

(様式2)

議事録番号

提出 2016年6月24日

会合議事録

研究会名：放射光構造生物学研究会

日時：2016年6月10日 9:30-12:00

場所：九州大学馬出病院キャンパス 総合研究棟 105号室

出席者：(議事録記載者に下線)

計 22名

大嶋浩介、神田大輔、嶋田睦、田口裕也、中島崇(九州大)、栗栖源嗣、中川敦史(大阪大)、陳明皓(北海道大)、沼本修孝(東京医科歯科大)、山口宏(関西学院大)、杉島正一(久留米大)、中村照也(熊本大)、河合聡人(崇城大)、村木則文(分子研)、関口雄介(Meiji Seika ファルマ)、杉本宏、引間孝明、山下恵太郎(理研)、河村高志、奥村英夫、Nipawan Nuemket、熊坂崇(JASRI)

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) 30分
3. 構造生物学ビームラインでの顕微分光測定 奥村英夫 (JASRI) 30分
4. 理研構造生物学ビームライン I (BL45XU) での BioSAXS の現状
引間孝明 (理研) 30分
5. 総合討論 (1時間程度)
6. 閉会挨拶

議題：

1. 共用ビームライン等の運用方法について
2. JASRI の高性能化の取り組みについて
2. SPring-8 次期計画について
3. 顕微分光測定の運用について
4. BL45XU での溶液散乱実験の実際について

議事内容：

今回はより広い分野の研究者の参加を期待して、第1,4回研究会会合と同様、日本蛋白質科学会年會に合わせて福岡市内で開催した。

開會挨拶では、阪大・栗栖代表より認知度の向上のために SPRUC の概要と研究会の趣旨説明がなされた。また、活動の活性化を目的として、研究会に世話人會を作る計画であることを説明。満場一致で承認された。

続いて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。BM-BL 以外に BL41XU でも遠隔実験(リモート測定)の環境整備を進め来年度をめぐりに実施すること、遠隔実験のために放射線安全教育が e-ラーニング対応となったこと、成果非専有の測定代行も実施中であることが説明された。また、実験ハッチ BSL1 対応 と結晶化ロボットなどのビームライン周辺機器を紹介した。さらに、最近の高性能化の現状としてロボット高速化、HAG 用加湿器の低温対応、BM-BL の高輝度化、高エネルギービームによる超高分解能測定、Serial Synchrotron Crystallography (SSX) 測定法の整備について説明がなされた。

次に、結晶回折実験と併用できる顕微分光測定 of 現状について、JASRI の奥村氏から紹介がなされた。BL38B1 (UV-Vis) と BL26B2 (Vis) にそれぞれ設置されており、26B2 は回折分光同時計測も可能。研究例の紹介のあと、試料調製に関してコメントが述べられた。

さらに理研の引間氏より、理研 SAXS ビームラインの現状について報告があった。まず SPring-8 では BL45XU のほか BL40B2, BL40XU, BL03XU でも小角散乱測定が行われていることを示し、小角散乱の概論のあと、BL45XU の整備状況、特に最近になって利用が広がりつつある SEC-SAXS の紹介が行われた。

これらの話題を受けて行った議論を行い(実際には最初の話題提供の段階で多くの議論がなされた)、閉會あいさつでは阪大・中川氏 (SPRUC 会長) より SPring-8 シンポジウムと Young Scientist Award について説明があった。

以上の話題からの議論は以下に報告する。

1. 共用ビームライン等の運用方法について

Q: 課題申請で継続が急に増えたのはなぜか。

A: 以前には継続課題は存在しなかったが、有効期間が半年から一年に伸びて生じた。A 期に応募が増えて、B 期に減ったので、課題の継続は認知されているようだ。

Q: 配分率はどうなっているか。

A : Bending は全て配分、ID は半分～すべての間。情報は JASRI タンパク質結晶解析推進室のウェブサイトに掲載している。

Q : 41XU は今最少何時間単位で配分されるか

A : 4 時間 (0.5 シフト) です。

Q : ID-BL は何時間の希望だと配分されやすいか。長い方がよいか、短い方がよいか。

A : 何とも言い難いが、現在の傾向を説明する。国内ユーザは遠慮気味に要求を出しているが、事情を知らない海外ユーザが長シフトを要求してくる傾向がある。それでも実験内容を勘案して配分調整はしている。また、成果専有で長時間の希望もあり、上限が設定された。今後の対応が変わってくることもあり、また期によっても傾向は変わる。配分方法についてはご意見をいただきたい

Q : 創薬プラットフォーム枠はどうなるのか、今後使えるのか。

A : 現状では不明。検討が行われていると聞く。

Q : 台湾 BL も使えますか。

A : もちろん使えます。Bending ビームラインも上手に活用していただきたい。

Q : 申請しておいて使わないとき、次回申請の評価に影響はないか。

A : ありません。成果発表の義務も生じません。

A : 3 年以内の成果発表は厳しくても、一つの論文に複数の課題を載せるのは問題ない。

Q : 昔は、結晶がないと申請できなかったが今はどうか。

A : 今は結晶がなくても出してよい。ただし、レフェリーの評点についてはわからない。それでも Bending ビームラインであれば、時間は確保できるだろう。

2. JASRI の高性能化の取り組みについて

Q : (SSX 測定について) 振動させるとよいと言うが、0.02 秒程度の振動に効果があるのか。

A : 0.02 秒でも 1 度の回転があり、データにも有意な差が出ている。

Q : 微小結晶に当たっていないフレームもあるのか。5 万枚中 2 万枚当たっているのなら、半分は当たるのか。2 コに同時に当たらないのか。

A : 結晶の大きさや密度によって決まる。2 コに当たることもあり、処理可能だが精度は良くない。

Q : 振動写真の方がよいのは partiality の見積もりが良くないのか、S/N は逆になるが。

A : (聞き取れず)

Q：(XFEL の)SFX は結晶のサイズによりノズルが詰まる問題があるが、SSX だと結晶のサイズがばらついてよいか。

A：マウント法にもよる。ほかのパラメータのバラツキもあり、今のところあまり気にはならないようだ。

Q：SFX のようなことを SR で撮れるということですか。いつから使えるのか。

A：そうなる。ただし、まだ開発中。今後講習などをして広めたい。

A：大きい結晶はふつうに回転写真を使えばよい。

Q：棒状結晶でスキャンするのはあったようだが。

A：あります。

Q：大きい結晶を作って砕いてはだめか。

A：試した人はおり、良くない結果が出ている。

A：クラスターをばらす、というのはありではないか。

Q：SR の実験は、アテネータなしで当てられるか。

A：dose は時々の判断による。さらに開発中。

3. SPring-8 次期計画について

Q：新しいリングが出来るのか。

A：そうではなくリングの中身を置き換える。1 年程度の停止期間を見込んでいるようだ。

Q：ビームが細くなるのか？

A：さらに 1 桁細くなる。

Q：どこまで細い必要があるのかが分からない。

A：単に強い光が出るわけではなく、高い干渉性など全く新しい光が出てくる。これをどのように活用して新しいサイエンスを導くのか。研究会はそうした議論の場にしたい。

A：そのうえで、ビームラインをどれだけ設置する必要があるのか。そうした議論になる。

Q：検出器は重要だが、独自開発の計画はあるか。

A：SACLA 用は理研で開発している。今後の課題であろう。

4. 顕微分光測定の実用について

Q：26B2 と 38B1 で分光装置の機構などが違うようだが、どのように使い分けすべきものなのか。

A：26B2 は白色光を照射してスペクトルをとるため短時間測定が可能。ただしや

や OD が小さい。38B1 は紫外まで測定可能。

Q：(深紫外レーザーで)結晶を削る方法で、多結晶を分けられるか。またこの加工で結晶が悪くならないか。

A：分けることも出来る。切断面より 5 ミクロン程度までは回折が悪化するようである。装置は、理研の河野氏が開発を継続している。

Q：なぜ悪くなるのか。以前はカッターなどで切ったりもしていた。

A：切断した境界の内側にはダメージは行かないが、切れる所の周辺に当たっていないわけではない、吸収による熱の影響もあるだろう。

Q：ラマン分光法は、結晶と溶液でスペクトルが変わらないのか。

A：変わらないことを示したかった。小さな変化はあると思う。装置が出来上がってきたのち、研究していく。

5. BL45XU での溶液散乱実験の実際について

Q：SEC-SAXS の方が早いかどうか。複数濃度サンプルが一度に測定されるのか。

A：通常だと 1 度インジェクションすれば 30 分程度かけて測定が完了する。さらなる効率化のため、オートサンプラーを導入予定。

Q：Nanodisc は解析出来るか。

A：最近そのためのプログラムが出てきたところ。

Q：精度はどれくらいか。AFM と結晶構造との違いを議論したいが使えるか。

A：測定自体に問題はないが、それほどの精度はないと考えた方がよい。

Q：SAXS の構造で論文を書く場合、必要となる情報は。

A：IUCr で議論されているのでご参照を。