

星野 学

科学技術振興機構／理化学研究所
さきがけ専任研究者／研究員

高分解能データの統計的推定による超高精細結晶構造解析の開拓

§ 1. 研究成果の概要

本研究課題は、被験試料の放射線損傷や X 線光子数低下(X 線強度低下)によって計測不可能な高分解能回折データを、計測可能な少数の低分解能データを用いた統計数理解析を用いて取得可能にすることを目指している。

2019 年度は、昨年度に達成した「少数の回折データを用いた、回折データの統計モデル構築」を、細孔性錯体結晶に内包された分子を結晶構造解析前に判別する技術として応用した(図 1)。加えて、結晶構造解析に用いる回折データ計測実験において、予備的に計測する少数のデータから統計モデリングを通じて発生させた未計測の回折データを用いて、与えられた X 線露光時間に対して予想されるデータ誤差を評価する X 線露光時間最適化を行った。この露光時間最適化を、価電子密度分布観察のための結晶構造解析の効率化技術として提案した(図 2)。

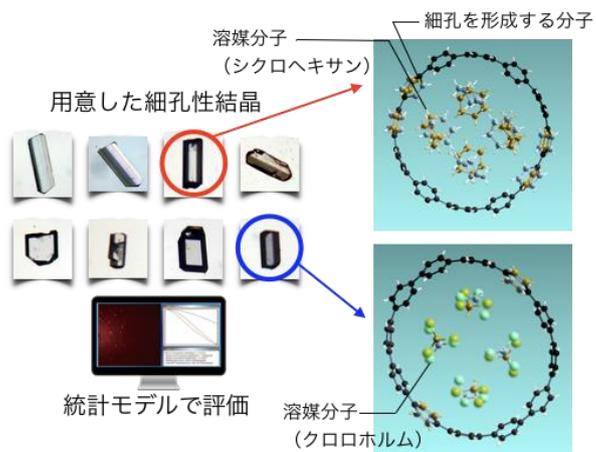


図 1. 統計モデル構築を通じて結晶構造解析前に内包する溶媒分子が区別された細孔性錯体結晶。

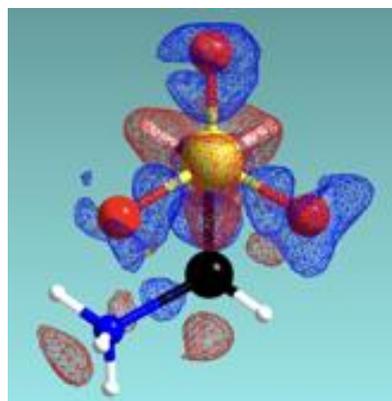


図 2. タウリンの単結晶について、露光時間最適化した計測データを用いた結晶構造解析で観察した価電子密度分布。青（正、価電子分布に相当）と赤（負）の電子密度分布が球対称分布からの変形として与えられている。