

平成 17 年度における大規模新規研究開発の事前評価

第 2 回評価検討会資料

X 線自由電子レーザーの開発・共用

平成 17 年 10 月 12 日

文部科学省研究振興局

基礎基盤研究課

目 次

1. X線自由電子レーザー（XFEL）の研究開発の意義について		1
	加速器科学、放射光科学の分野全体の中で、このプロジェクトをどのように位置付けて推進するのか、既存の放射光施設のあり方などを含めた説明、資料を示されたい。	1
	第1回検討会資料2-2にも示されている通り、XFELが先端科学技術に大きなインパクトを与え、多くの研究アウトプットを生み出すにしても、約400億円の大きな資金を使う以上は、それが社会にどのような変革をもたらすのか、期待されるアウトカムは何なのか（何を指すのか）を、総花的ではなく、わかりやすく示すべきである。例えば、医療や産業の現場に対してどのように貢献できるのかをより具体的に示されたい。また、国民にどのようなメリットがあるかについて、より明確で国民にも分かりやすい形で示されたい。	3
	開発（建設）に関して企業が参加するような部分があるのかについて示されたい。	5
	本プロジェクトの開発推進にあたって、特許化可能なものはあるか。	6

2. XFEL 施設の開発要素に関わる問題について		7
	開発において他国の先行特許が障害となることはないか。	7
	本計画は、既に実績のある技術を用いて諸外国と同等以上の性能を実現しようというもので、各要素技術の開発が進展しているとのことであるが、それらの技術を統合し、スケールアップする上で新たに生じる課題等が考えられるか。例えば、非常にギャップが狭く長尺のアンジュレータの中をビームを長時間安定に通す技術等、本研究開発において問題とならないか。また、このような開発において顕在化する可能性のある諸問題について説明するとともに、2010年に確かに発振できるというロードマップを示されたい。	8
	資料1. ロードマップ（SCSS 工程表）	10
	単分子の構造解析のために、どのくらいの光が必要かという点について、アセスメントとして示されていない。SASEによる光が単分子を対象として使用可能かについて追加資料の提示と説明を願いたい。その結果、SASEでは無理でシーディングが必要だということであれば、むしろシーディングを早期に進めるべきではないか。	11
	移動装置による実験ハッチの入れ替えを予定しているとの説明がなされたが、ファインチューニングを要する装置を実験のたびに移動させるのは非現実的ではないか。照射用ハッチで実験中も前段の準備用ハッチで作業できるような措置を想定しているのか。また、実験ハッチはいくつ予定しているのか。理想的には、SLACやDESYで計画されているようにアンジュレータの後ろでXFELビームを複数の扇状に並んだ実験ハッチに送り込むことで、タイムシェアリングができる方が、利用研究にとっては好ましいのではないか。以上の点を踏まえ、実験ハッチの有効利用について詳細に示されたい。	12
	第1回検討会 資料2-2の24ページに2次元X線検出器の開発について記述されているが、具体的にどのような検出器の開発を予定しているのか示されたい。	13

	<p>単分子構造解析におけるタンパク質の構造均一性に関して、カルシウムチャンネルを例にあげ、カルシウムの有無など、いくつかの状態がある場合、その一つの状態に固定したものについて単分子構造解析を行うので、コンフォメーションが揃っているとの説明であったが、例えばカルシウム無しの「状態」でタンパク質を調製したとしても、イオン化して射出した単分子が皆同じ立体構造を持っている保障は無いと思われる。結晶を精製する際は、「結晶場」に並べることで同じコンフォメーションを持ったタンパク質をセレクトしており、溶液中ではやはりフレキシブルな部分はフレキシブルであると考えられるので、百万個の単分子の散乱像を集めて構造を解いた場合に、フレキシブルな部分の構造は見えないことになるのではないかと。</p>	15
	<p>第1回検討会 資料2-2の6ページ、「XFELで加速した電子ビームをSPring-8に入射することで、SPring-8の一層の性能向上を実現」とあるが、ストレージリングであるSPring-8のビームクオリティは、放射励起と放射減衰のバランスにより決まるエミッタンスに左右され、入射ビームのクオリティの記憶をとどめないため、特に性能向上が期待できないのではないかと。何か特別な措置を検討されているのか。</p>	17

3. プロトタイプ機の利用について		18
	<p>SPring-8では、数年の遅れによって、かなりの成果を諸外国に先取りされたと聞いている。そのため、プロトタイプ機で既に全て問題が出尽くしているのであれば、これを前倒しして本当に世界初の成果を出すという計画にならないのか。</p>	18
	<p>プロトタイプ機によるシーディング研究の重要性に鑑み、プロトタイプ機の今後の運用に関する資料・説明が必要である。来年度以降の予算に、プロトタイプ機に関わる研究が含まれているのか。プロトタイプ機の利用と、XFEL本体の開発とが仕分けられているのか。プロトタイプ機の研究開発が継続して行われ、それがXFEL本体の開発にフィードバックされる仕組みがあるのかについて、明確な回答を求めたい。</p>	20
	<p>プロトタイプ機で達成されたか、或いは達成されようとしている「加速器科学への貢献」の内容（日本オリジナルのCバンドライナックの実証等）について示されたい。</p>	21
	<p>要素技術が全てプロトタイプ機で実証されるとすれば、今後高度化が必要な項目とその数値目標、及びそれを達成するための具体的方策を示されたい。</p>	22

4. 利用研究の推進・運営について		23
	<p>第1回評価検討会の説明では、利用研究（science cases）に関して、現状では実現が困難であり将来的に可能性のあるものを含めて漠然とした説明がなされた。開発後に直ちに実現可能な、目玉となる利用研究プロジェクトを絞り込んで検討すべきではないかと。</p>	23
	<p>公募テーマ、予算規模、理研との共同研究の必要性の有無など、どのように利用研究プログラムを展開するのか具体的に示されたい。</p>	24
	<p>学術研究を目的とする研究者と民間利用者の差別化を行うのか。海外からの利用要求にどのように対処するのか。</p>	25

5. XFEL 施設の運営・推進体制について		26
	開発を進めるにあたって、多くの課題を内包しており、進捗状況に対するクリティカルなアセスメントの実施が必要である。文部科学省あるいは理研においても実施されるであろうが、年度ごとにでも外部からのクリティカルな評価・指導を行うシステムが必要ではないか。	26
	推進体制・組織に関してより詳細な説明が必要である。開発（建設）を監督する組織、進捗状況の評価・指導する組織、利用研究を推進・監督する組織など、プロジェクト内（あるいは外部）の組織構成と、その規模や人員構成について示されたい。	27
	<u>資料 2.</u> 推進体制・組織	28
	マンパワーに関して、建設で 50 人、運営で 30 人という説明がなされたが、それで十分であるかを示すために、具体的な陣容についての資料、説明が必要である。どのようなレベルの研究者あるいはテクニシャンが参加するのか等の内訳を含めて説明願いたい。	29
	<u>資料 3-1.</u> XFEL 建設体制	30
	<u>資料 3-2.</u> XFEL 運転体制	31
	第 1 回評価検討会の説明では、SPring-8（非常に多くのユーザーが様々なニーズをこなす）と同様の利用形態に受け止められた。実際は利用研究技術や対象など大きく異なると考えられ、多数のユーザーを抱える SPring-8 とはまた違う運営方針が必要ではないか。	32
	共通部分と個別の部分について、SPring-8 との運用面におけるすみ分けを明確に示されたい。	33
	理研サイドからどの程度の人的、予算的な投入を行う予定なのかについて、特に理研からの自助努力による参加、あるいは利用推進協議会の年間 4.5 億円のプロジェクトでの利用実験にどのくらいのグループが参加（effort 率も含めて）するのかについて示されたい。	34
	産業（民間）利用も視野に入れた際の、利用・課金制度について、詳細な説明を願いたい。	35

7. その他		36
	第 1 回検討会 資料 2-2 に国際レビュー委員会の評価結果の抜粋が示されているが、英文の本文全文を閲覧することは可能か。	36
	<u>資料 4.</u> 国際レビュー委員会評価結果（Report of the First International Review Committee for the SPring-8 Compact SASE Source Project）	37

1. X線自由電子レーザー（XFEL）の研究開発の意義について

加速器科学、放射光科学の分野全体の中で、このプロジェクトをどのように位置付けて推進するのか、既存の放射光施設のあり方などを含めた説明、資料を示されたい。

回答：放射光が持つ二つの役割に鑑み、最先端ツールとしての XFEL の開発・整備を早期に着手するとともに、既存放射光施設については、各々得意とする波長領域に応じた光源の高度化に加え、汎用的ツールとしての利便性の向上や支援体制の強化等を進めていく。

わが国は、1976年に世界最初の放射光専用施設を整備し、以来、PF や UVSOR をはじめ、多数の放射光施設を建設し利用することで、常に世界の放射光科学をリードしてきた。1997年には、現在も X 線領域において世界最高輝度を誇る大型放射光施設 SPring-8 を建設。全国の研究者の共用に供することにより、幅広い分野において世界的に優れた多数の研究成果を輩出し、放射光先進国の一つとして確固たる地位を築いてきたところである。

このような歴史を経て、放射光は、物理学、化学、生物学、医学、工学などの広範な分野を対象として、原子・電子レベルでの構造・物性情報を提供する計測ツールとして広く認識されるに至り、現在、その役割は大きく次の二つに分けられると考えられている：

それまで全く見るできなかった構造・現象が見えるようにするという最先端ツールとしての役割、

新しい物質や材料など未知の対象の素性を調べる汎用的ツールとしての役割。

XFEL は、X 線領域における非常に強力かつ完全コヒーレントな光を、現時点において実現可能な唯一の装置であり、上記の最先端ツールと位置付けられるものである。従来の SPring-8 やレーザーでは見ることができない、より微細なレベルでより高速な動態・変化の観察を可能とし、新しい研究領域の開拓・研究分野の創出が期待される。それゆえ、早急に開発・整備を進めるとともに、広く情報を共有し、この最先端ツールをより効果的・効率的に活用するための手法開発を進め、整備が完了した直後から、多くの研究者の共用に供することが必要である。

一方、SPring-8 をはじめとする既存の放射光施設は、それぞれその建設

当初は上記 の役割を担っていたが、その後時を経て、 の汎用的ツールとしての役割に移行しつつある。その意味で、計測対象を拡げるための光源の高度化や利用者・利用分野の拡大のための支援体制の整備が重要となる。UVSOR や PF では、既に、挿入光源を設置するための直線部の増強や低エミッタンス化のための加速器の改修がなされ、それぞれが得意とする真空紫外線領域、軟 X 線領域における放射光の高輝度化が実現されている。また、SPring-8 は硬 X 線領域における世界最高性能の放射光源としての地位を確立していることから、現在は交付金により、支援要員の拡充や計測機器の自動化・汎用化を行うなど、新規利用や産業利用を促す施策を進めているが、並行して、低エミッタンス化、短バンチ化、短波長化を目指した高度化計画を進めている。

中長期的な放射光施設の運用のあり方、光源の高度化の方向性については、最先端ツールと汎用的ツールという二つの観点から、文部科学省科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 研究評価部会のもと、次世代放射光源計画評価作業部会を設置し検討を進めているところである。

第1回検討会資料2-2にも示されている通り、XFELが先端科学技術に大きなインパクトを与え、多くの研究アウトプットを生み出すにしても、約400億円の大きな資金を使う以上は、それが社会にどのような変革をもたらすのか、期待されるアウトカムは何なのか（何を目指すのか）を、総花的ではなく、わかりやすく示すべきである。例えば、医療や産業の現場に対してどのように貢献できるのかをより具体的に示されたい。また、国民にどのようなメリットがあるかについて、より明確で国民にも分かりやすい形で示されたい。

回答：XFELによる研究成果が医療や産業の現場に貢献する具体的な例として「セルマップ」や「水素自動車」があげられる。また、XFELを整備する際に確立する技術が産業の現場に貢献する例として「製造ラインの品質向上」があげられる。いずれの例においても年間100億円かそれ以上の経済波及効果が見込まれる。

XFELが持つ原子・分子レベルの空間分解能により、これまでは困難であった、細胞内におけるDNAやRNAの局在を高精度で明らかにすることが可能となり、大量の細胞についての発現情報を得ることが可能となる。更に、細胞集団における発現パターンの違いを解析することによって、成長過程のどの段階でどの細胞にどのようなDNAやRNAが発現し、また、それらが細胞のどの部分に局在して、どのように動き、何と相互作用するのかなどの解明が期待される。このようなXFELの利用によって、従来の組織レベルでの発現解析とは桁違いに精密な、細胞特異的なDNAおよびRNAの発現マップ（＝セルマップ）を構築することが可能となる。

このセルマップは、医療現場における遺伝子発現解析データと組み合わせることにより、疾病の診断や治療に役立てることが可能である。TOF-Massなどの質量分析装置は、細胞単位で遺伝子発現の解析が可能となっており、かつ安価・小型であるため、病院内に設置することが可能である。例えば、この質量分析装置を用いて、ガン患者のガン組織中の細胞の遺伝子発現解析データを取得し、これをセルマップと比較することで、そのガンが現在どの段階にあるのか、今後どのように転移していくのか、悪性度はどの程度か、また予後の診断などが正確、迅速、簡便に行うことが可能となる。

このようなXFELの利用は、従来の形態観察による医療診断から遺伝子レベルの医療診断へ、病理学の進展に大きく貢献するものと期待される。

更に、初発巣や転移巣における全細胞の性質診断は、細胞増殖やガン科学などの基礎科学に資するだけでなく、対ガン国民医療技術の飛躍的向上に貢献するものと言える。

XFEL が持つ化学反応領域の時間分解能により、これまでは構造しか解明できなかった気体吸着物質の、気体分子の選別や出し入れの機構を明らかにすることが可能となり、気体吸蔵素子としての応用が期待されている。

水素分子を選択して吸蔵する素子が開発されれば、例えば、水素自動車の燃料貯蔵としての利用が可能となる。

現在のわが国の自動車市場は年間約 5 兆円にものぼり、2020 年にそのうちの 10%が水素自動車への転換が図られると仮定すると、自動車本体における燃料貯蔵系統の開発の寄与度が 20%程度であることから、年間 1,000 億円程度の市場創出に貢献することとなる。

また、XFEL の開発により、1 μm 以下の高精度アライメント技術が確立されるが、この技術の応用により、産業機器の高精度位置決め、直進性の向上等による製造ラインの品質向上が可能となる。

日本総合研究所の試算によると、例えば、半導体産業の場合、製造工程において定盤が不要になることなどによるコスト削減、据付調整が簡素化されることによる人件費の削減、歩留まり向上によるコスト削減などのため、工場建設コストの 10%程度の削減が可能となり、1 つの工場あたり年間 5 ~ 10 億円の投資コストが削減されることになる。海外を含め日本企業の半導体工場の新増設は年間 5 ~ 10 工場あることから、これだけでも年 25 ~ 100 億円のコスト削減が見込まれることになる。

開発（建設）に関して企業が参加するような部分があるのかについて示されたい。

回答：本プロジェクトのようにハードウェアの比重が高い施設整備においては、必然的に企業の製造能力に頼らざるを得ない。実際、SPring-8 の建設・整備においても、建設、重工、重電、電線、計装、配管など幅広い業界から 60 社以上の企業が参加している。

XFEL の建設・整備においても、SPring-8 同様、ほとんど全てのハードウェアについて企業が製造することになる。具体的には、理研が設定した設計仕様を基に、理研と企業とで綿密な検討を重ねた後、企業が機器を製造し理研に納入するという手順を踏むことになる。限られた期限、予算で XFEL を実現するためには施設・設備の製造工程の効率化が不可欠であるが、この点でも企業が持つノウハウに負うところが大きい。

本プロジェクトの開発推進にあたって、特許化可能なものはあるか。

回答：これまでの要素技術開発の過程で、現在、出願準備中のものも含めて、18件の特許出願を進めている。

内訳は、電子銃関係 1 件、加速器関係 2 件、アンジュレータ関係 10 件、建屋コンクリートに関するもの 1 件となっている。

2. XFEL 施設の開発要素に関わる問題について

開発において他国の先行特許が障害となることはないか。

回答：基幹となる要素技術のほとんどが独自のものであり、海外先行特許に抵触するものは無いと理解している。

本計画は、既実績のある技術を用いて諸外国と同等以上の性能を実現しようというもので、各要素技術の開発が進展しているとのことであるが、それらの技術を統合し、スケールアップする上で新たに生じる課題等が考えられるか。例えば、非常にギャップが狭く長尺のアンジュレータの中をビームを長時間安定に通す技術等、本研究開発において問題とならないか。また、このような開発において顕在化する可能性のある諸問題について説明するとともに、2010年に確かに発振できるというロードマップを示されたい。

回答：個々の要素技術に関する開発課題は、全て解決済みか、もしくは解決の方向性が明確になっている。XFELは、線形加速器にしてもアンジュレータにしても、同一要素を多数並べる構造をとるため、スケールアップする上での課題は、より効率的な量産技術の確立と、より合理的な施工管理手法の探索にあると考えている。

施工管理手法に関しては、SPring-8建設時に、多数のビームライン装置を同時並行的に整備していくノウハウが確立されており、これをベースとして一層の合理化を図るべく検討を進めていくこととしている。

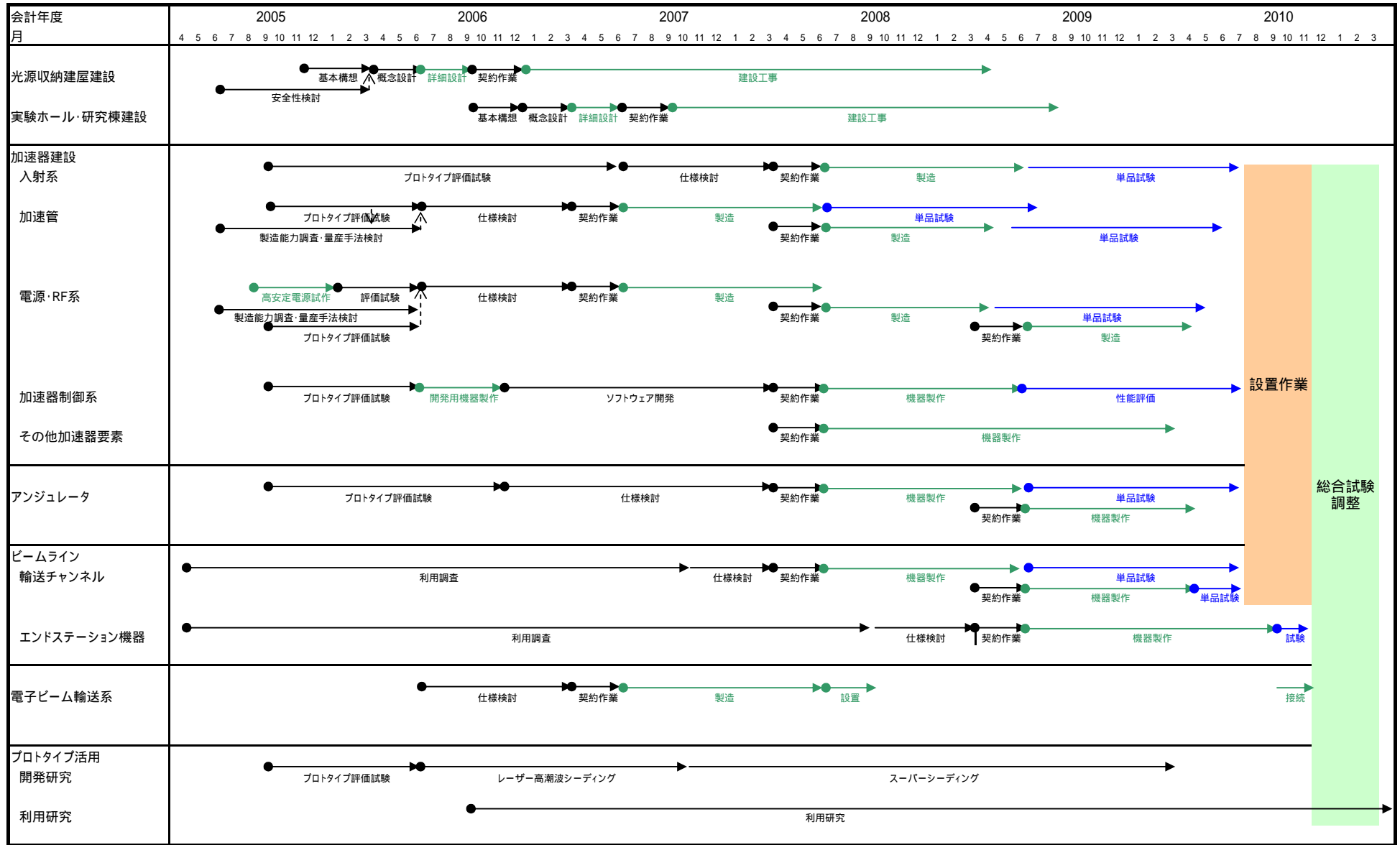
量産技術に関しては、同一要素を多数製作した際の要素間の性能のバラツキが問題となるが、量産技術の検討に併せて、同時に品質管理手法や性能試験・校正手法など、製造工程全体に至る検討を進めているところである。

例としてあげられたアンジュレータに関して言えば、本プロジェクトで採用した真空封止型アンジュレータは、真空槽の中で磁石列を上げ下げする機構を有しており、ビーム調整時に、一旦上下の磁石間隔を広げ、電子ビームに対して大きな開口を形成しておき、徐々に磁石列をビームの軸に近づけていくことで、ビームを長時間安定に通す設定とすることが可能となる。欧米が採用した従来型のアンジュレータは、磁石の間に非常に開口の小さな薄い真空チェンバーを置き、その中に電子ビームを通さなければならぬため、当初の据付けに非常に高い精度が要求され、実際に電子ビームを通すまでに長い時間を要している。

更に、欧米では、開口が小さいために、真空チェンバーによって電子ビームが散乱され、そこで発生する放射線によってアンジュレータの永久磁石が劣化するという問題も生じているが、真空封止型アンジュレータではこの問題が生じる可能性は非常に小さい。

現在、30m 級の長尺アンジュレータを通常運転で使用している施設は SPring-8 のみであり、この技術の延長線上で XFEL の超長尺アンジュレータの運用も可能となる。

XFEL の発振に向けたロードマップについては、資料 1 (次ページ) を参照されたい。



単分子の構造解析のために、どのくらいの光が必要かという点について、アセスメントとして示されていない。SASEによる光が単分子を対象として使用可能かについて追加資料の提示と説明を願いたい。その結果、SASEでは無理でシーディングが必要だということであれば、むしろシーディングを早期に進めるべきではないか。

回答：単分子での構造解析に必要なフォトン数の十分条件として、パルスあたりの光子密度 $2.55 \times 10^6 / \text{Å}^2$ という報告がある^{*1}。SASE方式で得られる光子密度は $4 \times 10^6 / \text{Å}^2$ であるから、単分子での構造解析に十分である。

この十分条件は、波長 0.25nm の X 線に対応する高散乱角データを実験的に得るための条件であるが、より分解能の低い散乱データのみから分子構造の高分解能解析を可能とするアルゴリズムの開発が進められており、このアルゴリズムが確立されれば、より小さな光子密度での単分子構造解析が可能となる。また、膜タンパク質や複合体など、より散乱断面積が大きな生体分子の構造解析を対象とする場合は、より一層この十分条件が緩和される可能性が高くなる。

一方、高強度フォトン単分子に照射すると、フォトンの電場によって分子を形成する電子や原子核が強い揺籃を受け、爆発が起こることから、分子が飛散するより前にデータを取得するため、フォトン数を維持したままパルス長を短くする必要があるとの議論がなされている。パルス長の圧縮はシーディング技術により可能となるが、クーロン爆発の議論はあくまで高分解能データまで実験的に得る場合の議論であり、上記アルゴリズムの開発によってデータ取得に必要なフォトン数が低減されることから、クーロン爆発に至る前でのデータ取得が可能となる。

シーディング技術に関しては、予備的研究をプロトタイプ機を用いて進めることとしており、実機完成後 1~2 年の間に導入する計画である。

*1. J.Miao et al. (2002) PNAS 98. 6641-6645

移動装置による実験ハッチの入れ替えを予定しているとの説明がなされたが、ファインチューニングを要する装置を実験のたびに移動させるのは非現実的ではないか。照射用ハッチで実験中も前段の準備用ハッチで作業できるような措置を想定しているのか。また、実験ハッチはいくつ予定しているのか。理想的には、SLAC や DESY で計画されているようにアンジュレータの後ろで XFEL ビームを複数の扇状に並んだ実験ハッチに送り込むことで、タイムシェアリングができる方が、利用研究にとっては好ましいのではないか。以上の点を踏まえ、実験ハッチの有効利用について詳細に示されたい。

回答：第 1 回検討会 資料 2-2 で示したビームライン配置は、最終的な姿ではなく、最も初期の形態であり、供用開始後の利用研究の拡大とともに同時利用可能なビームライン数や実験ハッチを増設する計画となっている。その際、実験ハッチを縦に並べるか扇状に並べるかは、行われる実験の種類、頻度に応じて柔軟に組み合わせて配置することになる。今後提案される利用研究課題の内容や利用開発の進捗状況を踏まえ、利用推進協議会において整備方針の検討・提言を行い、その方針に基づいて整備を進めることとなる。

また、2 本のビームラインのみの運用となる初期段階においても、これまでの SPring-8 における技術開発により、装置移動時の位置再現性数 μm が現実のものとなっている。更に、1 つの測定装置を複数のグループが順次利用するようスケジュールを調整し、装置の入れ替え頻度を極力少なくすることで、より効率的に利用研究を進めることが可能となる。

第1回検討会 資料2-2の24ページに2次元X線検出器の開発について記述されているが、具体的にどのような検出器の開発を予定しているのか示されたい。

回答：SPring-8ではSLS（Swiss Light Source）との協力によりピクセル検出器^{*1}の開発を進めており、また、CERN（欧州合同原子核研究機関）との協力により、2次元YAP検出器^{*2}の開発を進めてきた。更に、コヒーレント散乱顕微鏡用の真空内イメージングプレート検出器^{*3}の開発に成功している。

加えて、現在、理研内でRIビームファクトリーのグループと協力して検出器開発を行う体制を構築しているところであり、その中で、2次元APD検出器^{*4}、ジョセフソン検出器^{*5}の開発が検討されている。

その他、アメリカ、オーストラリアのグループと共同でXFEL用のCCD検出器^{*6}開発が計画されている。

- *1. ピクセル検出器：微細素子ごとにX線単一光子を計測するもの。データ取得速度が速いという特徴がある。光子量の非常に多いXFELから受ける負荷に対応するため、素子の更なる微細化、及びX線多重光子の計測方法開発を進めている。
- *2. 2次元YAP検出器：X線光子を $\text{YAlO}_3(\text{Ce})$ シンチレーター(YAP)により蛍光に変換して計測するもの。SPring-8で開発された技術を応用した検出器であり、時間応答が早いという特徴がある。XFELによる超高速現象の観測に対応するため、応答時間のさらなる短縮化の開発を進めている。
- *3. コヒーレント散乱顕微鏡用真空内イメージングプレート検出器：高い有効視野が特徴。コヒーレント散乱顕微鏡では、試料にコヒーレントX線を照射して得られる弱い散乱データから物体像を再構築するが、空気散乱などによるノイズを防ぐために真空内でのデータ取得・読み出しを可能にした。
- *4. 2次元APD検出器：X線光子をアバランシェ・フォトダイオード(APD)により光変換して計測するもの。検出可能な光子数の範囲(ダイナミックレンジ)が広いという特徴がある。XFELによる単分子などの非晶物質の構造解析において、弱い回折信号を精度よく検出するため、ダイナミックレンジの拡大に向けた開発を行っている。
- *5. ジョセフソン検出器：超伝導体のジョセフソン接合を応用し、卓越したX線エネルギー分解能を有する検出器。XFELを利用したナノ材料の物性評

価に向け、より検出効率を向上するべく、多素化、大面積化、エネルギー分解能のさらなる向上を目指した開発を行っている。

- *6. XFEL 用 CCD 検出器：単分子などの非晶物質の構造解析に向けて、CCD で X 線光子を直接検出するタイプ、及び X 線蛍光スクリーンで可視光に変換したうえで検出するタイプの双方を視野に入れ、ダイナミックレンジの拡大、データ取得時間の短縮を目指した開発を行っている。

単分子構造解析におけるタンパク質の構造均一性に関して、カルシウムチャンネルを例にあげ、カルシウムの有無など、いくつかの状態がある場合、その一つの状態に固定したものについて単分子構造解析を行うので、コンフォメーションが揃っているとの説明であったが、例えばカルシウム無しの「状態」でタンパク質を調製したとしても、イオン化して射出した単分子が皆同じ立体構造を持っている保障は無いと思われる。結晶を精製する際は、「結晶場」に並べることで同じコンフォメーションを持ったタンパク質をセレクトしており、溶液中ではやはりフレキシブルな部分はフレキシブルであると考えられるので、百万個の単分子の散乱像を集めて構造を解いた場合に、フレキシブルな部分の構造は見えないことになるのではないかと。

回答：タンパク質の取り得るコンフォメーションは無限にあるわけではない。それぞれのコンフォメーションの解析には数十万程度の散乱パターンを取得すれば十分であることから、百万パターンの散乱データからタンパク質の準安定構造を複数見出すことが可能である。

タンパク質の立体構造は、水和された状態ではかなり安定であることが様々な物理化学測定を通じて明らかにされてきた。例えば、かなり乱暴な試料の取り扱いを行う場合として電子顕微鏡の1粒子解析が挙げられるが、その解析によってタンパク質複合体の低分解能構造が構築可能であることは、その証左といえる。

確かに、タンパク質の中には複数の立体構造をとるものが知られている。質問ではフレキシブルという言葉で一括りにされているが、綿密な分子動力学計算や低温結晶構造解析からは、そのような立体構造は無限にあるわけではなく、タンパク質運動位相空間で定義されるごく少数の低エネルギー内部運動と周辺水和水によって制御されていることが明らかにされてきた。それゆえ、そのようなタンパク質分子を飛翔させてXFELによる散乱実験を行った場合には、そのタンパク質が取り得るコンフォメーションに対応した散乱パターンの取得が期待される。

XFEL 実験で得られる散乱パターンは、分子内部の電子分布を忠実に反映したものであるから、画像解析アルゴリズムの援用によりそれらを系統的に分類することは十分可能と考えられる。いずれにせよ、このようなことを想定した解析アルゴリズムは必要であり、実験に向けての準備が不可欠である。

ミヤオらがアメリカアカデミー紀要に発表した計算機シミュレーションでは 100 万の散乱パターンを発生させて解析しているが、実際に位相回復には 1 桁少ない数十万パターンもあれば十分である。それゆえ、複数のコンフォメーションを取りうるタンパク質の散乱パターンを 100 万取ればタンパク質の準安定構造を複数見出すことができ、タンパク質のダイナミクス解析に大きく貢献することが期待される。

第1回検討会 資料2-2の6ページ、「XFELで加速した電子ビームをSPring-8に入射することで、SPring-8の一層の性能向上を実現」とあるが、ストレージリングであるSPring-8のビームクオリティは、放射励起と放射減衰のバランスにより決まるエミッタンスに左右され、入射ビームのクオリティの記憶をとどめないため、特に性能向上が期待できないのではないかと。何か特別な措置を検討されているのか。

回答：入射ビームをある程度周回させて平衡状態に落ち着いた後は、ご指摘のとおり、SPring-8のビームの質は、蓄積リングに固有のエミッタンスに左右されることになる。逆に、平衡状態に達する前は、より質の高いビームの利用が可能となり、この範囲で高輝度放射光の利用が可能となる。

また、スーパーシーディング技術により成形された電子ビームをSPring-8に入射すると、蓄積リングのパラメータの最適化により、いくつかのアンジュレータにおいて非常に輝度の高い光や超短パルス光の発生が可能となる。これも電子ビームが周回を重ねていくうちに平衡状態に落ち着くため、蓄積リングに入射直後のみ利用可能という制限が付くが、現状からの性能向上が可能となる。

更に、SPring-8では、平衡状態でのエミッタンスをより低減し、放射光を高度化するための検討が進められており、これを実現する上でも、入射器としてXFELの低エミッタンス線形加速器を利用することが有利となる。

3. プロトタイプ機の利用について

SPring-8 では、数年の遅れによって、かなりの成果を諸外国に先取りされたと聞いている。そのため、プロトタイプ機で既に全て問題が出尽くしているのであれば、これを前倒して本当に世界初の成果を出すという計画にならないのか。

回答：要素技術開発は完了しているが、メーカーの製造能力やコンクリート建屋の経時変化等の問題から、実機整備の前倒しには注意を要する。

本プロジェクトのターゲットは、波長 0.1nm 以下の硬 X 線領域のレーザーを発振し、これを共用に供することによって画期的な成果を多数輩出することにあるが、プロトタイプ機についても、波長 60nm の真空紫外領域のレーザーを発振する実用機として利用に供する計画であり、主にこの波長領域が対象になる化学分野の利用研究において、世界初となる画期的な成果の輩出が期待される。具体的な例としては、この波長領域の強光子場を生成し、物質内部に強い電場を励起することにより、従来手法では困難な化学結合の制御の実現を目指した研究を計画している。

同時に、プロトタイプ機の製作を通して培われる量産技術、組立・調整技術は、スケールアップした本プロジェクトを円滑に遂行するための重要な技術要素であり、また、プロトタイプ機を活用した研究開発により、強力なレーザー光のハンドリング技術、超短パルス計測技術、光学系技術等の基盤技術が確立されることから、実機完成直後から、硬 X 線を利用した研究の展開が可能となり、こちらも世界初の成果輩出が期待される。

一方、実機製作の前倒しについては、以下の 2 つの問題を含んでいることから、注意を要する。

メーカーの製造能力の問題

本プロジェクトの主要構成要素である加速管、電源、アンジュレータは性能の揃った同一要素を多数用意する必要があるため、メーカーの製造能力が問題となる。現在の検討では、数は少ないが、全くトラブルが無い場合に 4 年間で完成させるだけの能力を有するメーカーがあると見込まれるが、安全率を考慮した余裕も必要であり、安直に計画を前倒することは危険である。

施設建屋の経時変化の問題

SPring-8 建設時の経験から、コンクリート構造物は打設後 1 年程度に

わたって経時変化を生じる。これは μm オーダーの据付精度を要求される XFEL にとって大きな問題であり、経時変化が収まった後でないと据付は行えないことになる。

現在、建設会社と共同で、打設後の経時変化の少ないコンクリートの開発に着手しているところではあるが、その実用化までには一定の期間を要することから、いずれにしても計画の前倒しは困難である。

プロトタイプ機によるシーディング研究の重要性に鑑み、プロトタイプ機の今後の運用に関する資料・説明が必要である。来年度以降の予算に、プロトタイプ機に関わる研究が含まれているのか。プロトタイプ機の利用と、XFEL本体の開発とが仕分けられているのか。プロトタイプ機の研究開発が継続して行われ、それがXFEL本体の開発にフィードバックされる仕組みがあるのかについて、明確な回答を求める。

回答：XFEL 本体の開発は施設整備補助金により行い、プロトタイプ機の利用は運営費交付金にて行うとしており、これらは明確に仕分けられている。

シーディング技術の開発を含む、プロトタイプ機を用いた加速器研究開発、利用技術開発は、理研の施設整備補助金により行うXFEL本体の開発とは別に、平成18年度以降の理研運営費交付金により手当てすることとしており、放射光研究事業 先端技術研究費として約3億円を概算要求に計上しているところ。

プロトタイプ機では、XFEL 本体建設と並行してシーディングを実現するための技術開発を行い、XFEL 本体完成後速やかにシーディング技術の導入が図られるよう準備を進めることとしている。また、プロトタイプ機は、真空紫外領域のレーザー光利用に供されるとともに、加速器の高度化技術開発の試験機としての役割も持ち、プロトタイプ機を用いて確立した新しい技術は、当然のことながら、XFEL 本体の開発・整備にフィードバックされることとなる。

プロトタイプ機で達成されたか、或いは達成されようとしている「加速器科学への貢献」の内容（日本オリジナルの C バンドライナックの実証等）について示されたい。

回答：例示された C バンドライナックに関しては、最初の実証試験は、小規模ながら高エネルギー加速器研究機構の KEKB において既に行われているものである。

プロトタイプ機の開発における「加速器科学への貢献」は、主として次のものがあげられる。

熱陰極型低エミッタンス電子銃

欧米で開発を進めているレーザー駆動型電子銃に比べ、低エミッタンス、低暗電流を達成し、高い安定性と信頼性を実現。

小型モジュレータ電源

クライストロン用モジュレータ電源を、絶縁油の中に高圧回路を密閉することによって小型化・高安定化を実現。SPring-8 のものと比較して 3 分の 1 の容積となり、スペース利用効率の向上に繋がる。

低熱膨張率架台

セラミック製とすることで、従来の鉄材を利用した架台の 20 分の 1 の熱膨張率を達成。これにより、100m にわたり変動誤差 10 μm 以内が実現可能となった。

低エミッタンス・短パルス用ビーム位置モニター

ビーム軸中心から外側に向かって対数目盛りでビーム位置を読み取るモニターを開発。中央付近の読み取り精度の向上により、ビーム位置調整が容易に。

コンポーネント・アライメント技術

不安定性が懸念されていた高さ方向の位置調整機構を不要とするアライメント技術を確立。

デジタルコントロールシステム

従来のものよりデジタル化を一層進めた加速器制御システムを開発。ビーム位置モニターとの連係により、 μm レベルでの位置安定性をもつ X 線レーザー光の発振を実現可能とする。

要素技術が全てプロトタイプ機で実証されるとすれば、今後高度化が必要な項目とその数値目標、及びそれを達成するための具体的方策を示されたい。

回答：スーパーシーディングを行うためには、電源の安定度を、プロトタイプ機のものから1桁向上させる必要がある。このための回路方式は既に検討済みであり、今年度内に試作機の製作を行う予定である。

また、アンジュレータ永久磁石のギャップ調整に関して、現在、プロトタイプ機用としては十分な精度 $3\mu\text{m}$ 程度を実現しているが、実機においては $1\mu\text{m}$ の精度が必要となる。これを実現するための方策として、

アンジュレータ架台の剛性を高める、

アンジュレータ全体の温度管理を徹底する、

ギャップ読み取り機構を、現在の間接式（ボールねじの回転角度）から直接指揮に変更する、

などを検討している。

4. 利用研究の推進・運営について

第1回評価検討会の説明では、利用研究（science cases）に関して、現状では実現が困難であり将来的に可能性のあるものを含めて漠然とした説明がなされた。開発後に直ちに実現可能な、目玉となる利用研究プロジェクトを絞り込んで検討すべきではないか。

回答：利用研究に関しては、平成17年5月に、理研にて利用研究促進懇談会を発足させ、幅広い科学技術分野から集結した懇談会メンバーの意見を基に利用計画を策定し、8月に中間とりまとめを行った。この中間とりまとめには、XFEL開発後に直ちに実現可能なものを含む革新的な7つの研究テーマについて、その内容や想定される成果や波及効果などが詳細に記述されており、第1回評価検討会では、その中の5つについて概要説明を行ったところである。

現在、これら分野別にワーキンググループの設置を進めており、各々プロジェクトディレクターのもと、更に議論を深めていくことを予定しており、その中から、わが国独自となる画期的な研究テーマを選び、検討していくことによって、XFEL開発後に直ちに着手できる最先端の利用研究プロジェクトを絞り込んでいく予定である。

更に、平成18年度当初には、文部科学省のもと利用推進協議会を設置し、利用研究促進懇談会での議論を継承するとともに、XFEL開発後に直ちに利用研究に着手するための利用技術の開発を進めていく計画である。

公募テーマ、予算規模、理研との共同研究の必要性の有無など、どのように利用研究プログラムを展開するのか具体的に示されたい。

回答：XFEL の利用研究については、文部科学省のもと利用推進協議会を設置し、プログラムディレクターのリーダーシップのもと、利用研究を行う上で必要となる技術開発テーマを公募、選定することを計画している。予算規模としては、1 テーマあたり 8,000 万円程度×5～6 テーマを想定しているが、XFEL を模擬する光源として、プロトタイプ機のほか、SPring-8 や PF などの放射光施設、大学などの研究室内のレーザー装置等、様々なものが考えられることから、各々に応じた予算配分と推進体制の構築が必要となる。

ここで、プロトタイプ機を利用したテーマを実施する場合は、理研との共同研究契約を締結して行うこととなるが、それ以外の光源を利用する場合は、その必要性は無い。

SPring-8 を利用したテーマを実施する場合は、優先利用枠の活用も考慮し、そのための利用経費についても、上記研究費の中で手当てすることも検討している。

学術研究を目的とする研究者と民間利用者の差別化を行うのか。海外からの利用要求にどのように対処するのか。

回答：SPring-8 における課題選考と同様、原則として、産学や国内外による差別化は行わないこととしている。

課題の公募、選考については、SPring-8 と同じ枠組みでの実施を計画しており、具体的には、SPring-8 の課題選定委員会に XFEL のための新しい分科会を設置し、そこで課題を公募、選考し、他の SPring-8 に関する分科会の選考結果とともに課題選定委員会に諮り、決定することを検討している。この仕組みにより、例えば、提案内容によって、XFEL への応募でも SPring-8 において実施すべき研究テーマや、逆に SPring-8 への応募の中でも XFEL を使用することによって、より一層優れた研究成果が得られる研究テーマを交換して採択することが可能となり、一体的な課題選考を行うことで、より効率的かつ効果的な実験研究が実施される。

5. XFEL 施設の運営・推進体制について

開発を進めるにあたって、多くの課題を内包しており、進捗状況に対するクリティカルなアセスメントの実施が必要である。文部科学省あるいは理研においても実施されるであろうが、年度ごとにでも外部からのクリティカルな評価・指導を行うシステムが必要ではないか。

回答：科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 研究評価部会のもと、平成 17 年 6 月に設置した次世代放射光源計画評価作業部会が、本プロジェクトの進捗状況の評価・指導を行うことを計画している。

本プロジェクトは、施設整備と利用研究開発の両面から計画を推進することが重要であり、施設整備に関しては、例えば、整備主体による年度ごとの報告や現地視察などによって進捗状況を把握するとともに、利用研究に関しては、利用推進協議会から利用方針や開発テーマの選定状況、更には利用開発の進捗状況をヒアリングするなどして、双方を併せて検討・評価し、適切な指導・助言が行える仕組みを検討しているところ。

推進体制・組織に関してより詳細な説明が必要である。開発（建設）を監督する組織、進捗状況を評価・指導する組織、利用研究を推進・監督する組織など、プロジェクト内（あるいは外部）の組織構成と、その規模や人員構成について示されたい。

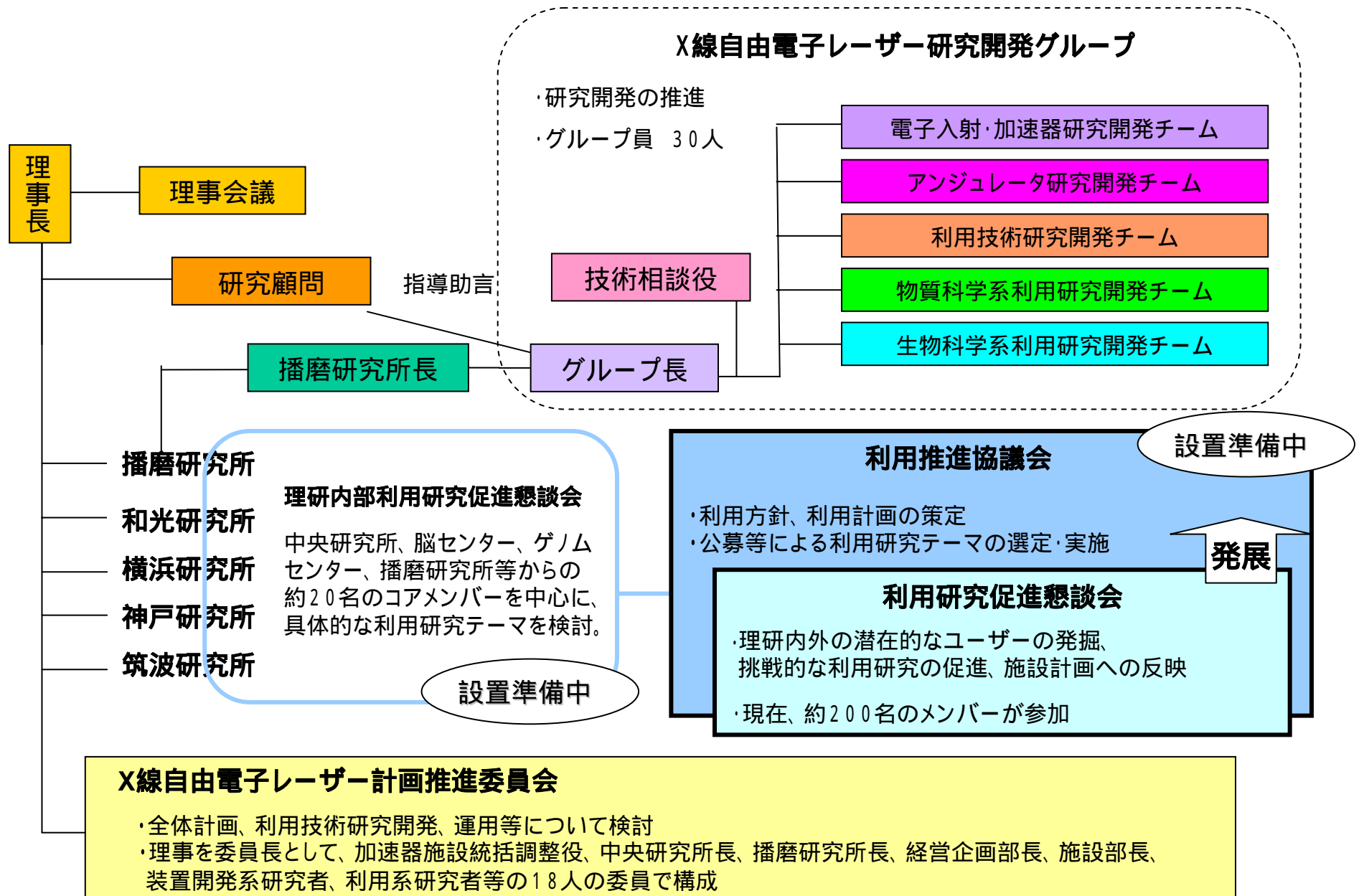
回答：これまで開発を進めてきた理研においては、平成 17 年 10 月より、理事を委員長とする X 線自由電子レーザー計画推進委員会（メンバー 19 人）を設置し、全体計画や利用研究、プロトタイプ機の運用等について検討を行い、効果的な計画の推進を行う体制を構築している。また、これまでの要素技術開発やプロトタイプ機の建設については、放射光科学研究センターのもと X 線自由電子レーザー研究開発グループ（メンバー 30 人）を設置し、研究開発を着実に進めている。

また、利用研究に関しては、平成 17 年 5 月、理研が中心となって利用研究促進懇談会（メンバー 214 人、10 月 1 日時点）を設立し、推進体制の基盤を構築したところである（資料 2：次ページ）。

文部科学省においては、平成 18 年当初より、理研の利用研究促進懇談会を継承・発展させる形で、利用推進協議会を設置することを計画している。そこでは、大学等の専門家をプロジェクトディレクターに迎え、その強力なリーダーシップによって、利用計画の策定や利用研究テーマの選定を行うほか、施設整備と利用研究開発の両面から、それぞれの進捗状況の評価・指導・助言にあたることを計画している。

更に、施設整備に関しては、理研を中心に、加速器科学分野の人材が豊富な（財）高輝度光科学研究センター（JASRI）や、わが国の加速器研究において中心的な役割を果たしてきている高エネルギー加速器研究機構（KEK）と協力して推進していく方針である。そのため、理研は平成 17 年 7 月に KEK と研究協力協定を締結しており、また JASRI との間でも締結手続きを進めているところである。既に、KEK より 5 人、JASRI より 18 人の研究者が開発に参画している。

推進体制・組織

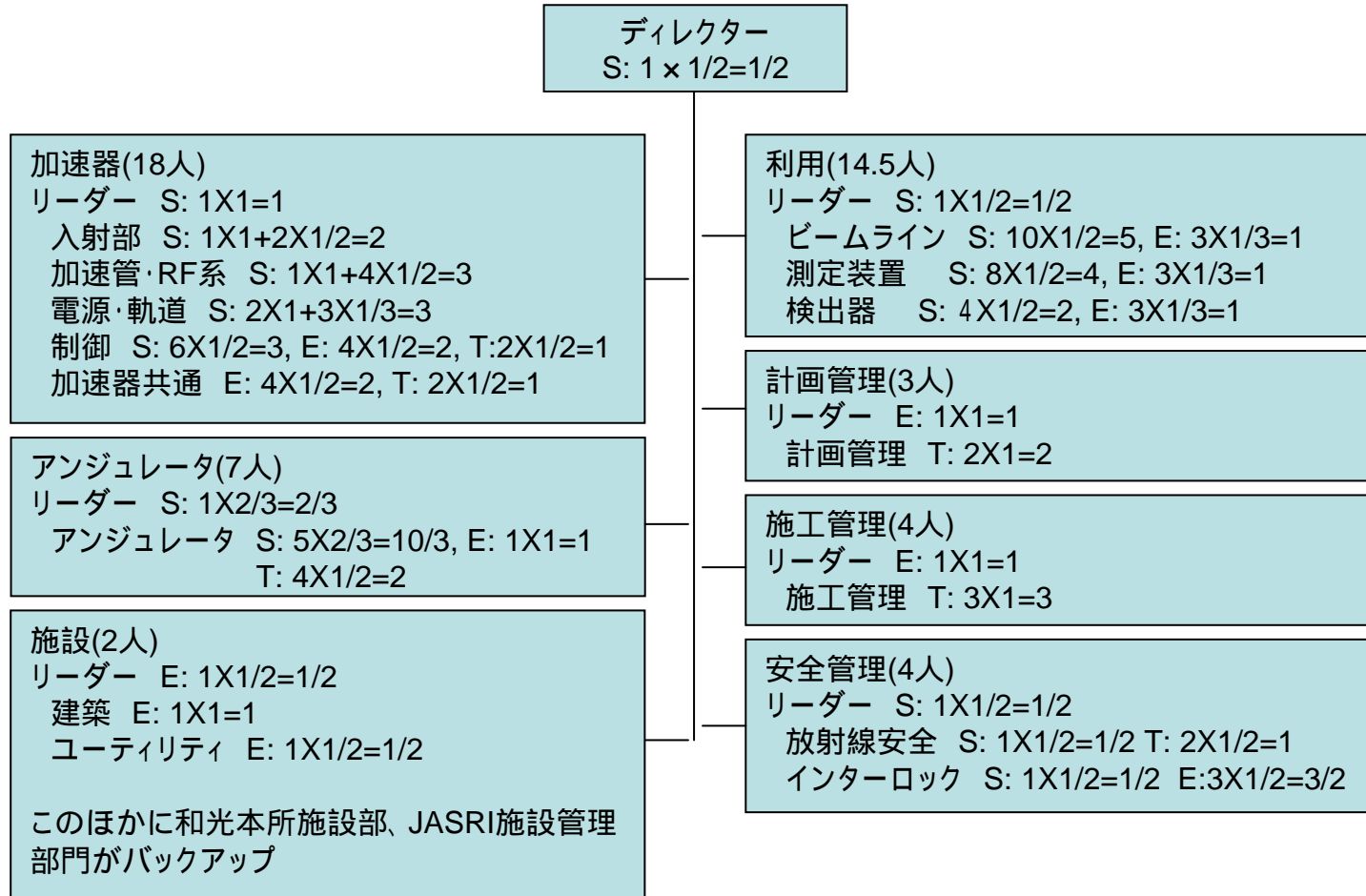


マンパワーに関して、建設で 50 人、運営で 30 人という説明がなされたが、それで十分であることを示すために、具体的な陣容についての資料、説明が必要である。どのようなレベルの研究者あるいはテクニシャンが参加するのか等の内訳を含めて説明願いたい。

回答：建設時の体制を資料 3-1（次ページ）に、運用時の体制を資料 3-2（次々ページ）にそれぞれ示す。

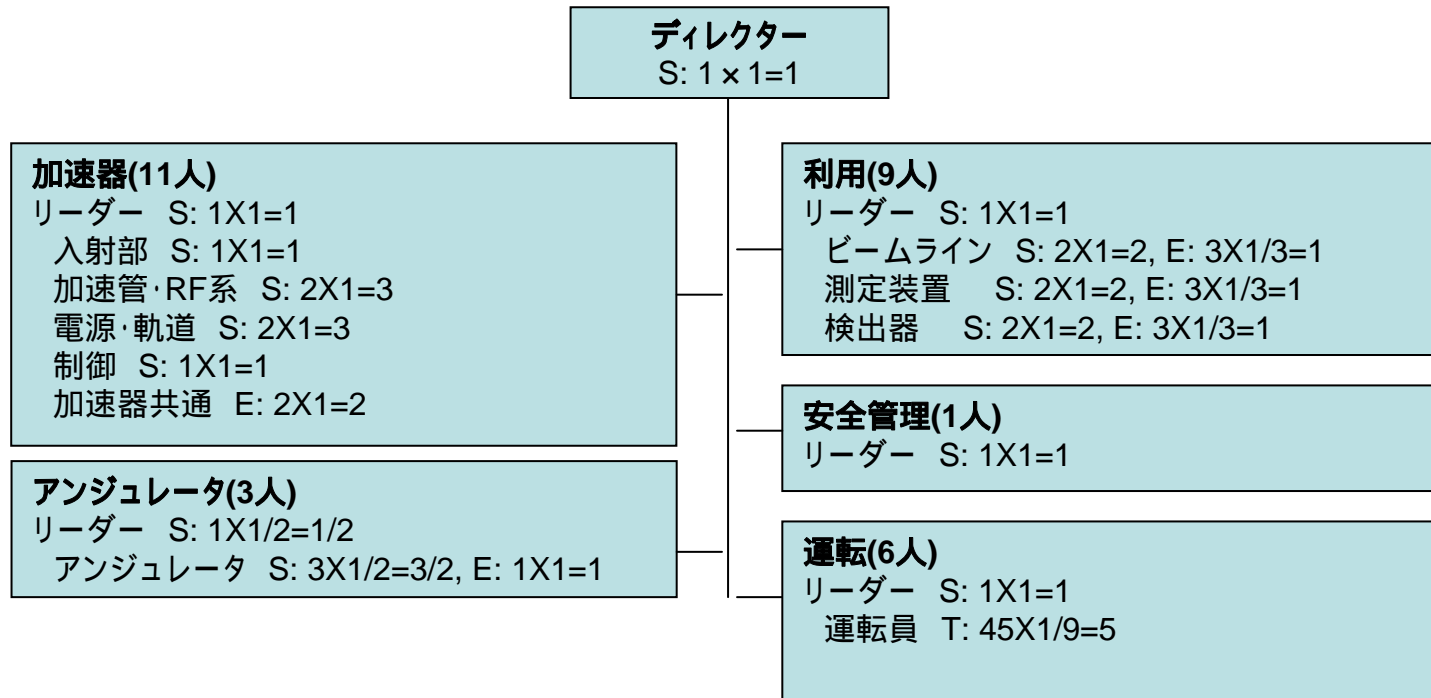
参加する研究者、エンジニア、テクニシャンの殆ど全員が SPring-8 や他の加速器施設の建設経験を有し、また運転に対する実務経験も持つレベルにある。

XFEL建設体制



S: サイエнтиスト、E:エンジニア、T: テクニシャン
 数字は (実人員) × (エフォート) = (フルタイム換算人員)

XFEL運転体制



- 運転体制移行時には、テクニシャンはJASRI共通技術部門で一括運用
- 安全管理業務はJASRI安全管理部門に委託
- 施設管理業務はJASRI施設管理部門に委託
- 利用者対応はJASRI利用業務部門に委託
- 運転はSPring-8中央制御室から行う。現行3直5班の運転員がSpring-8, XFELの両方の加速器を運転

S: サイエнтиスト、E:エンジニア、T: テクニシャン
 数字は (実人員) × (エフォート) = (フルタイム換算人員)

第1回評価検討会の説明では、SPring-8(非常に多くのユーザーが様々なニーズをこなす)と同様の利用形態に受け止められた。実際は利用研究技術や対象など大きく異なると考えられ、多数のユーザーを抱える SPring-8 とはまた違う運営方針が必要ではないか。

回答：XFEL は非常に強力なコヒーレント X 線を発振する装置であり、ご指摘のとおり、その利用研究技術や対象は SPring-8 と大きく異なると考えられるが、利用課題の選考やユーザータイムの割り振り、利用者の受け入れ等、施設を広く共用に供するための運用においては、XFEL のビームラインを SPring-8 のビームラインと同等に捉えることにより、SPring-8 と同様の利用形態によって対応が可能であると考えます。

具体的には、4. でも回答したとおり、SPring-8 の課題選定委員会に XFEL のための新しい分科会を設置し、そこで課題を公募、選考し、他の SPring-8 に関する分科会の選考結果をとともに課題選定委員会に諮り、決定することを検討している。

共通部分と個別の部分について、SPring-8 との運用面におけるすみ分けを明確に示されたい。

回答：XFEL 実機で計画している 2 本のビームラインを、SPring-8 の 26 本目、27 本目の共用ビームラインと捉え、研究課題の公募、選定、利用者の登録、受け入れ、実験支援等については共通の枠組みにおいて運用することを計画している。

運転は、XFEL と SPring-8 を独立に行うことが可能であることから、年間運転時間やユーザーに提供するマシンタイム等の設定は個別に行うこととなる。ただし、運転要員については、効率化を図ることで一部を共通化することも可能である。

ただし、XFEL の電子ビームを SPring-8 に入射する場合については、双方を一体的に運用することが必要となることから、XFEL、SPring-8 双方の運転状況や利用状況を鑑み、ユーザータイムの中での割り振りを検討していくこととなる。

理研サイドからどの程度の人的、予算的な投入を行う予定なのかについて、特に理研からの自助努力による参加、あるいは利用推進協議会の年間 4.5 億円のプロジェクトでの利用実験にどのくらいのグループが参加（effort 率も含めて）するのかについて示されたい。

回答：施設の建設においては、基本的に理研予算にて手当てすることを予定しており、体制についても理研を中心に、相応の人的投入を行うことを計画している。

また、利用技術開発に関しては、理研の自助努力として、理研内の競争的資金（理事長裁量経費等）の獲得や、外部競争的資金（CREST 等）の獲得を図るとともに、またこれらを獲得した研究チームとの共同研究等により推進することとしている。

なお、利用推進協議会の年間 4.5 億円については、公募により選定された研究テーマが対象となるため、理研サイドからどのくらいのグループが参加することになるか未定である。

産業（民間）利用も視野に入れた際の、利用・課金制度について、詳細な説明を願いたい。

回答：XFEL の利用・課金制度についても、SPring-8 と同じ制度を適用することを検討している。すなわち、実験ハッチ内においてユーザー実験に伴い消費する消耗品、損耗品については、その実費を利用時間に応じて負担することとなる。また、液体ヘリウムやストックルームからの持ち出しについても、SPring-8 と同様、従量分を負担することとなる。

更に、成果専有に対する課金についても、SPring-8 と同様の考え方を適用し、研究成果を公開しない場合、運営費回収方式にて課金を実施する。すなわち、以下の計算式によって課金することを計画している。

$$\begin{aligned} & (\text{XFEL の運営費} + \text{固定資産税} + \text{火災保険料}) \div \text{ビームライン本数} \\ & \div \text{供用時間} \times \text{利用時間} \end{aligned}$$

6. その他

第 1 回検討会 資料 2-2 に国際レビュー委員会の評価結果の抜粋が示されているが、英文の本文全文を閲覧することは可能か。

回答：次ページ以降に添付

Report of the First International Review Committee for the SPring-8 Compact SASE Source Project

February 3-4, 2005

Committee Members: Marie-Emmanuelle Couprie, John Galayda, Jerry Hastings, Kwang-Je Kim (Chair), Shin-ichi Kurokawa, Won Namkung, Jochen Schneider

EXECUTIVE SUMMARY

The SPring-8 Compact SASE Source (SCSS) is an innovative project for generation and use of intense, coherent, short-pulse X-ray beams. Although its goals are similar to other X-ray free-electron laser (FEL) projects in the USA and Europe, the SCSS is unique in its compactness of design and in its co-location with SPring-8, the world's leading third-generation X-ray synchrotron radiation facility. The project is ambitious in schedule and technologically challenging. However, members of the project team have track records for innovative solutions to difficult problems. The accumulated knowledge in accelerator technology and X-ray science at the SPring-8 site is also an important asset. The Committee therefore agrees that the SCSS project can be completed as scheduled and recommends the prompt start of the project.

The scientific case for the SCSS is in the formative stage, due largely to the revolutionary nature of the source. However, the SPring-8 scientists have extensive experience in making use of coherent X-ray beams, leading to recent success in coherent X-ray imaging, which will be one of the key application areas of the SCSS. The project team recognizes the importance of boosting discussions among scientists through workshops, and has already held successful workshops in chemistry, medicine, biology, and atomic physics. The Committee endorses the plan to hold many more workshops to further stimulate the engagement of leading scientists.

The design of the accelerator-undulator-beamline system is mature. The SCSS injector, being based on a DC gun, is unique among X-ray FEL injectors, aiming for high stability and reliable operation of high-brightness electron beams. The injector will be operational for the planned 250-MeV test experiment to be carried out this year. R&D items for the injector include beam collimating to suppress unwanted tails, and confirmation of low jitter. The high-gradient C-band structure is one of the critical elements in achieving the compactness of the SCSS facility. The C-band system has been in development since the mid-1990s as a part of the KEK linear collider effort. Prototypes of necessary technological ingredients for the SCSS have been demonstrated. The in-vacuum design of the undulator is essential for reaching the 1-Å goal with 6- to 8-GeV electron beams. The in-vacuum undulators have been operating successfully at SPring-8. R&D items for the undulator system include extension of the previous study of radiation damage at 2 GeV to the higher energies and more stringent requirements of the SCSS project, minimizing the dark current in the undulator area, and estimating the wakefield effect in the small gap device, including possible frequency-dependent resistivity. The design of the X-ray beamline is in the early stage, awaiting further definition of the experimental program. Important progress has been made in X-ray optics,

particularly in the understanding of wavefront distortions from optical elements. A detailed strategy for alignment has been worked out, a critical element of which is the laser alignment of RF beam position monitors (BPMs). A major step towards satisfying the stringent tolerances required for the SCSS project was achieved with the demonstration of 4-micron resolution with the test laser alignment system. The RF BPM was originally developed for the KEK linear collider project and has achieved 20-nm resolution and stability.

The SCSS project benefits from its co-location with SPring-8, especially in the areas of manpower sharing, development of coherent X-ray optics techniques, the accelerator control system, and novel use of the SCSS linac electron beam at SPring-8. The Committee recommends that the SCSS include provisions for 8-GeV operation to allow a possible SCSS operating mode involving injection of the SCSS linac beam to the SPring-8 ring. International collaboration with laboratories pursuing similar projects will be beneficial for all parties. Topics for collaboration include high-brightness gun development, beam diagnostics and alignment strategy, stability issues, shot-to-shot X-ray beam characterization, synchronization issues, and detectors.

To play a leading role in the worldwide X-ray FEL efforts, it is important that the SCSS project start in 2006. Timely construction and commissioning of the 250-MeV facility is critical for the success of the project. Sufficient resources for developing the scientific instrumentation should be allocated from the start of the project. Success of the SCSS project will be a milestone event in the advance of technology for X-ray FELs, stimulating progress in X-ray science worldwide.

SCIENTIFIC CASES

The science pursued at third-generation synchrotron radiation facilities is exciting and includes applications in many different fields of research. In most cases equilibrium states of matter are studied with atomic resolution in space. There is a clear trend to investigations of matter on nanometer-length scales and to spectromicroscopy. Focusing of hard X-ray beams down to about 50 nm has been achieved at various laboratories. The storage rings and the beamline technology are mature and offer very reliable research opportunities. However, the technology is getting close to its theoretical performance limit, and the facilities will put more emphasis on sample environment and detectors.

X-ray sources making use of energy recovery linacs (ERLs) will further improve the beam quality and mainly widen the potential of X-rays for studying equilibrium states of matter. A prototype ERL with superconducting RF is under development at Cornell University, USA, for proof of principle. The project just received funding from the National Science Foundation. A proposal for a hard X-ray user facility should be available in three years.

Free-electron lasers based on the principle of self-amplified spontaneous emission (SASE) offer hard X-ray beams with peak brilliance about 10 orders of magnitude higher than the best storage ring facilities available today and about 7 orders of magnitude higher than expected for ERL facilities. Proof of principle has been achieved at DESY in Hamburg. Using a linac in TESLA technology for 100- and 32-nm wavelength radiation, the shortest pulse duration was about 20 femtoseconds. In the first step of FEL development for hard X-rays the pulse duration will be of the order of 10 or 100 femtoseconds. When applying proposed seeding schemes combined with harmonic generation with external lasers, one should be able to achieve pulse durations of the order of 1 femtosecond and below with improved longitudinal coherence.

Whereas ERLs are a very interesting evolutionary extension of the opportunities offered by modern storage ring facilities, the potential of X-ray free-electron lasers is revolutionary in character. For the first time it will become possible to study nonequilibrium and new states of matter with atomic resolution in space and time. The scientific case for hard X-ray FELs has been discussed in some detail in context of the LCLS project at Stanford, USA, and the European XFEL Facility in Hamburg, Germany, as well as for the project pursued at Bates Laboratory at MIT, Boston, USA; the BESSY FEL at Berlin, Germany; and the FERMI project at Trieste, Italy. Essentially seven research fields have been identified:

- atomic, molecular and cluster phenomena,
- plasma physics,
- condensed matter physics,
- materials science,
- ultrafast chemistry,
- life-sciences, structural biology, and
- quantum optics and non-linear processes.

The scientific case for the SCSS is in its formative stage and will be sharpened by a number of topical workshops planned for the coming months. On the other hand, a lot of work has been accomplished by the SCSS team in developing

- understanding of wave-front distortions from optical elements,
- X-ray mirrors with unprecedented roughness and figure error to minimize wavefront distortions in collaboration with Osaka University, and
- nearly perfect synthetic diamond monochromators jointly with industry.

The SPring-8 scientists have extensive experience in making use of coherent X-ray beams, leading to recent success in coherent X-ray imaging, which will be one of the key application areas of the SCSS. The present beamline design is in the early stage and awaits further definition of the experimental program. Promising concepts for ultrafast timing experiments, single-event measurements, and X-ray intensity interferometry have been presented at the review.

TECHNICAL COMPONENTS

Injector

The injector consists of

- a 500-kV “pulsed DC” gun with a 3-mm-diameter single-crystal cerium hexaboride cathode, producing a 1-ampere pulse of duration 1.6 μ s,
- a pulsed chopper, reducing the pulse duration to 1-2 ns,
- a 238-MHz, 210-kV pre-buncher cavity inducing a 250-keV energy chirp centered on \sim 400 keV,
- a 476-MHz booster cavity accelerating the beam to about 1.1 MeV and compressing to 23 amps,
- an S-band pre-buncher and S-band linac, accelerating the beam to 50 MeV, and
- a chicane energy filter providing a 10-ps, 40-amp output beam.

The DC gun has been constructed and tested. Measurements of emittance have been carried out, yielding an estimate of the thermal emittance: 0.6 mm-mrad. Space-charge effects seem to have increased the projected emittance of the pulse to 1.1 mm-mrad, and stray capacitance in the gun load resistors caused the pulse duration of the gun voltage to be longer than required for SCSS. There is some emittance increase near the head and tail of the gun pulse, possibly due to space-charge effects. The data demonstrate that, with additional collimation, an emittance less than 1 mm-mrad should be achievable at the desired current.

The choice of a thermionic cathode with very low current in the early stages of acceleration offers some significant advantages. There should be no significant fast fluctuations of beam current within the bunch and no significant variations in current density across the beam profile.

Discussion of the start-to-end simulation did not cover assumptions about wakefields from the chopper aperture and RF cavities for RF bunching and acceleration. Incorporation of short-range transverse wakefields is important to determine alignment tolerances in the initial stages.

Linac

The SCSS adopts the C-band RF frequency for the main linac, which has been extensively developed for the linear collider at KEK. The accelerating gradient of higher than 30 MV/m is enough for a compact and economical accelerator of 6-8 GeV in the available space at the SPring-8 site. The proposed beam energy is also adequate for the 0.1-nm XFEL radiation combined with the in-vacuum undulators. The proposed C-band subsystems are state-of-the-art components. The integrated test will be demonstrated through the prototype system of 250 MeV for 60-nm radiation by November of this year. The major subsystems in the main linac are the accelerating section, klystron, modulator, and pulse compressor. Some special characteristics are noted as follows.

- Accelerating section: The choke-mode accelerating section has a unique feature of suppressing the wakefield effects by intense electron beams. The input coupler has also a feature of reducing breakdowns and providing symmetric RF fields in the structure. In view of the multibunch operation option, the Committee strongly recommends keeping this excellent choke-mode scheme for the SCSS project.
- Klystron: The reliability has been demonstrated for more than 10,000 hours at 50 MW, 2.5 ms, and 45% efficiency. The committee is confident and recommends the klystrons for the project.
- Pulse compressor and PM-AM modulation: This innovative concept is capable of providing flat RF pulses to accelerating sections with four times higher RF power, i.e., a beam energy gain of about two.
- Klystron modulator: The smart modulator adopts an inverter power supply and a compact oil tank that is available from the commercial utility market. The reduction of the modulator volume and costs is so dramatic that the SCSS will benefit greatly from this new development.
- Support and alignment system: The SCSS developed the Roller Cam Mover system with repeatability of about 0.1 mm; it is necessary for precise alignment of the whole system. The ceramic support stand is also developed for integration of the whole system.
- Cavity BPM: For beam-based position alignment, the SCSS group developed and tested the improved RF BPM with 20-nm resolution

The SCSS project team has developed or demonstrated most of the critical subsystems required for a linear accelerator of greater than 35 MV/m. The Committee is very impressed with the current project status, and the Committee strongly recommends the C-band accelerator to the SCSS main linac.

Undulator

The in-vacuum undulator adopted in the SCSS project is unique in the world. Due to its shorter period and higher magnetic field, the in-vacuum undulator allows the generation of 1-Å SASE with electron energy of 6-8 GeV, twice or three times smaller than in other X-ray FEL projects.

The SPring-8 insertion devices team was a pioneer in the concept and development and is a leader in the field of in-vacuum undulators. Besides the first devices installed in KEK and SPring-8, with the remarkable 25-m-long in-vacuum undulator on the 8-GeV synchrotron radiation facility, the group has shared its expertise with other facilities around the world such as the ESRF and the Swiss Light Source. The productive collaboration with industry (Sumitomo group) established many years ago makes the technology reliable. It supposes special magnet arrangement techniques (shimming not being allowed) while maintaining a high field quality, particular treatment to the magnets, and specific mechanical design.

From this choice arise new specific difficulties.

First, the electrons from the beam halo might directly damage the magnets, so particular care should be devoted to control the electron beam purity, to reduce and monitor the dark current in the undulator area, and to implement fast electron beam stops. In addition, the efforts to understand the magnet resistance to radiation, which have been already extensively studied in collaboration with PAL, should continue further. In particular, the studies should be extended to higher energy to meet the stringent requirements of the SCSS project.

Second, the effect of the wakefield in the small-gap device should be carefully studied, including possible frequency-dependent resistivity. Possible modifications to the beam dynamics should be driven; the 250-MeV SCSS prototype will provide some interesting results.

Third, the alignment of the electron beam in the undulator is more critical than on other 1-Å SASE facilities. The SCSS has proposed a double alignment strategy based on laser alignment of the different components and cross checked with undulator radiation analysis of each individual undulator segment. See the section “Diagnostics and Commissioning” below for further comments on alignment.

The success of the in-vacuum undulator approach for short wavelength free-electron lasers can contribute significantly to the FEL community and have a great impact on the future design of compact FEL sources around the world. It is therefore particularly relevant that this strategy has been adopted by the leaders in this field.

X-ray Optics

XFEL radiation has many unique aspects that will enable quality new science when compared to undulator radiation from current third-generation storage ring sources. In particular, its peak brightness will enable time-resolved studies of unprecedented temporal

resolution at the femtosecond level. This extraordinary peak brightness derives from the very large flux, the remarkably short pulse durations, and the fully coherent transverse phase space of the photon beams. The challenge for X-ray optics is to maintain and or manipulate the transverse phase space of this beam and develop X-ray optics that are the analogs of beam splitters, delay stages and polarizers, etc. that are used routinely at optical wavelengths.

The SCSS team is a world leader in these developments. The team of Dr. Ishikawa has developed the X-ray phase plates now in common use at third-generation light sources to manipulate the photon polarization. His team has demonstrated a variety of unique applications of X-ray optics in understanding the coherence properties of synchrotron radiation, and the extension of these ideas to the SCSS beam follows in a natural way. The SCSS team has the capability to provide not only optics to split/combine/delay the X-ray beams, but it is also developing, in collaboration with Osaka University, mirror optics that are world's best in both figure and roughness that will be used to focus the SCSS beam and provide unprecedented peak powers in the X-ray regime. In the area of X-ray optics, the SCSS team is the match for any in the world.

Diagnostics and Commissioning

Presentations on diagnostics and commissioning placed emphasis on RF beam position monitors and X-ray intensity measurements. The ability to open undulator gaps will be exploited for diagnostic purposes. A partial list of controllable parameters in the undulator includes:

- K of the undulator,
- pathlength (phase) adjustment between undulators,
- correctors for the Earth's magnetic field,
- steering correctors, and
- RF BPM position.

Adjustments to achieve best performance will be based on measurements of the position of the electron beam using RF BPMs, observation of position and profile of the electron beam using optical transition radiation monitors, and on-axis (and near-axis) intensity of monochromatized X-rays from the undulators. A system for direct measurement of undulator K was mentioned but not described in detail.

A method for alignment of the RF BPMs with a laser was presented. Iris targets are inserted into alignment features on the RF BPMs. The targets are illuminated with a collimated helium-neon laser, and the position of the light passing through the iris is measured with an imaging detector. The stated goal was to align the BPMs to a few microns. Results from a test of a single BPM and iris were presented, showing resolution and repeatability of a few microns in the measurement.

K and inter-undulator phase will be measured and corrected by observation of a higher harmonic of the spontaneous undulator radiation (3rd or 5th). Observation of the X-ray intensity profile will be used to co-align the X-ray beams to about 0.8 micro-radian.

C-band resonant RF beam position monitors will be used for measurement of electron beam position with sensitivity of the order of a micron.

Diagnostic measurements will be made on single undulators and pairs of undulators to achieve the necessary tolerances. Laser alignment of the BPMs is likely to be necessary on a daily basis.

The sensitivity of RF BPMs is adequate for the purpose of alignment. The sensitivity of the laser alignment technique has been measured. Continued testing should be carried out with more than one iris target in use. It is worthwhile to devise a test to confirm that the RF BPM position is not affected by insertion of the iris target. It is also worthwhile to verify that the laser spot profile is sufficiently stable over time, since a change in center-of-intensity of the laser spot could affect the alignment process. The effect of damaged or tapered undulators should be considered in interpreting the meaning of X-ray intensity measurements. The measurement may be affected by grazing-incidence reflection of X-rays if there are surfaces sufficiently close to the beam path.

The sensitivity of the lasing process to peak field in the undulator is used to set a tolerance of 6×10^{-4} on K. This tolerance translates into 1- to 2-micron-level adjustability and stability for gap control. This is practical but challenging. It will also be necessary to eliminate or compensate energy jitter in the electron beam to a precision comparable to the relative K tolerance.

Synergy with SPring-8

The unique aspects of FEL radiation provide the opportunity for complementary studies in the broad areas of materials, chemical, and biological sciences. As with the Linac Coherent Light Source (LCLS) and European XFEL (EXFEL), the SCSS is co-located with a world-class synchrotron radiation source. This co-location has many advantages spanning both the accelerator and X-ray science and instrumentation.

For the SCSS, as an example, the SPring-8 control system and the personnel responsible for its design, upgrade, and maintenance will provide the controls for the SCSS. The proposed design of the SCSS affords a unique option compared with the LCLS and the EXFEL. The location of the accelerator will be chosen so that pulses from the SCSS linac can be injected into the SPring-8 storage ring. It is here, for example, that a common control system is not only cost saving, but also provides the natural coordination for the SCSS accelerator as an injector for special operations of the SPring-8 storage ring.

In the area of X-ray science and instrumentation, the SPring-8 program will be critical in the early development phases of the SCSS program. Again, there is a natural integration from the leadership of Dr. T. Ishikawa, who has significant responsibilities for both the SPring-8 science and instrumentation and is the project leader for the SCSS proposal.

The undulator magnet is another obvious synergy. Here Dr. Kitamura is responsible for insertion device development for SPring-8. His world leading development in small-gap in-vacuum magnets is critical to the production of very high-energy undulator radiation at SPring-8, and it forms the basis of the design for the SCSS undulator. Dr. Kitamura and his team are part of the SCSS project.

Of course there are the obvious synergies in the areas of accelerator operations and maintenance beyond controls, in vacuum, power supplies, RF and so on. These developments will further engage the accelerator physics staff of both the new project and SPring-8 for years to come.

Finally, as the SCSS comes into operation, all of the infrastructure of the SPring-8 campus is available to the SCSS; the housing, food services, open space in close proximity for development of labs, offices, and so on.

In summary, there are significant advantages to locating the SCSS at the SPring-8 site that cannot be found elsewhere in Japan.

SCHEDULE AND MILESTONES

With the SPring-8 hard X-ray and the New Subaru soft X-ray storage ring facilities operating, together with the planned FEL for hard X-rays (SCSS) and the soft X-ray prototype facility for wavelengths down to 60 nm under construction, a Synchrotron Radiation Science Center of enormous potential for scientific and technological breakthroughs can be realized at the SPring-8 site. The Center will be highly attractive for scientists from many different disciplines including the optical laser community. This community is familiar with femtosecond pulses, coherence, and extreme intensities in the optical wavelength range and will transfer these concepts to studies of new states of matter with atomic resolution in space. The whole field of laser physics is progressing very fast, and it is important that the free-electron lasers are realized in due time.

At present there are four projects for hard X-rays in the world that are either under construction, approved, or close to approval.

- The Linear Coherent Light Source (LCLS) at SLAC in Stanford, USA, is under construction and is expected to provide first X-ray beam at the end of 2008.
- The Pohang Free Electron Laser Facility, making use of the existing linac, is approved. Construction is expected to start in 2006, and first X-ray beam in the wavelength range of 0.3 to 0.7 nm is anticipated in 2009.
- The European XFEL Facility is expected to start construction in the fall of 2006 and provide first X-ray beams in 2012.
- The SCSS at SPring-8: The Committee strongly recommends the start of this project in 2006.

The start of SCSS construction in 2006 is important in order to assure that Japan will play a leading role in the worldwide FEL efforts. Timely construction and commissioning of the 250-MeV facility is critical for the success of the SCSS.

The SCSS as well as the lower-energy prototype facility will be realized in close collaboration with Japanese industry. Without knowing the commitments and the potential of the industries involved in the realization of the project, it is difficult to judge if the proposed three-year construction time is realistic. The project schedule of the SCSS is ambitious but we feel it is feasible in view of the competence of the project team and the accumulated knowledge on the SPring-8 site. The success of the SCSS relies strongly on the performance record of the three principle investigators: Tetsuya Ishikawa, Hideo Kitamura, and Tsumoru Shintake. They are well known for their successes and innovative solutions to difficult problems. The review committee was also impressed by the other members of the design team, including a number of young scientists.

TOPICS FOR INTERNATIONAL COLLABORATION

The committee recognizes that the SCSS project is one of the four major X-FEL projects in the world; the other three being the LCLS in the USA, the PAL X-FEL in Korea, and the European X-FEL project in Germany.

Since the full-scale SCSS project has yet to be approved and funded by the Japanese government, the project can learn much from forerunners, LCLS and X-FEL, and at the same time all three X-FEL projects can reap benefits from each other by establishing a well-organized collaboration scheme. The Committee recommends that the SCSS project try to establish a well-organized collaboration scheme with the LCLS and the TESLA FEL, and also recommends having close contact with the PAL project.

Possible areas of the collaboration are listed below:

- High-brightness gun development
- Beam diagnostics and alignment strategy
- Stability issues
- Shot-to-shot X-ray beam characterization
- Synchronization issues
- Detectors

The Committee also recognizes the importance of the project's close collaboration with KEK, High Energy Accelerator Research Organization, in Japan, especially on the electron linac. The electron linac of the SCSS project is based on development of the C-band linac technology that has been developed at KEK for linear colliders. The Committee suggests the first step of this collaboration be the signing of a specific MOU under the umbrella of the general RIKEN-KEK accelerator collaboration.