

SPring-8 ワークショップ～SPRUC 放射光構造生物学研究会 第4回会合  
議事録および動向調査報告書

研究会名：放射光構造生物学研究会

日時：2015年6月27日 9:30-12:00

場所：徳島大学工学部 共通講義棟4階 K401号室

出席者：計25名（順不同）

波多野啓太・中村希・江藤勇樹・大畠海人・島田敦広・山際来佳（兵庫県立大）・栗栖源嗣・山下栄樹・中川敦史（大阪大）・中石雄一郎・板東政彦・辻憲悟（大塚製薬）・杉本宏・宮武秀行・山下恵太郎（理研）・田中良和・丹澤豪人（北海道大）・山縣ゆり子（熊本大）・小段篤史（京都大）・真板宣夫（徳島大）・村木則文（分子研）・上垣浩一（産総研）・山田雅胤（Meiji Seika ファルマ）・馬場清喜・熊坂崇（JASRI）（下線は議事録記載者）

プログラム：

1. 開会挨拶
2. SPring-8 MX ビームラインの現状報告 熊坂崇 (JASRI)
3. 理研・和光地区でのメールイン測定の実際 宮武秀行 (理研)
4. XDS の概要と自動データ処理システムについて 山下恵太郎 (理研)
5. 総合討論
6. 閉会挨拶

議題：

1. 共用ビームラインの運用方法等の説明と意見交換
2. SPring-8-II に向けた研究会としての取り組み等について
3. 遠隔実験・測定代行に関する意見交換
4. 測定した回折データの処理について意見交換

議事内容：

今回の SPring-8 ワークショップは、SPRUC の放射光構造生物学研究会の第4回会合として開催した。第2,3回は SPring-8 シンポジウムに合わせて行ったが、今回は第1回と同様により広い分野の研究者の参加を期待して、日本蛋白質科学会年会に合わせ、徳島市内で開催した。

開会挨拶の後、3件の話題提供を行った。まず、JASRI・熊坂よりビームラインの現状報告を行った。新しくなった課題募集制度について説明した後、ビームラインでの BSL1 対応とビームライン周辺機器を紹介し、最近の高度化の現状と次期計画の状況を報告した。次に、メールイン測定の現状について、理研の宮武氏から紹介がなされた。研究室のある埼

玉県和光市から、サンプルチェンジャーSPACE を用いたメーリング測定について、実体験に基づいて詳細かつ分かりやすい説明がなされた。最後に、理研の山下氏より、回折像を処理するソフトウェアとその処理自動化への取り組みについて紹介があった。ビームラインで最も利用されているものとは若干異なるインターフェースをもつこのソフトウェアは、ややとっつきにくい印象があったものの、多くの関心が寄せられた。

これらの話題を受けて行った議論について、以下に報告する。

### ・共用ビームラインの運用に関して

1: 新しい運用方法はありますか?(利用者に向けて)

>> 半年に一度の申請よりも進展具合に合ったビームタイムの申請ができていたのでありがたい。

>> PF のビームタイムの配分と時期が同じなので、ずらせないか?

2: グループ運用はどうか?

>> BL44XU(阪大ビームライン)では、阪大蛋白質研究所の内部ユーザーにはグループとしてまとめて配分している。

3: (企業ユーザーから) 成果専有課題で利用しているが、複数グループで1課題として利用しているため、ビームタイムが直前に決まると他に予定に左右されてしまう。従来のように事前に長い期間で予定が決まっている方が予定を決めやすい。しかし、各社の都合があるので、全体の総意ではない。

>> BL41XU ではより小さな単位での配分が進みつつある。各社の都合が聞けるようになるだろう。配分時のキャンセルなどにも対応しやすいかもしれない。

>> 使えなくなったときにキャンセルが可能であれば、企業個別での対応も可能ではないか。しかし、配分方法はシンプルな方が公平になる。

4: 測定試料として Biosafety level 2 (BSL2) のものが増えている。ビームラインとして対応をどのように考えているのか。

>> 物理的封じ込め P1 レベル (=BSL1) の対応は施設として準備中である。BSL2 については、BL44XU で過去に実績があるが、現状では実施されておらず、必要に応じて対応を行うほかない。しかし、32XU,41XU はハッチ内で精密空調を使っているため、対応が可能かは検討が必要である。

5: 世界の大型放射光施設では、今後どのようなアップグレードが行われるのか? SPring-8 も同じような方向性で進むのか?

>> 微結晶 (1  $\mu\text{m}$  以下) の結晶には複数結晶からのデータ収集の方法開発が進んでいる。

>> このような測定ではマウント方法が課題であり、SPring-8 でも種々開発を進めている。試料交換ロボットの高速化は不可欠になるだろう。

>> ソフトウェアに関しては、XFEL で Serial femtosecond crystallography (SFX) に対する開発が進んでいる。5年後にはかなり実用的になっているのではないか。

6 (研究会外での意見): 針状結晶が斜めにマウントされている際に、斜め 1 列に diffraction scan を簡単にできるようにしてほしい。また、アッテネータの厚みを入力する際に、減衰率 (%) を入力すると自動で必要な厚みのアッテネータが挿入されるようにしてほしい。  
>> 今後検討していく。

#### ・ SPring-8-II に関して

- 1: 偏向電磁石光源のビームラインはどうか。輝度は?  
>> 現在の ID 程度までに向上するかもしれない。
- 2: SP-8-II では、タンパク結晶用に現在のビームラインの本数が保障されている訳ではない。研究会として声を上げなくてはいけない。  
>> こういった会合を通して、施設者側から計画の状況を説明しつつ、研究会として新しい光を使った新しいサイエンスを提案しつつ、ビームラインに必要な機能や利用者数、必要なビームラインの数などをまとめていく必要がある。
- 3: 施設として最先端を求めるのは理解できるが、汎用的なビームラインも必要ではないか。  
>> 現在の利用方法を続けるという発信の仕方だけでは理解は得にくい。他分野も合流することで新しい研究が始まるなど、新分野開拓を行っていく必要がある。  
>> 企業、産業にも利用されているという声を上げることは可能である。  
>> 企業ではまだ酵素と低分子がメインのターゲットであり、膜タンパク・微結晶に特化されるのは企業の利用を阻害することになってしまうのでは?  
>> 偏向電磁石ビームラインでもピクセルアレー検出器などを導入することで、効率的に運用できるのではないか。
- 4: この分野としてユーザーの数は増えているのか?  
>> 本研究会への登録者数は増えている。ただし、サイレントマジョリティーでは困る。  
>> 裾野が広がりつつあるなか、タンパク質結晶解析の初心者の取り込みが必要ではないか。

#### ・ 遠隔測定および測定代行（メールイン）に関して

- 1: 遠隔測定について、通常利用と比べどのような点で異なるか。  
>> 試料を運ぶためのドライシッパーは SPACE ピンに対応した特殊仕様を使う。ビームラインオペレータとは適宜電話などで相談しながら進める。
- 2: 測定代行（メールイン）の成果非専有利用はどうしているのか?  
>> 共同研究ベースで利用可能です。個別にご相談ください。
- 3: データの処理はどうしているのか?  
>> 現在はデータをダウンロードしてから処理している。自動である程度処理できれば、より便利になると期待している。
- 4: リモート、メールインは主流になるのか? X を飛ばす方法での利用が可能になれば、ビームラインのオンラインでの操作と同じになり、効率的な実験やデータ処理ができるので

はないか。

>> 施設の性格上、ネットワークセキュリティポリシーが厳しくならざるを得ない。  
SPRUC など利用者からの声も重要。

#### ・回折データの処理に関して (XDS)

1: 成果専有ユーザーはソフトウェアライセンスを別途購入するとしても、ビームラインでも使用しやすい形態にしてほしい。

>> ライセンスを所有していれば、ビームラインでの使用は可能と思う。

2: 使いやすい GUI がないのでとっつきにくい。

>> 作者の自動化についての考え方として、GUI は重要でないと考えているようだ。

Generate\_XDS.INP を使用すると、検出器の種類ごとにカスタムしたパラメータが適用され、そのまま処理が可能ならず。とはいえ、GUI の意義も理解できるので、現在開発中。

3: 複数結晶からのデータのマージの方法はコツがありますか？

>> 現在開発中の自動化ソフトウェアでデータの取舍選択を行う予定。

4: HKL2000 に比べて最初の指数付けが弱いような気がする

>> そんなことはないはず。HKL と異なり、イメージの枚数やどのイメージを使用するのが重要。SPOT\_RANGE, SEPMIN, CLUSTER\_RADIUS がうまく行かないときに調整するパラメータです。

5: 開発中のソフトウェアは公開されていないようだが、どうやって要望を？

>> SPring-8 の計算機クラスターにインストール済み、使ってみてください。

#### ・研究会等の開催について

1: 参加しやすい学会年会に合わせて実施するのはよい。

2: SPring-8 シンポジウムはユーザーにポスター発表の機会がないので、学生を連れて行きにくい。

以上