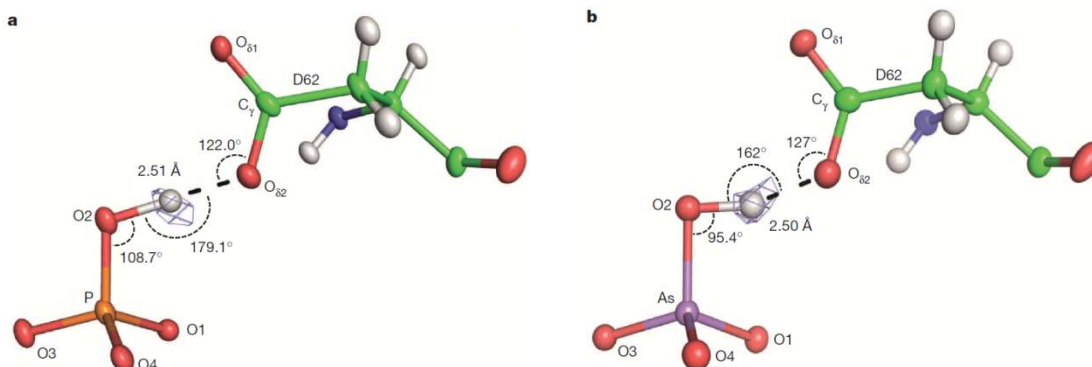


## 補足：X線結晶構造解析における水素原子の位置決定について

PowerPoint file p.37; Elias, M. *et al. Nature* 2012 (doi:10.1038/nature11517)

結論から申しますと、X線でのタンパク質中の水素原子の位置決定は、**高分解能であれば可能**だそうです。

水素原子は1s軌道にしか電子を有しておらず、一般に照射X線と電子との散乱が小さく情報が得られにくいです。しかし分解能（照射ビームの強度、結晶の質に依存）が高ければ、水素原子の位置をアサインできるだけのデータは得られるそうです。目安として、分解能が1Å以下（値が小さい＝高分解能）であれば、水素原子の位置が決められます。

実際、今回の論文では得られた結晶構造の分解能は 0.88~0.98Å でありました。上図で水素原子の周りに示されているメッシュの掛かった領域は、得られた結晶構造のデータから一度水素原子を削除（omit-H）した際に“余った”電子密度を示しており、他に当てはめべき原子がないこと、この領域が十分に狭くなっていることから、ここに水素原子を当てはめてよい、という帰結になるようです。さらにタンパク質改変の実験結果を今回得られた構造データが reasonable に説明できることから、水素原子の位置に関する今回の議論は妥当であると評価されているようです。

なお、中性子線による構造解析は水素原子核の位置決定には有効ですが、X線結晶構造解析とはノウハウがかなり違うため、良い結晶が取れたならずべてX線で決めてしまうことも多いそうです。具体的な差異は以下の通り。

- X線よりも大きな結晶が必要
- 測定時間が長い
- PDB（Protein Data Bank）のデータ収容数がX線に比べて少ない

謝辞：今回X線結晶構造解析についてご指導頂きました相馬Gの佐々木博士には、この場をお借りして深く感謝申し上げます。