

単結晶構造解析

次世代単結晶構造解析プラットフォーム XtaLABシリーズ



Rigaku

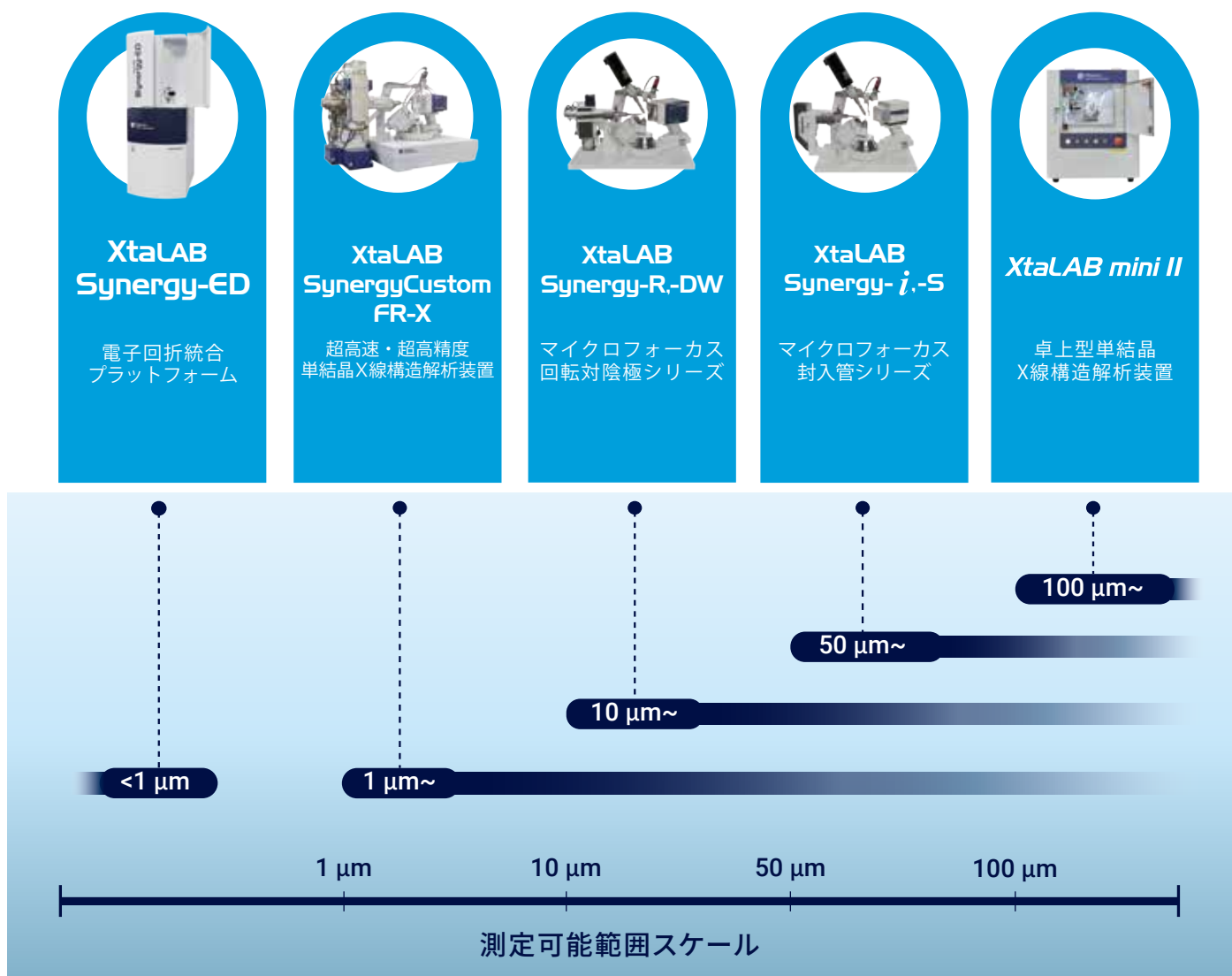
見るチカラで、世界を変える

THE POWER OF SYNERGY

ラボ装置の限界を、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、検出器と、それらの性能を最大限に引き出すソフトウェアを統合し、無駄のない洗練されたワークフローで研究開発を加速します。

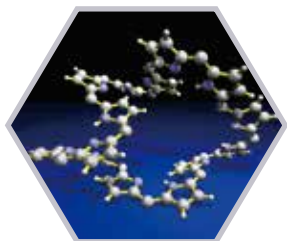
XtaLAB シリーズ製品ラインナップ



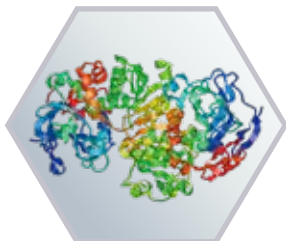
XtaLABシリーズは、卓上型装置から高輝度X線源を搭載したハイエンドシステムまで、結晶サイズや測定目的に応じた単結晶X線構造解析装置を幅広くラインアップしています。

さらに、電子回折統合プラットフォーム「XtaLAB Synergy-ED」により、単結晶X線回折では測定が難しいナノメートルサイズの結晶にも対応。X線回折と電子回折を使い分けることで、幅広い結晶サイズに最適な測定法を提供します。

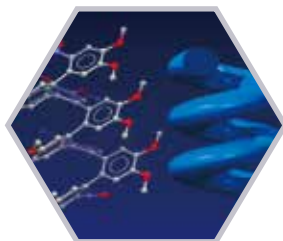
多彩なアプリケーション



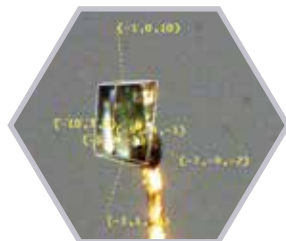
Small Molecules



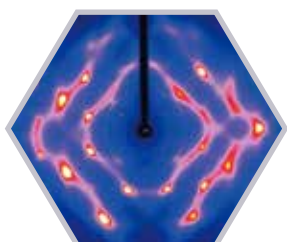
Macromolecules



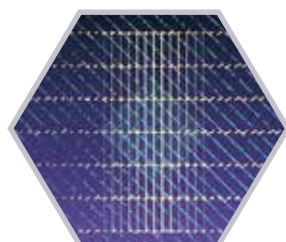
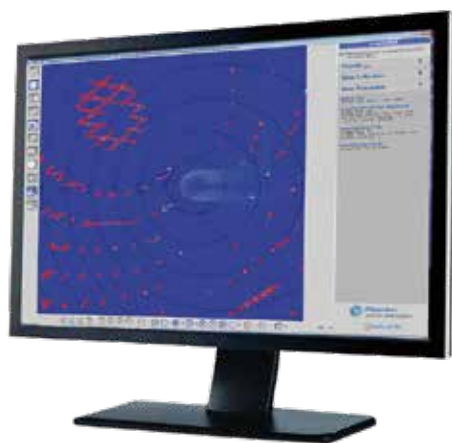
Absolute Structure



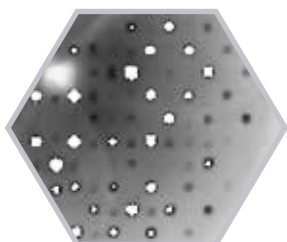
Face Indexing



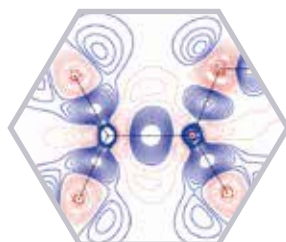
Diffuse Scattering



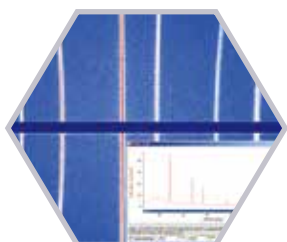
Twin/Multi Crystals



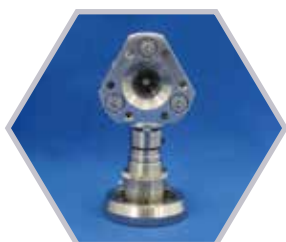
Incommensurate



Charge Density



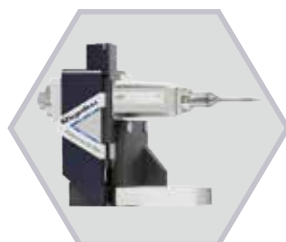
Powder
Diffraction



High
Pressure



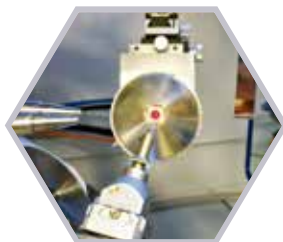
Automated Multiwavelength



Ultra-low Temperature



Variable Temperature



High Temperature



and MORE

XtaLAB Synergy-R / DW

回転対陰極 X線源搭載 超高速・高精度 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X線源PhotonJet-R/DW搭載モデルです。回転対陰極X線源と人工多層膜ミラー、超高速ゴニオメーター、高速読み出しHPC検出器の組み合わせにより、超高速・高精度測定を実現します。

XtaLAB Synergy-R/DWは封入管X線源を搭載したXtaLAB Synergy-Sに対して約12倍強力なX線ビームを照射することが可能です。タンパク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試料も、高輝度X線源と感度の向上したハイブリッドピクセル検出器により高角側の回折線を検出することが可能となります。また、測定時間が非常に短いため、高いスループットが求められる共用装置にも適しています。タンパク質結晶や10 μm以下の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まで、幅広い研究目的に対応します。

単波長モデル XtaLAB Synergy-R



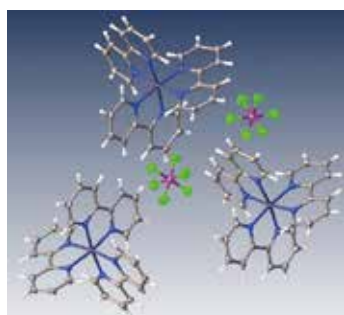
- CuまたはMo線源を搭載可能。タンパク質、無機化合物、有機化合物などの測定対象や高圧・高分解能測定などの測定目的に合わせた利用に適しています。
- Cu線源に搭載されている発散角制御スリットを使うことで、タンパク質などの格子の大きい結晶の回折スポットを分離できます。

2波長モデル XtaLAB Synergy-DW



- 2波長に対応した回転対陰極X線源を搭載。波長の切り替えは数分ほどで完了します。
- Cu/Mo、Cu/Ag、Ag/Moの3種類の組み合わせを搭載可能。波長切り替えによって、幅広い試料・測定に対応します。
- 多様な構成・オプションに対応したハイエンドモデルで、発散角制御スリットを標準搭載しています。

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 parameter
Synergy-DW	Cu	6 min	2.7%/4.3%	2.18%	0.115 (8)
	Mo	3 min	4.2%/14.1%	3.51%	0.18 (6)
Synergy-S	Cu	18 min	3.3%/5.1%	2.61%	0.117 (10)
	Mo	2 h 27 min	5.9%/18.5%	4.02%	0.02 (8)

新型高輝度 X線源 PhotonJetULTRA搭載 XtaLAB Synergy-DW

新型の高輝度X線源PhotonJetULTRAを搭載した最上級の構成です。

PhotonJetULTRAは受注時オプションとして選択可能です。

超高輝度

従来のPhotonJet-DWと比べてCuで1.3倍、Moで2倍の輝度を実現。

高角(高分解能)域の回折強度が求められる精密構造解析に最適です。

Multitrack機構

トラック切り替え機構を搭載し、ターゲットを長寿命化しつつ、強度を高く保ちます。

用途に応じたモード選択

従来と同じ出力で高強度のHigh Fluxモード(1.2 kW)、微小結晶の測定に効果的なHigh Brightnessモード(800 W)、ランニングコストを抑えたEcoモード(500 W)を切り替えて使用することができます。

高い安定性

新規設計のカソードにより、熱膨張によるフィラメント位置の移動を低減。強度の立ち上がりが早く、また、長期的な強度も従来より安定しています。

省エネルギー・長寿命

X線出力の最適化、Multitrack機構、低トルクターゲット、低出力のモードなどによって、省エネルギーかつ長寿命であり、ランニングコストを低減します。

波長切り替え時間を短縮

X線を停止せずに、Multitrack機構によって線源を切り替えるため、従来と比べてさらに波長切り替えがスムーズになりました。

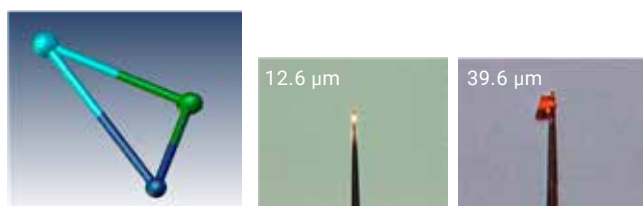
完全自動光学系調整機構を標準搭載

Intelligent Optics Module (iOM)を標準搭載しています。



無機結晶のX線回折強度の比較

● 試料：白金酸カリウム ● 組成式：K₂PtCl₄ ● 同一の条件で測定



	Cu	Crystal size/ μm				
		12.6	15.3	20.0	30.8	39.6
I/sig	PhotonJet-DW	165.93	216.73	291.48	301.55	565.24
	PhotonJetULTRA	169.67	232.06	312.97	338.67	644.02
	Mo	Crystal size/ μm				
		12.6	15.3	20.0	30.8	39.6
I/sig	PhotonJet-DW	86.92	110.85	153.96	181.76	320.58
	PhotonJetULTRA	117.65	147.8	211.68	220.39	398.22

Intelligent Optics Module (iOM)

iOMはXtaLAB Synergy-DWに搭載可能な完全自動光学系調整機構です。

PhotonJetULTRA搭載XtaLAB Synergy-DWおよびSynergyCustomには標準搭載されています。iOMは調整機構の各軸にエンコーダーを搭載しており、高い再現性で正確な位置にビームを調整します。常に最適なビーム位置を実現できるため、特に測定が困難な微小結晶の測定に効果を発揮します。調整は、ユーザーが防X線カバーを閉じた状態でソフトウェアから実行可能で、安全に作業ができます。サービスエンジニアがリモートで調整を行うことも可能で、現地訪問によるサービスコストを低減できます。



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、シャッターレス方式および、31bitモードでの測定が可能なHPC (Hybrid Photon Counting) 検出器 (HyPix-6000) 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-6000



マイクロフォーカス線源
PhotonJet-S

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、発散角制御スリット (Divergence Control Slit) を搭載しており、タンパク質結晶など、長い格子を持った試料に対応しています。

さらに進化した超高速ゴニオメーター

進化した最新型κ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。従来の超高速κゴニオメーターと比べてスキャン速度が25%向上し、さらに高速な測定を実現します。また、オプションのIGHv3の配線内蔵によってアタッチメント付け替えの作業性、試料照明の輝度向上および完全ソフトウェア制御によって画像の明度調整が改善されています。



さらに理想を追求した検出器 HyPix-6000⁺

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-6000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、幅広い試料に対応しています。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。



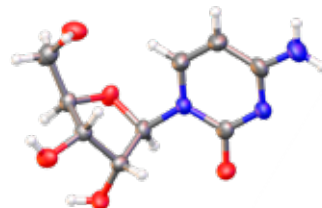
⁺ 本製品は、Department of Measurement and Electronics, AGH University of Science and Technology (ポーランド)と株式会社リガクが共同開発しています。

高輝度マイクロフォーカス封入管 X線源 PhotonJetMAX-S

PhotonJetMAX-SはXtaLAB Synergy-Sに搭載可能な最新のマイクロフォーカス封入管 X線源 (Cu, Mo線源に対応)です。管球からの X線光子を集光する光学系技術の向上により、PhotonJet-Sに対して、2倍以上の輝度を実現しました。輝度の向上によって、より小さな結晶の測定が可能になるとともにスループットも向上します。PhotonJet-Sと同等の管球出力と寿命を維持しながらスループットを向上するため、管球交換頻度や運用コストを増やすことなく測定効率を高められます。また、XtaLAB Synergy-Sをお使いのユーザーは X線源のみを PhotonJetMAX-Sにアップグレードすることが可能です。

PhotonJetMAX-S Cu 測定データ例

シチジン 結晶サイズ: 45 x 53 x 86 μm



	PhotonJet-S	PhotonJetMAX-S
F^2	11910	32128
$I/\sigma(I)$	38.1	57.4
$R_{\text{int}}(\%)$	1.68	1.09
$R_1(\%)$	1.89	1.40

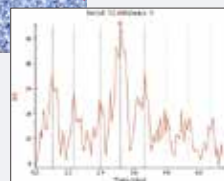
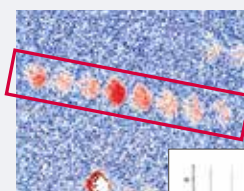
XtaLAB Synergyシリーズ搭載機能

発散角制御スリット Divergence Control Slit

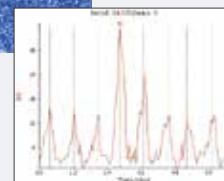
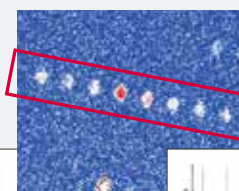
XtaLAB Synergy-RのCu線源およびXtaLAB Synergy-SのPhotonJet-S Cu線源とPhotonJetMAX-S線源は発散角制御スリットを搭載しています。また、XtaLAB Synergy-DW、SynergyCustomには、標準で発散角制御スリットが搭載されています。スリット位置の変更は、ソフトウェア上から電動で行うことが可能です。ビームの発散角を絞ると、回折スポットのサイズが小さくなります。タンパク質結晶など、より大きな格子を持ち、回折スポットが混み合っている試料に有効です。



スリットなし

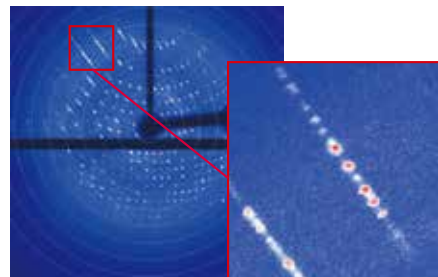


スリットあり



XtaLAB SynergyCustom

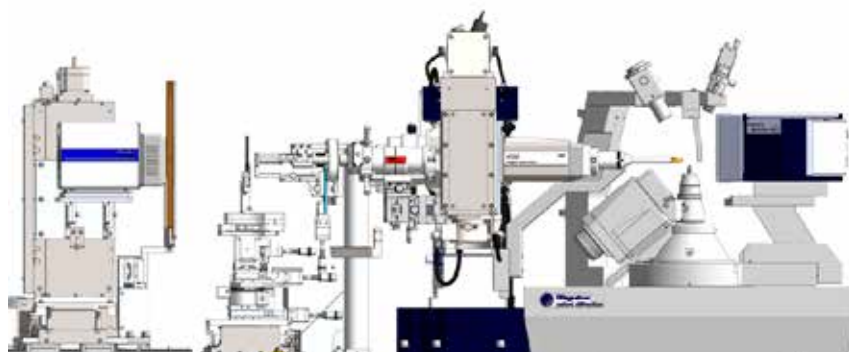
超高速・超高精度単結晶X線構造解析特注装置



格子定数が340 Åの試料でも測定可能/カメラ長60mm

XtaLAB SynergyCustomは、XtaLAB Synergyシリーズの高精度ゴニオメーターと、HyPix-6000やHyPix-Arc150°などのHPC検出器を、研究目的に合わせて構成できる単結晶X線構造解析カスタムシステムです。X線発生装置には、FR-XまたはMicroMax-007 HFEを組み合わせたことができ、XtaLABシリーズの中で唯一FR-Xに対応するモデルです。高輝度X線を用いた微小結晶の測定から、高分解能が求められる精密構造解析まで、幅広い研究ニーズに対応します。また、全自動光学系調整機構Intelligent Optics Module (iOM) を標準搭載し、各種検出器、アタッチメント、試料自動交換口ボットなど、多彩なオプションに対応しています。

さらに、左右両ポートを利用でき、右ポートにXtaLAB SynergyCustom、左ポートに広角X線散乱装置DicifferXを配置するなど、複数の測定システムを組み合わせた構成も可能です。試料、測定目的、運用方法に合わせたオリジナルのシステムを構築できます。



X線発生装置
FR-X
右ポート
SynergyCustom
HyPix-Arc150°
左ポート
DicifferX
HyPix-6000

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

世界最高クラスのX線輝度「67 kW/mm²」を達成した超高輝度X線発生装置です。MicroMax-007 HFE同様、実効焦点を球形の理想的な形でφ70 μmに収束させています。



FR-X	
線源(単波長)	Cu, Mo, Ag
線源(2波長)	Mo/Cu, Ag/Cu, Ag/Mo
最大負荷	2.97 kW
実効焦点	Φ70 μm
最大輝度	67 kW/mm ²
X線発生方式	回転対陰極式
ターゲット回転速度	12,000 rpm

MicroMax-007 HFE 高輝度X線発生装置

実効焦点を球状の理想的な形でφ70 μmに収束させることで、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。



MicroMax-007 HFE	
線源(単波長)	Cu, Mo, Ag
線源(2波長)	Mo/Cu, Ag/Cu, Ag/Mo
最大負荷	1.2 kW
実効焦点	Φ70 μm
最大輝度	31 kW/mm ²
X線発生方式	回転対陰極式
ターゲット回転速度	9,000 rpm

SynergyCustom化 (レガシーシステムアップグレード)



Saturn724システム



Saturn70システム



R-AXIS RAPID II



XtaLAB P200



リガク製のX線発生装置 (FRまたはMicroMax007シリーズ)とVarimax光学系を保有していれば、XtaLAB Synergyに搭載している最新の高速・高精度のゴニオメーターとHPC検出器と組み合わせることでSynergyCustomとしてアップグレードが可能です。制御・データ処理ソフトウェアもCrysAlis^{Pro}となり、新規装置を導入するより低コストで最新のシステムへアップグレードを実現します。また、SynergyCustom化の際に新たに光学系やオプションを追加することも可能です。

新設計の κ ゴニオメーターは、 θ 及びカメラ長の対応範囲も広く、効率よくX線回折強度データを収集できます。また、ゴニオメーター操作時の安全設計及び測定時のソフトウェアの衝突回避モデルにより、最高レベルの安全性を有しています。

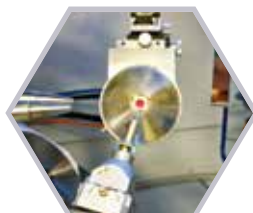
・対応可能製品は担当営業所までお問い合わせください。

・SynergyCustom化により既設装置部の保守サポート期間は、延長されません。

システム	旧AFCシステム	SynergyCustom
光学系バス	He置換	真空(He不要)
θ 軸可動範囲	-110~+5 deg	-97~+123 deg
χ/κ 軸可動範囲	0~+60 deg (χ 軸)	-179~+179 deg (κ 軸)
カメラ長可動範囲	40~115 mm	31~209 mm
スキャンスピード	1 deg/sec	12.5 deg/sec
イニシャライズ時間	84 sec	25 sec
動作モード	単軸動作	複数軸同時動作

高温ガスブローワー

XDS Oxford (旧FMB Oxford) 社製のDGB0002高温ガスブローワーを組み合わせ、最高1,000 °Cまでの高温測定に対応できます。使用には別途、乾燥ガスが必要です。



型番	DGB0002
ガスブローワー配管径	直径5 mm
ガスブローワー寸法	50 mm x 80 mm
試料サイズ	直径0.3 mm以下
重量	680 g
電源	単相200 V
冷却方式	水冷

検出器



HyPix-6000

HyPix-6000

光子計数型ハイブリッドピクセル検出器

最新かつ最も理想的なHPC(Hybrid Photon Counting)X線検出器です。計数率が高く (10⁶ 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、高強度の入射X線も正確に測定します。



HyPix-Arc150°

HyPix-Arc150° / HyPix-Arc100°

湾曲ハイブリッドピクセル検出器

HPC検出器の特長をさらに進化させた検出器です。HyPix-Arc 150°は3枚、HyPix-Arc 100°は2枚のモジュールを2 θ 方向の円周上に配置することで、一度に検出可能な2 θ 範囲が広くなり、1回の露光でより多くのデータを収集できます。また、大面積平板検出器に比べ、高角側の回折スポットのプロファイルの歪みを抑えることができます。

その他、EIGER2 R 1M や PILATUS4 R 260Kなどの検出器にも対応します。

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、リガク独自のHPC検出器HyPix-Bantamと、長寿命でランニングコストを抑えたマイクロフォーカスX線源 PhotonJet-iを搭載した単結晶X線構造解析装置です。導入しやすいエントリーモデルでありながら、シャッターレス方式による高速測定に加え、Cu/Moデュアルソース構成にも対応し、幅広い測定ニーズに応えます。

RAPIDシリーズからの更新に最適

マイクロフォーカス線源とHPC検出器を日常測定へ

高速測定

シャッターレス方式により測定時間を短縮

メンテナンス負担を低減

長寿命管球により、交換頻度とメンテナンスコストを低減

高品質なデータ

低ノイズ・広ダイナミックレンジ

導入しやすい設備要件

100 V 電源・送水装置内蔵・X線作業主任者の選任不要



高感度検出器と高輝度・長寿命 X線源



HyPix-Bantam

フotonカウンティング方式による高感度・低ノイズ・広ダイナミックレンジ。微弱な信号から強い反射まで高品質に取得します。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。

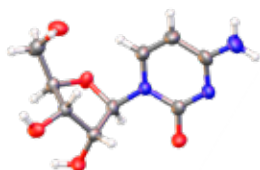


PhotonJet-i

マイクロフォーカス管球と多層膜集光ミラーにより、3 kW封入管を上回る高輝度X線ビームを実現します。高輝度と長寿命を両立し、ランニングコストの低減に貢献します。CuまたはMo線源から選択でき、デュアルソース構成にも対応します。

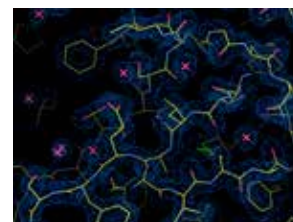
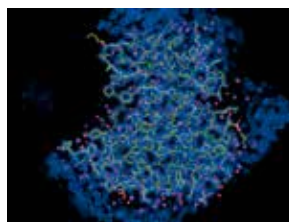
RAPID IIとのデータ比較

XtaLAB Synergy-i は検出器の読み取り時間が短いため、R-AXIS RAPID-Sと比較して、測定時間を1/3以下に短縮します。さらに、マイクロフォーカスX線源、高精度ゴニオメーター、フotonカウンティング検出器の組み合わせにより、高品質なデータを取得できます。



タンパク質結晶の測定例

低分子結晶の測定に加え、サウマチンなど格子が150Åくらいまでのタンパク質結晶の測定まで対応します。



装置	Synergy-i	RAPID II-S
試料名	シチジン	
試料サイズ	0.200 × 0.229 × 0.251 mm	
露光時間	1 秒	
測定時間	20 分 13秒	1 時間 14 分
I/sig(I)	36.59	7.11
R_{int}	5.75 %	9.78 %
R_1	4.26 %	5.78 %

装置	Synergy-i
試料名	サウマチン
空間群	$P4_12_12$
格子定数	$a = b = 57.96 \text{ \AA}, c = 150.15 \text{ \AA}$
測定時間 (露光時間)	1 時間 54 分 (4.1 秒)
分解能	1.5 Å
Completeness (last shell)	99.7 % (100.0 %)
Redundancy (last shell)	5.2 (3.2)
R_{int} (last shell)	5.3 % (33.9 %)
Rfactor/freeRfactor	15.85 % / 17.99 %

XtaLAB mini II

デスクトップ単結晶X線構造解析装置

XtaLAB mini II は、HPC検出器(HyPix-Bantam)、スーパーファインフォーカスのX線管球(Mo線源)を搭載した世界最小クラスの卓上型単結晶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との連携により、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。

世界最小クラスの卓上型装置

幅560 × 奥行395 × 高さ674 mmの世界最小クラスの筐体サイズを実現しました。

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 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できます。

シンプルデザインでメンテナンスコスト削減

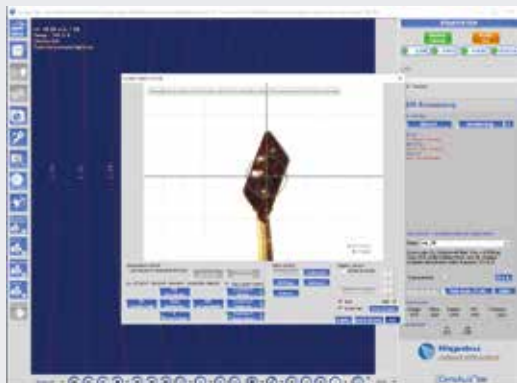
可動部分が、シャッターとゴニオメーターのφ軸およびω軸のわずか3か所に限られていることにより、メンテナンスコストの削減につながります。

XtaLABシリーズが実現する 洗練されたワークフロー

CrysAlis^{Pro} 単結晶構造解析 高機能統合プラットフォーム

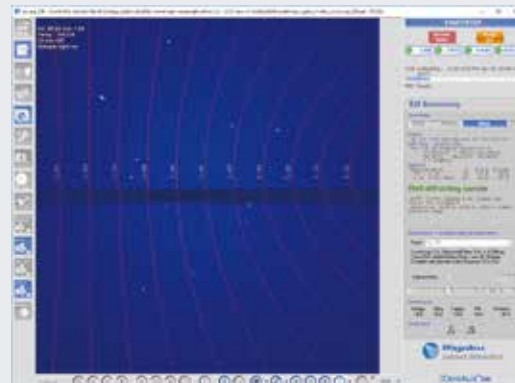
Mounting

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// sigmaの見積もりを実行します。



^{*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>

Well diffracting sample

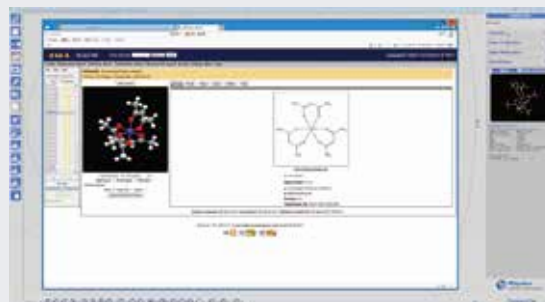
Moderately diffracting sample

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}



無機・有機・タンパク質、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線回折データ収集・処理ソフトウェアです。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

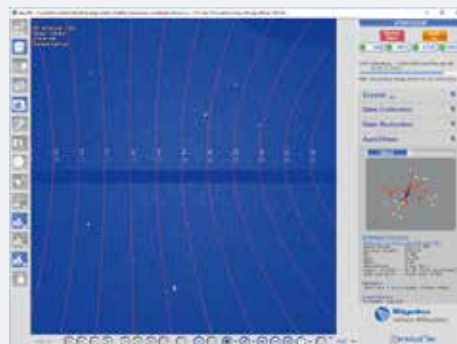
測定条件の決定



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、 λ/σ などの設定で本測定の測定条件が計算されます。

Experiment

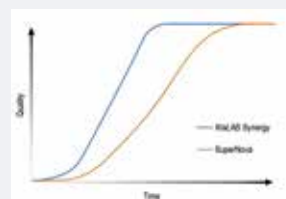
データ処理



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*

* 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 • WinGX*2 • Jana*2

タンパク質用

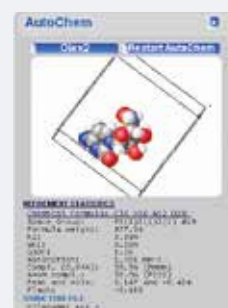
• CCP4*2

Olex2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

自動構造解析プラグイン AutoChem*2*3

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するプログラムです。直接法、パターン法、Charge Flipping法など、複数の構造解析手法を自動的に使い分け、構造解析の成功率向上に貢献します。



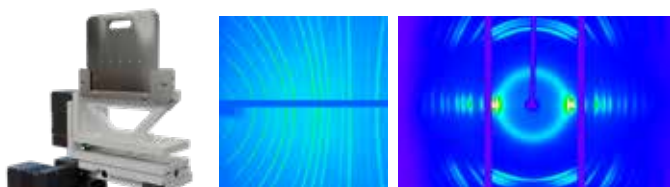
*2 ご使用いただくにはライセンス登録が必要です。

*3 XtaLAB Synergy シリーズには標準搭載されています。

オプション・アタッチメント

MaterialsExplorer for XtaLAB Synergy

汎用XYZステージ



粉末試料からの回折イメージと高分子フィルムからの回折イメージ

上部プレートにDiciifferXの各種試料セルを取り付けられる汎用XYZステージです。粉末試料や繊維試料、フィルム試料など、多様な試料を連続して測定することができます。

- 移動量：50×20×10 mm
- 最大搭載質量：500 g
- ω 可動範囲：-38°~106°

XtalCheck-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, UniversalGoniometer Ver.3に搭載可能です。

XtaLAB Synergy-Flow

試料自動交換ロボット搭載システム



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、多試料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。

※ 本アタッチメントは、Synergy-S, Synergy-R, Synergy-DWに搭載可能でシステム発注と同時注文が必要です。

Intelligent Goniometer Head

電動試料センタリングシステム



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。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試料に合わせたセンタリング方法を選択できます。手動では難しい微小結晶のセンタリングにも有用です。従来モデルよりもスリムな構造に進化し、広範囲のスキャンに対応します。配線を本体内部に収めることにより、手動ゴニオメーターヘッドや他のアタッチメントとの交換が容易になりました。

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。

※ 本アタッチメントは、Synergy-S, Synergy-R, Synergy-DW, SynergyCustomに搭載可能です。

ACTOR2

試料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。

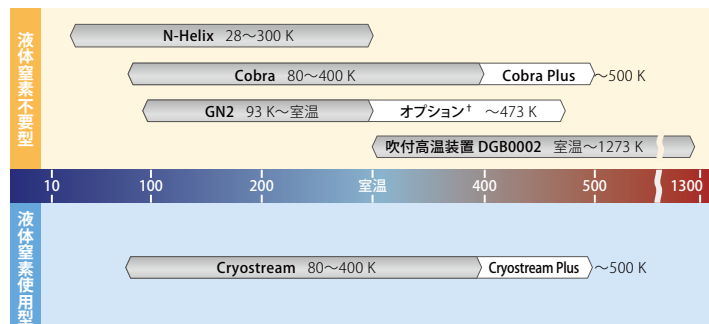
CrysAlis^{Pro}に完全統合することにより、結晶のスクリーニング、スコアリング、本測定まで全自動データ収集を実現しています。

- 最大112試料をセット可能 (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きます

アクセサリ

試料吹付温調装置一覧



- ・N-Helix、Cobra、CryostreamはOxford Cryosystems社製です。
- ・N-Helixの100 ~ 300 Kの領域については、ヘリウム吹付の際のサンプルマウント時にのみ使用可能です。また、常時使用には他の吹付温調装置との併用が必要です。
- ・XtaLAB mini II は、室温以上の測定には対応していません。
- † 受注時オプション

ダイヤモンドアンビルセル M22 セルコア

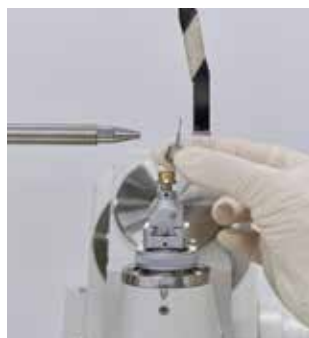
ダイヤモンドアンビルセル M22セルコアは、リガク単結晶X線回折装置XtaLABシリーズで、簡便に高圧測定を行うことができるアダプターです。小型化・超軽量化を実現し、標準のゴニオメーターヘッドに搭載することができる上、標準*1のコリメーター、ビームストッパーをそのまま使用できます。



*1 標準システムでは、試料位置からコリメーター先端まで、試料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。

アークレスゴニオヘッド

当社製およびHuber社製のゴニオメーターヘッドを、用途に応じて選択・購入いただけます。また、MicroMount™などのマグネット式試料ピンにも対応しており、試料ピンをワンタッチで簡単に着脱できます。



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の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

(MiTeGen社製)

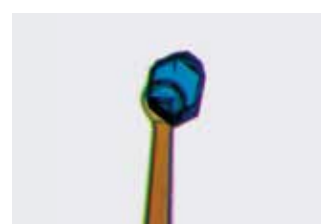
結晶化から試料マウントまでをサポート

タンパク質の結晶化からマウント、凍結保存までをサポートする各種試薬・器具を取りそろえています。

初めて結晶化に取り組む方から、日常的に研究を行う方まで幅広くご利用いただけます。



結晶化プレート



試料マウントピン

XtaLAB Synergy-ED

電子回折統合プラットフォーム

XtaLAB Synergy-EDは、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開発された電子回折統合プラットフォームです。電子回折専用機として設計され、単結晶X線回折では困難な数百ナノメートルの極微結晶から直接構造決定が可能です。

装置制御からデータ収集・処理・構造解析までが単結晶X線構造解析で定評のある CrysAlis^{Pro} に統合されています。そのため、電子顕微鏡に精通していなくても、使い始めることができます。

すでに査読付き論文 150 報超の研究成果を生み出しており、幅広い分野の発展を支えています。



装置構成



電子回折ワークフロー

1 試料調製

粉末をグリッドに載せるだけの手軽さで測定を開始できます。多彩な試料調製法にも対応します。



2 結晶探索

グリッド上の結晶をリアルタイムに可視化し、AIを活用して測定に適した結晶を自動で識別します。



3 データ収集・処理

Queue機能による連続測定と並行して、データを自動処理します。単位格子クラスタリングやデータマージも活用できます。

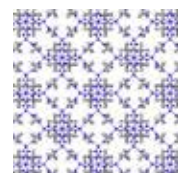


4 構造解析・精密化

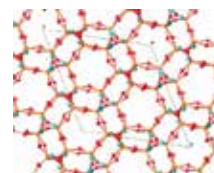
AutoChem による自動構造解析まで一気通貫で実行し、動力学的精密化や絶対構造の決定にも対応します。有機化合物・MOF・ゼオライトなど、幅広い試料の構造解析が可能です。



有機化合物



MOF



ゼオライト

CrysAlis^{Pro} for ED



装置制御、試料スクリーニング、データ収集・処理、構造解析までを担う統合プラットフォームです。測定と並行してデータを自動処理し、AutoChemによる自動構造解析まで、シームレスなワークフローを提供します。また、電子回折に有効なクラスタリングやデータマージ機能も搭載しています。

XtaLAB Synergy-ED用オプション

エネルギー分散型X線分析装置



JEOL社製のエネルギー分散型X線分析装置(EDS/EDX)は、電子線励起により発生する特性X線から含有元素を分析します。XtaLAB Synergy-EDと組み合わせることで、構成元素の同定・目的結晶の識別・不純物検出 など、構造解析に元素情報を付加できます。

MEMS Heating-Biasing Holder



Hummingbird Scientific社製のMEMS加熱／バイアス用ホルダーは、試料の加熱および電気バイアス印加下での電子回折測定を可能にします。1,000℃を超える温度制御と電気バイアス印加を、専用シリコンチップ上で高精度に行えます。温度依存性の相転移や、電場印加による構造変化の観察に有効です。

Variable temperature cryo transfer holder



Simple Origin社製の温度可変クライオトランスファーホルダーは、液体窒素で試料を低温に保持したまま電子回折測定を可能にします。放射線損傷の抑制や、溶媒和結晶・液中結晶化試料の測定に有効です。3 mmグリッドを2枚搭載でき、測定効率が向上します。

Cryogenic inert gas/vacuum transfer holder

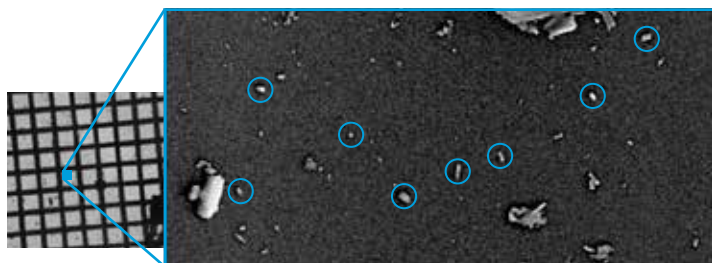


Simple Origin社製の極低温不活性ガス／真空トランスファーホルダーは、空気や水分に敏感な試料を大気非曝露で電子回折測定を可能にします。グローブボックスで調製した試料をそのまま測定でき、有機金属化合物や電池材料など、酸化や加水分解を避ける必要がある試料に有効です。

電子回折測定向け CrysAlis^{Pro} Ver.45 新機能

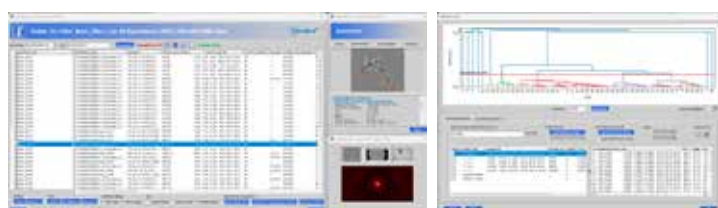
測定結晶の自動検知・自動測定

従来は、データ収集・処理は自動化されていた一方、測定する結晶の選定はユーザーが手動で行う必要がありました。Ver.45ではAIを活用して測定に適した結晶を自動で検知、そのままデータ収集・処理までを連続実行します。1枚のグリッド上に数千存在する結晶粒からの構造情報取得を、大幅に効率化します。



単位格子によるクラスタリング

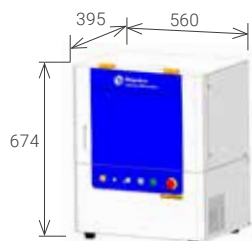
多数の結晶から取得したデータを、単位格子ごとに自動でグループ化します。1枚のグリッド上に存在する多形、不純物、混合物といった複数の結晶種を可視化し、それぞれの分布を把握できます。対称性の低い試料では複数結晶からのマージによる Completeness 補完が必要となりますが、その候補選定を効率化することで、構造解析へとつなげられます。



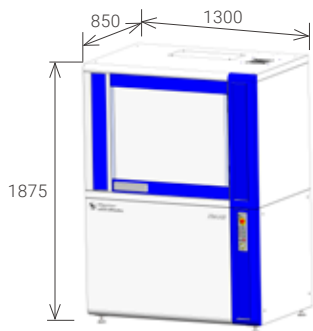
ユーティリティ

外形寸法 (単位:mm)

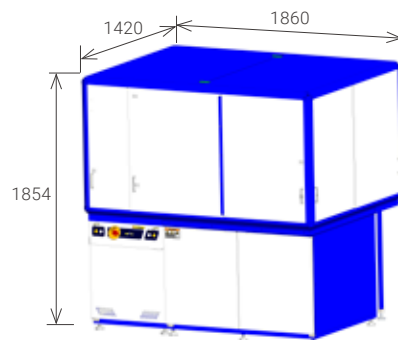
XtaLAB mini II



XtaLAB Synergy-i / S/ R/ DW



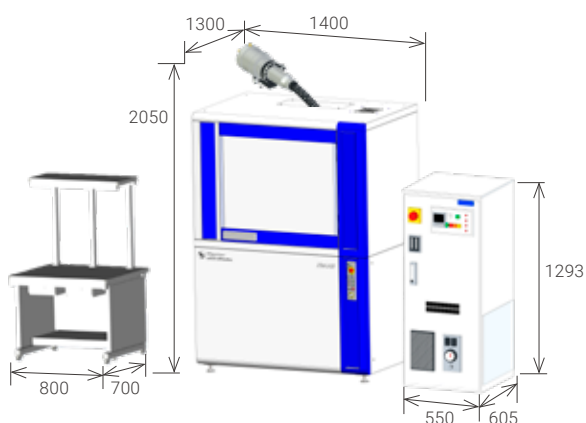
XtaLAB SynergyCustom (片側システム)



XtaLAB Synergy-ED



吹付低温装置 (GN2) 組合せ例

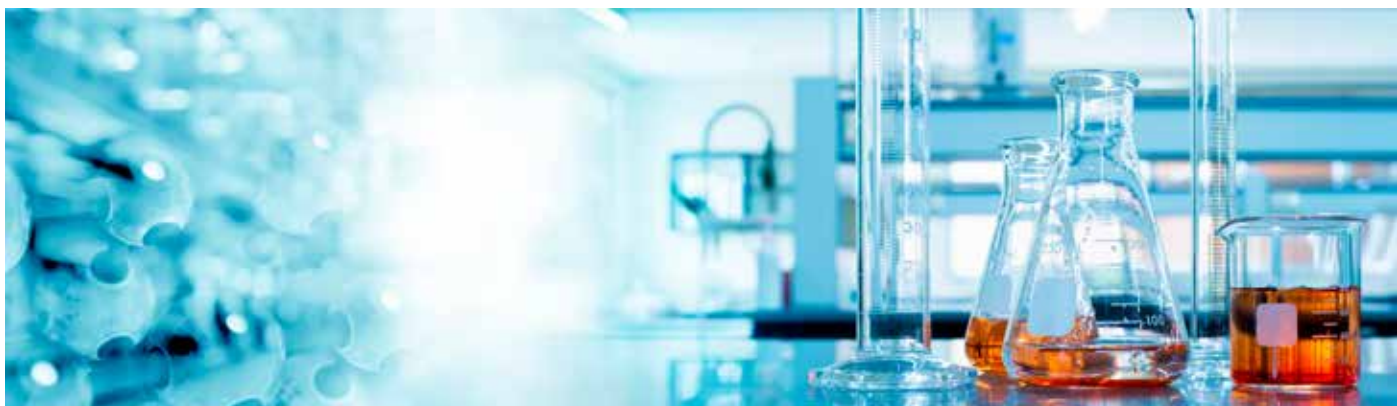


所要電源および重量

装置	XtaLAB mini II	Synergy-i /S	Synergy-R /DW	SynergyCustom	GN2吹付低温装置	CS1000	Cobra	Synergy-ED
本体	単相 100 V, 9 A [15 A] アース付きコンセント	単相 100 V, 10 A [15 A] アース付きコンセント	単相 200 V, 20 A [30 A] 丸型圧着端子	FR-X: 三相 200 V, 20 A [30 A], 丸型圧着端子 MM007: 三相 200 V, 12.5 A [15 A], 丸型圧着端子	単相 100 V, 20 A [30 A] 丸型圧着端子	単相 100 V, 10 A [15 A] アース付きコンセント	単相 200 V, 17 A [20 A] アース付きコンセント (NEMA L6-20P)	単相 200 V, 35 A [50 A]
制御PC	単相 100 V, 1 ~ 13 A [15 A] アース付きコンセント							単相 100 V, 3 A [15 A] アース付きコンセント
送水装置	単相 100 V, 11 A [15 A] アース付きコンセント	本体内蔵	三相 200 V, 8 A [15 A] 丸型圧着端子	FR-X: 三相 200 V, 20 A [30 A], 丸型圧着端子 MM007: 三相 200 V, 8 A [15 A], 丸型圧着端子			単相 200 V, 11 A [20 A] アース付きコンセント (NEMA L6-20P)	空冷一体型: 三相 200 V, 20 A [30 A]
本体重量	100 kg	550 kg	600 kg	FR-X: 1,030 kg MM007: 790 kg	170 kg	110 kg	140 kg	1,100 kg
備考	発熱量: 2.0 kW (7,200 kJ/h)	発熱量: 0.9 kW (3,240 kJ/h)	発熱量: 3.0 kW (10,800 kJ/h)	上記の他に、ダイアフラムポンプ、庫内モニターなどの100 V電源が必要になります。詳細は仕様書をご参照ください。	空冷と水冷の2タイプがあります。 発熱量 (空冷タイプ): 1.8 kW (6,480 kJ/h)		窒素ガス発生装置: 単相 100 V, 8 A [15 A] アース付きコンセント コントローラー: 単相 100 V, 5 A [15 A] アース付きコンセント	空冷分離型の送水装置は以下の電源が必要。 (室内) 単相 100 V, 5 A [15 A] (屋外) 三相 200 V, 20 A [30 A]

※ □ 内は、ブレーカー容量 ※ 所要電源は標準構成を基にした数値です。検出器・送水装置・特注構成により変わる場合があります。

ユーザーサポート体制



リガクトレーニングポータル

単結晶構造解析の原理から測定・解析方法、結果の解釈まで、幅広い情報をオンデマンドで学習できるコンテンツを公開しています。必要なときにいつでも利用できるため、復習や研修にも利用可能です。

セミナー／講習会の開催

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への登壇、個別講習会等も対応が可能です。日頃の疑問を解消する場としてご活用ください。

アプリケーションノート

単結晶構造解析装置に関する具体的な活用事例を紹介しています。最新型装置の性能や最適な分析手法の選定、課題の解決に役立つ情報を提供しています。

リース・レンタル契約

予算のご都合に合わせて、リース会社を介してのリースやレンタルの契約もご相談に応じます。

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

Webセミナーやメールマガジン、リガクジャーナル等でも単結晶構造解析に関する情報を提供しています。

デモンストレーション

お客様の試料を用いた測定デモを、リガクのアプリケーションラボで実施できます。

最新機種とCrysAlis^{Pro}による測定・解析を、実際の試料でご確認ください。

デモンストレーションのお問い合わせ

リガクHPの『専門家に相談する』からご相談ください





- * 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。
- * 「XtaLAB Synergy」、「XtaLAB SynergyCustom」、「XtaLAB mini II」、「XtalCheck」、「HyPix」、「HyPix-Arc」、「PhotonJet」、「PhotonJetMAX」、「CrysAlisPro」、「AutoChem」、「DicifferX」は、株式会社リガクまたはその関連会社の商標または登録商標です。
- * 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	〒564-0063 吹田市江坂町1-23-101	☎ (06) 6879-1660	FAX. (06) 6879-1664
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