

BL41XU 構造生物学 I

BL41XUは、SPRING-8標準アンジュレータを光源とするタンパク質結晶構造解析用の共用ビームラインである。2003年度より上流セクションから順番に光学系・回折計の更新・高度化を実施してきているが、本年も引き続き以下の高度化を行った。

1. 回折計高度化

1-1 高精度回折計の導入

2006年度に回折装置架台を更新したが、架台上に設置する回折系機器（4象限スリット、シャッター、ゴニオメータ、アッテネータ、コリメータ、強度モニター等）に関しては旧架台に設置されていた機器をそのまま流用していた。これらの回折系機器は5年以上前にデザインされた物であるが、BL41XUではこの5年の間に測定に使用するビームサイズ、結晶サイズともに $\sim 200\mu\text{m}$ から $50\mu\text{m}$ 以下へと高度化されている。従って、各機器の仕様は現在の要求精度を満たしておらず、また、経年劣化に伴い当初の性能自体も得ることは難しく、駆動精度、位置再現性などに関する様々な問題を抱えていた。そこで、2007年5月の中間点検期間中にこれらの機器をより高精度なものへと更新した（図1）。4象限スリットは各ブレードの駆動精度が一桁向上し（ $\sim 0.1\mu\text{m}$ ）、ゴニオメータの偏芯度も $2\mu\text{m}$ 以下となっている。また、この4象限スリットはX-Zステージ上に設置され、スリット開口中心の調整は4象限の各ブレードの配置を変更するのではなく、このX-Zステージにて調整する形態へと変更した。コリメータとゴニオメータ以外の各機器は真空チャンバー内に設置されているが、チャンパー最下流はベリリウム箔（厚さ $25\mu\text{m}$ ）で仕切られている。このベリリウム箔から試料直前のコリメータ先端部までは、これまでは大気であったが現在はヘリウムガスに置

換されている。コリメータ先端のピンホール直径は $300\mu\text{m}$ （以前までは $800\mu\text{m}$ ）で、試料との距離は低温窒素およびヘリウムガス吹付け装置からの低温ガス直近の 6mm に設定されている。

これらの機器の更新と合わせて、ダイレクトビームストッパーに関して交換を行った。これまで利用していたビームストッパーは、ストッパー部分の直径が 2mm 、柄の厚さが 1.2mm というもので、試料位置から 35mm 後方に固定して設置していた。そこで、ストッパー部分の直径を 0.7mm 、柄の厚さを 1mm に変更した。その結果、ビームストッパーと試料間距離は 15mm まで近づけることが可能になり、現状は、カメラ長に応じて測定ソフトウェアが $15\sim 35\text{mm}$ の間でその距離を変更するように設定されている。

1-2 回折イメージの低バックグラウンド化

前述の高精度回折計を導入した結果、回折イメージデータに顕著な違いが観測された。図2はその一例としてビームストッパー交換前後に空気散乱測定を行った結果である。ストッパー部分を小さくし、その支持部をより試料に近づけられる形状に変更して、試料からの距離を 35mm から 15mm に近づけた所、同じ低角領域のバックグラウンド散乱がカメラ長 250mm では 30% 減少した。この結果には、コリメータ内部をヘリウムガスに置換している効果とコリメータ先端部のピンホール径を $800\mu\text{m}$ から $300\mu\text{m}$ に減少させた効果も含まれていると考える。実際、回折機器更新前の2007年3月では、X線回折実験において良好な統計精度を持つデータを得るためには、回折イメージ上での平均回折強度が $1200\sim 1500$ カウント程度必要であった。一方、更新後は $500\sim 800$ カウント程度で更新前と同等かそれ以上の統計精度を持つデータが取得可能となった。従って、X線強度が

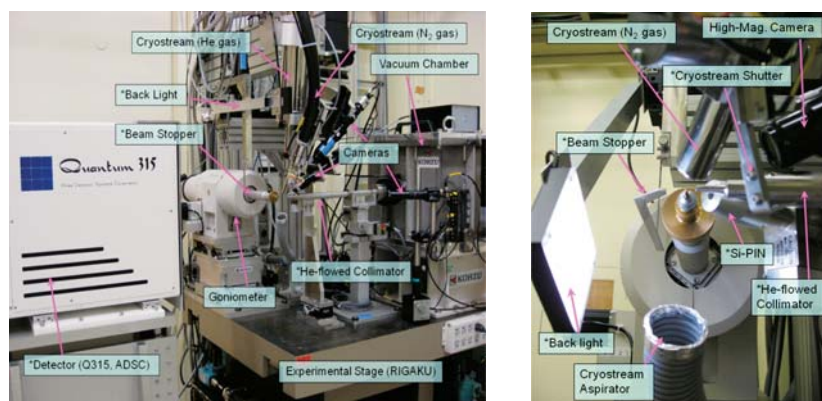


図1 更新された新回折計（神津精機製）。4象限スリットなどは、真空チャンバー内に納められている。

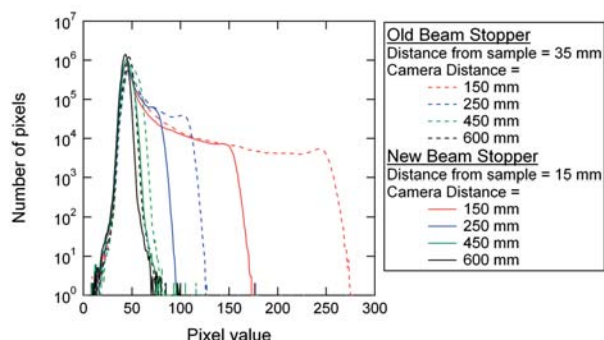


図2 ビームストッパー交換前後の空気散乱計測結果(波長 1 Å 露光 1 秒)。同一の分解能領域で比較しているが、カメラ長が近いほどビームストッパーとサンプルとの距離が近くなった効果が現れている。

同一であればより短時間露光でも高精度データ収集が可能となり、放射線損傷の低減化につながると考えられる。

2. サンプル交換ロボットの導入

ビームラインの効率的運用をさらに促進するために、SPring-8で開発されたサンプル交換ロボットSPACE^[1] (図3 (左)) と、ロボットが交換するサンプル格納容器に液体窒素を供給するための液体窒素自動供給装置 (図3 (右)) を導入した。また、ロボットアームの駆動と低温窒素ガス吹付け装置先端のノズルが干渉するため、ノズルをアームの駆動と干渉しない角度に調整可能なように手動傾斜機構も設置した。実際のロボットの運用に関する調整は2008年年度に実施する予定である。

3. On-siteでのデータ処理を効率化する小規模クラスタの導入

JASRI構造生物グループでは、理化学研究所研究技術開発室と共同でSPring-8のタンパク質結晶構造解析ビームライン (理研BL: BL26B1、BL26B2、BL44B2、BL45XU、共用BL: BL38B1、BL41XU) での解析をサポートするために、小規模クラスタを導入した (図4)。本クラスタは

2007年2月現在、1台のジョブ管理サーバーと16台のPCで稼働しており、1台当たり4コアのCPU (Dual-Core×2) を搭載しているため、合計64コアとなっている。本クラスタの利用で様々な解析を並列に実行することが可能となった為、幾つかのデータを同時に処理する等、解析の効率化が実現されている。一方、データ処理が高速化されたことで、実験で取得したイメージデータを圧縮して持ち帰るユーザーも増えている。これに関しても、クラスタによる並列処理で圧縮行程が高速化されたことが寄与していると考えられる。また、圧縮することでファイルサイズは3~4分の1程度まで減少するため、データのバックアップに掛かる時間も短縮されている。2008年度以降も、順次コア数を増強していく予定である。



図4 理研および共用BL共通のタンパク質結晶構造解析用小規模クラスタ

参考文献

- [1] G. Ueno, et al.: *J. Appl. Cryst.* **37** (2004) 867-873.

利用研究促進部門

構造生物グループ 結晶構造解析チーム

清水 伸隆、河本 正秀、

長谷川 和也、馬場 清喜、

岡崎 伸生、熊坂 崇

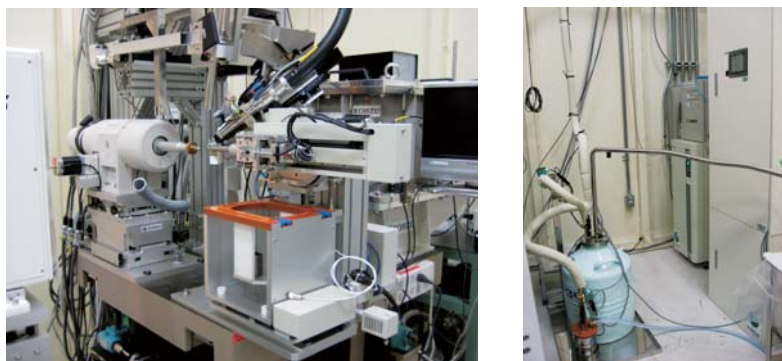


図3 (左) サンプル交換ロボット (Rigaku製) と (右) 液体窒素自動供給装置 (大陽日酸製)。サンプルは液体窒素中に格納され、ロボットは指定されたサンプルをゴニオメータにマウントする。