

課題名(タイトル):

## 計算機実験を援用するXFEL バイオイメージング

利用者氏名:

○城地 保昌(1, 2)

理研における所属研究室名:

(1)放射光科学研究センター データ処理系開発チーム

(2)放射光科学研究センター 先端光源開発研究部門

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

X線自由電子レーザー(XFEL)利用によるイメージング実験では、非結晶粒子の一瞬の姿をナノレベルでイメージングできる。国内外のXFEL利用によるイメージング研究では、数10ナノメートルの生体粒子の姿を捉えることがこれまで実現できていない。本研究では、計算機シミュレーションを援用することにより、その実現を目指す。具体的には、X線結晶構造などの既知構造に基づき、大量の回折パターンをシミュレートし、SACLA利用実験により数10ナノメートルサイズの生体超分子の姿をナノメートル分解能で捉えるための測定条件(試料濃度、試料ホルダの厚みなど)を明らかにする。さらに、その条件に基づきSACLAで測定したデータを並列計算により効率的に解析し、2次元バイオナノイメージングを実現したい。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究では、SACLAの利用実験に対応したランダムな方位の複数粒子(1~4粒子)からの回折強度パターンをシミュレートした。その回折強度 $I(\mathbf{k})$ (回折光子数の期待値)は、次式で表せる。

$$I(\mathbf{k}) = M_0 r_e^2 (\lambda d)^2 \cos^3 \theta_k \times \left| P(\mathbf{k}) \otimes \sum_{m=1}^{n_d} F(\mathbf{R}_m^{-1} \mathbf{k}) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_m) \right|^2 + BG(k) \quad (1)$$

$$F(\mathbf{k}) = \sum_a^N f_a(k) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a^0) \quad (2)$$

$M_0$ ,  $r_e$ ,  $\lambda$ ,  $d$ ,  $\theta_k$ は、それぞれ入射光子数、電子の古典半径、波長、サンプリング間隔、散乱角である。 $\mathbf{R}_m, \mathbf{t}_m$ は、それぞれXFELビームの視野内にある粒子 $m$ の方位回転行列、重心位置である。 $P(\mathbf{k})$ は、ビーム振幅の空間分布のフーリエ変換であり、 $\otimes$ は畳み込み積分を表す。式(2)で、 $f_a(k)$ ,  $\mathbf{r}_a^0$ は、それぞれ原子 $a$ の散乱因子、標準方位での位置である。また、 $BG(k)$ は、試料ホルダからの背景散乱を表し、

試料なしの条件で、XFELを照射し取得したものをを用いる。シミュレーションでは、現実近づけ、光子検出を表すため式(1)にポアソンノイズを加えた。XFEL光1パルスでは、3次元回折強度のEwald球面上のスライスが検出される。 $\mathbf{R}_m, \mathbf{t}_m$ を、乱数を利用して生成し、複数の回折パターンシミュレーションを実行した。約25万原子からなる70Sリボソームの結晶構造を用いて式(1)の回折パターンシミュレーションを行った。式(1)の計算は、検出器ピクセル( $\mathbf{k}$ )毎に独立に行えるので、MPIを利用して並列計算した。

3. 結果

1~4粒子の回折パターンを計算したところ、現状のSACLAの実験条件では、約5千~2万光子の微弱な回折シグナルが得られることが分かった。そこで、SACLAの利用実験で、試料ホルダのみからの散乱パターンと、試料ありの回折パターンを比較したところ、該当光子数分の差が見られた。70Sリボソームからの回折シグナルを取得できたと判断している。シミュレーションした回折パターンと実験で得られた回折パターンの類似性を解析して、良質回折パターンの選別を行っている。

4. まとめ

SACLAの利用実験を模したシミュレーションを実行し、その結果と利用実験データを比較することから、70Sリボソームからの微弱な回折シグナルを取得したことを確認した。

5. 今後の計画・展望

利用実験データから良質回折パターンを選別するための手法開発を継続し、XFELによる生体単粒子の2次元バイオイメージングの実現を目指す。また、生体粒子からの微弱な回折強度から2次元イメージングを可能とするため、試料ホルダからの背景散乱を除く解析手法を開発する。さらに、その適用条件を明らかにすることで、入射X線や試料ホルダの条件を提案する。