

課題名 (タイトル) :

X線自由電子レーザーを用いた生体分子系単粒子イメージングの実現に向けた理論研究

利用者氏名 : 徳久 淳師

理研での所属研究室名 : 播磨研究所 放射光科学総合研究センター XFEL 研究開発部門  
ビームライン研究開発グループ データ処理系開発チーム

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

X線自由電子レーザー (XFEL) を用いた単粒子構造解析法の確立を目指し理論的研究を進めた。XFEL 単粒子構造解析では、試料の結晶化の必要はなく、真空中に飛ばした単粒子試料に対して短パルス高強度X線レーザーを照射し、回折像のスナップショットを2次元検出器で観測する強い入射X線強度のため、試料分子は観測中にX線損傷をうける。この効果を取り入れるためのコードの改良に取り組み、我々が提案する立体構造構築法へ与えるX線損傷の影響を調べた。

2. 具体的な利用内容、計算方法

光吸収電離過程、コンプトン散乱過程、オージェ過程を考慮した、モンテカルロ法により生体分子のX線損傷モデルを用いた。分子のX線損傷モデルから、X線損傷を取り入れた回折像を作成し、提案する立体構造構築法に対する影響を調べた。

3. 結果散乱体の減少に伴う回折強度の減少は損傷の程度に応じて顕著に現れるものの、その理論回折パターン自体は損傷が無い場合の回折パターンと類似度が高いことがわかった。損傷過程は確率的事象であり、X線照射中のある瞬間を見れば、部位特異的に起こる。しかし、各素過程が回折像全体に及ぼす寄与は小さく、X線パルス全体が通り過ぎたあと、トータルの寄与としては、あたかも分子全体で均一に電子が抜け出たような振る舞いになっていると推測する。

4. まとめ

今回用いた、X線損傷モデルの範囲では、分子損傷が回折像に与える影響は比較的穏やかであった。2割程度の分子損傷に対して、我々が提案する方法が適用可能であることを確かめた。

5. 今後の計画・展望

今回、提案する立体構造構築法がある程度の分子

のX線損傷にも対応できることが分かった。XFEL 単粒子構造解析の実現にむけ、今後はより実際的な問題である回折像の分類操作の自動化に取り組む。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

我々が提案する立体構造構築法では、大量の回折像を類似度により分類する。回折像の分類法として、我々は回折像の同心円毎に相関係数を求めた相関図を提案している。一對の回折像が類似である場合、相関図には相関線が表れる。相関線が出現する波数領域を同定し、その積分値から類似度を自動判定する方法を開発する。

平成 23 年度 RICC 利用研究成果リスト

**【国際会議、学会などでの口頭発表】**

Tokuhisa A., Kai T., Kono H., Joti Y. and Go N.: "Estimation of attainable structural resolution by 3D imaging of biomolecules using X-ray free electron lasers", 第 49 回日本生物物理学会年会, 姫路市, 9 月 (2011)