

原子及び分子レベルの超高速科学

フランシスカ・ナポラ、マーティン・シュワルツバウアー

SwissFELは、構造や動作中の超高速プロセスに関する、これまでには得られなかったナノスケールの洞察をもたらす。

SwissFEL(スイスのパウル・シェラー研究所[Paul Scherrer Institute]所蔵)などのX線自由電子レーザーは、全く新しい次元を研究者らに切り拓いている。これらのレーザーは、極短で高強度のX線パルスが発生することにより、これまではあまりにも高速で実験できなかったプロセスをとらえることができる。その結果として、数多くの生物学的及び化学的プロセスが初めて記録されている。

電子ビームのモニタリングは、SwissFELの適切な動作に欠かせない処理である。この処理に選択されているカメラは、科学用CMOS(sCMOS)カメラである。例えば、pco.edge 5.5 CLHSは、その低ノイズセンサによって、鮮明な画像を出力するだけでなく、必要な長距離にわたる画像伝送を、Camera Link HS (CLHS)技術を使用して、高いデータ転送速度で行う⁽¹⁾。

光源としての電子加速器

SwissFELは、電子源を備えたインジェクタ、線形加速器、アンジュレータ列、実験装置という4つの要素で構成される(図1)⁽²⁾。

パウル・シェラー研究所は、費用対効果の高い設定を実現するために、電子源を小型化して安定化させている。パルスUVレーザーが電子ビームをセシウムテルライドフォトカソードから放射し、レーザーパルスのタイミングは、それが配置されている光共振器の無線周波数に同期される。この特殊形状の

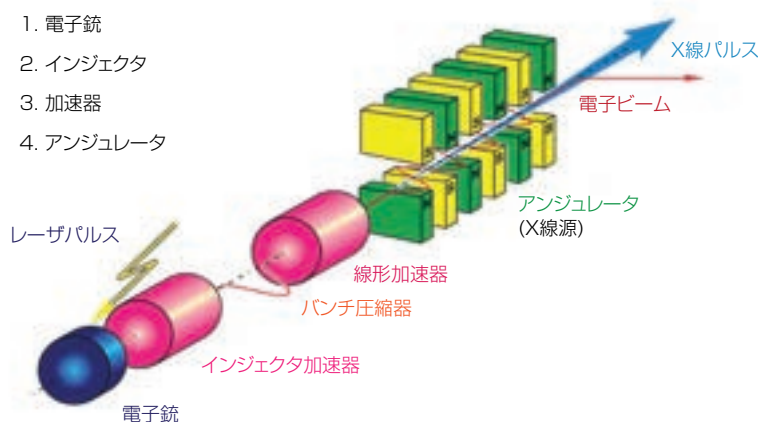


図1 複数の構成要素からなる自由電子レーザーの基本構造

チャンバには電界が含まれており、その定常波によって放射電子は、光速とほぼ同じ速度にまで加速される。この加速によって磁界が生成され、それが電子の分散傾向を抑制する。

初期加速を経て、電子バンチ(電子ビームの固まり)は、そのエネルギーをさらに高めるための線形加速器(LINAC)へと進む。LINACは、104の高加速器からなる400mの直線構造である。LINACを通過する中で、既に短い電子バンチは、バンチ圧縮器によって縦方向にさらに圧縮される。この過程で、電子は4つの強磁石からなるシケインを通過することにより、最初の電子は長い経路、最後の電子は短い経路へと振り分けられて、最終的に各電子間の距離はフェムト秒レベルになる⁽³⁾。

最終的に6ギガ電子ボルト(GeV)のエネルギーを持つ電子は、十分に高速となって磁気スイッチングシステムによって分割され、硬X線アンジュレー

タライン(ARAMIS)と軟X線アンジュレータライン(ATHOS)という2つの異なるラインに同時に供給される。アンジュレータは、磁性が交互になるように磁石を並べた特殊なアレイで、電子を波のような経路に送り出す。電子のこの動きによって、研究に必要な高強度でコヒーレントなX線パルスが生成される。X線ビームが生成された後に不要な電子は取り除かれ、X線ビームは、個々の実験ステーションに供給される⁽⁴⁾。

光の波長は、観測する構造のサイズに合わせる必要がある。可視光の波長はあまりにも長すぎるが、X線光は原子構造に最適である。X線パルスが達成可能な時間分解能は非常に短く(フェムト秒レベル)、その強度は非常に高いため、原子や分子の動きの観測に使用することが可能で、これまでは高速すぎてとらえることのできなかったプロセスの研究を可能にする。

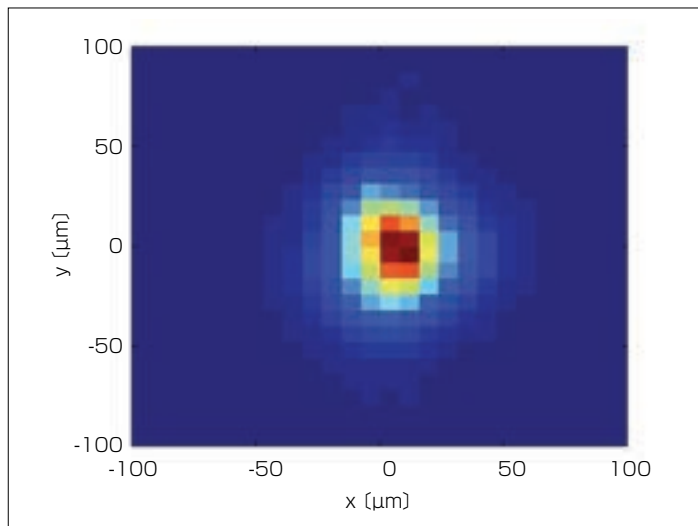


図2 バunch電荷のビームサイズ測定
の例(提供: Swiss
FEL)

を記録することができるためである。

同研究所の実験によって得られた知識は、量子スピン液体、トポロジカル絶縁体、新しい超伝導体など、新たな種類の物質につながる可能性がある。SwissFELなどの装置から得られる結果は、そうした魅力的な物質の大きな可能性の開拓に、なくてはならないものである⁽⁵⁾。

高速データレートによる 長距離伝送

自由電子レーザー(FEL)の動作には、電子のエネルギー分布の厳格な制御が必要である。アンジュレータに分散されるエネルギーが高すぎると、FELプロセスは妨げられる。バunch長が短すぎると、バunch圧縮シケイン内において、スペクトルの一部がコヒーレントなシンクロトロン放射に支配される場合は、ビームが遮断される可能性がある。特に最近では、最高輝度のX線とフェムト秒未満のパルス長を目指す開発が進められていることから、この装置に対する要件はますます厳しくなっ

新しい洞察を 科学、医療、技術分野に

パウル・シェラー研究所では、さまざまな科学分野の実験が行われている。例えば、ある実験ステーションでは、溶液や不均一系触媒の中の分子動力学や反応の研究が可能である。研究者らは徐々に、物質の最小単位の構成要素が、化学反応においてどのようにして互いから分離し、結合して新しい物質を形成するのかを、たどれるようになってきている。他の方法では、これらのプロセスはあまりにも高速で観測できない。しかし、SwissFELの極短パルスは、短い露光時間で個々の中間段階を撮像することを可能にする。これらの反応を正確に理解することは、化学業界におけるプロセスを最適化して、その費用対効果と資源効率をさらに高めるために役立つ可能性がある。

インテリジェントなドラッグデザイン(新薬設計)には、タンパク質などの関連する生化学系の詳細な知識が必要で、原子分解能での3次元分子構造という形でそれが得られれば望ましい。一般的に数万もの原子で構成されるそれらの分子が正しく機能するには、原子の正しい配置が不可欠である。最近

までX線結晶学では、試料の原子及び分子構造を解析する際の放射線曝露を制限するために、大きな井戸回折結晶を使用することが必要だった。しかし、それらの結晶は生成が難しく、不可能である場合も多い。SwissFELのフェムト秒のX線パルスの場合、必要なのは非常に小さな結晶のみである。その超高速撮像により、放射線損傷の影響が克服されている。放射線損傷によって試料が破壊される前に、回折データ

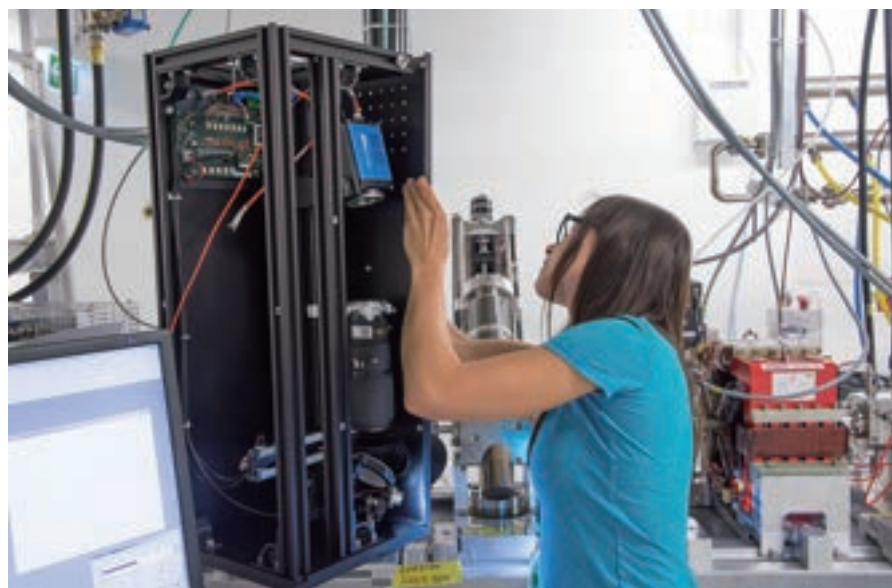


図3 pco.edge 5.5 CLHS を搭載するビームプロファイル撮像装置の例⁽⁷⁾(写真提供: SwissFEL)



図4 SwissFELには、年中無休で稼働する横方向ビームプロファイル撮像装置が、定期的なモニタリング用に搭載されている⁽⁷⁾(写真提供:SwissFEL)

ている⁽⁶⁾。

バンチ圧縮器において、分散された電子ビームの経路内のシンチレーションスクリーンによって、エネルギー分布が測定される。sCMOSカメラ(pco.edge 5.5 CLHS)は、電子ビームパルスの分光プロファイルを高い感度(100fps)で記録し、300mmのレンズとの組み合わせによって、0.04mmの投影ピクセルサイズでビームプロファイルを解像することができる(図2)。この検出方法は完全に非破壊的であるため、ビームエネルギーとエネルギー伝播の定期的なモニタリングや、ビーム圧縮構成の最適化に使用される。このカメラによって、インジェクタとアンジュレータのビームラインにおけるエネルギー分布の正確な測定も可能である(図3、図4)⁽⁷⁾。

オートメーション推進協会(Association for Advancing Automation : A3)によって管理されているCLHSインタフェースには、顕著なメリットがある。これが策定される前は、システム開発者は、ケーブル長と伝送速度の間の妥協を強いられていた。CLHSはこのトレードオフを取り払い、そのポイントツーポイントインタフェースは、最大5kmの距離にわたる1.2GB/sの伝送を問題なく行うことができる。光リンクと前方誤り訂正(Forward Error Correction:FEC)により、非常に信頼性の高い伝送が実現される。FECは、

11ビットのエラーバーストをオンザフライで訂正して、データの損失という最悪の事態を防ぐことができる。この信頼性の高い伝送は、電界によっても損なわれることはない。

光ファイバリンク(Fiber Optic Link:FOL)は、電磁干渉(EMI)に対する耐性が高い。逆にファイバは、他のシステムに干渉する恐れのある電磁波を放射しない⁽⁸⁾。また、カメラとPCの間の長い距離を、技術的障害なく実現することができる。CLHSのXプロトコルは、すべてのトリガコマンド遅延を補償し、ケーブルに追加されるトリガジッタは、非常に低く抑えられるか、リンクの受信パスの実装方法によってはゼロになる。ファイバケーブルは、長い距離と高いデータスルー

プットを提供する以外に、価格面でもメリットがあり、そのハードウェアは標準のネットワークコンポーネントに基づいている。最後にCLHSは、欧州マシンビジョン協会(European Machine Vision Association:EMVA)が定めるGenICam仕様に完全に準拠する。そのため、CLHS技術は将来的に、インタフェースとしても最適な選択肢になると、専門家らは確信している。

最先端科学の発展を 完璧にサポート

SwissFELの研究者らは、まだ限界には到達しておらず、その設計はさらなる改善が可能である。レーザと加速器の性質を利用した電子バンチの制御は将来的に、単一または一連のフェムト秒未満のFELパルスや、マルチカラーのFELパルスの発生、レーザベースのシーディングによる完全にコヒーレントなX線パルスの発生など、さらなるFELモードを可能にするだろう。それによって、最先端研究が今後も次々と可能になる見込みで、SwissFELを利用する次の複数の実験が、既に進行中である⁽⁹⁾。

参考文献

- (1) See www.automate.org/a3-content/vision-standards-camera-link-hs.
- (2) See www.psi.ch/en/swissfel/how-it-works.
- (3) See www.mdpi.com/2076-3417/7/7/720.
- (4) See <https://accelconf.web.cern.ch/ibic2013/papers/tupf08.pdf5>.
- (5) See www.psi.ch/sites/default/files/import/swissfel/SCSwissFELScienceCaseEN/SwissFEL_Science_Case_small.pdf.
- (6) R. Ischebeck, E. Prat, V. Thominet, and C. O. Loch, Phys. Rev. ST Accel. Beams, 18, 082802 (Aug. 27, 2015); <http://dx.doi.org/10.1103/physrevstab.18.082802>.
- (7) T. Schietinger et al., Phys. Rev. Accel. Beams, 19, 100702 (Oct. 26, 2016); <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevAccelBeams.19.100702>.
- (8) See <https://accelconf.web.cern.ch/FEL2014/papers/thp098.pdf>.
- (9) See www.psi.ch/en/lno/scientific-highlights/overview-of-swissfel-dual-photocathodelaser-capabilities-and.

著者紹介

フランチスカ・ナポラ(Franziska Naporra)は、独エクセリタスPCO社(Excelitas PCO)のアプリケーションスペシャリスト兼製品マネージャー、マーティン・シュワルツバウアー(Martin Schwarzbauer)は、同社カメラシステム担当マネージャー。e-mails: franziska.naporra@excelitas.com, martin.schwarzbauer@excelitas.com URL: www.pco.de