

## 創薬に向けた蛋白質結晶構造解析ビームライン PF-AR NE3A

山田 悠介、菊地 貴司、森 丈晴、豊島 章雄、岸本 俊二、五十嵐 教之、  
松垣 直宏、平木 雅彦、川崎 政人、加藤 龍一、若槻 壮市  
(物質構造科学研究所・構造生物学研究センター)

立体構造を基にした薬剤設計(**Structure Based Drug Design**)は新薬開発における一つの手段として非常に有効である。近年では結晶構造解析手法の進歩に伴い、標的となるタンパク質に対し、あらゆる化合物との複合体の構造解析を行い比較することで、化合物によるタンパク質の活性阻害機構(または促進機構)を総括的に理解することが可能になってきた。このような場合には、迅速に精確な回折データの収集を行うことが第一であり、大強度の X 線ビームを安定に供給できる放射光ビームラインの利用が必須となる。

本ビームラインは、PF-AR に設置されたアンジュレータ NE3 からの強力な X 線を利用し、平行化ミラー—二結晶分光器—集光ミラーという光学系を用いて実験に必要な単色 X 線ビームを生成する。集光率を高めた設計のため、レイトレースの結果ではサンプル位置でのビーム強度は BL-5A や NW12A を上回ることが期待されている。実験ハッチには新型 CCD 検出器や自動結晶交換ロボットを導入するほか、ソフトウェアの整備を行い、サンプル数の増加に対しても混乱なく、効率よくデータ収集が可能な環境を整備する。

2008 年 3 月から新ビームライン建設の現場作業を開始し、2008 年 10 月までに旧ビームラインコンポーネントの撤去、基幹部の改造、新ビームラインの建設を行った。10 月の光導入後、光学系の調整を進め、サンプル位置でのビーム強度が BL-5A や NW12A を上回っていることが確認された。現在は回折実験のコミッションングとして全自動のデータ収集・処理システムが整備しているところである。

本ビームラインはアステラス製薬株式会社からの受託研究によって建設されたもので、2009 年 4 月より本格利用を開始する。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は高エネ機構により共同利用、施設利用に供される。