

次世代放射光源に関する考え方

平成17年9月3日

日本放射光学会

要 旨

日本放射光学会では、光科学のフロンティアとして、我が国の放射光科学のあり方について、特別委員会を設置して提言を行うと共に、ワークショップや講演会などで様々な見地からの議論を積み重ねてきた。

最近、第3期科学技術基本計画に盛り込まれる予定のいわゆる「国家基幹技術10項目」の中に次世代放射光源が含まれることが明らかにされた。放射光学会はこれに対して、「次世代光源検討特別委員会」を設置し、従来提言してきた将来計画の考え方を踏まえて、新たに次世代光源計画についての基本的な考え方の検討を行った結果、以下のような二つの方向にまとめた。

1) 究極を目指す光源計画

X線自由電子レーザーは、レーザー光科学分野と放射光分野の両面からみて、究極的性能を達成する光源として位置づけられ、それらを渴望してきた研究分野に対して大きな飛躍を与えることが期待できる。我が国独自技術による光源のコンパクト化というブレークスルーにより国際的にも先導的な計画であり、X線自由電子レーザーの実現を目指すことはきわめて重要である。しかしながら、計画推進においては、光源建設とそれを利用する研究領域の開拓の両面において可能な限りの見通しを明確化し、より一層の研鑽を積む必要がある。そのためには、X線自由電子レーザーの利用形態は全国共同利用として明確に位置づけ、放射光コミュニティーを含むより幅広い科学技術分野の叡智を結集すべきである。

2) 先端的基盤設備としての光源計画

リング型光源は、全国共同利用の放射光施設において、数多くの成果を基礎科学から産業利用にわたって定常的に創出しており、幅広い研究領域において必要不可欠な基盤設備である。上記のX線自由電子レーザーはリング型光源とは全く異なる性質の光源であり、リング型光源はX線自由電子レーザーではカバーできない多数の重要な分野（物質科学、生命科学、環境科学等々）の基盤科学を支えている。従って、その重要性はX線自由電子レーザーの実現如何に関わらず益々増えていくことは確実であり、新しいリング型光源を計画的に建設することが極めて重要である。欧米でX線自由電子レーザー計画があると共に、新しいリング型光源の建設が予定されていることから、このことは明らかである。我が国の国際競争力を維持するためには、波及性、社会貢献度の大きい基盤設備としての先端的リング型光源計画を早急に策定・推進することが、放射光コミュニティーにとって極めて重要である。

1. はじめに

日本放射光学会では設立以来、我が国における放射光施設のあり方について特別委員会を設けて検討してきた。1989年に設けられた将来計画特別委員会（菊田惺志委員長）では、まず大型施設計画について検討し、1990年4月に調査報告書（「放射光」vol.3、206（1990））を出し、続いて1991年4月には「中型施設計画に関する調査報告書」（「放射光」別冊（1991））として中型施設7計画についての見解をまとめている。さらに2001年には我が国の放射光施設のグランドデザインを検討するために「将来計画検討特別委員会（上坪宏道委員長）」を設置し、一年にわたって、特に、極紫外・軟X線計画について詳細に議論を積み重ねてきた。この委員会での検討は、文科省が音頭を取った物性研、東北大、KEK-PF 三者の検討会の内容と連携しながらまとめられた（「放射光」vol.16、（2003））。これらの検討結果は放射光コミュニティの総意として国の委員会などに提出されたが、残念ながら計画の実現には至っていない。

最近、第3期科学技術基本計画に盛り込まれる予定の「今後10年以内に重点的に開発に取り組む国家基幹技術10項目」が明らかにされた。この中には次世代放射光源が挙げられている。次世代光源については、2002年以来、年会の企画講演会などで議論されてきた。また、2004年夏に行われた「若手を中心としたワークショップ 今後30年の未来像」での議論にも、科学的見地からの議論を行った。しかし、放射光学会全体の指針として総合的な検討は行われていない。そこで、「次世代光源検討特別委員会」を設置し、従来検討されてきた将来計画に新たに次世代光源を加えて検討を行い、第3期科学技術基本計画の国家基幹技術に対する放射光学会の考えをまとめることとなった。

2. 放射光学会の次世代光源計画に対する基本的な考え

合計4回の特別委員会と公開シンポジウムを開催し、議論を重ねた結果、国の第3期科学技術基本計画における基幹技術に対する放射光学会の基本的な考えとして、以下のようにまとめた。

放射光コミュニティが望む次世代光源は、従来から検討を行ってきた先端的基盤設備としての光源計画と、未踏技術としての究極を目指す光源計画という二つの相補的なコンセプトを矛盾なく実現するものでなければならない。

（A）究極を目指す光源計画

現在の放射光科学の連続的な発展を超えた、質の異なる飛躍的な発展が期待できる未踏の研究領域を開拓する光源計画であること。

（B）先端的基盤設備としての光源計画

物理、化学、ナノ・材料、情報、バイオ、医学、環境など幅広い研究領域においてインパクトのある実績を数多く定常的に創出している現在の放射光科学を持続的に、かつ、さらに広範に発展・進化させる拡張性、波及性のある光源計画であること。

「究極を目指す光源計画」は、これまでの放射光科学が主に利用してきた大強度、高輝度、広スペクトルという放射光の性能に対して、先導的な光の性質を特徴づけるキーワードであるコヒー

レンズ、超短パルス、超低エミッタンスの究極的性能を目指す光源開発とそれをを用いる研究領域を開拓する計画を意味する。これに対して、「先端的基盤設備としての光源計画」は、数多くのユーザーによる共同利用を実施しているアクティブな主要放射光施設の性能の維持・発展、物的・人的資源の最大活用、新たな利用者層の獲得、産業利用の拡大等を含む、加速器 R & D に基づく先端化した性能を持つ新しいリング型光源開発計画を意味する。

第 3 期科学技術基本計画の議論にのぼっている X 線自由電子レーザーは、前者のコンセプトの実現を目指す計画として、放射光コミュニティにおいては位置づけることができる。

(1) 究極を目指す光源計画に対する考え方

1・1

X 線自由電子レーザーは、レーザー光科学分野における短波長化による新たな光科学分野への展開と位置づけられると同時に、第 3 世代光源から生まれたキーワードである、コヒーレンス、超短パルス、超低エミッタンスの究極的性能を達成できる光源として位置づけられる。X 線自由電子レーザーが実現すれば、これらのキーワードを渴望してきた研究分野においては大きな飛躍が期待できる。加えて、米国やドイツにおいて、LCLS、X 線自由電子レーザーという同様の計画が高い優先度で進められている状況は、国際的にも X 線自由電子レーザーの意義が認知されていることを物語っている。我が国の独自技術による光源のコンパクト化というブレイクスルーにより国際的にも先導的な計画であり、X 線自由電子レーザーの実現を目指すことはきわめて重要である。

1・2

X 線自由電子レーザーが目指すサイエンスは、これまでの放射光科学の連続的な発展の延長線上には位置せず、質的な変化と飛躍を伴う未踏の研究領域の開拓を促す性質を有している。このような計画の常として、計画が立案される段階においては、すべての見通しが確実であることを要求することは困難である。しかしながら、大きな予算措置を伴う計画であることから、可能な限りの見通しを光源建設、特にそれを利用する研究領域の開拓面においてより一層明確化する必要がある。光源建設の段階的な進展において得られる軟 X 線領域の光を有効に利用する事を積極的に検討すべきである。放射光コミュニティは X 線自由電子レーザーが可能とならしめる研究領域の開拓に対して、十分な見識を持つべく、今後より一層の研鑽を積む必要がある。また、積極的に活用することを通して、放射光と相補的な役割を持つ X 線自由電子レーザーの活用寄予すべきである。

現状での放射光コミュニティの X 線自由電子レーザーの利用研究に対する考え方の一例を別添に示す。

1・3

カオス光である放射光では得られない X 線自由電子レーザーの利用研究は、放射光コミュニティのみならず、レーザー光科学コミュニティの参入が、未踏の研究領域の開拓にとって望ま

しい。従って、X線自由電子レーザーの利用形態も、従来の放射光施設と同様に、全国共同利用として明確に位置づけ、放射光コミュニティーを含むより幅広い科学技術分野の叡智を結集すべきである。

(2) 先端的基盤設備としての光源計画に対する考え方

2-1

リング型光源による放射光研究は第2世代、第3世代と進んできた現在、多くの研究領域でその利用が、基礎科学から産業利用にわたって、着実に定着してきた。その結果、放射光利用研究の数多くの成果が全国共同利用の放射光施設から定常的に創出される状況になった。PF、SPring-8、UVSOR等の既存のリング型光源で、光源性能の高度化の努力は行われてきており、当初の設計値を上回る性能で運転が行われている。その結果として、国際的に高い評価を得ている数多くの放射光利用研究の成果が創出され、タンパク3000やナノテクなどの国の基幹プロジェクトにも大きく貢献してきた。欧米でも同様に放射光を用いたナノテク、バイオ関係のプロジェクトが推進されている。このように、リング型光源は基礎科学から産業利用にわたる幅広い研究領域において必要不可欠な基盤設備としてその重要性が世界的に認識されている。

2-2

リング型光源に対しては、科学の発展により、光源性能に対するさらなる高度化の要望があり、それゆえ、欧米においても、ESRF、APSの建設後、ダイヤモンド、SLS、ソレイユ等の第3世代中型リング型光源の建設が進められている。さらに、サイエンスの最近の発展から出てきた光源に対するニーズを満たすための新しいリング型光源コンセプトが提案されてきている。このようなリング型光源はX線自由電子レーザーとは全く異なる性質の光源であり、X線自由電子レーザーでは現時点ではカバーできない多数の重要な分野が物質科学、生命科学、環境科学に存在し、基盤科学を支える必要不可欠な基盤設備である。従って、その重要性はX線自由電子レーザーの実現如何に関わらず益々増えていくことは確実であり、このことは日本のみならず世界の放射光コミュニティーの一致した認識である。

放射光利用研究を間断なく進化させ、世界最高レベルの我が国の国際競争力を維持するためには、新しいリング型光源コンセプトを実現するためのR&Dを強力に推進すると同時に、20～30年と言われるリング型光源の寿命を勘案して、先端的基盤設備としてのリング型光源を計画的に建設することが極めて重要である。このことは、米国でLCLSの建設後にNSLS、ALS、APSの後継器の建設が既にDOE政策のロードマップに明確に盛り込まれていることからみても明らかである。

2-3

以上のことから、第三世代光源ではカバーできない性能を有する先端的基盤設備としてのリング型光源計画の推進は必要不可欠である。そのためには、物質構造科学研究所や日本原子力研究所で検討されているSSR(Super Storage Ring)計画やERL計画等のR&Dを強力に推進し、特

色ある新しいリング型光源の開発・実現が望まれる。その際、放射光コミュニティは加速器コミュニティと連携して、技術革新による光源加速器建設費用のコストダウンに努めると共に、これらの将来計画の発展的な統合も含む新しいリング型光源計画を実現するために、一致団結して早期にその策定と推進を行い、波及性、社会貢献度の大きい放射光科学を持続的に発展させることこそが、放射光コミュニティにとっての緊急かつ最重要課題である。

2・4

極紫外・軟 X 線放射光源計画については 2001 年の放射光学会のまとめた提言や放射光コミュニティの強い要望を受け、東京大学が計画を強力に推進してきている。その間に行われたこの計画のための要素技術開発は、PF や UVSOR、HiSOR など現在稼働中の放射光施設の高度化に大きく貢献していることは高く評価されるものである。この分野の利用研究は日本の近未来の高度産業技術であるナノテクノロジーおよびバイオテクノロジーなどに直結しており、このリング型光源計画の早期実現を多くの利用者が期待している。その後の 4 年間に極紫外・軟 X 線領域のサイエンスは大きく進歩してきており、この領域のサイエンスを早期に遂行することが急務である。

(3) 光源計画全体に対する考え方

次世代光源の将来計画は、10 年先を見渡したものであるべきであるが、科学技術及びサイエンスの発展に伴い 2～3 年ごとに再検討を含めた議論を学会として今後行っていく必要がある。

また、次世代光源計画をより効率的かつ効果的に進めるために、今後、R&D の一環として、既存資源の有効活用及び既存施設の高度化を行うことも、検討課題として含めていくべきである。

以上の他に、地域に根ざした中・小型光源計画（東北大学、名古屋大学など）がある。これらの地域計画には独自の役割があり、それらを実現することは意義が大きい。

別添資料

資料 1 . 放射光学会「次世代光源検討特別委員会」委員およびスケジュール

資料 2 . 公開シンポジウムポスター

資料 3 . X 線自由電子レーザーの利用研究の展開

放射光学会「次世代光源検討特別委員会」委員

朝倉清高(北大)	<u>雨宮慶幸(東大)</u>	太田俊明(東大)
尾嶋正治(東大)	片岡幹雄(奈良先端大)	籠島 靖(兵庫県立大)
神谷幸秀(KEK)	熊谷教孝(JASRI)	腰原伸也(東工大)
坂田 誠(名大)	佐々木 聡(東工大)	佐藤能雅(東大)
中川敦史(阪大)	中迫雅由(慶応大)	並河一道(学芸大)
平井康晴(日立)	松原英一郎(東北大)	

(以上 17 名、下線委員長)

オブザーバー/事務局 (放射光学会)
下村理(会長)、高田昌樹(庶務幹事)、澤 博(渉外幹事)

特別委員会スケジュール

第1回 2005年3月22日 15-17時 八重洲ダイビル
第2回 2005年4月12日 13-20時 東大・理学部
公開シンポジウム(13-16時)
次世代光源の将来像
新しい高輝度X線源の建設とそれが切り開くサイエンス
第3回 2005年4月19日 14-16時 八重洲ホール
第4回 2005年8月11日 14-16時 理研東京事務所

別添資料 1 公開シンポジウムポスター

日本放射光学会・次世代光源検討特別委員会主催 公開シンポジウム

次世代光源の将来像

新しい高輝度X線源の建設とそれが切り開くサイエンス



日時:平成17年4月12日(火)13:00~16:30
会場:東京大学理学部化学本館(5階)講堂
〒804-8415 東京都文京区本郷7-3-1
地下鉄東大前、本郷三丁目、根津のいずれかで下車 徒歩10分
参加費:無料

プログラム

- 我が国の次世代光源計画を取り巻く状況
両宮慶幸(東大新領域)
- フォトンファクトリーの次期光源計画
松下 正(高エネルギー加速器研究機構物構研)
- 極紫外・軟X線放射光源計画
柿崎明人(東大物性研)
- エネルギー回収型超伝導リニアック(ERL)次世代放射光源とその拓く世界
羽島良一(原研関西研)
- X線自由電子レーザー
石川哲也(理研播磨研)
- 総合討論

連絡先:日本放射光学会事務局
〒170-0013 東京都豊島区東池袋2-62-0-507(有)WORDS内
TEL.03-5950-4896 e-mail: jsarrinfo@jsarr.jp

X線自由電子レーザーの利用研究の展開

これまでのわが国の放射光科学は、生命科学・物質科学分野において基礎科学上さらには今後の産業基盤に関わる知的資産の形成に大きな貢献を行ってきた。1997年に稼動した SPring-8 における一連の実験から、時間・空間コヒーレンスの積極的利用が次世代の放射光を用いた物質生命科学分野の方向性を決めるのではないかと考えられている。また、これまでの構造解析に積極的に時間軸をとりこむとともに、更にサブミクロン程度の非結晶試料測定が次世代の放射光研究展開の視野に入り始めた。このような放射光科学の展開では、コヒーレントな短パルス光を供給可能な次世代光源の開発が必要とされる。

次世代光源としては、従来の蓄積リング型光源の設計原理から離れて、上記2つの性能を積極的に実現することが可能な線形加速器を基本とする ERL、更に時間コヒーレンスの制御をも視野に入れた X線自由電子レーザーがある。蓄積リング型光源や ERL が同時期に多数のユーザーに対する光供給が可能であり、これまでの放射光ユーザーが積み上げてきた研究形態、実験設備などを有効に利用可能である。一方で、X線自由電子レーザーは人類がいまだかつて経験したことのない光を供給するものの、ごく限られたユーザーが極度に先鋭的な実験を行うものと予想される。

放射光コミュニティとしては、これまでの蓄積を将来においても生かし、数多くの実験によって新たな産業基盤を支えることの出来る基礎科学研究を実施可能な光源を必要とし、また一方で、世界的にも開発が始められた X線自由電子レーザーの実現を視野に入れた将来計画を模索せねばならない。

<物質科学関係： 文責 腰原伸也 >

フェムト秒の X線パルス発生技術の確立は、物質科学分野の研究者の永年の夢である。その利用研究には大きく分けて3つの方向性がある。一つは励起光源そのものとして利用する方法である。この場合には、パルス X線による高強度電場という特殊な環境下に置かれた原子や分子の超多価イオン化やクーロン爆発等の種々の新現象の発現が期待されている。とりわけ昨今では、フェムト秒レーザーによる超高励起場での実験から、原子周辺の電子の波動関数の立体像把握等へも、この種の超高エネルギー励起が活用できることが報告され、今後の展開が楽しみな分野となっている (Nature 432 (2004) 867)。また電子線そのものを超短パルス大電流として利用した、超高強度磁場の実験等も報告され (Nature 428 (2004) 831) このような利用法にも注目が集まりつつある。さらにフェムト秒 X線パルス励起による放射線化学反応の初期過程研究への利用も注目を集めている。

今一つの利用方向は、超短パルスレーザー等の他の励起源と組み合わせて、FELから発生する X

線を検索光として利用する、ポンプ - プローブ法である。この種の実験では、まさに化学反応や電子 格子相互作用に起因する物性変化の「動画」をとらえることが可能となるため、超高速光電子デバイス開発のための機構解明や生体物質も含めた動的構造科学、レーザーアブレーションといったプロセス科学 (Science 308 (2005) 392) 等々、広範な基礎、応用科学に利用できることが期待されている。特に近年発達の著しい電子相関係物質においては、その物性の鍵を握る種々の素励起が関与する電子的、磁氣的、誘電的素過程の時間領域がフェムト秒オーダーと推定されるため、その格子構造のみならず、電子密度解析等との組み合わせによる新しい動的特性解析技術の登場が待望されている。従来の半導体につながる強相関係物質デバイス科学を切り開くという視点でも、FELによるパルスX線技術の発達への期待は大である。さらに超短パルスX線を用いた各種X線吸収分光法との組み合わせによる、実用的な動的解析手段としての研究も進んでおり (Chem. Rev. 2004, 104, 1781-1812)、光触媒や表面化学反応の局所電子状態変化等も含んだ、一般的な超高速構造変化研究手法として幅広い利用が広がることが期待されている。さらに、X線強度が強大化すれば、衝撃圧縮下の構造変化のような不可逆現象における構造変化研究への応用も大きく広がるであろう。一方で、光源の低繰り返し、さらにはピーク強度の強大性等の問題も指摘されている。SLAC-LCLSでは、パルス長230フェムト秒 (FWHM)、ピーク輝度 10^{32} photons/sec/mm²/mrad²/0.1%BWが見込まれている。この輝度は、ナノスケールの物質構造解析を行うには十分であり、むしろダメージによる試料の損傷が問題となる。また、ポンプ - プローブ実験を行う際には、X線とレーザーとの同期ジッター (1ピコ秒以下)、X線ビームの位置安定性 (1ミクロン以下) が実現できるかどうか、技術的な課題である。この点に関しては、今後、もっと時間分解能が遅い手法を用いての事前検討実験との組み合わせが鍵となると考えられる。

3つ目の方向性は、コヒーレンスを利用するものである。コヒーレントX線による物質のX線散乱から、ナノスケールの非晶質試料の実空間での物質構造を再構成することが可能となり (いわゆるX線回折顕微鏡)、原子レベルの分解能でナノスケール材料の内部構造観察が可能となるであろう。 (Proc Natl Acad Sci U S A. 2003, 100 110-112; Phys. Rev. Lett. 2002, 89, 088303) たとえば物質内の微細構造や、物質全体にわたるドメイン構造など、電子顕微鏡では得られない、物質の原子レベルでのバルク構造に関する知見が得られると期待される。

< 生命科学関係 : 文責 中迫雅由 >

X F E L が 1 程度のX線レーザーを供給し、S / Nの良い測定装置が利用できるものと考えた場合、ライフサイエンス分野での利用研究として、タンパク質分子やその複合体、更には、細胞内小器官といった非結晶性単粒子の構造解析が挙げられる。

タンパク質や多数のタンパク質で構成された複合体の立体構造は生命現象の原子レベルでの理解につながるとともに、病気の原因タンパク質に対する創薬のための基盤データを与える。過去数年間にわたってタンパク 3 0 0 0 プロジェクトが実施されてきたのもこのような背景に基づくものである。これまでに3万を超えるタンパク質の立体構造解析が人類によってなされてき

たが、生物個体ゲノムの3ないし4割を占め、細胞活動に大きな影響を及ぼしている生体膜結合性タンパク質（膜タンパク質）の構造解析例は、水溶性のもの見比べると著しく少なく、全体の2%にも及ばない。膜タンパク質の大量発現が現在でも難しいこと、膜タンパク質を可溶化する必要があるなどといった点が良質な結晶作成を困難にしており、膜タンパク質結晶解析のボトルネックとなっている。このような状況から、ごく少量の試料溶液から結晶を作成することなく原子分解能での構造解析手法が望まれている。今世紀に入ってから非結晶性単粒子構造解析についての計算機実験が行われ、オーバーサンプリング - 位相回復アルゴリズムとX線自由電子レーザーがもたらす高強度、超短パルスX線を併用することで、タンパク質1分子の構造解析が可能であることが示された。それゆえ、X線自由電子レーザーの実現は、現在よりもはるかに短い期間で、網羅的な膜タンパク質構造解析を実施できる可能性を飛躍的に高めると考えられる。

さらに進んだX線自由電子レーザー利用としては、生体内で離散集合しながら機能を発現している超分子複合体の構造解析やそれら複合体の構造解析や時間変化追跡が挙げられる。生体内で、タンパク質は超分子複合体を形成し、効率的かつ迅速な生物学的反応を可能としている。そのような分子複合体の大きさは数十から百ナノメートルにも及ぶため、その構造決定を既存の結晶解析によっては行うには不十分と限界があろう。1分子計測なる顕微鏡下での生体分子の運動追跡方法が開発されたが、原子レベルでの運動追跡は不可能であるため、タンパク質複合体の動作原理の理解に向けて、さらに解像度の高い観察方法が希求されている。X線自由電子レーザーによる構造解析は、このような生体分子複合体のダイナミクス解明やそれに基づくナノマシン創生に大きく貢献すると期待される。タンパク質やその複合体からさらに大きな生体構成成分に目を転じればオルガネラと称されるミトコンドリアなどの原子レベルでの構造解析が究極目標としてあげられよう。

一方で、この手法を可能とするには生体物質特有の壊れやすさに起因した様々な問題に対処しなければならない。超強力なX線パルスによって、タンパク質分子は1ピコ秒以内にプラズマ化して構成原子がばらばらに飛散してしまうと予想され、全ての散乱パターン測定を通じて、タンパク質分子の立体構造は十分な構造同型性を保たなければならず、溶液中で生じる内部運動を制御する必要がある。タンパク質の運動を停止できるような阻害剤、万能な構造固定薬剤の開発と利用が必要となるかもしれない。また、サブナノメートルサイズの粒子に短パルスX線を照射する方法を検討する必要がある。例えば、質量分析装置などを利用して、タンパク質分子を飛翔させるならば、タンパク質の立体構造を壊すことのないマトリックス薬剤の開発が必要であろう。

一粒子測定に必要な加速器や解析面の技術要素は次第に完成に近づきつつあるが、サブミクロン生体試料の取り扱いに関しては、今後、有機化学関係、生化学関係の研究分野の協力を得ながら現実のものとしてゆく必要がある。