

SACLAの特徴とその活用



高輝度光科学研究センター

犬伏 雄一

2021年3月9日 SACLA Users' Meeting 2021

放射光ユーザーのためのSACLAの利活用に関するワークショップ

1. SACLAの概要と特徴
2. 実験手法の紹介
3. SACLA利用の仕組みや制度について

1. SACLAの概要と特徴

2. 実験手法の紹介

3. SACLA利用の仕組みや制度について

SACLA

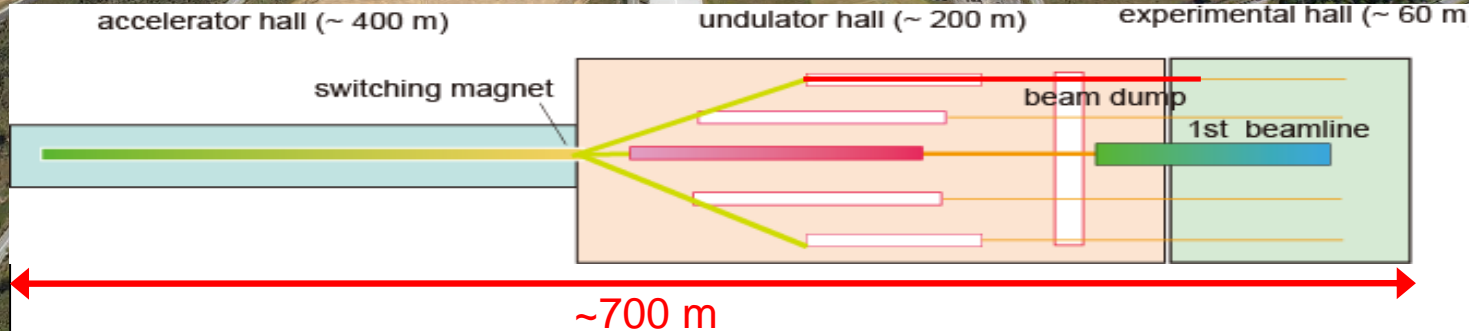
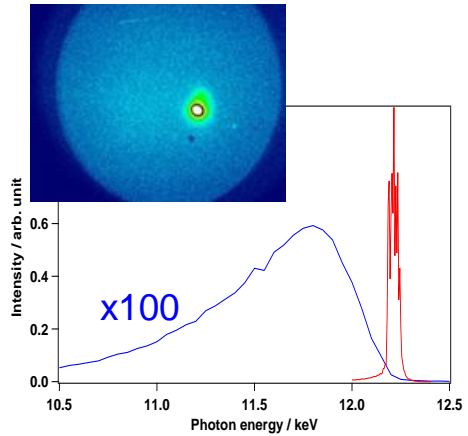
SPring-8 **A**ngstrom **C**ompact free electron **L**aser

世界初のコンパクトX線自由電子レーザー

建設: 2006~2010年

供用運転: 2012年3月~

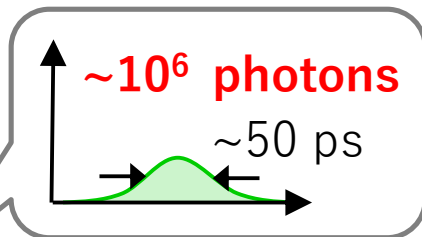
2011年6月
レーザー発振



SPring-8とSACLAの違い

SPring-8

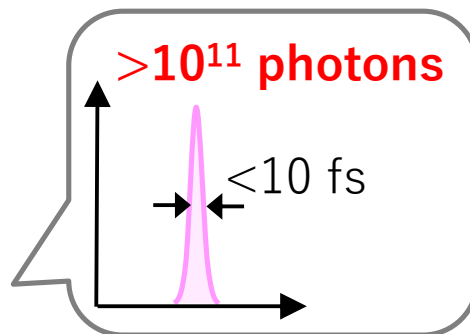
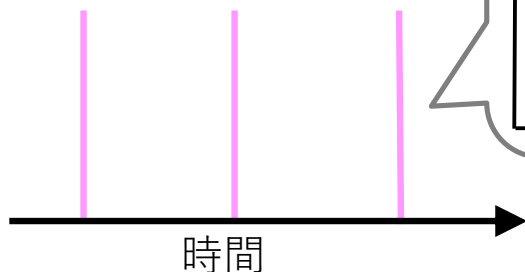
~50MHz (20 ns間隔)



1秒あたりの光子数：~10¹⁴

SACLA

30Hz (33 ms間隔)



1秒あたりの光子数：~10¹³

SPring-8とSACLAは特徴が異なるので
それぞれに適した利用法がある

SACLAの特徴

放射光の10万倍以上多い

(放射光: $\sim 10^6$ photons/pulse)

**Large number of photons
($>10^{11}$ photons/pulse)**

**Ultra-short
pulse duration
(<10 fs)**

放射光の2000倍短い

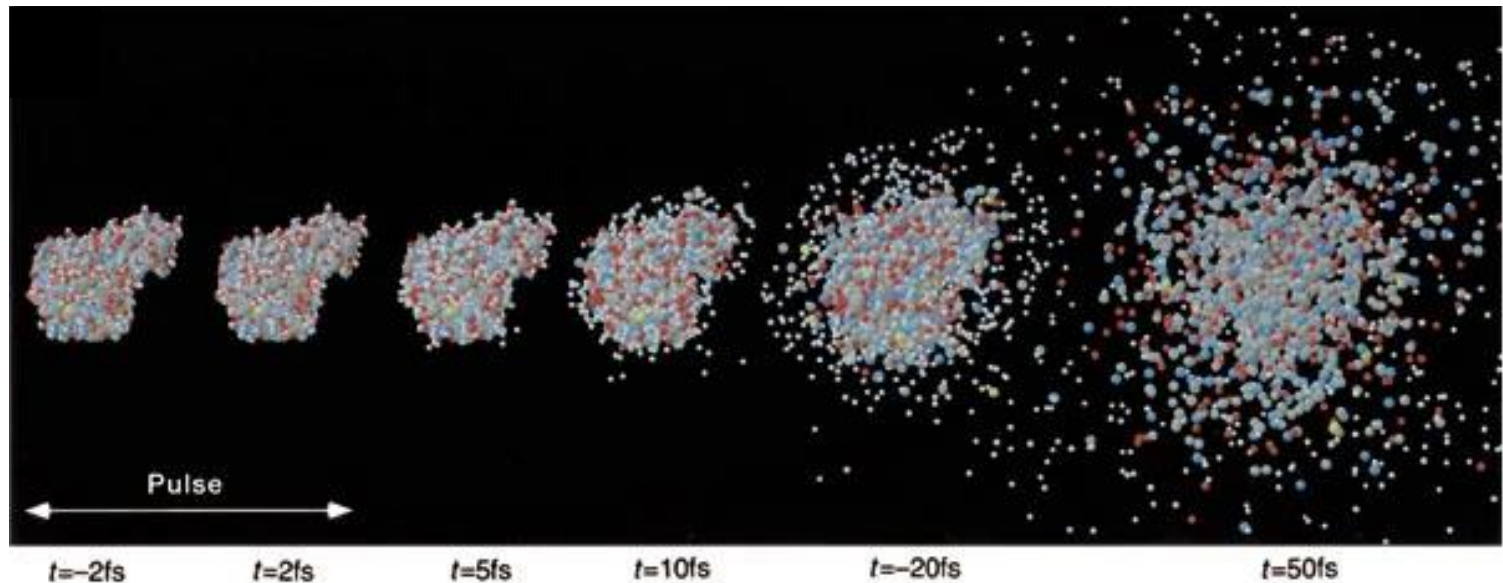
(放射光: ~ 50 ps)

**Nearly full
spatial coherence
($>80\%$)**

放射光の1500倍優れている

(放射光: $\sim 0.50\%$)

“See before destruction”



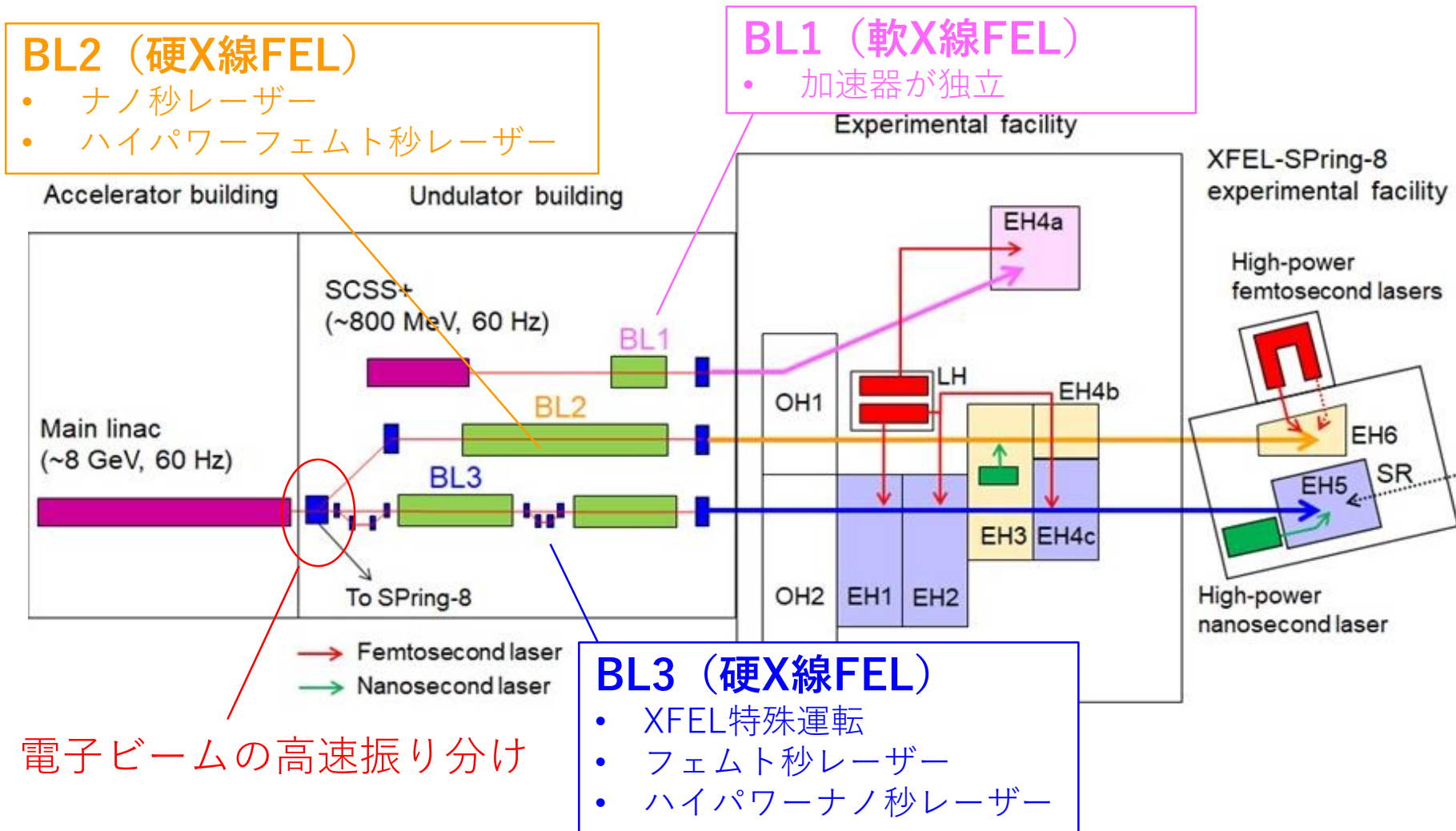
R. Neutze, *Nature* **406**, 752 (2000)

高い輝度と短いパルス幅を利用して

対象が壊れる前の情報をシングルショットで取得する

SACLAの概要

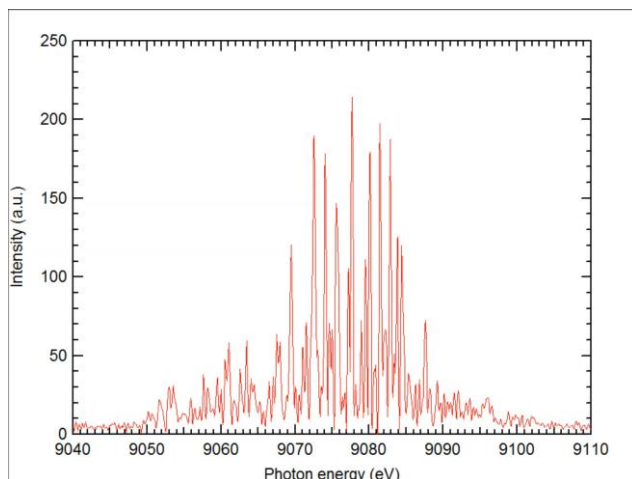
自己増幅自発放射（SASE: Self-amplified spontaneous emission）によりXFELパルスを発生



光源特性

		BL3	BL2	BL1
光子エネルギー		4 - 20 keV	4 - 15 keV	40 - 150 eV
パルス幅		<10 fs	<10 fs	<100 fs
ピンク ビーム	バンド幅 ($\Delta E/E$)	$\sim 5 \times 10^{-3}$	$\sim 5 \times 10^{-3}$	~ 0.01
	パルスエネルギー	$\sim 600 \mu\text{J}$ @10 keV	$\sim 500 \mu\text{J}$ @10 keV	$\sim 90 \mu\text{J}$ @100 eV
	光子数 (/pulse)	$> 3 \times 10^{11}$ @10 keV	$> 3 \times 10^{11}$ @10 keV	$> 5 \times 10^{12}$ @100 eV
モノクロ ビーム	バンド幅 ($\Delta E/E$)	$\sim 1 \times 10^{-4}$	$\sim 1 \times 10^{-4}$	
繰り返し周波数		30 Hz	30 Hz	60 Hz

スペクトル (9keV)



Y. Inubushi, *et al.*, *Appl. Sci.* **7**, 584 (2017)

XFELでは各パラメータがパルス毎に変動する

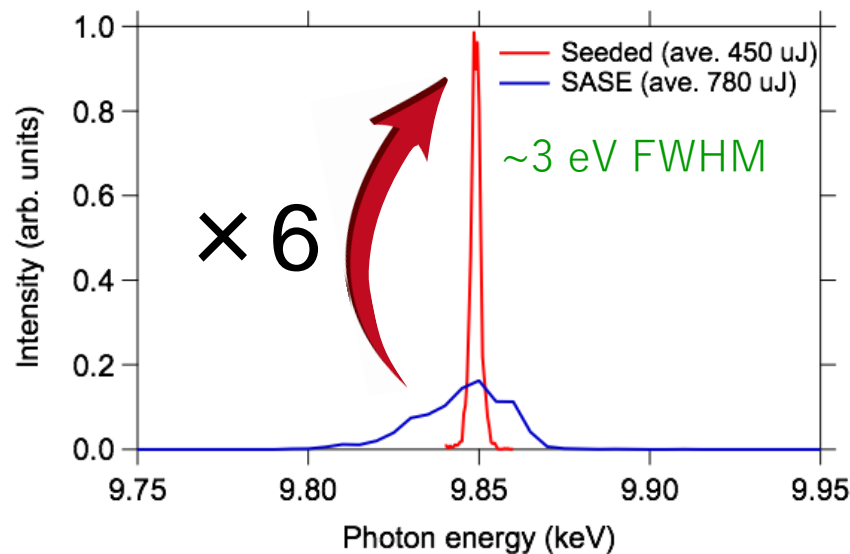


全てのパルスの各パラメータ
(パルスエネルギー、中心エネルギー等)
をモニターしながら実験を行う

特殊運転 (BL3)

セルフシードXFEL

自らが発生したSASE光を単色化し
それをシード光として増幅させることで
単色性の高いX線レーザーを発振

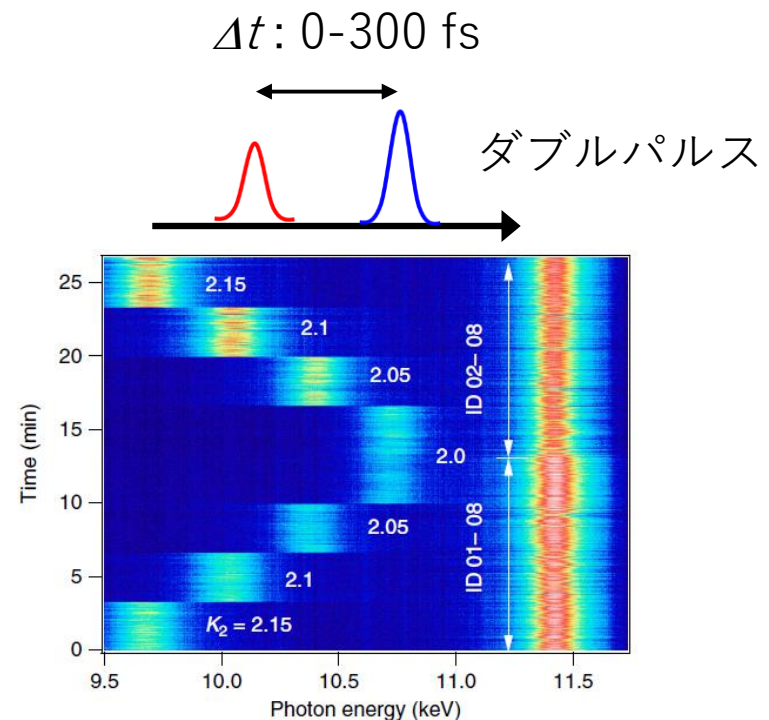


通常のSASE+モノクロメーター
から6倍のゲイン

I. Inoue, T. Osaka, *et al.*,
Nature Photonics **13**, 319 (2019).

2色発振XFEL

アンジュレータ列の前半と後半を異なる
パラメータにして、2色のXFELパルスを
発振。更に遅延時間を設けることも可能。



T. Hara, *et al.*,
Nature Communications **4**, 2919 (2013)

1. SACLAの概要と特徴

2. 実験手法の紹介

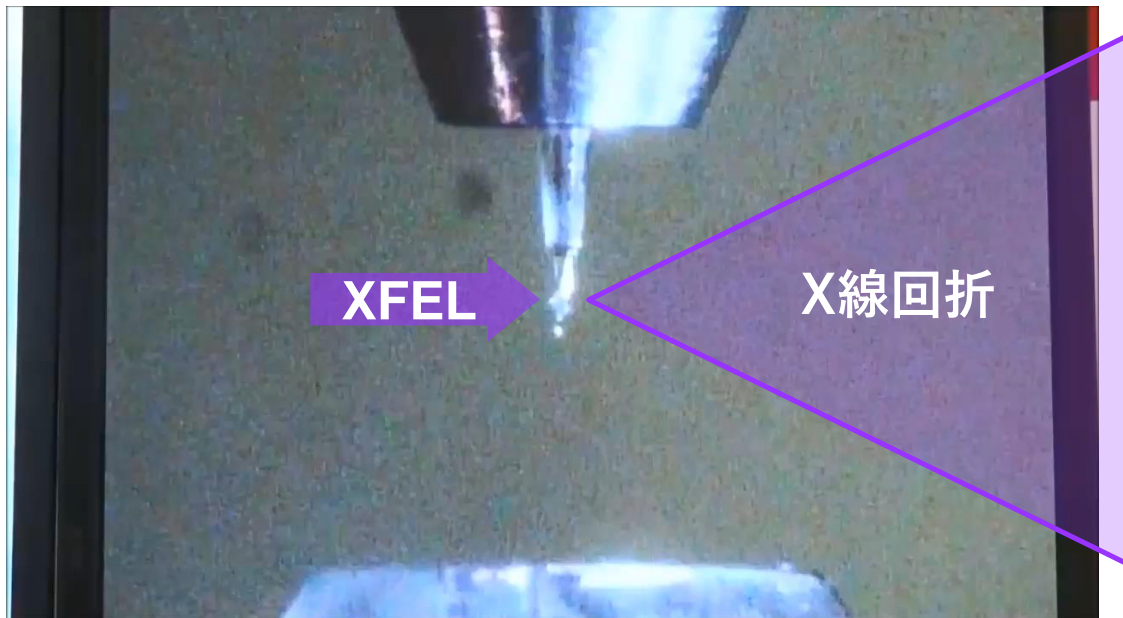
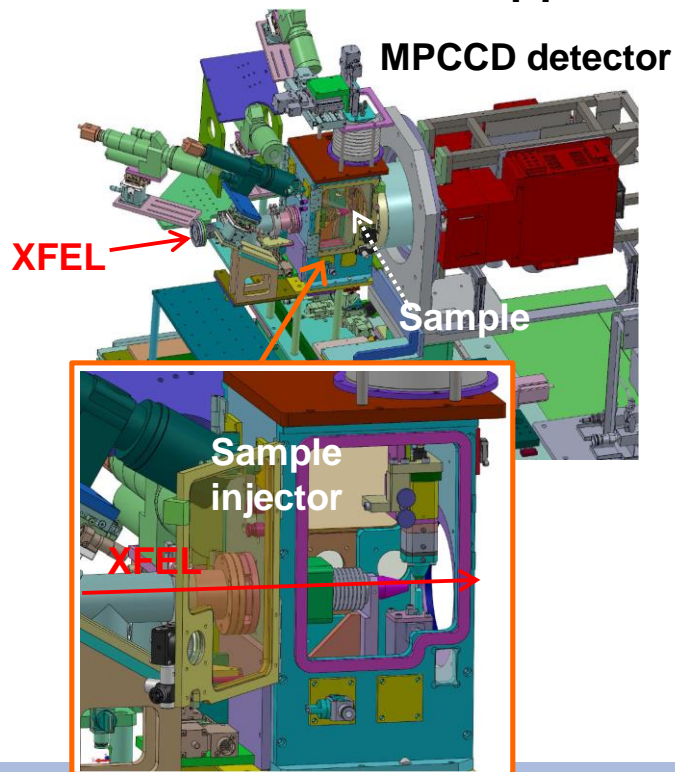
3. SACLA利用の仕組みや制度について

シリアルフェムト秒結晶構造解析

(SFX: Serial femtosecond crystallography)

- 極短時間のX線照射でダメージが回避できる
- 小さい結晶を室温で計測
- 光励起や試料の混合による構造の時間変化を追う

DAPHNIS (Diverse Application Platform for Hard X-ray diffraction In SACLA)



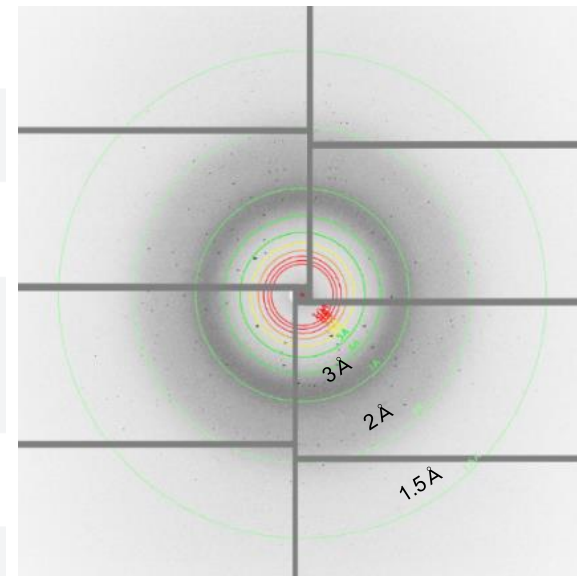
K. Tono *et al.*, *J. Synchrotron Rad.* **22**, 532 (2015).

構造生物学

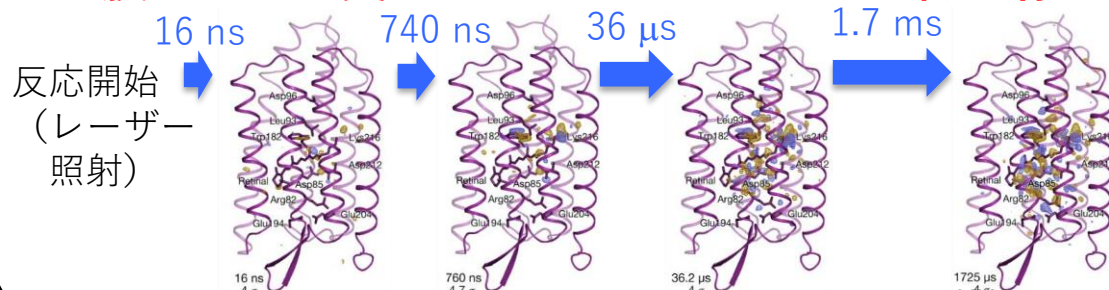
DAPHNISの基本性能

回折像取得レート	30 Hz
検出器距離	50 mm
検出エリア	約110 x 110 mm ²
到達可能分解能 @10 keV	1.5 Å (検出エリア内接円上において)
ヒット率	典型的な値として20–30% (高粘度試料インジェクタ利用時)
インデックス率	典型的な値として60–70%
解析に利用される回折像の数 (分子置換法の場合)	1×10^4 (静的構造解析) ~ <math>2 (ポンププローブ計測)<="" 10^4<="" \times="" math>="" td=""></math>2>

X線回折像



膜タンパク質バクテリオロドプシンの働く様子



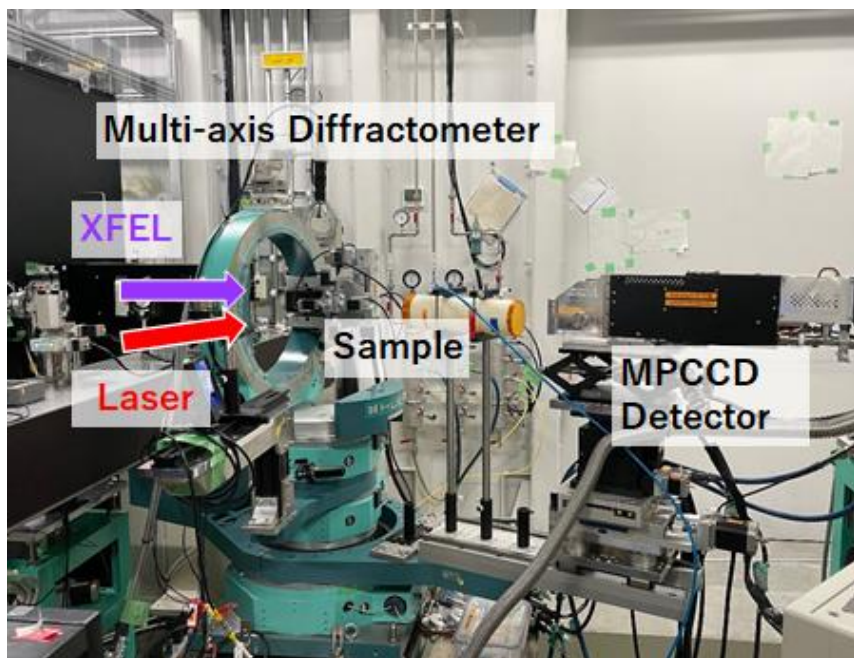
E. Nango et al., *Science*, **354**, 1552 (2016)

物質科学

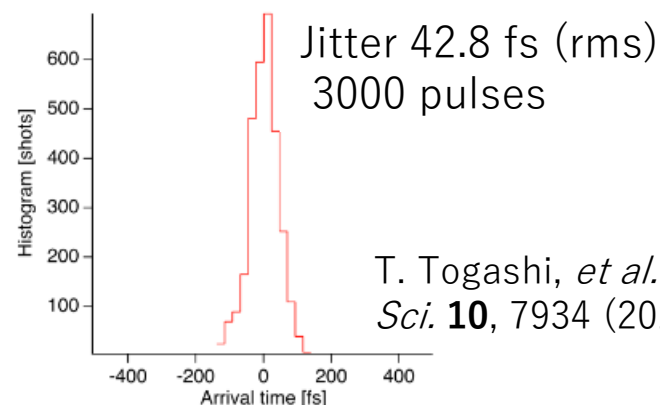
時間分解X線回折計測

光学レーザーを組み合わせたポンプ・プローブ法により、高速現象を観測する

多軸回折計のセットアップ

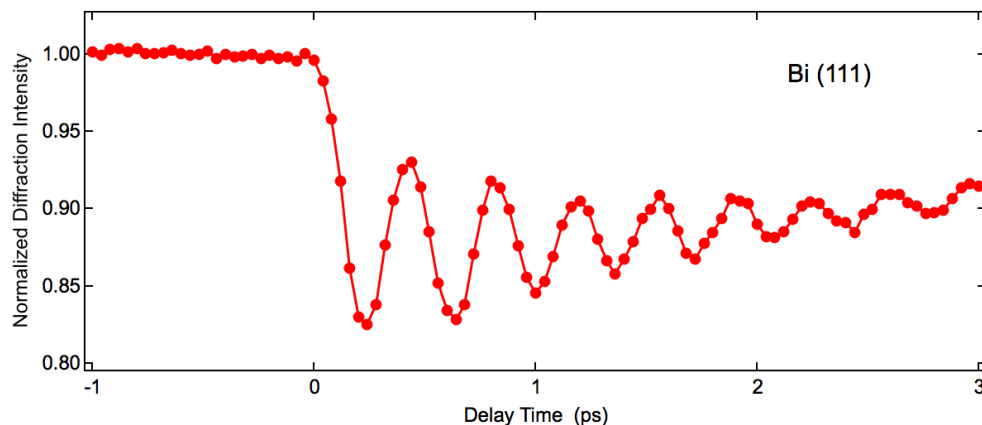


XFELと光学レーザーの タイミングジッター



Biのコヒーレントフォノン計測

超短パルスレーザーを励起光として、Bi薄膜の(111)回折強度の時間変化を測定

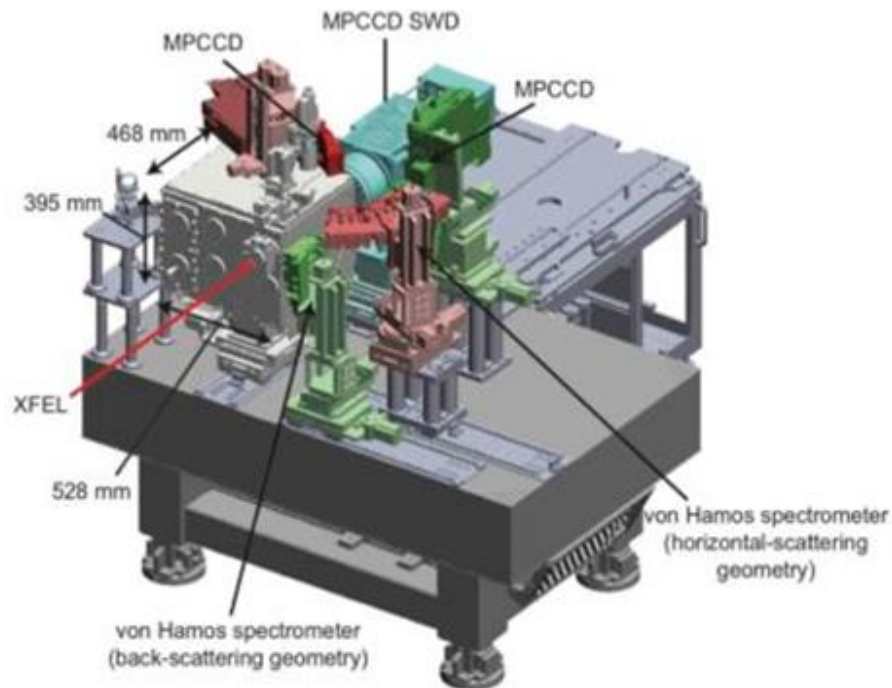


超高速化学

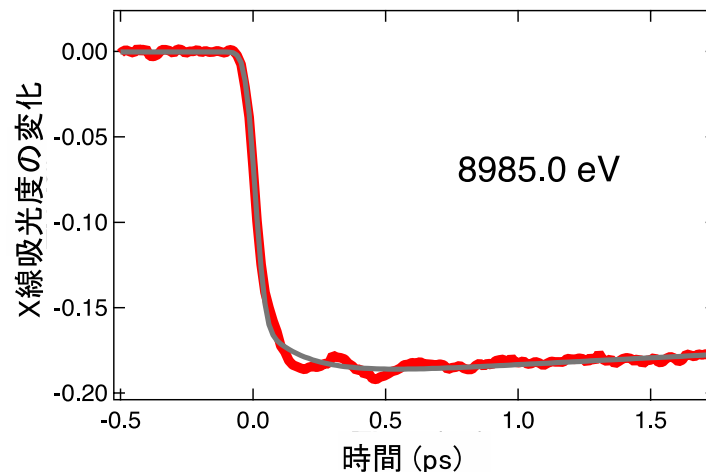
SPINETT

(SACLA Pump-probe INstrumEnt for Tracking Transient dynamics)

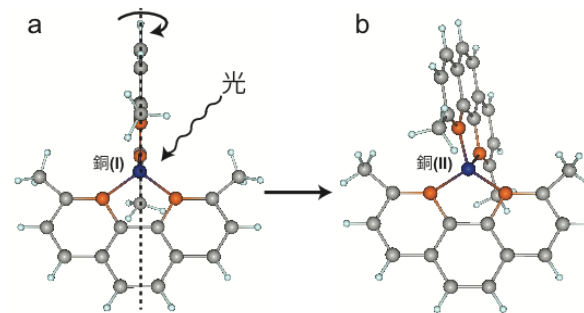
- 時間分解X線吸収分光 (TR-XAS)
- 時間分解X線発光分光 (TR-XES)
- 時間分解X線溶液散乱 (TR-XSS)



X線吸光度の時間変化



銅(I)フェナントロリン錯体の光による構造歪み



分子が歪む前段階の構造変化を sub-Å の空間分解能で追跡することに成功した。

T. Katayama *et al.*, *Nat. Commun.*, **10**, 3606 (2019)

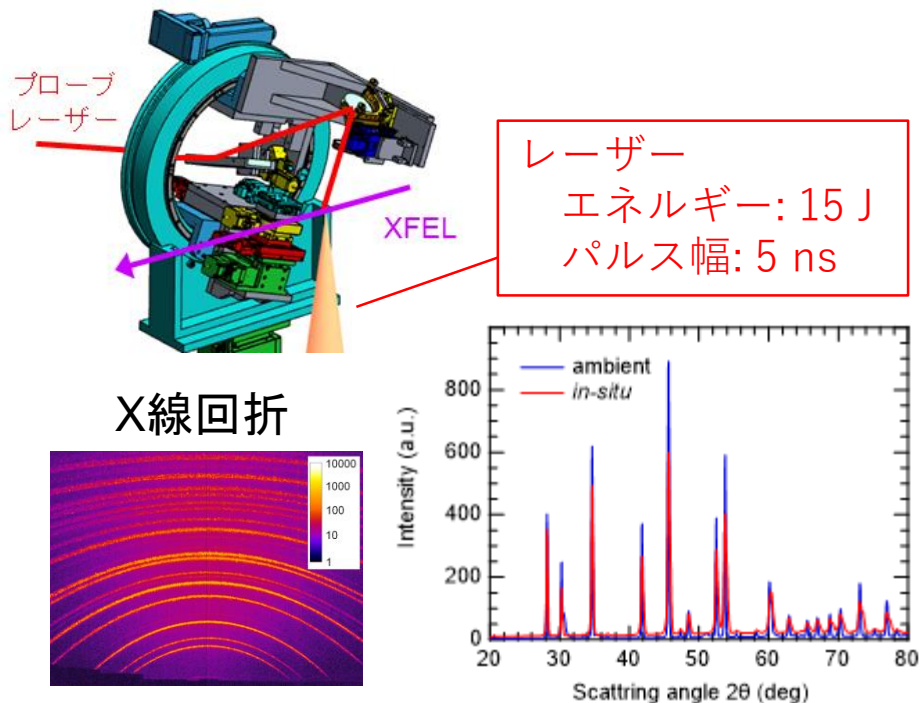
T. Katayama, *et al.*, *Struct. Dyn.* **6**, 054302 (2019).

高エネルギー密度科学

- XFELの明るい光を使って、破壊的現象をシングルショットで観測する
- XFELの短いパルス幅を利用して超高速現象を観測する

ハイパワーナノ秒レーザー

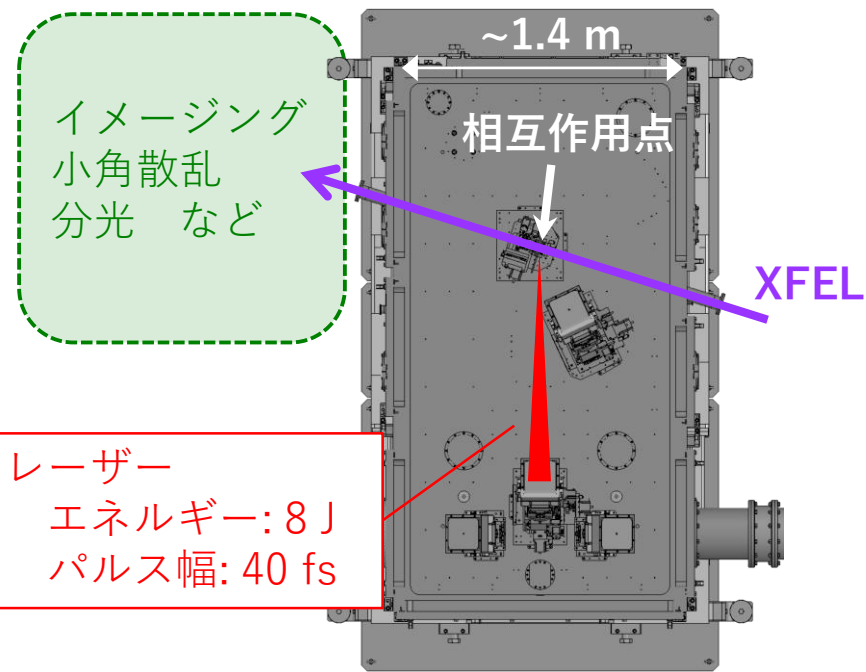
レーザー照射により物質を衝撃圧縮し、その様子を観測する



Y. Inubushi, *et al.*, Appl. Sci. **10**, 2224 (2020).

ハイパワーフェムト秒レーザー

高強度レーザー照射によりプラズマを生成し、その様子を観測する

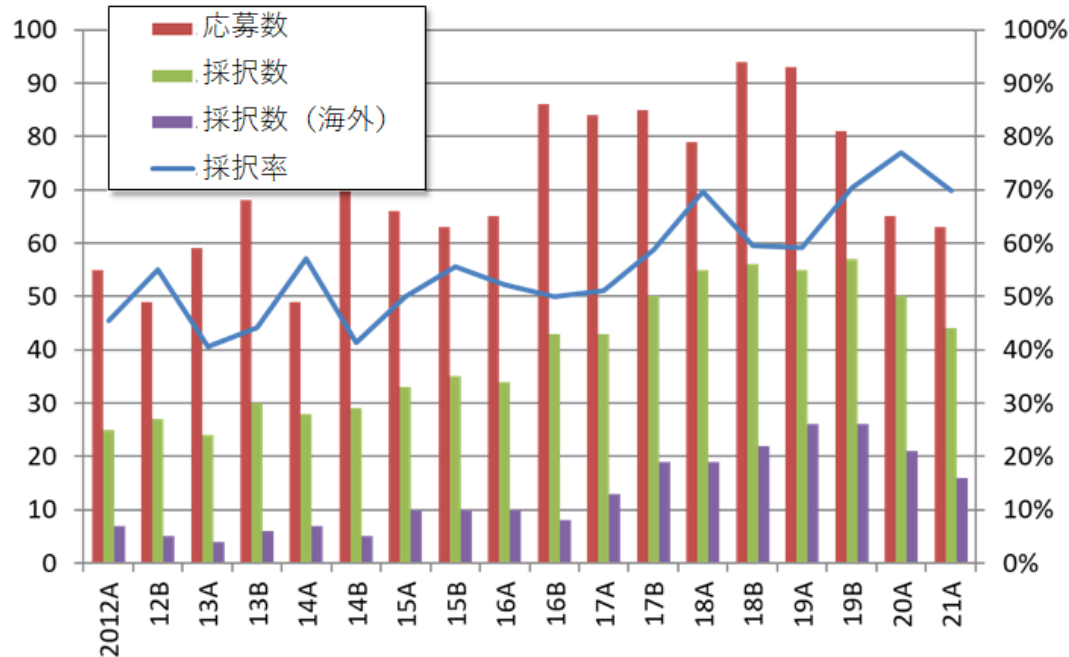


T. Yabuuchi, *et al.*, J. Synchrotron Rad. **26**, 585 (2019).

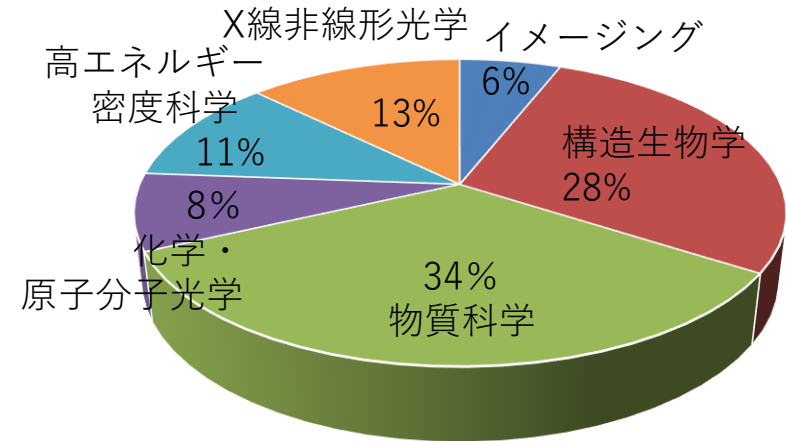
1. SACLAの概要と特徴
2. 実験手法の紹介
3. SACLA利用の仕組みや制度について

SACLA一般課題の状況

一般課題採択の推移



分野別割合 (FY2019)



- 課題募集は年2回 4~5月、10-11月
- 一般課題には成果非専有利用と成果専有利用がある
- 最近の成果非専有利用の採択率は70%程度

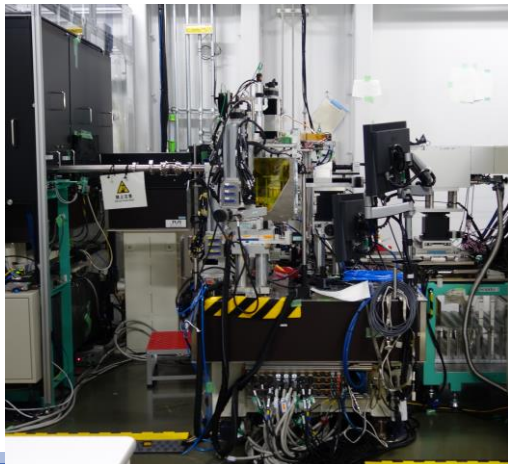
SACLAでの実験

- SACLAの実験は自由度が高い（実験毎に装置を入れ替える）
- 実験に最適なセットアップを担当研究員と相談して決定する
- 実験準備はSACLAスタッフが行う
- 実験の操作はユーザーが行う

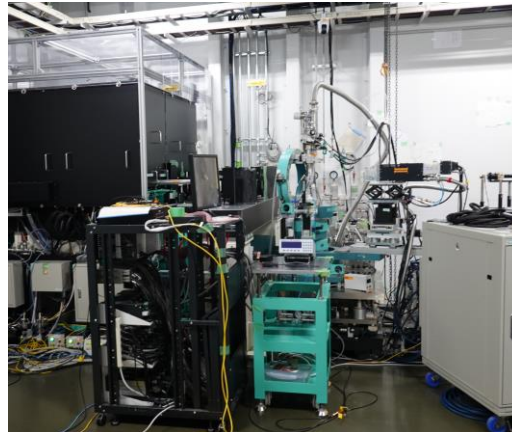
課題の募集期間以外でもお気軽にご相談ください。
sacla-bl.jasri@spring8.or.jp

実験セットアップの例（BL3-EH2）

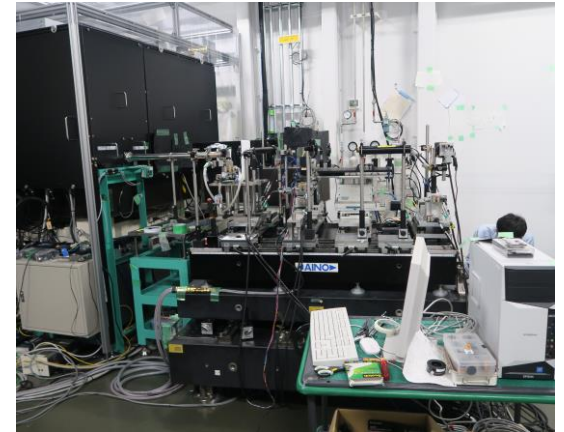
SPINNET（分光装置）



多軸回折計



特殊セットアップ
（ユーザーオリジナル）



試験利用

今後の科学的価値の高い実験の実施を目指して、予めSACLAを試験的に利用できる制度。実験装置・条件を限定して2021Aより運用。

実施可能実験：

ハイパワーナノ秒レーザー実験装置 (BL3-EH5) 2021A：6件
シリアルフェムト秒結晶構造解析 (BL2-EH3) 2021A：3件

シフト数：1シフト以内

募集時期：一般課題と同じ

成果公開：利用研究課題とは異なり、査読付論文等の公開義務はありません。

一般課題との関係：

一般課題との併願可能。

希望すれば、一般課題に不採択になった場合に試験利用として採択可能。

産業利用推進プログラム

SACLAの利用に習熟した大学・研究機関の協力のもと、企業の皆様に実際にSACLAを使って頂きながら、産業利用振興に必要な調査研究を実施していただきます。企業と大学・研究機関との連携チームに加えて、企業単独の応募も受け付けます。

2020年度採択課題

1. 「フェムト秒X線回折法による鉄鋼材料の転位挙動・炭素拡散の動的観測」
日本製鉄株式会社・大阪大学
2. 「次世代エネルギー材料の無損傷ナノキャラクタリゼーション」
北海道大学・トヨタ自動車株式会社・立命館大学
3. 「高機能タイヤ用ゴム材料開発へのXFEL検討2」
住友ゴム工業株式会社・高エネルギー加速器研究機構・京都大学
4. 「TBAB 過冷却水溶液の構造評価」
パナソニック株式会社

現在募集中 提出締切：2021年3月22日(月)17:00

ご応募お待ちしております。

http://xfel.riken.jp/topics/sacla_sangyo_2021.html

その他の制度

フィージビリティチェックビームタイム (FCBT)

一般課題に採択された課題において、ビームタイムを有効に活用するために、測定サンプルの事前確認を行う時間。FCBTにおける実験は、当面のあいだ、DAPHNISを利用した実験に限定する。一般課題申請時に希望する旨を記載。

基盤開発プログラム

SACLAの特色をさらに伸ばしユニークな成果の創出につなげるため、SACLAにおける基盤開発テーマの提案を募集し、施設として重点的に推進すべきターゲットを選定した上で、開発を実施する。毎年2月頃締切。

大学院生研究支援プログラム

意欲ある大学院生を研修生としてSACLAに一定期間受入れ、SACLAの先端利用を切り拓く研究実習活動を行いながら、研究者としての基礎力を養成する。毎年2月頃締切。

皆様の実験提案をお待ちしております。

お気軽にご相談ください。

sacla-bl.jasri@spring8.or.jp