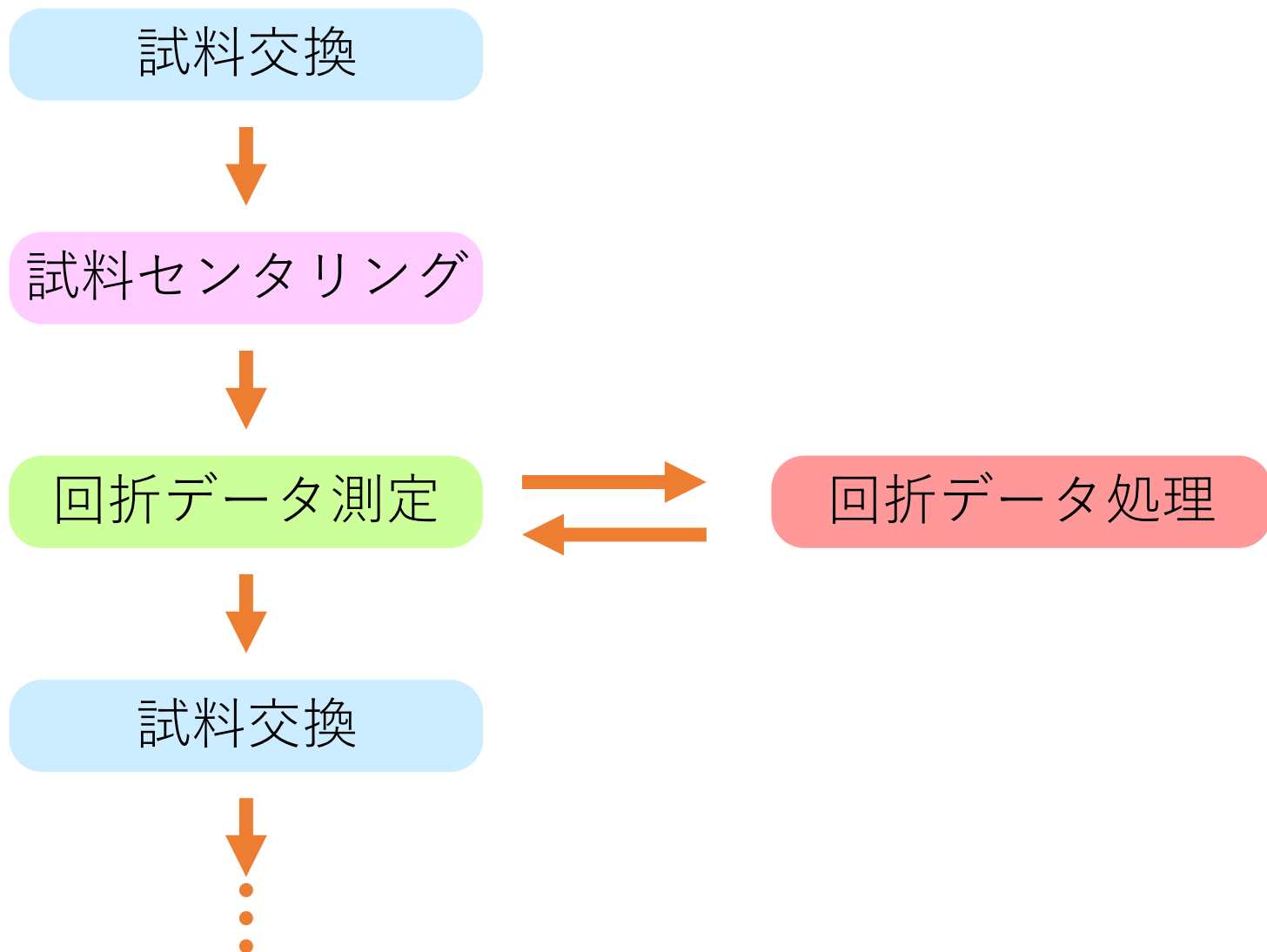


(PFの)全自動測定で出来ること、出来ないこと

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

SIROCC



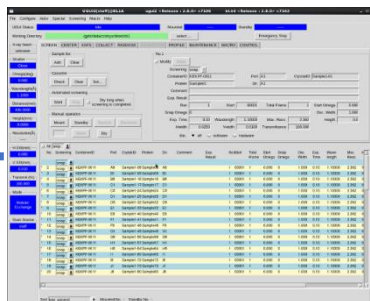
篠田晃

(KEK IMSS SBRC)

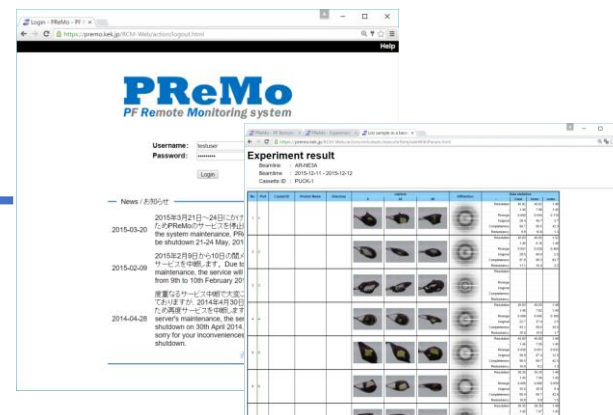
回折データ測定

データ処理

サンプル交換

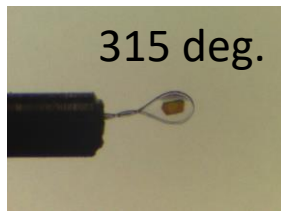
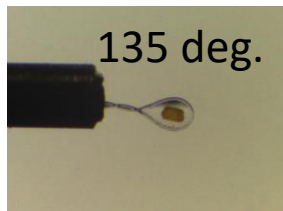
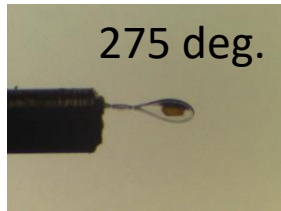
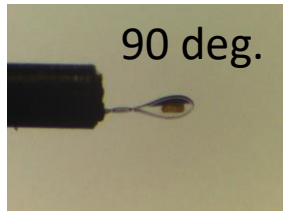
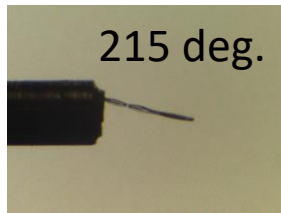
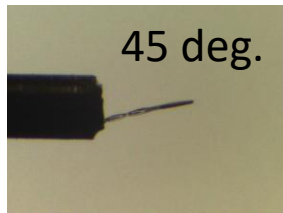
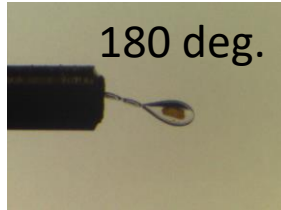
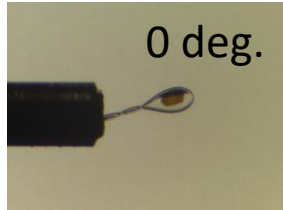


UGUISの改良

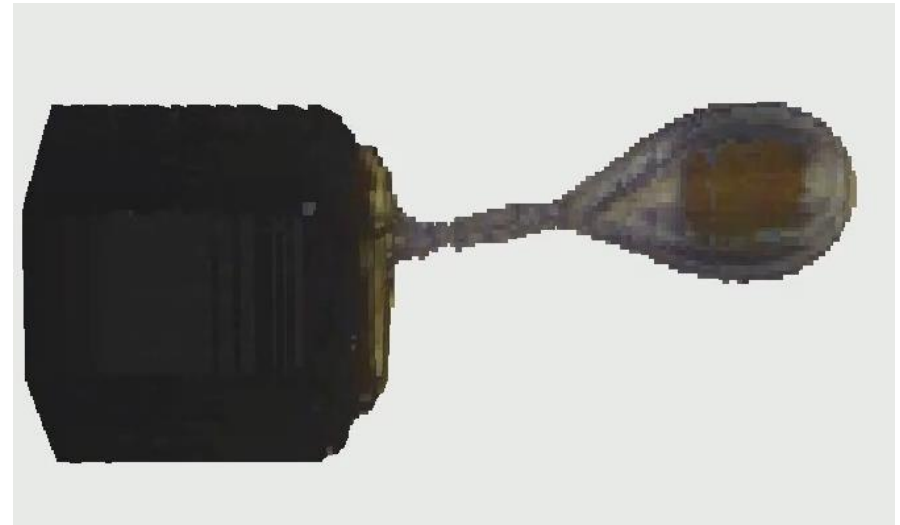
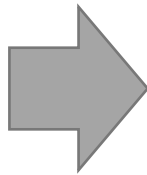


PReMoによる自動処理

SIROCCによる3次元ループ認識

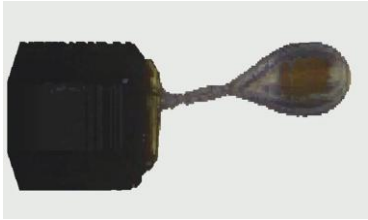


3D
reconstruction

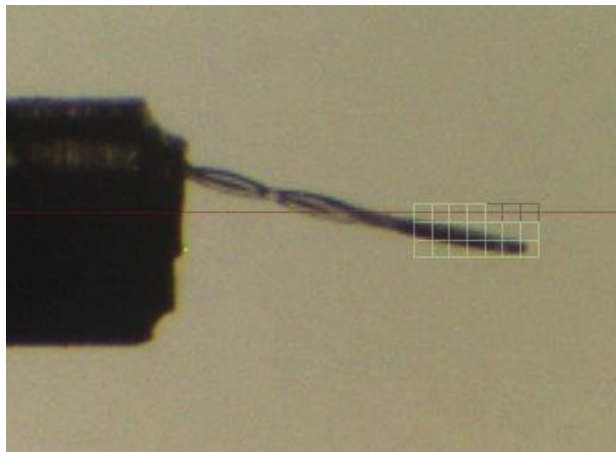
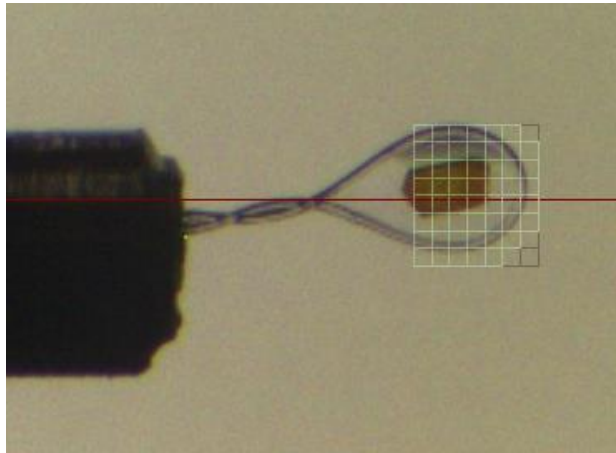


SIROCCによるグリッドスキャン

3D model



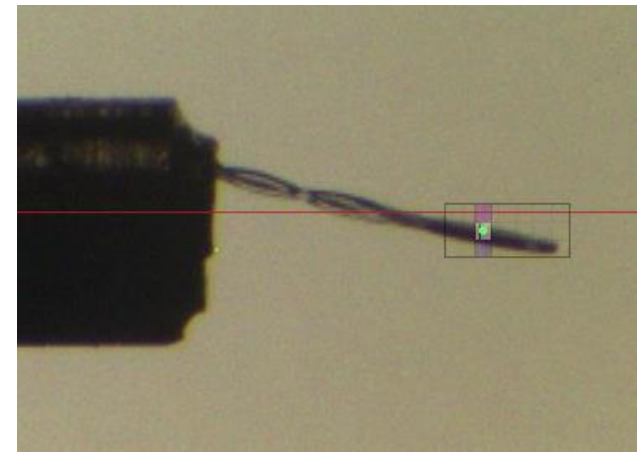
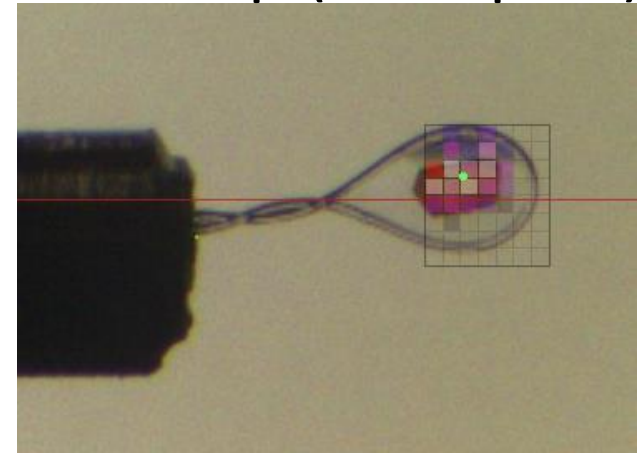
Grid



X-ray
scan



Heatmap (# of spots)



Applications Places System

UGUI2[staff]@NE3A

ugui2 <Alpha release : trunk> r.14439

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

File Configure Viewer Special Screening Macro Help

UGUI Status ready, SCREEN Mounted KUBSC01 - 4 Standby KUBSC01 - 5

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

X-ray beam

ON

Shutter

Close

Omega(deg)

0.0000

Wavelength(Å)

1.00060

Distance(mm)

300.000

Height(mm)

0.0000

Resolution(Å)

1.600015

Coll.(mm)

0.200

Transmit(%)

100.00000

Gas Temp.(K)

95.0000

Mode

Robotic Exchange

UGUI Mode

Low Temperature

PID feedback

on

Stars Master

Start

User ID

miki

SCREEN CENTER XAFS COLLECT EXTRACTOR PROFILE MAINTENANCE MACRO CONTROL

Sample list

Add Clear

Cassette

Check Clear Set

Automated screening

Start Stop Dry tongs when screening is completed.

Manual operation

Mount Standby Remove Transport

3 Wash Dry Auto standby

No.4

Modify Apply

User ID : miki

Screening runs

ContainerID KUBSC01 Port 5 CrystalID p626g3e

Protein 1_add_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. 1.600000 Height 0.0

Coll. 0.200 Transmittance 100.00

page 1 / 1 PREV NEXT

* No.	Screening	ContainerID	Port	CrystalID	Protein	Dir.	Comment	Exp. Result	Rt	Start	Total Frame	Start Omega	Snap Omega	Osc. Width	Exp. Time	Wavelength
1	runs	KUBSC01	2	p626g3b	1_add_G_1 p626g2			Done	01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
2	runs	KUBSC01	3	p626g3c	1_add_G_2 p626g3			Done	01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	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	1.000
5 4	runs	KUBSC01	5	p626g3e	1_add_G_C p626g3				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 5	runs	KUBSC01	13	p628d7b	2_no_G_C p628d7				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 6	runs	KUBSC01	14	p628g12a	2_no_G_C p628g1				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 7	runs	KUBSC01	15	p628g12b	2_no_G_C p628g1				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 8	runs	KUBSC02	1	p628g12c	2_no_G_C p628g1				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 9	runs	KUBSC02	9	p630c9a	3_no_C_C p630c9				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 10	runs	KUBSC02	10	p630c9b	3_no_C_C p630c9				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 11	runs	KUBSC02	11	p630c9c	3_no_C_C p630c9				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 12	runs	KUBSC02	12	p630c10a	3_no_C_C p630c1				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 13	runs	KUBSC02	13	p632f5a	4_no_G_S p632f5				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 14	runs	KUBSC02	15	p633f9a	4_no_G_S p633f9				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 15	runs	KUBSC03	1	p633f9b	4_no_G_S p633f9				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 16	runs	KUBSC03	2	p633f10a	4_no_G_S p633f1				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 17	runs	KUBSC03	6	p633f1b	5_no_C_S p633f1				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 18	runs	KUBSC03	7	p633f3a	5_no_C_S p633f3				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 19	runs	KUBSC03	8	p633f8a	5_no_C_S p633f8				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 20	runs	KUBSC03	9	p634c1a	5_no_C_S p634c1				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 21	runs	KUBSC01	1	p626g3a	1_add_G_1 p626g3				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 22	runs	KUBSC01	6	p626g11a	1_add_G_1 p626g1				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000
* 23	runs	KUBSC01	7	p626g11b	1_add_G_1 p626g1				01	00001	1800	0.000	Current,Ci 0.200	0.1000	1.000	1.000

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

Adxv - collect_01_01800.cbf

Network Camera - Mozilla Firefox

localhost:8018/cgi-bin/init X Network Camera

webcam1.ne3a.kek.jp/CgiStart?page=Sing

Top Single Multi Buffered Image Support

NE3A-Exp-Rutch

Pan / Tilt

Zoom

Focus

AP

Presets 1 2 3 4 5 6 7 8

Presets

Brightness

Backlight

White Balance

Auto

Refresh Rate MPEG-4

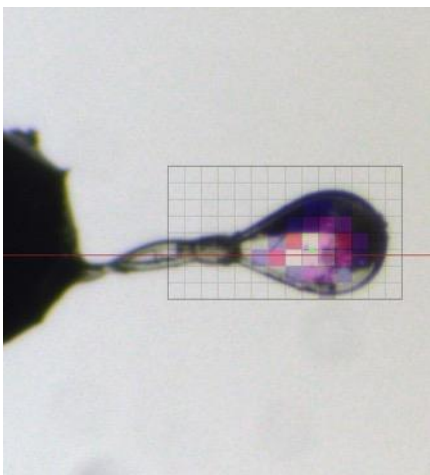
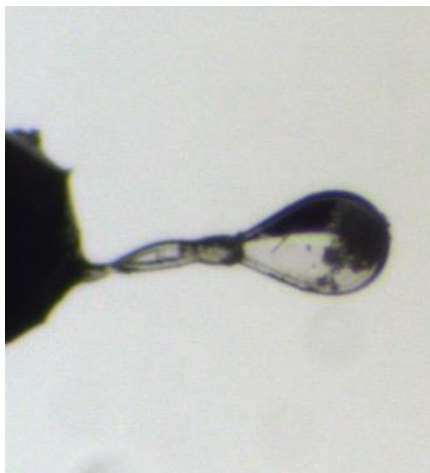
Resolution 640x480

Streaming Method Auto

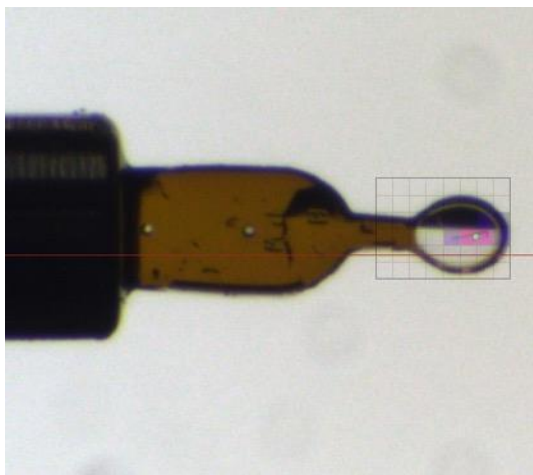
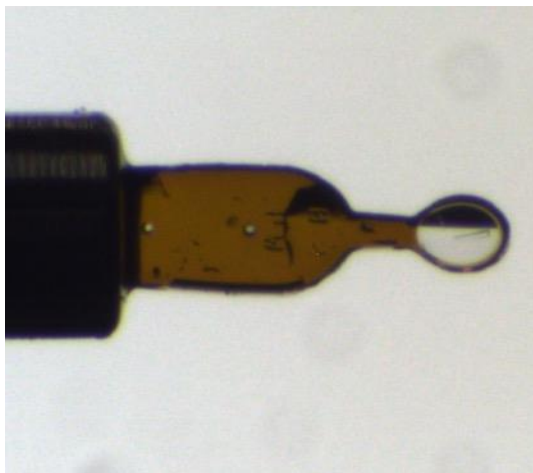
In case of no audio, please click here.
<http://panasonic.biz/htbty/shm/wkcam/support/info.html>
Running in IPv4 mode.

センタリング結果一例

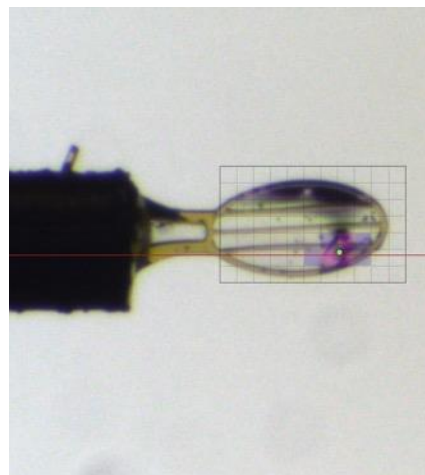
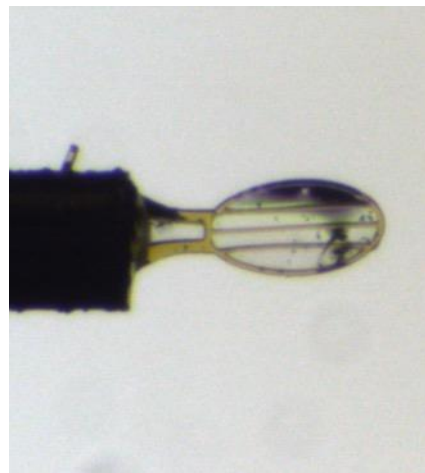
Nylon loop



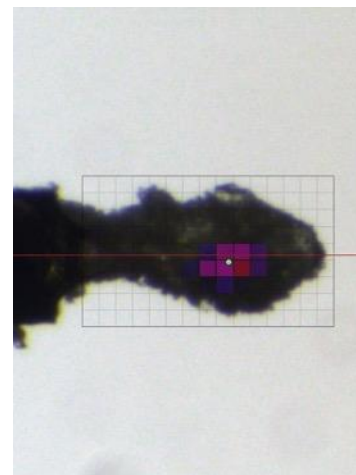
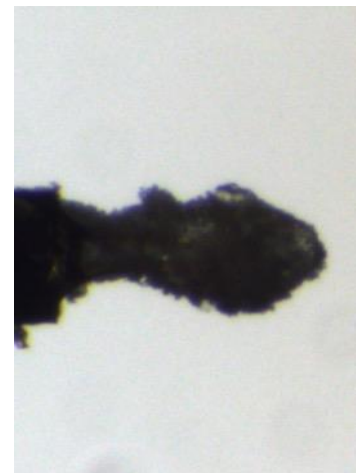
Litholoop



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

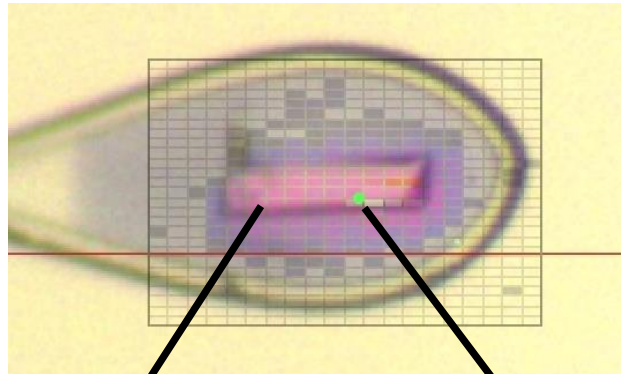
- X線を用いたタンパク質結晶の認識
- 重心位置1点でのスナップショットorデータセット測定(測定条件はあらかじめ決定)
- 結晶内での回折能比較(X線スキンの結果の目視)

出来ないこと

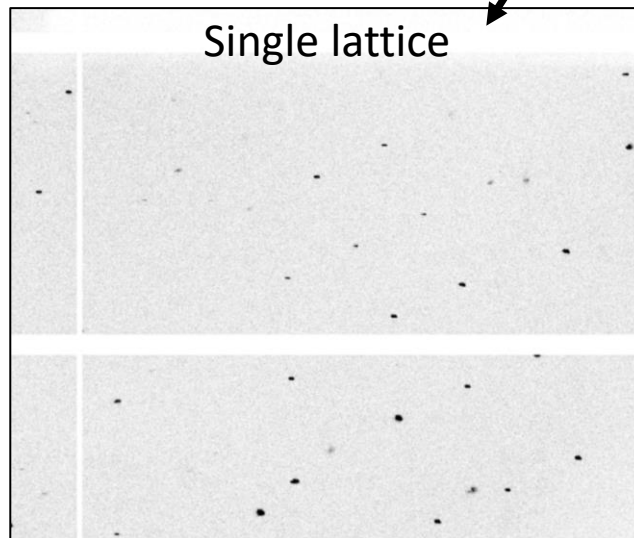
- 測定条件の自動決定
- 結晶内での多点測定や最適位置の同定
- 結晶1個1個についてベストな条件でデータを取るシステムではない

不均一な結晶で起きる問題例

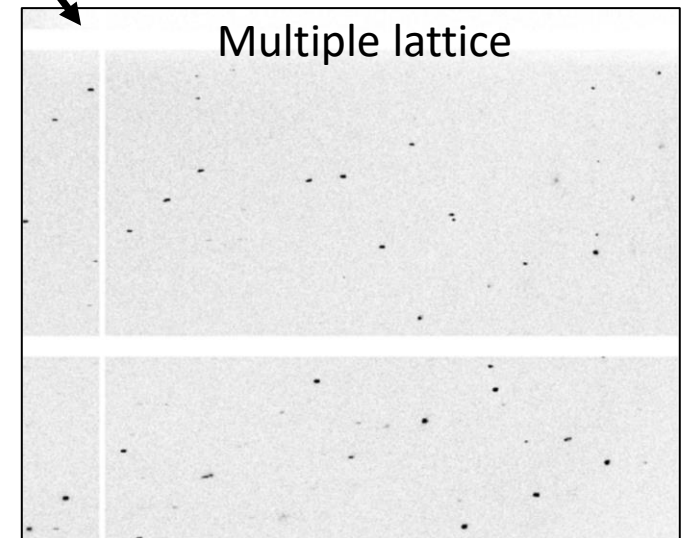
Because SIROCC recognizes a protein crystal based on the number of diffraction spots, SIROCC tends to choose a portion of multiple lattice.



Courtesy of Dr. Kudo
(RIKEN)



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



SG: $P1$, R_{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

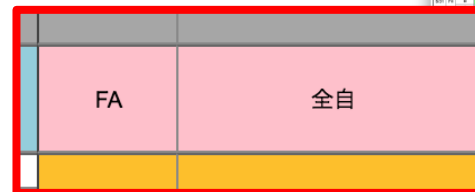
3. (施設利用) 契約時に全自動測定オプションを選択する。

4. UGUIのメニューでユーザーが実行する。

全自動測定ビームタイム

週1~2日で全自動測定ビーム
タイムを設定

G型課題保有者が申請可能



ビームタイム表

1. 全自動測定の申請
(4営業日前まで)

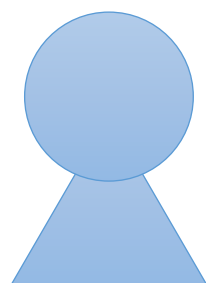
2. 試料、HDDの送付
PReMoへのサンプル
リスト登録

5. 試料、HDDの返却

ビームライン
スタッフ



3. 試料の測定装置へのセット
4. 全自動測定



利用者



申請方法

1. PReMoにログインする。

News / お知らせ

- 2017-06-19 2017年6月20～21日...
す。当日は接続出来な
よろしく願います。Ti
maintenance on 2017
- 2017-05-22 2017年5月24日にシス
日は接続出来ないこと
く願います。Ti
maintenance on 2017
- 2015-03-20 2015年3月21日～24日
PReMoのサービスを停
maintenance, PReMo
May, 2015

2. 全自動ビームタイム申請をクリックする

Beamtime

Submit fully-automated beamtime

Request beamtime registration

No.	ContainerID	Port	Barcode	Protein
1	SEN017	1		BphA
2	SEN017	2		BphA
3	SEN017	3		BphA
4	SEN017	4		BphA
5	SEN017	5		BphA
6	SEN017	6		BphA
7	SEN017	7		BphA
8	SEN017	8		BphA
9	SEN017	9		BphA
10	SEN017	10		BphA
11	SEN017	11		BphA

3. 申請フォームに記入する

全自動ビームタイム利用申し込み

ビームタイム: 2018-11-30 09:30:00 - 2018-12-01 09:00:00 @ AR-NE3A

課題番号: []

氏名: []

メールアドレス: []

実験担当者: []

メールアドレス (確認): []

電話番号: []

郵便番号: []

住所: []

試料数: [] 個 Uni-puck: 1 個

試料送り予定日: []

カセット認識用バーコードピンの出し出し: ☐ 希望する ☒ 希望しない

実験終了後の試料の取り扱い: ☒ 試料を返送する ☐ 試料をPFIに保管する

備考: []

試料・化学薬品等持ち込みリスト

名称	形態	数量	目的	無害	可燃性	毒性	放射性	リスクレベル	その他
タンパク質結晶	結晶	1g以下	測定	○				なし	凍結状態のまま測定し、持ち帰る。

Tab次のセルへ移動 ↑↓上下のセルへ移動 Enter:下のセルへ移動

遺伝子組み換え体

遺伝子組み換え体を: ☐ 含む ☒ 含まない

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 - PF Remote Monitoring system

Home Screening Setting XmlViewer Logout Help

User: testuser
Group: testuser

Year: 2017

Beamtime

BL-1A
2017-01-12
2017-03-12
2017-04-12
2017-05-12

BL-5A
2017-01-12
2017-02-12
2017-03-12
2017-04-12
2017-05-12

BL-17A
2017-01-12
2017-04-12

AR-NW12A
2017-01-12
2017-05-12

AR-NE3A
2017-01-12

Create a screening task

The Cassette List File (.csv) ファイルを選択してください

The Sample List File (.csv) ファイルを選択してください

Options

☐ Read barcode for every sample on exchange

Input comment

Automatic data processing

Snapshot none

Data collection none

Input below when you do not have a cassette list file

Select Barcode Position

Stanford L 8 Unipuck 16

Input Barcode and Cassette IDs

	Barcode ID	Cassette ID
1	C0304AD634	KEKPF-0011
3		
5		
7		
9		
11		
12		

Apply Cancel

02:04:59	Snapshot	1.0000	230.0	1.0	0.5	1.4	2017-05-12_AR-NW12A/PF-0125/13/snap
02:04:53	Snapshot	1.0000	140.0	1.0	0.5	1.4	2017-05-12_AR-NW12A/PF-0125/13/snap

Select Barcode Position

Stanford L 8 Unipuck 16

Input Barcode and Cassette IDs

	Barcode ID	Cassette ID
1	C0304AD634	KEKPF-0011
3		



PReMoによる結果の閲覧

PReMo - PF Remote Monitoring

PF Remote Monitoring system

User: sbguser
Group: sbguser

Home Beamtime Screening Setting XmlViewer Logout Help

Year: 2019

Beamtime Screening

Order: 3
ContainerID: FY-01
Port: 3
Barcode: DmNobo
CrystalID: DmNobo_003

Dxscan Done
Snapshot Done
Runs: Done
Process:

Comment: 30mM_OCB, 10mM GSH (02-28 17:58 sbguser) [Add comment](#)

[Back to the screening list](#) [Next](#)

[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

PReMo
PF Remote Monitoring system

[Previous experiment](#) [Next experiment](#)

Experimental condition (dxscan)

Beamline: BL-17A
File path: /gifs/data/sbguser/2019-03-01_BL17A/FY-01/3/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

38%

100µm

[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

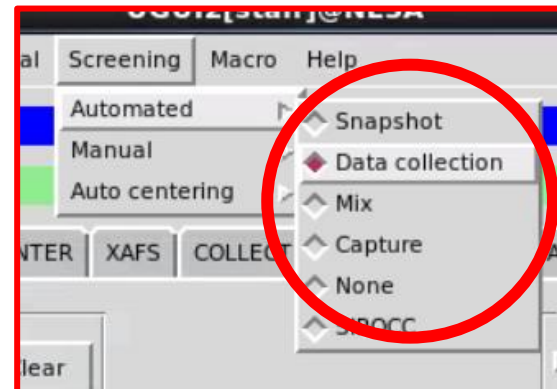
2018年度利用実績

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

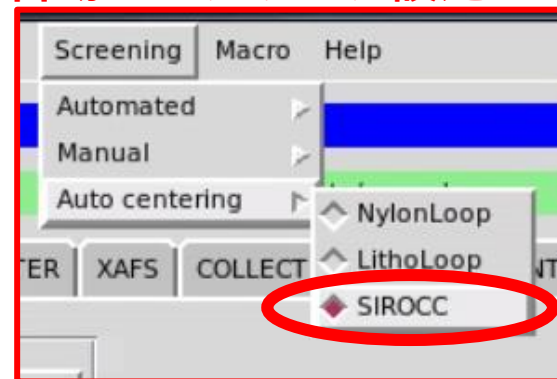
利用者数は徐々に増えてきている。

ユーザーによる全自動測定

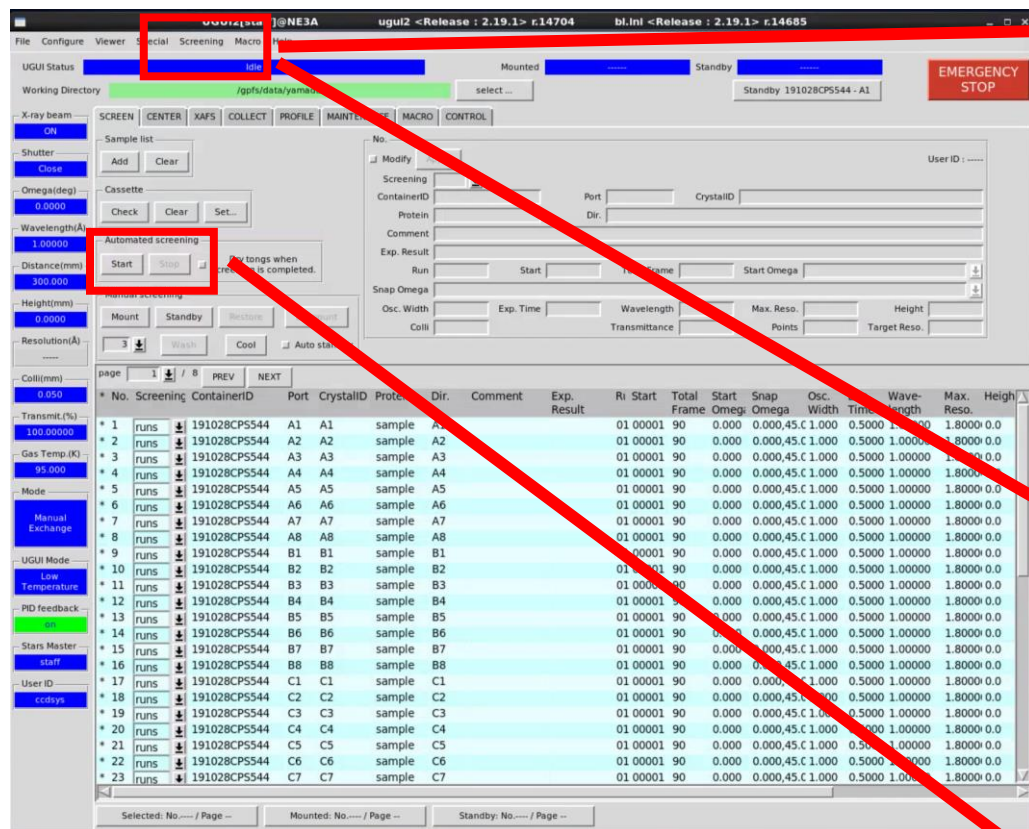
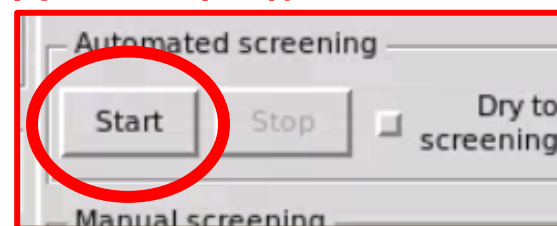
① 自動測定モード設定



② 自動センタリング設定



③ 自動測定開始



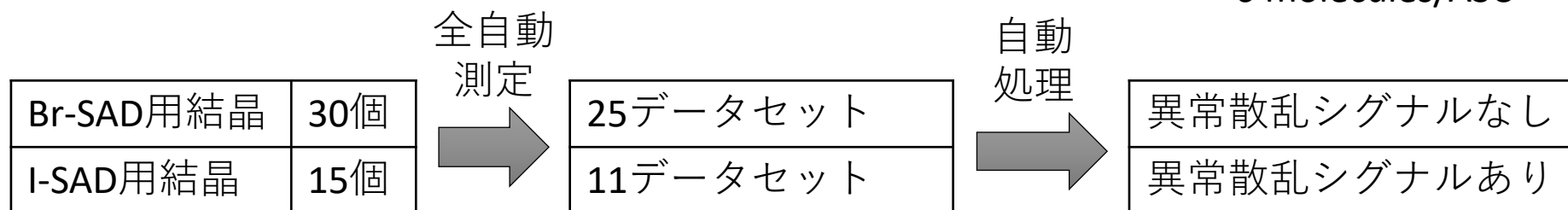
最近の利用例1 (東大薬 長江雅倫博士)

Br-SADもしくはI-SADによる構造解析

145 a.a.

C2

6 molecules/ASU

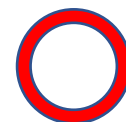


ContainerID	Port	Space group	Max. reso.	ISa	SigAno	Merge
CPS-1634	1	C 1 2 1	2.23	20.59	1.854	*
CPS-1634	2	C 1 2 1	2.42	21.81	1.522	*
CPS-1634	4	C 1 2 1	2.91	13.1	1.148	
CPS-1634	8	C 1 2 1	2.57	23.83	1.464	*
CPS-1634	9	C 1 2 1	3.12	7.92	1.109	
CPS-1634	10	C 1 2 1	2.57	8.41	1.167	
CPS-1634	11	C 1 2 1	2.58	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	*

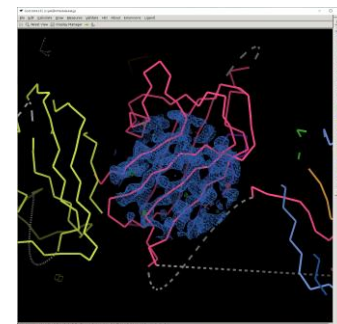
11データセットのマージ



7データセット(*)のマージ



Crank2による
自動解析



最近の利用例2 (上智大 近藤次郎博士)

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

GDCh

Communications

Angewandte
International Edition
Chemie

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 Ag₁₆ 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 Ag₁₆ nanocluster (DNA-Ag₁₆NC). The asymmetric unit of the crystal contains two DNA-Ag₁₆NCs and the crystal packing between the DNA-Ag₁₆NCs is promoted by several interactions, such as two silver-mediated base pairs between 3'-terminal adenines, two phosphate-Ca²⁺-phosphate interactions, and π -stacking between two neighboring thymines. Each Ag₁₆NC 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.

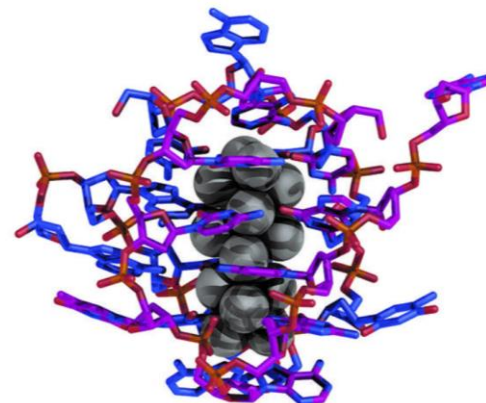
AgNCs are known for their remarkable fluorescence properties in comparison to other noble-metal clusters,^[7] and DNA-AgNCs have so far primarily found applications as fluorescence-based sensors.^[8] Given the increasing interest in thiol ligands for stabilizing monodisperse noble-metal nanoclusters,^[9] we present here a DNA sequence that is a biocompatible water-soluble alternative scaffold for creating an Ag₁₆NC.

The NIR-emitting DNA-Ag₁₆NC 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(NO₃)₂, 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 designed colors.^[10] In order

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、遠赤色光（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が巻きつい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。この成果によって、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

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

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。

PRemo
PF Remote Monitoring system

User: premodev
Group: premodev

Home Beamtime Screening **Setting** XmlViewer Logout Help

Year: 2019
Beamtime Screening
BL-1A
BL-5A

Beamtime: AR-NE3A
Date: 2019-03-08

Check all Uncheck all
☒ Exchange (2) ☒ Dxscan (4)

Custom Node
Pipeline

PRemo
PF Remote Monitoring system

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).

[Close](#)

使用可能パイプラインリスト

PRemo
PF Remote Monitoring system

Pipeline setting

Pipeline name : FastXDS
Status : **Active**

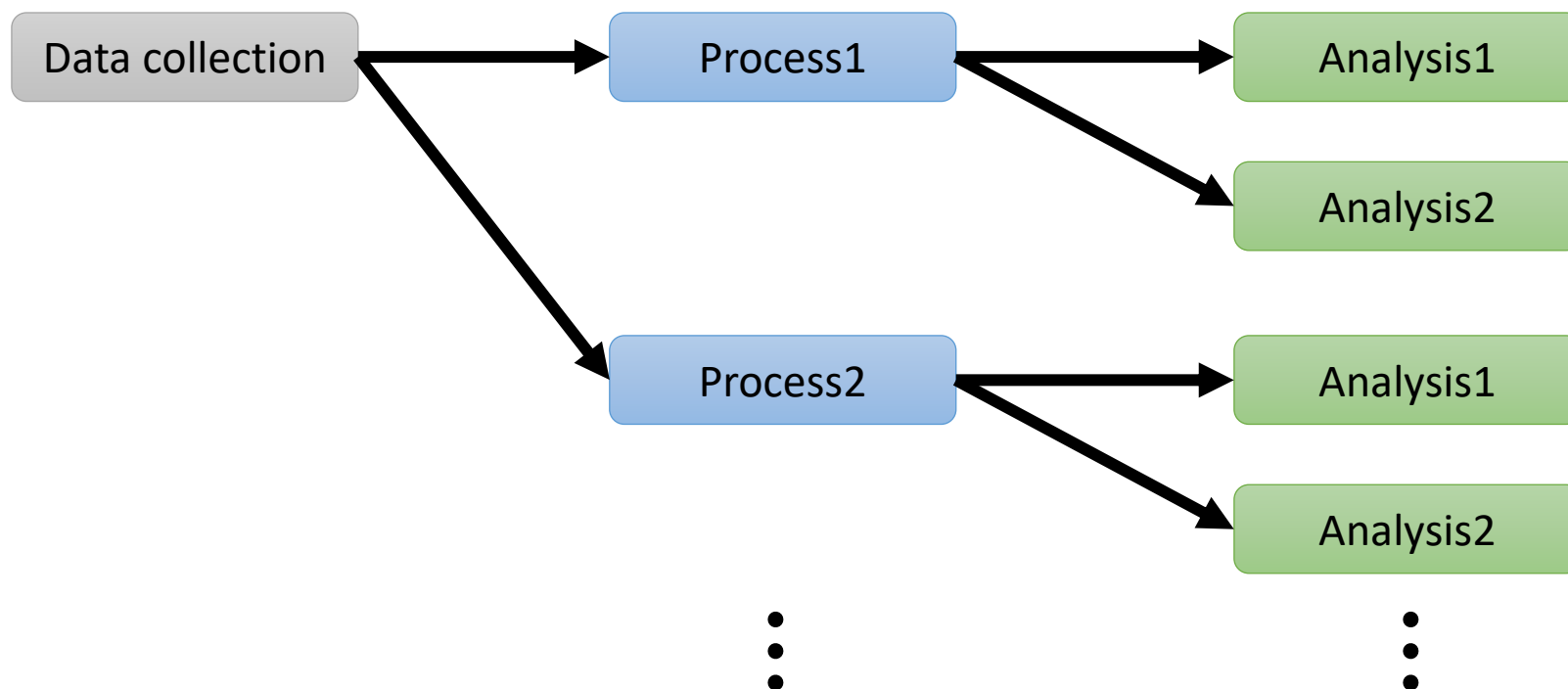
Name	Value	Default	Type	Comment
thresholdItem	<input checked="" type="checkbox"/> ioversigma <input checked="" type="checkbox"/> ccharif <input type="checkbox"/> rmerge	ioversigma	string	Statistics for resolution cut-off
thresholdIoversigma	2.0	2.0	float	I/sigma
thresholdCchalf	0.5	0.5	float	CC1/2
thresholdRmerge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

[Apply](#) [Close](#)

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

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 mm²

Start omega:

150.0 deg.

Oscillation width:

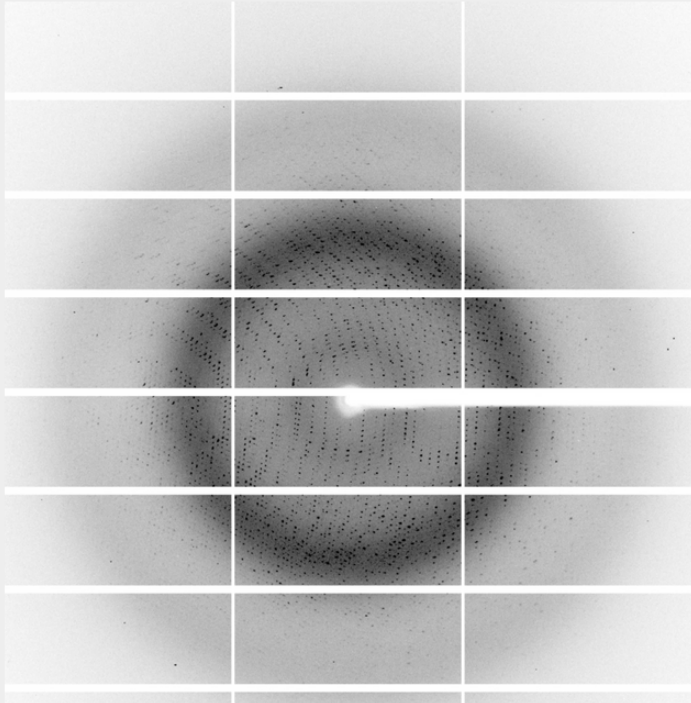
0.500 deg.

Exposure time:

0.2000 sec.

Number of images:

720 / 720 (Current / Total)



FastXDS

Status

Processed

SHELXC/D/E

Resolution

48.17 - 1.95 (2.00 - 1.95)

DIMPLE

Completeness

100.0 (100.0)

Rmerge

0.157 (1.557)

I/sigma(I)

15.1 (2.1)

Mosaicity (sigma)

0.275

ISa

37.31

Spacegroup

I4122

Unit cell

152.3380 , 152.3380 , 147.0260

-

90.0000 , 90.0000 , 90.0000

Xia2-DIALS

Status

end

SHELXC/D/E

Resolution

40.32 - 1.86 (1.89 - 1.86)

DIMPLE

Completeness

99.9 (98.1)

Rmerge

0.999 (0.750)

I/sigma(I)

10.4 (1.2)

Unit cell

152.4763 , 152.4763 , 147.0857

-

90.0 , 90.0 , 90.0

+ 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

+ xia2.txt

- xia2.html

Download

- AUTOMATIC_DEFAULT_scaled_unmerged.mtz

Download

+ inputParameters

+ Dimple

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 mm²
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

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

SHELXC/D/E
DIMPLE

+ XYCORR.LP
+ INIT.LP
+ COLSPOT.LP
+ IDXREF.LP
+ DEFPIX.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

2019-03-08 21:40:29 Runs

Data 2019-03-08_AR-NE3A001/FY-02/11/osc/collect_01

See Result

FastXDS (fastxds_osc_1)

☐ Merge

☐ Reference data

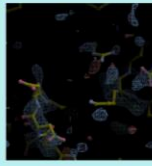
Spacegroup	Cell parameters	Resolution	ISa	I/s(I)	Rmerge	Completeness
P212121	58.98, 75.70, 107.24, 90.00, 90.00, 90.00	46.53 - 1.76 (1.79 - 1.76)	40.21	27.1 (2.2)	0.067 (1.285)	100.0 (100.0)

Dimple

Refmac5 0.4259 / 0.4769

Number of blobs 36

blob1



2019-03-08 21:34:46 Runs

Data 2019-03-08_AR-NE3A001/FY-02/10/osc/collect_01

See Result

FastXDS (fastxds_osc_1)

☐ Merge

☐ Reference data

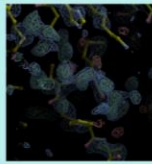
Spacegroup	Cell parameters	Resolution	ISa	I/s(I)	Rmerge	Completeness
P212121	58.98, 75.70, 107.05, 90.00, 90.00, 90.00	46.53 - 1.89 (1.93 - 1.89)	39.92	21.7 (2.2)	0.104 (1.497)	100.0 (100.0)

Dimple

Refmac5 0.417 / 0.472

Number of blobs 32

blob1



2019-03-08 21:28:56 Runs

Data 2019-03-08_AR-NE3A001/FY-02/9/osc/collect_01

See Result

FastXDS (fastxds_osc_1)

☐ Merge

☐ Reference data

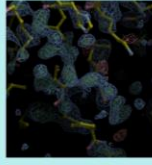
Spacegroup	Cell parameters	Resolution	ISa	I/s(I)	Rmerge	Completeness
P212121	58.87, 75.69, 107.53, 90.00, 90.00, 90.00	46.47 - 1.87 (1.91 - 1.87)	37.14	23.8 (2.4)	0.082 (1.212)	100.0 (100.0)

Dimple

Refmac5 0.4226 / 0.4455

Number of blobs 36

blob1



2019-03-08 21:23:05 Runs

Data 2019-03-08_AR-NE3A001/FY-02/8/osc/collect_01

See Result

FastXDS (fastxds_osc_1)

☐ Merge

☐ Reference data

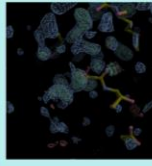
Spacegroup	Cell parameters	Resolution	ISa	I/s(I)	Rmerge	Completeness
P212121	58.90, 75.38, 107.74, 90.00, 90.00, 90.00	46.42 - 1.71 (1.74 - 1.71)	33.65	25.9 (2.4)	0.064 (1.129)	100.0 (100.0)

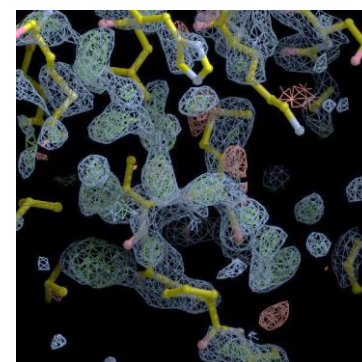
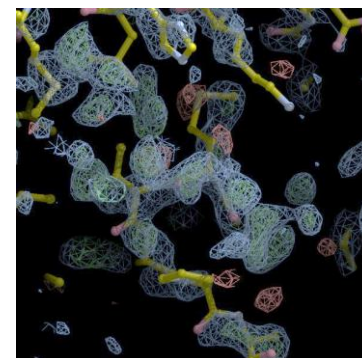
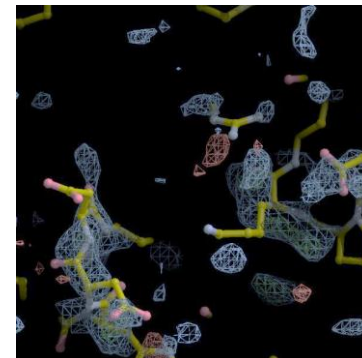
Dimple

Refmac5 0.4365 / 0.4457

Number of blobs 49

blob1





まとめ

- PFタンパク質結晶構造解析ビームラインではSIROCCを利用した全自動測定を推進している。
 - 全自動測定ビームタイム、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



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 颯(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 龍一¹・平木 雅彦²・山田 悠介¹・田辺 幹雄¹・千田 俊哉¹
(¹高エネ機構物構研放射光・²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^{1,2}・篠田 晃¹・小祝 孝太郎¹・松垣 直宏^{1,2}・平木 雅彦^{2,3}・引田 理英^{1,2}
千田 俊哉^{1,2} (¹高エネ機構物構研構造生物・²総研大高エネ・³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¹・山田 悠介¹・深海 隆明²・鳥澤 拓也²・千田 俊哉¹
(¹高エネ機構物構研 PF・²中外製薬)