第3回タンパク質結晶構造解析
中級者講習会
2018年10月27日(土)
東京理科大学葛飾キャンパス

XDSとSHELXC/D/EによるNative SAD構造解析演習

山田悠介
高エネ機構 物構研 構造生物

演習メニュー

1. XDSGUIを用いたデータ処理

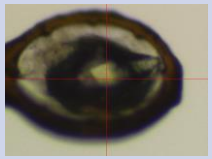
2. HKL2MAP(SHELX用GUI)を用いたNative SADによる位相決定

3. XSCALEによる複数データセットのマージと位相の向上

4. CRANK2(CCP4)を用いた位相および初期モデル決定

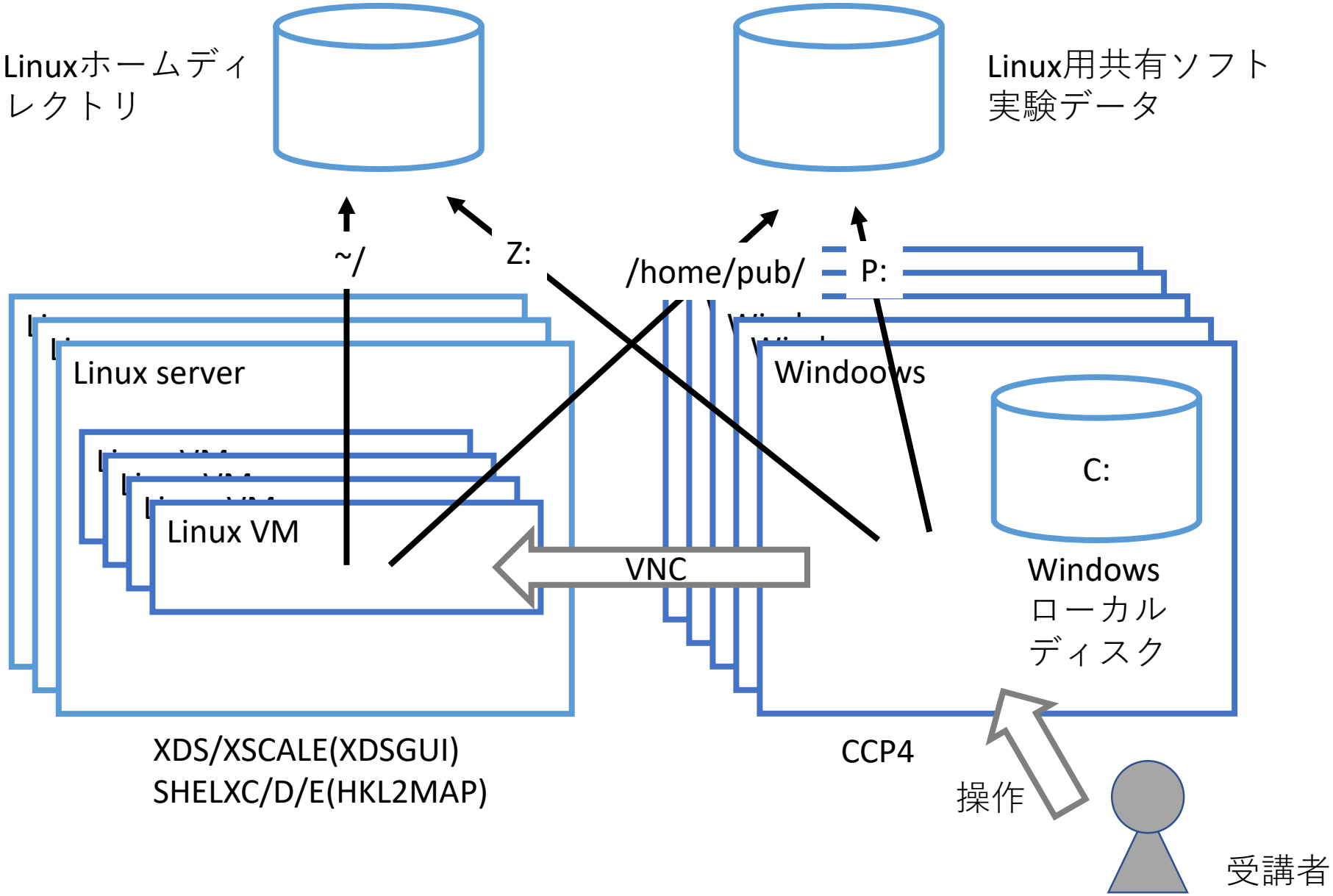
本講習会で用いるデータセット

Sample: Thaumatin crystal (208 a.a., 17 S atoms)

Data set	Native_sad1	Native_sad2	Native_sad3	High_reso
Crystal				
Beamline	BL-1A	BL-1A	BL-1A	BL-17A
Wavelength (Å)	2.700	2.700	2.700	0.9800
Beam size (μm^2)	13 x 13	13 x 13	13 x 13	40 x 20
Transmittance (%)	1.5	1.5	1.5	9.9
Exposure time (sec.)	1.0	1.0	1.0	1.0
Oscillation width (deg.)	1.0	1.0	1.0	1.0
Total frame	360	360	360	180
Detector	EIGER X 4M	EIGER X 4M	EIGER X 4M	PILATUS3 S 6M
Detector distance (mm)	60	60	60	243.9

Data sets are available at Zenodo. https://doi.org/10.5281/zenodo.1471237

タンパク質結晶構造解析中級者講習会
東京理科大解析環境



LINUXでの解析(XDS, SHELX)

ログイン

1. Windowsにログインする。
2. デスクトップにある「Linuxのlogin画面」アイコンをクリックする。
3. ユーザー名とパスワードを入力する。

ターミナルの起動

1. デスクトップを右クリックし、端末を起動する。
2. 以下のコマンドを打つ。
   $ source /home/pub/xds_shelx/bin1/setup.sh

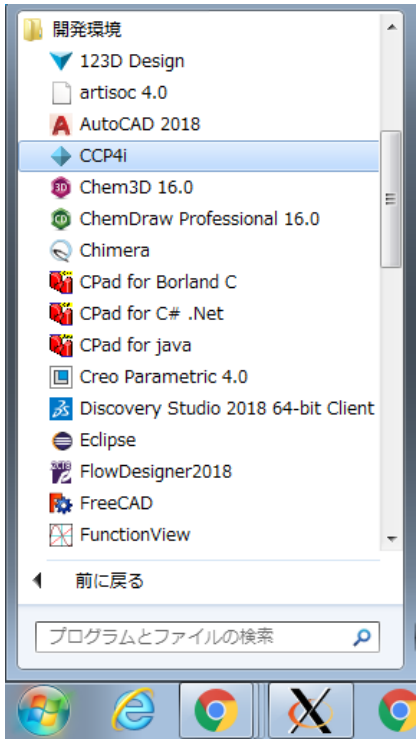
処理ディレクトリ

- 各自のホームディレクトリ(~/)の下に処理ディレクトリを作成する。
  $ cd
  $ mkdir xds

Windowsでの解析(CCP4)

解析ディレクトリ

- 解析ディレクトリはCドライブ上に作成する。
- Linuxでの解析結果はZドライブにあるので、必要なファイルをCドライブ上の解析ディレクトリにコピーする。

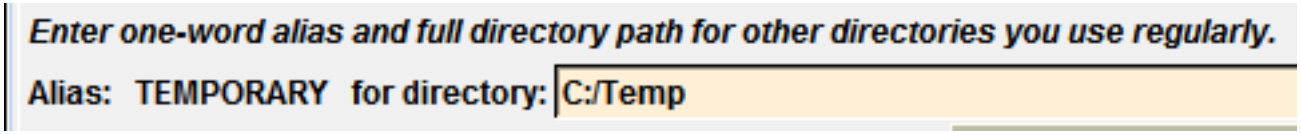


CCP4の起動

- デスクトップ左下にあるWindowsメニューから「開発環境」-> 「CCP4i」を選択し、実行する。

CCP4iでのプロジェクト

- Cドライブ上の解析ディレクトリを指定する。
- TEMPORARYディレクトリはC:¥Tempにする。



XDSGUIによる処理

処理ディレクトリ

~/xds

起動コマンド

xdsgui

処理するデータ

/home/pub/xds_shelx/data/collect_01_00001_master.h5

HKL2MAPによる処理

処理ディレクトリ

~/xds/hkl2map

実行コマンド

hkl2map

XSCALEによる処理

事前準備

残り2つの結晶について処理したデータをコピーする。

```
$ cp –r /home/pub/xds_shelx/data/xds_2 ~
$ cp –r /home/pub/xds_shelx/data/xds_3 ~
```

処理ディレクトリ

~/xscale/

マージするためのXSCALE.INP

```
OUTPUT_FILE=MERGE.HKL
 INPUT_FILE=../xds/XDS_ASCII.HKL
 INPUT_FILE=../xds_2/XDS_ASCII.HKL
 INPUT_FILE=../xds_3/XDS_ASCII.HKL
```