

SPring-8 ユーザー協同体研究会 利用者の動向調査報告書 (H26 年度版)

研究会名：放射光構造生物学研究会

日時：2014 年 9 月 13 日 10:00-12:00

場所：東京大学・生命科学総合研究棟・B301 号室

出席者：(報告書記載者に下線)

計 21 名

姚閔 (北大)、村田武士 (千葉大)、沼本修孝 (東京医歯大)、伏信進矢、中村顕 (東大)、堀越直樹、加藤大貴、鯨井智也 (早大)、伊藤拓宏 (理研 CLST)、松宮茂樹 (協和発酵キリン)、小段篤史 (京大)、山下栄樹、東浦彰史 (阪大)、山下敦子 (岡山大/JASRI)、山本雅貴、引間孝明、平田邦生、山下恵太郎 (理研 SPring-8)、馬場清喜、奥村英夫、熊坂崇 (JASRI)、(順不同)

- ・ 新分野、新領域に関する研究開発ニーズの収集、また、研究開発成果の展開について
- ・ その他

・新しいビームタイム運用に関して

Q1: 課題の募集は何回か?

A1: 募集は従来通り半年毎。課題の有効期限が 1 年になるだけ。

Q2: 募集した課題でビームタイムを使用しなかった場合の取り扱いは?

A2: この取り扱いについては、まだ確定していない。検討する。

Q3: 回折能の低い試料のスクリーニングは個別の課題になるのか?

A3-1: 包括的な課題は受け付けないが、安全審査が通っている試料であれば、質の確認などを行うことまでは否定しえない。

A3-2: スクリーニング課題を考えるのであれば、どのような形式が望ましいか。施設側や研究会の代表がスクリーニングの課題を申請することになるだろう。その場合、成果の扱い等について、参加者の協力が必要となる。

A3-3: 創薬 PF 枠では 2014 年 10 月より開始する。1 グループ 1 トレイ (16 サンプル) をビームライン側に委託し、確認の回折実験を行い、そのレポートのみを返却するような利用を予定している。

A3-4: 試料評価も含め、できるだけタイムリーに利用できるような形を希望したい。その場

合、試料のみを送って測定してもらえるとうれしい。遠隔地なので旅費が大変。

Q4: BL41XU, BL32XU で測定するとデータの量が膨大になる。データのバックアップを簡単にできるようにしてほしい。

A4-1: Raw データを持って帰る必要が本当にあるのか？ SACLA でも同じような問題が発生しており、I>Fに変換した後のデータのみをバックアップしている。

A4-2: ストレージは高速検出器の書き込みに対応できるような容量と速度は確保している。しかし、アクセスが多くなるほどパフォーマンスは頭割りになるので、バックアップ、解析によるアクセスが増えるとそれだけでパフォーマンスが落ちることになる。

A4-3: 検出器にバッファとなる書き込みサーバーがあれば問題ないが、その機能がない場合書き込みに失敗する危険もある。

A4-4: バックアップについては、ビームライン担当者間でもう一度どうやってバックアップをとるか考える必要がある。BL32XUは検出器にバッファ機能がない、などの問題もあるので、この辺りを解消する策を考える必要がある。ローカルにある程度高速なバッファ専用ストレージを運用する必要があるだろう。

Q5: グループ運用は可能か？可能なら、より効率的にビームラインを利用できるのでは？

A5-1: よく知っている人間同士では可能。しかし、あまり接点がない場合はどうか？

A5-2: PF では自分の前に使用している人からビームラインの状態について情報を得ているが、本来このような情報は BL 担当者から得られたほうが望ましい。

A5-3: あまりにフレキシブルにすると、利用料をどのように分けるのかが問題になる。

A5-4: 1 シフト x3 で1日を運用するケースなどでは、前後のユーザー間である程度の融通をユーザー間で行うのは可能なのでは？

A5-5: BL44XU では、使用者についてある程度どのような実験をするのか、あるいはどのくらいの時間で実験が終わるのか分かる場合は、次のユーザーにその辺りの情報は伝え、早めに実験を開始するなどの運用をしている。

Q6: 有償のデータ処理ソフトウェアは放射光施設に必要か？年間費用が 400 万程度必要。ほかに便利な装置などを導入することも可能かもしれない。

A6-1: ラボではこのソフトをメインで使用している。慣れの問題もあるので当面必要。

A6-2: 無償のソフトの性能を疑っているわけではないが、切り替える労力が問題。

A6-3: 無償のソフトを普及させるための活動が必要なのでは？

Q7: ID-BL は混みすぎて希望者がすべて実験できる状況ではない。一方で来年度から BL26B1 も共用枠を拡大する。例えば、BL26B1・BL38B1 をスクリーニング用に 1-3 シフト、その後すぐに BL41XU で 0.5 シフト測定といった配分はどうか？

A7-1: それで ID-BL を利用できる機会が増えるのであればうれしい。

A7-2: 一度、実現可能ななどの枠を考えず、ユーザーの希望する配分案などを募ってみては

どうか？その上で、さらに施設としてできる提案をしていく方がいいのでは？

A7-3: 各 BL でどのサイズの結晶でどの程度の実験が可能なのかの指標があれば、もっとビームラインを有効に使用できるのでは？施設側で Round robin を行って情報を提供するべき。

A7-4 (研究会外での意見): 1 回の実験で BL41XU の時間が 1 シフトしかないと短すぎる。できれば、3-6 シフト連続で実験できることを希望したい。BM-BL とセット配分でもよい。

・ HAG 法に関して

Q1: 1 回の測定時間はどのくらいか？

A1: 20 分程度は最低必要、初めて測定を行う場合、初めての条件検討であれば、1 時間程度を見込む必要がある。

Q2: 放射光の実験で、1 時間も時間をかけるのは非効率的ではないか？

A2: 結晶 1 つ当たりの実験時間で見た場合は時間がかかるが、少ない結晶の数で実験が完了できる。その意味では効率的な実験といえる。

Q3: HUM-1 の性能は？

A3: EMBL で開発された HC1 などとの比較実験が行われたことはない。ただし、HAG ではコーティング剤を使用するので、その効果により結晶の湿度への応答は緩和される。実際に性能による問題は生じていない。

Q4: コーティングした後、ソーキングできるか？

A4: HAG 法では、リガンド溶液にソーキングした後にコーティングする必要がある。北大姚さんらが開発しているコーティング法なども検討していく。

Q5 (研究会外での問い合わせ): HAG 法では試料を凍結できないが、結晶化プレートを運ぶリスクがある。SPring-8 に結晶化実験を行う環境は用意されているのか？

A5: 結晶保管用のインキュベータは用意されているので、SPring-8 サイトで実験をしていただければ、そこに入れて保管することは可能。LCP や微量結晶化に対応するロボットや自動観察装置はない。

・ BL41XU に関して

Q1: 0.01 秒露光測定で、プロファイルフィッティングは大丈夫か？

A1: 0.01 秒露光では 10 パーセントが欠けてしまうことになるので、現状では不正確。測定方法やソフトウェアでの対応など、検討を進めたい。

Q2: 測定時間が短縮し、むしろ SPACE のマウント時間が律速となっている。スピードアップの予定は？

A2: すぐに SPACE のスピードを上げることは難しい。一つのループに複数の結晶を揃えば、マウント動作を挟まずに微小ビームを活かして複数の結晶からデータを測定できるので、

やってみて欲しい。

(研究会で議論した該当事項のみご記載ください。各研究分野やビームラインの利用における最新状況や昨年度の議論からの発展的な内容や個々の解決すべき課題の詳細についてご議論いただいたことを報告書に記載ください。)