

PF 構造生物学ビームラインの高度化と構造解析の自動化の推進

構造生物学研究センターでは、挿入光源ビームライン(PF-AR-NW12A、PF-BL5A、PF-BL17A)、偏向電磁石光源のPF-BL6A の運用を行い、構造生物学ビームライン全体の効率的な運用、ユーザーインターフェースの向上、実験の自動化、および高難度タンパク質の構造解析に向けた技術開発を進めている。新ビームライン建設も並行して進んでおり、製薬会社による受託研究用ビームラインAR-NE3Aの具体的な建設作業が開始されている(2009年4月からの運用開始)。一方で、本年度から5年間の国家プロジェクト「ターゲットタンパク研究プログラム」が始まり、そのプロジェクト下でBL-1Aに新しいビームラインの建設が計画されている。新BL-1Aはshort-gap アンジュレータを光源とし4-5keVの低エネルギービームが利用可能な微小集光ビームラインであり、硫黄などの軽原子を用いたSAD(単波長異常分散法)による構造解析を主眼に置いている。利用開始は2010年4月となる予定である。

BL17Aでは、微小サンプル結晶を用いた実験で成果が上がりつつある。本ビームラインは低エネルギー(約6 keV)ビームにも強度が最適化されており、サンプル中に含まれる軽原子の異常分散を利用した構造解析も積極的に行われている。本年度はサンプル交換ロボットの設置および運用、高速X線検出器の導入が行われた。課題であったマイクロビームの位置・強度変動の抑制に関しても、光学系の振動対策やビーム位置フィードバックシステムによりほぼ解決された。

AR-NE3Aは、立体構造を基にした薬剤設計に特化したハイスループットビームラインとして、アステラス製薬株式会社からの受託研究により設計・開発中の新ビームラインである。2009年4月から運用を開始する予定であり、ビームタイムの一部はアステラス製薬株式会社により専有的に利用され、残りのビームタイムを全国共同利用実験に公開する。新NE3Aの光学系は、現在PF-ARで稼働しているハイスループットビームラインNW12Aと同様の構成で、上流から平行化ミラー、液体窒素冷却方式の二結晶分光器、集光ミラーを配置している。集光ミラーの集光率を上げることで、サンプル位置での発散角は大きくなるものの、ビーム強度はNW12A以上となることが期待される。2008年3月より旧NE3Aの解体を含め建設作業が始まった。

その他のトピックスとしては以下のとおり。

- 1) 実験の自動化と高速化を目的としてサンプル交換ロボットシステム(米国SSRL型の改良)の本格的な運用を行っている。サンプル交換時間の短縮化を目的としたダブルトンクシステムの運用もBL-17Aで開始した。
- 2) 制御ソフトウェアのソースコードの共有化によるコントローラとの通信の高速化と、ソフトウェア安定性・保守性の向上とを実現した。
- 3) 直感的で使いやすい共通GUIの開発を引き続き行っている。
- 4) 全自動スケジューリング実験を目的として開発中のデータベース型統合ソフトウェアの試験運用を行っている。所外から実験進捗状況をウェブ経由でモニターできるソフトウェアの開発も行い一部のユーザーに公開した。