

課題名(タイトル):

Simulation for XFEL nano-imaging

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 制御情報・データ創出基盤グループ ビームライン制御解析チーム

(2)放射光科学研究センター SACLA ビームライン基盤グループ データ処理系開発チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係する課題との関係
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、非結晶粒子の瞬間の姿をナノレベルで可視化することができる。国内外の XFEL 利用によるイメージング研究では、入射強度等の問題があるため、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。XFEL 施設 SACLA では、ナノビームコヒーレント回折イメージング装置 MAXIC-S を利用して XFEL 光を 100 ナノ以下に集光することで、微小試料のナノイメージングを実現するという挑戦的な試みが行われている。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、S/N の低い MAXIC-S 実験データを効率的に解析することを目的とする。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

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。検出器ピクセル $\mathbf{k}$ における回折強度 $I(\mathbf{k})$ (回折光子数の期待値)は、次式で表せる。

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

$$F(\mathbf{k}) = \sum_{a=1}^N f_a(k) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a^0) \quad (2)$$

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、光学系や試料ホルダ等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、現実に近い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。リボソームおよびヘモグロビン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

昨年度に引き続き、SACLA の利用実験中に実験条件に即したシミュレーションを実行し、回折パターンの特徴を比べ、試料電子数と粒子の大きさに類似性が観られる実験条件(試料濃度等)を調整した。調整した実験条件でデータを十分に取得することが出来た。

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 の利用実験データに生体ナノ粒子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

SACLA の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 による生体ナノ粒子の 2 次元ナノイメージングの実現を目指す。S/N 比の低い生体単粒子からの回折パターンから信頼度の高い電子密度像を再生する手法の開発が今後の課題である。