

SPring-8/SACLA

INFORMATION 利用者情報



ISSN 1341-9668 SPring-8 Document D2023-015

Vol.28 No.4
Autumn 2023

SPring-8/SACLA Information

目次 CONTENTS

理事長室から インテグリティ
Message from President Integrity

(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 343

1. 最近の研究から／FROM LATEST RESEARCH

放射光で見た甘味・うま味受容体T1rの構造解析～
Structural analysis of taste receptor type 1 by synchrotron

岡山大学 学術研究院医歯薬学域
Faculty of Medicine, Dentistry and Pharmaceutical Sciences, Okayama University

山下 敦子
YAMASHITA Atsuko 344

(12th SPRUC Young Scientist Award 受賞 研究報告)

高エネルギーX線回折を用いた価電子軌道の直接観測

Direct observation of valence electron orbital using high energy X-ray diffraction

東京大学 大学院新領域創成科学研究科
Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo

鬼頭 俊介
KITOU Shunsuke 349

(12th SPRUC Young Scientist Award 受賞 研究報告)

柔軟な多孔性配位高分子の動的挙動のその場観察による解明

Elucidation through in situ observation of the dynamic behavior of flexible porous coordination polymers

京都大学 物質-細胞統合システム拠点 (iCeMS)
Institute for Integrated Cell-Material Sciences, Kyoto University

大竹 研一
OTAKE Ken-ichi 355

2. 研究会等報告／WORKSHOP AND COMMITTEE REPORT

9IDMRCS 会議報告

Report on the 9th International Discussion Meeting on Relaxation in Complex Systems (9IDMRCS)

(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
Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI

筒井 智嗣
TSUTSUI Satoshi 362

15th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (ICESS-15) 会議報告

Report on 15th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (ICESS 15th)

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

安野 聡
YASUNO 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
Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI

木下 豊彦
KINOSHITA Toyohiko 364

第26回国際結晶学連合会議 (IUCr 2023) 報告

Conference Report: 26th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography (IUCr2023)

(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 構造生物学推進室
Structural Biology Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI

坂井 直樹
SAKAI Naoki 369

第37回メスバウアー効果の応用に関する国際会議 ICAME2023 会議報告

Conference Report: ICAME2023 (XXXVII International Conference on the Applications of the Mössbauer Effect)

(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 精密分光推進室
Precision Spectroscopy Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI

永澤 延元
NAGASAWA Nobumoto 373

第9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 9th 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
Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI

筒井 智嗣
TSUTSUI Satoshi 376

第20回SPring-8産業利用報告会

The 20th 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・産学連携推進室
Industrial Application and Partnership Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI

佐野 則道
SANO Norimichi 378

第7回SPring-8秋の学校を終えて

The 7th 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) 日本原子力研究開発機構 物質科学研究センター
Materials Sciences Research Center, Japan Atomic Energy Agency

松村 大樹
MATSUMURA Daiju 382

SPring-8 シンポジウム2023 報告

SPring-8 Symposium 2023 Report

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) /
近畿大学 理工学部 理学科 化学コース
Department of Science, Faculty of Science and Engineering, Kindai University

杉本 邦久
SUGIMOTO Kunihisa

大坂大学 大学院基礎工学研究科 Graduate School of Engineering Science, Osaka University (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 (国) 物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター Center for Basic Research on Materials, National Institute for Materials Science 東京大学 大学院工学系研究科 Graduate School of Engineering, University of Tokyo (国) 理化学研究所 放射光科学研究センター SPring-8 Center, RIKEN	関山 明 SEKIYAMA Akira 簗内 俊毅 YABUCHI Toshinori 永村 直佳 NAGAMURA Naoka 小林 正起 KOBAYASHI Masaki 香村 芳樹 KOHMURA Yoshiki	387
3. SPring-8/SACLA 通信／SPring-8/SACLA COMMUNICATIONS		
2024A 期 SPring-8 利用研究課題募集について Call for 2024A 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		394
第 51 回 (2023B) SPring-8 利用研究課題の採択について The Proposals Approved for Beamtime in the 51st Research Term 2023B		
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		395
2023B 期 採択大学院生提案型課題 (長期型) の紹介 Brief Description of Long-term Graduate Student Proposals Approved for 2023B		
(公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 User Administration Division, JASRI		400
第 50 回共同利用期間 (2023A) において実施された SPring-8 利用研究課題 2023A 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		402
2023A 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 2023A 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		407
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		408
論文発表の現状 Statistics on Publications Resulting from Work at SPring-8/SACLA		
(公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部 User Administration Division, JASRI		411
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		415
2023A 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 2023A		
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		432
HAXPES II ビームライン BL46XU の現状 Current Status of Hard X-ray Photoelectron spectroscopy II beamline BL46XU		
(公財) 高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター 産業利用・産学連携推進室 Industrial Application and Partnership Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI	安野 聡 YASUNO Satoshi ソ オッキュン SEO Okkyun 高木 康多 TAKAGI Yasumasa 保井 晃 YASUI Akira	434
利用系活動報告 放射光利用研究基盤センター 分光推進室 動的分光イメージングチーム Activity Reports - Spectroscopic Imaging Team, Spectroscopy 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 分光推進室 Spectroscopy Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI	河村 直己 KAWAMURA Naomi	439
4. 談話室・ユーザー便り／USER LOUNGE・LETTERS FROM USERS		
SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 四季報 SPRUC Communications		
SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 会長／筑波大学 数理解物質系物理学域 エネルギー物質科学研究センター Faculty of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba	西堀 英治 NISHIBORI Eiji	448

インテグリティ

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

近年、研究活動の不正行為への対応として、研究コンプライアンスの確保が研究者及び大学・研究機関に強く求められている。昨今は、これに加えて、研究インテグリティの確保が求められるようになった。「研究インテグリティとは、研究活動の国際化・オープン化に伴う新たなリスクに対して、研究活動の透明性を確保し、説明責任を果たすといった新たな規範」¹⁾、または、「従来の研究不正防止にとどまらず、「利益相反」開示の対象を、民間企業のみならず外国や機関との関係に拡張し、新興科学技術の生み出す知識を適切に管理する」²⁾、と言われる。大学・研究機関等において、研究インテグリティに対する具体的な取り組みが議論されていて、世界最高峰の研究施設から生まれるデータや情報を適切に管理して利用者が安心して研究できる創造の場となるように、JASRI としても早急に検討すべき事柄であると考えている。

ところで、ここでは「研究」という冠を除いた、「コンプライアンス」と「インテグリティ」³⁾について、少し述べてみたい。「コンプライアンス」とは規則遵守であり、人間が組織・社会内でのルールを守ることにより相克なく共生する上で重要であり、多くの企業で取り入れられてきた。しかしながら、現実には、それが旨く機能しているようには思えない。アリバイ作りのための資料作り、リスクがあるならやらない、誰が責任をとるのか？等々の働く人のモチベーションの低下に繋がる「コンプラ疲れ」という言葉も散見される。コンプライアンスには、服従、追従という意も含まれるため、コンプライアンスを守られる側は、「押しつけられた」という否定的・受身的・他律的・消極的なイメージを抱きがちで「自分ごと」として考えない傾向があり、コンプライアンスを他者に当てはめ「あげ足取り」の材料に用いられることすらあり、手垢がついてしまった感がある。

他方、「インテグリティ」という語は、「コンプライアンス」の規則遵守というコンセプトを持ちつつ、それと対比して肯定的・能動的・自律的・積極的なニュアンスがある。「誠実」「正直」「高潔性」「一体性のあること」「全体性」と和訳されているが、リーダーシップ、勇気、

コミュニケーションの意も含まれていると云われている。最近は組織理念としても用いられていて、コカ・コーラやマクドナルドは、インテグリティを「誰も見ていなくても正しいことをする」、ダイムラー・グループは「誰もが心に持っている善悪の羅針盤」と定義している。日本語の「良心」に相当するといえる。花王ではインテグリティを「正道」と表現している。

JASRI の経営を預かる立場から、放射光研究や JASRI のあるべき将来像を毎週の幹部打合せの中で討議しているが、次のようなタームがよく取り交わされる。参加意識の向上、意識改革、「自分ごと」として考える、相互作用（双方向の関わり）、心を込める、高い志を持つ、積極的姿勢、最後までやりきる姿勢、利用者に認められる貢献、やり遂げる決意、情熱と誇りを持つ、等々。これらのタームに共通する思いを何か一言で言い表せないかと思いを巡らせていた。私は「インテグリティ」の中にその可能性を見い出せたと感じている。すなわち、「インテグリティ」の言葉のもつ誠実（心を込める）、正直（誇り）、高潔性（高い志）、一体性（双方向の関わり）、全体性（最後までやりきる姿勢）というコンセプトと、肯定的・能動的・自律的・積極的なニュアンス。新しい言葉を用いれば物事が簡単に変化するとは思わない。しかし、言葉の持つ力は大きい。

今後、折に触れ、「インテグリティ」という言葉のコンセプトを皆さんと共有し、具体的なアクションに結びつけて行きたいと思っている。

1) 研究インテグリティ、文科省サイト

https://www.mext.go.jp/a_menu/kagaku/integrity/index.html

2) 「研究インテグリティ」という考え方の重要性、梶田隆章（日本学術会議会長）

[https://www.jstage.jst.go.jp/article/tits/27/9/27_9_65/_pdf/-char/ja#:~:text=](https://www.jstage.jst.go.jp/article/tits/27/9/27_9_65/_pdf/-char/ja#:~:text=pdf/-char/ja#:~:text=)

3) 「インテグリティ - コンプライアンスを超える組織論」

中山達樹著、中央経済社

放射光で視た甘味・うま味受容 ～味覚受容体 T1r の構造解析～

岡山大学 学術研究院医歯薬学域
山下 敦子

Abstract

味覚は、日々の食事で食物に含まれる化学物質を感知する生理反応である。味覚の生理反応は、食物中の味物質を味覚受容体タンパク質が結合し、生体内にシグナル伝達するところから始まる。一方、これらの仕組みの理解に欠かせない味覚受容体の構造は、近年まで明らかになっていなかった。筆者らは以前、SPring-8 を用いて、ヒトの甘味受容体やうま味受容体に該当するメダカ T1r2a/T1r3 の味物質結合領域の構造を、味覚受容体として初めて明らかにした。さらに最近、メダカの受容体に限らず、我々ヒトも含めた幅広い動物が持つ T1r3 に、塩化物イオン結合部位が存在することを、SPring-8 を用いた実験で見出し、実際に塩化物イオンが T1r を介して味覚で感知されることを解明した。本稿では、我々にとって身近な現象である甘味やうま味の受容について、SPring-8 での放射光実験から見てきたことを報告する。

1. はじめに

味覚では、食物の中に含まれる化学物質を、甘味・うま味・苦味・酸味・塩味の基本の5つの味に分類して知覚する。我々の口腔内には、これらの味を呈する化学物質を感知する味覚受容体が存在し、味物質を結合して、生体内にシグナル伝達する役割を担っている^[1]。味覚受容体は、基本五味それぞれに存在し、例えば甘味受容体やうま味受容体は、Taste receptor type 1 (T1r) と呼ばれるタンパク質で構成されている。ヒトでは、T1r2/T1r3 のヘテロ二量体が甘味受容体として機能し、糖などの甘味物質の受容を担う。また、T1r1/T1r3 ヘテロ二量体がうま味受容体として機能し、アミノ酸や核酸などのうま味物質の受容を担う。T1rはクラスC型Gタンパク質共役型受容体(GPCR) と呼ばれるタンパク質に分類されており^[2]、細胞外に大きなリガンド結合ドメイン(LBD)を備え、このLBDで糖・アミノ酸・核酸などの主要な味物質を結合し、シグナル伝達することが報告されていた。一方、T1rの味物質認識の仕組みについては、T1rの構造解明が遅れていたため、近年まで明らかになっていなかった。

T1rの構造解明が阻まれていた理由は、構造解析に用いる試料調製のための組換え発現が、極めて困難なことであった。実際、ヒト T1r の構造は、いまだに解明されていない。一方、上述した基本五味に分類する

味覚受容システムは、脊椎動物で保存されており、T1r も、ほとんどの動物に存在する。筆者らは以前、さまざまな動物が持つ T1r の発現スクリーニングを実施し、メダカが持つ味覚受容体・T1r2a/T1r3 の LBD の試料調製を達成して^[3]、SPring-8 を利用して結晶構造を解明した^[4]。この構造は、T1r だけでなく味覚受容体として初めての構造報告例となり、現在でも報告されている唯一の T1r 構造である。さらに最近、メダカ T1r3 に塩化物イオン (Cl⁻) が結合することを SPring-8 での実験から明らかにし、メダカだけでなくヒトも含めた幅広い動物の T1r3 に Cl⁻ 結合部位が存在しており、Cl⁻ の結合によって味覚を引き起こすことを解明した^[5]。本稿では、以前報告した構造決定から最近報告した Cl⁻ 結合解析まで、SPring-8 を利用して行った T1r 構造解析と、そこからわかってきた味覚受容との関連を概説する。

2. 実験方法

メダカ由来 T1r2a/T1r3LBD は、ショウジョウバエ S2 細胞を用いて発現し、タンパク質に融合した FLAG タグを利用して、抗 FLAG タグ抗体を用いたアフィニティークロマトグラフィーで、細胞培養上清から精製した。X 線溶液散乱実験のための試料調製では、得られた精製タンパク質をさらにゲルろ過カラムクロマ

トグラフィーで精製した。結晶化のための試料調製では、精製タンパク質のFLAG タグ配列をプロテアーゼ (Factor Xa) で切断除去し、さらに糖鎖をグリコシダーゼ (Endo H) で切断除去した。ついで、抗メダカ T1r2a 抗体より調製した Fab 断片をタンパク質に結合させ、ゲルろ過カラムクロマトグラフィーを行なって、T1r2a/T1r3LBD-Fab 複合体を精製した。いずれの場合でも、精製バッファーに各種アミノ酸を添加する (あるいはしない) ことで、目的とする味物質結合状態 (または非結合状態) のタンパク質試料を調製した。

X 線溶液散乱実験は、BL45XU にて、波長 1 Å の X 線を用いて実施した。L-グルタミン存在下およびアミノ酸非存在下の T1r2a/T1r3LBD 溶液についてそれぞれ測定を行い、PRIMUS を用いて解析したギニエプロットから回転半径を、GNOM を用いて解析した距離分布関数から粒子内最大距離を算出した。

結晶化は、T1r2a/T1r3LBD-Fab 複合体を用いて、PEG1000 と PEG500 を沈殿剤とし、シッティングドロップ蒸気拡散法により行った。ただし、Br 結合結晶については、NaCl 存在下で結晶を作製したのち、結晶化溶液中の NaCl を NaBr に置換した溶液をソーキングして、結晶中の Cl を Br に置換した。結晶の X 線回折強度データは、BL41XU にて、検出器として

PILATUS3 6M (DECTRIS) を用いて収集した。L-グルタミン (Gln)、L-アラニン (Ala)、L-アルギニン (Arg)、L-グルタミン酸 (Glu)、グリシン (Gly) 結合状態結晶は波長 1.0 Å、L-セレノメチオン結合状態結晶は波長 0.979 Å、Br / L-グルタミン結合状態結晶は波長 0.9194 Å、Cl / L-グルタミン結合状態結晶は波長 1.9 Å の X 線を用いてデータ収集を行った。得られたデータは HKL2000 または XDS を用いて処理し、Phaser を用いて、代謝型グルタミン酸受容体 LBD (PDB ID: 2E4U) および Fab 断片 (PDB ID: 1A6T) 構造を利用して、分子置換法により位相を決定した。

3. T1r2a/T1r3 へのアミノ酸結合とその作用^[3,4]

T1r2a/T1r3LBD は結晶化が困難で、当初得られた結晶の回折能も高いものではなかった。そこで、BL41XU の高輝度 X 線を利用することで、2.2 Å 分解能の回折強度データを収集し、立体構造を決定できた^[4] (図 1A)。T1r2a/T1r3LBD の結晶は、同受容体に対する味物質である L-アミノ酸存在下で作製し、実際、味物質認識を担うと予想されていた T1r2a に L-アミノ酸が結合していることが確認できた。一方、T1r3 の該当する部位にも、何らかの物質が結合していることを示す電子密度が観察された。T1r3 は、甘味受容体

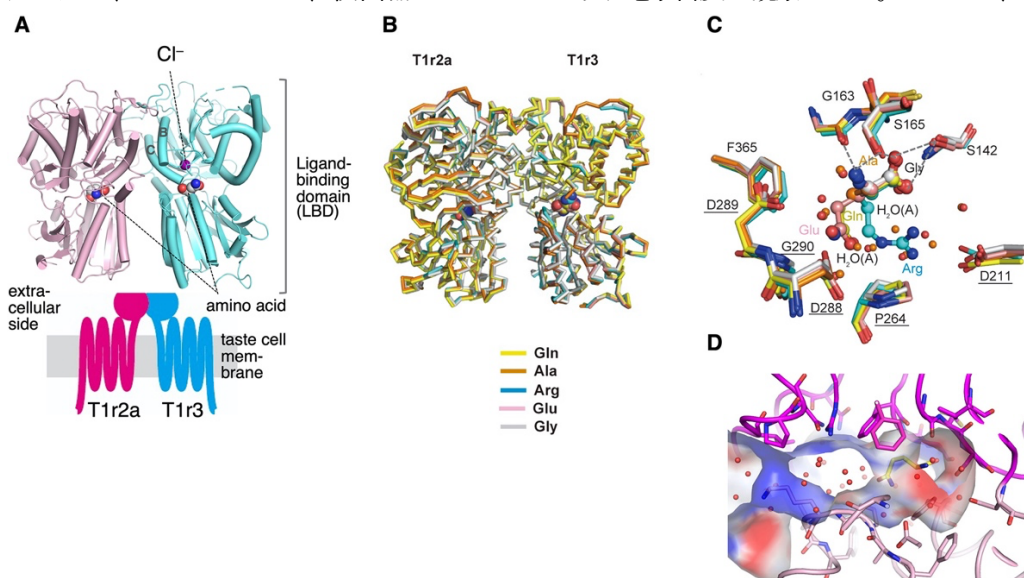


図 1 メダカ T1r2a/T1r3LBD の結晶構造。(A) T1r2a/T1r3 構造の概略図。LBD 部分は明らかになった結晶構造を示す。(B) L-グルタミン (Gln)、L-アラニン (Ala)、L-アルギニン (Arg)、L-グルタミン酸 (Glu)、グリシン (Gly) 結合 T1r2a/T1r3LBD 構造の重ね合わせ。(C) L-グルタミン、L-アラニン、L-アルギニン、L-グルタミン酸、グリシン結合 T1r2a リガンド結合部位の重ね合わせ。図中のアルファベットと数字は T1r2a 中の各アミノ酸残基のアミノ酸の 1 文字表記と残基番号を示す。(D) L-グルタミン結合 T1r2a のリガンド結合ポケットの構造。青、赤はそれぞれポケット表面の正、負の静電ポテンシャルを示す。図は文献 4, 5 より改変転載。

T1r2/T1r3 やうま味受容体 T1r1/T1r3 の共通サブユニットであり、それまで機能は明確になっていなかった。そこで、糖やアミノ酸など T1r の味物質として知られる物質について、BL41XU で異常分散効果を確認可能な核種を含む誘導体を添加して結晶を作製し、異常分散ピークの有無を指標にそれらの結合を調べた。その結果、Se を含有する L-セレノメチオニン存在下の結晶において、T1r3 に明瞭な異常分散ピークが確認できたことから、T1r3 も L-アミノ酸を結合することが明らかとなった。

T1r2a/T1r3LBD の構造は、クラス C 型 GPCR に共通する、Venus flytrap (ハエトリグサ) モジュール構造とよばれる、2つのサブドメインからなる構造をとっていた。そして、味物質となる L-アミノ酸は、この 2つのサブドメインの間の隙間に存在する結合部位に結合していた。興味深いことに、L-グルタミン、L-アラニン、L-アルギニン、L-グルタミン酸、グリシンといった、大きさ・電荷・疎水性度などの物理化学的性質の異なるさまざまな L-アミノ酸は、いずれも、T1r2a、T1r3 それぞれのサブユニットのアミノ酸結合部位におさまっており、どのアミノ酸が結合している、T1r2a/T1r3LBD は同じコンフォメーションをとっていることが判明した (図 1B, C)。

これらのアミノ酸の結合が、どのようにシグナル伝達を引き起こすのかを明らかにするため、アミノ酸非結合状態の構造解析を試みた。しかし残念ながら、アミノ酸非結合状態では結晶を得ることができなかった。そこで、アミノ酸存在下と非存在下における T1r2a/T1r3LBD 溶液の X 線散乱実験を行い、構造の

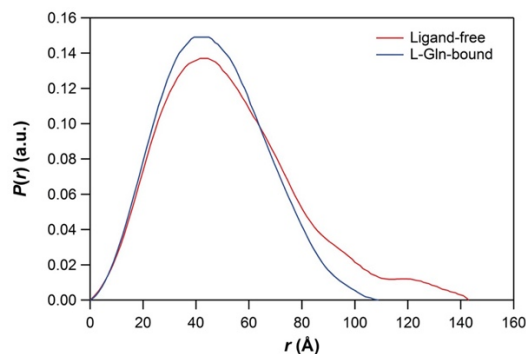


図2 メダカ T1r2a/T1r3LBD の X 線溶液散乱実験から求めた距離分布関数。赤色はアミノ酸非存在下、青色はアミノ酸 L-グルタミン存在下での実験結果を示す。図は文献 3 より転載。

違いを解析した^[3]。その結果、アミノ酸非存在下とくらべ、アミノ酸存在下の T1r2a/T1r3LBD の回転半径や粒子内最大距離は小さく、結晶構造から見積もられる大きさと同程度であることが明らかとなった (同実験は分子科学研究所の Nano-Viewer システムを用いて再現性を確認した; 図 2)。したがって、T1r2a/T1r3LBD はアミノ酸の結合に伴い、広がった構造からコンパクトな構造に変化することがわかった。他のクラス C 型 GPCR でも、アゴニストの結合により、LBD の二量体間が広がった構造から、コンパクトな構造に変化し、この構造変化がシグナル伝達を引き起こすと考えられている^[2]。これらの結果から、T1r についても、アミノ酸が結合することで同様の構造変化が起こっているものと考えられた。

T1r2a や T1r3 のアミノ酸結合部位の構造を調べると、アミノ酸の多様性を生み出す置換基部分を受け入れるポケットは、容量が大きく、モザイク状の電荷分布を示しており、大きさや電荷にかかわらず多様なアミノ酸が結合できる構造となっていた。一方、アミノ酸の共通構造である α -アミノ基やカルボキシ基は、共通した水素結合ネットワークで結合し、この部分の結合が LBD の構造変化に重要であることがわかった^[4]

(図 1C, D)。以上、放射光実験からわかったことと、実際の味覚との関連を考察すると、T1r2a/T1r3LBD の構造は、それまでに構造が報告されていた神経伝達物質などの生理活性物質の受容体とは異なる、味覚受容体特有の機能を示していることがわかった。生理活性物質受容体は、特定の生理活性物質を特異的に認識する機能が求められる。一方味覚では、食物に含まれる幅広い味物質を、限られた種類の受容体で認識する必要があることから、幅広い基質特異性を持つ受容体が多く見られる。例えばヒトの甘味受容体 T1r2/T1r3 が、単糖、二糖からオリゴ糖、さまざまな化学構造を持つ人工甘味料、甘味タンパク質まで、さまざまな物質に応答することもその一例である。実際、メダカ T1r2a/T1r3 は、幅広い L-アミノ酸に結合・応答することがわかっている^[4, 6]。今回放射光で見た T1r2a/T1r3LBD のアミノ酸結合部位は、幅広いアミノ酸を結合し、シグナル伝達につなげる仕組みをうまく説明できる構造を備えていた。

4. T1r2a/T1r3 への塩化物イオン結合とその作用^[5]

上述したアミノ酸結合状態の結晶構造解析を進めていた過程で、T1r3 内のアミノ酸結合部位の上部に、アミノ酸の他に、水分子またはイオンと思われる物質が結合していることが見出された。結合距離や電子密度、結合部位を構成するアミノ酸の性質から、その物質が Cl⁻ なのではないかと推測された (図 1A)。

そこでまず、この物質が本当に Cl⁻ であるかどうかを確認するために、タンパク質結晶化に用いた溶液中の Cl⁻ を Br⁻ に置換した結晶を作製した。Br⁻ であれば、BL41XU で実験可能な波長域で異常分散効果を確認することができるからである。実際に、Br⁻ の特性吸収端近傍波長でデータ収集を行ったところ、元の結晶では Cl⁻ と思われる物質が結合していた部位に、Br⁻ 由来と思われる異常分散ピークが明確に確認され、この部位に確かにハロゲンイオンが結合できることを確認した (図 3A)。

さらに、元の結晶では実際に Cl⁻ が結合しているのかを確認するため、Cl⁻ 結合状態結晶の回折強度データを、BL41XU で実験可能な範囲としては最長の波長となる 1.9 Å の X 線を用いてデータ収集した。この波長は、Cl⁻ の特性吸収端波長 (4.39 Å) からは離れているものの、Cl⁻ も弱い異常分散シグナルを示すことが期待できる。一方で、Cl⁻ だけではなく、タンパク質結晶に含まれる S や Ca など同程度に弱いシグナルを示すことも予想される。そこで得られたデータを慎重に解析したところ、T1r3 に結合している Cl⁻ 位置に異常分散ピークが確認され、その他に確認されたピークは全て、タンパク質のメチオニン残基やシステイン残基の S 原子に由来するものであることがわかった。この結果は、Photon Factory の BL-1A にて、さらに長

波長の 2.7 Å の X 線を用いた実験でも、再現性を確認することができた (なお、原著論文^[5]では、より長波長で測定した Photon Factory での実験データを報告している; 図 3B)。先ほどのハロゲンイオン結合実験結果とも考え合わせると、T1r3 には確かに Cl⁻ が特異的に結合する部位が存在することが明らかになった。

メダカ T1r3 に結合している Cl⁻ には、Thr105 の側鎖の水酸基と、Gln148-Ser149 の主鎖アミド基が配位していることがわかった (図 4)。調べると、Thr105 に相当するアミノ酸と、Gln148-Ser149 近傍のアミノ酸配列は、メダカだけでなく、ヒトも含めたほとんどの動物の T1r3 に保存されていることがわかり、これらの動物の T1r も Cl⁻ 結合能を有することが示唆された。

放射光実験で初めて見つかったこの Cl⁻ 結合が、T1r にどのような作用をもたらすかについては、知る限り

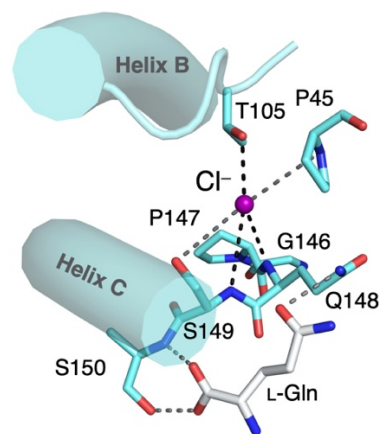


図 4 メダカ T1r3 の Cl⁻ 結合部位とアミノ酸結合部位。図中のアルファベットと数字は T1r3 中の各アミノ酸残基のアミノ酸の 1 文字表記と残基番号を示す。Helix B, C は T1r2a/T1r3LBD の二量体界面を構成するヘリックス構造 (図 1A 図中に B, C と示すヘリックス構造)。図は文献 5 より転載。

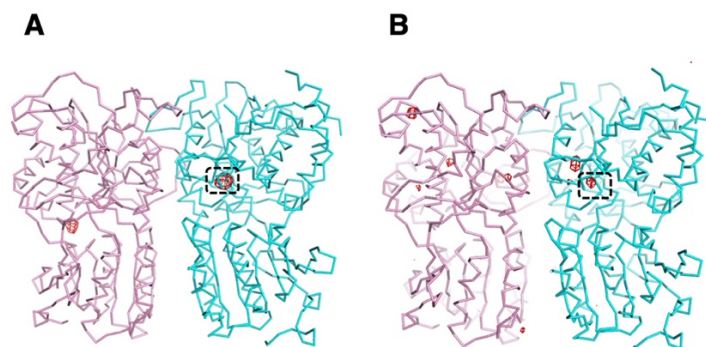


図 3 異常分散効果を利用したメダカ T1r2a/T1r3LBD におけるイオン結合解析。(A) Br⁻ 結合結晶。(B) Cl⁻ 結合結晶。赤色の電子密度はいずれも 4.5 rmsd の異常分散差フーリエピークを示す。図は文献 5 より転載。

において、これまで調べられた例がなかった。そこでまず、メダカ T1r2a/T1r3LBD を用いて調べたところ、Cl⁻は、結晶状態だけでなく溶液状態のタンパク質にも確かに結合し、結合によって LBD の構造変化を引き起こすことがわかった。さらにこの構造変化は、アミノ酸などの従来の味物質が引き起こすものと同様の変化であることが示唆された。実際、Cl⁻の結合部位も、味物質アミノ酸の結合部位も、シグナル伝達と関連する構造変化が起きる LBD 二量体界面の近傍にあり (図 1A、図 4)、これらの結合と解離が二量体構造変化を引き起こすものと考えられる。

以上、放射光実験からわかったことと、実際の味覚との関連を考察すると、食塩の味覚受容に T1r が関与する可能性が考えられた。塩味は、食塩の成分である Na⁺が塩味受容体 ENaC に作用して引き起こされる味覚であると理解されている^[1]。一方、ENaC が Na⁺に応答する濃度域よりも低い数 mM 程度の食塩水は、甘いと感じられることが報告されていた^[7]。上述したように、Cl⁻の結合部位が動物種を超えて T1r3 に保存されていること、低濃度食塩水の甘味はヒト甘味受容体 T1r2/T1r3 の阻害作用を持つギムネマ酸で阻害されること^[7]、さらに上述したメダカ T1r2a/T1r3 に対する Cl⁻の作用濃度 (EC₅₀ 値) が約 1 mM 程度であることを考え合わせると、食塩の塩味成分・Na⁺の対アニオンである Cl⁻は、実は甘味やうま味の受容に関わる T1r で感知されている可能性が考えられる。実際我々も、マウスを用いた検証実験を行い、T1r からのシグナルを伝達する味神経は、Cl⁻のみの添加でも応答を示すこと、マウスは純水よりも Cl⁻を含む水を好んで多く飲むこと、これらの反応・行動は、T1r の阻害薬で阻害されることを確認した^[6]。このことから、少なくともマウスでは、Cl⁻は実際に T1r を介して味覚で感知されることが証明された。

5. おわりに

我々は光を使って物を見る視覚によって、そのものがどういふもので、どういふことが起こっているのかを理解する。一方同じ五感の中でも、味覚は、化学物質を認識する化学感覚として知られる。今回の一連の実験では、日々経験しているはずの味覚においても、

実際に放射光という光を使って見ることで、初めて明らかになる、あるいは実は経験しているはずの現象の仕組みがわかる、という結果がもたらされた。このことは、放射光を利用した構造研究の重要性をあらためて感じさせる。味覚受容には、まだまだ解明されていない様々な謎が多く残っている。今後も、放射光利用と他の手法による解析を連関した受容体構造研究を進めていくことで、生命を支える摂食と大きな関わりを持つ味覚受容の仕組みを明らかにしていきたい。

本研究は BL41XU、BL45XU を利用し、理研ビームライン利用研究課題 No. 20120003、SPRING-8 利用研究課題 No. 2013A1162、2013B1113、2014A1085、2014A1859、2014B1147、2014B2021、2015A1074、2015B2074、2016A2534 にて実施しました。また、理研・南後恵理子博士、Nipawan Nuemket 博士、芦川雄二博士 (研究当時)、岡山大学・安井典久博士、渥美菜奈子氏をはじめとする多くの共同研究者のご協力のもとに実施しました。放射光実験について多大なご支援をいただいた JASRI・熊坂崇博士、長谷川和也博士、理研・山本雅貴博士、引間孝明博士をはじめとするビームラインサイエンティストの方々、共同研究者の方々にこの場を借りて心より感謝申し上げます。

参考文献

- [1] Taruno, A. *et al.*: *Pflugers Arch.* **473** (2021) 3-13.
- [2] Ellaithy, A., Gonzalez-Maeso, J., Logothetis, D. and Levitz, J.: *Trends Biochem Sci.* **45** (2020) 1049-1064.
- [3] Nango, E., *et al.*: *Sci Rep.* **6** (2016) 25745.
- [4] Nuemket, N. *et al.*: *Nat Commun.* **8** (2017) 15530.
- [5] Atsumi, N. *et al.*: *eLife* **12** (2023) e84291.
- [6] Yoshida, T. *et al.*: *PLoS One* **14** (2019) e0218909.
- [7] Bartoshuk, L.M., Murphy, C. and Cleveland, C.T.: *Physiol Behav.* **21** (1978) 609-613.

山下 敦子 YAMASHITA Atsuko

岡山大学 学術研究院医歯薬学域
〒700-8530 岡山県岡山市北区津島中 1-1-1
TEL : 086-251-7974
e-mail : a_yama@okayama-u.ac.jp

(12th SPRUC Young Scientist Award 受賞 研究報告)

高エネルギーX線回折を用いた価電子軌道の直接観測

東京大学 大学院新領域創成科学研究科

鬼頭 俊介

Abstract

科学技術の発展において「観測」は最も強力な実験手法であり、新しい観測技術が新たなサイエンスの扉を切り拓いてきた。物質科学においては、原子は最小の構成単位であり、物性は原子を構成する電子の空間分布（軌道）状態によって支配されている。従って、「電子軌道の観測」は物性を理解する最も直接的な実験手法と言える。我々は電子軌道の観測手法として、内殻電子と価電子のX線散乱能の違いに着目することで、単結晶X線回折データから物性を担う価電子の情報のみを効率的に抽出できるコア差フーリエ合成（core differential Fourier synthesis; CDFS）法による電子密度解析手法を提案した。特に、SPring-8 で得られる高強度・高エネルギーX線を用いることで、サブオングストロームの空間分解能で価電子密度分布を可視化することに成功した。本稿ではCDFS解析によって得られた価電子密度観測に関する最近の成果について紹介する。

1. はじめに

物質の性質は原子を構成する電子の状態によって支配されている。X線は物質中の電子と相互作用し、その電子状態を調べることができるため、物質科学の研究において不可欠なツールである。X線を用いる数多くの実験手法の中でX線回折は最も有名で様々な分野の研究者に利用されている手法の一つである。分析手法として広く認知されているX線回折法は、その簡便さから、物理学・化学・生命科学・材料科学などの様々な分野で重宝されている。X線回折は原子の持つ電子の散乱現象に基づいており、結晶内の原子の種類とその配列状態（結晶構造）を同定することができる。結晶構造解析では、実験で得られるX線回折強度を基に、仮定した構造モデルの原子座標や原子変位パラメータ（通称、温度因子）などを最小二乗法によって精密化する。最近では、実験室系の単結晶X線回折装置の発展は目覚ましく、良質な単結晶さえ準備すれば、測定や構造解析のほとんどが自動化されており、（X線回折の原理を知らなくても、）実験終了と同時に結晶構造の情報を得ることができる。

では、X線回折実験において、放射光を利用するメリットはなんだろうか？1つ目のメリットは強度である。放射光の非常に明るい光を用いることで、実験室で使用される特性X線とは桁違いに強い回折強度を得ることができる。これによって、結晶中の微小

な構造変化、短距離秩序、元素欠損、元素置換などを高精度に決定することができる。

2つ目のメリットは高いエネルギーである。実験室系では、Agの特性X線を用いたとしても、そのエネルギーは22keV程度である。一方、大型放射光施設SPring-8の単結晶X線回折用ビームライン（BL02B1）では60keV程度の高エネルギーX線を利用することができる。ブラッグの法則（ $n\lambda = 2d \sin \theta$ ）から分かるように、高エネルギー（短波長 λ ）のX線を用いることで、面間隔 d が小さい回折強度の情報を得ることができる。ただし、通常の構造解析において、高エネルギーX線を用いることで得られる恩恵はそれほど多くない。もちろん、より多くの回折ピークの強度情報が得られるため、解析における構造パラメータの収束度や信頼度は向上するものの、解析結果が劇的に変化することはない。では、放射光は実験室系に比べて単に定量性の高い実験や解析ができるだけであろうか？この疑問に対して、本稿ではSPring-8の高強度・高エネルギーX線を最大限に活かした価電子密度観測手法について紹介する。この手法を用いることで初めて得られた、実験室系の単結晶X線回折とは質的に異なる最近の研究成果について、いくつかの物質を例に挙げて紹介する。

2. コア差フーリエ合成法による価電子密度観測手法の提案

電子軌道とは実空間における電子の存在確率に対応し、物性を規定する最小単位である。原子核周りの電子の中でも、物性に寄与するのは最外殻の軌道を占有する価電子である。従って、価電子密度分布の実空間観測は物性を理解するために非常に有効な手段である。

X線回折で得られる強度は結晶中の全電子密度のフーリエ変換に対応する。従って、原理的には無限の回折ピークの強度を逆フーリエ変換することで、電子密度分布を観測できるはずである。しかし、実験では有限の回折ピークの情報しか得ることはできない。具体的には、観測可能な面間隔 d の最小値 d_{\min} (Å) は $d_{\min} = \lambda / (2 \sin \theta_{\max}) \cong 6.2 / (E \sin \theta_{\max})$ となり、使用するX線のエネルギー E (keV) と散乱角の最大値 θ_{\max} に依存する。このとき、 d_{\min} は電子密度を描画する際の実空間分解能 (きめ細かさ) に対応する。図1(a)、(b)にSPRING-8のX線回折データ ($d_{\min} = 0.25$ Å) をもとに、通常の逆フーリエ変換によって得られた、ダイヤモンド単結晶の全電子密度分布を示す^[1]。原子周りにおいて電子密度分布は大きく乱れており、C-C間に存在するはずの共有結合を正しく捉えられないことが分かる。これは実験で得られる回折ピークの強度が有限なことに起因する、フーリエ合成の数学的な打ち切りの影響である。つまり、良質な単結晶試料と高エネルギーX線を用いたとしても、電子密度分布を精密に観測することはできない。

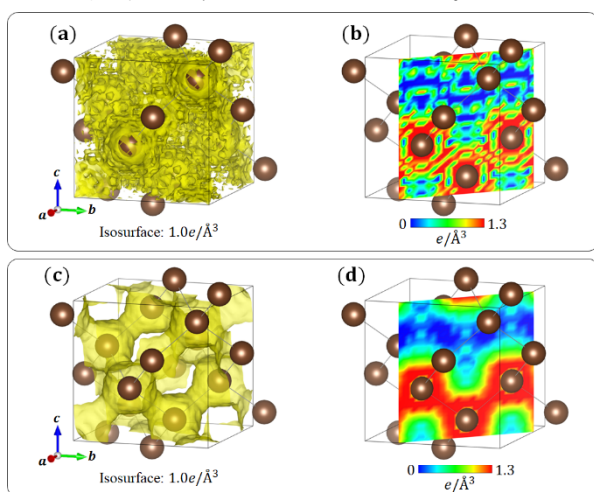


図1 (a)、(b) 通常の逆フーリエ変換によって得られたダイヤモンドの全電子密度分布。(c)、(d) コア差フーリエ合成 (CDFS) 法によって得られたダイヤモンドの価電子密度分布。文献[1]より引用。

“Concept of the CDFS method”

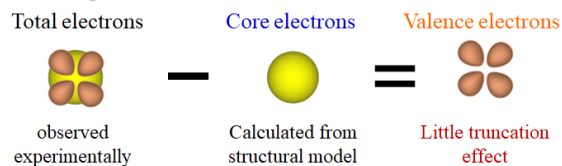


図2 CDFS法による価電子密度観測の概略図。

これに対して、我々のグループでは単結晶中の価電子の情報のみを効率的に抽出する方法として、コア差フーリエ合成 (core differential Fourier synthesis; CDFS) 法を提案した^[2,3]。本手法については文献[4、5]の解説記事で詳細に説明されているので、ご興味がある方はそちらを参照されたい。ここでは、簡単にこの手法のコンセプトを紹介する。図2にCDFS法の概略図を示す。X線回折実験で得られる全電子密度の情報から、球対称な内殻電子の寄与をモデル的に差し引くことで、価電子密度の情報のみを抽出する。

ここで、原子散乱因子に立ち返る。図3に例として炭素Cの原子散乱因子を示す^[6]。全電子 (内殻電子 + 価電子)、内殻電子、価電子の寄与をそれぞれ黒色、青色、橙色で示す。内殻電子は散乱角の大きな領域まで有限の値を持つに対して、価電子は $\sin \theta / \lambda = 0.5$ Å⁻¹ 程度までしか値を持たない。この振る舞いは、それぞれの電子の空間分布状態を反映している。X線回折実験の場合、測定可能な範囲は $\sin \theta / \lambda < 2$ Å⁻¹ 程度であり、範囲外の回折強度の情報は得られない。このとき、実験的に観測できない高角領域 ($\sin \theta / \lambda > 2$ Å⁻¹) において、内殻電子に由来する有限の値が逆フーリエ変換に組み込めないため、数学的な打ち切りの影響が顕著に現れ

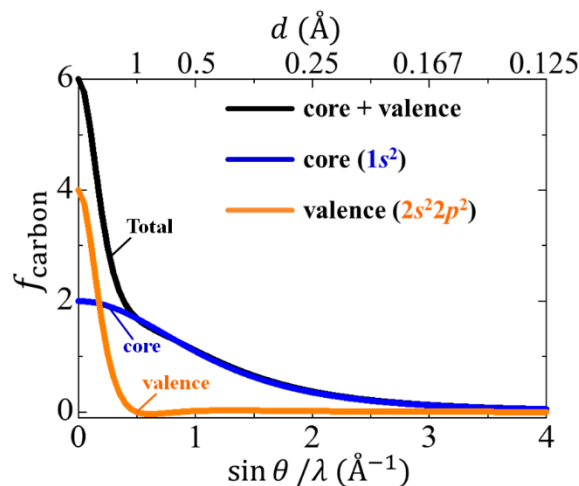


図3 炭素Cの原子散乱因子^[6]。

る。一方、これに対して CDFS 法で抽出される価電子の寄与は、高角領域においてほとんど値を持たないため、打ち切りの影響を極力抑えることができる。実際に、図 1(c)、(d)に CDFS 解析で得られたダイヤモンドの価電子密度分布を示す^[1]。C-C 間に sp^3 軌道混成に対応する結合電子がはっきりと存在することが分かる。ただし、ダイヤモンドの原子間に存在する結合電子は波長の長い波として表現できるため、実はそれほど高い空間分解能（高エネルギーの X 線）でなくとも観測は可能である。

3. 遷移金属酸化物における d 電子の観測

3.1 d 電子密度分布の観測に関する考察

多くの遷移金属酸化物では、伝導性や磁性を担うのは d 軌道を占有する価電子である。この原子サイト上に局在する d 電子の観測には高エネルギー X 線が不可欠となる。ここで、X 線回折データの分解能と電子密度分布の関係について、簡単な計算を行う。図 4(a)に計算によって得られた Ti の $3d_{xy}$ 軌道の電子密度分布 $\rho(r)$ を示す。得られた $\rho(r)$ をフーリエ変換することで、構造因子 $F(K)$ が得られる。ここで、 $F(K)$ をもう一度逆フーリエ変換する。このとき、計算に使用する散乱ベクトル K の範囲を $d_{\min} = 2\pi/|K_{\max}|$ の値によって制限することで、実験的な分解能 d_{\min} を考慮した電子密度分布 $\rho_{tra}(r)$ が得られる（図 4(b)、(c)）。Ti の $3d_{xy}$ 電子の場合は、 $d_{\min} = 0.25 \text{ \AA}$ で計算した $\rho_{tra}(r)$ は $\rho(r)$ とほぼ一致している。一方、 d_{\min} が大きくなるほど、電子密度がぼやけていき $3d_{xy}$ 電子の異方性が正しく捉えられないことが分かる。従って、 $3d$ 電子を正確に観測するには $d_{\min} = 0.25 \text{ \AA}$ 程度の X 線回折データ

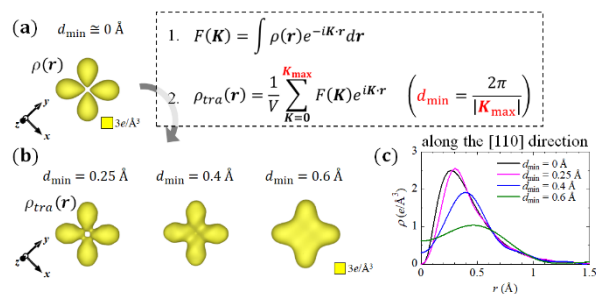


図 4 (a) Ti の $3d_{xy}$ 軌道の電子密度分布 $\rho(r)$ 。(b) 有限のフーリエ級数 $F(K)$ を用いて計算した $3d_{xy}$ 電子密度分布 $\rho_{tra}(r)$ 。(c) $[110]$ 方向に沿った $3d_{xy}$ 電子密度分布の 1 次元プロットの d_{\min} 依存性。

が不可欠である。また、ここまでの考察から、注目する軌道の動径方向の分布から実験に必要な空間分解能をある程度予想できることが分かる。以下では、高エネルギー X 線 ($d_{\min} \cong 0.25 \text{ \AA}$ の X 線回折データ) を用いることで得られた、 d 電子の観測例について紹介する。

3.2 YTiO₃ における $Ti^{3+} 3d^1$ 電子

CDFS 解析を用いた d 軌道観測の最初の対象物質として、1970 年代から現在に至るまで軌道観測実験の標準的な物質として多角的に調べられているペロブスカイト型酸化物 YTiO₃ に着目した（図 5(a)）。モット絶縁体である YTiO₃ において、物性を担う Ti^{3+} イオンは 19 個の電子を持っているが、その内 18 個の内殻電子は全体で等方的な分布状態を形成し、物性にはほとんど寄与しない。この系の電子状態を支配するのは Ti の $3d$ 軌道を占有するたった 1 個の価電子であり、過去の実験や理論計算からは図 5(b) のような軌道状態と蝶々型の価電子密度分布が予想されている^[7-12]。図 5(c)に CDFS 解析によって得られた Ti 周りの価電子密度分布を示す^[3]。TiO₆ 八面体の中心に局在している Ti の価電子密度分布は、まさに量子力学の教科書に載っているような蝶々型の $3d$ 軌道の形状を反映していることが分かる。さらに、得られた価電密度分布の異方性から、 $3d$ 軌道秩序状態における波動関数 $0.79|yz\rangle + 0.61|zx\rangle - 0.08|xy\rangle$ の決定に成功した。この値は、先行研究の実験や理論計算の結果とも整合している^[7-12]。このように、量子力学的なモデルを一切仮定せずに、 $3d$ 価電子密度分布の直接観測に成功した。

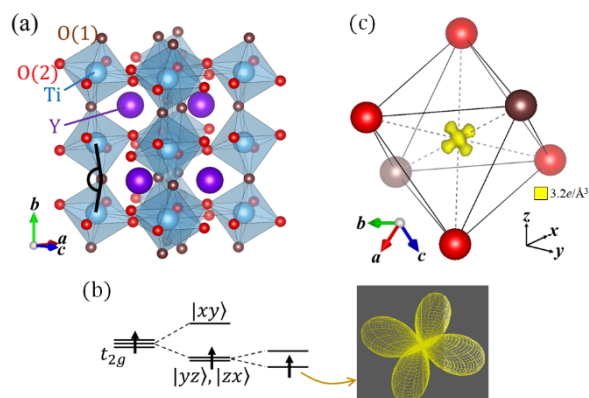


図 5 (a) YTiO₃ の結晶構造。(b) $Ti^{3+} 3d^1$ (t_{2g}) の軌道状態と予想される電子密度分布。(c) CDFS 解析で得られた Ti サイト周りの価電子密度分布。文献[3]より引用。

3.3 $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ における $\text{Mo}^{4+} 4d^2$ 電子

主量子数 $n=3$ の $3d$ 軌道と比べて $n=4$ の $4d$ 軌道は、波動関数の球面調和関数項（角度依存性）は同じであるが、動径方向において節が1つ存在する（図6）。電子密度としては $4d$ 軌道には図6(b)のような dip 構造が現れるはずである。しかし、これまで電子密度における dip 構造を実験的に観測した例はない。我々は SPring-8 の高エネルギー X 線を用いること $4d$ 電子密度の観測を試みた。

$4d$ 軌道観測の対象物質として、パイロクロア型酸化物 $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ に着目した（図7(a)）。この物質は全温度領域において、立方晶空間群 $F\bar{d}3m$ の高い対称性を有している。 Mo の形式価数は $4+$ で、 $4d$ 軌道に2個の電子を占有している。 $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ は金属的な伝導性を示し、約 90 K において強磁性転移を示す^[13]。さらに、より低温では Mo の非共面スピン構造に起因して、トポロジカルホール効果を示す^[14]。 Mo サイトに着目すると、周りの6つの酸素と結合し、八面体を形成している。 MoO_6 八面体の歪みやこの系の物性から図7(b)のような軌道状態が予想されているが、実験的な観測はなされていない。

図7(c)にこの系の CDFS 解析によって得られた Mo サイト周りの価電子密度分布を示す^[15]。 z 方向に伸びるような異方性が観測されており、これは八面体構造から予想される価電子密度の異方性（図7(b)）と一致している。また、この $4d$ 軌道状態 ($a_{1g}^1 e_g^1$) は二重交換相互作用に起因するこの系における強磁性金属状態^[13]と整合する。

図7(d)に Mo サイトの中心から z 方向に沿った価電子密度の1次元プロットを黒色の点で示す^[15]。比較として、スピネル型酸化物 FeV_2O_4 の高温立方晶相における V サイト周りの $3d$ 価電子密度分布の1次元プロ

ットを緑色の三角で示す^[16]。このとき、 V サイトは $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ の Mo サイトと同じ対称性 ($\bar{3}m$) を有しており、 Mo と同様に2個の価電子が d 軌道を占有している。 $\text{V}3d$ 価電子密分布には dip 構造がないのに対して、 $\text{Mo}4d$ 価電子密分布の $r = 0.2 \text{ \AA}$ 付近には電子密度が凹んだ dip 構造が現れていることが分かる。さらに、図7(d)に密度汎関数理論 (DFT) を用いて孤立原子を仮定した計算で得られた電子密度の1次元プロットを赤線で示す^[15]。DFT 計算では波動関数の節において電子密度がほぼゼロになっているが、CDFS 法で得られた価電子密度は完全にゼロには落ちていない。また、実験で観測された dip の位置は DFT 計算に比べて、約 0.1 \AA 原子核に近い位置に存在する。現状、実験と計算結果の差異の原因は不明であるが、酸素との軌道混成などが原因である可能性がある。我々は波動関数の節も含めて $4d$ 軌道状態の決定に成功した。

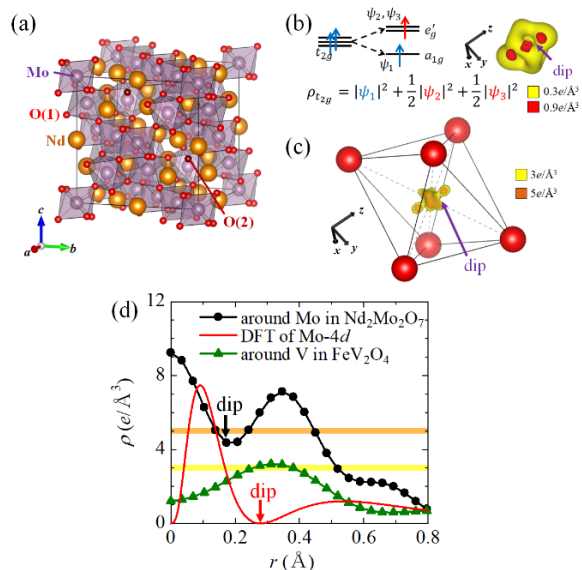


図7 (a) $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ の結晶構造。(b) $\text{Mo}^{4+} 4d^2$ (t_{2g}^2) の軌道状態と予想される価電子密度分布。(c) CDFS 解析で得られた Mo サイト周りの価電子密度分布。(d) z 軸方向に沿った Mo サイト周りにおける価電子密度の1次元プロット (CDFS 解析の結果は黒丸、DFT 計算の結果は赤線: 文献[15]より引用)。V サイト周りにおける価電子密度の1次元プロット (緑三角: 文献[16]より引用)。

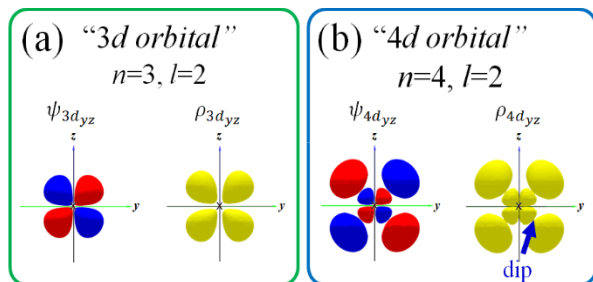


図6 (a) $3d$ 軌道と (b) $4d$ 軌道の波動関数と電子密度の概略図。

4. p - d 軌道混成によるリガンドホールの観測

鉄や銅の酸化物ではしばしば異常原子価状態が現れる。例えば、立方晶ペロブスカイト型酸化物 SrFeO_3 図 8(a)は、Sr と O の形式価数を $2+$ と $2-$ と仮定すると、Fe の価数は珍しい $4+$ となり、 $3d$ 軌道に 4 つの電子が占有している。この系では、酸素周りの一部の電子が Fe の周りに移動することで、酸素周りにおいて電子が不足した部分 (リガンドホール) が存在することが知られている^[17, 18]。リガンドホールは銅酸化物における高温超伝導や、鉄酸化物における磁気秩序と密接に関わっていると予想されている。実際、 SrFeO_3 は全温度-磁場領域において格子は立方晶の対称性を維持しているにも関わらず、らせん構造やヘッジホッグ構造など多彩な磁気秩序状態が現れる^[19, 20]。しかし、これまでリガンドホールの空間的な分布状態を実験的に観測した例はない。我々は、良質な SrFeO_3 単結晶を用いた X 線回折実験と価電子密度解析を行った。

図 8(b)に CDFS 解析によって得られた SrFeO_3 の価電子密度分布を示す^[21]。黄色の等電子面 ($3 \text{ e}/\text{\AA}^3$) を見ると Sr サイト周りにおいて電子密度は存在しない。 Sr^{2+} は最外殻の $5s$ 軌道が空となっているため、価電子が存在しないことと整合する。一方、Fe と O サイト周りには等方的な黄色で示す電子密度が存在する。さらに、Fe サイト周りについてより濃いオレンジ色の等電子面 ($10.3 \text{ e}/\text{\AA}^3$) を見ると、O 方向に電子密度が凹んでいることが分かった。

Fe 周りの価電子密度の異方性を精密に議論するために、Fe サイトの中心から $r=0.2 \text{ \AA}$ の距離 (電子密度が最も大きい r) に位置する電子密度を球上に表面カラープロットとして表示した (図 9(a))。これは電子密度の球面調和関数項に対応する。図 9(c)、(d)に $\text{Fe}^{4+} (3d^4)$ と $\text{Fe}^{3+} (3d^5)$ において予想される電子密度の表面カラープロットを示す。 Fe^{4+} では O 方向に向か

って電子密度が薄くなっているのに対し、 Fe^{3+} では異方性が存在しない。実験で得られた Fe サイト周りの異方性から $3d$ 電子数を見積もると、 $4.64(8)$ となり、Fe の価数としては $4+$ と $3+$ の中間状態である $3.36(8)+$ となった。これは、先行研究の X 線分光測定の結果と整合している^[17, 18]。また、このことは O 周りの電子の一部が Fe 周りに移動している可能性を示唆する。

理想的な O^{2-} では図 9(e)に示す通り、異方性は存在しない。図 9(b)に CDFS 解析で得られた O 周りの電子密度の球面調和関数項をカラープロットとして示す。

確かに、O の電子密度に異方性が存在しており、Fe 方向にのみ電子密度が薄くなっている。より詳細な解析の結果、これは Fe $3d$ と O $2p$ の軌道混成に起因するリガンドホール状態であることが分かった。我々は SrFeO_3 の価電子密度分布を高い精度で観測することで、O 周りに Fe 方向に伸びるリガンドホールが存在することを明らかにした。

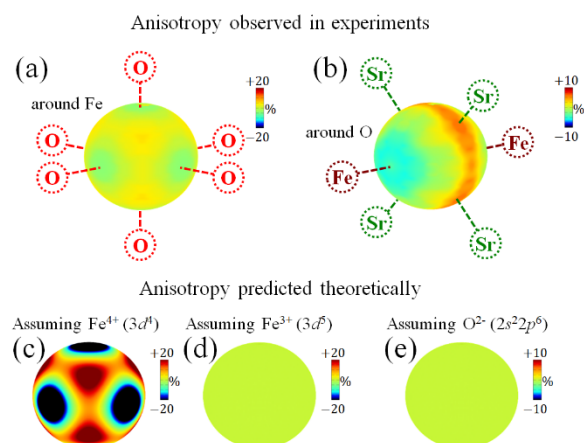


図 9 (a) Fe サイト周りと(b) O サイト周りの価電子密度の異方性(球面調和関数項)の表面カラープロット。(c) Fe^{4+} 、(d) Fe^{3+} 、(e) O^{2-} を仮定した価電子密度の表面カラープロット。文献[21]より引用。

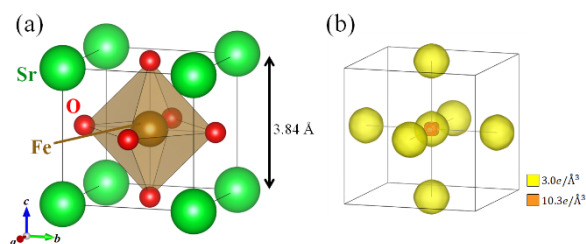


図 8 SrFeO_3 の(a) 結晶構造と(b) 価電子密度分布。文献[21]より引用。

5. 終わりに

本稿で紹介した CDFS 法による価電子密度観測は非常にシンプルであり、要は SPring-8 の高品質な X 線回折データから内殻電子の寄与を差し引いた後に逆フーリエ変換を行っているだけである。従って、実験で得られる X 線回折強度の質が価電子密度分布の質に直接的に反映される。つまり、測定に用いる「単

結晶」、「X線」、「回折計」の質や精度が向上するほど、電子軌道に関するより本質的な情報を抽出することができる。この点については、SPring-8-II へのアップグレードに伴い、価電子密度観測の精度の大幅な向上が期待できると考えている。また、CDFS 法は①原理的には対象物質の示す物性とは独立に全ての元素に適用することができる、②価電子密度分布を抽出する際にいかなる量子力学的・情報学的モデルを仮定する必要がない、③解析者によるバイアスがかかりづらい、という特徴がある。これらの特徴を活かし、今後、CDFS 法を用いた価電子密度観測が物質科学の研究に幅広く活用され、その発展に貢献することを期待する。

謝辞

SPring-8 での単結晶X線回折実験は全てBL02B1 ビームラインにて、高輝度光科学研究センターの杉本邦久 教授 (現 近畿大学)、中村唯我 博士の協力のもと行われた。本研究に関して、名古屋大学の澤博 教授、東京大学の有馬孝尚 教授をはじめとする多くの共同研究者のご協力を頂きました。この場を借りて御礼申し上げます。

参考文献

- [1] S. Kitou, Y. Hosogi, R. Kitaura, T. Naito, T. Nakamura, and H. Sawa: *Crystals* **10** (2020) 998.
- [2] S. Kitou, T. Fujii, T. Kawamoto, N. Katayama, S. Maki, E. Nishibori, K. Sugimoto, M. Takata, T. Nakamura, and H. Sawa: *Phys. Rev. Lett.* **119** (2017) 065701.
- [3] S. Kitou, T. Manjo, N. Katayama, T. Shishidou, T. Arima, Y. Taguchi, Y. Tokura, T. Nakamura, T. Yokoyama, K. Sugimoto, and H. Sawa: *Phys. Rev. Research*. **2** (2020) 033503.
- [4] 鬼頭俊介、澤博：日本放射光学会誌「放射光」 **34** (2021) 64-72.
- [5] 澤博、萬條太駿、鬼頭俊介：日本結晶学会誌 **64** (2022) 98-106.
- [6] Z. Su, and P. Coppens: *Acta Cryst.* **A53** (1997) 749.
- [7] T. Mizokawa, and A. Fujimori: *Phys. Rev. B* **54** (1996) 5368.
- [8] H. Sawada, N. Hamada, and K. Terakura: *Physica B* **237** (1997) 46.
- [9] M. Itoh, M. Tsuchiya, H. Tanaka, and K. Motoya: *J. Phys. Soc. Jpn.* **68** (1999) 2783.
- [10] J. Akimitsu, H. Ichikawa, N. Eguchi, T. Miyano, M. Nishi, and K. Kakurai: *J. Phys. Soc. Jpn.* **70** (2001) 3475.
- [11] H. Nakao, Y. Wakabayashi, T. Kiyama, Y. Murakami, M. V. Zimmermann, J. P. Hill, D. Gibbs, S. Ishihara, Y. Taguchi, and Y. Tokura: *Phys. Rev. B* **66** (2002) 184419.
- [12] M. Kubota, H. Nakao, Y. Murakami, Y. Taguchi, M. Iwama, and Y. Tokura: *Phys. Rev. B* **70** (2004) 245125.
- [13] N. Ali, M. P. Hill, S. Labroo, and J. E. Greedan: *J. Solid State Chem.* **83** (1989) 178.
- [14] Y. Taguchi, Y. Oohara, H. Yoshizawa, N. Nagaosa, and Y. Tokura: *Science* **291** (2001) 2573.
- [15] S. Kitou, Y. Kaneko, Y. Nakamura, K. Sugimoto, Y. Nomura, R. Arita, Y. Tokura, H. Sawa, and T. Arima: *Phys. Rev. B* **108** (2023) 024103.
- [16] T. Manjo, S. Kitou, N. Katayama, S. Nakamura, T. Katsufuji, Y. Nii, T. Arima, J. Nasu, T. Hasegawa, K. Sugimoto, D. Ishikawa, and H. Sawa: *Mater. Adv.* **3** (2022) 3192.
- [17] M. Abbate, G. Zampieri, J. Okamoto, A. Fujimori, S. Kawasaki, and M. Takano: *Phys. Rev. B* **65** (2002) 165120.
- [18] A. E. Bocquet, A. Fujimori, T. Mizokawa, T. Saitoh, H. Namatame, S. Suga, N. Kimizuka, Y. Takeda, and M. Takano: *Phys. Rev. B* **45** (1992) 1561.
- [19] S. Ishiwata, M. Tokunaga, Y. Kaneko, D. Okuyama, Y. Tokunaga, S. Wakimoto, K. Kakurai, T. Arima, Y. Taguchi, and Y. Tokura: *Phys. Rev. B* **84** (2011) 054427.
- [20] S. Ishiwata, T. Nakajima, J.-H. Kim, D. S. Inosov, N. Kanazawa, J. S. White, J. L. Gavilano, R. Georgii, K. M. Seemann, G. Brandl, P. Manuel, D. D. Khalyavin, S. Seki, Y. Tokunaga, M. Kinoshita, Y. W. Long, Y. Kaneko, Y. Taguchi, T. Arima, B. Keimer, and Y. Tokura: *Phys. Rev. B* **101** (2020) 134406.
- [21] S. Kitou, M. Gen, Y. Nakamura, K. Sugimoto, Y. Tokunaga, S. Ishiwata, and T. Arima: *Adv. Sci.* **10** (2023) 2302839.

鬼頭 俊介 *KITOU Shunsuke*

東京大学 大学院新領域創成科学研究科
〒277-8561 千葉県柏市柏の葉 5-1-5
TEL : 04-7136-3769
e-mail : kitou@edu.k.u-tokyo.ac.jp

(12th SPRUC Young Scientist Award 受賞 研究報告)

柔軟な多孔性配位高分子の動的挙動のその場観察による解明

京都大学 物質—細胞統合システム拠点 (iCeMS)

大竹 研一

Abstract

活性炭やゼオライト、多孔性配位高分子 (PCP) などは、一般に硬く剛直な物質として知られている。しかし、一部の PCP はその格子の可逆的な変形や、構成要素となる有機配位子の振動や回転などを通じて、構造に柔軟性を設計することが可能である。このような構造に柔軟性を持つ“フレキシブル PCP”は、外部環境への応答を示し、様々な動的な現象やプロセスによって多様な機能を発現している。我々は、フレキシブル PCP の応用開拓を目指し、系統的材料開発及びその機能発現に関する機構解明に従事してきた。フレキシブル PCP の動的なふるまいを視覚化するために、SPRING-8 の放射光を利用した in situ X 線回折測定を用いてゲスト分子の吸着プロセスの観測を行った。本稿では、in situ 測定を通じてフレキシブル PCP の動的な挙動の解明に取り組んだ、我々の最近の成果について紹介する。

1. はじめに

多孔性材料とはナノサイズの微細な細孔を有する材料のことを言う。多孔性材料は、その細孔により、外部の化学物質を貯蔵、分離、変換する機能を持つことができる。このような特性から、多孔性材料は脱臭剤や吸着分離材料、触媒材料など、現代社会において欠かせない材料として活躍しており、身近なところでも多く使用されている。多孔性材料の代表例として、ゼオライトや活性炭が盛んに研究されてきた。近年、構造や機能の設計と調整が可能な結晶性の多孔性材料として、多孔性配位高分子に注目が集まっている^[1,2]。多孔性配位高分子は Metal-Organic Frameworks の英語の頭文字をとった略称として“MOF”、もしくは Porous Coordination Polymers の略称として“PCP”として呼称される。本稿では、以下、PCP という呼称を用いる。PCP は、金属イオンと架橋性の有機化合物 (配位子) の配位結合からなる連続構造を持つ (図 1(a))。PCP は錯体化学に根差した高い設計性を有しており、その細孔のサイズと共に化学的性質をデザインして制御できるため、様々な分野において盛んな研究が展開されるようになってきている。PCP のうち、構造に柔軟性を持つものを、柔軟性のない剛直な PCP と区別して、フレキシブル PCP (もしくは、フレキシブル MOF やソフトポーラス結晶) と呼ぶ。フレキシブル PCP は、熱や圧力といった外部刺激に応答して可

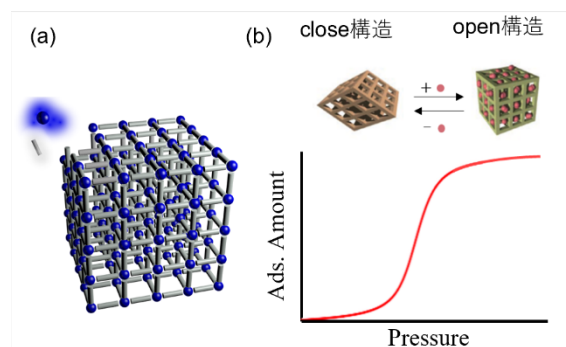


図 1 (a) 金属イオンと配位子から構築される PCP の連続構造のスキーム図。(b) フレキシブル PCP の構造変化と、ゲートオープン型の吸着特性。

逆に構造を変化させる性質を示す^[3]。フレキシブル PCP の構造柔軟性は、従来の多孔性材料にはない、PCP 独自の特性とも言え、新たな可能性を秘めていると言える。こうしたフレキシブル PCP の存在は、1998 年に北川によって提唱され^[4]、2001 年に金子らによって初めてのフレキシブル PCP による特徴的な吸着挙動の実験的な報告がなされた^[5]。その後、フレキシブル PCP は北川や Ferey らによって発展され、その応用への様々な可能性が示されてきた^[3,6]。フレキシブル PCP の示す特徴的な挙動として、ゲートオープン挙動が挙げられる。従来の剛直な骨格を持つ多孔性材料は、吸着圧力が増えるにしたがって徐々に吸着量が増えるような吸着特性を示す。一方で、フレキシブル PCP

は、ある閾値の吸着圧力（ゲートオープン圧力）において、構造変化が生じ、それに伴った急激な吸着容量の増加を見せ、吸着カーブがS字型の曲線となる（図1(b)）。フレキシブル PCP の示すゲートオープン圧は、吸着するガスの種類に応じて異なる。そのため、フレキシブル PCP のゲートオープン現象は、選択的な分離手法への応用で期待を集めている。また狭い圧力／温度の幅で大容量の吸着と脱着が達成できるため、圧力スイングによる効率的なガス分離回収や貯蔵応用でも有用な材料となる⁷⁾。我々は、吸着分離や触媒、センサ分野におけるフレキシブル PCP の機能開拓を目指し、系統的な材料開発及びその機能発現に関する機構解明に従事してきた。そこで以下に紹介するような興味深い性質や現象を発見し報告してきた。さらに、その詳細な機構解明を目指して、SPRING-8 における放射光を利用したその場 (in situ や operando) での構造解明に取り組んできた。本稿では、フレキシブル PCP を対象として、in situ 測定によってその動的な挙動の解明に取り組んだ、我々の最近の成果について紹介する。

2. クロスオーバー型吸着特性の解明

多孔性材料のガスの吸着量は、一般に温度が低下するほど増加するが、複数のガスの間での相対的な吸着量について大小関係に変化は生じない（図 2(a)）。こ

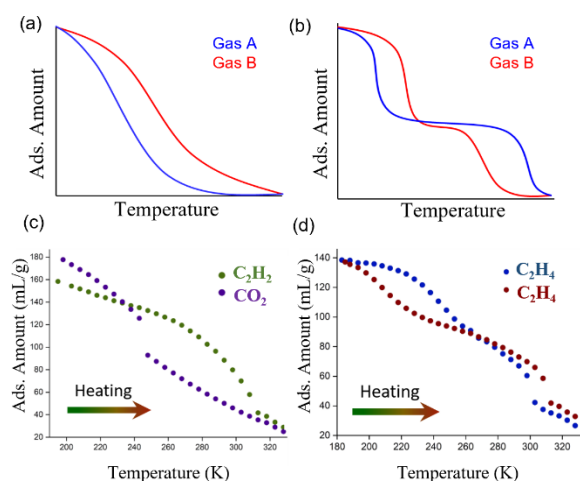


図2 (a) 通常の吸着等圧曲線。(b) クロスオーバー型の吸着等圧曲線。(c)、(d) PCP-A の C_2H_2/CO_2 や C_2H_4/C_2H_6 に対する吸着等圧曲線 (100 kPa)。

れは、特定のガスと吸着剤の間の熱力学的な吸着エネルギーの相対関係が温度によって変化しないためである。一方で、異なる温度で2つの類似のガスの吸着量が逆転する「クロスオーバー吸着」が稀に報告されてきた（図2(b)）が、この起源について考察されてこなかった。この現象は、異なる温度もしくは操作圧力でガス種に対する選択性を切り替える技術に繋がる可能性を秘めている。例えば、クロスオーバー現象を示す吸着剤は、類似の混合ガス (C_2H_2/CO_2 や C_2H_4/C_2H_6) から、使用する温度や圧力を制御することで、一つの吸着材でどちらか一方のガス分子を選択して吸着させることができると期待される。

我々は、亜鉛 (Zn^{2+}) イオンとV字型のカルボン酸配位子 5-methyl-1,3-di(4-carboxyphenyl)benzene (mdcp) とピリジン配位子 1,4-bis(4-pyridyl)benzene (bpb) から構築される新規のフレキシブルPCPである $[Zn_2(mdcp)_2(bpb)]_n$ (以下、PCP-A) を合成した。このPCP-Aが、 CO_2/C_2H_2 や C_2H_4/C_2H_6 に対して、こうしたクロスオーバー型の吸着挙動を示すことが分かった（図2(c)、(d)）。そこで、in situで温度や圧力を制御した状態で単結晶X線回折測定(SCXRD)を行うことで、ガスの吸着課程についての検証を行った。測定は、PCP-Aの単結晶1粒を一端が閉じたガラスキャピラリーに導入し、少量のグリースでガラス壁面に固定し、それをゴニオヘッドに装着した（図3(a)）。この際のゴニ

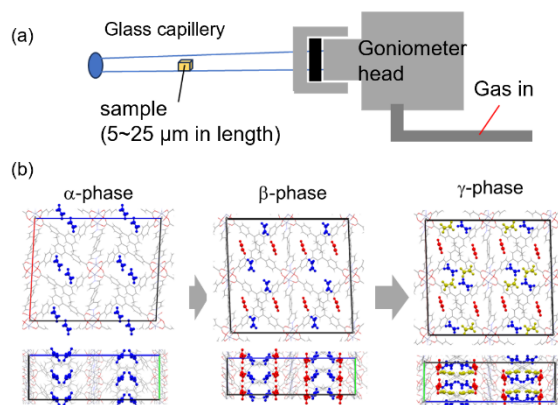


図3 (a) in situ SCXRD の実験セットアップのスキーム図。(b) PCP-A のガス導入下での構造変化ステップの1例。温度変化による C_2H_4 導入下での段階的な構造変化 (α, β, γ -phases) の様子。青、赤、黄色の C_2H_4 は異なる吸着サイトを表している。

オヘッドはガスの導入を可能とする特殊加工したものである。実験はSPring-8のBL02B1、及び実験室における測定装置 (Rigaku XtaLab) を用いて行った^[8]。

単結晶試料をキャピラリ中で熱活性化 (120°C下で真空加熱処理) 後、温度や圧力を制御しながら吸着ガスを導入して、in situ で SCXRD 測定を行うことで、全ての吸着相における構造の特定に成功した (図 3(b))。CO₂/C₂H₂ の吸着においては、細孔中におけるガス吸着のサイトが異なっていて、低圧領域もしくは高温領域においては、分子相互作用の大きな C₂H₂ の吸着量が相対的に多くなることが分かった。一方で、相対圧 (P/P₀) = 1.0 付近もしくは低温領域においては、CO₂ はより密にパッキングすることで吸着サイトの数が多くなり、C₂H₂ よりも吸着量が多くなったことが分かった。他方で、C₂H₄/C₂H₆ の吸着に関しては、PCP-A はすべての吸着相において同様の吸着サイトや吸着構造を示した。得られた構造を基に、理論計算を用いて吸着に伴うガスの吸着エネルギーについて精査したところ、吸着ガス分子数が多くなる構造相においては、吸着ガス同士における分子間相互作用が大きくなることにより、ガス吸着の見かけ上の親和性の逆転が観測されていたことを明らかにできた。これらの結果は、クロスオーバー型の吸着挙動の機構を初めて明らかにしたものであり、in situ における詳細な構造解析によって、ガスの吸着相構造の解明が可能となり達成された成果である。

3. 二酸化炭素に対してのみゲートを開いて吸着するフレキシブル多孔性材料

工場や発電所、化学プラントなどから排出される廃棄ガスやオフガスは、様々な小分子ガス成分を含んだ混合物である。こうした混合ガスから、エネルギー効率良く、目的の成分のみ分離する技術は、産業や環境問題において重要な課題となっている。特に CO₂ は中程度の分子サイズと吸着性を持っているため、CO₂ だけを選択的に回収することが難しく、これまでエネルギー効率の良くない化学吸着法などが利用されてきた。一方、エネルギー効率が高いとされるガス分離手法の一つとして、多孔性材料を利用した吸着分離法が注目を集めている。吸着分離法は、ナノサイズの細孔におけるガスの物理吸着を利用して、混合ガスから特定の

ガスのみを吸着して分離する方法である。しかし、これまでの多孔性材料を用いたガス分離の研究では、主に二成分混合ガスに焦点が当てられており、多数の類似成分ガスから単一成分を分離する多孔性材料の開発に関する研究は殆ど行われていない。そのため、多成分の混合系から一つの分子を選択的に分離するような材料の設計指針についても知られていなかった。

我々は、フレキシブルPCPの代表的な構造である、相互簾型の二次元シート積層構造に着目して^[9]、系統的な材料開拓を進めてきた。その中で、コバルト (Co²⁺) イオンと V 字型のカルボン酸配位子 3,5-pyridinedicarboxylate (pdc) 及びピリジン配位子 di(4-pyridyl)glycol (dpg) から構築される新規のフレキシブル PCP である [Co(pdc)(dpg)]_n (以下、PCP-B) を合成した^[10]。加熱活性化処理後の乾燥構造において PCP-B は、Co²⁺ イオンと pdc 及び dpg 配位子が連結して構成される二次元シートが互いにズレて積層したような二次元積層型構造を持っていて、ガスの吸着サイトとなるポケット同士が分断された細孔構造となっている (図 4(a))。PCP-B の様々なガス分子種に対する吸着特性について調べたところ、低温 (それぞれのガスの沸点) において N₂、CH₄、CO、O₂、H₂、Ar、C₂H₂、C₂H₄、C₂H₆ などの小分子ガスを吸着しない一方で、CO₂ に対してのみ大きな吸着を示すことが分かった。また、室温において高圧を用いた吸着測定を行ったところ、CO₂ に対してのみおよそ 4 bar 付近で急激

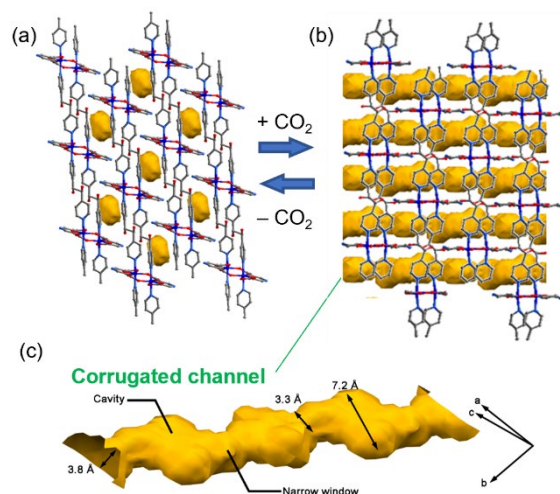


図 4 PCP-4 の結晶構造及び細孔構造 (黄色)
(a) 乾燥時の構造 (195 K)。 (b) CO₂ 導入時の構造 (195 K, CO₂ 100 kPa)。 (c) CO₂ 導入後における細孔構造。

な吸着量の増加を示すゲートオープン型の吸着を示す一方、他のガス分子に対してはゲートオープン型の吸着挙動を示さなかった。これまで、フレキシブル PCP のゲートオープン挙動を利用したガス分離では、ゲートオープン後には他のガスも一緒に吸着しやすくなるという選択性の制御に課題があった。そこで、PCP-B についても、混合ガスに対する吸着特性を調べたところ、ゲートオープン挙動後にも、CO₂ に対する高い選択性を維持することが分かった。こうした CO₂ のみに対する排他的な吸着特性は、これまで報告例が無く珍しい挙動である。そこで、PCP-B の CO₂ に対する排他的なゲートオープン挙動の機構解明のために、in situ での XRD 測定に取り組んだ。PCP-B は単結晶が小さく、in situ SCXRD を用いた構造解析を行うことができなかった。そこで、SPring-8 の BL02B2 において、in situ 粉末 X 線回折測定 (PXRD) 測定を行った。ガラスキャピラリー中に導入した試料の粉末を、in situ で熱活性化処理をして、195 K において CO₂ 導入を行い、CO₂ の吸着構造の解析を行った。SPring-8 の BL02B2 では、ガスを導入しながら、試料ホルダーを高速回転させることができるため、精度の高いデータを得ることができた。

フレキシブル PCP では、ガスの吸着前後で構造が大きく変化することが多く、さらに、PCP-B の結晶構造の対称性が三斜晶系であったため、Rietveld 解析を行うための初期構造モデルの構築が困難であった。しかし、SPring-8 で得られた高精度の PXRD パターンを元に Charge Flipping 法を用いたところ、吸着された CO₂ を含めた構造モデルを直接得ることができた。得られた構造を初期構造モデルとして Rietveld 解析を行うことで CO₂ 吸着構造を決定することに成功した (図 4(b))。PCP-B の CO₂ 吸着構造では、シート間の隙間が広がり、乾燥構造では分断されていたポケット状の空隙同士が小さな窓を通して相互に繋がったデコボコ形状の一次元状のチャンネルを形成していることが分かった (図 4(c))。得られた吸着構造を基にして、理論計算によりゲートオープンに伴う構造変形エネルギーとガス吸着エネルギーについて検討を行った。すると、PCP-B が CO₂、C₂H₄、C₂H₂ の 3 種類のガス吸着に対して安定な吸着構造をとることが可能で、その他のガスに対する親和性が低いことが分か

った。一方で、何故、C₂H₂ と C₂H₄ の吸着が実験的に観測されないのかという点を考察するために、吸着されたガス分子が結晶内を拡散する際の拡散障壁エネルギーについても検討を行った。すると、C₂H₂ や C₂H₄ では吸着ポケットから窓を通過する際の拡散障壁が CO₂ に比べて大きくなっていることが分かった。このように吸着自体の熱力学的な安定性と、吸着現象の拡散制御が複合的に作用することによって、PCP-B において排他的な CO₂ 選択性を発現していることが明らかになった。PCP-B では、ゲートオープン挙動を示す圧力に常圧以上の圧力が必要なため、実用に向かないが、構成する配位子の化学置換などによりゲート圧が低くなるような分子設計が可能であり、実用に資する材料開発に現在も取り組んでいる。

4. H₂O/D₂O の分離を可能な PCP の開発

水素 (H) の同位体には、重水素 (D) と三重水素 (T) がある。天然存在比でみると、水素が 99.985%、重水素は 0.015% であり、半減期が約 12 年の放射性原子でもある三重水素は自然にはほとんど存在しない (天然存在比 10⁻¹⁸)^[11]。重水は構造中に同位体を含んだ水の同位体置換体であり、通常の水 (以下、軽水と区別して“軽水”と呼ぶ) よりも比重が重いことから“重水”と呼ばれる。軽水 (H₂O) の水素が重水素に置き換わった水として、半重水 (HDO) と重水 (D₂O) がある。実際、自然界の水には軽水だけでなく、微量の半重水と重水が含まれている。水分子は、他の水分子と水素を素早く交換をする性質があるため、水中の重水はほぼ半重水となっていて、1 L の水には約 0.3 mL の半重水と約 0.00003 mL の重水が含まれることが知られている。軽水、半重水、重水は、ほぼ同一のサイズを有し、沸点も僅かな違いしかない (軽水、半重水、重水でそれぞれ 100.0°C、100.7°C、101.4°C)^[12]。このため、水から重水を製造するのは困難で、大型の設備と大量の燃料・電力が必要である。従来の生産方法としては、これまでに電解法や、蒸留法、化学交換法といった方法が知られているが、どれも分離係数が低く、非常に多くの工程数が必要であった。もし多孔性材料で軽水と重水が分離できれば、よりエネルギー効率の良い重水生産が可能となることが期待される。

そこで、著者を含む研究チームは、熱振動によりフ

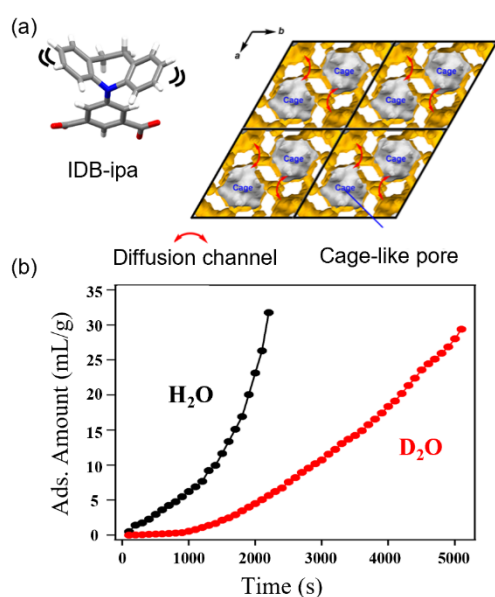


図5 (a) IDB-ipa の構造と、PCP-C の細孔構造。Cage 状の細孔が小さなチャンネルで繋がっており、そのチャンネル部分に分子ゲートが位置している。(b) PCP-C の H₂O/D₂O の吸着等温線 (時間変化)。

リップフロップ運動をするトンボ型分子を、分子ゲートとして骨格に組み入れる構造設計によって、軽水と重水の分離に取り組んだ。細孔内に組み込まれた分子ゲートは、その分子運動の緩急が温度で制御でき、様々なガスの速度論的な分離が可能となることが先行研究によって報告されていた^[13]。我々は、室温において分子運動を示す多数の分子ゲート候補を設計して PCP に組み込み、軽水と重水の分離が可能な PCP を見出した^[14]。この PCP は、銅イオン (Cu²⁺) と 5-(iminodibenzyl)isophthalic acid (IDB-ipa) を反応させることによって合成した (Cu(IDB-ipa); 以下、PCP-C と呼称する)。PCP-C における水分子を含む構造の解明のため、SPRing-8 の BL02B1 における SCXRD 測定を行った。この PCP は、約 1 nm のサイズの空間同士が水分子の大きさよりも少し小さいチャンネルによって連結したような細孔構造を持っている (図 5(a))。このチャンネルの部分に、トンボ型配位子が分子ゲートとして位置しており、室温ではトンボが羽根を動かすようにペコペコ振動する。この振動に連動してチャンネルの開口サイズが大きくなったり小さくなったりする性質がある。この開閉する分子ゲートにおいて、通過する分子と骨格との相互作用の強さの微妙な差によ

って、ゲートの通過速度に異なる分子間で変化が生じる。そのため、この PCP 中では、軽水と重水が拡散する際の速度に差が生じ (図 5(b))、水分子の方が重水分子よりも 2 倍以上早く拡散できることが実験的に分かった。同様の細孔径を有しているゼオライトや、ZIF-7 (PCP の代表例) に対しても同じ実験を行ったところ、軽水と重水の吸着速度間には差が生じなかった。このことから分子ゲートが重要な役割を果たしていることが示唆される。この PCP-C に軽水と重水の両方を含む蒸気にさらすと、軽水分子が優先的に細孔中に吸着され、分離係数は最大 212 にまで到達した。軽水と重水を区別する吸着材は史上初であり、従来法における分離係数に比べても 100 倍近く大きな値となった。この成果により、非常に分離が困難で、従来法では精製のために莫大なエネルギーやコストがかかっていた分子を、エネルギー消費を抑えて効率よく分離するための技術開発の実現に大きく近づいた。

5. PCP 薄膜によるケミレジスタ特性の機構解明

半導体式ガスセンサは、周囲の環境中に含まれる酸化・還元性のガス分子に反応して電気抵抗値が変化する材料であり、ケミレジスタと呼ばれる。ケミレジスタ材料は、環境中の微量な化学物質に対する非接触検出用センサへの応用に注目を集めている。金属酸化物を基盤としたケミレジスタは、可燃性ガスに対し非接触かつ瞬時に応答を示すため、ガス検出器として商業化もされている。しかし、従来のケミレジスタ材料は一般的に、化学物質に対する選択性が低く、動作温度として 300°C を超える高温が必要である。アセトンやアセトアルデヒド、アンモニア等の微量な“有機ガス”を高効率かつ選択的に検出する室温駆動ケミレジスタセンサは未だに実現が難しい。我々は、高選択性を有する室温駆動ケミレジスタセンサを実現するためのセンサ材料として選択吸着・濃縮能を有する PCP に着目した。様々な細孔サイズや伝導特性の π 共役構造 PCP からケミレジスタを作製し、ガスセンサ特性と構造パラメータの相関について詳細に検討を行ってきた^[15-17]。また、半導体特性を持つ PCP と吸着特性に優れた PCP を組み合わせることで、両方の特性を活かした優れた Hybrid 型のケミレジスタセンサを実現できることが分かった^[18]。しかし、これまで PCP を用いたケミレジスタでは、その作

動機構については不明瞭となっていた。ゲスト吸着における構造変化や電場下におけるゲスト分子の酸化/還元反応による PCP 骨格の電気伝導度変化が、ケミレジスタ特性の起源であることが予想されるが、詳細に機構について考察された報告例が無かった。PCP 薄膜の構造設計に関する知見は、高選択性・高感度のセンサ材料の開発に繋がることが期待できる。そこで筆者らは、薄膜試料にケミレジスタセンサ特性の起源を解明するために、図 6(a) のようなセルを開発して、SPring-8 の BL46XU (現在は、再編により BL13XU に移動) や BL19B2 において、電場をかけた状態でのセンサ動作条件でのオペランド GIXRD 測定に取り組んだ。

我々は、銅イオン (Cu^{2+}) と 2,3,6,7,10,11-hexahydroxy triphenylene (HHTP) を混合してできる $\text{Cu}_3(\text{HHTP})_2$ (Cu-HHTP) に着目した。Cu-HHTP は、ハニカム上の二次元レイヤーが積層したような構造をもっており、半導体特性を持つ安定な PCP として知られている。我々は、この Cu-HHTP の合成条件の調整により、基板上に方向を制御して薄膜試料を成長させることが可能であることを見出した^[19]。すなわち、合成時の配位子濃度の濃淡によって、Cu-HHTP のレイヤーの積層方向が基板と垂直な Edge-on 型と、積層方向が基板と並行となる Face-on 型の薄膜の作り分けに成功した (図 6(b))。Cu-HHTP は、ケミレジスタ材料としても知られているため、作成した Cu-HHTP 薄膜のケミレジスタ特性についてオペランド条件での GIXRD 測定によって評価を行った。興味深いことに、Cu-HHTP 薄膜ではゲスト分子の吸着に伴う格子の変形がシルク状態のものよりも顕著であり、また格子の膨張方向が積層方向によって変化していることが分かった。Edge-on 型の薄膜では水蒸気の導入によって、002 ピークが大きくシフトする一方で、Face-on 型の薄膜では 002 ピークよりも 200 ピークが大きくシフトするという挙動が見られた。この際の電流値変化 (センサ感度) は Face-on 型の方が Edge-on 型のものよりも約 3 倍顕著であった。この結果は、Cu-HHTP の電気伝導パスにおいて二次元骨格の積層方向 (HHTP 配位子同士のパスタック方向) が重要であることを示唆している。また PCP 薄膜試料の成長方向の制御により、ケミレジスタ材料としての特性が大きく変動することを明らかにした。これらは、オペランド下における実験によって初めて明らかにできた知見である。

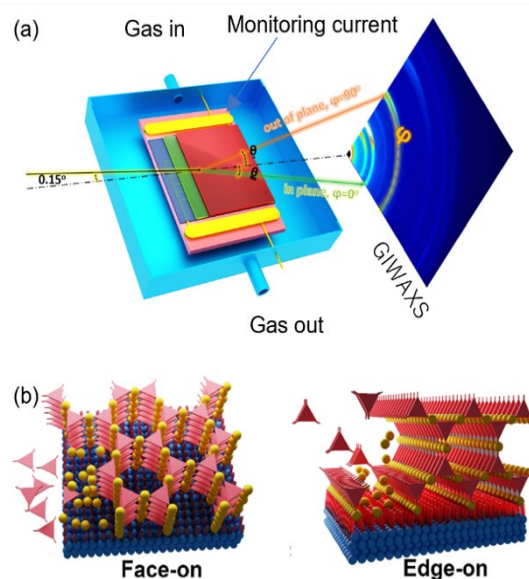


図 6 (a) オペランド GIXRD 測定用に開発した試料セルの模式図。(b) Cu-HHTP の Face-on 型及び Edge-on 型薄膜の構造についての模式図。

謝辞

本研究は北川進特別教授 (京都大学)、久保田佳基教授 (大阪公立大学)、榊茂好特任教授 (京都大学)、Gu Chen 教授 (四川大学) らとの共同研究です。的確なご指導、有意義なご議論をいただきありがとうございました。また本稿で紹介した試料の開発を担った北川研究室のメンバー (当時)、Mohana Shivanna 博士、Yifan Gu 博士、Ming-Shui Yao 博士らに感謝申し上げます。本研究に関わる X 線回折実験は、SPring-8 の BL02B1、BL02B2、BL19B2、BL46XU において課題番号 2019B1554、2020A1819、2020A0649、2020A0617、2020A1469、2020A1628、2021A1683、2021A1149、2021A1542、2021A1104、2021B1886、2021B1745、2021B1349、2022A1676、2022B1651、2022B0526 のもとで行いました。杉本邦久博士 (現近畿大学教授)、河口彰吾博士、小金澤智之博士をはじめとするビームラインスタッフの皆さま、関係者の皆さまにお礼を申し上げます。また本研究は、科研費 (18H05262、19K15584、22H05005、22K05128) 等の支援を受けて実施しました。

参考文献

- [1] M.-S. Yao, K. Otake, Z. Xue and S. Kitagawa: *Faraday Discuss.* **225** (2021) 341-357.
- [2] J.-S. Lee, K. Otake and S. Kitagawa: *Coord. Chem. Rev.* **421** (2020) 213447.
- [3] S. Horike, S. Shimomura and S. Kitagawa: *Nature Chem.* **1** (2009) 695-704.
- [4] M. Kondo, T. Yoshitomi, H. Matsuzaka, S. Kitagawa and K. Seki: *Angew. Chem. Int. Ed.* **36** (1997) 1725-1727.
- [5] D. Li and K. Kaneko: *Chem. Phys. Lett.* **335** (2001) 50-56.
- [6] S. Krause, N. Hosono and S. Kitagawa: *Angew. Chem. Int. Ed.* **59** (2020) 15325.
- [7] M. Bonneau *et al.*: *Nature Chem.* **14** (2022) 816.
- [8] M. Shivanna *et al.*: *Angew. Chem. Int. Ed.* **62** (2023) e202308438.
- [9] A. Schneemann *et al.*: *Chem. Soc. Rev.* **43** (2014) 6062-6096.
- [10] Y. Gu *et al.*: *Nature Commun.* **14** (2023) 4245.
- [11] I. Friedman: *Geochm. Cosmochim. Acta.* **4** (1953) 89-103.
- [12] F. Steckel *et al.*: *Trans. Faraday. Soc.* **59** (1961) 331-343.
- [13] G. Chen *et al.*: *Science* **363** (2019) 387-391.
- [14] Y. Su *et al.*: *Nature* **611** (2022) 289-294.
- [15] M. Yao *et al.*: *Angew. Chem. Int. Ed.* **59** (2020) 172-176.
- [16] M. Yao *et al.*: *Dalton Trans.* **50** (2021) 13236-13245.
- [17] Z. Xue *et al.*: *Angew. Chem. Int. Ed.* **62** (2023) e202215234.
- [18] M. Yao *et al.*: *Angew. Chem. Int. Ed.* **62** (2023) e202303903.
- [19] M. Yao *et al.*: *Proc. Natl. Acad. Sci.* **120** (2023) e2305125120.

大竹 研一 *OTAKE Ken-ichi*

京都大学

物質－細胞統合システム拠点 (iCeMS)

〒606-8501 京都府京都市左京区吉田本町

TEL : 075-753-9861

e-mail : ootake.kenichi.8a@kyoto-u.ac.jp

9IDMRCS 会議報告

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 筒井 智嗣

1. はじめに

8月12日から18日までの期間で千葉市の幕張メッセにおいて開催された9th International Discussion Meeting on Relaxation in Complex Systems (9IDMRCS) について報告する。IDMRCSは1990年に最初の会議がギリシャのクレタ島で開催され、4年に1度開催されてきた。今回の9IDMRCSは冒頭の数字が表すように9回目の開催で、日本では初めての開催である。会議のchairは東京大学物性研究所の山室 修氏であった。

本会議は、そもそも2021年7月に開催が予定されていたが、コロナ禍で延期となって今夏開催に至った。会場となった幕張メッセの最寄り駅であるJR京葉線の海浜幕張駅を下車すると、写真1のような看板に出迎えられた。

2. 会議報告

会議は10のカテゴリー(glasses, liquids, polymers, colloids/jamming/active matter, biomatter, low dimensions, transport, relaxations, crystal vs glasses 及び techniques) の下に配置された40のシンポジウムで構成され、非常に広い分野の物質群を扱う会議であった。招待講演や一般講演は連日6つもしくは7つのパラレルセッションの形式で会議が進行した。



写真1 海浜幕張駅前に掲げられた会議の看板

本会議は、会議の進行形式が私の参加した多くの会議と形式が少々異なっていた。私のこれまでに参加した会議では、開会のセレモニーで会議が始まり、閉会のセレモニーで会議が終了することが多かった。しかしながら、この会議では閉会のセレモニーはなく、結果として参加者が一堂に会して講演を聞く機会は初日のセッションだけであった（写真2）。会議初日には、開会のセレモニーに引き続いて5つの基調講演、その後この分野に大きな足跡を残したAusten Angell氏に関する3件の追悼講演が行われた。写真3は、初日の全講演が行われた後に撮影された当日の参加者のグループ写真である。この写真から本会議の規模が想像できると思う。

筆者1人で毎日開催された6～7のセッション全てについて述べることはできないので、ここでは聴講す

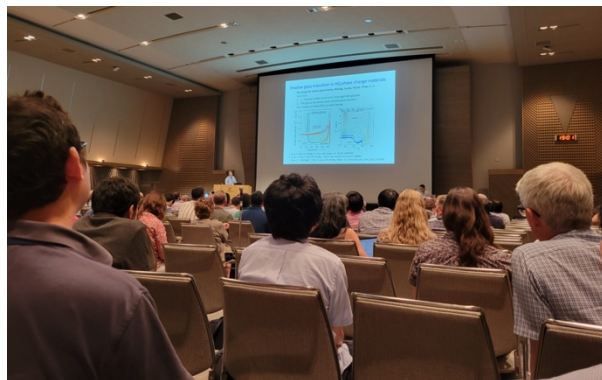


写真2 基調講演の会場の様子



写真3 会議初日に撮影したグループ写真

ることのできた概略について以下に述べることにする。

会議で議論される対象物質は前述の 10 のカテゴリに示した通り、主としてガラスや液体、高分子などである。一方で、電荷ガラスやスピングラスといった結晶の試料で電子の示す性質が周期性を持たないことから、秩序状態としてガラスと同様に扱われる物質群も対象となっていた（筆者にとっては、結晶性の物質を研究対象としてきた期間が長いという観点で、後者の分野の方がなじみ深く講演を聞くことができたが…）。様々な機能性材料として利用されているガラスや高分子においては、結晶のようなきちんとした原子配列を持たないために原子配列の詳細に関する議論はあまり行われない一方で、構造の階層性と物質機能との関わりについて議論されることが多い。本会議では、筆者が普段慣れ親しんでいる結晶系の試料を対象にした会議に比べて、計測における様々な時間スケールと空間スケールの両者を意識した講演や議論が多い印象を受けた。

このように計測における時間スケールや空間スケールへの意識は放射光や中性子を利用した研究においても同様である。回折実験においては、周期性を持たない物質群が多いということもあって PDF (Pair distribution function) 解析や逆モンテカルロ法などを利用した解析に基づく構造に関する議論がなされていた。物質の機能を議論する上では、この会議が対象とする分野においても物質中のダイナミクスに関する議論が重要であり、多くの招待講演や口頭発表が行われた。実験手法としては、古くから確立されてきた中性子及び第 3 世代光源によって手法が確立された放射光を用いて直接の観測量が長さで時間の逆数で記述される非弾性散乱や準弾性散乱に加えて、直接の観測量が実時間と長さの逆数で記述される自由電子レーザーを用いた光子相関法による計測に基づく研究成果も報告された。特に、筆者が聴講したセッションにおいては、SACLA での研究成果が多かったような印象を持った。

初日の基調講演以外で参加者が一堂に会して、サイエンスに関する議論を行える機会となった月曜日と木曜日のポスター・セッションでは、手前に見えるコーヒーなどの飲み物を手にした参加者が部屋の奥の

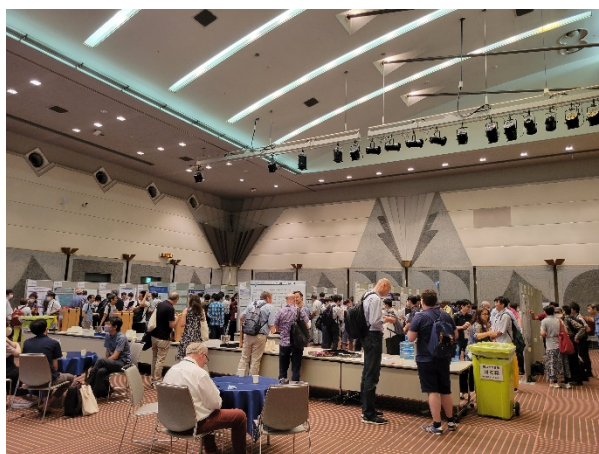


写真 4 ポスター・セッションの様子

方に見える多数のポスターの前で熱い議論を交わしていた（写真 4）。

最終日には、ガラスや液体、高分子などの高次構造やダイナミクスに利用される計測手法、特に量子ビームを利用した手法に関するセッションが設けられた。SPRING-8 や J-PARC の施設における現状紹介とともに海外施設の現状についての報告があった。会議全体を通して、複雑系と呼ばれる分野での量子ビーム連携利用の重要性を再認識できた。

3. おわりに

本会議は、筆者にとっては初めて参加する国際会議であったが、最近放射光と中性子の連携利用に関して取り組んでいる分野だったので、充実した 1 週間であった。会議全体としての印象は、お盆休み最中という日本の暦も影響した可能性もあり、1 週間の会議を通じて、日本で開催する国際会議としては外国からの参加者が非常に多い印象を受けた。本会議は、次回は 2025 年 7 月 20 日～25 日の会期でスペインのバルセロナのカタルーニャ工科大学で Josep-Luis Tamarit 氏を Chair として開催される。

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
〒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

15th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (ICESS-15) 会議報告

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 産業利用・産学連携推進室

安野 聡

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

木下 豊彦

1. はじめに

2023 年 8 月 21 日～25 日にフィンランド オウルにて、ICESS-15 (15th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure) が開催された^[1]。ICESS は「電子構造」とそれを調べるための「電子分光」に関連した研究が主として議論される会議である。1971 年に電子分光会議 (ICES: International Conference on Electron Spectroscopy) として開催され、その後、電子構造をはじめ、現在では吸収分光や発光分光、また走査トンネル顕微鏡などのコミュニティが集まり、現在ではこれらに関連した幅広い分野の研究報告が取り上げられている。近年では 2012 年にフランスのサン・マロ、2015 年にアメリカのニューヨーク、2018 年に中国の上海で開催され、3 年ごとに欧州、北米、アジアと順番に開催されている。本来であれば 2021 年に欧州であるフィンランド オウルでの開催が予定されていたが、新型コロナウイルスの世界的な感染拡大による影響と IAB (International Advisory Board) から対面形式での開催が強く要望された結果、開催時期を 2 年延期して 2023 年にオンラインでの開催となった。また本会議に近い話題が議論される VUVX 2023 (41st International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics、ブラジルで開催) とのオーバーラップをさけるため、今回の日程での開催の運びとなったようである。

今回の会議は、オウル大学 (University of Oulu) により主催され、Co-Chairs を University of Oulu の Marko Huttula 氏、Lund University の Joachim Schnadt 氏、University of Oulu の Minna Patanen 氏が務められた。写真 1 に会場となった University of



写真 1 ICESS-15 が開催された University of Oulu の外観写真。

Oulu メインキャンパスの外観写真を示す。本大学はオウル市の中心部から北に約 6 km の Linnanmaa に位置している。会期中における市街から大学までの主な移動は、主催者側が朝夕にそれぞれ 2 便ずつ準備したシャトルバスを利用することができ、不慣れな公共交通機関を利用する必要がなく大変便利であった。

会議は 24 か国から 170 名余りの参加があり、27% は女性の参加であった。主な参加国で人数の多かったところはフィンランド、スウェーデン、ドイツ、オランダ、日本であった。通常は 300 名近い参加者が期待される会議であるが、新型コロナウイルスの影響やウクライナ情勢の影響で参加者が少なかったのではないかと推察された。日本からの参加者も以前では 40 名前後が参加することが常であったが、上記事由に加えて円安やインフレの影響により特に学生の参加者が少なかったのが大変残念であった。一方で対面形式であったこと、また参加者が少なかったことが幸いして各所において密度の濃い議論ができていたように思う。



写真2 Marko Huttula氏により Climate compensation of ICESS participants traveling to Oulu in 2023 が説明された時の様子。

オープニングで、Co-Chairs の Marco Huttula 氏より挨拶があり、近年のサステナビリティへの社会的責務に鑑みて、環境に配慮した会議を目指す必要があることから Climate compensation of ICESS participants traveling to Oulu in 2023 として、参加者の数に見合うだけの二酸化炭素を吸収するため（旅程などを念頭においていると推定）、オウル南方の森林で行われた 190 本の松の木の新植について紹介されたことが特徴的であった（写真2）。

2. 会議の概要

会議の日程は、全日の午前前半にシングルでの Plenary session、以降は基本的に平行での口頭発表で構成され、他に 2 日目午後の Poster session と最終日の C. S. Fadley 氏を偲ぶ Memorial session が設定されており、各々の分野における研究報告と議論が



写真3 Plenary と口頭発表が行われた会場（Saalasti Hall）の様子。



写真4 セッションが平行で開かれる場合に使用された講義室（Lecture hall L2）の様子。

進められた。写真3 および写真4 に口頭発表が行われた会場の様子、写真5 にポスター会場の様子を示す。

本会議の講演分類としては、基礎物性に重きをおいた AMO (Atomic, Molecular, Optical physics) や Theory、実用材料への応用やオペランド測定に関する報告の多かった Material & surface science、Ambient & *in-situ* spectroscopy、その他、評価技術で分類した RIXS (Resonant Inelastic X-ray Scattering)、HAXPES (Hard X-ray photoelectron spectroscopy)、STM (Scanning Tunneling Microscope) & related techniques、FEL (Free Electron Laser)、測定対象で分類した Correlated systems & superconductors、Spin and magnetism など、幅広い分野に関するセッションが用意された（講演分類を表1に示す）。

本会議の全講演件数は Plenary session が 10 件、口頭発表が 57 件（うち招待講演 25 件）、Poster session

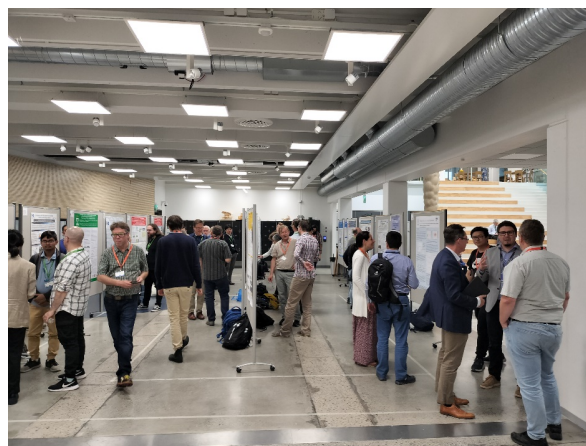


写真5 ポスター会場（Agora）の様子。

表1 ICESS-15 の講演分類

■ Session

Material & surface science

Correlated systems & superconductors

Dynamics

AMO

Spin and magnetism

HAXPES

Spectromicroscopy/Microspectroscopy

Ambient & *in-situ* spectroscopy

Theory

RIXS

Material science methods

FEL

HHG

Liquids

STM & related techniques

Enviromental molecular science

■ Chuck Fadley Memorial session

Photoelectron diffraction

が66件であった。発表時間は質疑応答を入れて招待講演が30分、一般講演が20分となっていて、各セッションの最初に招待講演が1~2件あり、その後一般講演が2~3件続く形式で、1つのセッションの時間は2時間程度になっていた。前述の通り、研究分野、対象が非常に広範であり、普段触れる機会の少ない分野については、講演内容や研究結果を理解するのに大変苦労することも多かったが、一方で Plenary session や招待講演については、最先端の結果は当然のこと、現在に至るまでの研究の経緯やベースとなる物理に関する内容を分かりやすくまとめた講演も多く大変参考になった。

3. 会議の内容の概要

・8/21 (月曜日)

初日の Plenary session では、Sogang University の Hyunjung Kim 氏より、Pohang の FEL を用いた触媒の構造の時間分解の観察結果の報告があった。NO_xの還元中に起こる ZSM-5 ゼオライトへの Cu の拡散と置換の現象を捉えるなど、かなり先端的なデータが出ていようで感銘を受けた。Spin & magnetism session

では、University of Münster の Markus Donath 氏から、HiSOR を利用した Re(0001)表面の ARPES (Angle-resolved Photoemission Spectroscopy) 測定によるショックレー準位とタム準位の起源についての議論をされていた。Material & surface science session では Momentum microscope の講演が2つあった。Stony Brook University の Alice Kunin 氏によるレーザー励起、もう一つは Johannes Gutenberg University の Olena Tkach 氏による DESY での HXP (Hard X-ray Photoelectron Diffraction) への応用であった。空間、運動量、エネルギー、スピンを分解したスペクトルが一気にとれることが特徴で、前者では層状化合物を積み重ねた界面におけるエキシトンの振る舞いが、後者では円偏光で表れる2色性の議論に新規性があり大変興味深かった。

初日の夜に DESY の Wolfgang Eberhardt 氏による Public lecture が行われた。講義では、Designing the energy system of the future と題し、カーボンフリーの世界を目指すために力を入れて研究開発すべき課題が細かい統計の数字も使いながら詳細に議論された。本も出版されており会場において10ユーロで販売されていた。その後、オウル市長主催のレセプションが開催された。市長のあいさつでは、フィンランドが世界で一番過ごしやすい国として評価されていること、オウルは、ヨーロッパの中堅都市の中でも暮らしやすい都市として高い評価を受けていること、などが歓迎の挨拶として述べられた。

・8/22 (火曜日)

Plenary session は東京大学 物性研の近藤 猛氏から、レーザー励起の高分解能スピン分解 ARPES で Exotic magnet の物性研究として Ba₂Ca₄Cu₅O₁₀(F,O)₂ の Fermi pockets の観察や CeSb における Devil's staircase transition のメカニズム解明などについて紹介された。また、台湾 National Synchrotron Radiation Research Center の Di-Jing Huang 氏からは RIXS によるクプラート超伝導体の La_{2-x}Sr_xCuO₄ や Bi₂Sr₂CaCu₂O、Spin-orbit material の CuAl₂O₄ についての詳細な電子構造評価の結果について発表されていた。同日では特に RIXS/SXES (Soft X-ray emission spectroscopy) の成果の発表が目立ってい

たように感じた。実際に RIXS session において、東京大学 物性研の原田 慈久氏や KTH Royal Institute of Technology の Faris Gel'Mukhanov 氏らの発表にあったように、固体、原子分子、溶液への応用が広がっている様子が目についた。他、FEL による RIXS や発光分光の利用もだんだん盛んになっているようであり、Uppsala University の Jan-Erik Rubensson 氏が発光分光を用いた Ne 原子のイオン化ダイナミクスについて Poster session で報告を行っていた。

Material science methods session では、Karlsruhe Institute of Technology の Constantin Wansorra 氏から XPS および HAXPES のおける低～高エネルギー (10 keV) 領域における光イオン化断面積について実測といくつかの理論計算値を比較した結果についての報告があった。本会議においてこのような基礎的データ収集に関する取り組みは珍しいものと感じたが、現在、実用的な表面分析として広がりを見せる HAXPES の定量分析には必須なデータであり、今後さらにもこのような取り組みが増えることに期待したい。

2 日目午後からは Poster session が実施された。内容はかなりバラエティーに富んでおり、評価手法としては、XAS (X-ray absorption spectroscopy)、RIXS、XPS (X-ray photoelectron spectroscopy)、ARPES、AP-XPS (Ambient pressure-XPS)、HAXPES などの評価手法のほか、放射光施設のビームラインに関する報告があった。研究対象の材料に重きをおいたものもあり、2D マテリアル、Li イオン二次電池、触媒などに関する報告も見られた。その他、計算関連や Core-hole clock など興味を引く報告も見られたが、筆者らは自身の Poster session や IAB 会合があったため、Poster session に関してはほとんど聴講することができなかったことは大変残念であった。

・8/23 (水曜日)

Plenary session では、DESY の Simone Techert 氏による報告が行われ、Water splitting 発現時におけるペロブスカイト型構造を持つ触媒材料について、*in-situ* RIXS により電子状態を明らかにしていた。光電子を捉える光電子分光に比べて、光 (X 線) を検出する RIXS は、その場計測の実現性や汎用性の点で利点

があると実感した。これは先述した 2 日目の RIXS のセッションでも同様の傾向が見られており、改めてその汎用性の高さを窺い知ることとなった。Ambient & *in-situ* spectroscopy session では、Institute of the Max Planck Society の Hendrik Bluhm 氏から、Liquid -Vapor Interfaces について報告があり、エアロゾルによる微量ガスの取り込みと放出、および海洋による CO₂ 隔離と光電子分光にしてはかなりスケールの大きな背景について説明があり大変興味深かった。溶液中の塩分や溶質濃度に依存した溶液界面におけるガス種の吸着状態を AP-XPS により明らかにしていた。他、Lund University の Esko Kokkonen 氏からは AP-XPS のエンドステーションへ Atomic layer deposition 装置を組み込み、酸化膜の成膜過程の観察へ応用した報告があった。AP-XPS や AP-HAXPES について、果敢に様々な現象や対象へ応用する姿勢に刺激を受けるとともに、同技術が適用できる分野、現象の潜在的な可能性の広さに改めて感心した。

・8/24 (木曜日)

Plenary session では Aalto University の Patrick Rinke 氏から、AI や machine learning をスペクトルの予測と材料特性・構造の予測に適用させた研究報告があった。リグニン (フェノール性化合物) における NMR (Nuclear Magnetic Resonance) の分析結果から、機械学習によって抗酸化活性などの特性を予測し、バイオベース・プラットフォームケミカルへ重合させるための最適な処理条件 (量や温度など) を抽出することに成功したとのこと。本会議では、本報告のような AI や機械学習に関する報告はまだそれほど多くなかったが、今後このような報告事例も増えてくるのではないかと実感した。

HAXPES session では、Sorbonne Université の Tatiana Marchenko 氏から、気相チオフェンおよび固体有機物の Post-collision interaction (PCI) effect におけるオージェ電子スペクトルの励起 X 線エネルギー依存性による評価事例の報告があった。PCI に起因するピークシフトが光電子の散乱に起因する電荷の遮蔽効果によるものと理論モデルと実験値の比較から結論づけている。他、高輝度光科学研究センター

の Ibrahima Gueye 氏からは、ペロブスカイト型太陽電池のオペランド計測による、試料構造に起因した劣化機構の解明、KTH Royal Institute of Technology の Fredrik O. L. Johansson 氏からは、共鳴オージェ分光法を使用して、Au、Ag、Cu に吸着された Xe の無放射減衰過程を観察し、Core-hole clock に基づく理論から減衰過程の違いを基材依存性から考察していた。

・8/25 (金曜日)

Plenary では TOF 型の Momentum microscopy を HARPES や HXPD へ応用した事例について、Johannes Gutenberg University の Gerd Schönhense 氏から報告があった。特に HXPD ではグラファイトをはじめ、GaAs、SrTiO₃ など様々な材料へ応用しており、XRD にはない元素選択性から構造を詳細に議論できる有用な評価であることを改めて実感した。その他、光電子ホログラフィの話が奈良先端大学院大学の松下 智裕氏が行った。両方の話題とも、この分野で先導的な役割を果たされ、4 年前に亡くなられた C. S. Fadley 氏の光電子回折現象の研究の功績に負うものが大きく、引き続いて行われた同氏の Memorial session でも一同その思いを新たにしていた。

4. おわりに

Closing remarks and awards では若手を対象とした ELSPEC Student Awards (Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena によって創設) と Poster session から選出されるポスター賞についての発表があった。例えば ELSPEC Student Awards の Uppsala University の Elin Berggren による有機高分子ヘテロジャンクションにおける Core-hole clock spectroscopy による電荷移動機構の解明をはじめ、どの受賞された研究内容においても、非常に洗練されよくまとめられた内容であったと思う。

次回は ALS (Advanced Light Source) やスタンフォードなどのアメリカ西海岸の施設の研究者を中心として 2 年後に (おそらく Berkeley で) 開催されることとなった。現地実行委員は Lawrence Berkeley National Laboratory の Eli Rotenberg 氏らを中心に行われる予定である。

参考文献

[1] <https://www.ices2021.com/>

安野 聡 YASUNO 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 産業利用・産学連携推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0924
e-mail : yasuno@spring8.or.jp

木下 豊彦 KINOSHITA Toyohiko

(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
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0802-3129
e-mail : toyohiko@spring8.or.jp

第 26 回国際結晶学連合会議 (IUCr 2023) 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 構造生物学推進室

坂井 直樹

1. はじめに

26th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography (IUCr2023) は 8 月 22 日から 29 日までオーストラリア、メルボルンの Melbourne Convention & Exhibition Centre (写真 1) で開催された。国際結晶学連合 IUCr の Congress は 3 年に 1 回の開催であり、前回 2020 年のプラハでの大会は COVID-19 の影響により翌 2021 年にハイブリッド形式で開催されており、実に 6 年ぶりにコロナ禍前のスタイルで開催された会議であった。



写真 1 会議が開催された Melbourne Convention & Exhibition Centre。



写真 2 ウェルカムレセプションにやってきたコアラ。メルボルン動物園の協力でカンガルーやワニなど多数の動物と触れ合うことができた。

連日最高気温が 35 度以上の猛暑の日本から、初春のオーストラリアへの移動で温度差を心配したが、存外気温の違いなど気にならないものであった。後述する初日の受賞講演に引き続き開催されたウェルカムレセプションではメルボルン動物園からコアラ、カンガルーをはじめとした動物たちも参加してオーストラリアらしい雰囲気での会議がスタートした(写真 2)。

2. 講演内容

会議はオーストラリアの先住民の伝統にのっとったオープニングセレモニー(写真 3)で幕を開けた。セレモニーに引き続き、Ewald prize を受賞された Columbia University の Wayne A Hendrickson 氏による受賞講演が行われた。蛋白質結晶構造解析の歴史と、波長可変の放射光を用いて蛋白質結晶に導入した重原子の異常散乱効果を利用する多波長異常散乱法 (MAD 法) および単波長異常散乱法 (SAD 法) に至る位相問題解決の歴史に関してご自身の研究やその時々背景を取り混ぜた講演であった。筆者が大学院生だった頃 (20 年以上前) に重原子誘導体の結晶を作成し、SPRING-8 で MAD 法のための回折実験を試行錯誤しながら行っていた頃を思い出した。



写真 3 オープニングセレモニーではオーストラリア、ニュージーランドの伝統的な音楽と踊りが披露された。

ここから、筆者の専門である構造生物学に関する発表について紹介していくこととする。生体高分子の構造解析では長きにわたって主たる手法であった結晶構造解析だがクライオ電子顕微鏡（クライオ電顕）の発展により近年では成熟した一つの選択肢となった感がある。さらに近年は AlphaFold2 という AI による立体構造予測の登場により、従来の構造予測手法を凌駕する精度で蛋白質の立体構造を予測することができるようになった。このような背景で構造生物学における蛋白質結晶構造解析の意味合い、あるいはクライオ電顕や AlphaFold2 との連携について模索するような発表が見られたことは今回の会議の一つの特長だったのではないだろうか。

LANL の Thomas Terwilliger 氏は基調講演において AlphaFold2 による予測構造を結晶構造解析にどのように利用していくかを述べていた。予測構造の信頼性が高い場合には結晶構造解析で得られる電子密度の弱い領域への分子モデルの構築に予測構造を用い、構造精密化を繰り返すことでより確からしい分子モデルを得ることができると主張していた。また AlphaFold2 は作業仮説を立てるために非常に有力なツールであり、結晶構造解析による仮説評価と組み合わせることにより、構造生物学研究を加速するものであるとも述べていた。

Duke University の Christopher Williams 氏は AlphaFold2 による予測構造の評価ツール `barbed_wire_analysis` を開発し、構造解析スイートである Phenix に実装したことを紹介していた。この評価ツールを使うと、pLDDT (predicted Local Distance Difference Test) の値が 70 以下の予測信頼性が低いモデルから立体構造を有している部分を抽出（全く立体構造としての要素を持たない領域を排除）することができ、このような部分の構造は分子置換法やクライオ電顕のモデル構築に十分に利用することができるものであるという報告がされた。AlphaFold2 を積極的に結晶構造解析に利用していくためにはこのような評価ツールも必要になるはずである。

今回の会議では自動測定を主とした放射光ビームラインにおける実験の自動化やリモート実験の開発にとどまらず、これらを利用した研究についてのセッ

ションが数多く組まれていた。蛋白質の立体構造を利用した創薬、いわゆる Structure-Based Drug Design (SBDD) はこれまでも広く用いられてきた。現在では主として放射光ビームラインにおける自動測定システムの開発により実験効率が向上したことにより、1 日あたり数百データセットを取得することが可能になっている。このような自動測定システムと組み合わせ、数百種類の化合物から構成されるライブラリー、特に分子量 300 程度の比較的小さな分子（フラグメントと呼ばれる）を蛋白質の結晶に導入し、結晶中の蛋白質に結合する分子を探索することで新たな薬剤を開発する出発点になる化合物を見出す、Crystallographic Fragment Screening (CFS) という手法の開発が進んでいる。このようにして得られた蛋白質とフラグメントの複合体の立体構造情報、特に相互作用様式に関する情報をもとにして化合物の構造展開をすることで新たな薬剤を開発する手法が Fragment-Based Drug Design (FBDD) と呼ばれ、構造生物学を利用した創薬研究に取り入れられている。このような背景を反映してか会議では CFS および SBDD にフォーカスしたセッションが多数開催された。

Swiss Light Source の May Sharpe 氏からは SLS FFCS (Fast Fragments and Compounds Screening) platform について報告があった。FFCS においては試料調製からデータ測定、自動データ処理、自動構造解析で得られるデータを一元的に管理する LIMS を開発して CFS を行っているとのことであった (Heidi という名だそう)。また化合物の蛋白質結晶への導入にはアコースティック分注装置 ECHO と、結晶凍結を効率的に行うために結晶化プレート中の結晶の状況を記録したデータベースを参照して結晶のあるプレート上のウェルへプレートを移動する XY ステージと実体顕微鏡を組み合わせた Shifter と呼ばれる装置を利用して効率よく結晶試料を準備することができるとのことだった。

Australian Synchrotron の Rachel Williamson 氏からコミショニング中の 3 本目の生体高分子用のビームラインとなる MX3 を利用した FBDD のためのシステム構築について発表があった。MX3 でも自動測定が導入され 1 サンプルあたり 3.5 分で測定可

能であり、結晶試料の準備には ECHO と Shifter を導入しているということだった。構造解析のパイプラインとして AutoRickshow を使っており、5 分間で 100 の分子置換の解を得ることができるなどデータ取得から構造解析までの効率化が進んでいた。

MAX IV の Tobias Krojer 氏は MAX IV の CFS プラットフォームである FragMAX について発表があった。FragMAX はルンド大学と連携して試料調製を実施しており、データ収集を MAX IV で行っていた。BioMAX での自動測定は 1 日あたり 400 データセットを取得することが可能であるとのこと。また MicroMAX を使って常温で結晶化プレート中の結晶に X 線を照射してデータを収集することにより、結晶凍結過程を省略することを目指した開発が紹介された。FragMAX でも SLS と同様に LIMS を開発して使用していた。

Helmholtz-Zentrum Berlin の Tatjana Barthel 氏からは BESSY II における CFS について報告があった。試料調製では化合物導入にアコースティック分注装置を利用しており、測定は自動測定で行っていた。分子置換のパイプラインを構築しており自動構造解析が可能である。LIMS は MAX IV のシステムを導入しているとのことだった。BESSY II の CFS の特色は解析した構造からの化合物の構造展開について医薬品化学の研究チームと共同研究体制を構築し、単に化合物複合体の構造解析をするのにとどまらず新たな化合物のデザインまでを一貫して行える体制になっていることであった。どちらかというと言製企業よりも学術機関の研究者のニーズに応えることを志向しているようであった。

放射光ビームラインを用いた CFS の先駆けである Diamond Light Source からは Daren Fearon 氏が CFS プラットフォームである XChem を用いてパンデミック初期に実施された SARS-CoV-2 の蛋白質を標的とした CFS の成果がポスターで報告されていた。本会議に先駆けて実施された CFS に関するサテライトワークショップでは Fearon 氏より同じライブラリセットを使ってクライオ条件でデータ収集を行った時と VMXi にて常温でデータ測定を行った時に得られるヒット化合物が両方で完全に一致しないことがわかってきたとの報告もあった。

DESY の Sebastian Günther 氏からは PETRA III P09 を使用した新たな CFS 用ビームライン HiPhaX による常温でのハイスループットスクリーニングに関する報告があった。HiPhaX では固定ターゲットを用いた Serial Synchrotron Crystallography が可能であり、微小結晶をターゲット上で化合物にソーキングして SSX 測定することで標的蛋白質と化合物の複合体の構造解析が可能であり、また常温で回折実験を行うことで凍結結晶からの測定では得られなかった化合物複合体の立体構造が得られたことが報告されていた。

このように CFS プラットフォームはヨーロッパやオーストラリアの放射光施設で整備されてきている。筆者らも SPring-8 で整備を進めている同様な化合物スクリーニングのためのプラットフォームについてポスターで発表した。発表があった各施設では試料調製から自動測定、自動構造解析まで一貫したパイプラインとして整備が進められており、実験情報を一元管理する LIMS が導入されている。また試料調製においては化合物導入にアコースティック分注装置を結晶凍結に Shifter を用いている施設が多く、自動構造解析では PanDDA (Pan-Dataset Density Analysis) を組み込んだシステムが標準になっている。今後の放射光施設の生体高分子解析ビームラインでは試料調製から構造解析まで一貫して実施できる利用環境を整備することが重要であることを改めて感じた。このようなスクリーニング可能な放射光施設では自動測定システムが導入されており、多くの場合 Unattended data collection (UDC) が可能である。Diamond Light Source の Ralf Fraig 氏は I04 に実装された自動測定システムを紹介していた。スループットの点ではこのシステムが 1 結晶 3 分を切っており最速ではないだろうか。SLS の Kate Smith 氏も SLS の自動測定システムについて報告していた。またリモート測定システムの導入も進んでおり、Canadian Light Source の Michael Fodje 氏からは生体高分子解析ビームラインでは 95% のユーザー実験がリモート測定であることが紹介されていた。質疑応答では年間を通してほとんどユーザーが来所しないとなるといかにしてユーザーとのコミュニケーションを取っていくのか？という議論がなされた。これについては毎年 1 週間、2-30

人の参加者に旅費を補助して実施するスクール (実験責任者も参加可能) でユーザーとのコミュニケーションを取っているとのことだった。私たちが運用している BL45XU でも同じことが起きており、現在は 100% のユーザー実験が UDC である。新規ユーザーとのコミュニケーションをどのように取っていくかなど参考になる点もあった。リモート測定や UDC の利用が広がっているがその際の試料の輸送も話題に上ることが多かった。前述したように凍結した結晶のみならず常温下での測定を行うケースも増えてきている。凍結結晶の場合はドライシッパーを用いて安全に輸送することが可能だが、常温の場合は多くの場合、結晶化プレートを送送することになる。Australian Synchrotron の Eleanor Campbell 氏は MX3 における In-tray screening を UDC またはリモート測定で実施するための結晶化プレート輸送用容器の開発を紹介していた。蓄熱剤を利用して 20 度程度で温度を保ち数枚の結晶化プレートを輸送できるというものであった。頭の高さから床面に落としてもプレート中の結晶化ドロップは飛散しないことを示すビデオも紹介されて会場は大いに沸いたが、今後プレート中での常温測定の自動化、リモート化が進むと輸送の問題は切実になってくるものと思われ、真剣に取り組む必要がありそうである。

3. おわりに

会議最終日前日の夜は Melbourne Museum において “Night at the Museum” と冠して Congress celebration party が行われた。Melbourne Museum は世界遺産である Royal Exhibition Building に隣接した博物館である。博物館の広大なエントランスホールにステージを設置しての立食形式のパーティーであり、博物館の展示も見て回れるというものであった。メルボルンの文化、歴史に触れることもでき、学会に集まった参加者と交流を深めるには良い会場であった。パーティーの後半にはステージ上でライブも開催され、老若問わずリズムに乗りながら、次回 2026 年のカルガリーでの IUCr congress での再会を期しつつメルボルン最後の夜は更けていった。

オーストラリアというヨーロッパからも北米からも地理的に遠い場所での開催、かつ COVID-19 の影

響もあって心配されたが、久々の対面での学会で会議での議論に加えて会場内外での交流も活発に行われていた。コロナ禍で人的交流が乏しかった時期に海外の放射光施設は着実に開発を進めていたことを痛感するとともに、私たちが進めている研究開発の方向性を再点検する良いきっかけにもなり有意義な会議であった。

坂井 直樹 SAKAI Naoki

(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 構造生物学推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0802 ext. 3838
e-mail : nsakai@spring8.or.jp

第 37 回メスバウアー効果の応用に関する国際会議 ICAME2023 会議報告

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 精密分光推進室

永澤 延元

1. はじめに

ICAME2023 (XXXVII International Conference on the Applications of the Mössbauer Effect) が 2023 年 9 月 3 日から 8 日までの日程で、コロンビアのカルタヘナで開催された^[1]。会議の名前にもあるメスバウアー効果とは、原子核の無反跳共鳴吸収現象を指しており、ICAME ではこのメスバウアー効果を応用した測定手法を取り入れた研究が議題の中心になっている。ICAME は 2 年毎の開催であり、ルーマニアで開催された前回の ICAME2021 に続いて ICAME2023 も対面・オンラインのハイブリッド形式で開催された。しかし大半の参加者がオンライン参加であった ICAME2021 とは異なり、ICAME2023 は多くの参加者が現地に足を運んでいた。また、ICAME2021 は超微細相互作用とその応用に関する国際会議 (International Conference on Hyperfine Interactions and their Applications, HYPERFINE) との共催であったが、今回の ICAME2023 は単独の開催である。



写真 1 ICAME2023 会場である Hotel Caribe by Faranda Grand の外観。

筆者は日本から地球の反対側に近いコロンビアまで移動するため、フライトだけでもかなりの時間が必要だった。関西国際 - ロサンゼルス - マイアミ - カルタヘナという、アメリカをほぼ横断する計 19 時間近いフライトでようやくコロンビアに降り立った。会場である Hotel Caribe by Faranda Grand はカリブ海のビーチすぐそばに位置するホテル (写真 1) であり、空港から 5、6 km 程度の距離をタクシーで移動し会場に到着した。

2. 会議の概要

初日には Tutorial Lecture のみが行われ、Opening Ceremony は 2 日目に行われた。Opening Ceremony では Universidad de Antioquia 学長の John J. Arboleda 氏、メスバウアー効果の応用に関する委員会 (International Board on the Applications of the Mössbauer Effect, IBAME) 委員長の R. Röhlberger 氏、IBAME のコロンビア代表であり ICAME2023 議長の C. A. Barrero Meneses 氏の挨拶が行われた。Scientific Program は従来の ICAME と同様のトピックで分類されていた。そのトピックは以下の通りである:

- Magnetism and solid-state physics
- Chemistry
- Nanostructures and thin films
- Materials science and industrial applications
- Biological and medical applications
- Earth sciences, mineralogy, cultural heritage and environmental sciences
- Lattice dynamics and vibrational properties
- Experimental techniques, methodology and coherent phenomena

会議スケジュールはハイブリッド開催にあたりオンライン参加者の時差を考慮した結果、セッション内でトピックが統一されてない進行となった。このことは Closing Ceremony 内の総括でもハイブリッド開催のデメリットとして取り上げられていたが、会議参加へのバリアを考えると難しいところである。

発表内容の概要を紹介する前に、ICAME と放射光を用いた実験の関係について少し述べる。メスバウアー効果を用いた測定で最も主流なのは放射性同位元素 (RI) から自然放射される γ 線を用いた吸収分光測定であり、放射光を利用しない測定である。その一方で SPring-8 を含む各放射光施設でも核共鳴散乱という括りでメスバウアー効果を用いた測定が行われている。放射光とメスバウアー効果を組み合わせることで得られる測定手法には、核ブラッグ散乱を用いることで高フラックスな偏光 γ 線を利用するエネルギー分光法 (Synchrotron Mössbauer Source, SMS)、RI 線源を利用することが難しい短寿命の原子核励起を利用する吸収分光法、特定の原子核の振動を観測する核共鳴非弾性散乱法などがあげられる。南米で核共鳴散乱実験を実施できる放射光施設が存在しないこともあってか、ICAME2023 での大多数の発表が RI 線源を用いた測定についてであったが、放射光ユーザーを读者として想定し、放射光施設が関係する発表内容からいくつか紹介する。

解析手法について ESRF の S. Yaroslavl'tsev 氏は、SMS 用の解析プログラム SYNCmoss を開発したという報告を行った。RI 線源の代わりに放射光メスバウアー線源を用いる SMS では、高いフィッティング精度を得るために放射光メスバウアー線源特有の装置関数を考慮する必要がある。今回発表された SYNCmoss はその装置関数を標準試料の測定から導出し、これを用いて試料のスペクトル解析を行うソフトウェアとなっている。これはオープンソースプロジェクトであり、Voigt 関数を用いることで SMS だけでなく RI 線源を用いるような従来のメスバウアー分光法のスペクトル形状も利用可能なソフトウェアであるという^[2]。興味がある方はダウンロードしてみると良いだろう^[3]。SMS に限らずメスバウアー吸収分光測定の解析では、(筆者が知る範囲で) 少なくない割合のユーザーが各自で解析プログラムを作成し、自身の

研究でのみ使用している。SMS は核共鳴散乱ビームラインの中で利用割合を伸ばしている測定手法であるため、これに最適化されたソフトウェアが開発されることはユーザー拡大に大いに貢献するのではないだろうか。

放射光を用いた核共鳴散乱測定は、高輝度である以外にも原子核励起の特徴の一つである電子系の励起と比べて長い寿命を利用することで、ダイナミクスの測定にも有用である。本会議でもいくつかのダイナミクスに関する発表が行われた。例えば ESRF の D. Bessas 氏は低温高圧下での ^{57}Fe SMS と ^{149}Sm 核共鳴前方散乱測定 (Nuclear Forward Scattering, NFS) を用いることで鉄系超伝導体 SmFeAsO の磁気揺らぎを観測した結果を、Helmholtz Institute Jena の S. Sadashivaiah 氏はレーザーパルスを用いることで原子核量子状態の制御を可能にする実験結果をそれぞれ報告していた。

メスバウアー効果を応用することで科学の重要な発展に貢献した研究者に贈られる IBAME Award には、Kyoto University の M. Seto 氏と AGH University of Science and Technology の S. M. Dubiel 氏が選出された。特に放射光分野においては Seto 氏は散乱体を用いる放射光メスバウアー吸収分光法、核共鳴非弾性散乱測定や準弾性散乱測定の手法開発・発展に大きく貢献されている。この場を借りて改めてお二人にお祝い申し上げる。

ポスターセッションではオンサイトでのポスターセッションとオンラインでのポスターセッションがそれぞれ開催された。オンラインのポスターセッションは Zoom を用いて行われた一方で、オンサイトのポスターセッションで掲示されたポスターについてオンラインから議論することはできなかったようだ。コロナ禍の収束までに学会の様式も大きく変化したのが、ポスターセッションは未だ発展の余地があるように思うのは筆者だけだろうか。

3. その他

初日の夜には Welcome Cocktail と称し飲み物と軽食がふるまわれ、参加者同士が再会を懐かしみ喜びながら談笑する声が多く聞こえた。Excursion ではカルタヘナの観光ツアーが実施され、サン・フェリペ要塞 (写



写真 2 Excursion で訪れたサン・フェリペ要塞の写真。要所ごとにガイドから説明を受けながら、複雑な通路やトンネルを通して頂上に登った。

真 2) やビーチ、旧市街をガイドしていただいた。Social Program (写真 3) では食事を堪能しながら伝統的な音楽、踊りを楽しんだ。

日本の IBAME 代表に今回の会議参加者数について教えていただいたところ、口頭、ポスター発表を合わせた総発表者 131 名、内オンサイト 84 名、オンライン 47 名であり、Web での最大同時接続は 32 アカウントであったそうだ。各国からの参加人数としては、やはり開催国のコロンビアが最も多く 25 名、次いでドイツ、日本という順番であった。

最後に、Closing Ceremony では次回開催についての案内があった。次回は 2025 年の 9 月 7 日から 12 日にかけてポーランドの Gdańsk にて、HYPERFINE との合



写真 3 Social Program 開催にあたり、ICAME 議長の挨拶の様子。Social Program は ICAME 会場と同じホテルで実施された。

同開催が予定されている。ICAME では各 ICAME 組織委員会の代表が代々バトン代わりにハンマーをリレーしているが、前回の ICAME はオンライン参加によってリレーができなかったため、今回は会議始めにコロンビア代表に、会議終わりにポーランド代表に、と 2 回の授与式が行われた。日本でもコロナウイルス感染症が 5 類に移行して随分経つが、全体を通してコロナ禍での制限からの脱却が感じられる会議であった。

参考文献

- [1] <https://www.udea.edu.co/wps/portal/udea/web/inicio/campanas/icame-2023>
- [2] S. Yaroslavtsev: *J. Synch. Rad.* **30** (2023) 596-604.
- [3] <https://gitlab.esrf.fr/yaroslav/syncmoss>

永澤 延元 *NAGASAWA Nobumoto*

(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 精密分光推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0833
e-mail : nagasawa@spring8.or.jp

第9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

筒井 智嗣

1. はじめに

9月4日に東京・秋葉原のUDXカンファレンスとオンラインのハイブリッドで開催された「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」について報告する。本シンポジウムは、放射光施設であるSPRING-8の登録機関であるJASRI、中性子施設であるJ-PARC MLFの登録機関であるCROSSと富岳を始めとする大型計算機に関する登録機関であるRISTが主催者となり、コロナ禍の2020年を除いて毎年開催されてきた。

第9回を迎えた今回のシンポジウムではデータ・サイエンスをテーマに7人の講師の先生方に講演を行っていただいた。当日のプログラムは以下の通りである。

第1セッション：施設と登録機関の現状

座長：野間 敬 (CROSS)

○開会挨拶

雨宮 慶幸 (JASRI)

柴山 充弘 (CROSS)

林 周平 (文部科学省)

○施設と登録機関の紹介

SPRING-8 木村 滋 (JASRI)

J-PARC 松浦 直人 (CROSS)

「富岳」、HPCI 齊藤 哲 (RIST)

第2セッション：データ駆動型研究Ⅰ

座長：吉澤 香奈子 (RIST)

「大型実験施設を活用したデータ駆動型マテリアルサイエンス」

小野 寛太 (大阪大学)

「第一原理計算データを活用したデータ駆動型物質・材料研究」

安藤 康伸 (産業技術総合研究所)

第3セッション：自動測定と自動計算

座長：岡崎 伸生 (CROSS)

「大型実験施設×スパコン×デジタルが切り拓く新しい研究開発環境」

一杉 太郎 (東京大学)

「SPRING-8 構造生物学ビームライン 自動測定システム (ZOO) の現状」

平田 邦生 (RIKEN/SPRING-8)

「高分子物性自動計算システム RadonPy の開発と産学連携によるデータプラットフォームの共創」

林 慶浩 (統計数理研究所)

第4セッション：データ駆動型研究Ⅱ

座長：筒井 智嗣 (JASRI)

「富岳におけるベイズ推定を用いた全反射高速電子回折 (TRHEPD) のデータ解析」

星 健夫 (核融合科学研究所)

「大型実験施設とスーパーコンピュータをハブとしたビッグデータ駆動型高分子材料設計」

沼田 圭司 (京都大学)

○講演終了時の挨拶

田島 保英 (RIST)

(オンライン参加者はここで終了)

第5セッション：

講演者との意見交換・利用相談・情報交換・ポスター展示

ポスター発表 (会場のみ)

・JASRI ・CROSS ・RIST ・DxMT ・NanoTerasu

○閉会挨拶

社本 真一 (CROSS)

2. 会議報告

本シンポジウムは初めてハイブリッドで開催された。施設及び登録機関の紹介で構成された第1セッションに引き続いて、3つのセッションで構成された学術講演 (写真1)、現地会場のみで開催された最後の第



写真1 講演会場の様子

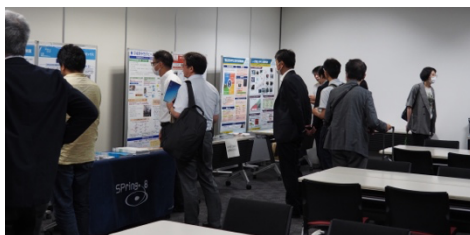


写真2 ポスター会場の様子

5セッションで、ポスター発表や講演者と参加者の意見交換の場(写真2)を設けるという構成で開催した。

第2セッションでは、データ駆動型研究Ⅰと題するセッションで、基調講演2件が行われた。まず、大阪大学の小野先生よりデータ科学を積極的に利用した大型実験施設での実験における新たな計測法の提案と実情が紹介され、限られたマシンタイムの中で如何に大事なデータを見落とさずに計測を実施するかについての講演が行われた。次に、産業技術総合研究所の安藤先生から機械学習ポテンシャルを用いた第一原理計算による物性理論研究の現状が紹介され、機械学習が不向きとする従来の結晶構造表記に関する問題克服の現状と精度の良い理論計算に基づく物性値の計算に関する講演が行われた。

第3セッションでは、自動計測と自動計算と題するセッションで、1件の基調講演と2件の招待講演が行われた。東京大学の一杉先生の基調講演では今後の大型共用施設、理論家、研究者に関する提言がなされ、研究室で実施されている試料作成から一連の評価を行うシステムに関する紹介があった。理化学研究所の平田先生からは SPring-8 でのタンパク結晶構造解析に実装されている Zoo システムの紹介、統計数理研究所の林先生からは高分子物性自動計算システム RandonPy の紹介があった。

第4セッションでは、データ駆動型研究Ⅱと題するセッションで、基調講演及び招待講演が1件ずつ行われた。基調講演の京都大学の沼田先生からはクモの

糸の研究を例示し、大型実験施設とスーパーコンピュータを利用した研究の現状と将来展望に関する講演が行われた。招待講演の核融合科学研究所の星先生からは陽電子線回折のデータ解析に関する講演が行われた。

3. おわりに

本シンポジウムは、参加者 189 名(現地参加:65 名、オンライン参加:124 名、事務局を除く)であり、完全オンラインで実施した第7回に匹敵する方々に参加していただいた。可能な限り多くの方に現地参加していただくことに加えて、講演者との活発な質疑応答を期待して、質問は現地参加者に限って実施した。期待通りの講演者の先生方と現地参加者の間での活発な質疑応答、その後の講演者同士や現地参加者との情報交換が行われた。開催日1日を通して、データ駆動型研究に関する関心の高さを示すシンポジウムとなった。また、本シンポジウムを開催するにあたって、実行委員の下に設けた各登録機関の研究者で構成されるプログラム委員メンバーに対して本紙面を通じて感謝を申し上げたい。特に、専任のプログラム委員メンバーは、講演者の選定に加えて、当日の講演に向けて講演者との粘り強い交渉をしていただいた。このことが、今回のシンポジウムの盛会に結び付いていると思う。最後に、プログラム委員のメンバーを記して本報告を結びたいと思う。

(プログラム委員)

漆原 良昌 (JASRI)、岡崎 伸生 (CROSS)、桑本 滋生 (JASRI)、社本 真一 (CROSS)、杉山 純 (CROSS)、筒井 智嗣 (JASRI)、吉澤 加奈子 (RIST)

(社本氏、吉澤氏、筒井氏は実行委員を兼ねる)

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
〒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

第 20 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・産学連携推進室 佐野 則道

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、高輝度光科学研究センター（JASRI）、および SPring-8 利用推進協議会（推進協）の 5 団体の主催、ならびに、理化学研究所放射光科学研究センター、SPring-8 ユーザー協共同体（SPRUC）、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）、総合科学研究機構（CROSS）、高度情報科学技術研究機構（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（あいち SR）および、佐賀県立九州シンクロトロン光研究センター（SAGA-LS）の後援で、第 20 回産業利用報告会が 9 月 7・8 日に神戸国際会議場において開催された。その目的は（1）産業界での放射光の有用性を広報するとともに、（2）SPring-8 の産業界利用者の相互交流と情報交換を促進することである。

本報告会は、推進協を除く主催団体が各々運用する専用・共用ビームライン利用成果の年次報告会の合同開催で、2004 年より毎年開催されてきた。今回は、例年の各主催団体の口頭発表会と合同のポスター発表に加えて、主催団体と参加者で SPring-8 産業利用のこれまでを振り返りさらにその将来について議論するパネルディスカッションが設けられた。また兵庫県の主体で実施する「ひょうご SPring-8 賞」の受賞講演会も併せて行われた。

総参加者数は 221 名で、口頭とポスターの各セッションでの活発な議論や、技術交流会（参加者 90 名）の盛況ぶりから、上述の開催目的は達成されたものと考えられる。特に本年は、主催団体らから望まれてきた完全対面の報告会と飲食を伴う技術交流会からなる、COVID-19 流行以前の形式が 4 年ぶりに実現できたため、開催目的が高い次元で達成されたとの印象を持った。

2. 口頭発表（第 1 日目）

セッション 1「開会挨拶」は 7 日の 11 時より行われた。JASRI の雨宮理事長が主催 5 団体を代表して挨拶し、SPring-8-II 実現の加速への期待と、パネルディスカッションや技術交流会を含めた本会が生み出す新しい人的「化学反応」への期待を述べた。

続いてセッション 2「第 21 回ひょうご SPring-8 賞受賞記念講演」が行われた。本年は花王（株）の田村氏が「紫外線が関与する毛髪うねり発生機構の解明と髪にも使える日焼け止めの開発」で受賞した。雨宮選定部会長による受賞理由説明、片山兵庫県副知事による賞状と副賞の授与、および記念撮影の後、田村氏が受賞内容に関する講演を行った。特筆すべき業績は、SPring-8 のマイクロビーム X 線を用いた広角・小角散乱法を活用し、紫外線と外力存在下での毛髪のうねり発生メカニズムを解明し、肌だけではなく毛髪のうねりに対しても効果のある日焼け止め新商品の開発に繋がったことである。日中の紫外線への曝露と夜間の寝癖により、意図しないパーマスタイリングが施されているとの発見は、非常に興味深かった。

昼食休憩を挟んで、セッション 3「兵庫県成果報告会」が開催された。まず兵庫県立大学の渡邊氏が、兵庫県における SPring-8 の専用ビームラインと中型放射



写真 1 口頭発表会場の様子

光施設ニュースバルの産業利用の取り組みについて説明を行った。続いて同大学の津坂氏が、BL24XUの明視野トポグラフィの概要と最近の成果について紹介した。X線トポグラフィは、結晶の格子欠陥や歪みを回折強度の違いから像のコントラストとして観察する手法で、回折光を用いる方法（暗視野）と、前方透過光を用いる方法（明視野）がある。（一財）ファインセラミックスセンターの姚氏は、後者によるパワーデバイス用ワイドギャップ半導体である β 型酸化ガリウム（ β -Ga₂O₃）の格子欠陥評価を行った結果、結晶成長条件の最適化に必要な転位の線方向と種類に関する情報が把握できた。一方、同BLには準大気圧硬X線光電子分光装置（NAP-HAXPES）がマツダ（株）により設置されており、同社の住田氏らがリチウムイオン電池（LIB）の充放電試験後の正極活物質に対し、埋もれた界面のニッケルやフッ素原子の電子状態の解析に利用している。ニュースバルの利用成果としては、兵庫県立大学の中西氏が、（株）コベルコ科研との共同研究で、BL05の軟X線吸収分光を用いて、次世代LIBケイ素負極におけるケイ素のフッ化が化学的劣化要因の一つであることを見出した。

セッション4「JASRI 実施課題報告会」では、4件の利用者による発表と、1件の施設側からの発表があった。まず、技術研究組合FC-Cubicの今井氏が、NEDO「燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業」により設置された固体高分子形燃料電池の評価解析プラットフォーム（通称FC-Platform）の紹介と、その材料解析グループによる量子ビームを用いた燃料電池解析について成果を発表した。同グループは、京大、名大、JASRI、およびCROSSにおける各研究グループの成果を集積し、燃料電池のマルチスケール解析を進めている。次に、早稲田大学の関根氏が、二酸化炭素転換のための触媒・材料の放射光を用いた微細構造解析の成果を発表した。回収二酸化炭素と再生可能エネルギー由来水素から、化学原料となる一酸化炭素を生成するための触媒プロセスとして、逆水性ガスシフト反応が知られている。同氏らは、この反応を高効率に達成するための電場中での触媒反応やケミカルルーピングの2つのプロセスと材料の開発において、BL14B2のXAFSを用いて反応機構を解明した。住友ゴム工業（株）の間

下氏らは、BL20B2の4次元CT法を用いて、タイヤゴム材料の伸長過程におけるゴム内部の破壊過程を観察し、タイヤに求められている強度および耐破壊性の向上に貢献した。住友電気工業（株）の久保氏は、筑波大学・RISTとの共同研究で、新しい耐衝撃材料や機械内部のダンパー等の幅広い応用が見込まれるせん断増粘流体の特性制御のために、せん断増粘性の発現機構の解明に取り組んでいる。せん断増粘性を示すシリカコロイド溶液について、BL40XUでSAXS、BL19B2でUSAXSを、それぞれ粘度測定と同時に散乱測定を行った結果、せん断応力の印加による一部のシリカクラスターの凝集や、ポリマー凝集体の流れ方向の整列による粘度増加の機構が明らかになった。本セッションの末尾にJASRIの安野氏が、大規模なアップグレードを実施し2023年7月よりユーザー利用が再開されたBL46XU HAXPES IIの現状を紹介した。光学ハッチに2種類のダブルチャンネルカット結晶分光器を導入したことで、定位置出射化により励起エネルギーの選択性が大幅に向上した。また2種類の分光器を使い分けて、分析目的に応じた励起X線の分解能やフラックスの条件が選択できるようになり、効率的な実験が可能になった。また、上流の実験ハッチEH1には自動化に特化したハイスループットHAXPES装置を、下流のEH2にはガス雰囲気下での測定が可能な大気圧HAXPES装置を、それぞれ整備した。特に後者は国内初の共用利用装置であり、ガスや湿潤雰囲気下の測定に対応し、固気・固液界面反応などの幅広い利用が見込まれる。

3. 技術交流会

4年ぶりに復活した技術交流会（懇親会）が、神戸国際会議場に隣接したアリストンホテル神戸で開催さ



写真2 技術交流会の様子

れた。これまで培われてきた産業分野や産官学の所属組織を超えた「SPRING-8 産業利用者仲間」の連帯感が再認識される会であった。また、主催各機関のOBとも交えた旧交を温める会話が随所に見られ、本報告会の歴史を振り返るとともに、産業界利用者らにとっての意義や将来の在り方を考える機会となった。

4. ポスター発表

第2日目9時30分より2時間に亘って行われたポスター発表には、主催の兵庫県17件、サンビーム20件、JASRI 共用ビームライン21件、豊田中央研究所7件、および後援のFSBLの1件を合わせて66件の研究成果のポスターに加えて、SAGA-LS、RIST、CROSS、あいちSR、中性子産業利用推進協議会、SPRUC 企業利用研究会、JASRI 利用推進部、および推進協から合わせて8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。ポスターは1階ロビー（ホワイエ）と地下フロアの2箇所に分野ごとにまとめて掲示され、1階ロビーには（1）機械・自動車、（2）有機材料、（3）エネルギー・資源、（4）生体・医療、および（5）食品の各分野、地下フロアには、（6）半導体・電子材料、（7）構造材料・金属、（8）装置・分析技術、および（9）ビームライン・施設の各分野が配置された。会場全体に溢れる笑談の声と、各ポスターの前での熱心な議論が印象的であった。

5. 口頭発表（第2日目）

セッション5「サンビーム研究発表会」では、サンビームの歴史と将来計画に関する発表が2件と、個別の研究成果の発表が4件あった。まず、日亜化学工業（株）の榊氏の「サンビームのこれまで」では、サンビーム共同体が、四半世紀以上に亘り、世界でも類を

見ない同業企業を含めた13社による【協調】と【競争】の運営の基本精神のもと、各社による研究開発、製品不具合究明、特許取得、社会・環境問題の解決策提供などの成果を生み出してきたことが述べられた。川崎重工業（株）の三輪氏の「サンビームのこれから」によると、第三期契約が終了する本年度を以て次期体制に移行するにあたり、装置構成の見直しを図るとともに、従来の共同体の義務や責任範囲を絞り込み、組織の簡略化を行うことで、機動性の高い運営が実現できる新体制の構築を進めている。次期サンビーム共同体では、運輸・鉄鋼・素材等の各事業における課題に対し、適時的に放射光利用先端分析技術を適用し、産業界における新製品開発に貢献していくことを目指す。個別の研究成果としては、（株）日立製作所の米山氏らが、集光ビームを用いた3次元マイクロトポグラフィの開発により、SiC パワーデバイスの積層欠陥に加えて、貫通系の転位や基底面転位がミクロンオーダーで可視化できた。日亜化学工業（株）の小林氏らは、DAFS による窒化物半導体の局所構造評価により、LED デバイスの発光層である $\text{In}_{0.32}\text{Ga}_{0.68}\text{N}$ 層中でGa原子がランダムに分布していることが明らかにした。

（一財）電力中央研究所の三浦氏らは、二重露光法による残留応力評価により、軽水炉プラントの応力腐食割れの発生例が多い配管溶接部の残留応力分布を比較的高い空間分解能で可視化し、構造健全性評価の一助とした。川崎重工業（株）の渡邊氏らは、X 線回折法によるレーザ肉盛溶接部の残留応力評価により、エネルギー、航空、自動車、医療など幅広い事業分野で注目されているレーザ肉盛溶接の製品適用の拡大に貢献した。

セッション6「豊田ビームライン研究発表会」では、（株）豊田中央研究所から2件の発表があった。村瀬氏らは迅速な CO_2 回収反応を可能にする酵素模倣多核亜鉛錯体の状態解析において、反応時の EXAFS スペクトル変化の追跡から、系中の主な化学種の形成過程を明らかにした。また伊勢川氏らが開発したディープラーニングによる放射光ラミノグラフィ像の画質向上技術は、これまで困難であった自動車電動化部品の内部構造を可視化し、同部品の研究開発を加速した。

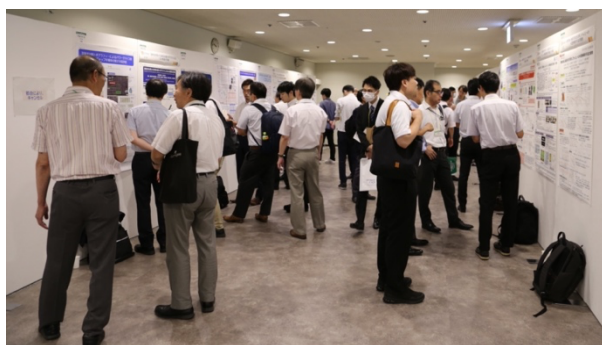


写真3 ポスター発表会場の様子

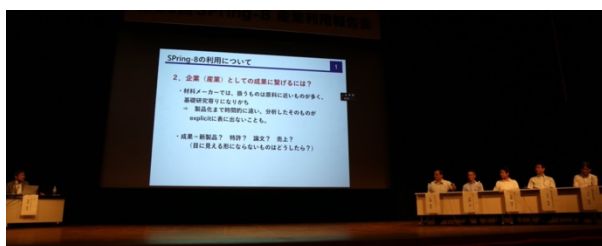


写真4 パネルディスカッションの様子

6. パネルディスカッション

セッション 7「パネルディスカッション」は、SPring-8 内外の放射光利用環境や SPring-8 産業界利用者らの利用形態の変化などを反映し、SPring-8-II の実現を念頭に、これからの民間企業による SPring-8 利用の在り方を議論することを目的とした。JASRI 産業利用基盤開発推進室の堂前シニアコーディネータの司会で、吉木氏（(株) 東芝）、木村氏（(株) 豊田中央研究所）、首藤氏（住友ベークライト（株））、高橋氏（JFE テクノリサーチ（株））、および佐藤氏（JASRI）の5人のパネリストにより、(1) 利用しやすい放射光施設の利用形態（利用目線）、(2) 放射光利用を企業（産業）としての成果に繋げる道筋（アウトプット目線）、および (3) 現状の SPring-8 への要望の各テーマで、会場の聴衆も交えて議論が進められた。テーマ (1) では、近年改変の進んだ利用制度が、産業界のヘビーユーザーらにとっての利便性を高めているとの共通認識が得られたとともに、成果専有課題実施の適時性の向上や試料数に基づく利用料金制度などの要望が挙げられた。テーマ (2) では、各社個別の情報発信に頼る成果の可視化は社会に対する影響力が小さく、「共同体」的な組織において情報発信に対する誘因を設定する必要があるとの提案があった。このような企業間ネットワークの構築やデータセンターのデータの企業間での利用を促す仕組みづくりへの、施設からの支援体制を望む声も挙げられた。テーマ (3) では、SPring-8-II の建設に伴うシャットダウン期間に、他施設を利用しやすくする支援が望まれた。

7. 講評と閉会の挨拶

セッション 8では、理研の石川センター長による講評の中で、文科省における SPring-8-II 建設の議論が、本年上半期に急速に進み、来年度の調査費予算が要求されることになり、この文科省の概算要求をこれまで

の産業利用成果の蓄積が後押ししたことが述べられた。最後に JASRI の山口常務理事の閉会の挨拶で、技術交流会の復活の意義やパネルディスカッションの議論の総括、さらに来年度の本報告会開催の場所、形式、運営体制の変更が検討されている旨の告知を以て、全プログラムが終了となった。

8. 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、さらに事後のとりまとめ等、主催5団体の事務局のご尽力と後援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。

産業界利用者らによる SPring-8 利用の在り方の変革に伴い、その変革に相応しい本報告会の来年以降の発展が、大いに期待される。

佐野 則道 SANO Norimichi

（公財）高輝度光科学研究センター
放射光利用研究基盤センター 産業利用・産学連携推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL：0791-58-0963
e-mail：sanon@spring8.or.jp

第7回 SPring-8 秋の学校を終えて

SPring-8 ユーザー協団体 (SPRUC) 行事幹事 (秋の学校担当)

日本原子力研究開発機構 物質科学研究センター 松村 大樹

秋の学校概要

2023 年度の第7回 SPring-8 秋の学校が、9月10日(日)～9月13日(水)の4日間の日程で開催されました。大きなトラブルもなく無事に終了したことを報告すると共に、多くの関係者のお力添えをいただきましたことに感謝申し上げます。

第7回 SPring-8 秋の学校は、SPring-8 ユーザー協団体 (SPRUC) と高輝度光科学研究センター (JASRI) が主催し、理化学研究所放射光科学研究センター、兵庫県立大学理学部／大学院理学研究科、関西学院大学理学部／工学部／生命環境学部／大学院理工学研究科、岡山大学からの共催をいただき、関係諸機関の後援を受けて実施されました。校長には SPRUC 会長の西堀英治先生 (筑波大学教授) が就任し、事務局は JASRI 利用推進部に担当いただきました。共催大学においては、SPring-8 秋の学校を大学／大学院の単位として認定しているところもあります。

SPring-8 秋の学校の目的は、幅広い観点からの SPring-8 ユーザーおよび放射光科学に関わる人材の発掘です。SPring-8 では夏の学校も開かれ、毎年多くの方が参加しています。夏の学校との最大の違いは、SPring-8 秋の学校では放射線業務従事者登録が必要ないということです。これにより、放射光に興味を持つ方であれば、どなたでも気軽に参加できます。今回の参加者におかれましても、大学3年生の方もいれば社会人経験が豊富な方もおり、多様な方に対して放射光を学ぶ実践的な場を提供する機会となっております。

秋の学校のもう1つの特徴は、SPRUC が主催団体に入っており、SPRUC の研究会および評議員の皆様からグループ講習のテーマおよび講師の推薦を受けていることです。今回も多くの SPRUC メンバーの方々から講師として秋の学校にご協力いただき、放射

光の幅広い分野を網羅した魅力的なグループ講習が行われました。遠方からご協力いただいた方もおられ、講師をお引き受けくださった皆様に深く感謝申し上げます。

参加申込者は79名を数え、その後一部キャンセルが生じたものの、最終的に23校11社から76名の参加を得ました。内訳は次の通りです。学生61名 (研究生1名、学部3年生9名、学部4年生26名、博士課程前期 (修士) 1年15名、博士課程前期 (修士) 2年6名、博士課程後期1年2名、博士課程後期2年2名)、社会人15名 (企業12名、大学2名、研究機関1名)。男性58名、女性18名。放射線業務従事者登録のない方は55名でした。

カリキュラムについて

カリキュラムは、表1に詳細を示すように1日目に3講義、2日目に3講義の基礎講義を行い、3日目と4日目の2日間で4テーマのグループ講習を行いました。基礎講義に関して、1つの講義が講師の体調不良により休講となりました。グループ講習に関しては、参加者は以下の「グループ講習について」で示す16テーマから希望する4テーマを選択し、受講しました。また、2日目には、SPring-8 および SACLA の見学が行われました。SACLA の実験ステーションを見学することは秋の学校においては初めての試みでした。参加者間の交流を促すため、2日目に自己紹介の時間を設けると共に、3日目には SPring-8 食堂にて懇親会を実施しました。昨年度までの3年間は、コロナ禍のため懇親会の実施を断念していましたが、本年度は懇親会を開催することができました。

表1 第7回 SPring-8 秋の学校日程表

	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
9/10 (日)		～10:30 受付	～11:00 開校式 「SPring-8 紹介」	11:00～12:30 「基礎講義1」 放射光発生の基礎 正木 満博 (JASRI)	12:30～13:30 昼食	13:30～15:00 「基礎講義2」 ビームライン 仙波 泰徳 (JASRI)	集合 写真 休憩 撮影	15:30～17:00 「基礎講義3」 X線検出器の基礎 今井 康彦 (JASRI/理化学研究所)		18:00～ Check-in 夕食	
9/11 (月)	9:00～10:30 「基礎講義5」 X線イメージング 籠島 靖 (兵庫県立大学)	休憩	10:40～ 自己紹介	12:10～13:00 昼食	13:00～15:00 SPring-8実験ホール SACLA見学	休憩	15:10～16:40 「基礎講義6」 X線回折入門 高橋 功 (関西学院大学)	休憩	16:50～18:20 「基礎講義7」 XAFS基礎 田淵 雅夫 (名古屋大学)	18:20～ 夕食	
9/12 (火)	移動	9:30～13:00 グループ講習1			13:00～14:00 昼食	14:00～17:30 グループ講習2			移動	18:00～ 懇親会	
9/13 (水)	移動	9:30～13:00 グループ講習3			13:00～14:00 昼食	14:00～17:30 グループ講習4			17:30～18:00 貸与物返却 ／アンケート 回収		

基礎講義について

基礎講義の内容と担当者は以下の通りです。講義内容はどれも工夫されたもので、私自身改めて勉強するところが多く、参加者の皆様にとっても有意義な講義であったと思われます。講義後の質疑は非常に活発で、参加者の秋の学校への意気込みが強く伝わってきました。

基礎講義1. 放射光発生の基礎

正木満博 (高輝度光科学研究センター)

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

今井康彦 (高輝度光科学研究センター/理化学研究所)

基礎講義5. X線イメージング

籠島靖 (兵庫県立大学)

基礎講義6. X線回折入門

高橋功 (関西学院大学)

基礎講義7. XAFSの基礎

田淵雅夫 (名古屋大学)



写真1 講義風景



写真2 見学風景

グループ講習について

グループ講習のテーマと担当者は以下の通りです。多くの皆様の協力により、16 テーマを準備することができました。秋の学校は放射線業務従事者登録が必要ない代わりに、放射光そのものを利用した講習はできず、実際の実験装置やデータに対して疑似的測定や解析を進める形になります。基礎講義とは異なり体や手を動かしての講習になり、多くの参加者にとって刺激的な時間になったと思われます。

1. 単結晶構造解析
橋爪大輔（理化学研究所 CEMS）
足立精宏（理化学研究所 CEMS）
2. 粉末 X 線回折によるその場観測の実際
漆原大典（名古屋工業大学）
岡研吾（近畿大学）
3. タンパク質結晶構造解析
水島恒裕（兵庫県立大学）
河村高志（高輝度光科学研究センター）
4. 小角 X 線散乱
増永啓康（高輝度光科学研究センター）
関口博史（高輝度光科学研究センター）
5. 放射光を利用した応力・ひずみ計測
菖蒲敬久（日本原子力研究開発機構）
富永亜希（日本原子力研究開発機構）
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
渡邊稔樹（京都大学）
伊奈稔哲（高輝度光科学研究センター）
片山真祥（高輝度光科学研究センター）
加藤和男（高輝度光科学研究センター）
8. 赤外分光分析
池本夕佳（高輝度光科学研究センター）
岡村英一（徳島大学）
9. 光電子分光（HAXPES）
保井晃（高輝度光科学研究センター）
高木康多（高輝度光科学研究センター）
10. 高圧力の発生と高圧下の物質科学
太田健二（東京工業大学）
11. ドーパント原子配列解析
松下智裕（奈良先端科学技術大学院大学）

12. 放射光軟 X 線光電子分光による表面化学反応の“その場”観察
吉越章隆（日本原子力研究開発機構）
津田泰孝（日本原子力研究開発機構）
13. 放射光 X 線イメージングの概要と基礎
上杉健太郎（高輝度光科学研究センター）
14. ナノビーム X 線を用いた局所 X 線回折
隅谷和嗣（高輝度光科学研究センター）
15. X 線発光分光法
松村大樹（日本原子力研究開発機構）
石井賢司（量子科学技術研究開発機構）
16. PDF 法を用いたガラスの構造解析
廣井慧（島根大学）
山田大貴（高輝度光科学研究センター）
下野聖矢（高輝度光科学研究センター）



写真3 グループ講習風景

まとめ

多くの参加申込をいただき、最終的に 76 名の参加を得て SPring-8 秋の学校を開催いたしました。大きなトラブルなく、無事に秋の学校を終えることができました。

秋の学校では必須ではないもののレポート課題を設定しております。原稿執筆時点ではべ切前ですが、既に多くの参加者から返信をいただいております、参加者の意欲の高さに感心しています。講師の方には添削のご負担をおかけしますが、参加者の一層の充実のため、宜しくお願い申し上げます。

これまでのアンケートでは、グループ講習の満足度が比較的高いという結果が得られています。そのため、当初の秋の学校では 3 コマだったグループ講習を、ここ数年では 4 コマで実施しています。今回の参加者からのアンケート結果においても、グループ講習の満足度はとても高く、多くの参加者が有意義な時間を過ごしたものと評価しております。一方、グループ講習の講師の方からは負担の大きさに関する指摘が挙がっており、これらのバランスを考えて実施していく必要があります。先に記しました通り、グループ講習のテーマ・講師は SPRUC 研究会および評議員の皆様からの推薦を受けており、グループ講習は秋の学校の最も重要な項目です。参加者・講師のどちらの満足度も高くなる形を目指して、今後も最適な秋の学校の形を実行委員一同考えて参ります。

SPRUC は SPring-8 秋の学校の主催機関であります。今後秋の学校をどのように発展させていくか、会員の皆様の忌憚のないご意見を賜うことができれば幸いです。

SPring-8 秋の学校を実施するにあたりまして、基礎講義およびグループ講習の講師の皆様を始めとして、多くの関係者の方々に大変お世話になりました。深く感謝申し上げます。より良い秋の学校にしていくことができるよう、今後とも御指導をどうぞ宜しくお願いいたします。

松村 大樹 MATSUMURA Daiju

(国) 日本原子力研究開発機構 物質科学研究センター
〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0975
e-mail : daiju@spring8.or.jp

第 7 回 SPring-8 秋の学校に参加して

国立研究開発法人産業技術総合研究所
山本 大樹

私は国立研究開発法人産業技術総合研究所の電池技術研究部門において、電池研究に従事しております。2 年半前に産総研に赴任してから 2 度ほど SPring-8 にて放射光を使って実験を行う機会がありましたが、目の前の実験を進めるだけでは理解が難しい部分が多いと感じており、SPring-8 や放射光、X 線を用いた測定について体系的に学べるということで、秋の学校に参加させていただくことにしました。

2023 年度の秋の学校は 4 日間の日程で開催されました。そのうち基礎講義が 2 日（間に蓄積リングや SACLA の見学あり）、グループ講習が 2 日というスケジュールでしたが、大変密度の濃い充実した時間となりました。体系的に学べるように座学・見学・実践のカリキュラムが順を追って組まれており、理解がしやすかったです。

基礎講義では、放射光の発生原理からビームラインの構成、放射光を使った代表的な分析手法等についてご講義いただきました。学部生の参加者も少なくないということもあって、専門家でなくても理解できるように講師の先生方が工夫をされていて、それでいて内容は深くて濃かったです。今まで曖昧だった放射光に対する理解をより明瞭にすることができました。一般的なラボでの測定との比較も交えながら放射光を使った測定の利点をご説明いただいたので、放射光を使わない方であっても有益になるような講義だったと思います。見学では、講義を踏まえて話を伺いながら蓄積リングを一周しました。講義で学んだものを実際に見ることができて理解をより深めることができました。見学しながら、どのようなビームラインがあるかや、蓄積リング内の様々な仕様や工夫（例えばハッチに書かれた色付きの線の色の意味や、一部のビームラインでアルミホイルが巻かれている理由など）についても教えていただき、ユーザーでただ一部のビームラインを利用するだけでは知ることのできない情報を様々聞くことができました。蓄積リングだけでなく SACLA の実験ステーションも見せていただきました。

が、(秋の学校で SACLA を見学するのは今回が初めてだったそうです)、日本の放射光測定技術の高さには大変驚かされました。グループ講習では、少人数での開催だったということもあって、細かい質問もしやすい雰囲気だったのがありがたかったです。その測定の座学とビームラインの見学をして、データの解析も実際に手を動かして行いました。ご担当いただいた講師の先生方は、その対象の測定の専門家でも放射光を使った分析の専門家でもあるので、前日までの基礎講義のときの疑問も含めて、様々な質問をして解消することができました。何をお伺いしてもわかりやすくお答えいただけて、その知識の広さと深さには大変驚かされました。参加させていただいた4つの講習のどれも大変有意義で、他のグループ講習も受けてみたいと

思うほどでした。

大変充実した時間を過ごさせていただき、秋の学校に参加させていただいて大変良かったと思っております。講師の先生方、SPRING-8の職員の方、ならびに秋の学校事務局の皆様、この場をお借りして感謝申し上げます。社会人の方の中には、4日間という時間をとることが難しい方もいらっしゃると思いますが、それに見合う素晴らしい機会だと思うので、是非参加してみてもと思います。今年はコロナ禍前以来という懇親会も開催され、様々な分野の方と交流することもできました。今後、学生からも社会人からもより一層参加者が増えて交流も活発になり、秋の学校や日本の放射光を使った分析がさらに発展することを祈念しています。



写真4 集合写真（放射光普及棟前にて撮影）

SPring-8 シンポジウム 2023 報告

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC)

近畿大学 理工学部 理学科 化学コース	杉本 邦久
大阪大学 大学院基礎工学研究科	関山 明
公益財団法人高輝度光科学研究センター	
XFEL 利用研究推進室	藪内 俊毅
国立研究開発法人物質・材料研究機構	
マテリアル基盤研究センター	永村 直佳
東京大学 大学院工学系研究科	小林 正起
国立研究開発法人理化学研究所	
放射光科学研究センター	香村 芳樹

はじめに

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

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

セッションI オープニング

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



写真1 SPRUC
西堀英治会長



写真2 大阪大学
尾上孝雄理事・副学長



写真3 理研
松尾浩道理事



写真4 JASRI
雨宮慶幸理事長



写真5 文部科学省
稲田剛毅課長

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

セッションⅡ 施設報告

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

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

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

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

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



写真 6 JASRI
坂田修身センター長

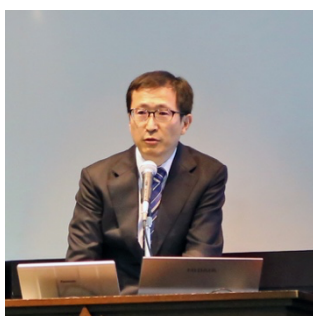


写真 7 理研 初井宇記 GD



写真 8 理研 矢橋牧名 GD

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

セッション III 大阪大学×SPring-8

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

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

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

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

セッション IV 研究会報告

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

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

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

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



写真 9 大阪大学
石川貴嗣氏



写真 10 大阪大学
中川敦史氏



写真 11 三井隆也氏



写真 12 太田健二氏

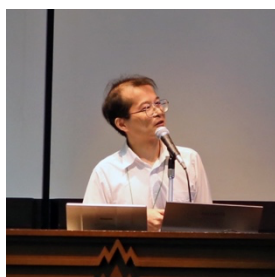


写真 13 水谷隆太氏



写真 14 菅滋正氏



写真 15 吹留博一氏



写真 16 橋爪大輔氏

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

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

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

の提案がなされました。

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

セッションV 最先端光源をリードする SPRING-8/SACLA

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

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



写真 17 山内和人氏



写真 18 尾崎典雅氏



写真 19 表和彦氏

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

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

セッション VI パネルディスカッション

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

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

次に、小松崎民樹氏より、既にオンザフライラマン分



写真 20 パネルディスカッション

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

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

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

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

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



写真 21 鷲尾隆氏



写真 22 小松崎民樹氏

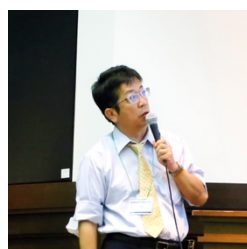


写真 23 赤井一郎氏

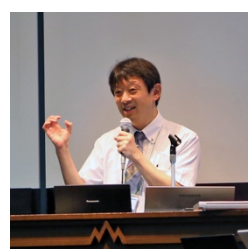


写真 24 矢代航氏



写真 25 関山明氏



写真 26 加藤健一氏

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

セッション IX ポスターセッション

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

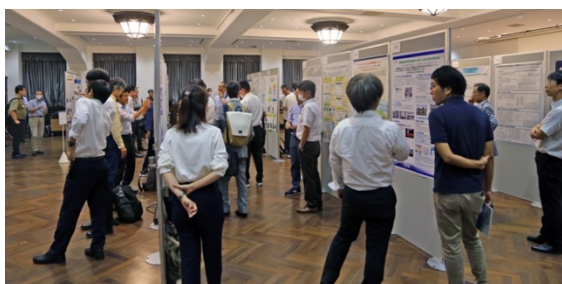


写真 27 ポスターセッション

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

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

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

鬼頭俊介氏は、「高エネルギー X 線回折を用いた価



写真 28 尾嶋正治選考委員長



写真 29 12th SPRUC YSA 授賞式

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

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

セッション VIII クロージング

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

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

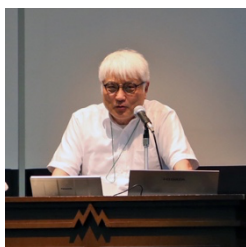


写真 30 理研 石川哲也センター長

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

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

杉本 邦久 SUGIMOTO Kunihisa

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

関山 明 SEKIYAMA Akira

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

鮫内 俊毅 YABUUCHI Toshinori

（公財）高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0802 ext. 7885
e-mail : tyabuuchi@spring8.or.jp

永村 直佳 NAGAMURA Naoka

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

小林 正起 KOBAYASHI Masaki

東京大学 大学院工学系研究科
〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1
TEL : 03-5841-6692（内線 26692, 86768）
e-mail : masaki.kobayashi@ee.t.u-tokyo.ac.jp

香村 芳樹 KOHMURA Yoshiki

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

2024A 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

2024A 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、下記、SPring-8 User Information HP 上の「現在募集中の SPring-8 利用研究課題」よりご確認ください。2024A 期に関しましても、ビームタイムキャンセルの影響を軽減するための運用が適用されますので、「2024A 期における利用研究課題及びビームタイムの運用について」(<https://user.spring8.or.jp/?p=47570>) もご確認ください。

■ 現在募集中の SPring-8 利用研究課題

(<https://user.spring8.or.jp/?p=22799>)

2024A 期 SPring-8 利用研究課題の各課題種の応募締め切りは次の通りです。

- ・ 成果公開優先利用課題（1 年課題含む）、成果専有課題
2023 年 11 月 15 日（水）午前 10:00 JST（提出完了時刻）
- ・ 一般課題、大学院生提案型課題
2023 年 12 月 7 日（木）午前 10:00 JST（提出完了時刻）

<特記>

1. 年 6 回募集ビームライン (BL01B1、BL02B1、BL02B2、BL09XU、BL13XU、BL14B2、BL19B2、BL46XU、BL47XU) においては、2024A 第 I 期（利用期間は 2024 年 4 月～5 月下旬予定）の締め切りとなります。2024A 第 II 期および第 III 期の課題募集は HP 上 (<https://user.spring8.or.jp/?p=22799>) で適時ご案内します。
2. 成果公開優先利用課題の 1 年課題は A 期のみ募集します。
3. 次回の大学院生提案型課題（長期型）の募集は 2024B 期に行う予定です。
4. 緊急・特別課題、成果専有時期指定課題（時間単位利用を含む）、測定代行課題は、随時募集しています。

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

■ 初めて利用申請を考えている方へ

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

申請にあたり、ご不明な点がございましたら下記までお問い合わせください。

[問い合わせ先] 〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用推進部 共用推進課
TEL : 0791-58-0961
e-mail : sp8jasri@spring8.or.jp

第 51 回 (2023B) 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 51 回共同利用期間 (2023 年 10 月 3 日～2024 年 2 月 21 日 (放射光利用 291 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、年 6 回募集のビームライン (BL01B1、BL02B1、BL02B2、BL09XU、BL13XU、BL14B2、BL19B2、BL46XU および BL47XU) は 2023B 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 2023 年 10 月 3 日～11 月 13 日 (117 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〕

2023 年 5 月 9 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 2023 年 5 月号に募集案内記事を掲載)

5 月 31 日 成果公開優先利用課題、長期利用課題応募締切

6 月 15 日 一般課題、大学院生提案型課題応募締切

〔課題審査、選定、採択および通知〕

2023 年 7 月 7 日～20 日

各分科会による課題審査

7 月 21 日 SPring-8 利用研究課題審査委員会 (PRC) による課題審査

7 月 31 日 SPring-8 選定委員会の意見を聴取

8 月 3 日 JASRI として採択決定し、応募者に審査結果を通知

案型課題) への応募 706 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 817 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 における“SACLA、J-PARC MLF または「京」/「富岳」を含む HPCI と連携した利用を行う課題”として、SPring-8 には 14 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、年 6 回募集のビームラインの第 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 (測定代行課題含む) 等は含まれていません。

3. 採択課題

2023B 期の採択課題の一覧は、SPring-8 User Information に掲載しています。以下をご覧ください。

ホーム > SPring-8 利用申請 > 課題募集 > 採択・実施課題一覧

<https://user.spring8.or.jp/?p=37038>

2. 応募および採択状況

2023B の新規応募課題数は 820、採択課題数は 574 でした。表 2 に 2023B 期の利用研究課題の課題種別の応募課題数および採択課題数と採択率 (%) を示します。また、表 3 に成果非専有課題としての科学審査の対象となる課題 (成果非専有一般課題、大学院生提

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*	応募締切日**	応募課題数	採択課題数
第 1 回：1997B	1997 年 10 月－1998 年 03 月	168	1997 年 01 月 10 日	198	134
第 2 回：1998A	1998 年 04 月－1998 年 10 月	204	1998 年 01 月 06 日	305	229
第 3 回：1999A	1998 年 11 月－1999 年 06 月	250	1998 年 07 月 12 日	392	258
第 4 回：1999B	1999 年 09 月－1999 年 12 月	140	1999 年 06 月 19 日	431	246
第 5 回：2000A	2000 年 02 月－2000 年 06 月	204	1999 年 10 月 16 日	424	326
第 6 回：2000B	2000 年 10 月－2001 年 01 月	156	2000 年 06 月 17 日	582	380
第 7 回：2001A	2001 年 02 月－2001 年 06 月	238	2000 年 10 月 21 日	502	409
第 8 回：2001B	2001 年 09 月－2002 年 02 月	190	2001 年 05 月 26 日	619	457
第 9 回：2002A	2002 年 02 月－2002 年 07 月	226	2001 年 10 月 27 日	643	520
第 10 回：2002B	2002 年 09 月－2003 年 02 月	190	2002 年 06 月 03 日	751	472
第 11 回：2003A	2003 年 02 月－2003 年 07 月	228	2002 年 10 月 28 日	733	563
第 12 回：2003B	2003 年 09 月－2004 年 02 月	202	2003 年 06 月 16 日	938	621
第 13 回：2004A	2004 年 02 月－2004 年 07 月	211	2003 年 11 月 04 日	772	595
第 14 回：2004B	2004 年 09 月－2004 年 12 月	203	2004 年 06 月 09 日	886	562
第 15 回：2005A	2005 年 04 月－2005 年 08 月	188	2005 年 01 月 05 日	878	547
第 16 回：2005B	2005 年 09 月－2005 年 12 月	182	2005 年 06 月 07 日	973	624
第 17 回：2006A	2006 年 03 月－2006 年 07 月	220	2005 年 11 月 15 日	916	699
第 18 回：2006B	2006 年 09 月－2006 年 12 月	159	2006 年 05 月 25 日	867	555
第 19 回：2007A	2007 年 03 月－2007 年 07 月	246	2006 年 11 月 16 日	1099	761
第 20 回：2007B	2007 年 09 月－2008 年 02 月	216	2007 年 06 月 07 日	1007	721
第 21 回：2008A	2008 年 04 月－2008 年 07 月	225	2007 年 12 月 13 日	1009	749
第 22 回：2008B	2008 年 10 月－2009 年 03 月	189	2008 年 06 月 26 日	1163	659
第 23 回：2009A	2009 年 04 月－2009 年 07 月	195	2008 年 12 月 11 日	979	654
第 24 回：2009B	2009 年 10 月－2010 年 02 月	210	2009 年 06 月 25 日	1076	709
第 25 回：2010A	2010 年 04 月－2010 年 07 月	201	2009 年 12 月 17 日	919	665
第 26 回：2010B	2010 年 10 月－2011 年 02 月	210	2010 年 07 月 01 日	1022	728
第 27 回：2011A	2011 年 04 月－2011 年 07 月	215	2010 年 12 月 09 日	1024	731
第 28 回：2011B	2011 年 10 月－2012 年 02 月	195	2011 年 06 月 30 日	1077	724
第 29 回：2012A	2012 年 04 月－2012 年 07 月	201	2011 年 12 月 08 日	816	621
第 30 回：2012B	2012 年 10 月－2013 年 02 月	222	2012 年 06 月 28 日	965	757
第 31 回：2013A	2013 年 04 月－2013 年 07 月	186	2012 年 12 月 13 日	880	609
第 32 回：2013B	2013 年 10 月－2013 年 12 月	159	2013 年 06 月 20 日	905	594
第 33 回：2014A	2014 年 04 月－2014 年 07 月	177	2013 年 12 月 12 日	874	606
第 34 回：2014B	2014 年 10 月－2015 年 02 月	230	2014 年 06 月 19 日	1030	848
第 35 回：2015A	2015 年 04 月－2015 年 07 月	207	2014 年 12 月 11 日	1030	685
第 36 回：2015B	2015 年 09 月－2015 年 12 月	198	2015 年 06 月 11 日	974	632
第 37 回：2016A	2016 年 04 月－2016 年 07 月	216	2015 年 12 月 10 日	907	699
第 38 回：2016B	2016 年 09 月－2016 年 12 月	198	2016 年 06 月 02 日	977	637
第 39 回：2017A	2017 年 04 月－2017 年 07 月	210	2016 年 12 月 08 日	947	678
第 40 回：2017B	2017 年 10 月－2018 年 02 月	240	2017 年 06 月 08 日	1000	761
第 41 回：2018A	2018 年 04 月－2018 年 08 月	228	2017 年 12 月 07 日	931	719
第 42 回：2018B	2018 年 10 月－2019 年 02 月	234	2018 年 06 月 07 日	982	744
第 43 回：2019A	2019 年 04 月－2019 年 07 月	222	2018 年 12 月 06 日	957	681
第 44 回：2019B	2019 年 09 月－2020 年 02 月	234	2019 年 06 月 21 日	1011	729
第 45 回：2020A	2020 年 04 月－2021 年 02 月	336	2019 年 12 月 05 日	1460	1044
第 46 回：2021A	2021 年 04 月－2021 年 07 月	216	2020 年 12 月 08 日	838	687
第 47 回：2021B	2021 年 09 月－2022 年 02 月	228	2021 年 06 月 10 日	1105	797
第 48 回：2022A	2022 年 04 月－2022 年 08 月	216	2021 年 12 月 01 日	957	708
第 49 回：2022B	2022 年 10 月－2023 年 02 月	228	2022 年 06 月 14 日	1272	878
第 50 回：2023A	2023 年 04 月－2023 年 08 月	213	2022 年 12 月 08 日	1063	775
第 51 回：2023B	2023 年 10 月－2024 年 02 月	216	2023 年 06 月 15 日	(820)	(574)

*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（産業第2期、第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。

2023B は今後、年6回募集ビームラインの第Ⅱ期、第Ⅲ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 2023B SPring-8 利用研究課題の課題種別応募および採択課題数と採択率

決定課題種	応募課題数	採択課題数	採択率 (%)	採択課題のシフト 充足率 (%) ****
一般課題*	637	437	68.6	94.2
成果専有課題	44	44	100.0	88.1
大学院生提案型課題	69	32	46.4	92.4
成果公開優先利用課題	53	53	100.0	91.7
大学院生提案型課題 (長期型) **	17	8	47.1	100.0
総 計	820	574	70.0	93.8
科学審査対象課題**のみの合計	706	469	66.4	94.1

*一般課題等のうち SPring-8 における“SACLA、J-PARC MLF または「京」/「富岳」を含む HPCI と連携した利用を行う課題”は、応募 14 課題のうち 12 課題を採択。

**複数課題を利用する課題 (3 課題) を含む (申請者数は 14 名、採択者数は 5 名)。

***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。

表3 2023B ビームラインごとの審査対象課題*の採択状況

ビームライン	応募課題数計	採択課題数計	採択率 (%)	配分シフト数計**	1 課題あたり 平均配分シフト**
BL01B1: XAFS I	18	15	83.3	83	5.53
BL02B1: 単結晶構造解析	15	15	100.0	72	4.80
BL02B2: 粉末結晶構造解析	28	20	71.4	87	4.35
BL04B1: 高温高圧	29	20	69.0	195	9.75
BL04B2: 高エネルギー X 線回折	45	27	60.0	201	7.44
BL05XU: 理研 施設開発 ID I	4	2	50.0	12	6.00
BL07LSU: 理研 施設開発 ID II	2	2	100.0	30	15.00
BL08W: 高エネルギー非弾性散乱	24	16	66.7	204	12.75
BL09XU: HAXPES I	12	7	58.3	69	9.86
BL10XU: 高圧構造物性	61	28	45.9	201	7.18
BL13XU: X 線回折・散乱 I	26	11	42.3	69	6.27
BL14B2: XAFS II	15	14	93.3	81	5.79
BL17SU: 理研 物理学 III	11	6	54.5	56	9.33
BL19B2: X 線回折・散乱 II	18	16	88.9	80	5.00
BL19LXU: 理研 物理学 II	4	3	75.0	47	15.67
BL20B2: 医学・イメージング I	35	21	60.0	178	8.48
BL20XU: 医学・イメージング II	23	15	65.2	109	7.27
BL25SU: 軟 X 線固体分光	24	17	70.8	204	12.00
BL26B1: 理研 構造ゲノム I ***	5	5	100.0	33	6.60
BL26B2: 理研 構造ゲノム II ***	-	-	-	-	-
BL27SU: 軟 X 線光化学	18	15	83.3	165	11.00
BL28B2: 白色 X 線回折	15	15	100.0	207	13.80
BL29XU: 理研 物理学 I	2	2	100.0	27	13.50
BL32XU: 理研 ターゲットタンパク ***	-	-	-	-	-
BL35XU: 非弾性・核共鳴散乱	27	16	59.3	218	13.63
BL36XU: 理研 物質科学 II	7	4	57.1	32	8.00
BL37XU: 分光分析	30	16	53.3	167	10.44
BL38B1: 理研 構造生物学 I ***	-	-	-	-	-
BL39XU: 磁性材料	-	-	-	-	-
BL40B2: SAXS BM	56	38	67.9	194	5.11
BL40XU: 高フラックス	39	17	43.6	168	9.88
BL41XU: 生体高分子結晶解析 I ***	1	1	100.0	6	6.00
BL43IR: 赤外物性	21	21	100.0	215	10.24
BL43LXU: 理研 量子ナノダイナミクス	2	2	100.0	24	12.00
BL44B2: 理研 物質科学 I	6	6	100.0	30	5.00
BL45XU: 生体高分子結晶解析 II ***	1	1	100.0	6	6.00
BL46XU: HAXPES II	15	7	46.7	66	9.43
BL47XU: マイクロ CT	33	16	48.5	151	9.44
PX-BL (BL41XU、45XU、26B1、26B2、32XU、38B1)	34	32	94.1	-	-
総 計	706	469	66.4	3,687	7.86

*成果非専有一般課題、大学院生提案型課題

**1 シフト=8 時間

***PX-BL 対象 BL (PX-BL 運用以外の対象課題の課題数およびシフト数)

年 6 回募集ビームラインの第 II 期・第 III 期募集分等は含まず。

表4 SPring-8 2023B 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	課題数	48	40	11	6	204	139	95	74	35	29	8	6	14	10	7	6	422	310	73.5
		シフト数	252	199	81	39	1663	1113	650	512	362	281	99	66	108	78	93	72	3308	2360	71.3
	成果専有課題	課題数	1	1			2	2	1	1					1	1			5	5	100.0
		シフト数	2	2			5	5	1	1					1	1			9	9	100.0
	大学院生提案型 課題	課題数	4	2	4	2	26	11	11	4	10	3			4	3			59	25	42.4
		シフト数	3		21	9	172	61	65	18	99	18			27	18			387	124	32.0
	大学院生提案型 課題（長期型）	課題数	3	2			4		2		8	6							17	8	47.1
		シフト数	46	26			45		18		78	54							187	80	42.8
	成果公開優先 利用課題	課題数	2	2			20	20	11	11					2	2			35	35	100.0
		シフト数	9	9			121	111	73	65					36	24			239	209	87.4
国 公 立 研 究 機 関 等	一般課題	課題数	58	47	15	8	256	172	120	90	53	38	8	6	21	16	7	6	538	383	71.2
		シフト数	312	236	102	48	2006	1290	807	596	539	353	99	66	172	121	93	72	4130	2782	67.4
	成果専有課題	課題数	7	5	6	4	38	27	11	10	8	6	2	1	7	2	11	10	90	65	72.2
		シフト数	7	3	57	45	391	272	114	92	72	48	27	12	60	15	102	99	830	586	70.6
	成果公開優先 利用課題	課題数					1	1											1	1	100.0
		シフト数					3	3											3	3	100.0
	成果公開優先 利用課題	課題数			2	2	4	4					1	1	1	1	1	1	9	9	100.0
		シフト数			18	18	30	30					3	3	1	1	1	1	53	53	100.0
	合 計	課題数	7	5	8	6	43	32	11	10	8	6	3	2	8	3	12	11	100	75	75.0
		シフト数	7	3	75	63	424	305	114	92	72	48	30	15	61	16	103	100	886	642	72.5
産 業 界	一般課題	課題数							1						20	16			21	16	76.2
		シフト数							6						191	152			197	152	77.2
	成果専有課題	課題数	7	7			2	2							28	28			37	37	100.0
		シフト数					7	7							107	92			114	99	86.8
	成果公開優先 利用課題	課題数							4	4					5	5			9	9	100.0
		シフト数							54	52					41	41			95	93	97.9
	合 計	課題数	7	7			2	2	5	4					53	49			67	62	92.5
		シフト数					7	7	60	52					339	285			406	344	84.7
海 外 機 関	一般課題	課題数	3	2	2	2	63	27	15	8	16	6	1		4	1			104	46	44.2
		シフト数	33	9	30	30	672	227	151	53	154	48	15		39	3			1094	370	33.8
	成果専有課題	課題数													1	1			1	1	100.0
		シフト数																			
	大学院生提案型 課題	課題数					4	3	3	3	3	1							10	7	70.0
		シフト数					57	51	45	41	15	3							117	95	81.2
	合 計	課題数	3	2	2	2	67	30	18	11	19	7	1		5	2			115	54	47.0
		シフト数	33	9	30	30	729	278	196	94	169	51	15		39	3			1211	465	38.4
合 計		課題数	75	61	25	16	368	236	154	115	80	51	12	8	87	70	19	17	820	574	70.0
		シフト数	352	248	207	141	3166	1880	1177	834	780	452	144	81	611	425	196	172	6633	4233	63.8
採 択 率		課題数	81.3		64.0		64.1		74.7		63.8		66.7		80.5		89.5		70.0		
		シフト数	70.5		68.1		59.4		70.9		57.9		56.3		69.6		87.8		63.8		

*ビームライン技術、素粒子・原子核科学、考古学、鑑識科学、安全管理

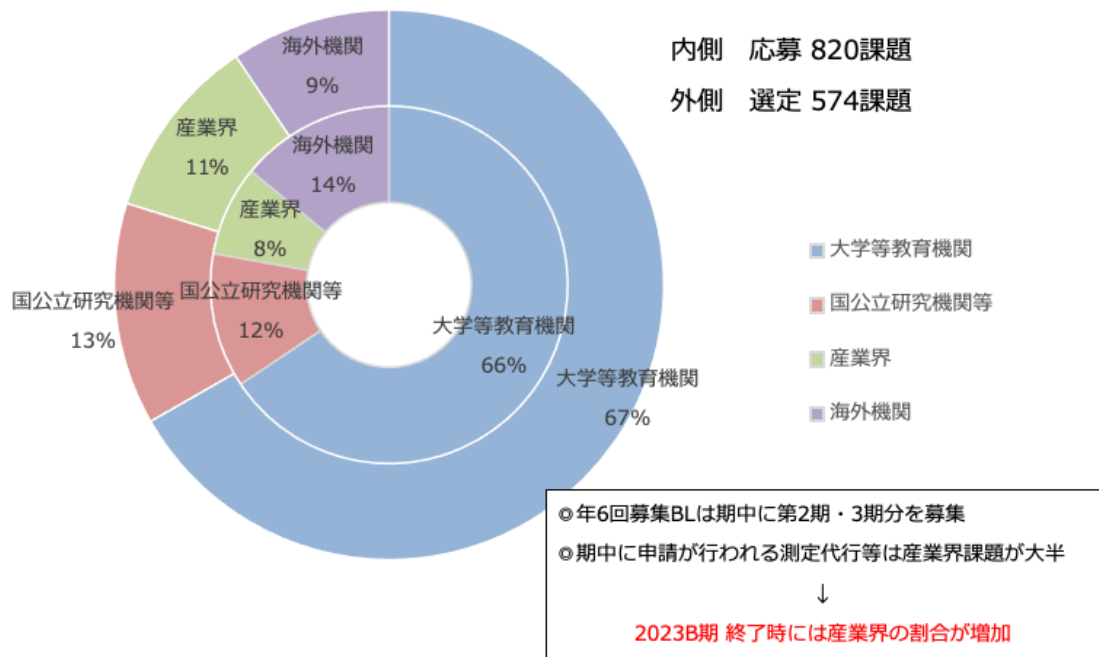


図1 2023B 所属機関別 応募/採択課題数割合

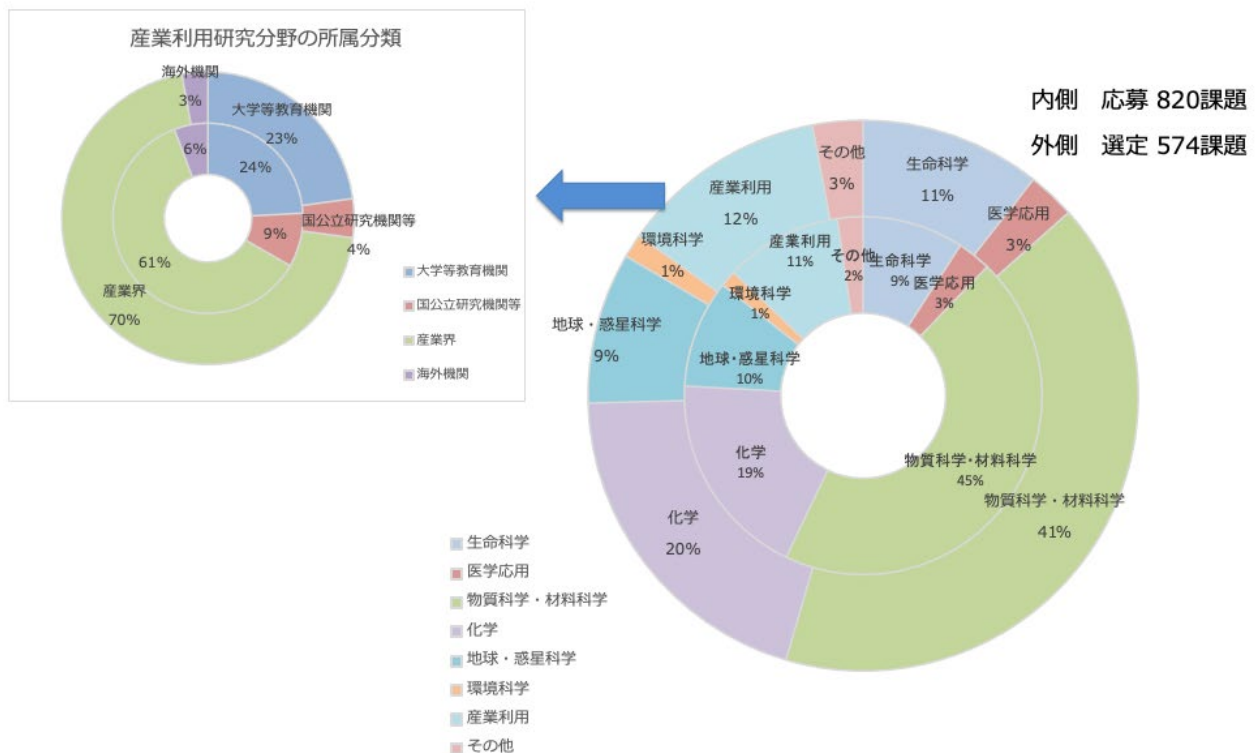


図2 2023B 研究分野別 応募/採択課題数割合

2023B 期 採択大学院生提案型課題（長期型）の紹介

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用推進部

放射光科学を支え、更に発展させる人材の育成に資することを目的として、大学院生提案型課題（長期型）を募集しています。2023B 期は 14 課題の応募があり、長期型という特性をいかした、学生自らの独創的、挑戦的、意欲的な課題という観点に主眼をおき、4 課題を採択しました。

〔募集案内公開と応募締切〕

2023 年 3 月 29 日 ホームページで募集案内公開
5 月 10 日 応募締切

〔課題審査、選定、採択および通知〕

2023 年 5 月 11 日～25 日
書面審査
6 月 13 日、20 日
大学院生利用審査委員会による課題審査（面接審査）
7 月 31 日 SPRING-8 選定委員会の意見を聴取
8 月 3 日 JASRI として採択決定し、応募者に審査結果を通知

－ 採択課題 1 －

課題名	高圧その場 X 線回折実験による火星コアの構造解明
実験責任者名（所属）	坂井 郁哉（東京大学）
採択時の課題番号	2023B0306
ビームライン	BL10XU

－ 採択課題 2 －

課題名	マントルカンラン岩中に分布する有機物包有物の 3 次元探索：ビームライン横断型マルチスケール CT の活用
実験責任者名（所属）	三津川 到（京都大学）
採択時の課題番号	2023B0307（BL20B2）、2023B0318（BL47XU）
ビームライン	BL20B2、BL47XU（併用）

－ 採択課題 3 －

課題名	CRISPR-Cas 系に関連したトランスポゾンの転移機構の解析と CRISPR-Cas 複合体の変異体によるゲノム編集技術への応用
実験責任者名（所属）	石原 一輝（九州大学）
採択時の課題番号	2023B0309（BL41XU）、2023B0319（EM01CT）
ビームライン	BL41XU、EM01CT（併用）

－ 採択課題 4 －

課題名	大規模 S 波低速度領域の結晶方位選択配向発達の理解へ向けた LLSVP 構成候補鉱物の下部マントル圧力条件での高温高圧大歪変形実験
実験責任者名 (所属)	夏井 文凜 (東京工業大学)
採択時の課題番号	2023B0312 (BL47XU)、2023B0320 (BL10XU)
ビームライン	BL10XU、BL47XU (併用)

第 50 回共同利用期間（2023A）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 50 回共同利用期間（2023A）における SPring-8 の共同利用は、2023 年 4 月から 2023 年 8 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 267 シフト [1 シフト＝8 時間] でした。

2023A では 26 本の共用ビームライン（共用施設）と、11 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。9 本の共用ビームライン BL01B1、BL02B1、BL02B2、BL09XU、BL13XU、BL14B2、BL19B2、BL46XU および BL47XU は、2023A 第 I 期（2023 年 4 月～5 月中旬）、第 II 期（同年 5 月下旬～7 月下旬）および第 III 期（同年 7 月上旬～8 月上旬）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、2023A 期の稼働数は 15 本でした。

表 1 に、SPring-8 共用施設の 2023A 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 2023A 実施課題数とシフト数を示します。表 3 に、SPring-8 年 6 回募集対象ビームラインにおける科学審査対象課題の 2023A 採択状況を示します。表 4 に、

2023A 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 5 に、1997B-2023A 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 2023A 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）	217	2876.125
専用ビームライン（成果専有）	33	144
合 計	250	3020.125

表 3 SPring-8 6 回募集対象ビームラインにおける審査対象課題^(注1)の 2023A 採択状況（II 期 III 期分を含む）

ビームライン	応募課題数	採択課題数	課題採択率 (%)
BL01B1 : XAFS I	46	29	63.0
BL02B1 : 単結晶構造解析	39	35	89.7
BL02B2 : 粉末結晶構造解析	67	45	67.2
BL09XU : HAXPES I	31	23	74.2
BL13XU : X 線回折・散乱 I	61	21	34.4
BL14B2 : XAFS II	47	36	76.6
BL19B2 : X 線回折・散乱 II	45	34	75.6
BL46XU : HAXPES II	9	5	55.6
BL47XU : マイクロ CT	37	18	48.6

(注 1) 一般課題、大学院生提案型課題

表 1 SPring-8 共用施設^(注1)の 2023A 課題種別の課題数と実施シフト数

課 題 種	応募課題数	採択課題数	課題採択率 (%)	採択課題の実施数	非応募課題 ^(注2) の実施数	実施課題数合計	実施シフト数合計
一般課題	785	538	68.5	519	24	543	4190.375
成果専有課題	57	57	100.0	56	15	71	312
大学院生提案型課題	92	52	56.5	52	—	52	343.875
大学院生提案型課題（長期型）	2023A 期は募集なし				2	2	24
時期指定課題	13	13	100.0	13	—	13	12.625
測定代行課題 ^(注3)	48	48	100.0	46	—	46	20.625
成果公開優先利用課題	68	67	98.5	64	—	64	447.625
成果公開優先利用課題（一年利用）	8	8	100.0	7	—	7	140.875
長期利用課題	2023A 期は募集なし				3	3	81
合 計	1071	783	73.1	757	44	801	5573

(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、BL28B2、BL46XU で実施。

表 4 2023A に Spring-8 共用施設^(注1) で実施された利用研究課題の所属機関分類および研究分野分類

機関分類	課題分類	課題数／シフト数	研究分野								計	
			生命科学	医学応用	物質科学・材料科学	化学	地球・惑星科学	環境科学	産業利用	その他 ^(注2)		
大学等教育機関	一般課題	課題数	65	6	177	102	27	3	15	4	399	
		シフト数	428.5	40.5	1328.75	638.625	263.875	31	84	42	2857.25	
	成果専有課題	課題数			1				1		2	
		シフト数			1				1		2	
	大学院生提案型課題	課題数	4	1	19	15	2	1	3		45	
		シフト数	25	6	116	93.875	15	2	27		284.875	
	大学院生提案型課題(長期型)	課題数			1	1					2	
		シフト数			12	12					24	
	時期指定課題	課題数	2		1						3	
		シフト数	1.5		0.25						1.75	
	測定代行課題	課題数							2		2	
		シフト数							0.25		0.25	
成果公開優先利用課題	課題数			19	10		1	3		33		
	シフト数			124.875	65		3	11		203.875		
長期利用課題	課題数					3				3		
	シフト数					81				81		
計	課題数	71	7	218	128	32	5	24	4	489		
	シフト数	455	46.5	1582.875	809.5	359.875	36	123.25	42	3455		
国公立研究機関等	一般課題	課題数	8	2	33	12	4	1	4	10	74	
		シフト数	72	21	316.875	104.875	45	12	17.875	109	698.625	
	成果専有課題	課題数	2		1						3	
		シフト数	46.25		3						49.25	
	時期指定課題	課題数			1					1	2	
		シフト数			0.25					2	2.25	
	測定代行課題	課題数							2		2	
		シフト数							1.25		1.25	
	成果公開優先利用課題	課題数		2	11					1	14	
		シフト数		18	41.875					1	60.875	
	成果公開優先利用課題(一年利用)	課題数	4			3					7	
		シフト数	99			41.875					140.875	
計	課題数	14	4	46	15	4	1	6	12	102		
	シフト数	217.25	39	362	146.75	45	12	19.125	112	953.125		
産業界	一般課題	課題数			1				15		16	
		シフト数			6				146		152	
	成果専有課題	課題数	11		7				45		63	
		シフト数	32.25		22				169.75		224	
	時期指定課題	課題数			2				6		8	
		シフト数			2.5				6.125		8.625	
	測定代行課題	課題数			1				36		37	
		シフト数			0.25				16.625		16.875	
	成果公開優先利用課題	課題数				5			12		17	
		シフト数				72			110.875		182.875	
	計	課題数	11		11	5			114		141	
		シフト数	32.25		30.75	72			449.375		584.375	
海外機関	一般課題	課題数	7	2	29	8	7			1	54	
		シフト数	78.25	30	236.25	63	69			6	482.5	
	成果専有課題	課題数	2						1		3	
		シフト数	33						3.75		36.75	
	大学院生提案型課題	課題数			5	2					7	
		シフト数			48	11					59	
	測定代行課題	課題数							5		5	
		シフト数							2.25		2.25	
	計	課題数	9	2	34	10	7		6	1	69	
		シフト数	111.25	30	284.25	74	69		6	6	580.5	
	課題数合計			105	13	309	158	43	6	150	17	801
	シフト数合計			815.75	115.5	2259.875	1102.25	473.875	48	597.75	160	5573

(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。

表 5 SPring-8 1997B-2023A 課題種別実施課題数の推移

課題種	1997B~ 2014A	2014B	2015A	2015B	2016A	2016B	2017A	2017B	2018A	2018B	2019A	2019B	2020A	2021A	2021B	2022A	2022B	2023A	合計
一般課題	12850	611	457	476	489	459	502	570	524	537	507	563	661	470	536	515	564	543	21834
緊急・特別課題	35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	1	0	0	0	40
成果専有一般課題	790	55	36	37	42	47	35	48	41	46	38	52	88	36	67	54	99	71	1682
時期指定課題 (除く測定代行)	214	2	8	8	6	10	7	16	6	16	8	20	17	14	25	14	35	13	439
測定代行 (時期指定課題の一環)	424	54	37	46	32	48	29	46	37	60	29	40	65	42	43	41	61	46	1180
産業利用準備課題											3	10	5	6	3				27
長期利用課題	283	13	26	23	28	25	28	25	13	14	15	14	11	10	9	10	3	3	553
被・量子ビーム施設ユー ザー支援課題	94																		94
大学院生提案型課題 (旧名称：萌芽的研究支 援課題〔～2015B〕)	434	58	45	54	65	52	29	53	53	58	41	52	53	43	52	46	54	52	1294
大学院生提案型課題 (長期型)																3	6	2	11
成果公開優先利用課題	434	30	18	28	35	37	39	52	34	43	33	33	53	52	71	58	87	64	1201
成果公開優先利用課題 (一年利用)																		7	7
重点タンパク 500 課題 (タンパク 3000)	489																		489
重点ナノテクノロジー支 援課題	928																		928
重点産業トライアルユ ース課題	112																		112
SPring-8 戦略活用プロ グラム課題	332																		332
重点産業利用課題	1000																		1000
重点産業化促進課題	58																		58
産業新分野支援課題	10	14	12	14	11	4	6	4											75
放射光施設横断産業利 用課題									5	3	6	4							18
先進技術活用による産 業応用課題											5	4	8						17
重点メディカルバイオ ・トライアルユース課題	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	125																		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)	65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	65
重点/パワーユーザー課題	126	1																	127
重点パートナーユーザー 課題	3	3	6	6	7	7	8	8	7	7	8	8	11	5	0	0			94
新分野創成利用課題				4	6	11	16	21	21	25	24	9	8	0	0	0			145
合 計	18926	858	674	726	738	719	718	857	755	822	717	809	984	678	807	741	909	801	32239

備考 長期利用課題、重点パートナーユーザー課題、新分野創成利用課題、大学院生提案型課題（長期型）は BL ごとに 1 課題としてカウント。

空白は制度なし。

2023A の延べ利用者数は、共用施設 4,731 人、専用施設 2,218 人でした。表 6 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 6 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 6 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 6 回募集対象ビームラインの第 II 期および第 III 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 6 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。

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。

<https://user.spring8.or.jp/?p=37038>

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。

<https://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 6 SPring-8 共用施設および専用施設利用実績の推移

利 用 期 間			利用時間	共用施設		専用施設	
				実施課題数	延べ利用者数	実施課題数	延べ利用者数
第 1 回	1997B	1997 年 10 月－1998 年 03 月	1,286	94	681	－	－
第 2 回	1998A	1998 年 04 月－1998 年 10 月	1,702	234	1,252	7	－
第 3 回	1999A	1998 年 11 月－1999 年 06 月	2,585	274	1,542	33	467
第 4 回	1999B	1999 年 09 月－1999 年 12 月	1,371	242	1,631	65	427
第 5 回	2000A	2000 年 02 月－2000 年 06 月	2,051	365	2,486	100	794
第 6 回	2000B	2000 年 10 月－2001 年 01 月	1,522	383	2,370	88	620
第 7 回	2001A	2001 年 02 月－2001 年 06 月	2,313	474	2,915	102	766
第 8 回	2001B	2001 年 09 月－2002 年 02 月	1,867	488	3,277	114	977
第 9 回	2002A	2002 年 02 月－2002 年 07 月	2,093	545	3,246	110	1,043
第 10 回	2002B	2002 年 09 月－2003 年 02 月	1,867	540	3,508	142	1,046
第 11 回	2003A	2003 年 02 月－2003 年 07 月	2,246	634	3,777	164	1,347
第 12 回	2003B	2003 年 09 月－2004 年 02 月	1,844	549	3,428	154	1,264
第 13 回	2004A	2004 年 02 月－2004 年 07 月	2,095	569	3,756	161	1,269
第 14 回	2004B	2004 年 09 月－2004 年 12 月	1,971	555	3,546	146	1,154
第 15 回	2005A	2005 年 04 月－2005 年 08 月	1,880	560	3,741	146	1,185
第 16 回	2005B	2005 年 09 月－2005 年 12 月	1,818	620	4,032	187	1,379
第 17 回	2006A	2006 年 03 月－2006 年 07 月	2,202	724	4,809	226	1,831
第 18 回	2006B	2006 年 09 月－2006 年 12 月	1,587	550	3,513	199	1,487
第 19 回	2007A	2007 年 03 月－2007 年 07 月	2,448	781	4,999	260	2,282
第 20 回	2007B	2007 年 09 月－2008 年 02 月	2,140	739	4,814	225	1,938
第 21 回	2008A	2008 年 04 月－2008 年 07 月	2,231	769	4,840	232	1,891
第 22 回	2008B	2008 年 10 月－2009 年 03 月	1,879	672	4,325	217	1,630
第 23 回	2009A	2009 年 04 月－2009 年 07 月	1,927	669	4,240	238	1,761
第 24 回	2009B	2009 年 10 月－2010 年 02 月	2,087	722	4,793	275	2,144
第 25 回	2010A	2010 年 04 月－2010 年 07 月	1,977	685	4,329	293	2,483
第 26 回	2010B	2010 年 10 月－2011 年 02 月	2,094	744	4,872	325	2,812
第 27 回	2011A	2011 年 04 月－2011 年 07 月	2,131	740	4,640	309	2,773
第 28 回	2011B	2011 年 10 月－2012 年 02 月	1,927	730	4,576	319	2,769
第 29 回	2012A	2012 年 04 月－2012 年 07 月	1,972	637	4,304	285	2,692
第 30 回	2012B	2012 年 10 月－2013 年 02 月	2,184	771	5,072	314	3,181
第 31 回	2013A	2013 年 04 月－2013 年 07 月	1,837	633	4,053	275	2,835
第 32 回	2013B	2013 年 10 月－2013 年 12 月	1,571	610	3,770	286	2,723
第 33 回	2014A	2014 年 04 月－2014 年 07 月	1,768	624	4,129	292	2,710
第 34 回	2014B	2014 年 10 月－2015 年 02 月	2,290	858	5,766	331	3,573
第 35 回	2015A	2015 年 04 月－2015 年 07 月	2,053	674	4,560	271	2,960
第 36 回	2015B	2015 年 09 月－2015 年 12 月	1,981	726	4,863	281	2,898
第 37 回	2016A	2016 年 04 月－2016 年 07 月	2,150	738	5,174	301	3,130
第 38 回	2016B	2016 年 09 月－2016 年 12 月	1,976	719	4,824	298	2,985
第 39 回	2017A	2017 年 04 月－2017 年 07 月	2,101	718	4,835	326	3,228
第 40 回	2017B	2017 年 10 月－2018 年 02 月	2,377	857	5,885	355	3,659
第 41 回	2018A	2018 年 04 月－2018 年 08 月	2,254	755	5,009	323	3,231
第 42 回	2018B	2018 年 10 月－2019 年 02 月	2,306	822	5,468	361	3,303
第 43 回	2019A	2019 年 04 月－2019 年 07 月	2,205	717	4,579	331	2,911
第 44 回	2019B	2019 年 09 月－2020 年 02 月	2,333	809	5,378	344	3,102
第 45 回	2020A	2020 年 04 月－2021 年 02 月	4,309	984	5,906	337	3,265
第 46 回	2021A	2021 年 04 月－2021 年 07 月	2,155	678	4,156	241	1,877
第 47 回	2021B	2021 年 09 月－2022 年 02 月	2,272	807	5,134	270	2,313
第 48 回	2022A	2022 年 04 月－2022 年 08 月	2,147	741	4,609	241	2,231
第 49 回	2022B	2022 年 10 月－2023 年 02 月	2,269	909	5,398	252	2,556
第 50 回	2023A	2023 年 04 月－2023 年 08 月	2,133	801	4,731	250	2,218
合 計			103,784	32,239	207,541	11,402	103,120

注：長期利用課題、重点パートナーユーザー課題、新分野創成利用課題をビームラインごとに 1 課題とカウント。

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。

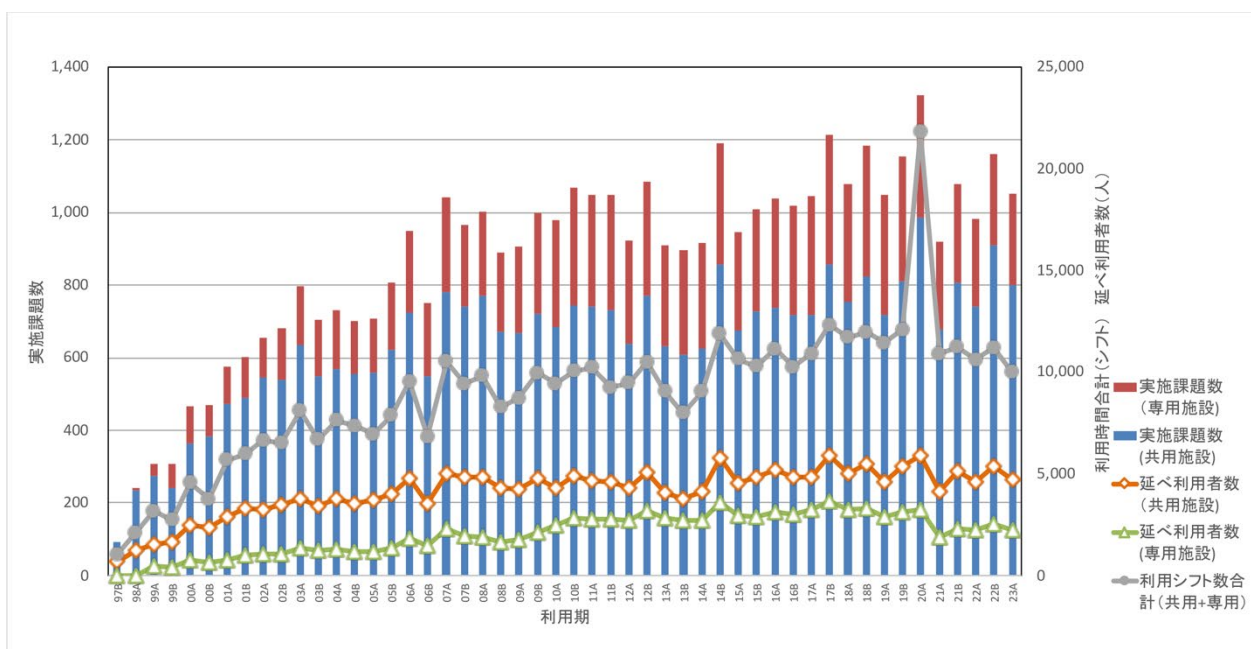


図1 SPring-8 共用施設および専用施設の利用実績の推移

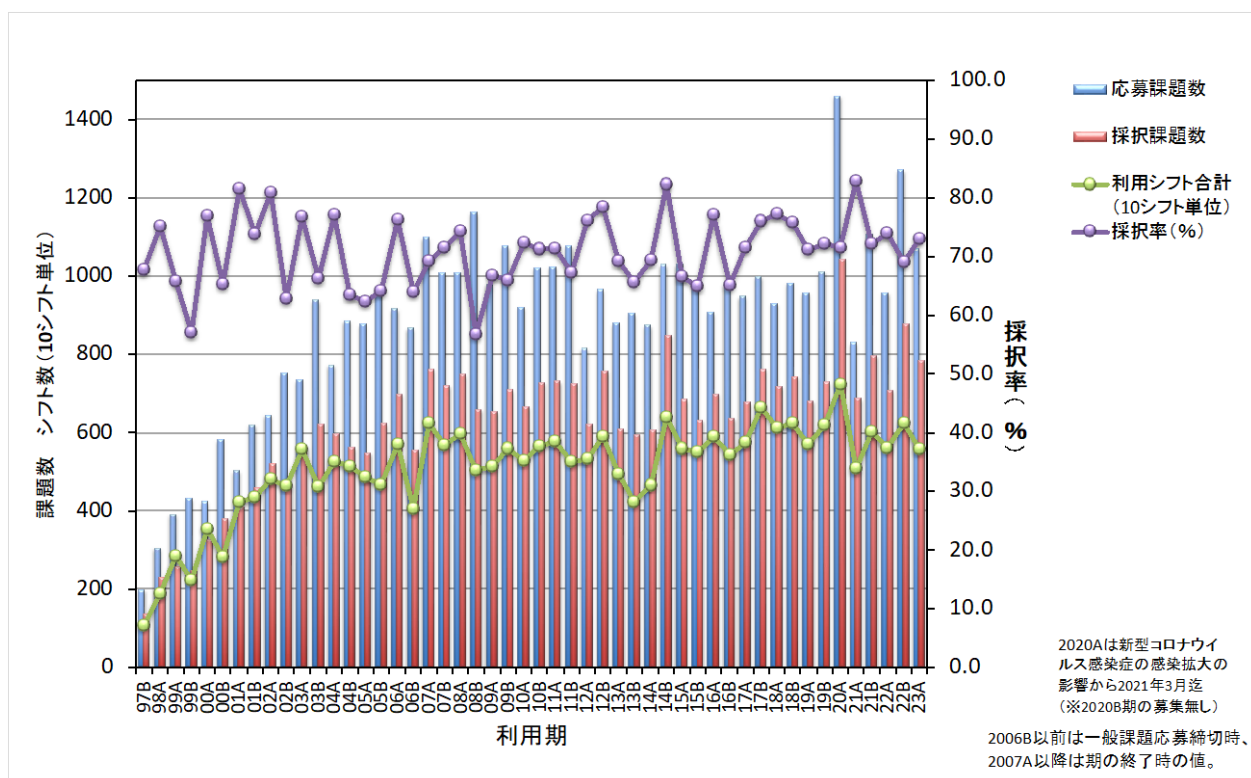


図2 SPring-8 共用施設の応募・採択課題数の推移実績

2023A 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

第 22 回目の利用期である 2023A 期の利用研究課題（共用課題）が、2023 年 4 月 10 日から 2023 年 7 月 31 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 48 の利用研究課題が実施され、ビームタイムは計 247.833 シフト（1 シフト＝12 時間）が利用されました。

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

なお、これらのほか、同ビームラインにおいて JASRI スタッフによるインハウス課題が計 3 課題実施され、ビームタイムは計 14 シフトが利用されました。

実施課題の課題名は、以下の Web サイトに掲載しています。

◆ SACLA User Information

> SACLA Guide > 採択課題／実施課題

> 実施課題一覧 > 2023A

https://sacra.xfel.jp/wp-content/uploads/sacra_performed_proposal_2023a_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：sacra.jasri@spring8.or.jp

表 1 2023A 期 SACLA 利用研究実施課題

課題種		産業界		大学等教育機関		国公立試験研究機関等		海外機関		合計	
		実施課題数	実施シフト数	実施課題数	実施シフト数	実施課題数	実施シフト数	実施課題数	実施シフト数	実施課題数	実施シフト数
一般課題	(成果非専有利用)			22	108.833	9	49	17	90	48	247.833
	(成果専有利用)										
時期指定課題（成果専有利用）											
緊急課題											
合計				22	108.833	9	49	17	90	48	247.833

○実施課題を実験責任者の所属（産学官 海外）で区分。

○延べ利用者数は計 519 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

◎2023 年 5～8 月の運転実績

SPring-8 は 5 月 10 日から 7 月 7 日までセベラルバンチ運転で第 2 サイクルの運転を行い、7 月 10 日から 8 月 2 日までセベラルバンチ運転で第 3 サイクルの運転を実施した。

第 2 サイクルでは SR RF Ast. Blower5 Err のインターロックによる RF Down (ビーム軌道変動によるアボート) 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 2 サイクルは約 0.1%、第 3 サイクルは 0% であった。

1. 装置運転関係

(1) 運転期間

第 2 サイクル (5/10 (水) ～7/7 (金))

第 3 サイクル (7/10 (月) ～8/2 (水))

(2) 運転時間の内訳

第 2 サイクル

運転時間総計 約 1,393 時間

①装置の調整およびマシンスタディ等 約 97 時間

②放射光利用運転時間 約 1,294 時間

③故障等による down time 約 1 時間

④フィリング変更時間 約 1 時間

総放射光利用運転時間 (ユーザータイム = ② + ③

+ ④) に対する down time の割合 (*1) 約 0.1%

第 3 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 120 時間

②放射光利用運転時間 約 432 時間

③故障等による down time 0 分

④フィリング変更時間 約 0.5 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) 0%

(3) 運転スペック等

第 2 サイクル (セベラルバンチ運転)

- ・ 203 bunches (A)
- ・ 406 × 11/29-bunches + 1 bunch (H)
- ・ 11 bunch train × 29 (C)
- ・ 406 × 11/29-bunches + 1 bunch (H)
- ・ 1/7 filling + 5 bunches (D)
- ・ 203 bunches (A)
- ・ 203 bunches (A)

第 3 サイクル (セベラルバンチ運転)

- ・ 4 bunch train × 84 (B)
- ・ 406 × 11/29-bunches + 1 bunch (H)
- ・ 11 bunch train × 29 (C)

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

2. 利用関係 (JASRI 利用推進部 集計)

(1) 放射光利用実験期間

第 2 サイクル (5/11 (木) ～7/7 (金))

第 3 サイクル (7/13 (木) ～8/1 (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	15 本
理研ビームライン	13 本

第 2 サイクル (暫定値)

共同利用研究実験数	708 件
共同利用研究者数	2,881 名
専用施設利用研究実験数	352 件
専用施設利用研究者数	1,409 名

第3サイクル（暫定値）

共同利用研究実験数	253 件
共同利用研究者数	1,045 名
専用施設利用研究実験数	116 件
専用施設利用研究者数	483 名

◎2023 年 8～9 月の運転実績（停止期間）

SPring-8 は 8 月 3 日から 9 月 27 日まで夏期点検調整期間とし、加速器やビームライン (BL) 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 5 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（実績））

(1) 蓄積リング関係

- ・ RF エージング (9/26)
- ・ 運転前連続通電作業 (9/26～)
- ・ 電磁石、電磁石電源等定期点検
- ・ SR 入射用バンプ電源 BP1 (サイラトロン交換)
- ・ SR 入射用 DC セプタム電磁石不具合調査
- ・ 真空系作業及び点検（保守、メンテナンス等）
- ・ CRAB 交換（セル 32、33、34）
- ・ C15 真空制御システム改造 (BL15XU 対応)
- ・ C39B 架台冷却水フレキホース交換
- ・ 機器保護インターロック自主検査
- ・ クライストロン定期点検等
- ・ クライストロン電源定期点検 (C、D-st)、高電圧試験
- ・ モニター系定期点検、動作確認試験
- ・ 旧 SPBPM 回路撤去、新 MTCA 回路設置
- ・ データベース及びネットワーク関連作業
- ・ 機器制御関連作業（整備及び更新等）
- ・ 中央制御室ディスプレイウォール更新
- ・ 加速器安全インターロックメンテナンス
- ・ 入退管理システムメンテナンス
- ・ ID15 架台入替
- ・ ID22 形状変換部冷却水管（スパイラル管）交換
- ・ Mg 列冷却用チラー入替
- ・ ID 関連作業及びメンテナンス
- ・ FE 作業及び冷却系／圧空系保守作業

- ・ BL20B2 アブソーバ交換
- ・ MBS 電磁弁交換（ビームシャッター等）
- ・ FE 定期検査（運転前・MBS 検査、駆動系検査）
- ・ 共用実験／制御ネットワーク関連作業
- ・ BL 改造工事 (BL15XU、BL39XU、他)
- ・ BL 関連作業（実験分電盤増設、ハッチ作業等）
- ・ BL インターロック自主検査
- ・ BL 制御・PLC ハードウェアメンテナンス
- ・ BL ネットワーク更新
- ・ 光学系・輸送チャンネル関係作業
- ・ DCM・LN2 循環装置定期メンテナンス等
- ・ その他作業及び定期点検等
- ・ LEPS2 実験棟ビームダンプ増強工事

(2) ユーティリティ関係

- ・ 電気設備保守点検及び整備作業
- ・ 冷却水設備保守定期点検及び整備作業
- ・ 空調用設備保守点検及び整備作業
- ・ 天井クレーン月次・年次点検作業
- ・ 消防設備等点検（防排煙、放送設備等）
- ・ 遮蔽扉点検作業

(3) 安全管理関係

- ・ 運転停止後の残留サーベイ
- ・ 安全インターロック自主検査（定期検査）
- ・ 特例区域設置 (8/3～9/25)
- ・ 放射線モニタ定期点検

(4) その他

- ・ 受変電設備点検（全施設停電 (8/5)）
- ・ 給水施設棟工水関連作業（工水断水作業）
- ・ 停止期間中の節電対策（装置冷却水等停止）
- ・ 空調機等間引き運転（長期停止期間節電対策）
- ・ 建屋設備機器等更新及び改修工事
- ・ 施設建屋、外構関連小工事等
- ・ LN2 供給設備・設備計画 (*2)

◎2023 年 9～12 月の運転予定

SPring-8 は 9 月 28 日から 12 月 15 日までセベラルバンチ運転で第 4 サイクルの運転を予定している。

第 4 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16日から1月18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5サイクルの運転開始は1月19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。

(*2) LN2 供給設備・整備計画

2023 年度においては、蓄積リング棟マシン収納部上部全周に環状 VJP 配管(真空断熱二重)を設置する。

夏期点検調整期間中に実験排気ダクト分岐作業及び、環状 VJP 配管用サポート取付(全周)、プレ工事を実施している。

※今後の環状 VJP 配管設置予定(作業場所:収納部天井)

- ・第1期工事:11/20～10日間程度(ユーザー実験中)
- ・第2期工事:12月末(冬期点検調整期間中)
- ・第3期工事:1月下旬
- ・第4期工事:2月末～3月上旬

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（2023 年 9 月 30 日現在）

SPRING-8

Beamline Name			Public Use Since	~2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023	Total
Public Beamlines	BL01B1	XAFS I	1997.10	630	92	75	87	94	82	86	105	90	81	38	1460
		Technical Journal	1												1
	BL02B1	Single Crystal Structure Analysis	1997.10	206	42	36	44	40	30	48	55	59	41	31	632
	BL02B2	Powder Diffraction	1999. 9	742	71	82	95	80	75	80	112	74	94	43	1548
	BL04B1	High Temperature and High Pressure Research	1997.10	232	19	16	16	15	17	17	13	12	13	5	375
	BL04B2	High Energy X-ray Diffraction	1999. 9	273	33	39	43	30	42	41	61	33	51	20	666
		Technical Journal	1								1				2
	BL08W	High Energy Inelastic Scattering	1997.10	182	13	19	16	16	14	11	18	25	17	4	335
	BL09XU	HAXPES I	1997.10	151	15	18	16	19	28	14	11	14	13	11	310
	BL10XU	High Pressure Research	1997.10	376	30	28	30	28	26	33	33	23	27	9	643
	BL13XU	X-ray Diffraction and Scattering I	2001. 9	188	21	24	35	28	32	34	32	24	24	19	461
	BL14B2	XAFS II	2007. 9	164	53	61	53	58	67	81	87	73	67	39	803
		Technical Journal	2	1						1	3				7
	BL19B2	X-ray Diffraction and Scattering II	2001.11	290	63	66	63	70	60	58	61	59	33	25	848
		Technical Journal	2	1	2				2	1	1				9
	BL20B2	Medical and Imaging I	1999. 9	269	25	35	26	28	32	29	40	26	31	13	554
	BL20XU	Medical and Imaging II	2001. 9	225	45	45	37	34	31	44	35	43	33	24	596
	BL25SU	Soft X-ray Spectroscopy of Solid	1998. 4	353	32	20	19	25	20	24	30	23	20	15	581
		Technical Journal	2												2
	BL27SU	Soft X-ray Photochemistry	1998. 5	372	35	25	36	27	26	16	42	17	20	16	632
	BL28B2	White Beam X-ray Diffraction	1999. 9	142	18	21	19	25	20	16	26	15	17	8	327
	BL35XU	Inelastic and Nuclear Resonant Scattering	2001. 9	109	13	16	15	15	14	8	21	17	12	9	249
	BL37XU	Trace Element Analysis	2002.11	165	28	35	29	29	29	25	34	21	19	16	430
		Technical Journal		1											1
	BL38B1	Structural Biology III	2000.10	550	48	70	66	48	31	31	29	30	15	4	922
	BL39XU	Magnetic Materials	1997.10	233	25	19	24	30	20	19	29	22	15	10	446
	BL40B2	SAXS BM	1999. 9	494	55	55	60	54	55	64	53	67	54	39	1050
		Technical Journal	1		1						1				3
	BL40XU	High Flux	2000. 4	157	21	32	42	30	35	52	30	40	31	15	485
		Technical Journal									1				1
	BL41XU	Macromolecular Crystallography I	1997.10	890	71	74	80	60	51	41	47	42	20	7	1383
	BL43JR	Infrared Materials Science	2000. 4	98	11	17	14	23	10	21	29	21	22	14	280
	BL46XU	HAXPES II	2000.11	175	28	56	50	52	44	55	45	65	44	20	634
		Technical Journal					1	1			1				3
	BL47XU	Micro-CT	1997.10	311	36	31	29	37	28	33	33	21	28	14	601
		Technical Journal						1							1
Public Use at Other Beamlines	BL05XU	R&D-ID I	2017. 4						3	7	9	9	2	2	32
	BL11XU	QST Quantum Dynamics I (1999. 3 - 2012. 2)		13											13
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II (1998. 4 - 2012. 2)		47	1										48
	BL15XU	WEBRAM (2002. 9 - 2012. 2)		34	1										35
	BL17SU	RIKEN Coherent Soft X-ray Spectroscopy	2005. 9	32	12	5	2	3	5	8	6	4	4	4	85
	BL19LXU	RIKEN SR Physics	2002. 9	5	1	1	2	5	7	2	3	8	1	3	38
	BL22XU	JAEA Actinide Science I (2004. 9 - 2012. 2)		6											6
	BL23SU	JAEA Actinide Science II (1998. 6 - 2012. 2)		51	2						1	1			55
	BL26B1	RIKEN Structural Genomics I	2009. 4	14	9	7	19	18	27	30	35	25	21	3	208
	BL26B2	RIKEN Structural Genomics II	2009. 4	10	5	7	11	9	7	9	7	1	3	3	72
		Technical Journal					1								1
	BL29XU	RIKEN Coherent X-ray Optics	2002. 9	13	1	1	2	2	3		1			1	24
	BL32XU	RIKEN Targeted Proteins	2010.10	18	11	17	8	17	16	14	13	8	6	3	131
	BL43LXU	Quantum NanoDynamics	2020. 8										1		1
	BL44B2	RIKEN Materials Science I	1998. 5	14			6	5	2	6	6	4	5	3	51
	BL45XU	RIKEN Structural Biology I	1997.10	106	9	13	20	10	7	16	24	25	20	9	259
	Subtotal			8340	995	1066	1114	1064	996	1073	1216	1041	905	499	18309

Beamline Name			Public Use Since	~2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023	Total
Contract Beamlines	BL03XU	Advanced Softmaterial	2009.11	38	21	14	17	23	9	19	20	12	9	7	189
		Technical Journal		77	39	36	33	31	28	28	34	24	27		357
	BL07LSU	The University-of-Tokyo Outstation Beamline for Materials Science	(2009.11 - 2022.8)	22	13	12	19	19	16	21	13	15	17	4	171
		Technical Journal								1	2				3
	BL08B2	Hyogo BM	2005. 9	12	9	5	6	11	5	7	12	10	10	2	89
		Technical Journal		8	18	7	4	4	1	3		1	1	1	48
	BL11XU	QST Quantum Dynamics I		111	14	8	20	20	16	20	14	20	10	7	260
	BL12B2	NSRRC BM	2001. 9	190	21	29	38	34	37	48	33	27	15	4	476
	BL12XU	NSRRC ID	2003. 2	81	18	19	18	25	19	27	30	15	16	6	274
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II		148	15	19	17	23	21	21	26	27	25	14	356
	BL15XU	WEBRAM	(2001. 4 - 2021. 9)	301	56	49	62	58	54	49	55	39	30	14	767
	BL16B2	SUNBEAM BM	1999. 9	58	6	4	10	9	6	10	12	21	19	8	163
		Technical Journal		35	14	8	15	21	15	11	8	7	4	7	145
	BL16XU	SUNBEAM ID	1999. 9	44	3	4	11	9	9	17	20	22	20	12	171
		Technical Journal		39	14	14	21	18	12	8	10	6	4	2	148
	BL22XU	JAEA Actinide Science I		95	19	15	14	15	26	25	18	27	26	12	292
		Technical Journal											1		1
	BL23SU	JAEA Actinide Science II		212	29	19	26	16	24	23	28	18	19	7	421
	BL24XU	Hyogo ID	1998.10	153	5	4	5	6	8	2	13	12	12	8	228
		Technical Journal		14	10	3	1	4		1	1	1			35
	BL28XU	Advanced Batteries	2012. 4	3	9	5	5	6	4	8	11	7	4		62
		Technical Journal									1				1
	BL31LEP	Laser-Electron Photon II	2013.10		1		3	2	1	3	2		1		13
	BL32B2	Pharmaceutical Industry	(2002. 9 - 2012. 3)	27		1					1			1	30
	BL33LEP	Laser-Electron Photon	(2000.10 - 2023.3)	55	4	2	2	3	5	2	1	1			75
	BL33XU	TOYOTA	2009. 5	10	8	4	10	16	6	9	19	17	12	11	122
		Technical Journal		11	5	3	4	1							24
	BL36XU	Catalytic Reaction Dynamics for Fuel Cell	(2013. 1 - 2020. 3)	1	7	6	7	12	15	8	11	4	7	6	84
	BL44XU	Macromolecular Assemblies	2000.2	409	53	73	61	61	47	59	65	57	42	20	947
Subtotal				1970	311	292	351	368	328	378	404	351	294	143	5190
RIKEN Beamlines	BL05XU	R&D-ID I		4	0	1	0	0	0	0	0	1	2	0	8
	BL17SU	Coherent Soft X-ray Spectroscopy		90	8	5	8	5	0	1	8	4	0	3	132
	BL19LXU	SR Physics		109	13	9	5	6	1	4	1	2		2	152
	BL26B1	Structural Genomics I		186	13	9	8	7	3		1	1	2		230
	BL26B2	Structural Genomics II		132	10	5	9	25	2	2	2		2	2	191
	BL29XU	Coherent X-ray Optics		195	9	10	15	9	8	4	7	4		2	263
	BL32XU	Targeted Proteins		25	9	11	19	9	3	1	4	4	3	1	89
	BL38B2	Diagnosis Beamline I		2											2
	BL43LXU	Quantum NanoDynamics		1		1	1				2				5
	BL44B2	Materials Science I		254	16	21	17	18	14	10	3	2	2	3	360
	BL45XU	Structural Biology I		211	9	13	13	8	5	2	5	4			270
Subtotal				1209	87	85	95	87	36	24	33	22	11	13	1702

SACLA

Public Beamlines	Beamline Name		Public Use Since	~2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023	Total
	BL1	SXFEL	2016. 3						7	6	9	9	5	6	42
	BL2/BL3	XFEL2/XFEL1	2012. 3	14	28	37	48	42	34	51	62	58	56	27	457
Hardware / Software R & D				612	13	33	46	53	49	35	26	15	17	3	902
NET Sum Total				10326	1138	1233	1323	1299	1144	1243	1362	1181	1019	511	21779
Technical Journal				173	97	67	74	71	54	49	53	34	36	9	717

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 BL でカウントした。

共用・専用・理研の変更があった次の BL については、変更前のカテゴリに含めた。BL07LSU、BL15XU、BL32B2、BL33LEP、BL36XU、BL38B1（以上、現理研BL）、BL45XU（現共用BL）

このデータは論文発表等登録データベース（<https://user.spring8.or.jp/ui/search/publication2/>）に 2023 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 BL 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（2023 年 9 月 30 日現在）

SPring-8

	Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total
Public Beamlines	BL01B1	XAFS I	1997.10	1461	66	89	1616
	BL02B1	Single Crystal Structure Analysis	1997.10	633	14	32	679
	BL02B2	Powder Diffraction	1999. 9	1548	41	86	1675
	BL04B1	High Temperature and High Pressure Research	1997.10	375	7	49	431
	BL04B2	High Energy X-ray Diffraction	1999. 9	668	13	62	743
	BL08W	High Energy Inelastic Scattering	1997.10	335	10	48	393
	BL09XU	HAXPES I	1997.10	310	15	37	362
	BL10XU	High Pressure Research	1997.10	643	22	61	726
	BL13XU	X-ray Diffraction and Scattering I	2001. 9	461	19	40	520
	BL14B2	XAFS II	2007. 9	810	11	39	860
	BL19B2	X-ray Diffraction and Scattering II	2001.11	857	47	94	998
	BL20B2	Medical and Imaging I	1999. 9	554	91	89	734
	BL20XU	Medical and Imaging II	2001. 9	596	106	159	861
	BL25SU	Soft X-ray Spectroscopy of Solid	1998. 4	583	15	61	659
	BL27SU	Soft X-ray Photochemistry	1998. 5	632	21	39	692
	BL28B2	White Beam X-ray Diffraction	1999. 9	327	17	25	369
	BL35XU	Inelastic and Nuclear Resonant Scattering	2001. 9	249	5	13	267
	BL37XU	Trace Element Analysis	2002.11	431	24	52	507
	BL38B1	Structural Biology III	2000.10	922	11	66	999
	BL39XU	Magnetic Materials	1997.10	446	17	80	543
	BL40B2	SAXS BM	1999. 9	1053	15	122	1190
	BL40XU	High Flux	2000. 4	486	25	71	582
	BL41XU	Macromolecular Crystallography I	1997.10	1383	4	103	1490
	BL43IR	Infrared Materials Science	2000. 4	280	15	64	359
	BL46XU	HAXPES II	2000.11	637	20	46	703
	BL47XU	Micro-CT	1997.10	602	93	136	831
Public Use at Other Beamlines	BL05XU	R&D-ID I	2017. 4	32			32
	BL11XU	QST Quantum Dynamics I	(1999. 3 - 2012. 2)	13	2	2	17
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II	(1998. 4 - 2012. 2)	48	1	11	60
	BL15XU	WEBRAM	(2002. 9 - 2012. 2)	35	19	7	61
	BL17SU	RIKEN Coherent Soft X-ray Spectroscopy	2005. 9	85	1	29	115
	BL19LXU	RIKEN SR Physics	2002. 9	38		5	43
	BL22XU	JAEA Actinide Science I	(2004. 9 - 2012. 2)	6			6
	BL23SU	JAEA Actinide Science II	(1998. 6 - 2012. 2)	55	4	15	74
	BL26B1	RIKEN Structural Genomics I	2009. 4	208		9	217
	BL26B2	RIKEN Structural Genomics II	2009. 4	73		11	84
	BL29XU	RIKEN Coherent X-ray Optics	2002. 9	24		1	25
	BL32XU	RIKEN Targeted Proteins	2010.10	131		5	136
	BL43LXU	Quantum NanoDynamics	2020. 8	1			1
	BL44B2	RIKEN Materials Science I	1998. 5	51		3	54
	BL45XU	RIKEN Structural Biology I	1997.10	259	5	20	284
	Subtotal			18341	776	1881	20998

Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total
Contract Beamlines	BL03XU	Advanced Softmaterial	2009.11	546	18	564
	BL07LSU	The University-of-Tokyo Outstation Beamline for Materials Science	(2009.11 - 2022.8)	174	11	185
	BL08B2	Hyogo BM	2005. 9	137	1	138
	BL11XU	QST Quantum Dynamics I		260	8	312
	BL12B2	NSRRC BM	2001. 9	476	1	479
	BL12XU	NSRRC ID	2003. 2	274	7	287
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II		356	19	463
	BL15XU	WEBRAM	(2001. 4 - 2021. 9)	767	14	841
	BL16B2	SUNBEAM BM	1999. 9	308	12	396
	BL16XU	SUNBEAM ID	1999. 9	319	8	390
	BL22XU	JAEA Actinide Science I		293	4	344
	BL23SU	JAEA Actinide Science II		421	45	576
	BL24XU	Hyogo ID	1998.10	263	19	345
	BL28XU	Advanced Batteries	2012. 4	63	1	64
	BL31LEP	Laser-Electron Photon II	2013.10	13		13
	BL32B2	Pharmaceutical Industry	(2002. 9 - 2012. 3)	30	3	33
	BL33LEP	Laser-Electron Photon	(2000.10 - 2023.3)	75	23	101
	BL33XU	TOYOTA	2009. 5	146	5	192
	BL36XU	Catalytic Reaction Dynamics for Fuel Cell	(2013. 1 - 2020. 3)	84	6	90
	BL44XU	Macromolecular Assemblies	2000. 2	947	46	993
Subtotal			5952	165	689	6806

RIKEN Beamlines	BL05XU	R&D-ID I		8	6	14
	BL17SU	Coherent Soft X-ray Spectroscopy		132	4	149
	BL19LXU	SR Physics		152	8	187
	BL26B1	Structural Genomics I		230	2	251
	BL26B2	Structural Genomics II		191	1	205
	BL29XU	Coherent X-ray Optics		263	14	315
	BL32XU	Targeted Proteins		89	4	93
	BL38B2	Diagnosis Beamline I		2	6	8
	BL43LXU	Quantum NanoDynamics		5		5
	BL44B2	Materials Science I		360	2	378
	BL45XU	Structural Biology I		270	5	320
Subtotal			1702	48	175	1925

SACLA

Public Beamlines	Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total
	BL1	SXFEL	2016. 3	42			42
	BL2/BL3	XFEL2/XFEL1	2012. 3	457	4	17	478

Hardware / Software R & D			902	554	475	1931
---------------------------	--	--	-----	-----	-----	------

NET Sum Total			22293	1374	2497	26164
---------------	--	--	-------	------	------	-------

Refereed Papers : 査読有りの原稿論文、査読有りのプロシーディングと博士論文、SPRING-8/SACLA 利用研究成果集、公開技術報告書

Proceedings : 査読なしのプロシーディング

Other Publications : 発表形式が出版で、上記の2つに当てはまらないもの（総説、単行本、賞、その他として登録されたもの）

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

複数ビームライン（BL）からの成果からなる論文等はそれぞれのBLでカウントした。

共用・専用・理研の変更があった次のBLについては、変更前のカテゴリに含めた。BL07LSU、BL15XU、BL32B2、BL33LEP、BL36XU、BL38B1（以上、現理研BL）、BL45XU（現共用BL）

・SPRING-8 または SACLA での成果を論文等にする場合は必ず BL 名および課題番号の記述を入れて下さい。

最近 SPring-8 もしくは SACLA から発表された成果リスト

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用推進部

SPring-8 もしくは SACLA において実施された研究課題等の成果が公表された場合は JASRI の成果登録データベースに登録していただくことになっており、その内容は以下の URL (SPring-8 論文データベース検索ページ) で検索できます。

http://www.spring8.or.jp/ja/science/publication_database/

このデータベースに登録された原著論文の内、2023 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/

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 2023 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	11	Chemical Communications	4
The Journal of Physical Chemistry C	6	Japanese Journal of Applied Physics	4
Journal of the American Chemical Society	6	Journal of Synchrotron Radiation	4
Nature Communications	6	Journal of the Ceramic Society of Japan	4
Physical Review B	6	Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America	4
The Journal of Biological Chemistry	5		
Angewandte Chemie International Edition	4	Protein Science	4

他全 117 誌、計 202 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
45602	Hideyuki Matsunami	6 (2016) 27399	2007B1500	BL41XU	今田 勝巳	Structural Flexibility of the Periplasmic Protein, FlgA, Regulates Flagellar P-ring Assembly in <i>Salmonella enterica</i>
45638	Ren Tomisawa	13 (2023) 11759	2019A7212	BL03XU	中田 克	Tensile Strength of Polyester Fiber Estimated by Molecular-chain Extension Prior to Structure Formation
45645	So Uezu	13 (2023) 10802	2017A8015	BL3	中迫 雅由	Ultrastructure and Fractal Property of Chromosomes in Close-to-native Yeast Nuclei Visualized using X-ray Laser Diffraction
			2017B8003	BL2	中迫 雅由	
45680	Sayoko Oiki	7 (2017) 17005	2016A2540	BL26B1	三上 文三	Alternative Substrate-bound Conformation of Bacterial Solute-binding Protein Involved in the Import of Mammalian Host Glycosaminoglycans
			2016A2574	BL38B1	橋本 涉	
			2016A2575	BL26B2	三上 文三	
			2016A2575	BL38B1	三上 文三	
45703	Akio Yoneyama	13 (2023) 12381	2021A5100	BL16XU	米山 明男	Three-dimensional Micro-X-ray Topography using Focused Sheet-shaped X-ray Beam
			2021B5100	BL16XU	米山 明男	
			2022A5100	BL16XU	米山 明男	
			2022B5100	BL16XU	米山 明男	
			2022A5500	BL16XU	米山 明男	
45767	Tomokazu Sano	13 (2023) 13796	2012A8053	BL3	佐野 智一	X-ray Free Electron Laser Observation of Ultrafast Lattice Behaviour under Femtosecond Laser-driven Shock Compression in Iron
			2012B8048	BL3	佐野 智一	
			2021B8031	BL3	佐野 智一	
			2022A8031	BL3	佐野 智一	
45784	Seiji Ishii	7 (2017) 4029	2015A1065	BL38B1	村川 武志	High-throughput Screening of Small Molecule Inhibitors of the <i>Streptococcus</i> Quorum-sensing Signal Pathway
45828	Hiroshi Yamaguchi	13 (2023) 16063	2014B1677	BL04B2	山口 展史	Structural Analysis and Ionic Conduction Mechanism of Sulfide-based Solid Electrolytes Doped with Br
			2022A2083	BL04B2	尾原 幸治	

Nature Communications

45574	Titouan Jaunet-Lahary	14 (2023) 1730	2012B1096	BL41XU	平井 照久	Structure and Mechanism of Oxalate Transporter OxIT in an Oxalate-Degrading Bacterium in the Gut Microbiota
			2015A1080	BL32XU	島村 達郎	
45596	Yasuaki Kabe	7 (2016) 11030	2011B1229	BL41XU	野村 紀通	Haem-dependent Dimerization of PGRMC1/Sigma-2 Receptor Facilitates Cancer Proliferation and Chemoresistance
			2012A1184	BL41XU	野村 紀通	
			2012B1253	BL41XU	野村 紀通	
45601	Kenji Tamasaku	14 (2023) 4262	2017B8034	BL3	玉作 賢治	Two-dimensional K β -K α Fluorescence Spectrum by Nonlinear Resonant Inelastic X-ray Scattering
			2018A8046	BL3	玉作 賢治	
			2018B8057	BL3	玉作 賢治	
			2019A8049	BL3	玉作 賢治	
			2020A8016	BL3	玉作 賢治	
			2021A8018	BL3	玉作 賢治	
45648	Katsumasa Irie	14 (2023) 4236	2016B2721	BL32XU	入江 克雅	The Structural Basis of Divalent Cation Block in a Tetrameric Prokaryotic Sodium Channel
			2017B2735	BL41XU	入江 克雅	
			2018B2710	BL41XU	入江 克雅	
			2016B2721	BL41XU	入江 克雅	
45744	Chengyi Yu	12 (2021) 4701	2018B1306	BL02B2	Xing Xianran	Plastic and Low-cost Axial Zero Thermal Expansion Alloy by a Natural Dual-phase Composite
			2018B1515	BL44B2	Lin Kun	
45745	Chengyi Yu	14 (2023) 3135	2019A1378	BL44B2	Lin Kun	Superior Zero Thermal Expansion Dual-phase Alloy via Boron-migration Mediated Solid-state Reaction
			2018B1515	BL44B2	Lin Kun	

Physical Review B-1

45625	Shunsuke Kitou	108 (2023) 024103	2019A0070	BL02B1	澤 博	Visualization of 4d Orbital Electrons in a Pyrochlore-type Oxide
			2021B1261	BL02B1	鬼頭 俊介	
45699	Hiroaki Hayashi	108 (2023) 075140	2021A1169	BL02B2	山浦 一成	Large Anomalous Hall Effect Observed in the Cubic-lattice Antiferromagnet Mn ₃ Sb with Kagome Lattice
			2022A1067	BL02B2	Belik Alexei	
			2022B1919	BL02B2	山浦 一成	
			2023A1496	BL02B2	Belik Alexei	
45701	Simone Altendorf	108 (2023) 085119	2022B4256	BL12XU	武上 大介	Electronic Structure of the Fe ²⁺ Compound FeWO ₄ : A Combined Experimental and Theoretical X-ray Photoelectron Spectroscopy Study

Physical Review B-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
45706	Yukiharu Takeda	108 (2023) 085129	2014B3821	BL23SU	竹田 幸治	Element-specific Insight into Ferromagnetic Stability in UCoGe Revealed by Soft X-ray Magnetic Circular Dichroism
			2015A3820	BL23SU	藤森 伸一	
			2015B3820	BL23SU	藤森 伸一	
			2016B3811	BL23SU	藤森 伸一	
			2017A3811	BL23SU	藤森 伸一	
			2017B3811	BL23SU	藤森 伸一	
			2018A3811	BL23SU	藤森 伸一	
			2020A3811	BL23SU	藤森 伸一	
			2021A3811	BL23SU	藤森 伸一	
45776	Ryo Okano	107 (2023) 205205	2018B3841	BL23SU	小林 正起	Ferromagnetism Induced by Hybridization of Fe 3d Orbitals with Ligand InSb Bands in the <i>n</i> -type Ferromagnetic Semiconductor (In,Fe)Sb
			2020A3841	BL23SU	小林 正起	
			2021A3841	BL23SU	小林 正起	
45806	Keita Kojima	108 (2023) 094107	2020A1063	BL02B2	片山 尚幸	Zigzag Chain Order of LiVSe ₂ Developing Away from the Vanadium Trimer Phase Transition Boundary
			2021A1111	BL10XU	片山 尚幸	
			2021A1117	BL44B2	片山 尚幸	
			2021B1136	BL02B2	片山 尚幸	
			2022A1167	BL02B2	片山 尚幸	

The Journal of Physical Chemistry C

45577	Kosuke Kawai	127 (2023) 12428-12434	2016A1161	BL27SU	朝倉 大輔	High-Voltage Electrochemical Properties of Lithium-Rich Spinel Oxides
			2016B1503	BL27SU	須田山 貴亮	
			2017B1328	BL27SU	須田山 貴亮	
			2018A1359	BL27SU	須田山 貴亮	
			2018B1514	BL27SU	須田山 貴亮	
45640	Takahiro Okuo	127 (2023) 14502-14509	2022B1474	BL40B2	松本 英俊	Magnesian Nafion-Based Gel Electrolytes: Structural and Electrochemical Characterization
45720	Naoya Yoshikane	127 (2023) 10375-10383	2017A4139	BL12B2	Prassides Kosmas	Isosymmetric Lattice Collapse in Mixed-Valence Rare-Earth Fullerenes at High Pressure—Coupling of Lattice and Electronic Degrees of Freedom
			2017B4132	BL12B2	Prassides Kosmas	
			2018A4133	BL12B2	Prassides Kosmas	
			2019B4125	BL12B2	Prassides Kosmas	
45807	Roman Svoboda	127 (2023) 16132-16147	2022A1315	BL01B1	Fons Paul	Formation of 2D-Structured InSe Ceramics from Amorphous Phase Deposited on a Kapton Foil
45841	Kohei Inagawa	127 (2023) 11542-11549	2021A3609	BL14B1	松村 大樹	Development of Hydrogen Oxidation Reaction Catalysts to Overcome CO Poisoning and Elucidation of Reaction Mechanism
			2021B3609	BL14B1	松村 大樹	
			2022A3609	BL14B1	松村 大樹	
			2022B3609	BL14B1	松村 大樹	
			2022B3630	BL14B1	田中 裕久	
			2023A3630	BL14B1	田中 裕久	

Journal of the American Chemical Society

45620	Yasuhiro Yamauchi	145 (2023) 16938-16947	2022A1767	BL14B2	植竹 裕太	Reversible Modulation of the Electronic and Spatial Environment around Ni(0) Centers Bearing Multifunctional Carbene Ligands with Triarylaluminum
			2020A1871	BL14B2	植竹 裕太	
			2021A1630	BL14B2	植竹 裕太	
			2022A1784	BL14B2	山内 泰宏	
45633	Hiroki Minamihara	145 (2023) 17136-17142	2022A1373	BL02B2	北川 宏	Continuous-Flow Chemical Synthesis for Sub-2 nm Ultra-Multielement Alloy Nanoparticles Consisting of Group IV to XV Elements
			2022B0598	BL13XU	北川 宏	
			2022A1394	BL46XU	北川 宏	
45676	Jinya Suzuki	145 (2023) 16398-16405	2021B3693	BL14B1	山本 隆文	Selective Synthesis of Perovskite Oxyhydrides Using a High-Pressure Flux Method
			2021A3693	BL14B1	Pan Zhao	
			2022B3693	BL14B1	山本 隆文	
			2022B1561	BL02B1	山本 隆文	
45685	Alisia Fadini	145 (2023) 15796-15808	2021A8006	BL3	van Thor Jasper	Serial Femtosecond Crystallography Reveals that Photoactivation in a Fluorescent Protein Proceeds via the Hula Twist Mechanism
			2019B8021	BL3	van Thor Jasper	
45760	Takuya Ohmi	145 (2023) 19759-19767	2021A1130	BL02B2	山本 隆文	Thiocyanate-Stabilized Pseudo-cubic Perovskite CH(NH ₂) ₂ PbI ₃ from Coincident Columnar Defect Lattices
			2021B1159	BL02B2	山本 隆文	
			2022A1191	BL02B2	山本 隆文	

Chemical 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
45634	Masashi Nakamura	59 (2023) 9485-9488	2021B1202	BL02B2	北川 宏	B2-structured Indium-platinum Group Metal High-entropy Intermetallic Nanoparticles
			2022A1373	BL02B2	北川 宏	
45675	Jaehee Park	59 (2023) 7799-7802	2020A1014	BL27SU	内本 喜晴	Unique Li Deposition Behavior in Li ₃ PS ₄ Solid Electrolyte Observed via Operando X-ray Computed Tomography
			2020A1015	BL20XU	内本 喜晴	
			2021A1026	BL20XU	内本 喜晴	
45797	Yuko Shishido	53 (2017) 11138-11141	2015A1065	BL38B1	村川 武志	A Covalent G-site Inhibitor for Glutathione S-transferase Pi (GSTP ₁₋₁)
45808	Tomiko M. Suzuki	(2023) Online published 20 Sep.(2023)	2021A7038	BL33XU	坂本 直柔	Highly Selective CO ₂ Electrolysis in Aqueous Media by a Water-soluble Cobalt Dimethyl-bipyridine Complex
			2021B7038	BL33XU	坂本 直柔	
			2022A7038	BL33XU	坂本 直柔	
			2022B7038	BL33XU	坂本 直柔	

Japanese Journal of Applied Physics

45631	Yasuhiro Yoneda	62 (2023) SM1006	2021A1134	BL04B2	米田 安宏	Local Structure Analysis of Bi _{0.5} Na _{0.5} TiO ₃ -BaTiO ₃ Solid Solutions
			2021B3801	BL23SU	吉越 章隆	
			2022A1192	BL04B2	米田 安宏	
			2022A3701	BL22XU	米田 安宏	
			2022B3701	BL22XU	米田 安宏	
			2021A3701	BL22XU	米田 安宏	
			2021B3701	BL22XU	米田 安宏	
45639	Yuhei Kondo	62 (2023) SM1008	2021A1186	BL02B1	青柳 忍	X-ray Diffuse Scattering and Polar Nanoregion of a Relaxor Ferroelectric under Electric Field
			2021B1661	BL02B1	青柳 忍	
45796	Yoshiaki Maegawa	62 (2023) 090903	2020A1370	BL40B2	奥田 浩司	Small-angle X-ray Scattering Analysis on the In-plane Cluster Distribution during Heating Amorphous Mg ₈₅ Y ₉ Cu ₆ Alloys
			2022B1502	BL40B2	奥田 浩司	
45809	Mingyang Shao	62 (2023) SM1024	2021B1459	BL02B1	黒岩 芳弘	Crystal Structure of Heteroepitaxial BaTiO ₃ -KNbO ₃ Core-shell Nanocomposite Particles Studied by Synchrotron Radiation X-ray Diffraction
			2021B1252	BL02B2	黒岩 芳弘	
			2022A1172	BL02B2	黒岩 芳弘	
			2022B1834	BL02B2	黒岩 芳弘	

Journal of the Ceramic Society of Japan

45578	Masahide Kaneko	131 (2023) 270-274	2020A1885	BL14B2	金子 雅英	Investigation of Grain Boundary and Local Structure of Sr-doped LLZO with High Li-ion Conductivity
			2021A1642	BL14B2	金子 雅英	
45590	Yuma Yamada	131 (2023) 306-312	2017B1516	BL02B2	上野 慎太郎	Solvothermal Synthesis of Dispersible Homogeneous KNbO ₃ Nanocubes from K ₄ Nb ₆ O ₁₇ Microsheets
			2018A1492	BL02B2	上野 慎太郎	
45762	Naoki Shinyoshi	131 (2023) 575-580	2022B1890	BL14B2	植竹 裕太	Radiation-induced Synthesis of Carbon-supported Niobium Oxide Nanoparticle Catalysts and Investigation of Heat Treatment Conditions to Improve the Oxygen Reduction Reaction Activity
			2021B1717	BL14B2	植竹 裕太	
45795	Shugo Sakuraba	131 (2023) 216-222	2021B1470	BL04B2	萩原 学	Influence of Local Crystal Structure and Grain Size on Electronic Transport Properties of (La _{1/2} K _{1/2})TiO ₃ -based Thermoelectric Ceramics

ACS Applied Materials & Interfaces

45581	Takeyuki Sekimoto	15 (2023) 33581-33592	2020A5120	BL16XU	山田 周吾	Perovskite Solar Cell Using Isonicotinic Acid as a Gap-Filling Self-Assembled Monolayer with High Photovoltaic Performance and Light Stability
			2021A5120	BL16XU	山田 周吾	
			2021B5120	BL16XU	山田 周吾	
			2022A5120	BL16XU	山田 周吾	
45714	Shoma Kondo	15 (2023) 37837-37844	2022A1095	BL40B2	西村 智貴	Counteraction Engineering of Graphene-Oxide Nanosheets for Imparting a Thermoresponsive Ability
45755	Renato Belli Strozi	15 (2023) 38412-38422	2022B3782	BL22XU	榊 浩司	Elucidating Primary Degradation Mechanisms in High-Cycling-Capacity, Compositionally Tunable High-Entropy Hydrides

Applied Physics Letters-1

45594	Kakeru Ujimoto	123 (2023) 022407	2018B1384	BL25SU	白土 優	Direct Observation of Antiferromagnetic Domains and Field-induced Reversal in Pt/Cr ₂ O ₃ /Pt Epitaxial Trilayers
			2019A1200	BL25SU	白土 優	
			2020A1172	BL25SU	白土 優	
			2020A2046	BL25SU	小谷 佳範	
			2021B1206	BL25SU	白土 優	
			2022A1205	BL25SU	白土 優	
			2022B1247	BL25SU	白土 優	
			2022B2053	BL25SU	大河内 拓雄	

Applied Physics Letters-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
45604	Hisato Yamaguchi	122 (2023) 141901	2022B3831	BL23SU	山口 尚登	Work Function Lowering of LaB ₆ by Monolayer Hexagonal Boron Nitride Coating for Improved Photo- and Thermionic-cathodes
			2022A3831	BL23SU	山口 尚登	
			2021B3831	BL23SU	山口 尚登	
			2021A3831	BL23SU	山口 尚登	
			2021A3801	BL23SU	吉越 章隆	
			2021B3801	BL23SU	吉越 章隆	
			2022A3801	BL23SU	吉越 章隆	
			2022B3801	BL23SU	吉越 章隆	
45681	Masafumi Horio	123 (2023) 031602	2022A8056	BL1	Lawler Keith	Detecting Driving Potentials at the Buried SiO ₂ Nanolayers in Solar Cells by Chemical-selective Nonlinear X-ray Spectroscopy

The Journal of Biological Chemistry

45588	Kenji Fukui	291 (2016) 16990-17000	2015A1065	BL38B1	村川 武志	Structural Features and Functional Dependency on β -Clamp Define Distinct Subfamilies of Bacterial Mismatch Repair Endonuclease MutL
45779	Masao Inoue	292 (2017) 9801-9814	2014B1148	BL38B1	村川 武志	The Lon Protease-like Domain in the Bacterial RecA Paralog RadA is Required for DNA Binding and Repair
45815	Rei Tohda	296 (2021) 100217	2019A6500	BL44XU	山下 栄樹	Crystal Structure of Higher Plant Heme Oxygenase-1 and Its Mechanism of Interaction with Ferredoxin

Journal of Synchrotron Radiation

45647	Hidetaka Kasai	30 (2023) 555-560	2019A0068	BL02B2	森吉 千佳子	Synchrotron X-ray Powder Diffraction under High Pressures up to 33 MPa for Mechanoresponsive Materials
			2021B1630	BL02B2	笠井 秀隆	
			2021B1775	BL02B2	藤田 知樹	
45711	Yojiro Koda	30 (2023) 995-1002	2015B1508	BL20B2	築部 卓郎	Structural Properties in Ruptured Mitral Chordae Tendineae Measured by Synchrotron-based X-ray Phase Computed Tomography
			2016A1165	BL20B2	築部 卓郎	
			2017B1163	BL20B2	築部 卓郎	
			2019B1542	BL20B2	築部 卓郎	
			2021B1449	BL20B2	築部 卓郎	
45778	Akira Yasui	30 (2023) 1013-1022	2019A2069	BL09XU	保井 晃	BL09XU: an Advanced Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy Beamline of SPRING-8
			2019B2099	BL09XU	保井 晃	
			2020A2055	BL09XU	保井 晃	
			2020A2144	BL09XU	高木 康多	
			2021B2099	BL09XU	保井 晃	
			2022A2080	BL09XU	保井 晃	

Physical Review Letters

45575	Kenji Ohta	130 (2023) 266301	2017A0072	BL10XU	廣瀬 敬	Measuring the Electrical Resistivity of Liquid Iron to 1.4 Mbar
45693	Hiroaki Tanaka	130 (2023) 186402	2020A0606	BL25SU	黒田 健太	Semiconducting Electronic Structure of the Ferromagnetic Spinel HgCr ₂ Se ₄ Revealed by Soft-X-Ray Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy
			2019B1092	BL25SU	黒田 健太	
45757	Quynh L. Nguyen	131 (2023) 076901	2021A8037	BL3	Trigo Mariano	Ultrafast X-Ray Scattering Reveals Composite Amplitude Collective Mode in the Weyl Charge Density Wave Material (TaSe ₄) ₂ I

Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America-1

45585	Takaaki Kato	120 (2023) e2215072120	2019A6500	BL44XU	山下 栄樹	Crystal Structures of Multidrug Efflux Transporters from <i>Burkholderia pseudomallei</i> Suggest Details of Transport Mechanism
			2019A6700	BL44XU	中川 敦史	
			2019B6500	BL44XU	山下 栄樹	
			2019B6700	BL44XU	中川 敦史	
			2020A6500	BL44XU	山下 栄樹	
			2020A6700	BL44XU	中川 敦史	
			2021A6500	BL44XU	山下 栄樹	
			2021A6700	BL44XU	中川 敦史	
			2021A6642	BL44XU	村上 聡	
			2021B6500	BL44XU	山下 栄樹	
			2021B6700	BL44XU	中川 敦史	

Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
45667	Chao Liu	120 (2023) e2221770120	2016B1091	BL04B1	芳野 極	Effect of Water on Seismic Attenuation of the Upper Mantle: The Origin of the Sharp Lithosphere–Asthenosphere Boundary
			2017B1175	BL04B1	芳野 極	
			2018B1071	BL04B1	芳野 極	
			2019B1071	BL04B1	芳野 極	
45749	Simon Miller	119 (2022) e2203936119	2019A6942	BL44XU	廣田 毅	CRY2 Isoform Selectivity of a Circadian Clock Modulator with Antiglioblastoma Efficacy
			2019B6942	BL44XU	廣田 毅	

Protein Science

45719	Toshiaki Hosaka	26 (2017) 1749-1758	2012A1332	BL32XU	保坂 俊彰	Crystal Structural Characterization Reveals Novel Oligomeric Interactions of Human Voltage-dependent Anion Channel 1
			2012B1453	BL32XU	保坂 俊彰	
45786	Monika Jain	31 (2022) e4312	2018B6600	BL44XU	Chen Chun Jung	Dimeric Assembly of Human Suv3 Helicase Promotes its RNA Unwinding Function in Mitochondrial RNA Degradosome for RNA Decay
			2018A6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2017B6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2017A6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2016B6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
45812	Debayan Dey	31 (2022) e4430	2021A6500	BL44XU	山下 栄樹	Crystal Structure and Reaction Mechanism of a Bacterial Mg-dechelataase Homolog from the Chloroflexi <i>Anaerolineae</i>

ACS Applied Energy Materials

45689	Yasushi Idemoto	6 (2023) 8327-8335	2021B1873	BL19B2	井手本 康	Rate Dependence of the Average Crystal Structure and Electronic Structure of 0.5Li ₂ MnO ₃ -0.5LiMn ₁₀ 24Ni ₇ 24Co ₇ 24O ₂ for a Lithium-Ion Battery Positive Electrode Material in Steady State
			2019B1882	BL19B2	井手本 康	
			2020A1728	BL19B2	井手本 康	
45694	Nozomu Ishiguro	6 (2023) 8306-8315	2021A1483	BL36XU	石黒 志	Comprehensive Operando Visualization of the Electrochemical Events in the Cathode/Anode Layers in Thin-Film-Type All-Solid-State Lithium-Ion Batteries
			2021B1566	BL37XU	石黒 志	
			2022A1430	BL37XU	石黒 志	
			2022B1491	BL37XU	石黒 志	

Advanced Engineering Materials

45793	Klaus-Dieter Liss	(2023) Online published 19 Aug.(2023)	2013B3606	BL14B1	Liss Klaus Dieter	Abnormal Grain Growth: A Spontaneous Activation of Competing Grain Rotation
45804	Gavin Tay	62 (2023) e202305122	2021A1302	BL26B1	佐藤 宗太	Synthetic Modulation of an Unstable Dehydrosecodine-type Intermediate and Its Encapsulation into a Confined Cavity Enable Its X-ray Crystallographic Observation
			2020A0757	BL26B1	佐藤 宗太	

AIP Advances

45764	Keisuke Hirata	13 (2023) 035122	2021B1837	BL02B2	平田 圭佑	Significantly Reduced Lattice Thermal Conductivity with Anharmonic Lattice Vibrations and Band Edge Effect in Electronic Thermal Conductivity in Ag ₂ S _{1-x} Se _x (0 ≤ x ≤ 0.6)
45765	Keisuke Hirata	13 (2023) 015016	2021B1837	BL02B2	平田 圭佑	Magneto-thermal Conductivity Effect and Enhanced Thermoelectric Figure of Merit in Ag ₂ Te

Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics

45788	Kuang-Lung Hsueh	1871 (2023) 140855	2018A6600	BL44XU	Chen Chun Jung	FeoC from <i>Klebsiella pneumoniae</i> Uses Its Iron Sulfur Cluster to Regulate the GTPase Activity of the Ferrous Iron Channel
			2018B6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2017B6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
			2017A6600	BL44XU	Chen Chun Jung	
45798	Kenji Fukui	1865 (2017) 1178-1187	2016A2522	BL38B1	村川 武志	Crystal Structure and DNA-binding Property of the ATPase Domain of Bacterial Mismatch Repair Endonuclease MutL from <i>Aquifex aeolicus</i>

Chemistry Letters

45582	Yusaku Araki	52 (2023) 533-537	2022B1609	BL01B1	吉田 真明	Hemispherical Cavity Cobalt Oxyhydroxides as Oxygen Evolution Electrocatalysts Electrodeposited in Borate-buffered Solution Using a Polystyrene Colloidal Template Method
45595	Yuna Yamaguchi	52 (2023) 542-545	2020A1117	BL02B1	久木 一朗	Construction of Hydrogen-bonded Crystalline Frameworks Using Tetrakis(carboxyphenyl)dimethyldihydropyrene Derivative
			2021B1180	BL40XU	久木 一朗	
			2022A1093	BL40XU	久木 一朗	

ChemSusChem

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
45619	Masakazu Murase	(2023) Online published 20 Jul.(2023)	2021B7038	BL33XU	坂本 直柔	Reversible CO ₂ Fixation and Release by a Trinuclear Zn(II) Cryptate Complex and Operando Analysis of the Complex Structure
			2022A7038	BL33XU	坂本 直柔	
			2022B7038	BL33XU	坂本 直柔	
45691	Kohsuke Mori	16 (2023) e202300283	2021A1095	BL01B1	森 浩亮	Improved Low-Temperature Hydrogen Production from Aqueous Methanol Based on Synergism between Cationic Pt and Interfacial Basic LaO _x
			2021B1096	BL01B1	森 浩亮	
			2020A1062	BL01B1	森 浩亮	

FEBS Letters

45758	Takeshi Yokoyama	591 (2017) 1862-1871	2012B1086	BL41XU	帯田 孝之	Stability and Crystal Structures of His88 Mutant Human Transthyretins
			2013A1060	BL38B1	帯田 孝之	
			2013B1235	BL41XU	帯田 孝之	
			2014A1185	BL41XU	帯田 孝之	
45787	Haoliang Ke	591 (2017) 2470-2481	2016A2515	BL38B1	熊坂 崇	Structural Basis for Intramolecular Interaction of Post-translationally Modified H-Ras-GTP Prepared by Protein Ligation

Journal of Alloys and Compounds

45573	Alexei Belik	946 (2023) 169435	2011B4512	BL15XU	Belik Alexei	Possible Metal-insulator Transition in a Bismuth Iridium Oxide with the KSbO ₃ -type Structure
			2022A1067	BL02B2	Belik Alexei	
45754	Veronique Charbonnier	965 (2023) 171348	2019B3686	BL14B1	榊 浩司	Hydrogenation Behavior of a C14 Laves Phase under Ultra-high Hydrogen Pressure
			2020A3686	BL14B1	榊 浩司	
			2021B3686	BL14B1	榊 浩司	
			2021A3686	BL14B1	榊 浩司	
			2022A3686	BL14B1	榊 浩司	
			2022B3686	BL14B1	榊 浩司	

Journal of Applied Crystallography

45777	Yuki Watanabe	56 (2023) 461-467	2019A7218	BL03XU	川添 真幸	Anomalous Small-angle X-ray Scattering Analyses on Hierarchical Structures of Rubber-filler Systems
			2019B7267	BL03XU	川添 真幸	
			2020A7216	BL03XU	川添 真幸	
45791	James Birch	56 (2023) 1361-1370	2017B8041	BL2	Moraes Isabel	A Versatile Approach to High-density Microcrystals in Lipidic Cubic Phase for Room-temperature Serial Crystallography
			2018B8018	BL2	Moraes Isabel	

Materials Transactions

45686	Megumi Kawasaki	64 (2023) 1683-1694	2018B1219	BL02B1	Liss Klaus Dieter	Synchrotron High-Energy X-Ray & Neutron Diffraction, and Laser-Scanning Confocal Microscopy: <i>In-Situ</i> Characterization Techniques for Bulk Nanocrystalline Metals
45780	Yoichi Ikeda	64 (2023) 2254-2260	2020A3647	BL14B1	池田 陽一	Local Atomic Displacements and Sign of the Structural Transformation in Medium-Entropy Alloys Observed in Extended X-ray Absorption Fine Structure Spectra

Physical Review Materials

45704	Kouta Kazama	7 (2023) 085402	2022B2106	BL25SU	山神 光平	Charge Transport and Thermopower in the Electron-doped Narrow Gap Semiconductor Ca _{1-x} La _x Pd ₃ O ₄
			2022B1332	BL25SU	坂野 昌人	
			2022A2060	BL25SU	山神 光平	
45832	Phillip Bentley	7 (2023) 064404	2019A3551	BL11XU	境 誠司	Cubic-type Heusler Compound Mn ₂ FeGa Thin Film with Strain-induced Large Perpendicular Magnetic Anisotropy
			2019B3551	BL11XU	境 誠司	
			2020A3551	BL11XU	境 誠司	
			2021A3551	BL11XU	境 誠司	
			2021B3551	BL11XU	境 誠司	
			2022A3551	BL11XU	境 誠司	
			2022B3551	BL11XU	境 誠司	

Polymer

45668	Ryohei Ippitsu	283 (2023) 126225	2021B1351	BL40B2	比江嶋 祐介	<i>In-situ</i> Observation of Falling-weight Impact Damage in Isotactic Polypropylene Sheet
45753	Aika Kishimoto	284 (2023) 126303	2018B1088	BL40B2	寺尾 憲	Correlation between Conformational Feature in Solution and Chiral Separation Ability of Linear and Nonlinear Amylose Tris(alkylcarbamate)s
			2019A1072	BL40B2	寺尾 憲	
			2019B1113	BL40B2	寺尾 憲	

Polymer Chemistry

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
45713	Naoki Ozawa	14 (2023) 3834-3842	2021A1065	BL40B2	西村 智貴	Exploring the Effects of Glyco-copolymer Architectures on the Solution Self-assembly of Amphiphilic Thermoresponsive Linear, Star, and Cyclic Polymers
			2021B1089	BL40B2	西村 智貴	
			2022A1095	BL40B2	西村 智貴	
			2022B1109	BL40B2	西村 智貴	
			2023A1121	BL40B2	西村 智貴	
45794	Takuya Matsumoto	13 (2022) 5536-5544	2019A7209	BL03XU	和泉 篤士	Mechanical Properties and Structures under the Deformation of Thiophene Copolymers with Cyclic Siloxane Units
			2019B7259	BL03XU	和泉 篤士	
			2020A7208	BL03XU	和泉 篤士	
			2021A7208	BL03XU	和泉 篤士	
			2021B7258	BL03XU	和泉 篤士	
			2022A7209	BL03XU	和泉 篤士	

Polymer Journal

45630	Eri Ito	(2023) Online published 25 Jul.(2023)	2019A1779	BL46XU	伊藤 恵利	Evaluation of Pigment Distribution in Contact Lenses with Iris Patterns by Multiprobe Analysis Methods
			2019B1871	BL46XU	伊藤 恵利	
			2019B1910	BL46XU	伊藤 恵利	
			2020A1639	BL46XU	伊藤 恵利	
			2020A1741	BL46XU	伊藤 恵利	
			2021A1566	BL46XU	伊藤 恵利	
45763	Daisuke Kawaguchi	55 (2023) 497-505	2021A7217	BL03XU	田村 雄児	Crystalline Structure, Molecular Motion and Photocarrier Formation in Thin Films of Monodisperse Poly(3-hexylthiophene) with Various Molecular Weights
			2016B7273	BL03XU	小池 淳一郎	
			2016A7225	BL03XU	小池 淳一郎	

ACS Applied Nano Materials

45771	Kenji Shinozaki	5 (2022) 4281-4292	2018A1463	BL04B2	篠崎 健二	Ultrafast Nanocrystallization of BaF ₂ in Oxyfluoride Glasses with Crystal-like Nanostructures: Implications for Upconversion Fiber Devices
			2020A0701	BL08W	篠崎 健二	

ACS Catalysis

45688	Yunfei Gao	13 (2023) 10988-11000	2021A1557	BL14B2	内山 智貴	Origin of High Activity and Durability of Confined Ordered Intermetallic PtCo Catalysts for the Oxygen Reduction Reaction in Rotating Disk Electrode and Fuel Cell Operating Conditions
			2021B1036	BL01B1	内山 智貴	
			2021B1037	BL04B2	内山 智貴	
			2021B1038	BL37XU	内山 智貴	

ACS Energy Letters

45622	Wataru Yoshimune	8 (2023) 3485-3487	2022A7032	BL33XU	山口 聡	3D Water Management in Polymer Electrolyte Fuel Cells toward Fuel Cell Electric Vehicles
-------	------------------	-----------------------	-----------	--------	------	--

ACS Omega

45818	Yuto Suga	8 (2023) 24078-24082	2023A1509	BL02B1	砂田 祐輔	Iron(II) Complex with a Silacycle-Bridged Biaryl-Based Ligand
-------	-----------	-------------------------	-----------	--------	-------	---

Acta Crystallographica Section F

45799	Hiroko Ikushiro	78 (2022) 408-415	2021A6652	BL44XU	生城 浩子	Crystal Structure of <i>Sphingobacterium multivorum</i> Serine Palmitoyltransferase Complexed with Tris-(hydroxymethyl)aminomethane
			2021B6652	BL44XU	生城 浩子	
			2022B6703	BL44XU	生城 浩子	
			2021B2540	BL26B1	生城 浩子	
			2021B2540	BL45XU	生城 浩子	

Advanced Materials

45775	Duc Anh Le	35 (2023) 2301347	2018A8064	BL1	小林 正起	Ultrafast Subpicosecond Magnetization of a 2D Ferromagnet
			2019A8001	BL1	小林 正起	
			2019B8060	BL1	小林 正起	
			2020A8063	BL1	小林 正起	

Advanced Materials Technologies

45743	Tokihiko Shimura	8 (2023) 2201992	2021B1106	BL40B2	松本 英俊	A High-Resolution, Transparent, and Stretchable Polymer Conductor for Wearable Sensor Arrays
-------	------------------	---------------------	-----------	--------	-------	--

Advanced 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
45715	Shunsuke Kitou	(2023) Online published 18 Aug. (2023)	2021B1261	BL02B1	鬼頭 俊介	Real-Space Observation of Ligand Hole State in Cubic Perovskite SrFeO ₃

Angewandte Chemie International Edition

45591	Rebecca Scatena	62 (2023) e202305994	2021A1169 2021A1334	BL02B2 BL02B2	山浦 一成 Belik Alexei	Hybrid Improper Ferroelectricity in Columnar (NaY)MnMnTi ₄ O ₁₂
-------	-----------------	-------------------------	------------------------	------------------	-----------------------	---

Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics

45810	Christoph Gerle	1864 (2023) 148986	2014A6500 2014B6500	BL44XU BL44XU	山下 栄樹 山下 栄樹	Three Structures of PSI-LHCI from <i>Chlamydomonas reinhardtii</i> Suggest a Resting State Re-activated by Ferredoxin
-------	-----------------	-----------------------	------------------------	------------------	----------------	---

Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters

45682	Hajime Sugiyama	93 (2023) 129431	2021B6612	BL44XU	木下 誉富	Low Entropic Cost of Binding Confers High Selectivity on an Allosteric ERK2 Inhibitor
-------	-----------------	---------------------	-----------	--------	-------	---

CCS Chemistry

45846	Can Wang	5 (2023) 2159-2170	2022A1654 2022A1777 2022A1822	BL19B2 BL19B2 BL19B2	柴山 直之 柴山 直之 柴山 直之	D ^π Symmetric Radical Donor-Acceptor Nanographene Modulated Interfacial Carrier Transfer for High-Performance Perovskite Solar Cells
-------	----------	-----------------------	-------------------------------------	----------------------------	-------------------------	---

Cellulose

45646	Tomoya Imai	30 (2023) 8423-8438	2023A1480	BL40B2	今井 友也	Disturbance of the Hydrogen Bonding in Cellulose by Bacterial Expansin
-------	-------------	------------------------	-----------	--------	-------	--

Ceramic International

45572	Alexei Belik	49 (2023) 14327-14334	2019A4501 2019B4500	BL15XU BL15XU	辻本 吉廣 山浦 一成	Realization of Triple A-site Cation Ordering through the Dy/Mn/Zn Combination in the Ferrimagnetic Dy ₂ MnZnMn _{4-x} Ti _x O ₁₂ Perovskites
-------	--------------	--------------------------	------------------------	------------------	----------------	--

ChemElectroChem

45583	Shunnosuke Tanaka	10 (2023) e202300095	2021A1257 2021B1488	BL13XU BL13XU	中村 将志 中村 将志	Hydrogen Evolution Reaction on AuNi Surface Alloy Formed on Single Crystal Au Electrodes
-------	-------------------	-------------------------	------------------------	------------------	----------------	--

Chemical and Pharmaceutical Bulletin

45571	Keiji Nishiwaki	71 (2023) 558-565	2019A6913	BL44XU	木下 誉富	Design, Synthesis and Structure-Activity Relationship Studies of Protein Kinase CK2 Inhibitors Containing a Purine Scaffold
-------	-----------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

Chemical Science

45707	Takeshi Hiromoto	14 (2023) 9306-9315	2018A2516 2014B1995	BL26B2 BL26B2	廣本 武史 玉田 太郎	New Insights into the Oxidation Process from Neutron and X-ray Crystal Structures of an O ₂ -sensitive [NiFe]-hydrogenase
-------	------------------	------------------------	------------------------	------------------	----------------	--

Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects

45782	Takanori Takiue	676 (2023) 132318	2018A1250 2019A1171 2019B1191	BL37XU BL37XU BL37XU	瀧上 隆智 瀧上 隆智 瀧上 隆智	Effect of Line Tension on Domain Formation of Fluorinated Compounds at Alkane/Water Interface
-------	-----------------	----------------------	-------------------------------------	----------------------------	-------------------------	---

Communications Biology

45814	Orkun Çoruh	4 (2021) 304	2014B6500	BL44XU	山下 栄樹	Cryo-EM Structure of a Functional Monomeric Photosystem I from <i>Thermosynechococcus elongatus</i> Reveals Red Chlorophyll Cluster
-------	-------------	-----------------	-----------	--------	-------	---

Communications Chemistry

45785	Saeid Malek Zadeh	5 (2022) 87	2018B6600 2018A6600 2017A6600 2017B6600	BL44XU BL44XU BL44XU BL44XU	Chen Chun Jung Chen Chun Jung Chen Chun Jung Chen Chun Jung	β-Hydroxylation of α-amino-β-hydroxybutanoyl-glycyluridine Catalyzed by a Nonheme Hydroxylase Ensures the Maturation of Caprazamycin
-------	-------------------	----------------	--	--------------------------------------	--	--

CrystEngComm

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
45789	Kanae Tsujita	25 (2023) 64-71	2020A1881	BL19B2	丸山 伸伍	Directional Lateral Crystallization of Vacuum-deposited C8-BTBT Thin Films via Liquid Crystal Phase by a Seeded Horizontal Temperature Gradient Cooling Technique

Current Research in Structural Biology

45811	Hiraku Kishimoto	5 (2023) 100101	2011B6500	BL44XU	山下 栄樹	Soluble Domains of Cytochrome c-556 and Rieske Iron-Sulfur Protein from <i>Chlorobaculum tepidum</i> : Crystal Structures and Interaction Analysis
-------	------------------	--------------------	-----------	--------	-------	--

Earth and Planetary Science Letters

45598	Yoshio Kono	618 (2023) 118287	2018A1201	BL04B1	桑原 秀治	Strong Effect of Liquid Fe-S on Elastic Wave Velocity of Olivine Aggregate: Implication for the Low Velocity Anomaly at the Base of the Lunar Mantle
			2019A0069	BL04B1	河野 義生	

ECS Journal of Solid State Science and Technology

45790	Yota Matsuoka	12 (2023) 074006	2022B1569	BL19B2	丸山 伸伍	Ionic Liquid-Assisted Vacuum Deposition of Organic Ionic Plastic Crystal Thin Films
-------	---------------	---------------------	-----------	--------	-------	---

Energy and AI

45834	Manabu Kodama	14 (2023) 100305	2022B1020	BL20XU	兒玉 学	Machine Learning Super-Resolution of Laboratory CT Images in All-Solid-State Batteries using Synchrotron Radiation CT as Training Data
			2022A1003	BL20XU	兒玉 学	
			2021B1005	BL20XU	兒玉 学	
			2021B1004	BL47XU	兒玉 学	
			2021A1017	BL47XU	兒玉 学	
			2020A1782	BL47XU	兒玉 学	

Epigenetics & Chromatin

45615	Takashi Urahama	9 (2016) 2	2011A1528	BL41XU	胡桃坂 仁志	Histone H3.5 Forms an Unstable Nucleosome and Accumulates around Transcription Start Sites in Human Testis
-------	-----------------	---------------	-----------	--------	--------	--

F1000 Research

45750	Moeri Yagi	11 (2022) 1016	2019A6942	BL44XU	廣田 毅	A Methylbenzimidazole Derivative Regulates Mammalian Circadian Rhythms by Targeting Cryptochrome Proteins
			2019B6942	BL44XU	廣田 毅	

Frontiers in Microbiology

45587	Masaaki Nakashima	7 (2016) 00061	2011B1255	BL38B1	鈴木 淳巨	Unique Flap Conformation in an HIV-1 Protease with High-Level Darunavir Resistance
-------	-------------------	-------------------	-----------	--------	-------	--

Inorganic Chemistry

45783	Rie Horie	62 (2023) 10897-10904	2018B1427	BL25SU	堀江 理恵	Origin of Unexpected Ir ³⁺ in a Superconducting Candidate Sr ₂ IrO ₄ System Analyzed by Photoelectron Holography
			2019B1558	BL25SU	堀江 理恵	
			2021A1534	BL25SU	堀江 理恵	
			2019A1323	BL25SU	室 隆桂之	

The International Journal of Advanced Manufacturing Technology

45747	Daichi Yamaguchi	128 (2023) 1981-1990	2020A3422	BL08B2	山口 大地	X-ray Observation Study of the Influence of Binder Deposition on Sintering Process of Aluminum Binder Jetting
-------	------------------	-------------------------	-----------	--------	-------	---

International Journal of Molecular Sciences

45825	Takahiro Nakayama	24 (2023) 15423	2016A1102	BL40XU	中山 高宏	Comparison of the Molecular Motility of Tubulin Dimeric Isoforms: Molecular Dynamics Simulations and Diffracted X-ray Tracking Study
-------	-------------------	--------------------	-----------	--------	-------	--

JACS Au

45692	Naoki Hashimoto	3 (2023) 2131-2143	2022A1076	BL01B1	森 浩亮	Sub-nanometric High-Entropy Alloy Cluster: Hydrogen Spillover Driven Synthesis on CeO ₂ and Structural Reversibility
			2021B1096	BL01B1	森 浩亮	

The Journal of Biochemistry

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
45813	Keizo Yamamoto	173 (2023) 21-30	2021A6500	BL44XU	山下 栄樹	Structural Insights into the Substrate Specificity of IMP-6 and IMP-1 Metallo- β -lactamases

Journal of Crystal Growth

45616	Yasuo Nakayama	621 (2023) 127365	2022A1324	BL13XU	中山 泰生	Epitaxial Growth of Crystalline Thin-films of Perfluorinated Copper Phthalocyanine on the Single-crystal Copper Phthalocyanine
-------	----------------	----------------------	-----------	--------	-------	--

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena

45664	Takuo Ohkouchi	267 (2023) 147371	2012B1429	BL25SU	大槻 匠	Present Status and Recent Progress of Research, using Photoemission-electron Microscopy at SPRING-8
			2013A1421	BL17SU	大槻 匠	
			2011B1304	BL43IR	北島 富美雄	
			2012A1290	BL17SU	北島 富美雄	
			2012B1588	BL17SU	北島 富美雄	
			2013A1499	BL17SU	北島 富美雄	
			2013A1695	BL17SU	田中 真人	
			2013B1761	BL25SU	田中 真人	
			2014A1432	BL17SU	田中 真人	
			2015A1887	BL17SU	堀田 善治	

Journal of Molecular Biology

45617	Rieko Kojima	428 (2016) 2392-2404	2014A1185	BL41XU	帯田 孝之	Structural Fine-Tuning of MIT-Interacting Motif 2 (MIM2) and Allosteric Regulation of ESCRT-III by Vps4 in Yeast
			2014B1451	BL38B1	帯田 孝之	
			2015A1038	BL41XU	帯田 孝之	
			2015A1038	BL26B1	帯田 孝之	

Journal of Non-Crystalline Solids

45774	Kana Tomita	597 (2022) 121891	2019B3645	BL14B1	矢野 哲司	Laser Heating Induced Spatial Homogenization of Phase Separated $\text{Na}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ Glass Plate with Bearing NiO for Heat Center and Structural Probe
-------	-------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

Journal of Pharmaceutical Sciences

45593	Yukio Morimoto	105 (2016) 2298-2301	2006A1422	BL38B1	森本 幸生	Structural Insight Into Protein Binding of Boron Tracedrug UTX-97 Revealed by the Co-Crystal Structure With Lysozyme at 1.26 Å Resolution
			2011B1138	BL38B1	茶竹 俊行	
			2011A6647	BL44XU	森本 幸生	
			2011B6647	BL44XU	森本 幸生	

The Journal of Physical Chemistry Letters

45773	Ruilin Zheng	13 (2022) 7809–7815	2021B1413	BL08W	篠崎 健二	Reversible Phase Segregation and Amorphization of Mixed-Halide Perovskite Nanocrystals in Glass Matrices
			2022A1371	BL08W	篠崎 健二	

Journal of Physics and Chemistry of Solids

45772	Fumitaka Sato	161 (2022) 110377	2020A1793	BL01B1	篠崎 健二	Formation of Highly Dispersed Tin Nanoparticles in Amorphous Silicates for Sodium Ion Battery Anode
-------	---------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

Journal of Solid State Chemistry

45748	Takanori Itoh	327 (2023) 124274	2017B1625	BL04B2	伊藤 孝憲	Correlation among Crystal and Local Structure, Phase Transition, and Li-ion Conduction of Solid Electrolyte $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$
			2017B1628	BL19B2	伊藤 孝憲	
			2017B1932	BL14B2	伊藤 孝憲	
			2018A1279	BL04B2	松井 雅樹	
			2018A1587	BL14B2	伊藤 孝憲	
			2018A1589	BL19B2	伊藤 孝憲	
			2019A5390	BL16B2	今井 英人	
			2019B5390	BL16B2	今井 英人	

Journal of the Physical Society of Japan

45641	Keiichi Imura	92 (2023) 093701	2021B4252	BL12XU	井村 敬一郎	Variation of Pressure-Induced Valence Transition with Approximation Degree in Yb-Based Quasicrystalline Approximants
			2022A4257	BL12XU	井村 敬一郎	
			2022B4265	BL12XU	井村 敬一郎	

Journal of Wood 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
45709	Koji Murata	69 (2023) 25	2021A1192	BL40B2	村田 功二	Effect of Thermal Modification on the Stress Relaxation Behavior and Microstructure of the Cell Wall

JVS-Vascular Science

45717	Takateru Yamamoto	4 (2023) 100123	2016A1186	BL20B2	築部 卓郎	Mechanism of Sac Expansion without Evident Endoleak Analyzed with X ray Phase-contrast Tomography
			2016B1453	BL20B2	築部 卓郎	
			2018B1331	BL20B2	築部 卓郎	
			2021A1460	BL20B2	築部 卓郎	

Langmuir

45624	Yuma Sasaki	39 (2023) 9262-9272	2022A7201	BL03XU	廣澤 和	Nanoparticle-Based Tough Polymers with Crack-Propagation Resistance
			2022B7251	BL03XU	廣澤 和	

Life Science Alliance

45698	Kenji Fukui	6 (2023) e202302001	2016A2522	BL38B1	村川 武志	Catalytic Mechanism of the Zinc-dependent MutL Endonuclease Reaction
-------	-------------	------------------------	-----------	--------	-------	--

Macromolecules

45629	Ken Terao	56 (2023) 5635-5641	2019B1113	BL40B2	寺尾 憲	Temperature-Induced Nanostructure Formation Behavior of Core Cross-Linked Star-Shaped Poly(<i>N</i> -isopropylacrylamide) in Water
			2020A1132	BL40B2	寺尾 憲	
			2020A0529	BL40B2	寺尾 憲	
			2021A1092	BL40B2	寺尾 憲	
			2021B1138	BL40B2	寺尾 憲	
			2021B1139	BL40B2	寺尾 憲	
			2022A1083	BL40B2	寺尾 憲	
			2022B1119	BL40B2	寺尾 憲	

Materials and Corrosion

45824	Masamitsu Takahashi	(2023) Online published 22 Sep. (2023)	2020A5050	BL16XU	出口 博史	Corrosion Behavior of Carbon Steel Covered with a Coating Film Containing Metallic Compounds under a Sulfuric Acid Mist Environment Containing Chloride
			2021A5050	BL16XU	出口 博史	
			2021B5050	BL16XU	出口 博史	

Materials Today Sustainability

45690	Kohsuke Mori	22 (2023) 100407	2020A1062	BL01B1	森 浩亮	Selective Production of Hydrogen Isotope Gases via PdAg-catalyzed Dehydrogenation of Formic Acid in D ₂ O Assisted by Surface-grafted Amine Groups
			2021A1095	BL01B1	森 浩亮	

Matter and Radiation Extremes

45829	Sergey Makarov	8 (2023) 066601	2021A8004	BL3	Koenig Michel	Direct Imaging of Shock Wave Splitting in Diamond at Mbar Pressure
			2021B8002	BL3	Albertazzi Bruno	

Molecular Cancer Therapeutics

45643	Kohei Takano	22 (2023) 317-332	2019B2503	BL45XU	高橋 瑞稀	Discovery of a Novel ATP-Competitive MEK Inhibitor DS03090629 that Overcomes Resistance Conferred by BRAF Overexpression in BRAF-Mutated Melanoma
-------	--------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

Nature Chemistry

45830	Alexander M. Wolff	(2023) Online published 18 Sep. (2023)	2017B8055	BL2	Thompson Michael	Mapping Protein Dynamics at High Spatial Resolution with Temperature-jump X-ray Crystallography
			2018A8023	BL2	岩田 想	

Nature Geoscience

45606	Hideharu Kuwahara	16 (2023) 461-465	2020A1313	BL27SU	桑原 秀治	Hadean Mantle Oxidation Inferred from Melting of Peridotite under Lower-mantle Conditions
			2021A1206	BL27SU	桑原 秀治	
			2022A1302	BL27SU	桑原 秀治	
			2021B1664	BL27SU	小池 みずほ	

Nature 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
45613	Clarisse Woodahl	22 (2023) 848-852	2019B8066	BL1	Schwartz Craig	Probing Lithium Mobility at a Solid Electrolyte Surface

Nature Structural and Molecular Biology

45716	Wataru Shihoya	24 (2017) 758-764	2015A1024 2015A1057	BL32XU BL32XU	石谷 隆一郎 西澤 知宏	X-ray Structures of Endothelin ET _B Receptor Bound to Clinical Antagonist Bosentan and its Analog
-------	----------------	----------------------	------------------------	------------------	-----------------	--

Nucleic Acids Research

45614	Takao Yamaguchi	51 (2023) 7749-7761	2018B6801 2019A6901	BL44XU BL44XU	青山 浩 青山 浩	Mechanism of the Extremely High Duplex-forming Ability of Oligonucleotides Modified with <i>N</i> -tert-butylguanidine- or <i>N</i> -tert-butyl- <i>N'</i> -methylguanidine-bridged Nucleic Acids
-------	-----------------	------------------------	------------------------	------------------	--------------	---

Optics Express

45618	Masaki Abe	31 (2023) 26027-26039	2022A1465 2022A1377 2022B1269 装置&技術	BL27SU BL27SU BL27SU BL29XU	高橋 幸生 金子 房恵 高橋 幸生	X-ray Ptychographic and Fluorescence Microscopy using Virtual Single-pixel Imaging Based Deconvolution with Accurate Probe Images
-------	------------	--------------------------	--	--------------------------------------	-------------------------	---

Optics Letters

45831	Katsuhiro Mikami	48 (2023) 5041-5044	2020A8024	BL1	坂上 和之	Sub-nanometer Scale Depth Patterning on Sapphire Crystal by Femtosecond Soft X-ray Laser Pulse Irradiation
-------	------------------	------------------------	-----------	-----	-------	--

Physical Chemistry Chemical Physics

45627	Nozomu Ishiguro	25 (2023) 17197-17206	2015A1125 2015A1599 2016B1330 2017B1852 2018A1332 2018B1343 理研	BL37XU BL37XU BL37XU BL37XU BL37XU BL37XU BL32B2	石黒 志 石黒 志 唯 美津木 石黒 志 松井 公佑 石黒 志	Oxidation and Phase Transfer of Individual Cr-doped Dendritic FeO _x Particles Visualized by Full-field Nano-XAFS Spectroimaging
-------	-----------------	--------------------------	--	--	--	--

Physics and Chemistry of Minerals

45570	Iori Yamada	50 (2023) 19	2017A1317 2017B1270 2018A3781 2018B1557 2019B1403	BL04B1 BL04B1 BL22XU BL04B1 BL04B1	寺崎 英紀 西田 圭佑 寺崎 英紀 寺崎 英紀 寺崎 英紀	Sound Velocity and Elastic Properties of Fe-Ni-S-Si Liquid: the Effects of Pressure and Multiple Light Elements
-------	-------------	-----------------	---	--	---	---

Pure and Applied Chemistry

45845	Keiichirou Ozawa	95 (2023) 733-741	2020A1451 2022B0571	BL02B2 BL02B2	長谷川 美貴 長谷川 美貴	Dispersion Control by using a Bulky Surfactant Medium in the LB Films for the Enhancement of Linearly Polarized Luminescence of Eu Complexes
-------	------------------	----------------------	------------------------	------------------	------------------	--

Results in Chemistry

45610	Masahiko Maekawa	4 (2022) 100550	2021B2075 2019A1262 2019A2071 2019B2092	BL02B1 BL02B1 BL02B1 BL02B1	杉本 邦久 杉本 邦久 杉本 邦久 杉本 邦久	Syntheses and Structural Characterization of Heterometallic Trinuclear {Cu(I), Ag(I)}-Ir(III) Hydride Complexes Bridged by Ir Metalloligands
-------	------------------	--------------------	--	--------------------------------------	----------------------------------	--

Review of Scientific Instruments

45752	Shintaro Kobayashi	94 (2023) 083103	2021A2068 2021B1315 2021B2083 2022A2077 2022B2105	BL02B2 BL02B2 BL02B2 BL02B2 BL02B2	河川 彰吾 小林 慎太郎 小林 慎太郎 小林 慎太郎 小林 慎太郎	<i>In situ</i> High Temperature Powder X-ray Diffraction Technique using a Sapphire Single-crystal Flat Cell
-------	--------------------	---------------------	---	--	---	--

Science China 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
45746	Chengyi Yu	65 (2022) 1912-1919	2021A1145	BL44B2	Lin Kun	Two-dimensional Zero Thermal Expansion in Low-cost $Mn_xFe_{5-x}Si_3$ Alloys via Integrating Crystallographic Texture and Magneto-volume Effect
			2019A1378	BL44B2	Lin Kun	

日本化粧品技術者会誌 (Journal of the Society of Cosmetic Chemists of Japan)

45805	Junichiro Kamikado	57 (2023) 251-264	2018A3264	BL24XU	小林 翔	Mechanism of Frizz Phenomenon Occurring in Bleached Hair
			2018B3264	BL24XU	小林 翔	
			2019A3264	BL24XU	小林 翔	
			2019B3264	BL24XU	小林 翔	
			2020A3264	BL24XU	小林 翔	
			2022A3264	BL24XU	木村 洋則	

日本生物学的精神医学会誌 (Japanese Journal of Biological Psychiatry)

45579	Ryuta Mizutani	34 (2023) 63-67	2018B1187	BL37XU	水谷 隆太	Structural Alterations of Neurons Revealed from Postmortem Brain Tissues of Schizophrenia Cases
			2019A1207	BL20XU	水谷 隆太	
			2019B1087	BL37XU	水谷 隆太	
			2020A1163	BL20XU	水谷 隆太	
			2023A1142	BL20XU	水谷 隆太	

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

45718	Hiroshi Matsui	36 (2023) 185-193	2022B1134	BL43IR	松井 広志	Mechanism of Antiferroelectric Ordering in Superprotonic Conductor $Cs_3H(SeO_4)_2$
			2021B1199	BL43IR	松井 広志	
			2020A1098	BL43IR	松井 広志	
			2019A1081	BL43IR	松井 広志	

溶接学会論文集 (Quarterly Journal of the Japan Welding Society)

45600	Tomoya Nagira	41 (2023) 1s-5s	2020A1150	BL20XU	柳 樂 知也	Elucidation of Solidification Mode of Fe-Mn-Si Alloy during TIG Spot Welding using Synchrotron X-ray
			2021A1121	BL20XU	柳 樂 知也	
			2021B1152	BL20XU	柳 樂 知也	
			2022A1096	BL20XU	柳 樂 知也	

博士論文 (Oregon State University)

45687	Jae-Kyung Han	(2023)	2018B1219	BL02B1	Liss Klaus Dieter	Characterization of Heterostructured Nanocrystalline Metals Processed by High-Pressure Torsion
-------	---------------	--------	-----------	--------	-------------------	--

博士論文 (兵庫県立大学)

45671	Satoshi Yamaguchi	(2023)	2017B7032	BL33XU	長井 康貴	Development of Imaging Techniques Using Synchrotron Radiation for Observation of Liquid Water in Gas Diffusion Layers of Polymer Electrolyte Fuel Cells
			2018A7032	BL33XU	長井 康貴	
			2018B7032	BL33XU	長井 康貴	
			2019A7032	BL33XU	山口 聡	

課題以外の成果として登録された論文

Bioorganic and Medicinal Chemistry

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
45592	Akane Kamiyama	24 (2016) 5340-5352		BL38B1	Phosphonate-based Irreversible Inhibitors of Human γ -glutamyl Transpeptidase (GGT). GGsTop is a Non-toxic and Highly Selective Inhibitor with Critical Electrostatic Interaction with an Active-site Residue Lys562 for Enhanced Inhibitory Activity
45650	Hitomi Yuki	25 (2017) 4259-4264	理研	BL26B2	Activity Cliff for 7-substituted Pyrrolo-pyrimidine Inhibitors of HCK Explained in Terms of Predicted Basicity of the Amine Nitrogen
45666	Yuichi Amano	25 (2017) 2617-2624	理研	BL26B2	Development and Crystallographic Evaluation of Histone H3 Peptide with N-terminal Serine Substitution as a Potent Inhibitor of Lysine-specific Demethylase 1

Scientific Reports

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
45611	Junko Morita	6 (2016) 20995		BL41XU	Structure and Biological Function of ENPP6, a Choline-specific Glycerophosphodiester-phosphodiesterase
45697	Shinsuke Niwa	7 (2017) 10681	理研	BL26B2	Structural Basis for CRMP2-induced Axonal Microtubule Formation
			理研	BL32XU	
				BL41XU	
45712	Taku Fukuzawa	7 (2017) 1080	理研	BL32XU	Long Lasting Neutralization of C5 by SKY59, a Novel Recycling Antibody, is a Potential Therapy for Complement-mediated Diseases

Structure

45589	Setsu Nakae	24 (2016) 1960-1971		BL44XU	Structure of the EndoMS-DNA Complex as Mismatch Restriction Endonuclease
				BL38B1	
45632	Chien-Chu Lin	24 (2016) 667-675		BL44XU	Structural Insights into the Allosteric Operation of the Lon AAA+ Protease
45635	Katsuhiko Kamada	25 (2017) 603-616	理研	BL26B2	Overall Shapes of the SMC-ScpAB Complex Are Determined by Balance between Constraint and Relaxation of Its Structural Parts
			理研	BL26B1	

Angewandte Chemie International Edition

45673	Hiromu Uehara	56 (2017) 15279-15283	理研	BL26B2	Structures of the Heme Acquisition Protein HasA with Iron(III)-5,15-Diphenylporphyrin and Derivatives Thereof as an Artificial Prosthetic Group
45674	Osami Shoji	56 (2017) 10324-10329	理研	BL26B2	Direct Hydroxylation of Benzene to Phenol by Cytochrome P450BM3 Triggered by Amino Acid Derivatives

Catalysis Science & Technology

45637	Hiroki Onoda	8 (2018) 434-442	理研	BL26B1	α -Oxidative Decarboxylation of Fatty Acids Catalysed by Cytochrome P450 Peroxygenases Yielding Shorter-alkyl-chain Fatty Acids
45679	Kazuto Suzuki	7 (2017) 3332-3338	理研	BL26B2	Control of Stereoselectivity of Benzylic Hydroxylation Catalysed by Wild-type Cytochrome P450BM3 using Decoy Molecules

The Journal of Biochemistry

45628	Ju Yaen Kim	160 (2016) 101-109		BL44XU	Structural and Mutational Studies of an Electron Transfer Complex of Maize Sulfite Reductase and Ferredoxin
45700	Ami Sotokawauchi	161 (2017) 45-53	理研	BL32XU	Structural Basis of Cucumisin Protease Activity Regulation by its Propeptide

The Journal of Biological Chemistry

45580	Toshiaki Hosaka	291 (2016) 17488-17495	理研	BL32XU	Structural Mechanism for Light-driven Transport by a New Type of Chloride Ion Pump, <i>Nonlabens marinus</i> Rhodopsin-3
45636	Tomoya Hino	292 (2017) 15804-15813	理研	BL26B1	Crystal Structures of TdsC, a Dibenzo[thiophene] Monooxygenase from the Thermophile <i>Paenibacillus</i> sp. A11-2, Reveal Potential for Expanding its Substrate Selectivity

Nature

45576	Wataru Shihoya	537 (2016) 363-368	理研	BL32XU	Activation Mechanism of Endothelin ET _B Receptor by Endothelin-1
45705	Ieva Vasiliauskaitė-Brooks	544 (2017) 120-123	理研	BL32XU	Structural Insights into Adiponectin Receptors Suggest Ceramidase Activity

Archaea

45612	Ekaterina Yu. Bezudnova	2016 (2016) 9127857		BL41XU	NADP-Dependent Aldehyde Dehydrogenase from Archaeon <i>Pyrobaculum</i> sp. 1860: Structural and Functional Features
-------	-------------------------	------------------------	--	--------	---

Biochemical and Biophysical Research Communications

45684	Kaori Yasuda	486 (2017) 336-341	理研	BL26B2	Production of an Active Form of Vitamin D ₂ by Genetically Engineered CYP105A1
-------	--------------	-----------------------	----	--------	---

Biochemistry and Biophysics Reports

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
45649	Fumiaki Tomoike	11 (2017) 93-98	理研	BL26B2	Indispensable Residue for Uridine Binding in the Uridine-cytidine Kinase Family

Biochemistry Research International

45586	Midori Murakami	2016 (2016) 7560919	理研	BL44B2 BL38B1	Crystal Structures of Two Isozymes of Citrate Synthase from <i>Sulfolobus tokodaii</i> Strain 7
-------	-----------------	------------------------	----	------------------	---

Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics

45603	Sebastian Veit	1857 (2016) 1879-1891		BL41XU	Structural and Functional Characterisation of the Cyanobacterial PetC3 Rieske Protein Family
-------	----------------	--------------------------	--	--------	--

Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters

45642	Satoyuki Takahara	28 (2018) 441-445	理研	BL26B1	Design, Synthesis, and Evaluation of Novel Inhibitors for Wild-type Human Serine Racemase
-------	-------------------	----------------------	----	--------	---

Cell

45623	Naoki Matsumoto	167 (2016) 484-497		BL41XU	Crystal Structure of Silkworm PIWI-Clade Argonaute Siwi Bound to piRNA
-------	-----------------	-----------------------	--	--------	--

Chemical Science

45626	Julian Esselborn	7 (2016) 959-968		BL44XU	A Structural View of Synthetic Cofactor Integration into [FeFe]-hydrogenases
-------	------------------	---------------------	--	--------	--

Extremophiles

45605	Konstantin Boyko	20 (2016) 215-225		BL41XU	First Structure of Archaeal Branched-chain Amino Acid Aminotransferase from <i>Thermoproteus uzoniensis</i> Specific for L-amino Acids and D-amines
-------	------------------	----------------------	--	--------	---

Faraday Discussions

45761	Sayaka Uto	198 (2017) 107-120		BL38B1	Mutual Relationships between Structural and Functional Changes in a PsbM-deletion Mutant of Photosystem II
-------	------------	-----------------------	--	--------	--

The FEBS Journal

45683	Marina Nawata	284 (2017) 3114-3127	理研	BL26B2 BL38B1	Heat-induced Native Dimerization Prevents Amyloid Formation by Variable Domain from Immunoglobulin Light-chain REI
-------	---------------	-------------------------	----	------------------	--

FEBS Letters

45621	Lisa Asano	590 (2016) 3270-3279		BL41XU	Regulation of the Vitamin D Receptor by Vitamin D Lactam Derivatives
-------	------------	-------------------------	--	--------	--

Genes to Cells

45665	Masamichi Nagae	22 (2017) 348-359	理研	BL26B2	3D Structural Analysis of Protein O-mannosyl Kinase, POMK, a Causative Gene Product of Dystroglycanopathy
-------	-----------------	----------------------	----	--------	---

Journal of Chemical Information and Modeling

45696	Chiduru Watanabe	57 (2017) 2996-3010	理研	BL26B2	Theoretical Analysis of Activity Cliffs among Benzofuranone-Class Pim1 Inhibitors Using the Fragment Molecular Orbital Method with Molecular Mechanics Poisson-Boltzmann Surface Area (FMO+MM-PBSA) Approach
-------	------------------	------------------------	----	--------	--

The Journal of Physical Chemistry C

45597	Takanori Koitaya	127 (2023) 13044-13054	理研	BL36XU	Operando Characterization of Copper-Zinc-Alumina Catalyst for Methanol Synthesis from Carbon Dioxide and Hydrogen by Ambient-Pressure Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy
-------	------------------	---------------------------	----	--------	---

Journal of Synchrotron Radiation

45670	Yukio Takahashi	30 (2023) 989-994	装置&技術	BL29XU	High-resolution and High-sensitivity X-ray Ptychographic Coherent Diffraction Imaging using the CITIUS Detector
-------	-----------------	----------------------	-------	--------	---

Journal of the American Chemical Society

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
45644	Koji Oohora	139 (2017) 18460-18463	理研	BL26B1	Manganese(V)Porphycene Complex Responsible for Inert C–H Bond Hydroxylation in a Myoglobin Matrix

Molecular Cell

45672	Yuta Shinohara	67 (2017) 783-798	理研	BL26B2	Temperature-Sensitive Substrate and Product Binding Underlie Temperature-Compensated Phosphorylation in the Clock
-------	----------------	----------------------	----	--------	---

Physical Review X

45678	Daisuke Takegami	13 (2023) 011037		BL12XU	Paramagnetic LaCoO ₃ : A Highly Inhomogeneous Mixed Spin-State System
-------	------------------	---------------------	--	--------	--

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

45584	Naoyuki Kuwabara	113 (2016) 9280-9285	理研	BL32XU	Carbohydrate-binding Domain of the POMGnT1 Stem Region Modulates O-mannosylation Sites of α-dystroglycan
-------	------------------	-------------------------	----	--------	--

Protein Science

45756	Yasuyuki Matoba	26 (2017) 763-783		BL38B1	Crystallographic and Mutational Analyses of Cystathionine β-synthase in the H ₂ S-synthetic Gene Cluster in <i>Lactobacillus plantarum</i>
-------	-----------------	----------------------	--	--------	---

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

45702	Haruko Yakumaru	54 (2023) 139-146		BL37XU	Cesium Distribution in Renal Tissues by High-Energy Synchrotron Radiation X-ray Fluorescence Analysis
-------	-----------------	----------------------	--	--------	---

2023A 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「ビームタイム終了届」を提出いただいております。ビームタイム終了届には、次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。

2023A 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. 2023A 期 要望等全体概要

2023A 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	801	1178	38	41	83
SACLA 共用 BL	48	50	9		

^{*1} 「なし」「None」等のコメントを除く。

<SPring-8 共用 BL 技術的要望等（計 38 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	その他
小角・広角散乱	1	2					
X 線回折 (単結晶)			4				
X 線回折 (高圧)		1		1			
X 線回折 (汎 用・構造評価)		2					
光電子分光		4					
イメージング	1					1	1
非弾性散乱							1
構造生物学	6						
産業利用						2	
その他 (持込 装置利用)		1					
成果専有等	1	3	1			5	

^{*2} 課題申請時の利用者申告ベース。

2. 2023A 期 要望等の内容（一部抜粋）

(1) 技術的要望等

○電気炉を使う実験で、900℃程度の高温度液体状態から温度を下げつつ過冷却液体の構造測定を行う際に、電気炉の温度制御が目的温度を下回らないように制御できると、大変にありがたいと感じて

おります。

【物質科学・材料科学／X 線回折 (汎用・構造評価)】

○非常にいいデータを効率よく測定することができました。ありがとうございました。BSS の使用時に作成されたディレクトリをみると画像ファイルがあり、結晶写真が自動撮影されているようである。しかしながら、何も映っていない（真っ黒な画像）。ピンホールで遮蔽された後に撮影されているなど、タイミングに問題があるかもしれないので設定の確認をお願いします。

【生命科学／構造生物学】

○本ビームタイムでは、担当者の方に適切にアドバイスを頂き、順調に実験データを取得することができました。画像再構成の際に、投影データに対してフィルターをかける解析が可能になれば、より素晴らしいと思いました。

【産業利用／イメージング】

(2) 施設その他要望等

○ビームラインや実験に関しては特にありませんが、食堂が流石に学生にとって高すぎます。物価高騰の折、施設が大変であることも十分承知してはいますが、大学院生が研究を支えている一面がある、ということをご考慮いただけると助かります。

○宿舎の部屋のインターネットの通信システムが変わったようで、夜部屋の電気を消すと、部屋の窓側の壁の上部に大きく設置されたネット接続を示すランプが赤、青、緑とチカチカと点滅し、とても眩しくて眠ることが出来ませんでした。宿舎のスタッフに相談したところ、他の人からも沢山相談（苦情）がきているようで、とりあえずポストイットを頂き、信号の上に貼って隠す（完全には隠れませんが）ことで今回の実験期間中はどうかしのぎました。ですが、ネット回線の信号を部屋の上部に設置し、しかもあんなに明るく 3 色点滅する信号は他にみたことがありません。全部屋点滅を隠して頂くか、通信システムを変えて頂くか、ご対応をお願いいたします。実験期間中に睡

眠が十分にとれないと、事故やケガにもつながるリスクも高まると思います。宜しく願い致します。

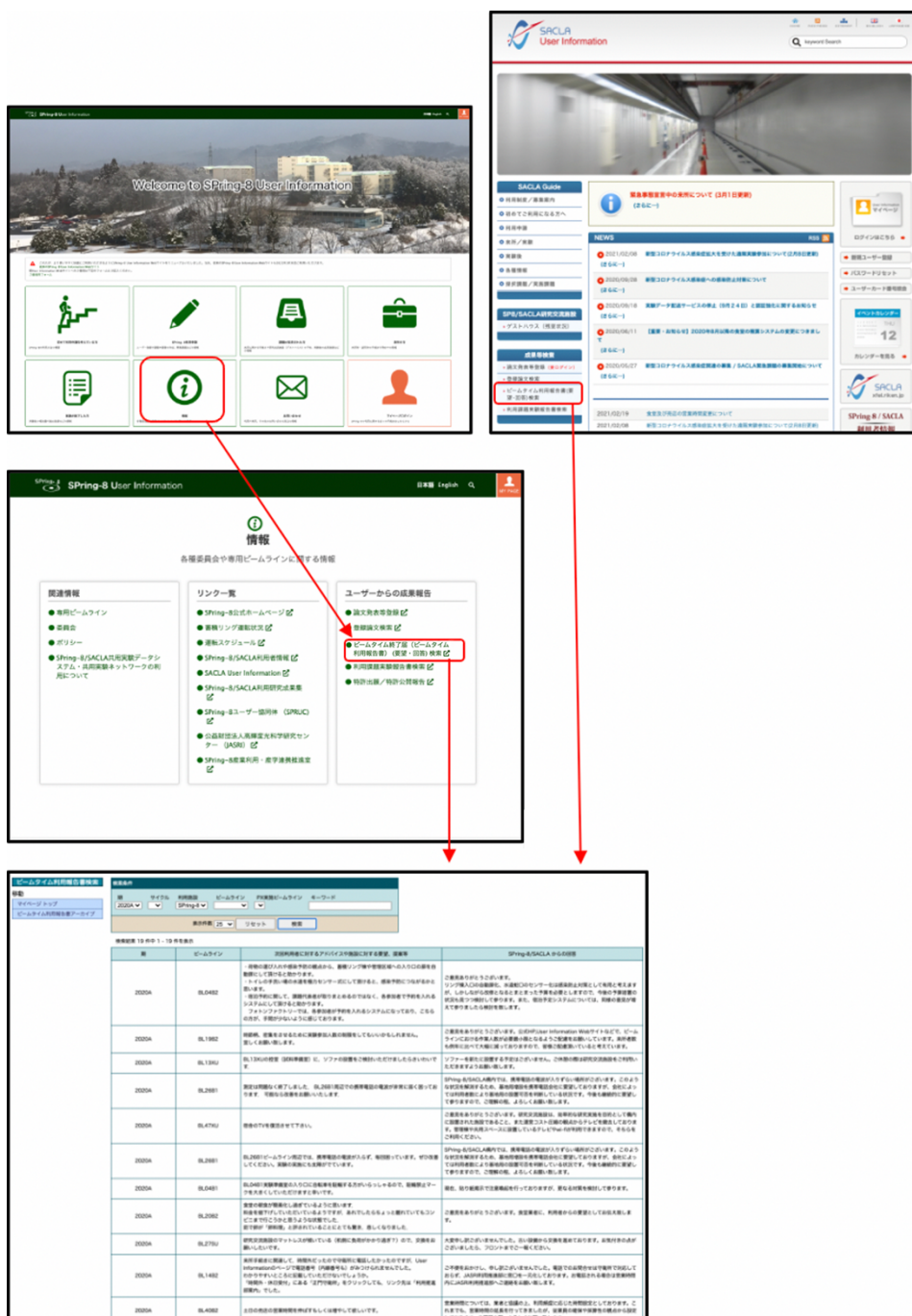
○BL20-28 付近で電波がつながりにくいのを何とかしてほしい。

3. 要望等および施設側回答の公開場所

SPRING-8/SACLA User Information のいずれからでも検索・閲覧ができます。

[検索・閲覧手順]

- ① 「ビームタイム終了届（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」



HAXPES II ビームライン BL46XU の現状

公益財団法人高輝度光科学研究センター

放射光利用研究基盤センター 産業利用・産学連携推進室

安野 聡、SEO Okkyun

公益財団法人高輝度光科学研究センター

放射光利用研究基盤センター 分光推進室

高木 康多、保井 晃

1. はじめに

硬 X 線光電子分光 (HAXPES、HArD X-ray PhotoElectron Spectroscopy) は数 keV~15 keV の硬 X 線を励起光として用いる光電子分光 (XPS、X-ray Photoelectron Spectroscopy) であり、一般に普及している軟 X 線の XPS に比べて、検出される光電子の運動エネルギーが数倍大きく、検出深さが数十 nm 程度にまで大きくなる特徴を持つ^[1]。これにより試料深部の電子状態や結合状態を非破壊で調べることが可能となり、近年は学術分野での利用の他、デバイス開発や実用材料などの産業利用をはじめとした様々な研究分野における分析評価ツールとして定着している。SPring-8 では、その有用性と汎用性の高さから複数のビームラインで運用され、目的や対象の試料構造によった使い分けがなされ利用が進んできた^[2]。一方で、これまでは HAXPES の運用や技術開発がビームライン・装置毎に独自に行われ、制御ソフトやサンプルホルダー等でビームライン・装置間に統一性が無いなど、ユーザビリティの向上や効率的な運用と技術開発の点で課題があった。このため、我々はこれまでに SPring-8 における共用 HAXPES アクティビティを BL46XU 及び BL09XU へ集約し、効率的なビームラ

イン運用と既存の利用ニーズ及び今後の潜在的なニーズに幅広く対応することをコンセプトとして検討しビームラインの改変を進めてきた。先行する BL09XU (HAXPES I) では既にビームラインのアップグレード作業と 2 台の HAXPES 装置の導入、コミッショニングが終了し、2021B 期にユーザーへの供用が開始された^[3,4]。さらに BL46XU においても、2022 年 12 月より光学系から計測装置に亘る大規模なアップグレードを実施し、BL09XU に続く 2 番目の HAXPES 専用ビームライン“HAXPES II”として 2023 年 7 月よりユーザー利用を開始した。表 1 に BL09XU 及び BL46XU の各 HAXPES 装置の特徴をまとめたものを示す。

アップグレード後の BL46XU のビームラインレイアウトを図 1 に示す。

表 1 BL09XU 及び BL46XU における各 HAXPES 装置の特徴。

実験ハッチ	BL09XU (HAXPES I)	BL46XU (HAXPES II)
EH1	共鳴・高分解能	自動測定
EH2	3 次元空間分解	大気圧測定

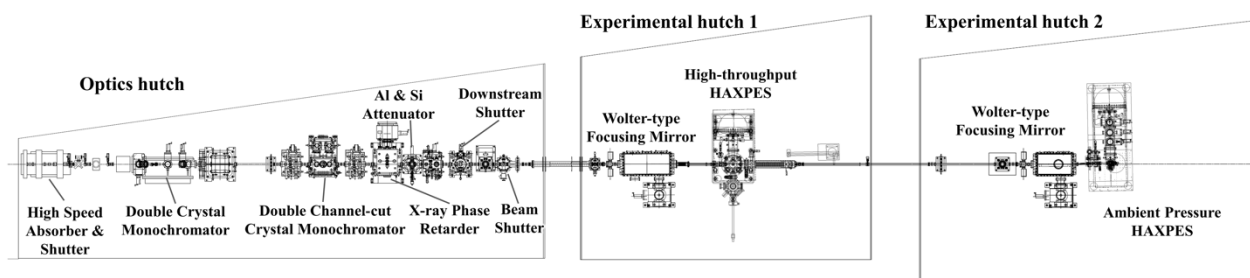


図 1 BL46XU (HAXPES II) のビームラインレイアウト。

今回実施したアップグレードの主な特徴を以下に示す。

(1) 2つの異なる特徴を持つ HAXPES 装置の導入

上流の実験ハッチ 1 (EH1) には自動測定に特化したハイスループット HAXPES 装置、下流の EH2 にはガス雰囲気下での測定が可能な大気圧 HAXPES 装置を整備した。特に大気圧 HAXPES 装置は国内初の共同利用であり、ガス・湿潤雰囲気下の測定に対応し、固気・固液界面反応など幅広い利用が見込まれる。

(2) ダブルチャンネルカット結晶分光器の導入

従来は Si(111) のチャンネルカットモノクロメーター (CCM、Channel-cut Crystal Monochromator) の Si 333、Si 444、Si 555 反射を用いていたため励起エネルギーが 6、8、10 keV に限定されていた HAXPES 計測において、定位置出射化により励起エネルギーの選択性が大幅に拡大した。また、Si(220) と Si(311) の 2 種類の結晶を使い分けることで、分析目的に応じて最適な励起 X 線条件 (分解能、フラックス) を選択でき、効率的な実験が可能になった。Si(311) は 5.5~21.8 keV、Si(220) は 5.5~18.5 keV のエネルギー範囲における使用が可能である。

(3) Wolter 集光ミラーの導入

EH1 及び EH2 の HAXPES 装置の前にそれぞれ Wolter 集光ミラーを新設し、高フラックスかつ安定性の高い X 線の利用が可能となった。また再集光時の再現性が高い特徴を持ち、実験ハッチ切替時間の短縮化によるビームタイムの高効率利用にも繋がっている。

(4) 新しい制御系システム BL774 の導入

BL774 は光学系機器・HAXPES 装置を同じプラットフォーム上で制御できるシステムである⁹⁾。これにより、機器間連携が容易になり、将来の自動計測実現につながる。加えて BL09XU を含めた SPRING-8 の各ビームラインへの導入が進められており、BL09XU との制御系ソフトウェアの共通化などさらなるユーザビリティの向上が期待できる。

本アップグレードや新規装置の導入は、今後の一層の成果創出やユーザーの利便性向上に繋がるものと考えている。本報告では、コミショニングで得られたビームラインスペックを紹介するとともに、光学系機器、及び、HAXPES 装置の整備状況について報告する。

2. 光学ハッチに関する整備状況

光学ハッチでは、二結晶分光器以外の機器がほぼ全て一新され、X 線の性能や利便性が大幅に向上した。上流側より、X 線の特性向上や将来の低エネルギー利用を目的とした差圧排気高速遮断アブソーバー & ゲートバルブ機構 (これにより FE 部と光学ハッチ間に設置されていた Be 窓の撤去が可能に)、X 線エネルギーの高分解能化のためのダブルチャンネルカットモノクロメーター (DCCM、Double Channel-cut Crystal Monochromator) 機構、偏光依存性計測を可能にするダイヤモンド移相子 (XPR、X-ray Phase Retarder) 機構、厚みの異なる Al 及び Si フィルターを選択して所望のフラックスに調整することで試料帯電やダメージの緩和を行うアッテネーター機構などを新設した。特に今回導入した DCCM は 2 つの CCM を組み合わせた機構となっており、先述した通りエネルギーを変更させても出射位置が変わらない特徴がある。従来 (1 つの CCM) に比べて、簡便に X 線エネルギーが変更できるため、例えば試料構造に最適な X 線エネルギー条件 (光電子の脱出深さ・分析深さ) での測定が実現できるなど、X 線エネルギーを自在に選択できる放射光の特徴を活かした HAXPES 測定が可能となった。また、Si(311) と Si(220) の 2 種類の結晶を整備しており、分解能やフラックスなど目的に応じた使い分けが可能である。

図 2 に DCCM Si(311) と Si(220) における X 線エネルギーと総エネルギー分解能 (HAXPES アナライザーの分解能を含む) の関係を示す。尚、測定には Au 箔を使用し、12 及び 15 keV の測定データは、アナライ

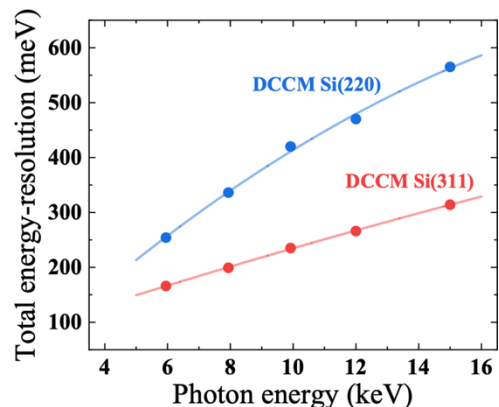


図 2 X 線エネルギーと総エネルギー分解能の関係。HAXPES 測定条件：パスエネルギー 100 eV、Slit 0.3 mm。

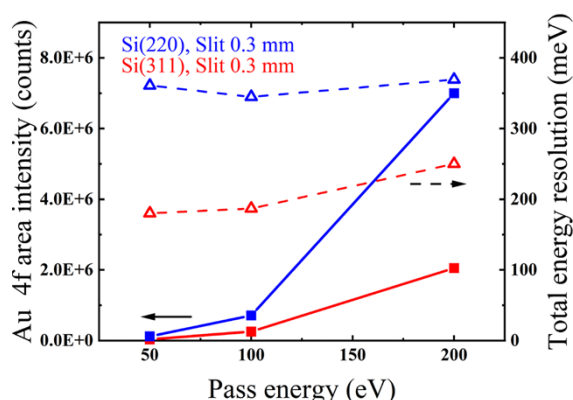


図3 X線エネルギー7.94 keVにおける光電子強度及び総エネルギー分解能のパスエネルギー依存性評価結果。図中の実線は光電子強度、波線は総エネルギー分解能を示している。Slit 0.3 mmは分散方向のアナライズスリットサイズを示している。

ザーで計測可能な10 keV（光電子の運動エネルギー）以下となるように、試料に正電圧を印加して測定を実施している。またこれを含む以下の全てのデータは室温で得たものである。得られた分解能は、BL09XUで得られたものとほぼ同等であった。その他、HAXPESのアナライザー条件を組み合わせることで、光電子強度や分解能の選択範囲をさらに広げることができる。図3にAu箔試料におけるX線エネルギー7.94 keVの光電子強度（Au 4fピーク）及び総エネルギー分解能のパスエネルギー依存性の評価結果を示す。このように適当なDCCMとアナライザー条件を組み合わせることで、試料構造や目的に応じて最適な測定条件（分解能、フラックス、光電子強度）を選択した計測を行うことができる。

3. 実験ハッチ1（EH1）ハイスループットHAXPES装置に関する整備状況

EH1のHAXPES装置では、近年の共用HAXPES全体における高い競争率を緩和するとともに多種試料のコンビナトリアル測定等を実現すべくハイスループット化を目指した自動計測HAXPES装置の開発を行っている。本装置は以前にBL46XU EH2に設置されていた汎用HAXPES装置をEH1に移設したものをベースとしており、これまでに高精度試料位置調節機構（6軸マニピュレーター）と自動試料搬送機構の導入を行ってきた。図4に自動試料搬送機構の概要（イメージ図、写真）を示す。試料の搬送は測定チャ

ンバー下部へ設置されたロードロックチャンバー内でストッカーを交換することによって行われる。現状では、ロードロックチャンバーは一度に4つのストッカーを格納して真空排気することが可能な構造となっている。ストッカーは図5(a)のようなものであり、BL09XUと共通のサンプルホルダーを4つ格納でき

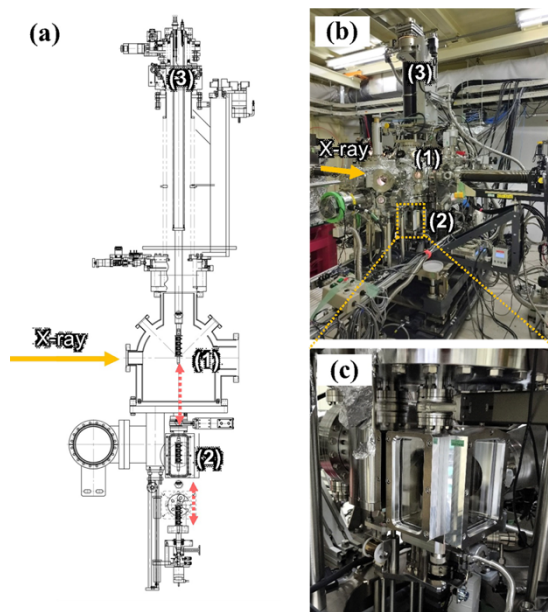


図4 BL46XU EH1に設置されたHAXPES装置用自動試料搬送機構。(a)イメージ図、(b)装置全体写真、(c)ロードロックチャンバー。図(a, b)中の数字は(1)測定チャンバー、(2)ロードロックチャンバー、(3)6軸マニピュレーターをそれぞれ示している。

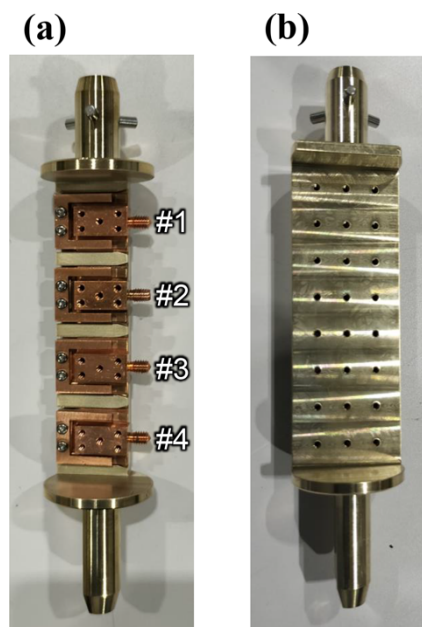


図5 (a)サンプルホルダー用ストッカー、(b)サンプルマウント型ストッカー。

る構造を有する。両ビームラインを利用するユーザーにおいて、同一サンプルの持ち回り測定など利便性向上に繋がることを期待している。この他、これまでにユーザーより要望のあった大型もしくは厚みのあるサンプル形状へ対応するため、ストッカー自体にサンプルマウント機能を持たせたタイプも整備している(図 5(b))。今後、試料搬送などの制御系から計測系を統一的に扱うアプリケーション開発を行うなど、完全自動計測にむけた技術開発を行っていく予定である。

4. 実験ハッチ 2 (EH2) 大気圧 HAXPES 装置に関する整備状況

EH2 にはガス雰囲気下の試料に対する XPS 測定が可能な大気圧 HAXPES 装置が設置された(図 6)。本装置は SPring-8 の BL36XU で運用されていたもので、本ビームラインアップグレードに合わせて BL46XU の EH2 に移設され、共用ビームラインの装置として一般供用が開始された。従来の XPS 装置は真空下の試料しか測定できなかったが、本装置はアナライザー先端の小径アパーチャーとアナライザー前段の差動排気部により、試料の周囲のガス圧を上げてもアナライザー内の真空度が維持されるためガス雰囲気下の試料の HAXPES 測定が可能である。

アナライザーには Scienta Omicron 社の差動排気型アナライザー R4000 Hipp-2 を用いている。標準のアパーチャーは $\phi 300 \mu\text{m}$ であり、カタログスペックとして 5000 Pa までのガス圧の測定に対応している。一方で、 $\phi 30 \mu\text{m}$ のアパーチャーを独自開発し、標準のアパーチャーと交換して利用することで、測定圧力を大気圧まで引き上げることに成功した^[6]。今回のビー

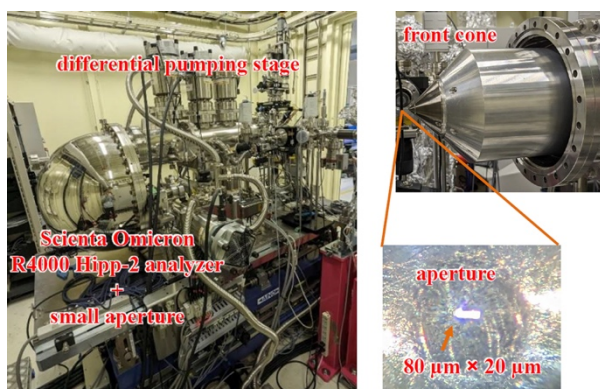


図6 BL46XU EH2に設置された大気圧HAXPES装置。

ムラインのアップグレードに伴い、ビームの集光サイズが BL36XU に比べより小さくなり、試料位置で約横 $10 \mu\text{m} \times$ 縦 $1 \mu\text{m}$ の集光ビームの利用が可能である。アパーチャー形状をビームに合わせることでより効率の良い測定が可能あることから、本アップグレードにおいて、従来の円形ではなく横 $80 \mu\text{m} \times$ 縦 $20 \mu\text{m}$ の長方形にしたものを作製した(図 6)。このアパーチャーを用いた場合でも、試料周りを大気圧にしてもアナライザー内部は 10^{-5} Pa 以下を維持しており、大気圧下の試料の測定も問題なく行えている。

測定槽に 0.1 気圧 (10 kPa) の大気を導入し、ガスそのものを測定した際のスペクトルを図 7 に示す。試料を入れずに測定槽内をガスで満たしており、入射 X 線がアナライザーのアパーチャー前の大気成分を励起し放出された光電子をアナライザーで分光している。入射光エネルギーは 7.94 keV、集光サイズは $10 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ である。

サーベイスキャンでは大気中の窒素分子と酸素分子からのピークが得られている。特に酸素分子からの O 1s ピークは酸素分子がスピンをもつことに由来して 1.1 eV の分裂が起きている^[7]。一方、測定槽に水を導入し、飽和水蒸気圧の 4000 Pa で満たして測定した結果も図 7 に併せて示す。このサーベイスキャンでは水分子の酸素からのピークが得られた。この O 1s

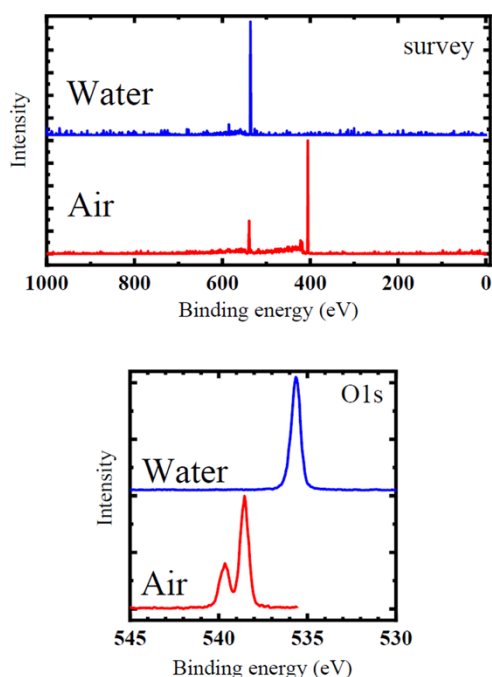


図7 大気 10 kPa と水蒸気 4000 Pa の HAXPES スペクトル。

ピークは酸素分子からのピークよりも 3.5 eV ほど低エネルギー側にあり、また分裂もしていない。このようにガスにおいても酸素原子の化学状態を反映したスペクトルが得られている。

本装置ではガス雰囲気下での測定が可能であり、今後は固体試料を導入してガスとの反応時のオペランド測定や水蒸気下に試料を導入して乾燥を嫌う試料の湿潤状態での測定などを行っていく予定である。

5. 最後に

本アップグレードにより、BL46XU は光学系から計測装置に関して大幅な性能の向上を達成した。正確な比較は励起 X 線の分解能やアナライザー、測定条件によるためにできないが、光電子強度は本アップグレード前に比べ 1000 倍程度に改善している。こうしたシグナルの高強度化や DCCM による励起 X 線エネルギーの選択性の向上を活かし、従来では検出が困難であった電子状態や化学結合状態の微弱な変化の観測、実用的な大気圧測定の実現、これまででない HAXPES をベースとした新しい測定技術の開発などを進めていく。またさらなるユーザーの利便性向上を進めるべく BL09XU との各機器、制御系の共通化にも取り組みたい。BL46XU 及び BL09XU のそれぞれ 2 台で計 4 台の HAXPES 装置を使い分けることで、SPRing-8 全体で幅広い測定対象や分析に対応できる体制を構築していく。

謝辞

本ビームラインアップグレードには非常に多くの方々の御尽力をいただきました。光学系全般に関しては、理化学研究所の大坂様、JASRI ビームライン技術推進室の大橋様、仙波様、山崎様、小山様、清水様、齊藤様の御協力をいただきました。また、現場工事作業では、理化学研究所の菅原様、エンジニアリングチームの皆様、JASRI のテクニカルスタッフの皆様の御協力をいただきました。BL774 関連では、理化学研究所の本村様、中嶋様の御協力をいただきました。本ビームラインアップグレード全体につきまして、理化学研究所の矢橋様、玉作様、JASRI の為則様、佐藤様、河村様の御協力をいただきました。この場を借りて御礼申し上げます。

参考文献

- [1] K. Kobayashi: *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.* **A601** (2009) 32-47.
- [2] C. Kalha *et al.*: *J. Phys. Condes. Matter* **33** (2021) 233001.
- [3] 保井晃、高木康多: *SPRing-8/SACLA 利用者情報* **26** (2021) 445-447.
- [4] A. Yasui *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **30** (2023) 1013-1022.
- [5] K. Nakajima *et al.*: *J. Phys. Conf. Ser.* **2380** (2022) 012101.
- [6] Y. Takagi *et al.*: *App. Phys. Exp.* **10** (2017) 076603.
- [7] J. D. Lee: *J. Surf. Analysis* **16** (2009) 127-152.

安野 聡 YASUNO 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 産業利用・産学連携推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0924
e-mail : yasuno@spring8.or.jp

ソ オッキュン SEO Okkyun

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

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 : ytakagi@spring8.or.jp

保井 晃 YASUI Akira

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

利用系活動報告

放射光利用研究基盤センター 分光推進室 動的分光イメージングチーム

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

1. はじめに

分光推進室・動的分光イメージングチームは、SPring-8 ならびに SPring-8-II で期待される高輝度放射光の特性を活用し、先鋭化する SPring-8 の利用ニーズに応えることをミッションとしている。具体的には、X 線吸収分光 (XAFS) や X 線発光分光 (XES) などの分光計測法に、イメージングや時分割計測などの新たな要素技術を取り込むことで発展させている。本チームが運用するビームラインは、すべてアンジュレータを光源とするビームライン群(硬 X 線分光ビームライン BL37XU、BL39XU、および軟 X 線分光ビームライン BL25SU、BL27SU、ならびに理研ビームライン BL17SU、BL36XU の一部の共用枠) である。

チームメンバーは、光源性能を活かした顕微分光測定手法の開発を進め、ユーザー支援、利用成果の創出や利用拡大を推進している。

図 1 に本チームが担当するビームラインでの主な計測手法とカバーする X 線エネルギー領域を模式的に表したものを示す。特定のエネルギー領域(テンダー X 線領域)に少しギャップがあるものの、X 線分光計測が 0.2~113 keV といった非常に広エネルギー範囲に亘ってカバーされているのがわかる。また、最近数年後に計画されている SPring-8-II アップグレードに向け、各ビームラインの再編・改造・高度化の検討が進められている。本稿では、各ビームラインの概要と最近の整備状況について紹介する。

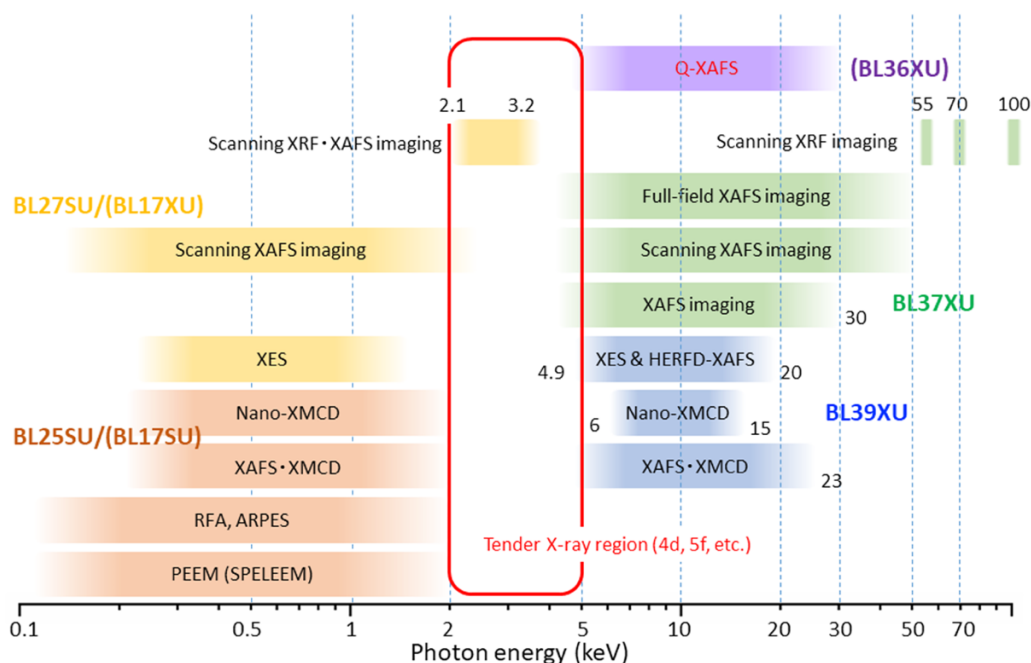


図1 動的分光イメージングチームが担当するビームラインでの主な計測手法とカバーする X 線エネルギー領域を示した図。

2. 硬 X 線分光ビームライン (BL37XU、BL39XU、BL36XU)

BL37XU および BL39XU は同じ標準型真空封止アンジュレータを光源とする硬 X 線ビームラインであるが、BL37XU は 4.5~113 keV、BL39XU は 4.9~37 keV の X 線が利用可能なビームラインである。SPRing-8 建設当初は磁気散乱・吸収、蛍光分析、医学応用の 3 つの手法が相乗りする形で BL39XU を共有していたが^[1]、2000 年に蛍光分析および医学応用のグループが BL37XU を新設する形で分離・独立した^[2]。また、2010 年にはグリーン・ナノ放射光分析評価拠点の整備の一環として、BL37XU および BL39XU 両ビームラインに光源から約 80 m の位置に新設ハッチが建設され、集光光学系 (Kirkpatrick-Baez (KB) ミラー) を設置することによって、100 nm 集光ビームによる X 線分光法の構築を実現した^[3]。X 線分光法としての手法は、BL37XU では触媒や環境試料の化学状態分析が主体で、BL39XU は磁性材料などの磁性研究が主体であることから、利用する X 線のエネルギー帯が異なる方向に進化してきた。蛍光分析では、可能な限り多くの元素に対する分析が必要であるため、比較的高いエネルギー (> 50 keV) での測定手法の開発が進められたのに対し、磁性分析では、主として磁性元素を対象とした分析が必要であるため、5d 遷移金属の L-吸収端を上限とした比較的低いエネルギー (< 15 keV) での開発が進められた。その系譜は現在でも引き継がれており、特に BL37XU では 30 keV 以上の高エネルギー X 線の集光光学系の開発とそれを利用した XAFS 計測が進められている。

2.1. 分光分析ビームライン BL37XU

分光分析ビームライン BL37XU は、3 つの実験ハッチで構成されているが、主として XAFS や蛍光 X 線分析などの分光計測に、X 線顕微鏡法を組み込んだ分光

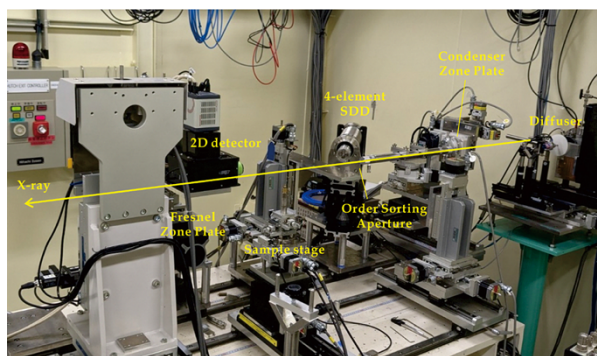


図 2 BL37XU 実験ハッチ 1 における結像型分光イメージングのセットアップ。

イメージング計測が行われている^[4]。この手法では、X 線顕微鏡法に対して X 線エネルギーを掃引するため、集光光学系は基本的に色収差のないミラーが利用される。一方で、より高い空間分解能を目指す場合にはゾーンプレートによる結像型方式を採用することもあり、その場合には X 線エネルギーの変化に合わせて、ゾーンプレートの位置を適切な集光位置に調整する方法を取っている。これらの顕微分光測定では、空間的な元素分布を可視化するだけでなく、価数や結合状態、配位数といった化学状態および電子状態に関する情報も同時に取得することができるため、化学系を中心とした基礎研究から産業応用への利用がなされている。特に最近では、2 次元像だけでなく、Computed tomography (CT) 手法を組み込んだ 3 次元像の再構成にも取り組んでおり^[5]、より実環境や実材料での利用拡大が期待されている。表 1 に、BL37XU で利用可能な顕微分光計測法についてまとめたものを示す。これらの手法を、ユーザーのニーズに合わせて選択するだけでなく、計測の高効率化や高分解能化を目指した開発も進められている。

実験ハッチ1では、主として全視野型顕微分光計測装置が設置されており、投影型および結像型分光イメージングが可能である (図2)。投影型イメージングでは、空間分解能は1 μm 程度ではあるが、4.5~113 keVの広い

表 1 BL37XU で利用可能な顕微分光計測法。

Type of microscopy		Energy (keV)	Spatial resolution	Field of view	3D measurement
Scanning		4.5 – 55	100 nm	μm ~mm	Long time
Full-field	Projection	4.5 – 113	1 μm	mm^2	Possible
	Imaging	6 – 15	50 nm	$\sim \mu\text{m}$	Possible
Coherent diffraction	CDI	5 – 10	10 nm	μm^2	Long time
	Ptychography	5 – 10	20 nm	mm^2	Long time

エネルギー範囲で計測可能であることが特長といえる。本手法の高感度・高効率測定の実現には、特に高エネルギー領域での検出器の高感度化と高空間分解能化が今後の課題といえる。一方、結像型イメージングでは、コンデンサーゾーンプレート (CZP) と対物フレネルゾーンプレート (FZP) によって、6~15 keV のエネルギー範囲において空間分解能 50 nm を達成している。本手法では、空間分解能の高い測定が可能であるが、現状では利用可能なエネルギー領域が限られており、したがって測定対象が制限される。高エネルギー領域で回折効率の高いゾーンプレートと検出器の開発が課題であろう。

実験ハッチ 2 では、多目的回折計が設置されており、主として X 線反射率測定が行われている。また、下流側にフリースペースを設けており、持ち込み装置に対する対応を行っている。ただし、このフリースペースへの持ち込みは、原則、BL37XU の光源性能を活かす実験装置に限定している。

実験ハッチ 3 は、アンジュレータ光源から 76 m の位置に KB ミラーが設置されており、主として 100 nm 集光ミラーによる走査型顕微分光計測が利用可能である (図 3)。このビームラインの特長の一つとして、4.5~55 keV の広エネルギー領域に亘って 100 nm 集光ビームを色収差なしに提供できることが挙げられ、これが分光イメージング計測を実現できる要素となっている。蛍光 X 線による走査型の利点は、測定対象となる試料形態の制限が少ないことが挙げられよう。全視野型では、測定対象が X 線の透過可能な試料に制限されるのに対し、走査型では実環境・実材料に近い試料での計測が可能となる。一方で、試料位置を動か

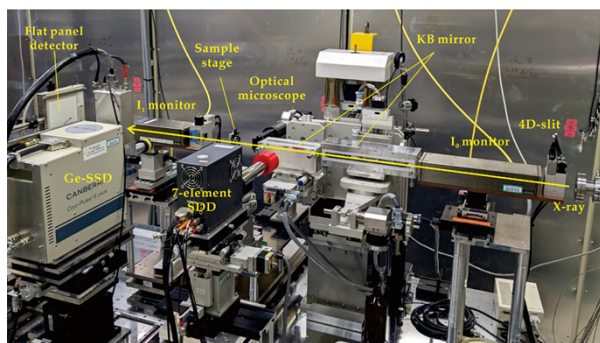


図 3 BL37XU 実験ハッチ 3 に設置されている KB 集光ミラーによる走査型分光イメージングのセットアップ。

す必要があるため、多くの計測時間が必要となる問題がある。この問題を少しでも改善するために、BL37XU では、蛍光 X 線検出器として 7 素子シリコンドリフト検出器 (SDD) や高エネルギー X 線対応の Ge 半導体検出器 (SSD) と併せて高速デジタル・シグナル・プロセッサ (DSP) の導入による検出効率の向上に加え、連続的に試料位置を移動させて計測する on-the-fly スキャンが開発され^[6]、データ処理速度の向上とステージ待機時間の縮小に伴う計測時間の大幅な縮小を実現している。

2.2. 磁性材料ビームライン BL39XU

磁性材料ビームライン BL39XU は、2 つの実験ハッチで構成されており、上流側の実験ハッチ 1 では、主として複合極限環境 X 線分光計測および X 線発光分光計測、下流の実験ハッチ 2 では、100 nm ビームを利用したナノ X 線分光計測が行われている。このビームラインの最大の特長は、厚さ 0.1~4.7 mm のダイヤモンド移相子によって、円偏光を 4.9~23 keV で生成できることであり、この円偏光を利用して X 線磁気円二色性 (XMCD) による磁性研究が行われている。

実験ハッチ 1 における複合極限環境 X 線分光計測装置では、強磁場・低温・高圧環境下での X 線分光計測が可能である。強磁場発生装置には、電磁石と超伝導磁石が装備されているが、それぞれ最大 3.5 T、7 T の強磁場印加が可能である。高圧発生装置は、主としてダイヤモンド・アンビル・セル (DAC) を利用しており、室温では最大 200 GPa 程度、低温環境下では最大 40 GPa 程度の圧力印加が可能となっている。複合計測環境として構築可能な低温環境 (試料温度) は、超伝導磁石に直付の VTI (Variable Temperature Insert) の利用で 2 K まで、ヘリウムフロー型冷凍機とパルスチューブ型冷凍機でそれぞれ 8 K、3 K まで冷却可能となっている。このような複合極限環境を、ユーザーのニーズに合わせて KB ミラーによる集光光学系と組み合わせたり、装置の設計、配置の最適化、ならびに調整を行ったりしている。複合極限環境下測定は、最近では XMCD 計測に留まらず従来型の XAFS 計測も推進され、強相関電子系物理分野での利用^[7,8]から高性能磁石材料やスピントロニクス材料の研究^[9]へ展開されている。

実験ハッチ 1 における X 線発光分光 (XES) 計測装置では、X 線吸収過程で発生する蛍光 X 線をアナライザー結晶によって 0.5~1 eV 程度の高エネルギー分解能で分光計測することができる。BL39XU の XES 装置の最大の特長は、アナライザー結晶を複数枚 (最大 15 枚) 搭載することで、高感度で XES 計測が可能となることである (図 4) ^[10]。また、XES を利用した高エネルギー分解能蛍光検出 (HERFD)-XAFS 計測^[11]が可能であることから、従来型 XAFS の寿命幅の影響を抑制した高エネルギー分解能 XAFS 計測を高感度で実現可能となる。特に、高感度 HERFD-XAFS 計測は、複数元素から構成される物質のうち、これまで蛍光 X 線の重畳によって半導体検出器 SSD や SDD による蛍光法による XAFS 計測が困難であったものにも適用可能という利点がある^[12]。最近では、本装置の利用が大幅に増加しており、対象とする蛍光 X 線に応じてより適切なアナライザー結晶を選択し、その光学系の最適化を行っている。

実験ハッチ 2 には、BL37XU と同様に光源から 76 m

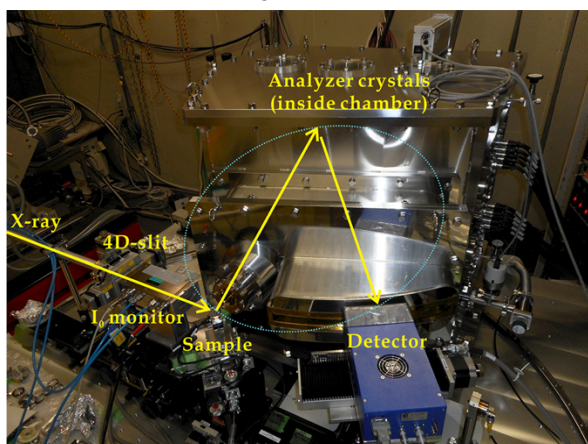
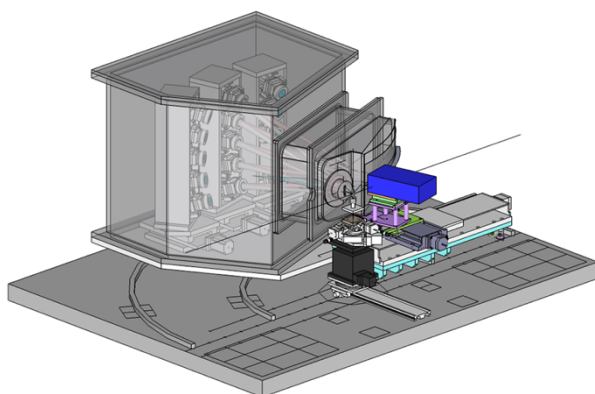


図 4 BL39XU 実験ハッチ 1 に設置されている高感度型 XES 計測装置の外観図 (上) と、実際の装置の写真 (下)。

の位置に設置された KB ミラー集光装置によって 100 nm 集光ビームが利用可能であり、主として円偏光を利用した走査型 XMCD 計測が行われている。100 nm 集光ビームを形成するためにワークディスタンスが 86 mm しかないが、この空間に電磁石を設置することで、最大 2.4 T の印加磁場下でのナノ XMCD 計測が可能であることが特長となっている^[13]。電磁石による発熱の影響があるため、安定した 100 nm 円偏光 X 線を提供するために、実験の数日前からセットアップを行い、実験ハッチ内温度の安定化を図っている。最近では、磁石材料の磁区構造の 3 次元可視化を目指した磁気 CT 計測の開発が進められ、その際には、別の小型電磁石の利用によって最大 1 T の磁場下での XMCD-CT 計測が可能となっている^[14]。磁気イメージングや元素マッピングの高効率計測の実現のために、ロックインアンプによる on-the-fly 計測の開発や多素子蛍光 X 線検出器の導入を進めている。

BL39XU は、2023 年 7 月より SPring-8-II に向けてビームラインのアップグレードが先行して行われている。光学系は二結晶分光器以外の高次光除去ミラーの刷新、2 枚移相子による可変偏光装置の導入が行われる。また、SPring-8-II では、光源サイズの縮小に伴う集光ビームの縮小が期待され、マイクロ/ナノビーム計測に対するビーム位置や試料位置の安定化は不可欠である。集光ミラーや実験装置の頻繁な搬入出は、計測系の不安定要素の一因となるため、本アップグレードでは主要な実験装置の常設とそれに最適な集光装置の常設を実現する。具体的には、現在の



図 5 BL39XU に建設中の XES 計測専用の実験ハッチ。現在の実験ハッチ 1 と実験ハッチ 2 の間に建設され、図 4 で示されている XES 計測装置が移設される。

BL39XU の主力装置である XES 装置専用の実験ハッチが現在の実験ハッチ 1 と実験ハッチ 2 の間に建設され (図 5)、各実験ハッチに専用の集光装置を常設、併せて多様な手法を各実験ハッチにおいて棲み分けることによって利便性の向上を図る。ビームライン・アップグレード後の再開は 2024 年 7 月を予定している。

2.3. 理研 物質科学 II ビームライン BL36XU

BL36XU は、新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) プロジェクトによって 2012 年に建設されたビームラインである。テーパ型アンジュレータを光源とし、小型 Si チャンネルカット結晶を利用することで、時間分解能 20~100 ms でスペクトル計測を実現する高速 XAFS (QXAFS) 測定が可能なビームラインである^[15]。KB ミラーなどの集光光学系も整備されており、投影型/走査型/結像型 XAFS イメージング計測、XAFS/XRD 同時計測、XES 計測なども可能であるが、本チームでは共用枠 (最大 10%) としての QXAFS 装置に限定して、ユーザー利用のサポートを行っている。

3. 軟 X 線分光ビームライン (BL25SU、BL27SU、BL17SU)

BL25SU、BL27SU、および BL17SU は主として軟 X 線分光計測を目的としたビームライン群であるが、各ビームラインの利用目的に適したアンジュレータ光源を導入している。BL25SU と BL27SU は、SPring-8 建設初期から運用されているビームラインであり、高エネルギーリングでもいかに軟 X 線の利用が重要であったかを意味している。BL25SU は物理系主体の固体の電子状態の研究に、BL27SU は化学系主体の光化学反応や原子・分子に関する研究に利用されてきた。その中で、BL25SU は元素戦略に基づいた材料開発の一環 (文部科学省・元素戦略プロジェクト) として磁性材料研究拠点に位置付けされ、2013 年にビームラインステーションの大幅な改造が行われた^[16]。また、BL17SU は 2022 年夏期に BL25SU と BL27SU の両方の特性を取り込むようなヘリカル 8 アンジュレータを導入し、水平・垂直直線偏光、および円偏光を光源から発生することが可能となっている^[17]。また、

BL17SU は理研ビームラインであるため、利用できる装置を限定した上で、そのビームタイムの一部 (最大 20%) を共用として供している。

3.1. 軟 X 線固体分光ビームライン BL25SU

BL25SU はツインヘリカルアンジュレータを光源としており、キッカー電磁石を利用することで、円偏光のヘリシティを最大 10 Hz で切り替えることが可能なビームラインである。2013 年のビームラインの改修によって、エネルギー分解能を重視した A ブランチと光子フラックスを重視した B ブランチの設置が行われた。前者では主として高分解能角度分解光電子分光 (ARPES)、分光型光電子・低エネルギー電子顕微鏡 (SPELEEM)、および光電子回折ホログラフィー測定が行われており、後者では主として軟 X 線磁気円二色性 (MCD) 装置と走査型軟 X 線 MCD 顕微鏡が整備されている^[18]。設置されている装置の特徴から、本ビームラインでは主として物理系および材料系を中心とした研究が行われている。

A ブランチの ARPES 装置では、Wolter 型集光ミラーによって縦 0.4 μm 、横 4 μm 程度の集光を実現することで、斜入射条件による高感度 ARPES 測定が可能となっている (図 6)^[19]。また、マイクロビームを利用することで、微小試料での測定や高分解能 ARPES 測定を実現可能とする平坦で良質な試料の劈開面を選択しやすくなっている。一方、ARPES の運動量空間マッピングにはエネルギー掃引が必要となるが、試料空間マッピング測定と併せて、その自動測定プログラムの構築

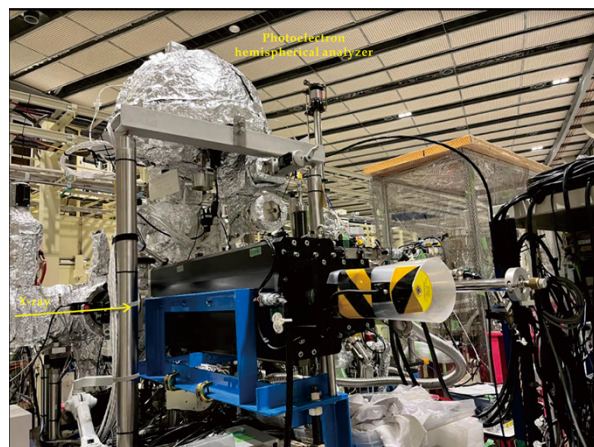


図6 BL25SU A ブランチに設置されている ARPES 装置。上流側に Wolter 集光ミラーが設置されており、マイクロビームが利用可能となっている。

が行われ、ユーザーの利便性が格段に向上した。

光電子顕微鏡 (PEEM) は、X 線照射位置から放出される光電子を静電レンズによって光電子像を拡大して取得する手法であるが、これを低エネルギー電子顕微鏡に組み込んだ装置が SPELEEM である^[20]。視野は 2~100 μm であり、PEEM 測定での空間分解能は 20 nm 程度を達成している。また、イメージングモード、回折モード、分散モードを切り替えながら測定することができるだけでなく、放射光 (円偏光軟 X 線)、電子線、水銀ランプの 3 種類の光源を目的に応じて選択可能となっている。これらをうまく組み合わせて利用することで、表面成長過程、相転移、吸着拡散、化学反応など、ナノサイエンスを軸とした基礎研究から応用研究に亘る幅広い利用に展開されている。本装置は非常に高い性能・機能を有しているが、老朽化が顕著であるため、今後はビームライン再編計画と併せて後継機の検討を進める必要がある。

また、光電子回折装置には、阻止電場型アナライザー (RFA) が導入されており、高いエネルギー分解能 ($E/\Delta E = 1,000$) でかつ大きな光電子取り込み角 ($\pm 49^\circ$) で高効率・高分解能の光電子ホログラフィー測定が可能であり、化学状態を分離した局所構造解析に利用されている^[21]。

B ブランチの軟 X 線 MCD 装置は、電磁石によって最大 1.9 T の磁場が発生可能となっており、また温度制御が 10~670 K で可能なクライオスタットが整備されている (図 7)。MCD は円偏光ヘリシティの切替

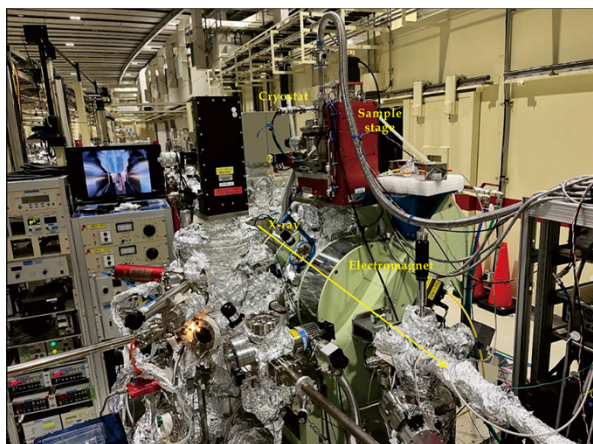


図 7 BL25SU B ブランチに設置されている電磁石軟 X 線 MCD 測定装置。ヘリウムフロー型冷凍機およびその駆動機構が利用可能である。また、SDD による PFY 測定も可能となっている。

に伴う信号強度の差分を検出する手法であるため、キッカー電磁石によって 0.1~10 Hz の円偏光ヘリシティ切替による測定を行うが、全電子収量 (TEY) 法、部分蛍光収量 (PFY) 法、および透過法という多彩な信号検出モードを、試料形態に合わせて選択することができる^[18]。また、その下流位置に設置されている走査型軟 X 線 MCD 顕微鏡装置は、FZP による 100 nm 集光ビームを用いた走査型 XAS/MCD イメージングを行うことができる。本装置の特長は、透過法だけでなく TFY 法での利用が可能で、最大磁場が超伝導磁石によって 8 T 印加可能であることから、他施設と比較してもユニークな装置であるといえる^[22]。しかしながら、本装置は 2022 年度をもって東北放射光施設 NanoTerasu へ移管され、現在は SPRing-8-II アップグレードを見据えた後継機の製作を開始している状況である。

3.2. 軟 X 線光化学ビームライン BL27SU

BL27SU は、8 の字アンジュレータ光源性能を活かし、水平・垂直直線偏光の選択とともに、異なるエネルギー領域で利用可能な 2 つのブランチを有している。一つは、2.1 keV 以上の高エネルギー領域の軟 X 線が利用可能な B ブランチ、もう一つは 2.2 keV 以下の軟 X 線が利用可能な C ブランチである。このビームラインの特長は、SPRing-8 の軟 X 線ビームラインの中でも、差動排気や真空窓を使用することで、試料環境として大気圧 (ヘリウム) から高真空条件まで利用可能なことである^[23, 24]。その結果、軟 X 線分光ビームラインとしては珍しく、実環境条件での物質・材料に含まれる軽元素の化学状態や電子状態の分析が可能となっており、希薄試料、大気圧環境下、循環型溶液セルを用いた液体試料などを対象とする、地球惑星・環境化学、有機化学、触媒化学、電気化学など、幅広い分野で利用されている。

B ブランチでは、Si(111)チャンネルカット結晶分光器を利用することで、2.1~3.3 keV の単色軟 X 線が利用可能となっている。ここでは、主として SDD を利用した PFY 法による希薄試料の軟 X 線 XAFS 測定、軽元素の蛍光 X 線 (XRF) 分析および元素分布マッピング、ならびに 2 枚の非球面鏡による 15 μm 集光ビームを用いた走査型軟 X 線顕微分光測定が可能

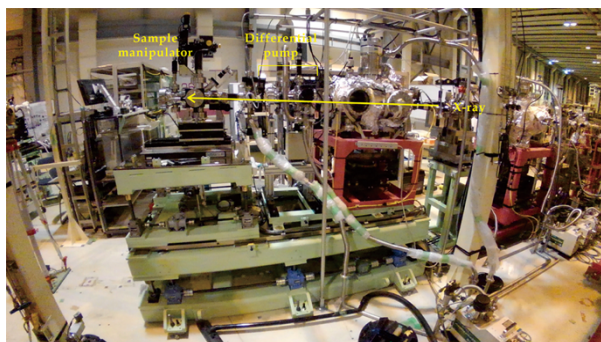


図8 BL27SU B ブランチに設置されている軟 X 線 XAFS 測定装置の外観。試料位置の上流側には、大気圧環境下での測定を実現するための差動排気システムが設置されている。

となっている (図8)。また、テンドーX線領域の高いコヒーレントフラックスを利用したタイコグラフィ分光測定の開発も行われており、空間分解能 50 nm を達成している^[25]。この手法開発は、NanoTerasu などの極低エミッタンス光源において威力を発揮するものと期待される。

C ブランチでは、3 種類の不等間隔刻線回折格子を用いた回折格子型分光器によって、0.17~2.2 keV の軟 X 線が利用可能である。3 つの実験ステーション C1、C2、および C3 がタンデムに配置されているが、最上流の C1 ステーションでは、比較的大きなビームサイズ (> 200 μm) での汎用型軟 X 線 XAFS 測定 (図9)^[26]、C2 ステーションでは軟 X 線 XRF 分析 (主に、深さ分解吸収分光法^[27]) が行われている。また、最下流の C3 ステーションでは、円筒鏡によって集光された縦 15 μm 程度のビームが利用可能である。水平方向はスリットで切り出すことで 30 μm 程度のビームが利用可能となっている。ここでは、主として差動排気を利用した大気圧環境下軟 X 線 XAFS^[24]、走査型軟 X 線顕微鏡 (SXM) による軽元素の顕微分光 XAFS、ならびに軟 X 線発光分光装置による価電子帯の電子状態観測が行われている。それぞれの装置は、それぞれの手法を利用する際に配置され調整されている。ユーザーニーズへの対応や測定のスループット向上を目指し、結像光学系によるイメージング開発も進められている^[28]。また、走査型イメージングについては、ビームライン老朽化を含め集光光学系に課題が残されており、今後は実験装置の常設化と併せ、試料への放射線ダメージの問題を検討した上での集光光

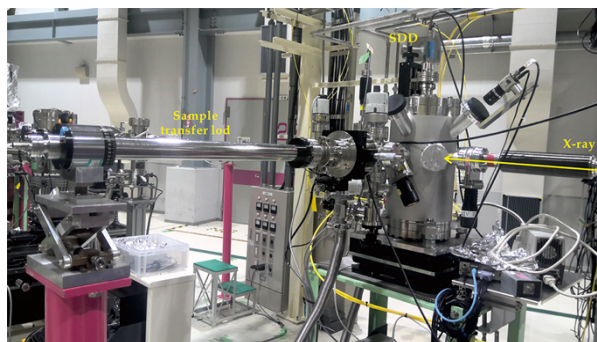


図9 BL27SU C ブランチに設置されている汎用型軟 X 線 XAFS 測定装置の外観。

学系の選定・導入が課題となっている。

3.3. 理研 物質科学 III ビームライン BL17SU

BL17SU は、ヘリカル 8 アンジュレータを光源とする軟 X 線ビームランで、不等間隔刻線平面回折格子分光器によって、水平偏光および左右円偏光を 0.23~2.15 keV、垂直偏光を 0.14~2.15 keV で利用可能である。エネルギー分解は $E/\Delta E > 8,000 \sim 10,000$ 、ビームサイズは試料位置で水平 30 μm 、垂直 10 μm となっている。また、ビームラインは 2 つのブランチ (A および B) から構成されており、本チームでは共用枠 (最大 20%) のユーザー利用に対し、A ブランチの走査型軟 X 線蛍光顕微鏡と B ブランチの静電レンズ型光電子顕微鏡 (PEEM) 装置に限定して、ユーザー利用のサポートを行っている。

4. 今後の展開

SPring-8 の供用開始からすでに 26 年が経過し、加速器やビームラインの老朽化が進行している。個々のビームラインに関しては、様々なプロジェクト研究の参入や理化学研究所による高性能化案件によって装置や手法は進化している。一方で、分光やイメージング、回折の各手法の複合化による高度計測手法の多角化が進められており、同じチームや推進室内だけでなく、他の推進室との連携も重要になってきている。もちろん、他放射光施設の動向も注視する必要がある。

他方で、SPring-8-II アップグレード計画が具現化する中、現在、ビームライン側ではその光源性能を最大限に活かすための再編・改造・高度化が着々と進めら

れている。本チームの管轄するビームラインでは、その先陣を切って BL39XU のアップグレードが今まさに進行しており、光学系の整備と最適化、および複雑化した装置・手法の整理や再編が進められている。ユーザーからのニーズは時代とともに変化しているため、そのニーズに対応しつつ未来を見据えたアップグレードが必要となっている。軟 X 線から硬 X 線領域に亘るエネルギー領域での分光手法の高度化を進めるだけでなく、必要とされるその他の回折やイメージング手法をうまく取り込むことで、社会ニーズに求められる課題解決に向けた放射光利用が可能となるだろう。

現在、分光推進室・動的分光イメージングチーム管轄のビームラインに求められている高度化は、ナノからミリに亘るマルチスケールな計測手法の確立、および時間軸の強化である。前者は、測定技術の面だけでなく解析技術の面においても、散乱・イメージング推進室の顕微・動的画像計測チームとの連携は欠かせない。後者は、XFEL (SACLA) 光源との棲み分けが必要であり、対象は高繰り返し計測が可能な系やマイクロ秒からナノ秒オーダーの分光計測が主体となるであろう。分光イメージング計測では、エネルギー軸の掃引が必要であるため、これらの高度化を推進するには様々な開発が必要となってくる。これはアンジュレータ光源のビームラインでは、今後、必要不可欠なものとなるだろう。その先駆的なビームラインの候補である BL37XU のアップグレードの議論を進めていくのが喫緊の課題である。軟 X 線ビームライン群についても、装置の再配置と併せて高度化を推進し、光源・光学系を含めたアップグレードについての検討を進めていく必要がある。

また、近い将来、これらの分光計測の自動化や遠隔実験が必要不可欠になると思われる。ビームライン・アップグレードに伴う計測装置の高度化や計測のスループット向上の実現で、限定されたビームタイムの中で最大限の成果を創出することが求められる。加えて、高度計測においてヒューマン・エラーによるトラブルを最小限に抑える上でも、自動化は必要不可欠なものとなるだろう。人的資源の確保が難しい昨今で、光学系や実験装置の調整の自動化などスタッフの省力化を実現し、研究開発に費やす時間を確保すること

も計測手法の先鋭化にとっては重要なことである。さらには、昨今のコロナ禍といったパンデミック再来の可能性を考慮し、遠隔実験の実現とそれを安全・安心で実施するための仕組みづくりも今後の課題といえる。

本稿を執筆するにあたり、動的分光イメージングチームのメンバーから有用な情報を提供いただきました。ここに感謝申し上げます。

参考文献

- [1] 伊藤正久, 早川慎二郎, 中井泉: SPing-8/SACLA 利用者情報誌 **1** (1996) 36-40.
- [2] 後藤俊治, 竹下邦和, 早川慎二郎, 石川哲也: SPing-8/SACLA 利用者情報誌 **6** (2001) 193-197.
- [3] 鈴木基寛, 寺田靖子, 大橋治彦, 河村直己, 水牧仁一朗, 他: SPing-8/SACLA 利用者情報誌 **16** (2011) 201-209.
- [4] K. Nitta, H. Suga and O. Sekizawa: *Rad. Phys. Chem.* **211** (2023) 111028.
- [5] Y. Kimura, A. Tomura, M. Fakkao, T. Nakamura, N. Ishiguro, et al.: *J. Phys. Chem. Lett.* **11** (2020) 3629-3636.
- [6] 新田清文, 寺田靖子: SPing-8/SACLA Annual Report **FY2016** (2017) 70.
- [7] N. Kawamura, N. Ishimatsu and H. Maruyama: *J. Synchrotron Rad.* **16** (2009) 730-736.
- [8] K. Matsubayashi, T. Hirayama, T. Yamashita, S. Ohara, N. Kawamura, et al.: *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015) 086401.
- [9] N. Kikuchi, K. Sato, S. Kikuchi, S. Okamoto, T. Shimatsu, et al.: *J. Appl. Phys.* **126** (2019) 083908.
- [10] N. Kawamura: *SPing-8/SACLA Research Frontiers* **2020** (2021) 114-115.
- [11] K. Hämäläinen, D. P. Siddons, J. B. Hastings and L. E. Berman: *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991) 2850-2853.
- [12] R. Konagaya, N. Kawamura, A. Yamaguchi and Y. Takahashi: *Chem. Lett.* **50** (2021) 1570-1572.
- [13] M. Suzuki, H. Yumoto, T. Koyama, H. Yamazaki, T. Takeuchi, et al.: *Synchrotron Rad. News* **33** (2020) 4-11.
- [14] M. Suzuki, K.-J. Kim, S. Kim, H. Yoshikawa, T. Tono, et al.: *Appl. Phys. Express* **11** (2018) 036601.
- [15] 宇留賀朋哉, 関澤央輝, 唯美津木, 横山利彦, 岩澤庸裕: SPing-8/SACLA 利用者情報誌 **18** (2013) 14-17.

- [16] 中村哲也、小谷佳範、高田昌樹、仙波泰徳、大橋治彦、他: SPring-8/SACLA 利用者情報誌 **19** (2014) 102-105.
- [17] T. Tanaka and H. Kitamura: *Nucl. Instr. Meth. A* **659** (2011) 537-542.
- [18] 中村哲也、室隆桂之、大河内拓雄、小谷佳範、辻成希、他: SPring-8/SACLA 利用成果集 Section C **3** (2015) 186-200.
- [19] Y. Senba, H. Kishimoto, Y. Takeo, H. Yumoto, T. Koyama, *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **27** (2020) 1103-1107.
- [20] 郭方准、小林啓介、木下豊彦: 表面科学 **26** (2005) 460-467.
- [21] T. Muro, T. Ohkochi, Y. Kato, Y. Izumi, S. Fukami, *et al.*: *Rev. Sci. Instrum.* **88** (2017) 123106.
- [22] Y. Kotani, Y. Senba, K. Toyoki, D. Billington, H. Okazaki, *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **25** (2018) 1444-1449.
- [23] Y. Tamenori: *J. Synchrotron Rad.* **17** (2010) 243-249.
- [24] Y. Tamenori, *J. Synchrotron Rad.* **20** (2013) 419-425.
- [25] M. Abe, F. Kaneko, N. Ishiguro, T. Kudo, T. Matsumoto, *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **28** (2021) 1610-1615.
- [26] Y. Tamenori, M. Morita, and T. Nakamura: *J. Synchrotron Rad.* **18** (2011) 747-752.
- [27] 鶴田一樹、為則雄祐: SPring-8/SACLA 利用成果集 Section A **10** (2022) 127-131.
- [28] K. Nitta, H. Suga, K. Yamazoe and O. Sekizawa: SPring-8/SACLA Annual Report **FY2021** (2022) 56-57.

河村 直己 KAWAMURA Naomi

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

筑波大学 数理物質系物理学域 エネルギー物質科学研究センター

西堀 英治

1. SPring-8 シンポジウム 2023

SPring-8 シンポジウム 2023 は、2023 年 9 月 26 日 (火) と 27 日 (水) の 2 日間、SPRUC 代表機関である大阪大学の大阪大学会館にて対面とオンライン (配信のみ) のハイブリッドにより開催されました。今年度は、大阪大学にホストをお願いしました。コロナ禍で先が読めない中、早い段階で同大学での開催を承諾いただき、入念な準備と当日の運営を担当いただいた大阪大学関山先生、中川先生を始めとする実行委員の皆様へ感謝の意を表します。詳細については杉本行事幹事による利用者情報誌の報告を参照してください。現場の様子と、私が感じた点について記述します。講演はすべて大阪大学会館講堂で、ポスターはアセンブリーホールで行われました。会場には少なくとも常時、100 名を超える参加者があったと思います。今回のシンポジウムでは、今年の 5 月頃に急に話が持ち上がってきた SPring-8-II に関する情報を施設報告に盛り込んだため、将来展望を考える形で全体が始まりました。各研究会からのセッションでは、アクティブな研究会が APS や ESRF の利用の様子を伝えるなど、ユーザーの中では国際的な施設の利用も始まっていることがうかがえました。

初日の阪大ビームラインのセッション、2 日目の大阪ミラーのセッション、パネルディスカッションでは、大阪大学と SPring-8 との緊密な連携の様子が良く伝わってきました。光源から測定した後のデータ解析、解釈まで含めた先端研究が大阪大学を中心に進められているという印象を受けました。

最も印象に残ったのは、ポスターセッションの賑わいぶりです。SPRUC 代表機関会議を終えて、階段を降りると、多くの人たちが活発な議論を酌み交わす様子が目に入ってきました。各ポスターの前や、横のス

ペースを使って、施設研究者とユーザー、ユーザーとユーザー、施設研究者と施設研究者が活発な議論を交わしている姿を見て、対面の現地開催を実施してよかったと切に思いました。今後の SPring-8 シンポジウムも対面で、代表機関をホストにして開催する予定です。詳細が決まり次第皆様に報告します。

2. SPring-8 秋の学校

「SPring-8 秋の学校」は、今年は 9 月 10 日 (日) から 13 日 (水) の日程で開催されました。定員 80 名のところ 76 名の参加者がありました。そのうち企業から 15 名の参加がありました。今回参加者を見て思ったことは、大学 3 年生、4 年生の参加者が多いということです。現在の大学 3 年生、4 年生は入学当初からコロナ禍でオンライン講義を受けてきた学年になります。こうした彼らが数多く SPring-8 に興味を持ってくれたことをうれしく思います。参加者の分布として北海道大学や東北大学など遠方からの参加も例年より多かった気がします。これは来年度より仙台で NanoTerasu が稼働することに関連しているかもしれません。今年度は久しぶりに懇親会も開催しました。参加者の評判は上々だったようです。担当の松村行事幹事を始め JASRI の実行委員の皆様、基礎講義、グループ講習を担当いただいた SPRUC 研究会の皆様へ感謝いたします。詳細については、松村行事幹事の利用者情報誌の報告をご参照ください。

西堀 英治 NISHIBORI Eiji

筑波大学 数理物質系物理学域

エネルギー物質科学研究センター

〒305-8571 茨城県つくば市天王台 1-1-1

TEL : 029-853-6118

e-mail : nishibori.eiji.ga@u.tsukuba.ac.jp

SPring-8/SACLA 利用者情報 編集委員会

委員長	木村 滋	利用推進部
委 員	池本 夕佳	分光推進室
	大和田成起	XFEL 利用研究推進室
	工藤 統吾	ビームライン技術推進室
	重松 秀樹	構造生物学推進室
	竹内 晃久	散乱・イメージング推進室
	田村 和宏	加速器部門
	辻本 繁樹	利用推進部
	筒井 智嗣	回折・散乱推進室
	南後恵理子	SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC)
		編集幹事 (東北大学)
	西野 玄記	情報技術推進室
	福井 宏之	精密分光推進室
	古川 聖	企画室
	本間 徹生	産業利用・産学連携推進室
	柳生 貴子	利用推進部

(以上、敬称略五十音順)

事務局	富松 亮介	利用推進部
	岡澤 貴裕	利用推進部
	青木 智子	利用推進部

SPring-8/SACLA 利用者情報

Vol.28 No.4 Autumn 2023

SPring-8/SACLA Information

発行日 2023 年 11 月 15 日

編 集 SPring-8/SACLA 利用者情報編集委員会

発行所 公益財団法人高輝度光科学研究センター
TEL 0791-58-0961 FAX 0791-58-0965

(禁無断転載)



JASRI

公益財団法人 高輝度光科学研究センター
Japan Synchrotron Radiation Research Institute

〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都^{こうと}1-1-1
[研究支援部] TEL 0791-58-0950 FAX 0791-58-0955
[利用推進部] TEL 0791-58-0961 FAX 0791-58-0965
e-mail : sp8jasri@spring8.or.jp
SPring-8 Web Site : <http://www.spring8.or.jp/>