

Status of IR FEL and photo science research at Tokyo University of Science

Takayuki Imai^{1,A)}, Koichi Tsukiyama^{A)}, Yoshiyasu Kato^{A)}, Kensuke Tono^{A)}, Tetsuo Shidara^{B)}, Mitsuhiro Yoshida^{B)},
Tetsuo Morotomi^{C)}, Keiichi Hisazumi^{C)} and Kozi Nakai^{A)}

^{A)} Tokyo University of Science

2641 Yamazaki, Noda, Chiba, 278-8510

^{B)} High Energy Accelerator Research Organization (KEK)

1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki, 305-0801

^{C)} Mitsubishi Electric System & Service Co., Ltd.

2-8-8 Umezono, Tsukuba, Ibaraki, 305-0045

Abstract

The IR-FEL (Free Electron Laser) center of Tokyo University of Science has a MIR (Middle Infra Red) – FEL which provides continuously tunable laser radiation in the wavelength range of 5-14 μm and is being used for various photo science experiments. We report present status of IR-FEL and photo science research by use of the FEL.

東京理科大学赤外自由電子レーザーと光科学研究の現状

1. はじめに

東京理科大学総合研究機構・赤外自由電子レーザー研究センター（略称FEL-TUS; Free Electron Laser at Tokyo University of Science）では、赤外自由電子レーザーの装置開発・高性能化研究とFEL光利用実験による光科学研究に取り組んでいる^[1-3]。

FEL-TUSの中核は、線形加速器と光共振器を組み合わせたMIR (Middle Infra Red) - FELである。短パルス、高出力に加え、分子の種類によって吸収スペクトルが顕著に異なる「指紋領域」を含む5 ~ 14 μm で発振波長可変である光源の特長を活かし、FEL光利用実験を行っている。近年は分子科学における基礎研究、例えば「分子クラスターイオンの赤外光解離分光」や「pump-and-probe法による振動励起過程の解明」等を中心としてきた。

また、これまでの学内外ユーザーの利用に加え、平成19年度より文部科学省が新たに開始した委託事業に採択され、FEL共用による産業界ユーザーの光利用実験を開始する予定である。

本稿では、FEL-TUSのFELと光科学研究の現状について報告する。

2. MIR-FEL

FEL-TUSに設置されているFELは、S-band 線形加速器を用い、5 ~ 14 μm の中赤外領域が発振波長である。装置の概略を図1に、パラメータを表1に示す。主な構成は、熱カソードRF電子銃、 α 電磁石、加速管、永久磁石を用いたアンジュレータである。

FELの光特性としては、2 μsec 程度の1パルス内に1 ~ 2 psecの短パルスが350 psec間隔で存在する時間構造を持つパルスで、パワーは波長により異なるが数十 mJ 程度で、最大5 Hzである。

装置は、大きなトラブルもなく順調に稼動して利用実験に光供給しており、年間総運転時間は1500時間程度である。まとめて装置が停止するのは、電子銃カソード交換時である。カソードにはLaB₆単結晶を用いているが、電子ビームの出力低下によりFELパワーが低下した場合に交換する。カソードの寿命は、半年から一年半程度とばらつきがある。経験例がそれほど多くないため正確には言えないが、寿命の長短は、FEL運転時間（もしくはカソード通電時間）にはあまり相関がなく、製作によるカソードの個体差と思われる。なお電子銃については、本装置の運転とは別に新たな開発研究を行っている^[4]。

表1: MIR-FEL装置の主なパラメーター

< Electron Source > cathode RF frequency	RF Gun with a thermionic cathode LaB ₆ single crystal 2856 MHz
< Linac > accelerating structure length beam energy RF frequency	2 π /3 mode Constant Gradient 3 m Max. 40 MeV 2856 MHz
< Undulator > length period number of period magnetic field	Halbach type 1.28 m 32 mm 40 Max. 0.83 T
< Optical Resonator > cavity length mirror curvature Rayleigh length	3.36 m 2 m 0.45 m

¹ E-mail: timai@rs.noda.tus.ac.jp

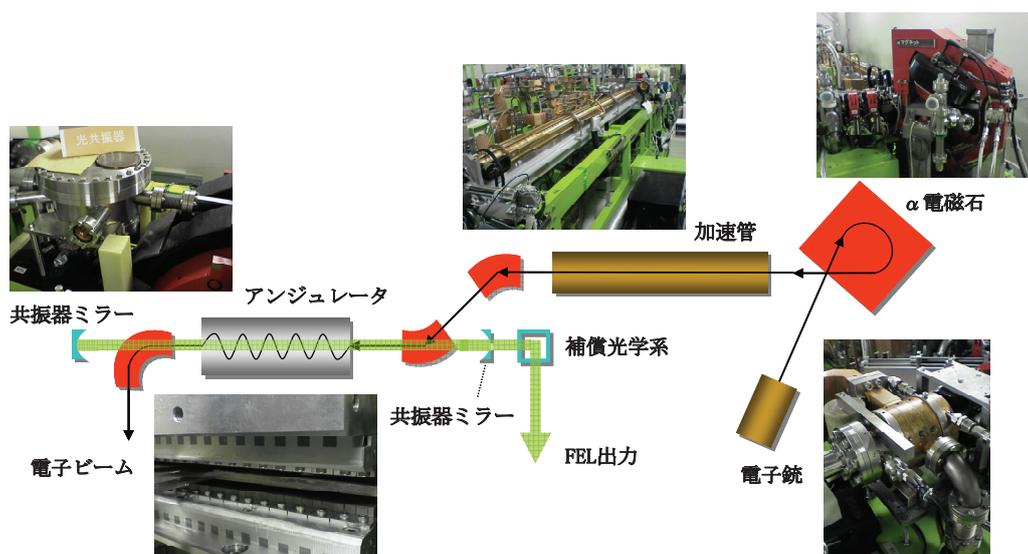


図1: MIR-FEL装置の概略図

3. FEL-TUSにおける光利用研究成果

この章では、FEL-TUSにおける最近の光利用研究の成果について、代表的なものを紹介する。

3.1 分子クラスターイオンの赤外光解離分光^[5,6]

水素結合性クラスターイオンは、溶液や生体系における水素結合の働きを理解するためのモデルとして注目されている。その構造や動的挙動の研究には、光の共鳴吸収とその後の前期解離によって生じる光解離生成物イオンの収量を質量分析法により測定し、光の吸収強度を見積もる「光解離分光法」が用いられている。ただし、この場合は大強度の波長可変レーザーが必要であり、2000 ~ 4000 cm^{-1} の中赤外領域では、光パラメトリック発振器 (OPO) を用いたレーザーにより様々な光解離スペクトルが測定されているが、2000 cm^{-1} 以下の領域のスペクトルについては、IR-FELが有用である。ここでは、FEL-TUSで行っている、代表的な水素結合性クラスターイオンであるプロトン化アンモニアクラスター正イオン $[\text{NH}_4^+(\text{NH}_3)_n]$ の実験結果を紹介する。

測定にはリフレクトロン型のTOF-MSを用いている。クラスター源で生成された $\text{NH}_4^+(\text{NH}_3)_n$ はTOF-MS初段にて質量選別され、IR-FELパルスが照射される。照射後の光解離生成物イオン $\text{NH}_4^+(\text{NH}_3)_{n-1}$ の収量を後段のTOF-MSにて測定することにより光解離断面積が算出できるので、FELの波数に対してプロットして光解離作用スペクトルが得られる。

図2にサイズ $n = 4$ から $n = 8$ までの $\nu_2(\text{NH}_3)$ 振動波数領域のスペクトルと密度汎関数法 (DFT) 計算によって最適化された幾何構造モデルを示す。 $n = 4$ では全ての NH_3 分子が等価な位置を占めており、1本のピーク(A)だけ観測されるのに対し、サイズが増加すると $\nu_2(\text{NH}_3)$ バンドは3本のピーク(A,B,C)に分裂

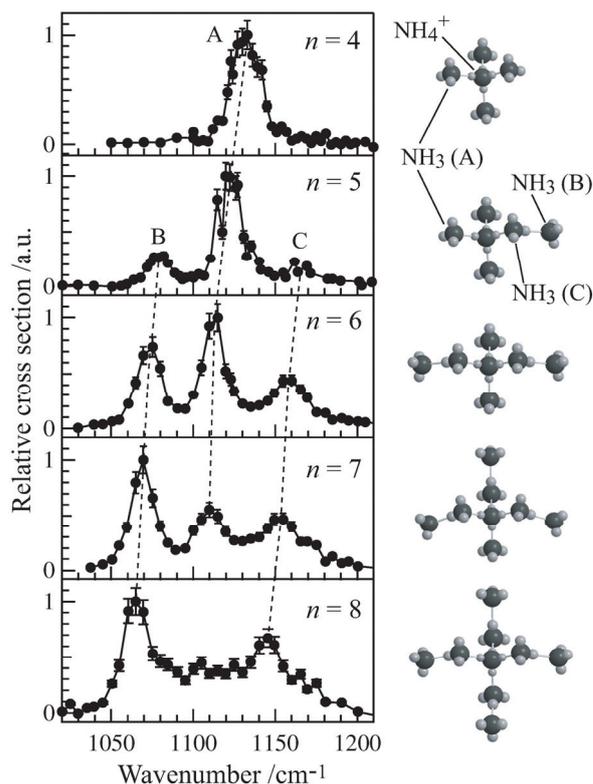


図2: $\text{NH}_4^+(\text{NH}_3)_n$ ($n = 4 \sim 8$) の $\nu_2(\text{NH}_3)$ 波数領域の赤外解離スペクトルと幾何構造モデル

する。図2に示した幾何構造モデルから分かるように、 $\text{NH}_3(\text{A})$ 、 $\text{NH}_3(\text{B})$ 、 $\text{NH}_3(\text{C})$ の3種の NH_3 分子が存在しているため、このような分裂が観測される。

赤外スペクトルの測定に成功し、さらに得られた一連のスペクトルは幾何構造を鋭敏に反映しており、理論計算によって提案された構造の妥当性を検討することができた。

3.2 赤外自由電子レーザーによる微量生体高分子解析^[7,8]

ライフサイエンス分野では、タンパク質の相互作用や分子機能を解明し生命システムにおけるその役割を研究するプロテオミクスやグライコプロテオミクス解析が行われている。解析対象は多種多様な分子種であり、構造情報を得るための分析手段として質量分析計 (MS) は不可欠であり、その利用により極微量な物質 (サンプル試料) をイオン化し、イオン化した物質の振る舞いを調べ、質量を迅速に求め同定することが可能となった。

本実験では、生体高分子の高効率切断手段として、レーザーを使用し真空中にトラップされたイオンや液体中の分子に中赤外レーザーを照射することでより効率よく断片化させ質量分析計で解析する手法を用いた。具体的には、フーリエ変換イオンサイクロトロン共鳴質量分析計 (Bruker 4.7 T FTICR MS) と MIR-FEL を組み合わせ、多光子吸収解離 (IRMPD) により得られたフラグメントの波長依存性 (5.7-9.3 μm) を解析した。一例として、シリアル・ルイス X(sLex) をサンプルとして用いた波長依存 MS スペクトラを図3に示す。波長依存解析を行ったところ、この糖鎖 ([sLex+Na]⁺) のグリコシド結合切断のために効果的な IRMPD を観測する波長域は 8.5-9.3 μm の長波長領域であることがわかった。

また、その他の実験結果も含め、FEL と FTICR MS の使用により生体高分子などの微量サンプルを対象として IR スペクトラ取得が可能であることが示された。

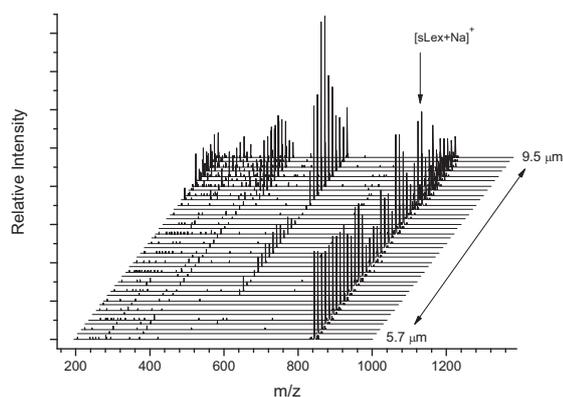


図3: シリアル・ルイスの波長依存MSスペクトラ

なお、本実験は「NEDO 健康維持・増進のためのバイオテクノロジー基盤研究プログラム/糖鎖エンジニアリングプロジェクト/糖鎖構造解析技術開発」に関わる委託研究として実施した。

3.3 その他の光利用研究

その他の光利用研究としては、「FEL励起による光異性化の研究」(東京理科大学理学部化学科)、「半導体のIR-FEL励起非線形可視発光」(東京理科大学理学部物理科)、「中赤外パルスレーザー光照

射による、選択的有機合成反応の開発」(群馬大学大学院工学研究科 応用化学・生物化学専攻) などがある。

4. 「赤外自由電子レーザー共用による先端計測分析技術研究拠点形成」支援事業

FEL-TUSは、平成19年度から文部科学省が新たに開始した委託事業「先端研究施設共用イノベーション創出事業」の【産業戦略利用】のプログラムに採択され、「赤外自由電子レーザー共用による先端計測分析技術研究拠点形成」支援事業を開始することになった。

この事業は、FEL-TUSの有するMIR-FELを産業界の広範な分野で幅広く利用(共用)することにより、赤外自由電子レーザーを光源とする次世代分析手法を開発することを主たる目的としている。

二つのプログラム「戦略分野利用推進」、「新規利用拡大」を通じて、産業界ユーザーに対して利用課題を募集することになった。前者については「遺伝子・タンパク質等の分析・計測のための先端技術開発」と「ものづくりのニーズに応える新しい計測分析技術・機器開発・精密加工技術」の二つを戦略分野と設定し、利用を推進する。また、FELを赤外光源として利用する簡易的な実験やこれまでの利用がなく挑戦的であるが新たに開拓できる分野については、後者の「新規利用拡大」として広くユーザーに門戸を開いている。

戦略分野については原則年間1回の募集で既に平成19年度分は締切ったが、新規利用については随時募集をしている。事業内容や利用課題への応募等の詳細、あるいは問合せなどは、FELリエゾンにて受け付けている²。

謝辞

FEL-TUSの研究活動には、共同研究ならびに加速器科学総合支援事業を通じ、高エネルギー加速器研究機構からご支援を頂いている。この場をお借りしまして、厚く御礼申し上げます。

参考文献

- [1] 今井貴之, 小城吉寛, 日本加速器学会誌 Vol.3, No. 1, 2006 (51-56).
- [2] T.Imai et al., Proceedings of the 1st Annual Meeting of Particle Accelerator Society of Japan and the 29th Linear Accelerator Meeting in Japan. (4B06)
- [3] T.Imai et al., Proceedings of the 2nd Annual Meeting of Particle Accelerator Society of Japan and the 30th Linear Accelerator Meeting in Japan. (21P068)
- [4] 平松崇英他「DAW型RF電子銃の設計」本会 (FP04)
- [5] K.Tono et al, J.Chem.Phys. 125, 224305 (2006).
- [6] K.Tono et al, Chem. Phys. Lett. 442, 206 (2007).
- [7] K.Fukui et al, J.Phys. Chem. B110, 16111(2006).
- [8] 福井一彦, 今井貴之 実用産業情報 39, 28(2006).

² <http://www.rs.noda.tus.ac.jp/liasion>