

# SPring-8/SACLA

INFORMATION 利用者情報



ISSN 1341-9668 SPring-8 Document D2019-010

**Vol.24 No.4**  
Nov. 2019

## SPring-8/SACLA Information

### 目次 CONTENTS

理事長室から —高輝度研究者センター—

Message from President - High-Brilliance (= Highly-Motivated) Researcher Center -

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

雨宮 慶幸  
AMEMIYA Yoshiyuki ..... 364

#### 1. 最近の研究から / FROM LATEST RESEARCH

(SPRUC 2019 Young Scientist Award 受賞 研究報告)

エンドセリン受容体 B 型の構造機能活性相関の解明

Structural and Functional Analyses of the Human Endothelin ETB Receptor

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

志甫谷 渉  
SHIHOYA Watanu ..... 365

(SPRUC 2019 Young Scientist Award 受賞 研究報告)

偏光変調型軟 X 線共鳴磁気光学効果による埋込層の磁性研究

Magnetism of Buried Layers Studied by Soft X-ray Resonant Magneto-Optical Effect using Polarization Modulation

(公財) 高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室  
XFEL Utilization Division, JASRI

久保田 雄也  
KUBOTA Yuya ..... 371

#### Long-term Proposal Report 1

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  
Dory E. Dewese Ariel B. Jacobs  
Department of Chemistry, Stanford University / Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST)

Edward I. Solomon  
Jeffrey T. Babicz Jr.  
Kyle D. Sutherlin  
Kiyoung Park ..... 376

#### Long-term Proposal Report 2

Application & Development of Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy (NRVS) and Synchrotron Mossbauer Spectroscopy of Iron-Hydrogen Interactions in Hydrogenases, Nitrogenases, and Model Complexes

SETI Institute  
University of California  
Hongxin Wang Nakul Mishra  
Diffraction and Scattering Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI  
Technische Universität Berlin  
Giorgio Caserta  
Ingo Zebger Peter Hildebrandt  
Max Planck Institute for CEC  
Edward Reijerse  
Institute of Chemistry, Academia Sinica  
Department of Chemistry, University of Illinois

Stephen P. Cramer  
Cindy Pham  
Leland Gee  
Yoshitaka Yoda  
Vladimir Pelmenchikov  
Lars Lauterbach  
Oliver Lenz  
James Birrell  
Wolfgang Lubitz  
Ming-Hsi Chiang  
Thomas Rauchfuss ..... 383

#### 2. ビームライン / BEAMLINES

所外実験データ転送システム BENTEN

Experimental Data Transfer System BENTEN

(公財) 高輝度光科学研究センター 情報処理推進室  
Information-technology Promotion Division, JASRI

松本 崇博  
MATSUMOTO Takahiro  
横田 滋  
YOKOTA Shigeru MATSUSHITA Tomohiro ..... 388

#### 3. 研究会等報告 / WORKSHOP AND COMMITTEE REPORT

第 5 回 SACLA Users' Meeting 報告

Report on the 5th SACLA Users' Meeting

(公財) 高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室  
XFEL Utilization Division, JASRI

大和田 成起  
OWADA Shigeki ..... 394

SPring-8 シンポジウム 2019 報告

SPring-8 Symposium 2019 Report

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 行事幹事 / 岡山大学 異分野基礎科学研究所  
Research Institute for Interdisciplinary Science, Okayama University  
兵庫県立大学 大学院物質理学研究科  
Graduate School of Material Science, University of Hyogo

横谷 尚睦  
YOKOYA Takayoshi  
田中 義人  
TANAKA Yoshihito ..... 397

第 16 回 SPring-8 産業利用報告会

The 16th Joint Conference on Industrial Applications of SPring-8

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

佐藤 真直  
SATO Masugu ..... 406

第 3 回 SPring-8 秋の学校を終えて

The 3rd SPring-8 Autumn School

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 行事幹事 (秋の学校担当) /  
(国) 量子科学技術研究開発機構 量子ビーム科学研究部門  
Quantum Beam Science Research Directorate, National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology

大和田 謙二  
OHWADA Kenji ..... 410



第 6 回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム報告 Report on the 6th Symposium for Cooperative Use of Quantum Beam Facilities and Super Computer (公財) 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 回折・散乱推進室 Diffraction and Scattering Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI	筒井 智嗣 TSUTSUI Satoshi	414
4. SPring-8/SACLA 通信/SPring-8/SACLA COMMUNICATIONS 2020A 期 SPring-8 利用研究課題募集について Call for 2020A 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		416
2020A 期 SACLA 利用研究課題の募集について Call for 2020A 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		417
第 44 回 (2019B) SPring-8 利用研究課題の採択について The Proposals Approved for Beamtime in the 44th Research Term 2019B 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		419
第 43 回共同利用期間 (2019A) において実施された SPring-8 利用研究課題 2019A 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		424
2017A 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 2017A -1- (公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 User Administration Division, JASRI		429
2019B 期 SACLA 利用研究課題の採択について The SACLA Public Proposals Approved for Beamtime in 2019B 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		431
2019A 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 2019A 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		433
SPring-8 運転・利用状況 SPring-8 Operational Status (国) 理化学研究所 放射光科学研究センター RIKEN SPring-8 Center		434
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		436
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		440
2019A 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 2019A 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		466
タンパク質結晶自動測定について SPring-8 PX-BL Automatic Data Collection (公財) 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター タンパク質結晶解析推進室 Protein Crystal Analysis Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI		468
利用系グループ活動報告 放射光利用研究基盤センター 回折・散乱推進室 回折・散乱 II グループ Activity Reports - Diffraction and Scattering Group II, Diffraction and Scattering Division (公財) 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 回折・散乱推進室 Diffraction and Scattering Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI	木村 滋 KIMURA Shigeno	471
5. 談話室・ユーザー便り/USER LOUNGE・LETTERS FROM USERS 海外放射光施設 PETRA III を訪問して Visiting Report on PETRA III (公財) 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 分光・イメージング推進室 Spectroscopy and Imaging Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI	高木 康多 TAKAGI Yasumasa	475
SPring-8 ユーザー協団体 (SPRUC) 四季報 SPRUC Communications SPring-8 ユーザー協団体 (SPRUC) 会長/関西学院大学 研究開発センター Center of Research Initiative, Kwansai Gakuin University	水木 純一郎 MIZUKI Jun'ichiro	480

## 高輝度研究者センター

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
理事長 雨宮 慶幸

JASRI の正式名は、高輝度光科学研究センターである。題目の「高輝度研究者センター」とは何？と思われたであろう。題目に込めた私の思いは、SPRING-8/SACLA のユーザーの研究支援を行う JASRI 研究者がこれまで以上に高輝度化して輝き、そのような高輝度化した研究者群からなる「高輝度研究者センター」を共に目指そう、という思いである。このことは、SPRING-8/SACLA が今後も世界のトップランナーであり続け、このサイトから引き続き優れた研究成果を創出し続ける上で、最も重要な要件であると確信している。

SPRING-8 が 1997 年に稼働を開始して以来、20 年余りが経過した。研究施設のハードウェア・ソフトウェアが老朽化する時期であると同時に、ややもすれば、研究施設を維持・運営する研究者の姿勢にマンネリ化、蝸壺化という傾向が現れ易くなる時期でもある。その意味でも今こそ、「高輝度研究者センター」を目指す時期である。

高輝度化した研究者とは、人目に目立つ研究者のことではない。高い志と強い動機付けを持つ研究者、highly-motivated researcher のことである。ともすれば、研究支援を行う研究者は、支援される研究者に比べると人目には目立たない。そのことは事実であるが、そのことを理由にした、「研究支援する立場は割が合わない。高いモチベーションを保てない。」という主張は当たらない。そのような主張は、魅力ある研究テーマを探索したり、主体的に研究に取り組む姿勢がない場合の言い訳であることが多い。

研究を支援する立場であれ、支援される立場であれ、研究者に求められる資質は同じである。それは、高い志と強い動機付けを持って主体的に研究に取り組むことのできる資質だと考えている。では、その資質とは何であろうか？それは、好奇心(Curiosity)、使命感(Mission)、情動(Passion)である、と私は学生に(実は、私自身に)言い続けてきた。その要点を以下に紹介させて頂く。

人間の心(精神性)には知・意・情の3つの機能がある。それは、「知性」と「意志」と「情動」である。アリストテレスは、その3機能が各々「真、善、美」という価値を追求すると述べている。研究に取り組む時に、これら3つの機能を持続的に活性化し続けることが大切である。

1 番目の「知性」。知性を健全に保つためには、「素朴な好奇心、飽くなき探究心」が大切。そして、物事を論理的にかつ実証的に考える習慣性を身に付けることが大切である。

2 番目の「意志」。「好奇心」に加えて、「何かのために役立ちたいという意志」、すなわち、「使命感(Mission)」を持って取り組むことが大切である。現代では死語になった感があるが、所謂、世のため人のため、という使命感を自分の心の中に育てることが重要である。競争的公的研究資金には、curiosity-driven な研究課題と、mission-oriented な研究課題がある。この仕組みを見ても分かるように、研究を進める上で、「好奇心(Curiosity)」と「使命感(Mission)」は車の両輪である。

3 番目の「情動(Passion)」。これは、人や物事に対する愛情や感動する心である。この情動は、好奇心や使命感を持続的に活性化するための車のエンジンに相当する。学問は哲学、すなわち、Philosophy から始まった。Philosophy は、Phil-「親しむ、愛する」という語と、Sophy「知、知識体系」という語からできている。すなわち、知を愛すること=Philosophy である。日本にも「好きこそ物の上手なれ」という諺がある。研究対象を愛し、その中にある美しさ・精緻さ・不思議さに感動する心(=情動)が好奇心を刺激する。さらに、情動は使命感をも強固にする。隣人や社会、ひいては、人類や世界に対する愛情があつてこそ、使命感は持続可能なものとなり得るからだ。

私は Photon Factory で 14 年間研究支援を行う立場で、その後、東京大学で 21 年間 Photon Factory や SPRING-8 で研究支援される立場で研究に携わってきた。この間、立場は変わっても、研究に対する動機付けは同じであり、上記は私にとって重要な羅針盤であった。

SPRING-8/SACLA が今後もトップランナーであり続け、優れた研究成果を創出し続ける上で、ユーザーの研究支援を行う JASRI 研究者が、これまで以上に各自の好奇心(Curiosity)、使命感(Mission)、情動(Passion)を高輝度化して輝き、研究に取り組んで頂くことを願っている。

舞台上でフラッシュライトを浴びることは嬉しい。しかし、それと同じく舞台下からユーザーに高輝度フラッシュライトを浴びせて、優れた研究成果を創出させることも大きな喜びである。そのような情動(Passion)を持つ highly-motivated researcher のプロ集団を目指したい。そのようなプロ集団こそ、今後益々高度化する放射光科学の担い手であると確信している。

そのためにも、JASRI 研究者においては、科研費、理事長ファンド、12 条枠等々を最大限に活用して各自の高輝度化を目指して頂きたい。

(SPRUC 2019 Young Scientist Award 受賞 研究報告)

## エンドセリン受容体 B 型の構造機能活性相関の解明

東京大学 大学院理学系研究科

志甫谷 渉

### Abstract

ペプチドホルモンであるエンドセリン-1 は G タンパク質共役受容体であるエンドセリン受容体を活性化し、体内の血圧制御等恒常性の維持に関わる様々なシグナル伝達に関与している。それゆえ、創薬標的としても非常に注目されており、エンドセリン受容体拮抗薬であるボセンタンが肺動脈性高血圧の治療薬として使われている。我々は、ヒト由来エンドセリン受容体 B 型とエンドセリン-1、およびリガンド非結合状態の結晶構造を決定し、エンドセリン-1 による受容体の活性化機構を解明した。また、拮抗薬ボセンタンが結合した状態の結晶構造も決定し、エンドセリン受容体拮抗薬に共通の結合様式および受容体活性阻害機構を明らかにした。さらに B 型選択的作動薬である ET-3 や IRL1620、逆作動薬である IRL2500 が結合した状態の結晶構造を決定し、複数の結晶構造を比較することで受容体の活性化・不活性化にともなう一連の構造活性相関を明らかにした。

### 1. エンドセリンシステム

エンドセリンは日本人によって 1988 年に発見された 21 アミノ酸残基からなるペプチドホルモンであり、最も強力な血管収縮物質である<sup>1)</sup>。その受容体として、細胞膜に存在するエンドセリン受容体 A 型およびエンドセリン受容体 B 型が発見された。エンドセリン受容体は G タンパク質共役受容体 (GPCR) であり、エンドセリンはこれらの受容体を介して細胞内の Gi や Gq など G タンパク質を活性化することにより、細胞膜を介しシグナルを伝達する (図 1)。エンドセリン受容体 A 型と B 型は血管収縮と拡張という拮抗した作用を示し、両者のバランスで体内の血圧を制御している (図 2)。エンドセリン-1 はエンドセリン受容体と見かけの上で不可逆的に結合し持続的な血圧の上昇に関わる。血流の制御の他にも、神経堤細胞の発生、

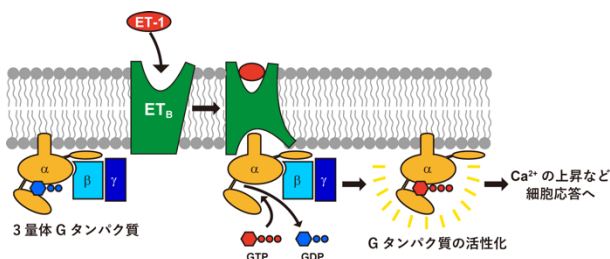


図 1 エンドセリン受容体 B 型による G タンパク質共役受容体の模式図

細胞の増殖、体液の水分濃度の調整など、エンドセリンの関わるシグナル伝達は生体内の多岐にわたる生理現象に関与する。

エンドセリン-1 の異常な産生はがん、高血圧、心臓病など様々な疾患の原因となる。その作用を拮抗的に阻害するエンドセリン受容体拮抗薬はこうした疾患に対する薬剤として注目されている。実際に、非選択的な拮抗薬であるボセンタンは肺高血圧に対する治療薬として使われている。さらに、エンドセリン受容体 B 型に選択的な作動薬であるエンドセリン-1 の誘導体 IRL1620 は、腫瘍細胞の血管を拡張させて血流を促進することにより抗がん剤や放射線治療の効能を

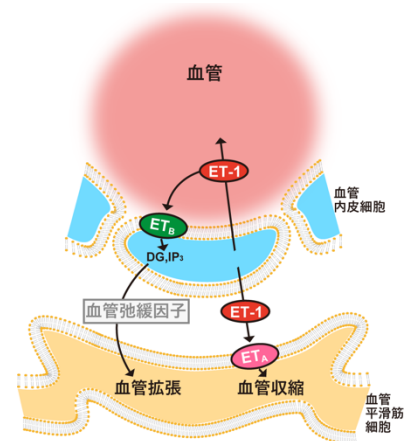


図 2 血管系でのエンドセリン受容体のシグナル伝達

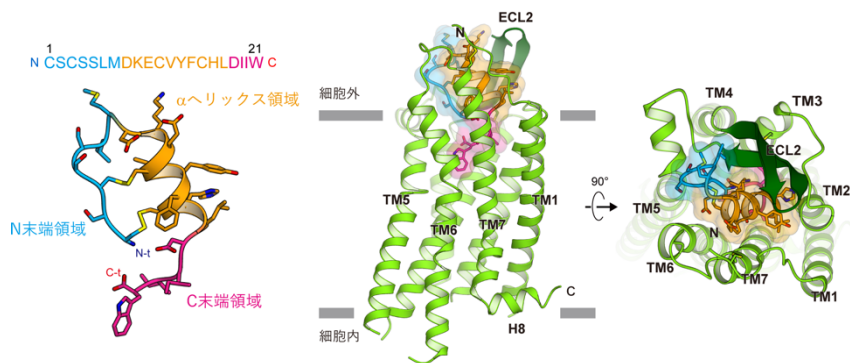


図3 エンドセリン-1 結合型の全体構造

高めるとされ、臨床研究が進められている。このように、エンドセリン受容体に対する選択的な作動薬や拮抗薬は、人類の医療を大きく向上させる可能性を秘めている。これまでに、エンドセリンに関する薬理的および医学的な研究は多くなされてきたが、エンドセリンや拮抗薬がどのようにエンドセリン受容体と結合し、これを活性化・不活性するのか、その分子機構の詳細は全く不明であった。そのため、エンドセリン受容体を標的とした新規の非ペプチド性の作動薬や拮抗薬の開発は停滞しており、エンドセリン受容体の構造の情報が待ち望まれていた。

## 2. エンドセリン-1 結合型および非結合型のエンドセリン受容体 B 型の構造解析

ヒト由来膜タンパク質、特に、G タンパク質共役受容体は構造が柔軟かつ不安定であり、結晶化が困難である。私の所属していた藤吉研究室においてヒト由来エンドセリン受容体 B 型の X 線結晶構造解析は 1994 年から取り組みがあったものの困難を極めていた。そこで我々は、結晶化の促進のため膜貫通領域一つ一つにアラニンを導入することにより、安定性の向上した耐熱変異体の作製に成功した。さらに、構造が柔軟であった細胞内第 3 ループに T4 リゾチームを挿入し脂質中間相を利用することにより、エンドセリン受容体 B 型とエンドセリン-1 (ET-1) との複合体の結晶化に成功し、単結晶から 2.8 Å 分解能で構造を決定した。ET-1 結合型の結晶は約 50 μm と小さかったが、SPRING-8 BL32XU のマイクロフォーカスビームで十分なデータを集めることができた。T4 リゾチームを小型 T4 リゾチームに改変することにより、リガンドと結合していないエンドセリン受容体 B 型の構造を

2.5 Å 分解能で決定した。

エンドセリン-1 は N 末端側領域、αヘリックス領域と C 末端側領域から構成され、主に後者二つの領域を介してエンドセリン受容体 B 型と密な相互作用を形成していた (図 3)。受容体側の約 40 残基のアミノ酸残基がエンドセリン-1 との相互作用に関わっており、その相互作用面積は 1,500 Å<sup>2</sup> と広範なものであった。特に、細胞外第 2 ループ (ECL2) の長い β シートと N 末端が、エンドセリン-1 の上で蓋を形成していた。エンドセリン受容体 B 型とエンドセリン-1 とは変性剤である SDS 存在下でも解離しない、超安定な複合体を形成することが知られている。こうした多数の相互作用と、エンドセリン-1 の上部での蓋構造が、エンドセリン-1 の不可逆的な相互作用を実現していると考えられた。

エンドセリン-1 と結合した状態とリガンドが何も結合していない状態を比較すると、細胞外側の結合ポケットにおいてエンドセリン-1 との結合にともなう大きな構造変化が観察された。受容体の膜貫通ヘリックス

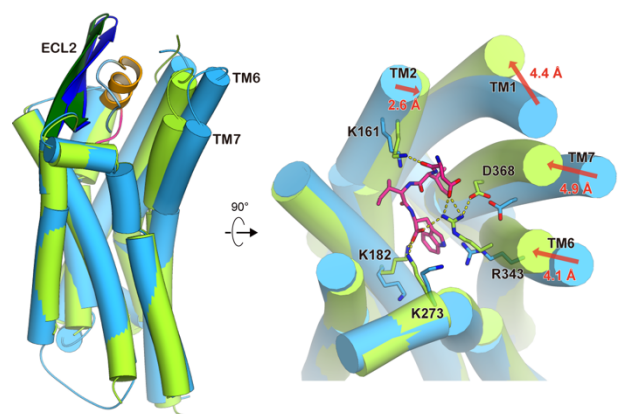


図4 エンドセリン-1 結合型 (緑) と非結合型 (青) の構造比較



2、6、7がエンドセリン-1との結合にともない、それぞれ2.6 Å、4.1 Å、4.9 Åほど結合ポケットの内部へと動いていた(図4)。それにともない、受容体のコアでは正電荷を持つ残基が大きく動き、エンドセリン-1のC末端領域と塩橋ネットワークを形成していた。こうしたダイナミックな動きにより、エンドセリン受容体B型の結合ポケットは開いた状態から閉じた状態になり、エンドセリン-1と強固な相互作用を形成することが明らかになった。こうした構造変化はこれまでに明らかになったGPCRの構造変化の中で最も大きいものであり、エンドセリン-1という大きなペプチドを受容するために重要である。一方、こうした構造変化が受容体中間部のGPCRで極めて保存されたモチーフ、transmission switchの構造変化を促すことで受容体を活性化することが明らかになり、GPCRの普遍的な活性化機構を解明した。

今回構造が解けたエンドセリン-1結合型の構造は、世界初の完全長のペプチド作動薬とGPCRの複合体構造である。また、受容体安定化技術によりリガンドが何も結合していない状態のGPCR構造を世界で初めて決定し、両者の比較により内在性ペプチド作動薬による受容体活性化機構を解明できた。こうした成果は国際的に高く評価され、*Nature*のarticleに掲載された<sup>2)</sup>。さらにヒト由来エンドセリン受容体B型の構造はBL32XU初のヒト由来膜タンパク質構造、GPCR構造であり、高フラックス微小ビームラインBL32XUとその測定技術によってヒト由来の創薬標的の迅速な構造解析が可能であることの証明になった。

### 3. 阻害剤結合型のエンドセリン受容体B型の構造解析

ボセンタンはハイスループットスクリーニングにより選抜された低分子化合物であり、エンドセリン受容体のA型およびB型に非選択的な拮抗薬である。ボセンタンは、最初に認可された肺動脈性肺高血圧症に対する経口投与性の治療薬である。肺動脈性肺高血圧症それ自体は稀少疾患であるものの、特許が切れる前の全世界におけるボセンタンの売り上げは過去に年間1,000億円を超えていた。しかし、エンドセリン受容体に対するボセンタンの結合能は低く解離も速いため、より薬効の高い薬剤の創出を目指しボセンタンを基にして多数のエンドセリン受容体の拮抗薬が開発されてきた。しかし、ボセンタンあるいはその誘導体のエンドセリン受容体への結合様式については未知な点が多く、拮抗薬の新規創出は困難であった。

エンドセリン受容体B型と拮抗薬との複合体の結晶化に際しては、リガンド非結合状態の構造決定に用いた改変型のエンドセリン受容体B型を用いた。この改変型とボセンタンおよびボセンタンの高親和性の誘導体であるK-8794との共結晶化に成功し、それぞれ、分解能3.6 Åおよび2.2 Åで構造を決定した。ボセンタン結合型については、結晶が小さかったため、後述する通り開発中だった自動データ収集システムZOOを用いてデータ測定を完了させた。

ボセンタンはスルホンアミドを中心とした芳香族性の部分の多い化合物である(図5)。ボセンタンのスルホンアミドはエンドセリン受容体B型のリジンやアルギニンといった正電荷を持つ残基と電荷相補的な相互作用を形成していた。全体としては、ボセン

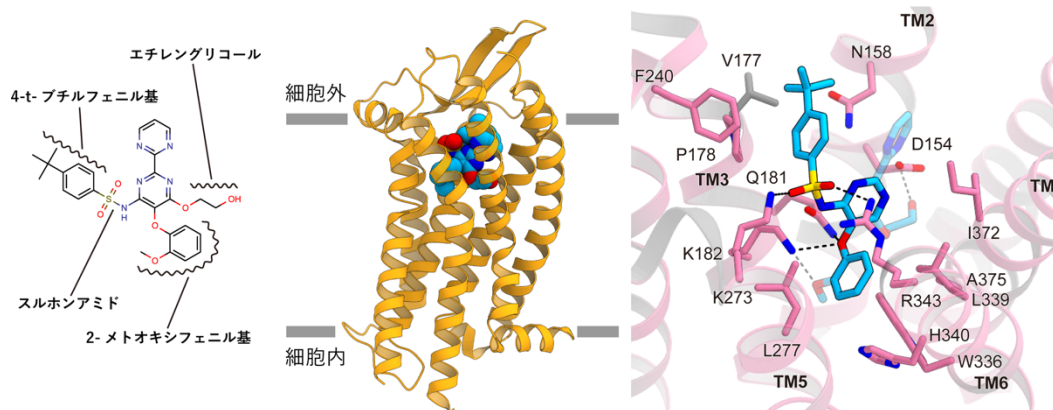


図5 ボセンタン結合型のエンドセリン受容体B型の構造。左がボセンタンの化学構造、中央が全体構造、右がボセンタンの結合部位。ピンクがAとBで保存されている個所で、灰色が保存されてない部分。



タンのスルホンアミドとエーテル酸素が受容体の正電荷を持つアミノ酸によって水素結合を介し認識されており、他の芳香族性の部分が膜貫通部位のポケットを埋めていた。こうしたボセンタンの結合様式は、エンドセリン受容体との結合に対するスルホンアミド部分の重要性を示した過去の研究と非常に良く合致した。エンドセリン受容体拮抗薬の全ては、その分子中心に負電荷を持つスルホンアミドやカルボキシル基を共通して持ち、他の部分は芳香族部分で構成されている。本構造から明らかになったボセンタンの結合様式は他の拮抗薬でも共通していると考えられ、エンドセリン受容体拮抗薬の一般的な受容体結合様式を解明することができた。さらに、エンドセリン受容体 B 型におけるボセンタンの結合部位はエンドセリン受容体 A 型においても保存されており、A 型に対する拮抗薬の結合様式も推定可能になった。

ボセンタンは内在性の作動薬であるエンドセリン-1 を基に開発されたわけではなく、エンドセリン-1 との化学構造における類似点は少ない。しかし、エンドセリン受容体 B 型とボセンタンとの複合体の構造をエンドセリン-1 との複合体の構造と比較すると、ボセンタンはエンドセリン-1 との結合部位の底部を占めており、エンドセリン-1 の C 末端の 3 つの残基と非常に良く重なっていた。特に、ボセンタンのスルホンアミドはエンドセリン-1 の C 末端のカルボキシル基と良く重なり、図 6 の紺色で示した正電荷を持つ残基により共通して認識されていた。一方、ボセンタンはその芳香族部分でエンドセリン受容体 B 型の構造変化を

妨げることで、不活性化状態を安定化し拮抗薬として機能できることを見出した (図 6)。

このように単に拮抗薬の結合様式を決定したことに留まらず、受容体の他の状態との比較からなぜ拮抗薬として機能できるかまで可視化した研究は国際的に高く評価され、*Nature Structural and Molecular Biology* 誌に掲載された<sup>[3]</sup>。

#### 4. B 型選択的作動薬結合型のエンドセリン受容体 B 型の構造解析

エンドセリン受容体拮抗薬は高血圧やがんへの治療薬となる一方で、エンドセリン受容体 B 型選択的作動薬は血管弛緩薬として研究されている。エンドセリン受容体 A 型とは異なり、B 型の活性化は血管弛緩作用を示すためである。現在までに、エンドセリンの一部領域を欠損させて線状ペプチド化した、IRL1620 という B 型選択的作動薬が開発されている。IRL1620 はエンドセリン-1 と同等の親和性で B 型に結合できるのに対して、A 型には全く作用せず、10 万倍以上の高い B 型選択性を示す。IRL1620 は抗がん剤や放射線治療による効能を高める併用療法として、臨床試験が行われている。B 型選択的作動薬は他にもエンドセリン-3 が存在するが、B 型選択性は 100 倍程度であり弱い。

我々は、エンドセリン受容体 B 型と B 型選択的作動薬である IRL1620 および ET-3 の複合体の結晶化に成功し、それぞれ、分解能 2.7 Å および 2.0 Å で構造を決定した (図 7)。特に ET-3 結合型構造については、BL32XU の自動データ収集システム ZOO を使うことで高分解能を追求し、現時点で作動薬結合状態の GPCR 構造の世界最高分解能を誇る。こうした構造から水分子を含めたエンドセリンと受容体の相互作用の詳細が明らかになり、B 型選択性のメカニズムの一端を解明した。詳細な構造比較とそれに指南された機能解析によって、IRL1620 は受容体を完全に活性化できない部分作動薬であることを示した。こうした成果は、IRL1620 には B 型選択的作動薬として改善の余地があることを示すと共に、構造情報に基づいた IRL1620 の改変や低分子化につながる事が評価され、*Nature Communications* 誌に掲載された<sup>[4]</sup>。

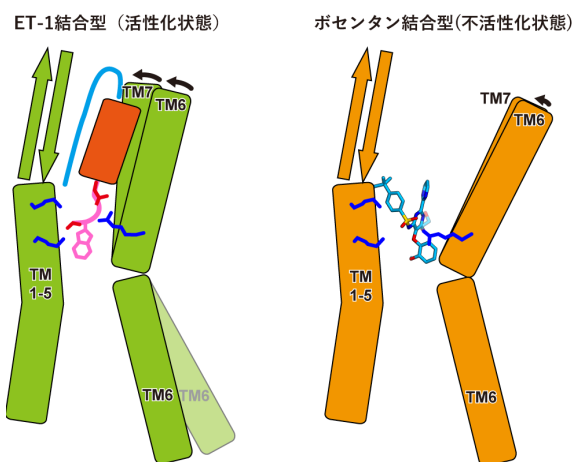


図 6 ボセンタンによる受容体不活性化の模式図

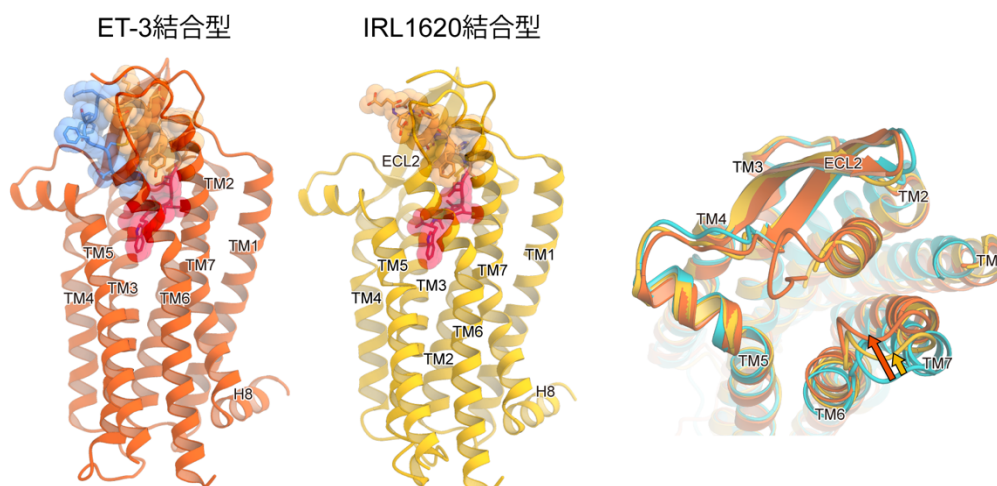


図7 ET-3 結合型、IRL1620 結合型の構造と、不活性状態（拮抗薬 K8794 結合型）との構造比較。IRL1620 結合型では、エンドセリンの N 末端領域に相当する部分と受容体の相互作用がないために、活性化に重要な TM6-7 を内側へ引き寄せる動きが小さい。

## 5. 逆作動薬 IRL2500 結合型のエンドセリン受容体 B 型の構造解析

エンドセリン受容体拮抗薬は、今日までボセンタンを基に開発が進められている。そのため、エンドセリン受容体拮抗薬はみな類似した化合物骨格であり、多様性が少ない。薬理作用は化合物骨格に強く依存するため、エンドセリン受容体拮抗薬のさらなる臨床応用のためには化合物空間の拡張が必要である。ボセンタンとは異なる化合物骨格を持つ拮抗薬に、IRL2500 というものがある。IRL2500 はエンドセリンの C 末端の一部を模倣して作られた拮抗薬であり、ボセンタンとは大きく異なっている。

ボセンタン結合型 vs ET-1 結合型    ボセンタン結合型 vs IRL2500 結合型

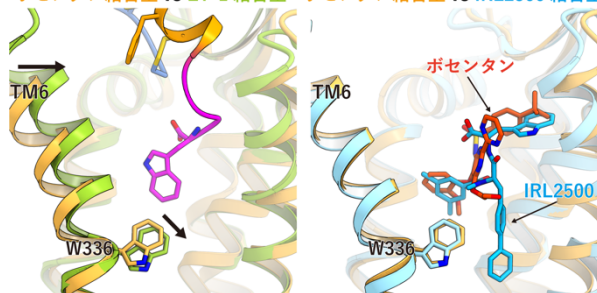


図8 エンドセリン-1、ボセンタン、IRL2500 結合型構造の比較。TM6 や W336 の内側への動きが受容体の活性化に重要であり、ボセンタンは立体障害によってその変化を防いでいる。IRL2500 では、ビフェニル基が受容体の奥深くに刺さり、W336 を挟み込む形でボセンタンよりも強固に構造変化を防ぎ、不活性状態を安定化している。

我々は、IRL2500 の結合様式を理解できれば、ボセンタン以外にも受容体を阻害し得る化合物骨格が同定できると考え、IRL2500 結合型のエンドセリン受容体 B 型の構造を分解能 2.7 Å で決定した。IRL2500 は ET-1 とは全く異なる結合様式であった。IRL2500 はボセンタンと同様に受容体の正電荷を持つアミノ酸と相互作用していたものの、IRL2500 は受容体の結合ポケットのより深い位置で相互作用しており、強固に不活性化状態を固定していた（図 8）。このことから我々は、IRL2500 が単なる拮抗薬ではなく受容体の恒常的な活性をも抑制する、逆作動薬ではないかと考えた。機能解析を試みた結果、IRL2500 が逆作動薬であることを解明した。こうした成果はエンドセリン受容体拮抗薬の化合物空間を広げるのみならず、GPCR 一般の動作原理について理解を深めるものと評価され、*Communications Biology* 誌に掲載された<sup>[9]</sup>。

## 謝辞

本研究の 2 章は現東京医科歯科大学の藤吉好則教授ら、東京大学の土井知子准教授らとの共同研究、第 3、4 章では加えて東北大学の井上飛鳥准教授らや SPring-8 の平田邦生博士らとの共同研究、第 5 章では東北大学の井上飛鳥准教授らとの共同研究である。また、X 線回折像の取得は、全て SPring-8 の BL32XU において行った（課題番号 2015A1024、2015A1057、

2015B2024、2015B2057、2016A2527、2017A2527、  
2017B2578)。この場を借りて深くお礼申し上げます。

参考文献

- [ 1 ] J. J. Maguire and A. P. Davenport: *Br. J. Pharmacol.* **171**  
(2014) 5555-5572.
- [ 2 ] W. Shihoya, T. Nishizawa, A. Okuta, K. Tani, N. Dohmae  
*et al.*: *Nature* **537** (2016) 363-368.
- [ 3 ] W. Shihoya, T. Nishizawa, K. Yamashita, A. Inoue, K.  
Hirata *et al.*: *Nat. Struct. Mol. Biol.* **24** (2017) 758-764.
- [ 4 ] W. Shihoya, T. Izume, A. Inoue, K. Yamashita, F. M. N.  
Kadji *et al.*: *Nat. Commun.* **9** (2018) 4711.
- [ 5 ] C. Nagiri, W. Shihoya, A. Inoue, F. M. N. Kadji, J. Aoki  
*et al.*: *Commun. Biol.* **2** (2019) 236.

志甫谷 渉 *SHIHOYA Wataru*

東京大学 大学院理学系研究科  
〒113-0033 東京都文京区本郷 7 丁目 3-1  
TEL : 03-5841-4391  
e-mail : wtrshh9@gmail.com

(SPRUC 2019 Young Scientist Award 受賞 研究報告)

## 偏光変調型軟 X 線共鳴磁気光学効果による埋込層の磁性研究

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 久保田 雄也

### Abstract

磁気光学効果を利用した磁性測定では、磁気円二色性と磁気旋光性を調べることで対象の磁性情報が得られ、さらには、物質固有のパラメータである誘電率テンソルを決定できる。これまで可視光領域にとどまっていた手法を、本研究では磁性元素の吸収端をカバーする軟 X 線領域に拡張した。SPring-8 BL07LSU において分割型クロスアンジュレータの特性を活かして、偏光が連続的に変化する偏光変調軟 X 線光源を世界で初めて実現し、それと磁気光学カー効果測定を組み合わせることで、磁気円二色性と磁気旋光性を同時測定することに成功した。さらに、磁性情報を持つ誘電率テンソルの非対角項を完全決定し、第一原理計算とも良い一致を示した。本稿では、新しい光源と測定手法の詳細、そして、得られた結果について紹介する。

### 1. 序論

磁気光学効果とは、磁性体の磁化が光の偏光状態を変化させる現象であり、光をプローブとした磁性測定に 19 世紀より広く利用されてきた。代表的なものにファラデー効果や磁気光学カー効果 (magneto-optical Kerr effect, MOKE) がある<sup>[1,2]</sup>。磁気光学効果では、磁性体による左右の円偏光の吸収の差に由来する磁気円二色性 (MCD) と左右の円偏光の位相差の変化に由来する磁気旋光性から磁性情報が得られる。ここで、本稿で用いる MOKE を例に見てみる。MOKE 測定では直線偏光の光を磁性体に照射し、その反射光の偏光状態変化を測定する。まず、MCD により直線偏光は楕円偏光に変化する。次に、磁気旋光性により、偏光面が回転する。この回転角をカー回転角と言い、楕円偏光の楕円率との 2 つのパラメータで MOKE は記述でき、磁性情報を得ることができる。これらのパラメータを同時測定する方法として、偏光が連続的に変調する可視光レーザーを使った光学遅延変調法がある<sup>[1,3,4]</sup>。

一方、入射する光の波長を、磁性体を構成する元素の吸収端に合わせることで、元素選択的な測定ができるとともに、共鳴効果により大きな信号が得られる。代表的な 3d 磁性元素の L 殻吸収端をカバーする軟 X 線領域では、2 つの磁気光学パラメータのうち、MCD のみを用いた X 線 MCD (XMCD) 測定が有用な磁性測定手法として広く用いられてきた<sup>[5]</sup>。さらに最近で

は、MOKE 測定においても軟 X 線領域の吸収端を利用した研究が進められており (特に共鳴 MOKE と呼ぶ)、可視光を用いるよりも大きなカー回転角 (磁気旋光性) の測定が可能となっている<sup>[6-10]</sup>。主に全電子収量法を用いる XMCD 測定と比較して、photon-in photon-out の測定である共鳴 MOKE 測定はバルク敏感であり、埋込磁性層や界面磁性などの測定に有用である。しかし、XMCD 測定では MCD のみ、共鳴 MOKE 測定では磁気旋光性のみの情報しか観測が難しく、軟 X 線領域の磁性情報の完全な測定は実現していなかった。これは、この波長領域において偏光を連続的に変調させる方法が存在しなかったからである。

そこで、本研究では、SPring-8 BL07LSU<sup>[11]</sup>における分割型クロスアンジュレータの特性を活かして世界初の連続型偏光変調軟 X 線 (以下、変調軟 X 線とする) 光源を開発し、それを用いた MCD と磁気旋光性の同時測定を実現した。2 つの磁気光学パラメータを測定できたことで、物質の基本的な固有パラメータである複素誘電率テンソルを完全決定できる<sup>[2,12,13]</sup>。軟 X 線領域で初めて得られた複素誘電率テンソルの非対角項スペクトルも示す。

### 2. 実験手法

変調軟 X 線光源は SPring-8 BL07LSU<sup>[11]</sup>にて開発した。このビームラインでは、世界唯一の分割型クロス



アンジュレータを有している。分割型クロスアンジュレータは、水平方向の直線偏光を発生する水平 8 の字アンジュレータと垂直方向の直線偏光を発生する垂直 8 (∞) の字アンジュレータの 2 種類のアンジュレータから成る。各 4 台のアンジュレータが交互に並び、その間に移相器が 7 台設置されている。移相器は永久磁石と電磁石から成り<sup>[14]</sup>、電子ビームの軌道を変えることで、水平と垂直の直線偏光間の位相差を制御し、様々な偏光状態の高輝度軟 X 線の発生が可能である。連続的な偏光変調を実現するためには、この電磁石移

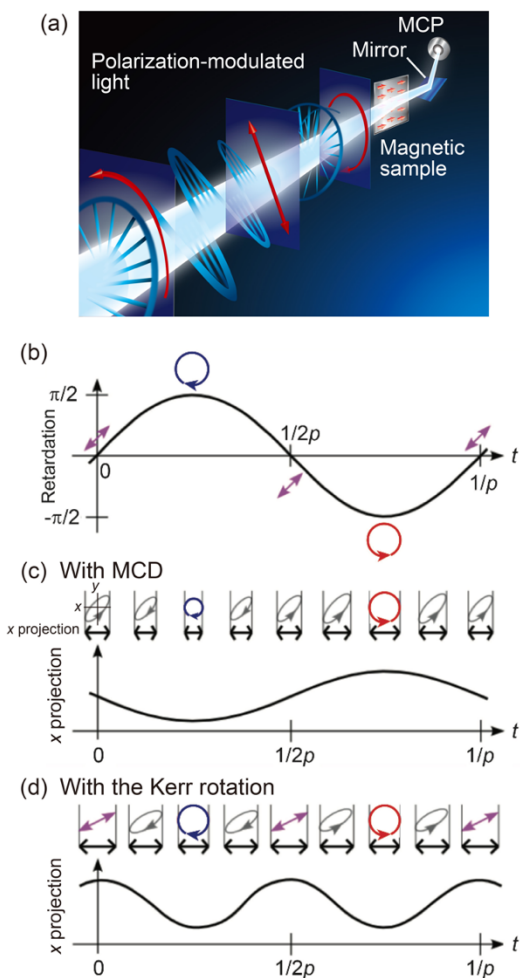


図 1 (a) 変調軟 X 線光源のイメージ図。本研究で用いた L-MOKE の測定配置とともに示す。(b) 光学遅延量  $\delta = (\pi/2)\sin 2\pi \nu t$  の時間変化とそれに対応する偏光の変化。斜め直線偏光 (skew linearly, SL) → 右円偏光 → SL → 左円偏光 → SL と連続的に変化する。(c),(d) MCD と磁気旋光性 (カー回転角) が  $\nu$ ,  $2\nu$  成分からそれぞれ得られることの説明図。磁性試料からの反射光電場の x 軸方向への投影を (c) MCD を示す場合、(d) 磁気旋光性を示す場合に対して図示している (文献 17 の Fig.1 からの転載)。

相器に交流電流を加えてやれば良い。図 1 に変調軟 X 線のイメージを示す。周波数  $\nu$  の正弦波交流電流を電磁石移相器に印加することで、図 1(b) に示すような、斜め直線偏光から左右の円偏光へ周波数  $\nu$  で切り替わる変調光源が実現できる。この時の光学遅延量は、

$$\delta = \delta_0 \sin 2\pi \nu t \dots (1)$$

で与えられる。ここで、 $\delta_0$  は遅延量の振幅を表し、直線から右または左円偏光へ連続的に変化する際は  $\delta_0 = \pi/2$  となる。この変調光源を MOKE 測定に利用すると、磁性体からの反射光強度のうち、MCD に由来する楕円率の情報が  $\nu$  成分として、磁気旋光性に由来するカー回転角が  $2\nu$  成分として得られる (図 1(c), (d))。つまり、検出信号から  $\nu$ ,  $2\nu$  成分を抽出することで、2 つの磁気光学パラメータを同時にかつ高感度に測定することが可能である<sup>[1,3]</sup>。

次に、この変調軟 X 線を用いた共鳴 MOKE 測定の具体的な手法を紹介する。今回は図 2(a) のように磁化方向が光の反射面に平行な、縦 MOKE (longitudinal MOKE, L-MOKE) 配置を用いる。従来の軟 X 線領域の共鳴 MOKE では、カー回転角の測定のために rotating analyzer ellipsometry (RAE) と呼ばれる手法が用いられてきた。これは、図 2 に示すように、磁性体からの反射光を多層膜ミラーと検出器から成るユニットに導き、磁性体とミラーを結んだ直線を回転

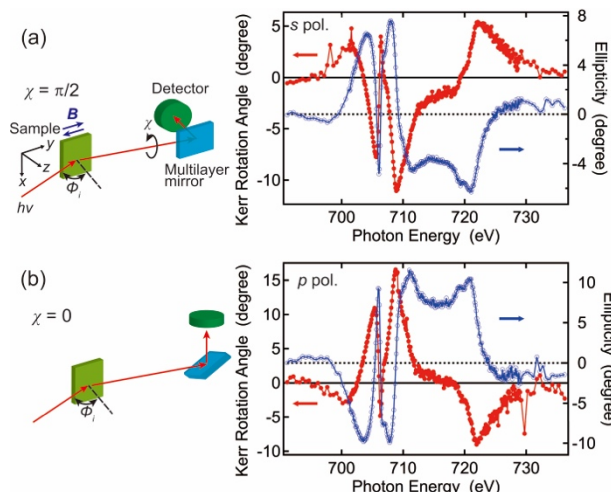


図 2 埋込 Fe 薄膜に対して行った、L 殻吸収端における変調軟 X 線 L-MOKE 測定結果。(a) s 偏光、(b) p 偏光入射に対応する場合をそれぞれ示し、その際のセットアップを左図に示している。測定結果の赤丸と青丸はカー回転角 (左軸) と楕円率 (右軸) のスペクトルをそれぞれ表す (文献 17 の Fig.2 を修正して掲載)。



軸として、ユニット全体を回転させる。その回転角を  $\chi$  と定義する。多層膜ミラーからの反射光強度は  $s$  偏光配置になった角度  $\chi$  で最大になるので、強度の  $\chi$  依存性を測定することで、偏光面方向が特定でき、カー回転角を求めることができる。詳細は先行研究[15,16]を参照していただきたい。一方、変調軟 X 線を入射光として用いると、この  $\chi$  の回転が不要になる。今、図 2(a) に示したように、RAE ユニットの反射面に対して平行方向 ( $z$  方向) に固定する場合を考える ( $\chi = \pi/2$  と定義する)。この状態で検出器から得られる信号のうち、DC 成分、 $\nu$  成分、 $2\nu$  成分をそれぞれ  $I(0)$ 、 $I(\nu)$ 、 $I(2\nu)$  とすると、従来の MOKE 測定で  $s$  偏光を入射したことに相当するカー回転角と楕円率、 $\theta_K^s$  と  $\varepsilon_K^s$  が、

$$\begin{aligned} I(0) &= C_s \{1 + \theta_K^s{}^2 + \varepsilon_K^s{}^2 + 2\theta_K^s J_0(\delta_0)\}, \\ I(\nu) &= 4C_s \varepsilon_K^s J_1(\delta_0), \\ I(2\nu) &= 4C_s \theta_K^s J_2(\delta_0) \end{aligned} \quad \dots (2)$$

と表せられる。ここで  $C_s$  は比例定数、 $J_n(\delta_0)$  は  $n$  次のベッセル関数をそれぞれ表す。一方、RAE ユニットの図 2(b) のように反射面に対して垂直方向 ( $x$  方向) に固定した場合 ( $\chi = 0$ ) は、従来手法の  $p$  偏光を入射したことに相当するカー回転角と楕円率、 $\theta_K^p$  と  $\varepsilon_K^p$  が、

$$\begin{aligned} I(0) &= C_p \{1 + \theta_K^p{}^2 + \varepsilon_K^p{}^2 + 2\theta_K^p J_0(\delta_0)\}, \\ I(\nu) &= -4C_p \varepsilon_K^p J_1(\delta_0), \\ I(2\nu) &= 4C_p \theta_K^p J_2(\delta_0) \end{aligned} \quad \dots (3)$$

という式から得られる。ここで  $C_p$  は  $p$  偏光に対する比例定数である。式(2)と(3)の詳細に関しては原著論文 [17]を参照していただきたい。本研究では、式(1)における偏光変調は交流電流  $25 \pm 0.588$  A を周波数  $\nu = 12.987$  Hz で印加して実現させた。交流電流の振幅 0.588 A が  $\delta_0 = \pi/2$  に対応し、左右の円偏光を作る。

本研究では測定試料として、マグネトロンスパッタ法で作成した、Ta/Cu/Fe/MgO(001)ヘテロ構造試料を用いた。Ta、Cu、Fe の厚みはそれぞれ 2、2、30 nm であり、Ta/Cu は Fe の酸化を防ぐためのキャップ層である。この埋込 Fe 薄膜は面内に容易磁化方向を持ち、図 2(a) に示す  $y$  軸方向に飽和磁場以上の  $B = \pm 0.3$  T の外部磁場を超伝導マグネット で印加した。変調軟 X 線の入射角  $\phi_i$  は  $yz$  平面内で試料の面直方向から約  $80^\circ$  とした。試料温度は室温である。

### 3. 結果と考察

変調軟 X 線を用いた Fe  $L$  殻吸収端における L-MOKE 測定結果を図 3 に示す。 $s$  偏光、 $p$  偏光を入射したことに相当するカー回転角と楕円率のスペクトルがそれぞれ得られた。絶対値は実際の光の偏光度を考慮して校正している。 $L_3$ 、 $L_2$  殻吸収端近傍に構造が見られ、カー回転角スペクトルは従来手法で測定した先行研究結果を再現している<sup>[16]</sup>。さらに、新しい測定手法では、RAE ユニットの回転する必要がなくなったため、測定時間の大幅短縮につながり、より詳細なスペクトル構造がより短い時間で得られた。また、カー回転角と楕円率はクラマースクローニヒの関係で結ばれており、それを反映した、お互いの微分形のスペクトルを示していることが見て取れる<sup>[2,18]</sup>。ここで、 $s$  偏光、 $p$  偏光を入射した時の L-MOKE は以下の式で表現される<sup>[2]</sup>。

$$\theta_K^s + i\varepsilon_K^s = -\frac{r_{ps}}{r_{ss}} \approx -\frac{in_0 n Q \cos \phi_i \tan \phi_t}{(n^2 - n_0^2) \cos(\phi_i - \phi_t)} \quad \dots (4)$$

$$\theta_K^p + i\varepsilon_K^p = -\frac{r_{sp}}{r_{pp}} \approx -\frac{in_0 n Q \cos \phi_i \tan \phi_t}{(n^2 - n_0^2) \cos(\phi_i + \phi_t)} \quad \dots (5)$$

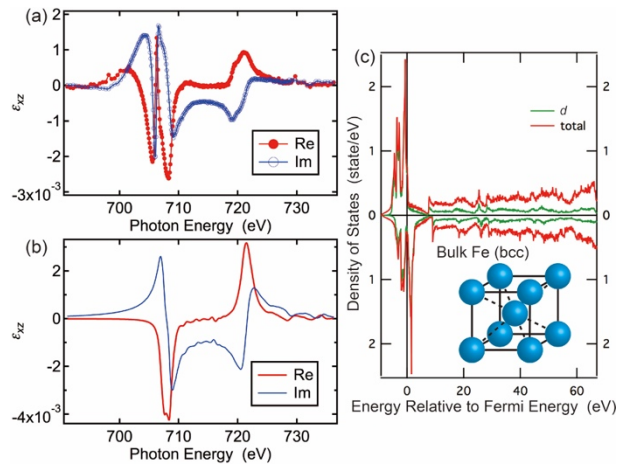


図 3 (a) 埋込 Fe 薄膜の  $L$  殻吸収端における  $\varepsilon_{xz}$  スペクトル。赤丸と青丸は  $\varepsilon_{xz}$  の実部と虚部をそれぞれ表す。(b) 第一原理計算により得られたバルク Fe(bcc) の  $L$  殻吸収端における  $\varepsilon_{xz}$  スペクトル。赤線と青線は  $\varepsilon_{xz}$  の実部と虚部をそれぞれ表す。(c) 第一原理計算から得られたバルク Fe(bcc) の状態密度。赤線と緑線は全状態の状態密度と  $d$  電子状態の状態密度をそれぞれ表している。図の上半分が majority スピン、下半分が minority スピンの状態密度である。バルク Fe(bcc) の結晶構造を挿入図にて表す (文献 17 の Fig.3 からの転載)。

式中の、複素フレネル係数  $r_j$  は入射光の  $j$  偏光電場と反射光の  $i$  偏光電場の比率である。また、 $n$  と  $n_0$  はそれぞれ磁性 Fe 薄膜とキャップ層 (Ta/Cu) の複素屈折率であり、 $\phi_i$  は屈折角を表す。今回のように  $\phi_i$  が大きく ( $70^\circ \leq \phi_i \leq 90^\circ$ )、 $\phi_r \approx \phi_i$  と近似できる時、分母の余弦関数により  $s$  偏光入射と  $p$  偏光入射でカー回転角と楕円率の符号が反転する<sup>[8,15,16]</sup>。図2を見ると、確かにそのような振る舞いをしているのがわかる。磁気光学の情報、式(4)と(5)内に現れているフォークトパラメータ  $Q$  に含まれる。この  $Q$  は物質の基本的な固有パラメータである複素誘電率テンソルの 2 成分の比で表すことができる。

$$Q = i \frac{\epsilon_{xz}}{\epsilon_{xx}} \dots (6)$$

ここで、磁場を  $y$  方向に印加した (L-MOKE) 時の誘電率テンソルは、

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & \epsilon_{xz} \\ 0 & \epsilon_{yy} & 0 \\ -\epsilon_{xz} & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \dots (7)$$

と表せられる。対角成分  $\epsilon_{xx}$  は磁性情報を持たず、 $\epsilon_{xx} = n^2$  で与えられる。それに対して、非対角成分  $\epsilon_{xz}$  が磁気光学特性を表し、磁性を議論する上で重要な物理量となる。式(4)–(6)から、測定条件  $\phi_i$  と  $\phi_r$ 、磁性に依存しない  $n$  と  $n_0$  の値がわかれば、カー回転角と楕円率から  $\epsilon_{xz}$  を求めることができる<sup>[19,20]</sup>。図3に本研究で得られたカー回転角と楕円率の結果から求めた  $\epsilon_{xz}$  のスペクトルを実部虚部ともに示す。  $\epsilon_{xz}$  の実部、虚部の間にもクラマースクローニヒの関係が成り立つため、スペクトルがそれを反映した微分の関係になっていることがわかる。さらに、第一原理計算で求めた  $\epsilon_{xz}$  のスペクトルと比較を行った。この計算では、KKR-CPA-LDA パッケージの Machikaneyama (AkaiKKR) を使用し、バルクの Fe(bcc) に対する  $\epsilon_{xz}$  スペクトルを KKR グリーン関数法から計算した<sup>[21]</sup>。電子構造は密度関数理論の局所密度近似 (local-density approximation, LDA) の枠組みで求め、相対論的効果は内殻電子及び価電子ともに考慮している。計算手法の詳細は先行研究を参照していただきたい<sup>[22]</sup>。その計算結果を図3(b)に示す。スペクトルの絶対値、形状ともに実験値と良い一致を示しているのがわかる。つまり、本研究で新

たに開発した測定手法と、本計算手法が、物質の最も基本的なパラメータである複素誘電率テンソルを軟 X 線領域で求めるのに大変有用であると言える。実験値では 706 eV 辺りで  $\epsilon_{xz}$  の実部のピークと、虚部のディップが確認できる。これは、先行研究から薄膜における干渉効果であると言われており<sup>[7,8,16]</sup>、バルクに対する計算スペクトルで見られないことから、試料の形状に由来するスペクトル構造であると考えられる。その詳細は今後他の厚みの試料も測定することで明らかにしていきたい。

#### 4. 結論

本研究において、SPRING-8 BL07LSU の分割型クロスアンジュレータの特性を十分に活かし、偏光が連続的に変調する軟 X 線光源を世界で初めて開発した。そして、その光を使って、光学遅延変調法を使った共鳴 MOKE 測定を埋込 Fe 薄膜に対して実施し、 $L$  殻吸収端におけるカー回転角と楕円率の両スペクトルが得られた。磁気光学効果の 2 つのパラメータである、MCD と磁気旋光性が同時測定できたことで、物質の基本パラメータである誘電率テンソルを求め、第一原理計算とも良い一致を示すことができた。本研究で新たに開発した磁性測定手法は、1) 軟 X 線を用いることで元素選択性を持つ、2) photon-in photon-out のバルク敏感な測定である、3) 特定の周波数を抽出することで高感度に磁性測定ができる、そして、4) 誘電率テンソルが決定できる、という特長を持っている。特に、4) の誘電率を求められるということは、物質中の電子構造や光学遷移を軟 X 線のエネルギースケールで考察できるようになる。さらに、光学素子を設計する上でも有用な情報を与え、高次高調波レーザーや放射光技術の発展に大いに貢献できると期待している。

#### 謝辞

本稿で紹介した研究結果は、松田巖氏、赤井久純氏、田中隆次氏、辛埴氏、原田慈久氏、和達大樹氏、角田匡清氏、平田靖透氏、田口宗孝氏、宮脇淳氏、山本達氏、保原麗氏、藤澤正美氏、山本真吾氏、山本航平氏、染谷隆史氏、田久保耕氏、横山優一氏、荒木実穂子氏、金城良太氏、鏡畑曉裕氏、清家隆光氏、竹内政雄氏、小飼真

人氏、大門寛氏、成田尚司氏、高橋良暢氏らを始めとする多くの研究者との共同研究や有益な議論に寄っている。この場をお借りして感謝申し上げる。また、本研究は文科省の「X線自由電子レーザー重点戦略研究課題」と「光・量子融合連携研究開発プログラム」にて実施された。また、光科学技術研究振興財団、ひょうご科学技術協会、科学技術振興機構の科学研究費基盤研究(C) (科研費番号: 26400328)、東京大学フotonサイエンス・リーディング大学院(ALPS)より助成を受けた。実験は東京大学放射光分野融合国際卓越拠点及び東京大学物性研究所の共同利用(SPring-8の課題番号: 2014A7401、2014B7401、2014B7473、2015A7401、2015B7401、2016A7403、2016A7504、2016B7403)にて行われた。

#### 参考文献

- [1] 佐藤勝昭: 光と磁気 改訂版 (朝倉書店、2001)
- [2] P. M. Oppeneer: *Handbook of Magnetic Materials* **13** (Elsevier, Amsterdam, 2001).
- [3] K. Sato: *Jpn. J. Appl. Phys.* **20** (1981) 2403-2409.
- [4] K. Sato, H. Kida and T. Kamimura: *J. Magn. Soc. Jpn.* **11** (1987) 113-116.
- [5] C. T. Chen *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995) 152.
- [6] J. B. Kortright and S.-K. Kim: *Phys. Rev. B* **62** (2000) 12216.
- [7] H.-C. Mertins *et al.*: *Phys. Rev. B* **69** (2004) 064407.
- [8] S. Valencia *et al.*: *Phys. B Condensed Matter* **345** (2004) 189-192.
- [9] J. B. Kortright: *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **189** (2013) 178.
- [10] M. F. Tesch *et al.*: *Appl. Opt.* **52** (2013) 4294-4310.
- [11] S. Yamamoto *et al.*: *J. Synchrotron Radiat.* **21** (2014) 352-365.
- [12] L. L. Landau and E. M. Lifshitz: *Electrodynamics of Continuous Media* **8** (Pergamon, Elmsford, NY, 1960).
- [13] B. Donovan and T. Medcalf: *Proc. Phys. Soc.* **86** (1965) 1179.
- [14] I. Matsuda *et al.*: *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.* **767** (2014) 296-299.
- [15] Y. Kubota *et al.*: *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **220** (2017) 17-20.
- [16] Y. Kubota *et al.*: *Phys. Rev. B* **96** (2017) 134432.
- [17] Y. Kubota *et al.*: *Phys. Rev. B* **96** (2017) 214417.
- [18] J. Kunes *et al.*: *Phys. Rev. B* **64** (2001) 174417.
- [19] H.-C. Mertins *et al.*: *J. Magn. Magn. Mater.* **240** (2002) 451-453.
- [20] L. Henke, E. Gullikson and J. C. Davis: [http://henke.lbl.gov/optical\\_constants/](http://henke.lbl.gov/optical_constants/)
- [21] H. Akai: <http://kkriissp.u-tokyo.ac.jp>
- [22] H. Akai: *J. Phys: Condens. Matter* **1** (1989) 8045.

久保田 雄也 KUBOTA Yuuya

(公財) 高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0992  
e-mail : kubota@spring8.or.jp

# Long-term Proposal Report 1

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

Jeffrey T. Babicz Jr.<sup>1</sup>, Dory E. Deweese<sup>1</sup>, Ariel B. Jacobs<sup>1</sup>, Kyle D. Sutherlin<sup>1</sup>,  
Kiyoun Park<sup>1,2</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*

Non-heme iron (NHF<sub>e</sub>) enzymes catalyze a wide range of reactions important in both health and technological development. These enzymes activate dioxygen to form transient intermediates capable of performing difficult chemical reactions. Understanding the geometric and electronic structures of these intermediates is essential in elucidating the mechanism of NHF<sub>e</sub> enzyme catalysis. We have developed an experimental and computational approach using nuclear resonance vibrational spectroscopy (NRVS) to define the structures of the intermediates and to evaluate the enzymatic reaction coordinates. Herein, we report our recent advances using NRVS to understand the importance of Fe(III)-superoxide intermediates in mononuclear NHF<sub>e</sub> enzymes, as well as the unique ability of binuclear NHF<sub>e</sub> enzymes to react with substrates on the Fe(III)<sub>2</sub>-OOH level.

### Introduction

Non-heme iron (NHF<sub>e</sub>) enzymes are ubiquitous in Nature and catalyze key reactions in human health, metabolism, and bioremediation, among many other functions. The prominent role of these enzymes in all realms of life have made them targets for breakthroughs in chemistry and biology. Generally, these enzymes use one or two ferrous ions to react with molecular oxygen in forming a substrate-reactive intermediate and are subdivided into classes based on the types of intermediates formed and substrates utilized (Figure 1). The chemistry performed by these enzyme intermediates spans broadly and includes hydrogen-atom abstraction (HAA), ring closure and expansion, electrophilic aromatic substitution (EAS), hydroxylation and halogenation<sup>[1]</sup>. Thus, a longstanding goal has been to determine the geometric and electronic structure of NHF<sub>e</sub> enzyme intermediates, and to correlate their unique structures with chemical function. To this end, our lab has developed a combined experimental and computational methodology using nuclear resonance vibrational spectroscopy

(NRVS) and density functional theory (DFT). NRVS probes the vibrational sidebands of the iron Mossbauer transition with spectral intensity proportional to iron displacement in a vibration; hence NRVS is site-selective for the catalytic center and yields rich spectroscopic information relating to the iron coordination environment. We collect NRVS spectra on freeze-quench trapped oxygen intermediates and simulate these data with DFT calculations to illuminate their geometric/electronic structures and evaluate their reaction coordinates in catalysis. This technique has led to major findings in the mononuclear NHF<sub>e</sub> family of enzymes. Our previous NRVS study on the alpha ketoglutarate-dependent ( $\alpha$ KG) enzyme syringomycin halogenase (SyrB2) defined the high-valent Fe(IV)=O intermediate responsible for L-threonine halogenation<sup>[2]</sup>, and provided major insight into how orientation of the Fe(IV)=O unit relative to the substrate controls preferential halogenation over the thermodynamically-favored hydroxylation reaction<sup>[3,4]</sup>. We have also utilized NRVS to define the low-spin hydroperoxide intermediate in

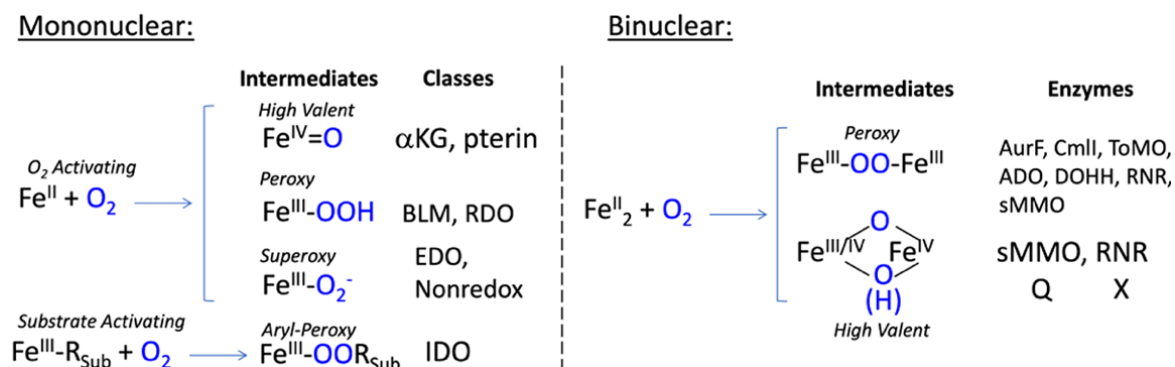


Figure 1 Intermediates of mononuclear (left) and binuclear (right) non-heme enzyme subclasses. Abbreviations:  $\alpha\text{KG}$ : alpha-keto-glutarate dependent dioxygenase; pterin: pterin-dependent hydroxylase; BLM: bleomycin; RDO: Rieske dioxygenase; EDO: extradiol dioxygenase; Nonredox: non-redox active 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 hydroxylase; sMMO: soluble methane monooxygenase; RNR: ribonucleotide reductase.

activated bleomycin (ABLM), and through DFT have shown how the hydroperoxide is primed for the double-strand cleavage of DNA in anticancer activity<sup>[5]</sup>. We have since applied our experimental and computational methods developed in the SyrB2/ABLM studies to two new classes of mononuclear as well as binuclear N<sub>2</sub>Fe enzymes. In this report, we review our progress in using NRVS to elucidate the intermediates present in the mononuclear Rieske and extradiol dioxygenases (RDO and EDO, respectively), as well as in the binuclear enzyme p-aminobenzoate N-oxygenase (AurF). We conclude by outlining future NRVS studies of N<sub>2</sub>Fe enzymes.

## Methodology

NRVS data were collected at SPring-8 BL09XU using C-mode. Raw data were analyzed using the PHOENIX software developed by W. Stuhrhahn<sup>[6]</sup> and the online spectra.tools adaptation by L. Gee<sup>[7]</sup>. The NRVS energy scales were calibrated with  $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{Cl}_4)]\text{NEt}_4$ <sup>[8]</sup>. DFT calculations were performed using Gaussian 09 and ORCA packages installed on an in-house cluster. DFT functionals and basis sets were chosen from calibrated studies on well-defined model complexes; for details, see references<sup>[9,10]</sup>. Models for intermediates were chosen from related crystal structures or available EXAFS data. Truncation schemes for the DFT models has been described<sup>[11]</sup>; briefly, amino acids are truncated at the C $\alpha$  with two hydrogen

atoms, resulting in all amino acid side chains initiating with a methyl group. For vibrational simulations, the mass of the two substituted hydrogens was increased to 100 to prevent artificial vibrational mixing of the methyl group into iron modes.

## Results

### *Fe(III)-peroxy Intermediate in the Benzoate 2,3-Dioxygenase Peroxide Shunt Reaction*

In our previous report, our NRVS studies on Fe-peroxy intermediates elucidated the active intermediate in the glycopeptide anticancer drug bleomycin, a low-spin Fe(III)-hydroperoxide responsible for DNA cleavage<sup>[12]</sup>. Insight into the structure of this intermediate allowed evaluation of the reaction coordinate, establishing key differences in the reactivity of heme vs non-heme Fe(III)-peroxy intermediates<sup>[13]</sup>. Iron-peroxy intermediates have also been observed in the Rieske and extradiol dioxygenase N<sub>2</sub>Fe enzyme classes, however, these intermediates are high-spin thus motivating our NRVS investigation of two high-spin Fe(III)-(hydro)peroxy models where we defined key spectroscopic handles for distinguishing the influence of peroxide binding mode and protonation state<sup>[14]</sup>. During this long-term proposal period, we have greatly enhanced our understanding of Fe(III)-peroxy intermediates by assigning and characterizing the intermediate in the peroxide shunt reaction of the Rieske dioxygenase, benzoate 1,2-dioxygenase (BZDO).



BZDO catalyzes the *cis*-dihydroxylation of benzoate and like other RDOs is an important target for enzyme derived bioremediation catalysts<sup>[1]</sup>. We have trapped and characterized, BZDop, the intermediate in the peroxide shunt reaction shown to be capable of product formation. Figure 2 shows the NRVS data of BZDop and key controls in the assignment of its geometric structure. All RDOs contain an iron-sulfur (Rieske) cluster and a catalytic NHFe center. Thus to distinguish the features arising from the Rieske center we compared NRVS on apo-BZDO (NHFe center removed, Rieske center intact) and BZDO (both NHFe and Rieske center intact), Figure 2 black and red traces respectively. We further obtained high quality H<sub>2</sub><sup>16/18</sup>O<sub>2</sub> isotope data on BZDop observing an isotope dependent feature (the  $\nu$ Fe-OO(H) mode) near 500 cm<sup>-1</sup>, Figure 2 blue trace and inset. Using DFT simulations and comparing to our high-spin Fe(III)-(hydro)peroxy model complex NRVS study we assigned BZDop binding mode and protonation state to be a side-on Fe(III)-hydroperoxy species.

With BZDop structure defined, we extended our study to the peroxide shunt and native O<sub>2</sub>-dependent reaction coordinate calculations. In the peroxide shunt reaction, the most viable pathway proceeded through heterolytic cleavage

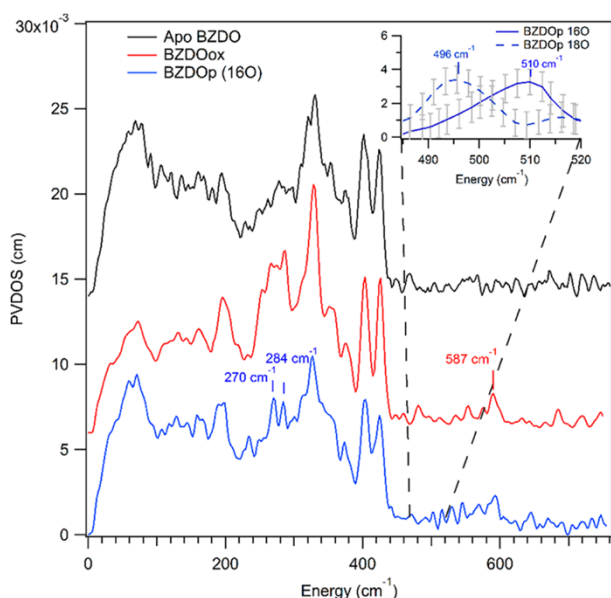


Figure 2 BZDO NRVS data on apo-BZDO, Rieske site intact, catalytic NHFe site depleted (black trace), BZDOox, both Rieske and NHFe site intact (red trace), BZDop, peroxide shunt intermediate generated with H<sub>2</sub><sup>16</sup>O<sub>2</sub> (blue trace). Inset: Focus region scans with high S/N depicting H<sub>2</sub><sup>16</sup>O<sub>2</sub> and H<sub>2</sub><sup>18</sup>O<sub>2</sub> isotopic dependent feature near 500 cm<sup>-1</sup>.

of the peroxide bond to form a high valent Fe(V) intermediate capable of *cis*-dihydroxylation via a large barrier consistent with the slow experimental kinetics of the shunt reaction. In contrast, the native O<sub>2</sub> reaction calculations revealed an Fe(III)-superoxo intermediate capable of electrophilic attack on benzoate with a low barrier consistent with rapid O<sub>2</sub> reactivity. While the binding of the O<sub>2</sub> to Fe(II) to form the Fe(III)-superoxo is endergonic, this reaction is driven by the PCET from the Rieske center. Importantly, our NRVS/DFT methodology showed that the BZDO peroxide shunt and native dioxygen reactions occur via different mechanisms both capable of producing the *cis*-dihydroxylated product, but with the Fe(III)-O<sub>2</sub><sup>-</sup> being far more reactive<sup>[15]</sup>.

#### Intermediates-1 and 2 in Homoprotocatechuate 2,3-Dioxygenase

Extradiol dioxygenases catalyze the aromatic ring cleavage of catechol derived substrates with concomitant incorporation of dioxygen. Like the RDOs, EDOs have generated much interest in the field of microbial bioremediation<sup>[1]</sup>. Our NRVS studies on the EDO, homoprotocatechuate 2,3-dioxygenase (HPCD) focused on two trappable solution phase intermediates, Int-1 which decays to Int-2, in the reaction of the H200N-HPCD variant with the slow nitrocatecholate substrate (4NC)<sup>[16]</sup>. The electronic structures of Int-1 and Int-2 had been evaluated, however geometric structural O<sub>2</sub> binding modes and protonation states were unknown. Figure 3 shows the NRVS data (A and D), the DFT simulations (B and E) and calculated structures (C and F) for Int-1 and Int-2, respectively. Analysis identified the key vibrational modes:  $\nu_1$   $\nu$ -Fe-O<sub>2</sub>,  $\nu_2$   $\delta$ -Fe-O<sub>2</sub>,  $\nu_3$   $\delta$ -transaxial,  $\nu_4$  z-translation and  $\nu_5$   $\delta$ -Fe-substrate. These provided the geometric structures of Int-1 and Int-2 as an end-on Fe(III)-superoxo-catecholate and an end-on Fe(III)-hydroperoxy-semiquinone species, respectively.

H200 is proposed to serve as an important second sphere proton acceptor/donor residue in extradiol catalysis, and thus to evaluate its role, we extended our study to DFT calculations of the wt-HPCD-4NC crystallographically characterized intermediates<sup>[17]</sup>. Our key findings from this analysis<sup>[18]</sup> were: 1. Fe(III)-(hydro)peroxy intermediates in both H200N and wt-HPCD are precluded from direct attack on substrate by a large activation barrier; 2. While H200N-HPCD-4NC Int-2,

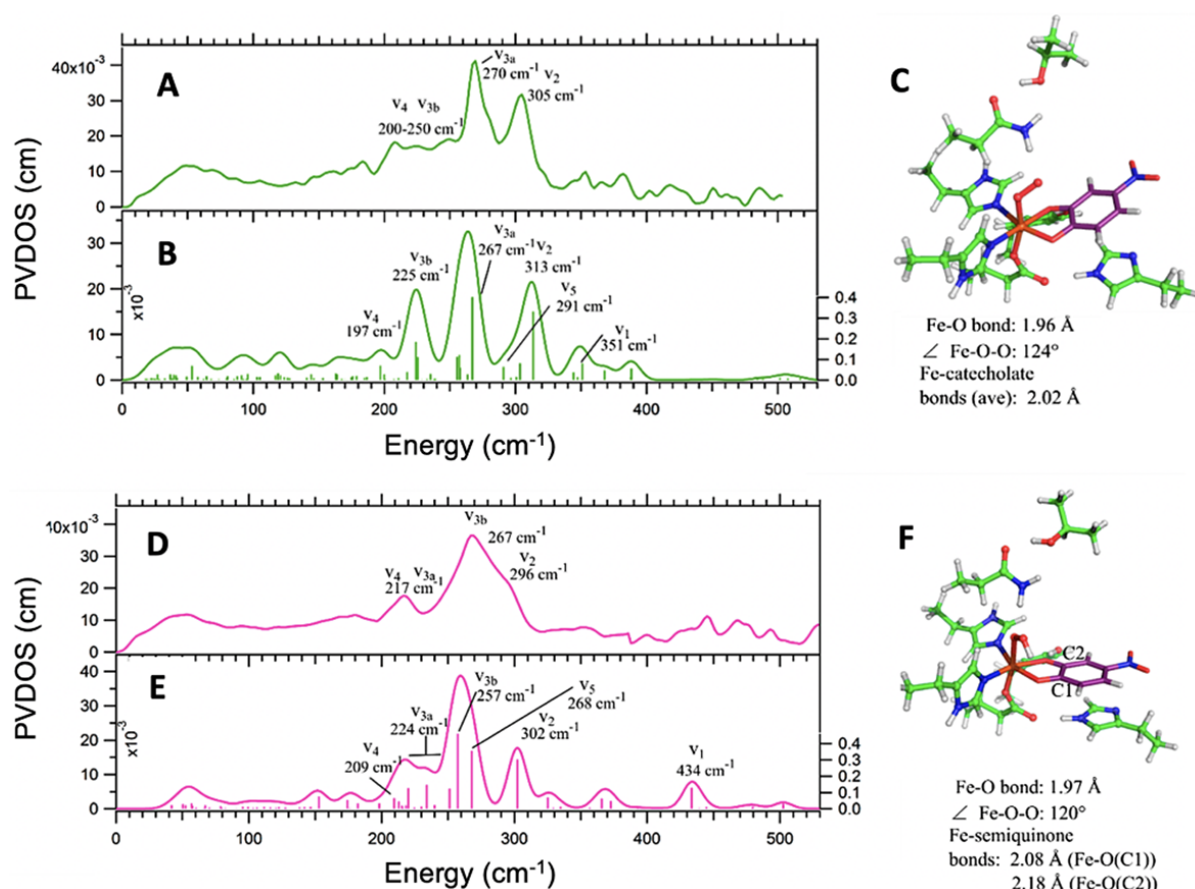


Figure 3 Top: Experimental NRVS data of Int-1 (A) with DFT spectral simulation (B) of structure (C) assigning Int-1 as a Fe(III)-superoxo-catecholate. Bottom: Experimental NRVS data of Int-1 (D) with DFT spectral simulation (E) generated from the end-on Fe(III)-hydroperoxy-semiquinone species (F). Key vibrational modes used in structural assignment are indicated (description in the text).

the Fe(III)-hydroperoxy, is a dead-end species that does not ring cleave, the presence of H200 in *wt*-HPCD allows for deprotonation to form an isoenergetic Fe(III)-superoxo-catecholate species with a  $\pi^*$ <sub>in-plane</sub> frontier molecular orbital capable of direct attack on the coordinated catechol substrate with a low barrier; 3. Finally, the presence of H200 stabilizes the thermodynamics of Fe-alkylperoxy-bridge formation a key step in extradiol reactivity. Future studies will focus on the understanding the Fe-alkylperoxy-bridge intermediate in *wt*-HPCD with native substrate, where NRVS data have been collected and analysis is currently underway. This intermediate is proposed to control extra- vs intradiol catecholate ring cleavage and therefore is key in understanding the chemistry of EDOs and the related intradiol dioxygenases.

Together our NRVS studies on RDO and EDO have greatly built upon our understanding of mononuclear Fe(III)-

(hydro)peroxy intermediates but importantly have revealed that Fe(III)-superoxo intermediates are in fact the key active species in mononuclear NHFe chemistry. The lack of reactivity of the mononuclear Fe(III)-(hydro)peroxy species provides an important contrast to binuclear systems, in which the binuclear hydroperoxy intermediates are highly reactive as described in our following study on AurF.

#### Intermediate P' in AurF

Binuclear non-heme iron enzymes (NH<sub>2</sub>Fe) activate molecular oxygen to perform diverse chemistries, including oxygenation of organic substrates and hydrogen atom abstraction<sup>[19]</sup>. The general reaction mechanism for NH<sub>2</sub>Fe enzymes involves initial activation of O<sub>2</sub> to form peroxo intermediate P that converts to the reactive intermediate that directly performs the oxygenation chemistry. These reactive

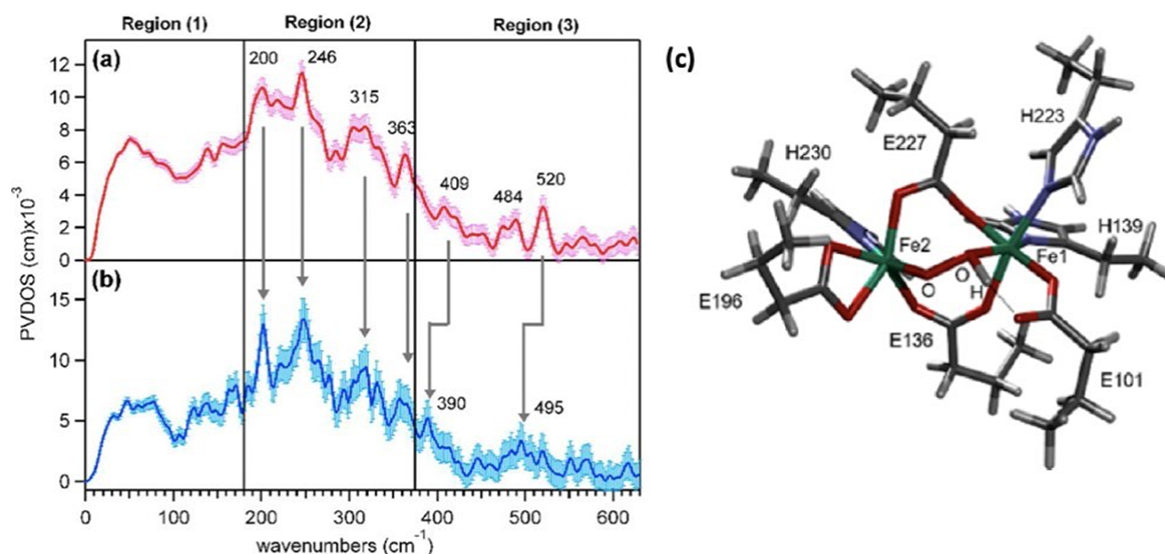


Figure 4 The NRVS spectrum of P' obtained with (a)  $^{16}\text{O}_2$  and (b)  $^{18}\text{O}_2$ . (c) The NRVS derived structure of the P' intermediate in AurF.

intermediates can be divided into two classes 1) high valent intermediates formed by the four-electron activation of  $\text{O}_2$  and 2) the two-electron activation of molecular oxygen to form biferric peroxy intermediates termed intermediate P' that is reactive. While the high-valent reactive intermediates have received much attention, the latter class of reactive intermediates had not been structurally characterized until our spectroscopic investigation of AurF. Here we present our completed analysis of its P' intermediate<sup>[1]</sup>.

NRVS spectroscopy was used to characterize the P' intermediate in AurF and its reactivity using  $^{16}\text{O}_2/^{18}\text{O}_2$  perturbation, summarized in Figure 4a and 4b respectively. The vibrational spectra for both the  $^{16}\text{O}_2$  and  $^{18}\text{O}_2$  P' intermediate can be divided into three regions. Region 1 consists of energies below  $180\text{ cm}^{-1}$  and the spectra are relatively featureless, region 2 contains four features at  $200$ ,  $246$ ,  $315$  and  $363\text{ cm}^{-1}$  and shows no isotope dependent features, and region 3 contains two oxygen isotope sensitive features above  $370\text{ cm}^{-1}$ . These features were assigned to the Fe-O stretches associated with the  $\text{O}_2$ -derived bridging ligand<sup>[19]</sup>.

To search for possible structures of P', potential intermediates were computationally generated by adding  $\text{O}_2$  to the DFT optimized structure of biferrous AurF and their NRVS spectra were calculated. Twenty-eight structures were generated with various geometries of the bridging peroxy,

different protonation states of the peroxy bridge, as well as differential coordination of a solvent water molecule. Only the model with a  $\mu$ -1,2-hydroperoxy bridge was able to reproduce the experimental NRVS spectrum, in particular, the large splitting of the oxygen sensitive vibrations at  $409$  and  $520\text{ cm}^{-1}$  (Figure 4c). This spectroscopically defined hydroperoxy intermediate was then evaluated for its reactivity with the p-aminobenzoate substrate by calculating the potential energy surface (PES) and reaction coordinate (RC), summarized in Figure 5. The oxidation of the substrate by one-electron triggers the rate-limiting cleavage of the O-O hydroperoxy bond and formation of a  $\text{Fe(IV)=O}$  poised to attack the radical substrate amine. Homolytic cleavage of the  $\text{Fe(IV)=O}$   $\pi$ -bond induces bond formation between the O atom of the  $\text{Fe(IV)=O}$  and the nitrogen atom of the oxidized substrate. The rate-limiting transition state barrier corresponds to the single electron transfer from the substrate into the hydroperoxy localized  $\sigma^*$  LUMO and was calculated to be  $\sim 8\text{ kcal/mol}$  lower in energy than that of a non-protonated peroxy as in P. Protonation of the peroxy bridge increases the electron affinity by lowering the energy of the hydroperoxy localized  $\sigma^*$  LUMO, lowering the reaction barrier for the single electron transfer. Correspondence between the NRVS analysis, DFT simulations, PES and RC calculations indicate that the  $\mu$ -1,2-hydroperoxy structure in Figure 4C is an appropriate model for the P' intermediate<sup>[19]</sup>.

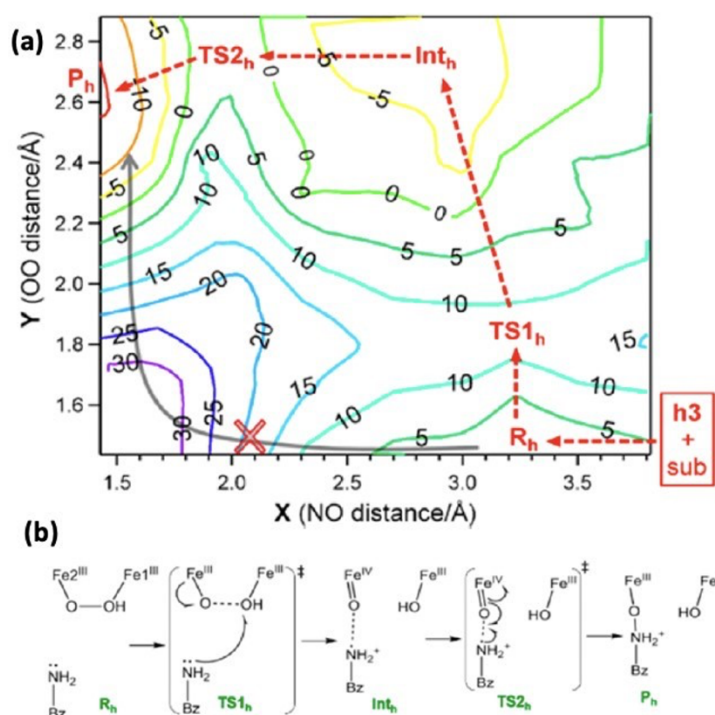


Figure 5 Calculated potential energy surface and reaction coordinate by the  $\mu$ -1,2-hydroperoxo model NRVS informed model (a) potential energy surface (b) reaction coordinate.

### Future Directions

NRVS has become an essential technique in evaluating oxygen intermediates in the superfamily of non-heme iron enzymes, and hence understanding the mechanisms of their diverse chemical reactivities. In the mononuclear subfamily, we are now expanding NRVS to intermediates of the intradiol dioxygenases to understand the fundamental driving forces differentiating extradiol vs. intradiol substrate cleavage. In the binuclear subclass we are using the results of our AurF study to inform a correlative study on the P' intermediate in CmlI, which shares the N-oxygenase activity of AurF while possessing an additional bridging oxo or OH moiety. These studies are key in understanding the high reactivity of binuclear Fe(III)<sub>2</sub> hydroperoxo species relative to the very low reactivity of the mononuclear non-heme Fe(III) hydroperoxides. We are also applying NRVS to intermediate Q in soluble methane monooxygenase (sMMO) to determine its geometric structure and its unique ability to activate the inert C-H bond of methane. These studies will continue to provide foundational insight into the exotic chemical transformations performed by the non-heme iron enzyme superfamily.

### Acknowledgements

Nuclear resonance vibrational spectroscopic measurements were approved by JASRI and conducted at SPring-8 BL09XU through the long-term proposal 2017A0137 - 2018B0137. The authors thank Y. Yoda and M. Seto for assistance at the beam line. These projects were funded through 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 ] Wong, S. D.; Smec, 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.
- [ 3 ] Smec, 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.
- [ 4 ] Smec, M. and Solomon, E. I.: *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 2396-2407.

- [ 5 ] 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.* **2010**, *107*, 22419-22424.
- [ 6 ] Sturhahn, W.: *Hyperfine Interactions* **2000**, *125*, 149-172.
- [ 7 ] L. B. Gee, spectra.tools: <https://www.spectra.tools/>
- [ 8 ] Smith, M. C.; Xiao, Y.; Wang, H.; George, S. J.; Coucouvanis, D.; Koutmos, M.; Sturhahn, W.; Alp, E. E.; Zhao, J. and Cramer, S. P.: *Inorg. Chem.* **2005**, *44*, 5562-5570.
- [ 9 ] 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.
- [10] Park, K.; Bell, C. B.; Liu, L. V.; Wang, D.; Xue, G.; Kwak, Y.; Wong, S. D.; Light, K. M.; Zhao, J.; Alp, E. E.; Yoda, Y.; Saito, M.; Kobayashi, Y.; Ohta, T.; Seto, M.; Que, L. and Solomon, E. I.: *Proc. Natl. Acad. Sci.* **2013**, *110*, 6275-6280. (doi: 10.1073/pnas.1304238110)
- [11] Park, K. and Solomon, E. I.: *Can. J. Chem.* **2014**, *92*, 975-978.
- [12] Liu, L. V.; Bell, C. B.; 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.* **2010**, *107*, 22419-22424.
- [13] Decker, A.; Chow, M. S.; Kemsley, J. N.; Lehnert, N. and Solomon, E. I.: *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 4719-4733.
- [14] Sutherlin, K. D.; Liu, L. V.; Lee, Y. M.; Kwak, Y.; Yoda, Y.; Saito, M.; Kurokuzu, M.; Kobayashi, Y.; Seto, M.; Que, L. Jr.; Nam, W. and Solomon, E. I.: *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 14294-14302.
- [15] Sutherlin, K. D.; Rivard, B. S.; Böttger, L. H.; Liu, L. V.; Rogers, M. S.; Smec, M.; Park, K.; Yoda, Y.; Kitao, S.; Kobayashi, Y.; Saito, M.; Seto, M.; Hu, M.; Zhao, J.; Lipscomb, J. D. and Solomon, E. I.: *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 5544-5559.
- [16] Groce, S. L. and Lipscomb, J. D.: *Biochemistry* **2005**, *44*, 7175-7188.
- [17] Kovaleva, E. G. and Lipscomb, J. D.: *Science*. **2007**, *316*, 453-457.
- [18] Sutherlin, K. D.; Wasada-Tsutsui, Y.; Mbughuni, M. M.; Rogers, M. S.; Park, K.; Liu, L. V.; Kwak, Y.; Smec, M.; Böttger, L. H.; Frenette, M.; Yoda, Y.; Kobayashi, Y.; Kurokuzu, M.; Saito, M.; Seto, M.; Hu, M.; Zhao, J.; Alp, E. E.; Lipscomb, J. D. and Solomon, E. I.: *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 16495-16513.
- [19] Park, K.; Li, N.; Kwak, Y.; Smec, 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.: *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 7062-7070. (doi: 10.1021/jacs.7b02997)



## Long-term Proposal Report 2

# Application & Development of Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy (NRVS) and Synchrotron Mossbauer Spectroscopy of Iron-Hydrogen Interactions in Hydrogenases, Nitrogenases, and Model Complexes

Stephen P. Cramer<sup>1</sup>, Cindy Pham<sup>2</sup>, Hongxin Wang<sup>2</sup>, Nakul Mishra<sup>2</sup>, Leland Gee<sup>2</sup>, Yoshitaka Yoda<sup>3</sup>, Vladimir Pelmenschikov<sup>4</sup>, Giorgio Caserta<sup>4</sup>, Lars Lauterbach<sup>4</sup>, Ingo Zebger<sup>4</sup>, Peter Hildebrandt<sup>4</sup>, Oliver Lenz<sup>4</sup>, James Birrell<sup>5</sup>, Edward Reijerse<sup>5</sup>, Wolfgang Lubitz<sup>5</sup>, Ming-Hsi Chiang<sup>6</sup>, Thomas Rauchfuss<sup>7</sup>

<sup>1</sup>SETI Institute, Mountain View, CA 94043, USA

<sup>2</sup>University of California, Davis, CA, USA

<sup>3</sup>Diffraction and Scattering Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI, SPring-8, Japan

<sup>4</sup>Technische Universität Berlin, Germany

<sup>5</sup>Max Planck Institute for CEC, Germany

<sup>6</sup>Institute of Chemistry, Academia Sinica, Nankang, Taipei 115, Taiwan

<sup>7</sup>Department of Chemistry, University of Illinois, Urbana, IL 61801, USA

### Abstract

Using <sup>57</sup>Fe nuclear resonant vibrational spectroscopy (NRVS), we have characterized <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 NRVS observation of the Ni-H-Fe mode in the Ni-R form of [NiFe] H<sub>2</sub>ase, we worked to extend this observation to the more difficult Ni-C species. We also continued studies of the [FeFe] H<sub>2</sub>ase from different organisms: *Chlamydomonas reinhardtii* (*Cr-HydA1*) and *Desulfovibrio desulfuricans* [FeFe] H<sub>2</sub>ase (*Dd-HydAB*). Fe-hydride and Fe-deuteride vibrational modes in [FeFe] H<sub>2</sub>ase were observed and interpreted by DFT calculations. We also observed the importance of the interaction of the amine ligand of the azadithiolate (ADT) bridge by comparing wild-type enzyme results with spectra for enzyme substituted with <sup>13</sup>CD<sub>2</sub>-ADT. Model compounds have played an important role in interpreting these spectra, and papers were published on compounds with bridging hydrides or deuterides.

### 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

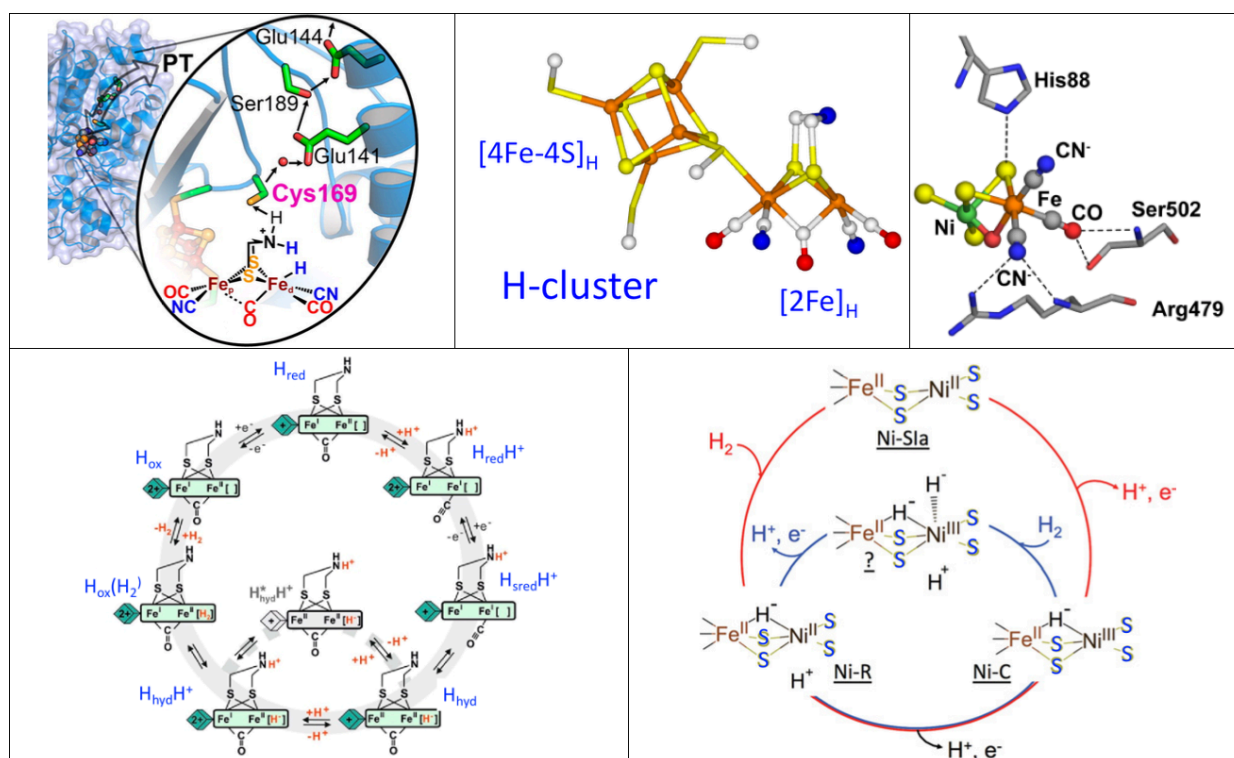


Figure 1 Top: Structures of the catalytic centers. Left to right: typical [FeFe] H<sub>2</sub>ase and the associated proton transfer chain; closeup of the active site H cluster; [NiFe] center inside a typical [NiFe] H<sub>2</sub>ase. Bottom: Proposed catalytic cycles. Left: [FeFe] H<sub>2</sub>ase, with key H<sub>hyd</sub> intermediate. Right: [NiFe] H<sub>2</sub>ase, cycling between Ni-C, NiSla, and Ni-R.

modes of a wide variety of Fe complexes and proteins<sup>[11-14]</sup>. More recently, we have extended NRVS studies to more difficult Fe-H related vibrational features in several H<sub>2</sub>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 ~1.0 eV resolution, followed by a Ge(422) × 2Si(975) high energy resolution monochromator (HRM) to narrow the resolution to ~0.8 meV, with a final flux of ~2.5 × 10<sup>9</sup> photons/s. Some NRVS data were also measured at SPring-8 BL19LXU. The NRVS measurements used a 2 × 2 avalanche photodiode (APD) detector array to collect the nuclear fluorescence and the internal conversion Fe K $\alpha$  fluorescence following <sup>57</sup>Fe nuclear excitation. The typical background count rates for this array is ~0.03 cts s<sup>-1</sup>. A closed-cycle liquid helium flow cryostat was used to maintain the samples at cryogenic temperatures (~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 modes. The energy scale

was always calibrated with respect to a standard sample of [<sup>57</sup>FeCl<sub>4</sub>][NEt<sub>4</sub>], which has a prominent peak at 380 cm<sup>-1</sup>. NRVS data were converted to an <sup>57</sup>Fe partial vibrational density of state (PVDOS) using the PHOENIX software package<sup>[7]</sup>.

## Results

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

Our collaborators in Mulheim have an established protocol for reconstitution of the apo-enzyme with synthetic mimics for the binuclear cluster. Using [<sup>57</sup>Fe<sub>2</sub>(odt)(CN)<sub>2</sub>(CO)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> prepared in the Rauchfuss lab (odt = oxadithiolate), they successfully replaced the amine at the bridge of the active site of *Cr-HydA1* with an oxygen to form the ODT variant (Figure 2). This approach allowed us for the specific <sup>57</sup>Fe labeling of the [2Fe]<sub>H</sub> subsites, while leaving other irons unlabeled. We then prepared a transient intermediate (known as the H<sub>hyd</sub> state)<sup>[16]</sup>, and we observed Fe-H bending modes at ~670 and ~730 cm<sup>-1</sup> (Figure 2). The Fe-H assignment was observed by D exchange, which moved one band to ~625 cm<sup>-1</sup> while the other feature became buried in the Fe-CO/CN region. This work was published in *J. Am. Chem. Soc.*<sup>[17]</sup>.

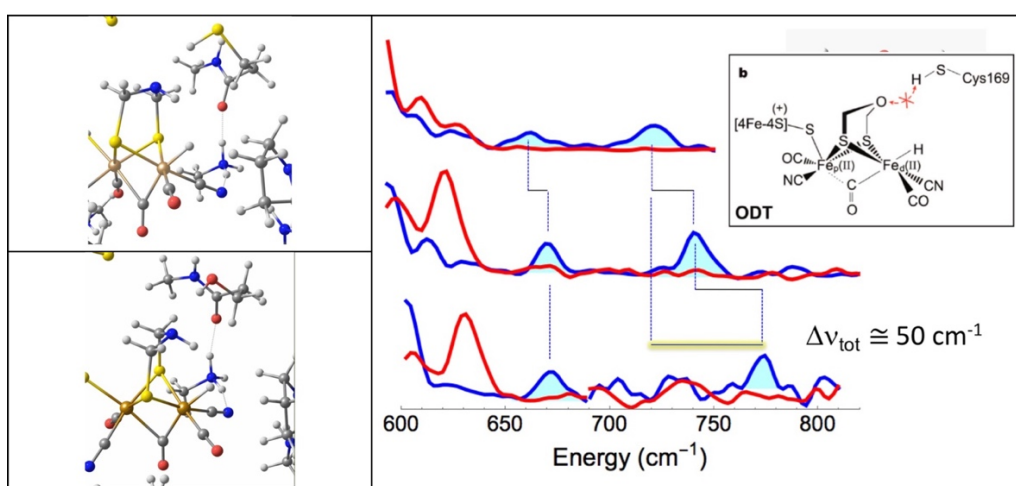


Figure 2 Left: DFT predictions for the active site  $H_{hyd}$  local structure for (top) the wild-type enzyme and (bottom) the C169S variant. Right:  $^{57}Fe$  PVDOS for various types *CrHydA1* [FeFe]  $H_2ase$ . Top to bottom: wild-type enzyme with ADT replaced by ODT; wild-type enzyme; C169S variant. Spectra are for  $H_2/H_2O$  (—) and  $D_2/D_2O$  (—) conditions. Inset: structure and inhibition mechanism of the ODT variant.

We were also able to observe the  $H_{hyd}$  intermediate in  $^{57}Fe$ -labeled wild type *Cr-HydA1* and *Dd-HydAB* with the natural ADT at the active site. We inspected the  $H_{hyd}$  forms of both of these enzymes and found the Fe-H bands now shifted to  $\sim 675$  and  $\sim 745 \text{ cm}^{-1}$  (Figure 2). DFT calculations reproduced these shifts as a consequence of the presence of a proton on the ADT nitrogen. This work was also published in *J. Am. Chem. Soc.*<sup>[18]</sup>.

Finally, we turned to the C169S mutant of *Cr-HydA1* where the  $H_{hyd}$  species was originally observed (Figure 2). The  $H_{hyd}$  species for this variant yielded bands at  $\sim 673$  and  $\sim 772 \text{ cm}^{-1}$  (Figure 2). The latter band is shifted by  $\sim 45 - 50 \text{ cm}^{-1}$  from the original observation on the ODT variant. DFT calculations were used to explain this shift in terms of variations in bond

strengths and distanced along the serine-ADT-H-Fe network (Figure 2). This was published in *Angew. Chem. Int. Ed.*<sup>[19]</sup>.

#### [NiFe] $H_2ases$

The local crystal structure for the [NiFe] center is shown in Figure 1. This enzyme has two species that have bridging hydrides between the Ni and Fe (Figure 3 - left). Previously, we were successful observing the Ni-H-Fe wag mode, as described article in *Nature Comm.* in 2015<sup>[14]</sup>, (Figure 3 - right). Since then, we have been engaged in trying to see the same mode for Ni-C  $H_2ase$ . This has turned out to be much more difficult. DFT calculations have shown that there is less Fe motion for the wag mode in this species. Work continues.

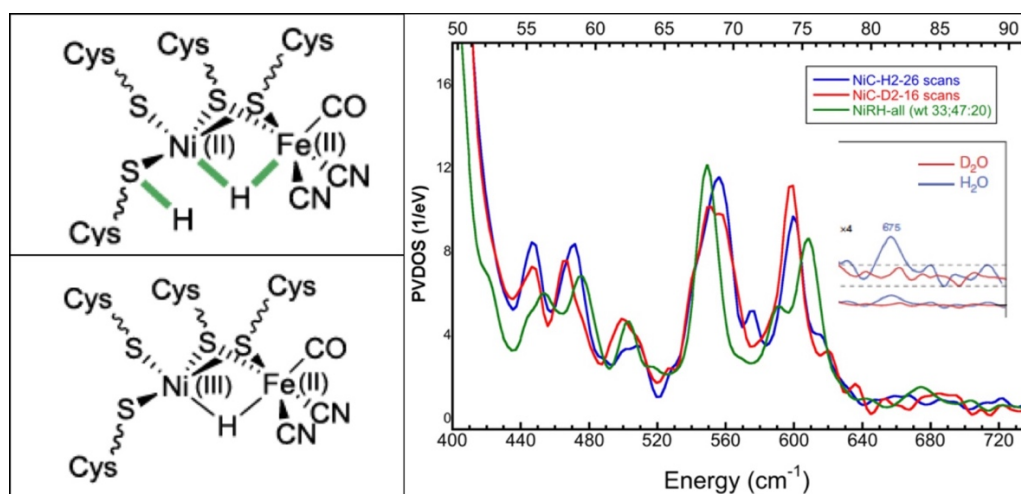


Figure 3 Left: proposed structures for Ni-R and Ni-C forms of [NiFe]  $H_2ase$ . Right: NRVS for Ni-R and Ni-C forms. Inset: expanded Ni-H-Fe region for Ni-R  $H_2ase$ .

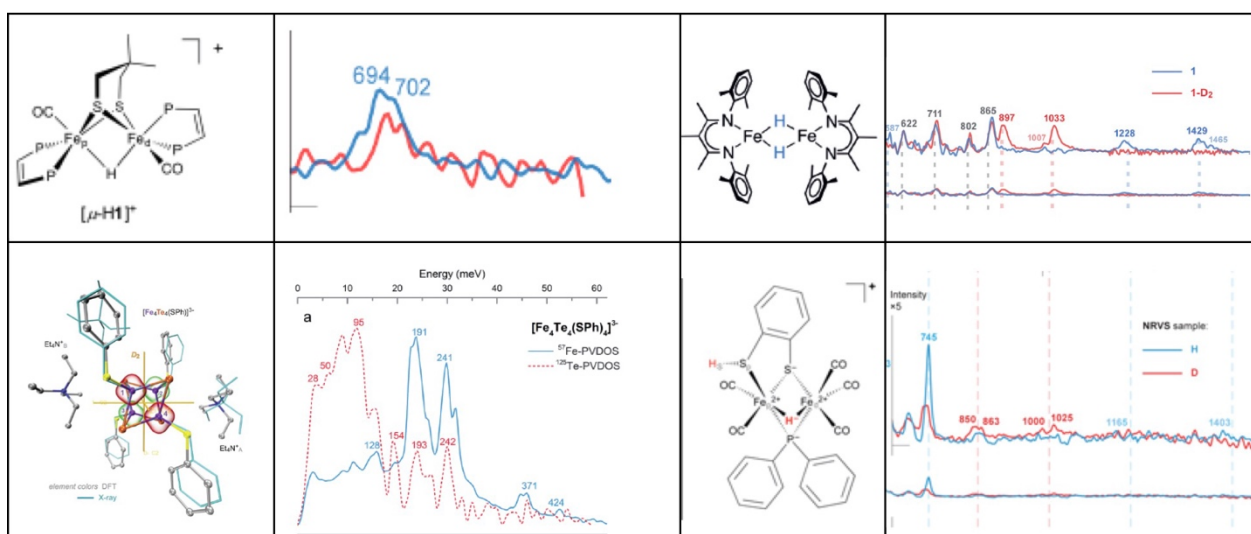


Figure 4 Top left pair: the bridging hydride isomer of a Rauchfuss model complex and the observed Fe-H-Fe mode in the NRVS<sup>[20]</sup>. Top right pair: a complex with two bridging hydrides from the Holland lab, and associated complex NRVS<sup>[21]</sup>. Lower left: an [Fe<sub>4</sub>Te<sub>4</sub>] cluster from Apfel lab and associated NRVS from Fe and Te points of view (Te data from PETRA-III)<sup>[22]</sup>. Lower right: a bridging hydride from Chang lab and associated NRVS<sup>[23]</sup>.

### Model Compounds

Interpretation of enzyme NRVS has been aided by model compound spectra. Structures of complexes and their NRVS are shown in Figure 4. All of this work has been published or submitted<sup>[20-23]</sup>.

### Summary

Over this long-term proposal (2017A0141-2018B0141) at SPring-8 BL09XU, and in combination with some work from BL19LXU, we have obtained fruitful NRVS results for many important enzymes. In this article, we illustrated how NRVS can probe Fe-H/D modes that are hard to see by other techniques. SPring-8 remains the best synchrotron light source in the world for these experiments.

### Acknowledgments

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

### References

- [ 1 ] J. Y. H. Kim and H. J. Cha: *Korean J. Chem. Eng.* **30** (2013) 1-10.
- [ 2 ] B. E. Jugder, J. Welch, K. F. Aguey-Zinsou and C. P. Marquis: *Rsc. Advances* **3** (2013) 8142-8159.
- [ 3 ] W. Lubitz, H. Ogata, O. Rudiger and E. Reijerse: *Chem. Rev.* **114** (2014) 4081-4148.
- [ 4 ] T. Spatzal, J. Schlesier, E.-M. Burger, D. Sippel, L. Zhang, S. L. A. Andrade, D. C. Rees and O. Einsle: *Nature Comm.* **7** (2016) 10902.
- [ 5 ] B. M. Hoffman, D. Lukoyanov, D. R. Dean and L. C. Seefeldt: *Acc. Chem. Res.* **46** (2013) 587-595.
- [ 6 ] M. Seto, Y. Yoda, S. Kikuta, X. W. Zhang and M. Ando: *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 3828-3831.
- [ 7 ] W. Sturhahn, T. S. Toellner, E. E. Alp, X. Zhang, M. Ando, Y. Yoda, S. Kikuta, M. Seto, C. W. Kimball and B. Dabrowski: *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 3832-3835.
- [ 8 ] Y. Yoda, K. Okada, H. Wang, S. P. Cramer and M. Seto: *Jap. J. App. Phys.* **55** (2016) 122401.
- [ 9 ] H. Wang, E. E. Alp, Y. Yoda and S. P. Cramer: *Metalloproteins: Methods and Protocols* **1122** (Springer, 2014) 125-138.
- [10] M. C. Smith, Y. Xiao, H. Wang, S. J. George, D. Coucovanis, M. Koutmos, W. Sturhahn, E. E. Alp, J. Zhao and S. P. Cramer: *Inorg. Chem.* **44** (2005) 5562-5570.
- [11] P. N. Serrano, H. Wang, J. C. Crack, C. Prior, M. I. Hutchings, A. J. Thomson, S. Kamali, Y. Yoda, J. Zhao, M. Y. Hu, E. E. Alp, V. S. Oganessian, N. E. L. Brun and S. P. Cramer: *Angew. Chem. Int. Ed.* **55** (2016) 14575-14579.
- [12] S. P. Cramer, Y. Xiao, H. Wang, Y. Guo and M. C. Smith: *Hyperfine Interact.* **170** (2006) 47-54.

- [13] A. Scott, V. Pelmenchikov, Y. Guo, H. Wang, L. Yan, S. George, C. Dapper, W. Newton, Y. Yoda, Y. Tanaka and S. P. Cramer: *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014) 15942-15954.
- [14] H. Ogata, T. Krämer, H. Wang, D. Schilter, V. Pelmenchikov, M. van Gastel, F. Neese, T. B. Rauchfuss, L. B. Gee, A. D. Scott, Y. Yoda, Y. Tanaka, W. Lubitz and S. P. Cramer: *Nature Comm.* **6** (2015) 7890.
- [15] Y. Yoda, M. Yabashi, K. Izumi, X. W. Zhang, S. Kishimoto, S. Kitao, M. Seto, T. Mitsui, T. Harami, Y. Imai and S. Kikuta: *Nucl. Inst. Meth. A* **467-468** (2001) 715-718.
- [16] H. Long, P. W. King and C. H. Chang: *J. Phys. Chem. B* **118** (2014) 890-900.
- [17] E. J. Reijerse, C. C. Pham, V. Pelmenchikov, R. Gilbert-Wilson, A. Adamska-Venkatesh, J. F. Siebel, L. B. Gee, Y. Yoda, K. Tamasaku, W. Lubitz, T. B. Rauchfuss and S. P. Cramer: *J. Am. Chem. Soc.* **139** (2017) 4306-4309.
- [18] V. Pelmenchikov, J. A. Birrell, C. C. Pham, N. Mishra, H. X. Wang, C. Sommer, E. Reijerse, C. P. Richers, K. Tamasaku, Y. Yoda, T. B. Rauchfuss, W. Lubitz and S. P. Cramer: *J. Am. Chem. Soc.* **139** (2017) 16894-16902.
- [19] C. C. Pham, D. W. Mulder, V. Pelmenchikov, P. W. King, M. W. Ratzloff, H. Wang, N. Mishra, E. E. Alp, J. Zhao, M. Y. Hu, K. Tamasaku, Y. Yoda and S. P. Cramer: *Angew. Chem. Int. Ed.* **57** (2018) 10605-10609.
- [20] M. R. Carlson, D. L. Gray, C. P. Richers, W. Wang, P.-H. Zhao, T. B. Rauchfuss, V. Pelmenchikov, C. C. Pham, L. B. Gee, H. Wang and S. P. Cramer: *Inorg. Chem.* **57** (2018) 1988-2001.
- [21] V. Pelmenchikov, L. B. Gee, H. Wang, K. C. MacLeod, S. F. McWilliams, K. L. Skubi, S. P. Cramer and P. L. Holland: *Angew. Chem. Int. Ed.* **57** (2018) 9367-9371.
- [22] F. Wittkamp, N. Mishra, H. Wang, H.-C. Wille, S. P. Cramer, U.-P. Apfel and V. Pelmenchikov: *Chem. Sci.* **10** (2019) 7535-7541.
- [23] L. B. Gee, V. Pelmenchikov, H. Wang, N. Mishra, Y.-C. Liu, Y. Yoda, K. Tamasaku, M. Kaupp, M.-H. Chiang and S. P. Cramer: *Chem. Int. Ed.* (2019) submitted.



## 所外実験データ転送システム BENTEN

公益財団法人高輝度光科学研究センター 情報処理推進室

松本 崇博、横田 滋、松下 智裕

### Abstract

SPring-8 で計測した実験データを所外からアクセスするための基盤として、実験データ転送システム BENTEN (Beamline ExperimentaL stations oriENTed data transfer system) を開発し、2019年3月より運用を始めました。BENTEN はユーザー認証機能を持ち、データを一般に公開する機能 (オープンデータ)、および実験課題の共同メンバーのみにデータ共有を行うアクセス制限機能を実装しています。現在、BENTEN は BL14B2 において X 線吸収微細構造 (XAFS) 標準試料のデータ公開や、ユーザー実験の計測データへの所外からのアクセスで利用されています。今後は硬 X 線光電子分光 (HAXPES) 標準試料のデータ公開を進めるとともに、共用ビームラインの複数の実験ステーションへと展開していき、様々な実験データの利活用を進めていく予定です。

### 1. はじめに

SPring-8 で計測した実験データを所外に転送するための実験データ転送システム BENTEN を開発し、2019年3月より運用を開始しました<sup>[1,2]</sup>。本稿では、BENTEN によるデータ公開を中心に紹介いたします。

オープンデータとは、データをインターネット上に公開し、誰でも無料で利活用できるようにすることです。近年、科学分野ではマテリアルズ・インフォマティクスなどデータ科学が注目されています。データ科学ではデータから知を創出するため、SPring-8 など放射光施設で計測された実験データに関してもオープンにして皆が利活用できる形にすることが強く求められています。

社会的にも公的資金を用いて計測した実験データについては、一定期間後にオープンにすべきとのデータポリシーの考えがあります。ESRF など海外の放射光施設では計測してから 3 年後にデータを公開する動きが出てきています<sup>[3]</sup>。

SPring-8 におけるオープンデータの取り組みとしては、BL14B2 における XAFS の標準試料のデータ公開を 2013 年より JASRI 産業利用推進室を中心に行ってきました。現在公開している XAFS の測定データ数は 800 程度であり、世界第 2 位の統計量になっています<sup>[4]</sup>。公開された XAFS 標準試料データは実験計測時の参照資料などで活用されています。

データ公開にあたっては、実験データ転送システム SP8DR を整備し運用を行ってきました<sup>[5]</sup>。SPring-8 では、遠隔実験や測定代行において実験の共同メンバーのみにデータ共有範囲を制限する利用ケースもあります。このため、SP8DR ではシステム利用時に SPring-8/SACLA 電子申請システムのアカウント (SPring-8 ID) 認証を行い、アクセス制限付きのデータ転送にも対応しています。この SPring-8 ID のアカウント登録は一般に公開されているため、オープンデータに関して誰でもアクセスできるようになっています。

このように実験データ転送システムを運用してきましたが、SP8DR では 1 ビームライン単位でシステムを構築する必要があるなど、導入のためのハードルが高く管理コストがかかること、使い方が難しいなど課題がありました。これらの課題を解消するため、実験データ転送システム BENTEN を新規に開発して対応しました。

### 2. 実験データ転送システム BENTEN について

実験データ転送システム BENTEN は、SPring-8 の複数の共用ビームラインの実験におけるデータ転送で汎用的に利用でき、かつ簡易に使えるソフトウェアとして開発しました。

BENTEN はオープンデータの基盤としても利用できますが、公開したデータを利活用するためには、データ

自身が FAIR 原則を満たすことが推奨されています<sup>6)</sup>。FAIR とは Findable (見つけられる)、Accessible (アクセスできる)、Interoperable (他施設ともデータの相互運用ができる)、Re-usable (再利用できる) の頭文字をとったものです。よって、データを単に公開するだけでは不十分であり、人がデータを理解して利用できるように、測定条件など十分なメタデータを付加し、データを正規化する必要があります。また、データは機械学習などの AI での利用も想定されるため、機械可読性を高めることも重要になります。他にも、システム運用時には適切なデータマネージメントを行う必要があります。

このため、BENTEN では以下の要件を満たすように設計しました。

- ・データ登録やデータ検索、ダウンロードなどの各機能が簡易に利用できること。
- ・複数のビームラインの実験で利用でき、多種多様な実験データフォーマットに対応できること。
- ・登録したメタデータ項目を用いて実験データが柔軟に検索できること。
- ・データのライフサイクル管理（登録、更新、一般公開や限定公開などデータ共有範囲の設定、およびデータ消去）が簡易に行えること。
- ・データを引用するため、各データセットにはユニークで永続的な PID (Persistent ID) が割り当てられており、また、データの責任者が把握できること。

BENTEN ソフトウェアは SPring-8 以外でも独立にインストールして利用することができます。将来、BENTEN は OSS (オープンソースソフトウェア) と

して提供することで、他の放射光施設でも利用できるようにする予定です。

BENTEN システムの概要を図 1 に示します。BENTEN システムでは、BENTEN agent のサーバーが、認証、データ登録、データ検索、ダウンロードなど全ての実験データ転送機能へのインターフェースを提供するように設計しました。BENTEN agent での通信には Web サービスでよく使われている REST API<sup>7)</sup>と呼ばれる http に基づくプロトコルを用いており、応答は JSON 形式で行います。BENTEN agent は Python による Web フレームワークである Django<sup>8)</sup>を用いて構築しました。インターフェースを REST API で統一することで、Web ポータルや、他のユーザーアプリケーションで簡易に利用することができます。REST API の機能を簡易に利用するため Python API も開発しました。データ登録は Python API を用いて作成されたコマンドを用いて簡易に行うことができます。所内外からのデータアクセスは Django で構築された Web ポータルから行います。データアクセスに Python API を利用することもできますが、セキュアなデータアクセスのため、現在のところ利用は所内に限定しています。

BENTEN システムでは、ユーザー毎に適切なアクセス制限を行うため、利用にあたっては始めに認証が必要になります。データ登録時にはビームラインのアカウント、データアクセス時には SPring-8 ID のアカウント認証が必要です。認証には、近年クラウドでの認証でもよく使われている OpenID Connect 1.0<sup>9)</sup>を用いています。

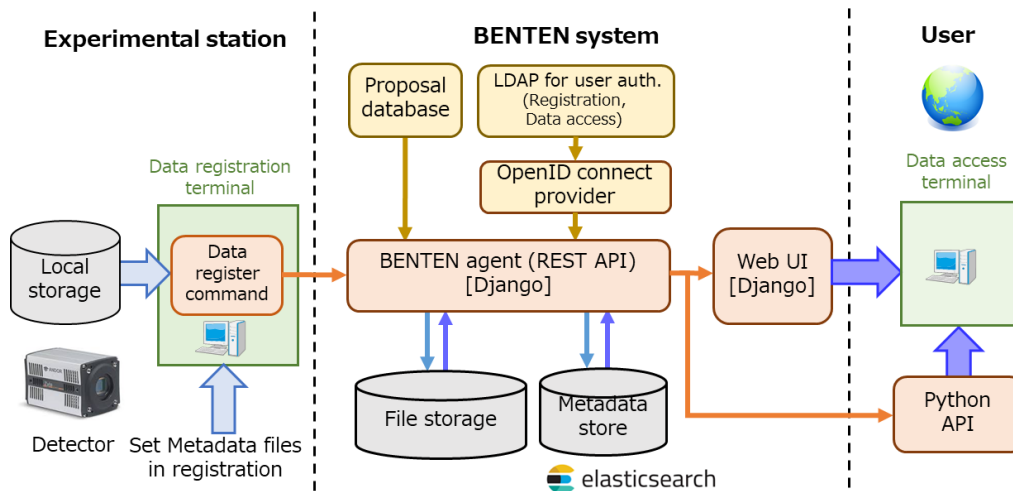


図 1 BENTEN システムの概要

表 1 BENTEN におけるメタデータ項目の例

項目名	説明	値の例
@subject@correspondance	Contact name	Takahiro Matsumoto
@subject@correspondance@affiliation	Affiliation of contact name	JASRI
@subject@proposal_number	proposal number	2014S0000
@subject@pid	Persistent ID	spring8.784d08a8-f39a-4ba0-ac13-6440688b54fd
@measurement@method	Measurement method	XAFS

## 2.1 データ登録

データ登録の際は、図 1 に示すように、実験データに対してメタデータが記述されたファイルを作成し、これらのファイルを纏めて BENTEN システムに登録します。

様々な実験データの利活用を効率的に行うためには、共通データフォーマットを定義し、そのフォーマットに従って実験データを記録することが望まれます。海外施設では NeXus<sup>[10]</sup> と呼ばれる HDF5<sup>[11]</sup> によるデータコンテナをベースとして作られたデータフォーマットで標準化する方向で進んでいます。しかし、日本ではデータフォーマットの標準化は進んでおらず、各実験で様々なデータフォーマットが使われています。

このため、実験データはそのままの形で扱い、メタデータ記述を JSON 形式のデータフォーマットで統一する手法を採用しました。JSON は人の可読性や機械可読性に優れたテキストベースのデータフォーマットです。メタデータ項目はサンプル、測定パラメータ、装置などカテゴリに分類して定義しています。メタデータ項目の例を表 1 に示します。階層構造を持つデータにも対応できるように、異なる文節を“@”でつなげる形でメタデータ項目名を定義しています。

メタデータ項目は、実験により様々な項目があり、これらを柔軟に定義する必要があります。このため、メタデータを管理するデータベースには Elasticsearch<sup>[12]</sup> を採用しました。Elasticsearch はスキーマレスのデータベースであり、必要に応じてメタデータ項目を随時追加することができます。また、全文検索にも対応しており、柔軟にデータ検索をすることができます。

メタデータの記述にあたっては、必須の記述項目をいくつか定義しています。最も重要なメタデータ項目は課題番号です。課題番号は実験課題毎に割り当てら

れますが、実験課題の共同メンバーも課題番号と関連付けて課題データベースに登録しています。よって、課題番号を用いることで、実験課題の共同メンバーに限定したデータアクセスが実現できるように設定できます。このように、課題番号は実験データの共有範囲を決める側面もあるため、極めて重要なメタデータ項目です。

その他は、データ公開・非公開のアクセス条件を示すフラグも必要になります。データを公開する際には、データの責任者とその所属を設定することが必要になります。

このシステムでは、1 データセットとして、複数のデータファイルと複数のメタデータのファイルで構成されることを想定しています。以下に、データ登録における 1 データセットのファイル構成例を示します。

- ・ <X>.json, <X>.system.json, <X>.user.json, …
- ・ <X>/AAA.csv, <X>/BBB.tiff, …

ここで、<X> はデータ登録時に指定する登録名です。この際、“<X>.” で始まる同名ファイルが 1 つのデータセットとみなされます。メタデータを示すファイルには json の拡張子が付いています。メタデータは用途毎に生成することもあるため、複数のメタデータファイルが登録できるようにしています。また、<X> のディレクトリを作成し、ディレクトリ以下のファイルを登録対象とすることもできます。ディレクトリは複数の実験データファイルをまとめて登録する際に利用できます。

データ登録後、データセットのコンテンツを更新する際は実験データやメタデータファイルの内容を更新して再登録します。

このように、データ登録・更新はファイルをベースに手続きが可能であり、データベースを直接編集する必要はないため、簡易に利用することができます。

## 2.2 データアクセス

データ登録後は、図2に示すように、所外から Web ポータル経由でデータにアクセスできます。利用の際は、SPring-8 ID のアカウントでの認証が必要になります。なりすましによる不正アクセスを防ぐため、2要素認証を実装しています。アカウントでのログインの後、利用にあたってはメールアドレスによる本人同意が必要になります。

図2の左側には認証したアカウントでアクセス権のあるデータのディレクトリツリーを表示しています。ここでディレクトリ構造は以下の形をとっています。

・/<施設名>/<分類名 (ビームライン名など) >/<ディスク名>/…

図2の例では、施設名がSPring-8、分類名がBL14B2 になっています。このようなディレクトリ構成をとることで、複数施設、およびビームラインのデータを一元的に扱うことができます。分類名の下は、用途毎にストレージ領域を分けてデータ管理するため、ディスク名のディレクトリを設置しています。図2では XAFS 標準試料を扱うため、ディスク名に Standard を設定しています。

ディスク名の下は、各ビームラインでのストレージ領域がそのまま見える形にしています。これにより、ユーザーが管理しやすい形でデータ公開をすることができます。

データの検索は、ディレクトリツリーをたどることにより行うこともできますが、登録されたメタデータ項目を用いて横断的にデータ検索することもできます。

図2では Zr の試料名を指定して全文検索を行っています。検索にマッチしたファイルは図2の右上にリストされます。それぞれのファイルを選択すると、図2の右下にデータに基づくメタデータ項目とその値のリストを閲覧することができます。データは、ファイルやディレクトリを指定し、zip ファイルでまとめてダウンロードできます。

## 3. SPring-8 における BENTEN 利用

BENTEN は 2019 年 3 月より SPring-8 で運用を開始しました。所外からの実験データアクセスのための Web portal も設置しています<sup>[3]</sup>。

BENTEN は SPring-8 の共用ビームラインで汎用的に活用できますが、BL14B2 における旧実験データ転送システム SP8DR の更新を最初のターゲットとして利用整備を進めました。現在、BL14B2 での BENTEN 利用は試験中ですが、既に本番環境としても利用できる形で運用を行っています。

BENTEN 運用を行うにあたり、データ共有範囲を管轄する課題番号をどのように正確に定義するかが大きな課題になりました。これを解決するため、課題番号発行機を開発し対応しました。

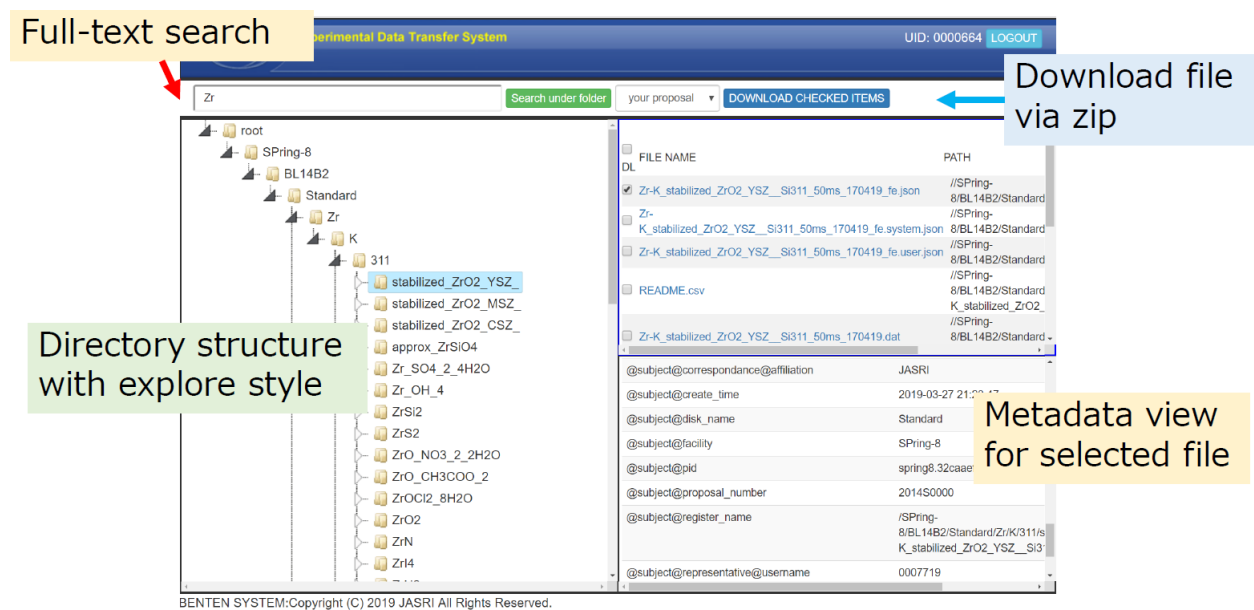


図2 BENTEN Web ポータルでのデータアクセス例

課題番号発行時は、ビームラインスタッフがユーザーに USB デバイスを貸与します。ユーザーは課題番号発行機に USB デバイスを差し込むとともに、ユーザーカードをカードリーダーにかざします。その後、課題番号発行機ではユーザーに紐づく課題番号リストが表示されます。ユーザーが対象の課題番号を選択すると USB デバイスに課題番号が保存されます。次に、ユーザーは課題番号発行機から USB デバイスを取り出し、実験計測の計算機に差し込むことで、課題番号をメタデータとして入力することができます。このように、USB デバイスに物理的に課題番号情報を保存し、利用することで間違えて課題番号を設定することを防ぐようにしました。

BL14B2 では、ユーザー実験において BENTEN システムを自動測定で利用できるように調整し、運用を開始しました。自動測定で利用するため、メタデータは課題番号の他はほとんど定義されていませんが、所外から実験課題の共同メンバーのみに制限してデータアクセスができるため、便利に活用されています。

また、XAFS 標準試料のデータ公開も開始しました。XAFS 標準試料に関しては、オープンデータで活用するため、十分なメタデータを入力してオフラインでデータ登録しています。なるべく効率よくメタデータ入力を行うため、メタデータ項目の多くは自動抽出しています。サンプル情報や測定条件、測定器のパラメータの一部など自動抽出が難しい項目に関しては手動でも登録して対応しました。

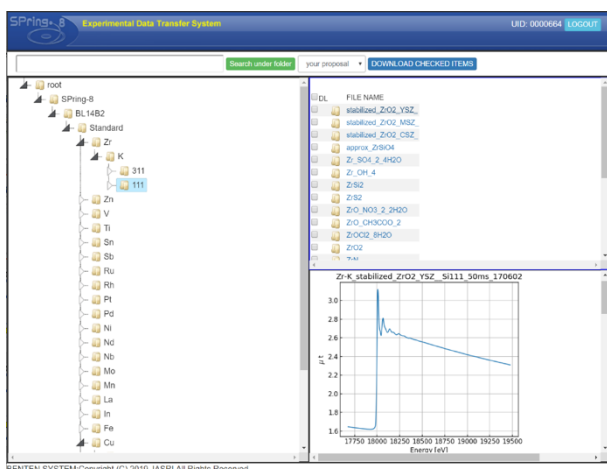


図3 BENTEN Web ポータルにおける XAFS スペクトルのサムネイル表示例

図3に BENTEN Web ポータルにおける XAFS 標準試料のデータアクセスの例を示します。データセット毎にサムネイルを付加することで、メタデータ項目のリストとともに閲覧することができます。

#### 4. まとめと今後の予定

本稿では、BENTEN における所外実験データ転送について紹介しました。BENTEN は放射光実験のデータ転送において汎用的、かつ簡易に利用できるソフトウェアとして設計しました。

2019年3月より SPring-8 で BENTEN の運用を開始し、XAFS 標準試料のオープンデータや BL14B2 でのユーザー実験におけるアクセス制限付きのデータ転送で活用されています。

今後は SPring-8 の共用ビームラインでの利用展開を進めていく予定です。現在は、HAXPES の標準試料のデータ公開や、CT 計測での画像データの遠隔からのアクセスなど整備を進めています。

#### 謝辞

BENTEN の開発および運用を進めるにあたって、JASRI 産業利用推進室の方々には多大なご協力を頂きました。この場を借りてお礼を申し上げます。

#### 参考文献

- [1] T. Matsumoto *et al.*: *AIP Conference Proceedings* **2054** (2019) 060076.
- [2] T. Matsumoto *et al.*: *Proceedings of ICALEPCS* (2019), to be published.
- [3] <https://www.esrf.eu/datapolicy>
- [4] K. Asakura *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **25** (2018) 967-971.
- [5] H. Sakai *et al.*: *Proceedings of ICALEPCS* (2013) 577-579.
- [6] <https://www.force11.org/group/fairgroup/fairprinciples>
- [7] <https://www.ics.uci.edu/~fielding/pubs/dissertation/top.htm>
- [8] <https://djangoproject.com>
- [9] <http://openid.net/connect/>
- [10] <https://www.nexusformat.org>
- [11] <https://www.hdfgroup.org>
- [12] <https://www.elastic.co/products/elasticsearch>
- [13] <https://benten.spring8.or.jp>



松本 崇博 MATSUMOTO Takahiro

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

横田 滋 YOKOTA Shigeru

(公財) 高輝度光科学研究センター 情報処理推進室  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0980 ext 3912  
e-mail : yokota@spring8.or.jp

松下 智裕 MATSUSHITA Tomohiro

(公財) 高輝度光科学研究センター 情報処理推進室  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0868  
e-mail : matusita@spring8.or.jp

## 第5回 SACLA Users' Meeting 報告

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

### 1. はじめに

2019年8月28日から29日にかけて、SACLA Users' Meeting 2019がSACLAで開催された。SACLAの利用者会議としては通算で5回目となるが、第3回(2017年12月開催)より使用言語を英語とし、“International Users' Meeting”として開催されている。今年は国内から97名、海外8名が参加し、最新のSACLAの性能に関する情報共有や、XFEL利用研究の在り方について、施設とユーザーコミュニティおよび利用者同士で議論が行われた。学术界からの参加者に加えて、産業界からも4名(2企業)の参加があり、多様な立場からの意見が交わされた。

### 2. 会議の内容

第1日目は、午前中に施設見学および実験データ処理実習(Hands-onセッション)、午後からは全体セッションとして、施設の現状報告(3件)と2018年度より開始されたSACLA基盤開発プログラムの進捗報告(5件)が行われた。

今回初の試みとなるHands-onセッションでは、SACLAの高性能計算機(HPC)システムを利用した実験データ処理の基礎を実習する場が設けられた。午後の施設報告では、SACLAの概要およびSACLA基盤開発プログラム(理化学研究所 矢橋牧名氏)、最新のビームライン状況(JASRI 登野健介氏)、昨年のUsers' Meetingで挙げられた要望への対応状況(JASRI 藪内俊毅氏)に関する報告が行われた。

SACLA基盤開発プログラムは、利用者の要望に応えながらSACLAの特色をさらに伸ばし、ユニークな成果の創出につなげることを目的として、昨年度より新たに募集が開始された。本年度は8件の課題が採択され、実験プラットフォームの開発などが進められている。本会議では、軟X線の集光・結像システム(東京大学 本山央人氏)、軟X線オプト・スピントロニク

ス実験装置(東京大学 平田靖透氏)、XFELイメージングのための溶液試料保持技術(北海道大学 鈴木明大氏)、X線分光と回折計測のためのタンパク質結晶供給技術(岡山大学 梅名泰史氏)、ハイパワーナノ秒レーザー集光技術(大阪大学 尾崎典雅氏)といった装置や技術の開発について、進捗状況などが報告された。SACLA基盤開発プログラムの詳細については、下記サイトを参照されたい。

<http://xfel.riken.jp/topics/20190326.html>

第1日目の全体セッションの後にはポスターセッションが開催された。施設からは10件の発表があり、BL1~BL3、同期レーザーに関する発表が行われた。特に前回(2018年9月)からの更新情報として、波面分割遅延光学系(BL3)や自己シード型FEL(BL3)、ハイパワーフェムト秒レーザーシステム(BL2)に関する最新情報に加え、同期レーザーのアップグレード(BL1~BL3)などが報告され、参加者の関心も高かった。また、利用者からも17件のポスター発表があり、最新のSACLA利用研究成果について、施設側、利用者を交えて活発な議論が行われた。

第2日目の午前は、全体セッションとして招待講演(2件)、分野毎のブレイクアウトセッション(4セッ



写真1 参加者の集合写真

ション)が行われた。Majed Chergui 教授 (スイス連邦工科大学ローザンヌ校) および David Reis 教授 (スタンフォード大学) による招待講演では、超高速化学や物質科学などの最新の研究のほか、SwissFEL や LCLS-II といった海外の XFEL 施設の動向なども交えた講演が行われた。

ブレイクアウトセッションでは、“Applications of advanced capability of BL3”、“New instruments for condensed matter”、“Extension of pump-probe capabilities for Biology and Chemistry” および “Development of experimental platforms with high-power lasers”の 4 つのセッションが行われ、それぞれ利用研究の今後の方向性や、施設の共用実験装置・実験環境などの運用や開発に関する要望などについて議論が行われた。どのセッションも発表 3~4 件とディスカッションで 80 分間を予定していたが、時間を超過しても議論が繰り広げられるセッションが多かった。以下に、各セッションの内容を簡潔にまとめる。

#### “Applications of advanced capability of BL3”

2 色発振、自己シード型 FEL やアト秒 FEL など、SACLA の独自性を高めるための特殊な運転および光診断技術について、利用者とビームライン研究員だけでなく、加速器研究員も交えた議論が行われた。

#### “New instruments for condensed matter”

主に固体物理分野の研究者により、SACLA BL2、BL3 における強磁場パルスやテラヘルツレーザーを用いたポンプ・プローブ実験装置の開発と最近の研究に関して議論が行われた。さらに、SACLA 基盤開発プログラムによって BL1 利用者向けに開発が進めら



写真2 全体セッションの様子

れているオプト・スピントロニクス実験プラットフォームなどについても情報共有と意見交換が行われた。

#### “Extension of pump-probe capabilities for Biology and Chemistry”

これまでのポンプ・プローブ実験では、化学反応のトリガーとして専ら光学レーザーが用いられてきたが、新しい反応トリガーとして温度ジャンプや 2 液混合などを使った手法や、反応を観測するための X 線吸収/発光分光法について、実験プラットフォームの開発も交えた議論がなされた。

#### “Development of experimental platforms with high-power lasers”

大出力のナノ秒レーザーまたはフェムト秒レーザーと XFEL を同時利用するための実験システムの共用が 2018 年度に開始されたことを受け、両システムの現状と最新の実験成果が報告された。これらを踏まえ、今後の基盤開発の重要項目や方向性などについて、既存の利用者だけでなく、将来の利用を検討している参加者からも意見が出され、議論が行われた。

第 2 日目午後にはショートプレゼンテーションのセッションが設けられ、5 件の口頭発表を通じて、新しい実験の提案や施設への要望などが挙げられた。その後、それぞれのブレイクアウトセッションを総括するサマリーセッションが開催され、全参加者で情報を共有するとともに、分野横断的な議論が活発に交わされた。

### 3. まとめ

SACLA Users' Meeting は、一般的な学術発表のための会議ではなく、利用者と施設および利用者間の情報共有と意見交換を主な目的として開催されている。今回も、ブレイクアウトセッションやそれに続くサマリーセッションにおける議論などを通じて、ある程度目的を果たせたように思える。今後も、利用者からの要望に対する施設側の対応や、施設側からの情報を活かした利用研究の展開などに注目していただきたい。2020 年度以降も、SACLA Users' Meeting は毎年開催される予定となっている。次回については詳細が決

まり次第、SACLA のホームページ (<http://xfel.riken.jp>)  
などで情報が公開される予定である。

通算 5 回目となる SACLA Users' Meeting を盛況  
のうちに終えることができたのも、多くの利用者  
の方々に参加いただき、活発に議論していただいたこと  
に尽きると思われる。本ミーティングに関わった皆様  
に厚く御礼を申し上げ、SACLA Users' Meeting 2019  
の報告とさせていただきます。

大和田 成起 *OWADA Shigeki*

(公財) 高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0992  
e-mail : [osigeki@spring8.or.jp](mailto:osigeki@spring8.or.jp)



## SPring-8 シンポジウム 2019 報告

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 行事幹事

岡山大学 異分野基礎科学研究所 横谷 尚睦

兵庫県立大学 大学院物質理学研究科 田中 義人

## はじめに

去る8月30日、31日の2日間にわたり、岡山大学創立五十周年記念館においてSPring-8 シンポジウム2019が、SPring-8 ユーザー協同体(以下、SPRUC)、高輝度光科学研究センター(以下、JASRI)、理化学研究所(以下、理研)、岡山大学の四者の主催により開催されました。第8回目となった本年のシンポジウムは、「次の20年に向けての一歩」と題し、SPring-8が次の20年で利用者にとってさらに魅力的な放射光施設となるための具体的な取り組みや仕組みを示すことをテーマとして、産官学の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なりました。350名を超える参加者があり、メイン会場となった金光ホール(写真1)では大変活発な議論が繰り広げられました。

## セッションI オープニングセッション

オープニングセッションでは、水木純一郎 SPRUC 会長(写真2)より開会の挨拶がありました。続いて理研の石川哲也放射光科学研究センター長(写真3)からは、SPring-8 供用開始から20年を過ぎ、多くの努力が行われつつあること、次期アップグレードを見据えたしっかりとした議論をしていくという趣旨の挨拶がありました。次に、JASRIの雨宮慶幸理事長(写真4)より、より高度で独創的な研究の推進による学術や社会、産業のイノベーションへの貢献を進めたいという発言の中で、「これが理想であるという強い意志を持ち努力を続けることでいつの間にか世界一になる、そういう不断の努力をしよう」という表明がありました。岡山大学の槇野博史学長(写真5)は、



写真1 メイン会場(金光ホール)

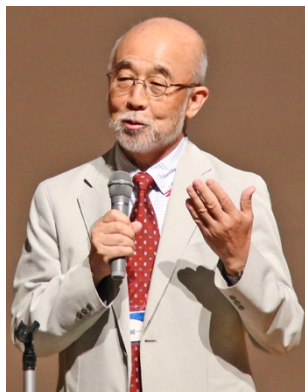


写真2 SPRUC 水木純一郎会長



写真3 理研 石川哲也センター長



写真4 JASRI 雨宮慶幸理事長



岡山大学の五十周年記念館においてSPring-8シンポジウムが開催されたことに歓迎の意を表し、岡山大学が早くからSDGsに取り組み、その中で文部科学省の「スーパーグローバル大学創成支援事業」、「研究大学強化促進事業」、「革新的医療技術創出拠点選定」の事業を展開していること、SPring-8の最近接の国立大学であり、多くのユーザーがいるとともに、講義の共催といった人材育成でも連携があり、今後もSPring-8との強い連携を構築していきたいと述べました。最後に、文部科学省 科学技術・学術政策局 研究開発基盤課 量子研究推進室の奥篤史室長(写真6)から挨拶をいただきました。日本での10の放射光施設や他の量子ビーム施設が稼働する中、SPring-8には科学的な成果のみならず運営や戦略策定においても、先導的な役割を期待したいという旨の発言がありました。

## セッションII SPring-8 この1年

セッションIIでは、「SPring-8 この1年」と題して、ユーザー、理研、JASRI を代表して、水木純一郎 SPRUC 会長、石川哲也理研放射光科学研究センター長、櫻井吉晴 JASRI 放射光利用研究基盤センター副センター長による講演が行われました。

水木会長からは、「SPRUC この1年とこれからの1年」と題した講演が行われました。最初に、この1年間のSPRUCの体制が紹介された後、昨年度のシンポジウムで示された「SPring-8を利用して世界に誇る成果を輩出し、人類社会の発展に貢献すること」を実現するために行ってきた活動の報告がありました。主な活動は以下の通りです。顧問会議を会長の諮問機関として大所高所から意見を戴く場とし、評議員会、代表機関と合わせてPDCAサイクルを回すようにした。

SACLA との連携を強めることを目指して SACLA 利用委員会を立ち上げた。SPring-8 のアップグレードに向けての施設者・登録機関・利用者間での風通しの良い議論を進める場として第1回BLsアップグレード検討ワークショップを開催した。利用者情報に「四季報」を掲載するようにした。産業界を中心とした裾野拡大、産業界と学術界の情報交換の場として、SPring-8シンポジウムで利用推進協議会からの成果発表の機会を設ける、人材育成の場としてSPring-8秋の学校を活用するなど。これらに加え、SACLA UCとサイエンスを基盤とした連携の強化や、Science Promotion Board (SPB) を設置し、長期的に狙うべきサイエンスの議論の場とすることなどの計画が紹介されました。

石川センター長からは、「この一年の進捗」と題した講演が行われました。まず、この数回のSPring-8シンポジウムで、実質的かつ活発な議論が行われてきており、今回もそれを期待しているというメッセージがありました。SPring-8に関してこの1年にあった多くの動きとして、文科省によるSPring-8/SACLA中間評価、BLsアップグレード検討ワークショップの開催、SPring-8/SACLA Advisory Councilの開催が紹介されました。さらに周辺の大きな動きとして、次世代3 GeV放射光施設の建設が開始され、相補的施設としてのSPring-8の位置づけの明確化とSPring-8-IIの本格的な検討を始める時期にきており、SPRUC、JASRIとも協力してロードマップを作成していくことが提案されました。さらに、放射光を中心とした広域研究協力体制の構築や、スマートファシリティ化、高性能検出器開発、「データ駆動型研究開発」を進めるためのルール作り、人材育成の国際交流の必要性などが示されました。



写真5 岡山大学 榎野博史学長



写真6 文部科学省 奥篤史室長



写真7 JASRI 櫻井吉晴副センター長

櫻井副センター長(写真7)からは、「共用ビームラインの現状と課題」と題した講演が行われました。まず、SPring-8 共用ビームラインに関する様々な統計が紹介された後、各研究会からの意見を基に SPRUC がまとめた動向調査への対応状況、この1年間での主な成果が紹介されました。また最近の動きとして、タンパク質構造解析遠隔測定、「新分野開拓」利用制度の立ち上げ(2020B期より)、「人文・社会科学」分科会の設置(2020A期より)、「先進技術活用による産業応用課題」の設置(2019A期より)が紹介されました。共用ビームラインにおいて、挿入光源ビームラインが少ないこと、同種の装置が複数のビームラインに設置されていたり、異なる種類の装置が1つのビームラインを共用していたりといった課題を抱えており、ビームラインと利用制度の両輪として高度化を進めていく考えが示されました。

SPring-8 が今後も世界最先端の施設としてのアクティビティを保ち続けるためには、ユーザーからの「提案とお願い」が必要であり、ユーザーの声を吸い上げる研究会活動とそれをまとめ、JASRI や理研に提案していく SPRUC の役割、さらにユーザー、理研、JASRI が連携をとって議論を進めていくことの重要性が改めて示されました。

### セッションⅢ パネルディスカッション

セッションⅢでは、今回で3回目となり、もはやSPring-8 シンポジウムの名物となりつつある「パネルディスカッション」が行われました。パネリストとし

て、SPring-8 施設側から矢橋牧名氏(理研)と上杉健太郎氏(JASRI)、SPRUC から有馬孝尚氏(東京大学)と西堀英治氏(筑波大学)、専用施設から坂田修身氏(物質・材料研究機構)、産業界から本間穂高氏(日本製鉄)が紹介されました。当パネルディスカッションの目的は、「SPring-8 における BL 再編、SPring-8-II 計画の進捗状況についての情報を共有し、施設-ユーザー組織の意思統一を図るべく、議論を深める」です。前半は情報整理で、モデレータの田中義人氏(兵庫県立大学)より、SPRUC のビームライン(BL)アップグレードに関する取り組みについて概要説明がありました。また、昨年度末に行われました SPRUC BLs アップグレード検討ワークショップについて、藤原明比古氏(関西学院大学)より補足説明がありました。さらに最新の施設の取り組み状況について、矢橋氏より、最新の BL 再編の動きについての報告がありました。後半の討論では、「議題Ⅰ:BLの再編」および「議題Ⅱ:SPring-8-II の光源性能を活かした研究」について、パネリストおよび会場の方々から多様な意見やコメントが飛び交いました。議題Ⅰでは、主に、汎用・先端・革新的とする BL 再定義と、再編計画および BL 利用制度について、一般ユーザー、専用 BL、産業界それぞれの視点から意見が交わされました。議題Ⅱでは、SPring-8-II の光源性能情報の確認と、期待される高エネルギーX線利用例の提示、さらには他施設と比較した時の求めるべき特徴へと話が展開されました。議論は熱く、会場からの質問や意見も多数あり、休憩時間を削っての討論となりました(写真8、9)。



田中義人氏



藤原明比古氏



矢橋牧名氏



上杉健太郎氏



有馬孝尚氏



西堀英治氏



坂田修身氏



本間穂高氏

写真8 情報提供や意見表明をされたパネルディスカッション参加者の方々





写真9 会場の方々からも多様な意見やコメントが出されたパネルディスカッションの様子

#### セッションⅣ SPRUC 総会・YSA 受賞講演、授賞式

白熱したパネルディスカッションの後、シンポジウム初日の最後のセッションでは、SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 総会、Young Scientist Award (YSA) 授賞式、受賞講演が行われました。総会では、まず、行事、予算、研究会での活動状況と評議員会での議題についての報告がされました。評議員会の報告では、広島大学の木村昭夫教授が次期会長に選出されたこと、SPB の設置が認められたことなどが報告されました。審議事項では、会員資格の会則改定に関わる審議が行われ、承認されました。これにより、会員資格の見直しは、年度末に一括して行うこととなりました。続いて、SPRUC 2019 YSA 授賞式が行われました。冒頭、尾嶋正治選考委員長より、10 名の応募があり、生物系と物質系からそれぞれ 1 名、計 2 名を受賞者としたこととそれぞれの受賞理由の紹介がありました。今回も高いレベルの競争となったものの、本賞の特徴である利用法や解析手法の開発、あるいは 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があった 2 名に決定したという説明もありました。



写真10 SPRUC 2019 YSA 授賞式。左から水木会長、志甫谷氏、久保田氏、尾島委員長。

その後、水木会長より東京大学の志甫谷渉氏と JASRI の久保田雄也氏にそれぞれ賞状と楯が授与されました。授賞式の後、志甫谷氏と久保田氏による受賞講演が行われました (写真 10)。

#### 懇親会

YSA 受賞公演の後、130 名を超える参加者がメイン会場の道路を挟んだ向かい側にあるピーチユニオン 3 階に移動し、「懇親会」が開催されました。懇親会是水木純一郎 SPRUC 会長の開会の辞で始まり、理研放射光科学研究センターの石川哲也センター長より挨拶がありました。その後、池田直シンポジウム実行委員長より乾杯の挨拶がありました。途中、SPRUC 2019 YSA 受賞者お二人からのスピーチがあり、今回受賞された研究成果につながるエピソードが紹介されました。最後は、JASRI 両宮理事長の閉会の辞で締めくくられました。SPring-8 の今後 20 年に向けての具体的な取り組みについて参加者の間で熱く意見が交わされ、大いに盛り上がった懇親会となりました。

#### セッションⅤ 産業連携

シンポジウム 2 日目の「産学連携」セッションでは 6 件の講演がありました。高橋幸生氏 (東北大学) (写真 11) は最先端のタイコグラフィー-XAFS 法の開発と情報科学を用いた触媒研究への応用の話をし、山本健太郎氏 (京都大学) (写真 12) は時分割 X 線回折を用いたリチウムイオン電池正極材料の準安定相の観察と材料設計における非平衡反応技術の重要性を示しました。徳田一弥氏 (住友電気工業) (写真 13) は実用化したレドックスフロー電池の低コスト化の課題解決に XAFS、



写真11 高橋幸生氏 (東北大学)



写真12 山本健太郎氏 (京都大学)



写真13 徳田一弥氏 (住友電気工業)



写真14 吉岡太陽氏 (農研機構)



写真15 山根宏之氏 (理研)



写真16 野中敬正氏 (豊田中央研究所)

PDF 解析、シミュレーションを組み合わせた研究を紹介し、吉岡太陽氏 (農研機構) (写真 14) は次世代構造材料として期待されるミノムシシルクの階層構造の動的構造変化を小角散乱法で明らかにしました。山根宏之氏 (理研) (写真 15) は新規接合技術により作られた複合材の接着接合界面の研究に軟 X 線顕微分光法が有用であることを報告し、野中敬正氏 (豊田中央研究所) (写真 16) は硬 X 線を用いて軽元素の XAFS 情報が得られる X 線ラマン散乱分光法の開発とリチウムイオン電池黒鉛負極のその場状態解析の応用例を示しました。全ての講演は応用研究または計測技術の最先端の内容であったこともあり、活発な質疑応答が行われました。

#### セッション VI ポスターセッション

ポスターセッションは、1 階交流サロンと 2 階小会議室および廊下において行われました (写真 17)。今年度の発表件数は、SPRUC 研究会 34 件、共用 BL12 件、理研・専用 BL21 件、施設 2 件、パートナーユーザー 7 件、長期利用課題 12 件および新分野創成利用課題 2 件の合計 90 件でした。ポスター番号の偶奇別に 1 時間 10 分ずつのコアタイムが設定され、活発な議論が行われました。会場の間口が広く、スペースにも余裕があったためか、例年よりも快適なポスターセッションだと感じられました。

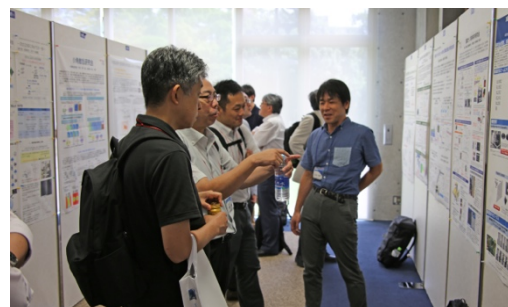
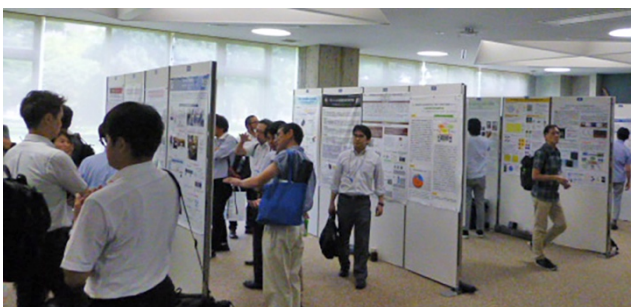


写真 17 活発な議論が行われたポスターセッション





写真18 吉村浩司氏 (岡山大学)



写真19 沈建仁氏 (岡山大学)



写真20 松尾光一氏 (慶應義塾大学)

### セッション VII 利用トピックス

このセッションでは、3名の研究者による講演がありました。

最初は、吉村浩司氏 (岡山大学) (写真18) による、「高輝度X線によるトリウム-229極低エネルギーアイソマーの能動的生成～究極の原子核時計に向けての第一歩～」と題した講演でした。原子核としては極めて低いエネルギーの励起準位 (アイソマー状態) を持つトリウム-229を用いて、SPring-8高輝度放射光X線により第二励起状態を経由してアイソマー状態の生成を確認したことが報告されました。

続いて、沈建仁氏 (岡山大学) (写真19) により、「SPring-8とSACLAを利用した光合成水分分解反応機構の解明」と題した講演がなされました。光合成において起こる反応のうち、太陽光エネルギーを利用した水分分解反応の触媒中心である $Mn_4CaO_5$ クラスターの詳細な構造を解析し、S状態遷移モデルのうちS3状態までが解明されたことが報告されました。

最後に、松尾光一氏 (慶應義塾大学) (写真20) が、「マウス耳小骨のタルボ位相イメージング」の題目で講演し、光学系の改良と生物試料作成法の改善により、これまで見えなかった細胞と高次形態との関連が議論できるようになったことが報告されました。観測することの重要性を再認識させられる成果でした。

SPring-8/SACLAの計測技術の発展と個々の研究者の得意とする部分がうまく噛み合って、これまで不可能であった測定が可能になり、それによって新たな研究領域が拡大している様子が見て取れました。高輝度放射光の威力を再認識させられました。

### セッション VIII SPring-8-II に向けた研究展開

セッション VIII 「SPring-8-II に向けた研究展開」では、4件の講演が行われました。

伊藤聡氏 (物質・材料研究機構) (写真21) は「マテリアルズインフォマティクスでできること」として、圧力誘起超伝導体、ナトリウムイオン二次電池正極材料、高熱伝導性高分子などを探索した事例を挙げながら、データプラットフォームの在り方、使いやすいデータベースの条件、データの用法について講演されました。材料データの絶対数が少ないという問題点は、転移学習などの手法を使ったり、計算科学を利用することで人工的にビッグデータを生成したりして克服したそうです。SPring-8のデータを再利用できる仕組みを構築するなどによりデータプラットフォームの一端を担う可能性などについても議論が展開されました。

百生敦氏 (東北大学) (写真22) は、三次元空間軸および時間軸の計四次元空間でイメージングする方法として、「X線 Talbot 干渉計を用いた 4D 位相 CT



写真21 伊藤聡氏 (物質・材料研究機構)





写真22 百生敦氏 (東北大学)



写真23 辻野典秀氏 (岡山大学)



写真24 宇留賀朋哉氏 (JASRI)

「高分子レーザー加工モデルへの応用」を紹介されました。放射線損傷を軽減するため、BL28B2に多層膜ミラーを設置し25 keVを中心としたバンド幅10%のピンクビームを作り出し、測定に用いています。高速二次元検出器の導入や、動画観測用の解析アルゴリズムの開発により、高分子材料がレーザー加工される様子をサブミリ秒の時間分解能で撮像し、高分子材料ごとに加工の過程が異なることが可視化されていました。

辻野典秀氏 (岡山大学) (写真 23) は、「高温高压下での変形実験と X 線その場観察」により行われている地球の下部マントルの流動特性の研究を紹介されました。BL04B1 に設置された川井式マルチアンビルセルを利用することで三軸変形川井式マルチアンビル装置を立ち上げて下部マントルの圧力条件での変形実験を可能にしたとのことでした。その結果得られた下部マントルの主成分岩石であるブリッジマナイトの選択配向や粘性について講演されました。

宇留賀朋哉氏 (JASRI) (写真 24) は、触媒反応をリアルタイムで解析するために構築した「BL36XU におけるマルチ同時/同時系列計測システム」を紹介されました。時間分解 XAFS/XRD 同時計測によって、化学状態と構造の時間変化を 60 ms の時間分解能で計測することが可能になっています。さらに、CT、発光分光などの手法も測定可能とのことでした。この計測システムを用いて、燃料電池の電極触媒に関する化学状態と構造の変化を研究した事例について講演されました。

一連の講演を通じて、SPRING-8-II において謳われている高エネルギービームやピンクビームの利用によ

って期待される研究展開の一端が垣間見えました。また、汎用ビームラインの在り方や、進化するオペランド計測の今後についても、議論の一助となったと思われます。

#### セッション IX クロージング

クロージングセッションでは、主催機関を代表して富田栄二岡山大学大学院自然科学研究科長 (写真25) より閉会の挨拶がありました。ご自身もSPRING-8ユーザーであるとともに、岡山大学では特に自然科学研究科において100名程度のユーザーがおり、活発な研究とともに、人材育成にも取り組んでいることに触れられました。最近接の国立大学として、放射光科学に意欲ある若手育成と活発な研究の推進により、世界的な研究を切り開く人材の育成に貢献したい、と締めくくられました。

最後に、司会の水木会長より、速報として参加者数が358名 (その後の精査で359名の参加者となりました) と多数であったことの報告、および実行委員を始めとした関係者、参加者へのお礼の言葉がありました。



写真25 岡山大学 富田栄二研究科長

SPring-8 シンポジウム 2019 プログラム

8月30日(金)

セッションⅠ オープニング <創立五十周年記念館 金光ホール>

座長：池田 直

(SPring-8 シンポジウム 2019 実行委員長、岡山大学)

13:00-13:05 開会挨拶

水木 純一郎 (SPRUC 会長、関西学院大学 特任教授)

13:05-13:25 挨拶

石川 哲也 (理化学研究所 放射光科学研究センター センター長)

雨宮 慶幸 (高輝度光科学研究センター 理事長)

槇野 博史 (岡山大学 学長)

来賓挨拶

奥 篤史 (文部科学省 科学技術・学術政策局 研究開発基盤課 量子研究推進室 室長)

セッションⅡ SPring-8 この1年 <同 金光ホール>

座長：中川 敦史 (SPRUC 前会長、大阪大学)

13:40-13:45 SPRUC この1年とこれからの1年

水木 純一郎 (SPRUC 会長、関西学院大学)

13:45-14:00 この一年の進捗

石川 哲也 (理化学研究所)

14:00-14:20 共用ビームラインの現状と課題

櫻井 吉晴 (高輝度光科学研究センター)

セッションⅢ パネルディスカッション <同 金光ホール>

司会 (モデレータ)：田中 義人 (SPRUC 幹事、兵庫県立大学)

14:30-16:10 パネリスト：矢橋 牧名 (理化学研究所/施設)

上杉 健太郎

(高輝度光科学研究センター/施設)

有馬 孝尚 (東京大学/SPRUC)

西堀 英治 (筑波大学/SPRUC)

坂田 修身

(物質・材料研究機構/専用施設)

本間 穂高

(日本製鉄株式会社/産業利用)

セッションⅣ SPRUC 総会・YSA 受賞講演、授賞式

<同 金光ホール>

司会：藤原 明比古 (SPRUC 幹事、関西学院大学)

16:30-16:50 SPRUC 活動報告、2018 年度決算・2019 年度予算報告等

16:50-17:00 SPRUC 2019 Young Scientist Award 授賞式

17:00-17:15 SPRUC 2019 Young Scientist Award 受賞講演 1 創業標的であるエンドセリン受容体 B 型の構造機能解析

志甫谷 渉 (東京大学)

17:15-17:30 SPRUC 2019 Young Scientist Award 受賞講演 2 新しい放射光光源で切り拓く軟 X 線磁気光学の展開

久保田 雄也 (高輝度光科学研究センター)

18:00-19:30 懇親会 <ピーチユニオン 食堂>

司会：横谷 尚睦

(SPring-8 シンポジウム 2019 実行委員、岡山大学)

8月31日(土)

セッションⅤ 産学連携 <創立五十周年記念館 金光ホール>

座長：櫻井 吉晴 (高輝度光科学研究センター)

09:00-09:20 タイコグラフィー-XAFS 法による触媒粒子のナノ構造・化学状態可視化

高橋 幸生 (東北大学)

09:20-09:40 蓄電デバイスにおける非平衡反応解析

山本 健太郎 (京都大学)

09:40-10:00 レドックスフロー電池電解液中の金属イオン状態の解析

徳田一弥 (住友電気工業株式会社)

10:00-10:20 次世代構造材料として期待されるミノムシシルク ～産学連携を加速させた SPring-8 での構造研究～

吉岡 太陽 (農業・食品産業技術総合研究機構)

10:20-10:40 次世代モビリティ材料の接着接合：放射光の可能性と課題

山根 宏之 (理化学研究所)

10:40-11:00 X線ラマン散乱分光による Li イオン電池黒鉛負極のその場状態解析

野中 敬正 (株式会社豊田中央研究所)

セッションⅥ ポスターセッション

<同 1 階交流サロン・2 階中小会議室他>

11:00-13:20 (コアタイム奇数 11:00-12:10、偶数 12:10-13:20)

SPRUC 研究会 34 件

共用 BL 12 件

理研・専用 BL 21 件

施設 2 件

パートナーユーザー 7 件

長期利用課題 12 件

新分野創成利用課題 2 件

合計 90 件

セッションⅦ 利用トピックス <同 金光ホール>

座長：横谷 尚睦 (SPRUC 幹事、岡山大学)

13:20-13:40 高輝度 X 線によるトリウム-229 極低エネルギーアイソマーの能動的生成 ～究極の原子核時計に向けての第一歩～

吉村 浩司 (岡山大学)

13:40-14:00 SPring-8 と SACLA を利用した光合成水分解反応機構の解明

沈 建仁 (岡山大学)

14:00-14:20 マウス耳小骨のタルボ位相イメージング

松尾 光一 (慶應義塾大学)

セッション VIII SPring-8-II に向けた研究展開

<同 金光ホール>

座長：有馬 孝尚 (SPRUC 利用委員長、東京大学)

14:30-14:50 **マテリアルズインフォマティクスでできること**

伊藤 聡 (物質・材料研究機構)

14:50-15:10 **X 線 Talbot 干渉計を用いた 4D 位相 CT - 高  
分子レーザー加工モデルへの応用 -**

百生 敦 (東北大学)

15:10-15:30 **高温高圧下での変形実験と X 線その場観察**

辻野 典秀 (岡山大学)

15:30-15:50 **BL36XU におけるマルチ同時/同時系列計測シ  
ステム**

宇留賀 朋哉 (高輝度光科学研究センター)

セッション IX クロージング <同 金光ホール>

座長：水木 純一郎 (SPRUC 会長、関西学院大学)

15:50-16:00 **閉会挨拶**

富田 栄二 (岡山大学 大学院自然科学研究科長)

横谷 尚睦 *YOKOYA Takayoshi*

岡山大学 異分野基礎科学研究所

〒700-8530 岡山県岡山市北区津島中 3 丁目 1-1

TEL : 086-251-7897

e-mail : yokoya@cc.okayama-u.ac.jp

田中 義人 *TANAKA Yoshihito*

兵庫県立大学 大学院物質理学研究科

〒678-1297 兵庫県赤穂郡上郡町光都 3-2-1

TEL : 0791-58-0139

e-mail : tanaka@sci.u-hyogo.ac.jp

## 第 16 回 SPring-8 産業利用報告会

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
放射光利用研究基盤センター 産業利用推進室  
佐藤 眞直

### 1. はじめに

産業用専用ビームライン建設利用共同体（サンビーム共同体）、兵庫県、(株)豊田中央研究所、(公財)高輝度光科学研究センター（JASRI）、SPring-8 利用推進協議会（推進協）の 5 団体の主催、及びフロンティアソフトマター開発専用ビームライン産学連合体（FSBL）、SPRUC 企業利用研究会、光ビームプラットフォーム、(一財)総合科学研究機構中性子科学センター（CROSS 東海）、(一財)高度情報科学技術研究機構（RIST）、茨城県、あいちシンクロトロン光センター、佐賀県立九州シンクロトロン光研究センター、中性子産業利用推進協議会の協賛で第 16 回 SPring-8 産業利用報告会が 9 月 5 日、6 日に川崎市産業振興会館において開催された。

本報告会は、主催団体の 4 団体（サンビーム共同体、兵庫県、(株)豊田中央研究所、JASRI）がそれぞれ運用する専用及び共用ビームラインにおける成果の報告会のジョイントとして構成され、その目的は、(1) 産業界における放射光の有用性を広報するとともに、(2) SPring-8 の産業利用者の相互交流と情報交換を促進することにある。また、SPring-8 立地自治体の兵庫県が SPring-8 の社会全体における認識と知名度を高める目的で 2003 年度より設置した「ひょうご SPring-8 賞」の第 17 回受賞記念講演が今年も併催された。

2004 年の開催から 16 回を数える今回の総参加者は 258 名で、口頭発表やポスター発表、技術交流会において活発な議論と産業分野を跨いだ交流が行われ、今回も前述の開催目的に沿った、SPring-8 の産業利用の「今」を伝える最良の情報発信の機会となった。

### 2. 口頭発表（1 日目）

報告会 1 日目の口頭発表は、9 月 5 日の午後 1 時より会場 1 階のホールにおいて行われた。最初のセッション 1

の開催挨拶は、主催団体を代表して JASRI の雨宮理事長から挨拶があり、日本の科学技術力の競争力維持に対する放射光科学の重要性を述べられるとともに、放射光科学を活用した産業界における「チャレンジ」を促す上での産学連携の大切さと難しさについての考えに言及され、この産学連携の促進には産業界と学術界のコミュニケーションが大事であり、本報告会のような場でぜひ活発化してほしいとの希望を述べられた。

次のセッション 2では、「兵庫県成果報告会」が行われた。まず横山放射光ナノテクセンター長から、SPring-8 の兵庫県ビームライン（BL08B2、BL24XU）とニュースバルにおける産業利用の取り組みの現状について報告があり、その後、これら施設の利用成果について 5 件の発表があった。

最初の発表は、(株)豊田中央研究所の米山氏より、「樹脂／金属直接接合体における樹脂結晶化度が気密性に及ぼす影響」というタイトルで、車体の部材として用いられる樹脂（PPS）とアルミの直接接合体において、接合界面の気密性が樹脂の成型条件に依存するメカニズム検討のため、マイクロビーム X 線散乱により PPS／アルミ接合界面近傍の PPS の結晶状態の分布を評価し、その結晶状態と気密性の相関を調べた



写真 1 口頭発表の様子

結果について報告があった。(株)神戸製鋼所の小澤氏からは、「放射光と計算科学を活用した金属材料劣化挙動の解析」というタイトルで、鉄鋼材料の腐食表面について転換電子収量法による 2 次元 XAFS 測定を行い、得られた Fe-K 吸収端の XAFS スペクトルのマッピングデータから NMF-SO 法による多変量解析によって腐食生成物の組成分布を評価した結果を発表された。(株)アトラステクノサービスの鯛氏からは、「真空フライによるケールの高機能化と構造・機能性・おいしさ評価」というタイトルで、真空下で食用油を熱媒体として食品を 100°C 以下の低温で加熱することにより食品へのダメージを抑えて乾燥処理することができる調理法「真空フライ法」を施したケールについて、原料の収穫時期や下処理の違いによる内部組織や化学成分分布への影響を X 線 CT 及び蛍光 X 線分析によって評価した結果について報告された。兵庫県立大学の中西氏からは、「動作中蓄電池材料中軽元素成分の反応解析とニュースバル放射光施設 軟 X 線 XAFS の将来構想」というタイトルで、ニュースバルの BL05A/B、BL06 ビームラインにおいて取り組んでいるリチウム 2 次電池の充放電動作中の評価を目的としたオペランド S-XAFS 測定技術の開発及びビームラインの整備状況について報告された。兵庫県立大学の山口氏からは、「シンクロトロン光プロセス」というタイトルで、ニュースバルで取り組まれている LIGA プロセスによる微細加工技術の開発研究の現状について紹介された。

セッション 3 の「第 19 回サンビーム研究発表会」では、サンビーム共同体幹事の住友電気工業 (株) の山口氏から報告された共同体の活動趣旨説明の後、同共同体が運用する SPring-8 の産業用専用ビームラインサンビーム (BL16B2、BL16XU) を利用した共同体参加企業の成果について 5 件の発表があった。

最初にパナソニック (株) の関本氏から、「HAXPES による有機-無機ハライドペロブスカイト太陽電池の接合界面解析」というタイトルで、鉛系有機-無機ハライドペロブスカイト (OIHP) 太陽電池の光劣化メカニズムについて OIHP 層/電子・正孔輸送層界面近傍の構成元素 (Pb、I) の化学状態と光劣化の相関評価を HAXPES 測定によって行い検討した結果について報告された。日産自動車 (株) の秦野氏からは、「高エ

ネルギーバッテリー開発における放射光利用解析技術」というタイトルで、リチウムイオン電池の高容量化活物質であるシリコン系負極材の耐久性向上のカギである電解液との副反応抑制を目的として同負極材の反応表面を HAXPES 測定で評価した結果について報告された。(一財)電力中央研究所の小林氏からは、「充放電サイクルによるリチウムイオン電池の正負極における運用領域変化の非破壊解析」というタイトルで、電力貯蔵用リチウムイオン電池の劣化メカニズム解明をもとにした寿命予測を目的として、充放電過程におけるラミネートセル中の正負極材の結晶構造変化を高エネルギー X 線を用いた時分割その場 X 線回折測定によって評価した結果について報告された。大阪大学の林田氏からは、「硫酸ミスト環境において金属塩含有樹脂を被覆した炭素鋼に形成した腐食生成物の XAFS 解析」というタイトルで、火力発電所の排ガス下の厳しい酸性腐食環境における鉄鋼材耐食性向上技術として考案された Ni イオン (NiSO<sub>4</sub>) 含有樹脂塗布技術に対する関西電力 (株) 及び同技術を開発した (株) 京都マテリアルズとの共同研究で、鉄腐食生成物に対する Ni イオン添加の効果について Ni-K 吸収端の XAFS 測定により検討した結果を報告された。ソニー (株) の稲葉氏からは、「X 線吸収微細構造と X 線回折による GaInN/GaN 単一量子井戸の解析」というタイトルで、GaInN/GaN 量子井戸構造を持つ LED や LD 等の発光デバイスにおける発光効率の劣化原因となると考えられる In の凝集に起因する組成むらについて X 線回折と XAFS を用いて評価した結果を報告された。

### 3. 技術交流会

この後行われた技術交流会では、総参加者の約半数近くの 117 名が参加し、活気溢れる雰囲気の中で行われた。最初に SPring-8 利用推進協議会副会長の川崎重工 (株) 牧村顧問代理の同社技術開発本部技術研究所 洲河部長から開会の辞が述べられた後、理化学研究所放射光科学研究センターの石川センター長から挨拶が述べられた。乾杯はサンビーム共同体運営委員長の住友電気工業 (株) の木村氏から挨拶された。

例年同様、産業分野と産学官の所属を跨いだ、幅広い SPring-8 利用者間の熱い交流が行われ、正に



SPring-8 産業利用の「多様性」を象徴する会となった。

1 時間半ほどの歓談の後、閉会の辞が川崎重工(株) 技術研究所テクニカルアドバイザーの巽氏から述べられ、盛会のうちに終了した。

#### 4. 口頭発表 (2 日目)

2 日目は、午前9時30分より口頭発表のセッション 4「JASRI 共用ビームライン実施課題報告会」から始まり、6 件の共用ビームラインの利用成果が報告された。

まず、東京理科大学の石田氏から、「ソフト化学法により合成したリチウム電池正極材料」というタイトルで、リチウムバッテリーの低コスト化、高容量化を目指した開発における次世代正極材料の候補である Mn 系正極材料について、その化学組成を放射光 X 線回折、中性子回折、XAFS を用いた多面的分析により解析した成果について報告された。京都大学の中村氏からは、「薄膜エレクトロニクスのための n 型有機半導体の分子配向制御」というタイトルで、ペロブスカイト太陽電池の電子輸送層を担う有機半導体薄膜について、BL19B2 において実施した微小角入射 X 線回折測定による配向評価で検証しながら進めてきた分子構造設計による配向制御技術開発の成果を報告された。住友電気工業(株)の館野氏からは、「HAXPES によるポテンシャルプロファイル導出における電子・正孔対発生の影響の研究」というタイトルで、AlGaIn/GaN 高移動度トランジスタにおいて課題となる電流コラプス(高電圧で動作させるとオン抵抗が大きくなる)の抑制を目的として、その原因と考えられるヘテロエピ界面での電子の捕獲につながる界面近傍のポテンシャル分布の HAXPES (BL46XU) による評価の成果について、特に放射光入射によって発



写真 2 口頭発表における聴講者の様子

生した電子・正孔対の影響を考慮して解析した解析結果を報告された。(株)大阪合金工業所の小川氏からは、「シンバルの減衰特性に対する金属組織の影響」というタイトルで、シンバルの音色を決めるパラメータの 1 つである音の減衰時間の制御メカニズムの解明を目的として、BL19B2 で実施した高エネルギー X 線回折による素材の合金組成及び加工プロセスに依存するシンバル中の結晶組成と減衰特性の相関評価の結果について報告された。(株)神戸製鋼所の山口氏からは、「高分解能観察を利用した Al-Fe 系金属間化合物の晶出挙動の解明」というタイトルで、アルミニウムの再利用において課題となる混入した不純物金属との合金析出挙動の制御技術開発を目的として BL20XU で実施した、難除去元素である Fe と Al の化合物の溶融状態からの晶出形態の時分割透過 X 線イメージングによるその場観察の結果について報告された。東京理科大学の小嗣氏からは、「X 線回折による貴金属フリー規則合金薄膜の構造評価」というタイトルで、貴金属フリーで高磁気異方性を示す新規機能性材料として期待される Li<sub>0</sub>型 FeNi 規則合金のパルスレーザー蒸着法による合成成膜技術の開発研究について、同方法で作成した薄膜の磁気異方性と、BL46XU で実施した異常分散効果を活用した微小角入射 X 線測定で評価した Li<sub>0</sub>型結晶構造の規則度との相関について検討した結果を報告された。

昼食休憩をはさんだポスターセッションの後、午後 3 時より開始されたセッション 5 の「第 10 回豊田ビームライン研究発表会」では、豊田ビームライン BL33XU において(株)豊田中央研究所が実施した研究成果 2 件が発表された。

1 件目の上山氏の発表では、「機械学習による放射光ラミノグラフィ像の高画質化」というタイトルで、ハイブリッド車や電気自動車の制御を担うパワーモジュールの信頼性向上を目的とした異種接合部の疲労破壊メカニズム検討の為に実施したラミノグラフィ法を用いた X 線イメージングによるパワーモジュール内部非破壊観察について、機械学習を用いて同手法で課題となるアーティファクトの低減対策を検討した結果を報告された。2 件目の樋口氏の発表では、「3 次元放射光イメージングによる燃料電池触媒層のクラック起点解析」というタイトルで、触媒微粒子の分

散液の塗布・乾燥によって製膜されている燃料電池の触媒層について、その製膜時に発生するクラックの発生メカニズムを検討するために実施したその場 X 線イメージング測定とラミノグラフィ測定の結果を報告された。

セッション 6 の「ひょうご SPring-8 賞受賞記念講演」は、午後 3 時 40 分より開催された。今年度はクラシエホームプロダクツ (株) の築瀬氏が、「ナノ構造情報に基づく乾燥肌を惹起しないボディウォッシュの開発」で受賞された。講演では、ボディウォッシュで課題となる風呂上がりの皮膚の乾燥抑制を目的とした技術開発研究において、皮膚のバリア機能を担う角質層の細胞間脂質のラメラ構造に対してボディウォッシュの主成分である界面活性剤が及ぼす影響について SPring-8 で実施した小角 X 線散乱測定によって得た知見をもとに皮膚角質層の損傷を抑制した商品開発に成功した経緯をご紹介いただいた。

最後のセッション 7 では、(公財) 科学技術交流財団あいちシンクロトロン光センターの竹田所長から報告会全体の講評をいただいた。まず、産業利用分野が非常に広がってきていることが印象的であったことを述べられ、分野拡大において重要な新規の放射光ユーザーの入口をどうするかという課題について、コーディネーター等の間に立つ施設側のスタッフの資質が産学問わず大切であるというご意見を、あいちシンクロトロンの経験を踏まえて提言された。また、外部発表を主要なミッションとしない産業利用において成果のアピールが施設側の課題になる点について言及され、この成果の深化において産学連携を活用してほしいという希望を述べられた。最後に、JASRI 山口常務理事から閉会の挨拶が述べられ終了した。

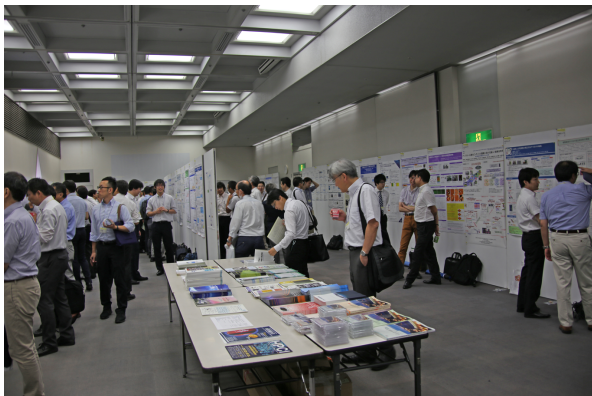


写真 3 ポスター会場の様子

## 5. ポスター発表

セッション 4 の後、ポスター発表が昼食休憩をはさんで午前 11 時 40 分からと午後 1 時 40 分からの 1 時間ずつ 2 回のコアタイムを設けて会場 4 階の企画展示場で行われた。主催団体のサンビーム共同体 28 件、兵庫県 23 件、豊田中央研究所 7 件、JASRI 共用ビームライン 33 件、協賛の FSBL から 2 件、SPRUC の分野融合研究グループから 2 件 (ナノデバイス科学、実用) の計 95 件の研究成果発表のポスターに加えて、ひょうご SPring-8 賞、SPring-8 利用推進協議会、茨城県、CROSS 東海、RIST、中性子産業利用推進協議会、あいちシンクロトロン光センター、光ビームプラットフォーム、佐賀県立九州シンクロトロン光研究センター、SPRUC 企業利用研究会、JASRI (産業利用推進室、利用推進部) から合わせて 21 件の施設紹介や利用制度、利用者動向などのポスターが掲示された。今年、(1) 装置・分析技術、(2) エネルギー・資源・電気化学、(3) 触媒、(4) 高分子・有機材料、(5) 半導体・電子材料、(6) 食品、(7) 金属・機械、(8) ビームライン、(9) その他、の分類で展示された。第 11 回よりこの分野別展示が実施されるようになってから、各分野で共通の興味を持つ参加者が集まりやすくなり、より充実した議論が交わされるようになったが、さらに自分の分野と違う分野のポスターの前で質疑をしている参加者も見られ、分野間の交流も進んでいる様子もうかがわれた。

## 6. おわりに

こうして本年の産業利用報告会が無事、盛況のうちに終えることができた。準備段階から当日の会場運営、さらに事後の取りまとめなど、主催 5 団体の事務局のご尽力と共催団体の関係者各位のご協力にこの場を借りて感謝の意を表したい。

佐藤 真直 SATO Masugu

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



## 第3回 SPring-8 秋の学校を終えて

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 行事幹事 (秋の学校担当)  
 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 大和田 謙二

### 秋の学校概要

第3回 SPring-8 秋の学校が、9月8日(日)～9月11日(水)の3泊4日の日程で開催されました。SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) と高輝度光科学研究センター (JASRI) が主催し、大学や関係諸機関の協力の下に行われました。校長は SPRUC 会長の関西学院大学特任教授水木純一郎先生にご就任いただき、事務局は JASRI 利用推進部が担当いたしました。

SPRUC が主催として加わる「SPring-8 秋の学校」は、SPring-8 ユーザーの発掘、ひいては次世代の放射光科学に貢献する人材の発掘を目指しています。放射線業務従事者登録や学年、指定校推薦などの参加資格の制限はなく、卒業研究や大学院進学を控えた方々が進路を考える機会、また、これから放射光の利用を考えている大学院生や企業研究者の方々へ放射光を知っていただく機会、となることを趣旨としています。

今回から社会人の参加費を有料 (2万円) とする新たな試みが始まりました。そのような状況の中、今回、27校6社 (大学含む) から秋の学校側が想定する定員を超える 62名の参加を得ました。内訳は次の通り

です。学生 53名 (学部2年生1名、学部3年生6名、学部4年生24名、高専専攻科2年1名、博士課程前期1年15名、博士課程前期2年4名、博士課程後期2年1名、博士課程後期3年1名)、社会人9名 (企業からの参加7名、大学関係者2名)。男性49名、女性13名。38名が SPring-8/SACLA の今年度の放射線業務従事者登録“なし”でした。第2回 SPring-8 秋の学校の実績：参加者45名 (学生25名、社会人20名) と比べると社会人が減り、学生参加者が大幅に増加しておりました。



図1 講義風景

### 第3回 SPring-8 秋の学校 日程表

	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
9/8 (日)		～10:30 受付	10:30-11:20 開校式 「SPring-8紹介」	11:20-12:50 ≪基礎講義1≫ 放射光発生の基礎	12:50-14:00 昼食	14:00-15:30 ≪基礎講義2≫ ビームライン	集合写真 撮影 休憩	15:30-17:20 ≪基礎講義3≫ X線検出器の基礎		18:00-19:30 懇親会	
9/9 (月)	9:00-10:20 ≪講義4≫ X線自由電子レーザー入門	休憩	10:30-11:50 ≪基礎講義5≫ X線回折入門 ～回折・散乱の基礎と 構造解析への応用～	11:50-13:00 昼食	13:00-15:00 SPring-8実験ホール SACLA見学	休憩	15:10-16:30 ≪基礎講義6≫ XAFSの基礎	休憩	16:40-18:00 ≪基礎講義7≫ X線イメージング	18:00-19:30 夕食	
9/10 (火)			9:30-13:00 グループ講義1		13:00-14:00 昼食		14:00-17:30 グループ講義2			18:00-19:30 懇親会BBQ	
9/11 (水)			9:30-13:00 グループ講義3		13:00-14:00 昼食	14:00-15:30 SPring-8最終リング 加速器収縮部見学	15:30- 開校式				

### カリキュラムについて

カリキュラムは、初日に3講座、2日目に4講座の基礎的な講義を行い、その後の2日間に3テーマのグループ講習が行われました。参加者は以下の「グループ講習について」で示す11テーマから希望する3テーマを選択し、受講しました。2日目には、SACLAとSPRING-8実験ホール一周の見学、最終日にはSPRING-8蓄積リング加速器収納部の見学が行われました。参加者のバックグラウンドは多様であり、参加者間の異分野・世代間交流を深めるために、懇親会やバーベキューも行われました。今年のカリキュラムは以下の通りでした。

### 基礎講義について

基礎講義内容と担当者(敬称略)は以下の通りです。工夫が凝らされ大変わかりやすく、参加者にとって満足のゆく講義であったと思われます。

#### 基礎講義 1. 放射光発生の基礎

金城良太(理化学研究所)

#### 基礎講義 2. ビームライン

～光源と実験ステーションを繋ぐもの～  
仙波泰徳(高輝度光科学研究センター)

#### 基礎講義 3. X線検出器の基礎

雨宮慶幸(高輝度光科学研究センター)

#### 基礎講義 4. X線自由電子レーザー入門

大坂泰斗(理化学研究所)

#### 基礎講義 5. 回折・散乱の基礎と構造解析への応用

藤原明比古(関西学院大学)

#### 基礎講義 6. XAFSの基礎

新田清文(高輝度光科学研究センター)

#### 基礎講義 7. X線イメージング

籠島靖(兵庫県立大学)

### グループ講習について

グループ講習のテーマと担当者(敬称略)は以下の通りであり、主にはSPRUC研究会よりご提案いただきました。SPRING-8施設の停止期間中ではありましたが、現地にて実際の装置やデータを手に取って進めることで効果的な講習になったと思われます。

#### 1. 単結晶構造解析

橋爪大輔・星野学(理化学研究所 CEMS)

杉本邦久(高輝度光科学研究センター)

#### 2. 粉末X線回折によるその場観測の実際

石橋広記(大阪府立大学)

河口彰吾(高輝度光科学研究センター)

#### 3. タンパク質結晶構造解析

水島恒裕・西尾和也(兵庫県立大学)

#### 4. 小角X線散乱

増永啓康(高輝度光科学研究センター)

#### 5. 応力・ひずみ解析

秋庭義明(横浜国立大学)

富永亜希(日本原子力研究開発機構)

城鮎美(量子科学技術研究開発機構)

#### 6. X線回折・散乱を用いた薄膜構造評価

小金澤智之(高輝度光科学研究センター)

#### 7. X線吸収分光法

山添誠司(首都大学東京)

新田清文(高輝度光科学研究センター)

#### 8. 軟X線分光

原田慈久・松田巖(東京大学)

#### 9. 赤外分光分析

池本夕佳・森脇太郎(高輝度光科学研究センター)

#### 10. 光電子分光(HAXPES)

保井晃(高輝度光科学研究センター)

#### 11. X線CT入門

上杉健太郎・八木直人(高輝度光科学研究センター)

SPRING-8秋の学校は今回が3回目、SPRING-8のイベントとして少しずつ定着してきたと思われていますが、先の概要で申し上げた開催趣旨以外は、その取り組み方を開催ごとに見直しております。今回からは、社会人参加者の参加費を有料とさせていただきます。この

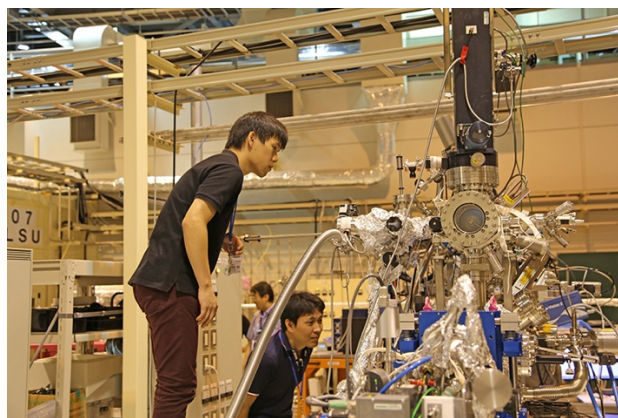


図2 グループ講習風景

件との因果は不明ですが、今回の社会人参加者は前回の半分程度にとどまりました。一方、兵庫県立大学がSPring-8 秋の学校を大学院新設コースでの講義・実習の単位の一部として認定したことなどがあり、学生参加者は倍増し、結果としては60名を超える参加者となりました。参加人数や参加者の構成は年ごとに波があると思いますが、参加者に実施したアンケートによれば、どのようにSPring-8 秋の学校を知ったか(複数回答可)については「周囲の勧めで」が最も多く、ここに改めて、皆様のご支援に感謝申し上げますとともに、今後とも噂か噂を呼ぶような良い循環が出来上がりますことを期待したいと思います。

次回以降、アンケートの分析結果をもとにSPring-8 秋の学校をどのような方向に発展させていくかはSPRUC 全体の課題です。SPRUC 会員の皆様の忌憚のないご意見を賜ることができれば幸いです。

#### 謝辞

工夫を凝らして分かりやすく丁寧に講義をしてくださった講師の先生方、2 日間にわたる講習を熱心に指導してくださったグループ講習担当の先生方、分かりやすい説明で参加者の興味を引きつけてくださった見学引率者の皆様、大人数の参加者にSPring-8 蓄積リング加速器収納部の見学を可能にくださったJASRI 光源基盤部門の方々、事務局として関係各所との調整、ウェブ作成から懇親会・バーベキューのお世話までしていただいたJASRI 事務局担当者の方々、講師の選定、テーマの決定にご協力いただいたSPRUC 研究会の方々、事務局に感謝申し上げます。また、事務局として関係各所との調整、ウェブ作成から懇親会・バーベキューのお世話までしていただいたJASRI 事務局担当者の方々、講師の選定、テーマの決定にご協力いただいたSPRUC 研究会の方々、事務局に感謝申し上げます。バーベキュー開始早々、(水木校長によれば)「タイをひっくり返したような」雷雨に見舞われましたが、参加者の避難のために萌光館を開放していただきましたQST 次世代放射光施設整備開発センターの皆様に感謝申し上げます。

#### 大和田 謙二 OHWADA Kenji

(国) 量子科学技術研究開発機構 量子ビーム科学研究部門  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-1045  
e-mail : ohwada.kenji@qst.go.jp

#### 第3回SPring-8 秋の学校に参加して

株式会社日東分析センター  
村上 修一

株式会社日東分析センターは多層フィルム/テープなどの表面/界面/局所/バルク評価、形態観察技術を基幹技術として有し、受託分析を行っております。現在弊社は分析による提供価値を上げる方法の一つとして放射光施設に注目し、利用を検討しております。今回、SPring-8 に興味のある学生を対象としている「夏の学校」以外に企業の研究者も参加可能な「秋の学校」の存在を知り、弊社も渡りに船とばかりに私を含め3人で参加しました。私個人は以前XPS 評価に携わっており、当時からSPring-8 には関心があったため、参加を決意しました。よって、企業からの参加者の一人として、私を感じたことを書きます。

まず、基礎講義ですが、X 線分析の三要素である光源(放射光発生)、光学系(ビームライン)、検出器の原理から実際の測定手法まで放射光科学について網羅的に解説していただき、今まで放射光測定を詳しく知らなかった私も理解が進みました。後からお聞きしたのですが、事前知識がなくても内容の理解が進むように数式を極力使わず説明を行うといった工夫をいずれの講義でもされており、講師の先生方は大変苦勞されたと思えました。なお、1 講義90分は、企業勤めの私には長いと感じるかも思っておりましたが、レポートの提出があることも手伝ってか、一般の講演会より集中して聴講することができました。

グループ講習は、実際のビームラインで行われる研究を体験できる場となり、放射光施設における評価の実際を垣間見ました。私は「軟X線分光」「光電子分光(HAXPES)」「X線吸収分光法」に参加しましたが、一度の参加で3つの講習に参加できるのが「秋の学校」のメリットであると感じました。さらに、少人数での講習となるため、質問や不明点などがすぐに聞けるだけでなく、講習後は仕事上での分析評価の悩みなども先生方に相談することができ大変勉強になりました。先生方の人柄もよくわかり楽しかったです。

2日目、4日目の放射光施設内部の見学は非常に印象深かったです。圧巻という言葉が浮かびました。また、



施設内は綺麗な外観からは想像ができない複雑な構造をしていることに驚きました。さらに、施設内では一人作業が禁止されているといった安全に配慮した取り組みも聞き、安全意識の高まっている企業の研究者も利用しやすい施設であることを認識しました。施設の休止期間を逆手にとった企画と思いますが、よりSPring-8に親しみをもちました。ただ、多くの参加者にとって最も印象深かったのは、3日目のバーベキューではないでしょうか。タイ(バケツではなく)をひっくり返したと評された豪雨に見舞われ開始が遅れてしまいましたが、開始後は学生の参加者には弊社のアピールを試みたり、先生方、職員の方とは、講義や講習でわからなかった内容を再度お聞きしたり、SPring-8や次世代放射光施設への熱い思いなどを語って頂いたりお話は尽きませんでした。さらに料理もおいしかったため、楽しい思い出となっております。これも「秋の学校」が持つ魅力なのだと感じております。

今回の秋の学校で、放射光科学の基礎から実際の研究例まで幅広い知識を得ることだけでなく、実習を通

して放射光利用のイメージをつかむことができ、満足度は高いと感じております。今後は、放射光施設を利用することで顧客の悩み事の解決や製品開発の加速につながる分析設計を行い、実際の利用につなげていきたいと思っております。講師の先生方、チームライン実習担当の皆様ならびに実行委員会の皆様にお礼申し上げます。



図3 懇親会バーベキュー風景



図4 記念写真

## 第6回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用 シンポジウム報告

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
放射光利用研究基盤センター

回折・散乱推進室 筒井 智嗣

### 1. はじめに

2019年9月17日に東京・秋葉原UDXにおいて、公益財団法人高輝度光科学研究センター(JASRI)、一般財団法人総合科学研究機構(CROSS)及び一般財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)の主催のもと、「大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム—物質構造の階層性とフォノン物性の理解—」が開催された。本シンポジウムは、大型実験施設であるSPRING-8/SACLA及びJ-PARC、スーパーコンピュータである「京」などの登録機関である上記の3機関で、実験による実証と計算によるシミュレーションの連携利用による新たな利用成果の創出を目的に開催され、今回が6回目となる。今回は、物質の機能発現に関して階層性をテーマとして、下記のプログラムで最先端の研究に関する講演及びパネル・ディスカッションを行った。

#### ・開会挨拶

横溝 英明 (CROSS)

雨宮 慶幸 (JASRI)

#### ・各施設の紹介

矢橋 牧名 (理化学研究所)

金谷 利治 (J-PARC センター)

奥田 基 (RIST)

#### ・中性子・X線非弾性散乱実験とデータ駆動科学によるフォノン研究

有馬 孝尚 (東京大学)

#### ・放射光・中性子散乱を利用した誘電体の構造・ダイナミクス研究 — バルク、境界、単一粒子

大和田 謙二 (量子科学技術研究開発機構)

#### ・構造材料研究における量子ビームの利用

乾 晴行 (京都大学)

#### ・企業におけるスパコン活用と、誘電体材料 BaTiO<sub>3</sub>

#### への取り組み事例紹介

中田 浩弥 (京セラ株式会社)

#### ・アルミネート系化合物における新規機能性誘電体の開発

谷口 博基 (名古屋大学)

#### ・大規模計算による光電磁場・電子・フォノンの第一原理シミュレーション

矢花 一浩 (筑波大学)

#### ・パネル・ディスカッション

「物質機能発現の理解のための成熟した連携利用に向けて」

#### ・閉会挨拶

関 昌弘 (RIST)



図1 シンポジウム会場の様子

### 2. 会議報告

第1セッションでは、物質構造の階層性を強く意識した放射光 X 線及び中性子の利用法に関する2件の講演が行われた。1件目の東京大学の有馬孝尚教授による講演では、現在、物質機能の理解として移行運動量とエネルギー空間の4次元空間で議論されているフォノン計測を、将来は実空間と実時間の4次元空間

を加えた 8 次元の計測による物質の機能発現の理解に向けての概念の提唱がなされ、データ駆動科学を利用した実際の計測データとデータ駆動科学の結果予測の比較について現在進行中の研究事例の紹介がなされた。2 件目の量子科学技術研究開発機構の大和田謙二氏による講演では、リラクサーと呼ばれる誘電体を中心に物質の階層性を意識した計測と機能発現に関する研究事例が示された。

第 2 セッションでは、材料特性や材料設計という観点から 2 件の講演が行われた。1 件目の京都大学の乾晴行教授による講演では、構造材料における塑性変形の理解に向けたプラストンと呼ばれる新しい概念に基づく学理構築に関する研究やハイエントロピー合金と呼ばれる新しい高強度・高韌性材料の研究の最前線に関する研究紹介が行われた。2 件目の京セラ株式会社の中田浩弥氏の講演では、チタン酸バリウムの研究例を中心に大型計算機を用いた材料設計に関するソフト開発や動力学解析等を利用した分析に関する研究事例が示された。

第 3 セッションでは、光応答・フォノン物性の観点から 2 件の講演が行われた。1 件目の名古屋大学の谷口博基准教授による講演では、物質合成の立場から放射光及び中性子を利用したゼオライト型化合物におけるフォノン物性や、高い誘電性をもつフォトキャパシターを目指した物質の光応答に関する研究事例が示された。2 件目の筑波大学の矢花一浩教授による講演では、フォノン計算に関する研究事例の紹介であったが、フォノンでよく議論されるエネルギー分散ではなく、光の時間応答という立場から計算機シミュレーションに基づくフォノンに関する研究事例が示された。

最後のセッションでは、「物質機能発現の理解のための成熟した連携利用に向けて」と題し、第 1 セッションの講演者である有馬氏がモデレータを務め、各セッションの講演者である大和田、乾、中田、谷口、矢花の各氏がパネラーとして、パネル・ディスカッションを行った。議論は、

- 1) 物質創製・分析の立場から量子ビーム・大型計算機の利用に向けて
- 2) 実験と理論の橋渡しとして
- 3) プロジェクト研究を進める研究代表として

という 3 つのテーマでパネラーの各氏から意見をいただき、聴衆からも質問やコメントを受ける形で進めた。施設側を含めてインフラを提供する側の意見としてはどこまでコストをかけ、どのような支援体系を整えるべきかを模索している状況が述べられ、ユーザー側からは利用したい装置や担当者へのアクセスの仕方を含めた利用のための窓口がわかりにくい点が指摘され、双方とも相互利用や新規利用について模索する活発な議論が行われた。

### 3. おわりに

本シンポジウムでは、さまざまな観点から大型実験施設やスーパーコンピュータを利用して物質の機能発現について第一線でご活躍の先生方にご講演をいただいた。各先生方にはパネラーとしてもご発言いただいてパネル・ディスカッションでの活発な議論が展開され、有意義なシンポジウムとなった。前回の熱電材料に比べて少し抽象的なテーマ設定となったものの、参加総数は 102 名であり、アンケートの結果から 9 割以上の参加者が満足できるシンポジウムとなったことは本企画に関わったものとしてうれしい限りである。このシンポジウムの企画を通じて、大型施設やスーパーコンピュータの連携利用が発展し、各施設の連携利用によるより多くの成果が創出されることを期待したい。

筒井 智嗣 *TSUTSUI Satoshi*

(公財) 高輝度光科学研究センター  
放射光利用研究基盤センター 回折・散乱推進室  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0802  
e-mail : satoshi@spring8.or.jp

## 2020A 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

2020A 期 SPring-8 利用研究課題の募集を開始しました。募集対象の課題種や申請の際の注意事項等の詳細につきましては、SPring-8 User Information HP 上の「現在募集中の SPring-8 利用研究課題」(<https://user.spring8.or.jp/?p=19319>) よりご確認ください。

- 2020A SPring-8 利用研究課題募集要項
- 2020A 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
- 2020A SPring-8 における“SACLA、J-PARC MLF または「京」を含む HPCI と連携した利用を行う課題”の募集について
- 2020A 成果公開優先利用課題の募集について  
    応募締切：2019 年 11 月 19 日（火）午前 10:00 JST（提出完了時刻）
- 2020A 長期利用課題の募集について  
    応募締切：2019 年 11 月 19 日（火）午前 10:00 JST（提出完了時刻）
- 2020A 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：2019 年 12 月 5 日（木）午前 10:00 JST（提出完了時刻）
- 2020A 大学院生提案型課題の募集について  
    応募締切：2019 年 12 月 5 日（木）午前 10:00 JST（提出完了時刻）
- 2020A 先進技術活用による産業応用課題の募集について  
    応募締切：2019 年 12 月 5 日（木）午前 10:00 JST（提出完了時刻）

### <特記>

1. 緊急課題、成果専有時期指定課題、測定代行課題および産業利用準備課題（測定代行課題および産業利用準備課題は一部共用ビームラインのみ対象）は、随時募集しています。
2. 2020A 期より新たに、考古学や文化財科学等の分野の課題を対象として、「人文・社会科学」が希望審査分野に追加されました。

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  
    (<https://user.spring8.or.jp/?p=605>)

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



## 2020A 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

2020A 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：2019 年 10 月 30 日（水）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：2019 年 10 月 30 日（水）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「2020A 期における SACLA 利用研究課題の募集について」([http://sacra.xfel.jp/?page\\_id=12812](http://sacra.xfel.jp/?page_id=12812)) よりご確認ください。

<2020A 期からの新規事項>

○ハイパワーナノ秒レーザーの利用について

SACLA では、大阪大学が中心となってハイパワーナノ秒レーザーの整備が行われました。このレーザーと XFEL との同時利用実験を実施するため、XFEL の集光光学系や実験チャンバーなどを含む実験システムが BL3 EH5 において整備されています。

この実験システムを利用した、ハイパワーナノ秒レーザーと XFEL の同時利用実験に関する共用課題については、下記事項に同意のうえ申請してください。

- (1) 上記実験システムを使用する SACLA 共用課題は、大阪大学レーザー科学研究所の共同利用課題としても取扱われます。
- (2) 課題が採択された場合、JASRI は課題情報を大阪大学レーザー科学研究所に通知します。
- (3) 利用研究成果の公開には、SACLA 及び大阪大学レーザー科学研究所のハイパワーナノ秒レーザーを使用した成果と明記する必要があります。

この実験システムの利用を希望するユーザーは、課題申請前に必ず XFEL 利用研究推進室 (sacra-bl.jasri@spring8.or.jp) まで、レーザー及び実験システムの運用条件についてお問い合わせください。

○解析用高性能コンピュータ (SACLA HPC) の利用について

SACLA の共用検出器で取得された実験データを処理するためには、SACLA High Performance Computer (HPC) を使用する必要があります。HPC の使用に関して連絡窓口となる申請メンバーの名前と連絡先を、申請書の「13.利用を希望する施設装置、共用装置」の欄に記載してください。なお、窓口となる方は、申請代表者と同一である必要はありませんが、「6.共同実験者」に登録されていることが必要です。

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

## 第 44 回 (2019B) 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 44 回共同利用期間 (2019 年 9 月 30 日～2020 年 2 月 21 日 (放射光利用 294 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 2019B を 3 期に分けて募集しており、これらのビームラインについては第 1 期の 2019 年 9 月 30 日～11 月 8 日 (111 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]

2019 年 5 月 10 日 SPring-8 ホームページで主要課題の募集案内公開

(利用者情報 2019 年 5 月号に募集案内記事を掲載)

6 月 6 日 成果公開優先利用課題応募締切

6 月 21 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 (放射光施設横断産業利用課題および先進技術活用による産業応用課題) 応募締切

#### [課題審査、選定、採択および通知]

2019 年 7 月 17 日～8 月 1 日

各分科会による課題審査 (長期利用以外)

8 月 2 日 SPring-8 利用研究課題審査委員会 (PRC) による課題審査

8 月 8 日 SPring-8 選定委員会の意見を聴取

8 月 8 日 JASRI として採択決定し応募者に審査結果を通知

題として応募された課題のうち一般課題として採択された課題の課題種は一般課題として整理)。2-2 に放射光施設横断産業利用課題および先進技術活用による産業応用課題の応募数と採択数を示します。また、表 3 に成果非専有課題としての科学技術的妥当性の審査対象となる課題 (成果非専有一般課題、大学院生提案型課題、放射光施設横断産業利用課題、先進技術活用による産業応用課題および長期利用課題) への応募 790 件について、ビームラインごとの応募課題数、採択課題数、採択率および配分シフト数、並びに採択された課題の 1 課題あたりの平均配分シフト数を示します。表 4 には全応募 847 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 17 件の応募があり、うち 12 件が採択されました。なお本記事の統計には、産業利用ビームラインの第 2 期および第 3 期分、並びに期中に随時募集する成果専有時期指定課題 (測定代行課題、産業利用準備課題含む) 等は含まれていません。

### 2. 応募および採択状況

2019B の新規応募課題数は 847、採択課題数は 584 でした。表 2 に 2019B 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 に決定課題種別の統計を示します (重点課

### 3. 採択課題

2019B 期の採択課題の一覧は、SPring-8 ホームページに掲載しています。以下をご覧ください。

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

表1 利用研究課題 公募履歴

利用期	利用期間	ユーザー 利用シフト*	応募締め日**	応募課題数	採択課題数
第1回:1997B	1997年10月-1998年03月	168	1997年01月10日	198	134
第2回:1998A	1998年04月-1998年10月	204	1998年01月06日	305	229
第3回:1999A	1998年11月-1999年06月	250	1998年07月12日	392	258
第4回:1999B	1999年09月-1999年12月	140	1999年06月19日	431	246
第5回:2000A	2000年02月-2000年06月	204	1999年10月16日	424	326
第6回:2000B	2000年10月-2001年01月	156	2000年06月17日	582	380
第7回:2001A	2001年02月-2001年06月	238	2000年10月21日	502	409
第8回:2001B	2001年09月-2002年02月	190	2001年05月26日	619	457
第9回:2002A	2002年02月-2002年07月	226	2001年10月27日	643	520
第10回:2002B	2002年09月-2003年02月	190	2002年06月03日	751	472
第11回:2003A	2003年02月-2003年07月	228	2002年10月28日	733	563
第12回:2003B	2003年09月-2004年02月	202	2003年06月16日	938	621
第13回:2004A	2004年02月-2004年07月	211	2003年11月04日	772	595
第14回:2004B	2004年09月-2004年12月	203	2004年06月09日	886	562
第15回:2005A	2005年04月-2005年08月	188	2005年01月05日	878	547
第16回:2005B	2005年09月-2005年12月	182	2005年06月07日	973	624
第17回:2006A	2006年03月-2006年07月	220	2005年11月15日	916	699
第18回:2006B	2006年09月-2006年12月	159	2006年05月25日	867	555
第19回:2007A	2007年03月-2007年07月	246	2006年11月16日	1099	761
第20回:2007B	2007年09月-2008年02月	216	2007年06月07日	1007	721
第21回:2008A	2008年04月-2008年07月	225	2007年12月13日	1009	749
第22回:2008B	2008年10月-2009年03月	189	2008年06月26日	1163	659
第23回:2009A	2009年04月-2009年07月	195	2008年12月11日	979	654
第24回:2009B	2009年10月-2010年02月	210	2009年06月25日	1076	709
第25回:2010A	2010年04月-2010年07月	201	2009年12月17日	919	665
第26回:2010B	2010年10月-2011年02月	210	2010年07月01日	1022	728
第27回:2011A	2011年04月-2011年07月	215	2010年12月09日	1024	731
第28回:2011B	2011年10月-2012年02月	195	2011年06月30日	1077	724
第29回:2012A	2012年04月-2012年07月	201	2011年12月08日	816	621
第30回:2012B	2012年10月-2013年02月	222	2012年06月28日	965	757
第31回:2013A	2013年04月-2013年07月	186	2012年12月13日	880	609
第32回:2013B	2013年10月-2013年12月	159	2013年06月20日	905	594
第33回:2014A	2014年04月-2014年07月	177	2013年12月12日	874	606
第34回:2014B	2014年10月-2015年02月	230	2014年06月19日	1030	848
第35回:2015A	2015年04月-2015年07月	207	2014年12月11日	1030	685
第36回:2015B	2015年09月-2015年12月	198	2015年06月11日	974	632
第37回:2016A	2016年04月-2016年07月	216	2015年12月10日	907	699
第38回:2016B	2016年09月-2016年12月	198	2016年06月02日	977	637
第39回:2017A	2017年04月-2017年07月	210	2016年12月08日	947	678
第40回:2017B	2017年10月-2018年02月	240	2017年06月08日	1000	761
第41回:2018A	2018年04月-2018年08月	228	2017年12月07日	931	719
第42回:2018B	2018年10月-2019年02月	234	2018年06月07日	982	744
第43回:2019A	2019年04月-2019年07月	222	2018年12月06日	957	681
第44回:2019B	2019年09月-2020年02月	234	2019年06月21日	(847)	(584)

\*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・3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。

2019Bは今後、産業利用ビームラインの第2・3期分、期中随時募集の成果専有時期指定課題等があるため現在の値は括弧内に示す。



表2 2019B 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) **	712	480	67.4	95.7
一般課題 (成果専有)	27	27	100.0	100.0
大学院生提案型課題**	73	42	57.5	94.9
(重点) 放射光施設横断産業利用課題**	1	1	100.0	100.0
(重点) 先進技術活用による産業応用課題**	4	4	100.0	100.0
成果公開優先利用課題	30	30	100.0	97.5
長期利用課題 (年1回A期のみ募集のため、2019B期募集なし)	-	-	-	-
総計	847	584	68.9	95.9
科学審査対象課題**のみの合計	790	527	66.7	95.7

\*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 17 課題のうち 12 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) 放射光施設横断産業利用課題	3	1	0	33.3	33.3
(重点) 先進技術活用による産業応用課題	8	4	3	50.0	87.5

表3 2019B 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	52	33	63.5	215	6.5
BL02B1: 単結晶構造解析	30	21	70.0	141	6.7
BL02B2: 粉末結晶構造解析	49	36	73.5	177	4.9
BL04B1: 高温高圧	25	17	68.0	186	10.9
BL04B2: 高エネルギーX線回折	40	24	60.0	197	8.2
BL05XU: 施設開発 ID	7	7	100.0	51	7.3
BL08W: 高エネルギー非弾性散乱	25	18	72.0	228	12.7
BL09XU: 核共鳴散乱	34	14	41.2	189	13.5
BL10XU: 高圧構造物性	56	24	42.9	174	7.3
BL13XU: 表面界面構造解析	33	20	60.6	216	10.8
BL14B2: 産業利用 II	11	7	63.6	51	7.3
BL17SU: 理研 物理学 III	8	5	62.5	60	12.0
BL19B2: 産業利用 I	14	11	78.6	72	6.5
BL19LXU: 理研 物理学 II	8	3	37.5	51	17.0
BL20B2: 医学・イメージング I	27	26	96.3	199	7.7
BL20XU: 医学・イメージング II	28	18	64.3	150	8.3
BL25SU: 軟X線固体分光	33	22	66.7	208	9.5
BL26B1: 理研 構造ゲノム I***	5	5	100.0	24	4.8
BL26B2: 理研 構造ゲノム II***	-	-	-	-	-
BL27SU: 軟X線光化学	22	19	86.4	183	9.6
BL28B2: 白色X線回折	25	19	76.0	219	11.5
BL29XU: 理研 物理学 I	-	-	-	-	-
BL32XU: 理研 ターゲットタンパク****	-	-	-	-	-
BL35XU: 高分解能非弾性散乱	29	15	51.7	228	15.2
BL37XU: 分光分析	34	18	52.9	168	9.3
BL38B1: 理研 構造生物学 I	-	-	-	-	-
BL39XU: 磁性材料	19	17	89.5	210	12.4
BL40B2: 構造生物学 II	47	38	80.9	225	5.9
BL40XU: 高フラックス	39	18	46.2	192	10.7
BL41XU: 構造生物学 I***	-	-	-	-	-
BL43IR: 赤外物性	20	18	90.0	193	10.7
BL44B2: 理研 物質科学	3	3	100.0	24	8.0
BL45XU: 構造生物学 III***	-	-	-	-	-
BL46XU: 産業利用 III	16	11	68.8	72	6.5
BL47XU: 光電子分光・マイクロCT	25	14	56.0	132	9.4
PX-BL (BL41XU、45XU、26B1、26B2、32XU)	26	26	100.0	-	-
総計	790	527	66.7	4,435	8.4

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

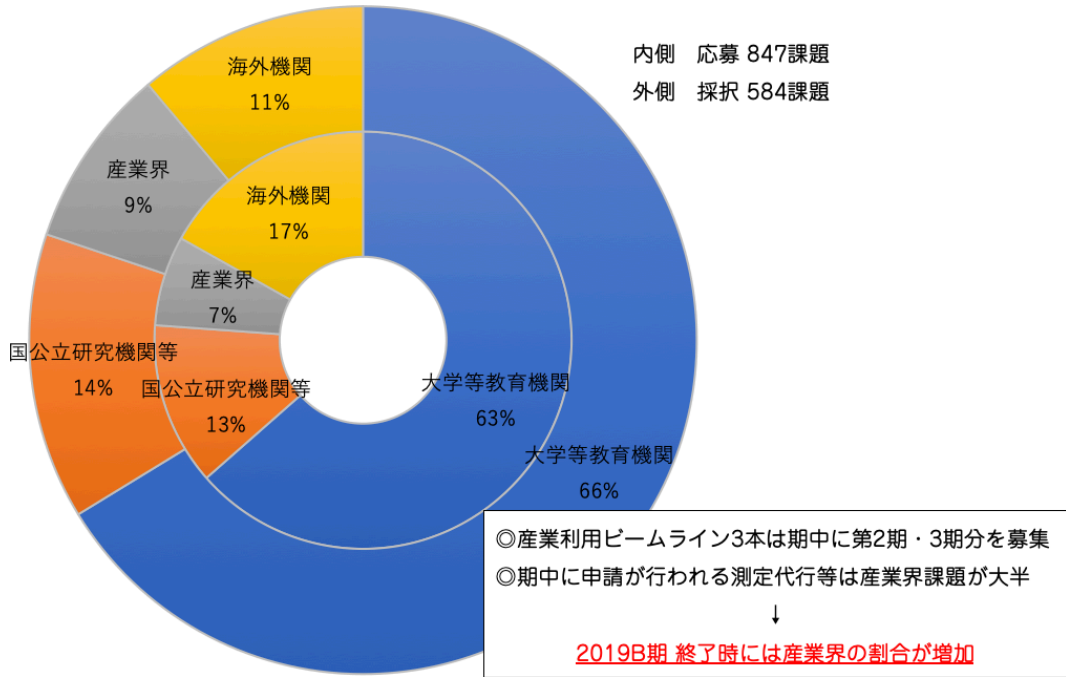


図1 2019B 所属機関別 応募/採択課題数割合

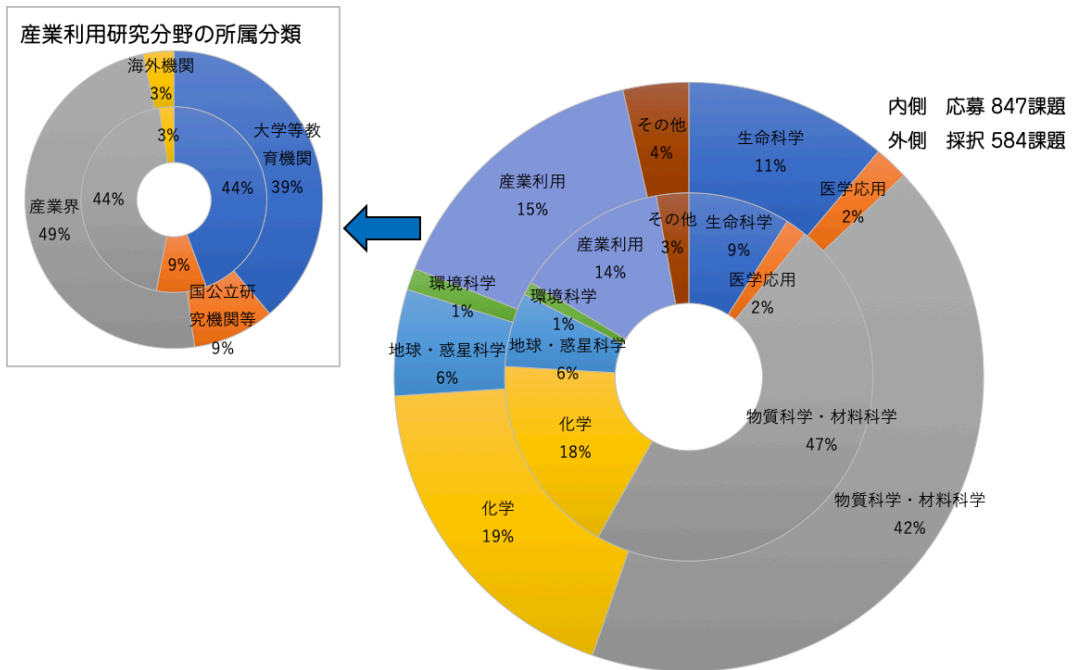


図2 2019B 研究分野別 応募/採択課題数割合

表 4 SPring-8 2019B 応募・採択結果の機関および研究分野分類

機関分類	課題分類		生命科学		医学応用		物質科学・材料科学		化学		地球・惑星科学		環境科学		産業利用		その他*		総計		採択率 (%)
	決定課題種	課題数/シフト数	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	
大学等教育機関	一般課題 (非専有)	課題数	41	38	7	4	224	156	96	74	27	17	3	2	37	24	10	9	445	324	72.8
		シフト数	275	222	81	42	2106	1422	648	504	309	189	27	21	241	151	87	84	3774	2635	69.8
	一般課題 (専有)	課題数													2	2			2	2	100.0
		シフト数													5	5			5	5	100.0
	大学院生提案型課題	課題数			1	1	35	18	19	11	3	2	1	0	7	5	1	1	67	38	56.7
		シフト数			12	6	245	126	103	66	24	9	3	0	38	33	6	6	431	246	57.1
	放射光施設横断産業利用課題	課題数													2	1			2	1	50.0
		シフト数													12	9			12	9	75.0
	先進技術活用による産業応用課題	課題数													1	1			1	1	100.0
		シフト数													6	6			6	6	100.0
成果公開優先利用課題	課題数	1	1			8	8	9	9				1	1	2	2			21	21	100.0
	シフト数	3	3			66	60	66	66				9	9	6	6			150	144	96.0
合計	課題数	42	39	8	5	267	182	124	94	30	19	5	3	51	35	11	10	538	387	71.9	
	シフト数	278	225	93	48	2417	1608	817	636	333	198	39	30	308	210	93	90	4378	3045	69.6	
国立研究機関等	一般課題 (非専有)	課題数	8	8	6	4	39	27	11	7	11	8	5	4	10	8	9	7	99	73	73.7
		シフト数	72	72	75	45	419	278	126	66	126	84	30	24	71	60	87	69	1006	698	69.4
	大学院生提案型課題	課題数					1	1											1	1	100.0
		シフト数					6	6											6	6	100.0
	成果公開優先利用課題	課題数	3	3			5	5												8	8
シフト数		35	35			44	44												79	79	100.0
合計	課題数	11	11	6	4	45	33	11	7	11	8	5	4	10	8	9	7	108	82	75.9	
	シフト数	107	107	75	45	469	328	126	66	126	84	30	24	71	60	87	69	1091	783	71.8	
産業界	一般課題 (非専有)	課題数					3	2							27	22			30	24	80.0
		シフト数					18	12							247	196			265	208	78.5
	一般課題 (専有)	課題数					2	2	1	1					18	18	1	1	22	22	100.0
		シフト数					8	8	2	2					78	78	1	1	89	89	100.0
	放射光施設横断産業利用課題	課題数													1	0			1	0	0.0
		シフト数													6	0			6	0	0.0
	先進技術活用による産業応用課題	課題数													4	3			4	3	75.0
		シフト数													48	36			48	36	75.0
成果公開優先利用課題	課題数													1	1			1	1	100.0	
	シフト数													12	12			12	12	100.0	
合計	課題数	0	0	0	0	5	4	1	1	0	0	0	0	51	44	1	1	58	50	86.2	
	シフト数	0	0	0	0	26	20	2	2	0	0	0	0	391	322	1	1	420	345	82.1	
海外機関	一般課題 (非専有)	課題数	22	14	2	2	80	26	14	7	13	6			2	2	2	2	135	59	43.7
		シフト数	229	60	24	24	924	303	201	75	170	54			25	24	24	24	1597	564	35.3
	一般課題 (専有)	課題数	1	1							1	1			1	1			3	3	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					4	2										1	1	5	3
シフト数						51	18										9	9	60	27	45.0
合計	課題数	23	15	2	2	84	28	14	7	14	7	0	0	3	3	3	3	143	65	45.5	
	シフト数	229	60	24	24	975	321	201	75	176	60	0	0	26	25	33	33	1664	598	35.9	
合計	課題数	76	65	16	11	401	247	150	109	55	34	10	7	115	90	24	21	847	584	68.9	
	シフト数	614	392	192	117	3887	2277	1146	779	635	342	69	54	796	617	214	193	7553	4771	63.2	
採択率 (%)	課題数	85.5		68.8		61.6		72.7		61.8		70.0		78.3		87.5		68.9			
	シフト数	63.8		60.9		58.6		68.0		53.9		78.3		77.5		90.2		63.2			

\*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

## 第43回共同利用期間（2019A）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43回共同利用期間（2019A）におけるSPring-8の共同利用は、2019年4月から2019年7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279シフト [1シフト=8時間] でした。

2019Aでは26本の共用ビームライン（共用施設）と、7本の理研ビームラインにおけるビームタイムの一部が共用に供されました。産業利用に特化した3本の共用ビームライン BL14B2、BL19B2 および BL46XU は、2019A 第1期（2019年4月～5月下旬）、第2期（同年5月下旬～7月上旬）および第3期（同年7月上旬～下旬）と、利用期を3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、2019A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2019A 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2019A 実施課題数とシフト数を示します。表3に、2019A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-2019A 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2019A 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）	302	4080.125
専用ビームライン（成果専有）	29	81.75
合計	331	4161.875

表1 SPring-8 共用施設<sup>(注1)</sup>の2019A 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）	741	511	69.0	485	22	507	4116.625
一般課題（成果専有）	41	40	97.6	38		38	147.75
大学院生提案型課題	73	38	52.1	38	3	41	293.625
時期指定課題	8	8	100.0	8		8	16.375
測定代行課題 <sup>(注3)</sup>	29	29	100.0	29		29	10.625
産業利用準備課題	3	3	100.0	3		3	0.75
先進技術活用による産業応用課題	9	5	55.6	5		5	48
放射光施設横断産業利用課題	7	6	85.7	6		6	42.875
成果公開優先利用課題	33	33	100.0	33		33	239.5
長期利用課題	9	4	44.4	4	11	15	282.875
重点パートナーユーザー課題	4	4	100.0	4	4	8	288.75
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）	(2019A 期は新規公募なし)				24	24	215.75
合計	957	681	71.2	653	64	717	5703.5

(注1) 理研ビームラインからの一部共用供出ビームタイムの利用を含む。

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

(注3) BL14B2、BL19B2、BL46XU で実施。



表3 2019A 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	54	4	133	66	21		47	1	326
		シフト数	314.375	24	1187.875	424.125	226.25		268.25	5.875	2450.75
	一般課題 (成果専有)	課題数							1		1
		シフト数							2.875		2.875
	大学院生提案型課題	課題数	2	1	12	3	1			19	38
		シフト数	7	12	95.625	12	12		107.125		245.75
	測定代行課題	課題数							1		1
		シフト数							0.25		0.25
	放射光施設横断産業利用 課題	課題数								3	3
		シフト数							24.875		24.875
	成果公開優先利用課題	課題数		1	3	11			7	1	23
		シフト数		6	21	86.625			31	5.875	150.5
	長期利用課題	課題数	2		3	3	2	2		1	13
シフト数		19.875		103.125	10	41.875	45		15	234.875	
重点パートナーユーザー 課題	課題数			5	1	2				8	
	シフト数			166.25	32.875	89.625				288.75	
新分野創成利用課題	課題数			12	7					19	
	シフト数			125.875	53.875					179.75	
計	課題数	58	6	168	91	26	2	78	3	432	
	シフト数	341.25	42	1699.75	619.5	369.75	45	434.375	26.75	3578.375	
国 立 研 究 機 関 等	一般課題 (成果非専有)	課題数	14	4	33	6	12	1	14	5	89
		シフト数	143.25	41.75	337.375	60.75	93.75	6	75.625	53.625	812.125
	一般課題 (成果専有)	課題数	1								1
		シフト数	5								5
	測定代行課題	課題数							1		1
		シフト数							0.75		0.75
	放射光施設横断産業利用 課題	課題数							1		1
		シフト数							3		3
	成果公開優先利用課題	課題数	2		5				1		8
		シフト数	36.625		39				8.375		84
	計	課題数	17	4	38	6	12	1	17	5	100
		シフト数	184.875	41.75	376.375	60.75	93.75	6	87.75	53.625	904.875
	産 業 界	一般課題 (成果非専有)	課題数			1				20	
シフト数					5.875				164.25		170.125
一般課題 (成果専有)		課題数	3		1				30		34
		シフト数	4.25		2				131.125		137.375
時期指定課題		課題数			3				5		8
		シフト数			10.875				5.5		16.375
測定代行課題		課題数							26		26
		シフト数							9.375		9.375
産業利用準備課題		課題数							3		3
		シフト数							0.75		0.75
先進技術活用による産業 応用課題		課題数							5		5
		シフト数							48		48
放射光施設横断産業利用 課題		課題数							2		2
	シフト数							15		15	
成果公開優先利用課題	課題数							2		2	
	シフト数							5		5	
新分野創成利用課題	課題数							5		5	
	シフト数							36		36	
計	課題数	3		5				98		106	
	シフト数	4.25		18.75				415		438	
海 外 機 関	一般課題 (成果非専有)	課題数	22	1	31	7	6		4		71
		シフト数	197.625	12	302.375	77	60.75		33.875		683.625
	一般課題 (成果専有)	課題数	1						1		2
		シフト数	1.5						1		2.5
	大学院生提案型課題	課題数			2	1					3
		シフト数			29.875	18					47.875
	測定代行課題	課題数							1		1
		シフト数							0.25		0.25
	長期利用課題	課題数		1					1		2
		シフト数		18					30		48
	計	課題数	23	2	33	8	6		7		79
		シフト数	199.125	30	332.25	95	60.75		65.125		782.25
	課題数合計		101	12	244	105	44	3	200	8	717
シフト数合計		729.5	113.75	2427.125	775.25	524.25	51	1002.25	80.375	5703.5	

(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

2019A の延べ利用者数は、共用施設 4,579 人、専用施設 2,911 人でした。表 5 に、SPring-8 共用施設および専用施設利用実績の推移を示します。表 5 の値を利用シフト数合計と共に示したものが図 1 です。利用シフト数合計は、表 5 の「利用時間」に利用した共用・専用ビームラインの数（理研ビームラインの一部共用への供出分を含む。但し、理研ビームラインは共用供出割合で換算）を掛けた数値となっています。図 2 には、SPring-8 共用施設の利用研究課題の応募・採

択数の推移実績を採択率と共に示します。応募・採択課題数は、2006B 以前は一般課題締め切り時、2007A 以降は期の途中で申請・採択される成果専有時期指定課題、測定代行課題および産業利用ビームラインの第 2 期および第 3 期申請分を含めた、期の終わりの値を示します。利用シフト数合計は、上記と同様に表 5 の「利用時間」に利用した共用ビームラインの数を掛けた数値となっています。

表 4 SPring-8 1997B-2019A 課題種別実施課題数の推移

課題種	1997B~2011A	2011B	2012A	2012B	2013A	2013B	2014A	2014B	2015A	2015B	2016A	2016B	2017A	2017B	2018A	2018B	2019A	合計
一般課題 (成果非専有)	10252	384	430	516	440	384	444	611	457	476	489	459	502	570	524	537	507	17982
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)	506	72	38	51	34	55	34	55	36	37	42	47	35	48	41	46	38	1215
時期指定課題 (除く測定代行)	173	8	4	15	6	4	4	2	8	8	6	10	7	16	6	16	8	301
測定代行 (時期指定課題の一環)	167	37	35	48	49	47	41	54	37	46	32	48	29	46	37	60	29	842
産業利用準備課題																		3
長期利用課題	194	17	15	14	14	16	13	13	26	23	28	25	28	25	13	14	15	493
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])	251	14	32	40	27	32	38	58	45	54	65	52	29	53	53	58	41	942
成果公開優先利用課題	255	44	33	33	18	27	24	30	18	28	35	37	39	52	34	43	33	783
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	896	32																928
重点産業トリアルユース 課題	112																	112
SPring-8 戦略活用プロ グラム課題	332																	332
重点産業利用課題	911	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	6	4				75
放射光施設構新産業利用 課題															5	3	6	14
先進技術活用による産業 応用課題																	5	5
重点メディカルバイオ・ トリアルユース課題	57																	57
重点拡張メディカルバイ オ課題	51																	51
重点グリーン/ライフ・ イノベーション推進課題		21	29	27	24	24												125
スマート放射光活用イノ ベーション戦略推進課題							12	17	18	14								61
社会・文化利用課題									11	16	17	19	19	14	14	13		123
重点戦略課題 (12 条戦略課題)	59	2	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	65
重点/パワーユーザー課題	90	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	8	8	7	7	8	70
新分野創成利用課題										4	6	11	16	21	21	25	24	128
合計	14921	730	637	771	633	610	624	858	674	726	738	719	718	857	755	822	717	26510

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

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

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

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

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

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

表5 SPring-8 共用施設および専用施設利用実績の推移

利用期間	利用時間	共用施設		専用施設			
		実施課題数	延べ利用者数	実施課題数	延べ利用者数		
第1回	1997B	1997年10月-1998年03月	1,286	94	681	-	-
第2回	1998A	1998年04月-1998年10月	1,702	234	1,252	7	-
第3回	1999A	1998年11月-1999年06月	2,585	274	1,542	33	467
第4回	1999B	1999年09月-1999年12月	1,371	242	1,631	65	427
第5回	2000A	2000年02月-2000年06月	2,051	365	2,486	100	794
第6回	2000B	2000年10月-2001年01月	1,522	383	2,370	88	620
第7回	2001A	2001年02月-2001年06月	2,313	474	2,915	102	766
第8回	2001B	2001年09月-2002年02月	1,867	488	3,277	114	977
第9回	2002A	2002年02月-2002年07月	2,093	545	3,246	110	1,043
第10回	2002B	2002年09月-2003年02月	1,867	540	3,508	142	1,046
第11回	2003A	2003年02月-2003年07月	2,246	634	3,777	164	1,347
第12回	2003B	2003年09月-2004年02月	1,844	549	3,428	154	1,264
第13回	2004A	2004年02月-2004年07月	2,095	569	3,756	161	1,269
第14回	2004B	2004年09月-2004年12月	1,971	555	3,546	146	1,154
第15回	2005A	2005年04月-2005年08月	1,880	560	3,741	146	1,185
第16回	2005B	2005年09月-2005年12月	1,818	620	4,032	187	1,379
第17回	2006A	2006年03月-2006年07月	2,202	724	4,809	226	1,831
第18回	2006B	2006年09月-2006年12月	1,587	550	3,513	199	1,487
第19回	2007A	2007年03月-2007年07月	2,448	781	4,999	260	2,282
第20回	2007B	2007年09月-2008年02月	2,140	739	4,814	225	1,938
第21回	2008A	2008年04月-2008年07月	2,231	769	4,840	232	1,891
第22回	2008B	2008年10月-2009年03月	1,879	672	4,325	217	1,630
第23回	2009A	2009年04月-2009年07月	1,927	669	4,240	238	1,761
第24回	2009B	2009年10月-2010年02月	2,087	722	4,793	275	2,144
第25回	2010A	2010年04月-2010年07月	1,977	685	4,329	293	2,483
第26回	2010B	2010年10月-2011年02月	2,094	744	4,872	325	2,812
第27回	2011A	2011年04月-2011年07月	2,131	740	4,640	309	2,773
第28回	2011B	2011年10月-2012年02月	1,927	730	4,576	319	2,769
第29回	2012A	2012年04月-2012年07月	1,972	637	4,304	285	2,692
第30回	2012B	2012年10月-2013年02月	2,184	771	5,072	314	3,181
第31回	2013A	2013年04月-2013年07月	1,837	633	4,053	275	2,835
第32回	2013B	2013年10月-2013年12月	1,571	610	3,770	286	2,723
第33回	2014A	2014年04月-2014年07月	1,768	624	4,129	292	2,710
第34回	2014B	2014年10月-2015年02月	2,290	858	5,766	331	3,573
第35回	2015A	2015年04月-2015年07月	2,053	674	4,560	271	2,960
第36回	2015B	2015年09月-2015年12月	1,981	726	4,863	281	2,898
第37回	2016A	2016年04月-2016年07月	2,150	738	5,174	301	3,130
第38回	2016B	2016年09月-2016年12月	1,976	719	4,824	298	2,985
第39回	2017A	2017年04月-2017年07月	2,101	718	4,835	326	3,228
第40回	2017B	2017年10月-2018年02月	2,377	857	5,885	355	3,659
第41回	2018A	2018年04月-2018年08月	2,254	755	5,009	323	3,231
第42回	2018B	2018年10月-2019年02月	2,306	822	5,468	361	3,303
第43回	2019A	2019年04月-2019年07月	2,205	717	4,579	331	2,911
合 計			86,166	26,510	172,229	9,467	85,558

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

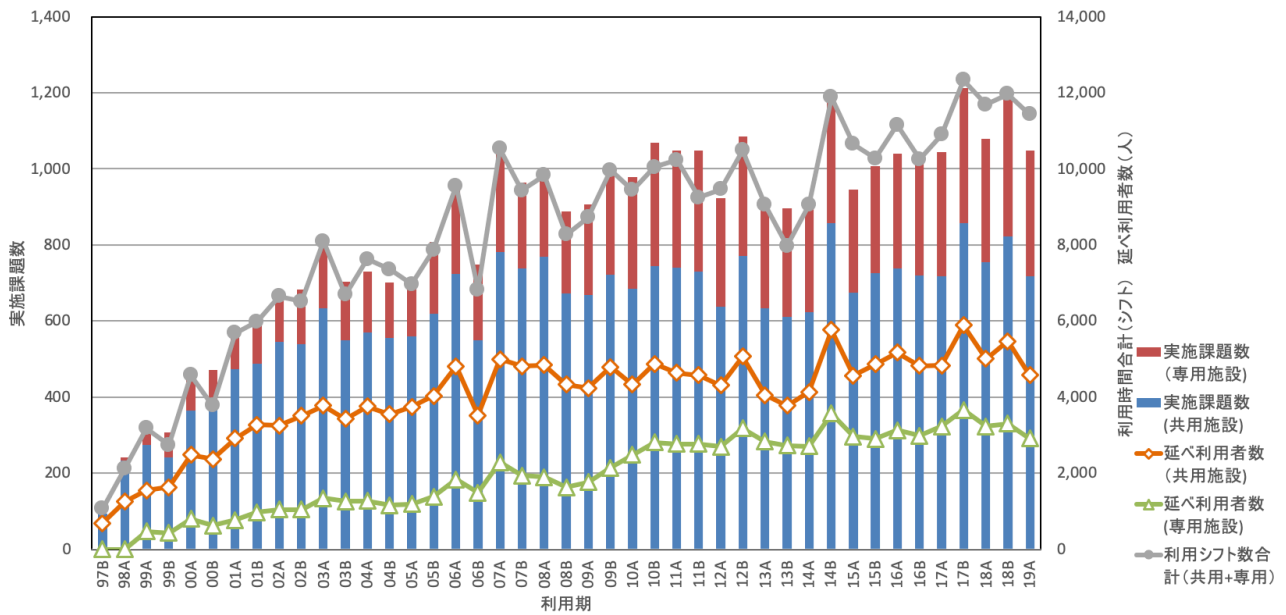
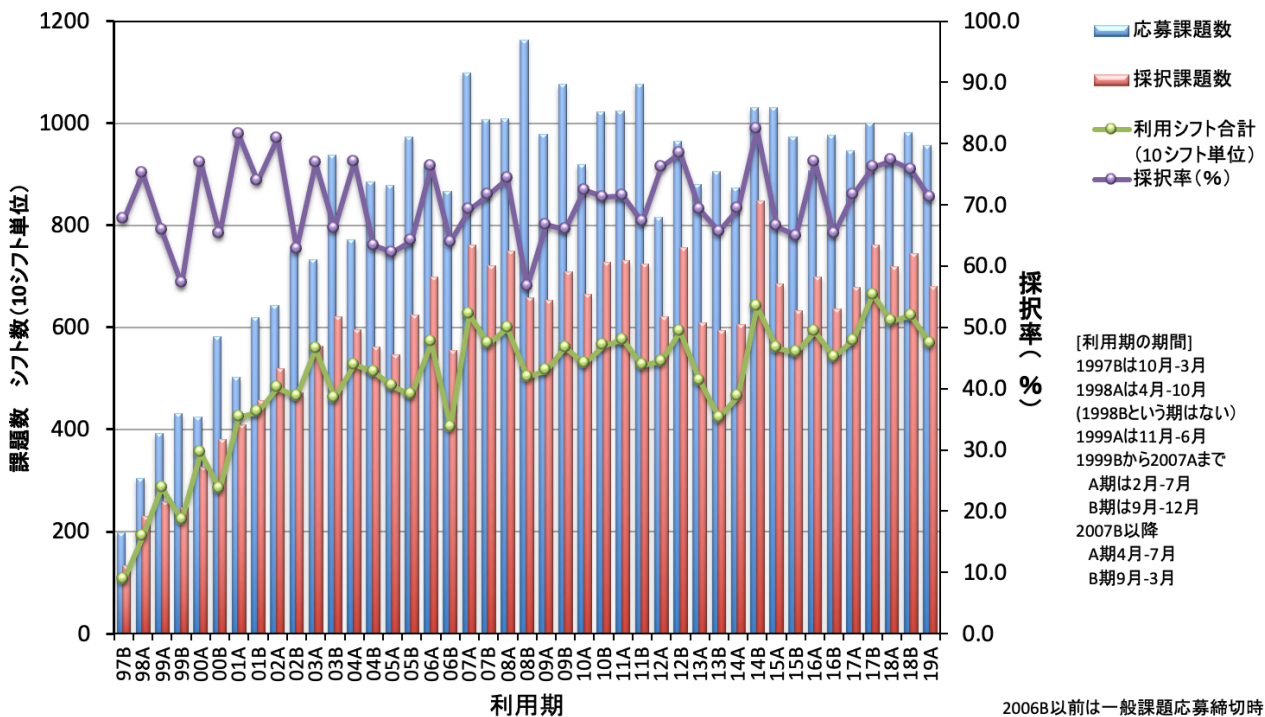


図1 Spring-8 共用施設および専用施設の利用実績の推移



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



2017A 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

2017A 期に採択された長期利用課題について、2018B 期に 2 年間の実施期間が終了したことを受け、第 64 回 SPring-8 利用研究課題審査委員会長期利用分科会（2018 年 12 月 13 日および 14 日開催）による事後評価が行われました。

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

なお、2017A 期に採択された長期利用課題 4 課題のうち残り 2 課題の評価結果は次号以降に掲載する予定です。

— 課題 1 —

課題名	NRVS of mononuclear and binuclear non-heme iron enzyme intermediates and related model complexes
実験責任者(所属)	Solomon Edward (Stanford University)
採択時課題番号	2017A0137
ビームライン	BL09XU
利用期間/配分総シフト	2017A~2018B/93 シフト

[評価結果]

This program was conducted as a renewal of the long-term project performed previously in 2013B - 2016A. The applicant defined the goal of the research project as to understand the geometric and electronic structure of mononuclear and binuclear non-heme irons in enzymes. The applicant is working with general interests on the enzymes but also focuses on the interaction of oxygens with the irons, which is quite informative to understand its biologically important roles in human health, catalysis and bioremediation, and so on.

During the period of the program, the applicant and his

colleagues have established and polished the powerful combination of NRVS and DFT, and routinely collected high-quality NRVS spectra to determine and analyze accurate structures of the metal centers. In particular, they revealed the reaction intermediates of an extradiol dioxygenase, homoprotocatechuate 2,3-deoxygenase using a freeze trap method. Furthermore, its NRVS structure can correct the relevant crystal structure determined previously. These results have expanded the experimental applicability and reliability of NRVS for iron proteins, and led to 7 articles published in major journals.

As described above, the committee concluded that this long-term project was successfully conducted.

[成果リスト]

(査読付き論文)

[ 1 ] SPring-8 publication ID = 37162

K. Sutherlin *et al.*: “NRVS Studies of the Peroxide Shunt Intermediate in a Rieske Dioxygenase and Its Relation to the Native Fe<sup>II</sup> O<sub>2</sub> Reaction” *Journal of the American Chemical Society* **140** (2018) 5544-5559.

[ 2 ] SPring-8 publication ID = 37163

K. Sutherlin *et al.*: “Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy Definition of O<sub>2</sub> Intermediates in an Extradiol Dioxygenase: Correlation to Crystallography and Reactivity” *Journal of the American Chemical Society* **140** (2018) 16495-16513.

— 課題 2 —

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(所属)	Stephen Cramer (University of California, Davis)

採択時課題番号	2017A0141
ビームライン	BL09XU
利用期間/配分総シフト	2017A~2018B/84 シフト

[評価結果]

The principal investigator focused on the investigation of the chemistry of hydrogen combined with metals, especially the nature of Fe-H bonds in enzymes which are important for the future energy and environment issues. In order to analyze the active site structures of the enzymes with organometallic transition metals, he introduced the NRVS (Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy) technique with the DFT calculations.

Although it is regrettable that technical developments to reduce measurement time were not carried out extensively, the committee recognizes the scientific achievements and appreciates that the PI published many high-impact original and review papers, and delivered several invited talks.

[成果リスト]

(査読付き論文)

[ 1 ] SPring-8 publication ID = 37054

E. Reijerse *et al.*: “Direct Observation of an Iron-Bound Terminal Hydride in [FeFe]-Hydrogenase by Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy” *Journal of the American Chemical Society* **139** (2017) 4306-4309.

[ 2 ] SPring-8 publication ID = 37058

V. Pelmenschikov *et al.*: “Reaction Coordinate Leading to H<sub>2</sub> Production in [FeFe]-Hydrogenase Identified by Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy and Density Functional Theory” *Journal of the American Chemical Society* **139** (2017) 16894-16902.

[ 3 ] SPring-8 publication ID = 37071

M. Carlson *et al.*: “Sterically Stabilized Terminal Hydride of a Diiron Dithiolate” *Inorganic Chemistry* **57** (2018) 1988-2001.

[ 4 ] SPring-8 publication ID = 37072

L. Gee *et al.*: “NRVS for Fe in Biology: Experiment and Basic Interpretation” *Methods in Enzymology* **599** (2018) 409-425.

[ 5 ] SPring-8 publication ID = 37073

C. Pham *et al.*: “Terminal Hydride Species in [FeFe]-Hydrogenases Are Vibrationally Coupled to the Active Site Environment” *Angewandte Chemie International Edition* **57** (2018) 10605-10609.

[ 6 ] SPring-8 publication ID = 37074

V. Pelmenschikov *et al.*: “High-Frequency Fe-H Vibrations in a Bridging Hydride Complex Characterized by NRVS and DFT” *Angewandte Chemie International Edition* **57** (2018) 9367-9371.

## 2019B 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 16 期目に当たる 2019B 期（2019 年 10 月～2020 年 3 月）の利用研究課題応募 81 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 57 課題を採択しました。

### 1. 募集、審査及び採択等の日程

2019B 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。

(2019 年)

4 月 18 日 ホームページで募集案内公開

5 月 24 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～

7 月 12 日 第 17 回 SACLA PRC（総合審査）

7 月 23 日 第 19 回 SACLA 選定委員会（審査結果の意見聴取）

8 月 1 日 JASRI として採否決定、結果通知

10 月 4 日 2019B 期利用開始

### 2. 応募、採択及びビームタイム配分状況

2019B 期の応募課題数は 81、採択課題数は 57 でした。また応募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及び配分シフト数を表 2 に示します。

採択 57 課題に対し、ビームタイムは計 275.5 シフト（1 シフト＝12 時間）が配分されました（フィジビリティチェックビームタイム (FCBT) 0.5 シフトを含む）。配分シフト数を含む採択 57 課題の一覧は、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

> 採択課題一覧 > 2019B

[http://sacla.xfel.jp/wp-content/uploads/sacla\\_approved\\_proposal\\_2019b\\_j.pdf](http://sacla.xfel.jp/wp-content/uploads/sacla_approved_proposal_2019b_j.pdf)

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			8	5	1	1	2	2	11	8	70%
BL2/BL3	2	2	19	15	9	8	40	24	70	49	
合計	2	2	27	20	10	9	42	26	81	57	

表 2

(単位：シフト数)

課題種	A	B	C	C/A	C/B
	応募課題 (81 課題) の全要求シフト数	採択課題 (57 課題) の全要求シフト数	採択課題 (57 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)	489.5	351.5	275.5	56%	78%
一般課題 (成果専有)	-	-	-	-	-
合計	489.5	351.5	275.5	56%	78%

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

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



## 2019A 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 15 回目の利用期である 2019A 期の利用研究課題（共用課題）が、2019年3月6日から2019年7月29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 56 の利用研究課題が実施され、ビームタイムは計 259 シフト（1シフト＝12時間）が利用されました。

実施課題は、一般課題（成果非専有利用）として、それぞれ表 1 のとおり国内外機関所属の実験責任者により実施されました。また、成果専有利用制度において時期指定課題が、1 課題／0.17 シフト（2 時間）実施されました。

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 30 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。

[http://sacla.xfel.jp/wp-content/uploads/sacla\\_performed\\_proposal\\_2019a\\_j.pdf](http://sacla.xfel.jp/wp-content/uploads/sacla_performed_proposal_2019a_j.pdf)

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

### ◆ SACLA User Information

> 成果等検索 > 利用課題実験報告書検索

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

成果は、課題実施期終了後 3 年以内に、査読付き原著論文等で公開されます。

公益財団法人

高輝度光科学研究センター 利用推進部

TEL：0791-58-0961

e-mail：sacla.jasri@spring8.or.jp

### ◆ SACLA User Information

> SACLA 利用案内 > 採択課題／実施課題

> 実施課題一覧 > 2019A

表 1 2019A 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)	3	13	16	81.83	9	45	27	119	55	258.83
	(成果専有利用)										
時期指定課題（成果専有利用）	1	0.17								1	0.17
合計	4	13.17	16	81.83	9	45	27	119	56	259	

○実施課題を実験責任者の所属（産学官 海外）で区分。

○延べ来所者数は計 564 人。

## SPring-8 運転・利用状況

国立研究開発法人理化学研究所  
放射光科学研究センター

### ◎2019年6～7月の運転実績

SPring-8は6月3日から7月5日までセベラルバンチ運転で第3サイクルの運転を行い、7月8日から7月31日までセベラルバンチ運転で第4サイクルの運転を実施した。第3～4サイクルでは瞬時電圧低下によるビームアポート等があったが、全体としては順調な運転であった。総放射光利用運転時間（ユーザータイム）内での故障等による停止時間（down time）は、第3サイクルは約0.5%、第4サイクルは約0.4%であった。

### 1. 装置運転関係

#### (1) 運転期間

第3サイクル (6/3 (月) ～7/5 (金))  
第4サイクル (7/8 (月) ～7/31 (水))

#### (2) 運転時間の内訳

第3サイクル  
 運転時間総計 約770時間  
 ①装置の調整およびマシンスタディ等 約50時間  
 ②放射光利用運転時間 約714時間  
 ③故障等による down time 約4時間  
 ④フィリング変更時間 約2時間  
 総放射光利用運転時間（ユーザータイム = ② + ③ + ④）に対する down time の割合（\*1） 約0.5%

第4サイクル  
 運転時間総計 約552時間  
 ①装置の調整およびマシンスタディ等 約96時間  
 ②放射光利用運転時間 約454時間  
 ③故障等による down time 約2時間  
 ④フィリング変更時間 約1時間  
 総放射光利用運転時間（ユーザータイム = ② + ③ + ④）に対する down time の割合（\*1） 約0.4%

### (3) 運転スペック等

第3サイクル（セベラルバンチ運転）

- ・ 11 bunch train × 29 (C)
- ・ 11/29-filling + 1 bunch (H)
- ・ 2/29-filling + 26 bunches (E)
- ・ 4 bunch train × 84 (B)
- ・ 203 bunches (A)

第4サイクル（セベラルバンチ運転）

- ・ 203 bunches (A)
- ・ 11/29-filling + 1 bunch (H)

- ・ 入射は電流値優先モード（2～3分毎（マルチバンチ時）もしくは20～40秒毎（セベラルバンチ時））の Top-Up モードで実施。
- ・ 蓄積電流 8 GeV、～100 mA

#### (4) 主な down time の原因

- ・ 瞬時電圧低下によるビームアポート
- ・ SR 四極電磁石補助電源過電流によるアポート

### 2. 利用関係（JASRI 利用推進部 集計）

#### (1) 放射光利用実験期間

第3サイクル (6/4 (火) ～7/5 (金))  
第4サイクル (7/11 (木) ～7/30 (火))

#### (2) ビームライン利用状況

稼働ビームライン  
 共用ビームライン 26本  
 専用ビームライン 19本  
 理研ビームライン 12本

第3サイクル（暫定値）  
共同利用研究実験数 340件

共同利用研究者数	1,548 名
専用施設利用研究実験数	275 件
専用施設利用研究者数	1,002 名
第4サイクル (暫定値)	
共同利用研究実験数	255 件
共同利用研究者数	1,147 名
専用施設利用研究実験数	222 件
専用施設利用研究者数	754 名

◎2019年8～9月の運転実績 (停止期間)

SPring-8は8月1日から9月24日まで夏期点検調整期間とし、加速器やビームラインに係わる機器の改造・点検作業、電気・冷却設備等の機器の点検作業を行った。

8月3日は施設内全域の計画停電を行い、電気設備の点検整備を行った。

(夏期点検調整期間中の主な作業)

(1) 線型加速器関係

- ・RF エージング
- ・入射系機器保護インターロック自主検査
- ・電子銃、クライストロン/モジュレータ電源点検
- ・瞬時電圧低下対策 (UPS 設置)
- ・カメラリンク伝送系フェライコア取付
- ・その他作業及び定期点検

(2) シンクロトロン関係

- ・RF エージング
- ・Sy クライストロン/電磁石定期点検・保守
- ・SSBT 偏向電源不具合調査
- ・その他作業及び定期点検

(3) 蓄積リング関係

- ・RF エージング
- ・電磁石、電磁石電源等定期点検
- ・電磁石他劣化ケーブル更新
- ・真空系作業及び点検
- ・低電力RF系更新、クライストロン定期点検
- ・モニター、タイミングケーブル更新
- ・ID/FE 作業及び点検
- ・制御系ネットワーク更新、計算機更新
- ・加速器安全インターロックメンテナンス

- ・加速器機器保護インターロック自主検査
- ・BL インターロック自主検査
- ・BL 制御系更新、BL インターロック改造及び更新

(4) ユーティリティ関係

- ・電気設備保守点検
- ・冷却水設備保守定期点検、改造工事
- ・空調用設備保守点検
- ・消防設備等点検
- ・装置冷却水瞬時電圧低下対策

(5) 安全管理関係

- ・安全系インターロック自主検査
- ・放射線監視設備定期点検
- ・特例区域設置
- ・その他作業及び点検

(6) その他

- ・蓄積リング棟LED化更新  
(測定及び試料準備室、談話室/共通室他)

◎2019年9～12月の運転予定

SPring-8は9月25日から11月8日までセベラルバンチ運転で第5サイクルの運転を行い、停止期間をはさみ、11月11日から12月13日までセベラルバンチ運転で第6サイクルの運転を予定している。

第5～6サイクルの運転実績については次号にて掲載する。

◎今後の予定

12月14日から1月16日まで冬期点検調整期間とし、加速器やビームラインに係わる機器の改造・点検作業、電気・冷却設備等の機器の点検作業を行う予定である。第7サイクルの運転開始は1月17日からを予定している。

(\*1) down time の割合に④フィリング変更時間は含まない。

## 論文発表の現状

公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用推進部

年別査読有り論文発表等登録数 (2019年9月30日現在)

SPring-8

Beamline Name		Public Use Since	~2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	Total	
Public Beamlines	BL01B1	XAFS	1997.10	357	58	76	65	74	92	75	86	93	71	42	1089
		Technical Journal				1								1	
	BL02B1	Single Crystal Structure Analysis	1997.10	121	19	12	18	36	42	36	43	38	28	31	424
	BL02B2	Powder Diffraction	1999.9	438	67	82	59	96	71	81	95	78	72	51	1190
	BL04B1	High Temperature and High Pressure Research	1997.10	153	21	22	16	20	19	16	16	15	14	14	326
	BL04B2	High Energy X-ray Diffraction	1999.9	166	28	23	28	28	33	37	43	30	40	25	481
		Technical Journal					1								1
	BL08W	High Energy Inelastic Scattering	1997.10	116	12	20	19	15	13	19	15	16	14	8	267
	BL09XU	Nuclear Resonant Scattering	1997.10	101	9	13	13	15	15	18	16	19	27	11	257
	BL10XU	High Pressure Research	1997.10	260	35	32	28	21	30	29	30	28	19	13	525
	BL13XU	Surface and Interface Structure	2001.9	121	18	27	6	16	21	24	36	27	31	22	349
	BL14B2	Engineering Science Research II	2007.9	18	25	32	36	53	53	61	52	58	63	49	500
		Technical Journal				1	1	1							4
	BL19B2	Engineering Science Research I	2001.11	125	18	35	53	59	63	65	64	66	54	47	649
		Technical Journal				1	1	1	2				2	1	8
	BL20B2	Medical and Imaging I	1999.9	165	17	24	35	28	25	35	26	28	28	22	433
	BL20XU	Medical and Imaging II	2001.9	102	36	27	21	40	44	43	37	32	29	28	439
	BL25SU	Soft X-ray Spectroscopy of Solid	1998.4	261	21	25	22	24	31	20	19	25	20	15	483
		Technical Journal				2									2
	BL27SU	Soft X-ray Photochemistry	1998.5	258	24	31	18	41	35	25	36	27	22	10	527
	BL28B2	White Beam X-ray Diffraction	1999.9	86	9	15	10	21	18	21	19	25	17	9	250
	BL35XU	High Resolution Inelastic Scattering	2001.9	66	9	12	8	14	13	16	15	15	14	7	189
	BL37XU	Trace Element Analysis	2002.11	74	22	23	13	32	28	35	29	29	24	12	321
		Technical Journal							1						1
	BL38B1	Structural Biology III	2000.10	281	48	48	60	59	48	65	60	37	29	20	755
	BL39XU	Magnetic Materials	1997.10	158	15	19	21	20	25	19	24	30	20	11	362
	BL40B2	Structural Biology II	1999.9	292	44	42	43	70	54	55	59	53	55	52	819
		Technical Journal					1		1						2
	BL40XU	High Flux	2000.4	78	11	13	18	37	21	32	41	30	32	32	345
	BL41XU	Structural Biology I	1997.10	524	66	66	53	65	55	60	67	55	44	28	1083
BL43IR	Infrared Materials Science	2000.4	63	6	8	11	9	11	17	15	23	10	14	187	
BL46XU	Engineering Science Research III	2000.11	80	20	22	15	38	28	56	51	49	44	38	441	
	Technical Journal								1	1				2	
BL47XU	HXPES・MCT	1997.10	200	27	31	17	36	36	31	29	36	29	20	492	
	Technical Journal										1			1	
Public Use at Other Beamlines	BL05XU	RIKEN Diagnosis Beamline I	2017.4										1	2	3
	BL11XU	QST Quantum Dynamics I	1999.3	13											13
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II	1998.4	41	3	2	1		1						48
	BL15XU	WEBRAM	2002.9	31	1	1	1		1						35
	BL17SU	RIKEN Coherent Soft X-ray Spectroscopy	2005.9	7	1	7	6	11	12	5	2	3	5	7	66
	BL19LXU	RIKEN SR Physics	2002.9	5					1	1	2	5	6	1	21
	BL22XU	JAEA Actinide Science I	2004.9	5				1							6
	BL23SU	JAEA Actinide Science II	1998.6	44	2		2	3	2						53
	BL26B1	RIKEN Structural Genomics I	2009.4			3	8	2	9	6	14	15	20	15	92
	BL26B2	RIKEN Structural Genomics II	2009.4		1		5	3	5	7	10	8	9	4	52
		Technical Journal								1					1
	BL29XU	RIKEN Coherent X-ray Optics	2002.9	13					1	1	2	2	3		22
	BL32XU	RIKEN Targeted Proteins	2010.10			5	5	8	9	16	8	13	14	7	85
	BL44B2	RIKEN Materials Science	1998.5	14							6	5	2	2	29
BL45XU	RIKEN Structural Biology I	1997.10	76	8	9	6	7	9	13	20	10	5	11	174	
Subtotal				4913	701	807	740	1002	974	1040	1087	1023	915	680	13882



Beamline Name		Public Use Since	~2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	Total	
Contract Beamlines	BL03XU	Advanced Softmaterials	2009.11		1	5	8	24	21	14	17	20	9	15	134
		Technical Journal					35	42	39	36	33	31	28		244
	BL07LSU	The University-of-Tokyo Outstation Beamline for Materials Science	2009.11		1	5	6	10	13	12	19	19	15	17	117
		Technical Journal								1					1
	BL08B2	Hyogo Prefecture BM	2005.9		1	1	3	7	9	5	5	9	2	4	46
		Technical Journal					7	1	18	7	4	4	1	1	43
	BL11XU	QST Quantum Dynamics I		67	9	6	13	16	14	8	20	20	13	12	198
	BL12B2	NSRRC BM	2001.9	103	28	13	25	22	21	28	31	32	32	17	352
	BL12XU	NSRRC ID	2003.2	31	15	10	14	11	18	19	18	25	16	9	186
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II		93	18	16	11	10	15	19	17	23	20	16	258
	BL15XU	WEBRAM	2001.4	113	35	51	41	61	57	48	63	56	48	34	607
	BL16B2	Sunbeam BM	1999.9	37	8	6	4	3	6	4	10	9	5	8	100
		Technical Journal		2			18	15	14	8	15	21	15	9	117
	BL16XU	Sunbeam ID	1999.9	32	6	2	2	2	3	4	11	9	9	8	88
		Technical Journal					20	19	14	14	21	18	12	6	124
	BL22XU	JAEA Actinide Science I		46	15	10	10	14	19	15	14	15	25	14	197
	BL23SU	JAEA Actinide Science II		138	15	22	20	17	28	19	25	16	22	17	339
	BL24XU	Hyogo Prefecture ID	1998.10	126	5	6	7	8	5	4	5	5	6	1	178
		Technical Journal					11	3	10	3	1	4			32
	BL28XU	RISING II	2012.4					3	9	5	5	5	4	6	37
	BL31LEP	Laser-Electron Photon II	2013.10						1		3	2			6
	BL32B2	Pharmaceutical Industry (2002.9 - 2012.3)		22	2	3				1					28
	BL33LEP	Laser-Electron Photon	2000.10	35	8	4	4	4	4	2	2	3	2		68
	BL33XU	Toyota	2009.5			3	5	2	8	4	10	16	6	8	62
		Technical Journal				2	5	4	5	3	4	1			24
	BL36XU	Catalytic Reaction Dynamics for Fuel Cell	2013.1					1	7	6	7	12	14	6	53
BL44XU	Macromolecular Assemblies	2000.2	174	21	49	59	59	50	64	54	60	43	32	665	
Subtotal			1017	188	212	232	274	308	281	336	356	291	224	3719	
RIKEN Beamlines	BL17SU	Coherent Soft X-ray Spectroscopy		51	12	10	14	3	8	5	8	5		116	
	BL19LXU	SR Physics		70	7	9	11	12	13	9	5	6	1	1	144
	BL26B1	Structural Genomics I		136	15	7	8	7	4	5	4	4	1		191
	BL26B2	Structural Genomics II		51	19	18	19	13	4	3	7	10	2	2	148
	BL29XU	Coherent X-ray Optics		140	16	8	16	15	9	10	14	9	8	3	248
	BL32XU	Targeted Proteins				2	9	8	8	7	13	4	3	1	55
	BL43LXU	Quantum NanoDynamics						1		1	1				3
	BL44B2	Materials Science		192	10	13	13	19	16	20	16	17	14	2	332
	BL45XU	Structural Biology I		173	8	9	9	11	9	13	13	8	2		255
	Subtotal			813	87	76	99	89	71	73	81	63	31	9	1492

SACLA

Public Beamlines	Beamline Name		Public Use Since	~2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	Total
	BL1	SXFEL	2016.3											7	1
BL2/BL3	XFEL2/XFEL1	2012.3				1	13	28	37	47	42	33	25		226
Hardware / Software R & D				411	39	37	56	67	12	33	43	52	42	17	809
NET Sum Total				6117	886	961	930	1201	1100	1191	1272	1238	1039	784	16719
Technical Journal				2		2	89	80	97	68	74	71	54	14	551

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 2019 年 9 月 30 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 (2019年9月30日現在)

SPring-8

Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total	
Public Beamlines	BL01B1	XAFS	1997.10	1090	66	88	1244
	BL02B1	Single Crystal Structure Analysis	1997.10	424	14	31	469
	BL02B2	Powder Diffraction	1999.9	1190	41	83	1314
	BL04B1	High Temperature and High Pressure Research	1997.10	326	7	48	381
	BL04B2	High Energy X-ray Diffraction	1999.9	482	13	55	550
	BL08W	High Energy Inelastic Scattering	1997.10	267	10	47	324
	BL09XU	Nuclear Resonant Scattering	1997.10	257	15	33	305
	BL10XU	High Pressure Research	1997.10	525	22	61	608
	BL13XU	Surface and Interface Structure	2001.9	349	19	36	404
	BL14B2	Engineering Science Research II	2007.9	504	10	35	549
	BL19B2	Engineering Science Research I	2001.11	657	45	90	792
	BL20B2	Medical and Imaging I	1999.9	433	88	88	609
	BL20XU	Medical and Imaging II	2001.9	439	104	121	664
	BL25SU	Soft X-ray Spectroscopy of Solid	1998.4	485	15	61	561
	BL27SU	Soft X-ray Photochemistry	1998.5	527	21	38	586
	BL28B2	White Beam X-ray Diffraction	1999.9	250	16	23	289
	BL35XU	High Resolution Inelastic Scattering	2001.9	189	5	13	207
	BL37XU	Trace Element Analysis	2002.11	322	24	45	391
	BL38B1	Structural Biology III	2000.10	755	11	65	831
	BL39XU	Magnetic Materials	1997.10	362	17	79	458
	BL40B2	Structural Biology II	1999.9	821	13	116	950
	BL40XU	High Flux	2000.4	345	21	69	435
	BL41XU	Structural Biology I	1997.10	1083	4	97	1184
	BL43IR	Infrared Materials Science	2000.4	187	14	60	261
	BL46XU	Engineering Science Research III	2000.11	443	18	35	496
	BL47XU	HXPES・MCT	1997.10	493	93	123	709
Public Use at Other Beamlines	BL05XU	RIKEN Diagnosis Beamline I	2017.4	3			3
	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	66	1	29	96
	BL19LXU	RIKEN SR Physics	2002.9	21		3	24
	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	92		8	100
	BL26B2	RIKEN Structural Genomics II	2009.4	53		10	63
	BL29XU	RIKEN Coherent X-ray Optics	2002.9	22		1	23
	BL32XU	RIKEN Targeted Proteins	2010.10	85		4	89
	BL44B2	RIKEN Materials Science	1998.5	29		3	32
	BL45XU	RIKEN Structural Biology I	1997.10	174	5	19	198
Subtotal			13905	758	1752	16415	

Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total	
Contract Beamlines	BL03XU	Advanced Softmaterials	2009.11	378		14	392
	BL07LSU	The University-of-Tokyo Outstation Beamline for Materials Science	2009.11	118		9	127
	BL08B2	Hyogo Prefecture BM	2005.9	89			89
	BL11XU	QST Quantum Dynamics I		198	8	36	242
	BL12B2	NSRRC BM	2001.9	352	1	2	355
	BL12XU	NSRRC ID	2003.2	186	7	5	198
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II		258	12	69	339
	BL15XU	WEBRAM	2001.4	607	14	53	674
	BL16B2	Sunbeam BM	1999.9	217	12	69	298
	BL16XU	Sunbeam ID	1999.9	212	8	53	273
	BL22XU	JAEA Actinide Science I		197	4	42	243
	BL23SU	JAEA Actinide Science II		339	44	108	491
	BL24XU	Hyogo Prefecture ID	1998.10	210	19	61	290
	BL28XU	RISING II	2012.4	37			37
	BL31LEP	Laser-Electron Photon II	2013.10	6			6
	BL32B2	Pharmaceutical Industry (2002.9 - 2012.3)		28		3	31
	BL33LEP	Laser-Electron Photon	2000.10	68	23	3	94
	BL33XU	Toyota	2009.5	86	5	26	117
	BL36XU	Catalytic Reaction Dynamics for Fuel Cell	2013.1	53		3	56
	BL44XU	Macromolecular Assemblies	2000.2	665		43	708
Subtotal			4304	157	599	5060	
RIKEN Beamlines	BL17SU	Coherent Soft X-ray Spectroscopy		116	4	13	133
	BL19LXU	SR Physics		144	8	27	179
	BL26B1	Structural Genomics I		191	2	19	212
	BL26B2	Structural Genomics II		148	1	13	162
	BL29XU	Coherent X-ray Optics		248	14	37	299
	BL32XU	Targeted Proteins		55		3	58
	BL43LXU	Quantum NanoDynamics		3			3
	BL44B2	Materials Science		332	2	16	350
	BL45XU	Structural Biology I		255	5	45	305
	Subtotal			1492	36	173	1701

SACLA

Public Beamlines	Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total
	BL1	SXFEL	2016.3	8			8
	BL2/BL3	XFEL2/XFEL1	2012.3	226	4	14	244

Hardware / Software R & D	809	516	464	1789
---------------------------	-----	-----	-----	------

NET Sum Total	17270	1316	2315	20901
---------------	-------	------	------	-------

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、2019 年 7 月～9 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 2019 年 7 月～9 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
Scientific Reports	13	Journal of Synchrotron Radiation	6
Japanese Journal of Applied Physics	11	Scientific Reports	6
Inorganic Chemistry	9	ACS Catalysis	5
Angewandte Chemie International Edition	8	Dalton Transactions	5
Physical Review B	8	Journal of Alloys and Compounds	5
Journal of the American Chemical Society	7	Macromolecules	5
Chemistry of Materials	6	Physical Chemistry Chemical Physics	5
Electrochemistry	6		

他全 182 誌、計 331 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

Scientific Reports

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
38281	Mark Gardner	9 (2019) 10983	2015A1325	BL20XU	Donnelley Martin	Particle Coating Alters Mucociliary Transit in Excised Rat Trachea: A Synchrotron X-ray Imaging Study
			2015B1109	BL20XU	Donnelley Martin	
			2016A1472	BL20XU	Donnelley Martin	
			2016B1345	BL20XU	Donnelley Martin	
			2016B1502	BL20XU	Morgan Kaye	
			2018B1315	BL20XU	Donnelley Martin	
38364	Mitsuharu Yonemura	9 (2019) 11241	2016B8004	BL3	米村 光治	Fine Microstructure Formation in Steel under Ultrafast Heating
			2017A8024	BL3	米村 光治	
			2017B8013	BL3	米村 光治	
38367	Takayuki Shibata	8 (2018) 14784	2017A1040	BL02B2	守友 浩	Thermal Efficiency of a Thermocell Made of Prussian Blue Analogues
			2017A1649	BL02B2	福住 勇矢	
38371	Wataru Kobayashi	8 (2018) 3988	2012A1094	BL02B2	守友 浩	Thermal Expansion in Layered Na <sub>2</sub> MO <sub>2</sub>
			2013A1649	BL02B2	守友 浩	
			2014A1056	BL02B2	小林 航	
			2015B1077	BL02B2	守友 浩	
38376	Gaku Okuma	9 (2019) 11595	2018A1633	BL20XU	大熊 学	3D Multiscale-Imaging of Processing-Induced Defects Formed during Sintering of Hierarchical Powder Packings
38395	Shang-Chieh Hou	8 (2018) 12695	2016A4130	BL12B2	Chang Chia-Chin	Mechanochemical Synthesis of Si/Cu <sub>3</sub> Si-based Composite as Negative Electrode Materials for Lithium Ion Battery
			2016A4133	BL12B2	Chen Tsan Yao	
			2016A4125	BL12B2	Chang Chia-Chin	
38589	Akihiko Machida	9 (2019) 12290	2015A3602	BL14B1	齋藤 寛之	Hexagonal Close-Packed Iron Hydride behind the Conventional Phase Diagram
			2016B3651	BL14B1	齋藤 寛之	
38602	Jonghyeon Son	8 (2018) 15075	2016B6664	BL44XU	Hwang Kwang Yeon	Structural Analysis of an Epitope Candidate of Triosephosphate Isomerase in <i>Opisthorchis viverrini</i>
38612	Keita Kakuda	9 (2019) 6001	2016B1237	BL45XU	荒木 克哉	Ultrasonication-Based Rapid Amplification of $\alpha$ -synuclein Aggregates in Cerebrospinal Fluid
			2017B1080	BL45XU	荒木 克哉	
			2018A1118	BL45XU	荒木 克哉	
38692	Keishi Akada	9 (2019) 12452	2015B7402	BL07LSU	尾嶋 正治	Microscopic Photoelectron Analysis of Single Crystalline LiCoO <sub>2</sub> Particles during the Charge-Discharge in an All Solid-State Lithium Ion Battery
			2016A7402	BL07LSU	尾嶋 正治	
			2016B7402	BL07LSU	尾嶋 正治	
			2017A7402	BL07LSU	尾嶋 正治	
			2017B7402	BL07LSU	尾嶋 正治	
			2018A7563	BL07LSU	赤田 圭史	
			2018A7567	BL07LSU	細野 英司	
38713	Keisuke Sakurai	9 (2019) 4359	2015A6527	BL44XU	中島 良介	Crystal Structures of Multidrug Efflux Pump MexB Bound with High-Molecular-Mass Compounds
			2015B6527	BL44XU	中島 良介	
			2016A6627	BL44XU	中島 良介	
			2016B6627	BL44XU	中島 良介	
			2017A6731	BL44XU	中島 良介	
			2017B6731	BL44XU	中島 良介	
			2018A6830	BL44XU	中島 良介	
38742	Yunbing Zong	7 (2017) 43595	2014A1270	BL29XU	Jiang Huaidong	Selection for Oil Content During Soybean Domestication Revealed by X-Ray Tomography of Ancient Beans
38769	Yasumitsu Sakamoto	9 (2019) 13587	2014A6924	BL44XU	阪本 泰光	Fragment-Based Discovery of the First Nonpeptidyl Inhibitor of an S46 Family Peptidase
			2014B6924	BL44XU	阪本 泰光	
			2015A6521	BL44XU	阪本 泰光	
			2015B6521	BL44XU	阪本 泰光	
			2016B6620	BL44XU	阪本 泰光	
			2017A6721	BL44XU	阪本 泰光	
			2017B6721	BL44XU	阪本 泰光	
			2018A6818	BL44XU	阪本 泰光	
			2018B6818	BL44XU	阪本 泰光	



Japanese Journal of Applied 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
38227	Takahiro Nagata	58 (2019) 080903	2014A4600	BL15XU	長田 貴弘	Photoelectron Spectroscopic Study on Electronic State and Electrical Properties of SnO <sub>2</sub> Single Crystals
			2013B4603	BL15XU	長田 貴弘	
			2015A4601	BL15XU	長田 貴弘	
			2016A4602	BL15XU	長田 貴弘	
38359	Yuichi Akahama	58 (2019) 095502	2015B1384	BL10XU	赤浜 裕一	Relation between O <sub>3</sub> Cluster Shape and Vibrational Spectra in the ε-phase of Solid Oxygen
38361	Yuya Fukuzumi	58 (2019) 065501	2017A1040	BL02B2	守友 浩	Configuration Entropy Effect on Temperature Coefficient of Redox Potential of P2-Na <sub>x</sub> CoO <sub>2</sub>
			2018A1125	BL02B2	守友 浩	
38386	Takahiro Yamada	58 (2019) SCCD26	2017A3833	BL23SU	渡部 平司	Controlled Oxide Interlayer for Improving Reliability of SiO <sub>2</sub> /GaN MOS Devices
			2017B3833	BL23SU	渡部 平司	
38387	Mikito Nozaki	58 (2019) SCCD08	2017A3833	BL23SU	渡部 平司	Comparative Study on Thermal Robustness of GaN and AlGaN/GaN MOS Devices with Thin Oxide Interlayers
			2017B3833	BL23SU	渡部 平司	
			2018A3833	BL23SU	渡部 平司	
38446	Takashi Kunimoto	58 (2019) SFFD03	2018A1781	BL14B2	國本 崇	Development of Eu <sup>2+</sup> and Mn <sup>2+</sup> Co-activated Silicate Phosphor for Plant Cultivation Light Source
38449	Masashi Kurosawa	58 (2019) SAAD02	2017A1152	BL47XU	財満 眞明	Synthesis of Heavily Ga-doped Si <sub>1-x</sub> Sn <sub>x</sub> /Si Heterostructures and Their Valence-Band-Offset Determination
			2017B1353	BL47XU	竹内 和歌奈	
38455	Yasuhiro Yoneda	58 (2019) SLLA03	2017B3607	BL14B1	米田 安宏	Short- and Middle-Range Order Structures of KNbO <sub>3</sub> Nanocrystals
			2018B1127	BL04B2	米田 安宏	
38473	Hao Yuwen	58 (2019) 083001	2019A1101	BL02B2	後藤 陽介	Enhanced Superconductivity by Na Doping in SnAs-Based Layered Compound Na <sub>1+x</sub> Sn <sub>2-x</sub> As <sub>2</sub>
			2018B1246	BL02B2	後藤 陽介	
38531	Daisuke Kan	58 (2019) 095504	2018B1780	BL19B2	菅 大介	Selective Growth of α-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , γ-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> and Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> at Low Temperatures and under Ambient Pressure
38712	Kenji Ohwada	58 (2019) SLLA05	2019A3761	BL22XU	大和田 謙二	Development of an Apparatus for Bragg Coherent X-ray Diffraction Imaging, and Its Application to the Three Dimensional Imaging of BaTiO <sub>3</sub> Nano-Crystals
			2018B3761	BL22XU	大和田 謙二	
			2018A3761	BL22XU	大和田 謙二	
			2017B3761	BL22XU	大和田 謙二	

Inorganic Chemistry

38224	Lila Bouéssel Du Bourg	57 (2018) 2517-2528	2011B1565	BL04B2	Bychkov Evgeny	Experimental and Theoretical Insights into the Structure of Tellurium Chloride Glasses
38263	Jie Chen	57 (2018) 7601-7609	2016B4504	BL15XU	山浦 一成	High-Pressure Synthesis, Crystal Structure, and Semimetallic Properties of HgPbO <sub>3</sub>
			2017A4503	BL15XU	Belik Alexei	
			2017B4502	BL15XU	辻本 吉廣	
38280	Feng-Chun Lo	53 (2014) 10881-10892	2013B4255	BL12XU	Hsu I Jui	Insight into the Reactivity and Electronic Structure of Dinuclear Dinitrosyl Iron Complexes
38321	Alexei Belik	58 (2019) 3492-3501	2018B4502	BL15XU	Belik Alexei	Valence Variations by B-Site Doping in A-Site Columnar-Ordered Quadruple Perovskites Sm <sub>2</sub> MnMn(Mn <sub>4-x</sub> Ti <sub>x</sub> )O <sub>12</sub> with 1 ≤ x ≤ 3
			2017B4502	BL15XU	辻本 吉廣	
			2017A4503	BL15XU	Belik Alexei	
38360	Yuya Ikeuchi	58 (2019) 6790-6795	2017B1172	BL02B2	高津 浩	Rattling Behavior in a Simple Perovskite NaWO <sub>3</sub>
			2016A1043	BL02B2	陰山 洋	
38408	Kazushige Ueda	58 (2019) 10890-10897	2017B1576	BL14B2	植田 和茂	Site-Selective Doping and Site-Sensitive Photoluminescence of Eu <sup>2+</sup> and Tb <sup>3+</sup> in Perovskite-Type LaLuO <sub>3</sub>
38411	Ryo Sasai	58 (2019) 10928-10935	2010A1287	BL02B2	笹井 亮	Why Do Carbonate Anions have Extremely High Stability in the Interlayer Space of Layered Double Hydroxides? Case Study of Layered Double Hydroxide Consisting of Mg and Al (Mg/Al = 2)
			2010B1279	BL02B2	笹井 亮	
			2011B1703	BL02B2	笹井 亮	
			2012B1770	BL02B2	笹井 亮	
			2013B1677	BL02B2	新井 栄作	
			2014A1684	BL02B2	帆足 宏一	
			2017A1483	BL02B2	藤村 卓也	
			2017B1196	BL02B2	藤村 卓也	
38469	Tsunetomo Yamada	58 (2019) 9181-9186	2013B1183	BL01B1	綿貫 徹	Formation of an Intermediate Valence Icosahedral Quasicrystal in the Au-Sn-Yb System
			2013A3701	BL22XU	綿貫 徹	
			2014A3701	BL22XU	綿貫 徹	
38679	Takashi Nakamura	58 (2019) 7863-7872	2014A0078	BL02B1	Iversen Bo	Bpytrisalen/Bpytrisaloph: A Triangular Platform That Spatially Arranges Different Multiple Labile Coordination Sites

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
38210	Naoki Ogiwara	58 (2019) 11731-11736	2018A1753	BL14B2	荻原 直希	The First Study on the Reactivity of Water Vapor in Metal-Organic Frameworks with Platinum Nanocrystals
38317	Yang Wang	58 (2019) 11893-11902	2018B1001	BL40B2	松本 英俊	Significant Difference in Semiconducting Properties of Isomeric All-Acceptor Polymers Synthesized via Direct Arylation Polycondensation
38433	Weiyang Ni	58 (2019) 7445-7449	2018B4269	BL12XU	Chen Hao-Ming	Ni <sub>3</sub> N as an Active Hydrogen Oxidation Reaction Catalyst in Alkaline Medium
38466	Masazumi Tamura	57 (2018) 8058-8062	2016B1410	BL01B1	富重 圭一	Transformation of Sugars into Chiral Polyols over a Heterogeneous Catalyst
			2016A1352	BL01B1	富重 圭一	
38552	Taisuke Matsuno	58 (2019) 12170-12174	2018B1053	BL38B1	松野 太輔	Retarded Solid-State Rotations of an Oval-Shaped Guest in a Deformed Cylinder with CH- $\pi$ Arrays
38590	Takayuki Iida	57 (2018) 6454-6458	2015A0115	BL04B2	脇原 徹	Concerted Bimetallic Nanocluster Synthesis and Encapsulation via Induced Zeolite Framework Demetallation for Shape and Substrate Selective Heterogeneous Catalysis
38595	Ziqiang Zhao	57 (2018) 11952-11956	2015A0115	BL04B2	脇原 徹	A 3D Organically Synthesized Porous Carbon Material for Lithium-Ion Batteries
38704	Ryo Nishimura	58 (2019) 13308-13312	2019A1110	BL40XU	内田 欣吾	Object Transportation System Mimicking the Cilia of <i>Paramecium aurelia</i> Making Use of the Light-Controllable Crystal Bending Behavior of a Photochromic Diarylethene
			2019A1670	BL02B1	西村 涼	
			2018B1091	BL02B1	内田 欣吾	
			2018B1092	BL40XU	内田 欣吾	
			2018B1674	BL02B1	西村 涼	
			2018A1104	BL02B1	内田 欣吾	
			2018A1208	BL40XU	内田 欣吾	
			2017B1134	BL40XU	内田 欣吾	
			2017B1159	BL40XU	内田 欣吾	
			2017A1084	BL40XU	内田 欣吾	
			2017A1120	BL40XU	内田 欣吾	
			2015B1215	BL40B2	内田 欣吾	
2015A1240	BL40B2	内田 欣吾				
2014B1213	BL40B2	内田 欣吾				

Physical Review B

38248	Shoya Sakamoto	100 (2019) 035204	2015B3881	BL23SU	藤森 淳	Electronic Structure of the High- $T_c$ Ferromagnetic Semiconductor (Ga,Fe)Sb: X-ray Magnetic Circular Dichroism and Resonance Photoemission Spectroscopy Studies
			2016A3831	BL23SU	藤森 淳	
38250	Ikuto Kawasaki	100 (2019) 035111	2018A3811	BL23SU	藤森 伸一	Electronic States of EuCu <sub>2</sub> Ge <sub>2</sub> and EuCu <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> Studied by Soft X-ray Photoemission Spectroscopy
			2018B3811	BL23SU	藤森 伸一	
38283	Masahiro Mori	100 (2019) 035128	2016A7601	BL28XU	小久見 善八	First-Principles Calculations of the Atomic Structure and Electronic States of Li <sub>x</sub> FeF <sub>3</sub>
			2016B7607	BL28XU	松原 英一郎	
38306	H. Ishikawa	100 (2019) 045142	2017A3552	BL11XU	石井 賢司	Ordering of Hidden Multipoles in Spin-Orbit Entangled 5d <sup>1</sup> Ta Chlorides
38445	Dezhong Meng	99 (2019) 024508	2018A0149	BL10XU	清水 克哉	Superconductivity of the Hydrogen-Rich Metal Hydride Li <sub>5</sub> MoH <sub>11</sub> under High Pressure
38448	Tommaso Pincelli	100 (2019) 045118	2017A1323	BL19LXU	Panaccione Giancarlo	Transient Quantum Isolation and Critical Behavior in the Magnetization Dynamics of Half-Metallic Manganites
			2018A1278	BL19LXU	Panaccione Giancarlo	
			2016A1289	BL19LXU	Panaccione Giancarlo	
			2015B1162	BL19LXU	Panaccione Giancarlo	
38685	Yuichi Yokoyama	100 (2019) 115123	2017A7403	BL07LSU	和達 大樹	Photoinduced Valence Dynamics in EuNi <sub>2</sub> (Si <sub>0.21</sub> Ge <sub>0.79</sub> ) <sub>2</sub> Studied via Time-Resolved X-ray Absorption Spectroscopy
			2017B7403	BL07LSU	和達 大樹	
			2018B7578	BL07LSU	平田 靖透	
38715	Manabu Takahashi	100 (2019) 094435	2016B4252	BL12XU	平岡 望	Magnetic Circular Dichroism in Hard X-ray Raman Scattering as a Probe of Local Spin Polarization

The Journal of Physical Chemistry C

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
38294	Akimitsu Ishihara	123 (2019) 18150-18159	2014B7900	BL36XU	石原 顕光	Emergence of Oxygen Reduction Activity in Zirconium Oxide-Based Compounds in Acidic Media: Creation of Active Sites for the Oxygen Reduction Reaction
			2016A7900	BL36XU	石原 顕光	
			2016B7900	BL36XU	石原 顕光	
			2017A7900	BL36XU	石原 顕光	
38368	Masatsugu Oishi	123 (2019) 16034-16045	2017A1347	BL01B1	大石 昌嗣	Evaluation of the Electronic and Local Structure of Mn in Proton-Conducting Oxide, Ca(Zr,Mn)O <sub>3-δ</sub> , To Elucidate a Direct Hydrogen Dissolution Reaction
			2017B1437	BL01B1	大石 昌嗣	
			2016B1143	BL01B1	中村 崇司	
38483	Yosuke Nakaji	123 (2019) 20817-20828	2018B1732	BL14B2	中路 洋輔	Mechanism of Formation of Highly Dispersed Metallic Ruthenium Particles on Ceria Support by Heating and Reduction
			2014B1248	BL01B1	奥村 和	
38574	Ray Miyazaki	123 (2019) 12706-12715	2014A1702	BL14B2	原 賢二	DFT Mechanistic Study on the Complete Oxidation of Ethylene by the Silica-Supported Pt Catalyst: C=C Activation via the Ethylene Dioxide Intermediate
			2014A1820	BL14B2	原 賢二	
			2014B1797	BL14B2	原 賢二	
			2014B1945	BL14B2	原 賢二	
			2015A1856	BL14B2	原 賢二	
			2015A1993	BL14B2	原 賢二	
			2015B1788	BL14B2	原 賢二	
			2016A1690	BL14B2	原 賢二	
2016A1791	BL14B2	原 賢二				
38594	Tadashi Umeda	121 (2017) 24324-24334	2015A0115	BL04B2	脇原 徹	Comparative Study on the Different Interaction Pathways between Amorphous Aluminosilicate Species and Organic Structure-Directing Agents Yielding Different Zeolite Phases
38605	Soichi Kikkawa	123 (2019) 23446-23454	2017B1739	BL01B1	吉川 聡一	Isolated Platinum Atoms in Ni/ $\gamma$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> for Selective Hydrogenation of CO <sub>2</sub> toward CH <sub>4</sub>
			2018A1682	BL01B1	吉川 聡一	
38764	Yuan Yuan Tan	123 (2019) 18844-18853	2016A7821	BL36XU	松井 公佑	Pt-Co/C Cathode Catalyst Degradation in a Polymer Electrolyte Fuel Cell Investigated by an Infographic Approach Combining Three-Dimensional Spectroimaging and Unsupervised Learning
			2016B7821	BL36XU	唯 美津木	
			2017A7820	BL36XU	唯 美津木	
			2017A7821	BL36XU	唯 美津木	
2018A7820	BL36XU	唯 美津木				
38767	T. T. Wang	121 (2017) 9681-9690	2016A4134	BL12B2	Lin Yan-Gu	Synergistic Effect of Hydrogenation and Thiocyanate Treatments on Ag-Loaded TiO <sub>2</sub> Nanoparticles for Solar-to-Hydrogen Conversion

Journal of the American Chemical Society

38303	Tasuku Inami	141 (2019) 12541-12544	2018B1594	BL14B2	倉橋 拓也	Nickel-Catalyzed [5+2] Cycloaddition of 10 $\pi$ -Electron Aromatic Benzothiofenenes with Alkynes To Form Thermally Metastable 12 $\pi$ -Electron Nonaromatic Benzothiepines
			2016A1549	BL14B2	倉橋 拓也	
			2018A1690	BL14B2	高橋 俊文	
			2017B1748	BL14B2	富藤 玲	
			2017A1700	BL14B2	前田 和輝	
			2016B1766	BL14B2	高橋 俊文	
			2016A1680	BL14B2	前田 和輝	
2015B1770	BL14B2	黒田 大樹				
38428	Sung-Fu Hung	140 (2018) 17263-17270	2018A4130	BL12B2	Chen Hao-Ming	Identification of Stabilizing High-Valent Active Sites by Operando High-Energy Resolution Fluorescence-Detected X-ray Absorption Spectroscopy for High-Efficiency Water Oxidation
			2018A4254	BL12XU	Chen Hao-Ming	
38430	Jiajian Gao	141 (2019) 3014-3023	2018B4254	BL12XU	Chen Hao-Ming	Breaking Long-Range Order in Iridium Oxide by Alkali Ion for Efficient Water Oxidation
38558	Yu Nakashima	140 (2018) 9743-9750	2017B2723	BL41XU	阿部 郁朗	Structural and Computational Bases for Dramatic Skeletal Rearrangement in Anditomin Biosynthesis
38608	Liyuan Qu	141 (2019) 6802-6806	2015A0074	BL02B2	森吉 千佳子	Porous Molecular Conductor: Electrochemical Fabrication of Through-Space Conduction Pathways among Linear Coordination Polymers
38678	Yao-Kai Chang	141 (2019) 8489-8502	2017A2576	BL32XU	別所 義隆	Human DNA Polymerase $\mu$ Can Use a Noncanonical Mechanism for Multiple Mn <sup>2+</sup> -Mediated Functions
			2018A2514	BL32XU	別所 義隆	
38688	Takumi Nakanishi	141 (2019) 14384-14393	2017A1364	BL02B1	佐藤 治	Observation of Proton Transfer Coupled Spin Transition and Trapping of Photoinduced Metastable Proton Transfer State in an Fe(II) Complex
			2017B1285	BL02B1	佐藤 治	
			2018A1213	BL02B1	佐藤 治	
			2018B1259	BL02B1	佐藤 治	

Chemistry of 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
38243	Tomoya Nakamura	31 (2019) 1729-1737	2018A1584	BL19B2	脇岡 正幸	Molecular Orientation Change in Naphthalene Diimide Thin Films Induced by Removal of Thermally Cleavable Substituents
			2018B1617	BL46XU	脇岡 正幸	
38305	Takayuki Nagai	31 (2019) 6257-6261	2018B1713	BL02B2	永井 隆之	Weak Ferroelectricity in $n = 2$ Pseudo Ruddlesden-Popper-Type Niobate $\text{Li}_2\text{SrNb}_2\text{O}_7$
			2018A1653	BL02B1	中埜 彰俊	
38402	Eriko Watanabe	31 (2019) 2358-2365	2015B7500	BL07LSU	大久保 将史	Redox-Driven Spin Transition in a Layered Battery Cathode Material
38442	Takahiro Ogata	31 (2019) 1352-1358	2018A1642	BL02B2	尾形 昂洋	Melting of $d_{xy}$ Orbital Ordering Accompanied by Suppression of Giant Tetragonal Distortion and Insulator-to-Metal Transition in Cr-Substituted $\text{PbVO}_3$
			2017A1388	BL02B2	酒井 雄樹	
			2018A1636	BL02B2	西久保 匠	
38706	Yuki Sakai	31 (2019) 4748-4758	2017A1242	BL09XU	東 正樹	Polar-Nonpolar Phase Transition Accompanied by Negative Thermal Expansion in Perovskite-Type $\text{Bi}_{1-x}\text{Pb}_x\text{NiO}_3$
			2017A1388	BL02B2	酒井 雄樹	
			2017B3751	BL22XU	町田 晃彦	
			2017B1721	BL47XU	西久保 匠	
			2018A1642	BL02B2	尾形 昂洋	
			2018A3751	BL22XU	町田 晃彦	
			2018A1667	BL09XU	西久保 匠	
			2018B3751	BL22XU	町田 晃彦	
38711	Zhao Pan	31 (2019) 6187-6192	2018B1222	BL02B2	岡 研吾	Pronounced Negative Thermal Expansion in Lead-Free $\text{BiCoO}_3$ -Based Ferroelectrics Triggered by the Stabilized Perovskite Structure
			2018B1860	BL19B2	西久保 匠	
			2019A1045	BL02B2	Pan Zhao	

Electrochemistry

38237	Naohisa Okita	(2019) Online publication 8 July 2019	2017B1295	BL01B1	直井 勝彦	Stabilization of Solid Solution Behavior for Monoclinic $\text{Li}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ via $\text{Al}^{3+}$ Doping
38279	Koji Kandori	87 (2019) 182-187	2017A7103	BL33XU	野中 敬正	Direct Observation of Ion Concentration Distribution on All-Solid-State Rechargeable Battery Using <i>operando</i> X-ray Radiography and Silver-Ion Conductor
			2017B7103	BL33XU	野中 敬正	
38459	Teppei Kawamoto	87 (2019) 270-275	2016B1606	BL14B2	犬飼 潤治	Sublayered Structures of Hydrated Nafion® Thin Film Formed by Casting on Pt Substrate Analyzed by X-ray Absorption Spectroscopy under Ambient Conditions and Neutron Reflectometry at Temperature of 80°C and Relative Humidity of 30–80%
			2017A1785	BL14B2	犬飼 潤治	
			2019A1768	BL14B2	犬飼 潤治	
38481	Yasushi Idemoto	87 (2019) 220-228	2016A1509	BL19B2	井手本 康	Synthesis, Crystal Structure and Electrode Properties of Spinel-Type $\text{MgCo}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_4$
			2016B1859	BL19B2	井手本 康	
			2016A1510	BL14B2	井手本 康	
			2016B1852	BL14B2	井手本 康	
38707	Naoto Kitamura	87 (2019) 265-269	2017A1578	BL19B2	井手本 康	Partial Substitution Effect on Electrical Conductivity, Crystal Structure, and Electron Density Distribution of $\text{LaBaGaO}_4$ -Based Protonic Conductor
			2017B1807	BL19B2	井手本 康	
			2016B1859	BL19B2	井手本 康	
38708	Yasushi Idemoto	87 (2019) 281-288	2016B1859	BL19B2	井手本 康	Synthesis, Electrochemical Properties and Changes of Crystal and Electronic Structures in Charge/Discharge Process of Spinel Type Cathode-Materials $\text{Mg}(\text{Mg}_{0.5}\text{V}_{1.5-x}\text{Ni}_x)\text{O}_4$ ( $x = 0, 0.1, 0.2, 0.3$ ) for Magnesium Secondary Batteries
			2016A1510	BL14B2	井手本 康	
			2016B1852	BL14B2	井手本 康	
			2017A1573	BL14B2	井手本 康	

ACS Catalysis

38432	Lan Yuan	9 (2019) 4824-4833	2018B4135	BL12B2	Chen Hao-Ming	Dynamic Evolution of Atomically Dispersed Cu Species for $\text{CO}_2$ Photoreduction to Solar Fuels
38434	Nian-Tzu Suen	9 (2019) 5217-5222	2018B4137	BL12B2	Chen Hao-Ming	Morphology Manipulation of Copper Nanocrystals and Product Selectivity in the Electrocatalytic Reduction of Carbon Dioxide
38465	Ji Cao	9 (2019) 3725-3729	2016B1410	BL01B1	富重 圭一	Direct Synthesis of Unsaturated Sugars from Methyl Glycosides
			2016A1352	BL01B1	富重 圭一	
			2018B1805	BL14B2	田村 正純	
38593	Takayuki Iida	7 (2017) 8147-8151	2015A0115	BL04B2	脇原 徹	Encapsulation of Molybdenum Carbide Nanoclusters inside Zeolite Micropores Enables Synergistic Bifunctional Catalysis for Anisole Hydrodeoxygenation
38618	Takashi Fujita	9 (2019) 8364-8372	2014B1832	BL14B2	大橋 弘範	CO Oxidation over $\text{Au/ZnO}$ : Unprecedented Change of the Reaction Mechanism at Low Temperature Caused by Different $\text{O}_2$ Activation Process
			2015A1702	BL14B2	大橋 弘範	
			2015B1781	BL14B2	村山 美乃	
			2015B1883	BL14B2	石田 玉青	

Dalton Transactions

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
38363	Hiroki Iwaizumi	48 (2019) 1964-1968	2017A1040	BL02B2	守友 浩	The Effect of 3d-Electron Configuration Entropy on the Temperature Coefficient of Redox Potential in $\text{Co}_{1-x}\text{Mn}_x$ Prussian Blue Analogues
			2018A1125	BL02B2	守友 浩	
38385	Tomohiro Sugahara	48 (2019) 9053-9056	2016B1716	BL02B1	菅原 知紘	The Formation of a 1,4-disilabenzene and its Isomerization into a Disilabenzvalene Derivative
38407	Toshio Naito	48 (2019) 12858-12866	2018A1653	BL02B1	中埜 彰俊	A Molecular Crystal with an Unprecedentedly Long-Lived Photoexcited State
			2017B1733	BL02B1	鬼頭 俊介	
38409	Kentarou Ichihashi	48 (2019) 7130-7137	2017B7821	BL36XU	唯 美津木	Enhanced Oxygen Reduction Reaction Performance of Size-Controlled Pt Nanoparticled on Polypyrrole-Functionalized Carbon Nanotubes
			2016A7822	BL36XU	松井 公佑	
38771	Hong-Jie Chen	43 (2014) 11410-11417	2014A4254	BL12XU	Hsu I Jui	Possible Intermediates of Cu(phen)-Catalyzed C-O Cross-Coupling of Phenol with an Aryl Bromide by <i>in situ</i> ESI-MS and EPR Studies

Journal of Alloys and Compounds

38218	Kenji Yoshii	804 (2019) 364-369	2014A3608	BL14B1	吉井 賢資	Dielectric and Magnetocaloric Study of $\text{TmCrO}_3$
38316	Taisuke Sasaki	790 (2019) 750-759	2016B1024	BL02B2	廣澤 哲	Role of Ga on the High Coercivity of Nd-rich Ga-doped Nd-Fe-B Sintered Magnet
			2015A1007	BL46XU	廣澤 哲	
			2017A1010	BL46XU	廣澤 哲	
38318	Nikolai G. Dorbakov	793 (2019) 56-64	2016B4504	BL15XU	山浦 一成	Barium-Induced Effects on Structure and Properties of $\beta$ - $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ -type $\text{Ca}_9\text{Bi}(\text{VO}_4)_7$
38319	Alexei Belik	793 (2019) 42-48	2018B4502	BL15XU	Belik Alexei	Crystal Structure and Magnetic Properties of A-Site-Ordered Quadruple Perovskite $\text{CeCu}_3\text{Cr}_4\text{O}_{12}$
38322	Evgeniya S. Zhukovskaya	787 (2019) 1301-1309	2017A4503	BL15XU	Belik Alexei	Crystal Structure, Dielectric, and Optical Properties of $\beta$ -Calcium Orthophosphates Heavily Doped with Ytterbium

Macromolecules

38291	Hitoshi Shimamoto	52 (2019) 5963-5970	2016A1018	BL19B2	高原 淳	Nanocomposite Elastomers Composed of Silica Nanoparticles Grafted with a Comb-Shaped Copolymer Brush
			2016B1034	BL19B2	高原 淳	
			2016A1031	BL20XU	高原 淳	
			2016B1035	BL20XU	高原 淳	
			2017A1028	BL19B2	高原 淳	
			2017A1029	BL20XU	高原 淳	
			2017B1016	BL19B2	高原 淳	
38562	Chen Kuang	52 (2019) 4812-4819	2017B1409	BL40B2	佐藤 尚弘	Micellization and Phase Separation in Aqueous Solutions of Thermosensitive Block Copolymer Poly( <i>N</i> -isopropylacrylamide)- <i>b</i> -poly( <i>N</i> -vinyl-2-pyrrolidone) upon Heating
			2018B1155	BL40B2	佐藤 尚弘	
38563	Tetiana Sezonenko	52 (2019) 935-944	2017B1409	BL40B2	佐藤 尚弘	Dehydration, Micellization, and Phase Separation of Thermosensitive Polyoxazoline Star Block Copolymers in Aqueous Solution
38564	Kohji Tashiro	52 (2019) 2189-2202	2018A1410	BL02B1	田代 孝二	Experimental Determination of the Geometrical Relation between Monomer and Polymer Species of 2,5-Distyrylpyrazine Single Crystal in the Topotactic Photoinduced Polymerization Reaction
38662	Wataru Takagi	52 (2019) 6633-6640	2016A1078	BL40B2	高野 敦志	Bicontinuous Double-Diamond Structures Formed in Ternary Blends of AB Diblock Copolymers with Block Chains of Different Lengths
			2016B1073	BL40B2	高野 敦志	
			2018A1474	BL40B2	高野 敦志	

ACS Applied Materials & Interfaces

38421	Yu-Te Liao	9 (2017) 42425-42429	2016A4129	BL12B2	Chen Hao-Ming	Mesoporous $\text{TiO}_2$ Embedded with a Uniform Distribution of CuO Exhibit Enhanced Charge Separation and Photocatalytic Efficiency
38476	Ming-Jay Deng	11 (2019) 29838-29848	2018A4143	BL12B2	Deng Ming-Jay	3D Network $\text{V}_2\text{O}_5$ Electrodes in a Gel Electrolyte for High-Voltage Wearable Symmetric Pseudocapacitors
			2019A4253	BL12XU	Deng Ming-Jay	
38498	Damian Kowalski	11 (2019) 28823-28829	2017B7612	BL28XU	松原 英一郎	Activation of Catalytically Active Edge-Sharing Domains in $\text{Ca}_2\text{FeCoO}_5$ for Oxygen Evolution Reaction in Highly Alkaline Media
			2018A7612	BL28XU	松原 英一郎	
38560	Shu-Jui Chang	11 (2019) 31562-31572	2018A1048	BL25SU	Chang Shu-Jui	$\text{GdFe}_{0.8}\text{Ni}_{0.2}\text{O}_3$ : A Multiferroic Material for Low-Power Spintronic Devices with High Storage Capacity



### Applied Physics Letters

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
38282	Huiwen Lin	112 (2018) 073903	2016B4503	BL15XU	野口 秀典	Application of Windowless Energy Dispersive Spectroscopy to Determine Li Distribution in Li-Si Alloys
38452	Kimihiko Kato	107 (2015) 102102	2012B1575	BL46XU	財満 鎮明	Oxygen and Germanium Migration at Low Temperature Influenced by the Thermodynamic Nature of the Materials Used in Germanium Metal-Insulator-Semiconductor Structures
			2009B0026	BL46XU	宮崎 誠一	
38453	Shigehisa Shibayama	103 (2013) 082114	2012B1575	BL46XU	財満 鎮明	Understanding of Interface Structures and Reaction Mechanisms Induced by Ge or GeO Diffusion in Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /Ge Structure
			2009B0026	BL46XU	宮崎 誠一	
38744	Shengkun Yao	108 (2016) 123702	2014A1270	BL29XU	Jiang Huaidong	Equally Sloped X-ray Microtomography of Living Insects with Low Radiation Dose and Improved Resolution Capability

### Chemical Communications

38236	Koh Sugamata	57 (2019) 8254-8257	2018A1167	BL40XU	笹森 貴裕	A Stable Bis(methylene)- $\lambda^4$ -selane with a >C=Se<C< Bond Containing Se(IV)
			2018A1405	BL40XU	箕浦 真生	
			2018B1084	BL40XU	笹森 貴裕	
			2018B1275	BL40XU	箕浦 真生	
			2019A1057	BL02B1	笹森 貴裕	
38378	Ji Ha Lee	55 (2019) 1303-1305	2017B1351	BL40B2	櫻井 和朗	Tuning of the Aggregation Number of Platonic Micelles with a Binary Mixture of Calix[4]arene Surfactants
			2017A1414	BL40B2	櫻井 和朗	
			2016B1481	BL40B2	櫻井 和朗	
			2016A1242	BL40B2	櫻井 和朗	
38474	Ryohei Yamakado	55 (2019) 10269-10272	2017B1302	BL40XU	山門 陵平	Photo-Responsive Dimension-Controlled Ion-Pairing Assemblies Based on Anion Complexes of $\pi$ -electric Systems
			2017A1248	BL40B2	山門 陵平	
			2017A1305	BL40B2	前田 大光	
			2018A1436	BL40B2	前田 大光	
			2018A1437	BL40B2	平田 剛輝	
38730	Silvia Bracco	53 (2017) 7776-7779	2016A1610	BL38B1	宮野 哲也	CO <sub>2</sub> Regulates Molecular Rotor Dynamics in Porous Materials
			2016B1746	BL38B1	岡田 直樹	

### Journal of Power Sources

38211	Jonghyun Han	435 (2019) 226822	2017B1077	BL02B2	山田 幾也	Suppressive Effect of Fe Cations in Mg(Mn <sub>1-x</sub> Fe <sub>x</sub> ) <sub>2</sub> O <sub>4</sub> Positive Electrodes on Oxidative Electrolyte Decomposition for Mg Rechargeable Batteries
38260	Naoto Kitamura	437 (2019) 226905	2015A1544	BL04B2	井手本 康	Study of Atomic Ordering across the Layer in Lithium-Rich Layered Positive Electrode Materials towards Preparation Process Optimization
38413	Shao-Chu Huang	435 (2019) 226702	2017B4138	BL12B2	Chen Han-Yi	Vanadium-based Polyoxyometalate as Electron/Ion Sponge for Lithium-Ion Storage
38731	Yasutaka Nagai	435 (2019) 226809	2017A7032	BL33XU	長井 康貴	Improving Water Management in Fuel Cells through Microporous Layer Modifications: Fast <i>Operando</i> Tomographic Imaging of Liquid Water
			2017B7032	BL33XU	長井 康貴	
			2018A7032	BL33XU	長井 康貴	

### Physical Chemistry Chemical Physics

38454	Daisuke Asakura	21 (2019) 18363-18369	2014B7475	BL07LSU	朝倉 大輔	Mn 2p Resonant X-ray Emission Clarifies the Redox Reaction and Charge-Transfer Effects in LiMn <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
			2015A7483	BL07LSU	朝倉 大輔	
			2015B7495	BL07LSU	朝倉 大輔	
			2016A7511	BL07LSU	朝倉 大輔	
38561	Kazumasa Murata	21 (2019) 18128-18137	2018A1756	BL14B2	村田 和優	Identification of Active Sites in CO Oxidation over a Pd/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Catalyst
38592	Takayuki Iida	20 (2018) 7914-7919	2015A0115	BL04B2	脇原 徹	Zeolites with Isolated-Framework and Oligomeric-Extraframework Hafnium Species Characterized with Pair Distribution Function Analysis
38637	Hongxin Wang	20 (2018) 8166-8176	2016B3302	BL08B2	李 雷	L-edge Sum Rule Analysis on 3d Transition Metal Sites: from d <sup>10</sup> to d <sup>9</sup> and towards Application to Extremely Dilute Metallo-Enzymes
			2017A3302	BL08B2	李 雷	

RSC Advances

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
38219	Akanksha Tyagi	8 (2018) 24021-24028	2017A1477	BL01B1	山本 旭	Novel Blended Catalysts Consisting of a TiO <sub>2</sub> Photocatalyst and an Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Supported Pd-Au Bimetallic Catalyst for Direct Dehydrogenative Cross-Coupling between Arenes and Tetrahydrofuran
			2016A1170	BL01B1	山本 旭	
38377	Okkyun Seo	9 (2019) 21311-21317	2015B4907	BL15XU	小林 浩和	The Relationship between Crystalline Disorder and Electronic Structure of Pd Nanoparticles and Their Hydrogen Storage Properties
			2017A4501	BL15XU	坂田 修身	
			2017B4503	BL15XU	坂田 修身	
			2014B1210	BL04B2	Kumara Rosantha	
			2015B1245	BL04B2	坂田 修身	
			2016B1033	BL01B1	坂田 修身	
			2017A1320	BL04B2	坂田 修身	
			2017B1019	BL04B2	坂田 修身	
			2017B1368	BL04B2	坂田 修身	
38405	Yuji Mahara	7 (2017) 34530-34537	2016A1662	BL01B1	馬原 優治	Methane Combustion over Pd/CoAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub> /Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Catalysts Prepared by Galvanic Deposition
			2015B1482	BL01B1	大山 順也	
38697	Masafumi Harada	9 (2019) 29511-29521	2015A1261	BL04B2	原田 雅史	Reverse Monte Carlo Modeling for Local Structures of Noble Metal Nanoparticles Using High-energy XRD and EXAFS
			2016A1093	BL04B2	原田 雅史	

IUCrJ

38254	Thomas P. Halsted	6 (2019) 761-772	2017B8028	BL2	吾郷 日出夫	Catalytically Important Damage-Free Structures of a Copper Nitrite Reductase Obtained by Femtosecond X-ray Laser and Room-Temperature Neutron Crystallography
38601	Woo-Chang Chung	5 (2018) 866-879	2017B6770	BL44XU	Hwang Kwang Yeon	Structure-Based Mechanism of Action of a Viral Poly(ADP-ribose) Polymerase 1-Interacting Protein Facilitating Virus Replication
38739	Shengkun Yao	5 (2018) 141-149	2014A1270	BL29XU	Jiang Huaidong	Three-dimensional Ultrastructural Imaging Reveals the Nanoscale Architecture of Mammalian Cells

Journal of Materials Chemistry A

38410	Anucha Koedtruad	7 (2019) 5583-5588	2018B1710	BL02B2	Koedtruad Anucha	Structure-Property Relations in Ag-Bi-I Compounds: Potential Pb-free Absorbers in Solar Cells
38471	Shinya Masuda	7 (2019) 16356-16363	2017B1084	BL01B1	森 浩亮	PdAg Nanoparticles Supported on Resorcinol-Formaldehyde Polymers Containing Amine Groups: the Promotional Effect of Phenylamine Moieties on CO <sub>2</sub> Transformation to Formic Acid
38607	Chengyan Liu	7 (2019) 9761-9772	2015A0074	BL02B2	森吉 千佳子	Dynamic Ag <sup>+</sup> -Intercalation with AgSnSe <sub>2</sub> Nano-Precipitates in Cl-Doped Polycrystalline SnSe <sub>2</sub> toward Ultra-High Thermoelectric Performance

Journal of the American Ceramic Society

38324	Nikolai G. Dorbakov	101 (2018) 4011-4022	2016B4504	BL15XU	山浦 一成	Influence of Magnesium on Dielectric Properties of Ca <sub>9-x</sub> Mg <sub>x</sub> Bi(VO <sub>4</sub> ) <sub>7</sub> Ceramics
38394	Donglin Han	(2019) Online published 17 Aug. 2019	2018B5331	BL16B2	後藤 和宏	Electrochemical and Structural Influence on BaZr <sub>0.8</sub> Y <sub>0.2</sub> O <sub>3-δ</sub> from Manganese, Cobalt, and Iron Oxide Additives
			2013B1568	BL14B2	宇田 哲也	
38719	Norimasa Nishiyama	102 (2019) 2195-2202	2017A1316	BL10XU	西山 宣正	Phase Relations in Silicon and Germanium Nitrides up to 98 GPa and 2400°C

Journal of the Physical Society of Japan

38247	Kento Kobayashi	88 (2019) 084708	2017B1235	BL25SU	菅 大介	Orbital Magnetic Moments in Strained SrRuO <sub>3</sub> Thin Films
38500	Chihiro Tabata	88 (2019) 093704	2018A3786	BL22XU	松村 武	Magnetic Field Induced Triple- <i>q</i> Magnetic Order in Trillium Lattice Antiferromagnet EuPtSi Studied by Resonant X-ray Scattering
38681	Shinichi Nakamura	88 (2019) 103702	2018B3583	BL11XU	中村 真一	The First Observation of Pure Nuclear Bragg Reflection from Natural Iron $\alpha$ -Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> by Synchrotron Mössbauer Diffraction
			2019A3583	BL11XU	中村 真一	

### Nature Communications

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
38400	Somnath Dey	10 (2019) 3711	2015A1497	BL43IR	Reddy Chilla Malla	Mechanically Interlocked Architecture Aids an Ultra-Stiff and Ultra-Hard Elastically Bendable Cocrystal
38553	Shin-Fu Chen	9 (2018) 3085	2015B4007	BL12B2	Chan Nei Li	Structural Insights into the Gating of DNA Passage by the Topoisomerase II DNA-Gate
			2015A4007	BL12B2	Chan Nei Li	
			2014A4008	BL12B2	Chan Nei Li	
			2013B4006	BL12B2	Chan Nei Li	
			2013A4013	BL12B2	Chan Nei Li	
2016A4006	BL12B2	Chan Nei Li				
38698	Tetsuo Katayama	10 (2019) 3606	2017A8044	BL3	片山 哲夫	Tracking Multiple Components of a Nuclear Wavepacket in Photoexcited Cu(I)-phenanthroline Complex using Ultrafast X-ray Spectroscopy

### Polymer

38208	Shotaro Nishitsuji	179 (2019) 121622	2005A0690	BL45XU	竹中 幹人	Viscoelastic Effects on Dynamics of Concentration Fluctuations in Semi-Dilute Polymer Solution in the Good Solvent Regime
			2005B0336	BL45XU	竹中 幹人	
38240	Ken Kojo	179 (2019) 121632	2015B1459	BL40XU	小椎尾 謙	Advantages of Bulge Testing and Rupture Mechanism of Glassy Polymer Films
38565	Kohji Tashiro	171 (2019) 140-148	2017B1215	BL02B1	田代 孝二	Crystal Structure of Cellulose-iodine Complex

### ACS Omega

38597	Toyohiro Usui	4 (2019) 3653-3659	2018A0155	BL04B2	脇原 徹	Identifying the Factors Governing the Early-Stage Degradation of Cu-Chabazite Zeolite for NH <sub>3</sub> -SCR
			2015A0115	BL04B2	脇原 徹	
38663	Junichi Nomoto	4 (2019) 14526-14536	2019A1813	BL46XU	野本 淳一	Improvement of the Properties of Direct-Current Magnetron-Sputtered Al-Doped ZnO Polycrystalline Films Containing Retained Ar Atoms Using 10-nm-Thick Buffer Layers

### Acta Crystallographica Section D

38401	R. Bruce Doak	74 (2018) 1000-1007	2017B8002	BL2	Schlichting Ilme	Crystallography on a Chip - without the Chip: Sheet-on-Sheet Sandwich
38614	Taisuke Nomura	75 (2019) 426-436	2016A2540	BL26B1	三上 文三	High-Resolution Crystal Structures of the Glycoside Hydrolase Family 45 Endoglucanase EG27II from the Snail <i>Ampullaria crosseana</i>

### AIP Advances

38365	Yuya Fukuzumi	8 (2018) 065021	2017A1040	BL02B2	守友 浩	Temperature Coefficient of Redox Potential of Li <sub>x</sub> FePO <sub>4</sub>
			2017A1649	BL02B2	福住 勇矢	
38747	Aya Obinata	8 (2018) 115122	2015B0901	BL25SU	千葉 大地	Electric Field Effect on Magnetism in a MgO/Pd/Co System with a Solid-State Capacitor Structure
			2017B0921	BL25SU	壬生 攻	
			2017A1869	BL25SU	小谷 佳範	

### Antimicrobial Agents and Chemotherapy

38416	Masayuki Amano	63 (2019) e00466-19	2014A1001	BL41XU	山本 雅貴	Novel Central Nervous System (CNS)-Targeting Protease Inhibitors for Drug-Resistant HIV Infection and HIV-Associated CNS Complications
38417	Shin-ichiro Hattori	63 (2019) e02635-18	2014A1001	BL41XU	山本 雅貴	Halogen Bond Interactions of Novel HIV-1 Protease Inhibitors (PI) (GRL-001-15 and GRL-003-15) with the Flap of Protease Are Critical for Their Potent Activity against Wild-Type HIV-1 and Multi-PI-Resistant Variants
			2016A1001	BL41XU	山本 雅貴	

### Applied Catalysis A: General

38257	Hien Nguyen	577 (2019) 35-43	2014A4900	BL15XU	小廣 和哉	Highly Durable Ru Catalysts Supported on CeO <sub>2</sub> Nanocomposites for CO <sub>2</sub> Methanation
			2014B1051	BL40XU	小廣 和哉	
			2015A4900	BL15XU	小廣 和哉	
			2016A4905	BL15XU	小廣 和哉	
			2017A4908	BL15XU	小廣 和哉	
38732	Min-Hong Liu	586 (2019) 117216	2018A4910	BL15XU	小廣 和哉	Origins of Catalysis for CO Oxidation on Porous Ag Fabricated by Leaching of Intermetallic Compound Mg <sub>3</sub> Ag
			2017B4907	BL15XU	亀岡 聡	
			2018B4912	BL15XU	亀岡 聡	

### Cell

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
38437	Xiaoting Li	176 (2019) 459-467	2018A2561	BL41XU	Liu Zhi-Jie	Crystal Structure of the Human Cannabinoid Receptor CB2
			2017A2708	BL41XU	Liu Zhi-Jie	
			2018B2721	BL41XU	Liu Zhi-Jie	
38439	Yao Peng	172 (2018) 719-730	2015B1031	BL41XU	Liu Zhi-Jie	5-HT <sub>2C</sub> Receptor Structures Reveal the Structural Basis of GPCR Polypharmacology

### Chemical and Pharmaceutical Bulletin

38301	Mitsuhiro Arisawa	67 (2019) 733-771	2011A1835	BL14B2	有澤 光弘	Development of Metal Nanoparticle Catalysis toward Drug Discovery
			2011B1761	BL27SU	有澤 光弘	
			2011B1952	BL14B2	有澤 光弘	
			2012A1621	BL27SU	有澤 光弘	
			2012A1770	BL14B2	有澤 光弘	
			2012B1751	BL27SU	有澤 光弘	
			2013A1792	BL14B2	有澤 光弘	
			2013A1322	BL14B2	新井 聡史	
			2014A1786	BL14B2	有澤 光弘	
			2014B1247	BL27SU	有澤 光弘	
			2016A1678	BL14B2	谷口 敬寿	
			2016B1745	BL27SU	谷口 敬寿	
			2017A1793	BL14B2	秋山 敏毅	
			2017B1931	BL14B2	秋山 敏毅	
2017B1732	BL27SU	秋山 敏毅				
2018A1793	BL14B2	秋山 敏毅				
2018B1864	BL14B2	秋山 敏毅				
38714	Yasunori Iwao	67 (2019) 935-939	2015A1293	BL02B1	野口 修治	Crystal Structures of Flavone C-Glycosides from Oolong Tea Leaves: Chafuroside A Dihydrate and Chafuroside B Monohydrate

### The Chemical Record

38403	Yuji Mahara	18 (2018) 1306-1313	2016A1662	BL01B1	馬原 優治	Synthesis of Supported Bimetal Catalysts using Galvanic Deposition Method
38414	Yuki Wakisaka	19 (2018) 1157-1165	2016A7902	BL36XU	朝倉 清高	Development of Surface Fluorescence X-Ray Absorption Fine Structure Spectroscopy Using a Laue-Type Monochromator

### Chemistry - A European Journal

38242	Minh Anh Truong	25 (2019) 6741-6752	2018A1584	BL19B2	脇岡 正幸	Influence of Alkoxy Chain Length on the Properties of Two-Dimensionally Expanded Azulene-Core-Based Hole-Transporting Materials for Efficient Perovskite Solar Cells
			2017A1823	BL19B2	若宮 淳志	
38427	Chia-Shuo Hsu	24 (2018) 18419-48423	2018A4125	BL12B2	Chen Hao-Ming	$\pi$ -Conjugated Organic-Inorganic Hybrid Photoanodes: Revealing the Photochemical Behavior through In Situ X-Ray Absorption Spectroscopy

### Crystal Growth & Design

38591	Hirofumi Horikawa	18 (2018) 2180-2188	2015A0115	BL04B2	脇原 徹	Crystallization of Ti-Rich *BEA Zeolites by the Combined Strategy of Using Ti-Si Mixed Oxide Composites and Intentional Aluminum Addition/Post-Synthesis Dealumination
38680	Venkatesha Hathwar	19 (2019) 3979-3988	2014A0078	BL02B1	Iversen Bo	Low-Temperature Structural Phase Transitions in Thermoelectric Tetrahedrite, Cu <sub>12</sub> Sb <sub>4</sub> S <sub>13</sub> , and Tennantite, Cu <sub>12</sub> As <sub>4</sub> S <sub>13</sub>
			2019A0159	BL02B1	西堀 英治	

### International Journal of Biological Macromolecules

38406	Hyounsok Kim	119 (2018) 335-344	2017A6772	BL44XU	Kim Hyounsok	Structural Basis for the Substrate Recognition of Peptidoglycan Pentapeptides by <i>Enterococcus faecalis</i> VanY <sub>B</sub>
38617	Wan Hasnidah Wan Osman	132 (2019) 222-229	2018A2533	BL26B1	三上 文三	Identification of Key Residues for Activities of Atypical Glutathione S-transferase of <i>Ceriporiopsis subvernisporea</i> , a Selective Degrader of Lignin in Woody Biomass, by Crystallography and Functional Mutagenesis
			2017A2547	BL26B1	三上 文三	
			2018A2563	BL26B1	三上 文三	

### Journal of Applied 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
38255	Satoshi Hiroi	125 (2019) 225101	2017B4902	BL15XU	竹内 恒博	Phonon Scattering at the Interfaces of Epitaxially Grown Fe <sub>2</sub> VAl/W and Fe <sub>2</sub> VAl/Mo Superlattices
38444	Kenji Nomura	126 (2019) 074105	2018A5110	BL16XU	淡路 直樹	Reconstruction of IrO <sub>2</sub> /(Pb, La)(Zr, Ti)O <sub>3</sub> (PLZT) Interface by Optimization of Postdeposition Annealing and Sputtering Conditions
			2018B5110	BL16XU	土井 修一	

### The Journal of Biochemistry

38604	Daiyu Doubayashi	166 (2019) 67-75	2013A6849	BL44XU	三上 文三	The Microenvironment Surrounding FAD Mediates Its Conversion to 8-Formyl-FAD in <i>Aspergillus oryzae</i> RIB40 Formate Oxidase
			2013B6849	BL44XU	三上 文三	
			2010A1489	BL26B1	三上 文三	
			2011A1221	BL38B1	三上 文三	
			2011B1419	BL38B1	三上 文三	
2010B1456	BL38B1	三上 文三				
38613	Katsumasa Nagano	(2019) Online published 3 Sep. 2019	2012A1631	BL28B2	深水 昭吉	Cooperative Action of APJ and $\alpha$ 1A-adrenergic Receptor in Vascular Smooth Muscle Cells Induces Vasoconstriction

### The Journal of Chemical Physics

38648	Hironobu Fukuzawa	151 (2019) 104302	2013B1688	BL17SU	立花 徹也	Probing Gaseous Molecular Structure by Molecular-Frame Photoelectron Angular Distributions
38686	Razib Obaid	151 (2019) 104308	2017B8019	BL3	Berrah Nora	Photo-ionization and Fragmentation of Sc <sub>3</sub> N@C <sub>80</sub> Following Excitation above the Sc K-edge

### The Journal of Physical Chemistry B

38207	Haruna Hayase	123 (2019) 5377-5383	2016B1383	BL37XU	瀧上 隆智	Solid Film Formation at the Tetradecane/Aqueous Hexadecyltrimethylammonium Bromide Solution Interface Studied by Interfacial Tensiometry and X-ray Reflectometry
			2017A1221	BL37XU	瀧上 隆智	
			2017B1126	BL37XU	瀧上 隆智	
38369	Rintaro Takahashi	123 (2019) 4340-4345	2018A7231	BL03XU	高橋 倫太郎	Observing the Kinetic Pathway of Nanotube Formation from Bolaamphiphiles by Time-Resolved Small-Angle X-ray Scattering
			2017B1354	BL45XU	櫻井 和朗	
			2017B7282	BL03XU	高橋 倫太郎	
			2018B1370	BL45XU	櫻井 和朗	
			2018B7283	BL03XU	高橋 倫太郎	

### Journal of Solid State Chemistry

38214	Yoshiyuki Inaguma	277 (2019) 363-367	2018B1194	BL02B2	稲熊 宣之	Low-Temperature Formation of Pb <sub>2</sub> O <sub>7</sub> with O/F Anion Ordering by Solid State Reaction
			2018A1187	BL02B2	植田 紘一郎	
			2018B1413	BL02B2	植田 紘一郎	
38320	Alexei Belik	275 (2019) 43-48	2018B4502	BL15XU	Belik Alexei	Crystal Structures of Cation Non-Stoichiometric RMn <sub>3</sub> O <sub>6</sub> (R = Gd, Er, and Tm) Manganites Belonging to A-Site Columnar-Ordered Quadruple Perovskite Family
			2017B4502	BL15XU	辻本 吉廣	
			2017A4503	BL15XU	Belik Alexei	

### Journal of Synchrotron Radiation

38252	Go Ueno	26 (2019) 912-921	2016A1001	BL41XU	山本 雅貴	Low-Dose X-ray Structure Analysis of Cytochrome c Oxidase Utilizing High-Energy X-rays
			2016A2533	BL41XU	長谷川 和也	
			2017A2522	BL41XU	長谷川 和也	
38297	Yuya Kubota	26 (2019) 1139-1143	2017B8088	BL3	久保田 雄也	Polarization Control with an X-ray Phase Retarder for High-Time-Resolution Pump-Probe Experiments at SACLA

### Microporous and Mesoporous Materials

38596	Kenta Iyoki	268 (2018) 77-83	2015A0115	BL04B2	脇原 徹	Formation of a Dense Non-Crystalline Layer on the Surface of Zeolite Y Crystals under High-Temperature Steaming Conditions
38598	Naomichi Hikichi	284 (2019) 82-89	2018A0155	BL04B2	脇原 徹	Role of Sodium Cation during Aging Process in the Synthesis of LEV-Type Zeolite



**Microscopy and Microanalysis**

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
38533	Rino Saiga	25 (2019) 1344-1345	2011A0034	BL47XU	水谷 隆太	Nanometer-Scale Structures of Neurons Differ Between Individuals and Those Difference Become Extraordinary in Schizophrenia
			2014A1057	BL37XU	水谷 隆太	
			2015B1101	BL20XU	水谷 隆太	
			2017A1143	BL37XU	水谷 隆太	
			2018B1187	BL37XU	水谷 隆太	
2019A1207	BL20XU	水谷 隆太				
38741	Shengkun Yao	23 (2017) 1-7	2014A1270	BL29XU	Jiang Huaidong	Synchrotron X-ray Microtomography with Improved Image Quality by Ring Artifacts Correction for Structural Analysis of Insects

**Physics of the Earth and Planetary Interiors**

38625	Takeshi Arimoto	295 (2019) 106297	2015B1682	BL04B1	有本 岳史	Phase Relations of MgSiO <sub>3</sub> -FeSiO <sub>3</sub> System Up to 64 GPa and 2300K Using Multianvil Apparatus with Sintered Diamond Anvils
38677	Takashi Yoshino	294 (2019) 106295	2018B1071	BL04B1	芳野 極	Fate of Water in Subducted Hydrous Sediments Deduced from Stability Fields of FeOOH and AlOOH up to 20 GPa
			2017B1175	BL04B1	芳野 極	

**Polymer Journal**

38244	Nagisa Tsuji	51 (2019) 1147-1161	2018B1141	BL40B2	鈴木 祥仁	Adamantane-Containing Poly(dialkyl fumarate)s with Rigid Chain Structures
38642	Mamiko Narita	(2019) Online published 9 Sep. 2019	2016A7003	BL33XU	原田 雅史	Simultaneous Study of Anionic Polymerization of ε-caprolactam and Crystallization of Polyamide 6 in an Isothermal Process by in situ WAXS
			2016B7003	BL33XU	原田 雅史	

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

38232	Binbin Yue	116 (2019) 14905-14909	2017A1302	BL10XU	Yue Binbin	A Simple Variant Selection in Stress-Driven Martensitic Transformation
			2014B1254	BL10XU	Yue Binbin	
38609	Katsuya Araki	116 (2019) 17963-17969	2013B1737	BL40XU	望月 秀樹	Parkinson's Disease is a Type of Amyloidosis Featuring Accumulation of Amyloid Fibrils of α-Synuclein
			2013A1671	BL40XU	望月 秀樹	
			2014A1712	BL40XU	望月 秀樹	
			2014B1811	BL40XU	望月 秀樹	
			2015A1858	BL40XU	望月 秀樹	
			2016A1149	BL45XU	望月 秀樹	
			2016A1153	BL43IR	望月 秀樹	
			2016B1235	BL40XU	荒木 克哉	
			2017B1281	BL40XU	荒木 克哉	
2018A1117	BL40XU	荒木 克哉				

**Science**

38397	Wenda Wang	363 (2019) 598-565	2018A2562	BL41XU	于 龍江	Structural Basis for Blue-Green Light Harvesting and Energy Dissipation in Diatoms
			2017A2590	BL41XU	于 龍江	
			2016A2553	BL41XU	于 龍江	
38435	Jun Gu	364 (2019) 1091-1094	2017B4142	BL12B2	Chen Hao-Ming	Atomically Dispersed Fe <sup>3+</sup> Sites Catalyze Efficient CO <sub>2</sub> Electroreduction to CO
			2017B4136	BL12B2	Chen Hao-Ming	

**Science and Technology of Advanced Materials**

38274	Tarojiro Matsumura	20 (2019) 733-745	2012B7402	BL07LSU	堀場 弘司	Spectrum Adapted Expectation-Maximization Algorithm for High-Throughput Peak Shift Analysis
			2013A7443	BL07LSU	吹留 博一	
			2014B7472	BL07LSU	吹留 博一	
			2015A7482	BL07LSU	吹留 博一	
			2015B7402	BL07LSU	尾嶋 正治	
			2017A7402	BL07LSU	尾嶋 正治	
38357	Shigenori Ueda	20 (2019) 796-804	2015B4606	BL15XU	上田 茂典	Electronic Structures of MgO/Fe Interfaces with Perpendicular Magnetization Revealed by Hard X-ray Photoemission with an Applied Magnetic Field
			2014B4606	BL15XU	上田 茂典	

### Thin Solid Films

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
38551	Vuong Van Cuong	669 (2019) 306-314	2016A1538	BL46XU	黒木 伸一郎	High-Temperature Reliability of Ni/Nb Ohmic Contacts on 4H-SiC for Harsh Environment Applications
			2016B1780	BL46XU	村岡 幸輔	
			2017B1617	BL46XU	黒木 伸一郎	
38676	Norikazu Ishigaki	686 (2019) 137433	2016B1143	BL01B1	中村 崇司	Effect of Post-deposition Annealing in Oxygen Atmosphere on LiCoMnO <sub>4</sub> Thin Films for 5 V Lithium Batteries
			2017A1417	BL01B1	中村 崇司	

### 実験力学 (Journal of the Japanese Society for Experimental Society)

38626	Rino Yamamoto	19 (2019) 30-37	2018A1775	BL46XU	三宅 修吾	Crystal Structure Analysis of Al/Ni Multilayer Powder during Exothermic Reaction by Synchrotron Radiation X-ray Diffraction Measurement
			2018B1779	BL19B2	三宅 修吾	
38627	Daiki Goto	19 (2019) 122-126	2018A1775	BL46XU	三宅 修吾	Bilayer Thickness Dependence on Self-Propagating Exothermic Reaction of Al/Ni Multilayer Films
			2018B1779	BL19B2	三宅 修吾	

### ACS Applied Energy Materials

38638	Takeyuki Sekimoto	2 (2019) 5039-5049	2018B5120	BL16XU	山田 周吾	Influence of a Hole-Transport Layer on Light-Induced Degradation of Mixed Organic-Inorganic Halide Perovskite Solar Cells
-------	-------------------	-----------------------	-----------	--------	-------	---

### ACS Applied Polymer Materials

38689	Sultan Otep	1 (2019) 2302-2312	2018B1001	BL40B2	松本 英俊	Tuning Backbone Planarity in Thiadiazolobenzotriazole-Bis(thienothiophenyl)ethylene Copolymers for Organic Field-Effect Transistors
-------	-------------	-----------------------	-----------	--------	-------	---

### ACS Central Science

38431	Fang Song	5 (2019) 558-568	2018B4126	BL12B2	Chen Hao-Ming	An Unconventional Iron Nickel Catalyst for the Oxygen Evolution Reaction
-------	-----------	---------------------	-----------	--------	---------------	--

### ACS Combinatorial Science

38220	Masato Matsubara	21 (2019) 400-407	2016A7030	BL33XU	田島 伸	Development of a High-Throughput Screening Method for Oxide-Ion Conductors and Its Application to Bismuth-Based Oxide Library Thin Films
			2016B7030	BL33XU	田島 伸	
			2017A7030	BL33XU	田島 伸	
			2017B7030	BL33XU	田島 伸	
			2018A7030	BL33XU	田島 伸	

### ACS Earth and Space Chemistry

38339	Minako Kurisu	3 (2019) 588-598	2017A1798	BL05XU	高橋 嘉夫	Stable Isotope Ratios of Combustion Iron Produced by Evaporation in a Steel Plant
-------	---------------	---------------------	-----------	--------	-------	---

### ACS Energy Letters

38285	Nagesh B. Kolhe	4 (2019) 1162-1170	2016B1574	BL19B2	葛原 大軌	New Random Copolymer Acceptors Enable Additive-Free Processing of 10.1% Efficient All-Polymer Solar Cells with Near Unity Internal Quantum Efficiency
			2018A1744	BL46XU	小金澤 智之	
			2018B1772	BL46XU	小金澤 智之	

### ACS Macro Letters

38238	Shuhei Nozaki	8 (2019) 218-222	2012B1506	BL40XU	小椎尾 謙	Direct Evaluation of Local Dynamic Viscoelastic Properties of Isotactic Polypropylene Films Based on Dynamic $\mu$ -Beam X-ray Diffraction Method
			2013B1186	BL40XU	小椎尾 謙	
			2014B1198	BL40XU	小椎尾 謙	
			2015A1514	BL40XU	小椎尾 謙	
			2015B1325	BL40XU	小椎尾 謙	
			2015B1459	BL40XU	小椎尾 謙	
			2016A1012	BL40XU	高原 淳	
			2016A1414	BL40XU	小椎尾 謙	
			2016B1032	BL40XU	高原 淳	
			2016B1436	BL40XU	小椎尾 謙	

### ACS Nano

38424	Lin Lv	12 (2018) 3042-3051	2017B4259	BL12XU	Chen Hao-Ming	A Universal Method to Engineer Metal Oxide-Metal-Carbon Interface for Highly Efficient Oxygen Reduction
-------	--------	------------------------	-----------	--------	---------------	---

### Acta Crystallographica Section F

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
38213	Masato Tsuyuguchi	75 (2019) 515-519	2017B6717	BL44XU	木下 誉富	A Promiscuous Kinase Inhibitor Delineates the Conspicuous Structural Features of Protein Kinase CK2a1

### Acta Materialia

38287	Hang Su	176 (2019) 96-108	2016A1199	BL37XU	戸田 裕之	Assessment of Hydrogen Embrittlement via Image-Based Techniques in Al-Zn-Mg-Cu Aluminum Alloys
			2016B1081	BL37XU	清水 一行	

### Advanced Materials

38703	Jicheng Zhang	31 (2019) 1901808	2018A3634	BL14B1	吉川 浩史	Tuning Oxygen Redox Chemistry in Li-Rich Mn-Based Layered Oxide Cathodes by Modulating Cation Arrangement
-------	---------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

### Advanced Materials Interfaces

38412	Chia-Ching Lin	5 (2018) 1800491	2017B4138	BL12B2	Chen Han-Yi	Mechanism of Sodium Ion Storage in Na <sub>2</sub> [H <sub>2</sub> PV <sub>14</sub> O <sub>42</sub> ] Anode for Sodium-Ion Batteries
-------	----------------	---------------------	-----------	--------	-------------	--

### Analytical Chemistry

38745	Jiadong Fan	87 (2015) 5849-5853	2014A1270	BL29XU	Jiang Huaidong	Quantitative Imaging of Single Unstained Magnetotactic Bacteria by Coherent X-ray Diffraction Microscopy
-------	-------------	------------------------	-----------	--------	----------------	--

### Applied Materials and Interfaces

38557	Hiroshi Senoh	11 (2019) 30959-30967	2016A7601	BL28XU	小久見 善八	Degradation Mechanism of Conversion-Type Iron Trifluoride: Toward Improvement of Cycle Performance
			2016B7607	BL28XU	松原 英一郎	
			2017A7607	BL28XU	松原 英一郎	
			2017B7607	BL28XU	松原 英一郎	
			2018A7607	BL28XU	松原 英一郎	
			2018B7607	BL28XU	松原 英一郎	

### Applied Physics Express

38721	Hiroshi Okuda	12 (2019) 105503	2016A1168	BL40XU	奥田 浩司	Small-Angle Scattering Tomography of Precipitation-Hardened Multilayer Al/Al-Zn/Al Model Alloys
			2016B1275	BL40XU	奥田 浩司	
			2017B1570	BL40XU	奥田 浩司	
			2016B1282	BL45XU	奥田 浩司	

### Applied Surface Science

38765	Tsai-Te Wang	488 (2019) 546	2016A4134	BL12B2	Lin Yan-Gu	Effective Hydrogenation of TiO <sub>2</sub> Photocatalysts with CH <sub>3</sub> OH for Enhanced Water Splitting: A Computational and X-ray Study
-------	--------------	-------------------	-----------	--------	------------	--

### Atmosphere

38340	Minako Kurisu	10 (2019) 76	2018A0148	BL37XU	高橋 嘉夫	Testing Iron Stable Isotope Ratios as a Signature of Biomass Burning
-------	---------------	-----------------	-----------	--------	-------	--

### Biochemical and Biophysical Research Communications

38615	Wan Hasnidah Wan Osman	510 (2019) 177-183	2018A2533	BL26B1	三上 文三	Structure of a Serine-Type Glutathione S-transferase of <i>Cerporiopsis sebcermisporea</i> and Identification of the Enzymatically Important Non-Canonical Residues by Functional Mutagenesis
			2018A2563	BL26B1	三上 文三	
			2017A2547	BL26B1	三上 文三	

### Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics

38302	Tomoo Shiba	1860 (2019) 375-382	2017A6722	BL44XU	志波 智生	Insights into the Ubiquinol/Dioxygen Binding and Proton Relay Pathways of the Alternative Oxidase
			2017B6722	BL44XU	志波 智生	

### Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects

38393	Naoya Shibayama	(2019) Available online 2 April 2019	2015B1211	BL40XU	柴山 修哉	Allosteric Transitions in Hemoglobin Revisited
-------	-----------------	--------------------------------------	-----------	--------	-------	--

### Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics

38550	Hongxu Yang	1867 (2019) 140265	2018B2707	BL26B1	長尾 聡	Protein Surface Charge Effect on 3D Domain Swapping in Cells for c-type Cytochromes
-------	-------------	-----------------------	-----------	--------	------	---

### Biomolecules

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
38554	Yumiko Saijo-Hamano	9 (2019) 260	2010B1013	BL41XU	山本 雅貴	Architecture of the Bacterial Flagellar Distal Rod and Hook of <i>Salmonella</i>
			2010B1901	BL41XU	今田 勝巳	

### Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry

38556	Sayoko Oiki	83 (2019) 1946-1954	2017A2592	BL38B1	橋本 涉	Substrate Recognition by Bacterial Solute-Binding Protein is Responsible for Import of Extracellular Hyaluronan and Chondroitin Sulfate from the Animal Host
			2016A2574	BL38B1	橋本 涉	
			2018A2563	BL26B1	三上 文三	

### Carbon

38273	Naoka Nagamura	152 (2019) 680-687	2011B7402	BL07LSU	組頭 広志	Influence of Interface Dipole Layers on the Performance of Graphene Field Effect Transistors
			2012A7402	BL07LSU	堀場 弘司	
			2012B7402	BL07LSU	堀場 弘司	
			2012B7435	BL07LSU	吹留 博一	
			2014A7402	BL07LSU	尾嶋 正治	
			2014B7402	BL07LSU	尾嶋 正治	
			2015A7402	BL07LSU	尾嶋 正治	
			2015B7402	BL07LSU	尾嶋 正治	
			2015B7494	BL07LSU	吹留 博一	
			2017A7402	BL07LSU	尾嶋 正治	
2017B7402	BL07LSU	尾嶋 正治				
2018B7580	BL07LSU	永村 直佳				

### Chem

38419	Chengyi Hu	3 (2017) 122-133	2016A4129	BL12B2	Chen Hao-Ming	In Situ Electrochemical Production of Ultrathin Nickel Nanosheets for Hydrogen Evolution Electrocatalysis
-------	------------	---------------------	-----------	--------	---------------	---

### ChemCatChem

38470	Kohsuke Mori	11 (2019) 1963-1969	2017A1057	BL01B1	森 浩亮	Ultra-Low Loading of Ru Clusters over Graphitic Carbon Nitride: A Drastic Enhancement in Photocatalytic Hydrogen Evolution Activity
			2017B1084	BL01B1	森 浩亮	
			2018A1144	BL01B1	森 浩亮	

### Chemical Science

38567	Satoshi Tominaka	10 (2019) 6604-6611	2016B3782	BL22XU	富中 悟史	Condensed Ferric Dimers for Green Photocatalytic Synthesis of Nylon Precursors
			2017A3751	BL22XU	町田 晃彦	
			2017A3783	BL22XU	富中 悟史	

### Chemistry Letters

38754	Naoto Kitamura	(2019) Online published Sep. 14, 2019	2016A1273	BL04B2	井手本 康	Local Structure in A-Site-Deficient Perovskite $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ and its Effect on Electrical Conduction Property
-------	----------------	---------------------------------------	-----------	--------	-------	--

### ChemNanoMat

38723	Zakary Lionet	(2019) Online publication 27 Aug. 2019	2016A1260	BL01B1	堀内 悠	Facile Post-Synthetic Modification of Amine-Functionalized Metal-Organic Frameworks to Integrate Visible-Light Responsive Pt Complexes for Hydrogen Evolution Reaction
			2017B1469	BL01B1	堀内 悠	

### Chemosphere

38341	Sang-Ho Lee	237 (2019) 124489	2018B1801	BL14B2	高橋 嘉夫	Carbothermal Preparation of Magnetic-Responsive Ferrihydrate Based on Fe-Rich Precipitates for Immobilization of Arsenate and Antimonate: Batch and Spectroscopic Studies
			2018A0148	BL01B1	高橋 嘉夫	
			2018A0148	BL37XU	高橋 嘉夫	

### ChemPhotoChem

38733	Mitsuo Shoji	2 (2019) 257-270	2012A1039	BL32XU	川上 恵典	Understanding Two Different Structures in the Dark Stable State of the Oxygen-Evolving Complex of Photosystem II: Applicability of the Jahn-Teller Deformation Formula
			2012B1532	BL41XU	川上 恵典	
			2013A1426	BL41XU	川上 恵典	
			2013B1279	BL41XU	川上 恵典	

### ChemPhysChem

38323	Alexei Belik	19 (2018) 2449-2452	2017B4502	BL15XU	辻本 吉廣	Intrinsic Triple Order in A-site Columnar-Ordered Quadruple Perovskites: Proof of Concept
-------	--------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

### ChemPlusChem

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
38241	Tomoya Nakamura	84 (2019) 1396-1404	2018B1617	BL46XU	脇岡 正幸	Phthalimide-Based Transparent Electron-Transport Materials with Oriented-Amorphous Structures: Preparation from Solution-Processed Precursor Films
			2018A1584	BL19B2	脇岡 正幸	

### Communications Biology

38295	Nai Chi Chen	2 (2019) 72	2015A6600	BL44XU	Chen Chun Jung	The Atomic Structures of Shrimp Nodaviruses Reveal New Dimeric Spike Structures and Particle Polymorphism
			2015A4000	BL12B2	Chen Chun Jung	
			2015B6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2015B4004	BL12B2	Chen Chun Jung	
			2015B4010	BL12B2	Chen Chun Jung	
			2016A6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2016A6659	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2016A4012	BL12B2	Chen Chun Jung	
			2016B6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2016B4000	BL12B2	Chen Chun Jung	
			2017A4000	BL12B2	Chen Chun Jung	
			2017A6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2017B6769	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2016A4007	BL12B2	Chen Chun Jung	
2016A4010	BL12B2	Chen Chun Jung				
2016A4003	BL12B2	Chen Chun Jung				

### Condensed Matter

38265	Kosuke Suzuki	4 (2019) 66	2018B1264	BL08W	鈴木 宏輔	High-Energy X-Ray Compton Scattering Imaging of 18650-Type Lithium-Ion Battery Cell
			2019A1721	BL08W	Barbiellini Bernardo	

### Crystals

38603	Kouichi Kifune	9 (2019) 447	2014A1367	BL02B2	木松 弘一	Boundaries of the X Phases in Sb-Te and Bi-Te Binary Alloy Systems
			2014B1404	BL02B2	木松 弘一	
			2016A1370	BL02B2	木松 弘一	
			2017A1272	BL02B2	木松 弘一	
			2013A1707	BL02B2	木松 弘一	
			2009A0084	BL02B2	久保田 佳基	
			2015A0074	BL02B2	森吉 千佳子	

### CrystEngComm

38222	Jaemyung Kim	21 (2019) 4036-4041	2018B4505	BL15XU	坂田 修身	Anisotropic Mosaicity and Lattice-Plane Twisting of an <i>m</i> -plane GaN Homoepitaxial Layer
			2018B1010	BL20B2	坂田 修身	

### e-Journal of Surface Science and Nanotechnology

38690	Kenichi Ozawa	17 (2019) 130-147	2012A7426	BL07LSU	小澤 健一	A Surface Science Approach to Unveiling the TiO <sub>2</sub> Photocatalytic Mechanism: Correlation between Photocatalytic Activity and Carrier Lifetime
			2012B7433	BL07LSU	小澤 健一	
			2013A7444	BL07LSU	小澤 健一	
			2014A7463	BL07LSU	小澤 健一	
			2015A7487	BL07LSU	小澤 健一	
			2016A7503	BL07LSU	小澤 健一	
			2017A7533	BL07LSU	小澤 健一	

### ECS Transactions

38450	Shigeaki Zaima	69 (2015) 89-98	2014A1721	BL47XU	財満 鎮明	Challenges of Energy Band Engineering with New Sn-Related Group IV Semiconductor Materials for Future Integrated Circuits
			2014B1358	BL47XU	財満 鎮明	

### Electrocatalysis

38358	Naoya Aoki	9 (2018) 125-138	2016A1769	BL14B2	折笠 有基	Enhancement of Oxygen Reduction Reaction Activity of Pd Core-Pt Shell Structured Catalyst on a Potential Cycling Accelerated Durability Test
			2016B1834	BL14B2	内本 喜晴	

### Electrochimica Acta

38768	Yan-Gu Lin	216 (2016) 287-194	2016A4134	BL12B2	Lin Yan-Gu	Hierarchical Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Nanotube/Nickel Foam Electrodes for Electrochemical Energy Storage
-------	------------	-----------------------	-----------	--------	------------	--

eLife

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
38695	Kenta Yamamoto	8 (2019) e47701	2018B2703	BL41XU	阿部 一啓	A Single K <sup>+</sup> -binding Site in the Crystal Structure of the Gastric Proton Pump
			2017B2701	BL41XU	阿部 一啓	

Extended Abstract (Proceedings) of 2019 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM)

38691	Akira Kiyoi	(2019) 741-742	2017B5130	BL16XU	清井 明	Synchrotron X-ray Photoelectron Spectroscopy on Interface State Densities of CVD-Grown SiO <sub>2</sub> /4H-SiC Structures Treated by Post-Deposition Treatments
			2018A5130	BL16XU	清井 明	
			2018B5130	BL16XU	今澤 貴史	

Food Science and Technology Research

38332	Keiichi Ihara	25 (2019) 391-397	2015B1896	BL19B2	井原 啓一	Influences of Beating Speed on Whipping and Physical Properties of Whipped Cream
-------	---------------	----------------------	-----------	--------	-------	--

Geochimica et Cosmochimica Acta

38223	Teruhiko Kashiwabara	240 (2018) 274-292	2012A1589	BL01B1	菊池 早希子	Synchrotron X-ray Spectroscopic Perspective on the Formation Mechanism of REY-rich Muds in the Pacific Ocean
			2012A1240	BL37XU	高橋 嘉夫	
			2012B1564	BL37XU	高橋 嘉夫	
			2012A1767	BL14B2	柏原 輝彦	
			2012B1672	BL01B1	戸田 隆一	
			2015A0118	BL01B1	高橋 嘉夫	
2017A1093	BL01B1	菊池 早希子				

Geological Magazine

38636	Jian Han	154 (2017) 1294-1305	2016A1698	BL47XU	小宮 剛	A <i>Cloudina</i> -like Fossil with Evidence of Asexual Reproduction from the Lowest Cambrian, South China
-------	----------	-------------------------	-----------	--------	------	--

Green Chemistry

38300	Makito Yamada	21 (2019) 4541-4549	2017A1793	BL14B2	秋山 敏毅	Ligand-free Suzuki-Miyaura Coupling Reaction of an Aryl Chloride using a Continuous Irradiation Type Microwave and a Palladium Nanoparticle Catalyst: Effect of a Co-Existing Solid
			2017B1931	BL14B2	秋山 敏毅	
			2017B1732	BL27SU	秋山 敏毅	
			2018A1793	BL14B2	秋山 敏毅	

Hyperfine Interactions

38462	Satoshi Tsutsui	240 (2019) 84	2005A0369	BL35XU	筒井 智嗣	Electronic and Atomic Dynamics in Sm and Eu Cage-Structures Intermetallics
			2005B0127	BL01B1	水牧 仁一朗	
			2006A1203	BL01B1	水牧 仁一朗	
			2006A1039	BL35XU	筒井 智嗣	
			2006B1053	BL35XU	筒井 智嗣	
			2007B1351	BL01B1	水牧 仁一朗	
			2008A1972	BL39XU	河村 直己	
			2014A1076	BL35XU	筒井 智嗣	
			2015B1947	BL09XU	筒井 智嗣	
			2016A1413	BL09XU	筒井 智嗣	
			2016B1057	BL09XU	筒井 智嗣	
			2016B1948	BL35XU	筒井 智嗣	
			2017A1060	BL09XU	筒井 智嗣	
			2017A1841	BL35XU	筒井 智嗣	
			2017B1275	BL09XU	筒井 智嗣	
			2018A1534	BL09XU	筒井 智嗣	
2018A1762	BL35XU	筒井 智嗣				
2018B2039	BL09XU	依田 芳卓				

Inorganics

38362	Kohdai Ishida	7 (2019) 63	2017B1172	BL02B2	高津 浩	High-Pressure Synthesis of Non-Stoichiometric Li <sub>x</sub> WO <sub>3</sub> (0.5 ≤ x ≤ 1.0) with LiNbO <sub>3</sub> Structure
-------	---------------	----------------	-----------	--------	------	---

International Journal of Cancer

38399	Ryo Koba	(2019) Online published 25 July 2019	2016A1624	BL37XU	木庭 遼	Quantitative Evaluation of the Intratumoral Distribution of Platinum in Oxaliplatin-Treated Rectal Cancer. <i>In situ</i> Visualization of Platinum via Synchrotron Radiation X-ray Fluorescence Spectrometry
			2015B1807	BL37XU	植木 隆	
			2017B1221	BL37XU	永吉 絹子	
			2018A1335	BL37XU	永吉 絹子	



**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
38555	Kazuhiro Ishikawa	44 (2019) 23101-23106	2015A3782	BL22XU	石川 和宏	Effects of Rolling and Annealing on Hydrogen Permeability and Crystal Orientation in Nb-TiNi Two-Phase Alloys
			2014B3782	BL22XU	石川 和宏	
			2017B3781	BL22XU	石川 和宏	

**International Journal of Molecular Sciences**

38755	Shino Homma-Takeda	20 (2019) 4677	2016B1806	BL37XU	武田 志乃	Phosphorus Localization and Its Involvement in the Formation of Concentrated Uranium in the Renal Proximal Tubules of Rats Exposed to Uranyl Acetate
			2013B1747	BL37XU	武田 志乃	
			2014A1720	BL37XU	武田 志乃	
			2014B1311	BL37XU	武田 志乃	
			2015B1430	BL37XU	武田 志乃	
			2016A1702	BL37XU	武田 志乃	
			2017A1725	BL37XU	武田 志乃	

**Journal of Applied Crystallography**

38480	Satomi Niwa	52 (2019) 864-868	2019A2560	BL41XU	竹田 一旗	Usefulness of Oils for Cleaning the Host Matrix and for Cryoprotection of Lipidic Cubic Phase Crystals
			2018B2706	BL41XU	竹田 一旗	

**Journal of Asian Ceramic Societies**

38304	Nobuhiro Kumada	7 (2019) 361-367	2015A1004	BL02B2	熊田 伸弘	Hydrothermal Synthesis of $\text{KTi}_2(\text{PO}_4)_3$ , $\alpha\text{-Ti}(\text{HPO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ and $\gamma\text{-Ti}(\text{PO}_4)(\text{H}_2\text{PO}_4) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ from a Lepidocrocite-type Titanate
-------	-----------------	---------------------	-----------	--------	-------	---

**The Journal of Comparative Neurology**

38532	Rino Saiga	527 (2019) 2091-2100	2017B1120	BL20B2	水谷 隆太	Synchrotron Radiation Microtomography of Brain Hemisphere and Spinal Cord of a Mouse Model of Multiple Sclerosis Revealed a Correlation between Capillary Dilation and Clinical Score
			2018A1164	BL20XU	水谷 隆太	

**Journal of Electronic Materials**

38256	Satoshi Hiroi	47 (2018) 3113-3118	2017A4502	BL15XU	Chen Yanna	Analyzing the Boundary Thermal Resistance of Epitaxially Grown $\text{Fe}_2\text{VAl/W}$ Layers by Picosecond Time-Domain Thermoreflectance
-------	---------------	------------------------	-----------	--------	------------	---

**Journal of Fiber Science and Technology**

38215	Tsunayuki Ishimori	75 (2019) 72-92	2014A1528	BL40XU	渡辺 大介	Structure and Its Extensional Properties of Straightened Hair Prepared by Heat Treatment with Glyoxylic Acid
-------	--------------------	--------------------	-----------	--------	-------	--

**Journal of Geophysical Research**

38398	Hidenori Terasaki	124 (2019) 2272-2293	2013B1488	BL20XU	寺崎 英紀	Pressure and Composition Effects on Sound Velocity and Density of Core-Forming Liquids: Implication to Core Compositions of Terrestrial Planets
			2014A1161	BL20XU	寺崎 英紀	
			2014A3787	BL22XU	寺崎 英紀	
			2014B1319	BL04B1	寺崎 英紀	
			2015A1330	BL04B1	寺崎 英紀	
			2015A3787	BL22XU	寺崎 英紀	
			2015B1555	BL04B1	寺崎 英紀	
			2015B3790	BL22XU	寺崎 英紀	
			2016A3787	BL22XU	寺崎 英紀	
			2016B1518	BL04B1	寺崎 英紀	
			2016B3781	BL22XU	寺崎 英紀	

**Journal of Hydrology**

38725	Yi Yang	571 (2019) 21-35	2016A1066	BL47XU	Yang Yi	Transient Increase in Reactive Surface and the Macroscopic Damköhler Number in Chalk Dissolution
-------	---------	---------------------	-----------	--------	---------	--

**Journal of Magnetism and Magnetic Materials**

38290	Yushi Kato	491 (2019) 165536	2018A5360	BL16B2	藤井 景子	Low Write Current and Strong Durability in High-Speed Spintronics Memory (Spin-Hall MRAM and VoCSM) through Development of a Shunt-Free Design Process and W Spin-Hall Electrode
			2018B5360	BL16B2	藤井 景子	
			2018B5060	BL16XU	藤井 景子	

### Journal of Materials Chemistry 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
38233	Tomoki Nishimura	(2019) Online publication 9 Jul. 2019	2018B1184	BL40B2	西村 智貴	Supramacromolecular Injectable Hydrogels by Crystallization-Driven Self-Assembly of Carbohydrate-Conjugated Poly(2-isopropylloxazoline)s for Biomedical Applications

### Journal of Mineralogical and Petrological Sciences

38275	Osamu Ikeda	114 (2019) 155-160	2018A1302	BL04B1	坂巻 竜也	Sound Velocity Measurements of $\epsilon$ -FeOOH up to 24 GPa
			2018B1180	BL04B1	坂巻 竜也	

### Journal of Molecular Biology

38628	Jun Hoe Kim	431 (2019) 3647-3661	2018B6867	BL44XU	Song HyunKyu	Structural and Mechanistic Insights into Caffeine Degradation by the Bacterial N-Demethylase Complex
-------	-------------	-------------------------	-----------	--------	--------------	--

### Journal of Non-Crystalline Solids

38313	Masanori Inui	522 (2019) 119571	2010A1184	BL35XU	乾 雅祝	Structural Studies on Fluid Sulfur at High Temperatures and High Pressures: I. Atomic Dynamics Investigated by Inelastic X-ray Scattering
			2014B1143	BL35XU	乾 雅祝	

### The Journal of Physical Chemistry Letters

38217	Jianbo Zhang	9 (2018) 4182-4188	2012A4262	BL12XU	Wang Shibing	Evaluation of a Novel Ribbon Phase in Optimally Doped $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ at High Pressure and Its Implication to High- $T_c$ Superconductivity
			2013A4253	BL12XU	Wang Shibing	
			2016A4254	BL12XU	Ding Yang	
			2016B4267	BL12XU	Ding Yang	
			2017B4263	BL12XU	Ding Yang	

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

38705	Sung-Yu Tsai	(2019) Online publication 16 Sep. 2019	2019A1173	BL40B2	平井 智康	Preparation of Polyhedral Oligomeric Silsesquioxane-Containing Block Copolymer with Well-Controlled Stereoregularity
-------	--------------	--	-----------	--------	-------	--

### Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics

38661	Momoka Watanabe	57 (2019) 952-960	2015B1539	BL40XU	高野 敦志	Preparation and Morphologies of $\text{AB}_6$ Block-Graft Copolymers
			2016A1078	BL40B2	高野 敦志	

### Journal of Solid State Electrochemistry

38559	Masahiro Seo	23 (2019) 2261-2275	2012A5320	BL16B2	稲葉 雅之	In situ X-ray Absorption Spectroscopy of Sn Species Adsorbed on Platinized Platinum Electrode in Perchloric Acid Solution Containing Stannous Ions
			2012B5320	BL16B2	稲葉 雅之	

### Journal of the Ceramic Society of Japan

38234	Ryoko Murakami	127 (2019) 414-420	2017A1466	BL02B2	和田 智志	Influence of Post-Annealing Treatment on Dielectric and Ferroelectric Properties of Dense $\text{BaTiO}_3$ Ceramics Prepared by Solvothermal Solidification Method
-------	----------------	-----------------------	-----------	--------	-------	--

### Journal of the European Ceramic Society

38718	Norimasa Nishiyama	39 (2019) 3627-3633	2015B1236	BL04B1	西山 宣正	Thermal Expansion and $P$ - $V$ - $T$ Equation of State of Cubic Silicon Nitride
-------	--------------------	------------------------	-----------	--------	-------	--

### Langmuir

38379	Shota Fujii	35 (2019) 3156-3161	2018A1454	BL40B2	櫻井 和朗	Discrete and Discontinuous Increase in the Micellar Aggregation Number: Effects of the Alkyl Chain Length on Platonic Micelles
			2018B1396	BL40B2	櫻井 和朗	
			2017B1351	BL40B2	櫻井 和朗	
			2017A1414	BL40B2	櫻井 和朗	

### Life Science Alliance

38418	Sakurako Goti-ito	2 (2019) e201900297	2017B1012	BL41XU	山本 雅貴	Structural Basis of Guanine Nucleotide Exchange for Rab11 by SH3BP5
-------	-------------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

### Materials Chemistry and 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
38245	Daiju Matsumura	238 (2019) 121885	2013A3611	BL14B1	吉井 賢資	X-ray Absorption Spectroscopy and Magnetocaloric Study of $\text{Pr}_{1-x}\text{Si}_x\text{CoO}_3$ ( $0 \leq x \leq 0.5$ )
			2013B3609	BL14B1	松村 大樹	
			2014A3608	BL14B1	吉井 賢資	

### Materials Research Express

38336	Hiroshi Sakurai	6 (2019) 096114	2017B0921	BL08W	壬生 攻	Temperature Dependence of Spin/Orbital Magnetization Switching Behaviour at the Interface in CoFeB/MgO and CoFeB/Ta Multi-Layered Films
			2015B0901	BL08W	千葉 大地	

### Molecular Catalysis

38631	Tatsuhiko Fukutake	477 (2019) 110550	2015A1411	BL28B2	和田 健司	Development of Titania-Supported Iridium Catalysts with Excellent Low-Temperature Activities for the Synthesis of Benzimidazoles via Hydrogen Transfer
-------	--------------------	----------------------	-----------	--------	-------	--

### Nano Letters

38457	Takayoshi Yokoya	19 (2019) 5915-5919	2015A1144	BL25SU	横谷 尚睦	Asymmetric Phosphorus Incorporation in Homoepitaxial P-Doped (111) Diamond Revealed by Photoelectron Holography
			2016A1204	BL25SU	横谷 尚睦	
			2016B1352	BL25SU	横谷 尚睦	
			2017B1169	BL25SU	横谷 尚睦	
			2018A1161	BL25SU	横谷 尚睦	

### Nature Chemistry

38429	Jiqing Jiao	11 (2019) 222-228	2018A4130	BL12B2	Chen Hao-Ming	Copper Atom-Pair Catalyst Anchored on Alloy Nanowires for Selective and Efficient Electrochemical Reduction of $\text{CO}_2$
			2018A4125	BL12B2	Chen Hao-Ming	

### Nature Energy

38426	Hong Bin Yang	3 (2018) 140-147	2017B4136	BL12B2	Chen Hao-Ming	Atomically Dispersed Ni(I) as the Active Site for Electrochemical $\text{CO}_2$ Reduction
-------	---------------	---------------------	-----------	--------	---------------	---

### Nature Geoscience

38720	Takayuki Ishii	12 (2019) 869-872	2003A0087	BL04B1	桂 智男	Sharp 660-km Discontinuity Controlled by Extremely Narrow Binary Post-Spinel Transition
			2003B0638	BL04B1	桂 智男	
			2004A0368	BL04B1	桂 智男	
			2004B0497	BL04B1	桂 智男	
			2015A1359	BL04B1	桂 智男	
			2015B1196	BL04B1	桂 智男	
			2016A1274	BL04B1	桂 智男	
			2016A1434	BL04B1	劉 兆東	
			2016B1094	BL04B1	劉 兆東	
			2017A1150	BL04B1	桂 智男	
			2018A1071	BL04B1	桂 智男	
			2018B1218	BL04B1	桂 智男	

### Nature Photonics

38693	Yasuhiro Kondo	13 (2019) 678-682	2016A1052	BL40XU	畠山 琢次	Narrowband Deep-Blue Organic Light-Emitting Diode Featuring an Organoboron-Based Emitter
			2016B1059	BL40XU	畠山 琢次	
			2017A1132	BL40XU	畠山 琢次	
			2017B1073	BL40XU	畠山 琢次	
			2018A1114	BL40XU	畠山 琢次	

### Nature Plants

38447	Keisuke Fujiyama	5 (2019) 589-594	2017A2594	BL41XU	永野 真吾	Structural Insights into a Key Step of Brassinosteroid Biosynthesis and its Inhibition
-------	------------------	---------------------	-----------	--------	-------	--

### New Journal of Chemistry

38621	Masanao Ishijima	42 (2018) 13044-13053	2016B1865	BL14B2	Balachandran Jeyadevan	<i>In situ</i> Spectroscopic Studies of the One-Pot Synthesis of Composition-Controlled Cu-Ni Nanowires with Enhanced Catalytic Activity
			2017A1575	BL14B2	Balachandran Jeyadevan	

### 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
38740	Jianhua Zhang	26 (2018) 30128-30145	2014A1270	BL29XU	Jiang Huaidong	Enhancement of Phase Retrieval Capability in Ptychography by Using Strongly Scattering Property of the Probe-Generating Device

### Organic Electronics

38231	Toshiaki Tanimura	74 (2019) 251-257	2014A1634	BL43IR	有馬 駿介	Accumulated Charge Measurement using a Substrate with a Restricted-Bottom-Electrode Structure
			2014B1743	BL43IR	宮尾 文啓	
			2015A1812	BL43IR	宮尾 文啓	
			2015B1728	BL43IR	宮尾 文啓	

### Organometallics

38657	Yuko Ikeda	38 (2019) 2363-2380	2009A1929	BL14B2	池田 裕子	Roles of Dinuclear Bridging Bidentate Zinc/Stearate Complexes in Sulfur Cross-Linking of Isoprene Rubber
			2009B2044	BL14B2	池田 裕子	
			2010A1778	BL14B2	池田 裕子	
			2010B1928	BL14B2	池田 裕子	
			2012A1419	BL14B2	池田 裕子	
			2012B1891	BL14B2	池田 裕子	
			2013A1828	BL14B2	池田 裕子	
			2013B1840	BL14B2	池田 裕子	
			2014A1574	BL14B2	池田 裕子	
2017A1611	BL14B2	池田 裕子				

### Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology

38634	Xiaoguang Yang	476 (2017) 147-157	2016A1698	BL47XU	小宮 剛	Euendoliths Versus Ambient Inclusion Trails from Early Cambrian Kuanchuanpu Formation, South China
-------	----------------	-----------------------	-----------	--------	------	--

### Palaeontology

38635	Xing Wang	60 (2017) 853-867	2016A1698	BL47XU	小宮 剛	Anatomy and Affinities of a New 535-Million-Year-Old Medusozoan from the Kuanchuanpu Formation, South China
-------	-----------	----------------------	-----------	--------	------	---

### Particle & Particle Systems Characterization

38425	Ching-wei Tung	35 (2018) 1700321	2017B4128	BL12B2	Chen Hao-Ming	Tunable Electrodeposition of Ni Electrocatalysis onto Si Microwires Array for Photoelectrochemical Water Oxidation
-------	----------------	----------------------	-----------	--------	---------------	--

### Physica Status Solidi A

38225	Koichi Kajihara	216 (2019) 1800475	2016A0130	BL04B2	小原 真司	Structure, Microscopic Ordering, and Viscous Properties of Amorphous Poly( <i>n</i> -alkylsilsesquioxane) Liquids and Solids Synthesized by Cosolvent-Free Hydrolytic Polycondensation of <i>n</i> -Alkyltrimethoxysilanes
-------	-----------------	-----------------------	-----------	--------	-------	--

### Physical Review Letters

38699	Toshiyuki Nishiyama	123 (2019) 123201	2016A8057	BL3	上田 潔	Ultrafast Structural Dynamics of Nanoparticles in Intense Laser Fields
			2016B8077	BL3	上田 潔	

### Physical Review Materials

38375	Yui Ishii	3 (2019) 084414	2017B1460	BL02B1	石井 悠衣	Glassy Anomalies in the Lattice Heat Capacity of a Crystalline Solid Caused by Ferroelectric Fluctuation
-------	-----------	--------------------	-----------	--------	-------	--

### Physical Review Research

38335	Makina Saito	1 (2019) 012008(R)	2015A1224	BL09XU	瀬戸 誠	Direct Observation of Interlayer Molecular Translational Motion in a Smectic Phase and Determination of the Layer Order Parameter
			2017A1096	BL09XU	瀬戸 誠	
			2017A0134	BL04B2	小原 真司	

### PLoS One

38726	Yi Yang	13 (2018) e0204165	2016A1066	BL47XU	Yang Yi	Patterns of Entropy Production in Dissolving Natural Porous Media with Flowing Fluid
-------	---------	-----------------------	-----------	--------	---------	--

### Polymers

38566	Kohji Tashiro	11 (2019) 1316	2015B1210	BL40B2	山元 博子	Structural Evolution Mechanism of Crystalline Polymers in the Isothermal Melt-Crystallization Process: A Proposition Based on Simultaneous WAXD/SAXS/FTIR Measurements
-------	---------------	-------------------	-----------	--------	-------	--

### Proceedings of SPIE

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
38722	Kaye Morgan	11113 (2019) 111130G	2014A1376	BL20XU	Donnelley Martin	In vivo X-ray Imaging of the Respiratory System using Synchrotron Sources and a Compact Light Source
			2014A1404	BL20XU	Morgan Kaye	
			2014B1217	BL20XU	Donnelley Martin	
			2014B1414	BL20XU	Morgan Kaye	
			2015A1325	BL20XU	Donnelley Martin	
			2015B1109	BL20XU	Donnelley Martin	
			2015B1515	BL20XU	Morgan Kaye	
			2016A1472	BL20XU	Donnelley Martin	
			2016A1374	BL20XU	Morgan Kaye	
			2016B1345	BL20XU	Donnelley Martin	
			2016B1502	BL20XU	Morgan Kaye	
			2017A1301	BL20XU	Donnelley Martin	
2017B1386	BL20XU	Donnelley Martin				
2018A1511	BL20XU	Donnelley Martin				

### Protein Science

38616	Taro Masuda	27 (2018) 1955-1960	2015A1063	BL26B1	三上 文三	The First Crystal Structure of Crustacean Ferritin That is a Hybrid Type of H and L Ferritin
			2015A1062	BL38B1	小手石 泰康	
			2015A6539	BL44XU	三上 文三	

### Radiation Physics and Chemistry

38756	Shino Takeda	(2019) Available online 2 Feb. 2019	2017B1764	BL37XU	武田 志乃	Two-Dimensional $\mu$ XAFS Analysis for Accumulated Uranium in Kidneys of Rats Exposed to Uranyl Acetate
			2018A1713	BL37XU	武田 志乃	

### Review of Scientific Instruments

38694	Okkyun Seo	90 (2019) 093001	2018A4505	BL15XU	坂田 修身	Time-Resolved X-ray Diffraction System for Study of Pb(Zr, Ti)O <sub>3</sub> Films under a Temporal Electric Field at BL15XU, SPring-8
			2018B4506	BL15XU	坂田 修身	
			2019A4503	BL15XU	坂田 修身	

### Science Advances

38221	Masaki Takahashi	3 (2017) e1700101	2014B1406	BL01B1	今岡 享稔	Finely Controlled Multimetallic Nanocluster Catalysts for Solvent-Free Aerobic Oxidation of Hydrocarbons
-------	---------------------	----------------------	-----------	--------	-------	--

### Sensors and Materials

38284	Hirokazu Fukidome	31 (2019) 2303-2311	2014B7472	BL07LSU	吹留 博一	Modulation of Electronic States Near Electrodes in Graphene Transistors Observed by Operando Photoelectron Nanospectroscopy
			2017B7545	BL07LSU	吹留 博一	

### Small

38620	Tokio Kobayashi	(2019) Online publication 4 Sep. 2019	2018B1811	BL19B2	藪内 直明	Nanosize Cation-Disordered Rocksalt Oxides: Na <sub>2</sub> TiO <sub>3</sub> -NaMnO <sub>2</sub> Binary System
-------	--------------------	---	-----------	--------	-------	--

### SN Applied Sciences

38622	Kaneyuki Taniguchi	1 (2019) 124	2017B1623	BL14B2	Balachandran Jeyadevan	Designed Synthesis of Highly Catalytic Ni-Pt Nanoparticles for Fuel Cell Applications
			2018A1549	BL14B2	Balachandran Jeyadevan	

### Soil and Tillage Research

38216	Miwa Arai	191 (2019) 275-281	2015B1168	BL20XU	和穎 朗太	An Improved Method to Identify Osmium-Stained Organic Matter within Soil Aggregate Structure by Electron Microscopy and Synchrotron X-ray Micro-Computed Tomography
			2014A1239	BL20B2	諸野 祐樹	
			2014B1367	BL20XU	諸野 祐樹	
			2015B1218	BL47XU	諸野 祐樹	

### Solid State Ionics

38479	Naoki Hamao	253 (2013) 123-129	2011A1853	BL19B2	井手本 康	Protonic Conduction, Crystal and Electronic Structures of La <sub>0.9</sub> Ba <sub>0.1</sub> Ga <sub>0.95</sub> Mg <sub>0.05</sub> O <sub>4-<math>\delta</math></sub>
-------	----------------	-----------------------	-----------	--------	-------	--

### Structural 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
38701	Tetsuo Katayama	6 (2019) 054302	2018B8062	BL3	片山 哲夫	A Versatile Experimental System for Tracking Ultrafast Chemical Reactions with X-ray Free-Electron Lasers

### Sustainable Energy & Fuels

38766	Hung-Chun Chiu	2 (2018) 271	2016A4134	BL12B2	Lin Yan-Gu	Calcium Containing Iron Oxide as an Efficient and Robust Catalyst in (Photo-)electrocatalytic Water Oxidation at Neutral pH
-------	----------------	-----------------	-----------	--------	------------	---

### Synchrotron Light Sources and Free-Electron Lasers

38682	Alfred Baron	(2019) 1-82	2014A1236	BL08W	Baron Alfred	High-Resolution Inelastic X-Ray Scattering I: Context, Spectrometers, Samples, and Superconductors
			2014A1884	BL35XU	内山 裕士	

### Thermochimica Acta

38246	Yasuo Saruyama	677 (2019) 26-31	2013B1219	BL40B2	猿山 靖夫	Temperature Modulated X-ray Diffractometry Applied to a Study on the Higher Order Structure of Semi-Crystalline Polyethylene
			2014A1400	BL40B2	猿山 靖夫	
			2014B1361	BL40B2	猿山 靖夫	

### Water Resources Research

38212	Yi Yang	55 (2019) 4801-4819	2017A1171	BL47XU	Bruns Stefan	Effect of Cumulative Surface on Pore Development in Chalk
			2015A1147	BL20XU	Yang Yi	

### X-ray Structure Analysis Online

38647	Yoshiki Ozawa	35 (2019) 51-53	2011B1246	BL40XU	小澤 芳樹	Crystal Structure of Hexakis(quinoline-2-thiolato)silver(I)
			2011B1181	BL40XU	安田 伸広	
			2011B1180	BL02B1	安田 伸広	

### 高知大学理工学部紀要 (Scientific and Educational Reports of the Faculty of Science and Technology, Kochi University)

38262	Yumeto Otsuka	2 (2019) 1-3	2016A6623	BL44XU	杉山 成	Crystallization and Preliminary Crystallographic Studies of Arginine Kinase from the Ciliate <i>Paramecium tetraurelia</i>
			2016B6623	BL44XU	杉山 成	
			2017A2516	BL26B1	杉山 成	
			2018B6824	BL44XU	杉山 成	
			2018A2509	BL41XU	杉山 成	
			2018A2509	BL38B1	杉山 成	

### 成形加工 (Journal of the Japan Society of Polymer Processing)

38310	Takeshi Kakara	29 (2017) 159-161	2015B1622	BL19B2	若林 みどり	X線回折法による半導体パッケージ用封止樹脂/銅界面の残留応力評価
			2015B1899	BL19B2	若林 みどり	

### 鉄と鋼 (Tetsu to Hagane)

38206	Sho Katsura	105 (2019) 709-715	2017A1549	BL20XU	桂 翔生	<i>In Situ</i> Observations of Nucleation and Growth Behavior on Fe <sub>2</sub> Al <sub>5</sub> Intermetallic Compound Formed in Molten Zinc Bath
			2016B1595	BL20XU	桂 翔生	

### 銅と銅合金 (Journal of Japan Institute of Copper)

38404	Tomotaka Miyazawa	58 (2019) 103-108	2013A1262	BL19B2	宮澤 知孝	Size and Morphology Analysis of Precipitates Dispersed in Cu Alloys by Small Angle X-ray Scattering
			2013B1829	BL46XU	宮澤 知孝	
			2014B1573	BL19B2	宮澤 知孝	
			2014B1880	BL19B2	宮澤 知孝	
			2014B1889	BL19B2	宮澤 知孝	
			2015B1877	BL19B2	宮澤 知孝	
			2013A1821	BL46XU	小金澤 智之	
			2013B1821	BL19B2	森 勉	
			2016B1891	BL19B2	宇尾 直也	

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

38748	Nobuhito Takamasu	83 (2019) 157-165	2016A1674	BL46XU	小ヶ倉 勇樹	Evaluation of Elastic Deformation Behavior of ARB Processed Ultrane Grained Ni Polycrystalline Material by X-ray Diffraction
			2014A1696	BL46XU	大久保 智	

### 日本セラミックス協会学術論文誌 (Journal of the Ceramic Society of Japan)

38226	Kohei Fukumi	126 (2018) 992-996	2012A1618	BL04B2	北村 直之	Coordination Structure of Bi Atoms in Li <sub>2</sub> O-Bi <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Glasses by X-ray Diffraction
-------	--------------	-----------------------	-----------	--------	-------	--



**表面と真空 (Vacuum and Surface Science)**

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
38314	Ryosuke Matsubara	62 (2019) 498-503	2014A1593	BL46XU	松原 亮介	Analysis of Initial Stage in Thin Film Growth of Organic Semiconductor Using Quartz Crystal Microbalance
			2016B1883	BL46XU	松原 亮介	

**分析化学 (Bunseki Kagaku)**

38724	Yohei Yamada	68 (2019) 639-646	2015B1034	BL38B1	山田 洋平	Utilization of Track-Etched Membrane Filter for a Crystallization Field and Single-Crystal X-ray Diffraction Analysis of Proteins
-------	--------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

**博士論文 (Ecole Polytechnique Federale de Lausanne)**

38606	Sara Fatale	(2017)	2014A7469	BL07LSU	Griani Marco	Lattice, Spin and Orbital Excitations in Selected Transition Metal Oxides a Resonant Inelastic X-ray Scattering Investigation
-------	-------------	--------	-----------	---------	--------------	---

**博士論文 (愛媛大学)**

38599	Sho Kakizawa	(2019)	2014B1746	BL04B1	柿澤 翔	Water in the Earth's Lower Mantle: Chemical, Physical, and Mineralogical Properties of Hydrous Bridgmanite
			2015B1683	BL04B1	柿澤 翔	
			2016B1691	BL04B1	柿澤 翔	
			2017B1687	BL04B1	柿澤 翔	

**博士論文 (大阪大学)**

38660	Niti Ngamsomprasert	(2017)	2016A1465	BL02B1	焼山 佑美	Synthesis of Hydroxysumanene and its Derivatives
-------	---------------------	--------	-----------	--------	-------	--

**博士論文 (東京大学)**

38763	Tomoya Irimatsugawa	(2018)	2014A1668	BL08W	畠山 修一	Study on Gamma-ray Transition Edge Sensor Array Based on Microwave SQUID Multiplexer
-------	---------------------	--------	-----------	-------	-------	--

**博士論文 (名古屋大学)**

38760	Takumi Isogai	(2019)	2016B1524	BL40B2	田川 美穂	Two-dimensional Crystallization and Structural Control of DNA-functionalized Nanoparticles using Lipid Molecules as Carriers
-------	---------------	--------	-----------	--------	-------	--

**博士論文 (奈良先端科学技術大学院大学)**

38389	Yusuke Hashimoto	(2018)	2017B1716	BL39XU	橋本 由介	The Photoelectron Diffraction and Holography Study of Spinel-type Iron Oxides
-------	------------------	--------	-----------	--------	-------	---

**博士論文 (北海道大学)**

38286	Hayato Takahashi	(2019)	2012B1281	BL02B2	陰山 洋	Study on the Microscopic Alteration of Cementitious Materials Subjected to High Temperature and Water Action using Non-Destructive Integrated CT-XRD Method
			2013B1511	BL28B2	杉山 隆文	
			2014A1559	BL28B2	杉山 隆文	
			2014A1782	BL46XU	梶原 堅太郎	
			2014B1010	BL28B2	杉山 隆文	
			2015A1002	BL28B2	杉山 隆文	
			2015A1682	BL46XU	梶原 堅太郎	
			2015B1608	BL28B2	梶原 堅太郎	
			2015B1569	BL28B2	杉山 隆文	
			2016A1133	BL28B2	梶原 堅太郎	
			2016A1532	BL28B2	杉山 隆文	
			2016B1256	BL28B2	梶原 堅太郎	
			2017A1009	BL28B2	杉山 隆文	
			2017A1552	BL28B2	梶原 堅太郎	
			2018A1783	BL46XU	人見 尚	
			2017B1021	BL28B2	杉山 隆文	
			2017B1627	BL28B2	人見 尚	
			2018A1691	BL28B2	高橋 駿人	
2018B1017	BL28B2	杉山 隆文				
2018B1602	BL28B2	人見 尚				
2018A1565	BL28B2	人見 尚				

**博士論文 (山形大学)**

38441	Satoshi Miyane	(2019)	2018B1807	BL46XU	宮根 聡	Development of Stretchable Semiconducting Polymer with All- $\pi$ -conjugated Backbone
-------	----------------	--------	-----------	--------	------	--

課題以外の成果として登録された論文

Journal of Synchrotron Radiation

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
38253	Sho Ito	26 (2019) 1361-1366	装置&技術	BL26B2	DeepCentering: Fully Automated Crystal Centering using Deep Learning for Macromolecular Crystallography
38292	Koudai Toyota	26 (2019) 1017-1030	XFEL		<i>xcalib</i> : A Focal Spot Calibrator for Intense X-ray Free-Electron Laser Pulses Based on the Charge State Distributions of Light Atoms
38700	Taito Osaka	26 (2019) 1496-1502	装置&技術 理研	BL3 BL29XU	A Micro Channel-Cut Crystal X-ray Monochromator for a Self-Seeded Hard X-ray Free-Electron Laser
38702	Hiroto Motoyama	6 (2019) 1406-1411	装置&技術	BL1	Intense Sub-Micrometre Focusing of Soft X-ray Free-Electron Laser beyond $10^{16}$ W cm <sup>-2</sup> with an Ellipsoidal Mirror

Electrochimica Acta

38382	He-Xin Lai	273 (2018) 115-126		BL12B2	All Binder-Free Electrophoresis Deposition Synthesis of Nickel Cobalt Hydroxide/Ultraphene and Activated Carbon Electrodes for Asymmetric Supercapacitors
38383	Hsin-Yen Sun	281 (2018) 692-699		BL12B2	Nickel Precursor-Free Synthesis of Nickel Cobalt-Based Ternary Metal Oxides for Asymmetric Supercapacitors
38384	Jia-Wen Cheng	283 (2018) 1245-1252		BL12B2	Rational Design of Nickel Cobalt Sulfide/Cobalt Sulfide Sheet-on-Sheet Structure for Asymmetric Supercapacitors

ACS Applied Energy Materials

38392	Ying-Yi Huang	1 (2018) 2979-2990		BL12B2	Synthesis of Ternary Metal Oxides for Battery-Supercapacitor Hybrid Devices: Influences of Metal Species on Redox Reaction and Electrical Conductivity
-------	---------------	-----------------------	--	--------	--

ACS Applied Nano Materials

38482	Matikde Saura-Múzquiz	1 (2018) 6938-6949	理研	BL44B2	Nanoengineered High-Performance Hexaferrite Magnets by Morphology-Induced Alignment of Tailored Nanoplatelets
-------	-----------------------	-----------------------	----	--------	---

Cell Chemical Biology

38249	Tatsuo Yanagisawa	26 (2019) 936-949	理研	BL26B2	Structural Basis for Genetic-Code Expansion with Bulky Lysine Derivatives by an Engineered Pyrrolysyl-tRNA Synthetase
			理研	BL32XU	
				BL41XU	

Environmental Pollution

38388	Liang-Ching Hsu	247 (2019) 180-187		BL12B2	Adsorption Mechanisms of Chromate and Phosphate on Hydrotalcite: A Combination of Macroscopic and Spectroscopic Studies
-------	-----------------	-----------------------	--	--------	---

IEEE Xplore, 2018 16th International Conference on Megagauss Magnetic Field Generation and Related Topics

38296	Yuya Kubota	(2019) 68-71	XFEL	BL1	Evaluation of Pulse Duration of the Soft X-ray Free Electron Laser at SACLA BL1 with Single-Shot Spectrometry
-------	-------------	-----------------	------	-----	---

Journal of Physics: Condensed Matter

38390	Ashish Chhaganlal Gandhi	29 (2017) 215802		BL12B2	Magnetic Resonance Study of Exchange-Biased Ni/NiO Nanoparticles
-------	--------------------------	---------------------	--	--------	--

Materials Research Express

38391	Ashish Chhaganlal Gandhi	3 (2016) 035017		BL12B2	Size Confined Magnetic Phase in NiO Nanoparticles
-------	--------------------------	--------------------	--	--------	---

Physical Chemistry Chemical Physics

38696	Akihiro Koide	(2019) Online published 2 Apr. 2019		BL3	Photoinduced Anisotropic Distortion as the Electron Trapping Site of Tungsten Trioxide by Ultrafast W L <sub>1</sub> -edge X-ray Absorption Spectroscopy with Full Potential Multiple Scattering Calculations
-------	---------------	-------------------------------------	--	-----	---

## 2019A 期における SPring-8/SACLA ユーザー要望等について

登録施設利用促進機関

公益財団法人高輝度光科学研究センター

利用推進部

SPring-8 および SACLA では、各ビームタイム終了後に実験グループごとに「ビームタイム利用報告書」を提出いただいております。この報告書には、その実験の概要、次回の利用者へのアドバイスや施設に対する要望、提案等を記入いただいております。

2019A 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. 2019A 期 要望等全体概要

2019A 期	実施課題数	利用実験数 (報告書数)	うち、要望等コメントがある*1 報告書数		
			技術的 要望等	施設他 要望等	その他 (お礼)
SPring-8 共用 BL	717	1,148	60	52	125
SACLA 共用 BL	56	64	12		

\*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 60 件) の研究分野/手法\*2 別内訳>

分野 手法	生命科学 医学応用	物質科学 材料科学	化学	地球・ 惑星科学	環境科学	産業利用
X線回折	12	5	3			5
X線散乱		1	1			2
X線非弾性散乱		4				
X線・軟 X 線 吸収分光	1	5	4	1		5
光電子分光		3	1			1
X 線イメージ ング	2	1		1		1
その他						1

\*2 課題申請時の利用者申告ベース。

### 2. 2019A 期 要望等の内容 (一部抜粋)

#### (1) 技術的要望等

○ステップスキャンでの測定において、測定開始角度が設定値から大きくずれる現象が頻繁に確認された。測定開始前にあらかじめ Move  $\theta$  で開始角度近くまで移動させると角度のずれがほぼ抑制された。この点は改善された方がよいと思われる。

【化学/X線・軟 X 線吸収分光】

○今回の測定で、マイクロスポット集光のメリットを実感しました。この素晴らしい装置のさらなる今後の発展のため、以下に幾つかコメントを差し上げますので、参考にして頂けると幸いです。

#### ①測定の自動化

現状、励起光エネルギーを変える時には、Gap、Slit、Grating の値を LabView パネルに手動で打ち込むことになっています。打ち込み時間、さらにはヒューマンエラーまでも含めると、ここの作業にかなりの時間をとられてしまいますので、放射光と軟 X 線 ARPES の強みである kz 分散の測定を行いつらい環境です。やはりビームライン制御の自動化は必要かと感じました。

#### ②試料位置の経時変化

マイクロオーダーで試料が動くこと測定に影響が出てしまうほど光がよく集光されているので、温度依存性測定に対応させるべきかと思います。ドメインの小さい試料を測定する場合、マニピレーター全体の温度が安定するのを待った上で、場所を探しなおしてから測定を行うため、かなり時間のロスがあります。この点は、試料周辺だけ局所的に温度を制御できるように、ヒータを使う環境を整備すれば改善できるかと思います。また、温度が安定しているにも関わらず、測定中に試料が動いてしまい、測定をやり直す事が何度かありました。解決するためには、マニピレーター制御とは別に、試料位置を安定化させる機構が必要であるように思います (例えば、マニピレーターのどこかにリファレンスにおいて、その位置をレーザーで見てフィードバックするなど)。

【物質科学・材料科学/X線・軟 X 線吸収分光】

○全自動測定の測定ジョブを発生させたが、ジョブが実行される毎に He クライオに温度を下げることを示す警告が立ち上がり、結局、人がコンソールに張り付いてエンターキーを押す作業を入れな

いといけない状況だった。可能であれば、警告表示が出ないモードも検討して頂ければと思います。また、BSSの画面に表示される測定条件が入力値と大きく異なっていたが、実行後に入力値が後から反映されるため、この仕様に気がつくのにしばらく時間がかかった。こちらも入力した値が反映されるように対応して頂ければと思います。

【生命科学/X線回折】

(2) 施設その他要望等

○宿舎にウォシュレットがほしい。また、夏は虫が大量にいて、部屋にも入ってくるので、虫の対策をしてほしい。コンビニの開店時間を長くしてほしい。

○宿舎へのチェックイン、チェックアウト可能時間を延長してほしい。具体的には、14時チェックイン、5時チェックアウトが実現できないでしょうか。事前打ち合わせ、準備時間の確保、始発バスの利用を考えると、メリットは大きいと思います。

○実験準備室にソファがあると、よりしっかりと休憩ができてありがたいです。

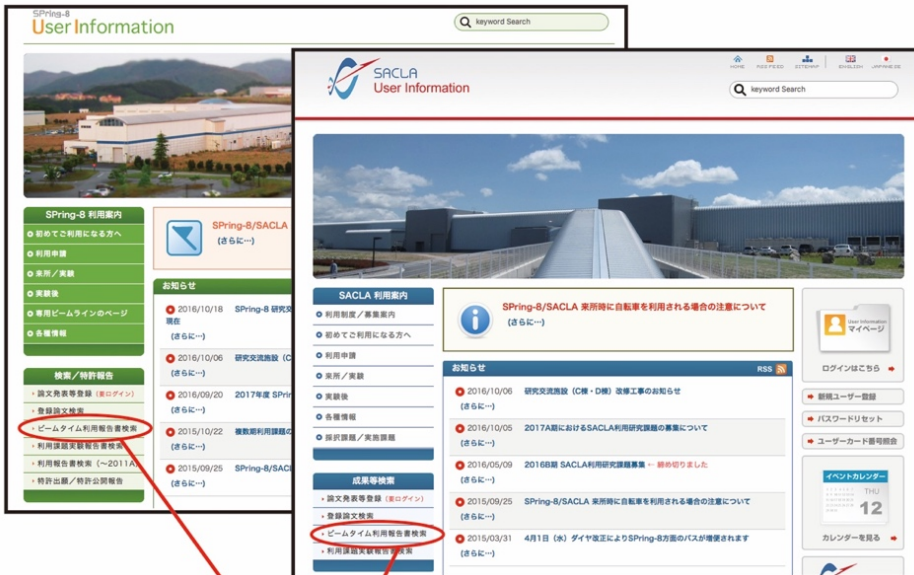
○重い荷物を持って来所する際や雨の際に移動に坂道を登って移動するのは苦勞するので、線量計・ユーザーカードの受け取りをバス停に近く、より高い位置にある中央管理棟付近でできるとありがたい(夜間についても)。

3. 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。

[検索・閲覧手順]

- ① 「ビームタイム利用報告書(要望・回答)検索」
- ② 利用期、ビームライン番号等を入力
- ③ 「検索」



期	ビームライン	2016年度に対するアドバイス情報に対する要望、提案等	SPring-8/SACLAからの回答
2016B	BL40XU	測定に際しては測定位置が1層ラックあたり、平均3〜8日程度の測定を行い、測定結果をまとめた上で測定期間のラックラックを長期間にわたって行う。測定結果をまとめた上で測定期間のラックラックを長期間にわたって行う。測定結果をまとめた上で測定期間のラックラックを長期間にわたって行う。	ラックラックを長期間にわたって行う。測定結果をまとめた上で測定期間のラックラックを長期間にわたって行う。測定結果をまとめた上で測定期間のラックラックを長期間にわたって行う。
2016B	PK-BL	測定に際しては測定位置が1層ラックあたり、平均3〜8日程度の測定を行い、測定結果をまとめた上で測定期間のラックラックを長期間にわたって行う。測定結果をまとめた上で測定期間のラックラックを長期間にわたって行う。	ラックラックを長期間にわたって行う。測定結果をまとめた上で測定期間のラックラックを長期間にわたって行う。測定結果をまとめた上で測定期間のラックラックを長期間にわたって行う。
2016B	BL30XU	測定に際しては測定位置が1層ラックあたり、平均3〜8日程度の測定を行い、測定結果をまとめた上で測定期間のラックラックを長期間にわたって行う。測定結果をまとめた上で測定期間のラックラックを長期間にわたって行う。	ラックラックを長期間にわたって行う。測定結果をまとめた上で測定期間のラックラックを長期間にわたって行う。測定結果をまとめた上で測定期間のラックラックを長期間にわたって行う。

## タンパク質結晶自動測定について

公益財団法人高輝度光科学研究センター

放射光利用研究基盤センター タンパク質結晶解析推進室

### 1. はじめに

近年、タンパク質結晶解析における利用者のニーズは、回折測定の自動化など測定や解析の迅速化効率化と、微小結晶測定や超高分解能構造決定など高難度解析に二極化してきています。これらに対応するため、アンジュレータビームライン (ID-BL) の BL45XU、BL32XU では、タンパク質結晶の自動測定環境を整備し、共用利用での本格運用を 2019 年 9 月 30 日 (2019B 期) より開始いたしました。

自動測定では、利用者の方に凍結試料を Spring-8 に宅配便でお送りいただき、サンプル情報や測定条件をお知らせいただくことで、来所不要の自動測定を実施し、測定後に試料と共に測定データと自動データ処理結果をお返しいたします。以下の内容をご確認の上、是非ご利用ください。

### 2. 概要

#### (1) タンパク質結晶自動測定

自動測定を実現するために理研ビームライン BL32XU で開発された自動データ収集/データ処理システム ZOO を実装しました<sup>[1]</sup>。ZOO システムでは、

(1) サンプルチェンジャー SPACE による試料の自動交換、(2) X 線を用いた結晶位置の探索、(3) 重篤な放射線損傷を回避したデータ収集、(4) 自動データ処理システム KAMO の機能を統合し、自動かつシーケンシャルに測定が行われます<sup>[2]</sup>。データ収集においては、結晶の形状に応じて以下のような測定モードを選択できます。「位置固定データ収集法」は照射位置 1 カ所で測定、「ヘリカルデータ収集法」では 2 点間を移動しながら測定、「複数部分データ集積法」では複数の結晶から数度～十度分程度の微小角で測定します。

この自動測定では、結晶を収容する共通規格の凍結保存容器 UniPuck (16 サンプルピン収容) の 1 パックの測定を 1.5～2 時間で完了します。SPACE には

UniPuck を 8 個搭載可能であり、128 試料を 12～16 時間でデータ収集できます。

#### (2) 対象ビームライン

##### 1) BL45XU 構造生物学 III ビームライン

BL45XU は、 $5.7 \times 10^{12} \sim 1.7 \times 10^{13}$  photons/sec @12.4 keV の高強度ビームを用いた自動での回折実験ができるタンパク質結晶解析ビームラインです。膜タンパク質を含む  $10 \mu\text{m}$  から数百  $\mu\text{m}$  までの様々な大きさの凍結結晶を対象試料とし、ビームサイズを  $5(\text{H}) \times 5(\text{V}) \sim 50(\text{H}) \times 50(\text{V}) \mu\text{m}^2$  の範囲で切り替え、試料の交換・X 線照射位置の決定・データ測定・データ処理を自動化した高効率な回折実験に対応します。

##### 2) BL32XU 理研ターゲットタンパク質ビームライン

BL32XU では、ビームサイズ  $1(\text{H}) \times 1(\text{V}) \sim 10(\text{H}) \times 15(\text{V}) \mu\text{m}^2$  の範囲で切り替えが可能で、 $7 \times 10^{10} \sim 8 \times 10^{12}$  photons/sec@12.4 keV の高フラックス微小ビームの利用が可能です。このビーム性能を最大限に活用し、膜タンパク質やタンパク質複合体など解析困難であった回折能が低い、もしくはサイズが  $10 \mu\text{m}$  以下の微小結晶からでも高分解能構造解析を実現してきました。最近では集光光学系の微調整により、 $1(\text{H}) \times 1(\text{V}) \mu\text{m}^2$  サイズで、 $2 \times 10^{12}$  photons/sec@12.4 keV でのハイパーフォーカスモードの利用により、サブミクロンのタンパク質結晶を用いて SS-ROX (serial synchrotron rotation crystallography) 法<sup>[3]</sup>による自動データ収集も実現しています。

#### (3) 利用実績

2019A 期の試験的運用では、成果専有課題の利用は 10 ユーザー (のべ 12 ユーザー) による 19.5 シフト (156 時間) でした。1 ビームタイムあたりの利用

時間は 0.25 シフト (2 時間) ~1.5 シフト (12 時間) と様々です。その主な利用者は製薬企業となっています。

BL32XU: 4 回 (2 ユーザー)

BL45XU: 14 回 (10 ユーザー)

成果非専有課題 (BL45XU のみ集計) では、5 ユーザーによる 2.5 シフト (20 時間) でした。また BL32XU ではユーザーが来所する測定においても、すでにほとんどが自動測定による運用となっております。

### 3. 利用時期、利用料金、試料、実験への立ち合いについて

#### (1) 利用時期と手続き

一般課題 (成果非専有課題、成果専有課題) の場合は、例年 5 回行われるビームタイム希望調査の際に自動測定希望の旨をお知らせください。

下記資料の「PX-BL 自動測定の手続き (一般課題・来所無し)」をご参照ください。

([http://bioxtal.spring8.or.jp/ja/users/Auto/PXBL\\_Auto\\_measurement\\_ja.pdf](http://bioxtal.spring8.or.jp/ja/users/Auto/PXBL_Auto_measurement_ja.pdf))

希望調査については、「2019B 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」の「3.詳細」、「3.3 利用時期」([http://www.spring8.or.jp/ja/users/proposals/call\\_for/protein\\_19b/](http://www.spring8.or.jp/ja/users/proposals/call_for/protein_19b/)) をご参照ください。

成果専有時期指定課題の場合は申請を随時受け付けます。

下記資料の「PX-BL 自動測定の手続き (成果専有時期指定・来所無し)」をご参照ください。

([http://bioxtal.spring8.or.jp/ja/users/Auto/PXBL\\_Auto\\_measurement\\_ja.pdf](http://bioxtal.spring8.or.jp/ja/users/Auto/PXBL_Auto_measurement_ja.pdf))

実施可能な日程については、ビームライン担当者にお問い合わせください。なお、これに伴い、タンパク質結晶解析ビームラインでの測定代行は運用を終了しました。

#### (2) 放射線従事者登録について

ユーザーが放射線管理区域に立ち入らない場合は、放射線従事者登録は不要です。

#### (3) 利用料金

成果専有利用の場合は、次の 1) および 2) の合計

金額となります。

成果非専有利用の場合は、2) の金額となります。

自動測定 1 回あたりの最小時間は 0.25 シフト (2 時間) となります (BL32XU については、最小時間は 1.5 シフト (12 時間) となります)。

#### 1) ビーム使用料

ビーム使用料は下記の金額となります。

成果専有 (一般課題) 料金相当: 120,000 円/2 時間

成果専有 (時期指定) 料金相当: 180,000 円/2 時間

#### 2) 消耗品実費負担相当額

消耗品実費負担相当額として、定額分 (2,680 円/2 時間) および従量分 (測定中に使用した消耗品等の金額) を 2 時間単位で算出します。

#### 3) 利用時間の目安

サンプル数と測定時間のおよその目安は、下記資料の「測定時間算出方法」、「ZOO 自動測定平均測定時間実績」をご参照ください。

([http://bioxtal.spring8.or.jp/ja/users/Auto/PXBL\\_Auto\\_measurement\\_ja.pdf](http://bioxtal.spring8.or.jp/ja/users/Auto/PXBL_Auto_measurement_ja.pdf))

#### (4) 測定試料

測定試料は、生体高分子結晶のみを取り扱います。重原子誘導体等の重金属を微量含む試料については相談窓口にご相談ください。なお、JASRI が定める「ランク 4」の化学薬品、即ち、取り扱いに際し、国または県の許可が必要な物質は、原則対象外とします。昆虫細胞で発現させた試料などの遺伝子組換え試料での実験の場合、担当者に事前に問い合わせください。

#### (5) 測定可能な試料の保存形態について

試料を金属製の共通規格ピンに搭載して液体窒素で凍結し、UniPuck に収納 (16 試料/パック) した状態での受け入れとなります。収納方法の詳細は、タンパク質結晶解析推進室ウェブページ(<http://bioxtal.spring8.or.jp>) をご覧ください。

### 4. 申込方法

申込方法の詳細および各種様式は、下記資料の「PX-BL 自動測定の手続き (一般課題・来所無し)」、「PX-BL 自動測定の手続き (成果専有時期指定・来所無し)」をご参照ください。



([http://bioxtal.spring8.or.jp/ja/users/Auto/PXBL\\_Auto\\_measurement\\_ja.pdf](http://bioxtal.spring8.or.jp/ja/users/Auto/PXBL_Auto_measurement_ja.pdf))

課題の種別ごとに申請方法が異なりますのでご注意ください。

## 5. 申請後の自動測定の流れ

### (1) 測定内容の打合せ

自動測定サンプルシートに測定内容に関する内容を記述していただき、自動測定実施日の2日前までにメールにて送付していただきます。その内容を基に打ち合わせを行い、測定内容を決定します。

### (2) 自動測定実施前の試料準備

試料は、UniPuck に収納し、自動測定実施日の前日まで必着にてご送付ください(送料は申請者負担となります)。また、「自動測定同意書」と、データコピー用のハードディスクドライブ、返信用の送り状を同梱してください。

### (3) 自動測定の実施

送付された試料を担当者がビームラインのサンプルチェンジャーにセットし、実験の準備を行います。打ち合わせの内容に即した測定条件のインプットファイルに沿って測定が実行されます。また得られたデータは自動データ処理プログラム KAMO により自動処理されます(ユーザーがデータ処理プログラム XDS のライセンスを所持されている場合に限りです)。

### (4) 自動測定実施後の流れ

申請者に、測定データと測定レポートを送付します。申請者から送付されたハードディスクドライブに収納し、お送りいたします。あわせて、測定後の試料についてもお返しいたします(送料は申請者負担となります)。なお、解析はサービスには含まれておりませんのでご注意ください。

試料および測定データを受領後、JASRI まで「試料等受領書」をご返信ください。受領書の受け取りを確認した後、測定データは消去いたします。

また、成果専有課題の場合は申請者の所属機関に利用料金の請求書を送付しますので、利用料金をお支払いください。

## 6. その他

### (1) 関連するプレスリリース

[1] タンパク質結晶から自動でデータ収集する「ZOOシステム」を開発

([http://www.spring8.or.jp/ja/news\\_publications/press\\_release/2019/190207/](http://www.spring8.or.jp/ja/news_publications/press_release/2019/190207/))

[2] タンパク質微小結晶のための自動データ処理プログラムの開発

([http://www.spring8.or.jp/ja/news\\_publications/press\\_release/2018/180510/](http://www.spring8.or.jp/ja/news_publications/press_release/2018/180510/))

[3] 凍結した試料を回転させる「SS-ROX 法」を確立、汎用化へ

([http://www.spring8.or.jp/ja/news\\_publications/press\\_release/2017/170105/](http://www.spring8.or.jp/ja/news_publications/press_release/2017/170105/))

### (2) タンパク質結晶自動測定に関するお問い合わせ先

〒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

放射光利用研究基盤センター

タンパク質結晶解析推進室

TEL : 0791-58-0833

e-mail : mail-in@spring8.or.jp

### (3) オンライン課題登録／書類提出に関するお問い合わせ先

〒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

TEL : 0791-58-0961

e-mail : sp8jasri@spring8.or.jp

利用系グループ活動報告

放射光利用研究基盤センター  
回折・散乱推進室 回折・散乱Ⅱグループ

公益財団法人高輝度光科学研究センター

放射光利用研究基盤センター 回折・散乱推進室

木村 滋

1. はじめに

回折・散乱Ⅱグループは、2018年4月より、旧利用研究促進部門 構造物性Ⅱグループと構造物性Ⅰグループのナノ構造物性チームが1つになる形で発足した。2019年4月からは、旧利用研究促進部門が分かれて新設された回折・散乱推進室のグループとして活動している。本グループは2つのチームで構成され、SPring-8の特徴である高輝度X線や高エネルギーX線を用いて、強い回折が得られない表面やナノ構造等の低次元構造や非晶質等の非周期構造の研究を推進する低次元・非周期構造チームと非弾性散乱により物質中の原子や電子のダイナミクスに関する研究を推進する量子状態解析チームで構成されている。なお、グループの人員構成についてはホームページを参照いただきたい<sup>[1]</sup>。

本報では、各チームが担当するビームラインで最近実施した高性能化を中心に紹介する。

2. 低次元・非周期構造チーム

低次元・非周期構造チームは、BL04B2（高エネルギーX線回折）、BL13XU（表面界面構造解析）、

BL28B2（白色X線回折）の3本のビームラインを主に担当し、利用実験の支援、実験装置の高性能化、新しい実験手法の研究開発等を行っている。

BL04B2は、37.7、61.4、113.1 keVの高エネルギーX線を用いた全散乱測定、小角散乱測定、ダイヤモンドアンビルセル(DAC)を利用した高圧下の粉末X線回折測定が可能なビームラインである。最も利用が多い全散乱測定は、これまで0次元半導体検出器を7連装した装置(図1左)で測定していたため、二体分布関数(pair distribution function; PDF)解析をするためのデータ測定に2~3時間を要していた。時分割測定のニーズに応えるにはこのシステムでは測定時間が長過ぎるので、2017年度に大面積2次元検出器であるPerkinElmer社製のフラットパネル検出器(flat panel detector; FPD)を使う測定システムを開発した(図1右)<sup>[2]</sup>。本FPDは、ピクセルサイズが0.2mm角で面積は400mm角である。検出器導入に伴い、高速データ処理プログラムの開発やダークノイズの削減を進め、秒オーダーでの時分割PDF解析が可能になっている<sup>[3]</sup>。

BL13XUは、表面、界面や薄膜等の低次元構造を回

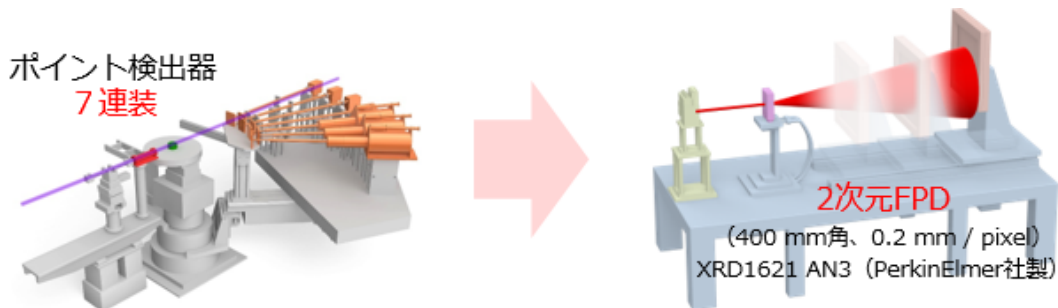


図1 0次元半導体検出器を7連装した測定装置(左)と新規に開発した大面積2次元検出器を備えた測定装置(右)の模式図。

折・散乱を利用し原子スケールで明らかにすることを目的とする標準アンジュレータを備えたビームラインである。微小角入射 X 線回折、クリスタル・トランケーション・ロッド (crystal-truncation-rod; CTR) 散乱、反射率測定、マイクロ／ナノビーム回折、逆空間マッピング等が主に行われている。

表面、界面や薄膜等の低次元構造からの回折や散乱は、散乱体の体積の小ささから弱いため、輝度の高いアンジュレータ光が威力を発揮している。しかし、実験によっては更なるフラックス増大が望まれている。そこで、非対称反射を使用し、バンド幅を広げることによりフラックスを増大させる光学系を標準分光器に導入し、最大 2.5 倍のフラックスを得ることに成功した (図 2)<sup>[4]</sup>。

BL13XU の実験ハッチ 4 には、高分解能マイクロ／ナノビーム回折計が導入されている (図 3)<sup>[5]</sup>。本装置にはこれまで検出器として CCD 型カメラを使用してきたが、読み取りノイズのため弱い回折信号を検出するのが困難であった。この問題を解決するため、ピ

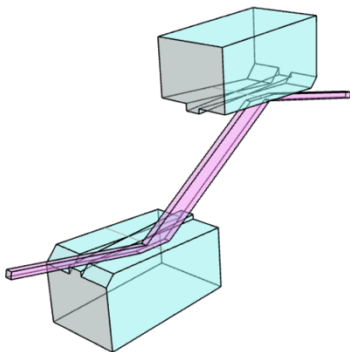


図 2 非対称反射を利用する分光結晶の模式図。奥から非対称角 6°、0°、4°の順に成っている。

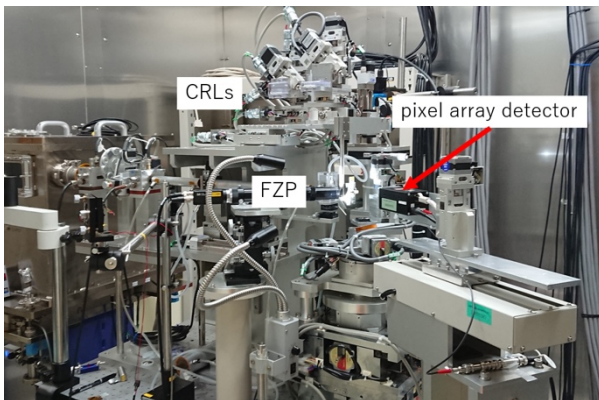


図 3 BL13XU 実験ハッチ 4 に設置されている高分解能マイクロ／ナノビーム回折計

クセルアレイ検出器 (Amsterdam Scientific Instruments 社製 STPX-65k) を導入した<sup>[6]</sup>。本検出器は低ノイズでフレームレートが高いことが特徴であり、これまで測定が難しかった微弱な回折信号の測定に威力を発揮している。

BL28B2 は、白色 X 線を利用することができる偏向電磁石ビームラインである。BL28B2 は、X 線回折、XAFS、イメージング等、さまざまな研究分野で利用されているが、本チームでは X 線回折を主に担当している。白色 X 線を利用して回折測定を実施する利点の 1 つは結晶を回転せずに回折測定が行えることである。その利点を活かし、マイクロラウエ測定によりその場圧縮試験下でグレイン変形を可視化する手法が開発されている<sup>[7]</sup>。

### 3. 量子状態解析チーム

量子状態解析チームは、BL08W (高エネルギー非弾性散乱)、BL09XU (核共鳴散乱)、BL35XU (高分解能非弾性散乱) の 3 本のビームラインを主に担当している。

BL08W は、SPring-8 で唯一のウィグラーを光源とすることができる 100~300 keV の高エネルギー X 線を使用することができるビームラインである。高エネルギー非弾性散乱 (コンプトン散乱) 測定による物性研究に主に利用されているが、その他に、蛍光 X 線実験、透過イメージング、高エネルギー X 線回折等にも利用されている。また、近年では透過イメージングとコンプトン散乱を組み合わせることにより、重い筐体内に存在する軽元素の分布を測定する手法が開発され<sup>[8]</sup>、実際のリチウムイオン電池の充放電に伴うリチウムの濃度変化の観察に成功している<sup>[9]</sup>。現在、コンプトン散乱の検出器として、エネルギー分解能のある 2 次元検出器の導入を進めており、測定手法の更なる高機能化を目指している。

BL09XU は、標準アンジュレータを光源とするビームラインで、現在は核共鳴散乱と高 X 線光電子分光の相乗りビームラインとなっている。本チームは共通光学系と核共鳴散乱を担当している。

核共鳴散乱を利用する手法として、現在は、1) 局所電子状態を調べる放射光メスバウアー分光、2) 原子振動を観測する核共鳴非弾性散乱、3) ソフトマテリアルの運動を調べる準弾性散乱、4) 核励起他、手

法が実施されている。これらの実験を効率的に実施できるように、各種高分解能モノクロメータを開発するとともに、最近では屈折レンズによる集光光学系を整備している<sup>[10]</sup>。上述の手法はそれぞれ特色のある手法であるが、ここでは紙面の関係で最近整備を進めている3)の準弾性散乱分光器について紹介する。時間領域核共鳴散乱を利用する準弾性散乱は、ナノ秒～マイクロ秒の原子・分子スケールのダイナミクス測定が可能であるが、従来の準弾性散乱法は、高輝度放射光X線を用いても長い測定時間を必要とし、そのため本手法の応用範囲が制限されるという点に問題があった。この問題を解決する手法として多色のガンマ線を用いて、それらを時間領域で干渉させ、その複雑な干渉パターンから試料のダイナミクスに関する情報を得るという独創的な測定方法が京大の齋藤等により考案され、従来の方法と比較して、測定時間を1/10以下に短縮できることが実証された<sup>[11]</sup>。本手法の共用利用を推進すべく、最近、最適化された高分解能モノクロメータを開発し(図4)、試料用冷凍機とアバランシェフォトダイオード(avalanche photodiode; APD)検出器からなる測定装置を構築した。

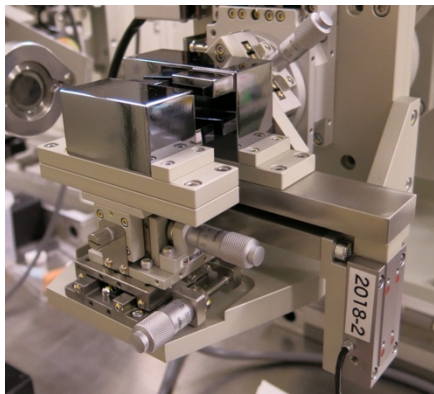


図4 準弾性散乱測定用に開発した高分解能モノクロメータ。入れ子型のSi 444と10 6 4反射を採用している。

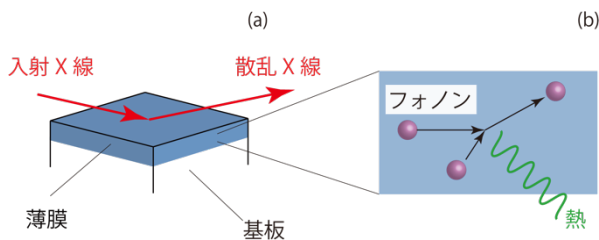


図5 (a) 基板上的の薄膜測定法の模式図、(b) 熱発生メカニズム、フォノン散乱により熱が発生する。

BL35XUは、短周期アンジュレータから得られる硬X線を利用したmeV分解能の高分解能非弾性X線散乱ビームラインである。本ビームラインでは、周期配列を持つ結晶や周期配列を持たない液体やガラス等の試料に対して、素励起観測を通じた原子ダイナミクスに関する研究が実施されている。X線が集光できる性質を利用することにより、中性子非弾性散乱実験では困難な極限条件(高温高圧下や極低温下)における微小試料(数十マイクロンからミリ以下)の原子ダイナミクス(弾性率やフォノン分散測定等を含む)測定も可能となっている。対象となる研究分野として、液体・固体物性から地球科学分野にわたる広汎な領域で研究が実施されている。一方で、近年フォノンエンジニアリングと呼ばれる研究分野が立ち上がり、ナノスケールでのフォノン輸送の物理的理解に基づいて、材料開発からデバイス応用までを進めようという機運が盛り上がっている。このような状況で、実デバイスに近い基板上薄膜のフォノン測定に対する要望が多く寄せられていたが、BL35XUでは、これまで基板上薄膜の測定はできていなかった。この状況を改善すべく、微小角入射配置でフォノン測定を行う測定法を開発した(図5)。この手法により、熱電材料への応用が期待される窒化スカンジウム(ScN)薄膜のフォノン測定し、熱伝導・熱散逸の機構について詳細な情報を得ることに成功している<sup>[12]</sup>。

#### 4. おわりに

回折・散乱IIグループが担当するビームラインで、メンバーが最近実施した装置の高性能化や測定手法の開発を中心に紹介した。引き続き、利用者の皆さんの研究に役立つ開発を推進していく所存である。是非、ご意見、ご要望を回折・散乱IIグループメンバーにお聞かせ下さい。

#### 参考文献

- [1] [http://rud.spring8.or.jp/group/diff\\_scatt2\\_g.html](http://rud.spring8.or.jp/group/diff_scatt2_g.html)
- [2] K. Ohara *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **25** (2018) 1627-1633.
- [3] S. Tominaka *et al.*: *ACS Omega* **3** (2018) 8874-8881.
- [4] H. Tajiri *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **26** (2019) 750-755.
- [5] K. Sumitani, Y. Imai and S. Kimura: *Microscopy and Microanalysis* **24** (2018) 302-303.

- [ 6 ] Y. Imai, K. Sumitani and S. Kimura: *AIP Conf. Proc.* **2054** (2019) 050004.
- [ 7 ] S. Kimura, K. Kajiwara and T. Shimura: *Jpn. J. Appl. Phys.* **55** (2016) 038002.
- [ 8 ] M. Itou *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **22** (2015) 161-164.
- [ 9 ] K. Suzuki *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **24** (2017) 1006-1011.
- [10] Y. Yoda: *Hyperfine Interactions* **240** (2019) 72.
- [11] M. Saito *et al.*: *Sci. Rep.* **7** (2017) 12558.
- [12] H. Uchiyama *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **120** (2018) 235901.

木村 滋 *KIMURA Shigeru*

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



## 海外放射光施設 PETRA III を訪問して

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
放射光利用研究基盤センター  
分光・イメージング推進室 高木 康多

### 1. はじめに

海外研修として8月20日から9月25日までの約1ヵ月間、ドイツの放射光施設 PETRA III に滞在した。PETRA III には、2018年から一般共用が開始された硬 X 線光電子分光法 (HAXPES: Hard x-ray photoelectron spectroscopy) の専用ビームライン (P22) がある。今回はそのビームラインの主担当である Christoph Schlueter 博士に受け入れ先になってもらい、P22 のビームラインのスタッフとともに HAXPES 実験についてビームラインの光学調整などを含めて見学・参加させてもらった。このビームライン P22 には、HAXPES、硬 X 線光電子顕微鏡 (HAXPEEM: Hard x-ray photoemission electron microscopy)、硬 X 線 k 空間顕微鏡 (k-microscope)、大気圧 HAXPES (AP-HAXPES: ambient pressure HAXPES) の4つの装置が整備されており、今回の1ヵ月の滞在中で AP-HAXPES を除く3つの装置を使った実験を経験することができた。ここではその滞在中に得られた情報について報告したいと思う。

### 2. PETRA III

PETRA III はドイツの北部ハンブルグ市内にある。市の中心地であるハンブルグ中央駅から西に直線距離で10 km 弱、電車とバスで30分程度の郊外にドイツ電子シンクロトロン (Deutsches Elektronen Synchrotron: DESY) があり、その中に放射光施設 PETRA III がある。

DESY は高エネルギー加速器・高エネルギー物理学の研究所であり、元々 PETRA は素粒子の実験用に周長 2.3 km の電子・陽電子の円形加速器として1978年に作られた。その後、高エネルギー物理実験の施設の大型化に伴い、1987年に DESY の敷地をはみ出し、近隣の公園や住宅地の下を通った周長 6.3 km の

電子・陽子の円形加速器 HERA が作られると、PETRA はそのための前段加速器として使用された (PETRA II)。その HERA も2007年にシャットダウンし、その後の DESY の素粒子実験はスイスにある欧州原子核研究機構 (CERN: European Organization for Nuclear Research) で行われるようになった。その一方で PETRA は、第三世代放射光施設 PETRA III として再利用され、世界でも有数の高輝度光源として2010年から運用されている。

PETRA III の周長は 2.3 km と、SPRing-8 (周長 1.4 km) よりも大きい。しかし、ほとんどが地下もしくは半地下にあるため、放射光施設の象徴的な丸いリング状の建屋はなく、当初はリングの 1/8 程度の範囲に14本のビームライン (P01~P14) が建設された。その後放射光利用の需要が増えたことを受けて、2014年から、蓄積リングの北側 (Paul P. Ewald hall) と東側 (Ada Yonath hall) に新たな実験ホールの建設が始まった。2019年9月時点で北ホールに2本 (P63、P64)、東ホールで4本 (P21~P24) が稼働しており、合計で20本のビームラインが PETRA III にはある。



図1 PETRA III の東ホール (Ada Yonath hall)。この建物の中に HAXPES ビームラインである P22 とスタッフの居室がある。滞在中はこの棟の短期滞在用者の居室に机を用意してもらい、そこで過ごした。



### 3. HAXPES ビームライン (P22)

当初の PETRA における HAXPES 実験は、P09 において他の実験手法と相乗りで行われており、全マシンタイムの 1/3 程度がシェアされている程度だった。しかし、近年の HAXPES 実験の需要の高まりに応える形で、東ホールの建設とともに HAXPES ビームラインが計画された。P22 は Wolfgang Drube 博士が設計した HAXPES 実験専用のビームラインであり、2018 年秋から共用が開始されている。Drube 博士は 2018 年に第一線から退かれ、後任として今回の滞在を受け入れていただいた Schlueter 博士が主担当となりビームラインの管理を行っている。ビームラインについては、PETRA III の Web サイトにある Technical Design Report に詳しく記載されているので参照してほしい<sup>1)</sup>。

P22 ビームラインのエネルギー範囲は、データシートには 2.4~30 keV と記されているが、実際の HAXPES の実験としては 3~10 keV の範囲が使われる。二結晶分光器 (double crystal monochromator: DCM) は Si(111) と Si(311) があり、入れ替えができるようになっている。HAXPES 測定においてビーム強度が必要な時は Si(311) を使い、高分解能が必要な時は Si(333) などの高次反射を使う。ただし、アナライザーの分解能などを考慮するとエネルギー分解能よりもビーム強度が優先されることが多く、実験では主に Si(311) による 6 keV の光を使い、高分解能を必要とする時に Si(333) に変更する運用がなされている。

滞在中に Au 試料の HAXPES 測定により、DCM の各反射を使った場合に得られるエネルギー分解能を

見積った。その結果、Si(311) の場合には 100 meV 弱の分解能が得られ、一方、Si(333) の場合にはアナライザーのパスエネルギーを絞ることによって 50 meV まで分解能が上がることが分かった。ただし Si(333) ではビーム強度が弱い上に、パスエネルギーも小さいため信号強度は弱く、長いため込み時間を必要とした。

集光については、垂直方向集光ミラーは円筒形ミラー (M1) でビームの角度補正のための平面ミラー (M2) とともに光学ハッチに入っている。一方、水平方向集光ミラーは長さが 1 m ある曲率変更可能な平面-楕円形ミラー (M3) であり実験ハッチ内の上流に設置されている。このミラーの入射角と曲率を変えることによって実験ハッチ内の各装置に合わせて焦点位置を変更している。スポットサイズの計算値は実験ハッチの上流にある HAXPES の位置で 8  $\mu\text{m}$  (縦)  $\times$  8  $\mu\text{m}$  (横)、下流の HAXPEEM の位置で 8  $\mu\text{m}$  (縦)  $\times$  20  $\mu\text{m}$  (横) 程度となっている。しかし、実際の HAXPES 実験では余裕を持たせ 20  $\mu\text{m}$  前後のスポットサイズで行っていた。スペックの上限を求めない分、光学調整の時間が短縮できる利点もあった。

P22 について発表されている論文には、Si(111) と Si(022) を用いた二段チャンネルカット結晶分光器とダイヤモンド位相子についても記述されている<sup>2)</sup>。これらが 1 つの真空チャンバーに入っており DCM の後ろに設置できるようになっている。しかしながら、これらは調整が複雑で難しいため、現状では使っておらず、このチャンバーはハッチ外に出されており、将来的には導入して安定稼働させる予定であるとのことであった。



図2 P22 の後方からの写真。ビームラインは地下にあり、写真は居室があるフロアの廊下から撮影した。写真奥中央にあるのが P22 の実験ハッチである。

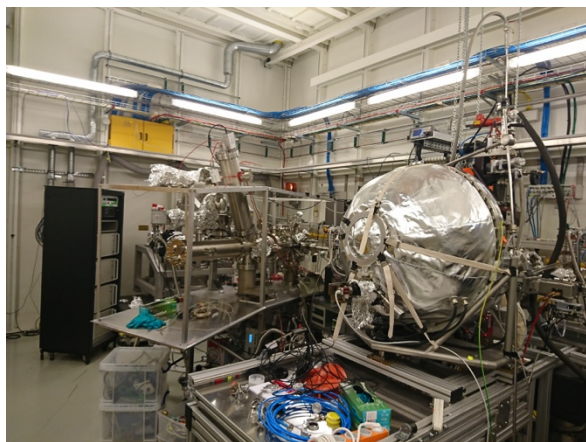


図3 3 つ装置が並ぶ実験ハッチ。手前に HAXPES 装置、中央に k-microscope、奥に隠れているのが HAXPEEM である。滞在中は AP-HAXPES はハッチ外に置かれていた。

光学調整において非常に役に立っていたのが、モノクロメーターや各ミラーの間に設置されたビームモニターである<sup>13)</sup>。これは CVD 成長させた 100  $\mu\text{m}$  ダイヤモンド板をスクリーンとして、ビームによる発光の位置、サイズ、強度を CCD カメラで読み取る。各光学素子の前後でのビームの状態が分かる上に、スクリーンを X 線が透過するので最終的な測定試料上の照射位置も弱いながらも確認できる。このビームモニターを SPring-8 の HAXPES のビームラインでも導入できると便利だろうと感じた。

ビームラインの制御はコントロールハッチ内の PC から行う。ビームラインの装置の制御には TANGO ライブラリを使っており、GUI としては Qt を用いて python でプログラムされた自作のソフトウェアを使っていた。ミラーやモノクロメーターなどの光学系とチェンバーの架台やマニピュレーターが同じような GUI で操作できるので、ユーザーにとって非常に使いやすい仕様になっていた。

また HAXPES のアナライザーは SPECS 製であり、コントロール用のソフトウェアとして同社が提供している Prodigy を用いていた。これを使うとアナライザーを TCP/IP によるリモート制御が可能になる。アナライザーの制御をビームライン制御用のソフトウェアに組み込み、HAXPES に関しては光学系やマニピュレーターと連動させて測定が行えるようになっていた。基本的には 1 つの端末から python を用いて HAXPES 装置を含めて、全ての機器が制御できるため、測定の手順のスキプトなどを作成すれば自動化が容易にできる環境になっていた。

#### 4. 実験装置

P22 には現在 HAXPES の装置として 4 つがあるが、私の滞在期間中には k-microscope、HAXPES、HAXPEEM の 3 つの装置の実験に参加させていただいた。また AP-HAXPES のマシンタイムは 11 月末から 12 月中旬までの予定だったので今回は実験を直接見ることはできなかったが、担当のグループが装置の改良などで来所され作業を行っていたので、いろいろ話を伺うことができた。ここでは実験の内容や結果について詳しいことは記述できないが、この 4 つの装置について、それぞれ実験に参加させてもら

った上で経験したことを報告したいと思う。

HAXPES のアナライザーは実験ハッチの最上流に設置されている。アナライザーは SPECS 社製の 225HV であり検出器には delay line detector (DLD) を使っている。分光可能な光電子のエネルギー範囲は 10.5 keV までであり、また前段に広角取込のプリレンズが付属していて  $\pm 30^\circ$  の取込角を持つ。マニピュレーターは xyz $\theta$  に加えて azimuth 回転が可能な 5 軸のものであり、液体ヘリウムのフローで 30 K 程度までの試料冷却した測定が可能である。

試料は 6 つのホルダをストックできるロードロックを経由して、測定槽に導入するようになっている。ホルダ自体も大きめのブロック状であり、小さな試料ならば複数個を一度に取り付けられる。マニピュレーターには azimuth 回転機構が付いているため 1 つの試料しか設置できないが、複数個の試料を同じホルダに取り付けることで、トランスファーの手間を減らすことが可能である。実際、滞在中の実験では、ホルダに 6 つの試料をのせて、それぞれの試料位置を記憶させた上でスペクトル測定と測定位置の移動をスクリプト化し、複数試料の連続測定を行っていた。始めにパラメーターをセットしておけば測定終了まで自動で測定するので、ユーザーとしては負担の少ない実験になっていた。

k-microscope は電子の運動量空間における分布の二次元マッピングが得られる装置であり、軟 X 線領域であるが UVSOR に導入が予定されているなど、光電子分光の分野で注目されている装置である。P22 の装置はマインツ大学の Schönhense 教授と Elmers 教授が中心となって開発を進めている。今回は両者のマシンタイムが 8 月下旬にあった。マシンタイムはそれぞれで割り振られていたが、中一日のシャットダウンを挟んで 10 日間ほぼ連続して実験を行っていた。k-microscope は 10 月にも 9 日間のマシンタイムが割り振られており、現在このビームラインが力を入れている実験の一つである。

k-microscope 装置は time of flight (TOF) 型のアナライザーで HAXPES 装置の下流にあり、試料とアナライザーを正対させる必要があるため、アナライザーがビームラインに対して  $22^\circ$  傾いて設置されている。k-microscope の検出器として使っている DLD

のカウンtrateが 5 MHz であり、時間に直すと 200 ns になる。一方、PETRA では 40 bunch の運転モードがあり、これのバンチ間隔が 192 ns であるのでちょうど良く合うため、この運転モードに合わせてマシンタイムが割り振られている。また、最近、この装置を用いた論文が *Communication Physics* に発表された。より詳しい情報はこちらを参照して欲しい<sup>14</sup>。

PETRA III を訪れるまでは k-microscope 装置はまだ開発段階であってセットアップなどの作業に時間がかかるのかと思っていたが、装置が前期の実験からそのまま置いてあったこともあり、今回のマシンタイムの時には大がかりな調整を必要とせずにデータが取れていたことには驚いた。しかしながら、傍から見るとデータは取れているようでも、実験の調子はどうかと聞くと、「うまくいってない」という返事が頻繁に返ってきた。運動量空間の像が得られるだけで満足するような装置の開発段階は終わり、次は物理的に面白い試料をどのようにとるかというところまできているようである。

また、今回滞在中のマシンタイムでは行わなかったが、Elmers 教授は 10 月中旬のマシンタイムでスピン検出器を用いたスピン分解測定を予定しているとのことである。その準備のため k-microscope のマシンタイム後もシャットダウンの時間を使って、ベークや装置のセットアップなどの作業を行っていた。

HAXPEEM は 1  $\mu\text{m}$  以下の空間分解能で XPS スペクトルが得られる装置である。また硬 X 線を使うことから検出深度も深く、バルク内部の状態の情報を得ることができる<sup>15</sup>。この装置は P09 ビームラインで実験を行っていた頃からユーリヒ総合研究機構の Schneider 博士が主導して開発しており、今回のマシンタイムでもそのグループの Wiemann 博士が来所されて実験を行っていた。

HAXPEEM 装置は Focus 社の NanoESCA であり、二段の静電半球型アナライザーを備えている。実験ハッチの最下流にあり、ビームに対して斜め上方向に 65° 傾いて設置されている。ビームパスは k-microscope 装置の後方から真空パスをつなぎ、上流から HAXPES、k-microscope の測定槽内を通して HAXPEEM まで届いている。今回の実験では

HAXPES から HAXPEEM への切り替え作業があったが、マシンタイムの初日の朝から始めて、午前中には光学調整が終了し、午後からは HAXPEEM の測定に入ることができた。これは装置が常設されていることで各光学素子や装置のパラメーターが大きく変化しないためあたりがつけやすいのと、前述した各光学素子間に設置されているビームモニタが有効に機能している点が挙げられると思う。また PEEM であるため集光サイズについてそれほど気にかけなくてもよいことも効いているだろう。

HAXPEEM のマシンタイムは 9 月下旬に 6 日間あり、今回はシリコン基板の上に金のパターンが施されている標準試料に、入射エネルギーを変えて分解能や強度などの変化についての測定を行っていた。金のパターンは最小で 1  $\mu\text{m}$  の格子になっており、エネルギー分解した PEEM 画像の測定でそれをギリギリ分解できる程度だった。分解能を引き上げるため、また現状では検出エネルギーによって視野が変わったり中心が動いたりするため、それらを修正するためのレンズパラメーター調整用の基礎データをとっているとのことであった。入射エネルギーを 3.5 keV から 8.5 keV まで 1 日毎に 1 keV 単位で変化させて 6 日間のマシンタイムを終えた。HAXPEEM は測定時間がかかり、特に信号が弱い内殻からの電子を使った場合、明瞭な像を得ようとすると長時間のため込みが必要である。今回の実験は基礎データの取得であったが、それでも潤沢なマシンタイムを配分されていた。これも専用のビームラインならではのスケジュールだと思われる。

AP-HAXPES はストックホルム大学の Nilsson 教授を中心に開発が進められている。滞在期間中に AP-HAXPES のマシンタイムは割り振られていなかったが、ちょうど同グループの Amann 博士と学生が AP-HAXPES の装置の改良を行うために PETRA に来所されたため話を伺う機会ができた。

AP-HAXPES は小径の光電子取り込み口と差動排気部を備えた光電子分光装置である。ベースは Scienta-Omicron 社の R4000-Hipp2 であるが、電子の取り込み口があるフロントコーンに一例に並べた直径 10  $\mu\text{m}$  程度のアパーチャーを設置し、その脇からガスを直接吹き付けられるようにしたことにより大気圧

以上の環境下での光電子分光測定を可能にした。

アパーチャーの列は入射光と同一の方向に並んでおり、斜入射になった時の試料表面のフットプリントをカバーするように並んでいる。また直径と穴の長さの関係も、アナライザーの電子の取り込み角範囲に収まるようになっており、全体がうまく設計されていると感じた。試料温度も液体窒素での冷却とヒーターでの加熱により-150~950°C までの変更が可能であるとしている。実際に CO ガス環境下で、表面温度を変更しながらコバルト表面の測定をしており、温度に依存した反応の変化が検出されているデータを見せていただいた。実際にマシンタイムには立ち会えなかったのは残念であるが、Amann 博士に直接いろいろと伺えたのは幸運だった。

## 5. おわりに

今回、PETRA III の HAXPES 専用のビームライン P22 を訪れて実際に実験などに参加させてもらったが、SPring-8 における HAXPES 実験の進め方について参考になる点がたくさんあった。

まずビームラインにおける状況をモニタするものが多く設置されており、それらが光軸や装置の調整に非常に役に立ち、その労力を抑えられることを再認識した。特に各光学素子の間に設置されているビームモニタはユーザーの切り替わりに伴う装置の入れ替え・再設定の手間を大幅に減らしていた。これらは SPring-8 の HAXPES のビームラインでもぜひ導入したいと思っている。

また、各装置・光学素子の操作のためのインターフェイスの統一も重要であると思われる。P22 では python と Qt を使ったソフトウェアにより 1 つの端末からほとんどの装置に同じような操作感でアクセスできるようになっていた。これは自分を含めて、ビームラインスタッフ以外の慣れていないユーザーにも理解しやすく扱いやすいと思われる。操作方法の見通しが良いと操作を覚えるのも容易になり誤操作も減る。このことはスタッフの負担の軽減にも繋がり利点は大きいと思える。

P22 は、最近設計・建設されたビームラインのため、比較的新しい装置が揃っており、PC も新調されているためインターフェイスの統一のための調整が

容易だったところはあるだろう。一方で、現状の SPring-8 の HAXPES のような時間をかけて装置が導入されてきたビームラインには装置のインターフェイスや PC が旧式のため対応しにくいものがあることは否めないが、それでもそれを吸収してうまくシステムを組むことには手間はかかるが利点が大いと感じた。他にも様々な点があるが、これらの経験を今後のビームラインの運営に活かしていきたい。

## 謝辞

今回、1 ヶ月以上にわたる滞在を快諾していただき、様々なサポートをしていただいた Wolfgang Drube 博士、Christoph Schlueter 博士、Andrei Gloskovskii 博士、また実験や装置について教えていただいた Yury Matveyev 博士、Patrick Lömker 博士に深く感謝いたします。PETRA III の他のビームラインの関係者、スタッフ、また自身の実験があるにもかかわらず色々教えていただいたユーザーの皆様にも感謝いたします。そして、今回の長期出張に関する手続きや所内のサポートを下さった SPring-8 関係者の皆様に深くお礼申し上げます。

## 参考文献

- [ 1 ] [http://photon-science.desy.de/facilities/petra\\_iii/beamlines/p22\\_haxpes/beamline\\_posters\\_etc/index\\_eng.html](http://photon-science.desy.de/facilities/petra_iii/beamlines/p22_haxpes/beamline_posters_etc/index_eng.html)
- [ 2 ] C. Schlueter *et al.*: *Synchrotron Radiation News* **31** (2018) 29-35.
- [ 3 ] M. Degenhardt *et al.*: *Journal of Physics: Conference Series* **425** (2013) 192022.
- [ 4 ] S. Babenkov *et al.*: *Communications Physics* **2** (2019) 107.
- [ 5 ] M. Långberg *et al.*: *Journal of The Electrochemical Society* **166** (2019) C3336-C3340.

高木 康多 TAKAGI Yasumasa

(公財) 高輝度光科学研究センター  
放射光利用研究基盤センター 分光・イメージング推進室  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0803 ext 3722  
e-mail : ytakagi@spring8.or.jp

## SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 四季報

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 会長  
 関西学院大学 研究創発センター

水木 純一郎

前回の SPRUC 四季報では、第 12 回理研・JASRI・SPRUC 三者会合懇談 (2019 年 6 月 18 日に開催) を中心に記述し、その中で SPring-8 シンポジウム 2019 のプログラムの進捗状況について報告いたしました。そのシンポジウムの詳細は、本号で横谷行事幹事から報告されています。シンポジウムの報告では、施設の状況、SPring-8 を活用した先端研究成果の動向はもちろん、SPring-8-II に向けたパネルディスカッションの様子も紹介されていますのでご参照ください。そのため、ここではシンポジウムの期間中に開催されました評議員会、代表機関会議で議論された内容を報告いたします。さらに SPRUC が主催する SPring-8 秋の学校について大和田行事幹事から本号で報告がありますので詳細な様子はそれを参照していただくことにし、ここでは校長として感想を述べたいと思います。

### 1. 評議員会

評議員会は、初日の 2019 年 8 月 30 日、シンポジウムが始まる前の 11 時 30 分から 12 時 30 分まで行われました。各種報告の後、以下に示す 4 つの議題を審議、1 つの懇談事項について議論いたしました。

#### I. 審議事項

##### (1) 会員資格にかかわる会則変更 (会則第 2 章第 4 条第 2 項第 3 項改定) の件

これまで、会員の有効期限は 3 年となっていました。SPRUC の会計年度は 4 月 1 日から翌 3 月 31 日までであることを考慮し、以下のように改定することが承認されました。

- ・会員の有効期限は、SPring-8 または SACLA を利用した日から 3 年とし、最後に利用した日から 3 年後の年度末をもって退会したものとみなされ、

会員資格を失う。ただし、学生として登録している会員については当該有効期限を 1 年とする。

- ・前 1 項のうち、ユーザー登録を必要としない理学研究所のビームラインを利用する利用者は、理化学研究所在職期間から 3 年後の年度末まで会員資格を有する。

これによって、会員資格は年度毎の見直しとなり、会員の有資格期限日に関する混乱が減るとともに、事務局業務の簡素化を実現しました。

##### (2) 評議員候補者推薦の件

これまで評議員選挙の候補者は代表機関からの推薦のみとしており、代表機関から推薦の得られにくい有識者が評議員選挙の候補者となることを可能とする方法を議論しました。その結果以下の方法が承認され、SPRUC 細則第 2 章第 1 条第 2 項が次のように改定されることが承認されました。

- ・評議員候補者は、機関代表者からの推薦者、評議員改選時に任期切れで退任となる評議員、および会長が推薦する者 (5 名以内) から辞退者を除き、15 名以上とする。

これによって、評議員選挙に評議員にふさわしい有識者が候補から漏れるリスクの削減を実現しました。

##### (3) 所属変更に伴う SPRUC 役職者の扱い

ご存知のように SPRUC 評議員兼監事であった雨宮慶幸氏が JASRI の理事長に就任されました。このため雨宮氏から SPRUC の役職辞退の申し出があり後任の評議員を選出する必要が出てきました。しかし、SPRUC の会則では欠員発生時の後任評議員の選出方法が規定されていなかったため、会長案として評議員に欠員が発生した場合は、当該欠員となった



評議員が選出された評議員選挙の次点者以降得票順に就任を打診して、後任者を選出することを提案し承認されました。また、雨宮慶幸氏には、これまでの SPRUC との深い関係に照らし、SPRUC の各種会議へのオブザーバー出席を歓迎したいことを会長として提案し了承されました。

今後とも SPRUC のユーザー組織としての自立性と施設との連携の適切なバランスを維持しながら活動を進めていきたいと思っておりますので、会員の皆様のご協力をお願いします。

#### (4) 次期会長

(本案件は懇談事項でしたが、評議員の同意を得て審議事項となりました)

前回の会長は、新年度(4月)が始まる年の1月の日本放射光学会年会時に開催される評議員会で決定されました。しかし、SPRUC を取り巻く環境に照らし早期の次期会長決定が好ましいと考え、早期の次期会長決定に関し懇談しました。いくつかの学会等の事例では、次期会長という役職を作り、早い段階より会長の補佐をしていただく制度があり、SPRUC でも半年前と言わず1年前に次期会長を選出することも考えてはいかかか、との案も出されました。また、これまで会長候補者は評議員の中から選出されていましたが、以下の資質を備えた方なら評議員である必要はないことを共通認識としました。会長候補者の資質としては、(ア)放射光科学の分野の第一線で活躍する研究者であること、(イ)SPRUC を始め、放射光関係の学会、研究会組織で活躍する研究者であること、(ウ)SPRUC の執行部業務や主要イベントであるシンポジウムの開催等で経験豊富な研究者であること、を確認しました。特にこれ以上の議論がなかったため懇談事項を審議事項に切り替えました。上記会長の資質を満足する候補者として広島大学の木村昭夫教授(現 SPRUC 広報・渉外幹事)が推薦され審議の結果、木村昭夫氏を次期会長と決定いたしました。

2020年3月までの現体制中も木村昭夫氏には次期会長としてコミットしていただき、スムーズな移行に努めたいと考えております。

## II. 懇談事項

### (1) Science Promotion Board (SPB) の設置

2019年3月に開催いたしましたBLsアップグレード検討ワークショップ(WS)で顧問との懇談を持ち、研究の活性化のため分野や産官学の壁を超えたサイエンスを議論する SPB の設置が提案されました。SPRUC では分野融合型研究テーマを募集しており、この具体的なテーマ提案や、またトップダウンではなく、サイエンスの面白さで研究者を巻き込むような委員会として SPB 設置を議論しました。SPB メンバーとしては、放射光の専門外の分野の方や国の科学技術動向にも詳しい方にも加わっていただくことが重要であるという意見を参考に、SPB 設置に向け有馬利用委員会委員長を中心として委員の選任を進めることにいたしました。

私は、SPB の役割は SPring-8 の成果最大化の実現を目指して必要なものを議論し、サイエンスのテーマだけでなく仕組みに関してもアドバイスすること、として活動していただきたいと考えています。

### 2. 代表機関会議

SPRUC には、日本にある放射光施設、SPring-8 のユーザーが多く在籍している大学、国研、等の代表者(あるいはそれに準ずる者)からなる代表機関会議が組織されています。SPring-8 シンポジウムの2日目にあたる8月31日の午前中1時間、当該会議を開催しました。ここでは SPring-8 の近況の報告と、今回特に文科省の SPring-8/SACLA の中間報告を受けて SPring-8 の産学官連携の更なる活性化についてご意見を伺いました。会議では、各組織の産学連携についての取り組みを紹介していただき、産業界が時代を問わず期待する共通の要望は、迅速性、困った時にすぐ使えること(timely 性)が備わっている施設であることがあらためて認識させられました。また、産業界が抱えている課題解決に対して適切な放射光利用技術を紹介できるコーディネーターの重要性と、しかし、実際はその人材が不足していることが議論されました。

現在、SPRUC では HP 上でこのコーディネーター機能を果たしていただける協力者を募集しています。

(<http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc/academi>)



a-industry\_cooperation.html)

協力者として手を挙げていただくと、課題を抱えている企業との共同研究に発展することも考えられ、企業にとっても協力者にとっても win-win の関係が築かれることが期待されます。学术界から多くの方が応募していただけることを期待、希望しています。

### 3. SPring-8 秋の学校

今年で 3 回目を迎えた SPring-8 秋の学校が 2019 年 9 月 8 日から 11 日まで開校されました。SPRUC 会長が校長です。秋の学校の目的、参加者、プログラム等に関する詳細は、大和田行事幹事の「第 3 回 SPring-8 秋の学校を終えて」を読んでいただくこととして、ここでは参加者からのアンケート結果から考えたことを記述したいと思います。アンケート結果から、多くの参加者がプログラム内容に大変満足していることが覗えましたが、その中で基礎講義が充実していたのでグループ講習が身になったという意見とともに、グループ講習時間を基礎講義時間に比べて多くしてもらいたい、という意見が見受けられました。これは参加者が学部学生から大学院博士課程の学生、企業の研究者・技術者という幅広いバックグラウンドを持っているからだと理解しました。このアンケート結果で垣間見えるのは、大学で SPring-8 を利用した実験研究に必要な基礎知識を教える講義があまりなされていないのではないかと思います。そこで大学に対しての提案ですが、施設と大学が協定を結び、秋の学校を大学学部 one semester の授業科目の一部と位置付け、秋の学校開催前のある期間にわたって講義を施設の研究者が大学で実施し、秋の学校でまとめとなる基礎講義とそれに関するグループ講習を実行するというのはいかがでしょうか（実行するためには、単位認定時期等の考慮をしなければいけない点があると思いますが、実際に兵庫県立大学の大学院新設コースでは類似のことを実施しているようです）。そうすれば秋の学校の実施期間を変えずにグループ講習のウエイトを大きくしたプログラムが可能となり、企業から大学学部までの幅広い参加者がより満足のいく学校になるのではないのでしょうか。

SPring-8 秋の学校参加者のアンケートを読ませて

いただくと、開催してよかったと勇気付けられます。この秋の学校が、学生にとっても SPring-8 にとってもさらに魅力あるものにしていきたいと思います。

水木 純一郎 MIZUKI Jun'ichiro

関西学院大学 研究創発センター  
〒669-1337 兵庫県三田市学園 2 丁目 1 番  
TEL : 079-565-7433  
e-mail : mastery@kwansei.ac.jp

## 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	吾郷日出夫	SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC)
		編集幹事 (理化学研究所)
	大河内拓雄	分光・イメージング推進室
	大和田成起	XFEL 利用研究推進室
	奥村 英夫	タンパク質結晶解析推進室
	坂尻佐和子	利用推進部
	関口 博史	回折・散乱推進室
	西川 健一	利用推進部
	本間 徹生	産業利用推進室
	松本 崇博	情報処理推進室
	松本 悠史	安全管理室
	山鹿 光裕	光源基盤部門
	山口 由紀	企画室
	渡部 貴宏	光源基盤部門

(以上、敬称略五十音順)

事務局	富松 亮介	利用推進部
	平山 明香	利用推進部
	山本 律	利用推進部

## **SPring-8/SACLA 利用者情報**

Vol.24 No.4 November 2019

### **SPring-8/SACLA Information**

発行日 2019年10月25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)



秋薫るキャンパスに、風の舞子が甘い香りをお届けに

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<sup>こうと</sup>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/>