

2011B 期 採択長期利用課題の中間評価について

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用業務部

第44回 SPring-8利用研究課題審査委員会長期利用分科会（平成25年3月）において、2011B 期に採択された3件の長期利用課題の中間評価が行われました。

長期利用課題の中間評価は、実験開始から1年半が経過した課題の実験責任者が成果報告を行い、長期利用分科会が、対象課題の3年目の実験を実施するかどうかの判断を行うものです。以下に対象課題の評価結果および評価コメントを示します。

- 課題1 -

課題名	超伝導元素の極限環境における構造物性
実験責任者(所属)	清水 克哉 (大阪大学)
採択時の課題番号	2011B0038
利用ビームライン	BL10XU
評価結果	3年目を実施する

[評価コメント]

本研究は超伝導を示す元素の超高压力・超低温の極限条件下における構造を明らかにすることを目的としている。特に、SPring-8のビームラインで複合極限環境下での物性測定と構造決定を同時に行って、測定が困難な「一回きり」の実験でも十分な情報を得ようとしている。申請者らはリチウム、カリウム、鉄、ベリリウムに対して物性と構造の同時測定を低温下の極めて高い圧力まで成功させており、当初計画どおりの大きな成果をあげている。特に、極めて高い圧力下での測定では、測定試料中での圧力分布が避けられず、結果を正しく解析するためには、同時測定が不可欠であることを示している。これらの成果は世界最先端のものであり、高く評価できる。

最終年度においても、引き続き研究を続けて、水素や上記物質などに対して、より多くの成果を得て、世界をリードする研究を一層発展させることを期待

する。

[成果リスト] (査読付)

- [1] SPring-8 publication ID = 24394
T. Ishikawa, H. Nagara, N. Suzuki and K. Shimizu: “First-principles molecular dynamics study on simple cubic calcium: comparison with simple cubic phosphorus” *High Pressure Research* **32** (2012) 11-17.
- [2] SPring-8 publication ID = 24395
T. Ishikawa, K. Mukai and K. Shimizu: “First-principles Study on Superconductivity of Solid Oxygen” *High Pressure Research* **32** (2012) 457-463.
- [3] SPring-8 publication ID = 24385
T. Ishikawa, H. Nagara, N. Suzuki and K. Shimizu: “First-principles Molecular Dynamics Simulation for Calcium under High-pressure: Thermodynamic Effect on Simple Cubic Structure” *Journal of the Physical Society of Japan* **81** (2012) 124601.

- 課題2 -

課題名	放射光 X 線を用いた多成分からなる自己集合性錯体の単結晶構造解析
実験責任者(所属)	藤田 誠 (東京大学)
採択時の課題番号	2011B0039 (BL38B1)、 2011B0042 (BL41XU)
利用ビームライン	BL38B1、BL41XU (併用)
評価結果	3年目を実施する

[評価コメント]

本研究課題の申請時に提案されたテーマのうち、特に蛋白質を内包した錯体の構造解析について、当初計画を上回るすぐれた成果を挙げたと認められる。

特に、施設側研究者との共同研究により、データ

収集法、データ処理法、MEM法を利用した新しい構造解析法が開発されたことは特筆すべきであり、その応用範囲の広さも考えると、今後の更なる展開が期待される。

残り1年間に、さらなる構造解析法の高度化が進められることを期待するとともに、さらに多くの構造解析の成果と新しい錯体の作製に向けた研究が展開されることを期待する。

〔成果リスト〕

(査読付)

- [1] SPring-8 publication ID = 22218
D. Fujita, K. Suzuki, S. Sato, M. Yagi-Utsumi, Y. Yamaguchi, N. Mizuno, T. Kumasaka, M. Takata, M. Noda, S. Uchiyama, K. Kato and M. Fujita: “Protein encapsulation within synthetic molecular hosts” *Nature Communications* **3** (2012) 1093.
- [2] SPring-8 publication ID = 22819
Y. Fang, T. Murase, S. Sato and M. Fujita: “Noncovalent Tailoring of the Binding Pocket of Self-Assembled Cages by Remote Bulky Ancillary Groups” *Journal of the American Chemical Society* **135** (2013) 613-615.
- [3] SPring-8 publication ID = 21457
D. Fujita: “Protein Encapsulation within Synthetic Molecular Hosts” Doctor Thesis (The University of Tokyo) (2012)
- [4] SPring-8 publication ID = 21458
J. Iwasa: “Synthesis and Functionalization of M24L48 Spherical Complexes” Doctor Thesis (The University of Tokyo) (2012)

- 課題3 -

課題名	Structural and functional understanding of secondary active transporters
実験責任者(所属)	Nieng Yan (Tsinghua University)
採択時の課題番号	2011B0040
利用ビームライン	BL41XU
評価結果	3年目を実施する

〔評価コメント〕

This proposal concerns crystallographic studies on secondary active transporters, AdiC, FucP, and UraA, to elucidate their transport and energy coupling mechanism. Eukaryotic transporters are also considered

as research targets. The committee acknowledges that interesting results have been obtained in this long-term project. In particular, the crystal structure of bacterial Xyle has been reported in *Nature*. However, there has not been a significant progress in the studies on the transporters described in the original proposal. Although a spectroscopic study has been published on FucP, no intermediate structure has been reported. The proposer should be aware that, since the proposal was selected as studies on AdiC, FucP, UraA and eukaryotic transporters, it is expected that research efforts will be made on these proteins to clarify the dynamic process of their working cycles. It is also requested that a paper published on data obtained in the beamtime of this long-term project must include at least one member of the proposer’s group. Name of the SPring-8 beamline and the proposal number must be always cited in the acknowledgement or other section of the paper. The committee strongly hopes for outstanding progress in line with the original proposal.

〔成果リスト〕

(査読付)

- [1] SPring-8 publication ID = 23896
D. Deng, C. Yan, X. Pan, M. Mahfouz, J. Wang, J. Zhu, Y. Shi and N. Yan: “Structural Basis for Sequence-Specific Recognition of DNA by TAL Effectors” *Sciences* **335** (2012) 720-723.
- [2] SPring-8 publication ID = 23895
L. Sun, X. Zeng, C. Yan, X. Sun, X. Gong, Y. Rao and N. Yan: “Crystal structure of a bacterial homologue of glucose transporters GLUT1-4” *Nature* **490** (2012) 361-366.