

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 個人研究者名

星野 学 (理化学研究所 創発物性科学研究センター 客員研究員/科学技術振興機構 さきがけ研究者)

3. 事後評価結果

本研究は、回折データを発生可能な「結晶学と統計数理・情報科学の融合技術」を開発し、計測困難な回折データを補完した結晶構造解析を実行可能にすることを目的として行われた。

回折データ発生モデル(任意の分解能の強度の回折データの検出を確率で表現した分布)の構築においては、本研究で開発したベイズ推定技術が、少ない回折データからであっても結晶構造解析結果に対応した試料固有パラメータの推定値を与えることを確認した。

回折データの指数の数理最適化においては、回折データの強度発生を行った上、最適化計算によって得られた回折データセットを結晶構造解析に利用することにより、電子密度分布において原子位置のピークが先鋭化したことを確認した。

以上により、高分解能回折データの欠損(級数打ち切り効果の影響増大)によって低下した原子位置精度の向上を達成した。さきがけ研究者との連携研究により、先端的な計測と情報が融合した研究が進められた点が評価できる。

今後は、研究成果の積極的な発信に努めることを期待する。

なお、新型コロナの影響による放射光施設の稼働停止に伴い、最終データ取得を2021年4月~6月として成果をまとめるため、「新型コロナウイルス支障対策のための延長支援制度」を活用し、研究計画を当初2021年3月31日終了から2021年9月30日終了に延長する。