

2022 年 3 月 9 日

株式会社リガク

リガク 電子回折装置『XtaLAB Synergy-ED』を使用した 解析成果が Nature Communications に掲載

電子回折(ED : Electron Diffraction)は電子線によって単結晶構造解析を行なう最新の技術です。株式会社リガク(以下、リガク)は世界で初めて、測定から解析までをひとつのパッケージとした電子回折統合プラットフォーム『XtaLAB Synergy-ED』を2021年6月1日に販売開始しました。このたび、英国のバーミンガム大学とノッティンガム大学の研究者たちがこのXtaLAB Synergy-EDによって決定された分子の立体構造を、著名な専門誌である『Nature Communications』に2022年1月20日に発表しました。

XtaLAB Synergy-EDは、リガクと日本電子株式会社(以下、日本電子)の共同開発の成果によるものです。リガクの高速高感度検出器『HyPix-ED』、単結晶構造解析に必要な測定と解析の両方の機能を備えたソフトウェアプラットフォーム『CrysAlis^{Pro} for ED』、そして、日本電子の電子顕微鏡開発で長年培った専門知識を活かしたシステムとのシナジーによって実現しています。XtaLAB Synergy-EDは、従来の単結晶X線構造解析装置では解析することが出来なかったナノスケールのちいさなサンプルを分析することができます。X線回折と電子回折の2つの解析技術を両輪で提供する事により、私どもが貢献出来る範囲が大きく広がりました。



▲XtaLAB Synergy-ED

バーミンガム大学の Neil Champness 教授が率いる研究チームは、彼らの研究対象となるサンプルを、おもに放射光施設のビームラインでデータ測定し、従来の方法で単結晶構造解析を試みていました。しかし、得られたデータの質が悪かったために分子の立体構造の決定が非常に難しく、彼らが必要とする結果は得られておりませんでした。

そこで、別の方法として電子回折による単結晶構造解析を検討することになり、厚さ約 100 nm の極微小結晶を 10 個ほど XtaLAB Synergy-ED で測定しました。このうち、9 つの測定データをマージして構造解析することで、新規構造であるヘテロロタキサンの構造を決定することに成功しました。XtaLAB Synergy-ED を用いることで、従来の方法では得ることが出来なかった構造を可視化し、反応プロセスの特定に至りました。

この研究プロジェクトについて尋ねられたバーミンガム大学の Champness 教授は、次のように述べています。

「私たちは、ロタキサンと呼ばれる分子スイッチの光誘起電子移動の反応プロセスを研究しています。この反応プロセスの仕組みを解釈するには、きわめて高精度に分子の立体構造を可視化する事が必要になります。これを達成する為の最適解は、単結晶構造解析です。」

「私たちは X 線結晶学者であり、放射光施設のビームラインも利用しますし、リガクの単結晶 X 線構造解析システム『XtaLAB Synergy-S』も所有しています。今回の研究対象の化合物も、X 線回折データを収集しましたが、残念ながら我々の研究に必要な精度の構造決定には至りませんでした。そのとき、リガクが最新機種である XtaLAB Synergy-ED での測定を提案してくれました。驚いたことに、電子回折によるデータ測定では、放射光施設のビームラインで測定したデータよりもずっと質の良いものを得ることが出来ました。我々が扱っている複雑な分子に対しても、電子回折によってこんなにも質の高いデータを得ることが出来て大変満足しておりますし、私たちが研究している反応プロセスの仕組みに関してもより深く理解することが出来ました。」

リガクの Mark Benson (General Manager of Global Sales and Marketing for Single Crystal, Rigaku Oxford Diffraction) も次のように述べています。

「XtaLAB Synergy-ED を発売して間もなく、結晶化が困難なことでよく知られているロタキサンでその性能を試してみたいと思っていました。XtaLAB Synergy-ED は難解であったロタキサンの分子構造を可視化することに成功し、我々の期待をはるかに上回る性能を証明しました。」

「我々が長年お付き合いさせていただいている Champness 教授の論文が、権威ある Nature Communications 誌に掲載されたことだけでなく、その論文のなかで我々が測定したデータが貢献している事を、リガクは非常に誇りに思っています。また、この論文では、サンプル量が極めて少ない場合や、結晶が小さすぎて従来の X 線や放射光での回折測定が困難な場合における、XtaLAB Synergy-ED の優位性についても強調していただいております。さらにいえば、電子回折という技術がいかに構造解析に革命をもたらすかについても、この論文が実証しています。私たちリガクは、この最新の研究開発の最前線にいることに興奮を隠せません。」

Champness 教授らのように、リガクの単結晶 X 線構造解析装置である XtaLAB Synergy シリーズをすでにご利用いただいている研究者の皆様にとって、電子回折による単結晶構造解析は、きわめて簡単にはじめることができます。リガクは測定から解析までをパッケージとした統合プラットフォームとして CrysAlis^{Pro} ソフトウェアを提供しておりますが、これは X 線回折と電子回折の両方のシステムに搭載しております。研究者の皆様は、X 線と電子線の違いを意識することなく解析に集中出来ます。

リガクは、単結晶構造解析による分子の立体構造の可視化ソリューションをこれからも発展させ、みなさまの研究に貢献致します。

Nature Communications に掲載された論文に関しては無料で参照できます。以下のリンク先よりご覧ください。

<https://doi.org/10.1038/s41467-022-28022-3>

【XtaLAB Synergy-ED について】

- ・ 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統合プラットフォームです。
- ・ 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できます。
- ・ 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す。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な時間を排除します。
- ・ これまで単結晶 X 線構造解析を利用してきた方であれば、すぐに使い始めることができます。電子顕微鏡への習熟は不要です。

製品詳細ページは弊社 Web サイトをご覧ください。

<https://www.rigaku.com/products/crystallography/synergy-ed>

本リリースに関するお問い合わせ先

リガクホールディングス株式会社 広報宣伝課

e-mail:prad@rigaku.co.jp