

「第2回タンパク質結晶構造解析ビームライン中級者向け講習会（今更聞けないデータ処理プログラムの使い方，上手な回折データの取り方）」開催報告

東京大学大学院薬学系研究科 藤間祥子

2017年10月25日（水），東京大学本郷キャンパス薬学部講堂において，タンパク質結晶構造解析ビームラインの中級者を対象とした講習会を開催した。この会は，PF-UAタンパク質結晶構造解析ユーザーグループ幹事会が主催し，創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム事業，構造解析ユニット / 構造解析領域の代表機関である高エネルギー加速器研究機構と共催で行った。

本講習会はある程度の経験を積んだユーザーを対象としており，参加者が互いに情報交換しながら学びあうことを目的に開催している。講習に先立ちPFタンパク質結晶構造解析ビームラインのユーザーに向けてアンケートを実施し，ユーザーがどのような内容の講習を望んでいるかを調査し希望に添うかたちでの講習を企画した。

申込受付開始より多数の申込を頂き，最終的に133名が参加する盛況の講習会となった。うち学生が42名，企業および大学研究員から教授クラスまでが92名と幅広い層から多くの参加があった。また，新しい取り組みとしてYouTubeによる講習会の動画配信も行った。ライブ視聴者の数は約60名で，総勢193名にもおよぶ方々が講習会に参加したことになる。

講習は3つのセッションに分けて行った。『XDSを使おう』ではPF構造生物学ビームラインで2年後を目処にライセンス取得を廃止計画であるデータ処理ソフトHKL2000に代わるソフトXDSについて，ユーザーが利用した率直な意見や回折データ処理ソフトトラブルシューティング方法，PFでの自動処理の観点からXDSの活用方法について講演いただいた。次の『効率的かつ効果的なデータ収集を目指そう』では，高輝度かつPAD検出器が配備



図1 会場の様子



図2 懇親会の様子

された最新のビームラインでの，X線損傷を考慮した効率的かつ効果的な測定方法，PFビームラインの開発状況を講演頂いた。最後のセッションである『スクリーニングで析出した結晶をうまく回折実験にもって行こう』ではPFビームラインにも整備され，今後一般ユーザーのさらなる利用が予測されるプレートスクリーニングについて，開発が先行し実績のあるイギリスDiamond LSの最新情報と，PFの現状や最新情報を発表いただいた。またJAXAでの宇宙実験の現状や結晶化の試みについてもご講演いただいた。

長時間にも関わらずほぼ全ての参加者が最後まで話を熱心に聞いてくださり，質問を重ねていただいた。

懇親会には75名もの多くの方に参加いただいた。講習会での講演内容についての話題をはじめとした，活発な意見交換が行われた。

<講演プログラム>

セッション1：XDSを使おう

『PFでの回折データ処理ソフトの整備状況と今後』

山田悠介（高エネ研）<動画配信>

『XDSを利用して～HKL2000ユーザーがXDSを使用した率直な感想』

伏信進矢（東大・院農）<動画配信>

『XDSを使おうトラブルシューティング編』

陳明皓（北大・院理）<動画配信>

『PFビームラインでのXDS自動処理とその活用』

山田悠介（高エネ研）<動画配信>

セッション2：効率的かつ効果的なデータ収集を目指そう

『取得効率やX線損傷を考慮したデータ収集例』

藤橋雅宏（京大・院理）<動画配信>

『PFビームラインでの全自動測定開発の現状』

山田悠介（高エネ研）<動画配信>

『その他PFビームライン開発の最新情報』

引田理英 <動画配信>（高エネ研）

セッション3：スクリーニングで析出した結晶をうまく回折実験にもって行こう

『測定に向けた結晶の取り扱いについて -Diamond LS および JAXA での取り組みと現状』

岩田茂美 (JAXA)

『PF 結晶化ロボットによる結晶化条件探索と BL-17A におけるプレートスクリーニングの活用』

阪本泰光 (岩手医大)

「第2回タンパク質結晶構造解析ビームライン中級者向け講習会（今更聞けないデータ処理プログラムの使い方、上手な回折データの取り方）」参加記

横浜市立大学大学院 生命医科学研究科 鎌田健一

2017年10月25日、東京大学本郷キャンパスにて開催された第2回PFタンパク質結晶構造解析ビームライン中級者向け講習会に参加させていただきました。今回の講習会は【今更聞けないデータ処理プログラムの使い方、上手な回折データの取り方】と銘打たれ、「XDS を使おう」（回折強度データ処理ソフト XDS の使用方法、またそのトラブルシューティングについて）、「効率的かつ効果的なデータ収集を目指そう」（取得効率やX線損傷を考慮したデータ収集例、PFビームラインでの全自動測定やその他開発の最新情報）、「スクリーニングで析出した結晶をうまく回折実験にもって行こう」（測定に向けた結晶の取り扱いについて Diamond LS や JAXA での取り組みと現状、PF 結晶化ロボットによる結晶化条件探索とプレートスクリーニングの活用）、という上記の3テーマについて諸先生方にご講演いただきました。

個人的に今回の講習の主たる参加動機は、回折強度データ処理ソフト XDS の使用方法とトラブルシューティングです。昨今使用されている代表的な回折強度データ処理ソフトには HKL2000 や CCP4, CrystalClear 等があるかと思われませんが、XDS はアップデートも頻繁に行われ、現代の多くの検出器に対応している、また無料で使用することができるなどの利点があります。PF における HKL2000 の使用契約が 2018 年度いっぱい打ち切られることも決定していることもあり、これもいい機会だと思って参加させていただいた次第です。

とは言いましても、私は回折強度データの処理に関しては、研究室では主に CCP4 で iMOSFLM を使ったり、HKL2000（先輩に教わり、助けてもらいつつですが）を使っていました。つまり、XDS に関しては全くの未経験という、今、省みると1回ぐらいいは使ってから行けよと言いたくなるような状態で参加してしまいました。私が会場となっていた東京大学薬学部総合研究棟の講堂に到着した頃には既に大勢の参加者が着席しており、詰めて座らないと席がないような盛況具合という状態でした。

本題の講習会内容に入らせていただきますと、まず初めに「HKL2000 ユーザーが XDS を使用した率直な感想（東大院農・伏信進矢先生）」「XDS を使おう トラブルシューティング編（北大院理・陳明皓さん）」ということで、これから XDS に手を出そうかなと考えているレベルの私でも大変参考になる、わかりやすいお話を聞かせていただくことができました。講習参加後に早速使用してみようとしたところ、早々にソフトのインストールで躓くなどスムーズにはいきませんでした。身の回りの先生方、先輩方にもかなり助けをいただき、どうにかデータ処理に使用することができました。周りの方々の助けに加え、XDSwiki や BioKids Wiki、またそれ以外にも様々な方が web 上に公開してくださっているトラブルシューティングの履歴を参考にさせていただきました。これから始められる方、私のように PC が苦手だけれどもどうにか XDS を使えるようにしたい方にとっては非常に頼りになるはずなので、是非そういったページを参考にしてみてもと思います。実際に XDS を使ってみた感想としては、トラブルが起こりそうな厄介なデータセットを処理していないことや、周りに教えてくれる人がいたという幸運もあり、慣れば使い勝手の易いソフトと感じました。私のようにコマンドライン上での操作が苦手という人にとっても、現在は XDSGUI がありますので、環境さえ構築できてしまえば大変使い易いと思います。

またここまで報告させていただいた XDS の使用方法と併せて講習会の内容として盛り込まれていた、PF ビームライン開発の現状についても少しだけ言及させていただきたいと思います。PF では現在整備が進められているリモートモニタリングシステム・自動回折データ処理システム PReMo (PF Remote Monitoring System) というものがあるそうです。これはビームラインでの実験をリモートで行い、さらに回折データの取得と同時に自動的にその処理(空間群や各種統計値の算出まで)行ってくれるというものです。私の所属するラボはX線結晶構造解析を専門としPFに近い立地(神奈川県横浜市)であるということ、さらに大変ありがたいことに先生方が旅費を捻出してくれているということもあり、ビームラタイムのたびにデュワ



図1 講義の様子

ービンを持って PF に行き、そこで収集した実験データを持ち帰って解析というような形で実験を行うことができます。一方で近県に放射光施設がないラボや結晶構造解析を専門としていないラボにとっては、ビームラインに直接赴いて実験するというのは中々に大変かと思います。このようにビームラインスタッフの方々の尽力によってリモート化・自動化が進むことで、X線結晶構造解析の敷居がどんどん低くなって結晶構造解析の裾野が広がっていきんだなあ、学生の私が偉そうに言うようなことではありませんが感じさせていただきました。

今回の私の講習参加を通して皆様何かにお伝えできることがあるとすれば、特に学生で私のような「興味はあるけど経験が……」といった状態で尻込みしている方がいらっしゃったら、次の講習には是非参加してみたいということです。私も実際参加したことで、ソフトを使用するきっかけになりました。結果的には自分一人の知識と力ではどうにもいかず、色々な人の助力をいただくことになりましたが、参加しなければ新しいソフトを使ってみようなどという気も当分は起きなかったような気がします。「構造解析に興味はあるけど経験が……」という方には結晶化や構造解析の経験がない方向けの初心者向け講習会も開催されていますので、そちらの方などぜひ参加を検討してみると良いのではないかと思います。

末筆にはなりますが、講習会にてご講演いただいた先生方、講習会運営委員の方々、また今回私のような若輩者にこのような報告記を書く機会をくださった PF NEWS 編集委員の方々にこの場をお借りして感謝を述べさせていただきますとともに、皆様の益々のご発展をお祈りさせていただきます。

Nanotech CUPAL 放射光利用技術入門コース 粉末X線回折研修会開催記

Nanotech CUPAL KEK 事務局

Nanotech CUPAL は、平成 26 年度下期から始まった文部科学省「科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業」で、TIA と京都大学を中核として形成されたコンソーシアムです。その中で KEK は、PF を利用した放射光分析に関して 2 つの研修コース（入門コース、上級コース）を実施しています。

入門コースは各回一つの手法をテーマとして取り上げ、講義と実技実習を計 3 日間で行ないます。1 日目は、放射光利用技術の全般的な概論と、テーマとする手法の詳細について講習を行います。2、3 日目は、PF にてその手法の実技実習を行います。

最近では平成 29 年 12 月 12 日～14 日、PF において第 6 回入門コースを実施しました。第 6 回は粉末 X 線回折をテーマとして、講師の佐賀山基准教授により、BL-8A にて粉末試料の作成方法や装置の操作方法について、また、

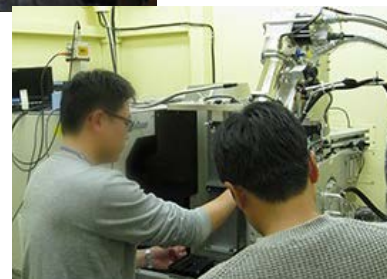


図 1 講習会の様子（上）と BL-8A での実習の様子（下）

測定、RIETAN を利用した構造解析という一連の実験手順について指導していただきました。

参加者からは、放射光分析に関する基礎的な知識が身についた、丁寧に指導して頂きながら実験を一通り体験することができとても参考になった等の感想をいただきました。

今後の研修会開催予定につきましては、p.37 「Nanotech CUPAL 第 7 回放射光利用技術入門コース X 線イメージング研修会開催のお知らせ」をご参照ください。

物質構造科学研究所 設立 20 周年記念 シンポジウム「物質構造科学の過去・現在・ 未来」を開催

物構研の来し方を振り返るとともに、将来を担う中堅・若手研究者の皆さんに、自らの未来の姿も重ねながら当研究所での研究活動の将来を語っていただくための、物構研設立 20 周年記念シンポジウムが、昨年 12 月 27 日に KEK 小林ホールにて開催されました。シンポジウムには、東海キャンパスでのテレビ会議を通じた参加者も含め、149 名が参加しました。

物構研の山田和芳所長は冒頭の挨拶で「今日は物構研の成人式です」と述べ、活発な議論を促しました。続いて KEK の野村昌治 理事が元物構研職員としての立場から「KEK の機構化と物構研 20 年の歩み」と題し、物構研の歴史と共同利用の現状について表やグラフを示しながら話しました。

続いて、19 名の物構研に関わる KEK 内外の中堅・若手研究者が、物構研の 4 つのプロープ（放射光・中性子・ミュオン・陽電子）に関し、利用研究の展望や将来の施設運営について、さらには加速器の将来展望について、次々と



図1 挨拶を述べる山田和芳物構研所長（上）と「KEKの機構化と物構研20年の歩み」を講演する野村昌治理事（下）

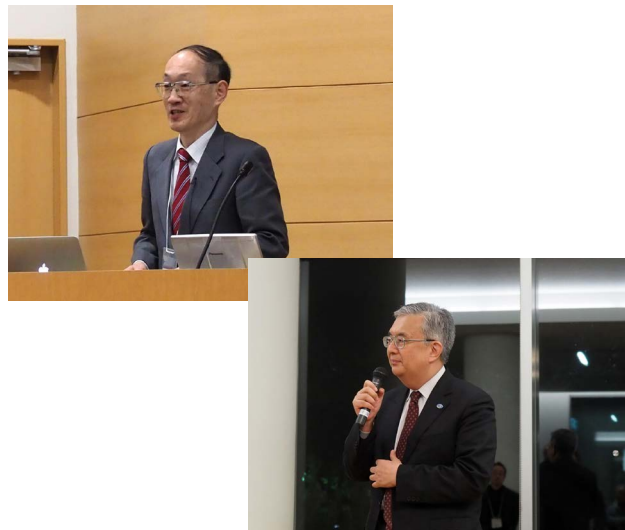


図3 物構研の将来像について講演する小杉信博次期物構研所長（上）と懇親会でお祝いを述べる山内正則機構長（下）

講演を行いました。会場からは各講演に対し質問の手が挙がり、時間の許す限り議論が続きました。

シンポジウムの最後に、次期物構研所長で分子科学研究所の小杉信博教授が「大学共同利用機関としての物構研の将来像」と題して講演を行いました。小杉教授は、物構研をとりまく組織を表した模式図を掲示し「外部からは物構研がどこか分かりにくい」と述べ、その理由として「物構研はKEKの機構化の流れの中で生まれ、組織が先だった」ためと話しました。続いて将来像と題した模式図を示して、これからはユーザーに自分たちの研究所だと感じてもらうため「物質構造科学とは何か」を確立し、コミュニティを作っていくべきだ、また他研究所等との連携も大切だと述べました。

各講演の要旨は、シンポジウムのプログラム (<http://www2.kek.jp/imss/notice/2017/11/1102IMSS20th.html#program>) からご覧いただけます。また、各講演のスライド資料を基に、プロシーディングスを発行の予定です。

シンポジウムに続いて、会場隣のラウンジにて懇親会が開かれました。シンポジウム出席者の半数以上が参加し、とても賑やかな会となりました。懇親会では、KEKの山内正則機構長や小間篤元物構研所長、下村理前物構研所長

からもお祝いと励ましの言葉をいただきました。
（ウェブ記事 - 物構研トピックス「物質構造科学研究所設立20周年記念シンポジウム「物質構造科学の過去・現在・未来」を開催」<http://www2.kek.jp/imss/news/2018/topics/0104IMSS20th/>より転載）



図2 会場の様子