

低温コヒーレントX線回折顕微鏡法による非結晶粒子の構造解析

中迫雅由

慶應義塾大学・理工学部・物理、理化学研究所・播磨研究所

第三世代放射光やX線自由電子レーザー(XFEL: X-ray Free Electron Laser)の利用では、百ナノメートル~ミクロンサイズのナノ材料粒子巨大超分子複合体、細胞内小器官や細胞など、結晶化が絶望的または原理的に不可能な生体非晶物体の立体構造を、ナノメートル分解能で可視化するコヒーレントX線回折顕微鏡(CXDM: Coherent X-ray Diffraction Microscopy)実験に期待が寄せられている。このような構造解析実験に向け、凍結試料作成システムと凍結試料粒子を操作して照射野に効率的に導入する低温CXDM用照射装置(壽壺号)の開発を行ってきた。これら装置は、電子顕微鏡観察での試料作製技術や操作技術を広く取り入れており、非結晶試料のみならず、極微小結晶の回折実験にも利用可能である。

これまでに、SPring-8のBL29XULにおいて葉緑体粒子などに対する低温回折実験通じて問題点を明らかにし、ハードウェア面での改良と高度化を行っている。データ解析の面では、Shrink-Wrap法を実装した反復的位相回復ソフトウェアを完成させ、現在は、得られた回折パターンに生じる読み出しノイズ、フリーデル則の満足度等をオンラインで処理できるソフトウェアの開発が進んでいる。また、同装置をXFEL施設SACLAに持ち込んで、超高輝度パルス光を用いるX線回折実験を開始したところである。

理論面では、液滴中の粒子に関する新しい構造解析法を示し(Kodama & Nakasako (2011) *Phys. Rev. E*)、その結果に基づいて、Ewald球面上の回折強度と三次元電子密度の関係について物理数学的変換についての考察を行っているところである。また、分子量100万程度の粒子について、XFEL数十ショットの回折パターンからナノメートル分解能で構造解析を行う可能性を大規模シミュレーションで検討しているところである。

セミナーでは、X線散乱の基礎理論に触れながら、装置の概要や実験、シミュレーションについての現状報告を行うとともに、今後の装置開発や理論構築への展望についても議論したい。