

木村 隆志

科学技術振興機構／東京大学大学院工学系研究科
さきがけ専任研究員／特任助教

ビッグデータアプローチによる X 線レーザーイメージングの高度化

§ 1. 研究成果の概要

科学上重要な現象には溶液中においてのみ反応が生じるものが多数存在し、化学固定や凍結乾燥などを経ず、溶液中試料を自然な状態のまま高分解能に観察することは、材料科学、生物学、化学において極めて重要である。本研究提案では、波長が Å オーダーの硬 X 線のレーザーであり、数フェムト秒の超短パルスという特徴を持つ X 線自由電子レーザーを活用しイメージングにより、こうした対象を高分解能に観察可能な、新たな顕微法の確立を目指している。

溶液中でランダムに生じるナノ粒子反応を捉えるために、コヒーレント回折パターンの事前学習モデルを元に大量に取得したデータを高効率に選別し、さらに低シグナルのデータに非弾性散乱などのノイズ除去を施すことによる高精度化を実現する。本年度は、X 線自由電子レーザー施設 SACLA でのフェムト秒シングルショットコヒーレント回折イメージング実験に取り組み、取得した生データを使用した手法の実証・高度化を試みた。実験には、理化学研究所および高輝度光科学研究センターと共同で開発した高分解能コヒーレント回折イメージング装置 MAXIC-S を利用した。図 1 に取得したコヒーレント回折パターンの一例を示す。ナノ粒子からのコヒーレント回折パターンを 2, 3 nm 分解能に相当する高角領域まで取得することに成功し、さらにその回折パターンに対し事前学習モデルを適用することにより、パターンの特徴を失うことなく高精度にノイズ除去を行えることを確認した。

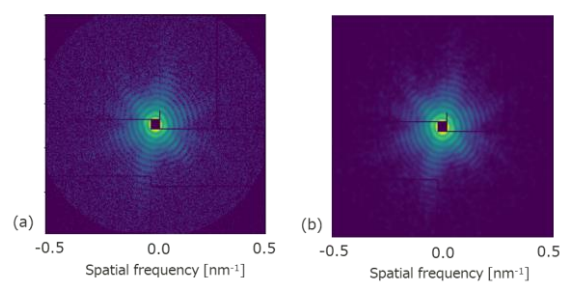


図1 SACLA において計測したナノ粒子からのフェムト秒コヒーレント回折パターン
(a)MAXIC-S で取得した生データ (b)ノイズ除去後の回折パターン