

加速器の歴史と利用研究 2 ＋ 電磁石

2コマ目の内容

- 放射光の特徴・パラメータ
- ビームラインとフロントエンド
- IDとビームラインの実例（BL15）
- 放射光利用実験
 - （利用実験の個別紹介は全て省く）
- 蓄積リング電磁石について

放射光の特徴・パラメータ

シンクロトロン放射の特徴

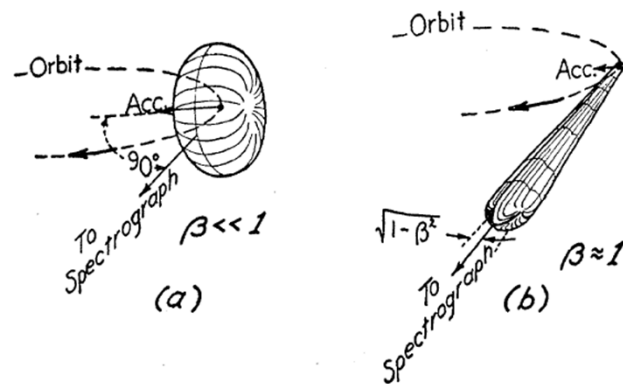
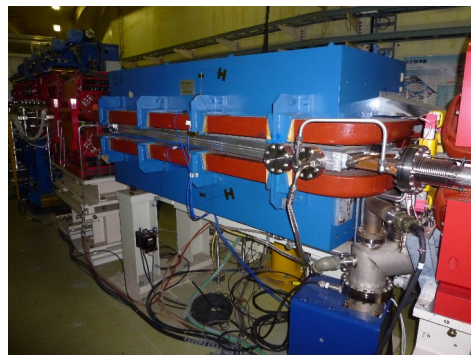
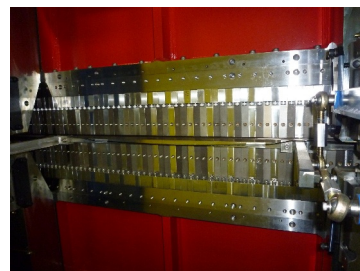


FIG. 1. Qualitative radiation patterns to be expected from electrons in a circular orbit (a) at low energy and (b) as distorted by relativistic transformation at high energy. [See also discussion in W. K. H. Panofsky and M. Phillips, *Classical Electricity and Magnetism* (Addison-Wesley Press, Cambridge, 1955), pp. 301-307.]

- 相対論的領域の電子を曲げると、接線方向に集中した強い光が出る。それを放射光という。
- 加速器に設置される光源要素は3種類：
偏向電磁石、挿入光源（ウィグラ、アンジュレータ）
- 発光原理も3種類：
偏向電磁石、挿入光源、FEL
- 偏向電磁石：軌道を曲げて光を出す。（基本）
- ウィグラ：磁場の強い偏向電磁石で高エネルギー光を出す。（波長シフターとも言う。高磁場BM、高磁場長周期U。）
- アンジュレータ：電子を多数回蛇行させて干渉効果で準単色の強い光を出す。
- FEL：電子を光の相互作用で電子を密度変調、電子が集団として協調・協奏して強力なコヒーレント光を発生させる。（量子的誘導放射ではない。）



偏向磁石



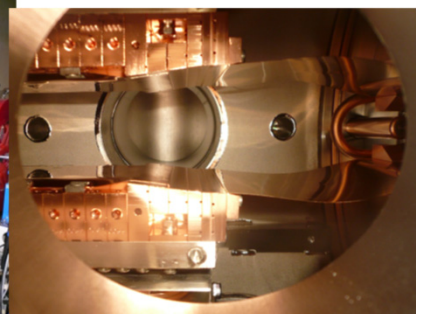
多極ウィグラ
ID05



APPLE II型可変偏光アンジュレータ ID19



真空封止短周期アンジュレータ ID01



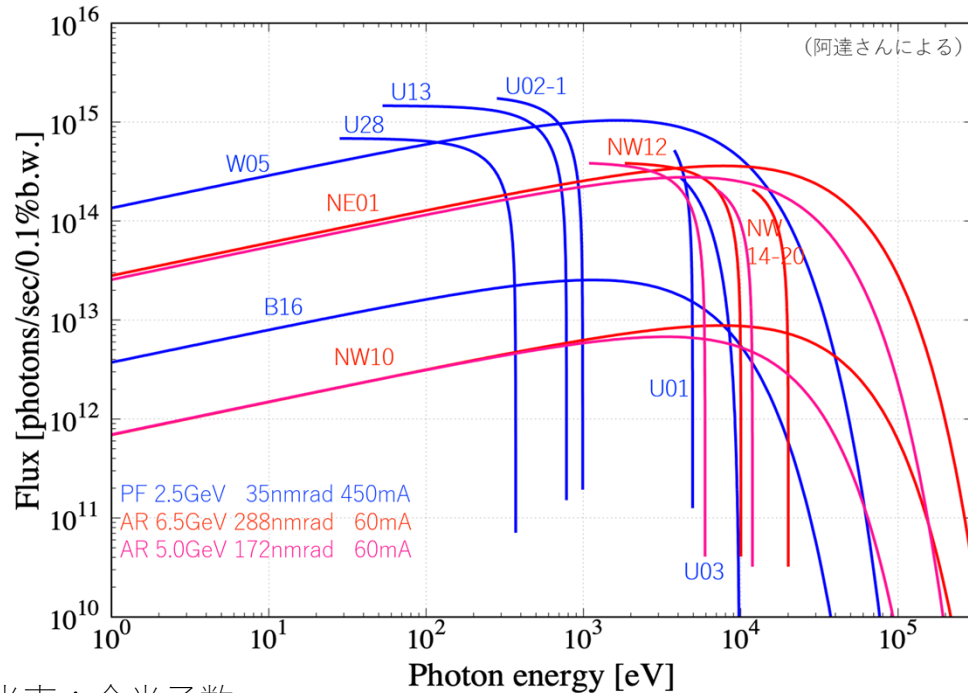
超伝導
ウィグラ
ID14



光のパラメータとリングのパラメータ

- **波長、エネルギー**
 - (加速器設計の観点から) より短波長には、**電子のエネルギー**を高く、**偏向電磁石の磁場**を強く、**挿入光源の周期**を短く。
 - (既存光源で実験する観点から) 偏向電磁石からは連続スペクトル、準単色の挿入光源では、**ギャップ**を開け閉め(もしくはギャップに相当する磁極列パラメータを変化、弱磁場 → 高エネルギー)。
 - バンド幅、エネルギー幅(縦方向のコヒーレンス、単色度) : 分光器で決まる。
- **光束**(光子の量、光の強さ)
 - 多くするには、**蓄積電流値**を増やす、**電子のエネルギー**を増やす。
- **輝度**(光源での光軸上の光子密度 → (位相空間の面積保存) → 試料上の密度、集中度)
 - 高くするには、**電子のエミッタンス**を下げ、オプティクスを整合させる。性能上限は光の固有エミッタンス($\lambda/4\pi$)までで、その場合を回折限界光源という。
 - (横方向) **コヒーレンス**(位相のそろい具合) : リングでは輝度の高さに依存。VSXではそれなり、10keVでは最先端光源で数%。FELでは原理的に100%。
- **偏光**
 - 光を出すために曲げた方向で決まる。
 - 水平ベンドは水平偏光
 - 挿入光源内の水平蛇行からは水平偏光、垂直蛇行からは垂直偏光、らせん、8の字運動からは円偏光や楕円偏光が出る。運動の方向で右回り、左回りも制御可能。
 - (X線領域は偏光子が存在。)
- **パルス長、パルス間隔(時間構造)**
 - **光のパルス長は電子のパルス長**で決まる。
 - パルス間隔(時間構造)は、リングに蓄積された電子バンチの間隔・時間構造(フィルパターン)で決まる。
 - 光用のチョッパーも存在する。

光源性能でよく見るグラフ



光束：全光子数

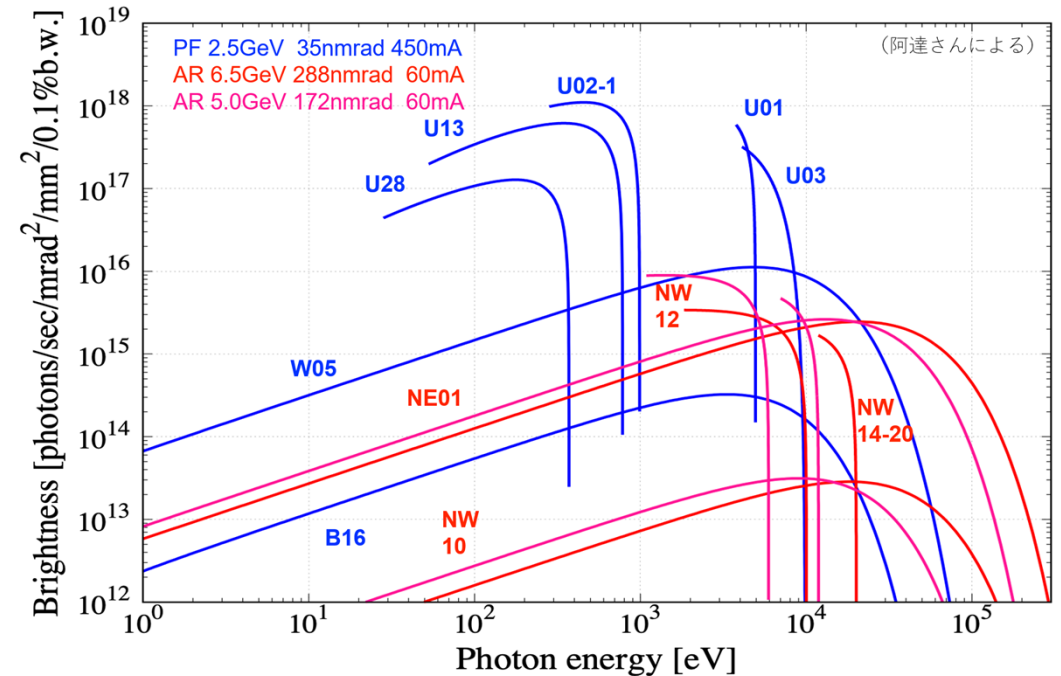
ユーザーが使える光子数の目安。
分光器でバンド幅を-3~-4乗に単色化、
マスクで削って中心部だけ取り出す。(3~4桁落ちる。)

偏向磁石とウィグラー

- 連続スペクトル
- グラフのスペクトルは同時に発生

アンジュレータ

- 準単色、線スペクトル
- ギャップを決めると各次数から1点ずつ、「基本波+高調波」で発生。
- ギャップを変えて図のスペクトルになる。
- Kを大きくすると1次光のエネルギーが下がり、高エネルギー側で高次光が連続的になり、ピークも高エネルギー側にシフト、多極ウィグラー的になる。



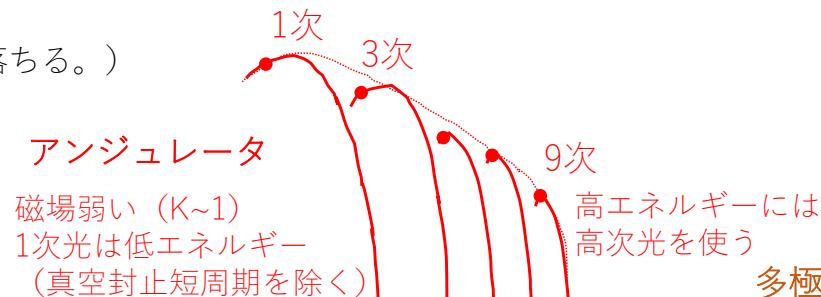
輝度～どこまで光を絞れるか、コヒーレンスが使えるか、の指標

IDのK値

$$K = \frac{eB_0\lambda_u}{2\pi mc}$$

1次光の波長

$$\lambda_1 = \frac{\lambda_u}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} \right)$$



多極ウィグラー

(K>>1) 高エネルギー
高輝度・高光束にシフト

偏向磁石

ウィグラー

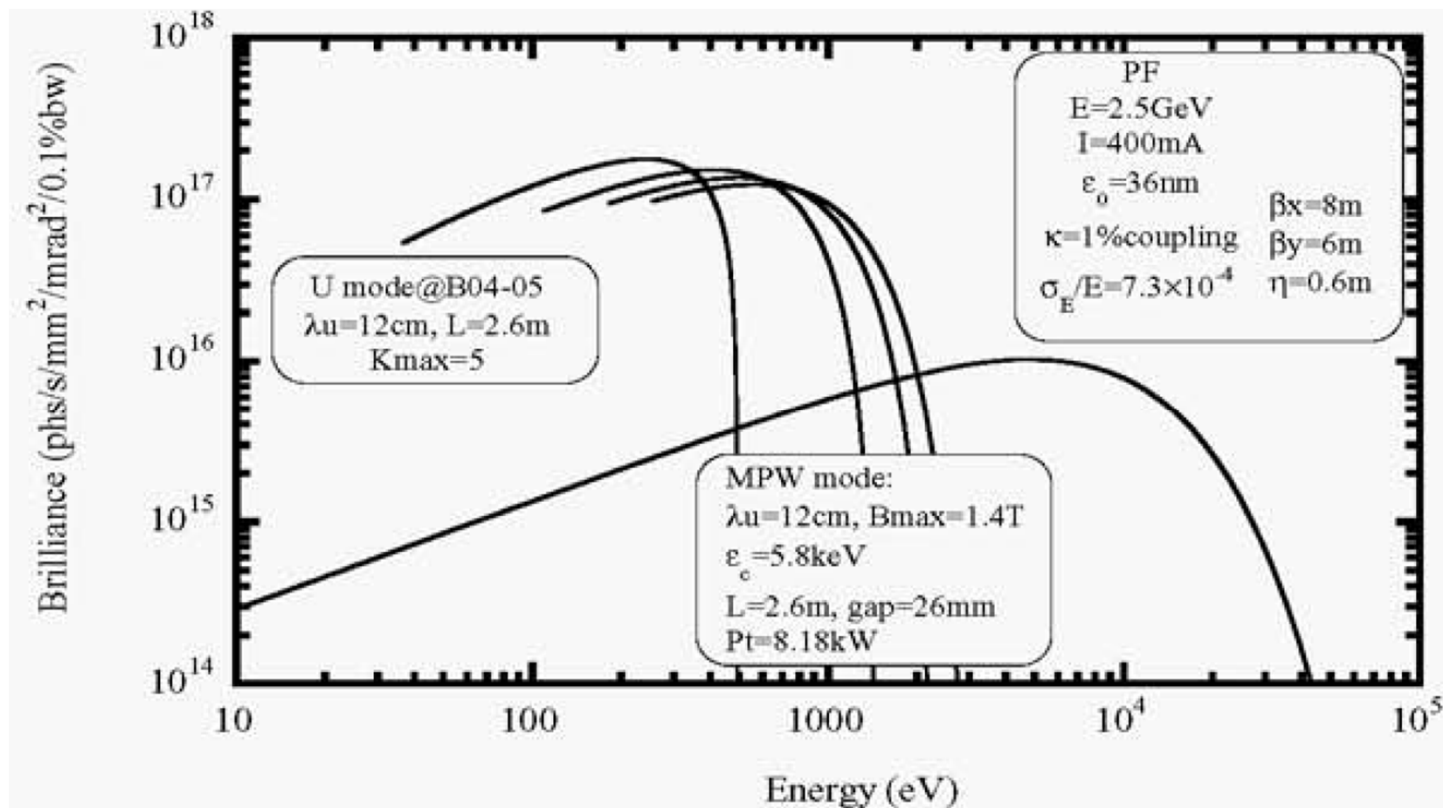
磁場強い

高エネルギー側にシフト

臨界エネルギー
(スペクトルのピーク)

ウィングラとアンジュレータの違い

- PFのMPW05は「アンジュレータ」モードと「ウィングラ」モードの両方が可能である。
K. Tsuchiya et.al., “Design and Construction of a New Multipole Wiggler (MPW # 05) at the Photon Factory”,
AIP Conf. Proc. 705, 211–214 (2004)
- アンジュレータモード： $0 < K < 5$
1次光のエネルギーとK値：
330eV (K=1)、165eV (K=2)、90eV (K=3)、55eV (K=4)、37eV (K=5)
図は1, 3, 5, 7次光までプロットしたもの。（高次光はもっと高エネルギー側まで裾を引いている。）
- ウィングラモード： $B=1.4\text{T}$ 、最小ギャップの26mm固定、 $K \sim 15.7$
現在のユーザーランはこのウィングラモード固定で、タンパク質結晶構造解析が行われている。
参考：アンジュレータと思った時の1次光のエネルギー：9.7eV (K=10)、4.4eV (K=15)、4.0eV (K=15.7)



光発生方法と光強度



X線管

制動放射 + 特性X線
波長固定（特性X）
毎秒 $10^3 \sim 10^6$ 個/s（特性X）

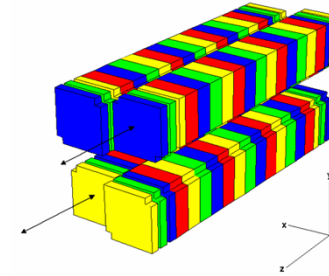
$\times 10^6$



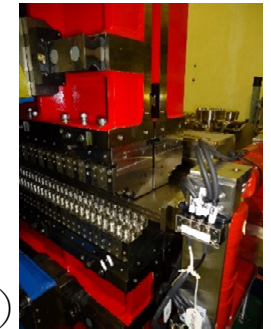
偏向電磁石光源：連続スペクトル
（波長選択可能）

水平偏光
全光束 10^{13} 個/s
試料上 10^9 個/s

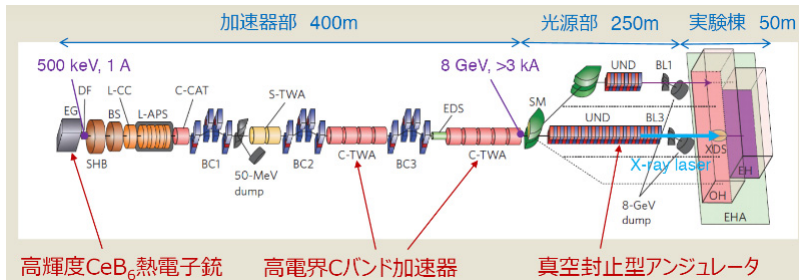
$\times 10^3$



リング挿入光源（数m）
準単色（波長可変）



X線領域ではコヒーレンス1%以下
高輝度、偏光可変
光束 10^{16} 個/s
試料上 10^{13} 個/s、500MHzの連続光

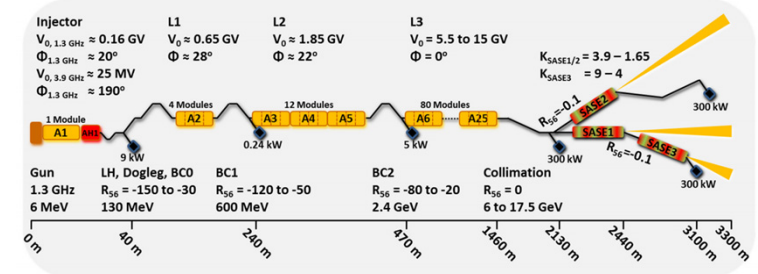


常伝導SASE-XFEL（ID数百m） SACLA、LCLS
単色（波長可変）、フルコヒーレント

（現段階で）水平偏光
1バンチ x 60パルスで 10^{16} 個/s、
極短パルス長（50fs 極短パルス）
試料上 10^{13} 個/s、60Hz極短パルス

コヒーレント
極短パルス

バンチ数=光強度
 $\times 10^3$



長パルス超伝導SASE-XFEL（EuroXFEL）

単色（波長可変）
（現段階で）水平偏光
2700バンチ x 10Hz、 10^{19} 個/s、
50fs、試料上 10^{16} 個/s

CW超伝導SASE-XFEL（LCLS II）

電流値はほとんど同じ。
真の等間隔光：kHz、MHz繰り返し。

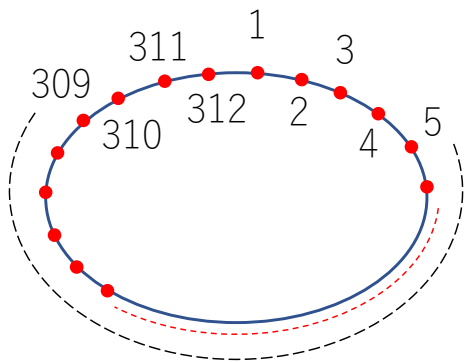
* $8\text{GeV} \times 60\text{nA} (1\text{nC} \times 60\text{Hz}) = 480\text{W}$
 $14\text{GeV} \times 27\mu\text{A} (1\text{nC} \times 2700\text{バンチ} \times 10\text{Hz}) \sim 400\text{kW}$
 $4\text{GeV} \times \text{例えば} 1\text{mA} (0.77\text{pC} \times 1.3\text{GHz}) = 400\text{MW}$
→ MW電力を常時共有、捨てることは不可能。
真のCW大電流運転はエネルギー回収が必須。

光のエネルギーと名称

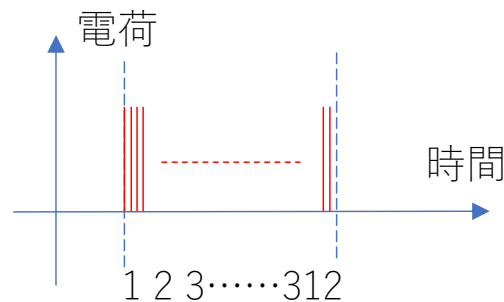
- 光のエネルギーと波長
 - 0.1 meV (12mm)
 - 1 meV (1.2mm) : テラヘルツ
(テラヘルツギャップといい、この領域は放射光源が有力な光源。低エネルギー、極短パルスの小型加速器でも発生可能。)
 - 10 meV (120 μ m)
 - 0.1 eV (12 μ m)
 - 1 eV (1.2 μ m) : 可視光 (赤(1.5eV)～青 (3eV)) ～紫外光
 - 10 eV (120nm) : 真空紫外光 (VUV)
 - 100 eV (12nm) : VUV～SX
(この領域以上は現状、放射光源のみが強力な光源。)
 - 1 keV (1.2nm) : 軟X線(Soft X)
 - (1～4keV : テンダーX線) 利用数としてはこの領域がメイン
 - 10 keV (120pm) : X線(Hard X)
 - 100 keV : 超硬X線
- 放射光利用される主な波長域は、テラヘルツ、VUV、Soft X、Hard Xである。
- リングの**エミッタンス**は古い第1世代～2世代光源が100nmrad (～光1eVで回折限界)、1990年代の3世代が1～10nmrad (～光100～10eV)、最新 (2010年代以降) の第4世代光源で100pmrad(～光1keV)である。
- 半導体レーザー等で (波長可変な) 高輝度・高光束光が出るようになれば、加速器はいらなくなる。数十eVまで、波長固定ならほぼ同じ強さ (光束) の光を半導体レーザーの結晶高調波で出せるようになってきている。

蓄積リング型光源のパラメータ

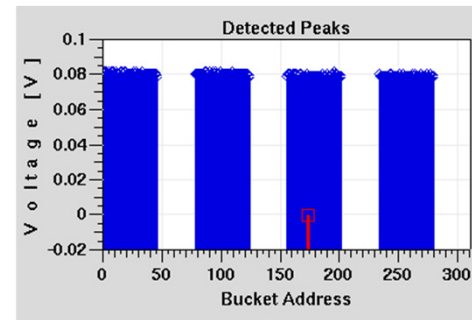
- 蓄積リング内で電子は「バンチ」という塊で周回している。PFの場合、最大312個の塊を回すことができる。
- バンチ間隔はRF周波数で決まり、500MHz（波長60cm）～2ns。最大蓄積可能バンチ数（ハーモニック数）は周長とRF波長で決まり、187m/60cm=312個。
- 電子ビームの位相空間の面積をエミッタンス（位置と向きのばらつき具合）といい、エネルギーのばらつき具合をエネルギー拡がりという。どちらも放射光の効果とリングの設計で決まるパラメータ。放射平衡のパラメータと、リングの電子光学設計、RF電圧で実際の電子のビームサイズやバンチ長が決まる。



リングを回るバンチ
(フルフィルの場合)



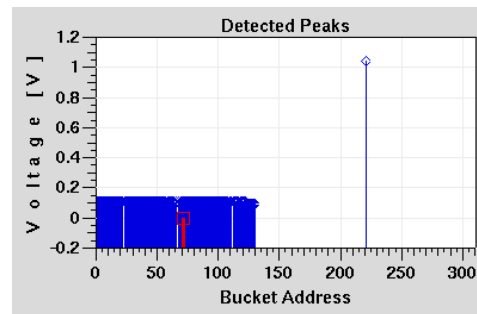
フィルパターン



マルチバンチ
47バケット
x 4トレインで450mA
1.5nC x 188バンチ
トレイン間隔 64ns

通常は不安定性抑制の為に隙間を空ける。(バンチギャップ)

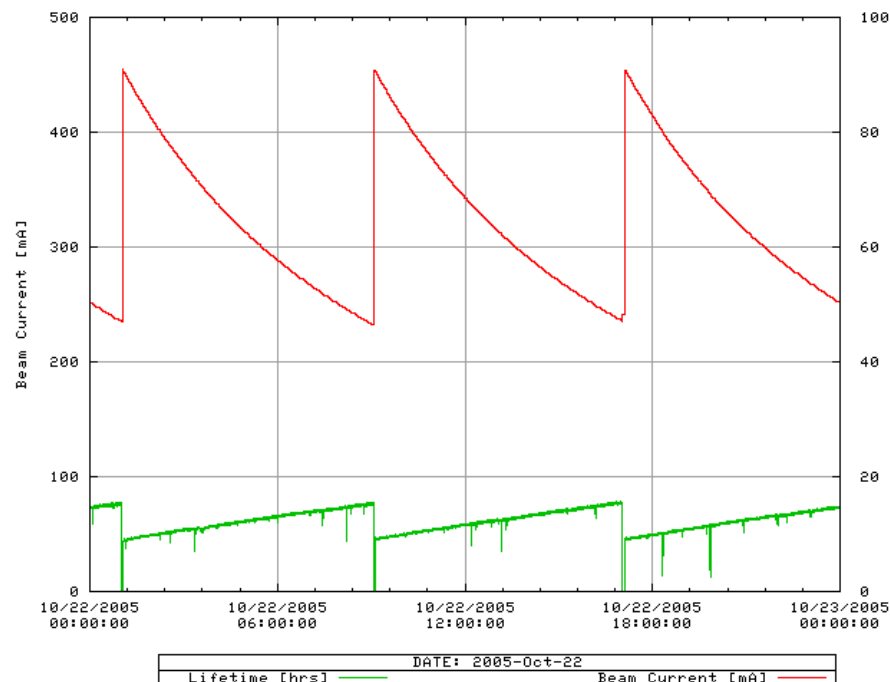
時間分解実験の為に孤立バンチを回すこともある(ハイブリッドモード)



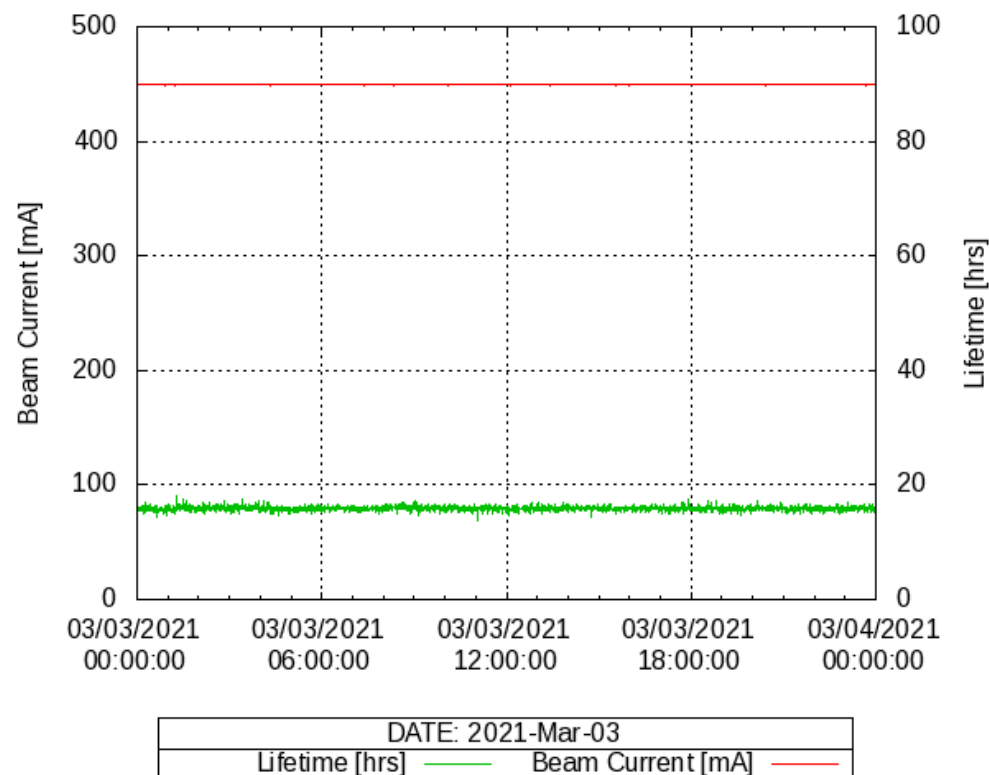
ハイブリッド
(マルチ400mA + シングル30mA)
131バケットで400mA
(1.90nC、2ns間隔で131個)
+ 電荷なし90バケット分、約180ns
+ シングランチ30mA (18.7nC)
+ 電荷なし90バケット分、約180ns

トップアップ入射による電流一定運転

- 以前は日に3回、実験を中断して入射を行っていた。現在は実験を中断せずにそのまま入射を行っている。



2005年10月22日



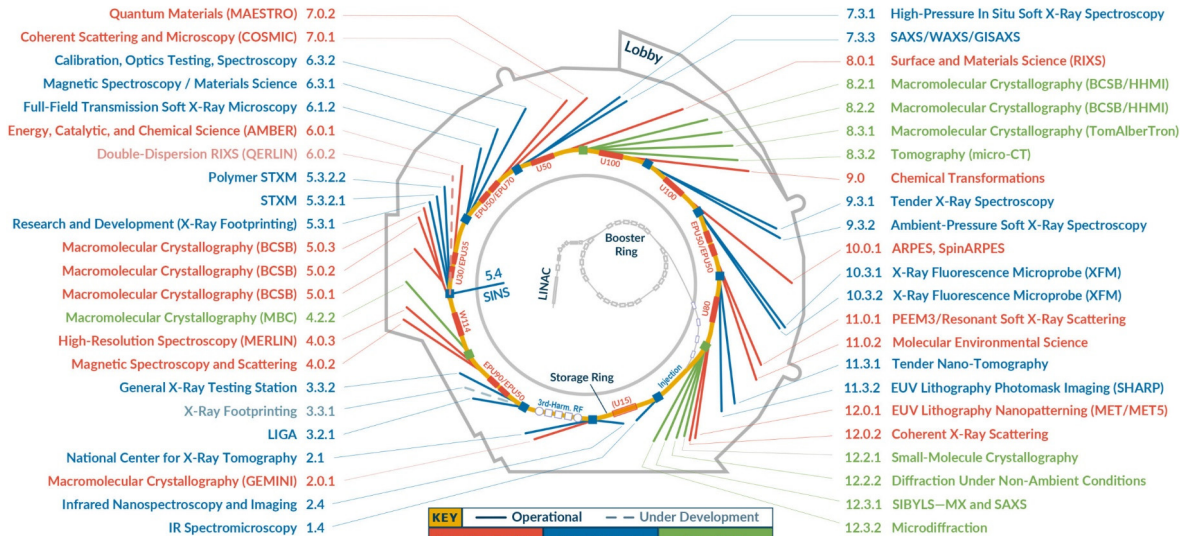
2021年3月3日

- 蓄積電流はだんだん減っていく。（ビームの寿命：残留ガスとの散乱、量子的ばらつきの効果で大エネルギーの放射光を出した、バンチ内の電子散乱）
- 減った電流値を回復させるため、入射器から電子を入射する。
- 以前は1日3回入射（ディケイモード）、現在は常時継ぎ足し入射（トップアップモード）で電流一定運転が行われている。マルチバンチの場合、数分に1回の入射頻度で入射している。

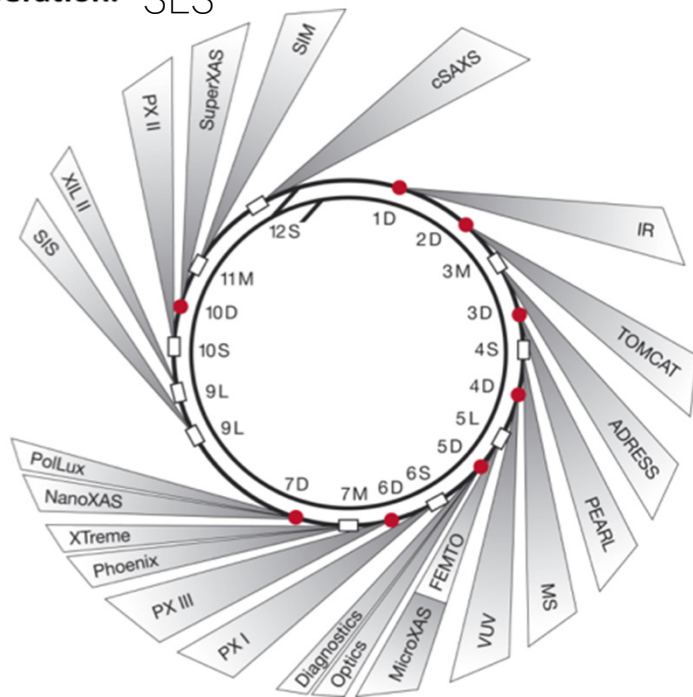
ビームラインとフロントエンド

放射光源加速器の特徴的なビームライン配置

ALS Beamlines



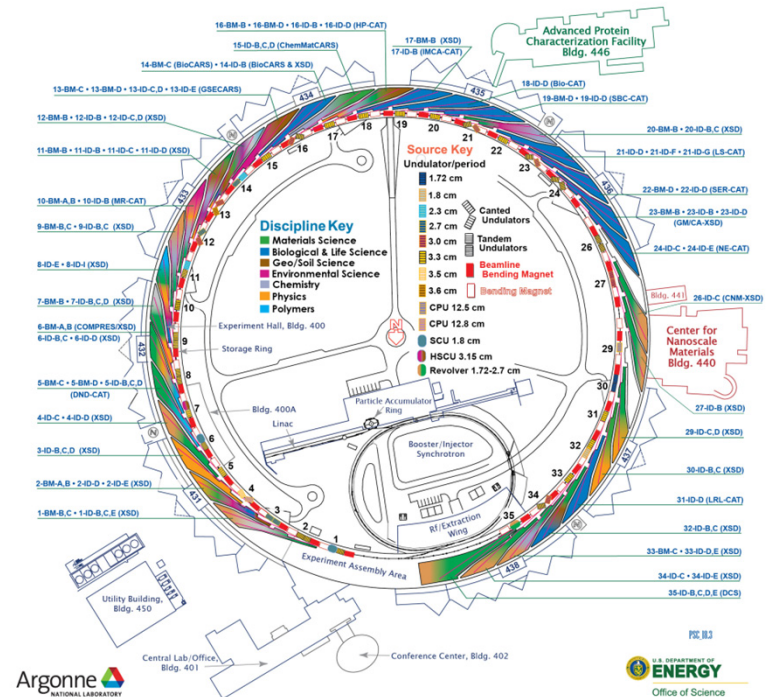
Beamline Map: 16 beamlines are in user operation. SLS



ARGONNE NATIONAL LABORATORY 400-AREA FACILITIES

ADVANCED PHOTON SOURCE (Beamlines, Disciplines, and Source Configuration)

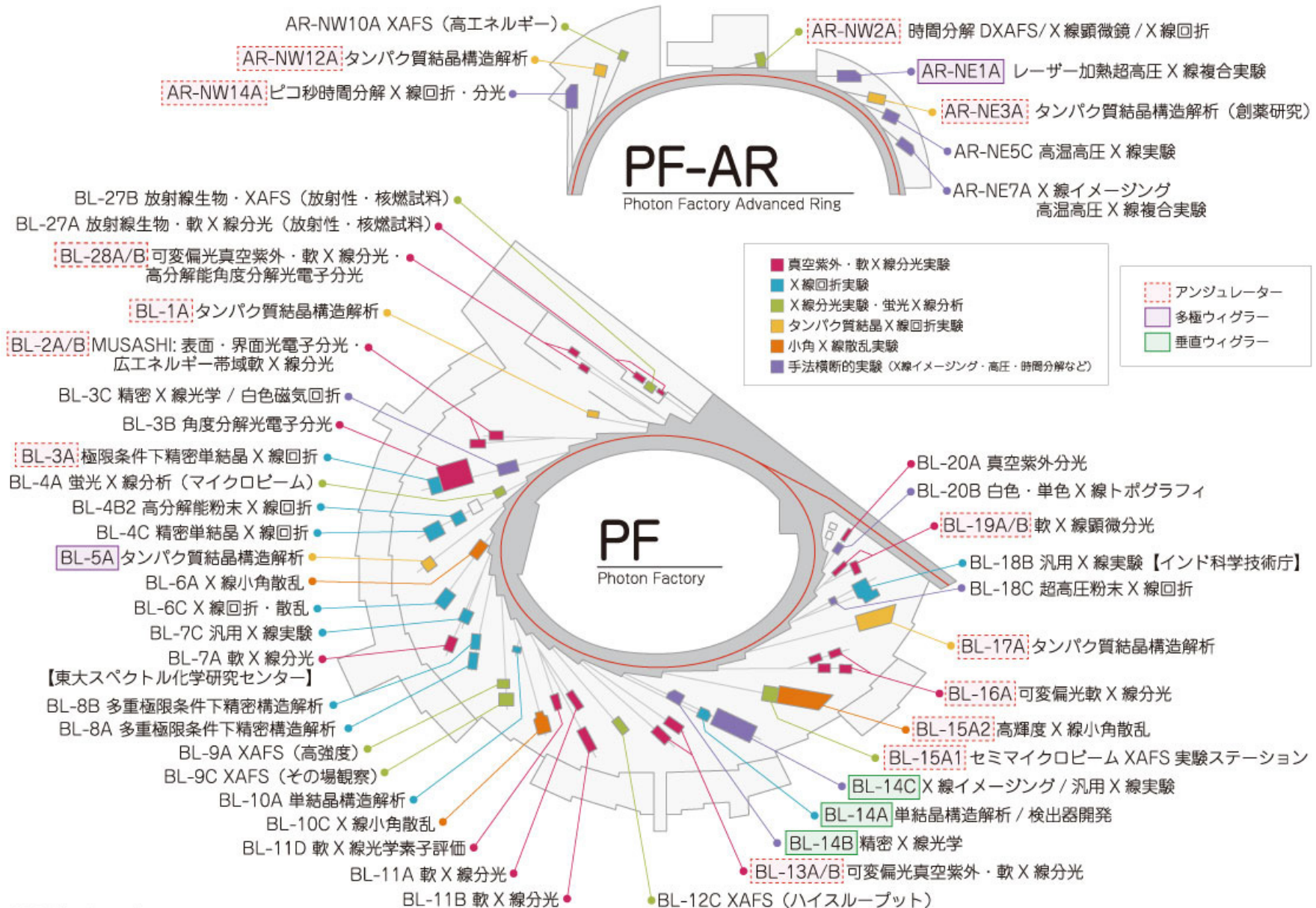
ADVANCED PROTEIN CHARACTERIZATION FACILITY CENTER FOR NANOSCALE MATERIALS



リング接線方向に実験ビームラインが多数建設され、それぞれ同時に光が出て、実験利用が可能。

放射光ビームラインと放射光利用実験

- PF 2.5 GeV、AR 5.0/6.5 GeVのビームラインは下記の通り
- PF BL11, 12は改造更新中

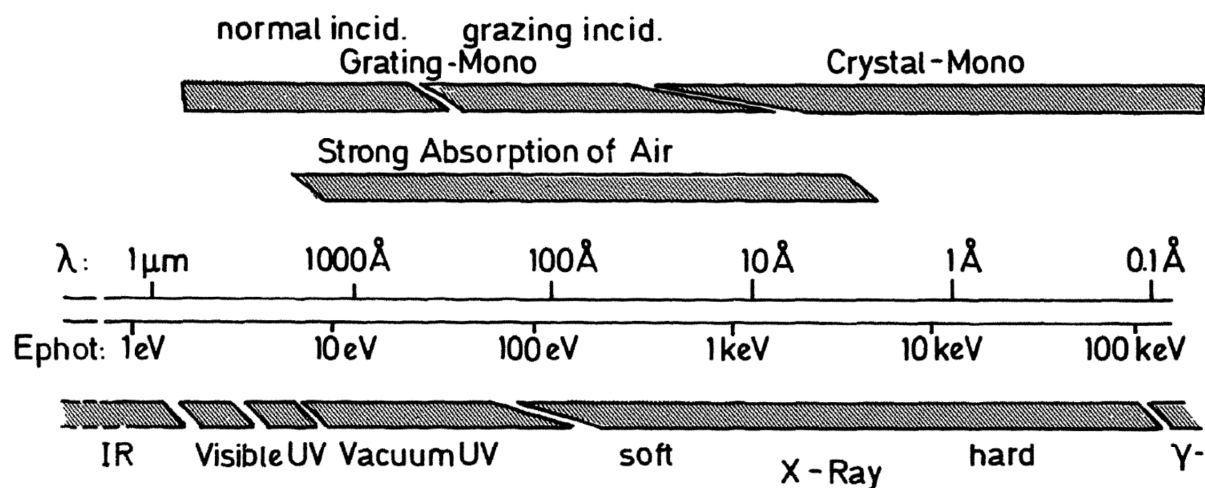


ビームラインとフロントエンド

- PFでは、実験ビームラインの上流側、蓄積リングのシールド内であって、蓄積リングとつながっている部分を「ビームラインフロントエンド、ビームラインチャンネル」と呼んでいる。
- チャンネルの役割
 - 人的安全、機械的安全の確保
 - インターロック制御の光シャッター（MBS）
 - 熱負荷としての不要な光の除去。
 - 全てのチャンネルに必ずあるもの：光用マスク、光用シャッター、バルブ、真空ポンプとバッファ
- ビームライン（実験ホール側）の役割
 - 人的安全、機械的安全の確保に加えて……
 - 分光する：利用目的にあわせたエネルギーの光だけを切り出す
 - 光を成形する：利用目的に合わせてサイズ、発散角を調整する（小スポットサイズ or 平行光）
 - 試料をセットして測定する。次々試料を入れ替える。（差動排気）
 - 電子ビームの変動に対して光を安定に保つ。（光軸FB補正、仮想光源スリット）
 - （変動しないようにするのが本来、光源の仕事ではある。）
 - マスク、シャッター、真空ステーションに加え、ミラー、分光器、測定器（+検出器）

分光器とエネルギー域

- 光のエネルギーで適した分光器は違う
 - Si(111)二結晶分光器 “2keV”～20keV程度**
BL1A、BL3A、BL3C、BL4A、BL4B2、BL4C、BL5A、BL6C、BL7C、BL8A、BL8B、BL9A、BL9C、BL10C、BL12C、BL14B、BL15A1/2、BL17A、BL18B、BL18C、BL20B、BL27B、AR-NE3A、AR-NE7A、AR-NW2A、AR-NW12A、AR-NW14A
 - Si(111)以外（も使える）二結晶分光器 10～100keV**
Si(311)やSi(533)は20keV以上の高エネルギー向け。主にダイヤモンドアンビルによる高圧実験。
InSb(111)は1.7keVくらいから連続で使いたい場合向け。
BL12A-T、BL14A、BL14C、BL27A、AR-NE1A、AR-NE5C、AR-NW10A
 - Ga(111)湾曲分光器（昔の分光器を固定で使っている特殊事例）：BL6A
 - 水平横振 1結晶分光器(Qz(100), Si(111), Si(311))：BL10A（高エネ、もと高圧BL）
- 回折格子分光器：6eV～“2keV”**（斜入射の場合、あたる面積が広いので不等間隔にする）
BL2A/B、BL3B、BL7A、BL12A-S、BL13A/B、BL16A、BL19A/B、BL20A、BL28A/B

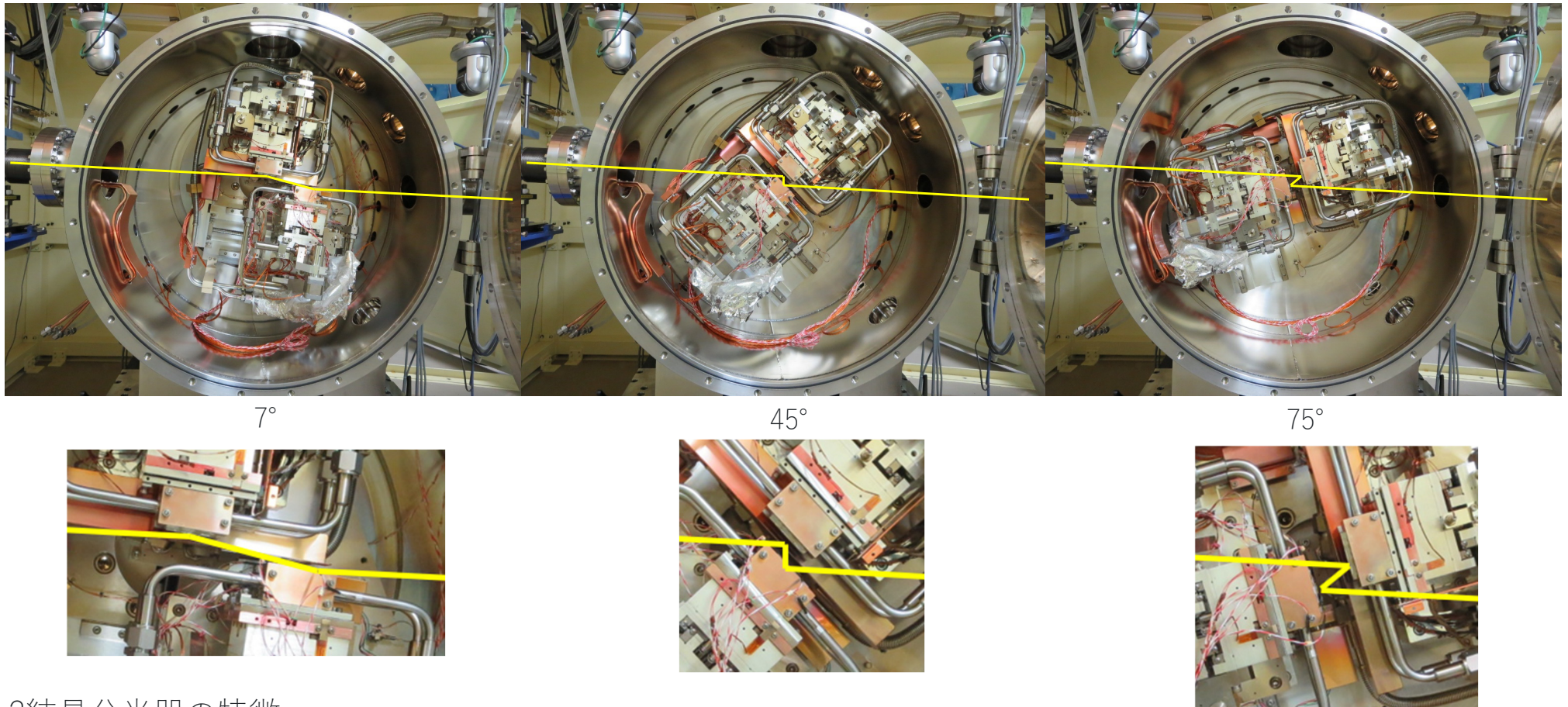


事実上Si(111)二結晶分光器の
下限(70°)の2keVが境界エネルギー
(PFでは1.8keVと記載資料もあり。)

C. Kunz, "Introduction Properties of
Synchrotron Radiation" from
"Synchrotron Radiation -
Techniques and Applications -",
Springer Berlin (1979)

Fig. 1.1 Nomenclature and basic facts about electromagnetic radiation from
1 - 10⁵ eV

BL15A Si(111)二結晶分光器



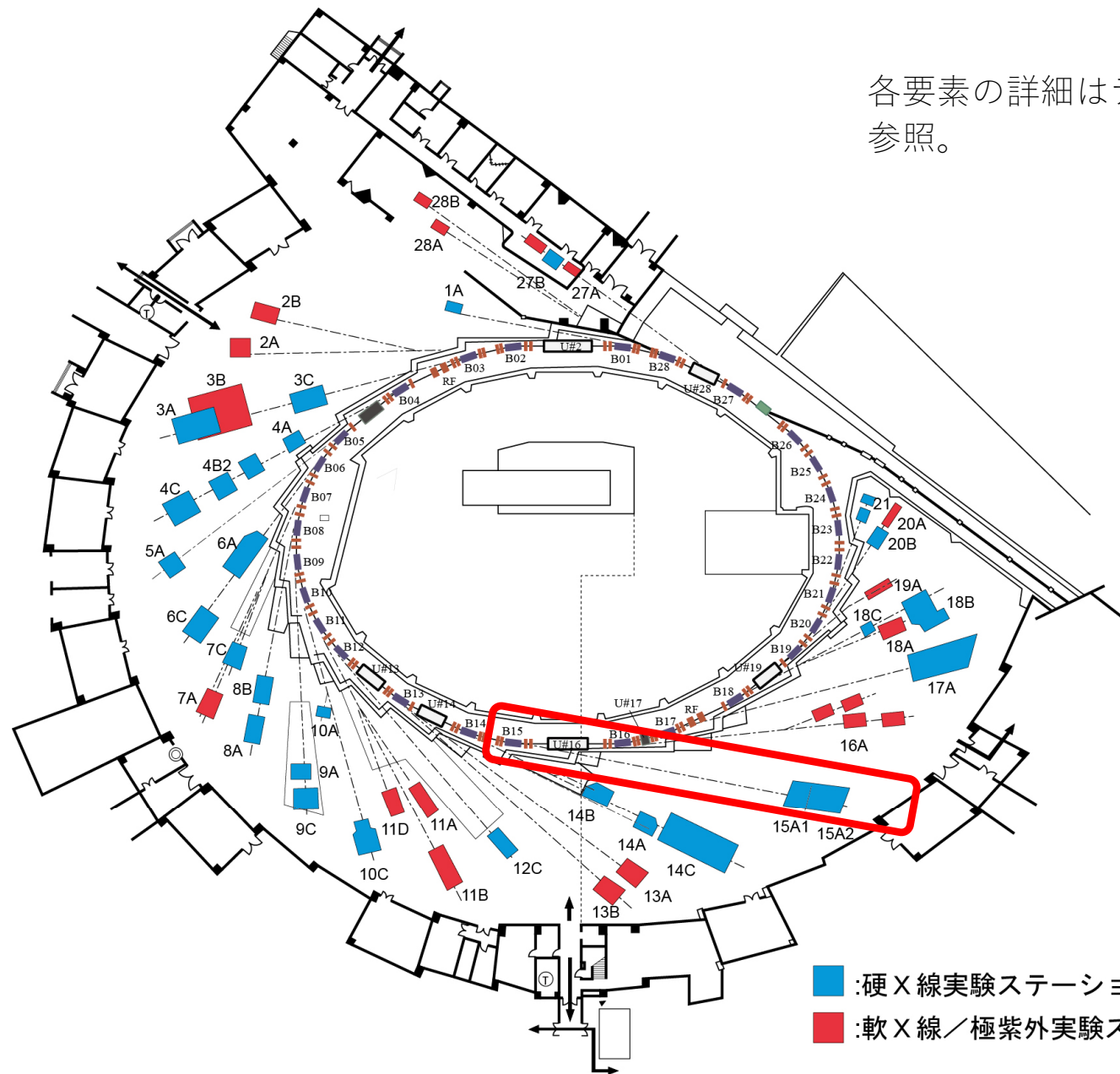
2結晶分光器の特徴

- 入射位置と出射位置を維持したまま分光できる。
- 70.3° で2.1keV ～ 7.57° で15keVまで利用。最大毎秒0.6° の高速掃引。
- シリコン単結晶Si(111)を利用。
- 液体窒素で冷却。（熱伝導率が上がり、熱膨張率の温度変化も小さくなる。）
- モーションコントローラによる6軸リアルタイムフィードバック制御。
- 挿入光源のギャップとの連動駆動。

IDとビームラインの実例 (BL15)

放射光ビームラインと放射光利用実験

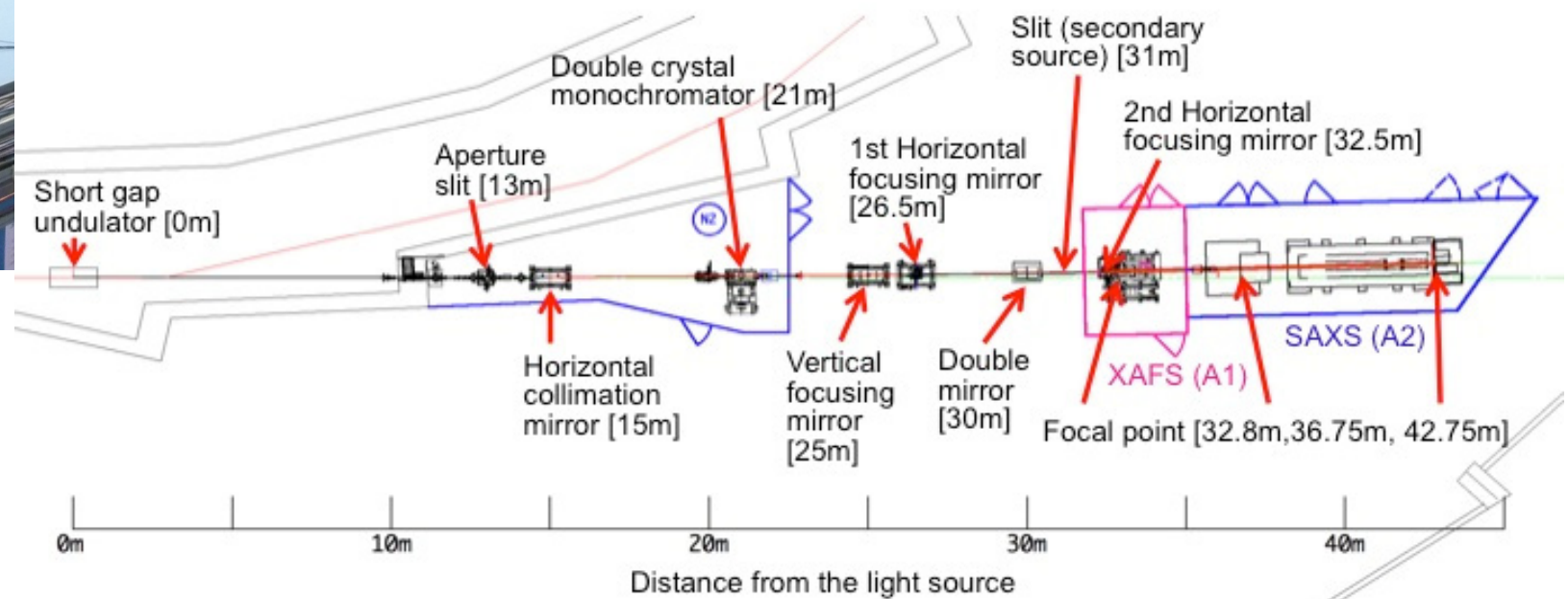
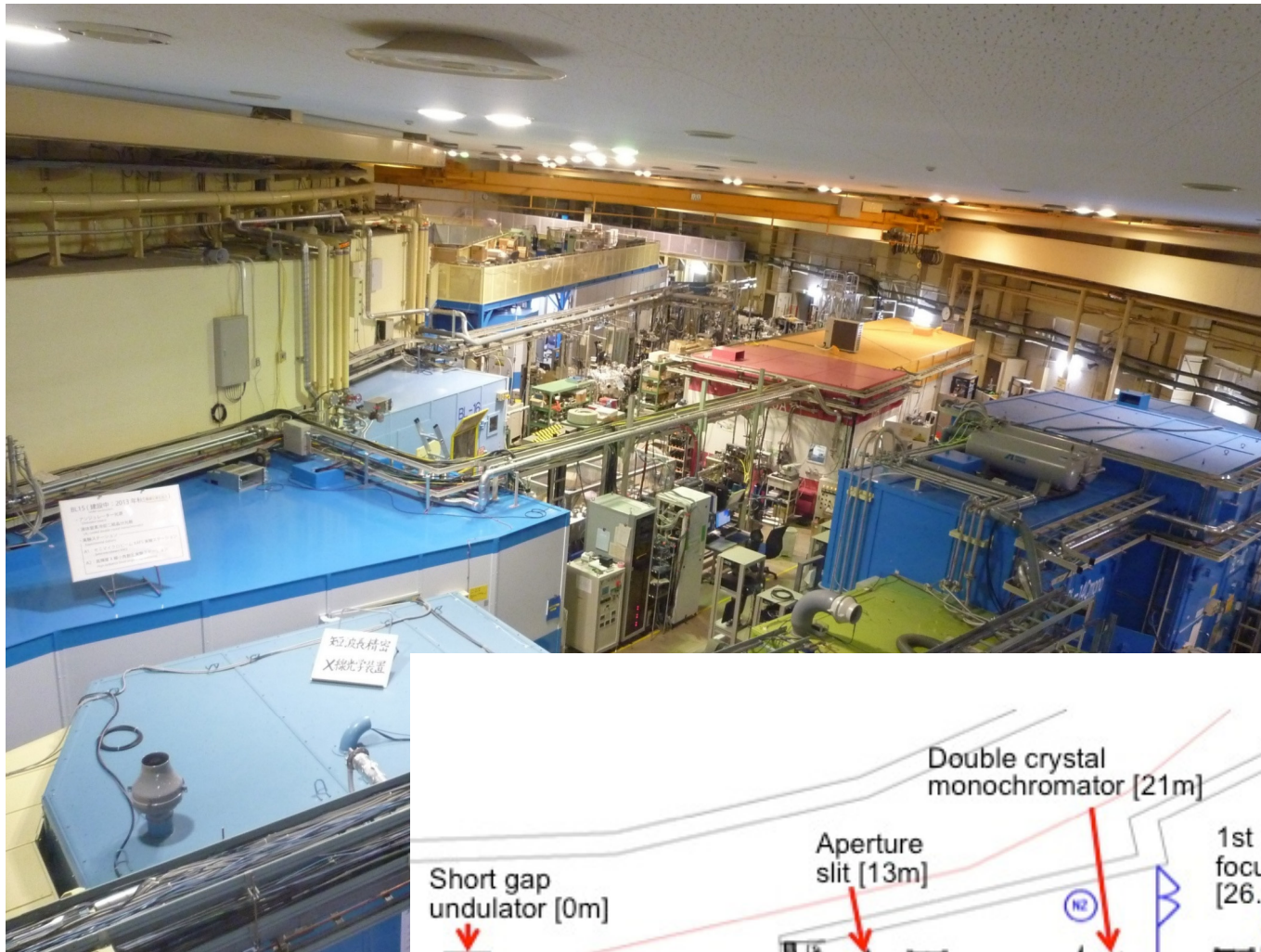
- 2.5 GeVの放射光源加速器であるPFのBL15を例に、ビームラインについて紹介する。



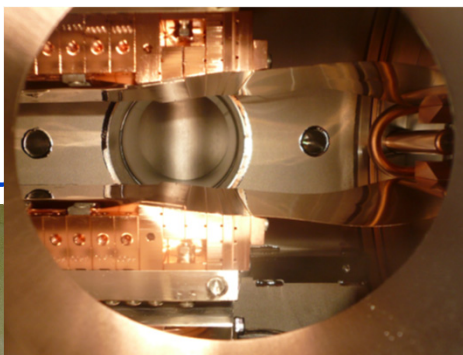
各要素の詳細はテキスト（電子版はカラー！）を参照。

- :硬X線実験ステーション
- :軟X線／極紫外実験ステーション

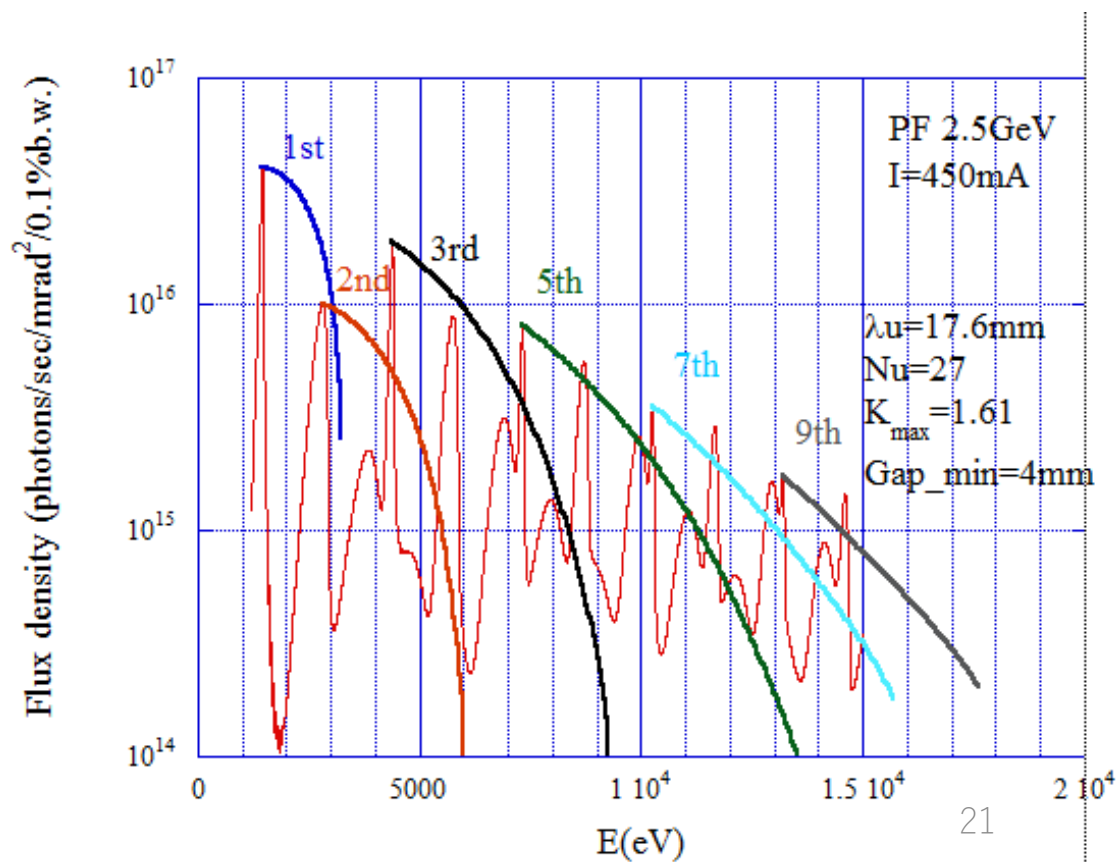
BL15



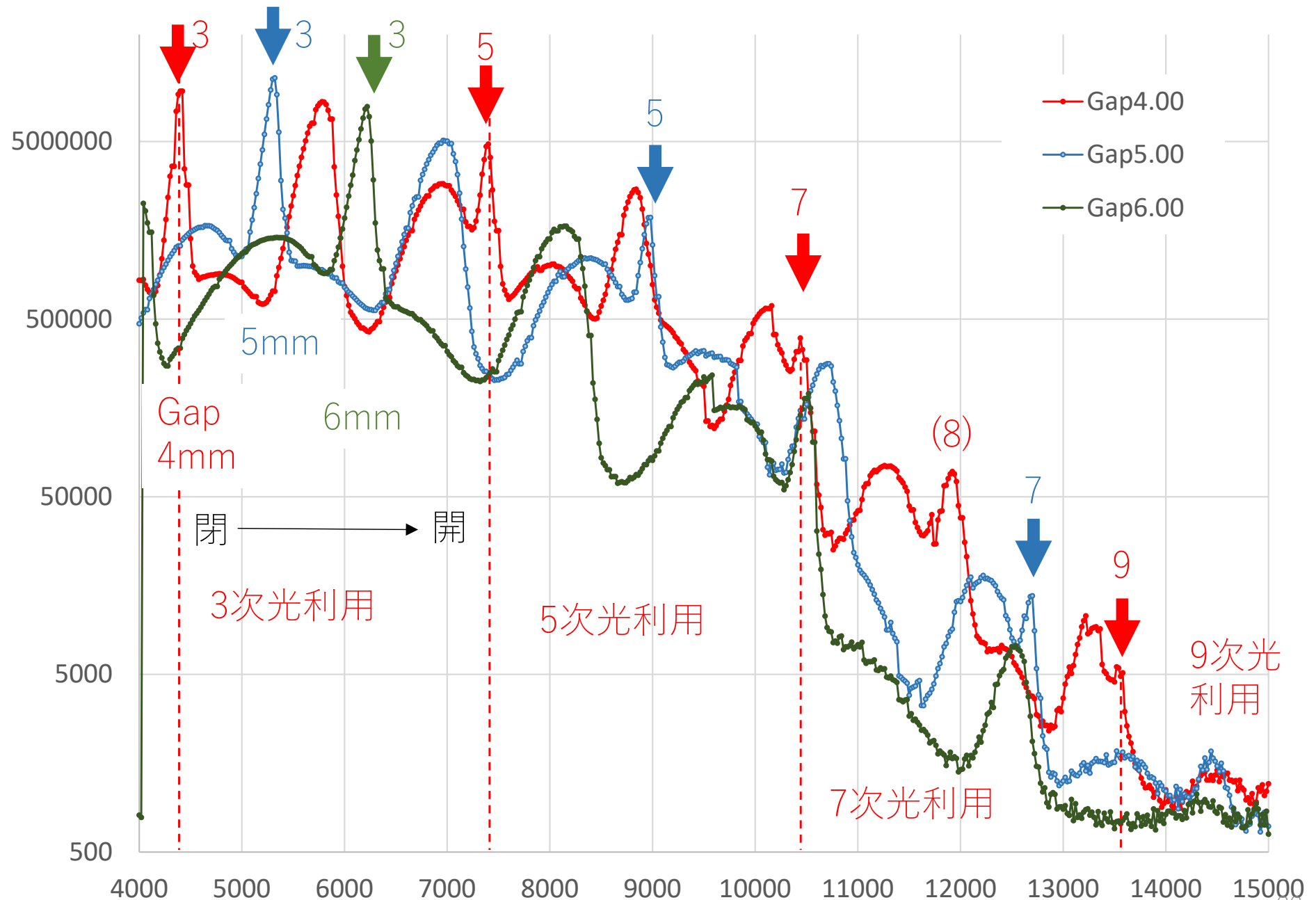
光源 (真空封止短周期ID #15)

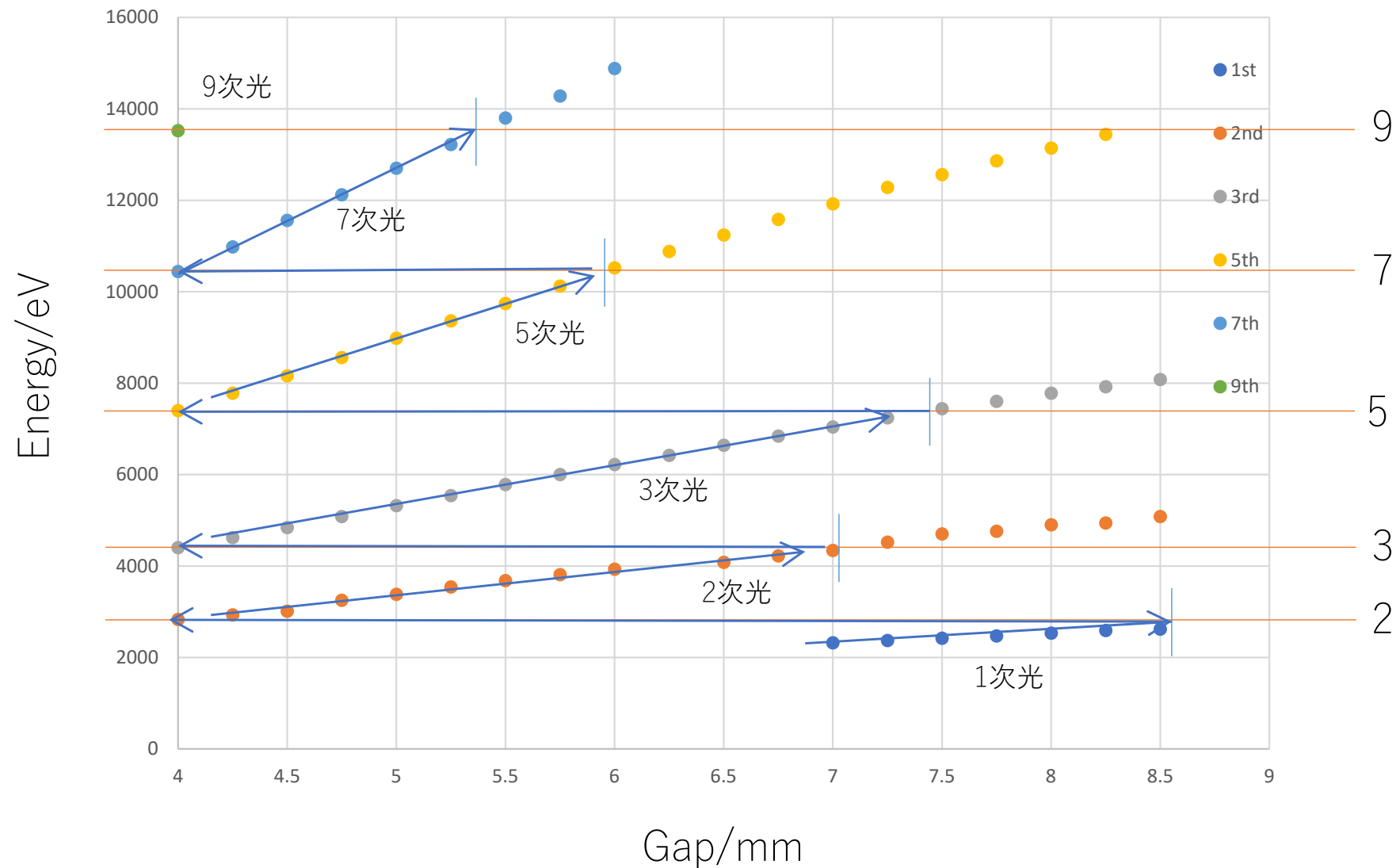


- 真空封止型短周期アンジュレーター (SGU#15)
- 周期長 17.6 mm、周期数 27
- 最小ギャップ4 mm、最大K値1.61
- 水平取り込み角 0.2 mrad
- 15A1 XAFSの要請：エネルギーの連続性
- 15A2 SAXSの要請：高いピーク強度



光源のスペクトル

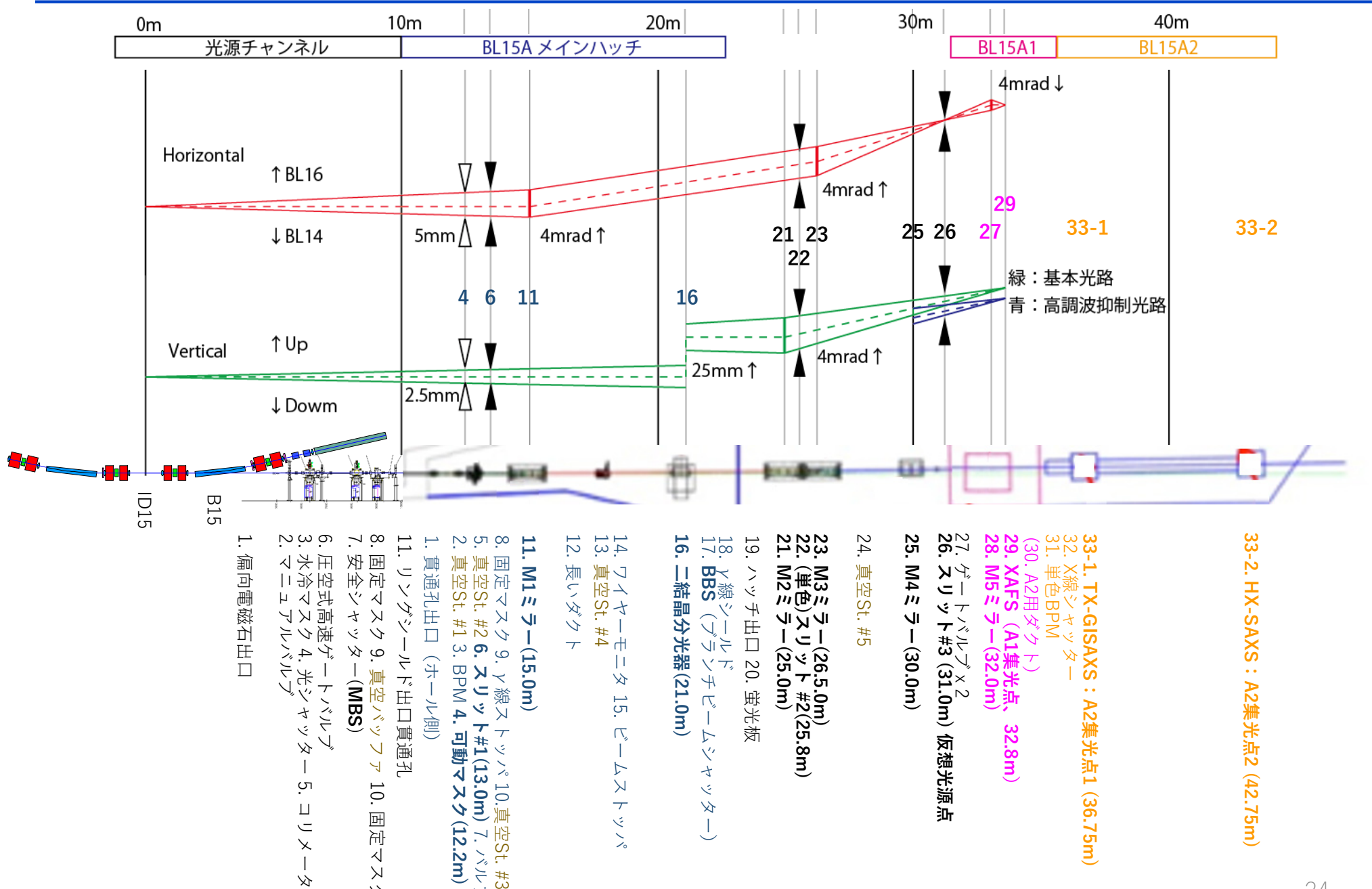




Gapとアンジュレータピークエネルギーの関係

※偶数次光の中心は軸上にはないが、PFはビームサイズが大きいいため、軸上強度が十分にある。

光学 (A1利用時)



(番号はテキスト本文の箇条書き、図の写真番号。)

放射光利用実験

物質科学は何をする分野か？

- 系統的にまとめるのは難しい……
- 構造と電子状態、スピンを調べている。
- 化合物の純物質結晶
 - 構造：どこにどんな元素があるか？
 - タンパク質はミニロボットという感じで、構造から機能が分かることもある。
 - 電子状態はどうなっているか？（価数、配位数、バンド状態）
 - 導体、半導体、絶縁体（モット絶縁体、強相間電子系）、そうなる理由
 - 電子のスピンはどうなっているか？
 - 強磁性（交代磁性）、常磁性、反磁性、磁性の起源
 - 電子間の相互作用、軌道-スピン相互作用など、「相関」の起源と機能の解明。
- 混合物（ソフトマター、非結晶）
 - ゴムなどの高分子重合物の多重構造
 - 混合化合物、生体物質の原料のトレース（重水素置換試料、中性子プローブ）
- 表面
 - 表面だけに現れる特殊状態（表面磁性、表面電気伝導など、例えば半導体産業では本質的）
 - 触媒の機能解明、表面化学反応の過程追跡。
 - マイクロ波、レーザー等で現象・反応を励起し、フラッシュライト的に間欠な放射光で時間を追ってスナップショットを撮影、現象の時間経過を観測する。
- 機能性物質の機能発現中測定（オペランド測定）
- 2D、3Dイメージング、顕微測定、顕微イメージング（顕微X線吸光分光 ～ STXM）

何が必要か？

- 見たい場所まで届く。
 - 全部表面で止まるものは表面の研究に使える。透過するものは内側に使える。
 - 出てくるものを見る、という場合は、大抵は表面（か、薄膜）。光電子分光、発光、蛍光、オージェ電子など……
 - 透過率の高いものはすれすれ入射にすると表面が見える。（全反射させられる、ミラーや回折光子の原理。）
- 試料のエネルギー準位に合っているもの、相互作用できるプローブを使う
 - 量子力学的に、受け手が受けられるものしか反応しない。相互作用が無ければすり抜けるだけ。
 - 発光分光や光電子分光のように、出てくる側でエネルギー差を吸収できる場合もあるが、「共鳴・吸収端XX」のように、試料側のエネルギーに合わせないといけない手法も多い。
- 何と相互作用するのか？
 - 電子、ミュオン、中性子ともスピン1/2、どれも磁性（電子のスピン状態）の測定に使える。
 - 光の相手は電子。水素はほとんど見えない。同位体を区別できない。細く絞れる。微細結晶を相手にする。10ミクロンとか100ミクロンとか、試料は小さい。レントゲンの印象からすると、X線は何でもすり抜けるイメージだが、（意外に）十分反応するし止まる（勿論波長による）。
 - 中性子の相手は原子核。水素がとてもよく見える。水素と重水素など、同位体が区別できる。中性子は透過率が極めて高い。電磁気で操作できないので、細く絞ることも難しい。試料は大きいサイズが必要。重水素置換すれば水中試料も測定できる。
- 電子線、X線の透過XXは、大抵は、試料を薄くしないとイケない。（薄くできるものしか測れない。）一方、光電子や蛍光を使えば、厚い試料の表面でも調べられる。
 - XXが分かる＝不必要でも差が出る＝整えて把握して測定しないとイケない。
- 試料の準備方法、どんな形に加工できるかで、使える手法が限られる。
- （一般論としてなかなかまとめられない……当たり前だが、困難が生じて乗り越える手法が大抵は開発されてしまうので、XXだからXXができない、となかなか言いがたいものが……）

放射光実験の利点と常識？

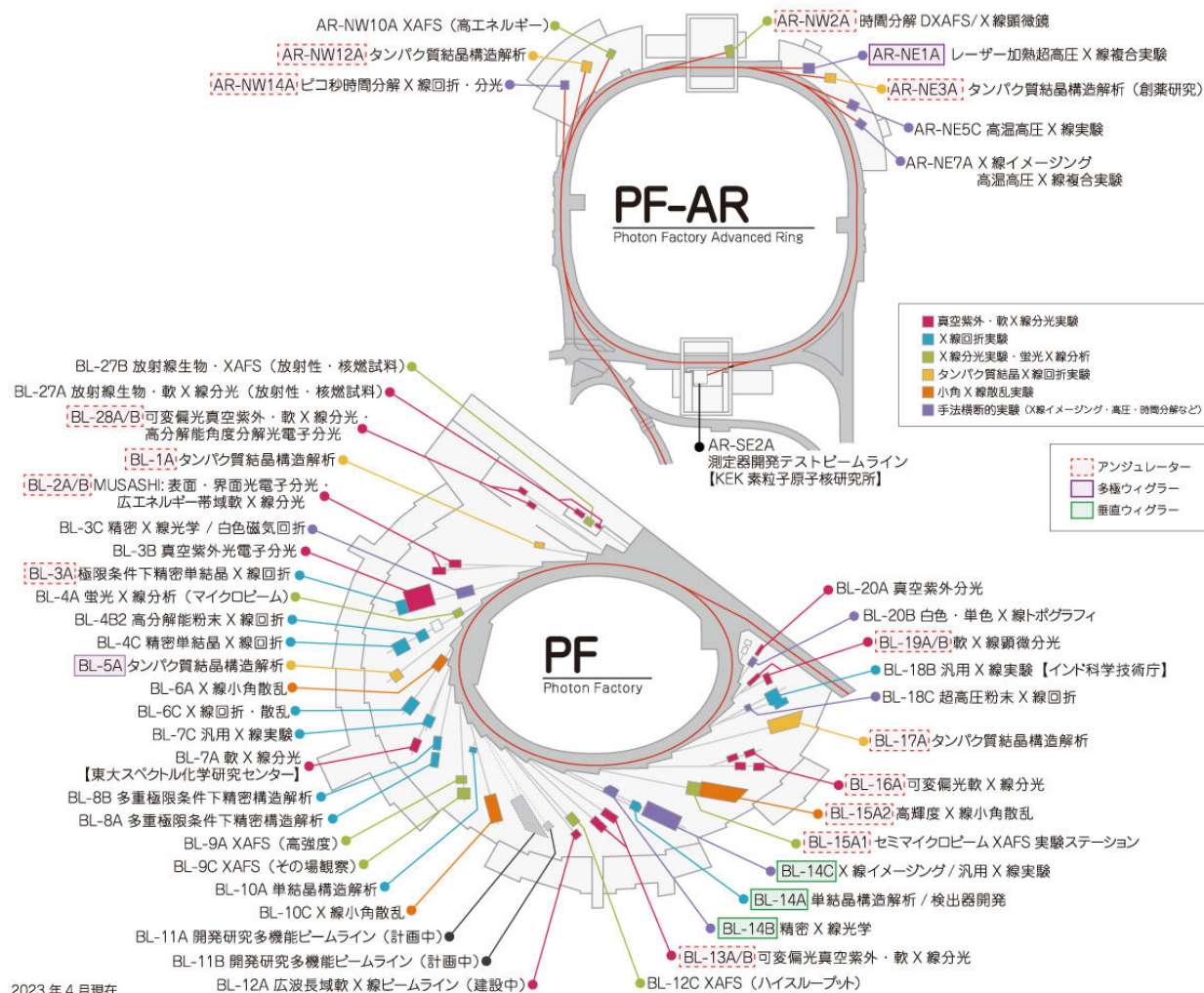
- 放射光の利点
 - 大強度（光子量が多い）、高輝度（サイズが小さく、向きが揃っている）、（光源での）波長可変性、（光源での）偏光可変性。
 - リングでは一部、FELでは100%のコヒーレンスを使えること。
 - リングでは連続パルス光で平均精密測定に優れていること。時間分解には、フィルパターンで対応するが、周回周波数以下にはならないので、BL側でチョッパーを併用する。FELは元々10Hz～MHz程度の間欠光になる。
- 常識？ イメージ？
 - ビームライン（分光光学系 - 試料設置部分 - 検出器）は長い。
 - 紫外～X線領域は鏡に直入射側で反射率がない。極端な斜入射光学系が必要で、収差も出るので、その補正に曲面鏡、不等間隔回折格子が必要。→ 鏡、回折格子の照射面は大きく、光路も長い。
 - 光強度が強いので熱伝導のよい材質と冷却が必須。→ 基本Si（鏡や回折格子の基材としても）
 - 回折格子と結晶分光器の境界は事実上、約2keV。
 - 低エネルギー側（VSX）は残留ガスや光学系の汚れに吸収されるので、超高真空と真空を汚さないことが必要。一方、X線も長距離（数m）の空気中はぼやける原因になるので光路は真空にするが、低真空で良い。高エネルギーだと薄膜窓でリングとBLの真空を仕切れる。
 - 低エネルギー側は実験槽の壁（真空チェンバーだけ）で遮蔽十分、隣にしながら測定可能。高エネルギー側は実験装置外側に放射線遮蔽が必要、ハッチ内に設置して人払いして測定する。
 - 低エネルギー側はBLで光を間引ける（高速シャッターが作れる）。X線側は難しい（加速器で対応）。
 - X線はBLで偏光を変えられる。低エネルギー側は難しい（加速器で対応）。

光のエネルギーと用途

- 硬X線 (10keV～、エネルギーの高いX線)
 - 吸収されない、反応しない。
 - 従って、透過率が高い。バルクや結晶全体の性質が分かる。
 - ビリヤードの球のように、衝突してそのまま散乱される。
 - ゾーンプレート、結晶そのもので分光、集光。
 - 結晶構造を見る。
- VUV～SX (10eV～数keV)
 - 吸収されたり反応したりする。
 - 照射すると何かが起こる。
 - 別の波長の光が出てくる、電子が出てくる
 - 化学反応が起こる
 - 表面で全部使われて内部まで到達しない
 - 真空紫外は空気中では酸素に吸収され、真空中でしか輸送できないことが名前の由来。鏡や回折格子もすれすれ入出射にしないといけない。加速器ダクトと繋がった超高真空が必須。
 - 原子や分子の電子状態、結合を観測、操作する。
 - 価電子帯の研究に使われる。(内殻はX線吸光分光、XAFSとか。)
- 中性子
 - 物質科学に使う「冷」中性子の定義は5meV以下～物質波としての波長0.4nm以上～これがX線に換算すると3keVに相当。
 - (電子の質量：0.511MeV、ミュオン：105.6MeV、中性子：939.6MeV)

PFの「ユーザーグループ」

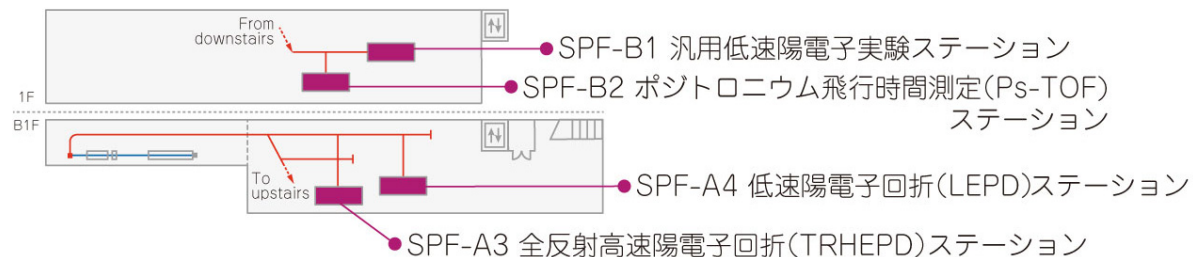
PAC 分科	測定手法 グループ	ビームライン
第 1	光電子分光	2A/B, 28A/B, 3B, 13A/B
	軟 X 線吸収分光	7A, 12A（建設中）, 16A, 20A, 27A
	軟 X 線顕微鏡	19A/B
第 2	回折・散乱	3A, 4B2, 4C, 6C, 7C, 8A, 8B, 10A, 14A, 18B
第 3	X 線吸収分光	4A, 9A, 9C, 12C, 15A1, 27B, NW2A, NW10A
第 4	タンパク質結晶解析	1A, 5A, 17A, NE3A, NW12A
第 5	小角散乱	6A, 10C, 15A2
第 6	高圧	18C, NE1A, NE5C, NE7A
	超高速時間分解	NW14A
	X 線光学・イメージング	3C, 14B, 14C, 20B, NE7A



(参考) J-PARC MLF、SPF

中性子

中性子非弾性散乱 (磁性)	BL01	四季 4次元空間中性子探索装置
	BL02	DNA ダイナミクス解析装置
	BL06	VIN ROSE 中性子共鳴スピンエコー分光器群
	BL12	HRC 高分解能チョッパー分光器
	BL14	アマテラス 冷中性子ディスクチョッパー型分光器
	BL23	POLANO 偏極中性子散乱装置
中性子回折 (バルク構造解析)	BL03	iBIX 茨城県生命物質構造解析装置
	BL08	SuperHRPD 超高分解能粉末中性子回折装置
	BL09	SPICA 特殊環境中性子回折装置
	BL11	PLANET 超高压中性子回折装置
	BL18	千手 特殊環境微小単結晶中性子構造解析装置
	BL19	匠 工学材料回折装置
	BL20	iMATERIA 茨城県材料構造解析装置
中性子小角散乱・反射率	BL21	NOVA 高強度全散乱装置
	BL15	大観 中性子小角・広角散乱装置
	BL16	SOFIA ソフト界面解析装置
イメージング・非破壊検査	BL17	写楽 偏極中性子反射率計
核物理、基礎実験	BL22	螺鈿 エネルギー分析型中性子イメージング装置
中性子光学開発、開発実験	BL04	ANNRI 中性子核反応測定装置
	BL05	NOP 中性子光学基礎物理実験装置
	BL10	NOBORU 中性子源特性試験装置

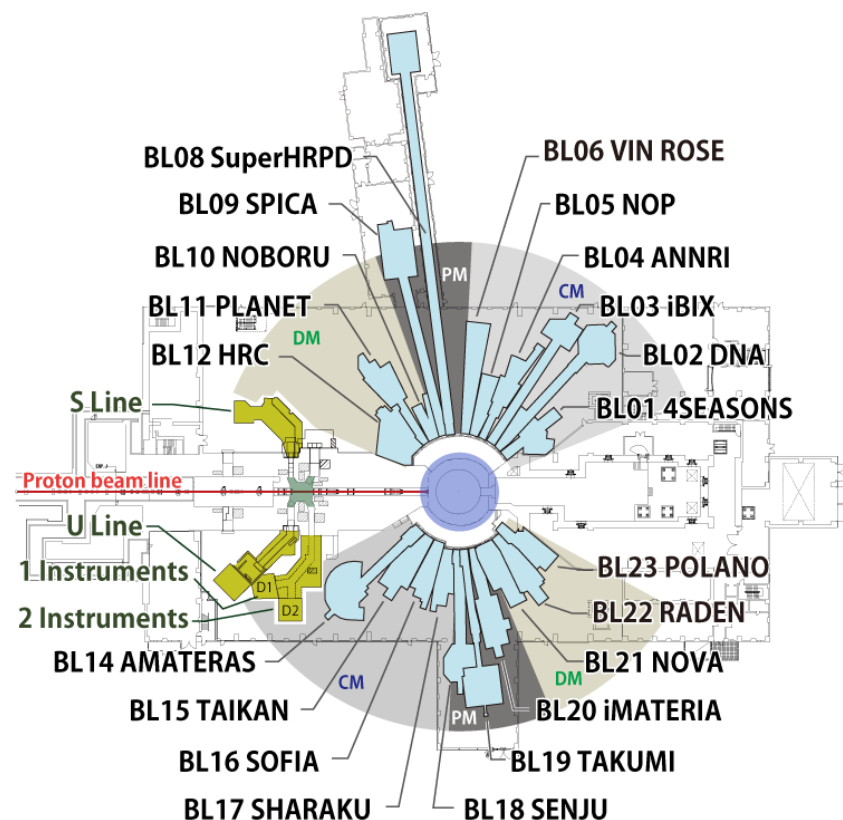


ミュオン

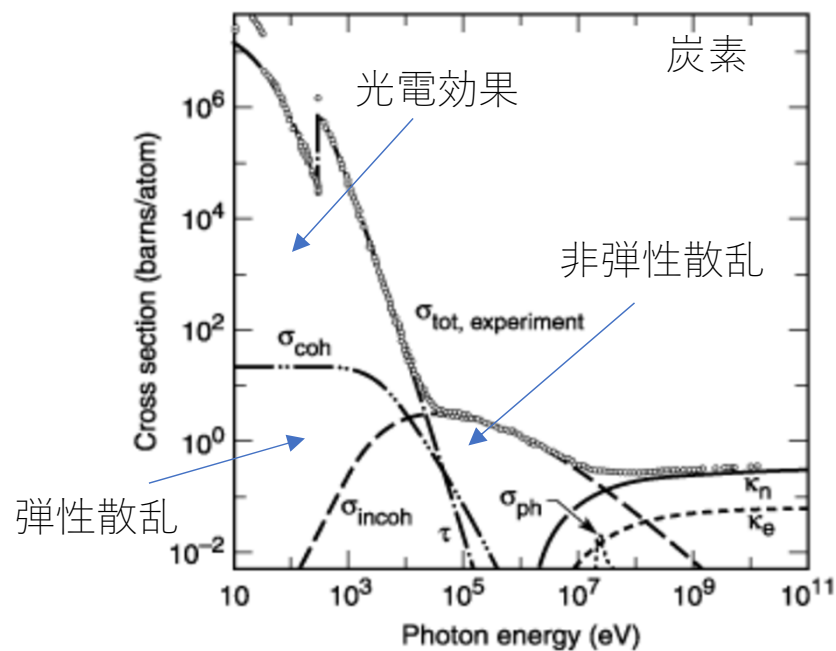
μSR (磁性)	D1	ミュオン物質生命科学実験装置
	S1	ARTEMIS 汎用 μSR実験装置
非破壊元素分析	D2	ミュオン基礎科学実験装置
微小試料・薄膜μSR	U1A	超低速ミュオン顕微鏡実験装置
素核	H1	大強度ミュオンビーム実験装置

低速陽電子

陽電子線回折 (表面構造解析)	A3	全反射高速陽電子回折(TRHEPD)
	A4	低速陽電子回折 (LEPD)
ポジトロニウム(Ps)	B1	Ps生成機構、飛行時間測定 (Ps-TOF)
	B2	Psレーザー冷却実験・汎用ステーション



物質とX線の相互作用



J. H. Hubbell et.al., J. Phys. Chem. Ref. Data 9, 1023 (1980).

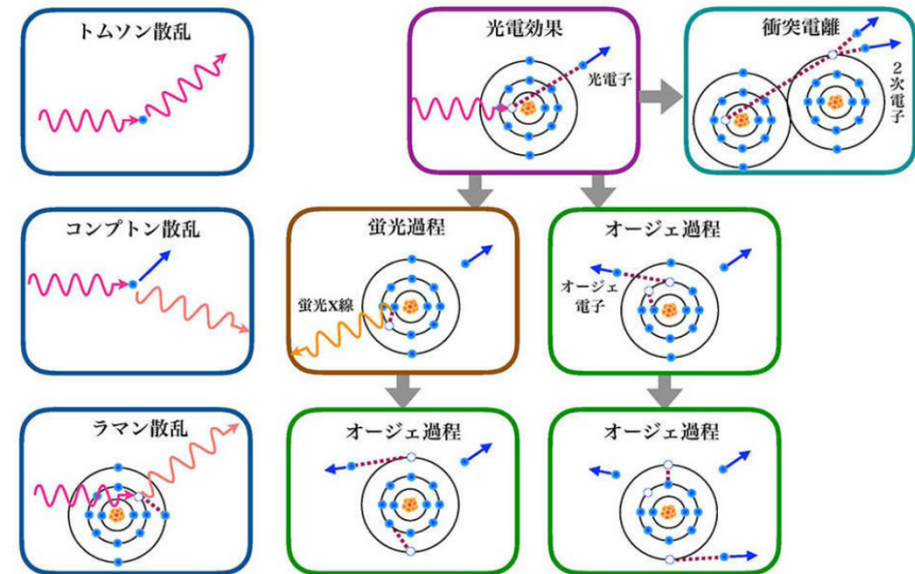


図15.17: X線と物質の相互作用, および関連して起こる主な緩和過程の模式図。

XFELなど超高輝度高光束光による雪崩のような過程の解説図
放射光ビームライン光学技術入門より

- 弾性散乱：入射光と散乱光の波長が同じ。普通の回折実験で使う。
(X線領域ではトムソン散乱。) 空が青いのは青い光が沢山レイリー散乱する為。
- 非弾性散乱：入射光と散乱光の波長が変わる (コンプトン、ラマン散乱)。空港の荷物検査が後方コンプトン散乱。放射光でやる時は弾性散乱が少なくなる領域 (50keVとか100keVとか) を使う。
- 光電効果：X線によって電子が励起され、光電子が放出される。X線が「吸収」される。
- 蛍光：内殻電子が跳ばされた後、外殻から電子が落ちてくる時に特性X線を出す。 K_{α} : L→K、 K_{β} : M→K
- オージェ：蛍光の代わりにエネルギーを別の電子が受け取って電子が放出される。
- ラマン：原子分子の振動準位の変化が加わり、波長の違う散乱光が出る。

これらを使って物質を調べる。組み合わせることもあるし、特殊環境下での測定もあるし、2次元、3次元的に画像化 (イメージング)、「顕微」測定で微小領域を画像化することもある。

典型的な利用実験 1

- 光電子分光 (Photoelectron Spectroscopy)
 - VSX光を当て、出てきた光電子のエネルギー、運動量を分析すると、試料のバンド構造、化学結合状態が分かる。超高真空技術と共に発展。実験室でも盛んに行われている。
 - 高強度 = 高分解能、高エネルギー光で高エネルギー光電子にすると深いところも見える。
- XAFS (X-ray Absorption Fine Structure)、X線吸光分光
 - 内殻まで含めたX線吸収スペクトルから、元素分析ができる。価数、配位数が分かる。結晶でなくてもいいので、考古学や食品添加物まで、色々な分析に使われる。
 - 吸収端に相当する殻の電子自体の状態を測定しているわけではなく、光電子、電子遷移を通じて元素の電子状態を測定していることになるので、重元素のK端（最内殻）で配意や結合（最外殻付近の情報）が分かる。吸収端が重ならない重元素内殻の高エネルギーXAFSも意義が大きい。
 - 高強度 = 微量元素でも測定可能。
- 結晶X線回折
 - 典型的な格子間隔は $1\text{ \AA}$ (0.1nm)、X線の波長で12.4keVになる。そのくらいの波長が必要。
 - 吸収端に合わせた「共鳴」回折散乱も可能。
- タンパク質結晶構造解析
 - 新第3世代光源はこのためにできたといってもいい。回折像撮影と同じだが、位相情報の回復に、X線の異常分散を使う。（X線管では固定の1波長でしか測定できないので、重元素を組み込んで測定しないといけなかった。）
 - 放射光は波長可変なので、（大腸菌で）メチオニンの硫黄をセレン化（セレのメチオニン）してその異常分散を使って複数波長での回折像から位相情報を回復するというMAD法が開発され、一気に解けたタンパクの数が増えた。現在は硫黄のままで、硫黄の異常分散を利用して単波長測定で済むSAD法が一般的になっている。
 - タンパク構造解析はNMR、クライオ電顕を使った方法もあるが、それぞれ適不適があり、メインはやっぱり放射光。小さな結晶しかできないタンパク質（膜蛋白とか）には高輝度光源が必須。第4世代光源でも引き続き主力ユーザー。

典型的な利用実験 2

- 小角散乱 (Small Angle X-ray Scattering)
 - 周期構造が大きいと、散乱角が小さくなる。(長波長光は吸収されて使えない。) 小角(入射光の延長線周り)の回折強度を測ると、物質の大構造が分かる。例えば、ゴムなどは分子がボールを作り、それが連なって紐状になり、さらにメッシュ、ネット構造になる。段階的なマクロな物質の構造を測るのに使える。中性子でも一般的に行われる。
- * XAFSとSAXSは混合物、液体、かけら、何に対してもできる。
- イメージング
 - 直接：医療と同じ。レントゲン、CTなど。光学・電子顕微鏡のようなイメージでは、X線領域ではゾーンプレートがレンズのように働く。軟X線顕微鏡(STXM)は顕微XAFSといえる。
 - 回折(非周期試料の実像化)：ミクロな像は回折像を測定し、フーリエ逆変換で実像に戻す。位相情報をオーバーサンプリング法、タイコグラフィー法で補う。ナノスケールで画像(再構成像)が撮れる。手法的にコヒーレンスが必要なことも多い。

極限環境下測定、差の利用、時間分解

- 極限環境下X線回折
 - 極低温、強電磁場、高圧力下などで物質の構造がどう変化するかを調べる。
- XMCD (X線磁気円二色性)
 - 右回り円偏光と左回り円偏光の差を測定する。キラルな物質で差が出る。10Hz高速偏光スイッチングによるロックイン測定も行われている。
- 時間分解実験
 - マイクロ波やレーザーを物質に当てて起こる表面の化学反応を時間追跡する。
 - 時間分解で何を調べるかは、対象による。(時間分解XX: 光電子分光、X線吸光分光 (XAFS)、小角散乱、光電子イメージング……)
 - 主戦場はリングよりもXFEL。
- 各利用実験を1～2枚で個別紹介するスライドを最後にbackupとして添付しておく。(時間の関係でここでは説明しない。)

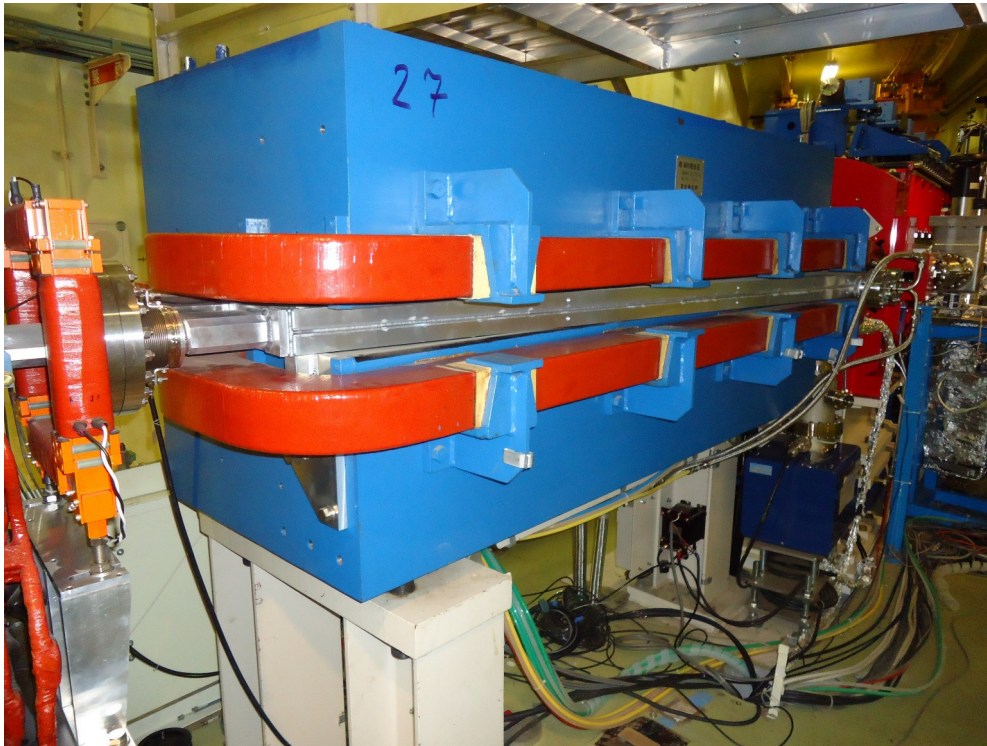
蓄積リング電磁石について

電磁石講義の一般的內容ダイジェスト

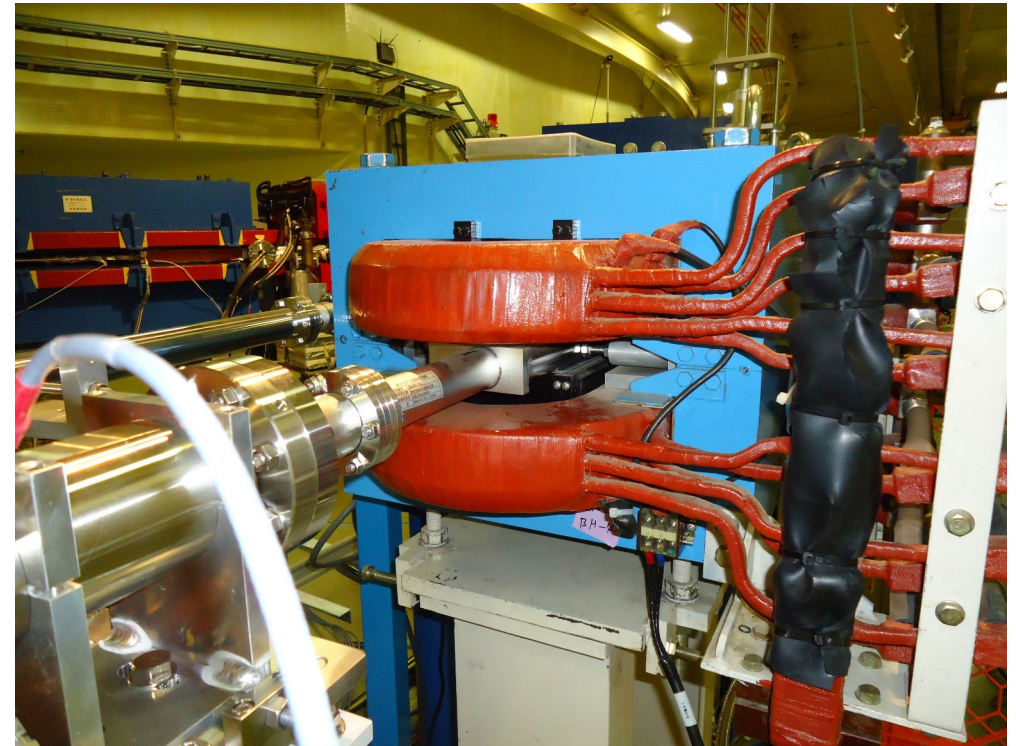
- 磁場を求める数学（全略、テキストや過去のOHO参照）
 - 真空中のマックスウェル方程式 → スカラーポテンシャルのラプラス方程式 → 円筒座標系で解くと、解は磁場の多極展開になる。
 - 各極成分の等ポテンシャル面と磁力線の図示、特に一般的に加速器で使われる2、4、6極について。
 - コイル周りの磁束の線積分から、不飽和、線形領域の解析解として電流と磁場の関係の計算。
- 現実の磁石
 - 電磁石の実例の紹介
 - ソフト強磁性体：飽和、履歴の効果
 - 渦電流と時間応答速度
 - コア材質と構造
 - コイル構造と冷却
 - 電磁石断面形状最適化と磁極端部補正
 - 2次元、3次元計算
 - 実効磁場と実効長

偏向電磁石

- 上下に磁極、曲げる磁石。

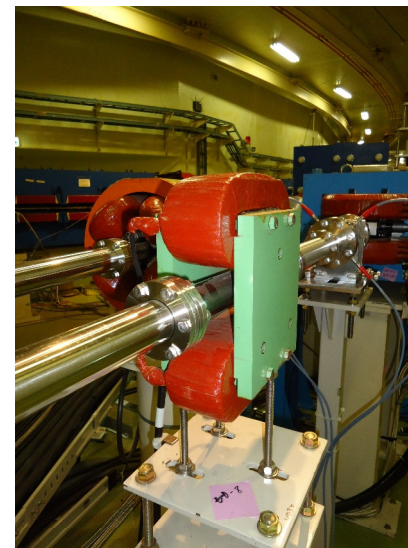


C型
片側空いている。
鉄がCの形



H型
隙間がHの形
ダクト入れる時は半割。

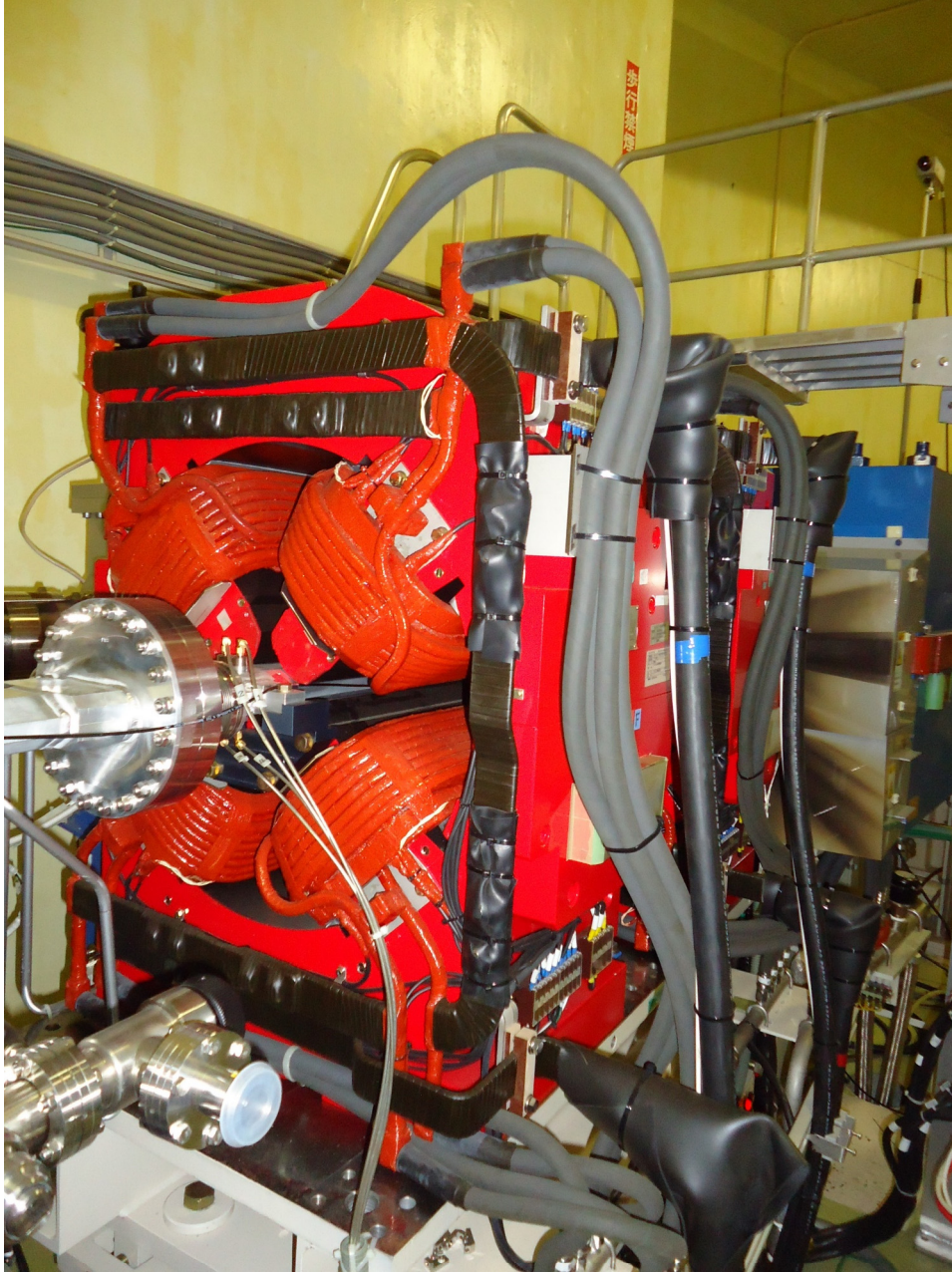
補正磁石。 →



←補正磁石。

4 極電磁石

- 4 つの磁極、「集束」の為の磁石。



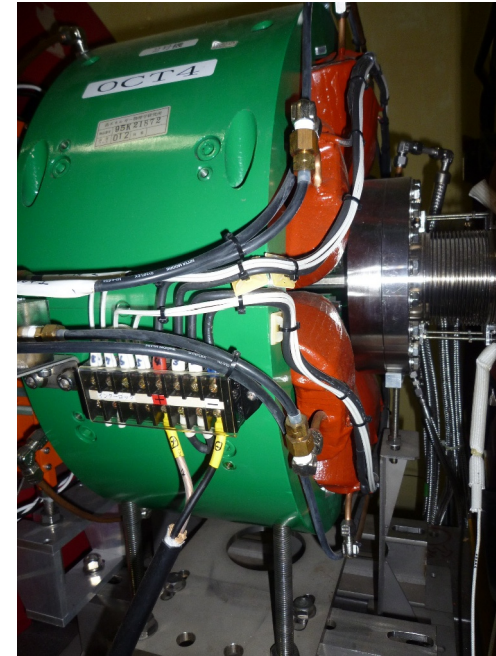
HD - QM - VD
水平補正用2極、4 極、垂直補正用2極

6極電磁石、その他

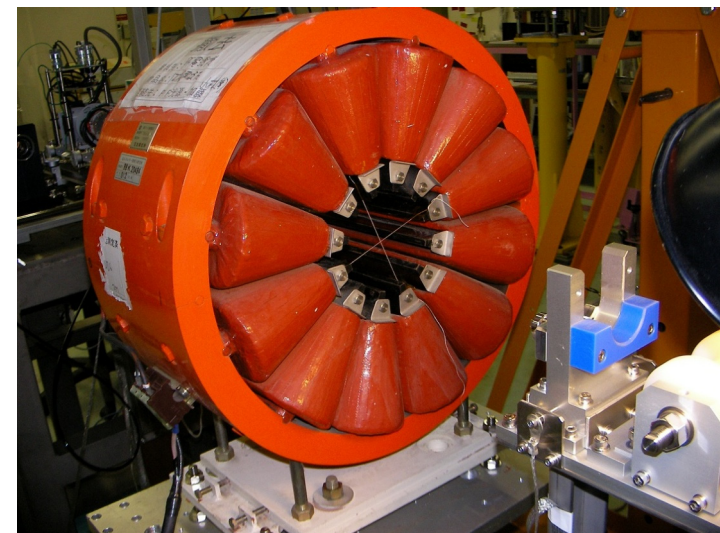
- 6つの磁極、エネルギー収差補正の為の磁石。



- 8極電磁石、不安定性抑制の為の磁石。（廃止）

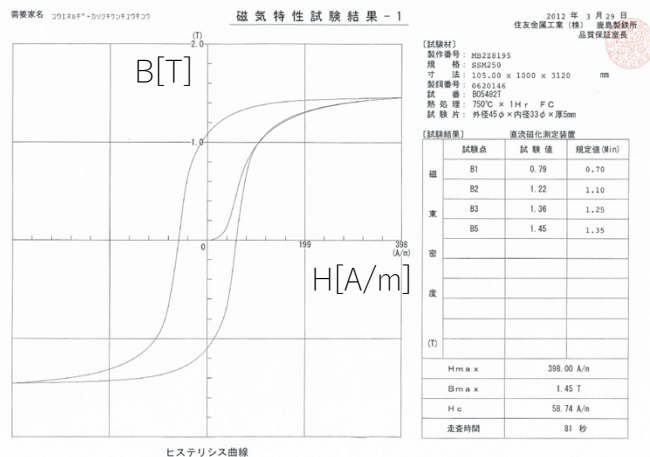
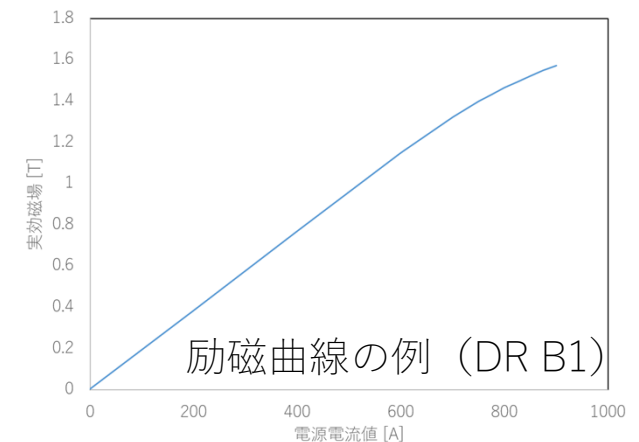
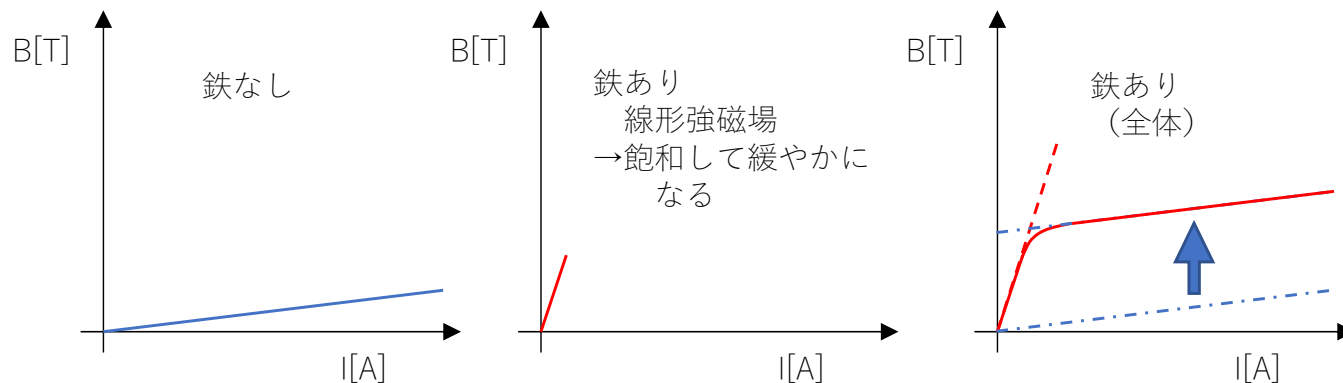


- 12極電磁石、何も効かなかったらしい、古の呪物。



鉄- ソフト強磁性体

- 鉄は「ソフト」な強磁性体である。
 - 強磁性体：外場と同じ方向に強く磁化する。
 - ソフト磁性体：外場（コイル電流）に柔軟に反応する。磁場が比例で強くなる、外場反転すれば反転する。（⇔ハード強磁性体の例は永久磁石）
- 「履歴」と「飽和」がある。
 - 履歴、残留磁場：励磁後、電流をゼロにしても磁化が残る。電流上げ下げで同じ磁場にならない。
 - 飽和：磁場を強くしていくと比例からずれて寝てくる。（スピンの揃いきるとそれ以上は磁化が増えない。）



- 材質データとしてのB-H曲線を左図に示す。（磁石の消磁は飽和領域までの正負電流ループしつつ、振幅を徐々に小さくしていく。素材ならキューリー点より加熱すればよい。）
- 加速器としての運転は、通常、電源に接続して、電流ゼロと規定最大値まで何度かループを回すという「標準化」を行い、電流上げ下げどちらで運転電流に設定するかも決めて、いつも同じ磁場が出るようにして使う。
- 飽和が大きすぎる：電力の無駄、小さすぎる：電磁石のオーバースペック。

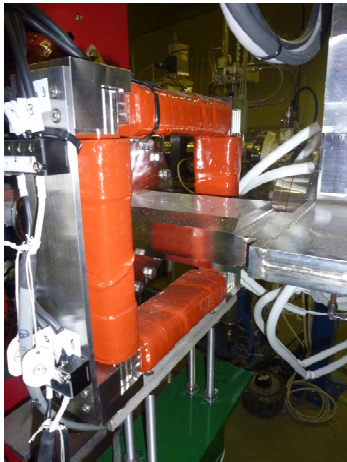
渦電流と時間応答速度

- 電磁石の磁場を変えると、真空ダクト、鉄芯に渦電流が生じる。
 - 入射点に設置し、入射路側だけに磁場を出し、入射ビームだけを曲げる「セプタム」は、渦電流の効果で磁場を遮蔽する。
 - キッカーなどパルス磁石はダクトの渦電流で磁場が遮蔽されないようにセラミックダクトにする。ただし、ビームの壁電流を流すことが必要なので、内面は金属コーティングする
 - セラミックは「フランジ接続やコーティングまで含めて非常に高価」「割れる」「ギリギリで作りたいくなるが、高精度は困難」などの課題がある。
- 高速応答の為には、磁石本体、電源だけでは無く、ダクトも重要。
- 時間応答として、だいたい3通りに分けられる。
- DC電磁石・電源（蓄積リングのラティスのメインの磁石）
 - 磁場は一定で運転することを想定。（時々磁場を変える補正の電磁石も含む。）
 - DC電源は昔はドロップ型、現在はスイッチング型がある。
 - 鉄塊（ソリッド）と薄板の積層（ラミナ）がある。
- パターン磁石（ブースターの磁石、蓄積リングの高速補正磁石や軌道スイッチング磁石）
 - 100ms、10Hzくらいの速さの応答の電磁石が例。電源は「半導体アンプ」。
 - 渦電流防止のためにラミナ型が必須。ダクトはSUS（ステンレス）で薄くすれば、渦電流の効果が抑制できる。正確に高速不規則パターン運転が必要な場合はセラミックダクト必須。
- パルス磁石（キッカーなど）
 - 半正弦波形でパルス幅 $1\mu\text{s}$ 、1秒に10発、というイメージ。
 - コイルは棒1本の「ブスバー」、電源はコンデンサに充電しておいて、それを放電する、という方式。（充放電のスイッチに真空管を使うことが一般的。） セラミックダクト必須。

コア材質と構造

- ソリッド：鉄塊を削り出して作る。素材による個体差大きい、切削中の温度変化の影響や機械的歪みの影響も残る。（通常は整形後の焼鈍や消磁は費用面から行わない。）
- ラミナ（積層）：硅素鋼板というロール状の薄板を金型で打ち抜き、絶縁接着剤を塗って、真空炉で加熱圧着して作る。多数枚を乱雑に混ぜ合わせることになるので、均一化され、個体差がなくなる。
- 珪素鋼、電磁軟鉄以外の素材
 - パーマジェール：鉄-コバルト合金、飽和磁束密度が高く、鉄より何割か高い磁場まで出せる。もろく、割れやすいので加工が難しい。
 - ミューメタル：ニッケル-鉄合金（パーマロイ）で、微小な磁場変化に容易に応答する。履歴、残留磁場がない。（磁気シールドにも使われる。） シールド用の箔にもできる金属質。
 - （ソフト）フェライト：酸化鉄主体、セラミック質、抵抗値が高く、渦電流がほとんど流れないで高速応答する。（高周波カットフィルタに使われる。なお、永久磁石はハード磁性体のフェライト。）

ラミネーション磁石の例
(DR QM)

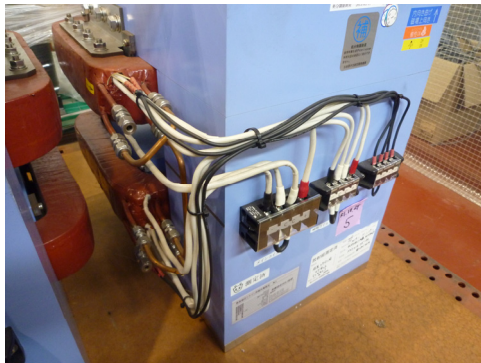


ミューメタルの
ステアリング



コイル構造と冷却

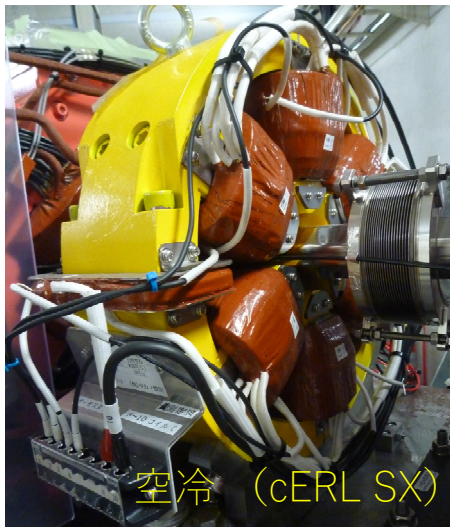
- ホロコン：ホローコンダクター、中空の銅パイプで、水を流して冷やしつつ、同時に大電流を流す。抵抗小さい、（1台あたりの）電圧小さい、巻き数少ない。冷却水は純水、水配管とコイルの間は絶縁耐放射線ゴムホースで繋ぐ。流量計とコイル温度の両方でインターロックをかける。
- 空冷：銅線を巻いただけ。感覚的には最大5Aくらい。
- 間接水冷：銅線コイルの間に、通電しないホロコン（水冷銅パイプ）を挟んで冷却だけ行う。感覚的には最大20Aとか。



間接水冷磁石の例
(cERL 周長補正シケインBM)



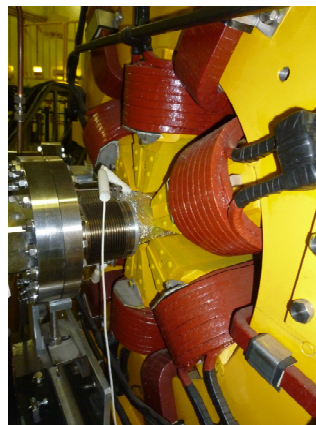
ホロコン (DR QM)



空冷 (cERL SX)



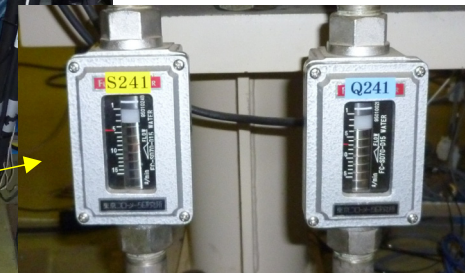
(PF QM)



(PF SX)



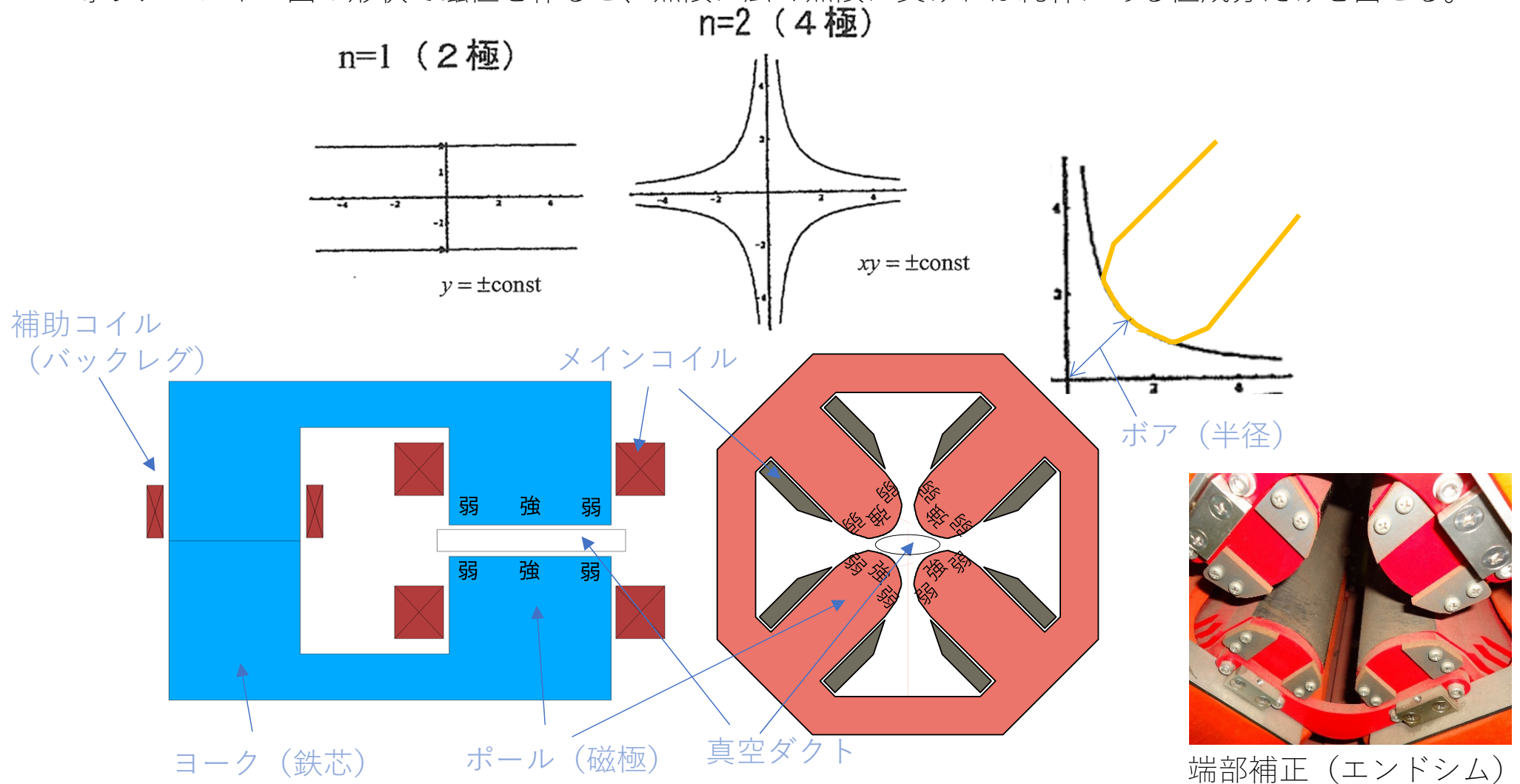
水配管と流量計
青が水
黒は電力線



コイル (ブスバー)
温度スイッチ

電磁石断面形状最適化と磁極端部補正

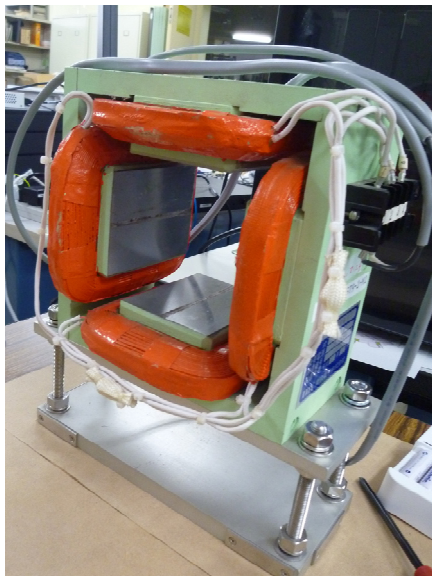
- 等ポテンシャル面の形状で磁極を作ると、無限に広く無限に長ければ純粋にある極成分だけを出せる。



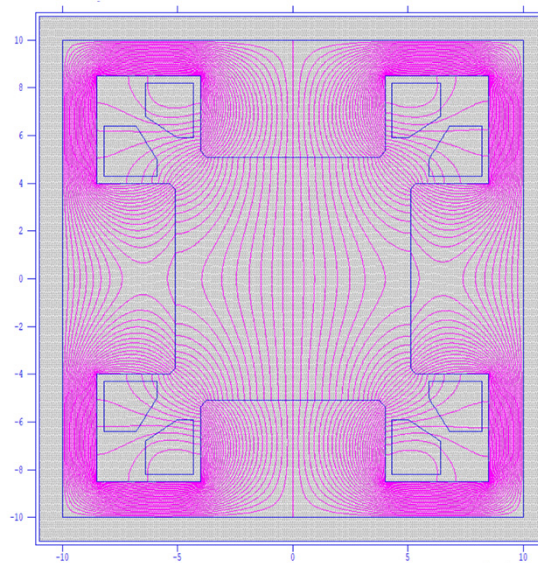
- コイルを巻くために磁極は途中で切り落とすので、磁極両端では磁場が弱くなる。
- BMの場合は強い弱い6回現れるので6極成分、QMの場合は12回現れるので12極成分が出る。
- 端部補正：「弱」の部分に鉄を貼り付ける、磁極を狭めるなどして補強、全体としての磁場分布一様性を高める。

2次元、3次元計算

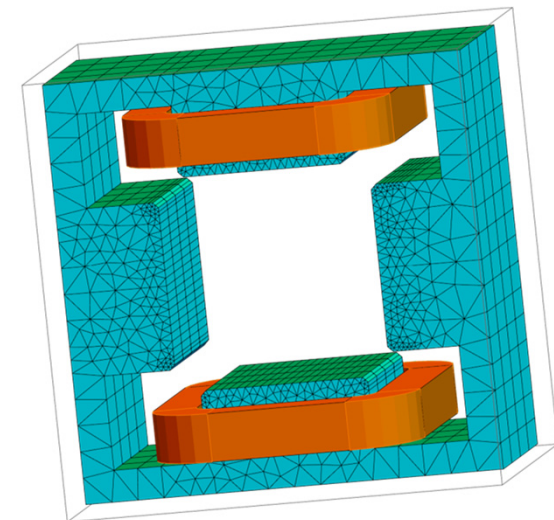
- 真空ダクトの太さを決め、ボア径を決める。
- 解析式から、電流比例領域の磁場（勾配）強さが推定できる。必要な曲げ角、積分集束力とコア長の兼ね合いで、現実的か、許容できるか見積もる。OKそうなら、磁場計算と詳細設計に進む。
- 2次元計算
 - 磁場分布、磁力線、電流を変えた時の変化（励磁曲線）が計算できる。
 - 断面形状の最適化、材質データを入れて、飽和の影響を計算できる。「中心磁場」がわかる。
 - ビームが通る領域全体で磁場が（端部補正後に）一定にできるように磁極の幅を決める。必要な総電流とホロコン（水量）、銅線断面積（電流密度）から、必要な太さと巻き数、断面積が決まる。鉄芯部分も飽和しないように幅を決めると、全体形状が決まる。
- 3次元計算
 - 3次元的な磁場分布、裾磁場や端部補正の効果が計算できる。
 - ばらつきを含めた材質データや製造過程の歪みや着磁履歴、環境の効果などはほぼ反映不可能。



電磁石の例



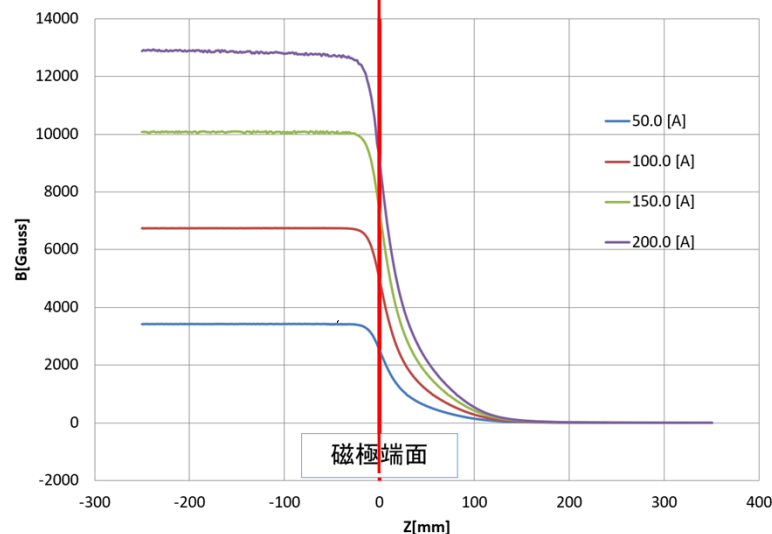
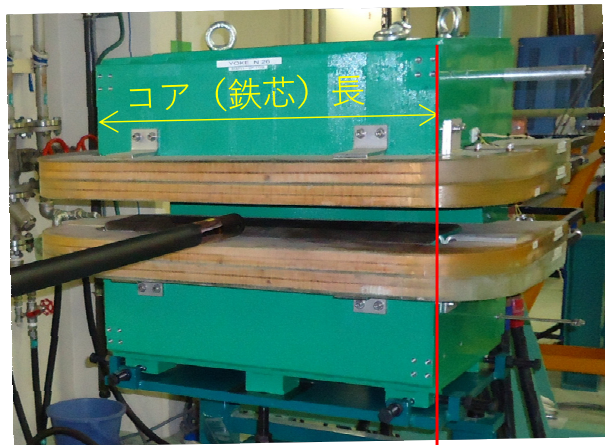
2次元計算の例



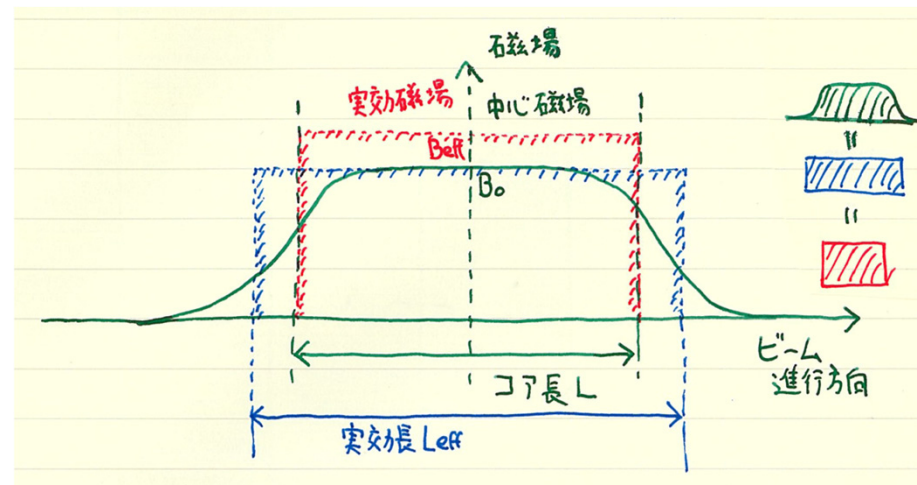
3次元計算のモデル
・メッシュ例

実効磁場と実効長

- 個体差と電磁石の健全性を確認する為に、通常、製作した電磁石は全数磁場測定を行う。
- 運転に使う励磁曲線として必要なのは、積分磁場（勾配）と電流の関係。
- 運転のためには、ホール素子やNMRによる分布測定は時間がかかるので、通常、ハーモニックコイルで積分磁場を直接測定する。（分布はホール素子等で測らないと分からない。）



- 電磁石の磁場はビーム進行方向に対して、鉄のある領域よりも外まで裾を引く。
- ビーム進行方向に磁場を積分したものを積分磁場と呼ぶ。
- 積分磁場はその磁石がビームに与える全影響を表している。（薄レンズ近似の値。）
- 一方、磁極中心の局所的な値を中心磁場と呼ぶ。
- 積分磁場を中心磁場で割った値を実効長、積分磁場を鉄芯長（コア長）で割った値を実効磁場と呼ぶ。
 - 積分磁場 = 実効磁場 $\times$ コア長 = 中心磁場 $\times$ 実効長
 - ラティス台本にどちらで入れるかは好みの問題。（安定性がこれで大きく変わるなら、設計自体が悪いと思う……）

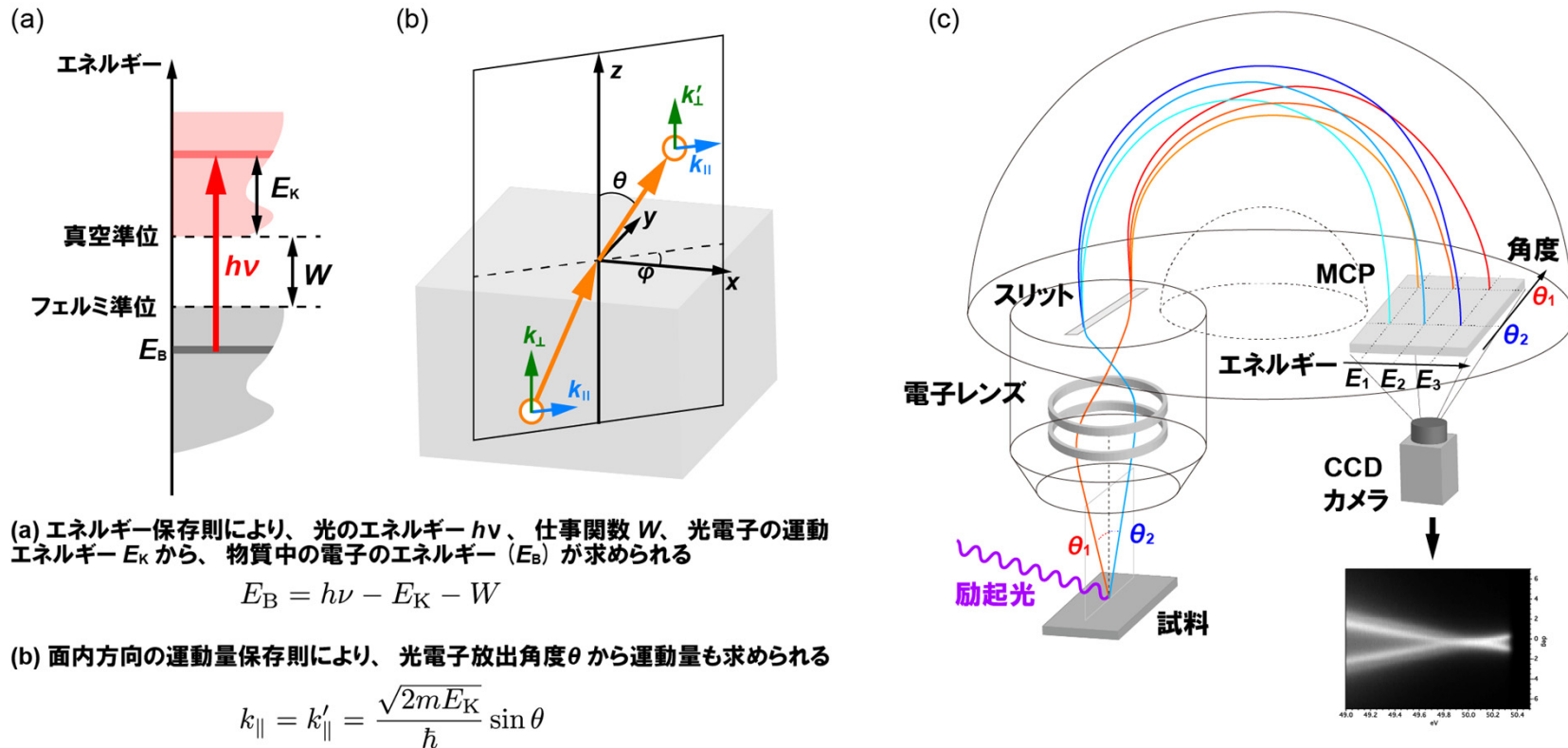


Backup

利用実験の紹介

光電子分光(PhotoEmission Spectroscopy: PES)

東大 松田研究室 WEBより

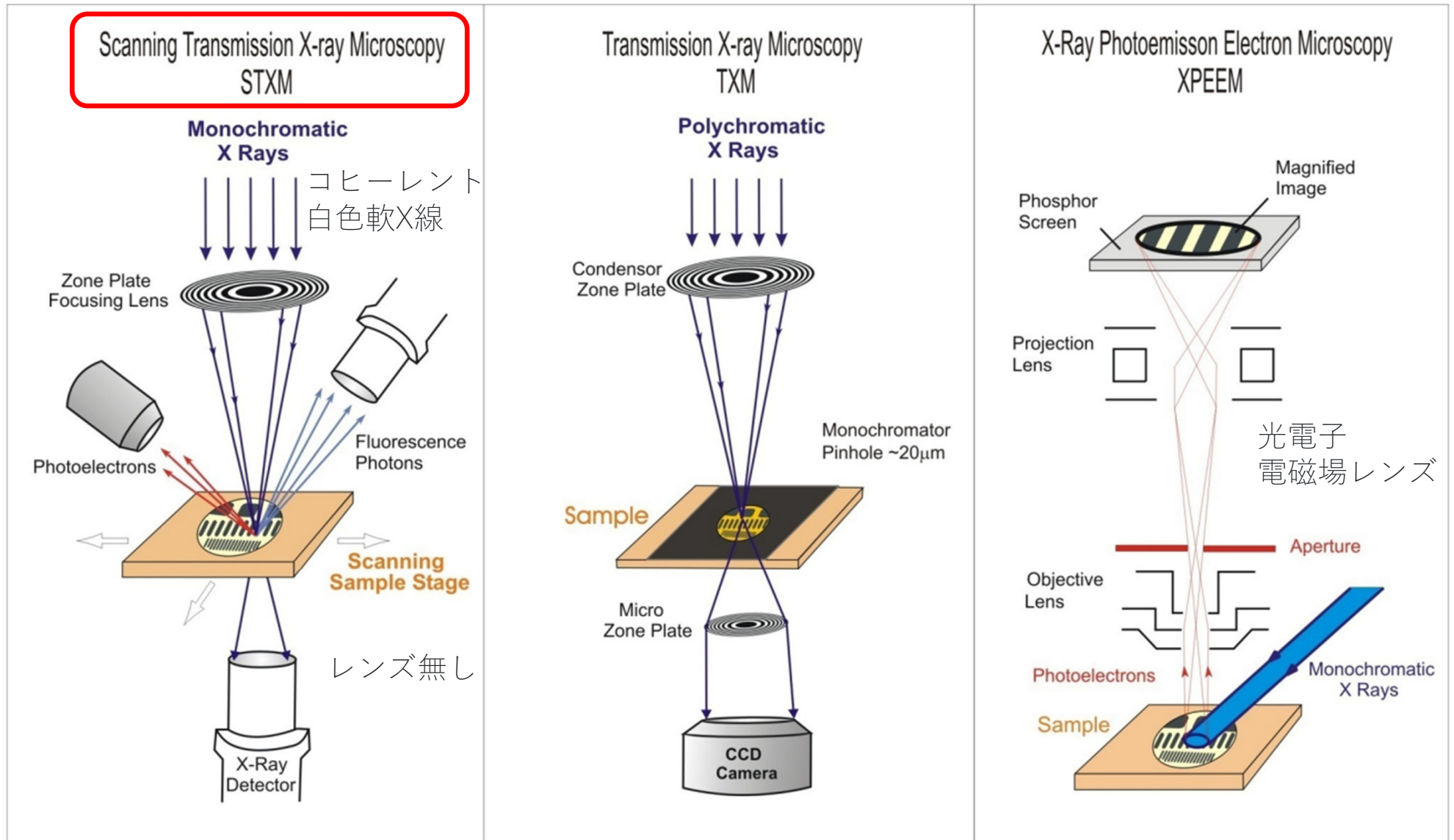


- 光電効果で出てくる電子のエネルギーを測定し、電子のエネルギー準位を調べる。角度分解(angle-resolved)するものをARPES、スピン分解測定もある。上図はARPES。
- 強相関電子系、MnやCuベースの高温超伝導物質（ペロブスカイト構造）、モット絶縁体といった言葉をよく聞く。 $M-A_xB_{(1-x)}$ みたいな原子の置換量の変化によるバンド構造の変化の研究とかもよく見る。



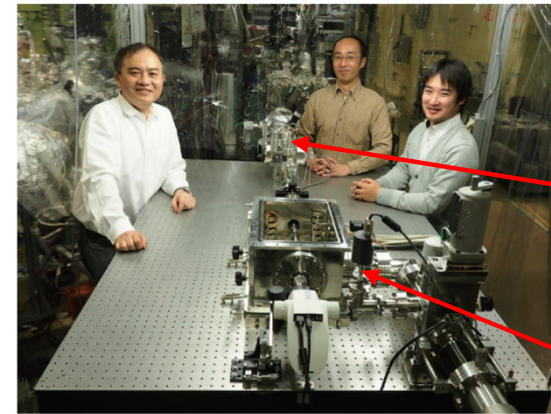
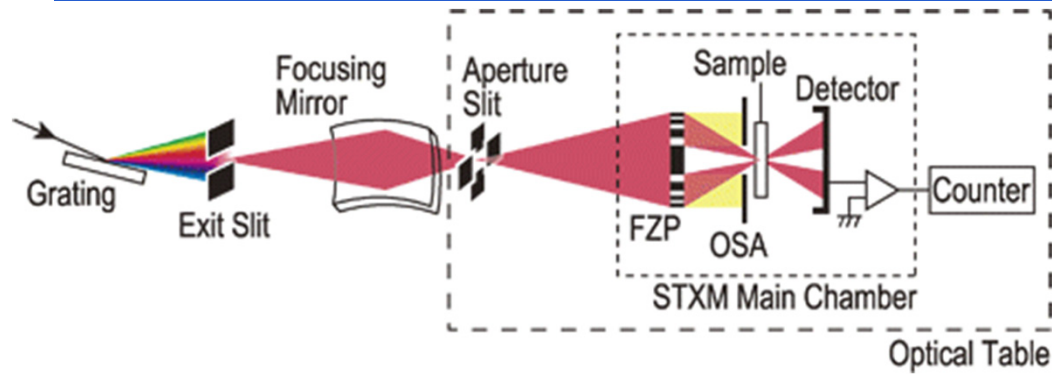
STXM

軟X線イメージング手法（分解能：10～20nm）



STXM (PF BL19A)

Y.Takeichi et.al., Rev. of Sci. Instr. 87, 013704 (2016)
放射光 29 (2016) 282-286



(当時はBL13A)

仮想光源スリット
(Aperture Slit)

STXMチェンバー

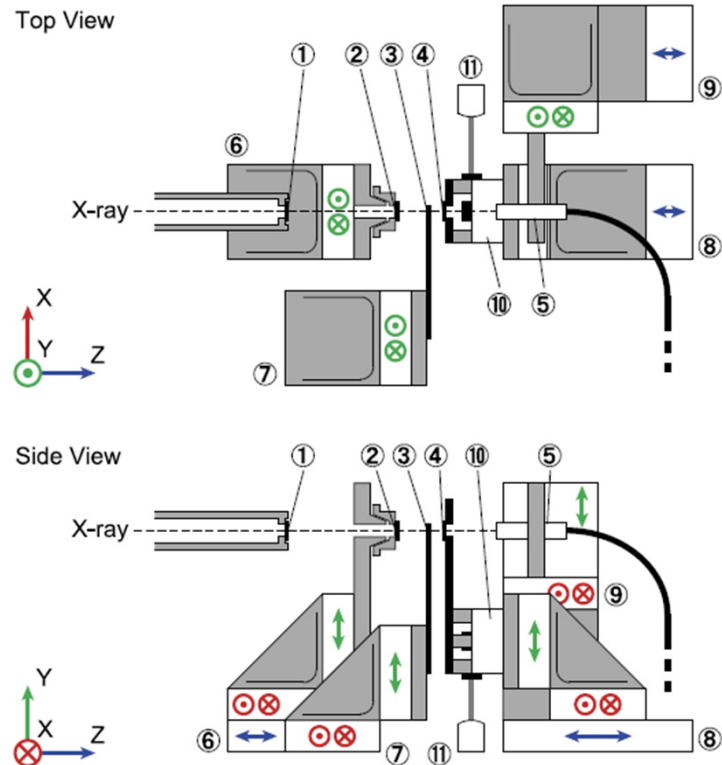
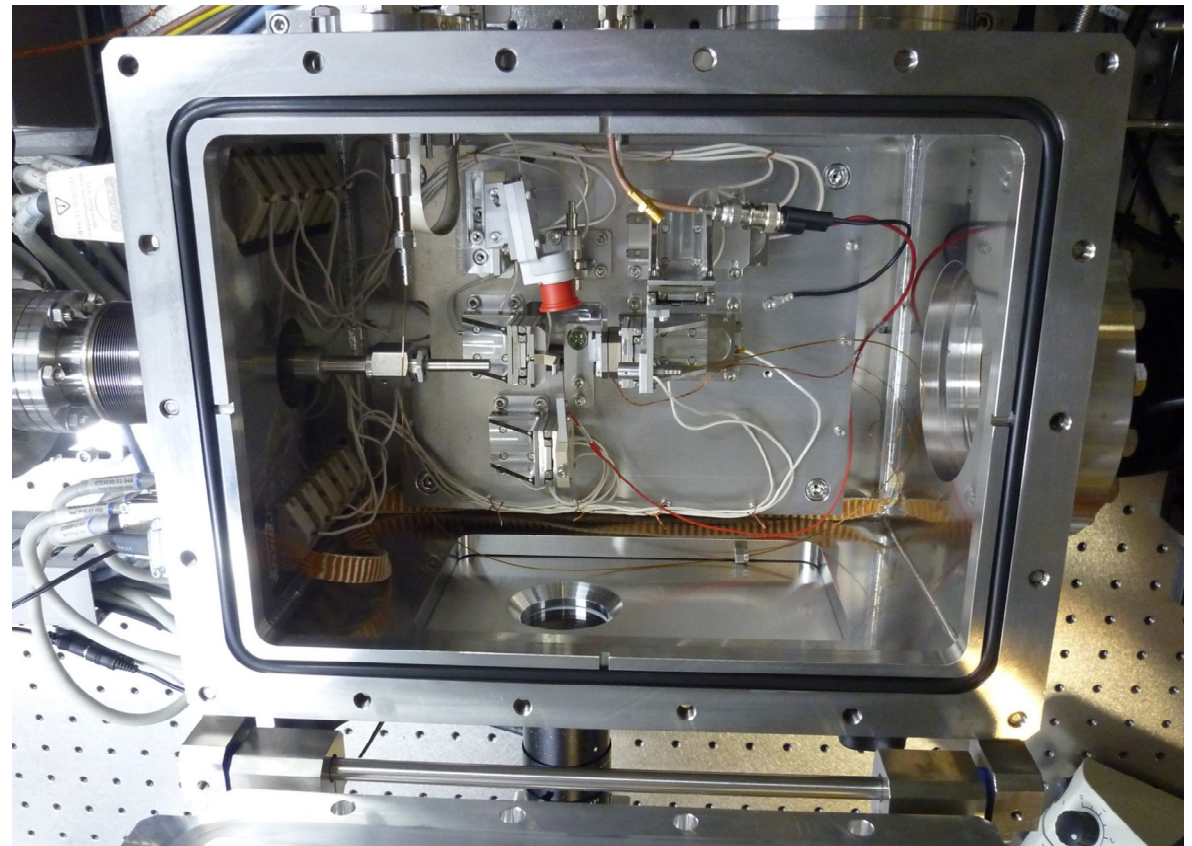


FIG. 3. Schematic diagram of key components of the compact scanning transmission X-ray microscope.³¹ 1—Vacuum window. 2—Fresnel zone plate (FZP). 3—Order sorting aperture (OSA). 4—Sample on a sample holder. 5—X-ray detector. 6—FZP stage. 7—OSA stage. 8—Sample coarse stage. 9—Detector stage. 10—Sample piezo-scanner. 11—Laser heads of the interferometric position sensors.

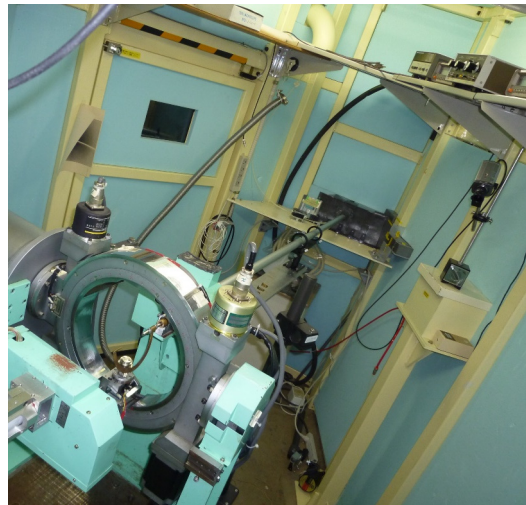


安定性→仮想光源 + 全部を1枚の定盤に載せる

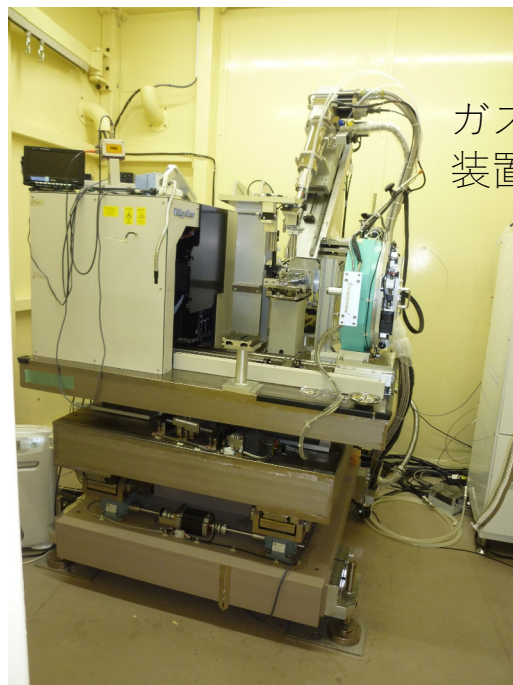
回折・散乱

- 回折、散乱～物質にX線を照射し、出てきたX線を測定。強度信号から電子密度が分かる。
 - 原子位置、電子密度分布がわかる。
- 鉛ガラスチェンバーでX線管でやる学生実験と何が違うか？
- 素直なブラッグ回折：X線管に比べ、光は絞られていて遥かに強く、エネルギー、偏光が可変。
 - 超高分解能、超精密測定が可能。
 - 極限環境下（高圧、高磁場、高電場、高温、低温など）での測定が可能。
- さらに、放射光では「共鳴」X線散乱が可能
 - 吸収端にあわせたX線を入射し、散乱されたX線を測定する。
 - X線の入射 → 電子励起 → 励起された電子が基底状態に戻る → 散乱X線が出射される
 - 始状態と終状態が同じもの（入出射X線の波長は同じ）を弾性共鳴散乱、違うものを非弾性共鳴散乱という。
 - 電子状態が変わるとスペクトルが変わる。同じ試料で環境を変える、組成を変えた試料で比較する、などの変化の観測で特に威力を発揮する。
 - 電荷・軌道秩序構造、磁気構造がわかる、スピンと軌道角運動量を分離できる。

回折・散乱BL

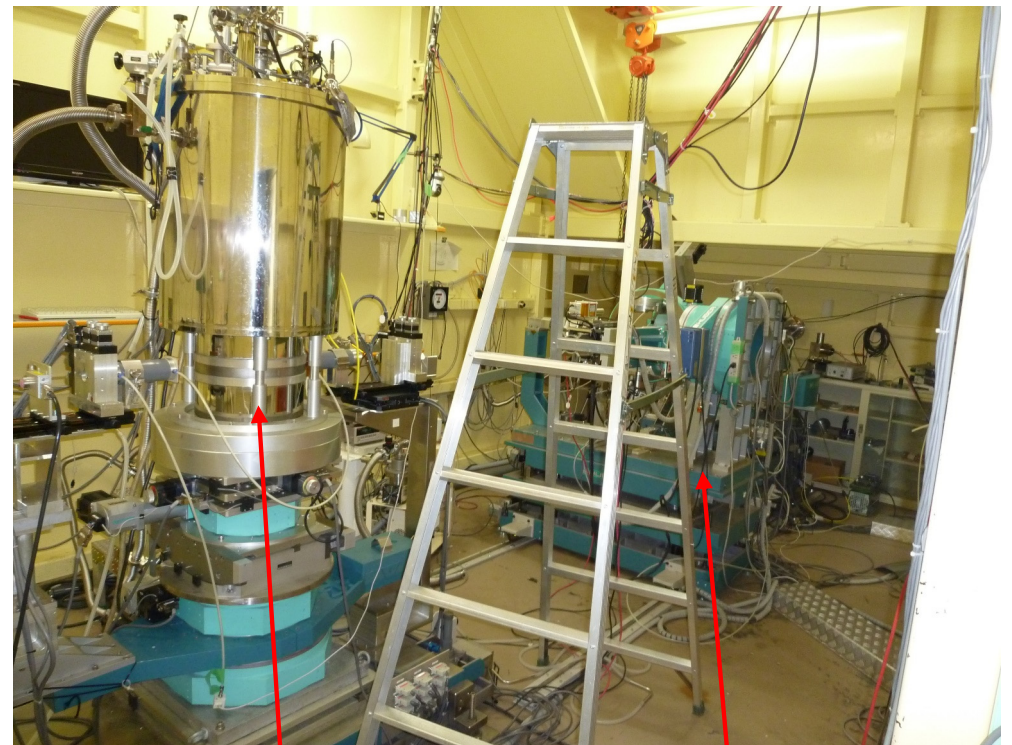


4軸回折計(BL10A)



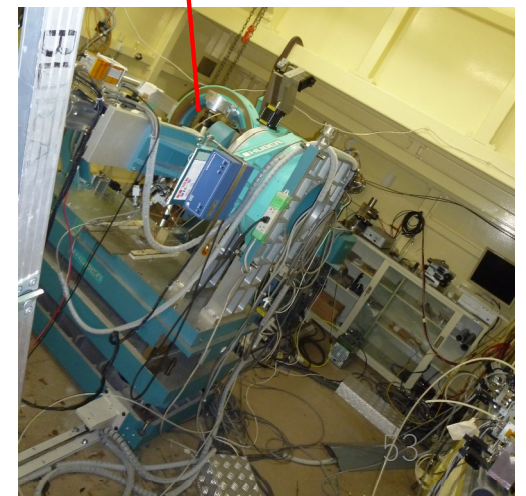
ガス吹き付け
装置

極限環境下单結晶構造解析 (BL8A)



超伝導磁石 + 単結晶構造解析

BL3C



4軸回折計&
極限環境下測定



XAFS : X-ray Absorption Fine Structure X線吸収微細構造

XANES : X-ray Absorption Near Edge Structure X線吸収端構造

- 吸収端付近
- 電子遷移スペクトルの重ね合わせ
- 元素の価数、化学形態（錯体や分子で軌道状態）が分かる。

EXAFS : Extended X-ray Absorption Fine Structure X線広域微細構造

- 吸収端より高エネルギー側の裾
- 光電子の散乱スペクトルの重ね合わせ（部分を抽出して解析）
- その原子の周囲の原子の様子（どんな元素がどのくらいの距離にどのくらいあるか）

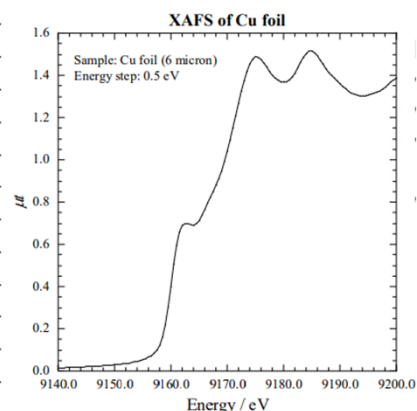
- 直接吸収を測る透過法では、精密に薄い試料の製作が大事。その他に、蛍光を測る蛍光法、オージェ電子を測る電子収量法がある。蛍光法はX線が透過しない試料でもOK、電子収量法の電子は本当にごく表面からしか出て来られないので、表面、薄膜の研究ができる、などの特徴がある。
- 特に軽元素に対する軟X線領域は、超高真空と強力な放射光の登場で初めて可能になった。

X線吸収端のエネルギー

<http://pfwww.kek.jp/sxspect/sx/edgetable.html>
(https://henke.lbl.gov/optical_constants/)

Z	Element	K(1s)	L3(2p)	L2(2p)	L1(2s)	M5(3d)	M4(3d)	M3(3p)	M2(3p)	M1(3s)
1	H	13.6								
2	He	24.6								
3	Li	54.7								
4	Be	111.7								
5	B	188.0								
6	C	284.2								
7	N	409.9								
8	O	543.1								
9	F	696.7								
10	Ne	870.2	21.6	21.7	48.5					
11	Na	1070.8	30.4	30.4	63.5					
12	Mg	1303.0	49.5	49.9	88.6					
13	Al	1559.6	72.7	73.1	117.8					
14	Si	1838.9	99.8	100.4	149.7					
15	P	2145.5	135.0	136.0	189.0					
16	S	2472.0	162.5	163.6	230.9					
17	Cl	2822.4	200.0	201.6	270.2					
18	Ar	3205.9	248.4	250.6	326.3			15.8	15.9	29.3
Z	Element	K(1s)	L3(2p)	L2(2p)	L1(2s)	M5(3d)	M4(3d)	M3(3p)	M2(3p)	M1(3s)
19	K	3608.4	294.6	297.3	378.6			18.3	18.3	34.8
20	Ca	4038.5	346.2	349.7	438.4			25.4	25.4	44.3
21	Sc	4492.8	398.7	403.6	498.0			28.3	28.3	51.1
22	Ti	4966.4	453.8	460.2	560.9			32.6	32.6	58.7
23	V	5463.8	512.1	519.8	626.7			37.2	37.2	66.3
24	Cr	5989.0	574.1	583.8	696.0			42.2	42.2	74.1
25	Mn	6537.7	638.7	649.9	769.1			47.2	47.2	82.3
26	Fe	7110.8	706.8	719.9	844.6			52.7	52.7	91.3
27	Co	7708.8	778.1	793.2	925.1			58.9	58.9	101.0
28	Ni	8331.5	852.7	870.0	1008.6			66.2	68.0	110.8
29	Cu	8980.5	932.5	952.3	1096.7			75.1	77.3	122.5
30	Zn	9660.8	1021.8	1044.9	1193.6	10.1	10.2	88.6	91.4	139.8
31	Ga	10367.1	1116.7	1143.6	1299.0	18.3	18.7	104.2	107.3	159.4
32	Ge	11103.1	1217.0	1248.1	1414.6	29.3	29.9	120.8	124.9	180.1
33	As	11866.7	1323.6	1359.1	1527.0	41.7	41.7	141.2	146.2	204.7
34	Se	12657.8	1433.9	1474.3	1652.0	54.6	55.5	160.7	166.5	229.6
35	Br	13473.7	1549.9	1596.0	1782.0	69.0	70.0	182.0	189.0	257.0
36	Kr	14323.9	1678.4	1730.9	1921.0	93.8	95.0	214.4	222.2	292.8

BL15Aでの初XANES測定例



Z	Element	K(1s)	L3(2p)	L2(2p)	L1(2s)	M5(3d)	M4(3d)	M3(3p)	M2(3p)	M1(3s)
37	Rb	15199.7	1804.4	1863.9	2065.1	112.0	113.0	239.1	248.7	326.7
38	Sr	16104.6	1939.6	2006.8	2216.3	134.2	136.0	270.0	280.3	358.7
39	Y	17036.6	2080.0	2155.5	2372.5	155.8	157.7	298.8	310.6	392.0
40	Zr	17995.9	2222.3	2306.7	2531.6	178.8	181.1	329.8	343.5	430.3
41	Nb	18983.0	2370.5	2464.7	2697.7	202.3	205.0	360.6	376.1	466.6
42	Mo	20000.4	2520.2	2625.1	2865.5	227.9	231.1	394.0	411.6	506.3
43	Tc	21044.0	2676.9	2793.2	3042.5	253.0	257.0	425.0	445.0	544.0
44	Ru	22117.2	2837.9	2966.9	3224.0	280.0	284.2	461.4	483.5	586.2
45	Rh	23220.0	3003.8	3146.1	3411.9	307.2	311.9	496.5	521.3	628.1
46	Pd	24352.6	3173.3	3330.3	3604.3	335.2	340.5	532.3	559.9	671.6
47	Ag	25515.6	3351.1	3523.7	3805.8	368.0	374.0	573.0	603.8	719.0
48	Cd	26713.3	3537.5	3727.0	4018.0	405.2	411.9	618.4	652.6	772.0
49	In	27940.4	3730.1	3938.0	4237.5	443.9	451.4	665.3	703.2	827.2
50	Sn	29200.4	3928.8	4156.1	4464.7	484.9	493.2	714.6	756.5	884.7
51	Sb	30490.5	4132.2	4380.4	4698.3	528.2	537.5	766.4	812.7	946.0
52	Te	31813.8	4341.4	4612.0	4939.2	573.0	583.4	820.0	870.8	1006.0
53	I	33169.4	4557.1	4852.1	5188.1	620.0	631.0	875.0	931.0	1072.0
54	Xe	34561.6	4782.2	5103.7	5452.8	676.4	689.0	940.6	1002.1	1148.7
Z	Element	K(1s)	L3(2p)	L2(2p)	L1(2s)	M5(3d)	M4(3d)	M3(3p)	M2(3p)	M1(3s)
55	Cs	35984.6	5011.9	5359.4	5714.3	726.6	740.5	1003.0	1071.0	1211.0
56	Ba	37440.6	5247.0	5623.6	5988.8	780.2	795.5	1063.0	1137.0	1293.0
57	La	38924.6	5482.7	5890.6	6266.3	836.0	853.0	1128.0	1209.0	1362.0
58	Ce	40443.0	5723.4	6164.2	6548.8	883.8	902.4	1187.0	1274.0	1436.0
59	Pr	41990.6	5964.3	6440.4	6834.8	928.8	948.3	1242.2	1337.4	1511.0
60	Nd	43568.9	6207.9	6721.5	7126.0	980.4	1003.3	1297.4	1402.8	1575.0
61	Pm	45184.0	6459.3	7012.8	7427.9	1026.9	1051.5	1356.9	1471.4	
62	Sm	46834.2	6716.2	7311.8	7736.8	1083.4	1110.9	1419.8	1540.7	1722.8
63	Eu	48519.0	6976.9	7617.1	8052.0	1127.5	1158.6	1480.6	1613.9	1800.0
64	Gd	50239.1	7242.8	7930.3	8375.6	1189.6	1221.9	1544.0	1688.3	1880.8
65	Tb	51995.7	7514.0	8251.6	8708.0	1241.1	1276.9	1611.3	1767.7	1967.5
66	Dy	53788.5	7790.1	8580.6	9045.8	1292.6	1332.5	1675.6	1841.8	2046.8
67	Ho	55617.7	8071.1	8917.8	9394.2	1351.4	1391.5	1741.2	1922.8	2128.3
68	Er	57485.5	8357.9	9264.3	9751.3	1409.3	1453.3	1811.8	2005.8	2206.5
69	Tm	59389.6	8648.0	9616.9	10115.7	1467.7	1514.6	1884.5	2089.8	2306.8
70	Yb	61332.3	8943.6	9978.2	10486.4	1527.8	1576.3	1949.8	2173.0	2398.1
71	Lu	63313.8	9244.1	10348.6	10870.4	1588.5	1639.4	2023.6	2263.5	2491.2

いろいろな元素の吸収端が測定に利用される。赤字はSX領域 (<3.5keV)。

「差」の利用

- エネルギーや偏光など、光の可変パラメータが増えると、それを変えた時の「差」のデータが取れる。
 - 吸収端を挟んで両側のデータの比較で、特定の元素の分布が分かる。

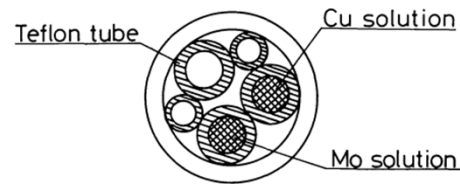


Fig. 4. Cross-sectional drawing of a test sample.

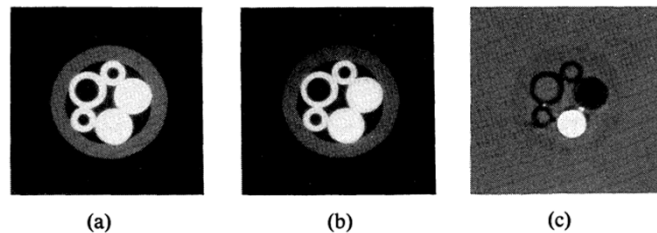


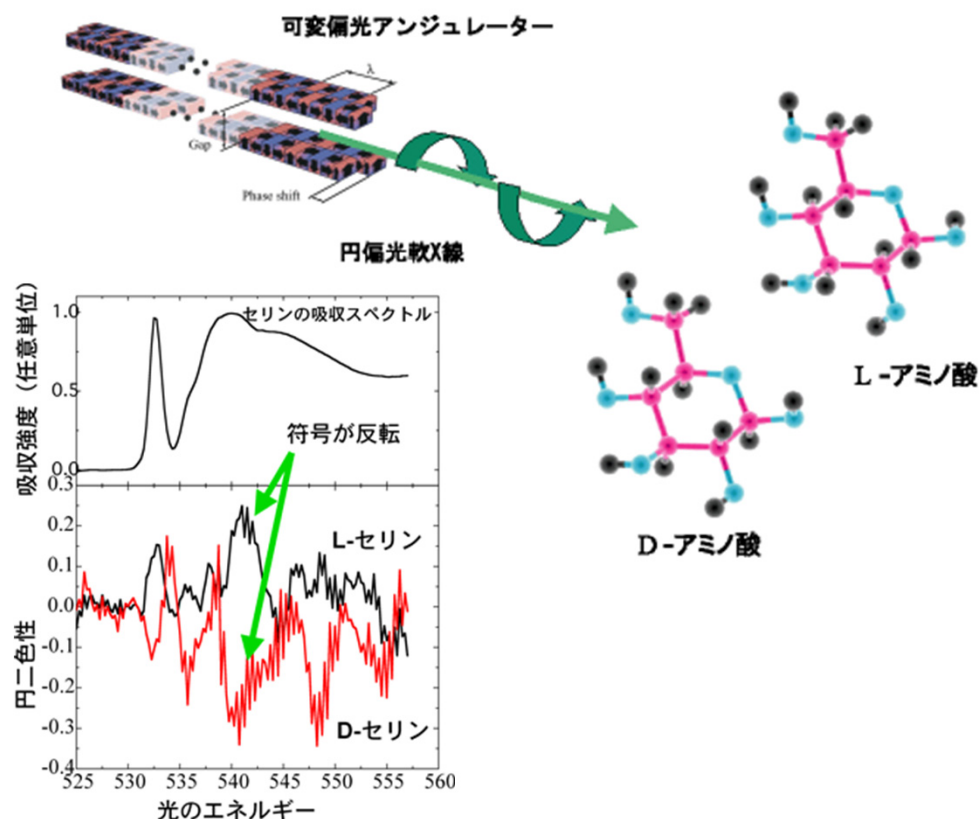
Fig. 5. Monochromatic X-ray CT images of test sample at X-ray energies below and above the Mo K-absorption edge (20.0 keV). (a) Below the absorption edge. X-ray energy is 19.6 keV (0.633 Å). (b) Above the absorption edge. X-ray energy is 20.6 keV (0.602 Å). (c) The differential CT image by subtracting the low-energy CT image (a) from the high-energy CT image (b). Subtraction was performed after image reconstruction.

- テフロンチューブに入れたCu溶液とMo溶液の差分CT
 - MoのK吸収端は20keV。
 - (a)は19.6keV、(b)は20.6keV、(c)は(b)-(a)でMoが強調されている。

Y. Suzuki et.al., JJAP 27, 3A, (1988) L461

偏光による差の利用

- 円偏光二色性 (Circular Dichroism)：左円偏光と右円偏光とで吸光度に差が生じる現象。物質にキラリティがある（鏡に映すと元の物質と重ならない）ときに見られる。
- X線磁気円二色性 (X-ray Magnetic CD) を測定し、原子のスピンや軌道磁気モーメントの研究に使う。
- HX領域では偏光子があるので、光源の段階で偏光させる必要はない。挿入光源は水平偏光（電子は水平平面内を蛇行）でよい。
- VSX領域では、偏光子がないので、光源の段階で偏光させる必要がある。可変偏光アンジュレーターで、欲しい偏光に合わせて、電子軌道を右回り、左回りの螺旋軌道にする必要がある。



右アミノ酸、左アミノ酸を放射光(軟X線)で初めて識別

http://www.spring8.or.jp/ja/news_publications/press_release/2005/050511/

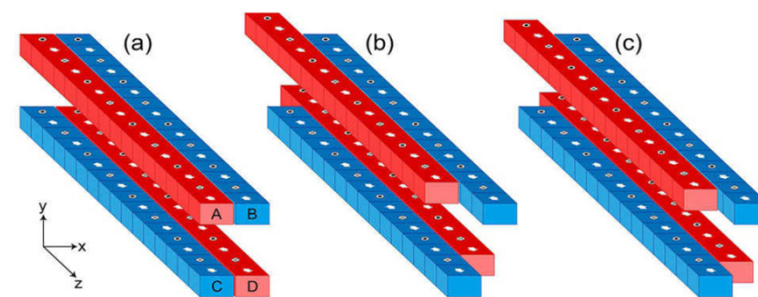


図2.10: APPLE型挿入光源磁気回路と偏光モード。
(a)水平偏光モード, (b)垂直偏光モード, (c)円(楕円)偏光モード。

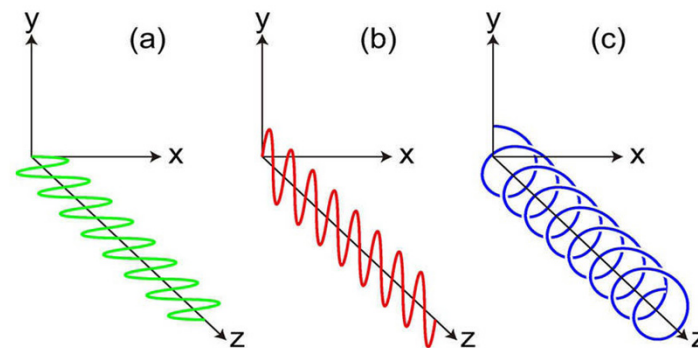
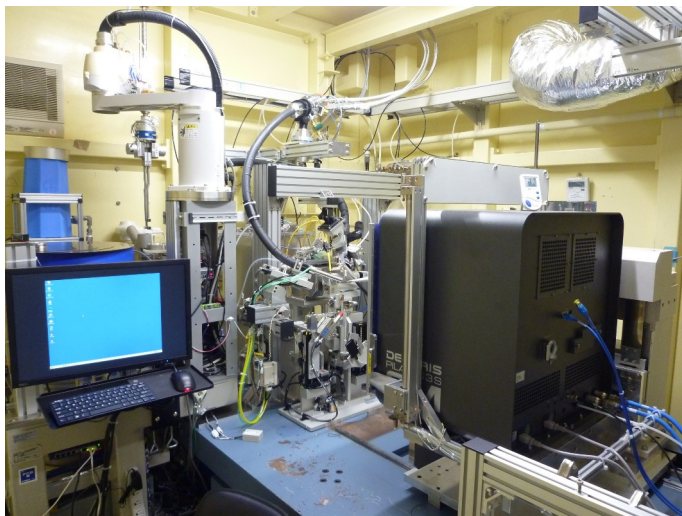


図2.9: 挿入光源における様々な電子軌道と偏光特性。
(a)水平偏光型, (b)垂直偏光型, (c)円偏光型。

- 新第3世代光源の主要ユーザーで世界中で光源加速器が建設された大きな理由の一つ。高輝度放射光源の登場で、一気に構造が解けたタンパク質の数が増えた。
- タンパク質の構造解析手法は3通りあり、X線結晶構造解析、NMR、電子顕微鏡法がある。
 - X線構造解析：1953年マックス・ペルーツ（重元素置換法）、1959年にヘモグロビンの構造決定、1962年のノーベル賞。大きな分子でも測定可能で高分解能だが、結晶化させないといけない。
 - NMR：1984年にクルト・ビュートリッヒがBUSI IIAタンパク質の構造決定。2002年にノーベル賞。溶液でも測定可だが小さな分子量に限る（<40 kDa）。
 - 電子顕微鏡法：1950年代後半にアーロン・クルーグがタバコモザイクウィルスの構造決定、1982年ノーベル賞。
 - クライオ電顕：TEMをベースに試料調製や検出器、手法の開発でどんどん高分解能化。2017年ノーベル賞。結晶化が不要、in vivoに近い環境で測定可能、どんどん大きい分子に対応してきている。（～50~60 kDa、分解能～1.5 Å）
- タンパク質X線結晶構造解析の難しさは、**試料の準備と、測定データの解析**。
- 回折パターンは「強度」信号しかなく、「位相」信号が失われている。従って、単純に逆フーリエ変換して実空間像に戻すことが不可能。（タンパク質以外の結晶でも同じ。）
- 位相情報の補完方法：
 - タンパク質の場合
 - （多）重原子同型置換法((Multiple) Isomorphous Replacement Method) → 異常分散の利用へ
1985年ヘンドリクソンが鉄の異常分散でヘモグロビンの位相情報決定に成功。
 - 大腸菌でメチオニンをセレン化してセレンの異常分散を測定するセレン多波長異常分散法 (Se-Multiwavelength Anomalous Diffraction Method : MAD)などが行われていたが、現在は単波長異常分散法 (SAD)法へ。（2006年に解けた蛋白数で、SAD法がMAD法を逆転。）
 - （通常の固体結晶の場合はオーバーサンプリング法やタイコグラフィ法がある。）

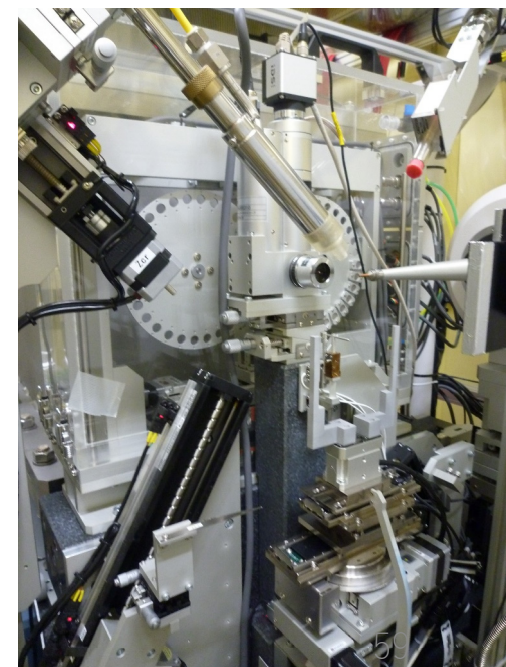
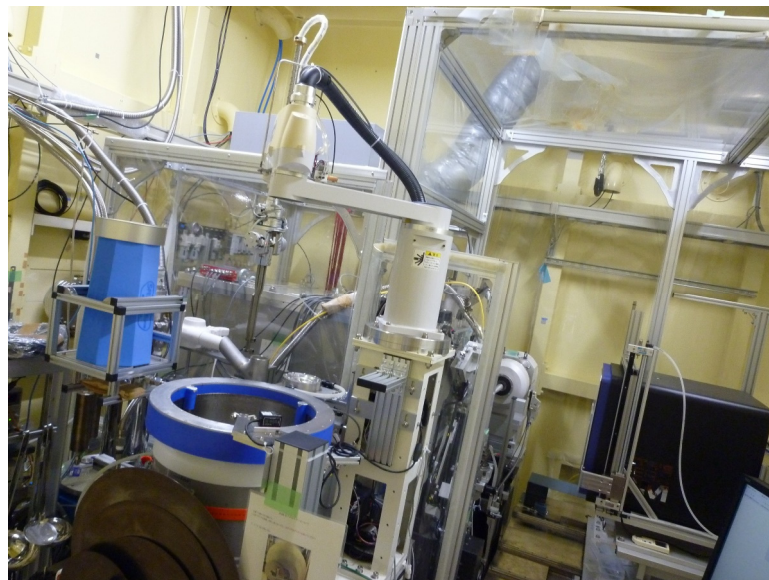
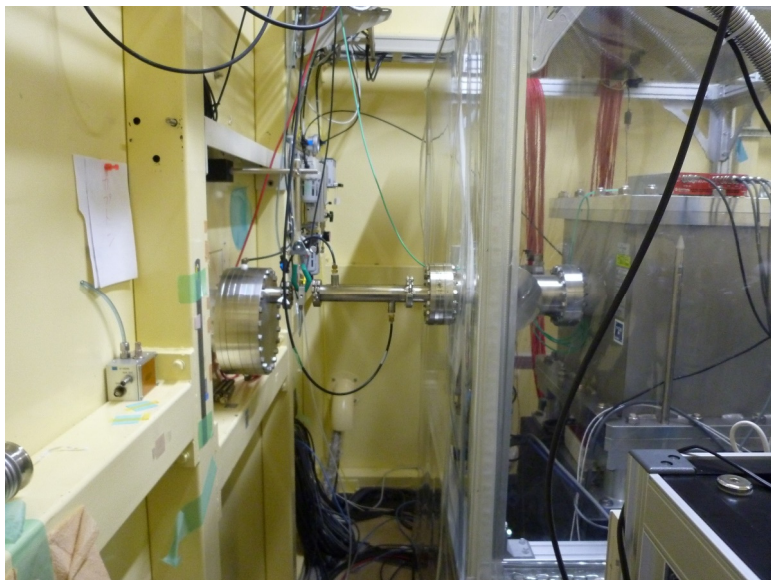
KEKでの蛋白質結晶構造解析

BL5A



液体窒素のデュワー内に試料を大量に準備。ロボットアームで自動的にセット、次々測定を行う。

BL17A



タンパク質データベース登録数の遷移

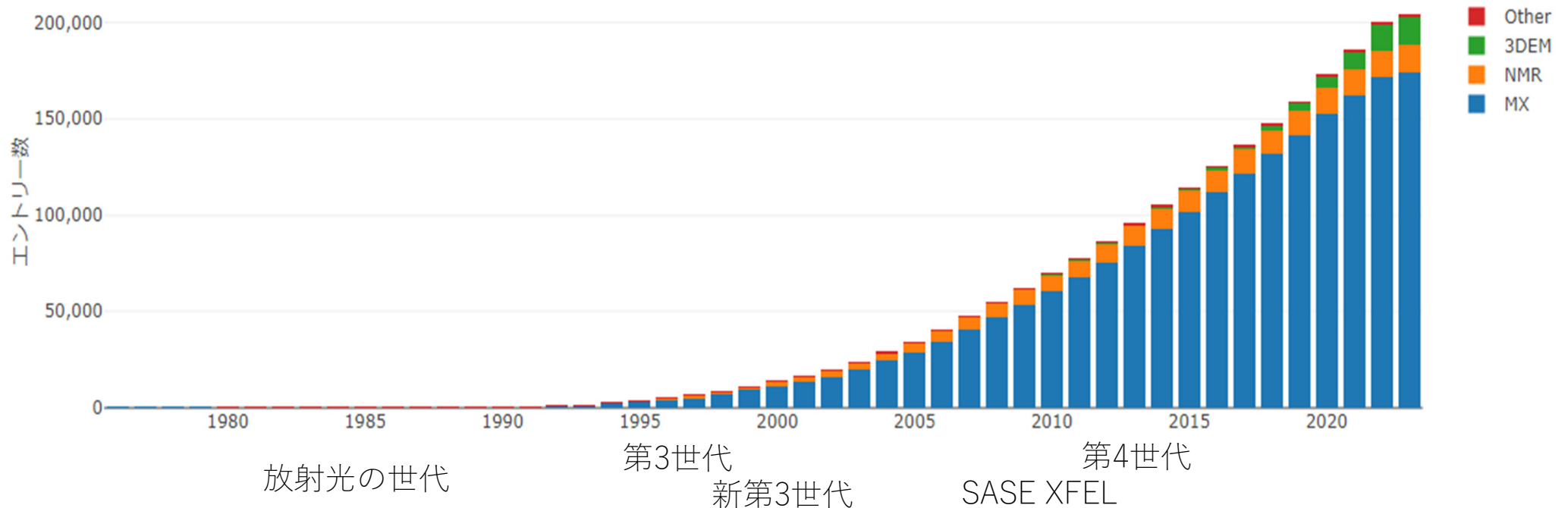
<https://pdj.org/info/statistics>

3DEM : 3D Electron Microscopy

NMRはNMR。

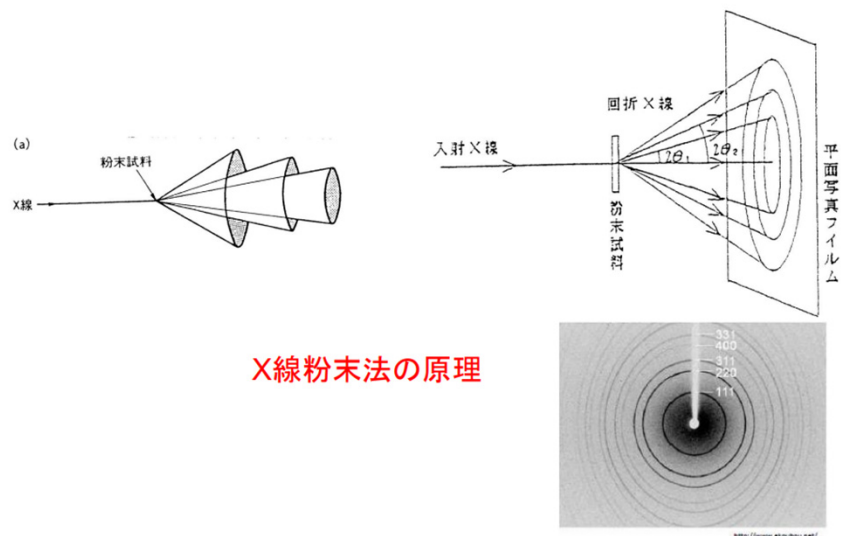
MX : Macromolecular X-ray Crystallography

実験手法別の公開PDBエントリー数



- 新第3世代光源はタンパク質構造解析用といってもいい。SLSはロシュがかなり出資しており、実際にロシュの非公開利用もかなり行われている。
- 10keV出せる安定な3GeV程度の放射光源の普及により、タンパク質構造解析が劇的に進んだ。

エックス線粉末法の原理



- 単結晶ではなく、粉末X線回折実験では、デバイー・シェラー環が観測される。
- 試料に特徴的な「長さ」によって環の半径が変わる。

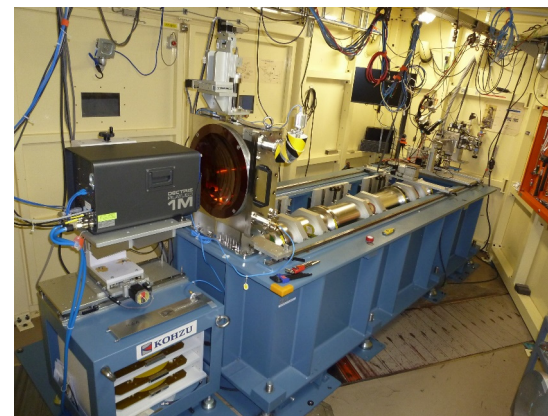
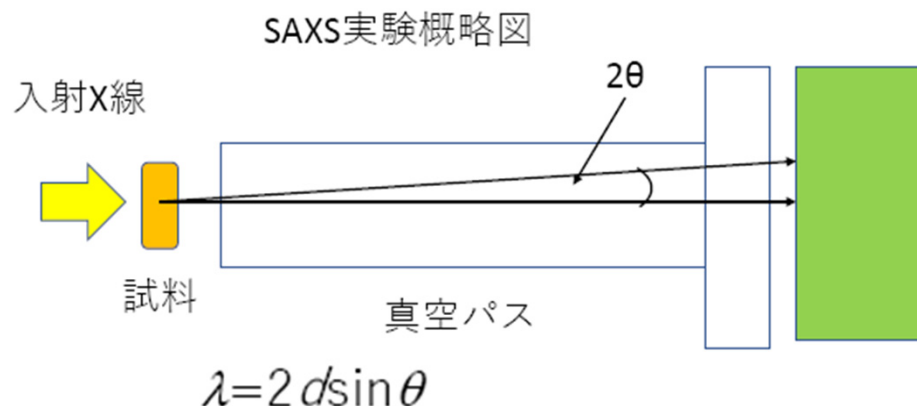
厚生労働省WEB

<https://www.mhlw.go.jp/content/000935620.pdf>

- 結晶の格子間隔 $1 \text{ \AA} \sim \text{X線} (12.4 \text{ keV})$ という感じの、普通の金属結晶粉末試料の場合、左図のような
光源-試料-検出
の距離感で測定ができる。

10

- では、試料がもっと大きな「特徴的な長さ」を持っていたら、どうやって測るか？
- 波長を長くすると、化学反応、吸収が起こって透過しない。X線のままで、大きなものの散乱を測りたい。散乱角が極小になる (d がでかい、 θ が小さい)。Small Angle X-ray Scattering (小角散乱) という。



SAXSで分かる物質の階層構造

雨宮慶幸他, 「2次元極小角・小角X線散乱法を用いたゴム中ナノ粒子凝集構造の観察」,
SPRING8利用者情報 14 149-153 (2009) <https://user.spring8.or.jp/sp8info/?p=3048>

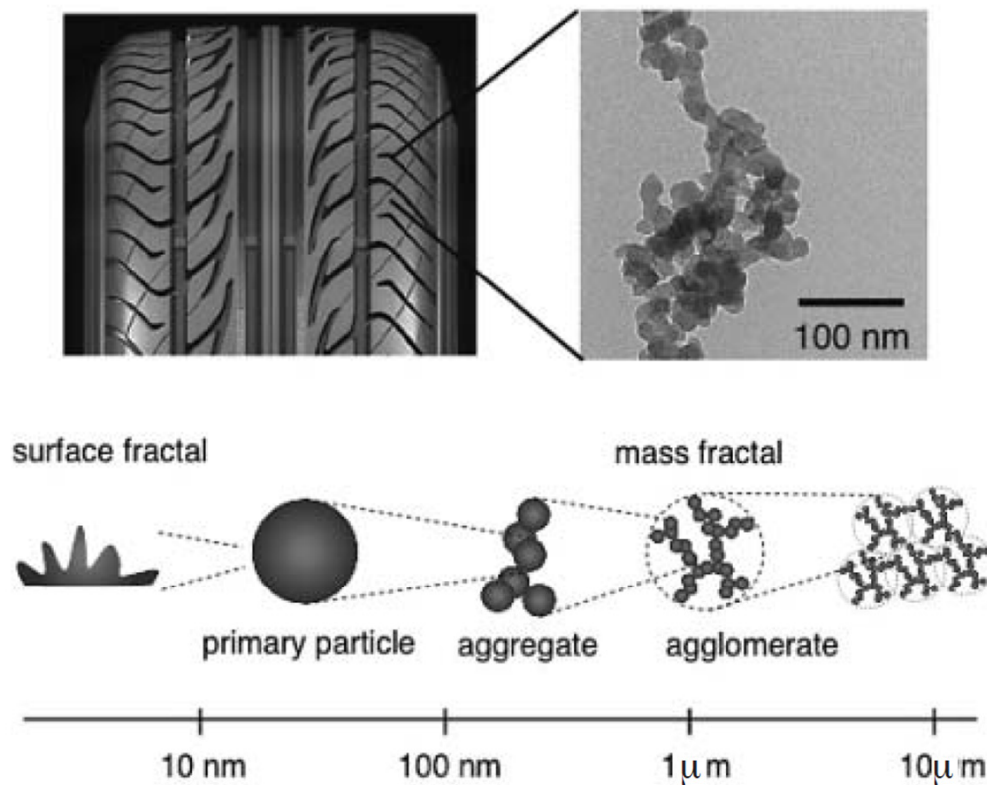


図1 階層的なナノ粒子凝集構造の模式図

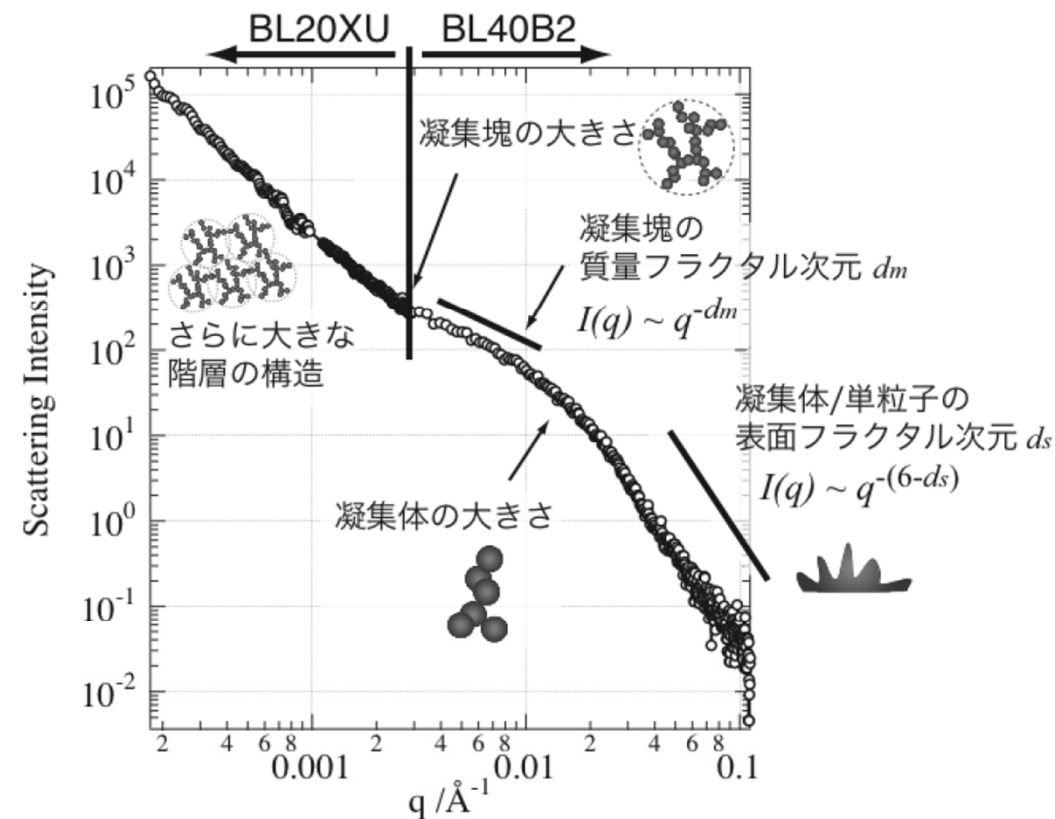
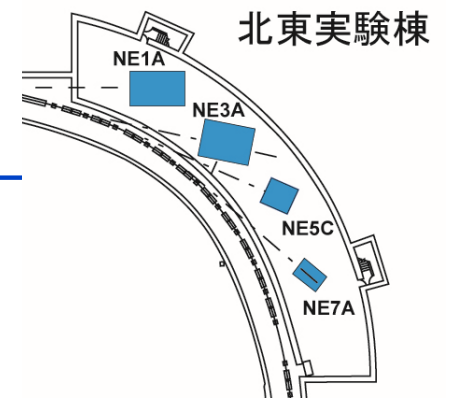


図5 散乱情報と階層構造との対応

- 特徴的な構造があると、X線散乱強度の曲線にピークが現れる。正確なパラメータ決定には、測定結果だけではなく、モデルによるシミュレーションや電子顕微鏡による直接観察などが必要。
- どんな状態の物質でも測定できる。
- 中性子線でも同様の測定ができる。(中性子小角散乱)

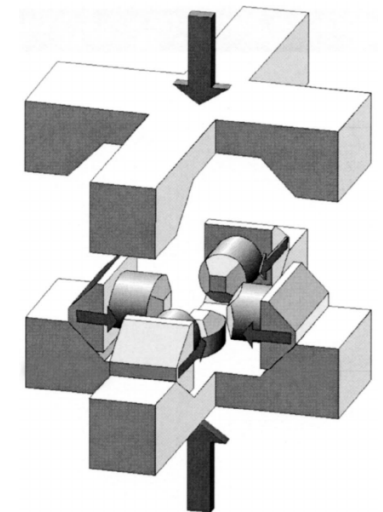
高圧 (AR NE5C)

- 試料をダイヤモンドアンビルで思い切り押し潰しながら測る。
- 地球内部の超高压の世界を調べる。高エネルギー側X線を使うので、ARに多い。
- 工作室のように機械油の匂い漂う別世界……



AR-NE5C : X線回折、XAFS

- エネルギー範囲：
20 ~ 140keV (白色)、10~60keV (単色)
- エネルギー分解能 ($\Delta E/E$) : $\sim 5 \times 10^{-4}$
- ビームサイズ : 30 mm (幅) x 3 mm (高さ)
- ビーム強度 : 10^9 photons/s/mm²
- MAX80 : 500トン DIA型高圧力発生装置



アンビルの概念図
Y. Wang, RSI, 74-6, (2003) p3003

1500℃、15万気圧下で
X線回折・吸収実験が可能。

パーシー・ブリッジマン：ダイヤモンドアンビルセルなどの発明で1946年ノーベル賞。

高圧 (AR NE7A)

AR-NE7A : X線回折 (&光学開発、イメージング)

- エネルギー範囲 : 20 ~ 140keV (白色)、10~60keV (単色)
- エネルギー分解能 ($\Delta E/E$) : $\sim 1 \times 10^{-3}$
- ビームサイズ : 30 mm (幅) x 3 mm (高さ)
- ビーム強度 : $10^8 \sim 10^9$ photons/s/mm² (30keV)
- MAX-III : 700トン、DIA / D-DIA / D111型アンビル

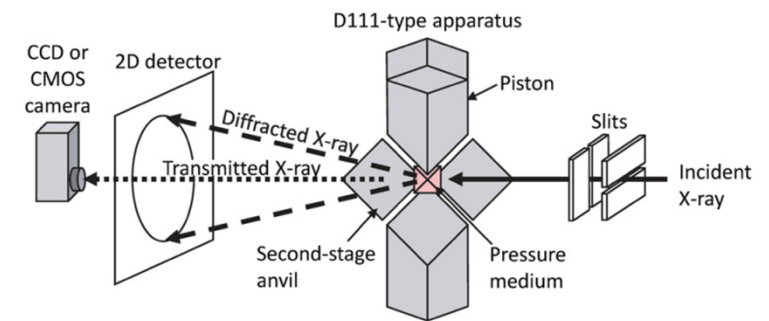
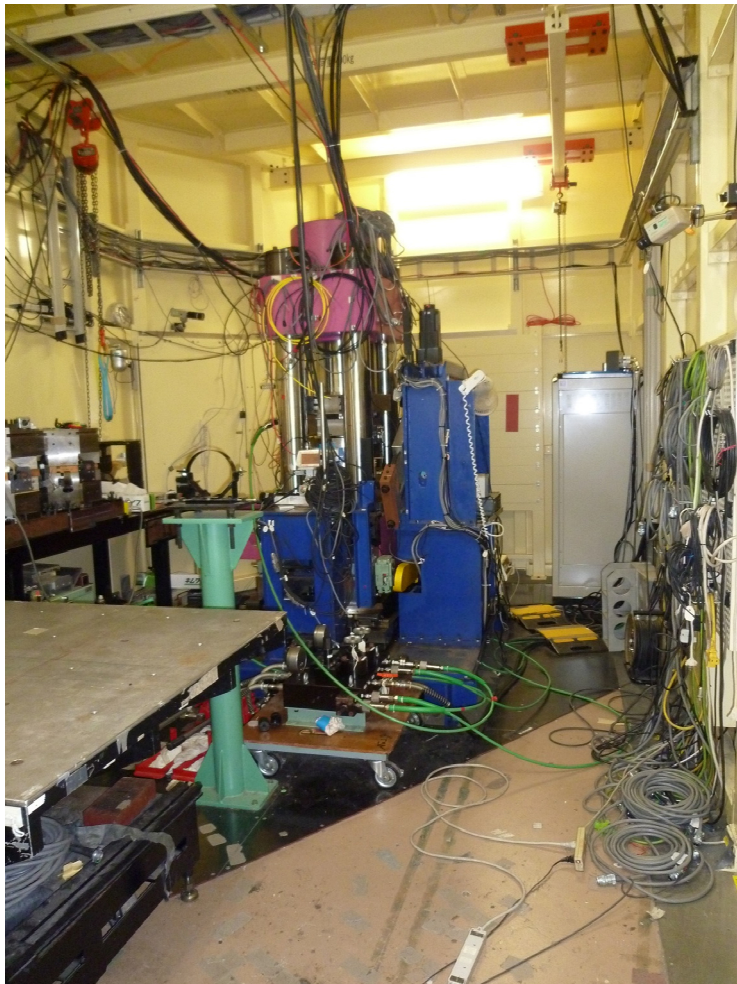


Figure 3 A schematic illustration of experimental system at a beamline NE7A, PF-AR, KEK (modified after ref. [4]).

PF News Vol.38, No.3, (2020), p11

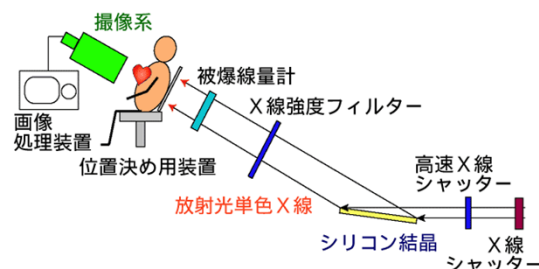


交換用アンビル

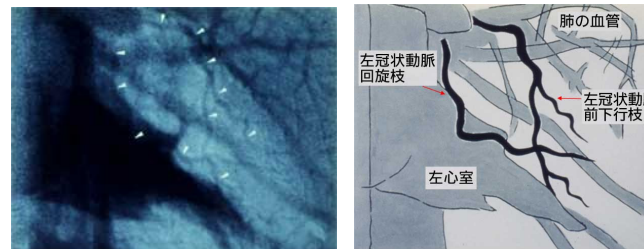


X線イメージング

- 何でも2次元、3次元で撮ればイメージング。
- X線管レントゲン撮影、PET/SPECTみたいなことは放射光でもできる。
- PF-AR医学利用の例

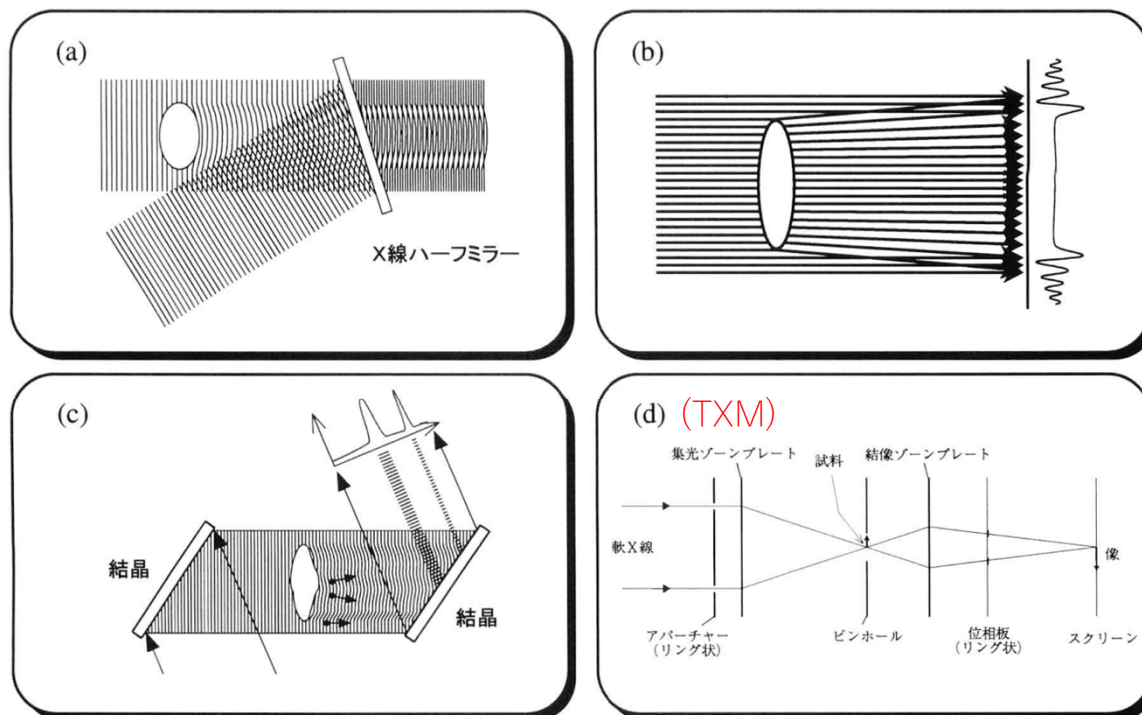


心臓診断システムの構成図



撮影された画像と説明

- 「位相」を利用したイメージングも可能

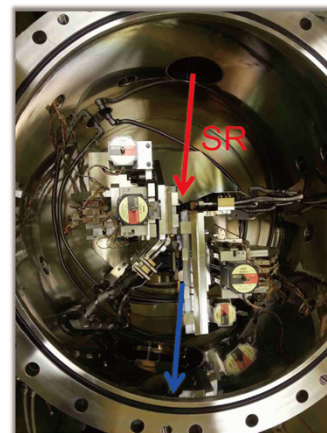


- (a) PF-BL14C (同じ光を分けて差だけ使う。)
- (b) (c) 光に試料サイズの空間コヒーレンスが必要 (軟X線でピンホール、HXだとFELが前提。)
- (d) 透過型X線顕微鏡、試料をscanすればSTXM

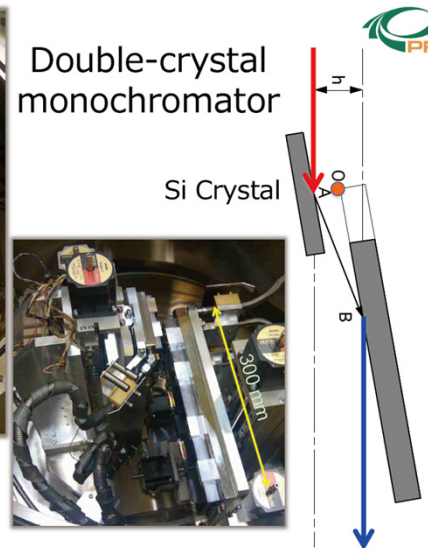
百生敦 「位相コントラストX線イメージング」 光学 29巻5号(2000)
<https://annex.jsap.or.jp/photonics/kogaku/public/29-05-kaisetsu1.pdf>

図2 X線領域で位相コントラスト法として報告されている手法。(a) X線干渉計を用いる方法、(b) フレネル回折に基づく方法、(c) ブラッグ回折に基づく方法、および (d) レンズ作用を有するゾーンプレートを用いる方法。

X線位相差イメージング (BL14C)



Monochromatic X-rays
BL-14 縦偏光



「横置き」2結晶分光器： ↑上から見た図
(兵藤一行 総研大高エネルギー加速器セミナー2022)

光源：垂直超伝導ウィグラー
4.8T超伝導電磁石で、電子を下げて、戻して、という曲げで光を出す。
縦方向に広がった光になるので、下流の光学系を水平展開できる。

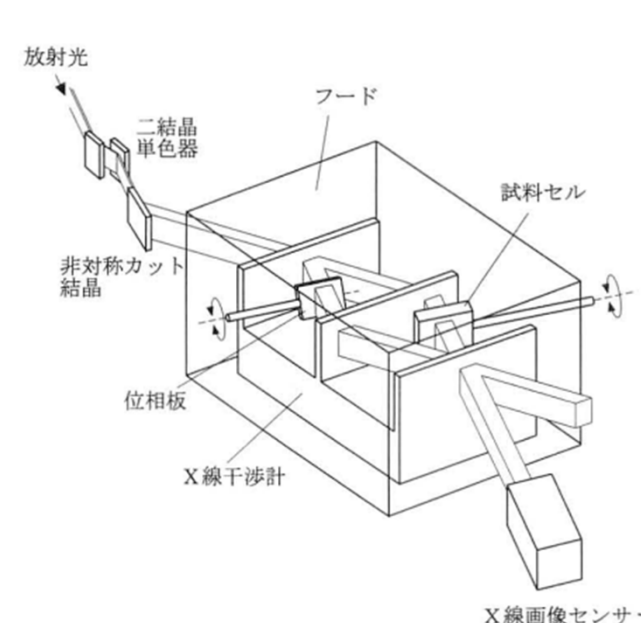
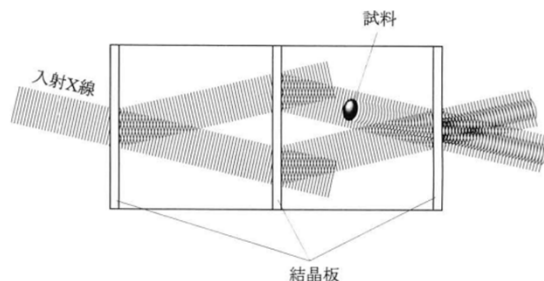
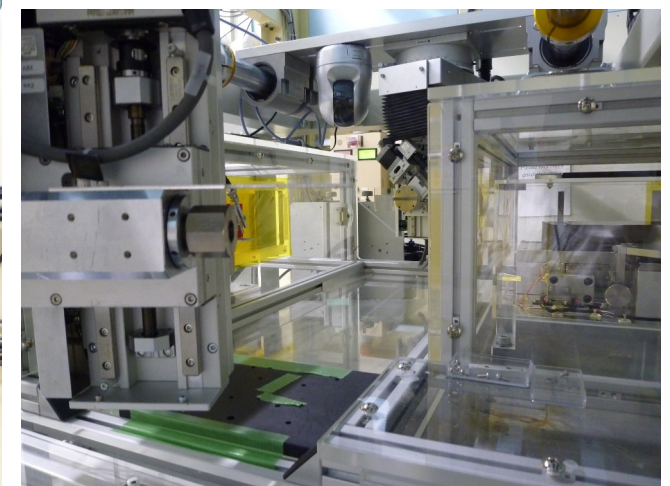


図6 放射光を用いた位相型 X 線 CT の実験配置. X 線干渉計の結晶板厚は 1 mm, 間隔は 34 mm.



回折イメージング

- リングからの光には長波長側で部分コヒーレンスしかないので、ピンホールを通してその部分（コヒーレント光束）を切り出す。（下記の例。）
- FELでは完全空間コヒーレンスがあるのでそのままできる。
- コヒーレント光を使ったイメージングの位相回復には、オーバーサンプリング法とタイコグラフィー法がある。（下記はオーバーサンプリング法の論文。）

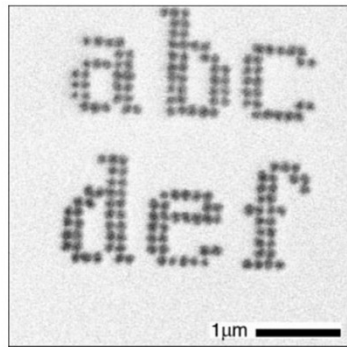


Figure 1 A scanning electron microscope image of the specimen. The specimen was fabricated by depositing gold dots, each ~ 100 nm in diameter and 80 nm thick, on a silicon nitride membrane.

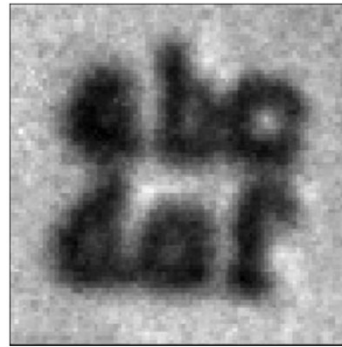


Figure 3 An optical microscope image of the specimen.

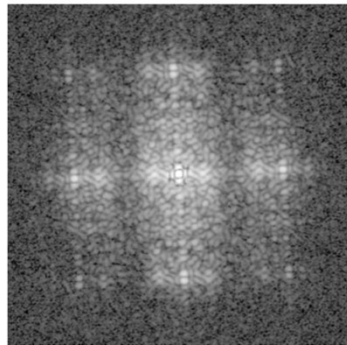


Figure 2 A diffraction pattern of the specimen (using a logarithmic intensity scale). The central 15-pixel-radius circular area is supplied by the squared magnitude of the Fourier transform of the optical microscope image (Fig. 3).

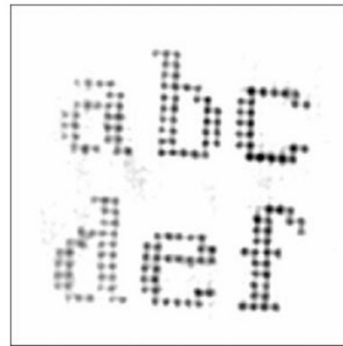


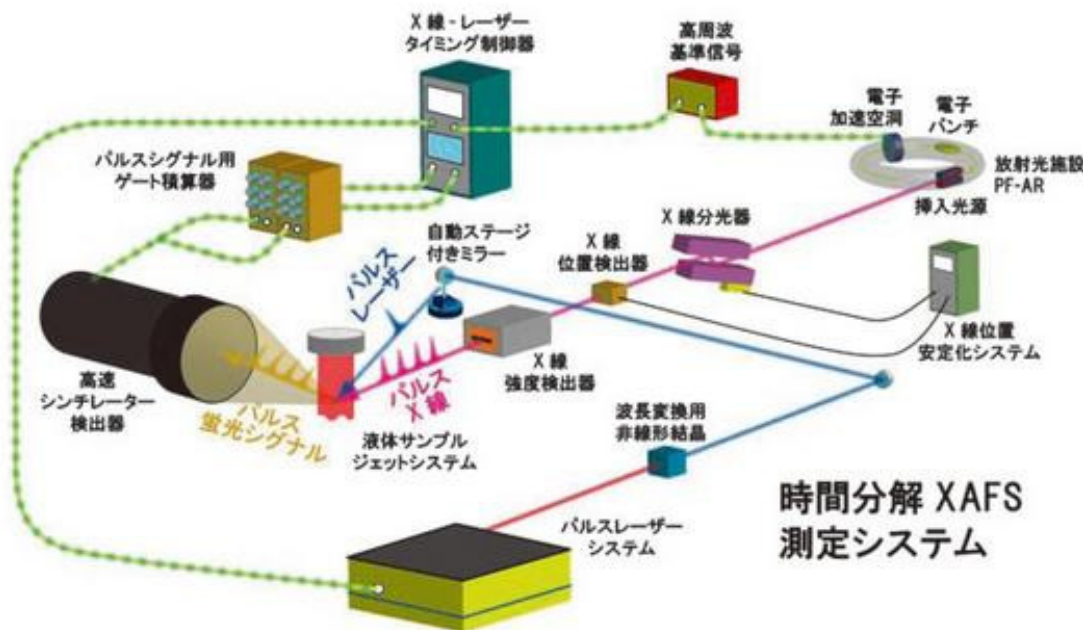
Figure 4 The specimen image as reconstructed from the diffraction pattern of Fig. 2.

1. SEM像：SiN膜上に半径100nm厚さ80nmの金のナノドットを描画
2. NSLSのBL-X1Aで撮影した回折データ（スペックル像）。波長1.7nm。
3. 光学顕微鏡像
4. オーバーサンプリング法による逆フーリエ変換で作った実像。

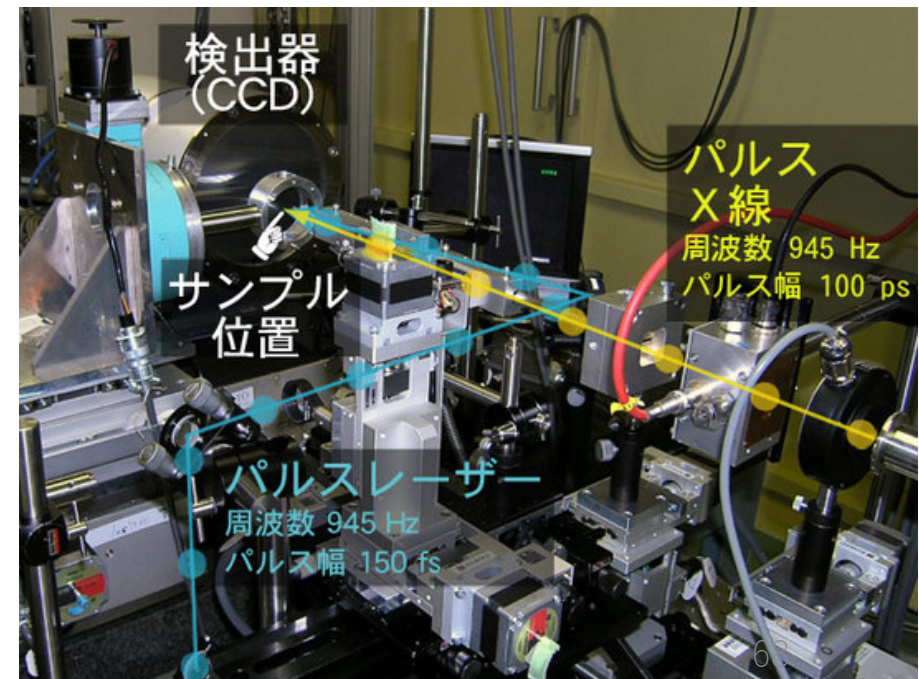
超高速時間分解

- 測定手法は様々で、ただ、時間的にきちんと制御する。
- パルス光が必要。（時間的に前後に余計な光があるといけないので、加速器として、あるべきタイミング以外の電子を削る作業（蓄積リングではバンチ純化、FELでは暗電流の抑制）が必須。
- 別の短パルス光源（レーザー）と組み合わせて、ポンプ＆プローブ実験が行われる。
 - ポンプ：可視光のレーザーで何かの現象を励起する。
 - プローブ：タイミングをきちんと制御しつつ、放射光であるタイミングのスナップショットを測定
 - 時間差を変えながら、「瞬時励起→（時間差）→瞬時測定」の繰り返しを行う。
 - 光源性能で「瞬時」の長さが変わる。リング～100ps、FEL～10fs

PF-AR NW14A



~100ps



- Time-Resolved X-ray Absorption Spectroscopy : TRXAS

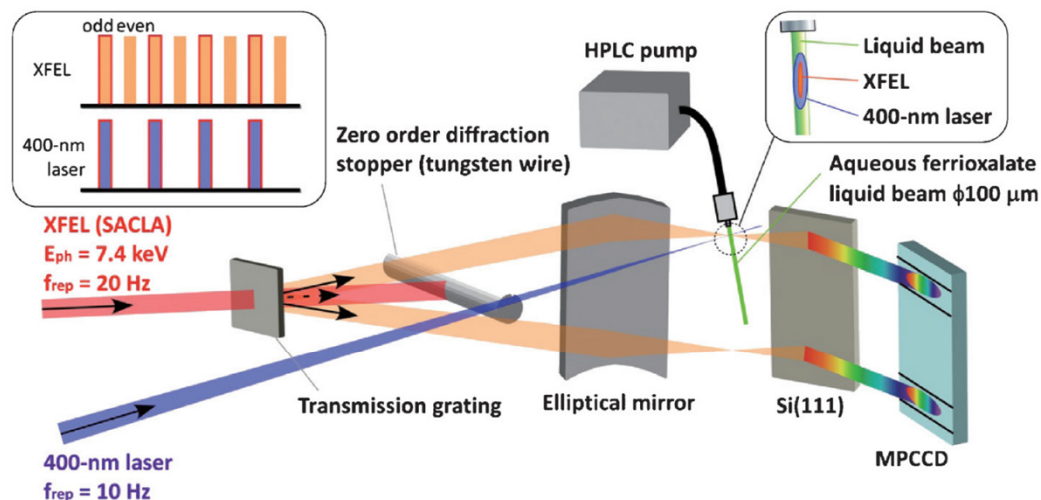
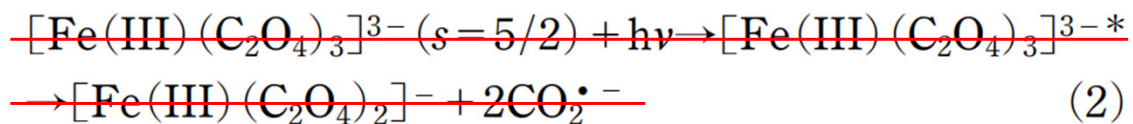
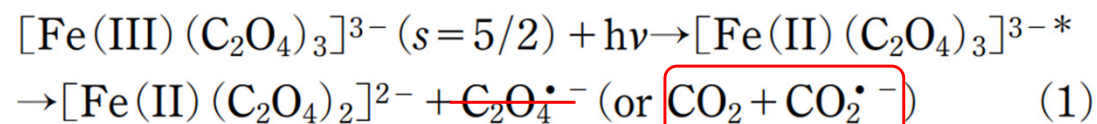


Fig. 1 (Color online) Schematic diagram of time-resolved direct X-ray absorption spectroscopy using SACLA.²⁶⁾

紫外線によって変化する錯体の反応経路の解明



経路も、何が放出されるのかも不明だった反応で、
時定数、反応経路、生成物を明らかにした。

(候補として、反応経路が上の2通り、上経路で放出過程が2通りあった。)

約3psで全反応が終了

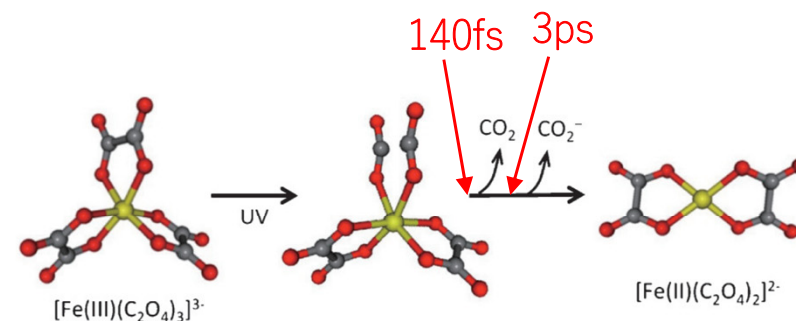


Fig. 6 (Color online) Molecular structures of $[\text{Fe(III)}(\text{C}_2\text{O}_4)_3]^{3-}$ and $[\text{Fe(II)}(\text{C}_2\text{O}_4)_2]^{2-}$ and the reaction mechanism. The structure shown in the middle is not a stable species but a transient structure with one of the C-C bonds dissociated by the ligand-to-metal charge transfer. Fe, C, and O atoms are shown in yellow, grey and red, respectively.

(赤字：分かったこと)