

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

理研における所属研究室名: 放射光科学研究センター 生体機構研究グループ

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

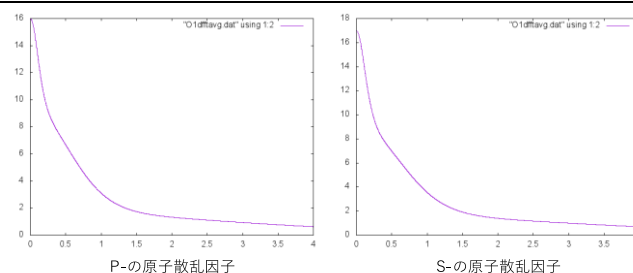
電子線によるタンパク質の構造解析を行う上では、正確な電子散乱因子を使うことが重要である。電子散乱因子は International tables に抄録されているものを使用しているが、イオンによっては、その電子散乱因子が記載されていないものが存在する。そこで、本研究では、それらの電子散乱因子を量子化学計算によって求め、International tables を補完することを目指す。現在、クライオ電子顕微鏡を用いることで、近原子分解能での構造解析が可能になっているが、タンパク質の荷電状態までは直接観測することができない。本研究で得られた電子散乱因子を使うことで、タンパク質の荷電状態の構造解析という新しい可能性を開拓することを目的とするが、2018 年度は前年の計算の検証作業を進めた。

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、電子密度に変換し、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。本年度は、さらに CCSD(T) を用いて電子相関を考慮した計算を行った。

3. 結果

計算したイオンで Figure のような電子散乱因子を計算した。



この結果は、GRASP での計算結果と詳細で異なることが確認できた。

4. まとめ

昨年の利用の成果を IUCrJ

(<https://doi.org/10.1107/S2052252518005237>)

に発表した。本課題では計算の検証作業を進め、昨年の計算と矛盾しないことを確認した。

5. 今後の計画・展望

実際の構造解析で、新規に得られた電子散乱因子が応用できるか実証していく。

平成 30 年度 利用研究成果リスト

**【雑誌に受理された論文】**

Yonekura K., Matsuoka R., Yamashita Y., Yamane T., Ikeguchi M., Kidera A. and Maki-Yonekura S.

Ionic scattering factors of atoms that compose biological molecules. IUCrJ (2018) 5: 348 - 353. doi: 10.1107/S2052252518005237

**【その他(著書、プレスリリースなど)】**

2018 年 4 月 27 日

理化学研究所

生体分子を構成する原子のイオンの散乱因子の決定

—クライオ電子顕微鏡、放射光での生体分子の構造、電荷の精密解析へ—