

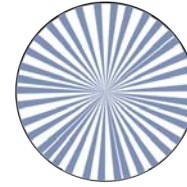
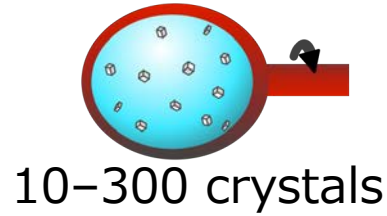
ZOOで利用できる測定方法

測定方法

角度 (/結晶)

データセット

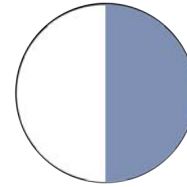
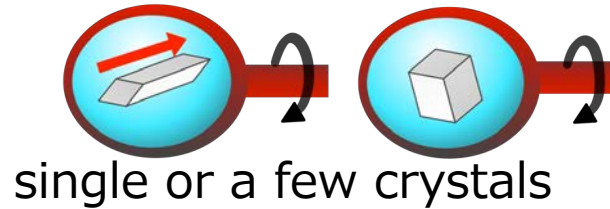
“multi”
(SWSX)



5-10 deg.

部分データ

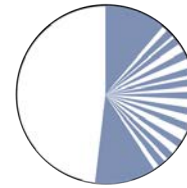
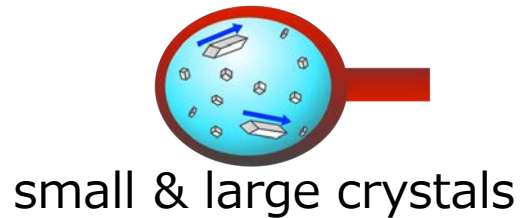
“helical” or “single”



90-360 deg.

フルデータ

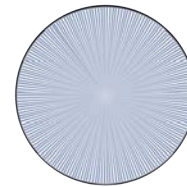
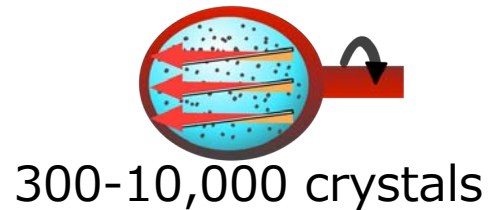
“mixed”



5-10 deg.
+
30-360 deg.

部分データ
+
フルデータ

“SSROX”

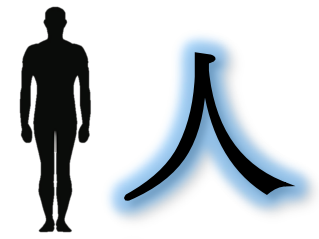


< 1 deg.

極端な
部分データ

結晶サイズ&ビームサイズを考慮して「ユーザが」最適な選択

Mixed scheme(HITO)



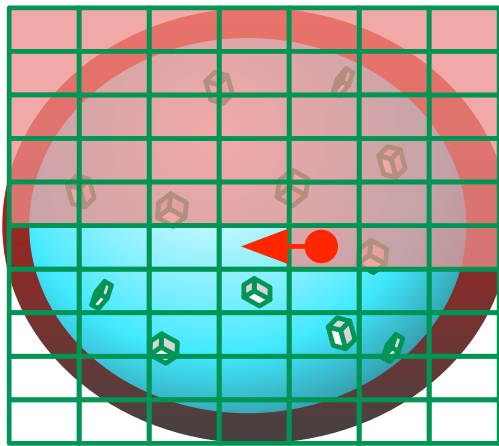
目的：小さい結晶と大きい結晶がグループ内に混在
(LCP結晶では頻出)

小さい結晶 → “SWSX”

大きい結晶 → “ヘリカルデータ収集”

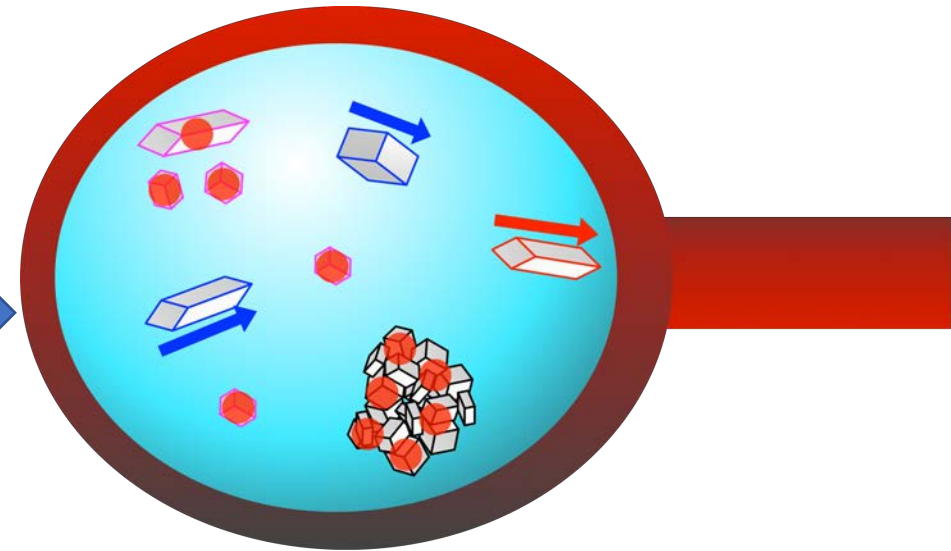
自動測定は大前提として

低線量走査



結晶の位置を特定(SHIKA)

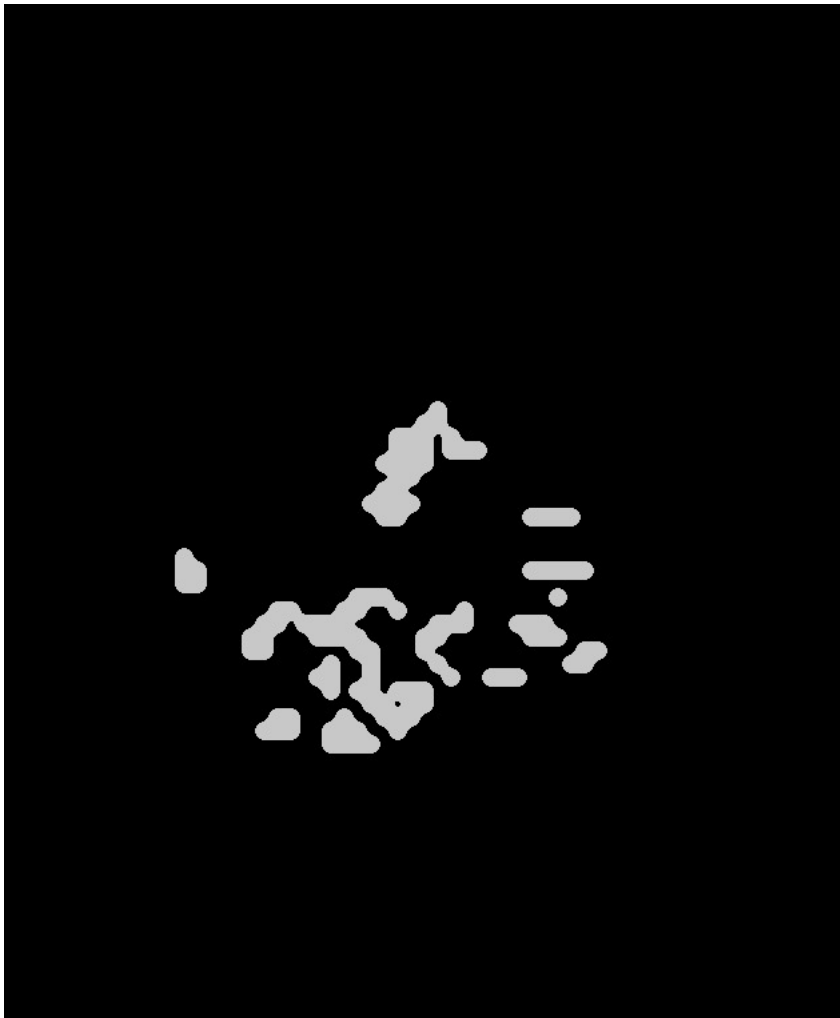
結果



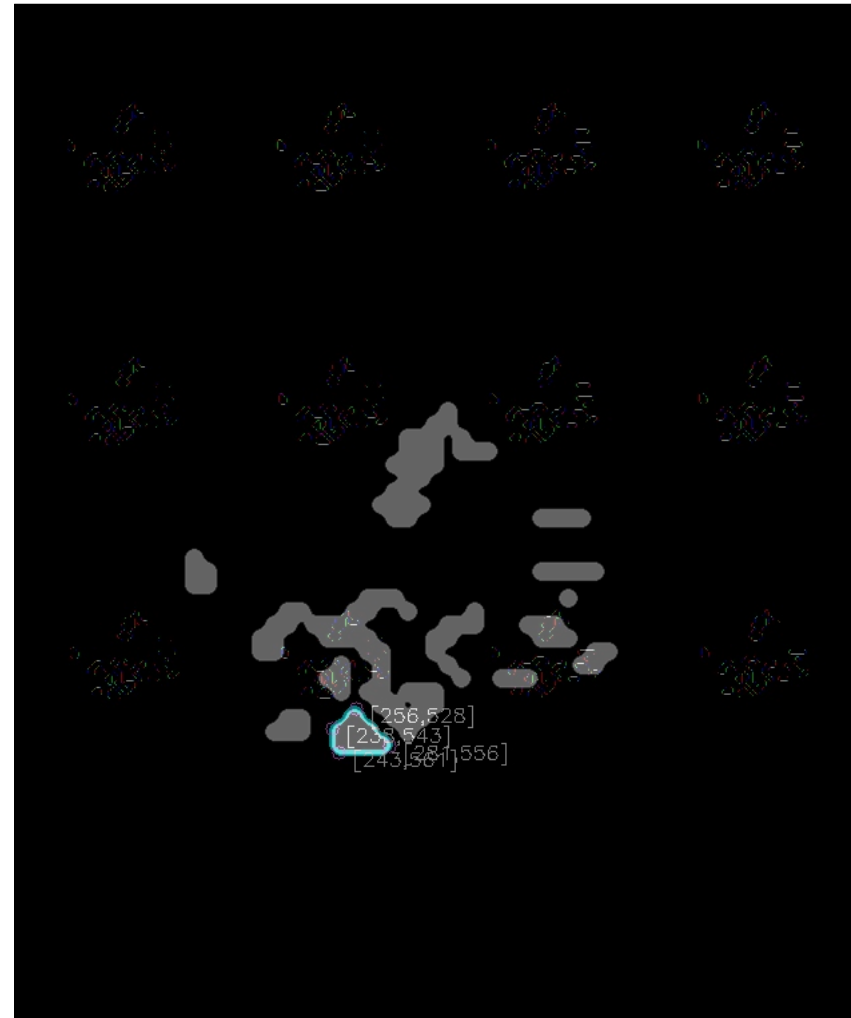
回転軸

HITO : 自動的に測定スキームを選定する

新しいHITOがやること



低線量走査の結果
(スコアしきい値で二値化)



結晶の外形を検出
(python-opencv2)

新しいHITOがやること

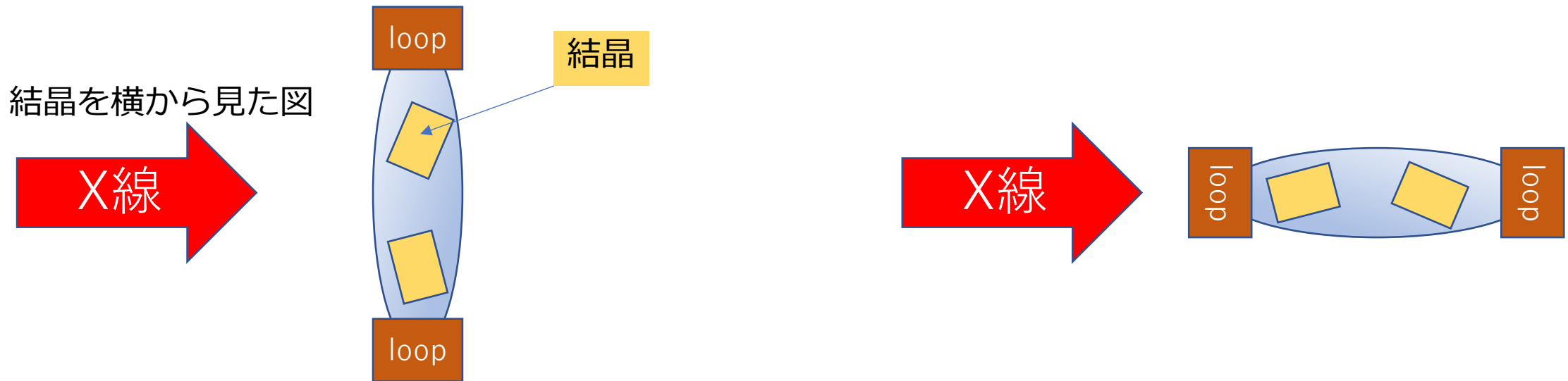
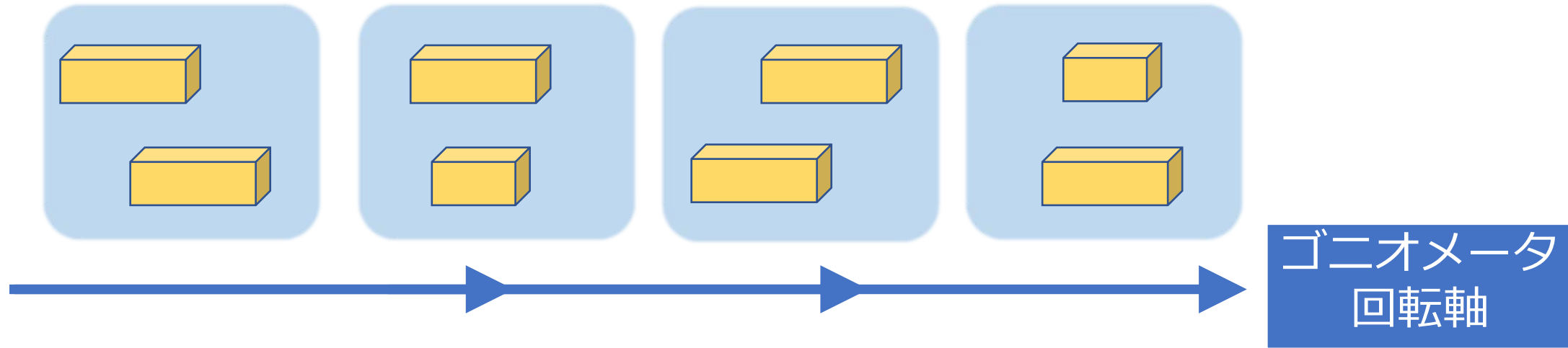


低線量走査の結果
(スコアしきい値で二値化)



回転軸方向に重なっている
結晶間の縦最短距離を計算

結晶が「縦に」かぶるということ

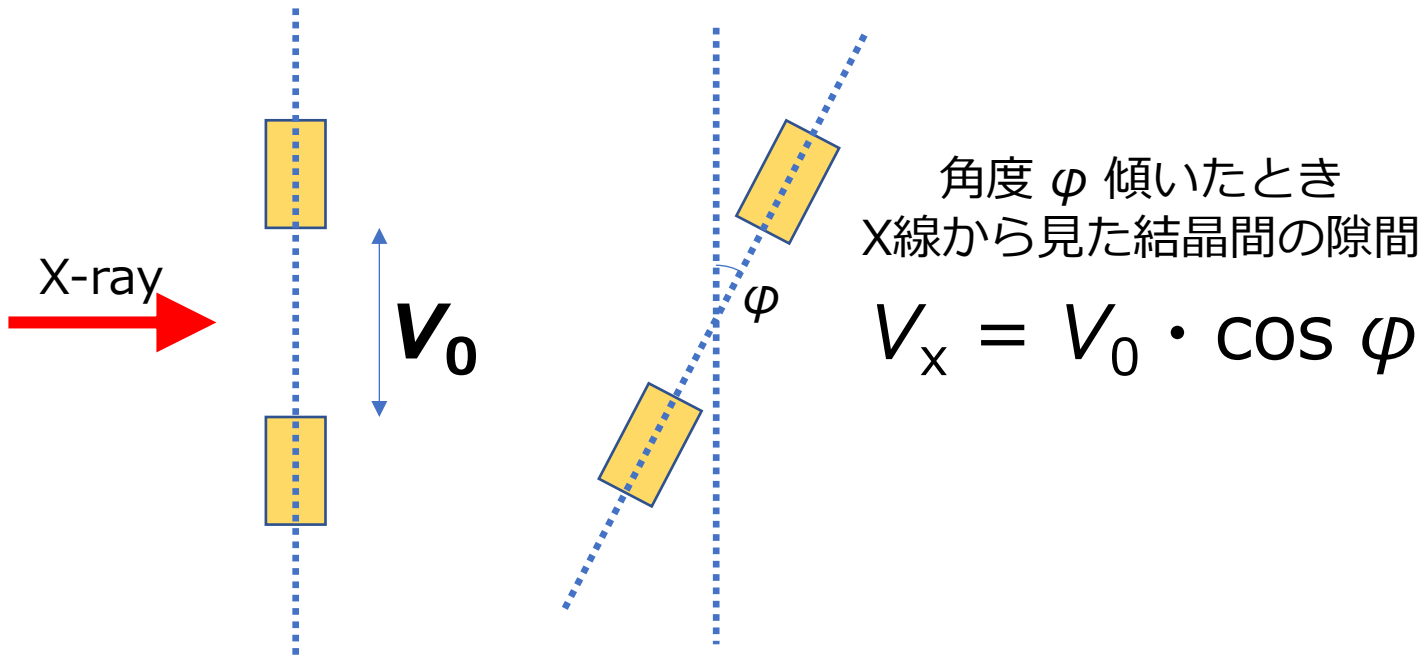


① Face angleのときは分離できる

② 回転すると分離できなくなる

かぶり結晶からのどの程度データを撮るか？

ループ正面から見た
結晶間の縦隙間



角度 φ 傾いたとき
X線から見た結晶間の隙間
 $V_x = V_0 \cdot \cos \varphi$

例) BL32XUの場合

縦ビームサイズ **15 μm** での測定

$$V_0 \cdot \cos \varphi = 2 \times 15$$

V_0 はスキャンの結果から計測できる

例) $V_0 = 50 \mu\text{m}$ の場合

$$\Phi \sim 53^\circ$$

(現状) ビームサイズの倍程度隙間があいていれば良い

$$V_0 \cdot \cos \varphi > 2V_{beam}$$

50 μm 離れていれば
106° 分のデータを取得可能

※結晶の厚みは考慮していない

どの結晶からどの程度データを撮るか？

結晶間の隙間を評価→最大測定角度を計算して以下の分類

Oscillation range	Crystal size	Mode	Centering	Special
360° (no-overlaps)	$\geq 40 \mu\text{m}$	Helical	Yes	-
	$< 40 \mu\text{m}$	Single	Yes	Face + 90 deg.
$< 180^\circ$	$\geq 40 \mu\text{m}$	Helical	$\pm (\text{Osc.}/2)$	-
	$< 40 \mu\text{m}$	Single	$\pm (\text{Osc.}/2)$	
$< 50^\circ$	$\geq 40 \mu\text{m}$	Helical	No	
	20~40 μm	Single	No	
-	$< 20 \mu\text{m}$	Multi	No	10° dataset

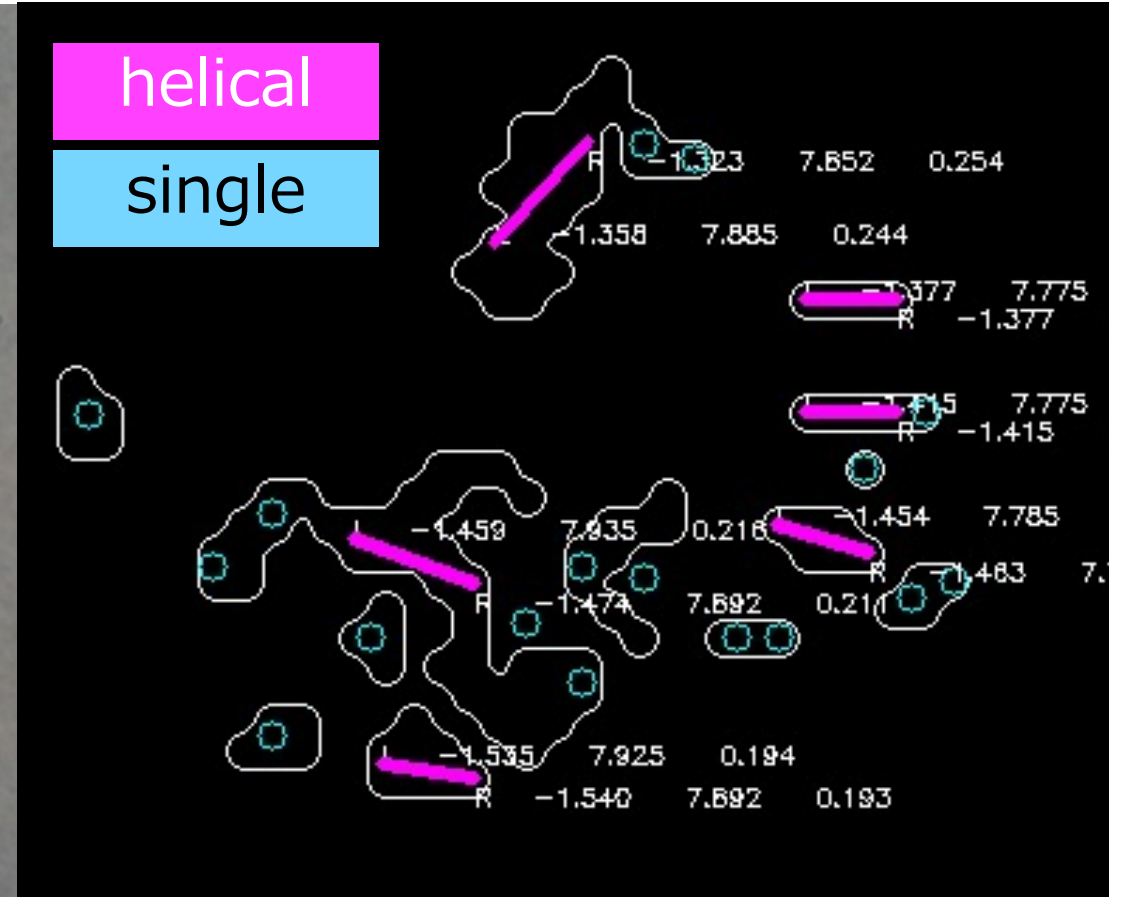
撮れる角度 & 結晶サイズ → 測定モード自動決定

HITO .vs. LCP結晶(膜タンパク質)

ある企業の方の測定@BL45XU (2021年10月吉日)



拾う前のLCP結晶の様子



HITOのモード設定

HITO .vs. LCP結晶 (収集したデータ)

PIN	Osc. range
Helical(no-align)	40° x 5
Helical part(align)	50° x 1
Multi	10° x 6
Single(full)	30° x 4
Single(no-align)	20° x 3
Single(align)	70° x 1, 50° x 1

一つのループから 610° 分のデータを収集

ある企業の方の
測定後のご感想

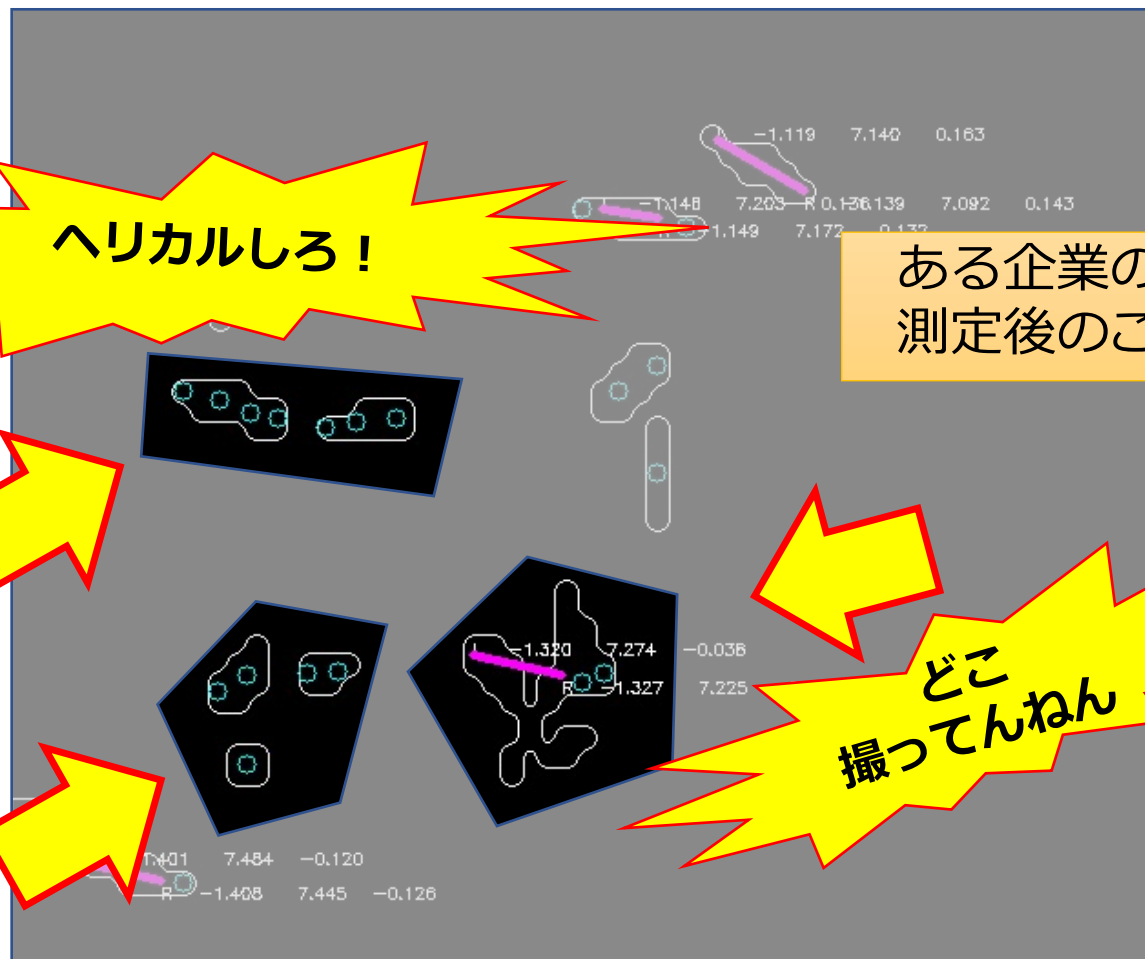
同数ループ約 8 倍の冗長度(c.f. SWSX)

HITO改善したい点

測定ベクトル設定に問題 (結晶の連続領域の認識に弱い)



どこ撮ってんねん



ある企業の方の測定後のご要望

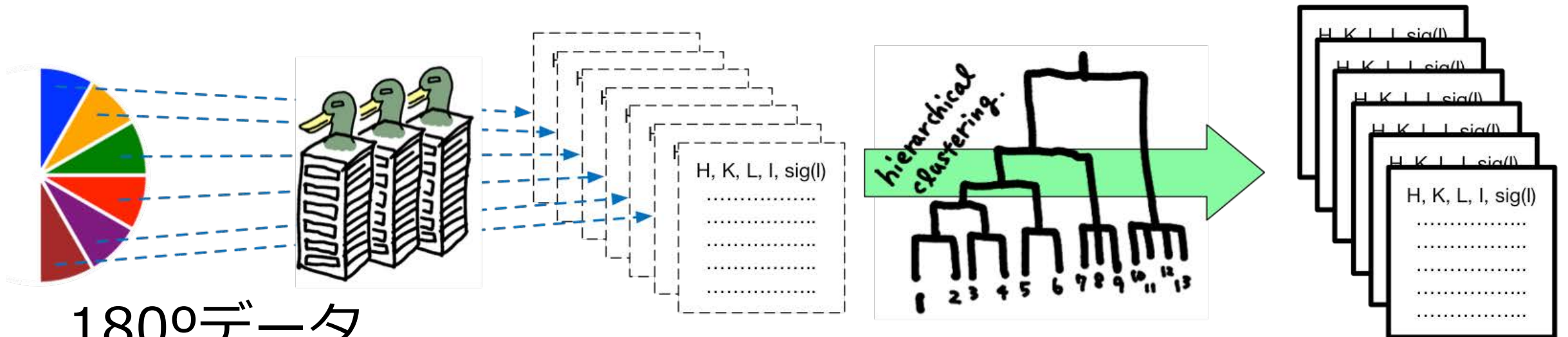
どこ撮ってんねん

(要) さらに測定ベクトル設定の高度化

途中ビームが外れていたら？

そんなときは**BUTTAGIRI処理**です

1 結晶を複数結晶とみなし個々のデータ処理→マージ



180°データ

= 30° x 6 wedges

異常データ除去や階層的クラスタリングで
より良い部分だけを抽出してマージ

手動測定や単点露光 < ヘリカルデータ収集 x 自動測定 ?

HITO試験運転中

ぜひ使ってみてご感想を！

HITO noyouni sokuteisuru system

ヘリカル+ BUTTAGIRIは
SPring-8ではデフォルト利用
(構造多型を捉えたい場合にも重要)