

PF-UA タンパク質構造解析 グループ (PX-UG) 第5回中級者講習会 2020.11.4

【主催】

- ・ PF-UA タンパク質結晶構造解析ユーザーグループ幹事会

【共催】

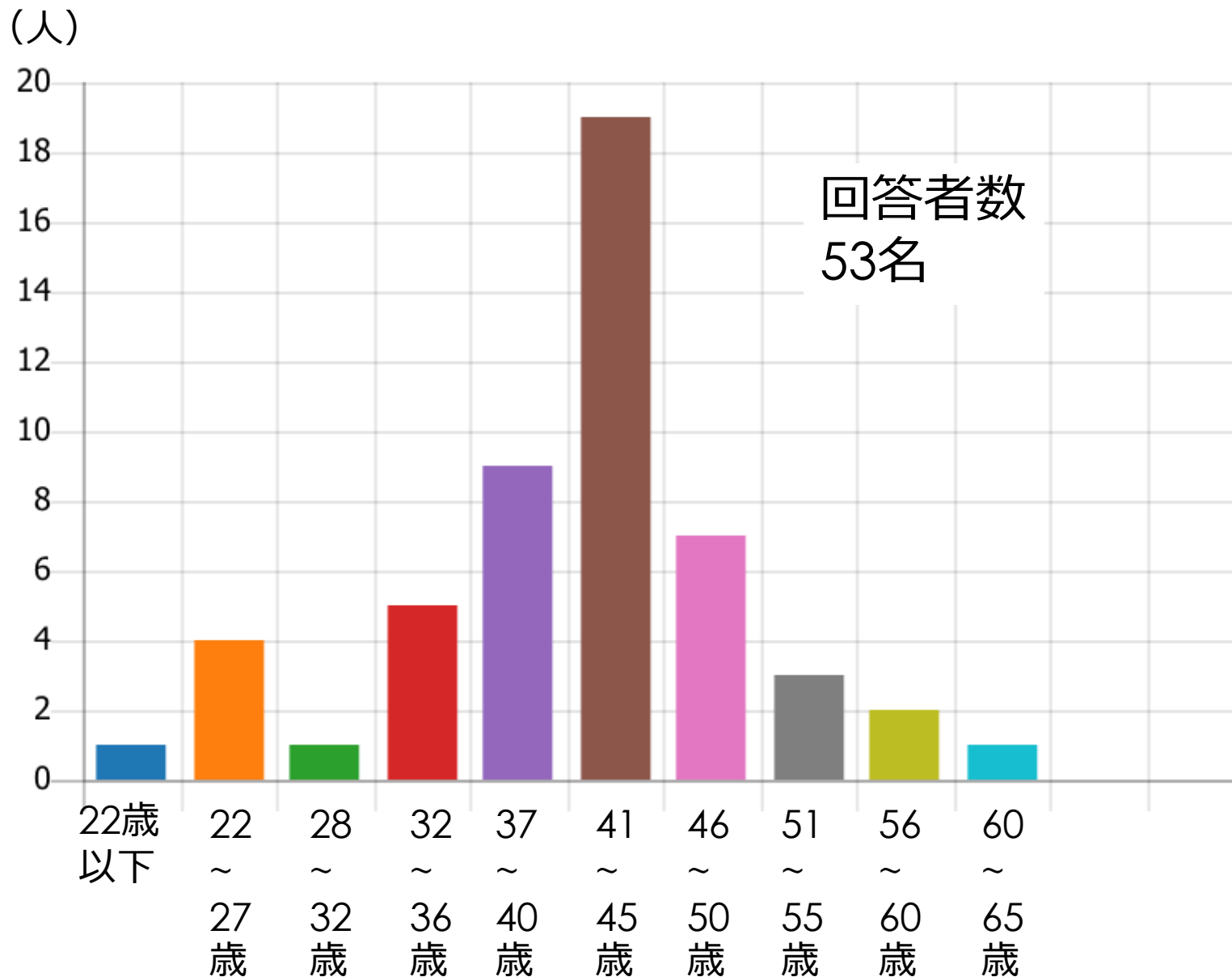
- ・ 高エネルギー加速器研究機構
(創薬等先端技術基盤プラットフォーム事業)

PX-UG代表： 茨城大学・海野昌喜

プログラム

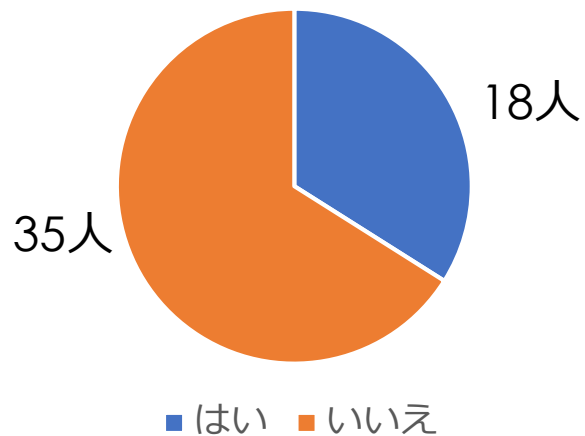
- 13:00～13:05 はじめに (茨城大・海野昌喜)
- 13:05～13:15 アンケート結果の紹介 (茨城大・海野昌喜)
- 13:15～13:45 PF全自動測定を使ってみて
(大阪市大・宮原郁子 東京医歯大・沼本修孝 京都大・藤橋雅宏)
- 13:45～14:05 自動測定とリモート測定の紹介&サンプル準備
(高エネ機構・山田悠介)
- 14:05～14:30 休憩
- 14:30～17:30 全自動・リモート測定の講習
- 17:30～17:35 終わりに (高エネ機構・千田俊哉)
- 18:10～19:10 リモート懇親会

2020年6月にとったアンケートのまとめ

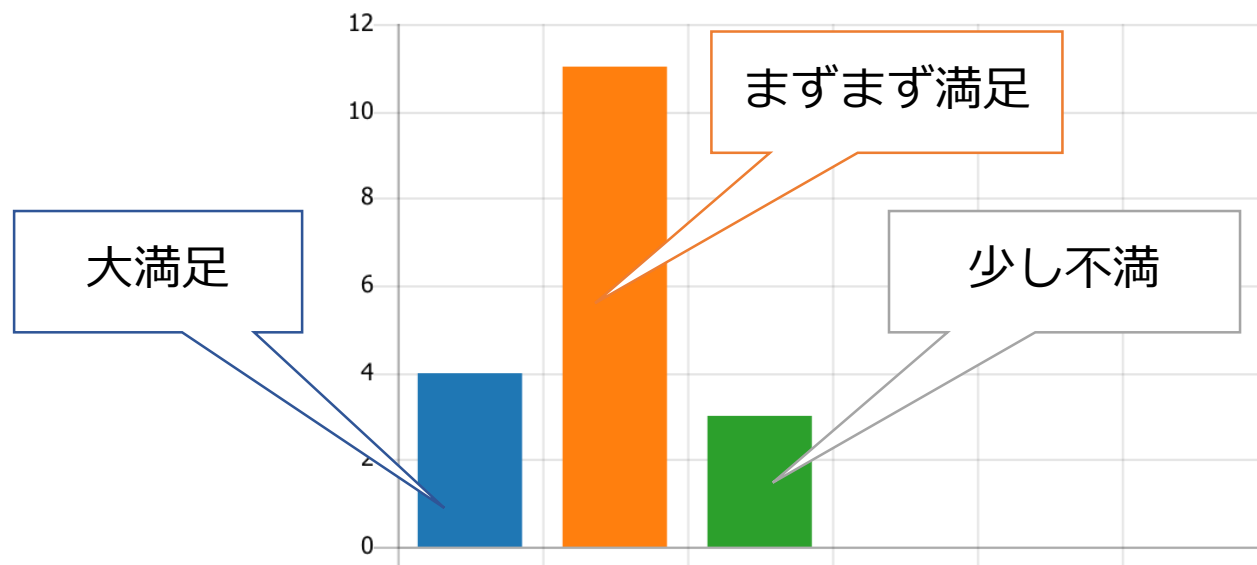


1. PFの全自動測定を使われたことはありますか？

PFの全自動測定を使われたことはありますか？



2. 1.で「はい」と答えた方にお聞きします。満足度はいかがですか。



3. 全自動への不満（大満足ではない理由）

- snapshotから最高分解能を判定してcollectしてくれれば大満足。
- タンパク質の沈殿にビームを当てて β アミロイドの円が出るかを見るという実験もときどきやるので、結晶がなくてもスナップショットをとるというオプションがほしい。
- （こちらが悪いのですが）クライオピンの長さがまちまちで、結晶にX線が当てられなかった時が多かった。

4. 全自動測定を使ったことがない、あるいは使わない理由 (代表的なものを抜粋)

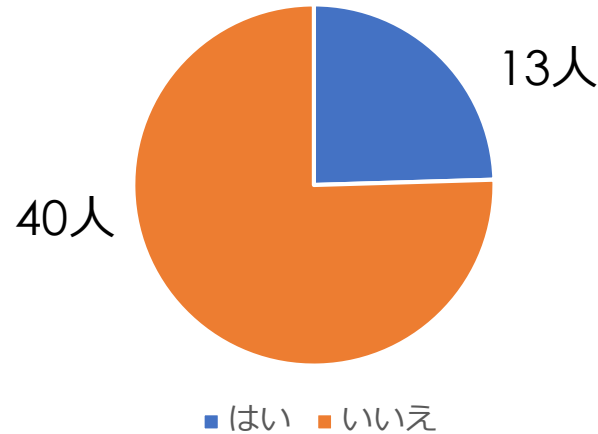
1. 道具（ユニパック等）を持っていない。
2. 手続き等が面倒そう。
3. スケジュールを合わせるのが難しい。
4. **クライオ条件（測定温度）**等の条件検討には使えない。（研究室でできない。その場でクライオ条件を決め、そのまま測定したい。）
5. **分解能**を見て測定条件を決めたい。
6. ヘリカル測定・複数箇所の照射・複数の結晶が付いているため当てる箇所を絞りたい。
7. **多波長**での測定ができない？
8. 学生への**教育的意義**

4. 全自動測定を使ったことがない、あるいは使わない理由 (特殊な事情)

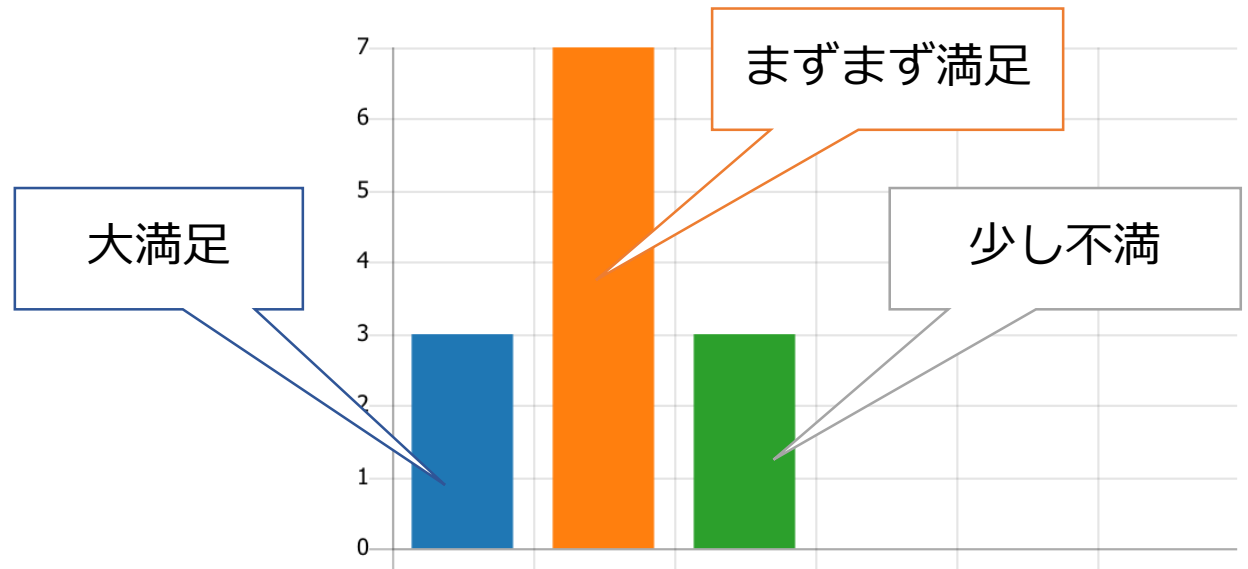
- PFに来るとリフレッシュできるから。
- 結晶にレーザーを当てながらの実験をしたいため。
- SPring-8の全自動に慣れているため。

5. PFでのリモート測定を行ったことはありますか。

PFでのリモート測定を行ったことはありますか。



6. 5.で「はい」と答えた方にお聞きします。満足度はいかがですか。



7. リモート測定への不満（大満足でない理由）

- 画像がカクカク動いた。
- 液体窒素をかけれない。
- （昨年度までは一般課題の場合、）グループメンバーの誰か1名はPFで作業する必要があった。
- インターネット接続がやや不安定なため。

8. リモート測定を使ったことがない、あるいは、使わない理由。

1. 道具（ユニパック等）を持っていない。
2. 手続き等が面倒そう。
3. クライオ条件（測定温度）等の条件検討には使えない。（研究室でできない。その場でクライオ条件を決め、そのまま測定したい。）
4. レーザー照射をしたい。
5. PFに行くとしフレッシュできる。
6. 学生の教育目的（全自動の時と異なり、リモートの場合は、プラスにもマイナスにも。）

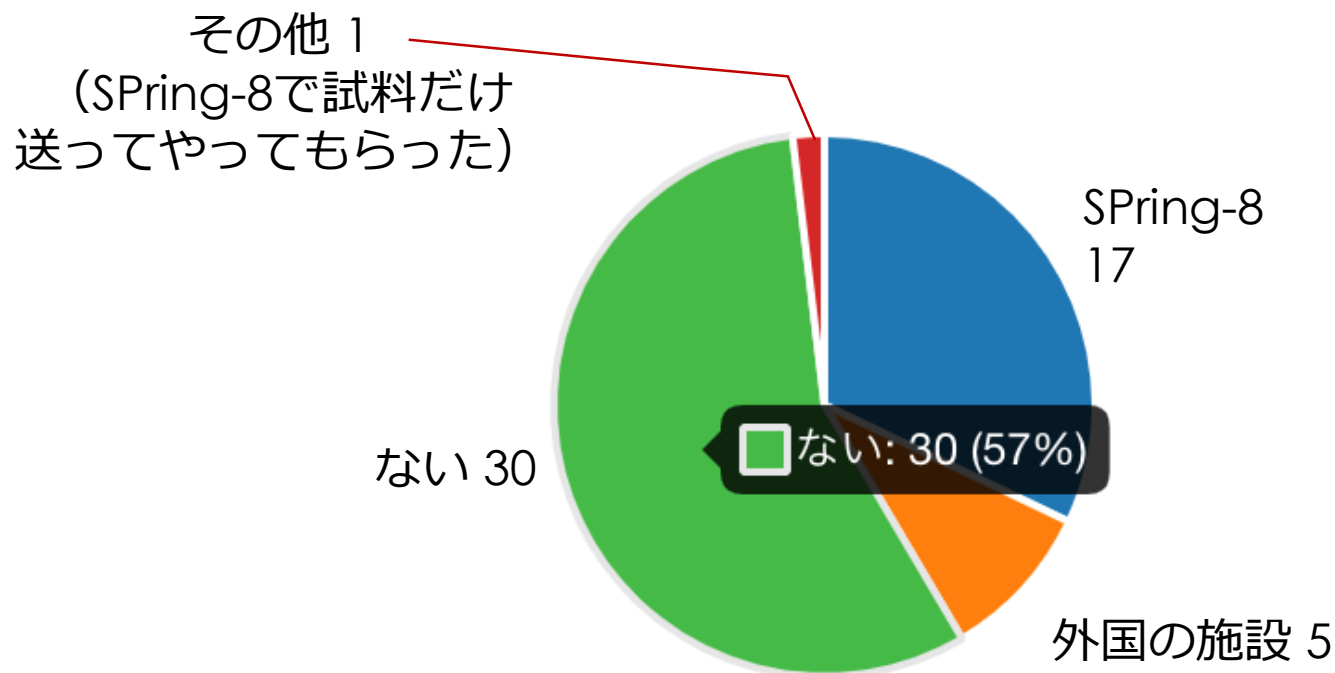
全自動を使わない理由と共通

教育目的に（全自動ではなく）リモートを使いたい、という人と、教育のために現地でやりたい、という両方のケースがある、ということ。

8. リモート測定を使ったことがない、あるいは、使わない理由。
(特殊事情)

- (1) 職場のネットワークからKEKのVPNに接続できないため。
(それとは別に、ネットワークに不安がある。)
- (2) どうせ一人行くのならみんなで行きたい。PFが近い(旅費も出るし)。
- (3) **全自動測定で満足しており**、リモート測定する必要がない。

9. 他の施設の全自動あるいはリモート測定を実施したことがありますか。（複数回答可）



10. 他の施設のこと（PFとの比較など）

（PFより優れていると感じた点等）

- SPring-8の方はPFでデータセット化が困難であった結晶でもヘリカルスキャンやKAMOMergeを用いることで、データセット化とすることができた。
- SPring-8; 微小ビームとヘリカルモードでの測定が良い。
- センタリング能力は若干SPring-8の方が良かったかも。
- SPring-8; multi結晶からのblend。
- SPring-8; ドーズ量などを計算してくれて、うまいこと測定の方法を微調整して測定してくれるので、ほんとうにすべてお任せしている。
- SPring-8; PFよりも細かい測定条件設定が可能だと思った。

10. 他の施設のこと（PFとの比較など）（その他）

- 目的に合わせて施設を**使い分けている**。それぞれの良さがある。PFは**初期の結晶スクリーニング**にととても向いている。
- SPring-8では通信が重く、苦勞した。
- SPring-8; 途中で他のサンプルに切り替えることができないということで時間がもったいないように思った。
- SPring-8; (**10年くらい前**の話) テレビ電話をつなげっぱなしで不具合があれば、放射光のスタッフに連絡し、対応してもらおうような形だった。スタッフが大変そうだった。
- SPring-8; (全自動は) 条件設定に自由度が少ない気がする。
- SPring-8; **インターフェースはPFの方が使い勝手が良い**。(SPACE時代のインターフェースを流用していると思うが、慣れないと難しいように感じる。)
(2016年頃使った)
- APS; とても良かった。
- SLS; PFと変わらないと感じた。

11. 施設側への要望や質問など

- 自動測定で**分解能を自動で設定**（最初の予備測定と処理で得た I/σ などの値から、本測定の測定条件を自動で設定）できるようにしてほしい。
- 全自動測定の枠、BLをどんどん増やしてください。
- リモート測定は、今後も現地に一人いなくてはならないという運用？
- **電動ミニカップーゴニオ**を順次導入していただけるとすごく助かります。
- **レーザー光照射**を可能に。
- ユーザーと放射光の研究者が疎遠にならないようなコミュニケーションが取れるといい。（**聞きたいことを聴ける環境がなくならないように。**）
- **Teamviewer**によるリモート測定環境を導入して欲しい。
- **訪問して実験するやり方も残して欲しい。**（手のせ等）
- 全自動測定で**波長が色々試せれば**、今後全自動測定も試してみたい。

16, 17 PX-UGへの要望等

- 構造解析ソフトの使い方についてまとめたウェブサイトなど作成して欲しい。
- 講習会などはオンラインでも配信して欲しい。
- どんどんデータを取ったあとの処理など、自動測定だからこそ可能な（可能だった）事例があれば、教えてください。
- 結晶を送付する際の注意点や、実際のpremoでのscreeningの登録、測定データの見方など、確認したい。
- 自動測定について、各ビームラインのデフォルト値はどのようになっているかなどを改めて確認したい。
- Dialsの詳しい使い方。DialsとXDSの違い、メリット、デメリットの比較、など。

まとめ

- 6月時点での要望は、かなり解決しているものもある。
- 全自動やリモート実験に対してのハードルもこの半年でだいぶ下がったと思う。
- 幹事会としては、今回答えられなかったことを、今後、HPや次回の講習会で解決できるように努力したい。
(なかなかゆっくり取り組む余裕もないが・・・。)
- 施設側とユーザーが疎遠にならないようにしないといけない。お互い、相補的に発展していきたい。