

BL41XU 構造生物学

1. X線入射光学系の導入

X線入射光学系を2000年1月に導入し、2月から運用を開始した。本装置はディフラクトメータ上の試料部上流に設置され、4象限スリット 多連装アッテネータ 4象限スリット イオンチャンパー シャッター コリメータホルダー、と並んだコンポーネントで構成されている。すべてのコンポーネントは外部からのオンライン制御が可能となっている。

本装置を用いることで、試料に入射するX線のサイズや強度の細やかな制御が可能となった。また試料部ゴニオメータの回転中心に対して、数ミクロン程度の精度で入射X線ビーム位置を制御することが可能となり、このことは微小結晶での回折実験において大きなアドバンテージとなっている。

本装置ではシャッターを閉じた状態でも入射X線の位置をスキャンすることが可能である。これを利用して、MAD測定でリモート波長を大きくはずしたい場合などに、試料結晶をゴニオメータに設置したままディフラクトメータの光軸アライメントが行えるようになっている。

2. オンライン・センタリングの実現

X線劣化の激しい試料結晶を用いる場合や、MAD測定のように1つの試料結晶から非常に大量のデータを収集する場合には、試料結晶上でX線の当たる場所を変えながら回折実験を行うことがある。これまではその度ごとに、X線を止めて実験ハッチ内に入り、手作業で試料結晶を動かしてセンタリングをし直していた。この時間も手間もかかる作業をより簡便にするため、試料結晶のオンライン・センタリングのシステムを開発し、2000年11月から運用を開始した。

ゴニオメータの回転モータと試料ホルダの間に設置したXYステージと回転モータのXステージをオンライン制御するソフトウェアを作製した。ゴニオメータに設置された試料結晶観察用CCDカメラの映像を見ながら、このソフトウェアを操作することで、ハッチ内にX線が入射している状態でのオンライン・センタリングが実現できている。

3. 統合型サーバシステムと高可搬性クライアント・ソフトウェアの開発

タンパク質X線解析用ビームラインの本数が増えて、ユーザーは多くのビームラインで実験を行うようになってきた。このような状況では、ビームラインごとに利用するソ

フトウェアの操作が異なるため習熟が困難である、という問題が顕著になってきた。これは、ビームラインによって光学系コンポーネントやディフラクトメータ・検出器などが異なるため、本質的に避け得ない問題である。また表面上の操作性をできるだけ統一するためにビームライン担当者やソフトウェア開発者の払わなければならない労力も馬鹿にならない。

これらの問題を解決する試みとして、統合型サーバシステムと高可搬性クライアント・ソフトウェアの開発を行った。

U S S A B L E (Unified Server System for Advanced BeamLine Environment) と名づけられた本システムは、Lab V I E Wを用いて開発された。統合型サーバシステムは、光学系コンポーネントやディフラクトメータを構成する各コンポーネントを制御するプラグインと、クライアント・ソフトウェアからのコマンドを解釈して対応するプラグインを起動するサーバからなっている。ビームラインごとにプラグインの構成を変更することで、異なった構成のビームラインを、同じサーバ、同じコマンド体系で利用することが可能となっている。またこの統合型サーバシステムを利用する高可搬性クライアント・ソフトウェアは、ビームラインごとのシーケンスの違いを記述した設定ファイルを外部に持つことで、同一のインターフェイスを異なるビームラインで利用することができる設計となっている。

2000年の秋から開発をはじめ、2001年1月からBL41XUで評価のための試験運用を開始した。約半年の運用で実用性・安定性が確認できたので、BL40B2での運用を目指して移植作業を行っている。

(河本 正秀)