

タンパク質結晶回折データ測定の全自動化

Automation of data collection in macromolecular crystallography

松垣直宏¹、山田悠介¹、引田理英¹、篠田晃¹、平木雅彦²、千田俊哉¹

¹ KEK-PF SBRC、² KEK MEC

タンパク質結晶構造解析(MX)ビームラインにおける実験の主目的は、構造解析に必要な回折データ測定である。そこでは、あらかじめ整備された測定環境において、試料結晶のセットを行い、ビームを照射し回折像を得る、という操作が繰り返される。特殊環境下での測定やパラメータや測定方針を注意深く選ぶ必要がある測定もあるが、100K 付近の低温下、既定の条件パラメータによる測定で十分な場合が多い。

MX ビームラインにおける測定の自動化は、このような実験の単調な性質に着目し、段階的に進められてきた。ユーザーを単純作業から解放しオペレーションミスが減らすだけでなく、ビームの有効利用という観点からも重要であった。特に、光源性能の向上や検出器の高速化などによる測定時間の短縮とともに、試料の交換やビーム位置へのアライメント時間を減らす必要性が増大した。試料交換に関してはこの分野でサンプルホルダーがほぼ標準化されていたことが大きく、サンプルチェンジャーの導入と開発を加速した。試料のビーム位置への自動アライメントは、高速 X 線検出器を利用した回折スキャンにより、実用的な時間・精度で行うことが可能となった。各段階の実験操作が自動化されると、それらをスケジューリングして実行させることで、測定の全自動化が実現される。現在では 5 本の MX ビームラインすべてにおいて全自動測定が可能である。

ユーザーの多くは、自らの実験を全自動測定で行うことについて、まず保守的である。これまで、ラピッドアクセス可能な全自動測定用ビームタイムを設けるなど利用促進に努めたが、なかなか進まなかった。ところが、新型コロナウイルス感染症拡大の影響で状況は一変し、多くのユーザーが全自動測定、あるいは自動化技術を使ったりリモートアクセス実験へと切り替えた(切り替えざるを得なくなった)。一方で施設側では、大量に送付される試料や測定データのハンドリングが大きな負担となった。ビームタイムの配分方法を含め運用体制を見直し、輸送管理用のソフトウェアを整備するなどすることで、円滑かつ間違えのない対応を目指している。

今後、全自動測定は MX ビームラインにおける利用の主流となることが見込まれる。測定パラメータの自動最適化や、より複雑な測定に対応するなど高度化していく一方、測定データの自動処理や解析の自動化も進める。多くユーザーからの測定を効率的に行うためには、より柔軟なビームタイム配分も必要となってくるだろう。