

課題名 (タイトル) :

イオン散乱因子の計算
calculation of ion scattering factors

利用者氏名 :

○米倉功治

松岡礼

理研での所属研究室名 :

放射光科学総合研究センター 米倉生体機構研究室

1.

本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

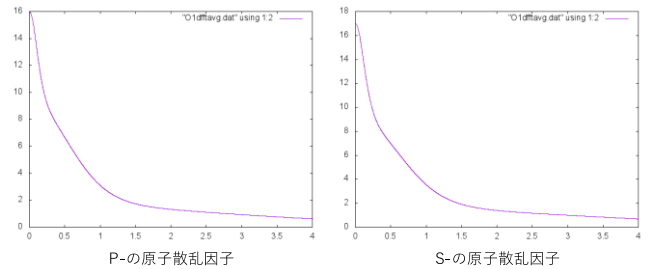
電子線によるタンパク質の構造解析を行う上では、正確な電子散乱因子を使うことが重要である。電子散乱因子は International tables に抄録されているものを使用しているが、イオンによっては、その電子散乱因子が記載されていないものが存在する。そこで、本研究では、それらの電子散乱因子を量子化学計算によって求め、International tables を補完することを目指す。現在、クライオ電子顕微鏡を用いることで、近原子分解能での構造解析が可能になっているが、タンパク質の荷電状態までは直接観測することができない。本研究で得られた電子散乱因子を使うことで、タンパク質の荷電状態の構造解析という新しい可能性を開拓する。

2. 具体的な利用内容、計算方法

量子化学計算を行うにあたり、Hokusai に実装されている Gaussian を使用した。Gaussian の計算では、基底関数を 6-31G, ccpVTZ, ccp5z などいろいろな種類での組み合わせで計算を行った。電子相関を考慮し、正確な計算結果を得ることに注視した。得られた計算結果を cubegen によって、電子密度に変化し、その電子密度をフーリエ変換し、式変換することで電子散乱因子を求めた。

3. 結果

必要なイオンで電子散乱因子を求めることができた。Figure 参照。



4. まとめ

既に登録されている原子の電子散乱因子と今回得られた電子散乱因子がよく一致しており、コントロール実験は上手くいっている。そのため、得られた電子散乱は正しいと解釈している。

5. 今後の計画・展望

実際の構造解析で今回得られた電子散乱因子が応用できるか実証していく。