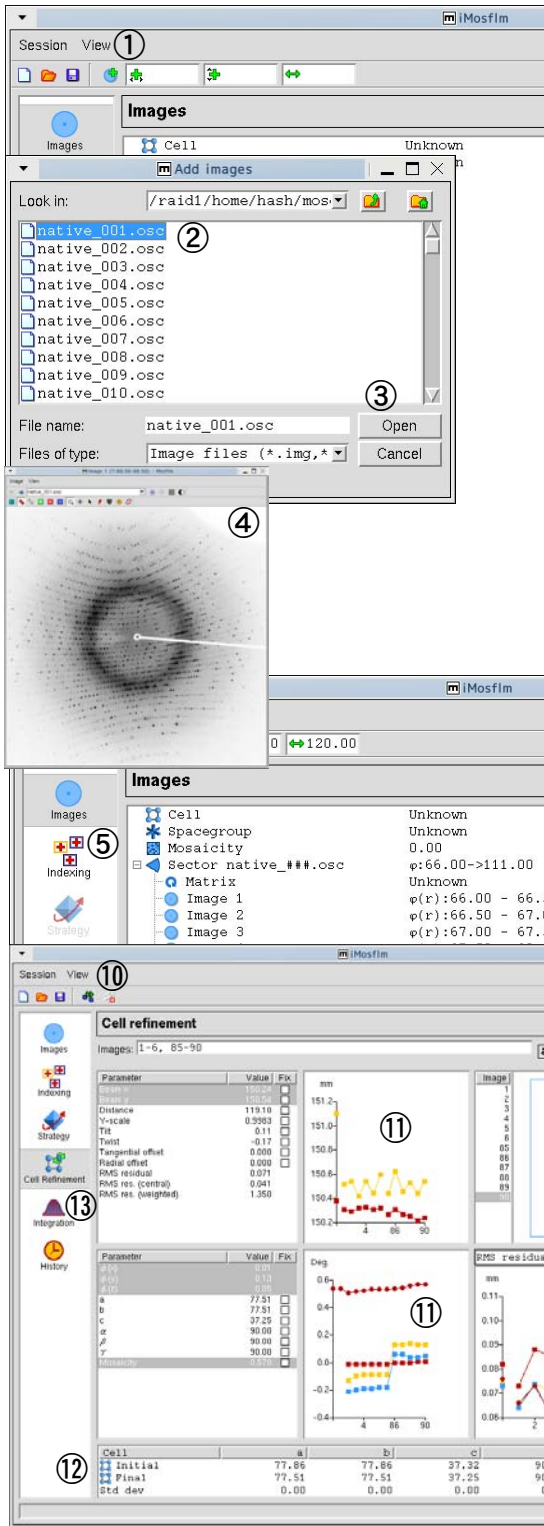


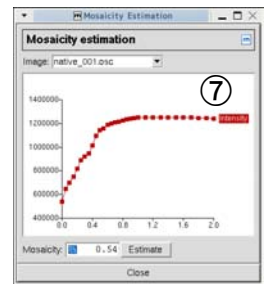
IMOSFLM を使った X 線回折データの処理




ターミナルで imosflm と入力し、[Enter].

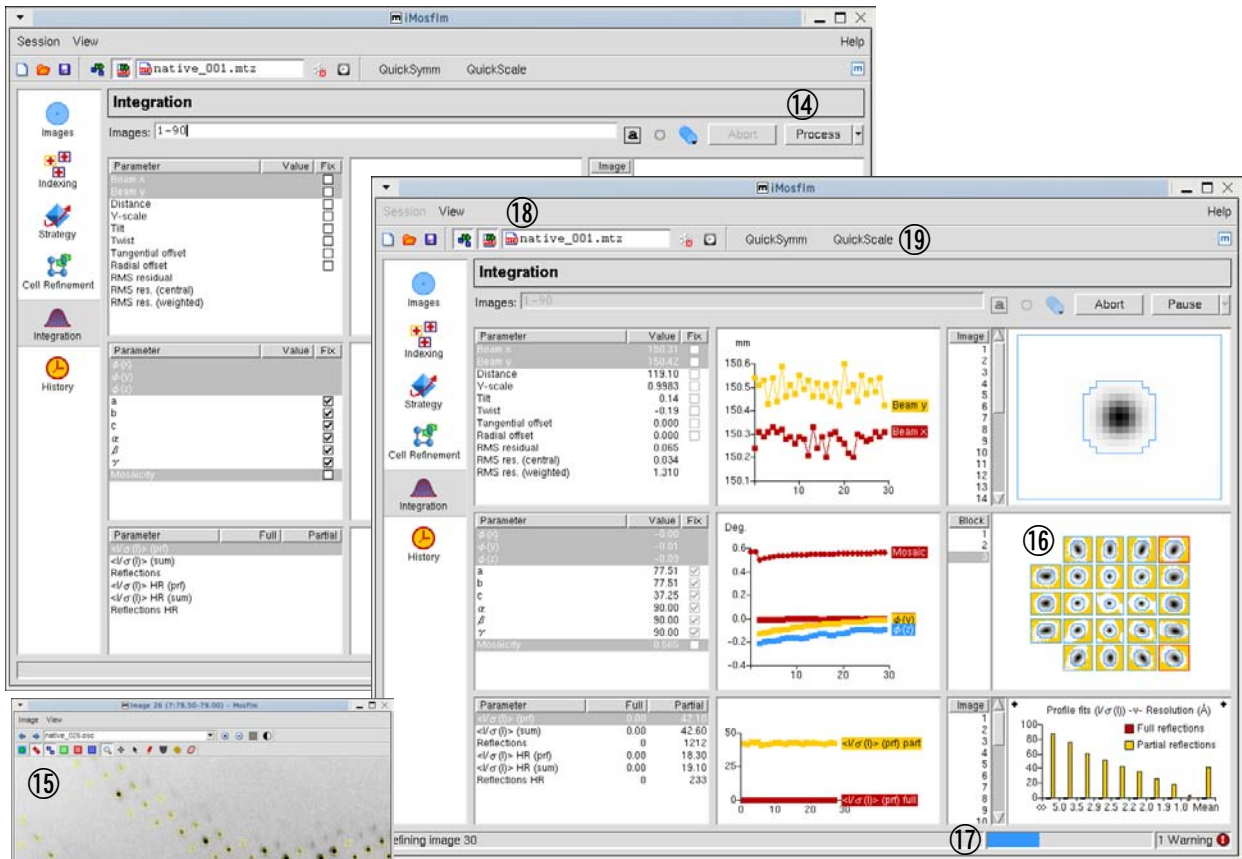
- ①  をクリックして回折イメージを選択する。
- ② native_001.osc を選択する。一枚だけ選択すればよい。
- ③ **Open** をクリックすると回折イメージが読み込まれる。
- ④ 一枚目が別ウインドウで表示される。
- ⑤  をクリックすると、index ウインドウに切り替わり、自動で指数付けが行われる。
- ⑥ 格子定数と対称性の候補が表示される。
可能性のある解は左端に緑色の印がつけられる。
その中で最も確からしい解が青で強調されている。
黄色の解は可能性が低い。
- ⑦ 結晶のモザイク性 (°) (結晶格子の乱れ) が見積もられる。



代表的な回折点と積分範囲



- ⑧  をクリックして、refinement ウインドウに切り替える。
- ⑨ **Process** をクリックして、精密化を実行する。
- ⑩  をクリックすると、回折写真上で精密化の様子がリアルタイムに表示される。
- ⑪ 精密化でのパラメーターの変動が示される。なだらかな変動であれば、精密化はうまく行えていると思う。
- ⑫ 精密化後の格子定数が表示される。極端に変動していなければ大丈夫だろう。
- ⑬  をクリックして integrate ウインドウに切り替える。



- ⑭ **Process** をクリックして、積分を開始する。
- ⑮ 回折点と予測 (prediction) が一致しているかどうかを確認する。
- ⑯ 代表的な回折点のプロファイルが表示される。中心に回折点があれば良い。
- ⑰ 進行状況が表示される。
- ⑱ 積分が終了すると出力されるファイル名。
- ⑲ 積分が終了したら、**QuickScale** をクリックしてスケールを行う。
スケールの結果は WEB ブラウザで表示される。

Summary data for Project: New Crystal: New Dataset: New

	Overall	InnerShell	OuterShell
Low resolution limit	33.57	33.57	1.87
High resolution limit	1.77	5.61	1.77
Rmerge	0.041	0.040	0.058
Rmerge in top intensity bin	0.038	-	-
Rmeas (within I+I-)	0.054	0.050	0.078
Rmeas (all I+ & I-)	0.055	0.051	0.079
Rpim (within I+I-)	0.034	0.030	0.052
Rpim (all I+ & I-)	0.027	0.024	0.043
Fractional partial bias	-0.049	-0.062	0.005
Total number of observations	38475	1285	5404
Total number unique	11191	357	1631
Mean(I)/sd(I)	19.9	26.5	12.5
Completeness	98.5	88.5	99.5
Multiplicity	3.4	3.6	3.3
Anomalous completeness	94.8	80.2	98.8
Anomalous multiplicity	1.9	2.5	1.7
DelAnom correlation between half-sets	0.056	0.134	0.036
Mid-Slope of Anom Normal Probability	0.989	-	-

← データの信頼度因子 R-merge

← データの完全性 Completeness

Average unit cell: 77.51 77.51 37.25 90.00 90.00 90.00 ← 格子定数 (Å, °)

Space group: P 41 21 2 ← 推定された結晶の対称性 (空間群) (この段階では確定できない)

Average mosaicity: 0.58 ← 結晶モザイク性 (°)

Minimum and maximum SD correction factors: Partial 3.16 35.04

Dataset: New/New/New
written as averaged data to output file scala_native_001.mtz ← スケール後に出力されたファイル

Maximum resolution: 1.77Å ← 分解能 (解像度)