

(様式 2)

議事録番号

提出 2017 年 8 月 23 日

会合議事録

研究会名：第 7 回 放射光構造生物学会

日 時：平成 29 年 8 月 3 日 10:00 - 12:00

場 所：大阪大学蛋白質研究所 1 階講堂

出席者：(議事録記載者に下線)

計 28 名

水島恒裕 (兵庫県立大理)、梅名泰史 (岡山大)、田中良和 (東北大)、大塚裕貴 (関西学院大学)、沼本修孝 (東京医科歯科大)、中村照也 (熊本大)、西澤知宏 (東大生物科学)、吉村政人 (台湾 NSRRC)、中川敦史 (阪大蛋白研)、山下栄樹 (阪大蛋白研)、高木賢治 (阪大蛋白研)、成田宏隆 (阪大蛋白研)、栗栖源嗣 (阪大蛋白研)、中村希 (阪大蛋白研)、東浦彰史 (阪大蛋白研)、河野能顕 (理研 RSC)、吾郷日出夫 (理研 RSC)、上野剛 (理研 RSC)、引間孝明 (理研 RSC)、山下恵太郎 (理研 RSC)、山本雅貴 (理研 RSC)、馬場清喜 (JASRI)、稲葉理美 (JASRI)、奥村英夫 (JASRI)、河村高志 (JASRI)、熊坂崇 (JASRI)、長谷川和也 (JASRI)、竹下浩平 (阪大蛋白研)

議題：構造生物学に関する SPring-8 の実験環境の現状と計画および次期計画を含めた将来について

プログラム：

1. 開会挨拶：
2. 話題提供： 「光源性能を活かす新しい蛋白質結晶解析技術の動向」 山本雅貴 (理研 RSC)
3. 動向調査： 話題提供や過去の議事録などを踏まえて議論
4. 総合討論

議事内容：

今回は大阪大学蛋白質研究所で開催された蛋白研セミナー&SPring-8 先端利用技術ワークショップ「SPring-8 における蛋白質構造生物学研究の現状と将来」

の会議前に研究会を開催したため、28名の構造生物関連のビームラインを使うユーザー及び関係者に参加を得ることができた。

まず、開催挨拶では研究会の趣旨説明およびビームラインの現状と今後について説明がされた。続いて、理研 RSC・山本雅貴氏から「光源性能を活かす新しい蛋白質結晶解析技術の動向」について話題が行われた。山本氏からは、現状の各構造生物ビームラインの特色と今後実施される SPring-8-II へのアップグレードの計画について説明があり、アップグレードによってエネルギーが 8 GeV から 6 GeV に下がる代わりに、光源のエミッタンス (6.6 nmrad: Achromat) (2.4 nmrad: not Achromat) は、従来よりも一桁低いエミッタンス放射光 (0.149 nmrad) となり、ビーム幅が 1 マイクロメートル以下のナノ集光光源を目指すという方針であるとのことであった。

総合討論に先だって山本氏から、SPring-8-II のファーストビームで求められているターゲットとして生命科学的に重要な反応の解析が期待されているが、結晶構造解析にこだわらない方法の可能性について紹介された。アップグレードに伴うコヒーレンシーの改善を視野に入れた Coherent Diffraction Imaging (CDI) の手法などが紹介され、回折と散乱の境界領域に新しい研究が期待されると述べられた。一方で、熊坂氏から結晶構造はパッキングの制限を受けるため、電子顕微鏡などの単粒子的な手法との棲み分けを踏まえて今後どのように取り組むべきかとの話題が出た。また、山本氏の回答として、X線結晶構造は高分解能な構造を理解する上で唯一の方法であるため、オペランド *Operando* (その場) 解析やナノ結晶を使った時分割などによる動的な取り組みとの連携について提言された。

ビームライン側の話題として、熊坂氏から SPring-8-II のビームサイズがこれまでより極めて小さくなる可能性が示され、従来の蛋白質結晶解析の手法で扱える線源かどうかの話題が上がった。阪大専用ビームラインの中川氏と理研ビームラインの山本氏からは、アップグレードによって格子の大きい蛋白質構造に対する回折能の問題や結晶学的な回折強度データの質の低下などの懸念が上がった。また、中川氏から蛋白質結晶専用のビームラインが減る可能性が話された。これに対して西澤氏からは研究対象の膜蛋白質は SPring-8 の利用が不可欠であるため、41XU クラスのビームサイズと強度のビームラインの維持を主張した。ビームラインサイドの意見として熊坂氏からは、偏向電磁石光源ビームライン (BM-BL) の有効的な活用が提案され、また、成果の多い構造生物の分野は SPring-8-II への高度化に対してコミュニティーとして積極的に主張する必要性を述べられた。

山本氏は挿入光源ビームライン (ID-BM) の標準化と BM-BL の必要性について話題提供がなされた。また、今後の SPring-8-II へのアップグレードに際して、蛋白結晶のビームラインの本数や性能の維持および予算の確保は確約されていない現状の問題を示され、新しい提案や計画が必要であると提案された。

梅名氏は、回折実験と他の手法を同時計測する複合的な解析について意見を述べられた。熊坂氏からの回答として、ビームライン側は具体的なターゲットがはっきりしていれば、開発や資金調達でも共同で行えるように検討できると述べられた。また、山本氏からの研究紹介として、ユーザーの課題であった微小結晶からデータ収集を行うラスタースキャン法や serial synchrotron crystallography (SSX) 法による測定は取り組みの 1 つと紹介された。また、利便性などのユーザーからの更なる意見が必要であるが、サイエンスとしての価値をユーザーから提案されることが要求されているとも述べられた。

阪大専用ビームラインの中川氏から汎用ビームラインは BM-BL なのか ID-BL なのかとの、話題提供がなされた。梅名氏からは BM-BL の複合的な測定として、XAFS による金属原子の状態把握などの評価や X 線損傷の条件検討に必要と述べられた。しかし、そのような条件検討の実験は最終的な結果を担保する過程で必要だが、その検討実験自体は成果になり難いことが問題とも述べられた。沼本氏も BM-BL の複合的な測定として、顕微分光測定によるスペクトル情報が状態の定量評価とに使われていると述べられた。また、回折実験だけにとらわれない、柔軟に対応できる BL の必要性を訴えられた。

沼本氏は一方で SPring-8-II の BL 整備計画にはフォトンファクトリー (PF) などの国内の他の放射光施設との役割分担や日本の放射光科学としての方向性がどのようにになっているのかとの、話題提供がなされた。山本氏から、複合解析の新しい提案にはサイエンスとしての価値が必要であり、BL 整備計画の設計に標準化すべきかどうかの問題であるとした。もし BL 整備計画には回折計以外の測定環境を盛り込む事が必要であれば、本研究会から方針を提言することを提案された。また、JASRI の熊坂氏からは、BL 整備計画の組織の違いとして、キャッシングエッジを狙った理研とユーザーの支援に主体を置く JASRI との組織の違いによる現状について示された。また、次期計画では ID-BL が強調されているが、汎用かつ共用の BM-BL でこれまでのノウハウを活かす必要性を考えていると述べられた。また、他分野のビームラインではユーザーのアクティビティーが違うためビームライン担当者との距離感が違うが、蛋白結晶の分野ではビームライン担当者とユーザーが密に連携できる可能性があるとも紹介された。ユーザーのニーズにどのように答えるか、またどのように一緒に取り組むかを課題

と考えており、研究会を通じて積極的に主張すべき、と述べられた。

栗栖氏から、X線損傷の回避法としてマイクロ結晶の解析が既に規定路線になりつつあるが、SPring-8-II ではそれがナノ結晶まで解析が拡張できるかどうか、低分子化合物の結晶構造の分野での現状について質問が出た。山本氏からの回答として、SPring-8 では微小結晶の取扱いや解析技術は低分子化合物ではなく蛋白質結晶が牽引していると述べられた。粉体の製薬試料の結晶構造は新規分野なると紹介されたが、低分子微小結晶の解析手法の開発者の不足や物性についてまだ取り組むべき課題が残っていると述べられた。また、ヨーロッパの放射光施設 PETRA IV の建設計画の紹介として、EMBL の Thomas Schneider らは集光しない均質な大きなビームを計画しており、回折強度データの質の向上を目指していると紹介され、SPring-8-II でも同様にサイエンスの目的に応じた実験ステーションの設計から議論をすべきとの話題が出た。

吾郷氏からは SPring-8-II で想定されている高いコヒーレント性を使った測定法として結晶性の低い試料の散乱光を使った解析の可能性について質問が出た。山本氏の回答として、CDI による測定を紹介され、SPring-8-II のコヒーレンシーの高い 100-1000 倍強い線源と結晶を使った単粒子解析に似た手法によって電頭レベルの CDI が可能かもしれないと述べられた。また、吾郷氏は質の低い結晶からの構造情報を取り出せるのではとの質問に、山本氏は結晶構造解析とイメージング解析の狭間となるクラスター構造解析が将来の可能性として示された。

SPring-8-II へのアップグレード時期について、西澤氏から 1 年間の停止期間が研究室の成果低下に繋がる懸念が出た。特に 32XU や 41XU を使った微小結晶のスクリーニングができない事が問題になると述べられた。また、ビームタイム確保の問題から電頭への手法転換も紹介された。山本氏は建設予定の東北の放射光施設で 1 本のビームラインが 41XU, 32XU 相当になることや、上海や米国 (APS) などのアップグレードが予定されている海外の放射光施設を理研の組織としてビームタイムを融通する処置があるのではないかと述べられた。

今回の研究会について梅名氏から SPring-8 シンポジウムでの開催では他分野からの参加者との議論が深まる場にならないかと意見が出た。中川氏からは研究科の合同開催も紹介された。また、熊坂氏からは他の研究会に参加する事も提案された。

SPRUC 会長でもある中川氏から、SPRUC 高性能化作業部会へのアンケート回答として、研究会としての回答として今後のサイエンスを見据えた提案を期待された。また、ユーザーからの広い意見の収集の要望と、東北の放射光施設の建設

スケジュールによる計画変更の可能性も示された。

なお、研究会の総合討論後、前回の研究会で任命された研究会世話人の内の7名が参加して今後の世話人としての活動について意見交換が行われた。