

SPring-8 でのコンパクト X 線自由電子レーザー計画

独立行政法人理化学研究所・播磨研究所
線型放射光研究開発グループ
石川哲也

SPring-8 Compact SASE Source (SCSS)
Harima Institute, RIKEN
Tetsuya Ishikawa

Abstract

The RIKEN Harima Institute is planning to construct an x-ray laser facility based on the principle of Self-Amplified Spontaneous Emission (SASE). Unique feature of the facility is its compactness realized by combining C-band accelerator structure and short-period in-vacuum undulator. This brief note introduces the conceptual design of the facility, and discusses possible applications of the x-ray laser to “structural biology”.

1. はじめに

レーザーを短波長化してX線領域に持ち込むことは、ここ数十年間にわたり光科学の大きな到達目標であった。筆者も今から四半世紀も前の大学院の頃 Madey の自由電子レーザー(FEL)の論文[1]を輪講で取り上げ X 線への拡張に関して論じたことがある。共振器を構成するミラーとして完全結晶のブラッグ反射を利用することを検討したが、反射率の低さから、余程のブレイクスルーが無ければレーザー発振は困難というのが当時の結論であった。1980 年代半ばに自己増幅自発放射 (Self Amplified Spontaneous Emission; SASE)型自由電子レーザーの原理[2]が発表された。これは、ミラーで共振器を構成する代わりに、長いアンジュレータによって、電子ビームのマイクロバンチを形成し、アンジュレータの中でコヒーレントに運動させることによって、コヒーレントな光を発生させるものである。進行方向に対して横波である電磁波が、進行方向に電子を動かしてマイクロバンチを作ることは一見矛盾があるように思えるが、その「からくり」については、新竹による非常に明解な解説[3]があるので参考にしていきたい。

原子や分子のエネルギー準位を利用する従来のレーザーには、発振波長に様々な制限があるのに対して、FEL では原理的には任意の波長で発振させることが可能である。しかしながら、高エネルギー加速器が絡む FEL は放射線発生装置であり、普通のレーザーに対するものと比較したら桁違いに厳しい規制の下で運用する必要がある。このため、普通のレーザーでカバーできる領域での FEL は、有用

ではあるものの不可欠な物ではなかった。それに対して、硬 X 線領域のコヒーレント光発生は、現時点で FEL が我々の知っている唯一の解である。このため、1990 年代の中頃から欧米で SASE 型の X 線 FEL(XFEL)施設建設計画が議論され、ヨーロッパでは DESY の European XFEL Facility[4]に、またアメリカでは SLAC の Linac Coherent Light Source (LCLS)[5]に収束していった。

ヨーロッパやアメリカで、SASE-XFEL 施設建設が盛んに議論されていた 1990 年代の終盤には、我々は SPring-8 の立ち上げに忙殺されており、とても新しい光源を議論する余裕はなかった。一方でこの状況のもとで 1999 年に出された学術審議会特定研究領域推進分科会加速器科学部会報告には、「近年、X 線自由電子レーザーが将来の第四世代光源として注目を集めている。この開発のため、高エネルギー加速器研究機構を中心にした関係研究機関、大学の連携・協力により基礎研究を推進する必要がある」と記載されている[6]。しかしながら、高エネルギー加速器研究機構はその後、日本原子力研究所とともに J-PARC 建設に乗り出し、放置しておけば XFEL 開発で日本が置き去りにされる状況が生じた。このため、理化学研究所播磨研究所では、1 km ビームライン[7]と 27 m アンジュレータビームライン[8]の建設の見通しのついた 2000 年から硬 X 線領域での SASE-XFEL の検討を開始した。

2. コンパクト SASE 光源

27m 真空封止型アンジュレータを建設した理研播磨の北村グループは、一方でミニポール真空封止型アンジュレータを開発し、中型蓄積リングで硬 X 線をアンジュレータで出す道を拓いた。これは最初に NSLS との共同開発として実施され、その後 SLS との共同研究によって、X 線第三世代放射光の小型化のコンセプトを確立し、その後の DIAMOND を始めとする多くの計画でこのコンセプトが採用された[9]。これと同様な考え方で SASE-XFEL の小型化が可能であろうというのがコンパクト SASE-XFEL の発想の原点である[10]。X 線レーザーは、現状の放射光と比較すると圧倒的な性能を持つはずであるが、一方で線型加速器ベースであるため、同時に多数のユーザーが利用することは困難である。しかしながら、圧倒的な性能を持つが故に、日本に一つあれば良いという性格の光源ではなからうというのが我々の結論である。多数の X 線レーザーの建設を可能にするには、小型化、低コスト化を押し進め、一つの光源を少数の利用者で使っても十分経済的と言えるレベルまで持って行く必要がある。ミニポールアンジュレータの採用は、比較的 low エネルギー線型加速器での硬 X 線 FEL を可能にすることから、小型化に向けての第一歩と成り得る。他方で、線型加速器として X-Band や C-band のような、高勾配加速器を用いると、さらにコンパクト (= 低コスト) の SASE-XFEL が可能となる。SCSS はこのような SASE-XFEL の小型化に向けての第一歩であり、第二世代 XFEL の魁と言うべきものである。

3. 要素技術開発研究

硬 X 線領域でのコンパクト SASE-FEL を実現するためには、加速器、アンジュレータに新たな技術開発が必要であるのに加えて、高密度・低エミッタンス電子ビームを供給するための電子入射器が重要である。またアライメントに関しても SPring-8 と比較して遥かに厳しい精度が必要となる。これらの問題点を一つずつ解決し、必要な要素技術を確立し、これらを XFEL に組上げるエンジニアリング的な問題解決のために、理化学研究所播磨研究所では、2001～2005 年の 5 年計画で、最終的に 1GeV プロトタイプ（発振波長 3.6 nm）の建設を目指した研究開発プログラムを策定し、理化学研究所の内部資金による R&D を進めてきた。計画途上での特殊法人改革や理化学研究所の独立行政法人化など、決して順調に進んだ訳では無かったが、2003 年までにほぼ主要要素技術開発を終了し、2005 年に当初計画よりはスケールダウンするものの、250MeV プロトタイプ（発振波長 60 nm）を建設することとなった。

短波長での SASE 光源では、電子ビームのエミッタンスを進行方向も含めて 6 次元で小さくすることが必要であり、またこのように規定された 6 次元のボリューム中に高密度で電子を詰め込む必要がある。この成否はほぼ最初の電子銃によって決定されるため、高密度短パルス電子ビームを生成するためのレーザー RF 電子銃開発が世界中の XFEL 計画で進められてきた。しかし、低エネルギー電子を高密度に詰め込もうとするとクーロン反発によるブローアップが生じ、低エミッタンスを保てなくなる。我々は、世界中で常識とされていたレーザー RF 電子銃を使わない解があるかどうかを検討し、極めて古典的な熱電子銃で、クーロン反発を避けるように薄く引き出した電子ビームを、加速しながら圧縮することにより SASE 発振に必要な電子ビーム性能が得られることを見出した。試作された電子銃はエミッタンスに関して目下世界最高性能を誇っており、電荷量も SASE 発振に十分である。

この他にも、数々の要素技術開発が積み重ねられ、2003 年度末には XFEL 建設に必要なかつ新規開発を要する主要要素の開発が終了した。これに基づき、2004 年度にプロトタイプの設計研究を実施し、2005 年度にプロトタイプ建設に進んでいった。

4. 6-8 GeV XFEL 計画

SCSS は当然のことながら、ゴールは XFEL を目指す計画である。プロトタイプ建設の予算説明等での将来の話が、役所の注目するところとなり、第 3 期科学技術基本計画で構想されている「国家基幹技術」の候補と目されるようになった。このこともあって、数年先での予算要求を睨んで、Conceptual Design Report[11]を作成し、それに基づく国際レビューを実施した。

当初 XFEL としては、1 で発振させるという観点から、6 GeV の線型加

速器を計画していたが、その後 SPring-8 の入射器として利用するというアイデアが出され、これがレビューで支持されたため、現時点では 8 GeV の線型加速器を建設する方向で計画が進められている。図 1 に施設の構想を示す。

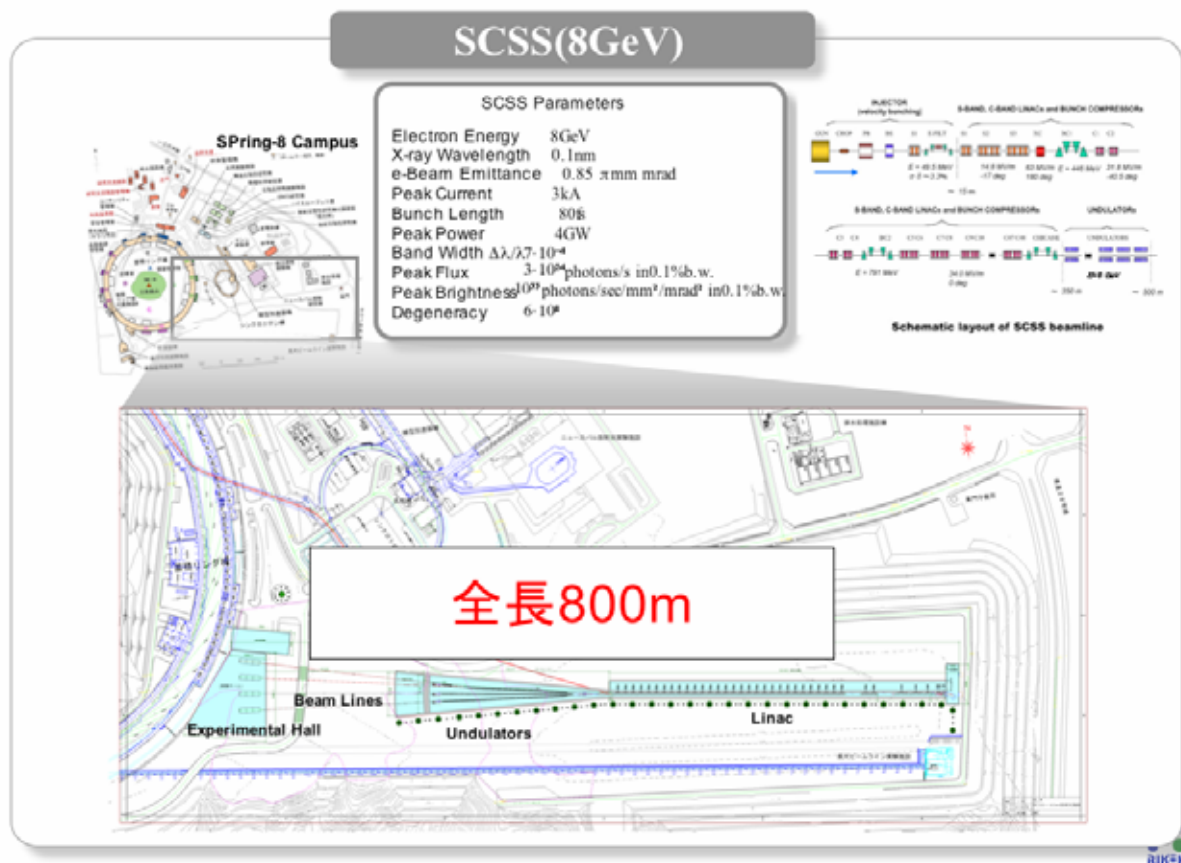


図 1 . SCSS 構想図

5. XFEL でのサイエンス

XFEL での X 線は、ピーク輝度が高く、短パルスで、かつコヒーレント光である。現在次世代放射光源としてこの他にも ERL やスーパーストレージリングが喧伝されているが、これらの光源が現状の放射光源と同じカオス光源であるのに対して、XFEL はレーザーとなるはずである。既に European XFEL や LCLS で精力的なサイエンスの議論が行われているが、どちらかという放射光からの延長の議論が多く、レーザー側からの議論を喚起することの重要性が共通に指摘されている。いずれにせよ、いつも言っていることではあるが、欧米のレポートに何が書いてあるかではなく、何が書いてないかを読み取る姿勢が重要である。

XFEL の最大の特徴、すなわち他の「次世代放射光候補」には無い特徴が「レーザー」であることとするならば、最初に行われるべきは「レーザーであること」の実証であろう。このためには高次のコヒーレンス計測[12]を行えばよい。周波数の高い蓄積リング光源で開発された高次コヒ

ーレンス計測方法をそのままの形で XFEL の高次コヒーレンス計測に適用することは出来ないので、XFEL 用の計測方法の検討が進められている。

レーザーであることが実証できれば、非常に安直なサイエンスの進め方としては、従来のレーザーが歩んできた道を、短波長で辿っていくことが考えられる。対象とするスケールがサブナノ領域に入るので、これはこれで 5-10 年程度は研究テーマに困らない。一方でサブナノメートル領域の構造変化をサブピコ秒の高速で追跡するための光と捉えれば、化学の核心に迫るツールとして利用可能であり、触媒反応や酵素反応の中間状態解析などに非常に有用であろうし、同様な意味で構造生物学にも有用であろう。

6. 構造生物学への応用

コヒーレントな X 線ですぐに思いつく新しい展開は X 線ホログラフィによるアトム分解能でのイメージングであり、これが実現すれば結晶でないナノ構造の解析が可能となる。このことは、結晶化が一部でボトルネックとなるタンパク構造解析への応用を想起させるが、実際は X 線領域で物体波と参照波を干渉させた場合の干渉縞間隔は波長の程度まで小さくなり、ホログラフを記録するメディアが無いという問題が生ずる。

そこで、参照波を使うことなく、物体波の強度情報から位相情報を数学的に回復する方法[13]の開発が精力的に進められ、コヒーレント散乱 X 線マイクロスコピィとでも呼ぶべき分野が急速に確立しつつある。この方法をタンパク 1 分子に適用するシミュレーションが行われており[14]、現実の問題点として強い X 線レーザー光による試料のクーロン爆発が指摘されている[15]が、最も基本となるプロセスに様々な不確定要因が存在するため、1 分子でしかもアトム分解能の構造解析が実現可能かどうかには未だ議論がある。

分解能を犠牲にして 1nm 程度まで落とすと、試料が損傷しない内にデータを取りきることはほぼ確実に可能であり、更に細胞内にある分子の低分解能構造を決定することも可能だと考えられる。このような低分解能データは、(a)生化学的シーケンス情報との組み合わせで構造情報を構築する、(b)結晶化が容易となる修飾手段に関する情報を与える、(c)結晶構造解析で結晶内構造が与えられている分子に関しては、細胞環境内での動きの情報を与える、(d)細胞環境内での複合体の低分解能構造データが得られる、等々の様々な新しい可能性が議論されているが、これらを実現するためには着実な研究開発が必要となろう。

一方で、コヒーレント散乱 X 線マイクロスコピィを分子クラスターに適用すると、試料が損傷するよりも早く、アトム分解能に対応する散乱データ収集が可能となると考えられている。このためには、「穏やかな」コヒーレント X 線入射が必要となる。コヒーレンスを崩さずに強度を下げる光学素子の開発は進行中だが、XFEL が出るころにはこのような光学素

子も完成しているものと思われる。

XFEL のフェムト秒領域のパルスは、高速現象の追跡に利用可能であり、生物学への応用も多いものと思われる。但し、ここでも放射線損傷が問題となるので、今後、多数の別個体でのデータから時間的シーケンスを構成していくアルゴリズムの開発が重要になって行くと考えられる。

7. おわりに

現時点で、まだ誰も見たことのない XFEL の利用方法を論じるのは、ある意味では言いたい放題であるが、実際には分かっていないことの方が圧倒的に多い。しかしながら、今から様々なシナリオを準備しておくことは重要である。特に第三世代の時とは違って我々が先頭に立って切り拓かなければならない局面が十分に予想される XFEL では、事前のシナリオのどれが正しいかを明らかにするだけでインパクトの大きな仕事となる場合が十分にある。

前例のない所でサイエンスの議論をしていく必要が生じたこと自体が、この分野で我が国がフロントランナーの一員となったことの証拠でもある。理化学研究所では XFEL でのサイエンスを皆で議論する機会を設ける予定であるが、プロジェクトへのご意見・ご要望メールアドレス

Project-XFEL@spring8.or.jp

で承っているので、新しいサイエンスのご提案にもご利用頂けることを期待している。

参考文献

- [1] J. M. C. Madey, J. Appl. Phys. **42** (1971) 1906-1913.
- [2] R. Bonifacio, C. Pellegrini and L. M. Narducci, Opt. Commun. **50** (1984) 373.
K.-J. Kim, Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 1871.
- [3] 新竹積, 放射光, **18** (2005) 35.
- [4] <http://xfel.desy.de/>
- [5] <http://www-ssrl.slac.stanford.edu/lcls/>
- [6] http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/12/gakujutu/toushin/990505.htm
- [7] T. Ishikawa *et al.*, SPIE Proceedings, Vol. **4145** (2000) 1.
- [8] T. Hara *et al.*, Rev. Sci. Instrum., **73** (2002) 1125.
- [9] H. Kitamura, J. Synchrotron Rad. **7** (2000) 121.
- [10] 北村英男, 新竹積, 石川哲也, 放射光, **16** (2003) 65.
- [11] <http://www-xfel.spring8.or.jp>
- [12] M. Yabashi, K. Tamasaku and T. Ishikawa, Phys. Rev. Lett., **87** (2001) 140801.
- [13] J. Miao *et al.*, Nature, **400** (1999) 342.

- [14] J. Miao, K. O. Hodgson and D. Sayre, PNAS, **98** (2001) 6641.
- [15] R. Neutze *et al.*, Nature, **408** (2000) 752.