

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

所属 : 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は高強度のフェムト秒パルス X線レーザーを発振する。単粒子構造解析では XFEL により発振される高強度フェムト秒 X線レーザーをランダムな分子方位の単粒子試料に照射することで多数のコヒーレント回折強像を観測する。観測対象である生体分子の散乱能は低いいため、観測される散乱強度は弱く、回折像は強い量子雑音にさらされる。このため、ランダムな分子方位に対する多数の測定結果から、図柄が似た回折像をグループ化しグループ内で回折像を平均することで S/N 比を向上する。我々の方法では、一対の回折像の図柄の類似度は、相関図により判定する。図柄が似ている場合相関図には相関線が現れる。相関線の長さ、強さ、方向から一対の回折像の図柄を判定することができる。大量の回折像を分類するため、相関線の長さ、強さ、方向を自動判定するための方法を開発した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

構造既知の生体高分子の原子座標から、模擬 X線回折像を作成し、これをもとに自動判定アルゴリズムの開発を進めた。

3. 結果

自動判定法では相関線の方向、強さ、長さ、有意度を相関図の積分値により判定する。相関図の積分値を判定基準として採用することで、雑音の影響を平均化し、加えて微弱な信号を集積ことで、類似性判定の感度を向上することができた。これにより、分類解析に必要な X線入射強度を下げることに成功した。

4. まとめ

自動判定法を用いると、約 300 Å の分子に対して、入射 X線強度密度 $\sim 8 \times 10^{19}$ [photons/pulse/mm²] 以上で回折像の分類計算が可能である。この結果は自動判定法において設定すべき幾つかのパラメータの最適化前の暫定的な結果であり、今後さらに必要な入射強度を下げることも期待できる。相関線の自動判定法の導入に伴う感度向上により単粒子構造解析の解析可能な領域を広げること成功した。

5. 今後の計画・展望

相関線の自動判定法の感度は、幾つかのパラメータの値に依存する。今後、パラメータの最適化を行いさらに感度を向上する予定である。

平成 24 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

Tokuhisa A.: "Possibility of atomic-resolution single bio-molecular imaging with X-ray Free Electron Laser",
Official journal of the Japanese Society for Synchrotron Radiation Research, 26, No.1, Jan., 26-37 (2013)

Tokuhisa A., Taka J., Kono H. and Go N.: "Classifying and assembling two-dimensional X-ray laser diffraction patterns of a single particle to reconstruct the three-dimensional diffraction intensity function: resolution limit due to the quantum noise", Acta Crystallographica A, 68, 336-381 (2012)

【国際会議、学会などでの口頭発表】

徳久淳師：“X線自由電子レーザーによる生体高分子の高分解能構造解析法に向けて”,第1回先進的観測技術研究会招待講演, 高エネルギー加速器研究機構,12月(2013)

徳久淳師：“生体高分子単粒子の高分解能構造解析の可能性”,第26回放射光学会年会・合同シンポジウム 企画講演4未踏の放射光科学への挑戦：若手の視点から,名古屋大学,1月(2013)