

論文審査の要旨および学識確認結果

報告番号	甲 第 号	氏 名	関 口 優 希
論文審査担当者：			
	主査	慶應義塾大学教授	理学博士 中迫 雅由
	副査	慶應義塾大学教授	博士(理学) 岡 朋治
	副査	慶應義塾大学准教授	博士(理学) 渡邊 紳一
	副査	慶應義塾大学准教授	博士(工学) 神原 陽一
<p>(論文審査の要旨)</p> <p>学士(理学)、修士(理学) 関口優希君提出の学位請求論文は、「大規模データ解析と統計分析を通じた生体粒子の XFEL コヒーレント回折イメージング」と題し、本論9章より構成されている。1999年の放射光X線を用いるコヒーレント回折イメージングの実証実験後、非結晶試料のX線構造解析法が実用化され始めた。さらに近年、XFEL(X線自由電子レーザー)の実用化により、サブマイクロメートルからマイクロメートルサイズの細胞や細胞内小器官など、電子顕微鏡と光学顕微鏡の適用限界空間階層に位置する生体非結晶粒子に対する新たなイメージング手法として利用できる可能性が高まってきた。このような状況下、著者は、我が国で建設されたXFEL施設SACLAにおいて先端的なXFELコヒーレント回折イメージング実験を実施し、得られる膨大量の回折パターンを処理しながら、最も確からしい電子密度を得る方法を独自に考案・実用化し、生体非結晶粒子のX線構造解析の広い展開を目指した基盤研究を推進している。</p> <p>第一章では、細胞内の空間階層構造と、既存のイメージング手法の概要をまとめ、生体非結晶試料イメージングにおけるXFELコヒーレント回折イメージングの必要性や役割について述べている。第二章では、X線回折の基礎理論に基づいて、コヒーレント回折イメージングの概要、特に、反復的位相回復法や生体粒子構造解析におけるコントラスト変調について述べている。また、通常のレーザーとは異なるXFELの発振原理について詳しく述べている。第三章では、SACLAにおける低温コヒーレントX線回折イメージング実験の概要について、低温試料固定照射装置、検出器を紹介し、得られる回折パターンの特徴や概要を紹介している。</p> <p>第四章では、70時間で約260万XFELパルスを用いて得られる膨大量の回折パターンを、人の手を介さずに高速自動処理するソフトウェアについて、その独自のアルゴリズムを紹介している。また、実際の適用例を通じて、データ処理結果の可視化や、スーパーコンピュータを用いて達成されている処理速度が示されている。第五章では、コヒーレント回折イメージングの弱点と指摘されてきた反復的位相回復法で得られる投影電子密度図の正当性を客観的に判断する方法を提案している。その方法では、多数回の試行で得られる位相回復電子密度を画像超空間の一点と見做し、主成分分析によってその分布を可視化しながら分類する。その概要と、ソフトウェアとしての実用化やシミュレーションについて論述し、従来に比べて格段に画像選択の客観性を高めている。第六章では、本研究でのソフトウェア開発によって、XFELコヒーレント回折イメージングが生体非結晶粒子のイメージングに適用できることを示している。金属粒子クラスターに対する予備的適用を経て、バクテリア葉緑体、磁性細菌、シアノバクテリアと出芽酵母核の水和凍結試料に関する解析結果とその生物学的意義を論述している。</p> <p>第七章では、多数の投影電子密度から生体粒子構造の三次元再構成を試みる構造解析法が提案され、出芽酵母核内のDNA分布イメージングを試みた結果が示されている。さらに、第八章では、現在の課題と将来展望として、データ処理への人工知能の導入や、放射光トモグラフィー実験との連携が提案されている。最後に、第九章において本研究を総括している。</p> <p>以上、本論文の内容をまとめると、著者は、高速データ処理及び客観的に回復電子密度の妥当性を判断可能な方法の開発と実用化に成功し、非結晶生体粒子の構造解析によってその有効性を示すことで、XFELコヒーレント回折イメージングを細胞生物学における新たなイメージング法として発展させることができた。よって、本研究は、細胞生物学分野に貢献できる回折イメージングの基盤を整え、その可能性を具体的に示したと評価できる。本論文の骨子である第四～六章の内容は、それぞれ学術論文として掲載されており、また、研究内容は、広く理学上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士(理学)の学位を受ける資格があるものと認める。</p>			
学識確認結果	学位請求論文を中心にして関連学術について、上記審査会委員で試問を行い、当該学術に関し広く深い学識を有することを確認した。 また、語学(英語)についても十分な学力を有することを確認した。		