

令和5年度PF-UA,  
タンパク質結晶構造解析グループ  
(PX-UG)  
ユーザーグループミーティング

2024年3月5日(火) 17:00 ~  
(水戸市民会館304中会議室+  
Zoomによるオンライン形式の  
ハイブリッド会議)

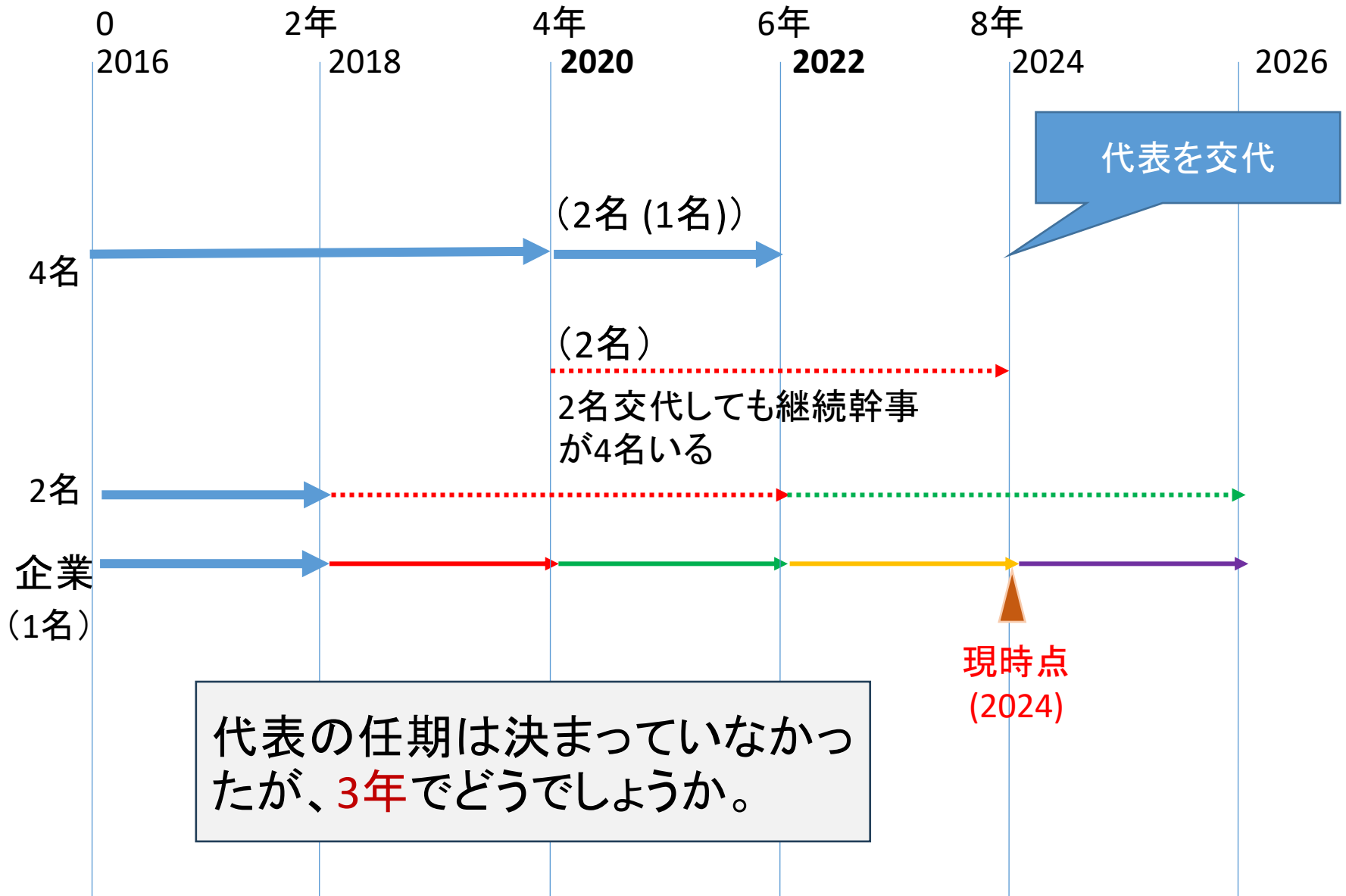
## プログラム

1. 挨拶 (海野・茨城大)
2. 来年度(R6年度)の新体制紹介 (海野・茨城大)
3. 構造生物学センターより (千田・KEK)
4. ビームラインの現状と今後の予定 (松垣・KEK)
5. UG活動報告(講習会／研究会) (海野・茨城大)
6. 自由討論
7. まとめ (千田・KEK)

# PX-UG 新・幹事会メンバー（R6年度）の紹介

代表(新)	橋本 博	静岡県立大学薬学部（R5年度から幹事）
幹事	平野 優	量子科学技術研究開発機構
	吉田 尚史	筑波大学生存ダイナミクス研究センター
	佐々木 大輔	和歌山県立医大薬学部
	白石 充典	東京理科大学先進工学部
(新)	喜多 俊介	北海道大学薬学研究院
(新)	竹下 大二郎	産業技術総合研究所バイオメディカル研究部門
(企業)(新)	河内 宏樹	中外製薬株式会社

幹事会メンバーの任期（基本、任期は4年。企業の方は2年だが、自身が希望すれば、2年延長あり。）





# 活動報告

## 第8回 中級者講習会

<https://pf-form.kek.jp/tanpaku/chukyu/8th/>

<https://research.kek.jp/group/pxpfug/katsudo/shiryo9.html>

# 第8回タンパク質結晶構造解析中級者向け講習会

【日時】 2023年11月11日(土) 13:30 ~ 17:30

【会場】 東京理科大学葛飾キャンパス 講義棟104教室

【形式】 Zoomを利用したハイブリッド形式

【プログラム】

13:30~13:35 はじめに 海野昌喜(茨大)

13:35~17:25 実習・実演

1. 結晶化プレートからの直接データ収集・構造決定(実演)  
山田 悠介/引田 理英 (高エネ研)
2. 休憩
3. DIALS、XIA2での回折データ処理(実習)※  
伊藤 翔/白石 充典 (東京理科大)

17:25~17:30 おわりに 千田俊哉(高エネ研)

18:00~ WEB懇親会

発表の内容の一部(動画・資料)を  
HPからご覧になることができます。

<https://research.kek.jp/group/pxpfug/katsudo/shiryo9.html>

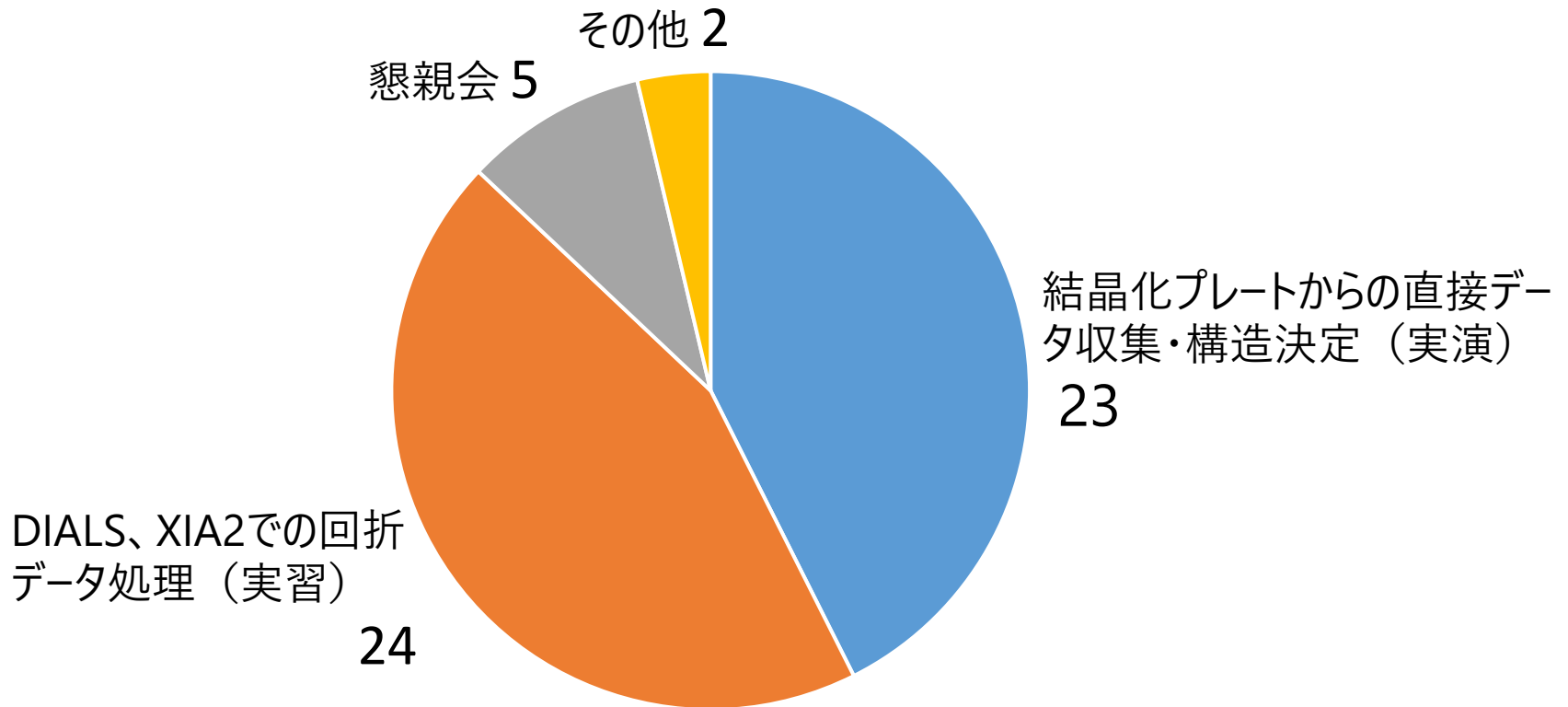
事前登録数181名

(参加者数は記録してありませんでした。)



# 中級者講習後のアンケート内容 28名から回答

1. どの項目に特に興味を持って参加しましたか。（複数回答可）



## その他の意見

- タンパク質の結晶構造解析について
- 結晶加工

## 2. 講習会で良かった点があれば自由に記入してください。(回答 )

- 前半では、最近のビームラインの高度化に向けた取り組みを聴けて良かった。DIALS, XIA2ではソフトウェアの中身を丁寧に解説して頂いてよかった。
- テクニカルなことをお教えいただき、大変感謝しております
- **新しいソフトウェアの解析について実際に触って学習できたこと。懇親会でいろいろ話げできたこと。**
- 簡単な実習形式だったので、実践的で良かったです。
- DIALS、XIA2の利用方法がわかった
- **対面とオンラインのハイブリッドで開催していただけたこと。**  
バーチャル環境が快適でした。**対面でもオンラインでも、参加者全員が同じ環境で実習できたことは良かったと思います。**
- **結晶のレーザー加工**など、進行中の整備に触れて頂いた点。
- **プレートを使用したin situ測定が(輸送の問題を除けば)かなり現実的なものに感じた。ぜひ積極的に試していきたい。**
- 結晶化プレートからの直接データ収集とDIALSでのデータ処理
- AWSで解析を体験できたことが良かったです。
- 内容は良かったと思いますが、私自身がついていけなかったので(学部生時代は、大きなカラムでゲルろ過やイオンクロマトをやったくらいでした。)、次回は初級編からじっくりと学んでいきたいと考えています。
- (毎回同様ですが)実習形式であるのは本当に勉強になってとても有り難いです。
- プレート測定の実演を見て実際の感じを理解することができた。WebからLinuxにログインして実際にソフトを動かして処理の経験ができた。ソフト開発の目的や経緯などの説明があったのも良かった。

- **土曜日のオンライン開催。**
- 仮想マシンを準備してくださったこと。機会を見てdials, xia2を自分のsystemにインストールする気になりました。
- DIALS, XIA2での回折データ処理の実習を、遠隔でもストレスなくでき、とても良かったです。ログインもrunもかなりスムーズでした。DIALS未経験者にとっては大変有意義な講習でした。
- オンラインで参加させていただき、対面とのハイブリッド開催はどうもありがとうございました。プレートでのデータ収集は、クライオ条件と室温では細かい構造が違うというような報告もありますので、クライオストリーマーの無い時代からのユーザーとしては、**あの割れやすいキャピラリーに封入しなくてもデータ収集できるのは素晴らしいシステム**かと思います。**使えるプレートの説明など参考になりました。**クライオピンの説明は了解しました。DIALSの使い方については、リモートのコンピュータシステムを用意いただき、お礼申し上げます。DIALSはCCP4IのXIA2からしか試したことがありませんでしたが、DUIから起動すると、使い方はiMOSFLMやXDGUIとほぼ同じやり方で、**難しくないことが分かりました。回折がうまくプロセスできない時、経験的にソフトウェアを変えようまくいく場合がありますが、選択肢が増えるのはよいことです。**  
自動化が進んで現地でデータ収集する機会がなくなってくると、**今や主なソフトウェアはWindowsにも対応しておりUNIXのコマンドを覚えなくても解析できてしまいますので、一部の参加者にはUNIXのコマンドから説明しなければならないのは、そういう時代になったのかなと思いました。**
- 結晶化プレートからの直接データ収集するメリットがわかりやすく、ためになりました。回折データ処理の実習をzoomで実施できるか不安でしたが、海野先生がわかりやすくサポートしていただき、実施できました。ありがとうございました。
- 実習形式があったのでDIALS、XIA2の使い方がよく理解できた
- 構造解析の流れや、DIALS,XIA2での回折データ処理について知れたのはよかった。

### 3. 講習会での不満点があれば自由に記入してください。

- あまり欲張らずに、DIALS、XIA2の実習だけに絞ってもよかったかもしれない。今回のような解説付きのソフトウェアの説明と、テストケースを用いた実習(自分たちの持ち込みデータとか)、データ処理におけるお悩み相談など。
- DIALSを用いる利点とXDSを用いる場合の利点をもう少し詳しく知りたかった。
- データ処理については、講演者・参加者からTipsがあったのは良かったが、それ以外はボタンを押すだけなので、初心者向けだったと思う。
- 構造決定まで行っていただければと思いました。
- リアルタイムでオンラインで実験操作を見せることに拘る必要はないと思いました。今回もトラブルが少しありましたし、事前に録画したものの再生でいいかと思いました。録画する手間があるのかもしれませんが。
- オンラインで、講演者の音声若干聞き取りにくい時があった。
- 講習のアーカイブ再配信を希望。
- 異常分散効果によるイオンの同定
- ハイブリッドでの実習形式の難しさを感じたが、今後もハイブリッドでの開催を希望する。
- 不満では無く、私自身の認識が甘かったのが原因なのですが、DIALS,XIA2での回折データ処理のあとのCCP4やPymolでの解析の方を知りたかった。

4. 今後、中級者講習会で取り上げてほしい話題があれば自由に記入してください。

- 今回の内容をもう少し掘り下げる意味で、DIALSとCCP4を用いたデータ処理。  
タンパク質結晶構造解析を理解するために、低分子結晶構造解析。フーリエ変換。
- 初心者(学生)に教えるときに適切な教科書
- AlphaFold2モデルによる分子置換によって、どこまでMADやSAD測定などの初期位相決定が不要になるのか、逆に必要なのか、その境界の現状が知りたいです。
- 異常散乱測定
- PyMOL以外のグラフィックソフト例えばChimeraXの便利な使い方とか。  
実験研究者によるAlphaFold2の上手な使い方。(去年やりましたね)  
実験研究者でもできる分子シミュレーション。
- 低回折像の回折データ処理の問題点と有効なアプローチ
- リガンド等の複合体解析に向けて、共結晶化やソーキングの方法に工夫があったら、ぜひ知りたい。UGミーティングと重複するかもしれないが、今回の結晶加工やin situ測定など施設側の新たな技術についての実演があると非常にありがたい。
- 分子置換法やMAD法に関して
- 学びたいことは色々ありますが、初級→中級→上級となっていくと思うので、そのつながりの部分を、もう少し丁寧に結びつけていただきたかったです。
- 解析の自動化
- アルファールド2の予測と結晶構造解析の未来の相乗効果は何か。
- 結晶構造解析の (AlphaFoldを用いた) 分子置換法、構造精密化。
- ビームラインで可能な最新のデータ収集法について
- 私自身、研究室にてほぼ独学でCCP4やPymolでの解析をしておりますそちらについて扱っていただけると大変嬉しいです。

5. PF（構造生物学）のスタッフへ伝えたいこと・要望等があれば自由に記入してください。

- いつもビームラインのメンテナンスありがとうございます。  
DIALSでも自動データ処理ができるようになってほしい。
- 測定や講習など、いつもありがとうございます。
- 日々のビームライン運用に加えて講習会開催、大変ありがとうございます。
- いつも大変にお世話になり、ありがとうございます。
- いつもベストな対応をありがとうございます。
- ビームタイムではいつもお世話になっております。



6. 講習会に限らず、PX-UG幹事会に伝えたいこと・要望等があれば自由に記入してください。

- PF-UAとかPX-UGは「お悩み相談」とかができるような、もっと気軽な会合であってほしい。
- 講習の開催をありがとうございます。
- いつも最新の話題を取り上げて頂いて大変参考になっています。
- これは、中級者講習会で取り上げた方がよいか、ユーザーミーティングで取り上げた方がよいか分かりませんが、私は首都圏の大学にいることから、昔からほとんどKEKしか使用したことがありません。しかしながら、最近のようにリモートでデータ収集が簡単にできるようになると、特にルーチン構造解析については、どのシンクロトン放射光施設でもできることは同じなので、SPring8や今後のナノテラスの状況も随時紹介いただけるとありがたいように思います。また要望というよりはコメントですが、だいぶ以前東北の震災の時にKEKの課題でもSPring8の時間を割り当てていただいた時があり大変ありがたかったですし、最近では夏期に海外のシンクロトンのビームが利用できるようなになっていますが、ルーチン構造解析については、最近の電気代の高騰などでシンクロトンの稼働もなかなか大変かと思っておりますので、将来的に一つの課題申請で、ビームタイムをシンクロトン放射光施設同士である程度融通しあうようなシステムがあるとよいのかなと思いました。
- 今後もオンラインと並行で講習会を開催して下さると大変ありがたいです。

# お問い合わせ

[px\\_pfug@kek.jp](mailto:px_pfug@kek.jp)

または

[masaki.unno.19@vc.ibaraki.ac.jp](mailto:masaki.unno.19@vc.ibaraki.ac.jp)

へ

ビームライン関係は

<https://sites.google.com/sbrc.jp/mxblmanual/inquiry>



# 懇親会について

19時半～

水戸郷土料理 個室居酒屋 れんま 水戸OPA店

<https://www.hotpepper.jp/strJ001268861/>

「海野（うんの）」の名前で  
予約してあります。



茨城県水戸市宮町 1-7-33  
水戸サウスタワー11F