

The 19th Conference of Asian Crystallographic Association 2025 (AsCA2025) 報告

公益財団法人高輝度光科学研究センター
回折・散乱推進室

佐々木 俊之

1. はじめに

※生物科学分野の報告は、後半（水野氏）の記事に記載しています。

2025年12月1日～6日にかけて、台湾の台北にてThe 19th Conference of the Asian Crystallographic Association (AsCA 2025) が開催された。AsCAはアジア・オセアニア地域における結晶学および構造科学の研究者が集う主要な国際会議であり、今回は「Jointly hosted by Taiwan and Japan」と銘打たれ、台湾と日本の強力なパートナーシップのもとで開催された点が大きな特徴である。組織委員長は、National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC) のChun-Jung Chen教授と、Japan Synchrotron Radiation Research Institute (JASRI) / 大阪大学の中川敦史教授が共同で務め、両国の結晶学コミュニティが密接に連携した運営が行われた。主催団体には、International Union of Crystallography Committee of R.O.C.、Taiwan Crystallographic Group、NSRRC、Taiwan Convention & Exhibition Associationに加え、日本結晶学会が名を連ねた。また、共催として台湾の最高学術研究機関であるAcademia SinicaのInstitute of ChemistryおよびInstitute of Molecular Biology、The NCKU Center of Crystal Research、National Science and Technology Councilなどが名を連ね、現地の主要な研究機関・行政機関が全面的にバックアップを行う体制で開催された。開催地となった台北市は、12月でも温暖で過ごしやすく、会場となったTaipei International Convention Center (TICC) は、台北のランドマークである台北101のすぐそばに位置している（図1）。周辺は近代的な商業施設が立ち並び一方で、少し足を伸ばせば夜市などの台湾らしい活気ある風景も楽しめるロケーションであった。日本

からのアクセスも非常に良く、時差もわずか1時間であるため、多くの日本人研究者が参加していたのが印象的である。



図1 台北101、TICC、およびTICCの入口前に設置されたAsCA 2025の看板

2. 学会の内容

AsCA 2025の参加者は世界28カ国・地域から700名を超える規模となった。国別の内訳としては、日本からの参加者が最も多く約250名、次いで開催地の台湾が約200名、韓国が約130名と続き、これら3カ国で全体の大部分を占めた。日本から多くの研究者が渡航したことは、日台共同開催という本会議

の性質を如実に反映しており、国際会議でありながらも日本と台湾のコミュニティが密接に融合した活気ある大会となった。

日程構成としては、12月1日にRigaku、Bruker、Dectrisといった主要ハードウェアメーカーによるPre-conference workshopが行われ、翌2日から5日にかけてメインの学術セッションおよび各種イベントが実施された。また、会期後の12月6日には台北会場にてPhenix主催のCryo-EMによる構造解析に関するworkshopが開催されたほか、沖縄にてPost-conference workshop「Exploring new frontiers in electron microscopy-driven structural studies」もサテライト開催された。

12月2日のOpening Ceremonyでは、まず組織委員長を務めるChun-Jung Chen教授（NSRRC）と中川敦史教授（JASRI／大阪大学蛋白質研究所）が登壇し、開催地である台湾と共同ホストである日本を代表して歓迎の辞を述べた。続いて、National Science and Technology Council（NSTC）のCheng-Wen Wu大臣、IUCr（国際結晶学連合）会長のSantiago Garcia-Granda教授（Oviedo University-CINN）、そしてAsCA会長である栗栖源嗣教授（大阪大学蛋白質研究所）による挨拶が順に行われた。式の最後には、国立台湾大学のDistinguished Research Chair Professor（Emeritus）であるYu Wang氏による「Tracing the journey of AsCA」と題した講演が行われた。講演ではAsCAの創設から現在に至るまでの歴史と発展の軌跡について紹介され、アジアにおける結晶学コミュニティの深化を共有する貴重な機会となった。

学術講演と並行して行われたSocial programも非常に充実していた。2日のOpening CeremonyとWelcome Receptionに続き、3日には若手研究者の交流を促すYoung Scientist Mixerが開催された。4日には、バンケット会場であるThe Grand Hotel Taipeiの名所「East Secret Passage」を見学するツアーが組まれた。その後のConference Dinnerとともに、参加者は台湾の歴史と文化を堪能しつつ交流を深めた。最終日の5日にはClosing Ceremonyに加え、新竹市のTPS（Taiwan Photon Source）への施設見学ツアーも実施された。

3. 主な講演内容

本会議では、基礎から応用まで多岐にわたるセッションが設けられた。以下に、特に印象に残った講演について報告する。

3.1 基調講演：数理による対称性の記述

M. L. A. N. De Las Peñas教授（フィリピン・Ateneo de Manila Univ.）によるPlenary Lecture「Mathematical approaches to symmetry in crystallography」は、結晶学の根幹である「対称性」を群論と離散幾何学の視点から再考するものであった。教授は、ナノチューブなどの材料設計における対称性の重要性を説くとともに、フィリピンの伝統的なバスケットの編み目模様を結晶学的対称群で記述するユニークな例を紹介した。数理科学が先端材料のみならず文化遺産の解析にも応用できることを示し、その美しい模様で聴衆の目を引いた。

3.2 マテリアルサイエンスセッション

セッション「Structural-properties relationship in materials (MS4-6)」や「Materials for the future (MS4-3)」では、新たな解析手法や材料設計に関する興味深い報告が相次いだ。

K. D. M. Harris教授（英国・Cardiff Univ.）は、有機材料における「ディスオーダー」の解明に焦点を当てた。X線回折などの回折法では空間・時間平均構造しか得られないため、その乱れが静的なものなのか動的なものなのかを区別することは困難である。Harris教授は、固体NMRなどの分光学的手法や計算科学を相補的に組み合わせることでこれらを明確に判別し、分子の動的挙動や局所構造を正しく理解するアプローチの重要性を説いた。

また、河野正規教授（東京科学大学）は、天然物の構造決定に向けた新たなMetal-Organic Frameworks（MOF）の開発について報告した。従来の結晶スポンジ法で課題であった分子サイズや安定性の制限を克服するため、柔軟かつ相互作用部位を持つMOFを設計し、天然物の構造可視化を実現した成果は、構造解析の適用範囲を大きく広げるものであると感じた。

星野学教授（帝京大学）らは、トリボルミネッ

センス（機械的刺激による発光）の機構について、Energy framework解析を用いた構造化学的アプローチから解明した事例を発表した。結晶の破壊面における電荷分布に着目し、分子設計によって発光を制御・再活性化できることを実証した点は非常に鮮やかであった。

ポスター発表においても興味深い報告があった。D. V. Z. Manansala氏（フィリピン大）らは、アセトアミノフェンと亜鉛の共結晶化において、互いの貧溶媒・良溶媒を組み合わせる「Modified antisolvent」法を用いた結晶化制御について報告しており、難溶性薬物の物性改善に向けた実践的な知見が得られた。

また、若手研究者を対象としたRising Star Award (Non-biology 部門) では、高原一真助教（兵庫県立大学）と若狭優惟氏（立教大学）が受賞し、日本勢の活躍が目立った。高原助教は、単分子磁石の合成に有用な三脚型配位子の簡便な合成法、およびそれを用いたランタノイドを含む多核錯体の合成と磁気特性評価について報告した。結晶構造解析の結果では、三脚型配位子の1つの脚が配位には関与していないという予想外かつ興味深い知見が得られていた。若狭氏は、高反応性分子への保護基「嵩高いトリプチル基 (Trp*)」の導入による速度論的安定化と、クリスタルエンジニアリング的アプローチによる分子の結晶性向上戦略を示した。Trp*は分子の速度論的安定性を向上させるものの、溶解度および結晶性の低さが課題となり、構造解析が困難であった。この問題を解決するため、各種長さのアルキル鎖をもつ新しい保護基「RTrp*」を導入し、分子の溶解度と結晶性を劇的に向上させることに成功していた。その他のRising Star Sessionの発表では、Kshitij Gurung氏（Czech Academy of Sciences）による、電子線回折（3D ED/MicroED）を用いた複数の結晶多形の発見に関する研究が目をつけた。有機半導体C6-BTBTにおいて、試料の構造・相が粉碎などの機械的刺激によって変化してしまうため、透過型電子顕微鏡のグリッド上で直接結晶化させるというアプローチを行っていた。これは報告者がごく最近報告した研究とも類似しており、微細な結晶多形研究において非常に有力な手法であるといえる。

3.3 キラリティと物理特性

「Chirality: meeting point of crystallography, chemistry and topology (MS3-1)」のセッションでは、桶谷龍成助教（大阪大学）らが、アキラル結晶へのレーザー照射によるキラル結晶への転移（Chiral symmetry breaking）について報告した。光熱効果により局所的な相転移を誘起し、照射位置を起点としてキラリティを制御できるという現象は、結晶成長プロセス制御やキラル材料開発における新たな可能性を示すものであった。また、3D EDの結果を用いたキラリティの判別に関する報告もあった。Tianyu Liu氏（東北大学）らは、Dynamical refinement（動力学的回折理論に基づく精密化）において、計算コストの高いフルパラメーターの最適化を行わずとも、結晶の厚みの最適化のみでキラリティの判別が可能であることを示した。標準試料を用いた検証により、R-factorおよびz-scoreの比較から正しい絶対構造を低コストで決定できることを実証しており、3D EDによる絶対構造決定のハイスループット化に資する成果であった。

4. 報告者の発表

報告者は、「Synchrotron X-ray Diffraction for Micro-Crystals using a Software-Controlled Pick-up System at SPring-8 BL40XU」というタイトルで、粉末中の1粒の微小結晶からの高精度データ収集に関するポスター発表を行った。具体的には、手では取り扱いが困難な10 μm以下の極微小結晶のための、顕微鏡と電動マニピュレータを組合わせたハンドリングシステムの導入、およびこれを用いた結晶ピックアップとSPring-8のBL40XU（測定当時は高フラックスビームライン、現：SAXS ID）での単結晶X線構造解析の成果について報告した。質疑応答では、実践的な質問が寄せられた。例えば、「結晶ハンドリングの際には上方からのカメラだけでなく、横方向からの視点（Side view）もあった方が操作しやすいのではないか」という指摘や、「わざわざ結晶1粒を拾わずに、Small-wedge synchrotron crystallography（多数の結晶から部分データを収集し統合する手法）のように多数の結晶をマージする手法を用いればよいのではないのか」といった本質

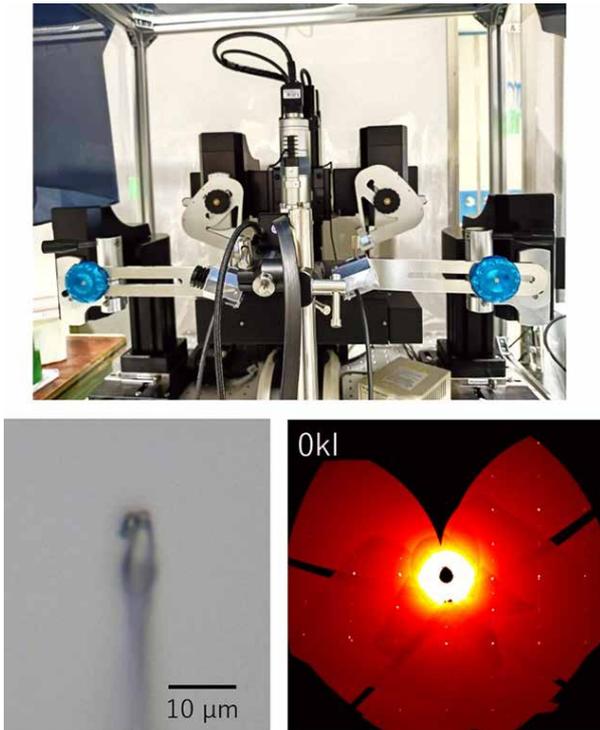


図2 微小結晶ハンドリングシステムの外観(上)、ピックアップした結晶の写真(左)、および擬プリセクションイメージ(右)

的な議論が交わされた。

5. おわりに

本稿では、AsCA 2025の概要と主な講演内容について報告した。今回の学会を通じて、アジア地域の結晶学コミュニティが着実に拡大し、基礎理論から最先端の応用、そして装置開発、X線だけでなく電子線を用いた結晶構造解析、さらにはAIの活用に至るまで多岐にわたる研究が精力的に進められていることを実感した。特に、日本と台湾の共同開催という枠組みの中で、両国の研究者が親密に交流し、次世代の研究・開発へ向けた議論を交わす姿は非常に頼もしく感じられた。今後のAsCAも非常に楽しみである。

佐々木 俊之 SASAKI Toshiyuki

(公財) 高輝度光科学研究センター

回折・散乱推進室

〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1

TEL : 050-3502-3649

e-mail : toshiyuki.sasaki@spring8.or.jp

The 19th Conference of Asian Crystallographic Association 2025 (AsCA2025) 報告 (生物科学分野)

公益財団法人高輝度光科学研究センター

回折・散乱推進室 相関構造生物チーム 水野伸宏

1. はじめに

2025年12月1日から6日にかけて、台湾・台北にて第19回アジア結晶学連合会議 (AsCA2025) が開催された。本会議は台湾結晶学会および日本結晶学会の合同開催であり、共同議長としてChun-Jung Chen氏 (NSRRC: 台湾国家放射光研究センター) と中川敦史氏 (JASRI/大阪大学) の2氏が務めた。会場となったTaipei International Convention Center (TICC)は、ランドマークである台北101にほど近く、交通アクセスの良い立地であった。今回は日本結晶学会年会としても開催されたことから、参加者は日本からの約250名を筆頭に、開催地の台湾から約200名、全体では約700名が参加した。ポスター発表も約300演題を数え、非常に活気ある会議となった。



図 台北101の101階展望エリアより望む会場全景

2. 講演内容

今回の会議では、物質科学分野と生物科学分野などある程度テーマ毎に発表の部屋が分かれており、目的となる発表を聞きにいきやすい会場構成であっ

た。本稿では主に生物科学分野において興味深かった発表やトピックについて報告する。

MS1-2 Membrane protein structure :

膜タンパク質の構造解析に関する本セッションでは、その成果のほとんどがクライオ電子顕微鏡 (Cryo-EM) を用いたものであった。膜タンパク質のような巨大な複合体分子は結晶化が困難であるため、今後はCryo-EMを中心とした構造解析が主流になると考えられる。SPRING-8においてもすでにCryo-EMの拠点が整備されており、今後のさらなる発展が期待される。

MS1-3 Nucleic acid-protein assemblies :

Haerang Hwang氏 (KAIST) からは、Cryo-EMによる時分割測定の実績が発表された。従来の試料作製法では凍結に数十秒を要するため、短い時間スケールの構造変化を捉えることが困難であった。そこでHwang氏は、噴射ノズルを用いた高速混合デバイスを新たに開発し、反応時間をミリ秒未満に短縮することで、より短い時間スケールでの構造可視化を実現した。これはCryo-EMの適用範囲を大きく広げる成果となることが期待される。

MS1-5 Integrative structural biology :

複数の分析技術を組み合わせ、機能を多角的に解明する「統合構造生物学」のセッションである。古川亜矢子氏 (京都大学) は、核磁気共鳴 (NMR) 法、X線小角散乱 (SAXS) 法、サイズ排除クロマトグラフィー多角度光散乱 (SEC-MALS) 法、粗視化分子動力学シミュレーション (CGMD-SAXS) 法など多彩な手法を用いた解析事例を紹介しており、非常に興味深い内容であった。また、山本雅貴氏

(理化学研究所)からは、こうした異分野の手法を有する拠点が連携し、解析支援を提供する「創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム (BINDS)」の現状と成果について報告があった。研究者個人が単独で扱える手法には限界があるため、本プロジェクトを通じて多角的な視点から分子を解析できることは、非常に有用な研究基盤である。私自身も本プロジェクトの支援の一端を担っており、今後も創薬研究を支えるべく注力したいと考えている。

MS1-6 AI-driven protein science :

近年急速に発展するAI分野については、生物領域でも5題の発表が行われた。特にYong Ho Kim氏 (Sungkyunkwan University) は、蓄積された膨大なタンパク質の配列・構造データベースを学習したAIモデルを用い、特定の標的受容体に最適化したタンパク質設計が可能になりつつあることを報告した。タンパク質デザインは創薬や化合物の大量生成における大きな目標の一つであり、AI活用による可能性の拡大を予感させるものであった。

MS1-8 Time-resolved structural analysis of biomacromolecules :

X線自由電子レーザー (XFEL)、放射光、Cryo-EMなど様々な手法を用いた時分割構造解析に関するセッションである。Manuel Maestre-Reynal氏 (National Taiwan University) は、フェムト秒からミリ秒に至る幅広い時間スケールでの構造変化を追跡する手法を紹介した。XFELと放射光を融合し、それぞれの時間分解能に適した現象を観察することで構造変化の過程を追う試みは、タンパク質動態研究の大きな進展に寄与すると思われる。また、時分割測定においては目的とする活性状態の構造を捉えることが重要課題となるが、熊坂崇氏 (JASRI)からは、湿度制御により結晶内の構造状態を固定する「Humid-Air and Glue-coating Method (HAG法)」が紹介された他、海野昌喜氏 (茨城大学) は、結晶試料を異なるpH溶液に浸透させ、異なる時間で急速凍結することで、構造変化を追跡するなど、様々な工夫が見られる興味深い発表であった。

Rising Star Session1 – Biology :

アジア地域の若手研究者を対象としたセッションで、5題の発表が行われた。その中から、Rising Star Awardとして、Tsan-Jan Chen氏 (National Tsing Hua University) と石本直偉士氏の2氏が受賞した。Chen氏は、多くの種類の癌において発現が亢進する酵素であるPyruvate kinase M2 (PKM2) について治療標的となりうる重要な分子であることを化合物複合体との結晶構造解析などから示唆できることを報告した。また、石本氏は、Cryo-EMを用いた細菌の接合を仲介する繊毛の高分解能構造解析を行い、従来の接合機構モデルと異なる新たな構造的知見を与えるという非常に重要な研究成果を報告した。

Flash Talk /ポスターセッション :

今回はポスターセッション直前に、発表者が3分間で内容を説明する「Flash Talk」が設けられた。要点を絞ってアピールすることで、その後のポスター会場での議論が円滑に進む仕組みとなっており、非常に有意義な試みであった。

報告者の発表 :

報告者は「Development of a fully automated in-situ diffraction measurement system at SPring-8」と題し、口頭発表を行った。SPring-8の構造生物ビームラインでは、凍結結晶の測定自動化はすでに確立されているが、さらなる高速化とビームタイムの有効活用を目指し、結晶化プレートのまま行う「in-situ測定」の自動化システムを開発した。本システムでは、事前に記録したプレート内の結晶位置情報をもとにビームラインでの全自動測定を行う。その結果、これまで20時間程度は必要だった200結晶の測定を約4時間で完了するという大幅な高速化を実現した。また、基質を含むトリプシン結晶約20個のデータから、基質の電子密度取得に成功した事例についても報告を行った。

3. おわりに

本会議は、アジア各国の研究者と対面で議論を交わし、最新の技術動向を網羅的に把握する非常に貴重な機会となった。特にCryo-EMによる構造解析

が身近なものになり、AI技術が浸透してくるなど、構造解析の手法が多様化する中で、異なる手法を組み合わせる統合的なアプローチがより重要なものとなって来ており、構造解析分野の大きな変革期であることを強く実感した。最後に、本会議に参加する機会を頂いた関係者の皆様に感謝の意を表する。

水野 伸宏 MIZUNO Nobuhiro

(公財) 高輝度光科学研究センター
回折・散乱推進室 相関構造生物チーム
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 050-3496-9082
e-mail : nmizuno@spring8.or.jp