

☆Summary

1. 2016 年度以降の UG 体制の説明

- ユーザーグループの意見を吸い上げる目的で、幹事会が新たに発足した。
- 2016 年度の UG 代表として清水敏之先生(東大薬)が就任された。幹事は、海野昌喜(茨大)、尾瀬農之 (北大)、藤間祥子(東大)、西野達哉(東理大)、沼田倫征(産総研)、藤橋雅宏(京大)。

2. 施設から施設からのビームライン現状報告および 2016 年度の計画

- 新しくビームライン担当者として引田理英さん(助教)が就任
- 2016 年秋は AR が止まるので採択率が低い見込み
- 全自動測定: 2016 年 5-6 月のほぼ毎週金曜日にユーザーの trial use を受け付ける。プログラムによる自動データ処理も。

3. 自動測定計画について

- ロボットを利用した自動測定を推進する。また、深夜は自動測定にすることを計画している。
- HKL2000 の契約解除も検討中
- 回折データ収集から構造解析までの自動化の開発を今後進めて行く。

4. 2016 年度の PF 研究会について

- 「回折データ収集の自動化に向けた生体分子結晶測定技術研究会」, 「中級者講習会」の紹介

5. 将来光源について

- 新しく KEK 放射光(仮称)の計画が公開された。
- ・タンパク質結晶構造解析グループとして考えているビームライン(3 本)
 - 高難度タンパク質結晶構造解析用ビームライン
 - ハイスループット全自動構造解析用ビームライン
 - 酵素反応追跡用ビームライン (分光などをあわせる)
- ・KEK 放射光計画に体する UG 提言が提案され、承認される。

以下詳述

1. 2016 年度以降の UG 体制 (京大院理, 三木先生)

- 幹事会: 幹事 6 名の紹介。今後、年度ごとの入れ替わりがあるかも。ユーザーグループ全員の意見を吸い上げることを目的とする。新しい光源計画においても、ユーザーグループとしての意見をまとめ発信する場となっていけばよい
- 海野昌喜 (茨大・院理工)

尾瀬農之 (北大・院薬)
藤間祥子 (東大・院薬)
西野達哉 (東理大・基礎工)
沼田倫征 (産総研・バイオメディカル)
藤橋雅宏 (京大・院理)紹介。

- これまでに2回あった会合の紹介

2015/8/4(火) 15:00~18:00, KEK 東京連絡所

2016/3/4(金) 15:00~17:30, 東大・薬

- 蛋白結晶のユーザーグループは20程度あるグループの中で最大のグループである。
- 自分たちのサイエンスを主体的に押し進めるためには、これまでタンパク質結晶構造解析グループは緩やかなグループとしてやってきたのを、今後はグループとしてある程度まとまっていくなることが必要になる。
- 代表者が、京大院理の三木邦夫先生から、東大院薬の清水敏之先生に、2015-2016年度替わりに伴って変更になるという紹介。

2. 施設からのビームライン現状 (PF, 松垣先生)

- 新しく引田理英さんがスタッフに入られた。NW12, 顕微分光の開発
- 2015年度より、昼のビームタイムが1h減り、夜が1h増えた。
- 2016年冬は運転期間が3週間だったので、採択率低い。2016年秋はARが止まるので採択率が低い見込み。
- 遺伝子組換え体(レベル1)のものも、実験試料として使えるようになった。バキュロウイルスの発現系を利用した際の組み換え体の混入が否定できない場合(主に企業の要望)、細胞の中で結晶化した場合などを想定。
- 1A: Eiger 2 台の検出器を導入予定。特に高角側のデータが良くなりそう。
- 17A: in situ 測定(プレートのまま測定)が出来る。ビームが明るくなった。
In situ でも、複数の結晶を使うとフルデータが撮れる
- NW12A: UV-VIS/ラマン顕微分光計導入
- PReMo を用いた全自動測定: プログラムによるデータ処理も。2016年5-6月のほぼ毎週金曜日にユーザーに公開する。
- その他、2016年度の計画の詳細は、http://research.kek.jp/group/pxpfug/shisetsu/2015UGM_v1.pdf

3. 自動測定計画 (PF 千田さん)

- 人より早くて正確: 深夜は自動測定にできないか。
自動測定を導入すると、教育がないがしろになるという心配もあるが、教育は別の方法で可能。
そもそも必要な教育は変わっている。
- 現在、25%の結晶はロボットを使わずに手のせされている。出来れば今後はロボットを使うよ

うにして欲しい。(山田さんや松垣さんの印象ではもっと手のせされているらしい。) 手のせ実験を否定はしないし、必要性は十分に理解している。完全になくすという方向ではないが、BLによって区別はすべき。というのは、サンプル周りがどんどん高度になっているので、手のせは手のせ用のスペースも確保した設計としないといけないから。ロボット使用の奨励は自動測定にもつながる。

- HKL2000 の契約を終了させることを検討したい。2016 年度は継続する。
HKL2000 の利用者を挙手で確認。けっこう (人数把握できていません) いる。
- AI 技術の応用などを構想中。
- 自動化しても、ユーザーのカセットをセットする場合は、テクニシャンなどの雇用などお金が必要。企業だけでなくアカデミアからも、ある種のサービスには課金が必要になる可能性もある。この点についてはユーザーと議論したい。
- 今の段階で、結晶があればそこからデータを撮って mtz を作るステップまでは自動化技術のめどが立っている。試料精製や結晶化、回折データの mtz から構造解析の自動化を進めるのが今後の課題。

4. 2016 年度の PF 研究会について (東大・藤間、京大・藤橋)

- 「回折データ収集の自動化に向けた生体分子結晶測定技術研究会」「中級者講習会」の趣旨・概要について資料を配付しながら紹介。詳細は <http://research.kek.jp/group/pxpfug/index.htm>
- 会場内で興味のある方に挙手してもらったところ、20 人ぐらいが挙手して下さった。会場にいらっやったのは数十人。➔ どちらも数十人規模の講習会を検討する必要がある？
- ・セッション終了後に、下記のコメントを UA 幹事が受けた。検討する。
 - 英語による講習会を検討してもらえないかという声があった。
 - 研究会に参加できなかった人のために、YouTube に up してもらえないかという声もあった。

5. 将来光源 (PF 千田先生)

- ・ 2016 年度、PF 予算は 14%削減だが、今年並みの 3000 時間のユーザー運転時間確保の予定。
- ・ ユーザーには、ビームが必要だと主張して欲しい。仮に将来光源ができて 6000 時間で 3 億円安くなるなら、3000 時間ならもっと安いなどと判断されては困る。構造解析の必要性は減らないので、もっと長時間の運転をして下さいと主張してほしい。
- ・ 論文登録がないと、放射光の必要性を文科省などにアピール出来ない。論文出版は極めて重要。研究の重要性を説得するとき大きな力となる。
- ・ 物質構造科学研究所としては、短中期の計画として、3GeV 蓄積リングを作ることを決めた (KEK の正式な計画にはまだなっていない)。3GeV 蓄積リングでは出来ないことは、長期計画でやる計画である。現在、KEK 内で放射光建設をする機運が高まっている。
- ・ 現在までに、PF 内と物構研の最高議決機関である物構研運営委員会で、新しい蓄積リングを作る計画が正式に認められた。今後 KEK の正式な計画として認めてもらえるように努力している。

ちなみに東北計画は、すでに確立した計画として存在している。KEK として決定しないと、東北放射光計画との交渉も出来ない。

(注：ここでいう、“計画“というのは、まさに計画であって、現状ではどの”計画“にも正式に（政府から）建設予算がつくということが決まっていはいない。KEK 放射光は、まだ KEK としての計画と言える段階にはなっていない状態。)

- ・ユーザーコミュニティの大きな声が欲しい。現在はタンパク質結晶構造解析 UG の声は小さい。ユーザーコミュニティの声が、外と交渉する際の大きな力となる。

- ・10 年前に ERL 計画があった。その後シンクロトロン技術革新は相当ある。現在は物構研として、KEK 放射光計画が短中期計画としてある。cw-XFEL などの技術が、長期計画として位置づけられている。

- ・タンパク質結晶構造解析グループとして考えているビームライン
 - 高難度タンパク質結晶構造解析用ビームライン
 - ハイスループット全自動構造解析用ビームライン
 - 酵素反応追跡用ビームライン (分光などをあわせる)

- ・KEK は大学共同利用期間法人なので、皆さんが切実に欲しいと思ってサポートがないと、次期光源は実現が困難。ユーザーが受け身では実現しない。積極的な支援が必要。
 - 蛋白ユーザーグループは、ユーザーの数も、論文数も、企業数も多い。そのユーザーグループが黙っていると、次期光源は出来ない。

- ・UG 提言(案) が千田先生から提言される。
この提言案は、事前に、幹事会で承認された提言(案)である。

- ・ユーザーからのコメント
 - 松垣さんが報告したような留保などの充足率をみせると、足りていると考えられるのではないか。見せ方を工夫すべきではとコメント
 - 企業ユーザーから。現状を率直に報告すると、企業ユーザーは実際に海外を利用している。ビームタイムがないので。運転が継続的に行われる(休止期間がない)のなら、より PF を使いたいと思うとのコメント
 - タンパク質結晶構造解析のコミュニティビームラインを汎用的に利用して高いアウトプットを排出している。しかし PF リングは老朽化しており、そのような状況で、次の計画が出てきたのは非常に重要でタイムリー。千田先生の提案にある提言はタンパク質結晶構造解析 UG として、是非行うべきであるので、承認してほしい。

- 皆さんの力がないと次期光源は実現しない。これは、KEK の存続・発展に必須。蛋白構造解析のグループの力は大きい。論文も登録して欲しい。幹事会に企業を入れる必要があるとのコメント。
 - ビームタイムをもっと細分化して欲しい。現在の配分方法だと、評点が低くてあたらないこともある。
 - UG に意見したいときは誰に連絡すればよいか？
 - => 共通のアカウントを作成してそこに連絡してもらう (E-mail : px_pfug'at'kek.jp)
 - 情報は HP 公開したほうが良いのでは？
 - => 作成をする方向で考える(<http://research.kek.jp/group/pxpfug/index.htm> に公開する)。
-
- ・タンパク質結晶構造解析 UG 提言(案)は採択された。海野さんが 16 日に発表する。

 - ・千田先生から、高圧グループは、新放射光源施設における高圧ビームラインの提案書という冊子を作っている。構造生物学でもそういう冊子があると助かる、とのコメント。ユーザーのみなさまに幹事を通じてお願いが行くので協力して欲しいとのコメント。