

タンパク質結晶測定対応 R-AXIS RAPID II用測定処理ソフトウェア RAPID AUTO 3.0

1. はじめに

RAPID AUTOは、湾曲型イメージングプレートを搭載した単結晶X線構造解析システムR-AXIS RAPID IIのソフトウェアで、装置制御や、回折イメージの収集および処理による回折強度データの取得を行うことができます。RAPID AUTOでは、データ収集に必要な各ステップがタブ化されており（図1）、タブを順に実行していくだけで、最適な測定条件の決定、測定したイメージの処理を簡単に行うことができます。最適な測定条件は、予備測定後に自動的に決定され、処理パラメーターも、あらかじめ適切な初期値が入っていますので、ほとんど手を加えることなく、測定から処理までを行うことができます。

R-AXIS RAPID IIは、元々、低分子単結晶構造解析用に開発された装置ですが、最近のX線源および光学系の進歩により、低分子結晶のみでなく、回折強度の弱いタンパク質結晶の測定も可能になりました。

RAPID AUTOも、今までの使い勝手はそのままに、タンパク質結晶のイメージも処理できるソフトウェア

として進化しました。起動時にタンパク質結晶（Macro）か低分子結晶（Small）かを切り替えるだけで、自動的にタンパク質結晶・低分子結晶のデータ集取に適したパラメーターが適用されるようになっています。

2. RAPID AUTOの特長

- ・測定条件自動決定機能
効率良い測定を行うため、予備測定実施後、測定範囲を自動的に決定します。
- ・自動処理機能
測定と平行して回折イメージの処理を行い、回折強度の算出を行います。測定終了とともに処理結果を表示します（図2）。
- ・d*TREK ファイルフォーマット
出力される回折強度ファイルは、d*TREK形式に準拠しており、CCP4をはじめとする各種タンパク質構造解析用ソフトウェアで、そのまま読み込むことが可能です。

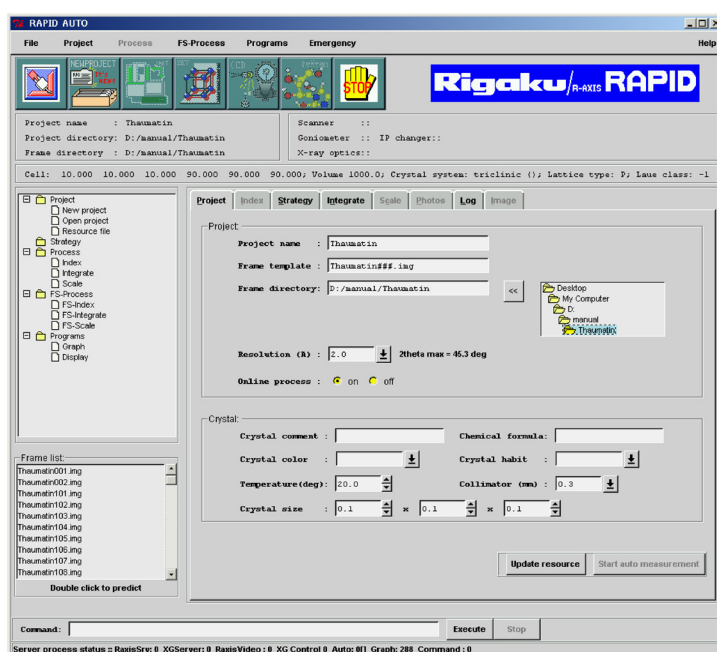


図1. RAPID AUTO.

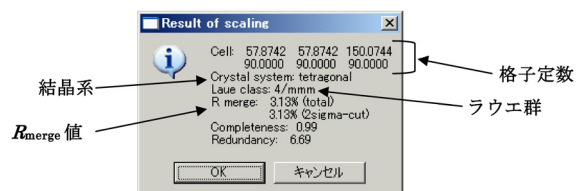


図2. 自動処理結果表示.

3. ヨウ素誘導体の単波長異常分散法 (SAD: Single Anomalous Dispersion 法) による構造解析例

新規構造のタンパク質の構造解析を行う上で、異常分散法は大変有用な位相決定法のひとつです。特に単波長異常分散法 (SAD 法) は、1 波長のみのデータで位相が決定できるため、タンパク質の迅速構造解析において重要な役割を果たしています。以下は、昇華法でヨウ素のソーキングを行ったサウマチン結晶を用い、RAPID AUTO を使用して測定・処理を行ったデータから SAD 法で構造解析を行った例です。測定結果は、 R_{merge} が 8% 以下、データの完全性 (Completeness) も 98% 弱と良好な値を示しました (表 1)。直接法に

表 1. 測定と精密化結果.

試料	サウマチン
結晶サイズ	0.20×0.10×0.10 mm
ヨウ素導入条件	ヨウ素蒸気法 20 分間
波長	CuK α ($\lambda=1.54187$ Å)
測定条件	0.5°振動×235 イメージ
露光時間	120 秒
空間群	P4 ₁ 2 ₁ 2 (#92)
格子定数	$a=b=57.355$ Å, $c=149.841$ Å
分解能	53.565–1.80 Å (1.86–1.80 Å)*
データの完全性 (Completeness)	97.7% (96.0%)*
R_{merge}	7.931% (34.824%)*
$R_{\text{factor}}/R_{\text{free}}$	19.49%/25.78%

* 括弧内は最外殻分解能の値.

より決定したヨウ素位置から、SAD 法による位相決定を行った結果、タンパク質のアミノ酸鎖をトレースすることができる質の電子密度を得ることができ (図 3, 4)、最終的な R_{factor} R_{free} の値もそれぞれ 19.49%, 25.78% となりました。この結果からも、R-AXIS RAPID II および RAPID AUTO は、タンパク質結晶の SIRAS 法, SAD 法といった実験的な手法による位相決定にも、十分に使用できることが分かります。

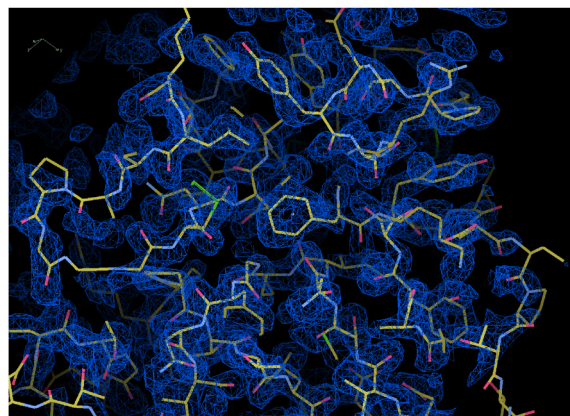


図 3. 電子密度図.

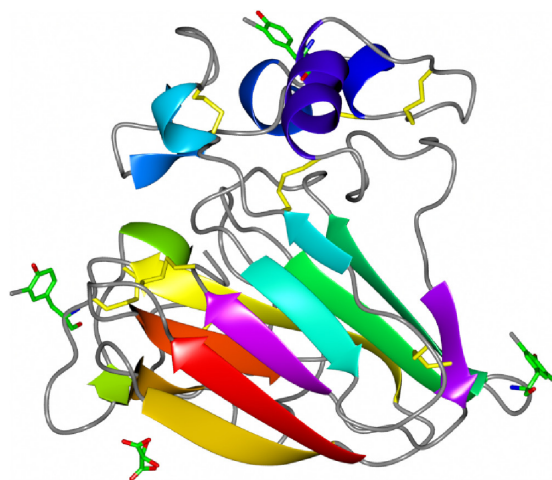


図 4. リボンモデル図.