

NOVIDADES ÁREA DE INFRAESTRUTURAS DE INVESTIGACIÓN

UNIDADE DE RAIOS X

A *Unidade de Raios X* do Campus Vida de Santiago mellora as súas prestacións coa incorporación dun novo difractómetro de monocristal Rigaku XtaLAB Synergy-S Flow, que permite a medida automática de ata 48 mostras.

A adquisición deste equipamento é parte da axuda EQC2021-007028-P, "AMPLIACIÓN DE LA CAPACIDAD DE MEDIDA Y DE LA VERSATILIDAD EXPERIMENTAL DE LOS DIFRACTÓMETROS DE RAYOS X DE MONOCRISTAL", financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033/ e pola "Unión Europea NextGeneration EU/PRTR"

EQUIPO: Rigaku XtaLAB Synergy-S Flow

CARACTERÍSTICAS TÉCNICAS BÁSICAS:

- Goniómetro con xeometría kappa de 4 círculos
- Detector "Hybrid Photon Counter" HyPix-ARC 150°
- Tubo de raios X microfoco "PhotonJet-S" ánodo de Mo
- Tubo de raios X microfoco "PhotonJet-S" ánodo de Cu
- Dobre video microscopio para centrado automático da mostra
- Cabezal goniométrico motorizado XYZ "IGH2"
- Robot cargador de 48 mostras en 3 UNIPUCKS
- Sistema de control de temperatura "CryoStream 1000 Plus" (100-400K)



APLICACIÓNS A DESTACAR

O novo equipamento permitiranos abordar problemas científico-técnicos que non podemos resolver coas limitacións dos difractómetros actuais. Podemos destacar os seguintes:

- De xeito análogo ao que se adoita facer cos cristais de proteínas, poderase realizar un cribado automático (“screening”) de múltiples cristais dunha mesma mostra de calquera tipo de composto, xa sexa do mesmo ou de diferentes ensaios de cristalización. Isto permitiranos:
 - Descartar os cristais problemáticos (xemelgos, desordenados, difracción débil, etc.) e recoller datos completos dos mellores dos analizados.
 - Detectar diversas estruturas (polimorfos ou pseudopolimorfos) presentes simultaneamente nun mesmo vial.
- Traballar en modo de alto rendemento para minimizar os tempos de resposta dos usuarios e causar o menor impacto no desenvolvemento da súa investigación.
- Mantemento das mostras crioxenizadas antes de montalas no difractómetro (para evitar que se danen durante a espera en fila) e tamén despois de montalas e de ter feita a caracterización preliminar do cristal (pendente de confirmación por parte do usuario da utilidade dos resultados finais para a súa investigación) e tamén mantelos estabilizados durante un tempo despois da medición completa dos datos (ata confirmar que non hai problemas co procesamento, resolución e refinamento final da estrutura. Poderían faltar datos de difracción debido a unha asignación inicial incorrecta de simetría, baixo número de pares de Friedel, baixa redundancia para corrixir a absorción, reflexións superpostas, etc.). Deste xeito, pódese recuperar as mostras facilmente e seguir traballando co mesmo cristal.

Deste xeito, cubriríase practicamente toda a gama de problemas estruturais dos monocristais, dende sistemas inorgánicos ata moléculas biolóxicas (péptidos e os seus complexos con outras moléculas), pasando por compostos orgánicos e organometálicos (incluíndo supramoléculas, MOF, etc.). Ademais, o sistema automático de montaxe e centrado do cristal permitiría un mellor aproveitamento do tempo (achegándose ao funcionamento 24h/7d).

Para máis información pode seguir o seguinte enlace a web do fabricante [Rigaku](#), o seu [foro](#) e consultar a páxina web da [Unidade de Raios X](#).

ENLACES

Catálogos

<https://rigaku.com/products/crystallography/x-ray-diffraction/xtalab-synergy-s>

Enlaces a software libre para tratamiento de datos:

[CrysAlisPro](#)

[Olex2](#)

LOCALIZACIÓN E CONTACTO

Localización

A Unidade de Raios X está localizada no **Campus Vida** de Santiago, no **edificio CACTUS**.

Contacto Persoal técnico da Unidade

Correo: URXMonocristal@grupos.nube.usc.gal

Teléfono: 881816223

INFORMACIÓN SOBRE A PRESTACIÓN DE SERVICIO

Solicitud de servizo LIMS:

<https://lims.usc.es/>

Enlace a TARIFAS:

<https://www.usc.gal/gl/servizos/area/infraestructuras-investigacion/documentacion/tarifas>