

Press Release

配信先：宮城県政記者会、文部科記者会、東北電力記者クラブ、科学記者会、新潟経済記者クラブ、厚生労働記者クラブ、厚生日比谷クラブ、経済産業記者会、ペンクラブ

2025 年 11 月 11 日

報道機関 各位

国立大学法人東北大学
一般財団法人光科学イノベーションセンター
国立研究開発法人日本医療研究開発機構

**NanoTerasu のビームラインで
タンパク質結晶立体構造解析を開始
—全自動測定とスパコン AOBa による即時データ解析により
ライフサイエンスを加速—**

【発表のポイント】

- 3GeV 高輝度放射光施設 NanoTerasu のビームライン、BL09U でタンパク質の立体構造を原子レベルで決定することが可能となりました。
- メールイン^(注1) 全自動測定と大規模計算科学計算システムスーパーコンピュータ AOBa による即時データ解析で高速データ創出を実現します。利用者は試料を送付するだけで、創薬の初期段階であるリード最適化期間^(注2)を大幅に短縮できます。
- 本ビームラインは、NanoTerasu の他のビームラインや、東北大学のクライオ電子顕微鏡等の既存インフラと連携します。分子から細胞、組織までのマルチスケール観察^(注3)を可能にし、アカデミア創薬^(注4)を加速する拠点化を推進します。

【概要】

国立大学法人東北大学（以下、東北大学）、一般財団法人光科学イノベーションセンター（以下、PhoSIC）及び国立研究開発法人日本医療研究開発機構（以下、AMED）は、11 月 11 日より、3GeV 高輝度放射光施設 NanoTerasu（以下、NanoTerasu）のコアリションビームライン BL09U において、東北大学が中心となって整備を進めてきたタンパク質構造解析エンドステーション（以下、MX-ES）の運用を開始します。

本 MX-ES はタンパク質のような複雑かつ巨大な生体高分子の立体構造を原子レベルで決定することが出来るエンドステーションで、メールインによる完全自動測定と東北大学サイバーサイエンスセンターが運用するスーパーコンピュータ AOBa^(注5)とのシームレスなデータ統合連携を特徴とし、膨大な数のサンプルの立体構造を原子レベルで迅速に決定することが可能です。

AMEDの生命科学・創薬研究支援基盤事業^(注6)では、創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム（以下、「BINDS」^(注7)）を整備、活用し、タンパク質構造解析に代表されるライフサイエンス・創薬分野における様々な支援を行っています。タンパク質構造解析に係る支援をさらに強化・効率化するため、同事業において、本 MX-ES を創薬基盤の強化に不可欠な要素として位置づけ、整備（設備、移設、設置にかかる費用を負担）を行っています。

本 MX-ES の稼働は、2024 年ノーベル化学賞の受賞対象となった AI 駆動型タンパク質設計・構造予測技術（AlphaFold2, Rosetta 等）が切り拓いた生命科学の新時代に対応するものでもあります。AI が生成した膨大な数のアイデアや候補構造を、短時間でかつ原子レベルの精度で「検証」し、創薬や新機能性材料の実用化を加速するための戦略的なインフラとなります。

本 MX-ES による高精度かつ高スループットなタンパク質構造解析環境の提供は、AI がもたらす創薬アイデアの検証速度を飛躍的に向上させるものであり、この最先端インフラを活用した支援を通じて、革新的な医薬品開発やライフサイエンス・創薬研究における国際競争力強化の更なる推進が期待されます。

【詳細な説明】

整備の背景

タンパク質は生命現象を司る機能性分子であり、創薬や機能制御のためには、その原子レベルの精密な立体構造情報が不可欠です。タンパク質の立体構造情報を取得する手法として、X 線結晶構造解析^(注8)は他の主要な構造解析手法（クライオ電子顕微鏡単粒子解析^(注9)など）と比較して、より高分解能の構造を短時間で決定できる特長があります。しかし、タンパク質の結晶は非常に小さく繊細であるため、微小なサンプルからデータを引き出すには、高輝度で強力な X 線ビームである放射光の利用が欠かせません。

特に薬剤設計のリード最適化期間における大規模な化合物スクリーニングにおいては、試料準備、測定、構造解析という研究サイクルを、わずかな期間に何度もまわす必要があります。研究を加速し、絶えず測定機会を提供するため、高度な全自動測定を有する新たな実験ステーションの開発が期待されてきました。

今回の取り組み

東北大学が中心となって整備した MX-ES は、高輝度放射光の能力を最大限に活用し、このボトルネックを解消します。

本 MX-ES は、研究者が全国どこからでも結晶サンプルを送付するだけで、ロボットアームと自動化システムがデータ収集までを連続的かつ無人で実施します。NanoTerasu の 3GeV 高輝度放射光を使用すると、微小な結晶からも高品質なデータを短時間で取得することができます。この高精度と自動化の組み合わせにより、多種多様なタンパク質や薬剤複合体構造の高速スクリーニングと検証が可能となります。

また MX-ES で取得された膨大な量のデータ（回折イメージ）は、地域連携の強みとして、直ちに東北大学サイバーサイエンスセンターが運用するスーパーコンピュータ AOBA に送られ、自動的に処理が行われます。研究者は処理結果（回折強度リスト）を即座にダウンロード可能で、研究室での構造確認に進むことが出来ます。物理インフラ（NanoTerasu）とデジタルインフラ（AOBA）の密な連携により、データ取得から最終的な原子レベルの立体構造決定までの時間差を最小限に抑え、フィードバックサイクルを飛躍的に短縮し、創薬研究での開発候補となるリード化合物の最適化プロセスを大幅に加速させます。

MX-ES は、東北大学の創薬戦略推進機構先端生体高分子構造研究センター^{（注10）}による測定支援のもと、より多くのユーザーが効果的に利用できる体制を整えています。本センターの会員になることで、NanoTerasu の PhoSIC のコアリションメンバー以外の方も、MX-ES の利用が可能になります。

今後の展開

NanoTerasu に MX-ES が加わることで、NanoTerasu における生体試料の分子レベルの観察が強化され、マルチスケール観察のラインナップが強化されます。NanoTerasu が持つ軽元素の可視化能力と高精度な構造決定能力の連携は、生命科学研究の新たな展開を強力に推進し、コアリションユーザーをはじめとした産学官の研究者に対する NanoTerasu の優位性、有用性を飛躍的に向上させます。このことは単なる測定ラインの追加に留まらない戦略的な価値を生み出し、日本の創薬を始めとしたライフサイエンス分野の競争力を確固たるものにすると考えられます。

また、本 MX-ES における完全自動測定システムによるタンパク質結晶構造解析が、新規に AMED による BINDS の対象に加わることで、国内のライフサイエンス・創薬研究への更なる寄与が期待されます。

MX-ES の整備・運用主体である東北大学には、既に学外にも共有されているクライオ電子顕微鏡をはじめとした多岐にわたる研究インフラがあります。今回の取り組みがこれらと連携することで、ひとつの事象を複数の手法で観測することによる多角的な構造生物学研究が加速されます。特に、東北大学創薬戦略推進機構が進めるアカデミア創薬に対し、タンパク質結晶構造解析という新たなツールが加わることで、その発展に大きく貢献すると期待されます。

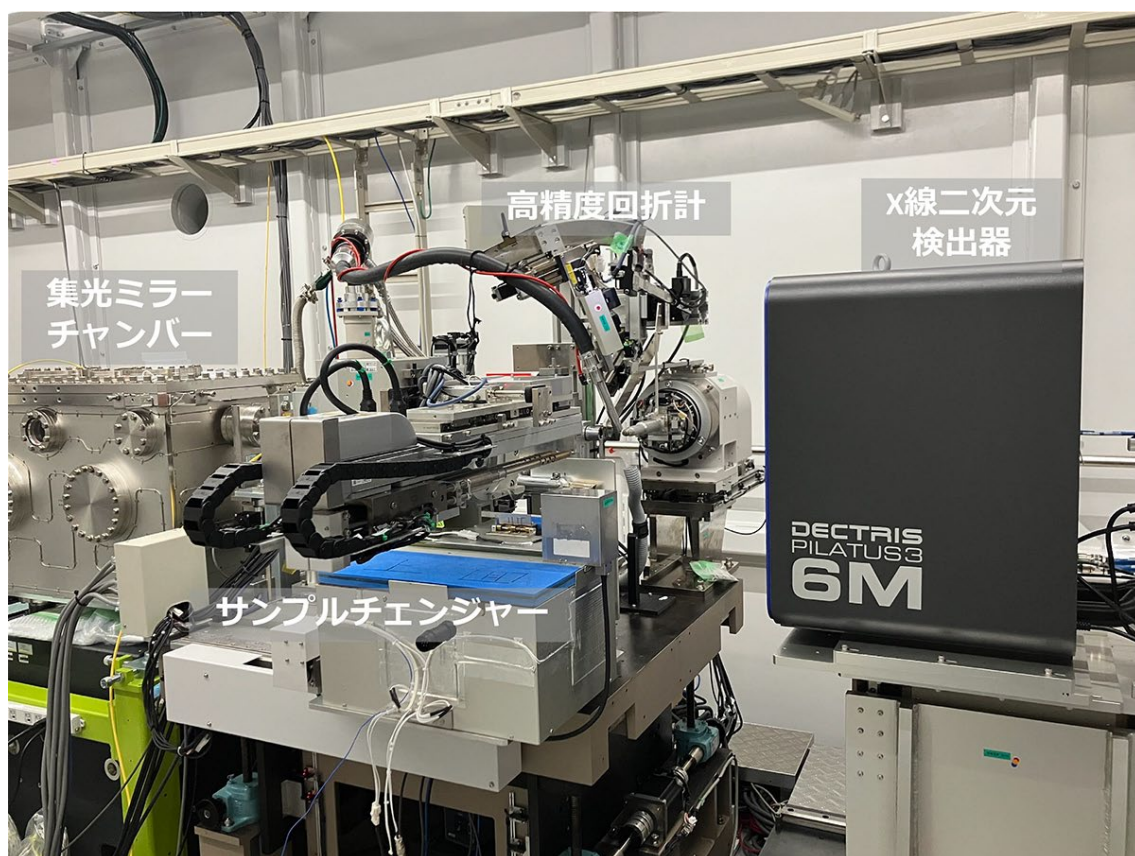


図 1. MX-ES の計測システム

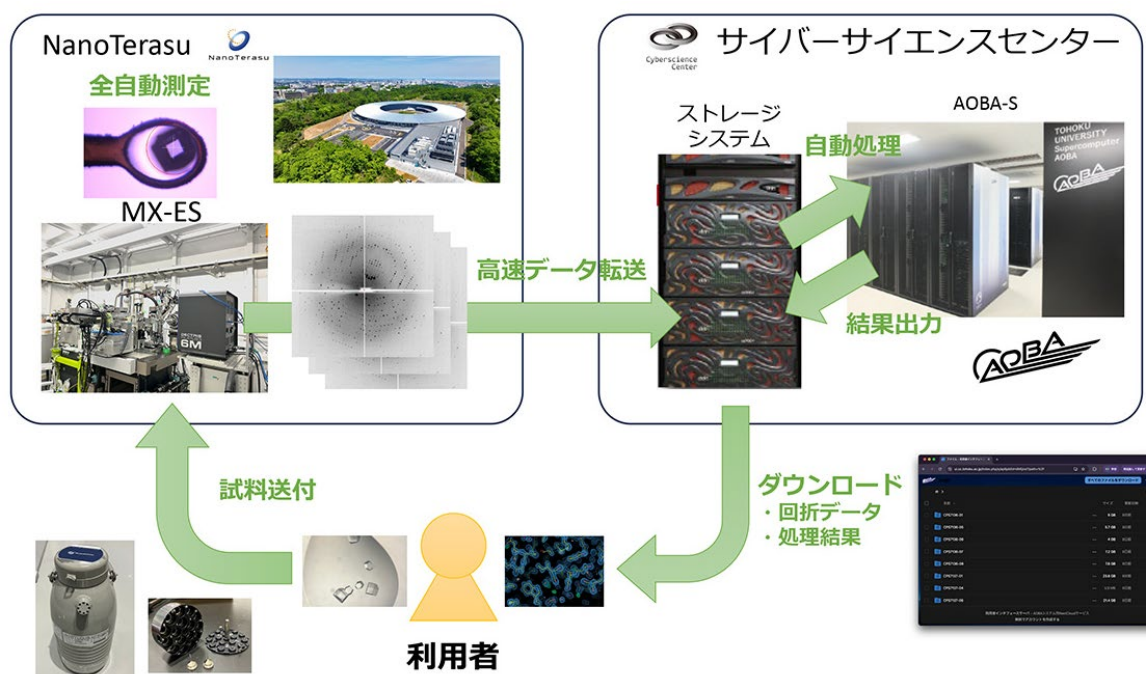


図 2. MX-ES と AOBA の連携によるメールイン全自動測定

【謝辞】

整備は、AMED 生命科学・創薬研究支援基盤事業（課題番号：JP25ama121001、課題名：生命科学と創薬研究に向けた相関構造解析プラットフォームによる支援と高度化）の支援、国立研究開発法人理化学研究所放射光科学研究センター（理研 RSC）の山本 雅貴 部門長、並びに SPring-8 構造生物学ビームラインのスタッフ（理研 RSC、公益財団法人高輝度光科学研究センター回折・散乱推進室）の皆様の多大なるご協力により行われました。

【用語説明】

注1. メールイン

利用者が試料を測定施設（NanoTerasu）に送付すると、施設側で測定が行われ、測定データが利用者に返ってくるサービス。

注2. リード最適化期間

創薬研究のプロセスにおいて、薬の候補となる物質（リード化合物）の有効性と安全性を高め、臨床試験（治験）に進めるための最適な「開発候補化合物」を選定するまでの段階。

注3. マルチスケール観察

異なるスケール（大きさ、例えば分子レベルから細胞・組織レベルまで）で試料を観察し、それぞれの情報をつなぎ合わせて総合的に解析する研究手法。

注4. アカデミア創薬

大学や研究機関（アカデミア）が、独自の研究成果を基に、基礎研究から創薬シーズ（新薬のタネ）の探索・開発までを行う取り組み。

注5. AOBA

東北大学サイバーサイエンスセンターが運用する、大規模な科学技術計算を高速に行うためのスーパーコンピュータ。

注6. 生命科学・創薬研究支援基盤事業

国内のライフサイエンス・創薬分野に従事する研究者を対象に、最先端の技術・機器を活用して高度な研究支援を実施する AMED 補助事業。全国の支援機関において、構造解析に係る大型機器（クライオ電子顕微鏡、放射光施設等）、創薬研究に必要な化合物ライブラリー、疾患モデル細胞・動物による評価、新規モダリティ探索、インシリコスクリーニング、生命現象を追究するオミックス解析などの支援を提供する。

注7. BINDS

創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム（バインズ；Basis for Supporting Innovative Drug Discovery and Life Science Research）。

注8. X 線結晶構造解析

結晶構造に入射した X 線が回折する性質を利用して、結晶の原子構造や分子構造を決定する解析手法。タンパク質の場合、精製したタンパク質溶

液に結晶化試薬を混合させて結晶を得たあと、その結晶にX線を照射してX線回折データを取得する。X線回折データを解析することで、タンパク質の3次元電子密度図が得られ、それを基にタンパク質の原子モデルを構築する。

注9. クライオ電子顕微鏡単粒子解析

タンパク質溶液を急速凍結した後、電子顕微鏡で撮影し、得られた多数の2次元像からコンピュータで立体構造を再構成する技術。結晶化を必要とせず、生理的な環境に近い水溶液中の詳細な構造を解析できる。

注10. 創薬戦略推進機構先端生体高分子構造研究センター

NanoTerasuにおけるタンパク質等のX線結晶構造解析を支援。放射光X線による生体高分子の構造データを通して、生命科学研究の進展と創薬をはじめとする応用研究への貢献を目指す。

センターWeb ページ : <https://arcbs.ddr.tohoku.ac.jp/>

【問い合わせ先】

(内容について)

東北大学多元物質科学研究所

教授 南後 恵理子

TEL: 022-217-5345

Email: eriko.nango.c4@tohoku.ac.jp

日本医療研究開発機構

創薬事業部 医薬品研究開発課

生命科学・創薬研究支援基盤事業

TEL: 03-6870-2219

Email: 20-DDLSG-16@amed.go.jp

(報道に関すること)

東北大学 多元物質科学研究所 広報情報室

TEL: 022-217-5198

Email: press.tagen@grp.tohoku.ac.jp

光科学イノベーションセンター

総務企画 伊藤 学

TEL: 022-752-2210

Email: m-ito@phosic.or.jp

日本医療研究開発機構

総務部 広報課

TEL: 03-6870-2245

Email: contact@amed.go.jp