

## 自動化によって得られたものは？

胡桃坂仁志  
早稲田大学理工学術院

X線結晶構造解析において、高分解能なデータセットを取得するためには、単結晶を得てから様々な条件のスクリーニング（pH、塩濃度、沈殿剤の種類/濃度、金属イオン、温度、抗凍結剤、脱水処理など）を行う必要がある。通常、1回のビームタイムあたり50-150個程度の結晶の品質を評価している。

我々は、放射光施設の高速な結晶交換ロボットや、高度化した検出器による高速データ収集及び自動回折データ処理システムを利用することで、多数の結晶の品質を効率よくスクリーニングしている。結晶のマウントからデータ収集までを、完全自動化システムを利用して行うことで、8時間のビームタイムあたり検討できる結晶の数を150個程度まで向上させ、効率よく結晶の品質評価を行うことができている。

自動回折データ処理システムは、結晶の品質をスクリーニングするだけでなく、広汎な利用が可能である。例えば一つの結晶で立体構造の決定に十分な回折データを取得できない場合でも、複数の結晶から得られたデータセットをマージすることで、立体構造の決定や異常散乱原子座標の取得が可能となった。自動回折データ処理システムの導入及び高速データ収集によって、1回のビームタイムで得られるデータセット数が増大したため、本アプローチは一般ユーザーが十分利用できる技術となったと考えられる。本パラレルセッションでは放射光施設での自動化ロボットと自動解析システムについて、我々の利用例を紹介する。