

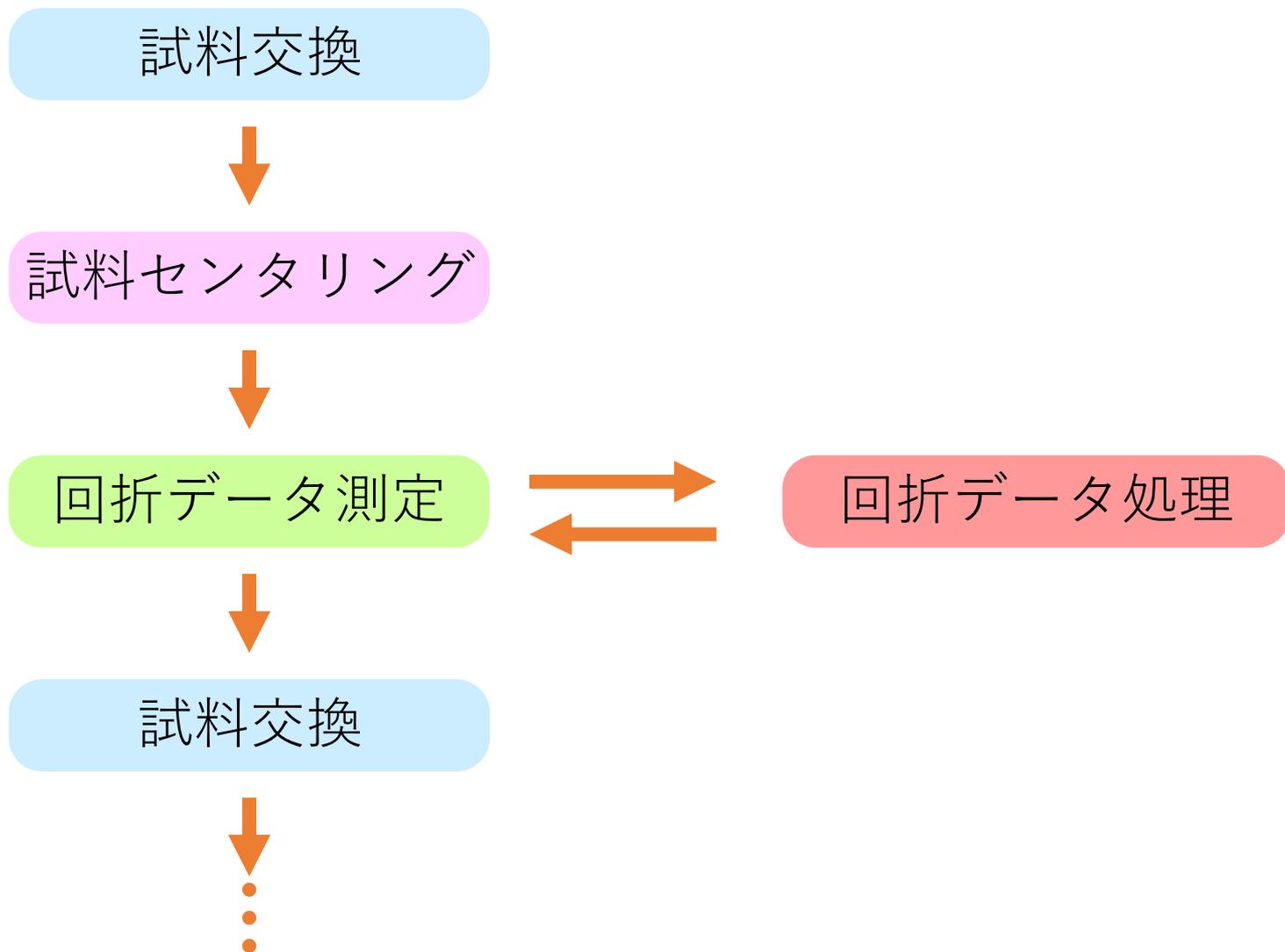
2019年3月11日  
蛋白質結晶構造解析UGM

# 全自動ビームタイムの運用 状況

山田悠介

KEK IMSS SBRC/PF

# 放射光ビームラインでの作業



# 全自動回折データ収集・処理システム

サンプル交換

PAM

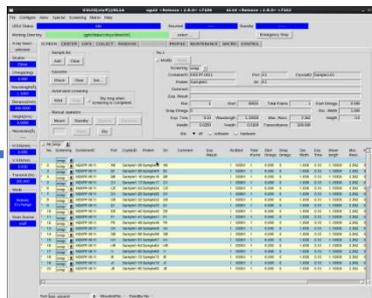


試料センタリング

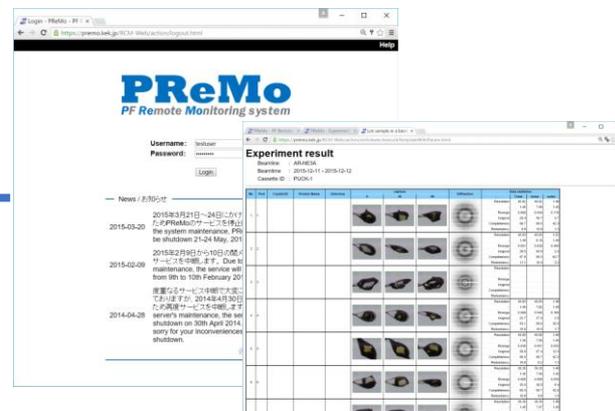
回折データ測定

データ処理

サンプル交換



UGUISの改良

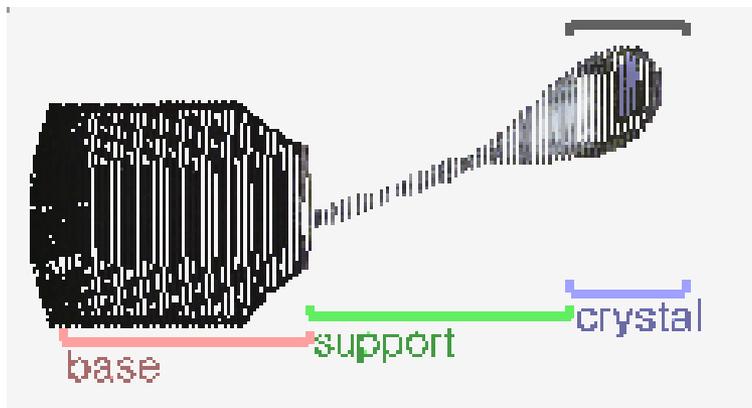


PReMoによる自動処理

# X線スキャンによるセンタリング (SIROCC)



篠田晃  
(KEK IMSS SBRC)

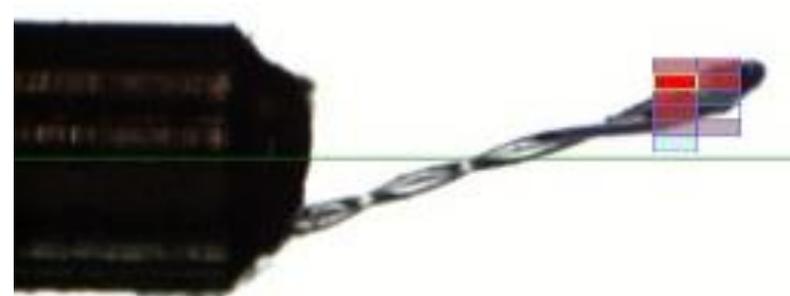


試料の3次元認識



(緑の線はゴニオの回転中心)

X線を照射するグリッドの作成



X線回折スキャンによる結晶外形認識

# PReMoによる結果の閲覧

PReMo - PF Remote Monitoring

https://premo.kek.jp/RCM-Web/action/xmlviewer/executeTemplateWithParam.html

User: sbguser  
Group: sbguser

Home Beamtime Screening Setting XmlViewer Logout Help

Year: 2019

Beamtime: Screening

Order: 3  
ContainerID: FY-01  
Port: 3  
Barcode: DmNobo  
Protein: DmNobo  
CrystallID: DmNobo\_003

Dxscan: Done  
Snapshot: Done  
Runs: Done  
Process: Done

Comment: 30mM\_DCB, 10mM GSH (02-28 17:58 sbguser) Edit

Refresh

Dxscan

Snapshot

Capture

Runs

Data statistics

	Total	Inner	Outer
Resolution	46.50	46.50	1.65
-	1.62	8.87	1.62
Rmerge	0.043	0.019	0.983
I/signal	27.6	79.7	2.3
Completeness	98.0	99.1	81.2
Redundancy	12.7	10.7	8.6

PReMo - Experiment Result Viewer - Google Chrome

https://premo.kek.jp/RCM-Web/action/xmlviewer/executeTemplateWithParam.html

Experimental condition (dxscan)

Beamline: BL-17A  
File path: /gifs/data/sbguser/2019-03-01\_BL17A/FY0113/sracc\_gridscan/13\_56  
Time: 2019-03-01 13:56:38  
File name: scan\_01

X: 5.1 mm Y: 187.4 mm Resolution: 2.15 Å

download capture image Show ruler

Synchronize with the capture image zoom when there are numerous the grid, processing will takes time

scan\_01\_00563.cbf (Omega: 75.0 deg)

Brightness: 1.00  
Contrast: 0.00

# 全自動測定システムの現状

全ビームライン(1A, 5A, 17A, NW12A, NE3A)で利用可能

## 出来ること

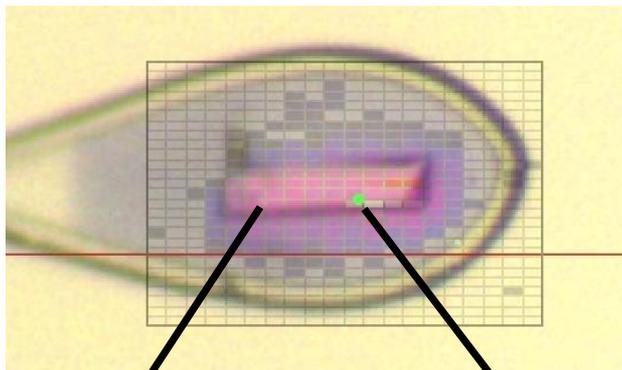
- X線を用いたタンパク質結晶の認識
- 重心位置1点でのスナップショットorデータセット測定(測定条件はあらかじめ決定)
- 結晶内での回折能比較(X線スキンの結果の目視)

## 出来ないこと

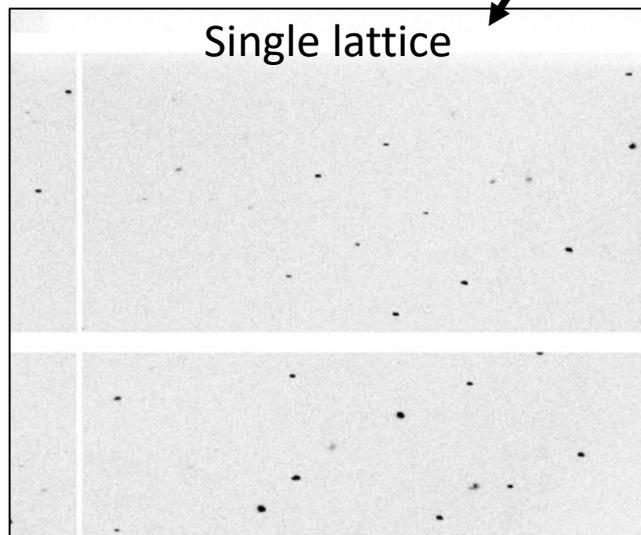
- 測定条件の自動決定
- 結晶内での多点測定や最適位置の同定
- 結晶1個1個について最適な条件でデータを取るシステムではない

# 不均一な結晶で起きる問題例

Because SIROCC recognizes a protein crystal based on the number of diffraction spots, SIROCC tends to choose a portion of multiple lattice.

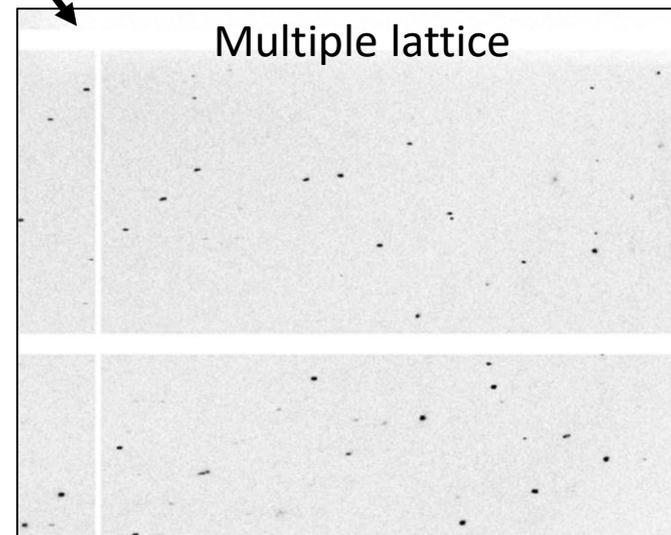


Courtesy of Dr. Kudo (RIKEN)



Single lattice

SG:  $P2_12_12_1$ ,  $R_{\text{merge}}$ : 5.8 %



Multiple lattice

SG:  $P1$ ,  $R_{\text{merge}}$ : 25.9 %

# 全自動測定システムを利用するには

1. 随時ビームタイム利用制度を利用する。
  - G型課題
  - 全自動ビームタイムへの申請
2. BINDSでビームタイム支援を利用する。
  - BINDSへ支援申請(ビームタイム)
  - BINDSのBT予約システムよりビームタイム予約
3. (来期より)UGUIのメニューでユーザーが実行する。

# 全自動測定システムを利用した随時ビームタイム利用

	利用者(G, P, T型課題)	BLスタッフ
4日前	利用申請書提出	申請内容に従って、薬品届の提出
	試料を宅急便で送付 • Unipuck (バーコードピン入り) • (HDD) • 返送用宅急便伝票 PReMoへの試料情報登録	試料の受け取りと保管
測定日		複数ユーザーからの試料を一度にセットし、全自動測定を実行 • 測定はPACの評点順 • 測定しきれなかった試料は次回へ繰り越し
翌営業日以降	試料の受け取りとデータダウンロード	試料と(HDD)の返送

# 2018年度利用実績

Date	Beamline	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	Unipuck数	Sample数
2018/5/18	AR-NE3A	●	●	●												12	174
2018/5/25	AR-NE3A	●	●													4	60
2018/6/1	AR-NE3A	●	●	●												6	85
2018/6/8	AR-NE3A	●	●		●											10	140
2018/6/15	AR-NE3A		●	●	●											10	150
2018/6/22	AR-NE3A	●	●													7	105
2018/6/28	AR-NE3A	●	●			●										8	121
2018/11/22	AR-NE3A		●	●			●	●								9	129
2018/11/30	AR-NE3A		●													2	21
2018/12/7	AR-NE3A	●							●	●	●					14	170
2018/12/14	AR-NE3A	●		●							●	●				10	151
2019/2/22	BL-5A	●														3	45
2019/3/1	BL-17A			●				●					●	●		10	131
2019/3/8	AR-NE3A			●											●	2	25
2019/3/22	BL-5A																

利用者数は徐々に増えてきている。2019年度5-6月期はAR-NE3AとBL-17Aで実施予定。

# 【提案】 全自動ビームタイムの使い方

## 1. 新しい結晶が出たら即座に利用する

- 申請して1週間程度で回折に関する知見が得られる

## 2. リガンドソーキング、重原子サーチなどのスクリーニングを行う

- 試料調製->測定->試料調製->・・・のサイクルを短くすることで最適化を効率化出来る

## 3. 自身のビームタイム前に予備測定として利用する

- X線スキャンにより結晶回折能の不均一性が分かる
- Cの時間に翌日のA, Bの測定をしてしまうとか・・・