

SPring-8 BL40B2 評価報告

委員長 若林克三 (大阪大学)
浦川 宏 (京都工芸繊維大学)
片岡幹雄 (奈良先端科学技術大学院大学)
中川敦史 (大阪大学)
J. Gunter Grossmann (Daresbury Lab.)

1 . はじめに

本評価委員会は平成 16 年 1 月 4 日 - 5 日の 2 日間、SPring-8 で開催された。本委員会には予め、

- 1) Beamline Report BL40B2 (Structural Biology II)
- 2) SPring-8 Overview 2004

の資料が送付され、全委員から事前に個別意見書が委員会に提出された。委員会当日には、4 名の国内委員が出席し、施設側から SPring-8 の全体説明、ビームラインの視察、及びビームライン担当者からの詳細説明を受け、質疑・応答・意見交換を行い、以下の評価報告書を取りまとめた。

BL40B2 はタンパク質単結晶回折 (PX) と生物試料を中心とする X 線小角散乱・回折 (SX) と、二つの異なる分野の研究を展開するための共用ビームラインとして、1998 年にビームライン建設がスタートし、2000 年 1 月から共同利用が開始された。その後、生体以外の高分子や脂質などのソフトマテリアル、合金などのハードマテリアルの小角・中角 X 線散乱の研究にも利用されるようになり対象とする研究分野を広げてきた。最近では、ギニエ幾何学の粉末 X 線回折装置も組み入れられてタンパク質や有機化合物の粉末 X 線回折実験の R & D も行われており、汎用ビームラインとして幅広い分野・手法の実験に利用されている。

本評価委員会では、このような BL40B2 の現状を踏まえて、過去 5 年間のアクティビティーに関する評価を行い、将来に関する提言を検討し、その結果をまとめた。

2 . ビームラインと実験ステーションの技術的状況

BL40B2 は、生体物質構造研究の汎用の X 線回折・散乱ステーションとして、ベンディングマグネットのビームラインに設置されている。主として、タンパク質単結晶回折 (PX) モードと、小角散乱・回折 (SX) モードの二通りの設定が可能になっており、モードの変更も、PX 用のゴニオメーターをビームライン上に出し入れするだけの操作で簡単に行えるように設計されている。特定の目的に特化したビームラインとは別に、このような汎用の X 線回折・散乱ステーションの設置は重要であり、その目的のために、光学系などは最適化されている。

Fixed-exit double crystal monochromator による単色化、bent cylindrical mirror による集光と、全体の光学系自体は標準的な構成であり、「汎用」という目的にあ

っている。実際、波長可変であることから多波長異常分散法 (MAD) による位相決定 (PX モード) ができる一方、SX モードでは十分な小角分解能が得られるなど、それぞれのモードで、基本的な測定からかなり高度な測定までができるように考慮されている。SX モードでは、フォトンフラックスが挿入光源のビームラインに比べると低いため、静的測定に特化している。また特に、SX モードでは、カメラ長が可変となっているために、広い範囲の散乱角をカバーできるビームラインとなっている。さらに、試料位置に十分な空間があり、実験目的に合った試料台を設置することが可能になっているため、このステーションの応用範囲を広くしている。

ユーザー数の増加に伴い、モードの変更に伴う時間的ロスをできるだけ少なくすることが重要であるが、このステーションは、その点についても装置面・運用面で十分に配慮されている。

光学系は一般的なものであり、SR 利用に慣れたユーザーにとっては、なじみ深いものであるため、使用にあたっての困難は少ない。また、初心者にとっても、十分なマニュアルが整備されていて、最低限の教育でビームラインを使いこなせるようになっている。

検出器は、PX 用に CCD (ADSC: Quantum 4R)、SX 用に II+CCD (浜松フォトリニクス)、PX, SX 両用にイメージングプレート (RIGAKU: R-AXIS IV⁺⁺) が常備されており、実験に応じての使い分けが可能となっている。

汎用の回折・散乱ステーションとして設計されたことにより、合成高分子化合物、合金などの非生物物質の中・小角散乱実験への利用や、粉末 X 線回折実験への利用など、幅広い分野への拡大を可能とした。

また、完全にブラックボックス化するだけでなく、ハードウェアに直接アクセスするためのインターフェイスを公開するなど、ユーザーの高度な要求にも対応している。

3. 研究成果に関して

1) PX モード

MAD 法による新規タンパク質の単結晶構造解析に加えて、1 Å を切る超高分解能構造解析がいくつかなされているなどで、多くの水素原子の位置決定など特筆すべき成果がみられる。PX モードからの成果は、数多くの論文がインパクトの高い国際的な雑誌に掲載されており (過去 5 年間で 56 報)、ビーム利用の効率が高い。また、タンパク 3000 プロジェクトの国家プロジェクトにも貢献している。

2) SX モード

生物物質の標準的な溶液散乱研究に加えて、高角領域の散乱を精密に測定する新しいタイプの研究が増えてきている。高角領域の解析は今後ますます重要性が増すと思われ、理論的にも興味ある課題を含んでいる。

生物物質以外の SX では、カーボンナノチューブや機能性の高分子材料を用いた研究が多数なされており、SX の有効性を示すことに役立っている。また、合金の小角散乱では異常分散の利用が必要不可欠なツールになっている。

SX に関しては、PX に比べて論文出版数が少ないが（過去 5 年間で 20 報）世界的に新規性の高い研究が行われている。また、幅広い分野からの課題申請が数多く出されている。

これらとは別に、タンパク質や有機化合物の粉末回折への応用が R & D として開始され、BL40B2 の新たな応用として今後の発展が期待される。

4. ユーザーに対する運用と支援に関して

このビームラインは、基本的にユーザーが単独で光学系の調整からデータ収集までができるように設計されており、それに応じたソフトウェアも完備している。ビームライン担当者の能力は高く、高度でしかもユーザーフレンドリーな実験環境を提供してきたが、よりきめ細やかなユーザー支援を行うためにも、さらに人員を増やすことが望ましい。

課題申請数も多く、採択率はおおむね 70% 前後である。また、分野間の採択のバランスも取れている。

5. 技術・科学的研究発展の将来に関して

PX モードについては、これまでに十分な成果が上がっている。しかし、現時点においては、他のタンパク質単結晶 X 線回折用の共用ビームライン BL38B1 や BL41XU などに比べて、自動化などの操作性の面で若干劣っていることは否めない。

一方、SX モードに関しては、生体分子以外にも、機能性高分子、カーボンナノチューブなど測定対象に広がりを見せており、また、粉末 X 線回折のタンパク質や有機化合物への興味深い応用も開始されている。

現状では、PX モードの利用がビームタイム全体の 30% 程度となり、モードの切り替えに伴うオーバーヘッドが年 40 シフト程度となっていることを考えると、SX、PX の両モードで今後とも運用していくことは、効率的ではないといえる。

非結晶物質に興味深いターゲットが多いことを考え、光学系、測定系、試料回りの改良を行うことが必要である。測定角度範囲を広げ、多様な試料への対応を可能とするためにカメラ長をより簡便に変更できるシステムを開発し、また試料回りの自由度を広げながらもセットアップを簡単にする標準プラットフォームの策定まで含めた実験ステーションにすることが望まれる。SX モードに特化した汎用ビームラインとすることで非結晶分野の論文出版数の増加を期待したい。また、SX モードの利用の 1 形態として、粉末 X 線回折への応用も期待される。

なお、現在の PX モードのアクティビティーは、高度化された他のビームラインに移行させる計画がなされている。この計画は、現在 BL40B2 で行われている PX モードのアクティビティーがすべて移行できるという条件の下で、妥当な対応であると評価できる。

6. まとめと提言

生体試料のための汎用の X 線回折・散乱実験ステーションとして、本ビーム

ラインは所期の目的を達成した。タンパク質単結晶X線回折と生物試料X線小角散乱・回折の異なる2つのモードが利用できる特長を持っているが、今後の研究目的、実験法の広がりから考えると、それぞれの専用ビームラインで実施することが望ましい。その点で、本ステーションをSXモード専用に変化させる計画は、時宜を得たものであると評価する。それによって、生物関連非結晶試料の研究をさらに拡大すべきである。さらに、生物以外のSX研究の多様な展開に対応して行くことが望ましい。そのことによって、今後はSXモード利用者の増加と研究成果が質・量とも向上することが期待される。一方、SX研究の多様な発展を鑑み、有効な定量的解析法の開発が望まれる。ビームラインスタッフの増員とともに解析に関する理論家の導入も望まれるところである