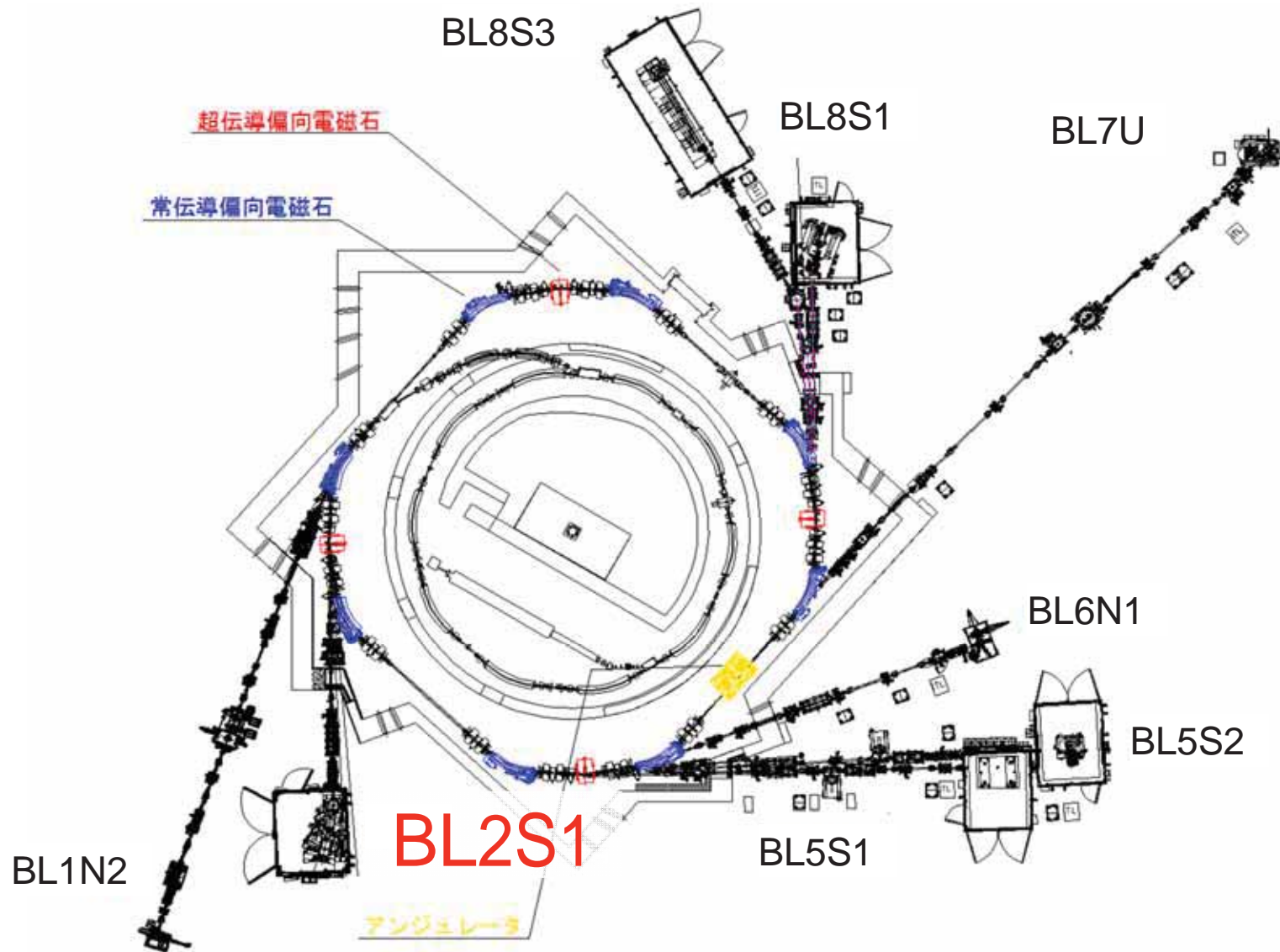


単結晶X線回折ビームラインの 学術および産業利用

名古屋大学 シンクロトロン光研究センター
渡邊 信久



ビームライン位置 (運用中)



BL2S1の外観

(名古屋大学ビームライン)



2015年5月
供用開始

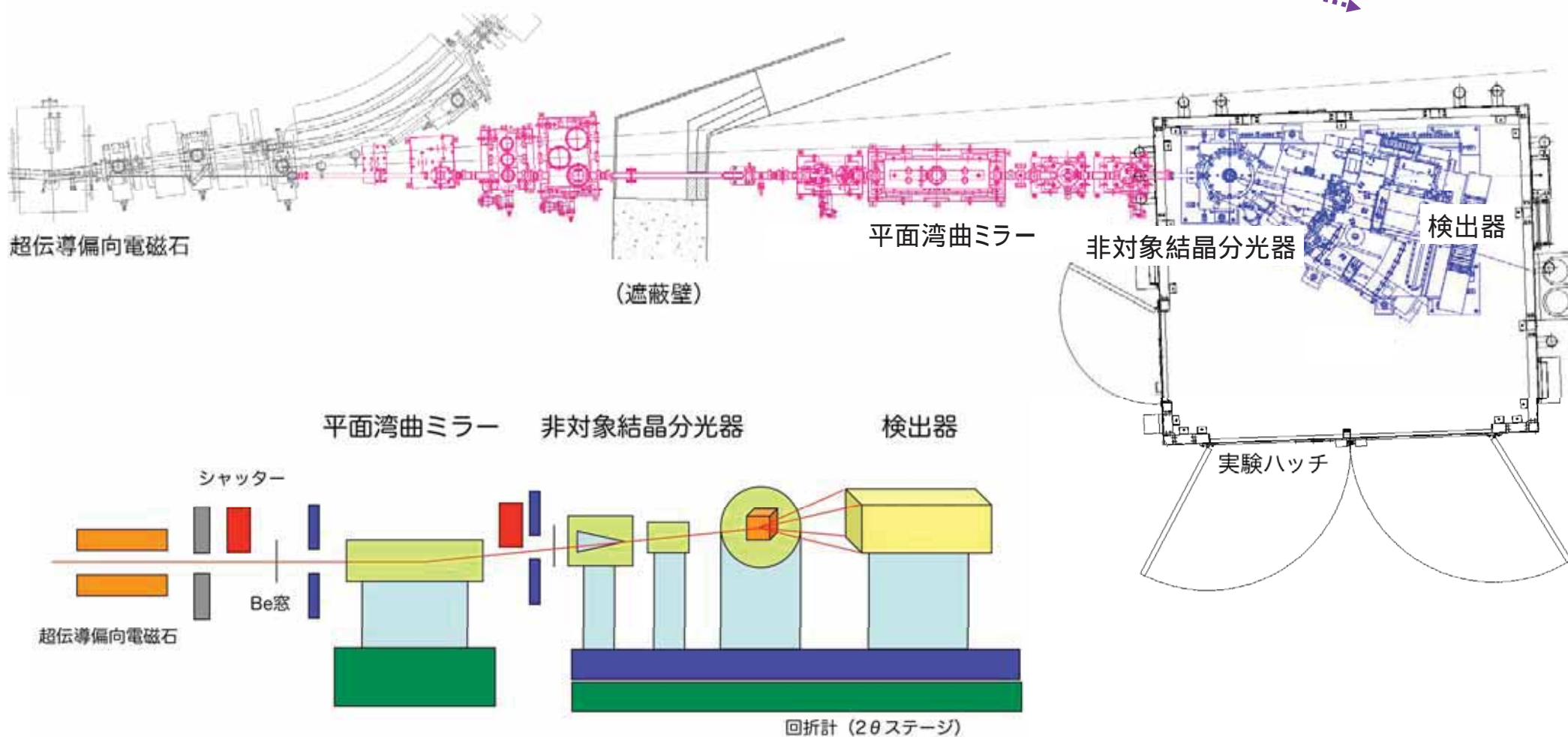
BL2S1の機器配置

(名古屋大学ビームライン)

10:1 集光 (水平面内)

12.57 m

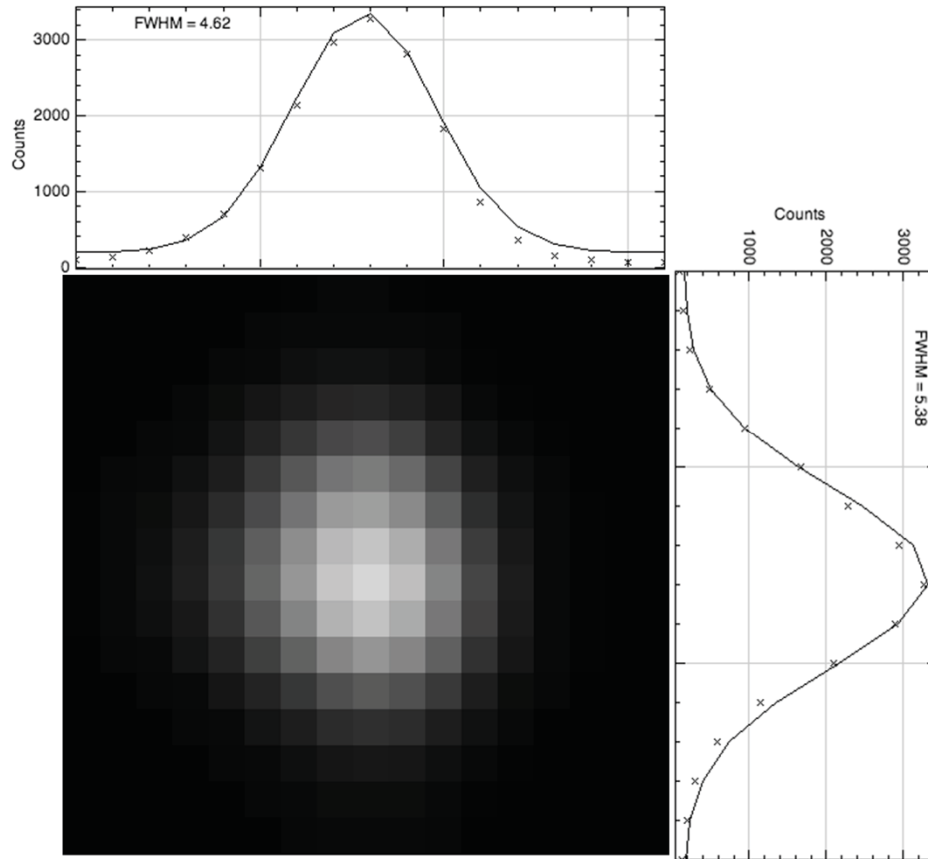
1.26 m



集光ビーム形状

(試料前ピンホール無し)

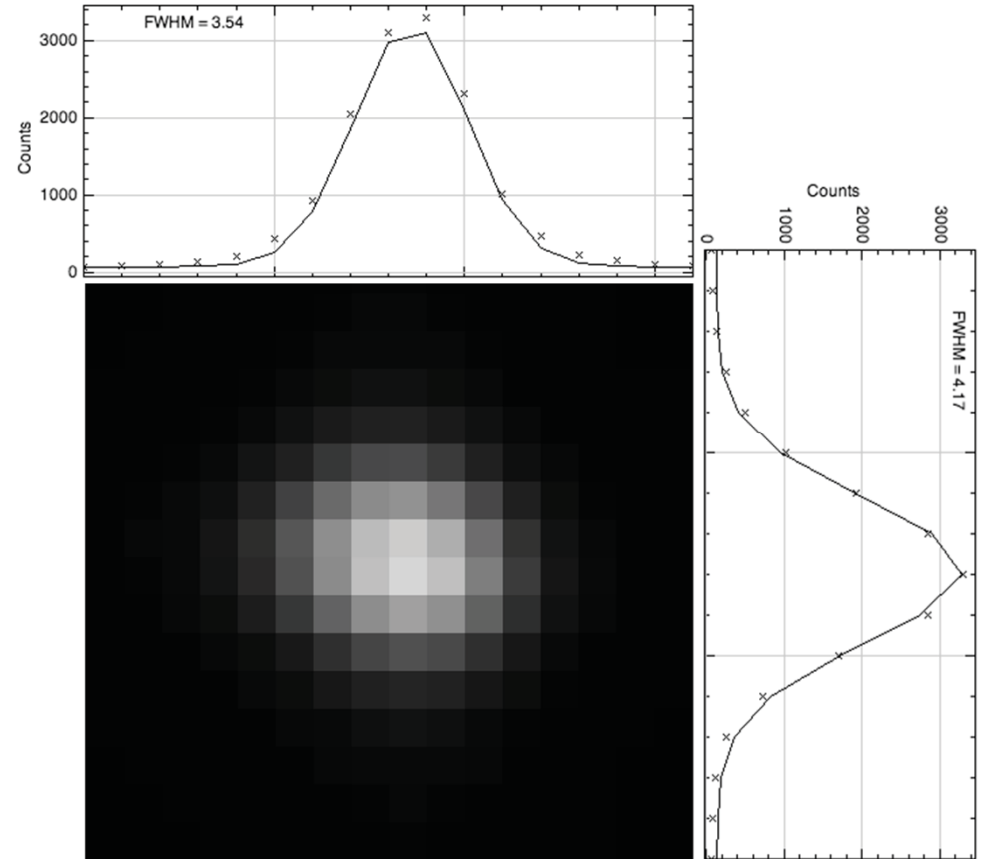
1.12



0.22 x 0.25 mm

@2016.1.6

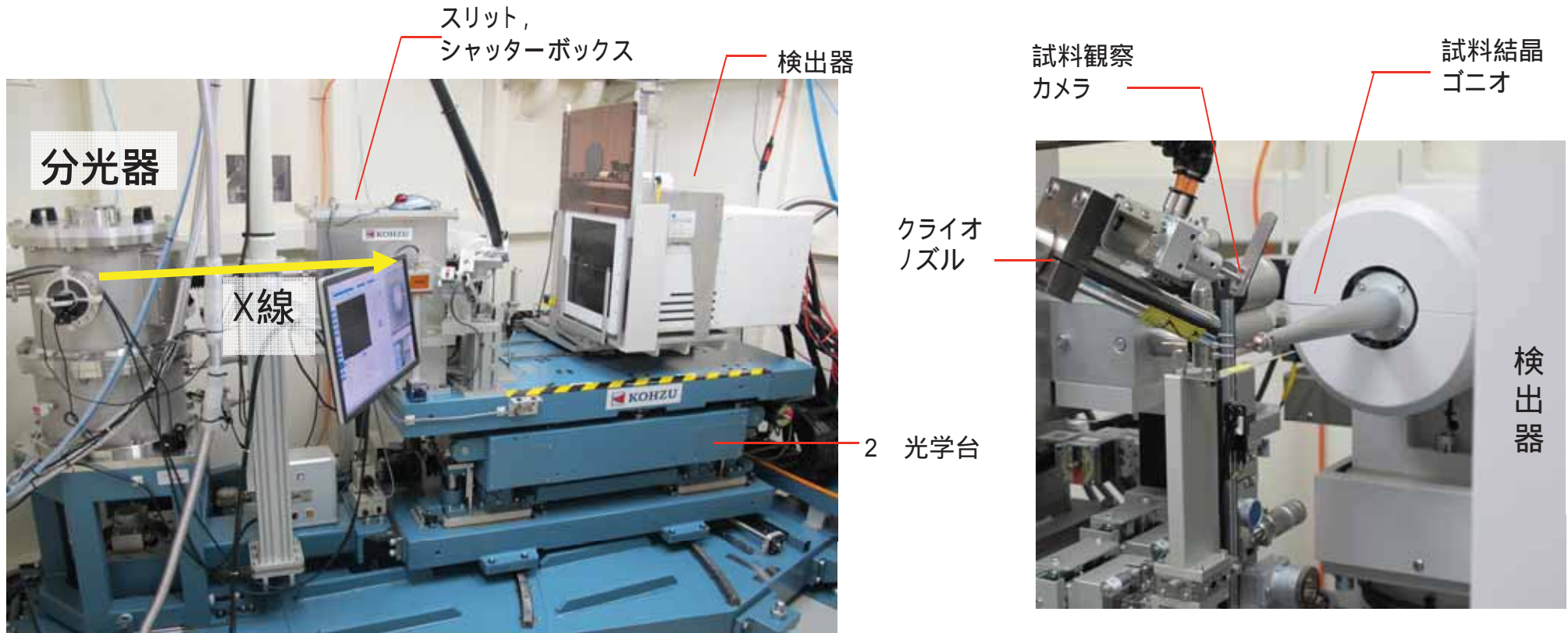
0.75



0.17 x 0.20 mm

@2016.2.4

分光器 & 回折計



ビーム性能

エネルギー	7 ~ 17 keV (1.8 ~ 0.7 Å)
光子数 (photons/s)	1.9 x 10 ¹⁰ @11.1 keV (1.12 Å) 8.0 x 10 ⁹ @16.5 keV (0.75 Å)
ビームサイズ(FWHM)	c.a. H 0.2 x V 0.2 mm ²
分解能 (E/ E) *	2000 > (@12 keV)

* 計算値

Quantum 315r



Pilatus 1M

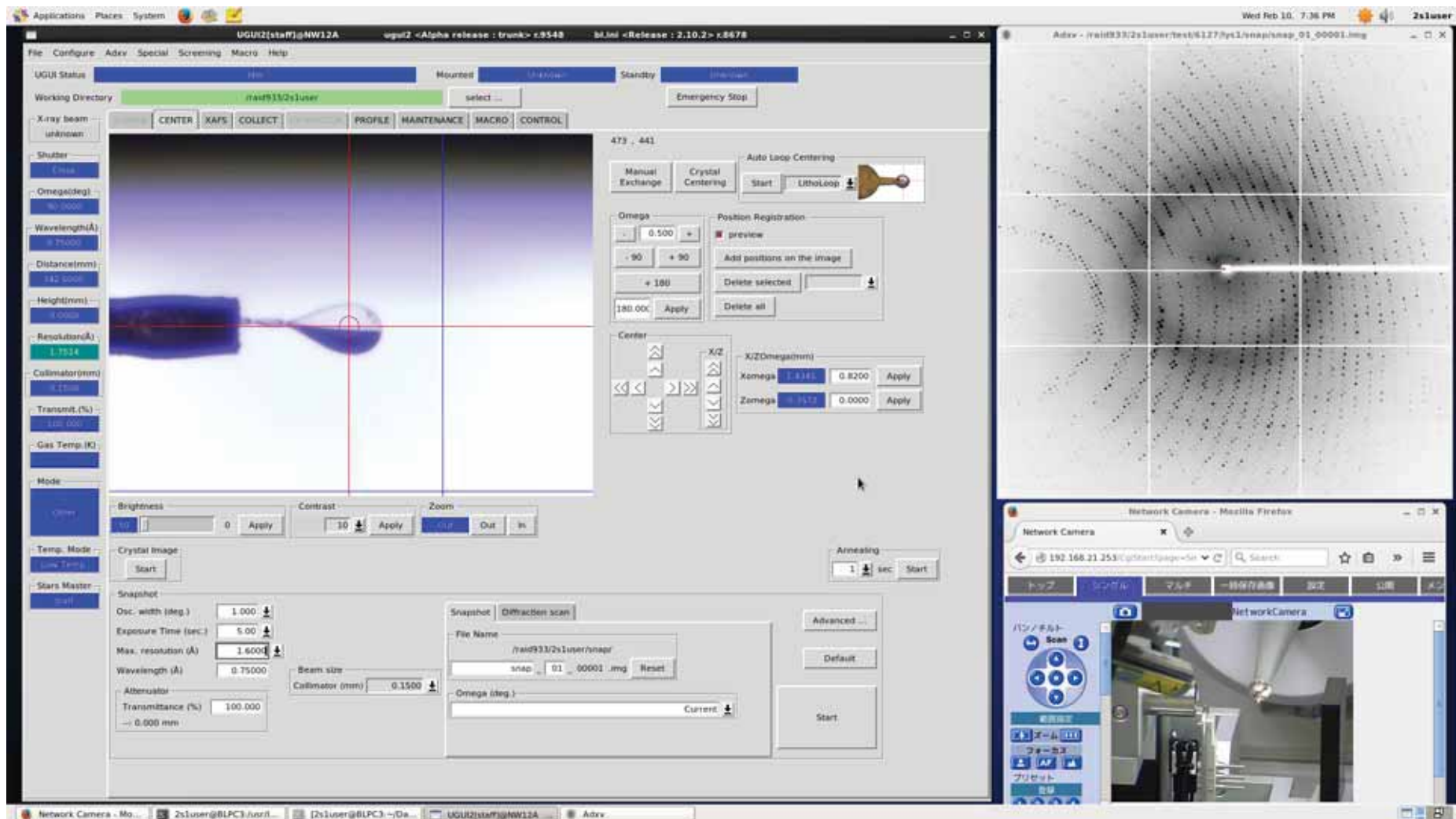


X線検出器

	ADSC Q315r	Dectris PILATUS 1M
ピクセルサイズ	51 μm	172 μm
イメージサイズ	315 x 315 mm^2	169 x 179 mm^2
	3072 x 3072	981 x 1043
	18.9 Mb	4 Mb
X線検出	CCD	Pixel array
ダイナミックレンジ	22,600	20 bit
読出時間	0.25 s	3.6 ms
重量	133 kg	25 kg

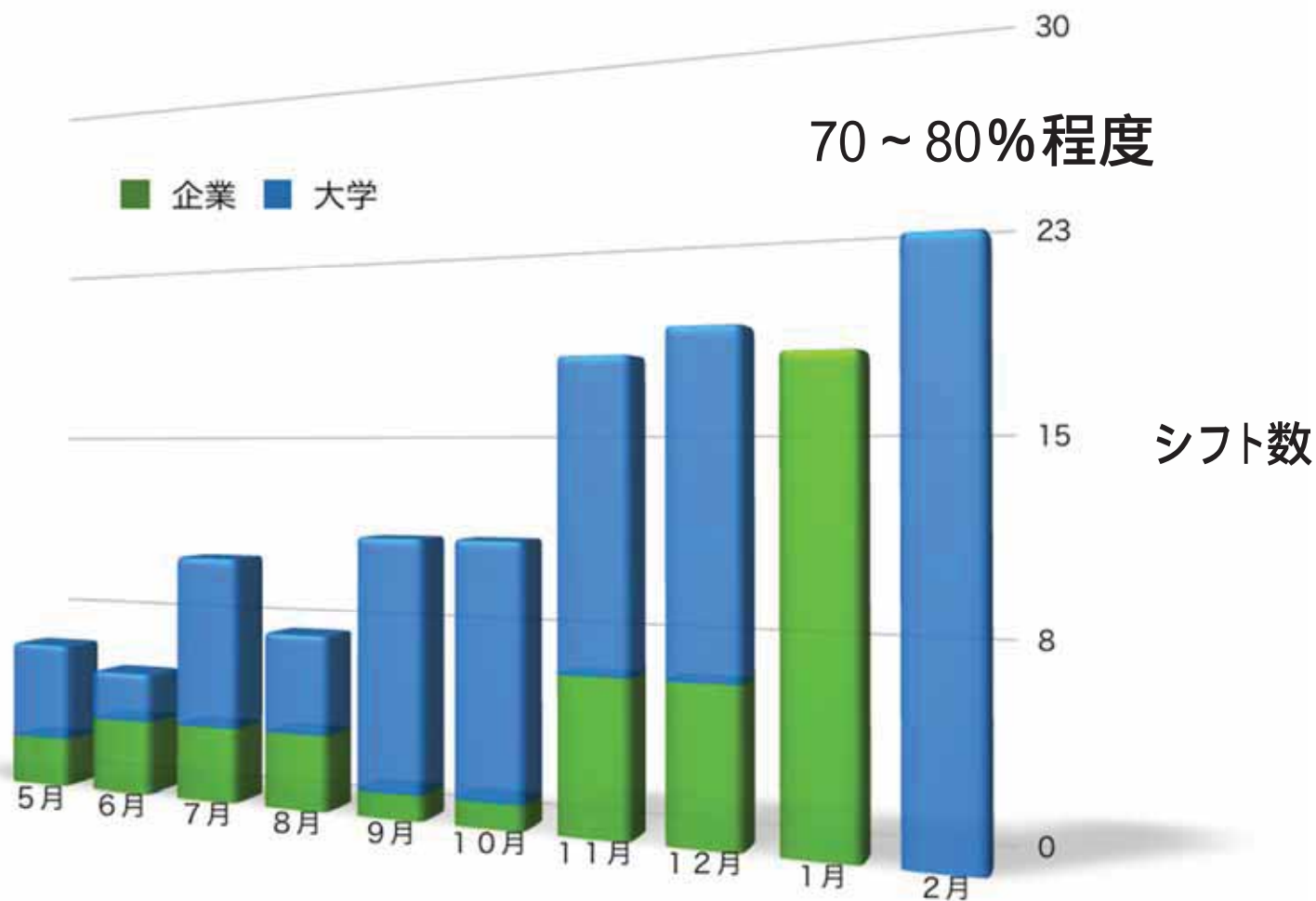
回折計制御ソフト

(KEK PF ugui を移植)



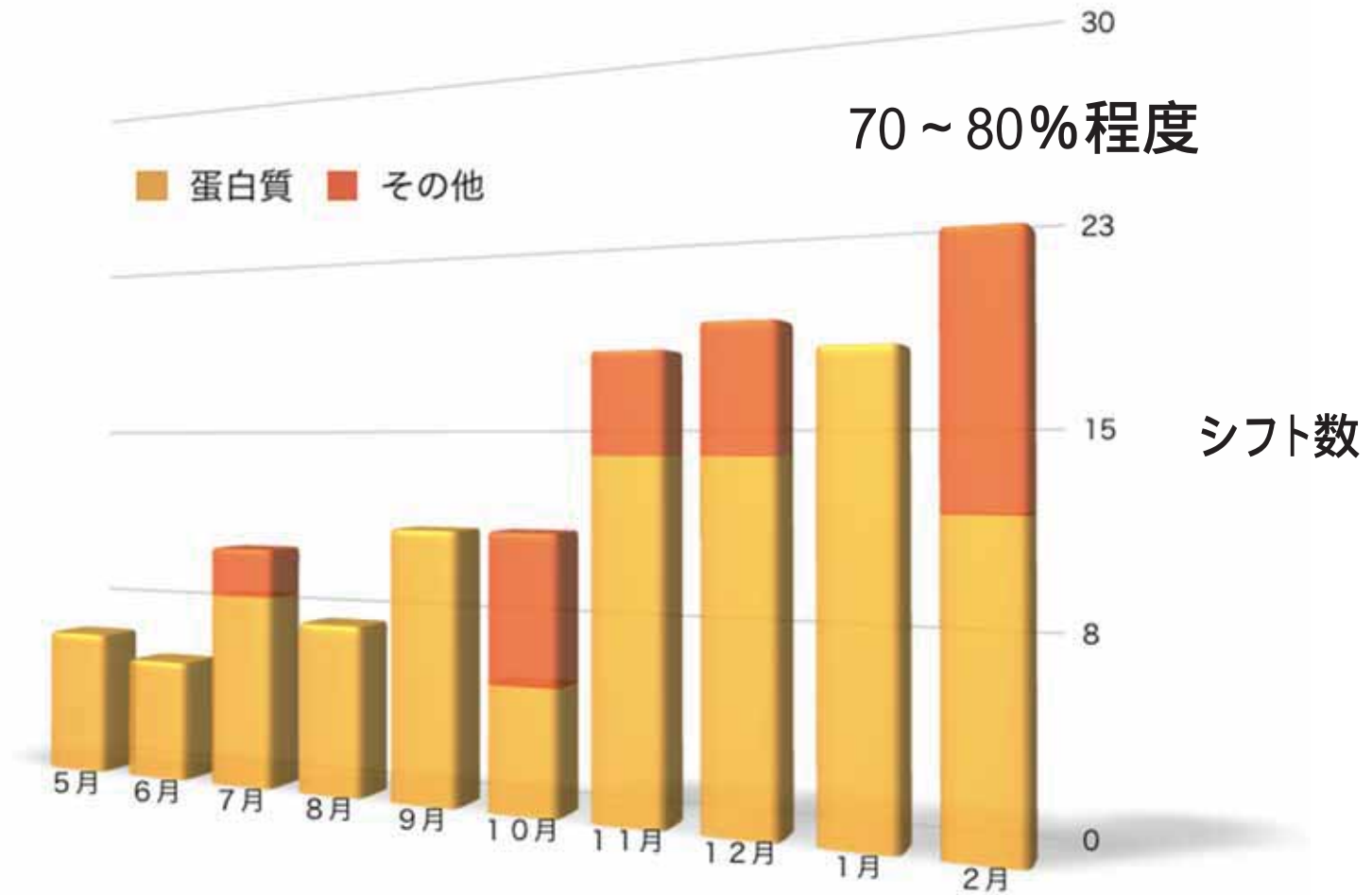
利用状況推移 (利用者別)

2015年5月: 供用開始

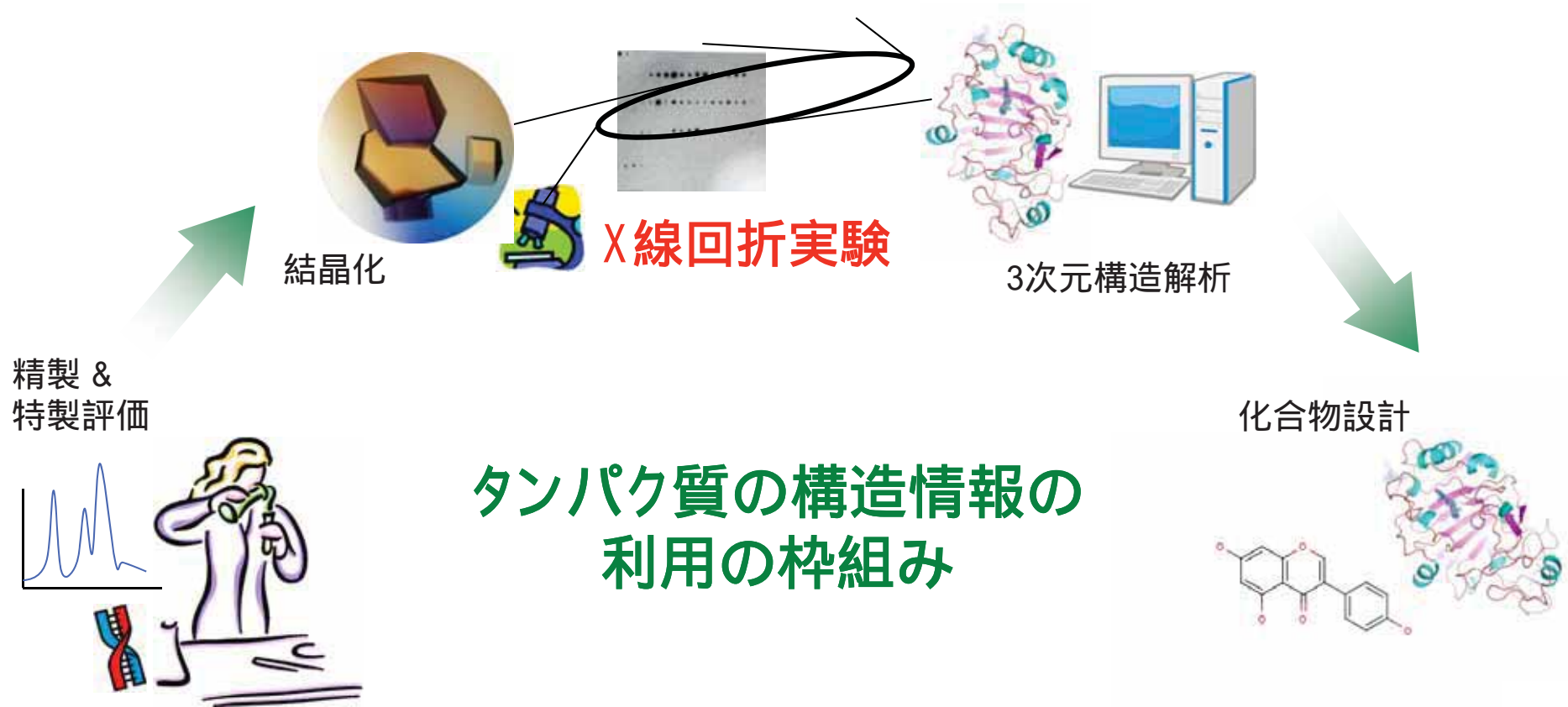


利用状況推移 (測定サンプル)

2015年5月: 供用開始



想定されるBL2S1の利用スキーム



利用例

企業の例

(株)丸和栄養食品

JAXA高品質タンパク質結晶作成プロジェクトの結晶評価

大学の例

名古屋大学医学研究科

薬剤耐性機構を抑制する阻害剤の開発

特殊な例

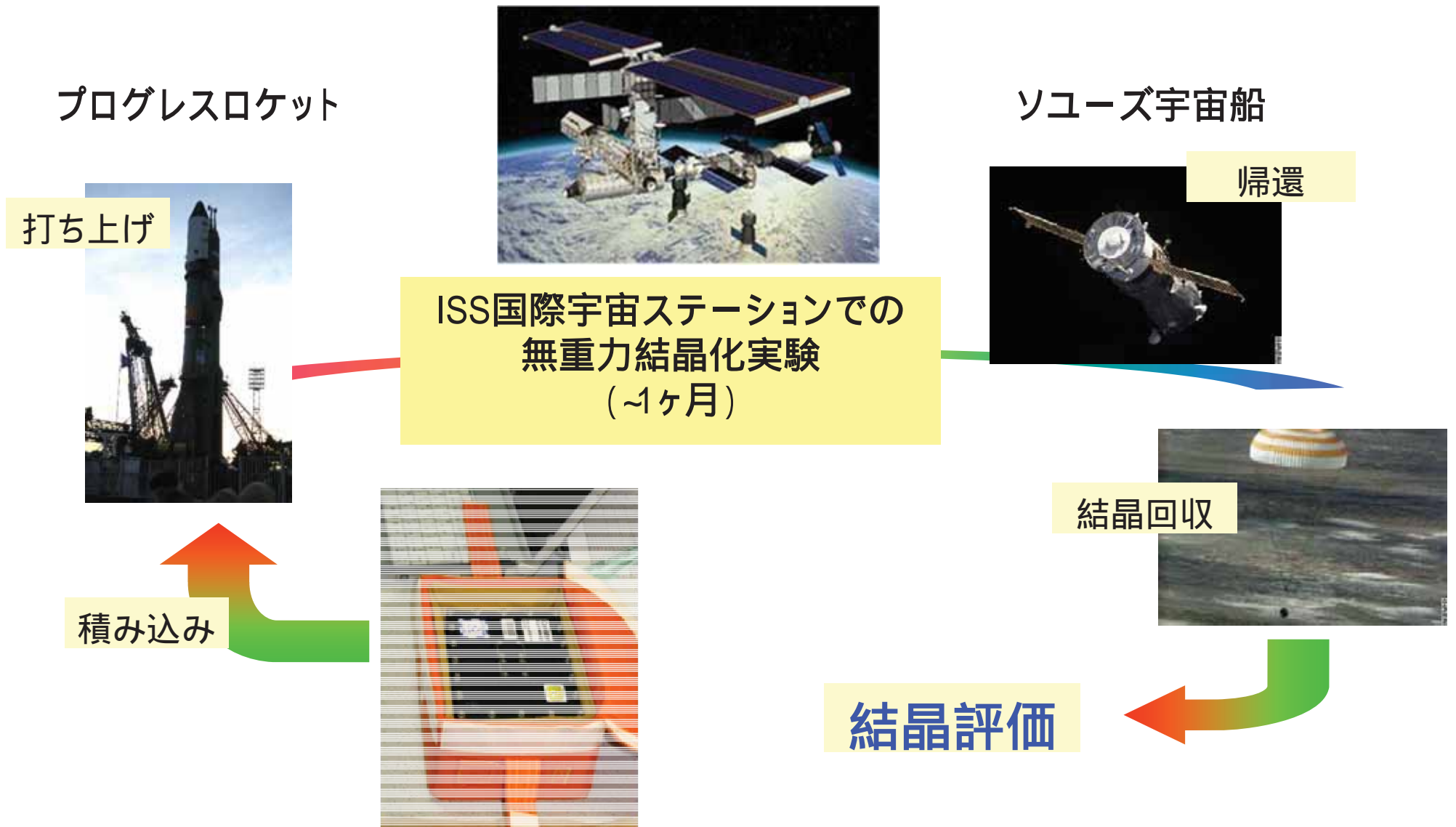
名古屋大学シンクロトロン光研究センター

高圧結晶構造解析法の開発&応用研究

利用例(1)

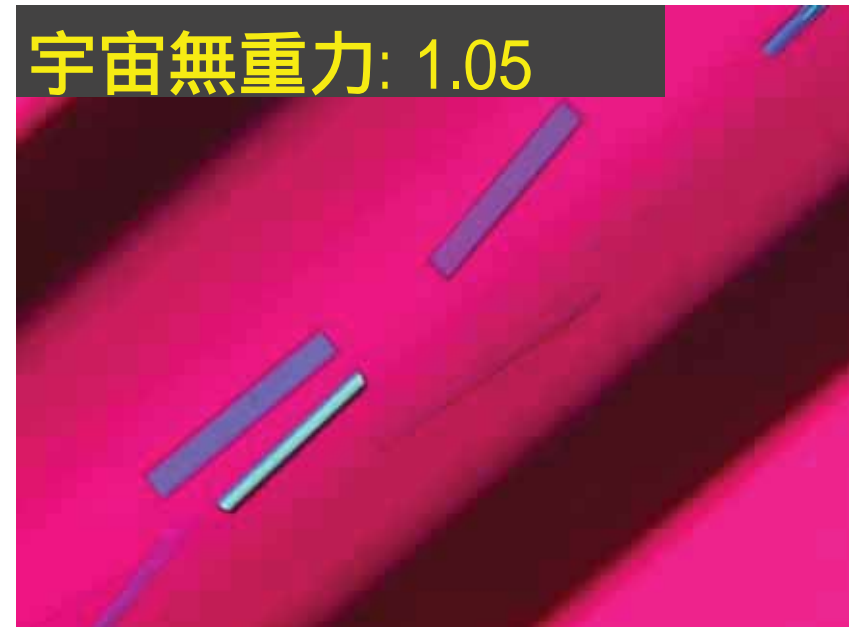
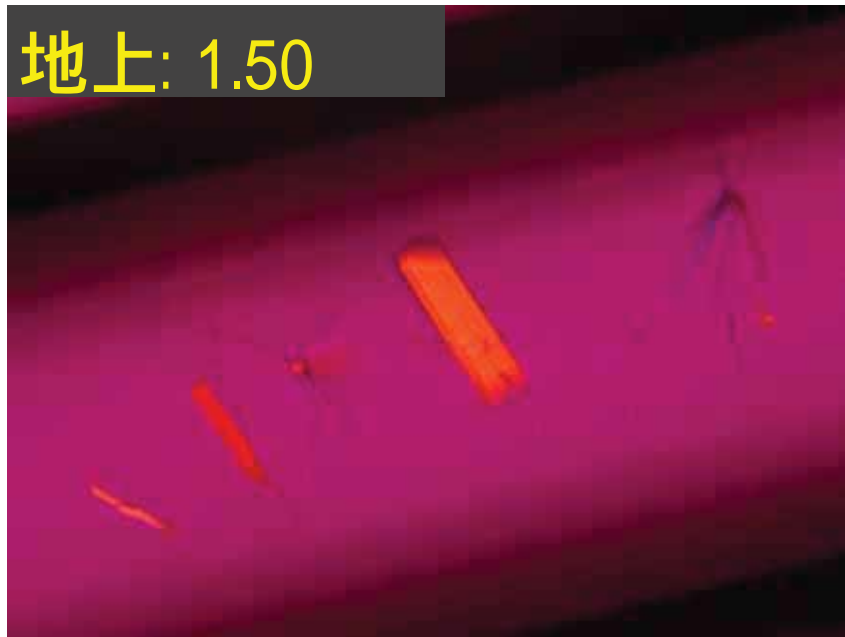
JAXA高品質タンパク質結晶作成プロジェクト

(株)丸和栄養食品



無重力下での良質結晶作製

きぼう(JEM)利用の高品質タンパク質結晶生成実験



蛋白質溶液

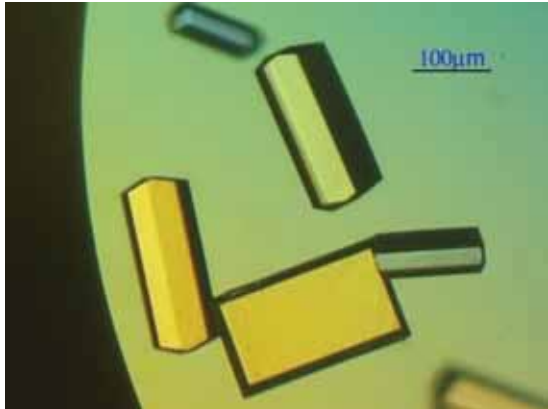
3mg/ml Protein, 12%(w/v) PEG6000
2mM GSH, 1mM MgCl₂, 50mM Tris-HCl pH8.5

結晶化条件

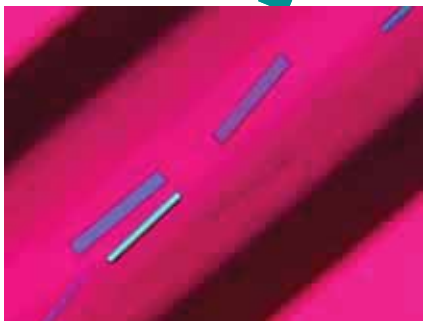
35%(w/v) PEG6000
2mM GSH, 2mM MgCl₂, 50mM Tris-HCl pH8.5

J. Synchrotron Radiation (2010), **18**, 88-91

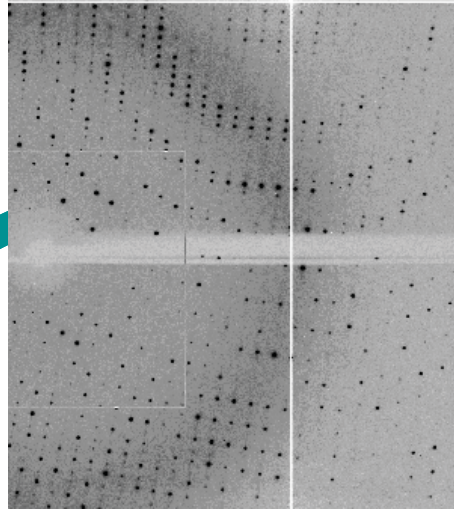
BL2S1データでの構造解析



リード化合物との
複合体結晶

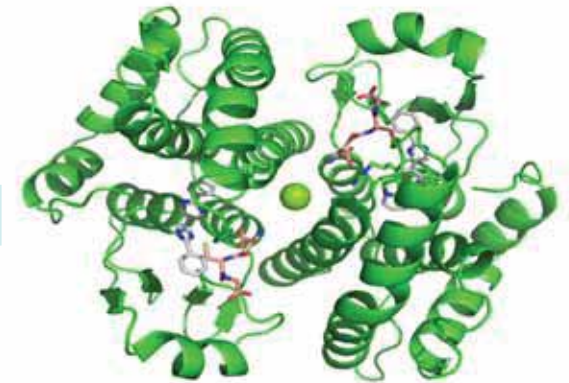


無重力良質結晶



回折実験
@BL2S1

タンパク質と化
合物の複合体の
構造

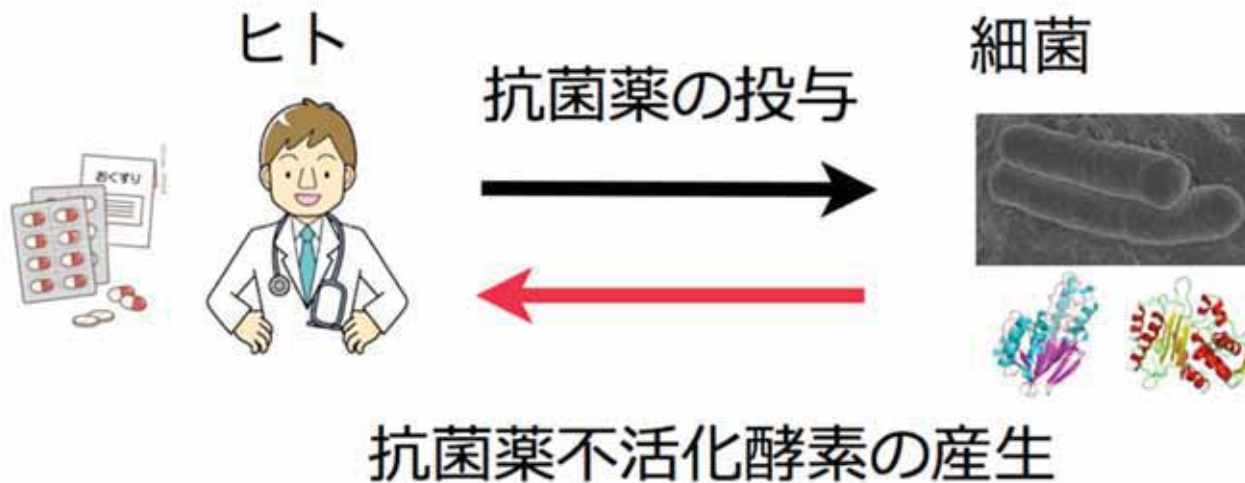


構造利用
創薬

SBDD

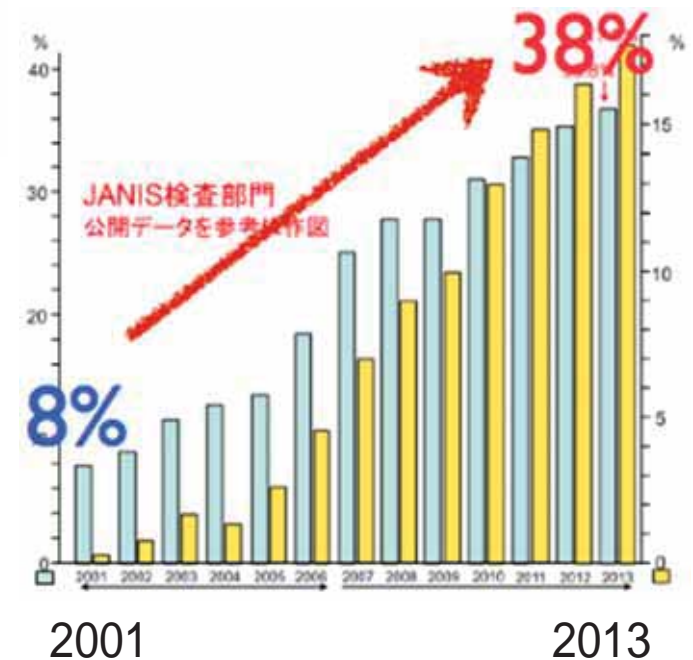
薬剤耐性機構を抑制する阻害剤の開発

名古屋大学医学研究科微生物・免疫学講座 和知野助教

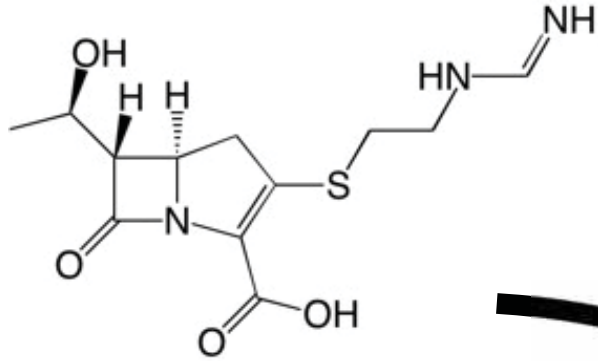


院内感染対策サーベイランス
JANIS

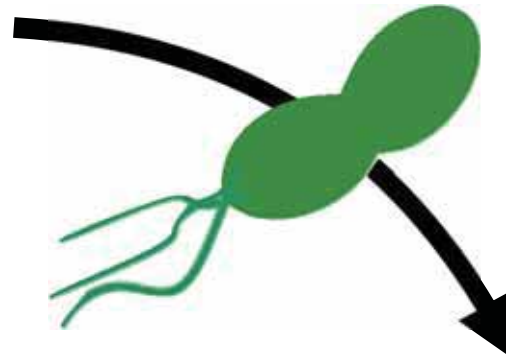
薬剤耐性菌の増加



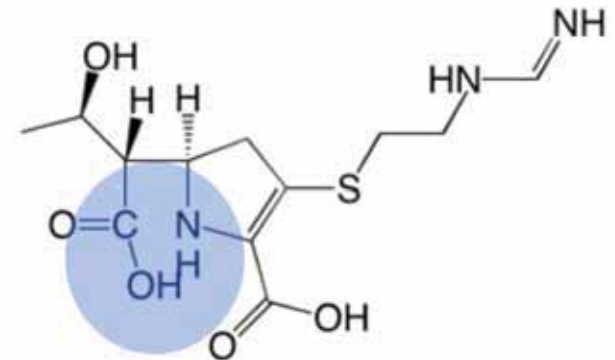
カルバペネム系抗菌薬分解酵素



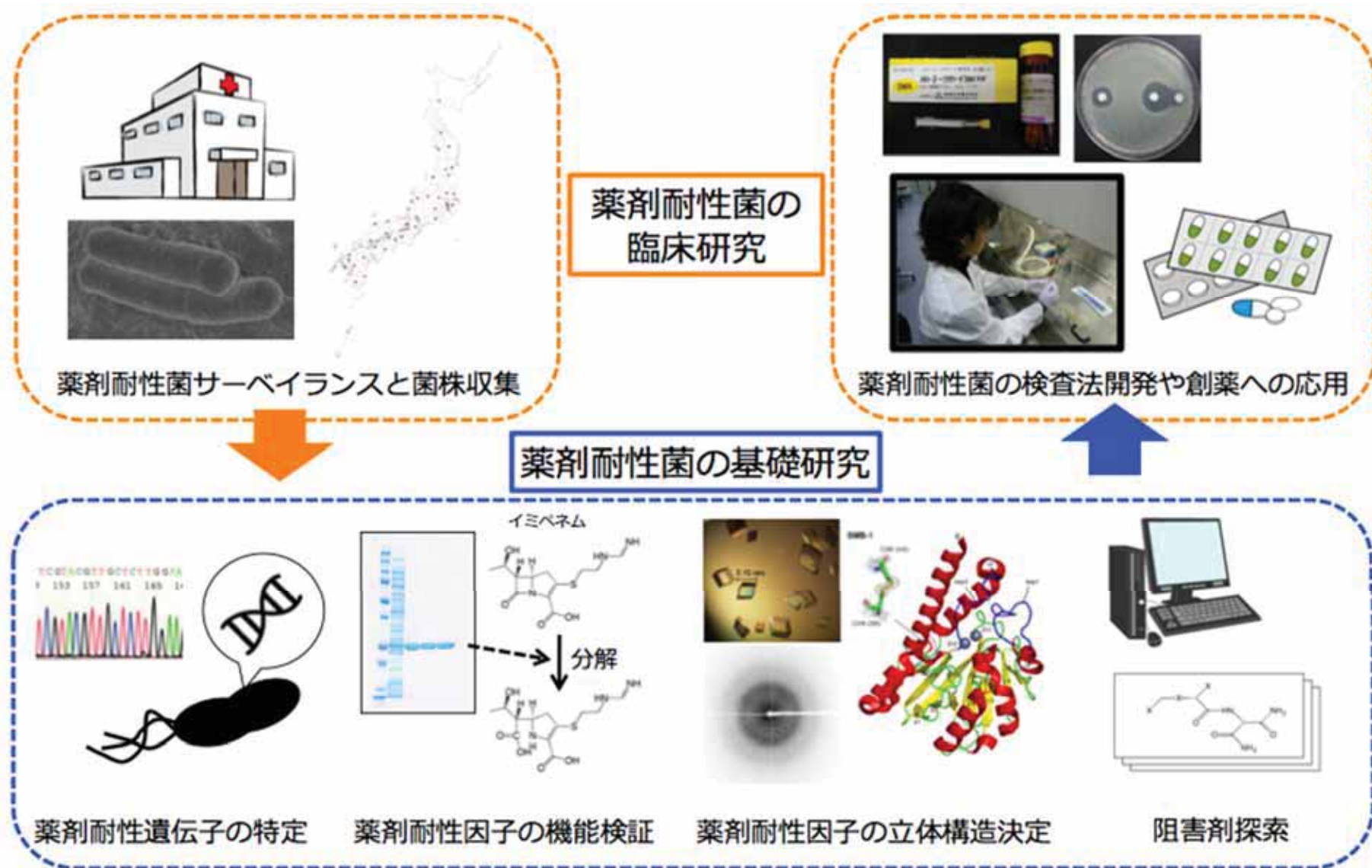
新型耐性菌



メタロ-β-ラクタマーゼ

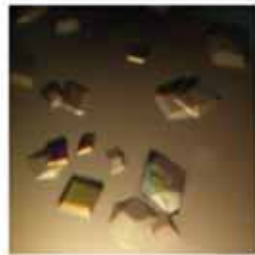


薬剤耐性菌に対する対応研究サイクル



カルバペネム系抗菌薬分解酵素のX線結晶構造解析 (メタロ-β-ラクタマーゼ:SMB 1)

Native SMB-1

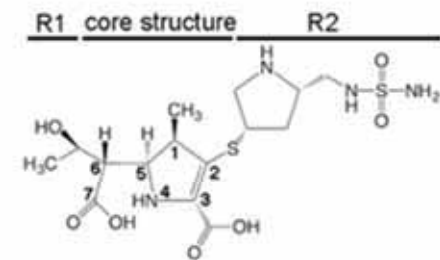
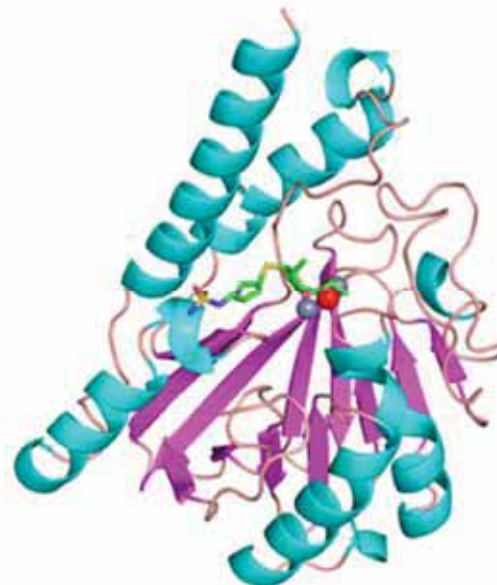
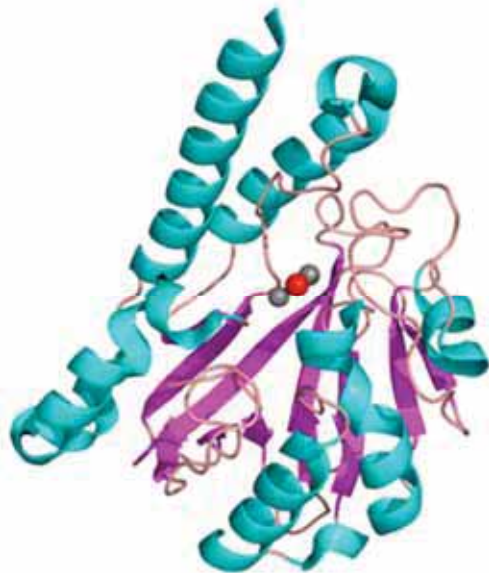


PF:BL-5A
1.6 Å

基質（カルバペネム分解物）結合体



AichiSR:BL2S1
1.4 Å



ドリペネム分解物

高压結晶構造解析法の開発&応用研究

名古屋大学シンクロトロン光研究センター

「高压」~ 1 GPa

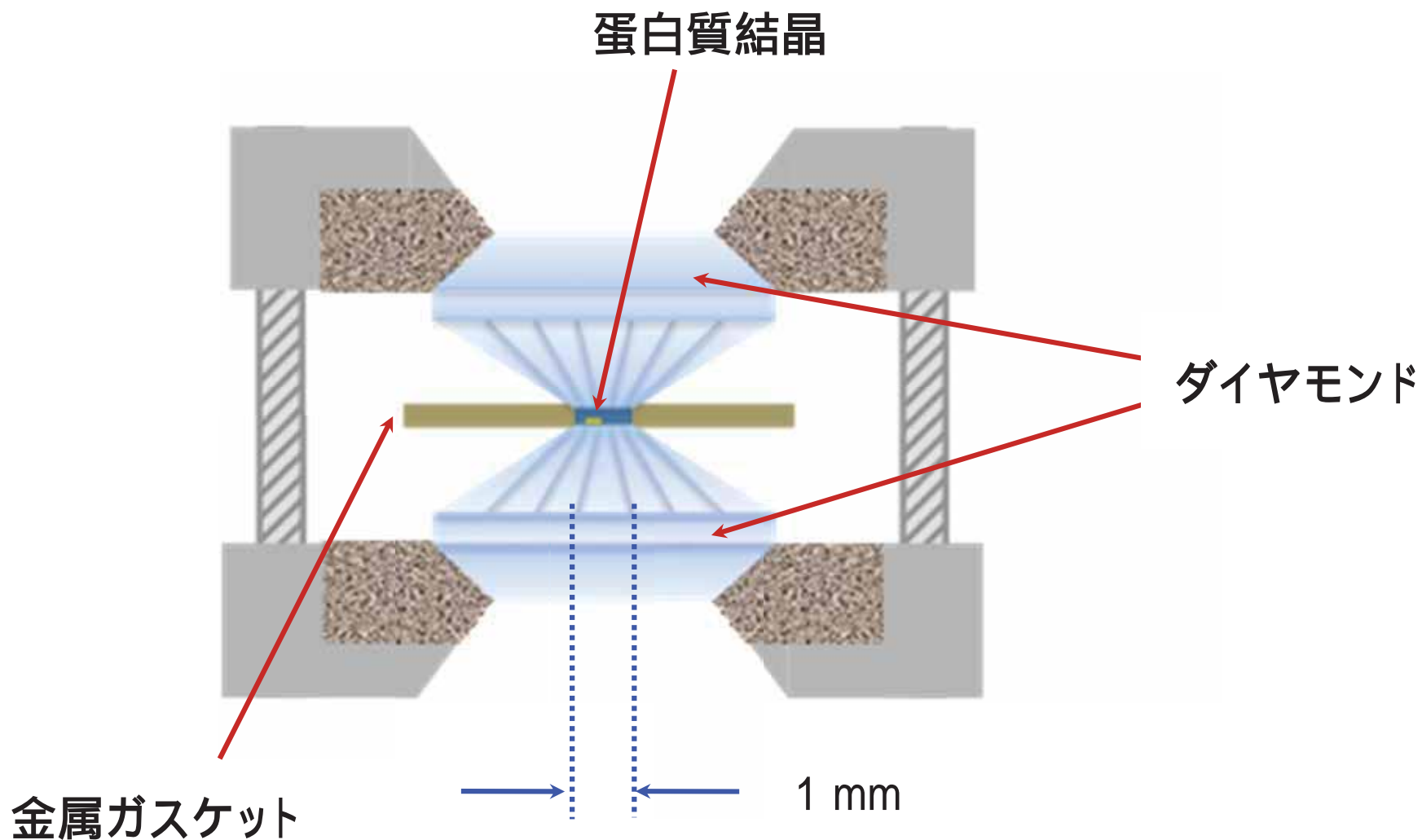
2000年頃から開発が進んでいる...

- 蛋白質の圧縮率
- 蛋白質の耐圧性
- 蛋白質の揺らぎと機能
- 蛋白質周辺の水分子の構造

ダイヤモンドアンビルセルと短波長X線を利用

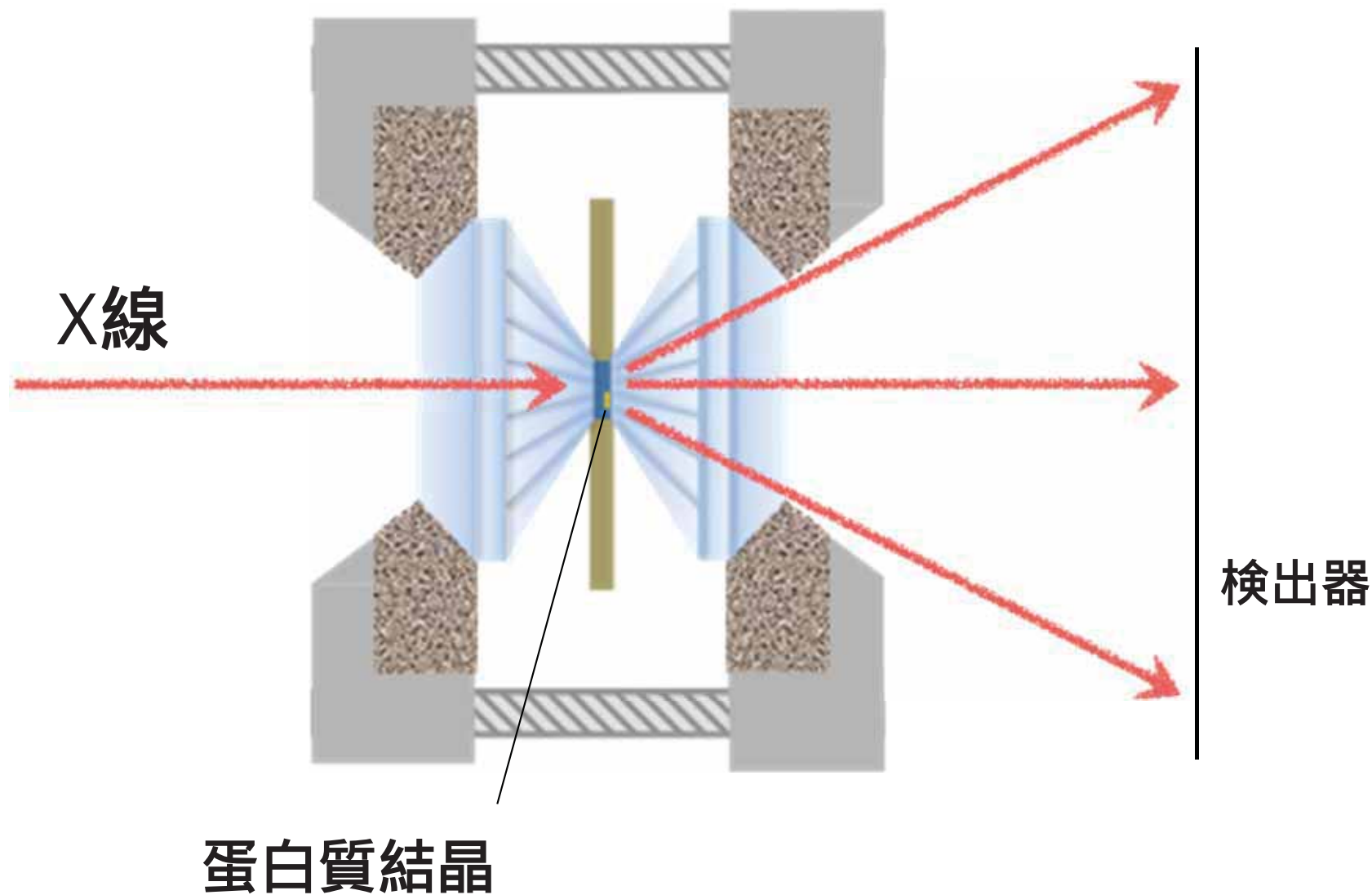
(DAC)

0.75 (16.5 keV)



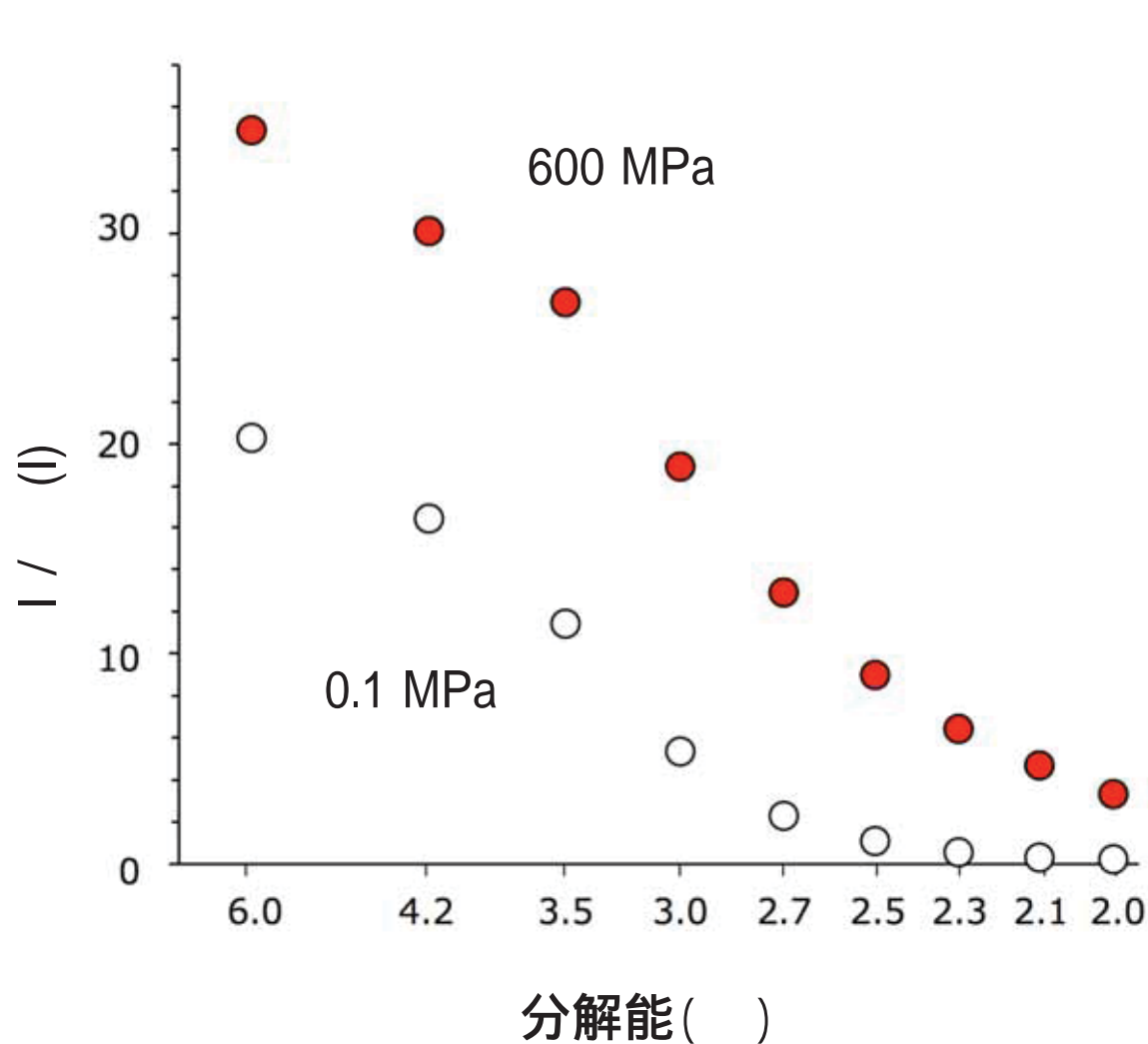
X線回折測定

@大気圧 ~ 1 GPa



BL2S1での測定例

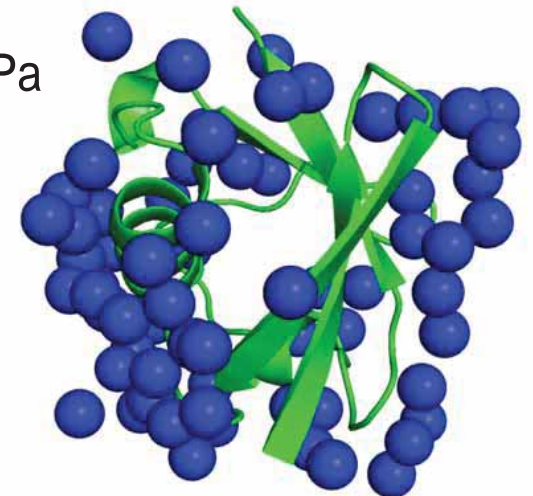
ヒト・ユビキチンの高圧構造解析



0.1 MPa



600 MPa



利用申込

BL2S1 は名古屋大学ビームラインですが
企業ユーザー等の利用相談窓口は
他のBLと共通です。

あいちSRビームライン課 産業利用コーディネータ

TEL: 0561-76-8330

E-Mail: aichisr@astf.or.jp