

# SEC-SAXS@Photon Factory

清水 伸隆

高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・放射光実験施設

放射光実験施設 Photon Factory (PF) では、BL-6A、BL-10C、BL-15A2 の 3 本のビームラインが小角 X 線散乱 (SAXS) 実験に活用されている[1]。いずれのビームラインも近年高度化を行っており、BL-6A は 2013 年度末に実験系を更新し、BL-10C は同じく 2013 年度末に光学系と実験系を刷新し、BL-15A2 は 2014 年に光源を短周期アンジュレータに更新して新設し、2015 年度より共用を開始した。SAXS はハードマテリアルから生体分子を含むソフトマテリアルまで多様な試料を対象とした構造解析に幅広く活用される手法であるが、このようなビームライン自体の高度化に合わせて、各試料分野それぞれに対応した実験環境の高度化、さらには自動測定による高スループット化などを進めている。

2000 年代中頃より、生体高分子の溶液試料を対象とする SAXS 解析を BioSAXS と呼ぶようになってきている。これはドイツの放射光施設 PETRAIII の Svergun 博士らが開発した解析ソフトウェア[2]を用いて SAXS データを *Ab initio* に解析することによって、溶液中の分子のおおよその形 (概形) を解析できるようになったことに起因する。また、PDB 座標から理論 SAXS データを計算することも可能になり、実験データと原子分解能構造由来の理論データを直接比較できるようになるなど、大きな発展を遂げてきている。一方、解析においては、試料溶液中における X 線照射範囲の空間的にも時間的にも平均情報が得られるため、溶液中の標的分子が均一に存在 (単分散) していることが必須である。しかしながら、複合体等の難易度の高い状態の解析では、標的以外の成分も混在する多分散状態になっていることは多く、この手法が活用され標的の難易度が増すほどに、解析自体の難易度も増してきていた。

スイスの Paul Scherrer 研究所で開発された大面積高速 2 次元ピクセル検出器 PILATUS が 2005 年に放射光施設 SLS のタンパク質結晶構造解析ビームラインで実用化され、2010 年頃には世界中の SAXS ビームラインにも導入された。PILATUS 検出器は数ミリ秒程度の高速読出しによって、ほぼデッドタイム無く連続的に露光を行なうことが可能である。そこで、HPLC 装置を用いたゲル濾過 (Size-Exclusion Chromatography) によって試料溶液を単離・生成しながら連続的に SAXS 測定を行なう、すなわち SEC-SAXS が 2010 年以降に世界の SAXS ビームラインに導入され、多分散状態にある試料の高精度解析が可能となった。国内においては、2014 年頃から PF、SPring-8 の SAXS ビームラインで PILATUS 検出器の利用が開始され、PF では 2014 年度より SEC-SAXS システムの導入を開始し、2015 年度から共同利用へ供出した。現在では、PF の一般課題と創薬等プラットフォーム (BINDS) の課題のほとんどで SEC-SAXS 実験が実施されている。また、我々自身も SEC-SAXS データの自動解析を行なうためのソフトウェア *Serial Analyzer*[3]の開発も進めつつ、多くの共同研究成果を公開している。本講演では、PF における SEC-SAXS 測定解析の現状を紹介しつつ、SEC-SAXS 解析の問題点、さらにはそれに基づく *Serial Analyzer* の開発の経緯、現状等に関して幅広く紹介する。

[1] <http://pfwww.kek.jp/saxs/>

[2] <https://www.embl-hamburg.de/biosaxs/software.html>

[3] <http://pfwww.kek.jp/saxs/SerialAnalyzer.html>

