

高輝度放射光屈折撮影技術に係る基礎理論の構築と可視化

石綿 元

統計数理研究所/総合研究大学院大学複合科学研究科博士後期課程

概要と目的：高輝度放射光とは、大型加速器によって得られるコヒーレントな高エネルギー光であり、高輝度光科学研究センター (JASRI)-SPring-8(Super Photon ring 8GeV) および、高エネルギー加速器研究機構 (KEK)-PF(Photon Factory) などで得られる、電子を加速しながらリング状の加速器に沿って曲げる際に、その接線方向に発生する光である。

高輝度放射光屈折撮影技術とは、回折強度曲線を用いて角度分析を行い、撮影物体の画像合成を行う技術であり、吸収 X 線撮影法に比べて軟組織の撮影も可能である。

回折強度曲線は「ロッキングカーブ」と呼ばれ、シリコン結晶などの完全に近い結晶での回折強度のブラッグ角周辺のプロファイルを表すものである。屈折撮影技術では、あらかじめわかっている完全結晶での回折強度プロファイルを用いて、撮影物体透過後の屈折光線での回折強度と比較し、そのズレによって撮影物体のベクトル強度分布を解析し、画像の再合成を行っている。

ところで、このロッキングカーブとは、Ewald-Laue 理論から導かれるものである^{1,2)}。Ewald-Laue 理論では完全な平面波を扱うため、波面に垂直な成分は考えていない。したがって、ロッキングカーブは一次元の角度分布を横軸とする二次元プロファイルである。従来技術では、入射光を平面波として扱い、ロッキングカーブを適用している。

我々は、このロッキングカーブから得られる情報を増やすことができないかを中心に研究を行ってきた。そのために、入射光を平面波理論で扱うのではなく、球面波をも考慮できる理論によって高次回折波におけるロッキングカーブの概念を導入することを目指し、かつ、撮影技術への応用をも視野に入れて研究を行っている。

理論と方法：従来技術の重要な解析ツールはロッキングカーブであるが、これは、Ewald-Laue 理論による平面波での解である。したがって、従来技術の基礎にある理論は Ewald-Laue 理論である。Ewald-Laue 理論は Maxwell 方程式から直接導かれるものであるが、同様に Maxwell 方程式から直接導かれる X 線動力学理論に高木-Taupin 理論がある³⁻⁵⁾。この理論は、従来は、ひずみを持った結晶に適用されてきた特殊理論であったが、共同研究者である、東京大学の沖津博士によって Ewald-Laue 理論との等価性が近年になって指摘されている⁶⁻⁹⁾。そこで、我々は、高木-Taupin 理論によるロッキングカーブの作成を目指し、現在論文を発表しているところである¹⁰⁾。

また、この高木-Taupin 理論では、球面波も扱えるため、高次反射波をも扱うことができ、それらを用いた新たな技術を検討する為に、Ewald-Laue 理論との等価性から高木-Taupin 理論によって導いたロッキングカーブの作成手法を応用して高次反射波でのロッキングカーブの作成を目指してきた。

さらに、撮影技術などへの応用の為に、統計数理研究所のスーパーコンピュータ群を用いた並列計算技術による、新しい撮影技術の基礎理論を構築するべく計算を進めている。

結果と考察：Ewald-Laue 理論によるロッキングカーブと同じものが高木-Taupin 理論からも数値計算シミュレーションによって得られる。このことから、高次反射波でのロッキングカーブも同様の手法で作成すること

が可能であるといえる。

高次反射波でのロッキングカーブを得るには高木-Taupin 理論による高次反射波の解であるピンホールトポグラフの計算結果から二次元での回折強度分布を求めて、三次元のロッキングカーブの角度分布を知る必要がある。

従来の二次元ロッキングカーブの一次元角度分布でのプロフィール同様に三次元ロッキングカーブの特徴をつかむことができるとその応用範囲は広がってくると考えられる。

結論と未来：Ewald-Laue 理論によるロッキングカーブと同じものが高木-Taupin 理論によっても得られることから、これら二つの理論は等価な理論であることが新たな側面からも証明できたといえる。

二次元ロッキングカーブと同様の計算技術によりピンホールトポグラフから得られた三次元強度分布は高次反射波でのロッキングカーブであるといえる。

この新しいロッキングカーブのうち、三次の高次反射波の場合の二次元サーフェスには回折強度のピークとなる点が二か所存在することがわかってきた。

これらのことから、撮影技術にとどまらず、物質や生体構造の解析などでの高次反射波を考慮した実験および解析が可能になり、新たな高輝度放射光関連技術の発展が期待できる。

今後は、より定量的な取り扱いを目指した数値計算シミュレーションの開発を行っていく。

なお、この三次元ロッキングカーブを表示する為にはサーフェスプロットのできる可視化ソフトが必要であり、そのために AVS/Express を利用してロッキングカーブ全体の様子を表示し、その特徴をつかむことができた。

参考文献

- [1] P.P.Ewald Ann.Phys.4.Folge, **54**, (1917) 519
- [2] M.von.Laue Ergeb.Exakten Naturwiss, **10**, (1931) 133
- [3] S.Takagi Acta Cryst., **15**, (1962) 1311
- [4] S.Takagi J.Phys.Soc.Jpn., **26**, (1969) 1239
- [5] D.Taupin Bull.Soc.Fr.Minéral.Cristallogr., **87** (1964) 469
- [6] A.Authier "Dynamical Theory of X-Ray Diffraction", Revised Edition(2004), Oxford University Press
- [7] K.Okitsu Acta Cryst., **A59** (2003) 235
- [8] K.Okitsu Adv.X-Ray.Chem.Anal.,Japan **36** 95-131 (2005) in Japanese
- [9] K.Okitsu Submitted to J.Phys.Soc.Jpn., (2009)
- [10] Gen I. K.Okitsu M.Ishiguro Submitted to J.Phys.Soc.Jpn., (2009)