

UG活動報告

第3回タンパク質結晶構造解析ビームライン中級者講習会

東京理科大学
西野達哉

PF NewsでのUG紹介と講習会開催報告

PF-UA だより

タンパク質結晶構造解析グループ (PX-UG) 紹介

茨城大学・海野昌喜 (PX-UG 代表)
北海道大学・尾瀬農之 (PX-UG 幹事)
東京理科大学・西野達哉 (PX-UG 幹事)
産業技術総合研究所・沼田倫征 (PX-UG 幹事)
京都大学・藤橋雅宏 (PX-UG 幹事)
量子科学技術研究開発機構・平野優 (PX-UG 幹事)
東京大学・鯨井智也 (PX-UG 幹事)
富士フイルム株式会社・藤川乃り映 (PX-UG 幹事)

1. PX-UG の歴史

タンパク質結晶構造解析グループ (PX-UG) は、1999 年度に三木邦夫先生 (京都大学・現名誉教授) を代表として発足しました。その当時、PF 所内には坂部知平先生のグループがあり、タンパク質結晶用ビームラインのユーザーには仮想的なグループ意識があったようですが、正式にユーザーグループを立ち上げるようになったようです。三木先生はその後 2016 年 3 月まで長きにわたって PX-UG の代表を務められましたが、その年の量子ビームサイエンスフェスタの時に、清水敏之先生 (東京大学) に代表職を引き継がれました。また、そのタイミングで若手ユーザーを中心とした「幹事会」が発足し、ユーザー側の意見や要望を吸い上げ実質的に PF の装置グループに伝えたり、装置グループと協力して講習会を企画・開催するようになりました。幹事会は、全国の大学や研究機関の若手、企業のユーザー 8 名で構成されました。幹事会では PX-UG のホームページを製作し、活動記録や講習会の資料を適宜公開して、ユーザーが情報を共有できるようにしました。清水先生が PF-UA 会長に就任された 2018 年 4 月からは海野 (茨城大学) が PX-UG の代表を仰せつかっております。また同時に、幹事会のメンバーのうち 3 名が入れ替わり、現在、第二期の新たな幹事会 (上記) を構成しています。今後、一定期間ごとにメンバーを少しずつ入れ換えながら多くのユーザーに活動に関心を持っていただき、活動の幅を広げていきたいと考えています。

2. PX-UG の活動

PX-UG は PF-UA の下にあるユーザーグループの中でも最大の会員数から構成されています。正確なメンバー数を把握することはできませんが、有効課題数を参考に換算すると、700 名程度であると考えられます。これまで PX-UG では量子ビームサイエンスフェスタの開催に合わせて会合を開いてきましたが、その他に幹事会を中心として企画した講習会も開催してきました。

PX-UG のホームページの URL は (<http://research.kek.jp/group/pxfug/>) で、そこにも紹介しておりますが、現在まで 3 回の「中級者講習会」を開催しました (表 1)。

中級者講習会には、毎回 100 名程度の人が参加します。学生も教員も研究員も、まさに「今更聞けない」ことを食欲に学びたいという方々が集まります。写真は 2018 年 10 月に開催した第 3 回の中級者講習会の様子です (図 1)。今年は新たな試みとして、プログラムのインストールや実際にソフトウェアを使って実践的な構造解析を体験しました。参加者の皆さんには大好評だったと思います。この活動は今後も続けていきたいと思えます (本誌 p.22 参照)。

3. タンパク質結晶構造解析用ビームライン

PF、PF-AR には 5 本のタンパク質結晶構造解析用ビームライン (BL-1A, BL-5A, BL-17A, AR-NE3A, AR-NW12A) があります。それぞれのビームラインの特徴は以



図 1 第 3 回タンパク質結晶構造解析ビームラインユーザー中級者講習会の様子 (2018 年 10 月)

表 1 タンパク質結晶構造解析ビームライン中級者講習会

開催年月日	会場	講習会内容	講習会 HP
2016 年 6 月 24 日	東京医科歯科大学 湯島キャンパス	第 1 回「今更聞けないビームラインの使い方」	http://pfwww.kek.jp/tanpaku/chukyu/1st.html
2017 年 10 月 25 日	東京大学薬学部	第 2 回「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」	http://pfwww.kek.jp/tanpaku/chukyu/2nd.html
2018 年 10 月 27 日	東京理科大学 葛飾キャンパス	第 3 回「タンパク質結晶構造解析ソフトウェアの使い方について学ぶ」	http://pfwww.kek.jp/tanpaku/chukyu/3rd.html

「第 3 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〜タンパク質結晶構造解析ソフトウェアの使い方について学ぶ〜」開催報告

放射光第二研究系 山田悠介

2018 年 10 月 27 日 (土)、東京理科大学葛飾キャンパスにおいて、タンパク質結晶構造解析ビームラインのユーザー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、創業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。

PF-UA の幹事会が企画する中級者向け講習会は一昨年から始まり、今年で 3 回目となったが、今回はこれまでの講習会の目的であったある程度経験を積んだユーザーを対象に、今更聞けない構造解析の最新事情について情報共有を行うことに加えて、より経験の浅いユーザーにも有用な情報を提供するようにした。今回はテーマを「タンパク質結晶構造解析ソフトウェアの使い方」と設定し、午前中は初心者を対象とした解析ソフトウェアのインストールに関するサポートと、構造解析の基礎講習を、午後は XDS や SHELXL、CCP4 に関する使い方の講習と、実際のデータ処理、精密化の演習を行った。

講習会は盛況で土曜日開催にもかかわらず会場での参加者は合計 94 名、YouTube によるライブ配信の視聴数は 78 であり、関心の高さが伺えた。

午前の部のソフトウェアインストールサポートでは、XDS のインストールに対するサポート希望が多かったが、2019 年度より PF タンパク質 X 線結晶構造解析ビームラインにおいて回折データ処理プログラム HKL2000 が廃止されることも影響していると思われる。その後、初心者を対象とした構造解析の基礎講習が東理大の西野氏により行われた。午後の部では、KEK 松垣氏によるビームラインでの開発紹介の後、PF で 2018 年度から開始された全自動測定ビームタイムについて京大藤橋氏による実例を交えた紹介があった。全自動測定だけでなく、BL-17A の In-situ 回折計を利用した複合結晶探索など PF ビームラインを最大限駆使した実例の紹介、そしてそれらを踏まえた一般ユーザーへの利用提案およびビームラインへの要望提示は大有意義であった。次に行われた東大山下氏による回折データ処理プログラム XDS の紹介では、その動作原理や HKL2000 との違いなどを分かりやすく解説していただき、また最近開発が活発に行われている新しいプログラム DIALS についても紹介があった。量研機構平野氏による SHELXL を用いた精密化の紹介では、高分解能構造解析ではスタンダードでありながら、多くの人にとって普段なかなか利用する機会がない SHELXL の使い方について実例とともに分かりやすく解説いただいた。午後の部、後半では東京理科大学の端末室に移動し、筆者による XDS/



図 1 講習会の様子

SHELXL を用いた Native-SAD データの解析と、徳島大真板氏による CCP4/Coot の使い方に関する演習が行われた。実際のデータを用いて演習を行うことで初心者にとってはより良い理解につながったと思われるし、中 / 上級者の参加者からも「おお、こんな使い方があるのか!」などの反応を見ることが出来た。最後には KEK 千田氏より、本講習会の総括および解析技術共有に関するユーザーへの期待などが述べられ講習会は幕を閉じた。

このように本講習会は大有意義なものであったが、これは単に PF-UA タンパク質結晶構造解析ユーザーグループ幹事会の皆様、そして講師の皆様のご尽力の賜である。この場を借りて感謝の意を表したい。

<プログラム>

(午前の部)

「XDS/SHELXL/CCP4/Coot のインストールサポート」
有志メンバー

「タンパク質結晶構造解析の基礎」
西野達哉 (東理大)

(午後の部)

「PF ビームラインの現状」

松垣直宏 (高エネ研)

「全自動測定ビームタイムを使ってみる」

藤橋雅宏 (京大)

「XDS による回折データ処理 (DIALS も少々)」

山下恵太郎 (東大)

「SHELXL による精密化の紹介」

平野優 (量研)

「XDS/SHELXL の演習」

山田悠介 (高エネ研)

「CCP4/Coot の講義と演習」

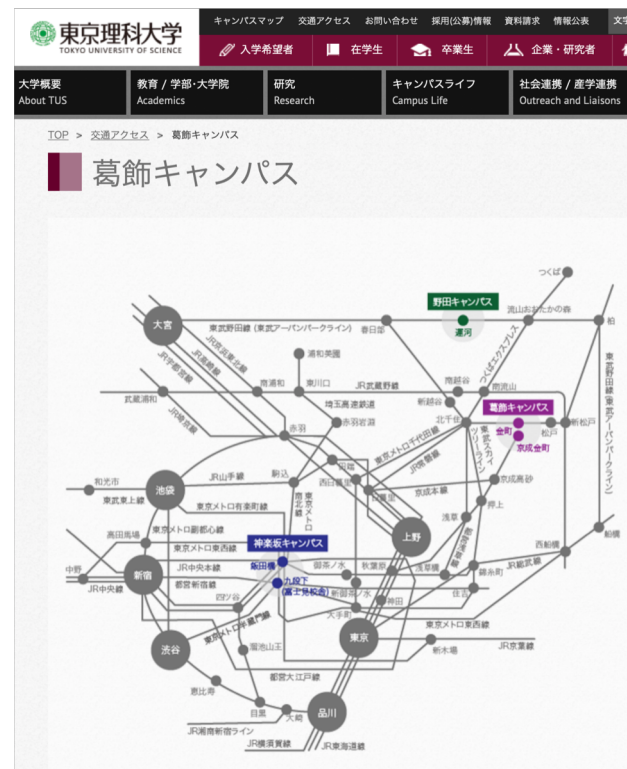
真板宣夫 (徳島大)

第3回タンパク質結晶構造解析ビームライン中級者講習会

プログラム

午前の部		基礎講習とソフトインストール 『基礎講習とインストールのサポート』
		初心者講習／ソフトインストールサポート
講演 1		「タンパク質結晶構造解析の基礎」 西野達哉(東理大)
午後の部		『中級者講習会』 中級者講習1:PFビームライン関係
講演2		「Pfビームラインの現状」 松垣直宏 (高エネ研)
講演3		「全自動ビームタイムを使ってみて」 藤橋雅宏 (京大)
		「全自動システムを用いた随時ビームタイム利用制度について」 山田悠介 (高エネ研)
講演4		中級者講習2:ソフトウェアの紹介 「XDSによる回折データ処理 (DIALSも少々)」 山下恵太郎 (東大)
講演5		「SHELXによる精密化の紹介」 平野優 (量研)
		中級者演習:ソフトウェアの利用法
		『XDS/SHELX/CCP4をしよう』
演習1		「XDS/SHELXの演習」 山田悠介 (高エネ研)
演習2		「CCP4/COOTの講義と演習」 真板宣夫 (徳島大)

2019年10月27日(土)



東京理科大学葛飾キャンパス

基礎講習とインストールサポート

午前の部 『基礎講習とインストールのサポート』
 初心者講習／ソフトインストールサポート
 講演1 「タンパク質結晶構造解析の基礎」
 西野達哉(東理大)

午後の部 『中級者講習会』
 講演2 「Pfビームラインの現状」
 松垣直宏(高エネ研)
 講演3 「全自動ビームタイムを使ってみて」
 藤橋雅宏(京大)
 「全自動システムを用いた随時ビームタイム利用制度について」
 山田悠介(高エネ研)

講演4 「XDSによる回折データ処理(DIALSも少々)」
 山下恵太郎(東大)

講演5 「SHELXによる精密化の紹介」
 平野優(量研)

『XDS/SHELX/CCP4を使おう』

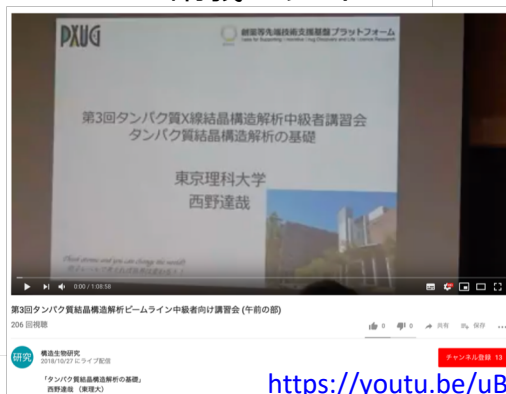
演習1 「XDS/SHELXの演習」
 山田悠介(高エネ研)

演習2 「CCP4/COOTの講義と演習」
 真板宣夫(徳島大)

午前からの来場者 84人／94人



講義ビデオ



講義スライド



 タンパク質結晶構造解析の流れ

第3回タンパク質X線結晶構造解析中級者講習会
 タンパク質結晶構造解析の基礎

東京理科大学
 西野達哉

今日の講義内容

- タンパク質結晶構造解析の基礎
 - タンパク質の結晶化
 - 回折データ測定、取得
 - 電子密度図
 - モデル作成と精密化

タンパク質の結晶化

http://research.kek.jp/group/pxpfug/katsudo/20181027_1.pdf

ビームライン報告と全自動測定

午前の部 『基礎講習とインストールのサポート』
初心者講習／ソフトインストールサポート

講演1 「タンパク質結晶構造解析の基礎」
西野達哉(東理大)

午後の部 『中級者講習会』

講演2 「Pfビームラインの現状」
松垣直宏(高エネ研)

講演3 「全自動ビームタイムを使ってみて」
藤橋雅宏(京大)

「全自動システムを用いた随時ビームタイム利用制度について」
山田悠介(高エネ研)

講演4 「XDSによる回折データ処理(DIALSも少々)」
山下恵太郎(東大)

講演5 「SHELXによる精密化の紹介」
平野優(量研)

『XDS/SHELX/CCP4を使おう』

演習1 「XDS/SHELXの演習」
山田悠介(高エネ研)

演習2 「CCP4/COOTの講義と演習」
真板宣夫(徳島大)



講義スライド

http://research.kek.jp/group/pxpfug/katsudo/20181027_3.pdf

http://research.kek.jp/group/pxpfug/katsudo/20181027_3-2.pdf

講義ビデオ

<https://youtu.be/Zl52mPLf1l0>

<https://youtu.be/vvPR9EoNqis>

XDSとSHELXソフトウェア講習

午前の部 『基礎講習とインストールのサポート』

初心者講習／ソフトインストールサポート

講演1 「タンパク質結晶構造解析の基礎」
西野達哉(東理大)

午後の部 『中級者講習会』

講演2 「Pfビームラインの現状」
松垣直宏(高エネ研)

講演3 「全自動ビームタイムを使ってみて」
藤橋雅宏(京大)

「全自動システムを用いた随時ビームタイム利用制度について」
山田悠介(高エネ研)

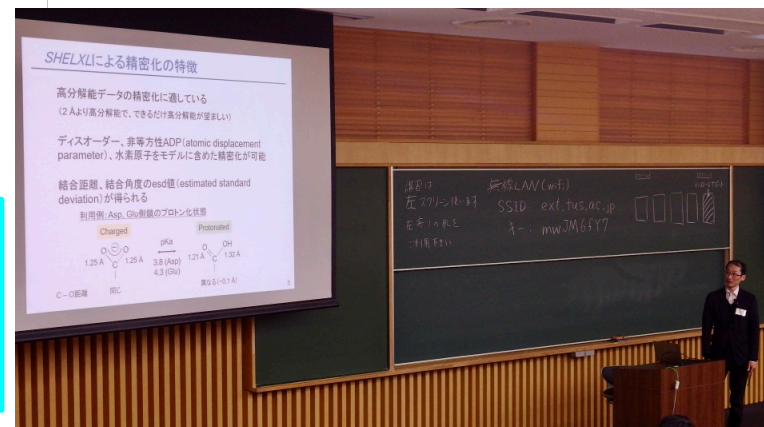
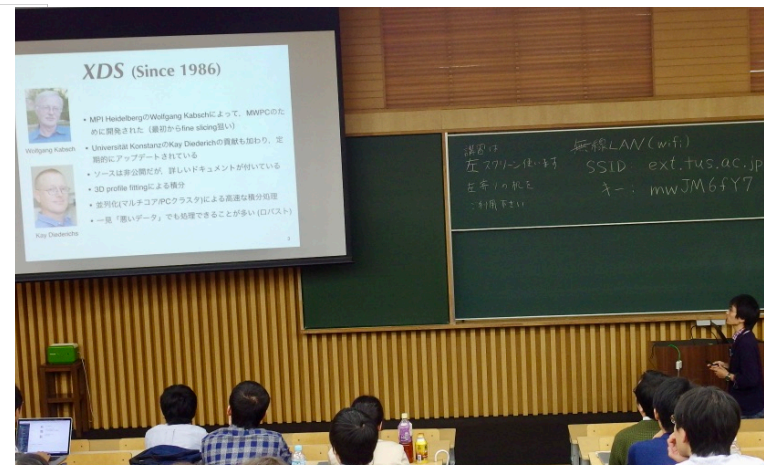
講演4 「XDSによる回折データ処理(DIALSも少々)」
山下恵太郎(東大)

講演5 「SHELXによる精密化の紹介」
平野優(量研)

『XDS/SHELX/CCP4を使おう』

演習1 「XDS/SHELXの演習」
山田悠介(高エネ研)

演習2 「CCP4/COOTの講義と演習」
真板宣夫(徳島大)



講義スライド

http://research.kek.jp/group/pxpfug/katsudo/20181027_4.pdf

http://research.kek.jp/group/pxpfug/katsudo/20181027_5.pdf

講義ビデオ

<https://youtu.be/CCzNhg2mJw>

<https://youtu.be/x9AW032FOWA>

XDS/SHELXソフトウェア演習

午前の部 『基礎講習とインストールのサポート』
初心者講習／ソフトインストールサポート

講演1 「タンパク質結晶構造解析の基礎」
西野達哉(東理大)

午後の部 『中級者講習会』

講演2 「Pfビームラインの現状」
松垣直宏 (高エネ研)

講演3 「全自動ビームタイムを使ってみて」
藤橋雅宏 (京大)

「全自動システムを用いた随時ビームタイム利用制度について」
山田悠介 (高エネ研)

講演4 「XDSによる回折データ処理 (DIALSも少々)」
山下恵太郎 (東大)

講演5 「SHELXによる精密化の紹介」
平野優 (量研)

『XDS/SHELX/CCP4を使おう』

演習1 「XDS/SHELXの演習」
山田悠介 (高エネ研)

演習2 「CCP4/COOTの講義と演習」
真板宣夫 (徳島大)



講義スライド

http://research.kek.jp/group/pxpfug/katsudo/20181027_6.pdf

http://research.kek.jp/group/pxpfug/katsudo/20181027_7.pdf

講義ビデオ

<https://youtu.be/oTVzZNoQfN0>

<https://youtu.be/5ilCzifiyoE>

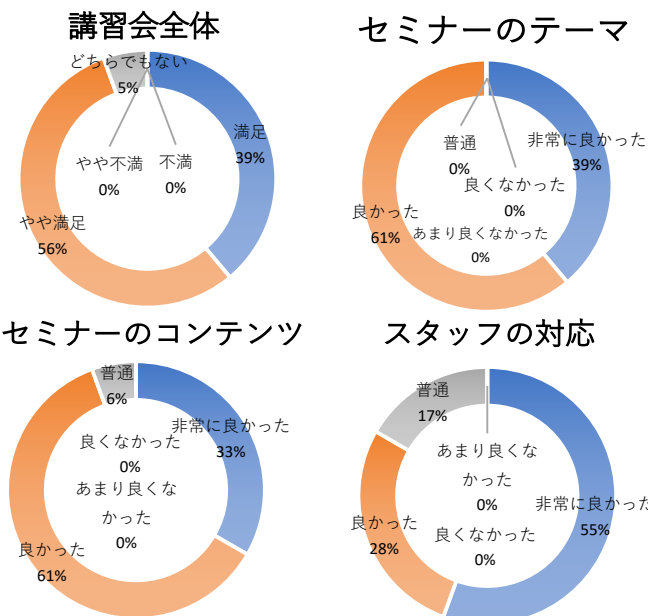
懇親会



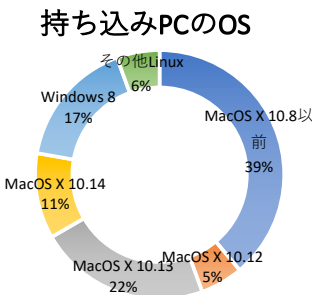
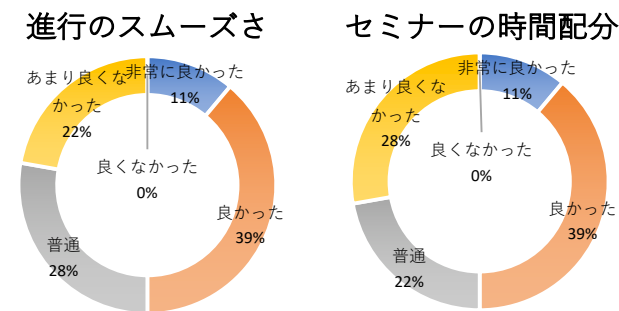
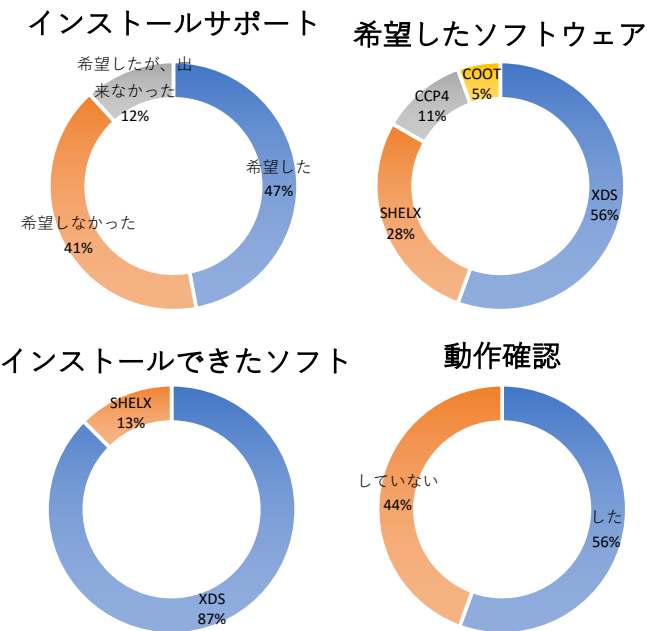
講習会集計とアンケート結果

参加者： 午前から 84人
午後から 10人 合計94人
懇親会参加者：36人

満足度



インストールサポートと結果



アンケート個別意見

良かった点、良くなかった点を含めてご意見やご感想をご自由にお書きください

実際にデータ処理を行うのは良い取り組みであったと思う。

午後の演習が大変参考になりましたが、時間が限られていて急ぎ気味であり、一度遅れると致命的でした。演習にもっと時間を費やしていただけると、より良かったと思います。教えてくださった講師陣、スタッフさんは皆さん親切で、大変感謝しています。

開催していただいてありがとうございました。aimlessでのスケーリングは、そちらのほうが良いという資料を見かけていてもまあそのままxdsでいいかと思っていたのですが、講習会を受けてみて試してみようと思いました。

午前中についてインストールサポートについては時間配分・サポート共に良かったと思いますが、セミナーについては内容がやや基本的すぎたように思います。午後のセミナーについては、特に山下先生のXDSについてのセミナーはもう少し時間が長くても良かったように思いました。また最後の演習については、内容をフォローするのが難しかったです（SHLEXの途中で脱落しました。。。）。また質疑応答での何気ないやり取りが参考になることが多かったです。

実習が組み込まれていて、使い方を学べるのはよかったが、説明が早すぎて、一度つまづく と何をやっているのかわからなくなってしまった。

実習が早すぎた。

今回はチャレンジングな企画で良かったですが、実習を大人数でやるのは、短時間ではちょっと難しいですね。 半日時間をとってもよかったのでは。

実習の最後の方が時間が足りなくなり駆け足での説明になっていた。セミナーのテーマとしてはHKL2000からXDSへ移行している時期だったのでとても参考になるテーマだった。

セミナーの講義スピードが早く、特に午後のPCを使った講習は途中でついていけなくなってしまった。しかし、復習もできるように講義の動画が公開されているのは嬉しい。

パソコンを使った演習において予め簡単なテキストを用意していただけたら、多くの人がつまづくことなくスムーズに演習を進めることが出来たと思います。

満足
構造解析の基礎について、独学で学ぶと断片的になりがちなので、こういった講義形式で話を聞けるのは良い機会だと感じたから。
交流を増やすことができたため。また、個人的には土曜日開催のおかげで参加しやすかった。

SHELXLの使い方を学べた。

各個人にPCを準備した実習までしていただいて、感謝しております。

講演会だけではなく、実習もすることで講演会の内容の理解を深めることができたため

実際にパソコンを動かしながら演習形式で学ぶことが出来たため。

xdsのやり方が多数あって、どれを使えば良いか選べなかったが今回の講習でxdsguiを使えば良いことがわかった。

やや満足

午後の演習が大変参考になりました。

コンピュータ室を利用した演習があり良かったが、途中でついて行けなくなってしまった。

当初の目的であるXDSを無事にインストールできたため

実習が組み込まれていたため。

特に実習を受講してとても良かった。ただ、事前に資料を頂いて一度自分の分かっているところを予習して行ったら、もっと有義に出来たかなと思った。

思っていたよりも上級者向けの内容であった為、途中でついていけなくなってしまった。事前にテキストなどをアップロードしてもらえてたら良かったと感じる。また、XDSのインストールサポートは受けることが出来たが、その他のインストールで伺いたい事がまだあった為。

演習がよかったです。

今後のテーマについて

回折データ処理の際に、どの統計値をどの程度重視するかなどについて、それぞれの意見を聞いてみたい。

事前の質問受付などがあればたいへんありがたいです。（実際に反映していただけるかはともかくとして。）

XDSにおけるデータ処理についてセミナー・演習でより時間をかけて（少し処理するのが難しいデータを用いて）指導していただけるとありがたいです。

ユーザー側のPF実験関連の最新情報，ソフトウェアの取り扱い

結晶化から構造決定に至ったプロセスについてex)結晶化条件のスクリーニングや最適化をする際の私見（過去こんなことをしたら成功率が高かったとか）回折実験を行う際にしている工夫など