

プロジェクト名(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 ビームライン制御解析チーム

1. 本プロジェクトの研究の背景、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 で測定した実験データと比較することにより、実験データの質を判別するとともに、良質回折パターンを選別する。さらに、選別した良質回折パターン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 , λ , d , θ_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、試料フォ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。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

昨年度までに、SACLA の利用実験データにリボソームのシグナルが含まれている間接的な情報を取得出来ていたが、背景散乱のために良質データの選別が困難であった。2021 年 11 月の SACLA の利用実験では試料フォルダを改良し、背景散乱のレベルをこれまでと比較して数倍低くすることに成功した。この測定実験条件を模してシミュレートした回折パターンと実際の実験データの特徴を比べたところ、試料電子数と粒子の大きさには類似性が観られ、リボソーム由来のシグナルが検出できたと判断している。しかし、回折パターンそのものの比較では、類似度がそれほど高くない、試料フォルダ上のリボソームは X 線結晶構造と異なる形になっていると推測される。現在のリボソーム単粒子からの回折パターンを選別するための手法検討を行っている。

4. まとめ

HOKUSAI での回折パターンシミュレーションを援用することで、SACLA の利用実験データ中にリボソームからの微弱シグナルが含まれていることを確認した。

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 次元ナノイメージングの実現を目指す。