

BL47XU 光電子分光・マイクロCT

1. CT画像再構成の高速化

BL47XUでは、高分解能CT (u-CT) の開発とその利用実験を行っている。計測は高精細CCDカメラを用いて行い、標準的な実験条件では1データセットを30分程度で取得する。この間に生成されるデータは約10GBとなり、すべての画像再構成を行うためには、Pentium 4マシンを利用した場合、約30時間かかることが問題であった。これを解消するために2005年にItanium2を利用した10CPUクラスター並列計算機と4TBファイルサーバーを導入した。これにより、画像再構成に要する時間は約1時間に短縮された。

しかし、この数値は純粋に計算時間のみを勘案した物であり、データ転送や計算の際に発生するHDDへの読み書きの時間は考慮に入れていない。つまり、計算時間にプラスして、データ転送の時間が発生するため、実際には1つのデータセットあたり2時間程度かかってしまう。いずれにしても、画像再構成の速度が撮影速度には追いついておらず、ユーザーはデータを持ち帰ってから画像再構成を行わなければならない状態が続いた。また、測定はデータ取得系の改良もあり、2007年後半には測定時間が20分にまで短縮され、1日あたりの計算量はますます増加した。

このため、産総研の中野司博士により、画像再構成サブルーチンをマルチコアCPUに対応するための改造が行われ、Intel製のマルチコアCPU上での画像再構成の計算速度が格段に上がった。同時期にNVIDIAからGPGPU (General Purpose computing on Graphics Processing Unite) のための開発環境及びハードウェアがリリースされ、GPUを利用した計算環境が整った。2008年度にNVIDIA製 Tesla C1060を導入し (図1)、Intel製のマルチコアCPUを大きく凌駕する性能を達成した。表1に各CPUあるいはGPUを利用した場合の計算速度を挙げている。これは、幅2048pixel・投影数1800の投影像からCT像を再構成するときには要する時間を示しており、1つのデータセットではこれを約1300回繰り返す。この表から、2005年に導入したクラスター並列計算機の10CPU分の計算能力に対してTesla C1060は約4.5倍の性能を発揮していることが分かる (導入コストは1/10以下である)。

これだけの計算性能が達成されると、もっとも時間のかかるプロセスはデータ転送となってしまふ。このため、Tesla C1060を搭載した小型のPCを測定装置の横に置き、eSATAなど、なるべく高速なデバイスを利用してデータ転送することが望ましく、順次CT計測を行っているビームラインに導入していく予定である。

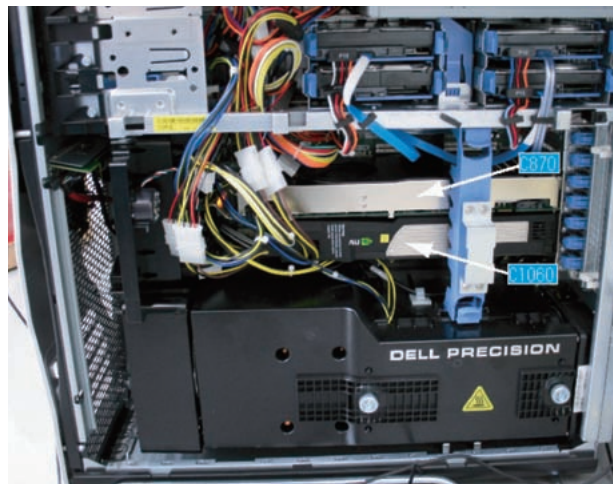


図1 NVIDIA製Tesla C1060

表1 CPUあるいはGPUの計算速度

CPU or GPU	Cores	Frequency (GHz)	time (sec)
Tesla C1060	240	1.296	0.7
Xeon (E5420)	4	2.5	5.7
C2Q (Q9550)	4	2.83	8.2
C2D (E6700)	2	2.66	15.4
Itanium2	1	1.6	31.6

C2D=Core 2 Duo, C2Q=Core 2 Quad

2. FZPを用いた集光マイクロビームにおける前置光学系による非点収差補正

BL47XUではフレネルゾーンプレート (FZP) を集光光学素子としたマイクロビームを用いて、走査型顕微鏡やマイクロ回折の各種ユーザー実験が定期的に行われている。このFZPを集光光学素子とするマイクロビームではシンクロトロン放射特有のエミッタンス非対称性に起因する非点収差が問題となることがある。現在のSPring-8の光源は、垂直方向には非常に小さいエミッタンスであり、通常の集光光学素子では回折限界に近い集光が可能である。それに対して水平方向では空間コヒーレンスが足りないために、集光光学素子の性能を生かすためには何らかの空間フィルターによりコヒーレンスを向上させる必要がある。具体的にはビームライン上流のどこかに設置したピンホールを仮想光源とするのが一般的な方法である。

単純にピンホールを光源とする光学系を設置する条件では、ビームサイズを小さくすることは可能であるが、それに伴ってフラックス密度の損失が生じる。垂直方向には元々十分良いコヒーレンスを持っていることを考えると、

損失を出来るだけ小さくするためには水平方向だけに仮想光源となるスリットを入れるのが適切であり、またこのスリットは光源に近いほど良いことになる。しかしながらこのスリットは物理的技術的制約により、本来の発光点から離れた位置に設置せざるを得ない。現在、ビームラインでもっとも発光点に近い位置に置くこと出来るスリットはフロントエンドの四象限スリットである。BL47XUではこのフロントエンドスリットは光源から約29mの位置にある。マイクロビーム実験を行う実験ハッチ1は光源から44m～48mの範囲である。したがって、FZPの位置はおおよそ発光点から46mと見なすことが出来る。この結果、図2に示すように垂直方向と水平方向で異なる焦点を結ぶことになる。

垂直、水平面内それぞれのマイクロビーム集光点は、結像方程式、

$$1/a + 1/b = 1/f$$

から、 $a = 46\text{m}$ 、及び $a = 17\text{m}$ を考慮して、BL47XUで使わ

れている典型的なFZPのひとつである焦点距離160mm (X線エネルギー 8keV) を考えると、 $b = 160.6\text{mm}$ (垂直方向)、 $b = 161.5\text{mm}$ となる。その差は0.9mmであるが、ここで想定しているFZP (最外線幅0.25 μm 、直径100 μm)の焦点深度より大きく、非点収差を無視することはできない。

この非点収差を解消するひとつの方法が、光軸に対してFZPを傾ける方法である^[1]。初期のマイクロビーム応用実験では実際にこの方法での非点収差補正を行っていた。しかしながら、この方法では、

1. X線エネルギーを変えた際に、非点収差補正に必要な傾斜角も変化する、
2. 同様に、異なるパラメータのFZPでは異なる傾斜角が必要である。

そのため、ユーザー実験に適用するには問題が残っていた。

一方BL47XUでは最近ビームライン光学系の改造が行われ、結晶分光器下流に鉛直偏向の+-配置全反射ミラーが設

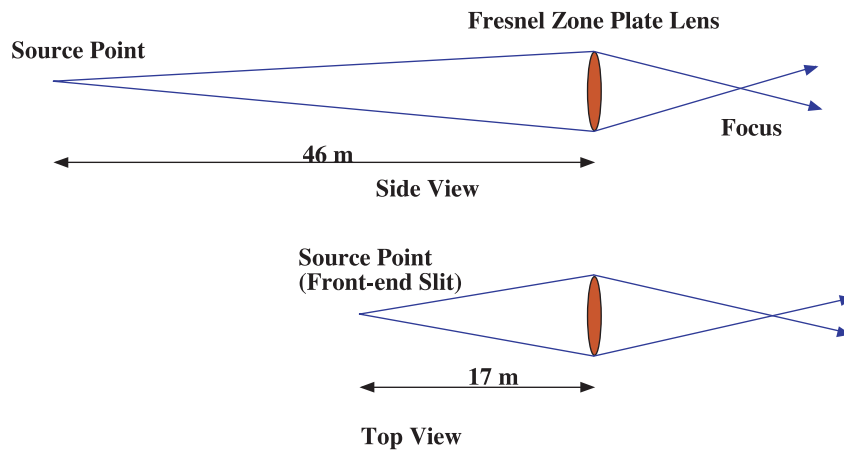


図2 水平方向のみがフロントエンドスリットを仮想光源とする場合の集光光学系概念図

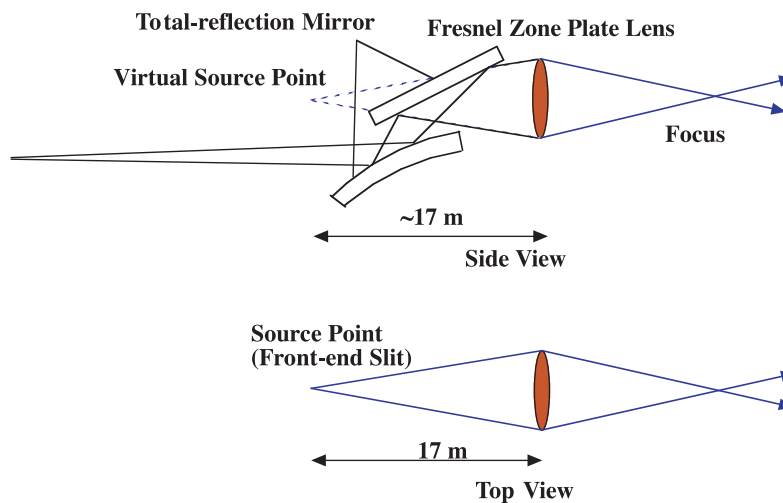


図3 凸円筒面全反射鏡による垂直方向仮想光源の生成と、非点収差補正の概念図。二枚の全反射鏡の第一ミラーだけを凸面にした場合。

置された。この全反射ミラーは弾性バンド機構により疑似円筒面を形成するものであり、高調波カットオフと共に、試料位置への集光が可能なのである。この弾性バンド機構は集光方向の凹面だけでなく、逆方向にバンドさせて凸面形状とすることも原理的には可能である。ここではこの前置光学系の反射鏡を凸円筒面として垂直方向の見かけの発光点位置を水平方向の仮想光源距離と一致させることによって、非点収差を解消する光学系を開発した。その光学系概念図を図3に示す。

この方法の有効性を確認するために、集光ビームサイズと集光位置を測定した結果を図4に示す。赤■は水平方向の集光、緑●は前置反射鏡を平面とした条件での測定結果である。フロントエンドスリットの開口は、垂直0.5mm、水平0.05mmであった。X線エネルギーは8keV。実験に用いたFZPは最外線幅0.25 μm 、8keVにおける焦点距離は160mmである。垂直方向の集光位置に対して、水平面内集光位置は約1mm長くなっている。この結果は上に示した計算値と矛盾しない。さらに上流側反射鏡のみ凸面にして、非点収差補正を行った条件での垂直方向の集光を青▲で示す。約1mmの焦点位置の違いが、ほぼ完全に補正されていることがわかる。この実験条件では、水平方向の集光ビームサイズの理論値はフロントエンドスリット開口と縮小率で決まる幾何光学的ビームサイズであり、そのため垂直方向の集光ビームサイズより大きくなっている。また、垂直方向の集光ビームサイズも理論値の半値幅0.25 μm より若干広がっているが、これは結晶分光器の振動、ナイフエッジ法によるビームサイズ測定誤差、などによるものと考えられる。

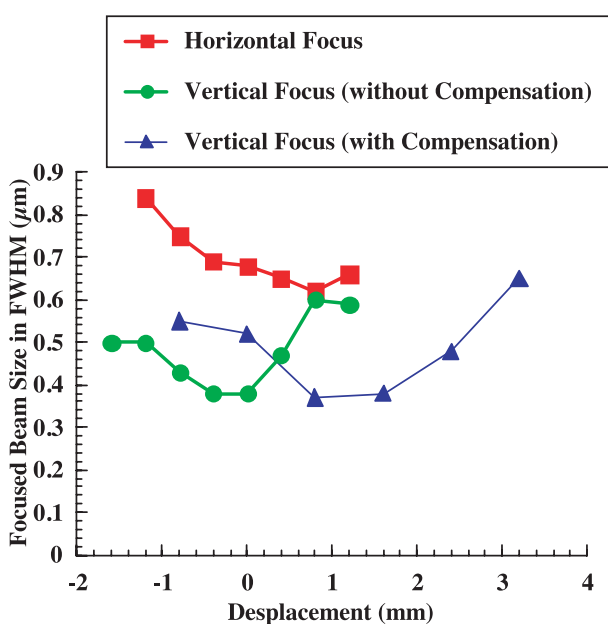


図4 焦点位置の測定結果。横軸の数値はFZP自体の焦点距離160mmを原点としてある。

この前置集光ミラーを利用した非点収差補正法は現在ほぼ全部のマイクロビーム実験に適用されている。

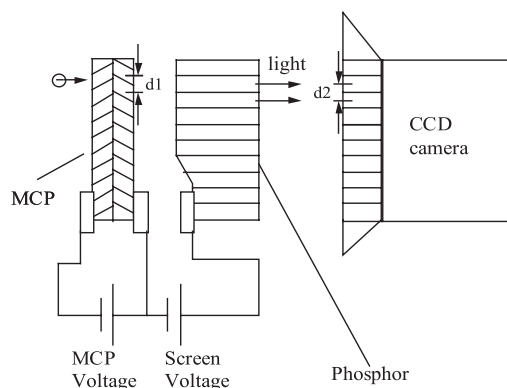
参考文献

- [1] Y. Suzuki, A. Takeuchi, H. Takano, T. Ohigashi and H. Takenaka : SPIE Proceedings **4499** (2001) 74-83.

利用研究促進部門 バイオ・ソフトマテリアルグループ
鈴木 芳生、竹内 晃久
上杉 健太郎

3. 硬X線光電子分光

硬X線を用いた光電子分光 (Hard X-ray Photoemission Spectroscopy : HAXPES) はバルク感性が高く、埋れた界面における化学結合状態を観測可能な測定手法である。本年度も前年に引き続き一般課題、重点ナノテクノロジー支援課題、重点産業利用課題に対して円滑な支援が実施され、活発なユーザー利用が行われている。特に産業利用におけるHAXPESは本年度からBL46XUでもユーザー利用展開されるに至り、新規ユーザーの増大など大きな広がりを見せている。HAXPESでは、物質の光イオン化断面積が小さいために捕集効率・スループットが小さくなる。この問題を克服して更なるハイスループット化を目指すため、光学ハッチに縦集光ミラー (反射材: Rh) 2部の増設を昨年度に引き続き行った。この縦集光ミラーと実験ハッチ内に配置された横集光ミラーを組み合わせることで、試料位置でのビームサイズ垂直38 μm ×水平34.8 μm 程度の集光を達成し、従来よりも50倍程度の光電子捕集強度が向上している。この高度化により、測定時間の大幅な短縮を実現しており、既に、ユーザー利用に提供している。また、検出器に関しては、MCP capillaryサイズとCCDカメラのpixelサイズを最適化することによってモアレ干渉効果が軽減し、測定精度が大幅に向上した。図5に光電子アナライザーの検出機構の概略図と電子スペクトル上でのモアレ干渉評価結果を示す。CCDカメラのpixelサイズを小さくすることにより、本来電子強度がない空準位領域で、以前までに観測されていた大きなノイズモジュレーションが、小さくなっていることが分かる。これによりS/Nが大幅に向上し、埋込まれた微量な元素に対して高い測定精度で観測することが可能となった。また、電子分析アナライザーを外部制御し、試料駆動と一元的に制御する計測ソフトウェアの開発を進めている。本開発の特徴は、コマンド形態をSPring-8の制御コマンドと統一化し、簡便にシーケンス機能を付与してユーザーの利便性を向上させることができる仕様となっていることである。2005年度から参画しているJST先端計測分析機器開発事業の本年度の進捗は、カークパトリック・バエズ (Kirkpatrick-Baez : K-B) 配置型集光ミラーを用いた光学系により、空間分解能1 μm



Scheme of the detection system in photoelectron analyzer

d1 : distance of one capillary to the nearest neighbor capillary in MCP

d2 : distance of one pixel to the nearest neighbor pixel in CCD camera

$$\text{Moire fringes } (D) = d1d2 / |d1 - d2|$$

S/N was improved by increasing |d1-d2|

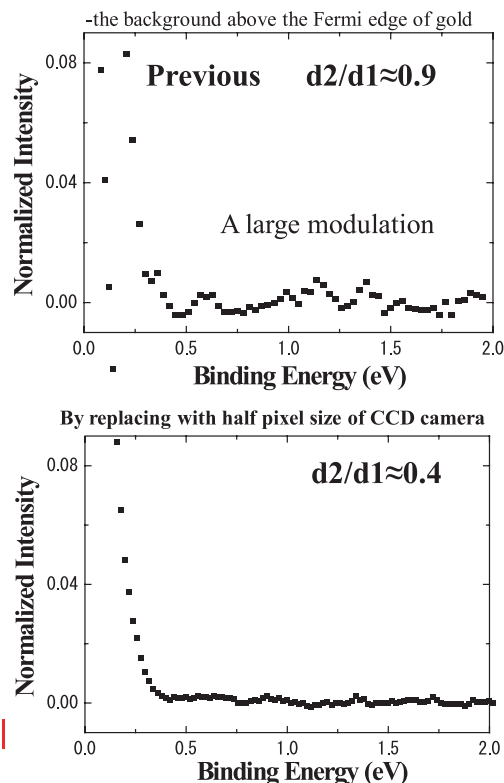


図5 BL47XUで使用している電子分析アナライザーの検出機構の概略図と評価結果。金の空準位領域で観測した電子スペクトル上のモアレ干渉の比較評価（下：改良後）で、CCDカメラのpixelサイズを最適化することによりS/Nが向上していることが確認できる。

を達成したことである。これにより、微小領域の電子状態を詳細に観測でき、走査マッピング計測と併せて μm オーダーでの元素分析に役立っている^[1]。この開発技術をユーザー利用へ展開すべく、更なるシステム整備を進めている。また昨年度後期から、新たにCREST研究課題「LSI用3次元カーボン・アクティブ配線の開発」が展開している。これはプラズマCVDを用いたグラフェン成長過程の詳細な評価に必要なシステムを構築し、特に絶縁膜上での高品質多層グラフェン形成技術の確立を目的とするもので、グラフェン構造の深さを分析した化学結合状態の評価を行っている。

参考文献

- [1] K. Kobayashi et al.: Nuclear Instrument and Methods in Physics Research A **601** (2009) 32-47.

利用研究促進部門

応用分光物性グループ 材料電子状態解析チーム

池永 英司、室 隆桂之