

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 : 本所 X線自由電子レーザー計画推進本部 利用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次元検出器で次々に観測する。個々の測定では新たな単粒子試料を用い、分子の立体構造を構築するためには多数回の測定を必要とする。試料を仮定した際のX線散乱強度の見積もり、及び最適な実験条件等をシミュレーションにより見積もることを目的とする。

2. 具体的な利用内容、計算方法

構造既知の分子の原子座標から、回折像強度を精度よく模倣するシミュレーションコードを作成した。この回折像データをもとに、提案する立体構造構築法の改良、実験に適した装置パラメータと期待される分解能等を、パラメータサーベイを行うことで見積もった。

3. 結果

分子長径 300 Å の生体試料を用いた場合、分解能 5 Å を達成するには、入射強度  $1.6E20$  [photons/pulse/mm<sup>2</sup>] が必要であるという結果を得た。また、XFEL 実機の波長と入射強度を仮定し、実機に用いられる MPCCD 検出器と試料間の距離に対して、提案する立体構造構築法に最適な距離を見積もった。また、実験が実施されることになっている金微粒子を試料とし、検出器で観測される散乱強度を見積もった。

4. まとめ

X線損傷がない場合に到達可能な分解能を見積もった。さらに、試料分子に適した実験条件等の探索を行った。これにより実験チャンバーの設計に対する指標を与えた。

5. 今後の計画・展望

分子のX線損傷を取り込んだ回折像強度を作成するシミュレーションコードを開発し、分子のX線損傷が立体構造構築法に与える影響を調べる予定である。

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現在の計算コードにはX線による分子損傷の影響は含まれていない。この効果を取り込むために、回折強度シミュレーションコードを改良する。試料分子のX線損傷が到達可能分解能に及ぼす影響を調査する予定である。