

# ネットワークを重視したX線装置利用支援体制

## Support system for X-ray apparatuses utilizing computer network

文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム 平成28年度「技術支援貢献賞」受賞

実地機関担当者：沖津 康平（東京大学）

Key Words

X-ray single-crystal diffractometer, XPS, Remote assistance

### 概要 / Overview

- 2台の単結晶構造解析装置,1台の光電子分光(XPS)分析装置利用に対して支援を行っている。X線単結晶構造解析は,機能性分子の分子構造決定手段として物性物理,触媒化学,生命化学,薬学などの研究分野に欠かせない実験手段である。また光電子分光は,試料表面元素の化学状態評価技術として非常に重要である。これらの装置ユーザーに対して行っている支援体制のポイントは3つある。①装置制御画面を投射する130~200インチ大型スクリーンの利用,②ホームページから閲覧,ダウンロードできるマニュアル作成と提供,および③ネットワーク環境,特にリモートアシスタンスの有効利用である。
- Advanced Characterization Nanotechnology Platform at The University of Tokyo provides technical support for the single-crystal XRD and the XPS utilizing the remote assistance systems.

### 単結晶XRD,およびXPSから得られる情報

Information available from the single-crystal XRD and the XPS

#### ● 単結晶構造解析装置

図1および図2は,それぞれ低分子結晶(サイズ,10×10×20μm)およびタンパク質結晶用X線単結晶構造解析装置により得られた分子構造である。前者は,機能性分子がその機能をどのようにして発現するかを知るために,物性物理,化学,薬学等の分野に欠かせない情報である。後者は,生命科学および創薬などの研究に必要な不可欠である。

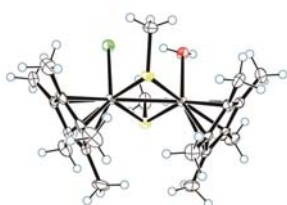


図1 低分子の構造(東大,工学系,総合研究機構,西林研究室よりご提供)

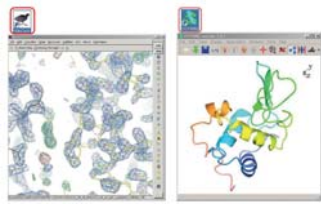


図2 タンパク質(リゾチーム)分子の構造。電子密度マップ(左)とリボンモデル(右)

#### ● 光電子分光分析装置(XPS)

図3および図4は,光電子分光分析装置(XPS)により得られた,光電子スペクトルおよび光電子マップである。これらの情報は,触媒や電池の電極など,表面がその機能を担う物質の化学結合状態を調べるために,欠かせない。

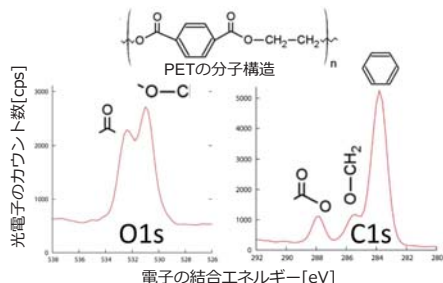


図3 PETの光電子スペクトル

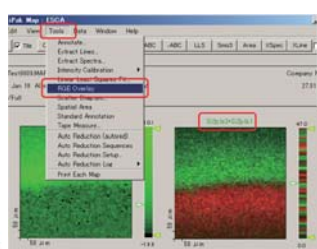


図4 酸化皮膜付きSiウェハ-上のSiとSiO<sub>2</sub>による光電子マップ

### ユーザーサポート体制

Support system for the users

#### ● 天井吊り下げプロジェクターと大型スクリーンの利用

図5は, XPS装置ユーザーのための遠隔体験実習会の様子である。12名程度受講者が,無線キーボードとマウスを持ち回ることにより,1日でXPS装置のすべての機能を体験できる。図6は,単結晶構造解析の実験を,多くのユーザーが議論しながら行っている様子である。プロジェクターを天井から吊り下げていることにより,正面から画面を見ることができる。



図5 XPS遠隔体験実習会



図6 単結晶構造解析実験風景

#### ● 使い方マニュアルの整備

図7は,装置管理者により作成されたXPS装置使い方マニュアルの表紙である。スマートフォンを含む,ネットワーク環境から自由に閲覧,ダウンロードできる。装置利用法,データ解析法は,一般に複雑で記憶できない。



図7 XPS使い方マニュアル(表紙)

#### ● リモートアシスタンスによる支援体制

図8は,スマートフォンに表示された装置制御用パソコンの画面。出先からでも装置ユーザーへのアシストができる。3台の装置すべてに対して可能である。

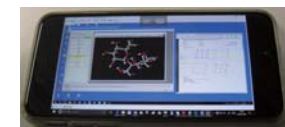


図8 スマートフォンによるリモートアシスト画面(低分子単結晶)

### 装置・技術の高度化

Development of Research Equipment and Systems

装置管理と利用支援を効率化することにより,研究での経験を支援業務に生かすことができる。例:スーパーコンピュータ利用支援。

#### ● 放射光X線の偏光コントロール

図9は,装置管理者により考案,開発された放射光X線任意偏光生成システムである(2006年完了)。これの開発,応用過程で,博士4名,修士10数名の研究を支援した。この経験が現在の支援業務に生かされている。

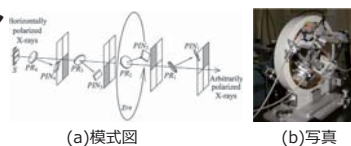


図9 任意偏光生成X線移相子システム

#### ● タンパク質結晶構造解析における位相問題解決に向けた研究

図10は,装置管理者により導出されたX線多波動力学理論と数値解法を記述した論文原稿表紙である。2波理論を多波理論に置き換えることによる,タンパク質結晶構造位相決定の可能性に言及している。(査読中)。

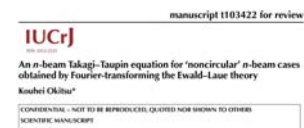


図10 査読中の論文の表紙(Invited)

Contact

沖津 康平