全自動測定システムを用いた随時ビームタイム利用制度について

2018 年 5 月 11 日　山田悠介

KEK 物構研フォトンファクトリーのタンパク質 X 線結晶構造解析ビームラインでは、2018 年 5 月のビームタイム期より、全自動測定システムを用いた随時ビームタイム利用制度を開始します。この利用制度は、全自動測定ビームタイムと設定した日の 4 日前までに申請をして試料を送付すれば、全自動測定を行うというものです。

2018 年 5-6 月期ビームタイムでの全自動測定

対象課題:　PAC 採択の有効課題(https://www2.kek.jp/imss/pf/use/list/)

実施日	ビームライン	申請締め切り
5 月 18 日(金)	AR-NE3A	5 月 14 日(月) 正午
5 月 25 日(金)	AR-NE3A	5 月 21 日(月) 正午
6 月 1 日(金)	AR-NE3A	5 月 28 日(月) 正午
6 月 8 日(金)	AR-NE3A	6 月 4 日(月) 正午
6 月 15 日(金)	AR-NE3A	6 月 11 日(月) 正午
6 月 22 日(金)	AR-NE3A	6 月 18 日(月) 正午
6 月 28 日(木)	AR-NE3A	6 月 25 日(月) 正午

全自動測定システムについて

全自動測定システムでは、PAM による結晶交換、X 線スキャンによるタンパク質結晶の外形認識を用いたセンタリング、あらかじめ CSV ファイルに入力された測定条件でのデータ測定を行います。以下のような利用例が考えられます。

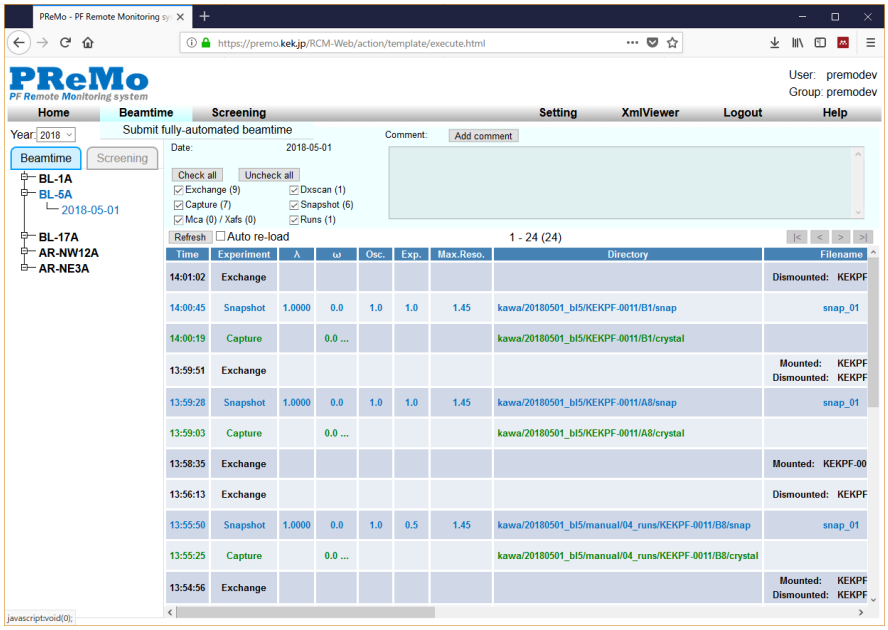
1. 得られた結晶についてすぐに測定を行いたい。
2. 自身のビームタイムの前に予備測定をして回折能チェックをしておきたい
3. 結晶の回折能がある程度分かっていて、たくさんの結晶からデータ測定をしたい

利用の流れ

1. 全自動ビームタイムの申請

1.1. PReMo(https://premo.kek.jp/RCM-Web/)にログインする。
ユーザー名とパスワードはビームラインで PC にログインする際に使用するものを使用してください。

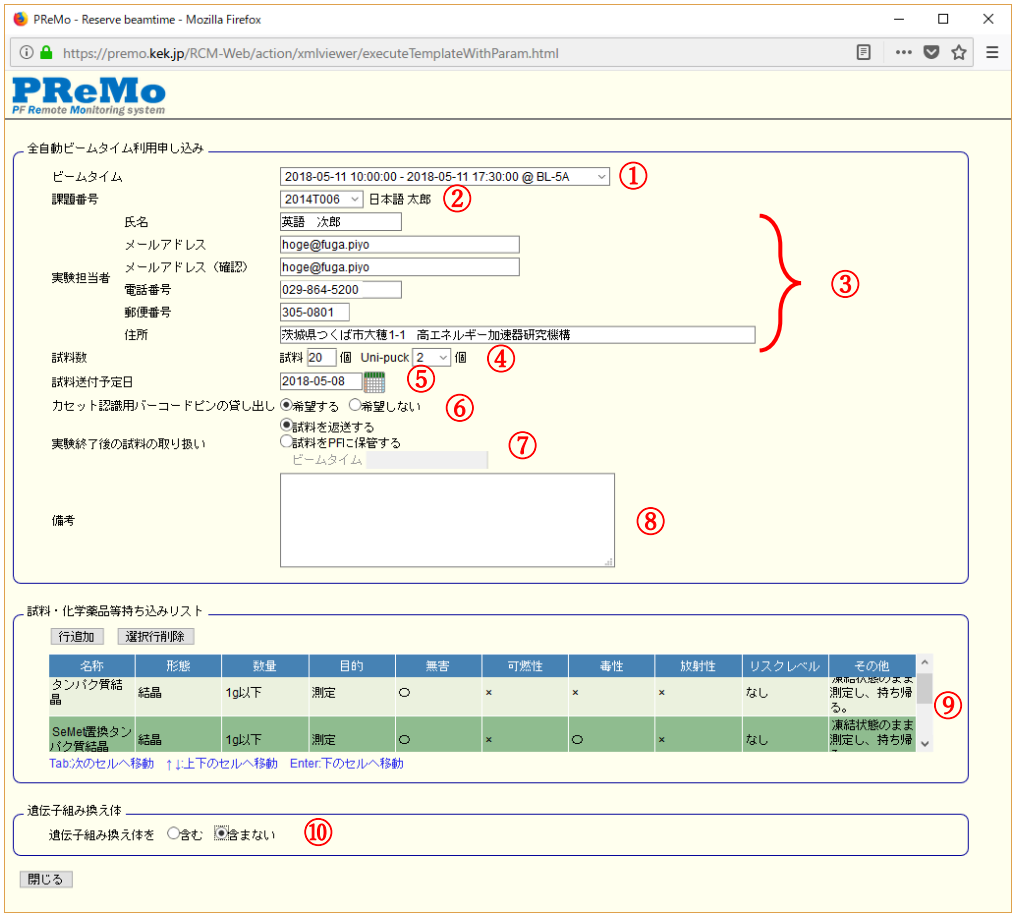
1.2. 画面上部のメニューバーにある Beamtime メニューから Submit fully-automated beamtime を選択する。



1.3. 現れたウィンドウに必要事項を記入し、申請をする。

①	申請するビームタイムを選択してください。
②	申請する課題番号を選択してください。ログインしたユーザーアカウントに紐づけされた課題番号がリストアップされます。リスト中に目的の課題番号がない場合には px_offcice@kek.jp までお問合せ下さい。
③	実験担当者として、全自動ビームタイム当日に連絡が取れる方の連絡先を記入してください。課題責任者である必要はありません。
④	送付を予定する試料数と Unipuck 数を入力してください。
⑤	カセット認識用のバーコードピンの貸し出しの希望の有無を選択してください。バーコードピンに関しての詳細は後述します。
⑥	研究室から試料を送付する予定日を入力してください。 なお、試料はビームラインに前日までに届いたもの -> 当日届いたものの順に測定を行います。
⑦	自動測定終了後の試料の扱いについて選択してください。最長 1 週間まで試料を PF に保管します。自動測定後にビームタイムがあり、手動で再測定を行う場合などは、そのビームタイムの日付とビームラインを記入してください。
⑧	ビームラインスタッフへの要望等をご記入ください。実験の目的を記入していただけると参考になり助かります。
⑨	試料・化学薬品等持ち込みリストを入力してください。全自動測定に関してはごく微量、且つ凍結状態で測定し持ち帰るタンパク質結晶しか取り扱わないので、以下のガイドラインが認められています。

	● 毒劇物を含まない試料については、代表してタンパク質結晶と記入する。 ● タンパク質結晶が毒劇物を含む(SeMet 置換体である、結晶化条件やソーキング条件に毒劇物を使用しているなど)場合は、それらを全て記入する。ただし数量は 1g 以下とし、リスクレベルはなしとする。また、必ずその他の欄に「凍結状態のまま測定し、持ち帰る」と記載する。 なお、通常のビームタイムにおいてはこれまで通りの記入を行ってください。
⑩	遺伝子組み換え体の有無を記入してください。 遺伝子組み換え体を含む場合には、本申請と同時に必ず遺伝子組み換え体使用届を提出してください。(http://www2.kek.jp/imss/pf/use/procedure/) 提出がない場合には送付された全ての試料について測定を行いませんのでご注意ください。



2. 試料の準備と発送

2.1. 16 番ポートにバーコードピンを入れた Unipuck を準備する。

バーコードピンの側面にバーコード ID が記載されているので、その ID を控えておいてください。後の PReMo への試料情報の登録のところで使用します。

Unipuck、および輸送用ケースの貸し出しも行っています。希望される方は http://www2.kek.jp/imss/pfweis/manual/ja/uni-puck.html をご覧ください。

2.2. 凍結した試料を Unipuck に入れる。

2.3. Unipuck を入れたドライシッパーを PF へ発送する。
https://www2.kek.jp/imss/pf/apparatus/utility/#parcel に従って発送手続きを行う。
なお、上記案内に加えて、メール送信先に pxblshipping@ml.post.kek.jp を追加し、また受取者名を田中牧子とするようお願いいたします。
また、返送用に返送先を記入した着払い伝票をドライシッパー内に同封してください。

Unipuck 識別用バーコードピンについて
UGUI 上で Unipuck のデュワー内の位置を指定する際に人為的なミスを防ぐために、バーコードピンを使用します。バーコードピンは市販されていますが、貸し出しも行っています。

3. PReMo への試料情報の登録

3.1. サンプルリスト(CSV ファイルを作成する)
https://www2.kek.jp/imss/pfweis/manual/ja/samplelist_prep.html に従ってサンプルリストファイルを作成してください。
実験目的に応じて Screening 列にスナップショット測定の場合には 1、データセット測定の場合には 2 を入れてください。

3.2. PReMo にログインする。
1.1 と同じユーザー名を使用してください。

3.3. スクリーニングの登録を行う。
https://www2.kek.jp/imss/pfweis/manual/ja/premo_Screening.html に従って登録をしてください。
必ず各 Unipuck に入っているバーコード ID とサンプルリストファイルに書かれている ContainerID の対応を入力してください。また、Mail-in/Remote access にはチェックを入れてください。

4. ビームラインでの測定

ビームラインでの測定はビームラインスタッフにより以下の測定順序で行われます。

1. 前回までの取り残した試料
2. ビームタイム前日までに到着した試料
3. ビームタイム当日に到着した試料

なお、この 1～3 の中でも実験課題の PAC 評点順に測定を行います。

測定データはそれぞれのユーザーアカウントの下に保存されていきます。これらはPReMo から閲覧も可能です。

5. データのダウンロード

データの取得は原則インターネットを介したダウンロードによって行っていただきます。50 個を超えるような多量の試料からのデータ測定を希望される方に対しては別途HDD によるデータの受け渡しを行うことがあります。

5.1. https://www2.kek.jp/imss/pfweis/manual/ja/remote_connect_setup.html の「PF 構造生物ビームライン(SBRC)専用の VPN 接続サービスを利用したリモートアクセス方法」に従って、VPN 接続をする。

5.2. SCP クライアント(WinSCP)を用いて以下のサーバーにアクセスし、ダウンロードを行う。

ホスト名	sbgfs.kek.jp
ユーザーID とパスワード	全自動測定で使用したもの

6. 試料の返送

測定が終了した試料は測定の翌営業日に着払いにて発送します。
測定が終了しなかったもの、試料の保管を希望されたものについてはビームラインにて保管します。

7. 全自動測定の利用報告のお願い

全自動測定を利用していただいたユーザーの皆様には、その都度利用報告として簡単なアンケートをおこないますので、ご回答よろしくお願いいたします。
本アンケートの内容は全自動測定の失敗の有無などをユーザー目線で回答いただくもので、全自動測定システムの精度向上を行っていく上で欠かせないものとなりますので、ご理解とご協力のほどよろしくお願いいたします。