

ラマンスペクトルデータ前処理法の改善

¹東北大院薬, ²東北大院理

菅原達郎¹, 楊啓¹, 中林孝和¹, 盛田伸一²

生細胞のラマンスペクトルおよびラマン顕微鏡によるイメージング測定は、現在では「バイオ・ラマン研究」というカテゴリーで呼ばれるほど盛んに研究が進められている。ラマン分光は、細胞内にある分子の情報を非染色で検出できる点に特徴があり、細胞内環境の様々な変化を高感度に検出することができる。近年では、細胞の未分化・分化の識別なども報告されている[1]。また、アルキンタグと呼ばれる方法によって逆に細胞の染色を行い、より詳細な細胞内環境変化を検出する試みも行われている。しかし細胞計測においては、細胞内でのスペクトルの差、また細胞間でのスペクトル差を補償するために、大量のスペクトルを測定し、それらのスペクトルに見られる共通の挙動について、多変量解析などの統計的方法によって抽出することになる。そのために、細胞計測では多いときは 1000 以上のスペクトルを測定する必要がある。また、得られた実測のスペクトルに対して、ベースラインの補正や培地、石英基板などのバックグラウンドとなるラマンスペクトルを引く必要がある。これまでは、ベースラインおよびバックグラウンドの補正を手動で行ってきたが、スペクトルが大量であるために、自動的に行える補正手法の開発が必須であった。本発表では、計測した生細胞のラマンスペクトル (数百~1000 個) から石英基板などによる不必要なスペクトルについて、恣意性なく自動的に除去する方法の提案を行う。

Fig. 1 に具体例を示す。計測したラマンスペクトル (p) を測定し、そのスペクトル p から石英基板の情報 (q) を除き、生細胞のラマンスペクトル (r) を得る。従来の方法では、一つ一つのスペクトルに対して k を動かし q の情報を排した r を探している。しかしそれでは恣意性が強く、大量のスペクトルに対しては膨大な時間がかかるという問題がある。当日はその問題の解決法について詳しく検討する。

[1] S. Morita *et al.*, *Biophys. J.* **107**, 2221–2229 (2014).

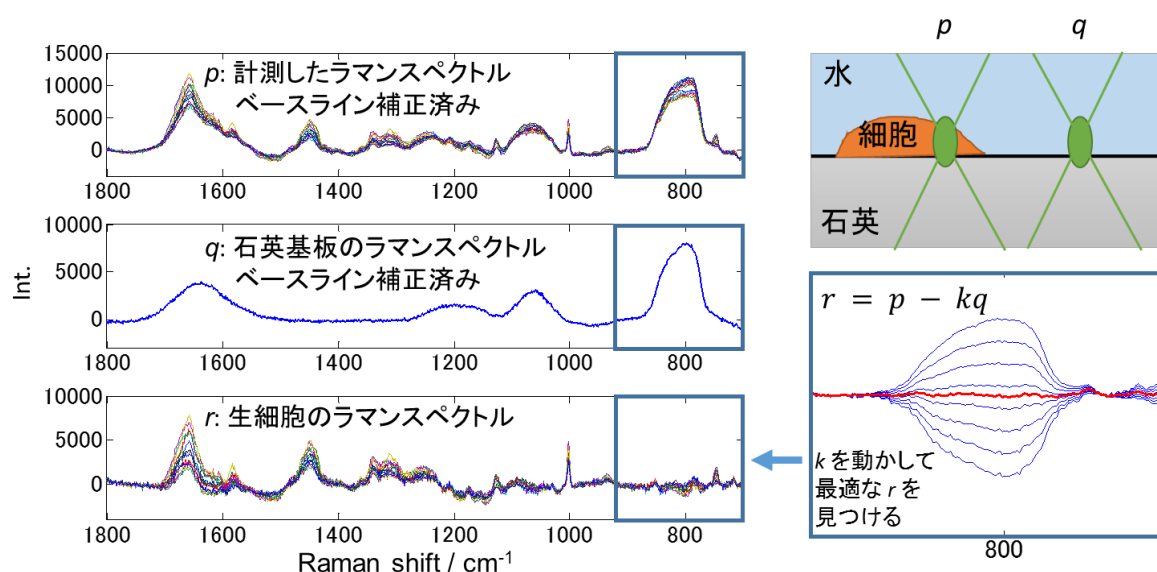


Fig. 1 p : 計測したラマンスペクトル (ベースライン補正済み)、 q : 石英基板のラマンスペクトル (ベースライン補正済み)、 r : $r = p - kq$ (生細胞のラマンスペクトル)