

## 第 17 回 APS-ESRF-SPring-8-DESY 三極ワークショップ報告

公益財団法人高輝度光科学研究センター

光源基盤部門

後藤 俊治

国立研究開発法人理化学研究所 放射光科学研究センター

XFEL 研究開発部門

井上 伊知郎、玉作 賢治

公益財団法人高輝度光科学研究センター

XFEL 利用研究推進室

矢橋 牧名

## 1. はじめに

ESRF-APS-SPring-8 三極ワークショップは、1994 年に ESRF にて第一回が開催されて以来、ほぼ 1 年半の間隔で行われ今回で 17 回目となる。2010 年からは DESY も加わり表題でもわかるように 4 施設にて行われている。今回は APS がホストとなり 2018 年 5 月 3 日、4 日の 2 日間の日程で開催された。高エネルギーの大型放射光施設としての各施設の現状を報告するとともに、共通して抱える課題、今後の方向性などを議論する場となっている。今回の三極ミーティングは、4 施設の現状と、それぞれのアップグレードの実施/検討状況を俯瞰するのに大変に良い機会となった。図 1 に参加者の集合写真を示す。また、プログラムを末尾に示す。

## 2. 施設の現状とアップグレード

各施設とも年間 5,000 時間程度で、概ね安定に運転が行われている。なかでも、SPring-8 はトップアップの電流の安定さ 0.03%、平均故障間隔約 200 時間であり、いずれも最も高いレベルで運転されている。サイエンスのトピックスとして ESRF、PETRA III、APS から共鳴非弾性散乱 (RIXS) の結果が紹介された。ESRF では、アップグレードフェーズ I で整備されたビームライン ID32 (Nano-magnetism & Spectroscopy) における  $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$  のマグノンの観察結果が取り上げられた。また、PETRA III では、ビームライン P01 (Intermediate X-ray energy RIXS) におけるエネルギー 2.5~3.5 keV のテングー X 線領域の RIXS の例として Ru 系物質の結果が示された。ESRF、PETRA III、SPring-8 から報告されたようにクライオ電子顕微

鏡が整備され、タンパク質の構造解析において放射光との相補利用が始まっている。

4 施設ともにフェーズは異なるものの、6 GeV でエミッタンス 100 pm.rad か、それ以下へのアップグレード計画を有している。各施設 1 時間の持ち時間で、マシン、ビームライン、サイエンスなどについての報告が行われた。

ESRF-EBS: ESRF は参加加盟 11 カ国で建設を開始してから今年で 30 周年を迎えた。アップグレードに関しても ESRF が一歩先行している。すでにアップグレードのフェーズ I (2009~2015 年) を完了し、戦略的にビームラインの再編も行われている。現在、アップグレードのフェーズ II (2015~2022 年) が進行している。ハイブリッド 7 bend achromat (BA) のラティスにより、エミッタンスはおよそ 100 pm.rad を目指している。すでに加速器コンポーネントの調達などが具体的に進行している。調達率は 80%程度となっている。シャットダウンを今年の 12 月に控え、準備は着々と進んでいる。2019 年 11 月末に加速器のインストールが完了し、その後コミッショニングが開始される予定となっている。

PETRA III~IV: 現状の PETRA III では、当初の Max-von-Laue ホールに加え、拡充された Paul P. Ewald ホール、Ada Yonath ホールへの最終 12 本のビームラインの建設が進められている。現在 Paul P. Ewald ホールは 2 本、Ada Yonath ホールは 1 本のビームラインがすでに稼働中となっている。PETRA IV へのアップグレード計画では、ESRF-EBS のハイブリッド 7BA ラティスを踏襲し、周長 2 km の優位性を生かすことにより、少なくとも紙の上では、4 施

設中で最も小さいエミッタンス 20 pm.rad を目指している。2019 年 4 月に Conceptual design report、2020 年 12 月に Technical design report に設計が取りまとめられ、2024 年に建設を行い、2026 年に運転開始する計画となっている。

SPring-8-II: まずは後藤から 5BA、100 pm.rad のアップグレード計画の概要と R&D の状況を紹介した。矢橋からミラーを用いた安定な X 線光学系、プリズムとミラーを利用したピンクビームの利用などアップグレード光源において適用されるビームライン光学系について、また、玉作から 3 次元イメージングなどを中心にして期待されるサイエンスの展望を示した。

APS-U: ESRF-EBS、PETRA IV 同様のハイブリッド 7BA ラティスに加え longitudinal gradient bend と reverse bend を適用し、42 pm.rad を得る計画である。2022~2023 年にシャットダウンしてマシンを建設、2023 年から利用再開を目指している。偏向電磁石ビームラインも含め現ビームライン光軸を維持する境界条件での設計が行われている。各種電磁石、真空システム、ビームモニター、超伝導アンジュレータなど要素技術の R&D が進められている。各施設のアップグレード時期を列挙するスライドでは、なぜか SPring-8-II の開始が 2027 年となっており、PETRA IV や中国の HEPS に続き最後尾に配置されていた。

### 3. パラレルセッション

#### 3-1 Strategies for time-resolved studies at storage ring sources

時分割のパラレルセッションでは、まず、SR と XFEL とのすみ分け・相補利用が議論された。主な内容は次の通りである。①XFEL が専ら破壊実験を行うのに対し、SR では非破壊型の実験、特に「ポンプ・プローブ・プローブ・プローブ…」型、若しくは、自発的な揺らぎをみる「プローブ・プローブ・プローブ…」型の計測が適している、②プローブの時間間隔に関して、将来 MHz 繰り返しの超伝導 XFEL が登場した際にも、SR は原理的にはより細かいステップで刻むことができる、③高エネルギー領域 (例えば 30 keV 以上) は、専ら SR のみでしかアクセスできない。一方で、フェムト秒に至る究極の時間分解能を達成しようとする XFEL の独壇場である。SR でもピコ秒

領域のポンプ・プローブ計測は行われてはいるものの (例: PETRA III における銅錯体の計測)、SR 単独で閉じた研究というよりは、XFEL の予備実験という位置づけがなされている場合が多い。

非破壊型の実験の場合、高速カメラとの組み合わせが重要になる。APS では、フレームレート 50 kHz の Photron 製の検出器を使って、レーザーを使った金属 3D プリンタ (粉末床溶融結合法) の加工過程の観察が行われている。また、Dynamic Compression Sector ビームラインでは、イメージインテンシファイヤを備えたカメラ 4 台を使って、24 バンチモード (154 ns 間隔) の連続 4 バンチを撮像するシステムを構築し、スラッパ起爆式雷管に用いる高速フライヤの観察を行っている。島津製の 10 Mfps の超高速カメラもいくつかの施設で用いられ始めている。

バンチ純度 (メインバンチとその近傍のバンチの電子数の比) は、核共鳴実験等においてデータの品質を決める重要な要素であるが、蓄積リングの運転中に徐々に悪化していくという報告が複数の施設からなされた (例: PETRA III ではメインバンチの 5 桁下)。このような現象は SPring-8 ではみられていない。

さらに、将来の Multi bend achromat (MBA) における時分割計測の展望について議論が行われた。高輝度化による各種顕微法へのメリットは大きく、またピンクビームの活用も有望である。一方で、MBA 光源ではバンチモードの制約が厳しくなる。特に、Swap-out 方式を採用する APS-U では、技術的な制約からハイブリッドモードは不可となり、等間隔・均等チャージモードのみとなる。APS-U では、タイミングモード (48 バンチ、77 ns 間隔) と高輝度モード (324 バンチ) の 2 種類が検討されている。いずれも 3rd ハーモニックキャビティを用いて、バンチ長を 200 ps (FWHM) 程度まで伸ばす。タイミングモードでも、バンチ間の時間間隔は現行の 24 バンチモードの半分となり、時間領域のメスバウワー分光などに制約が出てくるという指摘がなされた。

全体の印象として、XFEL の認知・普及が進み、全体としてそれなりに合理的なすみ分けができつつあると感じた。しかしながら、例えば APS や ESRF は、XFEL 施設とは地理的に遠いこともあり、無理をしても XFEL 向けの実験を取り込もうとしている部分

もまだある。一方で、SACLAを隣接して持つSPRING-8は、2つの施設を一体として考えることで時分割研究のポートフォリオの最適化を図ることができる。また、高速検出器・高エネルギーX線を使った時分割計測は、産業を含む広範な対象に適用可能であり、SPRING-8でも今後重点的に推進すべきテーマであろう。

### 3-2 High energy ( $E > 30$ keV) beamlines and their science drivers

30 keV以上の高エネルギーX線利用についてのパラレルセッションでは、各施設における研究ハイライトや建設中のビームラインなどが紹介された。参加者の内訳は、APSの関係者が20人程度、ESRF、PETRA IIIからそれぞれ5人程度であった。SPRING-8からは理研の井上が参加した。以下、各発表の概要について述べる。

ESRFからはHarald Reichertが、“An overview on the high energy beamlines”と題して、Pair Distribution Function (PDF) 解析とCTとの複合利用や原人の骨の位相イメージングといったESRFでの高エネルギーX線の利用実験のハイライトを紹介した。ESRFでは60 keV以上を高エネルギーX線と呼んでおり、全体のビームラインのうち15%程度が高エネルギーX線用のビームラインである(30 keV以上が使用できるビームラインは全体の30%程度)。ESRF-EBSでの将来計画として、(i) Coherent X-ray dynamics and imaging application、(ii) Serial macromolecular crystallography、(iii) Hard x-ray diffraction microscopy、(iv) High throughput large field phase-contrast tomographyの4つのビームラインをパイロットビームラインと定めて優先的に開発する予定である。このうちの(ii)を除く3つが30 keV以上の高エネルギーX線を使用するビームラインである。これらのビームラインは、ESRF-EBSへとアップグレードする前から段階的に高度化を進め、光源がアップグレードされた際にスムーズに利用実験を開始できるようにする。施設が高エネルギーX線利用を明確に推進している印象を受けた。

続いて、PETRA IIIから、現在建設中の2つのビームライン: Swedish materials science beamline (P21)と大容量プレスを使用する高圧ビームライン (P61B)

の紹介があった。P21は、標準的なアンジュレータビームラインであり、スウェーデンが建設費用と運転費用を負担している。Si結晶(平板結晶1枚、二結晶分光器、double Laueなど様々なバリエーションがある)をモノクロメータとして用いて、40 keVから150 keVの範囲の単色X線を生成し、物質系材料の各種回折実験(PDF解析や単結晶構造解析、広角散乱、小角散乱)に使用する予定である。このビームラインは2018年の春から実験ハッチにX線を導き、装置のコミッショニングを開始する予定である。

P61Bは、電子ビームのエミッタンスを下げるために設置されているダンピングウィグラーを光源としたユニークな高圧ビームラインである。光子数は実験ハッチにおける、1 mm × 1 mmのアパーチャーの条件下で $10^{11} \sim 10^{12}$  ph/s/0.1%b.w.と、同様の高圧ビームラインであるSPRING-8のBL04B1と比較して約1桁高い光子数を実現できる予定である。フロントエンド部の建設は2018年夏に終了する見込みで、実験ハッチに光がやってくるのは2018年の12月ごろを予定している。ラジオグラフィとX線回折が主な計測手法であるが、光子数が大きいためにシリコンドリフト検出器を使ったエネルギー分散型の回折実験をする際にはX線強度を弱める必要があるだろうとの発表者からのコメントがあった。

APSからは、ESRFと同様に最近の研究ハイライトの紹介があった。APSでは、現在30 keV以上が使用できるビームラインは全体の30%程度であり、アップグレード後もこの比率が維持される見込みである。新しい試みとして、2019年からPDF解析のメールインサービスを始めるとのことであった。ただし、APS-Uへのアップグレード時に各ビームラインをどのように高度化するかのロードマップはまだ定まっていない印象を受けた。

SPRING-8からは、電子ビームの低エミッタンス化によってアンジュレータのon-axis放射のスペクトル幅が現在の第3世代放射光源と比較して劇的に狭くなることと、プリズムを使ってアンジュレータの特定次数を取り出す光学手法(X線ハーモニックセパレーター、Inoue *et al.*, *J. Synchrotron Rad.* **25** (2018) 346)についての紹介を行った。目新しい話題だったため概ね関心を持って捉えてもらったようであった。

高エネルギーX線の利用は6 GeVの電子ビームを用いる高エネルギー次世代放射光源での中心的なアクティビティになることが期待されている。どのようにビームラインを作っていく／高度化していくのかは、各施設で検討が始まったところである。それぞれの施設の方針を注視しつつ、SPRING-8も方向性を定めていくことが必要になるだろう。また、各発表で話題になっていたが、高エネルギーX線の集光光学系や高繰り返し検出器といった要素技術は発展途上であり、次世代光源の性能を活かすためにはさらなる進化が必要になる。さらにアンジュレータビームを単色化することなくピンクビームとして使用する場合には、ビームラインの各光学機器の熱負荷対策も課題になる。これらの要素技術の開発は、次世代光源の光源性能を十分に活かすために今後重点的に推進すべきテーマであろう。

### 3-3 User Trends and Demands

ESRF: European Molecular Biology Laboratory および Institut de Biologie Structurale (バイオロジー関係)、Institut de Recherche Technologique Nanoelec (ナノテク関係)などの周辺施設との連携によりユーザープラットフォーム、インハウス研究基盤、および地域シナジーが構築されている。これらを活用することにより ESRF の放射光ユーザーの試料準備、解析など多方面での利便性向上が図られている。

DESY: ナノラボと計算機インフラに関する2件の話題が提供された。1) ナノラボ: PETRA III、FLASH、XFELのユーザーおよびインハウススタッフがナノラボのオフライン装置 (SEM、FIB、XRD、XPS など) を利用することが可能で、大型施設の限られたビームタイムを有効に利用できるような支援環境が整えられている。2) 計算機インフラ: DESY 内に High performance computing infrastructure、データストレージなどの共通インフラが整備され、ユーザーにも利用環境が提供されている。なお、データの保存期間は ESRF、DESY では10年間を目安にしている。

APS: 電気化学、高圧試料、光学素子計測・製作などの各種ラボ、検出器プール、計算機インフラなど APS/ANL におけるユーザーおよびインハウススタッフの利用支援環境が紹介された。

SPRING-8: 京を含む計算機インフラ、タンパク試料準備環境、クライオ電子顕微鏡などの SPRING-8 におけるユーザー利用環境について紹介された。また、将来の放射光ユーザー像を想定し、学術利用～産業利用、初心者～上級者の2軸の分類から、ビームラインを汎用～エキスパート用の軸で3段階に再編するアイデアが示された。

計算機、データストレージ、IT インフラに関しては、性能・仕様の差はあれ、各施設とも相当のものが整備されており、さらなる増強も計画されている。セッションの最後の議論では、特に今後の計測技術の発展において急速にデータ容量が増加すると予想される (すでに増加している) ユーザーのデータの取り扱いについて議論が集中した。データは誰のものか、何年間どのようなフォーマットのデータを保存すべきか、保存の責任は誰にあるのかなど、このセッション内だけでは当然明確な結論は出ないままではあるが、今後も運用を進めながら議論をすべき課題である。

## 4. Coordinating Strategies

Edgar Wecker (DESY) より、欧州の16の放射光/FEL施設のメンバー (放射光: 13施設、FEL: 6施設) から構成される League of European Accelerator-based Photon Sources (LEAPS) Program の概要が紹介された。現在、チェアは DESY の Helmut Dosch 所長が務めている。基礎・応用科学および産業利用における研究の質やインパクトを向上させ、欧州の科学技術や社会に対して利益をもたらすことを基本目標としている。このプログラムで光源、光学系、検出器開発などの放射光技術の開発戦略が議論されるとともに、若手人材育成に関しても取り組みが行われている。2035年までのロードマップの作成が進められている。

Stephen Streiffer (APS) からは、Basic Energy Sciences 関連施設の運営に関する DOE の基本戦略が紹介された。これまでの施設のアップグレードについて、多くの議論を経て優先順位を決定し、一つずつ予算化、実現させていく道筋が示された。2000年から2019年のアップグレード予算の推移を示すグラフでは、多少の年次のオーバーラップを持たせながら、Spallation Neutron Source、LCLS、NSLS-II、LCLS-

II、APS-U の順番で予算がつけられていることがわかる。APS-U もその路線に乗り、アップグレード計画が具体的に進み始めている。また、ALS、APS、NSLS-II、SSRL、LCLS の 5 つの光源施設の間で 5 極ミーティングが開催され、APS-U 建設・運転停止時の協力の仕方などが議論されている。

後藤からは、現在日本では新しい 3 GeV 放射光施設建設が最優先事項となっており、実現に向けて様々な検討が進められていることを報告した。また、次世代光源建設のための加速器技術開発の戦略として、入射器としての C バンドライナックの安定化/高度化開発と、蓄積リングへの低振幅ビーム入射技術開発の 2 件について紹介した。

## 5. おわりに

5月2日に行われたサテライトの Optics Workshop と、パラレルセッションのサマリーが報告され、議論が行われた。最後は、パラレルセッション User Trends and Demands のサマリーを受け、データポリシーなどの話で再び盛り上がった。現状で各施設の抱える最もホットな話題の一つということなのであろう。

今回は本来 SPring-8 の順番であるが、1 年半後がちょうど ESRF-EBS のマシンのインストールが完了する 2019 年 11 月末にあたることから、ESRF がホストとなることが決まった。



図 1 参加者の集合写真

## Agenda of 17th 3-Way Meeting (May 3-4, 2018)

### May 3, 2018

- 8:00 **Welcome and facility reports** (Chair: *Dennis Mills*)
  - Welcome address (*Dennis Mills*)
  - Status Report ESRF (*Francesco Sette*)

- Status Report PETRA III (*Edgar Weckert*)
- Status Report SPring-8 (*Tetsuya Ishikawa* → *Makina Yabashi*)
- Status Report APS (*Stephen Streiffer*)

- 9:30 **ESRF Talks** (Chair: *Francesco Sette*)
  - EBS Accelerator Project (*Pantaleo Raimondi*)
  - EBS Science/Beamlines (*Jean Susini*)
  - EBS Enabling Technologies (*Michael Krisch*)
- 11:00 **PETRA III Talks** (Chair: *Edgar Weckert*)
  - PETRA III Extension (*Wolfgang Drube*)
  - PETRA IV Science Scope/Science Case (*Christian Schroer*)
  - PETRA IV Status of the Conceptual Design (*Rainer Wanzenberg*)

- 12:00 **SPring-8 Talks** (Chair: *Dennis Mills*)
  - SPring-8-II Light Source (*Shunji Goto*)
  - SPring-8-II Beamlines (*Makina Yabashi*)
  - SPring-8-II Sciences (*Kenji Tamasaku*)

(Lunch)

- 14:00 **APS Talks** (Chair: *Stephen Streiffer*)
  - APS-U Project Update (*Bob Hettel*)
  - Beamlines for the APS-U Project (*Dean Haeffner*)

(Break)

- 15:15 **Parallel sessions 1: Strategies for time-resolved studies at storage ring sources** (Chair: *Kenji Tamasaku*)
  - An overview of X-ray time-resolved experiments at the ESRF (*Alexander Rack*)
  - Pump-Probe Experiments at PETRA III (*Oliver Seeck*)
  - Timing mode applications at PETRA III and PETRA IV (*Ralf Röehlsberger*)
  - Time resolved applications at SPring-8 campus (*Makina Yabashi*)
  - The APS Strategy for TR Programs pre- and post- APS-U (*Stefan Vogt*)

- 15:15 **Parallel sessions 2: High energy ( $E > 30$  keV) beamlines and their science drivers** (Chair: *Dean Haeffner*)
  - An overview on the high energy beamlines (*Harald Reichert*)
  - The Swedish high-energy materials science beamlines (*Ulrich Lienert*)
  - The large volume press beamline for ED diffraction and radiography at extreme conditions (*Robert Farla*)

High energy pink beam line (*Ichiro Inoue*)  
Supply and Demand for HE Beamlines at the APS (*Jon Almer*)

井上 伊知郎 INOUE Ichiro  
(国) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
XFEL 研究開発部門  
〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0802  
e-mail : inoue@spring8.or.jp

15:15 **Parallel sessions 3: User Trends and Demands** (Chair: *George Strajer*)

Infrastructure integration (inter-institute) (*Jean Susini*)  
DESY NanoLab (*Vedran Vonk*)  
Big data and scientific computing strategy at DESY (*Steve Aplin*)  
APS and ANL User Support Facilities (*Patricia Fernandez*)

五作 賢治 TAMASAKU Kenji  
(国) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
XFEL 研究開発部門  
〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-2806  
e-mail : tamasaku@spring8.or.jp

**May 4, 2018**

8:00 **Parallel sessions 1: Strategies for time-resolved studies at storage ring sources**  
Discussion

矢橋 牧名 YABASHI Makina  
(公財) 高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-2869  
e-mail : yabashi@spring8.or.jp

8:00 **Parallel sessions 2: High energy (E > 30 keV) beamlines and their science drivers**  
Discussion

8:00 **Parallel sessions 3: User Trends and Demands**  
User trends and facility responses (*Tetsuya Ishikawa*)  
Discussion

10:30 **Coordinating Strategies** (Chair: *Dennis Mills*)  
The LEAPS Program (*Edgar Weckert*)  
DOE Coordinating Strategies (*Stephen Streiffer*)  
Japanese Coordinating Strategies (*Shunji Goto*)

(Lunch)

13:00 **Summaries** (Chair: *Jean Susini*)  
Summary - Optics Workshop (*Lahsen Assoufid*)  
Summary - Parallel Session Time Resolved (*Stefan Vogt*)  
Summary - Parallel Session High Energy (*Jon Almer*)  
Summary - Parallel Session User Trends (*Patricia Fernandez*)  
Summary Discussions

後藤 俊治 GOTO Shunji  
(公財) 高輝度光科学研究センター 光源基盤部門  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0831  
e-mail : sgoto@spring8.or.jp