

BL38B1 R&D(3)

1. はじめに

R&Dビームライン(3X BL38B1)は偏向電磁石X線ビームラインの各種R&Dを目的として2000年秋からコミッションを始め、2001年度から共同利用も含めて本格的な運用が開始されている。このビームラインでは利用者が増加している構造生物学分野のステーション機器の整備、共通化を行い、その利用効率に関するR&Dを行う。また多目的な用途に利用できるように設計されており、光学素子や検出器の評価、新しい実験技術の試みにも利用されている。

2. 光学系

2.1. ビームライン制御系

BL38B1では新しいビームライン制御系のテストを行っている。新しいシステムではユーザーのパソコンから光学機器の制御がより高速化されたことが確認されており、このシステムを利用した新しい分光器の制御システムの開発等をBL38B1で行っている。

2.2. 位置敏感型イオンチャンバー

また、位置敏感型イオンチャンバー(PSIC、応用光研工業㈱位置敏感型イオンチャンバーS-2403)とプリアンプ(クリアパルス㈱8868A型2チャンネル高速I/V変換器)およびBeam Position Calculatorを用いて、分光器の定位置出射をはじめとする光学系の調整を行った。位置と強度の情報が電圧で出力されるので、ほぼリアルタイムでビーム位置の情報をモニターし、パソコン等に取り込むことが可能である。

3. 蛋白質結晶X線回折実験

3.1. 蛋白質結晶構造解析用CCDカメラの導入

メーカー：Area Detector Systems Corporation
(ADSC), San Diego, USA

機種：Quantum 4R

仕様：2×2 モザイクCCD

総検出面積：188 mm×188 mm

pixel size：82 micrometer in a 2304 grid

Dynamic range：10⁴

読み取り3秒、データ転送・書き込みを含めると、計13秒で設定し、動作確認した。

ビームラインでの光学系制御WSとの通信を統合したサーバーシステムを導入したことに伴い、ADSCコントローラ上であらかじめ入力設定した波長に自動変更することを

利用したMAD連続測定プロトコールも利用できるように設定した。

MAD測定に関連しては、波長変更、AMP・TEK社製XR-100CRを使用する重原子の吸収端自動測定、およびその吸収端・ピーク領域・リモート測定用推奨波長を計算することまでも含めたソフトウェア体系をLabVIEWで用意した。

例えば露光を20秒とした場合、約30秒で露光イメージ保存・表示可能とするX線回折データ検出器を導入したことになる。解析に必要な総角度180度の振動写真を連続測定しても計1時間30分程で測定終了するという迅速性が実現できる。

3.2. 大容量データ保存装置(RAID)導入

メーカー：アイ・イー・アイ㈱

機種：SNX76000ELV-2500C, SNX60000ELV (450GB)

仕様：ディスクアレイコントローラ内蔵

キャッシュメモリ：128メガバイト

ディスクドライブ(パリティ)：1台

ディスクドライブ(データ)：5台

それぞれ総容量250GBおよび450GBとする。

それぞれLinux PC (Pentium 1000 MHz, OS: Red Hat 6.2 (E)), SGI O2 (R12000, IRIX6.5)に接続し、ADSC controllerとはNFS接続して使用している。

収集データ総量の増大に対応し、CCD 1フレーム10MBのデータを20秒露光で連続測定することで1時間あたり1GB、結晶交換時間を含めると24時間連続測定すると15GB以上、実験日30日分で450GBは必要との想定の下に導入しており、連続する利用実験に対応することが可能であった。

3.3. 汎用データ処理ソフトウェアのライセンス契約

メーカー：HKL Research Inc. USA

ソフトウェア名：HKL2000 ver.1.0

仕様：Denzo、simulation、scalepack 最新版、GUI interface 付き、Academic licenseとする。

一般ユーザーが使用方法に慣れているX線回折データプロセスソフトウェア Denzoの最新版であることも起因し、CCDで連続測定中に積分強度算出を行うことが可能となった。測定中のデータの質を判定出来ることになり、計算処理対応の早いユーザーでは、24時間のビームタイム終了までに計算処理が完了出来るようになった。

ビームライン実験ハッチ前のSGI workstation および

Linux PC上での使用が出来ることが上記大容量データ保存装置の導入とも関連して解析計算処理までの所要時間短縮および効率化に有効であった。

4. 検出器の評価・実験技術の試み

4.1. 多素子SSDの調整

19素子SSDを用いたXAFS法への応用の最適化を行っている。Ortec、Canberra社のSSD及びスペクトロスコピーアンプの評価、ソフトウェアの改良やテストなどを行っている。19素子SSDを用いることにより、これまでは不可能だった低濃度の試料の測定が可能になる。例えば、生体試料中の微量金属や、表面に数層しか原子層がない薄膜などの試料の測定をこれまでに行った。

4.2. in-situ XAFSの試み

in-situ XAFS法に関するR&Dを行っている。最近、PFでも精力的に行われるようになっており、SPring-8でもユーザーからの要望が高まっている。反応性ガスの取り扱いなど、いくつかの問題点をクリアし、この方法がSPring-8で定常的に行えるように検討している。

(谷田 肇、三浦 圭子)