



PF研究会 放射光利用による構造生物学の将来像



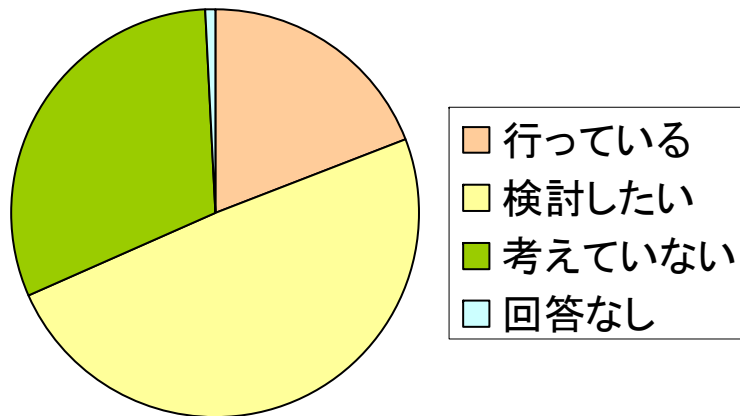
ユーザーからみたPF構造生物学ビームライン

松垣直宏

KEK-PF 構造生物学研究センター

試料交換ロボットの利用

試料交換ロボットの使用を



- 大量にデータを取る場合には有効であると思われるが、それ以外に利点はあるのか
- 手でマウントしたほうが結晶の特徴を把握しやすい
- 手でマウントさせたほうが教育効果が高い
- ビームラインサイトで臨機応変に結晶の調整処理をしたい
- フラッシュクーリングしたい
- 霜の問題がある
- 用具を揃える必要がある(お金がかかる)
- 結晶をカセットに装填するのが難しい
- 使用法が分からない(講習会を開いてほしい)
- 手でマウントすることに困っていない

試料をバイアルとケーンで保存してドライシッパーで持ってくるユーザーの皆さん

Unipuckにしてみませんか？



16pins/puck
12pucks/dewar
(192pins)

SPring-8をはじめ、海外の放射光施設の多くの交換ロボットで取り扱えます
SAM系(SSRL, AS, NSRRC, PF,...), ACTOR, ALS, CATS, SPACE

サンプル交換ロボット PAM の活用

リモートデータ測定

NX Client (仮想端末)を用いた遠隔実験

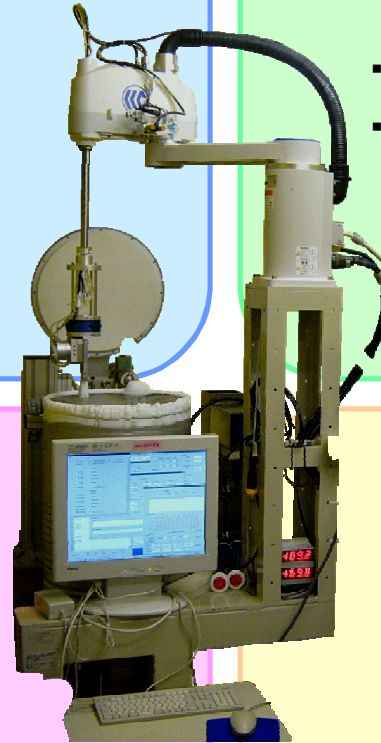
全自動データ測定

= サンプル交換 + 自動センタリング

- ・ AR入射後のシャッター自動開モード
- ・ 受託測定(企業向け)

安定な試料交換

- ・ 人間よりも圧倒的にミスが少ない、しかも高速



測定の高効率化

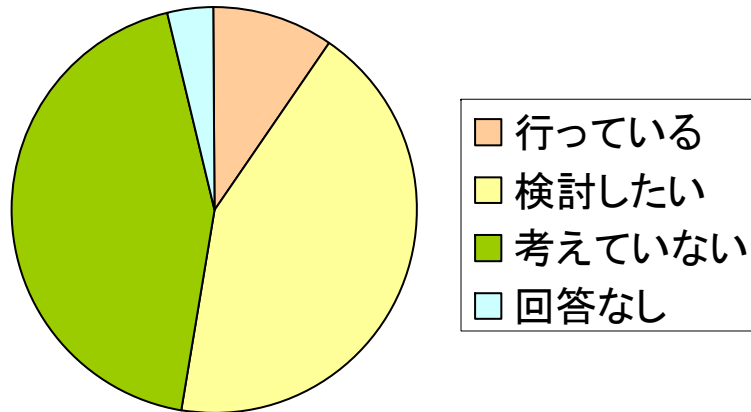
- ・ 大量のサンプルのスクリーニング
- ・ 複数の結晶からの部分データの足し合わせ



UGUI-2 開発中(秋公開予定)
サンプル交換時間=10秒!!

リモートアクセスの活用

リモートアクセスによる実験を

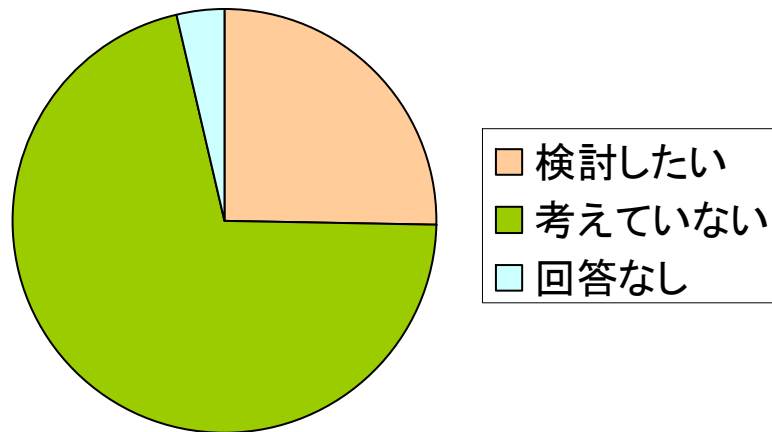


- ビームラインサイトで実験を行ったほうが教育効果が高い
- ビームラインサイトで臨機応変に結晶の調整処理をする
- 職場がPFから近いので必要性を感じない
- **一人で実験している**
- サンプルの発送(受け入れ)の問題
- ネットワーク(セキュリティ)の問題
- 使用法が分からない(使用法をアナウンスしてほしい)

依頼測定

教育効果・費用・機密性・「自分で測定することの重要性」は確かにありますが。。。

依頼測定を



- 測定条件が確立した結晶の測定
- 結晶化条件の検討にスナップショットを数枚撮るような場合
- 回折データ測定にあまり経験のない研究室からの需要
- ビームタイムの有効利用(空きビームタイムに複数ユーザー分の依頼測定を済ますなど)

オンサイト測定やリモート測定、依頼測定と使い分けられればユーザーから見て便利？

- 十分訓練されたオペレータの存在
- PF側の負担・受け入れ態勢

ビームラインの性能に関する要望

BL-17Aの他にもう一本、微小ビームが使えるビームラインが欲しい

	BL-1A	BL-5A	BL-17A	AR-NW12A	AR-NE3A
Starting year	2010	2004	2006	2003	2009
Status	Operational	Operational	Operational	Operational	Operational
Synchrotron Ring		PF		PF-AR	
Injection		Top-up		Twice (8:30,20:30)	
X-ray Source	Short-gap undulator	Multipole wiggler	Short-gap undulator	Undulator	Undulator
Wavelength range (Å)	0.9 - 1.1 2.7 - 3.0	0.7 - 1.9	0.9 - 2.1	0.7 - 1.9	0.7 - 1.9
Energy resolution ($\Delta E/E$)	-	2.5×10^{-4}	2.5×10^{-4}	2.5×10^{-4}	2.5×10^{-4}
Photon flux (photons/sec. @1.0 Å)	2×10^{10} (@ 1.0 Å) 2×10^9 (@ 2.7 Å)	2.0×10^{11}	6.6×10^9 (@ 1.0 Å) 1.3×10^{10} (@ 2.0 Å)	2.9×10^{11}	8.0×10^{11}
Slit size (μm^2)	10 x 10	200 x 200	20 x 20	200 x 200	200 x 200
Detector	Quantum 270	Quantum 315r	Quantum 210r	Quantum 210r	Quantum 270
Type	CCD	CCD	CCD	CCD	CCD
Active area (mm^2)	270 x 270	315 x 315	210 x 210	210 x 210	270 x 270
Pixel size (μm^2)	64.8 x 64.8	102 x 102*	102 x 102*	102 x 102*	64.8 x 64.8
Pixel number	4168 x 4168	3072 x 3072*	4096 x 4096	4096 x 4096	4168 x 4168
Frame data size (MByte)	34	19*	8	8	34
Readout time (sec.)	1.1	0.9	0.9	0.9	1.1
Dead collection time per frame (sec.)	Exp. time + 2.7	Exp. time + 1.6	Exp. time + 1.6	Exp. time + 1.6	Exp. time + 2.7
Camera distance (mm)	40 - 500	60 - 950	40 - 700	60 - 950	60 - 500
Detector vertical offset (mm)	0 - 100	0 - 150	0 - 100	0 - 100	0 - 150
Sample exchanger	-	PAM	PAM	PAM	PAM
Software for image processing			HKL2000, Mosfilm, XDS		

* These numbers are for a "binning" mode (default).

ビームライン制御への要望

- 回折イメージの自動評価・最適な露光時間の見積
- インデキシングやデータ測定ストラテジー計算ソフトウェアとの連動
- いくつかの結晶から得たスナップショットを簡単に並べて比較したい
- 針状結晶に順にビームを当ててデータ測定するような場合（ヘリカルスキャン）、始点と終点の指定で照射位置を決定できる機能
- データ測定中に回折像のdecayを計算・表示
- 結晶照射用ライト位置の微調整（結晶のコントラストをつける）
- 結晶センタリング支援（対微小結晶、自動センタリング）

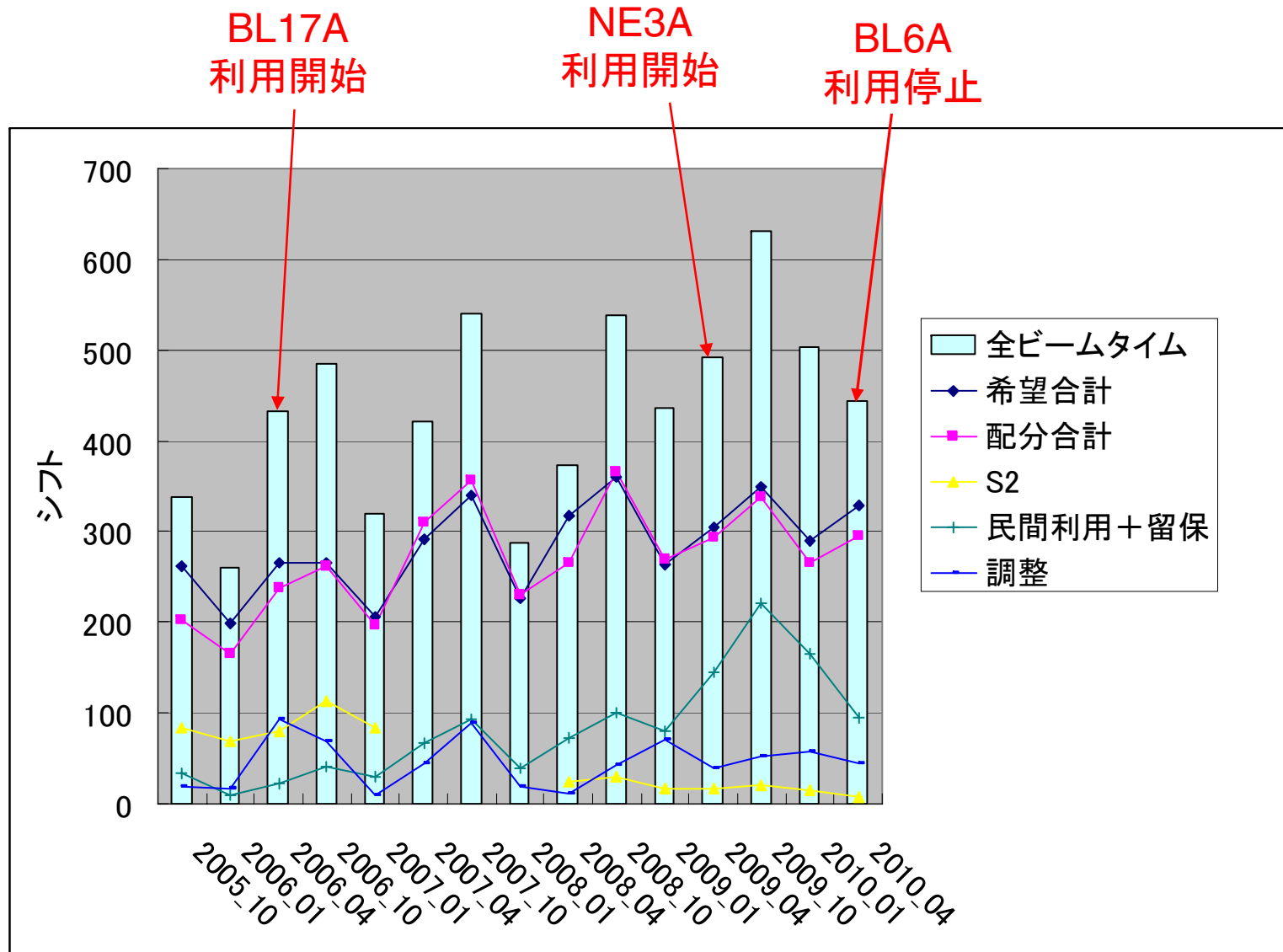
現在開発中のUGUI次期バージョン
UGUI2で対応します

2010年秋以降

ビームライン設備への要望

- 高感度・大面積のX線検出器
- ヘリウムクライオ
- アーク(銅)ゴニオ
- オンライン顕微分光光度計
- 多結晶を割るためのレーザー装置
- データ解析コンピュータの処理能力
- ドライシッパーを保管する専用の部屋
- ミニ遠心機とボルテックス
- 液体窒素かけて霜を除去するシステム
- リモートアクセス用実験ハッチ内ウェブカメラ
- (使える)自転車

十分な量のビームタイムを供給する



通常ビームサイズと微小ビームサイズの バランス

	BL-1A	BL-5A	BL-17A	AR-NW12A	AR-NE3A
Starting year	2010	2004	2006	2003	2009
Status	Operational	Operational	Operational	Operational	Operational
Synchrotron Ring		PF		PF-AR	
Injection		Top-up		Twice (8:30,20:30)	
X-ray Source	Short-gap undulator	Multipole wiggler	Short-gap undulator	Undulator	Undulator
Wavelength range (Å)	0.9 - 1.1 2.7 - 3.0	0.7 - 1.9	0.9 - 2.1	0.7 - 1.9	0.7 - 1.9
Energy resolution ($\Delta E/E$)	-	2.5×10^{-4}	2.5×10^{-4}	2.5×10^{-4}	2.5×10^{-4}
Photon flux (photons/sec. @1.0 Å)	2×10^{10} (@ 1.0 Å) 2×10^9 (@ 2.7 Å)	2.0×10^{11}	6.6×10^9 (@ 1.0 Å) 1.3×10^{10} (@ 2.0 Å)	2.9×10^{11}	8.0×10^{11}
Slit size (μm^2)	10 x 10	200 x 200	20 x 20	200 x 200	200 x 200
Detector	Quantum 270	Quantum 315r	Quantum 210r	Quantum 210r	Quantum 270
Type	CCD	CCD	CCD	CCD	CCD
Active area (mm^2)	270 x 270	315 x 315	210 x 210	210 x 210	270 x 270
Pixel size (μm^2)	64.8 x 64.8	102 x 102*	102 x 102*	102 x 102*	64.8 x 64.8
Pixel number	4168 x 4168	3072 x 3072*	4096 x 4096	4096 x 4096	4168 x 4168
Frame data size (MByte)	34	19*	8	8	34
Readout time (sec.)	1.1	0.9	0.9	0.9	1.1
Dead collection time per frame (sec.)	Exp. time + 2.7	Exp. time + 1.6	Exp. time + 1.6	Exp. time + 1.6	Exp. time + 2.7
Camera distance (mm)	40 - 500	60 - 950	40 - 700	60 - 950	60 - 500
Detector vertical offset (mm)	0 - 100	0 - 150	0 - 100	0 - 100	0 - 150
Sample exchanger	-	PAM	PAM	PAM	PAM
Software for image processing			KL2000, Mosfilm, XDS		

* These numbers are for a "binning" mode (default).

実験に最適なビームの性質(フラックス、サイズ、エネルギー)を選択できること

S-SAD法による構造解析の推進

BL17Aへ大面積検出器Q315rを移設する(2010年秋)

	BL-1A	BL-5A	BL-17A	AR-NW12A	AR-NE3A
Starting year	2010	2004	2006	2003	2009
Status	Operational	Operational	Operational	Operational	Operational
Synchrotron Ring		PF		PF-AR	
Injection		Top-up		Twice (8:30,20:30)	
X-ray Source	Short-gap undulator	Multipole wiggler	Short-gap undulator	Undulator	Undulator
Wavelength range (Å)	0.9 - 1.1 2.7 - 3.0	0.7 - 1.9	0.9 - 2.1	0.7 - 1.9	0.7 - 1.9
Energy resolution ($\Delta E/E$)	-	2.5×10^{-4}	2.5×10^{-4}	2.5×10^{-4}	2.5×10^{-4}
Photon flux (photons/sec. @1.0 Å)	2×10^{10} (@ 1.0 Å) 2×10^9 (@ 2.7 Å)	2.0×10^{11}	6.5×10^9 (@ 1.0 Å) 1.3×10^{10} (@ 2.0 Å)	2.9×10^{11}	8.0×10^{11}
Slit size (μm^2)	10 x 10	200 x 200	20 x 20	200 x 200	200 x 200
Detector	Quantum 270	Quantum 315r	Quantum 210r	Quantum 210r	Quantum 270
Type	CCD	CCD	CCD	CCD	CCD
Active area (mm^2)	270 x 270	315 x 315	210 x 210	210 x 210	270 x 270
Pixel size (μm^2)	64.8 x 64.8	102 x 102*	102 x 102*	102 x 102*	64.8 x 64.8
Pixel number	4168 x 4168	3072 x 3072*	4096 x 4096	4096 x 4096	4168 x 4168
Frame data size (MByte)	34	19*	8	8	34
Readout time (sec.)	1.1	0.9	0.9	0.9	1.1
Dead collection time per frame (sec.)	Exp. time + 2.7	Exp. time + 1.6	Exp. time + 1.6	Exp. time + 1.6	Exp. time + 2.7
Camera distance (mm)	40 - 500	60 - 950	40 - 700	60 - 950	60 - 500
Detector vertical offset (mm)	0 - 100	0 - 150	0 - 100	0 - 100	0 - 150
Sample exchanger	-	PAM	PAM	PAM	PAM
Software for image processing				HKL2000, Mosflm, XDS	

* These numbers are for a "binning" mode (default).

BL-1Aや17Aにおいて実験が本格化します
開発のための試料提供・手法提案を歓迎します