

# 紧凑型高通量纳米结构分析 解决方案



SAXSpace



# SAXSpace: 常规 SAXS 与 WAXS 分析的可靠合作伙伴

SAXSpace 是实验室进行多个样品常规分析的主要工具，尤其适合生物样品 (BioSAXS)、表面活性剂和纳米颗粒分散体。SAXSpace 结合先进的软件和数据分析技术，可确保对多个纳米结构样品进行快速而直接的研究。

凭借 60 多年 SAXS 专业知识，对纳米结构材料进行高通量常规测量和快速分析的多功能仪器得以实现。

## 助您成功

SAXSpace 是一款强大的实验室级 SAXS/WAXS 系统，满足以下最高需求：

- 小尺寸，高精度： $q_{\min}$ ：0.03 nm<sup>-1</sup>
- 测量时间短，最高 SAXS/WAXS 数据质量
- 样品处理量大：可同时处理多达 192 位样品
- 系统运行时间长，易于操作

值得您信赖的

# SAXSpace

实验室纳米研究合作伙伴



## 60 年 SAXS 创新

1957

首台商业 SAXS 分析仪由 Otto Kratky 研发并由安东帕制造

1981

Kratky Compact Camera

2003

SAXSess

2012

SAXSpace

2015

SAXSpoint

2017

SAXSpoint 2.0

# 特点

## 强劲的 X 射线 – 快速产生结果

SAXSpace 采用安东帕强大的 Primux 3000 X-射线源，并结合 AXO Dresden 的定制光学系统。这一组合可确保产生高强度和单色的 X-射线束。这项经过充分验证的无散射块准直概念最初由安东帕与 SAXS “创始人” Otto Kratky 于 20 世纪 50 年代联手研发，提供了一个定义明确和大的样品辐照面积的高强度的 X-射线束。用户可以获益于极短的测量时间和高信噪比，而产生具有高质量代表性的 SAXS 和 WAXS 数据。

## 高通量筛选的优化

SAXSpace 是实现快速测量和多个样品常规分析的实验室好帮手。ASX 自动进样器提供快速精准的样品传输、高效的清理程序，可在无监控情况下自动测量多达 192 个液体样品。这将加快常规分析的速度，特别是蛋白质溶液 (BioSAXS) 和纳米颗粒分散体。此外，SAXSpace 还具有各种其他样品台和支架，适合多种纳米材料的环境和非环境 SAXS 和 WAXS 研究。

## 同时得到 SAXS 和 WAXS

从同一样品中获取所有信息。TrueSWAXS 功能可同时连续收集从小角至广角的散射数据这一独特的功能是通过沿 X 射线光束轴精确移动组件来实现的，因而可以实现的散射角度范围从最小角度至  $60^\circ 2\theta$ 。您可以信赖一致的分辨率和可靠的结果，无需担心重新调准而浪费时间或更改探测器位置。

## 专用软件

处理和分析大量散射数据需要优化且功能强大的软件包。利用简单易用而全面的 SAXSdrive™ 和 SAXSanalysis™ 软件包来采集数据，以及处理和分析数据。轻松创建自动连续测量，包括自动采样、温度扫描等，并使用可定制模板分析大的散射数据集。

## 探测器技术的黄金标准

SAXSpace 采用 Dectris 最新的混合光子计数探测器 (HPC) 技术。高分辨率 Mythen2 R-系列和 EIGER R-系列探测器将单光子计数模式下的直接 X-射线探测与小像素尺寸 (50  $\mu\text{m}$  和 75  $\mu\text{m}$ ) 相结合，确保出色的信噪比与最高的空间分辨率。两款探测器完全集成到 SAXSpace 系统的硬件和软件中，您可以在同一系统中轻松完成自动化 SAXS 和 WAXS 测量。



# 关注焦点：BioSAXS

## 大分子的结构研究

生物材料的小角 X 射线散射研究提供了独特的结构信息，弥补了蛋白质晶体学、核磁共振 (NMR) 和冷冻电镜 (Cryo-TEM) 等其他技术的不足。

### 挑战

蛋白质晶体学研究需要生物分子的单晶体，这往往带来挑战。所需的“冷冻”，即结晶态的样品，给我们留下了悬而未决的问题：

- 样品结构如何受所处自然环境的影响？
- 样品涉及到哪些动态过程？

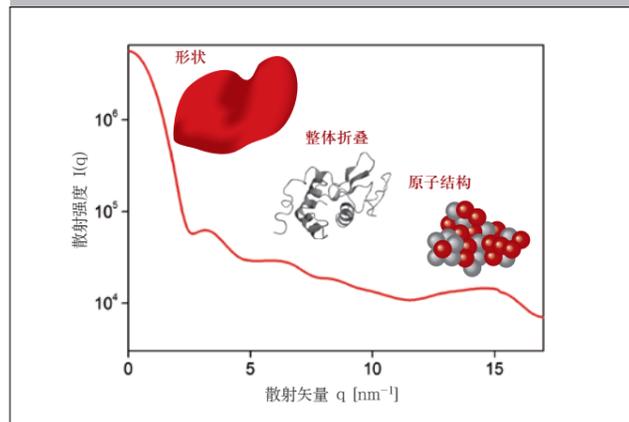
NMR 和 SAXS 对这些问题做出了解答，尽管 NMR 提供了高分辨率的结构信息，但信号通常非常复杂，在缺乏进一步输入的情况下无法解释。

### 解决方案

借助 SAXS，可在溶液（即生理条件下）研究生物大分子及其复合物。分析天然状态的样品对于研究动态过程至关重要，如配体结合时的结构变化和环境变化时的蛋白质折叠/展开。

### 结果：

- 生物大分子的大小和形状
- 蛋白质或蛋白质复合物的 3D 结构
- 聚集度
- 质量分析
- 蛋白质的折叠与展开 (Kratky 曲线)
- 外部参数变动时蛋白质的稳定性
- 配体结合导致的结构变化



散射曲线的结构信息

## BioSAXS 分析

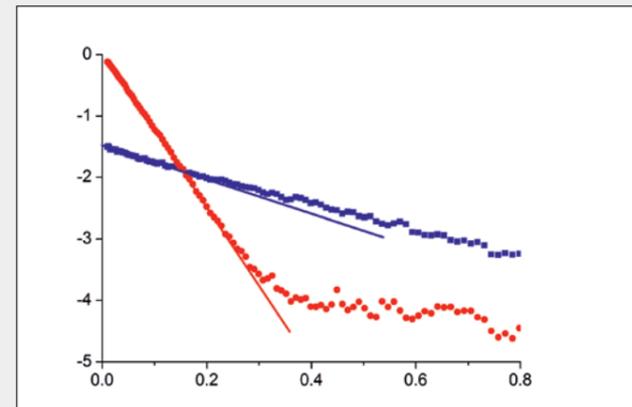
确定回转半径、颗粒体积/质量 以及折叠/展开状态

### Guinier 分析和 Kratky 曲线

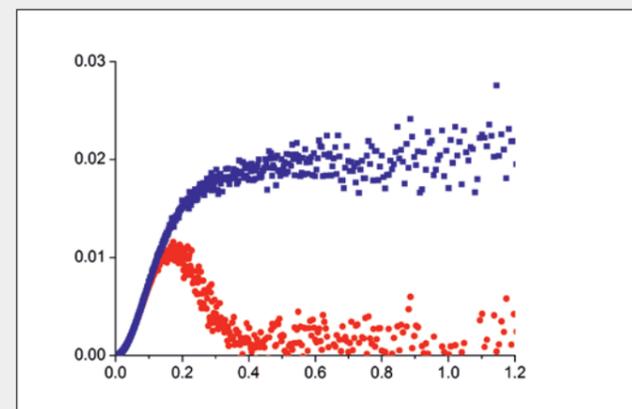
Guinier 法分析小角度的散射曲线并确定两个 SAXS 不变量。

- 从初始斜率中求得回转半径 (RG)，与颗粒尺寸成比例。
- 零散射角处外推的强度  $I(0)$  用于确定与颗粒质量成比例的颗粒体积。

Kratky 曲线提供了蛋白质折叠/展开的信息。在  $I(q)$   $q^2$  与  $q$  (Kratky) 曲线图中



- 未折叠蛋白质的信号趋向于水平
- 折叠的，即紧密的蛋白质信号则呈现显著最大值。

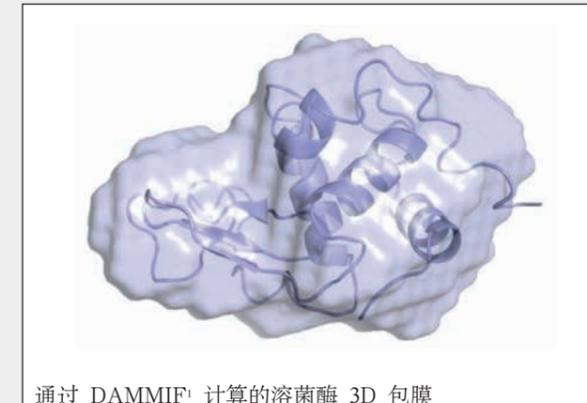


计算 3 维结构、颗粒尺寸、形状以及内部结构

### 傅里叶变换

SAXS 曲线的傅里叶变换揭示了真实空间中的信息，可以给出对距离分布函数，从而提取到有关颗粒尺寸、形状以及内部结构的有价值的信息。

基于随机排序分散颗粒的实验小角度散射数据，可利用从头开始的方法计算三维低分辨率形状。这些“结构”可显现蛋白质形状以及蛋白质骨架的折叠。

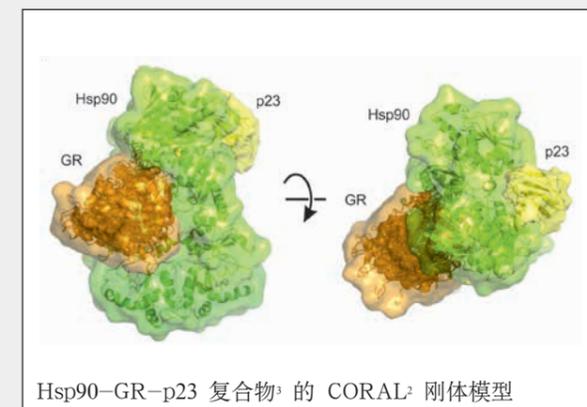


通过 DAMMIF<sup>1)</sup> 计算的溶菌酶 3D 包膜

### 模拟复配体的结构

通过其他技术（如蛋白质晶体学）获得的信息，可以与 SAXS 数据结合以确定复合物中各个结构域的相对方向和位置。

该过程称为“刚体建模”。通过它，您可以找到最适合实验室数据的复合物结构。例如，蛋白质复合物的结构可以借助构成蛋白质的晶体结构解开。



Hsp90-GR-p23 复合物<sup>3)</sup> 的 CORAL<sup>2)</sup> 刚体模型

<sup>1)</sup> Franke, D., Svergun, D.I., J. Appl. Cryst. 42 2009 342

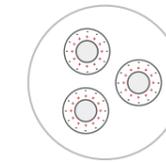
<sup>2)</sup> Svergun, D.I. et al., J. Appl. Cryst. 45 2012 342

<sup>3)</sup> Madl, T. et al., Molecular Cell 53 (2014) 941 ff.

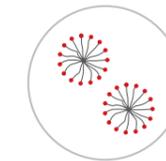
## 应用领域



生物样品  
(BioSAXS)



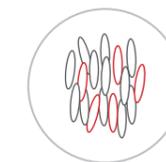
胶体分散液



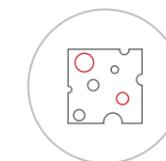
表面活性剂、乳液



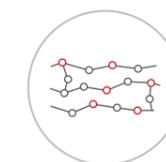
制药



液晶



多孔材料



聚合物、纤维

# 软件

## 专用软件确保最佳 SAXS/WAXS 结果

SAXSpace 系统包含直观、简单易用和全面的软件包，用于系统控制、数据采集以及多个 SAXS 和 WAXS 数据的快速处理与分析。

## SAXSdrive™: 仪器控制和数据采集

SAXSdrive™ 对所有 SAXSpace 系统组件提供全面控制。通过它，可以轻松编程和运行自动 SAXS/WAXS 实验。

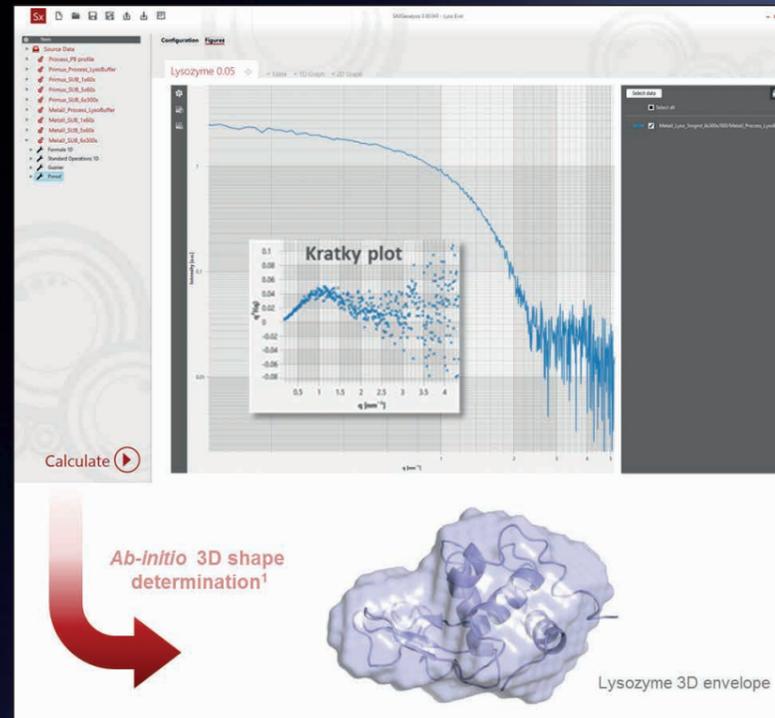
## SAXSanalysis™: 数据处理和分析

SAXSanalysis™ 是用于 2D 和 1D 散射数据的综合数据处理和分析包。完全可自定的模板和批处理概念使您能够处理大量数据。数据布局遵循常用的 Nexus 约定。

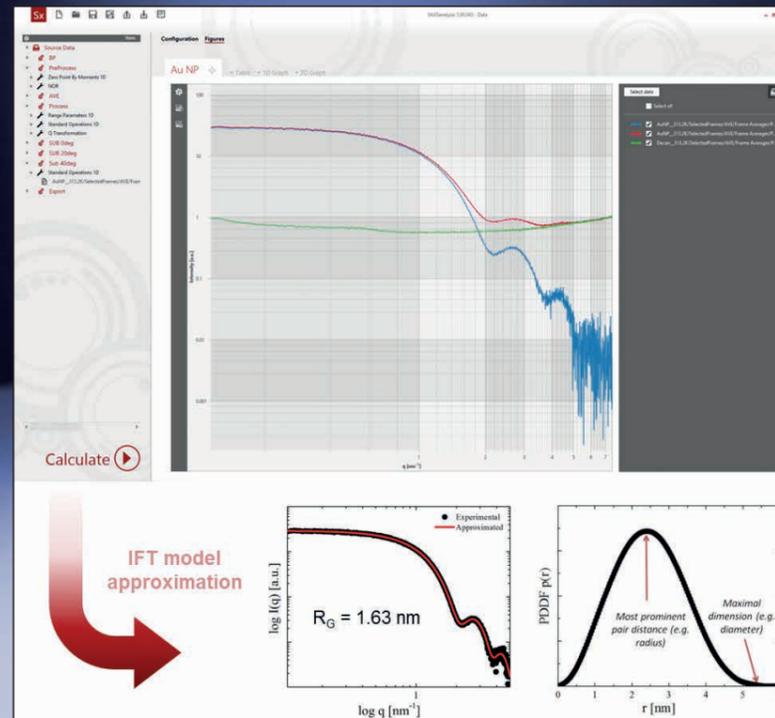
确定重要参数和曲线，如回转半径  $R_G$ 、颗粒尺寸、Porod 常数、比表面积和 Kratky 曲线。自动导出数据用于 IFT 和模型拟合软件包（GIFT、ATSAS、SASfit、MacSAS 以及其他软件）。

## PCG: 高级结构解释

使用 IFT 和去卷积方法来重新得到颗粒尺寸、尺寸分布、形状和内部结构等结构信息。解释相互作用（即浓缩或带电）的颗粒体系的散射数据。



BioSAXS: 确定 3D 结构



分散的金纳米颗粒的尺寸测定



# 妥善维护 SAXSpace 系统



## 最佳质量

确保 SAXSpace 仪器的所有组件达到最佳质量。安东帕在生产高精度测量仪器方面的悠久传统、经验和技能可保证您的 SAXSpace 可以得到高质量的 SAXS/WAXS 结果。

## 渊博的 SAXS/WAXS 知识

我们将为您的 SAXSpace 系统提供多种服务：从系统的安装和调试开始，我们的 SAXS/WAXS 专家将进行全面的现场用户培训，帮助您最大程度地利用 SAXSpace 系统。

## 应用和维修专业知识

安东帕在世界各地均拥有经验丰富的应用和维修专家，能够提供快速支持，确保 SAXSpace 仪器顺利运行。我们有 60 多年的 SAXS 经验，且拥有一支由技艺精湛的 SAXS/WAXS 应用科学家组成的专门技术和应用支持团队，竭诚为您服务。

# 技术参数

X-射线源	<ul style="list-style-type: none"> <li>Primux 3000 密封管 X 射线源 (Cu、Mo)</li> </ul>
X 射线光学元件和准直系统	<ul style="list-style-type: none"> <li>定制的多层光学元件 (全真空)</li> <li>自动无散射基于 Kratky 块的光束准直 (全真空)</li> </ul>
样品台和自动进样器	<ul style="list-style-type: none"> <li>TCStage 控温台</li> <li>适用于多个样品的温控自动进样器</li> <li>适用于多达 192 个液体样品的 ASX 自动进样器</li> <li>湿度样品台</li> <li>具有加热/冷却选项 (-150 °C 至 500 °C) 的 GISAXS 样品台</li> <li>具有加热/冷却选项 (-150 °C 至 350 °C) 的拉伸样品台</li> <li>根据需求提供的定制解决方案</li> </ul>
特殊功能	<ul style="list-style-type: none"> <li>TrueFocus: 自动调准直</li> <li>TrueSWAXS: 高达 60° 2θ 的连续、同时 SWAXS 研究</li> <li>Stagemaster: 带有自动识别样品台功能的 YZ 平台</li> </ul>
温度范围环境	<ul style="list-style-type: none"> <li>-150 °C 至 600 °C</li> <li>温度精度: ±0.1 °C</li> <li>真空、空气、惰性气体、湿度 (根据需求也可以是反应性气体)</li> </ul>
样品槽	<ul style="list-style-type: none"> <li>液体用石英毛细管样品槽</li> <li>低噪音 SiN 样品槽 (仅限点准直模式)</li> <li>固体样品槽</li> <li>粘稠及粉末样品的粘性样品槽</li> <li>样品旋转用的旋转样品槽</li> <li>高压样品槽</li> <li>少量样品的微量样品槽</li> <li>自动测量用的流动样品槽和试管样品槽</li> <li>渗透池</li> <li>加热进样器</li> <li>根据需求提供的定制解决方案</li> </ul>
探测器	<p>1D Mythen2 R 系列和 2D EIGER R 系列 HPC 探测器</p> <p><math>q_{\min}</math>: 0.03 nm<sup>-1</sup>, <math>q_{\max}</math>: 40.7 nm<sup>-1</sup> (60° 2θ)</p>
软件	<ul style="list-style-type: none"> <li>SAXSdrive™ 测量与采集软件</li> <li>SAXSanalysis™ 数据处理与分析软件</li> <li>PCG 高级数据解析软件</li> </ul>
尺寸	1.8 m x 0.9 m (长 x 宽)



## Anton Paar

**Anton Paar®** GmbH  
Anton-Paar-Str. 20  
A-8054 Graz  
Austria - Europe  
Tel: +43 (0)316 257-0  
Fax: +43 (0)316 257-257  
www.anton-paar.com

### 安东帕中国

#### 上海(中国总部)

中国上海市合川路2570号  
科技绿洲三期2号楼11层  
邮编: 201103  
电话: +86 21 2415 1900  
传真: +86 21 2415 1999  
销售热线: +86 400 820 2259  
售后热线: +86 400 820 3230  
E-mail: info.cn@anton-paar.com  
中国官网: www.anton-paar.cn  
在线商城: shop.anton-paar.cn

#### 北京

北京市朝阳区八里庄陈家林甲2号  
尚8里文创园 A座202室  
邮编: 100025  
电话: +86 10 6544 7125  
传真: +86 10 6544 7126

#### 广州

广州市越秀区先烈中路81号  
洪都大厦A栋1606室  
邮编: 510070  
电话: +86 20 3836 1699  
传真: +86 20 3836 1690

#### 青岛

青岛市崂山区海尔路63号  
数码科技中心B座820室  
邮编: 266000  
电话: +86 532 5557 9349  
传真: +86 532 5557 8349

#### 成都

中国成都市金牛区蜀西路9号丰德  
羊西中心1207室  
邮编: 610036  
电话: +86 28 8628 2862  
传真: +86 28 8628 2861

#### 西安

西安市雁塔区南二环东段396号  
秦电大厦926室  
邮编: 710061  
电话: +86 29 8523 5208  
传真: +86 29 8523 5208

### 本公司产品总览

#### 实验室与在线应用中的密度、浓度、粘度以及折光的测量

- 液体密度及浓度测量仪器
- 饮料分析系统
- 酒精检测仪器
- 啤酒分析仪器
- 二氧化碳测量仪器
- 精密温度测量仪器

#### 流变测量技术

- 高级流变仪
- MultiEranD™ 流变仪

#### 粘度测量

- 粘度计
- 落球式粘度计
- 旋转流变仪/粘度计

#### 化学与分析技术

- 微波消解/萃取
- 微波合成

#### 高精密光学仪器

- 折光仪
- 旋光仪
- 拉曼光谱仪

#### 石油石化测试仪器

- 闪点、常压蒸馏、氧化安定性
- 针/锥入度、软化点
- 燃料油、润滑油等常规测试

#### 表面力学性能测试仪器

- 微/纳米力学测试系统
- 微/纳米压痕仪
- 划痕测试仪
- 摩擦磨损测试仪
- 原子力显微镜

#### 材料特性检测

- 小角X射线散射仪
- 固体表面Zeta电位分析仪

#### 颗粒表面

- 激光(微米/纳米)粒度仪

#### 固体材料直接表征

- 比表面积、孔径分析仪
- 化学吸附仪
- 蒸汽吸附仪
- 压汞仪
- 薄膜孔径分析仪
- 真密度计
- 振实密度计

安东帕在线商城



安东帕微信公众号

