

蛋白質結晶構造解析ビームラインにおける自動測定

山田悠介、平木雅彦、松垣直宏、Leonard M.G. Chavas、
五十嵐教之、若槻壮市・KEK-PF

近年急速な進歩を遂げてきた蛋白質の X 線結晶構造解析技術の中で、放射光ビームラインでの回折データ測定技術は、成熟期を迎えつつある。測定に必要な各実験装置の制御は高度に自動化され、実験者がビームラインで行う回折データ取得のための作業は極めてルーチン化されている。このようななか、回折実験の自動化に対する要求は日増しに強くなっている。特に、ターゲットとする蛋白質の結晶に様々な化合物を浸漬させるなどして、複合体の構造解析を行う、創薬研究においてはルーチン化された回折データ測定を何十、何百という数で行う必要があるために、自動測定の実現が待ち望まれていた。PF では 2009 年 4 月より稼動を始めた大規模な創薬研究のためのビームライン AR-NE3A の建設と同時に、自動測定システムの開発を進め、現在一部ユーザーに使用されている。

蛋白質結晶の回折実験において放射光ビームラインで行う作業は次の5つ、(1)回折計上の結晶の交換、(2)結晶のセンタリング、(3)実験条件の検討、(4)回折データセット収集、(5)回折データセット処理、に大別される。今回開発した自動測定システムでは、結晶交換ロボット PAM による自動結晶交換、ループ形状の画像認識による自動センタリング、あらかじめ入力された実験条件・スケジュールに従った自動回折データ収集、そして既存データ処理ソフトウェア用スクリプトの自動作成・実行を組み合わせることで、これらの作業を自動化している。実験者は PAM に用意したサンプルをセットしたあと、スケジュールを実験制御ソフトウェアに読み込ませ、自動実験を開始すれば、一切手を介することなく全試料について回折実験を行うことが可能である。本発表ではこのシステムの概要について説明するとともに、ポスター発表では本システムの一般的な実験への適応の可能性について議論を行う。