

光ビームライン

1. はじめに

X線自由電子レーザー（XFEL）の光を安全かつ有効に利用して研究を行うためには、信頼性の高い光ビームラインが必要となる。光ビームラインの第一の役割は、光源より放射された光から実験に必要な空間領域および波長成分を切り出してエンドステーションまで輸送することである。当然のことながら、安全を保障しつつも光源の長所をなるべく損なわずに輸送することが望ましい。そのためには、光の特性に適合した光学系を構築しなければならない。SACLAのXFELの主な特性として以下のものが挙げられる。

- (1) 短波長（最短 0.06 nm）
- (2) 30 GW を超える高いピークパワー
- (3) 空間コヒーレンスが完全に近い
- (4) 10 fs 程度の短時間パルス
- (5) 低い繰返し周波数（最大 60 Hz）

(1) の短波長 X 線を対象としたビームライン光学系については、KEK-PF や SPring-8 に代表される放射光実験施設で長年にわたって蓄積された技術を活用することができる[1]。SACLA の場合も、多くの部分で放射光ビームラインの技術を踏襲しており、安定な光供給を実現している。

(2) ～ (4) の特性は従来の放射光源と大きく異なるもので、特に光学素子の選定に際して配慮を必要とする。例えば、空間コヒーレンスを損なわないために、超精密加工を施した光学素子を用いて波面の乱れを最小限にとどめる必要がある[2]。また、高いピークパワーによる光学素子の損傷も深刻な問題である。損傷が起こるメカニズムが放射光とは異なるため、現在も損傷に関する研究が続けられている[3]。(5) については、次で述べる光診断システムを設計するうえで特に重視すべき特性である。

光診断、すなわち強度、空間プロファイル、波長などの光特性の定量的評価もビームラインの重要な役割のひとつである。光診断システムこそ、従来の放射光ビームラインと比べて違いが際

立つ部分と言えよう。先に挙げた XFEL の特徴に加えて、診断結果の利用目的をじゅうぶんに考慮して性能（感度、分解能、精度）を決める必要がある。光診断システムは、光ビームラインの調整はもちろん、利用実験や加速器の調整にも利用される。

XFEL の利用実験では、単一パルス光で測定を完結させるシングルショット計測が主流となっている。単一パルス光の短時間露光によって原子や分子の動きによる試料のブレを抑えるためである。写真撮影に例えると、ストロボ撮影で被写体ブレを抑えることに相当する。また、高いピークパワーの光パルスでは試料が破壊されるため、そもそも複数パルス光の照射が不可能な場合も多い。シングルショット計測を行う上で光診断システムに求められる要件として、特に以下の二点を挙げることができる。

- (1) 光診断もシングルショットで行う。
 - (2) 透過型モニターを用いて非破壊診断を行う。
- すなわち、各パルス光について強度、空間分布、波長などを実験と並行して測定し、実験データの解析に活用する必要がある。特に、SASE 方式の XFEL ではパルス毎に特性がばらつくため、非破壊のシングルショット光診断が不可欠である。さらに、繰返し周波数の低い XFEL を有効利用するためには、全ショットについて計測を行うことが望ましい。

光診断は、加速器の調整においても重要な役割を果たす。XFEL 光源の最終産物である光を診断して加速器の調整を行うことが有効であることは言うまでもない。蓄積リング型の放射光源の場合は、基本的に加速器の運転条件は一定である。これに対し、XFEL 光源ではユーザーの要求にあわせて加速器の運転条件を機動的に変更する必要がある。SACLA においては電子ビームの診断システムと光診断システムが協調的に働くことによって加速器の迅速な調整が可能になっている。また、定常運転の際にも透過型モニターを利用した光のリアルタイム診断が活用され、光の安定供給が実現している。

光学系と診断システムの他に、エンドステーションの常設実験装置もビームラインの一部として考えることもできる。例えば X 線シャッター、集光装置、光学レーザーなどが挙げられる。

本テキストでは硬 X 線ビームラインに話題を限定し、特に従来の放射光ビームラインとの違いが際立つ部分を重点的に記す。第 2 章ではビームライン光学系を概説する。続いて第 3 章でビームラインの光診断システムを解説し、光特性の測定例を示す。第 4 章においては先進的な光診断法の例を紹介し、特に、SASE 型 XFEL の特徴であるスペクトルの微細構造について詳しく述べる。第 5 章は実験ステーションの概説に充て、第 6 章で今後の展望を述べる。

なお、現在稼働中の硬 X 線ビームラインは、米国 LCLS と SACLA に 1 本ずつ存在するだけである。現時点では、XFEL の光ビームラインとして

一般化した内容を述べられるほど事例が揃っていない。従って、このテキストの内容も SACLA のビームライン (BL3) に特化したものとする。

2. ビームライン光学系

2.1. 光学系の構成

SACLA の BL3 の光学系は、スリット、高次高調波除去ミラー (平面ミラー)、二結晶分光器などの主要構成要素からなる [4]。各光学機器の基礎については多くの文献があるので、興味のある方はそれらを参考にさせていただきたい [1,5]。Fig. 1(a) に、BL3 の光学系の配置図を示す。光学系は、加速器収納部のフロントエンドセクション、光学ハッチ、実験ハッチにわたって設置されている。

フロントエンドセクションには主としてコリメーター、スリット、メインビームシャッターが

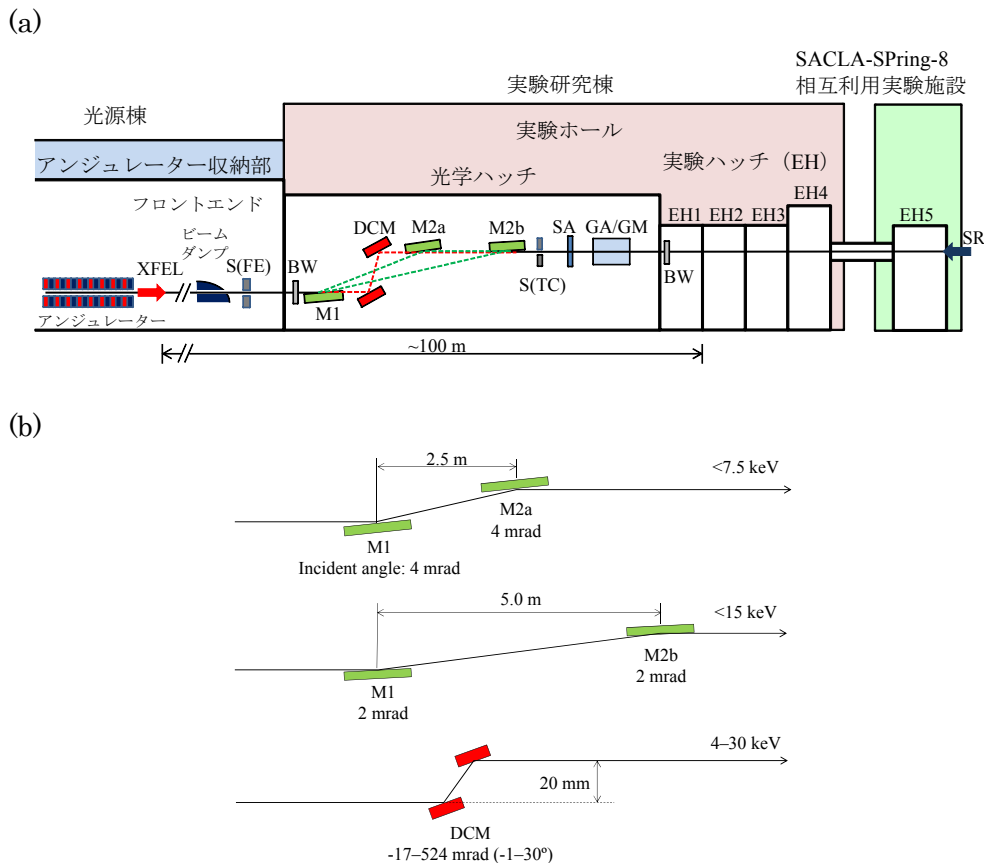


Fig. 1 (a) SACLA BL3 の光学系配置。S(FE) : フロントエンドスリット。BW : ベリリウム光学窓。M1, M2a, M2b : 高次光除去ミラー。DCM : 二結晶分光器。S(TC) : 四象限スリット。SA : 強度減衰板。GA/GM : 強度減衰用ガスチャンバー/ガスモニター。(b) 二結晶分光器および高次光除去ミラーの反射角と適用エネルギー範囲。

設置されている。これらの機器の主な役割は、下流側における安全の保証と機器保護である。コリメーターとスリットによって不要な軸外放射を取り除き、下流の光学系や放射線遮蔽体の負担を軽減する。メインビームシャッターは光学ハッチへの光の入射を制御し、入射に対して安全が確保されているときのみ開状態となる。

高次高調波除去ミラーや二結晶分光器などの基幹光学機器は、すべての実験に共通して利用されるため光学ハッチに集約されている。これにより各実験ハッチ内の常設光学機器を最小限にとどめ、実験用のスペースをなるべく広く確保することができる。SACLA で最初のビームラインのBL3では様々な種類の実験が提案されており、まだ開発途上の実験手法も多い。したがって、実験の汎用性と拡張性を重視したレイアウトとなっている。

光学ハッチ内のミラーと分光器は、XFELと同軸に入射してくるガンマ線や高次高調波を除去する光学フィルターの役割を担う。BL3ではミラーか分光器のどちらか一方を選択して利用する。どちらを使用する場合も、入射ビームの光軸から上方に20 mmシフトした位置に光が出射される。実験における利便性を確保するためにも、光軸のシフト量は波長や光学機器によらず一定としている(定位置出射)[4,6]。BL3の高次高調波除去ミラーと二結晶分光器の仕様を Fig.1(b)と Table 1に示す。

高次高調波除去ミラーは二枚一組で使用され、全反射条件によって光を選別する。一枚目のミラー(M1)で上方に向けて光を反射させ、等しい視斜角をもつ二枚目のミラー(M2aまたはM2b)で光軸を水平に戻す。この際、全反射条件を満たす低い光子エネルギーの光だけが反射されるため、ミラー対がローパスフィルターの役割を果たす。全反射条件を満たす光子エネルギーの上限は視斜角とミラー表面の材質によって決まっており、おおよその値はデータベース等で確認することができる[7]。光学ハッチには視斜角の異なる二組のミラー対が備えられている。一方のミラー対(M1とM2a)は視斜角4 mradで使用する。表面

に炭素コーティングが施されており、7.5 keVまでの光に使用できる。もう一方のミラー対(M1とM2b)の視斜角は2 mradであり、15 keVまでの光に使用できる。

二結晶分光器は、結晶のBragg反射を利用して特定の波長の光だけを透過させる。したがってバンドパスフィルターの役割を果たす。BL3ではシリコン結晶の111反射を利用しているため、透過した光のバンド幅は 10^{-4} ($\Delta E/E$)程度である。

上で述べた基幹光学系に加えて、4象限スリット、真空隔壁用の光学窓、強度減衰板、強度減衰用ガスチャンバーといった機器も光学ハッチ内に設置されている。また、実験ハッチにも集光用ミラーなどの光学機器が常設されている。これらは実験ステーションの汎用実験装置と位置付けることができ、第5章で解説する。

Table 1 高次光除去ミラーおよび二結晶分光器の仕様 [6]。

	高次光除去ミラー			DCM
	M1	M2a	M2b	
視斜角 /mrad	2, 4	4	2	-17-524 ^c
適用領域 /keV	<7.5	<7.5	<15	4-30
出射方向	上方	水平	水平	水平
長さ/mm ^a	400	400	400	90
幅 /mm	50	50	50	30
基板材質	Si	Si	Si	Si 結晶
コーティング		C ^b	C ^b	
結晶面				Si(111)

^a 光軸と平行な方向。

^b コーティング無しの部分(シリコン表面)も利用可。

^c -1° -30°

2.2. 光学素子

XFELのビームラインで用いるミラーや分光結晶などの光学素子の選定にあたっては、特に次のような点を考慮する必要がある。

(1) 数十 GW もの高いピークパワーの X 線が入射しても損傷しない材質とする。

(2) 密度ムラや表面の凹凸が極力少ない素子を使用し、コヒーレントな XFEL 光の波面を乱さないようにする。

この節では SACLA で使用されている光学素子を例に挙げ、上記の課題について解説する。

2.2.1. 光学素子の損傷

光学素子の損傷を避けるには、素子の材質を適切に選定しなければならない。選定の基準のひとつが、入射ビームフルエンスに対する吸収線量（ドーズ）である。物質に対して X 線が入射する場合の吸収線量は以下の式であらわされる。

$$D = \frac{F\mu A}{\rho N_A} \quad (2-1)$$

F : X 線ビームのエネルギーフルエンス

μ : 物質の X 線吸収係数

A : 物質の平均原子量

ρ : 物質の平均密度

N_A : アボガドロ数

$(A/\rho N_A)$ は原子数密度の逆数に相当するものである。大抵の固体の原子数密度は $10^{22} \sim 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 程度であり、物質の種類によって大きな差はない。これに対し、X 線吸収係数 μ は物質によって大きく異なる。一般的に軽元素で小さく、重元素では大きな値となる。例えば、光子エネルギー 10 keV における吸収係数は、ベリリウム（原子番号 4）では 1 cm^{-1} であるのに対し、銅（同 29）は $2 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ となる [7]。X 線用の光学窓としてベリリウム箔が利用されるのは、低い吸収係数によるところが大きい。

ミラーなどの反射光学素子の吸収線量については、反射率を考慮に入れる必要がある。このような場合であっても、一般的な傾向として軽元素ほど吸収線量が低くなる。例えば BL3 の平面ミラーの表面には炭素コーティングが施されており、吸収線量が低く抑えられている。

ここで、BL3 で使用されている素子の吸収線量を見積り、損傷のリスクがあるかどうかを考察してみる。まず、損傷が起こる吸収線量の目安とし

て、融解の閾値（メルティングドーズ）を考える。物質によって大小はあるが、概して 1 eV/atom 程度である。SACLA の BL3 では、光学窓としてベリリウム、分光結晶および減衰板としてシリコンを利用している。現状の 10 keV におけるエネルギーフルエンスを 0.5 J/cm^2 と見積もると、ベリリウムの吸収線量はおよそ $3 \times 10^{-5} \text{ eV/atom}$ 、シリコンでは $5 \times 10^{-3} \text{ eV/atom}$ となる（どちらも表面に対して垂直に光が入射した場合の値）。したがって、融解の閾値を超えることはない。ただし、 $1 \mu\text{m}$ 程度に XFEL ビームを集光する場合にはフルエンスが 5 桁ほど大きくなるので、シリコンはもちろん、ベリリウムでも損傷を受ける可能性が高い。

吸収線量を計算する際に必要となる X 線吸収係数などの情報は、データベースから入手することができる。特に、インターネット経由で参照できるものは便利である。一例として米国 Lawrence Berkeley National Laboratory のデータベースを紹介しておく [7]。

2.2.2. スペックルフリー品質

高い空間コヒーレンスを誇る SACLA の光は物質内の微細な構造を鋭敏に映し出すため、試料の高分解能観察にとって非常に有用である。ただ、この特徴は、ビームラインの光学素子のわずかな欠陥をも露見させてしまう。表面の凹凸や密度の濃淡など、不均一性のある物体にコヒーレントな光を照射すると、散乱された光が無秩序に干渉を起こす。結果として透過像や反射像にスペックルパターンと呼ばれる斑点模様が現れ、実験の妨げになることが多い。スペックルパターンを積極的に利用して構造解析をおこなう実験手法もあるが、当然のことながら試料以外のものに由来するスペックルは邪魔である。スペックルの発生を抑えるには、光学素子の表面形状精度と密度の均一性を高める必要がある。もちろん、ごみの付着、傷、汚れなどは論外である。

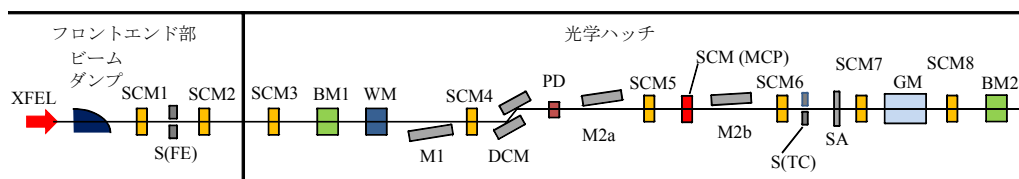


Fig. 2 BL3の光診断システムの配置図。SCM：スクリーンモニター。BM：ビームモニター。WM：波長モニター。PD：フォトダイオード。GM：ガスモニター。SCM(MCP)：MCP 付きスクリーンモニター。

ベリリウム窓やミラーといった XFEL ビームの輸送に不可欠な光学素子については、SACLAの建設が始まる前から開発が進められてきた[2,8]。ベリリウム窓には密度ムラの少ないベリリウム箔を用い、スペックルの発生を抑えている。このようなベリリウム箔は物理蒸着法（PVD法）で作製され、さらに表面の平均粗さ（Ra）が50 nm以下になるよう研磨されている[8]。ミラーには、elastic emission machining（EEM）法による超精密加工が施されている[2]。これにより表面粗さは0.2 nm（rms）以下にまで抑えられ、スペックルフリーの品質を実現している。なお、分光結晶および減衰板としては鏡面研磨されたシリコン結晶を採用しており、スペックルの発生が抑えられている。

3. 光診断システム

3.1. 診断システムの構成

BL3の主要な診断機器は光学ハッチ内に集約されており、光学系の調整、実験時の光特性データの取得、加速器の調整などに利用される。Fig. 2に光診断機器の配置図を示す。フロントエンド部から光学ハッチにかけて6種類の診断機器が配置されている。以下にモニターの名称と測定されるパラメーターを挙げる。

- (1) スクリーンモニター（強度、強度分布）
- (2) ビームモニター（強度、位置）
- (3) 波長モニター（中心波長）
- (4) フォトダイオード（強度）
- (5) ガスモニター（強度）

(6) MCP 付きスクリーンモニター（強度分布）

これらの診断機器では、光軸上に導入された薄膜やガスなどを媒体として光をモニターしている。いずれのモニターでも XFEL のパルス毎に測定を行うことが可能である。なお、モニターが不要の場合は、媒体を光軸より退避させることができる。以下の節ではそれぞれの診断機器の測定原理と測定結果の例を示す。

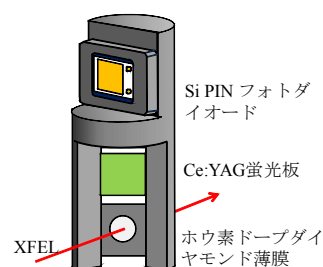


Fig. 3 スクリーンモニターの模式図。

3.2. スクリーンモニター

スクリーンモニターは、蛍光体を用いて XFEL ビームの空間強度分布を観測するためのものである。ミラーやスリットなどの下流に設置されており、特に光学系の調整の際に利用される。Fig. 3にBL3の標準的なスクリーンモニターを示す。2種類の蛍光スクリーン（Ce:YAG板およびホウ素ドープダイヤモンド薄膜）に加えて、パルスエネルギー測定用のフォトダイオードがセットになっている。これらのモニターが、パルスモーター駆動の位置決めステージによって光軸上に挿入される。

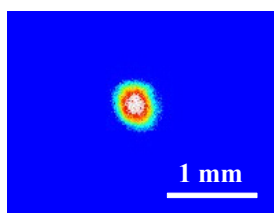


Fig. 4 スクリーンモニターで観測されたXFEL (10 keV) の空間強度分布。SCM3のホウ素ドープダイヤモンド薄膜を用いて観測された。

蛍光スクリーンは光軸に対して 45° 傾いており、光軸に直交する方向から CCD カメラで蛍光像を撮影できるようになっている。CCD カメラは毎秒 60 フレーム以上の撮像が可能であり、パルス毎に強度分布を記録することができる。2 種類のスクリーンのうち Ce:YAG の蛍光板は感度が高く、強度の低い X 線の観察に向いている。ただし、X 線透過率が低いため、透過型のモニターとしては利用できない。もう一方のホウ素ドープダイヤモンド薄膜は $30 \mu\text{m}$ 程度の厚さであり、X 線透過率が高い。光軸に対して 45° 傾けて配置した場合、10 keV の X 線に対して 96%以上の透過率を示す[7]。したがって、透過型のモニターとして利用でき、例えば実験データと入射光強度分布の相関をパルス毎に調べることも可能である。ただし、ダイヤモンド薄膜は Ce:YAG 板に比べて感度が低く、微弱な X 線の計測には向かない。Fig. 4 に、ホウ素ドープダイヤモンド薄膜で測定した XFEL パルスの強度分布を示す。

蛍光体とともに取り付けられているシリコン PIN フォトダイオード（浜松ホトニクス製 S3590-09）により、パルスあたりの強度（パルスエネルギー）を計測することが可能である。ただし、パルスエネルギーがマイクロジュールオーダーの強い光を入射すると出力が飽和してしまう。ナノジュールからピコジュールのオーダーの弱い光の強度計測に向いている。出力信号の増幅や伝送といった信号処理については、工藤らの論文で詳しく解説されている[9]。

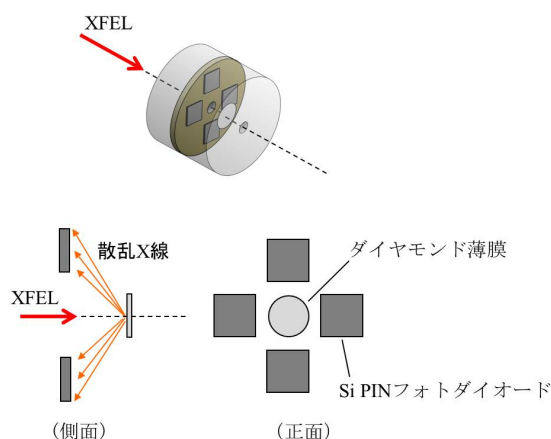


Fig. 5 ビームモニターの模式図。

3.3. ビームモニター

ビームモニターは、光軸上に挿入されたダイヤモンド薄膜からの後方散乱 X 線をフォトダイオードで検出し、XFEL パルスの強度と重心位置を測定する[10]。Fig. 5 に示すように、ダイヤモンド薄膜の上流側に、光軸を囲む形で上下左右にフォトダイオードが配置されている。上下左右のフォトダイオードからの出力を I_U 、 I_D 、 I_L 、 I_R とすると、パルスの強度はこれらの合計に比例する。

$$I \propto (I_U + I_D + I_L + I_R) \quad (3-1)$$

水平方向と鉛直方向の重心位置の変位（それぞれ x 、 y とする）については、変位量が小さい場合に以下の比例関係が成り立つ。

$$x \propto \frac{I_L - I_R}{I_L + I_R} \quad (3-2)$$

$$y \propto \frac{I_U - I_D}{I_U + I_D} \quad (3-3)$$

ビームモニターの出力を、強度と変位の絶対量に変換するには較正が必要である。強度については、X 線放射計を用いて較正が行われている[11]。変位に関しては、光を動かす代わりにビームモニターの筐体を上下または左右に移動させ、単位移

動量当たりの出力変化を求めている。Fig. 6に10 keVにおける強度のデータを、Fig. 7に光の変位と位置信号出力(3-2、3-3式の右边)の関係を示す。なお、ダイヤモンド薄膜(厚さ約15 μm)はX線透過率が高いため、透過型のモニターとして利用することが可能である。特に、実験時の入射光強度を測定するためのモニターとして重宝されている。

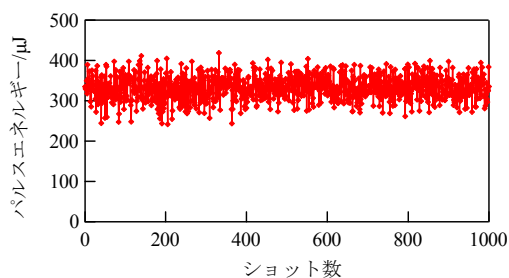


Fig. 6 ビームモニターでショット毎に測定されたパルスエネルギー。光子エネルギーは10 keV。

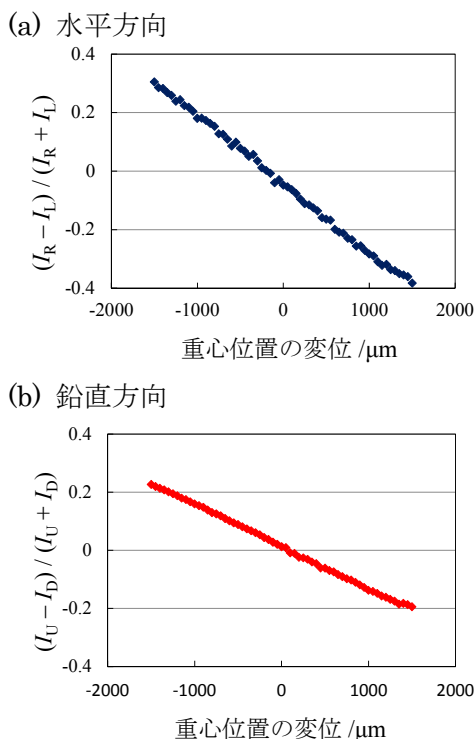


Fig. 7 XFEL ビーム位置の変位に対するビームモニターの位置信号出力。光子エネルギーは7 keV。(a) 水平方向。(b) 鉛直方向。

3.4. 波長モニター

波長モニターは、ダイヤモンド薄膜(厚さ約15 μm)からの回折X線の強度と回折角を測定することで、入射光の中心波長(光子エネルギー)を求める。前節で解説したビームモニターと同様、ダイヤモンド薄膜のX線透過率が高いため、透過型のモニターとして利用できる。

Fig. 8に、波長モニターの測定概念図を示す。ダイヤモンド薄膜と検出器アームに取り付けられた二次元検出器(Multi-port CCD; MPCCD)から構成される。ダイヤモンド薄膜は、平均粒径30 nm程度の微結晶からなる多結晶膜である。この薄膜にX線が入射すると粉末X線回折パターンが観測される。すなわち、各反射指数に対応したDebye-Scherrerリングが同心円状に形成される。このリングの一部をMPCCDで撮影し、回折角を求める。ここで、指数 klm のDebye-Scherrerリングについて考える。ダイヤモンド薄膜への入射X線と回折X線のなす角度を $2\theta_{klm}$ 、 klm 面間隔を d_{klm} とすると、Braggの式からX線の波長(λ)が求められる。

$$\lambda = 2d_{klm} \sin \theta_{klm} \quad (3-4)$$

BL3の波長モニターでは、反射指数111、220、311に対応するDebye-Scherrerリングを用いて

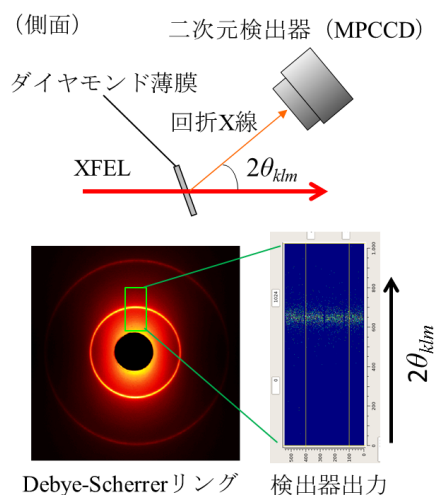


Fig. 8 波長モニターの測定概念図。二次元検出器でDebye-Scherrerリングの一部を観測し、Braggの式から波長を導出する。

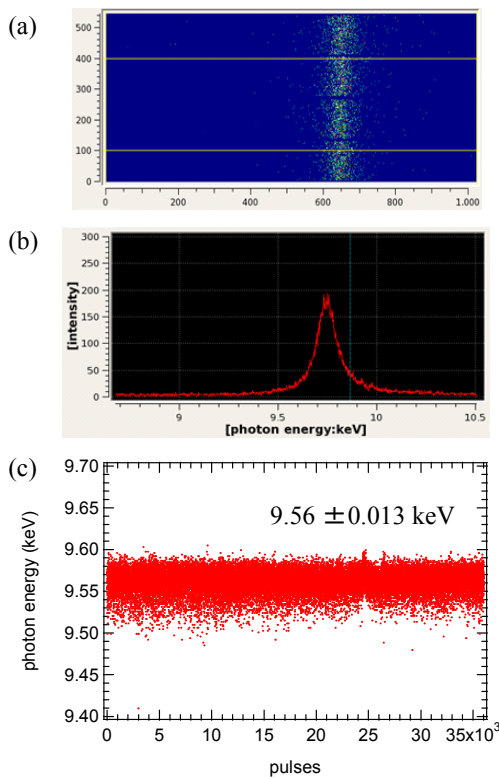


Fig. 9 波長モニターの測定結果。(a) MPCCD で観測した、111 反射の Debye-Scherrer リングの一部。(b) Debye-Scherrer リングの断層プロファイル。横軸は光子エネルギーに変換されている。(c) ショット毎に記録された中心光子エネルギー。

測定を行っている。Fig. 9(a),(b)に、MPCCD で取得した Debye-Scherrer リングの円弧と断層プロファイルを示す。断層プロファイルをカーブフィッティングしてピーク位置を求め、中心光子エネルギーを導出する。

光子エネルギーをパルス毎に測定した例を Fig. 9(c)に示す。9.6 keV の設定時に 36000 パルスにわたって測定されたデータである。このデータから、平均光子エネルギーは 9.56 keV、標準偏差は 0.013 keV (平均値の約 0.1%) と算出される。光子エネルギーのばらつきが XFEL のバンド幅 (FWHM で 0.5%程度) に比べて十分小さく、SACLA の加速器の安定性を示すデータの好例である。

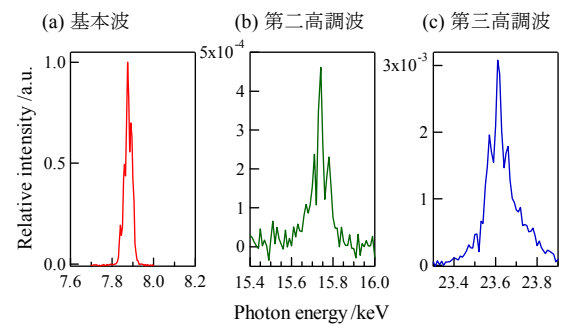


Fig. 10 二結晶分光器とフォトダイオードで測定した XFEL のスペクトル。基本波の光子エネルギーは 7.9 keV。(a) 基本波。(b) 第二高調波。(c) 第三高調波。

3.5. フォトダイオード

二結晶分光器からの出射光の強度を測定するために、分光器の下流側に Si PIN フォトダイオードが設置されている。3.2 節で述べたスクリーンモニターに取り付けられているものと同じである。主に、二結晶分光器の視斜角を掃引して入射光のスペクトルを測定する際に利用される。測定例として、アンジュレーター自発光、XFEL 基本波 (7 keV)、第二高調波、第三高調波のスペクトルを Fig. 10 に示す。

3.6. ガスモニター

ガスモニターは、アルゴンガスによって散乱された X 線をフォトダイオードで検出し、入射光の強度を測定する。Fig. 11 に模式図を示す。モニター内は約 1×10^3 Pa のアルゴンで満たされ、光軸の上下にフォトダイオードが配置されている。両方のフォトダイオードの出力の合計が入射光強度に比例する。Fig. 12 に測定例を示す。ガス充填領域の長さは約 500 mm であり、10 keV において 95%程度の X 線透過率を示す。したがって、透過

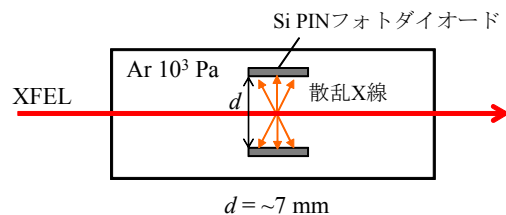


Fig. 11 ガスモニターの模式図。

型の強度モニターとして利用できる。なお、このガスモニターは、入射 XFEL の強度を減衰させるアッテネーターとしても機能する。

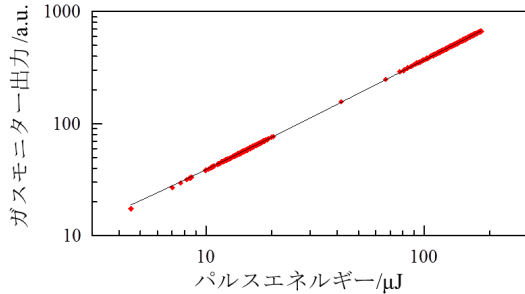


Fig. 12 パルスエネルギーに対するガスモニターの出力。シンボルが測定データを示す。直線は、一次関数によるフィッティング結果である。

3.7. MCP 付きスクリーンモニター

MCP 付きスクリーンモニターは、蛍光板とその前に設置された MCP を光軸上に挿入し、高い感度で X 線の強度分布を測定する。3.2 節で解説したスクリーンモニターでは検出できない弱い X 線ビームにも適用することができる。MCP (micro channel plate) には微小なチャンネルが多数設けられており、それぞれが電子増倍管の役割を果たす。X 線の照射によってチャンネルの内壁から発生した電子は電場で加速され、二次電子を次々と生み出しながら増倍される。増倍された電子がチャンネルから放出された後、電場で加速されて蛍光板に衝突する。結果として入射 X 線由来のシグナルが増幅され、強度分布を反映した蛍光像が観測できる。Fig. 13(a)に、MCP 付きスクリーンモニターの模式図を示す。他のスクリーンモニターと異なり、入射光に正対する向きに設置される。蛍光像は、後方に設置されたミラーを介して撮影される。

MCP 付きスクリーンモニターの主な用途は、アンジュレーター区間内における電子ビーム軌道の精密調整である[12]。この調整においては、マグネットで電子ビーム軌道を調整し、一台のアンジュレーターユニットで発生する自発放射の光軸をビームラインの基準軸に一致させる。単一

のユニットに限れば、自発放射の光軸は電子ビーム軸に一致しているため、電子ビーム軸も基準軸と一致することになる。それぞれユニットについて同様の調整を行うことで、最終的にすべてのユニットにおいて放射光軸および電子ビーム軸を基準軸に一致させることができる。このようにして、アンジュレーター区間全体にわたって光軸と電子ビーム軸を重ね合わせ、SASE 過程による光の増幅を促すことができる。しかも、XFEL 光軸がビームラインの仮想光軸に一致するため、光学系の調整が容易になる。

MCP 付きスクリーンモニターは、アンジュレーター自発放射の空間強度分布を観測し、光軸位置を求める目的で利用される。ただし、自発放射の全スペクトル領域を観測対象とすると、光軸位置を判定しがたい。自発放射の発散角が大きく、観測位置において空間的に大きく広がっているためである（大ざっぱに、発散角 $50 \mu\text{rad}$ 程度、観測点からアンジュレーターまで $100\text{--}200 \text{ m}$ ）。そこで、自発放射の光エネルギーと角度分布の関係を利用し、分光によって光軸に近い部分だけを取り出す。すなわち、自発放射のスペクトルから、高エネルギー側のエッジ付近を二結晶分光器で切り出す[Fig. 13(b)]。このようにして得られた近

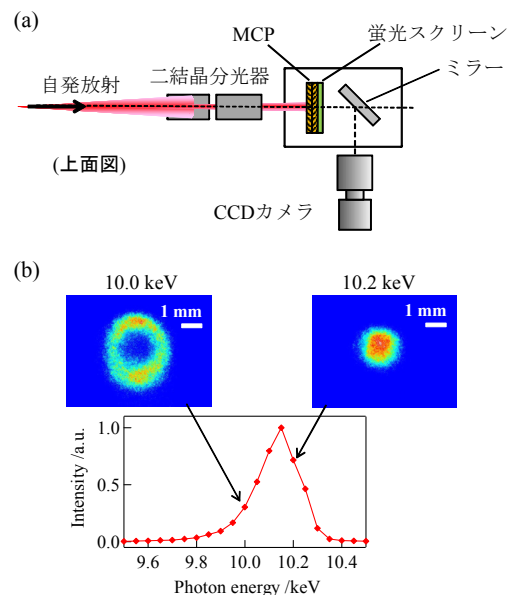


Fig. 13 (a) MCP 付きスクリーンモニターの模式図。(b)自発放射のスペクトルと分光後に観測される空間強度分布の例。

軸部分の光の強度分布をモニターし、光軸位置を求める。なお、Ce:YAG やダイヤモンドのスクリーンモニター (3.2 節) では感度が足りず、観測することができない。

4. 先進的光診断

4.1. 絶対強度計測

強度は最も基本的な光源パラメーターのひとつである。しかしながら、XFEL のような前例の少ない光の絶対強度を測定するのは簡単ではない。BL3 に常設されている診断機器では相対的な強度しか測定できないため、信頼できる絶対強度計による較正が必要である。絶対強度計のひとつとして、放射計が挙げられる。測定原理はシンプルで、X 線を物体に吸収させ、物体の温度の変化分と熱容量から X 線のエネルギーを求める。SACLA の BL3 においては、極低温放射計を利用して絶対強度を測定した[11]。また、ビームモニター (3.3 節) の較正と線形性の評価もこれを用いて行った。Fig. 14 に、ビームモニターの出力と絶対強度との関係を示す。両者の間に線形関係が成り立っていることが分かる。

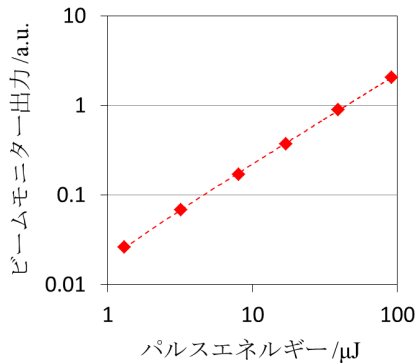


Fig. 14 極低温放射計で測定したパルスエネルギーとビームモニター出力の関係。

4.2. 高分解能スペクトル計測

SASE 方式によるレーザー発振はマルチモード発振であり、XFEL のスペクトルは、各モードに相当するスパイクに分解することができる[4]。スパイクのエネルギー幅はパルス時間幅のフーリエ

変換によって決まり、SACLA の場合は 10^{-1} eV のオーダーである。このようなエネルギー幅の狭いスパイク構造まで分解してスペクトルを計測するには、高分解能のスペクトロメーターが必要となる。しかも、スペクトルはパルス毎に変化するので、波長分散型のスペクトロメーターを用いたシングルショット計測が不可欠である。ここでは、SACLA で開発されたシングルショット高分解能スペクトロメーターによる計測について解説する。

波長分散型スペクトロメーターの観測領域は下記の式で表わされる。

$$\Delta E = \frac{\Delta\theta \cdot E}{\tan \theta_{klm}} \quad (4-1)$$

$\Delta\theta$: X 線の発散角

E : 光子エネルギー

θ_{klm} : klm 反射の Bragg 角

また、エネルギー分解能は次の式で表わされる。

$$\frac{dE}{E} = \frac{\sqrt{\sigma^2 + L^2 \omega^2}}{L \tan \theta_{klm}} \quad (4-2)$$

σ : 光源サイズ

L : 光源から検出器までの距離

ω : Bragg 反射のダーウィン幅

スペクトロメーターの観測可能領域について、Si(111)結晶を用いた場合を例に考えてみる。式

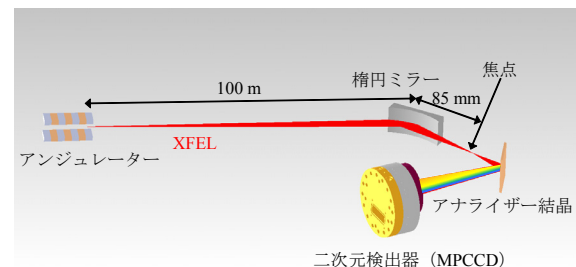


Fig. 15 高分解能スペクトロメーターの測定概念図。

(4-1)においてXFELの発散角($\Delta\theta$)を $1.5\ \mu\text{rad}$ とし、 $10\ \text{keV}$ の場合について計算すると、 $\Delta E = 74\ \text{meV}$ にしかならない。この観測領域では波長分散型スペクトロメーターとして機能しない。観測領域を拡げるためには、XFELの発散角を大きくする必要があるのである。SACLAのスペクトロメーターでは、楕円ミラーを用いて発散角を拡大し、観測領域を拡げている[13,14]。Fig. 15に、測定のご概念図を示す。楕円ミラーの一方の焦点はアンジュレーター光源点(焦点距離: 100m)とし、もう一方の焦点距離は 85mm 、入射角を 2.7mrad とすると、発散角を 2.5mrad まで拡げることができる。この場合の観測領域と分解能の計算結果をFig. 16に示す。楕円ミラーの集光点から検出器までの距離は 3m とした。観測領域を大きくするためには低指数面の反射が、分解能を向上させるためには高指数面の反射が適している。

反射指数としてSi(111)とSi(555)を用いた場合の計測結果をFig. 17に示す。Si(111)の場合は観測領域が広く、XFELスペクトルの全体を観測できている。Si(555)の場合は分解能が高いため、ス

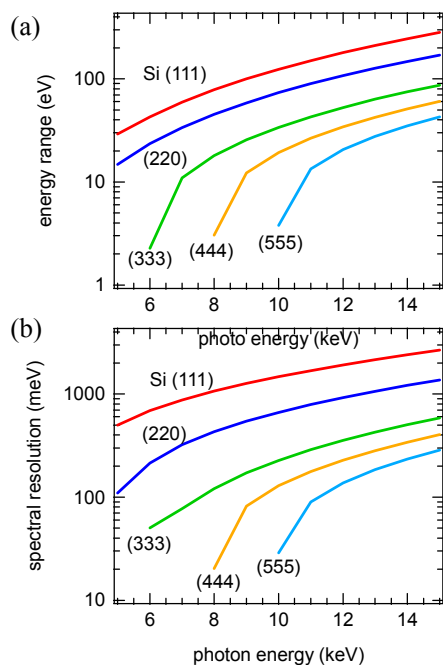


Fig. 16 高分解能スペクトロメーターの(a)観測領域と(b)分解能の計算結果。楕円ミラーの集光点から検出器までの距離を 3m 、集光点後のXFELの発散角を 2.5mrad とした。

パイク構造が分解されている。

このスパイクの幅はXFELパルスの時間幅と関連付けることができる。ただし、計測結果には位相情報が欠落しているため、単純にスペクトルをフーリエ変換して時間波形を求めることは不可能である。そこで、電子バンチ長をパラメーターとしたシミュレーションを行い、実験で得られたスペクトルと比較してパルス幅を導出した。結果をFig. 18に示す。Fig. 18(a)-(c)は、電子バンチ長、すなわちパルス時間幅を3段階で変化させた場合に計測されたスペクトルであり、(a)、(b)、(c)の順に時間幅が短くなっている。時間幅が短くなると、スペクトルのスパイク幅が大きくなっている。Fig. 18(d)-(f)に、シミュレーションによって得られたスペクトルを示す。各スペクトルのスパイク幅は、実験データとよい一致を示している。

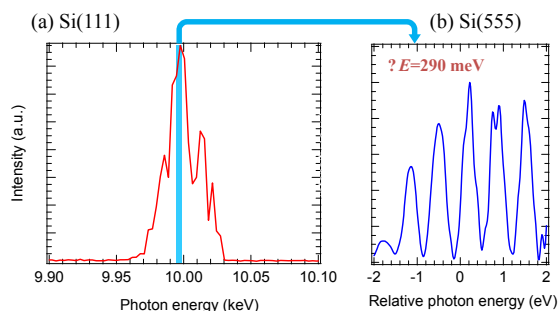


Fig. 17 高分解能スペクトロメーターの測定結果の例。(a) Si(111) および(b) Si(555)を用いた場合。

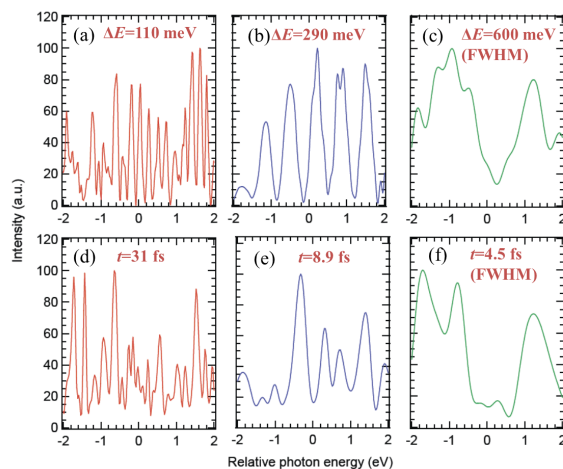


Fig. 18 電子バンチ長を変化させた際の、スペクトルの変化。(a)-(c) 測定結果。(d)-(f) シミュレーションの結果。

る。以上の結果から得られた XFEL のパルス時間幅(FWHM)はそれぞれ、(a) 31 fs、(b) 8.9 fs、(c) 4.5 fs であった。

5. 実験ステーション

5.1. 実験ステーションの構成

実験ステーションは光ビームラインの終点であり、利用実験の舞台となる。SACLA の実験ホールには、光学ハッチの下流に 4 個の実験ステーションが光軸に沿って並んでいる。さらに、5 番目のステーションが、SACLA-SPring-8 相互利用施設に設置されている。2012 年 3 月に供用運転を開始して以来、コヒーレント回折イメージング (CDI)、時間分解 X 線散乱・回折計測、X 線非線形光学、微小結晶構造解析など多岐にわたる実験が行われている。SACLA の BL3 には以下の 5 種類のステーションが設置されており、実験のスタイルに適したステーションを選択できる (Fig. 19)。

- (1) XFEL 先進オプティクス
- (2) ポンププローブ実験
- (3) コヒーレント集光
- (4) 大型装置用ステーション
- (5) XFEL-放射光相互利用

実験ステーションにおいては、放射線防護壁で囲まれた実験ハッチの中に実験装置が設置され、ハッチの外から遠隔制御される。したがって、各

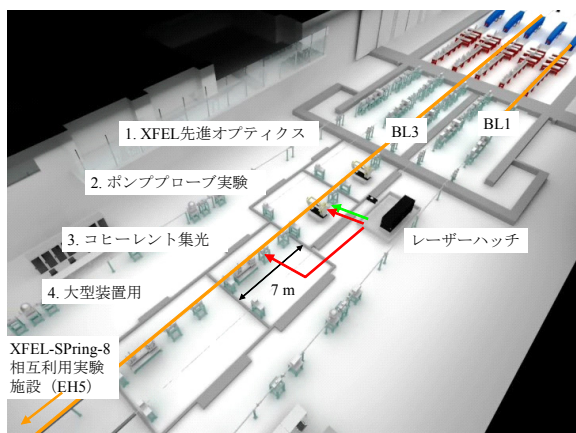


Fig. 19 BL3 の実験ステーション。5 番目のステーションは、XFEL-SPring-8 相互利用実験施設内に設置されている。

ステーションは実験ハッチ内部の実験装置群とハッチ外の実験制御・データ取得 (DAQ; data acquisition) の装置群から構成される。データ処理のためのストレージシステムや高性能計算機システム (HPC system; high performance computing system) は計算機専用の部屋に集約されている。なお、前述のように、全ての実験に共通で用いられる基幹光学機器や診断機器は、光学ハッチ内に集約されている。実験ハッチの常設機器は汎用性の高いものだけに限定され、広い実験スペースが確保されている。このスペースに可搬の実験装置を入れ替えることで、多様な実験に対応できるようになっている。また、以下の部分では、各ステーションについて簡単な解説を行う。

5.2. XFEL 先進オプティクス

最も上流側に位置する XFEL 先進オプティクスステーションは、XFEL 用光学機器の研究開発や高度な光診断のために利用されることが多い。実験ハッチは第一ハッチ (EH1) を利用する。EH1 には、ガイドレーザーと回転式シャッター (パルスセクター) が常設されている [15]。前者は XFEL 光軸と同軸に導入され、装置のアライメント時にガイド光として利用される。パルスセクターはパルスの切り出しのために使用される。これらの機器は、下流側のステーションで実験する際にも活用することができる。

5.3. ポンプ・プローブ実験

ポンプ・プローブ実験ステーションにおいては、XFEL と同期したフェムト秒レーザーを利用して時分割計測を行うことができる。フェムト秒レーザーの構成図と出力を Fig. 20 に示す。

ポンプ・プローブ実験においては、光学レーザーパルスが試料に到達してから XFEL パルスが到達するまでの時間差 (遅延時間) の制御が重要である。まず、加速器と共通のマスタークロックを用いることで、光学レーザーと XFEL を同期させる。さらに、光学遅延ステージによる光路長調節と電子回路による出射タイミング制御を併用して遅延時間の調整を行う。現状では調整の分解

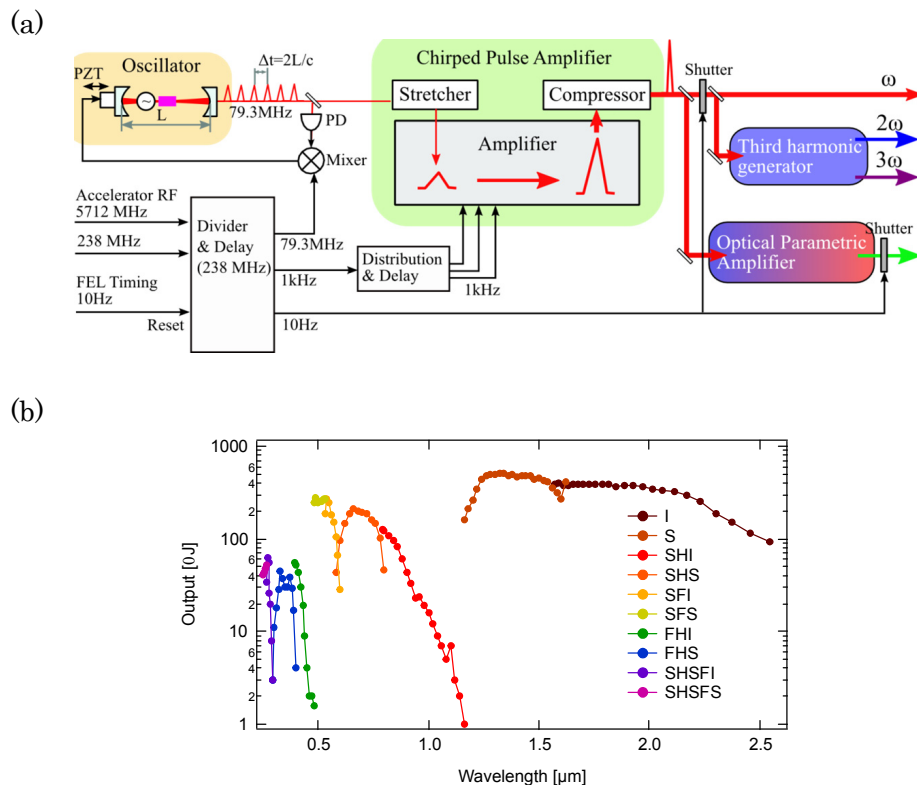


Fig. 20 (a) フェムト秒レーザーシステムの構成図。(b) 発振波長とパルスエネルギー。

能は数百 fs 秒程度が限界である。これは、光学レーザーと XFEL パルスの到達時間差に 100~200 fs (rms) のジッターが含まれるためである。ただし、遅延時間を計測して実験データとともに記録しておけば、データ解析の段階で遅延時間順にデータを並び替えることが可能となる。ポンプ・プローブステーションには、10 fs オーダーの分解能で遅延時間を計測できるモニターが整備されている[16]。

5.4. コヒーレント集光

コヒーレント集光ステーションの実験ハッチ（第三ハッチ; EH3）には集光装置が設置されており、1 μm (FWHM) に集光された XFEL 光を利用することができる。集光装置では Kirkpatrick-Baez (KB) ミラーが用いられている[17]。KB ミラーの仕様を Table 2 に、集光点におけるビームサイズの測定例を Fig. 21 に示す。

Table 2 コヒーレント集光ステーションの集光用ミラーの仕様 [17]。

収束方向	鉛直	水平
表面形状	楕円柱	楕円柱
視斜角 /mrad	1.55	1.50
焦点距離 /m	2.00	1.55
素子の長さ /mm	420	420
素子の幅 /mm	50	50
有効ミラー長 /mm	408	410
開口 /mm	0.632	0.615
基板材質	SiO ₂	SiO ₂
コーティング	C (50 nm)	C (50 nm)

このステーションで実施される実験の代表的な例として、CDI 実験のセットアップを Fig. 22 に示す。上流側から集光装置、スクリーンモニター、試料チャンバー、二次元 X 線検出器の順に並んでいる。試料と検出器との距離は実験条件に応

じて変更され、1 m 以下の近い場合から 3 m 以上の遠い場合があり、場合によっては EH4 に検出器を設置し、ハッチをまたいで実験することも珍しくない。

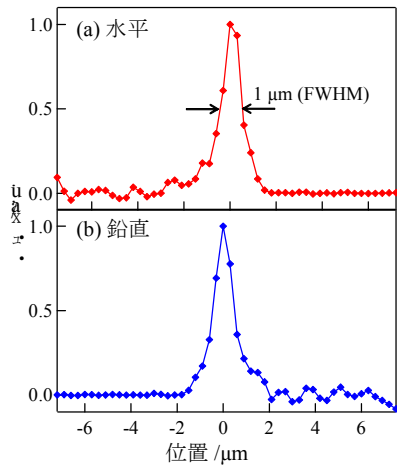


Fig. 21 コヒーレント集光ステーションにおける集光ビームサイズの測定結果。金ワイヤー（直径 200 μm）を用いたナイフエッジスキャンで測定された。

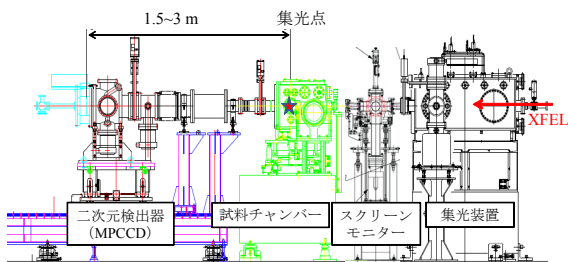


Fig. 22 コヒーレント集光ステーションにおける CDI 実験のセットアップ例。

5.5. 大型装置用ステーション

大型装置用ステーションは、SACLA の実験ホール内で容積の最も大きい第四ハッチ (EH4) を擁している。EH4 のサイズは 7 m × 9 m × 高さ 5 m であり、大型装置を利用した実験などに適している。このハッチの上流側には、次節で述べる二段集光装置の前段部分が常設されている。

5.6. XFEL-放射光相互利用ステーション

EH5 においては、SACLA の XFEL ビームと SPring-8 BL32XU のアンジュレーター放射光の

両方を利用することが可能である。SACLA 側には二段集光装置の後段部分が設置されている。二段集光装置は二組の KB ミラーで構成され、ミラーと試料間の距離を維持しながら極めて小さい値まで XFEL ビームを集光することが可能である。前段の KB ミラーはビームを拡大するように使用され、後段の KB ミラーにおける開口数を大きくすることができる。開口数を大きくすることで、小さな集光ビームサイズを実現している。

5.7. 実験制御および DAQ

SACLA の実験制御および DAQ システムは、加速器と同様、MADCOA (Message And Database Oriented Control Architecture) をベースにして構築されている [18]。制御・DAQ 機器はハッチ外に設置され、どの実験ハッチについても同様な構成としている。これらは、装置の駆動系、モニター系、およびデータ収集系で構成されている。

実験装置の機械的な動作は、殆どの場合、ステップモーターを遠隔で操作することによって制御される。このため、汎用のモータードライバーとコントローラーが各ステーションに設置されている。

X 線用のシリコン PIN フォトダイオード、可視光用 CCD カメラといったモニター類についても、汎用機器として整備されている。

DAQ については、シングルショット計測に対応したシステムが構築されている。SACLA から供給される X 線パルスは試料を破壊してしまうほど強力なものである。したがって、単一パルスの照射でなるべく高品質のデータを取得し、試料に関する情報を最大限に引き出す必要がある。さらに、繰返しが少ない光 (最大 60 Hz) を有効活用するため、全パルスのデータを取得しなければならない。BL3 の各実験ステーションでは、実験で利用される測定機器のデータだけでなく、ビームラインの診断系で得られた光特性データもパルス毎に取得され、保存される。パルス強度や位置などのゼロ次元データは、原則として常にデータベースに保存される。二次元画像のようにデータ量の多いものは、記録が必要な時だけストレージ

システムに保存する。なお、保存されたデータは、パルス毎に番号付けされており、解析時に各種のデータを対応付けることができる。持込みの検出器で取得したデータに対しても、施設側のデータと対応させられるよう、共通の番号を発行する仕組みを整えている。

6. 今後の展望

光ビームラインの今後の展開として、主なものを以下に挙げる。

(1) 現有ビームラインのアップグレード

このテキストで解説した BL3 の光ビームラインは、我々が XFEL の光を経験する前に設計されたものである。実際に XFEL の光を手にした今となっては、改良すべき点が多く見つかってきている。さらに、より精度の高い利用実験に向けて、ビームラインのさらなる安定性向上や新規機能の追加が期待されている。現在、光学系の最適化や光診断機器の精度向上などの改良に加え、ビームスプリッターなどの新技術の投入が進められている。

(2) 光源のアップグレードへの対応

ビームラインの改良に当たっては、シード化などの光源のアップグレードも見据えておく必要がある。アップグレードの恩恵を利用者が享受するためには、当然のことながら、光ビームラインも光源に追随して性能を高めていく必要がある。

(3) 新規ビームラインの建設

現在建設が進められているビームライン (BL2) には、BL3 で蓄積された経験を反映させることができる。同時に、BL3 との差別化が図られるであろう。BL3 は汎用性と拡張性を重視した標準モデルともいえるビームラインである。様々な分野の研究にバランスよく対応できることが求められ、その役割をじゅうぶんに果たしている。一方、新しいビームラインにおいては、利用目的をある程度絞り、特定の性能の向上を追求することも可能である。これにより、特定の分野における先進的な研究を推進することが可能となる。

(4) 他の光源との同時利用技術の開発

SPring-8 や様々な光学レーザーなど、他の光源との同時利用もますます重要になっていく。実験ステーション、タイミング制御システム、利用実験装置など、同時利用実験のための整備が進められている。

なお、BL3 とは波長領域の異なる軟 X 線ビームライン (BL1) もすでに完成しており、利用が本格化されようとしている。使用実績が積み重なった時点で、BL1 も紹介できることを願っている。

謝辞

本テキストの執筆にあたり、波長モニター (3.4 節) および高分解能スペクトロメーター (4.2 節) に関する資料を理化学研究所の犬伏雄一博士に提供していただいた。

参考文献

- [1] 大橋治彦, 平野馨一 (編), 放射光ビームライン 光学技術入門 (日本放射光学会, 2008)
- [2] H. Mimura *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.* **79**, 083104 (2008).
- [3] T. Koyama *et al.*, *Optics Express* **21**, 15382 (2013).
- [4] 矢橋牧名, 石川哲也 (編), *XFEL/SPring-8 Beamline Technical Design Report* (理化学研究所・高輝度光科学研究センター X 線自由電子レーザー計画合同推進本部, 2008), http://xfel.riken.jp/pdf/XFEL_BL-TDRver1.0.pdf
- [5] 例えば, 例えば, 大柳宏之 (編), *シンクロトロン放射光の基礎* (丸善, 1996)
- [6] H. Ohashi *et al.*, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A* **710**, 139 (2013).
- [7] *X-ray Database, The Center for X-Ray Optics, Lawrence Berkeley National Laboratory*, http://henke.lbl.gov/optical_constants/
- [8] S. Goto, S. Takahashi, T. Kudo, M. Yabashi, K. Tamasaku, Y. Nishino, and T. Ishikawa, *Proc. SPIE* **6705**, 67050H-1 (2007).
- [9] T. Kudo *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.* **83**, 043108 (2012).
- [10] K. Tono, T. Kudo, M. Yabashi, T. Tachibana, Y. Feng, D. Fritz, J. Hastings, and T. Ishikawa, *Rev. Sci. Instrum.* **82**, 023108 (2011).

- [11] M. Kato *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 023503 (2012).
- [12] T. Tanaka, S. Goto, T. Hara, T. Hatsui, H. Ohashi, K. Togawa, M. Yabashi, and H. Tanaka, *Phys. Rev. ST Accel. Beams* **15**, 110701 (2012).
- [13] M. Yabashi, J. B. Hastings, M. S. Zolotarev, H. Mimura, H. Yumoto, S. Matsuyama, K. Yamauchi, and T. Ishikawa, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 084802 (2006).
- [14] Y. Inubushi *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 144801 (2012).
- [15] T. Kudo, T. Hirono, M. Nagasono, and M. Yabashi, *Rev. Sci. Instrum.* **80**, 093301 (2009).
- [16] T. Sato *et al.*, *J. Phys.: Conference Series* **425**, 092009 (2013).
- [17] H. Yumoto *et al.* *Nature Photonics* **7**, 43 (2013).
- [18] R. Tanaka, T. Fukui, K. Kobayashi, T. Masuda, A. Taketani, T. Wada, and A. Yamashita, *Proc. of ICALEPCS'97 (Beijing)*, 1 (1997).