

ハイスループット分析用 小角X線散乱装置



SAXSpace



SAXSpace: 日常のSAXS/WAXS 測定における強力なパートナー

SAXSpaceシステムは、特に生体試料(BioSAXS)、界面活性剤、ナノ粒子の分散液など、大量のサンプルを日常的に分析する際に力を発揮します。最先端のソフトウェア及びデータ分析と組み合わせることで、SAXSpaceは複数のナノ構造サンプルをすばやく簡単に分析します。

60年を超えて蓄積されたSAXSの専門知識に基づいて、ナノ構造材料のハイスループット分析に最適な機器が構築されました。

多彩なニーズに対応

SAXSpaceは、最高の要求水準に応える
堅牢なラボスケールのSAXS/WAXSシステムです。

- 小型サイズで優れた分解能: q_{\min} : 0.03 nm^{-1}
- 短い測定時間と最高のSAXS/WAXSデータ品質
- 高いサンプルスループット: 最大192個の液体サンプル
- 高いシステム稼働率と簡単な操作

ナノ構造解析を高速化する

SAXSpace

強力なパートナー



SAXSの60年間にわたるイノベーション

1957年
オットー・クラツキー教授と
アントンパール社が初の商用
SAXS分析装置を開発

1981年
クラツキーコンパクトカメラ

2003年
SAXSess

2012年
SAXSpace

2015年
SAXSpoint

2017年
SAXSpoint 2.0

特長

パワフルなX線 – 短時間で良質な測定データ

SAXSpaceは、アントンパール社の強力なPrimux 3000 X線源とAXO Dresden社の洗練された光学系を採用しています。この組み合わせにより、強度の高い単色X線ビームが確保されます。SAXSの「生みの親」であるオットー・クラツキー教授とアントンパール社が1950年代に初めて共同開発したブロックコリメーションは、省スペースながら寄生散乱を極限まで低減した高強度のX線ビームを生み出し、サンプルの広範囲に照射されることで非常に短い測定時間と高いS/N比が実現します。この機構を採用したSAXSpaceでは、短時間で高品質のSAXS及びWAXSデータを得ることができます。

ハイスループットスクリーニングに最適化

SAXSpaceは、複数サンプルのすばやい測定と日常的な分析に適したラボ用SAXS装置です。ASXオートサンプラーは、すばやく高精度のサンプル輸送と効率的な洗浄プロセスにより、最大で192種の液体サンプルを自動的に無人で測定することができます。この結果、特に溶液内のタンパク質(BioSAXS)やナノ粒子の分散性などを簡単かつ効率的に分析できます。さらに、SAXSpaceは様々なサンプルステージとホルダーを装着でき、多種多様なナノ材料の大気下または非大気下でのSAXS/WAXS分析が可能です。

SAXSとWAXSの同時測定

サンプルを変えることなく、幅広いq-rangeの散乱データを取得します。X線ビーム軸に沿ってサンプル位置を高精度に可変するTrueSWAXS機能により、小角から広角（最大60° 2θまで）の散乱データを同時に連続して収集します。手間のかかる光学調整や検出器の位置変更に関わることなく、均一な分解能で信頼できる結果が得られます。

専用ソフトウェア

多種多様な散乱データを処理分析するには、最適化されたパワフルなソフトウェアパッケージが必要です。SAXSdrive™及びSAXSanalysis™ソフトウェアパッケージは直感的で使いやすいインターフェースを備え、データ取得、処理、分析の一連の作業をスムーズに行えます。自動サンプリング、温度スキャンなどの自動連続測定プログラムを簡単に作成でき、カスタマイズ可能な分析用テンプレートを使用すれば大量の散乱データセットでも一括で分析できます。

検出器テクノロジーのゴールドスタンダード

SAXSpaceは、Dectris社の最新のハイブリッドフォトンカウント(HPC)検出器テクノロジーを採用しています。高分解度のMythen2 Rシリーズ及びEIGER Rシリーズ検出器は、シングルフォトンカウントモードのX線直接検出と微小ピクセルサイズ(50 μm及び75 μm)とを組み合わせにより優れたS/N比と最高の空間分解能を実現します。これらの検出器はSAXSpaceシステムハードウェアとソフトウェアに完全に統合されているため、SAXSとWAXSの自動測定を1つのシステムで簡単に実行することができます。



注目: BioSAXS

巨大分子の構造解析

生体試料の小角X線散乱分析はナノスケールの構造情報を提供し、タンパク質結晶構造解析、核磁気共鳴分光法(NMR)、電子顕微鏡法(Cryo-TEM)などの他の技術を補足します。

課題

タンパク質の結晶構造解析には良質な単結晶が必要ですが、その結晶育成は非常に困難な作業です。また、結晶のように分子が「凍結」した状態では、以下のような非常に重要な疑問について未だ議論の余地があります。

- サンプルの構造は生体内の環境でどのような影響を受けるのか。
- サンプルには生体内でどのような動的プロセスが関与するのか。

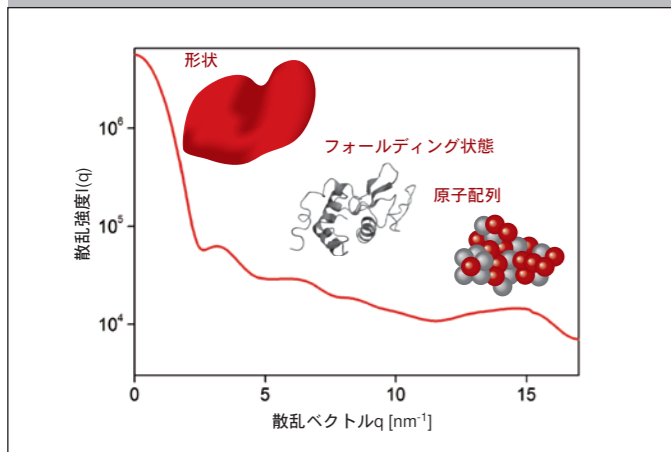
NMRとSAXSはこれらの疑問を解決する方法になります。しかし、NMRは高分解能の構造情報を提供する一方、信号が非常に複雑なことが多いため、それ以上の情報がない場合にはNMR単独での解析が非常に困難となります。

解決法

SAXSを使用すると、生体高分子とその複合体を溶液中で、つまり生理学的条件下で分析することができます。サンプルをその自然な状態で分析することは、配位子が結合したときの構造変化や、環境が変化したときのタンパク質のフォールディング/アンフォールディングなど、動的プロセスの理解に不可欠です。

効果:

- 生体高分子のサイズと形状
- タンパク質やタンパク質複合体の三次元構造
- 凝集の程度
- 分子量の分析
- タンパク質のフォールディング/アンフォールディング(Kratkyプロット)
- 外部パラメーターの変動によるタンパク質の安定性評価
- 配位子の結合による構造変化の観察



散乱曲線の構造情報

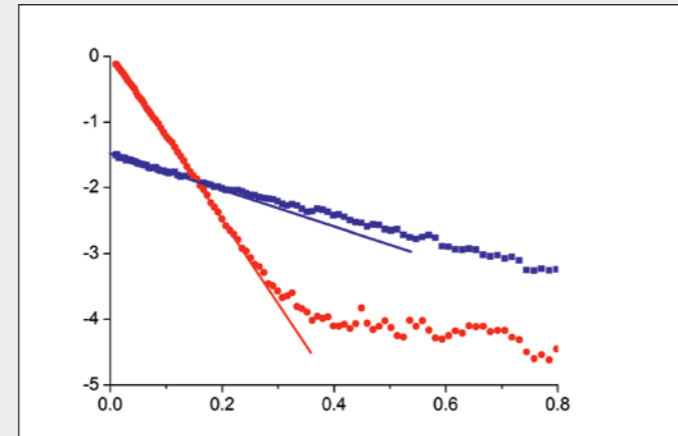
BioSAXS分析

慣性半径、粒子体積/質量、フォールディング/アンフォールディングの状態

Guinier分析及びKratkyプロット

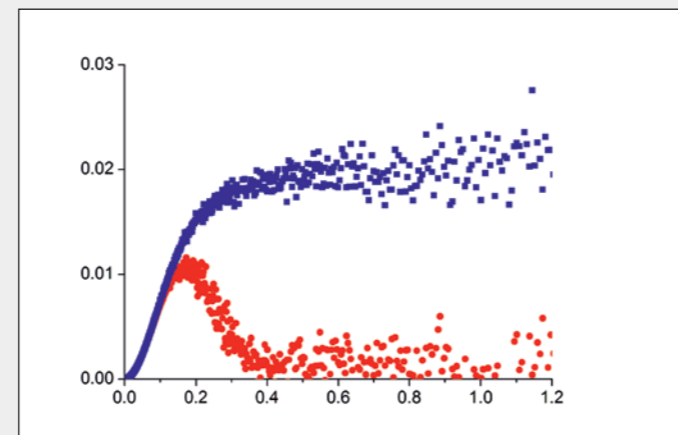
Guinier法では散乱曲線の小角領域を分析し、以下の2つの変数を確定します。

- 慣性半径(RG)が最初の傾きから計算されます。これは粒子サイズに比例します。
- 散乱角0への外挿により求めた強度を使用し、粒子分子量に比例する粒子体積を求めます。



$I(q)q^2$ vs q として出力されるKratkyプロットにより、以下のようにタンパク質のフォールディング/アンフォールディングに関する情報が得られます。

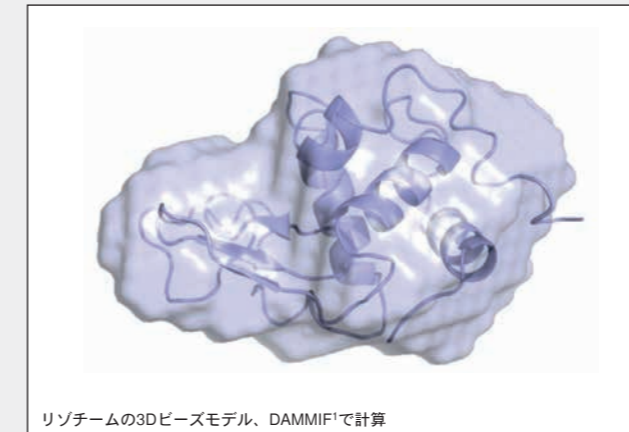
- アンフォールディングしたタンパク質の場合は平坦部が見られ
- フォールディングされた、つまり小さくなったタンパク質では明瞭な極大が見られます



3次元構造、粒子サイズ、形状、内部構造の計算 フーリエ変換

SAXS曲線のフーリエ変換により実空間での構造情報が明らかになり、粒子サイズ、形状、内部構造に関する情報を抽出できる二体間距離分布関数を利用できるようになります。

ランダムに分散した粒子の小角散乱データに基づいて、3次元の低分解能形状を第一原理法を使用して計算することができます。これによって得られる3次元ピースモデルはタンパク質の形状とタンパク質骨格のフォールディングを視覚化します。

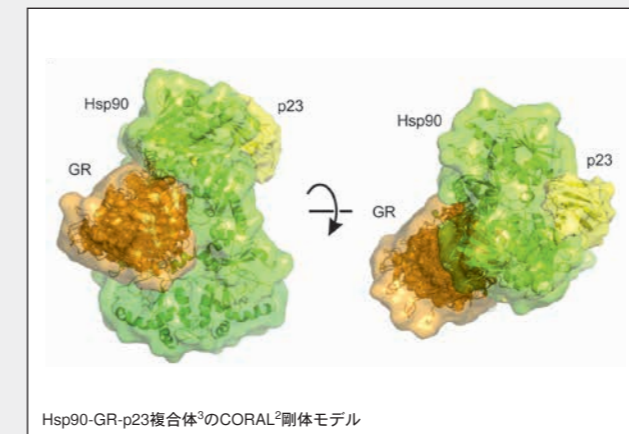


リゾチームの3Dピースモデル、DAMMIF¹⁾で計算

複雑な組み立ての構造モデル

他の手法(タンパク質結晶構造解析など)から得られた情報をSAXSデータと組み合わせることで、複合体内部における個々のドメインの相対的な配向と配置を確認することができます。

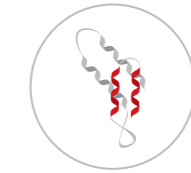
このプロセスは剛体モデリングと呼ばれます。これにより、実験データに最も適合する複合体の構造を見つけることができます。例えば、構成タンパク質の結晶構造の情報を参考にして、タンパク質複合体の構造を解析できます。



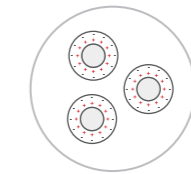
Hsp90-GR-p23複合体³⁾のCORAL²⁾剛体モデル

¹⁾ Franke, D., Svergun, D.I., J. Appl. Cryst.42 (2009) 342 ff.
²⁾ Svergun, D.I. et al., J. Appl.Cryst.45 (2012) 342 ff.
³⁾ Madl, T. et al., Molecular Cell 53 (2014) 941 ff.

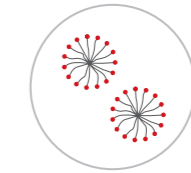
アプリケーション分野



生体試料
(BioSAXS)



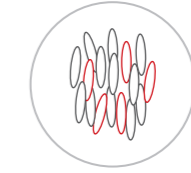
コロイド分散系



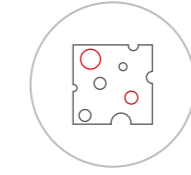
界面活性剤、エマルション



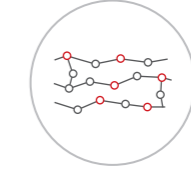
医薬品



液晶



多孔性物質



ポリマー、繊維

ソフトウェア

SAXS/WAXSの最高の測定結果をもたらす専用ソフトウェア

SAXSpaceシステムには、直感的操作で簡単に操作できる包括的ソフトウェアパッケージが含まれており、システム管理とデータ取得に加えて、複数のSAXS及びWAXSデータをすばやく処理・分析できます。

SAXSdrive™: システムの制御と測定

SAXSdrive™は、SAXSpaceシステムを構成する全てのコンポーネントを制御します。温度、露光時間、サンプラー検出器間距離などのパラメータを逐次的に自動制御させるSAXS/WAXS測定プログラムを簡単に設定できます。

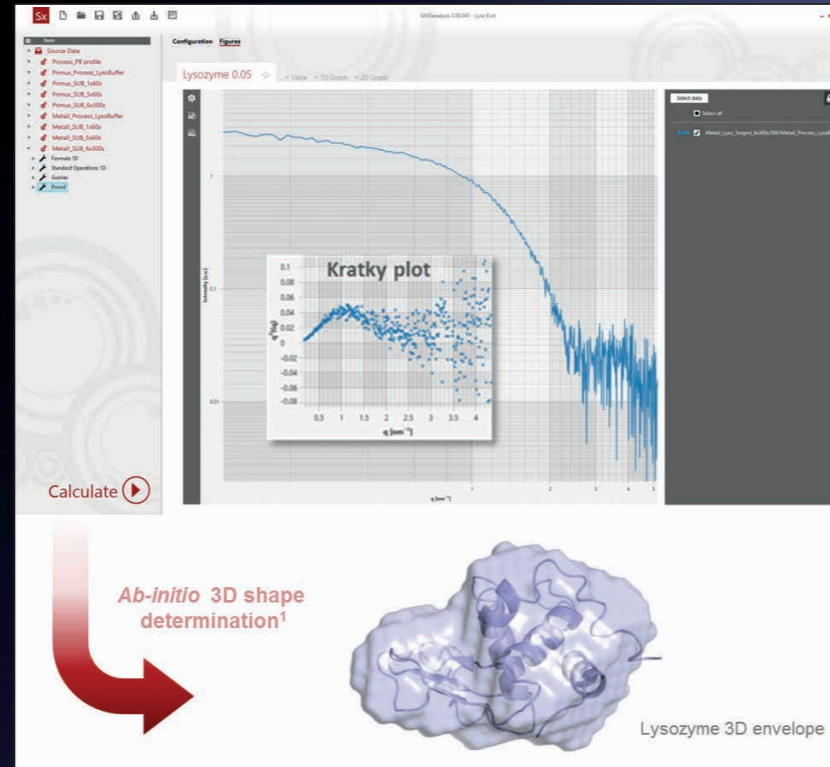
SAXSanalysis™: データ処理と分析

SAXSanalysis™は、2D及び1D散乱データ向けのデータ処理・分析パッケージです。自由にカスタマイズ可能な分析テンプレートとバッチ処理により、大量のデータを扱うことができます。データレイアウトは、一般に使用されているNexus方式に準拠します。

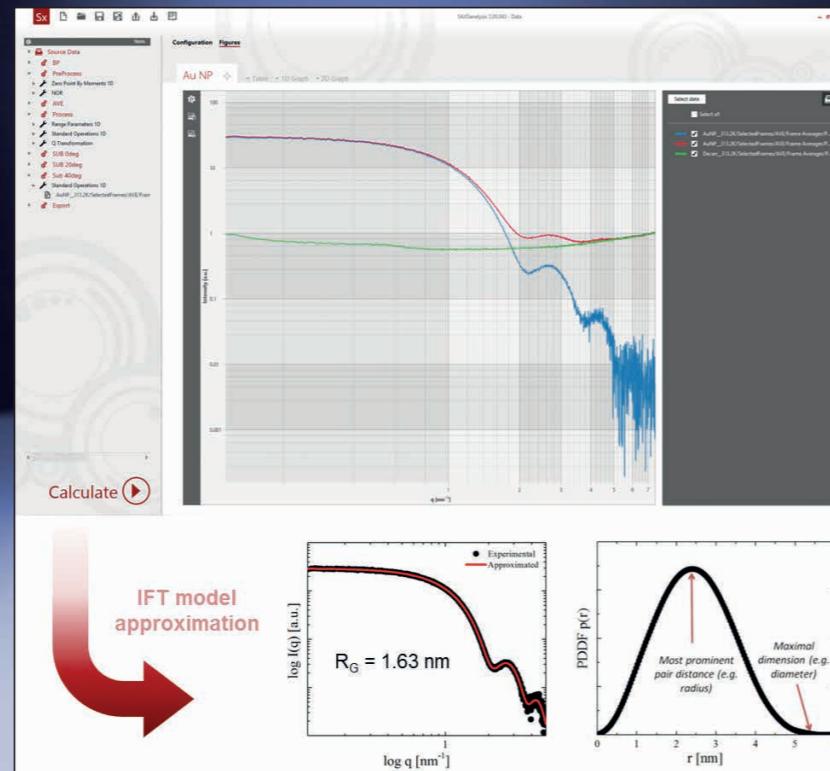
慣性半径(R_G)、粒子サイズ、Porod定数、比表面積、Kratkyプロットなどの重要なパラメータやプロットを簡単操作で表示できます。一般的なIFT及びモデルフィッティングソフトウェアパッケージ(GIFT、ATSAS、SASfit、MacSASなど)への自動データエクスポート機能も活用できます。

PCG: 高度な構造解析

間接逆フーリエ変換法(IFT)及び逆重畳法(デコンボリューション)を用い、粒子サイズ径、サイズ分布、形状、電子密度分布などの構造情報を引き出すことができます。粒子間相互作用が無視できない濃厚な微粒子分散系や荷電粒子系の散乱データでも、構造因子を定量的に評価できます。



BioSAXS: 3Dピースモデルの計算



分散した金のナノ粒子のサイズ測定



SAXSpaceシステムにお任せください



最高品質

SAXSpaceは、システムの構成機器の全てにおいて最高品質を達成しています。X線構造解析装置の製造に関わるアントンパール社の長い伝統、経験、熟練の技術が、SAXS/WAXS及びBioSAXSにおける優れたデータ品質を保証します。

SAXS/WAXSに関する専門知識

豊富な専門知識でお客様のSAXSpaceシステムをサポートします。システムの設置、試運転をはじめ、弊社のSAXS/WAXS専門技術者が現場で詳細なトレーニングを提供し、SAXSpaceシステムを最大限に活用していただけるようサポートします。

アプリケーション及びサービスの実績

アントンパール社の経験豊富なアプリケーション及びサービス専門技術者の世界規模のネットワークが、お客様によるSAXSpace装置システムの円滑な運用を迅速にサポートします。小角散乱に関する60年の経験に基づき、アントンパール社の熟練したSAXS/WAXSアプリケーション専門担当者が技術サポート及びアプリケーションサポートを提供します。

システムの仕様

X線源	Primux 3000封入管X線源(Cu、Mo)
X線光学系とコリメーション	- 高品質な多層光学系(完全真空) - 寄生散乱を極限まで抑えたKratkyベースの自動ブロックビームコリメーション(完全真空)
サンプルステージ及びオートサンプラー	- TCステージ(温度制御ステージ) - 複数サンプル用の温度制御オートサンプラー - 最大192個の液体サンプル用ASXオートサンプラー - 湿度ステージ - 加熱/冷却機能(-150~+500 °C)を備えたGISAXSステージ - 加熱/冷却機能(-150~+350 °C)を備えた引張応力ステージ - ご要望に応じてカスタムソリューションを提供
特殊機能	- TrueFocus: 自動光学系調整 - TrueSWAXS: 連続的小角・広角(SWAXS)同時測定(最大60° 2θ) - Stagemaster: サンプルステージの自動検出機能付きYZステージ
温度範囲 雰囲気条件	- -150~+600 °C - 温度の精度: ±0.1 °C - 真空、空気、不活性ガス、湿度(ご要望に応じて反応性ガスにも対応)
サンプルホルダー	- 液体用石英キャピラリーセル - 低寄生SiNセル(ポイントコリメーションモードのみ) - 固体用サンプルホルダー - 高粘度サンプル及び粉体サンプル用ペーストセル - 沈降/浮遊サンプル用ローターセル - 高圧セル - 極少量サンプル用マイクロセル - 自動測定用フローセル及びチューブセル - 使い捨てキャピラリー用ホルダー - 加熱サンプラー - ご要望に応じてカスタムソリューションを提供
検出器	1D Mythen2 Rシリーズ及び2D EIGER RシリーズHPC検出器 q _{min} : 0.03 nm ⁻¹ ~q _{max} : 40.7 nm ⁻¹ (60° 2θ)
ソフトウェア	- SAXSdrive: 測定・収集ソフトウェア - SAXSanalysis: データ処理・分析ソフトウェア - PCGデータ解析ソフトウェア
フットプリント	1.8 m x 0.9 m (長さ x 奥行)



Anton Paar

株式会社アントンパール・ジャパン
〒131-0034 東京都豊田区堤通1-19-9
リバーサイド隅田13階
Tel: 03-6661-8306 | Fax: 03-6661-8308

〒560-0082 大阪府豊中市千里東町1-4-2
千里ライフサイエンスセンタービル1020号
Tel: 06-6170-1761 | Fax: 06-6170-1762

info.jp@anton-paar.com
www.anton-paar.com