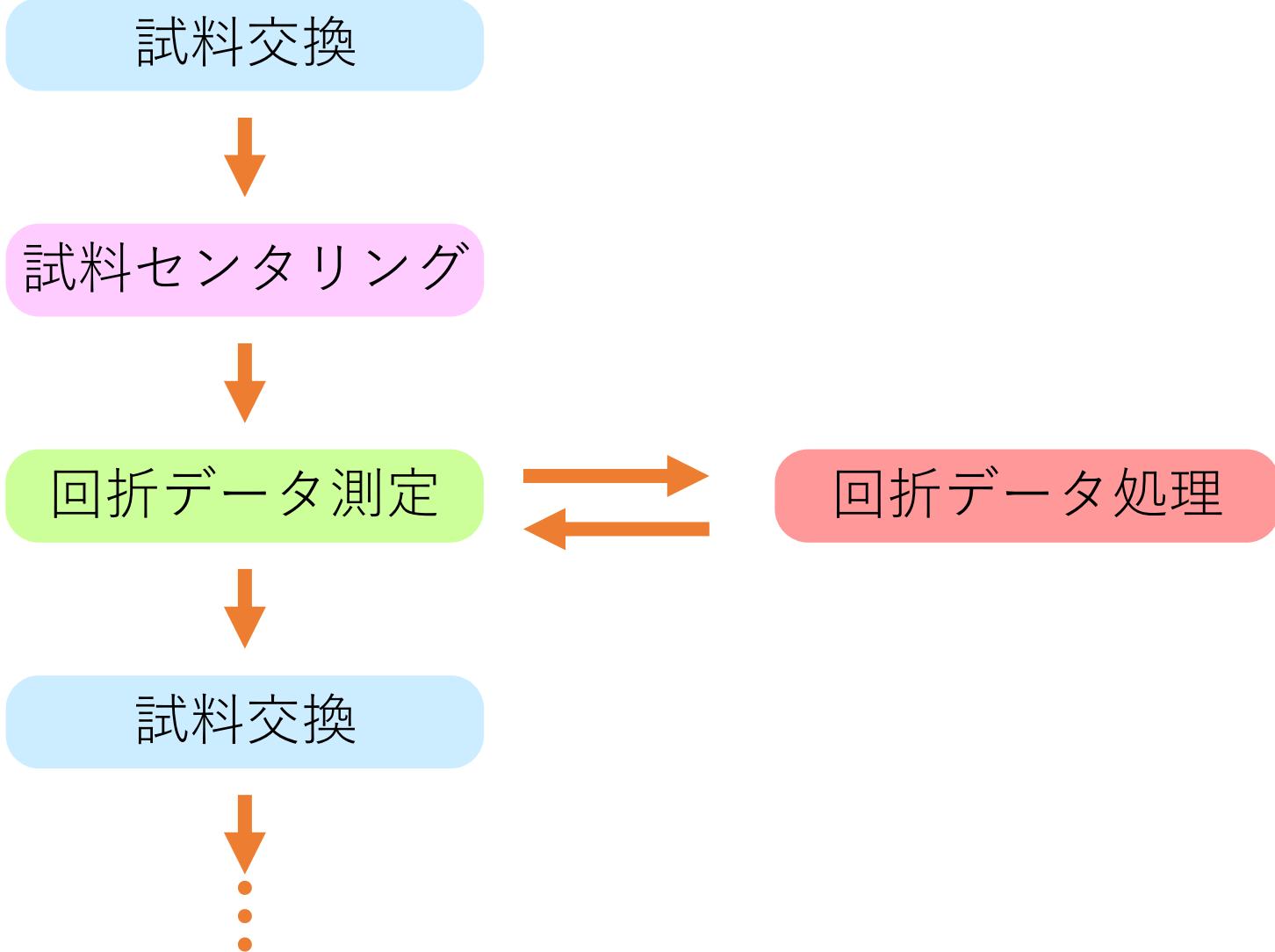


# (PFの)全自動測定で出来 ること、出来ないこと

山田悠介

高エネ機構・物構研・PF/構造生物

# 放射光ビームラインでの作業



# 全自动回折データ収集・処理システム

サンプル交換

PAM



試料センタリング

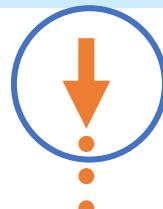
SIROCC



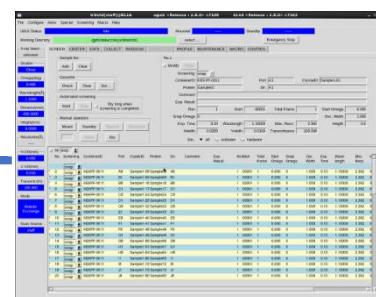
回折データ測定

データ処理

サンプル交換

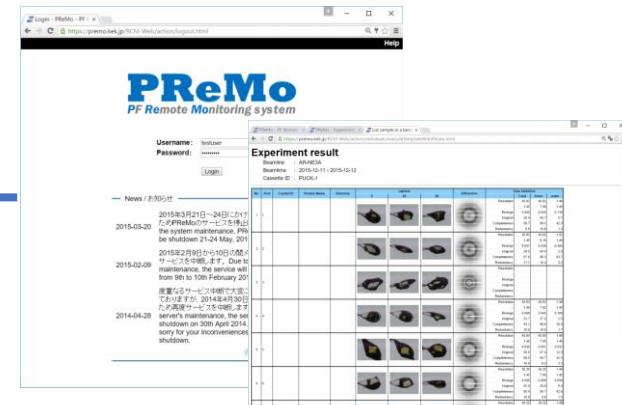


UGUISの改良



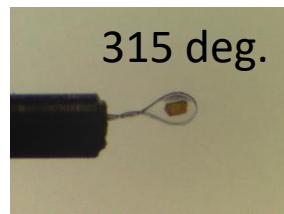
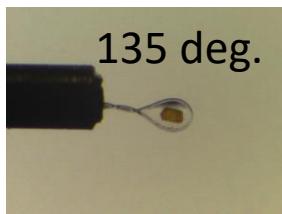
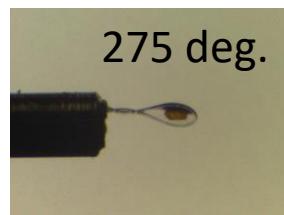
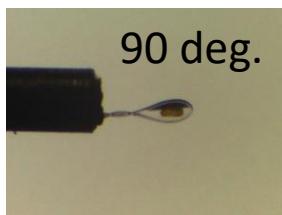
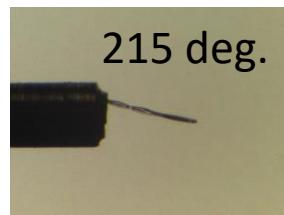
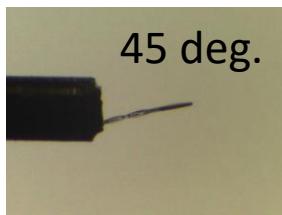
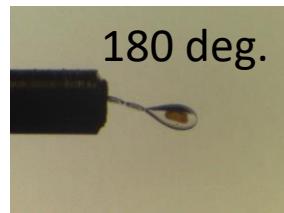
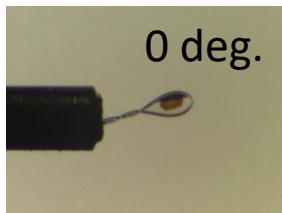
篠田晃

(KEK IMSS SBRC)

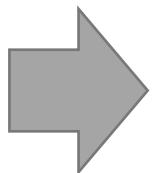


PReMoによる自動処理

# SIROCCによる3次元ループ認識

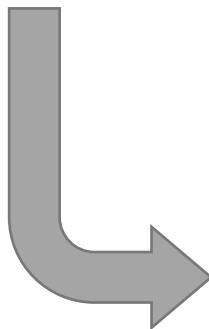
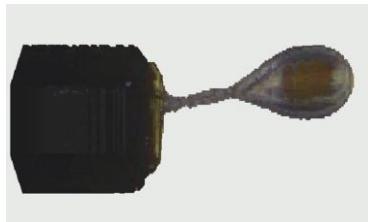


3D  
reconstruc  
tion

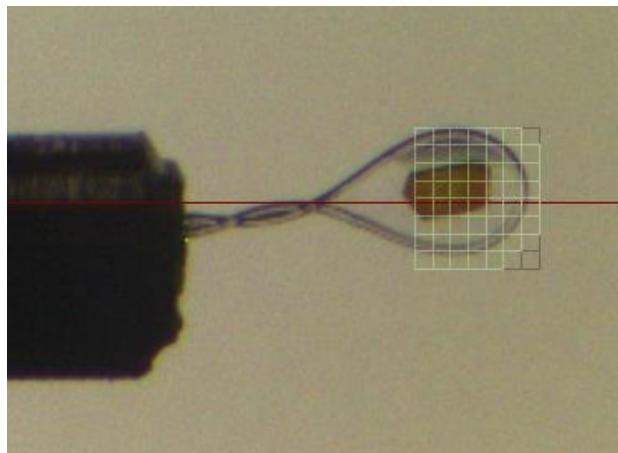


# SIROCCによるグリッドスキャン

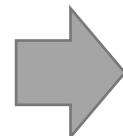
3D model



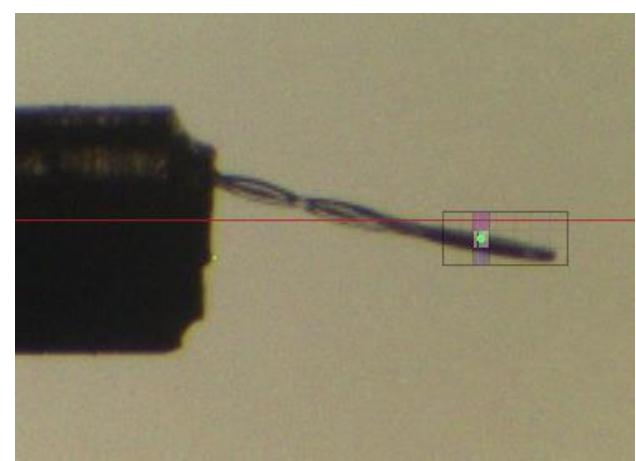
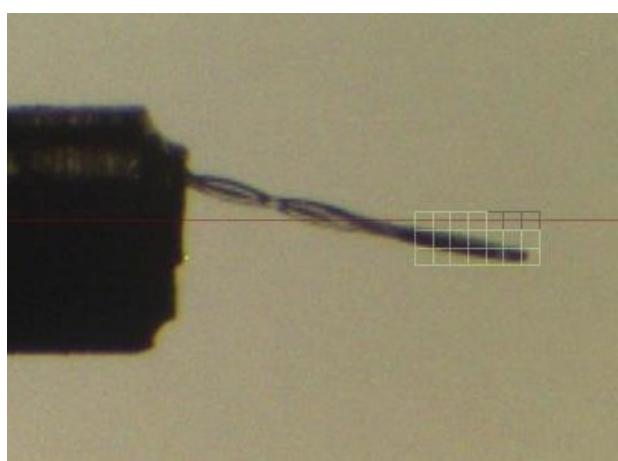
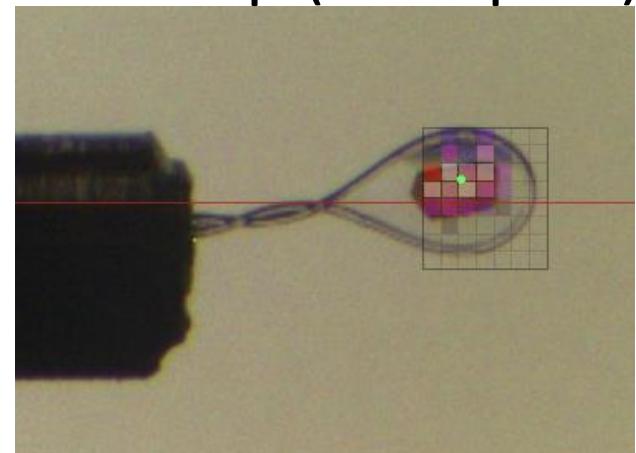
Grid



X-ray  
scan



Heatmap (# of spots)



Applications Places System

uguil2 <Alpha release : trunk> r.14439 bl.ini <Alpha release : trunk> r.14428

UGUI Status **rotor, SCREEN** Mounted KUBSC01 - 4 Standby KUBSC01 - 5 **EMERGENCY STOP**

Working Directory /gpfs/data/miki/2019-03-08\_AR-NE3A/KUBSC01/p626g3d select ... Mount KUBSC01 - 5

X-ray beam **ON** SCREEN CENTER XAFS COLLECT EXTRACTION PROFILE MAINTENANCE MACRO CONTROL

Shutter **Close**

Omeag(deg) 0.0000

Wavelength(Å) 1.00000

Distance(mm) 300.000

Height(mm) 0.0000

Resolution(Å) 1.690015

Coll(mm) 0.200

Transmit.(%) 100.0000

Gas Temp.(K) 95.000

Mode Robotic Exchange

UGUI Mode Low Temperature

PID feedback on

Stars Master staff

User ID miki

Sample list Add Clear

Cassette Check Clear Set...

Automated screening Start Stop Dry tongs when screening is completed.

Manual operation Mount Standby Retrace Unmount

Wash Dry Auto standby

No.4

Modify

User ID : miki

Screening runs

ContainerID KUBSC01 Port 5 CrystalID p626g3e

Protein Ladd\_G\_Co Dir. p626g3e

Comment

Exp. Result

Run	01	Start	00001	Total Frame	1800	Start Omega	0.000
Snap Omega	Current, Current+90.000					Osc. Width	0.200
Exp. Time	0.1000	Wavelength	1.00000	Max. Reso.	1.60000	Height	0.0
Celli	0.200			Transmittance	100.00		

page 1 / 1 PREV NEXT

No. Screening ContainerID Port CrystalID Protein Dir. Comment Exp. Result Rx Start Total Frame Start Omega Snap Omega Osc. Width Exp. Time Wavelength

1	runs	KUBSC01	2	p626g3b	1_add_G_C_p626g2*	Done	01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
2	runs	KUBSC01	3	p626g3c	1_add_G_C_p626g3*	Done	01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
M 3	runs	KUBSC01	4	p626g3d	1_add_G_C_p626g3*	Done	01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
S 4	runs	KUBSC01	5	p626g3e	1_add_G_C_p626g3	Done	01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
5	runs	KUBSC01	13	p626g7b	2_no_G_C_p626d7		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
6	runs	KUBSC01	14	p626g12a	2_no_G_C_p626g1		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
7	runs	KUBSC01	15	p626g12b	2_no_G_C_p626g1		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
8	runs	KUBSC02	1	p626g12c	2_no_G_C_p626g1		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
9	runs	KUBSC02	9	p630c9a	3_no_G_C_p630c9		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
10	runs	KUBSC02	10	p630c9b	3_no_G_C_p630c9		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
11	runs	KUBSC02	11	p630c9c	3_no_G_C_p630c9		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
12	runs	KUBSC02	12	p630c10a	3_no_G_C_p630c1		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
13	runs	KUBSC02	13	p632f5a	4_no_G_Si_p632f5		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
14	runs	KUBSC02	15	p6339fa	4_no_G_Si_p633f9		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
15	runs	KUBSC03	1	p633f9b	4_no_G_Si_p633f9		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
16	runs	KUBSC03	2	p633f10a	4_no_G_Si_p633f1		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
17	runs	KUBSC03	6	p633f1b	5_no_G_Si_p633f1		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
18	runs	KUBSC03	7	p633f3a	5_no_G_Si_p633f3		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
19	runs	KUBSC03	8	p633f8a	5_no_G_Si_p633f8		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
20	runs	KUBSC03	9	p634c1a	5_no_G_Si_p634c1		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
21	runs	KUBSC01	1	p626g3a	1_add_G_C_p626g3		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
22	runs	KUBSC01	6	p626g11a	1_add_G_C_p626g1		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000
23	runs	KUBSC01	7	p626g11b	1_add_G_C_p626g1		01 00001	1800	0.000	Current,Ci	0.200	0.1000	1.000

Selected: No.4 / Page 1 Mounted: No.3 / Page 1 Standby: No.4 / Page 1

Advx - collect\_01\_01800.cbf

Network Camera - Mozilla Firefox

localhost:8018/cgi-bin/index.cgi Network Camera

Top Single Multi Buffered Image Support

Scan Preset 1 2 3 4 5 6 7 8

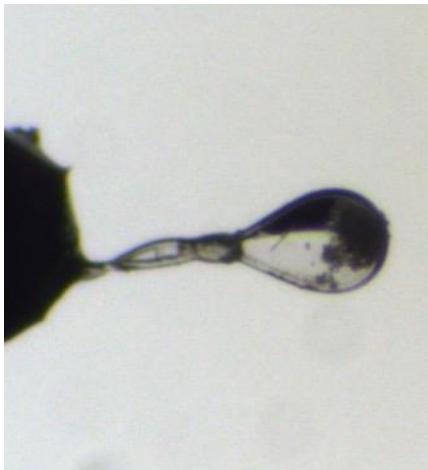
Zoom Focus Preset Brightness Backlight White Balance

Auto Refresh Rate MPEG-4 Resolution 640x480 Streaming Method Auto

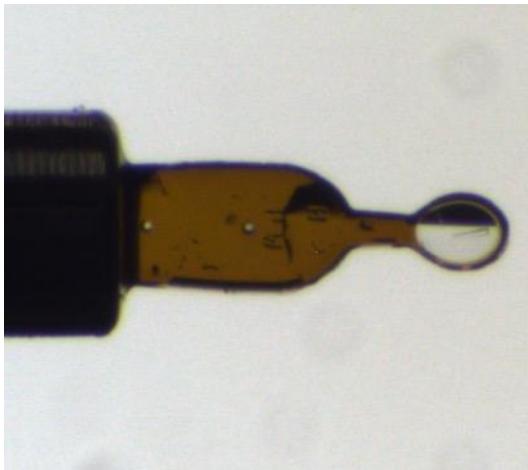
In case of no audio, please click here.  
http://panasonic.bn/bn/htsys/shenw/cam/support/ledo.html  
Running in IPv4 mode.

# センタリング結果一例

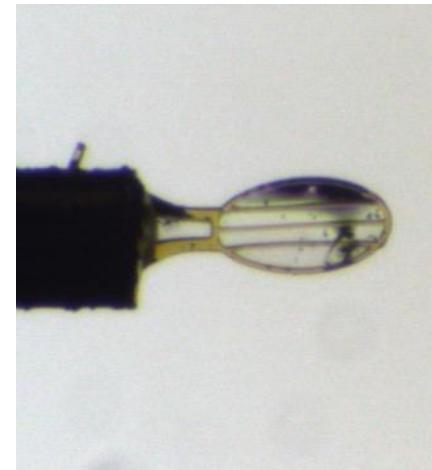
Nylon loop



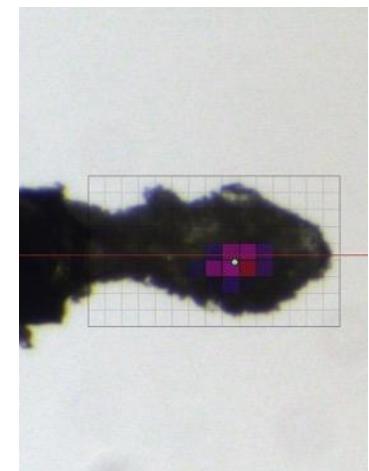
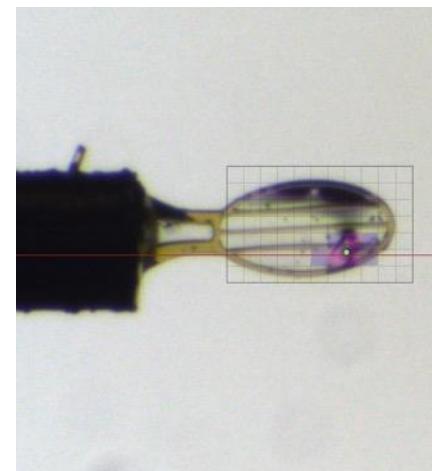
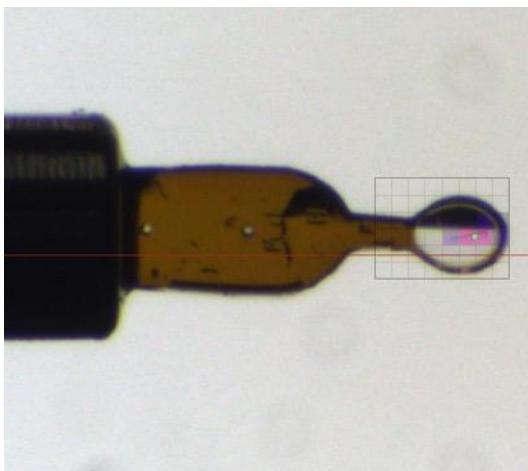
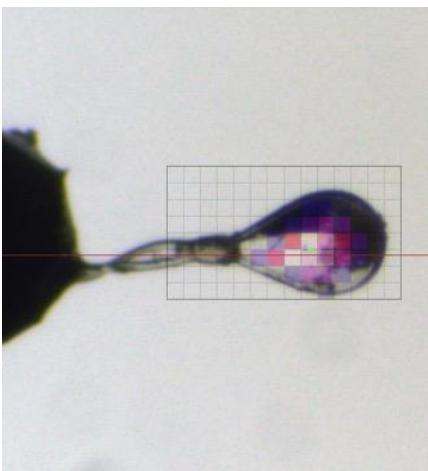
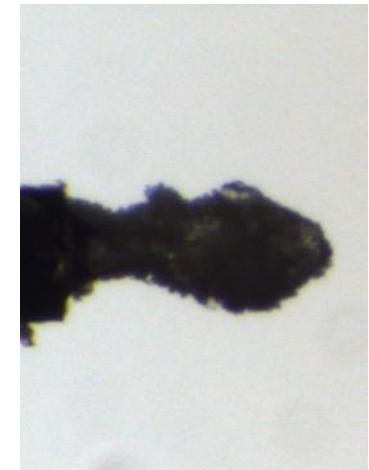
Litholoop



Hokudai loop



Crystal in ice



センタリングは1試料あたり2分30秒程度@AR-NE3A → 200 試料/日

# 全自动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

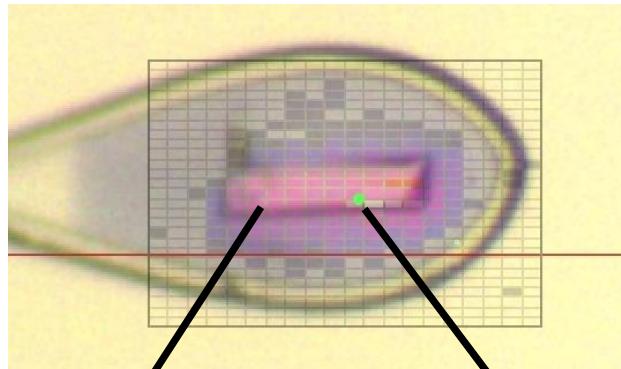
- X線を用いたタンパク質結晶の認識
- 重心位置1点でのスナップショットorデータセット測定(測定条件はあらかじめ決定)
- 結晶内での回折能比較(X線スキャンの結果の目視)

## 出来ないこと

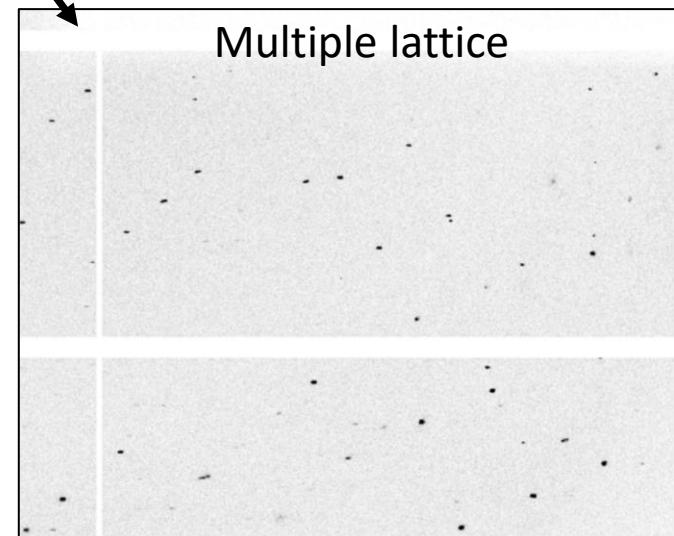
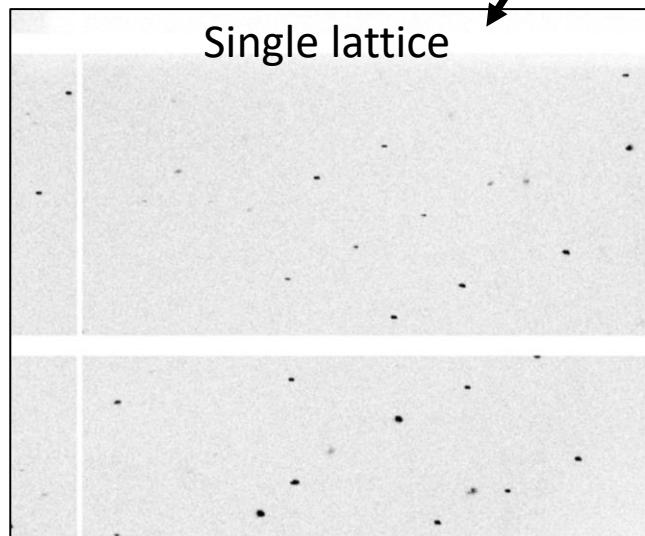
- 測定条件の自動決定
- 結晶内での多点測定や最適位置の同定
- 結晶1個1個についてベストな条件でデータを取るシステムではない

# 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)



Automated  
processing

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

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

# 全自动測定システムを利用するには

## 1. 隨時ビームタイム利用制度を利用する。

- G型課題
- 全自動測定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。

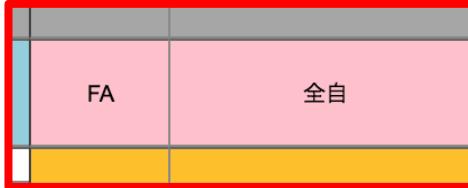
- BINDSへ支援申請(ビームタイム)
- BINDSのBT予約システムよりビームタイム予約

## 3. (施設利用) 契約時に全自动測定オプションを選択する。

## 4. UGUIのメニューでユーザーが実行する。

# 全自动測定ビームタイム

週1～2日で全自动測定ビーム  
タイムを設定  
G型課題保有者が申請可能

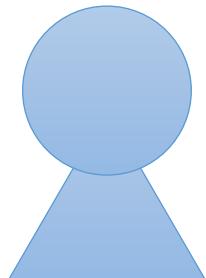


A screenshot of the PReMo beamtime scheduling interface. It shows a detailed beam time schedule for protein crystallography experiments. The schedule includes various beamlines and experimental details. A red box highlights a specific entry in the schedule.

ビームタイム表

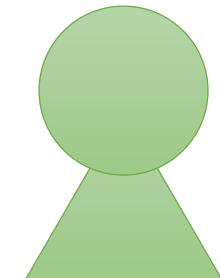
- 全自动測定の申請  
(4営業日前まで)

- 試料、HDDの送付  
PReMoへのサンプル  
リスト登録



利用者

- 試料、HDDの返却



ビームライン  
スタッフ



- 試料の測定装置へのセット
- 全自动測定

# 申請方法

## 1. PReMoにログインする。

The screenshot shows the PReMo login interface. On the left, there's a sidebar with "News / お知らせ" containing news items from 2017-06-19, 2017-05-22, and 2015-03-20. The main area has a "Beamtime" tab selected, showing a table of beamtime registrations for 2018. The table includes columns for No., ContainerID, Port, Barcode, and Proto. A "Request beamtime registration" button is visible at the top of the table.

## 2. 全自動ビームタイム申請をクリックする

## 3. 申請フォームに記入する

This screenshot shows the "Submit fully-automated beamtime" form. It includes fields for beamtime details (2018-11-30 09:30:00 - 2018-12-01 09:00:00 @ AR-NE3A), researcher information (氏名, メールアドレス, メールアドレス(確認)), experiment contact (電話番号, 郵便番号, 住所), sample details (試料数, 試料送付予定日, カセット認証用バーコードの貸し出し希望), and experimental end handling (実験終了後の試料の取り扱い). Below the form is a table for "Chemical Substances to be Carried" and a footer with keyboard navigation instructions.

# 試料・サンプルリストファイルの準備

1. Unipuckの16番ポートにUnipuck識別用のバーコードピン(\*)を入れる。



2. 試料を凍結し、Unipuckに装填する。
3. サンプルリストファイルを作成する。  
(Unipuck ID, Port, 測定条件)

(\*) バーコードピンが必要な方には提供します。

# PReMoへのサンプルリスト登録

# 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

**PReMo**  
PF Remote Monitoring system

Home Beamtime Screening Setting XmlViewer Logout Help

Year: 2019 ▾

Beamtime Screening

Order: 3 ContainerID: FY-01 Dxscan: Done Comment: Add comment

Port: 3 Snapshot: Done Runs: Done

Barcode: 30mM\_CCB\_10mM\_GSH (02-28 17:56 sbguser) Refresh

Protein: DmNobo Process:

Crystall: DmNobo\_003

**BL-1A** 2019-02-28

**BL-5A** 2019-03-03 2019-03-03 2019-03-05

**BL-17A** 2019-03-01 2019-03-09

**AR-NW12A**

**AR-NE3A** 2019-03-08

Dxscan

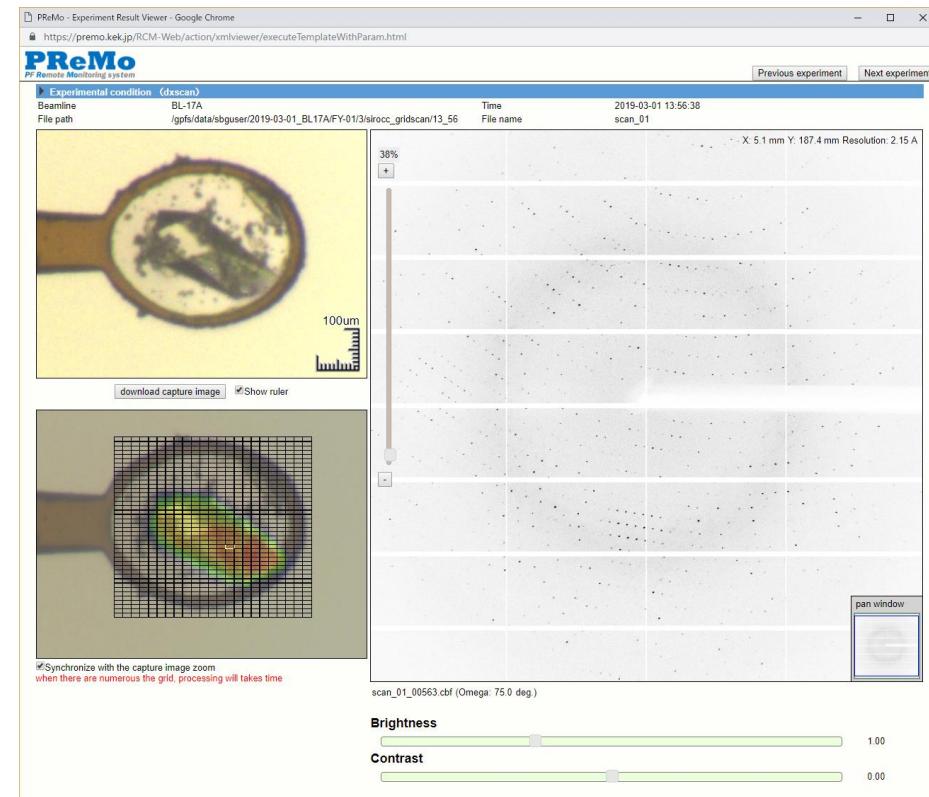
Snapshot

Capture

Runs

**Data statistics**

	Total	Inner	Outer
<b>Resolution</b>	46.50	46.50	1.65
-	1.62	8.87	1.62
<b>Rmerge</b>	0.043	0.019	0.993
<b>I/signal</b>	27.8	79.7	2.3
<b>Completeness</b>	98.0	99.1	81.2
<b>Redundancy</b>	12.7	10.7	8.6

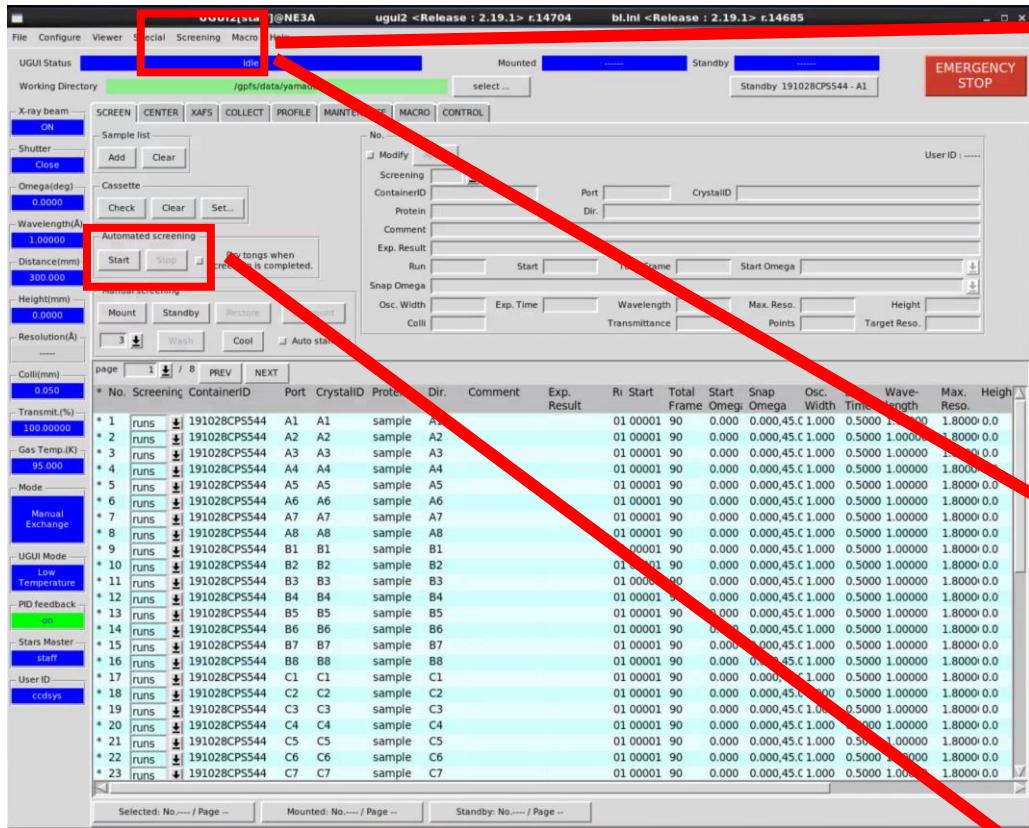


# 2018年度利用実績

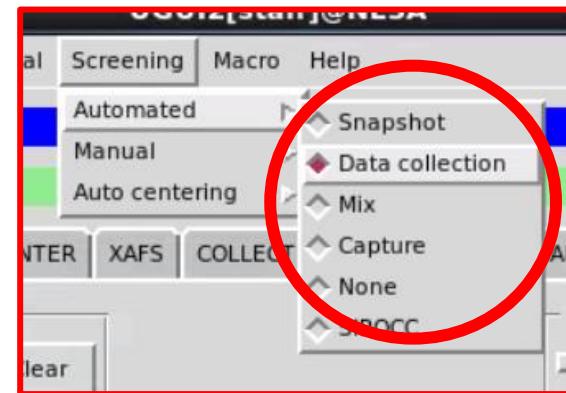
Date	Beamline	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	Unipuck数	Sample数
2018/5/18	AR-NE3A	●	●	●													12	174
2018/5/25	AR-NE3A	●	●														4	60
2018/6/1	AR-NE3A	●	●	●													6	85
2018/6/8	AR-NE3A	●	●		●												10	140
2018/6/15	AR-NE3A		●	●	●												10	150
2018/6/22	AR-NE3A	●	●														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			●				●	●				●				15	286

利用者数は徐々に増えてきている。

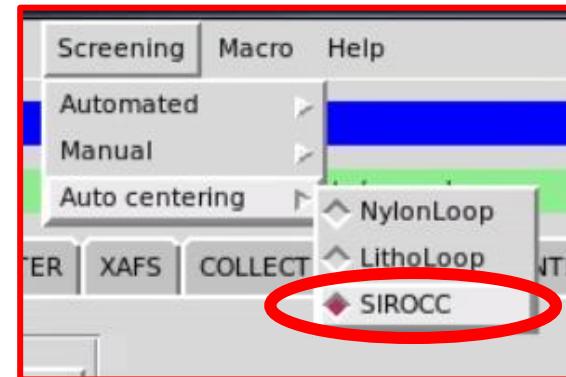
# ユーザーによる全自动測定



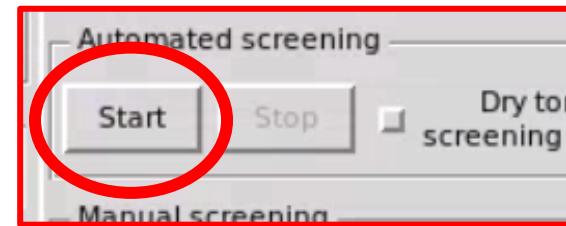
① 自动测定のモード設定



② 自动センタリング設定



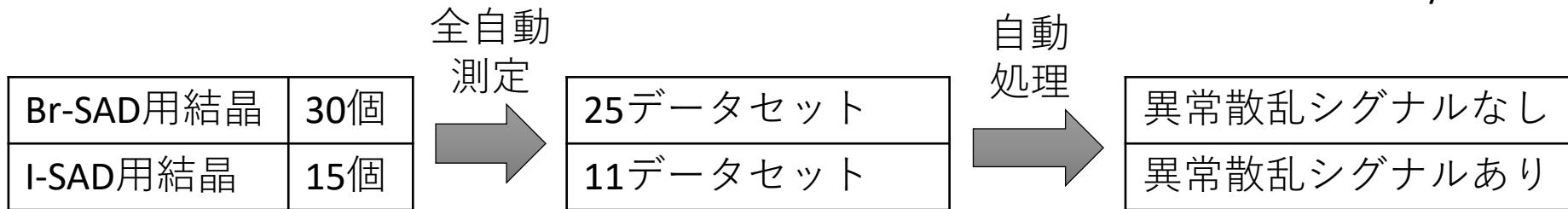
③ 自动测定開始



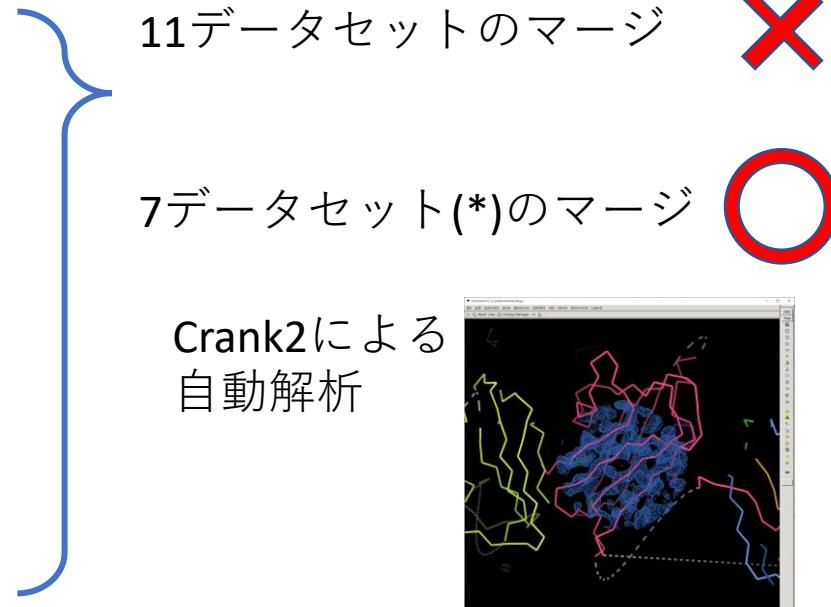
# 最近の利用例1 (東大薬 長江雅倫博士)

Br-SADもしくはI-SADによる構造解析

145 a.a.  
C2  
6 molecules/ASU



ContainerID	Port	Space group	Max. reso.	ISa	SigAno	Merge
CPS-1634	1	C 1 2 1	2.23	20.59	1.854	*
CPS-1634	2	C 1 2 1	2.42	21.81	1.522	*
CPS-1634	4	C 1 2 1	2.91	13.1	1.148	
CPS-1634	8	C 1 2 1	2.57	23.83	1.464	*
CPS-1634	9	C 1 2 1	3.12	7.92	1.109	
CPS-1634	10	C 1 2 1	2.57	8.41	1.167	
CPS-1634	11	C 1 2 1	2.58	19.84	1.498	*
CPS-1634	12	C 1 2 1	2.56	20.41	1.309	*
CPS-1634	13	C 1 2 1	2.52	6.88	1.015	
CPS-1634	14	C 1 2 1	2.6	15.39	1.414	*
CPS-1634	15	C 1 2 1	2.77	15.94	1.326	*



# 最近の利用例2 (上智大 近藤次郎博士)



VIP DNA Nanotechnology Very Important Paper

International Edition: DOI: 10.1002/anie.201906766  
German Edition: DOI: 10.1002/ange.201906766

## Crystal structure of a NIR-Emitting DNA-Stabilized Ag<sub>16</sub> Nanocluster

Cecilia Cerretani, Hiroki Kanazawa, Tom Vosch,\* and Jiro Kondo\*

**Abstract:** DNA has been used as a scaffold to stabilize small, atomically monodisperse silver nanoclusters, which have attracted attention due to their intriguing photophysical properties. Herein, we describe the X-ray crystal structure of a DNA-encapsulated, near-infrared emitting Ag<sub>16</sub> nanocluster (DNA-Ag<sub>16</sub>NC). The asymmetric unit of the crystal contains two DNA-Ag<sub>16</sub>NCs and the crystal packing between the DNA-Ag<sub>16</sub>NCs is promoted by several interactions, such as two silver-mediated base pairs between 3'-terminal adenines, two phosphate-Ca<sup>2+</sup>-phosphate interactions, and π-stacking between two neighboring thymines. Each Ag<sub>16</sub>NC is confined by two DNA decamers that take on a horse-shoe-like conformation and is almost fully shielded from the solvent environment. This structural insight will aid in the determination of the structure/photophysical property relationship for this class of emitters and opens up new research opportunities in fluorescence imaging and sensing using noble-metal clusters.

AgNCs are known for their remarkable fluorescence properties in comparison to other noble-metal clusters,<sup>[7]</sup> and DNA-AgNCs have so far primarily found applications as fluorescence-based sensors.<sup>[8]</sup> Given the increasing interest in thiol ligands for stabilizing monodisperse noble-metal nano-clusters,<sup>[9]</sup> we present here a DNA sequence that is a biocompatible water-soluble alternative scaffold for creating an Ag<sub>16</sub>NC.

The NIR-emitting DNA-Ag<sub>16</sub>NC was formed in solution by two DNA decamer fragments 5'-CACCTAGCGA-3', purified by HPLC and then crystallized by the hanging-drop vapor-diffusion method in an environment containing 3-(N-morpholino)propanesulfonic acid (pH 7), spermine, Ca(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, and polyethylene glycol 3350 at 293 K (see the Supporting Information). The sequence employed here was selected from a large data set developed by Copp et al. who used machine learning tools for prediction of sequences that stabilize fluorescent AgNCs with decimated colors.<sup>[10]</sup> In order

Cerretani et. al. Angew. Chem. Int. Ed. (2019)

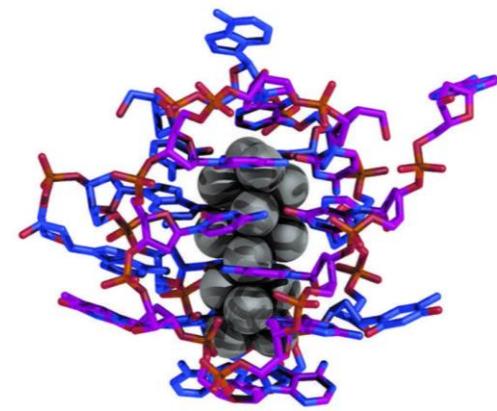
16個の銀原子をDNAでコーティングしたナノ蛍光物質「DNA-銀ナノクラスター」の立体構造解析に成功

物構研トピックス  
2019年9月17日

上智大学理工学部物質生命理工学科・近藤次郎准教授の研究グループは、コペンハーゲン大学のTom Vosch准教授らと共同で、16個の銀原子をDNAでコーティングしたナノサイズの蛍光物質「DNA-銀ナノクラスター」の立体構造を観察することに成功しました。

金属をナノメートルサイズの超微粒子にすると、固体の金属とは全く異なる性質を示すことが知られており、機能性材料としても注目されています。本研究の対象となった「DNA-銀ナノクラスター」は、赤色光（近赤外線）の蛍光を発するという性質を持っており、生物の遺伝物質であるDNAと人体に無害な金属である銀でできていることから、細胞内の生体分子の可視化や、それに基づく病気の診断など、幅広い分野への応用が期待されています。

研究グループはフォトンファクトリーのBL-17Aにおいて、全自動測定システムを活用した放射光X線結晶構造解析を行い、「DNA-銀ナノクラスター」の立体構造を解析し、16個の銀原子のクラスターに2本のDNAが巻きつけてコーティングしている様子を観察することに成功しました。この結果によって、今後は立体構造情報に基づいた銀ナノクラスターの精密なデザインが可能になると期待できます。



DNA-銀ナノクラスターの立体構造

物構研トピックス (2019/9/27)

研究グループはフォトンファクトリーのBL-17Aにおいて、全自動測定システムを活用した放射光X線結晶構造解析を行い、「DNA-銀ナノクラスター」の立体構造を解析し、16個の銀原子のクラスターに2本のDNAが

# 【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・・・

# 回折データ処理・解析パイプライン

2019年11月よりパイプラインのカスタマイズが  
ユーザー毎で可能になります。

The screenshot shows the PReMo interface with a navigation bar at the top. The 'Setting' tab is selected. On the right, there is a sidebar with 'User: premodev' and 'Group: premodev'. Below that is a section titled 'Custom Node' with a 'Pipeline' tab selected. The main area displays a tree view of beamtimes: 'Beamtime' (selected), 'Screening', 'BL-1A', and 'BL-5A'. Under 'Beamtime', there are buttons for 'Check all', 'Uncheck all', 'Exchange (2)', and 'Dxscan (4)'. The 'Beamtime' tab is highlighted.

This screenshot shows a list of pipelines. The table has columns: Action, Type, Name, Status, and Comment. There are four rows:

Action	Type	Name	Status	Comment
Edit	Process	FastXDS	Active	Simple and fast XDS pipeline run immediately after data collection
Edit	Process	Xia2-DIALS	Inactive	Xia2 with --pipeline=dials option (DIALS)
Edit	Process	Xia2-XDS	Inactive	XIA2 with --pipeline=3dii option (XDS)
Edit	Analysis	Dimple	Active	Ligand identification pipeline in CCP4. You need "Model" column in sample list file (.csv).

At the bottom right of the table is a 'Close' button.

使用可能パイプラインリスト

This screenshot shows a 'Pipeline setting' dialog box. It includes fields for 'Pipeline name' (FastXDS), 'Status' (Active), and a table for parameters:

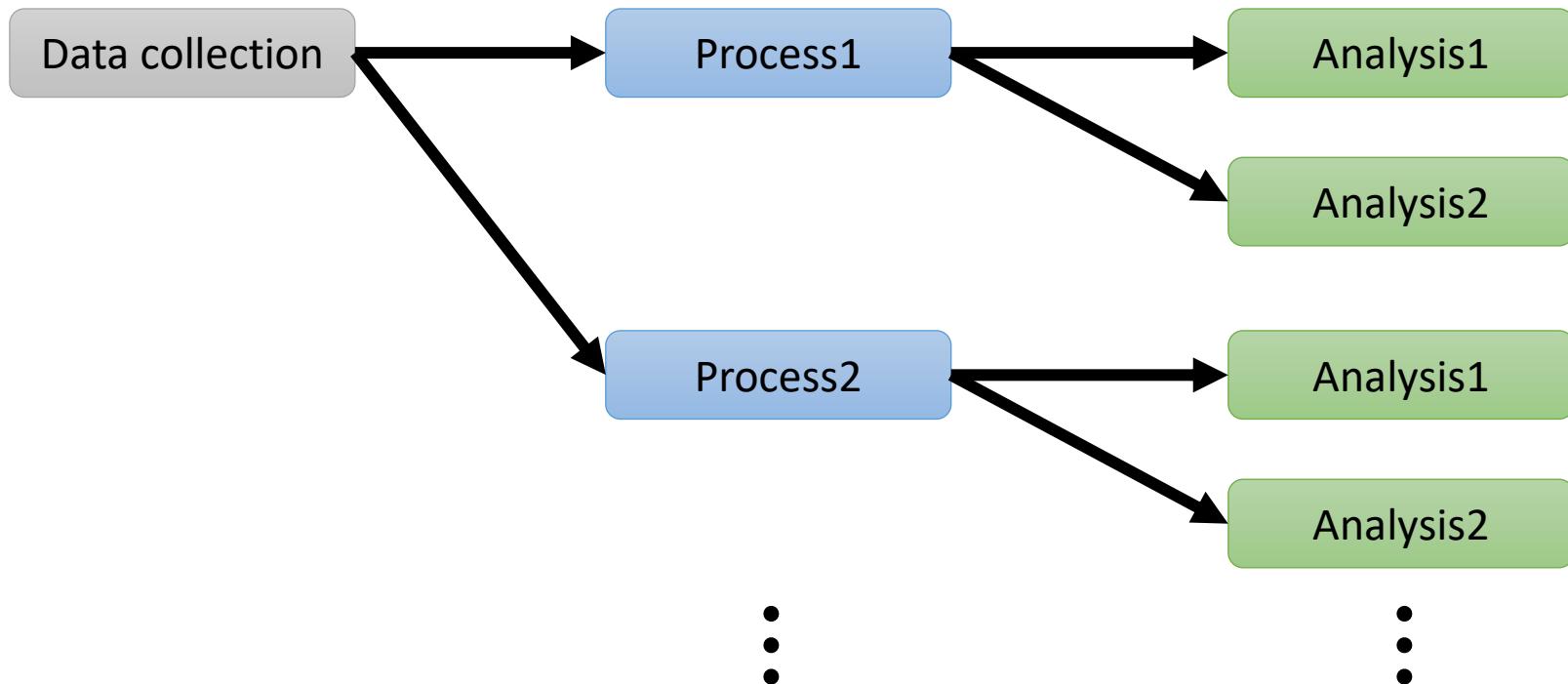
Name	Value	Default	Type	Comment
thresholdItem	<input checked="" type="checkbox"/> ioversigma <input checked="" type="checkbox"/> ccharif <input type="checkbox"/> rmerge	iversigma	string	Statistics for resolution cut-off
thresholdIoversigma	2.0	2.0	float	I/sigma
thresholdCchalf	0.5	0.5	float	CC1/2
thresholdRmerge	0.6	0.6	float	Rmerge

At the bottom right are 'Apply' and 'Close' buttons.

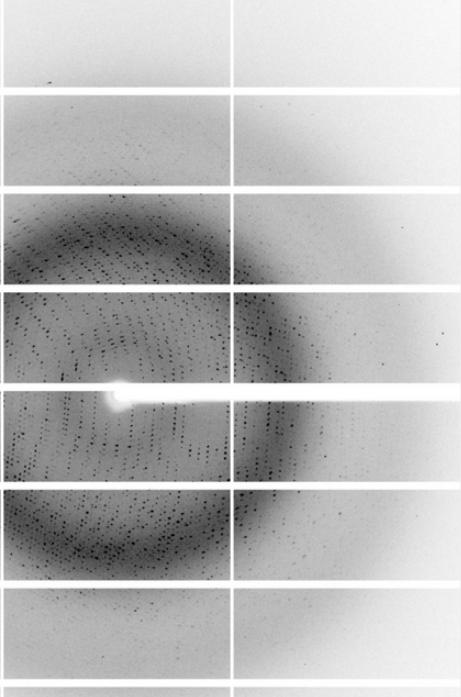
パイプラインのパラメータ設定

# PReMoの自動解析パイプラインの流れ

Type	Software
Process	FastXDS: Run immediately after data collection DIALS, XIA2(XDS), XIA2(DIALS), AUTOPROC, ...
Analysis	DIMPLE(CCP4): Ligand identification COMPASS: MR-SAD, MR, Ligand identification



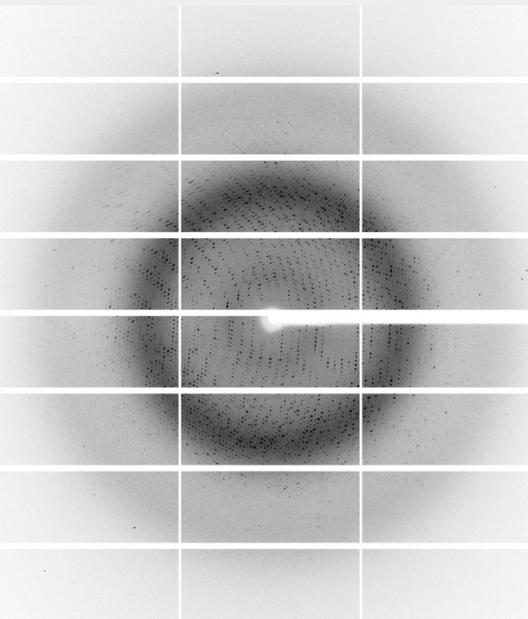
# 複数パイプラインの実行結果例

<p>2019-03-08 20:42:43 Runs</p> <p><b>Directory:</b> /gpfs/data/sbguser/2019-03-08_AR-NE3A001/FY-02/1/osc</p> <p><b>File prefix:</b> collect_01</p> <p><b>Detector distance:</b> 201.1 mm</p> <p><b>Detector height:</b> 0 mm</p> <p><b>Wavelength:</b> 1.0000 Å</p> <p><b>Maximum resolution:</b> 1.80 Å</p> <p><b>Slit size (H x V):</b> 0.2000 x 0.2000 mm<sup>2</sup></p> <p><b>Start omega:</b> 150.0 deg.</p> <p><b>Oscillation width:</b> 0.500 deg.</p> <p><b>Exposure time:</b> 0.2000 sec.</p> <p><b>Number of images:</b> 720 / 720 (Current / Total)</p> 	<p><b>FastXDS</b></p> <table border="1"><tr><td><b>Status</b></td><td>Processed</td><td>SHELXC/D/E</td></tr><tr><td><b>Resolution</b></td><td>48.17 - 1.95 (2.00 - 1.95)</td><td>DIMPLE</td></tr><tr><td><b>Completeness</b></td><td>100.0 (100.0)</td><td></td></tr><tr><td><b>Rmerge</b></td><td>0.157 (1.557)</td><td></td></tr><tr><td><b>I/sigma(I)</b></td><td>15.1 (2.1)</td><td></td></tr><tr><td><b>Mosaicity (sigma)</b></td><td>0.275</td><td></td></tr><tr><td><b>ISa</b></td><td>37.31</td><td></td></tr><tr><td><b>Spacegroup</b></td><td>I4122</td><td></td></tr><tr><td><b>Unit cell</b></td><td>152.3380 , 152.3380 , 147.0260 90.0000 , 90.0000 , 90.0000</td><td></td></tr><tr><td>-</td><td></td><td></td></tr></table> <p><b>Xia2-DIALS</b></p> <table border="1"><tr><td><b>Status</b></td><td>end</td><td>SHELXC/D/E</td></tr><tr><td><b>Resolution</b></td><td>40.32 - 1.86 (1.89 - 1.86)</td><td>DIMPLE</td></tr><tr><td><b>Completeness</b></td><td>99.9 (98.1)</td><td></td></tr><tr><td><b>Rmerge</b></td><td>0.999 (0.750)</td><td></td></tr><tr><td><b>I/sigma(I)</b></td><td>10.4 (1.2)</td><td></td></tr><tr><td><b>Unit cell</b></td><td>152.4763 , 152.4763 , 147.0857 90.0 , 90.0 , 90.0</td><td></td></tr><tr><td>-</td><td></td><td></td></tr></table>	<b>Status</b>	Processed	SHELXC/D/E	<b>Resolution</b>	48.17 - 1.95 (2.00 - 1.95)	DIMPLE	<b>Completeness</b>	100.0 (100.0)		<b>Rmerge</b>	0.157 (1.557)		<b>I/sigma(I)</b>	15.1 (2.1)		<b>Mosaicity (sigma)</b>	0.275		<b>ISa</b>	37.31		<b>Spacegroup</b>	I4122		<b>Unit cell</b>	152.3380 , 152.3380 , 147.0260 90.0000 , 90.0000 , 90.0000		-			<b>Status</b>	end	SHELXC/D/E	<b>Resolution</b>	40.32 - 1.86 (1.89 - 1.86)	DIMPLE	<b>Completeness</b>	99.9 (98.1)		<b>Rmerge</b>	0.999 (0.750)		<b>I/sigma(I)</b>	10.4 (1.2)		<b>Unit cell</b>	152.4763 , 152.4763 , 147.0857 90.0 , 90.0 , 90.0		-			<p>+ XYCORR.LP</p> <p>+ INIT.LP</p> <p>+ COLSPOT.LP</p> <p>+ IDXREF.LP</p> <p>+ DEFPIX.LP</p> <p>+ INTEGRATE.LP</p> <p>+ CORRECT.LP</p> <p>+ pointless.log</p> <p>+ XDSSTAT.LP</p> <p>+ aimless.log</p> <p>+ XDS.INP</p> <p>- XDS_ASCII.HKL <a href="#">Download</a></p> <p>- aimless.mtz <a href="#">Download</a></p> <p>+ inputParameters</p> <p>+ Dimple</p> <p>+ xia2.txt</p> <p>- xia2.html <a href="#">Download</a></p> <p>- AUTOMATIC_DEFAULT_scaled_unmerged.mtz <a href="#">Download</a></p> <p>+ inputParameters</p> <p>+ Dimple</p>
<b>Status</b>	Processed	SHELXC/D/E																																																			
<b>Resolution</b>	48.17 - 1.95 (2.00 - 1.95)	DIMPLE																																																			
<b>Completeness</b>	100.0 (100.0)																																																				
<b>Rmerge</b>	0.157 (1.557)																																																				
<b>I/sigma(I)</b>	15.1 (2.1)																																																				
<b>Mosaicity (sigma)</b>	0.275																																																				
<b>ISa</b>	37.31																																																				
<b>Spacegroup</b>	I4122																																																				
<b>Unit cell</b>	152.3380 , 152.3380 , 147.0260 90.0000 , 90.0000 , 90.0000																																																				
-																																																					
<b>Status</b>	end	SHELXC/D/E																																																			
<b>Resolution</b>	40.32 - 1.86 (1.89 - 1.86)	DIMPLE																																																			
<b>Completeness</b>	99.9 (98.1)																																																				
<b>Rmerge</b>	0.999 (0.750)																																																				
<b>I/sigma(I)</b>	10.4 (1.2)																																																				
<b>Unit cell</b>	152.4763 , 152.4763 , 147.0857 90.0 , 90.0 , 90.0																																																				
-																																																					

# 解析パイプライン(DIMPLE)の実行例

2019-03-08 20:42:43 Runs

**Directory:** /gpfs/data/sbguser/2019-03-08\_AR-NE3A001/FY-02/1/osc  
**File prefix:** collect\_01  
**Detector distance:** 201.1 mm  
**Detector height:** 0 mm  
**Wavelength:** 1.0000 Å  
**Maximum resolution:** 1.80 Å  
**Slit size (H x V):** 0.2000 x 0.2000 mm<sup>2</sup>  
**Start omega:** 150.0 deg.  
**Oscillation width:** 0.500 deg.  
**Exposure time:** 0.2000 sec.  
**Number of images:** 720 / 720 (Current / Total)



See Image with Result Viewer

FastXDS

<b>Status</b>	Processed
<b>Resolution</b>	48.17 - 1.95 (2.00 - 1.95)
<b>Completeness</b>	100.0 (100.0)
<b>Rmerge</b>	0.157 (1.557)
<b>I/sigma(I)</b>	15.1 (2.1)
<b>Mosaicity (sigma)</b>	0.275
<b>ISa</b>	37.31
<b>Spacegroup</b>	I4122
<b>Unit cell</b>	152.3380 , 152.3380 , 147.0260 90.0000 , 90.0000 , 90.0000

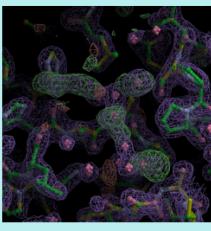
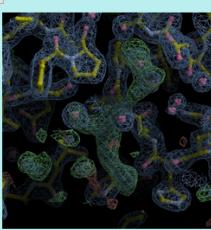
SHELXC/D/E  
DIMPLE

- + XYCORR.LP
- + INIT.LP
- + COLSPOT.LP
- + IDXREF.LP
- + DEFPPIX.LP
- + INTEGRATE.LP
- + CORRECT.LP
- + pointless.log
- + XDSSTAT.LP
- + aimless.log
- + XDS.INP
- XDS\_ASCII.HKL [Download](#)
- aimless.mtz [Download](#)
- + inputParameters

Dimple

Refmac5 0.2032 / 0.2364

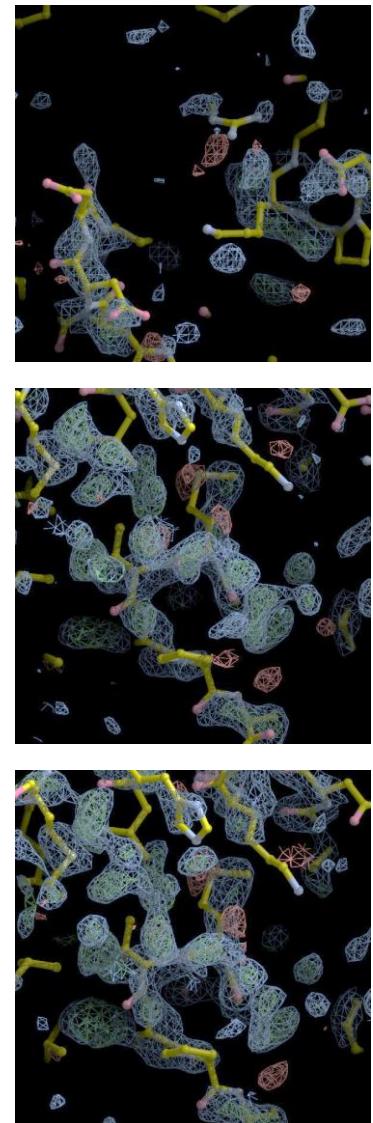
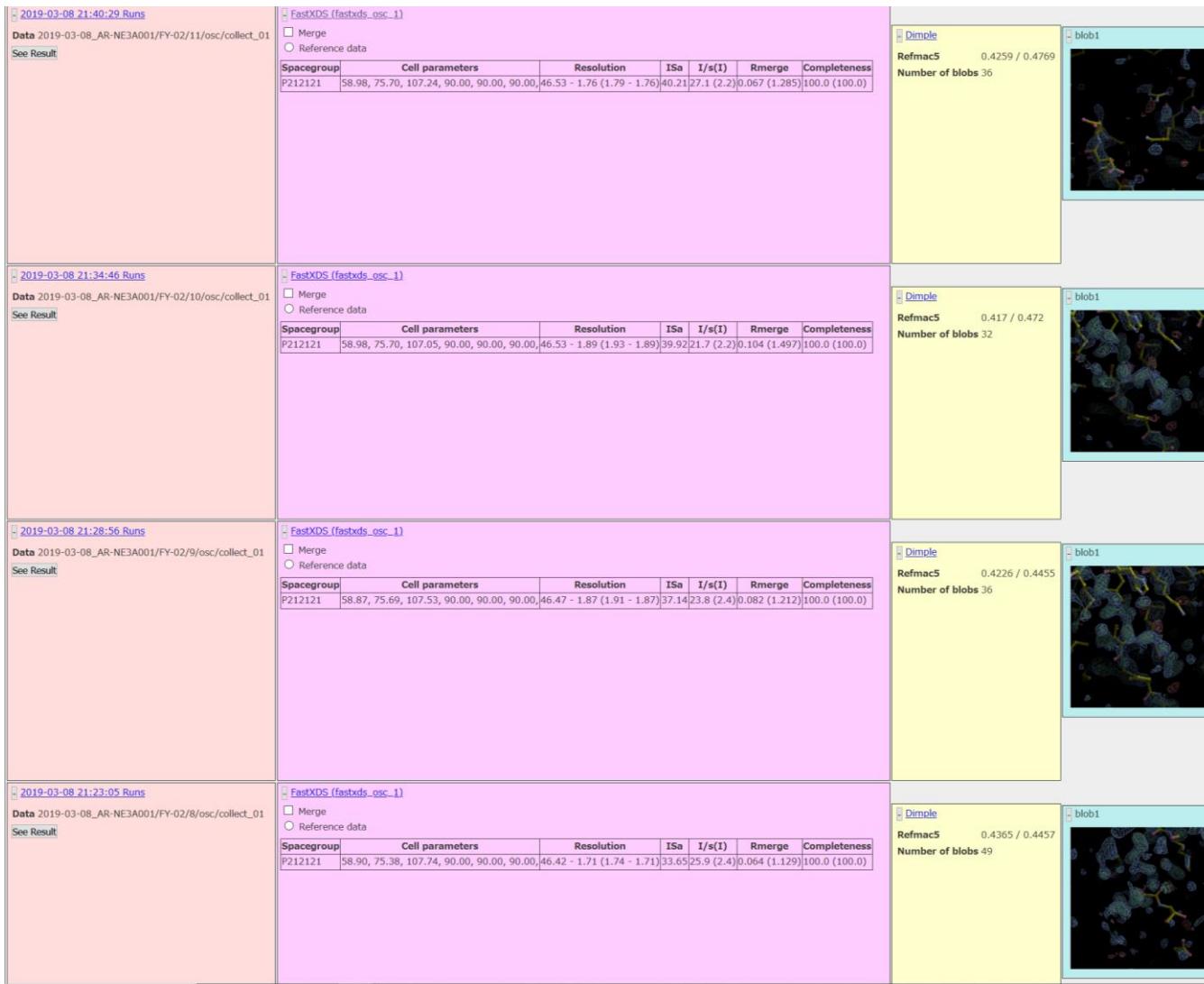
Number of blobs 6



inputParameters

- blob1
- blob2
- + screen.log
- + dimple.log

# リガンドスクリーニング



# まとめ

- PFタンパク質結晶構造解析ビームラインでは SIROCCを利用した全自动測定を推進している。
  - 全自动測定ビームタイム、 BINDSビームタイム
  - ユーザー自身がUGUISから実行することも可能である。
- データ収集後の処理・解析パイプラインをカスタマイズ可能な形で近日中にリリース予定である。

# 謝辞



## Structural biology research center

### Director

Toshiya Senda

### MX beamlines

Naohiro Matsugaki

Masahiko Hiraki

Masahide Hikita

### PXS

Ryuichi Kato

### SIROCC

Akira Shinoda

### COMPASS

Kotaro Koiwai

### Database

Ken-ichi Kawasaki

Masaki Ohno

And all other members

## Tsukuba University

Yusei Miura

Tetsuya Sakurai

## Funding



Basis for Supporting Innovative Drug Discovery and Life Science Research  
創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム



創薬等支援技術基盤プラットフォーム  
Platform for Drug Discovery, Informatics, and Structural Life Science

**Thank you for your attention!**

# 結晶学会年会2019 in 金沢 プログラム (最終日)

## 15:00～17:00 オーラルセッション(C会場)

15:00～16:00 座長 中村 顕(学習院大学)

OC-II-01 クマムシタンパク質はいいぞ

○福田 庸太・Kim JeeEun・Sim Kee Shin・楊 麗昕・松崎 琢朗・三浦 良将・井上 豪  
(阪大院薬・阪大院工)

OC-II-02 制限DNA グリコシラーゼ R.PabI による二本鎖DNAの折り畳み

○宮園 健一・王 徳龍・伊藤 友子・田之倉 優(東大院農生科)

OC-II-03 細胞周期チェックポイントに関わる 9-1-1 と RHINO の複合体のX線結晶構造解析

○飯田 奈央・原 幸大・櫻井 ひとみ・石川 吉伸・菱木 麻美・橋本 博(静岡県立大学薬学部)

OC-II-04 ラトランキュリンAはF型からG型へのコンフォメーション変化を誘起し

アクチン脱重合を促進する

○武田 修一・藤原 郁子・小田 俊郎・成田 哲博・前田 雄一郎  
(名大構造センター・大阪市大理生物・東海学院大)

16:00～16:15 休憩

16:15～17:00 座長 西川 幸志(兵庫県立大学)

OC-II-05 全自動結晶化観察システムの機能向上と外部利用

○加藤 龍一<sup>1</sup>・平木 雅彦<sup>2</sup>・山田 悠介<sup>1</sup>・田辺 幹雄<sup>1</sup>・千田 俊哉<sup>1</sup>

(<sup>1</sup>高エネ機構物構研放射光・<sup>2</sup>高エネ機構機械工学センター)

OC-II-06 全自動測定を活用したPFタンパク質結晶構造解析ビームラインの新しい利用法

○山田 悠介<sup>1,2</sup>・篠田 晃<sup>1</sup>・小祝 孝太郎<sup>1</sup>・松垣 直宏<sup>1,2</sup>・平木 雅彦<sup>2,3</sup>・引田 理英<sup>1,2</sup>  
千田 俊哉<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>高エネ機構物構研構造生物・<sup>2</sup>総研大高エネ・<sup>3</sup>高エネ機構共通基盤機械工学)

OC-II-07 自動X線結晶構造解析のための包括的MR-nativeSADパイプラインCOMPASS

○小祝 孝太郎<sup>1</sup>・山田 悠介<sup>1</sup>・深海 隆明<sup>2</sup>・鳥澤 拓也<sup>2</sup>・千田 俊哉<sup>1</sup>

(<sup>1</sup>高エネ機構物構研PF・<sup>2</sup>中外製薬)