

未来社会創造事業 探索加速型  
「共通基盤」領域  
年次報告書(探索研究期間)

令和2年度 研究開発年次報告書
--------------------

令和2年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：米倉 功治]

[所属・役職名]

国立研究開発法人 理化学研究所 放射光科学研究センター・グループディレクター  
国立大学法人 東北大学 多元物質科学研究所・教授

[研究開発課題名：微小結晶構造の自動・高精度電子線解析]

実施期間：令和2年11月1日～令和3年3月31日

## §1. 研究開発実施体制

(1)「自動・高精度構造解析」グループ(理化学研究所)

① 研究開発代表者:米倉 功治(理研放射光科学研究センター、グループディレクター/  
東北大学多元物質科学研究所、教授)

② 研究項目

- ・ 微小結晶からの電子回折と単粒子解析の像の自動測定・解析技術の開発。
- ・ 微小結晶から高精度かつ高分解能の解析。
- ・ 次世代機の要素技術の検討。

## §2. 研究開発実施の概要

X線回折が適用できないミクロンからサブミクロンサイズの微小結晶や薄膜結晶より電子回折を測定し、その構造を解明する電子線三次元結晶構造解析は、低・中分子から蛋白質等の高分子の構造解析に大きな可能性を秘めた技術である。一方、現状は構造既知の試料を対象とした手法の実証的な研究に留まっており、X線回折に比較して方法論は確立しておらず応用についても未開拓の余地が大きい。本課題では、これまで難しかった立体構造未知の試料を対象に、微小結晶からの電子回折の自動測定・解析技術の開発、微小結晶から高精度かつ高分解能の解析、単粒子解析の高度化、次世代機の要素技術の検討等を行う。

2020年度は、試料サポート上の微小結晶から網羅的に回折の自動測定する技術開発を重点的に進めた。ディープラーニングを利用した新しいプログラム **yoneoLocr** を開発することで、単粒子解析の分子像の撮影及び微小結晶回折の回転測定を実施する前に、試料位置の正確な調整、回折パターンの評価、結晶位置の同定が、自動で実行できるようになった。これにより、データ測定の際のユーザーの負担と無駄なデータ撮影の大幅に低減させ、品質の高いデータ測定が可能となった。

高精度構造解析のためには、散乱因子、運動学的散乱の検討、自動解析ソフトウェアの高度化、高難度試料の解析法の開発等を行った。さらに、電子分光装置の視野拡張等の次世代機の要素技術に繋がる項目を検討した。また、新規試料の電子線結晶構造解析とその技術開発について、下記等の論文を発表した。

- ・ Kato K., Takaba K., Maki-Yonekura S. et al., *J. Am. Chem. Soc.* 143, 5465–5469 (2021).
- ・ Maki-Yonekura S. et al., *Microscopy*, 70, 232–240 (2021).
- ・ Takaba K. et al., *Front. Mol. Biosci.*, 7, 612226 (2021).