

「PF 及び SAXS の自動化状況と将来計画」 PF タンパク質結晶構造解析ビームラインでの全自動測定システム

Fully automated data collection system of the macromolecular crystallography beamlines at the Photon Factory

山田悠介・KEK IMSS SBRC

Photon Factory にある 5 本のタンパク質結晶構造解析ビームラインでは回折実験の高度化や高効率化を進めている。その中でも回折データ測定の全自動化は重要な開発項目として位置づけられている。回折データの全自動測定では結晶交換ロボットを用いた試料交換から、画像認識と X 線スキャンを用いた試料のセンタリングと回折像の評価、そしてデータセット収集までを人の手を介さずに行う。さらには、得られたデータセットは自動的に解析クラスタによって処理され、後の構造解析に必要な回折強度リストとともに、得られた統計値からデータセットの精度までを評価することができる。そして現在は構造解析の自動化まで取り組んでいる。

2018 年 5 月の運転からは、この全自動測定システムを用いた新しいビームライン利用制度を開始するが、これをきっかけにより効率的な実験スタイルを提案していきたい。

SAXS の自動化状況と将来計画 Future Prospects and Current Status for Automatic Measurement and Analysis in SAXS

清水伸隆・KEK-PF

X 線小角散乱 (SAXS) は、生命科学から材料科学まで幅広い分野で構造解析に活用される分野である。生命科学では、特に生体高分子の X 線溶液散乱 (BioSAXS) が近年活発に利用されるようになってきている。そのため新規参入のユーザーも多く、PF では初心者でも測定や解析を容易に行える様に使いやすいソフトウェアを開発し提供している。一方、材料科学に関しては、測定の効率化・全自動化に重きをおいたハード・ソフトの開発を行っている。例えば、測定エネルギーを変調しながら試料に関係する複数の自動ステージを変動させ、さらに複数の検出器も同期制御しながら全自動測定を行うシステムなども整備されている。発表では、現在の開発状況を紹介しつつ、今後の手法の発展と共に必要となるであろうハード・ソフト面からの自動化開発計画に関して紹介する。