

Nowe metody obrazowania i nanokrystalografii z wykorzystaniem koherentnych femtosekundowych impulsów rentgenowskiego lasera na swobodnych elektronachJerzy B. Pelka*Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland**e-mail: pelkay@ifpan.edu.pl*

Jak wiadomo, rozdzielczość metod dyfrakcji i obrazowania wykorzystujących promieniowanie rentgenowskie ograniczona jest w sposób fundamentalny przez uszkodzenia radiacyjne. W przypadku obrazowania obiektów aperiodycznych zniszczenia wskutek radiacji uniemożliwiają zwykle zarejestrowanie obrazu o rozdzielczości porównywalnej z długością fali. W przypadku dyfrakcji omija się tę trudność dzięki zwielokrotnieniu „obektu badań” – komórki elementarnej w periodycznej strukturze kryształu. Przy odpowiednio dużym kryształku pozwala to odtworzyć przestrzenne ułożenie atomów bazy. Dla kryształów białkowych wykazano, że minimalna liczba komórek elementarnych niezbędnych do odtworzenia przestrzennej struktury białka z rozdzielczością atomową jest rzędu 10^{17} . Niestety, szacuje się, że trudności w wyhodowaniu odpowiedniej jakości kryształów molekularnych dotyczą aż ok. 40% białek, w tym np. większości szczególnie trudnych do krystalizacji białek transmembranowych, z którymi oddziałuje ponad 70% znanych obecnie leków. Z około 60 tys. struktur zgromadzonych w PDB tylko około setka należy do tej grupy.

Sytuację radykalnie może tu zmienić wprowadzenie nowych metod wykorzystujących koherentne rentgenowskie obrazowanie dyfrakcyjne (CXDI). Korzystają one z silnych femtosekundowych impulsów generowanych przez lasery na swobodnych elektronach, (FEL) - nowe źródła synchrotronowego promieniowania rentgenowskiego. Wykazano doświadczalnie, że za pomocą ultrakrótkiego, rzędu 10 fs, impulsu rentgenowskiego o mocy szczytowej dochodzącej do kilku GW można zrekonstruować dwuwymiarowy obraz obiektu o rozmiarach submikronowych lub pojedynczej makromolekuły rejestrując obraz dyfrakcyjny, zanim badany obiekt ulegnie całkowitemu zniszczeniu. Do wyznaczenia struktury przestrzennej białka wystarczy strumień niezwiązanych z sobą molekuł, nie jest więc wymagany materiał badawczy w postaci skryształowanej.

W ostatnich latach potwierdzono eksperymentalnie zasadnicze założenia technik obrazowania i nanokrystalografii opartych na CXDI, korzystając m. in. z laserów na swobodnych elektronach FLASH w Hamburgu oraz LCLS na Uniwersytecie Stanforda. Już w pierwszych eksperymentach na tych urządzeniach uzyskano rozdzielczość porównywalną z długością fali źródła. Celem wykładu jest prezentacja nowych metod wykorzystujących CXDI, dotychczasowych rezultatów doświadczalnych, a także przedstawienie kluczowych wyzwań stojących przed rozwojem tych pionierskich technik. Wykład ilustrują m in. obrazy CXDI otrzymane dla nanostruktur, komórek i wirusów.

Możliwość badania struktury dowolnych białek stała się istotną

przesłanką decyzji o budowie europejskiego rentgenowskiego lasera na swobodnych elektronach XFELw Hamburgu, który rozpocznie pracę pod koniec 2014 r. W przedsięwzięciu tym bierze także udział Polska.

