

## ビームライン・実験装置 評定票

評価委員名	生命科学学科		
ビームライン名	BL-18B	ビームライン担当者名	鈴木 守
課題数	やや過多		
混雑度	1.5 倍から 2 倍		
主な研究手法、研究分野とビームライン担当者の位置付け	A 白色ラウエ法による時間分割構造解析 B MAD 法による蛋白質結晶構造のルーチン解析 c	分野の一人 分野の一人	

## ビームラインの性能等について

適切に保守、整備されて、本来あるべき性能を発揮しているか	5 フル性能を発揮
取扱は容易か	4 やや容易
取扱説明書は整備されているか	4 やや充実
性能・仕様等で特記すべき点、他施設と比較して特記すべき点	本ビームラインは白色ラウエ法による蛋白質の時間分割解析と多波長異常分散法 (MAD) によるルーチン解析に対応することを前提に、上流側にブラチナコートの特ロイダルミラー (1 : 1 集光)、下流側に 2 結晶分光器を配置した光学系を採用している。本ビームラインの白色 X 線はミリ秒オーダーの時間分割解析に十分なものである。2 結晶分光器の波長選択性は MAD 実験をスムーズに進行させる上で重要である。入射スリット系を調整すれば MAD 法に十分なエネルギー分解能を達成できる。
改良・改善すべき点	白色ラウエ法による時間分割解析と MAD 法によるルーチン解析は、構造生物学上どちらも重要であるが、X 線光学系の立場からは本ビームラインの立地条件で両者を両立させ、かつそれぞれに最高性能を実現することは容易ではない。2つの実験目的の並立は本ビームライン建設当事の PF の事情によると思われるが、今後は両者を区別し、本ビームラインは MAD 法によるルーチン解析を中心にすえて改良を進めるべきである。白色ラウエ法による時間分割研究の対象は、現在ではナノ秒を超える超短時間の領域に集約されており、今後本ビームラインでミリ秒オーダーの時間分割解析を計画する利用者は少ないと思われる。また現在では、多くの酵素反応が結晶相では秒から分のオーダーで進行することが知られており、高フラックスの光源を利用できれば単色 X 線を利用することで広大な時間分割解析の領域が開けるため、今後の PF における蛋白質の時間分割解析では AR を光源とする単色ビームラインの建設と利用を模索すべきである。

## 実験手法のビームラインとの適合性・研究成果について

※1: 光源、ビームライン光学系と研究手法は適合しているか。

手法 a	適合性 (※1)	5. 最適
	研究成果	4. 高い
手法 b	適合性 (※1)	4. 適切
	研究成果	4. 高い
手法 c	適合性 (※1)	5. 最適 4. 適切 3. 妥当 2. やや不適 1. 不適
	研究成果	5 極めて高い 4. 高い 3. 妥当 2. やや低い 1. 低い
総合評価	研究成果	4. 高い
	世界の状況と比較しての評価、ビームライン性能が律速となっている場合はその指摘	本ビームラインは、日本の時間分割結晶構造解析と MAD 解析を牽引した点で高く評価できる。MAD 法は今後ますます、より困難な対象へと目標をシフトさせつつ発展すると考えられ、光源としての性能向上が必要である。本ビームラインは最近行われた CCD 検出器の導入により、さらに利用効率の向上が期待できるが、現状の X 線光学系と CCD 検出器の特性の間には若干の不一致が認められる。予算とマンパワーが許すならば、光学素子の再配置を含めた X 光学系の再構築が肝要である。本ビームラインを主に利用して達成された構造生物学上の成果には、北大、京大、奈良先端大などの各グループによる DNA と相互作用する蛋白質とその複合体の解析など、特筆すべきものが多い。

### 実験装置の性能等について

使用している実験装置名(a)	時間分割ラウエカメラ I P読み取り装置
適切に保守、改善されて、本来あるべき性能を発揮しているか	<b>5フル性能を發揮</b>
取扱は容易か	<b>4. やや容易</b>
取扱説明書は整備されているか	<b>3. 普通</b>
性能、仕様等で特記すべき点	大型 I P を利用し、その水平移動と同期してミリ秒オーダーで白色 X 線を ON/PFF するシャッター系を備えることで時間分割解析を可能にしている。I P は富士フィルムが開発し、蛋白質結晶構造解析の分野でも世界をリードした X 線検出器であり、その特性をよく考慮してカメラの設計が行われている。
改良・改善すべき点	白色ラウエ法による時間分割解析は、蛋白質結晶内部で反応を進行させる反応系の開発が容易ではないことに加え、光源の X 線強度の分布や、回折点の空間的な伸びや重なるの補正を必要とし、技術的に多くの問題を抱えていた。それぞれを克服するソフトウェアの開発が順次行われたものの、その結果達成された測定精度は単色 X 線を利用した場合と比較すれば、なお十分とは言えない。今後の時間分割解析では白色ラウエ法よりはむしろ高フラックスの単色 X 線の利用を考慮すべきである。

使用している実験装置名(b)	Quantam 4R
適切に保守、改善されて、本来あるべき性能を発揮しているか	<b>4ほぼ性能を發揮</b>
取扱は容易か	<b>4. やや容易</b>
取扱説明書は整備されているか	<b>4. やや充実</b>
性能、仕様等で特記すべき点	最近本検出器が導入されるまでは、上記の回折系に単色 X 線を導入し、大型 I P を検出器として MAD 法のための測定が行われていた。MAD 法はそのルーチン解析性に特徴があり、CCD 検出器の高速性と自動性は特に重要である。本装置の画像データの読み取り速度は秒のオーダーであり、結晶を回転させるゴニオメータ部と連動してデータ収集が自動化されていることが最大のメリットである。
改良・改善すべき点	本ビームラインでは、今後 MAD 法の適用範囲を拡大しようとする場合、単色 X 線のフラックスが十分とは言えず、CCD 検出器への記録時間は分のオーダーである。ビームラインの光学系の改良によりフラックスを向上するか、CCD 検出器の感度の向上が望まれる。

使用している実験装置名(c)	クライオストリームクーラー
適切に保守、改善されて、本来あるべき性能を発揮しているか	<b>5フル性能を發揮</b>
取扱は容易か	<b>4. やや容易</b>
取扱説明書は整備されているか	<b>4. やや充実</b>
性能、仕様等で特記すべき点	液体窒素を用いて低温窒素ガスを発生させ、蛋白質結晶試料の温度を 100K に保つことで、X 線損傷をドラスティックに押さえることを可能にした装置であり、構造生物学の発展には不可欠のものであったと言える。
改良・改善すべき点	これまで利用してきたものは液体窒素の定期的な補給が必要、低温エリヤがやや狭い、低温ガス導管に着氷した場合のメンテナンスがやや困難など、あたらしく開発された空気中の窒素を分離して利用するものにくらべ、やや使い勝手に問題があった。ビームライン担当者のプレゼンテーションでも触れられたように、早期の変更が望まれる。

### 今後のビームラインのあり方について

今後の計画の妥当性について	MAD 法による蛋白質結晶構造解析の初期の時代には、解析対象にできる蛋白質の分子量は 5 万程度までと考えられていたが、現在では 10 万を超える解析例も少なくない。MAD 法はそのルーチン解析性のゆえに今後も構造生物学の発展を支え続けるであろう。Spring-8 の存在を前提とする現状では、MAD 法を主な目的とするビームラインを PF リングまたは AR リングのアンジュレタポートに新設しようとする計画は妥当である。ただし新規のビームラインが複数実現して、時代の要請に答えられるようになるまでには数年の時間を要すると考えられるので、その間は本ビームラインを PF の主力として維持、発展させる必要がある。予算とマンパワーが許すならば単色 X 線のフラックスを改善して、本ビームラインで実行可能な MAD 実験の適用範囲を拡大すべきである。
今後 5 年間に	<b>余裕があれば 予算投入</b>
その他今後の計画に付いての意見	制御ソフトウェアの体系を BL6A と共通化することは、両ビームラインを共通に利用するユーザーにとって好ましい。