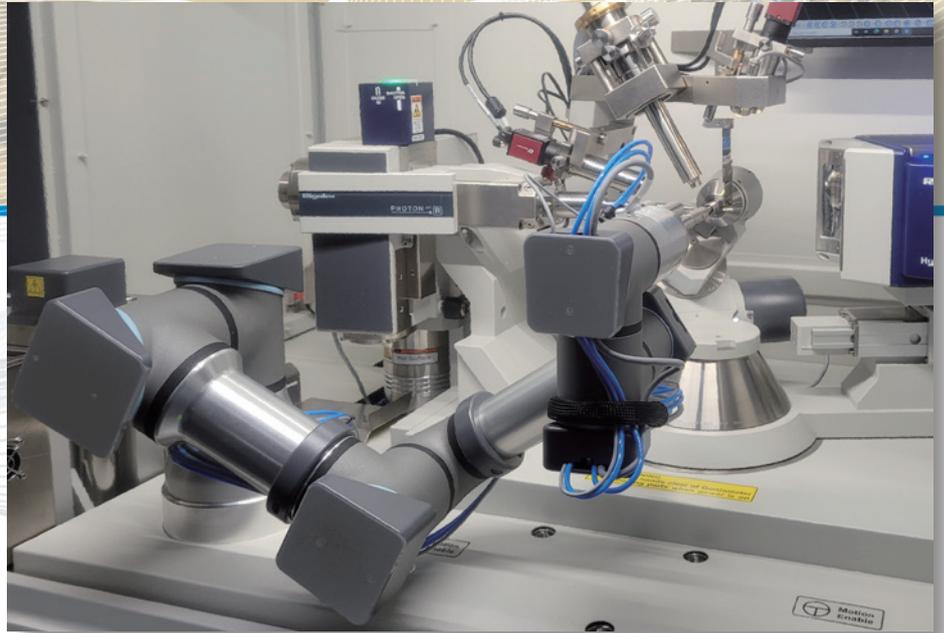


単結晶X線構造解析

Single crystal X-ray diffraction

次世代単結晶構造解析プラットフォーム XtaLABシリーズ2024



次世代単結晶構造解析プラットフォーム XtaLAB シリーズ 2024

THE POWER OF SYNERGY

ラボ装置だからと、決めつけてはいませんか？

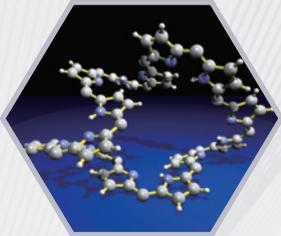
XtaLABシリーズは、実験室装置の常識を打ち破る機能と性能で、ユーザーの目的達成を強力にサポート。最先端のX線源・ゴニオメーター・検出器、それらを制御し最大のパフォーマンスを引き出すソフトウェア。無駄のない洗練されたワークフローが研究開発を加速させます。



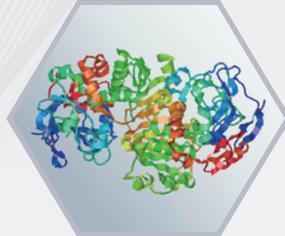
Rigaku Oxford Diffractionは、リガクの単結晶X線構造解析部門に、旧Oxford Diffractionが統合し、2015年に誕生した最強の単結晶X線構造解析ブランドです。

60年を超える歴史の中で培ってきたRigakuの技術力と専門的知識に、ソフトウェアを軸として世界的に定評のあるOxford Diffractionの開発力が加わり、今までにないまったく新しい次世代単結晶X線構造解析プラットフォームが誕生しました。

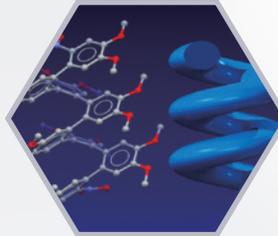
多彩なアプリケーション



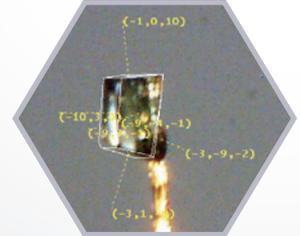
Small Molecules



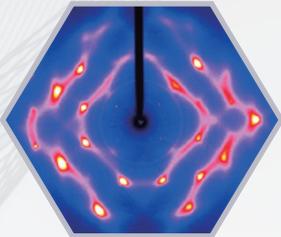
Macromolecules



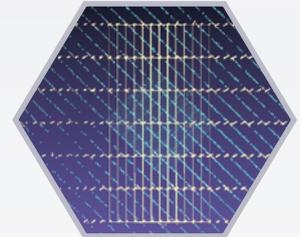
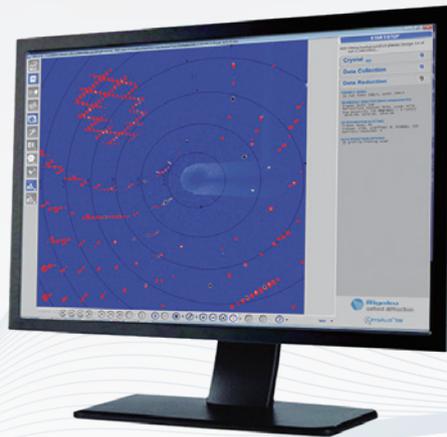
Absolute Structure



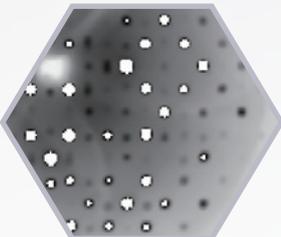
Face Indexing



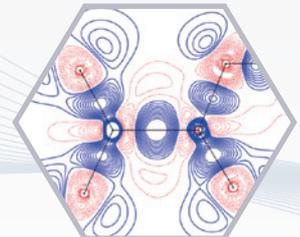
Diffuse Scatter



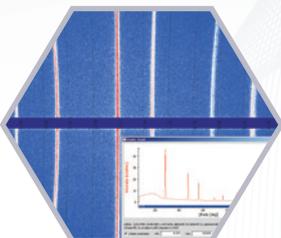
Twin/Multi Crystals



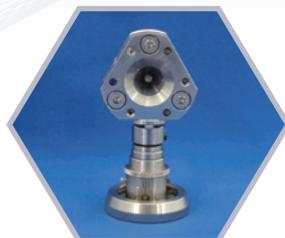
Incommensurate



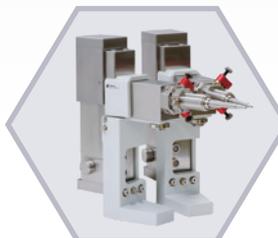
Charge Density



Powder Diffraction



High Pressure



Automated Multiwavelength



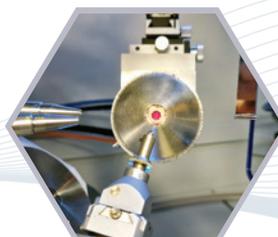
Element Analysis



Ultralow Temperature



Multi-temperature



High Temperature



YOUR
SAMPLE!

and MORE

XtaLAB Synergy-R/DW

回転対陰極線源搭載 単結晶X線構造解析装置



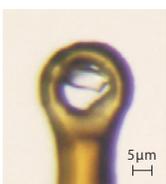
XtaLAB Synergy-R/DWは、XtaLAB Synergyシリーズのマイクロフォーカス回転対陰極型X線源搭載モデルです。多数の納入実績を持つ高輝度X線発生装置MicroMax007シリーズの最新型MicroMax007HFMRと、新型人工多層膜光学系とを組み合わせた、微小焦点型高輝度X線源 PhotonJet-R/DWを搭載。XtaLAB Synergy-Sに対して約12倍強力なX線を照射することが可能です。高輝度X線源 (PhotonJet-R/DW)、高速・高精度ゴニオメーター、高速読み出しHPC検出器 (HyPix-6000HE、HyPix-Arc150°) を組み合わせることにより、超高速・超高精度測定を実現。自動構造解析と相まって、あなたの研究スピードを加速させます。蛋白質結晶や微小結晶などからの微弱な回折線の測定や、高分解能が必要な精密構造解析の測定にも威力を発揮します。

より強く

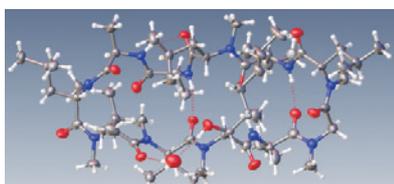
- PhotonJet-R/DWの回転対陰極線源は出力1.2 kW、実効焦点 ϕ 70 μ mにより、圧倒的な輝度を実現しています。
- XtaLAB Synergy-Sに比べ約12倍の強度のX線ビームを照射します。
- これまで測定を諦めていた10 μ m以下の極微小サンプルの測定も可能にします。

高分子量環状ペプチドの微小結晶の測定

高分子量環状ペプチドの微小結晶は、X線によるダメージが大きく長時間露光ができません。HyPix-Arc150°を使った測定では、約2時間で絶対構造まで判定しました。



$25 \times 10 \times 6 \mu\text{m}^3$
Vol: 1,500 μm^3

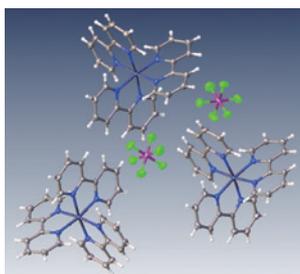


Sample	Cyclosporine A + H ₂ O
Crystal size (μm^3)	$25 \times 10 \times 6 \mu\text{m}^3$
Volume (μm^3)	Vol: 1,500 μm^3
Chemical formula	C ₆₂ H ₁₁₁ N ₁₁ O ₁₂
Molecular weight	1202.61
R1 (%)	7.21
Flack	-0.0 (2)

より速く

- 高輝度X線とシャッターレス測定との組み合わせにより、測定時間が大幅に短縮。より多くの試料が測定可能となるため共用装置として最適です。1試料あたりのランニングコストも下がります。
- AutoChemとの組み合わせにより、スクリーニングから構造解析までのトータルタイムを大幅に短縮します。
- XtaLAB Synergy-Sで1週間かかる測定も、XtaLAB Synergy-Rでは1日足らずで終了します。

金属錯体の高速測定



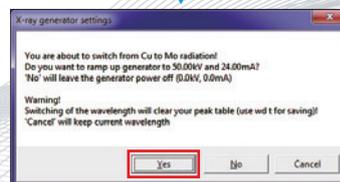
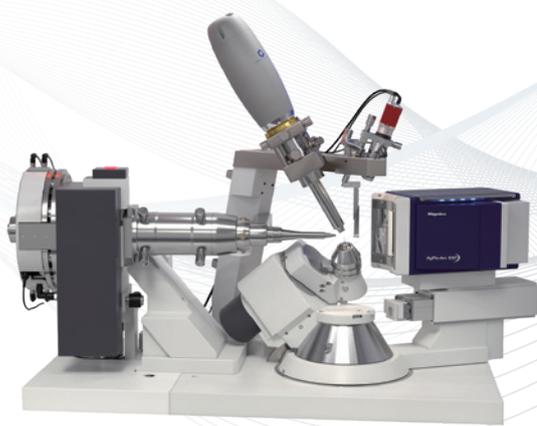
• 試料: Ru錯体 • 組成式: $C_{30}H_{24}F_{12}N_6P_2Ru$ • 結晶サイズ: $0.16 \times 0.14 \times 0.13 \text{ mm}^3$

System		Total time	R_{int} (total/last shell)	R_1	Flack
Synergy-DW	Cu	6min.	2.7%/4.3%	2.18%	0.115 (8)
	Mo	3min.	4.2%/14.1%	3.51%	0.18 (6)
Synergy-S	Cu	18min.	3.3%/5.1%	2.61%	0.117 (10)
	Mo	2h. 27min.	5.9%/18.5%	4.02%	0.02 (8)

より幅広く

- Cu線源以外にもMo線源、Ag線源の搭載も可能です。高圧・高分解能など、幅広いアプリケーションに対応します。
- 蛋白質結晶やディスオーダー構造を含む結晶など高角側の回折線が出にくいサンプルも、高輝度X線と光子計数型ハイブリッドピクセル検出器の搭載により高角側の回折線を検出することが可能となりました。
- 高輝度なX線、高角まで移動可能な2θ軸、高精度な検出器により、精密構造解析の測定にも最適です。
- フィラメント交換に要する時間はわずか45分。高いメンテナンス性によりダウンタイムを最小限に抑えます。

2波長線源搭載 XtaLAB Synergy-DW

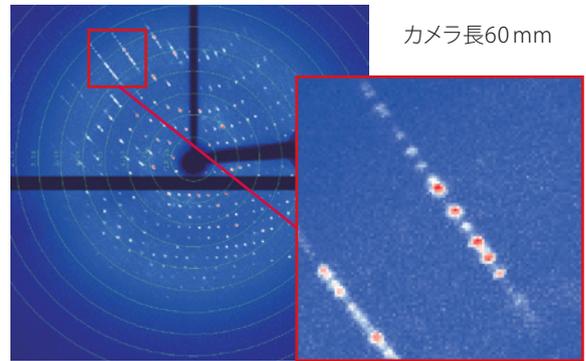


2波長線源PhotonJet-DWを搭載。波長の異なる線源を1台のシステムに搭載したXtaLAB Synergyパッケージの最上位機種です。

- Cu、Mo、Agから2種類のターゲットを選択した2波長が搭載可能で、より幅広いアプリケーション測定に対応します。
- 波長の切替も簡単。測定ソフトウェアCrysAlis^{Pro}上の線源ボタンをクリックするだけで、ターゲットおよび光学系が自動的に切り替わります。

XtaLAB SynergyCustom

超高速 K ゴニオメーターを中心に、用途に応じて、X線発生装置、検出器を組み合わせることで、最新鋭のSynergyシステムを構築可能です。X線発生装置は、2波長線源システムも選択可能で、X線発生装置の両側にシステムを構築することも可能です。有機・無機のsub-three結晶 ($3\ \mu\text{m}$ 以下の粉末粒子状結晶) から格子定数が 300\AA を超える、蛋白質結晶まで対応しています。



カメラ長60mm

格子定数が 340\AA のサンプルでも測定可能

組み合わせ可能なX線発生装置



FR-X 超高強度X線発生装置

ラボラトリーマイクロフォーカス線源として、世界最高のX線強度を達成した、超高輝度X線発生装置です。試料位置・実X線強度において従来比*「28倍」を実現しました。RA-Micro7 HF同様、実効焦点を球状の理想的な形で $\phi 70\ \mu\text{m}$ に収束させています。

* ultraX18+Yale MirrorとFR-X + Confocal Mirror MicroMaxとの比較

省エネルギー

封入管球並みの出力 ($2.97\ \text{kW}$) で、超高輝度と最高強度を実現した、省エネルギー設計です。

メンテナンスコストの削減

ターゲットにダイレクトドライブ型を採用。消耗品が抑えられ、メンテナンス費が削減できます。

デュアルターゲット

Mo/Cu、Cu/Cr、Cu/Co、Ag/Cuの4タイプがあります。蛋白質では、S-SAD法測定用や重原子を含む試料に有効です。また、高圧測定や精密構造解析においても、簡単な切り替え操作で2つの波長が切り替え可能です。



MicroMax007HFMR 超高輝度X線発生装置

実効焦点を球状の理想的な形で $\phi 70\ \mu\text{m}$ に収束させることにより、圧倒的な輝度を実現した微小焦点・高輝度X線発生装置です。

高いコストパフォーマンスを実現

従来モデルと比べ約 $1/3$ の電源容量でありながら、X線輝度は1桁アップ。

1.2 kW回転対陰極

新型ターゲット&ドライバにより、前モデル RA-Micro7の1.5倍の出力アップを実現しました。(輝度 $31\ \text{kW}/\text{mm}^2$)

磁気シール・ベアリングの性能向上により信頼性をアップさせました。

* お手持ちのFR-E+、FR-E、MicroMax007シリーズと組み合わせて、アップグレードすることも可能です。

現有システムアップグレードにも対応

検出器

HyPix-6000HE/C⁺ 光子計数型ハイブリッドピクセル検出器

計数率が高く (10^6 cps/pixel以上)、高いリニアリティーを実現。さらに、新しい計数方法を採用する事により、読み出しデッドタイムがゼロの真の超高速シャッターレス測定を可能としました。これらの相乗効果により、強い入射X線も余すことなく受け止め正確に測定します。

最適エネルギーウィンドウ設定機能、ゼロ読み出しノイズ・ゼロ暗電流

電気ノイズや蛍光X線によるバックグラウンドの上昇、および宇宙線や連続線などのノイズとなる原因を除去できるため、サイズの小さい結晶、回折X線の強度が弱い結晶でも、SN比の優れたデータを収集することができます。CCD型検出器やCMOS型検出器では、これらのノイズを直接除くことが不可能なため冗長な測定が必要です。

カウンター深さ (最大31 bit)

回折X線の強度が強い結晶でも、事実上、計数値が飽和することはありません ($2^{31} = 2,147,483,648$)。したがって、回折強度の強弱が混在する結晶でも長時間露光が可能で、弱い強度から強い強度まで、全てに由来するフォトン数を正確にカウントすることができます。

高い空間分解能

ピクセルサイズは小さく ($100 \times 100 \mu\text{m}^2$)、ピークの分離に優れており、格子定数が長い結晶のオーバーラップの問題を軽減します。



HyPix-6000 HE

HyPix-Arc150°/HyPix-Arc100° 湾曲ハイブリッドピクセル検出器

HyPix-Arc150°は、光子計数型ハイブリッドピクセル検出器の特長を生かし、更に進化させた検出器です。3枚のモジュールを2θ方向の円周上に配置することで、一度に検出可能な2θ範囲が広くなり、一回の露光でより多くのデータを収集できます。また、カメラ長が短い場合でも、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。



HyPix-Arc150°

広い検出範囲

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を振ることなく、IUCrガイドラインを満たす回折データを収集することが可能です。HyPix-Arc100°は、同じ検出面積を持った平板HyPix-6000検出器と比較して、検出範囲が大きく、検出面エッジ間で100度の角度範囲を提供します。

高速データ収集

高角と低角の回折点が、同じ条件で同時に測定されるため、スケーリング精度が向上します。一度に測定できる範囲が広いと、更なる高速測定が可能です。

その他、様々な最新検出器に対応

PILATUS3 CdTe* (検出面積 $83.8 \times 106.5 \text{ mm}^2$ 、ピクセルサイズ $172 \times 172 \mu\text{m}^2$)

高エネルギー線源での検出効率に優れており、DAC (ダイヤモンドアンビルセル) を用いた、Ag線源での測定に最適

お手持ちのCCDシステムからのアップグレード



Saturn724システム



Saturn70システム



Rigaku CCDシステムを最新のHPC検出器であるHyPix-6000 HEへアップグレードすることができます。CCD検出器は高感度ですが、暗電流があるため長時間露光に適さず、またダイナミックレンジが狭いため、強い反射と弱い反射が混在する測定は不得手でした。HPC検出器は、高感度でありながら、暗電流がなく長時間露光可能である上に、IPと同等の広いダイナミックレンジを持つため、強い反射の多い低角度から弱い反射の多い高角度まで、すべての領域で高いSN比を持つ測定が可能になります。また、シャッターレス測定により、CCDと比較して驚異的なスピードでの測定が可能となるため、大幅なスループットの向上が得られます。アップグレード後は、高機能統合プラットフォームCrysAlis^{Pro}をお使いいただけます。

※ Kappa, Partial Chi, 固定Chiゴニオメーターに対応しています。アップグレード可能機種についてはお問い合わせください。

※ AFC7 (フルサークル)タイプのゴニオメーターには、HyPix-6000HEは搭載できません。ゴニオメーターの更新が必要となります。アップグレード可能機種についてはお問い合わせください。

† HyPix-6000は、Department of Measurement and Electronics, AGH University of Science and Technology (ポーランド)と株式会社リガクが共同開発しています。

* PILATUS3 CdTeはDECTRIS社製です。

オプション・アタッチメント

XtaLAB Synergy-Flow

サンプル自動交換ロボット 搭載システム

(発注時オプション Synergy-S、Synergy-R、
Synergy-DW、Synergy-i専用)



キャビネットビルトイン型精密試料チェンジャーにより、多サンプルの終夜自動連続測定を可能にします。

※ 構成には、Intelligent Goniometer Headを含んでいます。

Intelligent Goniometer Head

電動サンプルセンタリングシステム (Synergyシリーズ専用)

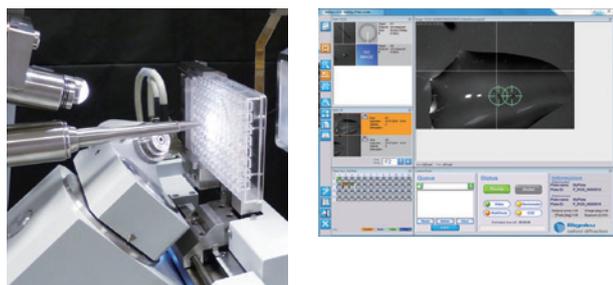


結晶のセンタリングをGUI上から電動で行うことが可能です。AI画像認識による自動センタリングからポイント&クリック方式による半自動センタリングまでサンプルに合わせたセンタリング方法を選択できます。手では困難な微小結晶のセンタリングにも有用です。

また、カメラのセンター位置のキャリブレーションも自動で実行でき、常に最適な状態を保ちます。

XtaCheck-S

結晶化プレート *in situ* X線照射アタッチメント



プレート中の結晶のセンタリングをGUI上から電動で行えます。

- 結晶化プレート中の結晶を測定
- モータ制御により微小な結晶も正確にセンタリング
- GUIからコントロール
- 構造解析用のデータ収集も可能

※ 本アタッチメントは、UniversalGoniometer Ver.2専用です。

ACTOR2

サンプル自動交換ロボットシステム



SynergyCustomシステムに搭載可能です。結晶マウント・センタリング・測定・回収動作を自動的に行います。

CrysAlis^{Pro}単結晶構造解析 高機能統合プラットフォームに完全統合することにより、結晶のスクリーニング、スコアリング、本測定まで全自動データ収集を実現しています。

- 最大112サンプルをセット可能 (Unipuck仕様の場合)
- Rigaku、Unipuck、ALS、ESRFの各パックに対応*
- 液体窒素自動供給機能搭載

* 発注時にいずれか1種類を選択していただけます

XtaLAB Synergy-S

超高速・超高精度 単結晶X線構造解析装置 マイクロフォーカス封入管システム

XtaLAB Synergyシリーズは、使用者の目的が十分に達成できることを最優先に考えて開発された単結晶X線構造解析装置です。最先端技術を駆使したハードウェアとユーザーフレンドリーなソフトウェアのそれぞれの特長を活かし、最高のパフォーマンスを発揮できるように設計されています。XtaLAB Synergyがあれば、X線回折強度データを精度よく、迅速かつインテリジェントに収集することができます。XtaLAB Synergy-Sは、シャッターレスおよび、31bitモードでの測定が可能なHPC (Hybrid Photon Counting) 検出器 (HyPix-6000HE) と、X線源として、さらに輝度の向上したマイクロフォーカス封入管 (PhotonJet-S) を搭載、超高速ゴニオメーター、洗練されたワークフローを提供するCrysAlis^{Pro}とのシナジーにより、次世代単結晶構造解析プラットフォームを実現しています。



光子計数型ハイブリッドピクセル検出器
HyPix-6000HE



マイクロフォーカス線源
PhotonJet-S

さらに理想を追求した検出器 HyPix-6000HE[†]

現存する検出器で最も理想的とされているHPC (Hybrid Photon Counting) 検出器にさらに磨きをかけ、単結晶X線構造解析装置用に新しく開発した最新の光子計数型ハイブリッドピクセル検出器HyPixを標準搭載しています。31bitモードでの測定が可能のため、微弱な信号から、高強度な信号までを測定することができ、幅広いサンプルに対応しています。メンテナンス性もすぐれており、乾燥ガスフローや冷却装置が必要なく、長期間安心して使用できます。さらにZero dead timeモードを搭載することで、超高速・超高精度測定を可能にします。

[†] 本製品は、Department of Measurement and Electronics, AGH University of Science and Technology (ポーランド) と株式会社リガクが共同開発しています。

さらに輝度の向上したマイクロフォーカス線源 PhotonJet-S (Synergy-Sに搭載)

新しい技術を集結し、従来のマイクロフォーカス線源に比べ約2倍の輝度を実現しました。最適化された多層膜集光ミラーには、モータ駆動の調整軸があり、コントロールPCから調整することで、常に最高のパフォーマンスが得られます。線源はCu、Mo、Agから選択でき、線源が1つのシングルソースシステム、2つのデュアルソースシステムに対応します。PhotonJet-SのCu線源には、オプションで発散角最適化スリット (Divergence Slit) が搭載可能で、蛋白質結晶など、長い格子を持ったサンプルに対応しています。

さらに進化した超高速ゴニオメーター

進化したKゴニオメーターを搭載。カメラ長の対応範囲も広く、CrysAlis^{Pro}のストラテジーと協働し、効率よくX線回折強度データを収集できます。Synergy-Sに搭載されているKゴニオメーターは、当社従来モデルの高速Kゴニオメーターと比較しても、回転軸の駆動速度は2倍になったため、全測定にかかる時間を大幅に短縮できます。

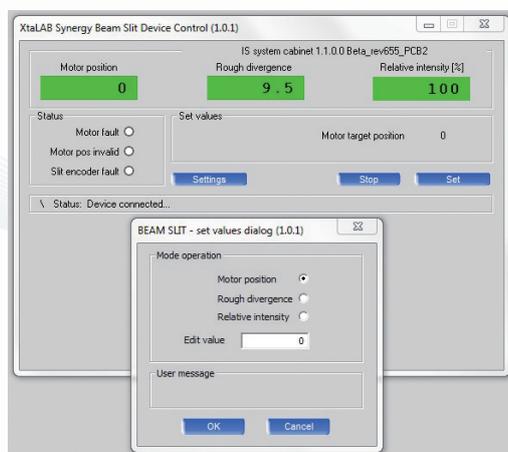
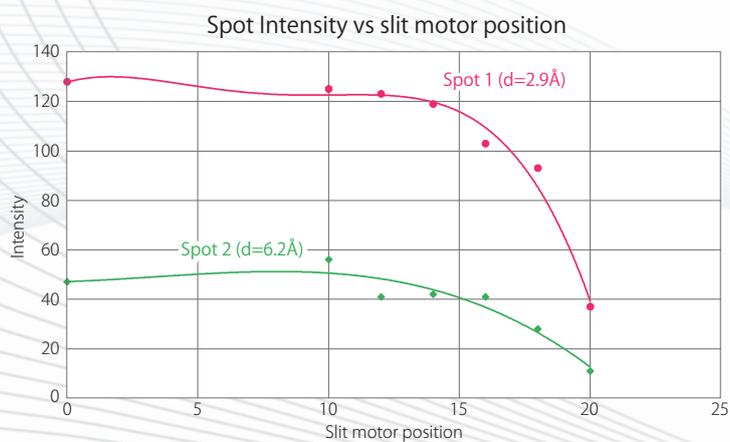


XtaLAB Synergy-S用オプション

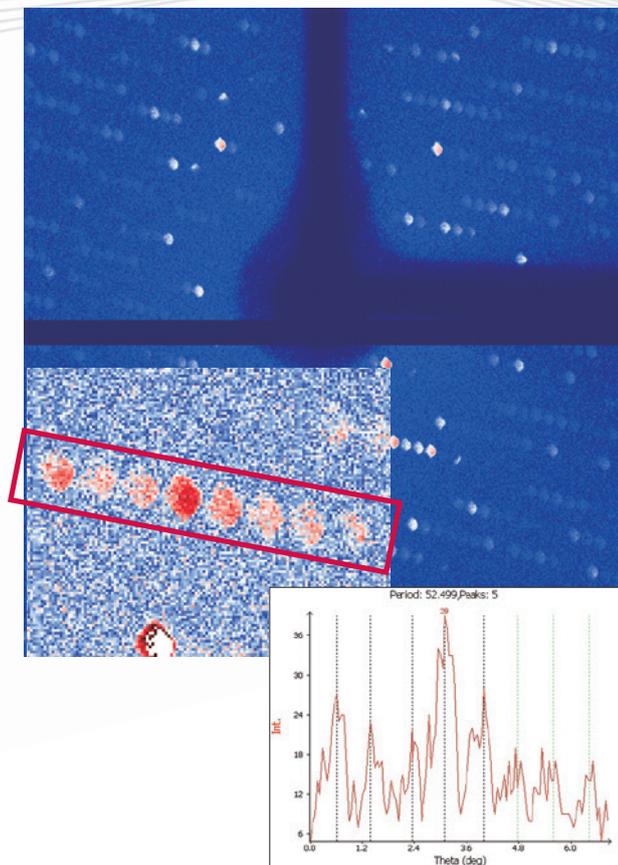
発散角最適化スリット Divergence Slit

XtaLAB Synergy-R、-SのCu線源には、出荷時オプション*として発散角最適化スリットを付けることが可能です。スリット位置の変更は、ソフトウェア上から電動で行うことが可能で、蛋白質結晶など、より大きな格子を持ち、回折スポットが混み合っているサンプルに強力な威力を発揮します。XtaLAB Synergy-DW、SynergyCustomには、標準で発散角最適化スリットが搭載されています。

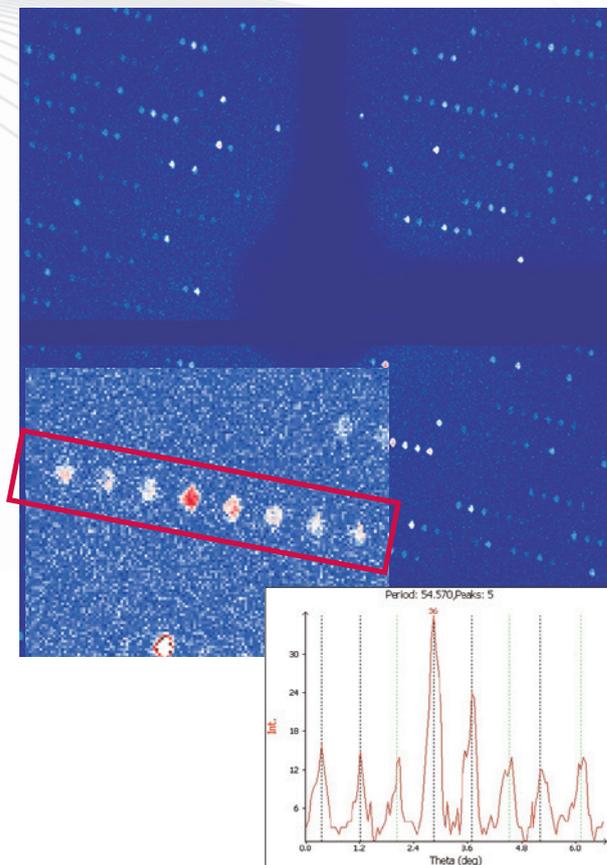
* 発散角最適化スリットは納品後の管球に付けることはできません。ご購入時に選択していただく必要があります。



スリットなし



スリットあり



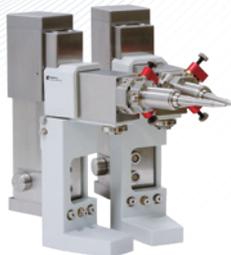
XtaLAB Synergy-*i*

マイクロフォーカス封入管システム搭載 単結晶X線構造解析装置

XtaLAB Synergy-*i*は、最新の集光光学系、シャッターレスおよび31bitモードでの測定が可能なHPC (Hybrid Photon Counting) 検出器 (HyPix-Bantam) と、マイクロフォーカス線源 PhotonJet-*i*を搭載した単結晶X線構造解析です。



光子計数型ハイブリッドピクセル検出器
HyPix-Bantam



マイクロフォーカス線源
PhotonJet-*i*

フォトンカウンティング型 二次元検出器 (HPC) 搭載 HyPix-Bantam

現存する検出器で最も理想的とされているHPC (Hybrid Photon Counting) 検出器にさらに磨きをかけ、単結晶X線構造解析装置用に新しく開発した最新の光子計数型ハイブリッドピクセル検出器 HyPix-Bantamを標準搭載しています。31bitモードでの測定が可能のため、微弱な信号から、高強度な信号までを測定することができ、幅広いサンプルに対応しています。メンテナンス性もすぐれており、乾燥ガスフローや冷却装置が必要なく、長期間安心して使用できます。

マイクロフォーカス線源 PhotonJet-*i*

PhotonJet-*i*はマイクロフォーカス管と多層膜集光ミラーから構成され、標準の封入管よりも高い輝度のビームを照射することが可能です。線源はCu、Moから選択することができ、用途に合わせて選択できます。

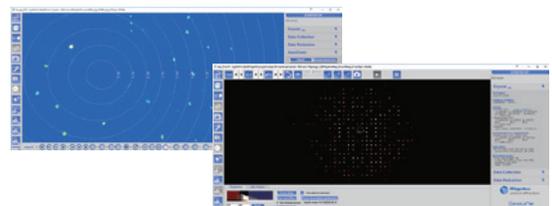
高速ゴニオメーター搭載

高速かつ多軸同時作動するKゴニオメーターとの組合せにより、これまでとは比較にならないほど、高速かつ高品質なデータを収集することが可能になりました。



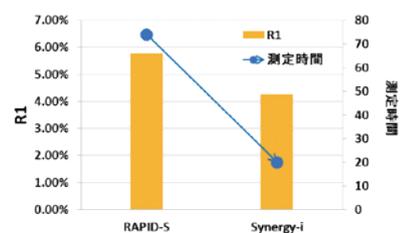
高機能統合プラットフォーム CrysAlis^{Pro}を採用

ソフトウェアには、世界的に評価の高い統合プラットフォームCrysAlis^{Pro}を採用。さらに、測定と構造解析が同時に行えるプラグインAutoChemを標準搭載しました。これにより、精度の高い三次元構造を、数分で、直接見て確認することが可能です。



高速かつ高品質なデータ測定

XtaLAB Synergy-*i*は、R-AXIS RAPID-Sと比較して、測定時間が1/3に短縮。さらに、R1は、1.5%改善しています。(Mo線源の場合)



特別な電源工事やユーティリティは不要

XtaLAB Synergy-*i*は、消費電力は800 Wと小さく、単相100 Vで稼働するため、三相200 V用の特別な電源工事は必要ありません。冷却システムは内蔵しており、外付け送水装置等、追加のユーティリティも必要ありません。

XtaLAB mini II

デスクトップ単結晶X線構造解析装置

XtaLAB mini II は、光子計数型ハイブリッドピクセル検出器を搭載した世界最小の卓上型単結晶X線構造解析装置です。従来のXtaLAB miniに比べて、フォトンカウンティングによるX線の計数やシャッターレス測定が可能になったことで、精度のよいデータを短時間で提供します。ソフトウェアにはCrysAlis^{Pro}を採用し、自動構造解析プラグインAutoChemとのコラボレーションにより、測定から構造解析まで自動で実行されます。ハードウェアからソフトウェアまでユーザーフレンドリーな設計で、初心者の方でも簡単に操作できます。

特長

最先端の2次元半導体検出器を搭載

光子計数型ハイブリッドピクセル検出器を採用し、従来よりも高速で高精度な測定が可能になりました。真のシャッターレス測定が実現したことに加え、オーバーロード測定もないことから、測定時間を短縮します。

世界最小の卓上型装置

幅560 × 奥行395 × 高さ672 mmの世界最小化を実現しました。

X線作業主任者の選任不要

インターロック機構の採用により、X線作業主任者の選任が不要です。

自動測定・解析モード搭載

CrysAlis^{Pro}とAutoChemを併用することにより、測定から構造解析までを自動で実行できます。CrysAlis^{Pro}上に構造解析ビューアがあり、最短時間で構造の確認が可能です。



利点

場所を選ばずに設置が可能

卓上サイズで設置場所を選びません。電源もAC100～240 Vコンセントだけなので、特別な工事が不要です。

高品質なデータを提供

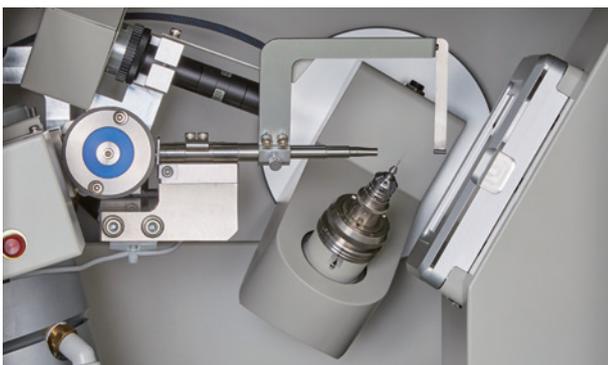
気軽に使用できる装置でありながら、専門誌への投稿基準を満たした高品質なX線回折データを取得できます。

どなたでも簡単に測定・解析が可能

最小限の操作で自動測定・解析を実行。初めて構造解析を行う方でも簡単に操作できます。機能充実の付属ソフトウェアCrysAlis^{Pro}により、双晶の処理や外形吸収補正も簡単に行えます。

シンプルデザインでメンテナンスコスト削減

可動部分が、シャッターとゴニオメーターのφ軸およびω軸のわずか3か所に限られていることにより、メンテナンスコストの削減につながります。



XtaLAB Synergy-ED

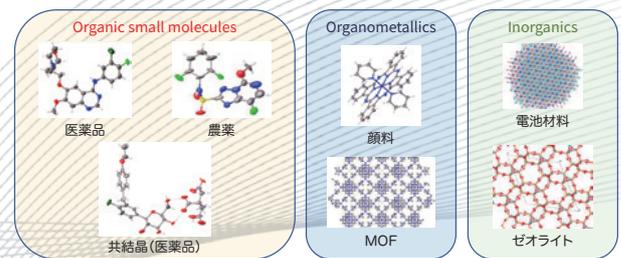
電子回折統合プラットフォーム

リガクの単結晶X線構造解析の要素技術と日本電子の透過型電子顕微鏡の要素技術を結集して作られた、全く新しい電子回折統合プラットフォームXtaLAB Synergy-EDは、X線構造解析の下限であるミクロンの壁を突破し、ナノ結晶の世界へあなたを誘います。測定から処理・構造解析をシームレスで実行し、ナノ結晶からターゲットの構造を得ることが可能になりました。



ナノ結晶の世界へようこそ

Synergy-EDを用いることで、これまで構造解析をあきらめていた非常に微細なナノ結晶から結晶構造を得ることができるようになりました。その結果、これまで認識もされていなかった錠剤中に存在する分解物を同定することも可能となりました。



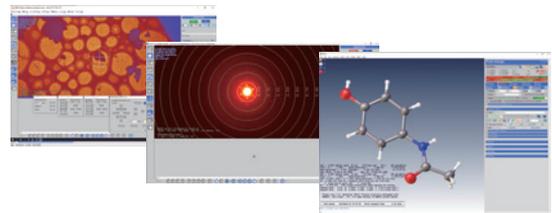
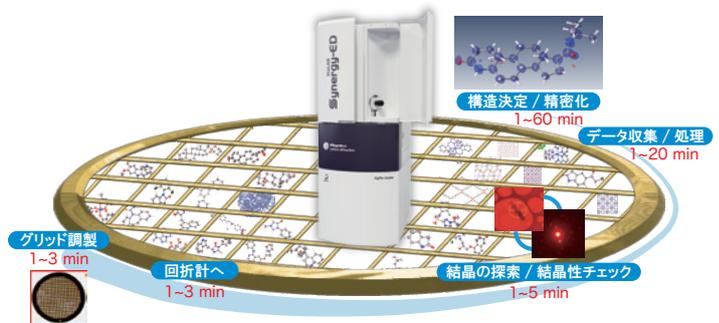
単結晶X線構造解析と同一プラットフォーム

統合プラットフォームには、単結晶X線構造解析で定評のあるCrysAlis^{Pro}を採用しています。

電子顕微鏡用グリッドへ試料を載せるだけで、測定・処理・構造解析をシームレスで実行し、ナノ結晶からターゲットの構造を得ることが可能となりました。

特長

- 電子回折用に最適化して設計された高感度超高速半導体検出器HyPix-EDを採用
- データ測定から結晶構造の決定まで、シームレスなワークフローを提供する電子回折統合プラットフォーム
- ナノサイズの結晶が測定可能である電子回折の強みを生かし、数百ナノメートルあるいはそれ以下の微結晶でも構造を決定することが可能
- 電子回折専用装置であるため、電子顕微鏡研究者との干渉もなく効率的で、高分解能透過型電子顕微鏡用のセッティングと電子回折用のセッティングの切り替えに必要であった時間を削減
- これまで単結晶X線構造解析を利用してきた研究者であれば、すぐに使い始めることができ、電子顕微鏡への習熟は不要



高感度超高速半導体検出器
HyPix-ED

References

Selective photoinduced charge separation in perylene diimide-pillar[5]arene rotaxanes. Pearce, N. et al., *Nat. Commun.* **13**, 415 (2022).

$\text{Na}_2\text{Ca}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ or $\gamma\text{-Na}_2\text{Ca}_2\text{Si}_2\text{O}_7$? A hybrid approach combining 3D single-crystal electron and powder X-ray diffraction. Kahlenberg, V. et al., *J. Am. Ceram. Soc.* **105**, 6976-6988 (2022).

Isostructural Family of Rare-Earth MOFs Synthesized from 1,1,2,2-Tetrakis(4-phosphonophenyl)ethylene. Steinke, F. et al., *Eur. J. Inorg. Chem.* **34**, e202200562 (2022).

Structure determination of small molecule compounds by an electron diffractometer for 3D ED/MicroED. Ito, S. et al., *CrystEngComm* **23**, 8622-8630 (2021).

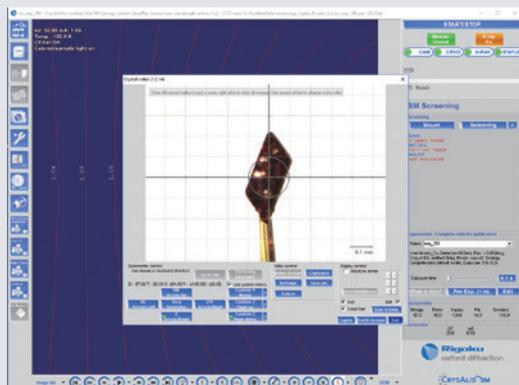
Synthesis and Characterization of a Calcium-Pyrazolonato Complex. Observation of *In-Situ* Desolvation During Micro-Electron Diffraction. Mies, T. et al., *Z. Anorg. Allg. Chem.* e202200294 (2022).

XtaLABシリーズが実現する 洗練されたワークフロー

CrysAlis^{Pro} プラットフォーム

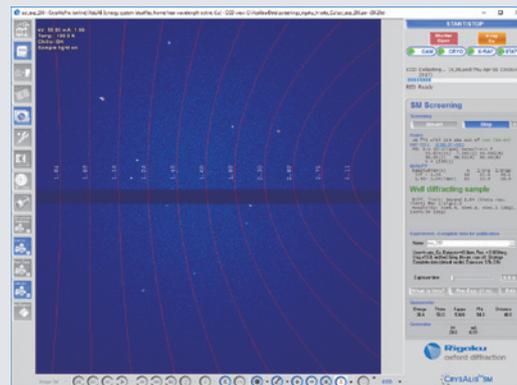
Mounting

結晶のセンタリング



Screen/Pre

結晶の良否判定



SMモード (Small Molecule) の場合は、回折強度に応じたメッセージを表示します。

What is this? *1

ボタンを押して、たった2分、化学組成未知な結晶であっても、化学式を見つけ出し、初期構造決定から精密化まで行います。



スクリーニングを開始すると、ピークサーチの反射数と現在決定した方位とのフィット率、現在の格子定数、データの質 (分解能、強度、Mosaicity) が表示されます。設定した分解能までの平均の $1/\sigma$ の見積もりを実行します。

SM Screening

Screening

Mount Stop

PEAKS
 UB Fit with 259 obs out of 260 (99.6%)
UNIT CELL (CSD: 274171)
 PG: 2/m (b-unique) monoclinic P
 13.624(11) 7.365(2) 16.086(4)
 90.05(2) 98.52(4) 90.06(4)
 V = 1596(1)

QUALITY

Resolution(A)	N	I/sig	I/sig0
inf - 1.04	19	22.6	26.5
1.43- 1.04(last)	10	13.9	16.9

Well diffracting sample

Diff. limit: beyond 1.04 (theta res. limit) for I/sig=2.0
 Mosaicity: e1=0.9, e2=0.8, e3=1.1 (deg), Iso=0.94 (deg)



Well diffracting sample

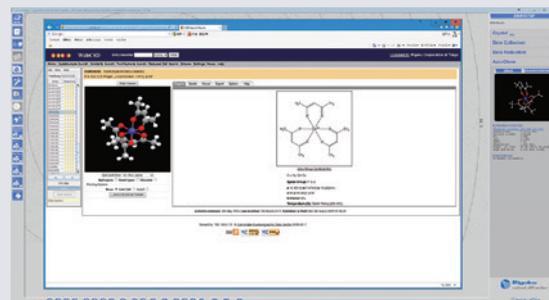
Moderately diffracting sample

Very few diffraction spots observed

CellCheckCSD

スクリーニングの時点で、ケンブリッジ結晶構造データベース (CSD) に登録された構造、もしくは過去に解析した構造から、測定した結晶の単位格子に一致する、もしくは類似する単位格子を検索し、表示します。

Access Structures/ WebCSD *2



*1 Reference
 Matsumoto, T. et al. "What is this?" a structure analysis tool for rapid and automated solution of small molecule structures" *J. Chem. Crystallogr.*
<https://rdcu.be/b87w6>

結晶のマウントからスクリーニングや予備測定、最適条件の決定、X線強度データの収集、データ処理まで、シームレスな、無駄や無理のないワークフロー。各ステップにおいて、結果の善し悪しを左右する要因を自動で判断、悪影響を与える要因を排除します。

Strategy

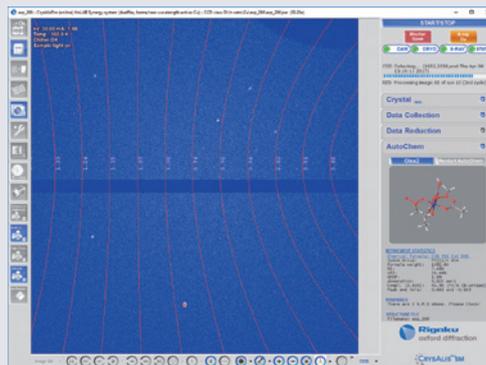
測定条件の決定



迅速なスクリーニングに基づき、測定を目的に応じて最適化。分解能、 $1/\sigma$ などの設定で本測定の測定条件が計算されます。

Experiment

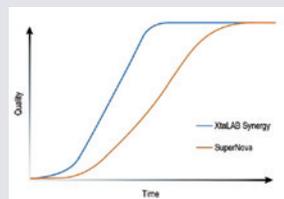
データ処理



測定中・処理と同時に、構造解析・精密化がリアルタイムに進行。

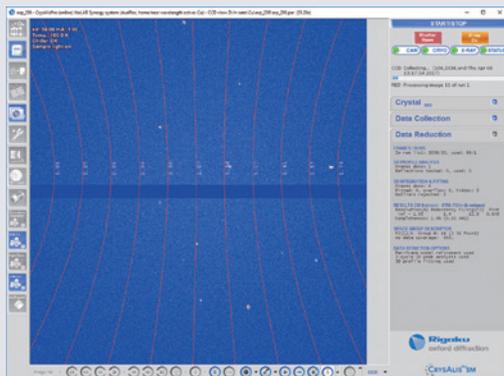
XtaLAB Synergyを構成する卓越した性能のハードウェアにより、迅速測定が可能、従来比最大24倍*を達成しました。

* SuperNovaとの比較



Structure

構造解析



様々な構造解析ソフトウェアに対応

複数の構造解析を呼び出して使用できます。

有機・無機結晶用

- Olex2
- CrystalStructure*²
- WinGX
- Jana

蛋白質用

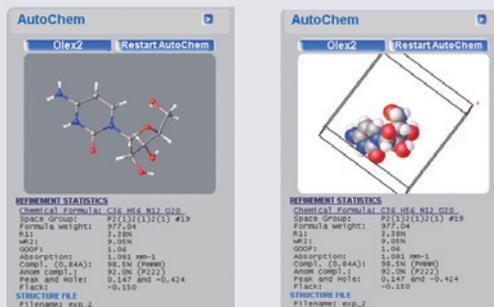
- CCP4

Olex2, CrystalStructureは、様々な構造解析エンジンに対応しています。

- SHELX*²
- SIR*²
- Superflip*²
- PLATON*²

AutoChem*²*³

複数の構造解析プログラム（直接法、パターンソ法、Charge Flipping法）を自動的に使用し、構造解析成功の可能性を最大化しています。



*² ご使用いただくにはライセンス登録が必要です。

*³ XtaLAB Synergy シリーズには標準搭載されています。

ソフトウェア

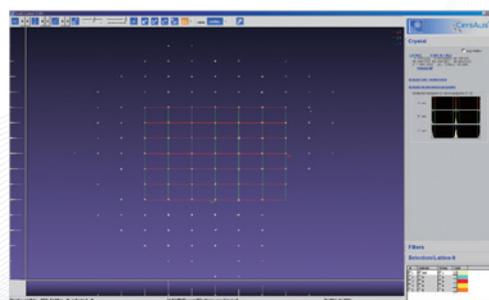
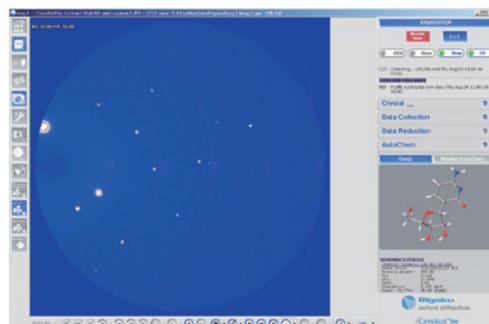
CrysAlis^{Pro}

単結晶構造解析 高機能統合プラットフォーム

無機・有機・蛋白質、すべての試料において同じプラットフォームを提供するX線回折データ測定・処理ソフトウェアです。使い勝手のよさを追求したユーザーフレンドリーなインターフェースを搭載。完全自動処理の他、インタラクティブ処理や完全マニュアル処理にも対応します。さらに、オプションの自動構造解析プラグインAutoChemを使用することで、測定から構造解析まで、完全自動化を実現します。

CrysAlis^{Pro}は、多様なユーザーニーズに応え、常に進化し続けるソフトウェアです。

- ユーザーフレンドリー
どなたでも簡単かつ直感的に操作できるユーザーインターフェースを搭載
- 洗練されたワークフロー
結晶のマウントからスクリーニングや予備測定、測定条件の設定、本測定、データ処理までシームレスに、無駄なく無理なく流れるワークフローをご提供します。
- 充実機能
インタラクティブ処理による格子決定のためのツールや逆格子ビューアなどの機能が充実しており、自動処理では対応が難しい試料を簡単に取り扱うことができます。



AutoChem 自動構造解析プラグイン

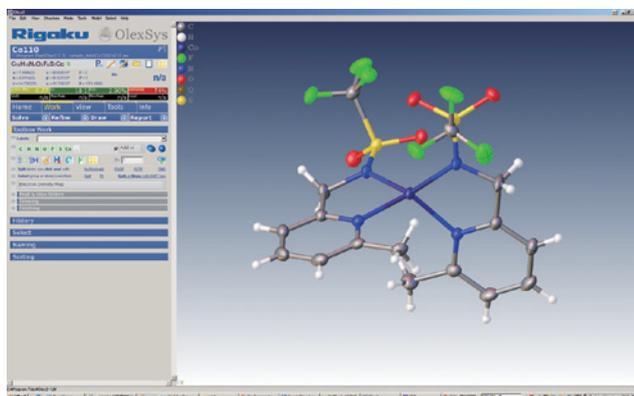
CrysAlis^{Pro}の自動構造解析プラグインです。X線回折データ収集と並行して、構造解析および構造の精密化を完全自動実行します。

- 構造解析、構造精密化、CrysAlis^{Pro}に完全統合
- 2500を超える構造を用いて実証実験を実施
- 検証した構造の大多数は1分以内、通常30秒以内に自動構造解析が完了
- プラグイン実行中であってもユーザーインタラクション可能
- 最適な初期構造決定方法の選択 (パターンソン法、直接法、チャージフリッピング法)
- 最適な初期構造決定プログラムの自動選択 (SMTBX (olex-solve)、SHELX、SIR、もしくはSuperflipなど)
- 化学組成の情報の有無に関わらず実行可能
- 複数の空間群による構造解析
- フーリエ合成による原子の割り当て、異方性温度因子による精密化、理想位置への水素原子発生
- 原子名の変更、再精密化の実行

※ XtaLAB Synergyシリーズには標準搭載されています。ご使用いただくにはライセンス登録が必要です。



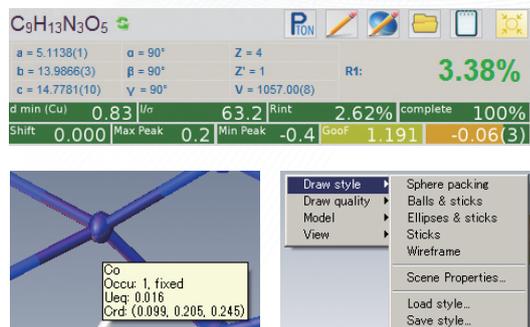
Olex2 構造解析プログラムパッケージ*



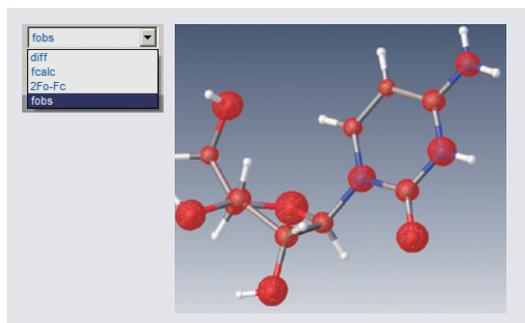
Olex2は、空間群決定から位相決定、分子モデルの構築と修正、構造の精密化、最終レポート、CIFファイルの作成を行うことができる構造解析用プログラムです。CrystalStructureに搭載されていた強力な空間群決定プログラム“XPlain”が標準装備されています。Bravis格子やLaue群の選択、消滅則の確認による空間群の決定を1ステップごとに確認しながら行えます。XPlainでは、選択した格子や空間群に応じて、格子変換が自動的に行われます。精密化プログラムとして、標準装備の“olex2.refine”もしくは“SHELXL”の2種類が用意されています。基本操作は全てGUI上で行うことができ、モデルに対する束縛条件の入力や不規則構造の取り扱い、そして双晶の解析を簡単に行うことができます。

* Olex2は、OlexSysによるライセンスフリー構造解析プラットフォームです。

洗練されたグラフィック画面

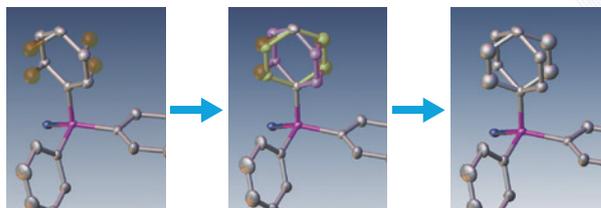


Olex2のグラフィック画面は、解析に必要な情報を常に表示し、解析不十分なパラメーターについて、赤・橙・黄緑の色で解析の進捗具合を知らせてくれます。また、必要な情報を必要な時に表示する機能を有しています。マウスのカーソルを情報を知りたい原子に合わせるだけで、占有率、温度因子、座標位置などを表示してくれます。電子密度表示も簡単に行えます。不規則構造の解析では、電子密度を見ながら注目している部分構造のみをクリック1つで表示することが可能であり、複雑な解析も容易に行えます。



ユーザーのニーズにこだわった操作性

● 不規則構造の解析

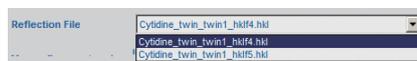


不規則構造のモデル構築において、直感的に適切なモデルが組めるようにグラフィック画面上の操作性を向上しています。分割されたモデルには、自動的にPartが振り分けられ、占有率の設定や原子名の変更を行います。ユーザーによる手動での振り分けも可能になっています。



また、解析における各束縛命令の入力は、グラフィックス画面上で原子をクリックで指定して行うことができます。これにより解析を行っているモデルを参照しながら、スムーズな解析を実現することができます。

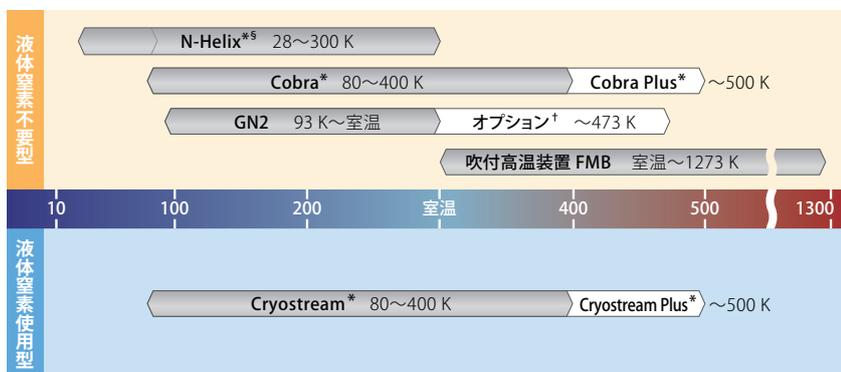
● 双晶の解析



HKLF4とHKLF5フォーマットの反射ファイルをプルダウンからいつでも選択する事が可能です。初期構造をHKLF4フォーマットの反射ファイルで求めた後、HKLF5フォーマットの反射ファイルに切り換えて、2つのドメインの反射を使用して精密化を行うことができます。

アクセサリ

試料吹付温調装置一覧



* Oxford Cryosystems社製 § 100~300Kの領域は、ヘリウム吹付の際のサンプルマウント時のみ使用可能です。常時使用には、他の吹付温調装置との併用が必要です。* Plusシリーズは、XtaLAB mini IIには、搭載できません。† 受注時オプション



試料吹付低温装置 Oxford Cryosystems社製 Cobra

ダイヤモンドアンビルセル M22 セルコア

ダイヤモンドアンビルセル M22セルコアは、リガク単結晶X線回析装置XtaLABシリーズで、簡便に高圧測定を行うことができるアダプターです。小型化・超軽量化を実現し、標準のゴニオメーターヘッドに、搭載することができる上、標準^{*1}のコリメーター、ビームストッパーをそのまま使用できます。小型でありながら、最大10GPa^{*2}を実現しています。

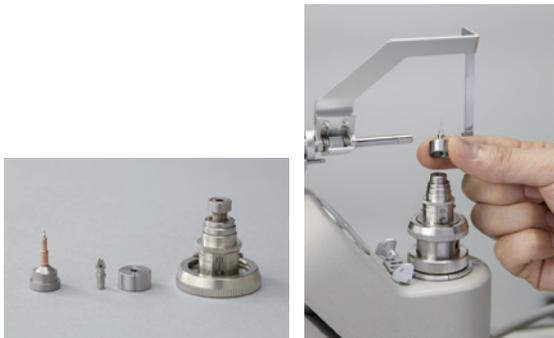


*1 標準システムでは、サンプル位置からコリメーター先端まで、サンプル位置からビームストッパーまでの距離が共に15mm以上を想定しています。15mmを確保できていない場合は、コリメーターおよびビームストッパーの交換が必要です。

*2 10GPa対応のアンビルおよびガスケットが必要です。

マグネチックアークレスゴニオヘッド

従来の試料ピンとMicroMount™などのマグネット専用ピンの両方を使用することができます。どちらのピンもゴニオヘッドにワンタッチで取り付け可能です。



無機・有機化合物 低分子スターターキット

これから単結晶X線構造解析を始める方のためのツールキットです。このキットで単結晶のマウントに必要な道具が一度にそろいます。



結晶化キット

(Hampton Research社製、MiTeGen社製)

初心者からエキスパートまで 結晶化・結晶取扱のスタンダード

蛋白質の結晶化から結晶のマウントまで、必要な器具・薬品がすべてそろっています。



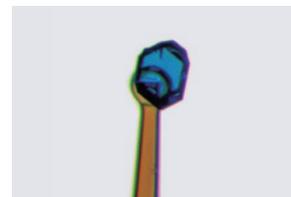
結晶化スクリーニング試薬



結晶化プレート



結晶化試薬



サンプルマウントピン



定期講習会

アプリケーションサイエンティストによる講義と装置実習を実施しています。単結晶X線構造解析の原理から、測定・解析方法、結果の解釈まで、幅広く学ぶことができます。

セミナー／ミーティングの開催

ワークショップでの講演・実演をはじめ、ユーザーズミーティングやインナーセミナーなど、日頃の疑問を解消する場を随時設定しています。また、海外への出張セミナーも行っており、国内と同等のアプリケーションサポートを受けられます。

リガクジャーナルの発行

最先端のトピックスや、「分析装置の使用例」「解析手法の応用例」「測定ノウハウ」など、役立つ情報をお届けしています。1959年に『理学ジャーナル』として発刊、現在は年2回の電子版ジャーナルを発行しています。

ウェブサポート

ソフトウェアダウンロード

単結晶構造解析関連ソフトウェアをお使いのみなさまへ、最新版のご案内をしています。

ユーザーフォーラム

ユーザーコミュニケーションの場としてフォーラムを開設しています。ソフトウェアや構造解析法に関する質問を投稿したり、他のユーザーと知識を共有したり、既存の解決方法を参照したりすることができます。

<https://www.rigakuxrayforum.com>



その他

各種アプリケーションやメールマガジン、動画を活用した資料を提供しています。

ライブデモ

お客様とリガクラボをつなぐライブデモを実施しています。リガクの最新機種とCrysAlis^{Pro}の実力を、ぜひお客様ご自身でご実感ください。

ご来社・ライブデモのお問い合わせ
rod-demo@rigaku.co.jp



プロジェクト予算に合わせたレンタル契約も承っております。

次世代構造解析とは!

X線では解析ができない事例だと、あきらめてはいませんか?

X線装置の進化により、以前は不可能と思われていた夢の解析が、すでに現実になっています。

特設ウェブサイト「次世代構造解析とは!」では、先進の解析事例をご紹介します。ぜひご覧ください。

新世代の構造解析によるソリューションを、リガクが提案します。



次世代構造解析とは

検索

<https://japan.rigaku.com/smc/>

- 超高速・超高精度 XtaLAB Synergy 2024 システム
- 電子回折統合プラットフォーム XtaLAB Synergy-ED
- XtaLAB SynergyCustom用自動サンプル交換ロボットシステムACTOR2
- 湾曲ハイブリッドピクセル検出器 HyPix-Arc150° / HyPix-Arc100°
- CrysAlis^{Pro}ほか先進のソフトウェア
- スクリーニング装置・温調装置ほか

X線装置設置の届出について

X線装置の設置に際しては、下記の通り届け出が必要です。

- 中央省庁：装置設置の検査終了後30日以内に人事院へ
 - 公立機関：工事開始の30日前までに各都道府県の人事委員会へ
 - 民間機関：工事開始の30日前までに労働基準監督署へ
- 詳しくは、弊社支店・営業所までお問い合わせください。

日本分析機器工業会規格 JAIMAS 0101-2001 に適合

*カタログ中に掲載されている性能上の数値は、株式会社リガクによるテスト結果であり、他の環境下で常に同様の結果となることを保証するものではありません。

*カタログ中の社名、製品名は各社の商標および登録商標です。

*このカタログに掲載されている製品は、外国為替および外国貿易法の安全保障輸出管理の規制品に該当する場合がありますので、輸出する場合、または日本国外に持ち出す際は、日本国政府への輸出許可申請等、必要な手続きをお取りください。

製品改良にともない、やむをえず仕様・外観などを予告なく変更させていただく場合があります。ご了承ください。

株式会社 **リガク** 〒196-8666 東京都昭島市松原町3-9-12
☎(042)545-8111(代表電話案内) FAX.(042)544-9795

東京支店 / 〒151-0051 渋谷区千駄ヶ谷5-32-10 ☎(03)5312-7077 FAX.(03)5312-7078
大阪支店 / 〒569-1146 高槻市赤大路町14-8 ☎(072)696-3387 FAX.(072)694-5852
東北営業所 / 〒980-0804 仙台市青葉区大町1-2-16 ☎(022)264-0446 FAX.(022)223-1977
名古屋営業所 / 〒461-0002 名古屋市東区代官町35-16 ☎(052)931-8441 FAX.(052)931-2689
九州営業所 / 〒802-0005 北九州市小倉北区堺町2-1-1 ☎(093)541-5111 FAX.(093)541-5288

URL <https://www.rigaku.com>