

## PF 構造生物ビームラインにおける全自動回折データ収集の実現への取り組み

平木雅彦、山田悠介、松垣直宏、五十嵐教之、若槻壮市  
(高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 放射光科学研究施設)

PF 構造生物学研究センターでは、BL-5A、BL-6A、BL-17A および AR-NW12A の 4 本のビームラインの運用を行っており、さらに 2009 年 4 月からは AR-NE3A のユーザー利用を開始する予定である。我々は、特に BL-5A、AR-NW12A および AR-NE3A の 3 本のビームラインをハイスループット構造解析ビームラインとして位置付けており、高効率回折データ収集に指向したビームラインの開発を行っている。

挿入光源ビームライン (BL-5A、BL-17A、AR-NW12A および AR-NE3A) においては、実験ハッチ外から遠隔操作でタンパク質結晶を交換することができるサンプル交換ロボット PAM (PF Automated Mounting system) を設置・運用している。PAM は、SSRL (Stanford Synchrotron Radiation Laboratory) で開発された結晶交換ロボット SAM (SSRL Automated Mounting system) をベースに PF 構造生物学ビームラインに合わせて設計されているが、一度に 2 個の結晶マウント用ピンを持つことができるダブルトングを搭載している点が SAM と異なる。PAM は単に実験ハッチの開閉を行うことなくサンプルを交換できるというだけでなく、ハイスループット構造解析ビームラインにおいては全自動回折データ収集の実現のためには必須のアイテムである。2006 年秋から BL-5A と AR-NW12A において、2007 年春から、BL-17A において PAM のユーザー利用を開始し、現在までに約 6,500 個のサンプルの交換を行った。

効率良く回折データ収集を行う方法の一つに全自動回折データ収集が挙げられる。これは、あらかじめセットされたサンプルを用いて無人でデータ収集を行うことで省力化を実現し、研究全体の効率を上げることを目的とした方法である。全自動データ収集を実現するためには、サンプルの交換、結晶のセンタリング、データ収集を連続して行う必要がある。その最初の段階として、結晶を保持しているループのセンタリングを行い、あらかじめ決められた実験条件に従ってデータ収集を行うシステムの開発を行った。

今後は、X 線による回折像に基づくセンタリング法を搭載することで、より確実に結晶に X 線を照射できるようにする予定である。また、データ収集の際の条件決定を行ったり、構造解析には不十分なデータ収集を中止したりするための収集データの評価システムの実装に向け、開発を進めている。