

SPring-8/SACL A

INFORMATION 利用者情報



ISSN 1341-9668 SPring-8 Document D2021-006

Vol.26 No.2
Spring 2021

SPRING-8/SACLA Information

目次 CONTENTS

理事長室から —JASRI 創立 30 周年を迎えて—

Message from President - Message Celebrating the 30th Anniversary of JASRI -

(公財) 高輝度光科学研究センター 理事長
President of JASRI

雨宮 慶幸
AMEMIYA Yoshiyuki

91

1. 最近の研究から / FROM LATEST RESEARCH

(JASRI 理事長ファンド採択研究課題)

大気非曝露下での電圧印加硬 X 線光電子分光法による有機薄膜トランジスタ動作中の電位分布の解明

Analysis of Electric Potential Distributions of an Organic Thin Film Transistor upon Controlled Exposure to Air Investigated by Bias-Applied Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy

(公財) 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 産業利用・産学連携推進室
Industrial Application and Partnership Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI

渡辺 剛
WATANABE Takeshi

92

(JASRI 理事長ファンド採択研究課題)

試料環境制御によるタンパク質結晶の構造多様性解析法の開発

Development of Protein Crystal Structural Analysis Method by Temperature and Humidity Control

(公財) 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター タンパク質結晶解析推進室
Protein Crystal Analysis Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI

馬場 清喜
BABA Seiki

98

新分野創成利用課題報告

ナノスケール実スピンデバイス開発に向けた新しい放射光利用

Initiative Study of Nano-Spin Devices Led by the Use of Advanced Synchrotron Light Source

京都大学 化学研究所
Institute for Chemical Research, Kyoto University
東北大学 多元物質科学研究所
Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University
大阪大学 産業科学研究所
The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University
名古屋大学 大学院工学研究科
Graduate School of Engineering, Nagoya University
名古屋工業大学 大学院工学研究科
Graduate School of Engineering, Nagoya Institute of Technology

小野 輝男
ONO Teruo
岡本 聡
OKAMOTO Satoshi
千葉 大地
CHIBA Daichi
水口 将輝
MIZUGUCHI Masaki
壬生 攻
MIBU Ko

101

長期利用課題報告 1

イオンポンプの結晶構造解析

Crystal Structure Analysis of Ion Pumps

東京大学 定量生命科学研究所
Institute for Quantitative Biosciences, The University of Tokyo

豊島 近
TOYOSHIMA Chikashi

109

長期利用課題報告 2

熱機関用超高速・マイクロスケール燃料噴霧の X 線計測：新たな X 線計測技法の構築による未解明の物理因子解析

X-ray Study of High-Speed Microscale Fuel Sprays for Modern Engines:

Development of Advanced X-ray Measurement Techniques for the Analysis of Undiscovered Physical Properties

仁荷大学 機械工学科
Department of Mechanical Engineering, Inha University
(国) 産業技術総合研究所 省エネルギー研究部門
Research Institute for Energy Conservation, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology
神戸大学 大学院海事科学研究科
Graduate School of Maritime Sciences, Kobe University
マツダ (株) MBD 革新部
MBD Innovation Dept., Mazda Motor Corporation

文 石洙
MOON Seoksu
黄 魏迪
HUANG Weidi
宋 明良
SOU Akira
和田 好隆
WADA Yoshitaka

119

長期利用課題報告 3

先端 X 線分光法を用いた分子地球化学的研究によるサステナブル科学への貢献

Contribution to Sustainable Sciences by Molecular Geochemistry using Advanced X-ray Spectroscopy

東京大学 大学院理学系研究科
Graduate School of Science, The University of Tokyo

高橋 嘉夫
TAKAHASHI Yoshio

124

長期利用課題報告 4

中空構造をもつ巨大自己集合錯体分子群の単結晶 X 線構造解析と機能創出

Synchrotron Studies on Self-Assembled Huge Metal Complexes Toward Their Applications

東京大学 大学院工学系研究科
School of Engineering, The University of Tokyo
澤田 知久
SAWADA Tomohisa

堂本 悠也
DOMOTO Yuya
藤田 誠
FUJITA Makoto

133

2. ビームライン / BEAMLINES

XAFS 標準試料データベース

XAFS Standard Sample Database

(公財) 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 産業利用・産学連携推進室
Industrial Application and Partnership Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI
(公財) 高輝度光科学研究センター 情報処理推進室
Information-technology Promotion Division, JASRI

大淵 博宣
OFUCHI Hironori
松本 崇博
MATSUMOTO Takahiro

138

機械学習手法の導入によるデータ解析高度化 Upgrade of Data Analysis Method by using Machine Learning Technique (公財) 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 分光推進室 Spectroscopy Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI	水牧 仁一朗 MIZUMAKI Masaichiro	142
3. 研究会等報告/WORKSHOP AND COMMITTEE REPORT 「マルチスケール 3D 画像取得解析セミナー」報告 Report of Web Seminar on Multiscale 3D Image Analysis (公財) 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 散乱・イメージング推進室 Scattering and Imaging Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI	安武 正展 YASUTAKE Masahiro 上杉 健太郎 UESUGI Kentaro	148
SPRUC 第3回 BLs アップグレード検討ワークショップ報告 Brief Report of SPRUC 3rd Workshop on BLs Upgrade SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 行事幹事/筑波大学 数理工学系 エネルギー物質科学研究センター Faculty of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba	西堀 英治 NISHIBORI Eiji	152
SACLA Users' Meeting 2021 Report on SACLA Users' Meeting 2021 (公財) 高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室 XFEL Utilization Division, JASRI	大和田 成起 OWADA Shigeki	159
4. SPring-8/SACLA 通信/SPring-8/SACLA COMMUNICATIONS 2021B 期 SPring-8 利用研究課題募集について Call for 2021B SPring-8 Research Proposals 登録施設利用促進機関 (公財) 高輝度光科学研究センター Registered Institution for Facilities Use Promotion, JASRI		162
2021B 期 SACLA 利用研究課題の募集について Call for 2021B SACLA Research Proposals 登録施設利用促進機関 (公財) 高輝度光科学研究センター Registered Institution for Facilities Use Promotion, JASRI		163
2021B 期 SACLA 試験利用の募集について Call for Proposals for 2021B SACLA Feasibility Study Program 登録施設利用促進機関 (公財) 高輝度光科学研究センター Registered Institution for Facilities Use Promotion, JASRI		164
SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて Report on the PRC (Proposal Review Committee) of SPring-8 SPring-8 利用研究課題審査委員会 委員長/関西学院大学 工学部 School of Engineering, Kwansei Gakuin University	藤原 明比古 FUJIWARA Akihiko	165
SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 1 -生命科学分科会- Proposal Review Committee (PRC) Report by Subcommittee Chair - Life Science - SPring-8 利用研究課題審査委員会 生命科学分科会主査/大阪大学 大学院薬学研究所 Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Osaka University	井上 豪 INOUE Tsuyoshi	167
SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 2 -散乱・回折分科会- Proposal Review Committee (PRC) Report by Subcommittee Chair - Diffraction and Scattering - SPring-8 利用研究課題審査委員会 散乱・回折分科会主査/(一財) 総合科学研究機構 中性子科学センター Neutron Science and Technology Center, CROSS	舟越 賢一 FUNAKOSHI Ken-ichi	170
SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 3 -XAFS・蛍光分析分科会- Proposal Review Committee (PRC) Report by Subcommittee Chair - XAFS and Fluorescence Analysis - SPring-8 利用研究課題審査委員会 XAFS・蛍光分析分科会主査/ (株) 日産アーク 解析プラットフォーム開発部 Analysis Platform Department, NISSAN ARC LTD.	今井 英人 IMAI Hideto	173
SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 4 -分光分科会- Proposal Review Committee (PRC) Report by Subcommittee Chair - Spectroscopy - SPring-8 利用研究課題審査委員会 分光分科会主査/東京大学 物性研究所 Institute for Solid State Physics, University of Tokyo	松田 巖 MATSUDA Iwao	174
SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 5 -産業利用分科会- Proposal Review Committee (PRC) Report by Subcommittee Chair - Industrial Application - SPring-8 利用研究課題審査委員会 産業利用分科会主査/ (公財) 科学技術交流財団 あいちシンクロトロン光センター Aichi Synchrotron Radiation Center, Aichi Science and Technology Foundation	渡辺 義夫 WATANABE Yoshio	175
SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 6 -人文・社会科学分科会- Proposal Review Committee (PRC) Report by Subcommittee Chair - Humanities and Social Sciences - SPring-8 利用研究課題審査委員会 人文・社会科学分科会主査/山陽学園大学/林原美術館 Sanyo Gakuen University / Hayashibara Museum of Art	谷一 尚 TANIICHI Takashi	177
SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 7 -先進技術産業応用分科会- Proposal Review Committee (PRC) Report by Subcommittee Chair - Industrial Application using Advanced Technology - SPring-8 利用研究課題審査委員会 先進技術産業応用分科会主査/高エネルギー加速器研究機構 High Energy Accelerator Research Organization	野村 昌治 NOMURA Masaharu	178

SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 8 -長期利用分科会- Proposal Review Committee (PRC) Report by Subcommittee Chair - Long-term - SPring-8 利用研究課題審査委員会 長期利用分科会主査/高エネルギー加速器研究機構 High Energy Accelerator Research Organization	野村 昌治 NOMURA Masaharu	179
第 46 回 (2021A) SPring-8 利用研究課題の採択について The Proposals Approved for Beamtime in the 46th Research Term 2021A 登録施設利用促進機関 (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 Registered Institution for Facilities Use Promotion, User Administration Division, JASRI		181
第 45 回共同利用期間 (2020A) において実施された SPring-8 利用研究課題 2020A Proposal and User Statistics 登録施設利用促進機関 (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 Registered Institution for Facilities Use Promotion, User Administration Division, JASRI		186
2017B 期 採択「新分野創成利用」における研究グループの事後評価について Post-Project Review of Epoch-Making Initiatives Projects Starting in 2017B (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 User Administration Division, JASRI		192
2018A 期 採択長期利用課題の事後評価について - 1 - Post-Project Review of Long-term Proposals Starting in 2018A -1- (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 User Administration Division, JASRI		195
SACLA 利用研究課題審査委員会を終えて Report on the PRC (Proposal Review Committee) of SACLA SACLA 利用研究課題審査委員会 委員長/大阪大学 蛋白質研究所 Institute for Protein Research, Osaka University	中川 敦史 NAKAGAWA Atsushi	199
2020A 期において実施された SACLA 利用研究課題 (共用課題) について The SACLA Public Proposals and User Statistics in 2020A Research Term 登録施設利用促進機関 (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 Registered Institution for Facilities Use Promotion, User Administration Division, JASRI		202
SPring-8/SACLA 利用者選定に係る 2019-2020 年度委員会の委員名簿の公表 List of SPring-8/SACLA User Selection-Related Committee/Subcommittee Members for FY2019-2020 Term 登録施設利用促進機関 (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 Registered Institution for Facilities Use Promotion, User Administration Division, JASRI		203
SPring-8 運転・利用状況 SPring-8 Operational Status (国) 理化学研究所 放射光科学研究センター RIKEN SPring-8 Center		208
論文発表の現状 Statistics on Publications Resulting from Work at SPring-8/SACLA (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 User Administration Division, JASRI		210
最近 SPring-8 もしくは SACLA から発表された成果リスト List of Recent Publications (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 User Administration Division, JASRI		214
2020A 期における SPring-8/SACLA ユーザー要望等について SPring-8/SACLA User Requests in 2020A 登録施設利用促進機関 (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 Registered Institution for Facilities Use Promotion, User Administration Division, JASRI		240
利用系グループ活動報告 情報処理推進室 情報処理推進グループ Activity Reports - Information-technology Promotion Group, Information-technology Promotion Division (公財) 高輝度光科学研究センター 情報処理推進室 Information-technology Promotion Division, JASRI	佐治 超爾 SAJI Choji	242
5. 談話室・ユーザー便り/USER LOUNGE・LETTERS FROM USERS SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 四季報 SPRUC Communications SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 会長/広島大学 大学院先進理工系科学研究科 Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University	木村 昭夫 KIMURA Akio	246
6. 告知板/ANNOUNCEMENTS 「SPRUC 2021 Young Scientist Award」の実施について SPRUC 2021 Young Scientist Award - Call for Nominations -		247
SPring-8 シンポジウム 2021 SPring-8 Symposium 2021		248
第 5 回 SPring-8 秋の学校 開催のご案内 SPring-8 Autumn School 2021		249

JASRI 創立 30 周年を迎えて

公益財団法人高輝度光科学研究センター
理事長 雨宮 慶幸

公益財団法人高輝度光科学研究センター (JASRI) は、2020 年 12 月で創立 30 周年を迎えました。

JASRI の使命は、特定先端大型研究施設である SPring-8/SACLA に関わる、①利用に対する支援、②利用者の選定、③施設の運転・保守、④技術開発です。

SPring-8/SACLA から発生される目に見えない光 (放射光) と目に見えないナノ物質世界が出会うことによって、ナノ物質世界の形や状態が可視化できるようになります。その可視化を通して、人類は自然界に対する理解を飛躍的に深めることができ、産業応用を通してより豊かな社会を実現することができます。ナノ物質世界を正しく見ることは、約 2,500 年前に釈尊が説いた八正道の第 1 番目の実践項目である正見 (しょうけん) に相通じます。釈尊は、自分の心を正しく見つめること、すなわち、正見の重要性を説きました。現代科学は、放射光を通して自然界を構成しているナノ物質世界を正しく見つめることの重要性を説いています。COVID-19 への対応も同様で、ナノ物質世界を正しく見つめることが重要です。心身共に豊かな社会を築く上で、賢人の教えと放射光科学の役割は車の両輪のような関係にあり、SPring-8/SACLA の存在意義は、益々大きくなっています。

それに比例して、JASRI の使命も益々大きくなっています。SPring-8/SACLA の威力を最大限に発揮するには、設備・装置群への投資が必要なことは言うまでもありませんが、それを有効に利活用するた

めの研究者・技術者・事務職員 (以後、研究者) が重要な役割を担っています。JASRI の誇りは、その役割を担う、高い志を持った優秀な研究者を擁していること、すなわち、人材の宝庫であるということです。今後もそのような誇りを持って、JASRI は、設置者である理化学研究所、及び利用者コミュニティである SPRUC と情報を密に共有して、ナノ物質世界を正しく見つめることを通して豊かな社会の構築に貢献していきたいと、その意を新たにしています。近い将来、SPring-8 が高輝度化され SPring-8-II が実現する予定です。光源だけでなく、研究者自身も高輝度に輝く高輝度研究者センターを目指したいと思っています。

地球レベルの環境破壊が進む中、global commons という視点が重要になってきました。自然は、地球規模で人類が共有している資産という意味です。と同時に、責任ある stewardship (管理・運営) が問われています。海外からを含む数多くの研究者が共用する SPring-8/SACLA は global commons であると云ってもよく、その stewardship を担う JASRI には、大きな責任があると考えています。

人類社会の持続的発展のために、そして、我が国が今後も科学技術分野で世界のトップランナーであり続けるために、SPring-8/SACLA における「場」の構築、「人」の育成、研究成果を通じた「知」の創出に、JASRI は今後も貢献していく所存です。

皆様、今後とも、よろしくお願い致します。

(JASRI 理事長ファンド採択研究課題)

大気非曝露下での電圧印加硬 X 線光電子分光法による 有機薄膜トランジスタ動作中の電位分布の解明

公益財団法人高輝度光科学研究センター

放射光利用研究基盤センター 産業利用・産学連携推進室

渡辺 剛

Abstract

有機薄膜トランジスタ (OTFT: Organic Thin-Film Transistor) は大気曝露することでデバイス特性の劣化が著しく進行することが知られている。従って大気曝露が OTFT 動作時の電子状態に及ぼす効果を解明することは重要である。本研究では、OTFT 作製、電気特性の評価および電圧印加硬 X 線光電子分光 (HAXPES: Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy) 測定を大気非曝露で実施できるシステムを開発した。このシステムを用いて、大気曝露が OTFT 動作中の電位分布形成に及ぼす効果を調べた。

1. はじめに

次世代エレクトロニクス材料として注目される有機デバイスでは、物質内部での電荷移動のしやすさを示す物理量である移動度の向上や、高い再現性のあるデバイス動作の実現が求められている。代表的な有機デバイスの一つである OTFT の概略を図 1 に示す。一般的に OTFT は、有機半導体材料だけでなくゲート電極、ソース電極、ドレイン電極や絶縁膜といった無機材料が組み合わされた有機/無機複合材料で構成されている。この OTFT に対して、図 1 のように 2 方向から電圧 (ゲート・ソース電圧: V_{gs} とドレイン・ソース電圧: V_{ds}) を印加すると、①ソース電極から電荷が注入され、②絶縁膜上に形成された有機半導体薄膜に電荷が蓄積し、さらに③ソース・ドレイン間で電荷移動が生じることでトランジスタの機能が発現すると考えられている^[1-3]。

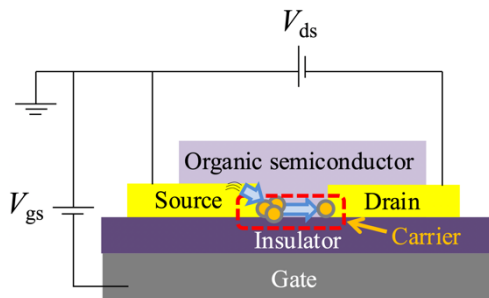


図 1 ボトムコンタクト型 OTFT の概略図。p 型 OTFT では $V_{gs} > V_{th}$ を超えた負の電圧を印加することで、有機半導体内部にキャリアが注入し始める。

従って OTFT の電荷輸送特性を向上させるためには、OTFT 動作 (V_{gs} 、 V_{ds} 印加) 中の電子状態を解明し電荷移動を制御する必要がある。特に OTFT は大気 (特に大気中に含まれる水や酸素) 曝露することで移動度の低下や、トランジスタを On 状態にするために必要な電圧 (しきい電圧: V_{th}) の増大といったデバイス劣化が著しく進行することが報告されている^[4,6]。このため大気曝露が OTFT 動作時の電子状態に及ぼす効果を解明することは、実用の観点から重要な課題となっている。

上記の効果を検討する手段として、OTFT 動作中の電位分布を検討することは有効である。これは OTFT 内部に形成される電位分布を調べることで、OTFT の劣化要因とされる捕獲準位などの発生箇所やエネルギー値を推定できるためである。従って大気曝露前後における OTFT 動作中の電位分布を調べることで、これら劣化要因の起源を定量的に解明することが期待できる。これまで OTFT 動作中の電位分布を調べる手法には、ケルビンフォースプローブ顕微鏡 (KFM: Kelvin probe Force Microscopy) 測定や真空紫外から軟 X 線領域 (数十 eV から 1.5 keV 程度) の光を励起光とする光電子分光測定が提案されてきた^[7-13]。とりわけ KFM 測定では、金属/有機半導体界面における接触抵抗の定量化や、デバイス構造の違いが電位分布形成に及ぼす効果といった素過程の解明に貢献をし

できた¹⁴⁾。しかし、従来の手法によって得られる知見は最表面から数 nm 以内の情報に限られていた。実用的な OTFT では、数十 nm を超える有機半導体薄膜を形成させる場合が多い。このため実用 OTFT では、①電荷注入が行われている金属膜下の有機半導体薄膜や、②電荷輸送を担う有機半導体薄膜/絶縁膜界面近傍といったトランジスタの性能を決定付ける「有機薄膜深部」の電位分布を調べることは困難とされてきた。

そこで我々は HAXPES 法に着目した。HAXPES 法は数 keV～十数 keV の硬 X 線を励起光として用いる。このため HAXPES 測定で検出される光電子の運動エネルギーは従来の光電子分光法より数倍以上大きくなり、薄膜深部の光電子を検出することが可能である。従って HAXPES 測定を OTFT に適用すれば、「有機薄膜深部」の電位分布を調べることが期待できる。

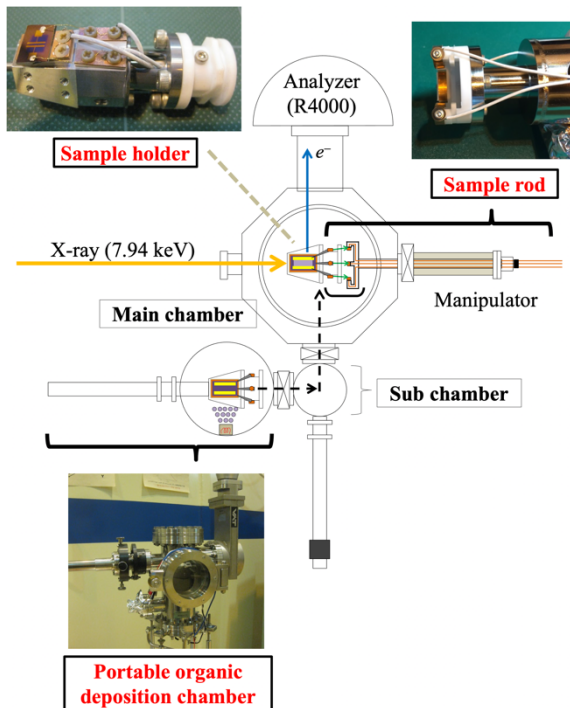


図2 HAXPES 測定装置の概略図。

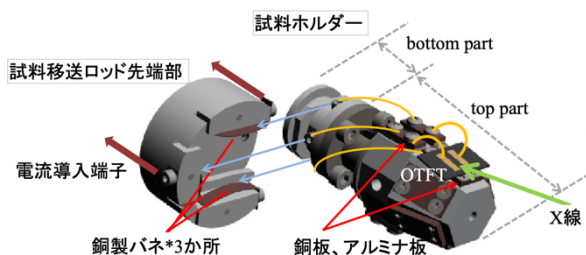


図3 作製した試料ホルダー（右）と電流導入端子付き試料移送ロッド（左）の概略図。これらがドッキングすることで OTFT に電圧印加することができる。

また、HAXPES 測定を含む電圧印加光電子分光測定では、束縛エネルギーだけでなく電圧印加によって変化した静電ポテンシャルを反映した光電子スペクトルを観察することができる¹⁵⁻¹⁷⁾。これまでに我々は、電圧印加 HAXPES 測定を用いた TFT 動作中の半導体薄膜内部の電位観察技術の開発に取り組んできた¹⁸⁻²⁰⁾。さらに本研究では、試料作製から電圧印加 HAXPES 測定までの試料環境を大気非曝露に制御できるシステムの開発を行った。また開発したシステムを利用して大気曝露前後における OTFT 動作中の電位分布を観察することで、大気曝露が OTFT の電位分布形成に及ぼす効果を検討した。

2. 実験

本実験は SPring-8 BL46XU で行った。蓄積リングで発生した放射光を HAXPES 測定チャンバーへ導入するための光学機器の装置構成や調整条件の詳細は、参考文献[21,22]に示したとおりである。図2には、本実験で用いた試料準備室を含んだ HAXPES 測定装置の概略を示す。本研究では既存の HAXPES チャンバーに取り付け可能な有機薄膜真空蒸着チャンバー、試料環境制御に必要な機器である試料ホルダーおよび電流導入端子付き試料移送ロッドを新規に導入した。以下では本研究で導入した各機器を紹介した後に、詳細な実験条件について説明する。

2-1. 新規導入した実験機器

大気非曝露環境下での OTFT 作製、電気特性評価と電圧印加 HAXPES 測定を実施するにあたり、試料ホルダーと試料移送ロッド開発は特に重要な開発項目であった。図3には、開発した試料ホルダーと試料移送ロッド先端部の概略図を示す。作製した試料ホルダーは、‘top part’ と ‘bottom part’ に大別される。top part は主にゲート電極、ソース電極、ドレイン電極および絶縁膜が形成された基板を固定する箇所として使用される。top part に基板を固定する際は、基板側から銅板とアルミナ板を挟んで固定する。この銅板にはゲート電極が接しており、銅板を通じて V_g が印加される。 V_g を印加するにはアルミナ板の設置によって試料ホルダー全体に電圧が印加されない仕様としている。一方の bottom part は、マニピュレータに取り付けられている電流導入端子付き試料移送ロッドとドッキングする箇所として使用される。

電流導入端子付き HAXPES 測定試料移送ロッドに関しては図3に示すように、先端部がテフロンと3つの銅製バネで構成されている。この銅製のバネは電流導入端子と接続されており、ドッキングすると銅製バネと試料ホルダー-bottom part に設置された3個のネジ(図3青矢印)が接触する。これら3個のネジは試料ホルダー-top part 部のゲート、ソース、ドレインの電極と各々が接続されている。このため試料ホルダーと試料移送ロッドをドッキングさせることで、電流導入端子を通じた外部からの OTFT への V_{ds} 、 V_{gs} 印加が可能となる。この開発で OTFT 作製、電気特性評価と電圧印加 HAXPES 測定を大気非曝露環境下で連続的に実施することが可能となった。

2-2. 実験条件

本実験ではボトムコンタクト型 OTFT を作製した。基板には、パターニング Au 膜および 300 nm の熱酸化 SiO_2 絶縁膜付き Si 基板を用いた。Si 基板はホウ素をヘビードープした p 型基板を使用し、ゲート電極として用いた。ソース、ドレイン電極に用いたパターニング Au 膜は真空蒸着法により作製した。チャンネル幅 (W) とチャンネル長 (L) はそれぞれ 5 mm、0.5 mm

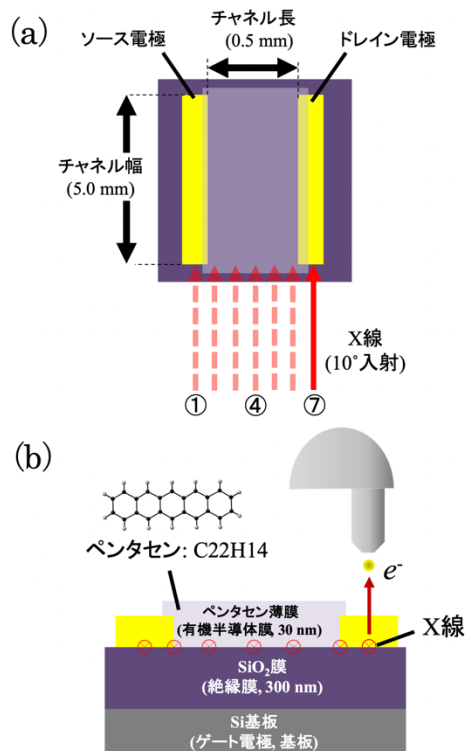


図4 HAXPES のマッピング測定の概要。(a) 上面図、(b) 断面図。図ではチャンネル長方向とチャンネル幅方向の長さの比率を変えている。

である。また有機半導体薄膜には、過去に表面電位分布を含む様々な物性が明らかにされている低分子材料のペンタセン(化学式: C₂₂H₁₄)を使用した^[23-27]。ペンタセン薄膜は、蒸着速度と膜厚の条件を各々0.01 nm/s、30 nm で作製した。

OTFT 作製後に試料ホルダーとともに HAXPES 測定チャンバーへ搬送し、電圧印加 HAXPES 測定を行った。励起 X 線エネルギーは 7.94 keV とした。X 線は試料表面に対して約 10° の条件で入射し、光電子の取り出し角度は 80° とした。使用した X 線のビームサイズは縦 0.02 mm 横 0.2 mm で、OTFT に対するフットプリントはチャンネル長方向、チャンネル幅方向でそれぞれに 0.02 mm、1 mm となっている。またパスエネルギーは 200 eV とし、Au 4f、C 1s、Si 1s のスペクトルを取得した。

光電子分光器は Scienta Omicron 社製の R4000L1-10kV を使用した。本実験の HAXPES 測定では、図4で示すようにソース電極、ドレイン電極、チャンネルを7分割した HAXPES マッピング測定を実施した。 V_{ds} 、 V_{gs} の印加には、2 台の Keithley 6517A を使用した。印加電圧は、 $V_{ds} = 0$ V、 $V_{gs} = 0$ V (ゼロバイアス) および、 $V_{ds} = -20$ V、 $V_{gs} = -30$ V (OTFT オン) とし、それぞれの印加条件下で HAXPES のマッピング測定を実施した。また、電圧印加 HAXPES 測定前後において OTFT の電気特性として伝達特性(ドレイン・ソース電流の V_{gs} 依存性)を評価した。

3. 実験結果

3-1. OTFT 大気非曝露

図5(a)には、ゼロバイアス時の HAXPES マッピング測定で得られた C 1s、Si 1s スペクトルを示す。各スペクトルの縦軸は光電子強度、横軸は光電子の運動エネルギーである。各チャンネルおよび電極位置においても、C 1s は 7654.5 eV、Si 1s は 6095.5 eV 近傍に各々ピークが観察されていることが分かる。今回の測定では、有機半導体層だけでなく各薄膜下に存在する絶縁膜からのスペクトルが得られている。HAXPES 測定では、従来の手法では困難であった深部や界面領域の知見も獲得できていることを改めて強調したい。本実験で観察された C 1s、Si 1s のスペクトルは各々ペンタセン薄膜、SiO₂ 膜に由来すると考えられる^[19]。これらの結果より、観察された C 1s スペクトルは絶

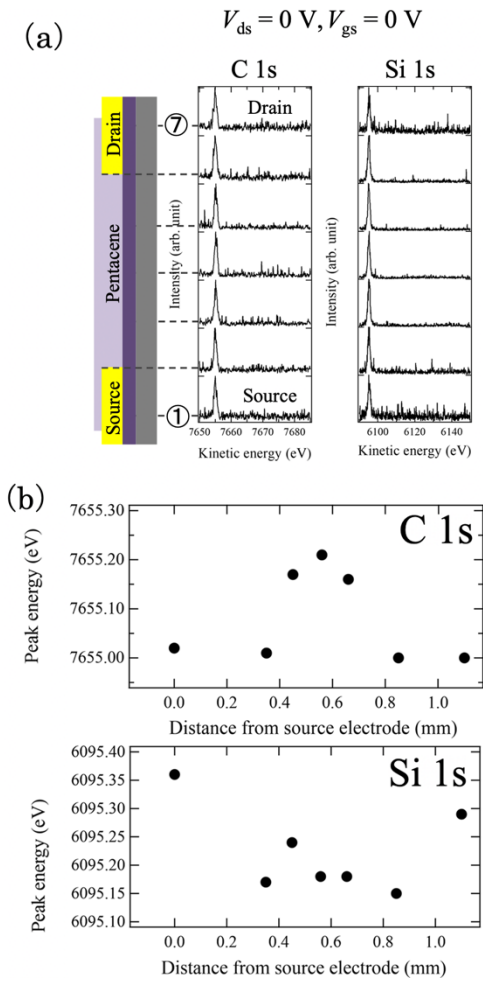


図5 (a) ゼロバイアス時の HAXPES マッピング測定で得られた C 1s, Si 1s スペクトル。(b) 見積もられた C 1s, Si 1s ピークエネルギーとソース電極からの距離との関係。

Without air exposure

$$V_{ds} = -20 \text{ V}, V_{gs} = -30 \text{ V}$$

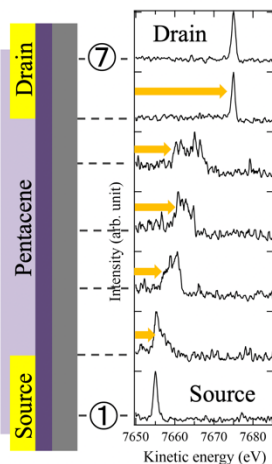


図6 大気非曝露下 OTFT オン時の HAXPES マッピング測定で得られた C 1s スペクトル。

縁膜界面近傍に形成されているペンタセン薄膜深部の状態も反映していると考えられる。さらに疑フォークト関数による当てはめを行うことで、得られた光電子スペクトルのピークとなる光電子運動エネルギーを見積もった。当てはめによって見積もられた C 1s, Si 1s のピークエネルギーとソース電極からの距離との関係をプロットしたものを図 5(b)に示す。ここで、ソース電極からの距離とは、ソース電極下 (図 4(a)①に対応) を原点とするドレイン電極下 (図 4(a)⑦に対応) までの距離を示す。ソース電極下とドレイン電極下のピークエネルギーを比較すると 0.10 eV 以下のわずかな差異であったのに対し、チャンネルと電極下を比べるとチャンネルで高エネルギー側に 0.15–0.20 eV 程度の有意なシフトが観察された。これはゼロバイアスの印加によって、電極下の有機薄膜とチャンネル部分の有機薄膜との間に電位差が発生したことを示している。このとき Si 1s 側は、ソース・ドレイン電極に比べ低エネルギー側に 0.15–0.20 eV 程度シフトしており、ゼロバイアス印加によって有機半導体内部と同程度の電位差が絶縁膜側でも発生していた。これはペンタセンと絶縁膜界面に形成された電気二重層を反映したものであると考えられる。

図 6 には、OTFT オン時の HAXPES マッピング測定で得られた C 1s スペクトルを示す。OTFT を動作状態にすると、ソース電極からの距離の増大に伴って高エネルギー側にピークエネルギーがシフトしていることが明らかとなった。このことから、ペンタセン薄膜ではソース電極からの距離に対して電位が連続的に変化していると示唆される。このように我々は開発したシステムを用いることで、大気非曝露環境下 OTFT 動作中における有機薄膜深部の情報を含むソース、ドレイン間の電位分布を観察することに成功した。ボトムコンタクト型 OTFT は、表面近傍でもソース電極からの距離に依存した電位分布を形成することが報告されている^[7,8,14]。今回の結果は、これらの報告と比較しても矛盾のない結果が得られた。一方で、本実験により我々が取得した各々の C 1s スペクトルは、ソース電極からの距離と平行な水平方向だけでなく、深さ方向の電位の情報が反映されている。今後は水平方向のマッピング測定だけでなく、深さ分析を併せて実施することで、深さ方向と水平方向に発生する電位を切り分けた検討を行っていきたい。

3-2. OTFT 大気曝露

図7には、大気曝露前後における OTFT の伝達特性を示す。電気特性の評価は、大気曝露後 60 分大気圧で放置した後に真空環境 (1.0×10^5 Pa) へ戻して実施した。作製した OTFT は、大気曝露に関係なく p 型トランジスタとして動作することを確認した。また大気曝露することで V_{th} は -5.93 V から 0.46 V へとプラス側にシフトしていた。この V_{th} の変化は、有機半導体層への酸素のドーピングによって形成されたアクセプタ準位が主要因として考えられる^[4]。さらに得られた伝達特性から、移動度 (μ_h) に及ぼす大気曝露の効果を確認するため大気曝露前後における μ_h を比較した。 μ_h は、

$$I_{ds} = \mu_h (WC_{OX} / 2L) (V_{gs} - V_{th})^2 \dots (1)$$

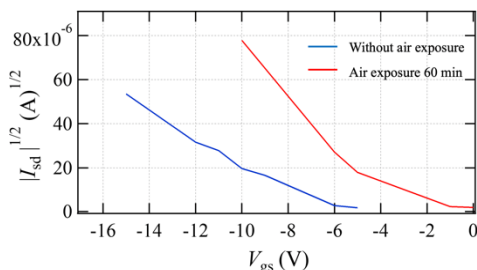
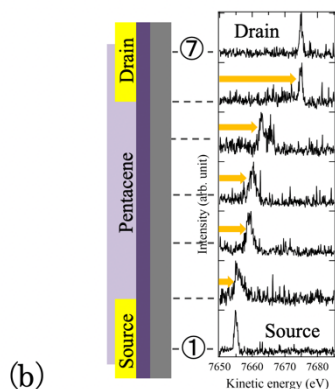


図7 大気曝露前後における OTFT の伝達特性。

(a) Air exposure 60 min

$$V_{ds} = -20 \text{ V}, V_{gs} = -30 \text{ V}$$



(b)

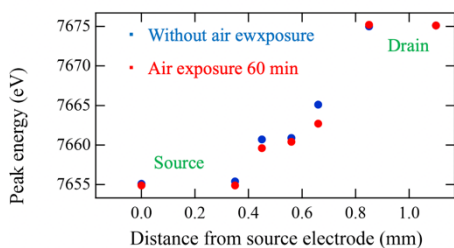


図8 (a) 大気曝露後 OTFT オン時の HAXPES マッピング測定で得られた C 1s スペクトル。(b) 大気曝露前後における C 1s ピークエネルギーとソース電極からの距離との関係。

と記述される。 I_{ds} 、 C_{OX} はそれぞれ、ドレイン電流と SiO_2 の静電容量を示している。 μ_h は大気曝露前の $1.9 \times 10^3 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ から $1.6 \times 10^3 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ と 80%程度低下しており、Knipp らの報告と矛盾のない結果が得られた^[4]。

3-3. OTFT 大気曝露後の HAXPES 測定

電気特性の評価に続いて OTFT 動作中の HAXPES マッピング測定を行った。大気曝露後 OTFT オン時の C 1s スペクトル、大気曝露前後における C 1s スペクトルのピークエネルギーとソース電極からの距離との関係をプロットしたものを図 8(a),(b)にそれぞれ示す。大気曝露前後のピークエネルギーを比較すると、チャンネル内部でピークエネルギーが低エネルギー側に 0.50–2.40 eV 程度シフトしたことが分かった。このことは大気曝露前後でチャンネル内部に形成される電位分布が変化することを示している。大気曝露前後の HAXPES 測定と電気特性の結果を併せると、この理由は以下のように考察できる。大気曝露することで、ソース・ドレイン電極/ペンタセン薄膜界面近傍のペンタセン薄膜内部に酸素がドーピングされアクセプタ準位が形成される。このアクセプタ準位の存在によって電位降下が発生した結果、ピークシフトが観察されたと考えられる。Knipp らの報告でも、アクセプタ準位密度は、結晶粒界密度が高くなる電極/ペンタセン薄膜界面近傍で形成されやすいという結果が示されている^[4]。今後は走査型原子間力顕微鏡や薄膜 X 線回折法による結晶評価を組み合わせ、電子状態と結晶状態の観点から大気曝露の効果を詳細に検討したい。

4. まとめ

本研究では、大気非曝露で OTFT 作製、電気特性評価および電圧印加 HAXPES 測定を可能とする計測システムを開発した。さらに開発した計測システムを用いて大気曝露前後の OTFT 電位分布を調べることで、大気曝露が OTFT 膜内の電位分布に及ぼす効果を検討した。この結果、ペンタセン薄膜内部への酸素ドーピング由来と推定されるアクセプタ準位の形成に起因する電圧降下を観察することができた。

しかしながら、本手法は未だ開発途上の技術であり、多くの課題を残している。特に今後は深さ分析とマッ

ピング測定を組み合わせた、OTFT 動作中の二次元電位分布の検討が必須である。現在、我々は励起エネルギー依存性を調べることで OTFT の電位分布の深さ分析に取り組む計画である。一方で OTFT 動作中の絶縁膜の電位分布を検討する試みは、HAXPES 測定にしかできない。今後は有機半導体薄膜、絶縁膜を含めた電位分布の検討を進めることで、大気曝露の効果をより定量的に検討していきたいと考えている。

謝辞

本研究は、公益財団法人高輝度光科学研究センター理事長ファンドの支援を受けて実施した。また実験は BL46XU (課題番号:2017A1608 および 2020A1892) で実施した。研究の遂行にあたっては、高輝度光科学研究センターの安野聡氏、陰地宏氏 (現:名古屋大学)、大麻隆彦氏、廣沢一郎氏 (現:九州シンクロトロン光研究センター)、岩手大学の吉本則之氏から多くの助言をいただいた。ここに深く感謝する。

参考文献

- [1] G. Horowitz, X. Peng, D. Fichou and F. Garnier: *J. Appl. Phys.* **67** (1990) 528.
- [2] M. A. Alam, A. Dodabalapur and M. R. Pinto: *IEEE Trans. Electron Devices* **44** (1997) 1332-1337.
- [3] A. R. Brown, C. P. Jarret, D. M. de Leeuw and M. Matters: *Synth. Metals* **88** (1997) 37-55.
- [4] D. Knipp, A. Benor, V. Wanger and T. Muck: *J. Appl. Phys.* **101** (2007) 044504.
- [5] H. Yang, L. Yang, M.-M. Ling, S. Lastella, D. D. Gandhi, G. Ramanath, Z. Bao and C. Y. Ryu: *J. Phys. Chem. C* **112** (2008) 16161-16165.
- [6] T. Watanabe, T. Koganezawa, M. Kikuchi, C. Vidélot-Ackermann, J. Ackermann, H. Brisset, N. Yoshimoto and I. Hirose: *J. Cryst. Growth* **468** (2017) 816-820.
- [7] L. Bürgi, H. Siringhaus and R. H. Friend: *Appl. Phys. Lett.* **80** (2002) 2913.
- [8] J. A. Nichols, D. J. Gundlach and T. N. Jackson: *Appl. Phys. Lett.* **83** (2003) 2366.
- [9] N. J. Watkins and Y. Gao: *J. Appl. Phys.* **94** (2003) 5782.
- [10] M. Nakamura, N. Goto, N. Ohashi, M. Sakai and K. Kudo: *Appl. Phys. Lett.* **86** (2005) 122112.
- [11] L. Chen, R. Ludeke, X. Cui, A. G. Schrott, C. R. Kagan and L. E. Brus: *J. Phys. Chem. B* **109** (2005) 1834-1838.
- [12] S. Ikeda, T. Shimada, M. Kiguchi and K. Saiki: *J. Appl. Phys.* **101** (2007) 094509.
- [13] N. Nagamura, Y. Kitada, J. Tsurumi, H. Matsui, K. Horiba, I. Honma, J. Takeya and M. Oshima: *Appl. Phys. Lett.* **106** (2015) 251604.
- [14] K. P. Puntambekar, P. V. Pesavento and C. D. Frisbie: *Appl. Phys. Lett.* **83** (2003) 5539.
- [15] Y. Yamashita, K. Ohmori, S. Ueda, H. Yoshikawa, T. Chikyow and K. Kobayashi: *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **8** (2010) 81-83.
- [16] J. Ikeuchi, H. Hamamatsu, T. Miyamoto, S. Tanaka, Y. Yamashita, H. Yoshikawa and S. Ueda: *J. Appl. Phys.* **118** (2015) 085308.
- [17] K. Kobayashi, M. Yabashi, Y. Tanaka, T. Tokushima, S. Shin, K. Tamasaku, D. Miwa, T. Ishikawa, H. Nohira, T. Hattori, Y. Sugita, O. Nakatsuka, A. Sakai and S. Zaima: *Appl. Phys. Lett.* **83** (2003) 1005.
- [18] T. Watanabe, K. Tada, S. Yasuno, H. Oji, N. Yoshimoto and I. Hirose: *Jpn. J. Appl. Phys.* **55** (2016) 03DD12.
- [19] I. Hirose, T. Watanabe, H. Oji, S. Yasuno, T. Koganezawa, K. Tada and N. Yoshimoto: *Jpn. J. Appl. Phys.* **55** (2016) 03DD09.
- [20] S. Yasuno, T. Watanabe and S. Ishimaru: *J. Surf. Anal.* **24** (2017) 136-140.
- [21] H. Oji, Y.-T. Cui, J.-Y. Son, T. Matsumoto, T. Koganezawa and S. Yasuno: *J. Surf. Anal.* **21** (2015) 121-129.
- [22] S. Yasuno, H. Oji, T. Koganezawa and T. Watanabe: *AIP Conf. Proc.* **1741** (2016) 030020.
- [23] R. B. Campbell, J. M. Robertson and J. Trotter: *Acta Cryst.* **14** (1961) 705-711.
- [24] A. R. Völkel, R. A. Street and D. Knipp: *Phys. Rev. B* **66** (2002) 195336.
- [25] H. Fukagawa, H. Yamane, T. Kataoka, S. Kera, M. Nakamura, M. Kudo and N. Ueno: *Phys. Rev. B* **73** (2006) 245310.
- [26] T. Kakudate, N. Yoshimoto and Y. Saito: *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 081903.
- [27] T. Watanabe, T. Hosokai, T. Koganezawa and N. Yoshimoto: *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **566** (2012) 18-21.

渡辺 剛 WATANABE Takeshi

(公財) 高輝度光科学研究センター
放射光利用研究基盤センター 産業利用・産学連携推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0924
e-mail : t5511001@spring8.or.jp

(JASRI 理事長ファンド採択研究課題)

試料環境制御によるタンパク質結晶の構造多様性解析法の開発

公益財団法人高輝度光科学研究センター

放射光利用研究基盤センター タンパク質結晶解析推進室

馬場 清喜

Abstract

X線結晶構造解析法は、タンパク質立体構造の解析手法として使われています。放射光ビームラインは高輝度なX線が利用でき、放射線損傷を低減するために100 K以下に凍結した結晶からの回折実験が広く利用されてきました。しかし近年、X線自由電子レーザーにより非凍結結晶からの無損傷での時分割実験が可能となり、放射光においても非凍結結晶からの構造解析の手法開発が進んでいます。我々は、SPRING-8の高輝度X線を利用し、非凍結環境でタンパク質の構造多様性を解析する手法について開発を進めてきましたので、その成果を報告します。

1. はじめに

SPRING-8のような大型放射光施設のX線を利用したタンパク質X線結晶構造解析においては、結晶のX線照射損傷の抑制が重要であり、抗凍結剤を用いて凍結したタンパク質結晶からのデータ測定が普及しました。近年、測定と解析のさらなる自動化が進み、高効率化が進んでいます。一方で、100 K以下に凍結された結晶から得られた構造は、室温の構造と比較して部分的な構造変化も報告されており、タンパク質の機能を理解する上で、生理活性状態を捉える室温測定の重要性が再認識され、測定方法についても検討が進んでいます。X線自由電子レーザー施設(XFEL)のフェムト秒のX線レーザーは無損傷での測定が可能となるため、非凍結結晶からの回折実験手法として光励起による結晶内での反応制御など、結晶内の化学反応の時分割実験が可能となりました。我々は、非凍結環境でタンパク質の構造解析を行う手法として、タンパク質結晶を水溶性高分子でコーティングし、調湿ガスを吹き付けて環境を制御する方法を開発しました。

2. HAG法を用いた構造多様性の解析

タンパク質の結晶は多くの水分(50%程度)を含んでいて脆く、環境の変化(温度、結晶周囲の溶媒組成の変化)によって劣化しやすく、結晶化溶媒から出し

た状態で品質を保持することが問題でした。抗凍結剤による結晶凍結が一般化する以前は、ガラスキャピラリーに結晶とともに母液を封入して結晶の質を保持する手法を用いて測定を行っていました。タンパク質結晶の凍結方法が普及して一般的に利用されるようになって、非凍結での測定にはキャピラリーが用いられていました。しかし2000年代に、一定の湿度を保った気流を結晶に吹き付けて質を保持する調湿装置が開発され、湿度を調整することで結晶の品質を改善する方法なども報告されました。

我々は、結晶周囲の湿度を制御する調湿装置の開発

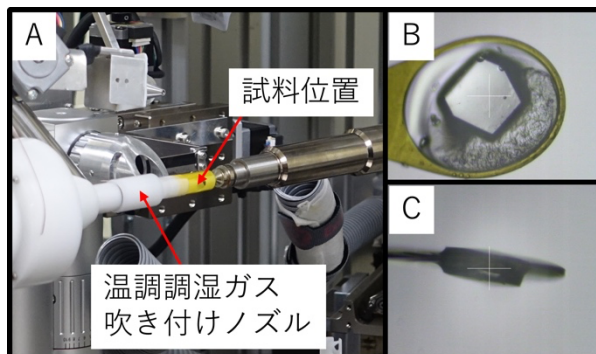


図1 HAG法を用いた回折実験。(A) 調湿調湿装置で調湿気流をゴニオ上の試料へ向けて吹き付けた状態の回折実験の様子。(B) リゾチーム結晶を調湿した様子(ループ垂直方向)。(C) リゾチーム結晶を調湿した様子(ループ水平方向)。

のみでなく、結晶を水溶性高分子であるポリビニルアルコール (PVA) 水溶液でコーティングする方法を組み合わせた新しい結晶マウント法 (Humid Air and Glue-coating (HAG) method : HAG 法) を BL38B1 で開発しました^[1]。PVA で結晶をコーティングすることで結晶の乾燥を防ぎ、結晶の品質を保持したまま回折実験を行うことが可能です (図 1)。さらに、がんの発生に関わるタンパク質 Ras の結晶構造解析においては、従来から解明されている GTP 結合型の Close 状態 (State2) のみでなく、湿度制御による構造変化を解析することで、X 線結晶構造解析ではこれまで得られなかった Open 状態 (State1) の構造解析に成功しました (図 2)^[2]。

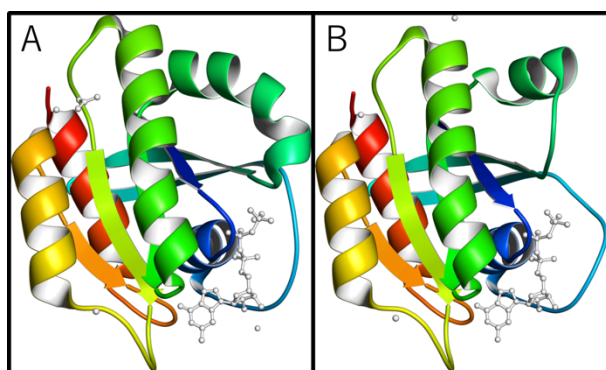


図2 Ras タンパク質結晶の構造解析。(A) State2 (PDB ID : 3K8Y)。(B) State1 (PDB ID : 5B30)。

タンパク質の結晶化条件として温度は重要な因子であり、4°C などの低い温度で得られた結晶は、室温などの昇温条件下で結晶の質が顕著に劣化する場合があります。牛由来のチトクロム酸化酵素 (CcO) は 4°C で結晶化されており、結晶の質を保つためには実験中に結晶を 4°C に保持する必要があります。そこで我々は、4°C に保って結晶をハンドリングするワークベンチと、4–20°C の温度制御機構を備えた独自の調湿装置を開発し、4°C 環境下で 90%RH 以上の高湿度を保てる回折実験環境を構築しました^[3]。兵庫県立大の島田 (現 岐阜大) らは、この技術を用いて SACLA で CcO の時分割実験に成功しています (図 3)^[4]。また SPring-8 においては、大阪医科大の村川らが銅アミン酸化酵素結晶の温度、pH 環境を変えた非凍結環境で構造を解析し、構造の平衡状態の変化を明らかにしました (図 4)^[5]。

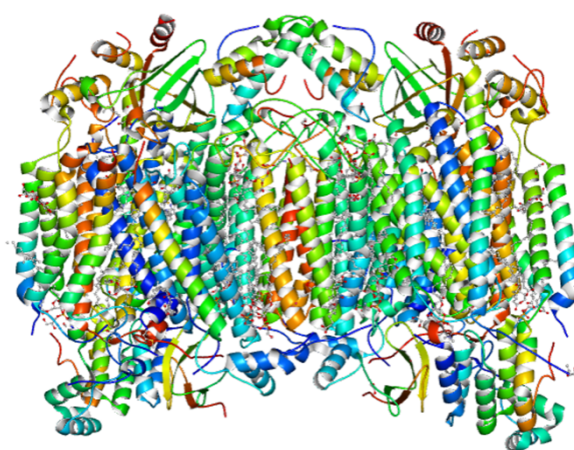


図3 CcO タンパク質結晶の構造解析 (PDB ID : 5X1B)。

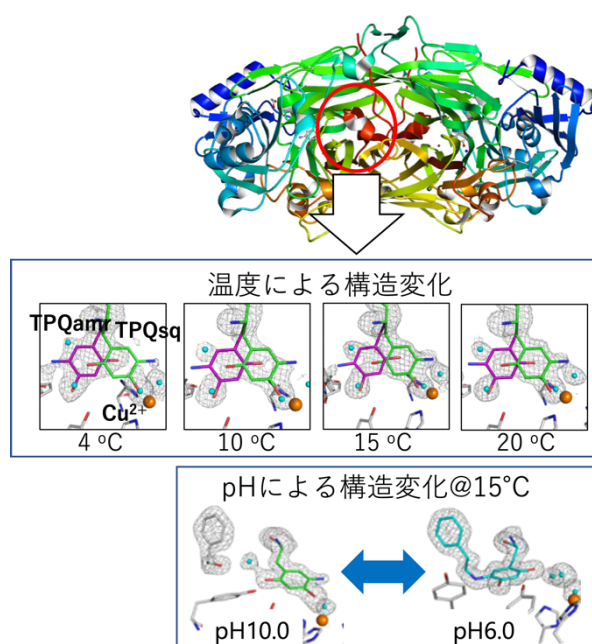


図4 銅アミン酸化酵素の結晶構造解析 (PDB ID : 5ZOU)。

3. 今後の展開

これまでバンディングマグネットビームライン (BM-BL) で研究開発を進め、100 μm 以上のサイズの結晶をターゲットに温度 (4–20°C)、湿度を回折実験環境下で制御し、タンパク質結晶からの多様な構造情報を得ることが可能となりました。さらに我々は、挿入光源ビームライン (ID-BL) の BL41XU の光源を用い、我々のグループの長谷川らが開発した多数の微小結晶に X 線を網羅的に照射するデータ収集法 serial synchrotron rotation crystallography (SS-ROX)^[6] と HAG 法を組み合わせることで微小結晶からの非凍結データ測定手法を開発しています^[7]。これらの技術を

基に、今後もタンパク質の時分割構造解析や構造多様性の研究を SPring-8 で進展していきます。

参考文献

- [1] S. Baba, T. Hoshino, L. Ito and T. Kumasaka: *Acta Cryst. D* **69** (2013) 1839-1849. (doi: 10.1107/S0907444913018027)
- [2] S. Matsumoto, N. Miyano, S. Baba, J. Liao, T. Kawamura *et al.*: *Scientific Reports* **6** (2016) 25931. (doi: 10.1038/srep25931)
- [3] S. Baba, A. Shimada, N. Mizuno, J. Baba, H. Ago *et al.*: *J. Appl. Cryst.* **52** (2019) 699-705. (doi: 10.1107/S1600576719006435)
- [4] A. Shimada, M. Kubo, S. Baba, K. Yamashita, K. Hirata *et al.*: *Science Advances* **3** (2017) e1603042. (doi: 10.1126/sciadv.1603042)
- [5] T. Murakawa, S. Baba, Y. Kawano, H. Hayashi, T. Yano *et al.*: *PNAS* **116** (2019) 135-140. (doi: 10.1073/pnas.1811837116)
- [6] K. Hasegawa, K. Yamashita, T. Murai, N. Nuemket, K. Hirata *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **24** (2017) 29-41. (doi: 10.1107/S1600577516016362)
- [7] K. Hasegawa, S. Baba, T. Kawamura, M. Yamamoto and T. Kumasaka: *Acta Cryst. D* **77** (2021) 300-312. (doi: 10.1107/S2059798321001686)

馬場 清喜 BABA Seiki

(公財) 高輝度光科学研究センター
放射光利用研究基盤センター タンパク質結晶解析推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0833
e-mail : baba@spring8.or.jp

新分野創成利用課題報告

ナノスケール実スピンデバイス開発に向けた新しい放射光利用

京都大学 化学研究所

代表責任者 小野 輝男

東北大学 多元物質科学研究所

分担責任者 岡本 聡

大阪大学 産業科学研究所

分担責任者 千葉 大地

名古屋大学 大学院工学研究科

分担責任者 水口 将輝

名古屋工業大学 大学院工学研究科

分担責任者 壬生 攻

Abstract

スピンと電荷の自由度を物質の多様な機能として活かすナノスピndeバイスの研究は、巨大磁気抵抗の発見とその磁気ヘッドへの応用に端を発し、不揮発性磁気メモリやマイクロ波発振器など多様な製品を産み出す学術基盤である。本研究計画では、磁気コンプトン解析 (BL08W)、核共鳴散乱解析 (BL09XU)、表面・界面 X 線回折 (BL13XU)、オペランドナノ電子状態解析 (BL25SU、BL39XU)、光電子分光 (BL09XU、BL17SU、BL47XU) など多岐にわたるビームラインを活用し、先端放射光ツールを駆使して構造・電荷・スピンへの包括的な解析アプローチを行った。本研究課題で得られた、個別の研究では実現しえない情報の共有やノウハウの蓄積によるシナジー効果の創出は、「放射光による物質デザイン・ナノデバイス創成」という新分野と位置づけられ、サステナブル社会の実現に必要な新規高性能機能性材料およびデバイスの開発に資するものである。

1. はじめに

スピンと電荷の自由度を物質の多様な機能として活かすナノスピndeバイスの研究は、巨大磁気抵抗の発見とその磁気ヘッドへの応用に端を発し、不揮発性磁気メモリやマイクロ波発振器など多様な製品を産み出す学術基盤として日本が世界をリードしている。本分野では先端計測基盤技術である SPring-8 の利活用についても多数の実績があるが、これまでは各大学・研究機関における小規模かつ個別の研究に限定され、ナノスピndeバイス分野が求める計測基盤技術としての役割が不明瞭であった。このような背景のもと、2015B 期より新分野創成利用「ナノスケール実スピンデバイス開発に向けた新しい放射光利用 (代表責任者：大野英男 (東北大学))」が採択され、研究者相互の触発が生み出すシナジー効果により新しい視点

での研究が展開され、放射光を利用した統合的研究スタイルの有用性が実証された。この2年間で得られた経験と研究成果をもとにさらに統合的研究を推し進めることで、飛躍的成果につながるため継続することとなった。

本研究計画では、磁気コンプトン解析 (BL08W)、核共鳴散乱解析 (BL09XU)、表面・界面 X 線回折 (BL13XU)、オペランドナノ電子状態解析 (BL25SU、BL39XU)、光電子分光 (BL09XU、BL17SU、BL47XU) など多岐にわたるビームラインを活用し、先端放射光ツールを駆使して構造・電荷・スピンへの包括的な解析アプローチを行った。このような個別の研究では実現しえない情報の共有やノウハウの蓄積によるシナジー効果の創出は、「放射光による物質デザイン・ナノデバイス創成」という新分野と位置づけられ、サス

テナブル社会の実現に必要な新規高機能性材料およびデバイスの開発に資するものである。

本新分野創成利用課題では、様々なビームラインでの多様な実験と、半年に一度の研究会による研究者間の情報交換を通して、基礎から実用にわたるスピントロニクス研究を効率的に進めた。研究実施体制として、分担責任者の壬生攻が、壬生攻グループ、櫻井浩グループから構成されるナノスピンドバイスのマイクロ磁性のチームを総括した。分担責任者の千葉大地が、千葉大地グループ、大野英男グループ、小野輝男グループから構成されるナノスピンドバイスの電界誘起物性のチームを総括した。分担責任者の岡本聡が、岡本聡グループ、佐藤利江グループ、野村光グループから構成されるナノスピンドバイスの超高速ダイナミクスのチームを総括した。分担責任者の水口将輝が、水口将輝グループ、桜庭裕弥グループ、遠藤哲郎グループから構成されるナノスピンドバイスの電子構造・結晶構造解析のチームを総括した。さらに各グループの下には共同実験者として若手の研究者や大学院生が参画した。各チーム間の連携は、代表責任者のリーダーシップのもと、主として分担責任者を通じて密接にとり行われた。なお、『期間内であればビームラインを追加でき、横断的に利用可能』、『実験責任者個人としてのみでなくグループとしても利用可能』という、新分野創成利用課題ならではの特徴を活かし、以下のような取り組みを行った。(i) 分野の裾野の拡大を意識し、いくつかのグループに4期の実施期間の途中から参画いただいた。これにより、2015B期には6ビームラインの利用であったが、最終的には8ビームラインへ利用を拡大した。(ii) いくつかのテーマは、複数グループの参画により行われた。このように、より有機的な研究成果を創成するための積極的な取り組みを行った。以下に、具体的な成果の一部を述べる。

2. ミクロ磁性

核共鳴散乱ビームライン (BL09XU) では、反強磁性物質であるヘマタイト ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) の(0001)配向薄膜の原子磁気モーメントの方向制御の実験が試みられた。磁気記録やスピントロニクスの分野では、磁気記録ビットの安定化や磁気スイッチングの高速化などのために、反強磁性材料を実用デバイスに有効利用

する動きが活発化している。とりわけ、強磁性垂直磁化膜との整合性が良い、原子磁気モーメントの方向が膜面に垂直方向に向いた反強磁性薄膜の作製と、外的刺激によるその方向の制御が重要と考えられる。一般に、反強磁性構造を持つ超薄膜の磁気特性を実験的に調べることは容易ではない。そこで、原子核によるガンマ線あるいは X 線の共鳴吸収スペクトルを通じて固体の局所的な磁性を調べることが出来るメスバウアー分光法の活用が有望になってくる。メスバウアー分光測定は通常、放射性同位元素の線源を用いて行われるが、厚い基板に作製された超薄膜試料に関しては、放射光メスバウアー分光法(放射光核共鳴散乱法)の有効利用に期待が寄せられている。

BL09XUにおける実験では、 ^{57}Fe 核の共鳴エネルギーに合わせた単色パルス放射光を試料に入射し、試料中の ^{57}Fe 核によって共鳴散乱された放射光を時間スペクトルとして検出する測定法を用いた。ヘマタイト薄膜における低温領域での垂直磁気モーメント配向状態から高温領域での面内磁気モーメント配向状態への転移(モーリン転移)は、時間スペクトルのパターンの違いとして明瞭に観測される。

一連の実験の結果、サファイア (Al_2O_3) (0001)基板上に作製されたヘマタイト(0001)薄膜のモーリン転移温度が、膜厚の減少とともに下降すること、イリジウム (Ir) などの重金属ドーブにより上昇すること、 Cr_2O_3 バッファ層の挿入により上昇することなどが示され、実用スピンドデバイスに必要な室温付近以上で垂直方向の原子磁気モーメントを持つ反強磁性ヘマタイト超薄膜の作製指針が得られた。

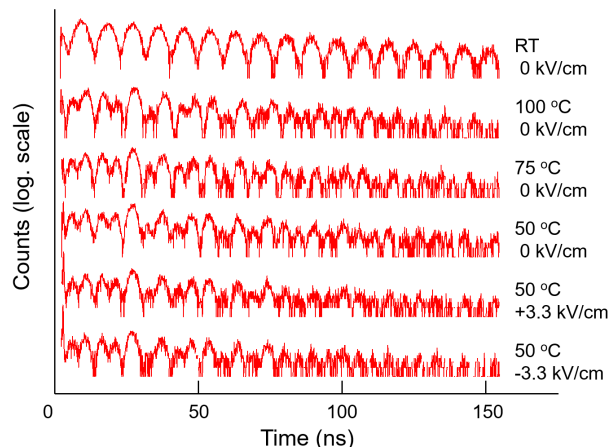


図1 イリジウムドーブヘマタイト薄膜の核共鳴散乱時間スペクトルの温度依存性・印加電圧依存性。

一方、電圧印加により、ヘマタイト薄膜のモーリン転移を能動的に制御することが可能かどうかを探るため、モーリン転移温度前後の温度において膜面垂直方向に電圧を印加した際の核共鳴散乱時間スペクトルの変化が調べられた(図1)。薄膜の厚さを増やして薄膜の絶縁性を強化し、上部電極層の厚さを増やして電極接触の一様性を担保するなど、試料構造および電極構造に改良を加え、最大 5.0×10^3 kV/cm (100 V/200 nm) の電場を印加した状態で核共鳴散乱スペクトルを測定する実験を行った。しかしながら、図1中の印加電圧の異なる 50°C での3つのタイムスペクトルから分かるように、電圧の印加やその極性の切り替えに伴うスペクトルの変化が明確に観測されるには至らなかった。

コンプトン散乱ビームライン (BL08W) では、磁気コンプトン散乱測定を通じた CoFeB/MgO 界面や CoFeB/Ta 界面のスピンの選択磁化曲線と軌道選択磁化曲線の分離や磁気量子数選択磁化曲線の測定が試みられた^{11,2)}。さらに、遷移金属-希土類金属合金薄膜における「角運動量補償温度」の実測が試みられた。後者の実験は、小野らのグループが $Gd_{23}Fe_{67}Co_{10}$ アモルファス合金の磁壁の移動速度の温度変化の観測において、全磁化がゼロになる「磁気補償温度」160 K とは異なる 230 K 近傍で移動速度が最大となることを見出し、この温度が、全角運動量がゼロとなる角運動量補償温度に対応する可能性を示唆したことを受けたもので^{3,4)}、本課題の研究会を通じて提案されたものである。

磁気コンプトン散乱プロファイルの温度依存性の測定は、182.6 keV の円偏光 X 線を用いて、 $Gd_{23}Fe_{77}$ アモルファス垂直磁化膜に対して行われた。スピン磁化(スピン角運動量)の温度変化および軌道磁化の温度変化を求め、 g 因子の見積もりから「角運動量補償温度」を実験的に求めることに挑戦した。この試料では、飽和磁化が 131 K 付近でゼロとなり、この温度が磁気補償温度に対応する。磁気補償温度より高温側および低温側での磁気コンプトンプロファイルを、フィッティングにより純 Fe の磁気コンプトンプロファイルと Gd 4f の磁気コンプトンプロファイルに分離した。その結果、磁気補償温度より高温側では Fe が磁場の方向を向き、低温側では Gd が磁場の方向を向くことが分かった。

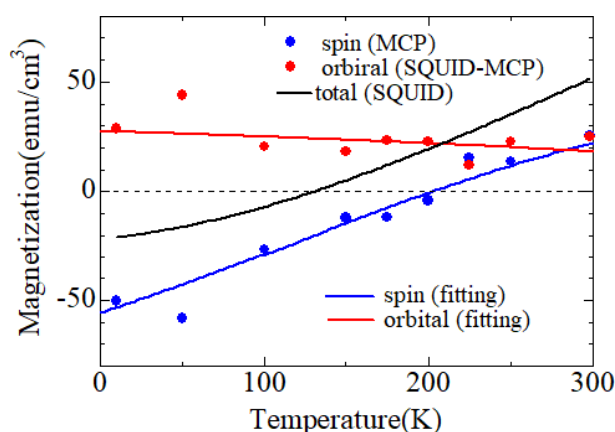


図2 磁気コンプトン散乱と SQUID 磁力計で求めたスピン磁化、軌道磁化および全磁化の温度依存性。

さらに、磁気コンプトンプロファイルの積分値からスピン磁化を求めた(図2)。スピン磁化は 207 K 付近でゼロとなり、この温度がスピン磁気補償温度に対応することが示された。また、フィッティングによる解析から、Fe、Gd のスピン磁化の大きさを求めると各々 1100 emu/cm^3 、 1200 emu/cm^3 程度となり、温度変化はほとんどみられなかった。全磁化とスピン磁化の差から軌道磁化を求めると 25 emu/cm^3 程度となり、温度変化は同様に少なかった。軌道磁化が Fe に起因すると考えると、Fe スピン磁化に対する軌道磁化の寄与は 2%であった。この値は $Gd_{40}Fe_{60}$ アモルファス合金の先行研究(軌道磁化の寄与 1.6%)と矛盾しない。これらの結果から g 因子を見積もると、 $g = 2.04$ 程度と $g = 2$ に近くなった。以上の結果を用いて角運動量補償温度を求めると 202 K となった。すなわち磁気補償温度、スピン磁気補償温度、角運動量補償温度が異なることを実験的に示唆するものである⁵⁾。

3. 電界誘起物性

反強磁性体は、原子スケールでマイクロな磁化を有するが、隣り合う磁化が互いに打ち消しあうように整列しているため漏れ磁場が発生せず、外部磁場に対しても磁気モーメントはほとんど応答しない。その性質から、強磁性体に比べて、磁化方向を制御・検出することが一般的に困難であると考えられてきた。しかしながら、最近の研究結果⁶⁾から、強磁性体と同様に、スピン流と反強磁性体の磁化との相互作用(スピントルク効果)が存在することが実験的に示唆されており、ス

ピン流による反強磁性体の磁化方向の制御、磁化ダイナミクスの制御などの研究が盛んに行われている^[7]。

我々は、図3(a)の概念図のようなPt/NiO/Ptの三層構造からなる試料を作製した^[8]。NiOは、(111)面内でスピニングが平行に揃い、隣接する(111)面間のスピニングが反平行となる絶縁性の反強磁性体であり、MgO(111)基板上に作製することで図のような成長方向に互い違いのスピニングが実現する。図ではNiOのスピニング軸は電流と平行となっているが、この状態とスピニング軸と電流が垂直な状態とは区別できるはずである。電流

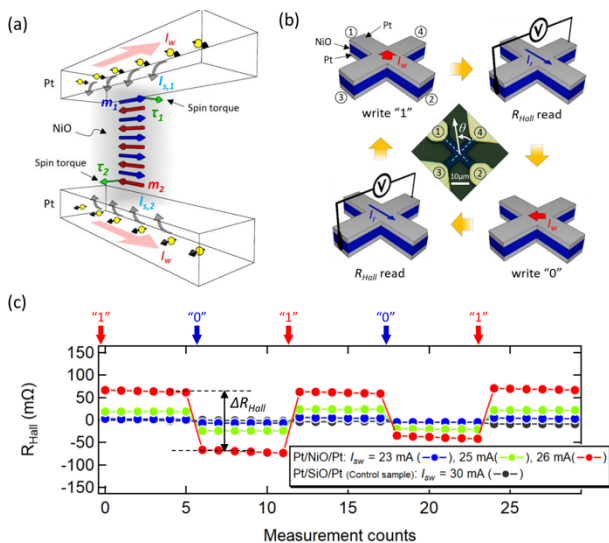


図3 (a)Pt/NiO/Pt 三層構造において、Ptのスピニング効果によりスピントルク効果を受けてNiOの磁気モーメントが回転する原理、(b)電流書き込み(“1”および“0”)・読み出し方法、(c)書き込み操作後のホール抵抗の変化。

(I_w)を流すとPtのスピニング効果によって生じたスピニングがNiO界面に流れ込み、スピントルク効果によりNiOの磁気モーメントを回転させる。図1(b)に示したような書き込み・読み出し手法を用いて、実際に書き込みにより素子のホール抵抗が変化することを示している(図3(c))。

図4は、5 μm 幅の素子における書き込み電流印加後のサンプル表面の磁気線二色性光電子顕微鏡画像(XMLD-PEEM画像)である。実験はBL17SUに設置されているSPELEEM装置を用いて直線偏光X線を素子に入射し、Ni-L₂端スペクトルの変化を画像化した。コントラストはそれぞれ図示した方向のネールベクトルを持つNiO磁気ドメインに対応している。実は、書き込みにおいてすべてのNiOのネールベクトルが一斉回転しているわけではなく、ドメインを作り一部のみが回転していることが見て取れる。これは、図3(a)に示したような状況がサンプルの一部でのみ実現しているということを示唆している。本実験や他の報告で得られているネールベクトル回転の閾電流密度は概ね $10^6 \sim 10^7$ A/cm²程度であり、強磁性体の磁化反転に必要なそれと同程度である。

フレキシブル基板上へ形成したスピニング素子へ応力を加えると、原子間隔が変化するとともに、磁性も変化する。特にナノ薄膜では、%オーダーの大きなひずみを加えても磁気特性がリバーシブルに変化する。単純な例としてはひずみによる磁化方向変化を磁気トン

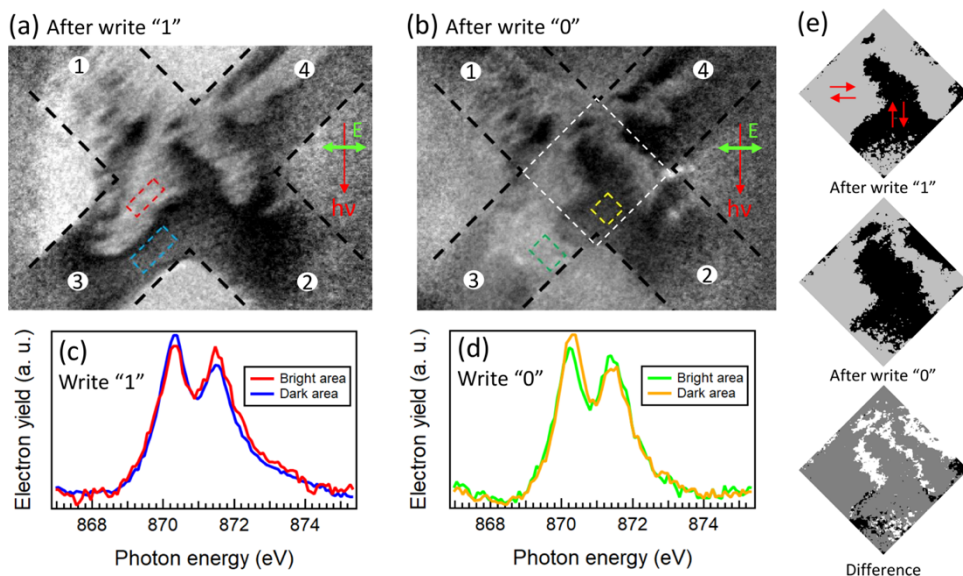


図4 書き込み“1”および“0”後のXMLD-PEEM画像(a,b)、およびNi-L₂端のスペクトル(c,d)。(a,b)の明暗を強調したもの、および“1”状態と“0”状態の差分(e)。赤矢印はドメイン内での磁気モーメントの方向。

ネル接合の抵抗変化として拾うひずみゲージへの応用が考えられるが⁹⁾、ナノ薄膜やその積層構造を舞台とするスピントロニクスセンシング範囲を、磁界から力学量へと広げる大きな意義がある。広域X線吸収微細構造(Extended X-ray Absorption Fine Structure: EXAFS)により、フレキシブル基板上に製膜したFeやCo薄膜の平均的な原子間隔変化を元素選択的に観測したところ、下地層の厚みなどにもよるが、基板へ意図的に加えたひずみの30-60%程度がこれらの薄膜にトランスファしていることが分かった¹⁰⁾。このように、正確なひずみ量を計測することで、磁気弾性結合との関係性などを議論することが可能となった。

また、ひずみによる物性変化の観点からも興味が尽きないが、例えばフレキシブル基板上的TbFeフェリ磁性薄膜においては、その補償温度がひずみにより変化することを見出した(図5(a))。ひずみをON/OFFした試料をX線磁気円二色性(X-ray Magnetic Circular Dichroism: XMCD)測定することにより、Fe、Tbともにスピン磁気モーメントがひずみにより有意に変化していることが分かった(図5(b))。結果とシミュレーション結果を比較考察することにより、原子間のexchange couplingが変化していることが補償温度変化の起源である可能性が示唆された¹¹⁾。

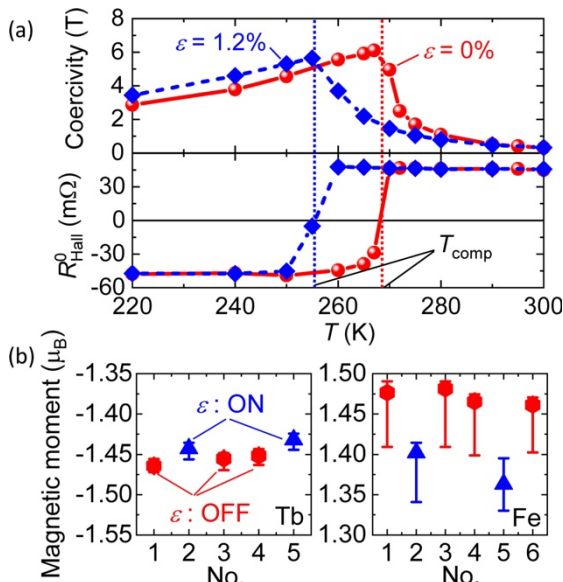


図5 フレキシブル基板上的TbFeフェリ磁性薄膜における補償温度のひずみによる変化(a)。 (a)の上のパネルは保磁力、下のパネルはゼロ磁場における異常ホール抵抗の温度依存性である。XMCDによって観測したTbとFeのスピン磁気モーメント(b)。

4. 超高速ダイナミクス

以下、ナノスケールでの磁気イメージングの結果を紹介する。まず、図6(a)に示すナノサイズのスピントロジカル構造である磁気Skyrmionは、その構造安定性ならびに、熱などにより容易に運動できることから次世代スピントロニクスデバイスへの応用が期待されている。しかしながら、このSkyrmionは外部磁場に敏感であり、高空間分解能磁化測定手法として一般的に用いられている磁気力顕微鏡法では、その状態を変化させてしまうという問題がある。そこで図7に示すナノXMCD/Scanning Probe Microscopy (SPM)複合装置を用いることでSkyrmionの観察を実施した。本装置は、原子間力顕微鏡プローブをナノビーム集光

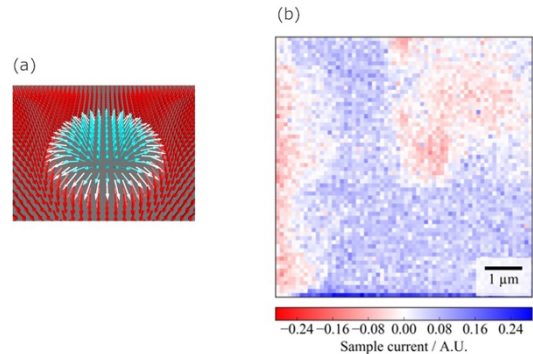


図6 (a)磁気Skyrmionのイメージ図(b)ナノXMCD/SPM複合装置によって観測した磁気Skyrmion。

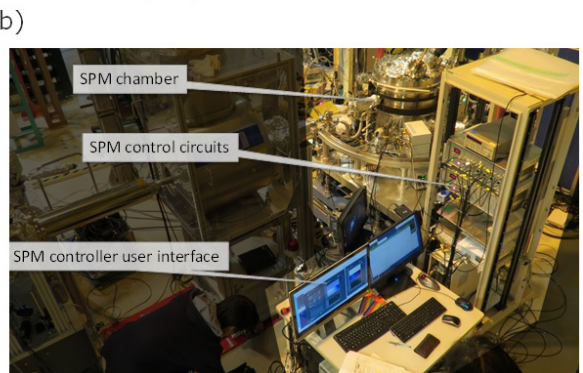
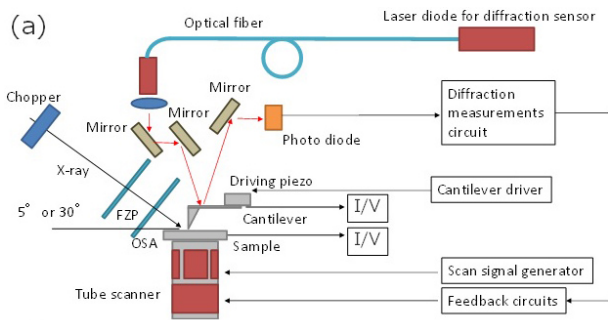


図7 ナノXMCD/SPM複合装置の、(a)模式図と、(b)装置写真。

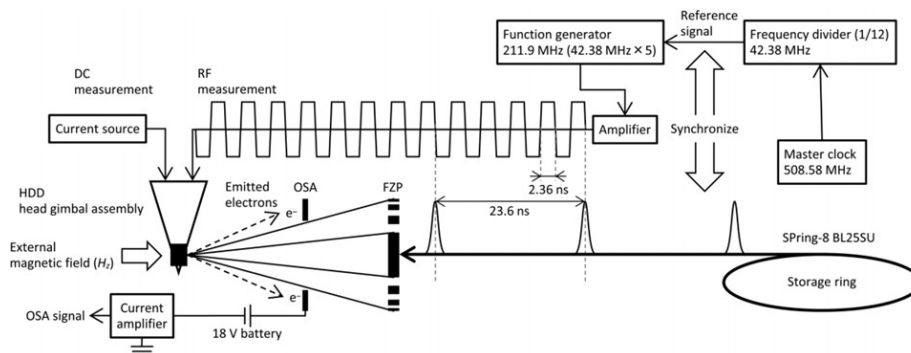


図8 HDD 記録ヘッド主磁極の実時間計測のためのセットアップ概略図。

された軟 X 線磁気円二色性検出器として用いるものであり、装置およびプローブも独自開発し、BL25SU に設置した。さらに制御系に Python3/Jupyter notebook を使用することにより、実験手順と実験結果の併記が可能であり、さらに実験結果を Python で解析、次のコマンド指示まで自動化可能となった。その結果、放射光位置合わせなどのプロセスにかかる時間を半減することができた。さらに制御手法の再利用も容易であることも特徴である。本装置を用いた観測結果の一例を図 6(b) に示す。明瞭なナノスケールの磁気コントラスト像が確認できている。このサイズは想定される磁気 Skyrmion と同程度であることから、本計測手法によって磁気 Skyrmion の観測に成功したものと判断している。

次に、ハードディスクドライブ (HDD) の記録ヘッドの実時間観測について紹介する。HDD はデータセンターにおける大容量情報ストレージデバイスとして現代の情報インフラの重要な一旦を担っている。最先端 HDD の記録ヘッド先端の主磁極はナノサイズに達しており、GHz 帯の高速での磁化スイッチング動作を行っているが、その駆動状態の観測は極めて困難であった。この課題に対して、BL25SU に設置されたナノ X 線磁気円二色性顕微鏡を用いて、さらに X 線パルスとヘッド駆動周波数の同期をとることで、記録ヘッドの駆動状態の実時間計測を試みた。図 8 に測定セットアップ概略図を示す。記録ヘッドは大振幅の高周波電流で励磁されるため、一般的な全電子収量法の適用が困難である。そのため、試料と FZP の間に設置され、高次回折光遮蔽に用いられる OSA を 2 次電子検出器として利用する新たな測定法を採用した。本測定法は、スピントロニクス素子のように電流・電圧

印可される素子に対して広く適用可能な手法として BL25SU で開発されたものである^[12]。図 9 に HDD 記録ヘッドの概略図と今回用いた記録ヘッドの記録面側から見た主磁極 (Main pole) 付近の SEM 像を示す。実際の測定には、コンタミネーション除去や駆動アンプをチャンバーの外側に移動するなど、様々な工夫が必要であったが、最終的に図 10 に示すように、記録ヘッド主磁極の磁化状態のスナップショット像を得ることに成功し、サブナノ秒での磁化スイッチング動作を確認できた^[13]。これは世界で初めての成果である。これにより、HDD のさらなる高性能化を可能とする次世代記録ヘッド開発への貢献が期待できる。

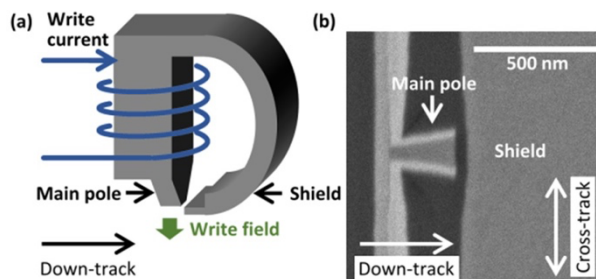


図9 (a) HDD 記録ヘッドの概略図と、(b) 記録面から見た主磁極 (Main pole) 付近の SEM 像。

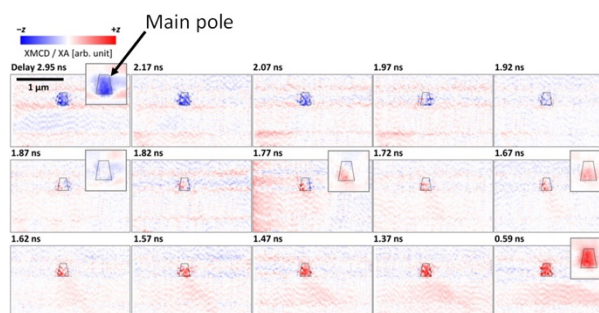


図10 HDD 記録ヘッドの主磁極 (Main pole) の磁化状態のスナップショット像。

5. 電子構造・結晶構造解析

スピントロニクス分野において、結晶の原子規則度とその電子構造が物性におよぼす影響は重要である。例えば、ハーフメタリックホイスラー合金材料をスピン偏極電子源へ応用する場合、スピン偏極度に原子規則度や電子構造が大きく寄与する (図 11)。以下に、様々なアニール温度で作製した $\text{Co}_2\text{Fe}(\text{Ge}_{0.5}\text{Ga}_{0.5})$ (CFGG)ホイスラー合金薄膜の原子秩序と電子構造を異常分散 X 線回折 (AXRD) を使用して調査した結果を紹介する。マグネトロンスパッタ法によって作製した CFGG 薄膜を異なるアニール温度 T_{an} (300~600°C) で 30 分間アニールした複数の試料を用いた。Cu-K α 源を使用したラボの XRD 測定において、002 と 004 のピークのみが観察され、CFGG 薄膜の(001)配向のエピタキシャル成長が確認された。また T_{an} の増加に伴い、ピーク位置がより低い角度にシフトすることが分かった。これは、格子定数が面外方向に拡大していることを示しており、この傾向は、MgO 基板との格子不整合によって引き起こされる CFGG 薄膜の面内引っ張り応力の解放によって説明できる。図 12 は、CFGG

ホイスラー合金 X_2YZ , XYZ

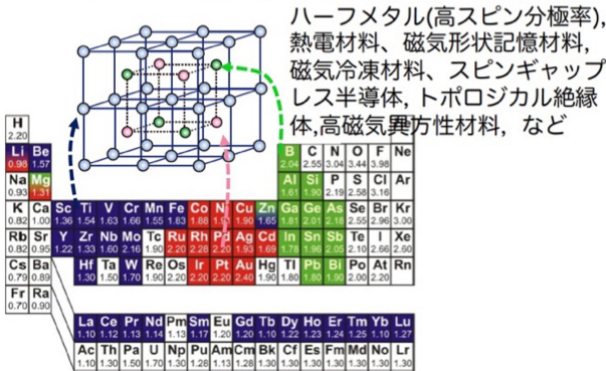
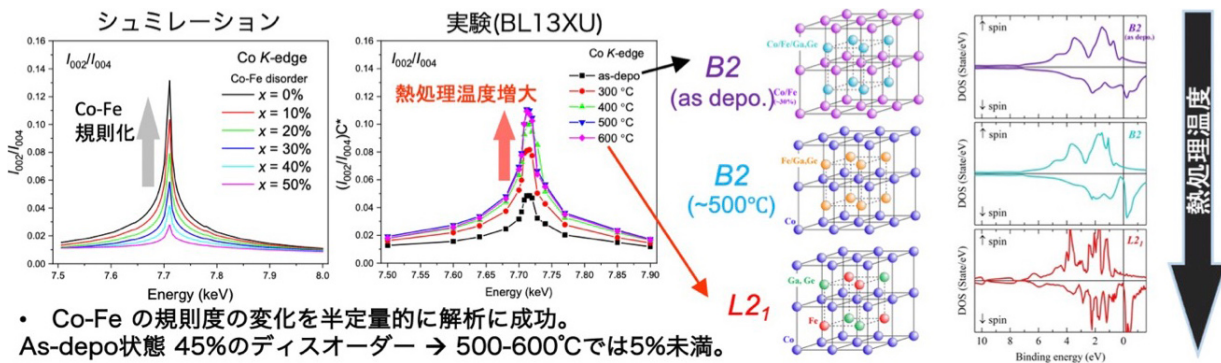


図 11 ホイスラー合金の模式図。

薄膜における I_{002}/I_{004} の X 線エネルギー依存性のシミュレーション結果と実験結果を示す。X 線エネルギーは、Co-K 吸収端周辺のエネルギー帯域である 7.5 から 7.9 keV の範囲で変化させた。シミュレーション結果は、Co-K 吸収端での I_{002}/I_{004} の強度比が不規則度 x の減少とともに増加することを示している。興味深いことに、Co-K 吸収端において as-depo 状態から $T_{\text{an}} = 500^\circ\text{C}$ まで T_{an} が増加すると、 I_{002}/I_{004} の増加が明確に検出され、Co-Fe の規則化が徐々に促進されることが示された。実験とシミュレーションの比較をすることにより、as-depo の試料の規則度と x は、それぞれ 0.66 と 0.46 と推定された。この結果は、as-depo の CFGG 薄膜がほぼランダムな Co-Fe 規則度を持っていることを示している。 T_{an} の増加に伴い、規則度は増加し、500°C でほぼ 1 になり完全な Co-Fe 秩序が形成されることを示している。また、 x も 500°C から 600°C まで変化しないことも分かった。以上の結果から、in-situ の CFGG 薄膜では Y/Z サイトに Ga 原子と Ge 原子がほぼランダムに存在する Co-Fe 無秩序状態にあると考えられる。 T_{an} が 500°C まで上昇すると、Co と Fe が B2 構造に規則化される。従って、Co と Fe はそれぞれ X サイトと Y/Z サイトを占める傾向が強まる。500°C では、Fe と Ga/Ge がほぼ秩序化し、600°C で部分的な B2 無秩序構造を含む L2_1 構造になると考えられる。この振る舞いは、原子空孔と各原子の交換活性化エネルギー計算により説明できる。Fe 原子はポテンシャル障壁が低いために Co サイトに形成される空孔に容易に移動できるが、Ga および Ge 原子は Co サイトを占有するエネルギーの不安定性のために移動がしにくい。これが、アニールによって Co-Fe 原子秩序が促進されるメカニズムである。Ga 原子と



- Co-Fe の規則度の変化を半定量的に解析に成功。
- As-depo 状態 45% のディスオーダー → 500-600°C では 5% 未満。

図 12 $\text{Co}_2\text{FeGa}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ 単結晶薄膜における X 線回折ピークのシミュレーションおよび実験結果。規則度との関係を示している。

Ge原子はFeサイトの空孔に移動し、L2₁構造を形成する必要があり、そのポテンシャル障壁はCoサイトの空孔へのFeの移動よりもはるかに高くなる。従って、CFGG薄膜でL2₁構造を形成するためには、500°Cを超える高いT_{an}が必要になると考えられる。以上のように、様々なアニール温度により作製したCFGG薄膜におけるCo-Feの規則化のメカニズムを、放射光を用いた異常分散X線回折により捉えることに成功した。これにより、ハーフメタリックホイスラー合金を使用した各種スピントロニクスデバイスのパフォーマンス向上のための知見が得られた^[14]。

水口 将輝 MIZUGUCHI Masaki

名古屋大学 大学院工学研究科

e-mail : mizuguchi.masaki@material.nagoya-u.ac.jp

壬生 攻 MIBU Ko

名古屋工業大学 大学院工学研究科

e-mail : k_mibu@nitech.ac.jp

参考文献

- [1] M. Yamazoe *et al.*: *J. Phys. Condens. Matter* **28** (2016) 436001.
- [2] H. Sakurai *et al.*: *Mater. Res. Express* **6** (2019) 96114.
- [3] K.-J. Kim *et al.*: *Nat. Mater.* **16** (2017) 1187-1192.
- [4] Y. Hirata *et al.*: *Phys. Rev. B* **97** (2018) 220403(R).
- [5] T. Ikebuchi *et al.*: *Magn. Soc. Jpn.* **45** (2021) 1-5.
- [6] P. Wadley *et al.*: *Science* **351** (2016) 587-590.
- [7] V. Baltz *et al.*: *Rev. Mod. Phys.* **90** (2018) 015005.
- [8] T. Moriyama *et al.*: *Sci. Rep.* **8** (2018) 14167.
- [9] S. Ota *et al.*: *Appl. Phys. Express* **12** (2019) 053001.
- [10] S. Ota *et al.*: *J. Appl. Phys.* **127** (2020) 173901.
- [11] S. Ota *et al.*: *Sci. Rep.* **11** (2021) 6237.
- [12] H. Suto *et al.*: *Appl. Phys. Express* **13** (2020) 043002.
- [13] H. Suto *et al.*: *J. Appl. Phys.* **128** (2020) 133903.
- [14] K. Goto *et al.*: *Phys. Rev. Mater.* **4** (2020) 114406.

小野 輝男 ONO Teruo

京都大学 化学研究所

〒611-0011 京都府宇治市五ヶ庄

TEL : 0774-38-3103

e-mail : ono@scl.kyoto-u.ac.jp

岡本 聡 OKAMOTO Satoshi

東北大学 多元物質科学研究所

e-mail : satoshi.okamoto.c1@tohoku.ac.jp

千葉 大地 CHIBA Daichi

大阪大学 産業科学研究所

e-mail : dchiba@sanken.osaka-u.ac.jp

2 つのゲートを順番に開け閉めすることが必要である (2 つのゲートが同時に開くことはないというのが肝心の点である)。従って、反応サイクルは多数のステップから成るが (図 1)、その全ての反応中間体の原子構造を決定し、それに基づいて作動機構を解明することを目指している。具体的には (i) 私達が世界に先駆けて構造決定に成功して以来、20 年以上にわたって追求してきた筋小胞体 Ca^{2+} ポンプ (Ca^{2+} -ATPase、sarco(endo)plasmic reticulum calcium ATPase (SERCA)) の反応サイクル中間体の結晶構造解析、(ii) 医学的・生物学的にはより重要とも言え、そのため激しい国際競争が続いているナトリウムポンプ (Na^+ , K^+ -ATPase) の複数の状態の結晶構造解析、(iii) 「結晶中の脂質二重膜の可視化」を行い、膜蛋白質が働く「場」である脂質二重膜とポンプ蛋白質との相互作用を解明すること、の 3 つのテーマから成る。それぞれ大きな進歩があったが、本報告では *PNAS* 誌に発表したテーマ (i) に関する論文¹¹ について紹介したい。

2. 筋小胞体 Ca^{2+} ポンプの構造研究の現状

私達は、筋小胞体 Ca^{2+} ポンプ SERCA1a (速筋由来の成熟型が Ia の意味) を対象に、2000 年の最初の構造² ($\text{E1} \cdot 2\text{Ca}^{2+}$) 以来、BL41XU を利用して、その反応過程のほぼ全体をカバーする 10 状態の結晶構造を決定した (図 1)。また、4 状態に関しては、結晶中の脂質二重膜を解像することによって、脂質二重膜は単に膜蛋白質を浮かべる海のようなものではなく、ポンプ機構の重要な部分として組み込まれていることを示し³、イオン能動輸送機構の原子構造に基づく理解を推進してきた。ここからさらに理解を進めるためには、変異体の構造決定は避けて通れない課題である。SERCA に関しては、組み換え蛋白質の大量生産技術も確立しているので⁴、結晶化に取り組むこと自体には大きな問題はない。2021 年 2 月末の時点では欧州グループによる 4 つの変異体の構造が発表されているが⁵⁻⁷、メカニズムの解明に大きく貢献しているとは言いがたい。生化学実験の条件と結晶化条件が離れていることも 1 つの要因であるが、得られた構造の意義を理解することは容易とは限らない。一方で、構造の理解のためには道具立ても重要であり、本稿で紹介する論文¹¹ では量子化学計算が必須であった。

3. Ca^{2+} ポンプのイオン通路ゲート残基 Glu309 とその変異体

SERCA1a は ATP1 分子の加水分解に対し 2 個の Ca^{2+} を細胞質から小胞体内腔へと濃度勾配に逆らって運搬し、逆方向に 2 ないし 3 個のプロトンを輸送する⁸。994 残基の単一鎖から成る膜蛋白質であり、3 つの良く分離した細胞質ドメイン (A、N、P) と 10 本の膜貫通ヘリックス (M1-M10) から成る (図 2a)。燐酸化される残基は Asp であり P ドメインに位置する。ATP のアデニン環は P ドメインに連結した N ドメインに結合する (図 2)。2 個の Ca^{2+} の結合サイトは膜貫通領域にあり、M4-M6、M8 にあるアミノ酸残基の酸素原子が配位することによって μM の親和性を生み出す (図 3)。 Ca^{2+} 結合サイトが Ca^{2+} に対し高親和性を持ち、細胞質側を向いている状態を E1、低親和性で内腔側を向いている状態を E2 という (図 1)。自己燐酸化 (E1P、P は燐酸を表す) に伴い、 Ca^{2+} のゲートを動かす actuator として機能する A ドメインが $\sim 30^\circ$ 膜面に対し傾き、M1-M2 ヘリックスを細胞質側に引き上げることで細胞質側通路が閉じられる⁹。その結果、2 個の Ca^{2+} は膜内に閉塞される。この状態で ADP が外れると E2P 状態になり、内腔側ゲートが開き Ca^{2+} は放出される。その後、燐酸が蛋白質から外れた状態が E2 (正確には $\text{E2} \cdot n\text{H}^+$ 、上述のように n は 2 ないし 3) であり、プロトンは自然に外れて Ca^{2+} に対し高親和性の E1 状態になる。イオンポンプはこのように膜貫通領域の細胞質側と内腔側 (細胞外側) にある 2 つのゲートを、P ドメインで起こる化学反応と共役させて順番に開け閉めし、運搬するイオンに対する結合サイトの親和性を変化させることによって濃度勾配に逆らった輸送を行う。E1 と E2 の変化は主に M4 ヘリックスを (手押しポンプのピストンのように) 上下させるとともに M6 ヘリックスのほどけている部分を回転させることによって成される (図 3、詳細は後述)。

SERCA の点変異体中最も注目されてきたものの 1 つに Glu309Gln 変異体がある。細胞質にある Ca^{2+} の細胞質側通路の入り口に位置し、イオン通路のゲートとなる。Glu309 は 2 つある高親和性 Ca^{2+} 結合サイトの 2 番目を構成する主要なアミノ酸残基であり、 Ca^{2+} 結合の完成を細胞質ドメインに伝え、次の「ATP からの

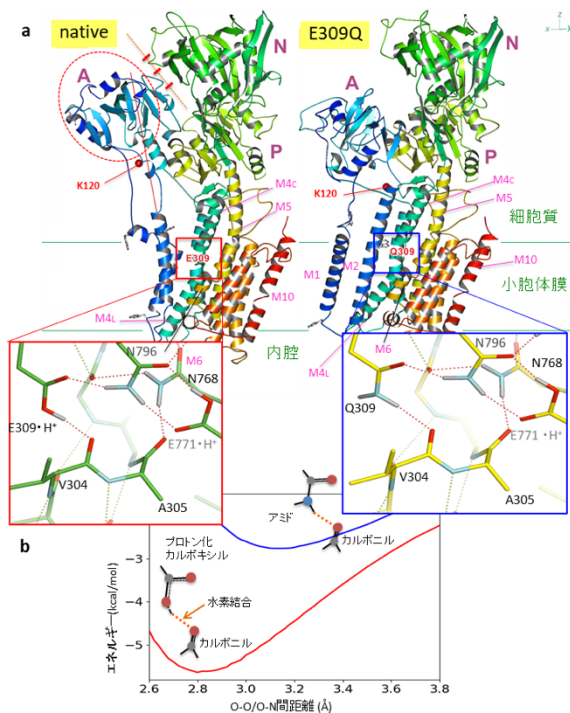


図2 Ca²⁺ポンプの天然型 (native) と Glu309Gln 変異体 (E309Q) の E2 状態の結晶構造(a)と Glu/Gln309-Val304 間の水素結合の至適距離(b)。拡大図中のオレンジ色の点線は水素結合を表す。天然型では A、N、P の3つのドメインから成る細胞質側頭部は A-N間の7つの水素結合 (赤の短い棒) のために閉じているが、変異体では開いている。また、Aドメインが大きく回転しているために M1、M2 ヘリックスの位置も大きく変わっている。M5 ヘリックスの湾曲も天然型に比べ著しく小さい。天然型 E2 状態では蛋白質分解酵素 (proteinase K) により Lys120 (K120、赤丸) で切断されるが、変異体ではされない。(b)のプロットは量子化学計算 (CCSD (T)) によるプロトン化カルボキシル-カルボニル間とアミド-カルボニル間の水素結合エネルギーの距離依存性を示す。エネルギー的至適距離はプロトン化カルボキシルの場合 2.83 Å、アミドの場合 3.16 Å である。

「リン酸転移」($E1 \cdot 2Ca^{2+} + ATP \rightarrow E1P \cdot 2Ca^{2+} + ADP$) のステップ (図 1) に導く働きを持つ。M4 ヘリックス中央のほどけた領域に位置するが (図 2、3)、リン酸転移に伴い、その側鎖でイオン通路を塞ぐ役割を持つ。この残基のいかなる変異によっても Ca²⁺ の結合が SERCA1 分子当たり 1 個になってしまうことが SERCA 研究の初期に示され、Ca²⁺ が 1 個だけ結合した状態の構造を決定できるかもしれないという希望のもとに構造研究も進められた^[7]。ところが、デンマークグループの結晶構造では、両方の Ca²⁺ 結合サイトともに埋まっており、しかも Ca²⁺ の配位にも大きな変化はなかった^[7]。変異体の生化学的実験結果は、低温 (0 ~ 4°C) で且つ低 Ca²⁺ 濃度 (μM) で得られたものであり、結晶化に使われる室温且つ mM Ca²⁺ の存在下とは大きく異なっていた、ということである。いずれにせよ、当初の期待は満足されず、得られた構造の意義も深く考えられたとはとても言い難い。

一方で Glu309 は、Ca²⁺ に対し低親和性の E2 状態においては、プロトン化していると考えられてきた。Ca²⁺ の高親和性結合に当たっては、負の荷電を持つ酸素原子が Ca²⁺ の周りに集中する (図 3)。Ca²⁺ 放出後 (E2 状態) においては 4 つある Glu や Asp (Glu309、Glu771、Asp800、Glu908) のカルボキシル基はプロトン化し、負電荷の集中による反撥を中和する必要があると考えられる^[10]。プロトン化は同時に、Ca²⁺ に対する親和性を低下させる役割も担う^[9]。つまり、E2 は厳密には $E2 \cdot nH^+$ (n は 2~3) と記述されるべきであるが、E2→E1 遷移において、「4 つあるカルボキシル基のどれからプロトンが外れるのか」、「プロトンの放出は構造変化の引き金なのか結果なのか」は分からないし、

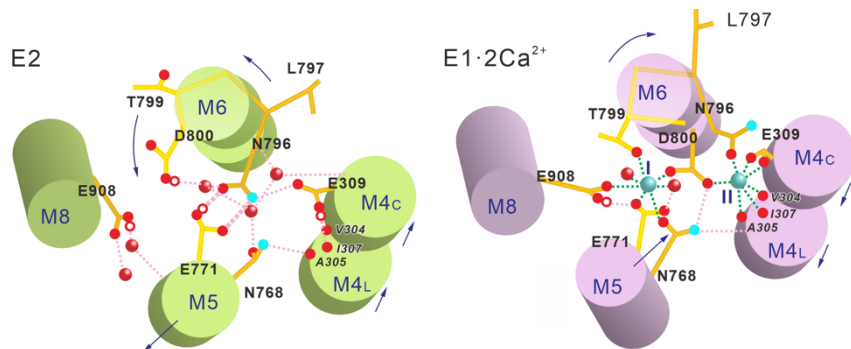


図3 Ca²⁺結合サイトを構成するアミノ酸残基の E2 と E1·2Ca²⁺状態における配置と量子化学的に最適化された水素結合ネットワーク。細胞質側から見ている。水色の小球は Ca²⁺、赤い小球は水分子、赤丸はプロトンを表す。イタリックの残基番号は主鎖カルボニル基が配位していることを示す。オレンジ色の点線は水素結合を、水色の点線は Ca²⁺ の配位を示す。最初にサイト I Ca²⁺ が結合する。

実験的にどうすればこの問題に迫れるのかも不明であった。

Glu309Gln 変異体が E2 状態で特異な振舞いをすることは、蛋白質分解酵素 (proteinase K) による部分消化実験で示されていた。すなわち、もっと「激しい」置換であるはずの Glu309Ala 変異体では切断パターンは E2 型であるのに対し、Glu309Gln 変異体は E1 型であった^[11]。その差異は膜貫通ヘリックス M2 の細胞質側の端にある Leu119-Lys120 (図 2a) 間のペプチド結合が蛋白質分解酵素で切断されるのが E2、されないのが E1 ということなのだが、切れる切れないの構造上の差異はごく小さいものかもしれない。ともあれ、Glu309Gln 変異体を Ca²⁺非存在下で結晶化しようということになり、E2 状態を確実なものにするために、SERCA を E2 状態に固定する強力阻害剤 thapsigargin 存在下で結晶化した^[11]。得られた構造 (図 2a の E309Q と 4b) は、Ca²⁺結合部位を構成する残基の配置 (側鎖の位置、配向も含めて) から言えば疑いもなく E2 状態を示しているのだが、これまでに得られてきた E2 状態 (6 種ある) の構造とは大きく異なっており、何が E2 状態を形成するのに本質的に重要かを明らかにし、さらに、E2→E1 遷移はどうか起こるかを示すものであった。

4. Ca²⁺ポンプの E2 状態

E2 状態の構造 (図 2a の native と 4a) の特徴としては、目立つ順に並べると^[12]、

- (i) 3 つのドメインから成る細胞質側頭部は閉じてコンパクトな構造である。

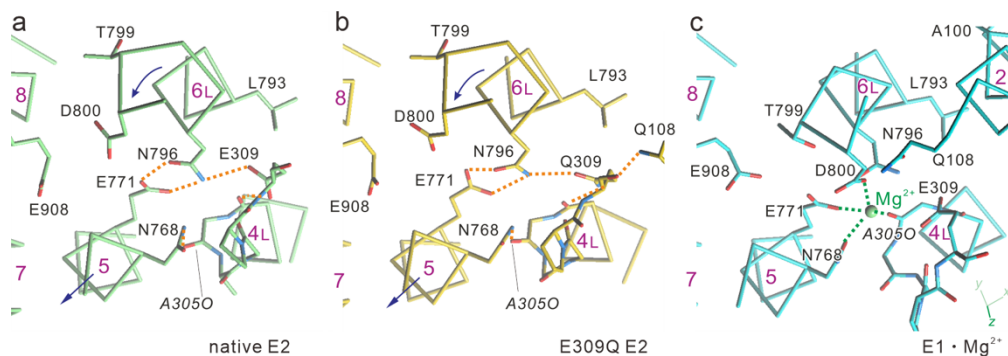


図 4 Ca²⁺に配位するアミノ酸残基の配置と E2→E1 遷移に伴う構造変化。(a) 天然型 SERCA1a の E2 状態。(b) Glu309Gln 変異体の E2 状態。(c) 天然型の E1·Mg²⁺状態。細胞質側からほぼ膜面に垂直に見ている。オレンジ色の点線は水素結合を表す。紫色の数字はヘリックスの番号。矢印は E2→E1 遷移に伴う M5、M6 ヘリックスの動き。M4 ヘリックスは紙面に対し手前に (細胞質側に) ~5 Å 移動する。Ca²⁺に配位するアミノ酸残基の配置は天然型と Glu309Gln 変異体とで同一であることを注意。

- (ii) SERCA 蛋白質の背骨である M5 ヘリックスは M1 方向に大きく湾曲している。
- (iii) Ca²⁺の結合・放出に当たって膜に対し上下運動する M4 ヘリックスは下がった位置にある。
- (iv) Ca²⁺に配位する 2 つの残基 (Asn796、Asp800) を含む M6 ヘリックスは、Asp800 付近でほどけているが、その部分は E2 では E1 に比べ、~90° 回転している。その結果、Ca²⁺結合時にはサイト II Ca²⁺に配位する Asn796 が、E2 ではサイト I Ca²⁺に配位する Glu771 と水素結合を作っている (図 3、4)。

ことが挙げられる。この 4 つは勿論独立の事象ではない。Ca²⁺結合部位が低親和性であるのは M4 が下がった位置にあるためであり、M5 の湾曲は M4 を下がった位置に持ってくるため (図 5)、また M5 の湾曲を保つためには細胞質側頭部は閉じて安定な構造をとることが必須と考えられていた。つまり、(i) - (iii) 間の連関は認識されていたが、(iv) の意義は構造の安定性のためくらい理解であった^[10]。さらに、(i) に関連して、

- (v) A ドメインの位置は E1 とは方位角にして 110° 違う (膜面に対しほぼ垂直な軸の周りに回転している)。
 - (vi) そのことを反映して、M2 ヘリックスは細胞質領域で一部ほどけており (図 2a)、長くなっている。その結果、M4 ヘリックスは膜に対して下がった位置にあることが可能である^[13]。
- も、構造的特徴であった。

ところがこの Glu309Gln 変異体では、細胞質側頭

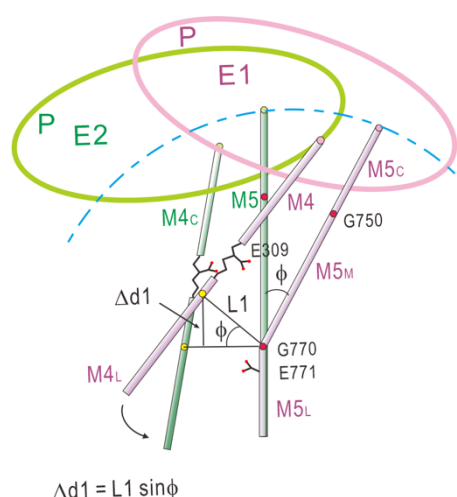


図5 M4 ヘリックスの上下運動と M5 の湾曲の関係。M4 と M5 ヘリックスは P ドメインに上端で固定されている。M5 ヘリックスは連続したヘリックスであるが、2つの Gly のために3つのセグメントから成るとみなすことができる。E1→E2 遷移においては M5 が図のピンク色から緑色の位置に傾きを変える（湾曲する）。その結果、P ドメインは傾斜し、M4 ヘリックスは $\Delta d1$ だけ下がり、 Ca^{2+} の結合に相当であったアミノ酸残基の配位は破壊される。一方で、M4L はより M5L に接近する（押し付けられる）。2002 年モデル^[12]の改訂版。

部は開いている（図 2a）。特に A ドメインは 125° 回転し、E1 状態の方位角とほぼ一致している。しかし、回転軸が膜に対して傾いている結果、膜表面に $\sim 10 \text{ \AA}$ も接近していた。この A ドメインの傾きは、これまでに得られたどの状態の構造とも違っていた。一方、M5 ヘリックスはほぼ真っ直ぐであり、標準的 E2 状態のような大きな湾曲は見られなかった。M2 は E1 様の連続したヘリックスになっており、蛋白質分解酵素による切断パターン^[11]を良く説明するものであったが、大きく膜面に対して傾いていた。これは A ドメインの大きな傾斜と相関していると考えられる。M1 ヘリックスは、これもまた全くユニークな位置・傾斜であり、しかも、これまで E1 $\cdot 2\text{Ca}^{2+}$ 状態で見られなかった連続ヘリックス（他の状態では Asp59 のところで大きく折れ曲がり、細胞質側（M1'）は両親媒性であることを反映し、膜表面に寝る）であった。一方、(iii) の M4 ヘリックスは下がった位置にあり、 Ca^{2+} 結合に関与するアミノ酸残基の配置は側鎖まで含めて全く同一であり（図 4）、従って、プロトン化状態も同じはずである。つまり、この Glu309Gln 変異体の構造

は間違いなく E2 状態にあるが、E2 構造の「看板」と目されていた (i) と (ii) は本質ではないことが明らかになってしまったのである。一方、あまり注目されてこなかった、(iv) の M6 のヘリックスがほどけている部分は E2 構造を保っていた。

5. Glu 残基の Gln 置換で何が起こり得るのか

このように大きな構造変化の原因は Glu309 を Gln に置換したことである。一方で、より激しい置換であるはずの Glu309Ala 変異体は、蛋白質分解酵素による切断パターンが示すように、標準的 E2 構造を保っていた。Glu の側鎖の位置には水一分子が固定された。つまり、水分子がプロトン化カルボキシル基の代わりをしていたわけである。一方、Gln 変異体では Gln の側鎖が邪魔をして水は入れない。ともかく、Glu→Gln の置換が大きな構造変化を引き起こしたわけであるから、まずは標準的 E2 状態において Glu309 が何をしているかを見てみよう。

Glu309 は M4 中央付近のヘリックスがほどけた部分に位置する（図 2、6）。そのカルボキシル基の酸素原子の 1 つは M4 ヘリックスの内腔側（M4L）の上端（細胞質側の端）にある Val304 主鎖カルボニル基の酸素と 2.8 \AA の距離にある（図 6b）。この距離はともに負の荷電を有する酸素原子間の距離としては近過ぎ、一方は（この場合可能なのは Glu309 側だけ）プロトン化して水素結合を作っている、としか考えられない。実際、分散を加味した密度汎函数法（DFT-D）を用いて、この X 線結晶解析（ 2.5 \AA 分解能）による原子モデルの量子化学的な構造最適化を行ってみても、結晶構造からのずれはほぼない。一方、Glu309Gln 変異体の結晶構造ではこの N-O 間の距離は 3.0 \AA と僅かに長い。これが意味のある違いなのかは、この結晶構造をいくら眺めていても分からないので、そもそも「量子化学的に期待される水素結合の距離はどんなものか、それは $\text{COO}^- \text{H}^+ \text{O}$ 間と $\text{NH}_2 \text{O}$ 間で違うのか」を調べることにした。

この計算自体は小さい系で可能なので、CCSD (T)（coupled-cluster single-double and perturbative triple）を用いた精度の高い計算を行った^[1]。標準的 E2 構造における Glu309-Val304 の geometry を仮定した時、プロトン化カルボキシル-カルボニル間の水素結合の距離（O-O 間のエネルギー的な至適値）は、水素結

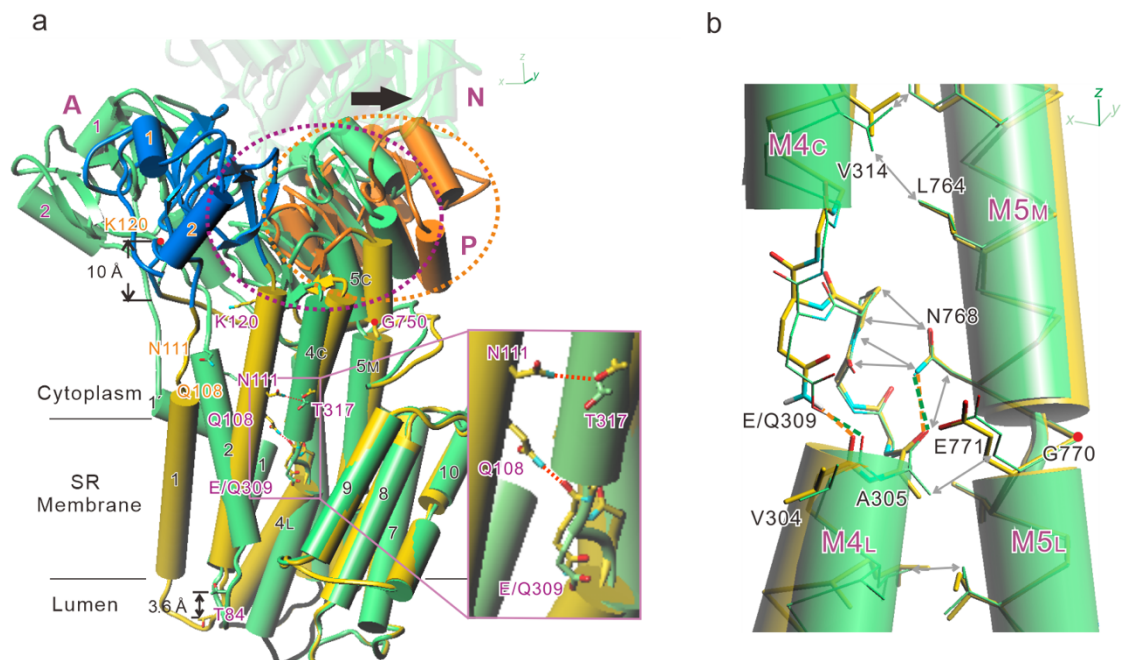


図6 SERCA1aの天然型と Glu309Gln 変異体の E2 状態の結晶構造の重ね合わせ。緑色、天然型。黄色(青色、A ドメイン。オレンジ色、P ドメイン)、変異体。変異体の A ドメインは 127°膜に垂直から 14°傾いた軸の周りに回転しており、Lys120 の位置で 10 Å 膜面に近づいている。そのため、A ドメインに直結した M2 ヘリックスは、傾くだけでなく、部分的にほどけたヘリックスから連続したヘリックスになる(a)。M4C の傾きの差は~5°。この差は M5C の傾きの変化で吸収され、M5M はほとんど傾きを変えない。P ドメインの運動は膜面にほぼ平行である(黒の矢印)。(b) 両頭の矢印はファンデルワールス接触を、破線は水素結合を示す。Glu309 の Gln 置換の結果、Val304 カルボニル基との間の水素結合は僅かに長くなり、M4C 全体が 5°傾くとともに上昇している。M4L は Ala305 のカルボニル酸素の周りに 16°、M5L から離れる方向に回転していることに注意。(a),(b)ともに M7-M10 ヘリックスで重ね合わせてある。

合の教科書的標準距離である 2.83 Å だが、アミド-カルボニル間 (N-O 間の距離) は 3.16 Å であった (図 2b)。M3-M6 の 4 つのヘリックスの 58 残基を含む DFT-D によるエネルギー最小化の結果は、CCSD(T) の結果と僅かに異なり、Glu→Gln 変異によって 2.62 Å が 2.98 Å に広がるはずとの答えであった。

実際の結晶構造と量子化学的に最適化されたモデルは実に良く一致しており、結晶構造では確かに水素結合距離は 2.8 Å から 3.0 Å に広がっていた (図 6b)。この O が N に置換されることによる僅かな差は、Gln 側鎖の回転で十分許容できそうであるが、van der Waals 接触を調べてみると、Glu309 の側鎖は隣接する M6 ヘリックスにある Leu793、Asn796 を中心にしっかり固定されており、角度変化の余地はないことが分かる。実際、Gln309 から主鎖も上昇し、M4C ヘリックス全体は標準的 E2 状態の M4C から~5°傾いていた。この傾きの変化自体は小さいが M4C ヘリックス (~30 Å ある) の反対端 (上端) では 4.4 Å、P

ドメインの上端ではそれがさらに拡大されて 9 Å を超える運動を生み出していた (図 6a)。この運動は、大きさは違っても、E2→E1 遷移で起こる運動と良く似ている。M4C ヘリックスは P ドメインの一部として組み込まれているから、これだけの大きさの運動があると、N-A 間の接触面は保たれるわけもなく、細胞質側頭部は開いて E1 様になったし、A ドメインは大きく回転してやはり E1 様の位置をとることになったわけである。そうすると、A ドメインに直結している M2 の位置も変わり、A ドメインの傾きのために E1 様ではあるがユニークな位置をとり、膜面に近くなったために E1 様の連続なヘリックスとなったということである。M1 についても同様であり、連続ヘリックスとなることに積極的意味はあるまい。一方、これだけ大きい構造変化があっても Ca^{2+} に配位するアミノ酸残基の配置は少しも揺らがなかった (図 4)。しかも、M4C は持ち上がっているのに、M4L は下がったままである。何故か。

6. Ca²⁺ポンプのE2構造の本質

そもそもM4の高さを決めているものは直接的にはPドメインの傾きであり、それを決めているのはM5ヘリックスの湾曲具合のほうであった^{9,12)}(図5)。E2状態ではM5ヘリックスはM1方向に大きく湾曲し、PドメインのAドメインに近い側を膜面に近づけるからM4も下がり、高親和性Ca²⁺結合サイトを破壊する。一方、Pドメインが傾く結果、AドメインはPドメインに押され、E1状態とは110°違う方向を向くように回転し、その結果Nドメインと3つの塩橋を含む7つの水素結合を作れるようになって閉じたコンパクトな細胞質側頭部を形成する。これが2002年の理解であった¹²⁾。この時点ではM5の湾曲にもっと深い意味があることを理解していなかった。

その1つはM6のヘリックスがほどけている部分の回転との関連である。このヘリックスがほどけている部分にはThr799とAsp800の2つの残基があり、E2状態においてはThr799のE1の位置にAsp800が来ることになり、Thr799はサイトIから完全に除外される(図3)。そしてサイトII Ca²⁺を配位していたAsn796がプロトン化したGlu771と2つの水素結合を形成し、この構造を安定化する。Glu771はサイトICa²⁺の配位に重要な残基だから、Thr799とGlu771をCa²⁺の配位から除外することによってサイトIを二重に破壊したわけである。実はこの、M6のほどけた部分の回転をもたらしているものは、M5の湾曲なのである。Tyr763とLeu764と2つの嵩高い残基がM5の湾曲によってThr799とAsp800の側鎖を押して回転させているのである。一方で、Glu771がプロトン化していない限り、Glu771-Asn796間の水素結合は作れず、この構造は安定化しない。つまりM5の湾曲はGlu771のプロトン化を引き起こす(確認する)ためのメカニズムなのであろう。

もう1つの意味は、この湾曲がM4LをM5、M6にきつく押しつけているということである。図5に示すようにM5の湾曲(傾斜)はGly770を中心にして起こるため、M5のGly770より下側(M5L)は動かず、E2状態への遷移によってM4は下に行くほどM5、M6との距離は短くなる。従って、Glu309→Glnの置換によってVal304との水素結合は長く

なるが、その差をM4Lの傾きの変化で吸収するのは不可能であるし、M5側に移動して吸収することもできない。実際、変異体でM4Lの傾きの変化は起こっている。しかし、その方向は予想とは逆で、Val305はGlu/Gln309により接近するようになっている(図6b)。すなわち、Ala305カルボニル酸素を中心とするM4Lの回転が生じている。このカルボニル酸素はAsn768アミドとの間で水素結合を作っており、その位置はGlu771 C β やAsn768 C β 等との接触で決まっている。Glu771がAsn796との二重の水素結合でしっかり固定されているため、Asn768も動けない。そのため、M4Lは上昇できず、結局M4Cがその傾斜角を変えることになる。つまり、M4ヘリックスの上昇のためには、M5、M6ヘリックスから離れることが必要なのである。実際、M6ヘリックスのほどけている部分がE1様になれば、Asp800とThr805がM4CにあるVal314を押すことになって、M4CをM5、M6ヘリックスから離し、Ala305もAsn768から離れ、ロックが外れることになる。

一方で、Glu309Gln変異体の構造は、このロック機構には十分な裕度があることを示している。実際、細胞質側頭部は開いているし、M5はかなり真っ直ぐである。それでもこのロックは外れない。M5には2つのGly(750と770)があり、M5ヘリックスはある程度独立した3つのセグメントから成るとも言える(図5)。M4Cの傾きの $\sim 5^\circ$ の違いはM5の上端セグメント(M5C)の傾きの変化で十分吸収できる。但し、M5CはPドメインに組み込まれているから、M5Cの傾きの変化はPドメインの運動を引き起こす(図6aの黒矢印)。この運動は、閉じた細胞質側頭部を開くには十分な大きさであるが、M5Mの大きな変化を引き起こすほどではない。実際、Glu309Gln置換によるM5Mの傾きの変化は $\sim 4^\circ$ であり、E1 \cdot Mg²⁺に遷移する時には 13° である。そこまではないとM4は上昇できず、E1には遷移できない。Glu771とAsn796間の二重の水素結合は局所的にM5-M6ヘリックス間を広げ、M5Lを内腔側に押し下げている。Glu771が自由にならない限り、M5Mの大きい変化は起こり得ないのである。すなわち、Glu309Gln変異体の構造はE2構造のロック機構を見事に示してくれたわけである。

7. E2→E1 遷移

それでは、この変異体構造は正常のポンプ反応サイクルにおける構造変化とどう関係しているのだろうか。Glu309 のカルボキシル基は E2 状態ではプロトン化されていると考えられてきた (図 3)。上述のように、結晶構造を出発点とし、DFT-D を用いた量子化学計算によってエネルギー最小化を行ってみると、プロトン化しているならば大きな構造変化は起こらない。問題はプロトンが外れた時に何が起こるか、である。これも DFT 計算によってエネルギー最小化を図ってみる。Glu309 カルボキシル基の酸素原子と Val305 カルボニル基の酸素原子間には今や水素結合は形成され得ないので静電的反発が起こる。それによって、M4C と M4L 間は拡大する (図 7b)。これは、Glu309Gln 変異体の構造で見たように、E2 状態の閉じてコンパクトな細胞質側頭部を開き、M5 の湾曲に対する制限を外すことになる。肝心なことは、それと同時に、Glu309 カルボキシル基の負電荷を中和すべく、M6 の Asn796 のアミド基が Glu771 のカルボキシル基との水素結合を切って、Glu309 側に移動することである。その結果、M6 は自由になり、ヘリックスがほどけていた部分は M5 の湾曲によって回転さ

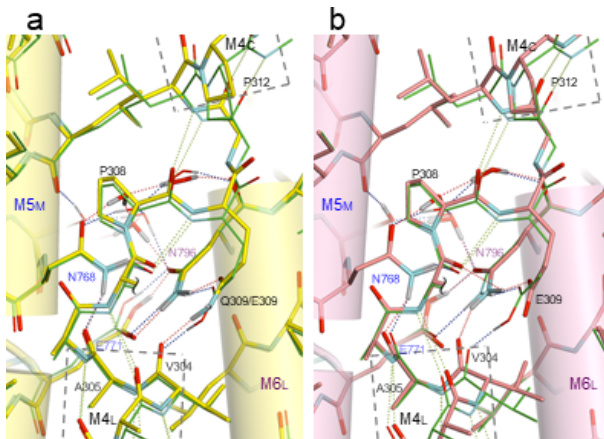


図 7 SERCA1a の E2 状態における Glu/Gln309 周辺の水素結合ネットワークの詳細。(a) 天然 SERCA1a の原子モデル (緑色の細い線) と Glu309Gln 変異体の原子モデル (黄色の棒と円筒) を重ねたもの。(b) 天然 SERCA1a において Glu309 がプロトン化されている時 (緑色の細い線) と脱プロトン化された時 (ピンク色の棒と円筒)。点線は水素結合を表す。原子モデルは全て量子化学的に最適化されており (但し、各残基の C α 原子は空間固定)、膜面にほぼ平行に、図 2 の左側から見ている。M5 と M6 ヘリックス上の残基が最大限一致するように重ね合わせた。

せられていたのと逆方向へ回転する。これは M5 の湾曲を戻し、M4C を M5、M6 から離れる方向へ押すことになる。M5 の湾曲が戻る結果、M4L を止めていた Asn768 は M4 から離れ、Ala305 との間の水素結合も切れる結果、M4 は自由になる。つまり、M4 全体が上昇することが許されることになり、E1 状態へ遷移する。これが E2 \cdot nH $^+$ →E1 遷移のシナリオであろう。この遷移によって、Glu771、Asp800 とともにプロトンを放出しているはずである。従って、金属イオンに対し高親和性になり、Ca $^{2+}$ が結合する前には Ca $^{2+}$ の 1 万倍は細胞質中に多く存在する K $^+$ や 100 倍は多い Mg $^{2+}$ を結合して構造を安定化するのである¹⁴⁾。

8. charge movement 測定実験

この結果は charge movement の実験結果¹⁴⁾を非常に良く説明するものであった。E2 \cdot nH $^+$ →E1 がプロトンの放出を伴うことから予想されるように、pH を弱酸性から弱アルカリ性に上げると E2 \cdot nH $^+$ →E1 遷移が起こる。そこで放出されたプロトンによる一過性の電流を測定すればこの過程をモニターできる。このプロトン放出は協働的で、天然の SERCA1a なら pH6.4 付近で明瞭な遷移が観測される。一方、Glu309Gln 変異体では遷移が観測されるのは pH7.8 付近である。このことは Glu309 以外の Glu/Asp からのプロトン放出は pH7.0 付近では起こらないことを意味する。一方、天然の SERCA1a ではプロトンの放出は一段で協働的に起こることから考えて、Glu309 がまずプロトンを放出し、それに伴う構造変化によって他の Glu/Asp からの放出が起こるのだろう。実際 Glu/Gln309-Val304 間の水素結合は Gln309 の方が安定なはずで (蛋白質分解酵素による切断パターンは E1 様であるが)、高い pH まで E2 状態を保つだろうと考えられる。

それでは Glu309Ala 変異体ではどうかというと、この変異体の結晶構造においては Glu309 のカルボキシル基は水分子で置換されているのであった。であるならば、プロトンを放出した Glu309 のカルボキシル基の負電荷を Asn796 アミド基が中和する必要はなくなるので、Glu309 のプロトン放出が引き起こす構造変化はやはり M6、M5 には伝わらないと考えられる。だから、charge movement に関してはどちらの変異体も同じ挙動を示すはずである。実験結果¹⁴⁾はまさにその通

りであった。一方、天然型では Glu309 の側鎖が邪魔をして、水分子は入れないのである。この結果は 2009 年に発表されたが、現象の記述に終わっていた。構造を理解して初めてその意味が理解されたわけである。

9. Ca^{2+} ポンプの反応サイクルは複雑である

さて、ここまでは、ポンプ機構の理解が最も容易と考えられる単一の経路 (図 1 の最も外側の経路) を仮定して進めてきたが、ポンプサイクルはポンプ蛋白質の自己リン酸化と共役しており、そのためには基質である ATP と Ca^{2+} との複合体が形成されれば良い。その意味では、最も重要な中間体は $\text{E1}\cdot\text{ATP}\cdot 2\text{Ca}^{2+}$ (結合した Ca^{2+} を膜内に閉じ込める直前の) 状態であり (図 1)、それに至る経路は複数あり得る。実際、SERCA は E2 状態でも ATP に対する高い親和性 (10 μM 以下) を持ち、細胞中には mM の ATP が常に存在するから、 Ca^{2+} 結合後に ATP が結合するという $\text{E2}\rightarrow\text{E1}\rightarrow\text{E1}\cdot 2\text{Ca}^{2+}\rightarrow\text{E1}\cdot\text{ATP}\cdot 2\text{Ca}^{2+}$ という経路を通るよりも、 $\text{E2}\rightarrow\text{E2}\cdot\text{ATP}\rightarrow\text{E1}\cdot 2\text{Ca}^{2+}\cdot\text{ATP}$ 或いは $\text{E2}\rightarrow\text{E1}\rightarrow\text{E1}\cdot\text{ATP}\rightarrow\text{E1}\cdot\text{ATP}\cdot 2\text{Ca}^{2+}$ という経路をたどる可能性の方が高いであろう。また、生理的 pH では E2 よりも E1 (Ca^{2+} に対し高親和性) 状態にあると考えられるが、どちらの経路をたどるかは $\text{E2}\rightarrow\text{E1}$ 遷移と E2 に対する ATP の結合速度に依存するであろう。いずれにせよ、そのような異なった経路上の中間体の構造を決定すれば、構造の意味 (どうしてポンプ蛋白質の構造はそうでなければならないのか) をより深く理解できるはずである。手始めは $\text{E2}\cdot\text{ATP}$ 状態である。リン酸化反応は起こらないはずだから ATP 結合そのものがどのような構造変化を引き起こすのかを理解できる、と期待された。実際、この $\text{E2}\cdot\text{ATP}$ 構造^[15] は予想外の breakthrough であったので、解説を書こうと思ったのだが、与えられた字数を既に大幅に超過している。稿を改めたい。

10. おわりに

20 年以上も同じ蛋白質の構造を眺めていると、「構造を理解するということはとんでもなく時間のかかるもの」であり、「如何に自分の理解は浅かったか」を痛感することになる。「SERCA は何のためにプロトンを対向輸送するのか」に対する答えは随分変わった。

「せっかくエネルギーを消費してプロトンを運んでも、小胞体膜はプロトンを含む 1 価のイオンに対し透過性であるから、プロトンは元に戻る。どうして、そんな無駄なことをするのだろう」が疑問だった。最初は、「 Ca^{2+} 結合サイトの構造安定性のために無駄だけれど運ぶのだ」が答えであった (2005 年)^[10]。比較的すぐにそれは浅はかで「 Ca^{2+} に対する親和性を下げ、また高親和性に戻すためである。小胞体膜がプロトンに対し leaky なのは、 Ca^{2+} 輸送を維持するためである。無駄なのに運ぶわけではない。その逆で、運んだままにしておくが駄目になるから元に戻すのだ」ということに気が付いた^[9]。今回は「いんや、それではまだ足りんよ」と宣告されたわけである。

ここに紹介したように、 Ca^{2+} ポンプの構造は M4C の傾きに非常に sensitive である。 Ca^{2+} ポンプは実に、酸素原子と窒素原子の差を認識できるのである！ヘリックスは剛体であろうから、その一端における小さな運動 (傾きの変化) は他端では大きな構造変化と成り得る。これは、蛋白質が構造変化を伝える常套手段であるが、この構造解析から、ヘリックスの傾きを変える手段として 2 つあることを学んだ。すなわち、M4C と M4L の 2 つの部分を経水素結合の長さを長くすることであり、もう 1 つは電荷を導入しそれによって生じる反発 (或いは引力) を利用することである。前者はまさに Glu309Glu 変異体がやっていたことである。反応サイクル中で変異を起こすことは不可能であるから、蛋白質ができることは後者でしかあり得ない。一方、電荷の導入による効果は周囲にあまねく及ぶわけだから、複数の events を引き起こし得る。つまりこの Glu309Gln 変異体はそのうちの 1 つだけ (水素結合の長さを長くすること) を選択的に取り出して、何が起こるかを見せてくれたことになっていたのである。そんなことは実験をやる前から予想できるわけがない (少なくとも筆者には)。

だから「実験はやってみるものだ」し、そして「答えはいつも思いがけない方向から飛んでくる」のである^[16]。「1 つのことが分かるとがらがらと色々なことが解決してしまう」というのも「蛋白質は 1 つの event で幾つものことを同時に片付ける」というのもこの論文^[11]を書いていてまたまた痛感したことであった。「蛋白質は実に良くできている」のである。

謝辞

本研究はSPring-8の長期利用課題(2016A0133と2018A0144)の一部としてなされたものである。量子化学計算は研究室の恒川直樹博士が担当した。回折データ収集に当たってはSPring-8 BL41XUの担当者、特に長谷川和也博士の絶大なご支援をいただいた。ここに記して御礼申し上げたい。また、結晶を作製してくれた杖田淳子さん、データ収集を手伝ってくれた研究室のメンバーに感謝したい。

豊島 近 *TOYOSHIMA Chikashi*

東京大学 定量生命科学研究所
〒113-0032 東京都文京区弥生 1-1-1
TEL : 03-5841-8492
e-mail : ct@iqb.u-tokyo.ac.jp

参考文献

- [1] N. Tsunekawa, H. Ogawa, J. Tsueda, T. Akiba and C. Toyoshima: *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **115** (2018) 12722-12727.
- [2] C. Toyoshima, M. Nakasako, H. Nomura and H. Ogawa: *Nature* **405** (2000) 647-655.
- [3] Y. Norimatsu, K. Hasegawa, N. Shimizu and C. Toyoshima: *Nature* **545** (2017) 193-198.
- [4] C. Toyoshima, S. Iwasawa, H. Ogawa, A. Hirata, J. Tsueda *et al.*: *Nature* **495** (2013) 260-264.
- [5] M. M. G. Geurts, J. D. Clausen, B. Arnou, C. Montigny, G. Lenoir *et al.*: *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **117** (2020) 31114-31122.
- [6] A. Marchand, A.-M. L. Winther, P. J. Holm, C. Olesen, C. Montigny *et al.*: *J. Biol. Chem.* **283** (2008) 14867-14882.
- [7] J. D. Clausen, M. Bublitz, B. Arnou, E. Montigny, C. Jaxel *et al.*: *EMBO J.* **32** (2013) 3231-3243.
- [8] S. Zafar, A. Hussain, Y. Liu, S. Lewis and G. Inesi: *Arch. Biochem. Biophys.* **476** (2008) 87-94.
- [9] C. Toyoshima: *Biochim. Biophys. Acta* **1793** (2009) 941-946.
- [10] K. Obara, N. Miyashita, C. Xu, I. Toyoshima, Y. Sugita *et al.*: *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102** (2005) 14489-14496.
- [11] G. Inesi, D. Lewis, C. Toyoshima, A. Hirata and L. de Meis: *J. Biol. Chem.* **283** (2008) 1189-1196.
- [12] C. Toyoshima and H. Nomura: *Nature* **418** (2002) 605-611.
- [13] C. Toyoshima, Y. Norimatsu, S. Iwasawa, T. Tsuda and H. Ogawa: *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **104** (2007) 19831-19836.
- [14] Y. Liu, R. Pilankatta, D. Lewis, G. Inesi, F. T. Buoninsegni *et al.*: *J. Mol. Biol.* **391** (2009) 858-871.
- [15] Y. Kabashima, H. Ogawa, R. Nakajima and C. Toyoshima: *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **117** (2020) 18448-18458.
- [16] C. Toyoshima: *Phys. Scripta* **91** (2016) 042501.

長期利用課題報告 2

熱機関用超高速・マイクロスケール燃料噴霧の X 線計測：
新たな X 線計測技法の構築による未解明の物理因子解析

仁荷大学 機械工学科	文 石洙
国立研究開発法人産業技術総合研究所	
省エネルギー研究部門	黄 魏迪
神戸大学 大学院海事科学研究科	宋 明良
マツダ株式会社 MBD 革新部	和田 好隆

Abstract

本研究グループは、エンジン数値解析の高度化による低炭素・グリーン社会の早期実現に貢献することを目指し、これまで未知の領域であったノズル近傍流動の可視化を可能とする X 線位相コントラスト画像装置を SPring-8 の BL40XU に構築し、超高速燃料噴霧基部の微粒化過程とダイナミクス構造を解析してきた。しかし、ノズル出口および近傍流動の現象解明とモデル化に重要な物理因子の中、まだ計測・解析できていないものも多く存在しており、その代表的な例として、ノズル内部キャビテーション・液体体積分率、ノズル内部の流れおよび乱流構造、ノズル内部流特性によるノズル出口流動の不安定性を上げられる。本長期利用課題では、ノズル内部流とノズル出口の初期流動に関わる上述の物理因子を解析できる新たな計測技法を構築し、その結果を用いてノズル内部と出口の流動特性を相関させることを研究の主な狙いとしている。本研究報告では、2 年間で行った長期利用課題の成果をまとめて紹介する。

1. はじめに

熱機関は輸送用、発電等の多様な分野で利用されており、これらの高効率化およびクリーン化は地球温暖化の抑制と環境問題の解決に大きな効果をもたらす。しかしながら、燃料と周囲気体との混合や噴霧の発達といったエンジンの燃焼室内で生じる物理現象はそのメカニズムに未解明の部分が多く、燃焼制御技術の実用化や製品化に際しては実験的な試行錯誤が数多くなされておられ、それがエンジン開発の効率性と的確性を落とす主な原因であった。同時に、噴射された燃料の微粒化および混合気形成過程について運転時に想定される全ての条件を対象に実験的方法で製品開発を行うのは非効率的・非現実的であることから、これまで理論モデルに基づく数値計算が併用されてきた。しかし、燃料噴霧を対象とした数値計算には、ノズル出口流動の速度分布および乱流エネルギー、ノズル近傍流動の粒径分布やダイナミクス構造等の理解とモデル化が重要であるが、これまでのレーザ光学に

基づく計測技法では、ノズル近傍の超高速・高密度領域の正確な情報を得ることが困難であった。また、ノズル出口や近傍の実験データの欠乏により理論噴霧モデルの妥当性の検証が十分ではなく、実験で得た巨視的噴霧形状に合わせて初期入力値とモデルの定数を任意に調整する、いわゆる合わせ込みが噴霧の数値解析において一般的に行われてきた。

本研究グループは、ノズル近傍流動の現象解明によるエンジン数値解析の高度化、更には低炭素・グリーン社会の早期実現に貢献することを目指し、ノズル近傍流動の可視化を可能とする X 線位相コントラスト画像装置を SPring-8 の BL40XU に構築し研究を行ってきた。X 線の高いエネルギー（短い波長）は、これまで未知の分野であったノズル近傍の高密度領域の解析を、X 線の高いフラックスと短いパルス幅は超高速流動の可視化と解析をそれぞれ可能とする。ノズル近傍の流動分裂および微粒化過程の可視化には、H モードの孤立電子バンチ（5 mA/bunch）からのナノ秒

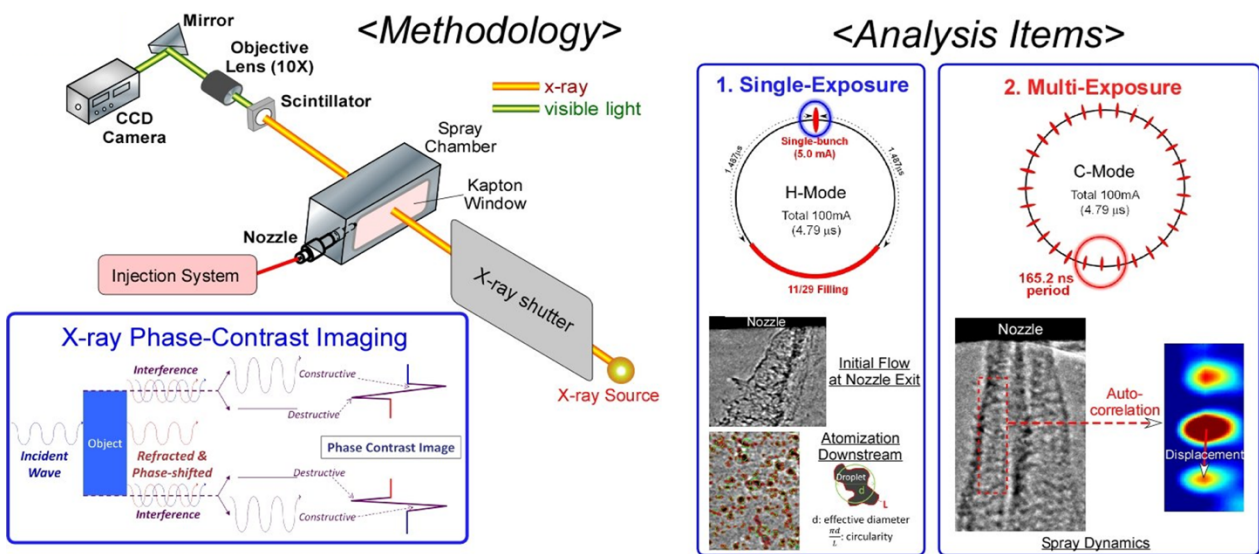


図1 X線噴霧計測の実験装置および解析項目

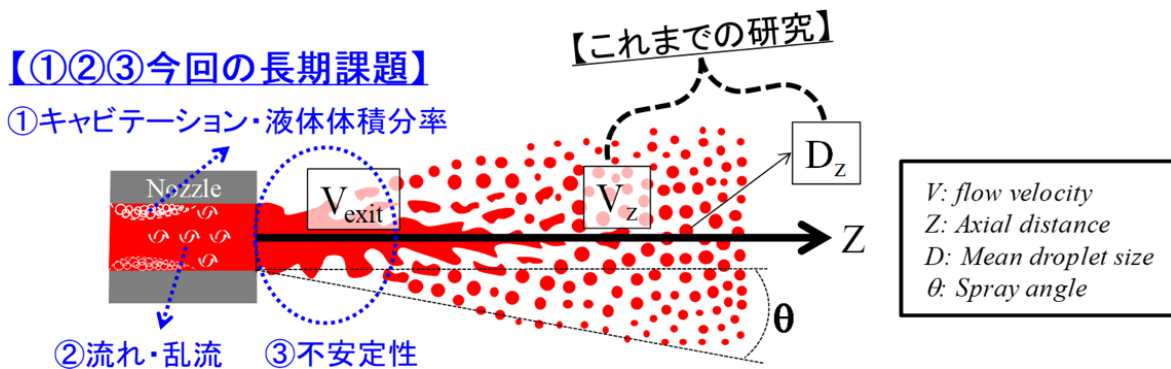


図2 長期利用課題で注目する物理因子

以下 (100 ps 程度) の時間幅と高い光強度を有するシングルパルスを用いた (図1 参照)。撮られた画像に粒子探知および形状解析アルゴリズムを適用することで、初期粒径および粒子の形状を定量的に解析することが可能になった。噴霧ダイナミクス構造を解析するためには、165.2 nsの間隔を持つCモードの3つのX線パルスを受光して3重露光X線画像を取得した。3重露光された画像のある関心領域に自己相関解析を行うことで、165.2 nsの間に流動が移動した速度ベクトルを求めることが可能になった (図1 参照)。以上の計測および解析技法はそれぞれが日本初、世界的にも実現した例が極めて少ないものである。

しかし、ノズル出口および近傍流動の現象解明とモデル化に重要な物理因子の中、まだ計測・解析できていないものも多く存在する。特に噴霧の形成を支

配する根元になるノズル内部流特性とそれにより変化するノズル出口流動の特性に関する理解が不十分であり、それらに関わる代表的な物理因子としては、「①ノズル内部キャビテーション・液体体積分率」、「②ノズル内部の流れおよび乱流構造」、「③ノズル内部流特性によるノズル出口流動の不安定性」を上げられる (図2 参照)。今回の長期利用課題では、ノズル内部流とノズル出口の初期流動に関わる物理因子を解析できる新たな計測技法を構築し、その結果を用いてノズル内部と出口の流動特性を相関させることを研究の主な狙いとした。それら物理因子の情報は、次世代燃料噴射インジェクタの開発とエンジン数値解析の高度化に活用性が高く、次世代エンジンの高効率化およびクリーン化に大きく貢献できると期待される。

2. X線噴霧可視化装置

図1に、本研究グループにてSPring-8のBL40XUに立ち上げたX線位相コントラスト画像装置の概略図を示す^{11,2)}。X線からの熱負荷による実験装置の損傷を防ぐため、X線シャッターを用いて熱負荷を減少させた。X線が流動を通過した後、位相コントラストされたX線画像をシンチレータ(LuAg:Ce)により535nmの可視光に変換し、傾き角45度のミラーに反射

させ、高速度カメラを用いて撮影した。燃料に対するX線の屈折率が1に近いため、液体噴霧からカメラまでの距離を十分持たないと鮮明な干渉パターンが現れないため、シンチレータとカメラは液体流動から最適化された距離(35cm程度)に設置した。液体噴霧に入射する前と通過後のX線強度を極力損失ないように噴射容器の窓にはX線通過率が95%以上のカプトン(kapton)膜を付着して実験を行った。

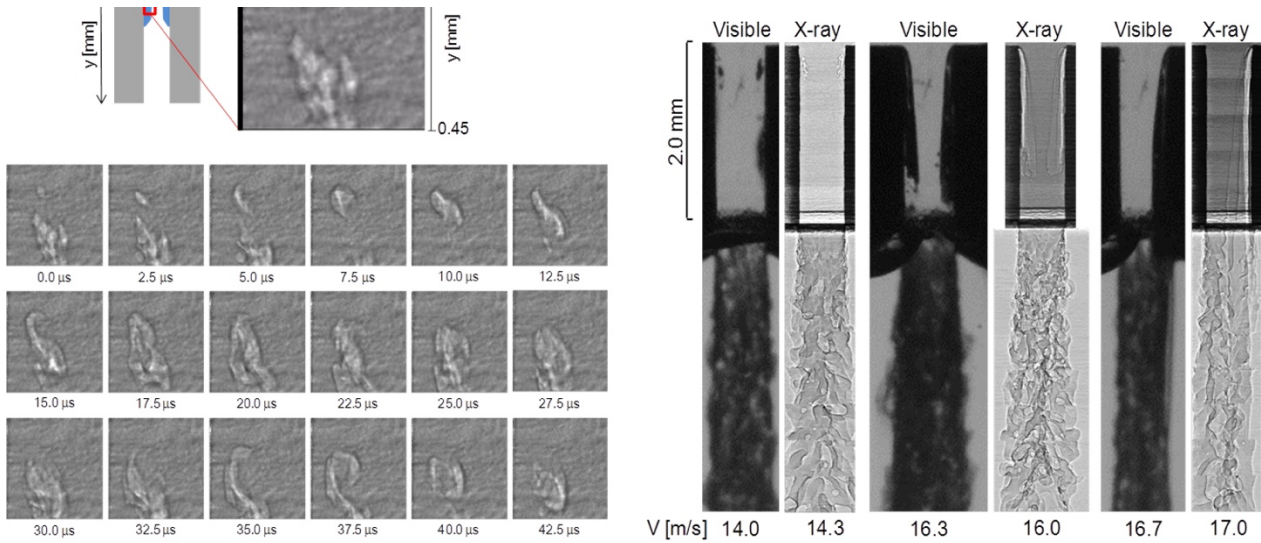


図3 ノズル内部流キャビテーションの初生と完全発達した構造の可視化結果

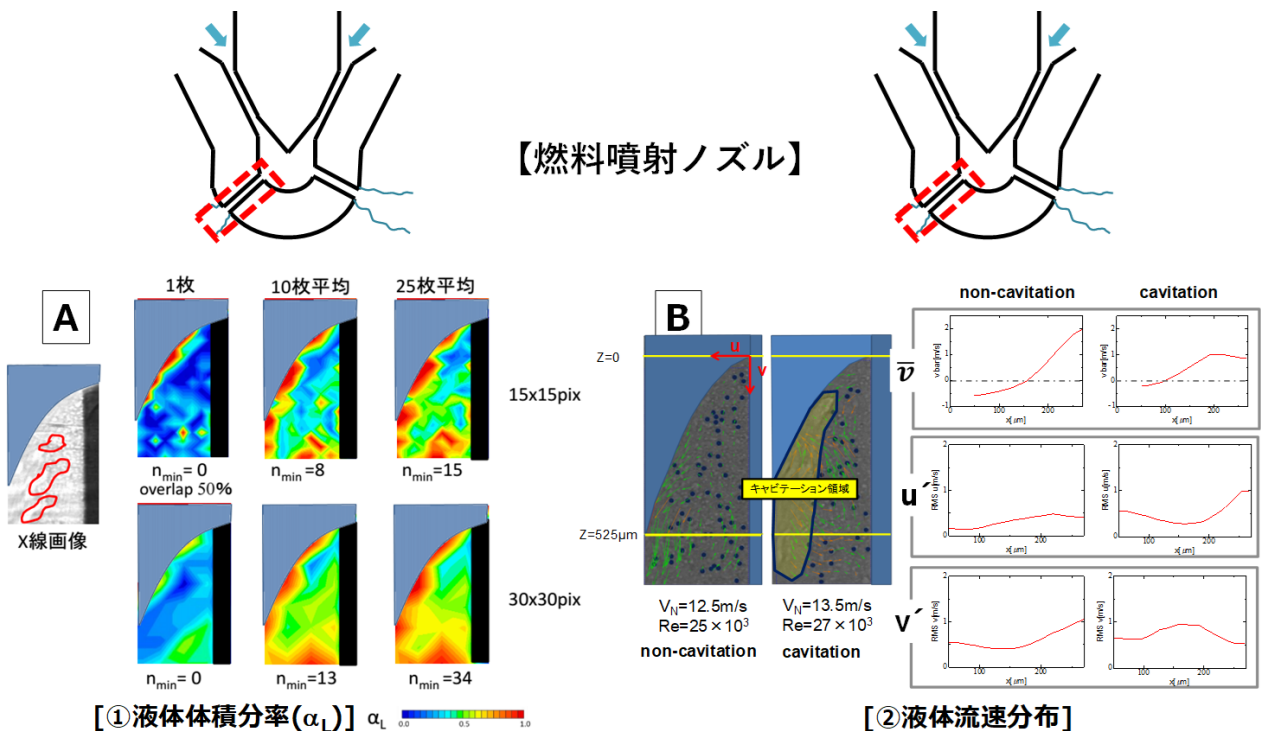


図4 ノズル内部流の液体体積分率および流速分布解析結果 (\bar{u} : 流速平均値、 u' 、 v' : 流速変動値)

3. 主な研究成果

3-1. ノズル内部キャビテーション・液体体積分率

図3に、図2の①に関わるノズル内部のキャビテーションを可視化した結果の一例を示す^[3]。BL40XUのX線源と形状を単純化したアクリル製ノズルを用いて様々な噴射条件に対するノズル内部キャビテーションの初生と完全発達した構造が鮮明に可視化できている。その後、計測技法を更に発展させ、キャビテーション内の気相体積分率 (void fraction) まで解析できる技法を構築した。液体体積分率を計測するためには、対象液体に10ミクロンの大きさを持つトレーサ粒子 (中空ガラスビード) を混入させ、キャビテーション領域におけるトレーサ粒子の濃度を解析することで液体体積分率分布を算出することに成功した (図4A参照)^[4]。

3-2. ノズル内部の流れおよび乱流構造

図2の②については、①と同じトレーサ粒子を用いてノズル内部流の粒子映像速度解析 (PIV: particle image velocimetry) を行った。可視光を用いたこれまでの研究では、透明拡大ノズルを用いてノズル内部流の速度分布を計測したが、キャビテーション内の液体流速分布やそれによって生じる乱流構造を計測した研究例はない。それは、キャビテーション気泡が多く存在する領域においては、可視光の屈折が大きく影

画像による流動構造の可視化が困難であることに起因する。今回の長期利用課題では、X線画像を用いてキャビテーション領域におけるトレーサの動きを追跡することで、キャビテーション内の液体流速分布と乱流構造を定量化することに成功した (図4B参照)。2019A期までは比較的速い主流領域における流速や乱流構造の解析が難しかったが、2019B期でビームの明るさを向上させ、またHモードの孤立バンチ (100 ps) を用いた可視化を行うことで、主流内のトレーサの動きを可視化することまで成功した。

3-3. ノズル出口流動の不安定性

図2の③については、流速のショット間変動値を計測し流動の乱れ強度を算出した研究実績がある^[5]。しかし、流体力学で定義される乱れ強度 (乱流エネルギー) は、ショット間の変動値ではなく時間変動値であるため、理論モデルと比較するためには、流速の時系列変動に基づいた解析を行う必要がある^[5]。ノズル内部の乱流やキャビテーションによって生じる流動の変動は最大MHz単位の周期を持っているとの予測結果があり、その計測のためには非常に高い撮影速度が要求される。これまでの本グループの研究では、蓄積リングの電子バンチ繰り返し周波数 (最小209 kHz) に合わせた高速撮影を行ってきたが、それでは流速の時系列変動を評価することが難しかった。今回の長期

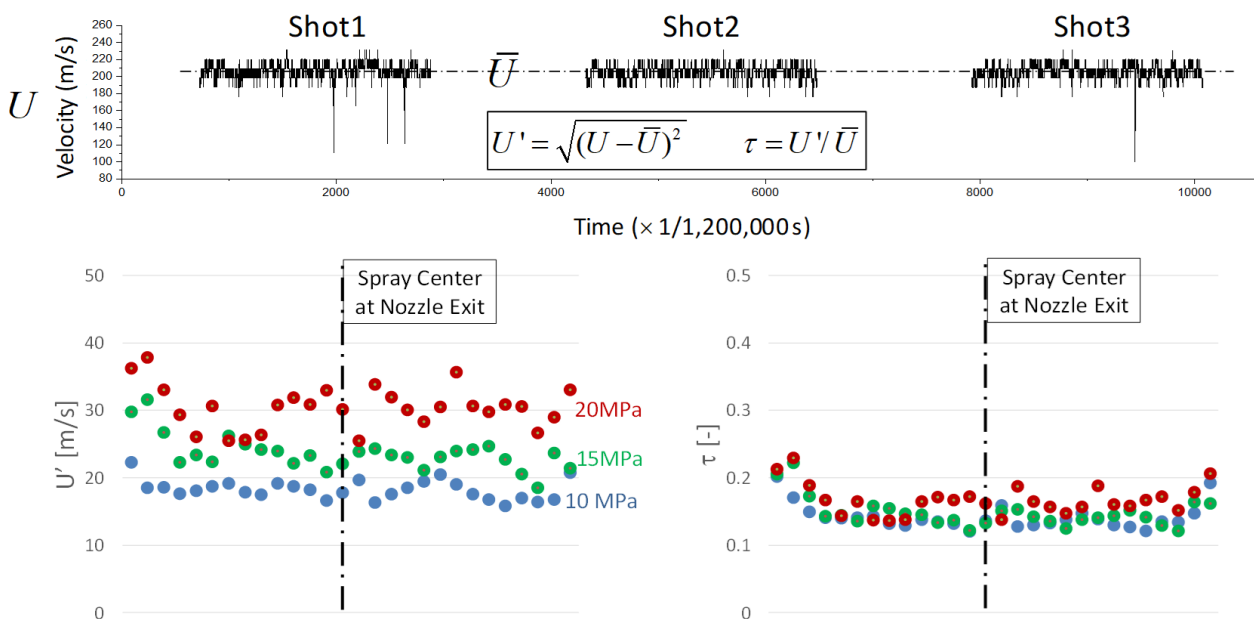


図5 ノズル出口流動の乱れ強度解析結果 (\bar{U} : 流速平均値、 U' : 流速変動値、 τ : 乱流強度)

利用課題では、出口流速の時系列変化を定量解析し、それを内部流特性と相関させることを目標とし、1 MHz 以上の撮影速度を持つノズル出口・近傍流動の計測に取り組んだ。Cモードの3つの連続パルスを用い(図1参照)、高性能の高速度カメラを投入することで、1.2 MHz の撮影速度に対するノズル出口流動の3重露光画像を取得することに成功した。最初には空間解像度の制約により、1.2 MHz 撮影速度における流速の時系列変化を定量化することができなかったが、より高い画像倍率を持つ可視化装置を構築することで、流速の時系列変化を定量化し局所的な乱れ強度分布を解析することが可能になった(図5参照)。

4. おわりに

本長期利用課題(2018A0145~2019B0145)では、ノズル内部流とノズル出口の初期流動に関わるこれまで計測できなかった様々な物理因子の新たな計測技法を構築した。本長期利用課題にて構築した計測技法は、高圧燃料噴射における未知の物理因子の解明を可能にし、かつエンジン数値解析の高度化による次世代エンジン開発の効率性向上およびモデルベースエンジン制御に大きく貢献できると期待している。

参考文献

- [1] S. Moon *et al.*: *Exp. Therm. Fluid Sci.* **68** (2015) 68-81.
- [2] J. Jeon and S. Moon: *Fuel* **211** (2018) 572-581.
- [3] R. Prasetya *et al.*: *Atomization and Sprays* **29** (2019) 123-141.
- [4] 西原等: 第27回微粒化シンポジウム講演論文集 (2018).
- [5] S. Moon *et al.*: *Fuel* **133** (2014) 299-309.

文 石洙 MOON Seoksu

仁荷大学 機械工学科
100 Inha-ro, Michuhol-gu, Incheon 22212, South Korea
TEL : +82-32-860-7378
e-mail : ss.moon@inha.ac.kr

黄 魏迪 HUANG Weidi

(国) 産業技術総合研究所 省エネルギー研究部門
e-mail : wd.huang@aist.go.jp

宋 明良 SOU Akira

神戸大学 大学院海事科学研究科
e-mail : sou@maritime.kobe-u.ac.jp

和田 好隆 WADA Yoshitaka

マツダ(株) MBD革新部
e-mail : wada.yos@mazda.co.jp

長期利用課題報告 3

先端 X 線分光法を用いた分子地球化学的研究による サステナブル科学への貢献

東京大学 大学院理学系研究科

高橋 嘉夫

Abstract

ひたすら発展を続けてきた人類は、ここにきて地球環境・資源・食糧などの観点から、人間平等という原則を堅持しながら持続可能な社会を実現するという困難な課題に直面している。環境資源科学・地球科学において、試料中の元素から先端 X 線分光法により得られる原子分子レベルの分子地球化学的情報は、環境中での物質移行・元素サイクルを解明する上で最も基盤的な情報となる。この情報を各元素の化学的性質に基づいて系統的に解釈することは、ここで着目する試料についてだけでなく、様々な環境における元素の挙動の物理化学的予測につながるため、先端 X 線分光法で分子地球化学的情報を得ることの波及効果は極めて大きい。ここでは、高エネルギー領域でのマイクロ／ナノ XRF-XAFS-XRD 法、高エネルギー分解能を持つ波長分散型検出法や超伝導転移端検出器 (TES) の応用、X 線マイクロ CT と分光法の複合利用などの先端 X 線分光法を発展させ、様々な研究対象に応用して得た持続可能な社会の確立に関わる大気化学、資源化学、環境化学 (サステナブル科学) に関する研究成果を紹介する。

1. はじめに

サステナブルな社会の実現は人類最大の課題であり、特に地球・環境科学においては、地球環境問題の実態解明・対策や新たな資源開発による資源の長期的利用への貢献が重要となる。このような中で我々のグループでは、原子分子レベルの化学素過程の解明を基に地球表層で起きる環境挙動・物質循環に関する研究を進めてきた。こうした化学素過程の解明は、有害元素の挙動 (環境問題)、有用元素の濃集現象 (資源科学)、気候変動問題 (大気科学) などの多くの問題の理解・解決の基盤になると共に、よりよい環境修復法の開発にも必須な情報となる。

我々は、天然試料分析、室内模擬実験、有害元素除去法開発などの様々な研究に対して SPring-8 における種々の X 線分光法を適用し、化学素過程解明に基づく環境化学・物質循環・資源化学の研究を進め (=分子地球化学^{1,2)})、多くの成果を得てきた (関連論文 280 編以上 (うち SPring-8 利用論文 110 編以上)、総被引用件数 (Web of Sci.) 7000 件以上、h-index 46、教科書出版³⁾など)。またこれらの研究の多くは、SPring-8 利用によってのみ可能となる高エネルギー

領域の XAFS を利用した化学種解明などの新規性の高い手法を利用することで可能であった。特に SPring-8 における X 線分光分析分野では、硬 X 線では世界最高レベルの 100 nm オーダーの微小 X 線ビーム (マイクロ／ナノビーム) を利用した蛍光 X 線 (XRF) 分析や顕微 X 線吸収微細構造 (XAFS) 分析が可能になるなど、多くの技術革新が進んでいる。本課題の目的は、これら最先端マイクロ／ナノ X 線顕微分光法を発展・応用し、環境・資源関連試料が内包する化学素過程の情報を明らかにし、サステナブル科学の進展に寄与することにある。

2. 本研究で用いた手法とその応用分野

放射光マイクロ／ナノビームを用いた XRF 検出による元素マッピング法および局所 XAFS 法は、環境試料中の微量元素の元素マッピング分析法や局所化学種分析法 (ここではこの手法全体をマイクロ／ナノ XRF-XAFS 法とする) として有効である。一方、このようなマイクロ／ナノ XRF-XAFS 法において最大の課題は、目的元素の XRF に対するそれ以外の元素の XRF や散乱 X 線の干渉である。例えば、頻繁に利用される

4–20 keV のエネルギー範囲に限ると、これら試料中では通常軽い元素ほど濃度が高いため、このエネルギー範囲に K 吸収端・K 線がある元素 (Ca~Zr) が、より濃度が低くこの領域に L 吸収端・L 線がある元素 (Sn~U、希土類元素 (REE) 含む) の XRF-XAFS の測定をしばしば妨害する。この問題を解決するため、本研究では世界的にも殆ど例のない、(1) より高エネルギー領域の X 線マイクロ/ナノ XRF-XAFS と、(2) 超伝導転移端検出器 (TES) を用いた蛍光 XAFS 分析に取り組んだ。またその他の取り組みとして、従来の、(3) 蛍光分光 XAFS 法および (4) X 線マイクロ CT 分析についても、新たな工夫を加えて分析法の確立と応用を進めた。

(1) 高エネルギー-X 線マイクロ/ナノ XRF-XAFS

BL37XU に導入された、40 keV 以上の X 線を 100 nm 程度まで集光できる Kirkpatrick-Baez (K-B) mirror を用いて作成したマイクロビームを用いて、主に天然試料中の希土類元素(レアアース、REE)の XRF マッピング・XAFS・局所定量分析を行った。この手法によって K 吸収端・K 線を利用した REE の分析に着目することで、L 吸収端利用では主要元素の妨害を受ける REE の局所分布・化学種解析が可能になると共に、同じ試料に対して 10 keV 以下の K 吸収端・K 線 (鉄など) の分析が可能になった。

このような広いエネルギー範囲を利用する場合、注意すべき点がある。20 keV 以上の X 線の利用では高次光の影響はないが、20 keV 以下の X 線を SPring-8 でのマイクロ/ナノ XRF-XAFS に利用する場合、高次光の除去が必要となる。高次光除去には X 線ミラーを利用するケースが多いが、20 keV 以下と以上で高次光除去ミラーを抜き差しすると、K-B ミラーに入る X 線の位置が動くので、マイクロ/ナノ X 線を同じセットアップで利用できなくなる。さらに BL37XU での 37.7 keV 以上および 13 keV 以下の X 線の分光には、それぞれ Si(111)面と Si(511)面は利用できない。そこで本研究では、40 keV 以下と以上でそれぞれ Si(111)の 1 次光および 3 次光を利用し、20 keV 以下での高次光除去にはミラーを使用せず、二結晶の平行性の調整

(detune: この平行性への依存性が 1 次光と 3 次光で異なることを利用) で対応する手法を考案した。こうし

た工夫により、同じセットアップを用いて幅広いエネルギー範囲でのマイクロ/ナノ XRF-XAFS 実験を実現した。これまで低エネルギー側と高エネルギー側で別々のセットアップで実験を行ってきたが、分析点の探索を 2 度行う必要があり、試料損傷の影響も増加し、効率が悪かった。本手法は、幅広いエネルギーを対象とするマイクロ/ナノ XRF-XAFS 分析の高効率化と試料損傷低減に貢献し、実際的なメリットが大きい。

(2) 超伝導転移端検出器(TES)を用いた蛍光 XAFS 分析

本課題では、環境試料中の微量元素のマイクロ/ナノ XRF-XAFS 分析のために蛍光分光法を利用し、多くの結果を得てきた。しかしこの方法では、比較的高濃度に目的元素を含む参照試料を用いて分光結晶の調整を行うが、実試料では試料中の目的元素の発光点が参照試料とは異なることが影響するためか、分光結晶の最適位置が変化の上、目的元素が低濃度であるため、分光結晶の調整に 6–12 時間程度を要する場合が殆どであった。また、一度分光結晶を調整すると、対象元素に限られるため、他元素まで含めた分析をする上では効率が非常に悪い。これらの問題を一挙に解決できる手法として、これまで硬 X 線への本格利用がなかった高エネルギー分解能を持つ TES を応用した。ここでは TES の高いエネルギー分解能 (6 keV でのエネルギー分解能が 5 eV 程度) を利用し、REE などの第 6 周期元素の L 線と干渉する遷移金属の K 線を分離して、XRF マッピング・XAFS 分析を行うことができた。ここでは、立教大・首都大 (現都立大) ・理化学研究所が共同で維持している NIST 製の 240 素子 TES を用いた。これらの手法が有効であることが示せれば、マイクロ/ナノ XRF-XAFS 法の弱点であった XRF への他元素の XRF や散乱 X 線の干渉問題を解決し、検出下限を大幅に下げられ、超微量元素へのマイクロ/ナノ XRF-XAFS 法の適用範囲が飛躍的に拡大し、関連分野の発展に大きく貢献できる。

(3) 蛍光分光 XAFS 法の利用

蛍光分光 XAFS 法において、試料からの蛍光 X 線を分光結晶で分光し、微量元素の蛍光 X 線のみを測定する検出器と、分光結晶を経ずに直接試料を見込む検出器の 2 系統を同時に用いることで、目的とする微量

成分のXRFとその他の元素のXRFを同時検出することを可能にした。

(4) X線マイクロCT分析の効率的計測

X線マイクロCT分析において、試料を連続回転し信号を取り込むことで測定の高速度を実現し、XAFS-CTを数時間以内（従来法の半分以下の測定時間）で測定することが可能になった。

これらを応用した具体的研究として、(1) 福島第一原発事故由来の放射性核種の挙動解明、(2) レアアースなどの有用元素の濃集過程解明、(3) エアロゾル中の鉄などの元素の化学種解析に基づく元素の供給源の解明とその地球環境への影響評価、(4) よりよい有害元素除去法の開発などに関する研究、などを進めた。以下ではこれらの研究のハイライトをいくつか紹介する。

3. 研究成果の紹介

3-1. 先端 X 線分光法による福島第一原発事故由来のセシウム含有微粒子 (CsMP) の分析

現在日本が直面する最大の課題である福島第一原発事故により大量の放射性セシウムが環境中に放出され、その一つの形態として、放射性セシウムが高濃度に濃集した数ミクロン以下のCsMPが発見された^[3,4]。この粒子は、ガラス質のSiO₂を主成分とし、球形で直径が数ミクロン、放射能が数ベクレルであった。その後、福島第一原発事故により近接した地域で報告された粒子は、同様にガラス質のSiO₂を主成分とするが、サイズが数百ミクロンで数百ベクレル程度の放射能を持つ^[3,4]。これらはそれぞれType-AとType-BのCsMPと呼ばれ、明確に異なる¹³⁴Cs/¹³⁷Cs比を持ち、Type-Aは2または3号機由来（以下、2/3号機由来と表記）であり、Type-Bは1号機由来であることが確実である。また大きさと形状の違い、および各号機からの放出時期の違いは、Type-AとType-Bの微粒子の地理的な分布の違いを生んでいる。これら粒子の特徴の差異は、最終的には生成過程や炉内状況の違いなどを反映すると考えられるが、どちらの粒子についても報告された粒子の数自体がまだ少ない。そこで我々は、これら粒子を効率的に分離する方法を開発し、SPRING-8における最先端X線分光法を適用すること

で、多数の新たな知見を得た^[5-7]。CsMPを多量に含む福島県内各地の道路粉塵から70個以上のCsMPを分離し、本研究での分析に供した。こうした多数のCsMPに対して研究を進めた例はこれまでなく、本研究はCsMP研究に重要な革新をもたらす。関連するマイクロX線CT法や波長分散型の蛍光分光マイクロ/ナノXRF-XAFS法を用いた研究成果を以下に述べる。

[研究1：マイクロX線CTを用いて得たCsMPの空隙率とその生成過程の研究]

研究1では、マイクロX線CTを用いて各CsMP粒子の有効体積（空隙を除く）を求め、放射能との関連を示した。分離したCsMP粒子は、外形820 μm・内径600 μmのポリイミドチューブに入れ、試料回転台に鉛直方向に固定する。この透過像を1周約1分で3600枚（2048 × 2048ピクセル）CMOSカメラで取得した。空間分解能は0.65 μmである。試料によっては、FeのK吸収端周辺での100点程度のエネルギーで画像取得を行い、Fe化学種の3次元マッピングも実施した。

福島県内の道路粉塵などから単離したCsMPのType-AとType-Bの粒子についてX線マイクロCT分析を行った。予備的な走査型電子顕微鏡（SEM）とエネルギー分散検出器（EDS）による測定から、これらはSiO₂を主成分とするシリカ粒子で、Feや亜鉛（Zn）を多く含むことが分かった。この結果から、X線CTに用いるエネルギーとしては、FeやZnの3Dマッピング像取得のため、7.100 keV、7.131 keV（FeのK吸収端の前後）および9.600 keV、9.800 keV（Znの

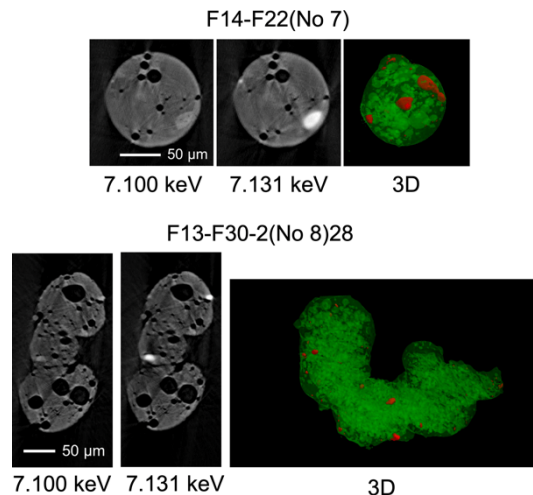


図1 放射性Cs粒子Type-BのCTの結果。

K 吸収端の前後) で取得した。図 1 には、Type-B 粒子の測定の結果、得られた球形 (試料名: F14-F22) および非球形 (F13-F30-2) の粒子に関して、Fe の 3 次元マップを含む X 線 CT の結果を示した (2D では白く光る部分、3D では赤い部分)。このように Fe は CsMP 内部で濃集して存在することが分かった。また、図 1 の例とは異なるが、特に球形の Type-B 粒子で多くの空隙があることが分かった。ImageJ[®]により適切な閾値を設定し取得した CT 像を 2 値化することで、正確な体積と空隙率の計算を行った。また、外形の体積を穴埋めした画像で求めた。これらの差分として得られる各粒子の空隙を含まない体積と、別途求めた各粒子の ^{137}Cs 放射能との関係を調べた (図 2)。その結果、放射能と CsMP 体積は、Type-A 粒子、球形の Type-B 粒子、非球形の Type-B 粒子の 3 つで独立の直線関係を持つことが分かった。これは、 ^{137}Cs 放射能濃度 (体積濃度) は 3 つで異なり、それぞれ独立のプロセスで生成したが、Type-A 粒子、球形の Type-B 粒子、非球形の Type-B 粒子の各カテゴリーに含まれる多数の CsMP は、同じ物質から同様の形成過程で生成したことを示唆する。Type-A と Type-B 粒子の ^{137}Cs 濃度は明確に異なり、前者が後者の 1 万倍程度の ^{137}Cs 濃度を示し、それぞれ 2/3 号機と 1 号機という異なる由来を持つことと整合的である。前者は、揮発性の高い ^{137}Cs を多く含む気体の凝結で生成した (小さなサイズ・球形と整合的) が、後者は溶融した SiO_2 に ^{137}Cs が溶け込んで生成したと考えると、その濃度差が説明可能である。

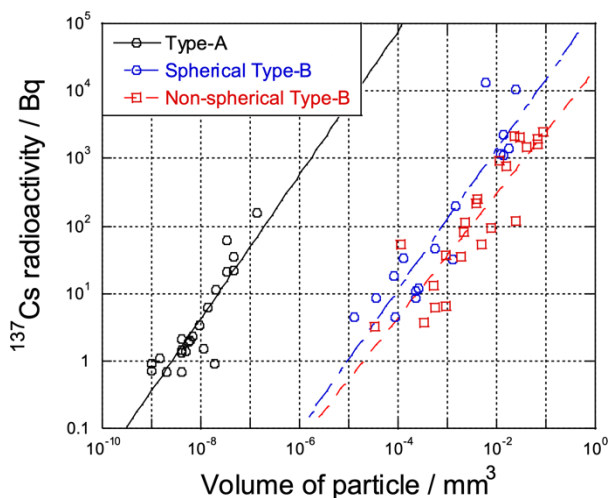


図 2 CsMP の体積と ^{137}Cs 放射能の関係。Type-A と Type-B では、 ^{137}Cs 濃度が約 1 万倍異なることが分かる。

[研究 2: 蛍光分光・2 系統マイクロ/ナノ XRF-XAFS による CsMP 中の揮発性/難揮発性元素やウランの分析]

研究 1 で CsMP の空隙率・体積と Cs 濃度には明確な関係があることが分かったので、球形で数 μm 以下の Type-A 粒子は大気中で揮発成分の凝結から生成したと考えられるが、50 μm を超える Type-B 粒子は溶融体の冷却で生成したと考えられる。このうち球形のものは溶融物が自由空間で冷却したもの (飛沫の冷却など)、非球形は何らかの固相表面で冷えたものと予想される。これら Type-A と Type-B の違いは、Type-A は屋根が保持され微小空隙から水蒸気などと共に CsMP が放出された 2 号機と、屋根が失われた状態で粗大粒子も外部に放出可能であった 1 号機との違いによると考えられる。この違いは、各粒子における揮発性元素濃度の違いや、諸元素の酸化還元状態の違いに現れると考えられる。そこで、マイクロ/ナノ XRF-XAFS を用いた他元素の相対濃度分析や、蛍光分光 XAFS によるウラン (U) の高感度 XAFS 分析を行った。

分離した CsMP 粒子について、K-B ミラーで得られた 300 nm 程度の X 線ビームを用いた XRF マッピングを用いて、ルビジウム (Rb: 揮発性元素) やストロンチウム (Sr: 難揮発性元素) の分布を得た。U では、U の $L\alpha$ 線 (13.5 keV) が Rb の K 線 (13.4 keV) や Sr の K 線 (14.1 keV) と近接しているため、通常の半導体検出器などによる検出は困難であった。そこでここでは、XRF 検出用の半導体検出器と試料の間に湾曲した Si 結晶を用いたラウエ型分光結晶 (Bent Crystal Laue Analyzer: BCLA; Oxford Danfysik 社製) を配置し、干渉する X 線を低減させ、目的とする U の $L\alpha$ 線を検出した。入射光として 300 nm 程度の微小 X 線を用い、XRF を BCLA で分光測定しながら試料を 2 次元で走査し、U の濃集部を探索し (図 3)、U の L_{III} 吸収端 XANES (蛍光分光 XANES) を得た。

得られた様々な元素のマッピング像のうち、XRF が検出器と試料との関係で陰になる部分で、10 keV 以下の XRF を発する元素 (Fe, Ca など) の信号強度は小さく、試料による吸収が問題となり、検出が困難であった。得られた様々な元素のマッピング像のうち、XRF が検出器と試料との関係で陰になる部分で、10 keV 以下の XRF を発する元素 (Fe, Ca など) の信号強度は小さく、試料による吸収が問題となり、検出が

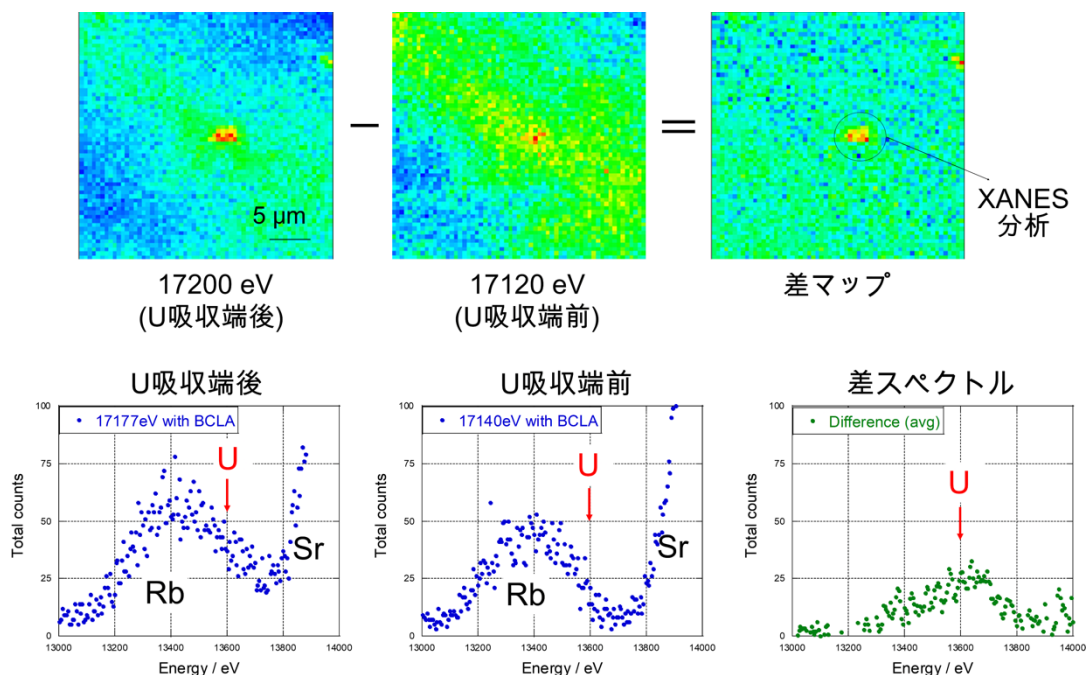


図3 BCLA を使用して検出した U L α 線吸収前後で得た差分から得た U の XRF マッピングおよび XRF スペクトル。

困難であった。そこで XRF が 13 keV 以上と比較的高いエネルギーにあり、100 ミクロン程度の粒子では吸収率は 20% 以下で、またエネルギーがほぼ同程度の Rb の K 線 (13.4 keV) と Sr の K 線 (14.1 keV) の強度比を調べた。その結果、Rb/Sr 比は揮発性が高い ^{137}Cs 濃度とよく相関した (図 4)。この Rb/Sr 比は、同じ溶融体を起源とするものの、急冷されたため揮発性元素の損失が小さいと考えられる球形 Type-B 粒子の方が高く、研究 1 で示した Cs 濃度・空隙率の関係とも整合的であった。

蛍光分光で得た 17200 eV での U の XRF 像 (図 3) では、U 濃集部は不鮮明であったが、吸収前後で得た XRF 像の差分マップからは U 濃集部が検出できた。

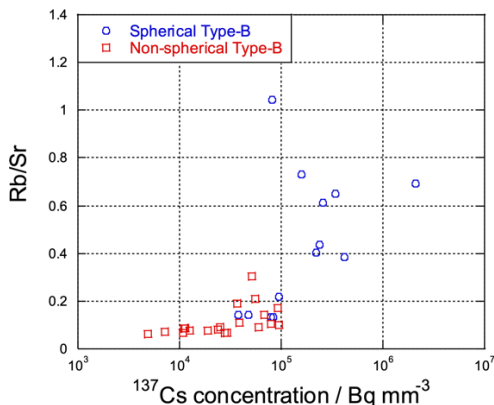


図 4 ^{137}Cs 濃度と Rb/Sr の XRF 強度比の関係。

ウランは数 μm 程度の濃集を示し、その部位の U の L α 吸収端 XANES (蛍光分光 XANES: 16.835–17.155 keV のエネルギー範囲の 106 点で測定) から U の価数を推定したところ、Type-A では +6 価が主であったが、Type-B では +4 価と +6 価の両方が見出された。このことは Type-A の CsMP が 2 号機から気体として放出された直後の大気中の酸化環境で凝集・生成した一方、Type-B は 1 号機炉内の還元環境で生成した後で水素爆発により外部に放出されたことを示唆する。

3-2. 幅広いエネルギー領域でのマイクロ/ナノ XRF-XAFS 実験: REE 鉱床への適用

REE は、様々な先端工業製品の光学的・磁気的性能を飛躍的に向上させるため、先端産業に必須な元素群 (イットリウム (Y)、ランタノイドの 15 元素) である。その後、REE 資源の備蓄や必要 REE 量の抑制、リサイクルの徹底などが進んだが、新興国の目覚ましい経済発展による REE の世界的需要の増加と REE 資源の地域的偏在性のため、REE は依然として最大のリスクを持つ金属資源である (英国地質調査所)。このような中で我々は、海底 REE 資源に比べて圧倒的に低コストな陸上 REE 資源として、総 REE 濃度が 4000 ppm

に迫る REE イオン吸着型鉱床を滋賀県で発見した。この発見を受けて本研究では、放射光分析による化学種解明に基づく REE 蓄積機構の解明を進めた。特に高エネルギーマイクロ/ナノ XRF-XAFS 法では、REE の局所状態分析が可能になると期待される一方、Fe などの XAFS からは REE のホスト相の情報が得られる。

REE を高濃度を含む風化花崗岩の両面研磨薄片を作成し分析に用いた。その際、放射光から得られる 40–55 keV の X 線を分光し、K-B ミラーで集光することにより、500–800 nm 程度の X 線マイクロ/ナノビームを得た。Si(511)利用の場合、40 keV および 55 keV での光子数はそれぞれ 7×10^8 photons/s と 9×10^6 photons/s であった。この 55 keV までのエネルギー範囲では、ランタノイド元素のうちジスプロシウム (Dy) の K 吸収端までを対象にできる。また、広域のエネルギースキャンが可能で本システムの特徴を活かし、同じ REE 濃集部位の Fe の XAFS から、REE 濃集部の鉄の化学種 (鉄を含む鉱物種) を同定した。

54 keV の励起光でのマッピングにより Y を含む各 REE の濃集部位を探索した (図 5)。今回同定した 2 つの部位では、ランタン (La) と Y の比 (La/Y 比) が高い部位 (図 5 の Point2) と低い部位 (Point1) が見出された。局所の EXAFS 解析と同じ部位に Ca が存在していることから、前者はリン酸塩粒子であること

が分かった (図 6)。後者の La の EXAFS は、水和イオンと同様のスペクトルであり、REE が外圏錯体として粘土鉱物に吸着された状態にあると考えられた^[9,10]。この部位のホスト鉱物は、XRD 分析からスメクタイトであることが推定された。ホスト相の同定は、REE イオン吸着型鉱床の形成機構解明において重要である。またこの化学種情報は、REE の効率的抽出法の開発においても重要で、本研究では同定した化学種に応じた抽出法の確立を進めている。陸上にあるイオン吸着型鉱床は、海底資源に比べて圧倒的に低コストで、その鉱床規模の見積もりなども容易であり、本研究の成果は「産業基盤技術の向上」に資する研究といえる。その他、類似の手法で陸上および海洋の REE などの微量元素の資源に関する研究を本課題において多く展開した^[11-14]。

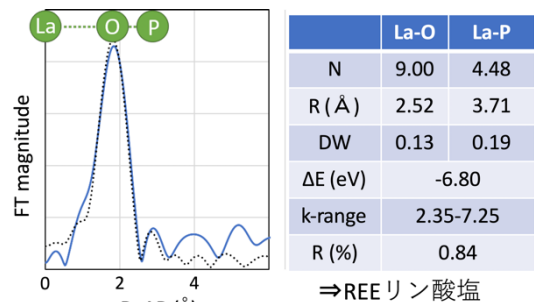


図 6 La 濃集部位の K 吸収端 EXAFS の動径構造関数とその構造解析。

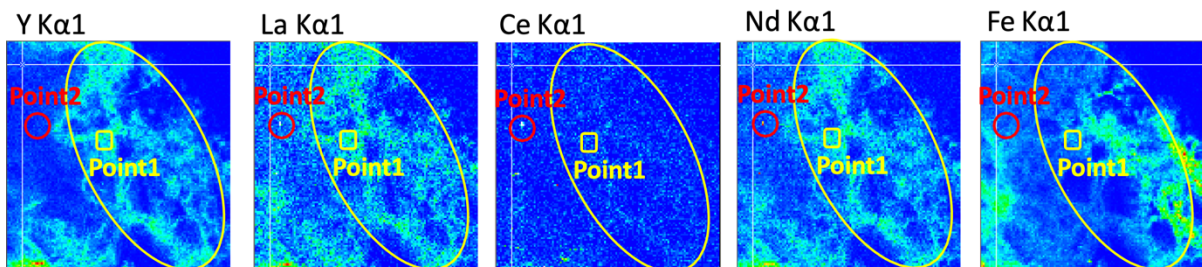
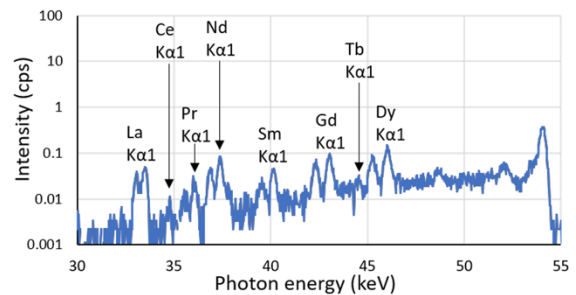
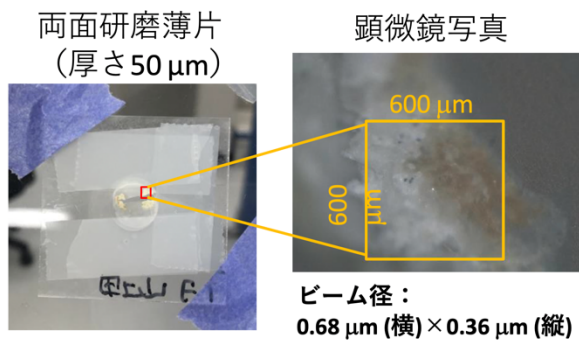


図 5 54 keV で励起した場合の風化花崗岩試料中の局所部位の XRF スペクトルおよびその XRF 強度の 2 次元マップから得た各元素の元素マッピング。

また本実験で対象とする REE 分析で利用する 33 keV (La の $L\alpha_1$) 以上のエネルギー範囲と、使用する試料厚さ (300 ミクロン以下) では、マトリクス元素による入射 X 線や REE の K 線の吸収効果がほぼ無視できるため、適切な標準試料と比較することで、XRF による REE の定量が可能である (図 5)。この手法が確立できれば、従来の微量元素局所分析法であるレーザーアブレーション ICP-MS 法に比べて、空間分解能が高く、試料ダメージが圧倒的に小さいというメリットがあり、新しい微量元素局所分析法として大いに期待される。これらを含めて、高エネルギーマイクロ/ナノ XRF-XAFS 法は、まだ検討すべき点が多いが、高い将来性を持つ手法として非常に重要である。

3-3. TES を用いた硬 X 線領域の蛍光 XAFS 分析

これまで蛍光 XAFS の測定では、エネルギー分解能のあるケイ素やゲルマニウムを素子に用いた半導体検出器 (SDD、SSD) で種々の元素の XRF や散乱 X 線を分離して検出し、高感度な分析を実現してきた。しかし、これらの検出器のエネルギー分解能は 100–200 eV 程度であり、多元素を含む環境試料・宇宙地球科学試料では元素間の干渉などで目的元素を検出できない例が多くあった。その場合、我々は分光結晶を用いて目的の XRF を分離する蛍光分光法を本課題でも実施してきたが、この方法は分光結晶の調整に多大な時間を要し、また対象元素を自由に選ぶことはで

きない。この点、TES は 2–15 keV の範囲で極めて高い分解能 (6 keV で 5 eV 程度) で X 線を同時計測でき、殆どの系で相互の干渉なく特定の元素の XRF を検出できる強力な検出器である。そのため TES は、環境科学・宇宙地球科学試料やそれ以外の様々な分野での XAFS 法の適用範囲を大きく拡大できる検出器であり、今後放射光施設への常設などが大いに期待される。

TES を用いた蛍光 XAFS 実験は、SPring-8 BL37XU で行った。TES として NIST 製の 240 素子 (X 線吸収体はビスマス) の検出器を用いた。TES はビームタイムの 10 日前から冷却試験を行い、TES の環境および性能評価試験をリモートで実施し、ビームタイムの開始に合わせて極低温 (~ 70 mK) で計測を開始した。総計数率の上限が 2000 cps 程度であるため、試料に入射する X 線の強度を調整し、検出器に入る XRF・散乱 X 線強度をその制限以下に抑えた。XAFS 測定に当たっては、 ~ 2 keV 以上の X 線パルスを素子ごとに保存し、波形に最適化フィルタをかけて各パルスの X 線エネルギーを決め、各エネルギー当たりの単位時間当たりのパルス数を得た。

今回用いた検出器の特性を明らかにするために、その基本的な特性評価を行った。これらの評価には、約 60 元素がドーピングされた SiO_2 ガラス標準試料 (NIST-SRM610) を用いた。図 7 には、14 keV で励起して得られた SRM610 の XRF スペクトルを示した。6–7 keV 付近を拡大してみると、SDD では分離不能な Fe

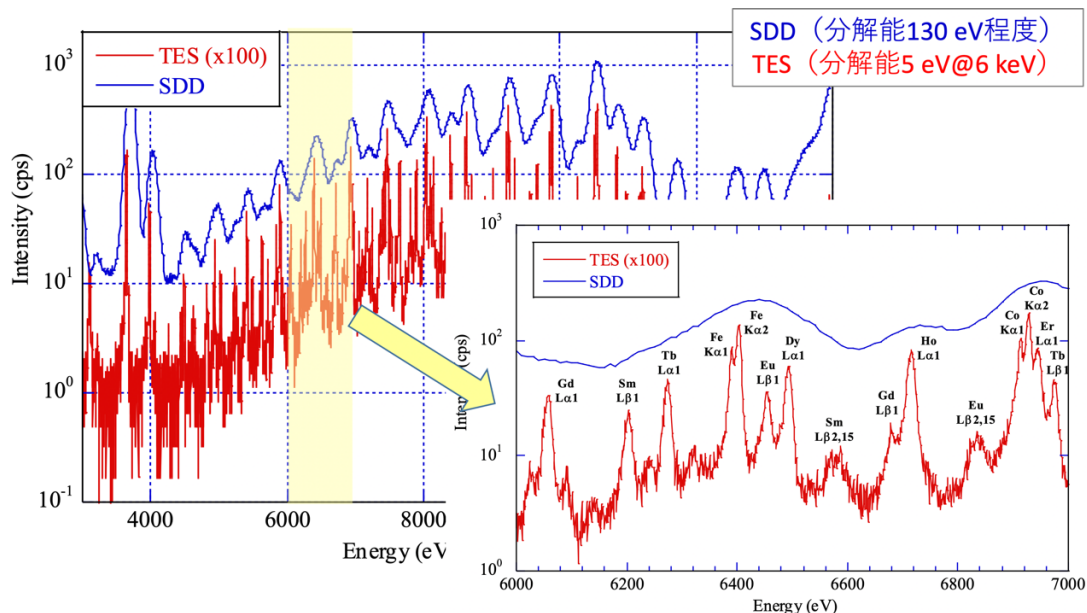


図 7 NIST610 (多元素混合標準ガラス：微量元素濃度 500 ppm) の 14 keV 励起 XRF スペクトル。

の $K\alpha$ 線と REE の L 線が明瞭に分離されると共に、Fe の $K\alpha 1$ 線と $K\alpha 2$ 線が分離されていた。これらから、地球惑星科学試料で濃度が高い鉄が存在する場合でも、REE の XRF や XAFS が測定可能であることが示唆された。一方、計数率が増大した場合には、TES では各パルスの処理に 10 msec 程度の時間を要するため、十分に低い死活時間で検出できる上限の計数率は、各素子当たり 10 cps 程度であると推定された。今回は 240 素子の TES を用いているので、これは 2400 cps 程度の計数率となる。実際にこの計数率以下では、Mn $K\alpha$ 線の半値幅を用いたエネルギー分解能は 5–6 eV 程度と見積もられたが、計数率が 5000 cps を超えた場合、エネルギー分解能は 10 eV よりも悪くなった。このように、十分なエネルギー分解能を保つためには、計数率を低く抑えて測定をする必要がある。地球化学・環境化学試料の場合、5 keV 以上の吸収端を持つ元素中では鉄が主要成分である場合が多いため、Fe を励起する 7.11 keV 以上の X 線を使う場合の TES の利用には、アルミなどによる Fe の XRF 強度の低減などの工夫を施す必要がある。

TES の有効性を確かめるために様々な系での TES 蛍光 XAFS 分析を検討した。主なもの(カッコ内は研究のポイント)として、(i) エアロゾル中の微量元素の高感度分析(散乱 X 線との分離)¹⁵⁻¹⁷⁾、(ii) 鉄マンガン酸化物中の V や Cr の化学種解析(妨害元素からの分離)、(iii) 環境試料中の水銀の高感度な状態分析(高分解能 XANES (後述))、(iv) 福島原発由来 Cs 濃集粒子中の Cs の化学種分析(妨害元素からの分離)、(v) コンドライト隕石(リュウグウ試料の模擬物質)中の微量元素の局所分布および XAFS 分析(妨害元素からの分離)、などが挙げられる。

今後は、これらの研究をさらに発展させると共に、マイクロ/ナノ XRF-XAFS にも TES による XRF 検出を適用し、超微量元素の局所状態分析を進めたい。また、XRF をその寿命幅を超えた高いエネルギー分解能で分析することで、従来よりも高いエネルギー分解能で XANES を得る High Energy Resolution Fluorescence Detection (HERFD)-XANES についても TES が利用できるかを検討していく。HERFD-XANES の分析にも TES が有効であることが示されれば、その応用範囲は飛躍的に広がり、その著しい発展が望める。

3-4. バライトや層状複水酸化物への共沈・吸着を用いた放射性核種・有害元素の除去・固定化

福島第一原発の廃炉作業を速やかに進めるためには、大量に蓄積した汚染水の処理や、廃炉作業に伴って排出される放射性核種の適切な処理・処分が極めて重要である。特に多核種除去設備(ALPS:高濃度の放射性物質を含む汚染水からトリチウム以外の放射性物質を低濃度まで除去する設備)の稼動以前に処理され貯蔵されている汚染水には、多くの放射性核種が残っており、多核種を簡便に除去できるシステムの構築が重要である。特に問題となり得る核種としては、 Sr^{2+} などの陽イオンや、 IO_3^- や SeO_4^{2-} などの陰イオンが挙げられる。本研究では、天然に普遍的に存在する極めて安定な鉱物であるバライト($BaSO_4$)が様々なイオンを取り込むことができる点に着目し、水への溶解性が高いイオンなどを水相から除去するためにバライト共沈法を用いることを着想した。その際、従来の炭酸カルシウムを含むセメントによる固化ではなく、アルミノケイ酸塩を主体とするジオポリマーによる固化が望ましく、バライトとジオポリマーの混合状態の解明などに X 線マイクロ CT やマイクロ/ナノ XRF-XAFS 法を適用した。またこれら分子レベルでの現象の理解に量子化学計算を適用した。

様々なイオンの分配係数 K_d を様々な元素について求めて、6 配位のイオン半径に対してプロットした結果、 Ba^{2+} のイオン半径に近い大きさを持つイオンで K_d が大きくなる傾向がみられ、除去が困難な核種(^{90}Sr)を持つ Sr について特に調べた。その結果、取り込まれた Sr の局所構造は、硫酸バリウム中の Ba とおおよそ類似した局所構造を持つことが分かり、バライト中の Ba サイトの置換による安定的な Sr の取込みが生じたことが裏付けられた。また、第一近接の Sr-O と Ba-O の距離の違い (0.16 Å 程度) は、2つのイオンのイオン半径の違いで説明可能であり、この近傍でバライトの構造はやや歪んでいる。このことは、対象イオンがより小さいとこの歪みも大きくなり、取り込まれたイオンの安定性・ K_d が低下する原因と考えられる。これらのことは、上記に示した K_d のイオン半径依存性の傾向を合理的に説明する。また、これらの傾向は、量子化学計算から推定した安定化エネルギーの計算からも支持された。一方、バライトの利点は、非常に溶解しにく

いため、一旦除去した有害元素をそのまま地層処分に用いることができる点である。ただし、地下環境であり得る高濃度の炭酸イオンの存在下ではバライトが溶解する可能性があるため、ジオポリマーなどと固化する手法の開発が重要である。そこでバライト-ジオポリマー混合物を作成した結果、十分によく混合し間隙構造も見られないことをX線マイクロCTで確認すると共に、強度試験でも十分な性能を発揮した。そのため、バライト共沈で除去した放射性核種や有害元素に対して、ジオポリマー固化体の地層処分が有効と考えられる。これらの研究は、有害元素の新規除去法として有用であり、バライトを用いた共沈現象の実用化(商品化)も検討している。その他、関連する方法による放射性核種や有害元素の除去に関する研究を行った^[18-23]。

4. おわりに

本研究では、主にXRF検出と蛍光XAFSに関して、より微小サイズのX線を用いて、より幅広いエネルギー範囲で、よりエネルギー分解能を高く、ということを目指した技術開発と、それを持続可能な社会の確立に関わる大気化学、資源化学、環境化学への応用を行った。人間平等という原則を堅持しながら持続可能な社会を実現するという困難な課題を解決するために、先端的なX線分光法を応用することは、放射光科学の重要性を広く知らしめることにもつながると期待している。

謝辞

本長期利用課題(2018A0148~2019B0148、2018A0156~2019B0156)における研究の実施において多大なるご協力を頂いた、(公財)高輝度光科学研究センターの新田清文博士、関澤央輝博士に心から感謝致します。本研究の一部は、科研費(19K21893、19H01960、18H04134、18KK0296、17F17084、17F17332、17F17383)の助成を受けて行われました。

参考文献

- [1] 高橋嘉夫: 分子地球化学、名大出版会 (2021).
- [2] 高橋嘉夫: 地球化学 **52** (2018) 1-28.
- [3] Y. Igarashi, Y. Takahashi *et al.*: *J. Environ. Radioactivity* **205-206** (2019) 101-118.
- [4] F. Chen, Y. Takahashi *et al.*: *J. Environ. Radioactivity* **196** (2019) 29-39.
- [5] H. Miura, Y. Takahashi *et al.*: *Geochem. J.* **52** (2018) 145-154.
- [6] Y. Kurihara, Y. Takahashi *et al.*: *Sci. Rep.* **10** (2020) 3281.
- [7] H. Miura, Y. Takahashi *et al.*: *Sci. Rep.* **10** (2020) 11421.
- [8] T. J. Collins: *BioTechniques* **43** (2007) S25.
- [9] M. Nagasawa, Y. Takahashi *et al.*: *Chem. Lett.* **49** (2020) 909-911.
- [10] A. Yamaguchi, Y. Takahashi *et al.*: *Geochem. J.* **52** (2018) 415-425.
- [11] H. B. Qin, Y. Takahashi *et al.*: *Geochim. Cosmochim. Acta* **257** (2019) 110-130.
- [12] S. Yang, Y. Takahashi *et al.*: *ACS Earth Space Chem.* **3** (2019) 29-38.
- [13] M. Tanaka, Y. Takahashi *et al.*: *ACS Earth Space Chem.* **2** (2018) 1187-1195.
- [14] T. Kashiwabara, Y. Takahashi *et al.*: *Geochim. Cosmochim. Acta* **240** (2018) 274-292.
- [15] M. Kurisu and Y. Takahashi: *Atmosphere* **10** (2019) 76.
- [16] M. Kurisu, Y. Takahashi *et al.*: *ACS Earth Space Chem.* **3** (2019) 588-598.
- [17] S. Yamada, Y. Takahashi *et al.*: *Rev. Sci. Instr.* **92** (2021) 013103.
- [18] S. H. Lee and Y. Takahashi: *J. Hazardous Mat.* **384** (2020) 121223.
- [19] S. H. Lee and Y. Takahashi: *Chemosphere* **237** (2019) 124489.
- [20] S. H. Lee, Y. Takahashi *et al.*: *Chemosphere* **211** (2018) 903-911.
- [21] K. Tokunaga, Y. Takahashi *et al.*: *J. Hazardous Mat.* **359** (2018) 307-315.
- [22] A. Yamaguchi, Y. Takahashi *et al.*: *J. Radioanal. Nucl. Chem.* **317** (2018) 545-551.
- [23] K. Tokunaga, Y. Takahashi *et al.*: *Chemosphere* **266** (2021) 129104.

高橋 嘉夫 TAKAHASHI Yoshio

東京大学 大学院理学系研究科
〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1
TEL : 03-5841-4517
e-mail : ytakaha@eps.s.u-tokyo.ac.jp

長期利用課題報告 4

中空構造をもつ巨大自己集合錯体分子群の 単結晶 X 線構造解析と機能創出

東京大学 大学院工学系研究科

堂本 悠也、澤田 知久、藤田 誠

Abstract

我々のグループでは、金属イオン (M) と有機分子 (L) の間における配位結合の形成に基づく、配位駆動自己集合によるナノ空間のデザインと機能創出を追求してきた。1990 年、留め金状の金属錯体と棒状有機配位子の混合により、正方形型の大環状分子がひとりでに組み上がることを初めて報告して以来、様々な構造や性質の内部空間をもったケージ分子を開拓している。とりわけ M_nL_{2n} 型球状錯体の登場以後、その構成分子数の多さや内部空隙の巨大さから構造決定の要である単結晶 X 線構造解析に困難が伴い、放射光 X 線の利用が研究遂行に不可欠な要素となっている。近年も、自然界のタンパク質に匹敵するほどのサイズをもつ種々の中空錯体群の構造解析を構造生物学ビームラインの利用を通して進めており、機能創出に向けた取り組みと併せて報告する。

1. はじめに

複数の分子が自律的に集まることで秩序をもった構造を形成する現象を「自己集合」と呼ぶ。自然界においては、コラーゲンの三重らせん形成による堅牢な繊維状構造の実現から、100 以上のタンパク質からなる数十ナノメートル径の球状ウイルス殻構造に至るまで、可逆的な分子間相互作用の集積により多様な自己集合システムが機能している。一方、我々のグループでは、人工系における金属イオンと有機分子の配位結合形成を駆動力とした自己集合をベースとした、

様々な一義構造を有するナノサイズ中空分子の構築とその機能発現について研究してきた。とりわけ、金属イオン (M) まわりの配位様式と有機配位子 (L) の構造が示す幾何学的性質に着目することで、自己集合構造の合理的なデザインが可能となることを示してきた。

その最たる例として、 M_nL_{2n} 型球状錯体の構築を図 1 に示す。平面 4 配位構造をとる Pd(II)イオンと折れ曲がった構造の二座配位子を溶液中において混合することで、配位結合形成に駆動された、一義的な多面体構造をもつ中空錯体の形成が観測された。

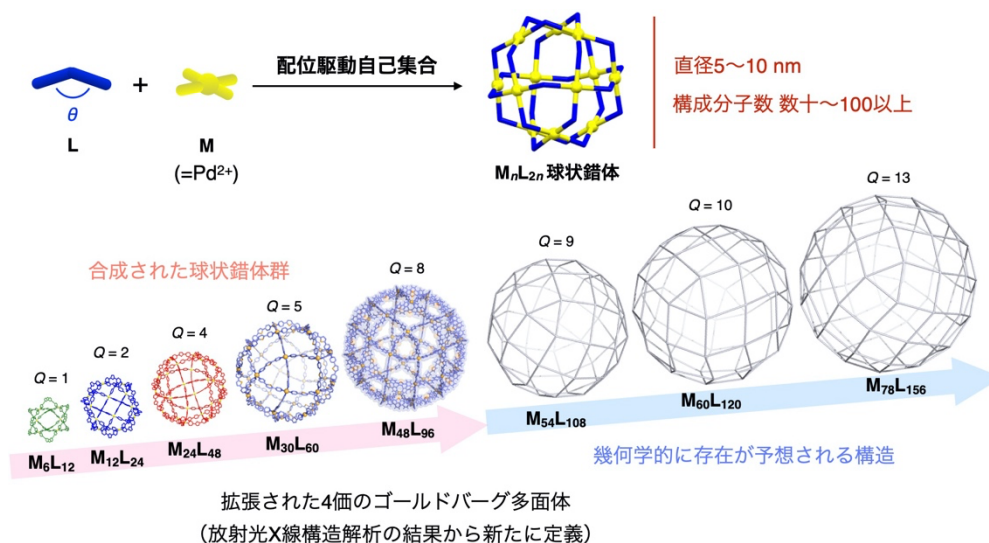


図 1 配位駆動自己集合による巨大中空錯体の構築

当初得られた $M_{12}L_{24}$ 錯体は 36 個もの構成分子からなる直径 5 nm 近い立方八面体構造を示し、この時点で従来知られていた人工系自己集合の概念を飛び越えるものであった。しかしさらに、二座配位子の折れ曲がり角度 θ や配位子の構造柔軟性を調節することで、アルキメデスの立体 (半正多面体) を考えることで予想される、より多くの構成分子からなる錯体群 ($n = 24, 30$) も実際に合成された^{11,21}。さらには、幾何学的な制約から存在し得る構造があと 1 つ ($n = 60$) で完結するというところで、これまで知られていないタイプの多面体構造をもつ $M_{30}L_{60}$ および $M_{48}L_{96}$ 錯体の構築が見出された³¹。これらの構造は拡張された 4 価ゴールドバーク多面体 (無限のバリエーションが予言される) として新たに定義され、合成化学を超えた成果への波及をもたらした。こうして開拓されてきた中空錯体はまた、従来のホスト分子とは異次元の巨大な内部空間の利用により、ナノ粒子の鋳型形成やユビキチンの包接などへ応用されている¹¹。

2. 配位自己集合における未踏領域への挑戦

巨大中空錯体の構造解析においては、SPRING-8 における放射光を用いた単結晶 X 線構造解析が決定的な役割を果たしている。従来の分子構造解析では、核磁気共鳴 (NMR) による溶液解析や各種質量 (MS) 分析も広く用いられてきた。しかし M_nL_{2n} 型中空錯体の解析過程においてはその巨大構造ゆえ、NMR におけ

る T2 緩和時間の短さに起因したシグナルの激しいブロードニングや、MS ピークの検出困難といった障壁に直面することとなった。X 線構造解析についても、ラボ機の性能向上が近年目覚ましいとはいえ、我々の M_nL_{2n} 中空錯体では最小の部類に入る $M_{12}L_{24}$ 錯体の骨格をおぼろげながら観測できる程度の回折データを得るのがやっとの状況である。数ナノメートルに及ぶ巨大な球状構造を有する錯体が配列した単結晶における格別の溶媒含有率 (max. 80–90%) が、結晶の堅牢性や回折強度の著しい低下を招いていると考えられる。これに対し威力を発揮したのが、放射光 X 線によるタンパク質結晶構造解析のノウハウである。タンパク質もまた、直径が数~数十ナノメートルに達し、かつ結晶溶媒を豊富に含む単結晶を生成しやすいことから、良好な回折データ取得のための測定手法が種々開発されている。そこで我々のグループでは構造生物学チームの協力を仰ぎつつ、タンパク質結晶に対して培われてきた知見を人工系における巨大自己集合構造の解析へ持ち込むことで、構造決定を達成してきた。

最近では、折れ曲がり角度を極限まで大きくした二座配位子と Pd(II) イオンとの自己集合により、原子間力顕微鏡 (AFM) による観察において直径 10 nm を超えるようなナノ構造体の形成が観測されている (図 2)。微小な単結晶の作製には成功しているものの、

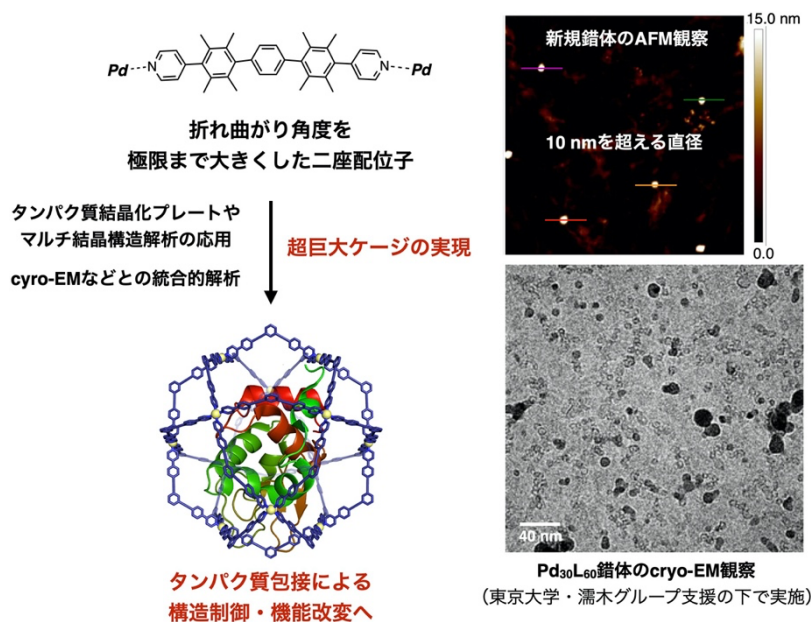


図 2 10 nm を超える超巨大ケージの構築と応用を目指した取り組み

やはり回折強度の脆弱さに直面しており、複数の微結晶から得られる回折データを統合的に扱う測定手法や解析法¹⁴⁾などを試みている。また、同じくタンパク質の構造解析に威力を発揮しているクライオ電子顕微鏡による観察および粒子解析技術との組み合わせにより、構造解析の統合的な活用にも着手している。さらに巨大な球状錯体の構築は、タンパク質の包接¹⁵⁾とその構造・機能制御といった従来のケージ分子では考えられなかった応用への観点からも必要とされており、さらなる開発研究を進めている。

上述のように、我々のグループが対象とする自己集合性「分子」は、従来の分子構造解析の技術限界を超えた領域へと突入している。キャラクター化の観点から険しい道のりの続く研究ではあるが、合成化学の立場から分析技術の飛躍に向けた刺激を与えるという点からも、有意義な試みとして期待される。

一連の取り組みにおいて、放射光 X 線を用いた結晶構造解析は極めて重要な役割を果たしている。以下、長期利用課題におけるビームライン利用 (BL38B1、BL26B1、BL41XU) を通して実現した 2 つの新たな自己集合システムの創出について紹介する。

3. 配位駆動の進化：弱い配位と強い配位の協働による複雑ナノ構造の構築法開拓

配位自己集合によるナノ構造の構築は近年多様な拡がりを見せている一方で、用いられる配位ドナーは含窒素複素環 (例：ピリジン環) やカルボキシレートといった、比較的結合力の強く高い方向規定性をもつものにはほぼ限られてきた。これに対し我々は最近、各種有機金属反応において良く知られた配位様式である、金属-不飽和結合間の π 配位を利用した新たな自己集合の開拓を進めている^{16,7)}。

プロペラ状構造とアセチレンSpacerをもつ三座配位子 (L、図 3) と Cu(I) イオンの錯形成を検討する過程で、溶液中における ¹H NMR および分子拡散係数の違いによるスペクトルの分離 (DOSY) を用いた追跡から、配位子が 2 つの異なる化学的環境下におかれた直径 2.5 nm 程度の単一構造形成が観測された。最終的に単結晶 X 線構造解析により、3 つの金属イオンを介した金属-アセチレン相互作用と金属-ピリジン配位の協働により 2 つの配位子が二重プロペラ型

に重なった構造 (Cu_3L_2) が安定化され、これが形式的に 2 量化することで、 $(\text{Cu}_3\text{L}_2)_2$ 組成のケージ錯体を形成することが明らかとなった。

この知見に基づき、金属のイオン半径や溶媒極性、さらに内部に包接する対アニオンのテンプレート効果など錯形成条件を種々探索することで、 M_3L_2 (M = Cu^+ , Ag^+) サブ構造が 4, 6, 8 個、階層的に集合した中空錯体群をそれぞれつくり分けることに成功した。一連の構造は分子量が 8,600~25,000、球体近似した直径が 3~5 nm に達し、放射光 X 線による回折測定を経て初めて結晶構造解析が可能となった。特に X 線照射による損傷を受けやすい単結晶についてはヘリカルスキャンによる回折データ取得を採用しており、また、

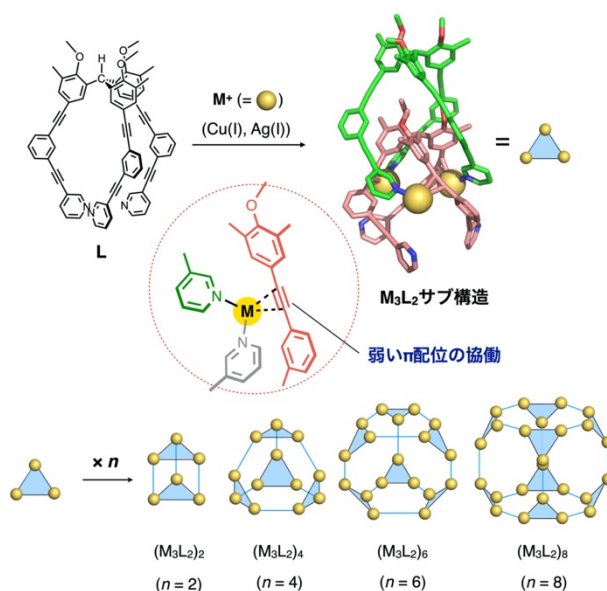


図 3 強い配位と弱い配位の協働による多面体錯体群の自己集合

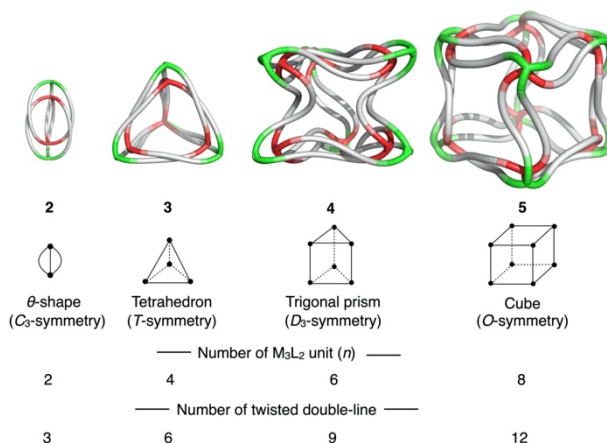


図 4 自己集合条件によりつくり分け可能な多面体錯体群における高度な絡まり

(Ag₃L₂)₈ 立方体錯体の構造解析においては、複数の結晶から得たデータを統合することで所望の分解能での構造解析を達成した。また一連の多面体構造を詳細に解析した結果、2つに重なった三ツ又モチーフ (= M₃L₂サブ構造)が多面体の各辺上でらせん状にねじれて接続することで、高度に絡まったキラルな3次元構造の構築が统一的に理解できることがわかった(図4、論文投稿中)。これらの中空錯体は、協働する金属-アセチレン配位の結合力の‘弱さ’と緩やかな方向規定性に起因した高い構造柔軟性を示し、この特性に基づく新たな構造変換過程(多面体への金属挿入)も見出されている。従来、強い配位一辺倒であった配位自己集合によるナノ構造構築に、弱い配位との協働という新たな戦略を導入することで、ナノ空間の構造柔軟性や動的特性を制御できるのみならず、高度に複雑な3次元構造のデザインを可能とする手法の開拓を進めている。

4. 自然界を凌駕する自己集合へ: ペプチドのフォールディング集合による「人工タンパク質」創出の試み
 近年我々のグループでは、金属イオンと数残基のペプチド配位子の自己集合により、ペプチド鎖を特定の配座へとフォールディングさせる過程と、これらの3次元的配置を精密制御する過程を協奏的に行う戦略

(フォールディング集合)^[8]を提唱している(図5)。

例えば、プロリン-グリシン-プロリン (PGP) の3残基ペプチド配列と Ag(I)イオンの錯形成により、ペプチド鎖がΩループ状の配座をとりつつ Ag(I)イオンと自己集合することで、複雑な絡まり構造をもつ^[4]カテナン構造(交差数12)が得られている。溶液中において金属イオンと配位子を混合するだけで、単独では複数のコンフォメーションをとり得るペプチド鎖を単一の配座に収束させ、複雑な秩序構造を実現するプロセスは、自然界におけるタンパク質の自己集合を彷彿とさせる。この知見を発展させることで、さらに高次の(交差数24)^[6]カテナンが構築されている^[9]。この錯体は外径が3.7 nmの球状であり、内部に3000 Å³の空孔をもつウイルスキャプシドに類似した構造を有する(図6)。

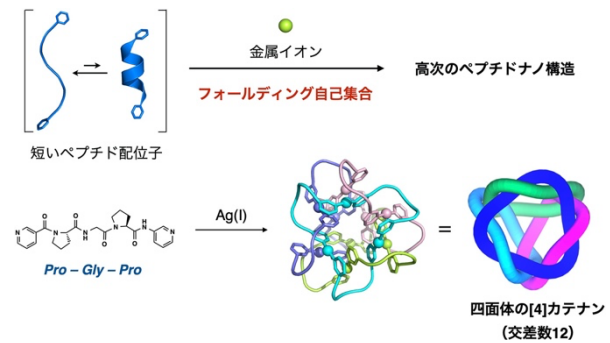


図5 フォールディング集合の提唱

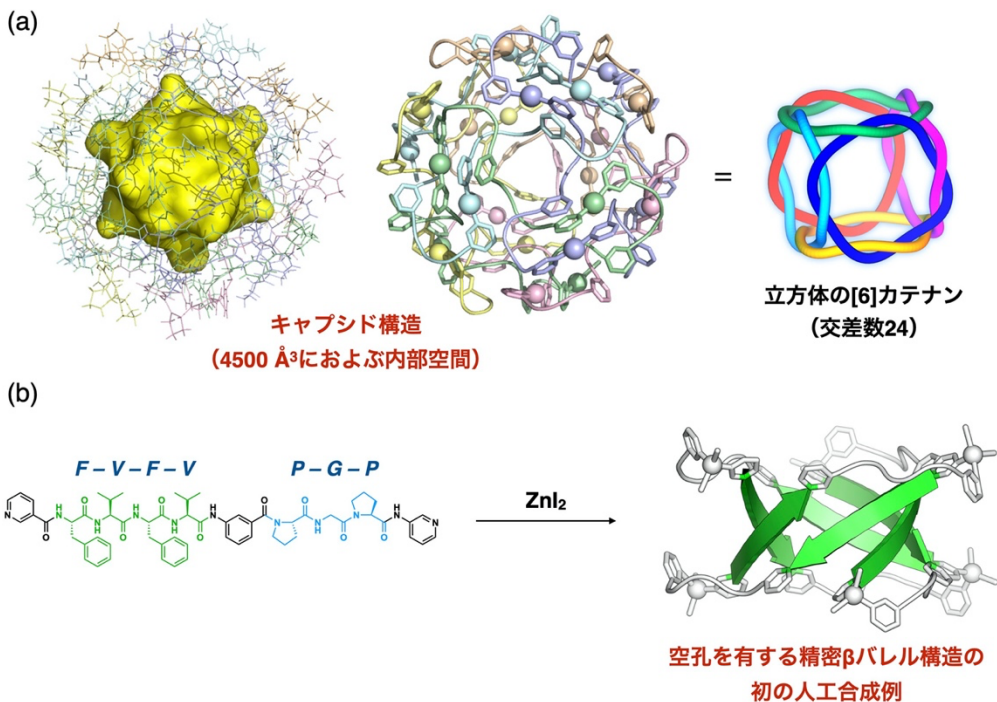


図6 (a) キャプシド構造をもつ高次カテナン、および、(b) 人工β-バレル構造の構築。

また、フォールディング集合の概念を適用することで、タンパク質の三次構造の1つである β -バレル構造を人工的に構築することにも初めて成功している^[10]。 β -バレルは β -ストランドを束ねてループ状に連結した構造をもつが、溶解性の乏しさと形状制御の点から人工合成は困難とされてきた。これに対して、1つの配位子内に β -ストランドを形成するペプチドと、ループ状構造をとる先述の P-G-P ペプチドを併せもつ配位子を設計することで一連の課題をクリアし、空孔をもつ人工 β -バレルの構築と構造解析を達成した。

フォールディング自己集合により、タンパク質の自己集合にみられる集合様式やモチーフを人工系に翻訳することで、タンパク質の構造特性や酵素機能をハイブリッド的に取り入れた人工タンパク質ともいべき新たなナノマテリアルの構築がさらに期待される。

5. まとめと今後の展望

本稿にて紹介した最近得られてきた巨大な自己集合構造は、微小な単結晶しか得られない場合も多く、また単位格子が 100 Å前後の軸長を示すこともしばしばであるのに加え、錯体の中空構造に由来する結晶溶媒含有率が大きくなるのが必然となっている。研究の進展とともに、構造解析の(潜在的な)難易度はますます上がっていくとみられるが、例えば現在進行中の課題では東京大学社会連携講座・佐藤宗太博士らの参画を得て、タンパク質結晶化プレートを用いた in-situ 回折測定やマルチ結晶構造解析といった最新の測定技術を我々の人工系試料へと導入する試みも開始している。今後も、分子デザインと構造解析技術における相乗的な進展を図ることで、従来考えも及ばなかったスケールの自己集合構造体を構築し、それらをもたらす内部空間における新たな機能の創造に挑戦していきたい。

最後にこの場を借りて、本長期利用課題(2018A0154~2019A0154、2018B0157~2019B0157、2019A0167~2019B0167)において測定実験および解析のあらゆる場面でご助力を賜った SPring-8 構造生物学ビームライン関係者の方々に対し、共同研究者を代表して深く感謝の意を表す。

参考文献

- [1] K. Harris, D. Fujita and M. Fujita: *Chem. Commun.* **49** (2013) 6703-6712.
- [2] D. Fujita, Y. Ueda, S. Sato, H. Yokoyama, N. Mizuno, T. Kumasaka and M. Fujita: *Chem* **1** (2016) 91-101.
- [3] D. Fujita, Y. Ueda, S. Sato, N. Mizuno, T. Kumasaka and M. Fujita: *Nature* **540** (2016) 563-566.
- [4] M. Yamamoto, T. Kumasaka *et al.*: *IUCrJ* **4** (2017) 529-539.
- [5] D. Fujita, K. Suzuki, S. Sato *et al.*: *Nat. Commun.* **3** (2012) 1093.
- [6] Y. Domoto, M. Abe, T. Kikuchi and M. Fujita: *Angew. Chem. Int. Ed.* **59** (2020) 3450-3454.
- [7] Y. Domoto, M. Abe, K. Yamamoto, T. Kikuchi and M. Fujita: *Chem. Sci.* **11** (2020) 10457-10460.
- [8] T. Sawada and M. Fujita: *Chem* **6** (2020) 1861-1876.
- [9] M. Yamagami, T. Sawada and M. Fujita: *J. Am. Chem. Soc.* **140** (2018) 8644-8647.
- [10] T. Sawada, Y. Inomata, K. Shimokawa and M. Fujita: *Nat. Commun.* **10** (2019) 5687.

堂本 悠也 DOMOTO Yuya

東京大学 大学院工学系研究科
〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1
TEL : 03-5841-1265
e-mail : domoto@appchem.t.u-tokyo.ac.jp

澤田 知久 SAWADA Tomohisa

東京大学 大学院工学系研究科
(JST さきがけ研究者 兼任)
〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1
TEL : 03-5841-0365
e-mail : tsawada@appchem.t.u-tokyo.ac.jp

藤田 誠 FUJITA Makoto

東京大学 大学院工学系研究科
(分子科学研究所 特別研究部門 兼任)
〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1
TEL : 03-5841-7256
e-mail : mfujita@appchem.t.u-tokyo.ac.jp

2019年3月から一般公開を開始した。本データベースは、SPRING-8 User Information Web サイト^[2]にユーザー登録している人であれば、User Information と同じアカウント（ユーザーカード番号）を用いて誰でも利用可能である。

2. 試料準備及び測定条件

本データベースに登録した標準試料はいずれも市販で純度や組成などの情報が分かる試薬を用いた。粉末、塊状の標準試料は XAFS 測定に適した吸収係数となる分量を秤量した後、窒化ホウ素とよく粉碎・混合してペレット化したものを用いた。試料の粉碎・混合は最低で 20 分、粒径の大きい試料や金属試料のように不均一になりやすいものについては 1~2 時間程度行った。箔状の試料については適切な吸収係数となる厚さのものを測定に使用した。潮解性や吸湿性など、大気雰囲気中で不安定な試料はグローブボックス内（酸素濃度及び水分値：1 ppm 以下）で試料を調製し、ガスバリア袋またはアルミラミネート袋で封入した上で測定を行った。XAFS 測定は全て BL14B2 において、quick scan での透過法にて行った。XAFS 測定の対象とした測定吸収端は BL14B2 にて測定可能なエネルギー範囲（Si(111)：4.0~34.0 keV、Si(311)：7.3~70.0 keV）にあるものとした。

測定により得られた XAFS スペクトルは他の試料や過去の文献報告と比較し、スペクトル形状に問題があるものについてはデータベースへの登録は行わず、試料の再調整及び再測定を行った。一例として、CuCl₂ 及び CuCl₂・2H₂O の XANES スペクトルを図 2 に示す。CuCl₂ 及び CuCl₂・2H₂O はいずれもメーカーから購入時は Ar ガス封入されていたためグローブボック

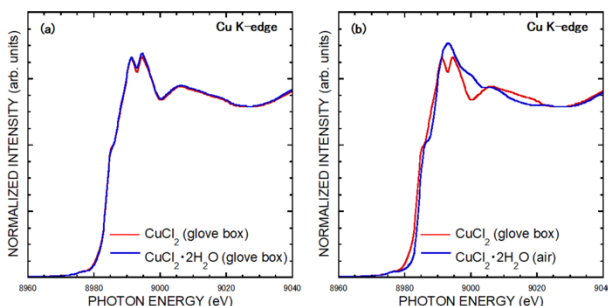


図 2 CuCl₂ 及び CuCl₂・2H₂O の XANES スペクトル。
(a) いずれもグローブボックス内で調整、(b) CuCl₂ はグローブボックス内、CuCl₂・2H₂O は大気中で調整。

ス内で試料調整を行った。しかしながら、図 2(a)のように両者の XANES スペクトルにほとんど違いが見られず、CuCl₂・2H₂O スペクトルは過去に報告されたものと異なるものであった^[3]。CuCl₂・2H₂O は乾いた空气中で風解する性質があるため^[4]、グローブボックス内での試料調整中に風解して CuCl₂ に変化したものと考えられる。このため、CuCl₂・2H₂O はグローブボックス内で秤量した後、大気中にて粉碎・攪拌してペレット化したものに対し XAFS 測定を行ったところ、図 2(b)に示すように CuCl₂ とは異なる XANES スペクトルが得られた。この XANES スペクトルは過去の文献報告とスペクトル形状が一致したため、このスペクトルデータを CuCl₂・2H₂O のものと判断しデータベースに登録した。

3. XAFS 標準試料データベース

SPRING-8 産業利用・産学連携推進室ホームページ内の BL14B2 XAFS 標準試料データベース (BENTEN 版) の Web サイト^[5]から接続することができる(図 3)。本サイトには XAFS 標準試料データベースの利用方法、登録試料、注意事項などの情報が記載されている。

Industrial Application and Partnership Division
産業利用・産学連携推進室

HOME 活動 産業利用レポート イベント情報 利用成果資料等

HOME > BL14B2 XAFS > BL14B2 XAFS標準試料データベース

BL14B2 XAFS標準試料データベース(BENTEN版)

概要
BL14B2 XAFS標準試料データベースは、JASRIユーザー支援活動の一環として、BL14B2にて測定した標準試料のXAFSスペクトルデータを収集し、系統的に整理して提供するデータベースです。XAFS標準試料データベースには、XAFSスペクトルデータ、測定条件、試料情報が収録されています。XAFS標準試料データベース上のデータはパソコンのブラウザからダウンロードすることができます。現在までにXAFS標準試料データベースには、34元素、667試料のXAFSスペクトルデータを収録しています(2021.3.10現在)。XAFS標準試料データベースは、様々な実験データを実験条件等のメタデータを含めて管理蓄積できるSPRING-8実験データ転送システムBENTENを利用しています。

最新情報
2021/3/15 マニュアルを更新しました
2021/3/10 XAFS標準試料データベースを更新しました(Ti 1試料、Sn 1試料、Pb 15試料)
2020/12/14 XAFS標準試料データベースを更新しました(Ni 2試料、W 23試料)

更新履歴一覧

注意事項
※本データベースの使用を希望される方は、データベース使用マニュアル(左メニューのリンク先)を必ずお読みください。

SPRING-8 BENTENデータベース及びXAFS標準試料データベースの著作権は、JASRIに帰属します。
SPRING-8 BENTENデータベース及びXAFS標準試料データベースをJASRIに無断で転載、複製、第三者へ配布することは禁じます。
SPRING-8 BENTENデータベース及びXAFS標準試料データベースの使用により使用者が被ったいかなる損害に対しても、JASRIは一切の責任を負いません。
XAFS標準試料データベースに使用されている登録番号(2014S0000)は、SPRING-8の実験課題番号とは無関係です。本データベースはユーザーの実験課題番号に対し登録された実験データを公開するものではありません。
XAFS標準試料データベースのデータを印刷物等に引用する場合は、印刷物の謝辞に下記のような文章を加えてください。
「標準試料○○のXAFSデータは、SPRING-8 XAFS標準試料データベースに登録されたものを使用した。」
"XAFS spectrum of standard sample *** is utilized by SPRING-8 BL14B2 XAFS database."

図 3 BL14B2 XAFS 標準試料データベース Web サイト



図4 BENTEN トップページ画面

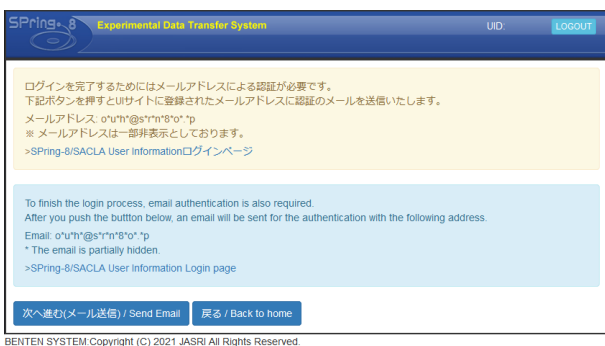


図5 メールアドレス認証(二要素認証)に関する画面

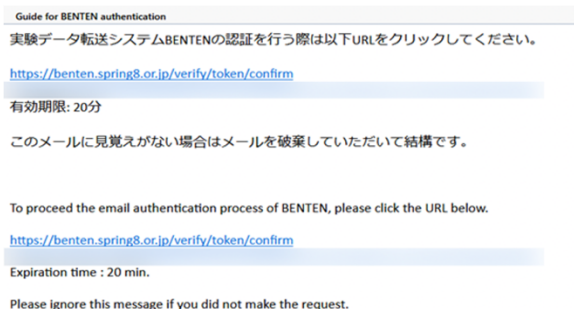


図6 BENTEN 認証に関するメール

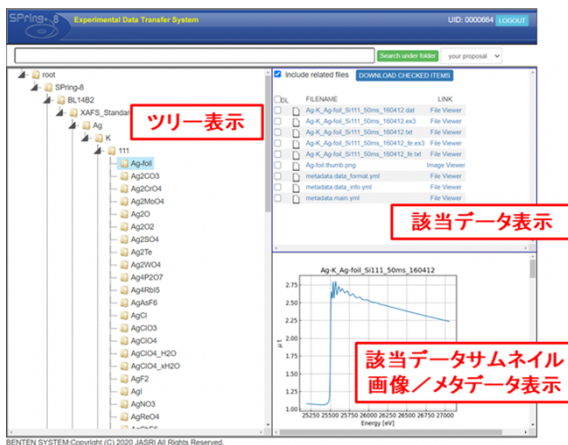


図7 XAFS 標準試料データベース閲覧画面

本サイト左上のログイン情報をクリックすると BENTEN トップページ(図4)が表示される。User Information のアカウント(ユーザーカート番号)及びパスワードを入力することでログインすることができる。正常にログインが行われると、メールアドレス認証(二要素認証)に関する画面(図5)が表示されるので、「次へ進む(メール送信) / Send Email」ボタンを押すと User Information サイトに登録されたメールアドレスに BENTEN 認証に関するメールが送信される(図6)。メールに記載されたリンクをクリックし、BENTEN 利用の承認手続きを進めると XAFS 標準試料データベース内の閲覧画面が表示される(図7)。閲覧画面は画面左部の「ツリー表示」、右上側の「該当データ表示」、右下側の「該当データサムネイル画像/メタデータ表示」により構成される。ツリー表示は吸収元素、吸収端、結晶面、標準試料名の順でフォルダが階層化されており、該当データ欄にツリー表示で選択された一段下のフォルダに関する情報が表示される。データベースには3種類の実験データ(拡張子:dat,ex3,txt)、及び実験データの詳細に関するメタデータ情報(図8)が登録されている。実験データのファイル形式は、

```

31 sample:
32 - chemical_formula: Cu-foil
33   lot_number: '30089105'
34   model_number: CU-113151
35   name: Copper
36   supplier: NILACO CORPORATION
37 measurement:
38   date:
39     end_time: '2012-06-13 02:32:00'
40     start_time: '2012-06-13 02:28:00'
41   method:
42     absorption_edge: Cu K-edge
43     category: spectroscopy
44     detection: Transmission( 2)
45     sub_category: XAFS
46     scan_mode: angle axis (1)
47   instrument:
48     monochromator:
49       distance: 3.13551
50       distance_unit: A
51       net_plane: Si(111)
52       section:
53         - start_energy: 13.3
54           start_energy_unit: deg
55           step_energy: -0.00052
56           step_energy_unit: deg
57           end_energy: 10.8
58           end_energy_unit: deg
59           dwell_time: 50.0
60           dwell_time_unit: ms
61   slit:
62     - name: 40slit
63       vertical_size: 1.0
64       vertical_size_unit: mm
65       horizontal_size: 5.0
66       horizontal_size_unit: mm
67   xafs:
68     I0:
69       element:
70         - type: Ion Chamber
71           gas: N2 100%
72           HV: 1000.0
73           HV_unit: V
74           element_number: 1
75     I1:
76       element:
77         - type: Ion Chamber
78           gas: N2 70% + Ar 30%
79           HV: 1000.0
    
```

図8 実験データの詳細情報(Cu-foil、Visual studio Codeにて表示)

拡張子 dat が 9809 フォーマット、ex3 が XAFS 解析ソフト REX2000^[6]で読み込み可能、txt が XAFS 解析ソフト Athena^[7]で読み込み可能なものに対応する。実験データ及びメタデータ情報は zip 形式で圧縮された状態でブラウザからダウンロードすることができる。

謝辞

XAFS 標準試料データベースの開発にあたり、産業利用・産学連携推進室の本間徹生氏、佐藤真直氏、廣沢一郎氏（現 九州シンクロトン光研究センター）、情報処理推進室の平岡裕二氏、横田滋氏（現 放射光利用研究基盤センター）、松下智裕氏、中田健吾氏には多大なるご支援・ご助力を頂いた。個々に感謝の意を表す。XAFS 標準試料データベースに登録された XAFS スペクトルデータの測定はインハウス課題 2018B2054、2019A2053、2019B2088、2020A2042、2020A2150 に基づいて行った。

参考文献

- [1] T. Matsumoto, K. Nakata, T. Matsushita, S. Yokota, Y. Furukawa, A. Yamashita and M. Kodera: *AIP Conf. Proc.* **2054** (2019) 060076.
- [2] <https://user.spring8.or.jp/>
- [3] R. A. Bair and W. A. Goddard III: *Phys. Rev. B* **22** (1980) 2767.
- [4] https://www.kojundo.co.jp/dcms_media/other/CUH13XAG.pdf
- [5] http://support.spring8.or.jp/xafs/standardDB_02/standardDB.html
- [6] T. Taguchi, T. Ozawa and H. Yashiro: *Physica Scripta* **2005** (2005) 205.
- [7] B. Ravel and M. Newville: *J. Sync. Rad.* **12** (2005) 537.

大淵 博宣 OFUCHI Hironori

（公財）高輝度光科学研究センター
放射光利用研究基盤センター 産業利用・産学連携推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0924
e-mail : ofuchi@spring8.or.jp

松本 崇博 MATSUMOTO Takahiro

（公財）高輝度光科学研究センター 情報処理推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0980 ext 3270
e-mail : matumot@spring8.or.jp

機械学習手法の導入によるデータ解析高度化

公益財団法人高輝度光科学研究センター
放射光利用研究基盤センター 分光推進室
水牧 仁一朗

Abstract

近年、機械学習の技術が急速に発展しており、その技術をサイエンス分野に適用する動きが活発化している。我々はこの技術を用いて、放射光計測データの解析法の高度化を精力的に行ってきた。本稿では、我々の成果である、1.ベイズ統合による異種計測 X 線分光のハミルトニアンパラメータ推定とその精度推定、2.ベイズ推定を用いた磁気コンプトン散乱測定における測定終了条件設定、の2例を紹介し、今後の展望を述べる。

1. 緒言・背景

今や機械学習の一つである深層学習による自動車の自動運転やデータ同化による天気予報など、我々の生活に密着したところで機械学習の技術が日々活躍している。このような機械学習の手法をサイエンスに適用しようとする動きが近年活発化している。Google DeepMind の Demis Hassabis や Facebook AI センターの Yann Le Cun らが CERN (欧州原子核機構) において人工知能に関する講演を行っていることもその流れの一つである。我が国においても、物質科学にも関連する領域では新学術領域「スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成」(2013-2017:代表/東京大学 岡田真人教授)^[1]や、CREST・さきがけ「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用」(2016-:統括/JASRI 雨宮慶幸理事長)^[2]あるいは、情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI³) (2015-2020:伊藤聡代表)^[3]などの大型プロジェクトが続々と立ち上げられ、目覚ましい成果を挙げている^[1-3]。

このような背景の下、JASRI において我々のグループは機械学習の導入によるデータ解析の高度化を進めることで成果最大化・測定効率化を目指している。具体的には、機械学習技術であるベイズ推定の導入により、1) 間接測定される物理量の統計的精度を評価することによる**データの高付加価値化**、2) 極端条件下での測定で、必要な精度を得るための実験条件が実験を行う前の事前シミュレーションによる**実験の効率化**に用いる、3) 物理モデルの良し悪しを判定し、

モデル選択を行うことでデータから対象としている**現象を理解する**、さらには新たなモデルを提案しそれをベイズ推定により評価し**新しいサイエンスを提唱する**などを行っている。大量のデータからのデータマイニングも機械学習を用いた重要なアプローチであるが、我々は一つひとつのデータを大事にすることで、測定者が一生懸命に測定したデータに存在する情報をでき得る限り抽出することを目的にデータ解析技術の高度化を行ってきた。本稿では、最近挙げた幾つかの成果について以下に紹介する。

2. 導入した機械学習技術

2-1. ベイズ推定を用いたハミルトニアン選択

X 線光電子分光 (XPS) や X 線吸収分光測定 (XAS) は、元素・軌道選択性をもった手法で着目する原子の価数や配位子との結合などの電子状態を明らかにする強力な測定手法である。これら XPS・XAS スペクトル解析は、従来不純物アンダーソン模型^[4]やクラスター模型^[5]を用いた理論スペクトルと実験スペクトルとを比較し、解析者が一致したかを判断する。この場合、ハミルトニアンに含まれる物理パラメータ (クーロン相互作用、混成相互作用) は点推定となり、精度は決められない。またどのモデルが良いかも解析者の主観によってしまう。XAS と XPS の解析を各スペクトルでそれぞれ行い、XPS で決定しやすいパラメータを決めてその後 XAS でその他のパラメータを決定し、両スペクトルを矛盾なく説明できるパラメータを解析者が決め、両スペクトルを統合的に解析してきた。

これも解析者の主観が入ってしまう問題点が存在する。これらの問題点を解決すべく、我々はこれらのスペクトル解析にベイズ的スペクトル分解⁶⁾を適用して、間接的測定量であるハミルトニアンパラメータ（クーロン相互作用や混成相互作用）を精度付きで評価し、XPS・XAS 測定から評価できるハミルトニアンパラメータのベイズ的統合に成功した⁷⁾。またベイズ情報量基準に基づいたハミルトニアン選択も可能であることを示した⁸⁾。本稿では、XPS・XAS の異種計測ベイズ統合による間接測定量の精度評価の結果について示す。

ベイズの定理は、

$$P(\theta|D) = \frac{P(D|\theta)P(\theta)}{P(D)} \dots (1)$$

と書ける。 $P(\theta|D)$ は事後確率でデータ D が取得された下でのパラメータセット θ が得られる確率、 $P(D|\theta)$ はパラメータセットが与えられた時のデータが得られる確率（尤度と呼ばれる）、 $P(\theta)$ はパラメータの事前確率、 $P(D)$ はデータが得られる確率である。

ここで具体的な問題へ適用する前にこの式の意味を考えてみる。尤度 $P(D|\theta)$ は、我々の測定行為そのもので、データはノイズを含んだ形で得られる。ノイズの確率分布は誤差論に基づきガウス分布が仮定されることが多く、本稿ではガウス分布を採用する。事後確率分布 $P(\theta|D)$ は本当に我々がデータから抽出したい量で、データを生成するモデルのパラメータの分布を与える。つまりベイズの定理は、データのばらつきが実験の誤差分布ではなくモデルパラメータのばらつきから生じるという発想の転換を意味している。この発想の転換により、間接物理量であるパラメータの値と精度を得ることができるのである。実装するために以下で定式化を行う。データ（実験データ） y_i は入力応答関数 $f(x_i; \theta)$ とノイズの足し合わせと考えると、

$$y_i = f(x_i; \theta) + n_i \quad (i = 1, 2, \dots, N) \dots (2)$$

と表す。ノイズがガウス分布すると仮定すれば、得られるデータの得られる確率は、

$$P(y_i|\theta) \propto \exp\left(-\frac{(y_i - f(x_i; \theta))^2}{2\sigma_{data}^2}\right) \dots (3)$$

と表される。データ y_i が各 i で独立と仮定すれば、データセット $Y = \{y_1, \dots, y_N\}$ の尤度 $P(Y|\theta)$ は、

$$P(Y|\theta) = \prod_{i=1}^N P(y_i|\theta) \propto \exp\left(-\frac{NE(\theta)}{\sigma_{data}^2}\right) \dots (4)$$

ここで、 $E(\theta) = 1/N \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i; \theta))^2$ である。この確率分布を得るために交換レプリカモンテカルロ (RXMC) 法を用いている。数万回のモンテカルロステップを経て事後確率分布が得られる。RXMC の詳細については参考文献[6]を参照していただきたい。

我々は、XAS および XPS のスペクトルを以下の理論モデルにより生成し、ガウスノイズを足し合わせることで実験データを模擬した。ベイズ統合の効果を検討するために、1) それぞれスペクトルに対してベイズ推定を行う、2) 2つのスペクトルに対して同時にベイズ推定するベイズ統合を行う、という2つの場合について電子物理量の精度を比較した。その結果を以下に示す。NiOを念頭に置き、正八面体クラスター[NiO₆]¹⁰⁾を対象とした。それらの XAS・XPS スペクトルを、XAS・XPS の始状態・終状態を表すハミルトニアンは、

$$\begin{aligned} H = & \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k + \sum_v \epsilon_d a_{dv}^\dagger a_{dv} + \epsilon_c a_c^\dagger a_c \\ & + \frac{V}{\sqrt{N_d}} \sum_{v,k} (a_{dv}^\dagger a_k + a_k^\dagger a_{dv}) \\ & - U_{dc} \sum_v a_{dv}^\dagger a_{dv} (1 - a_c^\dagger a_c) \\ & + U_{dd} \sum_{v>v'} a_{dv}^\dagger a_{dv} a_{d'v'}^\dagger a_{d'v'} \end{aligned} \dots (5)$$

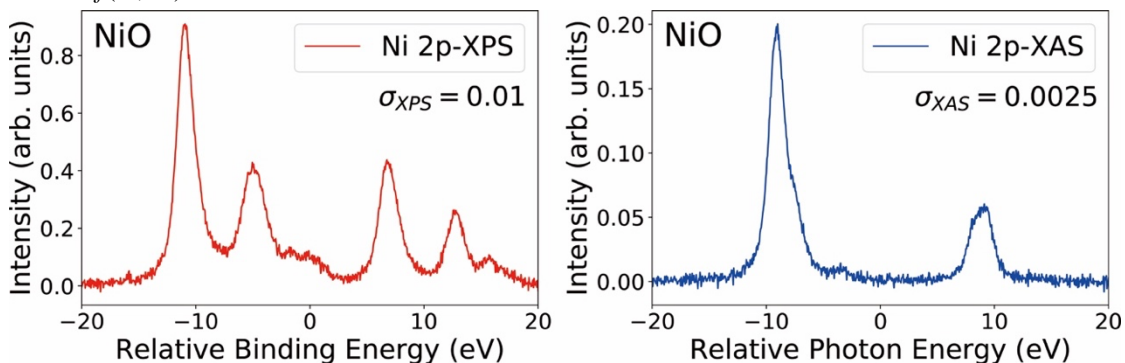


図1 NiOの2p-XPSと2p-XASの人工データ

で与えられ、XAS・XPSの素過程は、

$$I(\omega; \vartheta) = \sum_f |\langle f | T | g \rangle|^2 \frac{\Gamma/\pi}{(\omega - E_f(\vartheta) + E_g(\vartheta))^2 + \Gamma^2} \dots (6)$$

と表される。 ϑ は、 $\{\Delta = \epsilon_k - \epsilon_d, 10Dq, V, U_{dc}, U_{dd}, \Gamma\}$ である。パラメータはそれぞれ ϵ_k は価電子のエネルギー、 ϵ_d はd電子のエネルギー、 $10Dq$ は結晶場分裂エネルギー、 V は混成相互作用、 U_{dc} は内殻正孔とd電子とのクーロン相互作用、 U_{dd} はd電子同士のクーロン斥力である。(5)式から基底状態 $|g\rangle$ と終状態 $|f\rangle$ を求めて(6)式に代入することでXAS・XPSの強度が求まる。 T は、双極子演算子である。 Γ はピークの幅で内殻正孔の寿命で決まる。

この定式化を用いたNiの2p-XAS、2p-XPSの計算スペクトルは図1のようである。ノイズはXAS・XPSでS/N比が同一になるように設定している。XAS・XPSスペクトルに対して、それぞれベイズ推定を行った。(4)式の E をXASとXPSそれぞれに用意し、

$$E_{XAS}(\theta_{XAS}) = 1/N \sum_{i=1}^N (y_{XAS,i} - f(x_i; \theta_{XAS}))^2 \dots (7)$$

$$E_{XPS}(\theta_{XPS}) = 1/M \sum_{i=1}^M (y_{XPS,i} - f(x_i; \theta_{XPS}))^2 \dots (8)$$

と表す。 θ_{XAS} 、 θ_{XPS} はそれぞれのパラメータで、 $N(M)$ はXAS(XPS)の測定点数である。それぞれの事後確率 $P(Y|\theta)$ を最大となるように推定を行った。その結果、各ハミルトニアンパラメータ(Γ 以外を示す)は図2に示すような事後確率分布を示した。これにより間接測定量であるハミルトニアンパラメータの精度が評価できていることが分かる。おおよそXPSの方がパラメータの精度が高い。これは Ni^{2+} を対象と選んでいる特殊事情が絡んでいる。詳細は参考文献[7]を読んでいただきたい。次に統合の結果を示す。統合では E_{XAS} と E_{XPS} のデータ点数と測定データの標準偏差で加重平均をとった新たな E_{total} を(4)式の E に代入する。こ

の E の変換をすることでベイズ統合が行われる。その結果を図2に示す。別々でベイズ推定を行うよりも統合して行った方が各パラメータの推定精度が高くなっている(分布幅が狭くなっている)ことが図2から見取れる。またベイズ自由エネルギーを用いたベイズ情報量基準によれば、ベイズ自由エネルギーが低い方がモデル選択される。このことから統合を行った方が良いと結論付けられる(表1)。この結果を鑑みれば、対象とした系の電子状態を正確に理解するには異種の測定を統合して知ることが重要であるということを示唆している。対象の本当の「姿」を見なければ、様々な角度から「見る」ことが重要なのである。

2-2. ベイズ推定を用いた実験戦略の提案

次は、実験の目的により、どの程度の時間をかければ良いかをベイズ推定により決定する方法を紹介する。我々はこの方法を磁気コンプトン散乱に適用した。

コンプトン散乱は、固体中の電子の運動量を観測するもので、実空間の波動関数をフーリエ変換した「運動量空間の波動関数」を観測する手法である。入射X線に円偏光を用い、強磁性体のコンプトン散乱を測定すればスピンの依存したコンプトン散乱スペクトルが得られ、スピンの情報をもった電子の波動関数が得

表1 ベイズ自由エネルギーの比較:太字の数字を比較する。一番下段が統合の結果。

	ベイズ自由エネルギー
XPS	-2517.6
XAS	-3644.9
XPS+XAS	-6162.5
統合	-6180.5

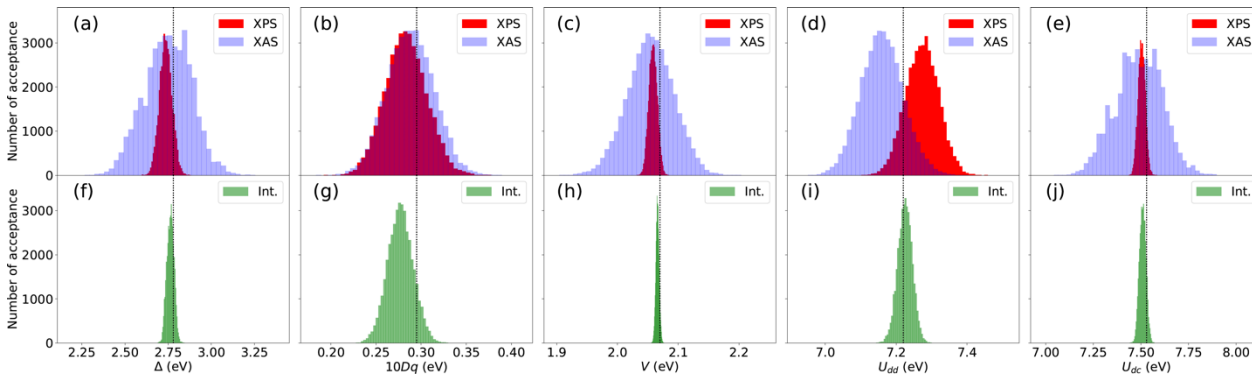


図2 XAS・XPSの各々でのベイズ推定による事後確率分布(上段)と統合後の事後確率分布

られる。このスペクトルを磁気コンプトン散乱スペクトルと呼び、その積分強度はスピン磁気モーメントの大きさを反映したものとなる。スピンに依存した電子運動量分布を測定できること、スピン磁気モーメントが評価できることから強相関電子系の電子状態や磁性材料の特性を調べる強力な手段となっている。特に高エネルギーX線を用いるため、バルクの性質を強く反映すること、試料周りの外場（磁場・高圧・温度など）パラメータを制御しながらの測定が容易であるといった特長をもつ。しかしながら、コンプトン散乱の散乱断面積が非常に小さく測定に非常に時間がかかることが、磁氣的性質を調べる他の手段と比べて不利な点である。この問題を解決するために、現在行われている測定終了条件を見直すことを考えた。今回は強磁性体であるFeを対象とした。磁気コンプトン散乱スペクトルは円偏光を入射し、フォトン波数ベクトルと磁場が平行(+)・反平行(-)という配置のスペクトルの差分を取ることで得られる。実際の測定の際は磁場反転を(+) → (-) → (-) → (+) というサイクルを1サイクルとしてスペクトルとして得ている。以下の2種類の問題設定を用意した。1) 磁気コンプトン散乱のスペクトルから3d電子軌道成分と4s電子軌道成分をある精度で分離評価できると測定を終了する。2) Feのスピン磁気モーメントがある精度で評価できると測定を終了する。測定はBL08Wにて室温で行った。Feの磁気コンプトン散乱スペクトルを図3に示す。136サイクルの積算を行った結果である。白丸が実験で、点線、破線がFe-3d、4sの理論スペクトルで、それらの和が実線である。理論スペクトルはFe原子の3d、4sの波動関数をHartree-Fock近似の下

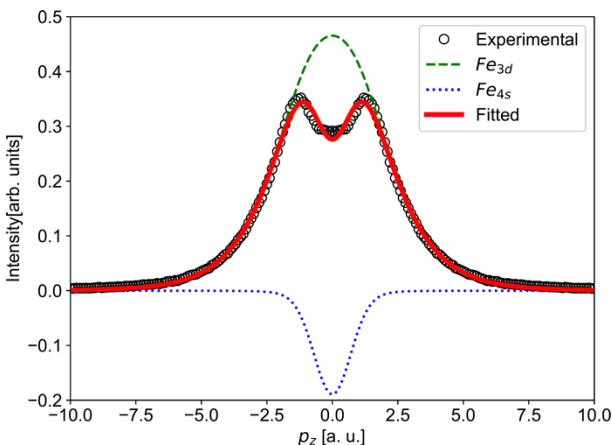


図3 Feの磁気コンプトンスペクトル

で評価したものである。これら2つの理論スペクトルの和を用いて実験スペクトルをフィッティングした結果が実線に対応している。フィッティングの結果、運動量がゼロ付近のスペクトルの凹みは4sが担っており、3d電子のスピン磁気モーメントと4sのそれが反対向きであることが分かる。このスペクトルにベイズ推定を以下のように適用する。測定データ y_i が先述した(2)式で表されるとすると、 $f(x_i; \theta)$ は理論スペクトルとなるが、それらは3d成分 Fe_{3d} と4s成分 Fe_{4s} を和で表されるため、

$$f(x_i; \theta) = ([a_{3d}Fe_{3d} + a_{4s}Fe_{4s}] * G)(x_i) \dots (9)$$

となる。ここで、 $G(x_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Gamma^2} \exp\left(-\frac{x_i^2}{2\Gamma^2}\right)$ であり、

*は畳み込み演算子であり、 x_i は運動量を表す。この幅 Γ は測定系分解能に対応する。2.2節と同様に各点は独立で、(2)式のノイズがガウスノイズであるとすると、

$$p(\mathbf{Y}|\mathbf{x}, \theta, b) = \prod_{i=1}^N p(y_i|x_i, \theta, b) = \left(\frac{b}{2\pi}\right)^{N/2} \exp\{-NbE(\theta)\} \dots (10)$$

ここで、 $E(\theta) \equiv \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \{y_i - f(x_i; \theta)\}^2$ である。

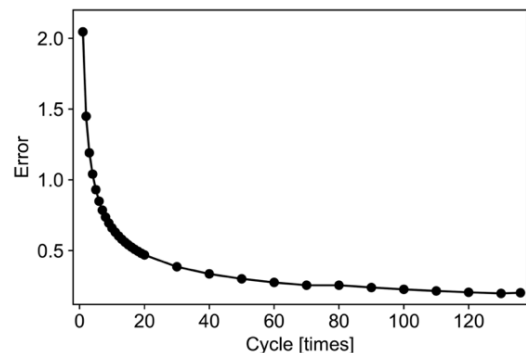
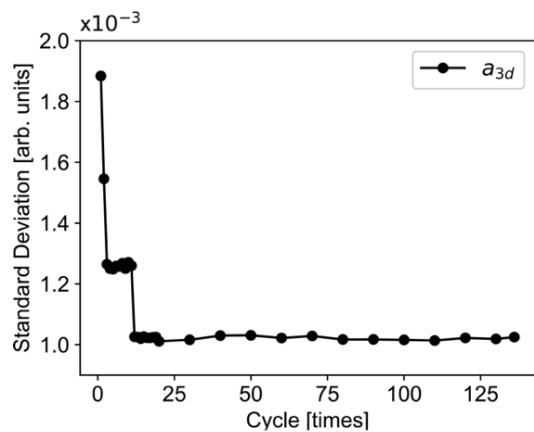


図4 Fe-3d成分の係数の事後確率分布の標準偏差(上段)と磁気散乱強度の統計誤差(下段)。

この定式化によりベイズ推定を行い、 $\theta = (a_{3d}, a_{4s}, \Gamma)$ を精度ともに評価する。これらパラメータをサンプリングし、評価することにより、磁気コンプトンスペクトルの形状・面積（スピン磁気モーメントに対応）といった物理量もサンプリングすることが可能となり、精度付きでの評価が可能となる⁹⁾。このベイズ推定を1サイクル分、2サイクル分積算したもの、…、136サイクル分積算したもの、それぞれに適用した。まず、1)の結果を示す。図5に3つのパラメータの事後確率分布を示す。これらの分布の標準偏差の積算サイクル依存性と、磁気コンプトン散乱の統計誤差のそれを図4に示す。統計誤差の方は徐々に滑らかに減少し、事後確率分布の標準偏差はおおよそ20サイクル積算したところで最小値を取り、それ以降一定である。この係数の精度がプロファイルの“合い”を表していると考えられるため、この精度が一定値を示す20サイクルで実験を終了することができる。一方、統計誤差の方はそのような振る舞いがなく、決定しづらいことが見て取れる。従って、事後確率分布の標準偏差を指標にすれば明瞭に収量条件を決定可能となる。次に、2)の結果について示す。図5に磁気コンプトン散乱スペクトルの積分強度の事後確率分布とその標準偏差の積算サイクル依存性を示す。通常磁気コンプトン散乱測定から要求される磁気モーメントの精度は $\pm 0.01 \mu_B$ であり、その範囲を点線で示している。図5を見れば分かるように6サイクル程度積算すれば、事後確率分布の標準偏差は要求精度範囲内に収まる。このことから磁気モーメントを評価したいのであれば6サイクル積算で十分ということになる。これは従来の測定時間の20分の1程度となり、大幅な効率化が望める。

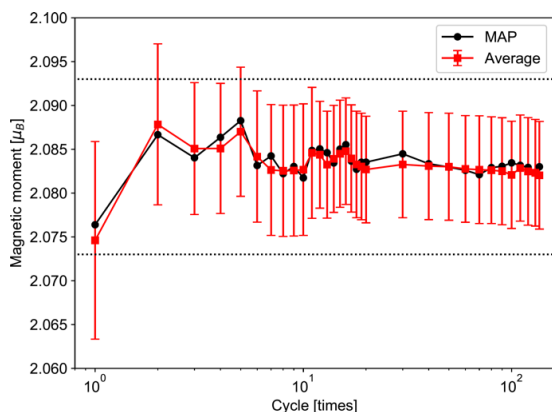


図5 ベイズ推定による磁気モーメントの最尤推定(黒丸)と平均値(赤丸)とその標準偏差(誤差棒)。

2-3. その他の例

我々は、上述したベイズ推定という機械学習技術以外にも導入を始めている。BL40B2において小角散乱測定の自動化に向けた準備として、カーネル密度推定(KDE)法を導入した。散乱パターンにカーネル密度推定法を適用し、散乱パターンの確率密度が収束した時点で測定を終了とする方法を確立した¹⁰⁾。また次世代光源においてさらに進展すると期待される物性研究に対するコヒーレント利用を想定し、磁区パターンのコヒーレント回折イメージングの実像再構成にも取り組んでいる。通常行われている位相回復アルゴリズムを発展させ、スパースモデリングと全変動正則化を導入することで磁区パターンの実像回復が比較的少ない繰り返し回数で可能となっている¹¹⁾。さらに、これまであまり省みられてこなかった画像データの特徴量の定量化にも取り組んでいる。島状磁区パターンと迷路状磁区パターンの違いの定量化を人間の視覚認知科学の概念に基づいた高次元テキスト特徴量であるPortilla-Simoncelli (PSS) 特徴量¹²⁾を用いて行った¹³⁾。これにより、与えられた磁区パターンがどの程度島状であるかを測ることが可能となった。それだけでなく、どの程度島状であることを示す量は、過飽和度と呼ばれる物理量と比例関係にあることまで分かってきた。詳細は参考文献[13]を読んでいただきたい。

3. まとめ

本稿では、我々が近年行ってきた機械学習の導入によるデータ解析の高度化の進展について紹介した。異種測定データのベイズ統合による「データの高付加価値化」、ベイズ推定を用いた「測定の効率化」が機械学習を導入すると可能となることを示した。さらには、近年放射光測定技術の格段の進歩により、重要度が増している画像データの「見た目」の定性的な議論にとどまらず、画像データの定量的議論への道筋を示した。今後は、BL08WやBL40B2に限らず、他のビームラインへも機械学習手法の導入を検討していきたい。

謝辞

本研究は多くの方々にお世話になりました。ここに感謝申し上げます。1つ目の例は、JASRI 博士研究員

の横山優一博士が精力的に進めてくれました。2つ目の例は、BL08W 担当者の辻成希博士の協力なくしてはできませんでした。お礼申し上げます。BL40B2 の測定・KDE 法導入では、JASRI 関口博史博士、太田昇博士に大変お世話になりました。また、ベイズ推定の方法論や情報数理科学の議論においては、東京大学新領域 岡田真人教授、熊本大学 赤井一郎教授、NIMS 永田賢二主任研究員、統計数理研究所 日野英逸教授、福水健次教授、本武陽一助教に、磁区パターンの解析においては、電気通信大学 庄野逸教授、修士1年の村上諒君には大変お世話になりました。XAS・XPS スペクトル計算の理論に関する議論は、大阪府立大学 魚住孝幸教授にアドバイスをいただきました。心より感謝申し上げます。また、本研究は JST-CREST (JPMJCR1761、JPMJCR1861) の助成により行いました。

水牧 仁一朗 MIZUMAKI Masaichiro

(公財) 高輝度光科学研究センター
放射光利用研究基盤センター 分光推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0833
e-mail : mizumaki@spring8.or.jp

参考文献

- [1] <http://sparse-modeling.jp>
代表例: *The Astrophysical Journal Letters* **875** (2019) L1.
- [2] https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/ongoing/bunyah28-3.html
代表例: *J. Phys. Soc. Jpn.* **88** (2019) 024009.
- [3] <https://www.nims.go.jp/MII-I/>
代表例: *npj Computational Materials* **5** (2019) 39.
- [4] F. de Groot and A. Kotani: *Core Level Spectroscopy of Solids* (CRC Press, Boca Raton, FL, 2008).
- [5] K. Okada, T. Uozumi and A. Kotani: *J. Phys. Soc. Jpn.* **63** (1994) 3176-3184.
- [6] K. Nagata, S. Sugita and M. Okada: *Neural Networks* **28** (2012) 82-89.
- [7] Y. Yokoyama, T. Uozumi, K. Nagata, M. Okada and M. Mizumaki: *J. Phys. Soc. Jpn.* **90** (2021) 034703.
- [8] Y. Mototake, M. Mizumaki, I. Akai and M. Okada: *J. Phys. Soc. Jpn.* **88** (2019) 034004.
- [9] Y. Yokoyama *et. al.*: in preparation.
- [10] H. Sekiguchi *et. al.*: in preparation.
- [11] Y. Yokoyama *et. al.*: in preparation.
- [12] J. Portilla and E. P. Simoncelli: *Int. J. Comput. Vis.* **40** (2000) 49-70.
- [13] R. Murakami, M. Mizumaki, Y. Hamano, I. Akai and H. Shouno: *J. Phys. Soc. Jpn.* **90** (2021) 044705.

「マルチスケール 3D 画像取得解析セミナー」報告

公益財団法人高輝度光科学研究センター

放射光利用研究基盤センター 散乱・イメージング推進室

安武 正展、上杉 健太郎

1. はじめに

「マルチスケール 3D 画像取得解析セミナー、Multi Scale Imaging Technology Web Seminar (MSITWS)」は、2020 年 10 月 22 日にオンライン形式で実施された。主催は、Thermo Fisher Scientific 日本エフイー・アイ (株)、(株) 島津テクノリサーチ、公益財団法人高輝度光科学研究センターの 3 者である (以降それぞれ、日本 FEI、島津テクノ、JASRI とする)。本稿ではこの件に関する経緯および講演概要を報告する。

2020 年は新型コロナウイルス感染症に振り回された年であった。感染拡大を防ぐため、マスクの着用や手指の消毒が常態化された。人同士の接触機会を減らすために、不要不急の外出を控えることが求められた。SPRING-8 では、2020 年 4 月中旬から約 2 ヶ月にわたり一般ユーザーの利用が制限された。同様に学会・展示会・セミナーが相次いで中止されるに至り、極端に情報交換の場が狭まった。このような中で目覚ましい発展を遂げたのは、オンライン技術である。会議・操作・データ交換がネットワーク上で十分な性能を持つ機能するようなソフトやハードウェアの進化が起こった。私たち使用者側も次第にその使用に慣れ、その活用の仕方を日々学んでいる。

本稿で報告するセミナーはそのような状況において、オンラインミーティングシステムを利用すれば、人数にしても、参加者の任地にしても、これまでのリアルな対面式では実現できないような規模でのセミナー開催が可能であるとの気づきをもたらしたものである (気付いたのは日本 FEI の馬場氏)。それはさらに主催者側にも当てはまる。対面式という物理的な枠が取り払われ、ネットワーク上で完結できるとなると、より自由度の高いアプローチの実践が可能となる。具体的には、対面式では場所の確保・運営人員の確保が必要となり、それは開催規模に応じて膨張していく。一方でオンライン方式では、オンライン特有の使用方法的な伝達は必要となるものの、分かりやすい情報展開・マニュアルの整備・参加登録と案内方法の自動化などができていれば、プレゼンテーションを含めた事前準備は、どんな開催規模でも似たようなものとなり得る。ここで十分なコストダウンが図られれば参加費不要となり、より広い層へのアプローチも可能となる。

以上のことを念頭にセミナーの内容検討を行った。その結果、3 者とも物質の 3 次元画像を取得するという共通点があり、それぞれが得意とする空間スケールが nm から cm まで広く分布していること、日本 FEI においては世界的に普及している画像解析ソフトを開発していること、が訴求ポイントとなると考えた。その結果、タイトルは「マルチスケール 3D 画像取得解析セミナー」となった。具体的には 3 者が取り扱っている装置および事例を紹介する。また、最近利用されることの多い、機械学習を用いた画像解析事例も含めることとした。計測・解析事例においては、共通の試料を測定した方がマルチスケール計測における具体性が良くなると思われたため、島津テクノより、GFRP 試料が提供された。図 1 に本セミナーのコンセプト概略を示す。

今回の開催までの流れを少し説明しておく。プラッ

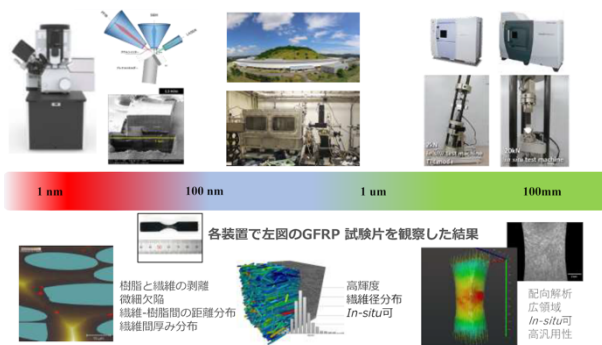


図 1 今回のセミナーのテーマである「マルチスケール」の基本コンセプトを表した図。1 nm から 100 μm まで 8 桁にわたるスケールでの連携を提案している。

トフォームは日本 FEI にてすでに導入済みであった Webex を使用し、他 2 者がそこに参加する形となった。告知は 3 者がそれぞれの利用者に対して行う事とした。合計では 1500 名以上の方に案内がされたはずである。参加資格は参加希望者からのメールに開催部屋へのアドレスを添付し返信することとした。撮影環境などは、ウェブ会議用の設備等を流用することで構築された。このように開催規模の割にほぼコストがかかっていないといつてよい。

2. 講演概要

図 2 に講演プログラムを示す。本セミナーは、実験を計画し、結果を得るまでの流れに沿うように内容が工夫されており、基礎から応用、また実際の実験や解析までカバーするように設定されている。

前半はイメージング技術に関わる基礎的情報をまとめて取り扱っており、まず最初に島津テクノの中山氏による X 線 CT の撮影原理や像質の解説、また実際の装置紹介が行われた。次は著者らの発表であり、

SPring-8 など放射光施設での CT 装置の解説、また一般的な X 線源を用いた CT 装置との違いなどを紹介した。日本 FEI 伊藤氏からは画像処理の基礎的な取り扱いについて解説があった。

中盤からは、応用事例や実際のイメージングの様子に関わる発表が連なる。中盤では一度昼食休憩をはさんだ。休憩時間についてはのちにまとめて詳細を記すこととする。まず、日本 FEI 村田氏からは、プラズマ FIB/SEM 装置、フェムト秒レーザー/SEM 装置などを用いた大容量高速加工装置などを、デモ分析を交えて紹介していただいた。島津テクノ中山氏からは、島津テクノでの分析サービスや実験設備などの紹介があり、変形試験機などと組み合わせた応用事例の紹介があった。著者らは、時間軸を絡めた実験や位相情報を用いた撮影など、放射光施設ならではの応用事例を紹介した。

続いて著者らによりライブ配信が行われ、BL47XU にて近年開発されたマルチスケール X 線イメージング装置の構成を紹介し、実際の試料の配置やパソコン

時間	内容	講演者/所属
9:00-9:15	イントロダクション	馬場 亨 Thermo Fisher Scientific
9:15-9:40	X線CTの基礎とWeb Lab Tour 島津テクノリサーチ X線CT試験室からのライブ配信	中山貴司 島津テクノリサーチ
9:40-10:30	放射光X線CT装置の特徴	上杉健太郎 JASRI / SPring-8
10:30-11:00	画像処理の基礎	伊藤栄佑 Thermo Fisher Scientific
11:00-12:00	大容量高速加工 プラズマFIB/フェムト秒レーザー/SEM複合機の応用事例と、 日本エフイーアイ電子顕微鏡デモンストラーションルームのライブ配信	村田 薫 Thermo Fisher Scientific
12:00-13:00	昼休憩 - 質疑応答セッション	
13:00-13:45	<i>In situ</i> X線透視/X線CT試験サービスのご紹介とWeb Lab Tour 島津テクノリサーチ 材料試験室からのライブ配信	中山貴司 島津テクノリサーチ
13:45-14:45	放射光X線CTの応用事例 - 高速撮影、4D-CT、NanoCT、位相CT	上杉健太郎 JASRI / SPring-8
14:45-15:25	SPring-8 放射光CT撮影のライブ配信	上杉健太郎 / 安武正展 JASRI / SPring-8
15:25-15:55	異なる解像度におけるAvizo Spftwareでの画像解析事例	馬場 亨 Thermo Fisher Scientific
15:55-16:15	休憩 - 質疑応答セッション	
16:15-16:45	画像解析ソフト Avizoの各研究分野での応用 - 分率、サイズ、分散、接触率、配向、分割、長さ、連結性、流体経路 等	馬場 亨 Thermo Fisher Scientific
16:45-17:15	4D-CT画像の画像相関法 (DVC)による3次元わずみ解析事例	中山貴司 島津テクノリサーチ
17:15-17:45	Deep Learningの画像処理への応用事例と、Avizoソフトウェア上での活用法	伊藤栄佑 Thermo Fisher Scientific
17:45-17:50	閉会の挨拶	馬場 亨 Thermo Fisher Scientific
17:50-18:20	質疑応答セッション	

図 2 当日のプログラム。各主催者から、装置説明（ライブデモ）・事例説明などが行われた。
(<http://www.spring8.or.jp/ja/science/meetings/2020/201022/>から)。

による画像取得の様子および得られた 3 次元像をリアルタイムで紹介した。我々の配信は、放射光施設になじみのない方には新鮮なものであったのではないかと考えている。

後半の発表からは取得データの解析方法、解析事例に関する発表が連なる。まず、日本 FEI 馬場氏による Avizo ソフトウェアの紹介、具体的な解析事例の発表があり、次に、島津テクノ中山氏からその場変形実験 CT 撮影の解析事例を紹介いただいた。最後に、日本 FEI 伊藤氏によるデータ処理における Deep Learning の応用と事例についての発表があった。

ここで、今回のセミナーの休憩時間と質疑応答の様式について紹介したい。今回のセミナーでは、各発表の後に質疑応答の時間は設けられていない。質問は常にチャットスペースにて投稿され、休憩時間を質疑の時間として併用するスタイルとなっている。これにはオンライン開催ならではのメリットがあると感じた。例えば、通常の現地開催での学会などでは、どうしても各質問者に対し一問一答ということになってしまう。一方、今回の方法では発表者はどのような疑問が多いかなど質問の傾向をあらかじめ掴むことができる。それだけでなく様々な質問に絡めて（時には他の発表に対する質疑も含め）回答することが可能である。質問者側も発表直後までに質問をまとめる制約がないため発表の後に気付いた疑問も投稿できるなどメリットがある。求めている回答も得やすいのではないかと感じた。今回、質疑応答の時間は 3 度のみであったが総じて質の高い時間であったのではないかと思う。



図3 実験ホールBL47XUからのライブ配信の様子。

本セミナーは、大きなトラブルも起きず、ほぼタイムスケジュール通りに進み 18 時頃に日本 FEI 馬場氏により閉会の挨拶があり、その後最後の質疑応答のち閉会となった。

ここで本題から少し脱線するが著者らのライブ配信の様子を紹介したい。配信は撮影も含め著者ら 2 名で行った。図 3 に簡単に撮影の様子を紹介する。用いた機材はすべて JASRI の所有する市販物品であり、特殊なものを使用していない。著者は全く撮影の経験などなかったが、近年の市販撮影機器の性能向上もあり、意外なほどに簡便な配信環境整備で、十分なクオリティの撮影ができたと考えている。

また、各者オンライン発表に創意工夫がみられた。著者が特に印象に残ったのは、島津テクノ中山氏の発表であった。その発表ではテレビでの天気予報などでよく用いられるクロマキー合成（緑のスクリーンをバックに撮影を行う手法）が巧みに取り入れられており、さながら黒板の前に立ち講義を行っているかのような発表であった。通常のオンライン発表では、スライドのみが表示され強調はデジタルポイントなどに限られる。一方、この手法では人によるモーションでの強調も可能でありオンライン発表に大きな工夫の余地があることを感じた。

3. おわりに

朝 9 時から午後 6 時半までという長丁場ではあったが、内容としては充実していたように感じられた。参加申し込み件数は延べ約 520 件であった。最大同時参加者数はおよそ 380 名であった。これは筆者らが行ったことのある発表のうちでは、最大人数であろう。

セミナー後に取得したアンケートでは、今回の企画自体は概ね好評だったようである。特に企業の方からは、自席を離れずに複数名で聴講できるメリットが強調されていた。また、マルチスケールで試料を観察することの利点も伝わったようである。一方、プレゼンテーションの手技に関しては、声がかもっていた・動画がうまく配信されていなかった、など技術的な指摘が多かった印象である。配信側でも気を配る必要があるが、聴取側のネットワーク環境の問題もあり得るので改善させるのは少し難しいと思われる。

本稿執筆時点（2021年3月）でこのセミナーの続編企画も進行中である。今後もマルチスケール3D観察技術が広く利用されていくことを期待する。

最後に、本セミナーを実施する上で多大な協力をいただいた、日本FEIの馬場亨氏および島津テクノの中山貴司氏に感謝の意を表したい。

安武 正展 YASUTAKE Masahiro

（公財）高輝度光科学研究センター
放射光利用研究基盤センター 散乱・イメージング推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL：0791-58-0833
e-mail：m.yasutake@spring8.or.jp

上杉 健太郎 UESUGI Kentaro

（公財）高輝度光科学研究センター
放射光利用研究基盤センター 散乱・イメージング推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL：0791-58-0833
e-mail：ueken@spring8.or.jp

SPRUC 第3回 BLs アップグレード検討ワークショップ報告

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 行事幹事

筑波大学 数理物質系 エネルギー物質科学研究センター

西堀 英治

1. 概要

SPRUC 第3回 BLs アップグレード検討ワークショップが、2021年3月5-6日の日程で、SPring-8 放射光普及棟大講堂での講演と Webex Events によるオンライン配信によりハイブリッド開催されました。本ワークショップ (WS) の目的は、第1、2回 WS や SPring-8 シンポジウム 2019、2020 での議論を踏まえ、それ以降の技術開発動向やビームライン (BL) アップグレードの具体的なプラン、更には、検討事項を共有するとともに、今後の継続的な BL アップグレードに向けた議論を行うことです。318名の参加者 (施設関係 113名、SPRUC 会員他 205名) の参加登録があり、260名以上が参加しました。新型コロナウイルス感染症の状況からほとんどのユーザーがオンライン参加となりました。人数的には、昨年、一昨年を上回る人数の参加者が集まり、活発な議論が行われました。以下、プログラムに沿って本 WS の様子を報告します。

2. 開会式と概要セッション

3月5日は最初に、SPRUC 木村昭夫会長 (写真1) より挨拶が行われました。BL 再編アップグレード計画が施設から提案され、ユーザーとの対話により成果の最大化を目指すという WS の目的が示されました。また、プログラムの内容について2日間のプログラムの概要と、参加登録者数が現時点で 300名を超えていることが紹介されました。SPring-8 は産業界にとっても重要なツールであり、研究会だけでなく産業界からも要望があること、この WS は施設とユーザーとの対話の機会であり、発案や気づきの機会になれば良いとの希望が述べられました。

続いて、雨宮高輝度光科学研究センター (JASRI) 理事長より挨拶が行われました。議論は SPring-8 シ

ンポジウム 2017 から始まっていること、議論は持続的・継続的に詰める必要があること、施設側の動向をにらんだ要望とユーザーの要望のすり合わせが必要なこと、走りながら考えるプロセスが重要との話がありました。放射光分野は学際的で、いろいろな分野があり、多様性があること、それに追従しながら高度化する必要があること、施設全体 (global) と個々の BL (local) の最適化があること、時間軸で見ても short term、medium term、long term の検討事項があることとの話がありました。最後に、本当は対面で official に personal に話したいが、コロナ禍でそれができない。しかし、ぜひ活発な議論をして欲しいとの WS への要望が述べられました。

次に、石川理化学研究所 (理研) 放射光科学研究センター長より SPring-8 のアップグレードに向けて検討中であるが、BL のアップグレードは蓄積リングのアップグレードと同時ではなく、その前後に少しずつやっていく考えであるとのアップグレードの基本的な考え方が示されました。新しい光がどのようなものになるか定かでない中、アップグレードを行わなければならない。コヒーレント、小さいビーム、高エネルギーを念頭に置き、今できるアップグレードを考えれば良いとの話がありました。また、海外と比べると、SPring-8 がカバーできていないことがあるが、それを



写真1 SPRUC 木村昭夫会長

カバーするのが良いか、すべてのカバーが必要かどうかも議論の必要があるとの指摘がありました。加えて、日本の特性をどのように出していくかも考える必要があるとのことでした。最後に、以上のようなことを頭において、個々の計画を作って欲しいとの希望を述べられました。

概要の最初の講演として理研/JASRI 矢橋牧名グループディレクター（写真2）より、近況サマリーの報告がありました。コロナ禍でもコンスタントに成果は出ていること、SPring-8は、かつては放射光の専門家がユーザーだったが、非専門家にとって複数の解析手法のうちの一つになってきているとの施設側の認識を示しました。その中で、高品質なデータに加え、簡便、迅速、計画性が求められるが、システムが対応できていないとのことでした。

BL再編・高度化、加速器更新に先行してBLのアップグレードを実施し、利用者ニーズを取りいれたいとの話がありました。BLを自動化により幅広い成果が期待されるプロダクションBLと特化型、戦略的な活用および新技術開発を目的としたスペシフィックBLに分類して装置、機能の集約とサポート体制の強化を行っていくとのことでした。

DX化の推進状況についても説明があり、自動化、リモート化はビームに触るところは進んでいるが、実験ハッチ以外の例えば試料調整などでは遅れているとのことでした。その他、次世代検出器CITIUSの紹介、SACLA/SPring-8基盤開発プログラムの紹介、今後の利用の概略など、このWSで紹介される項目の詳細が示されました。

SPring-8-IIにつなげていく話題として、SACLA入射の現状と、SPring-8-IIのラティスに関する話があ

り、ESRFのアップグレードを凌ぐ90 pm·radを目指すとのことでした。まとめとして、ロールモデルがないため、利用者と施設の対話、議論が必須であり、ユーザーの活発な議論、ユーザーからのインプットを期待したいとのことでした。

次に、BL再編についてJASRI 坂田修身副センター長（写真3）より講演がありました。BL再編、改修についてSPring-8シンポジウムおよびWSでこれまで議論され、施設で進められてきたことが報告されました。共用ID BLの有効活用として、HAXPESをBL09XUに集約、核共鳴散乱をBL09XUからBL35XUへの移動など現在進行中の状況について説明がありました。

続けて、2022年度からの再編に向けて、他の分野でも、ビームラインの整理、装置の集約、自動化とリモート化をポイントとして考えているとの報告がありました。このことについては、施設内のワーキンググループで2020年度に活発議論が行われたとのことでした。具体的な内容として、一部の共用回折・散乱BLの再編および装置の再編・導入案の概要を3月6日の本WSで紹介するとの報告がありました。分光のBLについてもBLポートフォリオを意識して再編計画を議論しており、現状の紹介があるとのことでした。

今回のWSで施設から報告のない小角散乱について、共用ID-SAXSへの要望があることを施設側が認識していること、高エネルギーUSAXSやXPCSに対応する必要性を感じているとの報告がありました。最後に、SPRUCから再編に向けて要望を挙げてほしいこと、連休前には研究会からのフィードバックをお願いしたい旨を述べて発表を終えられました。

次に利用制度について、JASRI 後藤俊治部門長（写



写真2 理研/JASRI
矢橋牧名グループディレクター



写真3 JASRI 坂田修身副センター長



写真4 JASRI 後藤俊治部門長

真4)より報告がありました。理研とJASRIで利用制度改正検討部会を立ち上げ議論を開始しているとのことでした。2019年2月の中間評価では、入口課金を含む利用制度の改正を検討し、利用者がわかりやすいように再整理、利用形態に合わせた利用制度が求められたとの報告がありました。共用BLから議論を開始し、課金ルールの変更は行わず、成果公開、成果公開優先利用、成果専有、成果専有時期指定の区分は変更せずに現行の共用BLの利用課題の整理を進めているとのことでした。

新制度では、年単位・複数BL利用制度を成果専有や成果公開優先利用にて導入すること、SACLA基盤開発プログラムをSPRING-8利用に拡張すること、年6回程度の課題募集を学術分野にも拡張すること、学術分野の成果専有利用でのテストユースの導入、大学院生支援プログラムの拡張を計画しているとのことでした。これらの新しい制度は、できるものから2022年度から始めていきたいとのことでした。

この報告については、産業界から産業では4~7月に試作して8月頃使いたいという要望がある。検討されているか?との質問がありました。夏の点検、保守、改修があるので調整が必要とのことでした。

3. BL再編とアップグレードの進捗状況

次のセッションでは、現在進められているBL再編とアップグレードの進捗状況について施設側からの報告と、ユーザーからの講演がありました。最初に、“HAXPESの進捗と今後”と題してJASRI保井晃氏(写真5)より講演がありました。発表内容はBL09XU高度化計画現状報告とBL46XU高度化計画案から構成されていました。BL09XUについて、現BL09XU、現BL47XUの装置をタンデムに配置して常設化する

ことで性能の安定化と簡便な調整を実現し、実質的なビームタイムが増加するとの報告がありました。統合BLのスペックと現BL09XUおよび現BL47XUとの比較が述べられ、統合BLのターゲットとして強相関系物質だけでなく鉄鋼材料や触媒開発などの研究に発展させたいとのことでした。高度化されたBLは2021Bから共用利用開始とのことでした。BL46XUの高度化については、新BL09XUでできないことをやるため、光学ハッチ設計中とのことでした。最後に「改造は順調に進んでいます」と講演をまとめられました。

次に、“NRS/IXSの進捗”と題してJASRI依田芳卓氏(写真6)より講演がありました。最初に、BL35XUにおける核共鳴散乱(NRS)/非弾性散乱(IXS)の進捗状況と立ち上げ計画の内容が示されました。IXSに大きな変化はないため、NRSについて報告するとの話があり、核共鳴散乱には様々な手法があり、線幅が短いのが特徴で多くの分野をカバーしていることについて説明がありました。ビームタイムは1課題に5~6日の日数になっており、光が強すぎることはないとのことでした。最後に、これまでの経緯と予定について非常にスピーディーにアップグレードできている。2020年4月にコロナ禍、緊急事態宣言でどうなるかと思ったが、今は、改造の真っ最中であるとまとめられました。

次に、“High-energy test bench (05XU)の進捗”と題して理研林雄二郎チームリーダー(写真7)より講演がありました。最初に、SPRING-8-IIの目玉の一つである高エネルギーにおける国際競争力の強化のため行われている試みであるとの説明がありました。

BL05XUのこれまでの利用について簡単なレビューが行われたのちに最近の進捗の紹介がありました。



写真5 JASRI 保井晃氏



写真6 JASRI 依田芳卓氏



写真7 理研 林雄二郎チームリーダー

ハッチ 1 では、多層膜分光器など新たな X 線光学系試験開発が行われ、ハッチ 2 では大強度セクションテストとベンチがおかれているとの説明がありました。光源性能は、多層膜分光器で 100 keV の場合、フラックス 1.3×10^{13} photon/s が得られており、スペクトルは理論計算とほとんど一致しているとのことでした。テストユースとして学術、産業からいくつかの事例が紹介されました。まとめとして、明るい 100 keV を実現し、テストユース実験を開始したとのことでした。なぜ 100 keV か? という質問があり、高エネルギーであるほど産業利用にとってよい。わかりやすく 100 keV としているとのことでした。

次のセッションでは、施設の再編中 BL とかかわる SPRUC 研究会からのコメントがありました。HAXPES の進捗に関するコメントが大阪大学 関山明教授より述べられました。最初に統合後の HAXPES ステーションの概要を述べられたのち、装置は、固体分光、機能磁性材料分光、光・磁性新素材産学連携研究会から、2019 年 10 月 31 日に提出した要望内容とコンシステントであるとの報告がありました。

今後検討を深めていただきたいこととして、液体 He の再利用回収などを通じた安定的な供給のための設備整備、Momentum Microscope など先端的装置の導入に向けて R&D のプログラムを考えてほしいとのことでした。最後に、リモートや DX への対応と大学院生教育について私見を述べられました。

NRS/IXS の進捗に関する核共鳴散乱研究会の検討状況のコメントが兵庫県立大学 小林寿夫教授より報告されました。研究会から見た、これまでの経緯について説明があり、SPRUC を通して研究会として要望書を提出したことが報告されました。次に 2020 年 8 月の研究会で話し合われた事項として、課題選定に関する議論が多いことが説明されました。最後に、2021A 期のコミッションングに研究会もできる限り協力する所存であること、また、核共鳴と非弾性 X 線散乱は相補性があるので、再編を契機に互いの手法を相補的に用いることでコミュニティ間の関係性を深めるなどして、ぜひ良い方向に研究を推進してほしいとまとめられました。

初日の最後にサマリーが木村昭夫 SPRUC 会長により行われました。HAXPES、NRS、IXS のアップグレ

ードは作業が開始したからと言って終わりではないと始められ、初日の個別の講演を要約されました。最後に、もう一度、BL 再編、アップグレードは、作業が始まったから終わりではなく、ここまで要望を出して進めていた HAXPES などが例となるとまとめられました。

4. 散乱・回折を中心とした BL 再編とアップグレードについて

3 月 6 日は、表題のように散乱・回折を中心とした BL 再編とアップグレードに関する議論が行われました。最初に坂田副センター長より“BL 再編で目指すもの”と題して講演が行われました。一部の共用回折・散乱 BL の 2022 年度からの BL 再編について説明がありました。既存かつ潜在的なユーザーの要望、社会要望を強く意識しつつ SPring-8 内で議論を進め、BL や装置にブレイクダウンする段階とのことでした。キーワードの一つは“オペランド構造解析”であり、リモート化・自動化とともに拡充していくとのことでした。新規装置導入について、発展的構築というキーワードから新 BL13XU にプロセス観察オペランド、高分解能 X 線粉末構造解析装置、in-situ 多軸回折計、マイクロ X 線回折装置などを設置することを計画しているとの話がありました。最終的にアクティビティの継続については十分に考慮した提案であるとの話があり、完璧な提案をしたつもりではなく、不十分な点もあると思うので、疑問や不安がある方は、BL 計画メンバーに入っていただき、より良い案にしたいとの要望が述べられました。2022 年度からの BL 再編に向けてぜひ要望を出していただきたい。関連研究会の代表者に、連休前には研究会からのフィードバックを出すよう要望がありました。

次に、“BL 再編の技術的な点について”と題して JASRI 杉本邦久氏 (写真 8) より講演がありました。最初に、その場の構造評価だけでなく、素材、合成、材料、生産プロセスにも貢献するという再編のコンセプトの説明がありました。現在、学術と産業の両方で別の BL がサポートする粉末結晶構造解析分野を、分けて相互連携協力により成果の最大化を目指すとのことでした。新設装置計画として高分解能粉末 PDF 構造解析装置が紹介されました。2 次元 CdTe 多連装

検出器を備えた70 KeVまでの高エネルギーに対応する装置であるとのことでした。この新装置の設置に伴い、BL02B2は自動in-situ粉末結晶構造解析、BL19B2は全自動粉末回折装置、BL04B2は自動PDF解析装置へと高性能化されるとのことでした。次に、多軸回折計の集約・再編についての報告がありました。

BL02B1、BL13XU、BL19B2、BL46XUに設置されている多軸回折計の幾つかを集約してin-situ+プロセス観察、オペランド回折計(ヘキサポッドとロボットアーム)に変更し、利用の効率化を図るとのことでした。自動単結晶構造解析装置については、最初にBL02B1とBL40XUの単結晶回折測定の特徴が示され、自動単結晶構造解析装置の構成が示されました。水平ゴニオを使用し、偏芯の μ オーダー以下の実現を目指すこと、検出器として、EIGER、PILATUS、将来的にはCITIUSを想定しているとのことでした。同様に μ オーダーの結晶の単結晶を進めているタンパク質BLの担当者からの質問や、CdTe検出器への意見など複数の質問があり、活発な議論が交わされました。

施設からの2件の講演を受けて、SPRUCからと題して、2件の講演がありました。最初に、研究会での検討状況1として構造物性研究会代表の東京工業大学



写真8 JASRI 杉本邦久氏



写真9 JASRI 為則雄祐室長

東正樹教授より講演がありました。研究会のアクティビティとして、ご自身の研究である負熱膨張材料の研究、メンバーの研究として水分解触媒のXANESと粉末回折の融合研究、単結晶X線回折による価電子の可視化の研究の報告がありました。最後に、新しく設置される高分解能粉末PDF構造解析装置について Q_{\max} 40 \AA^{-1} が達成されるので楽しみにしている、とのコメントが述べられました。

研究会での検討状況2として(株)コベルコ科研北原周氏より講演がありました。コベルコ科研の紹介の後、実験室と放射光で進められている計測研究についての報告がありました。サンビームBL16を使用しており、そこでは主に神戸製鋼の材料開発支援、他のSPRING-8ビームラインでは、受託分析サービス(多くは測定代行)を行っているとの報告がありました。放射光利用の課題と要望として、課題申請時期は年6回を希望していること。1シフト(8時間)は必要ない場合もあることなどが述べられました。また、同じような設備が複数あるため、どこで実験すればよいかをユーザーに適切に示してほしいとの要望がありました。最後に、当社の放射光利用の方針としては、将来のため先端分析を長期的視野で習得、活用したいと講演をまとめられました。

次に“分光を中心としたBL再編とアップグレードについて”として“BL再編で目指すもの”と題してJASRI 為則雄祐室長(写真9)より講演がありました。BLごとの逐次開発整備から脱却し、BLポートフォリオに基づいて全体を俯瞰したBL運営をしていくとのことでした。分光分野をイメージング、分光イメージング、HAXPES、XAFSの4つのグループに分類し、個々のBLではなく、BL間の重なる部分を重視して、最適な装置を最適なBLに配置していくとのことでした。

HAXPESとXAFSについては、ハイプロダクティブ装置と先端装置への再編を計画しているとのことでした。再編後は学術と産業の区別をしないとのことでした。2019年度の採択数を調査し、先端計測と汎用計測を両立して、ハイスループットと自動計測により多くの課題を実施し成果創出につなげたいと報告がありました。主にHAXPESとXAFSについて個別BL再編計画の詳細が述べられ、HAXPESビームラ

インとして BL46XU の応用 HAXPES を検討中であること、XAFS ビームラインでは時分割を強化していきたいとまとめられました。

5. 総合討論

昼食休憩をはさみ、午後から SPRUC 木村昭夫会長をモデレータとして、総合討論が行われました。最初に、SPRUC 田中義人利用委員長 (写真 10) より情報提供がありました。回折・散乱・小角散乱 BL の再編について、研究会がどのくらい関心があるか、反応はどのような感じか事前に調査した結果が示されました。関連ユーザーは会員の 1/3 に及ぶため 12 研究会に意見を求めたところ 6 研究会 9 件 (コヒーレント構造科学、固液界面、不規則系機能性材料、結晶化学、X 線トポグラフィ、構造物性) の回答があったとのことでした。5 つの研究会で ID が必須、有効であり高精度データや精密構造情報などを期待しているとのことでした。

続いて、BL 再編とアップグレードに関連の深い研究者の方々からの発言がありました。京都大学 小野寺陽平助教より PDF 分野での再編後の BL への期待についてのコメントがありました。非晶質分野での ID BL への期待として、X 線異常散乱を利用した特定元素周辺の構造の選択的測定があるとのことでした。

次に住友電気工業 (株) の徳田一弥氏 (写真 11) から、産業側での期待について報告がありました。会社の概要や SAGA-LS に専用 BL を有していること、SPRING-8 のサンビーム ID を利用していることなどが紹介されました。共用 BL に期待することとして、その場測定の装置の持込は難しいため、加熱などシンプルなものには施設で整備して欲しいこと、その場ステージを共通化して相互利用できるようにしてほしいこ

となどが示されました。また、夏期の極端に長い停止期間は空白となるので、再検討に期待しているとの要望を述べられました。この要望については、施設側の後藤部門長より、保守点検などを行わなければならないので、8~9 月すべてを運転することはできない。その中でどの程度なら妥協できるかを議論して可能性を検討したい。また、今年度から SACLA より入射している。SACLA のスケジュールとも連動を考慮する必要があるとのコメントがありました。

次に、その場観察研究の現状とアップグレードへの要望について、筆者 (写真 12) がコメントを述べました。超臨界ナノ材料合成とボールミル粉碎のその場観察実験の筆者のグループにおける現状を示し、アップグレードへ若手研究者が参加できる機会を増やしてほしいとの要望を述べました。

東京理科大学 北村尚斗講師よりエネルギー・環境デバイス、蓄電池などを対象とし、産学連携している立場からのコメントがありました。産学連携では企業と大学の間の方針にギャップがあること、企業は、製品開発 (プロセス開発) につながらなければならないことなどが紹介されました。再編後の同時測定による効率化、合成プロセスと作動時の測定ができるようになることに期待するとのことでした。新 BL13XU での PDF 測定への期待として、微小領域の測定があるとのことでした。

京都大学 竹中幹人教授より小角散乱およびフロンティアソフトマター開発専用ビームライン (FSBL) を通じた産学連携の観点からのコメントがありました。FSBL の紹介があったのち、企業間がライバル関係の場合もあり、共通基盤を作るのが難しいことが紹介されました。これまでの産学連携における課題として、他社と差別化された研究開発体制ができていないこ



写真 10 SPRUC 田中義人利用委員長



写真 11 住友電気工業 徳田一弥氏



写真 12 筑波大学 西堀英治

と、学術側で量子ビームを使う研究が継続できていないことなどが示されました。また、分野としては、すぐに結果を見たいので、年6回課題申請は良いとのことでした。

最後に薄膜ナノ構造研究会を代表して産業技術総合研究所の白澤徹郎氏よりコメントがありました。BL再編には慎重な意見が多く、大型真空装置がなくなるとを心配する声も聞かれたが、改廃自体には研究会全体としてポジティブであるとのことでした。再編案では真空装置を置くことができ、研究会の要望に対応いただいたと理解しているとのことでした。SPRING-8にはユーザーが自由に装置を持ち込めるハッチがほとんどないが、今後フリーポートも用意されるようであるため今後に期待しているとのことでした。最後に、研究会として、新しいサイエンスに向けて装置開発には協力できるとコメントされました。

木村会長より今回の再編に入っていない高圧分野からのコメントの提案があり、愛媛大学の河野義生准教授より、高圧物質科学と地球惑星科学研究会を代表してコメントがありました。今回はIDの話であるが、実はIDでもフラックスが足りないことがあるとの紹介がありました。数十 keV の中エネルギー領域のピンクビームに期待しているとのコメントがありました。

最後に討論のまとめとして、SPRUC 木村昭夫会長より、今回の提案は施設側が、ユーザーの考えを想定して練られたものであり、今後、検討していくうちに出てくるアイデア、提案があると予想されるとの意見が述べられ、2022年度再編に向けて各研究会において十分検討して、フィードバックをかけるようお願いしたいとの依頼が出されWSが終了しました。

ユーザー全体の1/3が関連する回折・散乱に関するBL再編がテーマだったため、学術・産業両者の幅広い分野からの意見が装置・手法から利用制度に至るまで交わされる有意義なWSでした。今回のWSでの情報をもとに研究会から5月までに多くの意見・要望が挙がってくることを期待されます。

SPRUC 第3回BLsアップグレード検討ワークショップ
報告 プログラム

3月5日(金)	
13:00-13:15	開会式(主催者等挨拶)
13:15-13:20	会長からのメッセージ(SPRUC 会長 木村昭夫)
<概要>(座長 SPRUC 利用委員長 田中義人)	
13:20-14:30	近況サマリー(理研/JASRI 矢橋牧名) BL再編について(JASRI 坂田修身) 利用制度について(JASRI 後藤俊治)
14:30-14:50	休憩
<BL再編とアップグレードの進捗状況> (座長 SPRUC 幹事 松村大樹)	
14:50-16:05	HAXPESの進捗と今後(09XU/46XU) (JASRI 保井晃) NRS/IXSの進捗(JASRI 依田芳卓) High-energy test bench(05XU)の進捗 (理研 林雄二郎)
16:05-16:20	休憩
<SPRUCから>(座長 SPRUC 幹事 松村大樹)	
16:20-16:50	HAXPESの進捗に関するコメント (大阪大学 関山明) NRS/IXSの進捗に関するコメント (兵庫県立大学 小林寿夫)
16:50-17:00	初日のサマリー(SPRUC 会長 木村昭夫)

3月6日(土)	
<散乱・回折を中心としたBL再編とアップグレードについて> (座長 SPRUC 幹事 大和田謙二)	
10:00-11:25	BL再編で目指すもの(JASRI 坂田修身) BL再編の技術的な点について(JASRI 杉本邦久) <SPRUCから> 研究会での検討状況1(東京工業大学 東正樹) 研究会での検討状況2((株)コベルコ科研 北原周)
<分光を中心としたBL再編とアップグレードについて> (座長 SPRUC 幹事 藤原秀紀)	
11:25-12:00	BL再編で目指すもの(JASRI 為別雄祐)
12:00-13:00	昼食休憩
13:00-14:30	総合討論(司会 SPRUC 会長 木村昭夫)
14:30-14:40	まとめと研究会への依頼(SPRUC 会長 木村昭夫)
14:40-14:50	休憩
14:50-15:50	SPRUC 特別総会

西堀 英治 NISHIBORI Eiji

筑波大学 数理物質系 エネルギー物質科学研究センター
〒305-8571 茨城県つくば市天王台 1-1-1
TEL : 029-853-6118
e-mail : nishibori.eiji.ga@u.tsukuba.ac.jp

SACLA Users' Meeting 2021

公益財団法人高輝度光科学研究センター
XFEL 利用研究推進室 大和田 成起

1. はじめに

2021年3月9日から11日にかけて、SACLA Users' Meeting 2021 が開催された。例年は100名規模の参加者で現地開催されていたが、今回はCOVID-19の影響により、「Zoom」を利用したオンラインでの開催となった。日本時間に合わせた開催ではあったが、オンライン開催で参加が容易になったためか、海外からの事前登録者数は前回までを大幅に上回り、最終的には100名近くにも及んだ。当日は、最新のSACLAの性能に関する情報共有や、XFEL利用研究のあり方について、施設とユーザーコミュニティおよびユーザー同士で議論が行われた。

2. 会議の内容

第1日目の午前中には「放射光ユーザーのためのSACLA利活用に関するワークショップ」と題するサテライトミーティングが日本語で開催された。本サテライトミーティングは、XFEL利用の拡大を目的として、主に放射光ユーザーを対象として行われた。SACLAの基本的な性能やビームライン・実験装置の技術情報について施設側より発表があった後、放射光とXFELの相補的な利用研究事例について、実際にSACLAとSPring-8の両施設を利用しているユーザーの講演が行われた。講演者と講演タイトルは下記のとおりである。

- ・物質科学におけるXFELと放射光の相補的利用の可能性（西堀英治教授、筑波大学）
- ・構造生物学におけるXFELと放射光の相補的利用（當舎武彦博士、理化学研究所）
- ・XFELと放射光の産業利用（米村光治博士、日本製鉄株式会社）

いずれもSPring-8およびSACLAの両施設を利用しているユーザーならではの講演であり、続く質疑応答でも活発な議論が行われた。

午後からはSACLA Users' Meetingのオープニングセッションとして、米田仁紀SACLAユーザー協同体会長（電気通信大学教授）、石川哲也理化学研究所放射光科学研究センター長より開会の挨拶が行われた。その後、全体セッションとして、施設の現状報告（4件）が行われた。今回の施設報告では、加速器・ビームラインの整備・高度化に関する報告だけでなく、COVID-19の影響により進められているリモート実験対応や、実験データの取り扱いに関する発表が行われた。

第2日目はブレイクアウトセッションが行われ、午前中はA1：フェムト秒同期レーザー、A2：ハイパワーレーザー、A3：検出器の3つのセッション、午後はB1：硬X線ビームライン、B2：軟X線ビームライン、B3：利用支援と情報共有のあり方についての3つのセッションが開催された。それぞれのテーマに基づいて利用研究の今後の方向性や、施設の共用実験装置・実験環境などの運用や開発に関する要望などについて議論が行われた。以下に、各セッションの内容を簡潔にまとめる。

A1：フェムト秒同期レーザー

本セッションでは、ポンプ・プローブ実験用にEH2、EH4c、EH4aで提供されているフェムト秒同期レーザーの現状に関する情報共有と高度化に向けた要望が議論された。これまでに高精度の同期システムを導入するなど、施設側による高度化がかなり進んだこともあり、THz光源や超短パルス光源の開発を除いては、新規の研究開発よりは実験のサポートや安定した運用に関する議論が行われた。

A2：ハイパワーレーザー

本セッションではEH5、EH6で提供されているナノ秒・フェムト秒の大出力レーザー用の実験基盤開発について議論された。今後の基盤開発の重要項目や方

向性などについて、既存のユーザーだけでなく、将来の利用を検討している参加者からも意見が出された。最後には、SACLA の装置を見学するためのバーチャルツアーが開催された。

A3：検出器

本セッションでは、まず SACLA で利用可能な検出器の現状と、開発中の CITIUS 検出器についての報告が施設側より行われた。続いて、各研究分野を代表するユーザーより、実験における検出器の利用法や新しい検出器への要望などに関する発表が行われた。本ブレイクアウトセッションで行われた議論も踏まえて、2022 年以降に SACLA への配備が予定されている CITIUS 検出器の整備計画などが検討されることとなった。

B1：硬 X 線ビームライン

SALCA の運転パラメータの現状報告と高度化計画案について施設側より発表があった後、各研究を代表するユーザーから、短期的および中長期的な SACLA 高度化に関する要望が発表され、それらに関する議論が行われた。

B2：軟 X 線ビームライン

施設の現状や SACLA 基盤開発プログラムで進められている共用実験装置に関する議論のほか、高調波の利用など施設の高度化に関する議論も行われた。また、利用可能な光子エネルギー領域が似ている UVSOR とのコラボレーションや、FLASH (ドイツ) や FERMI (イタリア) と SACLA BL1 の相違・差別化も話題となった。

B3：利用支援と情報共有のあり方

本セッションでは、SACLA で高度な研究成果を創出するための、情報提供や実験サポートなどの利用支援の向上をテーマとした。趣旨説明のあと、各研究分野における意見・要望をユーザーが発表し、その後、施設からの回答と議論を行った。寄せられた意見・要望は、「すぐに着手できるもの」「リソース(人・予算)があれば着手できるもの」「その研究分野のコミュニティの協力が必要なもの」「分野横断的なコミュニテ

ィの協力が必要なもの」「制度・仕組み等の変更が必要なもの」の 5 つのカテゴリに分類され、議論が行われた。

第 2 日目の最後にはバーチャル会議ツール「Remo」を利用した「Meet the Beamline Scientists」と題するセッションが行われた。今回はオンラインでの開催となったため、これまで休憩時間などに個々に行われていたフリーディスカッションのための場として、本セッションは設けられた。複数のテーブルが用意されたバーチャル会場が設けられ、それぞれのテーブルには SACLA のビームライン担当者が待機している、という形式であった。いくつかのテーブルでは、個別の議論が行われていたが、残念ながら全体を通して盛況とは言い難い状態であった。次回以降もオンラインでの開催となる場合には、改善が必要と思われた。

第 3 日目には、2020 年度の SACLA 基盤開発プログラムの報告が行われた。SACLA 基盤開発プログラムとは、SACLA のユニークな研究成果の創出のため、実験基盤開発テーマを募集し、施設と共同で開発を進めるプログラムである。今回は 9 件の課題の研究代表者から進捗が報告された。また Scientific Talks として、4 件の講演が行われた。講演者と発表タイトルは下記のとおりである。

- Beyond the Molecular Movies (岩田想教授、京都大学)
- X-ray Diffraction in High Magnetic Fields -Applications to Magnetic Field Induced Phase Transitions- (野尻浩之教授、東北大学)
- Molecular Structural Dynamics Probed by Femtosecond X-ray Liquidography (Prof. Hyotcherl Ihee, KAIST)
- Astrophysics in the Laboratory: Death and Birth of Stars (Prof. Michel Koenig, LULI-CNRS)

その後、それぞれのブレイクアウトセッションを総括するサマリーセッションが開催され、全参加者で情報を共有するとともに、分野横断的な議論が活発に交わされた。最後に米田仁会長の挨拶をもって、本会議は閉会となった。

3. まとめ

SACLA Users' Meeting は、一般的な学術発表のための会議ではなく、ユーザーと施設およびユーザー間の情報共有と意見交換を主な目的として開催されている。今回は初のオンラインでの開催となったが、各セッションにおける議論などを通じて、その目的は果たせたように思える。今後も、ユーザーからの要望に対する施設側の対応や、施設側からの情報を活かした利用研究の展開などに注目していただきたい。2021年度以降も、SACLA Users' Meeting は開催される予定となっている。次回については詳細が決まり次第、SACLA のホームページなどで情報が公開される予定である。

通算 6 回目、そして初のオンライン開催となる SACLA Users' Meeting を盛況のうちに終えることができたのも、国内外の多くのユーザーの方々に参加いただき、活発に議論していただいたことに尽きると思われる。本ミーティングに関わった皆様に厚く御礼を申し上げ、SACLA Users' Meeting 2021 の報告とさせていただきます。

大和田 成起 *OWADA Shigeki*

(公財) 高輝度光科学研究センター

XFEL 利用研究推進室

〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1

TEL : 0791-58-0992

e-mail : osigeki@spring8.or.jp

2021B 期 SPring-8 利用研究課題募集について

登録施設利用促進機関

公益財団法人高輝度光科学研究センター

2021B 期 SPring-8 利用研究課題の募集を開始しました。募集対象の課題種や申請の際の注意事項等の詳細につきましては、SPring-8 User Information HP 上の「現在募集中の SPring-8 利用研究課題」(<https://user.spring8.or.jp/?p=22799>) よりご確認ください。2021B 期に関しましても、新型コロナウイルス感染症によるビームタイムキャンセルの影響を軽減するための運用が適用されますので、必ず「2021B 期における利用研究課題及びビームタイムの運用について」(<https://user.spring8.or.jp/?p=37246>) もご確認ください。

■ 2021B SPring-8 利用研究課題募集要項

■ 2021B 生命科学／タンパク質結晶構造解析分野の課題の運用について

■ 2021B SPring-8 における“SACLA、J-PARC MLF または「京」／「富岳」を含む HPCI と連携した利用を行う課題”の募集について

■ 2021B 成果公開優先利用課題の募集について

応募締切：2021 年 5 月 25 日（火）午前 10:00 JST（提出完了時刻）

■ 2021B 長期利用課題の募集について

応募締切：2021 年 5 月 25 日（火）午前 10:00 JST（提出完了時刻）

■ 2021B 一般課題／一般課題（産業利用分野）の募集について

応募締切：2021 年 6 月 10 日（木）午前 10:00 JST（提出完了時刻）

■ 2021B 大学院生提案型課題の募集について

応募締切：2021 年 6 月 10 日（木）午前 10:00 JST（提出完了時刻）

<特記>

1. 緊急課題、成果専有時期指定課題、測定代行課題および産業利用準備課題（測定代行課題および産業利用準備課題は一部共用ビームラインのみ対象）は、随時募集しています。
2. 2021B 期より、CryoTEM の共用が開始されます。運用の詳細はこちら「クライオ電子顕微鏡の共用について」(<https://user.spring8.or.jp/?p=37402>) にてご確認ください。

初めて SPring-8 の利用をお考えの方は、申請の前に以下の Web サイトをご確認ください。

■ 初めて利用申請を考えている方へ

(<https://user.spring8.or.jp/?p=18832>)

申請にあたり、ご不明な点がございましたら下記までお問い合わせください。

[問い合わせ先] 〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1

公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用推進部 共用推進課

TEL : 0791-58-0961 FAX : 0791-58-0965

e-mail : sp8jasri@spring8.or.jp

2021B 期 SACLA 利用研究課題の募集について

登録施設利用促進機関

公益財団法人高輝度光科学研究センター

2021B 期 SACLA 利用研究課題の募集を開始しました。

■ 一般課題（成果非専有利用、成果専有利用とも）

応募締切：2021 年 5 月 25 日（火）午前 10:00 JST（提出完了時刻）

課題の申請や、申請の際の注意事項等の詳細につきましては、SACLA Web サイト (SACLA User Information) 上の、SACLA Guide > 利用制度／募集案内 > 現在募集中の利用研究課題等 (<http://sacla.xfel.jp/?p=10944>) よりご確認ください。

<重要なお知らせ>

○遠隔実験について

来所者数を最小限に抑えるため、所外からの遠隔実験システムの試験的な運用を開始します。

2021B 期は、以下の装置を利用する実験において遠隔実験システムを利用可能な場合があります。

対象となる課題は、実験条件等をもとに採択後に決定されます。

- ・使用ビームラインおよびハッチ：BL2 EH6、BL3 EH5
- ・使用実験装置：ハイパワーフェムト秒レーザー利用実験プラットフォーム、ハイパワーナノ秒レーザー利用実験プラットフォーム

なお、成果を公表しない成果専有利用のうち、定期的な募集の締切によらず応募・受付される時期指定課題の申請も随時受け付けています。申請された時期指定課題は順次迅速に審査されます（ビーム使用料は通常の成果専有利用の 5 割増しとなります）。

また、新型コロナウイルス感染症の関連研究を支援するための緊急課題の申請も随時受け付けています。

各々詳細につきましては、上記リンクよりご確認ください。

申請にあたり、ご不明な点がございましたら下記までお問い合わせください。

[問い合わせ先] 〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1

公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用推進部 共用推進課

TEL : 0791-58-0961 FAX : 0791-58-0965

e-mail : sacla.jasri@spring8.or.jp

2021B 期 SACLA 試験利用の募集について

登録施設利用促進機関

公益財団法人高輝度光科学研究センター

2021B 期 SACLA 試験利用の募集を開始しました。SACLA 試験利用は、今後の科学的価値の高い実験の実施を目指して、予め SACLA を試験的に利用していただくもので、2021A 期より開始しました。

応募締切：2021 年 5 月 25 日（火）午前 10:00 JST（提出完了時刻）

SACLA 試験利用の申請や、申請の際の注意事項等の詳細につきましては、SACLA Web サイト（SACLA User Information）上の、SACLA Guide > 利用制度／募集案内 > 現在募集中の利用研究課題等 (<http://sacra.xfel.jp/?p=10944>) よりご確認ください。

なお、SACLA 試験利用は、利用研究課題との併願も可能です。

申請にあたり、ご不明な点がございましたら下記までお問い合わせください。

[問い合わせ先] 〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用推進部 共用推進課
TEL : 0791-58-0961 FAX : 0791-58-0965
e-mail : sacra.jasri@spring8.or.jp

SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて

SPring-8 利用研究課題審査委員会 委員長
関西学院大学 工学部 藤原 明比古

1. はじめに

平成 31 年 (2019 年) 4 月～令和 3 年 (2021 年) 3 月の 2 年間、SPring-8 利用研究課題審査委員会の委員長を務め、2019B 期～2021A 期の課題審査を担当させていただきました。以下に、この 2 年間の審査を振り返り、概要と感想を簡単に述べます。

2. 本委員会での審査に関して

2-1. 本委員会の役割

本委員会は、SPring-8 選定委員会のもとに設置された 4 つの委員会 (専用施設審査委員会、パートナーユーザー審査委員会、本委員会、新分野開拓利用審査委員会) の 1 つで、一般利用研究課題および重点研究課題の課題審査を担っております¹⁾²⁾。近年では、800 以上の応募課題を審査し、600 程度の選定課題候補を決定してきております。応募課題数が多いことに加え、非常に多岐にわたるため、学識者によるレフェリー審査の結果が分科会で議論され、本委員会では選定課題候補が決定されるという 3 段階で審査が行われます。このような審査過程を経て決定された課題選定案を SPring-8 選定委員会に上程するのが本委員会の役割です。

2-2. 本委員会での課題審査

本委員会での審査過程は以下の通りです。申請課題は、主に科学技術的価値や成果への期待度の視点で、1 課題あたり原則 4 名のレフェリーによって審査されます。分科会は、生命科学分科会、散乱・回折分科会、XAFS・蛍光分析分科会、分光分科会、産業利用分科会、人文・社会科学分科会、長期利用分科会から構成されており、重点研究課題が募集されている場合には重点研究課題ごとの分科会もあわせて、レフェリー審査の結果をふまえ、それぞれの専門分野で総合的な審査を行います。本委員会は各分科会の主査および施設

側委員から構成されており、各分科会で議論された内容に関する情報を共有するとともに、ビームタイム配分案を決定します。

2-3. 本委員会での課題審査

本委員会では、当該期間のビームタイム配分案を決定するのが最も重要な任務ですが、その課題審査を通して、より良い課題を選定するために、研究動向や審査システムの課題についても議論します。

今期 2 年間の委員会では、申請課題内容の多様化と前期 2 年間の委員会からの提言を受け、以下の 2 点について特に議論を深めました。

1 点目は分科会の在り方と分科会間の連携についてです。各分科会では様々なビームラインに申請された課題を審査します。別の見方をすれば、1 つのビームラインの申請課題は様々な分科会で審査されます。このため、異なる分科会で審査された課題が、採否ライン上で審査されることも起こり得ます。この場合、複数の分科会にわたって審査を行う必要も出てくるため、審査過程がより複雑になる問題が顕在化してきました。これに関しては、分科会の在り方の見直しが始まり、今後、そのような問題が改善される方向に進んでいく予定です。

2 点目はレフェリー審査と分科会審査の間でのより緊密な情報伝達の工夫についてです。基礎研究と応用開発、堅実な内容とハイリスク・ハイリターンな内容、前述のように、採否ライン上にある異なる分野の課題など、1 軸上で比較できない課題も審査しなければなりません。その際、レフェリーの評価点はもちろんですが、その評価基準、根拠がわかるレフェリーからのコメントは非常に重要です。今期、レフェリーの皆様にコメントの充実をお願いしたところ、ほぼ全ての課題で、分科会での審査に有用な情報が得られるようになりました。

この様な議論をもとに、より良い申請が採択されるための施設整備（ハードウェア）と申請者へのサポート（ソフトウェア）についても議論が行われ、選定委員会に報告しました。今後のSPring-8利用研究課題審査委員会においても継続的に議論が行われ、より良い施設からより良い成果が創出されることに貢献することを期待します。

3. おわりに

SPring-8利用研究課題審査委員会は、透明性と公平性を担保し、SPring-8からの研究成果を最大化するための成熟したシステムが構築されていると感じます。数多くの課題を審査することは非常に大変な作業でしたが、このような基盤があることで、ビームタイム配分案を作成するにとどまらず、より良い課題を選定するためには何が必要かを議論することができることを、委員長を務めさせていただいた2年間で実感しました。

今期も分科会から様々な分析結果や提案が出され、改善可能なものは次の委員会で直ぐにフィードバックされ進化してきました。また、より大きなシステム改編が今後予定されています。成熟した基盤が、そこで硬直化することなく進化していくことが大切です。SPring-8では、ビームラインや利用制度の見直しが行われており、それに合わせた柔軟かつ迅速な委員会の対応への期待はより一層増していくものと考えられます。

最後に、レフェリー、分科会および本委員会の委員の皆様、JASRIスタッフの皆様のご尽力に敬意を表すとともに、心より感謝を申し上げます。

[1] SPring-8 選定委員会について：<https://user.spring8.or.jp/?p=16542>

[2] 放射光共用施設の利用研究課題選定に関する基本的考え方：<https://user.spring8.or.jp/?p=26047>

藤原 明比古 FUJIWARA Akihiko

関西学院大学 工学部

〒669-1337 兵庫県三田市学園2丁目1番地

TEL : 079-565-9752

e-mail : akihiko.fujiwara@kwansei.ac.jp

SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 1

—生命科学分科会—

SPring-8 利用研究課題審査委員会 生命科学分科会主査
大阪大学 大学院薬学研究科 井上 豪

1. はじめに

2019年4月から2021年3月までSPring-8利用研究課題審査委員会生命科学分科会主査を務めたが、生命科学分科会に関する課題審査は、3つの小分科(L1、L2、L3)に分かれ、それぞれ、L1:蛋白質結晶構造解析、L2:生物試料回折散乱、L3:バイオメディカルイメージング・医学研究一般に分かれて担当した。

以下の報告は、L1小分科は井上が担当し、L2小分科は藤澤哲郎先生(岐阜大学)、L3小分科は毛利聡先生(川崎医科大学)にまとめていただいた。

2. 生命科学分科I (L1:蛋白質結晶構造解析)

L1小分科の応募状況や動向そのものは以前と大きくは変化がなく、測定の迅速化と自動化により、短時間の利用が増加し、採択率も高い水準で維持された。ユーザーも中国からの新規利用が一段落し、ユーザーの固定化が見られるが、自動測定のさらなる進展で新しい利用者が期待出来る。

生体を構成し、その生命機能に深く関わっているタンパク質の構造と機能の関係について複数の解析手法を用いて解明する「相関構造解析」と呼ばれる構造生物学研究が広がりを見せているが、結晶化が困難な試料であっても構造生命科学研究を飛躍的に発展させつつある高性能クライオ電子顕微鏡(CryoTEM)による解析法が急速に発展し、これをさらに加速しつつある。

日本医療研究開発機構(AMED)の創薬等先端技術基盤プラットフォーム(BINDS)では、CryoTEMを全国に配備して、これらを効率的に活用することを促すための「BINDSクライオ電顕共用ネットワーク」が2018年から運用されている。SPring-8もCryoTEMの供用利用が検討され、BINDSの電顕共用ネットワークに加わって、次年度からはクライオ電顕のビームタイムに関する審査もL1小分科で行われ、蛋白質結晶

構造解析の分野で行われてきたPRCの審査制度と同様に数名のレフェリーによる評価を基に電顕利用のマシントイムが決まる予定である。

L1小分科での審査で問題になっていることとしては以下の5つがあげられる。

- i) PX-BLについては、2020A期採択課題は2021A期にも有効であったが、内容が重複する課題が59件中20件程度あった。申請から1年経過しており研究の進捗もあると想定され、そのまま審査を行っている。
- ii) 4名のレフェリーで評価が分かれる課題がかなり見られた。構造生物学と言っても、立場は様々で評価方法について意見が割れるのはやむを得ないが、極端なものについては分科会メンバーで補正を加えた。また、審査の考え方については、利用者情報誌で述べつつ、次のレフェリーにも一定の理解を求めたい。
- iii) 採択率が高いこともあり、申請書の内容が不十分なものが散見された。もちろんこれらは評価が低くなっているが、技術審査が適切に行えるような内容を求めたい。
- iv) CryoTEMを含む課題の審査の進め方について検討が必要である。特にCryoTEMはPX-BL利用者にとっても親和性が高く、放射光と連携した利用を促せるような配慮を分科会としても検討したいと考えている。同時に、「相関構造解析」をさらに普及させ、bioSAXSの連携利用など、他分科との連携も今後さらに検討していく必要があると思われる。
- v) 大学院生による課題申請については、申請を活発化させる目的で一定の配慮を行ったが、まだまだ件数も少なく、今後さらに改善を加え、促進していく必要があると思われる。

3. 生命科学分科Ⅱ (L2: 生物試料回折散乱)

L2 小分科の審査対象は、非結晶状態にある生体関連物質からの小角散乱・回折・反射に関する研究課題である。2019B 期から 2021A 期までの統計としては、申請課題総数が 55 課題、採択課題総数が 41 課題であり、2021A 期においてはコロナ禍の影響か申請・採択はほぼ例年の 6 割であった。

2019 年度以降、BL45XU での小角散乱の共同利用がなくなったため、使用するビームラインはほぼ BL40B2 と BL40XU の 2 つに集約された。近年は BL39XU など他のビームラインとの併用した申請は少なく審査自体は単純であった。

アンジュレータ光を要する実験は、必然的に BL40XU に申請が集中した。採択された課題は、X 線 1 分子追跡法による標的 1 分子の動態観察、筋肉の X 線繊維回折という従来の延長線上の申請が多かった。これらの申請は、非常に質も高く、新規の申請と審査で差がついてしまい新たな課題が参入する余裕が残念ながらなかった。現在のところは問題ないが、スタッフの代替わりの後のことが心配される。

一方、BL40B2 においては皮膚やドラッグデリバリーシステムなど広義の非晶質の試料による小角散乱が主で、他施設では主流となっているタンパク質溶液散乱の課題の割合が非常に少なかった。BL40B2 は、汎用の小角散乱ビームラインなので新規ユーザーを開拓するにはもう少し扱うサイエンスの特色を全面に出し、装置、スタッフを整備・補強していくのも 1 つの手ではないかと考える。

4. 生命科学分科Ⅲ (L3: バイオメディカルイメージング・医学研究一般)

L3 小分科では、X 線を利用した生体イメージングによる基礎的生物学研究から臨床応用を見据えた医学研究まで広範な領域の課題を審査する。計測の対象は化石から植物や昆虫、魚類から哺乳類、ヒト臨床検体まで多様である。2019B-2021A 期の申請課題総数は 86 件と例年 (2015B-2017A 期: 144 件、2017B-2019A 期: 112 件) と比べて少なかったが、これは 2020A 期には新型コロナウイルス感染症による実験中止があり、2020A 期後半にスライドさせ追加募集分と併せて実施したことが大きな理由である。各期の

申請件数は、2019B 期: 27 件、2020A 期: 40 件 (追加 9 件を含む)、2021A 期: 19 件であり、希望ビームラインは、多いものから BL20B2: 46 件、BL37XU: 12 件、BL28B2: 11 件、BL20XU: 9 件、BL47XU: 9 件、BL40XU: 5 件、BL40B2: 3 件、BL05XU: 1 件、BL27SU: 1 件、BL43IR: 1 件 (申請時ベース、重複あり) であった。大学院生提案型課題は 2017B-2019A 期に 9 課題であったが、今回は 4 課題に減少した。

この 2 年間の申請課題における実験手法としてはイメージング/CT が最多で、特に位相差 CT による生体の微細構造や機能を解析する課題が増加している。この傾向は近年続いているが、BL20B2 を希望する申請課題が全体の半数強を占めるに至った。軽元素で構成される生体組織をその密度により非破壊的に内部構造を可視化出来る位相差 CT は、心臓・脳・肺・腎臓・血管など臨床検体の評価によって病態解明や治療効果判定に応用する試みがなされている。また、病態モデルとして汎用される遺伝子改変マウスや薬剤による病態モデル動物の評価も位相差 CT を利用して新たな知見を求める課題も増加している。ホルマリンによる固定をせずに生体の機能評価を行うことが出来る位相差 CT は今後も様々な展開が期待される。また、新しい生体機能評価法としての X 線エラストグラフィの可能性を探索する試みもなされている。

主に BL37XU で行われる蛍光 X 線/XAFS 分析などによる微量元素・タンパク質の検出や動態解析に関する課題は 2017B-2019A 期から内容的に継続するものが多く、申請件数の比率もほぼ同じであった。1 分子イメージングや動物を用いたダイナミック・in vivo イメージングの課題も継続されているが、小分科内での比率は低下傾向にある。

新型コロナウイルス感染症の影響があったとは言え、申請件数は減少傾向にあると考えられる。その中で位相差 CT は分解能も向上し計測対象が広がって技術的蓄積もなされており、生命科学の分野で一般的ツールとなっている遺伝子改変マウス組織の構造・機能評価に応用することで新規利用者を開拓出来る可能性がある。新型コロナウイルス感染症の収束が見えない中で困難を伴うが、可能な範囲で今後の利用促進・普及活動が望まれる。

5. おわりに

様々な物理化学的手法で生命科学を理解したいという要求が高まる中で、それを自在に組み合わせで解析し、生命現象を科学的に解明する「相関構造解析」が潮流を迎えている。特に、CryoTEM は標的タンパク質を結晶化する必要がなく、粒子の画像を重ねる手法で比較的高分解能の構造を入手可能となり、さらに加速していると言える。SPring-8 はその相関構造解析を進めるための基盤技術が集積しており、常に世界最先端の技術を用いた解析が可能な重要な研究拠点であり、さらに発展していくためにも互いの分科が連携してユーザーに情報を提供していく必要がある。また、ユーザー同士もこの場を通じて連携し、大きなコミュニティの中での情報交換を密にすることで生命科学の研究がさらに加速されていくことを期待する。

課題審査にあたり、分科会委員、レフェリー、そして JASRI の関係者の方々には大変にお世話になりました。この場をお借りして心より御礼申し上げます。

井上 豪 *INOUE Tsuyoshi*

大阪大学 大学院薬学研究科
〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 1-6
TEL : 06-6879-8205
e-mail : t_inoue@phs.osaka-u.ac.jp

SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 2 — 散乱・回折分科会 —

SPring-8 利用研究課題審査委員会 散乱・回折分科会主査
一般財団法人総合科学研究機構 中性子科学センター
舟越 賢一

散乱・回折分科会では、放射光 X 線の散乱や回折を利用する研究課題の提案に対して、課題採択とビームタイムの配分を行っている。本分科会が扱う研究分野は多岐にわたり、課題数も多いことから D1 から D6 までの 6 つの小分科を設置し、それぞれの小分科の審査委員により審査を行っている。本報告では、D1：無機系結晶、有機・分子系結晶、D2：高圧物性、地球惑星科学、D3：材料イメージング（CT、トポグラフィ等）、D4：非弾性散乱（コンプトン散乱、核共鳴散乱、高分解能 X 線散乱）、D5：高分子（蛋白質を除く）、D6：非晶質（準結晶、アモルファス、液体等）、低次元系、表面界面構造、ナノ構造、機能性界面・薄膜材料等、ホログラフィーの各小分科を担当した審査委員に小分科概要を分筆していただいた。

D1 小分科では、無機系結晶 (D1a) と有機・分子系結晶 (D1b) を対象として、X 線回折を用いた構造解析に関わる課題を審査している。ビームライン (BL) としては単結晶構造解析 (BL02B1) および粉末結晶構造解析 (BL02B2) への申請課題と、硬 X 線を利用した構造解析の手法を利用する 10 を超える BL が対象となる。この 2 年間で、D1 小分科の申請が BL02B1 と BL02B2 以外の BL を選択する状況が後述する 2 つの要因で目に見えて増加した。1 つ目の要因は PDF 測定を目的とする申請が増えていることと関係している。SPring-8 で PDF 専用と銘打った BL がなかったためか、様々な BL が申請されている。第 1 希望で多いのは、BL04B2、BL08W、BL44B2 である。他にも BL02B2 を選択する申請も複数存在した。もう 1 つの要因は、微小単結晶の構造解析を目的とする申請の増加である。これらの申請はこれまでほとんど BL40XU が選択されていたが、蛋白質構造解析 BL (PXBL) を

選択する申請が増えてきている。こうした PDF と微小単結晶の申請の審査では、申請者が持っている情報が申請者によって異なっている印象を受けた。ほぼ同じ目的であっても第 1 希望の BL が申請者によって異なっていたためである。ユーザーの利用形態の広がりから、現在の分科の区分けと BL の区分けで、ユーザーが分科や BL を選択することが難しくなっている。分科の再編や BL の再編が必要な時期に来ていることが強く感じられた。

D2 小分科では、高圧物性と地球惑星科学に関する研究課題を審査している。申請課題の 8 割以上が高温高圧 (BL04B1) BL および高圧構造物性 (BL10XU) BL を利用する高圧実験で、この他に X 線回折 (BL02B1、BL02B2、BL04B2)、イメージング (BL20B2、BL20XU)、非弾性散乱 (BL35XU) の BL を利用する課題が申請されている。

BL04B1 では、大容量高圧プレスを使った地球科学分野の実験が主であり、高温高圧 X 線回折測定による状態方程式の決定や振動・変形実験の他、イメージング、超音波速度測定と組み合わせた複合測定などが行われている。一方、これまで申請が少なかった地球科学分野以外の課題では、新物質合成や圧縮特性の実験を中心に増加している傾向にある。高温高圧下の物質合成や物性測定は大容量高圧プレス実験の得意とするところであることから、今後も多様な分野にわたってニーズが広がっていくと思われる。

BL10XU では、ダイヤモンドアンビルセルを使った超高压実験を軸として、レーザー加熱を組み合わせた高温高圧実験、冷凍機を組み合わせた低温高圧実験の他、ラマン散乱やメスバウアー分光を組み合わせた様々な複合測定が行われている。海外からの申請数が

非常に多いのが特徴で（全体の 5 割以上）、中でも 2019A 期から本格参入してきた中国の北京高压科学研究中心 (HPSTAR) の申請数は全体の 3 割以上を占めており、競争が激しい状況にある。これに対して BL10XU では 2019B 期から制御系の自動化や測定の効率化を行うことで実施可能な課題数を増やす取り組みを始めている。1 実験に必要なビームタイムが減少したことによって採択課題数は増加し、40%台であった採択率は、2021A 期では 60%台にまで上昇した。

D2 小分科全体として、この 2 年間の申請数は横ばい傾向であったが、新規の課題や若手・大学院生の課題が非常に少ない状況が続いている。高圧を中心とした極端条件の実験は敷居が高く、初心者には手を出しにくいと言われるが、新規の独創的・挑戦的な課題や将来を担う若手・大学院生の課題を増やしていくためには、何らかのエンカレッジ・サポートを導入するなどの対策が必要と思われる。

D3 小分科では、X 線光学、材料科学、地球・宇宙科学、生物、法科学など広範の研究分野から課題申請があった。材料科学に関係する課題が最も多く、この 2 年間で研究分野の構成に大きな変化はなかった。申請課題の多くは、BL20B2、BL20XU、BL28B2、BL47XU での実施を想定した投影および結像イメージング、トモグラフィー、トポグラフィーなどである。おおむね単色 X 線による広視野観察は BL20B2、高空間分解能・高時間分解能観察は BL20XU および BL47XU、ピンクビーム・白色 X 線・高エネルギー X 線を必要とする観察は BL28B2 という棲み分けがなされている。BL20XU には成果専有課題、長期利用課題、成果公開優先利用課題があり、一般課題については比較的に低い採択率で推移した。特に 2021A 期では新型コロナウイルス感染症の影響で 2020A 期に実施できなかった課題が生じたためか、一般課題の採択率が低くなった。他の BL でも期によっては採択率が低くなることもあり、これらはイメージングに対するニーズの高さを反映していると考えられる。2021A 期以降、BL20B2 の高度化など BL の運用効率が向上し、採択率の改善が期待される。

課題内容では、静的観察から動的観察に主流が移りつつある。動的観察装置を X 線光学系に設置して時間

分解観察、*in-situ* 観察、operand 観察のデータを持ち帰る形態であり、今後もこの傾向が続くと考えられる。ただし、現状はユーザー側ニーズに対応した BL 担当者の実験環境の整備に負うところが大きく、小分科のタスクから外れるが共通装置の導入や解析の標準化などの施策が潜在的ニーズや新規ユーザーの掘り起こしにつながると思われた。

課題審査では、以前から指摘がある「実験室でも可能」や、「具体的な測定条件が不明」などの理由で評価を下げた課題があった。その中には SPring-8 で実施すべき課題もあったと思われる。専門外のレフェリーにも理解できる研究背景や具体的な実施内容に加えて観察条件など SPring-8 の必要性を定量的に記述した申請書が求められる。適切なフィードバックになるように可能な限り、評価を下げた理由などを通知するように心掛けた。

D4 小分科では、非弾性散乱に関する課題を審査している。関連する BL は、2020 年度以前の課題では、BL08W (コンプトン散乱)、BL09XU (核共鳴散乱)、BL35XU (高分解能非弾性 X 線散乱) などであったが、2021 年度からは、BL09XU における核共鳴散乱実験が BL35XU に統合される。従って、BL35XU では核共鳴散乱ユーザーと高分解能非弾性 X 線散乱が共存することとなる。採択率が著しく減少することが懸念されるが、理研 BL である BL19LXU、BL43LXU において、一定数の一般課題を受け入れることで対応する。BL19LXU、BL43LXU はどちらも強力な挿入光源を持つ BL であり、測定時間の短縮が期待できる。しかしながら、一般課題に割り振られるビームタイムは限られており、BL35XU について課題採択率が今後どのように推移するかを注視する必要がある。

近年の傾向として、BL08W においては、 > 100 keV の高エネルギー X 線を用いて、電池内の元素分布を調べるコンプトン散乱イメージングといった課題が高い評価を受けている。BL35XU においては、高分解能非弾性散乱で言えば熱電素子内の格子振動に関する課題、一方、核共鳴散乱では生体試料内の分子振動に関する課題が多く、また評価も高い。いずれも測定法の特徴をいかしたユニークな課題であり、今後さらなる発展が期待される。

D5 小分科では、高分子溶液構造、高分子固体構造、集合体構造（会合体、ミセルなど）の小角散乱と広角回折の同時測定が大部分を占めたが、表面・界面に関する実験、マイクロビームの実験、短波長 X 線を利用したアモルファス構造解析実験、異常小角 X 線散乱実験も数は多くなかったが提案された。全体としてみると、これまでと大きな変化はなかった。良く言えば、安定している分科と言えるが、チャレンジングな課題が少なく、一応の成果が期待できるものが多かった。これはユーザーが BL の使い方を習熟して成果が出る実験をこなすようになったためと思われるが、一方では、SPring-8 ならではの挑戦的なテーマが提案されることを期待したい。小角散乱 BL の利用としては、BL40B2、BL40XU がほとんどであった。D5 小分科は産業利用とも関連が深いが、産業界からの申請はほとんどなかった。これは、BL19B2 や BL03XU など産業利用 BL や専用 BL との棲み分けがうまく進んでいるためと思われる。

D6 小分科では、非周期系（液体、アモルファス等）と、不均一系（表面界面構造、薄膜、ナノ構造など）に関する課題を中心に審査している。これらに加え、蛍光 X 線ホログラフィー、表面界面ホログラフィー、光電子ホログラフィーを測定手法とする課題の審査もまとめて担当している。本小分科の課題で従来利用されてきた BL は BL04B2 および BL13XU であるが、蛍光 X 線ホログラフィーには BL37XU および BL39XU、光電子ホログラフィーには BL25SU が利用される他、非周期系の全散乱測定における BL08W や、小角散乱における BL40B2 など、利用される BL が分散する傾向が強まっており、小分科と利用 BL の対応が明瞭でなくなってきた。

蛍光 X 線ホログラフィーの課題は、平成 26 年度から平成 30 年度にわたって実施された科研費・新学術領域「3D 活性サイト科学」にともなって、急速に増加したものであるが、光電子ホログラフィーの課題とともに、科研費のプロジェクト終了後 3 年を経過した現在もなお活発な申請が継続している。また、ホログラフィー課題だけに着目した採択率は、それ以外の課題と比べてほぼ同程度の水準である。このように、蛍光 X 線ホログラフィーのユーザー層がほぼ独立の 1

小分科を形成していると言って良い程度に確立しつつある一方で、BL13XU においては、従来の課題である表面界面、薄膜回折の課題申請が減少し、かつユーザーが固定化している傾向が見られている。この背景として、本来はもっと多いはずの表面界面・薄膜の解析に対するニーズが産業利用課題に集中しているのではないかという指摘があった。また、BL04B2 においては、高度化による測定効率の向上などにより、期によって多少の増減はあるものの、概して競争率が低い状態が継続している。BL13XU や BL04B2 におけるこのような状況に対しては、多様な研究を呼び込む取り組みや、新規ユーザーの開拓が一層重要と思われる。

小分科での審査時に、2020A 期からレフェリーコメントが詳しく記入されるようになり、レフェリーの考え方や専門性などが良く分かり、小分科における審査の精度と効率を高める上で非常に役立ったというコメントがあった。丁寧な審査をしてくださっているレフェリーの方々のご努力に深く感謝いたします。

最後に、分筆いただいた、D1 小分科の西堀英治先生（筑波大学）、D3 小分科の安田秀幸先生（京都大学）、D4 小分科の平岡望先生（台湾国立放射光科学研究センター）、D5 小分科の金谷利治先生（高エネルギー加速器研究機構）、D6 小分科の高橋正光先生（量子科学技術研究開発機構）の各先生方に感謝いたします。また、分科会委員やレフェリーの皆様、JASRI の関係者の皆様には、この場を借りて深く感謝いたします。

舟越 賢一 FUNAKOSHI Ken-ichi

（一財）総合科学研究機構 中性子科学センター
〒319-1106 茨城県那珂郡東海村白方 162-1
TEL : 029-219-5300
e-mail : k_funakoshi@cross.or.jp

SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 3 —XAFS・蛍光分析分科会—

SPring-8 利用研究課題審査委員会 XAFS・蛍光分析分科会主査
株式会社日産アーク 解析プラットフォーム開発部 今井 英人

令和元年～令和 2 年度 (2019B～2021A 期) の XAFS・蛍光分析分科会主査を仰せつかり、この期間微力ながら雨澤浩史先生 (東北大学)、為則雄祐先生 (JASRI) と共に務めさせていただきました。2020 年度は、コロナ禍というこれまでにない状況でありましたが、施設側の切れ目ないビーム供給、柔軟な課題募集、キャンセル枠への繰り上げ採択などの対応により、数多くの課題が実施されましたこと、関係者の皆様に厚く御礼申し上げたいと思います。

本分科会では、XAFS・蛍光 X 線分析の手法を扱い、各期およそ 6 本のビームラインにまたがる課題の審査を行いました。課題申請に対するレフェリーの評価をもとに、選定課題の決定、ビームラインの決定、シフト配分、分科会としての評価点および申請者への審査コメントの作成を行っています。

XAFS・蛍光 X 線分析は、試料周りの制約が少ないことから非常に多くの分野で利用されています。触媒、金属、セラミックス、半導体、高分子材料など多様な材料を対象とし、基礎科学分野から、素材、エレクトロニクス、化学、エネルギー、医療、食品など多くの応用分野も含んでいます。また、新材料開発に伴う構造・状態の解析のような汎用的な利用から、特殊環境下やデバイス動作を模擬したオペランド計測、構造解析との複合計測、CT と分光を統合した計測、最先端計測領域に踏み込んだ課題など、多岐にわたっています。そのため審査にあたっては、レフェリーには評点のみならず、詳細な評価コメントを求め、評点のバラつきなどを見ながら慎重に検討を行いました。ボーダーライン付近では、分科会委員も課題申請書を細部まで読み込み、採否を決定しました。

採択課題の傾向としては、当初は、蓄電池・燃料電池・触媒といった応用系のテーマが多く申請／採択さ

れていましたが、大型プロジェクトの実施と共に、成果公開優先利用課題として採択されるようになりました。

これに伴い、分科会での審査対象としては、新材料、地球科学、生物、海洋科学など基礎科学分野や、セラミックス、エレクトロニクス、医療などの課題も増えてきました。このような傾向を踏まえ、分科会では、新分野、新規利用者の促進を促すように選定をさせていただきました。大学院生の課題についても、申請書の技術内容のレベルが年を追って上がっており、多くの課題が採択されるようになってきています。

このように新規利用者の増加を増やす試みの 1 つとして、不採択となった課題に対して、フィードバックを行う試みも開始されています。研究対象／手法が多岐にわたることから、専門家外のレフェリーに対しても、目的や意義、測定の内容・手順、実験後の解析、得られた成果の展開方法など、わかりやすく説明できれば、採択に繋がります。

一方で、利用希望が集中するビームライン／測定手法、あるいは、実験を実施するために多くのビームタイムを要するような提案については、科学・産業的な価値は認めつつも採択に至らない課題もありました。これについては、その状況を施設側とも共有し、実験枠の増加を要望させていただいています。

今後も多くの優れた提案課題が実施され、大きな成果が得られることを期待しています。

今井 英人 *IMAI Hideto*

(株) 日産アーク 解析プラットフォーム開発部
〒237-0061 神奈川県横須賀市夏島町 1 番地
TEL : 046-867-5172
e-mail : imai@nissan-arc.co.jp

SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 4 —分光分科会—

SPring-8 利用研究課題審査委員会 分光分科会主査
東京大学 物性研究所 松田 巖

2019-2020年度のSPring-8利用研究課題審査委員会(PCR)の分光分科会のS1小分科会の主査を務め、本施設における申請課題の審査に携わらせていただきました。伝統的な委員会ではございますが、今回は任期中に新型コロナウイルス感染症(COVID-19)が世界中に拡がり、我々の暮らしが一変させられる事態と重なりました。日本でも政府が緊急事態宣言を発令し、SPring-8を含めた研究機関や大学への来所および出張が制限され、多くのビームタイムがキャンセルあるいは延期されました。分科会の審査はオンラインで実施され、分科会では申請時と採択時で状況が変化することも想定して検討がなされ、申請課題の評価だけでなく、「キャンセル対応」、「追加募集」、「補欠課題」、「リモート実験」などビームタイムに対する様々なテーマについても議論が行われました。

さて、S1小分科会では光電子分光、光電子回折、発光分光、赤外分光などの申請課題について審査を実施しました。そして例年通り、審査はS1とS3小分科会と合同で行われました。これは磁気分光などを取り扱うS3小分科会の課題および実験責任者の分野が近く、ビームラインも共通することが多かったためです。そのため、分科会では多角的な意見を集約することができ、効率良く進めることができました。S1小分科会の委員は私の他に齋藤智彦先生(東京理科大学)と池本夕佳氏(JASRI)が務められ、S3小分科会では横山利彦先生(分子科学研究所)が主査で関山明先生(大阪大学)と鈴木基寛氏(JASRI)が委員をご担当されました。

SPring-8のビームタイムでは長期利用課題や重点課題等が優先的にシフト配分され、その残りが一般課題のシフト枠となります。本分科会ではこの限られた枠の中で配分できる課題を決定しました。各課題はレフェリーによる評価点とコメントが付けられており、点数の高いものから資料をもとに審査が進められました。また各ビームライン担当者による安全審査と技術審査も行われ、装置の状況に合わせて各課題の実験が確実かつ安全に

実施できるかも検討しました。レフェリーの評点の高い申請課題は研究内容の質が高く、採否は基本的に評点順で決定されました。課題によってはレフェリーの評点が分かれていることもありましたが、各課題に対してレフェリーが専門的なコメントを丁寧に記していただいたので、委員の間で適切な議論ができました。多くの優れた申請書を読ませていただいたのですが、シフト数が限られていたことから残念ながら多くの課題に対してビームタイムを配分することができませんでした。そこで分光分科会として、各課題の研究を少しでも支援したくレフェリーと委員のコメントをまとめて課題申請者へ通知させていただきました。また採択課題についても、分科会の議論の中で役立ちそうなものをビームライン担当者へ伝えました。課題審査委員会として申請された研究課題を節に掛けるだけでなく、専門家としてポジティブなフィードバックができるよう頑張らせていただきました。

このたび、SPring-8の課題審査という重要な役目を担わせていただきました。コロナ禍において難しい局面もございましたが、無事終えることができたのは多大なご協力をいただいた分科会委員の皆様、丁寧に査読していただいたレフェリーの方々、そして献身的にご尽力いただいたJASRI関係職員のおかげです。この場をお借りして厚く感謝申し上げます。

私の任期が満了した後もコロナ禍は続いています。委員会ではこのような状況下でのビームタイム利用に対する議論もさせていただきました。事態の収束を切に祈りつつ、我々の検討がSPring-8ユーザーの皆様にも少しでもお役に立てれば、と願っております。

松田 巖 MATSUDA Iwao

東京大学 物性研究所(播磨分室)
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL: 0791-58-0802 ext 4111/PHS 3619
e-mail: imatsuda@issp.u-tokyo.ac.jp

SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 5 —産業利用分科会—

SPring-8 利用研究課題審査委員会 産業利用分科会主査

公益財団法人科学技術交流財団 あいちシンクロトロン光センター
渡辺 義夫

SPring-8 利用研究課題審査委員会産業利用分科会は、2019A 第 2 期から 2021A 第 1 期までの 2 年間、主査：渡辺義夫、委員：木村正雄、妹尾与志木、宮崎司、佐藤真直の 5 名により産業利用分野の研究課題審査を行いました。以下に、当分科会の活動経過とその活動の中で気付いた点を中心に報告します。

当分科会では、成果非専有を前提とする産業利用分野の「一般課題」、「大学院生提案型課題」、さらに領域指定型の重点研究課題の審査を行いました。このうち、重点研究課題では、「放射光施設横断産業利用課題」の募集は 2019B 期で終了となりました。2018A 期から始まった産業利用に特化した 3 本のビームライン BL14B2、BL19B2 及び BL46XU に於ける年 6 回の課題募集では、分科会審査が頻繁になり結構大変ではありましたが、募集回数が増えたことから申請課題数が分散したため、分科会審査に十分な時間を掛けることが出来たという利点があったように思います。

この期間中の最大の出来事として、明記しておかなければならないことは、新型コロナウイルス感染症の影響でしょう。4 月 1 日に 2020A 期のユーザー利用が開始されましたが、その翌週 4 月 7 日に政府の緊急事態宣言によって、4 月 11 日以降のユーザー利用が停止となりました。全都道府県の緊急事態宣言は 5 月 25 日で終了となり、ユーザー利用は 6 月 16 日に再開されました。それに伴って、2020A 期のユーザー利用の取扱を再構築する必要が出たことから、施設スタッフの皆様方は大変ご苦労されたことと容易に想像されます。当分科会に於いても、2020A 第 2 期の課題募集の審査を 4 月 10 日に予定していたことから、急遽分科会の開催をリモートに切り替えて実施しました。その頃は未だリモート会議が不慣れなこともありましたが、リモートで意見集約をして採否を決定す

る難しさをはじめて体験しました。いずれにしても、2020 年度は 2020B 期の募集は行われずに、2020A 期に採択された課題を実施する等、これまでにない状況であることから、2020 年度のユーザー利用を含めて、今後に向けての動向を言うことは出来ません。これまでの産業利用分科会の審査から見えてくる点を述べたいと思います。

まず、はじめに機会ある毎にお話をしていることですが、産業利用に特化した 3 本のビームラインの課題申請書の実験責任者の内訳を調べると、民間企業に所属する実験責任者の割合が少ないということです。放射光利用の有用性が民間企業に幅広く認知されて、有料利用である測定代行をはじめとした成果専有課題が主流になっていることが主要因だとは思いますが、しかしながら、その一方で、民間企業が参画しているいくつかの専用ビームラインでは、成果専有利用がそれ程多くを占めている訳ではないように思われます。産業利用の 3 本のビームラインは、まだまだ潜在的な性能を引き出すことが出来る余地は十分あると思っています。まずは、ユーザーに一番近い施設スタッフが産業界の研究者とのコミュニケーションをさらに活発にすることで、企業ユーザーの利用動向を把握するとともに、この 3 本のビームラインの今後の方向性をコーディネーターと議論していただければと思います。また、上記のことにも関連しますが、3 本のビームラインでは、それぞれの手法で自動化が進んでいることから、民間企業ユーザーは測定代行等の成果専有利用、一方、大学等の実験責任者による課題は分科会審査による一般課題という流れにあるように思われます。この見方が間違っていなければ、現在、議論が進められているビームラインの再編と利用制度の見直しにマッチして、よりユーザーフレンドリーな共用

ビームラインと利用制度に向かっていくものと期待したいと思います。

最後に、2つお願いを述べたいと思います。産業利用分科会に於いては、産業分野が幅広いことから、4人のレフェリー評点が真つ二つに割れることがしばしば見受けられます。分科会委員では、カバーしきれない分野については、英語申請の場合と同様、専門家によるゲスト・レフェリーの絶対評価とコメントがあると参考になると思われます。是非、このような仕組みを早急に実現してもらえようお願いします。もう一つは、私を含めた分科会委員の感覚的な印象ですが、A期、B期それぞれ3回の募集になってから、次第に申請課題の質の低下を感じています。施設スタッフやコーディネーター等に事前相談が寄せられた際には、是非丁寧にご指導をお願いしたいと思います。

この2年間、課題審査にご尽力いただきました審査委員並びにご支援をいただきました産業利用推進室及び利用推進部のスタッフの皆様にご心より感謝申し上げます。

渡辺 義夫 WATANABE Yoshio

(公財) 科学技術交流財団 あいちシンクロトロン光センター
〒489-0965 愛知県瀬戸市南山口町 250-3
TEL : 0561-76-8344
e-mail : yoshio.watanabe@aichisr.jp

SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 6

— 人文・社会科学分科会 —

SPring-8 利用研究課題審査委員会 人文・社会科学分科会主査
山陽学園大学／林原美術館 谷一 尚

1. 申請課題数と申請動向

- ・2020A 期募集 6 件
- ・2020A 期追加募集 5 件
(うち法科学 2 件、押収薬物分析 1 件を含む)
- ・2021A 期募集 2 件

今回より領域指定型重点課題の優遇枠を外れ、一般課題として独り立ちする必要性が求められたが、申請件数は、コロナ禍の異常事態があったにせよ、他分科に比べあまりにも少ない。研究手段として SPring-8 利用の必要性の明確な研究申請を、さらに増やす手立てを早急に講じ、積極的に奨励すべきと考える。

特に、文化財分析技術のワークショップや関連研究会の開催が求められる。本分科会の性格上、申請者が SPring-8 に精通していない、もしくは、精通しにくいケースも多々存在するように感じる。その意味でも、最適なビームラインの選択や、ビームライン担当者との事前相談・打合せを積極的に行う機会を課題申請前に設ける必要があるように思われる。

2. 分野、測定手法、ビームライン

歴史的人工物としての文化財は、油彩絵画、仏像・木質文化財、日本刀、遺跡出土草鞋・稲藁・古代米、繊維製品、黒曜石など考古遺物。

希望の測定手法は、X 線 CT、蛍光 X 線、X 線吸収差分法、X 線小角散乱。

希望ビームラインは、BL08W、BL20B2、BL20XU、BL28B2、BL37XU、BL40XU、BL47XU。

3. 審査の問題点

今回より、重点領域指定の優遇措置はなくなり、自立が求められることとなったが、人文・社会科学分科への申請課題が、他の一般分科への課題と同程度まで

レベルアップしているかどうかについては、さらに多方面からの検証が必要である。

また、測定試料として SPring-8 に文化財を持ち込む場合、この世に 1 つしかない貴重な試料である場合も想定され、こういった貴重な試料が、盗難や破損に遭遇した場合の対処の仕方や、実験中の安全な保管、保険対応などについても予め検討しておく必要性を痛感する。

4. コメント

従来から指摘されていた申請書の記述不十分、利用者の固定化、成果の国際発信不足などの問題点は解消されておらず、有効で速やかな改善策を講ずる必要性を痛感する。

海外の放射光施設では、文化財や考古遺物の長期間に亘る系統的で組織的な測定が展開されている。人類の貴重な歴史文化遺産を引き継ぎ、研究を深め、次世代に継承する為に、SPring-8こそがこの役割を担い先導する意義は、極めて大きいと言える。そういった意味で、本分科会における研究活動を、さらに件数を増やし活性化させることが極めて重要であると考えられる。

谷一 尚 *TANIICHI Takashi*

山陽学園大学 副学長・教授

〒703-8501 岡山県岡山市中区平井 1-14-1

TEL : 086-272-6254

e-mail : takashi_taniichi@sguc.ac.jp

林原美術館 館長

〒700-0823 岡山県岡山市北区丸の内 2-7-15

TEL : 086-223-1733

e-mail : taniichi@hayashibara-museumofart.jp

SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 7 — 先進技術産業応用分科会 —

SPring-8 利用研究課題審査委員会 先進技術産業応用分科会主査
高エネルギー加速器研究機構 野村 昌治

2019A 期から 2020B 期までの 2 年間の指定で、重点研究課題領域指定型「先進技術活用による産業応用課題」(以下、本課題種) が設けられ、施設外委員 4 名と施設内委員 1 名の計 5 名の委員で構成する先進技術産業応用分科会が申請課題の審査にあたりました。COVID-19 のために 2020B 期の課題募集がなくなり、2020A の追加申請課題の審査が行われました。以下に、当分科会の活動経過等を記します。

先進技術活用による産業応用課題は、「産業応用を志向する実験責任者が、今までに利用経験がない SPring-8 の測定技術を新たに利活用することによって、高度な課題解決および新たな利用ニーズの発掘を推進することを目的とした産業利用分野の課題」とされてきました¹⁾。「XAFS 測定をしていた方が、初めて HAXPES 測定を行う場合」等複数の事例が示され、課題申請者にとって初めての手法を使い、成果に結びつけるため、申請に先立ってビームライン担当者と相談することとされ、他分科に先行して、優先的に課題を採択し、シフト配分を行いました。

他の分科同様にレフェリーによる検討を参考にし審査を行いました。期間中に 30 課題の申請があり、その内 17 課題を採択しました。コンプトン散乱イメージング実験の提案が多数ありましたが、一般課題を過度に圧迫しないよう定められた配分シフト数の制約を受けたり、募集要項で求めている条件を満たしていないため、当分科としては採択出来なかった課題もありました。採択出来なかった課題は一般課題として審査され、一部は採択されました。

申請書に、申請に至るまでの研究概要(何が分かっている、何が未解明か)や期待するアウトプットだけでなく申請課題の実施により得られると考えるアウトカムに関する記述の充実を分科会から求めました。

分科会は申請された課題の審査が主務ですが、より多くの方々に活用していただくための方策等に関する議論にも時間を割きました。その中で、本課題種の趣旨を活かすために募集要項に記す事例の充実を行うとともに、広報活動や日常的にユーザーに接し、ユーザーニーズを理解しているビームライン担当者からユーザーへ働きかけることをお願いしました。SPring-8 シンポジウム、産業利用報告会、研修会等での広報活動の他、ビームライン担当者やユーザーからの勧誘活動が行われ、これらは申請数の増に結びつき、有効に機能したと判断されます。また、事前相談の成果か、申請書の内容も回を追う毎に充実してきました。利用経験のない手法への挑戦を促すという性格より、同一測定技術を利活用する申請は 2 回までとされましたが、課題終了後に一般課題や成果専有課題を利用して研究を継続・発展させている例もあり、本課題種が有効に機能したものと判断出来ます。放射光は重要な研究ツールの 1 つとして定着してきましたが、産業利用に限らず、物質・生命科学等の研究者に対する同様な活動も日本の研究力強化に有効と考えられます。

課題審査にご尽力いただいた委員、制度活用にご尽力いただき、委員会に向け万全の準備や解析をしていただいた JASRI スタッフの皆様に感謝いたします。

[1] SPring-8/SACLA 利用者情報 23 (2018) 376.

野村 昌治 *NOMURA Masaharu*

高エネルギー加速器研究機構
〒305-0801 つくば市大穂 1-1
TEL : 029-879-6293
e-mail : masaharu.nomura@kek.jp

SPring-8 利用研究課題審査委員会を終えて 分科会主査報告 8 —長期利用分科会—

SPring-8 利用研究課題審査委員会 長期利用分科会主査
高エネルギー加速器研究機構 野村 昌治

2019、2020 年度の 2 年間にわたり、長期利用分科会の主査を担当しました。通常 A 期に向け課題審査を行います。2021A 期に向けて予定されていた課題募集は COVID-19 の影響で 2021B 期に延期され、2020 年度に予定されていた事後評価も延期されました。このため実質 1 回の分科会開催となりました。

長期利用課題は、4 期 2 年間有効の課題で、課題期間が長いので、一般課題の審査基準に加えて、

- ① 長期の研究目標及び研究計画が明確に定められていること。
- ② 以下のいずれかを達成するために SPring-8 を長期的かつ計画的に利用する必要があること。
 - a. 科学技術分野における傑出した成果の創出
 - b. 新しい研究領域及び研究手法の開拓
 - c. 産業基盤技術の著しい向上

の 2 点が審査で考慮されます。申請課題の審査は、書類審査と面接審査の 2 段階で行われ、採択された課題は実施後に事後評価を行っています。

本分科会は、施設外委員 7 名と施設内委員 6 名（人事異動に伴い途中で 2 名が交代）の 13 名で構成し、課題選定の書類審査、面接審査と実施課題の事後評価に加え、実施期間中、各期のビームタイム（以下、BT）配分を判断しました。

長期利用課題は、SPring-8 の目玉となる成果の創出を期待し、2 年間にわたり一定の BT を配分する課題です。一方、これにより一般課題の BT を過度に圧迫することを避けるため、長期利用課題のシフト配分調整や課題募集制限を適宜判断することとされています。このため、本分科会では、上述した研究の質の高さは当然のこととし、それぞれのビームライン（以下、BL）の状況を踏まえた上で、半年ごとの一般課題の積み重ねでは期待する成果を上げることが容易でなく、

2 年間にわたり長期利用課題として実施する必然性も重視し、慎重に課題採択について検討しました。議論を経て、2020A 期は 12 件の申請の中から以下の課題を採択しました。研究内容等については SPring-8/SACLA 利用者情報 Vol.25 No.2 を参照してください。

[2020A 期採択課題]

藤田 誠 課題	BL26B1、BL41XU
豊島 近 課題	BL41XU
中村 孝 課題	BL20XU
高橋 嘉夫 課題	BL01B1、BL37XU
矢代 航 課題	BL28B2

採択された課題は長期的、計画的に実施することが重要であるため、申請時に描いた各期の計画に照らして進捗状況を把握することが重要と考えました。研究の進捗状況に応じて計画を修正することは希ではないので、修正点も含めて把握出来ることが重要と考えました。この点について JASRI には、課題責任者の負担が過度にならずに、委員会としての的確な判断を行えるように工夫をお願いし、進捗状況を把握し易くなりました。各期の BT は、申請者の要求シフト数及び BL 担当者による推奨シフト数を尊重して配分しました。各期に 1 課題に割り当てられる BT は 16% を上限とされており、それに従いましたが、社会的関心の高い課題等で、この枠により成果が制限されないようにすべきか、SPring-8 としての戦略とも絡めて検討することを依頼しました。

課題実施後の研究成果は課題責任者による報告が SPring-8/SACLA 利用者情報に掲載されている／される予定ですので、詳細はそれらを参照してください。全般的には、長期的、計画的に BT を活用することに

よって初めて得られる研究がなされ、インパクトの高い論文誌に論文が出版されていました。

今後、長期利用課題を申請される方には、一般課題の積み上げでなく長期利用課題とし、2年間にわたってどのようなステップを経て研究を進めることで、SPring-8 の利用成果がどのように高まるかという点を意識して申請書を書いていただきたいと思います。

COVID-19 流行のために、かなりの変更を余儀なくされましたが、申請課題に対する書類審査と面接審査、BT 配分から事後評価まで、長期利用課題のあるべき姿と SPring-8 における BT 配分について慎重に議論していただいた委員の皆様へ感謝いたします。また、長期利用課題の進捗状況把握や委員会に向け、万全の事前準備をしていただいた事務局へ感謝いたします。

野村 昌治 *NOMURA Masaharu*

高エネルギー加速器研究機構

〒305-0801 つくば市大穂 1-1

TEL : 029-879-6293

e-mail : masaharu.nomura@kek.jp

第 46 回 (2021A) SPring-8 利用研究課題の採択について

登録施設利用促進機関

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用推進部

公益財団法人高輝度光科学研究センター (JASRI) では、SPring-8 利用研究課題審査委員会 (PRC) において SPring-8 の利用研究課題を審査した結果を受け、SPring-8 選定委員会の意見を聴き、以下のように第 46 回共同利用期間 (2021 年 4 月 1 日～2021 年 7 月 29 日 (放射光利用 270 シフト、1 シフト＝8 時間)) における利用研究課題を採択しました。ただし、産業利用 I、II および III ビームライン (BL19B2、BL14B2 および BL46XU) は 2021A を 3 期に分けて募集しており、これらのビームラインについては第 1 期の 2021 年 4 月 1 日～5 月 23 日 (114 シフト) における課題を採択しました。表 1 に利用研究課題公募履歴を示します。

1. 募集、審査および採択の日程

[募集案内公開と応募締切]

2020 年 11 月 10 日 SPring-8 ホームページで主要課題の募集案内公開

(利用者情報 2020 年秋号に募集案内記事を掲載)

11 月 24 日 成果公開優先利用課題、長期利用課題応募締切

12 月 8 日 一般課題、大学院生提案型課題応募締切

[課題審査、選定、採択および通知]

2021 年 1 月 15 日～26 日

各分科会による課題審査

1 月 28 日 SPring-8 利用研究課題審査委員会 (PRC) による課題審査

2 月 9 日 SPring-8 選定委員会の意見を聴取

2 月 9 日 JASRI として採択決定し、応募者に審査結果を通知

2. 応募および採択状況

2021A の新規応募課題数は 687、採択課題数は 539 でした。表 2 に 2021A 期の利用研究課題の課題種別の応募課題数および採択課題数と採択率 (%) を示します。また、表 3 に成果非専有課題としての科学技術的妥当性の審査対象となる課題 (成果非専有一般課題、

大学院生提案型課題) への応募 619 件について、ビームラインごとの応募課題数、採択課題数、採択率および配分シフト数、並びに採択された課題の 1 課題あたりの平均配分シフト数を示します。表 4 には全応募 687 課題について、申請者の所属機関分類と課題の研究分野分類の統計を示します。このうち、所属機関および研究分野について全体に対する割合をそれぞれ図 1 および図 2 に示します。SPring-8 と SACLA、J-PARC の MLF、または「京」を含む HPCI と連携して利用する課題として、SPring-8 には 8 件の応募があり、うち 6 件が採択されました。なお本記事の統計には、産業利用ビームラインの第 2 期および第 3 期分、並びに期中に随時募集する成果専有時期指定課題 (測定代行課題、産業利用準備課題含む) 等は含まれていません。

3. 採択課題

2021A 期の採択課題の一覧は、SPring-8 ホームページに掲載しています。以下をご覧ください。

ホーム > 利用案内 > 研究課題 > 採択・実施課題一覧
<http://www.spring8.or.jp/ja/users/proposals/list/>

表1 利用研究課題 公募履歴

利用期	利用期間	ユーザー 利用シフト*	応募締め日**	応募課題数	採択課題数
第1回:1997B	1997年10月-1998年03月	168	1997年01月10日	198	134
第2回:1998A	1998年04月-1998年10月	204	1998年01月06日	305	229
第3回:1999A	1998年11月-1999年06月	250	1998年07月12日	392	258
第4回:1999B	1999年09月-1999年12月	140	1999年06月19日	431	246
第5回:2000A	2000年02月-2000年06月	204	1999年10月16日	424	326
第6回:2000B	2000年10月-2001年01月	156	2000年06月17日	582	380
第7回:2001A	2001年02月-2001年06月	238	2000年10月21日	502	409
第8回:2001B	2001年09月-2002年02月	190	2001年05月26日	619	457
第9回:2002A	2002年02月-2002年07月	226	2001年10月27日	643	520
第10回:2002B	2002年09月-2003年02月	190	2002年06月03日	751	472
第11回:2003A	2003年02月-2003年07月	228	2002年10月28日	733	563
第12回:2003B	2003年09月-2004年02月	202	2003年06月16日	938	621
第13回:2004A	2004年02月-2004年07月	211	2003年11月04日	772	595
第14回:2004B	2004年09月-2004年12月	203	2004年06月09日	886	562
第15回:2005A	2005年04月-2005年08月	188	2005年01月05日	878	547
第16回:2005B	2005年09月-2005年12月	182	2005年06月07日	973	624
第17回:2006A	2006年03月-2006年07月	220	2005年11月15日	916	699
第18回:2006B	2006年09月-2006年12月	159	2006年05月25日	867	555
第19回:2007A	2007年03月-2007年07月	246	2006年11月16日	1099	761
第20回:2007B	2007年09月-2008年02月	216	2007年06月07日	1007	721
第21回:2008A	2008年04月-2008年07月	225	2007年12月13日	1009	749
第22回:2008B	2008年10月-2009年03月	189	2008年06月26日	1163	659
第23回:2009A	2009年04月-2009年07月	195	2008年12月11日	979	654
第24回:2009B	2009年10月-2010年02月	210	2009年06月25日	1076	709
第25回:2010A	2010年04月-2010年07月	201	2009年12月17日	919	665
第26回:2010B	2010年10月-2011年02月	210	2010年07月01日	1022	728
第27回:2011A	2011年04月-2011年07月	215	2010年12月09日	1024	731
第28回:2011B	2011年10月-2012年02月	195	2011年06月30日	1077	724
第29回:2012A	2012年04月-2012年07月	201	2011年12月08日	816	621
第30回:2012B	2012年10月-2013年02月	222	2012年06月28日	965	757
第31回:2013A	2013年04月-2013年07月	186	2012年12月13日	880	609
第32回:2013B	2013年10月-2013年12月	159	2013年06月20日	905	594
第33回:2014A	2014年04月-2014年07月	177	2013年12月12日	874	606
第34回:2014B	2014年10月-2015年02月	230	2014年06月19日	1030	848
第35回:2015A	2015年04月-2015年07月	207	2014年12月11日	1030	685
第36回:2015B	2015年09月-2015年12月	198	2015年06月11日	974	632
第37回:2016A	2016年04月-2016年07月	216	2015年12月10日	907	699
第38回:2016B	2016年09月-2016年12月	198	2016年06月02日	977	637
第39回:2017A	2017年04月-2017年07月	210	2016年12月08日	947	678
第40回:2017B	2017年10月-2018年02月	240	2017年06月08日	1000	761
第41回:2018A	2018年04月-2018年08月	228	2017年12月07日	931	719
第42回:2018B	2018年10月-2019年02月	234	2018年06月07日	982	744
第43回:2019A	2019年04月-2019年07月	222	2018年12月06日	957	681
第44回:2019B	2019年09月-2020年02月	234	2019年06月21日	1011	729
第45回:2020A	2020年04月-2021年02月	336	2019年12月05日	1460	1044
第46回:2021A	2021年04月-2021年07月	216	2020年12月08日	(687)	(539)

*ユーザー利用へ供出するシフト (1シフト=8時間) で全ビームタイムの80%

**一般課題の応募締め切り日

応募・採択課題数について: 2006B以前は応募締め切り日**の値である。

2007A以降は、期終了時の値(産業2期募集、生命科学等分科会留保課題、時期指定課題、緊急課題を含む)を示す。

2021Aは今後、産業利用ビームラインの第2・3期分、期中随時募集の成果専有時期指定課題等があるため現在の値は括弧内に示す。

表 2 2021A SPring-8 利用研究課題の課題種別応募および採択課題数と採択率****

決定課題種	応募課題数	採択課題数	採択率 (%)	採択課題のシフト充足率 (%) ***
一般課題 (成果非専有) *	566	435	76.9	96.6
一般課題 (成果専有)	25	25	100.0	100.0
大学院生提案型課題*	53	38	71.7	97.7
成果公開優先利用課題*	43	41	95.3	98.4
総 計	687	539	78.5	96.9
科学審査対象課題**のみの合計	619	473	76.4	96.7

*一般課題等のうち SACLA、J-PARC/MLF または「京」を連携して利用する課題は、SPring-8 では応募 4 課題のうち 4 課題を採択。
 **成果専有課題と優先利用課題を除いた課題。
 ***PX-BL 課題 (期中に配分シフトを決定する生命科学/タンパク質結晶構造解析分野関係課題) を除く。
 ****新分野開拓利用課題不採択 (1 グループ、9 課題) は含まず。

表 3 2021A ビームラインごとの審査対象課題*の採択状況

ビームライン	応募課題数計	採択課題数計	採択率 (%)	配分シフト数計**	1 課題あたり平均配分シフト**
BL01B1: XAFS	45	34	75.6	212	6.2
BL02B1: 単結晶構造解析	23	20	87.0	126	6.3
BL02B2: 粉末結晶構造解析	43	30	69.8	159	5.3
BL04B1: 高温高圧	22	15	68.2	165	11.0
BL04B2: 高エネルギー X 線回折	21	20	95.2	173	8.7
BL05XU: 施設開発 ID	3	2	66.7	12	6.0
BL08W: 高エネルギー非弾性散乱	23	17	73.9	213	12.5
BL09XU: 核共鳴散乱	-	-	-	-	-
BL10XU: 高圧構造物性	33	21	63.6	174	8.3
BL13XU: 表面界面構造解析	30	20	66.7	216	10.8
BL14B2: 産業利用 II	8	7	87.5	54	7.7
BL17SU: 理研 物理科学 III	7	5	71.4	56	11.2
BL19B2: 産業利用 I	3	3	100.0	9	3.0
BL19LXU: 理研 物理科学 II	5	3	60.0	51	17.0
BL20B2: 医学・イメージング I	19	12	63.2	99	8.3
BL20XU: 医学・イメージング II	21	12	57.1	111	9.3
BL25SU: 軟 X 線固体分光	23	16	69.6	186	11.6
BL26B1: 理研 構造ゲノム I***	3	3	100.0	24	8.0
BL26B2: 理研 構造ゲノム II***	-	-	-	-	-
BL27SU: 軟 X 線光化学	19	13	68.4	150	11.5
BL28B2: 白色 X 線回折	15	14	93.3	157	11.2
BL29XU: 理研 物理科学 I	-	-	-	-	-
BL32XU: 理研 ターゲットタンパク***	-	-	-	-	-
BL35XU: 高分解能非弾性散乱	12	4	33.3	60	15.0
BL36XU: 理研 物質科学 II	1	1	100.0	12	12.0
BL37XU: 分光分析	19	11	57.9	123	11.2
BL38B1: 理研 構造生物学 I	-	-	-	-	-
BL39XU: 磁性材料	23	18	78.3	216	12.0
BL40B2: 構造生物学 II	44	34	77.3	201	5.9
BL40XU: 高フラックス	34	25	73.5	195	7.8
BL41XU: 構造生物学 I***	-	-	-	-	-
BL43IR: 赤外物性	22	21	95.5	216	10.3
BL43LXU: 理研 量子ナノダイナミクス	4	4	100.0	42	10.5
BL44B2: 理研 物質科学	4	3	75.0	24	8.0
BL45XU: 構造生物学 III***	1	1	100.0	6	6.0
BL46XU: 産業利用 III	8	8	100.0	44	5.5
BL47XU: 光電子分光・マイクロ CT	22	17	77.3	129	7.6
PX-BL (BL41XU, 45XU, 26B1, 26B2, 32XU)	59	59	100.0	-	-
総 計	619	473	76.4	3615	7.6

*成果非専有一般課題、大学院生提案型課題
 **1 シフト=8 時間
 ***PX-BL 対象 BL (PX-BL 運用以外の対象課題の課題数およびシフト数)
 産業利用ビームラインの第 2・3 期募集分等は含まず。

表4 SPring-8 2021A 応募・採択結果の機関および研究分野分類

機関分類	課題分類		生命科学		医学応用		物質科学・材料科学		化学		地球・惑星科学		環境科学		産業利用		その他*		総計		採択率 (%)
	決定課題種	課題数/シフト数	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	
大学等教育機関	一般課題 (非専有)	課題数	58	55	7	4	184	140	99	82	28	24	2	2	22	17	6	4	406	328	80.8
		シフト数	201	171	57	27	1711	1284	681	557	291	249	12	12	186	119	59	42	3198	2461	77.0
	大学院生提案型課題	課題数	3	2	1	0	29	21	9	7	2	1			4	4	3	3	51	38	74.5
		シフト数	6	0	18	0	201	144	60	48	21	9			28	28	24	24	358	253	70.7
	成果公開優先利用課題	課題数					4	3	12	12	2	2			5	5			23	22	95.7
シフト数						30	24	108	105	9	9			24	24			171	162	94.7	
合計	課題数	61	57	8	4	217	164	120	101	32	27	2	2	31	26	9	7	480	388	80.8	
	シフト数	207	171	75	27	1942	1452	849	710	321	267	12	12	238	171	83	66	3727	2876	77.2	
国立研究機関等	一般課題 (非専有)	課題数	9	9	3	1	35	29	5	4	6	3	1	0	4	2	9	6	72	54	75.0
		シフト数	15	15	24	3	363	300	45	39	78	42	9	0	58	18	87	69	679	486	71.6
	一般課題 (専有)	課題数	1	1															1	1	100.0
		シフト数	0	0															0	0	-
	成果公開優先利用課題	課題数	2	2	1	1	3	3	1	1				1	0				8	7	87.5
シフト数		33	33	3	3	45	45	6	6				3	0				90	87	96.7	
合計	課題数	12	12	4	2	38	32	6	5	6	3	2	0	4	2	9	6	81	62	76.5	
	シフト数	48	48	27	6	408	345	51	45	78	42	12	0	58	18	87	69	769	573	74.5	
産業界	一般課題 (非専有)	課題数													14	13			14	13	92.9
		シフト数													123	114			123	114	92.7
	一般課題 (専有)	課題数	3	3			2	2							16	16			21	21	100.0
		シフト数	0	0			15	15							40	40			55	55	100.0
	成果公開優先利用課題	課題数					2	2	6	6					4	4			12	12	100.0
シフト数						6	6	90	90					33	30			129	126	97.7	
合計	課題数	3	3	0	0	4	4	6	6	0	0	0	0	34	33	0	0	47	46	97.9	
	シフト数	0	0	0	0	21	21	90	90	0	0	0	0	196	184	0	0	307	295	96.1	
海外機関	一般課題 (非専有)	課題数	14	12	1	1	39	17	10	6	10	4							74	40	54.1
		シフト数	59	27	12	12	521	172	102	57	90	33							784	301	38.4
	一般課題 (専有)	課題数	2	2											1	1			3	3	100.0
		シフト数	0	0											0	0			0	0	-
	大学院生提案型課題	課題数					2	0											2	0	0.0
シフト数						33	0											33	0	0.0	
合計	課題数	16	14	1	1	41	17	10	6	10	4	0	0	1	1	0	0	79	43	54.4	
	シフト数	59	27	12	12	554	172	102	57	90	33	0	0	0	0	0	0	817	301	36.8	
合計	課題数	92	86	13	7	300	217	142	118	48	34	4	2	70	62	18	13	687	539	78.5	
	シフト数	314	246	114	45	2925	1990	1092	902	489	342	24	12	492	373	170	135	5620	4045	72.0	
採択率 (%)	課題数	93.5		53.8		72.3		83.1		70.8		50.0		88.6		72.2		78.5			
	シフト数	78.3		39.5		68.0		82.6		69.9		50.0		75.8		79.4		72.0			

*ビームライン技術、素粒子・原子核科学、考古学、鑑識科学、安全管理

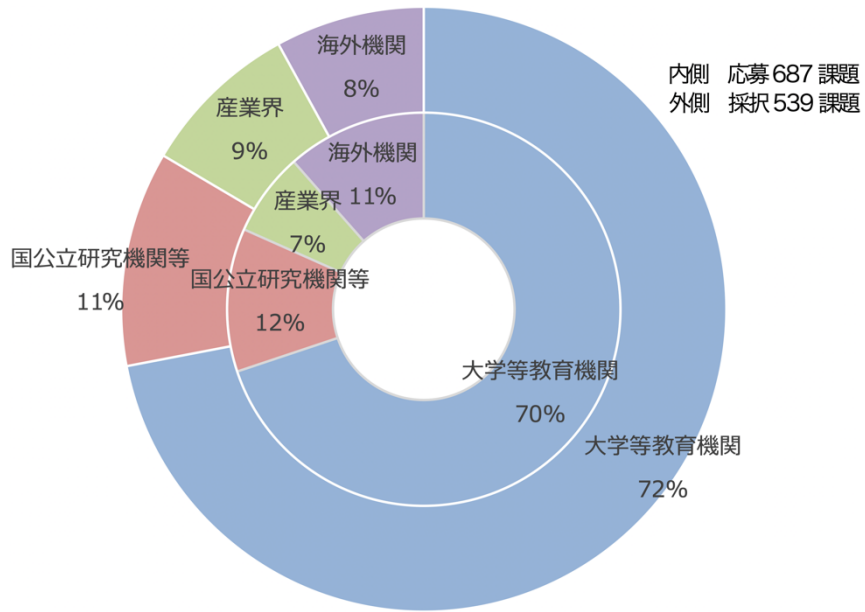


図1 2021A 所属機関別 応募/採択課題数割合

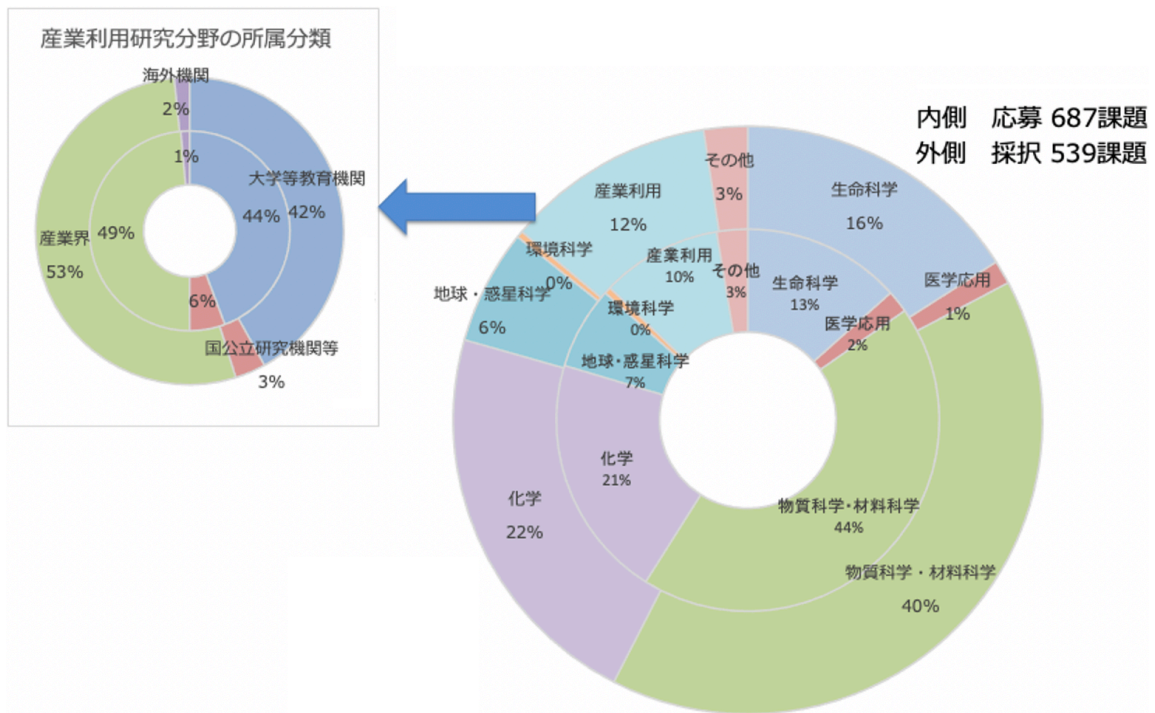


図2 2021A 研究分野別 応募/採択課題数割合

第45回共同利用期間（2020A）において実施された SPring-8 利用研究課題

登録施設利用促進機関

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用推進部

第45回共同利用期間（2020A）のSPring-8の共同利用は、新型コロナウイルス感染症の感染拡大の影響から、2021年3月まで延長され、2020B期の募集は行いませんでした。また、感染拡大防止対策として4月11日から6月15日までユーザー利用を停止いたしました（新型コロナウイルス感染症関連研究を除く）。なお、通年運用とした2020A期の放射光利用は、ビームライン1本あたり558シフト [1シフト=8時間] でした。

2020Aでは26本の共用ビームライン（共用施設）と、7本の理研ビームラインにおけるビームタイムの一部が共用に供されました。産業利用に特化した3本の共用ビームラインBL14B2、BL19B2およびBL46XUは、2020A第1期（2020年4月～5月下旬）、第2期（同年5月下旬～6月下旬）および第3期（2020年6月下旬～7月）、第4期（同年11月～12月）、第5期

（2021年1月～2月）と、利用期を5期に分けて課題募集・選定が行われました。専用ビームライン（専用施設）については、2020A期の稼働数は18本でした。

表1に、SPring-8共用施設の2020A課題種別の課題数と実施シフト数を示します。表2に、SPring-8専用施設の2020A実施課題数とシフト数を示します。表3に、2020A期にSPring-8共用施設で実施された利用研究課題の課題数とシフト数について実験責任者の所属機関分類および研究分野分類を示します。表4に、1997B-2020A課題種別実施課題数の推移を示します。

表2 SPring-8専用施設の2020A実施課題数とシフト数

課題種	実施課題数合計	実施シフト数合計
専用ビームライン（成果非専有）	295	5267.5
専用ビームライン（成果専有）	42	173.625
合計	337	5441.125

表1 SPring-8共用施設^(注1)の2020A課題種別の課題数と実施シフト数

課題種	応募課題数	採択課題数	課題採択率 (%)	採択課題の実施数	非応募課題 ^(注2) の実施数	実施課題数合計	実施シフト数合計
一般課題（成果非専有）	1083	720	66.5	642	19	661	5455.375
一般課題（成果専有）	103	103	100.0	86	2	88	323.25
大学院生提案型課題	101	57	56.4	53		53	380.75
緊急課題	4	4	100.0	4		4	65.5
時期指定課題	22	22	100.0	17		17	57.625
測定代行課題 ^(注3)	65	65	100.0	65		65	27.75
産業利用準備課題	5	5	100.0	5		5	1
先進技術活用による産業応用課題	9	8	88.9	8		8	65
成果公開優先利用課題	54	53	98.1	53		53	346.625
長期利用課題	14	7	50.0	7	4	11	191.625
重点パートナーユーザー課題	0	0	-	0	11	11	284.625
新分野創成利用課題 （新分野創成を行うとする 研究グループによる課題）					8	8	50.875
合計	1460	1044	71.5	940	44	984	7250

(注1) 理研ビームラインからの一部共用供出ビームタイムの利用を含む。

(注2) 既に採択等された課題で、当該期の応募・採択等プロセスを要しないもの。

(注3) BL14B2、BL19B2、BL46XUで実施。

表 3 2020A に Spring-8 共用施設^(注1) で実施された利用研究課題の所属機関分類および研究分野分類

機関分類	課題分類	課題数/ シフト数	研究分野							計	
			生命科学	医学応用	物質科学・ 材料科学	化学	地球・惑星 科学	環境科学	産業利用		その他 ^(注2)
大学 等 教育 機関	一般課題 (成果非専有)	課題数	67	5	206	100	30	2	59	8	477
		シフト数	390.5	41.75	1799.125	692.875	266.5	24	384.25	71.875	3670.875
	一般課題 (成果専有)	課題数				1			6		7
		シフト数				2			10		12
	大学院生提案型課題	課題数		1	25	12	1		12	1	52
		シフト数		7.875	164.25	71.75	9		97.875	12	362.75
	緊急課題	課題数	1								1
		シフト数	1.5								1.5
	時期指定課題	課題数				1		1			2
		シフト数				3		1			4
	測定代行課題	課題数				1			3		4
		シフト数				0.25			1.25		1.5
	先進技術活用による産業 応用課題	課題数							2		2
		シフト数							14		14
	成果公開優先利用課題	課題数	1		6	13			15		35
シフト数		3		33	89.5			69.625		195.125	
長期利用課題	課題数	2		2	2	4			1	11	
	シフト数	50.375		53.75	13	59.625			14.875	191.625	
重点パートナーユーザー 課題	課題数			5	2	4				11	
	シフト数			128.75	54	101.875				284.625	
新分野創成利用課題	課題数			1	6					7	
	シフト数			6	39					45	
計	課題数	71	6	245	138	39	3	97	10	609	
	シフト数	445.375	49.625	2184.875	965.375	437	25	577	98.75	4783	
国 公 立 研 究 機 関 等	一般課題 (成果非専有)	課題数	12	5	43	9	7	5	20	9	110
		シフト数	180.375	65.625	406.625	89.75	62.5	27	136.75	92.5	1061.125
	一般課題 (成果専有)	課題数	3								3
		シフト数	18								18
	緊急課題	課題数			2						2
		シフト数			57						57
	時期指定課題	課題数			1	1				1	3
		シフト数			13	0.625				3	16.625
	測定代行課題	課題数							6		6
		シフト数							2.5		2.5
	成果公開優先利用課題	課題数	1	1	10						12
シフト数		27.75	6	82.75						116.5	
計	課題数	16	6	56	10	7	5	26	10	136	
	シフト数	226.125	71.625	559.375	90.375	62.5	27	139.25	95.5	1271.75	
産 業 界	一般課題 (成果非専有)	課題数						24		24	
		シフト数						196.625		196.625	
	一般課題 (成果専有)	課題数	3		4			1	68		76
		シフト数	17		10.875			1	214.625		243.5
	時期指定課題	課題数							8		8
		シフト数							32.5		32.5
	測定代行課題	課題数							54		54
		シフト数							23.25		23.25
	産業利用準備課題	課題数							5		5
		シフト数							1		1
	先進技術活用による産業 応用課題	課題数							6		6
シフト数								51		51	
成果公開優先利用課題	課題数							6		6	
	シフト数							35		35	
新分野創成利用課題	課題数							1		1	
	シフト数							5.875		5.875	
計	課題数	3		4			1	172		180	
	シフト数	17		10.875			1	559.875		588.75	
海 外 機 関	一般課題 (成果非専有)	課題数	13		25	7	1	1	3		50
		シフト数	124.375		286.25	68.75	6	6	35.375		526.75
	一般課題 (成果専有)	課題数	2								2
		シフト数	49.75								49.75
	大学院生提案型課題	課題数			1						1
		シフト数			18						18
	緊急課題	課題数	1								1
		シフト数	7								7
	時期指定課題	課題数	2						2		4
		シフト数	1.5						3		4.5
	測定代行課題	課題数							1		1
シフト数								0.5		0.5	
計	課題数	18		26	7	1	1	6		59	
	シフト数	182.625		304.25	68.75	6	6	38.875		606.5	
課題数合計			108	12	331	155	47	10	301	20	984
シフト数合計			871.125	121.25	3059.375	1124.5	505.5	59	1315	194.25	7250

(注1) 理研ビームラインからの一部共用供出ビームタイムの利用を含む。

(注2) 素粒子・原子核科学、考古学、ビームライン技術他。

2020A の延べ利用者数は、共用施設 5,906 人、専用施設 3,265 人でした。表 5 に、SPring-8 共用施設および専用施設利用実績の推移を示します。表 5 の値を利用シフト数合計と共に示したものが図 1 です。利用シフト数合計は、表 5 の「利用時間」に利用した共用・専用ビームラインの数（理研ビームラインの一部共用への供出分を含む。但し、理研ビームラインは共用供出割合で換算）を掛けた数値となっています。図 2 には、SPring-8 共用施設の利用研究課題の応募・採択数の推移実績を採択率と共に示します。応募・採択課題数は、2006B 以前は一般課題締め切り時、2007A 以降は期の途中で申請・採択される成果専有時期指定課題、測定代行課題および産業利用ビームラインの第

2 期および第 3 期申請分を含めた、期の終わりの値を示します。利用シフト数合計は、上記と同様に表 5 の「利用時間」に利用した共用ビームラインの数を掛けた数値となっています。

図 3 に年度ごとのユニーク利用者数を示します。ユニーク数の算出方法は、2012 年度の SACLA 供用開始に伴い、2012 年度以降については延べ利用者数よりユニーク数を算出（2011 年度までは放射線業務従事者登録データより算出）しています。また、過去 5 年間に於いて 1 度も施設利用のための来所がない利用者新規と定義（2011 年度までは過去 1 度も放射線業務従事者登録がない場合を新規と定義）しています。

表 4 SPring-8 1997B-2020A 課題種別実施課題数の推移

課題種	1997B~2012A	2012B	2013A	2013B	2014A	2014B	2015A	2015B	2016A	2016B	2017A	2017B	2018A	2018B	2019A	2019B	2020A	合計
一般課題 (成果非専有)	11066	516	440	384	444	611	457	476	489	459	502	570	524	537	507	563	661	19206
緊急課題	35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4
一般課題 (成果専有)	616	51	34	55	34	55	36	37	42	47	35	48	41	46	38	52	88	1355
時期指定課題 (除く測定代行)	185	15	6	4	4	2	8	8	6	10	7	16	6	16	8	20	17	338
測定代行 (時期指定課題の一環)	239	48	49	47	41	54	37	46	32	48	29	46	37	60	29	40	65	947
産業利用準備課題															3	10	5	18
長期利用課題	226	14	14	16	13	13	26	23	28	25	28	25	13	14	15	14	11	518
被災量子ビーム施設ユーザー支援課題	94																	94
大学院生提案型課題 (旧名称：萌芽的研究支援課題 [~2015B])	297	40	27	32	38	58	45	54	65	52	29	53	53	58	41	52	53	1047
成果公開優先利用課題	332	33	18	27	24	30	18	28	35	37	39	52	34	43	33	33	53	869
重点タンパク 500 課題 (タンパク 3000)	489																	489
重点ナノテクノロジー支援課題	928																	928
重点産業トリアルユース課題	112																	112
SPring-8 戦略活用プログラム課題	332																	332
重点産業利用課題	1000																	1000
重点産業化促進課題	13	19	13	13														58
産業新分野支援課題					10	14	12	14	11	4	6	4						75
放射光施設構新産業利用課題													5	3	6	4		18
先進技術活用による産業応用課題															5	4	8	17
重点メディカルバイオ・トリアルユース課題	57																	57
重点拡張メディカルバイオ課題	51																	51
重点グリーン/ライフ・イノベーション推進課題	50	27	24	24														125
スマート放射光活用イノベーション戦略推進課題					12	17	18	14										61
社会・文化利用課題							11	16	17	19	19	14	14	13				123
重点戦略課題 (12 条戦略課題)	62	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	65
重点/パワーユーザー課題	104	7	7	7	1	1												127
重点パートナーユーザー課題					3	3	6	6	7	7	8	8	7	7	8	8	11	89
新分野創成利用課題								4	6	11	16	21	21	25	24	9	8	145
合計	16288	771	633	610	624	858	674	726	738	719	718	857	755	822	717	809	984	28303

備考 長期利用課題は BL ごとに 1 課題としてカウント。
空白は制度なし。

実施課題の課題名をホームページの以下の URL で公開しています。成果専有課題は「公表用課題名」が表示されています。

<http://www.spring8.or.jp/ja/users/proposals/list/>
 成果非専有課題の利用課題実験報告書 (SPring-8

Experiment Summary Report) は以下の URL で閲覧できます。

<http://user.spring8.or.jp/uisearch/expreport/ja>

成果は、3年以内に、論文または SPring-8/SACLA 利用研究成果集等で公開されます。

表 5 SPring-8 共用施設および専用施設利用実績の推移

利用期間	利用時間	共用施設		専用施設			
		実施課題数	延べ利用者数	実施課題数	延べ利用者数		
第 1 回	1997B	1997 年 10 月-1998 年 03 月	1,286	94	681	-	-
第 2 回	1998A	1998 年 04 月-1998 年 10 月	1,702	234	1,252	7	-
第 3 回	1999A	1998 年 11 月-1999 年 06 月	2,585	274	1,542	33	467
第 4 回	1999B	1999 年 09 月-1999 年 12 月	1,371	242	1,631	65	427
第 5 回	2000A	2000 年 02 月-2000 年 06 月	2,051	365	2,486	100	794
第 6 回	2000B	2000 年 10 月-2001 年 01 月	1,522	383	2,370	88	620
第 7 回	2001A	2001 年 02 月-2001 年 06 月	2,313	474	2,915	102	766
第 8 回	2001B	2001 年 09 月-2002 年 02 月	1,867	488	3,277	114	977
第 9 回	2002A	2002 年 02 月-2002 年 07 月	2,093	545	3,246	110	1,043
第 10 回	2002B	2002 年 09 月-2003 年 02 月	1,867	540	3,508	142	1,046
第 11 回	2003A	2003 年 02 月-2003 年 07 月	2,246	634	3,777	164	1,347
第 12 回	2003B	2003 年 09 月-2004 年 02 月	1,844	549	3,428	154	1,264
第 13 回	2004A	2004 年 02 月-2004 年 07 月	2,095	569	3,756	161	1,269
第 14 回	2004B	2004 年 09 月-2004 年 12 月	1,971	555	3,546	146	1,154
第 15 回	2005A	2005 年 04 月-2005 年 08 月	1,880	560	3,741	146	1,185
第 16 回	2005B	2005 年 09 月-2005 年 12 月	1,818	620	4,032	187	1,379
第 17 回	2006A	2006 年 03 月-2006 年 07 月	2,202	724	4,809	226	1,831
第 18 回	2006B	2006 年 09 月-2006 年 12 月	1,587	550	3,513	199	1,487
第 19 回	2007A	2007 年 03 月-2007 年 07 月	2,448	781	4,999	260	2,282
第 20 回	2007B	2007 年 09 月-2008 年 02 月	2,140	739	4,814	225	1,938
第 21 回	2008A	2008 年 04 月-2008 年 07 月	2,231	769	4,840	232	1,891
第 22 回	2008B	2008 年 10 月-2009 年 03 月	1,879	672	4,325	217	1,630
第 23 回	2009A	2009 年 04 月-2009 年 07 月	1,927	669	4,240	238	1,761
第 24 回	2009B	2009 年 10 月-2010 年 02 月	2,087	722	4,793	275	2,144
第 25 回	2010A	2010 年 04 月-2010 年 07 月	1,977	685	4,329	293	2,483
第 26 回	2010B	2010 年 10 月-2011 年 02 月	2,094	744	4,872	325	2,812
第 27 回	2011A	2011 年 04 月-2011 年 07 月	2,131	740	4,640	309	2,773
第 28 回	2011B	2011 年 10 月-2012 年 02 月	1,927	730	4,576	319	2,769
第 29 回	2012A	2012 年 04 月-2012 年 07 月	1,972	637	4,304	285	2,692
第 30 回	2012B	2012 年 10 月-2013 年 02 月	2,184	771	5,072	314	3,181
第 31 回	2013A	2013 年 04 月-2013 年 07 月	1,837	633	4,053	275	2,835
第 32 回	2013B	2013 年 10 月-2013 年 12 月	1,571	610	3,770	286	2,723
第 33 回	2014A	2014 年 04 月-2014 年 07 月	1,768	624	4,129	292	2,710
第 34 回	2014B	2014 年 10 月-2015 年 02 月	2,290	858	5,766	331	3,573
第 35 回	2015A	2015 年 04 月-2015 年 07 月	2,053	674	4,560	271	2,960
第 36 回	2015B	2015 年 09 月-2015 年 12 月	1,981	726	4,863	281	2,898
第 37 回	2016A	2016 年 04 月-2016 年 07 月	2,150	738	5,174	301	3,130
第 38 回	2016B	2016 年 09 月-2016 年 12 月	1,976	719	4,824	298	2,985
第 39 回	2017A	2017 年 04 月-2017 年 07 月	2,101	718	4,835	326	3,228
第 40 回	2017B	2017 年 10 月-2018 年 02 月	2,377	857	5,885	355	3,659
第 41 回	2018A	2018 年 04 月-2018 年 08 月	2,254	755	5,009	323	3,231
第 42 回	2018B	2018 年 10 月-2019 年 02 月	2,306	822	5,468	361	3,303
第 43 回	2019A	2019 年 04 月-2019 年 07 月	2,205	717	4,579	331	2,911
第 44 回	2019B	2019 年 09 月-2020 年 02 月	2,333	809	5,378	344	3,102
第 45 回	2020A	2020 年 04 月-2021 年 02 月	4,309	984	5,906	337	3,265
合 計			92,808	28,303	183,513	10,148	91,925

註：長期利用課題をビームラインごとに 1 課題とカウント (2008.7)。
 共用施設には理研ビームライン等からの供出ビームタイムの利用者を含む。

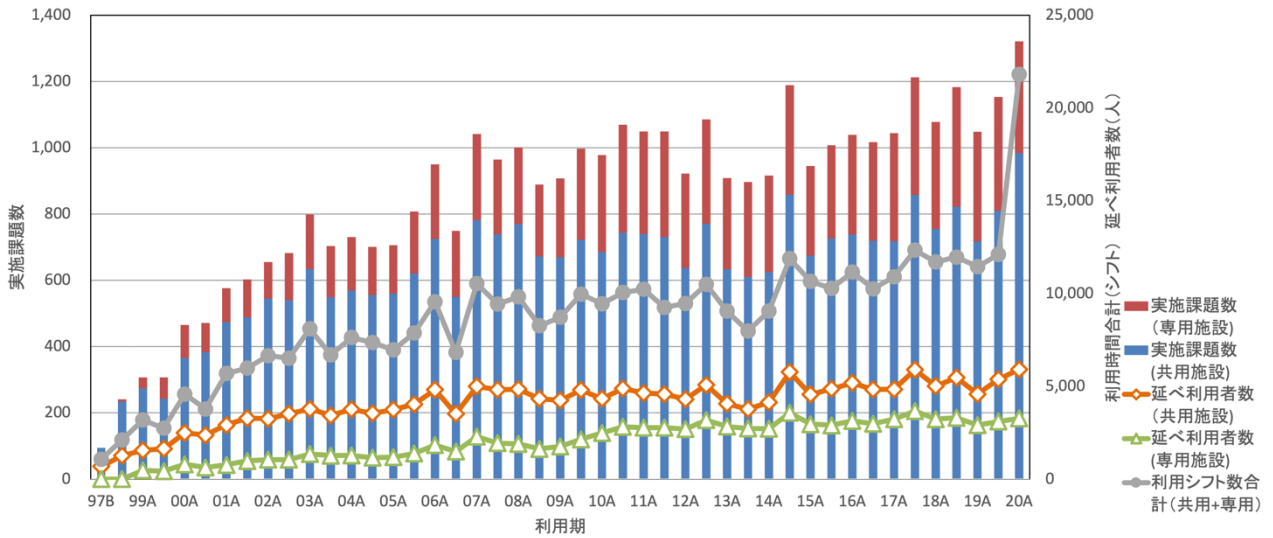
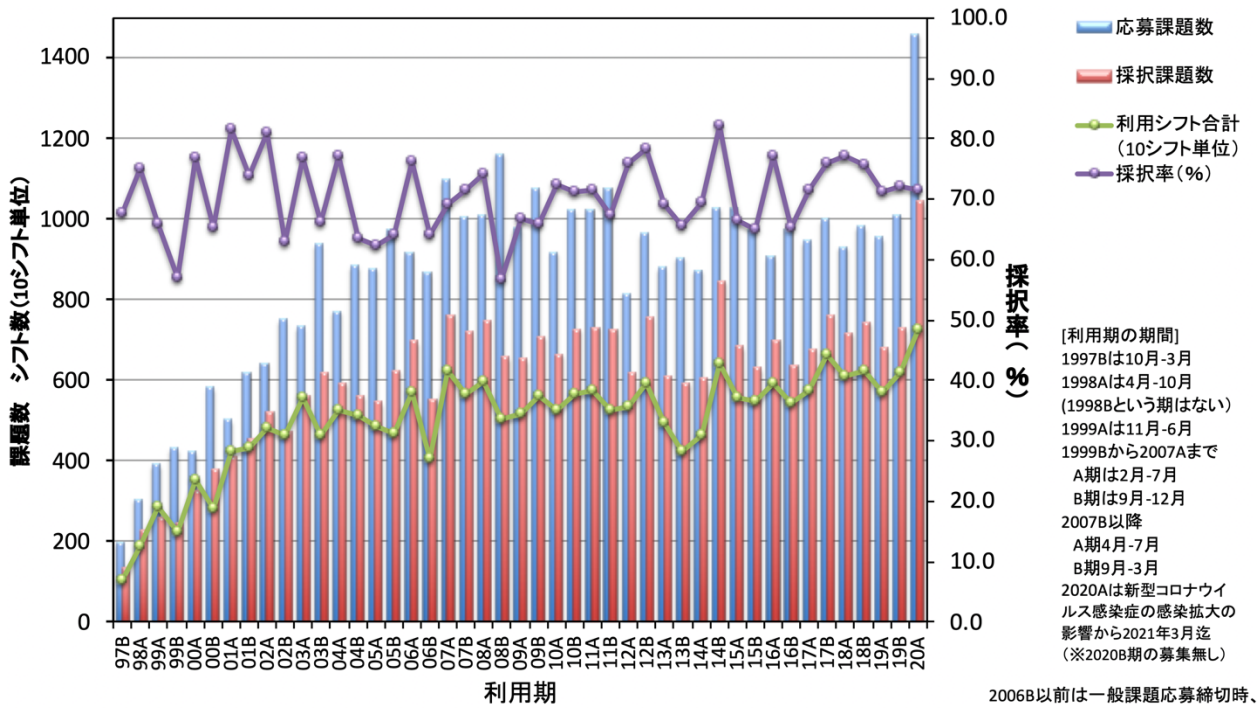


図1 SPring-8 共用施設および専用施設の利用実績の推移



2006B以前は一般課題応募締切時、
2007A以降は期の終了時の値。

図2 SPring-8 共用施設の応募・採択課題数の推移実績

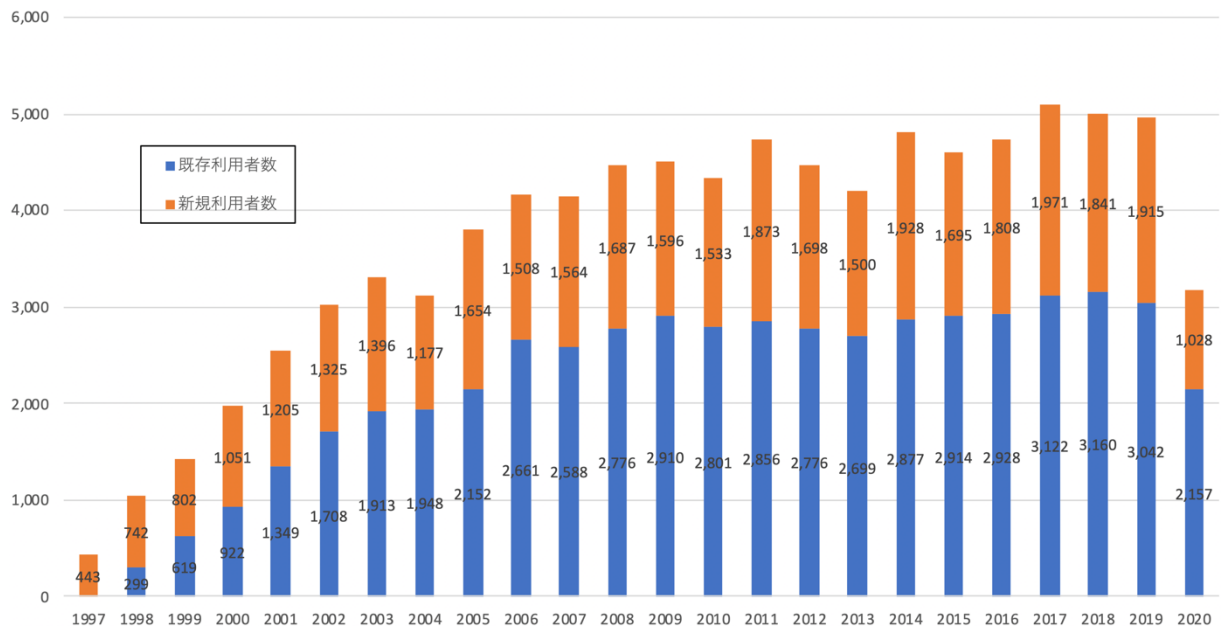


図3 SPring-8の年度ごとのユニーク利用者数

2017B 期 採択「新分野創成利用」における 研究グループの事後評価について

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用推進部

「新分野創成利用」は、SPring-8 の利用研究成果創出を質的・量的に飛躍させるために、既存の研究分野の枠を超えた複合・融合領域等における未踏分野の開拓・創成およびそれに伴う利用の裾野を拡大することを目的として、2015B 期より運用しています。採択された研究グループは、代表責任者の裁量により有効期間（2 年間）内に各分担責任者が複数ビームラインで「新分野創成利用課題」を実施することも可能となり、また、ビームタイムも認められた範囲内で期ごとに任意に配分（但し審査あり）することができます。

「新分野創成利用」における研究グループの事後評価は、新分野創成利用審査委員会における研究グループ終了報告書に基づいた代表責任者による発表と質疑応答により行われます。事後評価の着目点は、研究グループとしての、1) 目標達成度、2) 研究成果（①科学技術的価値、新しい研究領域・手法の開拓、産業基盤技術の向上、②科学技術的波及効果、③情報発信）、3) 「新分野創成利用」の趣旨との合致性（①新分野が創生され今後もその分野の発展が期待できるか、②実施にあたってマネジメントは妥当であったか）です。

今回は、2017B 期に採択された研究グループ（有効期間：2017B～2019A 期）について、事後評価（2020 年 12 月 1 日開催）を行いました。

以下に新分野創成利用審査委員会がとりまとめた評価結果等を示します。研究内容については本誌の「最近の研究から」に「新分野創成利用」研究グループによる紹介記事を掲載しています。

プロジェクト名	ナノスケール実スピンドバイス開発に向けた新しい放射光利用
代表責任者(所属)	小野 輝男 (京都大学)
分担責任者(所属)	壬生 攻 (名古屋工業大学)
	千葉 大地 (東京大学)
	岡本 聡 (東北大学)
	水口 将輝 (東北大学)

課題番号	2017B0921 ほか
ビームライン	BL01B1、BL08W、BL09XU、BL13XU、BL17SU、BL25SU、BL37XU、BL39XU、BL47XU
利用期間/配分総シフト	2017B～2019A/462 シフト (BL09XU：90 シフト、BL25SU：90 シフト、BL39XU：84 シフト、BL08W：60 シフト、BL13XU：45 シフト、BL37XU：36 シフト、BL01B1：24 シフト、BL17SU：24 シフト、BL47XU：9 シフト)

※所属は申請時

【評価結果】

1) 目標達成度

異なる研究グループによる多様な放射光利用成果の情報交換を通じて、さまざまな測定法を融合してナノスピンドバイスの原理説明を進めており、実スピンドバイス開発に向けた優れた成果が得られている。

2) 研究成果

①科学技術的価値、新しい研究領域・手法の開拓、産業基盤技術の向上

スピントロニクス材料やデバイスにおいて電圧、ひずみなど外場の印加下でのオペランド計測が、世界に先駆けて成功したことは高く評価できる。また、反強磁性体のドメインのオペランド観察に成功するなど、新しい測定法を確立したことは評価できる。

②波及効果

スキルミオンの 3D 観察につながるなど科学的波及効果が見られるほか、スピン軌道トルクの解明や MgO バリア層の改善など実デバイスの開発のための重要な成果が得られ、技術的波及効果も見られる。

③情報発信

引用度の高い論文が発表されており、学会や研究会などを通じて専門家向けの情報発信は行われている。これらの成果の国民向けのわかりやすい情報発信を行った方がよかったのではないかな。

3) 「新分野創成利用」の趣旨との合致性

①新分野創成と発展

学理として新しい分野が創成されたと言えないが、次世代オペランド科学を拓く手がかりが得られ、コミュニティの広がりや寄与している点において課題の趣旨に合致している。

②マネージメント

複数のビームラインを使って成果を出すことができている。マネージメントは概ね妥当であったが、シナジー効果を出すところまでは達していないのではないかな。

総合評価

本プロジェクトを通じて、広範なスピントロニクス分野の研究者をまとめ、多様な放射光計測を積極的に適用し、体系的に現象の解明を行うことによって、スピントロニクスのマイクロ構造とデバイス開発に有用な成果が得られた。例えば、外場印加下での実デバイスのスピン状態のダイナミックな変化のオペランド計測に成功したことは特筆すべきであろう。異なる測定手段の組み合わせによるシナジー効果は必ずしも得られたとは言えないが、新しい研究会の立ち上げによる新分野開拓が期待できる。

[成果リスト]

(査読付き論文)

[1] SPring-8 publication ID = 35774

J. Kim *et al.*: “X-ray Magnetic Circular Dichroism and Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy of Tetragonal Mn₇₂Ge₂₈ Epitaxial Thin Film” *Japanese Journal of Applied Physics* **57** (2018) 04FN10.

[2] SPring-8 publication ID = 36613

K. Hasegawa *et al.*: “Enhancement of Spin-Orbit Torque by Inserting CoO_x Layer into Co/Pt Interface” *Physical Review B* **98** (2018) 020405(R).

[3] SPring-8 publication ID = 37107

T. Moriyama *et al.*: “Spin Torque Control of Antiferromagnetic Moments in NiO” *Scientific Reports* **8** (2018) 14167.

[4] SPring-8 publication ID = 37559

M. Saito *et al.*: “Fabrication of L1₀-FeNi by Pulsed-Laser Deposition” *Applied Physics Letters* **114** (2019) 072404.

[5] SPring-8 publication ID = 38012

M. Niwa *et al.*: “Change in Chemical Bonding State by Thermal Treatment in MgO-Based Magnetic Tunnel Junction Observed by Angle-Resolved Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy” *Journal of Applied Physics* **125** (2019) 203903.

[6] SPring-8 publication ID = 38336

H. Sakurai *et al.*: “Temperature Dependence of Spin/Orbital Magnetization Switching behaviour at the Interface in CoFeB/MgO and CoFeB/Ta Multi-Layered Films” *Materials Research Express* **6** (2019) 096114.

[7] SPring-8 publication ID = 38747

A. Obinata *et al.*: “Electric Field Effect on Magnetism in a MgO/Pd/Co System with a Solid-State Capacitor Structure” *AIP Advances* **8** (2018) 115122.

[8] SPring-8 publication ID = 38961

S. Yamada *et al.*: “Experimental Verification of the Origin of Positive Linear Magnetoresistance in CoFe(V_{1-x}Mn_x)Si Heusler Alloys” *Physical Review B* **100** (2019) 195137.

[9] SPring-8 publication ID = 39661

A. Dashora *et al.*: “Study of Magnetism in Fe Doped CoCr₂O₄ using Magnetic Compton Scattering and First-Principles Computations” *Journal of Alloys and Compounds* **824** (2020) 153883.

[10] SPring-8 publication ID = 39840

N. Kikuchi *et al.*: “Microwave-Assisted Switching in CoCrPt Granular Medium under Continuous Microwave Fields” *Journal of Applied Physics* **126** (2019) 083908.

[11] SPring-8 publication ID = 39841

N. Kikuchi *et al.*: “Imaging of Transient Magnetization Dynamics of Co/Pt Multilayer Dots with X-ray Magnetic Circular Dichroism Excited by Microwaves” *Japanese Journal of Applied Physics* **59** (2020) SEED03.

[12] SPring-8 publication ID = 40036

K. Ito *et al.*: “Epitaxial L1₀-FeNi Films with High Degree

of Order and Large Uniaxial Magnetic Anisotropy Fabricated by Denitrating FeNiN Films” *Applied Physics Letters* **116** (2020) 242404.

[13] SPring-8 publication ID = 40173

X. D. Xu *et al.*: “Microstructure, Magnetic and Transport Properties of a Mn_2CoAl Heusler Compound” *Acta Materialia* **176** (2019) 33-42.

[14] SPring-8 publication ID = 40734

H. Suto *et al.*: “Time-Resolved Imaging of an Operating Hard-Disk-Drive Write Head using Nano-Beam X-ray Magnetic Circular Dichroism” *Journal of Applied Physics* **128** (2020) 133903.

[15] SPring-8 publication ID = 40735

H. Suto *et al.*: “Magnetization Manipulation Induced by Nonlocal Spin Injection from a Perpendicular Spin Polarizer: Nano-Beam X-ray MCD Study using an Order-Sorting-Aperture Collection Method” *Applied Physics Express* **13** (2020) 043002.

[16] SPring-8 publication ID = 40740

M. Niwa *et al.*: “Effect of Metallic Mg Insertion in CoFeB/MgO Interface Perpendicular Magnetic Tunnel Junction on Tunnel Magnetoresistance Ratio Observed by Synchrotron X-ray Diffraction” *Journal of Vacuum Science & Technology B* **38** (2020) 033801.

[17] SPring-8 publication ID = 40743

S. Ota *et al.*: “Extended X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy of Stretched Magnetic Films on Flexible Substrate” *Journal of Applied Physics* **127** (2020) 173901.

[18] SPring-8 publication ID = 40754

T. Nakatani *et al.*: “Thickness Dependence of Degree of B2 Order of Polycrystalline $\text{Co}_2(\text{Mn}_{0.6}\text{Fe}_{0.4})\text{Ge}$ Heusler Alloy Films Measured by Anomalous X-ray Diffraction and its Impacts on Current-Perpendicular-to-Plane Giant Magnetoresistance Properties” *Scripta Materialia* **189** (2020) 63-66.

2018A 期 採択長期利用課題の事後評価について - 1 -

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用推進部

2018A 期に採択された長期利用課題について、2019B 期に 2 年間の実施期間が終了したことを受け、第 66、67 回 SPring-8 利用研究課題審査委員会長期利用分科会（2019 年 12 月 17 日、18 日開催）による事後評価が行われました。

事後評価は、長期利用分科会が実験責任者に対しヒアリングを行った後、評価を行うという形式で実施し、SPring-8 利用研究課題審査委員会で評価結果を取りまとめました。以下に評価を受けた課題の評価結果を示します。研究内容については本誌の「最近の研究から」に実験責任者による紹介記事を掲載しています。

なお、2018A 期に採択された長期利用課題 8 課題のうち残り 4 課題の評価結果は次号以降に掲載する予定です。

- 課題 1 -

課題名	イオンポンプの結晶構造解析
実験責任者(所属)	豊島 近 (東京大学)
採択時課題番号	2018A0144
ビームライン	BL41XU
利用期間/配分総シフト	2018A~2019B/72 シフト

[評価結果]

本課題では、(1) 生物学的に重要なカルシウムポンプ (Ca^{2+} -ATPase)、(2) 各種疾患に関与する Na^+/K^+ -ATPase を対象に、それらの反応サイクル中に蓄積する各種中間体の結晶構造を決定するとともに、(3) $\text{Ca}^{2+}/\text{Na}^+/\text{K}^+$ -ATPase 近隣の脂質二重膜を可視化することを目的としている。

(1) については、2 種類の新規反応中間体を構造解析し、反応サイクル中におけるそれらの位置付けを同定することに成功している。これまでの一般/長期利用課題の成果を通算すると、構造決定された中間体は計 14 種となり、反応サイクル全体をほぼ網羅しつつある。なかでも、Glu309 変異体についての研究では、

Glu309 の脱プロトン化に伴うサブÅの局所的構造変化が静電的反発を引き起こし、それが引き金となって空間的に離れた Ca^{2+} 結合サイトと ATP 化学反応サイトが協同的 (非局所的) に制御されることを示している (E2 状態から E1 状態への遷移)。その他にも、 Ca^{2+} 結合サイトや ATP 化学反応サイトに関する新発見がなされており、 Ca^{2+} -ATPase の反応機構の完全解明に更に一步近づいたと言える。(2) および (3) は高難度の研究対象であるが、条件検討や最適化を繰り返すことにより着実に高分解能化されつつある。

上記のとおり各項目において進捗が認められ、それらの成果は注目度の高い国際誌の原著論文やデータベースへの座標登録として発表されており、大きな発見と進展を見ることができた。未発表データについても、生理学的な意義が十分に見出されること、それらが論文投稿直前であることが確認され、中間段階として十分な成果であると判断された。

[成果リスト]

(査読付き論文)

[1] SPring-8 publication ID = 37407

N. Tsunekawa *et al.*: “Mechanism of the E2 to E1 Transition in Ca^{2+} Pump Revealed by Crystal Structures of Gating Residue Mutants” *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **115** (2018) 12722-12727.

[2] SPring-8 publication ID = 39068

C. Toyoshima and Y. Norimatsu: “Dynamics of Interactions between a Membrane Protein and Phospholipids as Revealed by X-ray Solvent Contrast Modulation” 放射光 (*Journal of the Japanese Society for Synchrotron Radiation Research*) **31** (2018) 212-218.

[3] SPring-8 publication ID = 40243

Y. Kabashima *et al.*: “What ATP Binding does to the

Ca²⁺ Pump and How Nonproductive Phosphoryl Transfer is Prevented in the Absence of Ca²⁺
Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America **117** (2020) 18448-18458.

[4] SPring-8 publication ID = 41256

R. Kanai *et al.*: “Binding of Cardiotonic Steroids to Na⁺K⁺-ATPase in the E2P State” *Proceedings of the National Academy of the United States of America* **118** (2021) e2020438118.

－ 課題2 －

課題名	熱機関用超高速・マイクロスケール燃料噴霧の X 線計測：新たな X 線計測技法の構築による未解明の物理因子解析
実験責任者(所属)	文 石洙 (Inha 大学)
採択時課題番号	2018A0145
ビームライン	BL40XU
利用期間/配分総シフト	2018A~2019B/120 シフト

[評価結果]

本課題は、エンジン内における燃料噴霧の形成メカニズム解明を目指して 2014B 期より 3 年間にわたり実施された課題「クリーン・高効率次世代エンジン開発への X 線光学手法の適用：超高速燃料噴霧の形成メカニズム解明及び理論構築」を発展的に継続したものである。前課題では、ノズルから噴出した燃料の噴霧構造モデルを構築したが、本課題はノズル内部流とノズル出口の初期流動に関わる代表的な物理因子、①ノズル内部キャビテーション・液体体積分率、②ノズル内部の流れおよび乱流構造、③ノズル内部流特性によるノズル出口流動の不安定性、を解析できる新たな計測手法を構築し、解明することを目標としたものであった。それぞれ、難しいテーマではあったが、①については、前課題で開発した形状を単純化したアクリル製ノズルを用いるとともに、トレーサを新たに導入することで、キャビテーション内の液体体積分率を解析できる新たな手法を開発し成功した。③に関しては、最大 1.2 MHz で撮影できる高速カメラシステムを導入するとともに拡大レンズの倍率を 10 倍から 20 倍に変更したシステムを構築し、様々な噴射圧条件におけるノズル出口流動の速度計測を定量的に解析することに成功している。②に関しても、①で導入したトレーサ粒子を用いて C

モードの連続する 3 パルスで撮影することでノズル内部流の粒子映像速度解析を実施し、キャビテーション内の液体流速分布と乱流構造の可視化に成功している。更に、上記の方法で可視化が困難であった比較的速度が速い主流領域における流速や乱流構造についても、より光量が稼げる H モードのシングルバンチを利用する方法で主流内のトレーサの動きを可視化することを可能にした。これらの一連の計測手法の開発は、SPring-8 のバンチモードと BL40XU で利用できる高フラックス・ピンクビームを最大限に活かしたものであり、大変評価できるものである。また、得られた成果も、高圧燃料噴射における未知の物理因子を解明するもので、次世代エンジン開発に大きく貢献できると期待される。成果発表に関しても、2 年の間に既に論文 4 報を出版しており、準備中も含め、今後も多数の研究論文が創出されると期待できる。

以上のように、本課題は噴霧現象を X 線ストロボ撮影で捉える独創性の高いものであり、産業基盤技術としての重要性も高い。初期の目標も十分に達成しており、高く評価できる。

[成果リスト]

(査読付き論文)

[1] SPring-8 publication ID = 39147

R. Prasetya *et al.*: “X-ray Phase Contrast Imaging of Cavitation and Discharged Liquid Jet in Nozzles with Various Sizes” *Atomization and Sprays* **29** (2019) 59-78.

[2] SPring-8 publication ID = 39148

R. Prasetya *et al.*: “In-Nozzle Cavitation and Discharges Liquid Jet during Transient Injection Process” *Atomization and Sprays* **29** (2019) 123-141.

[3] SPring-8 publication ID = 39149

K. Kotani *et al.*: “X-Ray High Speed Visualization and Measurement of Cavitation Flow in a Nozzle under Transient Injection Condition” *Proceedings of the 14th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ICLASS 2018)* (2018) ID200.

[4] SPring-8 publication ID = 39682

M. Kawano *et al.*: “Combustion Simulation Technology Applied to SKYACTIV-X” マツダ技報 (*Mazda Technical Review*) **36** (2019) 44-50.

[5] SPring-8 publication ID = 41152

O. F. Atac *et al.*: “Unraveling the Initial Flash Boiling Spray Formation at the Same Superheated Index Achieved by Altering Ambient Pressure and Fuel Temperature Independently” *International Journal of Heat and Mass Transfer* **169** (2021) 120897.

－ 課題3 －

課題名	ナノ X 線顕微分光法を利用した分子環境地球化学的アプローチによるサステナブル科学の推進
実験責任者(所属)	高橋 嘉夫 (東京大学)
採択時課題番号	2018A0148
ビームライン	BL01B1、BL37XU
利用期間/配分総シフト	2018A~2019B/147 シフト (BL01B1:30 シフト、BL37XU:117 シフト)

[評価結果]

本長期利用課題は、地球表層で起きる環境挙動や物質循環を、原子・分子レベルの化学素過程の視点から理解し、環境問題や資源問題に対して、地球化学的立場から解決の糸口を探ろうとするものである。ここでは、BL37XU の高エネルギー X 線ナノビームを用いた顕微分光法を中心に、BL01B1 におけるバルク試料評価を補足的に利用しつつ、多様な地球環境物質を対象とした微量元素の組成や化学種の計測を行っている。本期間に得られた重要な成果として、

- (1) 福島原発事故由来の放射性セシウム濃集粒子 (CsMP) に対して、異なる二種類の構造を持つ CsMP を μ -CT 法によって精緻に観察し、空隙率や鉄の分布の違いを明らかにしている。さらに、CsMP 中のウランやセシウムを XRF-XAFS 法によって詳細に化学分析することで、CsMP の生成・放出プロセスのモデルを提唱することに成功した。
- (2) 風化花崗岩がレアアース鉱床となりうるという申請者の仮説に基づいて、申請者自身が発見した陸上レアアース鉱床から採取した試料を対象とし、XRF によりレアアース含有量を高い精度で定量評価するとともに、XAFS による化学種解析を通じてその形成機構を推定することに成功した。などを挙げる事ができる。また、これらの研究を進める過程において、30 keV 以上の高エネルギー X 線を用いることでマトリクス効果を低減し、同一セット

アップで広いエネルギー範囲での実験を実現し、XRF による定量評価精度を向上させる手法や、マルチスケールでのイメージング計測などの開発も行っている。最先端の放射光分析技術を駆使して微量環境元素の分析に取り組むと同時に、ビームラインスタッフの協力の下で X 線分光・イメージング技術の進展に資する開発も積極的に進めている。当初の計画とは研究内容が一部異なっているが、研究の進展に合わせて適宜計画が修正されたものであり、当初の研究目的を十分に達成したものと評価する。

研究期間中に 12 報の英文査読付き論文を発表しているほか、招待講演等も多く行っており、本研究結果が地球科学の分野で高い評価を得ていることが伺える。一方で、社会的にも高い波及効果が期待できる成果であるため、論文誌を通じた情報発信に加えて、非専門家も対象にした一層の情報発信をお願いしたい。

[成果リスト]

(査読付き論文)

- [1] SPring-8 publication ID = 36516
K. Tokunaga *et al.*: “A New Technique for Removing Strontium from Seawater by Coprecipitation with Barite” *Journal of Hazardous Materials* **359** (2018) 307-315.
- [2] SPring-8 publication ID = 38340
M. Kurisu and Y. Takahashi: “Testing Iron Stable Isotope Ratios as a Signature of Biomass Burning” *Atmosphere* **10** (2019) 76.
- [3] SPring-8 publication ID = 38341
S.-H. Lee and Y. Takahashi: “Carbothermal Preparation of Magnetic-Responsible Ferrihydrite Based on Fe-Rich Precipitates for Immobilization of Arsenate and Antimonate: Batch and Spectroscopic Studies” *Chemosphere* **237** (2019) 124489.
- [4] SPring-8 publication ID = 38993
T. Solongo *et al.*: “Distribution and Chemical Speciation of Molybdenum in River and Pond Sediments Affected by Mining Activity in Erdenet City, Mongolia” *Minerals* **8** (2018) 288.
- [5] SPring-8 publication ID = 38994
A. Yamaguchi *et al.*: “Local Structure of Strontium Adsorbed on 2:1 Clay Minerals and its Comparison with Cesium by

XAFS in Terms of Migration of Their Radioisotopes in the Environment” *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* **317** (2018) 545-551.

[6] SPring-8 publication ID = 38997

S.-H. Lee *et al.*: “Enhanced Adsorption of Arsenate and Antimonate by Calcined Mg/Al Layered Double Hydroxide: Investigation of Comparative Adsorption Mechanism by Surface Characterization” *Chemosphere* **211** (2018) 903-911.

[7] SPring-8 publication ID = 38998

S. Yang *et al.*: “Comparison of Arsenate and Molybdate Speciation in Hydrogenetic Ferromanganese Nodules” *ACS Earth and Space Chemistry* **3** (2019) 29-38.

[8] SPring-8 publication ID = 39000

H.-B. Qin *et al.*: “Enrichment Mechanisms of Antimony and Arsenic in Marine Ferromanganese Oxides: Insights from the Structure Similarity” *Geochimica et Cosmochimica Acta* **257** (2019) 110-130.

[9] SPring-8 publication ID = 39052

K. Tanaka and Y. Takahashi: “Application of MV-edge XANES to Determination of U Oxidation State in Zircon” *Geochemical Journal* **53** (2019) 329-331.

[10] SPring-8 publication ID = 39232

S.-H. Lee and Y. Takahashi: “Selective Immobilization of Iodide onto a Novel Bismuth-Impregnated Layered Mixed Metal Oxide: Batch and EXAFS Studies” *Journal of Hazardous Materials* **384** (2020) 121223.

容として実施された：(1) 新規中空錯体の構築と構造解析、(2) 巨大中空錯体の構築と構造解析、(3) 巨大中空錯体へのタンパク質包接と構造解析、(4) ペプチド断片のフォールディングとアセンブリ。

いずれの研究内容もユニークな着想に基づく新規性の高い研究であり、本課題の実施を通して着実な発展が見られている。(1) ではゲスト分子を中空空間に速度論的に取り込むことに成功し、(4) では鎖状分子集合体であるカテナンの新規構造が創製された。(2) では大きな進捗は見られなかったが、さらなる大型の錯体 (Q>8) の構築を進めており、関連する (3) では新たに植物ワックス分解酵素を錯体内に包接し、有機溶媒耐性の獲得など酵素の機能拡張に道を拓いた。一方、対象となる中空分子のX線解析技術の確立とそれらを利用した新しいX線解析法の開発については今後さらに発展を期待したい。

これらの成果は現時点でいずれも基礎研究の段階にあるが、中空構造へのゲスト分子の包接がより広く利用できることになれば、化学反応の制御や新たな分析手法の開発など化学・生物学分野への大きな波及効果が期待できる。

また、情報発信においても、これらの成果が注目度の高い学術誌の原著論文として発表され、さらに実験責任者の各種受賞にもつながるなど国際的な評価も得られている。

以上の通り、各項目において十分な進捗が認められ、本課題の実施は成果創出に意義があったと認められる。

[成果リスト]

(査読付き論文)

[1] SPring-8 publication ID = 39130

M. Yamagami *et al.*: “Synthetic β -Barrel by Metal-Induced Folding and Assembly” *Journal of the American Chemical Society* **140** (2018) 8644-8647.

[2] SPring-8 publication ID = 39475

Y. Inomata *et al.*: “Metal-Peptide Torus Knots from Flexible Short Peptides” *Chem* **6** (2020) 294-303.

[3] SPring-8 publication ID = 39588

Y. Domoto *et al.*: “Self-Assembly of Coordination Polyhedra with Highly Entangled Faces Induced by Metal-Acetylene Interactions” *Angewandte Chemie International Edition* **59** (2020) 3450-3454.

— 課題4 —

課題名	中空構造をもつ巨大自己集合錯体分子群の単結晶X線構造解析と機能創出
実験責任者(所属)	藤田 誠 (東京大学)
採択時課題番号	2018A0154
ビームライン	BL26B1、BL38B1、BL41XU、BL45XU
利用期間/配分総シフト	2018A~2019B/39シフト (BL26B1:15シフト、BL38B1:18シフト、BL41XU:3シフト、BL45XU:3シフト)

[評価結果]

本実験課題は、放射光を用いて初めて得られる結晶構造などを基に、有機分子ないしペプチドの金属錯体からなる中空構造を有する化合物の設計および合成を実施することが目的となっており、以下の4つの内

SACLA 利用研究課題審査委員会を終えて

SACLA 利用研究課題審査委員会 委員長
大阪大学 蛋白質研究所 中川 敦史

1. はじめに

2017年4月からの第4期2年間に引き続き、2019年4月～2021年3月の2年間、第5期SACLA利用研究課題審査委員会(2019B期～2021A期の審査委員会)の委員長を務めさせていただきました。2020年初頭から始まった新型コロナウイルス感染症(COVID-19)拡大の影響で、世の中が大きく変わりましたが、SACLA利用研究に関しては、理化学研究所とJASRIの方々のご尽力により、実験面での影響が最小限に押さえられました。課題審査関連もJASRI利用推進部の方々のご尽力で様々な運用を柔軟に対応していただいたおかげで、スムーズに研究課題が実施されたと思います。関係者の皆様にはこの場をお借りして深くお礼申し上げます。

以下に、この2年間の審査を振り返っての簡単な感想を述べさせていただきます。

2. 新型コロナウイルス感染拡大への対応

この2年間の審査期間の後半に入る直前の、2020年初頭にCOVID-19の感染拡大という未曾有のパンデミックが起こりました。2020年4月7日に兵庫県を含む7都府県に緊急事態宣言が発令されたことに伴って、SACLAも同日よりユーザー利用が停止となりました。そのため、4月17日に2020B期の課題募集を行うべく事務局を中心に準備が進められていましたが、募集は急遽延期となりました(その後募集中止を決定)。その一方で、このような緊急事態下において、COVID-19関連研究にSACLAが担う責務を果たすために、「緊急課題」が設置されることになりました。この緊急課題は、随時申請可能で、SACLA-PRCにおいて通常の審査内容に加えて、緊急性、重要性が審査され、審査から3週間程度での利用が可能な

制度となっています。なお、緊急課題は2020A期より開始されましたが、今後も常設の利用研究課題として続けられることになっています。

約2ヵ月間のSACLAのユーザー利用停止措置およびその前後の所属機関の出張制限などにより実施ができなかった課題については、10月以降の期間に行うこととなり、当初2020年7月までの予定であった2020A期は2021年3月まで延長となりました。そのため、2020B期の課題募集は中止となりましたが、若干のチームタイムの余裕ができたため、追加募集が行われました。

COVID-19の感染拡大により、国内外の移動が大幅に制限され、特に海外からの来所実験はほとんど不可能となりましたが、施設側の迅速かつ柔軟な対応により、オンラインミーティングなどを活用しながら、施設の方や最小限の来所者による現場での実験と外部ユーザーのリモート参加により、多くの課題が実施されたとお聞きしています。しかし、チームタイム直前の状況次第でどうしても実施できないと判断せざるを得ない課題も出てくることが見込まれたので、来所不可などによる課題キャンセルが発生した場合にもチームタイムが無駄にならない、2021A期より適用予定であった「補欠課題」を前倒しで設定することを、SACLA選定委員会で認めていただきました。

後でも延べますように、本委員会での審査は委員による合議制で行われるため、通常であれば対面での議論が重要なのですが、COVID-19感染拡大の状況下では、課題審査に関しては、オンライン会議に切り替えて行われました。オンライン会議は、対面での会議に比べて議論が若干やりにくい時がありますが、本会議では特に不自由は感じず、従来通りの活発な議論が行われ、課題審査が行われたと考えています。

3. 本委員会での審査に関して

3.1 審査方法について

2019年5月に発行されたSPring-8/SACLA利用者情報(Vol.24 No.2)に、SACLAの共用開始から5年以上が経過し、安定利用のフェーズに移行し、最先端のX線光源から最大限のアウトプットを引き出して、新しいサイエンスを開拓することが求められてきたと書かせていただきました。今期もこのような考えに基づいて課題審査が行われました。

審査方法の骨子を以下にまとめます。

1. 使用できるビームラインが3本(BL1、BL2、BL3)であること、応募課題総数は100程度であることから、分科会に分けるより審査委員会で総合的に議論の方が効率的であると考え、SPring-8で行っているレフェリー・分科会・審査委員会の3段階の審査と異なり、SACLAでは分科会に分けず、レフェリー・審査委員会の2段階で行う。
2. 原則として、本委員会委員が全ての応募課題の審査を行い、本委員会で調整の上、選定案を決定する。
3. 年間ビームタイム設定は、SPring-8と同様、24時間連続運転、および、同時期を想定する。ただし、1シフトは12時間とする。

3.2 レフェリーについて

本委員会の施設外委員は、レフェリーとして、応募課題の、1) 科学技術的妥当性(絶対評価)、2) SACLAの必要性(絶対評価)、3) 総合評価(相対評価)に関する審査を1課題あたり4名程度で事前に行い、施設側委員は、4) 実施可能性評価(絶対評価)、5) 奨励シフト数評価、6) 安全評価(絶対評価)の審査を事前に行い、本委員会に臨みました。

3.3 本委員会での審査方法

本委員会では、上記のレフェリーによる審査の結果を踏まえて、総合的に課題の採否に関して議論を行いました。特に、供給できるビームタイムの制約との関係で、レフェリー審査結果が採否のボーダーラインの近傍にある課題に関して詳細に議論を行いました。その際、以下の点に留意しました。

- ① 委員(=レフェリー)間の評価結果のバラツキの程度：採否ボーダーライン前後の課題について、個別

に各委員間の評価のバラツキを吟味。

- ② 科学技術的意義およびSACLAの必要性(いずれも絶対評価)と総合評価の相関：上記ボーダーライン前後の課題について、科学技術的意義およびSACLAの必要性と、総合相対評価との相関を吟味。
- ③ 利用機会：申請者の多様性(申請者の重複、所属機関、国内外、産学など)を確保するための配慮。
- ④ これまでに本申請に関連したSACLA実施課題がある申請者は、課題申請時に進捗報告書を記入し、当該申請課題は、審査時の参考資料とする。

これまで、本委員会での議論の結果、不採択となった課題の申請者に伝える情報の中に、不採択課題の中での評価結果が上位、中位、下位のどの位置にあったかの情報を盛り込むとともに個別事前審査において各課題に付された審査コメントをとりまとめ、課題申請者にフィードバックすることとしていましたが、2019B期からは、採択課題についても、申請者の施設利用の際に有益になると考えられる場合には、フィードバックコメントを付与することとしています。

3.4 緊急課題の審査方法

緊急課題は迅速な課題審査が求められることから、申請があった場合の課題選定の方法については、次のような審査方法をとっています。

- 1) 施設側委員による技術審査
- 2) 申請内容の関連分野のPRC委員3~4名を選任
- 3) 選任された委員により採択の妥当性について審査
- 4) PRC委員長承認
- 5) ビームタイム配分(PRCで配分したビームタイムとは別に(追加で)配分)
- 6) 次回の選定委員会で報告(時期指定課題と同様)《2020A期以降の新規事項》

3.5 補欠課題について

2020年9月に開かれた第22回SACLA選定委員会において2021A期の補欠課題が認められました。

補欠課題は、各ビームラインにおいて、採択ボーダーライン直下にある不採択課題のうち一定数を選定しておき、キャンセルが出た場合に繰り上げ採択し、ビームタイムを配分するものです。この制度の採用により、COVID-19の感染拡大状況などによって、当初

計画していた実験ができない場合にビームタイムの無駄が出ないようにしました。

4. 審査結果の概要

2019B 期 (BL1 : 54 シフト、BL2 : 81.5 シフト、BL3 : 140 シフト、計 275.5 シフト) では、応募 81 課題に対して 57 課題を採択しました (採択率=70%)。採択された 57 課題におけるシフト配分率 (=配分シフト数/要求シフト数) は 56%でした。

2020A 期 (通常募集) (BL1 : 38 シフト、BL2 : 89 シフト、BL3 : 135 シフト、延べ 262 シフト) では、応募 65 課題に対して 50 課題を採択しました (採択率=77%)。採択された 55 課題におけるシフト配分率は 62%でした。さらに、2020 年 7~8 月にかけて行われた 2020A 期の追加募集 (BL1 : 32 シフト、BL2 : 20 シフト、BL3 : 15 シフト、計 67 シフト) には 36 の研究課題の応募があり、14 課題が採択されました (採択率=39%、シフト配分率=29%)。その結果、通常募集と追加募集を合せて 2020A 期は 101 課題の応募に対して 64 課題が採択されたこととなります (採択率=63%)。これらに加えて、補欠繰り上げ 1 課題が実施されています。

2021A 期 (BL1 : 64 シフト、BL2 : 72 シフト、BL3 : 112 シフト、計 248 シフト) では、応募 63 課題に対して 44 課題を採択しました (採択率=70%)。採択された 44 課題におけるシフト配分率は 64%でした。

5. まとめと今後の課題

世界最高性能の X 線光源である SACLA ですが、諸外国にも様々なスペックの X 線自由電子レーザー施設が次々と設置され、施設間での競争も厳しくなっています。従来からのパワーユーザーに加えて、より幅広い分野・領域の研究者に対して、SACLA の優位性を理解してもらうことを目的として、2021A 期より、「SACLA 試験利用制度」が始まることになりました。これは、BL2、BL3 のビームタイムの 5%を上限として、特定の研究課題 (まずは、施設側指定の装置、条件によるシリアルフェムト秒結晶構造解析 (SFX)、ハイパワーナノ秒レーザー実験) について、試料のスクリーニング、測定条件・フィージビリティの検討を行うために、1 課題につき 0.5 シフト (最大

1 シフト) を配分する制度です。

また、ポストコロナ・ウィズコロナ時代に対応する必要性からリモート測定や自動測定など、来所を必要としない実験方法への対応も急速に進んでいます。このような新しい実験形態や、「SACLA 試験利用制度」や「緊急課題制度」など新しく導入された制度も活用し、安定利用のフェーズに入った SACLA の性能を最大限に活用して、新しいサイエンスを開拓し、社会に貢献していくことがさらに強く求められてきており、本審査委員会では「より良い」課題を選んでいくことが益々重要になってきていると考えています。

最後になりましたが、より良い課題を選定するという熱い思いで多くの申請書を細部にわたって熟読し、さらに長時間にわたって活発なご議論をいただきました本委員会の委員の皆様と、委員会を支えていただきました JASRI スタッフの皆様の御尽力に敬意を表し、心より感謝申し上げます。

中川 敦史 NAKAGAWA Atsushi

大阪大学 蛋白質研究所
〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 3-2
TEL : 06-6879-4313
e-mail : atsushi@protein.osaka-u.ac.jp

2020A 期において実施された SACLA 利用研究課題（共用課題）について

登録施設利用促進機関

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用推進部

2012年3月より供用運転が開始されたSACLAでは、第17回目の利用期である2020A期の利用研究課題（共用課題）が、2020年3月1日から2021年3月1日にかけて実施されました。

2020A期は、新型コロナウイルスの影響により、ユーザー利用が4月11日から6月15日まで停止されるとともに、2021年3月まで延長されました。また、採択済の利用研究課題は10月以降のビームタイムへの延期を可能とするとともに、追加募集を行いました。

この期間において、ビームラインBL1、BL2またはBL3にて計54の利用研究課題が実施され、ビームタイムは計276シフト（1シフト＝12時間）が利用されました。

実施課題は、一般課題（成果非専有利用）として、それぞれ表1のとおり国内外機関所属の実験責任者により実施されました。成果専有利用制度である一般課題（成果専有利用）及び時期指定課題（成果専有利用のみ）の利用、また、緊急課題の利用はありませんでした。

なお、これらのほか、同ビームラインにおいてJASRIスタッフによるインハウス課題が計5課題実施され、ビームタイムは計36シフトが利用されました。

実施課題の課題名は、以下のWebサイトに掲載しています。

◆ SACLA User Information

> SACLA 利用案内 > 採択課題／実施課題

> 実施課題一覧 > 2020A

http://sacla.xfel.jp/wp-content/uploads/sacla_performed_proposal_2020A_j.pdf

また、利用課題実験報告書（Experiment Summary Report：成果非専有利用のみ）は、以下のWebサイトに掲載しています。

◆ SACLA User Information

> 成果等検索 > 利用課題実験報告書検索

<https://user.spring8.or.jp/uisearch/expreport/ja>

成果は、課題実施期終了後3年以内に、査読付き原著論文等で公開されます。

公益財団法人

高輝度光科学研究センター 利用推進部

TEL：0791-58-0961

e-mail：sacla.jasri@spring8.or.jp

表1 2020A期SACLA利用研究実施課題

課題種	産業界		大学等教育機関		国公立試験研究機関等		海外機関		合計	
	実施課題数	実施シフト数	実施課題数	実施シフト数	実施課題数	実施シフト数	実施課題数	実施シフト数	実施課題数	実施シフト数
一般課題	2	6	23	126.5	16	84	13	59.5	54	276
(成果非専有利用)										
(成果専有利用)										
時期指定課題（成果専有利用）										
緊急課題										
合計	2	6	23	126.5	16	84	13	59.5	54	276

○実施課題を実験責任者の所属（産学官 海外）で区分。

○延べ来所者数は計461人。

SPring-8/SACLA 利用者選定に係る 2019-2020 年度委員会の委員名簿の公表

登録施設利用促進機関
公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用推進部

2019-2020 年度の SPring-8/SACLA 利用者選定のために設置した委員会委員名を公表します。一部の委員会は審査の公正性を保つため任務中は非公開としており、審査の透明性の確保の観点から任務終了後に公表することとしています。

○ 2019-2020 年度 SPring-8 選定委員会

(委員長)

佐々木 聡 東京工業大学 名誉教授

(委員長代理)

藤原明比古 関西学院大学 教授

(委員)

内海 渉 量子科学技術研究開発機構 次世代放射光施設整備開発センター センター長

岸本 浩通 住友ゴム工業株式会社 センター長

木村 昭夫 広島大学 教授

島川 祐一 京都大学 教授

妹尾与志木 佐賀県地域産業支援センター 九州シンクロtron光研究センター 所長

竹田 美和 科学技術交流財団 あいちシンクロtron光センター 所長

月原 富武 兵庫県立大学 特任教授

藤森 淳 早稲田大学 客員教授

村上 洋一 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 教授

山縣ゆり子 熊本大学 名誉教授

山田 和芳 東北大学/高エネルギー加速器研究機構 名誉教授

○ 2019-2020 年度 SACLA 選定委員会

(委員長)

小杉 信博 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 所長

(委員長代理)

中川 敦史 大阪大学 蛋白質研究所 所長/教授

(委員)

旭 良司 名古屋大学 教授

岩井伸一郎 東北大学 教授

河内 哲哉 量子科学技術研究開発機構 関西光科学研究所 所長

木村 剛 東京大学 教授

高橋 瑞稀 第一三共 RD ノバーレ株式会社 主任研究員

濡木 理 東京大学 教授

米田 仁紀 電気通信大学 教授

○ 2019-2020 年度 専用施設審査委員会

(委員長)

村上 洋一 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 教授

(委員長代理)

澤 博 名古屋大学 教授

(委員)

石川 哲也 理化学研究所 放射光科学研究センター センター長

岡島 敏浩 科学技術交流財団 あいちシンクロtron光センター 主席研究員 (副所長格)

木村 滋 高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室長

熊坂 崇 高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室長

後藤 俊治 高輝度光科学研究センター 光源基盤部門長

坂田 修身 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 副センター長 (2020年4月から)

櫻井 吉晴 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 副センター長 (2020年3月まで)

佐治 超爾 高輝度光科学研究センター 情報処理推進室長 (2019年10月から)

島田 賢也 広島大学 放射光科学研究センター センター長/教授
 田中 均 理化学研究所 放射光科学研究センター 副センター長
 田中良太郎 高輝度光科学研究センター 常務理事/放射光利用研究基盤センター長
 為則 雄祐 高輝度光科学研究センター 分光・イメージング推進室長
 花木 博文 高輝度光科学研究センター 安全管理室長 (2020年3月まで)
 廣沢 一郎 高輝度光科学研究センター 産業利用推進室長 (2020年3月まで) /安全管理室長 (2020年4月から)
 藤田 全基 東北大学 教授
 松下 智裕 高輝度光科学研究センター 情報処理推進室長 (2019年9月まで)
 八木 直人 高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室 コーディネーター
 矢橋 牧名 理化学研究所 放射光科学研究センター グループリーダー
 山口 章 高輝度光科学研究センター 常務理事/産業利用・産学連携推進室長 (2020年4月から)
 渡辺 義夫 科学技術交流財団 あいちシンクロトロン光センター 主席研究員

為則 雄祐 高輝度光科学研究センター 分光・イメージング推進室長
 西堀 英治 筑波大学 教授
 野村 昌治 高エネルギー加速器研究機構 ダイヤモンドフェロー
 花木 博文 高輝度光科学研究センター 安全管理室長 (2020年3月まで)
 Baron Alfred 高輝度光科学研究センター 精密分光推進室長 (2020年5月から)
 平岡 望 台湾國家同步輻射研究中心 (NSRRC) グループリーダー
 廣沢 一郎 高輝度光科学研究センター 産業利用推進室長 (2020年3月まで) /安全管理室長 (2020年4月から)
 藤澤 哲郎 岐阜大学 教授
 舟越 賢一 総合科学研究機構 (CROSS) 中性子科学センター 次長
 松下 智裕 高輝度光科学研究センター 情報処理推進室長 (2019年9月まで)
 松田 巖 東京大学 准教授
 毛利 聡 川崎医科大学 教授
 八木 直人 高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室 コーディネーター
 安田 秀幸 京都大学 教授
 横山 利彦 自然科学研究機構 分子科学研究所 教授
 渡辺 義夫 科学技術交流財団 あいちシンクロトロン光センター 主席研究員

○ 2019-2020 年度 SPRing-8 利用研究課題審査

委員会

(委員長)

藤原明比古 関西学院大学 教授

(委員)

井上 豪 大阪大学 教授
 今井 英人 株式会社日産アーク 部長
 金谷 利治 京都大学 名誉教授
 木村 滋 高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室長
 熊坂 崇 高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室長
 後藤 俊治 高輝度光科学研究センター 光源基盤部門長
 坂田 修身 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 副センター長 (2020年4月から)
 櫻井 吉晴 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 副センター長 (2020年3月まで)
 佐治 超爾 高輝度光科学研究センター 情報処理推進室長 (2019年10月から)
 佐藤 眞直 高輝度光科学研究センター 産業利用・産学連携推進室長代理 (2020年4月から)
 高橋 正光 量子科学技術研究開発機構 次世代放射光施設整備開発センター グループリーダー
 谷一 尚 林原美術館 館長/山陽学園大学 副学長 (2020年11月から)

○ 2019-2020 年度 SACLA 利用研究課題審査委

員会

(委員長)

中川 敦史 大阪大学 蛋白質研究所 所長/教授

(委員長代理)

足立 伸一 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 教授

(委員)

有馬 孝尚 東京大学 教授
 井上 豪 大阪大学 教授
 近藤 公伯 量子科学技術研究開発機構 量子ビーム科学研究部門 部長
 坂田 修身 物質・材料研究機構 高輝度放射光ステーション長
 佐藤 堯洋 Linac Coherent Light Source, SLAC National Accelerator Laboratory Staff Scientist
 佐藤 衛 横浜市立大学 教授
 清水 敏之 東京大学 教授

千田 俊哉 高エネルギー加速器研究機構 構造生物学研究センター 教授/センター長
 唯 美津木 名古屋大学 教授
 津本 浩平 東京大学 教授
 登野 健介 高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室 グループリーダー
 中堤 基彰 European XFEL, GmbH Senior Scientist
 西野 吉則 北海道大学 教授
 西堀 英治 筑波大学 教授
 初井 宇記 高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室 グループリーダー
 花木 博文 高輝度光科学研究センター 安全管理室長 (2020年3月まで)
 菱川 明栄 名古屋大学 教授
 廣沢 一郎 高輝度光科学研究センター 安全管理室長 (2020年4月から)
 松田 巖 東京大学 准教授
 矢橋 牧名 高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室長
 米田 仁紀 電気通信大学 教授

○ 2019-2020 年度 SPring-8 課題審査委員会

分科会委員

◎分科会主査 ○小分科主査

[生命科学分科会]

〈分科会 1 (蛋白質結晶構造解析)〉

◎◎井上 豪 大阪大学 教授
 熊坂 崇 高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室長
 杉本 宏 理化学研究所 専任研究員

〈分科会 2 (生物試料回折散乱 (非結晶))〉

○藤澤 哲郎 岐阜大学 教授
 岩本 裕之 高輝度光科学研究センター 研究プロジェクト推進室 特別嘱託研究員
 岡 俊彦 静岡大学 准教授

〈分科会 3 (バイオメディカルイメージング、医学研究一般 (元素分析、X線散乱、放射線効果等))〉

○毛利 聡 川崎医科大学 教授
 世良 俊博 九州大学 准教授
 八木 直人 高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室 コーディネーター

[散乱・回折分科会]

〈分科会 1 (無機系結晶、有機・分子系結晶)〉

○西堀 英治 筑波大学 教授
 杉本 邦久 高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室 チームリーダー
 中尾 裕則 高エネルギー加速器研究機構 准教授

〈分科会 2 (高圧物性、地球惑星科学)〉

◎◎舟越 賢一 総合科学研究機構 (CROSS) 中性子科学センター 次長
 上床 美也 東京大学 教授
 大石 泰生 高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室 グループリーダー

〈分科会 3 (材料イメージング (CT、トポグラフィ等))〉

○安田 秀幸 京都大学 教授
 上杉健太郎 高輝度光科学研究センター 分光・イメージング推進室 グループリーダー
 矢代 航 東北大学 准教授

〈分科会 4 (非弾性散乱 (コンプトン散乱、核共鳴散乱、高分解能 X 線散乱))〉

○平岡 望 台湾國家同步輻射研究中心 (NSRRC) グループリーダー
 石井 賢司 量子科学技術研究開発機構 量子科学研究部門 首席研究員
 筒井 智嗣 高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室 チームリーダー (2020年4月まで)
 Baron Alfred 高輝度光科学研究センター 精密分光推進室長 (2020年5月から)

〈分科会 5 (高分子 (蛋白質を除く))〉

○金谷 利治 京都大学 名誉教授
 関口 博史 高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室 チームリーダー
 竹中 幹人 京都大学 教授

〈分科会 6 (非晶質 (準結晶、アモルファス、液体等)、低次元系、表面界面構造、ナノ構造、機能性界面・薄膜材料等、ホログラフィー)〉

○高橋 正光 量子科学技術研究開発機構 次世代放射光施設整備開発センター グループリーダー
 今井 康彦 高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室 チームリーダー
 川北 至信 日本原子力研究開発機構 J-PARC センター 主任研究員

[XAFS・蛍光分析分科会]

(XAFS、蛍光 X 線分析、微量分析)

- ◎今井 英人 株式会社日産アーク 部長
 雨澤 浩史 東北大学 教授
 為則 雄祐 高輝度光科学研究センター 分光・イメージング推進室長

[分光分科会]

〈分科会 1 (固体光電子分光物性、赤外物性、光化学)〉

- ◎松田 巖 東京大学 准教授
 池本 夕佳 高輝度光科学研究センター 分光・イメージング推進室 チームリーダー
 齋藤 智彦 東京理科大学 教授

〈分科会 2 (MCD (軟 X 線、硬 X 線))〉

- 横山 利彦 自然科学研究機構分子科学研究所 教授
 鈴木 基寛 高輝度光科学研究センター 分光・イメージング推進室 グループリーダー
 関山 明 大阪大学 教授

[産業利用分科会]

- ◎渡辺 義夫 科学技術交流財団 あいちシンクロトロン光センター 主席研究員
 木村 正雄 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 教授
 佐藤 眞直 高輝度光科学研究センター 産業利用・産学連携推進室長代理
 妹尾与志木 佐賀県地域産業支援センター 九州シンクロトロン光研究センター 所長
 宮崎 司 総合科学研究機構 (CROSS) 中性子科学センター 次長

[人文・社会分科会] (2020 年 11 月発足)

- ◎谷一 尚 林原美術館 館長/山陽学園大学 副学長
 奥山 誠義 橿原考古学研究所 指導研究員
 中井 泉 東京理科大学 名誉教授
 八木 直人 高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室 コーディネーター

[先進技術産業応用分科会] (2020 年 8 月まで)

- ◎野村 昌治 高エネルギー加速器研究機構 ダイヤモンドフェロー
 宇留賀朋哉 高輝度光科学研究センター 研究プロジェクト推進室 特別嘱託研究員
 菖蒲 敬久 日本原子力研究開発機構 物質科学研究センター 研究主幹

- 竹田 美和 科学技術交流財団 あいちシンクロトロン光センター 所長
 藤田 大介 物質・材料研究機構 先端材料回折研究拠点 拠点長

[長期利用分科会]

- ◎野村 昌治 高エネルギー加速器研究機構 ダイヤモンドフェロー
 秋山 修志 自然科学研究機構 分子科学研究所 教授
 有馬 孝尚 東京大学 教授
 岩田 忠久 東京大学 教授
 木村 滋 高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室長
 熊坂 崇 高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室長
 坂田 修身 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 副センター長 (2020 年 4 月から)
 櫻井 吉晴 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 副センター長 (2020 年 3 月まで)
 佐藤 眞直 高輝度光科学研究センター 産業利用・産学連携推進室長代理 (2020 年 4 月から)
 為則 雄祐 高輝度光科学研究センター 分光・イメージング推進室長
 中島 健次 日本原子力研究開発機構 J-PARC センター セクションリーダー
 西畑 保雄 日本原子力研究開発機構 物質科学研究センター デイビジョン長
 廣沢 一郎 高輝度光科学研究センター 産業利用推進室長 (2020 年 3 月まで)
 八木 直人 高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室 コーディネーター
 横谷 尚陸 岡山大学 教授

◎ 2019-2020 年度 パートナーユーザー審査委員会

(委員長)

- 野村 昌治 高エネルギー加速器研究機構 ダイヤモンドフェロー

(委員)

- 秋山 修志 自然科学研究機構 分子科学研究所 教授
 有馬 孝尚 東京大学 教授
 岩田 忠久 東京大学 教授
 木村 滋 高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室長
 熊坂 崇 高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室長
 後藤 俊治 高輝度光科学研究センター 光源基盤部門長

坂田 修身	高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 副センター長 (2020年4月から)
櫻井 吉晴	高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 副センター長 (2020年3月まで)
佐治 超爾	高輝度光科学研究センター 情報処理推進室長 (2019年10月から)
佐藤 眞直	高輝度光科学研究センター 産業利用・産学連携推進室長代理 (2020年4月から)
為則 雄祐	高輝度光科学研究センター 分光・イメージング推進室長
中島 健次	日本原子力研究開発機構 J-PARC センター セクションリーダー
西畑 保雄	日本原子力研究開発機構 物質科学研究センター ディビジョン長
廣沢 一郎	高輝度光科学研究センター 産業利用推進室長 (2020年3月まで)
松下 智裕	高輝度光科学研究センター 情報処理推進室長 (2019年9月まで)
八木 直人	高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室 コーディネーター
横谷 尚睦	岡山大学 教授

○ 2019-2020 年度 新分野開拓利用審査委員会

(委員長)

下村 理 高エネルギー加速器研究機構 名誉教授

(委員)

足立 伸一	高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 教授
木村 滋	高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室長
熊坂 崇	高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室長
栗栖 源嗣	大阪大学 教授
後藤 俊治	高輝度光科学研究センター 光源基盤部門長
坂田 修身	高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 副センター長 (2020年4月から)
櫻井 吉晴	高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 副センター長 (2020年3月まで)
佐藤 勝昭	東京農工大学 名誉教授
佐藤 眞直	高輝度光科学研究センター 産業利用・産学連携推進室長代理 (2020年4月から)
為則 雄祐	高輝度光科学研究センター 分光・イメージング推進室長
並河 一道	東京学芸大学 名誉教授
西 敏夫	東京大学/東京工業大学 名誉教授
廣沢 一郎	高輝度光科学研究センター 産業利用推進室長 (2020年3月まで)
八木 直人	高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室 コーディネーター

○ 2019-2020 年度 SPring-8/SACLA 成果審査委員会

(委員長)

坂田 誠 名古屋大学 名誉教授

(委員)

木村 滋	高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室長
熊坂 崇	高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室長
黒岩 芳弘	広島大学 教授
坂田 修身	高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 副センター長 (2020年4月から)
櫻井 吉晴	高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 副センター長 (2020年3月まで)
佐々木 聡	東京工業大学 名誉教授
佐藤 眞直	高輝度光科学研究センター 産業利用・産学連携推進室長代理 (2020年4月から)
杉本 宏	理化学研究所 放射光科学研究センター 専任研究員
田中良太郎	高輝度光科学研究センター 常務理事/放射光利用研究基盤センター長
為則 雄祐	高輝度光科学研究センター 分光・イメージング推進室長
野田 健治	高輝度光科学研究センター 名誉フェロー
廣沢 一郎	高輝度光科学研究センター 産業利用推進室長 (2020年3月まで)
舟越 賢一	総合科学研究機構 (CROSS) 中性子科学センター 次長
矢板 毅	日本原子力研究開発機構 物質科学研究センター 副センター長
八木 直人	高輝度光科学研究センター タンパク質結晶解析推進室 コーディネーター
矢橋 牧名	高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室長
横山 和司	ひょうご科学技術協会 放射光研究センターセンター長

(所属・役職は2021年3月時点又は退任時のもの)

SPRing-8 運転・利用状況

国立研究開発法人理化学研究所
放射光科学研究センター

◎2021 年 1～2 月の運転実績

SPRing-8 は 1 月 17 日から 2 月 20 日までセベラルバンチ運転で第 5 サイクルの運転を実施した。第 5 サイクルではフィリング変更時に ID11 メインエンコーダーの不調及び SR RF_Ast のチューナー動作不良による停止時間 (down time) があったが、全体としては順調な運転であった。総放射光利用運転時間 (ユーザータイム) 内での故障等による停止時間は、第 5 サイクルは約 0.1% であった。

1. 装置運転関係

(1) 運転期間

第 5 サイクル (1/17 (日) ～2/20 (土))

(2) 運転時間の内訳

第 5 サイクル

運転時間総計 約 816 時間

①装置の調整およびマシンスタディ等 約 120 時間

②放射光利用運転時間 約 694 時間

③故障等による down time 約 1 時間

④フィリング変更時間 約 1 時間

総放射光利用運転時間 (ユーザータイム = ② + ③ + ④) に対する down time の割合 (*1) 約 0.1%

(3) 運転スペック等

第 5 サイクル (セベラルバンチ運転)

- ・ 11 bunch train × 29 (C)
- ・ 203 bunches (A)
- ・ 203 bunches (A)
- ・ 11/29 filling + 1 bunch (H)
- ・ 203 bunches (A)
- ・ 入射は電流値優先モード (2～3 分毎 (マルチバンチ時) もしくは 20～40 秒毎 (セベラルバンチ時))

の SACLA 入射、Top-Up モードで実施。

- ・ 蓄積電流 8 GeV、～100 mA

(4) 主な down time の原因

- ・ ID11 メインエンコーダーの不調
- ・ SR RF_Ast チューナーの動作不良

2. 利用関係 (JASRI 利用推進部 集計)

(1) 放射光利用実験期間

第 5 サイクル (1/20 (水) ～2/19 (金))

(2) ビームライン利用状況

稼働ビームライン

共用ビームライン	26 本
専用ビームライン	17 本
理研ビームライン	13 本

第 5 サイクル (暫定値)

共同利用研究実験数	341 件
共同利用研究者数	1,227 名
専用施設利用研究実験数	175 件
専用施設利用研究者数	636 名

◎2021 年 2～3 月の運転実績 (停止期間)

SPRing-8 は 2 月 21 日から 3 月 30 日まで年度末点検調整期間とし、加速器やビームラインに係わる機器の改造・点検作業、電気・冷却設備等の機器の点検作業を行った。

(年度末点検調整期間中の主な作業 (計画))

(1) 入射器関係 (Li、Sy、XSBT 等)

- ・ XSBT 真空制御保守作業
- ・ SSBT2 偏向電源 IPM 更新
- ・ SSBT ステアリング電磁石磁気シールド設置作業

- ・SSBT マシン冷却設備配管改修工事
- (2) 蓄積リング関係
 - ・RF エージング
 - ・運転前連続通電作業
 - ・電磁石、電磁石電源等定期点検
 - ・電磁石絶縁ホース交換
 - ・真空系及び冷却水関連作業、調整
 - ・大気開放作業及びNEG 活性化（真空）
 - ・タイミング用光ファイバー敷設（RF）
 - ・SPBPM 撤去及び新 19 インチラック設置
 - ・バンチ純化装置用パワーアンプ入替
 - ・MTCA.4 BPM 回路設置
 - ・MTCA.4 トリガモジュール、レベル変換器等設置
 - ・モニタ関連定期点検、動作確認
 - ・MADCOA2 データベース更新
 - ・ID 作業及びメンテナンス、ID25 関連作業
 - ・FE 作業及び冷却系/圧空系保守、駆動系検査
 - ・BL 改造工事（BL09XU、BL20B2、BL35XU）
 - ・BL インターロック工事、システム高度化、検査
 - ・BL_ILK 自主検査（後期）
- (3) ユーティリティ関係
 - ・電気設備保守点検及び整備作業
 - ・冷却水設備保守定期点検及び整備作業
 - ・空調用設備保守点検及び整備作業
- (4) 安全管理関係
 - ・放射線監視設備定期点検
 - ・特例区域設置
 - ・放射線モニタ更新工事
 - ・SPring-8/XSBT_ILK 自主検査（後期）
 - ・その他作業及び点検
- (5) その他
 - ・蓄積リング棟他 LED 化更新（実験ホール）
 - ・マシン実験棟 受変電設備更新工事
 - ・Sy 棟受変電設備高圧主幹ケーブル更新工事

◎2021 年 3～5 月の運転予定

- (1) SPring-8 は 3 月 31 日から 4 月 28 日までセベラルバンチ運転で第 1 サイクルの運転を予定している。
- (2) 4 月 29 日から 5 月 8 日までは春の点検調整期間とし、加速器やビームラインに係わる機器の改

造・点検作業、電気・冷却設備等の機器の点検作業等を予定している。

- (3) 春の停止期間後の運転再開は 5 月 9 日からの予定で 7 月 9 日まで第 2 サイクルの運転を予定している。第 1～2 サイクルの運転実績については次号にて掲載する。

◎2021 年度 SPring-8 運転計画

SPring-8 では 2021 年度の運転を以下のように計画している。

- (1) 運転計画予定表
SPring-8 の WWW にて公開している。
- (2) 運転計画の内訳
 - ①運転時間（総計/加速器の運転時間）
約 5,184 時間の運転を予定している。
 - ②運転時間（総放射光利用運転時間）
4,320 時間の運転を予定している。
 - ③サイクル数
合計 5 サイクルの運転を予定している。
 - ④特記事項
2021 年度は SACLA から蓄積リングへの入射となる。

(*1) down time の割合に④フィリング変更時間は含まない。

論文発表の現状

公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用推進部

年別査読有り論文発表等登録数 (2021年3月31日現在)

SPring-8

Beamline Name		Public Use Since	~2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	Total	
Public Beamlines	BL01B1	XAFS	1997.10	491	65	74	92	75	87	94	81	84	90	18	1251
		Technical Journal			1										1
	BL02B1	Single Crystal Structure Analysis	1997.10	152	18	36	42	36	44	40	29	46	47	10	500
	BL02B2	Powder Diffraction	1999.9	587	59	96	71	82	95	79	73	74	86	15	1317
	BL04B1	High Temperature and High Pressure Research	1997.10	196	16	20	19	16	16	15	15	19	13	3	348
	BL04B2	High Energy X-ray Diffraction	1999.9	217	28	28	33	37	43	30	41	38	60	3	558
		Technical Journal				1									1
	BL08W	High Energy Inelastic Scattering	1997.10	148	19	15	13	19	15	16	14	10	18	5	292
	BL09XU	Nuclear Resonant Scattering	1997.10	123	13	15	15	18	16	19	28	14	10	1	272
	BL10XU	High Pressure Research	1997.10	327	28	21	30	29	30	28	24	25	28	5	575
	BL13XU	Surface and Interface Structure	2001.9	166	6	16	21	24	36	27	32	33	24	9	394
	BL14B2	Engineering Science Research II	2007.9	75	36	53	53	61	53	58	66	79	82	20	636
		Technical Journal			1	1	1					1	2		6
	BL19B2	Engineering Science Research I	2001.11	178	53	59	63	65	64	68	60	57	53	16	736
		Technical Journal			1	1	1	2			2	1	1		9
	BL20B2	Medical and Imaging I	1999.9	206	35	28	25	35	26	28	31	25	31	3	473
	BL20XU	Medical and Imaging II	2001.9	164	21	40	45	43	37	34	29	43	26	5	487
	BL25SU	Soft X-ray Spectroscopy of Solid	1998.4	307	22	24	31	20	19	25	20	22	28	6	524
		Technical Journal			2										2
	BL27SU	Soft X-ray Photochemistry	1998.5	313	18	41	35	25	36	27	25	16	38	7	581
	BL28B2	White Beam X-ray Diffraction	1999.9	110	10	21	18	21	19	25	20	13	25	5	287
	BL35XU	High Resolution Inelastic Scattering	2001.9	87	8	14	13	16	15	15	14	8	20	9	219
	BL37XU	Trace Element Analysis	2002.11	119	14	32	28	35	29	29	29	21	23	5	364
		Technical Journal					1								1
	BL38B1	Structural Biology III	2000.10	378	60	59	48	65	60	38	30	31	28	7	804
	BL39XU	Magnetic Materials	1997.10	192	21	20	25	19	24	30	20	18	26	3	398
	BL40B2	Structural Biology II	1999.9	378	44	70	55	55	60	54	55	62	48	17	898
		Technical Journal				1		1							2
	BL40XU	High Flux	2000.4	102	18	37	21	32	42	30	34	44	28	9	397
		Technical Journal										1			1
BL41XU	Structural Biology I	1997.10	660	53	65	55	60	68	57	52	39	41	10	1160	
BL43IR	Infrared Materials Science	2000.4	77	11	10	11	17	15	23	10	19	24	5	222	
BL46XU	Engineering Science Research III	2000.11	122	15	38	28	56	51	49	45	50	30	12	496	
	Technical Journal							1	1			1		3	
BL47XU	HXPES・MCT	1997.10	258	17	36	36	31	29	37	28	29	25	5	531	
	Technical Journal								1					1	
Public Use at Other Beamlines	BL05XU	RIKEN Diagnosis Beamline I	2017.4								3	6	8	4	21
	BL11XU	QST Quantum Dynamics I	1999.3	13											13
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II	1998.4	46	1		1								48
	BL15XU	WEBRAM	2002.9	33	1		1								35
	BL17SU	RIKEN Coherent Soft X-ray Spectroscopy	2005.9	15	6	11	12	5	2	3	5	8	6		73
	BL19LXU	RIKEN SR Physics	2002.9	5			1	1	2	5	7	2	2	1	26
	BL22XU	JAEA Actinide Science I	2004.9	5		1									6
	BL23SU	JAEA Actinide Science II	1998.6	46	2	3	2						1		54
	BL26B1	RIKEN Structural Genomics I	2009.4	3	8	2	9	6	15	15	22	29	32	6	147
	BL26B2	RIKEN Structural Genomics II	2009.4	1	5	3	5	7	11	8	9	8	6	1	64
		Technical Journal							1						1
	BL29XU	RIKEN Coherent X-ray Optics	2002.9	13			1	1	2	2	3				22
	BL32XU	RIKEN Targeted Proteins	2010.10	5	5	8	9	16	8	16	16	11	12	2	108
BL44B2	RIKEN Materials Science	1998.5	14					6	5	2	6	4	1	38	
BL45XU	RIKEN Structural Biology I	1997.10	93	6	7	9	13	20	10	6	15	18	4	201	
Subtotal			6425	742	1003	976	1041	1095	1039	978	1004	1041	232	15576	

Beamline Name		Public Use Since	~2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	Total
BL03XU	Advanced Softmaterials	2009.11	6	8	24	21	14	17	23	9	19	17	3	161
	Technical Journal			35	42	39	36	33	31	28	28	34		306
BL07LSU	The University-of-Tokyo Outstation Beamline for Materials Science	2009.11	6	6	10	13	12	19	19	15	21	13	3	137
BL08B2	Hyogo Prefecture BM	2005.9	2	3	7	9	5	6	11	5	7	10	3	68
	Technical Journal			7	1	18	7	4	4	1	3			45
BL11XU	QST Quantum Dynamics I		82	13	16	14	8	20	20	15	18	11	7	224
BL12B2	NSRRC BM	2001.9	144	25	22	21	29	38	34	36	32	14	2	397
BL12XU	NSRRC ID	2003.2	56	14	11	18	19	18	25	20	24	18	1	224
BL14B1	QST Quantum Dynamics II		127	11	10	15	19	17	23	20	19	21	5	287
BL15XU	WEBRAM	2001.4	199	41	61	57	48	63	57	51	44	47	7	675
BL16B2	Sunbeam BM	1999.9	51	4	3	6	4	10	9	6	10	11	5	119
	Technical Journal		2	18	15	14	8	15	21	15	10	7	2	127
BL16XU	Sunbeam ID	1999.9	40	2	2	3	4	11	9	9	17	20	5	122
	Technical Journal			20	19	14	14	21	18	12	8	9	3	138
BL22XU	JAEA Actinide Science I		71	10	14	19	15	14	15	26	23	16	5	228
BL23SU	JAEA Actinide Science II		175	20	17	29	19	26	16	24	22	24	2	374
BL24XU	Hyogo Prefecture ID	1998.10	138	7	8	5	4	5	6	8	2	12	2	197
	Technical Journal			11	3	10	3	1	4		1	1		34
BL28XU	RISING II	2012.4			3	9	5	5	5	4	8	10		49
	Technical Journal											1		1
BL31LEP	Laser-Electron Photon II	2013.10				1		3	2	1	2	2		11
BL32B2	Pharmaceutical Industry (2002.9 - 2012.3)		27					1						28
BL33LEP	Laser-Electron Photon	2000.10	47	4	4	4	2	2	3	5	2			73
BL33XU	Toyota	2009.5	3	5	2	8	4	10	16	6	9	19	5	87
	Technical Journal		2	5	4	5	3	4	1					24
BL36XU	Catalytic Reaction Dynamics for Fuel Cell (2013.1 - 2020.3)				1	7	6	7	12	15	8	10	2	68
BL44XU	Macromolecular Assemblies	2000.2	247	59	59	50	65	54	61	47	50	53	18	763
Subtotal			1421	232	274	309	283	345	366	322	337	328	75	4292

RIKEN Beamlines	BL17SU	Coherent Soft X-ray Spectroscopy		73	14	3	8	5	8	5		1	6		123
	BL19LXU	SR Physics		86	11	12	13	9	5	6	1	4	1		148
	BL26B1	Structural Genomics I		158	8	7	4	5	4	4	1		1		192
	BL26B2	Structural Genomics II		88	19	13	4	3	7	10	2	2	1		149
	BL29XU	Coherent X-ray Optics		164	16	15	9	10	15	9	8	4	7		257
	BL32XU	Targeted Proteins		2	9	8	8	7	13	4	3	1	2		57
	BL43LXU	Quantum NanoDynamics				1		1	1				2		5
	BL44B2	Materials Science		217	13	19	16	20	16	18	14	10	2	1	346
	BL45XU	Structural Biology I		191	9	11	9	13	13	8	5	2	5	2	268
	Subtotal			979	99	89	71	73	82	64	34	24	27	3	1545

SACLA

Public Beamlines	Beamline Name		Public Use Since	~2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	Total
	BL1	SXFEL	2016.3									7	5	9	
BL2/BL3	XFEL2/XFEL1	2012.3		1	13	28	37	47	42	34	43	55	8		308

Hardware / Software R & D	489	56	67	13	33	46	53	49	34	24					864
---------------------------	-----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	--	--	--	--	-----

NET Sum Total	7976	931	1202	1104	1194	1289	1263	1125	1159	1155	248	18646
Technical Journal	4	89	80	97	67	74	71	54	47	49	4	636

査読有り論文発表等：査読有りの原著論文、査読有りのプロシーディングと博士論文、SPring-8/SACLA 利用研究成果集

Technical Journal：JASRI が認定した企業等の公開技術報告書

NET Sum Total：実際に登録されている件数（本表に表示していない実験以外に関する文献を含む）

複数ビームライン（BL）からの成果からなる論文はそれぞれのビームラインでカウントした。

このデータは論文発表等登録データベース (<https://user.spring8.or.jp/ui/search/publication2/>) に 2021 年 3 月 31 日までに登録されたデータに基づいており、今後変更される可能性があります。

・SPring-8 または SACLA での成果を論文等にする場合は必ずビームライン名および課題番号の記述を入れて下さい。

成果発表出版形式別登録数 (2021年3月31日現在)

SPring-8

Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total	
Public Beamlines	BL01B1	XAFS	1997.10	1252	66	90	1408
	BL02B1	Single Crystal Structure Analysis	1997.10	500	14	31	545
	BL02B2	Powder Diffraction	1999.9	1317	41	83	1441
	BL04B1	High Temperature and High Pressure Research	1997.10	348	7	48	403
	BL04B2	High Energy X-ray Diffraction	1999.9	559	13	59	631
	BL08W	High Energy Inelastic Scattering	1997.10	292	10	48	350
	BL09XU	Nuclear Resonant Scattering	1997.10	272	15	34	321
	BL10XU	High Pressure Research	1997.10	575	22	61	658
	BL13XU	Surface and Interface Structure	2001.9	394	19	38	451
	BL14B2	Engineering Science Research II	2007.9	642	11	37	690
	BL19B2	Engineering Science Research I	2001.11	745	47	93	885
	BL20B2	Medical and Imaging I	1999.9	473	88	89	650
	BL20XU	Medical and Imaging II	2001.9	487	106	138	731
	BL25SU	Soft X-ray Spectroscopy of Solid	1998.4	526	15	61	602
	BL27SU	Soft X-ray Photochemistry	1998.5	581	21	39	641
	BL28B2	White Beam X-ray Diffraction	1999.9	287	17	24	328
	BL35XU	High Resolution Inelastic Scattering	2001.9	219	5	14	238
	BL37XU	Trace Element Analysis	2002.11	365	24	51	440
	BL38B1	Structural Biology III	2000.10	804	11	64	879
	BL39XU	Magnetic Materials	1997.10	398	17	81	496
	BL40B2	Structural Biology II	1999.9	900	15	117	1032
	BL40XU	High Flux	2000.4	398	24	70	492
	BL41XU	Structural Biology I	1997.10	1160	4	99	1263
	BL43IR	Infrared Materials Science	2000.4	222	15	60	297
	BL46XU	Engineering Science Research III	2000.11	499	20	41	560
	BL47XU	HXPES・MCT	1997.10	532	93	131	756
Public Use at Other Beamlines	BL05XU	RIKEN Diagnosis Beamline I	2017.4	21			21
	BL11XU	QST Quantum Dynamics I	1999.3	13	2	2	17
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II	1998.4	48	1	11	60
	BL15XU	WEBRAM	2002.9	35	19	7	61
	BL17SU	RIKEN Coherent Soft X-ray Spectroscopy	2005.9	73	1	29	103
	BL19LXU	RIKEN SR Physics	2002.9	26		3	29
	BL22XU	JAEA Actinide Science I	2004.9	6			6
	BL23SU	JAEA Actinide Science II	1998.6	54	4	15	73
	BL26B1	RIKEN Structural Genomics I	2009.4	147		9	156
	BL26B2	RIKEN Structural Genomics II	2009.4	65		11	76
	BL29XU	RIKEN Coherent X-ray Optics	2002.9	22		1	23
	BL32XU	RIKEN Targeted Proteins	2010.10	108		4	112
	BL44B2	RIKEN Materials Science	1998.5	38		3	41
	BL45XU	RIKEN Structural Biology I	1997.10	201	5	20	226
Subtotal			15604	772	1816	18192	

Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total	
Contract Beamlines	BL03XU	Advanced Softmaterials	2009.11	467		14	481
	BL07LSU	The University-of-Tokyo Outstation Beamline for Materials Science	2009.11	137		11	148
	BL08B2	Hyogo Prefecture BM	2005. 9	113			113
	BL11XU	QST Quantum Dynamics I		224	8	37	269
	BL12B2	NSRRC BM	2001. 9	397	1	2	400
	BL12XU	NSRRC ID	2003. 2	224	7	6	237
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II		287	14	69	370
	BL15XU	WEBRAM	2001. 4	675	14	61	750
	BL16B2	Sunbeam BM	1999. 9	246	12	75	333
	BL16XU	Sunbeam ID	1999. 9	260	8	60	328
	BL22XU	JAEA Actinide Science I		228	4	43	275
	BL23SU	JAEA Actinide Science II		374	45	109	528
	BL24XU	Hyogo Prefecture ID	1998.10	231	19	62	312
	BL28XU	RISING II	2012. 4	50			50
	BL31LEP	Laser-Electron Photon II	2013.10	11			11
	BL32B2	Pharmaceutical Industry (2002. 9 - 2012. 3)		28		3	31
	BL33LEP	Laser-Electron Photon	2000.10	73	23	3	99
	BL33XU	Toyota	2009. 5	111	5	32	148
	BL36XU	Catalytic Reaction Dynamics for Fuel Cell (2013. 1 - 2020. 3)		68		6	74
	BL44XU	Macromolecular Assemblies	2000. 2	763		43	806
Subtotal			4967	160	636	5763	
RIKEN Beamlines	BL17SU	Coherent Soft X-ray Spectroscopy		123	4	13	140
	BL19LXU	SR Physics		148	8	27	183
	BL26B1	Structural Genomics I		192	2	19	213
	BL26B2	Structural Genomics II		149	1	13	163
	BL29XU	Coherent X-ray Optics		257	14	37	308
	BL32XU	Targeted Proteins		57		3	60
	BL43LXU	Quantum NanoDynamics		5			5
	BL44B2	Materials Science		346	2	16	364
	BL45XU	Structural Biology I		268	5	45	318
	Subtotal			1545	36	173	1754

SACLA

Public Beamlines	Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total
	BL1	SXFEL	2016. 3	21			21
	BL2/BL3	XFEL2/XFEL1	2012. 3	308	4	15	327

Hardware / Software R & D	864	554	466	1884
---------------------------	-----	-----	-----	------

NET Sum Total	19282	1366	2387	23035
---------------	-------	------	------	-------

Refereed Papers : 査読有りの原著論文、査読有りのプロシーディングと博士論文、SPring-8/SACLA 利用研究成果集、公開技術報告書

Proceedings : 査読なしのプロシーディング

Other Publications : 発表形式が出版で、上記の2つに当てはまらないもの(総説、単行本、賞、その他として登録されたもの)

NET Sum Total : 実際に登録されている件数(本表に表示していない実験以外に関する文献を含む)

複数ビームライン (BL) からの成果からなる論文等はそれぞれのビームラインでカウントした。

・SPring-8 または SACLA での成果を論文等にする場合は必ずビームライン名および課題番号の記述を入れて下さい。

最近 SPring-8 もしくは SACLA から発表された成果リスト

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用推進部

SPring-8 もしくは SACLA において実施された研究課題等の成果が公表された場合は JASRI の成果登録データベースに登録していただくことになっており、その内容は以下の URL (SPring-8 論文データベース検索ページ) で検索できます。

http://www.spring8.or.jp/ja/science/publication_database/

このデータベースに登録された原著論文の内、2021 年 1 月～3 月に登録されたものを以下に紹介します。論文の情報 (主著者、巻、発行年、ページ、タイトル) に加え、データベースの登録番号 (研究成果番号) を掲載していますので、詳細は上記検索ページの検索結果画面でご覧いただくことができます。また実施された課題の情報 (課題番号、ビームライン、実験責任者名) も掲載しています。課題番号は最初の 4 文字が「year」、次の 1 文字が「term」、後ろの 4 文字が「proposal no.」となっていますので、この情報から以下の URL で公表している、各課題の英文利用報告書 (SPring-8 User Experiment Report) を探してご覧いただくことができます。

http://www.spring8.or.jp/ja/news_publications/publications/user_exp_report/

今後も利用者情報には発行月の 2 ヶ月前の月末締めで、前号掲載分以降に登録された論文情報を掲載していく予定です。なお、データベースは毎日更新されていますので、最新情報は SPring-8 論文データベース検索ページでご確認ください。なお、実験責任者の方には、成果が公表されましたら速やかに登録いただきますようお願いいたします。

SPring-8 研究成果登録データベースに 2021 年 1 月～3 月に登録された論文が掲載された主な雑誌と掲載論文数

掲載雑誌	登録論文数	掲載雑誌	登録論文数
The Journal of Biological Chemistry	9	Journal of the American Chemical Society	6
The Journal of Physical Chemistry C	9	ACS Applied Energy Materials	5
Nature Communications	9	ACS Catalysis	5
Physical Review B	9	Applied Physics Letters	5
ACS Applied Energy Materials	7	Molecules	5
Chemical Communications	7	Scientific Reports	5
Japanese Journal of Applied Physics	6		

他全 177 誌、計 316 報

(注意) グループ課題として設定されている課題群については、その論文がグループ課題の中の複数の課題の成果である場合でも、代表課題となっている課題番号のみ表示しています。グループ課題に複数のビームラインの課題が含まれる場合、代表課題が複数のビームラインで実施されたように表示されています。

課題の成果として登録された論文

Physical Review B

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41050	Takeshi Matsumura	102 (2020) 214444	2019B1247	BL39XU	松村 武	Isotropic Parallel Antiferromagnetism in the Magnetic Field Induced Charge-Ordered State of SmRu ₄ P ₁₂ Caused by <i>p</i> - <i>f</i> Hybridization
			2015A3711	BL22XU	稲見 俊哉	
41080	Shunsuke Kitou	103 (2021) 035135	2017B1733	BL02B1	鬼頭 俊介	Ambient-Pressure Dirac Electron System in the Quasi-Two-Dimensional Molecular Conductor α -(BETS) ₂ I ₃
41081	Takahito Takeda	102 (2020) 245203	2017B3841	BL23SU	藤森 淳	Evolution of Fe 3 <i>d</i> Impurity Band State as the Origin of High Curie Temperature in the <i>p</i> -type Ferromagnetic Semiconductor (Ga,Fe)Sb
			2019A3841	BL23SU	小林 正起	
41094	Shingo Yamamoto	103 (2021) L020408	2019A1534 2019B1474	BL25SU BL25SU	山本 真吾 山本 真吾	Element-specific Field-induced Spin Reorientation and Tetracritical Point in MnCr ₂ S ₄
41214	Kristoffer A. U. Holm	102 (2020) 024112	2014A0078	BL02B1	Iversen Bo	Temperature Dependence of Dynamic Dipole Formation in PbTe
			2019A0159	BL02B1	西堀 英治	
41251	Kohei Yamagami	103 (2021) L060403	2019B1097	BL25SU	黒田 健太	Itinerant Ferromagnetism Mediated by Giant Spin Polarization of the Metallic Ligand Band in the van der Waals Magnet Fe ₃ GeTe ₂
			2019B3845	BL23SU	和達 大樹	
			2019B3841	BL23SU	小林 正起	
41263	Mariano Trigo	103 (2021) 054109	2016A8008	BL3	Wall Simon	Ultrafast Formation of Domain Walls of a Charge Density Wave in SmTe ₃
41404	M. Güttler	103 (2021) 115126	2015B1310	BL08W	Vyalikh Denis	Visualizing the Kondo Lattice Crossover in YbRh ₂ Si ₂ with Compton Scattering
			2016A1371	BL08W	Vyalikh Denis	
			2016B1299	BL08W	Vyalikh Denis	
			2017B1422	BL08W	Vyalikh Denis	
41441	Kohei Kudo	103 (2021) 104427	2019B2080	BL13XU	田尻 寛男	Positive Linear Magnetoresistance Effect in Disordered L ₂ B-type Mn ₂ CoAl Epitaxial Films
			2017B0921	BL13XU	壬生 攻	
			2019B1657	BL13XU	桜庭 裕弥	

The Journal of Physical Chemistry C

41044	Naoki Noguchi	125 (2021) 189-200	2017B1296	BL43IR	野口 直樹	Infrared and Raman Spectroscopic Study of Methane Clathrate Hydrates at Low Temperatures and High Pressures: Dynamics and Cage Occupancy of Methane
			2018A1483	BL43IR	野口 直樹	
			2018B1505	BL43IR	野口 直樹	
			2019A1361	BL43IR	野口 直樹	
41157	Kohsuke Mori	124 (2020) 11499-11505	2018B1082	BL01B1	森 浩亮	Interfacial Engineering of PdAg/TiO ₂ with a Metal-Organic Framework to Promote the Hydrogenation of CO ₂ to Formic Acid
			2019A1048	BL01B1	森 浩亮	
41210	Nobutaka Shioya	125 (2021) 2437-2445	2018B1595	BL46XU	尾坂 格	Monitoring of Crystallization Process in Solution-Processed Pentacene Thin Films by Chemical Conversion Reactions
41222	Kentarou Ichihashi	124 (2020) 26925-26936	2013B7802	BL36XU	岩澤 康裕	Oxygen Reduction Reaction Performance Tuning on Pt Nanoparticle/MWCNT Catalysts by Gd Species
			2017B7821	BL36XU	唯 美津木	
			2018B7821	BL36XU	唯 美津木	
41246	Dinesh Bhalothia	124 (2020) 2295-2306	2018B4256	BL12XU	Chen Tsan Yao	Heterogeneous NiO ₂ -to-Pd Epitaxial Structure Performs Outstanding Oxygen Reduction Reaction Activity
41314	Mitsuhiro Inoue	124 (2020) 10016-10025	2017B3398	BL08B2	今井 英人	Structure-Sensitivity Factors Based on Highly Active CO ₂ Methanation Catalysts Prepared via the Polygonal Barrel-Sputtering Method
41408	Mao Ye	125 (2021) 1784-1792	2012A7427	BL07LSU	奥田 太一	Persistence of the Topological Surface States in Bi ₂ Se ₃ against Ag Intercalation at Room Temperature
			2011B7421	BL07LSU	大門 寛	
			2011A7412	BL07LSU	大門 寛	
			2010B7411	BL07LSU	大門 寛	
41494	Guoxiang Yang	125 (2021) 3961-3971	2019A1050	BL01B1	桑原 泰隆	Pd-Cu Alloy Nanoparticles Confined within Mesoporous Hollow Carbon Spheres for Hydrogenation of CO ₂ to Formate
			2019B1114	BL01B1	桑原 泰隆	

Nature Communications-1

41071	Dohyun Im	11 (2020) 6442	2016B8060	BL3	岩田 想	Structure of the Dopamine D ₂ Receptor in Complex with the Antipsychotic Drug Spiperone
			2017A8019	BL3	岩田 想	
			2017B8022	BL2	岩田 想	
41183	Wei Yan	11 (2020) 5287	2019B2705	BL41XU	Shao Zhenhua	Structure of the Human Gonadotropin-Releasing Hormone Receptor GnRH1R Reveals an Unusual Ligand Binding Mode
41204	Yuan Chao Lou	6 (2015) 8838	2013B6600	BL44XU	Hsiao Chwan Deng	Structure and Dynamics of Polymyxin-Resistance-Associated Response Regulator PmrA in Complex with Promoter DNA

Nature Communications-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41276	Tomoaki Kawakami	12 (2021) 1104	2017A2512	BL26B1	大友 征宇	Crystal Structure of a Photosynthetic LH1-RC in Complex with its Electron Donor HiPIP
			2017A6708	BL44XU	大友 征宇	
			2018A6806	BL44XU	大友 征宇	
			2018B6806	BL44XU	大友 征宇	
41302	Hirotake Miyauchi	8 (2017) 1633	2017A2578	BL32XU	石谷 隆一郎	Structural Basis for Xenobiotic Extrusion by Eukaryotic MATE Transporter
			2016A2527	BL32XU	石谷 隆一郎	
			2015A1024	BL32XU	石谷 隆一郎	
41345	Toshinori Oozeki	12 (2021) 933	2014A6912	BL44XU	岡島 俊英	Functional and Structural Characterization of a Flavoprotein Monooxygenase Essential for Biogenesis of Tryptophylquinone Cofactor
			2014B6912	BL44XU	岡島 俊英	
			2015A6508	BL44XU	岡島 俊英	
			2016A6608	BL44XU	岡島 俊英	
			2017B6709	BL44XU	岡島 俊英	
			2018A6807	BL44XU	岡島 俊英	
			2018B6807	BL44XU	岡島 俊英	
2019A6907	BL44XU	岡島 俊英				
2019B6907	BL44XU	岡島 俊英				
41348	Shin-ichiro Hattori	12 (2021) 668	2020A1778	BL41XU	林 宏典	A Small Molecule Compound with an Indole Moiety Inhibits the Main Protease of SARS-CoV-2 and Blocks Virus Replication
41414	Sayaka Takehara	11 (2020) 2143	2018A2563	BL26B1	三上 文三	A Common Allosteric Mechanism Regulates Homeostatic Inactivation of Auxin and Gibberellin
			2018A2533	BL26B1	三上 文三	
			2015A1063	BL26B1	三上 文三	
			2015A2052	BL01B1	伊奈 稔哲	

ACS Applied Energy Materials

41130	Chen Liu	4 (2021) 1143-1149	2018A1750	BL19B2	内山 智貴	<i>Operando</i> X-ray Absorption Spectroscopic Study on the Influence of Specific Adsorption of the Sulfo Group in the Perfluorosulfonic Acid Ionomer on the Oxygen Reduction Reaction Activity of the Pt/C Catalyst
			2018B1616	BL19B2	内山 智貴	
			2018A1019	BL37XU	今井 英人	
			2019B1899	BL14B2	内山 智貴	
			2020A1801	BL19B2	内山 智貴	
			2020A1799	BL14B2	今井 英人	
2020A1800	BL19B2	今井 英人				
41161	Shinya Masuda	3 (2020) 5819-5829	2019B1091	BL01B1	森 浩亮	Interconversion of Formate/Bicarbonate for Hydrogen Storage/Release: Improved Activity Following Sacrificial Surface Modification of a Ag@Pd/TiO ₂ Catalyst with a TiO _x Shell
41162	Shinya Masuda	3 (2020) 5847-5855	2019B1091	BL01B1	森 浩亮	Additive-Free Aqueous Phase Synthesis of Formic Acid by Direct CO ₂ Hydrogenation over a PdAg Catalyst on a Hydrophilic N-Doped Polymer-Silica Composite Support with High CO ₂ Affinity
41217	Donglin Han	4 (2021) 1666-1676	2019A1795	BL14B2	韓 東麟	Protonated BaZr _{0.8} Y _{0.2} O _{3-δ} : Impact of Hydration on Electrochemical Conductivity and Local Crystal Structure
41288	Albertus Adrian Sutanto	4 (2021) 1259-1268	2019B1808	BL46XU	柴山 直之	Phosphine Oxide Derivative as a Passivating Agent to Enhance the Performance of Perovskite Solar Cells
			2019B1807	BL19B2	中村 唯我	
41448	Takashi Nakamura	3 (2020) 9703-9713	2019A1384	BL27SU	中村 崇司	Impact of Oxygen Defects on Electrochemical Processes and Charge Compensation of Li-Rich Cathode Material Li _{1.2} Mn _{0.6} Ni _{0.2} O _{2.5}
			2019B1441	BL27SU	中村 崇司	
			2019B1450	BL27SU	中村 崇司	
41515	Ning Wang	4 (2021) 554-563	2019B1450	BL27SU	中村 崇司	La _{0.8} Sr _{0.2} Co _{1-x} Ni _x O _{3-δ} as the Efficient Triple Conductor Air Electrode for Protonic Ceramic Cells

Chemical Communications-1

41063	Shun Sakaida	57 (2021) 1462-1465	2017A1415	BL13XU	北川 宏	Surface Morphology-Induced Spin-Crossover-Inactive High-Spin State in a Coordination Framework
			2018B1138	BL02B2	大坪 主弥	
			2019B1387	BL02B2	大坪 主弥	
41135	Hidetoshi Sonoki	55 (2019) 7454-7457	2019B1778	BL02B2	園木 秀聡	A Hydrated Strontium Cobalt Oxhydroxide Ruddlesden-Popper Phase as an Oxygen Electrocatalyst for Aqueous Lithium-Oxygen Rechargeable Batteries
41148	Shinya Okazoe	56 (2020) 14475-14478	2019B1143	BL02B2	北川 宏	Synthesis of Mo and Ru Solid-Solution Alloy NPs and Their Hydrogen Evolution Reaction Activity
41171	Shintaro Ishida	56 (2020) 15072-15075	2014A1211	BL02B1	岩本 武明	Naphtho- and Anthra-Disilacyclobutadienes
41385	Yuiga Nakamura	57 (2021) 2685-2688	2019B1865	BL19B2	中村 唯我	Visualization of Halide Perovskite Crystal Growth Processes by <i>in situ</i> Heating WAXS Measurements
			2018B1855	BL46XU	柴山 直之	
			2019B2066	BL19B2	小金澤 智之	
			2020A2005	BL19B2	小金澤 智之	

Chemical Communications-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41397	Masahiro Kouno	57 (2021) 1336-1339	2016B1007	BL02B1	今野 巧	Interconversion between Square-Planar Palladium(II) and Octahedral Palladium(IV) Centres in a Sulfur-Bridged Trinuclear Structure
41487	Hiroshi Itahara	(2021) Online publications 26 Mar., 2021	2019B5070	BL16XU	小坂 悟	Eutectic Salt Mixture-Assisted Sodium-Vapor-Induced Synthesis of Pt-Ca Nanoparticles, their Microstructural and Electrocatalytic Properties
			2020A5070	BL16XU	小坂 悟	
			2020A5071	BL16XU	高橋 直子	
			2020A5371	BL16B2	磯村 典武	

Japanese Journal of Applied Physics

41083	Yasunori Tateno	59 (2020) 124001	2015A1974	BL46XU	館野 泰範	An Investigation to Determine the Interface Condition between Graphene and Aluminum Oxide
			2016A1530	BL46XU	館野 泰範	
			2016B1619	BL46XU	館野 泰範	
			2016B1629	BL46XU	館野 泰範	
			2017B1835	BL46XU	斎藤 吉広	
			2018A5030	BL16XU	久保 優吾	
			2018B5030	BL16XU	斎藤 吉広	
41219	Yusaku Magari	60 (2021) SBBM04	2018B1669	BL47XU	曲 勇作	Effects of Water and Hydrogen Introduction during In-Ga-Zn-O Sputtering on the Performance of Low-Temperature Processed Thin-Film Transistors
			2019B1746	BL47XU	曲 勇作	
41241	Yousuke Shimura	60 (2021) SBBF11	2019B1286	BL35XU	志村 洋介	Thermal Conductivity and Inelastic X-ray Scattering Measurements on SiGeSn Polycrystalline Alloy
41242	Ichiro Nagai	60 (2021) 025502	2020A1090	BL40XU	守友 浩	Inter-Particle Structural Fluctuation of Prussian Blue Analogue as Investigated by X-ray Microbeam Diffraction
			2020A1660	BL02B2	岩泉 滉樹	
			2020A1061	BL02B2	守友 浩	
41392	Takumi Isogai	55 (2016) 03DF11	2015B1282	BL40B2	田川 美穂	Effect of Magnesium Ion Concentration on Two-Dimensional Structure of DNA-Functionalized Nanoparticles on Supported Lipid Bilayer
41433	Murugesan Mariappan	60 (2021) SBBC02	2019B1583	BL13XU	Mariappan Murugesan	Laue Microdiffraction Evaluation of Bending Stress in Au Wiring Formed on Chip-Embedded Flexible Hybrid Electronics
			2018A2050	BL13XU	木村 滋	
			2018B1342	BL13XU	木村 滋	

The Journal of Biological Chemistry

41311	Choong-Soo Yun	295 (2020) 11602-11612	2017A2580	BL26B1	日野 智也	Unique Features of the Ketosynthase Domain in a Nonribosomal Peptide Synthetase-Polyketide Synthase Hybrid Enzyme, Tenuazonic Acid Synthetase 1
41380	Dong Young Kim	278 (2003) 50664-50670	2002B0055	BL41XU	Kim Kyeong Kyu	Crystal Structure of ClpX Molecular Chaperone from <i>Helicobacter pylori</i>
41381	Yasuo Shikamoto	278 (2003) 24090-24094	2002A0131	BL41XU	水野 洋	Crystal Structure of Mg ²⁺ - and Ca ²⁺ -Bound Gla Domain of Factor IX Complexed with Binding Protein
41412	Yoko Shima	295 (2020) 6983-6991	2018A2563	BL26B1	三上 文三	Crystal Structures of Lysophospholipid-Bound MHC Class I Molecules
			2018A2533	BL26B1	三上 文三	
			2017A2546	BL26B1	三上 文三	
			2017A2547	BL26B1	三上 文三	
41446	Satoshi Sogabe	278 (2003) 19387-19395		BL24XU		The Crystal Structure and Stereospecificity of Levodione Reductase from <i>Corynebacterium aquaticum</i> M-13
41453	Ryota Futamata	295 (2020) 5002-5011	2001B0226	BL38B1	曾我部 智	<i>In vivo</i> FRET Analyses Reveal a Role of ATP Hydrolysis-Associated Conformational Changes in Human P-glycoprotein
			2011B1210	BL41XU	小段 篤史	
			2012A1304	BL41XU	小段 篤史	
			2012B1348	BL41XU	小段 篤史	
			2013B1277	BL41XU	小段 篤史	
			2014A1163	BL41XU	小段 篤史	
			2014B1001	BL41XU	小段 篤史	
2015A1039	BL41XU	小段 篤史				

ACS Applied Materials & Interfaces-1

41145	Keigo Nakamura	12 (2020) 51598-51606	2019A7451	BL07LSU	永村 直佳	All 2D Heterostructure Tunnel Field-Effect Transistors: Impact of Band Alignment and Heterointerface Quality
			2018B7580	BL07LSU	永村 直佳	
41213	Zhao Pan	13 (2021) 5208-5215	2019A1045	BL02B2	Pan Zhao	Polarization Rotation at Morphotropic Phase Boundary in New Lead-Free Na _{1/2} Bi _{1/2} V _{1-x} Ti _x O ₃ Piezoceramics
			2020A0589	BL02B2	Pan Zhao	
41259	Saki Sawayama	13 (2021) 6201-6207	2018B1472	BL04B2	藤井 健太	Fluorophosphate-Based Nonflammable Concentrated Electrolytes with a Designed Lithium-Ion-Ordered Structure: Relationship between the Bulk Electrolyte and Electrode Interface Structures
			2020A0533	BL04B2	藤井 健太	
			2019B1227	BL04B2	関 志朗	

ACS Applied Materials & Interfaces-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41272	Kazuhiro Hikima	13 (2021) 7650-7663	2013B3617	BL14B1	菅野 了次	Reactions of the Li_2MnO_3 Cathode in an All-Solid-State Thin-Film Battery during Cycling
			2015A1846	BL46XU	引間 和浩	
			2015B1551	BL13XU	菅野 了次	
			2015B3623	BL14B1	菅野 了次	
			2016A1675	BL46XU	引間 和浩	
			2016B1768	BL46XU	引間 和浩	
			2016A3623	BL14B1	菅野 了次	
			2016B3635	BL14B1	菅野 了次	
41402	Sadok Ben Dkhil	12 (2020) 28404-28415	2019B1851	BL19B2	吉本 則之	Direct Correlation of Nanoscale Morphology and Device Performance to Study Photocurrent Generation in Donor-Enriched Phases of Polymer Solar Cells
			2018B1791	BL19B2	吉本 則之	
			2017B1629	BL19B2	吉本 則之	

ACS Catalysis

41057	Shinichi Yamazaki	10 (2020) 14567-14580	2018B7906	BL36XU	大門 英夫	Creation of a Highly Active Pt/Pd/C Core-Shell-Structured Catalyst by Synergistic Combination of Intrinsically High Activity and Surface Decoration with Melamine or Tetra-(<i>tert</i> -butyl)-tetraazaporphyrin
41082	Shohei Tada	10 (2020) 15186-15194	2018B1788	BL14B2	多田 昌平	Development of CO_2 -to-Methanol Hydrogenation Catalyst by Focusing on the Coordination Structure of the Cu Species in Spinel-Type Oxide $\text{Mg}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Al}_2\text{O}_4$
41399	Daichi Yoshii	11 (2021) 2150-2155	2019B1820	BL14B2	山口 和也	C(sp^3)-H Selective Benzylic Borylation by In Situ Reduced Ultrasmall Ni Species on CeO_2
41488	Shu Fujita	10 (2020) 4261-4267	2019A1390	BL01B1	満留 敬人	Unique Catalysis of Nickel Phosphide Nanoparticles to Promote the Selective Transformation of Biofuranic Aldehydes into Diketones in Water
			2020A1487	BL01B1	満留 敬人	
			2020A0558	BL01B1	満留 敬人	
			2019B1560	BL01B1	満留 敬人	
41489	Hiroya Ishikawa	11 (2021) 750-757	2019A1390	BL01B1	満留 敬人	Air-Stable and Reusable Cobalt Phosphide Nanoalloy Catalyst for Selective Hydrogenation of Furfural Derivatives
			2019B1560	BL01B1	満留 敬人	
			2020A1487	BL01B1	満留 敬人	
			2020A0558	BL01B1	満留 敬人	

Applied Physics Letters

41144	Tomoyuki Kadono	117 (2020) 143901	2017A1011	BL47XU	小嗣 真人	Investigation of Local Structures and Electronic States of Sb-doped Mg_2Si by Fluorescence XAFS and HAXPES
			2017B1001	BL47XU	小嗣 真人	
			2017B1085	BL37XU	小嗣 真人	
			2017B1054	BL17SU	小嗣 真人	
			2018A1203	BL17SU	小嗣 真人	
			2018A1204	BL37XU	小嗣 真人	
			2019A1223	BL37XU	小嗣 真人	
			2019A1175	BL17SU	小嗣 真人	
41373	Junichi Nomoto	118 (2021) 101602	2020A1876	BL46XU	野本 淳一	Origin of Simultaneous Enhancement of Work Function and Carrier Concentration in In_2O_3 Films by Excimer-Laser Irradiation
			2020A1630	BL46XU	野本 淳一	
41400	Takanori Mimura	118 (2021) 112903	2019A4700	BL15XU	清水 荘雄	Large Thermal Hysteresis of Ferroelectric Transition in HfO_2 -Based Ferroelectric Films
41406	Jonathan Pellicciari	118 (2021) 112604	2016A3552	BL11XU	石井 賢司	Fluctuating Magnetism of Co- and Cu-Doped NaFeAs
41430	Hiroataka Mizushima	118 (2021) 121603	2017A5040	BL16XU	新井 龍志	Impact of Oxygen on Band Structure at the Ni/GaN Interface Revealed by Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy
			2017B5040	BL16XU	新井 龍志	
			2018A5040	BL16XU	新井 龍志	
			2018B5040	BL16XU	新井 龍志	
			2019A5040	BL16XU	新井 龍志	
			2019B5040	BL16XU	新井 龍志	

Molecules-1

41042	Ken Taguchi	26 (2021) 220	2017B1396	BL40B2	田口 健	Kinetic Study on Alpha-Form Crystallization of Mixed-Acid Triacylglycerols POP, PPO, and Their Mixture
			2019A1085	BL40B2	田口 健	
41056	Guowei Zhao	26 (2021) 299	2016B1778	BL19B2	大工原 秀吾	Syntheses and Characterization of Novel Perovskite-Type LaScO_3 -Based Lithium Ionic Conductors
			2019B1745	BL02B2	李 予祥	

Molecules-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41069	Yang Pan	25 (2020) 5917	2020A1644	BL02B1	潘 楊	Generation of Bis(ferrocenyl)silylenes from Siliranes
			2020A0834	BL02B1	西野 龍平	
			2020A1650	BL02B1	薄葉 純一	
			2020A1056	BL02B1	笹森 貴裕	
			2019B1784	BL02B1	早川 雅大	
			2019B1129	BL02B1	笹森 貴裕	
			2019A1677	BL02B1	鈴木 文陽	
			2019A1057	BL02B1	笹森 貴裕	
			2018B1668	BL02B1	菅原 知紘	
41173	Risa Kawai	25 (2020) 4881	2019B1782	BL40B2	河合 里紗	Surface Adsorption Properties and Layer Structures of Homogeneous Polyoxyethylene-Type Nonionic Surfactants in Quaternary-Ammonium-Salt-Type Amphiphilic Gemini Ionic Liquids with Oxygen- or Nitrogen-Containing Spacers
41437	Yohei Haketa	26 (2021) 861	2017A1305	BL40B2	前田 大光	Supramolecular Assemblies of Dipyrrolyldiketone Cu ^{II} Complexes
			2017A1408	BL40B2	羽田 洋平	

Scientific Reports

41092	Hirokazu Masai	11 (2021) 214	2017B1577	BL14B2	正井 博和	Low Melting Oxide Glasses Prepared at a Melt Temperature of 500°C
			2017B1595	BL14B2	山下 勝	
41221	Katsuya Araki	10 (2020) 19423	2016B1234	BL43IR	荒木 克哉	The Secondary Structural Difference between Lewy Body and Glial Cytoplasmic Inclusion in Autopsy Brain with Synchrotron FTIR Micro-Spectroscopy
			2017B1074	BL43IR	荒木 克哉	
			2018A1115	BL43IR	荒木 克哉	
41243	Michael Diez	11 (2021) 3562	2017A8072	BL3	Schulz Sebastian	A Self-Referenced in-situ Arrival Time Monitor for X-ray Free-Electron Lasers
41248	Dinesh Bhalothia	10 (2020) 8457	2019A4261	BL12XU	Chen Tsan Yao	CO-Reductive and O ₂ -Oxidative Annealing Assisted Surface Restructure and Corresponding Formic Acid Oxidation Performance of PdPt and PdRuPt Nanocatalysts
41273	Hirokazu Masai	11 (2021) 3811	2018A1557	BL14B2	正井 博和	Examination of Structure and Optical Properties of Ce ³⁺ -Doped Strontium Borate Glass by Regression Analysis
			2017B1577	BL14B2	正井 博和	

Chemistry - A European Journal

41078	Junichi Usuba	27 (2021) 1638-1647	2019A1057	BL02B1	笹森 貴裕	Dithieno[a,e]pentalenes: Highly Antiaromatic Yet Stable π-Electron Systems without Bulky Substituents
			2019B1129	BL02B1	笹森 貴裕	
			2019B1784	BL02B1	早川 雅大	
41352	Osamu Nakagawa	27 (2021) 3842-3848	2018B6801	BL44XU	青山 浩	Crystallographic Structure of Novel Types of Ag ⁺ -Mediated Base Pairs in Non-Canonical DNA Duplex Containing 2'-O,4'-C-Methylene Bridged Nucleic Acids
			2019A6901	BL44XU	青山 浩	
41375	Hiroki Fukunaga	26 (2020) 16755-16766	2019B2086	BL02B2	河口 彰吾	Magnetic Correlation Engineering in Spin-Sandwiched Layered Magnetic Frameworks
			2020A2052	BL02B2	河口 彰吾	
			2018A2061	BL02B2	河口 彰吾	
41490	Shu Fujita	27 (2021) 4439-4446	2019A1390	BL01B1	満留 敬人	Ni ₂ P Nanoalloy as an Air-Stable and Versatile Hydrogenation Catalyst in Water: P-Alloying Strategy for Designing Smart Catalysts
			2019B1560	BL01B1	満留 敬人	
			2020A1487	BL01B1	満留 敬人	
			2020A0558	BL01B1	満留 敬人	
			2019A1649	BL14B2	水垣 共雄	
2019B1858	BL14B2	水垣 共雄				

Chemistry of Materials-1

41207	Feilure Tuerxun	33 (2021) 1006-1012	2018A1022	BL02B2	内本 喜晴	Phase Transition Behavior of MgMn ₂ O ₄ Spinel Oxide Cathode during Magnesium Ion Insertion
			2019A1016	BL02B2	内本 喜晴	
41318	Takumi Nishikubo	33 (2021) 1498-1505	2018A1636	BL02B2	西久保 匠	Polarization- and Strain-Mediated Control of Negative Thermal Expansion and Ferroelasticity in BiInO ₃ -BiZn _{1/2} Ti _{1/2} O ₃
			2018B3751	BL22XU	町田 晃彦	
			2019A1688	BL02B2	西久保 匠	
			2020A3783	BL22XU	Hu Lei	
41401	Nagesh B. Kolhe	32 (2020) 195-204	2018B1791	BL19B2	吉本 則之	Designing High Performance Nonfullerene Electron Acceptors with Rylene Imides for Efficient Organic Photovoltaics
			2017B1629	BL19B2	吉本 則之	
			2018A1744	BL46XU	小金澤 智之	
			2018B1772	BL46XU	小金澤 智之	

Chemistry of Materials-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41502	Zhao Pan	31 (2019) 1296-1303	2016A1060	BL44B2	Xing Xianran	Large Negative Thermal Expansion Induced by Synergistic Effects of Ferroelectrostriction and Spin Crossover in PbTiO ₃ -Based Perovskites
			2015B1730	BL02B2	松田 奈瑠美	

Journal of Materials Chemistry A

41147	Ruiling Wang	8 (2020) 21613-21622	2019B1114	BL01B1	桑原 泰隆	Improvement of the Water Oxidation Performance of Ti, F Co-Modified Hematite by Surface Modification with Co(salen) Molecular Cocatalyst
			2019B1091	BL01B1	森 浩亮	
41249	Che Yan	8 (2020) 12744-12756	2019B4256	BL12XU	Chen Tsan Yao	Local Synergetic Collaboration between Pd and Local Tetrahedral Symmetric Ni Oxide Enables Ultra-High-Performance CO ₂ Thermal Methanation
41447	Takashi Nakamura	9 (2021) 3657-3667	2019A1384	BL27SU	中村 崇司	Oxygen Defect Engineering for the Li-Rich Cathode Material Li _{1.2} Ni _{0.13} Co _{0.13} Mn _{0.54} O _{2-δ}
			2019B1441	BL27SU	中村 崇司	
			2019B1450	BL27SU	中村 崇司	
41482	Akira Oda	9 (2021) 7531-7545	2017B1363	BL43IR	黒田 泰重	Unprecedented CO ₂ Adsorption Behaviour by 5A-type Zeolite Discovered in Lower Pressure Region and at 300 K

Journal of the American Chemical Society

41149	Dusan Kolarski	143 (2021) 2078-2087	2017A6743	BL44XU	廣田 毅	Photopharmacological Manipulation of Mammalian CRY1 for Regulation of the Circadian Clock
			2017B6743	BL44XU	廣田 毅	
			2018B1011	BL41XU	山本 雅貴	
			2018B6843	BL44XU	廣田 毅	
			2019A6942	BL44XU	廣田 毅	
41363	Masahiko Iyoda	142 (2020) 13662-13666	2016B1432	BL02B1	青柳 忍	Reversible Color and Shape Changes of Nanostructured Fibers of a Macrocyclic π-Extended Thiophene Hexamer Promoted by Adsorption and Desorption of Organic Vapor
			2017B1373	BL02B1	青柳 忍	
			2018A1345	BL02B1	青柳 忍	
			2018A1479	BL02B1	青柳 忍	
			2018B1535	BL02B1	青柳 忍	
41371	Sunney I. Chan	143 (2021) 3359-3372	2019B6600	BL44XU	Chen Chun Jung	Mechanism of Pyrroloquinoline Quinone-Dependent Hydride Transfer Chemistry from Spectroscopic and High-Resolution X-ray Structural Studies of the Methanol Dehydrogenase from <i>Methylococcus capsulatus</i> (Bath)
			2019A6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2018A6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2018B6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2017A6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2017B6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2016A6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2016B6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
41438	Yohei Haketa	142 (2020) 16420-16428	2017B4000	BL12B2	Chen Chun Jung	Self-Associating Curved π-Electronic Systems with Electron-Donating and Hydrogen-Bonding Properties
			2018B1823	BL02B1	笹野 力史	
			2017B1302	BL40XU	山門 陵平	
			2018B1563	BL40XU	前田 大光	
			2019A1475	BL40XU	前田 大光	

Macromolecules

41062	Riho Matsuoka	53 (2020) 9480-9490	2020A0533	BL04B2	藤井 健太	Importance of Lithium Coordination Structure to Lithium-Ion Transport in Polyether Electrolytes with Cyanoethoxy Side Chains: An Experimental and Theoretical Approach
			2018B1472	BL04B2	藤井 健太	
			2019B1227	BL04B2	関 志朗	
41174	Mizuki Kishimoto	53 (2020) 9097-9107	2017A7215	BL03XU	三田 一樹	Effect of Submicron Structures on the Mechanical Behavior of Polyethylene
			2017B7267	BL03XU	三田 一樹	
			2018A7217	BL03XU	内田 公典	
			2018B7267	BL03XU	内田 公典	
			2019A7215	BL03XU	内田 公典	
			2019B7264	BL03XU	内田 公典	
41377	Kohji Tashiro	54 (2021) 2334-2352	2016B1431	BL40XU	田代 孝二	High-Electric-Field-Induced Hierarchical Structure Change of Poly(vinylidene fluoride) as Studied by the Simultaneous Time-Resolved WAXD/SAXS/FTIR Measurements and Computer Simulations
			2017A1075	BL40XU	田代 孝二	
			2017B1213	BL40XU	田代 孝二	
			2019B1083	BL40XU	田代 孝二	
			2020A1224	BL40XU	田代 孝二	
41418	Tadanori Kurosawa	54 (2021) 2113-2123	2016B1879	BL46XU	池田 大次	Chrysenodithiophene-Based Conjugated Polymer: An Elongated Fused π-Electronic Backbone with a Unique Orbital Structure Toward Efficient Intermolecular Carrier Transport
			2017A1764	BL19B2	池田 大次	
			2017B1906	BL19B2	池田 大次	
			2018B1785	BL19B2	黒澤 忠法	

Minerals

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41065	Yukinori Tani	11 (2021) 53	2018B1012	BL01B1	田中 万也	Preferential Elimination of Ba ²⁺ through Irreversible Biogenic Manganese Oxide Sequestration
41127	Noriko Yamaguchi	11 (2021) 121	2018B1255	BL27SU	山口 紀子	Microscale Heterogeneous Distribution and Speciation of Phosphorus in Soils Amended with Mineral Fertilizer and Cattle Manure Compost
			2019B1126	BL27SU	山口 紀子	
41254	Ryoichi Nakada	11 (2021) 176	2017B1060	BL05XU	中田 亮一	EXAFS Determination of Clay Minerals in Martian Meteorite Allan Hills 84001 and Its Implication for the Noachian Aqueous Environment
			2017B1854	BL05XU	中田 亮一	
			2018A1108	BL05XU	中田 亮一	
			2018A1759	BL05XU	中田 亮一	
41396	Steeve Greaux	10 (2020) 261	2011B1372	BL04B1	Greaux Steeve	Thermoelastic Properties of K _{0.7} Na _{0.3} AlSi ₃ O ₈ Hollandite and NaAlSi ₂ O ₆ Jadeite: Implication for the Fate of the Subducted Continental Crust in the Deep Mantle
			2009A1300	BL04B1	Greaux Steeve	

Physical Review Materials

41052	Takahiro Matsuoka	4 (2020) 125402	2013B1109	BL10XU	松岡 岳洋	Beryllium Polyhydride Be ₄ H ₆ (H ₂) ₂ Synthesized at High Pressure and Temperature
			2014A1320	BL10XU	松岡 岳洋	
41086	Yuita Fujisawa	4 (2020) 114001	2019B3841	BL23SU	小林 正起	Tailoring Magnetism in Self-Intercalated Cr _{1+δ} Te ₂ Epitaxial Films
41355	Kenji Ishii	5 (2021) 024803	2017B3552	BL11XU	石井 賢司	Post-Growth Annealing Effects on Charge and Spin Excitations in Nd _{2-x} Ce _x CuO ₄
			2018A3555	BL11XU	石井 賢司	
41442	Kazuki Goto	4 (2020) 114406	2017B0921	BL09XU	壬生 攻	Effects of the Atomic Order on the Half-Metallic Electronic Structure in the Co ₂ Fe(Ga _{0.5} Ge _{0.5}) Heusler Alloy Thin Film
			2017B0921	BL13XU	壬生 攻	
			2019A1532	BL13XU	桜庭 裕弥	

Acta Crystallographica Section F

41066	Shuichi Takeda	77 (2021) 13-21	2017B2720	BL41XU	武田 修一	Crystal Structure of Human V-1 in the Apo Form
41134	Sho Ito	77 (2021) 1-7	2017A6737	BL44XU	西野 達哉	Structural Analysis of the Chicken FANCM-MHF Complex and its Stability
			2019B6935	BL44XU	西野 達哉	
			2014A6939	BL44XU	西野 達哉	
			2013B1195	BL38B1	西野 達哉	
41141	Takuya Yoshizawa	76 (2020) 86-93	2018B6859	BL44XU	吉澤 拓也	Crystal Structures of the Cell-Division Protein FtsZ from <i>Klebsiella pneumoniae</i> and <i>Escherichia coli</i>
			2018A6859	BL44XU	吉澤 拓也	
			2017A2570	BL38B1	松村 浩由	
			2017B2719	BL32XU	吉澤 拓也	

Chemical Science

41163	Shinya Masuda	11 (2020) 4194-4203	2017A1057	BL01B1	森 浩亮	Synthesis of a Binary Alloy Nanoparticle Catalyst with an Immiscible Combination of Rh and Cu Assisted by Hydrogen Spillover on a TiO ₂ Support
			2017B1084	BL01B1	森 浩亮	
41232	Jing Cao	11 (2020) 3978-3985	2019A4902	BL15XU	Deng Hexiang	Twist and Sliding Dynamics between Interpenetrated Frames in Ti-MOF Revealing High Proton Conductivity
41358	Tomohiro Ogawa	11 (2020) 5175-5181	2017B1261	BL02B2	堀毛 悟史	Coordination Polymer Glass from a Protic Ionic Liquid: Proton Conductivity and Mechanical Properties as an Electrolyte
			2018A1753	BL14B2	荻原 直希	
			2018B1311	BL02B2	堀毛 悟史	
			2019A1292	BL04B2	堀毛 悟史	

Chemistry Letters

41150	Shinya Okazoe	50 (2021) 596-598	2020A1130	BL02B2	草田 康平	First Observation of Superconductivity in Molybdenum-Ruthenium-Carbon Alloy Nanoparticles
41154	Norifumi Muraki	50 (2021) 603-606	2019A6953	BL44XU	村木 則文	Structural Characterization of Y29F Mutant of Thermoglobin from a Hyperthermophilic Bacterium <i>Aquifex aeolicus</i>
			2019B6953	BL44XU	村木 則文	
41164	Kohsuke Mori	50 (2021) 607-610	2020A0523	BL01B1	森 浩亮	PdAg Nanoparticles Supported on an Amine-Functionalized MOF as a Photo-Switchable Catalyst for Hydrogen Storage/Delivery Mediated by CO ₂ /Formic Acid
			2020A1062	BL01B1	森 浩亮	

Inorganic Chemistry

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41067	Yosuke Fukuda	60 (2021) 468-475	2016A1015	BL02B1	今野 巧	Insertion of a Hydride Ion Into a Tetrasilver(I) Cluster Covered by S-Donating Rhodium(III) Metalloligands
			2019A1302	BL02B1	吉成 信人	
			2019B1107	BL02B2	吉成 信人	
			2020A1210	BL02B2	吉成 信人	
41128	Daisuke Urushihara	60 (2021) 507-514	2017B1702	BL02B1	漆原 大典	Structural Transition with a Sharp Change in the Electrical Resistivity and Spin-Orbit Mott Insulating State in a Rhenium Oxide, $\text{Sr}_3\text{Re}_2\text{O}_9$
41434	Toshikazu Nakamura	60 (2021) 5206-5211	2019A0070	BL02B1	澤 博	Tetramethyltetraethiafulvalene $[(\text{NbOF}_4)]_n$: One-Dimensional Charge Transfer Salt with an Infinite Anion Chain

Journal of Alloys and Compounds

41093	Jia Yan Law	855 (2021) 157424	2019A2052	BL02B2	河口 彰吾	MnFeNiGeSi High-Entropy Alloy with Large Magnetocaloric Effect
41176	Keiji Kuno	865 (2021) 158637	2017A3582	BL11XU	松岡 岳洋	Mixed-Valence State and Structure Changes of EuH_x ($x = 2$ and $2 < x \leq 3$) under High-Pressure H_2 Atmosphere
			2017A1218	BL10XU	松岡 岳洋	
			2016A3753	BL22XU	町田 晃彦	
41264	Mamoru Kitaura	867 (2021) 159005	2017B1061	BL01B1	北浦 守	Structural Analyses of $\text{Gd}_3(\text{Al,Ga})_5\text{O}_{12}$ Garnet Solid Solutions via X-ray and UV Absorption Spectroscopy Experiments for Gd Atoms
			2018B1090	BL01B1	北浦 守	

Journal of the Physical Society of Japan

41244	Yutaka Moritomo	90 (2021) 013601	2020A1660	BL02B2	岩泉 滉樹	Structural Phase Transition Triggered by Na Ordering in $\text{Na}_{1.98}\text{Cd}[\text{Fe}(\text{CN})_6]_{0.99}$
			2020A1061	BL02B2	守友 浩	
41261	Shigenori Ueda	90 (2021) 034706	2014B4606	BL15XU	上田 茂典	Polarization Dependent Bulk-Sensitive Valence Band Photoemission Spectroscopy and Density Functional Theory Calculations: Part II. $4d$ Transition Metals
			2015B4606	BL15XU	上田 茂典	
			2016B4606	BL15XU	上田 茂典	
41493	Kazuo Soda	90 (2021) 044710	2017A1146	BL47XU	曾田 一雄	Electronic Structures of Transition-Metal Pernitrides Studied Using X-ray Absorption and Photoelectron Spectroscopy

Physical Review Letters

41049	Nicholas Hartley	126 (2021) 015703	2017B8075	BL3	Hartley Nicholas	Using Diffuse Scattering to Observe X-Ray-Driven Nonthermal Melting
			2018A8056	BL3	Hartley Nicholas	
41386	Shan Wu	126 (2021) 107001	2019B1455	BL35XU	Song Yu	Short-Range Nematic Fluctuations in $\text{Sr}_{1-x}\text{Na}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ Superconductors
41419	Ichiro Inoue	126 (2021) 117403	2018A8040	BL3	井上 伊知郎	Atomic-Scale Visualization of Ultrafast Bond Breaking in X-Ray-Excited Diamond

Protein Science

41043	Yota Fukuda	30 (2021) 513-518	2019A6943	BL44XU	福田 庸太	Structural Insights into a C2 Domain Protein Specifically Found in Tardigrades
			2019B6943	BL44XU	福田 庸太	
			2020A6543	BL44XU	福田 庸太	
41169	Atsushi Okawa	30 (2021) 663-677	2017A6722	BL44XU	志波 智生	Structural Basis for Substrate Specificity of L-methionine Decarboxylase
			2017B6722	BL44XU	志波 智生	
			2018A6820	BL44XU	志波 智生	
			2018B6820	BL44XU	志波 智生	
			2019A6918	BL44XU	志波 智生	
			2019B6918	BL44XU	志波 智生	
41398	Keita Matsuoka	30 (2021) 1064-1071	2017A2699	BL41XU	松岡 敬太	The Crystal Structure of the CmABCB1 G132V Mutant, which Favors the Outward-Facing State, Reveals the Mechanism of the Pivotal Joint between TM1 and TM3
			2018A2699	BL41XU	松岡 敬太	

ACS Applied Nano Materials

41155	Kohsuke Mori	3 (2020) 10209-10217	2019B1091	BL01B1	森 浩亮	Luminescent Single-Atom Eu-Coordinated Graphitic Carbon Nitride Nanosheets for Selective Sensing of Acetone and Cyclohexane
			2019A1048	BL01B1	森 浩亮	
41260	Tien K. Nguyen	4 (2021) 1672-1681	2017A2566	BL32XU	安部 聡	<i>In-Cell</i> Engineering of Protein Crystals with Nanoporous Structures for Promoting Cascade Reactions
			2018A2525	BL32XU	安部 聡	
			2019A2561	BL32XU	安部 聡	

ACS Central Science

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41047	Miho Sawamura	6 (2020) 2326-2338	2018B1811	BL19B2	藪内 直明	Nanostructured LiMnO ₂ with Li ₃ PO ₄ Integrated at the Atomic Scale for High-Energy Electrode Materials with Reversible Anionic Redox
			2019A2058	BL04B2	尾原 幸治	
			2016A1460	BL27SU	中西 康次	
			2016A1463	BL27SU	中西 康次	
41427	Chia-Jui Chang	5 (2019) 1998-2009	2017B4266	BL12XU	Chen Hao-Ming	Quantitatively Unraveling the Redox Shuttle of Spontaneous Oxidation/Electroreduction of Cu ₂ O _x on Silver Nanowires Using in Situ X-ray Absorption Spectroscopy

Acta Crystallographica Section B

41215	Finn K. Larsen	75 (2019) 621-633	2014A0078	BL02B1	Iversen Bo	Accessing the Rich Carbon Nitride Materials Chemistry by Heat Treatments of Ammonium Thiocyanate, NH ₄ SCN
41216	Venkatesha Hathwar	73 (2017) 304-312	2014A0078	BL02B1	Iversen Bo	Variable-Temperature Structural Studies on Valence Tautomerism in Cobalt Bis(dioxolene) Molecular Complexes

Acta Crystallographica Section D

41347	Kazuya Hasegawa	77 (2021) 300-312	2017B1012	BL41XU	山本 雅貴	Evaluation of the Data-Collection Strategy for Room-Temperature Micro-Crystallography Studied by Serial Synchrotron Rotation Crystallography Combined with the Humid Air and Glue-Coating Method
			2017A2522	BL41XU	長谷川 和也	
			2018A1003	BL41XU	山本 雅貴	
			2018A2554	BL41XU	長谷川 和也	
			2018B1011	BL41XU	山本 雅貴	
			2018B2089	BL41XU	長谷川 和也	
			2019A1005	BL41XU	山本 雅貴	
			2019A2055	BL41XU	長谷川 和也	
			2019B1002	BL41XU	山本 雅貴	
			2019B2090	BL41XU	長谷川 和也	
			2020A1780	BL41XU	山本 雅貴	
			2020A2028	BL41XU	長谷川 和也	
			2020A2090	BL41XU	長谷川 和也	
			2020A2551	BL41XU	山本 雅貴	
2020A2583	BL41XU	熊坂 崇				
41413	Naoki Saka	75 (2019) 792-803	2016B6640	BL44XU	三上 文三	Relationship between the Induced-Fit Loop and the Activity of <i>Klebsiella pneumoniae</i> Pullulanase
			2013B6849	BL44XU	三上 文三	
			2015A1052	BL26B1	三上 文三	
			2015B6539	BL44XU	三上 文三	
			2016A2540	BL26B1	三上 文三	
			2017A2546	BL26B1	三上 文三	
			2017A2547	BL26B1	三上 文三	

Angewandte Chemie International Edition

41151	Soichiro Nakatsuka	59 (2020) 1435-1439	2017A1132	BL40XU	畠山 琢次	Solvent-Vapor-Induced Reversible Single-Crystal-to-Single-Crystal Transformation of a Triphosphaazatriangulene-Based Metal-Organic Framework
			2017B1073	BL40XU	畠山 琢次	
			2018A1114	BL40XU	畠山 琢次	
			2018B1125	BL40XU	畠山 琢次	
			2019A1142	BL40XU	畠山 琢次	
41156	Susumu Oda	60 (2021) 2882-2886	2017A1132	BL40XU	畠山 琢次	Carbazole-Based DABNA Analogues as Highly Efficient Thermally Activated Delayed Fluorescence Materials for Narrowband Organic Light-Emitting Diodes
			2017B1073	BL40XU	畠山 琢次	
			2018A1114	BL40XU	畠山 琢次	
			2018B1125	BL40XU	畠山 琢次	
			2019A1142	BL40XU	畠山 琢次	
2019B1063	BL40XU	畠山 琢次				

Applied Catalysis B

41143	Guoxiang Yang	283 (2021) 119628	2019B1114	BL01B1	桑原 泰隆	PdAg Alloy Nanoparticles Encapsulated in N-Doped Microporous Hollow Carbon Spheres for Hydrogenation of CO ₂ to Formate
			2019A1050	BL01B1	桑原 泰隆	
41185	Tayyebeh Solitani	286 (2021) 119899	2015B1275	BL01B1	吉田 寿雄	Effect of Transition Metal Oxide Cocatalyst on the Photocatalytic Activity of Ag Loaded CaTiO ₃ for CO ₂ Reduction with Water and Water Splitting
			2019B1515	BL01B1	山本 旭	

Applied Physics Express

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41287	Kwan Hon	14 (2021) 033001	2017B1017	BL25SU	野村 光	Numerical Simulation of Artificial Spin Ice for Reservoir Computing
41508	Akio Ogura	14 (2021) 011001	2017B3585	BL11XU	鈴木 秀俊	Inhomogeneous In-Plane Distribution of Preferential Glide Planes of β Dislocations in a Metamorphic InGaAs Solar Cell
			2016B3565	BL11XU	鈴木 秀俊	
			2018B3586	BL11XU	鈴木 秀俊	
			2019A3592	BL11XU	鈴木 秀俊	

Applied Surface Science

41368	Yugo Kubo	553 (2021) 149437	2016B1845	BL46XU	久保 優吾	Changes in the Chemical State of Metallic Cr during Deposition on a Polyimide Substrate: Full Soft XPS and ToF-SIMS Depth Profiles
			2016B5030	BL16XU	久保 優吾	
			2020A5030	BL16XU	上村 重明	
41481	Yi-Jan Lin	528 (2020) 147014	2017B4144	BL12B2	Tseng Yuan-Chieh	Role of Electrode-Induced Oxygen Vacancies in Regulating Polarization Wake-Up in Ferroelectric Capacitors

Catalysis Science & Technology

41186	Seiji Yamazoe	11 (2021) 116-123	2018B1352	BL01B1	山本 旭	Identification of Hydrogen Species on Pt/Al ₂ O ₃ by <i>in situ</i> Inelastic Neutron Scattering and Their Reactivity with Ethylene
			2018A1497	BL01B1	吉田 寿雄	
41230	Kazumasa Murata	11 (2021) 506-515	2018A1797	BL14B2	村田 和優	Kinetic Analysis of Ag Particle Redispersion into ZSM-5 in the Presence of Coke using <i>in situ</i> XAFS
			2018B1806	BL14B2	村田 和優	
			2019A1710	BL14B2	村田 和優	

FEBS Letters

41428	Atsushi Kodan	595 (2021) 707-716	2011B1210	BL41XU	小段 篤史	ABCB1/MDR1/P-gp Employs an ATP-Dependent Twist-and-Squeeze Mechanism to Export Hydrophobic Drugs
			2012A1304	BL41XU	小段 篤史	
			2012B1348	BL41XU	小段 篤史	
			2014A1163	BL41XU	小段 篤史	
			2014B1001	BL41XU	小段 篤史	
41454	Fumihiko Ogasawara	594 (2020) 3876-3881	2015A1039	BL41XU	小段 篤史	ABC Proteins in Evolution
			2011B1210	BL41XU	小段 篤史	
			2012A1304	BL41XU	小段 篤史	
			2012B1348	BL41XU	小段 篤史	
			2013B1277	BL41XU	小段 篤史	
			2014A1163	BL41XU	小段 篤史	
2014B1001	BL41XU	小段 篤史				
2015A1039	BL41XU	小段 篤史				

International Journal of Heat and Mass Transfer

41152	Omer Faruk Atac	169 (2021) 120897	2017B1102	BL40XU	文 石洙	Unraveling the Initial Flash Boiling Spray Formation at the Same Superheated Index Achieved by Altering Ambient Pressure and Fuel Temperature Independently
			2018A0145	BL40XU	文 石洙	
41492	Shunsuke Hashimoto	173 (2021) 121245	2017B1580	BL35XU	橋本 俊輔	Analysis of Enhancement Mechanism for Thermal Conductivity of Nanofluids by Inelastic X-ray Scattering

Journal of Molecular Liquids

41255	Szilvia Pothoczki	329 (2021) 115592	2018B1210	BL04B2	Temleitner László	Hydrogen Bonding and Percolation in Propan-2-ol – Water Liquid Mixtures: X-ray Diffraction Experiments and Computer Simulations
41384	Shinya Hosokawa	332 (2021) 115825	2005B0346	BL35XU	加美山 隆	Collective Dynamics of Liquid Acetone Investigated by Inelastic X-ray Scattering

JPS Conference Proceedings

41484	Shinya Hosokawa	33 (2021) 011069	2017A4125	BL12B2	Stellhorn Jens	Local- and Intermediate-Range Atomic Order in Ga ₂ Ge ₃ Se ₉ Glass: Complementary Use of X-Rays and Neutrons
			2018B1208	BL13XU	細川 伸也	
			2019A1556	BL13XU	細川 伸也	
41485	Shinya Hosokawa	33 (2021) 011070	2014A1060	BL13XU	細川 伸也	Local- and Intermediate-Range Order in Room Temperature Superionic Conducting Ag-GeSe ₃ Glasses

Materials Transactions

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41189	Zenji Horita	62 (2021) 167-176	2017B1487	BL04B1	堀田 善治	<i>In Situ</i> Synchrotron X-ray Analysis: Application of High-Pressure Sliding Process to Ti Allotropic Transformation
			2018A1451	BL04B1	堀田 善治	
			2018B1697	BL04B1	増田 高大	
			2017A1851	BL04B1	肥後 祐司	
			2017A1864	BL04B1	肥後 祐司	
			2018B1494	BL04B1	堀田 善治	
41486	Tessui Nakagawa	(2021) Online publication Mar. 26, 2021	2015B1776	BL14B2	宮里 一旗	Structural Properties of (Ti, Zr)(Mn, Cr) ₂ M _{0.1} (M = None, Fe, Co, Ni, and Cu) Hydrogen Storage Alloys: Composition Distribution and Occupied Site of Doped Element

Nanoscale

41140	H. Kawamoto	12 (2020) 23274-23281	2019A7451	BL07LSU	永村 直佳	Micrometer-Scale Monolayer SnS Growth by Physical Vapor Deposition
			2018B7580	BL07LSU	永村 直佳	
41190	Masanori Wakizaka	12 (2020) 15814-15822	2018B1550	BL01B1	今岡 享稔	Subnano-Transformation of Molybdenum Carbide to Oxycarbide

Physical Chemistry Chemical Physics

41137	Jheng-Ming Huang	18 (2016) 15251-15259	2015B4134	BL12B2	Lin Chih Ming	Enhanced Electrical Properties and Field Emission Characteristics of AZO/ZnO-Nanowire Core-Shell Structures
41205	Suwilai Chaveanghong	23 (2021) 3866-3873	2018A7811	BL36XU	横山 利彦	Sulfur Poisoning of Pt and PtCo Anode and Cathode Catalysts in Polymer Electrolyte Fuel Cells Studied by <i>Operando</i> Near Ambient Pressure Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy
			2018B7810	BL36XU	横山 利彦	
			2018B7811	BL36XU	横山 利彦	
			2019A7810	BL36XU	横山 利彦	
			2019A7811	BL36XU	横山 利彦	
			2019B7810	BL36XU	横山 利彦	
			2019B7811	BL36XU	横山 利彦	

Physical Review Research

41240	Max Burian	3 (2021) 013128	2017B8039	BL3	Staub Urs	Structural Involvement in the Melting of the Charge Density Wave in 1T-TiSe ₂
41283	Shuvam Sarkar	3 (2021) 013151	2017A4901	BL15XU	藤田 伸尚	Bulk Electronic Structure of High-Order Quaternary Approximants

Polymer

41159	Taizo Kabe	215 (2021) 123418	2017A1875	BL03XU	加部 泰三	Thermal Degradation and Isothermal Crystallization Behavior of Curdlan Propionate and its Melt-Spinning Fiber
			2019B7272	BL03XU	加部 泰三	
			2017A1440	BL45XU	加部 泰三	
			2017A7232	BL03XU	加部 泰三	
			2017B7281	BL03XU	加部 泰三	
			2018A7232	BL03XU	加部 泰三	
			2019A1213	BL40B2	岩田 忠久	
			2019B1081	BL40B2	岩田 忠久	
			2016B1966	BL03XU	増永 啓康	
			2019A7234	BL03XU	岩田 忠久	
41356	Yohei Nakanishi	218 (2021) 123486	2019A1730	BL27SU	中西 洋平	Effects of Mixing Process on Spatial Distribution and Coexistence of Sulfur and Zinc in Vulcanized EPDM Rubber
			2019B1811	BL27SU	中西 洋平	
			2020A1705	BL27SU	中西 洋平	
			2020A2019	BL19B2	内田 公典	
			2019B7264	BL03XU	内田 公典	
			2020A7213	BL03XU	内田 公典	

Polymers

41170	Daisuke Kugimoto	13 (2021) 460	2017B1300	BL40B2	秋葉 勇	Effect of Molecular Architecture on Associating Behavior of Star-Like Amphiphilic Polymers Consisting of Plural Poly(ethylene oxide) and One Alkyl Chain
			2017B1327	BL40B2	秋葉 勇	
			2018A1392	BL40B2	秋葉 勇	
			2018A1475	BL40B2	秋葉 勇	
			2018B1205	BL40B2	秋葉 勇	
41370	Shigesaburo Ogawa	12 (2020) 671	2014B7254	BL03XU	高橋 功	Unveiling the Uniqueness of Crystal Structure and Crystalline Phase Behavior of Anhydrous Octyl β-D-Glucoside Using Aligned Assembly on a Surface
			2015B7254	BL03XU	高橋 功	
			2016A7204	BL03XU	高橋 功	
			2017A7203	BL03XU	高橋 功	

Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41194	Hongtao Liu	115 (2018) 12046-12050	2017A2531	BL32XU	Kobilka Brian	Structure-Guided Development of Selective M3 Muscarinic Acetylcholine Receptor Antagonists
41256	Ryuta Kanai	118 (2021) e2020438118	2020A0171	BL41XU	豊島 近	Binding of Cardiotonic Steroids to Na ⁺ ,K ⁺ -ATPase in the E2P State
			2018A0144	BL41XU	豊島 近	
			2016A0133	BL41XU	豊島 近	
			2013A0049	BL41XU	豊島 近	
			2012B1778	BL41XU	豊島 近	

Science Advances

41046	Samuel L. Rose	7 (2021) eabd8523	2019B8009	BL2	當舎 武彦	An Unprecedented Insight into the Catalytic Mechanism of Copper Nitrite Reductase from Atomic-Resolution and Damage-Free Structures
			2019A2575	BL41XU	當舎 武彦	
41417	T. Takenaka	7 (2021) eabf3996	2016A0073	BL43IR	佐々木 孝彦	Strongly Correlated Superconductivity in a Copper-Based Metal-Organic Framework with a Perfect Kagome Lattice

Solid State Ionics

41209	Masakuni Takahashi	361 (2021) 115568	2019B1021	BL08W	内本 喜晴	Improvement of Lithium Ionic Conductivity of Li ₃ PS ₄ through Suppression of Crystallization using Low-Boiling-Point Solvent in Liquid-Phase Synthesis
41374	Ryo Kawaguchi	355 (2020) 115415	2019A1216	BL02B2	単 躍進	Synthesis and Examination of GdNb _{1-x} W _x O _{4+z} New Scheelite-Type Oxide-Ion Conductor

レーザー研究 (The Review of Laser Engineering)

41076	Takuo Okuchi	49 (2021) 35-39	2018A8036	BL3	尾崎 典雅	Shock-Compression Experiments of Planetary Materials Driven by Power Lasers
			2018B8039	BL3	奥地 拓生	
			2018A8033	BL3	奥地 拓生	
			2017B8051	BL3	尾崎 典雅	
			2017B8080	BL3	奥地 拓生	
			2016B8083	BL3	奥地 拓生	
			2016B8084	BL3	尾崎 典雅	
41218	Yuhei Umeda	49 (2021) 56-60	2018B8069	BL3	尾崎 典雅	Experimental Investigations for Planetary Impact of Carbonate Minerals by High Power Laser and X-ray Free Electron Laser (XFEL)
			2018B8061	BL3	佐藤 友子	
			2018B8039	BL3	奥地 拓生	

2020 International Symposium on Electrical Insulating Materials (ISEIM)

41060	Ryota Kitani	(2020) 169-172	2017B1022	BL20XU	木谷 亮太	Q(t)-Measurements of Electrically Deteriorated Polymeric Materials Under Environmental Testing
			2018B1007	BL20XU	木谷 亮太	

ACS Applied Polymer Materials

41166	Masayuki Wakioka	3 (2021) 830-836	2019B1843	BL46XU	脇岡 正幸	Donor-Acceptor Polymers Containing 4,8-Dithienylbenzo[1,2- <i>b</i> :4,5- <i>b'</i>]dithiophene via Highly Selective Direct Arylation Polymerization
			2018A1584	BL19B2	脇岡 正幸	
			2018B1617	BL46XU	脇岡 正幸	
			2019B1803	BL19B2	富田 和孝	

ACS Energy Letter

41426	Sung-Fu Hung	4 (2019) 2813-2820	2017B4266	BL12XU	Chen Hao-Ming	In Situ Spatially Coherent Identification of Phosphide-Based Catalysts: Crystallographic Latching for Highly Efficient Overall Water Electrolysis
-------	--------------	-----------------------	-----------	--------	---------------	---

ACS Macro Letters

41391	Makoto Suzuki	10 (2021) 359-364	2020A0536	BL40XU	松下 裕秀	Hexagonally Packed Cylindrical Structures with Multiple Satellites from Pentablock Quarterpolymers of the AB ₁ CB ₂ D Type and Their Blends with Homopolymers
-------	---------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

ACS Omega

41513	Takeshi Fujita	3 (2018) 16651-16657	2017B4605	BL15XU	阿部 英樹	Nanoporous Nickel Composite Catalyst for the Dry Reforming of Methane
-------	----------------	-------------------------	-----------	--------	-------	---

Acta Materialia

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41070	Gaku Okuma	206 (2021) 116605	2019A1306	BL20XU	大熊 学	Microstructural Evolution of Electrodes in Sintering of Multi-Layer Ceramic Capacitors (MLCC) Observed by Synchrotron X-ray Nano-CT

Additive Manufacturing

41138	Kenta Yamanaka	37 (2021) 101678	2017A3740	BL22XU	山中 謙太	Quantifying the Dislocation Structures of Additively Manufactured Ti-6Al-4V Alloys using X-ray Diffraction Line Profile Analysis
-------	----------------	---------------------	-----------	--------	-------	--

Advanced Composite Materials

41495	Keisuke Iizuka	(2020) Published online 19 Nov. 2020	2018B1842	BL46XU	梶原 堅太郎	Reverse Piezo-Resistivity of 3D Printed Continuous Carbon Fiber/PA6 Composites in a Low Stress Range
-------	----------------	--------------------------------------	-----------	--------	--------	--

Advanced Electronic Materials

41136	Tatsuya Mori	7 (2021) 2001052	2019B1736	BL40B2	森 達哉	U-Shaped Heteroacenes Embedded with Heavy Chalcogen Atoms: Unique Bilayer Self-Organization of Crooked π -Cores Enabling Efficient Charge Transport
-------	--------------	---------------------	-----------	--------	------	---

Advanced Functional Materials

41077	Tsutomu Kanno	31 (2021) 2008469	2019B1812	BL35XU	菅野 勉	High-Density Frenkel Defects as Origin of N-Type Thermoelectric Performance and Low Thermal Conductivity in Mg ₃ Sb ₂ -Based Materials
			2019B1883	BL19B2	菅野 勉	

Advanced Materials

41153	Naoya Ikeda	32 (2020) 2004072	2017A1132	BL40XU	畠山 琢次	Solution-Processable Pure Green Thermally Activated Delayed Fluorescence Emitter Based on the Multiple Resonance Effect
			2017B1073	BL40XU	畠山 琢次	
			2018A1114	BL40XU	畠山 琢次	
			2018B1125	BL40XU	畠山 琢次	
			2019A1142	BL40XU	畠山 琢次	
			2019B1063	BL40XU	畠山 琢次	

Advanced Powder Technology

41229	Takumi Kusano	31 (2020) 4491-4499	2018B7035	BL33XU	原田 雅史	Rheological Behavior of Concentrated Slurry and Wet Granules for Lithium Ion Battery Electrodes
			2019A7035	BL33XU	松永 拓郎	
			2019B7035	BL33XU	松永 拓郎	

AIP Advances

41257	Kozo Osamura	9 (2019) 075216	2017A1108	BL28B2	長村 光造	Inverted-Parabolic and Weak Strain Dependencies on the Critical Current in Practical <110> and <100> Oriented REBCO Tapes
			2017B1857	BL28B2	長村 光造	

Archives of Biochemistry and Biophysics

41410	Taro Matsuda	688 (2020) 108370	2017B6750	BL44XU	三上 文三	The High-Resolution Crystal Structure of Lobster Hemocyanin Shows its Enzymatic Capability as a Phenoloxidase
			2017A2546	BL26B1	三上 文三	
			2017A2547	BL26B1	三上 文三	

Astroparticle Physics

41361	Q. Abarr	126 (2021) 102529	2014B1092	BL20B2	松本 浩典	XL-Calibur – a Second-Generation Balloon-Borne Hard X-ray Polarimetry Mission
			2015A1274	BL20B2	松本 浩典	
			2016A1035	BL20B2	松本 浩典	
			2019B1221	BL20B2	前田 良知	
			2020A1298	BL20B2	前田 良知	

BBA Advances

41509	Kyouko Shinzawa-Itoh	1 (2021) 100009	2018A6854	BL44XU	村本 和優	The 1.3-Å Resolution Structure of Bovine Cytochrome c Oxidase Suggests a Dimerization Mechanism
			2018B6854	BL44XU	村本 和優	
			2019A6954	BL44XU	村本 和優	
			2019B6954	BL44XU	村本 和優	
			2020A6552	BL44XU	村本 和優	

Biochemical Journal

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41362	Hideaki Sato	478 (2021) 1023-1042	2016A6622	BL44XU	杉島 正一	Crystal Structures of Hydroxymethylbilane Synthase Complexed with a Substrate Analog: a Single Substrate-Binding Site for Four Consecutive Condensation Steps
			2016B6622	BL44XU	杉島 正一	
			2018A6700	BL44XU	中川 敦史	
			2017B6725	BL44XU	杉島 正一	

Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics

41168	Kota Mochizuki	1861 (2020) 148283	2016A6635	BL44XU	原田 繁春	The ASCT/SCS Cycle Fuels Mitochondrial ATP and Acetate Production in <i>Trypanosoma brucei</i>
			2017A6722	BL44XU	志波 智生	
			2017B6722	BL44XU	志波 智生	
			2018A6820	BL44XU	志波 智生	
			2018B6820	BL44XU	志波 智生	

Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects

41200	Hirofumi Shimizu	1864 (2020) 129361	2018B1154	BL28B2	清水 啓史	Diffraction X-ray Tracking Method for Recording Single-Molecule Protein Motions
-------	------------------	-----------------------	-----------	--------	-------	---

Biophysical Reviews

41072	Masayoshi Nakasako	12 (2020) 541-567	2012A8005	BL3	中迫 雅由	Methods and Application of Coherent X-ray Diffraction Imaging of Noncrystalline Particles
			2012B8037	BL3	中迫 雅由	
			2013A8043	BL3	中迫 雅由	
			2013B8049	BL3	中迫 雅由	
			2014A8033	BL3	中迫 雅由	
			2014B8052	BL3	中迫 雅由	
			2015A8051	BL3	中迫 雅由	
			2015B8049	BL3	中迫 雅由	
			2016A8048	BL3	中迫 雅由	
			2016B8064	BL3	中迫 雅由	
			2017A8015	BL3	中迫 雅由	
2017B8003	BL2	中迫 雅由				

Bulletin of the Chemical Society of Japan

41503	Shuhei Nishinaga	92 (2019) 1107-1116	2017A1771	BL46XU	尾坂 格	Bis[1]benzothieno[5,4- <i>d</i> 5',4'- <i>d'</i>]benzo[1,2- <i>b</i> :4,5- <i>b'</i>]dithiophene Derivatives: Synthesis and Effect of Sulfur Positions on Their Transistor Properties
			理研	BL44B2		

Carbohydrate Polymers

41079	Akari Okugawa	259 (2021) 117656	2018A1066	BL40B2	山根 千弘	Relaxation Phenomenon and Swelling Behavior of Regenerated Cellulose Fibers Affected by Organic Solvents
-------	---------------	----------------------	-----------	--------	-------	--

Carbon

41366	Takaaki Taniguchi	177 (2021) 26-34	2017B4602	BL15XU	谷口 貴章	Reversible Hydrogenation and Irreversible Epoxidation Induced by Graphene Oxide Electrolysis
-------	-------------------	---------------------	-----------	--------	-------	--

Cardiovascular Diabetology

41312	Eugene Saw	20 (2021) 50	2018A1282	BL28B2	Katara Rajesh	Activation of the Cardiac Non-Neuronal Cholinergic System Prevents the Development of Diabetes-Associated Cardiovascular Complications
-------	------------	-----------------	-----------	--------	---------------	--

Cell

41195	Xiangyu Liu	177 (2019) 1243-1251	2018A2515	BL32XU	Kobilka Brian	Structural Insights into the Process of GPCR-G Protein Complex Formation
-------	-------------	-------------------------	-----------	--------	---------------	--

Cell Chemical Biology

41054	Daisuke Hazama	27 (2020) 1181-1191	2018B6500	BL44XU	山下 栄樹	Macrocyclic Peptide-Mediated Blockade of the CD47-SIRP α Interaction as a Potential Cancer Immunotherapy
-------	----------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

ChemCatChem

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41265	Sho Yamaguchi	13 (2021) 1135-1139	2017B1830	BL14B2	金田 清臣	H ₂ -Free Selective Dehydroxymethylation of Primary Alcohols over Palladium Nanoparticle Catalysts
			2017B1155	BL01B1	金田 清臣	
			2017B1620	BL14B2	金田 清臣	
			2017A1820	BL14B2	金田 清臣	
			2017A1239	BL01B1	金田 清臣	
			2018A1537	BL14B2	水垣 共雄	

Chemical and Pharmaceutical Bulletin

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41038	Hiroki Ohnari	69 (2021) 72-80	2014A1049	BL40B2	小幡 蒼子	Phase Separation in Lipid Lamellae Result from Ceramide Conformations and Lateral Packing Structure
			2017A1094	BL40B2	小幡 蒼子	
			2017B1092	BL40B2	小幡 蒼子	

Chemical Engineering Science

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41223	Chechia Hu	235 (2021) 116451	2019A1386	BL01B1	吉田 真明	Production of Glycerol Carbonate from Carboxylation of Glycerol with CO ₂ using ZIF-67 as a Catalyst

Chemistry - An Asian Journal

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41095	Keisuke Fujimoto	16 (2021) 690-695	2020A1627	BL19B2	中山 泰生	Curved Perylene Diimides Fused with Seven-Membered Rings

ChemistrySelect

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41369	Shigesaburo Ogawa	5 (2020) 10022-10028	2018A7203	BL03XU	藤原 明比古	Thermal Behavior of Anhydrous Ascorbic Acid 6-Palmitate with Trace of Decomposition

ChemSusChem

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41198	Hiroshi Ito	14 (2021) 1377-1387	2015B1791	BL20XU	辻 良太郎	High Capacity and Energy Density Organic Lithium-Ion Battery Based on Buckypaper with Stable π -Radical

Circulation Research

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41206	Jason Kar-Sheng Lew	127 (2020) 1384-1400	2015B1366	BL28B2	Schwenke Daryl	Exercise Regulates MicroRNAs to Preserve Coronary and Cardiac Function in the Diabetic Heart
			2016A1177	BL28B2	Schwenke Daryl	
			2017A1389	BL20B2	Pearson James	

Clinical Science

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41091	James Pearson	135 (2021) 327-346	2013A1267	BL28B2	Pearson James	β -Blockade Prevents Coronary Macro- and Microvascular Dysfunction Induced by a High Salt Diet and Insulin Resistance in the Goto-Kakizaki Rat
			2013B1767	BL28B2	Pearson James	
			2015A1354	BL40XU	Pearson James	
			2015A1449	BL28B2	Pearson James	
			2015B1469	BL28B2	Pearson James	

Communications Biology

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41411	Makoto Hibi	4 (2021) 16	2019B2714	BL26B1	三上 文三	A Three-Component Monooxygenase from <i>Rhodococcus wratislaviensis</i> May Expand Industrial Applications of Bacterial Enzymes
			2018A2533	BL26B1	三上 文三	
			2018A2563	BL26B1	三上 文三	

Communications Physics

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41422	Yuki Takayama	4 (2021) 48	2017A3201	BL24XU	高山 裕貴	Dynamic Nanoimaging of Extended Objects via Hard X-ray Multiple-Shot Coherent Diffraction with Projection Illumination Optics
			2017B3201	BL24XU	高山 裕貴	
			2018A3201	BL24XU	高山 裕貴	
			2018B3201	BL24XU	高山 裕貴	
			2019A3201	BL24XU	高山 裕貴	
			2019A3297	BL24XU	高山 裕貴	
			2019B3201	BL24XU	高山 裕貴	

CrystEngComm

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41382	Jaemyung Kim	23 (2021) 1628-1633	2020A1002	BL20B2	坂田 修身	Highly-Crystalline 6 Inch Free-Standing GaN Observed using X-ray Diffraction Topography
			2020A4503	BL15XU	Kim Jaemyung	
			2020A4504	BL15XU	Kim Jaemyung	
			2020A1794	BL20B2	生田目 俊秀	

Dalton Transactions

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41039	Atsushi Kondo	49 (2020) 3692-3699	2017B1112	BL02B2	近藤 篤	A Flexible Two-Dimensional Layered Metal–Organic Framework Functionalized with (Trifluoromethyl)trifluoroborate: Synthesis, Crystal Structure, and Adsorption/Separation Properties
			2018A1446	BL02B2	近藤 篤	
			2018B1111	BL02B2	近藤 篤	

e-Journal of Surface Science and Nanotechnology

41421	Mario Okawa	19 (2021) 20-23	2014A7465	BL07LSU	大川 万里生	Valence Fluctuations in Yb(Al,Fe)B ₄ Studied by Nanosecond-Time-Resolved Photoemission Spectroscopy Using Synchrotron Radiation
			2015A7485	BL07LSU	大川 万里生	

Genes

41167	Dan Sato	11 (2020) 1468	2015B6535	BL44XU	原田 繁春	Structural and Biochemical Features of <i>Eimeria tenella</i> Dihydroorotate Dehydrogenase, a Potential Drug Target
			2016A6635	BL44XU	原田 繁春	
			2016B6635	BL44XU	原田 繁春	

Geochimica et Cosmochimica Acta

41191	Paul Clarence M. Francisco	271 (2020) 1-20	2017B3504	BL11XU	土井 玲祐	Interaction of Fe ^{II} and Si under Anoxic and Reducing Conditions: Structural Characteristics of Ferrous Silicate Co-Precipitates
			2018A3711	BL22XU	土井 玲祐	

Green Chemistry

41491	Sho Yamaguchi	23 (2021) 2010-2016	2019A1390	BL01B1	満留 敬人	Air-Stable and Reusable Nickel Phosphide Nanoparticle Catalyst for the Highly Selective Hydrogenation of D-glucose to D-sorbitol
			2019B1560	BL01B1	満留 敬人	
			2020A1487	BL01B1	満留 敬人	
			2020A0558	BL01B1	満留 敬人	

IEEE Transactions on Magnetics

41282	Toshiya Inami	57 (2021) 6400105	2014B3711	BL22XU	稲見 俊哉	Feasibility Study of Magnetic-Domain Observation by Means of Non-Resonant Magnetic X-Ray Diffraction
			2015A3711	BL22XU	稲見 俊哉	
			2015B3711	BL22XU	稲見 俊哉	
			2016A3761	BL22XU	稲見 俊哉	
			2016B3762	BL22XU	稲見 俊哉	
			2017A3555	BL11XU	稲見 俊哉	
			2017B3555	BL11XU	稲見 俊哉	
			2018A3556	BL11XU	稲見 俊哉	
2018B3556	BL11XU	稲見 俊哉				

Inorganica Chimica Acta

41359	Masahiko Maekawa	514 (2021) 119962	2017B1254	BL02B1	杉本 邦久	Syntheses and Structural Characterizations of Mononuclear Ir(III) Hydride Complexes with 2,2':6',2''-terpyridine in the κ^2N,N' and κ^3N,N',N'' Coordination Modes
			2018A1426	BL02B1	杉本 邦久	
			2018B1409	BL02B1	杉本 邦久	
			2018B1412	BL02B1	杉本 邦久	
			2018B1818	BL02B1	杉本 邦久	
			2018B1819	BL02B1	前川 雅彦	

International Immunology

41416	Daisuke Morita	32 (2020) 805-810	2019B2714	BL26B1	三上 文三	Crystal Structure of the Ternary Complex of TCR, MHC Class I and Lipopeptides
-------	----------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

International Journal of Cosmetic Science

41064	Takeshi Yamada	43 (2021) 38-47	2016A1508	BL40B2	山田 武	Moisturizing Mechanism of Glycerol and Diglycerol on Human Stratum Corneum Studied by Synchrotron X-ray Diffraction
			2016B1578	BL40B2	山田 武	
			2017A1559	BL19B2	山田 武	
			2017A1821	BL19B2	山田 武	
			2017B1607	BL19B2	山田 武	
			2017B1910	BL19B2	山田 武	
			2018A1542	BL19B2	山田 武	
			2018B1601	BL40B2	山田 武	
2019B1720	BL40B2	山田 武				

International Journal of Hydrogen Energy

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41405	Toyokazu Tanabe	45 (2020) 28607-28615	2017B4910	BL15XU	田邊 豊和	Solar Hydrogen Evolution over Native Visible-Light-Driven Sn ₃ O ₄
			2018B4911	BL15XU	田邊 豊和	

Ionics

41058	Naoya Ishida	27 (2021) 925-933	2016A1509	BL19B2	井手本 康	Single-Phase Synthesis, Average, Electronic, and Local Structure and Cathode Properties of Pyroxene Type LiFeSi ₂ O ₆
			2016B1859	BL19B2	井手本 康	
			2017A1573	BL14B2	井手本 康	
			2017B1590	BL14B2	井手本 康	
			2017A1290	BL04B2	井手本 康	

ISJ International

41048	Masanori Suzuki	60 (2020) 2765-2772	2019A1444	BL08W	鈴木 賢紀	Phase Identification of Crystal Precipitated from Molten CaO-SiO ₂ -FeO _x -P ₂ O ₅ Slag by High Temperature <i>In-situ</i> X-ray Diffraction
			2018B1140	BL08W	鈴木 賢紀	

JOM

41224	Maranori Usui	73 (2021) 600-608	2017A7012	BL33XU	木村 英彦	Reliability of Cu Nanoparticles/Bi-Sn Solder Hybrid Bonding Under Cyclic Thermal Stresses
			2017B7012	BL33XU	木村 英彦	
			2018B7012	BL33XU	木村 英彦	

Joule

41425	Min Liu	3 (2019) 1703-1718	2017B4126	BL12B2	Hwang Bing Joe	Quantum-Dot-Derived Catalysts for CO ₂ Reduction Reaction
			2017B4269	BL12XU	Hwang Bing Joe	
			2018A4126	BL12B2	Hwang Bing Joe	
			2018A4255	BL12XU	Hwang Bing Joe	
			2018A4140	BL12B2	Hwang Bing Joe	

Journal of Applied Physics

41353	Yukiharu Takeda	128 (2020) 213902	2009A3829	BL23SU	竹田 幸治	Direct Observation of the Magnetic Ordering Process in the Ferromagnetic Semiconductor Ga _{1-x} Mn _x As via Soft X-ray Magnetic Circular Dichroism
			2009B3829	BL23SU	竹田 幸治	
			2010B3829	BL23SU	竹田 幸治	
			2014A3821	BL23SU	竹田 幸治	
			2014B3821	BL23SU	竹田 幸治	
			2016A3810	BL23SU	藤森 伸一	
			2011B3825	BL23SU	竹田 幸治	
			2013A3821	BL23SU	竹田 幸治	

Journal of Archaeological Science: Reports

41184	Masaaki Tabata	36 (2021) 102823	2017A1717	BL20XU	田端 正明	Estimation of Places of Production of Porcelains of Unknown Origins Excavated at the Mietsu Naval Facility Site Based on Differences in the Solubility of Trace Metals during the Elutriation Process
-------	----------------	---------------------	-----------	--------	-------	---

The Journal of Biochemistry

41193	Hiroki Tanaka	167 (2020) 419-427	2018A2535	BL41XU	胡桃坂 仁志	Biochemical and Structural Analyses of the Nucleosome Containing Human Histone H2A.J
-------	---------------	-----------------------	-----------	--------	--------	--

Journal of Catalysis

41053	Wei Liu	394 (2021) 50-57	2019B1830	BL14B2	八木 俊介	Effects of Zinc Ions at Tetrahedral Sites in Spinel Oxides on Catalytic Activity for Oxygen Evolution Reaction
			2019A1071	BL02B2	藤田 晃司	
			2019B1420	BL02B2	山田 幾也	

Journal of Chemical Engineering of Japan

41233	Anna Nagai	54 (2021) 44-49	2019A1695	BL40B2	永井 杏奈	Cocrystallization of 1-Pyrenemethylamine/CD-MOF Composite Using THF as a Cosolvent
-------	------------	--------------------	-----------	--------	-------	--

Journal of Energy Chemistry

41372	Junfu Zhou	56 (2021) 449-454	2019A1367	BL02B2	Ye Lin	The Synergy of Modulated Surface Polarity and Oxygen Vacancy for CO ₂ to Methanol over Zn ^(δ+) Ti ^(δ+) O _{vacancy}
-------	------------	----------------------	-----------	--------	--------	--

Journal of Inorganic Biochemistry

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41367	Satoshi Nagao	217 (2021) 111374	2018B2707	BL26B1	長尾 聡	Rational Design of Metal-Binding Sites in Domain-Swapped Myoglobin Dimers
			2017B2722	BL38B1	長尾 聡	

Journal of Luminescence

41498	Kazushige Ueda	229 (2021) 117683	2018B1573	BL14B2	植田 和茂	Site-Dependent Eu ³⁺ Photoluminescence in Double Perovskite-Type Alkaline Earth Lanthanum Tantalates
			2017B1576	BL14B2	植田 和茂	

Journal of Magnetism and Magnetic Materials

41393	A. K. Srinithi	529 (2021) 167866	2019A1007	BL02B2	廣澤 哲	Phase Relations and Extrinsic Magnetic Properties of Sm-(Fe,Co)-Ti-(Ga)-Based Alloys for ThMn ₁₂ -Type Permanent Magnets
-------	----------------	----------------------	-----------	--------	------	---

Journal of Morphology

41349	Zixin Cheng	280 (2019) 555-567	2016A1269	BL47XU	Blanke Alexander	Functional Morphology of <i>Trichadenotecnum</i> Male and Female Genitalia Analyzed using μ CT (Insecta: Psocodea: Psocomorpha)
			2017B1712	BL47XU	小川 直記	

The Journal of Organic Chemistry

41364	Keigo Shirahata	86 (2021) 302-309	2019A1478	BL02B1	青柳 忍	Reduction of Ethynylenes to Vinylenes in a Macrocyclic π -Extended Thiophene Skeleton Under McMurry Coupling Conditions
-------	-----------------	----------------------	-----------	--------	------	---

Journal of Peptide Science

41281	Yuki Orito	27 (2021) e3311	2017B1168	BL45XU	古屋 秀峰	Direct Determination of Helix Structures Involved in the Screw-Sense Reversal of Poly(β -phenylpropyl L-aspartate) by Synchrotron X-ray Diffraction
-------	------------	--------------------	-----------	--------	-------	--

The Journal of Physical Chemistry B

41365	Kazuhira Miwa	125 (2021) 918-925	2018A1479	BL02B1	青柳 忍	Anionic Fluorinated Zn-porphyrin Combined with Cationic Endohedral Li-Fullerene for Long-Lived Photoinduced Charge Separation with Low Energy Loss
-------	---------------	-----------------------	-----------	--------	------	--

The Journal of Physical Chemistry Letters

41051	Dmitrii Semenov	12 (2021) 32-40	2019B1476	BL10XU	Troyan Ivan	Novel Strongly Correlated Europium Superhydrides
-------	-----------------	--------------------	-----------	--------	-------------	--

Journal of Physics and Chemistry of Solids

41268	Naoya Yoshikane	150 (2021) 109822	2017B4268	BL12XU	Prassides Kosmas	Chemical Tuning of Samarium Valence in Mixed Valence (Sm _{1-x} Ca _x) ₂ 75C ₆₀ Fullerenes
			2018B4252	BL12XU	Prassides Kosmas	

Journal of Power Sources

41247	Yu-Qi Chen Master	477 (2020) 228473	2018B4266	BL12XU	Chen Tsan Yao	An Electrolyte Additive with Boron-Nitrogen-Oxygen Alkyl Group Enabled Stable Cycling for High Voltage LiNi _{0.5} Mn _{1.5} O ₄ Cathode in Lithium-Ion Battery
-------	-------------------	----------------------	-----------	--------	---------------	--

Journal of Power Sources Advances

41383	Manabu Kodama	8 (2021) 100048	2018B1482	BL47XU	上杉 健太郎	Three-Dimensional Structural Measurement and Material Identification of an All-Solid-State Lithium-Ion Battery by X-Ray Nanotomography and Deep Learning
			2019B2000	BL47XU	兒玉 学	
			2020A1035	BL20XU	兒玉 学	
			2020A1036	BL47XU	兒玉 学	
			2020A1390	BL20XU	竹内 晃久	
2020A1781	BL20XU	兒玉 学				

Journal of Solid State Chemistry

41055	Masatsugu Oishi	294 (2021) 121893	2018A1174	BL01B1	大石 昌嗣	<i>In situ</i> Evaluation of the Electronic/Local Structure in B-Site Mixed Perovskite-Type Oxide SrFe _{0.6} Mn _{0.4} O _{3-δ}
			2018B1446	BL01B1	大石 昌嗣	

Journal of Structural Biology: X

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41274	Chun Ming Zhang	5 (2021) 100045	理研	BL45XU		Structural Flexibility of the Tetanus Neurotoxin Revealed by Crystallographic and Solution Scattering Analyses
			2017A6745	BL44XU	福田 庸太	
			2017B6745	BL44XU	福田 庸太	
			2018A6844	BL44XU	福田 庸太	
			2018B6844	BL44XU	福田 庸太	
			2019A6943	BL44XU	福田 庸太	
2019B6943	BL44XU	福田 庸太				

Journal of Synchrotron Radiation

41073	Nami Nakamura	27 (2020) 1366-1371	2018A8060	BL3	山内 和人	Focus Characterization of an X-ray Free-Electron Laser by Intensity Correlation Measurement of X-ray Fluorescence
			2018B8027	BL3	山内 和人	

Journal of the American Ceramic Society

41300	Tomoya Kaneko	(2021) Online published 23 Feb., 2021	2017B1568	BL28B2	西堀 麻衣子	The Difference of PMMA-Brush-Modification on the Oxygen Permeable Perovskite-Type Oxides by Consisting Elements
-------	---------------	---------------------------------------	-----------	--------	--------	---

Journal of the Ceramic Society of Japan

41126	Kyoko Okada	128 (2020) 981-990	2015B1520	BL27SU	岡田 京子	In-Flight Melting Method with an Oxygen-Excess Gas Burner for Glass Making
-------	-------------	-----------------------	-----------	--------	-------	--

Journal of the Chinese Chemical Society

41068	Ryce Pratikha	67 (2020) 2189-2197	2019A1350	BL02B1	小島 達弘	A Charge-Separation-Type Ionic Solid Composed of Hexanuclear Complexes with a Macrocyclic Tetragold(I) Metalloligand
			2018A1441	BL02B2	吉成 信人	
			2019B1107	BL02B2	吉成 信人	

Journal of the Electrochemical Society

41188	Yuta Nabae	168 (2021) 014513	2016B7907	BL36XU	難波江 裕太	In Situ X-ray Absorption Spectroscopy to Monitor the Degradation of Fe/N/C Cathode Catalyst in Proton Exchange Membrane Fuel Cells
			2017A1035	BL14B2	今井 英人	
			2017B5390	BL16B2	今井 英人	
			2018A7840	BL36XU	岩澤 康裕	
			2018B7907	BL36XU	難波江 裕太	

Langmuir

41041	Hiromu Sakamoto	36 (2020) 14811-14818	2019A1118	BL37XU	松原 弘樹	Surface Freezing of Cetyltrimethylammonium Chloride-Hexadecanol Mixed Adsorbed Film at Dodecane-Water Interface
-------	-----------------	--------------------------	-----------	--------	-------	---

MATEC Web of Conferences

41146	Kenta Yamanaka	321 (2020) 03026	2017A3740	BL22XU	山中 謙太	In situ Synchrotron X-ray Diffraction Line-Profile Analysis of Additively Manufactured Ti-6Al-4V Alloy under Tensile Deformation
-------	----------------	---------------------	-----------	--------	-------	--

Materials

41346	Yuki Gunjo	14 (2021) 1088	2019B1908	BL19B2	鶴田 諒平	Interface Structures and Electronic States of Epitaxial Tetraazaphthalene on Single-Crystal Pentacene
			2020A1627	BL19B2	中山 泰生	

Materials Chemistry Frontiers

41267	Naoya Yoshikane	4 (2020) 3521-3528	2017B4268	BL12XU	Prassides Kosmas	Pressure-Induced Valence Transition in the Mixed-Valence (Sm _{1/3} Ca _{2/3}) ₂ 75C ₆₀ Fulleride
			2018B4252	BL12XU	Prassides Kosmas	
			2019A4264	BL12XU	Prassides Kosmas	

Materials Science Forum

41045	Mutsumi Sano	1016 (2021) 1223-1228	2018B1393	BL02B1	佐野 睦	Internal Dislocation Density in Deformed GlidCop from X-Ray Line Profile Analysis
-------	--------------	--------------------------	-----------	--------	------	---

Molecular Pharmaceutics

41395	Keishi Yamasaki	18 (2021) 1061-1070	2019B6911	BL44XU	河合 聡人	Interaction of Benzbromarone with Subdomains IIIA and IB/IIA on Human Serum Albumin as the Primary and Secondary Binding Regions
-------	-----------------	------------------------	-----------	--------	-------	--

Molecular Plant

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41139	Hiroyoshi Matsumura	13 (2020) 1570-1581	2018A6859	BL44XU	吉澤 拓也	Hybrid Rubisco with Complete Replacement of Rice Rubisco Small Subunits by Sorghum Counterparts Confers C ₄ Plant-Like High Catalytic Activity

Nanoinformatics

41388	Hitoshi Yusa	(2018) 259-277	2017B1198	BL10XU	遊佐 斉	Structural Relaxation of Oxide Compounds from the High-Pressure Phase
			2017B1192	BL04B2	遊佐 斉	

Nature

41231	Zhuo Jiang	586 (2020) 549-554	2019A4902	BL15XU	Deng Hexiang	Filling Metal-Organic Framework Mesopores with TiO ₂ for CO ₂ Photoreduction
-------	------------	-----------------------	-----------	--------	--------------	--

Nature Chemical Biology

41197	Xiangyu Liu	16 (2020) 749-755	2018A2515	BL32XU	Kobilka Brian	An Allosteric Modulator Binds to a Conformational Hub in the β_2 Adrenergic Receptor
-------	-------------	----------------------	-----------	--------	---------------	--

New Journal of Chemistry

41250	Dinesh Bhalothia	44 (2020) 9712-9724	2019B4274	BL12XU	Chen Tsan Yao	Heterogeneous Assembly of Pt-Clusters on Hierarchically Structured CoO _x @SnPd ₂ @SnO ₂ Quaternary Nanocatalysts Manifesting Oxygen Reduction Reaction Performance
-------	------------------	------------------------	-----------	--------	---------------	---

NPG Asia Materials

41040	Yohei Onodera	12 (2020) 85	2015A1366	BL04B2	増野 敦信	Structure and Properties of Densified Silica Glass: Characterizing the Order within Disorder
			2016A0130	BL04B2	小原 真司	

Nucleic Acids Research

41203	Chen Hsi Chu	47 (2019) 2113-2129	2013B6600	BL44XU	Hsiao Chwan Deng	Crystal Structures of <i>HpSoj</i> -DNA Complexes and the Nucleoid-Adaptor Complex Formation in Chromosome Segregation
-------	--------------	------------------------	-----------	--------	------------------	--

Organic & Biomolecular Chemistry

41158	Shu Fujita	18 (2020) 8827-8833	2019A1649	BL14B2	水垣 共雄	Nickel Phosphide Nanoalloy Catalyst for the Selective Deoxygenation of Sulfoxides to Sulfides under Ambient H ₂ Pressure
			2019A1390	BL01B1	満留 敬人	
			2019B1560	BL01B1	満留 敬人	
			2020A1487	BL01B1	満留 敬人	

Organic Letters

41436	Kazuto Nakamura	23 (2021) 305-310	2016B1311	BL40B2	山門 陵平	Conformation-Changeable π -Electronic Systems with Metastable Bent-Core Conformations and Liquid-Crystalline-State Electric-Field-Responsive Properties
			2016B1498	BL40B2	羽毛田 洋平	

Philosophical Magazine

41212	Jason Paul Hadorn	100 (2020) 194-216	2018B3321	BL08B2	鎌田 功穂	Direct Evaluation of Threading Dislocations in 4H-SiC through Large-Angle Convergent Beam Electron Diffraction
			2019A3269	BL24XU	鎌田 功穂	
			2019A3321	BL08B2	鎌田 功穂	

Photonics Research

41245	Anna Kafar	9 (2021) 299-307	2019B5080	BL16XU	榊 篤史	Influence of Substrate Misorientation on the Emission and Waveguiding Properties of a Blue (In,Al,Ga)N Laser-Like Structure Studied by Synchrotron Radiation Microbeam X-ray Diffraction
			2020A5082	BL16XU	榊 篤史	

PLoS Biology

41303	Jonathan B. Leano	17 (2019) e3000260	2017A2533	BL32XU	樹下 成信	Structures Suggest a Mechanism for Energy Coupling by a Family of Organic Anion Transporters
-------	-------------------	-----------------------	-----------	--------	-------	--

PLoS ONE

41252	Supaporn Baiya	16 (2021) e0241325	2016A6658	BL44XU	Caims James	Structural Analysis of Rice Os4BGlu18 Monoglucosyl β -glucosidase
-------	----------------	-----------------------	-----------	--------	-------------	---

Powder Technology

41228	Maria Yokota	380 (2021) 265-272	2019A7035	BL33XU	松永 拓郎	In-situ 3D Visualization of Compression Process for Powder Beds by Synchrotron-Radiation X-ray Computed Laminography
			2019B7035	BL33XU	松永 拓郎	

Proceedings of the 2020 10th International Conference on Biomedical Engineering and Technology

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41483	Keiji Umetani	(2020) 128-134	2017B1439	BL28B2	梅谷 啓二	Biomedical Micro-CT and Micro-Angiography Systems Using High Megapixel Digital Single-Lens Reflex Cameras and Synchrotron Radiation
			2018A1285	BL20B2	梅谷 啓二	
			2018A2039	BL28B2	梅谷 啓二	
			2018B1402	BL20B2	梅谷 啓二	
			2018B2021	BL28B2	梅谷 啓二	

Progress in Earth and Planetary Science

41096	Yoshinari Abe	8 (2021) 13	2018B1748	BL37XU	阿部 善也	Widespread Distribution of Radiocesium-Bearing Microparticles over the Greater Kanto Region Resulting from the Fukushima Nuclear Accident
			2019B1308	BL37XU	阿部 善也	
			2018A1704	BL37XU	阿部 善也	
			2017B1757	BL37XU	中井 泉	
			2017A1719	BL37XU	中井 泉	
			2016B1811	BL37XU	中井 泉	
			2016A1705	BL37XU	中井 泉	

Progress in Nuclear Science and Technology

41354	Yukiharu Takeda	5 (2018) 171-174	2015A3820	BL23SU	藤森 伸一	Soft X-ray Magnetic Circular Dichroism Study on UGe ₂
			2015B3820	BL23SU	藤森 伸一	
			2016A3810	BL23SU	藤森 伸一	
			2016B3811	BL23SU	藤森 伸一	
			2017A3811	BL23SU	藤森 伸一	

Progress in Superconductivity and Cryogenics

41258	Kozo Osamura	21 (2019) 1-9	2017B1857	BL28B2	Osamura Kozo	Local Strain / Stress and Their Influence to Mechano - Electromagnetic Properties of in Composite Superconducting Wires
-------	--------------	------------------	-----------	--------	--------------	---

Review of Scientific Instruments

41199	Akihisa Takeuchi	92 (2021) 023701	2015A1402	BL20XU	竹内 晃久	High-Energy X-ray Nanotomography Introducing an Apodization Fresnel Zone Plate Objective Lens
			2015A1482	BL47XU	竹内 晃久	
			2016B1454	BL47XU	竹内 晃久	
			2017A1377	BL47XU	竹内 晃久	
			2017B1482	BL47XU	竹内 晃久	
			2018A1382	BL47XU	竹内 晃久	
			2018A1389	BL20XU	竹内 晃久	
			2018B1395	BL20XU	竹内 晃久	
			2019A1169	BL20XU	竹内 晃久	
			2019B1406	BL47XU	竹内 晃久	
			2019B1404	BL20XU	竹内 晃久	
			2020A1390	BL20XU	竹内 晃久	

RSC Advances

41089	Preeyanuch Junkong	10 (2020) 4772-4785	2017B1631	BL14B2	池田 裕子	Effect of Fatty Acids on the Accelerated Sulfur Vulcanization of Rubber by Active Zinc/Carboxylate Complexes
			2017B1922	BL14B2	池田 裕子	
			2012A1419	BL14B2	池田 裕子	
			2012B1891	BL14B2	池田 裕子	
			2013A1828	BL14B2	池田 裕子	
			2013B1840	BL14B2	池田 裕子	
			2014A1574	BL14B2	池田 裕子	
			2017A1611	BL14B2	池田 裕子	
			2009A1929	BL14B2	池田 裕子	
			2009B2044	BL14B2	池田 裕子	
			2010A1778	BL14B2	池田 裕子	

Rubber Chemistry and Technology

41090	Preeyanuch Junkong	92 (2019) 388-398	2018B1523	BL40XU	池田 裕子	Influence of Strain-Induced Crystallization on Stress Softening of Sulfur Cross-Linked Unfilled Guayule and Dandelion Natural Rubbers
			2015A1872	BL40XU	池田 裕子	
			2015B1814	BL40XU	池田 裕子	

Science

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41196	Xiangyu Liu	364 (2019) 1283-1287	2018A2515	BL32XU	Kobilka Brian	Mechanism of β_2 AR Regulation by an Intracellular Positive Allosteric Modulator

Science and Technology of Advanced Materials

41394	Junais Habeeb Mokkath	22 (2021) 141-149	2015B4503	BL15XU	富中 悟史	Temperature-Dependent Electronic Structure of Bixbyite α - Mn_2O_3 and The Importance of a Subtle Structural Change on Oxygen Electrocatalysis
-------	-----------------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

Sensors and Actuators A

41376	Hiroaki Yoshizawa	323 (2021) 112634	2017B1591	BL40XU	上原 宏樹	Actuation Mechanism of Drawn Polyethylene Evaluated by Structural Change during Cyclic Stretching/Shrinking
			2017A1613	BL40XU	上原 宏樹	

Small

41165	Yanping Lin	16 (2020) 2002426	2019B4137	BL12B2	Lin Yan-Gu	Co-Induced Electronic Optimization of Hierarchical NiFe LDH for Oxygen Evolution
-------	-------------	----------------------	-----------	--------	------------	--

Solid State Communications

41059	Takeo Miyashita	326 (2021) 114180	2019A1209	BL25SU	岩澤 英明	Emergence of Low-Energy Electronic States in Oxygen-Controlled Mott Insulator $Ca_2RuO_{4+\delta}$
			2018B1371	BL25SU	岩澤 英明	

Sustainable Energy & Fuels

41420	Tomokazu Umeyama	5 (2021) 2028-2035	2020A1743	BL46XU	石田 圭一	Prolongation of the Singlet Exciton Lifetime of Nonfullerene Acceptor Films by the Replacement of the Central Benzene Core with Naphthalene
			2019A1824	BL46XU	石田 圭一	

Zeitschrift für Physikalische Chemie

41313	Shinya Hosokawa	235 (2021) 99-115	2008A1064	BL35XU	細川 伸也	Transverse Acoustic Phonon Excitations in Liquid Metals
			2009B1074	BL35XU	細川 伸也	
			2010B1353	BL35XU	細川 伸也	
			2011B1213	BL35XU	細川 伸也	
			2011B1314	BL35XU	乾 雅祝	
			2012A1102	BL35XU	細川 伸也	
			2012B1277	BL35XU	細川 伸也	
			2013A1138	BL35XU	細川 伸也	
			2013B1269	BL35XU	乾 雅祝	
			2017A1448	BL35XU	細川 伸也	
2017B1260	BL35XU	細川 伸也				

化学工学論文集 (Kagaku Kogaku Ronbunshu)

41429	Akihiko Kato	47 (2021) 44-50	2018B7001	BL33XU	岩崎 正興	Spatiotemporal Analysis of Plug Flow Reactor for NO_x Storage and Reduction Catalyst by Operando X-ray Absorption Spectroscopy
-------	--------------	--------------------	-----------	--------	-------	--

軽金属 (Journal of Japan Institute of Light Metals)

41409	Serina Tanaka	71 (2021) 144-151	2017B1772	BL27SU	足立 大樹	Soft X-ray XAFS Analysis of Cluster Formation Behavior during Natural Aging on an Al-Mg-Si Alloy
			2018A1539	BL27SU	足立 大樹	
			2019A1613	BL27SU	足立 大樹	

高圧力の科学と技術 (The Review of High Pressure Science and Technology)

41389	Fumio Kawamura	30 (2020) 195-201	2017B4506	BL15XU	遊佐 斉	Synthesis of Novel Nitride Semiconductors and Hard Materials Using High-Pressure Metathesis Reaction
			2018A4502	BL15XU	遊佐 斉	

塗装工学 (Journal of Japan Coating Technology Association)

41440	Tai Nakayama	56 (2021) 4-12	2017B1751	BL46XU	中山 泰	Analysis of Aluminum Flake Behavior during Formation of Metallic Coating by X-ray Imaging Method with High Energy Synchrotron Radiation
			2015B1921	BL46XU	谷口 昌司	
			2013A1307	BL46XU	梶原 堅太郎	
			2014A1782	BL46XU	梶原 堅太郎	
			2015A1682	BL46XU	梶原 堅太郎	

表面と真空 (Vacuum and Surface Science)

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
41466	Satoshi Toyoda	64 (2021) 86-91	2018A3835	BL23SU	豊田 智史	Development of <i>Spatiotemporal</i> Measurement and Analysis Techniques in X-ray Photoelectron Spectroscopy ~From NAP-HARPES to 4D-XPS~
			2018B3835	BL23SU	豊田 智史	
			2019A3835	BL23SU	豊田 智史	
			2019B3835	BL23SU	豊田 智史	

ぶんせき (Bunseki)

41129	Satoshi Tsutsui	(2021) 14-20	2016B1547	BL09XU	世木 隆	Synchrotron-Radiation-Based Mössbauer Spectroscopy for Chemical Analysis
			2013B1505	BL14B2	金田 清臣	
			2014A1552	BL09XU	世木 隆	
			2014B1629	BL19B2	齋藤 健一	
			2015B1947	BL09XU	筒井 智嗣	
			2016A1413	BL09XU	筒井 智嗣	
			2016B1498	BL40B2	羽毛田 洋平	
			2016B1057	BL09XU	筒井 智嗣	
			2017A1060	BL09XU	筒井 智嗣	
			2017B1275	BL09XU	筒井 智嗣	
2018A1534	BL09XU	筒井 智嗣				

博士論文 (京都大学)

41187	Guoji Huang	(2020)	2019B1362	BL02B2	山口 大輔	Carbon Based Membranes for Molecular Separations
41432	Soichi Kikkawa	(2020)	2017A1073	BL01B1	寺村 謙太郎	The Design of Active Sites for Selective Catalytic Conversion of Carbon Dioxide
			2017B1230	BL28B2	朝倉 博行	
			2017B1553	BL01B1	寺村 謙太郎	
			2018A1493	BL28B2	田中 庸裕	
			2019A1436	BL28B2	田中 庸裕	
			2017B1958	BL01B1	加藤 和男	
			2018A2070	BL01B1	加藤 和男	
			2018B2110	BL01B1	加藤 和男	
			2019A1447	BL01B1	寺村 謙太郎	
			2019A2066	BL01B1	加藤 和男	
2019B1761	BL01B1	吉川 聡一				

博士論文 (大阪大学)

41435	Kazuki Shida	(2020)	2018B1664	BL13XU	志田 和己	ナノビーム X 線回折法による 3 次元深さ分解結晶構造評価に関する研究
			2019A1702	BL13XU	志田 和己	
			2017A1860	BL13XU	今井 康彦	
			2017B1981	BL13XU	今井 康彦	

博士論文 (京都工芸繊維大学)

41088	Kosuke Miyaji	(2021)	2013A1455	BL40XU	池田 裕子	Study on Characteristics of Sulfur Cross-Linking of Rubbers Activated by Dinuclear Bridging Bidentate Zinc/Carboxylate Complexes
			2017B1631	BL14B2	池田 裕子	
			2017B1922	BL14B2	池田 裕子	
			2012A1419	BL14B2	池田 裕子	
			2012B1891	BL14B2	池田 裕子	
			2013A1828	BL14B2	池田 裕子	
			2013B1840	BL14B2	池田 裕子	
			2014A1574	BL14B2	池田 裕子	
2017A1611	BL14B2	池田 裕子				

博士論文 (東京大学)

41286	Peng Lu	(2020)	2014B1362	BL41XU	田之倉 優	Structural and Functional Studies of Iron Uptake Transporters in Gram-Negative Bacteria
-------	---------	--------	-----------	--------	-------	---

博士論文 (北海道大学)

41350	Naoki Ogawa	(2019)	2016A1269	BL47XU	Blanke Alexander	Evolutionary Process of Thoracic Jumping Ability in Hemiptera
			2017B1712	BL47XU	小川 直記	

課題以外の成果として登録された論文

The Journal of Biological Chemistry

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
41450	Yi Ding	278 (2003) 27966-27970		BL41XU	Crystal Structure of the Ectodomain of Human FcαRI
41451	Masayuki Yamasaki	278 (2003) 35524-35530		BL44XU	Crystal Structure of S-Ovalbumin as a Non-Loop-Inserted Thermostabilized Serpin Form
41452	Masamichi Nagae	278 (2003) 42240-42246		BL45XU	The Crystal Structure of the Novel Calcium-Binding Protein AtCBL2 from <i>Arabidopsis thaliana</i>

Journal of the American Chemical Society

41505	Shun Suginome	141 (2019) 15649-15655	理研	BL44B2	One-Step Synthesis of an Adaptive Nanographene MOF: Adsorbed Gas-Dependent Geometrical Diversity
41506	Keichi Yano	141 (2019) 10033-10038	理研	BL44B2	Supramolecular Polymerization in Liquid Crystalline Media: Toward Modular Synthesis of Multifunctional Core-Shell Columnar Liquid Crystals

Acta Crystallographica Section A

41357	Bjarke Svane	77 (2021) 85-95	理研	BL44B2	Multipole Electron Densities and Structural Parameters from Synchrotron Powder X-ray Diffraction Data Obtained with a MYTHEN Detector System (OHGI)
-------	--------------	--------------------	----	--------	---

Angewandte Chemie International Edition

41234	Zhifang Sun	57 (2018) 15772-15776	理研	BL45XU	An Anisotropic Hydrogel Actuator Enabling Earthworm-Like Directed Peristaltic Crawling
-------	-------------	--------------------------	----	--------	--

Biochemistry

41378	Shin Kawano	41 (2002) 15195-15202		BL44XU	Guanine Binding Site of the <i>Nicotiana glutinosa</i> Ribonuclease NW Revealed by X-Ray Crystallography
-------	-------------	--------------------------	--	--------	--

ChemBioChem

41235	Noriyuki Uchida	19 (2018) 1922-1926	理研	BL45XU	Kinetically Stable Bicelles with Dilution Tolerance, Size Tunability, and Thermoresponsiveness for Drug Delivery Applications
-------	-----------------	------------------------	----	--------	---

Chemical Science

41501	Tigmansu Pal	10 (2019) 5218-5225	理研	BL44B2	Interfacial Transmetalation Synthesis of a Platinadithiolen Nanosheet as a Potential 2D Topological Insulator
-------	--------------	------------------------	----	--------	---

Genes to Cells

41449	Nobutoshi Ito	8 (2003) 913-923		BL41XU	Crystal Structure of the <i>Pyrococcus horikoshii</i> DNA Primase-UTP Complex: Implications for the Mechanism of Primer Synthesis
-------	---------------	---------------------	--	--------	---

IUBMB Life

41275	Manuel Maestre-Reyna	73 (2021) 418-431	理研	BL45XU	<i>Vibrio cholerae</i> Biofilm Scaffolding Protein FbmA Shows an Intrinsic, Phosphate-Dependent Autoproteolysis Activity
-------	----------------------	----------------------	----	--------	--

The Journal of Physical Chemistry C

41238	Mizuho Sugiuchi	124 (2020) 16209-16215	理研	BL45XU	Aggregation-Mode-Dependent Optical Properties of Cationic Gold Clusters: Formation of Ordered Assemblies in Solution and Unique Optical Responses
-------	-----------------	---------------------------	----	--------	---

Langmuir

41504	Wanying Zhang	35 (2019) 14031-14041	理研	BL44B2	Highly Miscible Hybrid Liquid-Crystal Systems Containing Fluorescent Excited-State Intramolecular Proton Transfer Molecules
-------	---------------	--------------------------	----	--------	---

Nanoscale

41236	Liming Liu	11 (2019) 20467-20474	理研	BL45XU	Tunable Electronic Properties by Ligand Coverage Control in PbS Nanocrystal Assemblies
-------	------------	--------------------------	----	--------	--

Nature

41239	Chuangqi Zhao	580 (2020) 210-215	理研	BL45XU	Layered Nanocomposites by Shear-Flow-Induced Alignment of Nanosheets
-------	---------------	-----------------------	----	--------	--

Nature Communications

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
41237	Koki Sano	11 (2020) 6026	理研	BL45XU	A Mechanically Adaptive Hydrogel with a Reconfigurable Network Consisting Entirely of Inorganic Nanosheets and Water

Nucleic Acids Research

41379	Tomoko Sunami	30 (2002) 5253-5260		BL44XU	Crystal Structure of d(GCGAAAGCT) Containing a Parallel-Stranded Duplex with Homo Base Pairs and an Anti-Parallel Duplex with Watson-Crick Base Pairs
-------	---------------	------------------------	--	--------	---

Optica

41074	Jumpei Yamada	7 (2020) 367-370	理研	BL29XU	Compact Full-Field Hard X-ray Microscope Based on Advanced Kirkpatrick-Baez Mirrors
			装置&技術		

Science

41507	Keiichi Yano	363 (2019) 161-165	理研	BL44B2	Nematic-to-Columnar Mesophase Transition by in situ Supramolecular Polymerization
			理研	BL45XU	

Sensors

41075	Jumpei Yamada	20 (2020) 7356	理研	BL29XU	X-Ray Single-Grating Interferometry for Wavefront Measurement and Correction of Hard X-Ray Nanofocusing Mirrors
			装置&技術		

2020A 期における SPring-8/SACLA ユーザー要望等について

登録施設利用促進機関

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用推進部

SPring-8 および SACLA では、各ビームタイム終了後に実験グループごとに「ビームタイム利用報告書」を提出いただいております。この報告書には、その実験の概要、次回の利用者へのアドバイスや施設に対する要望、提案等を記入いただいております。

2020A 期における要望等の状況は下記のとおりです。これら要望等と、それに対する施設側の回答（内容により、必ずしも全てではありません）につきましましては、User Information で公開されています。

1. 2020A 期 要望等全体概要

2020A 期	実施 課題数	利用実験数 (報告書数)	うち、要望等コメントがある ^{*1} 報告書数		
			技術的 要望等	施設他 要望等	その他 (お礼)
SPring-8 共用BL	984	1,644	35	33	311
SACLA 共用BL	54	63	9		

^{*1} 「なし」「None」等のコメントを除く。

<SPring-8 共用 BL 技術的要望等 (計 35 件) の研究分野/手法^{*2} 別内訳>

分野 手法	生命科学 医学応用	物質科学 材料科学	化学	地球・ 惑星科学	環境科学	産業利用
X線回折	5	2	3			6
X線散乱		1	1			1
X線非弾性散乱		1				
X線・軟X線吸 収分光		2	3			2
光電子分光		3				
X線イメージ ング			1			4
その他						

^{*2} 課題申請時の利用者申告ベース。

2. 2020A 期 要望等の内容 (一部抜粋)

(1) 技術的要望等

○リモートでの回折実験でしたが、非常に効率よくデータ収集をすることができました。ありがとうございました。可能なら今後追加で以下の機能がリモートで可能になるとありがたいです。ご検討ください。

(1) He ストリームクーラーの利用と温度変更

(2) 液体窒素による霜とり

(3) バックライトやハッチ内照明の ON/OFF

(4) 収集データの解析

【生命科学/X線回折】

○実験中にデータ変換（出力？）サーバーがダウンして大量のデータを手動で変換する作業に手間取ったので、システムの安定性を向上してほしい。

【産業利用/X線・軟X線吸収分光】

○測定中のドリフトの影響について、持参した試料ホルダーで TEM グリッドを保持した状態が不安定と考えていますが、実験ハッチ内の温度変化がドリフトに影響しうるのかどうか知りたいです。

【物質科学・材料科学/X線非弾性散乱】

○拡散反射赤外分光計測との同時計測システムについて、Mn-K などの低エネルギーの核種の測定に対応した設備にしていきたい。

【化学/X線・軟X線吸収分光】

(2) 施設その他要望等

○BL17SU 近くの談話室に設置されている A4 サイズ用コピー機では、BL 備え付けの実験ノート (SPring-8 標準仕様) の全面をコピーすることができなかったので、BL46XU 近くの大型コピー機を使用して、実験ノートを A4 縦にてコピーした。できれば、もう少し、近くに大型コピー機を設置していただけると助かります。

○BL26B1 ビームライン周辺では、携帯電話の電波が入らず、毎回困っています。ぜひ改善してください。実験の実施にも支障がでています。

○荷物の運び入れや感染予防の観点から、蓄積リング棟や管理区域への入り口の扉を自動扉にしたいと助かります。トイレの手洗い場の水道を極力センサー式にいただけると、感染予防につながるかと思えます。

利用系グループ活動報告

情報処理推進室 情報処理推進グループ

公益財団法人高輝度光科学研究センター
情報処理推進室 佐治 超爾

1. はじめに

情報処理推進室・情報処理推進グループは、放射光実験にかかわる機器制御・データ収集システムや、情報・計算機技術を用いた実験データ処理の研究・開発を行っている。具体的には、実験データ収集・機器制御ソフトウェア、データ所外配送システム、実験ステーション用ユーザー認証システムなどの開発と運用に携わっている。また、ビームライン (BL) ユーザーが様々な登録や申請に用いる利用者情報支援システムの整備も行っている。今回は利用者に関連するシステムについて現状を報告する。

2. 利用者情報支援システム

SPRING-8 User Information (UI) システムはユーザーへの利用に関する情報支援を目的とした Web サイトであり、公開情報を扱う UI サイトと利用に関する手続きを行うマイページで構成されている。前回のリニューアルから 10 年が経過し更新を検討していたと

ころ、科学技術・学術審議会量子科学技術委員会量子ビーム利用推進小委員会による『大型放射光施設 (SPRING-8) 及び X 線自由電子レーザー施設 (SACLA) 中間評価報告書』にてユーザービリティ向上について指摘いただいたこともあり、Web サイトの刷新に取り組むこととなった。

今回の刷新では「情報配置の最適化」を重要なテーマとして検討を進めた。現状の Web サイトは制度変更などへの対応で建て増しのコンテンツが増加しており、新規ユーザーにはわかりにくい状態となっていた。そこで、課題申請・採択・来所・実験後というユーザーの状態によって情報を分類することにより、必要としている情報を素早く見つけられる構造への変更を目指した。まず「UI サイト」について利用推進部と共に取り組みを行い、過去の SPRING-8/SACLA 利用者情報¹⁾にて既報の通り全面刷新を完了させ既に運用を開始している (図 1)。

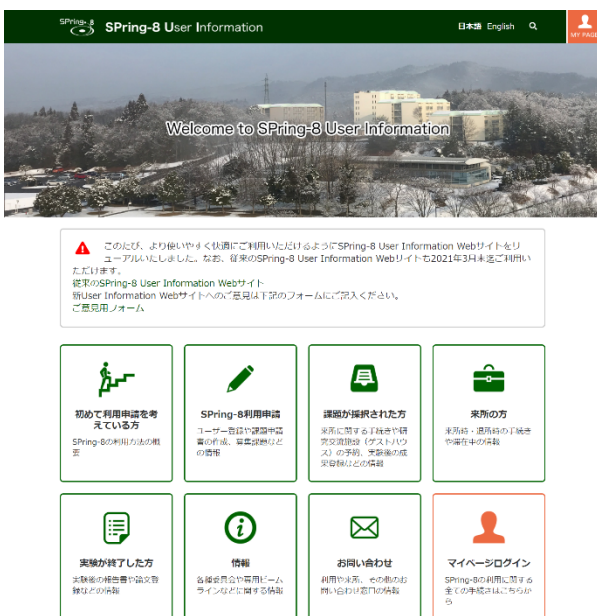


図 1 全面刷新後の UI サイトトップページ



図 2 新しいマイページ。ユーザーの状態による機能の分類・再配置がなされた。

次に「マイページ」について現在検討・実装を進めている。現行ページではすべての機能がトップページに羅列されており、必要な項目を探しづらい状態であった。これらの機能を先述のとおり分類し、メイン・サブメニューの構造で整理を行った(図2)。これによりユーザーは多くの情報から探し出さずとも必要な機能にたどり着けることが期待できる。

課題申請など情報を入力するページについては現行の縦型タブインターフェイスを再デザインし、タブとボタンの区別を認識しやすくすることで視認性と操作性の向上を目指している(図3)。ページ構造は大きく変更せず、既存ユーザーの違和感を最小限とすることを旨とした。新しいマイページについては2021年度内に公開予定である。

SPring-8 では課題制度や設備などが継続的に改善されており、システムも変化に対応し続けることが求められる。効率よく対応できるようにユーザーからは見えづらい内部構造についても今後改修を進めていく予定である。

3. DARUMA によるデータ収集・計測システムの現状

DARUMA (Data collection And control framework for X-Ray experimental stations Using MADOCA)^[2] と呼ばれる BL 向けのデータ収集・実験計測システムのソフトウェアパッケージ開発をしている。このパッケージは、SPring-8 加速器制御で活用されている分散制御フレームワーク MADOCA^[3]を基盤としており、SPring-8 で標準的に使われる可読性が高いテキスト(SVOC 文型)によるメッセージ通信を用いている。DARUMA を活用することで得られるメリットとして

は、1) 機器制御のプログラムとユーザーインターフェースのプログラムを分離して開発できるようになる、2) SVOC による機器制御の抽象化によるプログラムの可搬性の向上、3) 画像処理など機器制御以外のプログラムも SVOC の枠組みで部品化できる、4) 実験

表 1 DARUMA の主な対応機器

種別	装置
二次元検出器	PILATUS, PerkinElmer XRD, Andor Zyla, Andor iKonL, 浜松ホトニクス HiPic, Rigaku HyPix, Quantum-Merlin, Quantum-Hexite, X-Spectrum-Lambda
光電子分光	Scienta SES
ADC	NI-4492, NI-6000, NI-6003, NI-6210, NI-6341, NI-6602, NI-6612
Motor	tsuji-PM16C-04XDL, PM16C-16, tsuji-PM16C-02, tsuji-PM2C-01, SIGMA TECH FC-111/511/911, IMS MDRIVE Motor
Counter	tsuji-NCT08-01B, tsuji-CT08-01B/01E/CT08-ER2/CT16-01F, MITUTOYO KA12, 200
DMM	Keithley 2701, ADC7352A
ピコアンプ	Keithley 6485
カレントアンプ	Keithley 428
温調	SIMADEN-FP23, Cryo-con Model 24C, チノー-KP1000C
FPGA	NI-9269, NI-9239, NI-9403, NI-9260
ラマン分光	LightField
イオンチャンバーガス混合器	アイデン M37-4209-01
多素子 SSD 用 DSP	テクノエーピー APN504
カメラシステム	キーエンス CV5500
四重極型質量分析計	PFEIFFER GSD301
モノクロエンコーダーボード	Heidenhain IK220

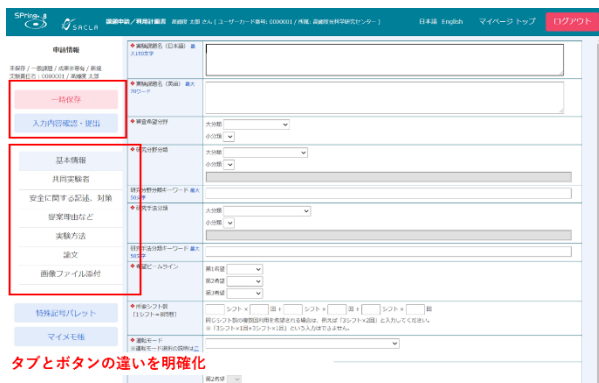


図 3 情報入力ページの改善例。デザインの変更によりボタンとタブの識別がしやすくなった。

計測時に測定条件などの付加情報（メタ情報）の収集が使える、など様々な特徴が挙げられる。これらの機能のため、実験セットアップ時の装置の組み替えにも柔軟に対応でき、既存の spec^[4]や LabVIEW^[5,6]、Visual BASIC などを用いた制御系に容易に組み込むことが可能となる。

DARUMA は、BL 向けに整備されたフレームワークの提供のみならず、開発のための様々な支援ツールやプログラムも提供している。表 1 にあるような、実際に BL で使われている多くの汎用機器の制御プログラムの提供を行っており、さらには、これらと連携するビューアなどの汎用的なインタフェース、様々な画像処理機能を持ったプログラム群なども提供している。たとえば、画像のヘッダ処理などの二次元画像に関する各種ツール群や、円環積分や指数演算 (HKL-map) などの計算など様々なソフトウェアコンポーネントを持つことも、DARUMA の特徴の一つである。様々な解析処理と汎用的な画像処理を組み合わせた制御が可能であり、計測システムの高度化と容易に関連付けることが出来る。

これらのシステムは、常設でないものを含めれば BL01B1、BL02B1、BL03XU、BL04B2、BL08W、BL10XU、BL13XU、BL14B2、BL19B2、BL35XU、BL36XU、BL37XU、BL40B2、BL46XU において実験計測に活用されている。

現在、理化学研究所（理研）を中心に利用実験に関する新しい基盤技術（BL-774）の開発が進められており、DARUMA の開発で培った技術・ソフトウェア資産をサポート機器の拡充の面で統合する方向で検討を始めている。



図 4 実験データ配送サービス Web ポータルにおけるデータファイルのアップロード例

4. 所外実験データ転送

情報処理推進室では、SPring-8 で計測した実験データを所外からアクセスするためのシステムとして、実験データ配送サービス^[7]、および実験データ転送システム BENTEN^[8,9]の開発・運用を行っている。

これらは、UI サイト (URL <https://user.spring8.or.jp>) にユーザー登録している人であれば、UI サイトと同じアカウント（ユーザーカード番号）を用いて認証手続きを行うことで利用可能である。セキュリティ強化のため E メールを利用した二要素認証を導入している。

実験データ配送サービスでは、図 4 に示すように Web ブラウザ上でデータファイルをアップロードする。その後、一定期間有効なデータダウンロード用の URL、およびパスワードが表示される。この情報を相手と共有することで、所外からデータをダウンロードできる。本サービスは、測定代行での実験データや、ドキュメントなどを所外ユーザーと共有する際に活用されている。

実験データ転送システム BENTEN は、実験データを一般に公開する機能（オープンデータ）、及び実験課題の共同メンバーのみにデータ共有を行うアクセス制限機能を実装している。BENTEN はデータ登録やデータ検索、ダウンロードの機能が Python のコマンド経由で簡易に実装できるように設計されており、実験計測系に容易に組み込んで利用できる。2019 年 3 月より運用を開始しており、SPring-8 の共用 BL で利



図 5 BENTEN Web ポータルにおける XAFS 標準試料のデータアクセス例

用できる。現在、産業利用・産学連携推進室と連携を進めてきており、BL14B2におけるユーザー実験データの限定共有、および、BL14B2 XAFS 標準試料やBL46XU HAXPES 標準試料のオープンデータで利用されている。

実験データを一般公開し、データ利活用を進めるためには実験データの試料や測定条件などについて詳細なメタデータを付与することが極めて重要となる。このため、BENTEN では、放射光実験計測での多様なメタデータを柔軟に定義し、データベースで管理できるように設計した。メタデータは試料に関しては手動入力の項目もあるが、できる限り自動抽出し、簡易に生成できるよう工夫している。

図5にBENTENに登録されたBL14B2 XAFS 標準試料データアクセス例を示す。Web ブラウザより、データ全文検索、データ閲覧およびダウンロードができる。2021年3月10日現在、34元素、667試料、1757スペクトルのXAFSスペクトルデータが収録されており、XAFS計測でのデータ解析時に活用されている。

SPring-8サイト全体として、理研では大量データの保存、解析、転送ニーズに対応するためのデータセンター設置を準備しており、本稿で紹介したサービスの統合も検討されていくだろう。

5. まとめ

情報処理推進室・情報処理推進グループは、利用実験申請、実験データ取得から大学・企業などへの所外配送までのデータの流れをシステム化し、放射光を利用した成果創出に貢献することをミッションとしている。本稿では情報処理推進室における活動の中から、主に利用者の皆様に関連するシステムについて現状を報告した。現在、BL再編に伴い、利用実験に関する制御システム基盤や情報システム基盤の開発・整備が進められている。今回紹介したシステムについても理研とJASRIの協力関係のもと、利用者の利便性向上にむけて検討を進めていく。

参考文献

[1] *SPring-8/SACLA 利用者情報* **25** (2020) 352-354.

[2] 中田 謙吾、他：*SPring-8/SACLA 利用者情報* **24** (2019) 269.

[3] T. Matsumoto *et al.*: *Proc. ICALEPCS 2013, Proc. ICALEPCS 2015, Proc. ICALEPCS 2017.*

[4] spec (<https://certif.com/spec.html>)

[5] LabVIEW (<http://www.ni.com/labview>)

[6] 松下 智裕、他：*SPring-8/SACLA 利用者情報* **20** (2015) 116-119.

[7] <https://filetransfer.spring8.or.jp/>

[8] <https://benten.spring8.or.jp/>

[9] 松本 崇博、他：*SPring-8/SACLA 利用者情報* **24** (2019) 388-393.

佐治 超爾 SAJI Choji

(公財) 高輝度光科学研究センター 情報処理推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0990
e-mail : saji@spring8.or.jp

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 四季報

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 会長
広島大学 大学院先進理工系科学研究科
木村 昭夫

1. はじめに

早いもので新年度を迎え、本 SPRUC 体制も 2 年目に突入です。昨年今頃は、1 年後にはコロナ騒ぎもすっかり収まっていると思っておりましたが、期待は裏切られ、3 月後半から一部の都市で感染者が激増し、この記事を書いている最中には、まん延防止等重点措置が大阪など 3 府県の 6 都市で適用されました。しばらくこの状況は続きそうです。

そのような中、3 月 5~6 日に第 3 回 BLs アップグレード検討ワークショップを開催しました。改めて、このワークショップの意義は何かを考えると、ユーザーと施設の対話の場を設け、それをベースに意見交換をし、最終的にはユーザーの成果が最大限得られるようにするという事だと思っています。前回のワークショップまでは主に、BL09XU と BL47XU の硬 X 線光電子分光 (HAXPES) 装置の移設・集約、BL09XU の核共鳴散乱 (NRS) 装置の BL35XU への移設、非弾性 X 線散乱 (IXS) 装置との共存について議論され、すでにこの 2020A 期後半から作業が開始されています。今回のワークショップは、前回までのレビューとフォローアップ、新たに「回折・散乱」、「分光」のビームライン (BL) 再編について主に議論することとなりました。

2. 第 3 回 BLs アップグレード検討ワークショップ

複数の研究会が全国で平行して行われる中、300 名もの事前登録があり、大いに盛り上がった 2 日間になりました。2 日間のうち初日前半は、BL 再編の近況、新たな再編の狙い、利用制度などについて、施設の方々からお話をいただきました。初日後半は、再編真つ只中の HAXPES、NRS/IXS について進捗状況をお話いただきました。それを受けて SPRUC からコメントをするという形で進められました。ここで、気付いたこととしまして、現在作業が進んでいる再編についても、決して

議論は終わりではないということです。詳しくは、報告に書かれておりますが、NRS と IXS が同居したことで、ビームタイムの配分についての議論が必要になってきたのです。今回はそれに関連する利用に関して事前に要望書が研究会から施設に提出されていましたが、その内容を研究会の代表からお話していただきました。

2 日目は、「回折・散乱」について、施設から再編計画が紹介されました。ご存知のように、「回折・散乱」を主な実験手法として研究をされている会員が大多数おられます。「回折・散乱」といっても多岐にわたっておりますので、今回はその一部の再編について施設の方々に再編の狙いや具体的計画案のお話をいただきました。コンセプトとしては、製品開発にもつながるオペランド構造解析の増強、産学の壁の除去、High production を狙った自動化リモート化、産業利用の機会の拡充、トータルの BL 開発の共有化を挙げられました。「回折・散乱」は、産業界の方々にとっても大変重要なツールとなっておりますので、その観点で産業界の方々にも議論に積極的に入っていただきました。施設側からの再編アップグレードに関する案は、ユーザーの考えを想定して練られたもので、これを元に、ユーザーからアイデア、提案をして欲しいとのことでした。

詳細については、西堀行事幹事による報告をご覧ください。2022 年度再編に向けて各研究会において十分検討して、フィードバックをかけていただくようぜひお願いいたします。次回の SPring-8 シンポジウムでは、それらのご意見を元に引き続き議論していきたいと思っております。どうぞよろしく申し上げます。

木村 昭夫 *KIMURA Akio*

広島大学 大学院先進理工系科学研究科
〒739-8526 広島県東広島市鏡山 1-3-1
TEL : 082-424-7400
e-mail : akiok@hiroshima-u.ac.jp

「SPRUC 2021 Young Scientist Award」の実施について

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) では今年度で 10 回目となる「SPRUC 2021 Young Scientist Award」を実施いたします。

つきましては、以下の募集要項にてご推薦いただきますようよろしくお願いいたします。

記

SPRUC 2021 Young Scientist Award 募集要項

1. 目的：将来の放射光科学を担う優秀な若手会員の研究を奨励し、SPring-8 ユーザー協同体をより活性化するために本賞を設ける。
※募集にあたっての選考委員会からのコメント
本賞は、SPring-8/SACLA の利用法や解析手法の開発に顕著な成果を創出した若手研究者、あるいは測定手法や解析手法は確立された方法であったとしても、SPring-8/SACLA の特徴を活用し測定対象の分野にとって顕著な成果を創出した若手研究者に与えられる賞である。なお、学術以外に、事業化や製品化につながる成果や産業応用に資する成果も対象とする。
2. 人数：2 名以内
3. 対象：SPring-8/SACLA を利活用し、2021 年 3 月 31 日までの間に優れた研究成果をあげた 35 歳以下（2021 年 4 月 1 日現在）の個人会員（グループでの応募は不可）。
産業界からの積極的なご推薦もお待ちしております。
4. 募集期間：2021 年 4 月 1 日（木）から 6 月 3 日（木）まで
5. 推薦要領：推薦（自薦）理由書と業績（以下 HP 別紙記載事項参照）を e-mail で送付してください。
6. 書類送付先：SPring-8 ユーザー協同体事務局（users@spring8.or.jp）
7. 選考方法：SPring-8 ユーザー協同体に選考委員会を設け、厳正な審査と選考を行います。
8. 発表等：7 月中旬頃に受賞者の公表及び通知を行い、SPring-8 シンポジウム 2021（SPring-8 を拠点としたオンライン配信で 9 月 17～18 日開催）において本賞の表彰式および受賞講演を行います。SPRUC からの旅費補助可能（海外からの渡航費上限 20 万円）。
9. 担当幹事：行事幹事 西堀英治
応募に際してご質問等あれば事務局までお願いします。

詳細（過去の受賞者情報含む）は以下の SPRUC の HP をご覧ください。

http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc/YSA_SPRUC_2021.html

[問い合わせ先] SPring-8 ユーザー協同体事務局
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0970 FAX : 0791-58-0928
e-mail : users@spring8.or.jp
<http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc/>

SPring-8 シンポジウム 2021

【趣旨抜粋】

昨今のデータサイエンスの進化、コロナ禍におけるオンライン化の加速など、社会のスマート化への要求が高まっています。第10回目となった本年のシンポジウムでは、学术界のみならず、産業界の研究者や技術者の参加により、変化する社会にどのように対応していくかではなく、むしろ新たな SPring-8 の将来像を描き、そこからのバックキャストによる現在と将来の利用について議論ができることを期待しています。

【主催】 SPring-8 ユーザー協同体

(公財) 高輝度光科学研究センター
理化学研究所 放射光科学研究センター

【開催期間】 2021年9月17日(金)～18日(土)

【会場】 オンライン開催

【問い合わせ先】 SPring-8 シンポジウム 2021 事務局

(公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部
TEL : 0791-58-2785 FAX : 0791-58-2786
e-mail : sp8sympo2021@spring8.or.jp

第5回 SPring-8 秋の学校 開催のご案内

SPring-8 秋の学校 趣意：

SPring-8 秋の学校は、次世代の放射光科学に貢献する人材の発掘と育成を目的として、SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) と高輝度光科学研究センター (JASRI) が中心となり、大学や関係諸機関と協力して開催するものです。夏の学校とは異なり、放射線業務従事者登録がない方でも参加できることが最大の特徴です。SPring-8 で活躍する最前線の研究者による講義と、個別テーマについての見学・原理説明・模擬実習からなる少人数グループ講習を組み合わせることで、放射光の原理と利用研究の基礎を学ぶと共に、実験法やデータ解析を体験できるようにカリキュラムが準備されています。また、SPring-8 のキャンパス内に設置されている X 線自由電子レーザー施設 SACLA についても学ぶことができます。講義とグループ講習は、大学3年生が十分に理解できる水準に設定されており、卒業研究や大学院進学を控えた方々が進路を考える最適な機会になります。また、放射光に興味があり、これから利用を考えている大学院生や企業研究者の方々にも適しています。もちろん、すでに SPring-8 利用経験がある方の参加も大いに歓迎します。

昨年度は新型コロナウイルス禍の影響で12月に実施しましたが、本年度は一昨年度までの日程に戻して、9月に開催します。感染対策には万全を期して実施いたします。

開催日：2021年9月5日(日)～8日(水)

場 所：大型放射光施設 SPring-8 (兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1)

カリキュラム概要：基礎講義／グループ講習

募集定員：60名程度 (受入れ予定人数を超える応募があった場合は参加登録の内容をもとに選考を行う)

参加費：20,000円 (但し学生は免除、宿泊費・交通費等は自己負担)

対 象：SPring-8 を用いた研究に関心を持つ者
(但し理系大学3年生レベルの講義内容を理解できること)
※ 放射線業務従事者登録は必要なし

主 催：SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC)
(公財) 高輝度光科学研究センター (JASRI)

※ 後援等につきましては関係諸機関への依頼を準備中

以 上

SPring-8/SACLA 利用者情報 編集委員会

委員長	木下 豊彦	利用推進部
委員	大河内拓雄	分光推進室
	大和田成起	XFEL 利用研究推進室
	小川 浩平	企画室
	奥村 英夫	タンパク質結晶解析推進室
	関口 博史	散乱・イメージング推進室
	竹田 幸治	SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 編集幹事 (日本原子力研究開発機構)
	濱本美和子	利用推進部
	平山 明香	利用推進部
	廣沢 一郎	安全管理室
	本間 徹生	産業利用・産学連携推進室
正木 満博	光源基盤部門	
松本 崇博	情報処理推進室	
山崎 裕史	光源基盤部門	
(以上、敬称略五十音順)		
事務局	富松 亮介	利用推進部
	坂尻佐和子	利用推進部
	山本 律	利用推進部

SPring-8/SACLA 利用者情報

Vol.26 No.2 Spring 2021

SPring-8/SACLA Information

発行日 2021 年 5 月 14 日

編集 SPring-8/SACLA 利用者情報編集委員会

発行所 公益財団法人高輝度光科学研究センター
TEL 0791-58-0961 FAX 0791-58-0965

(禁無断転載)



つつがない日々希う、凜として

JASRI

公益財団法人 **高輝度光科学研究センター**
Japan Synchrotron Radiation Research Institute

〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都^{こうと}1-1-1
[研究支援部] TEL 0791-58-0950 FAX 0791-58-0955
[利用推進部] TEL 0791-58-0961 FAX 0791-58-0965
e-mail : sp8jasri@spring8.or.jp
SPring-8 Web Site : <http://www.spring8.or.jp/>