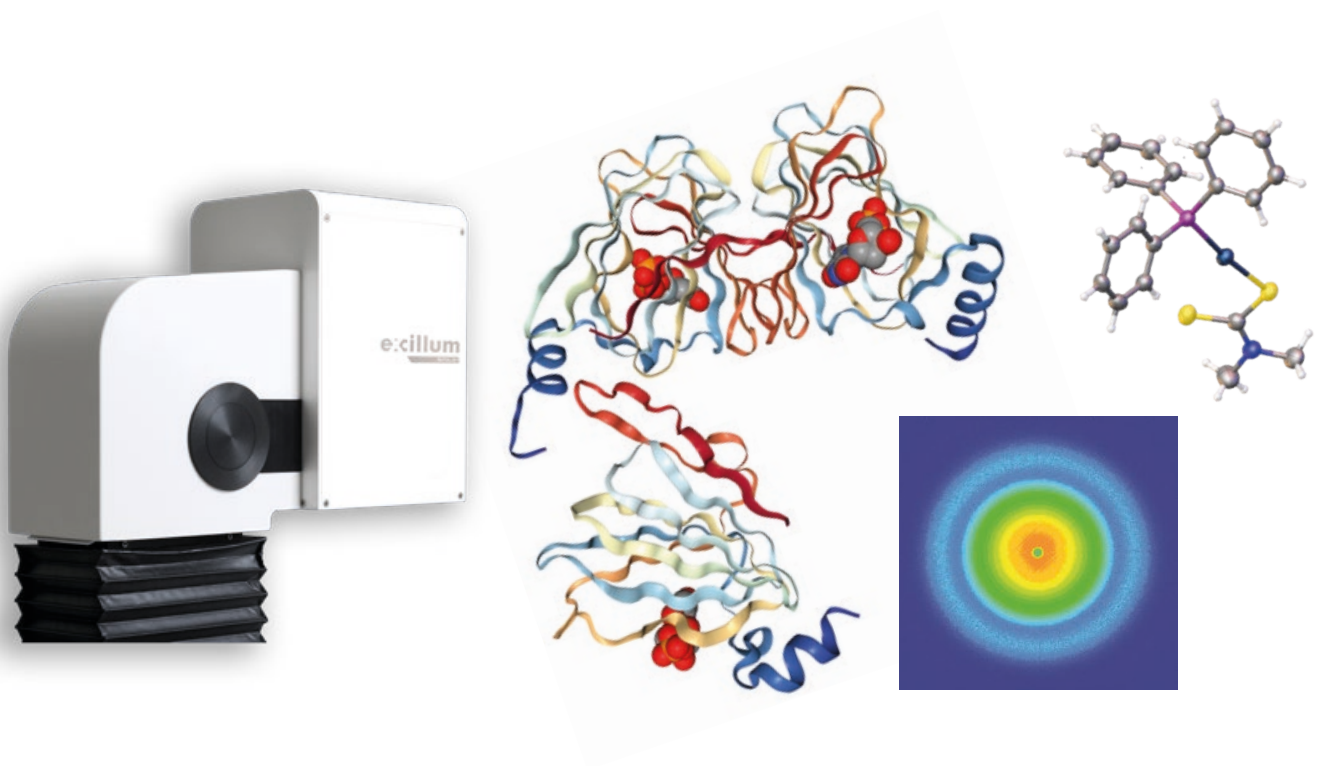


excillum

REDEFINING THE X-RAY TUBE



MetalJet

小角X線散乱法 (SAXS)、低分子およびタンパク質結晶構造解析のための

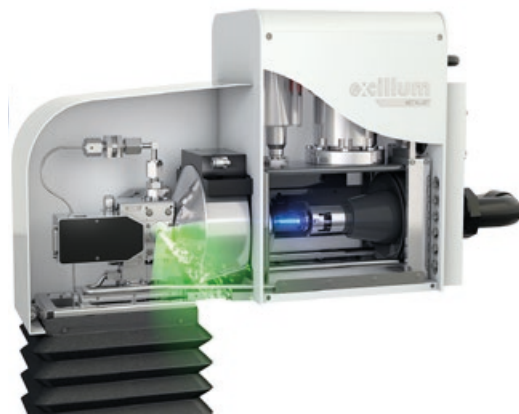
世界で最も明るいマイクロフォーカスX線源

MetalJet D2+

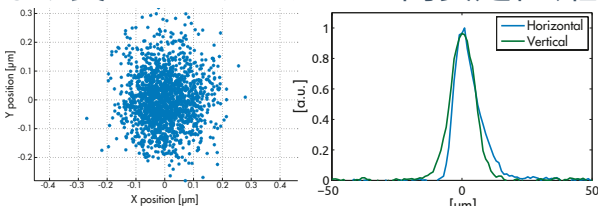
最先端の高輝度X線源

MetalJet D2+ は、Excillum社の特許取得済み高輝度マイクロフォーカスX線源の最新世代です。

MetalJetは、回転する陽極金属ターゲットの代わりに金属の高速流動液体ジェットを使用するため、回転陽極の限界を打ち破り、破損の恐れなしに金属ターゲットに大きな電力負荷をかけることができます。これにより、MetalJetは、従来のマイクロフォーカス回転陽極X線源よりも約10倍の高輝度X線ビームを生成することができます。



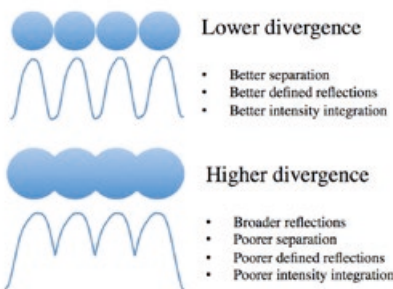
より良いデータのための高安定性、低発散度



MetalJetは、安定性の高い(24時間で $<0.1 \mu\text{m}$)電子ビームスポットを生成します。これは、X線光学系を経て安定性の高いX線ビームに変換されます。

電子ビームスポットは、典型的には $5\sim 30 \mu\text{m}$ のサイズに緊密に集束され、X線光学系の後の典型的なX線ビームサイズは、光学系に依存しますが、 $70\sim 100 \mu\text{m}$ となります。

24時間に渡る電子ビームの位置
最大電子ビームスポットのラインプロファイル



電子ビームとこれによるX線ビームのサイズ、形状及び射出角は、ソフトウェアで制御され、試料のサイズ及び用途に最も適合するようにユーザが調整することができます。

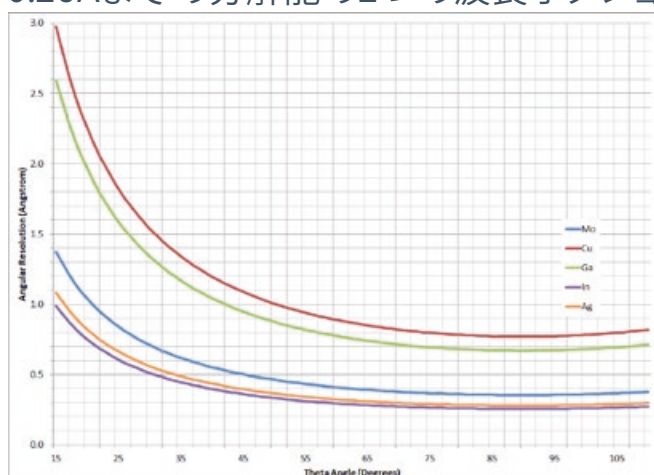
MetalJetは、通常、最高品質のデータを得るために、高品質で低発散のX線光学系とペアになっています。たんぱく質結晶構造解析のように、ブラッグ反射が密に詰まっている場合、発散度の低いX線ビームは、より良好なデータ分離、良好な位置及びより良い強度測定を提供し、全体的なデータ品質を改善します。対照的に、より高い発散度のX線ビームは、重なり合う可能性のあるより広い、より貧弱に規定されたデータをもたらし、位置情報と強度情報が混合して全体的なデータ品質が低下します。

コンパクトで、低い保守費用、低い保有経費

MetalJetは非常にコンパクトで、スタンドアロンX線源として使用することも、またExcillum社から直接アップグレードすることもできます。また、当社のパートナー機器メーカーの最先端X線回折装置または小角X線散乱法(SAXS)システムの一部として使用することもできます。

MetalJetは、高価なアノードの再研磨やアノードの交換を必要とせず、可動部品や強磁性シールもありません。フィラメントさえも必要ない設計になっており、長寿命のLaB₆結晶カソードに置き換えられました。これらの改善により、稼働時間の増加、より低い保守費用、保有費用の削減ならびに容易化が実現しています。

0.26Åまでの分解能の2つの波長オプション



ガリウム($\lambda=1.34\text{\AA}$)またはインジウム($\lambda=0.51\text{\AA}$)リッチ合金ベースのターゲットを使用し、MetalJetは $\theta=90$ 度で、ガリウムで最大 0.67\AA の分解能とインジウムで最大 0.26\AA の分解能までアクセス可能なデータを提供することができます。

MetalJetとガリウムまたはインジウム放射のいずれかの高い輝度を組み合わせると、他の従来の金属ターゲットと比較してデータ品質が向上します。この理由は以下のようになります。

- より低い空気/液体での散乱
- 銅放射線と比較して、低い吸収と潜在的放射線被害の低減
- 到達できるより高い分解能
- より高いデータ収集速度と効率

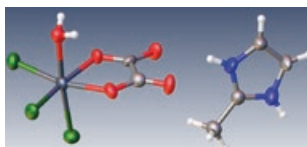
低分子結晶構造解析

低分子結晶構造解析では、原子および分子スケールでの材料の三次元構造の決定および研究においてX線回折を利用します。試料の単結晶が必要であり、結果として得られるX線構造は、原子タイプ、それらの相対配置、およびそれらがどのように空間内で接続されているかを示す正確な縮尺の三次元視覚マップを提供します。研究される結晶試料は、通常、無機、有機または有機金属化合物であり、主に化学、地質学および物理学の分野における研究から得られたものです。

低分子X線結晶構造解析がより自動化され、ルーチン化されるにつれて、高輝度のMetalJet X線源が望ましい、より困難で専門的な材料の研究に関心が高まっています。通常、MetalJetを使用すると、実験時間が短くなり、構造解析が速くなり、サンプルのスループットが向上します。小さな回折結晶と回折が弱い結晶は、より強く回折し、より高品質のデータを提供します。一方、感度の高い結晶はMetalJetでより高速に測定でき、それに応じて劣化も少なくなります。双晶データは、MetalJetを使用してより明確にすることができ、より簡単に識別して処理することができます。不整合に固有の非常に弱い回折効果、拡散散乱試料、準結晶および高圧試料はより強くなり、MetalJetの高輝度X線を用いてより容易に測定および研究することができます。

低分子への応用の例

小さな結晶



錫(IV)化合物は、生物学的活性のために潜在的な触媒および医薬品として興味深いものです。これらの化合物を理解するための一環として、モンリオール大学、Cheikh Anta Diop大学、Bourgogne大学の研究者らは、 $[\text{Sn}(\text{C}_2\text{O}_4)\text{Cl}_3(\text{H}_2\text{O})] \cdot (\text{C}_4\text{H}_7\text{N}_2)$ の50 μm 結晶の結晶構造をMetalJet X線源を用いて決定しました。

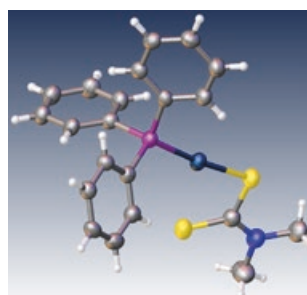
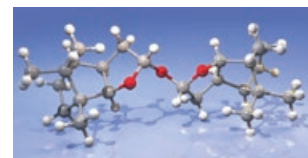
- 結晶のサイズ: 0.05 x 0.04 x 0.04 mm³ • R1 = 6.2%

Acta Cryst. 2015. E71, 520-522, M. B. Diop, L. Diop, L. Plasseraud, T. Maris

絶対構造

Bruker AXS社のアプリケーション科学者は、MetalJetをBruker D8 VENTURE回折計に組み込み、軽原子構造であり、重い原子は3つの酸素原子である(2S) - (-) - 2,2'-オキシビス(オクタヒドロ-7,8,8-トリメチル-4,7-メタノベンゾフラン)の絶対構造を決定することに成功しました。

- Flackパラメータ $x = 0.024(39)$ (Parsons')
- 結晶のサイズ: 0.15 x 0.05 x 0.04 mm³
- 実験時間: 4 hours
- 解像度: 0.75 Å
- 完全性: 96%
- 冗長性: 4
- R1 = 3.18%



高吸収体

モンリオール大学の研究者のグループは、最近、Bruker D8 VENTUREに組み込まれたMetalJet線源を使用して、高吸収化合物 $[\text{Au}(\text{PPh}_3)(\text{S}_2\text{CNMe}_2)]$ の結晶構造を決定しました。この化合物は、発光センサーの分野での応用が可能なd10構成の金(I)化合物に基づく材料の研究の一部でした。

- 結晶のサイズ: 0.08 x 0.04 x 0.04 mm³ • 吸収係数 $\mu(\text{Ga K}\alpha) = 10.57 \text{ mm}^{-1}$
- R1 = 3.94%

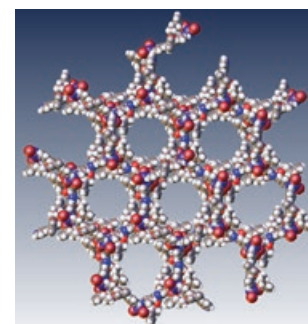
MolBank 2017, 2017(2), M937, N. Bélanger-Desmarais, C. Reber

拡張金属ネットワーク構造

バーゼル大学の研究者は、 $[\text{Zn}_2\text{Br}_4(\text{L})]_n$ を含む一連の拡張三次元金属網構造の結晶構造を研究するために、STOE回折計に取り付けられたMetalJetを使用しました。この構造は、長い単位セル端と、28133.2(9) Å³という大きな単位セル容積を示しました。

- $a = 35.9593(6) \text{ Å}$
- $b = 35.9593(6) \text{ Å}$
- $c = 25.1227(3) \text{ Å}$
- R1 = 8.98%

CrystEngComm, 2017, 19, 2894-2902, Y. M. Klein, A. Prescimone, M. Neuburger, E. C. Constable, C. E. Housecroft



タンパク質結晶構造解析

タンパク質結晶は、構造内の水の割合が非常に高いため、非常に敏感で、構造が明確ではありません。結果として、タンパク質構造は「柔らか」であり、X線回折データは、典型的には、低分子構造に比べてはるかに低い分解能品質です。同時に、タンパク質構造中に存在する原子の数は非常に多く、収集されるデータ（ブラッグ反射）は非常に密に詰め込まれています。

タンパク質結晶学者は、空気感度、小さな結晶、低回折、密集した反射の問題に対処するために、最も強いX線源に頼っています。従来、タンパク質構造決定に繋がる全タンパク質データを測定するためには高輝度シンクロトロンが用いられ、その一方で、シンクロトロンでの測定に好ましい結晶を識別するためのスクリーニングには、各研究室の装置が使用されてきました。

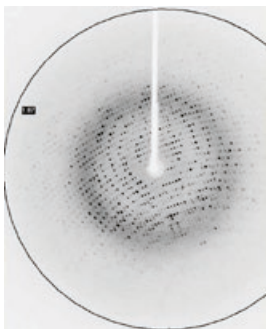
MetalJetのような高輝度X線源は、各研究室でより多くのタンパク質構造解析と実験を可能にし、アクセスと利便性を容易にし、研究を加速します。

高輝度のMetalJet X線源を使用すると、弱い回折データがより強くなり、実験時間が短縮され、サンプルの劣化の可能性が低減されます。狭く集中したX線ビームは、非常に小さなタンパク質結晶を測定するのにも理想的であり、コンパクトで明確な反射を提供します。より高い強度のMetalJet X線は、典型的には、収集される可視タンパク質データの角度分解能限界を拡大し、より正確な反射位置および強度を提供し、より高い分解能のタンパク質構造決定へと導きます。

「このX線源は非常に役立っており、場合によっては、シンクロトロンの代わりにもなります。MetalJetを購入して使用する私たちの主な目的は、より小さな結晶の研究に焦点を当てることにあります。30ミクロンの結晶で作業することは、もはや障害ではありません。」

Dr. Jan Dohnalek, Institute of Biotechnology, Czech Academy of Sciences, BIOCEV

タンパク質への応用例



ハイスループットスクリーニングのための高速データ収集

高速データ収集の例として、Bruker AXSのアプリケーション科学者は、Bruker D8 VENTUREシステムに搭載されたMetalJet X線源を使用してサイクリン依存性キナーゼ (CDK) の結晶に関するデータを記録しました。

実験を完了するには200秒かかり、結果として得られた分子置換による構造解を可能にする1.95Åのデータの100°のデータから成っています。

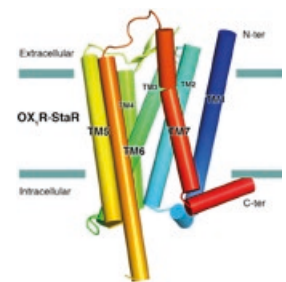
- 露出時間: 1 秒
- 結晶サイズ: 0.1 x 0.08 x 0.05 mm³
- 完全性: 97.5%
- 多様性: 3.68
- R_{merge}: 6.58%
- R_{pim}: 3.58%

社内での膜タンパク測定

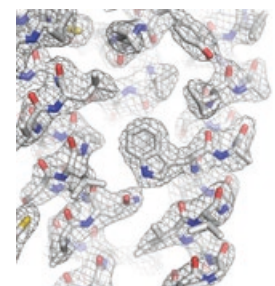
膜タンパク質のデータ収集および構造解に成功することは悪名高い程に難解であり、めったに達成されません。さらにまれなのは、シンクロトロンによる高輝度の放射光源ではなく、社内のX線回折計システムを使用して膜タンパク質の構造決定に成功したことです。

GPCR (ヒトオレキシンレセプターOx1R-Sta®) の小さな結晶を、社内のD8 VENTURE回折計に取り付けられたMetalJet X線源を用いてBruker AXSでの測定に成功しました。

実験時間は合計約2.5時間、分解能2.77Åでデータを収集し、構造は分子置換によって成功裏に解明されました。



- 走査幅: 0.1°
- 露出時間: 6 秒
- 結晶のサイズ: 0.08 x 0.08 x 0.05 mm³
- 多重度: 3.2
- I/sigma: 8.0
- R_{pim}: 7.62%
- R_{work} / R_{Free}: 0.244 / 0.2721

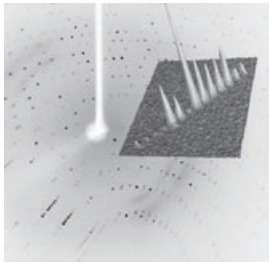
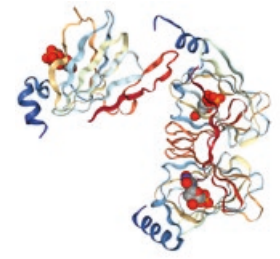


リガンド - 酵素共結晶化研究

ウィスコンシン大学(生化学学科)とカナダ国立研究評議会健康・治療(Human Health Therapeutics)の研究者らは、最近、カンピロバクター・ジェジュニ(Campylobacter jejuni)由来のWlaRA (TDP-フコース-3,4-ケトイソメラーゼ)の構造をガリウムMetalJet D2 + X線源を用いて収集したデータを使用して解析しました。

- 解像度: 2.15 Å
- 完全性: 99.3%
- R_{merge} : 7.1%
- 多重度: 7.1

Glycobiology. 2017, 27(4), 358-369, Z. Z. Li, A. S. Riegert, M. F. Goneau, A. M. Cunningham, E. Vinogradov, J. Li, I. C. Schoenhofen, J. B. Thoden, H. M. Holden, M. Gilbert



社内でのSAD法(単波長異常分散法)による構造解析

Bruker AXSのアプリケーション科学者は、D8 VENTURE回折システムとMetalJet X線源を用いて社内で収集したデータを使用して、硫黄-SADフェーシング法によってThaumatococcus danielliiから得られたタウマチンの結晶構造を決定しました。

1つの70 μm結晶を使用し、完全なデータセットが3時間以内に1.65Åまで集められました。実験フェーズは硫黄原子の異常シグナルに由来し、これらはタンパク質骨格の95%が追跡されることを可能にしました。



その場X線結晶構造解析

その場X線結晶構造解析は、マルチウエル結晶構造解析プレートおよびそれらの元の増殖培地/条件において、タンパク質結晶のX線回折スクリーニングやデータ収集を行う技術です。

通常、X線はマルチウエルプレートの方の側から導かれ、プレートおよび結晶を通過し、プレートの反対側に出て、回折データはX線に感度を持つ検出器に集められます。

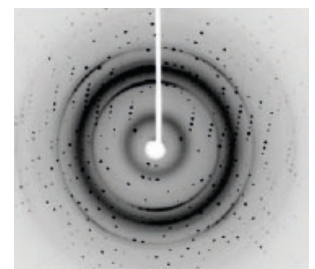
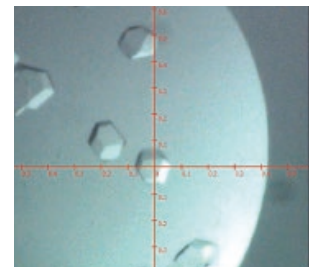
その場X線結晶構造解析は、以下の利点をもたらします。

- 結晶を損傷する危険なしに、多数の可能性のあるタンパク質結晶の自動化された、迅速なスクリーニングおよび同定
- 非結晶体、塩結晶および他の不純物結晶からタンパク質結晶の同定
- さらなるX線研究のための最良のタンパク質結晶の同定。

マルチウエル結晶構造解析プレートは、典型的にはプラスチック構造であり、X線透過率が低く、高いX線吸収および顕著なX線バックグラウンド散乱を示し、これら全ては、研究するX線回折信号を弱めるかあるいは不明瞭にします。

MetalJetは、以下に示す技術的特徴を併せ持つために、各研究室でその場X線回折を行うためのX線源として理想的な選択肢です。

- ソフトウェアでX線ビームサイズを調整可能です。すなわち、X線ビームを結晶のサイズに一致させ、結晶のグループではなく目的の結晶に正確に集中できることを意味します。これはまた、X線ビームによって照射されるプラスチックプレートの面積が非常に小さく、後方散乱が減少することを意味します。
- MetalJetのより高輝度のX線とガリウム放射線のより低いX線吸収とを組み合わせています。これは、銅のX線源と比較した場合、その場回折でMetalJetから得られるX線信号がより大きいことを意味します。



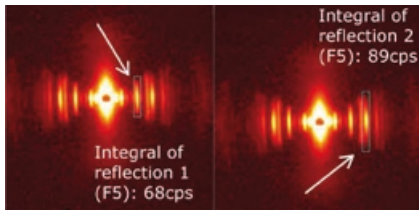
画像提供: Bruker AXS.

小角X線散乱法 (SAXS)

小角X線散乱法は、1nm~200nmの範囲の材料の構造を研究するために使用されます。研究される典型的な材料には、ポリマー、金属、コロイド、液晶および生物学的サンプル、例えば、タンパク質が含まれます。決定される情報は、粒度、形状、分布および配向、多孔度、表面の特徴および内部構造に関するものです。

SAXSサンプルは非常にわずかな準備しか必要とせず、バルク材料を代表する結果が得られます。散乱信号は、典型的には、6°未満の回折角で記録され、サンプルは、検出器から遠方に配置されます。したがって、測定される散乱信号は非常に弱くなります。この理由から、SAXS測定は、MetalJetのような高輝度X線源の使用が有利となります。弱い散乱効果を、より強く、より視認性を高め、より容易に研究ができるようになるのです。

SAXSへの応用例



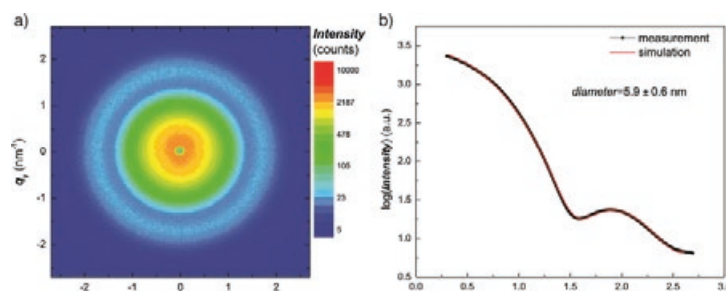
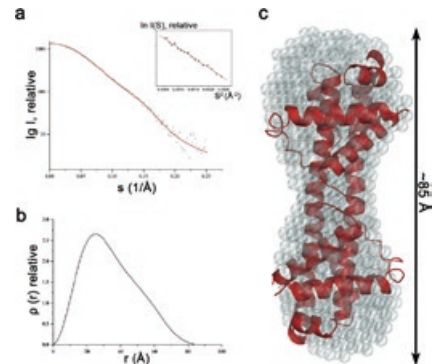
繊維

Bruker AXSのアプリケーション科学者は、ラットテール腱からの非常に細い繊維の一連のSAXS散乱プロットを記録するためにMetalJet (70Wで200W)を備えたNANOSTAR装置を使用しました。最先端の密封されたマイクロフォーカスチューブと比較して、50倍以上の強度ゲインを提供します。

生物学の(BioSAXS)

南洋理工大学のA * STAR、ルイビル大学、ロザリンド・フランクリン医科学大学、慶熙大学の研究者は、ミトコンドリアカルシウムイオン輸送の重要な調節因子であるBcl-xLタンパク質の研究にMetalJet搭載のSAXS装置を使用しました。タンパク質を弱い中性洗剤で処理し、2つの単量体間のヘリックス $\alpha 6$ - $\alpha 8$ の三次元ドメイン交換(3DDS)から生じる二量体の形成の間に、研究が行われました。

Sci. Rep. 5, 10609 (2015), S. Rajan, M. Choi, Q. T. Nguyen, H. Ye, W. Liu, H. T. Toh, C. B. Kang, N. Kamariah, C. Li, H. Huang, C. White, K. Baek, G. Grüber, H. S. Yoon.



金属とコロイド

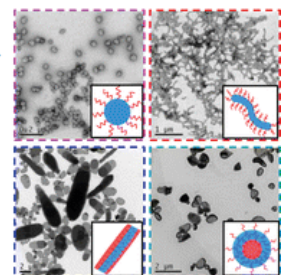
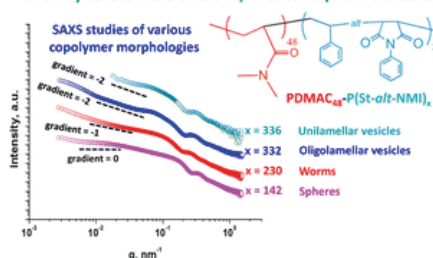
スロバキア科学アカデミーおよびSTUナノ診断センターの研究者は、フレキシブルなマイラー箔上に成膜したコロイド状金ナノ粒子の単層に基づいたひずみゲージのその場試験を行いました。これらのテストはSAXSによってモニターされ、高輝度のMetalJetは、10秒の時間分解能で非常に高速なデータ収集を可能にしました。

Sensors and Actuators A: Physical, 2016, 241, 87-95, K. Vegso, M. Jergel, P. Siffalovic, M. Kotlar, Y. Halahovetsa, M. Hodasa, M. Pelletta, E. Majkova

ポリマー

ポリマーの研究は、シェフィールド大学のソフトマター分析研究所 (SMALL) の重点領域の一つです。2016年に2百万ポンドのインフラ投資を実施し、ガリウムメタルジェットX線源を備えた新しいSAXSシステムの購入後、最初に新たに発表されたのは、スチレンとN-フェニルマレイミドの共重合研究でした。

PISA syntheses in a 50:50 w/w ethanol/MEK mixture



Macromolecules, 2016, 49 (18), 6731-6742, P. Yang, O. O. Mykhaylyk, E. R. Jones, S. P. Armes.

Excillum AB

当社はスウェーデンのストックホルム中心部のすぐ外側に位置するシスタを拠点とし、心を同じく、革新的で、個々人が啓発する、急速に成長しているダイナミックな企業です。2014年にExcillumはスウェーデンのデロイト・スウェーデン・テクノロジー・ファスト 50の中で14番目に速く成長を遂げた技術企業であると認定されました。

2008年に操業を開始して以来、ストックホルムのスウェーデン王立工科大学 (KTH) の生物医学ならびにX線物理学グループで発明されたメタルジェットX線源技術をさらに発展させました。当社の製品であるMetalJet D2 +マイクロフォーカスX線源は現在第2世代にあり、従来の固体マイクロフォーカス回転陽極X線源に比べて約10倍の輝度のX線を発生させます。このX線源の性能と技術の大幅な進歩により、MetalJetは2011年のR&D100賞を受賞しました。

Excillumの技術とX線製品は、最も明るいX線源が必要な場所であればどこでも、科学的な研究、分析、画像処理、試験にと、産業界や学界で採用されています。

応用分野は次の通りです：X線結晶構造解析、粉末および高分解能小スポットX線回折、X線分光法、SAXSナノ材料の特性評価、非破壊検査、電子検査、X線顕微鏡、医療および前臨床X線イメージング。

2009年以来、85以上のMetalJet X-線源が世界中で販売されています



Excillumとその社員は、お客様のニーズに最適なソリューションを見つけることに専念しています。当社は、OEMおよびエンドユーザー様と緊密に連携して、あらゆる用途に最適なX線源を提供しています。

様々なご要望にお応え致します。
お気軽にお問い合わせください。

お問い合わせ先

Excillum AB
Jan Stenbecks Torg 17
164 40 Kista, Sweden

excillum

電話: +46-8-7509660
ファックス: +46-8-7509665
E-mail: sales@excillum.com
Website: www.excillum.com

Although diligent care has been used to ensure that the information herein is correct, nothing contained herein should imply any representation or warranty as to the accuracy, currency or completeness of this information. The content hereof is subject to change without further notice. Please contact us for the latest version of this document or further information. Revision 2019-01-14. Marks, brands, logos, or similar used or displayed in this communication are registered trademarks or trademarks of Excillum or collaborators.

Excillum, MetalJet, MetalJet D1, MetalJet D2, MetalJet D2+, MetalJet C2, NanoTube, and NanoTube N1 are registered trademarks or trademarks of Excillum AB. Excillum's X-ray sources are protected by several patents including, but not limited to, US Patents No. US 6 711 233, US 8 170 179, US 8 681 943, US 8 837 679, US 9 171 693, US 9 245 707, US 9 380 690, US 9 530 607, US 9 564 283, US 9 947 502, and Chinese Patents No. ZL 01816396.3, ZL 200780026317.0, ZL 200980155094.7, ZL 200980158566.4, ZL 201080070417.5, ZL 201180058633.2, ZL 201280075230.3, ZL 201410213235.9, ZL 201510020687.X, and other corresponding national patents and patent applications pending.