

自動化によって失われたものは？ What did we lose by automation in protein crystallography?

中川敦史
阪大-蛋白研

放射光の発達と時期を同じくして蛋白質結晶学は目覚ましく進歩してきた。Protein Data Bank への登録数は、放射光の利用が始まった 1980 年代には年間わずか数 10 件程度であったが、2017 年には年間 10000 件を超えるまでになっている。蛋白質結晶学の進歩は、放射光の発展だけでなく、遺伝子組換え技術やコンピュータの進歩、あるいは結晶化技術の蓄積など、様々な技術がほぼ同時期に急激に進歩したことによるものである。特に放射光を利用した回折強度データ収集からデータ処理、構造解析計算に至るいわゆる「結晶学」の進歩は、「結晶学」という学問を「結晶構造解析」という技術に変えてきたと言える。そのような進歩の中で、様々なステップが自動化され、「結晶学」を知らなくても、「ボタンを押すだけで構造解析」を行うことができる時代となっている。自動化を含む結晶学のこのような技術の進歩なしには、現在の構造生物学の発展はありえなかったことは言うまでもない。演者が蛋白質結晶学を学び始めた 1980 年代半ばでも、ミオグロビン／ヘモグロビンの構造解析に成功してから 20 年以上経過していたにも関わらず、例えば構造解析のプログラムで扱える空間群が限られていて、それまでに解析された蛋白質結晶には見られなかった空間群の結晶が得られた場合に、プログラムを修正したり新たなサブルーチンを追加したりしなければならないなどということは普通に見られた。

「自動化」が進み、ほとんどの場合「ボタンを押すだけで構造解析」を行うことができる現在では、データ処理や解析のプログラムの中身を見る機会はほとんどないであろう。このような「ブラックボックス化」は、他の研究分野にも見られることであり、多くの研究分野で測定装置や解析ソフトを自作することもほとんどなく研究を進めることができるようになってきている。

しかし、蛋白質結晶学のすべての過程で「完全全自動化」が完成している訳ではなく、まだまだ解決しなければならない問題も多く、開発の余地が残っている。「結晶構造解析の自動化」が進むことで、これら諸問題を解決していくために必要な「結晶学」の知識を得る機会が減り、また「結晶学」を専門とする若手研究者の活躍の場が減ってきている現状をいかにして解決いくかが喫緊の問題であると考えている、