

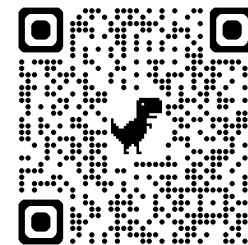


東北大学

東北大学 先端生体高分子構造研究センター 利用の手引き（簡易版）



お問い合わせ: arcbs-office@grp.tohoku.ac.jp



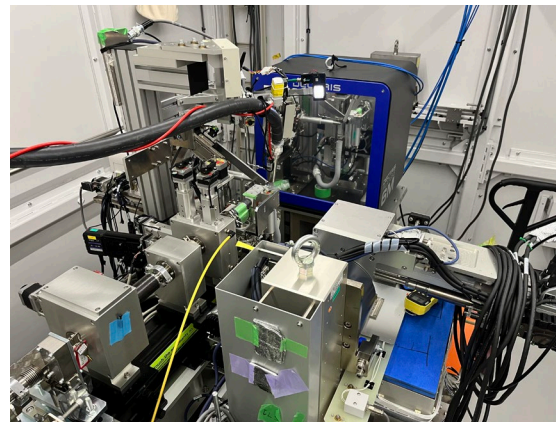
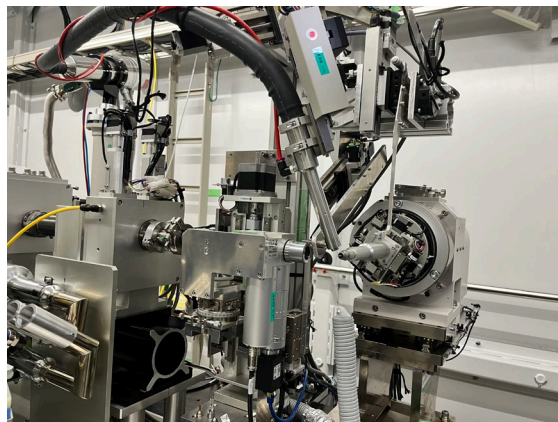
〒980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1
多元研物質科学研究所 量子ビーム構造生物化学 南後研究室

<https://arcbs.ddr.tohoku.ac.jp/>

先端生体高分子構造研究センター（ARCBS）概要

2025年、3GeV高輝度放射光施設NanoTerasuの優れた軟X線及び硬X線を生体高分子の構造解析にも活用すべく、生体高分子結晶構造解析実験ステーション（MX-ES）がコアリションビームラインBL09Uに建設されました。MX-ESは、高品質なX線ビームと高精度回折計、大面積且つ高速読み出し可能なX線検出器を備えた汎用性と先端性を兼ね揃えた実験ステーションです。さまざまな実験ニーズに応えることが可能なため、全自動データ収集はもとより多くの実験手法を提供いたします。また、東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータAOBAと連携した高度な解析環境と実験データ管理の構築を進めています。

先端生体高分子構造研究センターは、結晶構造解析の専門知識を有する皆様のMX-ESの利用支援を主な目的として、2025年3月東北大学創薬戦略推進機構の下に設立されました。MX-ESは2025年度下期の運用開始が予定されています。本センターは生命科学・創薬研究支援基盤事業（AMED-BINDS）をはじめとする国内構造解析ネットワークとの連携によりMX-ESを利用する全ての皆様に最適な利用環境を提供することで、企業並びに学术界の皆様のMX利用を促進し、タンパク質構造情報の利活用と応用研究を推進します。



MX-ES仕様

ビーム仕様

エネルギー(keV) (波長範囲, Å)	6.0 ~ 15 (0.83 ~ 2.0)	
集光源	仮想光源	光源
ビームサイズ (μm^2)	5 x 5 ~ 50 x 50	12 x 2
ビーム強度 (phs/s. 400mA)	4.0×10^{12} (50 x 50 μm^2) 4.0×10^{10} (5 x 5 μm^2)	7.2×10^{12}

測定装置構成

高精度回折計

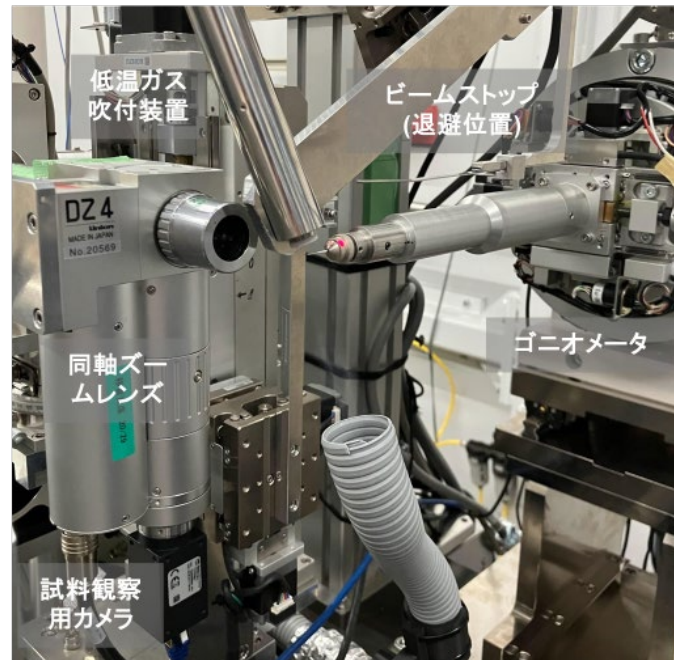
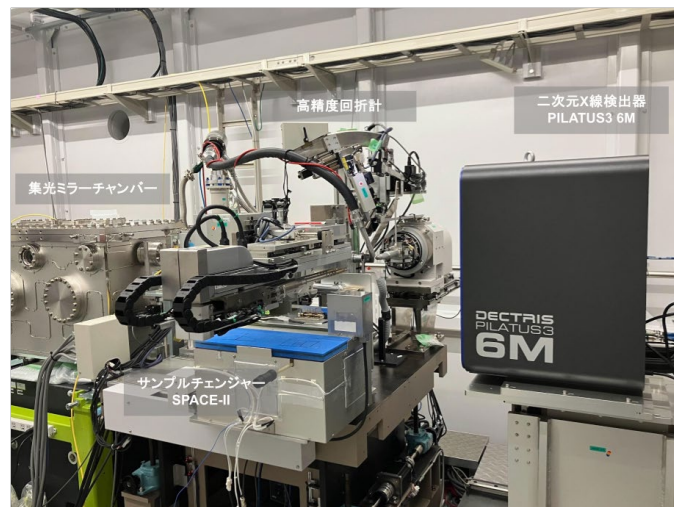
水平方向1軸ゴニオメータ
最大速度：180度/秒
芯ブレ精度：1 μm 以下
(試料位置)
窒素ガス吹付装置
温度：100 ~ 300 K
(手動にて変更可能)

サンプルチェンジャー

対応カセット：Unipuck
最大収容サンプル数：128 個
(8 Unipuck x 16 ピン)

二次元X線検出器

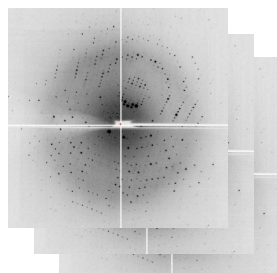
DECTRIS社製 PILATUS3 6M
ピクセル数：2463 x 2527
ピクセルサイズ：172 x 172 μm^2
受光面積：431 x 448 mm²
最大フレームレート：100 Hz
(ROI時) (500 Hz)
設定可能カメラ距離：120 ~ 650 mm



メールイン全自動測定

NanoTerasu

PILATUS3 X6M
最大100 Hz
6 MBのCBFファイル



BL09U
基幹スイッチ



自動測定



BL09U MX-ES

サンプル送付



サイバーサイエンスセンター



利用者

StarTAINS / SINET6

10G
10Gbps

自動処理

処理結果出力

回折データ出力

1G

講習会端末

大判プリンタ

サブシステム AOBA-S (SX-Aurora TSUBASA)
4,032VEs (504VHs), 21.05PFLOPS(DP), 504TB Memory, 9.97PB/s



ベクトルホスト (VH)+8VE
C401-8



ベクトルエンジン (VE)
AOBA (16コア, 96GBメモリ)

ストレージシステム (Lustre)
実効容量 4.5PB



サブシステム AOBA-A (SX-Aurora TSUBASA)
576VEs (72VHs), 1.48PFLOPS(DP), 45TB Memory, 895.68TB/s



ベクトルホスト (VH)+8VE
B401-8



ベクトルエンジン (VE)
Type 208 (8コア, 48GBメモリ)

ストレージシステム (ScaTeFS)
実効容量 2PB



サブシステム AOBA-B (LX 406Rz-2)
68nodes, 278.5TFLOPS(DP), 17TB Memory, 27.2TB/s

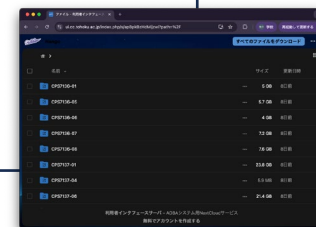


AMD EPYC 7002(64コア)×2
384GBメモリ



ダウンロード

- ・ 回折データ
- ・ 処理結果



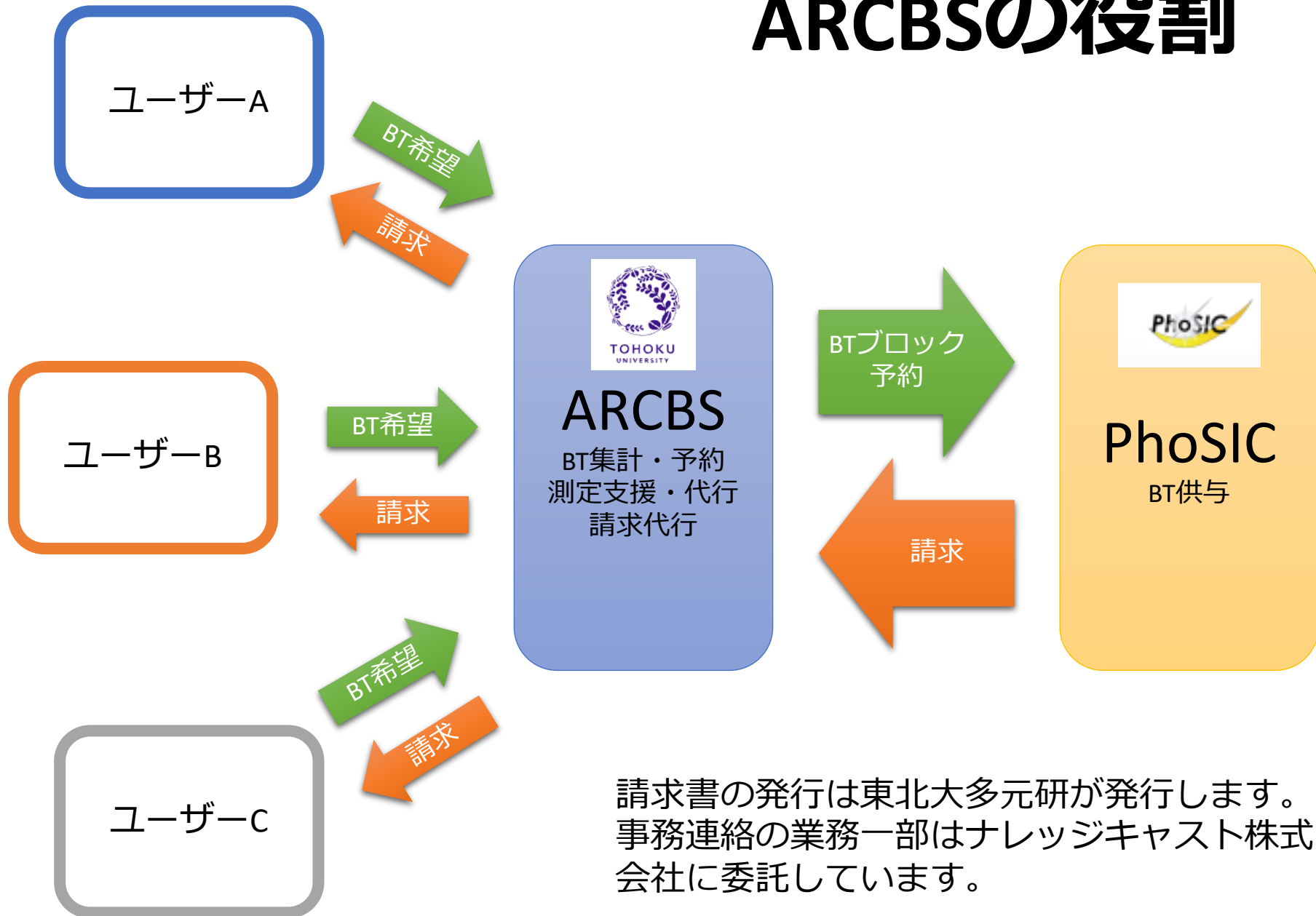
利用者

SPring-8との連携・比較

- SPring-8で開発された全自動測定システムZOOを使用します。
- SPring-8と同じ書式のサンプルシートを使用します。
- 測定データ、および処理結果はインターネットを介したダウンロードでのみ取得出来ます。
- HDDへのコピーサービスは行なっていません。



ARCBSの役割



年間利用登録までの流れ

電子メールをARCBSに送付

arcbs-office@grp.tohoku.ac.jp

利用料金内規・キャンセルポリシー

年間利用申込の記入・送付

ARCBSで受付・登録後

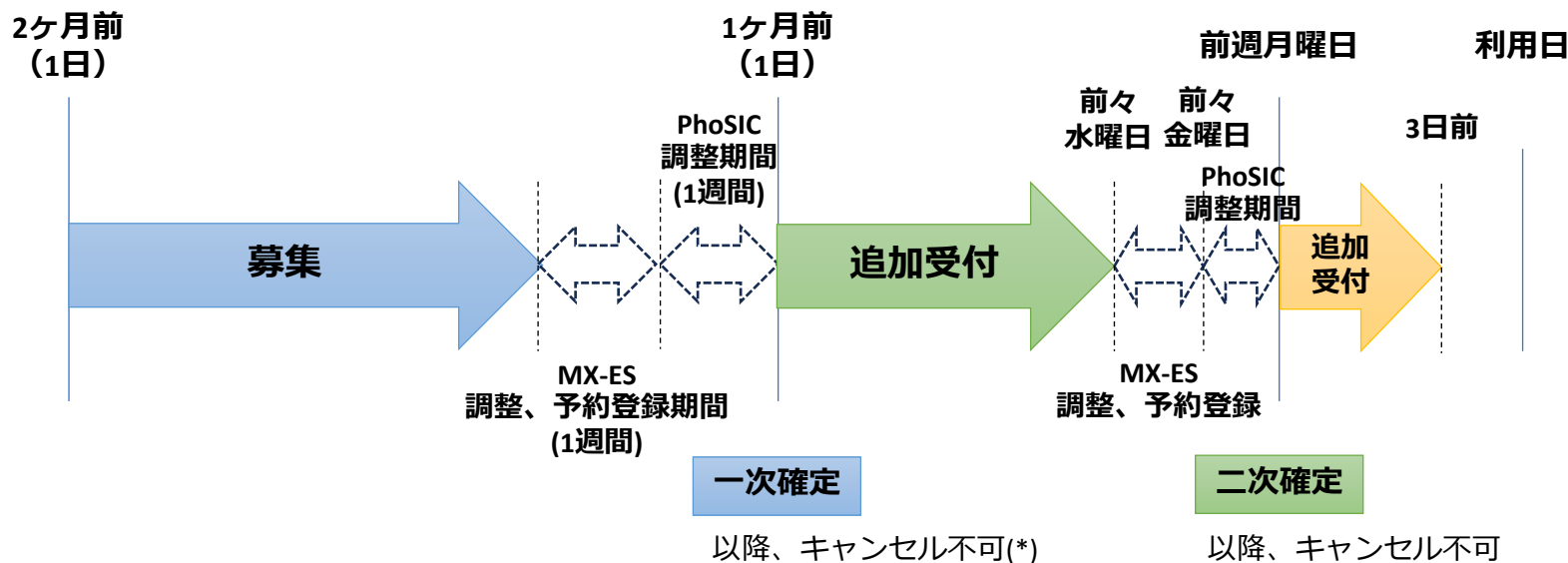
電子メールにて通知

MX-ESビームタイムの案内等の各種

お知らせやMX-ES利用開始の開始

ビームタイム募集・キャンセル

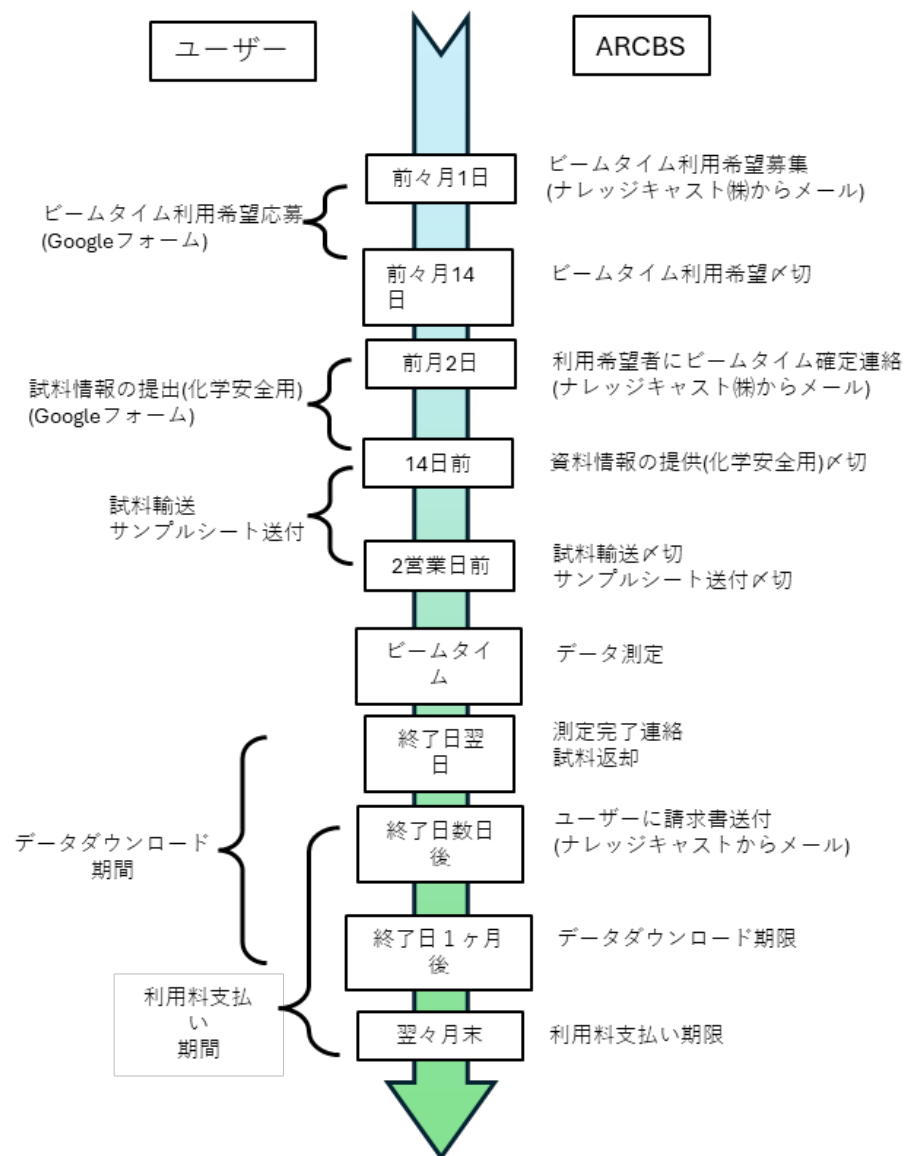
MX-ESビームタイム募集スケジュール



一次確定以降のキャンセルの場合はBL利用料金は徴収します。また保有するBTが予約時間分消滅します。

(*) 一次確定から二次確定の期間のキャンセルでは、BL利用料金が減額される可能性があります。

MX-ES 利用の流れ



ARCBSの行う標準測定支援

- メールイン全自動測定
 - 回折データ収集
 - 測定データの自動処理、
 - 利用方法に関する問い合わせ対応
- 来所測定での測定支援 (標準セットアップ)
 - 測定装置、測定ソフトウェアの使い方
- 測定結果への問い合わせ
 - データに関する質問への対応（但し高度な内容については共同研究契約などの可能性があります）

共同研究等で可能な支援内容

- 来所測定において特殊セットアップでの実験
- 手動測定での測定代行
- 遠隔操作
 - 原則対応していません。
- 手動での回折データ処理
- 構造解析 (位相決定、精密化、モデリング)

FAQ

(センター登録手続き・支払い関連)

- ・登録は団体が望ましいか、個人での登録が望ましいか？
→ コアリション会員（民間企業）の場合は団体で加入されていると
思われますので、コアリション同様団体としての登録をお願いします。
一方で学術のコアリション会員（大学）はBINDSの支援を申請する際には
PIで行うことになるため研究室名またはPI個人での登録の方がBT料金免除の
時間を確保できます。
- ・団体での登録ですが、試料の送付は登録者ではない別な者が担当します。
問題ありますか？
→ 登録の際の団体名を記載の上ご連絡頂ければ、問題ございません。
- ・秘密保持契約が必要ですか？
→ 利用料金内規の第13条に記載しております。センター登録は内規にご承諾の
上で行います。
- ・請求の発行はどうなりますか？
→ 一回の測定毎に発行されます。

FAQ

(ビームタイム予約)

- ・ビームタイムを予約する際、枠が足りなくて測定できないことはありますか？
→測定の二か月前までにお申し込み頂ければ、予約は可能です。

- ・測定したい日の一か月前に他の方がキャンセルした時など、ブロック予約に空が出た場合はセンターから再募集がありますか？

→こちらからはご案内しない予定です。しかし、必要時にはいつでもお問い合わせして頂ければ幸いです。

- ・4時間のBTを予約していましたが、2時間だけ使うことに変更（2時間キャンセル）するときの利用料金はいくらになりますか？

→BT利用料金は4時間分、MX-ES利用料金は2時間分のお支払いになります。

- ・送った試料が予約したBTにおさまらない場合はどうなりますか？

→基本的に予約したBTで測定を切り上げ、未測定の試料はそのまま返却します。予約した1時間6サンプル（6pin）で見込んでいます(2025年10月現在)。

- ・測定時間の追加は可能ですか？

→他の予約状況次第では可能です。ご連絡ください。

- ・ビームタイム予約の最小単位は何時間ですか？

→2時間となります。2時間単位での予約をお願いします。

FAQ

(試料準備)

- ・ 試料はいつ、どのように送れば良いでしょうか？
→ MX-ESのホームページからご確認をお願いします。
<https://sites.google.com/tohoku.ac.jp/nanoterasumx>

(測定)

- ・ 手動測定は可能ですか？
→ 可能です。ただしスケジュール調整が必要となりますので、出来るだけ早い段階でご相談ください。
- ・ 遠隔実験は可能ですか？
→ 不可です。
- ・ 遺伝子組み換え体の持ち込みは可能ですか？
→ 2025年10月時点では不可です。今後ナノテラスおよび東北大学内の手続きに従ってP1実験には対応予定です。

FAQ

(測定データ)

・測定データはどのように取得することができますか？

→ インターネットからのダウンロードのみが可能です。

・測定データはどれくらい保管されますか？

→ 生データは外付けHDD2本にバックアップをして、長期保管をします。AOBA上のデータ(生データ+処理結果)は6ヶ月は保管します。

・測定データを処理するためのソフトウェアライセンスはどのようなになっていますか？

→ XDSは商用ライセンス購入しており、ナノテラスでの処理結果は商用利用可能となっています。それ以外のソフトウェアについては各自でご準備をお願いします。

(その他)

・メールなどのやり取りで出てくるナレッジキャスト株式会社って何ですか？

→ ARCBSが事務作業の代行を委託している会社です。