

計測システム研究会2016

2016年10月13,14日

KEKにおける次期光源計画「KEK放射光」と 計測システムに対する期待

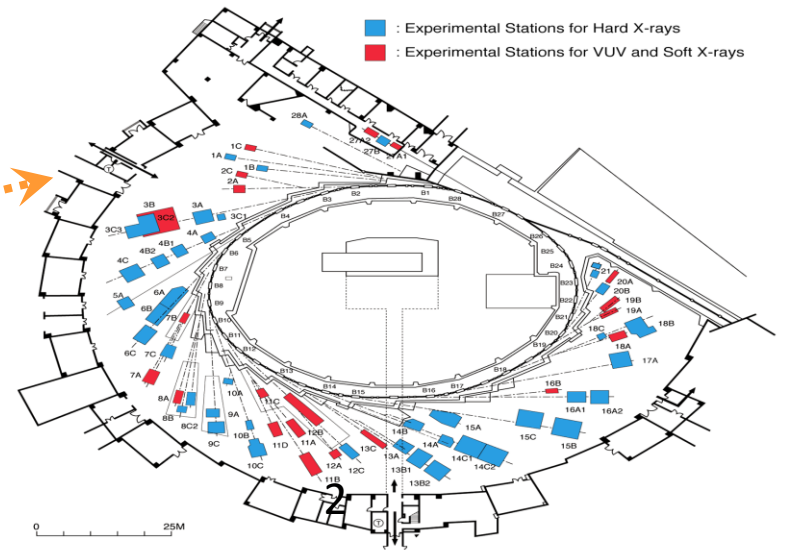
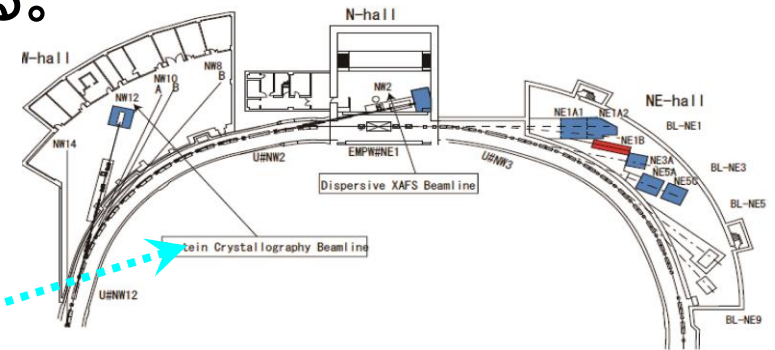
雨宮健太
KEK物構研

放射光科学研究施設 (Photon Factory) @KEK

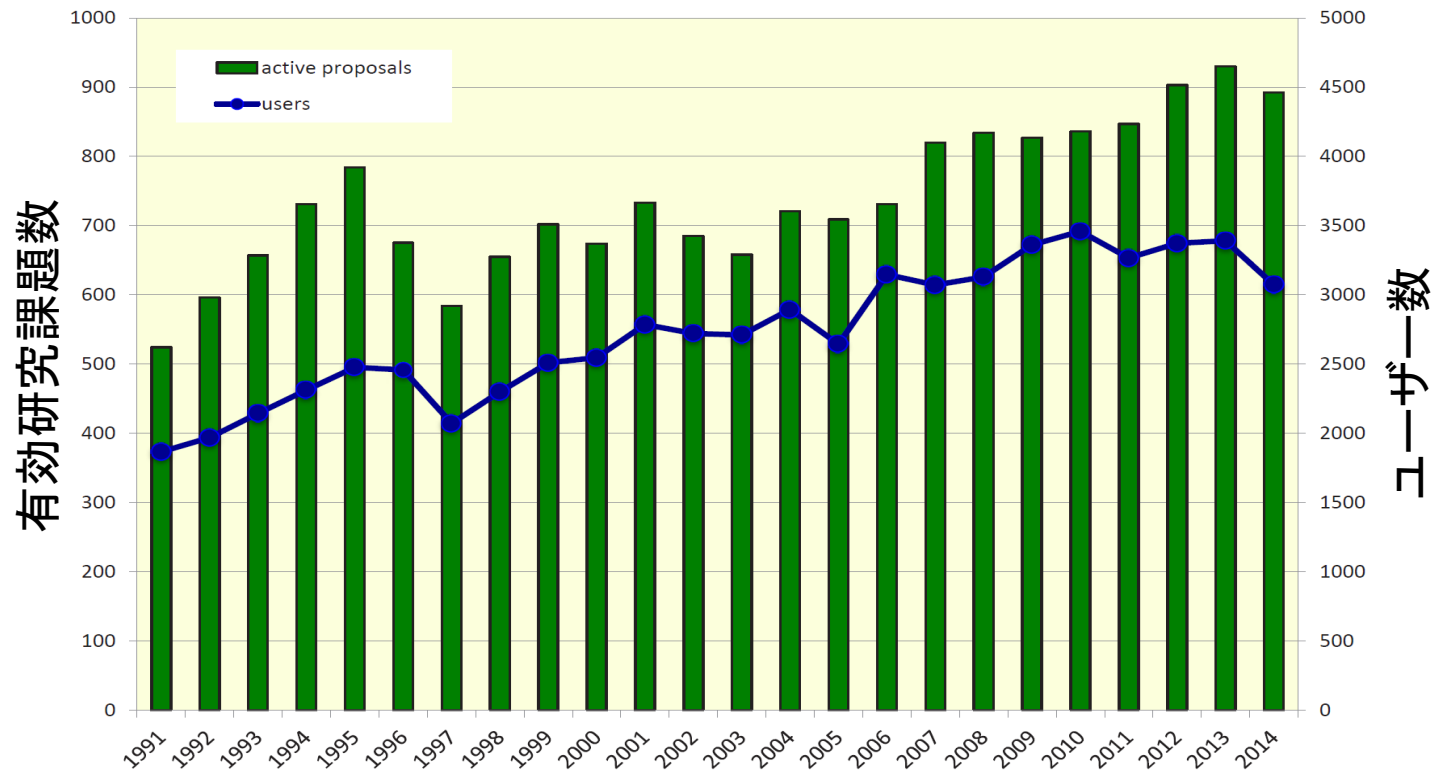
PF: 2.5 GeV, 450mA e^- (1982より)
1996 と 2005に大きなアップグレード

PF-AR : 6.5 GeV, 60mA e^-
(1987より, 1998に放射光専用)
Single bunch operation

PFとPF-AR の二つの放射光リングから得られる、真空紫外光からX線にわたる広い波長領域の光を用いて、物質の構造・性質を分子・原子レベルで解明する。



Photon Factory の利用



- 年間3000人以上のユーザー (海外から8%程度, 産業界から8%程度)
- 1300人を超える大学院生を受け入れ、人材育成に貢献

様々な国家プロジェクトへの参加

- 先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業
- 創薬等支援技術基盤プラットフォーム事業
- 光・量子科学拠点形成に向けた基盤技術開発
- 元素戦略プロジェクト

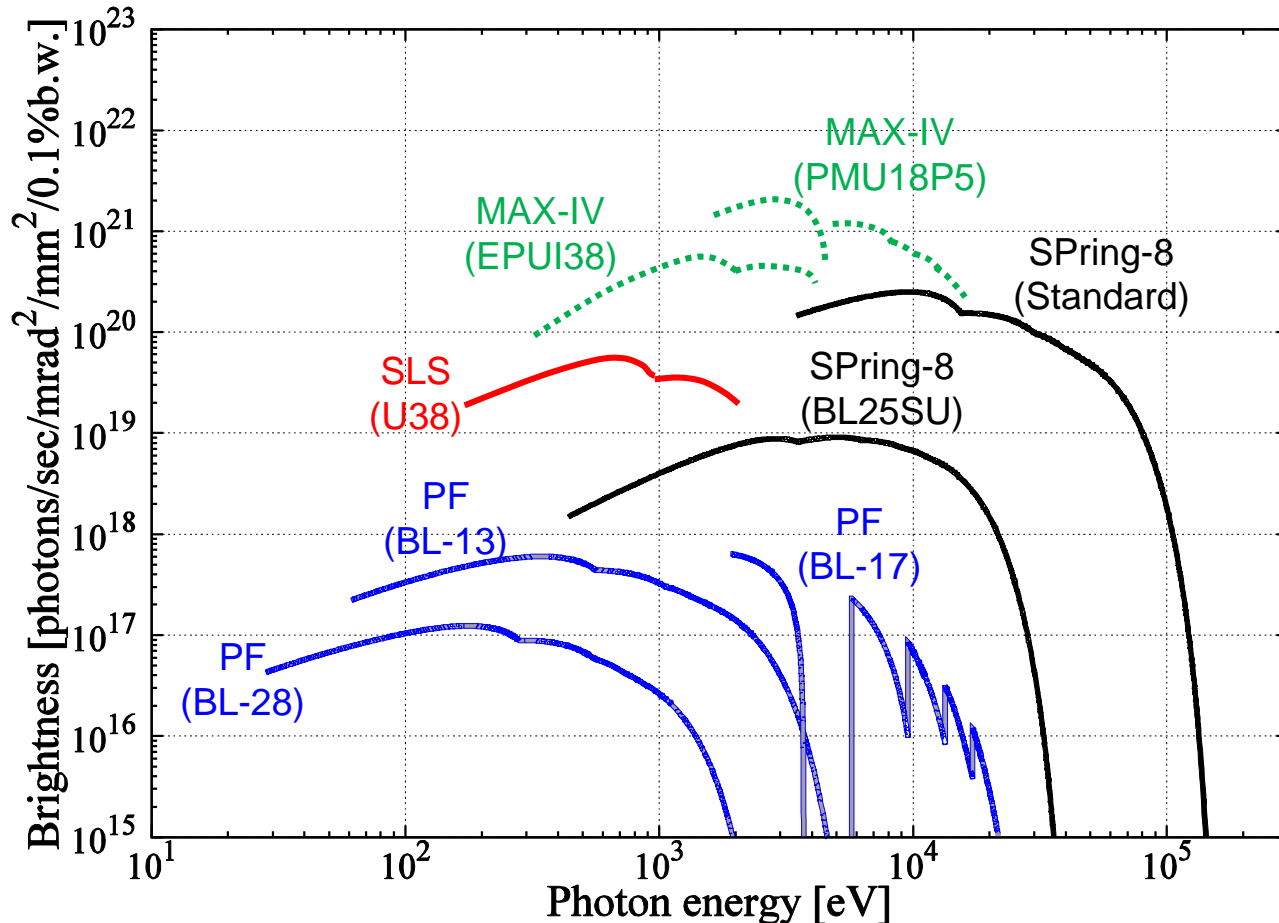
世界の中のPhoton Factory

PFは建設後30年以上たった現在で高いアクティビティを保っているが....

光源輝度の不足, 少ない直線部

⇒ 高品質ビーム(マイクロビームなど)を使う実験は困難

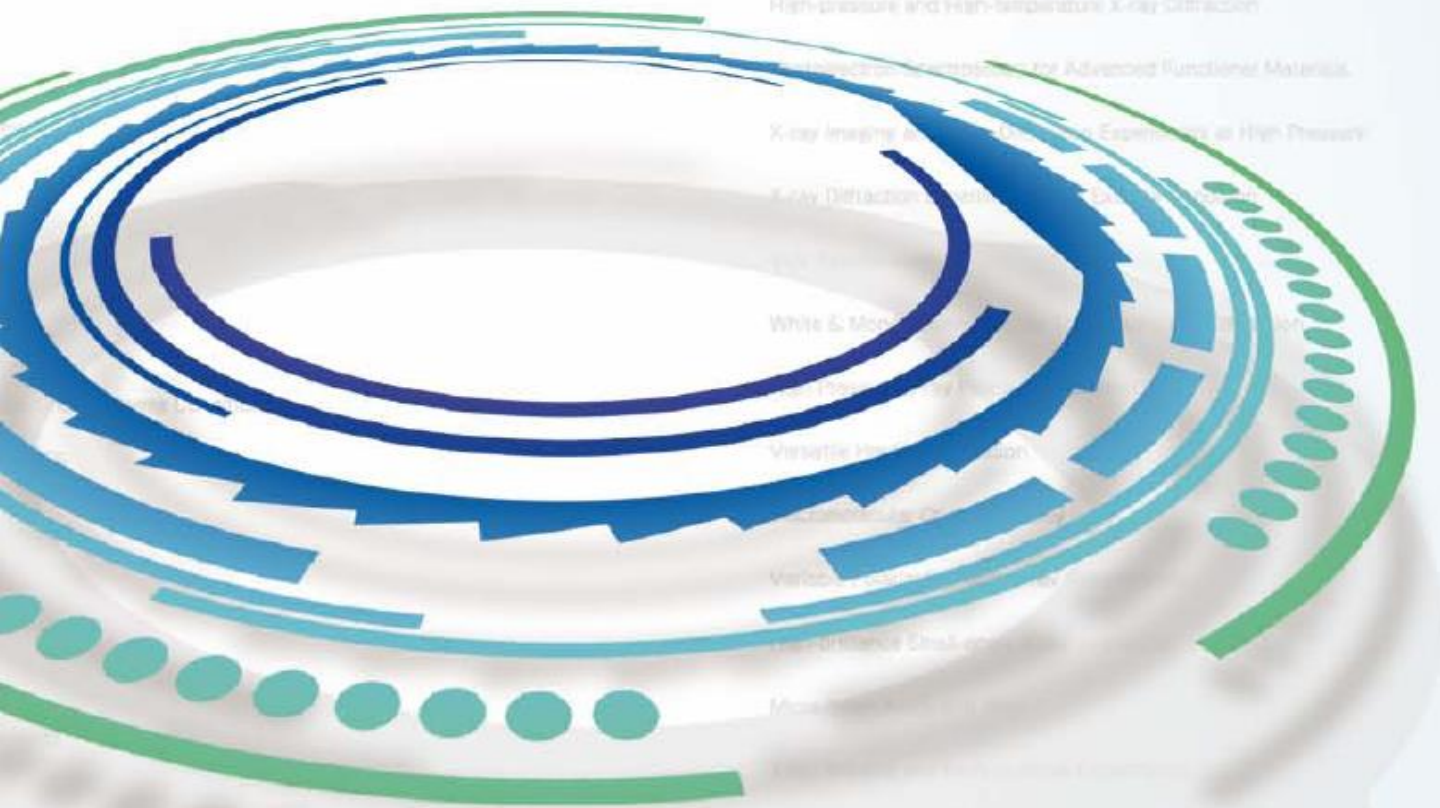
PFは光源としての競争力を失いつつある



KEK 放射光計画

Existing
Radioactive Samples
Soft X-ray Spectroscopy
Surface and Heterointerface
Synchrotron Diffraction
Microbeam

Time-resolved XAFS and XPS
X-ray Diffraction and Absorption Spectroscopy at High Pressure
Macromolecular Crystallography for Drug Design
Radiation Biology, Soft X-ray Spectroscopy for Radioactive Samples
High-pressure and High-temperature X-ray Diffraction
Synchrotron Radiation for Advanced Functional Materials
X-ray Imaging and Spectroscopy Experiments at High Pressure
X-ray Diffraction Spectroscopy
White & Micro
Versatile Microbeam
Performance Check



大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構

KEK放射光のコンセプト

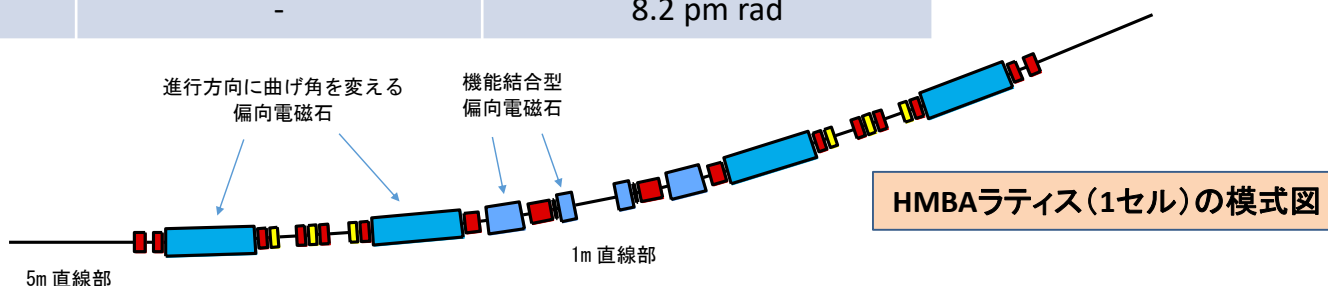
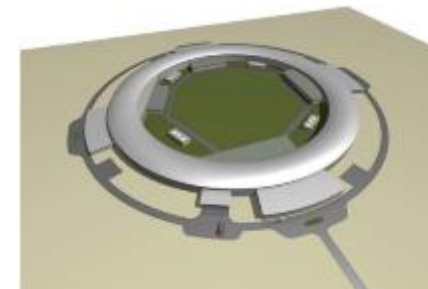
○世界最高の高輝度放射光を用いてトップサイエンスを創出するとともに、最先端の研究・開発を通して、日本の未来を支える人材を学术界から産業界にわたって幅広く育成する。

○我が国に不可欠な先端基盤研究施設として、トップサイエンスに端を発する幅広い研究を展開し、多種多様な学術研究および産業応用研究を支える。

世界最高レベルの低エミッタンス光源

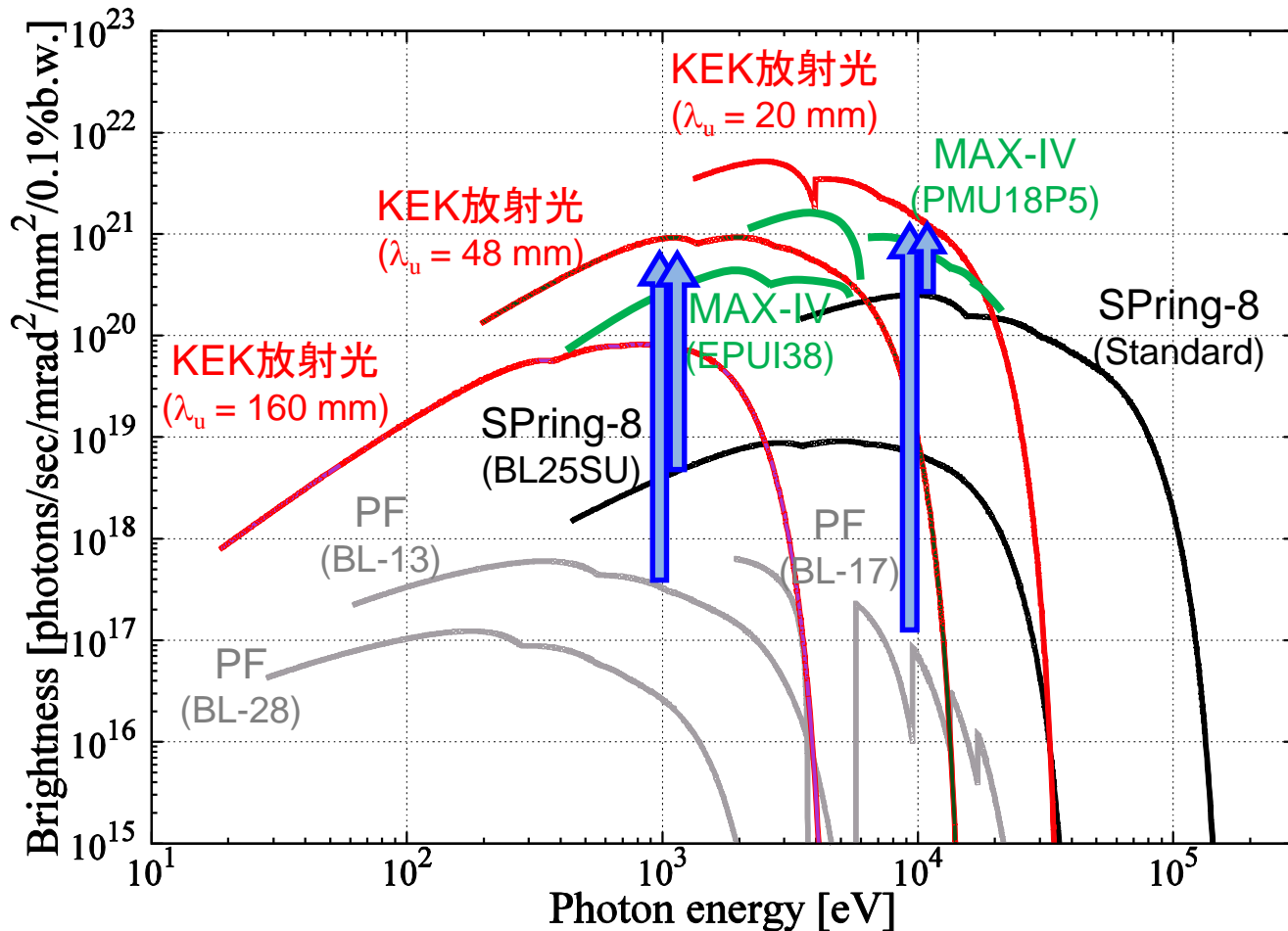
KEK放射光源加速器の主要パラメータ

エネルギー	3 GeV	
ラティスの型	HMBA (Hybrid Multi-Bend Achromat)	
セル数	20 セル	
周長	570 m	
直線部	5m級長直線部:20, 1m級短直線部:20	
最大ビームライン数	58(長直線部:18, 短直線部:20, 偏向電磁石部:20)	
蓄積電流値	0 mA	500 mA
水平エミッタンス	0.13 nm rad	0.31 nm rad
垂直エミッタンス	-	8.2 pm rad



- 最新型ラティス”Hybrid Multi-Bend Achromat (HMBA)”を応用し、各セルに長直線部と短直線部を持つ独自設計. エネルギー3GeVで世界最高レベルの低エミッタンス光源 (0.13 nm rad)を実現する.
- 最大58本(うち挿入光源38本)のビームラインが設置可能な設計により、高性能の光を広い分野のサイエンスで共有できる.

世界最高の輝度がもたらすブレークスルー



軟X線領域でPFより3桁、SPring-8より2桁以上輝度が向上。最新の施設であるMAX-IVも上回る。

軟X線 (~1 keV):
電子状態の観察
硬X線 (~10 keV):
構造の決定

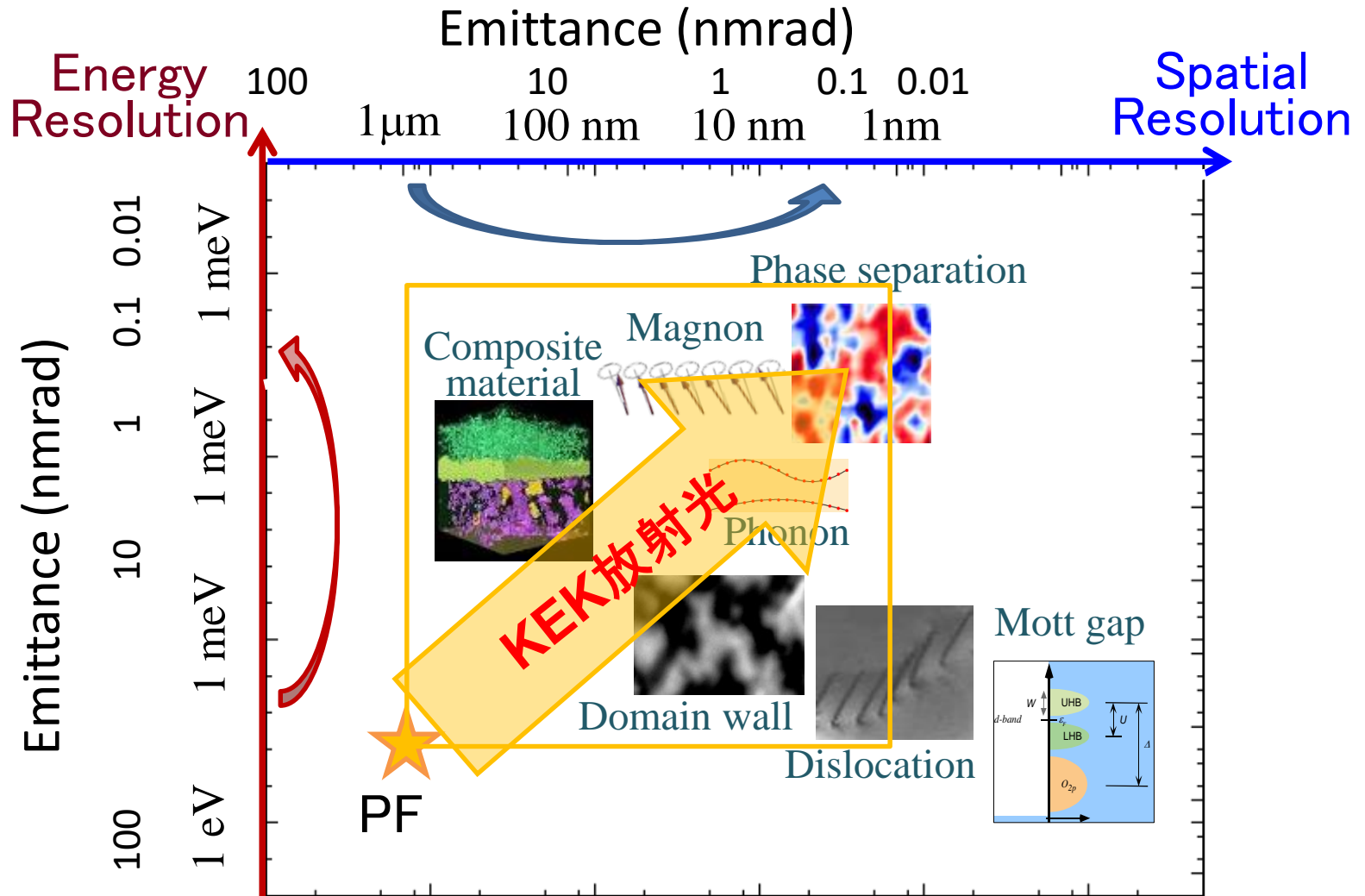
⇒ 物質・生命科学に最適化された光源

高いコヒーレントフラックス ⇒ 高い空間分解能 (~10 nm)

小さい光源サイズ, 高い平行度 ⇒ 高いエネルギー分解能 (~10 meV)

より微小な領域に対して, より精密な構造・電子状態の観察が可能に

分解能のフロンティアを切り拓く



KEK放射光が拓くトップサイエンス

「機能の起源」を探る

How does it work?
Why doesn't it work well?

物質科学



構造材料



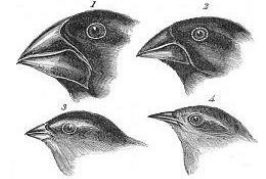
電子材料

物理学, 化学, 生物学,
地球科学において
機能の鍵を握る
不均質性, 階層性を解明

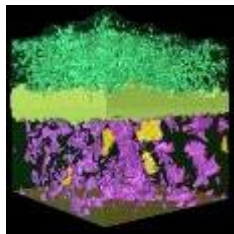
生命科学



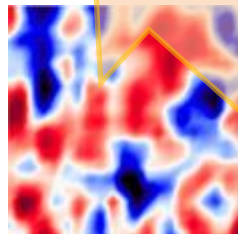
脳



進化



不均質な構造・電子状態の観察



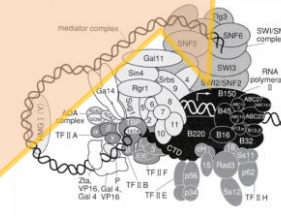
光の性能を活かした
最先端の実験

KEK放射光

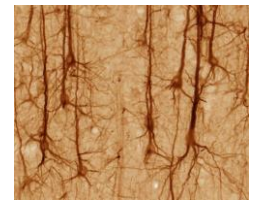
高コヒーレンス, 高輝度



高い空間分解能 (10 nm), 高いエネルギー分解能 (10 meV)
ハイスループット測定 & ビッグデータ解析 (1,000 sample/day)



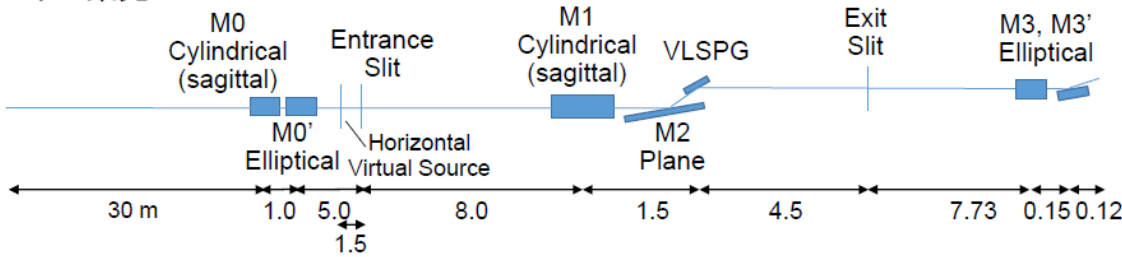
ハイスループット
結晶構造解析



マイクロビームに
よる細胞改変

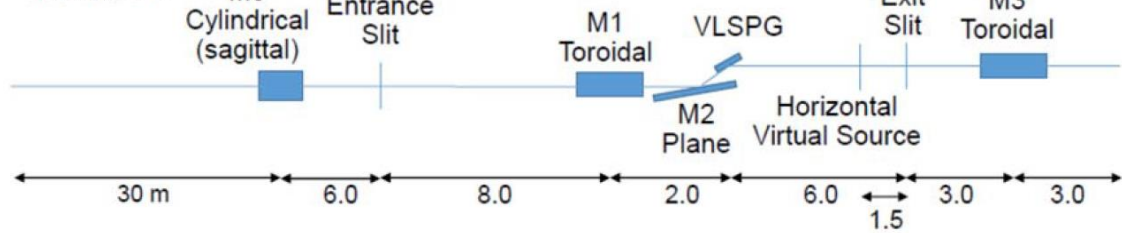
軟X線領域のビームライン設計

ナノ集光



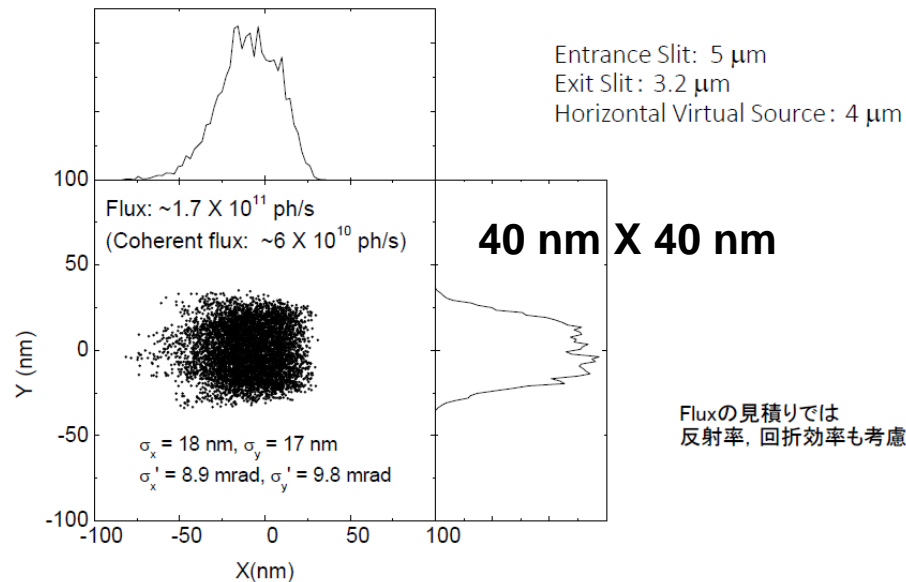
オーソドックスな設計で40 nm程度の
ナノ集光を実現
(スリットを狭めれば25 nmも可能)
回転楕円鏡で10 nmを目指す

簡易集光

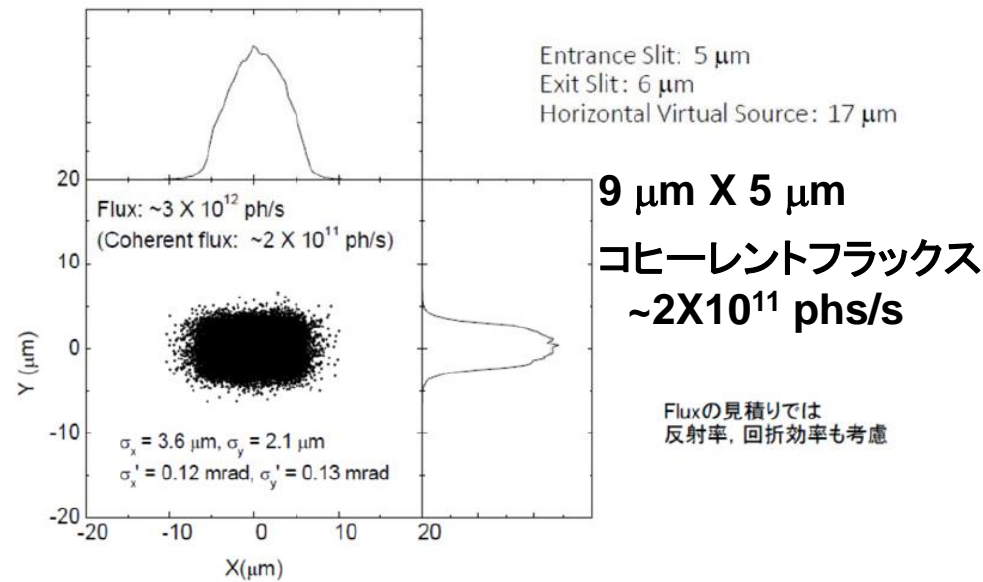


簡易的な光学系でも10 μm 以下の
集光と、高いコヒーレントフラックス
を実現

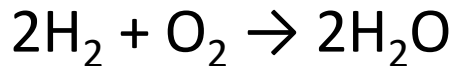
1000 l/mm, 1 keV, $\Delta E \sim 50$ meV



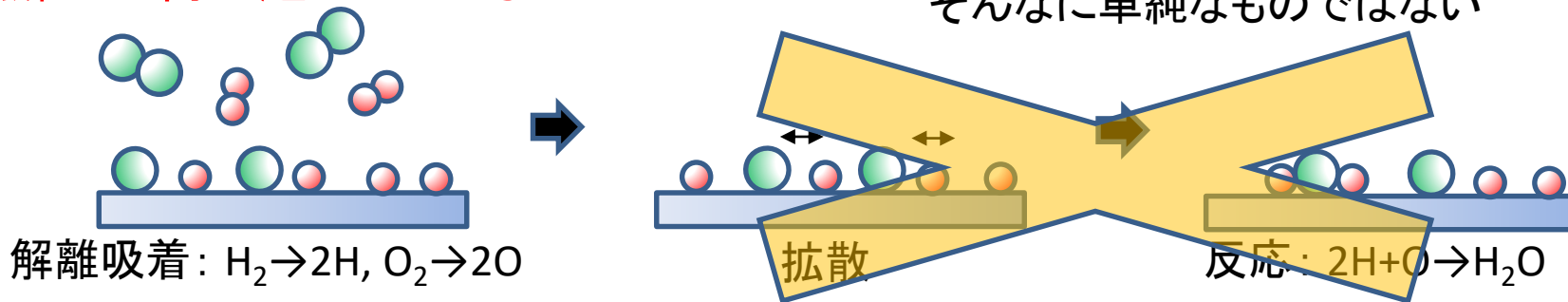
1000 l/mm, 1 keV, $\Delta E \sim 50$ meV



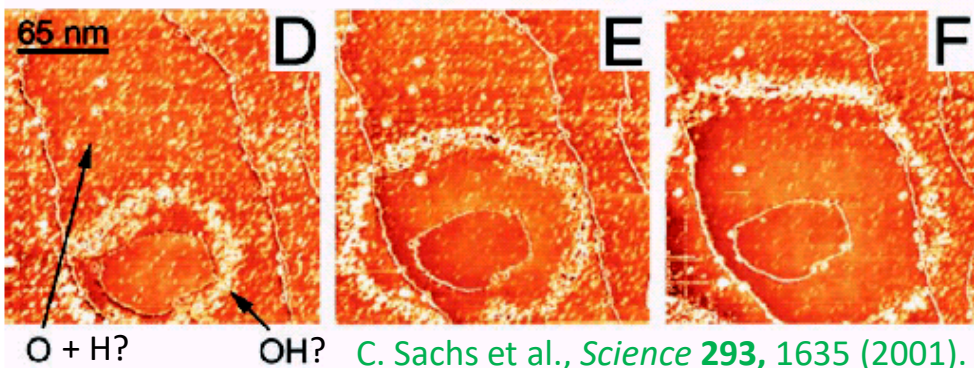
サイエンス(1): 化学反応の本質を探る



気体を直接反応させるには、大きなエネルギーが必要 ⇒ 「触媒」の登場
触媒上で何が起きているのか？

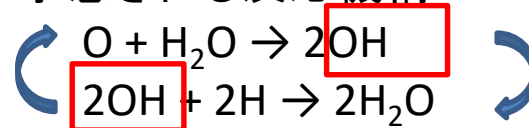


Pt上における O_2 と H_2 の反応 (STMによる観察)



ナノスケールのリングが広がっていく
⇒ 反応のフロンティア

予想される反応機構:



OHがフロンティアとなって、空間的に広がりながら反応を進めていく

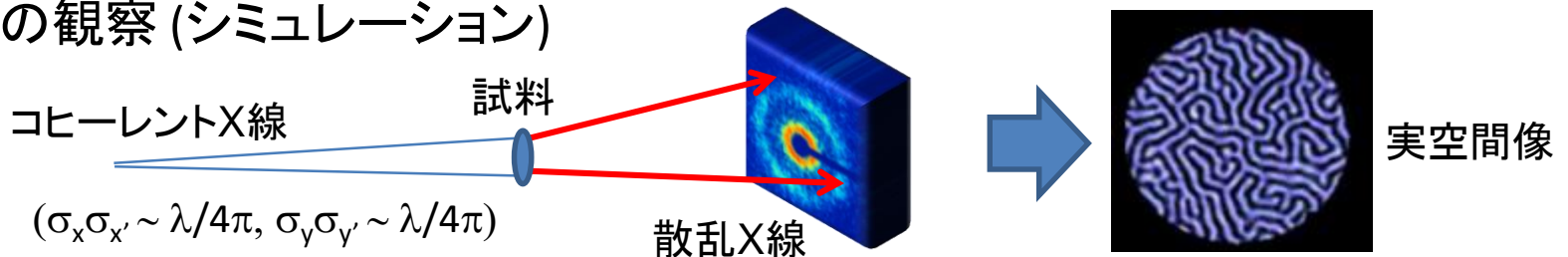
化学反応は不均一かつダイナミック

⇒ 場所ごとの化学種の種類, 量, 構造が時々刻々と変化

時間と位置を同時に分解して観察することで初めて, 反応の仕組みが理解できる

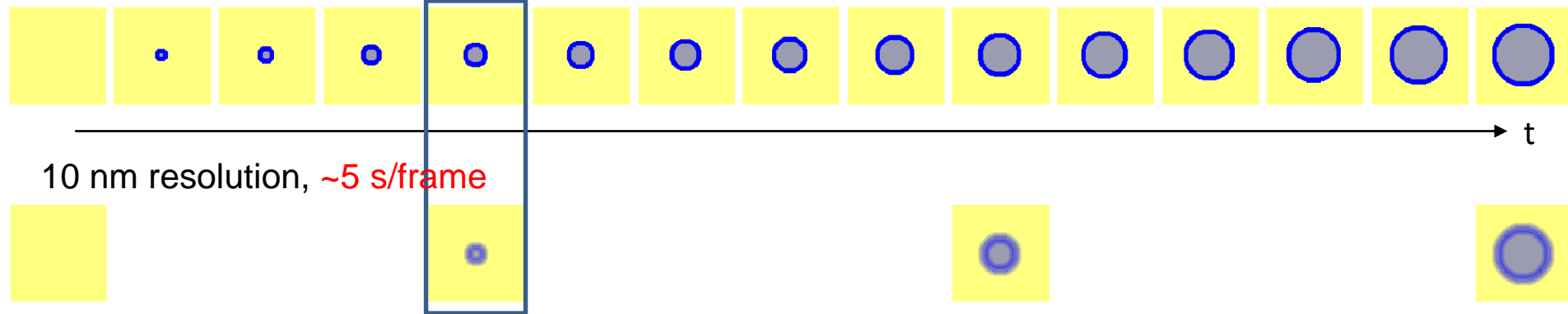
コヒーレンスを利用した化学反応の観察

化学反応の観察 (シミュレーション)



コヒーレントなX線の光子数 (コヒーレントフラックス) が空間・時間分解能を決める

KEK放射光 ⇒ 10 nm resolution, ~1 s/frame ※ 現状(SPring-8等)では10 nm resolution, ~10 min



10 nm resolution, ~5 s/frame

~1 s/frame

~5 s/frame

O + H

OH

H₂O

200 nm

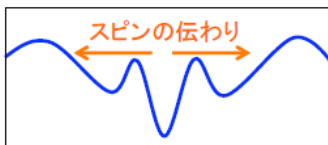
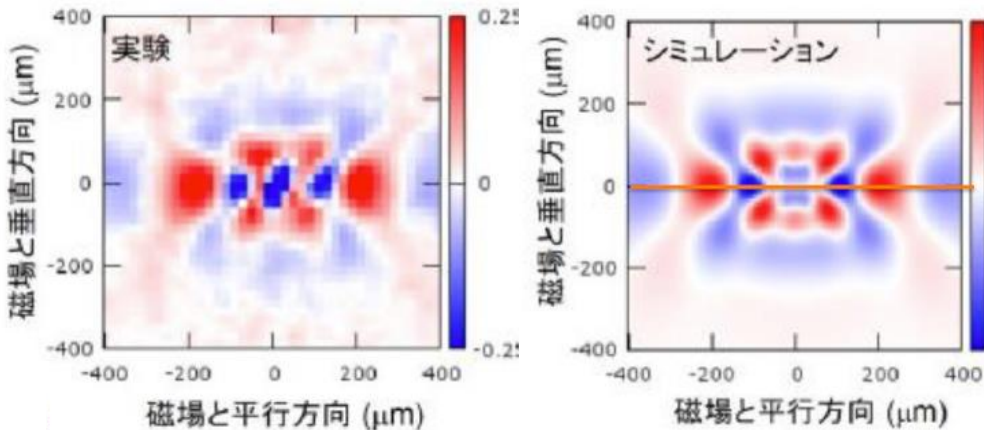
X線の利点(元素, 化学状態の識別, in-situ観察, ...)を活かした時空間分解測定
⇒ 化学反応の本質の理解

・どんな化学種(中間体含む)が空間的にどのように移動しながら反応が進むのか
・どの過程が反応のスピードを決めるか
⇒ より効率の高い反応の設計

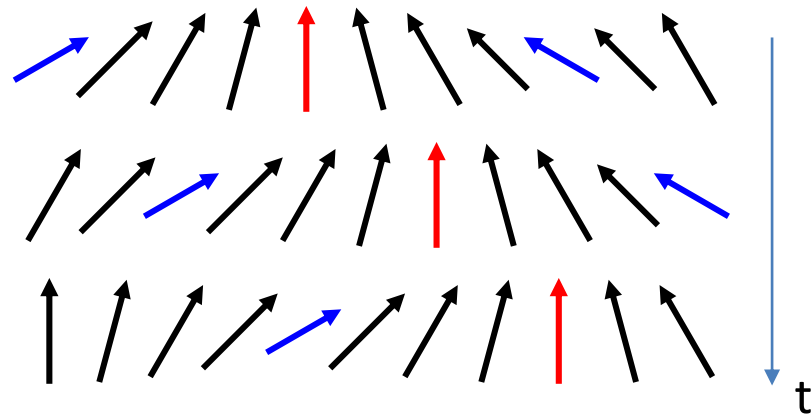
サイエンス(2): スピンの動きを探る

「スピン」は波のように振る舞う

$$\frac{d\vec{M}_2}{dt} = -\gamma\vec{M}_2 \times \vec{H}_{eff} + \vec{m}_2 \times \alpha \frac{d\vec{M}_2}{dt} + I\beta_{ST}\vec{m}_2 \times (\vec{m}_1 \times \vec{m}_2)$$



T. Satoh et al., Nat. Photon., 6 (2012) 662.



隣り合ったスピンの間や、スピンと電子軌道との間の相互作用が空間的、時間的に絡み合う

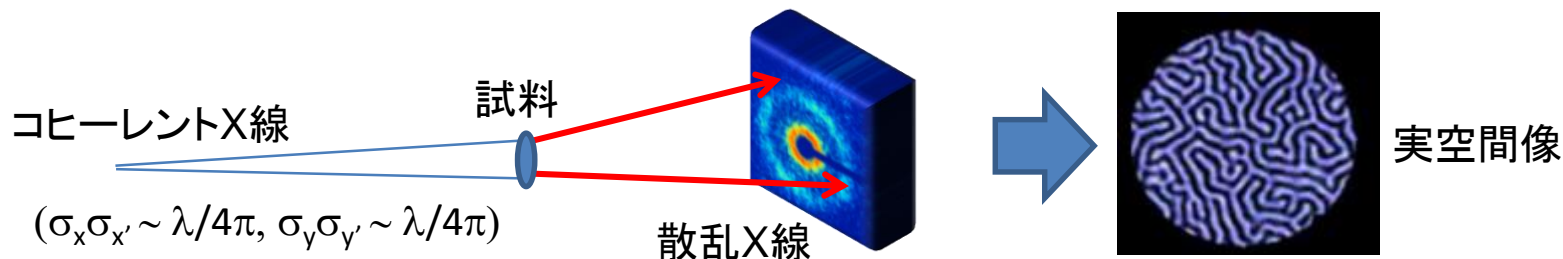
十分に大きい、均一な物質であれば、スピンの伝わり方は予測できる

ナノ領域ではどのように伝わるのか？ 表面・界面を含む薄膜では？

物質の端におけるスピンの波の反射，減衰，特有な波形
表面・界面における特異な磁氣的性質

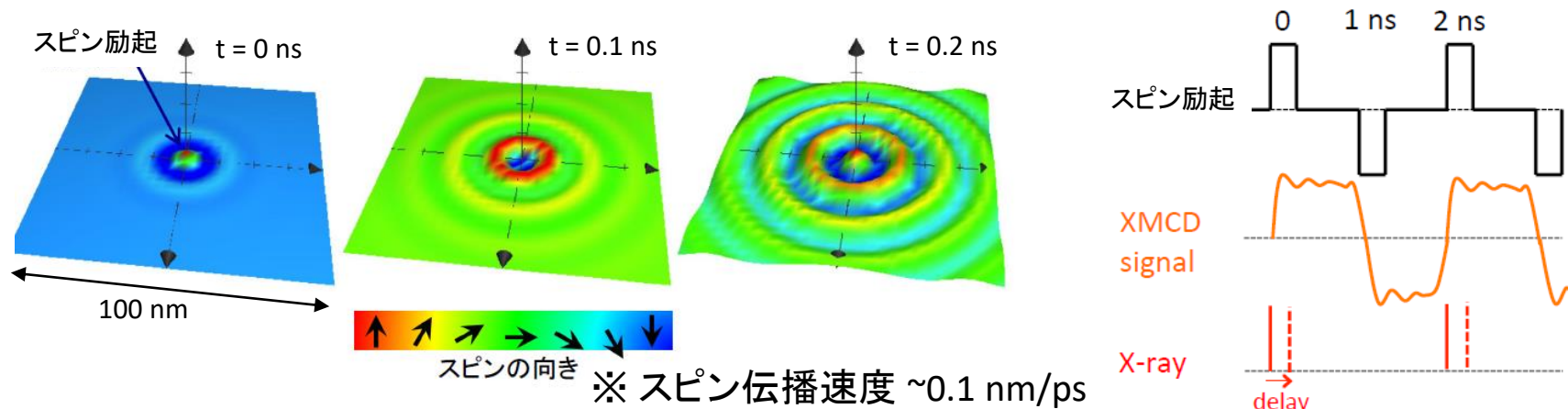
⇒ 空間＋時間を分解したスピンの観察が必須

コヒーレンスを利用したスピンの時空間分解観察



スピンの伝播の観察 (シミュレーション)

円偏光軟X線の元素選択性, スピン感受性を活かしたpump & probe 測定



磁性体の組成, 形状, 界面の状態などによるスピン伝播の違いを解明

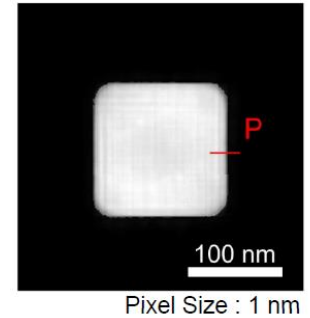
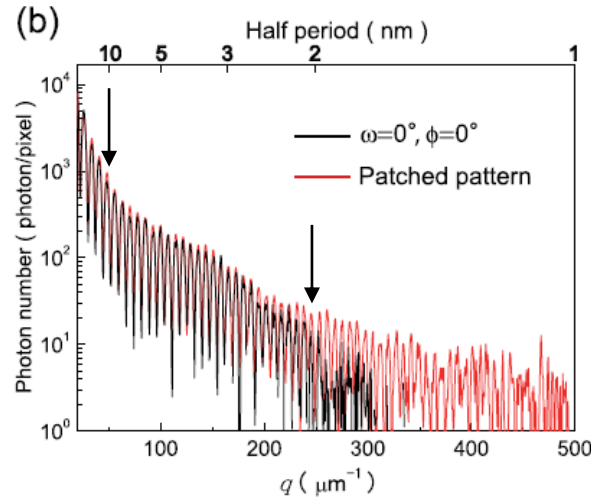
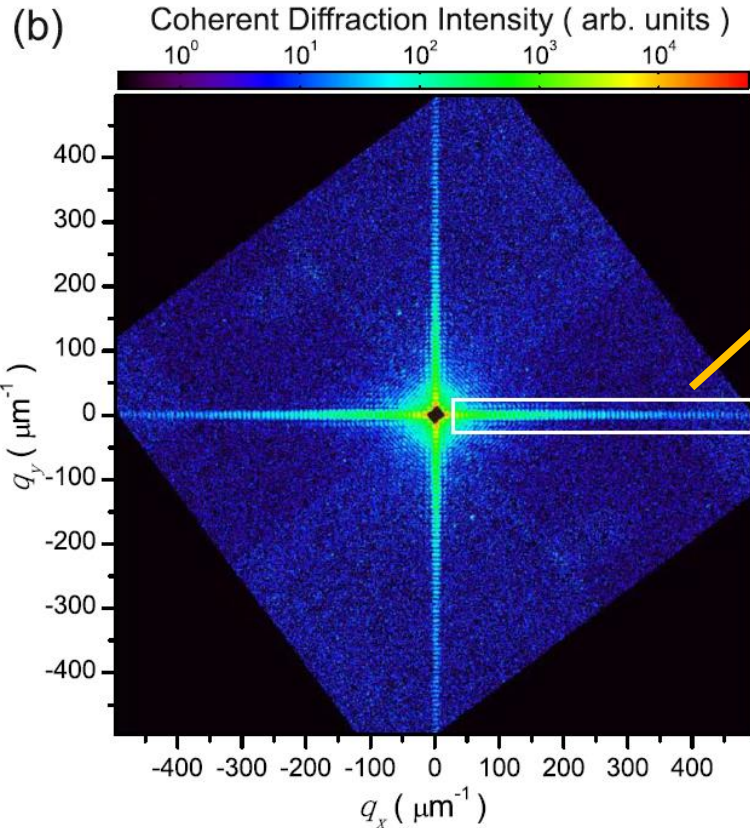
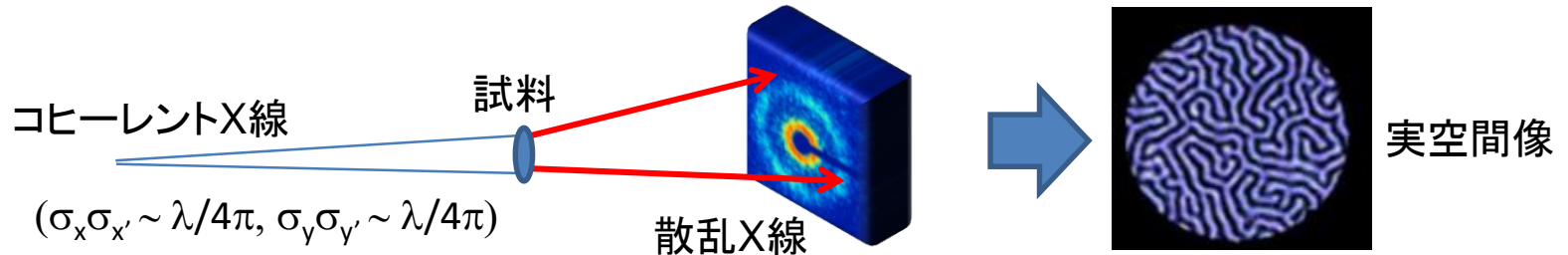
KEK放射光 \Rightarrow 5 nm resolution, ~ 10 s/frame

エネルギー30点, delay time 60点として ~ 5 h (1データセットあたり)

※ 現状(ALS等)では30 nm程度の集光ビームを利用して, 100 s/frame 程度

計測システムへの期待

高い空間分解能を実現するために



小さい空間スケールの情報は散乱角の大きいところ (散乱強度が弱い) に含まれる

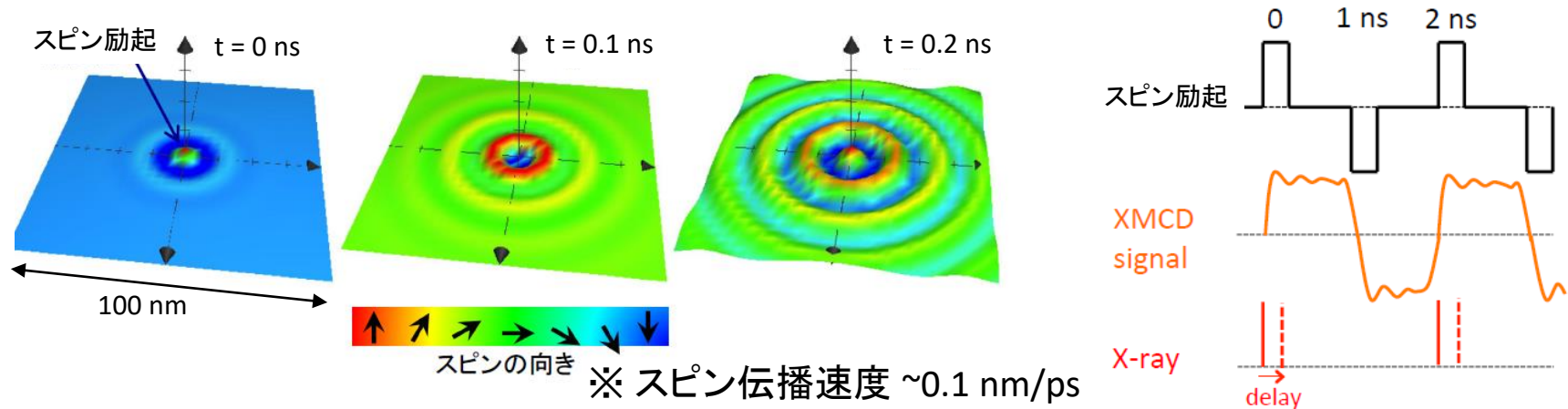
⇒ 空間分解能を上げるには、散乱強度の弱いところまでデータをとる必要がある。

コヒーレントなX線の光子数 (コヒーレントフラックス) と検出器のダイナミックレンジ ($\sim 10^5$), 読み込み時間 ($\sim s$) が空間・時間分解能を決める

パルス放射光を用いた時空間分解観察

スピンの伝播の観察 (シミュレーション)

円偏光軟X線の元素選択性, スピン感受性を活かしたpump & probe 測定



磁性体の組成, 形状, 界面の状態などによるスピン伝播の違いを解明

KEK放射光 \Rightarrow 5 nm resolution, ~ 10 s/frame

エネルギー30点, delay time 60点として ~ 5 h (1データセットあたり)

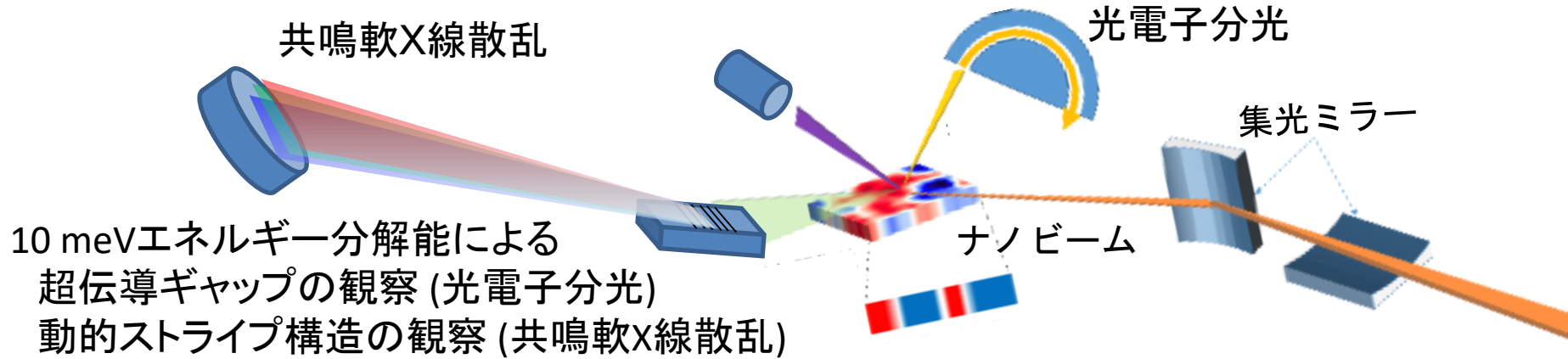
※ 現状(ALS等)では30 nm程度の集光ビームを利用して, 100 s/frame 程度

時間分解能自体はX線のパルス幅で決まる

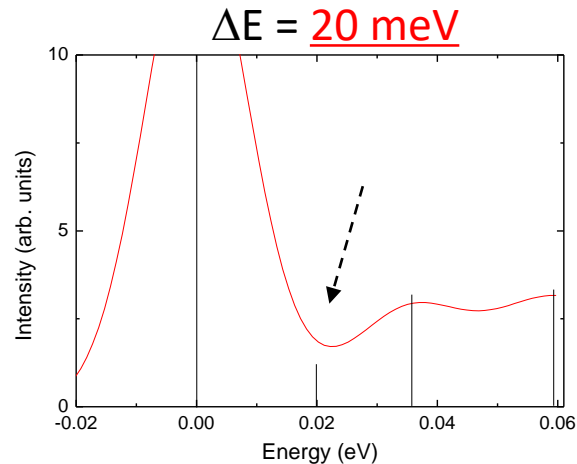
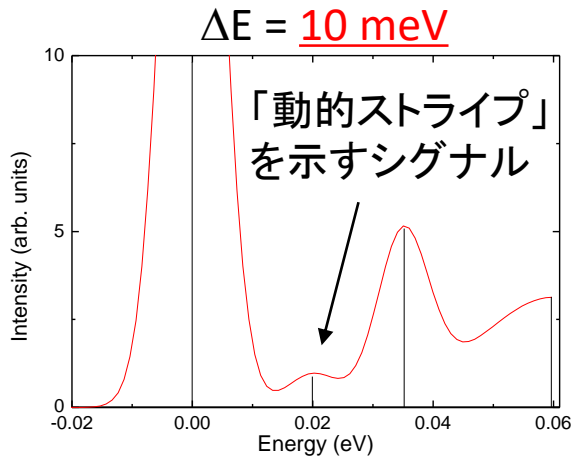
スピン励起とX線パルスの同期, 遅延制御が必須

現象の繰り返しがパルス間隔より遅い場合には, シグナルを選別する必要(\sim ns)

高エネルギー分解能測定



共鳴軟X線散乱による「動的ストライプ」観察(シミュレーション)

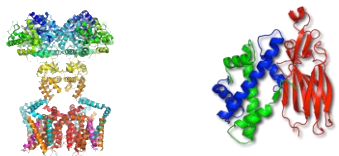


※ 現状(SLS等)では
50 meV程度

回折格子を用いて非弾性散乱軟X線を分光

エネルギー分解能を決める重要なファクターは検出器の位置分解能 (できれば $<5 \mu\text{m}$)
軟X線($<1 \text{ keV}$)における感度が高いことも重要

超ハイスループット構造解析

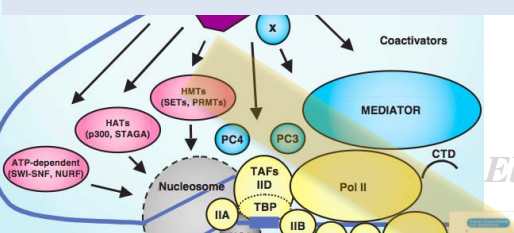


Micro-focus Beamline

- *Integrated Pipeline* 1 μm X 1 μm
- *DB & AI Technology* $>10^{12}$ photons/s

>1,000 times efficient!

Molecular Interaction Network



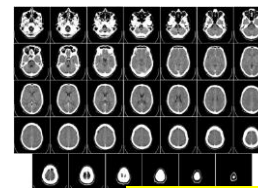
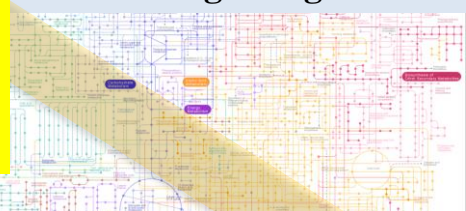
Integrated Pipeline for Biology

Electron microscopy

PF:
13 μm X 13 μm
 $\sim 10^{11}$ photons/s

**High-throughput
Crystal Structure Analysis**
1,000 samples/day

Metabolic/signaling network



High-resolution CT

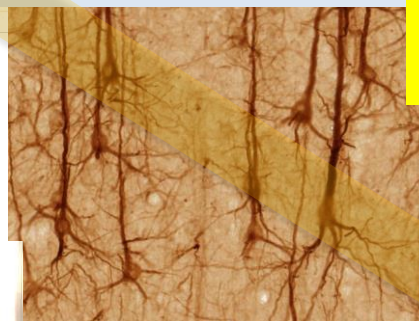
Mutant design
*Bioinformatics
Biochemistry*



Genome editing

Omics analysis
*Functional genomics
Metabolome
Proteomics*

Cellular network (Brain)



**Targeted One-cell
Manipulation with
Highly-focused X ray**

Structural genetics
Molecular Biology

Next generation sequencer



Functional Analysis
Cellular Functions

試料取付, 位置調整, 回折データ取得, ダメージ対策, ...を統合的に制御

新しい光を、ここから。

自然科学は、万物の成り立ちやしくみを探求しようとする好奇心から始まりました。その知的活動は、時を経て、現代の我々の生活を豊かにしています。

この連鎖を未来につなげるために、高エネルギー加速器研究機構（KEK）では、「学術研究」と「人材育成」の拠点として、加速器やビームラインの技術、大学共同利用の経験を集結した、世界最先端の高輝度光源施設「KEK放射光」を計画し、推進していきます。

イベント・ニュース

このサイトについて

学術研究と人材育成

<http://kekls.kek.jp/>

Conceptual Design Report (CDR) 暫定版 Ver.2 :

<http://www2.kek.jp/imss/notice/2016/09/072000.html>