放射光ビームラインにおける自動データ収集の現在と将来

山本 雅貴、平田 邦生 理研 SPring-8 センター

生命機能を実現するタンパク質は複雑かつ合理的な3次元立体構造を持ち,現在その立体構造は主にX線結晶構造解析により解析されている.現在この生命科学の分子論的基盤を構築するタンパク質の構造研究において,放射光は必要不可欠なツールとして広く認知されている.放射光による結晶構造解析では、近年その高精度回折データ収集を武器にさかんに「解析対象の拡大」および「解析の迅速・簡便化」が進められた.今まで解析できなかった高品質な結晶を得ることが困難な膜タンパク質など高難度サンプルの解析では、微小結晶に対応したマイクロビームや高速検出器を活用した新規測定法など計測技術の発展が不可欠であった。また、解析の迅速・簡便化が要求される構造ゲノム研究や創薬研究などに向けては膨大なサンプルを迅速に構造決定するため、サンプルチェンジャーやビームライン制御自動化による回折データ収集の自動化・高効率化が進んだ.さらに現在では、これらを併せ持つ高難度サンプルを迅速かつ簡便に解析するための自動構造解析パイプラインの整備が進められている。その結果、タンパク質立体構造の網羅的解析に貢献するのみならず、タンパク質構造研究の技術的水準を大きく高め、放射光結晶構造解析をタンパク質立体構造研究の汎用的なツールに近づけることとなった.

本発表では、放射光ビームラインでのデータ収集の自動化・高効率化の現状と展望を要約するとともに、現在 SPring-8 で進めている自動構造解析パイプライン ZOO を紹介する。