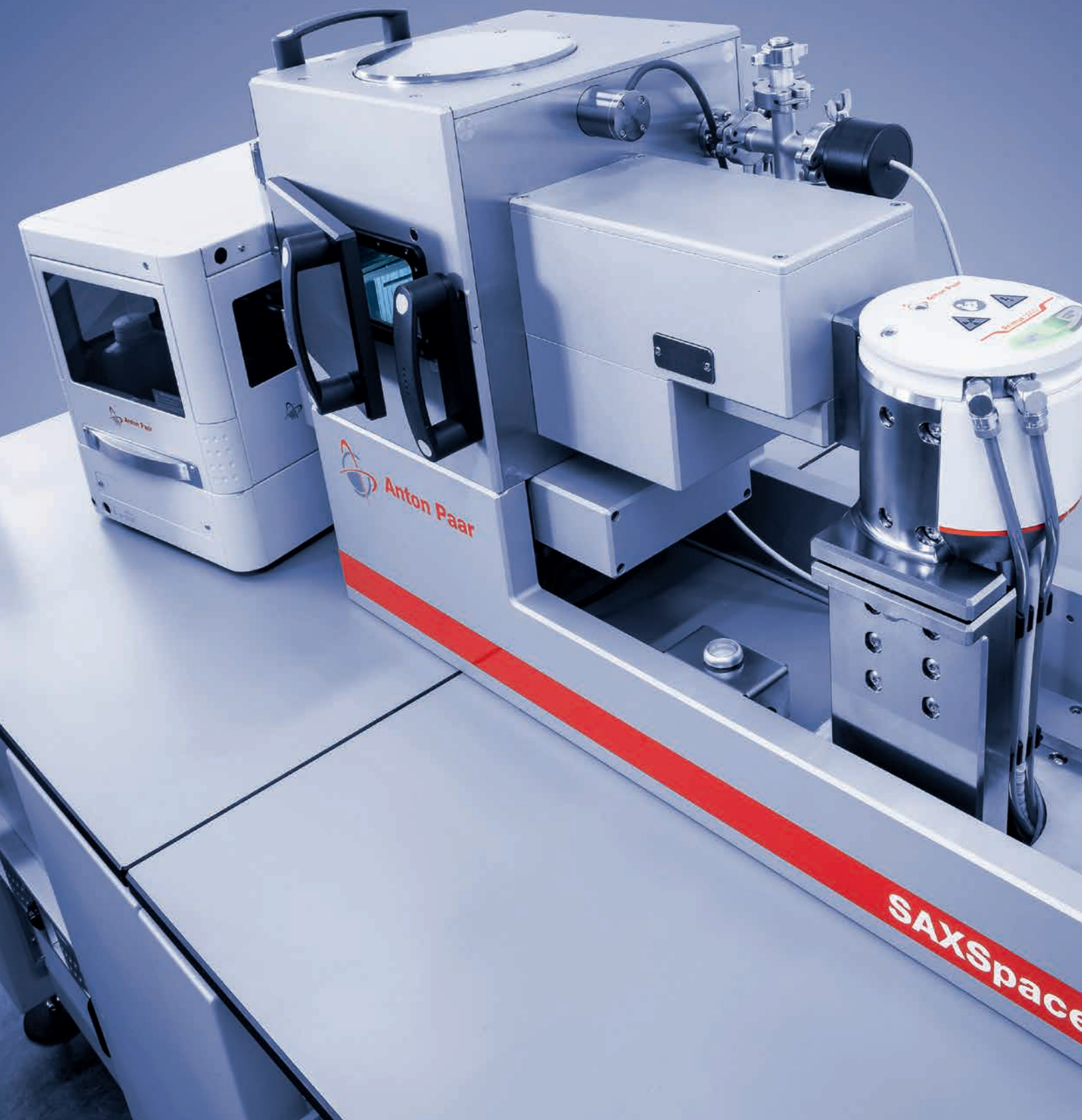


Kompaktní řešení pro
nanostrukturální analýzy s
vysokou průchodností



SAXSpace



SAXSpace: Spolehlivý partner pro rutinní analýzy SAXS a WAXS

System SAXSpace pro laboratoře je dříčem v oblasti rutinní analýzy více vzorků, zejména pak biologických vzorků (BioSAXS), surfaktantů a nanočásticových disperzí. Ve spojení s nejmodernějším softwarem a datovou analýzou pak SAXSpace zajišťuje rychlá a jednoduchá prověřování více nanostrukturovaných vzorků.

Více než 60 let zkušeností SAXS představuje základ univerzálního přístroje vytvořeného pro rutinní měření s vysokou průchodností a rychlou analýzou nanostrukturovaných materiálů.

Genialita ve vašich službách

SAXSpace je robustní laboratorní systém SAXS/WAXS splňující nejvyšší požadavky:

- Vysoké rozlišení při zachování kompaktních rozměrů: q_{\min} : $0,03 \text{ nm}^{-1}$
- Rychlé měření a nejvyšší kvalita dat SAXS/WAXS
- Vysoká kapacita: až 192 kapalných vzorků
- Vysoká spolehlivost a snadná obsluha

VÁŠ SPOLEHLIVÝ PARTNER PRO

SAXSpace

NANO VÝZKUM V LABORATOŘI



60 let inovací v SAXS

1957

První komerční analyzátor od Otto Kratkeho, vyroben v Anton Paar

1981

Kompaktní kamera Kratky

2003

SAXSess

2012

SAXSpace

2015

SAXSpoint

2017

SAXSpoint 2.0

Charakteristika

Výkonný rentgen – rychlé výsledky

SAXSpace používá výkonný rentgenový zdroj Primux 3000 od Anton Paar společně se speciální optikou od AXO Dresden. Tato kombinace zajišťuje intenzivní a monochromatický rentgenový paprsek. Osvědčený koncept bezrozptylové blokové kombinace, který byl původně vyvinut v Anton Paar společně se „zakládajícím otcem“ SAXS Otto Kratky v 50. letech, vytváří dobře ohraničený a intenzivní rentgenový paprsek, který osvítil velký objem vzorku. Díky tomu budete těžit z velmi krátké doby měření a vysokého poměru signálu vůči šumu, což vám přinese vysoce kvalitní a reprezentativní údaje SAXS a WAXS.

Optimalizováno pro screening s vysokou průchodností

SAXSpace je laboratorním dříčem pro rychlé měření a rutinní analýzu více vzorků. ASX autosamplery umožňují rychlou a precizní dopravu vzorků, efektivní čisticí postupy a umožňují vám automaticky a bez dozoru změřit až 192 vzorků kapalin. Tím se urychlí vaše rutinní analýza, zejména pak proteinů v roztocích (BioSAXS) a nanočásticových disperzí. Kromě toho SAXSpace nabízí řadu dalších platform a držáků vzorků pro ambientní i neambientní studie SAXS a WAXS řady nanomateriálů.

SAXS a WAXS společně

Získejte všechny informace z jediného vzorku. Funkce TrueSWAXS shromažďuje data rozptylu od malých po velké úhly, a to současně a nepřetržitě. Tato unikátní funkce vychází z přesných pohybů komponent podél osy rentgenového paprsku, a tak vám umožňuje využívat rozptylové úhly od těch nejmenších až po $60^\circ 2\theta$. Spolehněte se na uniformní rozlišení a spolehlivé výsledky, aniž byste se museli zabývat časově náročným chystáním nebo měněním polohy detektoru.

Specializovaný software

Zpracování a analýza řady rozptylových dat vyžaduje optimalizované a výkonné softwarové balíčky. Využijte uživatelsky přívětivé a komplexní softwarové balíčky SAXSdrive™ a SAXSanalysis™ k akvizici, zpracování a analýze dat. Provádějte automatizovaná sériová měření snadno, a to včetně automatické tvorby vzorků, teplotních skenů apod., a analyzujte velké rozptylové datové sady tím, že využijete přizpůsobitelné šablony.

Zlatý standard v detektorové technologii

SAXSpace používá nejnovější technologii hybridního detektoru pro čítání fotonů (HPC) od společnosti Dectris. Detektory s vysokým rozlišením Mythen2 řady R a řady EIGER R kombinují přímou detekci rentgenového paprsku v režimu čítání jednotlivých fotonů s malou velikostí pixelů ($50 \mu\text{m}$ a $75 \mu\text{m}$), což zajistí excelentní poměr signálu k šumu a nejvyšší prostorové rozlišení. Oba detektory jsou plně integrovány do hardwaru a softwaru systému SAXSpace, takže můžete snadno spouštět automatizovaná měření SAXS a WAXS v jediném systému.



Ve světle reflektorů: BioSAXS

Strukturální studie makromolekul

Malé studie rozptylu rentgenových paprsků v biologických materiálech přináší unikátní strukturální informace a tím pádem doplňují jiné technologie, jako například proteinovou krystalografii, nukleární magnetickou rezonanci (NMR) a elektronovou mikroskopii (Cryo-TEM).

Výzva

Proteinová krystalografie pracuje s jediným krystalem biomolekuly, což často představuje výzvu. Požadovaný „zmrzlý“, tedy krystalický, stav vzorku ponechává řadu otázek bez odpovědi:

- Jaký má na strukturu vzorku vliv přirozené prostředí?
- Do jakých dynamických procesů se vzorek zapojuje?

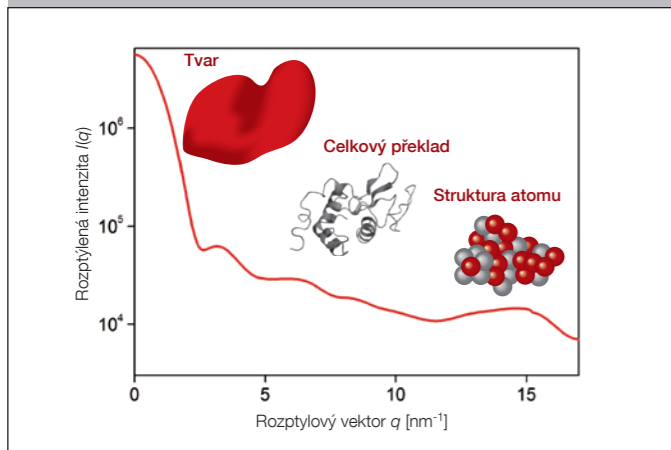
Na tyto otázky odpovídají NMR a SAXS, ale NMR sice přináší strukturální informace ve vysokém rozlišení, jeho signál je často tak komplexní, že není možné jej interpretovat bez dalších vstupů.

Řešení

Pomocí SAXS jsou biologické makromolekuly a jejich komplexy vyšetřovány v roztoku, tzn. za fyziologických podmínek. Analýza vzorků v přirozeném stavu je nezbytná ke studiu dynamických procesů, například strukturálních změn během vázání ligandů nebo proteinovém překládání/rozkládání při změnách prostředí.

Výsledky:

- Velikost a tvar biologických makromolekul
- 3D obaly proteinů nebo proteinových komplexů
- Stupeň agregace
- Analýza hmoty
- Překládání a rozkládání proteinů (Kratkeho graf)
- Stabilita proteinů při změně externích parametrů
- Strukturální změny při vázání ligandů



Strukturální informace rozptylové křivky

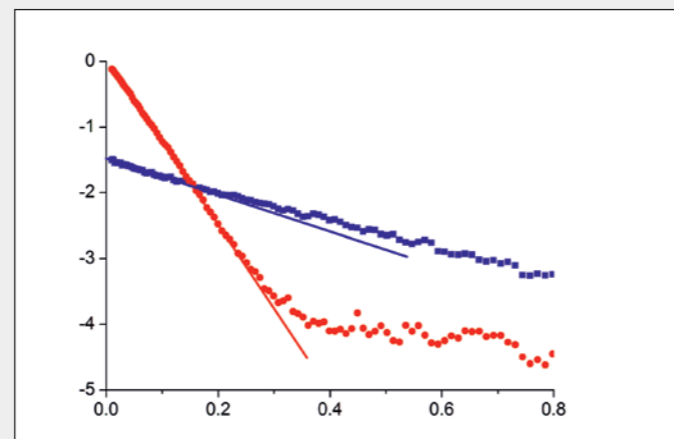
Analýza BioSAXS

Určování poloměru otáčení, velikosti/hmotnosti částic a přeloženého/rozloženého stavu

Guinierova analýza a Kratkeho graf

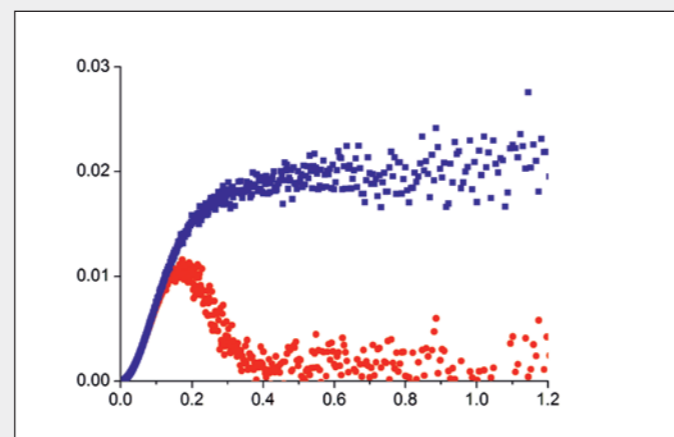
Guinierova metoda analyzuje rozptylovou křivku při malých úhlech a určuje dvě invarianty SAXS:

- Poloměr otáčení (RG) se vypočítá z počátečního sklonu a odpovídá velikosti částice.
- Extrapolovaná intenzita při nulovém rozptylovém úhlu $I(0)$ slouží k určení objemu částic, který odpovídá hmotnosti částic.



Kratkeho graf poskytuje informace o překládání a rozkládání proteinů. $I(q) q^2$ vs. q (Kratkeho) graf

- Signál rozloženého proteinu vstupuje do stabilní hladiny
- přeložený, tzn. kompaktní, protein vykazuje jasné maximum.

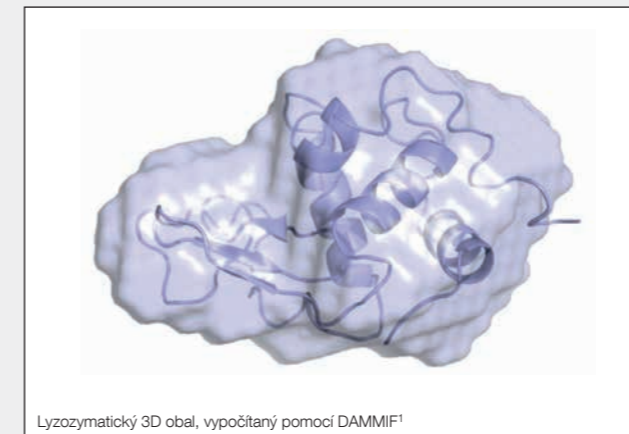


Výpočet 3rozměrných obalů, velikosti, tvaru a interních struktur částic

Fourierova transformace

Fourierova transformace křivek SAXS odhaluje informace v reálném prostoru a poskytuje vám přístup k funkci distribuce párové vzdálenosti, která vám umožňuje dovodit cenné údaje o velikosti, tvaru a interní struktuře částic.

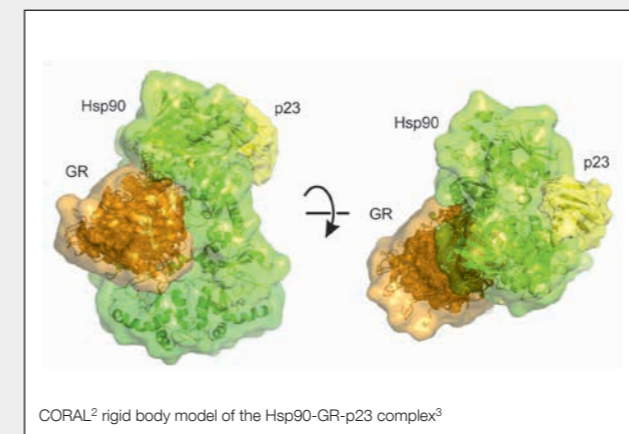
Na základě experimentálních dat o náhodně řazených částicích rozptýlených pod malým úhlem lze pomocí metody ab-initio vypočítat trojrozměrné tvary v nízkém rozlišení. Tyto „obaly“ jsou vizualizací tvaru proteinu a překládání proteinových hlavních řetězců.



Lysozymatický 3D obal, vypočítaný pomocí DAMMIF¹

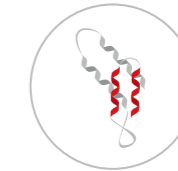
Model struktury komplexních struktur

Informace získané jinými technikami (např. proteinovou krystalografií) lze zkombinovat s daty SAXS a určit relativní orientaci a umístění jednotlivých domén v komplexu. Tomuto procesu se říká modelování tuhého celku. Umožňuje vám vyhledat struktury komplexů, které nejlépe zapadnou do vašich experimentálních dat. Strukturu proteinového komplexu lze například analyzovat s pomocí krystalové struktury stavebních proteinů.

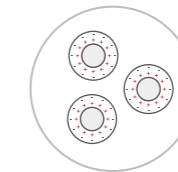


CORAL² rigid body model of the Hsp90-GR-p23 complex³

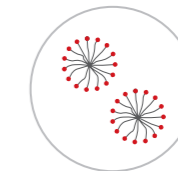
Aplikační využití



Biologické vzorky (BioSAXS)



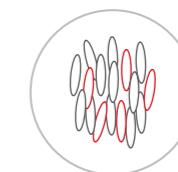
Koloidní disperze



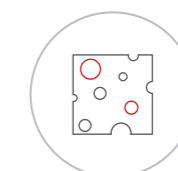
Surfaktanty, emulze



Farmaka



Tekuté krystaly



Porézní materiály



Polymery, vlákna

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.

Software

Specializovaný software – zajištění nejlepších výsledků SAXS/WAXS

Systém SAXSpace obsahuje intuitivní a uživatelsky přívětivé a komplexní softwarové balíčky pro řízení systému, akvizici dat a také rychlé zpracování mnoha dat SAXS a WAXS.

SAXSdrive™: Řízení systému a akvizice dat

SAXSdrive™ poskytuje úplnou kontrolu nad všemi komponentami systému SAXSpace. Umožňuje vám snadno programovat a spouštět automatizované experimenty SAXS/WAXS.

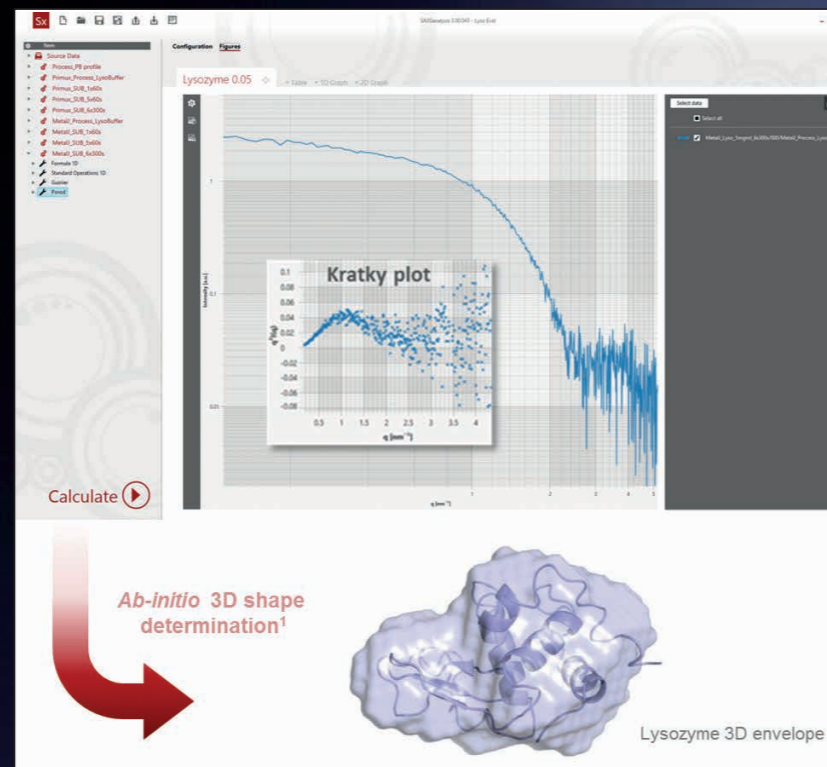
SAXSanalysis™: Zpracování a analýza dat

SAXSanalysis™ je komplexním balíčkem pro datovou redukci a analýzu pro 2D a 1D rozptylová data. Plně přizpůsobitelné šablony a koncept hromadného zpracování vám umožňuje manipulovat s velkým množstvím dat. Rozvržení dat se řídí běžně používanou konvencí Nexus.

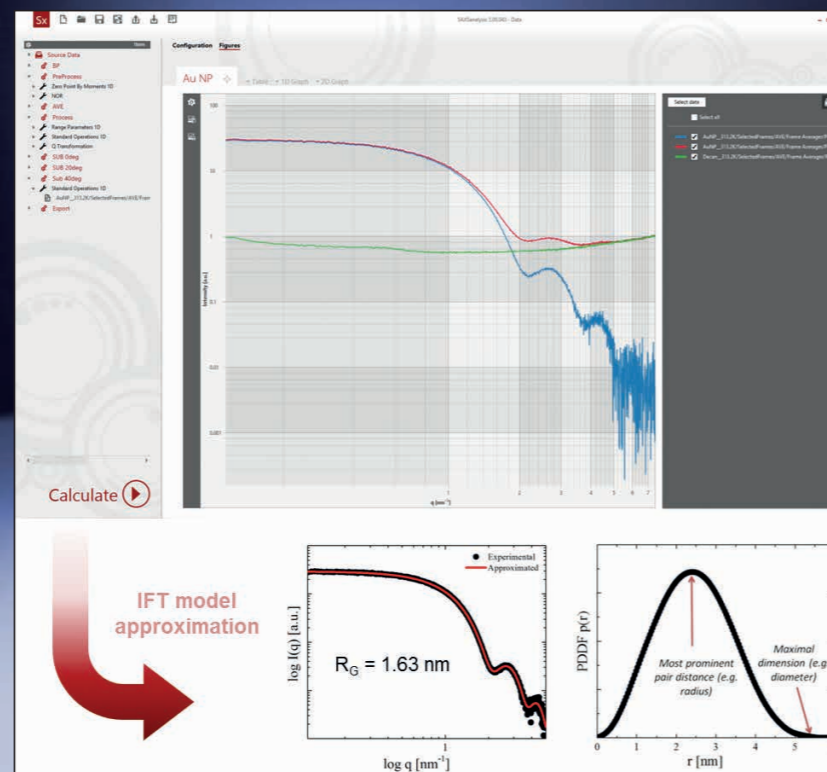
Určete důležité parametry a grafy, například poloměr otáčení R_G , velikost částic, Porodovu konstantu, specifický povrch a Kratkeho grafy. Přínos rutin automatického exportu dat do běžných softwarových balíčků IFT a zpracování modelů (GIFT, ATSAS, SASfit, MacSAS a další).

PCG: Pokročilá strukturální interpretace

Získejte strukturální informace, například o velikosti částic, rozložení částic, tvaru a vnitřní struktuře za využití IFT a dekonvolučních technik. Interpretujte rozptylová data z interagujících (tzn. koncentrovaných nebo nabitých) částicových systémů.



BioSAXS: Určení 3D obalu



Určení velikosti rozptýlených nano částic



Váš systém SAXSpace v dobrých rukách



Nejlepší kvalita

Můžete si být jisti, že všechny komponenty vašeho nástroje SAXSpace mají nejlepší možnou kvalitu. Dlouhá tradice, zkušenosti a dovednosti Anton Paar při výrobě vysoce přesných měřicích přístrojů pro rentgenovou strukturální analýzu zajistí, aby váš systém SAXSpace vyprodukoval vysoce kvalitní výsledky SAXS/WAXS a BioSAXS.

Hluboké znalosti SAXS/WAXS

O naše systémy SAXSpace se dobře staráme: Počínaje instalací a uvedením do provozu naši specialisté na SAXS/WAXS zajistí pečlivé proškolení uživatelů v místě provozu a pomohou vám systém SAXSpace využít na maximum.

Zkušenosti s aplikací a servisem

Celosvětová síť zkušených specialistů na aplikace a servis ze společnosti Anton Paar poskytuje okamžitou podporu pro plynulý provoz vašeho nástroje SAXSpace. Díky 60 letům zkušeností s SAXS jsme schopni vám poskytnout specializovanou technickou a aplikační podporu ze strany našich zkušených odborníků na SAXS/WAXS.

Technické parametry systému

Zdroj RTG	Zdroj RTG se zatavenou trubicí Primux 3000 (Cu, Mo)
RTG optika akolimace	- Speciálně navržená vícevrstvá optika (plně evakuovaná) - Automatická bezrozptylová bloková kolimace paprsku dle Kratkeho (plně evakuovaná)
Cely a autosamplery vzorků	- TCStage držáky s řízenou teplotou - Autosamplery pro více vzorků s teplotní regulací - Autosamplery ASX až pro 192 kapalných vzorků - Vlhkostní cela - Cela GISAXS s možností ohřevu/chlazení (-150 °C až 500 °C) - Tahová cela s možností ohřevu/chlazení (-150 °C až 350 °C) - Přizpůsobená řešení k dispozici na požádání
Speciální funkce	- TrueFocus: automatické vyrovňování - TrueSWAXS: nepřetržité a současné studie SWAXS až do 60° 2θ - Stagemaster: YZ držák s autodetekcí držáků vzorků
Rozsah teploty Atmosféra	- -150 °C až 600 °C - Přesnost teploty ±0,1 °C - Vakuum, vzduch, inertní plyn, vlhkost (reaktivní plyny na vyžádání)
Držáky vzorků	- Křemenné kapiláry pro kapaliny - Nízkoparazitická cela SiN (pouze režim bodové kolimace) - Držák pro pevné vzorky - PasteCell pro viskózní a práškové vzorky - RotorCell pro rotaci vzorků - Vysokotlakové cely - μ-Cell pro malá množství vzorku - FlowCell/TubeCell pro automatizaci - Osmotická cela - Temperovaný dávkovač - Přizpůsobená řešení k dispozici na požádání
Detektory	Detektory HPC řady 1D Mythen2 R a 2D EIGER R q_{\min} : 0,03 nm ⁻¹ a q_{\max} : 40,7 nm ⁻¹ (60° 2θ)
Software	- Měřicí a akviziční software SAXSdrive™ - Software pro zpracování a analýzu dat SAXSanalysis™ - Pokročilý software pro interpretaci dat PCG
Plocha	1,8 m x 0,9 m (D x Š)

