

# PF 構造生物学ビームラインにおける回折データセットの収集と解析の自動化

## Automated data collection and processing from macromolecular crystals at PF MX beamlines

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-放射光

タンパク質をはじめとする生体高分子の X 線結晶構造解析は、近年急速な進歩を遂げ、より短時間でより簡便に構造決定を行うことが出来るようになってきた。このためにより高度な解析技術に対する要求が日増しに増えてきている。

FBDD(Fragment Based Drug Discovery)に代表される創薬研究での利用では、1 つのタンパク質に対して多数の低分子化合物との複合体構造を網羅的に解析するために、膨大な数の結晶から回折データが取得される。また、微小な結晶からの構造解析を行うにあたっては、高輝度の X 線を体積の小さな結晶に照射するために放射線損傷の影響が甚大で、これまでのように 1 つの結晶から 1 つの回折データセットを収集することが不可能となってきた。この場合、複数の結晶より回折データセットを収集し、それらを足し合わせることで単一のデータセットを作り上げることが必要不可欠となってくる。結晶の X 線に対する寿命や、同型性等の問題から、このような解析に用いる結晶の数が数百を超えるようになることは容易に想像が出来る。

このような膨大な数の結晶を用いた解析を行うためには、各回折データを系統的に取り扱い処理するシステムと、それらの結果の相互関係を明らかにし、次の解析へとつなげることが出来るようなデータベースの構築が必須である。さらに、膨大な数の実験をおこなう研究者にかかる負担を軽減するために、データ処理は高度に自動化されている必要がある。

PF 構造生物学ビームラインでは、このようなデータ処理の自動化を遂行すべく、RCM システムというミドルウェアを導入し、ビームライン上で行われる実験条件、結果の取り込みから、データ処理、その結果の取り込み、そしてそれらの閲覧にいたるまでを行えるシステムを開発している。本発表ではこのシステムの概要と応用例について紹介する。