

SPring-8 シンポジウム 2023 報告

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC)

近畿大学 工学部 理学科 化学コース	杉本 邦久
大阪大学 大学院基礎工学研究科	関山 明
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	藪内 俊毅
国立研究開発法人物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター	永村 直佳
東京大学 大学院工学系研究科	小林 正起
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	香村 芳樹

はじめに

去る9月26日(火)、27日(水)に、SPring-8 シンポジウム2023が、SPring-8 ユーザー協同体(以下、SPRUC)、理化学研究所 放射光科学研究センター(以下、理研)、高輝度光科学研究センター(以下、JASRI)、大阪大学の主催により開催されました。共用開始から四半世紀以上が経過した SPring-8 ですが、世界最大の放射光リングから得られる光とそれを受け止める測定系、そしてそこから得られるサイエンス、それぞれが連携して常に進化を続け、世界のフロントランナーとして放射光科学を牽引してきました。第12回目となった本年度のシンポジウムでは、そのような中で、SPring-8 の進歩とともに爆発的に増えてきているビッグデータをどのように扱い、どのような新しいサイエンスを生み出していくかについての議論を通して、次世代の放射光科学の将来ビジョンを描いて行くことを期待し、「SPring-8/SACLA とデータ科学の融合

が生み出す可能性」をテーマとしました。基本的には対面により大阪大学会館 講堂、アセンブリー・ホールで2日間開催し、現地に参加されない会員には、講演をオンラインで配信する形をとりました。開催方式の検討と当日の運営については大阪大学の中川敦史氏にご尽力いただきました。

セッションI オープニング

オープニングセッションでは、西堀英治 SPRUC 会長(写真1)より開会の挨拶がありました。4年ぶりの SPring-8 外での対面(ハイブリッド)開催ということで、ホスト機関として大阪大学の尾上孝雄理事・副学長(研究担当)(写真2)から挨拶がありました。続いて、理研の松尾浩道理事(写真3)、JASRIの雨宮慶幸理事長(写真4)より挨拶があり、最後に、文部科学省 科学技術・学術政策局 研究環境課 稲田剛毅課長(写真5)から来賓挨拶をいただきました。久々に、



写真1 SPRUC
西堀英治会長



写真2 大阪大学
尾上孝雄理事・副学長



写真3 理研
松尾浩道理事



写真4 JASRI
雨宮慶幸理事長



写真5 文部科学省
稲田剛毅課長

挨拶される皆様全員が現地に揃い、壇上から多くの出席者（とオンライン参加者）に向かって話す形となりました。挨拶された皆様からも本シンポジウムが本格的な対面開催を実施できたことへの歓迎感が強くあったように思います。

セッションII 施設報告

セッションIIでは、施設報告として、JASRI 放射光利用研究基盤センター 坂田修身センター長(写真6)、理研 放射光科学研究センター 制御情報・データ創出基盤グループ 初井宇記グループディレクター (GD) (写真7)、物理・化学系ビームライン基盤グループ 矢橋牧名 GD (写真8) による講演が行われました。

坂田センター長からは、「SPring-8の現状」と題した講演が行われました。前回のSPring-8シンポジウム以降の1年間を振り返り、SPring-8の利用研究の公募回数が最大年6回となったことや成果公開優先課題が開始されたこと、施設の運転統計、最近の研究成果の統計が報告されました。また、SPring-8の高度化について、硬X線領域の重点化やオペランド構造解析に対するニーズへの対応を重点的に進めていることが説明され、ユーザーニーズに応えるためにSPring-8-IIを見据えた重複装置の集約や配置最適化、加速器やビームライン技術の開発整備が行われていることが報告されました。その中では、大規模改修の進むBL39XUなどビームライン再編の現状、高エネルギーX線CTの測定代行、測定試料の準備や交換の自動化システムの開発状況などが報告されました。

初井GDからは、「SPring-8データセンター構想」と題して、データセンターのインフラおよびサービスの構想の他、欧州、米国、および日本のデータ政策とその動向について報告されました。講演の冒頭では、

欧州や米国におけるオープンデータに関する戦略やデータインフラの整備、計算科学との連携について紹介され、日本の振興方策と違いはあるものの、データの利活用と流通基盤の重要性は共通していることが報告されました。また、今後想定される非常に巨大なデータの取り扱いについては、ネットワーク転送前にデータ圧縮することが重要であることが述べられ、そのための取り組みが報告されました。整備の進んでいるデータセンター構想のインフラに関しては、その仕様概要や国内のデータ基盤との連携について解説されました。また、データセンターのサービスについては、試料あたりのデータ量や1日あたりの試料数をもとにデータ特性の類型化を行い、両類型に向けたサービスが準備されることが案内されました。

矢橋GDからは、「SPring-8-IIの概要」と題した講演が行われました。講演は、SPring-8共用開始から現在までのあゆみを振り返った上で、現在の課題として、ビームタイムの混雑、光熱費高騰や老朽化による安定運転への懸念、海外施設の分析能力の向上などが指摘されました。これに対し、SPring-8-II計画では、特に加速器を中心としたインフラのアップグレードを行い、現状より100倍輝度の高い高エネルギーX線の生成と消費電力の大幅な削減を両立し、日本の分析能力の持続的発展を将来に渡って支える計画であることが述べられました。そのために、5バンドの磁石配置を用いた超低エミッタンス化、SACLAからの高効率入射システム、小型真空封止アンジュレータ、30m長直線部の利用などといった革新的テクノロジーが活用される計画であり、SPring-8-IIでは最高輝度の大幅な向上に加え、空間コヒーレンスの向上、大強度の準単色光の実現などが期待されることが報告されました。SPring-8-IIは軟X線を得意とするNanoTerasu



写真6 JASRI
坂田修身センター長

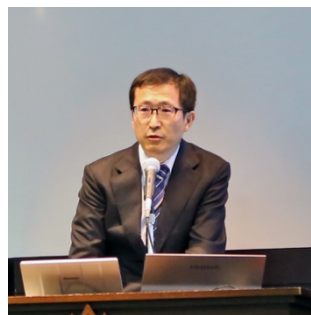


写真7 理研 初井宇記GD



写真8 理研 矢橋牧名GD

と相補的な関係にあり、世界的に見ても非常に高いレベルの分析能力が期待されることが説明されました。今後の想定スケジュールでは、2025年度から本格的な整備を開始し、2027年度から2028年度にかけて約1年間運転を停止して加速器の入れ替えを行った後に、早期の共用再開が計画されているということでした。講演の後半では、利用基盤としての質的な飛躍、量的な飛躍の2つの方向性から、現在検討されている利用事例や利用制度のあり方が紹介されました。SPring-8-II計画について、その概要をまとめた報告が行われたのは本講演が初めてということもあり、その後の質疑でもこの講演に関するものが多くありました。

セッション III 大阪大学×SPring-8

セッション III では、大阪大学×SPring-8として、大阪大学から、石川貴嗣氏(写真9)と中川敦史氏(写真10)による講演が行われ、大阪大学における特徴的なSPring-8活用の取り組みが紹介されました。

石川貴嗣氏からは「SPring-8/LEPS2 (BL31LEP) で拓くクォーク核物理」と題した講演が行われました。物質の起源と進化の謎を追求するクォーク核物理学のコンセプトを始め、LEPS2 実験棟 (BL31LEP) における後方コンプトン散乱過程による高エネルギーレーザー光発生仕組みや基幹検出器についての解説がありました。最近の取り組みとして、データ科学活用の観点から、トリガー信号レスでのシグナル取得を可能にするストリーミング型データ収集システム開発について報告されました。

引き続き中川敦史氏からは「生体超分子複合体構造解析ビームライン(蛋白研ビームライン):BL44XU」と題した講演が行われました。生体超分子複合体のX線結晶構造解析の難しさと、課題解決のために実施さ



写真9 大阪大学
石川貴嗣氏



写真10 大阪大学
中川敦史氏

れたビームラインの整備・改良について、高精度多軸ゴニオメータの導入や長格子結晶解析用の可動式ダイレクトビームストッパーなど、具体的な仕組みを交えながら解説がありました。ウイルス様粒子のデータ収集効率化などの成果紹介に続き、SPring-8-IIでの次世代ターゲット(高次機能)研究に向けた期待、共同利用としての課題募集中である旨について報告がありました。

セッション IV 研究会報告

セッション IV では、研究会報告として、核共鳴散乱研究会 三井隆也氏(写真11)、地球惑星科学研究会 太田健二氏(写真12)、高分解能X線イメージング研究会 水谷隆太氏(写真13)、固体分光研究会および原子分解能ホログラフィー研究会 菅滋正氏(写真14)、顕微ナノ材料科学研究会 吹留博一氏(写真15)、結晶化学研究会 橋爪大輔氏(写真16)による講演が行われました。

三井隆也氏からは、「結晶核モノクロメーターを用いた物質科学のための先端メスバウアー計測技術の開拓」と題した講演が行われました。放射光を用いてマイクロビーム利用が可能となった超高輝度メスバウアー分光の有用性や利用研究に関する報告をされました。また、薄膜作製を組み込んだ *in-situ* メスバウアー分光装置の紹介があり、鉄の清浄表面の磁性を原子層単位で評価した研究成果が報告されました。

太田健二氏からは、「放射光が切り拓く地球惑星・高圧物質科学研究」と題した講演が行われました。地球惑星科学・高圧物質科学における高温高圧環境におけるその場観測の重要性や、微小領域、複合測定、高速測定への展開について報告されました。また、放射光を用いた研究成果として、はやぶさ2の分析結果や惑星コアの熱進化について紹介されました。展望として、データ科学と高圧科学の協働の重要性に関する提案がなされました。

水谷隆太氏からは、「米国アルゴンヌ国立研究所の放射光施設 Advanced Photon Source の利用申請から実験まで〜SPring-8 とその次期計画を考える」と題した講演が行われました。Advanced Photon Source での生体試料におけるナノ・マイクロCT実験に関して、プロポーザル提出から実際の実験環境やユーザーの報告



写真 11 三井隆也氏



写真 12 太田健二氏

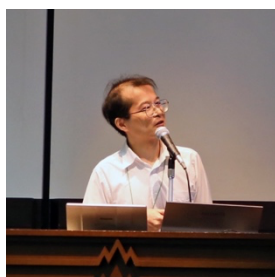


写真 13 水谷隆太氏



写真 14 菅滋正氏



写真 15 吹留博一氏



写真 16 橋爪大輔氏

義務に関して報告されました。海外放射光施設での実験経験を基に、SPring-8-II 計画に関して、制度の改正案やエンドステーションの性能向上、新イメージングビームラインの建設などの提案がなされました。

菅滋正氏からは、「スピン分解光電子運動量顕微鏡と振動下共鳴 X 線非弾性散乱の新展開」と題した講演が行われました。スピン関連の放射光分光の中でも、特に光電子分光における三次元的なバンド構造と合わせてスピン状態を観測することの重要性について指摘されました。顕微分光と超高効率のスピン分解光電子分光を可能にするドイツで開発された Momentum Microscope 装置の紹介があり、この装置で得られた研究成果と日本への導入の重要性について報告されました。また、光電子分光実験が難しい非伝導体については、軟 X 線共鳴非弾性 X 線散乱測定による電子状態観測の重要性であることを提案されました。

吹留博一氏からは、「放射光分光を活用した社会実装・国際標準化への取り組み」と題した講演が行われました。次世代の半導体材料・デバイスの創発およびその社会実装・国際標準化を目指して行われた、放射光を用いたオペランド・ナノ X 線分光の研究成果、および、実際に企業との共同研究におけるデバイス開発に資する研究成果が得られたことを報告されました。更なる放射光分光の進化と機械学習によるデバイス・シミュレーションによる解析を組み合わせることで、最先端デバイス・モデリングの発展や低環境負荷デバイスの実現について

の提案がなされました。

橋爪大輔氏からは、「SPring-8 で得られる異種データのハイブリッド構造解析による構造化学研究」と題した講演が行われました。固体材料開発において構造解析がボトルネックとなっており、構造モデルを決定することの重要性についての問題提起がなされました。この問題を解決する 1 つの方法として、X 線回折と X 線吸収微細構造の間でパラメータを受け渡ししながら交互に繰り返すことで構造モデルを求めるハイブリッド構造解析法とその研究成果について報告されました。それぞれの解析法の長所を活かした多変量解析には、データ科学との融合が重要であることを提案されました。

セッションV 最先端光源をリードする SPring-8/SACLA

セッション V は、光源性能を最大限に引き出す大阪ミラーについて特集し、3 名のご講演者にご講演を依頼しました。最初に、大阪ミラーの開発を精力的に進められた大阪大学の山内和人氏 (写真 17) からは、形状可変ミラーを使って、X 線集光サイズとして、7 nm という世界最高記録を達成したとのご講演をいただきました。また、X 線結像光学系の開発のため、凹凸を組み合わせた Wolter-I 型、-III 型の併用型を導入し、縦横等倍率を実現したとのご説明をいただきました。大阪ミラーを JTEC 社に技術移転して、年間 100 枚程度販売できるようになったとのご講演に対し、ビジネス展開が成功した秘訣は何だったのかとの質疑があり、長続きする良いパートナーとの出会いを大切にしてきたのが秘訣だったとのご回答がありました。

大阪大学の尾崎典雅氏 (写真 18) から、科学技術の様々な分野において、高エネルギー密度物質に関する基礎研究が不可欠であることのご説明後に、最新の成果として、レーザー核融合の燃料容器として用いられる多結晶ダイヤモンドの応力状態の変化が詳細に観察



写真17 山内和人氏



写真18 尾崎典雅氏



写真19 表和彦氏

されたとのこと報告がありました。また単結晶ダイヤモンドでは、横波音速を超えた欠陥の伸張が世界で初めて観察されたとのこと報告がありました。

(株)リガク 表和彦氏 (写真19) から、微細構造を有する3D flash memory の非破壊での評価の需要が高まる中、Wolter ミラーを用いたX線結像顕微鏡を開発し、実デバイスに近い試料の観察に大きな進展が見られたとのこと報告がありました。使い勝手の良い視野を持つ顕微鏡を構築でき、X線発生装置を使った実験で50 nm程度、SPring-8を使った実験で20 nmを切る分解能が得られ、デバイスの微細構造を観察できたとのこと報告がありました。

セッションVI パネルディスカッション

今回で7回目となる「パネルディスカッション」が行われました(写真20)。大阪大学の鷲尾隆氏(写真21)をモデレーターとし、パネリストとして、北海道大学の小松崎民樹氏(写真22)、熊本大学の赤井一郎氏(写真23)、東北大学の矢代航氏(写真24)、大阪大学の関山明氏(写真25)、理化学研究所の加藤健一氏(写真26)が参加しました。

当パネルディスカッションのテーマは、「SPring-8/SACLAとデータ科学の融合が生み出す可能性」であり、最初に、司会の鷲尾隆氏より計測インフォマティクスの実験科学に対するインパクトと実験科学はどのように対応する、どう変わるべきかとの問いかけが行われました。

次に、小松崎民樹氏より、既にオンザフライラマン分



写真20 パネルディスカッション

光イメージングなどに活用例のある人工知能により計測を迅速化するアルゴリズムについての紹介がありました。今後の情報科学と計測科学の関わり方としては、一方通行ではなく双方向的な協働の必要性について述べられました。

赤井一郎氏より、非線形回帰で解を求める場合において、従来法の最小二乗法に代わるレプリカ交換モンテカルロ法に基づくベイズ推定についての紹介が行われました。放射光計測における適切な事前確率の設計により、物性情報や計測特性を組み込んだベイズ推定による解析法についての提案がありました。

矢代航氏より、放射光CTにおける圧縮センシングと深層学習のデータ科学の活用例として、不完全投影データCT再構成、デノイジングなどの活用例について紹介がありました。データ科学の発展により、見えてきた放射光CTの新たな展開として、高速化、低線量化、放射光利用の高効率化、高スループット化による新たな4D領域のDX化が期待されることを示されました。

関山明氏より、専門とする内殻光電子線二色性スペクトルの計測などで行われているオールドファッションな放射光計測からの脱却への期待について紹介されました。データ科学を活用することにより、もっといい測定方法はないか、もっと情報を引き出せないかとの問いについても述べられました。

加藤健一氏より、SPring-8側から見たアプローチとして、粉末X線計測に用いる検出器の感度ムラ補正によるダイナミックレンジの復元について紹介されました。データ科学に期待する点として、未計測データの復元、未知の感度ムラの粉末X線回折パターン予測の可能性について述べられました。



写真 21 鷲尾隆氏



写真 22 小松崎民樹氏



写真 23 赤井一郎氏



写真 24 矢代航氏



写真 25 関山明氏



写真 26 加藤健一氏

各パネリストからの講演の後、パネリスト間での議論が行われ、最後に、鷲尾隆氏により総括が行われました。総括では、現時点では、計測インフォマティクスは世界的に確立された分野でなく、機械学習の研究の中で計測問題を目的とする基礎研究は皆無であって異分野融合に挑戦する人材が不足しており、放っておいても計測インフォマティクス研究が進まない状況について懸念を示されました。実験科学が発展、かつ持続的に日本の実験科学が世界をリードするには、実験科学研究の研究者自らが波及効果の大きい新しい計測インフォマティクス原理を含む情報科学基礎研究を継続的に行い、それを前提とした計測科学（設備、装置、センサー開発、設計）研究を行う必要性が高いことを述べられました。

セッション IX ポスターセッション

ポスターセッションは、1階アセンブリー・ホールにおいて行われました（写真 27）。今年度の発表件数は、SPRUC 研究会 35 件、共用ビームライン 16 件、専用ビームライン 10 件、理研ビームライン 6 件、施設 2 件、長期利用課題 2 件、大学院生提案

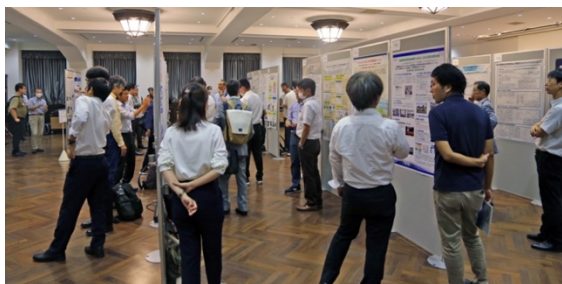


写真 27 ポスターセッション

型課題（長期型）3 件の合計 74 件でした。対面での開催は 4 年ぶりであり、セッションの最初から最後まで非常に活発な議論が行われました。

セッション VII SPRUC 総会・YSA 授賞式、受賞講演

SPRUC 総会、Young Scientist Award (YSA) 授賞式、受賞講演が行われました。総会では、まず、西堀会長による挨拶があり、続けて、行事、予算、研究会での活動状況についての報告がありました。最後に、今後の SPRUC の活動予定が示されました。

続いて、12th SPRUC YSA 授賞式が行われました。冒頭、尾嶋正治選考委員長（写真 28）より、6 名の応募があり、計 2 名を受賞者としたことと、それぞれの授賞理由の紹介がありました。授賞式の後、受賞者である鬼頭俊介氏と大竹研一氏による受賞講演が行われました（写真 29）。

鬼頭俊介氏は、「高エネルギー X 線回折を用いた価



写真 28 尾嶋正治選考委員長



写真 29 12th SPRUC YSA 授賞式

電子軌道の直接観測」について発表しました。鬼頭俊介氏は、コア差フーリエ合成法による電子密度解析手法を独自に開発し、SPring-8 から発生する 40 keV 付近の短波長高輝度 X 線放射光を用いた回折実験データ解析に適用することで、サブオングストロームの空間分解能で価電子密度分布の可視化に成功した研究内容について講演を行いました。

大竹研一氏は、「柔軟な多孔性配位高分子の動的挙動のその場観察による解明」について発表しました。大竹研一氏は、SPring-8 の単結晶、多結晶 X 線回折ビームラインを利用し、*in-situ* ダイナミック構造解析を行うことで、この細孔窓の開閉メカニズムが滑格と官能基間との相互作用に基づく安定化構造の変化にあることを明らかにした研究内容について講演を行いました。

セッション VIII クロージング

クロージングセッションでは、最初に理研の石川哲也センター長（写真 30）より総括がありました。まず、施設報告では、SPring-8-II の計画概要について、これまでより具体的な内容の報告があり、今後は、各研究会において SPring-8-II に向けた議論が進むことへの期待が寄せられました。また、30 年後の後輩たちのために、SPring-8-II が「強い日本」をつくる道具として活躍できるように、若手に尽力してもらいたいと期待を寄せられました。

次に、主催機関を代表して SPRUC 西堀会長より閉会の挨拶がありました。会長自身の全体の感想が述べられ、実行委員を始めとした関係者、参加者へのお礼の言葉がありました。

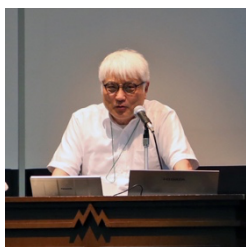


写真 30 理研 石川哲也センター長

会議のプログラムの詳細とアブストラクトは下記 Web ページにて公開されています。

<http://www.spring8.or.jp/ja/science/meetings/2023/sp8sympo2023/>

杉本 邦久 *SUGIMOTO Kunihisa*

近畿大学 理工学部 理学科 化学コース
〒577-8502 大阪府東大阪市小若江 3-4-1
TEL : 06-4307-5099
e-mail : sugimoto@chem.kindai.ac.jp

関山 明 *SEKIYAMA Akira*

大阪大学 大学院基礎工学研究科
〒560-8531 大阪府豊中市待兼山町 1-3
TEL : 06-6850-6420
e-mail : sekiyama@mp.es.osaka-u.ac.jp

藪内 俊毅 *YABUUCHI Toshinori*

(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 : 0791-58-0802 ext. 7885
e-mail : tyabuuchi@spring8.or.jp

永村 直佳 *NAGAMURA Naoka*

(国) 物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター
〒305-0003 茨城県つくば市桜 3-13
TEL : 029-859-2627
e-mail : NAGAMURA.Naoka@nims.go.jp

小林 正起 *KOBAYASHI Masaki*

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 : 03-5841-6692 (内線 26692, 86768)
e-mail : masaki.kobayashi@ee.t.u-tokyo.ac.jp

香村 芳樹 *KOHMURA Yoshiki*

(国) 理化学研究所 放射光科学研究センター
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0802 ext. 3823
e-mail : yoshiki.kohmura@riken.jp