

構造生物学研究分野

BL38B 1

構造生物学Ⅲ

BL38B1は偏向電磁石を光源とし、回折能の大きな結晶を用いてルーチ的に回折データ測定を行うのに適したビームラインである。これまでに、データ測定ソフトウェアBSS (Beamline Scheduling Software) [1] の導入、新型CCD検出器と大面積IP検出器の導入を行い、ユーザー実験の利便性を高め、効率よく実験が行えるシステムの構築を図ってきた(図1)。また、2005年には、自動サンプルチェンジャーSPACE (SPring-8 Precise Automatic Cryo-sample Exchanger) [2] の導入を行い測定の自動化を図るとともに、メールインデータ測定を実現する際に必要となるWebデータベースD-Cha (Database for Crystallography with Home-lab. Arrangement) の開発を行い、試料情報、測定条件、回折データなどの管理を行う環境を整えた。今年度は、メールインデータ測定を実運用するための準備を行うと共に、実験ホール内側と外側にある側室を、それぞれ試料準備室と計算機室として使用するための環境整備を行った。また、将来的に高輝度化を図ることを視野に入れて、光学系の高度化にも着手した。

1. メールインデータ測定のテスト運用

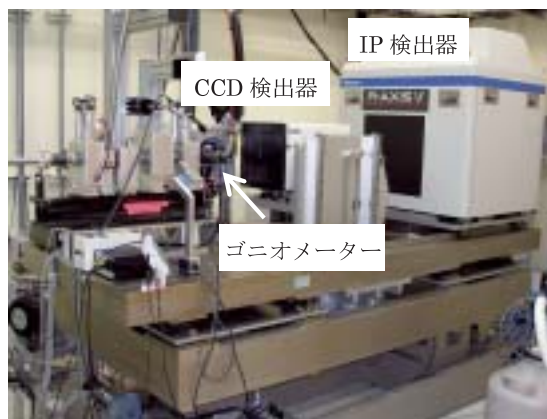
我々が導入を進めているメールインシステムでは、サンプルチェンジャーSPACEを用いた自動データ測定を活用する。したがって、ユーザーはSPACE用サンプルピンに取り付けた結晶試料を専用サンプルトレイにマウントし、ドライシッパを用いてSPring-8に送付する。試料に関する情報や回折データ測定条件などビームラインでの実験に必要な情報は、Webインターフェースを用いてネットワーク越しにD-Chaに登録する。ビームラインでは、D-Chaに登録された情報を

BSSにダウンロードすることで、ユーザーが指定した条件で回折データ測定を行う。データ測定は、2モード運転 [2] を利用し、日中に全ての結晶試料のスクリーニングを行い、良好な回折パターンを示す試料を用いて、夜間に自動測定を行う。D-Chaを利用することで、SPring-8に来所することなく、自由に測定条件を選択して放射光を用いた回折データ測定を行えることが、我々のメールインデータ測定の特徴である(図2)。今年度は、凍結試料をトレイにマウントするのに必要なツール類の整備や、D-Chaの高度化、メールイン測定のマニュアル類の整備を行った。ツール類の整備はユーザーに貸し出すことを目的として、計4セット整備した(図3)。これは、ユーザーに余分なコスト負担を課さずにメールインを運用する上で重要である。次年度以降、数を増やし、常時10組程度のユーザーに貸し出しを行える体制を整える予定である。

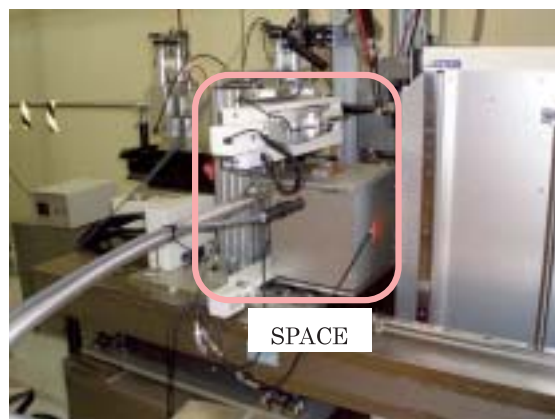
これらの整備を行った上で、ユーザーの需要を喚起することと、立ち上げたシステムのパフォーマンスを調べることを目的として、8組のユーザーを対象にメールインデータ測定

表1 2006年度のメールインデータ測定のテスト運用実績

ユーザーグループ	送られてきた試料の数	スクリーニングのための測定の数	回折データセット測定数
①	24	26	6
②	22	22	10
③	41	47	8
④	7	18	2
⑤	17	19	17
⑥	26	34	4
⑦	40	44	12
⑧	42	43	8



(a)



(b)

図1 (a) BL38B1の回折計、(b) 回折計に設置したサンプルチェンジャー SPACE

のテストを行った。表1は今年度実施したメールイン測定テスト運用の実績をまとめたものである。多い日には、50個近い結晶のスクリーニングを行い、そのうち12個のデータセット測定を実施した。テストはいずれも成功裏に終了し、これまで整備したシステムの有効性を証明するとともに、協力していただいたユーザーからは非常に便利であるとの評価を得ることができた。

2. ビームライン側室の整備

2-1. SPACE用試料準備室

実験ホール内の側室 (D09) に、サンプルマウンターと吹き付け低温装置を整備した。サンプルマウンターは、ビームラインに導入したSPACEと同様の構造を持つロボットで、結晶化プレートから拾い上げた試料を低温吹き付け装置で急速凍結した後、SPACE用サンプルトレイに試料をマウントするために使用する。SPring-8に来所してSPACEを用いた自動データ測定を行う場合は、メールインデータ測定で使用するマウントツールではなく、このサンプルマウンターを用

いて試料の準備を行うことができる。来年度には、BL41XUにSPACEを導入することが計画されており、将来的には、BL38B1の実験準備室をタンパク質結晶解析ビームラインで共通に使用する試料準備室として運用する予定である。

2-2. タンパク質結晶解析用計算機室

また、実験ホール外側の側室 (D10) には、これまでタンパク質結晶解析データプールとして8TBのIsilon1920iクラスタストレージを整備してきた。今年度は、ノードの追加を行い、ストレージ容量を14TBまで増強した。これにより、ユーザーが測定した回折データの長期保存が可能となるばかりでなく、測定のスループット向上に伴うデータ量の増加にも対応可能となった。さらに、回折データ処理用のコンピューターの高度化 (高速化) を行うため、LinuxによるPCクラスターシステムを5ノード導入した。これらのクラスターは、ビームラインの端末からリモートログインすることにより使用する。

理化学研究所のタンパク質結晶解析ビームライン



図2 WebデータベースD-Chaを用いたメールインデータ測定。D-Chaは試料情報、測定条件、回折データなどの情報を保存するデータベースである。ユーザーの研究室からはインターネットを通じて、また、ビームラインからはLANを通じて情報のやり取りを行う。D-Chaが研究室とビームラインのインターフェースとしての役割を果たすことで、メールインデータ測定が可能となる。



図3 (a) メールインデータ測定用マウントツールキット、(b) 凍結試料輸送用ドライシッパ

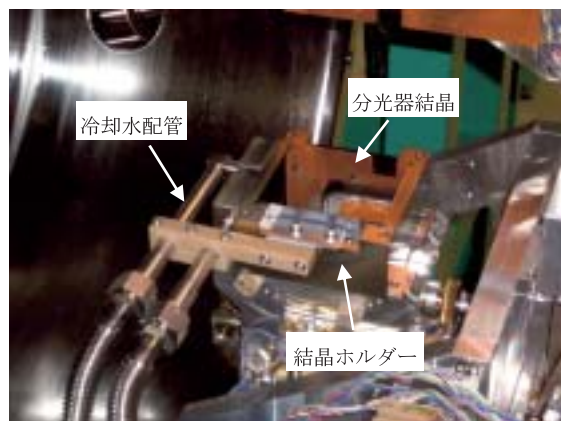


図4 分光器に取り付けられた、新型の直接冷却結晶

(BL26B1、BL26B2、BL44B2)も、この部屋に同じ仕様のストレージ及びクラスターを整備している。SPring-8のタンパク質結晶解析ビームラインのストレージや計算機をこの部屋に集約することで、ユーザーはビームラインの違いを意識することなくデータの管理や処理を行うことができる。また、一箇所で集中管理するため、保守・管理にかかるコストの軽減も図られる。

3. 光学系の高度化

将来的に、サジタル集光による高輝度化を実施することを見据えて、分光器結晶を間接冷却型のSi (311) 結晶から直接冷却型のSi (111) 結晶に取り替えた。これは、ビームライン技術部門で新しく開発された偏向電磁石ビームライン用直接冷却型結晶で、従来の直接冷却型結晶と異なり、冷却水の出入り口を結晶側面に設置することで、結晶をホルダーに装着する際に発生する歪の軽減が図られている。また、Oリングに放射光が直接さらされない構造になっているため、Oリング劣化による漏水などの事故が起きにくく、安定なビームライン運用が可能である。現在、年2回の長期停止期間中にOリングを交換して運用している。

参考文献

- [1] Ueno, G. et al. J. Synchrotron Rad. (2005). 12, 380-384
- [2] Ueno, G. et al. J. Appl. Cryst. (2004). 37, 867-873

利用研究促進部門 構造生物グループ
 長谷川和也、酒井 久伸、
 岡崎 伸生、清水 伸隆、
 河本 正秀、熊坂 崇、
 山本 雅貴