



Rigaku
oxford diffraction

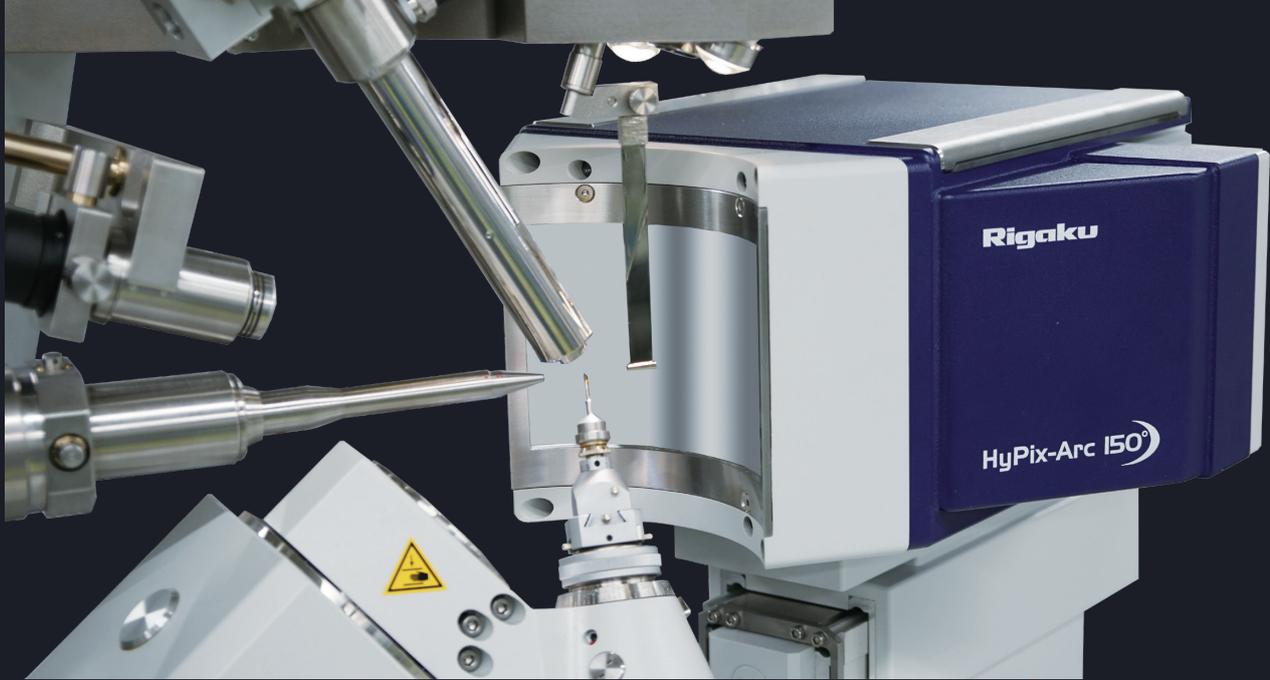
Embrace your **sample**



湾曲ハイブリッドピクセル検出器

HyPix-Arc 150°





湾曲ハイブリッドピクセル検出器

HyPix-Arc 150°

HyPix-Arc150°は、1光子検出型ハイブリッドピクセル検出器（HPC）の特長を生かし、更に進化させた検出器です。2θ方向の円周上にモジュールを配置することで、一度に検出可能な2θ範囲が広くなり、1回の露光でより多くのデータを収集できます。また、大面積平板検出器に比べ、高角側回折点のプロファイルの歪みを抑えることができます。

光子計数型ハイブリッドピクセル検出器（HPC）の機能

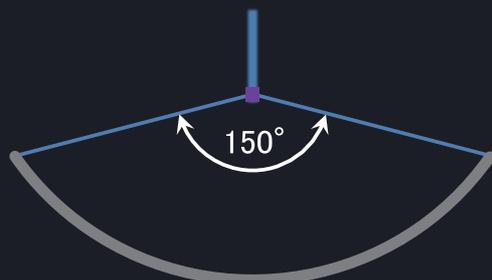
- 最適エネルギーウインドウ設定機能
- 1×10⁶ cps/pixel以上の高計数率
- ゼロ読み出しノイズ・ゼロ暗電流
- 高い空間分解能（100×100μm²で1 PSF^{*}以下）

※Point Spread Function

150°の検出範囲

HyPix-Arc150°は、検出面エッジ間で150度の検出範囲を実現しており、CuKα線源であっても、2θを変更することなく、低角から高角までのイメージを同時に測定できるため、X線によるダメージの大きなサンプルであっても、回折データを効率良く収集することが可能です。

※カメラ長 38 mm時



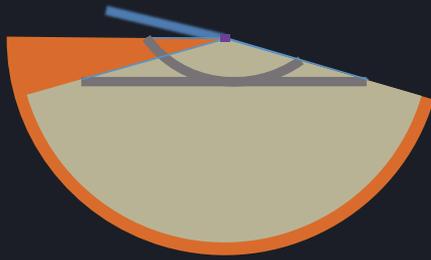
■ X線ビーム ■ 結晶 ■ 検出面（上方から見た図）



HyPix-Arc150°上面

高速データ収集

大面積平板検出器に比べ、一度に検出可能な 2θ 範囲が広いため、1枚の露光でより多くのデータを収集できます。より短時間での測定が可能となりました。



- X線ビーム
- 結晶
- 検出器面 (上方から見た図)
- 大面積平板検出器が一度にカバーできる 2θ 範囲
- HyPix-Arc150°が一度にカバーできる 2θ 範囲

プロファイル形状の向上

大面積平板検出器に比べ、高角側回折点のプロファイルの歪みを抑えることができるため、高精度な回折強度を得ることができます。

大面積平板検出器の場合

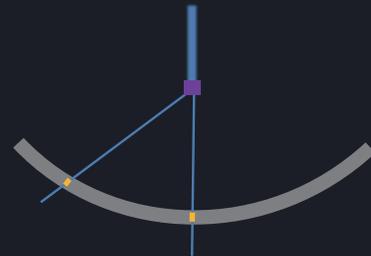
入射角度が変わるため、ピークプロファイルが大幅に変化する



- 検出器上のピーク
- X線ビーム
- 結晶
- 検出器面 (上方から見た図)

湾曲型検出器の場合

入射角度が大きく変わらないため、ピークプロファイルに大きな差はない

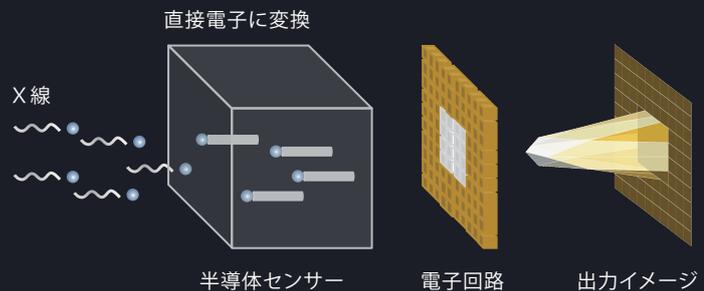


Point Spread Function

X線光子を直接検出するため、画像の滲みがなく、読み出しノイズのないイメージが得られます。

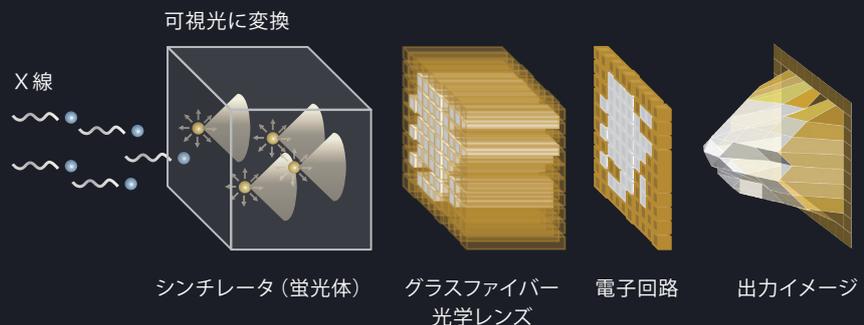
HPC検出器

X線光子を直接電子に変換



CMOS・CCD検出器

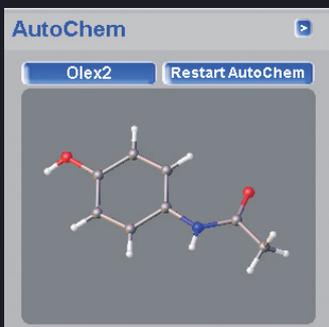
X線光子を一度可視光に変換してから電子に変換



アプリケーション例

Sub-three結晶の未知化合物3次元構造決定にも最適 (6 μm^3)

市販解熱剤のカプセルから取り出した粉末から3 $\mu\text{m} \times 2\mu\text{m} \times 1\mu\text{m}^3$ のSub-three結晶を選び、What is this? モードによる未知構造決定自動測定を実施しました。その結果、約30分でアセトアミノフェンであると判明しました。粉末状のサンプルであっても、単結晶構造解析をあきらめる必要はありません。



Space group	P2 ₁ /n
Chemical formula	C ₈ H ₉ NO ₂
Formula weight / ASU	602.42
Total time / Dose time	34m 25s / 34m 20s
R1 (%)	7.39
wR2 (%)	19.41
Goodness of fit	1.04



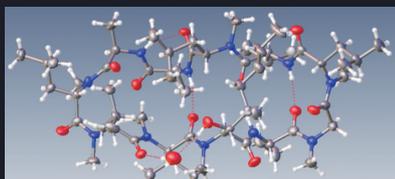
3 \times 2 \times 1 μm^3
Vol: 6 μm^3

X線によるダメージが大きな結晶にも最適

最近話題の高分子量環状ペプチドは、X線によるダメージが大きく長時間露光ができませんが、HyPix-Arc150°を使った測定では、低角から高角まで一度にカバーできる領域が広いので、短時間測定に成功し、微小結晶であっても、約2時間で絶対構造まで判定できました。



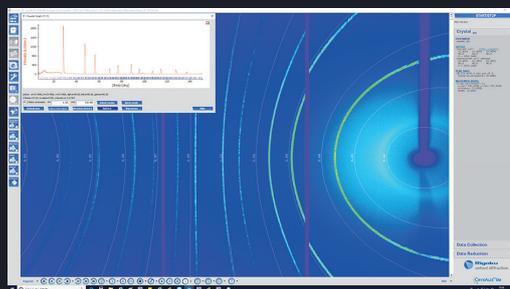
25 \times 10 \times 6 μm^3
Vol: 1,500 μm^3



Cyclosporine A + H₂O : C₆₂H₁₁₁N₁₁O₁₂
Molecular Weight : 1202.61
R₁ = 7.21%, Flack = -0.0 (2)

粉末データ収集にも

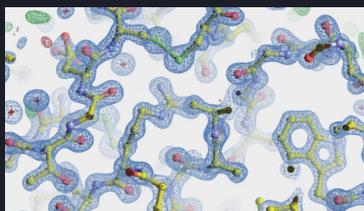
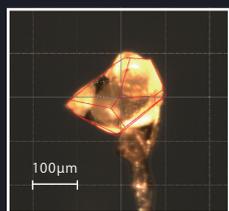
1枚でカバーできる2 θ 範囲が広いので、粉末データ収集にも適しています。



シリコン粉末の測定イメージ

10分間で Thaumatinタンパク質の S-SAD法による位相決定が可能

9分53秒間の測定で得たデータを用いて、Thaumatin結晶の1.45Å分解能での位相決定に成功しました。



Space group	P 4 ₁ 2 ₁ 2
Unit Cell (Å) (°)	57.81, 57.81, 149.95 90, 90, 90
Total time	9m 53s
Resolution (Å) [last shell]	22.96 - 1.45 [1.48 - 1.45]
Total / unique reflections	699245 / 45973
Completeness [last shell]	99.7 [94.3]
Multiplicity [last shell]	15.2 [3.3]
<1/ σ (I)> [last shell]	23.1 [1.4]
R _{merge} (%) [last shell]	7.5 [69.6]
CC _{1/2} [last shell]	0.999 [0.571]
R / R _{free} (%)	12.0 / 16.0