

## 放射光ビームラインにおける低エネルギーSAD法 山田悠介（高エネ研 PF）

タンパク質の X 線結晶構造解析において回折強度データから構造因子の位相を決定する作業は、電子密度図を得て原子モデルを構築する上で最も重要な過程の 1 つである。近年、SeMet を用いた重原子誘導体の作成技術や放射光ビームラインでの測定技術、高度に自動化されたソフトウェアによる解析技術の発達により、比較的容易に位相決定を行うことが可能となってきている。しかしながら、膜タンパク質や複雑なタンパク質—タンパク質複合体など解析の高難度なタンパク質では、SeMet 置換体のような重原子誘導体の作成が困難であり、位相決定は依然タンパク質 X 線結晶構造解析におけるボトルネックの 1 つである。低エネルギーSAD法は、硫黄原子等の軽い原子からの微弱な異常散乱シグナルを利用して位相を決定する手法であり、天然のタンパク質結晶から位相を決定することが可能な手法である。この低エネルギーX線と高輝度な放射光 X 線ビームとを組み合わせることで、微小な結晶しか作成することの出来ない解析高難度な試料でも迅速に構造決定を行うことが可能となることが期待される。このためには軽原子からの微弱な異常散乱シグナルを少しでも高める必要があり、結晶へと照射する X 線のエネルギーを出来るだけ低く（波長を長く）し、それと同時に低いエネルギーで顕著となる X 線の吸収効果を出来るだけ低減する必要がある。

PF 構造生物学研究センターでは、現在このような放射光を用いた低エネルギーSAD法の開発に力を注いでいる。ビームラインとしては、短周期アンジュレータからの 3 次光で 6keV 近傍のエネルギーが利用可能な BL17A, さらに 1 次光で 4keV 近傍のエネルギーが利用可能な BL1A の建設を行ってきた。また、これらのビームラインにおいて低エネルギーX線からの高精度なデータ収集を可能とするような、ヘリウムチャンバーに代表される実験機器の開発も同時に進めている。さらに、放射線損傷により単一結晶から完全な回折データセット収集が不可能であるであることが、複数の結晶からの部分データセットを足し合わせることで位相決定に耐えうる回折データセットを得る。本発表ではこれらの開発項目についての現状を紹介し、今後進めるべき開発について議論を行って生きたい。