

会議報告

Second International Workshop on Non-Crystallographic Phase Retrieval に参加して
百生 敦 (東京大学大学院新領域創成科学研究科)

標記のワークショップは、SSRLのJ. Miaoによってデモンストレーションされたオーバーサンプリング法によるX線回折パターンからの位相回復とその顕微法への応用が契機となり、2001年5月に米国ローレンス・バークレー国立研究所にて行われた第1回に続くものである。X線結晶構造解析における位相問題は本誌の読者の多くが知るところであろうが、非結晶物質とX線や電子線との相互作用における位相回復を可能とするこの分野の動向に注目されている諸氏も多いと思う。

ワークショップは、ウィンターバケーション中のオーストラリア・ケアンズ郊外のリゾート地であるパームコーブにおいて、メルボルン大学のK. Nugent教授のホストにより2003年6月30日から7月2日までの3日間で行われた。X線および電子線を用いた位相回復の研究について、下記のプログラムによる講演と活発な議論が展開された。

【1日目】

- Phase discontinuities and phase (A. Peele; Univ. Melbourne)
- Coherence and phase discontinuities (I. McNulty, APS)
- Quantitative phase contrast tomography using coherent synchrotron radiation (P. Cloetens; ESRF)
- Imaging of quantum array structures with coherent and partially coherent diffraction (I. Vartanyants; Univ. Illinois)
- Atomic resolution imaging of a carbon nanotube from diffraction intensities (I. Vartanyants; Univ. Illinois)
- Origins of decoherence in coherent X-ray diffraction experiment (I. Vartanyants; Univ. Illinois)
- Crystallography without crystals and the potential of imaging single biomolecules (J. Miao; SSRL)
- Prospects for single-particle imaging at XFELs (H. Chapman; LLNL)
- Experimental diffractive imaging with X-rays, electrons and visible light (J. Spence; Arizona State Univ.)

[Poster session]

【2日目】

- Development of 3D microscopy of biological specimens using soft X-ray diffraction (J. Kirz; LBNL)
- Limits of Coherent X-ray diffraction for imaging small crystals (I. Robinson; Univ. Illinois)
- Composite techniques for phase retrieval and visualization in the near-Fresnel region (T. Gureyev; CSIRO)

- Unique phase recovery using astigmatic fields (K. Nugent; Univ. Melbourne)
- Convex counterparts to iterative transform algorithms and hybrid projection-reflection (R. Luke; Simon Fraser Univ.)
- Phase retrieval with atoms, bits and pixels (V. Elser; Cornell Univ.)

[Panel Discussion]

【3日目】

- From exit wave to structure: is the phase object approximation useless? (D. Van Dyck; Univ. Antwerp)
- Phase retrieval at atomic resolution in the presence of incoherence (M. P. Oxley; Univ. Melbourne)
- Comparison of two phase-retrieval methods in TEM; interference with phase plates and noninterference based on TIE (永山国昭; 生理研)
- 3D X-ray microscopy by phasing diffraction patterns: prospects and limitations (M. R. Howells; LBNL)

ワークショップには37名の参加があり、オーストラリアおよびニュージーランドから17名と最も多く、北米12名、日本5名、欧州3名といった内訳であった。比較的規模が小さい反面、和やかな雰囲気のもと、焦点を絞って掘り下げた議論がなされ、参加者にとっては極めて有意義なものであった。

本ワークショップの中心となっている、非結晶物質からの回折像より位相回復を目的とする研究の歴史は決して短くはなく、1970年代にまで遡ることができる。計測されたフラウンホッフ回折像に対してある位相(初期位相)を定めて、フーリエ変換とフーリエ逆変換の繰り返し演算により、もっともらしい位相に収束させるアルゴリズムがSaxtonとGerchbergにより提案されたのが起源といえよう。80年代初めにFienupによりある範囲より外を電子密度ゼロとできる「枠(support)」の導入が提案され、さらに、90年代初めのSayerによるオーバーサンプリング法の提案に至り、位相回復アルゴリズムの骨組みが構築された。

ワークショップでは、アルゴリズムの改良や比較についての講演も多くあったが、何といたっても実験的研究が確実に進捗しているとの印象を強くした。Science誌に掲載されたばかりの、Vartanyantsによる電子線を用いたカーボンナノチューブの原子分解能画像の報告が示すように、デモンストレーションに留まらず応用面での優れた成果が出てきていることは注目に値する。X線を使う場合は、原

子との相互作用断面積が電子よりはるかに小さいために、原子分解能への道のりは決して平坦ではないだろうが、XFELの実現が近づきつつある現在において、今後の進展が大いに期待される。

筆者らは縞走査X線干渉法を以前から研究しており、原子分解能化を意識したものではないが、位相計測とそれによる三次元観察を実現している。ワークショップでもポスターで最近の状況を報告した。他にも位相敏感イメージングということで国内に優れた研究は多く、今後の展開が大いに期待できるであろう。しかし、本ワークショップが

主題とする上記分野の日本のアクティビティに限れば、J. MiaoがSP8を使って研究を展開していることを除けば、いささか物足りない気がする。外国の動向をみると、位相回復手法の研究者とX線顕微鏡（イメージング）の研究者がうまく協働しているという印象を持った。自らも鑑み、研究をより一層発展させる上で必要な課題であろうと感じた次第である。次回はESRFのCloetensのホストにより、欧州（たぶんフランス）にて2年後の2005年に開かれる予定である。

SRI2003 satellite workshop X-ray Science with Coherent Radiation

鈴木芳生 (JASRI/SPring-8)

表記ワークショップがSRI2003のサテライトミーティングとして、本会議に先立ち8/22-23にLawrence Berkeley National Lab (LBNL)で開かれた。このワークショップの主催者はQun Shen (CHESS), John Spence (Arizona State Univ./LBNL), ならびにJohn Arthur (SSRL)であり、会議の主旨としてはコヒーレントX線が可能にする新しいサイエンスということであった。このような会議が開かれるようになった理由としては、TESLAに代表されるようなSASE-FELの進歩でX線領域の完全コヒーレント光源が夢の世界から現実へ一歩踏み出して来たこと、現状の光源を用いてコヒーレンスを利用した多くの研究が行われるようになってきたことであろう。例えば、10年前は非常に難しい実験であった硬X線領域のin-line holographyが第三世代光源の出現で今日では容易なものになってしまっている。参加者数はおおざっぱに見積もったところでは100名+ α 程度であるが、このようなテーマにしては思った以上に関心を持たれたように思う。

会議の内容は、23件のオーラル（すべて招待講演）と16件のポスター発表であり、光源から光学系、応用研究までの広い範囲を含めた構成になっていた。最初の講演はコヒーレントな次世代X線光源に関するものであり、ERLについてはコーネル大学のGrunerが一般論に続いてCHESSのERL計画の紹介を行った。7 GeV, 100 mA, エミッタンス15 pmrad, パルス長100 fsであり、これで波長1.5 Åでほぼ完全な一次のコヒーレントをもつ光源を目指している。FELに関してはHasting (SLAC)がスタンフォードにおけるFEL計画の紹介をおこなった。やはり短波長限界の目標値を1.5 ÅとしてSASE-FEL発表を目指す計画である。電子ビームパルス圧縮によりfs以下の短パルス光の発生を計画しているそうである。

利用研究の分野では大別して、光学素子と光学系に関するものと、応用研究では、スペックル、コヒーレント回折からの位相回復、ホログラフィーを含めた位相コントラストイメージングに分類される。

光学素子に関しては、石川哲也（理研）からElastic

Emission Machning (EEM)による超平滑反射面の加工とKirkpatrick-Baez (KB) 光学系による集光実験の発表があった。反射面の加工精度は非球面（平面楕円）でnmレベルの領域に到達しており、回折限界の集光（硬X線で90 nm）が可能だけでなく、表面形状誤差によるスペックルノイズがほとんどない理想に近い光学素子がEEMによって全反射光学系で達成されていることが示された。同様な非球面KBミラーに関してはESRFにおいて非対称bendingの方法でも行われており、同じように硬X線で90 nmの集光ビームサイズが達成されていることがCloetens (ESRF)から発表されていた。ミラーの片方が多層膜ミラーであり、結晶分光器は使わずに多層膜ミラーで単色化されている。ただし、こちらのオプティクスは完全とは言えないようで、実用に耐える領域はミラー全長の1/3程度、それでもスペックルによる強度むらが問題だと言っていた。フレネルゾーンプレートに関してはYun (Xradia Inc.)から、最外線幅50 nmの硬X線用FZP（パターンはウェットプロセスの金）の発表があった。これは製品レベルのものであり、60 K\$払えれば買える。もっとも、このFZPのユーザーであるAPSのPatersonに聞いてみると最外線幅100 nmのものはperfectだが50 nmのはまだそうとは言えないらしい。他には、屈折レンズに関してESRFとBNLからの発表があり、250 nm程度の分解能が達成されている。

X線領域のコヒーレンスを定量的に測定する手法としては、Paterson (APS)によるUniformly Redundant Array (URA)を用いた空間コヒーレンス測定法と、矢橋牧名氏 (JASRI)による強度相関法の講演があった。URAは一種のCoded Maskであり、スリット間隔をいくつか変えたヤングのスリットの干渉縞に相当するものを一度に測定する方法である。これに対して、強度相関法は可視光やマイクロ波でのHanbury-Brown & Twissの実験に相当するものであり、狭帯域分光器（バンド幅120 μ eV）とシンクロトロン放射のパルス特性を利用することで硬X線領域で2次のコヒーレンス測定が可能となっている。講