

[rigaku.com](https://www.rigaku.com)で見る

B-SCX1011 - HyPix-Arc150°で可能となった ペプチド医薬（環状ペプチド）の高速測定

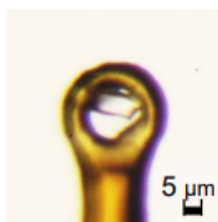
はじめに

中分子薬は、低分子薬と抗体医薬等のバイオ医薬の中間に位置する、ペプチド結合をもつ約0.5 - 5.0 kDa程度の新たな医薬品で、低分子薬と抗体医薬等のバイオ医薬が持つ問題点を解決できる可能性を秘めています。中でも、環状ペプチド医薬品は、ポスト抗体医薬として期待されている“次世代医薬品”です。環状ペプチド薬のような高分子量化合物の結晶でも、超高輝度X線発生装置、当社独自開発による湾曲光子計数型ハイブリッドピクセル検出器 HyPix-Arc150°、単結晶構造解析統合プラットフォーム CrysAlis^{Pro} による最適化された測定スケジュールを組み合わせることにより、従来にはない高速・高精度解析が実現します。

測定・解析例

HyPix-6000HEは極めて低いノイズ、高計数率、高い空間分解能と、優れた特徴を持つ検出器ですが、最短カメラ長を採用した際の最大検出角度は50°程度となります。したがってCu線源を用いた測定では、通常低角側と高角側を分けて測定する必要があります。HyPix-Arc150°では、3つのモジュールを湾曲型に配置する事により、最大検出角度は150°程度となっています。このため低角から高角までのデータをより短時間で収集することができるようになりました。このため極微小結晶など、X線による損傷を受けやすい結晶でも、損傷が進行する前にデータ収集を終了することが可能となります。

環状ペプチド薬の一つ“シクロスポリンA”の微小結晶（図1）の、測定・構造解析結果を示します（図2、表1）。このような微小な結晶でも、HyPix-Arc150°を用いることで、わずか2時間ほどで測定が終了した結果、構造を得ることができました。絶対構造の妥当性を示すFlackパラメーターが0に近く標準不確かさも小さいことから、絶対構造も判定できていることがわかります。



Sample size: 20 x 10 x 6 μm

Chemical Formula:

C₆₂H₁₁₁N₁₁O₁₂

Molecular weight: 1202.61

図1 シクロスポリンAの微小結晶

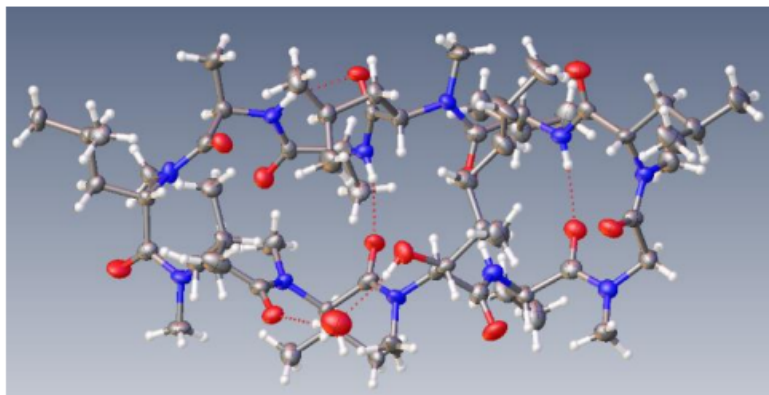


図2 シクロスポリンAの構造

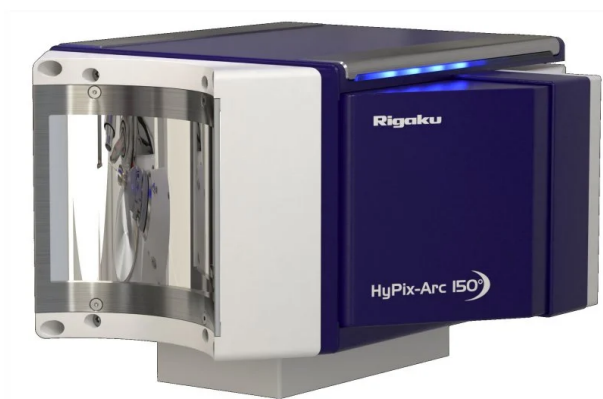
表1 シクロスポリンA結晶の構造解析結果

System	Detector	Total time	I/ σ (I)	R _{int} (total/last)	R ₁ /wR	Flack
XtaLAB-SynergyCustom	HyPix-Arc150°	1 h 54 min	11.04	12.9%/72.8%	7.21%/15.95%	-0.0(2)

推奨装置・ソフトウェア

- 単結晶X線構造解析装置 XtaLAB Synergy
- 湾曲光子計数型ハイブリッドピクセル検出器 HyPix-Arc150°
- 単結晶構造解析統合プラットフォーム CrysAlis^{Pro}

おすすめの製品



HyPix-Arc 150°

湾曲HPC X線検出器 HyPix-Arc 150°

検出面エッジ間で150°の検出範囲を実現した最新型X線検出器。一度に高角度から低角度までのデータを取得することが可能。



XtaLAB SynergyCustom

超高速・超高精度単結晶X線構造解析装置 XtaLAB SynergyCustom

現有システムのアップグレードや、ニーズに合わせたカスタムモデルを構築可能なシステム。



XtaLAB Synergy-S

超高速・超高精度 単結晶X線構造解析装置 XtaLAB Synergy-S

高輝度マイクロフォーカス封入管線源を搭載し、回折データを精度よく、迅速かつ効率的に収集可能なX線構造解析装置。



XtaLAB Synergy-R

回転対陰極線源搭載 単結晶X線構造解析装置 XtaLAB Synergy-R

超高輝度X線発生装置を搭載した単結晶X線構造解析装置のフラッグシップモデル。



XtaLAB Synergy-i

マイクロフォーカス封入管システム搭載単結晶X線構造解析装置 *XtaLAB Synergy-i*
 広範囲の低分子試料に対応可能な単結晶X線構造解析装置のエントリーモデル。



XtaLAB Synergy-ED

電子回折統合プラットフォーム
 データ測定から結晶構造の決定まで、シームレスなワークフローを備えた唯一の単結晶電子回折装置。



XtaLAB Synergy-DW

2波長搭載単結晶X線構造解析装置 *XtaLAB Synergy-DW V HF* 多用途性と組み合わせて驚異的なパフォーマンスを実現。



XtaLAB mini II

デスクトップ単結晶X線構造解析装置 *XtaLAB mini II*
 HPC X線検出器を搭載した世界最小の単結晶X線構造解析装置。