

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

B-SCX1009 - ペプチド医薬 (環状ペプチド) の構造解析

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、高輝度のX線発生装置、当社独自開発による光子計数型ハイブリッドピクセル検出器 HyPix-6000HE、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、高精度解析が実現します。

測定・解析例

従来の装置では測定することが困難であった、環状ペプチド薬の一つである、“シクロスポリンA”の微小結晶を最新の Synergy-DWで測定を行ったところ、良好なデータを取得することができ、構造解析に成功しました。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、絶対構造が判定できていることがわかります。図1にシクロスポリンAの微小結晶の写真、図2に構造、表1に構造解析結果を示します。



Sample size: 15 x 13 x 7 μm^3

Chemical Formula: $\text{C}_{62}\text{H}_{111}\text{N}_{11}\text{O}_{12}$

Molecular weight: 1202.61 g/mol

図1 シクロスポリンAの微小結晶

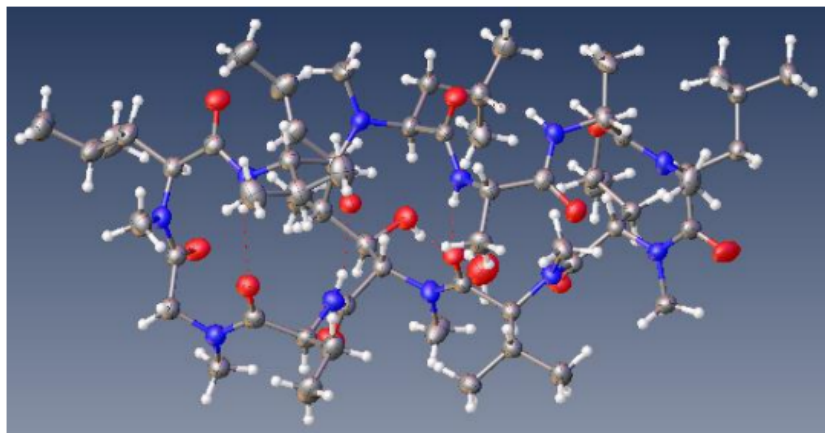


図2 シクロスポリンAの構造

表1 シクロスポリンAの構造解析結果

System	Total time	Redund	I/ σ (I)	R _{int} (total/last)	R ₁ /wR	Flack
XtaLAB-Synergy-DW	29h 50min	4.5	8.46	12.2% / 61.6%	6.89% / 17.23%	0.038 (254)

推奨装置・ソフトウェア

- 単結晶X線構造解析装置 XtaLAB Synergyシリーズ
- 光子計数型ハイブリッドピクセル検出器 HyPix-6000HE
- 単結晶構造解析統合プラットフォーム CrysAlisPro

おすすめの製品



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-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 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 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。



HyPix-6000C/6000HE

ハイブリッドピクセル2次元検出器
 単結晶X線回折用の大面積ハイブリッド光子計数検出器



CrysAlis^{Pro}

単結晶構造解析統合プラットフォーム *CrysAlis^{Pro}*
 データの収集と解析、高度な機能を備えた統合ソフトウェア。