



PF-AR NW12ビームラインにおける構造生物学への取り組み

- 松垣直宏** 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 フォトンファクトリー 構造生物学研究センター 〒305-0801 茨城県つくば市大穂 1-1
- 五十嵐教之** 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 フォトンファクトリー 構造生物学研究センター 〒305-0801 茨城県つくば市大穂 1-1
- 鈴木 守** 大阪大学蛋白質研究所附属プロテオミクス総合センター超分子構造解析学研究室 〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 3-2
- 平木雅彦** 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 フォトンファクトリー 構造生物学研究センター 〒305-0801 茨城県つくば市大穂 1-1
- 若槻壮市** 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 フォトンファクトリー 構造生物学研究センター 〒305-0801 茨城県つくば市大穂 1-1

要旨

PF-AR NW12は、ハイスループットなタンパク質結晶回折実験、特にMAD（多波長異常分散）実験を効率的におこなうことを主眼にデザインされたビームラインである。アンジュレータ光源からの高フラックスなビームと、CCD検出器を用いた高速データ収集システムにより、実験時間が大幅に短縮されている。ビームは広範囲のエネルギー範囲で定位置出射調整され、波長変更に伴う再アライメントなしで効率的なMAD実験が可能である。微小結晶を用いたデータ測定や、微小振動角での回折実験が可能となるように、実験ステーション内に高精度に設計された回折計を備えている。サンプル交換以外の実験操作は全て遠隔から可能で、ロボットを導入した自動測定に対応している。PFの構造生物学ビームライン全体および構造生物学センターの展望を交え、PF-AR NW12ビームラインの現状と開発状況を述べる。

1. はじめに

ここ10年ばかりの間に各国で稼動が始まった第三世代放射光実験施設から得られるX線の強度、平行性、エネルギーの安定性、検出器等の格段に進歩により、タンパク質X線結晶構造解析が迅速かつ高分解能で行われるようになった。これらの技術革新により超分子複合体や微小結晶の構造解析が可能となりつつあり、構造生物学における放射光の重要性はますます顕著になってきている。さらに、近年、世界各国で数多くのタンパク質構造を系統的・網羅的に解析する構造プロテオミクス（もしくは構造ゲノミクス）プロジェクトが進行しつつあり、タンパク質分子の立体構造の情報を大量かつ迅速に得たいという要望が非常に強くなってきた。我が国では、平成14年度に国家プロジェクト「タンパク3000」が発足し、5年間で3000種類のタンパク質の立体構造決定が進行中である。高エネルギー

加速器研究機構 物質構造科学研究所 フォトンファクトリー 構造生物学研究センター（SBRC）では、当該プロジェクトの中核研究機関のひとつとして6大学、3研究所と「翻訳後修飾と輸送」をターゲットとした研究拠点ネットワークを構成し構造生物学研究を進めるとともに、これらの構造プロテオミクスプロジェクトを円滑に遂行するための基盤整備、超分子複合体、超微小結晶構造解析など次世代放射光X線構造生物学のための方法論・技術開発を進めている。X線結晶構造解析による立体構造決定の過程はパイプラインに例えることができ、試料の発現精製、結晶化、回折データ測定、およびデータ解析といったプロセスが、流れに沿って行われる。我々は各プロセスを高度化・自動化し、プロセス間をスムーズに連携することにより、構造解析のハイスループット化によるタンパク質結晶構造研究の量と質の充実を目指している。

Table 1. Beam lines for protein crystallography at the Photon Factory

Beam line	BL-6A	BL-18B	NW12	BL-5	BL-6B	BL-6C
Ring	PF	PF	PF-AR	PF	PF	PF
Source	BM	BM	undulator	MPW	BM	BM
X-ray detector (TYPE)	ADSC Q4R (CCD)	ADSC Q4R (CCD)	ADSC Q210 (CCD)	ADSC Q315 (CCD)	RIGAKU RAXIS IV ⁺⁺ (IP)	GALAXY (IP)

BM: bending magnet, MPW: multipole wiggler

物質構造科学研究所には2つの放射光専用リング、2.5 GeV Photon Factory (PF) リング、および、6.5 GeV Photon Factory Advanced Ring (PF-AR) があり、2004年3月現在、計6本のタンパク質結晶解析専用ビームラインが存在する (Table 1)。このうち、BL-6A, BL-18B, NW12, および建設中のBL-5において、SBRCによるビームラインの高度化、ユーザーインターフェースの改良・共通化が進行中である。

2. ビームライン NW12

2.1 概要

2000年および2001年度に行われたPF-AR高度化¹⁾の一環として、PF-AR北西実験棟の建設および構造生物学専用ビームラインの建設が行われた。NW12というビームライン名は、PF-ARの北西 (North West) 第12セクションの光源を使用することに由来する。2001年度にビームラインのデザイン及び主要な光学素子の仕様を決定し、入札作業を行った。2002年3月に北西実験棟が竣工し、それにタイミングを合わせて北西棟地下実験ホールにビームラインコンポーネントの設置を開始した。2002年9月に光導入試験が行われ、放射線漏洩試験、光学素子調整、内外のユーザーのテスト実験等を経て、2003年5月より共同利用実験を開始した。

ビームラインへの性能に関する要求は、ユーザーの行う実験によって様々であるが、NW12における光学系および実験ステーションのデザインは、MAD (多波長異常分散) データ測定を迅速に行うことに最適化されている。具体的には、高強度のビーム及び高速データ読み出し可能な検出

器による測定時間の短縮、及び、エネルギー分解能の高いX線の簡便で迅速な波長変更を重視した。微小結晶の測定が可能のように、実験ステーションでは高精度の回折計を備えている。また、将来、ロボットを用いた全自動データ測定に容易に移行できるよう、柔軟なシステム設計を行った。

Fig. 1 にビームライン全体の平面図を示す。光源は、PFの山本らが開発したビームラインPF-AR NW2の挿入光源と同タイプの、テーパモード付き真空封止型アンジュレータである²⁾。周期長40 mm、周期数95で、MAD実験で最も頻繁に用いられるSe原子の吸収端の波長 (約0.978 Å) 近傍において三次光のフラックス密度が最大になるよう設計されている。フロントエンドはmain beam shutter (MBS)、四象限スリット、ベリリウム窓などから構成される。ここでビームは横0.3 mrad、縦0.1 mradのサイズに整形され、最初の光学素子である平板湾曲型ミラー (光源から23.5 m地点) に入射する。このミラーはシリコン単結晶をロジウムコートしたもので、縦発散のあるビームを平行化すると同時に、ビームを入射角3.5 mradで上方向に全反射させることで20 KeV以上の高調波を除去する。25.4 m地点には液体窒素冷却方式の二結晶分光器が設置されている。そこで単色化されたビームは27.0 m地点に設置された擬似トロイダル型の縦横集光用ミラーにより、入射角3.5 mradで下方向に全反射され、水平に実験ステーションに導入される。集光ミラーの設置位置はビームのフォーカスと平行性のバランスを考慮し、38 m地点のサンプル位置に約2:1集光するよう決定された。

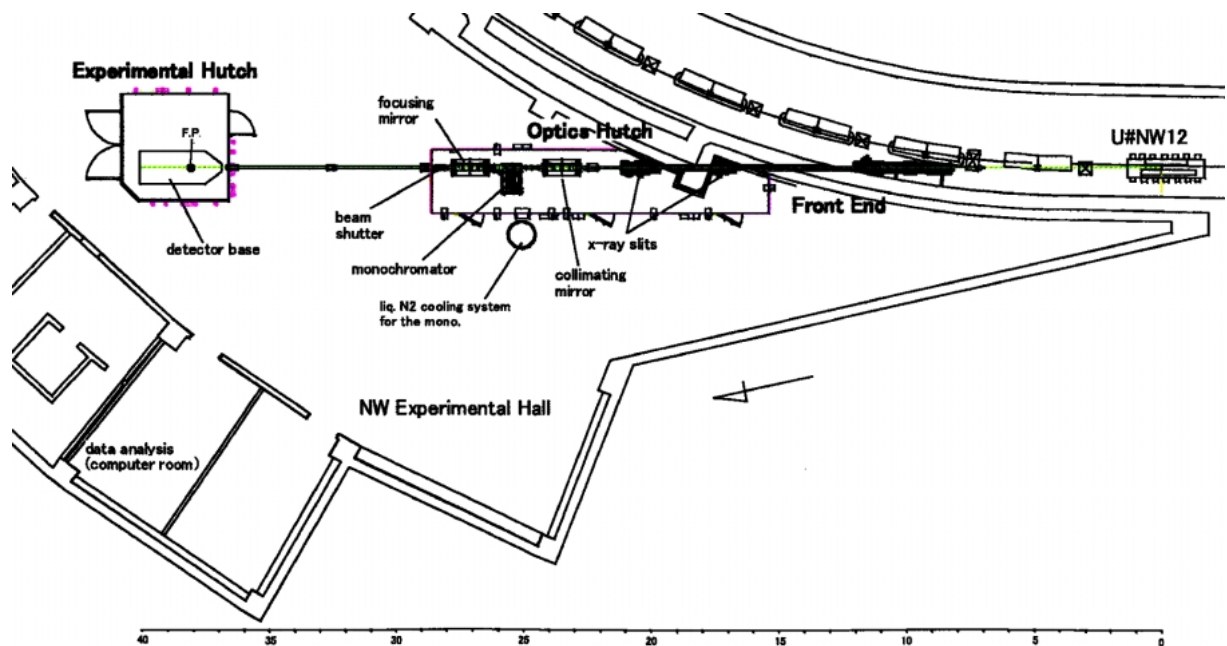


Figure 1. Plan view of the beam line PF-AR NW12.

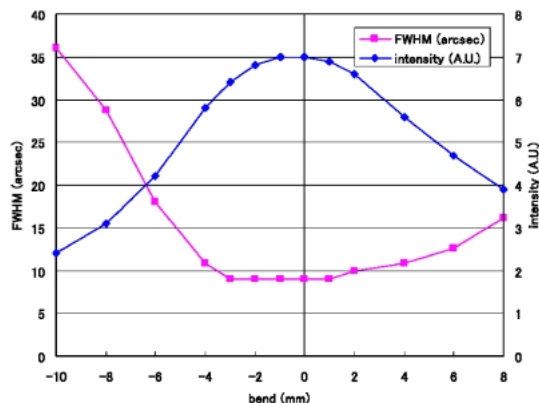


Figure 2. Adjustment of the bend of the collimation mirror with the analyzer crystal.

ビームのモニタリングシステムとして、カーボンワイヤを用いたビームのプロファイルモニターがフロントエンド直後に設置されている他、圧空制御の蛍光板が5箇所設置されている。

2.2 光学系の評価

2.2.1 平行化ミラー調整

分光器の上流にビームの縦発散を平行化する平板湾曲型ミラー（平行化ミラー）を導入することにより、安定した高いエネルギー分解能の単色ビームを得ることが可能となる。ミラーのベンド調整は、分光器の二結晶および実験ハッチ内に設置したSi(111)結晶（アナライザー結晶）で（+/-）配置を作り、アナライザー結晶のロックンクカーブの半値全幅（FWHM）を最小化することによって行った（Bragg角9度）。調整結果をFig. 2に示す。ロックンクカーブのFWHMを最小にするようなミラーのベンドが存在し、その点でビーム強度も最大となっている。

2.2.2 液体窒素冷却型二結晶分光器

アンジュレータからの熱負荷を効果的に取り除き、分光結晶の熱変形を抑えるため、分光結晶の冷却システムには液体窒素冷却を採用した。分光器はPF-AR NW2ビームラインに導入されているものと同タイプのものを導入した。これはPFのBL-4C, 14C, 15B, 18Cに導入されているタイプの二結晶分光器をベースにし、それを液体窒素での冷却が可能になるように改造したものである³⁾。PFの河田らによって開発されたこの分光器は、定位置出射で必要となる第二結晶の並進操作を結晶自身が持っている完全性を利用することで機械的な並進操作を除き、その代わりに長い結晶（約200 mm）を用いている事が特徴である。一方、液体窒素循環システムはSPring-8の望月らによって開発されたシステム⁴⁾導入した。このシステムは約175 W程度の冷却効率を有する冷凍機を2台液体窒素循環システム内に設置し、約330 W以内の放射パワーに対して第1結晶を液体窒素温度に保つことが出来る。

アンジュレータ光の熱負荷による第一結晶の熱変形の度

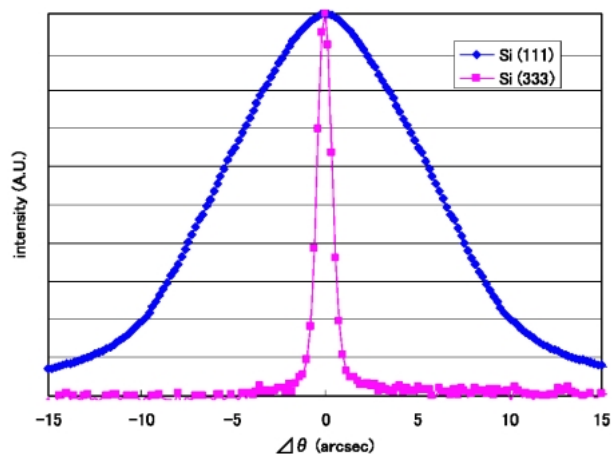


Figure 3. Rocking curve of Si(111) and Si(333) at the Bragg angle of 17.68 degree and the undulator gap of 11.57 mm. $\Delta\theta$ step is 0.2 arcsec.

合いを確認するため、Bragg角 $\theta=17.63^\circ$ において、第一結晶のロックンクカーブ測定を行った。アンジュレータのギャップは11.5 mmにセットし、3次光エネルギーをSi(111)反射（波長1.9 Å）に一致させた。ビームラインの使用条件としては、全熱負荷、熱負荷密度ともに厳しい条件での測定であったが、Si(333)による高次反射のロックンクカーブのFWHMは1.0 arcsec以下と理想的な値を示した（Fig. 3）。

2.2.3 ビームの集光

縦横集光用の擬似トロイダルミラーの傾き、面内回転およびビント量を調整することで、単色X線ビームをサンプル位置（光源から約38 m地点）に集光する。設計ではサンプル位置に集光するようミラーのサジタル半径を決めたが、実際の集光点はサンプル位置下流150 mm地点であった。12.7 keVにおける集光点でのビームサイズは半値全幅で水平方向1.2 mm、鉛直方向0.28 mmであり、レイトレスの結果とほぼ一致している。

通常の実験に用いられる0.2 mm角のビームの強度測定を行った。サンプル位置上流約1 mにある4象限スリットで0.2 mm角に絞ったビームを、サンプル位置に設置した0.2 mm径のピンホールを通し、通過して来たビームの強度をPINフォトダイオードにより測定した。リングの電流値35 mAでの各エネルギーでの光子フラックスをFig. 4に示す。12 keV近傍での強度は約 2×10^{11} photons/秒であり、偏光電磁石を光源とするビームライン（BL-6A, BL-18B）と比較して、二桁以上強い。

2.3 回折計

実験ハッチ内の回折計架台は、回折計及び検出器の位置を1 μmの精度で制御できるよう設計されている。検出器面でのダイレクトビームのポジションの精度および再現性は、検出器の稼動範囲（サンプル位置からの距離で60 mm～960 mm）で51 μm（検出器のピクセルサイズ）以下

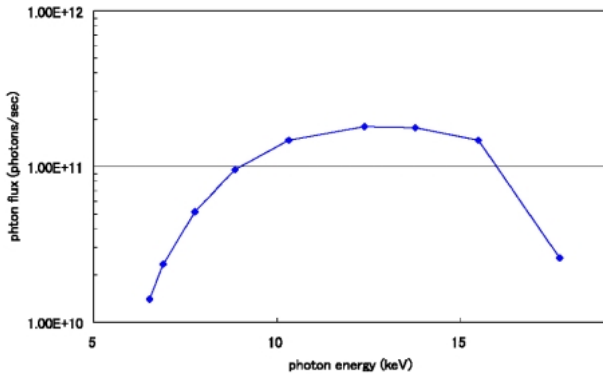


Figure 4. Number of photons at the sample position.

に抑えられている。

回折計の結晶回転軸は、微小結晶を用いた測定も行えるよう高精度に設計されている。評価のため、神津精機の協力のもと、サンプル軸の回転芯精度および送り精度の測定を行った。回転芯精度の測定にはタッチセンサープローブを用い、HUBER社のゴニオメータヘッドを取り付けた状態で、10度送りで一回転させたときの変位を測定した。最大変位量は2.3 μmであり、10 μm程度の微小結晶でも十分測定可能な芯精度であることが確認された。現在ゴニオメータヘッドは取り除かれて回転軸にかかる負荷が減少したため、芯精度はより高いと推定される。測定回転送りの精度は、サンプル軸に取り付けたロータリーエンコーダを用いて測定し、10度送りでの累積誤差は0.005度という結果であった。通常の振動写真法による測定の際の振動角は0.5度ないし1度程度であるため、誤差は1%未満である。

振動写真法での測定において、サンプル回転軸とシャッターの開閉のタイミングは大変重要であり、微小振動角・短時間露光であるほど、正確なタイミングが要求される。タイミング調整を行った結果、シャッターの開閉と振動の開始終了の誤差は1ミリ秒以内であることをオシロスコープで確認した。これは通常回折データ測定（露光時間1秒程度）では無視できる誤差レベルである。短時間露光の測定に関して、我々の採用したダブルフラップ型の高速X線シャッター（神津精機製）は、10ミリ秒の露光をコントロールできる仕様となっている。しかし、露光時間が0.1秒を下回るような測定は、ダークイメージによる補正の問題もあるため、現段階では推奨できない。

2.4 X線 CCD 検出器による回折データ収集

高分解能の回折データを迅速に測定するため、210 mm 平方の検出面積を持ち、ピクセルサイズ51 μm、回折イメージ（4096 × 4096 × 2 byte、約33 MB）を約一秒で読み出すことのできる CCD 型 X 線検出器（ADSC 社製 Quantum 210）を導入した。ADSC 社の CCD 検出器については、Quantum4R 型（面積188 mm 平方、位置分解能 82 μm、回折イメージサイズ2304 × 2304 × 2 byte、読み出

し時間約7秒）を BL-6A や BL-18B で使用してきた実績があり、ソフトウェア・ハードウェアともに安定して稼動している。Q210もその例に違わず、現在まで順調に稼動し続けている。

Q210の高速データ読み出しに加え、イメージの補正や統合などのプロセスの分散化、およびギガビットイーサネットによる通信・転送時間の短縮を図った結果、測定のデッドタイム（ビームを使用しない時間）を1イメージ当たり約2.5秒に抑えることが可能になった。この結果、典型的な1データセットの測定（5秒露光、1度振動で180枚のイメージの収集）は20分程度で完了する。また、MAD実験（XAFS測定と4波長分の回折データ収集）に要する全所要時間は1-2時間程度となり、BL-6AやBL-18Bと比較して10倍前後の高速測定が実現されている。

CCD型X線検出器で収集された回折イメージは、テラバイトクラスの大容量RAIDディスク上にギガビットイーサネットを介して転送・保存される。ビームラインには数台のデータ処理・解析用のLinux計算機が用意されており、それぞれがNFSによって回折イメージデータにアクセスできるようになっている。回折データの処理にはHKL2000、DPS/Mosflmなどのソフトウェアが利用可能である。処理結果を用いてその場ですぐ位相計算を行えるように、SOLVE/RESOLVE、CCP4パッケージ等の解析ソフトウェアもインストールされている。迅速な位相計算による回折データの評価は、次の測定へのフィードバックという意味で、効率的な実験のためには不可欠である。

データのバックアップは、同じネットワーク上のバックアップ用WindowsマシンのSCSI、IEEE1394、USB2.0等のインターフェースを介して、ユーザー持ち込みのストレージデバイスにFTP転送するという方法で行う。ユーザー持ち込みのノートPC等をネットワーク接続してバックアップすることも可能である。

データの処理およびバックアップは、データ測定と並行して行うことができる。この際、大量のデータ転送によるネットワークへの負荷が大きくなり、1割ないし2割程度の転送速度の低下が見られる。データ処理やバックアップのスピードは低下するが、データ測定はほとんどの場合露光時間が律速であるため、データ測定のパフォーマンスには影響しない。

2.5 ビームラインコントロールシステムとユーザーインターフェース

2.5.1 STARS ネットワーク

ビームラインを構成する機器（一部を除く）は、TCP/IPによるネットワーク通信によりコントロールされている。これは、大量の測定を迅速に自動で進めていくシステムの実装のため、従来のタンパクビームラインの制御方式（一つ一つの機器をそれに直結したコンピュータによって個別に制御する形）を全面的に更新したものである。PFの小菅氏らによってインターロック用に開発されたメッ

セージ配信サーバ STARS (Simple Transmission And Retrieval System)⁵⁾の構成するネットワークに、個々の機器(パルスモーターコントローラ等)を制御するコンピュータがクライアントとして加わる構造をとる。各クライアントは STARS プロトコルという共通言語により通信を行い、例えば、MAD 実験のように「X 線の波長を変えて複数のデータセットを連続で自動測定する」といったことが容易に実装できる。システムに結晶交換ロボットを追加する場合も、ロボットを制御する STARS クライアントを作ることで、ロボット(ハードウェア)の詳細を問わずにシステムを柔軟に拡張できる。最終的には、後述するデータベースシステムを利用して、回折データ収集は全自動化される予定であるが、現在はボトムアップ的に個々の操作の自動化を計っている。このような開発方式が取れることも、この制御システムの特徴である。

2.5.2 波長変更

MAD 測定に用いる重原子は様々なので、波長を迅速に大きく変更できることは効率的なデータ収集に不可欠である。NW12の二結晶分光器は、利用頻度の高い7-17 keVの範囲においてビーム位置のずれが $\pm 20 \mu\text{m}$ 未満となるよう調整されており、波長変更に伴う検出器架台の再調整は必要ない。アンジュレータのギャップも連動して自動設定されるため、偏向電磁石ビームライン並みの簡便さで波長変更が可能である。ユーザーは波長変更の詳細を意識せずに、希望の波長を選択するだけでよい。

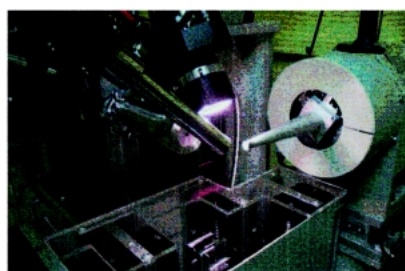
2.5.3 実験モード

ユーザーは実験中、結晶交換、結晶のセンタリング(ビーム位置と結晶位置を合わせる)や XAFS 測定

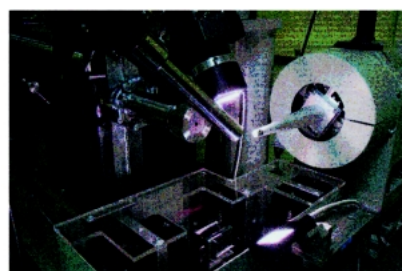
(MAD 実験での使用波長の決定)などを行う。これらの作業には、サンプル周辺機器の操作が含まれる。機器が密集していることもあり、従来は結晶交換等のマニュアル操作でユーザーの誤操作によりしばしば再アライメントの必要が生じた。短時間でデータ収集が可能になればなるほど、結晶交換の頻度は上がり、従ってヒューマンエラーも増加する。

このようなトラブルを防ぐため、サンプル位置周辺の作業を遠隔操作可能なように機器の駆動を全て電動化した。ユーザー側から見ると、「実験モード」と呼ばれるインターフェースが提供される。結晶の交換、センタリング、XAFS 測定および回折データ測定に応じて「実験モード」を選択することで、ビームストッパー、照明等機器や蛍光検出器などが自動的に適切な場所に配置される。「実験モード」は、PFの共通ユーザーインターフェースとして開発したもので、BL-6A や現在建設中の BL-5 でも実装され、ユーザーはこれらのビームラインでは同様の操作で実験を行うことができる。

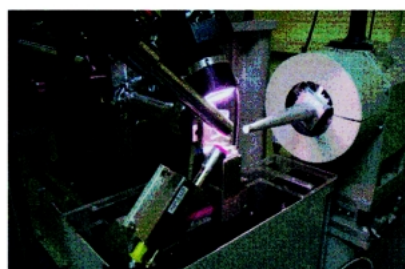
「実験モード」は「loop mounting」、「crystal centering」、「XAFS measurement」、及び「data collection」の4モードである。この他にも、管理用(アライメント用)のモードが存在する。loop mounting モードを選択すると、ビームストッパー、CCD 検出器等が退避位置まで移動する(Fig. 5-a)。ここでユーザーは結晶をサンプル軸にマウントするが、サンプル軸周辺の機器が全て待避しているため、誤操作なく効率的にマウント作業を行うことができる。crystal centering モードを選択するとセンタリング用の照明が点灯し、照明位置に自動的に移動する(Fig. 5-



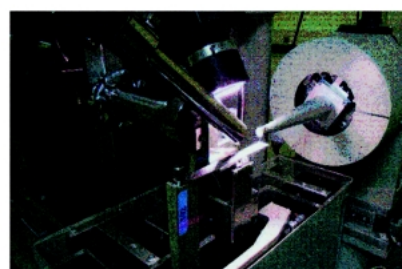
a) Loop mounting mode



b) Crystal centering mode



c) XAFS measurement mode



d) Data collection mode

Figure 5. Four 'experimental modes' at the beam line.

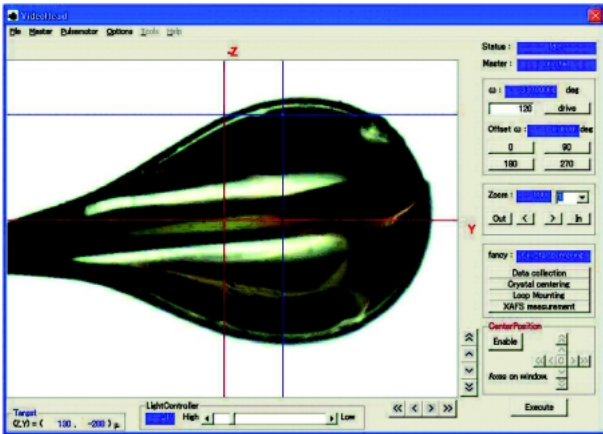


Figure 6. GUI for crystal centering.

b). MAD 法による実験の場合、XAFS モードを選択すると蛍光検出器が測定位置に移動する (Fig. 5-c)。XAFS スペクトルにより MAD 測定に用いる波長を決定し、回折データ収集を始める (Fig. 5-d : data collection モード)。

結晶交換以外では、コンピュータから遠隔操作するための GUI が用意されている。例として、結晶のセンタリングを行うための GUI を Fig. 6 に示す。センタリングは「半自動」(結晶の認識は人間が行う)形式で、マウスのクリック操作のみでセンタリングが可能になっている。結晶の中心をダブルクリックすることで、その位置が赤色のクロス(ビーム位置)に移動する。この他、XAFS 測定用、および回折データ測定用にもそれぞれ GUI があり、操作は全て遠隔で実行できる。結晶のセンタリング作業の全自動化も開発中で、2004年度中に整備される予定である。

2.6 その他利用可能な装置

ビームラインでは窒素吹き付け型低温装置が常時稼動している。ユーザーが持ち込む結晶の一時保存には、ビームラインに設置された小型インキュベータ(温度設定はユーザーによって変更可能)、側室の大型インキュベータ(設定温度は20度で固定)および低温室(設定温度4度)が利用できる。重原子同型置換体の一つとして用いられるキセノンガスの導入装置も利用可能である。

3. 今後の予定

3.1 結晶自動交換ロボットシステムの導入

2004年度に NW12 及び BL-5 にロボットを用いた結晶の自動交換システムを導入する予定である。スタンフォード大学で実用化されているシステム⁶⁾を改良したデザインで、水平多関節ロボット、96本のクライオループを装填できるカセット、カセット3本を貯蔵できる液体窒素デューワー、および、液体窒素自動供給装置から構成される。システムの概略を Fig. 7 に示す。ロボットの腕に装着したクライオ tong がデューワー中のカセットに装填されたク

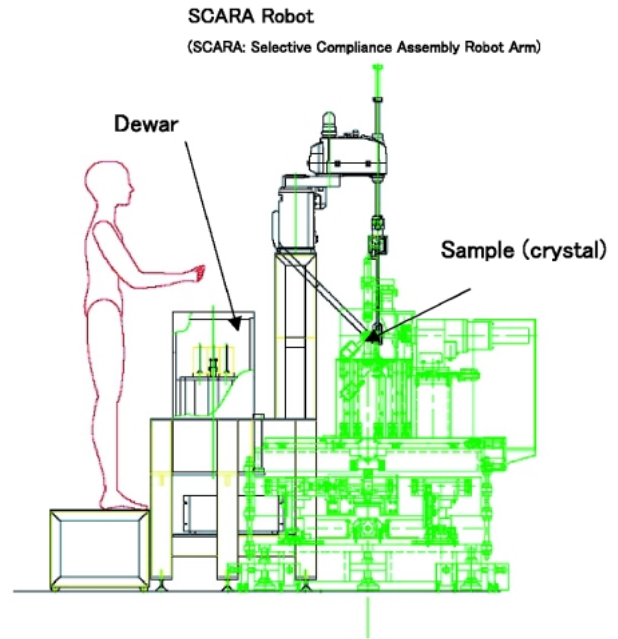


Figure 7. Side view of the crystal exchange robot.

ライオループと、回折計の回転軸にマウントされたクライオループを交換する。ユーザーはカセットを一度だけセットすれば、実験ハッチに入ることなく288個の結晶について連続して実験を行うことができるようになる。このシステムでは、現在大多数のユーザーが使用している Hampton Research 社製のクライオループと互換性のあるループを用いているため、マニュアル結晶交換操作とも互換性がある。

3.2 コラボラトリー

構造生物学研究のハイスループット化のため、サンプル調整や結晶化、データ測定・解析など、実験に関わる全てのデータを集中的に管理する統合型データベースシステムを開発中である⁷⁾。全ての構造生物ビームラインの制御は一元的にデータベース管理され、スケジュールされた全自動測定が実行される。将来的には、ユーザーはこのデータベースを介して、遠隔地からネットワーク経由で情報の閲覧やデータ測定の指示が可能となる。セキュアなプロトコルでの WEB ベースのインターフェースが、そのために準備される。このシステムの最終的な概念図を Fig. 8 に示す。2003年度に基盤整備として専用高速ネットワークの敷設およびセントラルサーバーの導入を行った。

4. 謝辞

NW12の建設には、PF や SSRL 等の放射光研究施設の多くの方からのご助言とご協力を頂いた。結晶交換ロボットの導入には SSRL の M. Soltis 氏、A. Deacon 氏、M. Miller 氏、S. McPhillips 氏らに協力して頂いた。ビームライン制御ソフトウェアの開発には、Yurii Gaponov 氏、笹島久美子氏らに協力していただいた。

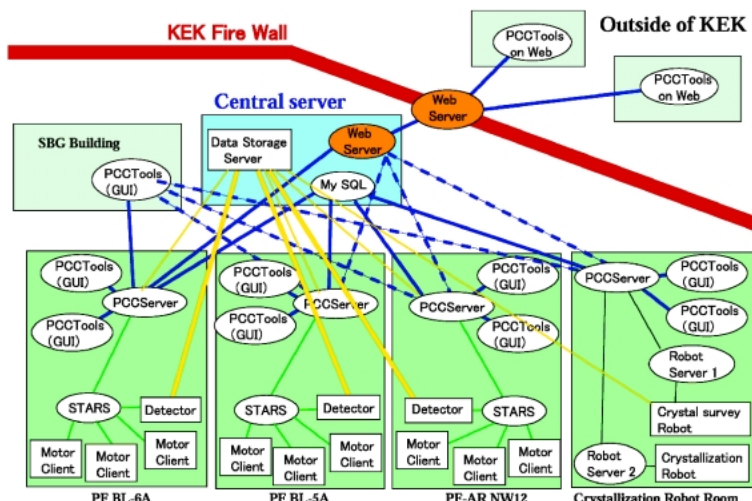


Figure 8. Schematic drawing of the future network system of the protein crystallography beam lines at the PF-SBRC. The yellow lines show the high-speed network for data (mainly diffraction images) transfer. The blue (and dotted blue) lines are the network connections for remote access which allows users to perform experiments from their individual laboratories. The green lines are the network for beam line control. PCCServer is a server to control experiments at the beam lines.

ビームラインのデザインから建設にかけて、PFの河田洋氏には全面的にご協力頂いた。挿入光源は山本樹氏、土屋公央氏、塩屋達郎氏に多大なご協力を頂いた。フロントエンドの建設には佐藤昌史氏に協力していただいた。ビームライン建設中の様々な助言を森丈晴氏から頂いた。

インターロックシステムの設置には伊藤健二氏、小菅隆氏、斉藤裕樹氏に協力頂いた。とくに小菅氏には、STARSシステムの利用について開発者自らの貴重な意見を頂いた。ビームラインコンポーネントの設置には、三菱電機サービスの方々のご協力が不可欠であった。とくに大田浩正氏、渡辺一樹氏には我々の様々な細かい要求に応えて頂き大変感謝している。

春日俊夫氏をはじめとするPF-AR高度化チームの人々の努力によって、リングの性能が格段に向上した結果、ビームラインが安定した性能を発揮できるようになった。また、帯名崇氏には挿入光源の制御に関して協力していただいた。

NW12の建設の主要な部分は平成13年度補正予算によっておこなわれた。ビームラインの整備には、文部省科学研究費補助金特定領域研究(A)「シンクロトロン放射光による生物マシーナリーの構造生物学」、科学技術振興調整費「蛋白質X線結晶構造解析の高度化に資する基盤整備」、文部科学省「タンパク3000プロジェクト個別解析プログラム」などから支援を受けた。

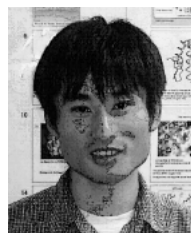
参考論文

- 1) T. Kasuga, H. Kawata and A. R. Upgrading Project Team. S.: *J. Synchrotron Rad.*, To be published.
- 2) S. Yamamoto, K. Tsuchiya and T. Shioya: *J. Synchrotron*

Rad., To be published.

- 3) H. Kawata, T. Mori, H. Adachi, N. Matsugaki, A. Koyama and M. Nomura, S.: *J. Synchrotron Rad.*, To be published.
- 4) T. Mochizuki, et al.: *Nucl. Instrum. Methods, A467-8*, 647 (2001).
- 5) T. Kosuge, Y. Saito, K. Nigorikawa, H. Kawata, A. Shirakawa, H. Nakajima, K. Ito, I. Abe, J. Kishiro and S. Kurokawa: PCaPAC2002 Proceedings, Frascaty, 2002.
- 6) <http://smb.slac.stanford.edu/research/robot/index.htm>
- 7) Yu. A. Gaponov, N. Igarashi, M. Hiraki, K. Sasajima, N. Matsugaki, M. Suzuki, T. Kosuge and S. Wakatsuki: *J. Synchrotron Rad.*, To be published.

著者紹介



松垣直宏

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 フォトンファクトリー構造生物学研究センター
E-mail: naohiro.matsugaki@kek.jp
専門：タンパク質結晶構造解析

略歴：

- 1999年 九州大学大学院理学研究科物理専攻（博士課程）修了
- 1999年 大阪大学たんぱく質研究所リサーチアソシエイト
- 2000年 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 助手 現在に至る



五十嵐教之

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 フォトンファクトリー構造生物学研究センター

E-mail: noriyuki.igarashi@kek.jp

専門：蛋白質結晶学，構造生物学

略歴：

1997年 東京工業大学大学院生命理工学研究科バイオサイエンス専攻（博士課程）修了

1997年 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 助手 現在に至る



鈴木 守

大阪大学蛋白質研究所附属プロテオミクス総合研究所

E-mail: mamoru.suzuki@protein.osaka-u.ac.jp

専門：タンパク質結晶構造解析

略歴：

1995年 北海道大学大学院理学研究科（博士課程）修了

1995年 高エネルギー物理学研究所放射光実験施設 助手

2004年 大阪大学蛋白質研究所附属プロテオミクス総合研究所 助教授 現在に至る



平木雅彦

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 フォトンファクトリー構造生物学研究センター

E-mail: masahiko.hiraki@kek.jp

専門：ロボティクス

略歴：

1996年 東北大学大学院工学研究科精密工学専攻（博士課程）修了

1996年 東京大学大学院工学系研究科精密機械工学専攻 助手

2001年 東京電機大学工学部精密機械工学科助手

2002年 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 助手 現在に至る



若槻壮市

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 フォトンファクトリー構造生物学研究センター

E-mail: soichi.wakatsuki@kek.jp

専門：放射光 X 線タンパク質結晶学と構造生物学に関する研究

略歴：

1982年 東京大学工学部化学工学科卒業

1984年 東京大学大学院工学系研究科化学工学専攻修士課程終了

1990年 スタンフォード大学化学科博士課程終了（Ph.D in Chemistry）

1990年 オックスフォード大学ポスドクフェロー

1994年 European Synchrotron Radiation Facility ビームラインサイエンティスト，同年ビームライン責任者

1999年 ESRF Macromolecular Crystallography Group グループリーダー

2000年 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 教授，構造生物学グループリーダー

2003年 構造生物学研究センター，センター長 現在に至る

High-throughput Structural Biology at the Beam Line PF-AR NW12

- Naohiro MATSUGAKI Structural Biology Research Center (SBRC), Photon Factory (PF), Institute of Materials Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization (KEK), 1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki 305-0801, Japan
- Noriyuki IGARASHI Structural Biology Research Center (SBRC), Photon Factory (PF), Institute of Materials Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization (KEK), 1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki 305-0801, Japan
- Mamoru SUZUKI Laboratory of Supramolecular Crystallography Research Center for Structural and Functional Proteomics Institute for Protein Research, OSAKA University Suita, Osaka, 565-0871, Japan
- Masahiko HIRAKI Structural Biology Research Center (SBRC), Photon Factory (PF), Institute of Materials Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization (KEK), 1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki 305-0801, Japan
- Soichi WAKATSUKI Structural Biology Research Center (SBRC), Photon Factory (PF), Institute of Materials Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization (KEK), 1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki 305-0801, Japan

Abstract

The beam line PF-AR (Photon Factory Advanced Ring) NW12 is designed for high-throughput diffraction measurement, especially for MAD (Multiple Anomalous Dispersion) experiments for protein crystallography. With the high-flux beam from the undulator and the high-speed data acquisition system using a CCD detector, rapid data collection is realized. The fixed-exit beam in a wide energy range allows efficient MAD experiments without realignment of the sample stage. Experiments with crystals of micron-size and oscillation measurement with fine phi slicing are possible with the high-precision diffractometer. All the procedures except sample exchange can be controlled using several GUIs remotely, which allows both manual and (future) automatic data collection. The current status of the beam line and on going R & D projects are described, as well as the future direction of PF protein crystallography beam lines and the SBRC.