

Spring-8 BL41XU 評価報告

委員長 佐藤能雅（東京大学大学院薬学系研究科，教授）

委員 月原富武（大阪大学蛋白質研究所，教授）

雨宮慶幸（東京大学新領域創成科学研究科，教授）

赤坂一之（近畿大学生物理工学部，教授）

Peter F. Lindley（Director of ITQB）

Matthias Wilmanns（Head of the EMBL Outstation,
Hamburg c/o DESY）

1. 実験の設備と環境の現況

現状のビームラインと実験ステーション（双方を併せてビームライン施設とよぶ。以下同じ）は，第3世代放射光施設として，タンパク質結晶のX線回折強度データの収集に必要とされる基本的な構成，設備と性能を備えるに至っている。この状況に至る過程においては，実験ステーションの回折強度データ測定装置としては必ずしも当初において想定した開発と構築の経過をたどっていないものと見受けられるが，開発と試行の経過を経て，十分に強度フラックスが高い，指向性が鋭いビームとなり，多波長異常分散法（MAD）のための実験も容易に行える，使い易いビームライン施設になったものといえる。

ビームラインとしては，基本性能は概ね要求される性能を満たしていると思われる。操作の自動化によって，波長変更のための所要時間の短縮，操作に必要なスキル面の低減なども進められており，高く評価できる。

ミラーによって収束した焦点ビームサイズ（0.2 mm x 0.2 mm）が，微小結晶の測定には未だ大きすぎるとの見方もあり，焦点サイズの改善を引き続き検討されたい。スリットの開口サイズを利用者が適宜，容易に，試料サイズに最適化できることは実験には不可欠である。

実験ステーションにおける操作やデータ処理，その他において，使い易さのフレンドリー性が高まれば，担当スタッフのサポート介在が低減されてスタッフの負担も軽減され，実験のスループットが向上する。スタッフがフレンドリー化の必要性を挙げているように，これは今後の優先課題といえる。

実験装置への利用者側の習熟度を高めることで，問題を解決できる面は多々あり，そのための具体的な方策の立案と実行も必要であろう。習熟した利用者，それほど習熟してはいないが回折実験そのものには熟達した利用者，まったくの初

心者では、フレンドリー性の必要度と対応は異なるので、どのレベルまでがフレンドリー化としては必要かを検討されたい。この面でも、利用者の要望や声をより積極的にフィードバックし、スタッフと意見交換などを図る環境あるいはシステムを整える必要性があるのではなかろうか。

操作マニュアル冊子、オンラインマニュアル、習熟用ソフトウェア教材などは、実験の遂行には不可欠であり、今後も整備を進められたい。

ビームライン施設は必要とされる基本的な構成、設備と性能を備えるに至っていることから、高い性能と迅速なターンラウンドで実験を常時遂行できる環境を積極的に提供されたい。

2. 研究のアクティビティー

多くの利用希望と課題申請があり、しかも、平均して3シフトのビームタイムが割り当てられている状態が最近では定着している。この2~3年は成果が着実に増えており、極めて高く評価される論文も出ている。成果は今後さらに増加していくものと期待する。

研究のアクティビティーの評価においては、顕著な成果の多少がしばしば目安とされる。この点に関しては、施設がその成果の結実にどのように寄与したのかを考慮してビームライン施設の評価を行うことが重要と認識する。また、利用者課題での試料の特徴とその研究の意義、過去の利用者側の蓄積が成果に反映される場合が多いことも考慮すると、特徴ある優れた成果が多く、しかも増大しつつあるといえる。優れたビームライン施設は魅力的な課題を多く引き寄せることから、利用者とスタッフが有機的に連携して施設設備を改良し、実験がいつそう円滑に遂行できるように図られたい。

高いスループットが問われる構造解析実験とチャレンジングな構造解析実験（高精度が問われる試料、難度が高い試料など）の双方に対する高いアクティビティーが求められている。本ビームライン施設では、双方のバランスを保ちながらアクティビティーを高めることが重要と考えられる。

今回の評価において施設から提供された論文資料のなかで、とくに選択された成果には、他のビームライン、他の施設（Photon Factoryのビームラインなど）を併用しているものが少なからず認められた。これは、先行して実用的なものとなった施設を論文では記載していることを反映しているものと考えられる。このビームライン施設の完成度が高まったことから、成果への寄与、貢献度は現状ではより増大しているものと期待したい。現時点では、本ビームライン施設は、結晶回折構造生物学用の我国唯一の高性能の共用設備と位置付けられ、この分野の研究には必須なものとなっている。保守改良などを今後も進めれば、この

高い貢献度と位置付けは変わることはなかろう。

本ビームライン施設は、タンパク質結晶の回折データ測定専用の共用設備として、施設の名実ともに看板であり、さらに完成度を高めて成果を挙げていくべきである。貴重なビームタイム、施設および人的な資源を有効に活用し、結晶回折構造生物学の基盤となる事項や関連分野の展開、開発を目指すべきである。

3. 利用サポートのシステム

課題の採択率とビームタイムの配分について、ここ数年間は平均3シフトのビームタイムが割り当てられ、まだ課題の採択率も定常的な高い値となっている。CCD検出器の採用など、実験ステーションの機能の充実によってデータ収集に要する時間が短縮され、また、利用者の習熟度も高まっている。担当スタッフによるサポートのあり方を（フレンドリー化も含めて）工夫し、課題実施の形態を改良すれば、スループットは高まり、現在よりも多い課題を遂行できるようになる。ひいては、より多くの課題を遂行でき、また、既に実施した課題において達成できなかった点を補うような追加実施も可能となり、さらに多くの成果へと結実するであろう。

通常の申請による課題実施の制度のほかに留保ビームタイムの制度を設けたことにより、タイムリーな実験が可能になってきたことは、大いに評価できる。

試料の測定前の保管、準備、装置へのマウントから、測定中と測定後のデータの解析処理までを、できるだけスムーズにオンサイトで可能とする、また、この諸段階を測定にフィードバックできる、サポートの設備面での充実と体制が望まれる。なお、解析処理としては、測定した回折強度パターンから回折強度の算出までが可能だが、一応の必須条件であり、その先は初心者ならば多大なサポートを要することになる。

4. 今後の展開

ビームライン施設の強度フラックスを高めるための分光器のアップデート、その他のマイナーな改良は想定されるが、「大規模な改造」の必要性は、現状に大きな支障あるいは問題が無ければ、少ないのではないだろうか。なお、ハッチ内のビーム導入ラインが現状では空気パスとなっているが、これを真空パスに置き換えることにより、10 keV程度よりも低いエネルギーでのフラックスが大幅に高まることを指摘しておく。

ビームライン施設の将来課題として、高フラックスX線の照射による試料の損傷への対処は重要であり、損傷現象の解析と対処法の開発には系統的な研究が必要と思われ、具体的な計画と方策を検討し、実施されたい。

微小結晶に対応したビームライン施設の改良は重要であり，方針と方策を明確にされたい。

なお，優先課題と位置付けられているフレンドリー化と試料損傷の解析と対処は「大規模な改造」の必要性が少ないとの上記の見方と対応したものである。イメージングプレート検出器を CCD 検出器と利用者が随時切り換えて利用できることは極めて有効であり，また，必須なことである。CCD 検出器の読取り時間のさらなる短縮も求められている。もちろん，検出器のアップグレードとバックアップ機の準備，試料環境制御系や回折系の改良などは経常的な措置であり，不可欠なものである。微小試料への対応や損傷への対処は，「大規模な改造」を必ずしも必要としない経常的な措置の範囲内で可能ではなかろうか。

試料マウントのロボット化については，コスト面と有効性が満たされるならば，たとえば，試料交換に伴う時間のロスと良好な回折能の試料の選択には有効であり，現実的な形での導入を検討されたい。導入に際しては，我国および国際的なレベルでの試料ホルダーの共通化，利用者へのホルダーの提供と普及も必要である。

担当スタッフ自身の，この分野における，ビームラインに密着した研究テーマの展開が今後の施設の充実と進歩に重要と考える。そこで，施設としてのビームライン施設の拡充と運営の方針，「今後のスタッフ研究の振興策」の計画と見通しを明確にされたい。SPring-8 には，結晶回折構造生物学用のビームライン施設が他にも存在する。利用課題の遂行におけるビームライン施設・スタッフの間での相互の連携と役割の分担，ハイスループット化などの将来計画での開発の共同化と共通化，人員の配置などについての施設としての方策を引き続き検討されたい。

5. まとめ

現況でのビームライン施設の完成度，アクティビティー，成果は総合的に高く評価できるレベルに達しつつあると認識する。完成度とアクティビティーを高め，この方向性をさらに発展させて頂きたい。

追記 本報告書は，Peter F. Lindley と Matthias Wilmanns の 2 委員が委員会に寄せた評価と意見を取り込んで，これら 2 委員を除いた委員が協議して取りまとめたものである。