

構造生物学研究センター Structural Biology Research Center

構造生物学研究センター(SBRC)は、物質構造科学研究所(IMSS)内の組織として2000年5月に発足し、2013年1月より千田俊哉センター長を中心とした体制で研究活動を推進しています。現在、当センターには約50名のメンバーが所属し、約半数がビームラインの研究開発とユーザーサポートに従事し、約半数が構造生物学的研究に従事しています。

当センターはPFとPF-ARにおいて5本の生体高分子の結晶構造解析用ビームラインの研究開発を行い、外部ユーザーの共同利用に供しています。ビームラインに関する最先端の研究としては、タンパク質に含まれる天然の硫黄原子を利用した位相決定法の開発(S-SAD)や、理化学研究所(SACLA)と共同でX線自由電子レーザーによる立体構造決定法の開発を行っています。また同時に、独自の生命科学研究を推進し、エネルギー代謝(GTPと細胞機能)、遺伝情報とエピジェネティクス、糖鎖代謝、感染症(ピロリ菌・薬剤耐性)、酸化還元関連酵素など、生物学的に重要な生命現象の背後にある分子機構を立体構造情報に基づいて解明する研究に取り組んでいます。

これらの研究には様々な階層での立体構造情報を取得することが必須であり、放射光における立体構造解析と電子顕微鏡やNMRによる立体構造解析を組み合わせることが不可欠です。そのため、クライオ電子顕微鏡については2018年3月に導入、同年10月より共同利用型の運用を開始し、NMRについては外部との共同研究を推し進めています。さらに、国立研究開発法人日本医療研究開発機構(AMED)が推し進める創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業(BINDS)に代表機関として参画し、構造解析ユニットの構造解析領域・タンパク質生産領域において主要な役割を担っています。

結晶用ビームライン(PX:BL-1A, 5A, 17A, NW12A, NE3A)は、主に外部のアカデミックユーザーの共同利用に供され、放射光共同利用実験審査委員会(PF-PAC)の審査を経て、各ユーザーにビームタイムが配分されています。申請数は年々増加傾向にあり、生命活動において根源的な反応を担うタンパク質や高難度のヒト由来タンパク質などの結晶構造解析など、科学的に重要性の高い課題にビームタイムが配分される傾向があります。ビームタイムの一部は企業利用に割り当てられ、現在は国内15社に利用していただいております。主に創薬の基盤情報となりうる薬剤標的タンパク質と化合物との複合体の結晶構造解析等が行われています。この目的のため、2009年にアステラス製薬株式会社に御協賛いただき、ハイスループットのタンパク質結晶用ビームラインAR-NE3Aを建設しました。また、BINDSの支援を受けて、溶液散乱用ビームライン(BioSAXS:BL-10C, 15A)の高度化を積極的に推進しています。

J-PARC MLF における BL 共通低温試料環境機器の 運用(ユーザ利用)・整備・コミッショニング状況 Operation, Maintenance and Commissioning of BL-common Low-temperature Sample Environment equipment in J-PARC MLF

石角元志¹、高橋竜太²、河村聖子²、山内康弘²、中村雅俊²、
坂口佳史¹、渡辺真朗²、奥隆之²

1 CROSS、2 J-PARC Center

J-PARC MLF では、各ビームラインが整備している試料環境機器とは別にビームラインに共通して使える試料低温環境機器を整備している。MLF の試料環境チームに所属する低温マグネットグループでは、主な共通低温試料環境機器としてトップロードイング 4He クライオスタット、縦磁場 7T 超伝導マグネット、希釈冷凍機インサート、3He 冷凍機などを整備している。特に、2016 年度後半からユーザ実験に供される低温試料環境機器の整備台数が増えたことに伴って、近年ではユーザ実験支援の課題数や使用するビームラインの数も増えている。

最近では極限環境(極低温と磁場)でのユーザ実験の数も激増しており、ビームライン側からの試料環境の要望も多くなっている。これらの要望に応え、機器のさらなる性能向上と実験の効率化を目指すため、我々は、希釈冷凍機の制御温度の拡大、真空槽に鉄フレームが使用されているビームラインでの使用可能最高磁場の再検討、バックグラウンドの低減などに取り組んできた。講演では、低温マグネットグループが整備している共通低温試料環境機器の紹介(仕様など)や近年のユーザ実験における使用実績に加えて、コミッショニングの状況、特に希釈冷凍機インサートの温度制御範囲拡大・再液化時間の把握・最低温度への冷却時間短縮、3He 冷凍機の薄型輻射シールド冷却試験の詳細について報告する。

茨城県中性子ビームライン Ibaraki Neutron Beamline

茨城県産業戦略部

茨城県では、J-PARC MLF に2本の中性子ビームライン(BL03:iBIX 及び BL20:iMATERIA)を設置し、装置の運転維持管理等を委託している茨城大学とともに中性子の産業利用促進に取り組んでいます。

具体的には、装置機能の向上や試料周辺環境の整備を進めるとともに、初めての方にも利用しやすくするため、産業利用コーディネーターを2名配置し、実験内容の検討から申請書作成や実験・解析まで手厚い支援をしています。

さらに、産業界の課題解決に即応できるように、いつでも課題申請が可能な「常時公募制度」、初めての方が無料でお試し利用ができる「トライアルユース制度」のほか、ユーザーから試料を受け取り測定を代行する「メールインサービス制度」を他ビームラインに先駆けて導入し、産業界が利用しやすい環境を整えています。その結果、2008 年 12 月の供用開始以来、2019 年度までに 127 社の企業・研究機関等にご利用いただき、MLF の産業利用採択課題数の 61%は当ビームラインで実施されています。

iMATERIA の成果では、MLF 主要成果でもある「最高イオン電導度を示す全固体 LIB 用電解質材料のイオン電導可視化による全固体 Li イオン電池材料の開発」への寄与があげられます。最近では In-situ(オペランド)測定の装置機能強化に注力しており、電池の充放電時構造変化のオペランド測定、金属材料の熱処理過程における In-situ 組織変化測定、並びに時分割小角散乱測定ができる他、新規開発した動的核スピン偏極小角散乱装置を世界で初めて産業利用課題に提供し、成果をあげ始めています。

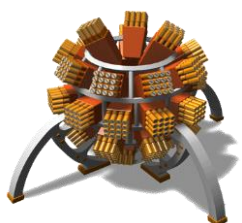
iBIX では、中性子構造解析における世界最大の結晶格子($133.43 \text{ \AA}^3$)を持つタンパク質の構造解析に成功した他、セルロース加水分解酵素(セルラーゼ)における反応機構(水の機能)の解明、銅アンミン酸化酵素の補酵素トパキノンのエノレート型—ケト型の互変異性の観測等の成果をあげています。

詳細については、以下の URL をご覧ください。

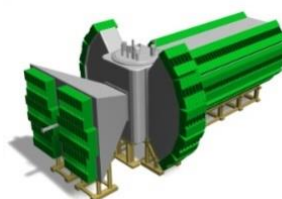
【相談窓口・問合せ先】 いばらき量子ビーム研究センター 茨城県事務室

TEL:029-352-3301 E-mail:info-neutron@pref.ibaraki.lg.jp

<https://www.pref.ibaraki.jp/sangyo/kagaku/tyusei/bl-top.html>



BL03: 茨城県生命物質構造解析装置 (iBIX)



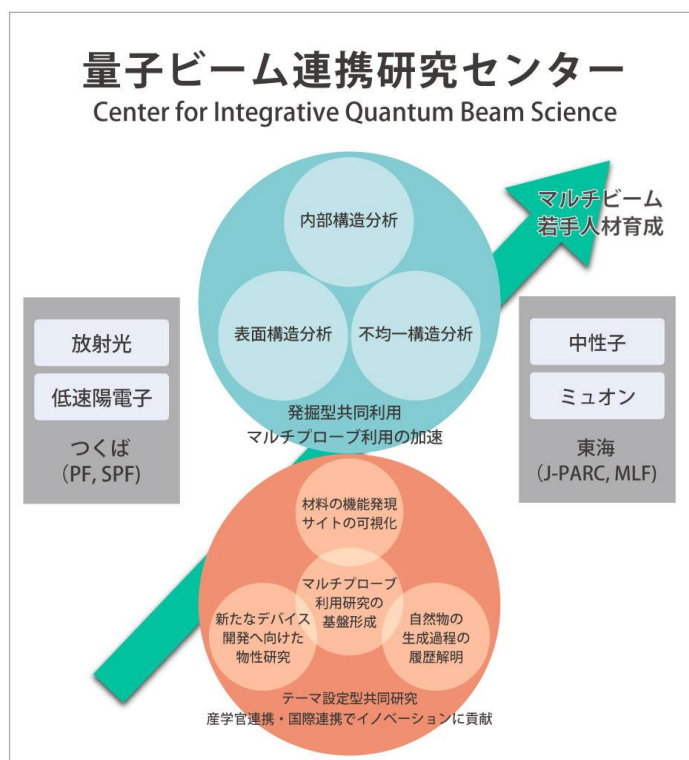
BL20: 茨城県材料構造解析装置 (iMATERIA)

量子ビーム連携研究センター(CIQuS)における マルチプローブ連携研究の促進 Promotion of Multi-probe Collaborative Research at Center for Integrative Quantum Beam Science (CIQuS)

雨宮健太
KEK 物構研 量子ビーム連携研究センター

物構研では、2020 年 4 月に従来の構造物性研究センターを発展的に改組し、量子ビーム連携研究センター(Center for Integrative Quantum Beam Science: CIQuS) を新設しました。CIQuS は、放射光・中性子・ミュオン・低速陽電子という4つの量子ビームを備えた、世界的にもユニークな研究所である物構研のメリットを活かして、新しいマルチプローブ連携研究分野を創成することを目指しています。そのために CIQuS では、共同利用研究者を異なる量子ビームを複合的に利用した研究(マルチプローブ利用研究)へと誘導・支援する「発掘型共同利用」と、所内スタッフが中心となってイノベーションに貢献できる量子ビーム連携研究課題を設定し、産学官連携・国際連携によって課題解決する「テーマ設定型共同研究」を推進し、これらの取り組みを通して、マルチプローブ利用研究を展開できる人材の育成を行っています。

今年度は、「テーマ設定型共同研究」として 11 件の研究プロジェクトを開始するとともに、「発掘型共同利用」の試行として、主に中性子と放射光で共通の手法について、一方のユーザーに他方のプローブを試行的に利用してもらうプログラムを実施しました。また、2015 年度に公募を開始した「物構研マルチプローブ共同利用実験課題」の見直しを行い、従来に比べてハードルを下げた、「スタンダードタイプ」を新設しました。本ポスターでは、マルチローブ連携研究を促進するための CIQuS の取り組みを紹介します。



JRR-3 運転再開と JRR-3 ユーザーズオフィスの活動 Restart of JRR-3 Operation and activities of JRR-3 Users Office

田村格良、樹神克明、井川直樹、阿部一英、松江秀明
日本原子力研究開発機構 JRR-3 ユーザーズオフィス

JRR-3 は熱出力 20MW、炉心付近における最大熱中性子束 3×10^{14} n/(cm²・sec) の我が国最大級の研究炉である。昭和 37 年に初の国産研究炉として建設され、原子力の黎明期を支える多くの研究に広く活用された後、平成 2 年に大規模な改造を行い、照射設備、ビーム実験用設備および冷中性子源装置を有する世界最高水準の実験研究が可能な汎用型研究炉に生まれ変わった。その後、種々の中性子ビーム実験、放射化分析、医療用アイソトープの製造等が行われ、基礎研究から産業利用に至る幅広い分野に利用されきた。

JRR-3 は、平成 22 年 11 月に施設定期検査で停止後、新規制基準適合性確認に係る設置変更許可申請を平成 26 年 9 月に申請し、新規制基準適合性審査を経て、平成 30 年 11 月に設置変更許可を取得した。平成 31 年 4 月からは、原子炉建家、ビームホール等の耐震補強工事を開始し、令和 3 年 1 月にこれら耐震補強工事を竣工し、本原稿執筆の 1 月末現在、法定検査の受検の準備を行っており、令和 3 年 2 月末の運転再開を目指している。また、運転再開後は慎重に試験運転や実験装置の調整等を行い、6 月末から供用運転を開始する予定である。また耐震補強工事と並行して、シャッターより炉心側の冷中性子導管の更新等によるビーム強度増強等の実験設備の高度化、ユーザーズオフィスの整備など、装置の性能向上や JRR-3 の利用する際の利用者の利便性向上にむけた活動にも取り組んでいる。

本ポスターでは、JRR-3 の運転再開までの道のりと JRR-3 の多彩な中性子利用について紹介すると共に、日本中性子科学会の「ロードマップ特別委員会」の提言[1]でも述べられている JRR-3 の利用に対する機動性の高さや利用ジャンルの多様性、さらには教育への活用の観点からプラットフォームのハブ施設となることへの期待に応えるべく活動を行っている JRR-3 ユーザーズオフィスの活動を紹介させていただく。

[1] 中性子科学会特別委員会報告「ロードマップ検討委員会提言と評議会の決定に関する報告書」(2018.7.9) <https://www.jsns.net/committee>

J-PARC MLF における KENS 実験装置 KENS instruments at J-PARC/MLF

伊藤 晋一

KEK 物質構造科学研究所 中性子科学研究系

物質構造科学研究所・中性子科学研究系(KENS)では、J-PARC 物質・生命科学実験施設において、8台の装置を設置して大学共同利用を展開している(下表)。

BL	装置名	特徴
BL05 NOP	基礎物理実験装置	基礎物理、中性子光学研究
BL08 SuperHRPD	超高分解能粉末回折装置	高分解能で粉末結晶中のわずかな構造変化を観測
BL12 HRC	高分解能チョッパース分光器(東大物性研との共同運営)	磁気励起や格子振動などの素励起を高分解能中性子非弾性散乱により観測
BL16 SOFIA	水平型反射率計	多様な環境下における物質界面の構造を短時間で観測
BL21 NOVA	高強度全散乱装置	水素化物の規則・不規則構造解析を中心に、様々な物質構造を解析
BL09 SPICA	特殊環境粉末回折装置	蓄電池材料の構造をその場観測することに特化した粉末回折装置
BL06 VIN-ROSE	スピンエコー装置(京大連携)	物質中のスローダイナミクスを観測
BL23 POLANO	偏極中性子回折装置(東北大連携)	偏極中性子を用いて磁気励起と格子振動を分離して観測

各装置においては、他大学・他機関の研究者とともに S1 型課題申請によるプロジェクト型研究が展開されている。2019A より、BL23 POLANO についても、非偏極限定ながら一般課題の受け入れを開始した。これにより、全ての装置において一般課題が実施されることとなった。また、各装置の高度化を、JAEA、CROSS および外部研究機関とともに進めている。

ポスターでは、KENS 装置の状況や基盤技術開発についてのサマリーを紹介する。

低速陽電子実験施設報告

Activity Report of the KEK IMSS Slow Positron Facility

永井康介^{1,2}, 和田健¹, 望月出海¹, Rezwan Ahmed³, 長嶋泰之^{1,4}, 兵頭俊夫¹, 一宮彪彦¹,
五十嵐教之⁵, 二谷浩明⁵, 小菅隆⁵, 齋藤裕樹⁵, 石井晴乃⁵, 永谷康子⁵,
古川和朗⁶, 峠暢一⁶, 諏訪田剛⁶, 榎本嘉範⁶, 白川明広⁶, 設楽哲夫⁶, 岩瀬 広⁷,
河裾厚男⁸, 前川雅樹⁸, 白澤徹郎⁹, 満汐孝治⁹, 石田明¹⁰, 周健治¹⁰, 星健夫¹¹.

1 KEK 物構研 SPF, 2 東北大金研, 3 KEK 物構研 CIQuS, 4 東京理科大,
5 KEK 物構研 PF, 6 KEK 加速器, 7 KEK 共通基盤, 8 量研, 9 産総研, 10 東京大, 11 鳥取大,

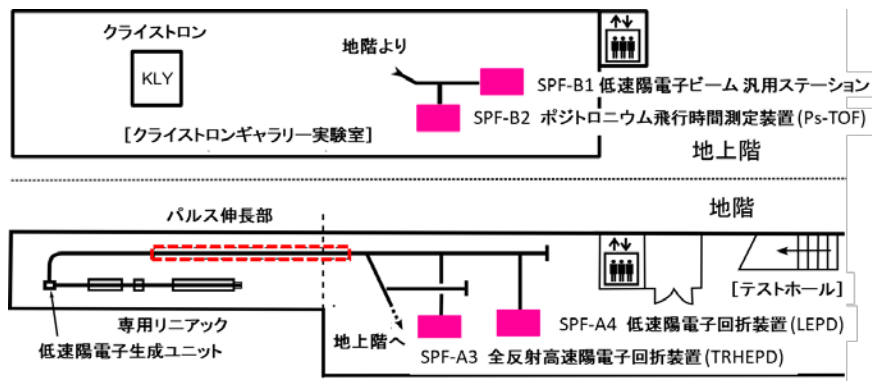
本施設では専用リニアック（～50 MeV, < 600 W）で加速された電子ビームで生成した世界最高クラスの高強度低速陽電子ビームを共同利用に供している。

2020 年度は、地階テストホールにあるビームライン SPF-A3 の全反射高速陽電子回折（TRHEPD）ステーション、同じく SPF-A4 の低速陽電子回折（LEPD）ステーション、1階クライストロンギャラリー実験室にある SPF-B1 の汎用ステーション、同じく SPF-B2 のポジトロニウム飛行時間（Ps-TOF）ステーションで共同利用実験を行った。また、技術開発用の SPF-A1 で、磁場輸送ビームの、新方式による非磁場領域への取り出し法を開発し、成功した。

2020 年度の共同利用実施課題数は 12 課題、共同利用実人数は 30 名、ユーザー実験の配分時間は 2440 時間であった。このうち第 1 期運転（5/8-7/1）は、放射光実験施設と歩調をあわせて、新型コロナウイルス感染拡大防止のため中止としたが、改めて後半の 2 週間（6/15-7/1）、同じく放射光にあわせて運転を再開した。ただし、ビーム配分は行わず、TRHEPD の代行測定の可能性の検討と実地試験を行った。

2010 年に改修してこれまで順調に使用してきた低速陽電子生成ユニット（コンバータ/モデレータ）の高電圧導入端子から真空リークをきたす恐れが出てきたため、ユニット全体を再改修した。その際、陽電子を低速化するモデレータの構造を変更し、背面に W 薄膜を配置し、前面の取り出しグリッドを SUS メッシュから W メッシュに変更するなどの工夫をした。その結果、以前よりビーム強度が増強された。

また、これまで不十分であった、各ステーションの真空インターロックの整備を開始した。



フォトンファクトリー Photon Factory

放射光実験施設

新型コロナウイルス感染症拡大への対応として、安全第一の観点から、PF と PF-AR の 2020 年度第1期運転(5/8-7/1)を中止した。その後、緊急事態宣言の解除や、新しい生活様式・実験様式に対応する試行の重要性を鑑みて、6月後半の2週間(6/15-7/1)、PF(BL-14 を除く)のみの運転を実施した。短い期間ではあったが、ユーザーの皆様の協力により、リモート化・自動化も含めた感染症拡大防止に配慮しながらの実験を試行することができた。得られた知見は PF の安全ガイドラインなど、その後の第2期以降の運転に活かされている。第3期の予定を含め、2020年度の運転時間(スタディ等含む)はPFが3120時間、PF-ARが2520時間となる見込みである。開催を見合わせた第37回 PF シンポジウムは9月27日にオンラインで代替開催し、海外からの接続を含む多くの方の参加をいただいた。

[BL の整備状況] PF/PF-AR の各ビームラインでは、新しい実験様式として、リモート化・自動化などの機能強化を進めている。試料周辺部を各ビームラインだけでなく、他の量子ビーム施設とも共通仕様にする事で、マルチプローブ研究の推進にも寄与する。また、将来計画の検討とともに、短期計画として、PF リングの高度化(PF Upgrade 2020)を開始し、PF リングのビーム軌道フィードバックシステムの高度化、研究開発専用ビームラインの設計を進めている。これらの詳細な計画や進捗状況に関しては3月11日午後に予定されているPF シンポジウムの将来計画セッションにおいて討論する。PF-AR 南棟では、KEK 素粒子原子核研究所を中心に、電子ビームを取り出す測定器開発用テストビームラインの建設が2020~2021年の2ヶ年で計画されている。

[共同利用に関する制度改正] 放射光共同利用実験審査委員会(PF-PAC)および物構研運営会議の議論を経て、学術施設としての PF のミッションを踏まえた、共同利用に関するいくつかの制度改正を進めている。今年度からは、P型課題、評価基準、イエローカード制度(論文の登録が少ない実験責任者に対する審査基準)の見直し、T型課題の締切日の変更を実施した。また、PF-PAC の分科および PF 内部課題の見直しを進め、来年度から運用する。学生への教育サポートのために旅費辞退を申告する制度を開始し、すでに多くの方からご協力をいただいている。

この他、PF の活動は、PF 年報に詳しくまとめられています。

<https://www2.kek.jp/imss/pf/science/publ/pfnenpo/>

PF-BL1A、BL5A、BL6A、BL10C、BL-15A2、BL17A、PFAR-NW12A、NE3A

KEK 構造生物学研究センターの産業利用促進への取り組み **Efforts to promote industrial usage at the Structural** **Biology Research Center of KEK**

高エネ機構・物構研・構造生物学研究センター（長瀬里沙）

現在、構造生物学研究は学術研究だけではなく、医薬をはじめとする様々な産業においても重要な研究領域となっている。高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・構造生物学研究センターでは研究施設の産業利用のニーズに対応するための体制を整えている。そこで、構造生物学研究センターにおける産業利用促進に向けての取り組みについて紹介する。構造生物学研究センターでは 5 本の結晶構造解析用ビームライン、3 本の溶液散乱用ビームライン、200kV クライオ電子顕微鏡を備えており、全ての施設において産業利用のユーザーを受け入れている。当センターでは産業利用受け入れに関わる担当者と各施設の責任者が連携して産業利用ユーザーに対応しており、学術利用と産業利用がバランスの取れた形で運用されるよう努めている。また、創薬等支援技術基盤プラットフォームを通じた支援により産官学が連携した研究の促進に貢献している。

総合科学研究機構 中性子科学センターの活動 Activity of CROSS in 2020

総合科学研究機構(CROSS) 中性子科学センター 利用推進部

J-PARC の特定中性子線施設の登録施設利用促進機関である CROSS 中性子科学センター(以下、「CROSS」という。)は、J-PARC センターと連携し、中性子線共用施設(共用ビームライン)の課題公募と選定、施設利用者に対する情報提供・相談・実験支援等を行っています。CROSS は、J-PARC MLF の利用促進活動を通じて、施設利用者の課題解決に貢献していきます。

○J-PARC MLF は新型コロナウイルス感染症による実験課題への影響に対応するため、2020B 期と 2021A 期を統合した期間で一般利用課題(短期)を公募しました。2020A 期、2020B 期及び 2021A 期の一般利用課題(定期募集:短期)への申請数は全中性子ビームラインで 644 件あり、そのうち共用ビームラインには 343 件の応募がありました。採択数は全中性子ビームラインで 345 件、共用ビームラインでは 162 件(うち新利用者支援課題(New User Promotion : NUP)¹⁾ 12 件含む。)でした。

○J-PARC MLF では産学連携・産業利用をより活発化していくため「J-PARC JOIN」を組織し、J-PARC MLF の産業利用の一元的な利用相談窓口を設置しました。<https://neutron.cross.or.jp/ja/join/>

○CROSS は東京大学物性研究所(以下、「東京大学物性研」という。)と物質科学の研究推進に関わる連携協力協定を 2020 年 11 月 2 日に締結しました。この協定のもと、CROSS は東京大学物性研と相互の特徴と研究資源を活かした研究、人材交流及び中性子利用者の拡大に関する一層の連携協力を図り、物質科学の研究推進に貢献します。

○第 3 回放射光・中性子の連携利用に向けた合同研修会「小角散乱測定研修会」を SPring-8(11/24・兵庫)及び J-PARC MLF(2021 年 4 月上旬予定・茨城)において企画しました。量子ビーム施設の施設利用者に実習を通して放射光、中性子それぞれの測定技術の特徴を把握していただくことで、効果的な連携的利用方法の検討の一助とすることを目的として、2019 年度より JASRI²⁾ と CROSS が協力して実施しています。

○中性子科学における人材育成を行うため、CROSS では研究生制度を導入しています。2020 年度は中性子科学に関する知識や技術を習得したい大学院生を研究生として 3 名(2021 年 1 月現在)受け入れました。

<https://neutron.cross.or.jp/ja/student/>

1) https://neutron.cross.or.jp/ja/users/trial_use/

2) 公益財団法人高輝度光科学センター(JASRI)。JASRI は、SPring-8 及び SACLA の登録施設利用促進機関です。