

# SPring-8/SACL A

INFORMATION 利用者情報



ISSN 1341-9668

SPring-8 Document D2017-007

**Vol.22 No.2**  
May 2017

## SPring-8/SACLA Information

### 目次

#### CONTENTS

理事長室から - 脱炭素社会のための技術開発とエネルギー選択 - Message from President - Technology Development and Energy Choice for Zero-Emission Society - (公財) 高輝度光科学研究センター 理事長 President of JASRI	土肥 義治 DOI Yoshiharu	90
1. 最近の研究から / FROM LATEST RESEARCH neV 分解能のガンマ線準弾性散乱法による原子・分子のナノ秒-マイクロ秒ダイナミクス Atomic and Molecular Slow Dynamics Studied by Gamma-Rays Quasi-Elastic Scattering Method with neV-Energy Resolution 京都大学原子炉実験所 Kyoto University Research Reactor Institute	齋藤 真器名 SAITO Makina	91
超高引裂き強度を有するシリコンゴムの開発 Developments of High Tear Silicone Erastomers 住友ベークライト株式会社 研究開発本部 R&D Department, Sumitomo Bakelite Co., Ltd.	妹尾 政宣 SENOO Kazunobu	99
Long-term Proposal Report 1 Nuclear Resonant Vibrational Spectroscopy for Observation of Fe-H/D Bending Modes in Hydrogenases and Nitrogenases Department of Chemistry, University of California Cindy Pham Nakul Mishra Research & Utilization Division, JASRI Department of Chemistry, University of Illinois Department of Chemistry, Technische Universität Berlin Max Plank Institute for Chemical Energy Conversion Edward J. Reijerse Department of Chemistry and Biochemistry, Utah State University	Stephen P. Cramer Hongxin Wang Leland Gee Yoshitaka Yoda Thomas B. Rauchfuss Vladimir Palmenshikov Hideaki Ogata Wolfgang Lubitz Nimesh Khadka Lance Seefeldt	104
Long-term Proposal Report 2 NRVS of Mononuclear and Binuclear Non-heme Iron Enzyme Intermediates and Related Model Complexes Department of Chemistry, Stanford University/SLAC National Accelerator Laboratory Department of Chemistry, Stanford University Kyle D. Sutherlin Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST)	Edward I. Solomon Lars H. Boettger Ariel B. Jacobs Jeffrey T. Babicz, Jr. Kiyoung Park	110
2. 研究会等報告 / WORKSHOP AND COMMITTEE REPORT 第5回 JASRI ワークショップ 「地球惑星科学検討ワークショップ：大容量高圧プレス・ビームラインの将来」報告 5th JASRI Workshop on Science Discussion for Earth and Planetary Science using Large Volume Press: Report (公財) 高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 Research & Utilization Division, JASRI	肥後 祐司 HIGO Yuji	116
第8回 Spring-8 先端利用技術ワークショップ 「オープンサイエンスに向けたオープン解析プラットフォーム」参加報告 Report of the Workshop on Open Data Analysis Platform towards Open Science (国) 理化学研究所 放射光科学総合研究センター RIKEN Spring-8 Center	杉本 宏 SUGIMOTO Hiroshi	120
第14回 Spring-8 先端利用技術ワークショップ / 第3回放射光・中性子の相補利活用セミナー 「量子ビームで観る物質の内部構造」会議報告 The 14th Workshop on Advanced Techniques and Application at Spring-8/The 3rd Joint Seminar on Complementary Use of Synchrotron X-ray and Neutron (公財) 高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 Research & Utilization Division, JASRI	星野 真人 HOSHINO Masato	123
第4回 Spring-8 文化財分析技術ワークショップ 2017 報告 Spring-8 Workshop on Analytical Techniques for Cultural Heritage : Report (公財) 特殊無機材料研究所 Advanced Institute of Materials Science	鈴木 謙爾 SUZUKI Kenji	128
3. Spring-8/SACLA 通信 / Spring-8/SACLA COMMUNICATIONS 2017B 期 Spring-8 利用研究課題募集について Call for 2017B 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		131
2017B 期 SACLA 利用研究課題の募集について Call for 2017B 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		132
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 / 大阪大学 蛋白質研究所 Institute for Protein Research, Osaka University	中川 敦史 NAKAGAWA Atsushi	134
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 / (国) 理化学研究所 放射光科学総合研究センター RIKEN Spring-8 Center	杉本 宏 SUGIMOTO Hiroshi	136
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 / 関西学院大学 理工学部 School of Science and Technology, Kwansai Gakuin University	藤原 明比古 FUJIWARA Akihiko	140

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/首都大学東京大学院 都市環境科学研究科 Graduate School of Urban Environmental Sciences, Tokyo Metropolitan University	戸 哲也 SHISHIDO Tetsuya	143
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/広島大学大学院 理学研究科 Graduate School of Science, Hiroshima University	木村 昭夫 KIMURA Akio	145
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) 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 Saga Prefectural Regional Industry Support Center, Kyushu Synchrotron Light Research Center	平井 康晴 HIRAI Yasuharu	146
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 -社会・文化利用分科会- Proposal Review Committee (PRC) Report by Subcommittee Chair - Social Interest - SPring-8 利用研究課題審査委員会 社会・文化利用分科会主査/ (公財) 特殊無機材料研究所 Advanced Institute of Materials Science	鈴木 謙爾 SUZUKI Kenji	148
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 -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 物質構造科学研究所 Institute of Materials Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization	村上 洋一 MURAKAMI Youichi	150
第 39 回 (2017A) SPring-8 利用研究課題の採択について The Proposals Approved for Beamtime in the 39th Research Term 2017A 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		151
2017A 期 採択長期利用課題の紹介 Brief Description of Long-term Proposals Approved for 2017A (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 User Administration Division, JASRI		156
2017 年度に指定されたパートナーユーザーの紹介 A Newly Designated Partner User FY 2017 (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 User Administration Division, JASRI		162
2017 年度に指定期間が延長されたパートナーユーザーの紹介 The Duration of the Designation Period of Partner Users Extended in FY2017 (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 User Administration Division, JASRI		164
第 38 回共同利用期間 (2016B) において実施された SPring-8 利用研究課題 2016B 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		166
2013B 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 2013B -1- (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 User Administration Division, JASRI		172
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/東京大学大学院 新領域創成科学研究科 Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo	雨宮 慶幸 AMEMIYA Yoshiyuki	174
2017A 期 SACLA 利用研究課題の採択について The SACLA Public Proposals Approved for Beamtime in 2017A 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		176
2016B 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 2016B 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		178
SPring-8/SACLA 利用者選定に係る平成 27-28 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 FY2015-2016 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		179
論文発表の現状 Statistics on Publications Resulting from Work at SPring-8 (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 User Administration Division, JASRI		184
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		188
2016B 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 2016B 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		222
4. 告知板/ANNOUNCEMENTS 「SPRUC 2017 Young Scientist Award」の実施について SPRUC 2017 Young Scientist Award - Call for Nominations -		224
SPring-8 シンポジウム 2017 高性能化を目指す SPring-8 の将来 SPring-8 Symposium 2017		225

## 脱炭素社会のための技術開発とエネルギー選択

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
理事長 土肥 義治

2015年12月に国連気候変動枠組条約第21回締約国会議(COP21)がパリで開催され、各国は国内事情に配慮しながら脱炭素社会をめざすとする内容の協定を採択した。パリ協定は、1997年に京都で開催されたCOP3における京都議定書以来の地球温暖化問題に対処する国際条約である。京都議定書は、先進国のみが温暖化ガス削減義務を負い、先進各国が低炭素社会をめざす条約内容であった。今回のパリ会議では、産業革命以降の気温上昇を2度未満、できれば1.5度に抑えるために、先進国も途上国も今世紀後半には二酸化炭素を排出しない脱炭素社会をめざすという長期目標に合意した。この目標の達成には、革新的な技術の開発によって、人為的な温暖化ガスの排出量を実質ゼロまで削減する必要がある。パリ協定に米中を含む55ヵ国以上が批准し、世界の温暖化ガス排出量の55%以上に達して、2016年11月に協定が発効した。

ここで、2013年における世界とわが国の状況を把握しておきたい。世界の二酸化炭素排出量は年間330億トンであり、排出量は、中国、米国、インド、ロシア、日本、ドイツ、韓国の順である。世界の一次エネルギー消費量は石油換算で127億トンであり、内訳は化石燃料(石油、石炭、天然ガス)87%、原子力4%、再生可能エネルギー(水力含む)9%である。さて、わが国の二酸化炭素排出量は年間13億トンであり、電源・熱配分後の各部門の排出量は産業35%、業務23%、運輸18%、家庭16%、エネルギー転換8%の順である。わが国の一次エネルギー消費量は石油換算で4.3億トンであり、化石燃料の割合は92%にも達し、エネルギー輸入依存度は94%であった。なお、一次エネルギーに占める電力の比率は43%である。

ところで、地球環境問題解決の基本は、“Think globally, Act locally”である。パリ協定では、各国が国情に応じて温暖化ガス排出削減目標を定め、目標達

成のための国内措置をとることを締約国の義務とした。わが国は、2030年目標(2013年比26%削減)と、2050年目標(80%削減)を定めた。2020年までに排出削減のための中長期戦略を提出することになっている。まずは、2030年目標を達成するために、技術開発とともに国内対策を着実に進めることが重要である。脱炭素社会構築のためには、第一にエネルギー効率向上技術の開発を加速するとともに合理的な省エネルギー社会をつくること、第二に化石燃料に依存するエネルギー源を再生可能エネルギー(風力、太陽光、地熱、バイオマス、水力)に転換する経済的なシステム技術を開発してエネルギー自給率を向上させること、第三に発電所や工場から排出される二酸化炭素を回収、貯蔵する炭素集約技術(CCS)を確立することなど、エネルギー供給と需要の両者で革新的技術の開発と社会構造の変革が必要である。

脱炭素社会に向けたエネルギー源の選択は、各国の自然環境、発展状況、歴史や文化などによって大きく異なる。簡潔に欧州各国の現状を紹介しよう。ドイツ、イタリア、スイス、ベルギーは段階的に原発を閉鎖して、再生可能エネルギー源に転換することを決めている。他方、フランスは総電力の80%を占める原発58基を稼働させている。水力と風力に恵まれないフィンランドは原発の新設と核廃棄物の最終処分場の建設を進めている。風力に恵まれたデンマーク、オランダは風力発電の割合を増やしている。ノルウェーは総電力の90%以上が水力である。スウェーデンは、原発と水力発電を主要電源としている。

省エネルギー技術の開発とエネルギー源の開発と選択は、わが国の持続的発展に係わる最重要課題であろう。今後とも、SPRING-8とSACLAがこの分野の科学と技術の進展に貢献できるよう努力を続けたい。

# neV 分解能のガンマ線準弾性散乱法による 原子・分子のナノ秒～マイクロ秒ダイナミクス

京都大学原子炉実験所  
齋藤 真器名

## Abstract

パルス放射光を用い原子核を励起することによって得られるガンマ線を利用した時間領域干渉計によって、原子・分子スケールにおけるナノ秒～マイクロ秒の電子密度の緩和が測定可能な準弾性散乱実験を行うことができる。励起された原子核から時間的に遅れて放射されるガンマ線をプローブ、リファレンス光として用いる本手法には、放射光のパルス間隔が比較的広いセベラルバンチモードの利用が必要になる。これまで、この時間スケールでの過冷却液体やソフトマターのミクロなダイナミクスの測定に関しては、中性子スピン・エコー法が唯一の手法であったが、本手法により放射光を用いた測定も可能となってきた。近年、この手法を用い、液体やガラス、結晶、ソフトマターなどの様々な物質に関して、これまで得られなかった時間空間領域でのミクロなダイナミクスが調べられ始めている。本稿では、ガンマ線を用いた準弾性散乱法の基礎的原理およびその応用例を紹介する。

## 1. はじめに

凝集系にはミクロからマクロな空間スケールにわたって階層構造を有するものが多く存在し、その階層構造がマクロな物性や機能の発現において重要な役割を担うことがある。構造の階層性に関してこれまで非常に多くの研究がなされてきた。可視レーザー光、X線、中性子、電子などをプローブとして用いることで、原子スケールからマクロな長さスケールにわたる広い空間スケールにおいて物質の構造を調べることが可能であり、物質の構造の理解に飛躍的な進展がもたらされてきた。物質中の多様な振動・緩和ダイナミクスを調べるためには、赤外分光法、ラマン分光法、各種ブリルアン散乱測定法、可視光光子相関法など、様々な測定法が用いられている。これらの手法ではダイナミクスの時間スケールに関する知見は得られるが、ミクロな空間スケールに関する情報は乏しい。しかしながら、物質の機能や物性をより詳細に理解するためには時間スケールのみならず、ダイナミクスのミクロな空間スケールに関する理解も必要である。

ミクロな空間スケールにおいて各時間スケールの物質のダイナミクスを測定する手法として、中性子や X 線の非弾性・準弾性散乱法や中性子スピン・エコー法、X 線光子相関法などが挙げられる。それらの手法は、それぞれユニークな時間・空間スケールをカバーしている。図 1 に様々な手法がカバーする典型的な空間・時間領域を示す<sup>1)</sup>。

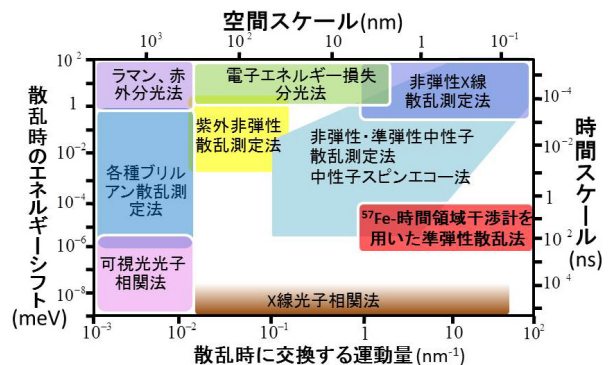


図 1 様々なエネルギー・時間分解能を有する非弾性・準弾性散乱法とそれらのカバーするダイナミクスの時間・空間スケール

凝縮系において重要となるダイナミクスの時間スケールは、一般にフェムト秒～マクロな時間スケールと非常に幅が広く、図 1 に示されているように現状では 1 つの方法ではすべての時間・空間スケールをカバーすることができない。図 1 中の“<sup>57</sup>Fe-時間領域干渉計を用いた準弾性散乱法”の示す領域は、本稿で解説する時間領域干渉計を用いたガンマ線準弾性散乱法のカバーする時間・空間領域である。時間領域干渉計を用いたガンマ線準弾性散乱法により、他の手法では測定が非常に困難な原子・分子スケールの数 ns～サブ μs の時間スケールのダイナミクスを測定できる。この時間スケールは、結晶固体と液体の中間にあるよ

うな半固体的な物質中で原子・分子が運動する時間スケールとなっている。そのような時間スケールのミクロなダイナミクスを理解することは、基礎物性研究においてはもちろん、様々な産業利用材料（例えばイオン伝導ガラス、イオン液体、液晶、脂質膜、ゴムなど）や生体系のモデル物質においても大変重要であることが近年分かってきており、現在精力的に研究されている。本稿ではその原理と応用例に加えて、なぜ本手法がセベラルバンチモードを必要とするかを解説する。

2章ではまず準弾性散乱実験の基礎として、試料がない場合に、放射光により励起された原子核が放射するガンマ線の前方散乱時間スペクトルがどのように観測されるか、そして、2つの異なる励起エネルギーをもつ原子核からガンマ線が放射される場合に、時間領域上でどのようにそれらが干渉し、いかにガンマ線のエネルギープロファイルと対応付けられるかを解説する。3章では、一般的なモノクロメーター、アナライザーを用いたエネルギー領域上での非弾性・準弾性散乱実験の基礎を解説する。4章以降では、時間領域干渉計を用いた準弾性散乱について解説する。本手法、“時間領域干渉計を用いた準弾性散乱法”は、時間領域においてダイナミクスを測定する方法であるが、エネルギー領域上の測定と同等な情報を得ることができることを説明する。本手法を一言で言えば、レーザーを用いた実験手法の光ヘテロダイン干渉法と同様に、プローブ・リファレンス光を時間領域上で干渉させ、その干渉パターンからダイナミクスの情報を引き出す手法である。時間領域干渉計のセットアップでは、2章で解説した2つの異なる励起エネルギーをもつ原子核から放射されるガンマ線を、それぞれプローブ・リファレンスガンマ線として用いる。プローブ・リファレンスガンマ線としてそれぞれに単一のエネルギーのガンマ線を用いる場合が、基本となる“シングルラインの時間領域干渉計”という手法である。このシングルラインの時間領域干渉計については4章で解説する。測定の効率を上げるために、プローブ・リファレンスそれぞれに複数エネルギーのガンマ線を用いるのが、“マルチラインの時間領域干渉計”であり、5章ではその原理を解説する。6章では、時間領域干渉計を用いた準弾性散乱実験のこれまでの応用結果を紹介し、7章では他の準弾性散乱法との関係性

をさらに詳細に議論し、まとめと今後の展開を最後に述べる。

## 2. 核共鳴（ガンマ線）前方散乱<sup>2,3)</sup>

この章では、準弾性散乱実験でプローブ、リファレンスとして用いられるガンマ線吸収体1、2からの放射ガンマ線が、試料がない場合にどのように時間領域上で干渉するのかを解説し、それらのエネルギースペクトルとの関係性を明らかにする。

ガンマ線を用いた準弾性散乱実験の基礎となる、<sup>57</sup>Fe核共鳴前方散乱実験のセットアップを図2(a)に示す。SPRING-8などの大型放射光施設において、電子は高周波バケット内の安定な領域で集団（バンチ）を形成し、蓄積リングを周回することで放射光を出す。ここで、蓄積リング内で電子がどのような構造のバンチを形成するかは放射光運転のバンチモードに依存するが、例えば、Dモード（1/7-filling + 5 bunches）では、図2(a)に示されるようなバンチが比較的連続的に連なったマルチバンチ部と、1バンチが孤立したシングルバンチからなるバンチ構造を有する。シングルバンチ部の電子から放射される放射光は時間幅数十psのパルスとみなせる。<sup>57</sup>Fe核の前方散乱実験では、このような放射光のエネルギーを<sup>57</sup>Fe原子核の核励起エネルギー～14.4 keV近傍でmeV程度の幅に分光する。この放射光を、相対的に核励起エネルギー差 $\delta E$ をつけた2つの<sup>57</sup>Feガンマ線放射体を通して、前方方向の散乱強度の時間依存性測定、すなわち時間スペクトル測定を行う。核励起エネルギー差をつける方法としては、同等な2つの<sup>57</sup>Fe放射体間に相対速度を与えることで、ドップラー効果により両者の核励起エネルギーを相対的に変化させるなどの方法がある。検出器としては1 nsの時間分解能を有するアヴァランシェフォトダイオード検出器（APD）を用いる。

パルス放射光により原子核が励起された場合、励起原子核は励起寿命（<sup>57</sup>Fe原子核の場合141 ns）程度の時間スケールでガンマ線を放射し基底状態に戻る。励起核から弾性的に放射されたガンマ線は核の励起エネルギーを有する、共鳴エネルギー幅 $\Gamma_0 \sim 4.7$  neV程度のエネルギー不確定幅を持つ単色の光であり、入射パルスに対し励起核の寿命程度遅れて検出される。このような単色ガンマ線には、入射光の向きと指向性を比較的保ったまま放射される成分があり、前方方向で

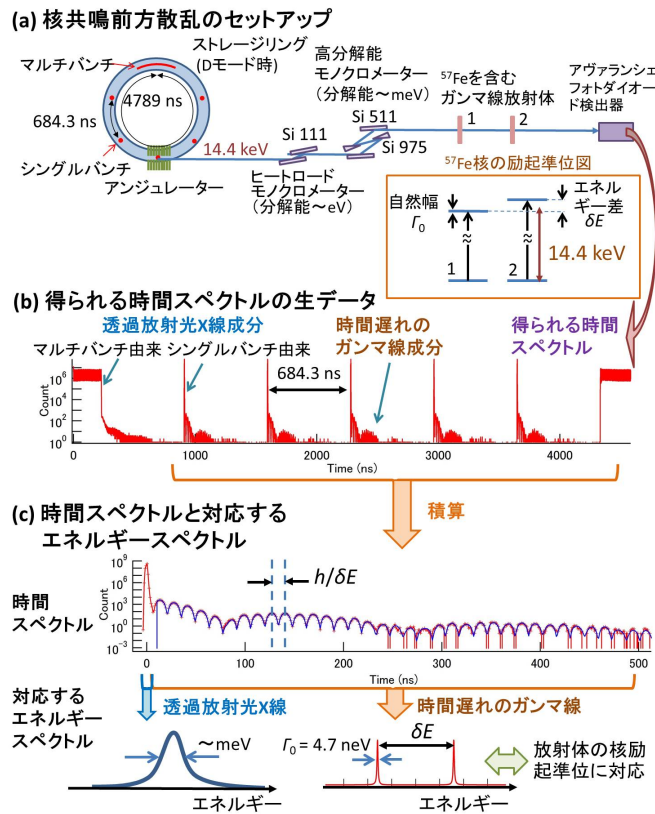


図2 核共鳴前方散乱測定、(a) セットアップ (Dモード運転時、BL09XU、SPirng-8での測定の例)、(b) 得られる時間スペクトルの生データと、(c) 積算されて得られた時間スペクトルと対応するエネルギースペクトルの概念図

はそのような指向性を保った弾性成分が主として観測される。“核共鳴散乱”は、励起原子核から放射される散乱（電子、蛍光 X 線、弾性・非弾性ガンマ線など）の総称であるが、本研究ではこの弾性的で前方方向に指向性をもって放射されるガンマ線が重要な役割を果たす。以降このようなガンマ線を単にガンマ線と呼ぶ。

このような前方散乱実験において、蓄積リングの周回時間 4789 ns にわたって繰り返し積算された時間スペクトルを図 2(b)に示す。マルチバンチおよびシングルバンチ由来の透過放射光として示された比較的高強度の成分は、蓄積リングのバンチ構造をそのまま反映したものとなっている。一方、それらに対し原子核の励起寿命の時間スケールだけ遅れてガンマ線成分が観測される。図 2(c)にシングルバンチ部のスペクトルを 5 つ分積算して得られた時間スペクトルを示す。得られた時間スペクトル上には、2つのガンマ線放射体のエネルギー差  $\delta E$  から決まる周期  $h/\delta E$  のうなり（量子ビート）が観測される。核共鳴前方散乱実

験では、このような時間スペクトル上の量子ビートの周期から核の励起エネルギーの差などを決定することができる。

この量子ビートは一見すると特異な現象に見えるが、放射光ユーザーにとって馴染み深い、位置-運動量空間における回折実験と共通点を見出すことができる。回折実験において、位置-運動量空間は互いにフーリエ変換により関係付けられ、X線回折測定により運動量空間上での回折プロファイルから原子位置の情報を得ることができる。一方、エネルギー（または角振動数）と時間も同様にフーリエ変換の関係性があり、回折実験で位置をエネルギー、運動量を時間と読み替えると、量子ビートは、異なったエネルギーを有する光子が時間領域上でつくる干渉縞と例えることができる。どのような時間スケールまで干渉縞ができるかはガンマ線の単色性が決めており<sup>4)</sup>、neV レベルまで単色なガンマ線を用いることで、ようやく比較的高速の検出器である APD を用いて、実験的に測定可能な 100 ns の時間スケールで干渉縞を観測するこ

とができる。そのため、時間領域上での干渉は、物理現象としては一般的な現象にもかかわらず、多くの放射光実験では馴染みのないものになっている。

回折実験においては、運動量空間での回折プロファイルが散乱体位置の情報を有し、広い運動量空間で測定を行うことで、精度よく位置に関する情報を得ることができる。同様に、時間領域上での干渉縞である量子ビートは、ガンマ線のエネルギー情報を有し、時間スペクトルを広い時間スケールで測定することによって詳細なエネルギーの情報を引き出すことができる。時間スケールの幅を広くとるために、核共鳴前方散乱実験では、パルス間隔が適当に開いた運転モードであるセベラルバンチモードが必要となっている。また後述するように、時間領域干渉計を用いた準弾性散乱実験でも測定したいダイナミクスの時間領域を含む広い時間スケールにわたって時間スペクトルを観測する必要があるため、長いパルス間隔のセベラルバンチモード、例えば SPring-8 の場合には D (684.3 ns)、および F (342 ns) モードの利用が大変有利となる。ここで、括弧内の数字はシングルバンチとシングルバンチの間隔である(さらに詳細な解説は文献2、3を参照)。

### 3. 非弾性・準弾性散乱の典型的な測定手段<sup>[5,6]</sup>

時間領域干渉計の解説の前に典型的な非弾性・準弾性散乱実験について解説する。エネルギー領域上での準弾性散乱実験としては、比較的エネルギー不確定幅の狭い光などの粒子を拡散などのダイナミクスを調べたい試料に照射し、散乱粒子のエネルギースペクトルを調べる実験を行う。このとき、試料中のマイクロな運動性に応じて試料と散乱粒子はエネルギーを移行し合う。これにより散乱粒子のエネルギーの幅は広がるなど変化するため、その変化から試料のダイナミクスを調べることができる。非弾性・準弾性散乱法は、プローブ粒子のエネルギーや散乱角などを選択することにより試料との運動量移行  $q$  を変化させることで、ダイナミクスを調べたい試料の空間スケールを選択できるという特徴がある。この特性により、例えば複雑な構造をもつ物質においても、その内部で異なる空間スケールでのダイナミクスを比較的独立に調べることができる。図3に典型的な非弾性・準弾性散乱実験のセットアップの模式図を示す。試料上流側のモ

ノクロメーターにより入射粒子のエネルギー幅を  $\Delta E_{mono}$  と制限しておく。試料より散乱された電場強度のエネルギープロファイルは、いわゆる動的構造因子  $S(\mathbf{q}, E)$  ( $E$  はエネルギー) が入射エネルギープロファイルに畳み込まれたような形をしている。動的構造因子は、X線を用いた場合、電子密度  $\rho(\mathbf{r}, t)$  ( $\mathbf{r}$  は位置ベクトル、 $t$  は時間) の時空間相関関数である  $G(\mathbf{r}, t)$  の  $\mathbf{r}$  および  $t$  に関するフーリエ変換により定義されており、試料の詳細なダイナミクスの情報を有する(さらに詳細な解説は文献5、6を参照)。

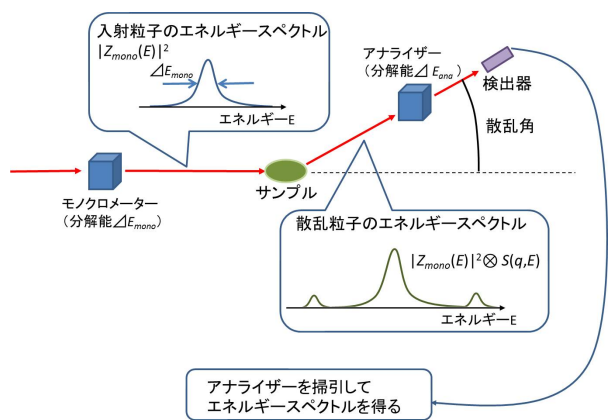


図3 典型的な非弾性・準弾性散乱実験のセットアップの概念図

一般的に  $S(\mathbf{q}, E)$  は広いエネルギー、 $q$  スケールにわたり物質の構造とダイナミクスを特徴付けるような形状を有する。観測可能な  $S(\mathbf{q}, E)$  のエネルギースケールは測定系の分解能  $\Delta E_{mono}$ 、およびアナライザーの分解能  $\Delta E_{ana}$  (典型的には  $\Delta E_{mono} \sim \Delta E_{ana}$ ) の近傍となる。図1に示すように、例えば BL35XU で実験可能な X線非弾性散乱測定は、meV スケールのエネルギー分解能を有する測定系であり、これは、フーリエ変換すると、時間スケール ps 程度以上のダイナミクスの測定が可能となっていることに対応している。

回折実験において測定する  $q$  レンジが大きいほど小さな構造を調べることができることに対応して、一般的にエネルギー分解能が高い測定系ほどより長い時間スケールのダイナミクスの測定に適している。<sup>57</sup>Fe 核からのガンマ線は数 neV の分解能を有しているので、X線非弾性散乱測定の数 100000 倍ほど長い時間スケール (100 ns) のダイナミクス測定が可能となる。



4. シングルラインの時間領域干渉計<sup>[7-9]</sup>

<sup>57</sup>Fe 核からのガンマ線を用いた時間領域干渉計のセットアップの概念図を図4に示す。実験はSPring-8、BL09XUにおいて行っている。この図では、4.7 neVのエネルギー不確定幅を有する単一の励起エネルギーをもつシングルラインのガンマ線放射体を用いたセットアップを示している。ここでは、試料として、長周期構造のない物質（例えば液体）を考える。放射光のパス上の試料の前後にはガンマ線放射体1と2を配置し、前述の前方散乱実験と同様にそれらの励起エネルギーを $\delta E$ だけ異なったものとしておく。

3章では入射光を単色化することにより、散乱実験において試料の動的な応答をエネルギー領域上で観測する非弾性・準弾性散乱法を説明した。一方、放射光によりガンマ線を生成した場合は、単色なガンマ線成分以外に透過放射光成分も試料によって散乱されるため、上述のエネルギー領域上の測定をそのまま行うことができない（例えば、<sup>57</sup>Feの核共鳴を用いた場合、透過成分はそれに対し100000倍ほど強い）。ここで、前方散乱実験でガンマ線の時間スペクトル測定をすると、強い透過放射光成分とガンマ線を分けて観測でき、しかも時間スペクトル上の量子ビートからガンマ線のエネルギースペクトルの情報が得られることを利用すると、ガンマ線を用いた準弾性散乱実験においても、時間スペクトルを測定し量子ビートを調べること、 $S(q, E)$ を得ることができると考えられる。 $S(q, E)$ がどのように量子ビートに影響するか調べるため、まずは図4を基に試料での散乱過程によるガンマ線のエネルギープロファイルの変化を考える。放射体1から放射されたガンマ線1が試料により準弾性散乱されると、エネルギー幅は、試料中の拡散の度合い（すなわち $S(q, E)$ ）に応じて半値全幅 $\Gamma$ 分だけ広がる。ガンマ線1はプローブ光として機能する。一方、試料の下流側にあるガンマ線放射体2から放射されるガンマ線2については、そのエネルギー幅は試料による準弾性散乱による広がりを受けない。そのため、ガンマ線2はリファレンス光として機能する。原子核共鳴を起こさない大部分の放射光に対し、時間的に遅れてこれら2つの放射体起源のガンマ線が検出器に到着することになる。

$S(q, E)$ の中心ピークの幅 $\Gamma$ が、neVのエネルギースケールに比べて十分狭い場合、前方散乱の条件とほぼ

変わらなくなる。ゆえに、図5(a)のように時間領域上の量子ビートは比較的明瞭なものとなる。一方、拡散が速くなると図5(b)のようにガンマ線1のエネルギー幅が広がるため、時間領域上で量子ビートの振動数成分が増え、量子ビートが時間とともに緩和するような効果をもたらす。より一般的には、量子ビートは、 $S(q, E)$ の時間領域上の表現である関数 $S(q, t)$ に従って緩和することを示すことができる。この $S(q, t)$ を中間散乱関数と呼ぶ。中性子スピン・エコー法やX線光子相関法も、時間領域上でダイナミクスを測定し、 $S(q, t)$ を求める手法である。このように、時間スペクトルの測定を通じて量子ビートの明瞭性の時間変化を調べることにより、試料のマイクロなダイナミクスを調べることができる。

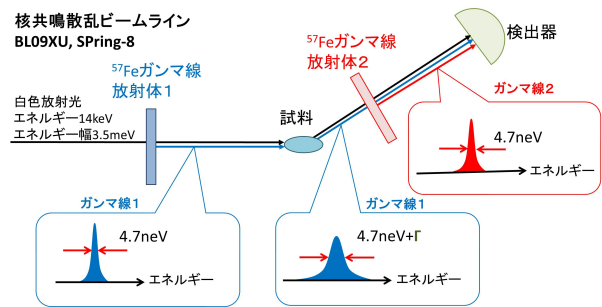


図4 ガンマ線準弾性散乱実験セットアップの概念

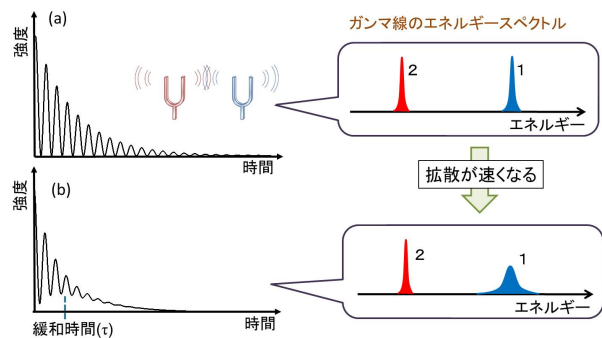


図5 ダイナミクスが比較的、(a)早い場合と、(b)遅い場合のシングルラインの時間領域干渉計の時間スペクトルと対応するガンマ線のエネルギースペクトル

5. マルチラインの時間領域干渉計<sup>[10]</sup>

シングルラインのガンマ線準弾性散乱法では、白色の放射光から neV 幅の単色のガンマ線のみを実験に用いていることにも関係して、大部分の放射光を実験に用いていない。より多くの入射光を有効に用いてさ

らに効率よく実験を行うため、複数の異なるエネルギーの単色ガンマ線を用いて構築された時間領域干渉計が、マルチラインの時間領域干渉計である。

このセットアップではガンマ線放射体 1、2 として鉄箔を用いる。鉄中には 33 T の内部磁場が存在し、 $^{57}\text{Fe}$  原子核の磁気モーメントと相互作用することにより、励起状態および基底状態の鉄原子核のエネルギー準位はそれぞれ Zeeman 分裂を起こしている (図 6(a)参照)。この分裂幅は数十 neV 程度で、電子系の Zeeman 分裂幅に比べて大変小さく、核エネルギー準位の超微細構造分裂と呼ばれる。

$^{57}\text{Fe}$  の核準位間の遷移に関する選択則により、図 6(a)に示されるような 6 種の遷移が許容となる。励起状態の磁気量子数  $m_e$  と基底状態の磁気量子数  $m_g$  の差  $\Delta m$  に関して、6 種の遷移は、-1, 0, 1 のいずれかの値をとる。各  $\Delta m$  を有する遷移の遷移確率は、内部磁場  $H$  の方向と入射放射光の磁場偏光ベクトル  $h_e$  の向きとの関係性にそれぞれ大きく依存する。例えば、線 2 色性や磁気円 2 色性実験では電子系の準位間遷移に関するこのような選択則を利用して物性研究を行っている。 $H \perp k$  とし ( $k$  は波数ベクトル)、さらに、 $H \parallel h_e$  ならば  $\Delta m = 0$  の遷移のみが、 $H \perp h_e$  ならば  $\Delta m = \pm 1$  の遷移のみが許容される。それらの条件でそれぞれ得られるガンマ線のエネルギースペクトルをそれぞれ図 6(b)中に示す。

マルチラインのガンマ線準弾性散乱法では、このような選択則を利用し、ガンマ線放射体 1、2 にそれぞれ、 $H \parallel h_e$  および  $H \perp h_e$  と磁場をかけることでエネルギー的に異なる複数のエネルギーのガンマ線が両者から放射されるような条件をつくる。このときの実験セットアップの概念図を図 7 に示す。図にはマルチライン法を反映するガンマ線のエネルギースペクトルが描かれている。1 と番号付けられた放射体 1 起源のプローブガンマ線のピークでは、試料の拡散の影響を受けてエネルギー幅が広がる。一方、2 と番号付けされた放射体 2 起源のリファレンスガンマ線のピークでのエネルギー幅は、試料による散乱の影響を受けない。時間領域上ではこれらの干渉の結果生じる複雑な量子ビートが測定される。その時間スペクトルの例を図 7 に示す。

シングルラインの時間領域干渉計では、ガンマ線 1 と 2 の干渉項(量子ビート)はダイナミクスの影響(中

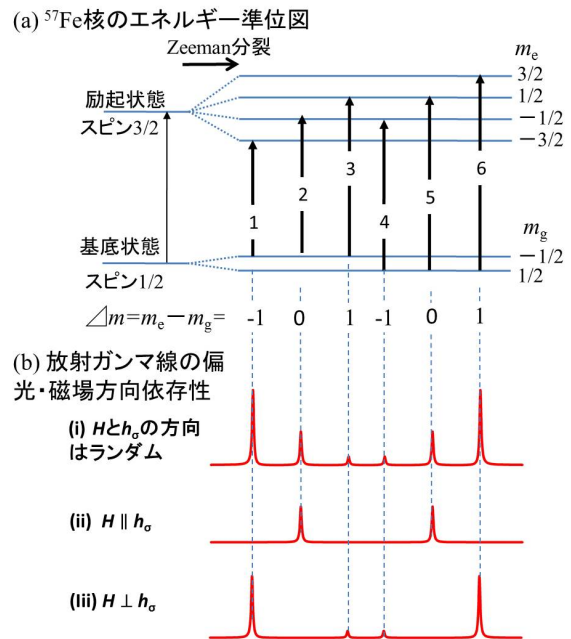


図 6 (a)  $\alpha$ -Fe 中の核準位の分裂と、(b) 放射ガンマ線の偏光・内部磁場方向依存性

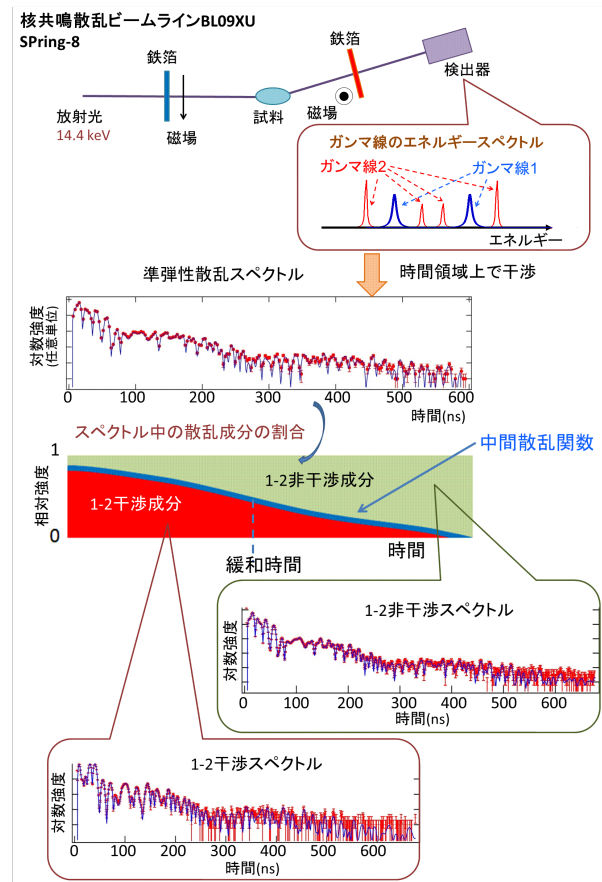


図 7 マルチラインの時間領域干渉計法を用いた準弾性散乱実験により得られるガンマ線の時間スペクトル

間散乱関数)により時間的に消失していった。マルチライン法でもスペクトルの形状は複数の量子ビートが混在し複雑になるものの、基本的に同様のことが起こる。すなわち、中間散乱関数に従ってスペクトルの形状はプローブガンマ線1とリファレンスガンマ線2の成分間の干渉がある場合のスペクトル(1-2干渉スペクトル)から、プローブガンマ線1とリファレンスガンマ線2の成分間の干渉がない場合のスペクトル(1-2非干渉スペクトル)に変化する。ゆえに、両スペクトルをあらかじめ精度よく測定しておけば、準弾性散乱スペクトルにおけるそれらのスペクトルの成分比の時間変化を調べることで、動的構造因子と等価な中間散乱関数を決定することができる。

既存のシングルライン法では、量子ビートは時間とともに消失するのみであったが、マルチライン法では、1-2干渉スペクトルと1-2非干渉スペクトルはそれぞれ大きく異なった時間構造(ピーク位置)をもつため、両者間に大きな強度のコントラストがつき、ダイナミクスの影響を反映して量子ビートのパターンが劇的に変化する。このような高いコントラストに基づく高いダイナミクス測定効率も、マルチライン法を用いる利点である。

## 6. 応用例の紹介

ガンマ線準弾性散乱法は過冷却液体、結晶、ガラス、および液晶などのソフトマターのダイナミクス研究に対して用いられている。過冷却液体のダイナミクス測定はガラス転移のメカニズムの理解に有用である<sup>[11]</sup>。これまで過冷却液体、およびガラス状態の *o*-terphenyl<sup>[11-13]</sup>、polybutadiene<sup>[13]</sup>、glycerol<sup>[12,14]</sup>、ionic liquid 1-butyl-3-methylimidazolium iodide<sup>[15,16]</sup>の研究がなされている。また、ordered alloy 中の拡散も

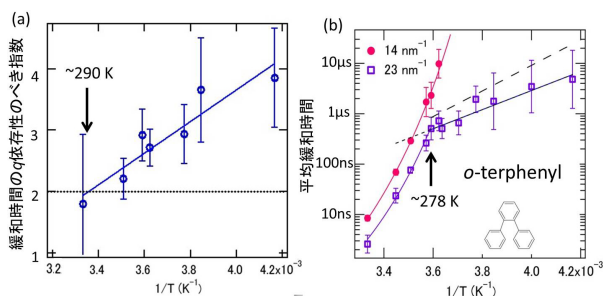


図8 *o*-terphenylの冷却過程におけるマイクロなダイナミクスの結果、(a)緩和時間の $q$ 依存性のべき指数の温度変化、(b)緩和時間の温度依存性

報告されている<sup>[17,18]</sup>。液晶分子の拡散ダイナミクスもガンマ線を用いた準弾性散乱法で調べられており、典型的なサーモトロピック液晶 4-n-octyl-4-cyanobiphenyl と部分的にフッ素化された炭化水素鎖をもつ液晶が測定され、それらの非等方的な緩和時間からマイクロな構造が議論されている<sup>[19]</sup>。

これまでに得られた新しい結果の例として、典型的な過冷却液体 *o*-terphenylの冷却過程におけるマイクロなダイナミクスの研究を紹介する<sup>[11]</sup>。この液体を冷却していくと、分子間スケールの緩和時間はガラス転移温度近傍に向けて発散的に遅くなる。図8(a)に実験で得られたマイクロな緩和時間の $q$ 依存性のべき指数の温度依存性を示す。緩和時間の $q$ 依存性を測定することで、マイクロな拡散の局所的な度合いを調べることができ、べき指数が2から大きくなるほど拡散は局所的になっていると解釈できる。実験の結果、*o*-terphenylでは290 Kにおいて拡散が局所的になり始めることが分かった。これまでの他の測定でも290 Kで様々なダイナミクスの変化が観測されており、この温度で分子環境が徐々に局所的に液体的な振る舞いから固体的な振る舞いに変化し始めていると考えられている。我々の実験でも、290 Kにおいて分子環境が固体ライクとなり始める様子が拡散の局所化という観点から観測されたと考えている。一方、図8(b)に示される緩和時間の温度依存性に関しては、分子内スケールの緩和時間( $q = 23 \text{ nm}^{-1}$ )は、278 Kで発散的な温度依存性からより温度依存性が穏やかな Arrhenius 則に従うようになることが見出された。この変化は、冷却に伴い278 Kから本来固体中で見られる活性化過程である Johari-Goldstein  $\beta$  過程が生じたことによると結論できた。すなわち、290 Kからさらに冷却すると、278 Kにおいて活性化過程が起こるのに十分な時間スケールまで分子環境が固体的となることが分かった。このように、過冷却液体中ではマイクロなダイナミクスは冷却に伴い段階的に固体的な特徴を帯び始めることが明らかにされた。

## 7. まとめと今後の展開

図7中の準弾性散乱スペクトル例から分かるように、現在のところ時間領域干渉計を用いて600 ns程度まで時間スペクトルを観測することができ、凝縮系の ns~ $\mu$ s ダイナミクス測定が可能となっている。一

方、中性子スピン・エコー法では、nm スケールの構造のダイナミクスに関しては典型的に数百 ns までの時間レンジで測定できる。ゆえに、nm スケールの 100 ns 程度のダイナミクス研究に関しては、両者を相補的に用いた研究を行うことができ、プローブの違いを有効に利用することで 1 手法により得られる結果よりも遥かに多くの情報を得ることができる。

中性子スピン・エコー法にはダイナミクスを観測する空間スケールを小さくすると、緩和の観測時間スケールが相対的に短くなるという特性がある。このため、中性子を用いて、原子スケール (0.1 nm スケール) の  $\mu\text{s}$  の緩和ダイナミクスを観測するのは現実的ではない。一方、時間領域干渉計は原子スケールにおいても比較的容易に  $\mu\text{s}$  スケールという長い時間スケールのダイナミクスを測定できるという特徴がある。

核 Bragg 分光器を用いて白色放射光から単色ガンマ線をほぼ完全に切り出し、そのガンマ線を用いて準弾性散乱測定をエネルギー領域上で行う方法も提案されている<sup>[20,21]</sup>。この方法には必ずしもセベラルバンチモード運転が必要でないという利点がある。この手法では、生成されたガンマ線のエネルギー幅が自然幅より大きくなってしまふなどの手法上の特性のため、数十 ns 程度より短い時間スケールのダイナミクス測定に適していることが示唆されている。

このように、時間領域干渉計を用いたガンマ線準弾性散乱法は凝縮系の物性研究法として非常にユニークな手法であり、いまださらなる開発の余地がある。そして今後の装置開発により、さらに様々な対象への応用が可能となると考えられる。その効率よい測定のため、1 バンチに比較的高い電流が蓄積され、340 ns 以上のバンチ間隔を有する加速器運転におけるセベラルバンチモード (D、F モード) の利用が本質的に重要である。この手法が今後益々発展していくためには、このようなセベラルバンチ運転等による放射光パルスの時間間隔制御が不可欠であり、そのうえで、より高輝度の放射光の利用ができるようになることを期待したい。

#### 参考文献

- [1] 齋藤真器名：固体物理 **47** (2012) 11.  
[2] 瀬戸誠：日本結晶学会誌 **43** (2001) 405-412.

- [3] 瀬戸誠：固体物理 **44** (2009) 27.  
[4] 菊田惺志：X 線散乱と放射光科学 基礎編 (東京大学出版会、2011)  
[5] 細川伸也：分光研究 **57** (2008) 301-312.  
[6] A. Q. R. Baron：固体物理 **44** (2009) 11.  
[7] A. Q. R. Baron *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997) 2823.  
[8] G. V. Smirnov, V. G. Kohn and W. Petry: *Phys. Rev. B* **63** (2001) 144303.  
[9] G. V. Smirnov *et al.*: *Phys. Rev. B* **73** (2006) 184126.  
[10] M. Saito *et al.*: *Hyperfine Interact.* **206** (2012) 87-90.  
[11] M. Saito *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **109** (2012) 115705.  
[12] M. Saito *et al.*: *Hyperfine Interact.* **226** (2014) 629-636.  
[13] T. Kanaya *et al.*: *J. Chem. Phys.* **140** (2014) 144906.  
[14] M. Saito *et al.*: *Hyperfine Interact.* **237** (2016) 22.  
[15] M. Saito *et al.*: *J. Phys.: Conf. Ser.* **217** (2010) 012147.  
[16] M. Saito *et al.*: *Appl. Phys. Express* **2** (2009) 026502.  
[17] B. Sepiol *et al.*: *Hyperfine Interact.* **126** (2000) 329-333.  
[18] M. Kaisermayr *et al.*: *Eur. Phys. J. B* **20** (2001) 335-341.  
[19] M. Saito *et al.*: *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** (2012) 023001.  
[20] J. Z. Tischler *et al.*: *J. Appl. Phys.* **79** (1996) 3686.  
[21] R. Masuda *et al.*: *Jpn. J. Appl. Phys.* **48** (2009) 120221.

齋藤 真器名 SAITO Makina

京都大学原子炉実験所

〒490-0494 大阪府泉南郡熊取町朝代西二丁目

TEL : 072-451-2680

e-mail : msaito@rri.kyoto-u.ac.jp

## 超高引裂き強度を有するシリコンゴムの開発

住友ベークライト株式会社 研究開発本部  
妹尾 政宣

### Abstract

我々は表面修飾されたシリカフィラー添加によるゴムの補強効果を利用して処方改善を行い、通常の5倍程度の引裂き強度を有するシリコンゴムの開発に成功した。そこで、放射光を用いた延伸同時X線構造解析手法を用いて、シリコンゴムの高引裂き強度の発現に影響を与える内包フィラーの凝集状態の延伸に伴う構造変化とその物性との相関について検討した。その結果、延伸同時USAXS測定から延伸に平行な方向において顕著なプロファイルの立ち上がりが観察された。さらに、延伸に伴う表面フラクタル次元を観察したところ、延伸に平行な方向のみ延伸に伴いフラクタル次元の増加が観察された。このことからマトリックスの延伸に伴い延伸に平行な方向でシリコンゴム内のシリカ凝集体の密度揺らぎが増加し、階層構造が変化していることが示唆された。その結果、更なる高機能素材開発に関する指針が得られ、各種製品でナノ構造制御技術に基づく劇的な物性改良（硬度、引裂き強度、延伸度の独立制御）に成功した。

### 1. はじめに

ソフトマテリアルへのフィラーの添加は機械的強度の増加に効果的な方法であることが知られている<sup>[1]</sup>。特にポリジメチルシロキサン（PDMS）へのシリカフィラーの添加はその弾性率や破断伸びを大幅に向上させる<sup>[2]</sup>。PDMS中のシリカフィラーはその強い凝集エネルギーのためマトリックス中で凝集している。一般にPDMSを主鎖骨格に有するシリコンゴムは耐熱、耐寒、化学的安定性に優れ、離型性や電気絶縁性、気体透過性、透明性が良好であることから医療機器用途の幅広いアプリケーションで用量が増加している（図1）<sup>[3]</sup>。しかしながら、シリコンゴムはイソプレンゴムや天然ゴムに比べて引裂き耐性が弱い<sup>[4]</sup>ため、含有するシリカフィラーとマトリックスであるPDMSとの界面の破断メカニズム<sup>[5]</sup>や構造制御に関する研究<sup>[6]</sup>が重要になってきている。

延伸同時放射光X線測定はゴムマトリックス中でのフィラー凝集体の階層構造を観察する強力な手段である<sup>[7]</sup>。ポリイソプレンおよびポリ（スチレン-co-ブタジエン）中のカーボンブラック<sup>[8]</sup>や天然ゴム中のシリカ凝集体<sup>[9]</sup>の階層構造は延伸下での放射光超小角X線散乱（USAXS）と放射光小角X線散乱（SAXS）を用いて明らかになっている。最近、PDMS中のシリカ凝集体の構造変化について放射光を用いた延伸同時SAXS観察を行った報告において、PDMSの3倍程度

の延伸において含有シリカ凝集体の延伸方向への異方性が観察された<sup>[10]</sup>。しかしながら、階層構造の有無および高延伸下での詳細なシリカ凝集体の構造変化は明らかとは言えない。

そこで、本研究では放射光を用いた延伸同時USAXS/SAXS構造解析手法を用いて、PDMS中の延伸に伴うフィラー凝集体の階層構造の変化について明らかにしたので報告する。



図1 医療用シリコン利用製品例：手術後の創部の血液、膿、滲出液などの持続吸引器

### 2. 実験

#### 2.1 試料

本研究で用いたビニル基含有ポリジメチルシロキサン（ビニル基含有量0.4 mol%）は既報により合成

した<sup>11)</sup>。シリカ粒子は日本アエロジル社製（平均一次粒子径 7 nm）を用いて、各配合量（0, 25.6, 34.1 wt.%）にて調整した。シランカップリング剤として Gelest 社製のヘキサメチレンジシラザンを用い、硬化触媒として Gelest 社製の白金/ジビニルテトラメチルシロキサン錯体を用いた。

## 2.2 シリコンゴムの作製

ビニル基含有ポリジメチルシロキサン 100 per hundred rubber (phr) に、ヘキサメチルジシラザン 10.5 phr と水 5.25 phr を予め混練し、その後、シリカ粒子を加えて混練することで混練物を得た。シリカ粒子添加後の混練は、カップリング反応のために窒素雰囲気下、75°Cの条件下で 1 時間混練する第 1 ステップと、副生成物（アンモニア）の除去のために減圧雰囲気下 170°Cの条件下で 2 時間混練する第 2 ステップとを経ることで行った。また、得られた混練物は、室温にまで冷却させ、この混練物に白金触媒 0.05 phr を加えた後、ロールで混練を行いシート化し、170°C、10 MPa で 10 分間プレスし、1 mm のシート状に成形するとともに一次硬化した。続いて 200°C で 4 時間二次硬化を行い架橋体を得た。

## 2.3 測定

### 2.3.1 引張りおよび引裂き試験

島津製作所製オートグラフ AG-5kNX 型を用いて室温にて引張り試験および引裂き試験を行った。試験片はシート状シリコンゴムを用いて、JIS K6251(2004)に準拠して、ダンベル状 3 号形試験片、ならびに、JIS K6252(2001)に準拠してクレセント形試験片を作製し、JIS K6251(2004)によるダンベル状 3 号形試験片の引張り強さおよびひずみ、ならびに、JIS K6252(2001)によるクレセント形試験片の引裂き強さおよびストロークを測定した。ただし、引張り強度、ひずみ、引裂き強度およびストロークの測定に用いた試験片の厚みは 1 mm とした。

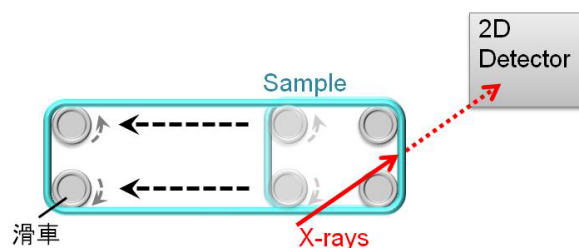
### 2.3.2 延伸同時 X 線測定

試験片は幅 1 mm、円周 50 mm のリング形状として、自作のプーリーを備えた高速延伸機により延伸を行った（スキーム 1）<sup>12)</sup>。本延伸機を用いることにより、サンプルのチャックでのスリップが起きず、サン

プルネッキングが避けられる点およびサンプルの延伸中に X 線ビームの照射位置が変化しない点が利点となる。放射光を利用した USAXS/SAXS および MSAXS 測定は表 1 の条件下で測定を行った。ビームラインは SPring-8 の BL19B2 および BL08B2、BL03XU を利用した（図 2）。

表 1 測定条件

	Beam Line	Detector	Wave Length (Å)	Camera length (m)
USAXS	BL19B2	PILATUS 2M	0.689	41.82
SAXS	BL08B2	II+CCD	1.00	4.273
MSAXS	BL03XU	R-AXIS VII	1.00	1.128



スキーム 1 定点照射型の高速延伸機

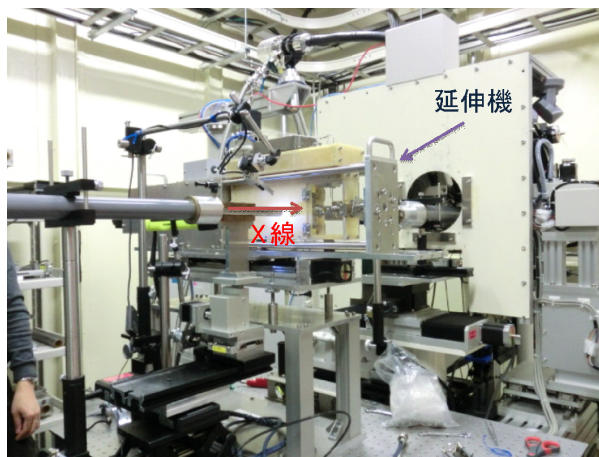


図 2 BL19B2 ラインでの超高速引張り試験（1 m/s）同時 X 線散乱観察

ンプルの初期および延伸時の厚みは別途マイクロメーターにて測定した。延伸の際のサンプル厚みは透過率から見積もられた X 線吸収係数によって計算した（式 1）。

$$I = I_0 e^{-\mu t} \dots \dots \text{(式 1)}$$

I: 透過 X 線強度、 $I_0$ : 入射 X 線強度、t: サンプル厚み、 $\mu$ : X 線吸収係数

ここで、

$$t(\lambda) = t(\lambda = 1) / \sqrt{\lambda}$$

$\lambda$  : 延伸比

### 3. 結果と考察

#### 3.1 引張りおよび引裂き試験

種々のシリカ含有量のシリコンゴムの応力歪曲線の結果から以下のことが示された。フィラーとしてシリカを添加しないシリコンゴムの破断応力は、1 N/mm 以下であり、歪は  $\lambda = 3$  で破断に至った。一方、シリカ粒子を 25.6 wt.% 添加したシリコンゴムは、 $\lambda = 10$  で応力は 10 N/mm を超える値となった。このことからシリコンゴムはシリカナノ粒子の添加により効率的に補強が成されることが確認できる。我々は表面修飾されたシリカフィラー添加によるゴムの補強効果を利用して種々処方改善を行い、図3に示すように通常の 5 倍程度の引裂き強度を有するシリコンゴムの開発に成功した。

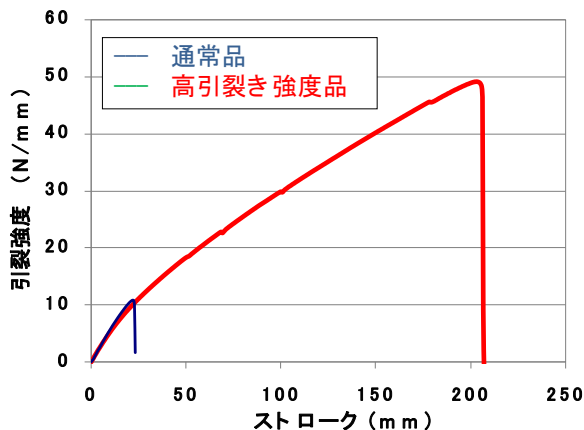


図3 開発した高引裂き強度を有するシリコンゴム

図4にフィラーが34.1 wt.%含有したシリコンゴムを用いたサンプル厚みに対する延伸比の影響を示す。見かけのサンプル厚みはシリコンゴスを延伸させながら放射光 X 線装置を用いることにより得られた X 線透過率から見積もられた。シリコンゴムの延伸に伴う X 線透過率の変化から見積もられた各延伸倍率でのサンプル厚みは線形関数として表される均質な変形であるアフィン変形を仮定した値よりも小さい値となった。一方、実測から得られた厚みはアフィン変形を仮定した値よりも大きいことが分かった。このことから延伸により内部のフィラーの凝集構造が変化していることが示唆された。

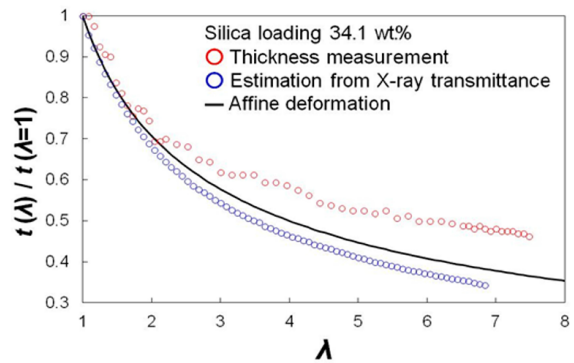


図4 フィラー34.1 wt.%含有したシリコンゴムを用いたサンプル厚みに対する延伸比の影響

#### 3.2 延伸同時 X 線測定

延伸過程におけるフィラーの凝集構造の変化と強度との相関を得るため放射光を利用した延伸同時 X 線測定を行った。図5に延伸における二次元の SAXS パターンの一例を示す。いずれの X 線散乱プロファイルにおいても延伸初期から典型的な配向を示すバタフライパターンが得られた<sup>[10]</sup>。

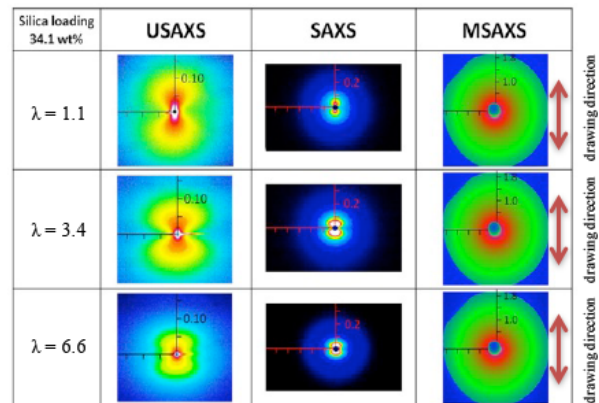


図5 延伸における二次元の SAXS パターン

これらの結果はシリコンゴムに補強材として含有しているシリカ粒子凝集体間の干渉による散乱に起因すると考えられ、凝集体の疎密構造内で不均一に延伸されていることが非アフィン変形の要因の一つであることが示唆される。

図6に得られたバタフライパターンの子午線および赤道方向の $\pm 5^\circ$ の範囲でのセクター平均から延伸に平行および垂直な方向の一次元プロファイルを示す。その結果、並行のプロファイルと垂直のプロファイルが、 $q$ が減少するにつれて乖離していくポイントより低い USAXS 領域において、シリコンゴムの延伸に

に伴い、延伸に平行な方向のプロファイルの立ち上がり  
が観察された。このことからマトリックスの延伸に伴  
い延伸に平行方向でシリコーンゴム内のシリカ凝集  
体の密度揺らぎが増加し、階層構造が変化している  
ことが分かった。一方、SAXS 領域で観察される散乱  
から剛体球モデルでのフィッティングにより計算され  
た最小単位で存在するシリカ凝集体に起因する形状  
因子は、延伸に平行および垂直な方向において変化  
は観察されなかった。

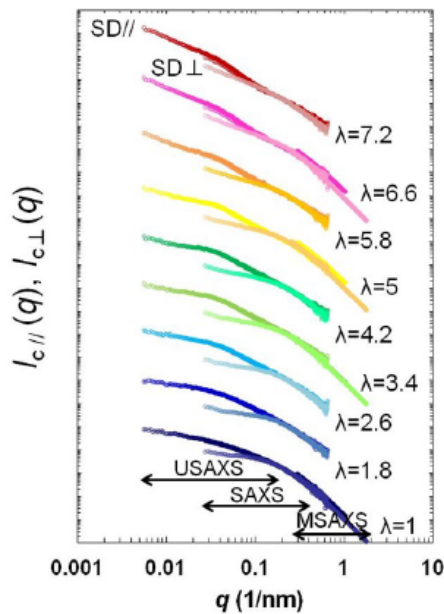


図6 フィラー34.1 wt.%含有したシリコーンゴムの  
延伸による延伸と平行 (SD // ) および垂直  
(SD⊥) 方向の USAXS/SAXS/MSAXS 1D  
プロファイル

### 3.3 フラクタル次元について

図6のプロファイルにおいて、関数  $I(q) \sim q^{-(6-D_s)}$  を利用してその傾きを求める解析を行った。  $D_s$  は表面粗さの解析に利用される表面フラクタル次元である。延伸に伴う表面フラクタル次元を観察したところ、延伸に平行な方向のみ延伸に伴いフラクタル次元の増加が観察された。これらの結果は延伸に垂直方向における構造変化を伴わないこと、および広角 X 線回折パターンにおける中間層の形成結果とも関連付けられると考えている。更に USAXS を用いた測定結果と結びつけて考察することでシリコーンゴム内のシリカ凝集体の階層構造の変化を捉えることができる。現在、シリコーンゴム中のシリカフィラー凝集体の階層構

造の延伸同時 X 線観察における形状因子と質量フラクタルおよび表面フラクタルを考慮した詳細な解析は進行中である。以上の結果から、巨視的な変形挙動がシリコーンゴム複合体内部のフィラーのミクロな変形挙動と密接に関連していることが示された。一方、引裂き強度が低い試料の測定を行って比較した結果ではミクロな変形挙動が観察される前に破断することから、ミクロな変形挙動が引裂き強度などの物性に特異性を与えることが期待される。

### 4. おわりに

本研究では巨視的な変形挙動がシリコーンゴム複合体内部のフィラーのミクロな変形挙動と密接に関連していることを示し、そのことが引裂き強度などの物性に大きな特異性を与えることを示唆した。高引裂き強度を有するシリコーンゴムは通常のシリコーンゴムに比べて5倍を超える引裂き強度を有し、8倍を超える延伸が可能のため、引張り・破壊・経時劣化過程を観察することができる。このことから、材料内のナノフィラー凝集構造が柔軟に変化追従し、強固で柔軟な階層構造を成していることが明らかになる。その結果、更なる高機能素材開発に関する指針が得られ、各種製品でナノ構造制御技術に基づく劇的な物性改良 (硬度、引裂き強度、延伸度の独立制御) に成功した。当社の全医療機器製品に対する高強度グレードのソフトマテリアルを使用した製品の割合は年々増加しており、更なる高強度・高信頼性を有する素材開発の重要性が増してきている。本成果をもって、更にお客様に信頼して頂ける新規医療機器製品群の創成に寄与したい。

### 謝辞

本研究を行うにあたり、以下の皆様にご多大なご協力を賜りました。この場を借りて厚くお礼を申し上げます。兵庫県立大学産学連携・研究推進機構 放射光ナノテクセンター 桑本滋生博士、漆原良昌博士、李雷博士、横山和司博士、竹田晋吾博士、中前勝彦神戸大学名誉教授、松井純爾兵庫県立大学名誉教授、京都大学化学研究所 登阪雅聡准教授、橋本竹治京都大学名誉教授。

広角小角 X 線散乱実験は、主に兵庫県ビームライン BL08B2、フロンティアソフトマター開発産学連合



BL03XU、および産業利用 I ビームライン BL19B2 にて実施しました (課題番号: 2011B3330、2012A3229、2012B3330)。

参考文献

- [ 1 ] R. G. Jones, W. Ando and J. Chojnowski: "Silicon-Containing Polymers" Edited by Springer (2001).
- [ 2 ] C-L. Lee: *US Patent* **4,162,243** (1979.7.24).
- [ 3 ] J. E. Mark, D. R. Paul: *Prog. Poly. Sci.* **35** (2010) 893-901.
- [ 4 ] J. E. Puskas, E. A. Foreman-Orlowski, G. T. Lim, S. E. Porosky, M. M. Evancho-Chapman, S. P. Schmidt, M. E. Fray, M. Piatek, P. Prowans and K. Lovejoy: *Biomaterials* **31** (2010) 2477-2488.
- [ 5 ] D. Yang, W. Zhang, B. Jiang and Y. Guo: *Compos. Part A: Appl. Sci. Manuf.* **44** (2013) 70-77.
- [ 6 ] 磯貝由紀子、森田涼介、上原宏樹、山延健、秋山映一: *高分子論文集* **72** (2015) 110-117.
- [ 7 ] S. Murakami, K. Senoo, S. Toki, S. Kohjiya: *Polymer* **43** (2002) 2117-2120.
- [ 8 ] S. Toki, I. Sics, S. Ran, L. Liu, B. S. Hsiao, S. Murakami, K. Senoo and S. Kohjiya: *Macromolecules* **35** (2002) 6578-6584.
- [ 9 ] M. Tosaka, K. Senoo, K. Sato, M. Noda and N. Ohta: *Polymer* **53** (2012) 864-872.
- [10] G. J. Schneider and D. Göritz: *J. Chem. Phys.* **133** (2010) 024903.
- [11] C. Brick, K. Senoo, M. Mori and K. Ito: *International SAMPE Technical Conference* **44** (2007).
- [12] M. Tosaka, M. Noda, M. Ito, K. Senoo, K. Aoyama and N. Ohta: *Colloid Polym. Sci.* **291** (2013) 2719-2724.

妹尾 政宣 SENOO Kazunobu

住友ベークライト株式会社 研究開発本部  
 コーポレート R&D センター  
 〒651-2241 兵庫県神戸市西区室谷 1-1-5  
 TEL : 078-992-3902  
 e-mail : senoo@sumibe.co.jp

# Long-term Proposal Report 1

## Nuclear Resonant Vibrational Spectroscopy for Observation of Fe-H/D Bending Modes in Hydrogenases and Nitrogenases

Cindy Pham<sup>1</sup>, Hongxin Wang<sup>1</sup>, Nakul Mishra<sup>1</sup>, Leland Gee<sup>1</sup>, Yoshitaka Yoda<sup>2</sup>, Thomas B. Rauchfuss<sup>3</sup>, Vladimir Pelmenschikov<sup>4</sup>, Hideaki Ogata<sup>5</sup>, Edward J. Reijerse<sup>5</sup>, Wolfgang Lubitz<sup>5</sup>, Nimesh Khadka<sup>6</sup>, Lance Seefeldt<sup>6</sup>, Stephen P. Cramer<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, University of California, Davis, CA, USA

<sup>2</sup>Research & Utilization Division, JASRI, SPring-8, Japan

<sup>3</sup>Department of Chemistry, University of Illinois, Urbana, IL, USA

<sup>4</sup>Department of Chemistry, Technische Universität Berlin, Berlin, Germany

<sup>5</sup>Max Plank Institute for Chemical Energy Conversion, Muelheim an der Ruhr, Germany

<sup>6</sup>Department of Chemistry and Biochemistry, Utah State University, Salt Lake City, UT, USA

### Abstract

Using <sup>57</sup>Fe nuclear resonant vibrational spectroscopy (NRVS), we have characterized several important <sup>57</sup>Fe-labeled proteins such as [FeFe] hydrogenase ([FeFe] H<sub>2</sub>ase), [NiFe] hydrogenase ([NiFe] H<sub>2</sub>ase), and nitrogenase (N<sub>2</sub>ase). Following the successful observation of the Ni-H-Fe wag mode in *Desulfovibrio vulgaris* Miyazaki F [NiFe] H<sub>2</sub>ase (*DvMF* for abbreviation), we extended these studies to other enzymes, such as *Chlamydomonas reinhardtii* [FeFe] H<sub>2</sub>ase (*Cr-HydA1*) and *Desulfovibrio desulfuricans* [FeFe] H<sub>2</sub>ase (*Dd-HydAB*). Fe-hydride and Fe-deuteride related bending modes in [FeFe] H<sub>2</sub>ases were observed and interpreted by density functional theory (DFT) calculations. We also observed the interaction between the amine group (NH) in the azadithiolate (ADT) bridge and the Fe-H/D structure by comparing the *wild type Dd-HydAB* result with that from a variant with an oxodithiolate (ODT) bridge. With the advancement we have made for studying H<sub>2</sub>ase, we have also better characterized the catalytic intermediates in N<sub>2</sub>ase, such as the E<sub>4</sub> state.

### Background and Purpose

H<sub>2</sub>ases catalyze the reversible reaction of  $2\text{H}^+ + 2\text{e}^- \rightleftharpoons \text{H}_2$ <sup>[1-3]</sup>, while N<sub>2</sub>ases catalyze the fixation of molecular nitrogen (N<sub>2</sub>) in the atmosphere into bio-available NH<sub>3</sub><sup>[4,5]</sup>. Since today's world faces multiple pressures from the demands for sustainable energy and food resources, H<sub>2</sub>ases and N<sub>2</sub>ases have both attracted a lot of attention and have been intensively studied for decades. Although crystal structures are available for all of these enzymes (Figure 1), many key enzyme intermediates cannot be crystallized. We are therefore using spectroscopy as an alternative probe of these key intermediates, with the overarching goal of understanding the catalytic mechanisms of these systems.

Nuclear resonant vibrational spectroscopy (NRVS)

measures vibrational transitions that occur together with nuclear transitions that are typically associated with the Mossbauer effect<sup>[6,9]</sup>. For the study of Fe in biology, <sup>57</sup>Fe NRVS has key features that complement traditional techniques such as infrared (IR) and Raman spectroscopies. Despite the complexity of these samples, <sup>57</sup>Fe NRVS only sees normal modes that involve motion of the <sup>57</sup>Fe nucleus. Since the NRVS intensity is proportional to this <sup>57</sup>Fe motion, the NRVS spectrum is easy to calculate from a normal mode analysis of a candidate structure. The technique has moderate sensitivity, and at the moment can be used to study frozen protein samples at ~mM concentrations<sup>[9,10]</sup>. Over the past decade, this technique has been used to study the lower frequency modes of a wide variety of Fe complexes and proteins<sup>[11-14]</sup>. More recently, we

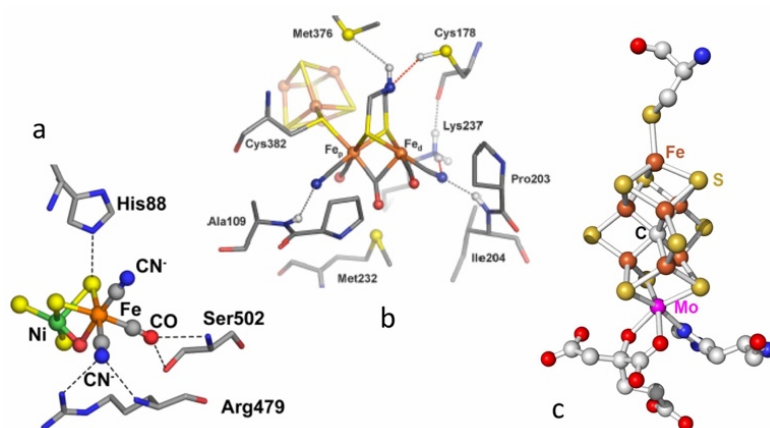


Figure 1 Crystal structures of the catalytic centers: (a) [NiFe] center inside a typical [NiFe]  $H_2$ ase; (b) H cluster inside a typical [FeFe]  $H_2$ ase; (c) FeMo cofactor inside a typical  $N_2$ ase.

have extended NRVS studies to more difficult Fe-H related vibrational features in several  $H_2$ ase enzymes as will be detailed later in this article<sup>[14]</sup>.

Our NRVS measurements were performed at SPring-8 BL09XU<sup>[15]</sup>, which uses a high heat load monochromator to produce 14.4 keV radiation with  $\sim 1.0$  eV resolution, followed by a  $Ge(422) \times 2Si(975)$  high energy resolution monochromator (HRM) to narrow the resolution to  $\sim 0.8$  meV, with a final flux of  $\sim 2.5 \times 10^9$  photons/s. Some NRVS data were also measured at SPring-8 BL19LXU. The NRVS measurements used a  $2 \times 2$  avalanche photodiode (APD) detector array to collect the nuclear fluorescence and the internal conversion Fe  $K\alpha$  fluorescence following  $^{57}Fe$  nuclear excitation. The typical background count rates for this array is  $\sim 0.03$  cts/s<sup>-1</sup>. A closed-cycle liquid helium flow cryostat was used to maintain the samples at cryogenic temperatures ( $\sim 50$  K). During the NRVS measurements, the scans were often divided into segments with different data collection times at a given energy. These acquisition times ranged from 1-3 s in the Fe-S region to as much as 30 s per point for weak Fe-H related modes. The energy scale was always calibrated with respect to a standard sample of  $[^{57}FeCl_4][NEt_4]$ , which has a prominent peak at 380  $cm^{-1}$ . Raw NRVS data were converted to PVDOS using the PHOENIX software package<sup>[7]</sup>.

## Results

### [NiFe] $H_2$ ases

The crystal structure for the [NiFe] center in *Desulfovibrio vulgaris* Miyazaki F [NiFe]- $H_2$ ase ( $DvMF$ ) is shown as in Figure 1a. By a series of careful and strenuous NRVS measurements, we recorded the first direct spectroscopic

evidence for a bridging Ni-H-Fe species in a  $^{57}Fe$ -labeled  $DvMF$  Ni-R sample. The overall NRVS spectra are shown in Figure 2, with Fe-S, Fe-CN/CO and the weak Ni-H-Fe features. Via DFT simulation on the measured PVDOS, the optimized structure with detailed H and S bonding information (Figure 2, insert) was obtained as the possible Ni-R structural candidate. The biochemical science and the DFT simulations were presented and well-discussed in an article in *Nature Communications* in 2015<sup>[14]</sup>, while its technical details leading to the successful observation of the weak Ni-H-Fe wag mode was presented in *J. Synchrotron Rad* in the same year<sup>[16]</sup>.

The existence of Ni-H-Fe in  $DvMF$  Ni-R has provided a critical reference for the DFT simulation to determine the possible Ni-R structure (Figure 2, insert). The successful observation of this extremely weak feature also has: 1) established that a 0.1 cts/s<sup>-1</sup> Fe-H related bending/wagging mode is observable although it has a much weaker NRVS

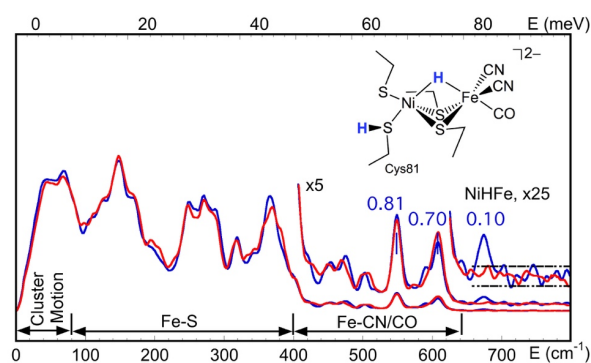


Figure 2 PVDOS of  $DvMF$  Ni-R prepared under  $H_2/H_2O$  (—) and  $D_2/D_2O$  (—) conditions. The blue numbers are the NRVS signal levels for the corresponding Fe-CO and Ni-H-Fe features; (insert) the best Ni-R structural model obtained from DFT simulation of the PVDOS.

signal than the already weak Fe-CO<sup>[14,17,18]</sup>; 2) identified the energy position for the Ni-H-Fe at 675 cm<sup>-1</sup>, which was virtually unknown because this position is much lower than the Fe-H bending positions in model complexes or in previous DFT “predictions”; 3) demonstrated that the comparison of Fe-CO features in H<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O (—) vs. D<sub>2</sub>/D<sub>2</sub>O (—) prepared Ni-R samples can also be used as an indirect evidence for the existence of Ni-H-Fe in addition to the direct observation.

[FeFe] H<sub>2</sub>ases

We then successfully evaluated two H<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O vs. D<sub>2</sub>/D<sub>2</sub>O [FeFe] H<sub>2</sub>ase enzyme pairs from the *Chlamydomonas reinhardtii* [FeFe] H<sub>2</sub>ase (*Cr-HydA1*) and the *Desulfovibrio desulfuricans* [FeFe] H<sub>2</sub>ase (*Dd-HydAB*). *Dd-HydAB* differs

from *Cr-HydA1* by the amount of [4Fe4S] accessory clusters in the enzyme, but their active sites are the same - both consist of a binuclear Fe-S subcluster ([2Fe]<sub>H</sub>) bound to a special [4Fe4S]<sub>H</sub> cluster via a cysteine to form an H-cluster (as illustrated in Figure 1b).

First, a synthetic precursor [57Fe<sub>2</sub>(adt)(CN)<sub>2</sub>(CO)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> (where adt<sup>2-</sup>=[(SCH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>NH]<sup>2-</sup>) was produced and artificially inserted into the Apo-*Cr-HydA1* enzyme (Figure 3a). This approach allows for the specific <sup>57</sup>Fe labeling of the [2<sup>57</sup>Fe]<sub>H</sub> subcluster, while leaving other irons unlabeled. The PVDOS for such labeled *Cr-HydA1* Hox-CO (—) and its precursor (—) were observed as shown in Figure 4a, from which we identified Fe-S modes from 0 to 300 cm<sup>-1</sup>, 2 Fe-CN modes at 400-450 cm<sup>-1</sup>, and 6 Fe-CO modes at 480-700 cm<sup>-1</sup>. This labeling has helped

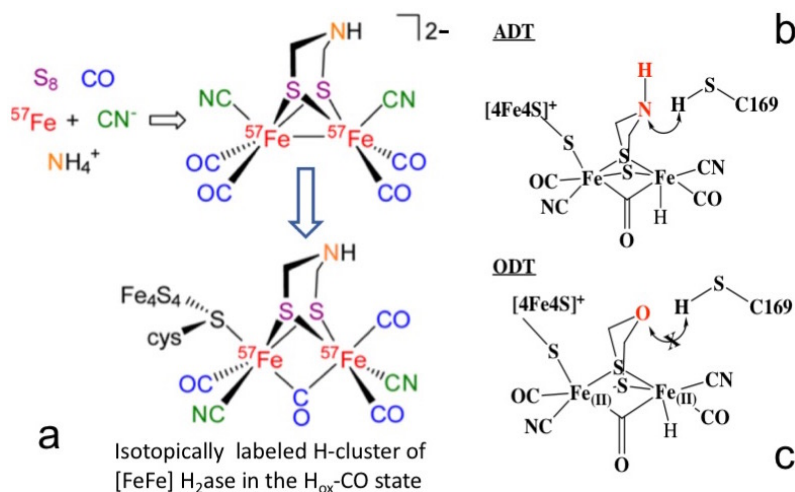


Figure 3 (a) The artificial maturation process of [FeFe] H<sub>2</sub>ase using a [57Fe<sub>2</sub>(adt)(CN)<sub>2</sub>(CO)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> precursor<sup>[19]</sup>; (b, c) manipulation of the active sites from ADT (b, with a NH) to ODT (c, with an O)<sup>[21]</sup>.

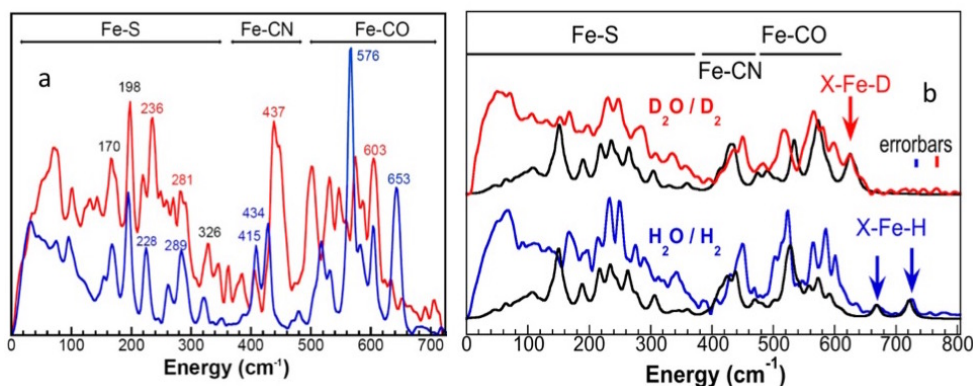


Figure 4 (a) PVDOS of <sup>57</sup>Fe-labeled [2Fe]<sub>H</sub> subcluster in *HydA1* Hox-CO (—) and the precursor [57Fe<sub>2</sub>(adt)(CN)<sub>2</sub>(CO)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> (—). Important peak positions are labeled in the color corresponding to the spectra, or in black while the positions are the same for both spectra<sup>[19]</sup>; (b) the observed PVDOS spectra for *Cr*-ODT prepared under D<sub>2</sub>/D<sub>2</sub>O (—) vs. under H<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O (—) conditions vs. the DFT calculations (—). The arrows indicate the X-Fe-H/D bending features.

characterize key intermediates in the catalytic cycle and advanced our spectroscopic investigation of [FeFe] H<sub>2</sub>ases.

Taking advantage of the same protocol, we successfully replaced the azadithiolate (ADT) bridge of the active site in *Cr-HydA1* (Figure 3b) with an oxodithiolate (ODT) bridge (or NH→O) to form an ODT variant (*Cr*-ODT, Figure 3c)<sup>[19]</sup>. This replacement obstructs the proton transport chain, which allows us to trap a transient intermediate (known as the H<sub>hyd</sub> state)<sup>[20]</sup> with high population.

For *Cr*-ODT (Figure 3c), we have observed clear Fe-H/D bending features (Figure 4b). The H<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O prepared sample leads to a well-resolved band at 727 cm<sup>-1</sup> (in-plane bending mode) and a smaller feature at 670 cm<sup>-1</sup> (out-of-plane wagging mode) (Figure 4b, —). Its X-Fe-H wagging mode has a similar energy position as the Ni-H-Fe wagging mode in *Dv*MF Ni-R (Figure 2, at 675 cm<sup>-1</sup>). The sample prepared under D<sub>2</sub>/D<sub>2</sub>O does not have these features, but instead shows a sharp peak at 625 cm<sup>-1</sup>; the second Fe-D band is presumably highly mixed with Fe-CO features (Figure 4b, —). The observed H/D-dependent spectral changes in the 400-800 cm<sup>-1</sup> region coupled

with the <sup>57</sup>Fe-H/D DFT calculations clearly confirmed our mode assignments. Using observed PVDOS and DFT simulations, we have concluded the strong evidence for the X-Fe-H related modes in transient states of H<sub>hyd</sub> in *Cr*-ODT, which has a similar NRVS signal level with *Dv*MF Ni-R (both at ~0.1 cts/s<sup>-1</sup>).

In addition to observing the transient intermediate in *Cr*-ODT, we were also able to observe a catalytic intermediate in the *wild type Dd-HydAB* (with an ADT bridge, PVDOS not shown). Direct evidence for the terminal Fe-H bending mode has led to the identification of the intermediate H<sub>hyd</sub> and the difference between *Cr*-ODT and *Dd-HydAB* has helped understand of the interaction between the amine group (NH) and the terminal Fe-H structure in the catalytic cycle.

#### N<sub>2</sub>ases

We also evaluated the E<sub>4</sub> state in V70I variant of the N<sub>2</sub>ase. This so-called Janus intermediate is considered to be the turning point in the biological nitrogen fixation mechanism (Figure 5). The intermediate was freeze-trapped with high populations

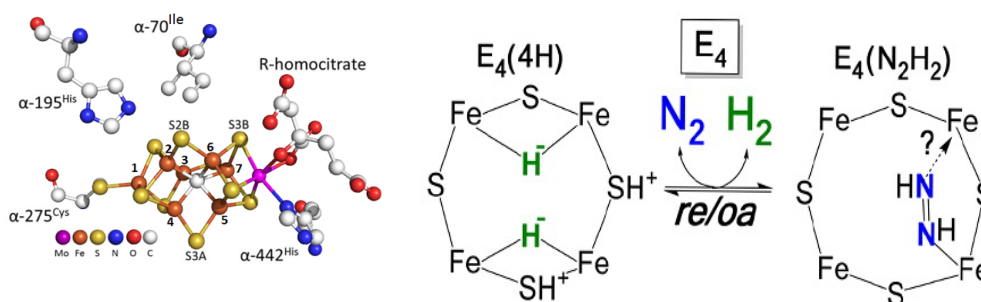


Figure 5 (a) Local structure around the active site (FeMo-cofactor) in V70I mutant Av N<sub>2</sub>ase<sup>[22]</sup>, (b) proposed mechanistic pathway of nitrogen binding at E<sub>4</sub> intermediate step<sup>[23,24]</sup>.

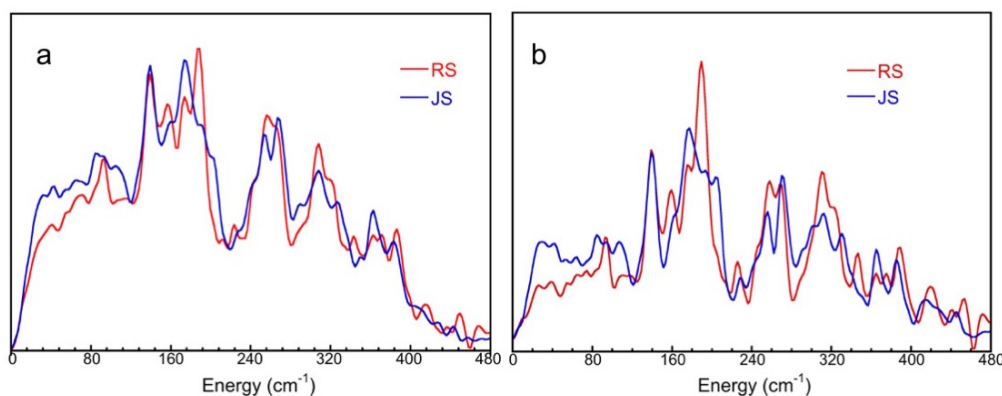


Figure 6 The <sup>57</sup>Fe PVDOS of Av N<sub>2</sub>ase MoFe protein (a) and of FeMo-co inside it (b) for JS (—) vs. RS (—).

from the *Azotobacter vinelandii* (Av) strains. The resting state (RS, E<sub>0</sub>), the Janus intermediate (JS, E<sub>4</sub>) were prepared in H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O buffers, respectively.

Figure 6a compares the <sup>57</sup>Fe PVDOS for the RS and JS V70I variant of N<sub>2</sub>ase in D<sub>2</sub>O. N<sub>2</sub>ase MoFe protein consists FeMo-cofactor (FeMo-co, 7Fe) and P-cluster (8Fe). We are able to obtain the PVDOS for FeMo-co by subtracting the PVDOS for *nifE* (containing only P-cluster) from the PVDOS of the whole MoFe protein. The FeMo-co PVDOS for RS and JS are shown as in Figure 6b. The PVDOS for RS is dominated by a peak near 188 cm<sup>-1</sup> with a resolved shoulder at 172 cm<sup>-1</sup> (Figure 6a, b, —). This mode has been associated with the ‘breathing’ mode of the FeMo cofactor which involves expansion and contraction of the [6Fe–C<sub>i</sub>] core<sup>[13,25]</sup>. The spectrum for JS shows a diminished intensity at this peak (Figure 6a, b, —).

The above illustration (Figure 6) is indirect evidence for the Fe-D bonding, which is consistent with our previous observation on the CO bound Av N<sub>2</sub>ase PVDOS<sup>[13]</sup>. Preliminary direct evidence for Fe-D and Fe-H interactions were also observed and the corresponding DFT simulations are underway.

## Summary

In the last long term proposal (2013B0103-2016A0103) at SPring-8 BL09XU, and in combination with some work from BL19LXU, we have obtained significant NRVS results for many important enzymes. One of the most important results is our observation of Fe-H/D bending modes in NRVS for H<sub>2</sub>ases. Improvements of the SPring-8 synchrotron light source, beamline monochromators, and detectors have allowed us to measure these extremely weak features with NRVS. The results for [FeFe] H<sub>2</sub>ase, [NiFe] H<sub>2</sub>ase, and N<sub>2</sub>ase will allow chemists to better understand H interaction in these important enzymes. Moving forward, we hope to be able to push the NRVS observation to higher energy regions and to resolve the Fe-H/D stretching modes for the appropriate enzymes. In addition, we also hope to combine multiple experimental methods with NRVS, e.g. photolysis NRVS and/or NRVS/IR simultaneous measurements, which will be a great addition to our tool box to analyze critical intermediates in the enzymatic catalysis.

## Acknowledgments

We thank Dr. Kenji Tamasaku very much for his assistance in our beamtime at BL19LXU and other contributions.

This work was supported by NIH grant GM-65440 (to S.P.C.). V.P. was supported by UniCat initiative of DFG.

## References

- [ 1 ] Kim, J. Y. H. and Cha, H. J.: *Korean Journal of Chemical Engineering* **2013**, *30*, 1-10.
- [ 2 ] Jugder, B. E.; Welch, J.; Aguey-Zinsou, K. F. and Marquis, C. P.: *Rsc Advances* **2013**, *3*, 8142-8159.
- [ 3 ] Lubitz, W.; Ogata, H.; Rüdiger, O. and Reijerse, E.: *Chem Rev* **2014**, *114*, 4081-4148.
- [ 4 ] Spatzal, T.; Schlesier, J.; Burger, E.-M.; Sippel, D.; Zhang, L.; Andrade, S. L. A.; Rees, D. C. and Einsle, O.: *Nature Comm.* **2016**, *7*, 10902.
- [ 5 ] Hoffman, B. M.; Lukoyanov, D.; Dean, D. R. and Seefeldt, L. C.: *Acc. Chem. Res.* **2013**, *46*, 587-595.
- [ 6 ] Seto, M.; Yoda, Y.; Kikuta, S.; Zhang, X. W. and Ando, M.: *Phys Rev Lett* **1995**, *74*, 3828.
- [ 7 ] Sturhahn, W.; Toellner, T. S.; Alp, E. E.; Zhang, X.; Ando, M.; Yoda, Y.; Kikuta, S.; Seto, M.; Kimball, C. W. and Dabrowski, B.: *Physical Review Letters* **1995**, *74*, 3832-3835.
- [ 8 ] Yoda, Y.; Okada, K.; Wang, H.; Cramer, S. P. and Seto, M.: *Japanese Journal of Applied Physics* **2016**, *55*, 122401.
- [ 9 ] Wang, H.; Alp, E. E.; Yoda, Y. and Cramer, S. P.: *Methods in Molecular Biology; Metalloproteins: Methods and Protocols* **2014**, *1122*, 125-137.
- [10] Smith, M. C.; Xiao, Y.; Wang, H.; George, S. J.; Coucovanis, D.; Koutmos, M.; Sturhahn, W.; Alp, E. E.; Zhao, J. and Cramer, S. P.: *Inorg. Chem.* **2005**, *44*, 5562-5570.
- [11] Serrano, P. N.; Wang, H.; Crack, J. C.; Prior, C.; Hutchings, M. I.; Thomson, A. J.; Kamali, S.; Yoda, Y.; Zhao, J.; Hu, M. Y.; Alp, E. E.; Oganessian, V. S.; Le Brun, N. E. and Cramer, S. P.: *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, *55*, 14575-14579.
- [12] Cramer, S. P.; Xiao, Y.; Wang, H.; Guo, Y. and Smith, M. C.: *Hyp. Interact.* **2006**, *170*, 47.
- [13] Scott, A.; Pelmenchikov, V.; Guo, Y.; Yan, L.; Wang, H.; George, S. J.; Dapper, C. H.; Newton, W. E.; Yoda, Y.; Tanaka, Y. and Cramer, S. P.: *Journal of the American Chemical Society* **2014**, *136*, 15942-15954.
- [14] Ogata, H.; Krämer, T.; Wang, H.; Schilter, D.; Pelmenchikov, V.; van Gastel, M.; Neese, F.; Rauchfuss, T. B.; Gee, L. B.; Scott, A. D.; Yoda, Y.; Tanaka, Y.; Lubitz, W. and Cramer, S. P.: *Nature Comm.* **2015**, *6*, 7890.
- [15] Yoda, Y.; Yabashi, M.; Izumi, K.; Zhang, X. W.; Kishimoto, S.; Kitao, S.; Seto, M.; Mitsui, T.; Harami, T.; Imai, Y. and Kikuta, S.: *Nuclear Instruments & Methods in*

- Physics Research Section A-Accelerators Spectrometers Detectors & Associated Equipment* **2001**, *467*, 715-718.
- [16] Wang, H.; Yoda, Y.; Ogata, H.; Tanaka, Y. and Lubitz, W.: *Journal of Synchrotron Radiation* **2015**, *22*, 1334-1344.
- [17] Pelmenchikov, V.; Guo, Y.; Wang, H.; Cramer, S. P. and Case, D. A.: *Faraday Discussions* **2011**, *148*, 409-420.
- [18] Kamali, S.; Wang, H.; Mitra, D.; Ogata, H.; Lubitz, W.; Manor, B. C.; Rauchfuss, T. B.; Byrne, D.; Bonnefoy, V.; Jenney Jr., F. E.; Adams, M. W. W.; Yoda, Y.; Alp, E.; Zhao, J. and Cramer, S. P.: *Angewandte Chemie-International Edition* **2013**, *52*, 724-728.
- [19] Gilbert-Wilson, R.; Siebel, J. F.; Adamska-Venkatesh, A.; Pham, C. C.; Reijerse, E.; Wang, H.; Cramer, S. P.; Lubitz, W. and Rauchfuss, T. B.: *Journal of the American Chemical Society* **2015**, *137*, 8998-9005.
- [20] Long, H.; King, P. W. and Chang, C. H.: *J Phys Chem B* **2014**, *118*, 890-900.
- [21] Reijerse, E. J.; Pham, C. C.; Pelmenchikov, V.; Gilbert-Wilson, R.; Adamska-Venkatesh, A.; Siebel, J. F.; Gee, L. B.; Yoda, Y.; Tamasaku, K.; Lubitz, W.; Rauchfuss, T. B. and Cramer, S. P.: *J Amer Chem Society* accepted March 13, **2017**. (doi:10.1021/jacs.7b00686)
- [22] Spatzal, T.; Aksoyoglu, M.; Zhang, L.; Andrade, S. L. A.; Schleicher, E.; Weber, S.; Rees, D. C. and Einsle, O.: *Science* **2011**, *334*, 940.
- [23] Lukoyanov, D.; Yang, Z. Y.; Khadka, N.; Dean, D. R.; Seefeldt, L. C. and Hoffman, B. M.: *Journal of the American Chemical Society* **2015**, *137*, 3610-3615.
- [24] Yang, Z. Y.; Khadka, N.; Lukoyanov, D.; Hoffman, B. M.; Dean, D. R. and Seefeldt, L. C.: *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **2013**, *110*, 16327-16332.
- [25] Xiao, Y.; Fisher, K.; Smith, M. C.; Newton, W. E.; Case, D. A.; George, S. J.; Wang, H.; Sturhahn, W.; Alp, E. E.; Zhao, J.; Yoda, Y. and Cramer, S. P.: *Journal of the American Chemical Society* **2006**, *128*, 7608-7612.

## Long-term Proposal Report 2

# NRVS of Mononuclear and Binuclear Non-heme Iron Enzyme Intermediates and Related Model Complexes

Lars H. Boettger<sup>1</sup>, Kyle D. Sutherlin<sup>1</sup>, Kiyoung Park<sup>2</sup>,  
Ariel B. Jacobs<sup>1</sup>, Jeffrey T. Babicz Jr.<sup>1</sup>, Edward I. Solomon<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Stanford University, Stanford, California 94305, USA

<sup>2</sup>Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST), Daejeon 34141, Korea

<sup>3</sup>SLAC National Accelerator Laboratory, Menlo Park, California 94305, USA

### Abstract

Mononuclear and binuclear non-heme iron enzymes catalyze a broad range of reactions that are relevant in fields from health to bioremediation. In many classes, O<sub>2</sub> intermediates have been trapped, and knowing the structure of these intermediates is essential to understanding reactivity. We have developed a combined NRVS/DFT methodology for structural definition of these important intermediates. We present an overview of our recent work at SPring-8 applying this NRVS/DFT methodology to mononuclear Fe<sup>IV</sup>-oxo and Fe<sup>III</sup>-(hydro)peroxy intermediates, and to a binuclear Fe<sup>III</sup>-peroxy P' intermediate. This has allowed us to define the structures of these intermediates and has given new insight into their reactivities.

### Introduction

Non-heme iron enzymes are a diverse class of biological catalysts that drive reactions with molecular oxygen relevant in bioremediation, hypoxia regulation, DNA repair, anticancer activity, antibiotic and natural product biosynthesis. Broadly, understanding the chemistry of these systems at a fundamental level would provide great inspiration in numerous fields including drug design and bio-inspired industrial catalysts. These enzymes perform an extensive range of molecular transformations including hydrogen atom abstraction (HAA), hydroxylation, mono- and di-oxygenation, electrophilic aromatic substitution (EAS), ring cleavage/closure/expansion and halogenation reactions<sup>[1]</sup>. Mononuclear non-heme enzymes (NHFe) are divided into classes based on the nature of the substrate and whether a cofactor is required (Figure 1, left)<sup>[2]</sup>. This article summarizes studies on enzymes from two of these classes. One, the alpha-ketoglutarate ( $\alpha$ -KG) dependent enzymes, employ an organic cofactor with a ferrous center to activate O<sub>2</sub> by a four-electron reduction, generating an Fe<sup>IV</sup>-oxo intermediate. Another class, the Rieske dioxygenases (RDOs), use a non-heme ferrous center and a reduced 2Fe<sub>2</sub>S Rieske center to reduce O<sub>2</sub> by two electrons, potentially yielding an Fe<sup>III</sup>-(hydro)peroxy intermediate species. Binuclear non-heme

iron enzymes (NH<sub>2</sub>Fe) can be classified based on whether they activate O<sub>2</sub> by two electrons to generate biferric peroxy intermediates, P/P', or four electrons to generate a high-valent species, Q/X (Figure 1, right)<sup>[3]</sup>. In this review, we summarize our very recent study on P vs P' peroxide activity by the NH<sub>2</sub>Fe enzyme p-aminobenzoate N-oxygenase (AurF). Ultimately, to understand the molecular mechanism the geometric and electronic structure of these intermediates must be determined, and nuclear resonance vibrational spectroscopy (NRVS) is an ideal technique to accomplish this. NRVS is a synchrotron technique that looks at vibrational sidebands of the <sup>57</sup>Fe Mössbauer nuclear transition<sup>[4,5]</sup>. All normal modes with Fe displacement appear in the NRVS spectrum, with an intensity proportional to the amount of displacement at the energy of the vibrational mode, giving direct structural information on the iron active site.

### Methodology

#### Experimental details

NRVS data were collected at beamline BL09XU in C-mode. The resulting data files were analyzed with the Phoenix program package from W. Stuhrhahn<sup>[6]</sup>. Density functional theory (DFT) calculations were performed with Gaussian and ORCA software



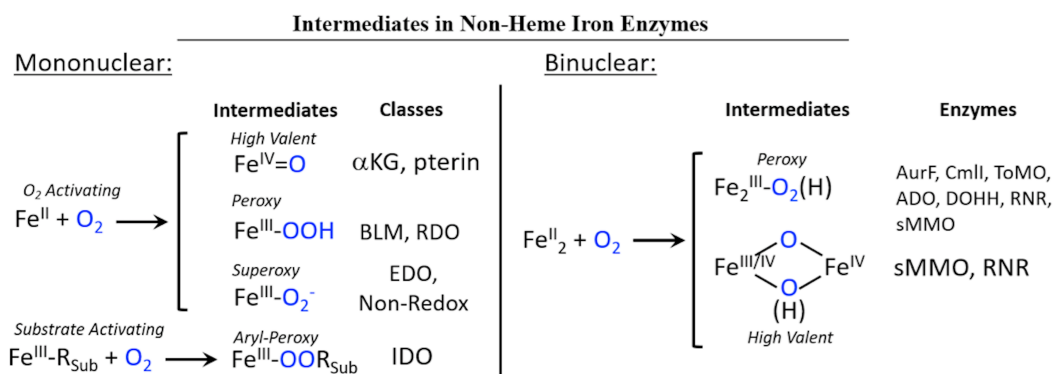


Figure 1 Mononuclear (left) and binuclear (right) non-heme Fe enzymes and their intermediates. Abbreviations:  $\alpha$ KG - alpha-ketoglutarate dependent dioxygenase, pterin - pterin dependent hydroxylase, BLM - bleomycin, RDO - Rieske dioxygenase, EDO - extradiol dioxygenase, Non-Redox - non-redox substrate enzymes, IDO - intradiol dioxygenase, AurF - p-aminobenzoate N-oxygenase, CmlI - arylamine oxygenase of the chloramphenicol pathway, ToMO - toluene/o-xylene monooxygenase, ADO - aldehyde-deformylating oxygenase, DOHH - deoxyhypusine hydrolyase, RNR - ribonucleotide reductase, sMMO - soluble methane monooxygenase.

packages using an in-house 1,000 core cluster, with basis set and functional chosen based on model calibration (*vide infra*). Computational model geometries were generated either from crystal structures or EXAFS data, and modified to evaluate specific structural candidates.

#### DFT model calibration

We have developed a NRVS/DFT approach for defining unknown intermediate structures. This first involves collecting NRVS data on related model complexes with known structural parameters (for example, from a crystal structure or from EXAFS data). DFT calculations with a variety of functionals and basis sets are used to calculate the model complex and simulate the NRVS data, and the functional/basis set combination that best simulates the NRVS data, and any other available data, including resonance Raman and Mössbauer spectra, is then used to simulate the NRVS spectrum of the related enzyme intermediate.

#### Influence of calculated NRVS spectra due to truncation of models

Since quantum chemical calculation of a full enzyme is not feasible and we are interested in building a representation of the metal center that is contributing to the NRVS spectrum that can be used to evaluate reactivity through reaction coordinate calculations, it is also necessary to establish a truncation scheme to model the iron active site, while still taking into consideration the effects of the protein. We investigated a series of calculations on a known model compound and the enzyme

methane monooxygenase (MMO) alongside several DFT calculations of the full and truncated versions of these examples (see Figure 2)<sup>[7]</sup>. Model systems which have been truncated in the 1<sup>st</sup> or 2<sup>nd</sup> ligand sphere show distinctive intensity and frequency changes compared to the experimental spectra. A reasonable agreement was reached for truncation at the C $\alpha$  atoms,

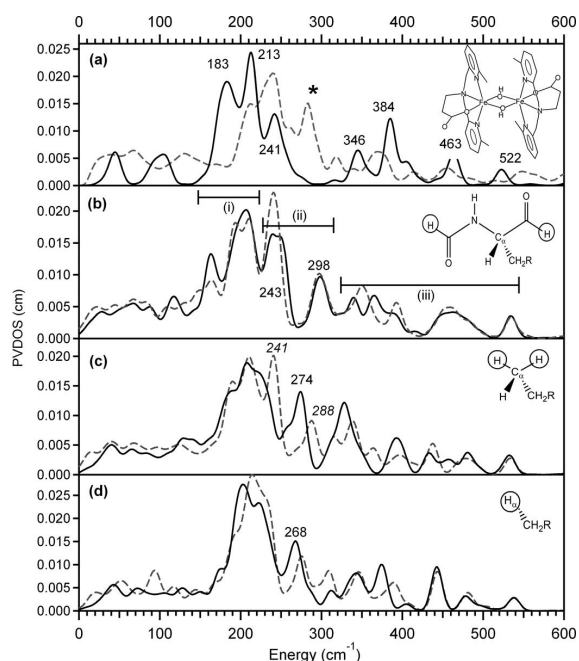


Figure 2 NRVS spectra of (a)  $[\text{Fe}_2(\mu\text{-OH})_2(6\text{Me}_2\text{-BPP})_2]^{2+}$  (structure depicted) obtained from experiment (dashed gray line) and DFT computation (solid black line), and the MMO models (b), (c), and (d). The solid black and dashed gray line spectra in (b)-(d) are simulated using constraints with a mass of 1 and 100, respectively.

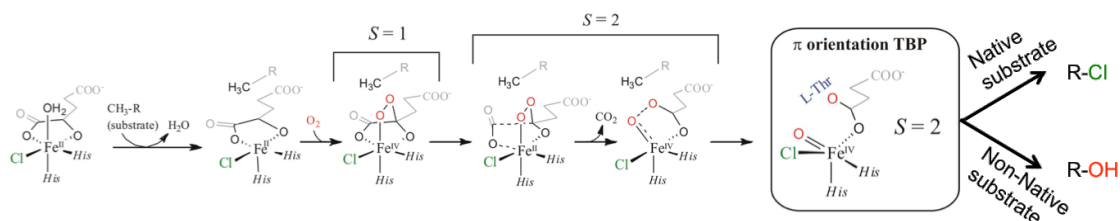


Figure 3 Mechanism of  $O_2$  activation by SyrB2<sup>[8]</sup>.

with replacing the two cut bonds with H atoms and neutralizing the remaining charge by converting the C $\alpha$  into a methyl group. To avoid artifacts from the methyl vibration and mimic the effects of the protein backbone, the mass of the protons is increased by a factor of 100. This procedure ensures reliable DFT calculations of reasonably-sized clusters, which reproduce the experimentally observed NRVS features and enable reaction coordinate evaluation.

## Results

### $Fe^{IV}=O$ intermediate in SyrB2

Syringomycin halogenase (SyrB2) is a mononuclear non-heme iron enzyme which, upon reacting with dioxygen, generates a high spin  $Fe(IV)=O$  intermediate capable of substrate halogenation (Figure 3). This reactivity is interesting considering that hydroxylation is the thermodynamically preferred chemistry. A number of theoretical studies have suggested mechanisms describing the halogenation of SyrB2; however, these studies are not consistent with experimental data and substrate selectivity. To elucidate the factors governing halo- vs. hydroxylation by SyrB2, our lab has utilized NRVS in conjunction with variable temperature magnetic circular dichroism (VT MCD) to develop an experimentally-calibrated DFT study on reactivity of the iron oxo intermediate with substrates. The geometry of the intermediate, defined with NRVS, possesses a five-coordinate (5C) trigonal bipyramidal structure with the  $Fe(IV)=O$  vector axially positioned (Figure 4) and perpendicular to the C-H bond of the substrate<sup>[8]</sup>. The frontier molecular orbitals (FMOs) of this intermediate, which are important for understanding reactivity, have been investigated with VT MCD, revealing a  $\pi$ -FMO that is anisotropic due to the halide equatorially ligated that activates this intermediate perpendicular to the Fe-O bond for H-atom abstraction of the substrate C-H bond<sup>[9]</sup>. This produces an HO- $Fe^{III}$ -Cl species with the hydroxyl oriented away from the C' that is perpendicular to the HO-Fe-Cl plane. Marcus theory analysis of the HO- $Fe(III)$ -Cl/C' complex revealed a  $d\pi^*_{Fe-Cl}$  FMO

intrinsically more reactive compared to the  $d\pi^*_{Fe-O}$  FMO by  $\sim 4$  kcal/mol (Figure 5)<sup>[10]</sup>. This energetically favored  $d\pi^*_{Fe-Cl}$  FMO is responsible for lowering the activation barrier of halogenation to be in competition with the thermodynamically favored hydroxylation, resulting in selective chlorination of the native substrate. Halo- or hydroxylation of other substrates depends on the positioning of the radical above the HO- $Fe^{III}$ -Cl plane as shown in Figure 5.

### $Fe^{III}$ -OOH intermediates

In contrast to the  $Fe^{IV}=O$  intermediates discussed above, some classes of mononuclear N $H$ Fe enzymes utilize  $Fe^{III}$ -OO(H) intermediates in their reactivity. These include the anticancer glycopeptide drug bleomycin, which uses a low-spin  $Fe^{III}$ -OOH intermediate called activated bleomycin (ABLM) to catalyze the double-strand cleavage of DNA. We used NRVS to determine the structure of this intermediate<sup>[11]</sup>. The NRVS spectrum of ABLM (Figure 6A) has a double-peak

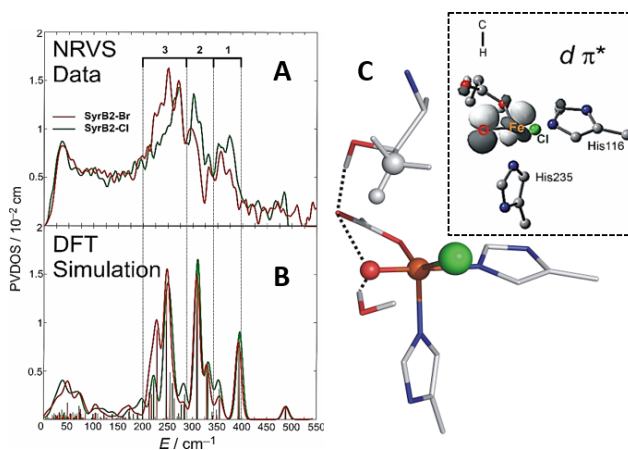


Figure 4 NRVS-derived geometry of the SyrB2  $Fe(IV)=O$  intermediate<sup>[8]</sup>. A: NRVS spectrum of SyrB2 consists of three unique regions of intensity. B: Simulating NRVS data in A with DFT provides. C: The geometry of the  $Fe(IV)=O$  intermediate, which is found to be 5C trigonal bipyramidal. Inset:  $d\pi^*$  FMO of the intermediate.

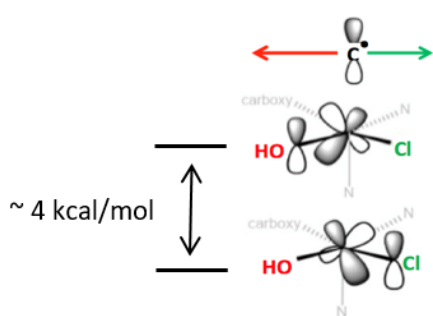


Figure 5 Depiction of  $d\pi^*_{\text{Fe-O}}$  and  $d\pi^*_{\text{Fe-Cl}}$  FMOs of the SyrB2 HO-Fe(III)-Cl intermediate post H-atom abstraction of the substrate. The  $\sim 4$  kcal/mol stabilization of the  $d\pi^*_{\text{Fe-Cl}}$  FMO permits halogenation of the substrate over the thermodynamically preferred hydroxylation.

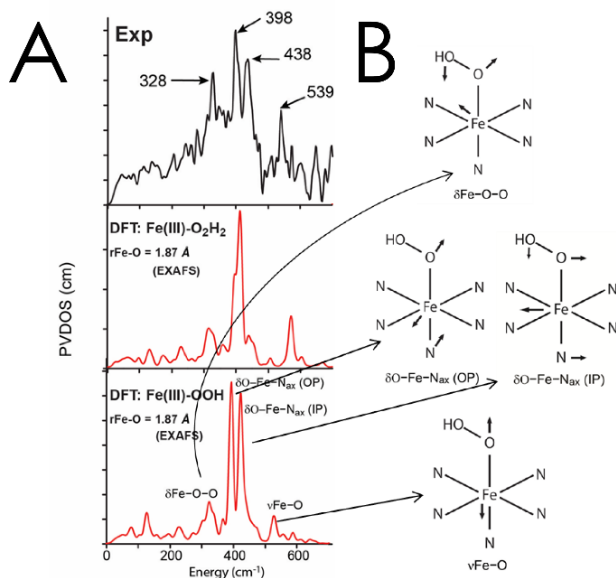


Figure 6 A: NRVS spectrum of ABLM (top) with DFT simulations corresponding to Fe(III)-O<sub>2</sub>H<sub>2</sub> (middle) and Fe(III)-O<sub>2</sub>H (bottom) structures. B: Schematic depictions of the vibrations assigned to ABLM.

feature at 398 and 438 cm<sup>-1</sup>. DFT simulations allowed us to assign this as the pair of degenerate transaxial bends (Figure 6B), split by interaction of the in-plane component with the Fe-OO bend. This splitting was only reproduced computationally for a Fe<sup>III</sup>-OOH structure and not for the Fe<sup>III</sup>-O<sub>2</sub>H<sub>2</sub> structure that had been proposed based on calculations, allowing us to experimentally define the geometric structure of this intermediate. From this structure, we calculated the H-atom abstraction reactivity of ABLM, finding that the mechanism proceeded through direct H-atom abstraction by the hydroperoxy rather than through an initial heterolytic cleavage of the O-O bond to form an Fe<sup>IV</sup>=O and ligand radical as in

heme chemistry. Our NRVS study thus demonstrated that non-heme Fe<sup>III</sup>-OOH chemistry is fundamentally different from heme chemistry.

Another class of NHFe enzymes that are proposed to use a Fe<sup>III</sup>-OOH intermediate in their reactivity are the Rieske dioxygenases (RDOs), which are important in bioremediation. In the RDO benzoate 1,2-dioxygenase (BZDO), an Fe<sup>III</sup>-OO(H) intermediate (BZDOp) has been trapped, but in contrast to ABLM this is a high-spin ferric-peroxy species. The binding mode and protonation state of this intermediate are unknown, and defining its structure is essential to understanding the *cis*-dihydroxylation reactivity of these enzymes. We thus expanded our NRVS study of the low-spin Fe<sup>III</sup>-OOH ABLM to two structurally well-characterized high-spin Fe<sup>III</sup>-(hydro)peroxy model complexes to obtain NRVS spectroscopic handles for distinguishing between different high-spin Fe<sup>III</sup>-OO(H) structures: a side-on Fe<sup>III</sup>-O<sub>2</sub><sup>2-</sup> and an end-on Fe<sup>III</sup>-OOH complex<sup>[12]</sup>. These data are shown in the top half of Figure 7. The NRVS spectra were assigned using DFT simulations that are consistent with the known structural parameters of these complexes. Using DFT, we systematically correlated between these structures, which defined four spectral handles, shown at the bottom of Figure 7, to differentiate between side-on Fe<sup>III</sup>-O<sub>2</sub><sup>2-</sup>, side-on Fe<sup>III</sup>-OOH, and end-on Fe<sup>III</sup>-OOH structures. We

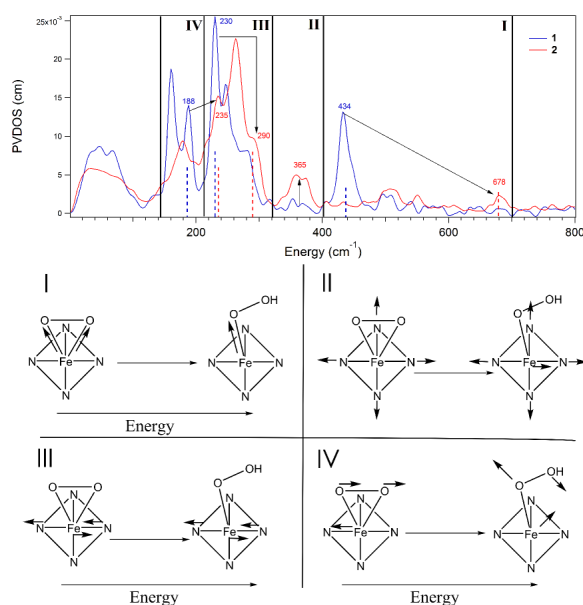


Figure 7 Top: NRVS data for the side-on Fe<sup>III</sup>-O<sub>2</sub><sup>2-</sup> (blue) and end-on Fe<sup>III</sup>-OOH (red). The four regions correspond to the four types of vibrations at bottom. Bottom: schematic depiction of the four spectral handles distinguishing between a side-on peroxo and end-on hydroperoxy.

are now in the process of applying this methodology to analyze NRVS data on BZDOp and to use the geometric and electronic structure determined to evaluate the reaction coordinate of this class of enzymes.

#### Intermediate P' in AurF

The P' intermediate of 4-aminobenzoate N-oxygenase (AurF) is relatively stable, but directly reacts with 4-aminobenzoic acid to produce 4-nitrobenzoic acid. Thus P' in AurF is a suitable target for defining the nature of a reactive binuclear ferric peroxo intermediate by NRVS.

To determine the structure of P' in AurF, NRVS spectra (Figure 8A) were obtained from samples prepared with  $^{16}\text{O}_2$  and  $^{18}\text{O}_2$ <sup>[13]</sup>. Spectra of these species are divided into three distinct regions: region (1) at energies below 180  $\text{cm}^{-1}$ , which is almost featureless, region (2) between 180  $\text{cm}^{-1}$  and 375  $\text{cm}^{-1}$ , which displays a series of four peaks with decreasing intensity toward higher energies and region (3) showing two oxygen-isotope-sensitive peaks above 375  $\text{cm}^{-1}$ .

In our previous study on  $\mu$ -1,2-peroxo-bridged Fe(III)<sub>2</sub> models, we identified several vibrations associated with the Fe<sub>2</sub> core in these regions<sup>[14]</sup>. To evaluate the NRVS spectrum of P'

based on that study, 28 peroxo-bridged structures in different binding modes and with an additional H<sup>+</sup> or H<sub>2</sub>O were calculated. A more detailed assignment of the NRVS spectrum will be presented elsewhere<sup>[13]</sup>; here, we note that only one model, with a  $\mu$ -1,2-hydroperoxyl bridge, reproduced the experimental spectrum (see Figure 8B).

To examine the viability of this model, the potential energy surface (PES) for the reaction was constructed; the reaction initiates as the O-O bond cleaves and this step triggers oxidation of substrate (Figure 9). This results in a transition state barrier consistent with the reaction rate and a barrier that is  $\sim 8$  kcal/mol lower in energy than that for the non-protonated peroxo P.

Protonation increases the electron affinity and stabilizes the high-valent product of O-O bond cleavage. This protonation-enhanced electrophilicity of P' and its conversion to an Fe(IV)Fe(III) intermediate in AurF may be relevant to the activation of P to form P' for the conversion to intermediate X in RNR, and the protonation activation of a peroxo bridged intermediate may also be relevant to the electrophilic chemistry of ToMO. These studies are underway.

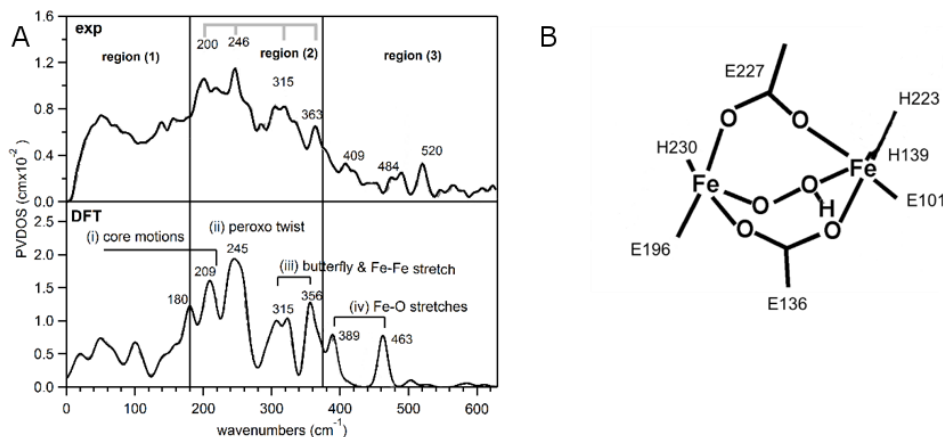


Figure 8 NRVS data and DFT-assisted assignment of P' in AurF. A: (Top) The NRVS spectra of P' obtained with  $^{16}\text{O}_2$ . (Bottom) The DFT-predicted NRVS spectrum of  $\mu$ -1,2-hydroperoxo-bridged h3, which is the only structure that reproduces the NRVS data. B: The structure of h3 used to simulate the NRVS data.

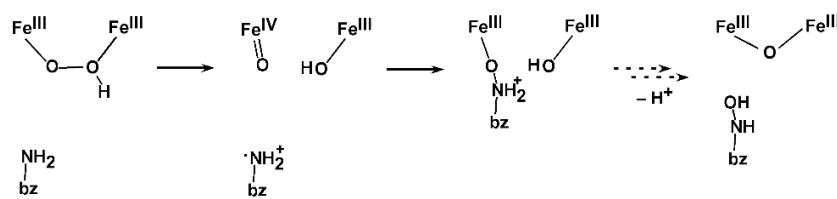


Figure 9 DFT calculations of reaction coordinate for N-oxygenation in AurF.

## Outlook

NRVS has proven to be an invaluable tool for defining the structures of intermediates in non-heme Fe enzymes to elucidate their reactivity. We are now well situated to expand our NRVS studies to other intermediates, including but not limited to BZDOP and Fe<sup>IV</sup>=O heme Compound I and II for mononuclear Fe enzymes and high-valent Q and X intermediates in the NH<sub>2</sub>Fe enzymes. This will both provide insight into the specific reactivities of these important enzymes, and also into the broader questions regarding the factors governing NHFe versus NH<sub>2</sub>Fe chemistry, and how heme and non-heme reactivity differ.

## Acknowledgments

Beam time at SPring-8 was provided by JASRI under Long Term Proposal 2013B0105-2016A0105. We thank Y. Yoda and M. Seto and his group for their support and assistance in data collection. Financial support for this research was provided to EIS by the National Institutes of Health (GM040392).

## References

- [1] Solomon, E. I.; Brunold, T. C.; Davis, M. I.; Kemsley, J. N.; Lee, S. K.; Lehnert, N.; Neese, F.; Skulan, A. J.; Yang, Y. S. and Zhou, J.: *Chem. Rev.* **2000**, *100*, 235-350.
- [2] Solomon, E. I.; Goudarzi, S. and Sutherlin, K. D.: *Biochem.* **2016**, *55*, 6363-6374.
- [3] Solomon, E. I. and Park, K.: *JBIC* **2016**, *21*, 575-588.
- [4] Seto, M.; Yoda, Y.; Kikuta, S.; Zhang, X. W. and Ando, M.: *Phys. Rev. Lett.* **1995**, *74*, 3828-3831.
- [5] Sturhahn, W.; Toellner, T. S.; Alp, E. E.; Zhang, X.; Ando, M.; Yoda, Y.; Kikuta, S.; Seto, M.; Kimball, C. W. and Dabrowski, B.: *Phys. Rev. Lett.* **1995**, *74*, 3832-3835.
- [6] Sturhahn, W.: *Hyperfine Interactions* **2000**, *125*, 149-172.
- [7] Park, K. and Solomon, E. I.: *Can. J. Chem.* **2014**, *92*, 975-978.
- [8] Wong, S. D.; Srnec, M.; Matthews, M. L.; Liu, L. V.; Kwak, Y.; Park, K.; Bell, C. B., III; Alp, E. E.; Zhao, J.; Yoda, Y.; Kitao, S.; Seto, M.; Krebs, C.; Bollinger, J. M., Jr. and Solomon, E. I.: *Nature* **2013**, *499*, 320-323.
- [9] Srnec, M.; Wong, S. D.; Matthews, M. L.; Krebs, C.; Bollinger, J. M., Jr. and Solomon, E. I.: *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 5110-5122.
- [10] Srnec, M. and Solomon, E. I.: *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 2396-2407.
- [11] Liu, L. V.; Bell, C. B., III; Wong, S. D.; Wilson, S. A.; Kwak, Y.; Chow, M. S.; Zhao, J.; Hodgson, K. O.; Hedman, B. and Solomon, E. I.: *Proc. Natl. Acad. Sci. United States Am.* **2010**, *107*, 22419-22424.
- [12] Sutherlin, K. D.; Liu, L. V.; Lee, Y.; Kwak, Y.; Yoda, Y.; Saito, M.; Kurokuzu, M.; Kobayashi, Y.; Seto, M.; Que, L., Jr.; Nam, W. and Solomon, E. I.: *JACS* **2016**, *138*, 14294-14302.
- [13] Park, K.; Li, N.; Kwak, Y.; Srnec, M.; Bell, C. B.; Liu, L. V.; Wong, S. D.; Yoda, Y.; Kitao, S.; Seto, M.; Hu, M.; Zhao, J.; Krebs, C.; Bollinger, J. M., Jr. and Solomon, E. I.: "Peroxide activation for electrophilic reactivity by the binuclear non-heme iron enzyme AurF" *J. Am. Chem. Soc.* **2017** doi: 10.1021/jacs.7b02997.
- [14] Park, K.; Tsugawa, T.; Furutachi, H.; Kwak, Y.; Liu, L. V.; Wong, S. D.; Yoda, Y.; Kobayashi, Y.; Saito, M.; Kurokuzu, M.; Seto, M.; Suzuki, M. and Solomon, E. I.: *Angewandte Chemie Int-Ed* **2013**, *52*, 1294-1298.

## 第5回JASRIワークショップ

「地球惑星科学検討ワークショップ：  
大容量高圧プレス・ビームラインの将来」報告

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用研究促進部門 肥後 祐司

## 1. はじめに

第5回JASRIワークショップとして、地球惑星科学検討ワークショップが2017年2月10日に、SPring-8の上坪講堂で開催された。本ワークショップはSPRUCの「地球惑星科学研究会」、「高圧物質科学研究会」との共催で行われ、大容量高圧プレスを使用した高圧科学研究の将来について、10件の口頭発表と総合討論が行われた。参加者は合計31名で人数は少ないものの、JASRIや国内の主要大学のほか、KEK(高エネルギー加速器研究機構)物質構造科学研究所、CROSS 東海(総合科学研究機構 中性子科学センター)、QST(量子科学技術研究開発機構)など、放射光・中性子利用研究に携わる国内の高圧科学研究者が一堂に会した。本ワークショップでは、SPring-8における大容量高圧プレスを利用した放射光X線利用高圧科学研究にテーマを絞り、最先端の研究テーマや実験技術について深い議論が行われた。

SPring-8において、最大荷重1,000トンを超える大容量プレスを備える唯一の共用ビームラインであるBL04B1は、SPring-8共用開始の最初期から稼働しているビームラインのうちの一つであり、先端的な高圧科学研究を約20年にわたり担ってきた。この間、大容量プレスによる準静水圧・高温環境と高輝度放射光の併用により多くの研究成果を生み出してきたが、近年大容量高圧プレスを利用した高圧科学研究は、従来の静的高圧環境下における結晶構造解析や物性測定から、より複雑な動的な高圧環境下における高空間分解能・高速時分割測定にシフトしつつある。

動的な高圧環境を利用した研究として、地球惑星分野では、地震や核・マントルダイナミクス解明のためのマントル鉱物の変形や粘弾性定数測定、熔融鉄の粘性測定が試みられつつある。一方、材料科学分野におけ

る利用研究はまだ進んでいないものの、高圧ニューセラミックスの高速組織制御技術の開発、巨大ひずみ付加による新規機能性材料の合成など、今後多岐にわたる分野拡大が見込まれる。しかしながら現在、SPring-8において大容量高圧プレスに使用しているX線光源は、偏向電磁石による白色X線およびその白色光をSi<sub>2</sub>結晶分光装置(無集光)により単色化した光源のみであり、上記の時分割測定や高分解能光学系形成のためにはフラックスを含めた光源特性が絶対的に不足していることが否めない。一方、競合する諸外国の情勢においては、DESYで新しい挿入光源、大容量プレスビームラインが完成間近であるなど、BL04B1の有してきた先端性は主に光源性能の限界から徐々に失われつつある。

そこでSPring-8でも、高圧科学研究分野で新たなサイエンスを引き続き展開していくために、挿入光源の利用が可能な大容量高圧実験用ビームラインの建設が切望されている。以上のような背景のもと本ワークショップでは、地球惑星科学分野を中心として、今後解決すべきサイエンスの展望と大容量プレスを利用した動的な高圧環境下におけるその場測定の役割、さらに必要とされる新ビームラインの具体的なデザインなどについて検討を行った。

## 2. 各講演のトピックス

今回、大容量高圧プレスを利用し、世界的にも最先端の研究を行っている研究者9名の方に、外部講演を依頼した。講演は地球惑星科学分野に限定したものの、研究対象や手法は様々であり、大容量高圧プレス技術の応用範囲の広さを物語っていた。以下講演の概要について順に紹介する。

1 件目の講演、「次世代光源と期待されるサイエン

ス」(大石泰生、JASRI)では、SPring-8-II計画の概要を中心に新しい短周期のアンジュレータ光源の光源特性の紹介と、分光結晶を使用しない高フラックス・ピンクビームの分光技術や利用法が紹介された。大容量高圧プレスでは圧力封止用のガスケット材と圧力媒体により、大きなX線吸収を受ける。新たな短周期アンジュレータによる高エネルギー・高フラックスX線の利用が可能になれば、大容量高圧プレスを利用した時分割実験に大きなブレークスルーをもたらすことが見込まれる。講演後の質問や総合討論でも、本講演で紹介された光源特性に関して特に多くの質問が寄せられ、新アンジュレータへの高い関心が示された。

2件目の講演は、「DESY・P61.2ビームラインの紹介、そしてSPring-8におけるサイエンス戦略」(西山宣正、東京工業大学)で、昨年の12月までDESYの大容量プレスビームライン(P61.2)のビームライン担当者を務めていた西山氏からDESYの最新情報について紹介があった。講演ではP61.2ビームラインに導入した大型の6軸加圧大型プレスの性能の詳細や、ダンピングウィグラー光源のスペクトルなどが紹介された。DESY・P61.2ビームラインは2017年から共用を開始することが予定されており、今後SPring-8の大容量プレスビームラインの最も強力なライバルになると考えられている。P61.2ビームラインでは高エネルギー・高フラックス光源の特性を生かして、大型の構造材料の非破壊測定も予定されており、SPring-8-IIにおける高エネルギーX線源の活用法について大変参考となった(写真1)。



写真1 西山氏によるDESY P61.2ビームラインの紹介の様子

3件目は、「相転移カイネティクスの高速時分割測定による惑星内部の動的現象の解明」(久保友明、九州大学)で、地球惑星科学の重要なテーマの一つである、地球深部地震に関する実験的研究について紹介された。深発地震の主因と考えられる脱水分解反応や非平衡状態での高圧相転移では、相転移に伴う動的再結晶や固体流動が重要な要素であるが、時分割2次元X線回折測定がこれらの測定に非常に有効であることが示された。現状のBL04B1では分オーダーの時分割測定しか行えていないが、将来サブミリ秒のX線回折測定が実現すれば、深発地震の発震機構について重要な知見を得ることが紹介された。

4件目の講演は、「ポストペロブスカイト相転移におけるトポキシャル関係のその場観察」(山崎大輔、岡山大学)で、下部マントル最下部に存在すると考えられ、マントル対流の理解に非常に重要な高圧鉱物であるポストペロブスカイト相について研究紹介があった。本研究ではペロブスカイト(鉱物名:ブリッジマナイト)からポストペロブスカイトへの相転移における結晶方位関係についてダイヤモンドアンビルセル型高圧装置を使用した予察的な研究結果が紹介された。ポストペロブスカイト相の結晶選択配向や相転移カイネティクスを高圧プレスを使用して精度良く研究するためには、80 keV程度の高エネルギーX線によるX線回折実験が必要であると示された。

5件目は、「高温高圧変形実験における格子選択配向のその場観察」(西原遊、愛媛大学)について、特に高圧鉱物の変形メカニズムについてこれまでの研究と今後の課題について紹介があった。多結晶試料の個々の粒子について結晶方位と応力を測定することが今後の重要課題であり、高温高圧下での3次元結晶方位マッピング技術の開発が急務であると結論された。

6件目の「下部マントル鉱物の粘性率測定」(辻野典秀、岡山大学)では、下部マントルを構成する高圧相の2相混合状態での粘性率測定について、高圧実験セルに関する先端的技術開発の紹介があった。また、新光源ビームラインについて具体的な提言もなされ、多結晶試料の粒径や粒子数のその場測定には、高エネルギー(~120 keV)の単色X線の利用や、フラックスを一定に保ったままビームサイズを変更する技術を希望することなどが紹介された。

7 件目の「周期振動におけるその場応力・歪観察による非弾性測定」(芳野極、岡山大学)では、短周期変形実験による地震波の減衰を実験的に再現する、先進的な実験技術について紹介があった。この実験は数 Hz の周期的な差応力を高圧プレスに印加するもので、周期加圧装置はすでに BL04B1 に導入済みである。これまでの研究で、試料歪を高速で測定する実験には成功しているものの、試料応力の周期変動の高速測定には至っていない。これを実現するためには、ミリ秒オーダーでの X 線回折測定が必要であり、高フラックスの X 線光源と高速 2 次元検出器が必須となる。新光源のビームラインにはこれらの機器の整備が必須であると述べられた(写真 2)。



写真 2 芳野氏による周期振動実験の紹介の様子

8 件目の講演は、「高速 2 次元 X 線回折パターン測定による高圧下での岩石破壊の前兆現象の解明」(大内智博、愛媛大学)で、マントル内部で発生する『やや深発地震』の発生原因や震震過程解明のために、岩石試料の破壊に伴う相転移や応力変化を、高温高圧下で測定した研究が紹介された。これまでの研究で、X 線ラジオグラフィにより試料の断層形成のその場観察が可能となったほか、アコースティック・エミッション測定との併用により、断層形成の前兆現象について多くの情報を得ることに成功した。今後、応力(圧力)・ひずみの更なる高速測定(ミリ秒オーダー)が実現できれば、地震現象の理解に重要な情報が得られるという展望が示された。

9 件目は、「X 線イメージングを用いた液体金属の弾性および界面特性測定」(寺崎英紀、大阪大学)について紹介があった。液体は地球内部にマグマとして存

在するだけでなく、地球深部の外核に熔融鉄として大量に存在すると考えられている。融体の密度や流動性を測定するために X 線ラジオグラフィ技術を利用した、高温高圧下での融体の 3 次元密度トモグラフィの最新成果が報告された。新光源を利用した研究として、金属-ケイ酸塩の分離過程のその場観察のための、高速 CT 撮影や元素拡散速度を測定するために X 線吸収端を利用した元素マッピング技術の開発が必要であると提案された。

10 件目の「低粘性流体の落球法による粘性測定」(鈴木昭夫、東北大学)では、融体の粘性率を測定するための落球法による粘性率測定技術について紹介があった。特に粘性率の低い流体の粘性率測定には、高速 X 線ラジオグラフィ測定技術が必須であり、新光源では高フラックス X 線を利用した高速 X 線ラジオグラフィ撮影技術が必要であると提案された。

### 3. 総合討論

講演後は約 1 時間、総合討論の時間が設けられており、今後の大型プレス用ビームラインに必要な条件について、様々な議論が活発に行われた(写真 3)。要点を列挙する。

- ・利用する X 線のエネルギー範囲は?
  - 大容量プレスを使用した高圧実験では 30 keV 以下の X 線は吸収により利用できないため、高エネルギー X 線の利用に特化すべきである。
- ・従来の白色 X 線を利用したエネルギー分散型 X 線回折測定(EDXRD)の利点はどうするか?
  - 80 keV 以上の高エネルギー X 線による、角度分散型 X 線回折測定とコリメータの高速スキャン、もしくはラジアルコリメータの利用で同等の測定が可能。
  - 白色 X 線+Ge-SSD 検出器では極端に高フラックスな X 線は扱えないのでは?
- ・測定機器はどうするか?
  - CdTe のピクセル型検出器をテスト済み。エネルギー分解能を持つものもあり、アンジュレータ光源の高次光の同時利用も可能では?
- ・材料科学分野の高圧研究者の意見も集約すべき。
- ・SPring-8-II で利用可能な新光源のスペックは?



(以下、今後必要な情報)

- ・利用したいエネルギー範囲 (30-120 keV) が発生可能か?
- ・イメージング実験で最適なエネルギー範囲。



写真3 ワークショップ会場の様子

肥後 祐司 HIGO Yuji

(公財) 高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0802 ext 3721  
e-mail : higo@spring8.or.jp

#### 4. おわりに

本ワークショップを通じて、大容量高圧プレスを利用した高圧科学研究の方向性について、多くの研究者の意見を聞くことができた。また総合討論では、高エネルギー・高フラックス光源を使用した空間・時間分解 X 線回折 (イメージ) 測定が重要であるという共通認識を持つことができた。本シンポジウムを契機として、放射光利用高圧科学研究の更なる発展と、SPring-8-II を見据えた高エネルギー・高フラックス光の利用実験へ、具体的な議論がより一層活発になると期待される。

なお、昨年 3 月には SPring-8 において、高圧力学会主催、SPRUC 地球惑星科学研究会と高圧物質科学研究会の協賛で「コヒーレント放射光を利用した新しい高圧力科学」研究集会も開催している。本ワークショップの議題と最も関連の深い学会である日本高圧力学会では、「コヒーレント放射光を利用した新しい高圧力科学」研究・作業グループを立ち上げ、次期光源の利用が検討されている。今回、上記作業グループの代表である鈴木氏も本ワークショップに参加している。これまで本コミュニティではユーザー・SPRUC 研究会・関連学会と施設側関係者が連携して、新光源を利用した研究・技術開発について検討を続けてきた。今後も引き続き活動を継続、活性化し、将来展望の実現を目指したい。

## 第8回 SPring-8 先端利用技術ワークショップ

「オープンサイエンスに向けたオープン解析プラットフォーム」  
参加報告国立研究開発法人理化学研究所 放射光科学総合研究センター  
杉本 宏

## 1. はじめに

2017年1月7日に神戸芸術センターにおいて「オープンサイエンスに向けたオープン解析プラットフォーム」と題するワークショップが(公財)高輝度光科学研究センター(JASRI)主催で開催された。本ワークショップは、同会場で日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウムが開催される直前ということもあり、多数のSPring-8ユーザーおよび放射光施設関係者の参加があった。オープンサイエンス(インターネットを活用して科学研究の成果を社会に対してオープンに共有することで、より効果的に発展させようという試み)は、世界的に大きな流れとなっている。公的資金によって大量の実験データを生み出しているSPring-8でも、オープンデータの考え方を取り入れる必要があるのではないかという論理は多くの人が理解できるだろう。その一方で、オープンにするデータの切り分け方や、膨大な量の生のデータに対応するための技術的な課題も多いはずである。今後、新しく開発される測定方法やデータ解析技術の進展も見据えて考えていかなければならない。本ワークショップでは、データの公開を念頭にしつつ、まずはSPring-8でのオンラインデータ解析の基盤を今後どのように整備していくか、そしてユーザーの利便性を向上させるにはどのような観点が必要かを議論することを目的として、各分野から実際の利用研究におけるデータ処理の事例が紹介された。本稿では、各講演の概要を紹介した上で筆者の感想を述べたい。

## 2. 講演

冒頭にオーガナイザーのJASRIの八木直人氏からの趣旨説明として、オープンサイエンスの推進についての内閣府や日本学術会議による検討状況が紹介さ

れた。具体的な推進策がまだ明確ではなく、各コミュニティでの議論を進める必要性が挙げられている。また、SPring-8の施設としては、単なる実験データの公開だけではなく、それを解析するための大容量データサーバと、オンラインソフトウェアの提供が一体となったデータ解析プラットフォームの整備が、利用者にもメリットが大きいという提案が行われた。

最初の講演者として、理研の横田秀夫氏から画像処理手法の開発者としての観点に加え、科学分野における大量のデータの一元管理の方法やオンライン解析の経験に基づいたシステム構築の方法、そしてオープンサイエンスの展望について講演があった。画像処理の技術の応用として、親子判別、交通の監視、戦車の追跡、車両の自動運転など様々なアルゴリズムがあるが、学術研究への応用については、処理の前提となる条件が未定である場合や、細胞のようにダイナミックに変化する難しい観察対象というのが特徴的のことだった。また商用クラウドの利用のメリットについて力説し、横田氏らが構築した画像処理プラットフォームでは、計算機リソースの整備や大量のデータを維持管理するためのコストの問題を解決するために、Amazon Web Serviceを利用している例が挙げられた。

JASRIの松下智裕氏の講演では、原子分解能ホログラフィーの測定制御と解析ソフトウェアの開発経緯が説明された。本手法は、結晶中のドーパントなどの原子構造や、触媒の反応中心での機能発現機構の解明を行うために用いられる。1998年頃から開発をスタートし、測定画像のデータフォーマットの汎用化、そして応用対象の模索から始まった。現状は、松下氏が現在参画している新学術領域研究グループの強力な推進力によって、幅広い分野の研究者がこのソフトを利用する機会を得ている。現在、研究分野の発展によ

りユーザーが拡大しており、成長期の入り口にさしかかったという位置づけでとらえている。これまでのフリーウェアという配布形態からクラウド上での利用に切り替える展望が述べられた。また、ソフトウェア開発には、戦略と組織化が最も重要であると結論した。

JASRI の伊藤真義氏の講演では、コンプトン散乱実験のデータ解析の手順を解説し、画像データを逐次処理していく際に必要な解析サーバの性能と大容量ストレージの必要性を強調した。世界的にみても、実働しているコンプトン実験ステーションは SPring-8 BL08W 高エネルギー非弾性散乱ビームラインのみであり、解析ソフトウェアの開発・保守は、現在、BL 担当者が一人で行っている。SPring-8 に施設で整備された共用データサーバがあれば、少なくともサーバ管理は BL 担当者の手から離れるメリットがある。さらに、検出器からの生データは大容量 (884 GB/day) であるため、オープンデータに際してはそれなりのデータストレージが必要だと述べられた。生データの保存が可能であれば、測定後の再解析も容易になり、条件によってバックグラウンドの低減、分解能の向上が見込まれる。

(株) 豊田中央研究所の林雄二郎氏の講演では、SPring-8 BL33XU 豊田ビームラインにおいて構築した X 線マイクロビームを用いた走査型の 3D X-ray diffraction microscopy (3DXRD) 顕微鏡装置によるデータ記憶や解析方法についての解説が行われた。鉄鋼材料の内部の不均一性を定量的に解析する為に、結晶粒のスケールでの実験と理論計算に基づいたデータ処理が行われる。解析作業は SPring-8 内のサーバに研究所からリモート接続を介して行っており、約 12 時間かけて測定した 1.6 TB 程度の回折斑点の情報から構造の再構成に要する計算時間は、小規模クラスタ計算機で 1 週間ほど要する。解析には無償公開されているソフトウェアを利用していた。

東京大学の篠原佑也教授からは、X 線光子相関分光実験 (XPCS) とデータ解析について講演が行われた。コヒーレント X 線によるスペックルを時間分解測定し、散乱強度の時間相関を計算することで、系のダイナミクスに関する情報を得る手法である。ゴム中でのナノ粒子の揺らぎといった現象を観測できる例が挙げられていた。世界的には XPCS 用の新しい検出器を作る動きがあるが、データ転送や保存の方法も検出器

の開発と同様に重要であると述べられた。実験で得られるデータは 4 TB 程度とのことだった。実際の放射光施設での測定では、観測されるスペックルのゆらぎが試料内部の本質的なものなのか、蓄積リングの電子軌道のゆらぎ等に起因するものかどうかをその場で判断する必要性が述べられた。また、実験が終わって帰った後も生データにアクセスして新たな解析法を試したい状況があるため、オープン解析プラットフォームが切望されるとのことだった。ただし、汎用性のない独自の規格や、GUI 化のデメリット、さらに、実験前に検出器制御や解析のスクリプトなどをテストできるような仮想サーバの整備といった具体的な要望が挙げられた。

JASRI の熊坂崇氏からは、生命科学分野におけるオープンデータの流れについての現状と課題についての解説が行われた。バイオサイエンスの領域では、ゲノム DNA の塩基配列情報や、メタボローム解析を筆頭に、莫大な情報量をまとめた公開型のデータベースが多数存在している。放射光関連では、タンパク質の立体構造情報のデータベースである Protein Data Bank (PDB) や、X 線イメージングの CXIDB が知られている。また、講演ではタンパク質結晶構造解析における試料調製から分子構造情報まで、データの取得や一連の解析の自動化が進んでいることが説明された。今後は完全自動化の方向へ進むため、これとオープンデータが融合していくという展望が述べられた。

### 3. 感想

本ワークショップは、オンラインデータ解析の現状を把握した上で将来のユーザーの利便性や新たな技術の発展に寄与するにはどうしたら良いかについて考える初めての機会であったと思う。オープンソースや学術論文などのオープンアクセスに比べてオープンデータについての議論はまだ入り口の段階で、各利用分野によってデータの互換性、サイズ、解析方法、記録方法も千差万別であることが浮き彫りになり、このことが本テーマの議論を複雑にしていると感じた。その一方で、SPring-8 のユーザーや BL 担当者が BL で実際にどのような測定や処理を行った後、データをどのように所属機関へ持ち帰っているかなど、現状と今後の展望についての現場の声を聞ける貴重な機会であった。

筆者が専門とする構造生物学(特にタンパク質の結晶構造解析)の分野の特徴についてもう少し触れた上で、私見を述べたい。熊坂氏の講演にもあったように、この分野ではオープンソースやオープンデータの概念が比較的早い段階から取り入れられてきた。1970年代に設立されたPDBは、研究者が自身の解析結果の妥当性を示すため、そして科学研究を発展させるためには、不可欠なデータベースである。その有益性に疑いの余地はない。そういえば、つい昨年に話題になった例では、構造精密化用プログラムの開発チームが、すでにPDBで公開されていた構造座標に大きな問題があることを見つけた。タンパク質領域にダミー原子として多数の水分子が置かれているなど、全体的に正確性を欠いた分子モデルだった。このような間違いは、位相決定のために分子置換法に用いた初期モデルのバイアスに起因したとはいえ、経験者なら考えられない間違いである。10年程前には、手系が逆の電子密度に無理矢理タンパク質のモデルを組んだ例もあった。これらは、論文の査読やPDBによる構造validationにも限界があることを見せつけた。この分野ではほとんどのジャーナルでPDBへのデータ登録が論文受理の必須条件になっていることから、X線回折画像という生データを登録しなさいと言われたとしても、技術的な問題がクリアされれば、研究者側に違和感がないと考えられる。タンパク質の立体構造解析のための回折データの測定はルーチン的な要素が多いことから、国外の放射光施設では遠隔測定が主流となっている。従って、オンラインデータ解析プラットフォームはあって当然のシステムである。このように、完全自動化と遠隔測定が進むのは時代の流れだが、人材育成の観点からは少々不安な気持ちになる。

#### 4. おわりに

オープンサイエンスは一般論としては正論だが、それぞれのコミュニティーでの議論をまとめるには時間を要する。どの分野でも共通しているのは、データの量とメタデータの標準化である。そして、SPRING-8ユーザーにとっての利便性とオープンサイエンスの推進意義が両立しなければ成功しない。何らかのインセンティブがないと人はなかなか従わないからである。技術的にもまだ課題が多いため、拙速に導入すべきではないというのが大部分の意見のようだ。一方、

SPRING-8のデータ解析プラットフォームについては、近い将来に検出器から出力されるデータが毎秒100GBに迫る大容量となると、生データを自分の所属機関に持ち帰ることや転送することは実質的には不可能となる。従って、本ワークショップで議論された効率の良いデータ解析のためのプラットフォームの必要性がいつそう認識されるだろう。オープンデータを見据えた利便性の高いシステムの構築については、ユーザーと施設の双方が協力して問題解決に取り組むことが重要である。



#### プログラム

- 「趣旨説明」 八木 直人 (JASRI)
- 「クラウド画像処理システムの開発と複数装置情報の統合解析」 横田 秀夫 (理化学研究所)
- 「原子分解能ホログラフィーの測定制御・解析ソフトウェア」 松下 智裕 (JASRI)
- 「コンプトン散乱実験とデータ解析」 伊藤 真義 (JASRI)
- 「走査型3DXRD顕微鏡法とデータ解析」 林 雄二郎 (豊田中央研究所)
- 「XPCS実験とデータ解析」 篠原 佑也 (東京大学)
- 「タンパク質結晶構造解析～結晶化・回折測定・データ解析」 熊坂 崇 (JASRI)
- 「大規模データを扱うその他の実験手法」 八木 直人 (JASRI)

#### 杉本 宏 *SUGIMOTO Hiroshi*

(国)理化学研究所 放射光科学総合研究センター  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-2817  
e-mail : sugimoto@spring8.or.jp

## 第14回 SPring-8 先端利用技術ワークショップ／第3回放射光・中性子の相補利活用セミナー

## 「量子ビームで観る物質の内部構造」会議報告

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用研究促進部門 星野 真人

## 1. はじめに

第14回 SPring-8 先端利用技術ワークショップ／第3回放射光・中性子の相補利活用セミナー「量子ビームで観る物質の内部構造」が、2017年2月17日に東京都新宿区の研究社英語センタービル地下2階大会議室で行われた。本ワークショップは、SPring-8 先端利用技術ワークショップという位置づけではあるが、放射光と中性子の相互利用展開を目的とした放射光・中性子相補利活用セミナー（第3回目）として開催された。なお、本ワークショップは、公益財団法人高輝度光科学研究センター（JASRI）と、一般財団法人総合科学研究機構（CROSS）との共催という形で行われた。

主催者の集計によると、本ワークショップの参加者数は計68名で、内訳は、産業界25名、学術界8名、公官庁35名ということであった。プログラムは、中性子利用実験施設（J-PARC）や放射光実験施設（SPring-8）に関して、イメージング・画像計測に関する研究内容を中心として、施設側からの実験施設や計測手法などの紹介に関する発表と、主にユーザー側からの各施設あるいは両施設を利用して得られた研究成果などに関する発表で構成され、合計9件の口頭発表が行われた（図1）。なお、CROSS 中性子科学センターの横溝英明センター長による冒頭のセミナー趣旨説明では、放射光 X 線イメージングと、まだ歴史の浅い中性子イメージングの相互利用の重要性について強調された。以下では、各発表の内容の詳細について報告する。

## 2. 会議報告詳細

J-PARC MLF／日本原子力研究開発機構の甲斐哲也氏からは、「エネルギー分析型中性子イメージング装置「螺鈿」の紹介と研究活動」として、中性子イメ

ージングについての紹介と、パルス中性子を用いたイメージング技術について紹介された。発表では、中性子と X 線イメージングの違いについて、重元素に対する透過能力や、軽元素に対する高感度性、また元素識別性の観点から、分かりやすく解説された。また、世界初のパルス中性子イメージング装置である J-PARC ビームライン「螺鈿」で利用可能な、パルス中性子イメージングの特徴として、中性子エネルギーによって試料への到達時間（Time of Flight）が異なることを利用することにより、いわゆる静的な計測から動的計測への展開が可能であることが紹介された。その他、中性子反応のエネルギー依存性を解析（ブラッグエッジイメージング）することにより、結晶組織や組成の情報が得られることで、結晶組織情報の空間分布を画像化できることや、偏極子により片方のスピンの中性子を抜き出すことによる磁気イメージングなど、パルス中性子ならではの計測手法が紹介された。また、「螺鈿」では共用開始からまだ1年足らずということであるが、海外からのユーザーも多数来所していることなど、ビームラインの有用性について示された。実際の中性子ラジオグラフィ・CT の測定例では、エンジンシリンダの3次元像や、自動車ラジエータの断層像の



図1 セミナー会場の様子

紹介など、放射光 X 線イメージングでは透過率の観点から計測不可能な試料に関する計測例が紹介された。また、TOF 法を用いることで、パルス中性子の強度が高い部分と撮影タイミングを同期することにより、コイル中の冷媒の様子のライブイメージングの様子が紹介された。ライブイメージングでは、25 Hz (20 ms の露光時間) の時間分解能で測定できるということである。パルス中性子イメージングにおける空間分解能の展望としては、空間分解能を突き詰めていくようなことはしないで、むしろエネルギー依存のイメージングなど、パルス中性子ならではの計測を推進していきたいという考えを明らかにした。なお、空間分解能の追求に関しては、原子炉の方に任せたいというコメントも見られた。

JASRI の上杉健太郎氏からは、「SPring-8 イメージングビームライン」ということで、SPring-8 の共用ビームラインでイメージング・画像計測が可能なビームライン (BL20XU、BL20B2、BL47XU、BL28B2、BL40XU) に関する紹介が行われた。各ビームラインの典型的なスペックと、ユーザー利用実験における実際の応用事例について、いくつか紹介があった。応用事例としては、近年の画像計測効率などの向上により可能となってきた 4D-CT の一つとして、ゴムの引っ張り試験時においてゴム内部で生じている現象の時分割 CT 計測や、1 CT 計測あたりに要する時間をより短くした高速 X 線マイクロ CT 計測による、人工呼吸条件化における生きたマウス胸部の CT 計測など、高輝度な放射光 X 線ならではの測定について紹介された。また、より高空間分解能画像計測法である X 線顕微鏡による測定例として、小惑星探査機「はやぶさ」が持ち帰ったイトカワ粒子における、鉄の吸収端を挟んだデュアルエネルギー測定の結果などが紹介された。SPring-8 における放射光 X 線イメージングのまとめとしては、各試料に対して最適な計測条件あるいはビームラインの利用の重要性が強調された。また、今後の課題としては、高分解能画像計測と、それとは画像計測の原理上相対する広視野計測との両立を目指した計測への取り組みを行っていくことが示唆された。

理化学研究所光量子工学研究領域の横田秀夫氏からは、「非破壊イメージングと画像処理による多次元情報可視化」というタイトルで、画像処理や情報処理

を駆使することで、見えないものを観るための研究への取り組みが紹介された。近年多次元化が進む情報 (例えば、4 次元：空間的 3 次元情報 XYZ に時間軸 T を加えたもの、あるいは、3 次元情報 XYZ に波長軸  $\lambda$  を加えたもの、5 次元：ボクセル動画、3 次元情報 XYZ に時間軸 T および波長軸  $\lambda$  を加えたもの) を、人間が理解できる情報へ置き換えるための可視化技術が紹介された。また、Image based modeling として、例えば CT 計測によって得られた 3 次元像において、計測対象内部における空隙の存在を確認後、その空間的情報を元に計算機シミュレーションにより、その材料が持つ機能解析へ展開していくという試みが紹介された。情報の可視化という観点では、複数情報からの 3 次元解析、あるいは異なるモダリティ (例えば X 線イメージングと中性子イメージング) からの情報処理により、単独モダリティの計測よりも、より多くの情報を引き出すことができるとして、定量的な画像処理および Registration 処理の重要性が示された。その一つの例として、人体のボクセルモデルの構築についての紹介があった。複数情報からの情報解析においては、異なるモダリティ間でも計測対象を同じ姿勢で計測を行う必要があるため、計測対象の配置あるいは位置を一致させる必要がある。そのための工夫の一つとして、人体用の石膏の型を用いることにより、1 mm 以下の精度で位置合わせが可能であることが紹介された。また、ネズミなどの実験動物のような、異個体あるいは異種間の比較においては、異なるモダリティによる撮影情報の統合解析として、相関解析を用いる手法が紹介された。その一方で、上記のような複合計測においては、撮影条件などに対する計測情報に関する記述の規格化が必要であることが示された。

JASRI の星野 (筆者) からは、「高エネルギー X 線マイクロ CT による文化財の非破壊 3 次元イメージングと X 線位相 CT による生体軟組織の 3 次元定量イメージング」というタイトルで、現在 SPring-8 で行っている放射光 X 線マイクロ CT に関する話題提供として、鉄や銅を含むような文化財試料に対する 200 keV 高エネルギー X 線マイクロ CT と、通常の吸収コントラストによる計測では、十分な画像コントラストが得られない生体軟組織に対する X 線位相 CT と、その応用事例に関する紹介を行った。200 keV 高エネルギー X 線マイクロ CT では、白色放射光を用いて、適

当なアブソーバを挿入することにより、200 keV に中心エネルギーを持った白色 X 線スペクトルが利用できることを紹介した。実際に文化財試料への応用例についても紹介し、15  $\mu\text{m}$  程度の画素サイズで、数 10 mm 径の鉄や銅を含む試料の 3 次元計測が行えることを紹介した。一方で、生体軟組織の測定では、組織を構成するのが主に H、C、N、O といった軽元素であり、水 (1  $\text{g}/\text{cm}^3$ ) に近い密度を有していることから、例えば 25 keV の X 線を用いた場合でも、吸収コントラストだけでは、それらの構造を十分な画像コントラストで可視化することはできない。このような場合、位相情報を用いた画像計測の方がより高感度で測定することが可能であり、僅かな密度差に起因する構造を可視化することができる。発表では、この位相イメージングの簡単な原理説明と、実際に X 線位相 CT を用いたユーザー実験における計測例として、水晶体におけるタンパク質濃度 (屈折率) 分布の 3 次元計測などについて紹介した。X 線と中性子の相互利用という観点からみると、中性子は文化財を構成する鉄や銅のような比較的重い元素に対しては高い透過性を示す一方、生体軟組織を構成する軽元素に対しては、高い感度を得られるということで、X 線で測定している試料 (例えば、上記の水晶体のたんぱく濃度分布) を中性子で測定してみても良いのではないかというコメントが寄せられた。

東京藝術大学の田中真奈子氏からは、「X 線と中性子イメージング技術を用いた非破壊分析による日本の鉄鋼文化財の材料特性と製造方法の解明」ということで、火縄銃や日本刀のような鉄鋼文化財に関する非破壊分析へ向けた放射光 X 線イメージングおよびパルス中性子イメージングの相互利用に関する発表が行われた。SPring-8 における 200 keV の X 線マイクロ CT を用いた計測では、実験室系の X 線 CT 装置では測定することができない、微小な非金属介在物の分布や配向を非破壊で 3 次元的に観察できることが示された。非金属介在物は日本古来の鉄製品に良く見られるもので、それを調べることで、その鉄製品がどのように作られたかに関する端緒が得られるとのことである。一方で、同じ試料に対して、パルス中性子のブラッグエッジイメージングを適用することで、X 線イメージングからでは得ることができない、結晶配向・結晶子サイズ・歪みなどの鉄の結晶組織に関する

情報が得られることが紹介された。放射光 X 線イメージングとパルス中性子イメージングによる非破壊での計測で得られた結果と、従来法として、いわゆる破壊検査である金属組織観察の結果を照らし合わせることで、X 線や中性子による非破壊計測でも鉄鋼文化財の材料特性や、製造・加工技術に関する情報が十分得られそうだという展望が示された。火縄銃や日本刀以外にも、佐賀城跡から出土した和釘の研究への応用も紹介され、特に中性子を用いた測定前には、文化財試料の放射化のリスクを未然に防ぐために、蛍光 X 線で金属組成を確認するなど、貴重な文化財試料ならではの注意点も紹介された。

招待講演である Helmholtz Zentrum Berlin (HZB) の John Banhart 氏からは、“Use of neutron and X-ray imaging techniques to explore complex materials and systems” というタイトルで、複合材料などに対する中性子および X 線イメージングの利用に関する講演が行われた (図 2)。HZB の Institute of Applied Materials のヘッドである Banhart 氏は、様々な試料に対し、そのスケールや必要な空間分解能に応じて、様々な量子ビームイメージング手法を用いていることを紹介した上で、放射光 X 線イメージングと中性子イメージングを取り上げ、その簡単な原理や応用例について紹介した。X 線と中性子を用いた Dual modality tomography による測定例では、容器中の砂の隙間を水で満たした試料の測定を取り上げた。X 線による測定では、砂のような吸収物体に対しては、最適なコントラストが得られるように高いエネルギーの X 線を用いて測定を行うことができるが、その反面、高エネルギー X 線では水に対するコントラストが得られなくなり、その分布を可視化することができなくなってしまう。この課題に対して、中性子イメージングを併用することにより、水への高い感度とその他の部分に対する高い透過率を利用することにより、水の分布だけを抜き出した測定ができることが示された。X 線で得られた砂の 3 次元分布と、中性子で得られた水の 3 次元分布を合わせることで、砂と水の混合構造に対する 3 次元可視化ができることが紹介された。また、放射光 X 線イメージングを用いた測定例では、その高輝度性を生かした測定として、加熱過程におけるメタルフォーミングプロセスのライブ観察 (1,250 fps) や、液体アルミナ合金 (liquid

aluminum alloy)などのメタルフォーミングプロセスの高速度イメージング(最速 105,000 fps、250  $\mu$ s 露光)が紹介された。また、Swiss Light Source (SLS)の TOMCAT ビームラインや BESSY-II の EDDI ビームラインで行っている fast in-situ tomography として、Al-Mg 合金におけるバブル核生成および成長過程の定量化のための時分割トモグラフィが紹介された。計測例とともに、高速画像計測を支える高速画像検出器として、SLS で開発された GigaFRoST を用いた高速トモグラフィ(時間分解能 20 Hz)についても紹介があった。しかし、このような高速計測では、1 データの量が 36 TB に及ぶなど、高速・ハイスループット計測ならではの課題も指摘された。一方で、中性子イメージングに関しては、軽元素に対する高感度性を利用して、電気分解過程における水素イオン(H<sup>+</sup>)の拡散の様子オペランド計測への応用例が紹介された。また、高速中性子トモグラフィにおける feasibility 測定では、植物の根周辺の水管理への応用を目指したウォーターフロントの移動に関する測定への取り組みも紹介された。



図2 講演を行う Helmholtz Zentrum Berlin の John Banhart 博士

九州大学の戸田裕之氏からは、「構造用金属材料の損傷・破壊挙動の 3D イメージング」というタイトルで、現在 SPring-8 を利用して行われている構造材料の疲労破壊評価に関する研究の紹介が行われた。冒頭では、疲労破壊評価を行うために開発を行ってきた、その場観察用の特殊な材料試験機の紹介が行われ、実際にそれらの試験機を SPring-8 のイメージングビームラインに持ち込んで、目的的材料試験を行っていることが示された。構造材料の破壊挙動計測の実施例と

して、組成が同じフェライト相とマルテンサイト相から成る二相鋼の X 線マイクロ CT による破壊観察を例として紹介し、マルテンサイト相がポイド成長により割れることにより、材料としての破壊につながることを解明したということが詳しく紹介された。また、航空機用高強度アルミニウムの破壊試験では、析出水素ポアの成長と破壊に関する新しい知見が得られたことが紹介された。一方で、構造材の歪みの 3次元可視化技術により、膨張の起源の解析を目的としたナノポイドのマルチスケール観察においては、空間分解能に関してスケールリングする際に不連続点があることが紹介され、その不連続点のギャップに関しては、現在 SPring-8 で開発を進めている 30 nm 空間分解能を目標とした X 線ナノ CT により、埋めることができるだろうという認識が示された。結晶組織の 3D イメージングでは、X 線マイクロ CT と X 線回折(XRD)を組み合わせることにより、多結晶から成る材料の各結晶粒の 3次元形態と、結晶方位測定を行っていることが紹介された。引張試験と組み合わせることにより、結晶粒の局所変形挙動の解明につなげていることが示された。今後の展望としては、計測データ内に埋もれた更なる情報を引き出すことにより、構造材料における各種現象に対して統合的理解が得られていくであろうという見解が示された。

東京理科大学理工学部建築学科の兼松学氏からは、「量子ビームのコンクリート工学分野への応用」というタイトルで、高性能化・高機能化・合理化・環境配慮性能の向上が求められているコンクリートに対して、主に中性子イメージングを用いた非破壊定量計測の展開に関する発表が行われた。特に、ひび割れ部分の修復という課題のために、ひび割れ近傍の水分挙動を測定する必要があることが示され、中性子ラジオグラフィを用いた水分可視化定量イメージングに関する研究紹介が行われた。その一つとして、モデル粗骨材を利用した計測では、骨材に対して水分が吸い付き回りこむような挙動を示すということが分かったという研究成果が紹介された。中性子ラジオグラフィでは検出器の画素サイズが 150  $\mu$ m という一方で、より高い空間分解能が必要な場面においては、X 線マイクロ CT による計測も取り入れているとのことである。X 線マイクロ CT の高分解能測定により、より細かい領域におけるミクロな水分移動の検証に利用してい



るということが紹介された。しかし、本報告でも既に述べたように、比較的高いエネルギーの X 線によるマイクロ CT 計測では、コンクリート内の水を可視化することは困難であるので、NaI 造影剤を用いることで、水部分のコントラスト強調を図るといった工夫も紹介された。また、コンクリートの爆裂現象（火災により過熱されたコンクリートの表面が飛び散る現象で、特に高強度化したコンクリートで顕著に現れるとのこと）の解明に関する話題が提供され、中性子によるイメージングとして、京都大学原子炉実験所における観察例が紹介された。この爆裂現象に関しては、SPring-8 における X 線マイクロ CT を用いて観察することはできないかという質疑応答が行われた。SPring-8 では、サイズとして 50 mm 程度までのコンクリートに対する測定可能性が示されたが、この爆裂現象を引き起こすには、コンクリート単体ではなく、10~20 mm スケールの骨材が入っていることが必要条件になるとの見解が示された。

産業技術総合研究所省エネルギー研究部門のムンソクス氏からは、「次世代エンジン開発への X 線噴霧計測技法の適用」というタイトルで、次世代エンジン開発へのアプローチとして求められる従来型噴霧・燃焼モデルの見直しのための、超高速 X 線イメージングによる噴霧計測への応用に関する発表が行われた。冒頭では、高速・高密度領域となるノズル近傍における噴霧計測の実現が、現時点における重要な課題であることが示された。X 線を用いることのメリットとして、可視レーザーによる噴霧のイメージングでは、散乱成分により計測が困難であることが示された上で、X 線の高い透過性能および屈折コントラストによるコントラスト強調効果により、より高精度（高い空間分解能）で計測が可能であることが示された。放射光を用いた超高速のパルスイメージングでは、白色のアンジュレータ光が利用できる SPring-8 の BL40XU において、放射光のフィリングパターンに同期し、シングルバンチを利用することにより、100 ps の露光時間で、2  $\mu\text{m}$  の空間分解能で噴霧の様子を観察できることが紹介された。現状の課題として、ノズルから出てきた噴霧のみに関しては、SPring-8 におけるパルスイメージングでも実施可能とのことであるが、ノズル内部における内部流動の観察には、ノズルを透過できるだけの高いエネルギーが必要であることが示され、現状で

は、アメリカの APS でしか実施することができないことが示された。これは、BL40XU では、ヘリカルアンジュレータを用いているため、利用できる最大エネルギーが 16 keV に制限されてしまうためであり、目的とする計測には、ビームフラックスと高エネルギーの両立が求められるという見解が示された。一方で、中性子イメージングの可能性についても検討してみてもというコメントも会場から寄せられていた。中性子イメージングを用いることで、特にノズル内の液体流動の可視化に関して展望が拓けてくるのではないかと思われる。ただし、セミナー冒頭の甲斐氏の講演で示されたように、パルス中性子イメージングの時間分解能は数 10 Hz 程度ということで、超高速パルスイメージングへの展開にはまだ課題が残されていると言える。

### 3. おわりに

本セミナーでは、施設側とユーザー側の各講演者が、それぞれの専門の話題を提供することにより、放射光 X 線イメージングと中性子イメージングの相互利用への理解が深まったものと思われる。今回で第 3 回目の放射光・中性子利活用セミナーの開催であるが、今後もこのような場が提供されることにより、特に放射光ユーザー側にとっては、これまで X 線を用いた計測により得られた知見に対して、中性子という新しい側面からのアプローチにより、計測対象に対する更なる理解が進むのではないかと期待される。

#### 星野 真人 HOSHINO Masato

(公財) 高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0833  
e-mail : hoshino@spring8.or.jp

## 第4回 SPring-8 文化財分析技術ワークショップ2017 報告

公益財団法人特殊無機材料研究所

鈴木 謙爾

「先進の光で文化財が語りだす」をテーマにして、第4回 SPring-8 文化財分析技術ワークショップ/第12回 SPring-8 先端利用技術ワークショップが、平成29年3月4日午後、朝日新聞東京本社・浜離宮朝日ホールにおいて、公益財団法人高輝度光科学研究センター (JASRI) の主催により開催されました。平成27年11月開催の第1回ワークショップならびに平成28年1月開催の第2回ワークショップでは、文化財研究に役立つ SPring-8 の実験手法ならびに測定事例を紹介し、SPring-8 ユーザーを発掘することが主目的でした。しかし、今回の第4回ワークショップでは、実際にユーザーにより SPring-8 を用いて得られた研究成果の発表を中心に、SPring-8 利活用のさらなる深化を図るために何をなすべきかがパネルディスカッション形式で検討されました。ワークショップ参加者数も78名に達し、前2回のワークショップに比べて一挙に倍増しました。前回までの参加者は、大学、ミュージアム、研究所等の専門研究者が圧倒的に多いのですが、今回の参加者はいろいろな職種に広がっています。興味深いことに、民間企業の研究者・技術者ならびに無所属の文化財愛好家の参加がかなり目立ちました。

本ワークショップのプログラムを以下に示します。

### ○開会挨拶

土肥 義治 (高輝度光科学研究センター (JASRI))

### ○文化財研究ツールとしての SPring-8

八木 直人 (高輝度光科学研究センター (JASRI))

### ○非破壊高エネルギー放射光蛍光 X 線分析による古代ガラスの起源推定

～サーサーン・ガラス容器を中心として～

阿部 善也 (東京理科大学)

### ○イランにおける鉄製利器出現の謎を追う

～高エネルギー放射光を用いたバイメタル剣の CT 画像撮影の成果から～

四角 隆二 (岡山市立オリエント美術館)

### ○放射光で江戸・明治の匠の製作技術を探る

～自在置物・火縄銃・日本刀などの鉄文化財の X 線 CT 撮影を通して～

田中 真奈子 (東京藝術大学)

### ○パネルディスカッション

～文化財研究が SPring-8 に求めるもの～

中井 泉 (東京理科大学)

鈴木 謙爾 (特殊無機材料研究所)

谷一 尚 (山陽学園大学)

山花 京子 (東海大学)

### ○閉会の挨拶

中井 泉 (東京理科大学)

冒頭に、土肥義治 JASRI 理事長がワークショップ開会の挨拶を述べられました。その中で、SPring-8 における社会・文化利用を学術利用ならびに産業利用に続く第3の柱として伸ばしていきたいとの基本方針の説明があり、参加者一同は大いに勇気づけられ、明るい未来を感じ取ることができました。

最初の講演では、八木直人 JASRI 利用研究促進部門コーディネーターから、「文化財研究ツールとしての SPring-8」と題して、2015A 期から始まり 2016B 期までの2年間に、重点領域指定を受けて実施された文化財分野の研究課題の状況について詳細な説明がありました。この最初の2年間における社会・文化利用分野の全実施課題数は69課題ですが、そのうち41課題が文化財に関する課題であること、測定対象は陶磁器、ガラス、鉄・青銅製品、絵画、漆、木材、染料等の多種多様な文化財資料であること、使用されたビームラインは9本に達すること、測定には X 線回折が一部あるものの、多くは蛍光 X 線分析、イメージング、赤外分光分析、軟 X 線分光等の分光分析手法が用いられていること、微小試料測定、局所分析、CT 観察も始められていること等々の SPring-8 における文化財研究のトレンドが紹介されました。

続いて、この2年間に実施された多くの文化財研究課題の中から、特に SPring-8 放射光の特徴である高輝度・高エネルギーに着目した下記の3ユーザーの研究成果が報告されました。

阿部善也東京理科大学講師の「非破壊高エネルギー放射光蛍光 X 線分析による古代ガラスの起源推定～サーサーン・ガラス容器を中心として～」では、SPring-8 BL08W の 116 keV 高エネルギーウィグラー光を用いて、大型資料であるサーサーン・ガラス容器中に、微量に存在する重金属元素ならびに、希土類金属元素を ppm レベルまで精密に分析した研究成果が述べられました。その結果、イラン北部の古墓より見つかっていたサーサーン・ガラス容器が、サーサーン朝の中心地であったメソポタミア（現在のイラク）で出土したサーサーン・ガラスと同じ化学組成を持つことが示されました。本研究は、SPring-8 放射光が大型文化財の非破壊・非接触分析に威力を発揮することを如実に示しています。



講演発表の様子

四角隆二岡山市立オリエント美術館学芸員の講演「イランにおける鉄製利器出現の謎を追う～高エネルギー放射光を用いたバイメタル剣の CT 画像撮影の成果から～」では、北部イランにおいて紀元前 15～13 世紀の青銅器時代から鉄器時代への移行期に特徴的にみられるバイメタル剣の高分解能 X 線 CT イメージングが、SPring-8 BL28B2 の 200 keV 入射 X 線を用いて測定されました。その結果、バイメタル剣は鉄茎の周囲に青銅を溶融して流し込む「铸ぐるみ」技術により制作されていることが初めて明らかにされました。SPring-8 において得られる緻密かつ鮮明な 3 次元画像は、考古学における Archaeometry（考古学

資料の科学的分析) の寄与をますます確固なものにするでしょう。

休憩の後、田中真奈子東京藝術大学特任講師から、「放射光で江戸・明治の匠の製作技術を探る～自在置物・火縄銃・日本刀などの鉄文化財の X 線 CT 撮影を通して～」と題して研究成果が報告されました。日本刀は、古来より砂鉄から製錬された「たたら鉄」を素材として、日本独特の伝統的鍛造プロセスにより作られています。したがって、日本刀の内部組織の詳細を解明することは、日本独自の鉄冶金技術の発展をフォローするためにも極めて重要です。本研究では、SPring-8 BL28B2 の 200 keV X 線ならびに BL20B2 の 72 keV X 線を用いる CT 撮影により、日本刀ならびに火縄銃のマイクロ内部組織、そして江戸から明治にかけて製作された自在海老置物の可動式内部接合構造の精密観察が行われました。特に興味深い結果として、自在海老置物の可動接合部には銀蟻が流し込まれて、自在に動かしても顕著な摩耗がないように工夫されていること、また火縄銃では非金属介在物分布を巧みにコントロールした高度な銃身組織が形成されていることが解明されました。

加えて、茨城県にある大強度陽子加速器施設 J-PARC のパルス中性子透過分光イメージングを相補的に利用して、火縄銃の断面組織を構成する結晶粒の原子配列、寸法そして歪のマッピング像の解析に非破壊で成功しており、これは画期的な成果です。

今回のワークショップでは、「文化財研究が SPring-8 に求めるもの」をテーマとするパネルディスカッションが特別企画され、中井泉東京理科大学教授が司会者として進行されました。最初に 4 人のパネラーが自己紹介を兼ねて、各自それぞれが文化財研究と SPring-8 に関わるに至る経緯をスピーチしました。中井教授からは、放射光による文化財研究のパイオニアとして 30 年に及ぶ長い研究の中で、放射光を利用する文化財研究がまさに最先端のサイエンスの研究でもあることを実感として味わっているとの格調の高い経験が語られました。若い人たちへの貴重な教訓です。

2 番目に鈴木謙爾（公財）特殊無機材料研究所代表理事からは、東北大学で長らく液体・アモルファス金属の構造の研究に携わっていたが、大学停年退職後、

住友金属工業（株）にお世話になり、そのご縁で京都にある泉屋博古館に所蔵されている、三角縁神獸鏡を含む中国古代青銅鏡 100 面余の出自を、SPring-8 放射光を用いて探る機会に遭遇したことが紹介されました。

3 番目の谷一尚山陽学園大学教授は、ガラス文明研究の専門家として岡山市オリент美術館長時代に SPring-8 での研究を始められた経緯、特に国宝・重文クラスの文化財の SPring-8 放射光測定に際して想定される注意事項について有用なコメントを話されました。

4 人目の山花京子東海大学准教授も長年にわたりガラスの考古学的研究に従事されており、SPring-8 とは 1997 年以來の古くて楽しいお付き合いであること、その中で産地や成分を同定するには生データに直に触れ、かつ文理融合の視点が不可欠であること等々の貴重なご意見を力説されました。

その後、各パネラーから、文化財資料の微量分析、内部可視化、非破壊・非接触測定等々に関して SPring-8 放射光が期待されるいろいろなケースについてコメントが出されました。特に、文化財研究に特有な問題点として、他に替え難い唯一無二の文化財の安全な運搬・保管、破損・紛失事故、強力 X 線照射の影響等が言及されました。文化財資料の取り扱いについては、課題申請者であるユーザーが第一義的な責任を有することは言うまでもありませんが、SPring-8 としてもその対応策に関して一考をお願いしたいとの意見が述べられました。



パネルディスカッションの様子

公的研究設備である SPring-8 の利用に際しては、文化財研究といえども趣味的なマニアックな課題は

避けられるべきでしょう。しかし、文化財の公的学術研究と私的趣味探求の識別は時には判然としません。文化財研究において SPring-8 の利活用が社会的に許容されるには、成果を私蔵するのではなく、積極的に公開・公表することが肝要であるとの指摘がなされました。これは、「SPring-8 に求めるもの」のではなく、ユーザーにこそ求められることです。

最後に、パネルディスカッションのまとめとワークショップ閉会の挨拶が中井教授から述べられ、4 時間に及ぶ興味と熱意が満ち満ちたミーティングが閉じられました。

閉会后、JR 浜松町駅近くの居酒屋において SPRUC 文化財研究会メンバーを中心として懇親会が開催され、熱心な研究交流が遅くまで続けられました。

鈴木 謙爾 SUZUKI Kenji

(公財) 特殊無機材料研究所  
〒982-0252 仙台市太白区茂庭台 2-6-8  
TEL : 022-281-0572  
e-mail : k.suzuki@aims.or.jp

## 2017B 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

2017B 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 公式 HP 上の「現在募集中の SPring-8 利用研究課題」([http://www.spring8.or.jp/ja/users/proposals/call\\_for/](http://www.spring8.or.jp/ja/users/proposals/call_for/)) よりご確認ください。

### ■ 2017B SPring-8 利用研究課題募集要項

#### ■ 2017B 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

#### ■ 2017B SPring-8 における“SACLA、J-PARC MLF または「京」と連携した利用を行う課題”の募集について

#### ■ 2017B 成果公開優先利用課題の募集について

応募締切：2017 年 5 月 25 日（木）午前 10:00JST（提出完了時刻）

#### ■ 2017B 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：2017 年 6 月 8 日（木）午前 10:00JST（提出完了時刻）

#### ■ 2017B 大学院生提案型課題（旧名：萌芽的研究支援課題）の募集について

応募締切：2017 年 6 月 8 日（木）午前 10:00JST（提出完了時刻）

#### ■ 2017B 産業新分野支援課題の募集について

応募締切：2017 年 6 月 8 日（木）午前 10:00JST（提出完了時刻）

#### ■ 2017B 社会・文化利用課題の募集について

応募締切：2017 年 6 月 8 日（木）午前 10:00JST（提出完了時刻）

### <特記>

1. 緊急課題、成果専有時期指定課題および測定代行課題（測定代行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. 長期利用課題は、2015 年度より年 1 回（A 期のみ）の公募となりましたので 2017B 期の募集はありません。
3. 2017 年 4 月 1 日より、BL05SS は BL05XU へ名称が変更になっています。

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。

### ■ SPring-8 利用研究課題募集の概要

([http://www.spring8.or.jp/ja/users/proposals/call\\_for/summary](http://www.spring8.or.jp/ja/users/proposals/call_for/summary))

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

## 2017B 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

2017B 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）

応募締切：2017 年 6 月 9 日（金）午前 10:00 JST（提出完了時刻）

■ 一般課題（成果専有利用）

応募締切：2017 年 6 月 9 日（金）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 利用案内 > 利用制度/募集案内 > 現在募集中の利用研究課題 の「2017B 期における SACLA 利用研究課題の募集について」(<http://sacla.xfel.jp/?p=1517>) よりご確認ください。

<2017B 期の特記事項>

○BL3 と BL2 の同時利用の開始について

2017B 期より、BL3 (XFEL ビームライン 1) と BL2 (XFEL ビームライン 2) の同時利用を開始します。これにより、既に供用中の BL1 (SXFEL ビームライン) とあわせて、3 本の FEL ビームラインを同時に利用することが可能となります。

○BL2 において実施される実験について

下記の手法を用いる課題は、原則として BL2 で実験を行います。

- ・シリアルフェムト秒結晶構造解析 (SFX, Serial Femtosecond Crystallography)
- ・固定ターゲットタンパク質結晶構造解析 (FPX, Fixed-target Protein Crystallography)
- ・コヒーレント回折イメージング (CDI, Coherent Diffractive Imaging)

○フィジビリティチェックビームタイム (FCBT) の導入について

同時運転により増加するビームタイムを有効に活用するため、2017B 期より、測定サンプルの事前確認のためのフィジビリティチェックビームタイム (FCBT, 最大 0.5 シフト) の希望を受け付けます。

○BL1 の現状の性能について

加速器の増強により、BL1 (SXFEL ビームライン) の標準的な波長領域が、10–30 nm (光子エネルギー 40–120 eV) に拡張されました。

これらの詳細は、SACLA ホームページ (<http://xfel.riken.jp/topics/20170414.html>) をご覧ください。

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 ([http://sacla.xfel.jp/?page\\_id=10937](http://sacla.xfel.jp/?page_id=10937))。

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)。

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

## 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  
大阪大学 蛋白質研究所 中川 敦史

### 1. はじめに

平成 27 年 4 月～29 年 3 月の 2 年間、SPring-8 利用研究課題審査委員会（2015B 期～2017A 期の審査委員会）の委員長を務めさせていただきました。それまで、生命科学分科会主査を務めさせていただきましたが、委員長という大役を仰せつかり、何かと不慣れな点もあったことから、JASRI 利用推進部の方々には、色々とお手数をお掛けしました。本委員会委員の皆様や関係者の方々のご協力で無事に任を終えることができ、皆様に感謝申し上げます。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と思います。

### 2. 成果最大化に向けての課題審査の役割

SPring-8 は共用開始後 20 年近く経過し、世界トップレベルの研究成果が数多く生み出され、さらに産業応用や社会・文化にも大きく寄与するなど、我が国の科学技術にとって不可欠な基盤施設となっています。その成果は、年 1,000 報を超える原著論文などとして報告されています。一方、SPring-8 の特性を活かした、成果の最大化に向けての努力も続けられています。2015A 期から始まった生命科学／蛋白質結晶構造解析分野の特殊性に合わせた独自のビームタイム配分方式や 2015B 期より始まった「新分野創成利用」制度などはその例ですが、SPring-8 利用研究課題審査委員会にも、真に実施すべき本質的なテーマの見極めとその選定が求められています。特に、実質的な審議を行う分科会においては、そのような視点から審査が行われました。

### 3. 本委員会での審査に関して

利用研究課題審査委員会は、従来の進め方を踏襲し、各分科会から挙がってきた審査結果を基に課題選定作業を行いました。それに加えて、各分科会での審

査過程や研究動向、審査の過程で問題になった事項などについて議論を行いました。その結果は、SPring-8 選定委員会において報告させていただいています。全体を通し、審査に際して大きな問題はありませんでした。本利用研究課題審査委員会の 2 年間の活動において議論になったこと、改善したことなどの中で重要と思われるものを簡単にまとめます。

#### 3-1. 本委員会での主な議論のポイント

- 特定の実験手法に対して分科会をまたがって申請された場合、同じ基準で審査できるよう、レフェリー審査では手法でまとめて統一的に審査するようにした。これにより、このような課題が他の手法に対し、「相対評価でごっそり低くなる」ことを回避することができた。但し、手法が優先されると研究分野サイドの審査とのバランスが取れなくなる恐れがあり、今後の状況に注意していく必要がある。
- 大学院生提案型課題の採択率が低く、指導教官の十分なコミットが必要と認識している。アイデアは学生主体であっても、申請段階からやはり指導教官の十分な指導が必要である。一方で大学院生と指導教官のオーバーラップ申請と思われる課題が散見している。
- SACLA の予備実験的な申請課題に対して、評価がレフェリーで割れることが起きたため、それを避けるために、申請書に連携利用課題であることが明確に判るコメント枠を加えることで、これにより連携の目的、メリットなどを申請者が記載できるようにした。
- 1 つのビームラインに複数分科会がまたがる場合、分科会開催が別日程では分科会間の議論（分科会間の不公平を生じさせないような調整など）が困難となる場合があった。
- 大きな研究テーマやグループでの申請の自由を束



縛るようなルールは決めるべきではないが、競争の激しい分野では今後、同時期に多くのビームタイムを要求するような課題もあるかもしれない。他の利用者を圧迫しないような配慮が必要である。

- ビームライン毎の混雑の差を緩和するため、SPring-8 全体で、個々のビームラインで何ができるのかなどの相互共有・情報発信を推進することが重要である。
- 一層の成果創出のためには、事前の利用相談が重要である。

#### 4. おわりに

本利用研究課題審査委員会では、様々な分野の基礎から応用までをカバーする、各期 800 件前後にも達する課題を効率良く審査できるシステムがほぼ確立しており、総じて順調に審査が行われていると思います。その一方で、SPring-8 は我が国の科学技術の基盤となる重要な施設であり、より様々な分野にまたがる課題を効果的に審査し、成果最大化に向けた真に実施すべき課題を確実に選定することが、今後ますます期待されていると強く感じました。

2 年間委員長を務めさせていただきましたが、私自身勉強させていただくことばかりだったというのが実情です。審査にあたって、多くのレフェリーの方々、本審査委員会委員各位、JASRI スタッフの皆様の御尽力に敬意を表すとともに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

# 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

国立研究開発法人理化学研究所 放射光科学総合研究センター 杉本 宏

### 1. はじめに

平成 27 年 4 月から平成 29 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させていただいた。生命科学分科会は、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・医学研究一般の課題審査を担当している。

以下の報告は、L1 小分科は杉本が担当し、L2 小分科は片岡幹雄先生（奈良先端科学技術大学院大学）、L3 小分科は白井幹康先生（国立循環器病研究センター）にまとめていただいた。

### 2. L1：蛋白質結晶構造解析

L1 小分科では、蛋白質結晶の構造解析の課題を審査する。この分野のユーザーのほとんどは、ビームラインに整備された試料ステージ、試料交換ロボット、検出器、解析用ソフトウェアなどを利用する。ルーチン的な要素が多いため、国内外の他の放射光施設においても自動化が進んでいるのが特徴である。しかし、測定対象とする蛋白質試料が膜タンパク質や巨大分子の複合体のような例では、結晶を得ること自体が難しい。結晶が運良く得られたとしてもそれが良質かどうかに関わらず、その X 線回折能をいち早く評価して次のサンプルの調製や結晶化へとフィードバックをかけることの繰り返し、厳しい研究競争に打ち勝つためには必須である。このような実験の特徴に対応するため、L1 小分科では、これまでもビームタイムを細分化したり、留保ビームタイムという枠を設けて緊急を要する利用希望にも審査と配分を行ってきた。さらに柔軟な対応を目指して、2015A 期から運用方針が大きく変更された。2014B 期までは半年毎に行われる課題審査を経てビームタイムが配分されていたが、課題有効期間が 1 年となり、ビームタイムの配分は年

に 4 回に分けて決定するという方式が変わった。本分科会ではまず、レフェリーによる評価点に基づいた配分優先順位だけをつけ、その後で年に 4 回の配分希望調査書に基づいて、5 つの蛋白質結晶構造解析用のビームラインの選択とそのシフト数を決定した。したがって、課題申請時には希望ビームラインを PX-BL という 5 つのビームラインをまとめた形で課題申請をしてもらっている。この運用の狙いは、結晶が得られたら直ちにデータ収集・解析を行うことができるようにすること、そして、半年先には必要になるだろうと思っ確保したビームタイムの直前のキャンセルを回避することである。また、高速二次元検出器、解析用計算機の充実、共通化された測定制御インターフェースの導入などによって測定の効率が近年著しく向上したことから、1 シフト（8 時間）でもいいから BL41XU を使いたいというユーザーの声を反映させたい意図もある。つまり、ビームタイムの効率的な運用によって、より多くのユーザーが共用アンジュレータとピクセルアレイ型検出器「Pilatus 6M」を利用する機会が増えることになり、ユーザーの全体的な成果向上の効果も期待した。

L1 小分科では、結晶が得られていなくても課題申請を行うことができるため、課題申請書にしっかりと実験目的、研究対象や意義などについて書かれていれば、ほぼ全ての課題が採択される。レフェリーの採点に基づいて決定した配分優先順位と申請者の希望に合わせて、配分ビームラインも本分科会が決定することになるが、やはりアンジュレータビームラインの BL41XU と BL32XU の競争率は高かった。上位 50% 以上の点数がなければ BL41XU への配分は困難であった。創薬等支援技術基盤プラットフォーム事業によって整備されている BL32XU は、一般課題枠への配分が限られていることから、さらに競争率は高かった。

脂質キュービック層での結晶化もより汎用的になってきた。受容体・チャネル・トランスポーターといった薬剤やホルモンなどの物質のやり取りに関わる膜タンパク質や創薬のターゲットとなり得るようなものを研究対象とした課題は申請総数の約 30%を占めており、多くは SPring-8 のアンジュレータビームラインの必要性が高いと評価されている。その一方で、偏向電磁石ビームラインの BL38B1 では顕微分光システムや、試料湿度調整装置、遠隔地からの実験を支援するリモートアクセスのシステムが運用されており、他の蛋白質構造解析用ビームラインとの差別化を図っていることから、多様な課題申請があった。2015A 期から理研の BL26B1 の共用枠が 80%に拡大されたこともあり、偏向電磁石ビームラインに限っては、全ての利用時間枠が最初の希望申請で埋まらなくなった。埋まらない時間枠は、先着順の追加募集となる。したがって、ユーザーは結晶が得られ次第すぐに実験ができるメリットを享受できる。余裕のある配分によって、多数の結晶の X 線回折能を確認するためのスクリーニングや開発的な実験を行うことも可能となるかもしれない。ユーザーは各ビームラインの特性を考慮して有効な使い方を検討すべきであろう。

### 3. L2：生物試料回折散乱

L2 小分科のグループ名は生物試料回折散乱であるが、実際は蛋白質結晶構造解析 (L1 小分科)、バイオメディカルイメージング・医学研究一般 (L3 小分科) 以外の生物科学系の課題は全てこの小分科に申請される。したがって、小角散乱・溶液散乱の他に、X 線分光はじめ X 線を利用したさまざまな測定手法を用いた生物科学系の課題を審査することになる。2015B 期から 2017A 期までの申請課題総数は 137 件、採択課題総数は 94 件であり、申請、採択とも例年よりやや多目であった。採択課題数を使用ビームライン毎に見ると、BL40B2 (42 件)、BL40XU (32 件)、BL45XU (17 件) と大半を占め、BL19LXU、BL35XU、BL37XU が各 1 件ずつあった。BL37XU では X 線反射率を用いた研究が行われている。ソフトマターの分野では威力を発揮する反射率測定であるが、生体試料では広がりが見られないのが残念である。BL19LXU では核共鳴振動分光、BL35XU では X 線非弾性散乱を用いたチャレンジングな申請が、ともに外国からな

されたことが特徴的であった。

BL40XU では、羽ばたき中の昆虫飛翔筋の収縮機構など、マイクロビームを応用した筋肉などの繊維状生体組織の in situ X 線回折の研究が進んだことが特筆される。細胞内あるいは組織内構造解析は、マイクロビームと干渉性を兼ね備えた放射光によって初めて可能になる重要な研究であるが、SPring-8 で今後目指すべき方向の一つと思われる。このビームラインでは、高速 X 線 1 分子追跡法 (XDT) のさまざまな系への応用研究も盛んに行われた。XDT は日本発の測定法であり、期待度は高いものがある。興味深い成果も挙がってきているのは心強い。

BL45XU、BL40B2 では、生物学的に意味のあるタンパク質に関する溶液構造の動態や脂質膜、皮膚、毛髪に関する溶液散乱・回折の伝統的な研究が数多く行われた。高速液体クロマトグラフィーや限外ろ過カラムを試料槽に連結させた X 線溶液散乱測定が行われるようになったことも最近の特徴である。凝集しやすい試料の単分散系の測定や、凝集そのものの時間分解測定のために重要な技術的進歩である。その他、皮膚角層での透過機構の研究や膜タンパク質の結晶化で脚光を浴びる脂質キュービック層に関する研究に関して、さまざまな観点からの課題が採択されたのも特徴であった。

Ab initio の溶液構造解析が簡便にできるようになり、低分解能の形状を容易に求められる溶液散乱はタンパク質研究の標準的手法になってきている。この中で、天然変性タンパク質や天然変性領域を持つタンパク質、その特殊な凝集形であるアミロイド線維の溶液散乱研究も最近のトレンドであり、興味深い課題が採択された。

最近、SPring-8 と「京」あるいは J-PARC/MLF との相補的利用の重要性が強調されるようになってきた。溶液散乱情報は、空間平均だけでなく時間平均された構造情報である。すなわち、ダイナミクスの情報を隠れ持つ。ダイナミクス情報を直接得ることのできる分子動力学シミュレーションや中性子非弾性散乱、中性子スピネコー測定などと組み合わせ、溶液構造の動態に迫る研究は、相補的利用の好例になるのではないかと期待される。このような観点の課題が今後増えて欲しい。

4. 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、医学から生物学まで広い分野の申請を扱い、課題の対象はヒト、動物、植物、薬剤など多様である。2015B~2017A 期の申請課題の総数は144 課題 (2015B 期 36 課題、2016A 期 30 課題、2016B 期 41 課題、2017A 期 37 課題) で、2013B~2015A 期とほぼ同じであった。希望先のビームラインは、多いものから、BL20B2 (54 課題)、BL37XU (31 課題)、BL28B2 (22 課題)、BL20XU (17 課題)、BL39XU (7 課題)、BL47XU (6 課題)、BL43IR (3 課題)、BL40XU (2 課題)、BL29XU (1 課題)、BL40B2 (1 課題) の順であった。

この2年間の研究動向について、研究法別にみると、位相差コントラスト X 線 CT および透過 X 線マイクロ CT を用いた摘出臓器組織、植物、昆虫や薬剤などのサンプルの構造・機能解析が申請総数の 50~60% を占め、2013B~2015A 期より割合がさらに増えた。特に位相差コントラスト X 線 CT による構造解析の課題が増加し、2017A 期には申請総数の約 40% に達した。その申請内容は、病的な心臓、血管、眼のレンズなどの組織内密度差解析、骨の成長・リモデリングの 3次元解析、軟骨コラーゲンの分布解析、脳微小血管網と脳実質組織の同時イメージングなど多彩であった。特に注目される課題として、病的な心臓に移植した iPS 由来心筋細胞シート組織の密度差解析が挙げられ、シート組織内の血管構築、血流分布 (in vivo 微小血管造影による) との関連付けが進めば、心筋シートの質的改善や心筋移植技術の向上に寄与する可能性がある。透過 X 線マイクロ CT の研究内容は、脳神経、骨・軟骨、肺、歯、植物、昆虫、薬剤 (錠剤) などの微細構造解析であり、2013B~2015A 期から継続した課題が多く見られた。

2番目に多かった研究は、蛍光 X 線元素分析 (XRF) あるいは X 線吸収分光法 (XAS) を用いた組織中の元素、微量物質の検出、分布・動態解析などで、申請総数の約 20% を占めた。薬物の組織、腫瘍内の分布・動態解析は、薬理効果・毒性発現や治療抵抗性のメカニズム解明に役立つ可能性がある。また、脳組織内での (精製された状態ではない) タンパク質凝集体の解析は、アルツハイマー病などの脳変性疾患の病態解明、治療法開発に繋がる可能性がある。

次に多かったのは、微小血管造影法および屈折コン

トラスト法による生きた動物での機能・構造イメージングの課題であった。微小血管造影では、遺伝子改変マウスを用い、糖尿病性冠動脈機能障害の分子機序解析や機能障害に対する運動・薬剤の治療効果の評価が進んだ。麻酔下マウスの微小冠動脈の高精度な可視化技術は世界的に見て SPring-8 が突出しており、また、生体内拍動心臓での心筋収縮たんぱく質分子動態解析 (BL40XU) との関連研究ができる唯一の放射光施設でもあることから、SPring-8 は将来、心臓病基礎研究の中核施設となり得る。屈折コントラスト法を用いた肺気道・血管イメージングでは、換気・ガス交換機能や気道上皮の分泌・異物排出能の機序解明がさらに進み、臨床への還元が期待される。しかし、残念なことに、これらの in vivo 研究はこれまで申請総数の約 20% を維持してきたが、2015B 期では 20%、2016A/B 期では 15%、2017A 期では 5% と割合が減少した。また、その多くは海外からの申請であった。SPring-8 は、現状、大型動物を用いた前臨床的研究ではなく、小動物イメージングによる基礎研究にほぼ特化しており、臨床分野まで含めた幅広い研究者の参入には限界があるかもしれない。また、小動物実験には技術的な困難さがともなうであろう。今後、生体イメージングの研究を増やすには、SPring-8 の特性を活かして、遺伝子改変マウスによる生体での分子病態機序解明が治療法開発に直結し得ることをアピールすると同時に、実験技術のサポート体制を築くことが必要かもしれない。また、新たな技術開発を進め、定性的に新しい発見を生み出すことも重要であろう。この2年での新技術の動向として、1. 大視野 X 線位相 CT を用いた高感度定量計測、2. 高エネルギー X 線ビームを用いた X 線位相 CT による強位相 (たとえば頭蓋骨) および弱位相物体 (たとえば脳実質) の同時計測、3. 4D-X 線位相 CT の時間分解能向上、4. 高視野高時間・空間分解能の微小血管造影技術が挙げられ、将来の発展が望まれる。

その他の課題として、白色 X 線によるタンパク質 1 分子構造変化計測、マイクロビームを用いた放射線治療法の開発があるが、今後の展開が待たれる。

SPring-8 の医学利用の普及には、高度専門化だけでなく、裾野の拡大も必要であろう。放射光研究に初めて興味を持った研究者に対してトライアルビームタイム申請枠を設けたり、大学院生提案型課題の宣伝・

普及も必要であろう。2015B～2017A 期の大学院生  
提案型課題は全部で6 課題であった。

杉本 宏 *SUGIMOTO Hiroshi*

(国) 理化学研究所 放射光科学総合研究センター  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-2817  
e-mail : sugimoto@spring8.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 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  
関西学院大学 理工学部 藤原 明比古

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シフトの配分を行っている。本分科会で取り扱う研究分野は多岐にわたり、課題数も多いため、分科に D1 から D6 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 (高压物性、地球惑星科学)、D3 (材料イメージング)、D4 (非弾性散乱)、D5 (合成高分子)、D6 (非晶質、不均一系) の各小分科を担当した審査員に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) や有機・分子系結晶 (D1b) を対象として、弾性散乱によって静的・動的構造を明らかにすることを目的とした申請課題を中心に審査している。単結晶構造解析 (BL02B1)、および、粉末結晶構造解析 (BL02B2) のビームラインへの申請課題をはじめ、BL40XU など回折・散乱に関係する約 15 のビームラインへの申請が対象となる。申請課題数は毎回 100 以上と多い。課題内容は、従来から多く申請されている未知構造決定、構造相転移、構造精密化、電子密度分布解析に加え、外場応答や時分割測定などもあり、実験手法も多岐にわたる。今期は、これまで実験が困難であった微小結晶を対象とした BL40XU への申請や分子性結晶を扱う課題で、対象分子が巨大化しているためか、蛋白質結晶回折実験用ビームラインへの申請も増加した。また、蛍光 X 線ホログラフィなど、従来の分科、小分科の区分を超えて検討すべき課題も申請されるようになった。課題数が多く、課題の研究分野が多岐にわたる状況であるため、異なる専門分野でも評価基準が比較できるレフェリー制度を尊重しつつ、小分科会で審査を行った。新規申請や大学院生による申請もあり、利用分野の広が

りに寄与している一方で、これらの申請では、実施可能性やビームタイムの算出の検討が十分でない場合も多い。常に最先端研究が実施されるよう、新しい利用研究の開拓、新規利用実験での申請前の十分な検討など、利用者側と施設側の相互努力に期待したい。

D2 小分科は、高温高压 (BL04B1) および高压構造物性 (BL10XU) のビームラインで行われる課題を中心に審査している。BL04B1 では大容量高压プレスを使った地球科学分野の実験が行われている。国内からの申請課題は、高压下で密度測定と超音波速度測定を行うことで弾性定数を決定すること、高温高压下において X 線回折実験によって格子体積を正確に決定し、状態方程式を決定すること、高温高压下での変形流動実験を行うことなど、高压地球科学の課題が卓越していた。また、海外からの申請も増加する傾向にあり、これらは地球科学的な課題のみならず、物質合成、新素材の圧縮特性の測定など材料科学を志向する課題も申請された。

BL10XU では、ダイヤモンドアンビルセルとレーザー加熱を組み合わせた高温高压実験、冷凍機を組み合わせた低温高压実験、さらに、ラマン散乱、放射光メスバウア分光を組み合わせた複合測定が可能で、高压力下での多重環境下の複合測定を行えるユニークな放射光実験ビームラインとなっている。このビームラインにおいては、海外からの申請が増加しつつあり、2017A 期には 50% と非常に多くなり、極めて競争が激しいビームラインになっている。国内からの申請課題は、地球科学の課題と高压材料物性の課題が同程度であり、高温高压 X 線粉末回折による相平衡の解明、格子定数の精密測定による状態方程式の決定、物質の融点の決定と液体やガラスの物性測定などの課題が申請されている。海外からの申請課題のほとんどすべ

てが高圧材料物性の課題であった。海外からの申請は、目的・意義・方法の記述に不適切なものも認められ、何らかの改善の助言をすることで、採択率が向上できる課題も多い。

これ以外の D2 の申請課題として、ダイナミクス、カイネティクス、イメージングなどに注目する高圧実験が増えていることも最近の傾向と言える。その結果、非弾性散乱測定やイメージングが可能なビームラインへの申請数が増加しており、高圧科学の新たな動向となりつつあることが伺える。

D3 小分科 (材料イメージング: CT、トポグラフィ等) では、投影および結像イメージング・CT (課題によっては位相コントラスト) などを含めた X 線イメージング (BL20B2、BL20XU、BL47XU) やトポグラフィ (BL28B2) の課題申請が主であり、これらイメージング法の高度化を目的とした X 線光学系の開発課題も申請がある。概ね視野の大きさで、BL20B2 と BL20XU・BL47XU の棲み分けがなされており、高い光子密度やマイクロメータ以下程度の高空間分解能を必要とする場合は、BL20XU か BL47XU のいずれかに限られる。BL47XU は硬 X 線光電子分光 (HAXPES) との共用であり、以前は競争率が高かったが、2015B-2017A 期においては必ずしもそうとは言えなくなっている。BL20XU の競争率が高い傾向にあるが、第 2 希望の BL47XU で採択されることはほとんどなく、申請書の質そのものが採否にとって重要であると言える。研究分野は、物質科学・材料科学が主であるが、この他にもビームライン技術、生命科学、医学利用、地球・惑星科学、宇宙科学、考古学など多岐にわたっている。そのため、放射光利用の必然性だけでなく、専門分野が違う審査員にも申請課題の科学的価値が容易に理解できるような申請書の書き方が重要であろう。また、2015A 期から新設された社会・文化利用課題へ応募した方が通りやすいのではないと思われる申請もあった。海外のユーザーからの申請の採択率がやや低い傾向にあるが、これも多くは事前の相談不足にあると思われる。今後とも、イメージングにおける放射光利用の特性をよく理解し、新しい科学成果を追求した、また新しいイメージング技術の開発やその科学的応用に関する申請がなされることを期待したい。

D4 小分科では、非弾性散乱をキーワードとする課題を審査している。関係するビームラインは、BL08W、BL09XU、BL35XU で、それぞれコンプトン散乱法、核共鳴散乱法、高分解能非弾性 X 線散乱法をベースとするビームライン群である。高エネルギー X 線を必要とするコンプトン散乱法の BL08W は世界的にただ一つのビームラインであり、海外からの申請が多くを占めている。またその対象物質も以前は強相関物質群の電子軌道状態や、極端条件下での物質電子状態研究といった基礎科学を中心としたものであったが、電池材料のイメージングなどの新しい応用分野への広がりも生じてきており今後の展開を期待したい。BL09XU が展開している核共鳴散乱法も第三世代放射光源によって発展してきた手法であるが、近年、磁性材料から生物試料に至る幅の広い応用研究が展開されてきている。2017 年度からは生物応用の長期利用課題が 2 件採択された。一方、硬 X 線光電子分光 (HAXPES) の実験もビームラインとして受け入れているため、今後も、本ビームラインの混雑が予想される。BL35XU が展開する高分解能非弾性 X 線散乱法も第三世代放射光源によって発展してきた手法である。超伝導物質群をはじめとする強相関電子系物質群、液体・ランダム系の格子振動観測、そして地球科学で代表される高圧下での物質群を中心に基礎科学分野で広い応用研究が展開されている。

D5 小分科 (合成高分子) では、高分子材料 (合成高分子、天然高分子、生物関連高分子など) を対象とし、その分子鎖構造、結晶構造、高次構造の広角および小角を用いた構造解析に加え、フィルム、繊維、コンポジット、ゲル、薄膜、射出成型品の動的な構造形成機構に関する研究が申請の大半を占めている。手法としては、広角回折および小角散乱の別々の測定に加え、広角・小角同時測定、マイクロビーム回折、昇温あるいは延伸過程における時分割測定などが中心である。使用ビームラインは、BL40B2、BL45XU、BL40XU の利用がほとんどである。最近では、学術を中心として行われてきた前述の基礎研究に加え、食品中での氷の形成、パーマネント剤が髪に与える影響、光学素子に関する研究など、産業界からの申請も徐々に増え、研究の幅が広がってきている。しかし、学術からの申請に目を向けると、申請および採択されるメ

ンバーが固定化しており、新しい学術メンバー（博士課程の学生を含む、30代以下の若い研究者）にもっと積極的に課題申請を行ってもらいたく、事前相談や書類作成のサポートの必要性を実感している。また、実験対象に目を向けると、従来のポリエチレンやポリエチレンテレフタレートなどの石油合成高分子が大半を占め、若干重箱の隅をつつくような研究が多いと感じている。今後は、新規に化学合成された高分子や生物由来高分子などの新たな高分子材料の合成・反応機構や機能発現の解明を目指した基礎および応用研究に果敢に挑戦してもらいたいと思っている。

そこでD5小分科では、これまでの審査分野「合成高分子」を「高分子（タンパク質は除く）」と変更することにした。これまでのユーザーに加え、新規ユーザーからの新しいチャレンジな提案を大いに期待している。その際、結果が出る・出ないにとらわれることなく、審査員は提案内容をよく吟味し、将来性を加味した評価をするよう意識改革を行う必要があるとともに、冒険心あふれる申請を10%程度採択できる余裕の必要性を感じている。そのためには、守りに徹し過ぎず、攻めの姿勢を忘れないことが重要であり、JASRI全体の課題審査に対する考え方も少し変革する時期にきているのではと個人的には考えている。

D6小分科では、非晶質（アモルファス、液体等）と不均一系（表面界面構造、ナノ構造等）に関する申請を審査している。前者はBL04B2、後者はBL13XUを用いる実験が多いが、BL40B2他の様々なビームラインが用いられている。

小分科への総申請数は、71、62、80、72であり、この2年では変化は少なかった。過去3回の申請数で並べると、BL04B2-BL13XU-BL40B2であったが、2017A期ではBL13XU-BL04B2-BL40B2であった。BL04B2の一部の課題がBL13XUに移ってきて、BL13XUの課題が増えている印象である。

一層の成果創出につなげるために平均評価点のみを採択の判断材料に用いるのでよいのだろうか、ということが審査委員会で話題に上がった。特に汎用性の高いビームラインへの申請課題は、様々な小分科で審査されるものが混在するため、異なる基準で出された点数に加えて他の判断材料をどうするのか、ということである。結論は出ていないが、今後慎重に検討され

る項目の一つであろう。たとえばBL13XUは採択率が約38%であり、採否は点数だけで結局判断されている。2017A期の結果では、平均評価点が3-3.2の間にあり、他のビームラインでは採択される点数で評価された10課題が採択されなかった。また、このビームラインに限らず、汎用性の高いビームラインでは採択課題とビームラインの名称との関係性が解離する場合がある。そのようなビームラインについては今後のあり方を含め将来計画の中で議論されてはどうかという提案もあった。

解析手法に関して2体分布関数(PDF)、ホログラフィ解析を用いる課題申請が増加している。適切な小分科にそのキーワードを追加するかどうかについても審査委員会で話題になった。

分筆いただいた、D2小分科の大谷栄治先生（東北大学）、D3小分科の土山明先生（京都大学）、D4小分科の河田洋先生（高エネルギー加速器研究機構）、D5小分科の岩田忠久先生（東京大学）、D6小分科の坂田修身先生（物質・材料研究機構）に感謝いたします。最後に、分科会委員やレフェリーの先生方、JASRIの関係者に深く感謝いたします。

藤原 明比古 FUJIWARA Akihiko

関西学院大学 理工学部  
〒669-1337 兵庫県三田市学園2-1  
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 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  
首都大学東京大学院 都市環境科学研究科 宍戸 哲也

平成 27~28 年度 (2015B~2017A 期) の XAFS・蛍光分析分科会主査を仰せつかり、2 年間微力ながら務めさせていただきました。XAFS・蛍光分析分科会では、分科会委員の宇留賀朋哉先生 (JASRI) と高橋嘉夫先生 (東京大学) に私を加えた計 3 名で、XAFS と蛍光 X 線・微量分析および軟 X 線分光を担うビームラインについて課題審査を担当致しました。

XAFS と蛍光 X 線・微量分析に関する課題を大雑把に分類すると XAFS に関する申請課題の割合が多いのですが、最近では複数のビームラインの利用を組み合わせるマルチプローブ実験に関する申請課題も増加しつつあります。また、ビームラインの時間分解能・空間分解能の性能向上に加え、ガス導入、無害化装置の設置や、各種分析装置をはじめとして様々なアタッチメントの導入が進んだことを反映して、いわゆる *in-situ* 分析、*operando* 分析に関する課題が増加する傾向にあります。これは、ユーザーのニーズに対してスタッフ・施設サイドの多大な努力があったからこそ、はじめて達成された状況だと思えます。ユーザーとしてスタッフ・施設の御尽力に深く感謝の意を表したいと思えます。

さて、*in-situ* 分析、*operando* 分析については、例えば、ガスの導入経路の確保やリークテストなどを含めた実験準備段階の時間がある程度必要となることなどを反映して、1 申請課題あたりのシフト数が増加する場合があります。最近では、その結果、全体の採択課題数は、見掛け少ない目になる傾向があると感じています。また、実験をスムーズに行うためには、ビームライン担当者との事前の打ち合わせやセルなどの設計を含む予備実験の重要性が高くなることは言うまでもありません。ビームライン担当者との事前打ち合わせは、実験の問題点や見落としがち点について考える良い機会であり、それ以降の課題申請の際に非

常に役立ちます。従って、担当者の過度な負担にならないように十分配慮の上、可能な限り事前打ち合わせを実施していただくことが、ビームタイムの有効活用に対して望ましいと考えます。

課題審査は、JASRI 安全管理室による安全審査とビームライン担当者による技術審査をパスした上で、4 名のレフェリーの評価を軸に行われます。従って、実験の意義や目的が分かり難いと、傾向として評価が低くなり、ビームタイムの配分が行われないこととなります。実験の意義と目的が分かり易い形になるよう申請書を作成していただければと思います。また、サンプルの選定の理由を明確にすることは、必要なビームタイムの算出の根拠を評価する上で重要となります。つまり、闇雲にサンプル数を増やすのではなく、何故そのサンプルの測定が必要であり、データを比較することでどのような情報が得たいのか?を明確に記載していただくことは、レフェリーからみて、実験の意義と目的の理解を容易にする上でも重要です。

つい先日、*Nature* 誌で重要な雑誌における日本の研究者の貢献度が低下していることが指摘されたことは、皆さんの記憶にも新しいと思えます。SPring-8 は、世界最高水準の施設とスタッフを有する国内の放射光利用の世界的拠点であり、J-PARC、京コンピュータとの連携も含め、国内外における基礎学術研究と社会の要請に応える戦略的研究の両者に対して果たすべき役割が大きいことは論を俟ちません。上述した様に日本の科学の課題が指摘される状況下において、今後もその役割の存在意義は大きく、ユーザーが魅力的な実験を実施し、有意義な成果を挙げるためにも、ユーザーは、配分されたビームタイムの有効利用に努めることが必要であると考えます。配分された貴重なビームタイムが可能な限り有効利用され、その結果として今後も SPring-8 から継続的に研究成果が生み出

されること、またそれがトリガーとなって研究が発展  
することを願ってやみません。

穴戸 哲也 *SHISHIDO Tetsuya*

首都大学東京大学院 都市環境科学研究科  
〒192-0397 東京都八王子市南大沢 1-1  
TEL : 042-677-2850  
e-mail : shishido-tetsuya@tmu.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 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  
 広島大学大学院 理学研究科 木村 昭夫

平成 27、28 年度の SPring-8 利用研究課題審査委員会 (PRC) 委員として分光分科会の主査を務め、実験課題の審査に携わりました。課題審査は例年通り、S1 と S3 分科会と合同で行われました。S1 分科会では、光電子分光、光電子回折、発光分光、赤外分光等の実験手法を用いた研究課題について審査いたしました。磁気分光を主なツールとする課題と実験責任者のフィールドが近く、ビームラインも共通することが多いため、S3 分科会と合わせて審査を行うことで、複数の意見を集約して効率よく進めることができたと思います。S1 分科会の審査メンバーは、木須孝幸先生 (大阪大学)、室隆桂之氏 (JASRI)、S3 分科会の審査メンバーは、主査の小森文夫先生 (東京大学物性研究所)、中川剛志先生 (九州大学)、中村哲也氏 (JASRI) でした。

本分科会は、SPring-8 の一般課題を対象としており、長期利用課題や重点課題等については既にシフト配分が決定されている中、残りの限られたシフト枠に配分する課題を決定するものです。レフェリーによりそれぞれの課題について評価点・コメントがつけられており、ビームラインごとにそれが高い順番に並べられた資料を見ながら、審査が行われました。審査の際、ビームライン担当者による、安全審査や技術審査は、課題とビームラインとのマッチングについての情報を得る上で大変重要視されます。また、場合によっては、要求シフト数が実際に必要なシフト数よりも多い場合があります、この点は、技術審査結果を参考にする場合が多かったように思います。このようにレフェリーによる評点でおおよその採否は決定されますが、分科会の最大の役割は、ボーダーラインに位置する課題に

ついて慎重に議論し採否を決めていくことでした。また、残念ながら配分シフト数がゼロと判断された課題については、申請者がディスカレッジせず、申請書をより充実させ次回にチャレンジしていただくよう配慮いたしました。

ビームラインによっては、競争率が4倍を越えるところも見受けられ、他のビームラインでは採択ボーダーラインを十分に越える評価点でも不採択になるというものもありました。もちろん、質の高い課題が実行される意味では喜ばしいことですが、「はやりの研究」には相当せず、真の挑戦的な研究等が排除されてしまうというジレンマに陥りがちなことは否めません。全く新しいアイデアに基づく挑戦的な課題は、やはり一般課題として申請されるはずですので、上記のように他の重点課題で圧迫されたシフト数ではなかなか困難な状況です。これについては簡単に解決できることではありませんが、いま SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) でワーキンググループが立ち上がり、議論が始まった「ビームライン高性能化」と合わせて、十分議論されるべきことと感じました。

最後に、SPring-8 の課題審査という重要な役目終え、安堵するとともに、多大なるご協力をいただいた分科会委員の皆様、レフェリーの皆様、JASRI 関係職員の皆様に感謝いたします。

木村 昭夫 *KIMURA Akio*

広島大学大学院 理学研究科  
 〒739-8526 東広島市鏡山 1-3-1  
 TEL : 082-424-7471  
 e-mail : akiok@hiroshima-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 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

公益財団法人佐賀県地域産業支援センター 九州シンクロトン光研究センター  
平井 康晴

SPring-8 利用研究課題審査委員会産業利用分科会は、2015A 第 2 期から 2017A 第 1 期までの 2 年間、主査：平井康晴、委員：松井純爾、木村正雄、渡辺義夫、佐野則道の 5 名により産業利用分野の研究課題審査を行いました。なお、報告者は主査を 2 期 4 年間担当しました。以下に、当分科会の活動経過と気付いた事項を報告します。

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」および領域指定型研究課題の「産業新分野支援課題」（2015A 第 2 期～2017A 第 1 期）の審査を行いました。産業利用分野の課題募集は年 4 回の利用期（例えば 2015A 第 1 期、同第 2 期、2015B 第 1 期、同第 2 期）に分けて行われ、他分科が年 2 回（例えば 2015A 期、2015B 期）であることと比べると、産業界のニーズにより迅速に対応可能となっています。但し、「一般課題」、「大学院生提案型課題」および「産業新分野支援課題」で利用出来るビームラインは、年 4 回の利用期で異なります。「一般課題」と「大学院生提案型課題」は、第 1 期（例えば 2015A 第 1 期と 2015B 第 1 期）では全共用ビームラインおよび一部共用に供する理研ビームラインで募集が行われ、「産業新分野支援課題」は、共用ビームラインのうち産業利用に限定した 3 本のビームライン（BL14B2、BL19B2、BL46XU）でのみ募集が行われます。また、第 2 期（例えば 2015A 第 2 期と 2015B 第 2 期）では、全ての課題は上記 3 本のビームラインでのみ募集が行われます。そして、利用課題数の実績では、これら 3 本の産業利用ビームラインでの利用が多数を占めてきました。

また、産業利用の趣旨を活かす観点から「一般課題」への応募には、2015A 第 1 期から民間企業または産業界に準じる機関に所属する方の参加が必要となり

ました。さらに、「産業新分野支援課題」への応募には、2017A 第 1 期から「一般課題」と同様に民間企業または産業界に準じる機関に所属する方の参加が必要となりました。この措置は一時的に応募課題件数に影響するかもしれませんが、産業利用分科の役割を明確にする上で妥当な変更と言えます。なお、「大学院生提案型課題」は民間企業等の参加を必要としていません。

さて、産業利用分野の応募課題数と採択率の年度推移を迫りますと、「一般課題」の応募課題数は減少傾向にあり（2013A 期：149 課題→2016B 期：131 課題）、採択率は高くなる傾向にありますが（2013A 期：63%→2016B 期：67%）、それほど大きな変化は認められません。但し、実験責任者が民間企業に所属する課題の応募件数は年々減少傾向にあります。これは、成果専有課題（測定代行を含む）への移行等が考えられます。また、利用分野の変化は大きく、エレクトロニクス分野の応募課題数は急減しています（2016B 第 1 期：23 課題→2017A 第 1 期：15 課題）。また、素材・原料分野も同様に減少傾向が見られます。一方で、健康・生活用品分野の応募課題数はほぼ横ばいであり（2016B 第 1 期：12 課題→2017A 第 1 期：11 課題）、後述の食品加工産業の参入による将来展開の可能性は大きいと考えられます。

次に、「産業新分野支援課題」の応募課題数は 2015B 期以降減少しています（2014A 期：13 課題→2015B 期：20 課題→2016B 期：11 課題）。また、採択率は年々低くなっていますが（2014A 期：77%→2016B 期：36%）、これは、課題募集の趣旨に沿わない（「一般課題」で応募すべき）課題が増えているためです。このことは、本来、「産業新分野支援課題」によって新分野が形成され、「一般課題」の募集分野に移行すべきことを考えると、その過渡的状況を反映しているとも

考えられます。一方、採択された課題は食品加工分野が多く、新しい利用分野の開拓が進んでいることを示しています。

ところで、課題審査での不採択の理由には、(1) 申請内容の検討不足（ビームライン担当者による実験困難の判断、募集の趣旨との不適合等）、(2) 実験室タイプの装置での事前検討の推奨等、がありますが、いずれも施設担当者（コーディネーター）に利用相談することで事前に最適解を得ることが可能です。また、実施可能な課題についても、利用相談により実験手順の最適化や試料回りの工夫に関するヒント等を得ることが出来ます。その意味で、これら採択の可能性を高める申請準備段階の利用相談・技術相談を、申請書作成の自然な流れの中で申請者に促すよう、コーディネートシステムの一層の高度化が期待されます。

最後にレフェリーによる課題評価についてお願いを記します。課題は相対評価を行い、評価点は各レベルの課題数が均等になるように配点されるはずですが、場合により各レベルの課題数が均等でなく、分科会での公平な審査に苦慮する結果となりました。ルールに則ったレフェリー評価を是非お願いしたいと思います。なお、2年前の主査報告では、レフェリーコメントの記載励行をお願いしました。その結果、とくに採否の境界上にある課題の審査について、分科会でレフェリーコメントに基づいた多面的な検討が可能となったことを追記致します。

この2年間、課題審査にご尽力いただきました審査委員ならびにサポートいただきました産業利用推進室を含む事務局スタッフの皆様にご心より感謝申し上げます。

平井 康晴 HIRAI Yasuharu

（公財）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  
〒841-0005 佐賀県鳥栖市弥生が丘 8-7  
TEL : 0942-83-5017  
e-mail : hirai@saga-ls.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 — 社会・文化利用分科会 —

SPring-8 利用研究課題審査委員会 社会・文化利用分科会主査  
公益財団法人特殊無機材料研究所 鈴木 謙爾

社会・文化利用分科会は、環境、安全、文化財、考古・遺物、宇宙、食品等々の社会生活や文化活動に直結する分野の課題を SPring-8 を用いて科学的に解明するミッションを負って、2015A 期からスタートし、2017A 期を以って、最初の 2.5 年間の任務を終えました。

初めに、社会・文化利用分科会に特化した課題審査のプロセスについて簡単に紹介しておきます。スタートしたばかりの社会・文化利用を促進するために、この最初の 2.5 年間は重点領域に指定されて、共用ビームライン 23 本の全ユーザータイムの 4%、そして個々のビームラインについては夫々 8% を上限として、ビームタイムの優先的配分を受けました。さらに、課題審査に際しては、相対評価が行われている他の分科会と異なり、社会・文化利用分科会の性格上、申請課題分野を専門とする複数のレフェリーによる絶対評価が重視されました。

さて、下記の表にこの最初の 2.5 年間における各期の申請課題数ならびに採択課題数をまとめて示します。

期	申請課題数	採択課題数
2015A	16	14 (1)
2015B	24	21 (3)
2016A	21	20 (1)
2016B	24	23 (2)
2017A	22	22 (3)

表中の採択課題数の( )は、一般課題として採択された課題数です。社会・文化利用分科会に申請された全課題の内、[社会の範疇に属する課題数] / [文化の範疇に属する課題数] の割合は、2015A 期ではほぼ 1/1、2015B 期では 1/2、2016A～2017A の 3 期では 1/5

となり、文化利用課題の著しい増加傾向が認められます。社会利用課題の主な分野は、大気・土壌、食品、健康、法科学等であり、福島第一原発由来の放射能汚染に関する課題が注目されました。文化利用課題では、化石・隕石、陶磁器、ガラス、鉄製品、絵画、漆、木材、繊維、染料等が多く見受けられました。マイクロ CT イメージングによる化石や隕石の内部組織観察に関する課題の申請が 2016A 期以降に急増し、20～25% に達しました。化石や隕石が社会・文化利用分科会で審査する課題であるか否かは議論のあるところですが、SPring-8 の特性を活用した社会的関心の高い研究領域であることは間違いありません。

審査委員会において言及された問題点やコメントのいくつかを以下に列記します。

- ・一般課題としては不採択であるが、重点領域指定による特別枠の設定により採択された課題が 40～50% を占めました。このことは、SPring-8 における社会・文化利用を活性化するという重点領域指定の狙いが大いに効果を発揮していることを物語っています。しかし、このような優遇措置を永久に続けることは難しいので、社会・文化利用分科会の申請課題が一般課題と同等程度までレベルアップする方策を積極的に講じなければなりません。文化財分析技術ワークショップや関連する研究会の開催は極めて有効な方策の一つと考えられます。
- ・社会・文化利用分科会の性格上、申請課題が複数ビームラインにまたがり、申請者が SPring-8 に less-familiar であるケースが少なくありません。したがって、最適なビームラインの選択や安全対策のためにも、事前にビームライン担当者と詳しく相談・打合せを済ませておくことを課題申請に際しての必要条件とするのは如何でしょうか？

- ・測定試料として SPring-8 に持ち込まれる文化財の中には、この世に一つしか存在しない、あるいは国宝・重要文化財に指定されているものがあり得るでしょう。貴重な試料が盗難や破損に遭遇した場合の対処の仕方、実験中の安全な保管等について予め検討をしておく必要があるのではないのでしょうか？
- ・SPring-8 が公的機関である以上、趣味的なマニアックな課題の申請は避けられるべきですが、研究の自由を制限することは許されません。課題の申請ならびに審査に際して、広い社会的関心と趣味的なマニアックの間の線引きを如何様に決着させるかは、ユーザーならびにレフェリー双方にとって慎重に考察しなければならないテーマです。同様なことは、成果の評価に関しても言えるでしょう。

いくつかのヨーロッパの放射光施設では、文化財や考古遺物の長期間にわたる系統的かつ組織的測定が展開されており、定期的に関連する国際会議も開催されています。人類の歴史的遺産を引き継ぎ、深めて、そして次世代に渡していくために、SPring-8 こそがこの役目を担い、かつ先導する意義は極めて大きいと考えます。社会・文化利用分科会における研究活動がますます盛んになることを願って止みません。

鈴木 謙爾 SUZUKI Kenji

公益財団法人特殊無機材料研究所  
〒982-0252 仙台市太白区茂庭台 2-6-8  
TEL : 022-281-0572  
e-mail : k.suzuki@aims.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 7 — 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 物質構造科学研究所 村上 洋一

2015、2016 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。本分科会での審査の概要を報告いたします。

長期利用課題の審査は、第 1 段階として書類審査を行い、書類審査を通過した申請者に対し、第 2 段階として面接審査を行っています。長期利用分科会での審査基準は、他分科会での審査基準に加え、1. 長期の研究目標およ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. 新しい研究領域および研究手法の開拓、C. 産業基盤技術の著しい向上、となっています。

SPring-8 の共用ビームラインでは、様々な利用制度が導入されており、一般課題（成果非専有）および重点課題に配分できるビームタイムが厳しくなってきたという理由により、長期利用課題の運用の見直しが行われました。その結果、2016A 期より、以下のような変更が行われました。

1. これまで長期利用課題は、採択されれば最長 3 年間（6 期）有効でありましたが、期間を短縮して 2 年間（4 期）となりました。
2. 複数のビームラインを利用する課題の場合、これまで各ビームラインで 16% を上限としておりましたが、利用ビームラインの本数に限らず、合計 16% を上限とすることになりました。
3. これまでは年 2 回の新規の公募を行っていましたが、公募は年 1 回として、各 A 期から始まる課題のみとなりました。
4. 既に長期利用課題またはパートナーユーザー課題を合計 2 課題以上受け入れているビームラインは、新規の長期利用課題の公募対象外とすることになりました。

任期 2 年間で新規に採択した長期利用課題は以下の 8 課題です。

[2016A]

小原 真司 課題 (BL01B1、BL04B2)  
Jonathan Duffy 課題 (BL08W)  
Stuart Hooper 課題 (BL20B2)  
豊島 近 課題 (BL41XU)

[2017A]

宮寺 哲彦 課題 (BL46XU)  
Edward Solomon 課題 (BL09XU)  
犬飼 潤治 課題 (BL46XU)  
Stephen Cramer 課題 (BL09XU)

いずれの課題も SPring-8 の特徴を活かした挑戦的な課題であり、所期の成果が得られれば、学术界や産業界に大きなインパクトを与える課題であると判断しました。今後の成果創出に期待したいと思います。

本分科会の審査は、外部委員 7 名と内部委員 3 名で行って来ました。各委員には本分科会で公平で真摯なご議論をいただきましたことを心より感謝いたします。

村上 洋一 MURAKAMI Youichi

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所  
〒305-0801 茨城県つくば市大穂 1-1  
TEL : 029-864-5589  
e-mail : youichi.murakami@kek.jp



## 第 39 回 (2017A) 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 39 回共同利用期間 (2017 年 4 月 8 日～7 月 31 日 (放射光利用 264 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 2017A を 2 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 2017 年 4 月 8 日～6 月 24 日 (177 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]

2016 年 11 月 7 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 2016 年 11 月号に募集案内記事を掲載)

11 月 12 日 成果公開優先利用課題応募締切

11 月 22 日 長期利用課題募集応募締切

12 月 8 日 一般課題、大学院生提案型課題および領域指定型重点研究課題 (産業新分野支援課題および社会・文化利用課題) 応募締切

#### [課題審査、審査、採択および通知]

12 月 13 日 長期利用分科会による課題審査

2017 年 1 月 13 日～24 日

各分科会による課題審査 (長期利用以外)

1 月 25 日 SPring-8 利用研究課題審査委員会 (PRC) による課題審査

2 月 6 日 SPring-8 選定委員会の意見を聴取

2 月 10 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

2017A の特記事項は下記のとおりです。

#### ○社会・文化利用課題の指定期間延長

国民の関心や社会的要請が高い事項に係る研究を推進するため、「社会・文化のための利用領域」を重点領域として 2015A 期より 2016B 期までの 2 年間

で設定していましたが、これを 2018B 期までの 4 年間に延長しました。

#### ○産業新分野支援課題の申請要件変更

これまで、「一般課題 (産業利用分野)」に設定していた課題申請の要件「実験責任者または共同実験者に、民間企業または産業界に準ずる機関等に所属する者を含む」を、産業新分野支援課題にも新たに設定しました。

#### ○産業利用 BL19B2 の配分ビームタイム変更

増加傾向にある BL19B2 の測定代行ニーズ (BL19B2 では粉末 X 線回折と小角散乱の 2 手法) を踏まえ、当該 BL において、従来の高度化・調整ビームタイム枠 (全ビームタイムの 20%) 内での実施に加え、新たに測定代行枠 (同 5% 上限) を追加で設定しました。

#### ○大学院生提案型課題の申請要件変更

これまで、大学院生提案型課題に設定していた課題申請の要件「課題申請者 (= 実験責任者) が、課題実施時に大学院前期・後期課程に在学中であることを」、「(略) 大学院生後期課程に (略)」へ変更しました。

2017A の新規応募課題数は 846、採択課題数は 590 でした (パートナーユーザーが行う課題および既に採択されている長期利用課題の 2 期目以降の課題等を除く)。表 2 に 2017A 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。2-1 に決定課題種、すなわち重点課題として応募された課題で一般課題として採択された課題の課題種を一般課題として整理した統計を示します。2-2 に本来の産業新分野支援課題および社会・文化利用課題の応募数と採択数を示します。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、すなわち、成果非専有一般課題、大学院生提案型課題、産業新分野支援課題、社会・文化利用課題および長期利用課題への応募782件について、ビームラインごとの応募課題数、採択課題数および採択率ならびに配分シフト数と、採択された課題の1課題あたりの平均配分シフト数を表3に示します。また表4に、全応募846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」と連携して利用する課題として、SPring-8には9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-

ムラインの第2期分や、期中に随時募集する成果専有時期指定課題等は含まれていません。

### 3. 採択課題

2017A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/>  
 なお、2017A期に新規で採択された長期利用課題、また、新規で指定または指定期間が延長されたパートナーユーザー(か行う課題を含む)の紹介を本誌に掲載しています。

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*	応募締め切り**	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	(846)	(590)

\*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。

2017Aは今後、産業利用ビームラインの第2期分、期中随時募集の成果専有時期指定課題があるため現在の値は括弧内に示す。

表2 2017A 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

2-1

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) **	686	472	68.8	94.3
一般課題 (成果専有)	27	27	100.0	98.8
大学院生提案型課題*	67	28	41.8	82.6
(重点) 産業新分野支援課題*	3	3	100.0	100.0
(重点) 社会・文化利用課題*	19	19	100.0	98.4
成果公開優先利用課題	37	37	100.0	100.0
長期利用課題	7	4	57.1	41.2
総計	846	590	69.7	92.8
科学審査対象課題**のみの合計	782	526	67.3	92.1

\*重点課題で応募のうえ一般課題として採択されたものは、それぞれ決定した課題種で応募数を表示。  
 \*\*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 9 課題のうち 6 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。

2-2

応募課題種	応募課題数	重点課題としての採択課題数	一般課題としての採択課題数	重点課題としての採択率 (%)	課題採択率 (%)
(重点) 産業新分野支援課題	5	3	2	60.0	100.0
(重点) 社会・文化利用課題	22	19	3	86.4	100.0

表3 2017A 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	47	23	48.9	145	6.3
BL02B1 : 単結晶構造解析	21	17	81.0	135	7.9
BL02B2 : 粉末結晶構造解析	40	28	70.0	141	5.0
BL04B1 : 高温高圧	20	9	45.0	126	14.0
BL04B2 : 高エネルギー X 線回折	19	15	78.9	111	7.4
BL05SS : 加速器診断	3	3	100.0	12	4.0
BL08W : 高エネルギー非弾性散乱	17	14	82.4	168	12.0
BL09XU : 核共鳴散乱	25	11	44.0	150	13.6
BL10XU : 高圧構造物性	34	15	44.1	120	8.0
BL13XU : 表面界面構造解析	45	17	37.8	162	9.5
BL14B2 : 産業利用 II	17	14	82.4	92	6.6
BL17SU : 理研 物理学 III	5	4	80.0	48	12.0
BL19B2 : 産業利用 I	18	17	94.4	102	6.0
BL19LXU : 理研 物理学 II	4	2	50.0	51	25.5
BL20B2 : 医学・イメージング I	37	21	56.8	171	8.1
BL20XU : 医学・イメージング II	28	17	60.7	150	8.8
BL25SU : 軟 X 線固体分光	27	8	29.6	88	11.0
BL26B1 : 理研 構造ゲノム I***	0	0	0.0	0	0.0
BL26B2 : 理研 構造ゲノム II**	0	0	0.0	0	0.0
BL27SU : 軟 X 線光化学	21	10	47.6	96	9.6
BL28B2 : 白色 X 線回折	17	16	94.1	187	11.7
BL29XU : 理研 物理学 I	3	1	33.3	9	9.0
BL32XU : 理研 ターゲットタンパク****	1	1	100.0	1.5	1.5
BL35XU : 高分解能非弾性散乱	24	13	54.2	210	16.2
BL37XU : 分光分析	16	14	87.5	168	12.0
BL38B1 : 構造生物学 III***	5	5	100.0	21	4.2
BL39XU : 磁性材料	26	14	53.8	147	10.5
BL40B2 : 構造生物学 II	41	33	80.5	197	6.0
BL40XU : 高フラックス	33	21	63.6	159	7.6
BL41XU : 構造生物学 I***	1	1	100.0	4	4.0
BL43IR : 赤外物性	15	15	100.0	174	11.6
BL44B2 : 理研 物質科学	2	2	100.0	15	7.5
BL45XU : 理研 構造生物学 I	13	7	53.8	51	7.3
BL46XU : 産業利用 III	20	15	75.0	119	7.9
BL47XU : 光電子分光・マイクロ CT	28	16	57.1	151	9.4
PX-BL (BL38B1、41XU、26B1、26B2、32XU)	109	107	98.2	-	-
総計	782	526	67.3	3,681.5	7.0

\*成果非専有一般課題、大学院生提案型課題、重点 2 課題、長期利用課題  
 \*\*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及びシフト数)  
 産業利用ビームラインの第 2 期募集分等は含まず。

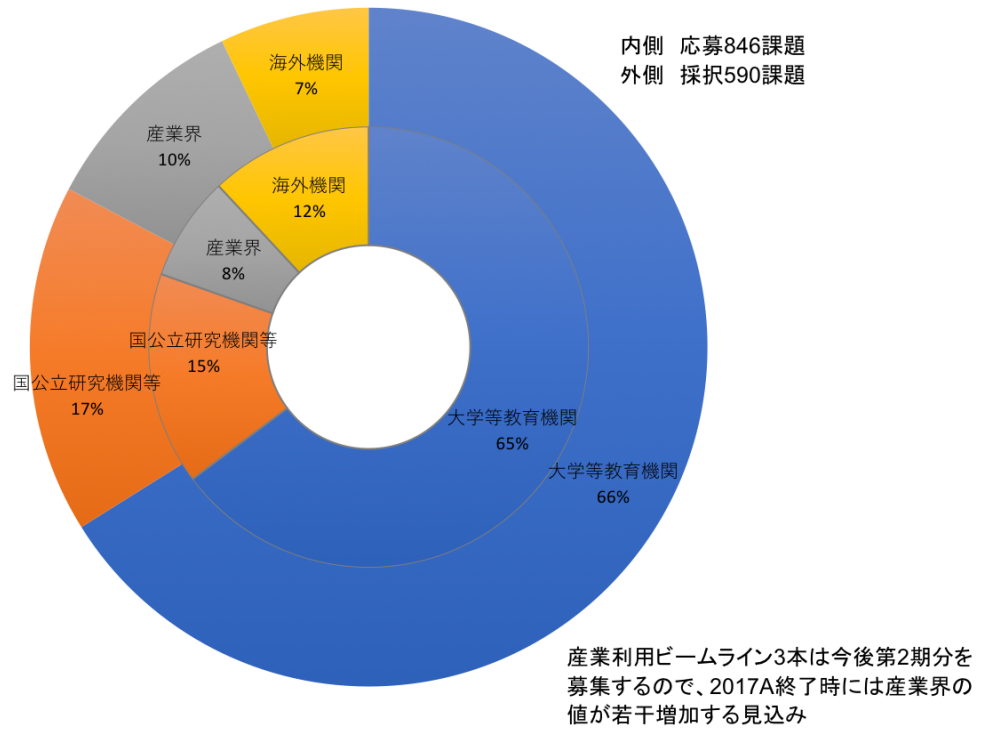


図1 2017A 所属機関別 応募/採択課題数割合

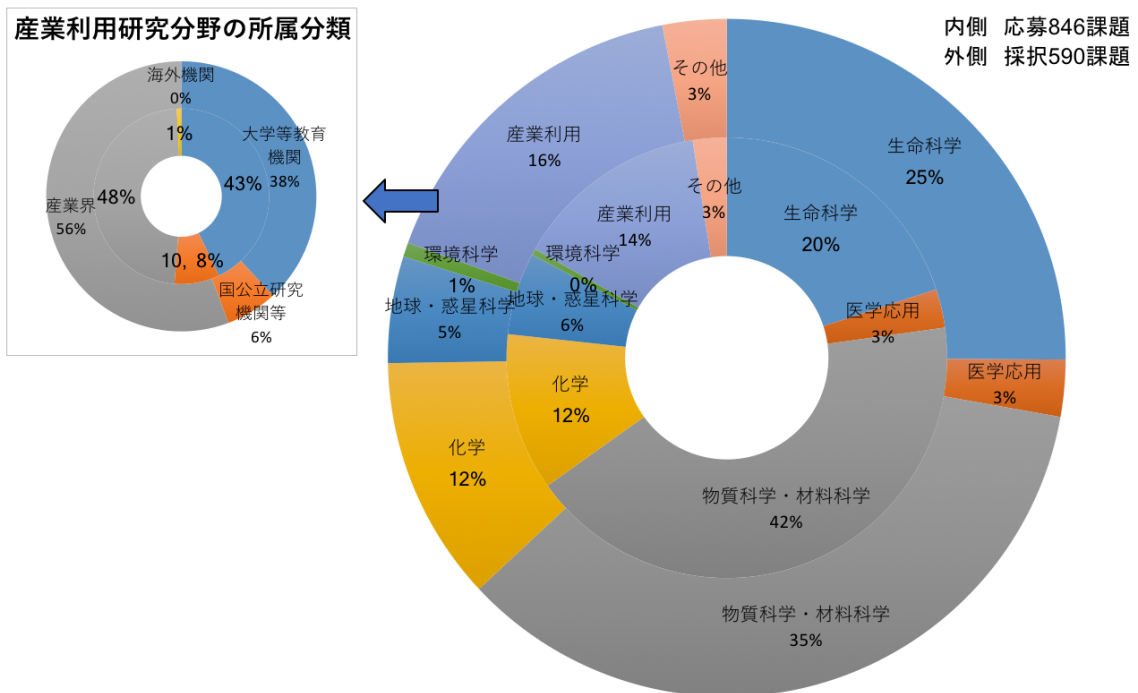


図2 2017A 研究分野別 応募/採択課題数割合

表4 SPring-8 2017A 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・材料化学		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	111	98	9	5	198	127	64	47	24	19	1	1	41	28	4	3	452	328	72.6
		シフト数	308	203	84	45	1720	1047	431.5	311.5	243	201	12	12	319	211	48	24	3165.5	2054.5	64.9
	大学院生提案型課題	課題数	6	6	1	0	31	12	10	3	5	2			5	3			58	26	44.8
		シフト数			9	0	276	73	69	24	57	12			33	21			444	130	29.3
	産業新分野支援課題	課題数													1	1			1	1	100.0
		シフト数													6	6			6	6	100.0
	社会・文化利用課題	課題数	1	1			2	2	1	1	2	2	1	1	1	1	3	3	11	11	100.0
		シフト数	8	6			9	9	6	6	12	12	12	18	6	6	21	15	74	72	97.3
	成果公開優先利用課題	課題数			1	1	9	9	10	10					3	3			23	23	100.0
		シフト数			6	6	57	57	63	63					30	30			156	156	100.0
	長期利用課題	課題数	1	0			1	0							1	1			3	1	33.3
		シフト数	12	0			24	0							12	12			48	12	25.0
合計	課題数	119	105	11	6	241	150	85	61	31	23	2	2	52	37	7	6	548	390	71.2	
	シフト数	328	209	99	51	2086	1186	569.5	404.5	312	225	24	30	406	286	69	39	3893.5	2430.5	62.4	
国立研究機関等	一般課題 (非専有)	課題数	22	22	11	8	50	29	4	3	9	6	2	2	8	5	6	4	112	79	70.5
		シフト数	75	75	129	81	534	345	60	20	108	66	12	12	56	38	36	30	1010	667	66.0
	一般課題 (専有)	課題数	1	1															1	1	100.0
		シフト数	5	5															5	5	100.0
	社会・文化利用課題	課題数	1	1													7	7	8	8	100.0
		シフト数	6	6													45	45	51	51	100.0
	成果公開優先利用課題	課題数					8	8	1	1									9	9	100.0
		シフト数					60	60	4	4									64	64	100.0
	長期利用課題	課題数													2	1			2	1	50.0
		シフト数													46	8			46	8	17.4
合計	課題数	24	24	11	8	58	37	5	4	9	6	2	2	10	6	13	11	132	98	74.2	
	シフト数	86	86	129	81	594	405	64	24	108	66	12	12	102	46	81	75	1176	795	67.6	
産業界	一般課題 (非専有)	課題数			1	1	1	0							32	28			34	29	85.3
		シフト数			18	9	12	0							239	201			269	210	78.1
	一般課題 (専有)	課題数	2	2			3	3							19	19			24	24	100.0
		シフト数	12	12			11	11							86.5	85			109.5	108	98.6
	産業新分野支援課題	課題数													2	2			2	2	100.0
		シフト数													15	15			15	15	100.0
	成果公開優先利用課題	課題数													5	5			5	5	100.0
		シフト数													45	45			45	45	100.0
合計	課題数	2	2	1	1	4	3	0	0	0	0	0	0	58	54	0	0	65	60	92.3	
	シフト数	12	12	18	9	23	11	0	0	0	0	0	0	385.5	346	0	0	438.5	378	86.2	
海外機関	一般課題 (非専有)	課題数	21	14	1	1	46	15	8	4	10	1			1	0	1	1	88	36	40.9
		シフト数	253	87	15	15	576	186	130	63	123	24			21	0	9	9	1127	384	34.1
	一般課題 (専有)	課題数	1	1			1	1											2	2	100.0
		シフト数	6	6			1	1											7	7	100.0
	大学院生提案型課題	課題数					8	2			1	0							9	2	22.2
		シフト数					128	36			6	0							134	36	26.9
	長期利用課題	課題数	2	2															2	2	100.0
		シフト数	96	36															96	36	37.5
合計	課題数	24	17	1	1	55	18	8	4	11	1	0	0	1	0	1	1	101	42	41.6	
	シフト数	355	129	15	15	705	223	130	63	129	24	0	0	21	0	9	9	1364	463	33.9	
合計	課題数	169	148	24	16	358	208	98	69	51	30	4	4	121	97	21	18	846	590	69.7	
	シフト数	781	436	261	156	3408	1825	763.5	491.5	549	315	36	42	914.5	678	159	123	6872	4066.5	59.2	
採択率 (%)	課題数	87.6		66.7		58.1		70.4		58.8		100.0		80.2		85.7		69.7			
	シフト数	55.8		59.8		53.6		64.4		57.4		116.7		74.1		77.4		59.2			

\*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

## 2017A 期 採択長期利用課題の紹介

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用推進部

2017A 期は 7 件の長期利用課題の応募があり、4 件が採択されました。採択された課題の審査結果および実験責任者による研究概要を以下に示します。

### － 採択課題 1 －

課題名	低コストフレキシブル太陽電池の実現に向けた有機無機ハイブリッド材料の構造および電子状態解析
実験責任者名 (所属)	宮寺 哲彦 (産業技術総合研究所)
採択時の課題番号	2017A0136
ビームライン	BL46XU
審査結果	採択する

#### [審査コメント]

有機系の新材料や低温プロセスで作成可能なペロブスカイト太陽電池など、現在普及しているシリコン系太陽電池よりも低コストで高効率な太陽電池開発を目指した研究課題であり、これを実現することができれば社会的意義は高い。申請者らはフレキシブルデバイスの実用化を目指した要素技術を研究開発するため、有機薄膜・有機鉛ペロブスカイト薄膜の結晶構造および電子状態の解析を行うことを提案している。具体的には、(1) 薄膜形成過程の斜入射広角 X 線回折 (GI-WAXS) の実時間観察、(2) 真空製膜した薄膜の構造解析や界面電子状態解析、(3) コンビナトリアル成膜手法を用いた試料の構造・電子状態解析、(4) 有機トランジスタの operando 光電子分光解析が提案されている。しかしながら、放射光を用いた解析結果をより性能の高い材料開発にどの様にフィードバックしていくのか、太陽電池と有機トランジスタがどの様に結びつくのか、課題有効期間の間の具体的な達成目標やそのためのマイルストーンなどや、4つの主要な研究課題を個別課題ではなく、長期利用課題として一体的に実施することによって生み出させる相乗効果が鮮明でなく、相当部分は個別課題でも実施可能と判断される。

一方、有機薄膜形成過程の観察およびモバイルコン

ビチャンバーを SPring-8 の設備と組み合わせて使えるようにすることは、手法開発と平行して研究成果を上げていく上でも長期利用課題が適当であり、手法が実用化することで新しい展開を期待出来るので、是非進めて成果を出して頂きたい。コンビナトリアル解析を行うにあたっては、予め物性を押さえた上で必要な測定を行うなど、限られたビームタイムを有効に活かし、高性能の太陽電池を実現することを期待する。

#### [実験責任者による研究概要]

有機系の新材料を用いた太陽電池によりシリコン太陽電池ではなしえなかった低コスト化を実現することが期待されている。特に 2013 年以降急速に発展し、短期間で 20%を超える高い光電変換効率が達成されたペロブスカイト太陽電池は、低コストかつ高効率な次世代太陽電池として注目されている。ペロブスカイト太陽電池は低温プロセスが可能であることから、高効率なフレキシブル太陽電池の実現も可能となる。また、他の有機材料の代表として有機薄膜太陽電池に関してはフレキシブルやシースルー太陽電池のような形で製品の試作がすでに行われており、実用化に向けた動きが活発となってきた。

本研究課題においてはフレキシブルデバイスの実用化を目指した要素技術の研究開発のため、放射光を利用して、有機薄膜・有機鉛ペロブスカイト薄膜の結晶構造および電子状態の解析を行う。フレキシブルデバイスとして、有機薄膜太陽電池、有機鉛ペロブスカイト太陽電池、さらにはそれらを制御する有機トランジスタを対象とした研究を行う。具体的な実験項目としては、1. 有機薄膜太陽電池や有機鉛ペロブスカイト太陽電池の薄膜形成過程の斜入射広角 X 線回折 (GIWAXS) リアルタイム観察、2. 真空製膜により

精密に制御された有機薄膜、有機鉛ペロブスカイト薄膜の構造解析、3. 同一基板上に組成や製膜温度などの製膜条件を連続的に変化させるコンビナトリアル製膜手法によるサンプルの構造解析、となっている。

研究体制として、産業技術総合研究所、諏訪東京理科大学、東北大学、株式会社コメットと協力して研究を推進する。それぞれが個別のテーマに取り組むという事ではなく、それぞれの技術を持ち寄って一体となって研究を進めていくことで、ハイスループットな物性探索、機能評価を行っていく。SPring-8 の長期利用課題を軸とした産学連携体制を構築し、現在注目を集めているフレキシブルデバイス、特に有機鉛ペロブスカイト太陽電池の研究を推進していく。

－ 採択課題 2 －

課題名	NRVS of mononuclear and binuclear non-heme iron enzyme intermediates and related model complexes
実験責任者名 (所属)	Edward Solomon (Stanford University)
採択時の課題番号	2017A0137
ビームライン	BL09XU
審査結果	採択する

[審査コメント]

This proposal is a renewal of the Long-Term project performed in 2013B through 2016A. The goals of the project are to understand the factors that govern differences in reactivity of mononuclear vs. binuclear non-heme iron enzyme intermediates, to understand the key differences in reactivity for non heme vs. heme iron enzymes, and to determine why different modes of oxygen activation are utilized for specific functions. The research theme set in the project is important in enzyme research. For these goals, a combination of nuclear resonance vibrational spectroscopy (NRVS) experiment and density functional theory (DFT) computation is used, which has been developed by the previous Long-Term project and earlier experiments. This methodology is expected to provide a complete picture of the reaction mechanism on a molecular level.

The renewal proposal includes the extension of the previous studies, such as non-heme facial triad and heme Fe(IV)=O intermediates, Fe(III)-OO(H) intermediate in Rieske dioxygenases, O<sub>2</sub> intermediates in extradiol dioxygenation,

peroxy intermediates and high valent intermediates. These studies are appropriate for achieving the goals and lead to publications in major journals. The experiments proposed are challenging because of low concentration intermediates and thus the project indeed needs the high brilliance x-rays at BL09XU, SPring-8. On the other hand, a new high-resolution monochromator for NRVS will be installed in the BL09XU beamline, which improve the data-taking efficiency. Therefore, the committee recommends that the renewal proposal should be approved with a reduced number of beamtime shifts.

[実験責任者による研究概要]

Mononuclear and binuclear non-heme iron (NHFe and NH<sub>2</sub>Fe, respectively) enzymes exhibit a wide range of chemistry and play important roles in biosynthesis, DNA repair, and the treatment of diseases. The purpose of our research is to use nuclear resonance vibrational spectroscopy (NRVS) to characterize catalytically relevant intermediates of non-heme enzymes and to understand mechanisms governing their unique chemistry. NRVS provides key vibrational information on the NHFe active sites. This vibrational density of states gives geometric and electronic structural insight into the intermediates and their frontier molecular orbitals that are key to reactivity.

Intermediates in NHFe enzymes can be broadly divided into three classes: Fe<sup>IV</sup>-oxo, Fe<sup>III</sup>-(hydro)peroxo, and Fe<sup>III</sup>-superoxo. In the area of Fe<sup>IV</sup>-oxo intermediates, we have recently made great progress in defining the structure of the Fe<sup>IV</sup>-oxo intermediate in the halogenase SyrB2 through NRVS and using this structure to define the frontier molecular orbital contributions that govern hydroxylation versus halogenation reactivity in this class of enzymes. We are now expanding these studies to the Fe<sup>IV</sup>-oxo intermediate in the alpha-ketoglutarate dependent enzyme taurine dioxygenase to form a basis for understanding the hydroxylation, desaturation, and electrophilic aromatic substitution reactions catalyzed by this class of enzymes.

In the area of Fe<sup>III</sup>-(hydro)peroxy intermediates, we have previously used NRVS to define the structure of the active intermediate in the low spin Fe<sup>III</sup>-OOH intermediate in the anticancer drug bleomycin and used this to understand the differences between heme and non-heme Fe<sup>III</sup>-OOH

reactivity. Recently, we extended these studies to a series of high-spin Fe<sup>III</sup> peroxy model complexes to define the effect protonation state and peroxy binding mode have on the NRVS spectrum, allowing us to define spectral features that distinguish between side-on peroxy, side-on hydroperoxy, and end-on hydroperoxyl structures. We are now in the process of extending these studies to the peroxy intermediate in the Rieske dioxygenase benzoate 1,2-dioxygenase to define its structure and correlate this to its reactivity, which we will complete under this long-term proposal.

The extradiol dioxygenases are a class of NHFe enzymes proposed to proceed through a Fe<sup>III</sup>-superoxy intermediate. Previously, we have collected and analyzed NRVS data on two relatively stable intermediates in an extradiol dioxygenase, including a putative Fe<sup>III</sup>-superoxo intermediate and a Fe<sup>III</sup>-hydroperoxo intermediate, that are not reactive in extradiol cleavage, in addition to nitrosyl analogues where NO mimics O<sub>2</sub> binding. This has allowed us to define the structural factors that influence the NRVS spectra of these intermediates. In the current long-term proposal, we are now extending those studies to a series of extradiol dioxygenase intermediates active in extradiol cleavage to define the structures of these intermediates and correlate these to their reactivity in building the reaction coordinate for extradiol deoxygenation. We will also initiate NRVS studies on two intermediates in the intradiol dioxygenase protocatechuate 3,4-dioxygenase, which will define the reaction coordinate of this class of enzymes and, together with the extradiol study, give insight into the factors that govern extradiol versus intradiol cleavage.

NH<sub>2</sub>Fe enzyme reactivity can be divided into two major classes of intermediates: peroxy and high-valent intermediates. For the peroxy intermediates two subclasses are further distinguished: P and P', which exhibit different UVvis absorption bands and Mössbauer parameters (~700 nm,  $\delta \approx 0.66$  mm/s and  $\Delta E_q \approx 1.5$  mm/s for P versus no visible UVvis band,  $\delta \approx 0.55$  mm/s and  $\Delta E_q \approx 0.66$  mm/s for P') and only P' is reactive. With respect to high-valent intermediates, there is the Fe(IV)/Fe(IV) intermediate Q in methane monooxygenase (MMO) and the Fe<sup>IV</sup>/Fe<sup>III</sup> intermediate X in ribonucleotide reductase (RNR). In previous studies, we focused on intermediates P and Q and

we will now extend these studies to understand the P' and X intermediates.

Recently, we showed that P' in AurF, which performs an electrophilic attack, is a hydroperoxy species. We are now extending this to the N-oxygenase CmlI, which is believed to contain a  $\mu\text{-}\eta^1 : \eta^2$  peroxy, rather than a hydroperoxy as in AurF and CmlI. We are currently investigating isotope labeled <sup>16</sup>18O<sub>2</sub> P' intermediates of CmlI. We will extend this study to toluene o-xylene monooxygenase (ToMO), which performs an electrophilic attack on aromatic rings and utilizes 2His/4Glu ligation instead of the 3His/4Glu ligation of AurF. We will elucidate how the different ligation facilitates similar reactivity. In contrast to AurF, CmlI and ToMO, aldehyde-deformylating oxygenase (ADO) performs nucleophilic rather than electrophilic reactivity. We will elucidate geometric and electronic differences that lead to these different reactions. Furthermore, the P intermediate in deoxyhypusine hydroxylase (exhibiting a down-shifted UVvis band at ~630 nm) is believed to contain an additional  $\mu\text{-O(H)}$  bridge and a 4His/2Glu ligation set. We will use NRVS to define how this peroxy species relates to those summarized above.

We recently finished our NRVS study of Q in MMO and are using these data to define how the binuclear core is more reactive relative to the mononuclear Fe=O species in SyrB2 in H-atom abstraction. We will extend these studies to intermediate X in RNR class 1a and compare our findings to results from our previous NRVS study which defined a Mn/Fe class 1c RNR, which exhibits Q- and X-analog (Mn<sup>IV</sup>/Fe<sup>IV</sup> and Mn<sup>IV</sup>/Fe<sup>III</sup>, respectively) intermediates. This study of X focuses on its function of generating the tyrosyl radical required for deoxyribonucleotide synthesis in class 1a versus the Mn<sup>IV</sup>/Fe<sup>III</sup> providing the radical directly class 1c RNR.

— 採択課題 3 —

課題名	電気化学反応速度と HAXPES の複合同時計測を目指した新規 operando フローセルシステムの開発と燃料電池触媒への応用
実験責任者名 (所属)	犬飼 潤治 (山梨大学)
採択時の課題番号	2017A0138
ビームライン	BL46XU
審査結果	採択する



### [審査コメント]

本課題は電気化学反応測定と同時に HAXPES 測定を行う技術を開発し、反応中の燃料電池触媒の化学状態を明らかにすることを目的としている。SPring-8 の複数の専用ビームラインにおいては、燃料電池反応の解析を目的に差動排気型光電子分光装置の導入による準大気圧下での HAXPES 測定技術の開発が行われているが、現状では共用ビームラインでは実施することが難しい。本課題は装置開発終了後に一般ユーザーによる利用も視野に入れている上、この技術は燃料電池触媒のみならず、二次電池、腐食、鍍金等の広い分野での利用が期待されるため、長期利用課題に相応しい申請である。また、装置開発は NEDO プロジェクトの一環として行われるため、資金面での懸念はない。

フローセル窓材の圧力耐性評価を行うなど、本格的な技術開発に向けた準備に着手していることは評価できるが、現段階では一部の技術的課題の克服方法が確立していない。特に、フローセル窓材の破壊は HAXPES 装置に致命的な障害を与えかねないので、窓材の圧力耐性のみならず X 線照射劣化に関する十分な試験検討が必須である。課題申請では 2017B 期よりフローセルを HAXPES 装置に取り付けての技術検討が計画されているが、その前に BL46XU の放射光を用いて十分な X 線照射耐性試験を行うことが必要と思われるため、JASRI の装置担当職員と緊密な連携のもと開発計画の見直しを行うことを強く勧める。

### [実験責任者による研究概要]

電気化学とは、電解質溶液中において電極電位を制御しながら電子の授受を行い、酸化・還元反応を進行させる学問・技術分野である。電池、燃料電池、半導体デバイス、メッキ、腐食・防食、生物電気化学、電気化学センサー、金属精錬、電解合成など、科学・産業の根幹を担っている。電気化学反応を利用した学問分野・産業領域は膨大であり、今後ますます発展していくと予想されている。これら電気化学環境下の電極物質の構造・電子状態の解析は、もっぱら「閉鎖系」で行われており、測定中における反応物の供給は、原則的にはできなかつた。一方で、電気化学反応を定常的に進行させるためには、電極に反応物を供給し続けることが必要である。そこで、反応物連続供給により「電気化学チャンネルフロー法」で電極反応速度を厳

密に測定しながら電極物質の電子状態を HAXPES で解析し、電気化学速度論と電子論を実験的に融合することが可能な装置を開発することを目的とする。

本申請においては、1 年目に電気化学フローセルを超高真空チャンバーと一体化し、電極反応速度の厳密測定と同時に電極試料の HAXPES が可能な今までにない画期的な装置の開発を行う。ビームラインは BL46XU を用いる。本装置の完成した 2 年目には、反応中の燃料電池触媒の operando 解析を行う。

電気化学と HAXPES の同時測定を可能とするために、厚さ 30 nm 程度の  $\text{Si}_3\text{N}_4$  製のウィンドウを用いる。ウィンドウの片側が溶液、別の側が超高真空である。溶液を流通させない状態では、このウィンドウは安定で、HAXPES 測定が可能であることは、既に報告されている。本研究において、電気化学フローセルの流通溶液が万が一真空槽中に入るとその後の SPring-8 における測定に重大な支障をきたすため、ウィンドウは水圧・真空とともに放射光照射に対して十分な耐久性を持つことが必要である。そのために、真空槽と電位化学フローセルを実実験とまったく同じ状態に設定し、放射線照射をしながら「溶液/真空+放射光耐久試験」実施し、実測定中にウィンドウの破損がないことを確実にする。溶液漏れ以外の問題もないことを十分に確認した後、BL46XU の上部フランジを利用して、本機構を取り入れた測定装置を取り付ける。測定試料には、山梨大学で合成した燃料電池用白金・コバルト合金触媒を用いる。触媒ナノ粒子の直径は 2~5 nm の任意の大きさで、コアには白金とコバルトが均一に分布しているが表面約 2 層は白金でおおわれている。粒径制御のみならず、カーボン担体上への均一分散性制御が極めて高いレベルで実現されている。本触媒は高い酸素還元反応 (ORR) 触媒能と耐久性を持ち、次世代の燃料電池触媒の担い手として期待されているが、反応中の構造および電子状態については、全くわかっていない。そこで、酸素濃度を規定した任意の温度 (室温-90°C) の水溶液を様々な溶液速度で導入し、電極の電位を自然電位から負側に変化させて ORR 速度を測定しながら、Pt および Co の HAXPES 測定を同時に行う。Pt は ORR 反応を主としてつかさどる元素であるが、反応中の Pt の酸化状態に関する情報は全くない。また、第 2 成分である Co が、反応中 Pt にどのような影響を与えているかも、推論の域

を出ない。様々な合金触媒の反応速度を測定しながら operando 測定により、電子状態に関する ORR 活性の向上因子が得られることになる。将来的には HAXPES に加えて XRD、XAFS、SAXS 測定などを行い、合金組成、構造、電子状態、表面吸着種の同定と定量などを operando 測定する計画でいる。さらに、加速劣化試験を行いながら上記測定を行うことにより、劣化メカニズムも明らかとなる。これにより、高活性・高耐久性燃料電池用触媒の一般的原理が導き出されると期待される。

本申請では、燃料電池に応用内容を絞ったが、ここで開発される装置は、電気化学反応を利用したほぼ全ての分野で適用可能なものとなる。国内外の研究開発に大きく寄与することが期待される。

－ 採択課題 4 －

課題名	Application & Development of Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy (NRVS) and Synchrotron Mössbauer Spectroscopy of Iron-Hydrogen Interactions in Hydrogenases, Nitrogenases, and Model Complexes
実験責任者名 (所属)	Stephen Cramer (University of California, Davis)
採択時の課題番号	2017A0141
ビームライン	BL09XU
審査結果	採択する

[審査コメント]

The principal investigator developed the technique of NRVS (Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy) and his group has been applying it to iron-containing enzymes in Long-Term projects over several years. They have produced significant results and contributed much to understanding of the reaction mechanisms of these enzymes. In this Long-Term proposal, the PI proposes to focus on iron-hydrogen bonds in intermediate states of hydrogenases and nitrogenases. The committee highly appreciates the past achievements of the PI and considers the project worthy of beamtime for the next two years. On the other hand, since the NRVS technique has been established, this can be regarded as just a routine measurement that requires a large amount of beamtime. In the interview, the PI explained the technical developments to reduce the measurement time. Thus, the committee recommends the PI to apply for external funding

to achieve these improvements, together with the left-over technical developments from the last Long-Term project, in collaboration with the SPring-8 staff. This will be the most efficient way to get the data the PI needs without sacrificing too much beamtime of other users.

[実験責任者による研究概要]

At beam line BL09XU the principal investigator (PI) developed the use of Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy (NRVS) for analyzing iron active sites of metalloenzymes. The use of this technique has resulted in several high impact papers in Journal of American Chemical Society (JACS) as well as Angewandte Chemie and Inorganic Chemistry<sup>[1-4]</sup>. The research was focused on enzymes such as nitrogenase (N<sub>2</sub>ase), [FeFe] hydrogenases (FeFe-H<sub>2</sub>ases), [NiFe]-hydrogenase (NiFe-H<sub>2</sub>ase), and WhiD. Most recently we have been focused on analyzing Fe-H/D bending modes in model compounds and H<sub>2</sub>ase enzymes. Fe-H/D modes are weak and thus development of NRVS technique is necessary in order further the study of these enzymes. We hope that future collaboration with SPring-8 will allow us to push the boundaries of NRVS. In addition, we are also focused on collecting data at higher energy region to analyze Fe-H/D stretching modes (>1000 cm<sup>-1</sup>). We hope to work on technique development in collaboration with scientist at beam line BL09XU. Our goal is to increase the count rates by two fold without loss of resolution, increase the count 2x by increasing the size of the APD or by using double sided detection, and developing a cosmic ray anti-coincidence system to reduce background count rates with the help of scientist at SPring-8.

This proposal aims to use the nuclear resonance vibrational spectroscopy (NRVS) to study the structure and dynamics of Fe-S proteins. NRVS is a spectroscopic technique that probes vibrational sidebands from a nuclear excited state transition in Mössbauer active nuclei, in our case <sup>57</sup>Fe. NRVS exploits nuclear resonant absorption with recoil to reveal vibrational dynamics of the resonant nuclei using high flux and high monochromation (0.8 meV). It yields vibrational spectra for all the normal modes involving Fe motion, making it highly selective and valuable technique.

Iron-sulfur [Fe-S] clusters are ubiquitous and evolutionary ancient prosthetic groups that are required to sustain fundamental life processes, including electron transfer within and between proteins, catalysis of chemical reactions, sensing of the chemical environment, regulation of DNA expression, repair of damaged DNA, and maintenance of molecular structure<sup>[5]</sup>. Our research in this proposal involves three critical Fe-S proteins: (1) MoFe and VFe nitrogenases (N<sub>2</sub>ase)-responsible for biological nitrogen fixation and supplies the chemically reactive N needed for building proteins and nucleic acids<sup>[6]</sup>. (2) NiFe and FeFe-hydrogenases(H<sub>2</sub>ase) -the production or consumption of molecular H<sub>2</sub> which is as fast as the best artificial fuel cells, but uses earth-abundant Fe instead of rare and expensive Pt. (3) WhiD proteins for NO and O<sub>2</sub> sensing.

The NRVS studies from our previous proposal obtained significant NRVS results for many important enzymes. One of the most important results is our observation of Fe-H/D bending modes in NRVS for H<sub>2</sub>ases and N<sub>2</sub>ase which are considered among the weakest vibrational modes.

#### References

- [1] Serrano, P. N.; Wang, H.; Crack, J. C.; Prior, C.; Hutchings, M. I.; Thomson, A. J.; Kamali, S.; Yoda, Y.; Zhao, J.; Hu, M. Y.; Alp, E. E.; Oganessian, V. S.; Le Brun, N. E.; Cramer, S. P.: "Nitrosylation of Nitric-Oxide-Sensing Regulatory Proteins Containing [4Fe-4S] Clusters Gives Rise to Multiple Iron-Nitrosyl Complexes.", *Ang. Chem. Int. Ed.* **2016** 55 (47) 14575-14579.
- [2] Gilbert-Wilson, R.; Siebel, J. F.; Adamska-Venkatesh, A.; Pham, C. C.; Reijerse, E.; Wang, H.; Cramer, S. P.; Lubitz, W.; Rauchfuss, T. B.: "Spectroscopic Investigations of [FeFe] Hydrogenase Maturated with [<sup>57</sup>Fe<sub>2</sub>(adt)(CN)<sub>2</sub>(CO)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup>", *J Am Chem Soc* **2015** 137 (28) 8998-9005.
- [3] Ogata, H.; Krämer, T.; Wang, H.; Schilter, D.; Pelmenschikov, V.; van Gastel, M.; Neese, F.; Rauchfuss, T. B.; Gee, L. B.; Scott, A. D.; Yoda, Y.; Tanaka, Y.; Lubitz, W.; Cramer, S. P.: "Hydride bridge in [NiFe]-hydrogenase observed by nuclear resonance vibrational spectroscopy.", *Nature Comm.* **2015** 6 7890-7897.
- [4] Reijerse, E.; Pham, C. C.; Pelmenschikov, V.; Gilbert-Wilson, R.; Adamska-Venkatesh, A.; Siebel, J.; Gee, L. B.; Yoda, Y.; Tamasaku, K.; Lubitz, W.; Rauchfuss, T. B.; Cramer, S. P.: "Direct observation of an iron bound terminal hydride intermediate in [FeFe] hydrogenase.", *Journal of the American Chemical Society* **2016** submitted, under review.
- [5] Johnson, D. C.; Dean, D. R.; Smith, A. D.; Johnson, M. K.: "Structure, function, and formation of biological iron-sulfur clusters.", *Annual Reviews of Biochemistry* **2005** 74 247-281.
- [6] Yagi, T.; Higuchi, Y.: "Studies on hydrogenase.", *Proceedings of the Japan Academy Series B-Physical and Biological Sciences* **2013** 89 (1) 16-33.

## 2017 年度に指定されたパートナーユーザーの紹介

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用推進部

2013 年度まで運用していた「パワーユーザー」制度について、2014 年度より名称および一部運用を変更し、「パートナーユーザー」(以下「PU」という)として運用を開始しました。2017 年度は、2 名の応募があり、PU 審査委員会による審査の結果、2 名が指定されました。指定された PU および PU 審査委員会からの審査結果を以下に示します。

### PU の概要

- ・PU は、2013 年度までの「パワーユーザー」の名称および一部運用を変更したもの。
- ・2014 年度以降の PU は、共用ビームラインおよび測定技術を熟知し、放射光科学・技術の学術分野の開拓が期待できる研究者で、
  - 1) ビームライン実験設備の開発および高度化への協力
  - 2) 上記高度化等に関連した、先導的な放射光利用の実施および当該利用分野の拡大・推進
  - 3) 上記高度化等に関連した利用者支援のいずれも満たすユーザーを指す。
- ・PU の指定期間は原則 2 年間 (PU 審査委員会が必要と認めた場合には延長可。最長 5 年間)。

### [指定期間]

2017 年 4 月 1 日から 2019 年 3 月 31 日まで  
(2 年間)

### [指定された PU]

#### 1. 三村 功次郎 (大阪府立大学)

##### (1) 実施内容

研究テーマ：強相関電子系における量子臨界現象  
解明のための共鳴硬 X 線光電子分光  
および共鳴発光分光の複合計測技術  
の構築

高度化：共鳴硬 X 線光電子分光計測技術の基盤開  
発

利用研究支援：当該装置を用いた利用実験の支援

(2) ビームライン：BL09XU

##### (3) 審査コメント

本課題は元素選択的かつバルク敏感であることから、広範な物質系の電子状態研究の強力な実験手法となっている硬 X 線光電子分光法を、内殻吸収端近傍で励起エネルギーを掃引することにより、光電子放出過程に対する共鳴効果を観測できる共鳴硬 X 線光電子分光に進化させることを目標としたものである。また、主たる研究目標としては希土類化合物の価数揺動現象の鍵となる d-f クーロン斥力の直接観測を目指している。

共鳴硬 X 線光電子分光法の確立は、本課題の研究対象物質である希土類化合物に止まらず、より広範な物質系の物性研究に新しい展開をもたらす契機となりうる。この点から、新規ユーザーを含む多くの研究グループへの利用拡大を前提とした課題推進が求められる。具体的には、ユーザー獲得計画の策定、理論計算を含む解析ソフトの整備、著名雑誌への速やかでインパクトの高い成果発表などによって、本課題はパートナーユーザー課題としての意義を格段に高めるものとなる。

以上により、本申請はパートナーユーザーとして遂行されるにふさわしいものと判断し、採択とする。

#### 2. 廣瀬 敬 (東京工業大学)

##### (1) 実施内容

研究テーマ：超高圧高温ダイヤモンドセル実験の  
新展開

高度化：極限環境下における X 線回折複合計測技  
術の高度化

利用研究支援：当該装置を用いた利用実験の支援

(2) ビームライン：BL10XU

### (3) 審査コメント

申請者グループは、長年にわたり BL10XU における超高温高温環境下での物質構造解析の技術開発に取り組み、世界をリードする技術を構築するとともに、地球科学の分野で継続的に目覚ましい成果を挙げている。申請者グループによるパートナーユーザーとしての SPring-8 の地球科学分野への貢献は非常に大きく、本委員会としても、これまでの活動に深く感謝するものである。

新規に提案された課題「超高温高温ダイヤモンドセル実験の新展開」は、1) 超高温高温環境下での試料の密度や電気伝導度、熱伝導率を精度よく測定するための高解像度 3 次元 X 線イメージングシステムの構築、2) レーザー加熱光学系の継続的な改良、3) 超高温超高温環境下での X 線吸収分光 (XAFS) 測定法開発が挙げられ、いずれも同分野の利用技術の発展と成果創出を大きく期待できる。1) 高解像度 3 次元 X 線イメージングシステムの開発については、X 線画像検出器の導入により 20 nm の空間分解能のラミノグラフィ装置を構築し、2017B 期より一般のユーザーにも開放することが計画されている。新しい装置の導入と立ち上げを 2017A 期で完了する計画であるが、既に必要な機器調達の見込みもある上、これまでの申請者グループの実績から判断すると計画どおりに進捗するものと期待している。2) レーザー加熱光学系の継続的な改良は、地球科学分野における最先端の技術を維持するために必須の項目であるため、2017A 期以降も継続的な技術開発が実施されることを期待している。3) 超高温超高温環境下での X 線吸収分光 (XAFS) 測定法開発は、超高温超高温下での試料の化学状態に関する知見を得ることを目的とした意欲的な提案であり、同技術の構築は地球科学にとどまらず、物質科学等、幅広い他分野への波及が大きく期待される。この技術の構築には、現有の BL10XU の挿入光源で得られる X 線よりも更に低エネルギーの X 線が必要になるため、挿入光源の更新が計画されている。挿入光源の更新は BL10XU の全利用者に影響を与える事項であるが、高圧力学会会合等を通じて他利用者への説明と意見聴取が行われていることから、大きな不利益を被る既存利用者への懸念はないが、今後も継続的に BL10XU 利用者への周知を行っていただきたい。XAFS 測定装置開発は 2018A 期、新挿入光源を利用

した XAFS 測定は 2018B 期に実施する計画となっているが、他の共用ビームラインを利用するなどして早い段階から事前の技術検討を実施されることをお勧めしたい。

以上のように、本課題は地球科学のみならず物質科学全般に対して大きな貢献が期待できることから、パートナーユーザーとして指定することに何の懸念もない。なお、2017A 期は、希望があったビームタイム 42 シフトのうち、本人が課題申請書の中で“極限環境下における X 線回折複合計測技術の高度化との関連が希薄”と記載している 8 シフトを除いた 34 シフトが適切なビームタイムと考える。

以上

## 2017 年度に指定期間が延長されたパートナーユーザーの紹介

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用推進部

2013 年度まで運用していた「パワーユーザー」制度について、2014 年度より名称および一部運用を変更し、「パートナーユーザー」（以下「PU」という）として運用を開始しました。2017 年度は、2015 年度に指定（指定期間：2015～2016 年度）された PU3 名のうち、3 名の指定期間延長申請があり、PU 審査委員会による審査の結果、当該 3 名が指定期間延長されました。延長された PU および PU 審査委員会からの審査結果を以下に示します。

### PU の概要

- ・PU は、2013 年度までの「パワーユーザー」の名称および一部運用を変更したものです。
- ・2014 年度以降の PU は、共用ビームラインおよび測定技術を熟知し、放射光科学・技術の学術分野の開拓が期待できる研究者で、
  - 1) ビームライン実験設備の開発および高度化への協力
  - 2) 上記高度化等に関連した、先導的な放射光利用の実施および当該利用分野の拡大・推進
  - 3) 上記高度化等に関連した利用者支援のいずれも満たすユーザーを指す。
- ・PU の指定期間は原則 2 年間（PU 審査委員会が必要と認めた場合には延長可。最長 5 年間）。

### [延長後の指定期間]

2015 年 4 月 1 日から 2019 年 3 月 31 日まで  
(4 年間)

### [指定された PU]

#### 1. 森吉 千佳子（広島大学）

##### (1) 実施内容

研究テーマ：粉末・多粒子 X 線回折によるその場  
構造計測基盤の構築

高度化：迅速オペランド構造計測ステーションの  
整備

利用研究支援：当該装置を用いた利用実験の支援

##### (2) ビームライン：BL02B2

##### (3) 審査コメント

本パートナーユーザー課題は、従来のイメージングプレートと新規導入した一次元半導体検出器を組み合わせて大型デバイシェラカメラを高度化することにより、多彩な粉末・多粒子 X 線回折による高精度かつ迅速なその場構造解析を実現する重要で汎用性の高いプロジェクトである。

新しい研究基盤の整備も順調に進んでおり、すでに開始している利用者支援においては、非常に多くのユーザーを獲得しているだけでなく、学会などを通じた宣伝活動も含めて、今後の新規ユーザーの開拓に向けた努力も計画されている。また、PU メンバー間の連携、及びビームライン担当者との連携もよく取れており、論文出版による成果発表も活発に行われている。継続期間においては、ガス・真空・溶液雰囲気におけるその場構造計測の実現が計画されており、これまでの実績から考えても、学術研究だけでなく、産業応用も視野にいれた多彩な発展が期待できる。さらに、ユーザー支援についても、課題申請・ビームタイム時の測定・試料調整・成果発表まで含めた相談や指導も計画に盛り込んでおり、非常にユーザー・フレンドリーな研究基盤の整備につながるものと考えられる。

以上の理由から、本申請は PU 課題としてふさわしい課題と判断し、2 年間の継続申請を採択し、2017A 期には希望シフトである 42 シフトを承認する。なお、継続期間においては、解析ソフトの公開など、さらにユーザー・フレンドリーな研究基盤の整備を心掛けていただきたい。

#### 2. 入船 徹男（愛媛大学）

##### (1) 実施内容

研究テーマ：大容量高圧装置を活用した地球および  
関連物質の高温高圧物性研究の推進

高度化：高圧高温条件下での弾性率および変形・破壊挙動測定システムの高度化

利用研究支援：当該装置を用いた利用実験の支援

## (2) ビームライン：BL04B1

### (3) 審査コメント

本申請は、マルチアンビル装置と超音波装置を組み合わせた測定システムの高度化と同システムの利用者支援を継続して行うものである。2015A から2016B までの指定期間において、電氣的ノイズの低減対策による弾性波速度の精密測定、新しい光学系の導入による X 線回折と X 線ラジオグラフィの同時測定、微小破壊音検出システムの組み込みによる岩石試料の破壊挙動観測、を可能にしている。利用研究においては、同システムを用いた下部マントル物質の弾性波速度の精密測定と相平衡実験、カンラン石の破壊挙動や地球内核物質の変形挙動の観測を行い、地震メカニズムに関連する物質科学的知見を得て、論文発表を行っている。また、利用者支援も積極的に行い、ユーザー拡大に貢献しており、パートナーユーザーとして十分な成果を挙げていると判断する。

今後の計画として、申請者グループが開発したナノ多結晶ダイヤモンドをマルチアンビル装置に組み込むことを予定している。これにより、圧力発生と X 線計測の両面においてその効率が大きく向上し、地球および関連物質の高圧高温物性研究がさらに進展すると期待される。また、ナノセラミックスなどの超高压材料科学の開拓も目指しており、利用分野の拡大も期待される。

以上より、本申請書にあるパートナーユーザーの指定期間の延長は適当であると判断する。

## 3. 戸田 裕之（九州大学）

### (1) 実施内容

研究テーマ：構造材料の 4D イメージング技術およびその周辺解析技術のさらなる高度化

高度化：マイクロ CT の多元イメージング化並びにマルチスケール化

利用研究支援：当該装置を用いた利用実験の支援

## (2) ビームライン：BL20XU

### (3) 審査コメント

本パートナーユーザーは、これまで SPring-8 の X 線マイクロ CT 技術を用いて金属材料の変形・破壊等の問題に関する研究を行ってきた。本 PU 課題においては、これまでの研究を更に発展させると共に、疲労・引張・圧縮試験機、高温用材料試験機を用いて疲労破壊のその場観察を行う 4D イメージングの実験・解析技術を、施設側と共同して開発することを目的としてきた。

これまで2年間の研究は、(1) 新型材料試験機の試作、改良、実用化、(2) X 線トモグラフィーと細束 X 線ビームを用いた回折コントラストトモグラフィーによる多結晶イメージング、(3) 定量解析技術や画像応用解析技術の開発、の3つのテーマを中心に行われてきた。(1) については、新型試験機を利用して高強度チタン合金の疲労破壊のその場観察が行われており、実用化に成功している。一般利用者も同試験機を利用しており、利用者支援への協力も行われている。

(2) については、多結晶アルミ合金を用いた利用実験を通して高度化への協力を行い、研究成果もあげている。(3) は主としてソフトウェア開発であり、位相回復等の 4D 解析に必要なソフトウェアを開発、整備し、他利用者にも提供している。これらの実績から、PU の役割は十分に果たされていると判断できる。

今後 2 年間の実施計画の中心課題としては、BL20XU におけるフレネルゾーンプレートを用いた結像顕微鏡の開発が挙げられている。これは中尺ビームラインの特長を活かして超高倍率を狙うものであり、SPring-8 にとって重要な開発テーマである。挑戦的であるが、高倍率化と並行して画像解析手法の開発を進めることにより、金属のみならず高分子等も含めた材料開発に向けて、従来よりも飛躍的に多くの有用な情報を引き出せると思われる。この成果を広く利用者へアピールすれば、本ビームラインの大幅な利用拡大が期待できることから、2年間の期間延長は妥当であると判断される。

以上

## 第 38 回共同利用期間（2016B）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 38 回共同利用期間（2016B）における SPring-8 の共同利用は、2016 年 9 月から 12 月にかけて実施されました。この期間の放射光利用は、ビームライン 1 本あたり 249 シフト [1 シフト=8 時間] でした。

2016B では 26 本の共用ビームライン（共用施設）と、8 本の理研ビームラインおよび加速器診断ビームライン BL05SS 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、2016B 第 1 期（2016 年 9 月～11 月中旬）および第 2 期（同年 11 月中旬～12 月）と、利用期を 2 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、2016B 期の稼働数は前期より引き続き 19 本でした。

表 1 に、SPring-8 共用施設の 2016B 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 2016B 実施課題数とシフト数を示します。表 3 に、2016B 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-2016B 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 2016B 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）	285	3816.875
専用ビームライン（成果専有）	13	26.25
合計	298	3843.125

表 1 SPring-8 共用施設<sup>(注1)</sup> の 2016B 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 <sup>(注2)</sup> 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）	676	414	61.2	404	55	459	3625.375
一般課題（成果専有）	48	48	100.0	47		47	161.875
大学院生提案型課題	122	51	41.8	49	3	52	403.875
時期指定課題	10	10	100.0	10		10	31.5
測定代行課題 <sup>(注3)</sup>	48	48	100.0	48		48	22
産業新分野支援課題	9	4	44.4	4		4	22.875
社会・文化利用課題	22	21	95.5	19		19	104.625
成果公開優先利用課題	38	37	97.4	37		37	288.625
長期利用課題	(2016B期は新規公募なし)				25	25	381.625
重点パートナーユーザー課題					7	7	266.75
新分野創成利用課題（新分野創成を行おうとする研究グループによる課題）	4	4	100.0	4	7	11	125.75
合計	977	637	65.2	622	97	719	5434.875

(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、BL38B1、BL46XU で実施。



表 3 2016B に SPring-8 共用施設<sup>(注1)</sup> 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 <sup>(注2)</sup>
大学等 教育 機関	一般課題 (成果非専有)	課題数	89	2	98	43	22	4	49	4	311
		シフト数	507.875	21	828.5	291.625	250.5	29.875	298.125	47.875	2275.375
	一般課題 (成果専有)	課題数				1			1		2
		シフト数				1			12		13
	大学院生提案型課題	課題数	5		19	10	4	1	12		51
		シフト数	22.375		185.75	72	36	9	69.75		394.875
	時期指定課題	課題数	1						1		2
		シフト数	3						2		5
	産業新分野支援課題	課題数							2		2
		シフト数							9		9
	社会・文化利用課題	課題数	1		3	1		1		5	11
		シフト数	6		17.625	6		18		18	65.625
	成果公開優先利用課題	課題数		2	8	8			3		21
		シフト数		12	71.125	49.125			35.875		168.125
長期利用課題	課題数	2		8	6		3			19	
	シフト数	25.5		161.75	39.875		38.125			265.25	
重点パートナーユーザー課題	課題数			4		2				6	
	シフト数			139.75		88.125				227.875	
新分野創成利用課題	課題数			10						10	
	シフト数			119.75						119.75	
計	課題数	98	4	150	69	28	9	68	9	435	
	シフト数	564.75	33	1524.25	459.625	374.625	95	426.75	65.875	3543.875	
国立 研究 機関等	一般課題 (成果非専有)	課題数	15	9	19	8	7	1	11	6	76
		シフト数	123.125	80.5	198.75	89.125	83.125	11.75	62	59.75	708.125
	一般課題 (成果専有)	課題数	1		1	2			2		6
		シフト数	4.875		6	4			6		20.875
	時期指定課題	課題数			1						1
		シフト数			1						1
	測定代行課題	課題数						1	3		4
		シフト数						0.75	2.5		3.25
	社会・文化利用課題	課題数				1				7	8
		シフト数				3				36	39
成果公開優先利用課題	課題数	1		7	1			1		10	
	シフト数	24		44	3			3		74	
長期利用課題	課題数			2				1		3	
	シフト数			27				38.875		65.875	
計	課題数	17	9	30	12	7	2	18	13	108	
	シフト数	152	80.5	276.75	99.125	83.125	12.5	112.375	95.75	912.125	
産業 界	一般課題 (成果非専有)	課題数						36		36	
		シフト数						264.375		264.375	
	一般課題 (成果専有)	課題数	2	1	4	1			30		38
		シフト数	3	7	16	1			96.5		123.5
	時期指定課題	課題数	2					4	1		7
		シフト数	9.875					15	0.625		25.5
	測定代行課題	課題数						44			44
		シフト数						18.75			18.75
	産業新分野支援課題	課題数						2			2
		シフト数						13.875			13.875
成果公開優先利用課題	課題数						6			6	
	シフト数						46.5			46.5	
新分野創成利用課題	課題数						1			1	
	シフト数						6			6	
計	課題数	4	1	4	1			123	1	134	
	シフト数	12.875	7	16	1			461	0.625	498.5	
海外 機関	一般課題 (成果非専有)	課題数	16	2	10	3	4		1		36
		シフト数	136.5	18	151.5	35.5	33		3		377.5
	一般課題 (成果専有)	課題数	1								1
		シフト数	4.5								4.5
	大学院生提案型課題	課題数			1						1
		シフト数			9						9
	長期利用課題	課題数	1		1		1				3
		シフト数	17.75		23.875		8.875				50.5
重点パートナーユーザー課題	課題数			1						1	
	シフト数			38.875						38.875	
計	課題数	18	2	13	3	5		1		42	
	シフト数	158.75	18	223.25	35.5	41.875		3		480.375	
課題数合計			137	16	197	85	40	11	210	23	719
シフト数合計			888.375	138.5	2040.25	595.25	499.625	107.5	1003.125	162.25	5434.875

(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

2016B の延べ利用者数は、共用施設 4,824 人、専用施設 2,985 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、理研ビームラインおよび以前の共用 R&D ビームラインはそれぞれ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・採択される生命科学分科会留保課題（～2014B まで。2015A 期以降は生命科学／タンパク質結晶構造解析分野課題における運用）、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ビームラインの第 2 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を新規と定義（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-2016B 課題種別実施課題数の推移

課題種	1997B~2008B	2009A	2009B	2010A	2010B	2011A	2011B	2012A	2012B	2013A	2013B	2014A	2014B	2015A	2015B	2016A	2016B	合計
一般課題 (成果非専有)	8292	398	382	393	408	379	384	430	516	440	384	444	611	457	476	489	459	15342
緊急課題	35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	35
一般課題 (成果専有)	310	30	44	33	53	36	72	38	51	34	55	34	55	36	37	42	47	1007
時期指定課題 (除く測定代行)	140	8	8	4	9	4	8	4	15	6	4	4	2	8	8	6	10	248
測定代行 (時期指定課題の一環)	37	5	25	31	38	31	37	35	48	49	47	41	54	37	46	32	48	641
長期利用課題	141	9	11	10	11	12	17	15	14	14	16	13	13	26	23	28	25	398
被災量子ビーム施設ユーザー支援課題						91	3											94
大学院生提案型課題 (旧名称：萌芽的研究支援課題 [～2015B])	156	18	24	22	17	14	14	32	40	27	32	38	58	45	54	65	52	708
成果公開優先利用課題	69	21	43	30	51	41	44	33	33	18	27	24	30	18	28	35	37	582
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	680	41	44	46	48	37	32											928
重点産業トリアルコース課題	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	390	111	117	107	100	86	89											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	65
重点メディカルバイオトリアルコース課題	48	5	4															57
重点拡張メディカルバイオ課題	28	13	10															51
重点グリーン/ライフ・イノベーション推進課題							21	29	27	24	24							125
スマート放射光活用イノベーション推進課題												12	17	18	14			61
社会・文化利用課題														11	16	17	19	63
重点戦略課題 (12 条戦略課題)	45	4	4	2	2	2	2	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	65
重点パワーユーザー課題	57	6	6	7	7	7	7	7	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	32
新分野創成利用課題															4	6	11	21
合計	11361	669	722	685	744	740	730	637	771	633	610	624	858	674	726	738	719	22641

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
合計			74,923	22,641	146,453	7,771	69,226

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

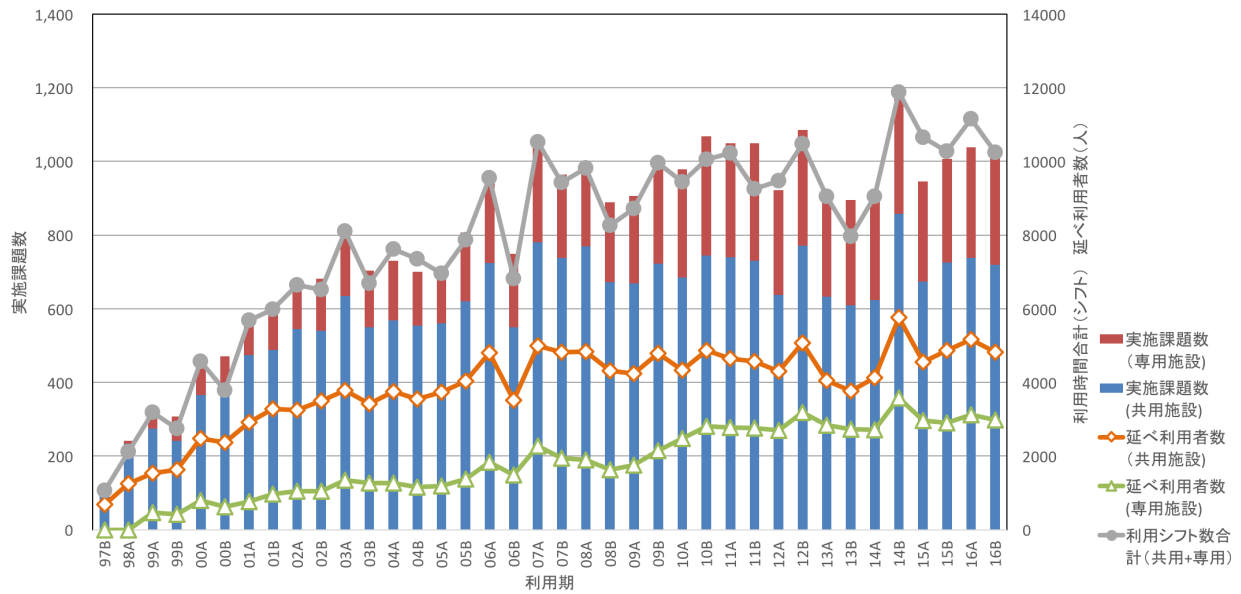
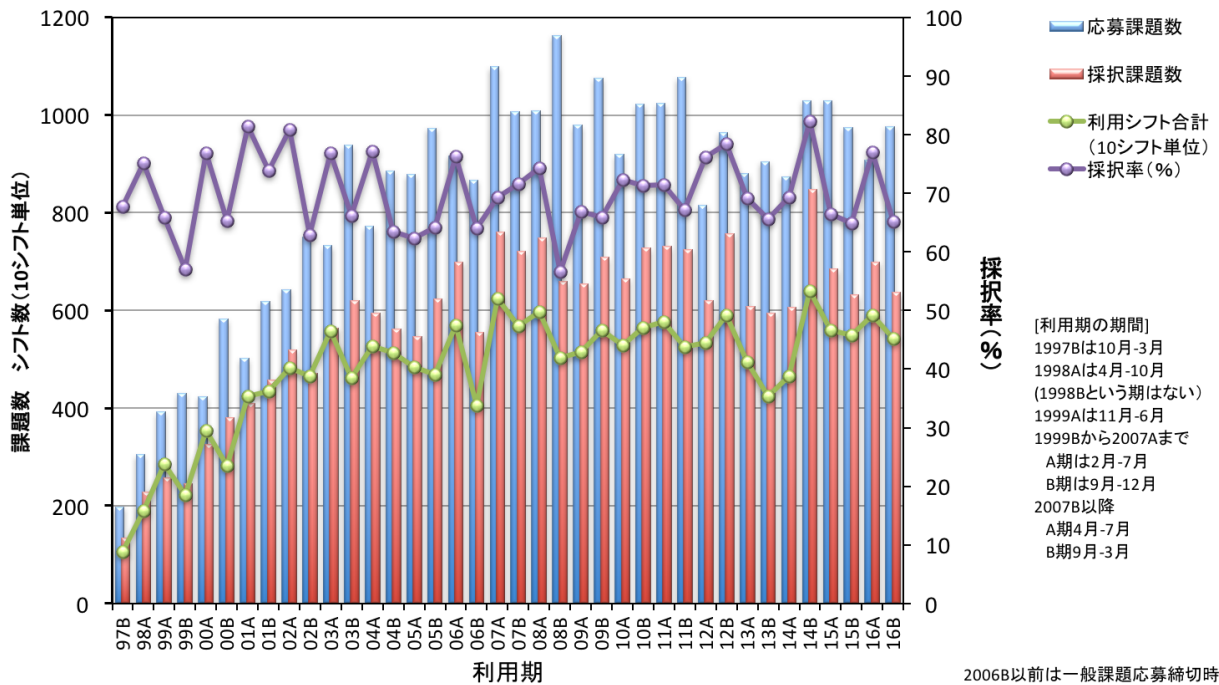


図1 Spring-8 共用施設および専用施設の利用実績の推移



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

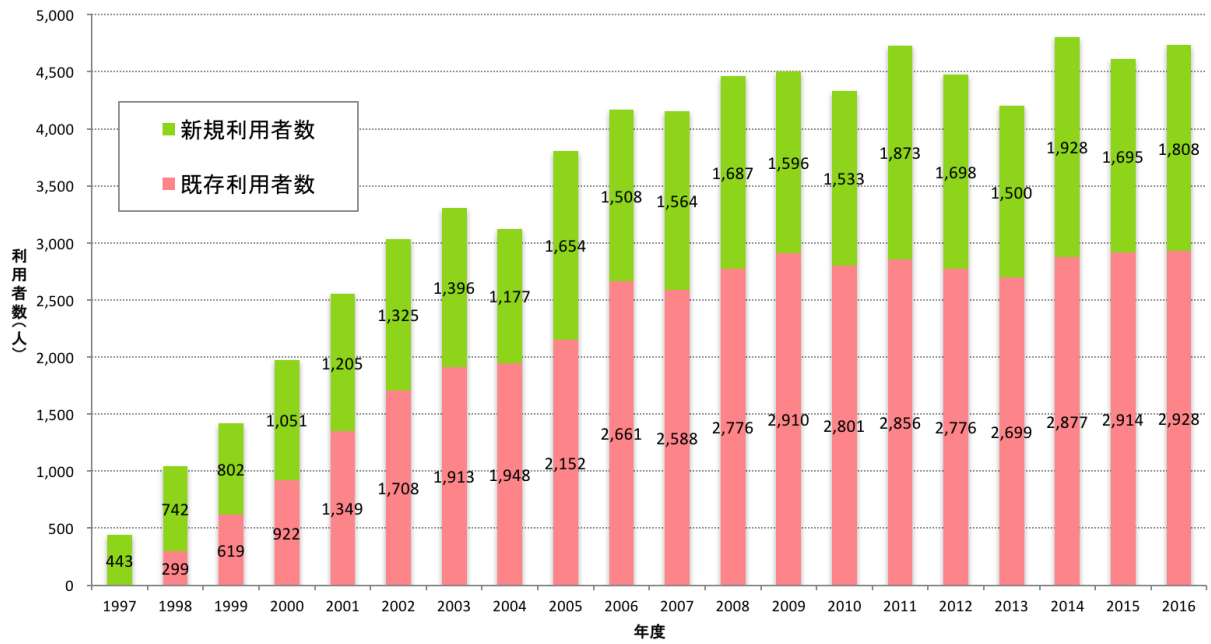


図3 SPring-8の年度ごとのユニーク利用者数

2013B 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

2013B 期に採択された長期利用課題について、2016A 期に3年間の実施期間が終了したことを受け、第 59 回 SPring-8 利用研究課題審査委員会長期利用分科会（2016 年 12 月 13 日開催）において、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。以下に対象となる長期利用課題 2 課題の評価結果を示します。研究内容については本誌 104 ページの「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、2013B 期に採択された長期利用課題 3 課題のうち残り 1 課題の評価結果は「SPring-8/SACLA 利用者情報」Vol.22 No.4（2017 年 11 月号）に掲載する予定です。

— 課題 1 —

課題名	Application Development of Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy (NRVS) and Synchrotron Mössbauer Spectroscopy of Multinuclear Iron Proteins
実験責任者(所属)	Stephen Cramer (University of California, Davis)
採択時課題番号	2013B0103
ビームライン	BL09XU
利用期間/配分総シフト	2013B~2016A/99 シフト

[評価結果]

The principal investigator developed the technique of NRVS (Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy) to study vibrational modes of an iron atom in proteins. His group focused on Fe-S proteins in this project. They worked on intermediate states in enzymatic reactions of hydrogenase and nitrogenase which play important roles in hydrogen catalysis and nitrogen fixation, respectively. DFT models were used to

analyze the NRVS spectra to discuss the mechanisms of enzymatic reactions. This is undoubtedly a leading-edge biochemistry as shown by more than ten publications since 2013 in high-profile journals such as *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, and *Nature Comm.*. Thus, the committee judges that this project was completed successfully. There are some unresolved technical issues in the experimental techniques, which should be considered in the next Long-Term project.

[成果リスト]

(査読付き論文)

- [1] SPring-8 publication ID = 27050  
H. Wang *et al.*: “A Practical Guide for Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy (NRVS) of Biochemical Samples and Model Compounds” *Methods in Molecular Biology* **1122** (2014) 125-137.
- [2] SPring-8 publication ID = 27816  
L. Lars *et al.*: “Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy Reveals the FeS Cluster Composition and Active Site Vibrational Properties of an O<sub>2</sub>-tolerant NAD<sup>+</sup>-reducing [NiFe] Hydrogenase” *Chemical Science* **6** (2015) 1055-1060.
- [3] SPring-8 publication ID = 28326  
A. Scott *et al.*: “Structural Characterization of CO-Inhibited Mo-Nitrogenase by Combined Application of Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy, Extended X-ray Absorption Fine Structure, and Density Functional Theory: New Insights into the Effects of CO Binding and the Role of the Interstitial Atom” *Journal of American Chemical Society* **136** (2014) 15942-15954.
- [4] SPring-8 publication ID = 32563  
M. Maiuri *et al.*: “Low Frequency Dynamics of the Nitrogenase MoFe Protein via Femtosecond Pump Probe Spectroscopy — Observation of a Candidate Promoting Vibration” *Journal of Inorganic*

- Biochemistry* **153** (2015) 128-135.
- [5] SPring-8 publication ID = 32565  
P. Serrano *et al.*: “Nitrosylation of Nitric-Oxide-Sensing Regulatory Proteins Containing [4Fe-4S] Clusters Gives Rise to Multiple Iron–Nitrosyl Complexes” *Angewandte Chemie International Edition* **55** (2016) 14575-14579.
- [6] SPring-8 publication ID = 32566  
H. Ogata *et al.*: “Hydride Bridge in [NiFe]-hydrogenase Observed by Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy” *Nature Communications* **6** (2015) 7890.
- [7] SPring-8 publication ID = 32619  
L. Gee *et al.*: “Docking and Migration of Carbon Monoxide in Nitrogenase: The Case for Gated Pockets from IR Spectroscopy and Molecular Dynamics” *Biochemistry* **54** (2015) 3314-3319.
- [8] SPring-8 publication ID = 33468  
L. Gee *et al.*: “Synchrotron-based Nickel Mössbauer Spectroscopy” *Inorganic chemistry* **55** (2016) 6866-6872.

— 課題 2 —

課題名	NRVS of mononuclear and binuclear non-heme iron enzyme intermediates and related model complexes
実験責任者(所属)	Edward Solomon (Stanford University)
採択時課題番号	2013B0105
ビームライン	BL09XU
利用期間/配分総シフト	2013B~2016A/135 シフト

[評価結果]

The Long-Term project aims at understanding the molecular mechanism of non-heme iron (NHFe) enzyme intermediates and related model complexes using nuclear resonance vibrational spectroscopy (NRVS) and density functional theory (DFT) calculations. In 2013B through 2016A oxygen-activated intermediates have been investigated, which include the selective halogenation of Fe(IV)=O NHFe intermediate, the low/high-spin chemistry of NHFe Fe<sup>III</sup>-OOH intermediates, the oxidative chemistry of extradiol dioxygenases, and the geometric and electronic structures of peroxy intermediates and high valent intermediates. The qualities of these results are high because of its unique approach to the local structure around iron

ions in biologically relevant materials.

Besides for the results, the Long-Term project also has contributed to the development of a new methodology for investigating molecular systems with iron atoms, based on a combination of NRVS experiment and DFT computation. The series of studies have shown that the NRVS data are well reproduced by experimentally-calibrated DFT calculations, indicating that the methodology can provide reliable information on the reaction coordinate for catalysis and other molecular systems.

Therefore, the committee evaluates the Long-Term project as a successful one, although their publications are delayed. The results should be published in major journals as early as possible.

[成果リスト]

(査読付き論文)

- [1] SPring-8 publication ID = 32555  
K. Sutherlin *et al.*: “Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopic Definition of Peroxy Intermediates in Nonheme Iron Sites” *Journal of American Chemical Society* **138** (2016) 14294-14302.
- [2] SPring-8 publication ID = 33479  
E. Solomon *et al.*: “O<sub>2</sub> Activation by Non-Heme Iron Enzymes” *Biochemistry* **55** (2016) 6363-6374.
- [3] SPring-8 publication ID = 33480  
K. Park and E. Solomon: “Modeling nuclear resonance vibrational spectroscopic data of binuclear nonheme iron enzymes using density functional theory” *Canadian Journal of Chemistry* **92** (2014) 975-978.

## 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  
 東京大学大学院 新領域創成科学研究科  
 雨宮 慶幸

### 1. はじめに

2012 年度から供用が開始された SACLA の第 3 期利用研究課題審査委員会（2015 年 4 月～2017 年 3 月）（以下、本委員会）の委員長を、第 1 期、第 2 期に引き続き仰せつかりました。本委員会では、2015B 期、2016A 期、2016B 期、2017A 期の SACLA 利用研究課題審査を 2 年間にわたり行いました。以下に、本委員会での審査の概要を報告します。

### 2. 審査委員会での審査に関して

#### 2.1 審査方法に関して

審査は、第 1 期（2011 年 12 月～2013 年 3 月）及び、第 2 期利用研究課題審査委員会（2013 年 4 月～2015 年 3 月）における審査方法をほぼ踏襲して行いました。具体的には、以下がその骨子です。

1. SPring-8 で行っているレフェリー・分科会・審査委員会の 3 段階の審査を、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。その理由は、使用できるビームラインが 2 本（BL2 と BL3）であること、応募課題総数は 3 桁未滿と予想されること、従って、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、ということである。2016B 期からは BL1 の共用が開始され、ビームライン数が 3 本になったが、以前と同様に分科会に分けずに審査を行うこととした。
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、本委員会での調整の上、選定案を決定する。
3. 重点戦略課題は、重要な利用研究課題であることを鑑み、ボーダーライン付近の課題については、一般課題に比して優先的な配分を行う。ただし、重点戦略課題は 2016B 期をもって終了したため、2017A 期についてはこの限りではなかった。
4. 年間ビームタイム設定は、SPring-8 と同様、24 時間連続運転、及び、同時期を想定する。ただし、1 シフトは 12 時間とする。

#### 2.2 レフェリーに関して

本委員会の施設外委員（委員長を除く 18 名）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 5 名で事前に行い、審査委員会に臨みました。施設側委員（6 名）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、審査委員会に臨みました。

#### 2.3 審査委員会での主な議論のポイント

審査委員会では、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（10 課題程度）について、個別に各委員間の評価のバラツキを吟味。
- ② 科学技術的意義及び 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、科学技術的意義及び SACLA の必要性と、総合相対評価との相関を吟味。
- ③ 重点戦略課題：ボーダーライン上の課題で、一般課題と重点戦略課題の評価が同じ場合は後者を優先。文部科学省委託事業（XFEL 重点研究課題）に関わる課題については、「XFEL 利用推進計画（H24.2.1：XFEL 利用推進戦略会議）」における事項<sup>(註1)</sup>及び、第 4 回 SACLA 選定委員会（H24.4.23～4.26 メール開催）における審議結果を踏まえ、審査に際し一定の配慮。ただし、重点戦略課題は 2016B 期をもって終了したため、2017A 期についてはこの限りではなかった。
- ④ 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、等)を確保するための配慮。

また、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ことにした。2016B期以降は、SACLAの産業利用促進の観点から、産業界所属者が実験責任者の不採択課題については、定型コメントに加え、個別の不採択理由等コメントを付することとした。さらに、2017A期以降は、実験責任者の所属如何に関わらず、不採択課題のうちSACLAの技術的な状況等を示すべき課題に対しては個別コメントを付することとした。

### 3. 審査結果の概要

2015B期(シフト数=152)では、応募63課題に対して35課題を採択しました(採択率=56%)。採択された35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58%でした。

2016A期(シフト数=158.17)では、応募65課題に対して34課題を採択しました(採択率=52%)。採択された34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66%でした。2016A期からは成果専有課題の受付を開始し、0.17シフト(2時間)を配分しました。

2016B期では、応募85課題に対して42課題を採択しました(採択率=49%)。後述の時期指定課題(専有)を除く。採択された42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63%でした。2016B期からは、BL1の共用が開始され、その結果、BL1とBL2/BL3に対して配分された合計シフト数は、197.17シフトになりました。また、採択された42課題のうち、7課題がBL1、35課題がBL2/BL3でした。2016B期からは常時募集の時期指定課題(専有)の受付を開始し、0.17シフト(2時間)を配分しました。

2017A期では、応募84課題に対して43課題を採択しました(採択率=51%)。時期指定課題(専有)を除く。BL1、BL2/BL3に対しては各々48シフト、162シフト、併せて210シフトを配分しました。また、採択さ

れた43課題のうち、7課題がBL1、36課題がBL2/BL3でした。

以上のように、いずれの期においても、採択率、及び、シフト配分率はSPring-8の場合に比べて低く、供用開始以来のSACLA利用に対する要求の強さを感じました。また、国外からの課題申請数は2017A期では全申請課題数の49%に達し、その割合は次第に高まってきており、海外からのSACLAの性能に対する期待の高さを感じます。

### 4. まとめと今後の課題

SACLAが、2012年(平成24年)3月に共用が開始されて、丸5年が経過しました。SPring-8に比べてビームラインの数が圧倒的に少ないため、課題採択率が低くならざるを得ない状況が続いています。SACLAから価値ある成果が創出されるために、本委員会が果たすべき役割の重要性を改めて実感しています。

SACLA利用研究課題の審査は、公平性と透明性をもって臨むことは大前提ですが、今後、利用できるビームライン数の増加、応募課題数の増加、それに伴う分野の広がり等々が予想されることから、分科会の導入も検討する時期にきているのではないかと感じます。2016B期以降の審査委員会では、委員会の途中で分科に分かれて詳細な議論を行う時間を確保するという試行を行いました。今後はこのような方法が定着していくのではないかと考えています。

最後になりましたが、活発なご議論を頂いた本委員会の委員の皆様のご尽力に感謝いたします。また、本委員会の関係者各位に感謝いたします。

雨宮 慶幸 AMEMIYA Yoshiyuki

東京大学大学院 新領域創成科学研究科  
〒277-8561 千葉県柏市柏の葉5-1-5  
TEL : 04-7136-3750  
e-mail : amemiya@k.u-tokyo.ac.jp

(注1) <XFEL利用推進計画 抜粋>

「また、競争的資金や国のプロジェクトにおいて、審査・採択された課題については、既に科学技術イノベーション推進の観点から重要性が認められているものと考えられることから、その結果を尊重し、登録機関で行う選定においては一定の配慮がなされるべきである。」

## 2017A 期 SACLA 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

高輝度光科学研究センター（JASRI）の SACLA 利用研究課題審査委員会（SACLA PRC）において、SACLA の供用運転開始以降、第 11 期目に当たる 2017A 期（2017 年 3 月～7 月）の利用研究課題応募 84 課題を審査しました。

さらに、当該審査結果について SACLA 選定委員会の意見を聴き、JASRI として 43 課題を採択しました。

### 1. 募集、審査及び採択等の日程

2017A 期の課題募集、審査及び採択は、以下のスケジュールを経て行われました。

(2016 年)

10 月 5 日 ホームページで募集案内公開

11 月 14 日 応募締切

～この間、審査基準に即した各課題の個別審査を実施～

12 月 27 日 第 12 回 SACLA PRC（総合審査）

(2017 年)

1 月 13 日 第 14 回 SACLA 選定委員会（審査結果の意見聴取）

1 月 18 日 JASRI として採否決定、結果通知

3 月 6 日 2017A 期利用開始

### 2. 応募、採択及びビームタイム配分状況

2017A 期の応募課題数は 84、採択課題数は 43 でした。応募対象課題種である一般課題／成果非専有利用および同／成果専有利用（後述の時期指定課題を除く）のうち、応募 84 課題は全て一般課題／成果非専有利用でした。ビームライン別・申請者所属別の応募・採択課題数を表 1 に、採択された課題の要求シフト数および配分シフト数を表 2 に示します。

採択 43 課題に対し、ビームタイムは計 210 シフト（1 シフト＝12 時間）が配分されました。配分シフト数を含む採択 43 課題の一覧は、以下の Web サイトに掲載しています。

表 1

(単位：課題数)

ビームライン	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		採択率
	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	
BL1			4	4	5	3			9	7	
BL2/BL3	3	3	17	9	14	11	41	13	75	36	
合計	3	3	21	13	19	14	41	13	84	43	51%

表 2

(単位：シフト数)

課題種	A	B	C	C/A	C/B
	応募課題 (84 課題) の 全要求シフト数	採択課題 (43 課題) の 全要求シフト数	採択課題 (43 課題) の 全配分シフト数	配分率 (採択配分/ 応募要求)	配分率 (採択配分/ 採択要求)
一般課題 (成果非専有)	542	293	210	39%	72%
一般課題 (成果専有)	-	-	-	-	-
合計	542	293	210	39%	72%

◆ SACLA User Information

> SACLA 利用案内 > 採択課題／実施課題

> 採択課題一覧 > 2017A

[http://sacla.xfel.jp/wp-content/uploads/sacla\\_approved\\_proposal\\_2017a\\_j.pdf](http://sacla.xfel.jp/wp-content/uploads/sacla_approved_proposal_2017a_j.pdf)

なお、成果を公表しない成果専有課題のうち、定期的な募集の締切によらず、随時応募・受付される時期指定課題利用制度を 2016B 期より導入しました。当該課題は基本的に利用期中に申請・審査のうえ実施されることから、申請・実施があった場合は、利用期終了後に結果として応募課題数・採択課題数に追加されます。

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](mailto:sacla.jasri@spring8.or.jp)

## 2016B 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 10 回目の利用期である 2016B 期の利用研究課題（共用課題）が、2016 年 9 月 23 日から 2017 年 3 月 6 日にかけて実施されました。この期間において、ビームライン BL1、BL2 または BL3 にて計 43 の利用研究課題が実施され、ビームタイムは計 197.26 シフト（1 シフト＝12 時間。成果専有利用は 0.17 シフト＝2 時間単位）が利用されました。

実施課題は、一般課題（成果非専有利用／成果専有利用）、重点戦略課題（成果非専有利用のみ）、および、時期指定課題（成果専有利用のみ）の大きく 3 種類あり、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。当該期より新規利用制度として導入された時期指定課題においては、1 課題／0.17 シフト（2 時間）が配分のうえ利用されました。

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 4 課題実施され、ビームタイムは計 12 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 > 2016B

[http://sacla.xfel.jp/wp-content/uploads/sacla\\_performed\\_proposal\\_2016b\\_j.pdf](http://sacla.xfel.jp/wp-content/uploads/sacla_performed_proposal_2016b_j.pdf)

※ 2016B 期の実施課題は、2017 年 5 月 19 日に公開。

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>

※ 2016B 期の報告書は、2017 年 5 月 19 日に公開。

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 2016B 期 SACLA 利用研究実施課題

課題種	産業界		大学等教育機関		国立試験研究機関等		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	(成果非専有利用)	2	8	6	30	8	47	4	16	20	101
	(成果専有利用)	1	0.17							1	0.17
重点戦略課題（成果非専有利用）			12	59.92	5	19	4	17	21	95.92	
時期指定課題（成果専有利用）	1	0.17							1	0.17	
合計	4	8.34	18	89.92	13	66	8	33	43	197.26	

○実施課題を実験責任者の所属（産学官 海外）で区分。

○1 シフト＝12 時間、0.17 シフト＝2 時間。

○延べ来所者数は計 650 人。

## SPring-8/SACLA 利用者選定に係る 平成 27-28 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

平成 27-28 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。

### ○ 平成 27-28 年度 SPring-8 選定委員会

#### (委員長)

佐々木 聡 国立大学法人東京工業大学 応用セラミックス研究所 教授

#### (委員長代理)

中川 敦史 国立大学法人大阪大学 蛋白質研究所 教授

#### (委員)

片桐 元 株式会社東レリサーチセンター 常務取締役

金谷 利治 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 J-PARC MFL デイビジョン 教授・デイビジョン長

栗原 和枝 国立大学法人東北大学 多元物質科学研究所 教授

坂田 誠 国立大学法人名古屋大学 名誉教授

谷一 尚 山陽学園大学 副学長・教授

藤原明比古 関西学院大学 教授

水木純一郎 関西学院大学 教授

矢野 映 株式会社富士通研究所 取締役

山田 和芳 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 所長

横溝 英明 一般財団法人総合科学研究機構 (CROSS) 中性子科学センター 理事・センター長

渡辺 義夫 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 リエゾン (副所長格)

### ○ 平成 27-28 年度 SACLA 選定委員会

#### (委員長)

坂田 誠 国立大学法人名古屋大学 名誉教授

#### (委員長代理)

雨宮 慶幸 国立大学法人東京大学 教授

#### (委員)

上村みどり 帝人ファーマ株式会社 生物医学総合研究所 上席研究員

妹尾与志木 株式会社豊田中央研究所 シニアパートナー

月原 富武 公立大学法人兵庫県立大学 特任教授

豊島 近 国立大学法人東京大学 分子細胞生物学研究所 教授

水木純一郎 関西学院大学 教授

三間 罔興 光産業創成大学院大学 特任教授

宮永 憲明 国立大学法人大阪大学 レーザーエネルギー学研究センター 教授

### ○ 平成 27-28 年度 専用施設審査委員会

#### (委員長)

雨宮 慶幸 国立大学法人東京大学 教授

#### (委員長代理)

渡邊 信久 国立大学法人名古屋大学 教授

#### (委員)

石川 哲也 国立研究開発法人理化学研究所 放射光科学総合研究センター センター長

入船 徹男 国立大学法人愛媛大学 地球深部ダイナミクス研究センター センター長

岡島 敏浩 公益財団法人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 ビームライングループ グループ長

後藤 俊治 公益財団法人高輝度光科学研究センター 光源・光学系部門長 兼 加速器部門長

櫻井 吉晴 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用研究促進部門長  
壽榮松宏仁 国立大学法人東京大学 名誉教授  
田中良太郎 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
制御・情報部門長 (H27.6 まで)  
花木 博文 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
安全管理室長  
廣沢 一郎 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
産業利用推進室長  
松下 智裕 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
制御・情報部門長 (H27.6 から)  
八木 直人 公益財団法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長  
渡辺 義夫 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 リエゾン (副所長格)

**○ 平成 27-28 年度 SPring-8 利用研究課題審査委員会**

(委員長)

中川 敦史 国立大学法人大阪大学 蛋白質研究所 教授

(委員)

岩田 忠久 国立大学法人東京大学 教授・専攻長  
大谷 栄治 国立大学法人東北大学 教授  
片岡 幹雄 国立大学法人奈良先端科学技術大学院大学  
理事・副学長  
河田 洋 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研  
究機構 教授  
木村 昭夫 国立大学法人広島大学 教授  
小森 文夫 国立大学法人東京大学 教授  
後藤 俊治 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
光源・光学系部門長 兼 加速器部門長  
坂田 修身 国立研究開発法人物質・材料研究機構 技術開  
発・共用部門 高輝度放射光ステーション長  
櫻井 吉晴 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用研究促進部門長  
宍戸 哲也 公立大学法人首都大学東京 教授  
白井 幹康 国立研究開発法人国立循環器病研究センター  
肺高血圧症先端医学研究部 特任研究員  
杉本 宏 国立研究開発法人理化学研究所 放射光科学  
総合研究センター 専任研究員  
鈴木 謙爾 公益財団法人特殊無機材料研究所 代表理事  
土山 明 国立大学法人京都大学 教授  
花木 博文 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
安全管理室長  
平井 康晴 公益財団法人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  
廣沢 一郎 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
産業利用推進室長

藤原明比古 関西学院大学 教授  
松下 智裕 公益財団法人高輝度光科学研究センター 制  
御・情報部門長  
村上 洋一 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研  
究機構 副所長・教授  
八木 直人 公益財団法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長

**○ 平成 27-28 年度 SACLA 利用研究課題審査委員会**

(委員長)

雨宮 慶幸 国立大学法人東京大学 教授

(委員長代理)

西堀 英治 国立大学法人筑波大学 教授

(委員)

足立 伸一 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研  
究機構 物質構造科学研究所 教授 (H28.11  
から)  
後藤 俊治 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
光源・光学系部門長 兼 加速器部門長  
近藤 公伯 国立研究開発法人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  
近藤 寛 慶應義塾大学 教授  
坂田 修身 国立研究開発法人物質・材料研究機構 技術開  
発・共用部門 高輝度放射光ステーション長  
佐藤 衛 公立大学法人横浜市立大学 教授  
繁政 英治 大学共同利用機関法人自然科学研究機構 分  
子科学研究所 准教授 (H28.11 から)  
千田 俊哉 大学共同利用機関法人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  
登野 健介 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 実験技術開発チーム  
チームリーダー (H27.11 から)  
中川 敦史 国立大学法人大阪大学 蛋白質研究所 教授  
西野 吉則 国立大学法人北海道大学 教授・センター長  
(H27.11 から)  
濡木 理 国立大学法人東京大学 教授  
初井 宇記 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 先端計測・解析技術グ  
ループ グループリーダー  
花木 博文 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
安全管理室長  
菱川 明栄 国立大学法人名古屋大学 教授 (H27.11 から)  
平井 康晴 公益財団法人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  
前仲 勝実 国立大学法人北海道大学 教授

- 松田 巖 国立大学法人東京大学 物性研究所 准教授 (H27.11 から)  
 水木純一郎 関西学院大学 教授  
 矢橋 牧名 公益財団法人高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室長  
 山川 考一 国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構 関西光科学研究所 レーザー医療応用研究グループ グループリーダー  
 山下 宏一 国立研究開発法人理化学研究所播磨研究所 安全管理室長  
 米田 仁紀 国立大学法人電気通信大学 レーザー新世代研究センター センター長・教授

○平成 27-28 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)〉

- ◎◎杉本 宏 国立研究開発法人理化学研究所 放射光科学総合研究センター 専任研究員  
 熊坂 崇 公益財団法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長代理  
 栗栖 源嗣 国立大学法人大阪大学 教授

〈分科会 2 (生物試料回折散乱 (非結晶))〉

- 片岡 幹雄 国立大学法人奈良先端科学技術大学院大学 理事・副学長  
 岩本 裕之 公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 コーディネーター  
 高橋 浩 国立大学法人群馬大学 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))〉

- 白井 幹康 国立研究開発法人国立循環器病研究センター 肺高血圧症先端医学研究部 特任研究員  
 武田 徹 北里大学 教授  
 八木 直人 公益財団法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長

[散乱回折分科会]

〈分科会 1 (無機系結晶、有機・分子系結晶)〉

- ◎◎藤原明比古 関西学院大学 教授  
 北川 宏 国立大学法人京都大学 理事補 (研究担当)・教授

〈分科会 2 (高圧物性、地球惑星科学)〉

- 大谷 栄治 国立大学法人東北大学 教授  
 大石 泰生 公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 グループリーダー  
 谷口 尚 国立研究開発法人物質・材料研究機構 グループリーダー

〈分科会 3 (材料イメージング (CT、トポグラフィー 等))〉

- 土山 明 国立大学法人京都大学 教授  
 上杉健太郎 公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 チームリーダー  
 安田 秀幸 国立大学法人京都大学 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))〉

- 河田 洋 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 教授  
 筒井 智嗣 公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 チームリーダー  
 藤田 全基 国立大学法人東北大学 教授

〈分科会 5 (合成高分子)〉

- 岩田 忠久 国立大学法人東京大学 教授・専攻長  
 秋葉 勇 公立大学法人北九州市立大学 教授  
 関口 博史 公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 チームリーダー

〈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)〉

- 坂田 修身 国立研究開発法人物質・材料研究機構 技術開発・共用部門 高輝度放射光ステーション長  
 木村 滋 公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 副部門長  
 松原英一郎 国立大学法人京都大学 教授

[XAFS・蛍光分析分科会]

(XAFS、蛍光 X 線分析、微量分析)

- ◎宍戸 哲也 公立大学法人首都大学東京 教授  
 高橋 嘉夫 国立大学法人東京大学 教授  
 宇留賀朋哉 公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 副部門長

**[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)〉

- ◎◎木村 昭夫 国立大学法人広島大学 教授
- 木須 孝幸 国立大学法人大阪大学 准教授
- 室 隆桂之 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用研究促進部門 チームリーダー

〈分科会 2 (MCD (軟 X 線、硬 X 線))〉

- 小森 文夫 国立大学法人東京大学 教授
- 中川 剛志 国立大学法人九州大学 准教授
- 中村 哲也 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用研究促進部門 グループリーダー

**[産業利用分科会]**

- ◎平井 康晴 公益財団法人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
- 木村 正雄 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 教授
- 佐野 則道 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
産業利用推進室 コーディネーター
- 松井 純爾 公立大学法人兵庫県立大学 産学連携・研究推進機構 放射光ナノテクセンター 顧問
- 渡辺 義夫 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 リエゾン (副所長格)

**[スマートイノベーション分科会]**

- ◎藤原明比古 関西学院大学 教授
- 梶谷 文彦 川崎医科大学・川崎医療福祉大学 名誉教授・特任教授
- 木村 滋 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用研究促進部門 副部門長
- 白井 幹康 国立研究開発法人国立循環器病研究センター  
肺高血圧症先端医学研究部 特任研究員
- 壽榮松宏仁 国立大学法人東京大学 名誉教授
- 村上 昌雄 獨協医科大学医学部、獨協医科大学病院  
放射線治療センター 教授・センター長
- 八木 直人 公益財団法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長

**[社会・文化利用分科会]**

- ◎鈴木 謙爾 公益財団法人特殊無機材料研究所 代表理事
- 谷一 尚 山陽学園大学 副学長・教授
- 寺田 靖子 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用研究促進部門 チームリーダー

八木 直人 公益財団法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長

**[長期利用分科会]**

- ◎村上 洋一 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 副所長・教授
- 金谷 利治 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構  
物質構造科学研究所 J-PARC MFL デイビジョン 教授・デイビジョン長
- 坂井 徹 公立大学法人兵庫県立大学 教授
- 櫻井 吉晴 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用研究促進部門長
- 佐藤 衛 公立大学法人横浜市立大学 教授
- 野村 昌治 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 理事
- 平谷 篤也 国立大学法人広島大学 教授
- 廣沢 一郎 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
産業利用推進室長
- 松原英一郎 国立大学法人京都大学 教授
- 八木 直人 公益財団法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長

**○平成 27-28 年度 パートナーユーザー審査委員会**

**(委員長)**

村上 洋一 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 副所長・教授

**(委員)**

- 金谷 利治 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構  
物質構造科学研究所 J-PARC MFL デイビジョン 教授・デイビジョン長
- 後藤 俊治 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
光源・光学系部門長 兼 加速器部門長
- 坂井 徹 公立大学法人兵庫県立大学 教授
- 櫻井 吉晴 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用研究促進部門長
- 佐藤 衛 公立大学法人横浜市立大学 教授
- 野村 昌治 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構  
理事
- 平谷 篤也 国立大学法人広島大学 教授
- 廣沢 一郎 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
産業利用推進室長
- 松下 智裕 公益財団法人高輝度光科学研究センター  
制御・情報部門長
- 松原英一郎 国立大学法人京都大学 教授
- 八木 直人 公益財団法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長



**○ 平成 27-28 年度 新分野創成利用審査委員会****(委員長)**

下村 理 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 名誉教授

**(委員)**

足立 伸一 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 教授

後藤 俊治 公益財団法人高輝度光科学研究センター 光源・光学系部門長 兼 加速器部門長

櫻井 吉晴 公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門長

佐藤 勝昭 国立研究開発法人科学技術振興機構 研究広報主監

並河 一道 国立大学法人東京学芸大学 名誉教授 研究員

西 敏夫 国立大学法人東京工業大学 特任教授

廣沢 一郎 公益財団法人高輝度光科学研究センター 産業利用推進室長

水木純一郎 関西学院大学 教授

八木 直人 公益財団法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長

**○ 平成 27-28 年度 SPring-8/SACLA 成果審査委員会****(委員長)**

坂田 誠 国立大学法人名古屋大学 名誉教授

**(委員)**

櫻井 吉晴 公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門長

杉本 宏 国立研究開発法人理化学研究所 放射光科学総合研究センター 専任研究員

巽 修平 川崎重工業株式会社 技術研究所 テクニカルアドバイザー

廣沢 一郎 公益財団法人高輝度光科学研究センター 産業利用推進室長

藤原明比古 関西学院大学 教授

松田 巖 国立大学法人東京大学 物性研究所 准教授

矢板 毅 国立研究開発法人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

八木 直人 公益財団法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長

矢橋 牧名 公益財団法人高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室長

(所属・役職は平成 29 年 3 月時点又は退任時のもの)

## 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 (2017年3月31日現在)

SPring-8

Beamline Name		Public Use Since	~2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	Total	
Public Beamlines	BL01B1	XAFS	1997.10	244	54	59	58	75	65	73	92	72	69	16	877
		Technical Journal							1						1
	BL02B1	Single Crystal Structure Analysis	1997.10	98	10	13	19	12	18	36	43	34	37	5	325
	BL02B2	Powder Diffraction	1999.9	307	66	65	67	82	59	96	70	76	79	18	985
	BL04B1	High Temperature and High Pressure Research	1997.10	117	14	20	21	22	16	20	19	16	16	3	284
	BL04B2	High Energy X-ray Diffraction	1999.9	123	17	26	28	23	28	28	33	35	33	4	378
		Technical Journal								1					1
	BL08W	High Energy Inelastic Scattering	1997.10	96	8	12	12	20	19	15	13	19	13		227
	BL09XU	Nuclear Resonant Scattering	1997.10	78	12	9	9	13	13	15	14	18	12	1	194
	BL10XU	High Pressure Research	1997.10	198	33	24	34	31	28	20	28	23	22	7	448
	BL13XU	Surface and Interface Structure	2001.9	76	28	16	18	25	6	16	20	23	31	6	265
	BL14B2	Engineering Science Research II	2007.9		2	16	25	32	36	52	53	59	42	10	327
		Technical Journal								1	1	1			3
	BL19B2	Engineering Science Research I	2001.11	82	22	20	18	35	53	56	61	62	54	20	483
		Technical Journal								1	1	1	2		5
	BL20B2	Medical and Imaging I	1999.9	121	26	14	16	25	34	28	25	32	15	2	338
	BL20XU	Medical and Imaging II	2001.9	54	24	24	36	28	20	40	44	37	28	5	340
	BL25SU	Soft X-ray Spectroscopy of Solid	1998.4	211	24	21	20	25	22	24	30	20	17	5	419
		Technical Journal								2					2
	BL27SU	Soft X-ray Photochemistry	1998.5	200	36	15	22	31	18	40	33	22	34	5	456
	BL28B2	White Beam X-ray Diffraction	1999.9	55	16	14	9	15	9	21	18	20	15	2	194
	BL35XU	High Resolution Inelastic Scattering	2001.9	41	19	5	9	12	8	13	13	15	12	4	151
	BL37XU	Trace Element Analysis	2002.11	49	13	12	22	23	13	31	28	30	20	3	244
		Technical Journal									1				1
	BL38B1	Structural Biology III	2000.10	182	45	53	47	46	60	58	48	62	49	10	660
	BL39XU	Magnetic Materials	1997.10	114	15	27	15	19	21	19	25	18	19	10	302
	BL40B2	Structural Biology II	1999.9	234	25	30	43	42	43	70	54	50	49	14	654
		Technical Journal								1		1			2
	BL40XU	High Flux	2000.4	56	9	13	11	13	18	36	19	29	30	5	239
	BL41XU	Structural Biology I	1997.10	383	61	78	65	66	53	65	55	57	54	9	946
BL43IR	Infrared Materials Science	2000.4	40	13	10	5	8	11	8	11	17	13	7	143	
BL46XU	Engineering Science Research III	2000.11	46	19	13	20	22	15	36	27	52	40	6	296	
	Technical Journal										1			1	
BL47XU	HXPES・MCT	1997.10	144	22	27	27	28	17	35	36	25	23	9	393	
Public Use at Other Beamlines	BL11XU	QST Quantum Dynamics I	1999.3	9	4									13	
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II	1998.4	35	3	3	3	2	1		1			48	
	BL15XU	WEBRAM	2002.9	24	5	2	1	1	1		1			35	
	BL17SU	RIKEN Coherent Soft X-ray Spectroscopy	2005.9	1	4	2	1	7	6	11	11	5	2	1	51
	BL19LXU	RIKEN SR Physics	2002.9	5							1	1	1		8
	BL22XU	JAEA Actinide Science I	2004.9	4	1					1					6
	BL23SU	JAEA Actinide Science II	1998.6	38	4	2	2		2	3	2				53
	BL26B1	RIKEN Structural Genomics I	2009.4					3	8	2	8	5	12	3	41
	BL26B2	RIKEN Structural Genomics II	2009.4				1		5	3	4	7	8		28
		Technical Journal											1		1
	BL29XU	RIKEN Coherent X-ray Optics	2002.9	8	4	1					1				14
	BL32XU	RIKEN Targeted Proteins	2010.10					5	5	8	9	13	5	1	46
	BL44B2	RIKEN Materials Science	1998.5	13	1								4	1	19
BL45XU	RIKEN Structural Biology I	1997.10	61	4	11	8	9	6	7	9	12	18	3	148	
Subtotal			3547	663	657	692	800	737	986	959	966	876	195	11078	

Beamline Name		Public Use Since	~2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	Total	
Contract Beamlines	BL03XU	Advanced Softmaterials	2009.11				1	5	8	24	21	14	17	3	93
		Technical Journal							35	42	39	36	33		185
	BL07LSU	The University-of-Tokyo Outstation Beamline for Materials Science	2009.11				1	5	6	10	12	11	16	6	67
	BL08B2	Hyogo Prefecture BM	2005.9				1	1	3	6	7	5	5	3	31
		Technical Journal							7	1	18	7	4		37
	BL11XU	QST Quantum Dynamics I		50	7	7	9	6	13	16	14	8	16	4	150
	BL12B2	NSRRC BM	2001.9	87	9	7	28	13	25	22	21	22	24	2	260
	BL12XU	NSRRC ID	2003.2	18	8	5	15	10	14	11	16	17	14		128
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II		55	18	16	18	16	11	10	15	19	14	6	198
	BL15XU	WEBRAM	2001.4	66	17	28	35	50	41	59	56	46	49	5	452
	BL16B2	Sunbeam BM	1999.9	28	3	6	6	5	3	3	6	3	9	1	73
		Technical Journal			2					18	17	14	11	10	3
	BL16XU	Sunbeam ID	1999.9	25	1	6	5	2	2	2	3	4	8	1	59
		Technical Journal								21	21	18	18	9	2
	BL22XU	JAEA Actinide Science I		31	5	9	15	10	10	14	19	15	14	1	143
	BL23SU	JAEA Actinide Science II		85	25	22	15	22	20	17	27	19	23	5	280
	BL24XU	Hyogo Prefecture ID	1998.10	111	7	8	5	6	7	8	5	4	5		166
		Technical Journal								11	3	10	3	1	28
	BL28XU	RISING II	2012.4							3	9	5	5		22
	BL31LEP	Laser-Electron Photon II	2013.10								1				1
BL32B2	Pharmaceutical Industry (2002.9 - 2012.3)		15	6	1	2	3				1			28	
BL33LEP	Laser-Electron Photon	2000.10	24	3	5	8	2	3	4	3	2	1		55	
BL33XU	Toyota	2009.5					2	5	2	8	4	10	2	33	
	Technical Journal							2	5	4	5	3	4	23	
BL36XU	Catalytic Reaction Dynamics for Fuel Cell	2013.1							1	7	6	7	1	22	
BL44XU	Macromolecular Assemblies	2000.2	122	22	30	20	48	57	58	46	54	41	12	510	
Subtotal			717	131	150	184	206	228	270	296	259	278	52	2771	
RIKEN Beamlines	BL17SU	Coherent Soft X-ray Spectroscopy		20	18	13	12	10	13	3	7	4	6		106
	BL19LXU	SR Physics		50	5	11	7	8	11	12	13	9	2	1	129
	BL26B1	Structural Genomics I		99	23	13	14	7	8	7	4	5	3		183
	BL26B2	Structural Genomics II		24	19	6	18	18	19	13	4	3	5	1	130
	BL29XU	Coherent X-ray Optics		105	14	9	15	8	16	14	9	10	10		210
	BL32XU	Targeted Proteins						2	9	8	8	8	7	1	43
	BL43LXU	Quantum NanoDynamics										1	1		2
	BL44B2	Materials Science		165	15	10	9	12	11	13	12	17	14		278
	BL45XU	Structural Biology I		146	16	9	8	9	9	10	9	12	3	1	232
	Subtotal			609	110	71	83	74	96	80	66	69	51	4	1313

SACLA

Public Beamlines	Beamline Name		Public Use Since	~2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	Total
	BL2/BL3	XFEL2/XFEL1	2012.3							1	13	26	37	44	4

Hardware / Software R & D	355	22	34	35	35	56	65	12	34	35	3	686
---------------------------	-----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	---	-----

NET Sum Total	4438	798	800	871	943	923	1172	1069	1105	1025	213	13357
Technical Journal		2			2	90	84	100	73	59	4	414

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 (<http://user.spring8.or.jp/?p=748&lang=ja>) に 2017 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 (2017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	878	66	84	1028
	BL02B1	Single Crystal Structure Analysis	1997.10	325	14	31	370
	BL02B2	Powder Diffraction	1999.9	985	40	82	1107
	BL04B1	High Temperature and High Pressure Research	1997.10	284	7	48	339
	BL04B2	High Energy X-ray Diffraction	1999.9	379	13	49	441
	BL08W	High Energy Inelastic Scattering	1997.10	227	10	40	277
	BL09XU	Nuclear Resonant Scattering	1997.10	194	15	33	242
	BL10XU	High Pressure Research	1997.10	448	22	59	529
	BL13XU	Surface and Interface Structure	2001.9	265	18	33	316
	BL14B2	Engineering Science Research II	2007.9	330	10	32	372
	BL19B2	Engineering Science Research I	2001.11	488	45	85	618
	BL20B2	Medical and Imaging I	1999.9	338	87	86	511
	BL20XU	Medical and Imaging II	2001.9	340	101	111	552
	BL25SU	Soft X-ray Spectroscopy of Solid	1998.4	421	16	60	497
	BL27SU	Soft X-ray Photochemistry	1998.5	456	21	35	512
	BL28B2	White Beam X-ray Diffraction	1999.9	194	16	22	232
	BL35XU	High Resolution Inelastic Scattering	2001.9	151	5	11	167
	BL37XU	Trace Element Analysis	2002.11	245	24	43	312
	BL38B1	Structural Biology III	2000.10	660	11	56	727
	BL39XU	Magnetic Materials	1997.10	302	17	74	393
	BL40B2	Structural Biology II	1999.9	656	13	107	776
	BL40XU	High Flux	2000.4	239	20	68	327
	BL41XU	Structural Biology I	1997.10	946	4	96	1046
	BL43IR	Infrared Materials Science	2000.4	143	14	53	210
	BL46XU	Engineering Science Research III	2000.11	297	18	33	348
	BL47XU	HXPES・MCT	1997.10	393	93	117	603
Public Use at Other Beamlines	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	51	1	29	81
	BL19LXU	RIKEN SR Physics	2002.9	8		2	10
	BL22XU	JAEA Actinide Science I	2004.9	6			6
	BL23SU	JAEA Actinide Science II	1998.6	53	4	15	72
	BL26B1	RIKEN Structural Genomics I	2009.4	41		3	44
	BL26B2	RIKEN Structural Genomics II	2009.4	29		5	34
	BL29XU	RIKEN Coherent X-ray Optics	2002.9	14		1	15
	BL32XU	RIKEN Targeted Proteins	2010.10	46		3	49
	BL44B2	RIKEN Materials Science	1998.5	19		3	22
BL45XU	RIKEN Structural Biology I	1997.10	148	5	18	171	
Subtotal			11095	752	1647	13494	

Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total	
Contract Beamlines	BL03XU	Advanced Softmaterials	2009.11	278		10	288
	BL07LSU	The University-of-Tokyo Outstation Beamline for Materials Science	2009.11	67		7	74
	BL08B2	Hyogo Prefecture BM	2005. 9	68			68
	BL11XU	QST Quantum Dynamics I		150	8	33	191
	BL12B2	NSRRC BM	2001. 9	260	1	2	263
	BL12XU	NSRRC ID	2003. 2	128	7	3	138
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II		198	11	62	271
	BL15XU	WEBRAM	2001. 4	452	11	38	501
	BL16B2	Sunbeam BM	1999. 9	148	12	61	221
	BL16XU	Sunbeam ID	1999. 9	148	8	44	200
	BL22XU	JAEA Actinide Science I		143	1	37	181
	BL23SU	JAEA Actinide Science II		280	44	102	426
	BL24XU	Hyogo Prefecture ID	1998.10	194	19	58	271
	BL28XU	RISING II	2012. 4	22			22
	BL31LEP	Laser-Electron Photon II	2013.10	1			1
	BL32B2	Pharmaceutical Industry (2002. 9 - 2012. 3)		28		3	31
	BL33LEP	Laser-Electron Photon	2000.10	55	23	3	81
	BL33XU	Toyota	2009. 5	56	5	11	72
	BL36XU	Catalytic Reaction Dynamics for Fuel Cell	2013. 1	22			22
	BL44XU	Macromolecular Assemblies	2000. 2	510		39	549
Subtotal			3208	150	513	3871	
RIKEN Beamlines	BL17SU	Coherent Soft X-ray Spectroscopy		106	4	13	123
	BL19LXU	SR Physics		129	8	26	163
	BL26B1	Structural Genomics I		183	2	19	204
	BL26B2	Structural Genomics II		130	1	13	144
	BL29XU	Coherent X-ray Optics		210	14	36	260
	BL32XU	Targeted Proteins		43		3	46
	BL43LXU	Quantum NanoDynamics		2			2
	BL44B2	Materials Science		278	2	15	295
	BL45XU	Structural Biology I		232	5	44	281
	Subtotal			1313	36	169	1518

SACLA

Public Beamlines	Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total
	BL2/BL3	XFEL2/XFEL1	2012. 3	125	4	9	138

Hardware / Software R & D	686	505	454	1645
---------------------------	-----	-----	-----	------

NET Sum Total	13771	1292	2147	17210
---------------	-------	------	------	-------

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、上記の二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/](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、平成 29 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/](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 2017 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
放射光	27	Applied Physics Letters	8
Physical Review B	26	Journal of Synchrotron Radiation	7
Scientific Reports	24	Journal of the American Chemical Physics	7
Journal of Applied Physics	13	Nature Communications	7
Japanese Journal of Applied Physics	11	Physica B	7
The Journal of Physical Chemistry C	10	レーザー研究	7
Journal of the Physical Society of Japan	9	他全 218 誌、計 481 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-1

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
32734	S. Yamada	95 (2017) 035101	2013A1005	BL02B1	有馬 孝尚	Physical Properties and Crystal Structure Analysis of Double-Perovskite NdBaMn <sub>2</sub> O <sub>6</sub> by using Single Crystals
			2013B1006	BL02B1	有馬 孝尚	
			2014A1399	BL02B1	有馬 孝尚	
32747	Takeshi Matsumura	94 (2016) 184425	2014A3711	BL22XU	稲見 俊哉	Atomic Displacements and Lattice Distortion in the Magnetic-Field-Induced Charge-Ordered State of SmRu <sub>4</sub> P <sub>12</sub>
			2014B3711	BL22XU	稲見 俊哉	
			2015A3711	BL22XU	稲見 俊哉	
32750	Junichi Yamaura	95 (2017) 020102(R)	2011A1184	BL10XU	山浦 淳一	Successive Spatial Symmetry Breaking under High Pressure in the Spin-Orbit-Coupled Metal Cd <sub>2</sub> Re <sub>2</sub> O <sub>7</sub>
32768	S. R. Park	89 (2014) 020506(R)	2007A1441	BL35XU	Reznik Dmitry	Evidence for a Charge Collective Mode Associated with Superconductivity in Copper Oxides from Neutron and X-ray Scattering Measurements of La <sub>2-x</sub> Sr <sub>x</sub> Cu <sub>4</sub>
			2009A1506	BL35XU	Reznik Dmitry	
32792	Takafumi Miyanaga	76 (2007) 035314	2000B0152	BL01B1	宮永 崇史	Atomic Distribution in In <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> N Single Quantum Wells Studied by Extended X-ray Absorption Fine Structure
			2002A0138	BL10XU	宮永 崇史	
			2002A0139	BL38B1	宮永 崇史	
			2003A0372	BL10XU	宮永 崇史	
32793	Keisuke Tomiyasu	70 (2004) 184411	2003A0580	BL02B1	富安 啓輔	Magnetic Structure of CoO Studied by Neutron and Synchrotron X-ray Diffraction
32807	Hirofumi Matsuhata	70 (2004) 134109	2001B2004	BL10XU	高田 昌樹	Phase Separation in Y <sub>1-x</sub> Ca <sub>x</sub> TiO <sub>3</sub> Associated with the Insulator-to-Metal Transition: Observation by Transmission Electron Microscopy
			2001B0229	BL10XU	伊賀 文俊	
			2000B0053	BL02B2	伊賀 文俊	
			2001A0174	BL10XU	伊賀 文俊	
32808	D. Huo	71 (2005) 075113	2003A0247	BL02B2	伊賀 文俊	Structural, Transport, and Thermal Properties of the Single-Crystalline Type-VIII Clathrate Ba <sub>8</sub> Ga <sub>16</sub> Sn <sub>30</sub>
32817	Hitoshi Yamaoka	94 (2016) 165156	2014A4136	BL12B2	辻井 直人	Pressure-Induced Phase Transition in LaCo <sub>5</sub> Studied by X-ray Emission Spectroscopy, X-ray Diffraction, and Density Functional Theory
			2014B4132	BL12B2	辻井 直人	
			2014B4261	BL12XU	辻井 直人	
			2014B4269	BL12XU	辻井 直人	
32888	Inge Serdons	70 (2004) 014109	2001B0461	BL09XU	那須 三郎	Isomer Shift Determination in Eu Compounds using Stroboscopic Detection of Synchrotron Radiation
32891	S. Kawasaki	77 (2008) 064508	2001A0004	BL10XU	高田 昌樹	Pressure-Induced Unconventional Superconductivity in the Heavy-Fermion Antiferromagnet CeIn <sub>3</sub> : An <sup>115</sup> In-NQR Study under Pressure
32894	Kazunori Umeo	71 (2005) 064110	2002A0469	BL10XU	伊賀 文俊	Pressure Effects on the Phase Transitions and Energy Gap in CeRhAs
			2002B0421	BL10XU	伊賀 文俊	
			2003A0248	BL10XU	伊賀 文俊	
32913	Teruo Kanki	84 (2011) 085107	2009B4904	BL15XU	田中 秀和	Identifying Valence Band Structure of Transient Phase in VO <sub>2</sub> Thin Films by Hard X-ray Photoemission
32976	Sara Fatale	94 (2016) 195131	2015B7499	BL07LSU	Griani Marco	Hybridization and Electron-Phonon Coupling in Ferroelectric BaTiO <sub>3</sub> Probed by Resonant Inelastic X-ray Scattering
33024	Yuki Wakabayashi	95 (2017) 014417	2015B3881	BL23SU	藤森 淳	Origin of the Large Positive Magnetoresistance of Ge <sub>1-x</sub> Mn <sub>x</sub> Granular Thin Films
33028	Takanori Wakita	95 (2017) 085109	2013B1649	BL25SU	園山 純生	Ce 4f Electronic States of CeO <sub>1-x</sub> F <sub>x</sub> BiS <sub>2</sub> Studied by Soft X-ray Photoemission Spectroscopy
33034	Jeongsoo Kang	68 (2003) 012410	2001B0028	BL25SU	Kang Jeongsoo	Resonant Photoemission Spectroscopy Study of Impurity-Induced Melting in Cr- and Ru-Doped Nd <sub>1/2</sub> A <sub>1/2</sub> MnO <sub>3</sub> (A = Ca, Sr)
33039	Kurt Kummer	84 (2011) 245114	2009A1029	BL25SU	Vyalikh Denis	Intermediate Valence in Yb Compounds Probed by 4f Photoemission and Resonant Inelastic X-ray Scattering
33041	Hitoshi Fujii	90 (2014) 014430	2012A1006	BL25SU	島川 祐一	<i>Ab initio</i> Study of Electronic, Magnetic, and Spectroscopic Properties in A- and B-Site-Ordered Perovskite CaCu <sub>3</sub> Fe <sub>2</sub> Sb <sub>2</sub> O <sub>12</sub>
33042	Shoya Sakamoto	95 (2017) 075203	2014B3881	BL23SU	藤森 淳	Origin of Robust Nanoscale Ferromagnetism in Fe-doped Ge Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy and First-Principles Calculation
33058	Kanako Fujii	95 (2017) 024116	2014B1849	BL39XU	石松 直樹	Relationship between Element-Selective Electronic States and Hydrogen Absorption Properties of Pd-M (M = Ru, Rh, Ag, and Au) Alloy
33220	Shigeki Fujiyama	86 (2012) 174414	2010B1317	BL02B1	藤山 茂樹	Weak Antiferromagnetism of J <sub>eff</sub> = 1/2 Band in Bilayer Iridate Sr <sub>3</sub> Ir <sub>2</sub> O
			理研	BL19LXU		

Physical Review B-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
33418	Jonathan Pelliciani	95 (2017) 115152	2014A3502	BL11XU	石井 賢司	Local and Collective Magnetism EuFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub>
			2014B3502	BL11XU	石井 賢司	

Scientific Reports-1

32738	Wen-Ting Chen	6 (2016) 27729	2013B4001	BL12B2	Yin Hsien Sheng	Structure and Function of Chicken Interleukin-1 Beta Mutants: Uncoupling of Receptor Binding and <i>in vivo</i> Biological Activity
32829	Hidetaka Kasai	7 (2017) 41375	2006A0096	BL02B2	西堀 英治	Spatial Distribution of Electrons Near the Fermi Level in the Metallic LaB <sub>6</sub> through Accurate X-ray Charge Density Study
			2009A0084	BL02B2	久保田 佳基	
			2015A0074	BL02B2	森吉 千佳子	
32896	Yoshihiko Imanaka	6 (2016) 35593	2015A5110	BL16XU	淡路 直樹	An Artificial Photosynthesis Anode Electrode Composed of a Nanoparticulate Photocatalyst Film in a Visible Light Responsive GaN-ZnO Solid Solution System
			2015A5410	BL16B2	淡路 直樹	
			2015B5110	BL16XU	淡路 直樹	
			2015B5410	BL16B2	淡路 直樹	
32917	Natalia Palina	7 (2017) 41264	2015B4907	BL15XU	小林 浩和	Electronic Structure Evolution with Composition Alteration of Rh <sub>x</sub> Cu <sub>y</sub> Alloy Nanoparticles
			2016A4904	BL15XU	小林 浩和	
			2015B1245	BL04B2	坂田 修身	
			2016A1292	BL04B2	坂田 修身	
32935	Ross T. Howie	6 (2016) 34896	2016A1041	BL10XU	Howie Ross	Formation of Xenon-Nitrogen Compounds at High Pressure
32937	Ryo Manabe	6 (2016) 38007	2016A1729	BL14B2	関根 泰	Surface Protonics Promotes Catalysis
32947	Jia Zhao	5 (2015) 17779	2015A4141	BL12B2	McLeod John	Reduced GeO <sub>2</sub> Nanoparticles: Electronic Structure of a Nominal GeO <sub>x</sub> Complex and Its Stability under H <sub>2</sub> Annealing
32998	Miyuki Kinebuchi	6 (2016) 33247	2012B1002	BL37XU	松浦 晃洋	Diagnostic Copper Imaging of Menkes Disease by Synchrotron Radiation-Generated X-ray Fluorescence Analysis
			2006B1712	BL37XU	松浦 晃洋	
			2007A1852	BL37XU	松浦 晃洋	
			2008A1871	BL37XU	松浦 晃洋	
			2008B1986	BL37XU	松浦 晃洋	
			2009A1881	BL37XU	松浦 晃洋	
			2009B1925	BL37XU	松浦 晃洋	
			2010B1720	BL37XU	松浦 晃洋	
			2013A1010	BL37XU	松浦 晃洋	
			2015B1003	BL37XU	松浦 晃洋	
			2010A1341	BL37XU	松浦 晃洋	
2016B1003	BL37XU	松浦 晃洋				
33037	Hiroyuki Iwamoto	7 (2017) 42272	2010A1233	BL40XU	岩本 裕之	The Earliest Molecular Response to Stretch of Insect Flight Muscle as Revealed by Fast X-ray Diffraction Recording
			2010B1267	BL40XU	岩本 裕之	
			2011A1275	BL40XU	岩本 裕之	
			2012A1277	BL40XU	岩本 裕之	
			2012B1250	BL40XU	岩本 裕之	
33052	Norimasa Nishiyama	4 (2014) 6558	2013B1913	BL27SU	為則 雄祐	Fracture-Induced Amorphization of Polycrystalline SiO <sub>2</sub> Stishovite: A Potential Platform for Toughening in Ceramics
			2014A1224	BL27SU	西山 宣正	
33060	Yuya Hanazono	6 (2016) 34654	2015A1077	BL41XU	竹田 一旗	Structural Studies of the N-terminal Fragments of the WW Domain: Insights into Co-Translational Folding of a Beta-Sheet Protein
33067	Akihisa Osakabe	7 (2017) 41783	2015A1020	BL41XU	胡桃坂 仁志	Polymorphism of Apyrimidinic DNA Structures in the Nucleosome
33111	Young-Ho Yoon	6 (2016) 35552	2011B2014	BL41XU	Samatey Fadel	Structural Insights into Bacterial Flagellar Hooks Similarities and Specificities
			2013A1880	BL41XU	Samatey Fadel	
			2013A6845	BL44XU	Samatey Fadel	
			2011A1466	BL41XU	Samatey Fadel	
			2010A6534	BL44XU	Samatey Fadel	
			2009B2106	BL41XU	Samatey Fadel	
33137	I-Ming Lee	7 (2017) 42711	2015A4003	BL12B2	Huang Kai Fa	Structural Basis for Fragmenting the Exopolysaccharide of <i>Acinetobacter baumannii</i> by Bacteriophage ΦAB6 Tailspike Protein
33156	Charlene S. Stahr	6 (2016) 29438	2011B1182	BL20B2	Siu Karen	Quantification of Heterogeneity in Lung Disease with Image-Based Pulmonary Function Testing
33175	Kiyofumi Takaba	7 (2017) 43162	2012B1332	BL41XU	竹田 一旗	Distribution of Valence Electrons of the Flavin Cofactor in NADH-Cytochrome b <sub>5</sub> Reductase
			2009B1300	BL41XU	竹田 一旗	
			2011A1353	BL41XU	竹田 一旗	
			2012A1264	BL41XU	竹田 一旗	
			2014A1488	BL38B1	竹田 一旗	



Scientific Reports-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
33193	Atsushi Yamagata	5 (2015) 9686	2014B1357	BL41XU	深井 周也	Structure of Slitrk2-PTPδ Complex Reveals Mechanisms for Splicing-Dependent <i>trans</i> -Synaptic Adhesion
			2014A1294	BL41XU	深井 周也	
			2013B1252	BL41XU	深井 周也	
33194	Jianxing Chen	7 (2017) 40909	2014B1330	BL32XU	深井 周也	Crystal Structure of Sec10, a Subunit of the Exocyst Complex
			2015A1102	BL41XU	深井 周也	
			2016A2563	BL41XU	深井 周也	
			2014A1303	BL41XU	深井 周也	
33195	Sakurako Ito	7 (2017) 42123	2014B1484	BL41XU	深井 周也	Structural Basis of the Interaction between Topoisomerase IIIβ and the TDRD3 Auxiliary Factor
			2015A1105	BL41XU	深井 周也	
33197	Ae Kyung Park	6 (2016) 33903	2015A6560	BL44XU	金 翰佑	Structure and Catalytic Mechanism of Monodehydroascorbate Reductase, MDHAR, from <i>Oryza sativa</i> L. <i>japonica</i>
33214	Fang Hong	7 (2017) 44078	2014B1254	BL10XU	Yue Binbin	Significant Improvement in Mn <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Transition Metal Oxide Electrical Conductivity via High Pressure
33296	Shigeyuki Takagi	7 (2017) 44253	2014B3602	BL14B1	齋藤 寛之	Formation of Novel Transmission Metal Hydride Complexes with Ninefold Hydrogen Coordination
33369	Yi-Ru Lee	6 (2016) 38071	2013B4006	BL12B2	Chan Nei Li	Structural Analysis of Glycine Sarcosine N-methyltransferase from <i>Methanocalophilus portucalensis</i> Reveals Mechanistic Insights into the Regulation of Methyltransferase Activity

Journal of Applied Physics

32789	Eider Goikolea	107 (2010) 09E317	2008A1567	BL01B1	Garitaonandia Jose	Magnetic and Structural Characterization of Thiol Capped Ferromagnetic Ag Nanoparticles
32790	Alexander Kolobov	117 (2015) 125308	2011B1519	BL01B1	Calarco Raffaella	Local Structure of Epitaxial GeTe and Ge <sub>2</sub> Sb <sub>2</sub> Te <sub>5</sub> Films Grown on InAs and Si Substrates with (100) and (111) Orientations: An X-ray Absorption Near-Edge Structure Study
			2011B1044	BL01B1	Rodenbach Peter Josef	
32827	Konstantin D. Litasov	113 (2013) 133505	2009A1278	BL04B1	Fei Yingwei	Thermal Equation of State to 33.5 GPa and 1673 K and Thermodynamic Properties of Tungsten
			2009B1327	BL04B1	Fei Yingwei	
			2012B1289	BL04B1	Litasov Konstantin	
32828	Konstantin D. Litasov	113 (2013) 093507	2009A1278	BL04B1	Fei Yingwei	Thermal Equation of State and Thermodynamic Properties of Molybdenum at High Pressures
			2009B1327	BL04B1	Fei Yingwei	
			2012B1289	BL04B1	Litasov Konstantin	
32843	Soichiro Mizusaki	103 (2008) 07C910	J05A0513	BL08W	伊藤 真義	Magnetism of CaRu <sub>1-x</sub> Mn <sub>x</sub> O <sub>3</sub> : Magnetic Compton Scattering Study
32901	Andrei Nikulin	109 (2011) 076106	2008A1132	BL13XU	Nikulin Andrei	Columnar Structure in Porous Silicon: Influence of Etching Time on Pore Dynamics and Ordering
32902	Masashi Tsujino	110 (2011) 126103	2008A1738	BL13XU	辻野 雅之	Synthesis of Submicron Metastable Phase of Silicon using Femtosecond Laser-Driven Shock Wave
32918	Masahiko Hashimoto	100 (2006) 103907	2002B0495	BL19B2	鈴木 彰	Local Crystal Structure and Local Electronic Structure around Cr in Low-Temperature-Grown GaCrN Layers
			2003A0251	BL19B2	寺口 信明	
33131	Mitsuharu Yonemura	107 (2010) 013523	2004A0257	BL46XU	米村 光治	Two-Dimensional Time-Resolved X-ray Diffraction Study of Dual Phase Rapid Solidification in Steels
			2004B0363	BL46XU	米村 光治	
			2006A1017	BL46XU	米村 光治	
33147	Takayuki Tashiro	117 (2015) 17E309	2012B1667	BL46XU	小嶋 隆幸	Structural and Magnetic Properties of FeNi Thin Films Fabricated on Amorphous Substrates
			2013B1590	BL46XU	水口 将輝	
33198	Yu Shiratsuchi	121 (2017) 073902	2013A1751	BL39XU	白土 優	Simultaneous Achievement of High Perpendicular Exchange Bias and Low Coercivity by Controlling Ferromagnetic/Antiferromagnetic Interfacial Magnetic Anisotropy
			2013B1267	BL25SU	白土 優	
			2014A0079	BL25SU	白土 優	
33304	Hiroyuki Fujishiro	121 (2017) 115104	2013A1093	BL01B1	藤代 博之	Electrical Resistivity Anomaly, Valence Shift of Pr Ion, and Magnetic Behavior in Epitaxial (Pr <sub>1-y</sub> Y <sub>y</sub> ) <sub>1-x</sub> Ca <sub>x</sub> CoO <sub>3</sub> Thin Films under Compressive Strain
			2016B1089	BL01B1	藤代 博之	
33354	Tomohiro Koyama	121 (2017) 123903	2015B0901	BL39XU	千葉 大地	Magnetization Switching by Spin-Orbit Torque in Pt with Proximity-Induced Magnetic Moment

Japanese Journal of Applied Physics-1

32910	Yoshinobu Miyamoto	50 (2011) 102401	2009B2054	BL14B2	宮本 快暢	Photoluminescence Characteristics of Mn <sup>2+</sup> Centers Selectively Substituted for Different Cations in CuAlS <sub>2</sub>
32911	Hiroshi Okura	51 (2012) 062602	2010A1847	BL14B2	大倉 央	X-ray Absorption Fine Structure Analysis of Valence State of Ce in Y <sub>3</sub> Al <sub>5</sub> O <sub>12</sub> :Ce Phosphor Synthesized by Coprecipitation Method
33021	Ryo Yoshimatsu	56 (2017) 032601	2015A1708	BL14B2	石垣 雅	Correlational Analysis of Eu <sup>3+</sup> Charge Transfer State using La Effective Charge in La-Based Mixed-Anion Host Compounds
			2014B1647	BL14B2	石垣 雅	

Japanese Journal of Applied Physics-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
33053	Sadaharu Jo	53 (2014) 115506	2004A0212	BL28B2	安宅 光雄	Growth Process of Pentacene Crystals Obtained by Physical Vapor Transport Technique
			2005B0363	BL28B2	城 貞晴	
			2006B1278	BL28B2	城 貞晴	
33093	Paul Fons	46 (2007) 3711-3714	2005A0004	BL01B1	Fons Paul	Sub-Nanosecond Time-Resolved Structural Measurements of the Phase-Change Alloy Ge <sub>2</sub> Sb <sub>2</sub> Te <sub>5</sub>
			2005A0561	BL14B1	Kolobov Alexander	
33139	Haruki Sumi	49 (2010) 076201	2008A1858	BL47XU	池永 英司	Effect of Carrier Gas (Ar and He) on the Crystallographic Quality of Networked Nanographite Grown on Si Substrates by Photoemission-Assisted Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition
			2008B1997	BL47XU	池永 英司	
33154	Tomoko Hishida	54 (2015) 083201	2011A1420	BL47XU	池永 英司	Laboratory Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy of La <sub>1-x</sub> Sr <sub>x</sub> MnO <sub>3</sub>
			2011B1710	BL47XU	和達 大樹	
33157	Motonobu Sato	51 (2012) 04DB01	2011A1775	BL47XU	室 隆桂之	Fabrication of Graphene Directly on SiO <sub>2</sub> without Transfer Processes by Annealing Sputtered Amorphous Carbon
33188	Yoichiro Ogata	56 (2017) 041101	2014B1599	BL14B2	小形 曜一郎	X-ray Absorption Fine Structure Analysis of Molybdenum Added to BaTiO <sub>3</sub> -based Ceramics Used for Multilayer Ceramic Capacitors
33202	Hitoshi Osawa	56 (2017) 048001	2009A1456	BL13XU	大沢 仁志	Development of High-Repetition-Rate X-ray Chopper System for Time-Resolved Measurements with Synchrotron Radiation
			2009B1259	BL13XU	大沢 仁志	
			2010A1354	BL13XU	大沢 仁志	
			2010B1422	BL13XU	大沢 仁志	
			2011A1360	BL13XU	大沢 仁志	
2012B1987	BL39XU	大沢 仁志				
33364	Kenji Ito	56 (2017) 04CG07	2015B1344	BL47XU	片岡 恵太	Band Offset of Al <sub>1-x</sub> Si <sub>x</sub> O <sub>3</sub> Mixed Oxide on GaN Evaluated by Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy

The Journal of Physical Chemistry C-1

32751	Mustafa Al Samarai	120 (2016) 24063-24069	2014A4255	BL12XU	Al Samarai Mustafa	1s3p Resonant Inelastic X-ray Scattering of Cobalt Oxides and Sulfides
			2014B4262	BL12XU	De Groot Frank	
32757	Kaori Takeuchi	121 (2017) 2807-2814	2015A7490	BL07LSU	山本 達	Adsorption of CO <sub>2</sub> on Graphene: A Combined TPD, XPS, and vdW-DF Study
			2015A7491	BL07LSU	吉信 淳	
32777	Masaaki Yoshida	121 (2017) 255-260	2015B1082	BL01B1	吉田 真明	Integration of Active Nickel Oxide Clusters by Amino Acids for Water Oxidation
32812	Titus Masese	119 (2015) 10206-10211	2012B1018	BL02B2	内本 喜晴	Crystal Structural Changes and Charge Compensation Mechanism during Two Lithium Extraction/Insertion between Li <sub>2</sub> FeSiO <sub>4</sub> and FeSiO <sub>4</sub>
			2012A1022	BL02B2	内本 喜晴	
			2011B1029	BL02B2	内本 喜晴	
32832	Takashi Nakamura	121 (2017) 2118-2124	2015B1991	BL37XU	新田 清文	Visualization of Inhomogeneous Reaction Distribution in the Model LiCoO <sub>2</sub> Composite Electrode of Lithium Ion Batteries
32921	Yufei Zhong	119 (2015) 23-28	2013B1719	BL19B2	尾坂 格	Crystallization-Induced Energy Level Change of [6,6]-Phenyl-C <sub>61</sub> -Butyric Acid Methyl Ester (PCBM) Film: Impact of Electronic Polarization Energy
32925	Kenichi Ozawa	120 (2016) 29283-29289	2014A7463	BL07LSU	小澤 健一	What Determines the Lifetime of Photoexcited Carriers on TiO <sub>2</sub> Surfaces?
			2015A7487	BL07LSU	小澤 健一	
32985	Takuma Kaneko	120 (2016) 24250-24264	2011B1015	BL01B1	横山 利彦	Key Structural Kinetics for Carbon Effects on the Performance and Durability of Pt/Carbon Cathode Catalysts in Polymer Electrolyte Fuel Cells Characterized by In Situ Time-Resolved X-ray Absorption Fine Structure
			2011B1017	BL40XU	横山 利彦	
			2011B1038	BL40XU	岩澤 康裕	
			2012A1004	BL40XU	岩澤 康裕	
			2012A1013	BL40XU	横山 利彦	
			2012A1014	BL01B1	横山 利彦	
			2012B1022	BL01B1	岩澤 康裕	
			2013A7801	BL36XU	岩澤 康裕	
			2013A7802	BL36XU	岩澤 康裕	
			2013B7806	BL36XU	岩澤 康裕	
			2014A7801	BL36XU	岩澤 康裕	
			2014B7803	BL36XU	岩澤 康裕	
			2015A7803	BL36XU	岩澤 康裕	
			2015A7804	BL36XU	岩澤 康裕	
			2015B7805	BL36XU	岩澤 康裕	
2015B7801	BL36XU	岩澤 康裕				
2015B7803	BL36XU	岩澤 康裕				
2016A7802	BL36XU	岩澤 康裕				

The Journal of Physical Chemistry C-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
33094	Akihiro Okamoto	112 (2008) 19777-19783	2007A1640	BL39XU	中村 龍平	Anchored Oxo-Bridged Bimetallic Complexes, (SiO) <sub>2</sub> -Ti-O-Fe(corrall), on Silica Mesopores as Multi-Electron-Transfer Photosystems
33107	Satoshi Ishikawa	119 (2015) 7195-7206	2011B1181	BL40XU	安田 伸広	Redox Treatment of Orthorhombic Mo <sub>29</sub> V <sub>11</sub> O <sub>112</sub> and Relationships between Crystal Structure, Microporosity and Catalytic Performance for Selective Oxidation of Ethane
			2012A1161	BL40XU	安田 伸広	
			2014A1316	BL40XU	安田 伸広	

Journal of the Physical Society of Japan

32730	Naomi Kawamura	86 (2017) 014711	2010A1963	BL39XU	河村 直己	Lifetime-Broadening-Suppressed X-ray Absorption Spectrum of $\beta$ -YbAlB <sub>4</sub> Deduced from Yb 3d $\rightarrow$ 2p Resonant X-ray Emission Spectroscopy
			2010B1349	BL39XU	松田 康弘	
			2011B2094	BL39XU	河村 直己	
			2011B2097	BL39XU	河村 直己	
			2012A1173	BL39XU	松田 康弘	
			2012A1843	BL39XU	河村 直己	
			2012B0046	BL39XU	渡辺 真仁	
			2012B1976	BL39XU	河村 直己	
32759	Mihee Lee	86 (2017) 024706	2014A1671	BL39XU	李 美希	Perpendicular Magnetic Anisotropy and Induced Magnetic Structures of Pt Layer in the Fe/Pt Multilayers Investigated by Resonant X-ray Magnetic Scattering
32800	Katsuhiko Inagaki	77 (2008) 093708	2007A0010	BL02B1	寺崎 一郎	Field-Induced Discommensuration in Charge Density Waves in $\alpha$ -TaS <sub>3</sub>
32822	Toshiaki Fujita	73 (2004) 1987-1997	2003A5004	BL10XU	高田 昌樹	Transport and Magnetic Studies on the Spin State Transition of Pr <sub>1-x</sub> Ca <sub>x</sub> CoO <sub>3</sub> up to High Pressure
32899	Tatsuo C. Kobayashi	82 (2013) 114701	2008A1505	BL10XU	武田 圭生	Valence Crossover of Ce Ions in CeCu <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> under High Pressure -Pressure Dependence of the Unit Cell Volume and the NQR Frequency-
			2002A3004	BL10XU	高田 昌樹	
32968	Shinichi Nakamura	86 (2017) 023706	2016A3561	BL11XU	中村 真一	Crystal-Site-Selective Spectrum of Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> Obtained by Mössbauer Diffraction
33092	Shin Uegaki	82 (2013) 024711	2004B0154	BL39XU	壬生 攻	Depth Profile of Induced Magnetic Polarization in Au Layers of Fe/Au(001) Metallic Superlattice by Resonant X-ray Magnetic Scattering at High Angle Region
			2005A0291	BL39XU	大河内 拓雄	
33172	Yuu Tsuchiya	86 (2017) 033705	2015B1301	BL10XU	小林 寿夫	Pressure-induced Phase Transition in K <sub>x</sub> Fe <sub>2-y</sub> S <sub>2</sub>

Journal of Synchrotron Radiation-1

32749	Junya Sakamoto	24 (2017) 95-102	2014A3713	BL22XU	大和田 謙二	Design of a Prototype Split-and Delay Unit for XFEL Pulses, and Their Evaluation by Synchrotron Radiation X-rays
			2014B3713	BL22XU	大和田 謙二	
32802	Kazuya Hasegawa	24 (2017) 29-41	2014A1001	BL41XU	山本 雅貴	Development of a Dose-Limiting Data Collection Strategy for Serial Synchrotron Rotation Crystallography
			2014B1002	BL41XU	山本 雅貴	
			2015A1001	BL41XU	山本 雅貴	
			2015B1035	BL41XU	山本 雅貴	
			2015B1650	BL41XU	山本 雅貴	
			2016A1001	BL41XU	山本 雅貴	
			2014A1464	BL41XU	長谷川 和也	
			2014B1450	BL41XU	長谷川 和也	
			2015A1094	BL41XU	長谷川 和也	
			2014A1900	BL41XU	奥村 英夫	
			2014B2058	BL41XU	奥村 英夫	
			2015A2063	BL41XU	奥村 英夫	
32813	M. Ruiz-Lopez	24 (2017) 196-204	2014A8045	BL3	尾崎 典雅	Coherent X-ray Beam Metrology using 2D High-Resolution Fresnel-Diffraction Analysis
		2014B8068	BL3	尾崎 典雅		
32889	Laszlo Deak	22 (2015) 385-392	2002B0239	BL09XU	Bottyan Laszlo	Stroboscopic Detection of Nuclear Resonance in an Arbitrary Scattering Channel
33014	Marek Brancewicz	23 (2016) 244-252	2015A2046	BL08W	伊藤 真義	A Monte Carlo Study of High-Energy Photon Transport in Matter: Application for Multiple Scattering Investigation in Compton Spectroscopy
			2015B2010	BL08W	伊藤 真義	

Journal of Synchrotron Radiation-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
33182	Keisuke Kitahara	24 (2017) 456-462	2013A1688	BL37XU	武田 志乃	Uranium XAFS Analysis of Kidney from Rats Exposed to Uranium
			2013A1750	BL01B1	武田 志乃	
			2013B1747	BL37XU	武田 志乃	
			2014A1720	BL37XU	武田 志乃	
			2014B1311	BL37XU	武田 志乃	
			2015B1430	BL37XU	武田 志乃	
33237	Jun Miyawaki	24 (2017) 449-455	2014B7474	BL07LSU	宮脇 淳	A Compact Permanent-Magnet System for Measuring Magnetic Circular Dichroism in Resonant Inelastic Soft X-ray Scattering
			2015A7489	BL07LSU	宮脇 淳	
			2015B7497	BL07LSU	宮脇 淳	

Nature Communications

32756	Takunari Kono	8 (2017) 14007	2014A6947	BL44XU	松村 浩由	A RuBisCO-mediated Carbon Metabolic Pathway in Methanogenic Archaea
			2015B6538	BL44XU	松村 浩由	
			2012B6640	BL44XU	松村 浩由	
			2013A6848	BL44XU	松村 浩由	
			2013B6848	BL44XU	松村 浩由	
			2014B6947	BL44XU	松村 浩由	
32816	Wei-Tin Chen	5 (2014) 3909	2012A1006	BL39XU	島川 祐一	A Half-Metallic A- and B-Site-Ordered Quadruple Perovskite Oxide $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$ with Large Magnetization and a High Transition Temperature
			2013B1011	BL25SU	島川 祐一	
32936	Kuglae Kim	7 (2016) 12677	2015B1053	BL41XU	Cho Hyun soo	Crystal Structure and Functional Characterization of a Light-Driven Chloride Pump having an NTQ Motif
			2015B1053	BL32XU	Cho Hyun soo	
33000	Seshiru Nakazawa	7 (2016) 12547	2014A1109	BL41XU	石井 亮平	Linear Ubiquitination is Involved in the Pathogenesis of Optineurin-Associated Amyotrophic Lateral Sclerosis
33030	Haruna Takao	8 (2017) 14397	2009A1183	BL38B1	和田 啓	A Substrate-Bound Structure of Cyanobacterial Biliverdin Reductase Identifies Stacked Substrates as Critical for Activity
			2009B1219	BL38B1	和田 啓	
			2013A6863	BL44XU	和田 啓	
			2013B6863	BL44XU	和田 啓	
			2014A6963	BL44XU	和田 啓	
			2014B6963	BL44XU	和田 啓	
			2015A6557	BL44XU	和田 啓	
			2015B6557	BL44XU	和田 啓	
			2016A6622	BL44XU	杉島 正一	
2016A6655	BL44XU	和田 啓				
33129	Youichi Naoe	7 (2016) 13411	2013A1365	BL41XU	杉本 宏	Crystal Structure of Bacterial Haem Importer Complex in the Inward-Facing Conformation
			2013B1206	BL41XU	杉本 宏	
			2014A1394	BL41XU	杉本 宏	
			2014B1389	BL41XU	杉本 宏	
			2015A1120	BL32XU	杉本 宏	
			2016A2571	BL32XU	杉本 宏	
33303	Basudev Maity	8 (2017) 14820	2016A2559	BL26B1	安部 聡	Observation of Gold Sub-Nanocluster Nucleation within a Crystalline Protein Cage
			2015A1055	BL26B1	安部 聡	
			2014A1182	BL38B1	安部 聡	
			2014B1249	BL38B1	安部 聡	
			2014B1067	BL38B1	上野 隆史	

Applied Physics Letters-1

32791	B. S. D. Ch. S. Varaprasad	104 (2014) 222403	2013B1917	BL01B1	宇留賀 朋哉	Mechanism of Coercivity Enhancement by Ag Addition in FePt-C Granular Films for Heat Assisted Magnetic Recording Media
32811	Hongze Xia	110 (2017) 043102	2014B1545	BL35XU	Conibeer Gavin	Inelastic X-ray Scattering Measurements of III-V Multiple Quantum Wells
			2013B1883	BL35XU	内山 裕士	
32981	Hiroshi Oka	110 (2017) 032104	2015B1226	BL13XU	志村 考功	Fabrication of Tensile-Strained Single-Crystalline GeSn on Transparent Substrate by Nucleation-Controlled Liquid-Phase Crystallization
33051	Alexander Kolobov	100 (2012) 061910	2010B1703	BL27SU	Kolobov Alexander	Local Structure of Nitrogen in N-Doped Amorphous and Crystalline GeTe

Applied Physics Letters-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
33099	Shinichi Shikata	110 (2017) 072106	2015B1795	BL27SU	鹿田 真一	X-ray Absorption Fine Structure Study of Heavily P Doped (111) and (001) Diamond
33144	Nicholas Hartley	110 (2017) 071905	2012A8015	BL3	丹下 慶範	Ultrafast Observation of Lattice Dynamics in Laser-Irradiated Gold Foils
			2012B8015	BL3	丹下 慶範	
			2012B8046	BL3	田中 和夫	
			2013B8063	BL3	尾崎 典雅	
			2014A8045	BL3	尾崎 典雅	
			2015A8066	BL3	尾崎 典雅	

Physica B

32801	Katsuhiko Inagaki	404 (2009) 396-398	2007A0010	BL02B1	寺崎 一郎	Commensurate-Incommensurate Transition of Charge Density Waves in $\alpha$ -TaS <sub>3</sub>
32890	Yoko Yoshino	273-274 (1999) 781-783	1999A0117	BL10XU	財部 健一	Optical Ionization of DX Center in AlGaAs : Se by Inner-Shell Excitation
32893	Masashi Ishii	340-342 (2003) 1142-1146	2001B0503	BL10XU	石井 真史	X-ray Absorption Measurement by Scanning Capacitance Microscopy
			2002B0586	BL10XU	石井 真史	
32898	Keiki Takeda	359-361 (2005) 1312-1314	2002A3004	BL10XU	高田 昌樹	Pressure-Induced Charge Ordering of LiV <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
			2003B6004	BL10XU	高田 昌樹	
33089	Hiroshi Maruyama	351 (2004) 328-332	2000A0383	BL39XU	圓山 裕	XMCD Study of Magnetic Phase Transition in Mn <sub>3</sub> ZnC Perovskite
			2003A0652	BL39XU	圓山 裕	
33091	Yoshihiko Inada	359-361 (2005) 1054-1056	2002B0617	BL39XU	稲田 佳彦	XMCD Study on Ferromagnetic Superconductor UGe <sub>2</sub>

Journal of the American Chemical Society

32794	Ljupco Pejov	139 (2017) 2318-2328	2014A1826	BL43IR	森脇 太郎	Probing Structural Perturbation in a Bent Molecular Crystal with Synchrotron Infrared Microspectroscopy and Periodic Density Functional Theory Calculations
32823	Youwen Long	131 (2009) 16244-16247	2008B1222	BL27SU	水牧 仁一朗	Various Valence States of Square-Coordinated Mn in A-Site-Ordered Perovskites
			2009A1006	BL27SU	島川 祐一	
33019	Ayako Tanaka	139 (2017) 1718-1721	2012A6713	BL44XU	神谷 信夫	Two Different Structures of the Oxygen-Evolving Complex in the Same Polypeptide Frameworks of Photosystem II
			2012B6713	BL44XU	神谷 信夫	
			2013B6814	BL44XU	神谷 信夫	
			2014A6916	BL44XU	神谷 信夫	
			2014B6916	BL44XU	神谷 信夫	
			2015A1118	BL38B1	神谷 信夫	
			2015A6512	BL44XU	神谷 信夫	
			2015B6512	BL44XU	神谷 信夫	
			2015B1045	BL26B1	神谷 信夫	
			2016A2576	BL26B1	神谷 信夫	
2011B1059	BL13XU	山崎 裕史				
2011B6613	BL44XU	神谷 信夫				
33152	Hidenori Hiramatsu	132 (2010) 15060-15067	2010A1638	BL47XU	細野 秀雄	Origins of Hole Doping and Relevant Optoelectronic Properties of Wide Gap p-Type Semiconductor, LaCuOSe
33307	Takayuki Yamamoto	139 (2017) 1392-1395	2014B1783	BL10XU	山本 貴之	The Room-Temperature Superionic Conductivity of Silver Iodide Nanoparticles under Pressure
			2015A1835	BL10XU	山本 貴之	
			2015B1701	BL10XU	山本 貴之	
			2016A1661	BL10XU	山本 貴之	

Macromolecules

32922	Atsushi Noro	49 (2016) 8971-8979	2014A1486	BL40B2	野呂 篤史	Enthalpy-Driven Swelling of Photonic Block Polymer Films
33102	Hideaki Yokoyama	41 (2008) 8626-8631	2006A1408	BL40B2	横山 英明	Horizontally and Vertically Aligned Polymeric Nanosheets: CO <sub>2</sub> -Induced Morphological Changes of Block Copolymer Thin Films
33105	Takumi Takano	45 (2012) 3859-3865	2010B1884	BL40B2	増永 啓康	PEDOT Nanocrystal in Highly Conductive PEDOT:PSS Polymer Films
			2011A1496	BL40B2	増永 啓康	
33328	Shuhei Nozaki	50 (2017) 1008-1015	2013B1186	BL40XU	小椎尾 謙	Superior Properties of Polyurethane Elastomers Synthesized with Aliphatic Diisocyanate Bearing a Symmetric Structure
			2012B1506	BL40XU	小椎尾 謙	
33396	Taiyo Yoshioka	50 (2017) 2803-2813	2013A1285	BL40B2	吉岡 太陽	Observation of Water-Stimulated Supercontraction of Uniaxially Oriented Poly(vinyl alcohol) and the Related Hierarchical Structure Change Revealed by the Time-Resolved WAXD/SAXS Measurements
			2013B1475	BL40B2	吉岡 太陽	

Angewandte Chemie International Edition

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
33257	Tsuyoshi Yamamoto	55 (2016) 6207-6210	2015A1042	BL38B1	原 幸大	Oxidative <i>trans</i> to <i>cis</i> Isomerization of Olefins in Polyketide Biosynthesis
33290	Yoshiteru Hosaka	56 (2017) 4243-4246	2016A1622	BL02B2	保坂 祥輝	Successive Charge Transitions of Unusually High-Valence Fe <sup>3.5+</sup> : Charge Disproportionation and Intermetallic Charge Transfer
33309	Soichiro Nakatsuka	56 (2017) 5087-5090	2014B1815	BL40XU	高谷 光	Divergent Synthesis of Heteroatom-Centered 4,8,12-Triazatriangulenes
			2015A1320	BL40XU	畠山 琢次	
			2015A0114	BL40XU	高谷 光	
			2016A1052	BL40XU	畠山 琢次	
33323	Ryota Hashiguchi	56 (2017) 3838-3841	2016B1442	BL02B2	大坪 主弥	Mixed-Valence Nickel Bis(azamacrocyclic) Compounds with Ghost-Leg-Type Sheets
			2015B1316	BL02B1	北川 宏	
			2015A1523	BL02B1	北川 宏	

Chemical Communications

32999	Kazuhiro Shikinaka	53 (2017) 613-616	2015B1251	BL45XU	敷中 一洋	Quasi-Solid Electrolyte: A Thixotropic Gel of Imogolite and an Ionic Liquid
33115	Kousuke Ono	50 (2014) 13683-13686	2013A1052	BL40XU	安田 伸広	Procedure-Dependent Construction of Two Isomers of Trimeric Self-Assembled Boronic Esters
33178	Shinobu Aoyagi	50 (2014) 524-526	2009B0027	BL02B1	北浦 良	A Cubic Dipole Lattice of Water Molecules Trapped Inside Carbon Cages
33342	Guangqin Li	50 (2014) 13750-13753	2013B1446	BL02B2	小林 浩和	An Ordered bcc CuPd Nanoalloy Synthesised <i>via</i> the Thermal Decomposition of Pd Nanoparticles Covered with a Metal-Organic Framework under Hydrogen Gas
			2014A1478	BL02B2	小林 浩和	

Journal of Physics: Condensed Matter

32995	Masato Kotsugi	26 (2014) 064206	2007A2119	BL19B2	小綱 真人	Structural, Magnetic and Electronic State Characterization of L1 <sub>0</sub> -type Ordered FeNi Alloy Extracted from a Natural Meteorite
			2007A2032	BL39XU	小綱 真人	
			2011B1472	BL17SU	小綱 真人	
33029	Cong Lu	29 (2017) 045702	2014B1523	BL39XU	中島 伸夫	Observation of the Flexoelectricity of a SrTiO <sub>3</sub> Single Crystal by X-ray Absorption and Emission Spectroscopies
			2015A1570	BL39XU	中島 伸夫	
33134	Takanori Wakita	29 (2016) 064001	2009B1697	BL27SU	岡崎 宏之	Electronic Structure of K-doped Picene Film on HOPG
			2012B1692	BL25SU	蛇淵 泰平	
			2013B1708	BL19B2	蛇淵 泰平	
33294	Koichi Murata	29 (2017) 155001	2011B1692	BL37XU	村田 晃一	Dopant Activation Mechanism of Bi Wire-δ-Doping into Si Crystal, Investigated with Wavelength Dispersive Fluorescence X-ray Absorption Fine Structure and Density Functional Theory
			2012A1546	BL37XU	村田 晃一	
			2012B1664	BL37XU	村田 晃一	

Physical Chemistry Chemical Physics

32837	Jadna Catafesta	16 (2014) 12202-12208	2008A1965	BL04B2	小原 真司	Confined H <sub>2</sub> O Molecules as Local Probes of Pressure-Induced Amorphisation in Faujasite
33070	Ryo Sasai	19 (2017) 5611-5616	2014B1744	BL02B2	Soomtomchaiyakul Wasusate	Photoinduced Electron Transfer in Layer-by-Layer Thin Solid Films Containing Cobalt Oxide Nanosheets, Porphyrin, and Methyl Viologen
33148	Zhenji Han	17 (2015) 3783-3795	2013B1546	BL46XU	駒場 慎一	Electrochemical Lithiation Performance and Characterization of Silicon-Graphite Composites with Lithium, Sodium, Potassium, and Ammonium Polyacrylate Binders
			2013A1399	BL46XU	駒場 慎一	
33222	Yasumasa Takagi	19 (2017) 6013-6021	2014A7810	BL36XU	横山 利彦	<i>In situ</i> Study of Oxidation States of Platinum Nanoparticles on a Polymer Electrolyte Fuel Cell Electrode by Near Ambient Pressure Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy
			2014A7811	BL36XU	横山 利彦	
			2014B7810	BL36XU	横山 利彦	
			2014B7811	BL36XU	横山 利彦	
			2015A7810	BL36XU	横山 利彦	
2015B7810	BL36XU	横山 利彦				

Review of Scientific Instruments-1

33015	Marek Brancewicz	87 (2016) 085106	2014A1898	BL08W	伊藤 真義	High Transmission Ni Compound Refractive Lens for High Energy X-rays
			2014B2043	BL08W	伊藤 真義	
			2013B1924	BL08W	伊藤 真義	
33016	Keiji Umetani	84 (2013) 034302	2008A1490	BL28B2	梅谷 啓二	X-ray Intravital Microscopy for Functional Imaging in Rat Hearts using Synchrotron Radiation Coronary Microangiography
			2010A1917	BL28B2	梅谷 啓二	

Review of Scientific Instruments-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
33047	Takashi Imazono	76 (2005) 023104	2004B0748	BL27SU	木村 洋昭	Performance of a Reflection-Type Polarizer by Use of Muscovite Mica Crystal in the Soft X-ray Region of 1 keV
33063	Keiji Umetani	85 (2014) 073704	2012A1440	BL28B2	近藤 威	Phase Contrast Portal Imaging using Synchrotron Radiation
			2012B1568	BL28B2	近藤 威	

放射光 (Journal of the Japanese Society for Synchrotron Radiation Research)

33276	Yoshinori Nishino	28 (2015) 18-24	2012A8034	BL3	西野 吉則	Live Cell Nano-Imaging by using X-ray Free-Electron Laser
			2012B8039	BL3	西野 吉則	
			2013A8046	BL3	西野 吉則	
33277	Shinya Yoshikawa	28 (2015) 56-66	2014A8036	BL3	吾郷 日出夫	A Damage-Free Structural Determination of the Highly X-ray Irradiation-Sensitive Active Site of Bovine Heart Cytochrome <i>c</i> Oxidase by the Femtosecond X-ray Laser Crystallography using SACLA
33287	Keitaro Yamashita	29 (2016) 204-212	2014A8032	BL3	岩田 想	Experimental Phasing with Serial Femtosecond Crystallography using Anomalous Dispersion
			2013B8045	BL3	岩田 想	
33291	Masaki Oura	29 (2016) 14-22	2013A8050	BL3	大浦 正樹	Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy Experiment at SACLA ~Towards Femtosecond Time-Resolved Measurement~
			2013B8067	BL3	大浦 正樹	
			2014B8019	BL3	松波 雅治	
			2015A8016	BL2	大浦 正樹	
			理研	BL19LXU		

ACS Applied Materials & Interfaces

32780	Evelyn Handick	9 (2017) 3581-3589	2014A1729	BL47XU	Wilks Regan	Formation of a K-In-Se Surface Species by NaF/KF Postdeposition Treatment of Cu(In,Ga)Se <sub>2</sub> Thin-Film Solar Cell Absorbers
			2015A4600	BL15XU	Gerlach Dominic	
32930	Valeri Petkov	7 (2015) 23265-23277	2015A4127	BL12B2	Chen Tsan Yao	3D Atomic Arrangement at Functional Interfaces Inside Nanoparticles by Resonant High-Energy X-ray Diffraction
33059	Kohtaro Takahashi	9 (2017) 8211-8218	2015A1842	BL19B2	高橋 功太郎	Engineering Thin Films of a Tetrabenzoporphyrin toward Efficient Charge-Carrier Transport: Selective Formation of a Brickwork Motif
			2015A1683	BL19B2	鈴木 充朗	
			2015A1965	BL46XU	小金澤 智之	
			2015B1769	BL19B2	高橋 功太郎	

Acta Crystallographica Section F

32770	Noor Dina Muhd Noor	72 (2016) 53-58	2014A6925	BL44XU	柴田 直樹	Improved Purification, Crystallization and Crystallographic Study of Hyd-2-type [NiFe]-hydrogenase from <i>Citrobacter</i> sp. S-77
			2014B6925	BL44XU	柴田 直樹	
			2015A6700	BL44XU	中川 敦史	
33088	Shoko Hashimoto	68 (2012) 476-478	2010B2011	BL38B1	馬場 清喜	Crystallization and Preliminary Crystallographic Analysis of the Complex between Triiodothyronine and the <i>bb'</i> Fragment of Rat Protein Disulfide Isomerase
33249	Yuzu Ikegaya	71 (2015) 668-670	2014B1990	BL26B2	原 幸大	Crystallographic Study of a Novel DNA-Binding Domain of Human HLTf Involved in the Template-Switching Pathway to Avoid the Replication Arrest Caused by DNA Damage

American Mineralogist

32833	Anton Shatskiy	98 (2013) 11-12	2010B1308	BL04B1	Shatskiy Anton	Melting and Subsolvus Phase Relations in the System Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> -MgCO <sub>3</sub> ·H <sub>2</sub> O at 6 GPa and the Stability of Na <sub>2</sub> Mg(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> in the Upper Mantle
			2011B1416	BL04B1	Shatskiy Anton	
			2011B1163	BL04B1	Shatskiy Anton	
			2012B1548	BL04B1	Shatskiy Anton	
33177	Shohei Kaneko	100 (2015) 1308-1311	2009B0028	BL10XU	大谷 栄治	Discovery of Stishovite in Apollo 15299 Sample
			2012B1062	BL10XU	大谷 栄治	
			2013A1496	BL10XU	大谷 栄治	
			2013B0104	BL10XU	大谷 栄治	
33205	Anna Dymshits	100 (2015) 378-384	2011B1091	BL04B1	Litasov Konstantin	In situ Observation of the Pyroxene-Majorite Transition in Na <sub>2</sub> MgSi <sub>6</sub> O <sub>12</sub> using Synchrotron Radiation and Raman Spectroscopy of Na-Majorite
			2012A1416	BL04B1	Litasov Konstantin	
			2012B1289	BL04B1	Litasov Konstantin	

Applied Surface Science-1

32916	Ryutaro Yasuhara	254 (2008) 4757-4761	2006A1657	BL17SU	尾嶋 正治	Application of Spectroscopic Photoemission and Low Energy Electron Microscope to High- <i>k</i> Gate Dielectrics: Relationship between Surface Morphology and Electronic States during Hf-Silicide Formation
-------	------------------	----------------------	-----------	--------	-------	--

### Applied Surface Science-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
33035	Azusa Hattori	237 (2004) 311-315	2002A0464	BL25SU	大門 寛	Atomic Structure of Fe Thin-Films on Cu(0 0 1) Studied with Stereoscopic Photography
			2003A0268	BL25SU	大門 寛	
33114	Vygantas Mizeikis	255 (2009) 9745-9749	2006A1746	BL40XU	高田 昌樹	Formation of Amorphous Sapphire by a Femtosecond Laser Pulse Induced Micro-Explosion

### Biochemistry

32745	Long-Jiang Yu	55 (2016) 6495-6504	2011A6608	BL44XU	大友 征宇	Structural Basis for the Unusual Q <sub>y</sub> Red-Shift and Enhanced Thermostability of the LH1 Complex from <i>Thermochromatium tepidum</i>
			2011B6608	BL44XU	大友 征宇	
			2012A6709	BL44XU	大友 征宇	
			2012B6709	BL44XU	大友 征宇	
			2013A6809	BL44XU	大友 征宇	
			2013B6809	BL44XU	大友 征宇	
			2014A6911	BL44XU	大友 征宇	
			2014B6911	BL44XU	大友 征宇	
			2015A1028	BL41XU	大友 征宇	
			2015B6507	BL44XU	大友 征宇	
32895	Shunsuke Matsumoto	56 (2017) 602-611	2014A6922	BL44XU	神田 大輔	Tethering an N-Glycosylation Sequon-Containing Peptide Creates a Catalytically Competent Oligosaccharyltransferase Complex
			2014B6922	BL44XU	神田 大輔	
			2015A6519	BL44XU	神田 大輔	
			2015B6519	BL44XU	神田 大輔	
32904	Masahiro Watanabe	55 (2016) 4399-4409	2016A6657	BL44XU	渡邊 真宏	Construction of Thermophilic Xylanase and Its Structural Analysis

### Cell

32883	Hiroshi Nishimasu	162 (2015) 1113-1126	2015A0119	BL41XU	濡木 理	Crystal Structure of <i>Staphylococcus aureus</i> Cas9
			理研	BL32XU		
			2014A1356	BL41XU	西増 弘志	
32884	Hisato Hirano	164 (2016) 950-961	2015A0119	BL41XU	濡木 理	Structure and Engineering of <i>Francisella novicida</i> Cas9
33124	Hirofumi Shimizu	132 (2008) 67-78	2005A0594	BL44B2	佐々木 裕次	Global Twisting Motion of Single Molecular KcsA Potassium Channel upon Gating

### Chemistry Letters

32839	Mina Sakuragi	46 (2017) 185-187	2015B1708	BL40B2	荒井 泰史	Locational Analysis of Glutathione in Liposomes by Using Small-angle X-ray Scattering
33103	Ichiro Hatta	41 (2012) 1363-1364	2008A1458	BL40B2	八田 一郎	Disruption/Reconstitution of Skin Structure Treated by Ethanol
			2008B1195	BL43IR	八田 一郎	
			2009A1779	BL19B2	八田 一郎	
33189	Sakiko Matsumoto	46 (2017) 750-752	2016A1619	BL40B2	松本 紗葵子	Salt-Induced Morphology Transition of Micelle Formed of a Calix[4]arene-Derivative Cationic Surfactant in Aqueous Solution

### Dalton Transactions

32764	Yuka Kobayashi	42 (2013) 3821-3826	2008A1843	BL02B2	橋爪 大輔	Ionic Semiconductor: DC and AC Conductivity of Anilinium Tetrathiafulvalene-2-carboxylate
32906	O. Shekhah	40 (2011) 4954-4958	2009B1344	BL13XU	北川 進	MOF-on-MOF Heteropitaxy: Perfectly Oriented [Zn <sub>2</sub> (ndc) <sub>2</sub> (dabco)] <sub>n</sub> Grown on [Cu <sub>2</sub> (ndc) <sub>2</sub> (dabco)] <sub>n</sub> Thin Films
33031	Kun Lin	46 (2017) 733-738	2015B1127	BL44B2	Lin Kun	Anomalous Dispersion X-ray Diffraction Study of Pb/Bi Ordering/Disordering States in PbTiO <sub>3</sub> -based Perovskite Oxides

### Earth and Planetary Science Letters

32825	Christian Liebske	240 (2005) 589-604	2002B0087	BL04B1	Schmickler Bettina	Viscosity of Peridotite Liquid up to 13 GPa: Implications for Magma Ocean Viscosities
			2003A0056	BL04B1	寺崎 英紀	
			2003B0042	BL04B1	Rubie David	
32994	Daisuke Yamazaki	459 (2017) 238-243	2012A1438	BL04B1	山崎 大輔	Grain Growth of ε-iron: Implications to Grain Size and its Evolution in the Earth's Inner Core
			2013B1449	BL04B1	山崎 大輔	
			2014B1424	BL04B1	山崎 大輔	
			2015B1319	BL04B1	山崎 大輔	
33203	Kenji Ohta	465 (2017) 29-37	2014A0080	BL10XU	廣瀬 敬	Thermal Conductivity of Ferropericlase in the Earth's Lower Mantle



### Electrochimica Acta

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
32798	Toyokazu Tanabe	224 (2017) 429-438	2016A1560	BL19B2	松本 太	Preparation of Water-Resistant Surface Coated High-Voltage LiNi <sub>0.5</sub> Mn <sub>1.5</sub> O <sub>4</sub> Cathode and Its Cathode Performance to Apply a Water-Based Hybrid Polymer Binder to Li-Ion Batteries
			2015B1618	BL19B2	松本 太	
32900	Frank Renner	53 (2008) 6064-6069	2007A1963	BL13XU	Renner Frank	Gold Model Anodes for Li-Ion Batteries: Single Crystalline Systems Studied by in situ X-ray Diffraction
33143	Kiyofumi Yamagiwa	160 (2015) 347-356	2012B1373	BL46XU	駒場 慎一	Improved High-Temperature Performance and Surface Chemistry of Graphite/LiMn <sub>2</sub> O <sub>4</sub> Li-ion Cells by Fluorosilane-Based Electrolyte Additive
			2013A1399	BL46XU	駒場 慎一	

### Journal of Alloys and Compounds

33064	Xinzhe Jin	650 (2015) 444-449	2013B1573	BL28B2	町屋 修太郎	Effect of Epoxy Impregnation on Strain Distribution of Materials in Bi2223 Superconducting Coils by using Synchrotron X-ray Diffraction
33217	Hiroyuki Saitoh	706 (2017) 520-525	2013B3614	BL14B1	青木 勝敏	P-V-T Relation of the Fe-H System under Hydrogen Pressure of Several Gigapascals
			2014B3602	BL14B1	齋藤 寛之	
33394	Shih-Nan Hsiao	656 (2016) 876-880	2013B4132	BL12B2	Chen Shi-Kun	Evolution of Microstructure, Residual Stress, and Texture in FePt Films during Rapid Thermal Annealing
			2015A4137	BL12B2	Hsiao Shih-Nan	

### The Journal of Biological Chemistry

32903	Shouhei Mine	292 (2017) 4996-5006	2016A6657	BL44XU	渡邊 真宏	The Structure of an Archaeal $\beta$ -glucosaminidase Provides Insight into Glycoside Hydrolase Evolution
			2016B6657	BL44XU	渡邊 真宏	
			2016A6645	BL44XU	峯 昇平	
			2015B6546	BL44XU	峯 昇平	
			2015B6559	BL44XU	渡邊 真宏	
			2015A6559	BL44XU	渡邊 真宏	
			2015A6546	BL44XU	峯 昇平	
			2014B6903	BL44XU	渡邊 真宏	
33173	Shaimaa Waz	292 (2017) 2785-2794	2013A6859	BL44XU	山縣 ゆり子	Structural and Kinetic Studies of the Human Nudix Hydrolase MTH1 Reveal the Mechanism for Its Broad Substrate Specificity
			2013B6859	BL44XU	山縣 ゆり子	
			2014A6958	BL44XU	山縣 ゆり子	
			2015B6551	BL44XU	山縣 ゆり子	
33250	Asami Hishiki	290 (2015) 13215-13223	2014B1990	BL26B2	原 幸大	Structure of a Novel DNA-Binding Domain of Helicase-Like Transcription Factor (HLTF) and Its Functional Implication in DNA Damage Tolerance
			2014B6953	BL44XU	峯 昇平	

### Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena

32838	Hiroyuki Matsuda	195 (2014) 382-398	2012A7431	BL07LSU	大門 寛	Development of Display-Type Ellipsoidal Mesh Analyzer: Computational Evaluation and Experimental Validation
			2012B7434	BL07LSU	大門 寛	
33046	Hiroaki Kimura	144-147 (2005) 1079-1081	2003B0311	BL27SU	木村 洋昭	Transmission Type Sc/Cr Multilayer as a Quarter-Wave Plate for Near 400 eV
			2004A0567	BL27SU	木村 洋昭	
33106	Yasuhiro Nakatani	(2017) Online publication 27 Jan. 2017	2013B3882	BL23SU	関山 明	Circular Dichroism in Resonant Angle-Resolved Photoemission Spectra of LaNi <sub>2</sub> Ge <sub>2</sub>
			2014B3882	BL23SU	関山 明	

### Journal of Magnetism and Magnetic Materials

32840	Soichiro Mizusaki	310 (2007) 1635-1636	2005B0511	BL08W	水崎 壮一郎	Direct Observation of the Magnetic Spin Component of Samarium-Iron-Based Laves Compound by Magnetic Compton Scattering
32841	Soichiro Mizusaki	310 (2007) e325-e326	2005B0511	BL08W	水崎 壮一郎	The Magnetic Compton Scattering for the Strongly Correlated Electron System of Orthorhombic Perovskite Ruthenates CaRu <sub>1-x</sub> T <sub>x</sub> O <sub>3</sub> (T=Ti, Mn, Fe, Ni)
			J05A0513	BL08W	伊藤 真義	
33038	Masanori Tsunekawa	310 (2007) e1010-e1011	2005B0710	BL25SU	今田 真	Temperature and Magnetic Field Dependence of the Soft X-ray Magnetic Circular Dichroism Intensity for the Mn-L <sub>3</sub> Edge of MnFeP <sub>0.78</sub> Ge <sub>0.22</sub>

### Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section 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
32782	Tsukasa Miyazaki	394 (2017) 121-125	2012B1512	BL19B2	宮崎 司	Precise Small-Angle X-ray Scattering Evaluation of the Pore Structures in Track-Etched Membranes: Comparison with Other Convenient Evaluation Methods
			2013A1793	BL19B2	宮崎 司	
33101	Naoki Ishimatsu	238 (2005) 167-170	2001A0210	BL39XU	圓山 裕	Magnetic Phase Transition in Laves Phase DyCo <sub>2</sub> Probed by XRD and XMCD under High Pressure
			2001B0247	BL39XU	圓山 裕	
			2002A0501	BL39XU	圓山 裕	
			2002B0680	BL39XU	石松 直樹	
			2003A0653	BL10XU	石松 直樹	
			2003B0646	BL39XU	石松 直樹	
33163	Inge Serdons	251 (2006) 297-303	2003B0791	BL09XU	Serdons Inge	Stroboscopic Detection of the <sup>181</sup> Ta-Mössbauer Resonance with Synchrotron Radiation

### Physics of the Earth and Planetary Interiors

32834	Konstantin D. Litasov	224 (2013) 83-87	2011B1416	BL04B1	Shatskiy Anton	P-V-T Equation of State of Siderite to 33 GPa and 1673 K
32836	Carine Vanpeteghem	138 (2003) 223-230	2002A0299	BL04B2	日比野 拓矢	The Compressibility of Hexagonal Al-Rich NAL Phase: Similarities and Differences with Calcium Ferrite-Type (CF) Phase with Implications for the Lower Mantle
32897	Shigeaki Ono	264 (2017) 1-6	2013A1201	BL04B1	小野 重明	Precise Determination of the Phase Boundary between Coesite and Stishovite in SiO <sub>2</sub>
			2014B1161	BL04B1	小野 重明	
			2015A1185	BL04B1	小野 重明	

### Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America

32760	Naoyuki Katayama	112 (2015) 9305-9309	2009A0083	BL02B1	澤 博	Absence of Jahn-Teller Transition in the Hexagonal Ba <sub>3</sub> CuSb <sub>2</sub> O <sub>9</sub> Single Crystal
			2009A0084	BL02B2	久保田 佳基	
32915	Min Kyung Kim	113 (2016) 12438-12443	2014A6966	BL44XU	Song HyunKyu	Structural Basis for Dual Specificity of Yeast N-terminal Amidase in the N-end Rule Pathway
			2014B6966	BL44XU	Song HyunKyu	
33191	Witold Andratojc	114 (2017) E1840-1847	2013A6841	BL44XU	野尻 正樹	Identification of Productive and Futile Encounters in an Electron Transfer Protein Complex
			2013B6841	BL44XU	野尻 正樹	

### Spectrochimica Acta Part B

33073	Jun Kawai	62 (2007) 677-681	2003A0816	BL37XU	河合 潤	Risk Assessment of TiO <sub>2</sub> Photocatalyst by Individual Micrometer-Size Particle Analysis with on-Site Combination of SEM-EDX and SR-XANES Microscope
			2005A0631	BL37XU	石井 秀司	
33090	Hajime Tanida	59 (2004) 1071-1076	2001B0531	BL39XU	谷田 肇	Total-Reflection X-ray Absorption Fine Structure on Liquid Surface
			2002B0637	BL39XU	永谷 広久	
33247	Kenji Shiota	131 (2017) 32-39	2013B1437	BL01B1	高岡 昌輝	Chemical Kinetics of Cs Species in an Alkali-Activated Municipal Solid Waste Incineration Fly Ash and Pyrophyllite-Based System using Cs K-edge in situ X-ray Absorption Fine Structure Analysis
			2013A1479	BL01B1	高岡 昌輝	
			2012A1081	BL01B1	高岡 昌輝	
			2012B1359	BL01B1	高岡 昌輝	

### Thin Solid Films

32914	Takahiro Nagata	591 (2015) 105-110	2011B4611	BL15XU	長田 貴弘	Ge Incorporated Epitaxy of (110) Rutile TiO <sub>2</sub> on (100) Ge Single Crystal at Low Temperature by Pulsed Laser Deposition
			2012A4613	BL15XU	長田 貴弘	
33120	Yasuaki Okumura	471 (2005) 91-95	2002B0019	BL44B2	佐々木 裕次	Fabrications of Dispersive Gold One-Dimension Nanocrystals using Vacuum Evaporation
			2003A0610	BL44B2	佐々木 裕次	
33235	Takayuki Kojima	603 (2016) 348-352	2014A1568	BL46XU	水口 将輝	Growth of L <sub>10</sub> -FeNi Thin Films on Cu(001) Single Crystal Substrates using Oxygen and Gold Surfactants
			2014A1809	BL46XU	水口 将輝	
			2015A1976	BL46XU	水口 将輝	
			2015B1625	BL46XU	水口 将輝	
			2012B1667	BL46XU	小嶋 隆幸	
			2013A1637	BL46XU	水口 将輝	
2013A1832	BL46XU	水口 将輝				

### ACS Catalysis

32746	Meng-Che Tsai	6 (2016) 6551-6559	2013B4133	BL12B2	Hwang Bing Joe	Interplay between Molybdenum Dopant and Oxygen Vacancies in a TiO <sub>2</sub> Support Enhances the Oxygen Reduction Reaction
32924	Hiroki Miura	7 (2017) 1543-1553	2015B1277	BL01B1	三浦 大樹	Supported Palladium-Gold Alloy Catalysts for Efficient and Selective Hydrosilylation under Mild Conditions with Isolated Single Palladium Atoms in Alloy Nanoparticles as the Main Active Site

### 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
32977	Jingwei Xian	126 (2017) 540-551	2015B1611	BL20XU	Gourlay Christopher	Cu <sub>6</sub> Sn <sub>5</sub> Crystal Growth Mechanisms during Solidification of Electronic Interconnections
			2015A1675	BL20XU	野北 和宏	
32978	Kristina Maria Kareh	125 (2017) 187-195	2012B1173	BL20XU	柳楽 知也	Dilatancy in Semi-Solid Steels at High Solid Fraction
			2013B1242	BL20XU	柳楽 知也	

### Applied Physics Express

32752	Takahiro Nagata	10 (2017) 011102	2012B4606	BL15XU	長田 貴弘	Photoelectron Spectroscopic Study of Electronic State and Surface Structure of In <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Single Crystals
			2013B4603	BL15XU	長田 貴弘	
			2012A4614	BL15XU	長田 貴弘	
33395	Kun Zhang	5 (2012) 042303	2011B4608	BL15XU	吉川 英樹	A New Factor Affecting the Performance of Dye-Sensitized Solar Cells in the Presence of 4- <i>tert</i> -Butylpyridine

### Chemical Physics Letters

32892	Haruki Kawamura	372 (2003) 373-376	2001B0131	BL10XU	川村 春樹	Bulk Modulus of Solid Deuterium at 15 K
			2002A0535	BL10XU	川村 春樹	
33133	Hirofumi Yoshimura	482 (2009) 125-128	2007B1865	BL46XU	橘 勝	Grazing Incidence X-ray Diffraction Study on Carbon Nanowalls

### Chemistry - A European Journal

32929	Yasutaka Kuwahara	23 (2017) 380-389	2016A1057	BL01B1	桑原 泰隆	Palladium Nanoparticles Encapsulated in Hollow Titanosilicate Spheres as an Ideal Nanoreactor for One-pot Oxidation
			2015A1149	BL01B1	森 浩亮	
			2015B1083	BL01B1	森 浩亮	
33208	Shoubao Zhang	20 (2014) 9510-9513	2013B1218	BL27SU	齊藤 高志	Temperature-Induced Intersite Charge Transfer Involving Cr Ions in A-Site-Ordered Perovskites ACu <sub>3</sub> Cr <sub>4</sub> O <sub>12</sub> (A=La and Y)
			2013B1226	BL02B2	齊藤 高志	

### Crystal Growth & Design

33128	Takuma Itai	17 (2017) 949-953	2013B1036	BL02B1	吉成 信人	Strong-Acid-Templated Construction of a Metallosupramolecular Architecture: Reversible Ammonia Adsorption in Aqueous Media in a Single-Crystal-to-Single-Crystal Conversion Manner
			2014B1391	BL02B1	今野 巧	
			2014B1021	BL02B1	今野 巧	
			2014B1022	BL19B2	今野 巧	
33169	Masanori Kawai	10 (2010) 2044-2046	2008B1222	BL27SU	水牧 仁一朗	Orientation Change of an Infinite-Layer Structure LaNiO <sub>2</sub> Epitaxial Thin Film by Annealing with CaH <sub>2</sub>
			2008B1314	BL39XU	水牧 仁一朗	

### CrystEngComm

32740	K. Kawahara	19 (2017) 313-317	2015B1799	BL47XU	近松 彰	Topotactic Fluorination of Perovskite Strontium Ruthenate Thin Films using Polyvinylidene Fluoride
32933	Powei Yang	17 (2015) 8623-8631	2015A4140	BL12B2	Chen Tsan Yao	Core-Shell Nanocrystallite Growth via Heterogeneous Interface Manipulation

### Electrochemistry

32778	Hirokatsu Kurosu	84 (2016) 779-783	2015B1082	BL01B1	吉田 真明	In Situ Observations of Oxygen Evolution Cocatalysts on Photoelectrodes by X-ray Absorption Spectroscopy: Comparison between Cobalt-Phosphate and Cobalt-Borate
33096	Akihiro Watanabe	85 (2017) 88-92	2015B1768	BL19B2	渡邊 明尋	Ambient Pressure Synthesis and H <sup>+</sup> Conductivity of LaSrLiH <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
			2015A1778	BL02B2	渡邊 明尋	

### Geochimica et Cosmochimica Acta

33135	Toshihiro Yoshimura	202 (2017) 21-38	2012A1556	BL27SU	吉村 寿紘	Altrivalent Substitution of Sodium for Calcium in Biogenic Calcite and Aragonite
			2012B1714	BL27SU	吉村 寿紘	
			2013B1340	BL27SU	吉村 寿紘	
33151	Tooru Matsumoto	116 (2013) 84-95	2009A1605	BL47XU	土山 明	Three-Dimensional Observation and Morphological Analysis of Organic Nanoglobules in a Carbonaceous Chrodrilite using X-ray Micro-Tomography

### IEEE Transactions on Magnetics

33036	A. G. Prieto	41 (2005) 3421-3423	2004A0025	BL25SU	Fernandez-Gubieda Luisa	Influence of the Interface on the Magnetic Moment of Co Clusters in CoCu Granular Alloys
33141	Yuya Sakuraba	49 (2013) 5464-5468	2011A1769	BL46XU	桜庭 裕弥	Fabrication of Fully-Epitaxial Co <sub>2</sub> MnSi/Ag/Co <sub>2</sub> MnSi Giant Magnetoresistive Devices by Elevated Temperature Deposition
			2010B1824	BL46XU	桜庭 裕弥	

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
32996	Daiju Matsumura	42 (2017) 7749-7754	2013B1438	BL28B2	松村 大樹	<i>In situ</i> X-ray Absorption Spectroscopy Study on Water Formation Reaction of Palladium Metal Nanoparticle Catalysts
			2011A1369	BL28B2	松村 大樹	
			2011B1477	BL28B2	松村 大樹	
			2012B1393	BL28B2	松村 大樹	
			2013A1432	BL28B2	松村 大樹	
			2014A1449	BL28B2	松村 大樹	
			2014B1843	BL28B2	松村 大樹	
2014B3609	BL14B1	松村 大樹				
2015A3609	BL14B1	松村 大樹				
33357	Junichiro Kugai	42 (2017) 2984-2995	2013A1745	BL01B1	久貝 潤一郎	Effects of Carboxylate Stabilizers on the Structure and Activity of Carbon-Supported Pt-Cu Nanoparticles towards Methanol Oxidation

Journal of Materials Science

32797	Tooru Kitagawa	52 (2017) 4142-4154	2016A7212	BL03XU	船城 健一	Effects of Hydrophilicity of Rigid-Rod Polymers on the Formation of Poly- <i>p</i> -pyridylenebenzobisoxazole Fibers
33043	El Said Nouh	49 (2014) 35-42	2012A7431	BL07LSU	大門 寛	Lattice Distortion of Porous Si by Li Absorption using Two-Dimensional Photoelectron Diffraction
			2012A1553	BL25SU	松井 公祐	

Journal of Power Sources

33068	Machiko Abe	345 (2017) 108-119	2009B3671	BL14B1	菅野 了次	Study on the Deterioration Mechanism of Layered Rock-Salt Electrodes using Epitaxial Thin Films - Li(Ni, Co, Mn)O <sub>2</sub> and Their Zr-O Surface Modified Electrodes
33150	Masahiro Shikano	174 (2007) 795-799	2005B0713	BL47XU	鹿野 昌弘	Investigation of Positive Electrodes after Cycle Testing of High-Power Li-Ion Battery Cells II: An Approach to the Power Fading Mechanism using Hard X-ray Photoemission Spectroscopy

Journal of the Vacuum Society of Japan

32743	Yusuke Tamenori	59 (2016) 333-340	2014A1909	BL27SU	為則 雄祐	Recent Progress on <i>In-situ</i> and <i>Operando</i> Analysis using Soft X-ray Spectroscopy
			2012A1847	BL27SU	為則 雄祐	
			2008A2061	BL27SU	為則 雄祐	
			2012A1273	BL27SU	雨澤 浩史	
			2012B1497	BL27SU	雨澤 浩史	
			2013A1685	BL27SU	高谷 光	
32799	Hirosuke Matsui	59 (2016) 307-314	2013B7821	BL36XU	唯 美津木	Imaging Analysis of Heterogeneous Solid Catalyst by Spatially-Resolved XAFS
			2013B7822	BL36XU	唯 美津木	
			2014A7821	BL36XU	唯 美津木	
			2014B7821	BL36XU	唯 美津木	
			2015A7821	BL36XU	唯 美津木	
			2015B7821	BL36XU	唯 美津木	

Materials Transactions

33204	Yoshitomo Kamiura	57 (2016) 1609-1614	2010B3806	BL23SU	上浦 良友	Characterization of Polycrystalline Tungsten Surfaces Irradiated with Nitrogen Ions by X-ray Photoelectron Spectroscopy
32831	Takahiro Ogata	58 (2017) 157-159	2013B3602	BL14B1	齋藤 寛之	Infrared Spectroscopic and Computational Studies on Li <sub>4</sub> FeH <sub>6</sub> with High Gravimetric Hydrogen Density
			2013B3614	BL14B1	青木 勝敏	

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A

32776	Toko Hirono	731 (2013) 64-67	2010B1987	BL14B2	広野 等子	Development of CdTe Pixel Detector for Synchrotron Radiation Experiments
33013	Masami Ando	548 (2005) 1-16	2004A0484	BL20B2	安藤 正海	Clinical Step Onward with X-ray Dark-Field Imaging and Perspective View of Medical Applications of Synchrotron Radiation in Japan
			2003B0657	BL20B2	安藤 正海	
			2003A0353	BL20B2	安藤 正海	
			2002B0622	BL47XU	安藤 正海	
			2002B0621	BL20B2	安藤 正海	
			2002A0309	BL20B2	宇山 親雄	
			2002A0462	BL20B2	安藤 正海	
			2001A0137	BL20B2	梅谷 啓二	
			2001A0340	BL20B2	清水 健治	
			2002A0175	BL28B2	梅谷 啓二	
			2002B0665	BL20B2	今井 茂樹	
C02B5054	BL24XU	安藤 正海				

### Optics 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
32954	Ishkhan Gorgisyan	25 (2017) 2080-2091	2015B8002	BL3	Juranic Pavle	THz Streak Camera Method for Synchronous Arrival Time Measurement of Two-Color Hard X-ray FEL Pulses
33155	Kaye Morgan	24 (2016) 24435-24450	2013A1352	BL20XU	Morgan Kaye	Capturing and Visualizing Transient X-ray Wavefront Topological Features by Single-Grid Phase Imaging
			2013B1764	BL20XU	Morgan Kaye	
			2015A1325	BL20XU	Donnelley Martin	

### Polymer Journal

32795	Masaaki Kondo	49 (2017) 385-389	2013B1647	BL40B2	近藤 優士	Small-Angle X-ray Scattering from the Concentrated Bulk Phase Separated from an Amphiphilic Block-Copolymer Solution
33170	Takamichi Shinohara	45 (2013) 307-312	2010A7241	BL03XU	小池 淳一郎	Precise and Nondestructive Characterization of a 'Buried' Nanostructure in a Polymer Thin Film using Synchrotron Radiation Ultra-Small Angle X-ray Scattering

### X線分析の進歩 (Advances in X-ray Chemical Analysis, Japan)

33212	Hiroki Wadati	48 (2017) 215-223	2011A1624	BL47XU	和達 大樹	Electronic Structures of SrIrO <sub>3</sub> /SrTiO <sub>3</sub> Superlattices Revealed by Synchrotron X-Ray Diffraction and Spectroscopy
			2011B1710	BL47XU	和達 大樹	
			2012A1624	BL47XU	和達 大樹	
			2012B1757	BL47XU	和達 大樹	
			2013A1596	BL47XU	山村 周玄	
33258	Koji Nakanishi	48 (2017) 403-416	2013B1016	BL27SU	小久見 善八	Development of in situ Soft X-Ray Absorption Spectroscopy Technique for Light Element Analysis in Lithium Ion Secondary Batteries
			2013B1026	BL27SU	小久見 善八	
			2014B1489	BL27SU	中西 康次	

### 日本結晶学会誌 (Journal of the Crystallographic Society of Japan)

33275	Ei-ichiro Matsubara	56 (2014) 15-21	2012B8044	BL3	松原 英一郎	Development of Measurement Technique of Photo-Induced Picosecond Structural Transition by Ultra-Short Pulse Powder X-ray Diffraction
			2013A8048	BL3	松原 英一郎	
			2013B8053	BL3	松原 英一郎	
33283	Michihiro Suga	58 (2016) 126-132	2014B8048	BL3	沈 建仁	Radiation Damage-Free Structure of Photosystem II Determined by Femtosecond X-Ray Free Electron Laser Pulses
			2015A8055	BL3	沈 建仁	

### 分析化学 (Bunseki Kagaku)

33078	Yohko Yano	59 (2010) 437-445	2006A1124	BL37XU	瀧上 隆智	Characterization of Liquid Surfaces Using the Advanced Surface-Horizontal X-ray Reflectometer at SPRING-8
			2006B1751	BL37XU	宇留賀 朋哉	
			2007A1197	BL37XU	矢野 陽子	
			2007A1737	BL37XU	宇留賀 朋哉	
			2007B1091	BL37XU	矢野 陽子	
			2007B1212	BL37XU	宇留賀 朋哉	
			2007B1353	BL37XU	瀧上 隆智	
33079	Wakiko Yamaoka	59 (2010) 463-475	2008B1791	BL37XU	山口 紀子	Study on Accumulation Mechanism of Cadmium in Rice ( <i>Oryza sativa</i> L.) by Micro-XRF Imaging and X-ray Absorption Fine Structure Analysis Utilizing Synchrotron Radiation
			2009A1522	BL37XU	北島 信行	

### ACS Chemical Biology

33001	Ratana Charoenwattanasatien	11 (2016) 1891-1900	2014A6968	BL44XU	Caims James	Bacterial $\beta$ -Glucosidase Reveals the Structural and Functional Basis of Genetic Defects in Human Glucocerebrosidase 2 (GBA2)
-------	-----------------------------	------------------------	-----------	--------	-------------	--

### ACS Nano

33362	Daichi Oka	11 (2017) 3860-3866	2013B1328	BL25SU	廣瀬 靖	Strain Engineering for Anion Arrangement in Perovskite Oxynitrides
			2015B1338	BL17SU	廣瀬 靖	

### ACS Omega

33284	Kazuhiko Mukai	2 (2017) 864-872	2016A1229	BL02B2	山田 幾也	Superior Low-Temperature Power and Cycle Performances of Na-Ion Battery over Li-Ion Battery
-------	----------------	---------------------	-----------	--------	-------	---

### ACS Sustainable Chemistry & Engineering

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
32927	Yasutaka Kuwahara	5 (2017) 1141-1152	2016A1057	BL01B1	桑原 泰隆	Catalytic Transfer Hydrogenation of Biomass-derived Levulinic Acid and Its Esters to $\gamma$ -valerolactone over Sulfonic Acid-functionalized UiO-66

### Acta Crystallographica Section B

32810	Florence Porcher	64 (2008) 713-724	2006B1166	BL02B2	Porcher Florence	Synchrotron Powder Diffraction Characterization of the Zeolite-Based ( <i>p</i> - <i>N,N</i> -dimethylnitroaniline-Mordenite) Guest-Host Phase
-------	------------------	----------------------	-----------	--------	------------------	--

### Acta Physica Polonica A

33095	Takeshi Mito	118 (2010) 870-872	2009B1544	BL39XU	水戸 毅	Magnetic Field Effect on Yb-Based Heavy Fermions Near Magnetic-Nonmagnetic Transition
-------	--------------	-----------------------	-----------	--------	------	---

### Advanced Electronic Materials

33100	Masaki Nakano	1 (2015) 1500093	2013B1476	BL39XU	奥山 大輔	Distinct Substrate Effect on the Reversibility of the Metal-Insulator Transitions in Electrolyte-Gated VO <sub>2</sub> Thin Films
			2014A1451	BL39XU	中野 匡規	

### Advanced Functional Materials

32748	Yang Wang	27 (2017) 1604608	2015B1105	BL45XU	松本 英俊	Rational Design of High-Mobility Semicrystalline Conjugated Polymers with Tunable Charge Polarity: Beyond Benzobisthiadiazole-Based Polymers
			2015B1690	BL45XU	長谷川 司	

### Advanced Materials

32886	Ikuya Yamada	29 (2017) 1603004	2015B1152	BL02B2	山田 幾也	Bifunctional Oxygen Reaction Catalysis of Quadruple Manganese Perovskites
-------	--------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

### Advanced Materials Interfaces

33040	Songbai Hu	2 (2015) 1500012	2013B1079	BL25SU	Seidel Jan	Growth and Properties of Fully Strained SrCoC <sub>x</sub> ( <i>X</i> ≈ 2.8) Thin Films on DyScO <sub>3</sub>
-------	------------	---------------------	-----------	--------	------------	---

### AIP Conference Proceedings

32820	Masugu Sato	879 (2007) 1577-1580	2004B0915	BL19B2	佐野 雄二	Non-destructive Measurement of Residual Stress Depth Profile in Laser-peened Steel at SPring-8
-------	-------------	-------------------------	-----------	--------	-------	--

### Applied Catalysis B

32909	Makoto Ikegami	134-135 (2013) 130-135	2009B1007	BL14B2	春田 正毅	Air Purification by Gold Catalysis Supported on PET Nonwoven Fabric
-------	----------------	---------------------------	-----------	--------	-------	---

### Arteriosclerosis, Thrombosis and Vascular Biology

33054	Hiroto Iwasaki	27 (2007) 1326-1333	2004B0339	BL28B2	浅原 孝之	Synchrotron Radiation Coronary Microangiography for Morphometric and Physiological Evaluation of Myocardial Neovascularization Induced by Endothelial Progenitor Cell Transplantation
			2005A0590	BL28B2	浅原 孝之	

### The Astrophysical Journal

33012	Rei Niimi	744 (2012) 18	2010B1536	BL20B2	土山 明	Size and Density Estimation from Impact Track Morphology in Silica Aerogel: Application to Dust from Comet 81P/Wild 2
-------	-----------	------------------	-----------	--------	------	---

### Autophagy

33297	Do Hoon Kwon	13 (2017) 70-81	2015A6562	BL44XU	Song HyunKyu	The 1:2 Complex between RavZ and LC3 Reveals a Mechanism for Deconjugation of LC3 on the Phagophore Membrane
			2016A6661	BL44XU	Song HyunKyu	
			2016B6661	BL44XU	Song HyunKyu	

### Biochemical and Biophysical Research Communications

33125	Takuma Sagawa	355 (2007) 770-775	2005A0594	BL44B2	佐々木 裕次	Dynamical Regulations of Protein-Ligand Bindings at Single Molecular Level
-------	---------------	-----------------------	-----------	--------	--------	--

### Biochemical Society 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
33118	Yuji Sasaki	32 (2004) 761-763	2002B0019	BL44B2	佐々木 裕次	Single Protein Molecular Dynamics Determined with Ultra-High Precision

### Biophysical Chemistry

33344	Sivaraman Padavattan	221 (2017) 41-48	2011B1078	BL41XU	Thirumananseri Kumarevel	Structural Analyses of the Nucleosome Complexes with Human Testis-Specific Histone Variants, hTh2a and hTh2b
-------	----------------------	---------------------	-----------	--------	--------------------------	--

### Bulletin of the Chemical Society of Japan

33080	Hiroki Matsubara	86 (2013) 492-496	2011A1055	BL37XU	松原 弘樹	X-ray Reflectivity Measurements for Freezing Transitions of Alkane Wetting Film on Surfactant Solution Surface
			2010B1202	BL37XU	松原 弘樹	

### Canadian Journal of Chemistry

32767	Eiichi Kayahara	95 (2017) 351-356	2015B1311	BL02B1	山子 茂	Synthesis and Physical Properties of [4]cyclo-3,7-dibenzo[ <i>b,d</i> ]thiophene and its <i>S,S</i> -dioxide
			2014B1203	BL02B1	山子 茂	

### Catalysis Communications

32821	Masaaki Haneda	90 (2017) 1-4	2015B3325	BL08B2	末広 省吾	Three-Way Catalytic Performance and Change in the Valence State of Rh in Y- and Pr-doped Rh/ZrO <sub>2</sub> under Lean/Rich Perturbation Conditions
-------	----------------	------------------	-----------	--------	-------	--

### Cement and Concrete Research

33199	Ippei Maruyama	91 (2017) 24-32	2013B3306	BL08B2	今泉 公夫	Microstructural Changes in White Portland Cement Paste under the First Drying Process Evaluated by WAXS, SAXS, and USAXS
			2014A3306	BL08B2	今泉 公夫	
			2014B3306	BL08B2	今泉 公夫	

### ChemBioChem

33251	Ryo Tachibana	18 (2017) 358-362	2015A6523	BL44XU	杉山 成	Improving the Solubility of Artificial Ligands of Streptavidin to Enable More Practical Reversible Switching of Protein Localization in Cells
			2015B6523	BL44XU	杉山 成	
			2015A1056	BL38B1	杉山 成	
			2014B1195	BL38B1	杉山 成	

### ChemElectroChem

32824	Naoaki Yabuuchi	1 (2014) 580-589	2012B1777	BL02B2	駒場 慎一	Phosphorous Electrodes in Sodium Cells: Small Volume Expansion by Sedition and the Surface-Stabilization Mechanism in Aprotic Solvent
			2012A1395	BL46XU	駒場 慎一	
			2012B1373	BL46XU	駒場 慎一	

### Chemical and Pharmaceutical Bulletin

33122	Shinya Yoshida	65 (2017) 134-142	2011B1222	BL43IR	小幡 誉子	Molecular Interaction between Intercellular Lipids in the Stratum Corneum and <i>l</i> -Menthol, as Analyzed by Synchrotron X-Ray Diffraction
			2014A1049	BL40B2	小幡 誉子	
			2014B1188	BL40B2	小幡 誉子	
			2015A1139	BL40B2	小幡 誉子	
			2015B1099	BL40B2	小幡 誉子	
			2016A1209	BL40B2	小幡 誉子	

### Chemical Engineering Journal

33248	Akira Sano	315 (2017) 598-607	2014A1284	BL01B1	高岡 昌輝	Vapor-Phase Elemental Mercury Adsorption by Activated Carbon Co-Impregnated with Sulfur and Chlorine
			2015A1904	BL01B1	高岡 昌輝	

### Chemistry of Materials

32804	Masahiro Abe	27 (2015) 5049-5057	2014B1514	BL02B1	杉本 邦久	Thermally, Operationally, and Environmentally Stable Organic Thin-Film Transistors Based on Bis[1]benzothieno[2,3- <i>d'</i> 2',3'- <i>d</i> ]naphtho[2,3- <i>b</i> :6,7- <i>b'</i> ]dithiophene Derivatives: Effective Synthesis, Electronic Structures, and Structure-Property Relationship
-------	--------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

### Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects

33130	Noritaka Kato	321 (2008) 275-280	2003B0222	BL46XU	加藤 徳剛	Crystallographic Coherent Length of J-aggregates and Their Absorption Spectra
			2004A0247	BL46XU	加藤 徳剛	
			2006A1259	BL46XU	加藤 徳剛	

### Corrosion

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
33361	Masashi Watanabe	72 (2016) 1155-1169	2011B3771	BL22XU	米澤 利夫	In Situ X-Ray Diffraction Study of the Oxide Formed on Alloy 600 in Borated and Lithiated High-Temperature Water
			2012A3783	BL22XU	米澤 利夫	
			2012A1018	BL13XU	米澤 利夫	
			2012B3783	BL22XU	米澤 利夫	
			2012B1017	BL13XU	米澤 利夫	
			2013A3781	BL22XU	米澤 利夫	
			2013A1428	BL13XU	米澤 利夫	
			2013B3785	BL22XU	米澤 利夫	
			2013B1007	BL13XU	米澤 利夫	
			2014A3786	BL22XU	米澤 利夫	
			2014B3786	BL22XU	米澤 利夫	
			2014B1020	BL13XU	米澤 利夫	
2015A3786	BL22XU	米澤 利夫				
2015B3789	BL22XU	米澤 利夫				

### Environmental Science & Technology

32931	Hua-Cheng Liu	49 (2015) 7726-7734	2015A4127	BL12B2	Chen Tsan Yao	Mechanism of Arsenic Adsorption on Magnetite Nanoparticles from Water: Thermodynamic and Spectroscopic Studies
-------	---------------	------------------------	-----------	--------	---------------	--

### European Journal of Immunology

33299	Seisuke Kusano	46 (2016) 892	2012A1211	BL41XU	保坂 俊彰	The Flanking Region of Cedar Pollen Peptide in Complex with HLA-DP5 Facilitates T-cell Activation
-------	----------------	------------------	-----------	--------	-------	---

### European Journal of Radiology

33061	Masami Torikoshi	68 (2008) S114-S117	2006A1529	BL20B2	取越 正己	Dosimetry for a Microbeam Array Generated by Synchrotron Radiation at SPring-8
			2007A1751	BL28B2	小山田 敏文	

### European Polymer Journal

32781	Tooru Kitagawa	88 (2017) 9-20	2016A7212	BL03XU	船城 健一	Dependence of Fiber-Structural Formation Processes for Rigid-Rod Polymers on the Miscibility of Their Molecular Chains in Poly-Phosphoric Acid
-------	----------------	-------------------	-----------	--------	-------	--

### Expert Systems with Applications

33153	Hye-Won Jung	73 (2017) 57-68	2013A1706	BL20XU	Donnelley Martin	Automated Detection of Circular Marker Particles in Synchrotron Phase Contrast X-ray Images of Live Mouse Nasal Airways for Mucociliary Transit Assessment
-------	--------------	--------------------	-----------	--------	------------------	--

### eXPRESS Polymer Letters

32854	H. Kishi	9 (2015) 23-35	2010B7260	BL03XU	浅田 光則	Control of Nanostructures Generated in Epoxy Matrices Blended with PMMA- <i>b</i> -PnBA- <i>b</i> -PMMA Triblock Copolymers
-------	----------	-------------------	-----------	--------	-------	---

### Forensic Science International

33074	Toshio Nakanishi	175 (2008) 227-234	2004A0282	BL37XU	中西 俊雄	Lower Limits of Detection of Synchrotron Radiation High-Energy X-ray Fluorescence Spectrometry and Its Possibility for the Forensic Application for Discrimination of Glass Fragments
-------	------------------	-----------------------	-----------	--------	-------	---

### Geophysical Research Letters

32826	Tomofumi Hosoya	32 (2005) L17305	2002B0567	BL04B1	久保 友明	Water Controls the Fields of Metastable Olivine in Cold Subjecting Slabs
			2003A0533	BL04B1	久保 友明	



## High Pressure 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
32818	Hitoshi Yamaoka	36 (2016) 262-274	2011B4259	BL12XU	山岡 人志	Pressure Dependence of the Electronic Structure of 4f and 3d Electron Systems Studied by X-ray Emission Spectroscopy
			2012A4259	BL12XU	山岡 人志	
			2012A4266	BL12XU	佐藤 仁	
			2012B4253	BL12XU	山岡 人志	
			2013A4250	BL12XU	山岡 人志	
			2013A4254	BL12XU	山岡 人志	
			2013B4127	BL12B2	水木 純一郎	
			2013B4128	BL12B2	山岡 人志	
			2013B4256	BL12XU	水木 純一郎	
			2013B4258	BL12XU	山岡 人志	
2014A4256	BL12XU	山岡 人志				
2014A4257	BL12XU	水木 純一郎				

## Icarus

33158	Tooru Matsumoto	257 (2015) 230-238	2012B1346	BL47XU	土山 明	Surface and Internal Structures of a Space-Weathered Rim of an Itokawa Regolith Particle
-------	-----------------	-----------------------	-----------	--------	------	--

## Inorganic Chemistry

33337	Mirza Rubel	56 (2017) 3174-3181	2016B1163	BL02B2	熊田 伸弘	Hydrothermal Synthesis, Structure, and Superconductivity of Simple Cubic Perovskite (Ba <sub>0.62</sub> K <sub>0.38</sub> )(Bi <sub>0.92</sub> Mg <sub>0.08</sub> )O <sub>3</sub> with T <sub>c</sub> ~ 30 K
-------	-------------	------------------------	-----------	--------	-------	--

## Inorganica Chimica Acta

32815	Masahiko Maekawa	414 (2014) 257-263	2012B1455	BL02B1	杉本 邦久	The First Copper(I) Coordination Polymers Self-Assembled by 4,4'-biquinazoline
			2012B1463	BL02B1	杉本 邦久	
			2013B1482	BL02B1	杉本 邦久	

## International Journal of Heat and Mass Transfer

32932	Toshihiro Sera	108 (2017) 730-739	2012A1637	BL20XU	世良 俊博	Distribution of Nanoparticle Depositions after a Single Breathing in a Murine Pulmonary Acinus Model
			2011B1881	BL20B2	世良 俊博	
			2011B1875	BL20XU	世良 俊博	
			2009B1198	BL20B2	世良 俊博	

## International Journal of Pharmaceutics

33174	Tomonobu Uchino	521 (2017) 222-231	2014B1431	BL40B2	内野 智信	Modulation Mechanism of the Stratum Corneum Structure during Permeation of Surfactant-Based Rigid and Elastic Vesicles
			2015A1650	BL40B2	内野 智信	
			2016A1215	BL40B2	内野 智信	

## International Journal of Radiation Biology

33069	Ayumi Narita	92 (2016) 733-738	2014A3812	BL23SU	藤井 健太郎	Use of a DNA Film on a Self-Assembled Monolayer for Investigating the Physical Process of DNA Damage Induced by Core Electron Ionization
-------	--------------	----------------------	-----------	--------	--------	--

## Ionics

32905	Yasuro Ikuma	21 (2015) 2495-2501	2008B1393	BL13XU	伊熊 泰郎	Surface X-ray Diffraction Study and Photocatalytic Activity of HF-Treated Single Crystal Rutile TiO <sub>2</sub> (001) Surface
			2008B2208	BL13XU	田尻 寛男	
			2009B1445	BL13XU	伊熊 泰郎	
			2010A1258	BL13XU	伊熊 泰郎	

## IUCrJ

33183	Mattia Sist	3 (2016) 377-388	2014A0078	BL02B1	Iversen Bo	Carrier Concentration Dependence of Structural Disorder in Thermoelectric Sn <sub>1-x</sub> Te
			理研	BL44B2		

## Journal of Biological Inorganic Chemistry

33116	Toshio Iwasaki	16 (2011) 923-935	2007A1271	BL41XU	清水 伸隆	ISC-like [2Fe-2S] Ferredoxin (FdxB) Dimer from <i>Pseudomonas putida</i> JCM 20004: Structural and Electron-Nuclear Double Resonance Characterization
-------	----------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

**Journal of Biomolecular Structure and Dynamics**

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
33044	Ansuman Biswas	(2016) published online: 27 Jul. 2016	2014A6967	BL44XU	Jeyaraman Jeyakanthan	Role of Sequence Evolution and Conformational Dynamics in the Substrate Specificity and Oligomerization Mode of Thymidylate Kinases

**Journal of Crystal Growth**

32788	Shigeeya Kimura	301-302 (2007) 651-655	2005B0813	BL01B1	江村 修一	Growth and Characterization of Ferromagnetic Cubic GaCrN: Structural and Magnetic Properties
-------	-----------------	------------------------	-----------	--------	-------	--

**Journal of Dermatological Science**

33109	Noboru Nakagawa	65 (2012) 196-206	2005B0734	BL40XU	太田 昇	Knocking-in the R142C Mutation in Transglutaminase 1 Disrupts the Stratum Corneum Barrier and Postnatal Survival of Mice
			2006A1051	BL40XU	山西 清文	
			2006B1026	BL40XU	山西 清文	

**Journal of Environmental Quality**

33315	Kosuke Yamamoto	46 (2017) 461-465	2015A1667	BL14B2	橋本 洋平	Chemical Species of Phosphorus and Zinc in Water-Dispersible Colloids from Swine Manure Compost
			2011B1218	BL01B1	山口 紀子	

**Journal of Fiber Science and Technology**

32912	Kyoung-Hou Kim	73 (2017) 19-26	2013B1080	BL40B2	大越 豊	Fiber Structure Development of Nylon 6 After Necking
			2007B1226	BL40B2	大越 豊	

**Journal of Forensic Sciences**

33161	Yoshinori Nishiwaki	54 (2009) 564-570	1999B0222	BL08W	中井 泉	Trace Elemental Analysis of Titanium Dioxide Pigments and Automotive White Paint Fragments for Forensic Examination Using High-Energy Synchrotron Radiation X-Ray Fluorescence Spectrometry
			2000A0098	BL08W	中井 泉	
			2000A0140	BL08W	二宮 利男	

**Journal of Geophysical Research**

33206	Anna Dymshits	119 (2014) 8034-8046	2011B1091	BL04B1	Litasov Konstantin	Thermal Equation of State of Majoritic Khorringite and Its Significance for Continental upper Mantle
			2012A1416	BL04B1	Litasov Konstantin	
			2012B1289	BL04B1	Litasov Konstantin	

**Journal of Geophysical Research: Biogeosciences**

33136	Ayumi Maeda	122 (2017) 185-199	2015B1525	BL27SU	吉村 寿紘	Evaluation of Oxygen Isotope and Mg/Ca Ratios in High-Magnesium Calcite from Benthic Foraminifera as a Proxy for Water Temperature
-------	-------------	--------------------	-----------	--------	-------	--

**Journal of Hazardous Materials**

32742	Kentaro Kameda	327 (2017) 171-179	2015A1667	BL14B2	橋本 洋平	Simultaneous and Continuous Stabilization of As and Pb in Contaminated Solution and Soil by a Ferrihydrite-Gypsum Sorbent
			2015B1565	BL14B2	橋本 洋平	

**Journal of Instrumentation**

32771	Hidenori Toyokawa	12 (2017) C01044	2011B3606	BL14B1	菫浦 敬久	Development of CdTe Pixel Detectors Combined with an Aluminum Schottky Diode Sensor and Photon-Counting ASICs
			2013A1082	BL46XU	広野 等子	
			2013A1796	BL46XU	豊川 秀訓	
			2013B1837	BL46XU	豊川 秀訓	
			2014A1555	BL28B2	豊川 秀訓	
			2014A3606	BL14B1	菫浦 敬久	
			2014B1626	BL28B2	豊川 秀訓	
			2014B3605	BL14B1	菫浦 敬久	
			2015A1678	BL28B2	豊川 秀訓	
			2015A3605	BL14B1	菫浦 敬久	
			2015B3605	BL14B1	菫浦 敬久	
			2016A3605	BL14B1	菫浦 敬久	
			2015B1584	BL28B2	豊川 秀訓	
2013B1566	BL46XU	豊川 秀訓				

**Journal of Macromolecular Science, Part B-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
33190	Tooru Kitagawa	56 (2017) 178-193	2016A7212	BL03XU	船城 健一	Effects of Thermal History in the Fiber Production on Preferential Orientations of Molecular Planes of Rigid-Rod Polymers along the Radial Direction Normal to the Fiber Axis

**Journal of Materials Chemistry A**

33417	Keita Sekizawa	5 (2017) 6483-6493	2013B1018	BL47XU	森川 健志	Stoichiometric Water Splitting using p-type Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Based Photocathode with the Aid of Multi-heterojunction
			2014A1009	BL47XU	森川 健志	
			2014B1018	BL47XU	森川 健志	

**Journal of Materials Chemistry C**

33215	Dongho Yoo	5 (2017) 2509-2512	2015B1690	BL45XU	長谷川 司	N-unsubstituted Thienoisindigos: Preparation, Molecular Packing and Ambipolar Organic Field-effect Transistors
			2016A1194	BL45XU	松本 英俊	

**Journal of Materials Engineering and Performance**

32957	Kozo Osamura	25 (2016) 5323-5329	2013A1346	BL28B2	小出 俊雄	The Correlation Between the Percussive Sound and the Residual Stress/Strain Distributions in a Cymbal
-------	--------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

**Journal of Materials Science and Chemical Engineering**

32830	Kensuke Ozawa	5 (2017) 121-128	2014A1008	BL02B2	熊田 伸弘	Thermoelectric Properties of Silver Antimonate with Mixed Valency of Antimony
-------	---------------	---------------------	-----------	--------	-------	---

**Journal of Mineralogical and Petrological Sciences**

32765	Satoko Motai	111 (2016) 305-312	2014A3701	BL22XU	綿貫 徹	Mineralogical Characterization of Radioactive Particles from Fukushima Soil using $\mu$ -XRD with Synchrotron Radiation
			2014B3701	BL22XU	綿貫 徹	

**Journal of Molecular Biology**

32753	Hidemi Hirano	429 (2017) 249-260	2011B1083	BL41XU	松浦 能行	Structures of the Karyopherins Kap121p and Kap60p Bound to the Nuclear Pore-Targeting Domain of the SUMO Protease Ulp1p
-------	---------------	-----------------------	-----------	--------	-------	---

**The Journal of Organic Chemistry**

33032	Hirokazu Miyoshi	82 (2017) 1380-1388	2014B1168	BL38B1	久木 一朗	Fluoreno[2,3- <i>b</i> ]fluorene vs Indeno[2,1- <i>b</i> ]fluorene: Unusual Relationship between the Number of $\pi$ Electrons and Excitation Energy in <i>m</i> -Quinodimethane-Type Singlet Diradicals
-------	------------------	------------------------	-----------	--------	-------	--

**The Journal of Physical Chemistry B**

33314	Chiung-Cheng Hunag	120 (2016) 12736-12754	2014B4143	BL12B2	Hsu I Jui	Effect of the Functional Groups of Racemic Rodlike Schiff Base Mesogens on the Stabilization of Blue Phase in Binary Mixture Systems
-------	--------------------	---------------------------	-----------	--------	-----------	--

**The Journal of Physical Chemistry Letters**

33196	Yasuo Nakayama	8 (2017) 1259-1264	2015A1685	BL46XU	中山 泰生	Single-Crystal Pentacene Valence-Band Dispersion and Its Temperature Dependence
-------	----------------	-----------------------	-----------	--------	-------	---

**Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics**

33049	Xiao-Jing Liu	40 (2007) F1-F7	2006A1216	BL27SU	Liu Xiao-Jing	Evidence of Sequential Interatomic Decay in Argon Trimers Obtained by Electron-Triple-Ion Coincidence Spectroscopy
			2006A1757	BL27SU	齋藤 則生	

**The Journal of Physiology**

33127	R. Corpeno	592 (2014) 3859-3880	2012B1047	BL45XU	Ochala Julien	Time Course Analysis of Mechanical Ventilation-Induced Diaphragm Contractile Muscle Dysfunction in the Rat
			2011B1058	BL45XU	Ochala Julien	

**Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry**

32986	Tomoyuki Yamamoto	53 (2015) 1586-1593	2014A1779	BL46XU	井改 知幸	Influence of 4-fluorophenyl Pendants in Thieno[3,4- <i>b</i> ]thiophene-benzo [1,2- <i>b</i> :4,5- <i>b'</i> ]dithiophene-based Polymers on the Performance of Photovoltaics
-------	-------------------	------------------------	-----------	--------	-------	--

### Journal of Solid State 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
32809	Zhaoming Zhang	180 (2007) 1083-1092	2005A0355	BL02B2	Howard Christopher	Structures and Phase Diagram for the System CaTiO <sub>3</sub> -La <sub>2</sub> O <sub>3</sub> TiO <sub>3</sub>

### Journal of Solid State Electrochemistry

33140	Shinji Fujimoto	19 (2015) 3521-3531	2009B1863	BL46XU	佐藤 真直	Characterization of Oxide Films Formed on Alloy 600 and Alloy 690 in Simulated PWR Primary Water by using Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy
-------	-----------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

### Journal of Structural Biology

33045	Ansuman Biswas	197 (2016) 236-249	2014A6967	BL44XU	Jeyaraman Jeyakanthan	Crystal Structures of an Archaeal Thymidylate Kinase from <i>Sulfolobus tokodaii</i> Provide Insights into the Role of a Conserved Active Site Arginine Residue
-------	----------------	-----------------------	-----------	--------	-----------------------	---

### Journal of Superconductivity and Novel Magnetism

33057	Masahiro Mikuriya	(2016) Online publication: 27 Jul. 2016	2015B1001	BL02B1	今野 巧	Two-Dimensional Chain Complex Based on Diruthenium (II, III) Acetate and Tetracyanidoplatinate(II)
-------	-------------------	---	-----------	--------	------	--

### Journal of the Electrochemical Society

32887	Tomokazu Sakamoto	164 (2017) F229-F234	2015B3616	BL14B1	坂本 友和	NiO/Nb <sub>2</sub> O <sub>5</sub> /C Hydrazine Electrooxidation Catalysts for Anion Exchange Membrane Fuel Cells
			2016A3616	BL14B1	坂本 友和	

### Journal of the Korean Physical Society

32842	Tomohiro Ohnishi	62 (2013) 1887-1892	2006B1272	BL08W	谷口 貴士	Correlation between Magnetism and Crystal Symmetry in the Mixed Valence System of Sr <sub>1-x</sub> Ca <sub>x</sub> Ru <sub>0.5</sub> Mn <sub>0.5</sub> O <sub>3</sub>
			2007B1410	BL08W	水崎 壮一郎	

### Journal of Vacuum Science & Technology A

32755	Akito Takashima	35 (2017) 021507	2012B1817	BL47XU	室 隆桂之	Hard X-ray Photoemission Study of Oxidation States of Ti Underlayer in Fe/Ti Film System
			2013A1708	BL47XU	室 隆桂之	
			2013B1784	BL47XU	室 隆桂之	

### Magnesium Technology 2017

33138	Klaus-Dieter Liss	(2017) 633-638	2013B1157	BL04B1	Liss Klaus Dieter	Structural Evolution of Metals at High Temperature: Complementary Investigations with Neutron and Synchrotron Quantum Beams
-------	-------------------	-------------------	-----------	--------	-------------------	---

### Materials Letters

32907	M. Ghafani	164 (2016) 535-538	2009B1344	BL13XU	北川 進	Occurrence of Two Amorphous Phases in an Fe <sub>40</sub> Co <sub>40</sub> B <sub>20</sub> Alloy
-------	------------	-----------------------	-----------	--------	------	--

### Materials Research Express

33345	Kyle Moriai	4 (2017) 045017	2013A1753	BL39XU	川上 修平	Synthesis of TiO <sub>2</sub> Nanotubes: Effect of Post-treatment on Crystallinity and Photocatalytic Activity
			2015A0074	BL02B2	森吉 千佳子	

### Metallurgical and Materials Transactions A

33207	Hiroshi Okuda	45 (2014) 4780-4785	2013A1447	BL04B2	奥田 浩司	Microstructural Evolution of Long-Period Stacking Ordered Structures in Mg <sub>97</sub> Y <sub>2</sub> Zn <sub>1</sub> Alloys Examined by <i>In-Situ</i> Small Angle X-ray Scattering
			2013B1383	BL04B2	奥田 浩司	

### Methods in Molecular Biology

33180	Tatsuya Nishino	1413 (2016) 135-146	2013A6839	BL44XU	西野 達哉	Biochemical and Structural Analysis of Kinetochore Histone-Fold Complexes
			2013B1195	BL38B1	西野 達哉	
			2014A6939	BL44XU	西野 達哉	
			2011B1146	BL38B1	西野 達哉	
			2012A1104	BL38B1	西野 達哉	

### Microporous and Mesoporous Materials

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
33159	Kazu Okumura	241 (2017) 400-408	2016B1148	BL01B1	奥村 和	Direct Inclusion of Triphenylphosphine Derivatives into the Zeolite Y Supercage

### Molecular Cell

32885	Seiichi Hirano	61 (2016) 886-894	2015A0119	BL41XU	瀧木 理	Structural Basis for the Altered PAM Specificities of Engineered CRISPR-Cas9
-------	----------------	----------------------	-----------	--------	------	--

### Molecular Crystals and Liquid Crystals

33149	Nobutaka Tangaki	621 (2015) 118-123	2014A1507	BL46XU	宮寺 哲彦	Oriented Thin Films of the Low-Band-Gap Polymer PTB7 by Friction Transfer Method
-------	------------------	-----------------------	-----------	--------	-------	--

### MRS Communications

33055	Yifan Ye	7 (2017) 53-66	2013A7450	BL07LSU	Guo Jinghua	X-ray Spectroscopies Studies of the 3d Transition Metal Oxides and Applications of Photocatalysis
			2012B7438	BL07LSU	Guo Jinghua	
			2012A7428	BL07LSU	Guo Jinghua	

### Nature

33165	Michihiro Suga	543 (2017) 131-135	2013B1259	BL41XU	沈 建仁	Light-Induced Structural Changes and the Site of O=O Bond Formation in PSII Caught by XFEL
			2014A1243	BL41XU	沈 建仁	
			2014A6927	BL44XU	菅 倫寛	
			2014B1281	BL41XU	沈 建仁	
			2014B6927	BL44XU	菅 倫寛	
			2014B8048	BL3	沈 建仁	
			2015A1108	BL41XU	沈 建仁	
			2015A6522	BL44XU	菅 倫寛	
			2015A1108	BL26B1	沈 建仁	
			2015B6522	BL44XU	菅 倫寛	
			2015B8044	BL3	沈 建仁	
			2016A2542	BL26B1	沈 建仁	
2016A2542	BL41XU	沈 建仁				
2016A8033	BL3	沈 建仁				

### Organic & Biomolecular Chemistry

33033	Kazuma Oda	15 (2017) 1426-1434	2016B1151	BL38B1	久木 一朗	Synthesis of Bright Red-Emissive Dicyanoetheno-Bridged Hexa-peri-hexabenzocoronene Dimers
-------	------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

### Organometallics

33002	Kotohiro Nomura	36 (2017) 530-542	2016A1455	BL01B1	野村 琴広	Synthesis of (Adamantylimido)vanadium(V) Dimethyl Complex Containing (2-Anilidomethyl)pyridine Ligand and Selected Reactions: Exploring the Oxidation State of the Catalytically Active Species in Ethylene Dimerization
			2015B1308	BL01B1	山添 誠司	

### Physica C

33050	Rikiya Yoshida	469 (2009) 1034-1036	2008A1576	BL27SU	横谷 尚睦	Bulk-Sensitive Spectroscopic Studies on Noncentrosymmetric Superconducting System of Mg-Ir-B
-------	----------------	-------------------------	-----------	--------	-------	--

### Physical Review E

33119	Yasuaki Okumura	70 (2004) 021917	2002B0019	BL44B2	佐々木 裕次	Picometer-Scale Dynamical Observations of Individual Membrane Proteins: The Case of Bacteriorhodopsin
			2003A0610	BL44B2	佐々木 裕次	

### Physics and Chemistry of Minerals

32975	Masaki Akaogi	44 (2017) 63-73	2015A1200	BL04B2	遊佐 斉	High-Pressure High-Temperature Phase Relations in FeTiO <sub>3</sub> up to 35 GPa and 1600°C
			2015A1204	BL10XU	遊佐 斉	
			2015B1157	BL04B2	遊佐 斉	

### PLoS One

33017	Ken Inaoka	11 (2016) e0167078	2013A6843	BL44XU	原田 繁春	The Open Form Inducer Approach for Structure-Based Drug Design
			2014A6943	BL44XU	原田 繁春	
			2015B6535	BL44XU	原田 繁春	

### Polymer

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
33048	Xinyue Jiang	112 (2017) 152-158	2015B1100	BL40B2	寺尾 憲	Dimensional and Hydrodynamic Properties of Cellulose <i>Tris</i> (Alkylcarbamate)s in Solution: Side Chain Dependent Conformation in Tetrahydrofuran
			2016A1053	BL40B2	寺尾 憲	
			2016B1088	BL40B2	寺尾 憲	

### Polymer Chemistry

33104	Yoshifumi Amamoto	2 (2011) 957-962	2009A1011	BL40B2	高原 淳	Mesh-Size Control and Functionalization of Reorganizable Chemical Gels by Monomer Insertion into Their Cross-Linking Points
-------	-------------------	---------------------	-----------	--------	------	---

### Proceedings of the Royal Society B Biological Sciences

33209	Alexander Blanke	282 (2015) 109-115	2014B1046	BL47XU	町田 龍一郎	Structural Mouthpart Interaction Evolved Already in the Earliest Lineages of Insects
-------	------------------	-----------------------	-----------	--------	--------	---

### Protein Engineering Design and Selection

32997	Li-Jen Hsu	29 (2016) 513-522	2015A1111	BL41XU	Li Tsung Lin	Structural and Biochemical Interrogation on Transketolase from <i>Pichia stipitis</i> for New Functionality
-------	------------	----------------------	-----------	--------	--------------	--

### Protein Science

33179	Masaru Yamanaka	26 (2017) 464-474	2015B1030	BL38B1	長尾 聡	Formation and Carbon Monoxide-Dependent Dissociation of <i>Allochromatium vinosum</i> Cytochrome <i>c'</i> Oligomers using Domain-Swapped Dimers
-------	-----------------	----------------------	-----------	--------	------	--

### RSC Advances

33312	Chiung-Cheng Huang	6 (2016) 110898-110910	2014B4134	BL12B2	Hsu I Jui	Wide Blue Phase Range Observed in Simple Binary Mixture Systems Containing Rodlike Racemic Biphenyl Mesogens with 2-octyloxy Tails
-------	--------------------	---------------------------	-----------	--------	-----------	--

### Science

32940	Ruobing Ren	349 (2015) 187-191	2013B1035	BL32XU	Yan Nieng	Crystal Structure of a Mycobacterial Insig Homolog Provides Insight into how These Sensors Monitor Sterol Levels
			2011B0040	BL41XU	Yan Nieng	
			2011A1050	BL41XU	Yan Nieng	

### Science and Technology of Advanced Materials

33065	Moritz Hoesch	7 (2006) S31-S36	2004B0736	BL35XU	Hoesch Moritz	Acoustic and Optical Phonons in Metallic Diamond
			2005A0596	BL35XU	Hoesch Moritz	

### Science of Advanced Materials

32739	Chih Ming Lin	7 (2015) 1039-1044	2013B4129	BL12B2	Lin Chih Ming	Pressure-Induced Phase Transitions in InAs Studied by Angular- Dispersive X-ray Diffraction and Raman Spectroscopy
			2014A4134	BL12B2	Lin Chih Ming	
			2014B4133	BL12B2	Lin Chih Ming	

### Scripta Materialia

32919	Sumiaki Nakano	53 (2005) 59-61	2004A0802	BL19B2	濱田 糾	Variation of Microhardness with Chemical Composition for Melt- Spun Mg-Pd and Mg-Pd-Ni Amorphous Alloys
-------	----------------	--------------------	-----------	--------	------	--

### Separation and Purification Technology

32923	Motoki Maeda	177 (2017) 176-181	2013B3518	BL11XU	成田 弘一	Selective Extraction of Pt(IV) over Fe(III) from HCl with an Amide- Containing Tertiary Amine Compound
-------	--------------	-----------------------	-----------	--------	-------	---

### Soft Matter

33311	Chiung-Cheng Huang	12 (2016) 3110-3120	2012B4136	BL12B2	Hsu I Jui	Broad Temperature Range of Cubic Blue Phase Present in Simple Binary Mixture Systems Containing Rodlike Schiff Base Mesogens with Tolane Moiety
-------	--------------------	------------------------	-----------	--------	-----------	---

### Solid State Communications

33168	Hojun Im	209-210 (2015) 45-48	2007A3835	BL23SU	伊藤 孝寛	Fermi Surface Variation of Ce 4f Electrons in Hybridization Controlled Heavy-Fermion Systems
-------	----------	-------------------------	-----------	--------	-------	---

### Solid State Ionics

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
33062	Kazuhiro Mori	301 (2017) 163-169	2014A1440	BL04B2	小野寺 陽平	Structural Origin of Massive Improvement in Li-ion Conductivity on Transition from (Li <sub>2</sub> S) <sub>5</sub> (GeS <sub>2</sub> )(P <sub>2</sub> S <sub>5</sub> ) Glass to Li <sub>10</sub> GeP <sub>2</sub> S <sub>12</sub> Crystal

### Superconductor Science and Tecgnology

33142	Kozo Osamura	26 (2013) 094001	2012A1765	BL46XU	町屋 修太郎	Thermal Strain Exerted on Superconductive Filaments in Practical Nb <sub>3</sub> Sn and Nb <sub>3</sub> Al Strands
-------	--------------	---------------------	-----------	--------	--------	--

### Surface and Interface Analysis

33132	Masayasu Nagoshi	46 (2014) 888-891	2005B0934	BL46XU	名越 正泰	Crystal Structure of Oxide Layers on Mo-Added Fe-Cr Alloys Studied by GIXS and XPS
-------	------------------	----------------------	-----------	--------	-------	--

### Synthetic Metals

32920	Seichiro Izawa	197 (2014) 175-181	2013A1634	BL19B2	尾坂 格	Separated Crystallization of Donor and Acceptor in Oligo( <i>p</i> -phenylenevinylene)-naphthalenediimide Dyad Films
-------	----------------	-----------------------	-----------	--------	------	--

### Topics in Catalysis

32787	Licheng Liu	57 (2014) 595-606	2011B1597	BL01B1	岩澤 康裕	Dependences of the Oxygen Reduction Reaction Activity of Pd-Co/C and Pd-Ni/C Alloy Electrocatalysts on the Nanoparticle Size and Lattice Constant
			2011B1040	BL01B1	岩澤 康裕	
			2012A1026	BL01B1	岩澤 康裕	

### Transactions of Nonferrous Metals Society of China

33027	Masakazu Kobayashi	24 (2014) 2094-2101	2009A1554	BL20XU	小林 正和	Development of 3D Crystallographic Orientation Measurement for Grain Deformation Analysis in Aluminum Alloy
-------	--------------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

### Vacuum

33026	Shigeharu Tamura	84 (2010) 1457-1459	2008B1197	BL20XU	田村 繁治	Fabrication and Testing of Sputtered-Sliced Kinoform Style Fresnel Zone Plate
-------	------------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

### 軽金属 (Journal of Japan Institute of Light Metals)

32796	Masakazu Kobayashi	66 (2016) 589-594	2014A1192	BL20XU	小林 正和	Relationship between Internal Inhomogeneous Deformation and Local Misorientation in Aluminum Alloy Deformed by Plane Strain Compression
-------	--------------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

### 高圧力の科学と技術 (The Review of High Pressure Science and Technology)

32763	Yoichi Nakajima	21 (2011) 98-108	2008B1267	BL04B1	高橋 栄一	Possible Role of Carbon and Hydrogen in the Earth's Core
-------	-----------------	---------------------	-----------	--------	-------	--

### 高分子論文集 (Japanese Journal of Polymer Science and Technology)

32744	Daigo Kobayashi	74 (2017) 91-98	2012B1274	BL43IR	高原 淳	Interphase Structure of Oxidized Carbon Fiber Reinforced Polyamide 6 Revealed by Synchrotron Microbeam X-ray Diffraction and Infrared-Spectroscopy
			2011B1433	BL40XU	高原 淳	
			2012B1237	BL40B2	高原 淳	

### 国立歴史民俗博物館研究報告 (Bulletin of the National Museum of Japanese History)

33416	Yoshiko Shimadzu	206 (2017) 61-87	2015B1822	BL43IR	島津 美子	Technical Study of Paint Materials in the Buddhism Polychrome Wood Sculptures Made in the 19th and the Early 20th Century in Japan: Case Studies of Ryusen-ji, Shioda-Gyoya and Horai-ji
-------	------------------	---------------------	-----------	--------	-------	--

### 材料 (Journal of the Society of Materials Science, Japan)

32835	Mitsuo Shibutani	66 (2017) 23-28	2007B3300	BL08B2	桑本 滋生	Characteristics of the Amorphous Polyvinyl Alcohol Resin Derivative Having Side Chain 1,2-Diol
			2007A3300	BL08B2	桑本 滋生	

### 生物物理 (Biophysics)

33282	Jian-Ren Shen	56 (2016) 79-86	2014B8048	BL3	沈 建仁	Structural Biology of Photosynthetic Systems
			2015A8055	BL3	沈 建仁	

電気学会論文誌 C (IEEJ Transactions on Electronic, Information and Systems)

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
33181	Yuden Teraoka	137 (2017) 394-399	2012B3801	BL23SU	寺岡 有殿	Chemical Reaction Mechanisms of Oxide Layer Formation via Oxygen Molecule at Ni(001) Surface as Observed by Synchrotron Photoemission Spectroscopy
			2013A3801	BL23SU	寺岡 有殿	
			2013B3801	BL23SU	寺岡 有殿	
			2014A3801	BL23SU	寺岡 有殿	

日本金属学会誌 (The Journal of the Japan Institute of Metals and Materials)

33160	Masugu Sato	78 (2014) 415-418	2005B0947	BL47XU	西山 佳孝	Analysis for Surface and Interface of Metallic Materials by Synchrotron Radiation
			2006A0187	BL39XU	來村 和潔	
			2009A1785	BL19B2	大塚 伸夫	
			2009B1790	BL19B2	大塚 伸夫	
			2009A1940	BL46XU	土井 教史	

日本食品工学会誌 (Japan Journal of Food Engineering)

32819	Masugu Sato	17 (2016) 83-88	2013B1847	BL19B2	佐藤 真直	Non-destructive Three-dimensional Observation of Structure of Ice Grains in Frozen Food by X-ray Computed Tomography Using Synchrotron Radiation
-------	-------------	--------------------	-----------	--------	-------	--

保全学 (Maintenance)

33166	Kenji Suzuki	14 (2015) 89-95	2013A3784	BL22XU	鈴木 賢治	Evaluation of Welding Residual Stresses in Austenitic Stainless Steel using Diffraction Spot Trace Method
-------	--------------	--------------------	-----------	--------	-------	---

博士論文 (東京大学)

33171	Yusuke Takeda	(2017)	2016A1711	BL47XU	竹田 裕介	Evolution and Diversity of Biomineralogical Nature in Ectococheate Cephalopod Septa
			2015B1837	BL47XU	竹田 裕介	
33184	Masafumi Horio	(2017)	2015B1699	BL47XU	堀尾 真史	Photoemission Studies of New Electron-Doped Cuprate High-Temperature Superconductors
			2015B7401	BL07LSU	松田 巖	
33210	Akira Yoko	(2017)	2015B1705	BL02B2	横 哲	Nanostructure Measurements and Theoretical Calculation toward Improvement of Supercritical Hydrothermal Synthesis
			2016A1634	BL01B1	横 哲	
			2013B1710	BL04B2	横 哲	
			2014A1623	BL04B2	横 哲	

博士論文 (東北大学)

33081	Satoru Sasaki	(2017)	2016A0073	BL43IR	佐々木 孝彦	Charge Vitrification and Crystallization Dynamics in an Organic Conductor with Geometric Charge Frustration
			2015B1752	BL43IR	佐々木 智	
			2015A1777	BL43IR	佐々木 智	
			2014B1752	BL43IR	佐々木 智	
			2014B1340	BL43IR	橋本 顕一郎	
33082	Yuta Honma	(2017)	2016A1617	BL40B2	本間 優太	Control of Higher-Order Structures by Developing Fabrication Methods of Conductive Polymer PEDOT/PSS Films and Investigations of their Electrical Transport Properties
			2015B1694	BL40B2	本間 優太	
			2015A1773	BL40B2	本間 優太	
			2014B1730	BL40B2	本間 優太	
			2014A1629	BL40B2	本間 優太	
33221	Takayuki Tashiro	(2016) 1-133	2014B1790	BL46XU	田代 敬之	Fabrication and Characterization of L <sub>10</sub> -FeNi
			2014B1933	BL46XU	田代 敬之	
			2015A1961	BL46XU	小金澤 智之	
			2015B1621	BL46XU	小金澤 智之	
			2016A1513	BL46XU	小金澤 智之	
			2016A1665	BL13XU	田代 敬之	
			2016A1682	BL46XU	田代 敬之	
			2016A1757	BL46XU	小金澤 智之	
			2016A1781	BL19B2	田代 敬之	
			2016B1894	BL19B2	田代 敬之	
			2013B4909	BL15XU	水口 将輝	
2014A4906	BL15XU	水口 将輝				



博士論文 (東京工業大学)

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
33097	Akihiro Watanabe	(2017)	2016A1673	BL19B2	渡邊 明尋	Synthesis and Hydride Ion Conductivities of $K_2NiF_4$ -type Oxyhydrides
			2016B1767	BL19B2	渡邊 明尋	
33360	Suzue Yoneda	(2017)	2016A1681	BL19B2	米田 鈴枝	The Mechanism of a Protective $Al_2O_3$ Scale Formation on Fe-Cr-Al Alloys
			2014A1550	BL19B2	林 重成	
			2014B1646	BL19B2	林 重成	
			2015A1727	BL19B2	林 重成	

博士論文 (Universität Würzburg)

33084	Florian Pfaff	(2017)	2013B3881	BL23SU	藤原 秀紀	Spektroskopie und Hochauflösende Mikroskopie zur Analyse der Grenzflächeneigenschaften in SrTiO <sub>3</sub> -basierten Heterostrukturen
			2013A3881	BL23SU	藤原 秀紀	
			2013A7449	BL07LSU	Sing Michael	
			2012B7439	BL07LSU	Sing Michael	
			2014B3883	BL23SU	藤原 秀紀	
			2012A7429	BL07LSU	Sing Michael	

博士論文 (University of Warwick)

33400	Ian Maskery	(2013)	2011B1523	BL08W	Duffy Jonathan	Spin Densities in 4f and 3d Magnetic Systems
			2012B0045	BL08W	Duffy Jonathan	

博士論文 (大阪大学)

33083	Takuya Aoyama	(2015)	2014B1775	BL10XU	青山 拓也	High Pressure Study on Dielectric and Nonlinear Optical Properties in Magnetic Insulators
-------	---------------	--------	-----------	--------	-------	---

博士論文 (大阪府立大学)

32966	Takashi Go	(2016)	2013A1056	BL43IR	溝口 幸司	Optical Study on Electronic Ferroelectric Material $LuFe_2O_4$
			2013B1139	BL43IR	溝口 幸司	
			2009A0089	BL43IR	岡村 英一	
			2014B1740	BL43IR	呉 剛志	
			2015A1770	BL43IR	呉 剛志	

博士論文 (北九州市立大学)

32758	Rintaro Takahashi	(2017)	2011B1068	BL40B2	寺尾 憲	Self-Assembly of Block Copolymers in Solution Controlled by the Intermolecular Interactions
			2014B1715	BL40B2	高橋 倫太郎	
			2014B1087	BL40B2	寺尾 憲	
			2015A1804	BL40B2	高橋 倫太郎	
			2015B1674	BL40B2	高橋 倫太郎	

博士論文 (京都大学)

33185	Yoshiteru Hosaka	(2017)	2016B1732	BL02B2	保坂 祥輝	Charge Transitions of Perovskite Structure Oxides with Unusually High Valence Fe
-------	------------------	--------	-----------	--------	-------	--

博士論文 (慶應義塾大学)

33353	Shunsuke Sakuragi	(2017)	2014A1675	BL13XU	櫻木 俊輔	Ferromagnetism Induced by Quantum-Well States in Pd(100) Ultrathin Films
			2015A1775	BL13XU	櫻木 俊輔	
			2015B1689	BL13XU	櫻木 俊輔	

博士論文 (神戸大学)

33270	Megumi Matsumoto	(2017) 1-71	2015A1378	BL10XU	瀬戸 雄介	Nepheline and Sodalite in the Ningqiang Carbonaceous Chondrite: Implications for Formation through Parent-body Processes
			2013B1215	BL10XU	瀬戸 雄介	
			2012B1344	BL10XU	瀬戸 雄介	
			2011B1339	BL10XU	瀬戸 雄介	
			2009B1238	BL10XU	瀬戸 雄介	

博士論文 (鳥取大学)

33302	Ryo Yoshimatsu	(2017)	2014B1893	BL14B2	吉松 良	Basic Research of Oxynitride and Mixed-anion (S, O, F) Compound Phosphor for White LEDs
-------	----------------	--------	-----------	--------	------	---

博士論文 (長浜バイオ大学)

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
33301	Emi Takeda	(2017)	2013A6836	BL44XU	中村 卓	Elucidation of the Primary-Substrate Recognition Mechanism in O-phospho-L-Serine Sulfhydrylase from Hyperthermophilic Archaeon <i>Aeropyrum pernix</i> K1
			2013B6836	BL44XU	中村 卓	
			2014A6936	BL44XU	中村 卓	
			2014B6936	BL44XU	中村 卓	
			2015B6529	BL44XU	中村 卓	
2016A6630	BL44XU	中村 卓				

博士論文 (名古屋大学)

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
33025	Toshio Nishino	(2016)	2013B1422	BL38B1	山田 泰之	Development of Macrocyclic Metal Complexes Based on Self-Assembly
			2012B1525	BL02B1	山田 泰之	
			2013B1415	BL02B1	山田 泰之	
			2013A1370	BL02B1	山田 泰之	
			2014B1175	BL02B1	山田 泰之	

博士論文 (兵庫県立大学)

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
33390	Yuu Tsuchiya	(2017)	2015B1735	BL35XU	土屋 優	Studies on the Iron Electronic States in Iron-Based Superconductors and the Related Compounds
			2012B0046	BL39XU	渡辺 真仁	
			2015B1982	BL35XU	筒井 智嗣	

博士論文 (北海道大学)

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
33113	Sohtaro Anraku	(2017)	2012A1544	BL01B1	安楽 総太郎	Natural Analogue Study of Secondary Minerals at Naturally Occurring Hyperalkaline Springs in Oman

博士論文 (明治大学)

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
32779	Norihiro Ikeno	(2016)	2015A1986	BL46XU	池野 成裕	Study on Control of Insulator/Semiconductor Interface for Crystalline Silicon Solar Cells
			2015A1706	BL19B2	小椋 厚志	
			2014B1892	BL46XU	小椋 厚志	
			2014B1615	BL46XU	小椋 厚志	

博士論文 (立命館大学)

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
33005	Toshiki Watanabe	(2017)	2013B1294	BL01B1	稲田 康宏	Development of in-situ Observation Cell for X-ray Absorption Fine Structure by Conversion Electron Yield Detection and its Application to Reduction Process of Shape-Controlled Copper(I) Oxide Particles

課題以外の成果として登録された論文

放射光 (Journal of the Japanese Society for Synchrotron Radiation Research) -1

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	タイトル
33224	Yasumasa Hikosaka	23 (2010) 291-294	XFEL		Multi-Photon Multiple Ionization of Atoms Irradiated with EUV SASE-FEL Pulses
33225	Takahiro Sato	23 (2010) 295-298	XFEL		Non-Linear Optical Processes of Molecules Induced by Intense EUV-FEL Light
33226	Kiyonobu Nagaya	23 (2010) 299-302	XFEL		Multiple Photoionization Dynamics of Clusters by EUV-FEL
33227	Yoshihiro Ogi	23 (2010) 303-306	XFEL		Study on Ultrafast Electronic Dynamics of Photo-Excited Molecules using EUV-FEL and UV Femtosecond Laser
33228	Yuji Fukuda	23 (2010) 308-312	XFEL		High-Sensitive, High-Resolution, and Wide-Field-of-View Image Sensor for EUV-FEL
33229	Toshihiko Shimizu	23 (2010) 313-316	XFEL		Development of a Fast ZnO Scintillator for XFEL
33231	Hitoki Yoneda	23 (2010) 317-320	XFEL		Nonlinear Optics in High Density Matter with Extreme Ultra-Violet Free Electron Lasers
33232	Yoshinori Nishino	23 (2010) 322-324	XFEL		Toward Ultrafast Coherent Imaging of Materials Science Phenomena with FEL
33233	Jae Hoon Park	23 (2010) 325-327	SCSS		EUV-FEL Diffraction Imaging of Nanostructures at SCSS

放射光 (Journal of the Japanese Society for Synchrotron Radiation Research) -2

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
33234	Makina Yabashi	22 (2011) 56-69		XFEL	XFEL/EUV-FEL Beamlines at SPring-8
33238	Toru Fukui	25 (2012) 65-69		加速器	The Accelerator Control System for SACLA
				制御	
				XFEL	
33239	Makina Yabashi	25 (2012) 70-75		XFEL	Beamline
33240	Hidekazu Mimura	25 (2012) 76-81		XFEL	Development of 1 μm XFEL Focusing System at SACLA
33241	Takaki Hatsui	25 (2012) 82-88		装置&技術	Detector, Data Acquisition System, Instrument Control, and Data Analysis
				XFEL	
33242	Hitoshi Tanaka	25 (2012) 89-97		光学系	Beam Commissioning and Achieved Laser Performance
				XFEL	
33243	Shunji Goto	25 (2012) 98-100		XFEL	Public User Operation of SACLA
33245	James Harries	26 (2013) 327-334		装置&技術	Superfluorescence Observed using an EUV-FEL
				XFEL	
33246	Atsushi Tokuhisa	26 (2013) 26-37		装置&技術	Possibility of Atomic-Resolution Single Bio-Molecular Imaging with X-ray Free Electron Laser
				XFEL	
33286	Michihiro Sugahara	29 (2016) 198-203		装置&技術	Method of Sample Loading for Serial Femtosecond Crystallography
				XFEL	
33288	Hitoki Yoneda	29 (2016) 165-169		装置&技術	Development of Atomic Inner Shell Ionized Hard X-ray Laser with Intense X-ray Free Electron Laser Pulse
				XFEL	
33289	Tetsuo Katayama	29 (2016) 110-113		装置&技術	Development of femtosecond X-ray spectroscopy using XFELs
				XFEL	
33292	Toshinori Suzuki	29 (2016) 23-31		XFEL	Femtosecond Time-Resolved X-ray Absorption Spectroscopy of Liquids using SACLA
				装置&技術	
33293	Hitoshi Tanaka	30 (2017) 28-38		加速器	Photon Diagnostic System to Fully Utilize the Performance of Upgraded SPring-8
				XFEL	

レーザー研究 (The Review of Laser Engineering)

33253	Yuichi Inubushi	38 (2009) 453-457		装置&技術	Nonlinear Transmission in Metal Using Intense Femtosecond EUV Free Electron Laser
				XFEL	
33255	Makina Yabashi	37 (2009) 879-885		XFEL	SPring-8 X-Ray Free Electron Laser: Status
33259	Takashi Tanaka	40 (2012) 658-665		XFEL	Mechanism of X-Ray Free Electron Lasers
33260	Makina Yabashi	40 (2012) 675-679		XFEL	Review of Scientific Cases and Beamline Technology for X-Ray Free-Electron Laser
33263	Atsushi Iwasaki	40 (2012) 687-690		装置&技術	Photoionization of Atoms and Molecules by Intense EUV-FEL Pulses and FEL Seeded by High-Order Harmonic of Ultrashort Laser Pulses
				XFEL	
33264	Kazuto Yamauchi	40 (2012) 691-695		装置&技術	Nanofocusing of X-Ray Free Electron Laser
				XFEL	
33265	Hitoki Yoneda	40 (2012) 696-702		XFEL	Nonlinear X-Ray Interactions with a Solid Target and Their Applications

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics

32774	Hiroshi Iwayama	46 (2013) 164019		SCSS	Frustration of Photoionization of Ar Nanoplasma Produced by Extreme Ultraviolet FEL Pulses
32775	R. Ma	46 (2013) 164018		SCSS	Photoelectron Angular Distributions for the Two-Photon Ionization of Helium by Ultrashort Extreme Ultraviolet Free-Electron Laser Pulses
32783	Subhendu Mondal	46 (2013) 205601		SCSS	Photoelectron Angular Distributions in Infrared One-Photon and Two-Photon Ionization of FEL-Pumped Rydberg States of Helium
32784	Kiyonobu Nagaya	46 (2013) 164023		SCSS	Unusual Under-Threshold Ionization of Neon Clusters Studied by Ion Spectroscopy

Applied Physics Letters

32989	Hiroki Ueda	109 (2016) 182902		理研	BL17SU	Magnetic Structure and Effect of Magnetic Field on its Domain Structure in Magnetoelectric Ba <sub>1.3</sub> Sr <sub>0.7</sub> CoZnFe <sub>11</sub> AlO <sub>22</sub>
33321	Yasuhiro Yoneda	83 (2003) 275-277			BL02B2	Stacking-Fault-Induced Intermediate Structure in Bismuth Titanate

### Crystal Growth & Design

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
33086	Peter Norby	16 (2016) 2646-2652	理研	BL44B2	Continuous Flow Supercritical Water Synthesis and Temperature-Dependent Defect Structure Analysis of YAG and YbAG Nanoparticles
33110	Peter Norby	16 (2016) 834-841	理研	BL44B2	Hydrothermal Synthesis of CoSb <sub>2</sub> O <sub>4</sub> : In Situ Powder X-ray Diffraction, Crystal Structure, and Electrochemical Properties

### Dalton Transactions

33123	Martin Roelsgaard	45 (2016) 18994-19001	理研	BL44B2	The Hydrothermal Synthesis, Crystal Structure and Electrochemical Properties of MnSb <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
33126	Hiroyasu Masunaga	42 (2013) 16216-16221	理研	BL45XU	Trilayer-Cubic Core-Shell Structure of PbS/EuS Nanocrystals Revealed by the Combination of the Synchrotron Small-Angle X-ray Scattering Method and Energy-Dispersive X-ray Spectroscopy

### Journal of the American Chemical Society

32762	Masaaki Sadakiyo	134 (2012) 5472-5475		BL02B2	Promotion of Low-Humidity Proton Conduction by Controlling Hydrophilicity in Layered Metal-Organic Frameworks
33308	Shigeyuki Masaoka	128 (2006) 15799-15808		BL02B2	Chemical Reaction-Inspired Crystal Growth of a Coordination Polymer toward Morphology Design and Control

### Physical Review A

32785	Satoshi Yase	88 (2013) 043203	SCSS		Crossover in the Photoionization Processes of Neon Clusters with Increasing EUV Free-Electron-Laser Intensity
32786	Subhendu Mondal	89 (2014) 013415	SCSS		Pulse-Delay Effects in the Angular Distribution of Near-Threshold EUV + IR Two-Photon Ionization Ne

### Physical Review B

32990	Y. W. Windsor	94 (2016) 214412	理研	BL17SU	Ferromagnetic and Antiferromagnetic Orders of a Phase-Separated Manganite Probed throughout the <i>B-T</i> Phase Diagram
33403	T. Taniguchi	75 (2007) 024414		BL08W	Anomalous Volume Expansion in CaRu <sub>0.85</sub> Fe <sub>0.15</sub> O <sub>3</sub> : Neutron Powder Diffraction and Magnetic Compton Scattering

### Radiation Measurements

33218	Yoshihiro Asano	41 (2006) S236-S241	装置&技術	BL01B1	Radiation Safety Issues for Top-up Operation at SPring-8
33219	Yoshihiro Asano	41 (2006) S194-S199	装置&技術	BL47XU	Shielding Design Aspects of SR Beamlines for 3 and 8 GeV Class Synchrotron Radiation Facilities
			装置&技術	BL02B1	
			装置&技術	BL45XU	
			装置&技術	BL08W	

### 高圧力の科学と技術 (The Review of High Pressure Science and Technology)

33271	Tetsuya Ishikawa	23 (2013) 207-213	XFEL		X-Ray Free Electron Laser: SACLA
33272	Kazuto Yamauchi	23 (2013) 220-226	装置&技術		Current Status and Future Challenges in Focusing Technology of X-Ray Free Electron Laser
			XFEL		

### 日本結晶学会誌 (Journal of the Crystallographic Society of Japan)

33273	Tetsuya Ishikawa	56 (2014) 4-8	XFEL		Early Days of SPring-8 Angstrom Compact Free-Electron Laser (SACLA)
33274	Makina Yabashi	56 (2014) 9-14	XFEL		Overview of X-ray Free Electron Laser Facility SACLA

### 日本物理学会誌 (Butsuri)

33278	Tetsuya Ishikawa	70 (2015) 675-682	XFEL		An Alley from 'X-rays and Crystals' by Torahiko Terada to an X-ray Free Electron Laser, 'SACLA'
33279	Masayoshi Nakasako	70 (2015) 702-712	XFEL		X-ray Structure Analyses of Biological Molecules and Particles in Japan. A Brief History and Future Prospect

### Acta Crystallographica Section B

33087	Mattia Sist	72 (2016) 310-316	理研	BL44B2	Crystal Structure and Phase Transition of Thermoelectric SnSe
-------	-------------	----------------------	----	--------	---

**AIP Conference Proceedings**

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
32773	Haruhiko Ohashi	1741 (2016) 040023	光学系		Development of Contamination-Free X-ray Optics for Next-Generation Light Sources

**Biochemical and Biophysical Research Communications**

32754	Viswanathan Thiruselvam	482 (2017) 264-269	理研	BL26B2	Crystal Structure Analysis of a Hypothetical Protein (MJ0366) from <i>Methanocaldococcus jannaschii</i> Revealed a Novel Topological Arrangement of the Knot Fold
-------	-------------------------	-----------------------	----	--------	---

**Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry**

32769	Hiroki Tsuruta	74 (2010) 69-74		BL38B1	Crystal Structure of Cold-Active Alkaline Phosphatase from the Psychrophile <i>Shewanella</i> sp.
-------	----------------	--------------------	--	--------	---

**Chemical Communications**

33306	Yuh Hijikata	47 (2011) 7632-7634		BL02B2	Differences of Crystal Structure and Dynamics between a Soft Porous Nanocrystal and a Bulk Crystal
-------	--------------	------------------------	--	--------	--

**Chemical Physics Letters**

33305	Masaki Takata	372 (2003) 512-518		BL02B2	Sc <sub>2</sub> Dimer in IPR-Violated C <sub>66</sub> Fullerene: a Covalent Bonded Metallofullerene
-------	---------------	-----------------------	--	--------	---

**Chemical Science**

33085	Espen Bojesen	7 (2016) 6394-6406	理研	BL44B2	The Chemistry of ZnWO <sub>4</sub> Nanoparticle Formation
-------	---------------	-----------------------	----	--------	---

**Chinese Journal of Physics**

33324	Kazunori Takada	43 (2005) 556-565		BL02B2	Characterization of Superconducting Sodium Cobalt Oxide Bilayer-Hydrate
-------	-----------------	----------------------	--	--------	---

**Computational and Theoretical Chemistry**

33348	Niels Bindzus	1053 (2015) 245-253		BL02B2	Mapping the Complete Bonding Network in KBH <sub>4</sub> using the Combined Power of Powder Diffraction and Maximum Entropy Method
-------	---------------	------------------------	--	--------	--

**CrystEngComm**

33098	Troels Lindahl Christiansen	18 (2016) 1996-2004	理研	BL44B2	Crystal Structure, Microstructure and Electrochemical Properties of Hydrothermally Synthesised LiMn <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
-------	-----------------------------	------------------------	----	--------	---

**European Journal of Mineralogy**

33355	Anton Shatskiy	27 (2015) 175-184		BL04B1	Na-Ca Carbonates Synthesized under Upper-Mantle Conditions: Raman Spectroscopic and X-ray Diffraction Studies
-------	----------------	----------------------	--	--------	---

**FEBS Letters**

32761	Yutaka Yorinaga	591 (2017) 540-547	理研	BL45XU	Crystal Structure of a Family 80 Chitosanase from <i>Mitsuaria Chitosanitabida</i>
-------	-----------------	-----------------------	----	--------	--

**Journal of Magnetism and Magnetic Materials**

33347	Yasujiro Taguchi	310 (2007) 1229-1230		BL02B2	One-Dimensional Magnetism and Doping Effects in Metal-Phthalocyanine Systems
-------	------------------	-------------------------	--	--------	--

**Journal of Materials Chemistry C**

33112	Anders Blichfeld	3 (2015) 10543-10553	理研	BL44B2	Fast Direct Synthesis and Compaction of Phase Pure Thermoelectric ZnSb
-------	------------------	----------------------	----	--------	--

**Journal of Physics and Chemistry of Solids**

33298	Eiji Nishibori	62 (2000) 2095-2098		BL02B2	The Large Debye-Scherrer Camera Installed at SPring-8 BL02B2 for Charge Density Studies
-------	----------------	------------------------	--	--------	---

**Journal of the Physical Society of Japan**

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
33356	Takateru Kawakami	72 (2003) 33-36		BL04B2	High-Pressure Mössbauer and X-ray Powder Diffraction Studies of SrFeO <sub>3</sub>

**Journal of Physics: Conference Series**

32766	Kazumasa Okada	388 (2012) 022030		BL27SU	Photo Fragmentation of the K-shell Excited Perfluorocyclobutane Probed by a Multiple-Ion Coincidence Technique
-------	----------------	----------------------	--	--------	--

**Macromolecules**

33350	Ryohei Ishige	48 (2015) 2697-2705		BL03XU	Structural Analysis of Microphase Separated Interface in an ABC-Type Triblock Terpolymer by Combining Methods of Synchrotron-Radiation Grazing Incidence Small-Angle X-ray Scattering and Electron Microtomography
-------	---------------	------------------------	--	--------	--

**Nature Materials**

33295	Yoji Kobayashi	11 (2012) 507-511		BL02B2	An Oxyhydride of BaTiO <sub>3</sub> Exhibiting Hydride Exchange and Electronic Conductivity
-------	----------------	----------------------	--	--------	---

**New Journal of Physics**

33349	Yoichi Kamihara	12 (2010) 033005		BL02B2	Electronic and Magnetic Phase Diagram of Superconductors, SmFeAsO <sub>1-x</sub> F <sub>x</sub>
				BL09XU	

**Physica B**

33358	Ichimin Shirovani	382 (2006) 8-13		BL10XU	X-ray Study with Synchrotron Radiation for Filled Skutterudite YbFe <sub>4</sub> P <sub>12</sub> at Ambient and High Pressures
				BL04B2	

**Physical Chemistry Chemical Physics**

33071	Sebastian Christensen	18 (2016) 15874-15883	理研	BL44B2	Structural Disorder, Anisotropic Micro-Strain and Cation Vacancies in Thermo-Electric Lead Chalcogenides
-------	-----------------------	--------------------------	----	--------	--

**Physical Review Letters**

33146	Toshiaki Inada	118 (2017) 071803	理研	BL19LXU	Search for Two-Photon Interaction with Axionlike Particles Using High-Repetition Pulsed Magnets and Synchrotron X Rays
			装置&技術		

**Physics of the Earth and Planetary Interiors**

33352	Yuichiro Sueda	174 (2009) 78-85		BL04B1	Thermal Equation of State of CaFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> -Type MgAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
-------	----------------	---------------------	--	--------	--

**PLoS One**

33186	Chia-Jung Chang	11 (2016) e0147485		BL12B2	Exploring the Mechanism Responsible for Cellulase Thermostability by Structure-Guided Recombination
-------	-----------------	-----------------------	--	--------	---

**Radiation Physics and Chemistry**

33415	Marek Brancewicz	78 (2009) S137-S139		BL08W	Electron Momentum Density of Hexagonal Magnesium Studied by High-Resolution Compton Scattering
-------	------------------	------------------------	--	-------	--

**Review of Scientific Instruments**

33351	Anton Shatskiy	80 (2009) 023907		BL04B1	Boron-Doped Diamond Heater and Its Application to Large-Volume, High-Pressure, and High-Temperature Experiments
-------	----------------	---------------------	--	--------	---

**Scientific Reports**

32908	Teruhiko Bizen	6 (2016) 37937	装置&技術		Radiation-Induced Magnetization Reversal Causing a Large Flux Loss in Undulator Permanent Magnets
-------	----------------	-------------------	-------	--	---

**固体物理 (Solid State Physics)**

33223	Makina Yabashi	44 (2009) 887-896	XFEL		X-ray Free Electron Laser
-------	----------------	----------------------	------	--	---------------------------

**真空 (Journal of the Vacuum Society of Japan)**

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
33256	Kazuaki Togawa	55 (2012) 73-77	装置&技術 XFEL		Low-emittance Electron Gun for X-ray Free Electron Laser at SPring-8

**生物物理 (Biophysics)**

33280	Kunio Hirata	55 (2015) 84-86	装置&技術 XFEL		Determination of Radiation Damage-Free Crystal Structure of Cytochrome <i>c</i> Oxidase Using XFEL
-------	--------------	--------------------	---------------	--	--

**プラズマ・核融合学会誌 (Journal of Plasma and Fusion Research)**

33281	Hitoki Yoneda	92 (2016) 729-734	装置&技術 XFEL		Development of Atomic Inner Shell Excitation X-ray Laser and Future Prospects
-------	------------------	----------------------	---------------	--	---

**博士論文 (東京大学)**

32741	Shinji Mori	(2016)	理研	BL32XU	A Study of Human Chemokine Receptor XCR1 by Generation and Application of Monoclonal Antibodies
33216	Toshiaki Inada	(2015)	理研 装置&技術	BL19LXU	Search for Axion-Like Particles using Strong Pulsed Magnets at SPring-8

## 2016B 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 及び 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。

2016B 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）につきましては、User Information で公開されています。

### 1. 2016B 期 要望等全体概要

2016B 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 <sup>*1</sup> 報告書数		
			技術的 要望等	食堂他 要望等	その他 (お礼)
SPring-8 共用BL	719	1,045	74	35	127
SACLA 共用BL	43	45	15		

\*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 74 件) の研究分野/手法<sup>\*2</sup>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・ 惑星化学	産業利用	その他
X線回折	18		5	7	2	7	
X線散乱	2		1			3	
X線非弾性 散乱			1		2		1
X線・軟X 線分光		1	5	3		8	
光電子分光				1		1	
X線イメージング		1	3			1	
その他			1				

\*2 課題申請時の利用者申告ベース。

### 2. 2016B 期 要望等の内容 (一部抜粋)

#### (1) 技術的要望等

○初期に比べて、より大きな標本の撮影が可能となったが、心臓標本などのより大きな試料を撮影するため、さらに改良された実験装置 (CT 撮影装

置) が開発されることを希望します。

#### 【医学応用/X線イメージング】

○測定そのものには全く問題はないが、結晶の選定のために 1 種類あたり 4~5 回の仮測定を行うため、本測定以上の時間を費やすことになる (24 時間のうち、仮測定に 10~14 時間程度必要)。より多くのサンプルを測定するために、センタリングのセミオート化が望ましい。

#### 【化学/X線回折】

○施設の検出器 PILATUS 2M が老朽化のため、不具合の生じることがあります。高額なものは承知しておりますが、できる限り速やかに、装置を更新していただくとユーザーとしてはたいへんありがたいと思っております。

#### 【産業利用/X線回折】

○生物試料準備室で純水を利用しましたが、どのようなレベルの純水 (イオン交換水、超純水?) など明示していただくと利用しやすいです。

#### 【産業利用/X線散乱】

○SPring-8 で結晶化すると結晶化条件が異なってしまう、今回うまくデータが得られませんでした。湿度が異なることが一因だと考えられるため、結晶化するための環境整備を進めていただくと助かります。

#### 【生命科学/X線回折】

#### (2) 食堂その他要望等

○食堂の営業時間について、朝は 7:30 からにしていただきたい。ビームタイムが 10:00 に終了するため、終了前の装置前での作業時間確保のためにも朝早く営業していただきたい。研究交流施設のチェックアウト時間を 11:00 までにしていただきたい。10:00 のビームタイム終了後、余裕を持って部屋を片づけてチェックアウトできるため。



○ビームタイムの関係上、売店の利用ができないタイミングであったため、土曜日だけでなく日曜日にも営業して頂ければ非常に助かります。

○今回は4泊のうち後半2泊で宿泊施設が満室で利用できず実験の遂行に問題が生じた。その影響は大きい。予約が遅れたことが原因ではあるが、慢性的に満室の状況が続いているようなので対策が必要ではないでしょうか。

## 2. 要望等及び施設側回答の公開場所

SPring-8/SACLA User Information のいずれからも検索・閲覧ができます。

期	サイクル	利用施設	ビームライン	PK実験ビームライン	キーワード
2016B	3	3	3	3	
検索結果 32 件中 1 - 25 件を表示					
期	ビームライン	次回利用者に対するアドバイスや施設に対する要望、提案等	SPring-8/SACLA からの回答		
2016B	BL40XU	測定と解析に特に問題はないが、1種のサンプルあたり、平均3~8回程度の仮測定を行い、最適な結果を得るために測定時間のうちセンタリングに費やす時間が多くなってしまった。4~6回程度で5~6種類の測定しかできない。オートセンタリング機能がつけば、8~10種類くらい測定できるのではないかと思われる。	センタリングに費やす時間を減らす方法としてα軸のセンタリング用の自動化プログラムがありますのでPC上の画面をクリックして結果を動かすシステム、結果チェックの段階ではα軸のセンタリングを省略し、良い結果であれば改めてα軸のセンタリングを行う方法があるかと思えます。将来的にはα軸にも自動ステージの導入を検討しておりますので現状上記の方法をお試しいただければと思います。		
2016B	PK-BL	既に報告済みの KUMA でビームサイズや露光時間を定めたときの dose 見直しに気づいてほしい。対応が望まれる。見直しが不正確である旨、警告メッセージなどが表示されるようにしてほしい	ご迷惑をおかけしました。2016/10/17 現在、対応済みです。		
2016B	BL35XU	前回のビームタイムでは材料位置でのビームフラックスが昨年と比較し大幅に低下していたが、今回は前回と比較し強度が材料位置で3-4割ほど回復しており、我々の高圧試験を測定するために十分なものであった。しかし、12種ある検出器のうち1つ(α5)が故障、3つ(α6)の検出器が故障で比較し3割ほど低下し、また1つ(α1)の検出器のバックグラウンドが少し高めであった。これらのことを実験が始まるまで知らなかったため、予定していたデータ取得方法を変更し、現状での最適なデータ取得方法を再考するに少し苦労しました。ビーム停止時間が長く停止中のメンテナンス後の状態がユーザーに直感で判明しないこと、ソフトの取り違えでビームラインセットアップにあまり時間をかけないこと、さらに我々の高圧実験のために大変難しい条件下でのセットアップ(特にKBでの果敢)を行っていることから今回は難事ではなかったのですが、BLの状況が通常と異なる場合は、可能な範囲で事前連絡をユーザーにして頂くを希望します。	検出器の件ではご迷惑をおかけしました。BL35XUの検出器は、既に設置より10年経過しており、老朽化対策としての本年度予算として当初計上しておりました。ご指摘のノイズについては老朽化によるものであり、ご指摘のチャンネル以外もノイズの問題があることが判明し、今年度で前回の検出器の寿命の入り替えを行う予定で予算の確保をいたしました。今回のケースでは動作不良の原因は明らかになりました。実験開始3日前ではありますが、状態が明らかになった時点で準備のために採用された共同研究者の方にはお伝えいたしました。少なくとも今回は現状のままユーザー準備を継続させるを優先せんで、少なくとも2016B期のユーザーについてはご指摘のとおり、事前のアクセスを行う予定で。		
2016B	BL35XU	エンドステーションはよく整備されています。光の設置、バルブの掛け替えもエンドステーションから行うようにしてほしい。	次回からは光の設置とバルブの掛け替えもエンドステーションからできるようにしたい。		

## 「SPRUC 2017 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6回目となる「SPRUC 2017 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 2017 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 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 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：各年2名以内とする。
3. 対象：SPring-8 を利活用し、平成29年3月31日までの間に優れた研究成果をあげた原則35歳以下（平成29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：平成29年4月3日（月）から平成29年5月23日（火）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2017（平成29年9月4日～5日、広島大学東千田未来創生センター）において本賞の表彰式および受賞講演を行います。
9. 担当幹事：行事幹事 木村昭夫、西堀麻衣子

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\\_2017.html](http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc/YSA_SPRUC_2017.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 2017

### 高性能化を目指す SPring-8 の将来

#### 【趣旨抜粋】

第6回目となった本年のシンポジウムは広島大学東千田キャンパスにおいて開催されます。高性能化を目指す SPring-8 の将来と題し、持続可能な社会を実現するために SPring-8 が目標にすべき先端性について、基礎科学から産業応用までの幅広い分野の視点からの討論の場とします。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、将来の SPring-8 の活性化に向けた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  
 広島大学

【日時】 平成 29 年 9 月 4 日 (月) ~ 5 日 (火)

【会場】 広島大学 東千田未来創生センター  
 〒730-0053 広島市中区東千田町1丁目1番89号  
[https://www.hiroshima-u.ac.jp/centers/education\\_facilities/miraisousei](https://www.hiroshima-u.ac.jp/centers/education_facilities/miraisousei)

【詳細情報】 <http://www.spring8.or.jp/ja/ja/science/meetings/2017/sp8sympo2017/>  
 プログラム等随時更新します。参加申込は6月頃開始予定。

【問い合わせ先】 SPring-8 シンポジウム 2017 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 : [sp8sympo2017@spring8.or.jp](mailto:sp8sympo2017@spring8.or.jp)



#### SPring-8シンポジウム2017

日時：平成29年9月4日(月)、5日(火)

場所：広島大学 東千田未来創生センター

JR広島駅から路線バスで約20分、路面電車で約30分



## 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	淡路 晃弘	利用研究促進部門
	池本 夕佳	利用研究促進部門
	大橋 治彦	光源基盤部門
	大端 通	企画室
	小金澤智之	産業利用推進室
	小瀬川奉久	企画室
	佐々木茂樹	光源基盤部門
	杉本 正吾	利用推進部
	田中 義人	SPring-8ユーザー協同体 (SPRUC) 編集幹事 (兵庫県立大学)
	丹下 慶範	利用研究促進部門
	長谷川和也	タンパク質結晶解析推進室
	松原 伸一	XFEL利用研究推進室
	松本 悠史	安全管理室
		(以上、敬称略五十音順)
事務局	小南 篤史	利用推進部
	山本 律	利用推進部

## **SPring-8/SACLA 利用者情報**

Vol.22 No.2 May 2017

### **SPring-8/SACLA Information**

発行日 平成29年 (2017年) 5月15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)



ぽかぽかと陽気に包まれ、薄紫の華が空を舞う

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/>