

## 放射光回折データからいかに最大の構造情報を引き出すか

### － 超高分解能および中・低分解能での結晶構造解析 －

三木邦夫（京都大学大学院理学研究科）

放射光の利用によって、回折データを測定できるタンパク質結晶の対象は大きく広がられた。また、近年の放射光X線の高度化の結果、得られる回折データの精度は格段に向上した。それに伴って、近年、極めて高分解能（0.8 Å 分解能以上）での回折データに基づく解析ならびに、中・低分解能における解析（3.5 Å 分解能以下）という、結晶分解能の対極的な回折データでの構造解析例が増加の傾向にある。前者は超高分解能の回折を与える結晶から、その極限までの回折データを高精度で収集し、水素原子位置のみならず結合電子や金属 *d* 電子など外殻電子の情報までを得ようとするものであり、後者は通常の分解能に達さない結晶からも、できるだけ信頼のおける重要な構造情報を得ようとするものである。このような放射光回折データから最大の構造情報を引き出す二つの試みについて、最近の状況を概観し、光合成細菌の高電位鉄イオウタンパク質（HiPIP）の超高分解能解析<sup>1)</sup>、高度好熱菌 V 型 ATPase の 4.5 Å 分解能解析<sup>2)</sup>をそれぞれの具体例として紹介したい。

1) K. Takeda, K. Kusumoto, Y. Hirano, and K. Miki, *J. Struct. Biol.*, **169**, 135-144 (2010).

2) N. Numoto, Y. Hasegawa, K. Takeda, and K. Miki, *EMBO Rep.*, **10**, 1228-1234 (2009).