

理研 GSC におけるタンパク質結晶化システムの副産物  
**Protein Crystallization System at GSC Yokoyama  
in RIKEN Structural/Genomics Initiative**

竹本千重<sup>1</sup>, 小西史一<sup>2</sup>, 赤坂領吾<sup>1</sup>, 内窪友美<sup>1</sup>, 小長谷明彦<sup>2</sup>, 白水美香子<sup>1</sup>,  
横山茂之<sup>1,3</sup>, 村山和隆<sup>1,4</sup>

C. Takemoto<sup>1</sup>, F. Konishi<sup>2</sup>, R. Akasaka<sup>1</sup>, T. Uchikubo<sup>1</sup>, A. Konagaya<sup>2</sup>,  
M. Shirouzu<sup>1</sup>, S. Yokoyama<sup>1,3</sup>, and K. Murayama<sup>1,4</sup>

(<sup>1</sup>理研 GSC, タンパク質構造・機能研究グループ, <sup>2</sup>理研 GSC ゲノム情報先端技術研究グループ,  
<sup>3</sup>東京大学・院・理学系研究科, <sup>4</sup>東北大学先進医工学研究機構)

[<sup>1</sup>Protein Research Group, Genomic Sciences Center (GSC), RIKEN Yokohama  
Institute, <sup>2</sup>Advanced Genome Information Technology Research Group, GSC, RIKEN,  
Department of Biophysics and Biochemistry, Graduate School of Science, The  
University of Tokyo, Tohoku University Biomedical Engineering Research  
Organization (TUBERO)]

E-mail (C. Takemoto): [chie@gsc.riken.jp](mailto:chie@gsc.riken.jp)

タンパク 3000 プロジェクトの下、理研 GSC では、多数のタンパク質結晶化実験が行われている。結晶化実験のシステム化と並行して、結晶化予測プログラムとハンギングドロップ(HD)用プレートシールを開発したので、紹介したい。

X 線結晶構造解析における近年のソフト・ハードの発展は、顕著な解析の効率化を実現しつつある一方、結晶化のプロセスは、試行錯誤的アプローチに終始し、1 つのタンパク質の結晶化に数百から千といった条件を探索するなど、構造決定のボトルネックの一つである。我々は、結晶化に至らなかった結果も積極的に利用するということ念頭におき、蓄積された結晶化実験データについて、ソフトコンピューティング技術のひとつである Support Vector Machine (SVM) によって情報相関解析を行い、結晶化実験の結果を予測するプログラムの開発を試みた。SVM による情報解析の可能性を検討し、アミノ酸配列を入力すると、市販の 3 種のスクリーニングキットの実験結果を予測するプログラムを作製した。GSC で行われた高度好熱菌サンプルについて予測を行い、構造決定された 9 種のタンパク質について、実際の実験結果と比較し、プログラムの評価を行った。

また、多検体結晶化実験においては、主に自動化の観点から、シッティングドロップ法での結晶化が主流になっているが、結晶取扱いの容易さや、異なる結晶化法の試みとして、HD 法でのスクリーニングの要望は根強い。そこで、HD 法でも容易で安価にスクリーニングを行うためのプレートシールを考案し委託作製した。現在、マルチチャンネルピペットによる結晶化と微量ドロップ作製装置モスキートによるスクリーニング実験に使用している。