

# SPring-8/SACLA

INFORMATION 利用者情報



ISSN 1341-9668 SPring-8 Document D2024-004

**Vol.29 No.1**  
**Winter 2024**

## SPring-8/SACLA Information

### 目次 CONTENTS

理事長室から 今後に向けて JASRI の成すべきこと—JASRI Vision 2030—  
Message from President What JASRI should do for the future - JASRI Vision 2030 -

(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 ..... 1

### 1. 最近の研究から / FROM LATEST RESEARCH

(ひょうご Spring-8 賞 受賞)

紫外線と外力による毛髪のおねり発生機構の解明と髪用日焼け止めの開発

Hair Frizz Caused by the Combined Effect of Ultraviolet Rays and External Forces and Development of Sunscreen for Hair

花王株式会社 研究開発部門 解析科学研究所  
Kao Corporation, R&D - Core Technology, Analytical Science Research

田村 俊紘  
TAMURA Toshihiro ..... 2

電子の波動関数操作によりピコ秒以下の超高速で磁化制御を実現—テラヘルツ周波数帯で動作する低消費電力スピンドバイスに向けて—  
Sub-picosecond ultra-high speed magnetization control by wave-function engineering

東京大学 工学系研究科 電気系工学専攻 スピントロニクス学術連携研究教育センター  
The University of Tokyo, Department of Electrical Engineering and Information Systems, Graduate School of Engineering

レ デウック アイン  
Le Duc ANH  
小林 正起 田中 雅明  
KOBAYASHI Masaki TANAKA Masaaki ..... 6

XFEL と電子線による低分子有機化合物の微小結晶構造解析—二線源の特性を生かし、水素原子と電荷に関する情報を取得—  
XFEL and electron microcrystallography of small organic compounds -measuring charges and chemical bonds of hydrogen atoms using the two beam sources-

(国) 理化学研究所 放射光科学研究センター / 東北大学 多元物質科学研究所  
RIKEN, SPring-8 Center / Tohoku University IMRAM  
(国) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
RIKEN, SPring-8 Center

米倉 功治  
YONEKURA Koji  
高場 圭章  
TAKABA Kiyofumi  
眞木 さおり  
MAKI-YONEKURA Saori ..... 14

### 2. ビームライン・加速器 / BEAMLINES AND ACCELERATOR

実験制御用プログラム開発のモダン化とビームライン制御・データ収集・オンライン解析プラットフォーム: BL-774

Beamline control, data acquisition and online analysis platform, BL-774, for modernization of program development for beamline experiment control

(国) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
RIKEN, SPring-8 Center  
(公財) 高輝度光科学研究センター ビームライン技術推進室  
Beamline Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI  
(公財) 高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室 / (国) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
Diffraction and Scattering Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI/RIKEN, SPring-8 Center  
(公財) 高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室 / (国) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
XFEL Utilization Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI/RIKEN, SPring-8 Center

本村 幸治  
MOTOMURA Koji  
安田 伸広  
YASUDA Nobuhiro  
今井 康彦  
IMAI Yasuhiko  
中嶋 享  
NAKAJIMA Kyo  
城地 保昌  
JOTI Yasumasa ..... 19

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

244th ECS meeting 報告

Report on 244th Electrochemical Society (ECS)

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

渡辺 剛  
WATANABE Takeshi ..... 28

MRM2023/IUMRS-ICA2023 Ground meeting 報告

Report on MRM2023/IUMRS-ICA2023 Ground meeting

(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  
櫻井 吉晴  
SAKURAI Yoshiharu ..... 32

Conference report 10<sup>th</sup> Annual Ambient Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy Workshop

(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

Okkyun SEO ..... 37

NanoTerasu・SPring-8 合同シンポジウム報告

NanoTerasu/SPring-8 joint symposium

(公財) 高輝度光科学研究センター 企画室  
Planning Office, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI

大端 通  
OHATA Toru ..... 40



4. SPring-8/SACLA 通信 / SPring-8/SACLA COMMUNICATIONS			
登録機関による施設利用研究活動評価の実施について			
Review of Research Activities as Registered Institution for Facilities Use Promotion	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	.....	42
2024A 期 SACLA 利用研究課題の採択について			
The SACLA Public Proposals Approved for Beamtime in 2024A 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	.....	45
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	.....	47
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	.....	49
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	.....	53
専用ビームラインにおける評価・審査の結果について			
Review Results of Contract Beamlines	(公財) 高輝度光科学研究センター 利用推進部		
	User Administration Division, JASRI	.....	76
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 先端分光計測チーム			
Activity Reports - Advanced Spectroscopy Team, Spectroscopy Division, Center for Synchrotron Radiation Research	(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	片山 真祥	
	Spectroscopy Division, Center for Synchrotron Radiation Research, JASRI	KATAYAMA Misaki	.....
			82
5. 談話室・ユーザー便り / USER LOUNGE・LETTERS FROM USERS			
SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 四季報			
SPRUC Communications	SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 会長 / 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	西堀 英治	
	Faculty of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba	NISHIBORI Eiji	.....
			86
6. 告知板 / ANNOUNCEMENTS			
SPRUC 第 6 回 BLs アップグレード検討ワークショップ開催のご案内			.....
			88
SPRUC 6 <sup>th</sup> Workshop on BLs Upgrade			
SACLA Users' Meeting 2024			.....
			89

## 今後に向けて JASRI の成すべきこと —JASRI Vision 2030—

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、私達を取り巻く科学技術、社会、世界の変化は大きく、それに伴い新たに取り組むべき課題が現れた。脱炭素社会に向けた GX (グリーントランスフォーメーション)、AI 等の情報技術の急速な進展による DX (デジタルトランスフォーメーション)、エネルギー・半導体などのサプライチェーンの

リスクに対応する「経済安全保障」、少子高齢化によって必要性が高まる「若手研究人材の育成」等々である。

第 4 世代放射光施設に関しては、欧米ではアップグレードが、アジアでは新建設が進み、我が国では NanoTerasu が本年 4 月から稼働が始まる。SPring-8 においては、第 4 世代化 (SPring-8-II) に向けた高度化開発費が 2024 年度に認められた。いずれにおいても、JASRI に対する期待は大きい。放射光科学の人材宝庫である JASRI の強みを更に強化して、研究成果の最大化に向けて、役職員が一体となって取り組んでいきたい。以下に年頭挨拶で紹介した JASRI Vision 2030 の要点を記し、皆さんと共有したい。

### I. 安全で安心な研究環境と職場環境を創る。

研究・技術・事務の職員の総合力でその安全を確保することが大前提。まずは、放射線、高圧ガス、電気機器、化学薬品、交通安全等の物理的安全性。次には、DX 化に伴い大切な情報や技術を守る情報的安全性 (情報セキュリティ)。更には、共通の目標に向け、お互いに忌憚なく議論し、相互協力の精神で仕事に取り組むための土台である心理的安全性<sup>1)</sup>。相互信頼・相互尊重の姿勢を持って、役職員間のコミュニケーションを活性化し、個人力とチーム力を発揮できる安全で安心な研究環境と職場環境を創る。

II. 施設者と密な情報共有と信頼関係を構築し、第 4 世代放射光施設 (SPring-8-II・NanoTerasu) を核とした放射光研究をバランスよくリードする機関となる。

来年度末に共用を開始する NanoTerasu の登録機関に申請し、その審査が進行中。その採択を前提にして、必要な事柄を計画的に進め、研究・安全管理・事務の組織化など仙台での運営体制の構築を最重要事項の一つとして取り組み、NanoTerasu の登録機関としての業務運営の基盤を作る。研究開発力を磨きながら、両研究施設の安定運用と持続的な高度化の両方に確実に貢献し、加速器・ビームラインの研究開発と利用系の研究開発をバランスよく一体となって進める。

III. 多様化する利用者ニーズに的確に応える利用者支援とそれに向けた仕組みづくり。

利用者ニーズが多様化・高度化するなかで、利用者目線で的確に利用者ニーズを捉える利用者支援を、技術相談から成果創出まで見届けるという視点を持って、迅速・確実に行う。職員一人ひとりの主体的、自律的、積極的な取り組み、チーム力を発揮した支援を行う。更に、利用成果の価値の最大化につながる積極的な提案を含めた利用支援の高度化・総合化を目指す。第 4 世代放射光施設で可能になる新規研究テーマに関して、継続的に積極的な提案を行う。施設・設備の高度利用や利用者開拓のため、利用者コミュニティ (SPRUC、利用推進協など) と一体となった活動を行う。第 4 世代放射光施設の有する性能・能力に関して、ターゲットを明確にして分かり易く伝え、かつ、潜在的利用者の開拓にも繋がる戦略的広報を行う。

[1] 「理事長室から 心理的安全性—安心・安全な JASRI を目指して」

<https://user.spring8.or.jp/sp8info/?p=41052>

(ひょうご SPring-8 賞)

## 紫外線と外力による毛髪とうねり発生機構の解明と 髪用日焼け止めの開発

花王株式会社 研究開発部門 解析科学研究所  
田村 俊紘

### Abstract

頭髪の髪をめぐりあげた内側に比べて表層の髪は顕著にうねりが多く、美髪を損ない様々な髪悩みに繋がる原因となっている。頭髪表層には紫外線や外力といった複数の外的要因が影響しやすいことに着目し、うねり発生機構を調べた。分光的手法により毛髪内部の結合状態の経時変化を、マイクロビーム X 線散乱法により毛髪タンパク質の構造変化を詳細に解析した。その結果、紫外線の影響で切断された毛髪内部のジスルフィド結合が、外力の影響でひずんだ状態で再結合し、パーマに類似した機序でうねりが発生することが示唆された。ここでは X 線構造解析の内容について詳しく紹介する。

### 1. はじめに

毛髪一本一本の形状の不規則なうねりは、浮き毛、はね毛、フリッツ等とも呼ばれ、日々のヘアケアでは抜本的な解決は困難であり、日本だけでなくグローバル共通の深刻な髪悩みの一つになっている。うねりの原因としては、ヘアカラーやパーマなどの化学処理、ヘアアイロンやドライヤーによる熱、洗髪やブラッシング等によるダメージの影響が考えられており、これらは毛先方向に徐々に蓄積していく。一方で、頭髪の実態を改めて観察したところ、髪とうねりは必ずしも毛先のみにある訳ではなく、髪をめぐりあげた内側に比べて頭髪の“表層”で顕著にうねりが多いことを見出した (図 1)。うねりが頭髪表層に存在すると、頭髪の毛流れを乱して見た目や印象を損なうだけでなく、ぱさつきといった感触にまで影響するなど、様々な髪悩みの潜在的原因の一つとなり得る。そこで本研究では、頭髪表層におけるうねり発生の本質的なメカニズムを解明し、改善または予防するた



図 1 頭髪表層および内側から採集した毛髪一本一本の形状の違い。あらかじめ毛髪を水に十分に浸し、自然な状態で自然乾燥させて観察した。

めの技術を開発することを目指した。

本研究のこれまでの経緯として、頭髪の内側に比べて表層では紫外線 (UV) や熱、外力によるひずみの影響が大きいこと、日常生活レベルの UV や熱の影響を与えた後に毛髪をひずんだ状態で保持すると経時的にうねりが発生するが、UV や熱単独の影響ではうねりは発生しないことを確認している。毛髪に対する UV の影響については多数研究されており、その影響の一つとして、毛髪を構成するケラチンタンパク質のジスルフィド (SS) 結合が切断され、システイン酸が生成すること等が報告されている<sup>1,2)</sup>。一方で、我々は、UV の影響を受けた後の毛髪内部における経時変化に特に着目し、ラマンなどの種々の分光スペクトル測定により調べたところ、切断された SS 結合の一部が再結合することを見出した。つまり、UV の影響で SS 結合が切断されてから再結合するまでの過程において、外力の影響も加わるとひずんだ状態で再結合が進行し、うねりの発生に繋がると推察した (図 2)。

そこで本研究ではさらに、大型放射光施設 SPring-8 を利用した X 線構造解析を通じて、毛髪内部で複雑に

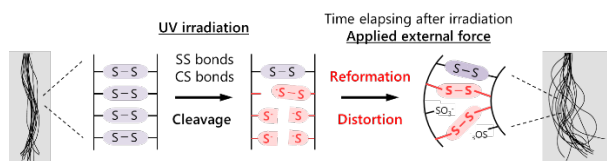


図 2 毛髪のマクロなうねり発生メカニズムの模式図。

層化しているケラチタンパク質について、UV および外力の影響下における構造変化を詳細に解析し、うねり発生のマイクロなメカニズムを調べた。

## 2. 実験

ソーラーシミュレーターを使用し、真夏の南中時程度の照度条件で人工太陽光を照射後、外力によるひずみを与えてうねりが生じた毛髪（曲率半径  $r = 4, 20 \text{ mm}$ ）を調製した。これを X 線透過用のスリットが入った  $5 \times 5 \text{ cm}$  四方のステンレス板に貼付し、測定試料とした。

うねり発生時に毛髪は曲がった形状に変化し、うねりの外側と内側では異なる方向に力がかかるため、結果として変形量に内外の「偏差」が生じる。したがって、うねりの発生に特徴的な変化を調べるためには、うねりの外側と内側を分けて測定する必要がある。そこで、SPring-8, BL24XU の A ブランチを利用して放射光 X 線を集光したマイクロビームを毛髪に照射し、照射位置を細かく変えながら X 線散乱測定を実施した。屈折レンズにより約  $3 \mu\text{m}$  の半値幅に絞ったマイクロビーム X 線を、太さ約  $90 \mu\text{m}$  の毛髪の軸に対して垂直に照射し、うねりの外側から内側に向けて照射位置を  $3 \mu\text{m}$  間隔で走査しながら、位置分解で広角/小角散乱 (WAXS/SAXS) 測定を実施した (図 3)。X 線のエネルギーは  $10 \text{ keV}$  であり、SAXS 測定の条件は、露光時間  $50 \text{ sec}$ 、ビーム半値幅  $3.0 \mu\text{m}$ 、試料-検出器間距

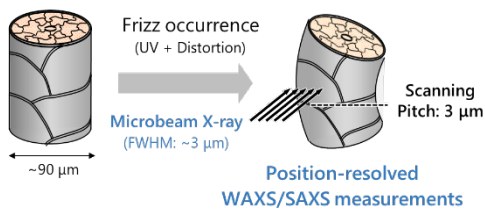


図 3 マイクロビーム X 線を使用した毛髪の位置分解 X 線散乱測定の模式図。

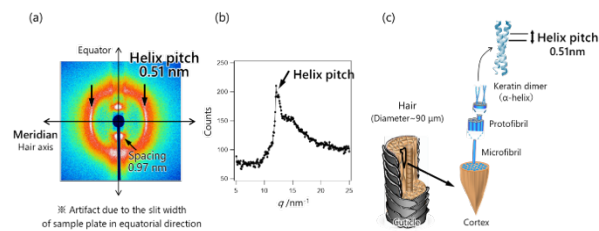


図 4 毛髪の典型的な (a) WAXS 像と (b) 子午線方向に積分した一次元プロファイル、(c) 子午線ピークに対応する  $\alpha$  ケラチンのらせんピッチ。

離  $627 \text{ mm}$ 、PILATUS 200K 検出器を使用、WAXS 測定の条件は、露光時間  $10 \text{ sec}$ 、ビーム半値幅  $3.4 \mu\text{m}$ 、試料-検出器間距離  $48 \text{ mm}$ 、フラットパネルディスプレイ (FPD) 検出器を使用した。

## 3. 結果と考察

WAXS 測定から得られた典型的な二次元散乱像を示す (図 4(a))。中心にはビームストッパーが設置しており、上下の赤道方向に沿って  $\alpha$  ケラチンダイマー間の Spacing  $\sim 0.97 \text{ nm}$  由来のスポット状の散乱が観測される。一方、うねり発生時には毛髪軸の法線方向に力がかかるため、これに対応する子午線方向に特に着目した。子午線方向に積分したプロファイル (図 4(b)) から、 $\alpha$  ケラチンのらせんピッチ  $\sim 0.51 \text{ nm}$ <sup>[3]</sup> (図 4(c)) を決定した。実際には、うねりの外側から内側にむけてマイクロビーム X 線の照射位置を走査しながら測定したため、規格化した照射位置に対してらせんピッチをプロットした (図 5)。その結果、コントロール (凡例: 白丸) に対して、太陽光照射および外力の影響でうねりが発生した場合、二次の近似曲線を比較すると、曲率半径  $20 \text{ mm}$  の弱いうねり (凡例: 灰色四角) では外側が伸長されてらせんピッチがやや増大する傾向、曲率半径  $4 \text{ mm}$  の強いうねり (凡例: 黒四角) では内側が圧縮されてピッチが少し低下する傾向がみられた。これは内外におけるマクロな変形の向きに対応はするが、データのばらつきを考慮しても、らせんピッチの変化は微小であることがわかった。

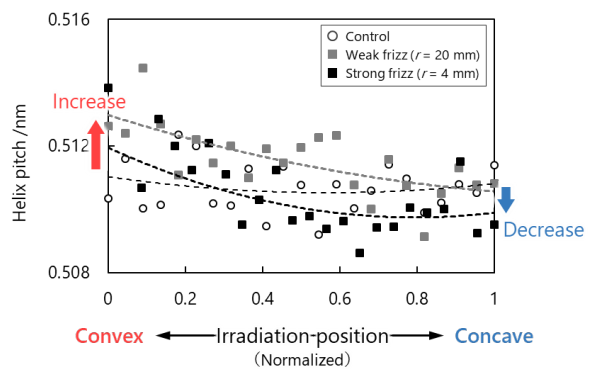


図 5 うねりの外側から内側に向けてマイクロビーム X 線を走査した位置分解 WAXS 測定から決定した  $\alpha$  ケラチンのらせんピッチ。毛髪ごとに太さ/走査距離が異なるため、うねりの外側を 0、内側を 1 のように規格化してプロットした。二次の近似曲線を表示。



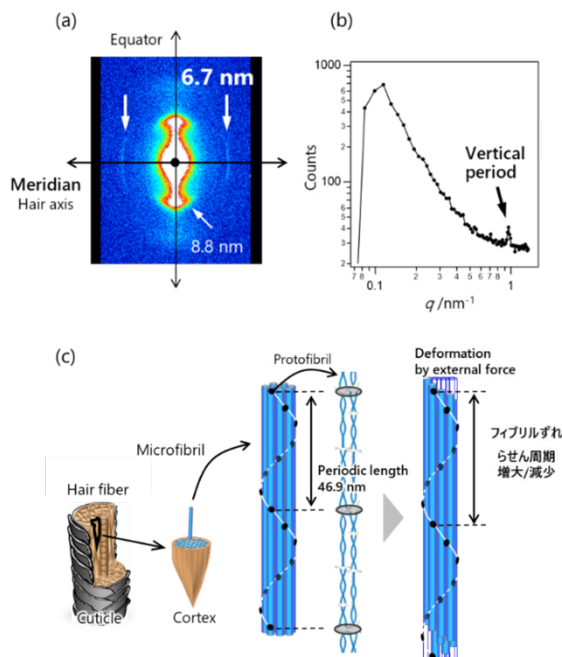


図6 (a) 毛髪の典型的な SAXS 像と(b) 子午線方向に積分した一次元プロファイル、(c) 子午線ピークに対応するマイクロフィブリルを構成するプロトフィブリルの軸方向のずれ。

次に、SAXS 測定から得られた典型的な二次元散乱像を示す (図 6(a))。赤道方向に沿ってマイクロフィブリル間の Spacing  $\sim 8.8$  nm 由来の散乱が観測される。一方、特に注目している子午線方向 (毛髪軸に対応) の積分プロファイル (図 6(b)) からわかるように、鋭い弓状の散乱 ( $Z_a \sim 6.7$  nm) が観測される。これは、毛髪を構成するマイクロフィブリル (周期長 46.9 nm の  $\alpha$  ケラチンダイマーから成るプロトフィブリル 7~8 本が軸方向にずれながら集合化したもの) の周期構造の 7 次散乱に相当し、フィブリルの軸方向のずれを反映する<sup>[4]</sup>。うねり発生時には毛髪軸の法線方向に力がかかるため、毛髪軸に対応する子午線方向の散乱からフィブリルの軸方向ずれ  $Z_a \sim 6.7$  nm を決定し、うねりの外側から内側の各照射位置に対してプロットした (図 7)。その結果、コントロール (凡例: 白丸) に対して、曲率半径 20 mm の弱いうねり (凡例: 灰色四角) では外側において  $Z_a$  が顕著に増大、曲率半径 4 mm の強いうねり (凡例: 黒四角) ではさらに内側の  $Z_a$  が顕著に低下した。外側および内側の各 3 点の平均と標準偏差を計算すると、外側における変化は  $6.51 \pm 0.02$  nm  $\rightarrow$   $6.61 \pm 0.02$  nm、内側における変化は  $6.58 \pm 0.02$  nm  $\rightarrow$   $6.504 \pm 0.015$  nm であった。すなわち、観測されたマイクロな変形量の

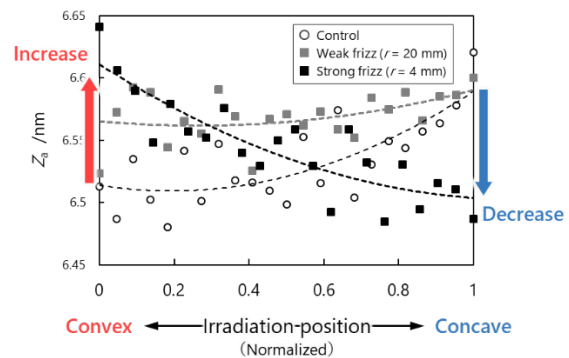


図7 マイクロビームによる位置分解 SAXS 測定から決定した各照射位置 (規格化) におけるフィブリルの軸方向のずれ。二次の近似曲線を表示。

内外偏差は 2.5% 程度であり、マクロな変形量の内外偏差 ( $\sim 2\%$ ) に匹敵することがわかった。

ケラチン繊維を構成するタンパク質の外力による構造変化については、繊維を直線的に最大数十%と大きく伸長した時の変化について主に研究されており、 $\alpha$  ケラチンが物理的に大きく伸長されることによるらせんピッチの増大や  $\beta$  転移<sup>[3,5]</sup>、 $\alpha$  ケラチンが集合化したマイクロフィブリルの細径化<sup>[6]</sup>などが報告されている。一方で、うねり発生時に毛髪は曲がった形状に変化し、その際の変形量はせいぜい数%以内の微小な曲げ変形と捉えることができる。今回、マイクロビーム X 線を使用した位置分解 WAXS/SAXS 測定の結果、 $\alpha$  ケラチンのらせんピッチは変化しにくく、マイクロフィブリルを構成するプロトフィブリル間が軸方向にずれる構造変化が支配的であることがわかった。 $\alpha$  ケラチンのヘリックス二次構造は分子内水素結合で安定化した剛直なものであり、うねり発生時の微小な曲げ変形では変化しにくいと考えられる。一方、マイクロフィブリルはさらに小さなプロトフィブリルが集合化した構造をとっており、プロトフィブリル同士の界面は比較的ひずみやすく、フィブリル同士がずれるように構造変化することでマクロな変形に連動していると考えられ、うねり発生 (微小な曲げ変形) に特徴的なタンパク質の構造変化と言える。

これまでの議論を踏まえ、うねり発生メカニズムの模式図をマイクロな描像まで含めて示す (図 8)。マイクロフィブリル近傍に分子間架橋として存在する SS 結合が UV の影響で切断され、その後、外力によりひずんだ状態で再結合することでうねりの発生に繋がると推察した。この時、SAXS で観測されたフィブリルのずれの大

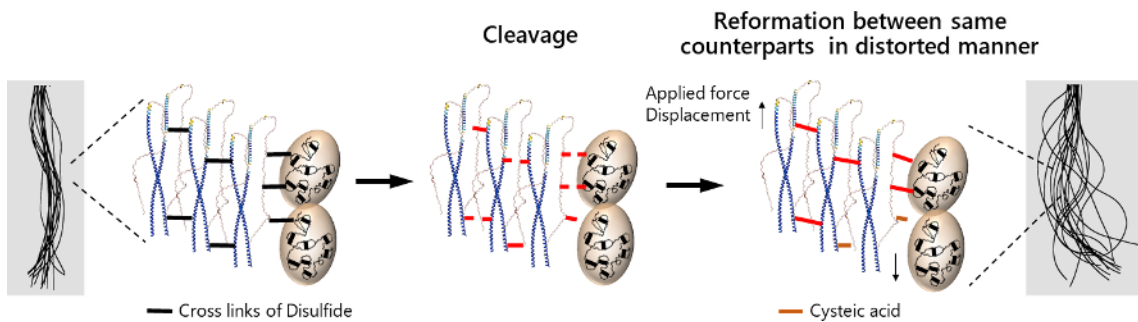


図8 毛髪のうちねり発生メカニズムの模式図。

きさはSS結合同士の間の距離よりも小さいため、切断されたSS結合が異なるカウンターパートと組み変わることは物理的に起こりにくく、同じカウンターパートとひずんだ状態で再結合する。このような機序は、還元剤によるSS結合の切断、望ましい形状にした状態で酸化剤による再結合を通じて毛髪形状を記憶させるパーマの原理に類似している。つまり、UVや熱、外力の影響を受けやすい頭髪の表層では、パーマに類似した機序で意図せず不規則な形状に固定され、うねりに繋がることが示唆された。

#### 4. まとめ

本研究では、実態観察から見出された頭髪の表層に特異的な毛髪一本一本の形状のうちねりに着目し、その原因と詳細な発生機序を解明することで、髪悩み解決のための効果的な手段と価値を提案することを目指した。UVと外力によるひずみの影響が複合化すると顕著にうねりが発生することを実証し、そのメカニズムを種々の分光的手法およびX線構造解析を駆使して調べた。その結果、毛髪内部のジスルフィド(SS)結合がUVの影響で切断され、その後の経時過程において、外力の影響でひずんだ状態で再結合するというパーマに類似した変化が起きていることが示唆され、SPring-8を活用することでうねりが発生する際の毛髪タンパク質の構造変化を分子レベルで明確にすることができた。

メカニズムを詳細に理解したことで、うねりが一旦発生するとパーマのように簡単には元に戻すことができないと考えられ、事後的な髪のダメージケアの限界が示唆された。そこで、製品開発においては予防の重要性を考慮し、予防意識が生活者に十分に定着した肌用の日焼け止めを改良して、髪にも使いやすいミスト状の日焼け止め(Biore UV アクアリッチアクアプロテクトミスト、

通称：瞬感ミストUV)を開発・全国発売した。うねり予防のためには髪のUVケアが重要であるという科学的知見に基づいた訴求を展開することで、生活者のケア意識の向上や髪のUVケア製品の市場活性化に貢献することができた。

#### 謝辞

本研究における放射光を使ったマイクロビームX線散乱測定は、BL24XU A ブランチを使用して実施しました(課題番号:2022A3076, 2022B3076)。測定のご支援を賜りました公益財団法人高輝度光科学研究センターの桑本滋生氏に感謝申し上げます。また、第21回ひょうごSPring-8賞の受賞に際して、ご関係の皆様へ心より感謝申し上げます。

#### 参考文献

- [1] C. M. Pande: *J. Soc. Cosmet. Chem.* **45** (1994) 257-268.
- [2] C. Dubief: *Cosmet. & Toilet.* **107** (1992) 95-102.
- [3] L. Kreplak, J. Doucet and F. Briki: *Biopolymers* **58** (2001) 526-533.
- [4] 新井幸三:ケラチン繊維の力学的性質を制御する階層構造の科学 (2014) 138.
- [5] 佐野則道、竹田晋吾、松井純爾、高野秀和、籠島靖: *光学* **39** (2010) 550-552.
- [6] L. Kreplak *et al.*: *Biophysical Journal* **82**(4) (2002) 2265-2274.

田村 俊紘 TAMURA Toshihiro

花王株式会社 研究開発部門 解析科学研究所  
〒131-8501 東京都墨田区文花2-1-3  
TEL: 03-5630-9425  
e-mail: tamura.toshihiro@kao.com



# 電子の波動関数操作によりピコ秒以下の超高速で磁化制御を実現 —テラヘルツ周波数帯で動作する低消費電力スピndeデバイスに向けて—

東京大学 工学系研究科 電気系工学専攻  
スピントロニクス学術連携研究教育センター  
レ デウック アイン、小林 正起、田中 雅明

## Abstract

強磁性体の磁化をサブピコ秒 (サブ ps) の時間スケールで制御することは、スピン自由度を利用する超高速電子デバイスの実現につながることで期待される。これまでの磁化 (スピン) ダイナミクス研究では、磁化の超高速制御は強磁性体の d 軌道または f 軌道に多数のキャリアを光学的に励起することで実現されてきたが、ゲート電圧によって実現することは極めて困難であった。本研究では、s (または p) 電子の空間分布を決める波動関数を光照射による内部電界によって制御し、キャリア密度を変化させる必要のないサブ ps で磁化操作する新しい方法 (波動関数工学と呼ぶ) を実証した。具体的には、強磁性半導体 (FMS) (In,Fe)As 超薄膜を含む III-V 族半導体量子井戸構造にフェムト秒 (fs) レーザパルス照射し、量子井戸中の 2 次元電子の波動関数が急速に移動するときに、600 fs という先行研究の 300 分の 1 の非常に短い時間で磁化が増大することを観測した。この波動関数制御法は、ゲート電界の印加でも実現できるため、本研究の結果は、次世代エレクトロニクスに向けて超高速で動作する磁気メモリやスピンを用いた情報処理を実現する新しい道を開くものである。

## 1. 研究背景

強磁性材料がもつ「不揮発性」「再構成可能」という特長と機能を「高速度演算」を担う半導体集積回路に融合することにより、高速かつ低消費電力で動作するスピン機能半導体デバイスを実現することが期待されている<sup>[1]</sup>。このようなスピndeデバイスの出力は強磁性体の磁化 (スピン) の向きで制御されるが、磁気ランダムアクセスメモリ (MRAM) を代表とする最も研究が進み実用化されているスピndeデバイスでは、磁化反転は速くても数ナノ秒 (ns) 程度であり、従来の半導体トランジスタ (MOSFET) の動作速度より一桁程度も遅い。また、MRAMでは磁化を反転させ書き込みを行うために電流駆動による磁化制御法が用いられているが、 $10^6 \sim 10^7$  A/cm<sup>2</sup> という極めて高い電流密度を必要とするため、大量の電力を消費する。将来のスピndeデバイスでは、これらの問題を解決し高速かつ低消費電力で磁化を制御する方法を確立する必要がある。特に、スピndeデバイスを現在の CMOS の動作速度を超える THz 周波数で動作できるようになることが望ましく<sup>[2]</sup>、そのためには強磁性体の磁化をサブピコ秒 (サブ ps) の時間スケールで制御することが必要になる。さらに、基礎研究の観

点から、このような超高速時間スケールでスピndeダイナミクス現象を調べることにより、交換相互作用やスピン軌道相互作用など、強磁性体におけるさまざまな磁気結合の基礎となるメカニズムを明らかにすることができると期待される。

これまでの超高速スピndeダイナミクスの研究では、磁性材料を励起するために強い強度を持つ fs パルスレーザーを照射し (この操作は光ポンピングと呼ばれる)、それと同期した別のレーザーパルスで磁化の変化を観察する (この操作はプローブと呼ばれる) ポンプ・アンド・プローブ法が一般的に使用されている。その際、電荷、スピン、格子振動 (フォノン) の間で非平衡な熱的相互作用と熱によらない相互作用が発生する<sup>[3]</sup>。これらの過程によって、消磁現象<sup>[4-13]</sup>、磁気歳差運動<sup>[14-19]</sup>、光照射による磁化反転<sup>[20-27]</sup>、磁化の増大<sup>[28, 29]</sup>、サブ格子間におけるスピndeランスマー<sup>[30-35]</sup>、磁気相転移<sup>[36-38]</sup>など、金属、半導体、絶縁体のさまざまな強磁性材料における超高速現象、ときにはサブ ps の磁化制御が報告されている。光は材料のスピン自由度とほとんど相互作用しないが、強い fs レーザパルスを照射すれば瞬時に大量の光キャリア (正孔、電子) を

強磁性材料中に生成することができる。これにより電子温度が上昇し、その結果、電荷-スピン、電子-フォノン、電子-マグノンの相互作用を介してスピン温度と格子温度が上昇し、磁化の変化が起こると考えられる<sup>[3]</sup>。レーザ光のエネルギーが物質中のバンド間遷移と共鳴すると、レーザパルス照射により直接 d 軌道または f 軌道のスピン偏極バンドにキャリアを励起し、瞬間的な磁化増大<sup>[29]</sup>またはサブ格子間のスピントランスファー<sup>[30-35]</sup>を引き起こす。場合によっては、レーザパルスの電場が材料の磁気特性に直接影響を与える<sup>[39-42]</sup>。これらの実証実験は、光で制御する超高速スピネレクトロニクスに応用できると期待される。一方、このような超高速スピンドイナミクスを、すでに確立している半導体デバイス技術および大規模集積化が可能な現在の CMOS 集積回路に実装することが強く望まれる。しかし、CMOS の基本動作であるゲート電圧による電界効果では、光ポンピングのようにキャリア密度を瞬時に大幅に変えたり、超高速の時間スケールでバンド間の遷移を引き起こしたりすることは不可能である。本研究では、波動関数工学と呼ばれるサブ ps 磁化操作の新しい手法を、強磁性半導体を含む半導体量子井戸ヘテロ構造を用いて実証することを目指した。この手法では、フェルミ準位  $E_F$  における s (または p) 電子の空間分布 (波動関数によって決める) のみを制御し、電子濃度の変化を必要としないため、ゲート電圧による制御操作と整合性があり、将来の超高速スピネレクトロニクスへの応用が期待される。

超高速スピンドイナミクスについてこれまで研究されてきた材料の中で、強磁性半導体 (Ferromagnetic semiconductor, FMS) は多くの重要な利点を有する。FMS は、通常の IV 族、III-V 族、または II-VI 族非磁性半導体に局在スピンの役割を果たす d 軌道または f 軌道を持つ磁性元素 (Mn, Fe, Eu など) を数%程度以上添加した混晶半導体である<sup>[43,44]</sup>。これらの局在スピン (d または f 電子) は、s-d (f) または p-d (f) 交換相互作用を介して遍歴キャリア (s または p 電子) と強く結合することによって、強磁性秩序が成立すると考えられる<sup>[45]</sup>。FMS では、強磁性金属とは異なり局在スピンとキャリアが明確に分離されているため、スピン-キャリア相互作用が引き起こす様々な物理現象を解

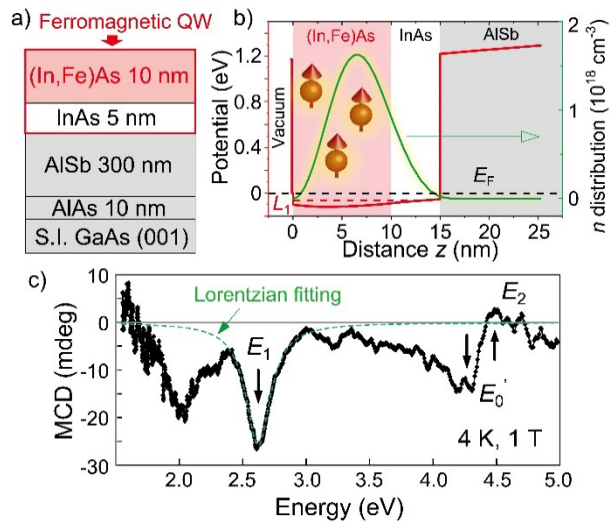


図1 (a) 本研究で用いた試料構造。(b) 試料における伝導帯のポテンシャルプロファイルと電子分布。(In,Fe)As (10 nm、Fe 濃度 8%) / InAs (5 nm) から成る二層構造は、電子キャリアの波動関数が二層全体に広がって表面量子井戸 (QW) を形成。(c) 4 K、1 T で測定した MCD スペクトル。InAs の特異点エネルギー  $E_1$  での光学遷移に対応する 2.626 eV で大きなピークを示す。図は文献[63]より改変転載。

明するという点で理想的な材料系である。さらに、FMS は比較的小さいキャリア密度 ( $10^{18} \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  程度) と長い Thomas-Fermi スクリーニング長により、レーザ光源を用いた光ポンピングまたはゲート電圧を用いた電気的なキャリア特性の制御が可能である。FMS の強磁性性を超高速で増大させた実験例として、光ポンピングによって p 型 (Ga,Mn)As の磁化を増大させた報告があり<sup>[28]</sup>、その時間スケールは 100 ps であった。(Ga,Mn)As の p-d 交換相互作用の大きさは約 1 eV であるため、ハイゼンベルクの不確定性原理によるキャリアの濃度変化に対する磁化変化の最短時間は 1 fs 程度と考えられ、上記の 100 ps という時間ははるかに長い。この磁化増大が遅い理由として、(Ga,Mn)As の磁化を変えるには  $E_F$  での正孔密度の大きな変化 ( $\sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ) が必要であり、これらの正孔は高いエネルギーバンドに光生成された光キャリアがゆっくり緩和した後に  $E_F$  位置の状態に供給されるためと考えられる。したがって、より高速で磁化を制御するためには、FMS におけるキャリアとスピンの相互作用の物理を明らかにして、キャリア特性をサブ ps で変調するための新しい手法を開発する必要がある。

さまざまな FMS の中で、III-V 族ベース FMS は最も広く研究され半導体デバイスとも整合性が良い。中でも我々が開発した(In,Fe)As は最初の電子誘起 n 型 FMS でありいくつかの有用な特長を有している<sup>[46-50]</sup>。(In,Fe)As の伝導帯下端に存在する電子キャリアは 40 nm もの長いコヒーレンス長を持つ<sup>[49]</sup>。したがって、図 1(a)に示すような薄い(In,Fe)As/InAs 二層構造は、電子キャリアの波動関数が二層全体に広がって表面量子井戸を形成する(図 1(b))。この二次元(2D)電子をもつ強磁性半導体量子井戸構造の重要な特徴の一つは、キュリー温度( $T_C$ )などの磁気特性が、波動関数と局在スピン(Fe)の間の空間的重なりによって決定されることである<sup>[49-51]</sup>。したがって、波動関数のピーク位置と形状を制御することにより、量子井戸に余分なキャリアを注入しなくても、(In,Fe)As/InAs 量子井戸の磁気特性を効果的に制御できる。波動関数工学と呼ばれるこの新しい手法は、キャリア蓄積プロセスがなく、量子井戸内で電子波動関数をわずか数ナノメートル移動させるだけであるため、消費電力が極めて低く<sup>[50]</sup>、動作速度が非常に速くなることが期待される。本研究では、この超高速波動関数工学が fs パルスレーザーを使用して実現可能であり、これにより(In,Fe)As/InAs 量子井戸の磁化がサブ ps の時間で増大することを示す。

## 2. 実験結果

本研究で用いる試料構造は、半絶縁 GaAs (001) 基板上に分子線エピタキシー法(Molecular Beam Epitaxy, MBE)を用いて成長した、表面から(In,Fe)As (10 nm、Fe 濃度 8%) /InAs (5 nm) /AlSb (300 nm) /AlAs (5 nm) /GaAs で構成される単結晶ヘテロ構造である(図 1(a))。図 1(b)に示すように、InAs/AlSb 界面の 1.3 eV の伝導帯オフセットと(In,Fe)As 表面の真空ポテンシャル(4.2 eV)がポテンシャル障壁の役割を果たし、電子キャリアを(In,Fe)As/InAs 二層構造から成る量子井戸に閉じ込める。(In,Fe)As/InAs 量子井戸の磁気特性を、可視光磁気円二色性(Magnetic circular dichroism, MCD)分光法を使用して評価した。低温(5 K)から様々な温度において(In,Fe)As/InAs 量子井戸の磁化曲線を反映する MCD 信号の磁場依存性(MCD-H 曲線)

の

ア

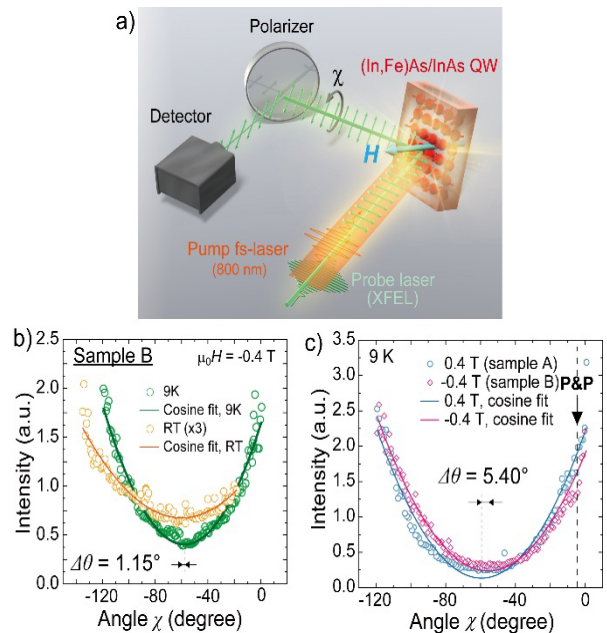


図 2 (a)測定系の概念図。(b)  $\mu_0 H = -0.4$  T を垂直に印加しながら 300K (オレンジ色の円) と 9K (緑色の円) でサンプル B について測定した強度  $I(\chi)$ 。(c) サンプル A と B について、両方とも 9K で測定された強度  $I(\chi)$  の比較。図は文献[63]より改変転載。

ロットプロットから、(In,Fe)As/InAs 量子井戸のキュリー温度( $T_C$ )は約 17 K であると見積もられる。図 1(c)に示す MCD スペクトルは、InAs の特異点エネルギー  $E_1$  での光学遷移に対応する 2.626 eV で大きなピークを示す。この  $E_1$  ピークは、バルク状態に近い厚い(In,Fe)As 試料のピーク(2.610 eV)から 0.016 eV だけ高いエネルギーの方にシフトしている。これは、(In,Fe)As/InAs 量子井戸における量子化によるバンドギャップの増大を反映している<sup>[49, 50]</sup>。

(In,Fe)As/InAs 量子井戸の磁化を調べるために、SACLA の直線偏光の軟 X 線自由電子レーザー(X-ray free electron laser, XFEL) ビームを使用して、Fe の M 吸収端と共鳴する 52 eV エネルギーで X 線磁気光学カー効果(XMOKE)測定を行った<sup>[52-54]</sup>。同じ試料の 2 枚のサンプル(A および B)を 2 つのネオジウム(Nd)磁石(磁場の大きさ  $\mu_0 H = 0.4$  T および  $-0.4$  T)上に接着し、He フロークライオスタットのコールドフィンガーに設置した。続いて図 2(a)に示すように、(In,Fe)As/InAs 量子井戸から反射された後の XFEL ビームのカー回転角  $\theta_k$  を、多層膜ミラーとマイクロチャンネルプレート(MCP)で構成される回転アナライザ



ーエリプソメーターによって検出した。多層膜ミラーと MCP は、サンプル軸に対して角度  $\chi$  だけ一緒に回転される。反射する XFEL ビームの強度  $I$  は  $I(\chi) \propto \cos^2(\theta_k - \chi)$  のように  $\chi$  の関数として変化するため、アナライザーと XFEL ビームの偏光面が平行/垂直のときに最大/最小に達する<sup>[54]</sup>。図 2(b)は、Nd 磁石から  $\mu_0 H = -0.4$  T を垂直に印加しながら 300 K (オレンジ色の丸) と 9 K (緑色の丸) でサンプル B について測定した強度  $I(\chi)$  を示しており、どちらの曲線も関数  $\cos^2(\theta_k - \chi)$  によくフィッティングできている。9 K での曲線は 300 K での曲線から  $1.15^\circ$  だけ右にシフトしている。これは、温度の低下に伴って (In,Fe)As/InAs 量子井戸の強磁性秩序が成立するため XFEL ビームのカー回転角  $\theta_k$  が増大することで理解できる。さらに、サンプル A と B について、両方とも 9 K で測定した強度  $I(\chi)$  を図 2(c) で比較している。サンプル A ( $\mu_0 H = 0.4$  T) の曲線は左に、サンプル B ( $\mu_0 H = -0.4$  T) の曲線は右にシフトし、それぞれ反対の磁化方向を持つことを反映している。2つの  $\theta_k$  値の差は  $5.40^\circ$  であり、そこから (In,Fe)As/InAs 磁化に対応する XFEL ビームのカー回転角は  $2.70^\circ$  であると見積もられる。磁場を反転することによって得られる  $\theta_k$  の変化は、温度を下げた場合に比べて 2 倍大きい。これらの結果は XMOKE 測定の有効性を示すものである。

(In,Fe)As/InAs 量子井戸のスピンドイナミクスを研究するために、ポンプ・アンド・プローブ測定を実施した。fs パルスレーザー (波長 793 nm、パルス幅 30 fs、エネルギー 169  $\mu$ J) を使用してフェルミ面近くの s、p 電子系を励起し、XFEL ビームを使用して Fe の局在スピンの応答を調べた。異なる光子エネルギーを持つ別々のポンプレーザー光源とプローブレーザー光源を利用することにより、(In,Fe)As/InAs 量子井戸におけるスピン・キャリア相互作用の超高速ダイナミクスを捉えることができる。時間分解測定では、回転アナライザーの角度  $\chi$  は  $5^\circ$  に固定し、温度は 9 K とした。図 2(c)の結果から、サンプル A と B において磁化  $\mathbf{M}$  が増大すると、 $I(\chi)$  曲線がそれぞれさらに左と右にシフトする。その結果、図 3(a)の挿入図に示すように、サンプル A の場合、磁化の向きに応じて強度  $I(\chi = 5^\circ)$  が増加する。図 3(a)の上部パネルに示す

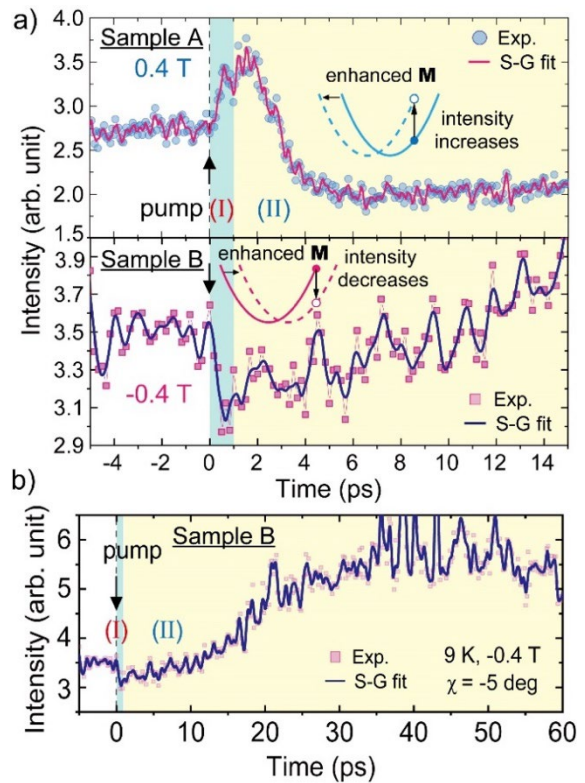


図 3 (a) (上)  $\mu_0 H = 0.4$  T と (下)  $\mu_0 H = -0.4$  T を垂直に印加したサンプル A と B を赤外レーザーパルスでポンプしたときの XFEL ビーム強度の時間変化。600 fs の時間スケールで瞬時に磁化が増大したことが分かった (領域 I)。 (b) サンプル B の反射した XFEL ビーム強度の時間変化をより広い範囲で示す図。測定温度は 9 K である。図は文献[63]より改変転載。

ように、赤外レーザーパルスでサンプル A をポンプすると、XFEL ビーム強度は 600 fs の時間スケールで瞬時に増加 (2.8 から 3.4) (領域 I) し、その次の数 ps で徐々に飽和してから減少した (領域 II)。これらの結果は、サンプル A の (In,Fe)As/InAs 量子井戸の磁化  $\mathbf{M}$  が 1 ps 未満で増大することを示している。比較のために、サンプル B についても同様の実験を行った。ここで、図 3(a)の下のパネルに示すように、 $\mathbf{M}$  は反対方向に向いている場合、XFEL ビーム強度は最初が 1 ps (領域 I) で 3.5 から 3 に急速に減少し、次の 60 ps で 5~6 に増加した後 120 ps でゆっくりと初期値に戻った (図 3(b)) を参照)。サンプル A と B の XFEL ビーム強度の変化の符号が反対になっていることから、その変化が実際に (In,Fe)As/InAs 量子井戸の磁化  $\mathbf{M}$  の増大から生じていることを示しており、ポンプレーザーパルスの光磁気効果に関する原因を除外でき

る。照射により、磁化  $M$  は 600 fs の超高速の時間スケールで増大し、その後平衡に戻る前に 40 ps にわたってゆっくりと減少する。この緩やかな消磁現象は、サンプル温度を一時的に上昇させるポンプレーザーパルスの熱効果によるものと考えられる。本研究で観測した (In,Fe)As/InAs 量子井戸の超高速磁化増大 (~600 fs) は、これまでに報告された強磁性半導体の磁化制御の中で最速の値である。

### 3. 超高速磁化増大の機構

次に、(In,Fe)As/InAs 量子井戸で観察された磁化増大の考えられるメカニズムについて考察する。キャリア誘起 FMS では、磁化増大の考えられる原因の 1 つは、フェルミ準位付近のキャリア密度 ((In,Fe)As の場合は n 型なので電子) の増加である。フォトンエネルギー 1.55 eV (波長 798 nm) の fs レーザパルスを照射すると、(In,Fe)As/InAs 量子井戸内に大量の光キャリア (電子と正孔) が瞬時に生成される。しかし、生成された光電子は伝導帯底部より 1 eV も高いバンド中に存在するため、伝導帯下端の直下に形成される Fe の不純物バンドの d 電子スピンの s-d 交換相互作用に直接関与することができない<sup>[48,55]</sup> (図 4(a)参照)。伝導帯下端までの光電子の緩和には、一般的には数十 ps が必要である<sup>[3]</sup>。したがって、光キャリア生成だけでは磁化  $M$  のサブ ps 増大を説明できない。さらに、フェルミ準位より上には少数スピンの Fe 関連不純物バンドしか存在せず<sup>[55]</sup>、これらの d 軌道不純物バンドへの電子の励起は、試料の磁気モーメントの減少につながると考えられる。これは明らかに実験観察と一致しない。一方、AISb バッファ層では  $\Gamma$  点でのバンドギャップ (2.2 eV) が大きいのでポンプレーザーでは光キャリアは生成されず、下層の AISb 層からの超拡散電流による機構<sup>[56-60]</sup>も否定される。

しかし、成長軸 ( $z$  軸) に沿った光キャリアの時間依存の分布により、(In,Fe)As/InAs 量子井戸のポテンシャルと 2D 電子の波動関数が変化し、その磁気特性が変化する可能性がある。ポンプレーザーパルスが照射されると、光照射により電子と正孔 (光電子、光正孔) が即座に生成され (~1 fs)、光照射直後では表面から基板側に向かって指数関数的に減少する分布を持つ (図 4(a)の右パネルを参照)。このとき、光電子  $N_{pe}(z)$  と

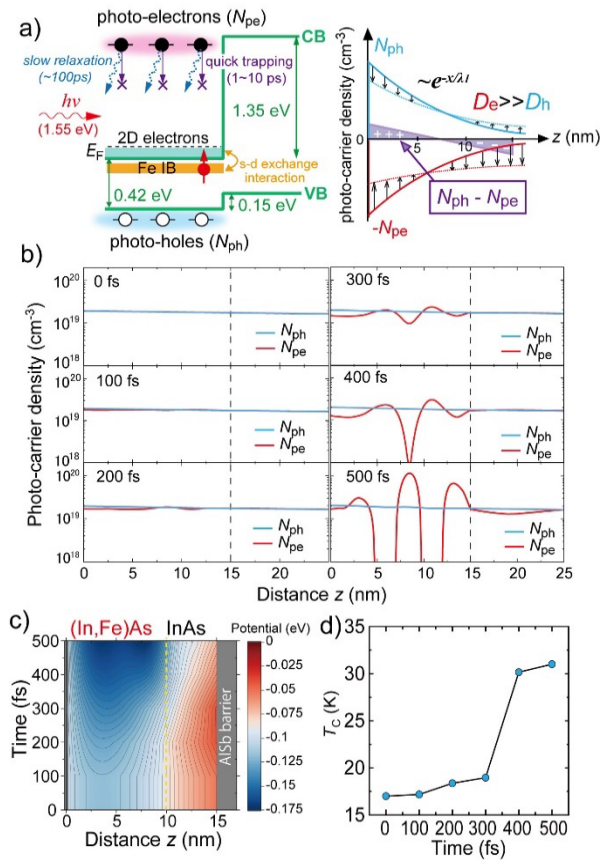


図 4 (a) (In,Fe)As/InAs 量子井戸にポンプ光が照射される時に生成される光キャリア (正孔、電子、左図) とその分布の時間変化 (右図) の概要。(b) 自己無撞着計算で再現した (In,Fe)As/InAs 量子井戸の光キャリア分布の時間変化。100 fs ごとのタイムステップで計算した。光照射により生成された電子の局所濃度  $N_{pe}(z,t)$  はすぐに AISb 側に拡散するが、光照射により生成された正孔の局所濃度  $N_{ph}(z,t)$  は計算した時間内ではほとんど変化しないため、光デンプー電場が形成される。(c) 量子井戸ポテンシャルが (In,Fe)As 層の中心で深くなり、2次元電子キャリアの濃度  $N_{2d}(z,t)$  の再分布を引き起こす。(d) 量子井戸の  $T_C$  (青丸) の時間変化を計算した結果。図は文献[63]より改変転載。

光正孔  $N_{ph}(z)$  の局所密度は等しいため全体的に光キャリアによる空間電荷が形成されない。次に、 $z$  軸に沿った密度勾配により、これらの光キャリアは基板側に向かって拡散し始める。ただし、光電子は、InAs 内での移動度が高く、ポンプレーザーによって励起される温度が高いため、光正孔よりも速く拡散する。その結果、表面にはより多くの光正孔が、基板側にはより多くの光電子が再分布することによって表面から基板側に向かう電界が時間の経過とともに急速に形成される。

これは、いわゆるフォトデンバー電場<sup>[61]</sup>であり、InAs<sup>[61,62]</sup>などの高移動度半導体でテラヘルツ電磁波を生成するために利用されている。(In,Fe)As/InAs 量子井戸では、このフォトデンバー電場が上部の(In,Fe)As 層に向かって 2D 電子波動関数を押し、波動関数と(In,Fe)As 層の重なりが大きくなるため、これが量子井戸の磁化の強化につながると考えられる。

上記のシナリオを確認するために、(In,Fe)As/InAs 量子井戸内の光キャリアと 2D 電子の時間依存分布の数値計算を行った（詳しい計算方法は論文[63]を参照されたい）。(In,Fe)As/InAs 量子井戸中には大量の Fe が添加されているため、(In,Fe)As の電子移動度は InAs より低く、通常 100 cm<sup>2</sup>/Vs 程度である<sup>[46]</sup>。したがって、光キャリアの散乱の性質により、光キャリアの移動度  $\mu$  が低いと仮定するのが現実的である。我々は光電子 ( $\mu_e = 2 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ) と光正孔 ( $\mu_h = 0.2 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ) の移動度は低いと仮定して、ポンプレーザーパルスに対する(In,Fe)As/InAs 量子井戸のポテンシャルと 2D 波動関数、および光キャリアの空間分布の 100 fs のタイムステップごとの応答を計算した。図 4(b)に示すように、光電子はすぐに AlSb 側に拡散するが、(In,Fe)As/InAs 界面および InAs/AlSb 界面での反射により局所濃度  $N_{pe}(z, \eta)$  が強く振動している。一方、光正孔の局所濃度  $N_{ph}(z, \eta)$  は計算した時間内ではほとんど変化しない。その結果、時間の経過とともに、光電子と光正孔の局所濃度の差が急速に発生するために、(In,Fe)As/InAs 量子井戸ポテンシャルは(In,Fe)As 層の中心で深くなり（図 4(c)を参照）、2次元電子キャリアの濃度  $N_{2D}(z, \eta)$  の再分布を引き起こす。この変化により(In,Fe)As 領域の局所的な 2D 電子キャリア濃度が増加し、これがキュリー温度の上昇の原因となったと考えられる。2D 電子波動関数を用いて、(In,Fe)As/InAs 量子井戸の  $T_c$  は次式で与えられる<sup>[49-51]</sup>。

$$T_c^{2D} = \frac{S(S+1) A_F^{2D} J_{sd}^2 m^*}{12 k_B \pi \hbar^2} N_{Fe} \sum_{E_j < E_F} \int_{(\text{In,Fe)As}} |\varphi_j(z)|^4 dz \quad \text{式 (1)}$$

ここで、 $S$  は Fe 原子のスピン角運動量 (= 5/2)、 $J_{sd}$  は s-d 交換相互作用定数、 $A_F^{2D} = 1.2$  は 2次元構造におけるストナー補正係数<sup>[64]</sup>、 $k_B$  は Boltzmann 係数、 $m^*$  は電子の有効質量、 $N_{Fe}$  は Fe 原子密度  $\phi_j(z)$  は占有量子化準位  $E_j$  の波動関数である。式 (1) の唯一の

フィッティングパラメーターは  $J_{sd}$  であり、これは s-d 交換相互作用エネルギーで決まる。図 4(d)に示すように、0.054 eV · nm<sup>3</sup> という妥当な  $J_{sd}$  (1 eV の s-d 交換相互作用エネルギー  $N_0 \alpha$  に相当)<sup>[48-50]</sup> を使用すると、(In,Fe)As/InAs 量子井戸の可視光 MCD の温度依存性から見積もられた  $T_c$  が定量的に再現された。特に電子が占有する量子化準位の数が増加したときに  $T_c$  が急増する。この結果は、全体的な電子波動関数の変化により、 $T_c$  が 17 K から 31 K へ増加することを明確に示している。これは、光キャリアの移動度が低い (0.2~2 Vs/cm<sup>2</sup>) と仮定しても、光ポンピングの最初の 500 fs で発生する磁化の増大が再現されたことを意味する。したがって、ここで我々が提案した波動関数の操作によって磁化が変化したというモデルにより、(In,Fe)As/InAs 量子井戸において観測されたサブ ps という超高速での磁化の増大を説明できたといえる。

#### 4. 結論と展望

磁性材料の磁化をサブ ps の超高速時間スケールで制御できることは、強磁性半導体量子井戸の顕著な特長である。(In,Fe)As/InAs から成る量子井戸中の 2D キャリア分布 (波動関数) と強磁性半導体(In,Fe)As 層との重なりを変えることにより超高速磁化制御が可能であることを、fs レーザ光を用いたポンプ・プローブ法により実証した。キャリアの波動関数を制御する方法は本研究で行った光ポンピングに限定されるものではなく、トランジスタ構造においてゲート電圧を印加することによって実行することもできる。この波動関数工学では、強磁性量子井戸中にキャリア濃度の変化を起こす必要がないため、材料とデバイスを適切に設計することでゲート容量  $C$  を可能な限り低減できる。したがって、 $CR$  定数 ( $R$  は配線抵抗) によって制限されるゲート動作速度はサブ ps にまで速くすることができる。本研究で実験的に示したように、スピナーキャリア相互作用による磁化制御時間は 1 ps より短いため、波動関数制御法を利用した強磁性の電氣的制御は半導体エレクトロニクスと整合性があり、将来的には超高速でスケラブルなスピントロニクスデバイスに応用できる可能性がある。



## 謝辞

本研究の実施に当たってご協力・議論いただいた松田巖、堀尾真史、鷺見寿秀、山本航平、武田崇仁、荒木恒星、岡野諒、久保田雄也、矢橋牧名、大和田成起の各氏に感謝する。この研究の一部は、科学研究費補助金 (19K21961、20H05650、23K17324)、科学技術振興機構 CREST (JPMJCR1777) および PRESTO (JPMJPR19LB)、UTECH-東京大学 FSI 研究助成プログラム、村田科学財団、およびスピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク (Spin-RNJ) の支援を受けた。XFEL 実験は、高輝度光科学研究センター (JASRI) の承認を得て、SACLA の BL1 で実施された (提案番号 2018A8064、2018B8022、2019A8001、2019B8060、2020A8063)。

## 参考文献

- [1] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma: *Rev. Mod. Phys.* **76** (2004) 323-410.
- [2] K. A. Mistry: *2007 IEEE Intl. Electron Devices Meeting.* (2007) 247-250.
- [3] A. Kirilyuk, A. V. Kimel, and T. Rasing: *Rev. Mod. Phys.* **82** (2010) 2731-2784.
- [4] E. Beaurepaire, J. -C. Merle, A. Daunois and J. -Y. Bigot: *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 4250.
- [5] J. Hohlfeld, E. Matthias, R. Knorren and K. H. Bennemann: *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997) 4861.
- [6] A. Scholl, L. Baumgarten, R. Jacquemin and W. Eberhardt: *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997) 5146.
- [7] B. Koopmans, M. van Kampen, J. T. Kohlhepp, and W. J. M. de Jonge: *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 844.
- [8] H.-S. Rhie, H. A. Dürr, and W. Eberhardt: *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003) 247201.
- [9] M. Lisowski, P. A. Loukakos, A. Melnikov, I. Radu, L. Ungureanu *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 137402.
- [10] M. Cinchetti, M. Sanchez Albaneda, D. Hoffmann, T. Roth, J. P. Wustenberg *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 177201.
- [11] C. Stamm, T. Kachel, N. Pontius, R. Mitzner, T. Quast *et al.*: *Nature Mater.* **6** (2007) 740.
- [12] E. Carpene, E. Mancini, C. Dallera, M. Brenna, E. Puppin *et al.*: *Phys. Rev. B* **78** (2008) 174422.
- [13] E. A. Mashkovich, K.A. Grishunin, H. MuneKata, & A.V. Kimel: *Appl. Phys. Lett.* **117** (2020) 122406.
- [14] G. Ju, A. V. Nurmikko, R. F. Farrow, R. F. Marks, M. J. Carey *et al.*: *Phys. Rev. B* **58** (1998) R11857.
- [15] L. H. F. Andrade, A. Laraoui, M. Vomir, D. Muller, J.-P. Stoquert *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 127401.
- [16] D. M. Wang, Y. H. Ren, X. Liu, J. K. Furdyna, M. Grimsditch *et al.*: *Phys. Rev. B* **75** (2007) 233308.
- [17] Y. Hashimoto, S. Kobayashi and H. MuneKata: *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 067202.
- [18] E. Rozkotová, P. Němec, P. Horodyská, D. Sprinzl, F. Trojánek *et al.*: *Appl. Phys. Lett.* **92** (2008) 122507.
- [19] J. Qi, Y. Xu, A. Steigerwald, X. Liu, J. K. Furdyna *et al.*: *Phys. Rev. B* **79** (2009) 085304.
- [20] Y. Yang, R. B. Wilson, J. Gorchon, C. -H. Lambert, S. Salahuddin *et al.*: *Sci. Adv.* **3** (2017) e1603117.
- [21] C. D. Stanciu, F. Hansteen, A. V. Kimel, A. Kirilyuk, A. Tsukamoto *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **99** (2007) 047601.
- [22] S. Mangin, M. Gottwald, C-H. Lambert, D. Steil, V. Uhlir *et al.*: *Nat. Mater.* **13** (2014) 286-292.
- [23] C-H. Lambert, S. Mangin, B. S. D. Ch. S. Varaprasad, Y. K. Takahashi, M. Hehn *et al.*: *Science* **345** (2014) 1337-1340.
- [24] C. Banerjee, N. Teichert, K. E. Siewierska, Z. Geraci, G. Y. P. Atcheson *et al.*: *Nat. Commun.* **11** (2020) 1-6.
- [25] I. Radu, K. Vahaplar, C. Stamm, T. Kachel, N. Pontius *et al.*: *Nature* **472** (2011) 205-208.
- [26] T. A. Ostler, J. Barker, R.F.L. Evans, R.W. Chantrell, U. Atxitia *et al.*: *Nat. Commun.* **3** (2012) 666.
- [27] K. Yamamoto, S. El Moussaoui, Y. Hirata, S. Yamamoto, Y. Kubota *et al.*: *Appl. Phys. Lett.* **116** (2020) 172406.
- [28] J. Wang, I. Cotoros, K. M. Dani, X. Liu, J. K. Furdyna, and D. S. Chemla: *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 217401.
- [29] F. Liu, T. Makino, T. Yamasaki, K. Ueno, A. Tsukazaki *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 257401.
- [30] D. Rudolf, C. La-O-Vorakiat, M. Battiato, R. Adam, J. M. Shaw *et al.*: *Nature Commun.* **3** (2012) 1037.
- [31] P. Elliott, T. Müller, J. K. Dewhurst, S. Sharma and E. K. U. Gross: *Sci. Rep.* **6** (2016) 38911.
- [32] F. Siegrist, J. A. Gessner, M. Ossiander, C. Denker, Y.-P. Chang *et al.*: *Nature* **571** (2019) 240-244.
- [33] P. Tengdin, C. Gentry, A. Blonsky, D. Zusin, M. Gerrity *et al.*: *Sci. Adv.* **6** (2020) eaaz1100.
- [34] M. Hofherr, S. Häuser, J. K. Dewhurst, P. Tengdin, S. Sakshath *et al.*: *Sci. Adv.* **6** (2020) eaay8717.

- [35] D. Steil, J. Walowski, F. Gerhard, T. Kiessling, D. Ebke *et al.*: *Phys. Rev. Research* **2** (2020) 023199.
- [36] J. U. Thiele, M. Buess and C. H. Back: *Appl. Phys. Lett.* **85** (2004) 2857-2859.
- [37] G. Ju, J. Hohlfield, B. Bergman, R. J. M. van de Veerdonk, O. N. Mryasov *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 197403.
- [38] G. Li, R. Medapalli, J. H. Mentink, R. V. Mikhaylovskiy, T. G. H. Blank *et al.*: *Nature Commun.* **13** (2022) 2998.
- [39] C. Vicario, C. Ruchert, F. Ardana-Lamas, P. M. Derlet, B. Tudu *et al.*: *Nat. Photonics* **7** (2013) 720.
- [40] S. Bonetti, M. C. Hoffmann, M.-J. Sher, Z. Chen, S.-H. Yang *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **117** (2016) 087205.
- [41] T. Kampfrath, K. Tanaka, and K. A. Nelson: *Nat. Photonics* **7** (2013) 680.
- [42] T. Ishii, H. Yamakawa, T. Kanaki, T. Miyamoto, N. Kida *et al.*: *Appl. Phys. Lett.* **114** (2019) 062402.
- [43] H. Ohno: *Science* **281** (1998) 951-956.
- [44] M. Tanaka, S. Ohya, and P. N. Hai: *Appl. Phys. Rev.* **1** (2014) 011102.
- [45] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert and D. Ferrand: *Science* **287** (2000) 1019-1022.
- [46] P. N. Hai, L. D. Anh, S. Mohan, T. Tamegai, M. Kodzuka *et al.*: *Appl. Phys. Lett.* **101** (2012) 182403.
- [47] P. N. Hai, L. D. Anh and M. Tanaka: *Appl. Phys. Lett.* **101** (2012) 252410.
- [48] L. D. Anh, P. N. Hai and M. Tanaka: *Nature Commun.* **7** (2016) 13810.
- [49] L. D. Anh, P. N. Hai and M. Tanaka: *Appl. Phys. Lett.* **104** (2014) 042404.
- [50] L. D. Anh, P. N. Hai, Y. Kasahara, Y. Iwasa and M. Tanaka: *Phys. Rev. B* **92** (2015) 161201(R).
- [51] B. Lee, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald: *Phys. Rev. B* **61** (2000) 15606.
- [52] T. Ishikawa *et al.*: *Nat. Photonics* **6** (2012) 540.
- [53] S. Owada, K. Togawa, T. Inagaki, T. Hara, T. Tanaka *et al.*: *J. Synchrotron Radiat.* **25** (2018) 282.
- [54] Sh. Yamamoto, M. Taguchi, M. Fujisawa, R. Hobara, S. Yamamoto *et al.*: *Phys. Rev. B* **89** (2014) 064423.
- [55] M. Kobayashi, L. D. Anh, J. Minár, W. Khan, S. Borek *et al.*: *Phys. Rev. B* **103** (2021) 115111.
- [56] A. Melnikov, I. Razdolski, T. O. Wehling, E. Th. Papaioannou, V. Roddatis *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011) 076601.
- [57] N. Berggaard, M. Hehn, S. Mangin, G. Lengaigne, F. Montaigne *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **117** (2016) 147203.
- [58] M. Hofherr, P. Maldonado, O. Schmitt, M. Berritta, U. Bierbrauer *et al.*: *Phys. Rev. B* **96** (2017) 100403.
- [59] A. Eschenlohr, M. Battiato, P. Maldonado, N. Pontius *et al.*: *Nat. Mater.* **12** (2013) 332.
- [60] T. Jiang, X. Zhao, Z. Chen, Y. You, T. Lai, and J. Zhao: *Materials Today Physics* **26** (2022) 100723.
- [61] H. Dember: *Phys. Z* **32** (1931) 554.
- [62] P. Gu and M. Tani: *Terahertz Optoelectronics*, edited by K. Sakai (Springer, Berlin) (2005) Chap. 4 63.
- [63] L. D. Anh, M. Kobayashi: T. Takeda, K. Araki, R. Okano *et al.*: *Adv. Mater.* **35** (2023) 2301347.
- [64] T. Dietl, A. Haury and Y. Merle d'Aubigne: *Phys. Rev. B* **55** (1997) R3347.

レ デウツク アイン Le Duc ANH

東京大学  
工学系研究科 電気系工学専攻  
スピントロニクス学術連携研究教育センター  
〒113-8658 東京都文京区本郷 7-3-1  
TEL : 03-5841-6654  
e-mail : anh@cryst.t.u-tokyo.ac.jp

小林 正起 KOBAYASHI Masaki

東京大学  
工学系研究科 電気系工学専攻  
スピントロニクス学術連携研究教育センター  
〒113-8658 東京都文京区本郷 7-3-1  
TEL : 03-5841-6692  
e-mail : masaki.kobayashi@ee.t.u-tokyo.ac.jp

田中 雅明 TANAKA Masaaki

東京大学  
工学系研究科 電気系工学専攻  
スピントロニクス学術連携研究教育センター  
〒113-8658 東京都文京区本郷 7-3-1  
TEL : 03-5841-6728  
e-mail : masaaki@ee.t.u-tokyo.ac.jp

# XFEL と電子線による低分子有機化合物の微小結晶構造解析 —二線源の特性を生かし、水素原子と電荷に関する情報を取得—

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  
東北大学 多元物質科学研究所  
米倉 功治  
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  
高場 圭章、眞木 さおり

## Abstract

複雑な構造を持つ有機化合物では、X線回折に適したサイズの結晶の調製が難しいことがある。そこで、創薬、材料科学などの広範な分野で、小さな結晶から原子配置を決定することが重要になっている。私たちは、この問題の解決のために、X線自由電子レーザーを用いた低分子有機化合物の微小結晶構造解析法を開発した。実証実験では有機蛍光分子であるローダミン 6G の構造を、0.82 Å の空間分解能で決定できた。電子回折から得た構造と比較すると、どちらの構造も水素原子の位置を化学結合の種類に依存して正確に区別できることが分かった。両構造間の水素原子の測定距離の違いは、X線と電子線の散乱の特性を反映しており、また、原子座標の信頼性は XFEL の方が高いが、電子線は電荷に対してより高い感度を示すことも明らかにできた。

## 1. はじめに

有機合成化学、薬学、材料科学などの分野において、研究対象となる低分子有機化合物の原子の立体配置は欠くことのできない情報である。しかし、従来の X 線回折に適した数百  $\mu\text{m}$  以上の大きさの結晶作製が困難であることも多い。構造決定に必要な結晶サイズを決める原子の散乱断面積は、X 線と電子線で顕著に異なり、電子線では X 線に比べて 4 から 5 桁も大きい<sup>[1]</sup>。この性質を反映し、X 線回折にサイズが満たない厚さ数百 nm 以下の結晶から、電子回折像が得られる。電子顕微鏡を用いて試料を回転させながら回折像を連続的に記録する電子線三次元結晶構造解析法<sup>[2, 3]</sup>により、原子レベルの空間分解能で結晶構造の決定が可能になった。逆に、電子線の透過力は低く、厚い結晶への電子回折の適用は著しく制限される。

X 線自由電子レーザー (XFEL) 施設 SACLA は、高強度かつ極短い X 線パルスを発生させる。1 パルスで試料破壊前のデータ収集が可能であり<sup>[4]</sup>、電子線の散乱断面積との大きな差を補うことができると考えられた。XFEL パルスを用いた連続結晶 X 線構造解析 (SX) では、多数の微小結晶から回折パターンを記録する。

この手法は、これまで主にタンパク質結晶に適用されてきた<sup>[5, 6]</sup>が、それは、低分子有機化合物の結晶の小さな結晶格子では、カメラ 1 フレーム当たりの回折点の数が少なくデータ処理が難しいという理由からである。

それでも、2022 年には、無機有機ハイブリッド材料の小さな結晶から、1.2 - 1.35 Å の分解能の構造が XFEL を用いて決定されたことが報告された<sup>[7]</sup>。同研究では、微小結晶試料を含む溶液を細いノズルの先端から噴出させることで、XFEL パルスを照射する手法が採られた。この試料供給法は、タンパク質結晶の SX 解析で最も頻繁に用いられているものであるが、低分子でよくみられる試料形態の微結晶粉末などに対して、適しているとは考えられなかった。また、回折点の指数付けには、回折像を円環平均し粉末パターンを模した一次元の強度分布が用いられたが、私たちは別のアプローチを採った。解析された試料には Ag、Se、または Te などの重原子が含まれ回折強度の向上に寄与していたにも関わらず、得られた構造の分解能は水素原子の解像に不十分であった。

有機分子構造において、水素原子は分子内・分子間で広範に非共有結合を形成し、分子の性質、機能に大

きな影響を及ぼす。しかし、X線や電子線で得られる水素原子からの信号は弱く、1 Å よりも良い空間分解能での高精度な構造解析が不可欠である。これに対し、中性子回折は水素原子の検出に向き、その原子核の位置を決定できるが、現行の中性子源から十分な強度の中性子線が得られないという問題がある。解析には mm サイズの巨大な結晶が必要になってしまう。

中性子線は核に散乱されるのに対して、X線は原子核の周りの電子、電子線は原子の周りのクーロンポテンシャルによってそれぞれ散乱される。このように、3つの代表的な量子線の散乱実体は大きく異なる。そこで、同じ微小結晶試料から XFEL と電子線で得られた構造を詳しく比較し、実験的信頼性を評価する必要があった<sup>8)</sup>。

## 2. 構造解析

X線の散乱が少ないポリイミド製の4 mm × 4 mm の試料支持板をデザインし、その表面にロードミン 6G の微小結晶を流動パラフィンと共に散布し試料とした。微小結晶の平均サイズは2.5 μmであった（文献[8]の補足図1）。この試料支持板を高速で移動させ、径約1 μm に集光した15 keV の高エネルギーXFEL パルスを、10 μm の間隔で個々の微小結晶に照射し、回折パターンを集めた（図1）。パルス長は約7 fs、パルス間隔は30 Hz で、測定は大気中、室温で実施した。支持板1つあたり約1.5時間の測定から13万枚以上の回折像が得られ、このうち約6万5千枚が、結晶からの反射を確認できる“ヒット”パターンに分類された。図2(a)に支持板上の微小結晶の分布を示す。

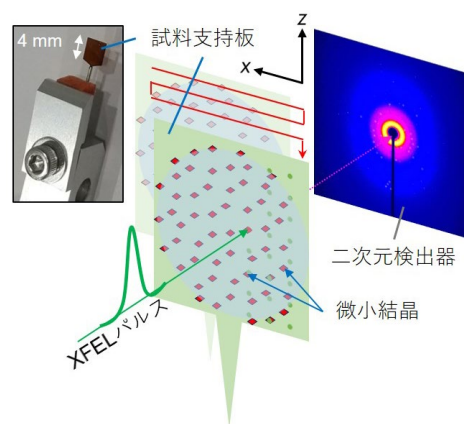


図1 X線自由電子レーザー (XFEL) による回折データ測定の様式図。

4 mm × 4 mm の大きさの試料支持板に微小結晶を散布し、高速に移動させながら（赤矢印）、XFEL パルスを1秒間に30回照射し、回折パターンを後方の検出器で記録する。文献[8]より改変。

XFEL と並行し、加速電圧300 kV のクライオ電子顕微鏡（日本電子 CRYO ARM 300）を用いて、同じ試料の複数の微小結晶から、試料ステージを回転させ電子回折像を集めた<sup>9, 10)</sup>。得られた回転回折データセットをクラスター解析で分け<sup>10)</sup>、40 - 50 セットを統合し構造決定した。

XFEL の回折像は、電子線で得られた結晶格子情報を与えることで指数付けでき、その成功率はタンパク質の SX パターンに匹敵する69.2%に達した。以上の測定と回折像の処理の手順は、前出の無機-有機ハイブリッド材料で採用された液体噴霧を用いる方法に比べ、約20倍高効率であった。抽出された反射強度はモンテカルロ法により積分し、統合したデータ

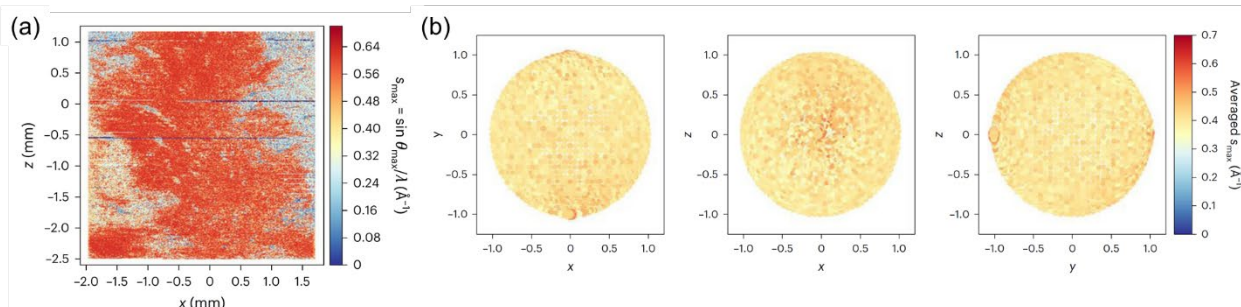


図2 試料支持板上の微小結晶の分布と向き。

(a) ロ-ダミン 6G の微小結晶の分布を、その場所から得られた回折フレーム中の回折点の最高分解能 ( $s_{\max}$ ) で色分けし表示。 $s_{\max} = \sin \theta_{\max} / \lambda$  と定義され、 $\theta_{\max}$  は回折点の最大散乱角の半分の値を表し、 $\lambda$  は X 線の波長に対応する。(b) 指数付けされたフレームに寄与する結晶方位を、逆格子の単位ベクトル  $\mathbf{g}$  の端点に色付けし表示。各点のサイズと色は、対応する方位をとるフレーム数（結晶数）と平均  $s_{\max}$  にそれぞれ対応する。図は左から x-y 平面、x-z 平面、y-z 平面への射影で、入射 X 線の方向は y 軸に、x 軸及び z 軸は支持板平面上の直行座標を表す（図1）。文献[8]から転載。

から、支持板上に分散した結晶の向きはランダムであり(図2(b))、すべての反射点が記録されていることが確認された。統合したデータを *ab initio* 法で位相付けし、0.82 Å の空間分解能でローダミン 6G の構造を決定することに成功した(図3)。実験データから水素原子を省いたモデルの構造因子を差し引いた差フーリエマップによって水素原子の密度が明瞭に解像された(図3(b), (c)、図4(b))。差マップ内の原子間の残留密度は、共有結合電子に相当すると考えられる(図4(b))。

### 3. 精度の比較

電子回折からは 0.90 Å の分解能で構造が得られ、差マップから水素原子が可視化できた。XFEL と電子回折から得られた両構造間で、水素以外の原子位置はほぼ一致した。一方、実験データとモデルの不一致を示す *R* 値は XFEL の回折データが優り、これを反映して結合長の標準不確かさも約 1/5~1/2 になった<sup>[8]</sup>。このように電子回折データの品質が劣ることは、標準的な X 線結晶構造解析との比較からも、一般的傾向とし

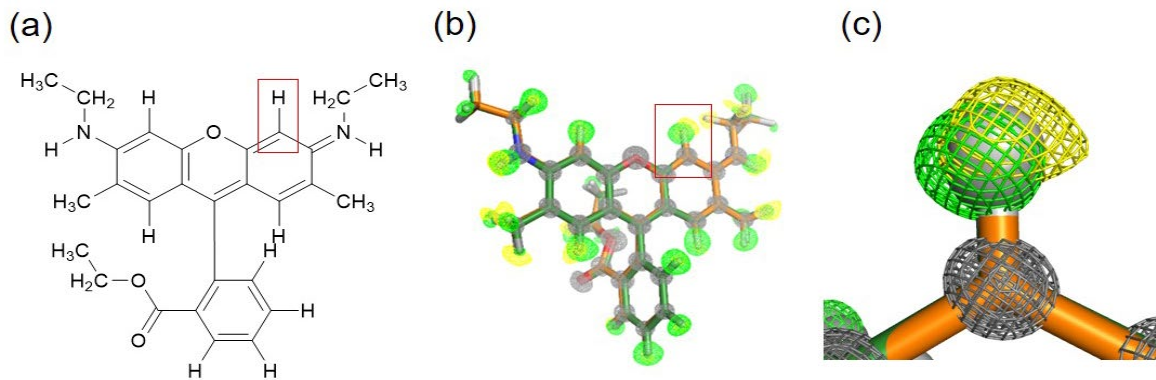


図3 XFEL 及び電子線を用いて決定した結晶中のローダミン 6G の立体構造。

(a) ローダミン 6G の構造式。(b) 結晶構造と水素原子分布の重ね合わせ。緑は XFEL、黄色は電子線での測定データからそれぞれ得られた水素原子の密度を示す。水素原子は、XFEL では結合相手の原子に近い位置に観察される。水素以外の原子位置(灰色)は両者の構造間でほぼ等しい。(c) (a)と(b)の赤枠で囲った部分の拡大。

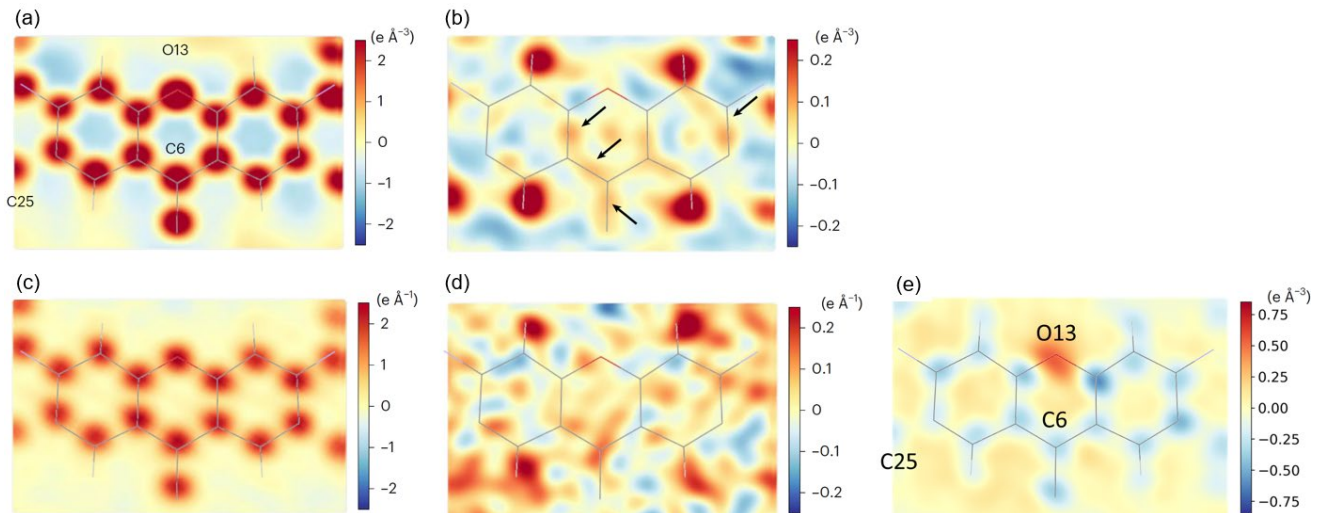


図4 ローダミン 6G の3つの六員環から構成されるキサテン環平面での電子密度とクーロンポテンシャルマップの二次元断面。

(a) XFEL から得られた実験振幅( $F_o$ )マップの断面に原子モデルを重ねて表示。見やすいよう、いくつかの原子にラベル付けした。(b) XFEL の実験データと水素を除いた計算データの差マップ ( $mF_o - DF_o$ ) の断面。図中の矢印は、共有電子に対応する残留密度を表すと考えられる。(c, d) 電子回折から得られた(a)と(b)に対応する断面。色の表示は、各マップの右側に示されているグラデーションバーに従う。差マップの残留密度(b)と(d)の比較では、後者にノイズが多くみえる。(e) (c)のクーロンポテンシャルを電子密度に変換し計算した差マップ。文献[8]より改変。



て報告されている<sup>[11]</sup>。前述のように、電子線の試料への透過力は低く、特に試料の傾斜角が大きくなる際に試料の厚みは増加し、構造解析の大きな制限になる。また、多重散乱や部分電荷に対する電子散乱の取り扱いなど、解決すべき課題も残っている。

#### 4. 水素原子の化学結合の計測

電子を一つしか持たない水素原子では、結合相手の炭素原子や窒素原子の方に引き寄せられ、X線回折から得られる電子密度マップではピーク位置がシフトすることが知られる。一方、電子回折から得られるクーロンポテンシャルマップでは、入射電子は電子と核の双方の電荷に影響を受けるが、後者の寄与が優勢になる。ピーク位置は中性子回折で観察される核密度に近くなるが同一ではない。ポアソン方程式に基づく理論的な計算では、クーロンポテンシャルマップのピークの位置は核よりやや長くなる。さらに、化学結合の種類によって、水素原子と結合相手の原子との距離は異なる。電子への引力が増す極性の高い結合では、結合距離が短くなる。

今回の実測で得られた XFEL の電子密度マップと電子線のクーロンポテンシャルマップで、上記の水素原子からの信号のふるまいを測定できる正確度と精度を示す結果となった(図3(b), (c)及び文献[8]の表2、図4)。メチル及びメチレンの C-H 結合に比べ、芳香族の C-H 結合では X 線と電子線の違いが、座標の標準不確かさに対してより有意に観測できた。これらの密度の特徴は基本的に C-H 結合の極性から生じるものであるが、同時に結合の柔軟性の違いを反映している。すなわち、芳香族の C( $sp^2$ )-H 結合での水素原子の動きは、他の C( $sp^3$ )-H 結合よりも結合方向に制限されており、これが水素の視認性とピーク位置の精度の向上に繋がっていると考えられる(文献[8]の図2(d)、表2、図4)。アミドの N( $sp^2$ )-H 結合では極性が強く、水素のピーク位置の変位はより大きな差となって表れた(文献[8]の表2、図4)。

#### 5. 電荷の計測

イオンの電子散乱曲線を反映し、電子線は電荷に対して高い感度を持つことが予想される<sup>[3, 12, 13]</sup>。イオン結合した塩素原子(図3、5では示していないが、文献[8]の

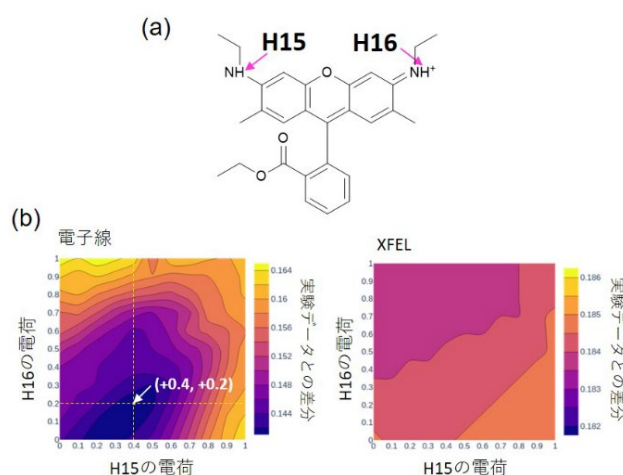


図5 電子回折、X線回折に基づいた最適電荷値の探索。(a) 正電荷をとりうる水素原子は二つあるが(H15、H16)、一般的な表記では片方の水素に正電荷が付記される。(b) 原子モデル中の二つの水素原子の電荷を縦横の軸に沿って変化させた計算データと実験データの間で  $R$  値を計算し、電荷値の組み合わせを探索した。水素の正イオンの散乱因子は文献[13]を参照した。電子線(左)では実験データを最もよく説明する最小の  $R$  値(グラフの色の濃い部分)が得られ、二つの水素の両方が部分的に正電荷を帯びていることが実験的に示された。一方で XFEL(右)では電荷を変えても変化が小さく、電荷は決定できない。文献[8]より改変。

図2などを参照)とその周囲の水素原子に部分電荷(図5の H15、H16)を与え計算した  $R$  値の変化を調べることで、XFEL と比べ、電荷に対して高い感度を持つことが実際に示された。また、部分電荷の値も推定できた(図5)<sup>[8]</sup>。さらに、クーロンポテンシャルを電子密度に変換して計算した差マップから、各原子の電子の分布を可視化できる可能性も示された(図4(e))。

#### 6. おわりに

紹介した研究により、XFEL を用いて低分子有機化合物の微小な結晶から、その詳細な構造を解析することが可能になった。実証実験として示したローダミン6Gの解析では、微小結晶を分散させた試料支持板を二次元スキャンすることで、XFEL 回折像を多数の結晶から集め、同じ試料の電子回折の回転撮影から求めた格子情報を使って指数付けする手順を確立した。これにより、水素原子が可視化できると共に、電子回折のデータに比べ優れた統計値と高い信頼性を持つ原



子座標が得られることが分かった。両線源の構造比較では、両者が水素原子の位置を化学結合の種類に依存して正確に区別でき、両構造間での測定距離の違いは、X線と電子の散乱の特性を反映することも明らかになった。また、電子線は電荷に対して高い感度を持つことを実験的に示せた。

これまで、高分解能X線回折、中性子回折、及びその組み合わせは、対象分子内の水素の結合特性やポテンシャル分布など、非水素原子の原子座標を超える情報の取得に利用されてきた。しかし、中性子回折では、mmサイズの非常に大きな結晶が必要であるという制限に変わりはない。XFELと電子回折では、小さい結晶が使用でき測定に試料の特別な処理も必要ないため、より実用的であろう。一方、同じ結晶試料でも、上述のように透過能の違いから、XFELでは厚い結晶、電子回折では薄いものが適している。

開発した技術は、合成有機化学から創薬、材料科学に至る広範な分野で正確かつ高精度な構造解析を実施するために利用できる。さらに、機能性の有機低分子の時間分解解析などへの応用の可能性も広がると期待される。

#### 謝辞

SACLAでの実験は、理研放射光科学研究センターの井上伊知郎研究員、高輝度光科学研究センターの登野健介チームリーダーらの協力の下で行いました。この研究にご協力いただいた皆様、理研の生体機構研究グループの当時のメンバーに感謝申し上げます。

紹介した研究は、日本学術振興会 (JSPS) 科学研究費助成事業若手研究「電子線を利用したタンパク質の分子内電荷の決定 (研究代表者: 高場圭章、20K15764)」、科学技術振興機構 (JST) 未来社会創造事業探索加速型「微小結晶構造の自動・高精度電子線解析 (研究代表者: 米倉功治、JPMJMI20G5)」、同戦略的創造推進事業 CREST「実験・計算・データ科学融合による塗布型電子材料の開発 (JPMJCR18J2)」などの助成を受けて行いました。

#### 参考文献

[1] Henderson, R.: *Q. Rev. Biophys.* **28** (1995) 171–193.

- [2] Nannenga, B. L., Shi, D., Leslie, A. G. W. and Gonen, T.: *Nat. Methods* **11** (2014) 927–930.
- [3] Yonekura, K., Kato, K., Ogasawara, M., Tomita, M. and Toyoshima, C.: *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **112** (2015) 3368–3373.
- [4] Barty, A. *et al.*: *Nat. Photonics* **6** (2012) 35–40.
- [5] Chapman, H. N., *et al.*: *Nature* **470** (2011) 73–78.
- [6] Boutet, S. *et al.*: *Science* **337** (2012) 362–364.
- [7] Schriber, E. A. *et al.*: *Nature* **601** (2022) 360–365.
- [8] Takaba, K. *et al.*: *Nat. Chem.* **15** (2023) 491–497.
- [9] Yonekura, K., Ishikawa, T. and Maki-Yonekura, S.: *J. Struct. Biol.* **206** (2019) 243–253.
- [10] Takaba, K., Maki-Yonekura, S., Inoue, S., Hasegawa, T. and Yonekura, K.: *Front. Mol. Biosci.* **7** (2021) 612226.
- [11] Clabbers, M. T. B., Gruene, T., van Genderen, E. and Abrahams, J. P.: *Acta Crystallogr. A* **75** (2019) 82–93.
- [12] Yonekura, K. and Maki-Yonekura, S.: *J. Appl. Crystallogr.* **49** (2016) 1517–1523.
- [13] Yonekura, K. *et al.*: *IUCrJ* **5** (2018) 348–353.

#### 米倉 功治 YONEKURA Koji

(国) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
生体機構研究グループ  
東北大学 多元物質科学研究所  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-2837  
e-mail : yone@spring8.or.jp

#### 高場 圭章 TAKABA Kiyofumi

(国) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
生体機構研究グループ  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-2837  
e-mail : takaba@spring8.or.jp

#### 眞木 さおり MAKI-YONEKURA Saori

(国) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
イメージング開発チーム  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-2837  
e-mail : makis@spring8.or.jp

## 実験制御用プログラム開発のモダン化とビームライン制御・ データ収集・オンライン解析プラットフォーム：BL-774

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

本村 幸治

公益財団法人高輝度光科学研究センター ビームライン技術推進室

安田 伸広

公益財団法人高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室

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

今井 康彦

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

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

中嶋 享、城地 保昌

### Abstract

SPring-8/SACLA において開発と導入が進められてきた「ビームライン制御・データ収集・オンライン解析プラットフォーム：BL-774」は、2023年夏の時点で、SPring-8の5つのビームラインにおいて、光学機器の制御を含めたユーザー共用が行われている。ビームラインにおけるBL-774のシステム構成は、ネットワークの接続を含めてビームライン毎に完結的である。本稿では、特に実験制御用プログラムの作成・開発のあり方に着目し、現代に相応しいソフトウェア開発のコンセプトと、そのコンセプトを実現していくBL-774の基幹的なソフトウェア・システム「774 Basic System」を紹介する。774 Basic Systemは、実験制御用プログラムの作成段階ではロジックに関わる部分に注力できるよう、周辺のパーツがビームラインでの実験に適切な形、機能、規模で実装されていて、利用形態に沿って選択可能な複数のマイクロサービスとして提供される。今後、機能の拡張を図るとともに幅広いビームラインでの導入が進められていく見通しである。

### 1. はじめに

SPring-8では、そのアップグレード・プロジェクトであるSPring-8-IIプロジェクト<sup>1),2)</sup>の計画が進められているところであり、光源性能の利点に対して最大限の活用を加速するために、光源だけではなく、光学系、試料準備、2次元検出器、データ解析、実験制御システムなどのビームライン・コンポーネントに対するアップグレードも進められている。その中で、SPring-8-IIのビームラインに求められる機能には、(i)システムの堅牢性と柔軟性、(ii)コンフィグレーション管理、(iii)実験ワークフローのシーケンス管理、(iv)リモート制御、(v)最大1メガ・サンプル/秒(MSPS)の高速データ収集に関する項目を挙げることができる。それぞれの目的を達成するための個々のタスクは、項目を越えて互いに密接に関連しているため、迅速性に加えて一

貫性を持って統合されていく必要がある。そのため、著者らは「ビームライン制御・データ収集・オンライン解析プラットフォーム：BL-774」<sup>3),4)</sup>の開発と導入を進めてきた。

ここでBL-774の名称についてであるが、日本語では、語呂合わせで「774」に“nanashi”と音を当てはめている。これは「名無し」に由来し、命名時に、このプラットフォームが持つ機能の範囲を示す概念に対して、特定の一語をあてはめることが困難であったことに関係している。なお、英語での気の利いた読み方は今後、決める予定である。

さて、BL-774では、これまでに、(i)、(ii)、(iv)の3つの機能を実装している。BL-774の(i)、(ii)の機能を用いることで、新しいハードウェアあるいはソフトウェアの開発者は、実際のビームライン環境を使って開

発や試験、運用への組み込みを行うためのワークフローを利用することができる。このワークフローは、専用のラピッド・アプリケーション・デベロップメント (RAD) と Web ベースのグラフィカル・ユーザー・インターフェース (GUI) に象徴される 2 フェーズ開発が組み込まれたものである。ここで、このワークフローを、本稿の第 3 章「BL-774 のソフトウェア・システム」の内容に沿ってあらかじめ概観しておくことにする。本稿で紹介する BL-774 のソフトウェア・システム「774 Basic System」<sup>6)</sup>は、プログラミング言語である Python<sup>6)</sup>の実行環境などと一括して PC 等に構築される。この際に、パルスモーター・コントローラーや 2 結晶分光器 (DCM) など、ビームラインで標準的に使用される機器の制御を扱う「ecpy」という名前のソフトウェア・モジュールがあらかじめ組み込まれる。この ecpy は、774 Basic System が持つクラス・ライブラリ「774 API」を構成する一つである。API (Application Programming Interface) については、この章の後半で再び扱うことにする。したがって、774 Basic System の利用者は、Python 環境で、ecpy をインポートすれば 774 API の利用を開始できる。BL-774 の RAD 環境は、JupyterLab<sup>7)</sup>などの Web ベースの対話型実行環境を含め、Python の開発に用いられるインターフェースで ecpy をインポートすることにより、774 API を直接的に利用できる環境である。そこで、2 フェーズ開発の最初のステップとして、ハードウェアの開発者は、ビームラインに新しい機器を設置した後に行う初期検査や、それらを使用した初期実験を、BL-774 の RAD 環境を用いて実行できる。ここでの主目的は、開発中の機器における操作手順や取得した値の演算方法のような、結果を得るまでの具体的な処理の流れを規定するロジックを作成したり、それらの中で用いられる変数を決定したりすることである。これらのロジックや変数は、ノートブック形式のファイルなどに保存され、必要に応じて他の資料と共に、ソフトウェアの開発者と共有される。次のステップでは、前のステップで作成されている、プログラミング言語で記述されたロジックを基に、ソフトウェアの開発者が堅牢性も考慮したソフトウェアを作成し、公式の API あるいは Web GUI としてビームラインにリリースしていく。ここでは、特にソフトウェア

開発の観点で重要な、エラー処理やカプセル化が追加されたスクリプトが作成される。さらに、これらのスクリプトを利用して Web GUI のアプリケーションが作成される。このワークフローを経ることにより、利用者は、Web GUI を使用して機器の基本操作を実行できるだけでなく、API そのものの利用においても、さまざまな可変パラメーターを Web インターフェースを使用して設定できるようになる。さらに、これらの Web GUI と対話型実行環境等を組み合わせることで、さまざまな研究開発プロジェクトを迅速かつ簡単に実行できるようになる。これは、新しい機器の導入時だけでなく、実験準備やデータ収集においても当てはまることであり、本稿のテーマである実験制御用プログラムの作成・開発においても同様である。また、本稿では詳細に触れないが、BL-774 の(iv)の機能を用いることにより、SPRING-8 においてリモート制御を行う際に運用面で必要とされている安全に関する基準を標準的に満たすことが可能になる。

ところで、放射光ビームラインで行われる制御には、互いに関連がありながら異なる側面を持つものとして、ビームライン機器制御と実験機器制御を挙げることができる<sup>8)</sup>。前者は、主にフロントエンド (FE) や輸送チャンネル (TC) において光を操作することを主目的とする機器に対する制御であり、常設的で共同利用性の高いものと位置づけられる。一方で、後者は、実験ハッチ内の試料ステージや検出器を操作することを主目的とする。これは、前者の間接的な操作を含めて、実験に必要な操作を統合して扱うものであり、常設的な機器のみで構成される場合もあれば、一時的な持ち込み機器を含めて構成される場合もある。774 Basic System は、複数のビームラインにおいて前者および、後者の中の制御目的で標準的に多用される機器の操作を対象とし、後で述べるコンセプトに基づいたソフトウェアの実装を行ってきたものである。さらに、ビームライン制御のためのフレームワークに普遍的に望まれる形態として、再利用性に優れた API 群の整備やエコシステムによる供給様式を挙げることができる<sup>8)</sup>。「API (Application Programming Interface)」という用語は既に前で使用しているが、その定義は文脈に応じて広狭がある。ここでは、「他のソフトウェアに特定のサービスを提供する明確に定義されたイ

インターフェース<sup>9)</sup>としておく。また、「エコシステム (ecosystem)」は、本来は「生態系」を意味する言葉であるが、その、互いに独立している多様な構成要素が相互に依存しあい連携しながら1つの大きなシステムを形成する様を表す使い方で、さまざまな分野において利用されている。例えば、「地域経済エコシステム」や「ビジネス・エコシステム」、「イノベーション・エコシステム」といった言葉をお聞きになったことのある読者もおられるかもしれない。IT やソフトウェア・システムの分野でエコシステムという言葉が利用される場合、そこでは、「ソフトウェアの再利用が大きな特徴であり、『全てを自分で作らず、使えるものは使い、車輪の再発明はしない』が基本的な考え方<sup>10)</sup>に基づいて、システムが構築されていくことになる。なお、この「車輪の再発明」もまた、IT やソフトウェア・システムの分野だけでなく、さまざまな分野でしばしば目にする比喩表現であろう。774 Basic System は、これらの API やエコシステム概念も実現している。

さて、この後に述べるように、BL-774 にはいくつかの利用形態が存在するのであるが、本稿を執筆している2023年夏の時点で、主に光学機器の制御に適用し、ユーザー共用を行っているビームラインには、BL20B2<sup>10)</sup>、BL09XU<sup>11)</sup>、BL13XU<sup>12)</sup>、BL46XU<sup>13)</sup>、BL07LSUがある。今後、適用範囲を拡大するとともにその他のビームラインでも導入が進められていく見通しである。

本稿では、まず、ビームラインのネットワークから見たBL-774の位置づけと、BL-774のソフトウェア・システムの仕組みを、ビームライン実験の担当者や利用者の方々と共有できるよう紹介する<sup>14)</sup>。その上で、BL-774のサンプル・コードの実例を用いて、実用的なプログラミングへの展望についても触れることにしたい。

<sup>14)</sup> 本稿では、774 Basic System について執筆時 (2023年夏)の最新バージョン (Summer 2023 Version) に基づいて記述している。今後のアップデートに伴い仕様の変更や追加等の可能性があるため、774 Basic System を実際に利用する場合には、対応するバージョンに関する情報も併せて参照していただくことを推奨する。

## 2. ビームラインにおけるBL-774のシステム構成

ビームライン制御で対象となる被制御機器の数はビームラインあたり100個程度が目安である。通常、

これらの機器の詳細はそのビームラインの担当者が把握している。また、特に実験ハッチでは、ユーザータイム中において機器の新規追加や移動、入れ替え等の必要が実験に応じて頻繁に発生する。そこで、BL-774では、既存の(加速器制御)システムと違って、システムの基本構成をビームライン単位で完結させた。この規模にシステムを集約したことで、適切な設計と実装が図られた。

BL-774をビームラインへ導入するには、2021年度以降にビームライン単位で段階的に導入が進められている「ビームラインネットワーク」と呼ばれる新しいネットワークと併せて導入することが標準形である。図1は、ビームラインで扱われる機器を操作するためのネットワーク接続とビームライン制御が、ビームラインネットワークとBL-774の導入前後でどのように変化するかを、対象となる機器のまとまりごとに示している。なお、ここでは基本的な考え方を示すために、ビームラインのネットワークの一部を切り出し、想定される事例を簡略化して図示した。

まず、図1(a)は、従来のビームラインのネットワーク接続と制御の経路を示す。蓄積リングやフロントエンド、光学ハッチには、挿入光源 (ID)、メイン・ビーム・シャッター (MBS)、ダウン・ストリーム・シャッター (DSS)、DCM、ミラー等の装置があり、実験ホール内の実験ステーション等には、ビームライン制御に用いられるPCが置かれている。ビームラインのPCから、これらの装置を操作する場合には、制御に関するソフトウェアを受け持つ「ビームライン・ワークステーション (BL-WS)」<sup>14), 15)</sup>が介在してきた。このためビームラインで標準的に使用されているネットワーク「BL-USER-LAN」に接続されたPCから、「制御LAN」に接続されたBL-WSに通信するためには、ネットワーク間の特別な通信許可が必要である。多くの場合で、ビームライン制御に用いるPCには、既に通信許可が与えられているIPアドレスを使用する方法が取られてきた。一方、実験ハッチで使われる試料ステージ、2次元検出器、Webカメラを制御するには、やはりBL-USER-LANを用いたネットワーク接続か、独自のローカルLANを用いたネットワーク構成を用いてきた。

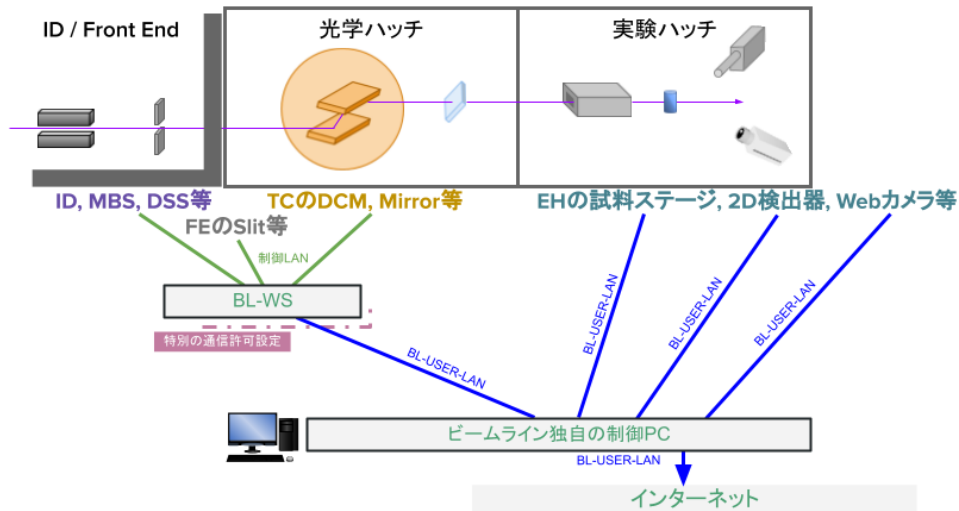
図1(b)では、BL-774を、ビームラインネットワー

クと併せて導入した際の、ネットワーク接続を示している。ID や MBS、DSS については、従来通り、BL-WS 内のソフトウェアの機能を利用するものの、ビームラインの PC と BL-WS の通信は「774 サーバー」と呼ばれる 774 Basic System がインストールされた計算機が中継する。一方、主に TC に配置されている光学機器、および、FE に配置されているスリット等の機器については、774 サーバー上のソフトウェアが通信接続と制御を直接的に受け持つ。

ビームライン機器のためのソフトウェア開発の観

点から見れば、この構成は、ビームライン制御としてのまとまりをより意識したものである。なぜならば、ビームラインの PC と 774 サーバーは、共に同じ「BL-Core Zone」<sup>※2</sup>と呼ばれるネットワーク上に存在し、ビームラインの PC が 774 サーバーと通信するための特別な通信許可設定は不要となるからである。BL-774 の導入時に標準的に設置される 774 サーバーには、BL-WS と通信するための通信許可設定が既定として設定されることになっているため、ビームライン担当者がこの申請を改めて行う必要はない。

(a) これまでのビームラインでのネットワーク接続と制御の一例



(b) これからのビームラインでのネットワーク接続と制御の一例

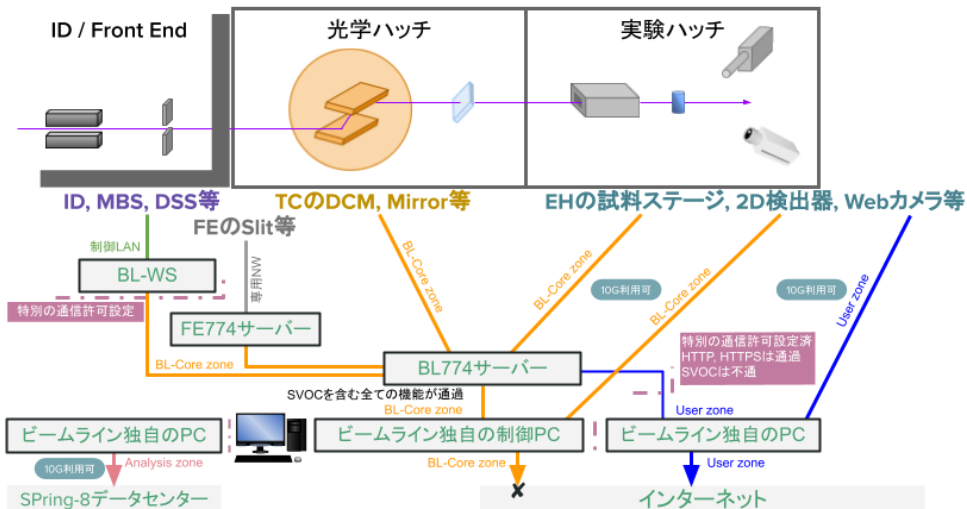


図1 ビームラインで扱う機器に対するネットワーク接続とビームライン制御の(a)これまでと(b)これから。

また、実験ハッチ内の機器に対するネットワーク接続については、複数の経路が利用できる。例えば、試料ステージの駆動に用いるパルスモーター・コントローラーなど、774 サーバーが標準的にサポートする機器は、BL-core Zone に接続したうえで、774 サーバーのソフトウェアが制御を受け持つことができる。この場合には、光学機器と試料ステージ等が同一の 774 サーバーによって制御される構成になることから、両者の動作を複合的に組み合わせるスキャン測定のような制御のためのソフトウェアも、ビームラインの範疇において、より簡潔に構築できるようになることも特筆すべき点である。

それに対して、専用のフレーム・グラブボードを用いる 2 次元検出器など、774 サーバーが標準的にサポートしていない機器は、774 サーバー以外の PC が直接の制御を受け持つことになる。なお、詳細は省くが、ビームラインネットワークでは、BL-core Zone のほかに、「User Zone」と「Analysis Zone」と呼ばれるネットワークも利用することができるようになる。<sup>※2</sup>このゾーン名称は本稿の執筆時の仮称であるが、2023 年度中に確定する見込みである。

### 3. BL-774 のソフトウェア・システム

実験計測用プログラムの作成は、その時代のプログラム開発の流行り廃りを色濃く反映するものであり、近年では、プログラムをスクラッチで一から全て作り上げる必要は少なくなっている。その背景には、Docker<sup>[16]</sup>など、仮想環境において既存のソフトウェアを配置、実行する仕組みの普及が挙げられる。Docker については、この章の「BL-774 とエコシステム」の中で改めて触れることにする。また、数値演算ライブラリでも自らスクラッチで用意するより Web サイトからインストールして利用できることが多い。最近では、コードの生成をサポートする生成 AI<sup>[17]</sup>が、その急速な進化に伴いホットな話題となっている。このため、例えば実験計測用の GUI アプリケーションの作成でも、様々な GUI のフレームワークが既に利用でき、相対的に比重が大きくなるのは、第 1 章でも述べたように、各ビームラインに特有のソフトウェアを使って実現したい目的に対して、ロジックとなる部分のプログラム化である。

このように、ソフトウェアの取扱いがより柔軟なものに進化していることを踏まえ、BL-774 は、プログラミング全般にわたる学習コストを抑制した上で、ロジックに関わる部分のプログラム作成に注力できる仕組みを構築してきた。

774 Basic System の実装に使用しているプログラミング言語は基本的に Python であり、現在の典型的な動作環境は Linux (Ubuntu)<sup>[18]</sup>と Python (>=3.8)である。Python 本体のバージョンは継続的にアップデートされるので、BL-774 のソフトウェア・アップデートも数年ごとにこれを追従している。この際、過去に対応していた機器は継続して利用できるように構築している。

774 Basic System の構成要素については、文献[3, 4]等があり、以下ではごく簡単に述べる。

#### 対象機器と Communication service

対象とする被制御機器は、ビームラインで広く使われる、パルスモーター・コントローラーに代表される、イーサネット・インターフェースを有するものであり、アクセス頻度が 10 Hz 程度の機器である。

774 Basic System において被制御機器との接続・通信を仲立ちするプロセスとして「Communication service」と呼ばれるものがある。これは機器（通信インターフェース）ごとに 1 プロセスを起動させる。複数のプロセスや PC からの通信の制御や制限を行う機能も実装される。

#### 774 API

774 API は、Python で記述された 774 Basic System のクラス・ライブラリである。Ecpy (Experiment Control API) はその構成要素の一つで、ロジックの開発に用いるための API 環境を提供する。Ecpy は、ソフトウェア動作のステップごとに整理された階層構造を持ち、それらには「Device layer」や「Object layer」と呼ばれるものがある。また、ecpy のメソッドは、非同期動作の簡潔な記述として、asyncio<sup>[19]</sup>の実装形式であるコルーチン関数として記述されている。

#### パラメーターの扱いと 774 ConfigDB

ConfigDB は、システムにおけるパラメーター設定ファイルの氾濫を避け、パラメーターの一元管理を図



り、登録・閲覧・変更の容易なコンフィグレーション・システムを提供する。これにはビームラインの担当者やユーザーが扱うパラメーターも含まれる。このデータベースには MariaDB<sup>[20]</sup> を使用し、入出力には専用の Python API (cfpy) が作成されている。データの閲覧・編集には専用の Web フォームを備える。

## ユーザー・インターフェースと 774 Service

774 API は、774 Basic System の環境が構築された PC 上の Python 開発インターフェースにおいて ecpy をインポートすることで直接的に利用できる。例えば、JupyterLab や統合開発環境上でのアプリケーション開発が該当する。これに加えて、774 API を実行する利便性を補完するために、Web GUI の形態によるインターフェースを一定の範囲で提供している。機器の基本的な操作や、システムに必要な設定や内部プロセスの立ち上げ等は基本的に Web GUI から行うことができる。これらのアプリケーション群は、必要に応じて選択的にアップデートや水平展開をすることができるように、それぞれが独立性に富んだマイクロサービスの形態で構築されている。その他、ConfigDB に対する Web インターフェース (図 2) や、774 Basic System に対するリモート操作のためのプロトコル等も用意している。

## BL-774 とエコシステム

774 Basic System のビームライン等の利用環境へ

の水平展開を考える時、スケーラビリティや、各ビームラインに存在している多様な OS やそれに基づくアプリケーション群との両立に関する課題がある。ここで、「スケーラビリティ (scalability)」も、さまざまな文脈で使用される言葉であろう。IT やソフトウェア・システムにおいて用いられる場合には、「運用上のある次元での増大に対応するソフトウェア・システム的能力」<sup>[21]</sup>として定義できる。ここでの運用上の次元とは、「システムが同時に処理できるユーザーや外部からのリクエストの数」や「システムが有効に処理と管理ができるデータの量」<sup>[21]</sup>などが挙げられる。そこで、774 Basic System においても、利用環境におけるソフトウェア・システムのインストールやアップデート等のソフトウェア・デプロイメントに関わる作業を再現性よく行うため、Docker と呼ばれるコンテナ型仮想化のためのオープン・プラットフォームを利用している。「コンテナ (container)」は、本来は物流輸送で用いられる容器を意味する言葉であるが、IT やソフトウェア・システムの分野においては、そのメタファーで、「アプリケーションとその依存関係をカプセル化したもの」<sup>[22]</sup>を表す用語として使われている。このコンテナに基づく仮想化技術がコンテナ型仮想化と呼ばれるものであり、この他に、いわゆる仮想マシン (Virtual Machine、VM) に基づく仮想化技術が知られている。この2つのアプローチは本質的に異なる特徴を持ち、「コンテナの目的はアプリケーションを移植可能で自己完結型にすること」であり、「VM

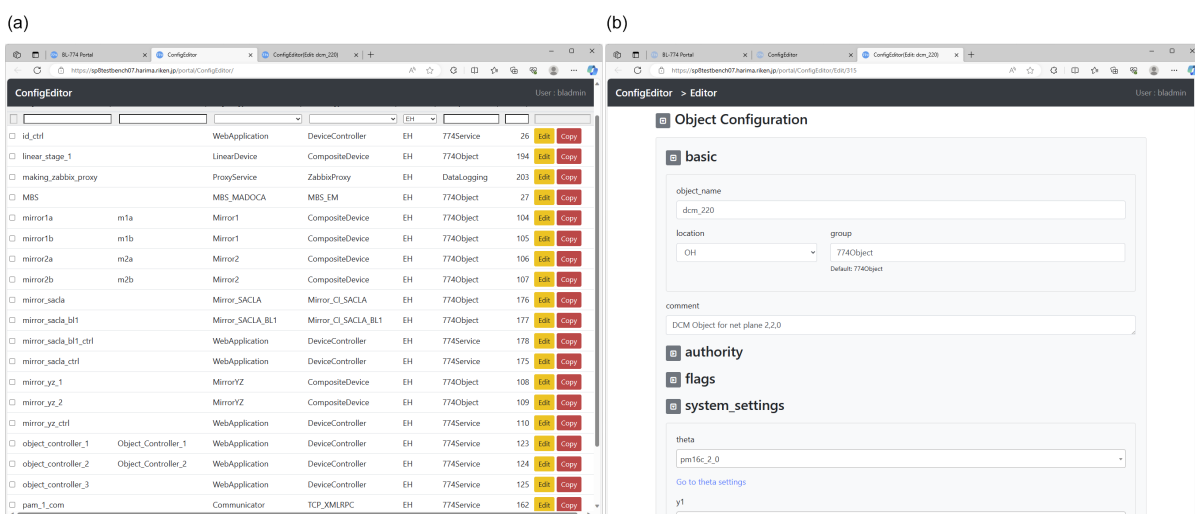


図 2 ConfigDB の Web インターフェース。(a)オブジェクトの一覧画面と、(b)編集画面の例。

の目的は外部環境を完全にエミュレートすること」<sup>[22]</sup>と捉えることができる。さらに、コンテナは、ホスト OS とリソースを共有して使用することから効率が大幅に向上し、起動や停止に要する時間も短縮されている。このことから、ユーザーは、コンフィグレーションやインストールの問題に時間を費やしたり、システムに必要な変更を心配したりすることなく、複雑なアプリケーションをダウンロードして実行できるし、開発者は、ユーザー環境の違いや依存関係の可用性について心配する必要がなくなる、という利点<sup>[22]</sup>がある。「依存関係の可用性 (availability of dependencies)」とは、ここでは、そのアプリケーションが依存関係を持つコンポーネントがどの程度、安定して持続的に動作するかという度合いを示すものと解釈できる。そして、Docker<sup>[16]</sup>は、同名の企業によって開発、公開されている、コンテナ型仮想化環境を提供するオープン・ソース・ソフトウェアである。Docker の仕組みでは、Docker コンテナ・イメージ<sup>[16]</sup>と呼ばれる、「コード、ランタイム、システム・ツール、システム・ライブラリ、設定など、アプリケーションの実行に必要なすべてのものを含む、軽量でスタンドアロンの実行可能なソフトウェア・パッケージ」があり、これが Docker エンジン<sup>[16]</sup>と呼ばれるコンポーネントで実行されることにより、Docker コンテナとして機能することになる。また、Docker コンテナを生成、実行するために、Docker Compose<sup>[23]</sup>と呼ばれる、ツール、コマン

ド体系も Docker から提供されている。774 Basic System では、Docker コンテナの持つ利点を活かし、774 Basic System のサービスや、事前にカスタマイズした環境を供給する手段としてコンテナを利用して、例えば、「774 Software Development Environment (774 SDE)」や、「774 Portable system (774 Portable)」と呼ばれるコンテナ環境を用意している。

#### 4. BL-774 のサンプル・コード

リスト 1 に、BL-774 の ecpy を用いた実験計測用プログラムのサンプル・コードを掲載する。ここでは紙面の都合上、デモ的なコードにとどめるが、実践的なサンプル・コードについては順次、BL-774 の Web サイトで公開していく予定である。また、リスト 1 のサンプル・コードを実行した時に得られる出力は、リスト 2 に示すようなものになる。

リスト 1 の特徴は、BL-774 が推奨している `asyncio`<sup>[19]</sup>形式のコーディングになっていることである。Ecpy は、機器制御の並行処理<sup>[24]</sup>を扱うコードの実装に、非同期 I/O を実現する Python ライブラリ `asyncio` を利用している。ここで並行処理とは、プロセッサが 1 つだけであるか複数であるかによらず、計算資源全体として効率的な処理の実現を図る技法である。I/O は、ファイルの読み書き、データベースへの接続、ネットワーク通信などのシステムの入出力を

```
import asyncio
import ecpy

# DCM and motor scan with signal counting
d = ecpy.DCM("dcm") # Make DCM instance
p = ecpy.PulseMotor("test_motor1") # Make motor instance
c = ecpy.Counter("test_counter1") # Make counter instance

photon_energies = [10.0, 10.1, 10.25, 10.35, 10.45, 10.5, 10.6]
positions = [-0.6, -0.4, -0.2, 0.0, 0.2, 0.4, 0.6]

async def scan():
    for ph, pos in zip(photon_energies, positions):
        # Many methods have available co-routines with prefix "cr_"
        # Move concurrently
        await asyncio.gather(d.cr_set_photon_energy(ph), p.cr_move(pos, unit="mm"))
        # Count in 0.5 second
        data = c.count("timer", time=0.5)['count'][0]
        print(f"Energy:{ph}keV Position:{pos}mm Count:{data}")

asyncio.run(scan())
```

リスト 1 BL-774 の ecpy を用いたサンプル・コード。

Energy:10.0 keV	Position:-0.6 mm	Count:10
Energy:10.1 keV	Position:-0.4 mm	Count:50
Energy:10.25 keV	Position:-0.2 mm	Count:150
Energy:10.35 keV	Position: 0.0 mm	Count:300
Energy:10.0 keV	Position: 0.2 mm	Count:450
Energy:10.5 keV	Position: 0.4 mm	Count:500
Energy:10.6 keV	Position: 0.6 mm	Count:500

リスト2 リスト1の実行結果の例。

意味する。ビームラインの機器制御の場合では、例えばフライ・スキャンにおいて可動軸の駆動中に他の計測機器へのアクセスを行う際などに、I/Oが全体の処理時間を支配する状況が発生しうる。そこで非同期I/Oでは、1つの処理フローの中で入出力の処理を開始した後に、その終了を待ち続けるだけでなく、待ち時間中に別の処理の実行を進める。一般に、非同期I/Oを実現するためのコーディングは煩雑でありスキルが必要とされる。そのためライブラリや構文によって簡潔にコーディングするための方法がさまざまなプログラミング言語において用意されている。リスト1も、`asyncio`を用いたアプリケーションのコーディングで推奨されている `async/await` 構文を用いて書かれたものである。また、ここで呼び出している `ecpy` のメソッド自体も、非同期処理として実行できるように実装されている。

なお、リスト1で使用している `ecpy` のDCMクラスには、DCMを制御するための基本的な機能のみが実装されている。ビームラインによっては、さらに複合的な操作、例えば、DCMの $\Delta\theta_1$ をピエゾで制御し、光強度のスキャン測定の結果を用いてさらに微調整を加えることも行われている。この場合でも、774 Basic Systemのソフトウェア開発環境を用いれば、`ecpy`のDCM用のクラスを継承した上で、ピーク・サーチの結果から $\Delta\theta_1$ の微調整を加えるロジック部分の記述に着手しやすい。このように、`ecpy`が直接サポートしていない機能であっても、`ecpy`の基本的な機能を利用しながら、そのビームライン固有のロジックを扱うプログラムの作成に注力できるならば、BL-774のコンセプトの実現に近づいていると行うことができるだろう。

## 5. まとめ

BL-774の基幹的なソフトウェア・システム774 Basic Systemについて紹介した。実験制御用プログラムの作成段階では、ロジックに関わる部分に注力できるよう、周辺のパーツがビームラインでの実験に適切な形、機能、規模で実装されていて、利用形態に沿って選択可能な複数のマイクロサービスとして提供されていることを紹介した。

本稿では記載しきれなかったが、BL-774では、ビームライン制御以外にも、データ収集などにおいてビームラインに関わる他のテーマにも取り組んでいる。また、BL-774は、2次元検出器システムやSPRING-8データセンターなど、現在SPRING-8/SACLAで開発中の他のシステムとシームレスに統合する予定にもなっている。BL-774を施設内の他のインフラと併せて導入することで、オンライン・データ解析に基づくフィードバック運用やビームライン外からの遠隔運用など、より高度な実験運用に対する期待が高まるであろう。今後のBL-774の発展にぜひご期待いただきたいとともに、関心を持たれた方は774 Basic Systemのコンテナ・イメージをダウンロードし触れてみていただきたい。

なお、本稿はソフトウェア・システムやプログラム開発に関する内容の都合上、いくつかのIT用語を用いた。編集委員会の意向も踏まえて、本文中で説明を試みた箇所もあるが、十分ではないかもしれない。そこでも触れたように、これらのIT用語は、既存の表現のメタファーであったり、文脈に応じて幅のある定義がなされたりする場合がある。また、技術の変遷とともに意味づけが変化していくこともある。気になられた用語については、本稿の記述にとらわれることなく、各種文献やインターネット等を通して理解を深められることを希望する。最近、話題の生成AIに聞いてみることも面白いかもしれない。もし、本稿に関心をもたれた方が、ビームライン制御への興味を深めていただくきっかけになることができれば望外の喜びである。

## 謝辞

BL-774の開発と導入にあたり、SPRING-8/SACLAのビームライン関係者、理化学研究所のエンジニアリング・チームメンバーには多くのご助言、ご協力をいただきました。厚く御礼申し上げます。

参考文献

- [ 1 ] H. Tanaka: *Synchrotron Radiat. News* **27** (2014) 23-26.
- [ 2 ] T. Watanabe and H. Tanaka: *Synchrotron Radiat. News* **36** (2023) 3-6.
- [ 3 ] K. Nakajima *et al.*: *J. Phys.: Conf. Ser.* **2380** (2022) 012101.
- [ 4 ] K. Motomura *et al.*: *Synchrotron Radiat. News*, Published online: 13 Dec 2023, doi: 10.1080/08940886.2023.2277638.
- [ 5 ] 774portable (<https://bl774-repo01.usr.common.sp8int.jp/pub/774portable>, 2023年11月22日閲覧, SPring-8施設内での公開).
- [ 6 ] Python (<https://www.python.org>, 2023年11月22日閲覧).
- [ 7 ] Jupyter (<https://jupyter.org>, 2023年11月22日閲覧).
- [ 8 ] 大橋治彦、平野馨一編: 改訂版・放射光ビームライン光学技術入門, 日本放射光学会 (2019).
- [ 9 ] M. Reddy: *API Design for C++*, Morgan Kaufmann (2011).
- [ 10 ] 上杉健太郎、星野真人: *SPring-8/SACLA 利用者情報* **26** (2021) 448-449.
- [ 11 ] A. Yasui *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **30** (2023) 1013-1022.
- [ 12 ] 隅谷 和嗣 他: *SPring-8/SACLA 利用者情報* **27** (2022) 274-279.
- [ 13 ] 安野聡、ソ オッキョン、高木康多、保井晃: *SPring-8/SACLA 利用者情報* **28** (2023) 434-438.
- [ 14 ] 大端通: *SPring-8/SACLA 利用者情報* **2** (1997) 15-17.
- [ 15 ] 古川行人、松本崇博、石井美保: *SPring-8/SACLA 利用者情報* **19** (2014) 392-395.
- [ 16 ] Docker (<https://www.docker.com>, 2023年11月22日閲覧).
- [ 17 ] ChatGPT (<https://chat.openai.com>, 2023年11月22日閲覧).
- [ 18 ] Ubuntu (<https://ubuntu.com>, 2023年11月22日閲覧).
- [ 19 ] asyncio (<https://docs.python.org/ja/3/library/asyncio.html>, 2023年11月22日閲覧).
- [ 20 ] MariaDB (<https://mariadb.org>, 2023年11月22日閲覧).
- [ 21 ] I. Gorton: *Foundations of Scalable Systems*, O'Reilly Media, Inc. (2022).
- [ 22 ] A. Mouat: *Using Docker*, O'Reilly Media, Inc. (2016).
- [ 23 ] Docker Compose (<https://docs.docker.com/compose/>, 2023年12月30日閲覧).
- [ 24 ] 例えば、B. Barney: *Introduction to Parallel Computing Tutorial*, Lawrence Livermore National Laboratory

(<https://hpc.llnl.gov/documentation/tutorials/introduction-parallel-computing-tutorial>, 2023年11月22日閲覧).

本村 幸治 MOTOMURA Koji

(国) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 050-3502-6167  
e-mail : motomura@spring8.or.jp

安田 伸広 YASUDA Nobuhiro

(公財) 高輝度光科学研究センター ビームライン技術推進室  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0831  
e-mail : nyasuda@spring8.or.jp

今井 康彦 IMAI Yasuhiko

(公財) 高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
(国) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0833  
e-mail : imai@spring8.or.jp

中嶋 享 NAKAJIMA Kyo

(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  
(国) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0992  
e-mail : kyo.nakajima@spring8.or.jp

城地 保昌 JOTI Yasumasa

(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  
(国) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0992  
e-mail : joti@spring8.or.jp



## 244th ECS meeting 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

渡辺 剛

## 1. はじめに

2023年10月8日～12日にかけてスウェーデンのヨーテボリで244th Electrochemical society (ECS) meeting が開催された。ECS meeting は電気化学分野における最大規模の会議であり、年に2回、春と秋にアメリカで開催されている。ところが、今回は上述の通り216th ECS meeting(2009年、オーストリア)以来となるヨーロッパ開催となった。この影響からか244th ECS meeting における参加者は約3,200人に達し例年の1.3倍ほど多かったようだ<sup>1)</sup>。ちなみに報告者は236th meeting (2019年、アトランタ)、PRiME2020 (2020年、COVID-19の影響で完全オンライン)に続き3回目の参加となった。

今回はスウェーデンでの開催ということで、厳しい寒さを想定して現地に赴いた。しかし現地に着くと平均気温5～10℃と「少し肌寒い」程度に落ち着いているだけでなく日照時間も10時間ほどあったので、比較的過ごしやすい環境であった。244th ECS meeting はSwedish Exhibition & Congress Centreで開催された。



写真1 244th meeting の会場となった Swedish Exhibition & Congress Centre および隣接するホテル Gothia Towers。



写真2 ヨーテボリ中央駅付近の繁華街の様子。

写真1は、会場となったSwedish Exhibition & Congress Centre および隣接するホテル Gothia Towersである。この会場はランドベッテル空港から高速バスで25分ほど移動した場所に位置する。またヨーテボリ中央駅を中心とする繁華街(写真2)からは2～3 kmほど離れており、会場付近はスポーツ競技場、遊園地や映画館といった興行施設が建ち並んでいた。さらに5～10分の徒歩圏内には美術館、博物館や図書館だけでなくGothenburg大学やChalmers工科大学などの文化的な施設も建ち並んでいて、朝夕の市街散歩はとても気持ち良かった。

## 2. 学会の内容

244th ECS meeting では口頭、ポスター発表ともに現地での発表が求められた。一方で希望者は動画、ポスターやスライドといった補助資料を提出することができた。これらの資料は学会初日までにweb上へ公開され、学会参加者は自由に閲覧することができる措置が取られている。この措置は先のPRiME2020以来、継続しているようである。また口頭発表者に関しては講演資料の事前提出が求められていて、当日は

クラウド上に保存された事前提出資料を用いて発表した。

ECS meeting では研究分野が15ほどに大別されており、各研究分野で細分化されたセッションが多数存在する。ECS meeting で対象となる研究分野は、電気化学分野にとどまらず電子・光デバイスといったエレクトロニクス分野（有機・無機）にまで及ぶ。今回のECS meeting では全68セッションが設けられており、会期中は朝8:00から夜20:00（最終日は18:00）にかけて何らかのセッションが開催されていた。さらに各セッションの合間を縫うように、Opening Reception（初日19:00-21:00）、ECS presidentによるWelcome talkおよびZ. Bao氏によるPlenary talk（2日目16:30-18:00）、ポスターセッション（2、3、4日目18:00-20:00）といった学会全体のイベントが催された。報告者は本会議において燃料電池分野を中心に二次電池、有機・無機半導体や航空宇宙といった研究分野の情報収集を行った。以下では、特に今回の学会で印象に残った講演を紹介していく。なお報告に際しては、報告者の興味・関心で聴講した分野に偏りが生じていることをご容赦いただきたい。

**初日：**この日はI01D: Non-PGM Catalysts & Pt Cathode Catalystsセッションを聴講した。本セッションではPaul Scherrer InstituteのThomas J. Schmidt氏による招待講演が行われた。Thomas氏は薄膜回転ディスク電極（TFRDE）法と呼ばれる電気化学測定手法で多数の成果を創出してきた研究者である。講演では、TFRDE法による燃料電池の触媒研究の発展とともにThomas氏の25年間にも及ぶ研究の成果が紹介されていた。またThomas氏は放射光も積極的に活用している研究者で、本講演でもX線吸収分光（XAS）測定の事例が紹介されていた。本会議での報告者の発表ネタはThomas氏らが先駆的に実施していた測定技術を参考にした経緯もあり<sup>2)</sup>、Thomas氏の講演は報告者にとって勉強になる点が多かった。続いて報告者が“Effect of dissolved gases on Pt nanoparticle catalysts investigated by in situ SAXS, XAS measurements”という題目で口頭講演を行った。なお報告者の講演では、先のThomas氏が座長を務めてくださっていた。講演では放射光の測定

技術や考察内容に関する質問を受けた。実験内容と結果の両方で、電気化学分野の専門家に対してそれなりの反響があったので安心した。

**2日目：**午前中にA06. Batteries and Energy StorageおよびG02. Electronic Materials and Processingのセッションを聴講した。Rhode Island大学のBrett L. Lucht氏からは、リチウムイオン電池のsolid electrolyte interphase（SEI）被膜の評価に関する招待講演が行われた。SPRING-8でもSEIは硬X線光電子分光（HAXPES）測定などで評価されているが、Lucht氏らのグループもNational Synchrotron Light SourceにおいてHAXPES、XASといった手法でSEIを評価しているようであった。続いてStanford大学のZ. Bao氏から、高分子を組み合わせたSiアノード材料開発に関する研究紹介があった。Bao氏は有機エレクトロニクス分野において著名な研究者として知られている。最近Bao氏は自身らが有するソフトマテリアル技術をリチウムイオン電池用の材料開発へ展開しているようで、講演ではリチウムイオン電池に用いられるバインダーや電解液などの材料開発について紹介していた。後述の通りBao氏は本会議のPlenary talkにも登壇しており、本学会を通じて非常に多岐に渡る研究成果を紹介していた。特に本講演では、Siアノード粒子と相互作用することで自己修復するポリマーの開発事例が印象に残った。続くG02のセッションでは、報告者と共同研究を実施している明治大の小椋グループによる講演を2件聴講した。2件の講演はいずれも、次世代CMOS型デバイスとして期待されるSiGe薄膜に関する講演であった。

午後からは、I06: Accelerated Discovery & Development of Energy Materialsのセッションを聴講した。Jülich原子力研究所のS. Cherevko氏からは、自身らが開発したハイスループット電気化学評価システムに関する講演が行われた。Cherevko氏らのグループでは、触媒の調整・塗布から性能評価に至るプロセスを全自動で実施可能とするシステムを開発した。このシステムでは自動ピペッターと自動xyzステージの組み合わせによって任意の場所・条件で基板上に触媒を塗布することが可能で、塗布された基板は電気化学セルの位置まで自動で搬送されたのちに電

電気化学セルとドッキングする。これらの仕組みによって、彼らは触媒の塗布・評価を全自動で可能としていた。さらに講演では、本システムが最大 50 水準に塗り分けられた触媒の評価をハイスループットで実施できていることを示していた。一方で電気化学セルに着目すると、電解液の循環が可能でなく誘導結合プラズマ質量分析装置が組み込まれている点など興味深い点が多かった。このため聴衆からの反響も大きく、講演後はシステムの仕様、制御に関するコメントや質問が相次いでいた。

16:30 からは Plenary talk に先駆けて、電気化学分野の発展に寄与してきた研究者への表彰が行われた。続いてヨーテボリ市長より歓迎の挨拶が述べられた後、アメリカ電気化学会の President である Gerardine 氏による Welcome talk が行われた。その後、Z. Bao 氏が“Skin-inspired Materials for Sensing, Soft Integrated Circuits and Next Generation Batteries”と題して Plenary talk を行った。講演で Bao 氏は、Sensors、Circuits、Advanced battery という 3 つのトピックに分けて最新の研究紹介を行っていた。Advanced battery のトピックに関しては、上述に記載した午前中の内容を中心に紹介していた。また Sensors、Circuits のトピックでは電子皮膚に関する研究紹介が印象的であった。Bao 氏らが開発した電子皮膚では、電気信号をラットの脳を介して神経へ伝えることを可能とし、ラットの身体動作を自由に制御できることを示していた。さらに電子皮膚に与える信号強度 (=電子皮膚に与える圧力) に応じて、ラットの身体動作量が制御できる事を示していた。講演は報告者の理解が及ばない事例も多数存在したが、全体を通じて興味深い成果が多かった。

**3 日目、4 日目** : G02 に加えて、I01E: Alkaline Membranes and Devices、L08: Electrocatalytic Carbon Dioxide Reduction、およびポスターセッションを聴講した。G02 のセッションでは、明治大の小椋氏から二硫化タングステン ( $WS_2$ ) の研究に関する招待講演が行われた。小椋氏によると、 $WS_2$  は次世代のチャネル材料に応用が期待されている二次元積層材料のようである。同研究グループでは毒性の低い硫黄前駆体を用いた  $WS_2$  の成膜技術を確立しているよ

うで、本講演ではこの手法で作製した  $WS_2$  薄膜を X 線光電子分光、ラマン分光、透過電子顕微鏡で評価した結果について報告していた。講演後は  $WS_2$  薄膜の結晶成長に関する質疑が出ており、小椋氏と聴衆の議論は勉強になった。

両日の 18:00-20:00 ではポスター発表と企業展示を聴講した。写真 3 にポスターおよび企業展示会場の様子を示す。PI-KEM 社のブースでは、卓上型の乳鉢付き粉末試料混合機 (MSK-SFM-8) が展示されていた。コロナ禍を経て試料作製の自動化・ハイスループット化への動きが活発になっていて、本装置の需要も急激に増していると営業担当が話していた。前述した Cherevko 氏の講演状況も鑑みると、試料作製の自動化・ハイスループット化に対する関心がとても高いことがわかる。次に地元スウェーデンの会社で種々の電気化学セルを作製している redox.me 社のブースを訪問した。この会社ではラボの電気化学セルだけでなく、放射光実験専用の電気化学セルも納品しており展示ブースにおいても放射光実験用の電気化学セルが展示されていた。会場には営業だけでなく技術 (主に設計担当) の社員も参加していて、会場では電気化学セルの設計に関連する情報交換を行うことができた。なお今回ポスター発表の総数は 3 日間で 763 講演ということで、ポスターセッションが始まると会場内は多くの参加者で賑わっていた。ポスターセッションでは、燃料電池触媒の評価に関する講演を中心に多数聴講した。



写真 3 ポスターセッション開始前のポスターおよび企業展示会場の様子。ポスターセッションが始まると、会場全体は (うんざりするほど) 異様な熱気に包まれていた。



**最終日：**一日を通じて Z02. Electrochemistry in space のセッションを聴講した。京都大学の福永氏による招待講演では「燃料電池の技術は宇宙工学技術に端を発する」というメッセージを発端に、電気化学分野と宇宙開発の深い結びつきを示していた。本セッションに参加した当初は電気化学と宇宙開発の間にもどのような接点があるのか疑問を抱いていたが、福永氏の講演を通じてむしろ両者には深い関係があるのだと自分の考えを改めることとなった。続いて Colorado 鉱山大学の J. Girschik 氏からは、ポリヨウ化亜鉛フロー蓄電池開発に関する研究紹介が行われた。Girschik 氏は、日照などの外的要因に依存せずに宇宙ステーションや宇宙船の様な構造物に対して安定かつ大規模にエネルギーを供給できるシステムとして蓄電池の開発に取り組んでいる。彼らは高い安定性とエネルギー密度を備えるポリヨウ化亜鉛フロー蓄電池に着目していて、講演ではポリヨウ化亜鉛フロー蓄電池の特徴を詳細に紹介していた。講演を通じて、Girschik 氏が無重力下での技術や知識（例えば、結晶成長や、液体の流れ、ガスや気泡の形成過程の制御など）が人類全体として不足していると指摘していた点が印象に残った。Z02 セッション全体を通じても頻繁に「無重力、低重力」というキーワードが頻繁に飛び交っていたことから、今後の重要な研究テーマになるような気がした。また Faraday Technology, Inc 社の T. Hall 氏は、無重力下 In situ 電気化学測定技術に関する成果を報告していた。Hall 氏は航空機による放物線飛行で無重力下を形成し、その間に電気化学反応を実施して  $H_2O_2$  が生成していく過程を評価していた。Hall 氏によると航空機では約 20 秒間の無重力状態を形成できるようで、彼らは 1 課題につき 20 秒 × 30 サイクルの無重力下実験に取り組んでいた。講演では彼ら自身初の無重力実験時の動画も放映されており、実験当時の興奮や緊張が聴衆にも良く伝わっていた。Hall 氏は無重力実験のほかにも、火星での運用を想定した酸素生成装置の開発など先駆的な事例をいくつも紹介しており、どの話題も聴衆からの反響が大きかった。

### 3. おわりに

本稿では、244th ECS meeting の会議内容を紹介

した。報告者は過去 2 回 ECS に参加していたことは冒頭で述べたが、初回の 236th ECS meeting は台風上陸に伴う旅程の短縮、2 回目の PRiME2020 は完全オンライン形式とイレギュラーな学会参加が続いていた。そのなかで今回は 3 回目にして、事前の計画通りに全日参加できた点は素直に良かったといえる。一方で会議以外に視点を変えると、COVID-19 の影響による飛行機搭乗手続きの一部オンライン化、ウクライナ情勢の影響で日本からヨーロッパへの航路がロシアを通過せずに北極圏を通過したことや、円安やインフレによる現地物価の高騰など、世界情勢の急激な変化を随所で感じる学会参加であった。

次回の 245th ECS meeting は、2024 年 5 月 26 日～30 日にアメリカのサンフランシスコで開催される予定である。現地では、次回の 245th ECS meeting に加えて 2024 年 10 月 6 日～11 日にハワイで開催を予定している PRiME2024 も大きく宣伝されていた。常夏ハワイのビーチが印刷された PRiME2024 のフライヤーを肌寒いヨーテボリの屋外で眺めていると、「来年の秋も現地で参加したいなあ」という思いが沸き上がってくるのを感じた。

### 参考文献

- [1] <https://issuu.com/ecs1902/docs/2023-göteborg-guide-01-with-covers-final>
- [2] T. Binniger *et al.*: *J. Electrochem. Soc.* **163** (2016) H906-H912.

### 渡辺 剛 WATANABE Takeshi

(公財) 高輝度光科学研究センター  
放射光利用研究基盤センター 産業利用・産学連携推進室  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0802  
e-mail : t5511001@spring8.or.jp

## MRM2023/IUMRS-ICA2023 Ground Meeting 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  
木下 豊彦、櫻井 吉晴

## 1. はじめに

2023年12月11日～16日に、京都の国際会館(写真1)を会場として、表記の国際会議が開催された<sup>1)</sup>。MRS-J (Material Research Society Japan) が主催団体となり、物質・材料科学の進展について議論する会議である。また、今回の会議は、International Union of Material Research Societies (IUMRS) のメンバーのうち、アジアのメンバーが毎年主催する会議との合同開催ともなった。前回の日本でのIUMRS-ICAは2014年に福岡で開催されたとのことである。前回のMRM<sup>2,3)</sup>は、横浜のパシフィコノースで開催され、その時はオンラインと対面とのハイブリッド開催であったが、今回は原則として対面形式の会議となり、活況を呈していたように思う。今回は九州大学の白谷正治教授が、組織委員長を務められ、実務は横浜国立大学の鈴木淳史教授が責任者として活躍された。我が国の材料科学系の学会、成果創出が縮小傾向にある中、分野横断的に関連学会の協力を仰ぎ、この会議を起爆剤に日本の材料科学の発展を促したいという目的は前回および前々回<sup>4,5)</sup>同様である。また、カーボンフリー社会の実現などの環境問題や持続可能性社会の実現に向けたトピックスを考慮しつつプログラム編成も組織委員会で議論された。

会場内では大ホールや、ポスター&企業展示会場を含め、22部屋ほどが貸切られており、A～GとSまでの8クラスター、各クラスターの中には4～5個のシンポジウムが企画された。MRMでは、少し異なる分野間での連携を促進することもその目的とされており、同一クラスターでは、Keynote speaker を推薦して合同セッションを行う形式は前回までと同様である。また、各シンポジウムは、それぞれ独立に口頭発表、およびポスター発表を設けた。

今回、(公財)高輝度光科学研究センター(JASRI)が中心となり、A3 (Materials Research by Advanced



写真1 会場となった京都国際会館

analysis: Synchrotron radiation and Neutron methods) とB2 (Advanced Analysis for Fuel Cell Materials and Technologies) の2つのシンポジウムを企画した。それぞれ、A (Fundamentals) とB (Energy) クラスターに含まれるシンポジウムである。

今回の会議は、対面を原則とし、特に基調講演、招待講演者には会場に来ていただいたの講演を依頼する形をとった(シンポジウムによっては口頭発表をZoomで行っていた会場もあった)。また、基調講演者を選定する際に、なるべくカーボン・ニュートラルや持続可能性社会の実現に関する話題につながるような配慮もなされた。会場が京都であったこと、対面を原則とした会議であったことから、これまでの会議よりも非常に活発な様子が感じられた。2,000名を超える参加者があり、海外からの参加者は550名を超えたということであった。講演数は、1,860件であった。

京都国際会館は60年代後半に建設が始まった古い建物であるが、周りは山に囲まれ、宝ヶ池にも面した庭園が整備されており、会議に集中できる良い環境である。11日の午後から会議が始まり、組織委員長の九州大学の白谷正治教授の挨拶ののち、MRS-Jの会長である青山学院大学の重里有三教授、IUMRSを代表して

Oswaldo N. Oliveira 教授 (Universidade de São Paulo, Brasil)、ヨーロッパの MRS である E-MRS を代表して Juan Ramón Morante 所長 (IREC, Spain) が祝辞を述べられ、本格的な国際会議の様相を醸し出していた。

## 2. Plenary Talks

本会合における Plenary Talk は 7 件の講演が予定されていた。ガザ地区の紛争の影響で、イスラエルに関係の深い Alex Zunger 教授 (University of Colorado Boulder, USA) の来日がかなわずキャンセルとなったが、すべて印象深い講演であった。A3 シンポジウムからは、放射光を利用した様々な分光研究で興味深い成果を発表されている Kai Rossnagel 教授 (Kiel University, Germany) を推薦し、“Innovation in Materials and Soft X-ray Analytics: From Quantum to Networked” と題したご講演をいただいた (写真 2)。同時刻に別会場ではランチョンセミナーが開催されていたが、会場には 180 名余りの聴衆が集まった。Rossnagel 教授は、様々な物質の電子状態を、吸収分光、光電子分光で測定されている。本講演では、教授が研究対象とされている、遷移金属カルコゲナイド系の層状物質を重ねた時に現れる新しい物性、例えばモアレパターンが生じるとどのように興味深い物性が現れるのか、さらに、量子力学的に興味深い物性を示す物質の組み合わせ、ここではネットワークという言葉が使われていたが、それによって実際にどのように興味深い物質材料ができてくるのかなどを紹介された。現在ホットなトピックスとなっている様々な物性を示す物質と、それによって起こるイノベーションをうまくまとめられた講演で印象深く、会場からも時間を少し超過するまでいくつかの質問が出された。

SPring-8 を利用して様々な業績を発表されている東京大学の伊藤耕三教授は、電気自動車のボディや環境にやさしい釣り糸の開発など、専門外の聴衆にも興味を引くような話題を提供されて、多くの関心を集めていた。

初日の夕方には Business Lecture として堀場製作所の足立正之社長が登壇され、企業の立場として様々な産学連携を推進されている事例を紹介された。



写真 2 Rossnagel 教授の Plenary Talk

## 3. A3 Symposium “Materials Research by Advanced analysis: Synchrotron radiation and Neutron methods”

本シンポジウムでは、放射光、中性子、ミュオンなど大型施設における量子ビームを用いた物質材料の先端的な解析についての様々な講演を行っていただき、それぞれのビームの相互利用などについても議論の対象とした。12月12日～15日まで9個のオーラルセッションおよび、一つのポスターセッションの枠で議論がなされた。シンポジウムのオーラルセッションの会場には常時30名程度の聴講者が集まり、海外からの参加者の割合も比較的多かったように思う。また、国内に留学している外国籍の参加者も何名か見られ、英語での発表が、彼らにとっても情報交換のために非常に良い機会となっていることがうかがえた。以下に示す9件の招待講演、24件の口頭発表 (うち1件は残念ながらキャンセル)、30件のポスター発表があった。

12日の午前中の最初には CROSS 東海の柴山充弘センター長に招待講演をお願いした。“DNA hydrogels with predictable and controllable viscoelastic properties” と題し、生体親和性のあるゲル状物質の話題を講演された。引き続いての口頭発表ではポリマーやガラスなど、非結晶物質材料に対し様々な解析手法での研究事例が紹介された。午後には2つのセッションが実施された。招待講演者の Javier Campo 博士 (Spanish National Research Council; CSIC, Spain) は“New incommensurate magnetic phases in the multiferroic compound  $MnCr_2O_4$ ” と題し、放射光、中性子による解析でマルチフェロイックサンプルの研究の紹介をされた。同じく招待講演者の Alicia Manjón Sanz 博士 (Oak Ridge National Laboratory, USA) は、“Examining the structure-



property relationships of environmentally friendly functional ceramics using powder diffraction”として、ピエゾ効果を示す物質など機能性セラミックの研究事例を紹介された。放射光、中性子の相補性を強調されていた。口頭発表ではポリマー、電池材料など様々な物質に対し、放射光、中性子、ミュオンを利用した成果が報告された。

13日の午前中は物質のスペクトルの角度分布を測定する手法がメインのセッションとなった。招待講演者の Olena Fedchenko 博士 (Johannes Gutenberg University of Mainz, Germany) は“ToF-MM as a comprehensive tool for the analysis of the electronic and geometrical structure of materials”として、DESY や DIAMOND などで開催されている飛行時間型の Momentum Microscope 実験の実際とそれを利用した角度分解光電子分光によるバンドの可視化、光電子回折によるドーパントサイトの解析の実例などを示された。分子科学研究所の松井文彦教授は、UVSOR で立ち上げ中の Momentum Microscope の紹介をされた。その後の口頭発表では蛍光 X 線ホログラフィー、光電子ホログラフィー、中性子ホログラフィーなど関連する内容の報告があった。午後の2つのセッションでは、3名に招待講演をお願いした。Marc de Boissieu 博士 (Université Grenoble Alpes, CNRS) は、“Thermal conductivity, lattice dynamics and phonon lifetime in structurally complex materials”と題し、放射光や中性子散乱を利用した物質のフォノンダイナミクス研究の実例を紹介された。Alexander Föhlisch 教授 (Helmholtz Zentrum Berlin, Germany) は、“How exchange-energy thresholding of electron-phonon spin-flip scattering governs ultrafast (de)magnetization: Selective determination from core-hole-clock RIXS”というタイトルで磁性体の内殻励起に伴うスピントリップ現象とその寿命に関し、発光分光 (共鳴非弾性散乱) を利用した研究の紹介を行った。東京理科大学の小飼真人教授は、“Automated interpretation of magnetic domain image using feature extended Landau free energy model”として、パーシステントホモロジーの手法を用いて、欠陥のある磁性体における磁化反転の観察への応用を講演された。そのほかの口頭発表では、X線非弾性散乱を用いたフォノンの解析、XAFS や解説を用いた構造解析、自由電子レーザー-SACLA を



写真3 A3 シンポジウムの様子

用いた磁化ダイナミクスなどの話題などが報告された。

14日午前中はポスターセッションが実施された。ポスターセッションでは、発表賞 (事前の書面審査と当日の発表審査の2段階方式) が設けられたこともあり、若い人の講演が多かったように思う。特に茨城大学の量子線専攻の学生たちが何名か参加しており、中性子を利用した研究をいくつか発表されていた。また、物質・材料研究機構の石井真史博士からは、データベースに関する興味深い報告があった。石井氏はA3のみならず他のシンポジウムでも報告をされており、今後のデータ利用に関してのコミュニティの関わり方が重要である旨を強調されていた。

15日の午前中は主に構造材料に関する口頭発表のセッションを設けた。機械学習のほかトモグラフィ、ラミノグラフィといったイメージングの成果が報告された。午後のセッションでは主に磁性に関わる物質に関する討論が行われた。2件の招待講演を依頼した。Hendrik Ohldag 博士 (Lawrence Berkley National Laboratory, USA) は、“Visualizing Spin Currents with X-ray Microscopy”として、軟エックス線顕微鏡を用いたスピントロニクス研究の進展について講演された。Advanced light Source (ALS) の顕微鏡ビームラインの将来についても触れられていた。東北大学の岡本聡教授は、“3D visualization of the magnetic domain structure inside advanced Nd-Fe-B sintered magnets with Tb-diffused fine particles using X-ray magnetic tomography”として、SPring-8 で開発されてきた強磁性元素の磁気円二色性を利用した3次元磁区構造の観察について講演され、外国の研究者からの関心を集めていた。そのほかの口頭発表では、XMCD、スピン分解光電子分光による研究のほか、ミュオンによるスピン緩和の研究成果なども報告されていた。



各セッションでは、磁性で興味深い物質、ポリマー、ゲル、ガラスなどの非晶質物質など比較的関連のある物質のトピックスを集め、それらに対する様々な量子ビームを利用した分析についての議論が行われた。筆者にとっても普段あまりなじみのない中性子やミュオンで得られる情報について知見を得ることができ、今後の大型施設間の連携においても意義深いセッションになったことと思う。また、海外からの招待講演者からは、A3シンポジウムのみならず、ほかのシンポジウムの講演も大変興味深く、A3に常時参加できなかったことに対するお詫びのようなコメントも多数あった。これらは、むしろMRMのGrand Meetingの趣旨に合致するものであると思われ、今後さらに連携研究などが深まっていく機会になることを期待したい。

#### 4. B2 Symposium: “Advanced Analysis for Fuel Cell Materials and Technologies”

本シンポジウムは、Cluster B: Energyの下、燃料電池材料・技術の分析・解析をテーマとして開催された。カーボン・ニュートラルに向けた取り組みが世界的な規模で加速される中、量子ビームを用いた先端分析・解析技術が注目されている<sup>6)</sup>。12月13日、14日の2日間にわたって開催された本シンポジウムでは、合計で44件の発表があった。その内訳は、国内24件、海外20件（アジア（日本を除く）12件、欧州4件、米国4件）で、同研究分野の世界的な関心の高まりを反映して、海外機関からの発表が多いシンポジウムであった。

12月13日の午前は、今井英人博士（FC-Cubic）のOpening Remarkの後、山梨大学の内田裕之教授のシンポジウム・キーノート講演で始まった。講演内容は、Pt合金触媒の研究開発最前線の成果がテーマであり、燃料電池Pt合金ナノ粒子触媒において、安定で均質なPtスキン相の形成の重要性が強調された。単結晶電極を用いたX線散乱、XPSの研究、燃料電池の耐久性向上に不可欠な、OHラジカルの抑制機構の研究、などの成果報告があった。引き続き、2件の口頭発表があった。X. Xie氏（Charles University, Czech Republic）は、PtNiナノ粒子にAuを3-15%添加することで安定性が向上することを報告した。一方でAu添加により触媒活性が低下することから、最適なAu添加量を光電子分光による電子論的理解と組み合わせて報告した。Thi Ha



写真4 B2シンポジウム・キーノート講演の様子

My Pham氏（EPFL, Switzerland）は、 $\text{IrO}_2$ 、 $\text{RuO}_2$ に代わる酸素還元触媒  $\text{FeCo}$  酸化物のその場合成について報告した。電子顕微鏡観察、電気化学測定、オペラント・ラマン分光を用いて、FeがCoを置換することで酸素還元ポテンシャルが低くなることを報告した。

12月13日の午後は、3件のClusterキーノート講演に引き続き、本シンポジウムを含むポスターセッションがあった。触媒、電解質膜、量子ビーム計測に関する24件の発表があり、活発な議論と意見交換が行われた。

12月14日の午前のセッションは、電解質膜・アイオノマーの解析が主であった。Ahmet Kusoglu博士（LBL, USA）は燃料電池の耐久性の要となる電解質膜について放射X線による評価を報告した。小角X線散乱プロファイルのアイオノマーピークに着目した解析、斜入射配置での小角・広角X線散乱の有用性とX線異常散乱の活用についての報告があった。Yao Yang博士（UC Berkeley, USA）はオペラント・走査型透過電子顕微鏡観察と放射X線計測の併用によるアニオン交換膜形燃料電池用3d金属酸化物触媒の報告を行い、CoとMnのシナジー効果によるプロトン共役電子移動機構を提案した。立命館大学の折笠有基博士は、Ceクエンチャーの移動の様子を高エネルギー・マクロビーム蛍光X線分析法で観測し、各条件下でのCe拡散を議論した。本手法により、電解質膜の面直方向をサブミクロンの空間分解能で解析した。Jin Young Kim博士（Hydrogen Fuel Cell Research Center, KIST, Korea）は、電解質膜用のPFSA材料開発について講演をした。CROSSの鈴木淳市博士は小角中性子散乱によるカーボン担体、アイオノマーの構造解析を報告し、コントラストバリエーションによる湿度依存性の解析を議論した。大阪工業大学の平井智康博士は、膜の引張応答下での小

角 X 線散乱の結果から電解質膜の劣化を議論した。

12 月 14 日の午後前半セッションは、液水に関する講演が主であった。豊田中央研究所の瀬戸山大吾博士は中性子 TOF (Time-of-Flight) 法による中性子イメージングの報告をした。実機レベルの燃料電池セル中の液水と氷を識別した観察の結果について議論した。名古屋大学の松井公佑博士は、放射光 X 線イメージングの結果を報告し、加湿条件下での液水の可視化を議論した。Efrain E. Rodriguez 教授 (University of Maryland, USA) はペロブスカイト酸化物の酸素取込・放出過程の構造変化を放射光 X 線、中性子、電子顕微鏡で観察した結果を報告した。

12 月 14 日の午後後半のセッションは、Nozomi Shirato 博士 (ANL, USA) の Soft X-ray Scanning Tunneling microscopy の報告で始まった。エネルギー関連材料の環状分子の構造イメージング、化学状態イメージング、電子状態イメージングの可能性を示した。Arno Bergmann 博士 (Fritz-Haber-Institute, Germany) はオペランド放射光計測による電気化学的界面の構造について講演した。X 線回折、X 線吸収等を併用したマルチモーダル計測の重要性を強調した。Feng Ryan Wang 博士 (UCL, UK) はハイエントロピー合金のリガンドの歪みの影響について、電子顕微鏡、X 線吸収分光、共鳴非弾性 X 線散乱を用いた研究について報告した。Jessie Manopo 氏 (Institut Teknologi Bandung, Indonesia) は V ベース単原子触媒の可能性を計算に基づいて報告した。

全体をとおして、常時 30 名前後の聴衆が各セッションに参加しており、コロナ禍で開催された MRM2021 のシンポジウムに比べて活発な議論がなされ、燃料電池材料・技術に関する分析・解析分野での国際交流にも貢献できたシンポジウムであった。

## 5. 終わりに

会議終了後、何名かの参加者が SPring-8 キャンパスを訪れた。そのうち、Olena Fedochenko 博士 (Johannes Gutenberg University of Mainz, Germany) と、Leira Noohinejad 博士 (DESY) には、それぞれ第 307 回と 308 回の SPring-8 セミナーでの講演をお願いした。MRM 国際会議期間はビームタイム中であったため、会議に参加できなかった研究者とも貴重な情報交換、交流が行われたようである。

今回は、2 年後の 2025 年 12 月 8 日～13 日、前回同様横浜のパンフィコノースで開催される予定である。

最後に、本シンポジウムをオーガナイズするにあたりスポンサーになっていただいた組織・会社に感謝申し上げます。まず、(公財) 高輝度光科学研究センターには会議全体のスポンサーをお願いした。A3 シンポジウムには (公財) 高輝度光科学研究センター、SPring-8 利用推進協議会のほか、ツジ電子 (株)、真空光学 (株) および MB Scientific AB にご支援をいただいた。B2 シンポジウムでは、(公財) 高輝度光科学研究センター、SPring-8 利用推進協議会、高エネルギー加速器研究機構、FC-Cubic より Symposium Sponsor としてご支援いただき、また燃料電池実用化推進協議会、燃料電池開発情報センター、SPring-8 ユーザー共同体、SPring-8 利用推進協議会、日本放射光学会、日本中性子科学会、中性子産業利用推進協議会より Cooperating Organization としてご支援をいただいた。感謝を申し上げます。

## 参考文献

- [1] <https://mrm2023.jmru.org/>
- [2] <https://mrm2021.jmru.org/>
- [3] SPring-8/SACLA 利用者情報 Vol.27, No.1, p.20.
- [4] <https://mrm2019.jmru.org/>
- [5] SPring-8/SACLA 利用者情報 Vol.25, No.1, p.33.
- [6] [https://www.nedo.go.jp/library/battery\\_hydrogen.html](https://www.nedo.go.jp/library/battery_hydrogen.html)  
(NEDO 燃料電池・水素技術開発ロードマップ)

## 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 : 0791-58-0803 ext. 3219  
e-mail : toyohiko@spring8.or.jp

## 櫻井 吉晴 SAKURAI Yoshiharu

(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 : 0791-58-0803 ext. 3803  
e-mail : sakurai@spring8.or.jp

# Conference report: 10<sup>th</sup> Annual Ambient Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy Workshop

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

Okkyun SEO

## 1. Introduction

As COVID-19 is gradually ending, many academic societies are reverting back to onsite workshops from virtual ones. The 10<sup>th</sup> Annual Ambient Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy Workshop was held onsite at the Chang Yung-FA Foundation (CYFF) International Convention Center in Taipei, Taiwan, from December 5 to 8, 2023. This workshop is held annually under the single topic of Ambient Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy (AP-XPS). It is a significant event as it garners much interest in AP-XPS. Furthermore, with the construction of a new AP-XPS beamline, the AP-XPS workshop is expected to grow even more. Over 100 researchers, including approximately 30 oral and 30 poster presenters, attended this workshop and

shared the latest research trends and beamline upgrade information. Unfortunately, researchers working in China could not participate in this workshop as an onsite.

## 2. Workshop

The workshop started with a speech by Dr. Chai-Hung Hsu at the National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC) in Taiwan. This workshop's plenary talk was given by Prof. Anders Nilsson from Stockholm University, Sweden, with the title "Ambient XPS Studies of CO/CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub> Catalytic Reduction Reactions". His research focused on surface science and shared insights on the Haber-Bosch process, which interests people in reducing CO<sub>2</sub> gas, the primary cause of greenhouse gases, and matching components to manufacture



Figure 1 Group photo of 10<sup>th</sup> Annual Ambient Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy workshop at the CYFF international convention center.



new energy sources. Despite the high temperature and pressure required for the Haber-Bosch process, he experimentally showed that it is possible even at 100 mbar  $\sim$  1 bar on a well-arranged Fe single crystal surface. He conducted the AP-HAXPES (Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy) experiments at the P22 beamline of PERTA-III, Germany, to understand the surface reaction process and mechanism. Although most surface reactions in a single crystal were observed using soft X-ray techniques, it was interesting to use HAXPES to observe reactions under high pressure. He performed AP-HAXPES experiments at the total reflection region using grazing incident geometry to observe the surface-sensitive area of a single crystal.

Prof. J. Knudsen of NanoLund/MAX IV laboratory, Sweden, presented research results on "Probing minority sites and their activity using chemical perturbations and Fast Fourier Transformed Ambient Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy". His research aimed to determine the reaction results of gas reactions that occur in a repeated gas environment as a function of time by using FFT of C 1s and O 1s spectra while changing the CO: O<sub>2</sub> gas ratio in a Pd (100) single crystal. The study analyzed the periodic weak signals of the surface CO gas phase and CO<sub>2</sub> gas phase on

the Pd (100) surface using FFT to determine the time at which the reaction occurred. This technique could be useful in observing the kinetics of gas reactions.

Dr. Slavomir Nemsak from the Advanced Light Source in the United States presented research results on "Correlating Chemical and Morphological Transformations through Multi-Modal X-ray Characterization". This method was a study on a method that can be measured simultaneously by introducing grazing incident small angle X-ray scattering (GI-SAXs) to the existing AP-XPS measurement method. It was a useful method to observe changes in both the electronic and crystal structure that can occur in the operation environment. In particular, because the BL46XU beamline uses the characteristic of hard X-ray, we could be applied to multi-modal X-ray techniques of the AP-HAXPES and AP-I powder X-ray diffraction (XRD).

One of the interesting highlights of the workshop was the presentation given by SPECS and Scienta Omicron, who manufacture AP-XPS equipment. They introduced new AP-XPS equipment that can operate even at high pressure and measure liquid conditions. One of the impressive features of the system was the ability to switch from a soft X-ray source (Al K $\alpha$ ) to a hard X-ray source (Cr K $\alpha$ ) with just a single



Figure 2 Group photo of 10<sup>th</sup> Annual Ambient Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy workshop in front of TPS at NSRRC.



button. They also showcased operation and analysis software that is easy for users to operate.

During the final day of the workshop, we had the opportunity to visit NSRRC. As part of the tour, we visited Taiwan Light Source (TLS) and Taiwan Photon Source (TPS) and attended a closing presentation by Dr. Yasumasa Takagi from JASRI. Dr. Y. Takagi presented research results on "Development of the ambient pressure hard X-ray photoelectron spectroscopy in BL46XU at SPring-8". During the presentation, he announced the improvement of energy resolution using a double channel-cut monochromator (DCCM). He shared detailed information on BL46XU beamlines, such as creating focused X-ray beams through the use of Wolter mirrors. He also explained the difference in photoelectron intensity loss between the 30  $\mu\text{m}$  diameter and rectangular 20  $\times$  80  $\mu\text{m}^2$  aperture. Furthermore, he presented full atmospheric HAXPES results, measured with the chamber open, which demonstrated that XPS can be measured in air, contrary to what is stated in the textbook that it can only be measured in ultra-high vacuum. I found this result to be surprising and interesting.

After Dr. Y. Takagi's presentation, the 11<sup>th</sup> Annual AP-XPS Workshop location was announced in an invitation video by Prof. Susumu Yamamoto from Tohoku University, Japan. It will be held at the newly built NanoTerasu in Sendai, Japan, from December 3 to 6, 2024. Since it is being held in Japan, I hope it will be a successful workshop, and I hope to participate in the next workshop as well.

### 3. NSRRC tour and sightseeing

After that, there was a visit to the TLS and TPS facilities. Those are located with two light sources side by side. The fact that Taiwan has two synchrotron radiation research facilities shows that Taiwan scientists are serious about synchrotron radiation research fields, considering that South Korea currently only has one synchrotron radiation facility in Pohang. We were able to get a glimpse of Taiwan's developing synchrotron X-ray technology through a tour of the powder XRD, X-ray absorption fine structure, soft X-ray spectroscopy, and AP-XPS beamlines.

After finishing the 4-day workshop schedule, I headed to

a famous night market called Shilin in Taipei. This night market was crowded with tourists and young people. I had stinky tofu and drank watermelon juice, brown sugar milk tea, and so on. It was an excellent opportunity to try out the local food of Taipei at a reasonable price. Furthermore, it was not difficult to enjoy Taipei as English was widely used, and the locals were very helpful towards tourists. Although I came to Taipei for a workshop, the city was impressive not only for science but also for its local cuisine, tourist attractions, and friendly people.

### Okkyun SEO

(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 : 0791-58-0802  
e-mail : seo.okkyun@spring8.or.jp

## NanoTerasu・SPring-8 合同シンポジウム報告

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
企画室 大端 通

### 1. はじめに

去る11月20日(月)、量子科学技術研究開発機構(以下、QST)、光科学イノベーションセンター(以下、PhoSIC)、高輝度光科学研究センター(以下、JASRI)、理化学研究所(以下、理研)の主催により、NanoTerasu・SPring-8 合同シンポジウムが開催されました。NanoTerasuは、日本で初めてマルチバンドラティスを採用する第4世代光源であり、2024年度からの運用開始を目前に控え、今まさに整備の終盤にかかっています。一方、SPring-8も同じく第4世代光源への改修により世界最先端の大型研究基盤として卓越した研究と産業の協働の場の構築を目指していることから、「放射光の新時代-第4世代光源の稼働に向けて-」をテーマとして、合同シンポジウムが開催されました。全国からの参加を募るため、東京駅に隣接するステーションカンファレンス東京で対面方式で開催しました。参加者の約25%が企業からの参加で、国研・大学等の学術及び文科省等官公庁からの参加がそれぞれ約65%、約10%と、SPring-8の利用状況を踏まえると産学官バランスの取れたシンポジウムであったと思います。

### 2. 主催者と来賓の挨拶

プログラムとしては、最初にQSTの小安重夫理事長より主催者を代表して挨拶がありました。NanoTerasuの整備が順調に進んでおり、実験ホールに初めて放射光を導くファーストビームが当初の計画通り12月に予定していることの報告がありました。また、理研により同じ第4世代光源SPring-8-IIの計画が検討されていることを踏まえ、今が放射光が新しい時代に向かう時期であり、将来の放射光計測は測定と計算を融合させたサイバーフィジカルが重要になるため、関係機関との議論を活発にしていきたいとの提案がありました。また、田無のSOR-RINGに始ま

り、世界で50以上の放射光施設が稼働している状況を踏まえ、これからは見るだけでなく、「何故？」の疑問に答え課題解決に向かっていくことが重要であるとの考えが示されました。

続いて、文部科学省の柿田恭良科学技術・学術政策局長から挨拶があり、NanoTerasuとSPring-8の高度化に関する国の取り組み状況について紹介がありました。NanoTerasuについては、先ごろ行われた国会衆議院文部科学委員会で、整備状況に関する質問があり、1ヶ月前倒しで来年4月の運用開始に向け順調に進んでいることを報告したこと、また、SPring-8の高度化については、山本左近大臣政務官を座長としたタスクフォースを設置し、硬X線施設の更新についても検討を始め、戦略的広報の重要性が議論されたことなどの紹介がありました。文部科学省としては、SPring-8とNanoTerasuが世界の革新的な施設として、人類が直面する様々な課題に対するブレイクスルーをもたらすことに加え、施設を核とした人材ネットワークが構築されることを期待しているとの考えが示されました。

### 3. 講演概要

最初の講演は、理研放射光科学研究センターの石川哲也センター長からMBAラティスによる極低エミッタンスを実現する第4世代放射光源について、光源技術の歴史的な発展から世界の動向を紹介しつつ、SDGsを踏まえSPring-8-IIが目指すグリーン化とデータサイエンスを取り込んだ課題解決のための高度化計画の重要性が述べられました。続いて、NanoTerasuにおける官民地域パートナーの枠組みに基づく国の主体機関であるQST次世代放射光施設整備開発センターの内海渉センター長からNanoTerasuの整備状況の詳細について報告がありました。整備計画の最終年度として突貫で作業を進め

ることで、計画より数ヶ月短縮して加速器のコミッションが進んでいることや、3本の共用ビームラインの測定装置の性能等についても報告があり、RIXSでは世界一の分解能を目指していることが紹介されました。また、NanoTerasuでは実験ホールを放射線管理区域から外す方針であることが改めて示されました。次に、地域パートナーの代表機関である PhoSIC の高田昌樹理事長からコアリション形成状況の報告と東北大学や自治体を巻き込んだイノベーションエコシステムの将来像について報告がありました。コアリション形成では、放射光実験において非専門家の利用障壁を取り除き、放射光未経験でも共創により課題解決を目指すという考え方が示されました。利用ニーズにスピーディーに対応する利用制度と合わせて、企業のお困りごとの課題解決から社会実装まで、NanoTerasu を中心とした東北大学や仙台市などの自治体を巻き込んだエコシステムで解決する取り組みについての紹介がありました。次に、SPring-8 の施設者として、理研放射光科学研究センターの矢橋牧名グループディレクターから SPring-8 のこれまでの歩みと近年の SDGs に向けた取り組みから SPring-8-II に向かう高度化プロジェクトの概要について紹介がありました。世界の趨勢が第3世代光源から第4世代光源へ移行する中、最先端の分析能力を維持することの重要性が示され、現在の SPring-8 が抱える課題を示すとともに、2050年までイノベーション創出を牽引する SPring-8-II の革新的なテクノロジーとユースケースの将来像が示されました。講演の最後は、JASRI の後藤俊治コーディネーターより SPring-8 と SACLA における利用制度と利用状況及び成果の創出状況について報告がありました。2024年度からの NanoTerasu の運用開始により、国内のビームラインリソースが拡大することを踏まえ、SPring-8 と NanoTerasu が利用情報や放射線管理などの連携、利用情報システムの一体運用、調査研究などにあたる支援要員の育成や技術力向上で協力することが重要であるとの考えが示されました。シンポジウムの最後には総合討論が行われ、課題解決のための充実したサポート体制や人材育成、利便性の高い課題制度などについて、多角的な議論が行われ、シンポジウムの最後に登壇者の集合写真（写真）を撮影して閉会となりました。



写真 登壇者の集合写真

#### 大端 通 OHATA Toru

(公財) 高輝度光科学研究センター 企画室  
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1  
TEL : 0791-58-0960  
e-mail : ohata@jasri.jp

## 登録機関利用研究活動評価の実施報告について

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

### 1. はじめに

公益財団法人高輝度光科学研究センター（以下「JASRI」という）は、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律（共用促進法）」に基づく登録施設利用促進機関として大型放射光施設 SPring-8 及び X 線自由電子レーザー施設 SACLA の利用促進業務を行い、これらの施設の共用を促進するための様々な業務を行っています。

放射光を利用するユーザーは増加し、その研究分野は多様化しています。ユーザーが短期間のうちに世界トップレベルの研究成果を創出するためには、高性能な実験装置とともに、専門的な視点や豊富な経験に裏付けされた「支援」が求められ、そのためには、財団職員が最先端の放射光技術を開拓しつつ、知識・経験を常に向上させることが必要となります。その必要性は文部科学省が定めた「特定放射光施設の共用の促進に関する基本的な方針（告示第 9 号 平成 23 年 2 月 7 日）」の中で「第 2 施設利用研究等に関する事項 /6 登録機関の研究機能の強化」として述べられています。

そのため、JASRI による SPring-8 及び SACLA における研究活動については、登録機関自らが施設を利用した研究手法の改善など施設利用研究を促進するための方策に関する調査研究等を行うものとして、共用促進法の第 12 条「登録施設利用促進機関による利用」に基づき、文部科学大臣の承認を受け実施しています。

この条項に基づき、JASRI では登録機関が利用するビームタイム枠は「12 条枠」、またその枠内で実施される研究・開発課題は「12 条課題」と呼称し、同枠の利用、同課題の実施にあたっては、ユーザーの要望を反映させるとともに、JASRI の研究機能の維持・向上を図りつつ、適正な一般枠を確保するため、ビームタイムは SPring-8 においては全体の 20%、SACLA においては全体の 15%を上限と定めています。

### 2. SPring-8、SACLA における 12 条利用研究活動の評価

12 条利用については、外部有識者から構成される登録機関利用研究活動評価委員会を設置し、次項に記載した観点から評価することとしています。この度、2018A 期から 2022B 期の 12 条利用の実施結果を対象として 2023 年 9 月 14 日に評価委員会が開催され、2023 年 10 月 5 日付けで評価報告書が理事長に提出されました。今般、評価委員会から提示された評価結果の概要は以下の通りです。報告書の全文については、以下 URL にアクセスの上、ご覧ください。（JASRI ホームページ：登録機関利用研究活動評価報告書 <https://www.jasri.jp/content/files/koukai-jyousehou/231005.pdf>）

なお、12 条利用に対する評価は平成 20 年に第 1 回、平成 25 年に第 2 回、平成 30 年に第 3 回が実施されており、今回が 4 回目となります。

第 4 回登録機関利用研究活動評価委員会 委員一覧  
委員長 野村 昌治

（高エネルギー加速器研究機構 名誉教授）

委員 足立 伸一

（高エネルギー加速器研究機構 理事）

佐藤 衛

（総合科学研究機構中性子産業利用推進

センター サイエンスコーディネーター）

志満津 孝

（豊田中央研究所 取締役兼 CCO）

米田 仁紀

（電気通信大学 教授）

渡辺 義夫

（名古屋大学 招聘教員、光科学イノベーションセンター 理事長特別補佐）



第4回登録機関利用研究活動評価委員会 開催概要

開催日：2023年9月14日（木）

議 事：概要説明、利用研究活動成果報告等の発表、  
評価・審議など

(1) 運営方法について

支援に当たる財団職員が、ユーザーにとって、相補的な専門性を有する強力で信頼される研究パートナーであることが望まれる。そのためには研究支援に当たる財団職員が、担当する実験装置を利用する研究に精通し、新しい研究の可能性や新しい研究分野を開拓していくことが重要であり、12条利用は、このために不可欠な制度である。

前回委員会で指摘されたインハウス課題と一般課題の利用区分については、その趣旨を徹底し、インハウス課題に必要となるビームタイムを予め確保するなど改善が進められている。

専門的知見や技術を有するユーザーを財団の客員研究員として受け入れて、財団単独では困難な新しい技術開発を進め、12条課題の中に共同研究者として財団内外の研究者が参加することで研究の可能性を広げている。

12条利用による成果は、課題募集要項への反映、「SPring-8/SACLA 利用者情報」の記事、SPring-8 シンポジウムやワークショップ等での報告等を通して、ユーザーが把握できる仕組みとなっている点は評価できる。

その他、前回評価における提言、指摘事項等へ適切に対応されている。

(2) 利用状況について

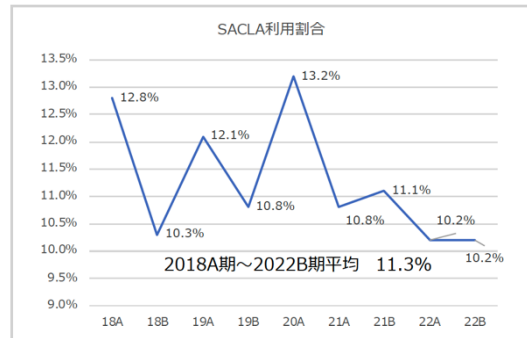
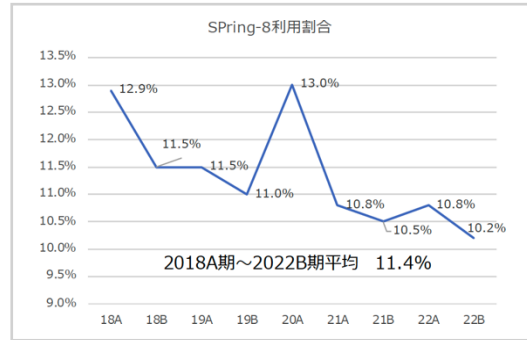
① 高性能化・調整枠の状況について

高性能化・調整枠の中で、機器入替、調整等の自動化・省力化が進められ、これらに充てるビームタイムは大幅に短縮されている。

② 12条利用の状況について

全ビームラインでの利用時間割合の平均（SPring-8が11.4%、SACLAが11.3%）については、SPring-8において目安よりやや低い数字であったが、COVID-19 やビームライン再編の影響を考慮すれば適切であったと判断できる。

前回の指摘に基づき、実験装置の入替や実験条件の切り替えに要する時間は、12条利用の外数として適切に整理されている。



時期指定課題等を適時に実施するために、高性能化・調整枠を利用することは妥当であるが、12条利用が極度に圧迫され、必要な調査研究が滞ることは望ましくない。

一部のビームラインで実績に基づき高性能化・調整枠を拡大していることは適切である。

(3) 実施体制について

① 人員体制について

高い研究成果を持続的に創出するためには、ユーザーから信頼できるパートナーと認められるような、高い能力と意欲を有する職員が必要であり、彼ら/彼女らが専門性を活かし、誇りを持って職務を遂行できる環境を作っていくことが重要である。

テニュアトラック制度を導入し、有能な若手人材を確保し、理事長ファンドなどで自発的な研究・開発を奨励している点は評価でき、更に発展させて欲しい。

職員が世界的な視野を持って職務に当たることは重要で、積極的に視野を広める機会を拡大することが望まれる。

② 予算について

獲得した外部資金の間接経費を活用して理事長ファンドなどの若手職員への支援の取り組みを進めることは評価できる。

職員だけで大型外部資金を獲得することは容易でないことも考えられ、有力ユーザーや設置機関と共同

して大型の外部資金の獲得を行えるよう、更なる工夫を期待する。

12 条課題実施のために充当している予算の裏付けを明確にしていくことが望まれる。

#### (4) 研究成果について

##### 【SPring-8】

報告された研究成果は SPring-8 の特色をより高いレベルで発揮することを可能にし、新しい研究に繋がるとともに、実験の高精度化・効率化にも資すると期待され、また新たな研究成果を生み出している。

実験の自動化やリモート実験環境の整備推進、メールインサービスの充実は、今後活用されるものと期待される。この技術開発は重要であり、検討段階から共用まで、装置に対する専門的理解とともに高度の engineering work が必要な反面、論文化し難い面もある。技術を組織的に共有し、他のビームライン等で更に発展させられるように、具体的で充実した内容の技術資料を作成し、それらも十分に評価されることを期待したい。

##### 【SACLA】

12 条利用の成果は SACLA を活用していくために不可欠なものとなっている。

12 条利用の前提として、世界的な競争力を一層高めるためにコミュニティと議論し、戦略を立てて欲しい。

#### (5) 今後の運営について

##### ① 各 12 条課題の位置付けの明確化

中長期的な全体計画の中での位置付け、目標や当初計画に対する達成度、利用研究への効果を一層鮮明にすることが望まれる。

インハウス課題として実施する技術開発等は中長期に及ぶことが多く、その計画についてユーザーが概要を知ることができるように工夫して欲しい。

##### ② 内部評価について

インハウス課題の場合は、当初計画に対する達成度や課題など内部的に事後評価を行い、概要を示して欲しい。

当初計画通りの成果や効果が得られなかった場合、個人任せにするのではなく、組織的に英知を集めてその原因を明らかにし、改善していくことを期待する。

##### ③ 高性能化・調整枠の運用について

必要に応じて時期指定課題の増大により 12 条利用が極度に圧迫されているビームラインにおける高性能化・調整枠を実績に基づき予め拡大するか、不足分については次期の高性能化・調整枠を増やすなどの方策を進めて欲しい。

##### ④ 12 条利用成果の普及・広報について

12 条利用の成果について、利用者情報や SPring-8 シンポジウム、各種セミナー等でも紹介されており、成果広報に進展が見られる。

各ビームラインの website から 12 条利用の成果の情報や成果報告にリンクを貼るなど、12 条利用による成果 (=研究環境の改善状況) を多くのユーザーが随時参照できるよう工夫して欲しい。

#### (6) 総評

登録機関は将来計画の実現に向けて様々な開発を主体的に実施する必要がある。これらの活動を主に担うビームライン担当者が研究動向の変化を体感し、意欲的に活動を展開することが重要であり、そのため 12 条利用を一層活性化する環境を整え、更に活発に利用し、成果をユーザーに還元することを期待する。

#### 3. おわりに

JASRI では本評価報告書における指摘事項、提言等を踏まえ、以下の項目に取り組んでいきたいと考えています。

##### (1) 12 条利用の位置付けの明確化

中長期的な全体計画 (SPring-8-II 計画等) の中での 12 条課題の位置付け、達成度等を明示できる方法を検討します。

##### (2) 高性能化・調整枠の柔軟な運用

インハウス課題の実績に応じて、ビームラインの高性能化・調整枠の運用をビームライン毎に検討します。

##### (3) 成果発信の推進

論文発表、学会、シンポジウム等での発表の他、SPring-8/SACLA 成果集、SPring-8/SACLA 利用者情報誌での発表を今後も積極的に行っていくとともに、各ビームラインの website から 12 条利用の成果の情報や成果報告にリンクを貼るなど、アクセシビリティの改善方法を検討します。

## 2024A 期 SACLA 利用研究課題の採択について

登録施設利用促進機関

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用推進部

高輝度光科学研究センター（JASRI）の SACLA 利用研究課題審査委員会（SACLA PRC）において、SACLA の供用運転開始以降第 24 期目に当たる 2024A 期（2024 年 4 月～2024 年 7 月）の利用研究課題応募 67 課題を審査しました。

さらに、当該審査結果について SACLA 選定委員会の意見を聴き、JASRI として 46 課題を採択しました。

### 1. 募集、審査及び採択等の日程

2024A 期の課題募集、審査及び採択は、以下のスケジュールを経て行われました。

(2023 年)

9 月 29 日 ホームページで募集案内公開

11 月 7 日 応募締切

～この間、審査基準に即した各課題の個別審査を実施～

12 月 14 日 第 26 回 SACLA PRC（総合審査）

(2024 年)

1 月 15 日 第 29 回 SACLA 選定委員会（審査結果の意見聴取）

1 月 24 日 JASRI として採否決定、結果通知

4 月 8 日 2024A 期利用開始予定

### 2. 応募、採択及びビームタイム配分状況

2024A 期の応募課題数は 67、採択課題数は 46 でした。また応募課題は全て一般課題／成果非専有利用でした。ビームライン別・申請者所属別の応募・採択課題数を表 1 に、採択された課題の要求シフト数および配分シフト数を表 2 に示します。

採択 46 課題に対しビームタイムは計 251.5 シフト（1 シフト＝12 時間）が配分されました（フィジビリティチェックビームタイム（FCBT）0.5 シフトを含む）。配分シフト数を含む採択 46 課題の一覧は、以下の Web サイトに掲載しています。

#### ◆ SACLA User Information

> SACLA Guide > 採択課題／実施課題

> 採択課題一覧 > 2024A

[http://sacla.xfel.jp/wp-content/uploads/sacla\\_approved\\_proposal\\_2024a\\_j.pdf](http://sacla.xfel.jp/wp-content/uploads/sacla_approved_proposal_2024a_j.pdf)

表 1

(単位：課題数)

ビームライン	産業界		大学等 教育機関		国公立試験 研究機関等		海外機関		合計		採択率
	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	
BL1	0	0	5	5	1	0	2	2	8	7	69%
BL2/BL3	0	0	18	15	12	11	29	13	59	39	
合計	0	0	23	20	13	11	31	15	67	46	

表 2

(単位：シフト数)

課題種	A		B		C		C/A 配分率 (採択配分/ 応募要求)	C/B 配分率 (採択配分/ 採択要求)
	応募課題 (67 課題) の 全要求シフト数	採択課題 (46 課題) の 全要求シフト数	採択課題 (46 課題) の 全配分シフト数	採択課題 (46 課題) の 全配分シフト数	採択課題 (46 課題) の 全配分シフト数			
一般課題 (成果非専有)	413	294	251.5	251.5	61%	86%		
一般課題 (成果専有)	-	-	-	-	-	-		
合計	413	294	251.5	251.5	61%	86%		

なお、成果を公表しない成果専有課題のうち、定期的な募集の締切によらず随時応募・受付される時期指定課題利用制度を 2016B 期より導入しています。また、成果を公表する成果非専有課題のうち、公共的かつ緊急性を有する極めて重要な研究を対象とした緊急課題制度を 2020A 期より導入しました。当該課題は、いずれも基本的に利用期中に申請・審査のうえ実施されることから、申請・実施があった場合は、利用期終了後に結果として応募課題数・採択課題数に追加されます。

公益財団法人  
高輝度光科学研究センター 利用推進部  
TEL : 0791-58-0961  
e-mail : sacla.jasri@spring8.or.jp



## 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9月～12月の運転実績

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サイクルの運転を実施した。

第4サイクルでは、SACLA キッカー電磁石電源のトラブルによる停止等があったが、全体としては順調な運転であった。総放射光利用運転時間（ユーザータイム）内での故障等による停止時間（down time）は、第4サイクルは約0.3%であった。

のSACLA入射、Top-Upモードで実施。

・蓄積電流 8 GeV、～100 mA

### (4) 主な down time の原因

- ・SACLA キッカー電磁石電源トラブル（フィリング変更/10Hz 入射時）
- ・BL23SU LATCHBOX FCS ABORT (Alarm Level 6) によるアボート

### 1. 装置運転関係

#### (1) 運転期間

第4サイクル (9/28 (木) ～12/15 (金))

#### (2) 運転時間の内訳

第4サイクル

運転時間総計 約1,873時間

①装置の調整及びマシンスタディ等 約241時間

②放射光利用運転時間 約1,625時間

③故障等による down time 約5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0.3%

#### (3) 運転スペック等

第4サイクル（セベラルバンチ運転）

- ・203 bunches (A)
- ・406 × 11/29-bunches + 1 bunch (H)
- ・203 bunches (A)
- ・11 bunch train × 29 (C)
- ・4 bunch train × 84 (B)
- ・1/14 filling + 12 bunches (F)
- ・203 bunches (A)
- ・406 × 11/29-bunches + 1 bunch (H)
- ・入射は電流値優先モード（2～3分毎（マルチバンチ時）もしくは20～40秒毎（セベラルバンチ時））

### 2. 利用関係（JASRI 利用推進部 集計）

#### (1) 放射光利用実験期間

第4サイクル (10/3 (火) ～12/14 (木))

#### (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 14本

第4サイクル（暫定値）

共同利用研究実験数 965件

共同利用研究者数 3,960名

専用施設利用研究実験数 432件

専用施設利用研究者数 1,708名

### ◎2023年12月～2024年1月の運転実績（停止期間）

SPring-8 は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った。

（冬期点検調整期間中の主な作業（実績））

#### (1) 蓄積リング関係

・電磁石運転前連続通電作業（1/16～）

・SR-St、Skew-Q 基板内 IC 交換（通電作業）

・SR-Skew-Sx 不具合調査、修理

- ・ CRAB 交換 (C29、31)
- ・ PB1 フィラメント交換 (C46 pb1)
- ・ ダミーロード低電力高周波測定 (A~Dst)
- ・ SR 入射部差動 CT7 予備信号用 E/O、O/E の設置
- ・ 制御計算機関連作業
- ・ データベース関連作業
- ・ 機器制御関連作業
- ・ BL 制御・インターロック関連作業
- ・ ID 関連作業 (架台メンテナンス、チラー入替等)
- ・ アンジュレータ架台移動
- ・ FE 関連作業 (機器交換、保守作業等)
- ・ 駆動系検査 (BL37XU~BL47XU)
- ・ BL 改造工事 (BL36XU)
- ・ BL 関連作業 (LN2、ハッチ内作業等)
- ・ 光学系・輸送チャンネル関係作業
- ・ LN2 供給設備・整備計画  
環状 VJP 配管設置作業 II 期 (実験ホール)
- ・ その他作業及び定期点検等

(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
- ・ 天井クレーン月次点検作業
- ・ 消防設備等点検 (放送設備等)

(3) 安全管理関係

- ・ 運転停止後の残留サーベイ (12/15)
- ・ 特例区域設置 (12/16~1/18)
- ・ 放射線モニタ定期点検

(4) その他

- ・ 空調機等間引き運転 (長期停止期間節電対策)
- ・ 冷却水設備停止 (長期停止期間節電対策)
- ・ 施設建屋、外構関連小工事等
- ・ 中央管理棟外壁及び防水改修工事 (~3/29)
- ・ 構内外灯照明設備 LED 化改修工事 (~2/29)
- ・ 中尺ビームライン実験施設昇降機更新工事

◎2024 年 1 月~2 月の運転予定

SPring-8 は 1 月 19 日から 2 月 22 日までセベラルバンチ運転で第 5 サイクルの運転を予定している。

第 5 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

2 月 23 日から 4 月 2 日まで年度末点検調整期間とし、加速器やビームラインに係わる機器の改造・点検作業、電気・冷却設備等の機器の点検作業を行う予定である。

2024 年度の加速器運転 (第 1 サイクル) は 4 月 3 日からを予定している。

(\*1) down time の割合に④フィリング変更時間は含まない。

# 論文発表の現状

公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用推進部

年別査読有り論文発表等登録数 (2023年12月31日現在)

SPring-8

Beamline Name		Public Use Since	~2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023	Total	
BL01B1	XAFS I	1997.10	630	92	75	87	94	82	86	105	92	85	52	1480	
	Technical Journal		1											1	
BL02B1	Single Crystal Structure Analysis	1997.10	206	42	36	44	40	30	48	55	60	41	37	639	
BL02B2	Powder Diffraction	1999. 9	742	71	82	95	80	75	80	112	77	94	62	1570	
BL04B1	High Temperature and High Pressure Research	1997.10	233	19	16	16	15	17	17	13	12	13	8	379	
BL04B2	High Energy X-ray Diffraction	1999. 9	273	33	39	43	30	42	41	61	34	52	27	675	
	Technical Journal		1							1				2	
BL08W	High Energy Inelastic Scattering	1997.10	182	13	19	16	16	14	11	18	25	17	6	337	
BL09XU	HAXPES I	1997.10	151	15	18	16	19	28	14	11	14	13	16	315	
BL10XU	High Pressure Research	1997.10	376	30	28	30	28	26	33	33	23	28	14	649	
BL13XU	X-ray Diffraction and Scattering I	2001. 9	188	21	24	35	28	32	34	32	24	25	23	466	
BL14B2	XAFS II	2007. 9	164	53	61	53	58	67	81	87	74	69	52	819	
	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	34	36	860	
	Technical Journal		2	1	2			2	1	1				9	
BL20B2	Medical and Imaging I	1999. 9	269	25	35	26	28	32	29	40	27	33	16	560	
BL20XU	Medical and Imaging II	2001. 9	225	45	45	37	34	31	44	35	44	33	37	610	
BL25SU	Soft X-ray Spectroscopy of Solid	1998. 4	353	32	20	19	25	20	24	30	23	20	19	585	
	Technical Journal		2											2	
BL27SU	Soft X-ray Photochemistry	1998. 5	372	35	25	36	27	26	16	42	18	20	19	636	
BL28B2	White Beam X-ray Diffraction	1999. 9	142	18	21	19	25	20	16	26	15	17	12	331	
BL35XU	Inelastic and Nuclear Resonant Scattering	2001. 9	109	13	16	15	15	14	8	21	17	13	13	254	
BL37XU	Trace Element Analysis	2002.11	165	28	35	29	29	29	25	34	21	20	18	433	
	Technical Journal			1										1	
BL38B1	Structural Biology III	2000.10	550	48	70	66	48	37	32	29	30	15	8	933	
BL39XU	Magnetic Materials	1997.10	233	25	19	24	30	20	19	29	22	18	11	450	
BL40B2	SAXS BM	1999. 9	494	55	55	60	54	55	64	53	67	54	47	1058	
	Technical Journal		1		1					1				3	
BL40XU	High Flux	2000. 4	157	21	32	42	30	35	52	30	40	31	21	491	
	Technical Journal								1					1	
BL41XU	Macromolecular Crystallography I	1997.10	890	71	74	80	72	60	41	47	42	20	11	1408	
BL43JR	Infrared Materials Science	2000. 4	98	11	17	14	23	10	21	29	21	23	16	283	
BL46XU	HAXPES II	2000.11	175	28	56	50	52	44	55	45	65	44	34	648	
	Technical Journal					1	1			1				3	
BL47XU	Micro-CT	1997.10	311	36	31	29	37	28	33	33	22	28	20	608	
	Technical Journal						1							1	
Public Use at Other Beamlines	BL05XU	R&D-ID I	2017. 4					3	7	9	9	2	4	34	
	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	85	
	BL19LXU	RIKEN SR Physics	2002. 9	5	1	1	2	5	7	2	3	8	1	5	40
	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	19	29	30	35	27	24	9	222
	BL26B2	RIKEN Structural Genomics II	2009. 4	10	5	7	11	9	7	9	7	1	3	4	73
		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	18	15	13	8	6	6	137
	BL43LXU	Quantum NanoDynamics	2020. 8										2		2
	BL44B2	RIKEN Materials Science I	1998. 5	14			6	5	2	6	6	4	5	4	52
BL45XU	RIKEN Structural Biology I	1997.10	106	9	13	20	11	7	16	24	25	20	14	265	
Subtotal			8341	995	1066	1114	1078	1015	1075	1216	1055	927	686	18568	

SPRING-8/SACLA COMMUNICATIONS

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	12	194
		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	18	5	173
		Technical Journal								1	2				3
	BL08B2	Hyogo BM	2005. 9	12	9	5	6	11	5	7	12	10	10	6	93
		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	8	261
	BL12B2	NSRRC BM	2001. 9	190	21	29	38	34	37	48	33	27	14	5	476
	BL12XU	NSRRC ID	2003. 2	81	18	19	18	25	19	27	30	15	16	10	278
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II		148	15	19	17	23	22	21	26	27	26	19	363
	BL15XU	WEBRAM	(2001. 4 - 2021. 9)	301	56	49	62	58	54	49	55	40	31	17	772
	BL16B2	SUNBEAM BM	1999. 9	58	6	4	10	9	6	10	12	21	19	11	166
		Technical Journal		35	14	8	15	21	15	11	8	7	5	10	149
	BL16XU	SUNBEAM ID	1999. 9	44	3	4	11	9	9	17	20	23	20	18	178
		Technical Journal		39	14	14	21	18	12	8	10	6	4	4	150
	BL22XU	JAEA Actinide Science I		95	19	15	14	15	26	25	18	27	27	19	300
		Technical Journal											1		1
	BL23SU	JAEA Actinide Science II		212	29	19	26	16	24	23	28	18	21	12	428
	BL24XU	Hyogo ID	1998.10	153	5	4	5	6	8	2	13	12	12	13	233
		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	15	126	
	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	7	85	
BL44XU	Macromolecular Assemblies	2000.2	409	53	73	61	67	51	59	65	58	43	28	967	
Subtotal			1970	311	292	351	374	333	378	404	354	300	206	5273	
RIKEN Beamlines	BL05XU	R&D-ID I		4		1					1	2		8	
	BL17SU	Coherent Soft X-ray Spectroscopy		90	8	5	8	5		1	8	4		4	133
	BL19LXU	SR Physics		109	13	9	5	6	1	4	1	2		2	152
	BL26B1	Structural Genomics I		186	13	9	8	7	6		1	1	2		233
	BL26B2	Structural Genomics II		132	10	5	9	25	9	2	2		2	2	198
	BL29XU	Coherent X-ray Optics		195	9	10	15	9	8	4	7	4		3	264
	BL32XU	Targeted Proteins		25	9	11	19	9	10	1	4	4	3	1	96
	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	4	361
	BL45XU	Structural Biology I		211	9	13	13	8	6	2	5	4			271
Subtotal			1209	87	85	95	87	54	24	33	22	11	16	1723	

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	10	5	6
BL2/BL3	XFEL2/XFEL1	2012. 3	14	28	37	48	42	34	51	62	58	56	41	471	
Hardware / Software R & D				612	13	33	46	53	49	35	26	15	17	6	905
NET Sum Total				10327	1138	1233	1323	1318	1176	1245	1362	1195	1043	739	22099
Technical Journal				173	97	67	74	71	54	49	53	34	37	13	722

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12月31日までに登録されたデータに基づいており、今後変更される可能性があります。

・SPRING-8またはSACLAでの成果を論文等にする場合は必ず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12月31日現在)

SPring-8

Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total	
Public Beamlines	BL01B1	XAFS I	1997.10	1481	66	89	1636
	BL02B1	Single Crystal Structure Analysis	1997.10	639	14	32	685
	BL02B2	Powder Diffraction	1999. 9	1570	41	86	1697
	BL04B1	High Temperature and High Pressure Research	1997.10	379	7	49	435
	BL04B2	High Energy X-ray Diffraction	1999. 9	677	13	62	752
	BL08W	High Energy Inelastic Scattering	1997.10	337	10	48	395
	BL09XU	HAXPES I	1997.10	315	15	37	367
	BL10XU	High Pressure Research	1997.10	649	22	61	732
	BL13XU	X-ray Diffraction and Scattering I	2001. 9	466	19	40	525
	BL14B2	XAFS II	2007. 9	826	11	39	876
	BL19B2	X-ray Diffraction and Scattering II	2001.11	869	47	94	1010
	BL20B2	Medical and Imaging I	1999. 9	560	91	89	740
	BL20XU	Medical and Imaging II	2001. 9	610	106	160	876
	BL25SU	Soft X-ray Spectroscopy of Solid	1998. 4	587	15	61	663
	BL27SU	Soft X-ray Photochemistry	1998. 5	636	21	39	696
	BL28B2	White Beam X-ray Diffraction	1999. 9	331	17	25	373
	BL35XU	Inelastic and Nuclear Resonant Scattering	2001. 9	254	5	13	272
	BL37XU	Trace Element Analysis	2002.11	434	24	52	510
	BL38B1	Structural Biology III	2000.10	933	11	66	1010
	BL39XU	Magnetic Materials	1997.10	450	17	80	547
	BL40B2	SAXS BM	1999. 9	1061	15	122	1198
	BL40XU	High Flux	2000. 4	492	25	71	588
	BL41XU	Macromolecular Crystallography I	1997.10	1408	4	103	1515
	BL43IR	Infrared Materials Science	2000. 4	283	15	64	362
	BL46XU	HAXPES II	2000.11	651	20	46	717
	BL47XU	Micro-CT	1997.10	609	93	137	839
Public Use at Other Beamlines	BL05XU	R&D-ID I	2017. 4	34			34
	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	40		5	45
	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	222		9	231
	BL26B2	RIKEN Structural Genomics II	2009. 4	74		11	85
	BL29XU	RIKEN Coherent X-ray Optics	2002. 9	24		1	25
	BL32XU	RIKEN Targeted Proteins	2010.10	137		5	142
	BL43LXU	Quantum NanoDynamics	2020. 8	2			2
	BL44B2	RIKEN Materials Science I	1998. 5	52		3	55
	BL45XU	RIKEN Structural Biology I	1997.10	265	5	20	290
Subtotal			18599	776	1883	21258	

Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total	
Contract Beamlines	BL03XU	Advanced Softmaterial	2009.11	551		18	569
	BL07LSU	The University-of-Tokyo Outstation Beamline for Materials Science	(2009.11 - 2022.8)	176		11	187
	BL08B2	Hyogo BM	2005. 9	141		1	142
	BL11XU	QST Quantum Dynamics I		261	8	44	313
	BL12B2	NSRRC BM	2001. 9	476	1	2	479
	BL12XU	NSRRC ID	2003. 2	278	7	6	291
	BL14B1	QST Quantum Dynamics II		363	20	88	471
	BL15XU	WEBRAM	(2001. 4 - 2021. 9)	772	14	60	846
	BL16B2	SUNBEAM BM	1999. 9	315	12	77	404
	BL16XU	SUNBEAM ID	1999. 9	328	8	64	400
	BL22XU	JAEA Actinide Science I		301	4	47	352
	BL23SU	JAEA Actinide Science II		428	45	110	583
	BL24XU	Hyogo ID	1998.10	268	19	63	350
	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	3	101
	BL33XU	TOYOTA	2009. 5	150	5	43	198
	BL36XU	Catalytic Reaction Dynamics for Fuel Cell	(2013. 1 - 2020. 3)	85		6	91
	BL44XU	Macromolecular Assemblies	2000. 2	967		46	1013
Subtotal			6041	166	693	6900	

RIKEN Beamlines	BL05XU	R&D-ID I		8	6		14
	BL17SU	Coherent Soft X-ray Spectroscopy		133	4	13	150
	BL19LXU	SR Physics		152	8	27	187
	BL26B1	Structural Genomics I		233	2	19	254
	BL26B2	Structural Genomics II		198	1	13	212
	BL29XU	Coherent X-ray Optics		264	14	38	316
	BL32XU	Targeted Proteins		96		4	100
	BL38B2	Diagnosis Beamline I		2	6		8
	BL43LXU	Quantum NanoDynamics		5			5
	BL44B2	Materials Science I		361	2	16	379
	BL45XU	Structural Biology I		271	5	45	321
	Subtotal			1723	48	175	1946

SACLA

Public Beamlines	Beamline Name		Public Use Since	Refereed Papers	Proceedings	Other Publications	Total
	BL1	SXFEL	2016. 3	43			43
BL2/BL3	XFEL2/XFEL1	2012. 3	471	4	18	493	

Hardware / Software R & D			905	554	475	1934
---------------------------	--	--	-----	-----	-----	------

NET Sum Total			22821	1375	2499	26695
---------------	--	--	-------	------	------	-------

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

Proceedings : 査読なしのプロシーディング

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

NET Sum Total : 実際に登録されている件数(本表に表示していない実績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・専用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、現運用BL)、BL45XU (現共用BL)

・SPring-8 または SACLA での成果を論文等とする場合は必ず 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/](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 10 月～12 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、以下の URL で検索することによりその課題の情報を閲覧することが可能です。

<https://user.spring8.or.jp/uisearch/expreport/ja/?criteria.institution=0>

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 10 月～12 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
Nature Communications	11	Physical Review Materials	4
The Journal of Biological Chemistry	6	AIP Conference Proceedins	4
The Journal of Physical Chemistry C	6	Chemical Communications	4
Journal of the Physical Society of Japan	6	Inorganic Chemistry	4
Acta Crystallographica Section F	6	Journal of Alloys and Compounds	4
Japanese Journal of Applied Physics	5	Journal of the American Chemical Society	4
Physical Review B	4	他全 183 誌、計 290 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

Nature Communications

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
46022	Pritam Sadhukhan	12 (2021) 4836	2019B1272	BL02B1	佐藤 治	Manipulating Electron Redistribution to Achieve Electronic Pyroelectricity in Molecular [FeCo] Crystals
			2020A1124	BL02B1	佐藤 治	
			2021A1070	BL02B1	佐藤 治	
46048	Takashi Fujishiro	14 (2023) 5609	2020A6545	BL44XU	藤城 貴史	Class III Hybrid Cluster Protein Homodimeric Architecture Shows Evolutionary Relationship with Ni, Fe-carbon Monoxide Dehydrogenases
			2019A6945	BL44XU	藤城 貴史	
46108	Wataru Shihoya	9 (2018) 4711	2016A2527	BL32XU	石谷 隆一郎	Crystal Structures of Human ET <sub>B</sub> Receptor Provide Mechanistic Insight into Receptor Activation and Partial Activation
46129	Shaoping Zhan	13 (2022) 5937	2021B1109	BL01B1	Zhu Yingcai	Realizing High-ranged Thermoelectric Performance in PbSn <sub>2</sub> Crystals
46131	Kazumasa Oda	9 (2018) 3949	2015A1024	BL32XU	石谷 隆一郎	Crystal Structure of the Red Light-activated Channelrhodopsin Chrimson
			2015A1057	BL32XU	西澤 知宏	
			2016A2527	BL32XU	石谷 隆一郎	
46139	Saizheng Cao	14 (2023) 7671	2022B1283	BL35XU	Song Yu	Competing Charge-density Wave Instabilities in the Kagome Metal ScV <sub>6</sub> Sn <sub>6</sub>
46158	Daisuke Nakashima	14 (2023) 532	2019A0165	BL20XU	土山 明	Chondrule-like Objects and Ca-Al-rich Inclusions in Ryugu May Potentially be the Oldest Solar System Materials
46196	Michiko Shimokawa	14 (2023) 5803	2016B2714	BL26B1	伏信 進矢	Identification and Characterization of endo- $\alpha$ -, exo- $\alpha$ -, and exo- $\beta$ -D-arabinofuranosidases Degrading Lipoarabinomannan and Arabinogalactan of Mycobacteria
			2017A2540	BL26B1	伏信 進矢	
			2018B2528	BL26B2	伏信 進矢	
			2019B2556	BL45XU	伏信 進矢	
			2020A2553	BL26B2	伏信 進矢	
2022B2537	BL45XU	伏信 進矢				

Journal of the Physical Society of Japan

46014	Yutaka Moritomo	90 (2021) 063801	2020A1061	BL02B2	守友 浩	Origin of the Material Dependence of the Temperature Coefficient of the Redox Potential in Coordination Polymers
46016	Dai Inoue	91 (2022) 094605	2021A1062	BL01B1	守友 浩	Coordination States of Fe <sup>3+</sup> and Fe <sup>2+</sup> Dissolved in Organic Solvents
46135	Shinichi Nakamura	92 (2023) 124708	2022A3583	BL11XU	中村 真一	Anomalous Interference Effect in Pure Nuclear Bragg Reflection of Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>
			2022B3583	BL11XU	中村 真一	
			2023A3583	BL11XU	中村 真一	
46154	Yoshikazu Mizuguchi	92 (2023) 114702	2022A1086	BL10XU	水口 佳一	Absence of T <sub>c</sub> -Pinning Phenomenon under High Pressure in High-Entropy REO <sub>0.5</sub> F <sub>0.5</sub> BiS <sub>2</sub> Layered Superconductor
46234	Ikuto Kawasaki	92 (2023) 064709	2021A3811	BL23SU	藤森 伸一	Quasiparticle State in 4f Localized Ferromagnet CeRu <sub>2</sub> Ge <sub>2</sub> Studied by Soft X-ray Photoemission Spectroscopy
46261	Shinya Hosokawa	93 (2024) 014601	2021A1181	BL13XU	細川 伸也	Local- and Intermediate-range Partial Structure Study of As-Se Glasses
			2021B1110	BL13XU	細川 伸也	
			2022A1306	BL47XU	細川 伸也	

Japanese Journal of Applied Physics-1

45915	Ryoma Yoneda	61 (2022) SC1080	2021A1230	BL01B1	別府 孝介	Crystallographic and Optical Properties of Wide Bandgap Photovoltaic Semiconductor System, Cu(AI,In)Se <sub>2</sub>
45991	Kotaro Ishiji	64 (2024) 02SP05	2022A5500	BL16XU	米山 明男	3D Structure of Threading Screw Dislocation at a Deep Location in 4H-SiC using 3D Micro-X-ray Topography
46015	Yutaka Moritomo	60 (2021) 040904	2020A1061	BL02B2	守友 浩	Extended Charge-transfer Model for Na <sub>x</sub> Co[Fe(CN) <sub>6</sub> ] <sub>0.82</sub>
			2020A1660	BL02B2	岩泉 滉樹	



Japanese Journal of Applied Physics-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
46252	Norihiro Oshime	62 (2023) SM1022	2021A1100	BL40XU	黒岩 芳弘	Lattice Strain Visualization Inside a 400 nm Single Grain of BaTiO <sub>3</sub> in Polycrystalline Ceramics by Bragg Coherent X-ray Diffraction Imaging
			2021B1252	BL02B2	黒岩 芳弘	
			2022A1172	BL02B2	黒岩 芳弘	
			2022A3761	BL22XU	大和田 謙二	
			2022A3762	BL22XU	町田 晃彦	
			2022A3763	BL22XU	押目 典宏	
			2022A3784	BL22XU	黒岩 芳弘	
			2022B1834	BL02B2	黒岩 芳弘	
			2022B3761	BL22XU	大和田 謙二	
46257	Ichiro Hirose	63 (2024) 01SP11	2020A1748	BL19B2	吉岡 和俊	Strain Distributions in Carbon-doped Silicon Nanowires along [110] and [100] Investigated by X-ray Diffraction
			2020A1849	BL19B2	吉岡 和俊	

The Journal of Physical Chemistry C

45916	Dexiang Gao	127 (2023) 8482-8492	2019B4268	BL12XU	Li Kuo	Arylazo under Extreme Conditions: [2 + 2] Cycloaddition and Azo Metathesis
			2020A1191	BL10XU	Li Kuo	
46055	Ikuya Yamada	127 (2023) 19213-19219	2022A1493	BL02B2	山田 幾也	Switching of Intermetallic Charge Transfer and Negative Thermal Expansion in Mn-Doped CaCu <sub>3</sub> Fe <sub>4</sub> O <sub>12</sub>
			2022B1619	BL14B2	山田 幾也	
			2022B1816	BL19B2	山田 幾也	
46091	Haoqing Li	127 (2023) 22510-22517	2023A1294	BL44B2	Zhang Jiawei	Crystal Structure and Chemical Bonding of Layered $\alpha$ -In <sub>2</sub> Se <sub>3</sub>
46192	Hiroyuki Okazaki	127 (2023) 23628-23633	2018A3654	BL14B1	八巻 徹也	Weakened Oxygen Adsorbing the Pt-O Bond of the Pt Catalyst Induced by Vacancy Introduction into Carbon Support
			2018B3654	BL14B1	出崎 亮	
			2019A3654	BL14B1	出崎 亮	
			2019B3654	BL14B1	出崎 亮	
			2020A3654	BL14B1	出崎 亮	
			2021A3654	BL14B1	出崎 亮	
46215	Kazuhiisa Tamura	127 (2023) 22733-22739	2018A3600	BL14B1	田村 和久	Comparative Study of the Underpotential Deposition of Bi in an Aqueous Electrolyte and an Ionic Liquid
			2018B3600	BL14B1	田村 和久	
			2019A3600	BL14B1	田村 和久	
			2021A3702	BL22XU	田村 和久	
			2021B3702	BL22XU	田村 和久	
			2022B3702	BL22XU	田村 和久	
2023A3702	BL22XU	田村 和久				

Physical Review B

45899	Hidenori Fujiwara	108 (2023) 165121	2013B3882	BL23SU	関山 明	Impact of the Ground-state <i>4f</i> Symmetry for Anisotropic <i>cd</i> Hybridization in the Heavy-fermion Superconductor CeNi <sub>2</sub> Ge <sub>2</sub>
			2014B3882	BL23SU	関山 明	
			2014A1023	BL27SU	関山 明	
			2014B1305	BL19LXU	関山 明	
			2014B1299	BL27SU	関山 明	
46120	Nozomu Hiraoka	108 (2023) 195104	2015A1533	BL19LXU	関山 明	Screening Response of Valence and Core Electrons in a Metal: Inelastic X-ray Scattering Study
			2018A4261	BL12XU	松田 和博	
			2018B4260	BL12XU	松田 和博	
			2020A4251	BL12XU	平岡 望	
			2021A4250	BL12XU	平岡 望	
46121	Hiroshi Fukui	108 (2023) 134311	2021B4250	BL12XU	平岡 望	Isotope Effects on Cubic Boron Nitride Investigated by X-ray Scattering
			2022A4261	BL12XU	平岡 望	
46232	Ikuto Kawasaki	108 (2023) 165127	2021A3811	BL23SU	藤森 伸一	Strongly Renormalized Quasiparticles in UPt <sub>3</sub>
			2021B3811	BL23SU	藤森 伸一	
46240	Takeshi Suzuki	108 (2023) 184305	2022A8024	BL3	鈴木 剛	Ultrafast Control of the Crystal Structure in a Topological Charge-density-wave Material

Physical Review 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
45896	Hiroshi Uchiyama	7 (2023) 104601	2016A1324	BL35XU	内山 裕士	Quantifying Doping-dependent Electron-phonon Scattering Rates in Silicon by Inelastic X-ray Scattering and First-principles Lattice Dynamics
			2016B1947	BL35XU	内山 裕士	
			2017B1340	BL35XU	内山 裕士	
			2017B1966	BL35XU	内山 裕士	
			2018A1486	BL35XU	内山 裕士	
			2018B1530	BL35XU	内山 裕士	
			2018B2020	BL35XU	内山 裕士	
2019A2026	BL35XU	内山 裕士				
46056	Yuta Kato	7 (2023) 073401	2022A1493	BL02B2	山田 幾也	Electronic Structure of $ACu_3Co_4O_{12}$ ( $A = Y, La, Bi$ ): Synthesis, Characterization, Core-level Spectroscopies, High-pressure Application, and <i>ab initio</i> Calculation
			2022B1619	BL14B2	山田 幾也	
			2022B1816	BL19B2	山田 幾也	
46183	Junyeon Kim	7 (2023) L111401	2021B7410	BL07LSU	金 俊延	Oxide Layer Dependent Orbital Torque Efficiency in Ferromagnet/Cu/Oxide Heterostructures
			2022A7411	BL07LSU	金 俊延	
			2022A7412	BL07LSU	堀尾 眞史	
46185	Yuki K. Wakabayashi	6 (2022) 094402	2021B3841	BL23SU	小林 正起	Isotropic Orbital Magnetic Moments in Magnetically Anisotropic SrRuO <sub>3</sub> Films
46267	Daiki Ootsuki	7 (2023) 124601	2017A1406	BL47XU	吉田 鉄平	Effect of Mn Substitution on the Electronic Structure for Mn-doped Indium-Tin Oxide Films Studied by Soft and Hard X-ray Photoemission Spectroscopy
			2019A3841	BL23SU	小林 正起	
			2022A1579	BL09XU	吉田 鉄平	
			2022A1729	BL09XU	石田 達広	
			2022A3841	BL23SU	小林 正起	
			2022B1765	BL09XU	石田 達広	
2023A1802	BL09XU	石田 達広				

AIP Conference Proceedings

46013	Kentaro Uesugi	2990 (2023) 040019	2016B1463	BL47XU	上杉 健太郎	Development of Multiscale X-ray Tomography at SPring-8 BL47XU
			2017A1458	BL47XU	上杉 健太郎	
			2018B1482	BL47XU	上杉 健太郎	
			2019A1240	BL47XU	上杉 健太郎	
			2019B1588	BL47XU	上杉 健太郎	
46034	Masato Hoshino	2990 (2023) 040016	2019B1303	BL28B2	星野 真人	High-resolution X-ray Microtomography at 200 keV Region
			2020A1269	BL28B2	星野 真人	
			2020A2100	BL28B2	星野 真人	
			2021A1265	BL28B2	星野 真人	
			2022A1796	BL28B2	星野 真人	
46088	Akihisa Takeuchi	2990 (2023) 040012	2020A1386	BL47XU	竹内 晃久	High-energy X-ray Nanotomography at SPring-8
			2021A1323	BL20XU	竹内 晃久	
			2021B1519	BL47XU	竹内 晃久	
			2021B2106	BL20XU	竹内 晃久	
			2022A1400	BL47XU	竹内 晃久	
46301	Yoshio Suzuki	2990 (2023) 030001	2018B1167	BL20XU	戸田 裕之	Hard X-ray Schlieren Microscopy and its Application to Computer Tomography

Inorganic Chemistry

46017	Takumi Yomogida	61 (2022) 20206-20210	2020A0174	BL01B1	高橋 嘉夫	Application of High-Energy-Resolution X-ray Absorption Spectroscopy at the U L <sub>3</sub> -Edge to Assess the U(V) Electronic Structure in FeUO <sub>4</sub>
			2020A1566	BL39XU	河村 直己	
			2021B1821	BL39XU	蓬田 匠	
			2022A1733	BL39XU	蓬田 匠	
46092	Masahiro Kouno	62 (2023) 9463-9470	2016A1485	BL02B1	小島 達弘	Jahn-Teller Switching of a Redox-Active Nickel(III) Center in a Homoleptic Thiolato Metalloligand Environment
			2017B1203	BL02B2	吉成 信人	
46093	Nobuto Yoshinari	62 (2023) 9291-9294	2020A0603	BL02B1	吉成 信人	Silver(I) Sulfide Clusters Protected by Rhodium(III) Metalloligands with 3-Aminopropanethiolate
			2021A1242	BL02B1	吉成 信人	
46097	Xun Kang	62 (2023) 18474-18484	2022A1067	BL02B2	Belik Alexei	Cd <sub>2</sub> FeReO <sub>6</sub> : A High-T <sub>c</sub> Double Perovskite Oxide with Remarkable Tunneling Magnetoresistance
			2022B1919	BL02B2	山浦 一成	
			2023A1496	BL02B2	Belik Alexei	
			2023A2361	BL02B2	山浦 一成	

Journal of Alloys and Compounds-1

45930	Renato Belli Strozi	969 (2023) 172415	2022B3782	BL22XU	榊 浩司	High Entropy Alloys Containing Immiscible Mg and Refractory Elements: Synthesis, Structure, and Hydrogen Storage Properties
-------	---------------------	----------------------	-----------	--------	------	---

## Journal of Alloys and Compounds-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
45948	Masafumi Matsushita	970 (2024) 172457	2019B1423	BL04B1	松下 正史	Formation Process, Microstructure, and Mechanical Properties of an Ultrafine Dual-phase Alloy Formed through Phase Transition of 18R-type Long-period Stacking Ordered in Mg <sub>85</sub> Zn <sub>6</sub> Y <sub>9</sub> under High Pressure
46054	Amane Morimura	968 (2023) 172263	2021B1609	BL02B2	赤松 寛文	High-pressure Syntheses, Crystal Structures, and Magnetic Properties of Novel Quadruple Perovskite Oxides LaMn <sub>3</sub> Ru <sub>2</sub> Mn <sub>2</sub> O <sub>12</sub> and LaMn <sub>3</sub> Ru <sub>2</sub> Fe <sub>2</sub> O <sub>12</sub>
			2022A1493	BL02B2	山田 幾也	
			2022A1828	BL14B2	岡崎 湧一	
			2022B1619	BL14B2	山田 幾也	
46199	Takahiro Nishio	976 (2024) 172992	2021A1675	BL13XU	西尾 隆宏	Uniaxial Magnetic Anisotropy of L1 <sub>0</sub> -FeNi Films with Island Structures on LaAlO <sub>3</sub> (110) Substrates by Nitrogen Insertion and Topotactic Extraction
			2022B1682	BL46XU	西尾 隆宏	

## The Journal of Biological Chemistry

46006	Atsuhiko Shimada	299 (2023) 105277	2019A6920	BL44XU	島田 敦広	Crystallographic Cyanide-probing for Cytochrome c Oxidase Reveals Structural Bases Suggesting that a Putative Proton Transfer H-pathway Pumps Protons
			2017A2597	BL38B1	島田 敦広	
			2019B2573	BL45XU	島田 敦広	
46032	Atsushi Taguchi	299 (2023) 104892	2021B6624	BL44XU	中島 良介	Functional and Structural Characterization of <i>Streptococcus pneumoniae</i> Pyruvate Kinase Involved in Fosfomycin Resistance
			2022A6720	BL44XU	中島 良介	
			2022B6720	BL44XU	中島 良介	
46204	Takeaki Ikeuchi	298 (2022) 102109	2019B2714	BL26B1	三上 文三	Crystal Structure of <i>Grimontia hollisiae</i> Collagenase Provides Insights into its Novel Substrate Specificity toward Collagen
			2021A2760	BL26B1	三上 文三	
			2022A2744	BL26B1	三上 文三	
46282	Nozomi Katsuki	300 (2024) 105508	2022B2537	BL45XU	伏信 進矢	Protocatechuate Hydroxylase is a Novel Group A Flavoprotein Monooxygenase with a Unique Substrate Recognition Mechanism

## Journal of the American Chemical Society

45854	Jeffrey T. Babicz Jr.	145 (2023) 15230-15250	2021B1350	BL35XU	Solomon Edward	Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy Definition of Peroxy Intermediates in Catechol Dioxygenases: Factors that Determine Extra- versus Intradiol Cleavage
			2019B1103	BL19LXU	Solomon Edward	
			2013B0105	BL09XU	Solomon Edward	
45941	Nobutaka Fujieda	139 (2017) 5149-5155	2014A6500	BL44XU	山下 栄樹	A Well-Defined Osmium–Cupin Complex: Hyperstable Artificial Osmium Peroxygenase
			2014B6500	BL44XU	山下 栄樹	
			2015A6500	BL44XU	山下 栄樹	
			2015B6500	BL44XU	山下 栄樹	
46011	Morito Namba	145 (2023) 21807-21816	2021A1383	BL39XU	高津 浩	Large Perpendicular Magnetic Anisotropy Induced by an Intersite Charge Transfer in Strained EuVO <sub>2</sub> H Films
			2021A1528	BL10XU	高津 浩	
			2020A0628	BL01B1	高津 浩	
			2019B1084	BL01B1	高津 浩	
			2019A1304	BL01B1	高津 浩	
			2021B1218	BL04B1	高津 浩	
			2022A1147	BL25SU	高津 浩	
46026	Shinya Okazoe	145 (2023) 24005-24011	2020A1130	BL02B2	草田 康平	Molybdenum–Ruthenium–Carbon Solid-Solution Alloy Nanoparticles: Can They Be Pseudo-Technetium Carbide?
			2020A1696	BL14B2	岡副 真也	

## Acta Materialia

45869	Hiroyuki Toda	257 (2023) 119188	2013B1027	BL20XU	戸田 裕之	Surrogate-Based Optimization of Microstructural Features of Structural Materials
			2020A1796	BL20XU	戸田 裕之	
			2020A1084	BL20XU	戸田 裕之	
46072	Yan Chong	257 (2023) 119165	2022A1007	BL13XU	辻 伸泰	Oxygen Interstitials Make Metastable $\beta$ Titanium Alloys Strong and Ductile
46128	Feiyu Qin	264 (2023) 119544	2020A1156	BL35XU	Zhu Yingcai	Integrating Abnormal Thermal Expansion and Ultralow Thermal Conductivity into (Cd,Ni) <sub>2</sub> Re <sub>2</sub> O <sub>7</sub> via Synergy of Local Structure Distortion and Soft Acoustic Phonons
			2019B3751	BL22XU	町田 晃彦	
			2021A1074	BL02B2	Hu Lei	
			2021A3751	BL22XU	町田 晃彦	

### Advanced Energy 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
45936	Yuji Mahara	13 (2023) 2301843	2020A7030	BL33XU	田島 伸	Activation and Stabilization of Mn-Based Positive Electrode Materials by Doping Nonmetallic Elements
			2021A7030	BL33XU	田島 伸	
			2021B7030	BL33XU	梅原 密太郎	
			2022A7008	BL33XU	野中 敬正	
			2022B5070	BL16XU	高橋 直子	
45993	Datong Zhang	11 (2021) 2102285	2020A1287	BL01B1	山本 健太郎	Reversible and Fast (De)fluorination of High-Capacity Cu <sub>2</sub> O Cathode: One Step Toward Practically Applicable All-Solid-State Fluoride-Ion Battery
			2019A1016	BL02B2	内本 喜晴	
			2019B1014	BL01B1	内本 喜晴	
			2019B1015	BL02B2	内本 喜晴	
			2019B1022	BL27SU	内本 喜晴	
			2019B1500	BL02B2	松永 利之	
			2020A1009	BL01B1	内本 喜晴	
2020A1010	BL02B2	内本 喜晴				
2020A1288	BL27SU	山本 健太郎				
46148	Thorsten O. Schmidt	13 (2023) 2302039	2019A1394	BL01B1	神谷 和秀	Elucidating the Active Sites and Synergies in Water Splitting on Manganese Oxide Nanosheets on Graphite Support

### Bulletin of the Chemical Society of Japan

45855	Koh Sugamata	96 (2023) 977-979	2023A1771	BL02B1	菅又 功	A Novel Hydrogen-Bonded Organic Framework Constructed by Triptycene-2,3,6,7,14,15-Hexacarboxylic Acid
			2023A1727	BL02B1	箕浦 真生	
			2022B1626	BL02B1	村田 理尚	
			2022A1584	BL02B1	森迫 祥吾	
			2022A1200	BL02B1	箕浦 真生	
			2021B1798	BL02B1	早川 雅大	
			2021B1132	BL02B1	森迫 祥吾	
			2021B1435	BL02B1	村田 理尚	
			2021A1578	BL02B1	早川 雅大	
			2021A1592	BL02B1	西野 龍平	
46160	Hiroaki Ito	96 (2023) 1262-1268	2021A1573	BL02B2	井藤 浩明	Stability and Metastability of Li <sub>3</sub> YCl <sub>6</sub> and Li <sub>3</sub> HoCl <sub>6</sub>
			2022A1698	BL02B2	井藤 浩明	
			2019B1195	BL02B2	後藤 陽介	
			2021B1175	BL02B2	後藤 陽介	
			2022B0559	BL02B2	山下 愛智	
46293	Naoki Kito	96 (2023) 1045-1051	2021A1200	BL01B1	増田 晋也	Au <sub>13</sub> Superatom Bearing Two Terpyridines at Coaxial Positions: Photoluminescence Quenching via Complexation with 3d Metal Ions

### Catalysis Science & Technology

46049	Ayaka Shigemoto	12 (2022) 4450-4455	2021A1038	BL14B2	関根 泰	Elucidation of Catalytic NO <sub>x</sub> Reduction Mechanism in an Electric Field at Low Temperatures
			2021B1847	BL14B2	関根 泰	
46150	Kousuke Bepu	13 (2023) 6653-6661	2020A1165	BL01B1	別府 孝介	Amorphous <i>versus</i> Nanocrystalline RuO <sub>2</sub> Electrocatalysts: Activity and Stability for Oxygen Evolution Reaction in Sulfuric Acid
			2021B1585	BL01B1	別府 孝介	
			2022B0590	BL01B1	別府 孝介	
46188	Takehiro Matsuyama	14 (2024) 76-82	2022B1656	BL14B2	矢部 智宏	Direct Thioether Metathesis Enabled by <i>in situ</i> Formed Pd Nanocluster Catalysts

### Chemical Communications

46051	Jun-Ichiro Makiura	58 (2022) 4837-4840	2022B1775	BL14B2	関根 泰	Efficient CO <sub>2</sub> Conversion to CO using Chemical Looping over Co-In Oxide
46052	Keke Kang	59 (2023) 11061-11064	2023A1036	BL14B2	関根 泰	Equilibrium Unconstrained Low-temperature CO <sub>2</sub> Conversion on Doped Gallium Oxides by Chemical Looping
			2022B1775	BL14B2	関根 泰	
46075	Taito Hashimoto	59 (2023) 7224-7227	2022B1151	BL40XU	久木 一朗	Statically and Dynamically Flexible Hydrogen-bonded Frameworks Based on 4,5,9,10-tetrakis(4-carboxyphenyl)pyrene
			2023A1264	BL40XU	久木 一朗	



### Dalton Transactions

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
46210	Ginji Harada	52 (2023) 13895-13905	2022B1312	BL10XU	新名 良介	Growth of Submillimeter SrTaO <sub>2</sub> N Single Crystals by an NH <sub>3</sub> -assisted SrCl <sub>2</sub> Flux Method
			2023A1146	BL10XU	新名 良介	
46223	Yuto Suga	53 (2024) 862-865	2022B1592	BL02B1	砂田 祐輔	Reduction-induced Hapticity Increase in a Silacycle-bridged Biaryl-based Ligand Coordinated to an Iron Center
46224	Reon Ishii	52 (2023) 15124-15130	2022B1592	BL02B1	砂田 祐輔	Four- and Three-coordinate Planar Iron(II) Complexes Supported by Bulky Organosilyl Ligands

### Journal of Applied Physics

45932	Yongzhao Yao	134 (2023) 155104	2022B3055	BL24XU	姚 永昭	Three-dimensional Distribution and Propagation of Dislocations in $\beta$ -Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Revealed by Borrmann Effect X-ray Topography
			2023A3055	BL24XU	姚 永昭	
46284	Reika Ota	134 (2023) 214103	2021A1160	BL13XU	白石 貴久	Scalable Ferroelectricity of 20 nm-thick (Al <sub>0.8</sub> Sc <sub>0.2</sub> )N Thin Films Sandwiched between TiN Electrodes
			2022A1266	BL13XU	舟窪 浩	
46325	Masayuki Yoshida	132 (2022) 075101	2018B3683	BL14B1	佐野 智一	Influence of Pulse Duration on Mechanical Properties and Dislocation Density of Dry Laser Peened Aluminum Alloy using Ultrashort Pulsed Laser-driven Shock Wave
			2020A3784	BL22XU	佐野 智一	
			2021A3723	BL22XU	菅浦 敬久	
			2021B3723	BL22XU	菅浦 敬久	

### Journal of Materials Chemistry A

45895	Chen Chen	11 (2023) 15389-15393	2022B1694	BL02B2	後藤 真人	Thermal Properties and Phase Transition Behaviors of Possible Caloric Materials Bi <sub>0.95</sub> Ln <sub>0.05</sub> NiO <sub>3</sub>
45907	Hajime Suzuki	11 (2023) 15159-15167	2020A0824	BL02B2	加藤 大地	A Silén Oxyhalide SrBi <sub>3</sub> O <sub>4</sub> Cl <sub>3</sub> as a Promising Photocatalyst for Water Splitting: Impact of the Asymmetric Structure on Light Absorption and Charge Carrier Dynamics
			2022A1081	BL02B2	加藤 大地	
46280	Yuta Harada	(2024) Online published 12 Dec. 2023	2021A1356	BL01B1	直井 勝彦	Ultrafast Cathode Characteristics of a Nano-V <sub>2</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> Carbon Composite for Rechargeable Magnesium Batteries
			2022A1499	BL01B1	直井 勝彦	

### The Journal of Physical Chemistry Letters

46100	Kota Aoki	14 (2023) 10396-10401	2023A1244	BL40B2	高橋 倫太郎	Polymeric Sol-Gel Transition with the Diverging Correlation Length Verified by Small-Angle X-ray Scattering
			2022B1233	BL40B2	高橋 倫太郎	
			2022A1193	BL40B2	高橋 倫太郎	
			2023B1174	BL40B2	高橋 倫太郎	
46216	Zhuanfang Jing	14 (2023) 6270-6277	2021A1110	BL04B2	Zhou Yongquan	Hydration of Alkali Metal and Halide Ions from Static and Dynamic Viewpoints
46220	Aya Fujimoto	14 (2023) 10019-10024	2021A1480	BL40XU	小椎尾 謙	Deformation Behavior of Body-Centered Cubic Lattice in Polymers
			2021A1525	BL05XU	小椎尾 謙	
			2018B1035	BL40XU	高原 淳	
			2019A1015	BL40XU	高原 淳	
			2019B1011	BL40XU	高原 淳	
			2020A1007	BL40XU	高原 淳	
			2021B1460	BL05XU	小椎尾 謙	

### Materials Transactions

45865	Zenji Horita	64 (2023) 1585-1590	2021A1390	BL04B1	堀田 善治	<i>In Situ</i> Synchrotron High-Pressure X-ray Analysis for ZnO with Rocksalt Structure
			2019B1496	BL04B1	堀田 善治	
46279	Toyokazu Tanabe	64 (2023) 2445-2449	2023A1540	BL09XU	田邊 豊和	Metal-Support Interaction at Palladium-Composite Manganese Oxide Interface and CO Oxidation Activity
46307	Hiroyuki Toda	64 (2023) 2729-2738	2019B2046	BL20XU	戸田 裕之	Dominant Factors Controlling the Initiation of Hydrogen Embrittlement in Al-Zn-Mg Alloy
			2020A1084	BL20XU	戸田 裕之	
			2020A1796	BL20XU	戸田 裕之	
			2021A1002	BL20XU	戸田 裕之	
			2021B1123	BL20XU	戸田 裕之	
			2022A1005	BL20XU	戸田 裕之	

### Meteoritics and Planetary Science-1

46156	Daisuke Nakashima	(2023) Online published 3 Jul. 2023	2021B0185	BL20XU	松本 恵	Development of Preparation Methods of Polished Sections of Returned Samples from Asteroid Ryugu by the Hayabusa2 Spacecraft
			2019A0165	BL20XU	土山 明	

### Meteoritics and Planetary Science-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
46157	Zelia Dionnet	(2023) Online published 2 Sep. 2023	2021B0185	BL47XU	松本 恵	Three-dimensional Multiscale Assembly of Phyllosilicates, Organics, and Carbonates in Small Ryugu Fragments
46159	Takaaki Noguchi	(2023) Online published 22 Nov. 2023	2021B0185 2019A0165	BL47XU BL47XU	松本 恵 土山 明	Mineralogy and Petrology of Fine-grained Samples Recovered from the Asteroid (162173) Ryugu

### Physical Chemistry Chemical Physics

46018	Takumi Nakanishi	25 (2023) 12394-12400	2020A1124	BL02B1	佐藤 治	Observation of Proton-transfer-coupled Spin Transition by Single-crystal Neutron-diffraction Measurement
			2021A1070	BL02B1	佐藤 治	
			2021B1223	BL02B1	佐藤 治	
46218	Keke Chai	25 (2023) 10481-10494	2021A1110	BL04B2	Zhou Yongquan	Structure of Choline Chloride-carboxylic Acid Deep Eutectic Solvents by Wide-angle X-ray Scattering and DFT Calculations
46227	Peidong Hu	26 (2024) 116-122	2017A1657	BL13XU	山田 大貴	Revealing the Evolution of Local Structures in the Formation Process of Alkaline Earth Metal Cation-containing Zeolites from Glasses
			2017A3751	BL22XU	町田 晃彦	
			2017B3785	BL22XU	脇原 徹	
			2018A3751	BL22XU	町田 晃彦	
			2018B2095	BL04B2	尾原 幸治	
			2018B3783	BL22XU	脇原 徹	
			2019A2058	BL04B2	尾原 幸治	
			2019B1572	BL02B2	脇原 徹	
			2019B2091	BL04B2	尾原 幸治	
			2021A1455	BL04B2	山田 大貴	
2022B1368	BL04B2	山田 大貴				
2022B2121	BL04B2	山田 大貴				

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

46004	Wei Sun	120 (2023) e2303675120	2021A2742	BL45XU	Wang Yanli	Acr1IC4 Inhibits Type II-C Cas9 by Preventing R-loop Formation
46153	Hiromi Imamura	120 (2023) e2307687120	2020A2576	BL41XU	今田 勝巳	Red Fluorescent Proteins Engineered from Green Fluorescent Proteins
			2021A2736	BL41XU	今田 勝巳	
			2022A2739	BL41XU	今田 勝巳	
46324	Pablo Artigas	120 (2023) e2313999120	2023B2518	EM01CT	阿部 一啓	A Na Pump with Reduced Stoichiometry is Up-regulated by Brine Shrimp in Extreme Salinities

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

45994	Akihiro Minagawa	71 (2021) 409-414	2020A1548	BL20XU	村上 雄一朗	Relationship between TiB <sub>2</sub> Agglomerate Size and Grain Refinement Effectiveness of Al-Ti-B Grain Refiner
46266	Hiroki Adachi	73 (2023) 628-632	2019A1809	BL46XU	足立 大樹	Investigation of the Cause of Serration Generation in Al-Mg Alloy using <i>In-situ</i> XRD/DIC Simultaneous Measurement
			2021A1673	BL46XU	足立 大樹	
46309	Ryota Higa	73 (2023) 530-536	2015A0076	BL20XU	戸田 裕之	Multi-modal 3D Image-based Simulation of Hydrogen Embrittlement Crack Initiation in Al-Zn-Mg Alloy

### ACS Applied Polymer Materials

46025	Isamu Saito	4 (2022) 7054-7060	2021A1131	BL43IR	桶蔭 興資	Anisotropic Responses with Cation Selectivity in Hierarchically Ordered Polysaccharide Networks
46262	Masatoshi Todaka	6 (2024) 298-307	2020A1896	BL19B2	小椎尾 謙	Interfacial Structure Analyses of Single Carbon Fiber-Embedded Polymers by In Situ X-ray Scattering and Birefringence Measurements
			2021A1452	BL20XU	小椎尾 謙	
			2021B1476	BL05XU	小椎尾 謙	
			2021A7223	BL03XU	小椎尾 謙	

### ACS Catalysis

46294	Shinya Masuda	13 (2023) 16179-16187	2021B1415	BL01B1	増田 晋也	Partially Thiolated Au <sub>n</sub> (n = 25, 102) Clusters on Layered Double Hydroxides Anchored by Electrostatic Interactions: Size Effect on 5-Hydroxymethylfurfural Oxidation Catalysis
			2022B1576	BL14B2	増田 晋也	
46328	Takeshi Nishimoto	13 (2023) 14725-14736	2022B1609	BL01B1	吉田 真明	Oxidized Copper and Molybdenum Species Exclusively Boosting Electrocatalytic Hydrogen Evolution in Non-Extreme pH Carbonate Buffer Electrolyte

### 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
46028	Hirohito Umeno	9 (2022) 2104907	2021A7498	BL07LSU	大久保 将史	Oxygen Redox Versus Oxygen Evolution in Aqueous Electrolytes: Critical Influence of Transition Metals
			2020A7474	BL07LSU	大久保 将史	
			2019B7456	BL07LSU	大久保 将史	
			2019A7452	BL07LSU	大久保 将史	
			2018B7590	BL07LSU	大久保 将史	
46105	Kota Matsumoto	10 (2023) 2304978	2022B1046	BL02B2	河底 秀幸	Thermally Reentrant Crystalline Phase Change in Perovskite-Derivative Nickelate Enabling Reversible Switching of Room-Temperature Electrical Resistivity
			2019A0068	BL02B2	森吉 千佳子	

### Chemistry Letters

45876	Taki Suginaga	52 (2023) 715-719	2022B1609	BL01B1	吉田 真明	Development of an FeOOH Electrocatalyst for Water Oxidation from the Recycling of Disposable Body Warmers
46149	Tsugumi Araki	52 (2023) 314-316	2022A1123	BL40B2	櫻木 美菜	Structural Characteristics and Skin Permeabilities of Bicelles Dispersed in Hydrated Deep Eutectic Solvents
			2022B1196	BL40XU	櫻木 美菜	

### Communications Biology

46202	Kyosuke Kawai	5 (2022) 67	2015A1052	BL26B1	三上 文三	Evolutionary Alterations in Gene Expression and Enzymatic Activities of Gibberellin 3-oxidase 1 in <i>Oryza</i>
46323	Kazuhiro Abe	6 (2023) 956	2022B2522	EM01CT	阿部 一啓	Deep Learning Driven de novo Drug Design Based on Gastric Proton Pump Structures
			2021B2530	EM01CT	阿部 一啓	

### FEBS Letters

46145	Kenji Fukui	592 (2018) 1611-1619	2016A2522	BL38B1	村川 武志	Multiple Zinc Ions Maintain the Open Conformation of the Catalytic Site in the DNA Mismatch Repair Endonuclease MutL from <i>Aquifex aeolicus</i>
46203	Saori Ueshima	597 (2023) 2473-2483	2022A2744	BL26B1	三上 文三	Insights into the Catalytic Mechanism of <i>Grimontia hollisae</i> Collagenase through Structural and Mutational Analyses
			2022B6744	BL44XU	三上 文三	
			2023A2733	BL26B1	三上 文三	

### Frontiers in Microbiology

46003	Touya Toyomoto	14 (2023) 1276447	2019A6918	BL44XU	志波 智生	Alkyl Gallates Inhibit Serine <i>O</i> -acetyltransferase in Bacteria and Enhance Susceptibility of Drug-resistant Gram-negative Bacteria to Antibiotics
			2019B6918	BL44XU	志波 智生	
			2020A6518	BL44XU	志波 智生	
			2021A6616	BL44XU	志波 智生	
			2021B6616	BL44XU	志波 智生	
46035	Kunihiko Nishino	12 (2021) 737288	2018B6830	BL44XU	中島 良介	Function and Inhibitory Mechanisms of Multidrug Efflux Pumps
			2019A6928	BL44XU	中島 良介	
			2019B6928	BL44XU	中島 良介	

### The Journal of Chemical Physics

45910	Tsuyoshi Yamaguchi	157 (2022) 154504	2021B1103	BL43LXU	吉田 亨次	Effects of Molecular Shape and Flexibility on Fast Sound of Organic Liquids
46186	Yoshiyasu Matsumoto	159 (2023) 214706	2021B5070	BL16XU	高橋 直子	Understanding the Reaction Mechanism and Kinetics of Photocatalytic Oxygen Evolution on CoO <sub>x</sub> -loaded Bismuth Vanadate

### Journal of Magnetism and Magnetic Materials

46002	Takahiro Onimaru	588 (2023) 171379	2010A1060	BL09XU	筒井 智嗣	Effects of Si Substitution on Ferromagnetic Order and Off-center Rattling of Eu Ions in the Type-I Clathrate Eu <sub>8</sub> Ga <sub>16</sub> Ge <sub>30</sub>
			2015B1112	BL09XU	筒井 智嗣	
46288	Toshiyuki Igarashi	590 (2024) 171640	2021A1538	BL25SU	岡本 聡	Analysis on Bimodal Complex Permeability Spectrum of a Noise Suppression Sheet and Single Constituent Flakes

### Journal of Molecular Liquids

45908	Koji Yoshida	391 (2023) 123197	2017B1229	BL04B2	吉田 亨次	<i>In-situ</i> Observation of an Anion Exchange Membrane at Various Humidity by X-ray Scattering
			2022B1181	BL04B2	吉田 亨次	
45909	Koji Yoshida	366 (2022) 120218	2020A1320	BL35XU	吉田 亨次	The Translational, Rotational, and Phonon Dynamics of Water in ZrO <sub>2</sub> /Water Nanofluid

### The Journal of Physical Chemistry B

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
46176	Masaru Nakada	127 (2023) 10556-10563	2020A3337	BL08B2	桑本 滋生	Low-Temperature Behaviors, Cold Crystallization, and Glass Transition in Poly(vinylpyrrolidone) Aqueous Solution
			2021A3337	BL08B2	桑本 滋生	
			2021B3337	BL08B2	桑本 滋生	
46217	Zhuanfang Jing	127 (2023) 4858-4869	2021A1110	BL04B2	Zhou Yongquan	Alkali Metal Ion Recognition by 18-Crown-6 in Aqueous Solutions: Evidence from Local Structures

### Journal of Physics: Condensed Matter

46127	Kazuhiro Matsuda	36 (2024) 075501	2021B4258	BL12XU	松田 和博	Observation of Plasmon Excitation in Liquid Silicon by Inelastic X-ray Scattering
			2022A4254	BL12XU	松田 和博	
			2018A4261	BL12XU	松田 和博	
			2018B4260	BL12XU	松田 和博	
46255	Takashi Naka	36 (2024) 125801	2015B4505	BL15XU	名嘉 節	Phase Transitions and Slow Spin Dynamics of Slightly Inverted A-site Spinel $\text{CoAl}_{2-x}\text{Ga}_x\text{O}_4$
			2016B4505	BL15XU	名嘉 節	
			2018A4507	BL15XU	名嘉 節	

### Materials Science and Engineering A

46073	Lavakumar Avala	878 (2023) 145214	2018B1760	BL46XU	辻 伸泰	Unique Microstructure Formations during Low-temperature Partitioning after Intercritical Annealing in Low Alloy Multi-phase TRIP Steel and Their Mechanical Behavior Clarified by in-situ Synchrotron X-Ray Diffraction
46074	Lavakumar Avala	874 (2023) 145089	2018B1760	BL46XU	辻 伸泰	Role of Surrounding Phases on Deformation-induced Martensitic Transformation of Retained Austenite in Multi-phase TRIP Steel

### Microscopy

46178	Ryohei Yamaura	71 (2022) 364-373	2020A1264	BL20B2	山内 大輔	Three-dimensionally Visualized Rhizoid System of Moss, <i>Physcomitrium patens</i> , by Refraction-contrast X-ray Micro-computed Tomography
			2021B1154	BL20B2	山内 大輔	
46179	Ichirou Karahara	72 (2023) 310-325	2020A1264	BL20B2	山内 大輔	Three-dimensional Visualization of Plant Tissues and Organs by X-ray Micro-computed Tomography
			2021B1154	BL20B2	山内 大輔	
			2022B1143	BL20B2	唐原 一郎	

### Molbank

46094	Masahiro Kouno	2023 (2023) M1684	2021A1295	BL02B2	吉成 信人	Hexakis( $\mu$ -3-aminopropanethiolato-1 $\kappa^6$ N,S:2 $\kappa^3$ S;3 $\kappa^6$ N,S:2 $\kappa^3$ S)cadmium(II)dihodium(III) Dibromide Tetrahydrate
			2022A1578	BL02B2	吉成 信人	
46095	Taichi Baba	2023 (2023) M1698	2021A1295	BL02B2	吉成 信人	[ $\mu$ -1,2-Bis(diphenylphosphino)ethane- $\kappa^2P,P'$ ]bis(3-mercapto-1,2-propanediolato- $\kappa$ S-gold(I))

### Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A

46000	Alexander Rack	1058 (2024) 168812	2019B1648	BL40XU	Rack Alexander	Recent Developments in MHz Radioscopy: Towards the Ultimate Temporal Resolution using Storage Ring-based Light Sources
			2019B2087	BL40XU	関口 博史	
46110	Shunji Kishimoto	1058 (2024) 168884	2017B1208	BL09XU	岸本 俊二	X-ray Timing Detectors with HfO <sub>2</sub> Nanoparticle-loaded Plastic Scintillator and Silicon Avalanche Photodiode
			2018B1299	BL09XU	岸本 俊二	

### Physica Status Solidi A

46292	Nobuya Hiroshiba	220 (2023) 2300252	2018A1777	BL46XU	松原 亮介	Early Stage Growth Process of Dinaphtho[2,3-b:2',3'-f]thieno[3,2-b]thiophene (DNTT) Thin Film
			2021B1953	BL46XU	松原 亮介	
46295	Ryosuke Fukazawa	220 (2023) 2300161	2021B1953	BL46XU	松原 亮介	Hole Injection Characteristics and Annealing Temperature Dependence for Organic Light-Emitting Diodes Using Spontaneous Polarization

### Science-1

45922	Kento Katagiri	382 (2023) 69-72	2021A8004	BL3	Koenig Michel	Transonic Dislocation Propagation in Diamond
			2021B8067	BL3	尾崎 典雅	



### Science-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
46243	Manuel Maestre-Reyna	382 (2023) eadd7795	2017A8019	BL3	岩田 想	Visualizing the DNA Repair Process by a Photolyase at Atomic Resolution
			2017B8052	BL2	別所 義隆	
			2018A8008	BL2	別所 義隆	
			2018B8031	BL2	別所 義隆	
			2019A8014	BL2	別所 義隆	
			2019B8005	BL2	別所 義隆	
			2018A2514	BL32XU	別所 義隆	
			2019A2534	BL32XU	別所 義隆	
2020A2585	BL32XU	別所 義隆				

### Science Advances

46085	Shunsuke Sato	9 (2023) eadh9986	2021B7038	BL33XU	坂本 直柔	Enhanced Performance of Molecular Electrocatalysts for CO <sub>2</sub> Reduction in a Flow Cell Following K <sup>+</sup> Addition
			2022A7038	BL33XU	坂本 直柔	
			2023A7038	BL33XU	坂本 直柔	
46207	Fuminao Kishimoto	9 (2023) eadi1744	2021B1394	BL04B2	岸本 史直	Direct Microwave Energy Input on a Single Cation for Outstanding Selective Catalysis
			2022A1079	BL04B2	岸本 史直	
			2022A1082	BL01B1	岸本 史直	

### Science and Technology of Advanced Materials: Method

45921	Shin Tajima	3 (2023) 2260299	2023A7030	BL33XU	梅原 密太郎	Charge-discharge Properties of LiMn <sub>2</sub> O <sub>4</sub> -group Positive Electrode Active Materials for Lithium-ion Batteries using High-throughput Experimental Screening and Machine Learning Models
			2021A7030	BL33XU	田島 伸	
			2021B7030	BL33XU	梅原 密太郎	
46228	Satoru Hamamoto	3 (2023) 2270529	2022A2043	BL20XU	大浦 正樹	Demonstration of Efficient Transfer Learning in Segmentation Problem in Synchrotron Radiation X-ray CT Data for Epoxy Resin

### Soft Matter

45931	Madoka Mizuguchi	19 (2023) 7781-7786	2021B1138	BL40B2	寺尾 憲	Solution Characterization of a Hyperbranched Polysaccharide Carbamate Derivative and Specific Phase Separation Behavior Due to Chain Branching
			2021B1139	BL40B2	寺尾 憲	
46103	Taiki Hoshino	19 (2023) 3267-3272	2021B7259	BL03XU	山本 渥史	Dynamic Behaviours of Epoxy Resin Thin Films during the Curing Process
			2022A7210	BL03XU	山本 渥史	

### ACS Applied Energy Materials

46123	Zulai Cao	6 (2023) 11906-11914	2021A1645	BL14B2	山本 健太郎	High-Performance Copper/Copper Oxide-Based Cathode Prepared by a Facile Ball-Milling Method for All-Solid-State Fluoride-Ion Batteries
			2021B1374	BL27SU	山本 健太郎	
			2021B1878	BL14B2	山本 健太郎	
			2021B1019	BL20XU	内本 喜晴	
			2021B1508	BL02B2	松永 利之	
			2021B1540	BL02B2	松永 利之	
2020A1509	BL02B2	松永 利之				

### ACS Applied Materials & Interfaces

46005	Yuto Higuchi	15 (2023) 38463-38473	2022A1219	BL02B2	田中 俊輔	CO <sub>2</sub> -Induced Gate-Opening Adsorption on a Chabazite/Phillipsite Composite Zeolite Transformed from a Faujasite Zeolite Using Organic Structure-Directing Agent-Free Steam-Assisted Conversion
-------	--------------	--------------------------	-----------	--------	-------	---

### ACS Applied Nano Materials

45860	Loku Singgappulige Rosantha Kumara	6 (2023) 16653-16661	2017A1320	BL04B2	坂田 修身	Persistent Homology and Bond Orientational Order in Ir-Cu Solid-Solution Alloy Nanoparticles: Implications for Electrocatalysts
			2017A1034	BL04B2	坂田 修身	
			2017A4910	BL15XU	草田 康平	
			2017A4501	BL15XU	坂田 修身	
			2020A1416	BL04B2	坂田 修身	

### ACS Engineering Au

46208	William J. Movick	3 (2023) 292-300	2022B0532	BL01B1	岸本 史直	Low-Temperature Ammonia Synthesis with an In Situ Adsorber under Regenerative Reaction Cycles Surpassing Thermodynamic Equilibrium
			2022B1629	BL14B2	岸本 史直	

### ACS 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
46008	Shun Hayashi	3 (2023) 456-463	2021A1283	BL01B1	林 峻	Highly Active and Durable Rh–Mo-Based Catalyst for the NO–CO–C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> –O <sub>2</sub> Reaction Prepared by Using Hybrid Clustering

### ACS Organic & Inorganic Au

46009	Shun Hayashi	3 (2023) 283-290	2022B1655	BL01B1	林 峻	High-Density Formation of Ir/MoO <sub>x</sub> Interface through Hybrid Clustering for Chemoselective Nitrostyrene Hydrogenation
-------	--------------	---------------------	-----------	--------	-----	---

### ACS Sustainable Chemistry & Engineering

46197	Huyen Nguyen	10 (2022) 923-934	2016A2540	BL26B1	三上 文三	Functional and Structural Characterizations of Lytic Polysaccharide Monoxygenase, Which Cooperates Synergistically with Cellulases, from <i>Ceriporiopsis subvernisporea</i>
			2016A2575	BL26B1	三上 文三	
			2016B6640	BL44XU	三上 文三	

### Advanced Electronic Materials

45919	Xueyou Yuan	11 (2024) 230714	2017B4903	BL15XU	山田 智明	Extraordinarily Large Contribution Ratio of Ferroelastic Domain Switching to Piezoresponse in Monoclinic (K, Na)NbO <sub>3</sub> Films
			2017B1574	BL13XU	山田 智明	

### Advanced Materials

46147	Dali Ji	35 (2023) 2301506	2021B1204	BL01B1	神谷 和秀	Angstrom-Confined Electrochemical Synthesis of Sub-Unit-Cell Non-Van Der Waals 2D Metal Oxides
			2022A1165	BL01B1	神谷 和秀	

### Analytical Sciences

46122	Yuji Sasaki	(2023) Online published 7 Nov. 2023	2019A3740	BL22XU	中瀬 正彦	Preliminary Studies of XANES and DFT Calculation of Ru Extraction by Imino-diacetamide and Related Compounds
			2019B3737	BL22XU	中瀬 正彦	

### Angewandte Chemie International Edition

46058	Yuki Nakaya	60 (2021) 19715-19719	2020A1255	BL01B1	古川 森也	Doubly Decorated Platinum–Gallium Intermetallics as Stable Catalysts for Propane Dehydrogenation
			2020A1609	BL14B2	古川 森也	
			2021A1541	BL14B2	古川 森也	

### Antimicrobial Agents and Chemotherapy

46036	Seiji Yamasaki	66 (2022) e00672-22	2019A6928	BL44XU	中島 良介	Spatial Characteristics of the Efflux Pump MexB Determine Inhibitor Binding
			2020A6527	BL44XU	中島 良介	
			2021A6624	BL44XU	中島 良介	

### Applied and Environmental Microbiology

46143	Yuki Honda	84 (2018) e02213-18	2017B2708	BL38B1	中野 祥吾	Improvement of ST0452 <i>N</i> -Acetylglucosamine-1-Phosphate Uridyltransferase Activity by the Cooperative Effect of Two Single Mutations Identified through Structure-Based Protein Engineering
-------	------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

### Applied Catalysis A: General

46061	Hiroyasu Tabe	237 (2018) 1124-1129	2016B2718	BL26B1	安部 聡	Photocatalytic Hydrogen Evolution Systems Constructed in Cross-linked Porous Protein Crystals
-------	---------------	-------------------------	-----------	--------	------	---

### Applied Catalysis B

46027	Xiao Zhao	324 (2023) 122268	2017A7800	BL36XU	岩澤 康裕	Roles of Structural Defects in Polycrystalline Platinum Nanowires for Enhanced Oxygen Reduction Activity
			2017A7801	BL36XU	岩澤 康裕	
			2017A7807	BL36XU	岩澤 康裕	
			2017A7808	BL36XU	岩澤 康裕	
			2017B7800	BL36XU	岩澤 康裕	
			2017B7801	BL36XU	岩澤 康裕	
			2017B7806	BL36XU	岩澤 康裕	
			2018A7800	BL36XU	岩澤 康裕	
			2018A7801	BL36XU	岩澤 康裕	
			2018A7806	BL36XU	岩澤 康裕	
			2018B7800	BL36XU	岩澤 康裕	
			2018B7801	BL36XU	岩澤 康裕	
			2019A7800	BL36XU	岩澤 康裕	
			2019A7801	BL36XU	岩澤 康裕	
2019B7800	BL36XU	岩澤 康裕				
2019B7801	BL36XU	岩澤 康裕				

### Applied Microbiology and Biotechnology

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
45961	Tomohiko Matsuzawa	101 (2017) 8353-8363	2016A6657	BL44XU	渡邊 真宏	Improved Thermostability of a Metagenomic Glucose-tolerant $\beta$ -glycosidase Based on its X-ray Crystal Structure
			2016B6657	BL44XU	渡邊 真宏	

### Applied Physics Express

45885	Yasuo Nakayama	16 (2023) 101001	2020A1627	BL19B2	中山 泰生	Well-ordered Molecular Heterojunction of Epitaxial C <sub>60</sub> on Single-crystal Dinaphtho[2,3-b:2',3'-f]thieno[3,2-b]thiophene (DNTT)
			2021A1629	BL46XU	中山 泰生	
			2022A1324	BL13XU	中山 泰生	

### Applied Science

45917	Tetsuya Miyazawa	13 (2023) 10753	2021B2078	BL08W	今井 英人	Imaging Liquid Water in a Polymer Electrolyte Fuel Cell with High-Energy X-ray Compton Scattering
			2022A1017	BL08W	今井 英人	
			2022B1007	BL08W	今井 英人	
			2023A1010	BL08W	今井 英人	
			2019B1371	BL08W	辻 成希	
			2020A1301	BL08W	辻 成希	
			2020A1300	BL08W	辻 成希	
			2021A2077	BL08W	辻 成希	
			2021B1639	BL08W	辻 成希	
2022B2122	BL08W	辻 成希				

### Applied Surface Science

45912	Ibrahim Gueye	593 (2022) 153272	2020A4602	BL15XU	長田 貴弘	Operando Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy Study of Buried Interface Chemistry of Au/InO <sub>1.16</sub> C <sub>0.04</sub> /Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /p <sup>+</sup> -Si Stacks
			2020A4651	BL15XU	長田 貴弘	

### Biochemistry

45960	Daichi Murata	56 (2017) 6281-6291	2016B2572	BL26B1	松村 浩由	Structural Basis for the <i>Serratia marcescens</i> Lipase Secretion System: Crystal Structures of the Membrane Fusion Protein and Nucleotide-Binding Domain
			2016B6639	BL44XU	松村 浩由	

### Biochimie

45904	Asako Kikuchi	142 (2017) 41-50	2017A2545	BL41XU	姚 閔	A Novel Glycoside Hydrolase Family 97 Enzyme: Bifunctional $\beta$ -L-arabinopyranosidase/ $\alpha$ -galactosidase from <i>Bacteroides thetaiotaomicron</i>
-------	---------------	---------------------	-----------	--------	-----	---

### Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters

46118	Rie Nishikawa-Shimono	97 (2023) 129541	2022B2518	BL32XU	上谷 将史	Discovery of Novel Indole Derivatives as Potent and Selective Inhibitors of proMMP-9 Activation
-------	-----------------------	---------------------	-----------	--------	-------	---

### Bioscience, Biotechnology & Biochemistry

46206	Manami Suzuki	85 (2021) 386-390	2018A2546	BL26B1	榎田 哲哉	Insight into the Mechanism of Thermostabilization of GH10 Xylanase from <i>Bacillus</i> sp. Strain TAR-1 by the Mutation of S92 to E
			2018A2526	BL26B1	榎田 哲哉	
			2018A2563	BL26B1	三上 文三	
			2019B2714	BL26B1	三上 文三	

### Carbohydrate Polymers

46111	Yuma Nakata	325 (2024)121587	2020A0529	BL40B2	寺尾 憲	Dual Thermoresponsive Polysaccharide Derivative – Water System. Partially Substituted Amylose Butylcarbarnate in Water
			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	
			2022B1120	BL40B2	寺尾 憲	

### Cellulose

45861	Yoshinori Doi	30 (2023) 8287-8297	2021A1240	BL40B2	磯部 紀之	Monitoring Crystallite Fusion of Nanocellulose during Colloid Condensation
-------	---------------	------------------------	-----------	--------	-------	--

### Chemistry - A European Journal

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
46126	Mahfuza Akter	24 (2018) 18052-18058	2012A6721	BL44XU	柴田 直樹	Redox Potential-Dependent Formation of an Unusual His-Trp Bond in Bilirubin Oxidase
			2012B6721	BL44XU	柴田 直樹	
			2014A6925	BL44XU	柴田 直樹	
			2014B6925	BL44XU	柴田 直樹	
			2018A6821	BL44XU	柴田 直樹	
			2017A2538	BL26B1	柴田 直樹	
			2017A2538	BL38B1	柴田 直樹	
	理研	BL32XU				

### Chemistry of Materials

45958	Xun Kang	35 (2023) 8621-8628	2021A1169	BL02B2	山浦 一成	Promising Approach to Achieving a Large Exchange Bias Effect in Bulk Materials with Small Cooling Fields
			2022A1067	BL02B2	Belik Alexei	
			2022B1919	BL02B2	山浦 一成	

### ChemSusChem

45942	Ritsuki Nakajima	16 (2023) e202300384	2018B5311	BL16B2	中山 耕輔	Principles of Self-Repairing Ability of Tripodal Ligand-Stabilized Hybrid Cobalt Hydroxide Nanosheets for Alkaline Water Electrolysis
			2019A5311	BL16B2	中山 耕輔	
			2019B5311	BL16B2	尾角 英毅	
			2020A5311	BL16B2	尾角 英毅	
			2021B5310	BL16B2	尾角 英毅	

### Communications Chemistry

45913	Erika Tsutsumi	6 (2023) 190	2020A2548	BL41XU	竹田 一旗	Structure of a Putative Immature Form of a Rieske-type Iron-Sulfur Protein in Complex with Zinc Chloride
			2019A2560	BL41XU	竹田 一旗	

### Computer Physics Communications

45950	Katsumi Hagita	295 (2023) 108971	2018B3404	BL08B2	萩田 克美	Two-dimensional Pattern Reverse Monte Carlo Analysis of Nanoparticles in Polymer Matrices using a Combination of OpenACC and cuFFT
			2018B3290	BL24XU	萩田 克美	

### e-Journal of Surface Science and Nanotechnology

45923	Shinya Hosokawa	20 (2022) 36-41	2021A1177	BL39XU	細川 伸也	Three-dimensional Atomic Image of FeSe High-temperature Superconductor by X-ray Fluorescence Holography
			2020A0549	BL13XU	細川 伸也	

### ECS Transactions

45925	Yuki Orikasa	109 (2022) 109	2020A0682	BL37XU	折笠 有基	Operando Cerium Distribution Analysis on Through-Plane Membrane Electrode Assemblies in 2nd-Generation MIRAI
			2021A1010	BL37XU	今井 英人	
			2021A2046	BL37XU	今井 英人	
			2021B1011	BL37XU	今井 英人	
			2022A1019	BL37XU	今井 英人	

### Electrochemistry

45926	Mariya Yamagishi	91 (2023) 037002	2021B1725	BL46XU	折笠 有基	Effect of Fluorine Substitution in Li <sub>3</sub> YCl <sub>6</sub> Chloride Solid Electrolytes for All-solid-state Battery
			2021B1936	BL46XU	折笠 有基	
			2020A1704	BL28B2	山重 寿夫	

### Electronic Structure

46231	Shin-ichi Fujimori	5 (2023) 045009	2019A3811	BL23SU	藤森 伸一	Impact of the Ce 4f States in the Electronic Structure of the Intermediate-valence Superconductor CeIr <sub>3</sub>
			2019B3811	BL23SU	藤森 伸一	
			2020A3811	BL23SU	藤森 伸一	

### Faraday Discussions

45937	Chinmoy Das	225 (2021) 403-413	2020A1383	BL04B2	堀毛 悟史	Crystal Melting and Vitrification Behaviors of a Three-dimensional Nitrile-based Metal-organic Framework
-------	-------------	-----------------------	-----------	--------	-------	--

### Frontiers in Oncology

46226	Seigi Yamamoto	13 (2023) 1213678	2022B1242	BL40B2	松尾 龍人	Structural Characterization of Human <i>de novo</i> Protein NCYM and its Complex with a Newly Identified DNA Aptamer using Atomic Force Microscopy and Small-angle X-ray Scattering
-------	----------------	----------------------	-----------	--------	-------	---



### IEEE Transactions on Magnetics

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
45954	Taku Okada	59 (2023) 2501205	2018B1467	BL25SU	藤枝 俊	Evaluation of Magnetic Flux Density Change for Vibration Energy Harvesting: Comparison between Direct and Indirect Measurements

### Internal Medicine

45874	Shogo Kitahata	(2023) Online published Aug. 23, 2023	2017A1431	BL37XU	松浦 晃洋	Renal Cell Carcinoma and Hepatocellular Carcinoma in a Patient with Wilson's Disease: A Case Report
			2018A1395	BL37XU	松浦 晃洋	
			2019A1026	BL37XU	松浦 晃洋	

### International Journal of Biological Macromolecules

46201	Apisian Phienluphon	253 (2023) 127188	2021A2760	BL26B1	三上 文三	Structural Insights into the Molecular Mechanisms of Substrate Recognition and Hydrolysis by Feruloyl Esterase from <i>Aspergillus sydowii</i>
			2022A2744	BL26B1	三上 文三	

### International Journal of Hydrogen Energy

46229	Akihiko Kato	50 (2024) 1218-1227	2019B7032	BL33XU	山口 聡	Dependence of Vapor and Liquid Water Removal on Cross-flow in Polymer Electrolyte Fuel Cell Investigated by Operando Synchrotron X-ray Radiography
			2020A7032	BL33XU	山口 聡	

### International Journal of Mechanical Sciences

46296	Takashi Matsuno	261 (2024) 108671	2020A1772	BL46XU	松野 崇	Flow Stress Curves for 980MPa- and 1.5GPa-class Ultra-high-strength Steel Sheets Weakened under High-stress Triaxiality
			2020A1097	BL28B2	松野 崇	
			2022A1385	BL28B2	松野 崇	

### International Journal of Molecular Sciences

45881	Koichiro Oishi	24 (2023) 12069	2019A1313	BL40XU	西野 有里	Ligand-Dependent Intramolecular Motion of Native Nicotinic Acetylcholine Receptors Determined in Living Myotube Cells via Diffracted X-ray Tracking
			2018B1087	BL40XU	西野 有里	
			2020A2018	BL40XU	関口 博史	

### ISIJ International

45951	Sohei Sukenaga	63 (2023) 1263-1266	2017B1400	BL04B2	助永 壮平	Mechanism of Al Coordination Change in Alkaline-earth Aluminosilicate Glasses: An Application of Bond Valence Model
-------	----------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

### Journal of Applied Glycoscience

46205	Hisamu Iwase	70 (2023) 99-107	2017B2592	BL38B1	橋本 涉	Crystal Structures of <i>Lactocaseibacillus</i> 4-deoxy-L-threo-5-hexosulose-uronate Ketol-isomerase Kdul in Complex with Substrate Analogs
			2019A2557	BL45XU	橋本 涉	
			2020A2577	BL26B1	橋本 涉	

### Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, and Systems

45911	Kazunori Asakura	9 (2023) 025004	2020A1506	BL20B2	林田 清	Multi-image X-ray Interferometer Module: I. Design Concept and Proof-of-concept Experiments with Fine-pitch Slits
			2018A1368	BL20B2	林田 清	
			2018B1235	BL20B2	林田 清	
			2019A1503	BL20B2	林田 清	
			2019B1492	BL20B2	林田 清	
			2021A1442	BL20B2	林田 清	

### The Journal of Biochemistry

46146	Shota Akai	165 (2019) 185-195	2013B1204	BL38B1	宮原 郁子	The Crystal Structure of Homoserine Dehydrogenase Complexed with L-homoserine and NADPH in a Closed Form
-------	------------	-----------------------	-----------	--------	-------	--

### Journal of Composite Materials

46219	Masatoshi Todaka	57 (2023) 4157-4167	2021A7223	BL03XU	小椎尾 謙	In situ and Offline Mapping Analyses of Fatigue Behavior in Carbon-fiber-reinforced Polymers by Small- and Wide-angle X-ray Scattering
-------	------------------	------------------------	-----------	--------	-------	--

### Journal of Materials Processing Technology

46297	Takashi Matsuno	322 (2023) 118174	2020A1097	BL28B2	松野 崇	Unstable Stress-triaxiality Development and Contrasting Weakening in Two Types of High-strength Transformation-induced Plasticity (TRIP) Steels: Insights from a New Compact Tensile Testing Method
			2022A1385	BL28B2	松野 崇	

### Journal of Materials Science & Technology

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
46107	Naoki Takata	178 (2024) 80-89	2021A1663	BL19B2	足立 大樹	Microstructural Origins of High Strength of Al-Si Alloy Manufactured by Laser Powder Bed Fusion: <i>In-situ</i> Synchrotron Radiation X-ray Diffraction Approach
			2022A1001	BL13XU	足立 大樹	
			2022A1798	BL19B2	足立 大樹	

### Journal of Medicinal Chemistry

45997	Kumi Abe-Sato	66 (2023) 14653-14668	2021B2518	BL32XU	上谷 将史	Structure-Based Optimization and Biological Evaluation of Potent and Selective MMP-7 Inhibitors for Kidney Fibrosis
			2021B2518	BL45XU	上谷 将史	

### Journal of Molecular Biology

46113	Mohammad Shahrizal Bin Mohammad Umar	431 (2019) 625-635	2017A2557	BL32XU	塚崎 智也	Structural Basis for the Function of the $\beta$ -Barrel Assembly-Enhancing Protease BepA
-------	--------------------------------------	-----------------------	-----------	--------	-------	---

### Journal of Photopolymer Science and Technology

46245	Yuji Hosaka	34 (2021) 95-98	2018B8042	BL1	錦野 将元	Study on Irradiation Effects by Femtosecond-pulsed Extreme Ultraviolet in Resist Materials
-------	-------------	--------------------	-----------	-----	-------	--

### Journal of Solution Chemistry

46246	Toshio Yamaguchi	(2023) Online published 1 Aug. 2023	2021A1362	BL08W	山口 敏男	Structure of Single Aqueous MgSO <sub>4</sub> Droplets Ultrasonically Levitated in the Air: Supersaturation and Crystallization
			2020A0771	BL08W	山口 敏男	
			2019B1656	BL08W	山口 敏男	
			2019A1603	BL08W	山口 敏男	

### Journal of Surface Analysis

46059	Shuichi Ogawa	29 (2022) 82-89	2019A3836	BL23SU	小川 修一	Evaluation of Electronic/Chemical State of Nano Carbon Materials Using Photoelectron Spectroscopy
			2019B3801	BL23SU	吉越 章隆	
			2020A3801	BL23SU	吉越 章隆	
			2021A3801	BL23SU	吉越 章隆	

### Journal of the American Association for Laboratory Animal Science

46194	Martin Donnelley	62 (2023) 559-568	2022A1077	BL20XU	Donnelley Martin	Noncontact Respiratory Motion Detection in Anesthetized Rodents
			2022B1169	BL20XU	Donnelley Martin	

### Journal of the American Ceramic Society

45897	Kei Maeda	106 (2023) 7440-7448	2020A1603	BL20XU	前田 敬	Indentation-induced Ductile Behavior of Glass-ceramics Involving Layered Aluminosilicates
			2020A0521	BL20XU	大熊 学	

### Journal of the Ceramic Society of Japan

45873	Keigo Aihara	131 (2023) 813-822	2019A1830	BL14B2	相原 啓吾	Design of Oxygen-Storage/Release Materials with High-Speed of Oxygen release in Rare-Earth Trivalent Cation M <sup>3+</sup> -doped Ceria-Zirconia System
-------	--------------	-----------------------	-----------	--------	-------	--

### Journal of the Japan Petroleum Institute

46187	Tomohiro Hojo	66 (2023) 238-245	2022B1656	BL14B2	矢部 智宏	Efficient in situ Formation of Fe <sub>3</sub> C <sub>2</sub> from Alkali Metal-doped Ru/Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> during CO <sub>2</sub> Hydrogenation
			2023A1512	BL14B2	矢部 智宏	

### JTCVS Open

46024	Yuson Wada	8 (2021) 557-560	2021A1141	BL20B2	大嶋 義博	Identification of the Atrioventricular Conduction Axis and its Positional Relationship with Anatomical Landmarks of a Heart with Tricuspid Atresia
-------	------------	---------------------	-----------	--------	-------	--

### Key Engineering Materials

46283	Kenji Suzuki	968 (2023) 3-8	2021A3684	BL14B1	鈴木 賢治	Actual Stress Analysis of Welded Part Using a Quantum Beam Hybrid Method
			2022A3684	BL14B1	鈴木 賢治	

### Liquids

46247	Toshio Yamaguchi	3 (2023) 288-302	2012B3623	BL14B1	山口 敏男	An X-ray and Neutron Scattering Study of Aqueous MgCl <sub>2</sub> Solution in the Gigapascal Pressure Range
-------	------------------	---------------------	-----------	--------	-------	--

### Macromolecules

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
45949	Katsumi Hagita	56 (2023) 4457-4467	2018B3290	BL24XU	萩田 克美	Structural Changes of Aggregated Filler Particles in Elongated Rubbers through Two-Dimensional Pattern Reverse Monte Carlo Modeling
			2018B3404	BL08B2	萩田 克美	
			2016B1557	BL19B2	曾根 卓男	

### Materials Science Forum

46222	Yoshikazu Nakai	1107 (2023) 61-66	2018B1597	BL46XU	中井 善一	Misorientation of Grains in Fatigue of Harmonic Structured Steel Observed by Diffraction Contrast Tomography Using Ultrabright Synchrotron Radiation
			2019A1643	BL46XU	中井 善一	
			2019B1728	BL46XU	中井 善一	
			2021B1887	BL46XU	中井 善一	

### Microbiome Research Reports

46195	Aina Gotoh	2 (2023) 20	2011A1891	BL38B1	伏信 進矢	Substrate Recognition Mode of a Glycoside Hydrolase Family 42 $\beta$ -galactosidase from <i>Bifidobacterium longum</i> Subspecies <i>infantis</i> (BiBga42A) Revealed by Crystallographic and Mutational Analyses
			2011A1908	BL26B1	伏信 進矢	

### Modern Physics Letters B

46193	Keisuke Matsui	(2023) Online published 27 Nov. 2023	2021A1587	BL02B2	芳鐘 順也	Electron Injection into Superconducting Trivalent Fullerenes Close to the Mott Transition Boundary
-------	----------------	--	-----------	--------	-------	--

### Nano Letters

45918	Masatoshi Kimura	21 (2021) 9240-9246	2020A4701	BL15XU	上田 茂典	Large Phonon Drag Thermopower Boosted by Massive Electrons and Phonon Leaking in $\text{LaAlO}_3/\text{LaNiO}_3/\text{LaAlO}_3$ Heterostructure
			2018A4701	BL15XU	井手 啓介	
			2018B4701	BL15XU	井手 啓介	

### Nature

46225	Long-Jiang Yu	556 (2018) 209-213	2014B1277	BL41XU	于 龍江	Structure of Photosynthetic LH1-RC Supercomplex at 1.9 Å Resolution
			2015A1079	BL41XU	于 龍江	
			2016A2553	BL41XU	于 龍江	
			2017A2590	BL41XU	于 龍江	
			2015B6522	BL44XU	菅 倫寛	
			2016B6621	BL44XU	菅 倫寛	
			2017A6724	BL44XU	菅 倫寛	

### Nature Chemical Biology

45858	Takahiro Mori	13 (2017) 1066-1073	2015A1031	BL41XU	阿部 郁朗	Molecular Basis for the Unusual Ring Reconstruction in Fungal Meroterpenoid Biogenesis
-------	---------------	------------------------	-----------	--------	-------	--

### Nature Chemistry

45859	Christopher D. M. Hutchison	15 (2023) 1607-1615	2017B8008	BL3	van Thor Jasper	Optical Control of Ultrafast Structural Dynamics in a Fluorescent Protein
			2019B8021	BL3	van Thor Jasper	

### Nature Energy

46119	Jie Ding	8 (2023) 1386-1394	2020A4260	BL12XU	平岡 望	A Tin-based Tandem Electrocatalyst for $\text{CO}_2$ Reduction to Ethanol with 80% Selectivity
			2020A4262	BL12XU	平岡 望	
			2020A4265	BL12XU	平岡 望	
			2020A4266	BL12XU	平岡 望	
			2020A4267	BL12XU	平岡 望	
			2020A4264	BL12XU	平岡 望	

### Nature Geoscience

46230	Tomoaki Kubo	3 (2010) 41-45	2006B1430	BL04B1	久保 友明	Plagioclase Breakdown as an Indicator for Shock Conditions of Meteorites
-------	--------------	-------------------	-----------	--------	-------	--

### Nature Physics

45857	Gilberto A. de la Pena Munoz	19 (2023) 1489-1494	2018A8007	BL3	Wall Simon	Ultrafast Lattice Disorder can be Accelerated by Electronic Collisional Forces
			2019A8038	BL3	Trigo Mariano	
			2019B8075	BL3	Trigo Mariano	

### Nature Structural & Molecular Biology

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
46010	Si Hoon Park	30 (2023) 1695-1706	2021A6673	BL44XU	Song HyunKyu	Structure and Activation of the RING E3 Ubiquitin Ligase TRIM72 on the Membrane
			2021B6673	BL44XU	Song HyunKyu	

### NPG Asia Materials

45868	Xin Tang	15 (2023) 50	2020A1785	BL25SU	廣澤 哲	Unveiling the Origin of the Large Coercivity in (Nd, Dy)-Fe-B Sintered Magnets
			2020A1787	BL25SU	廣澤 哲	
			2020A2046	BL25SU	小谷 佳範	

### Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B

46213	Shan Lin	547 (2024) 165173	2018B1043	BL40XU	奥田 浩司	Nanostructure Distribution in Multilayered Al Alloy Sheets Analyzed by Quantitative Small-angle X-ray Scattering Tomography
			2020A7224	BL03XU	奥田 浩司	
			2021B7281	BL03XU	奥田 浩司	
			2022A1472	BL40XU	奥田 浩司	

### Nucleic Acids Research

46214	Yasuhiro Arimura	46 (2018) 10007-10018	2014A1042	BL41XU	胡桃坂 仁志	Cancer-associated Mutations of Histones H2B, H3.1 and H2A.Z.1 Affect the Structure and Stability of the Nucleosome
			2014B1125	BL41XU	胡桃坂 仁志	
			2015A1020	BL41XU	胡桃坂 仁志	

### Optics Express

46012	Takenori Shimamura	31 (2023) 38132-38145	2020A1694	BL25SU	島村 勇徳	Soft-X-ray Nanobeams Formed by Aberration-reduced Elliptical Mirrors with Large Numerical Aperture
-------	--------------------	--------------------------	-----------	--------	-------	--

### Organisms Diversity & Evolution

46099	Tatsuki Matoba	23 (2023) 871-879	2022A1201	BL20XU	吉澤 和徳	Is the Copulation of Silver-washed Fritillary Inverted? Function of the Female Genital Projection (Lepidoptera: Nymphalidae: Argynnini)
-------	----------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

### Physical Review Letters

45924	Ichiro Inoue	131 (2023) 163201	2021A8057	BL3	井上 伊知郎	Femtosecond Reduction of Atomic Scattering Factors Triggered by Intense X-Ray Pulse
			2021B8022	BL3	井上 伊知郎	
			2022A8030	BL3	井上 伊知郎	
			2022B8010	BL3	井上 伊知郎	

### Physical Review X

46254	Yijing Huang	13 (2023) 041050	2018B8079	BL3	Weber Christopher	Ultrafast Measurements of Mode-Specific Deformation Potentials of Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> and Bi <sub>2</sub> Se <sub>3</sub>
-------	--------------	---------------------	-----------	-----	-------------------	---

### Physics and Chemistry of Minerals

46209	Shuhou Maitani	49 (2022) 11	2021A1281	BL10XU	新名 良介	The Electrical Conductivity of Fe <sub>4</sub> O <sub>5</sub> , Fe <sub>3</sub> O <sub>6</sub> , and Fe <sub>7</sub> O <sub>9</sub> up to 60 GPa
			2021B1331	BL10XU	新名 良介	

### Polymer Chemistry

46037	Junsu Park	13 (2022) 4361-4365	2021A1696	BL19B2	小西 昂	Additional Crystalline Structures of Syndiotactic Polystyrene Composites with Acetylated Cyclodextrin
-------	------------	------------------------	-----------	--------	------	---

### Polymer Journal

45996	Yohei Nakanishi	55 (2023) 1199-1209	2014B1469	BL40B2	石毛 亮平	Unified Explanation for Self-assembly of Polymer-brush-modified Nanoparticles in Ionic Liquids
			2014B1648	BL19B2	石毛 亮平	
			2015A1718	BL19B2	石毛 亮平	
			2017A1845	BL03XU	小川 紘樹	
			2017A7213	BL03XU	宮崎 司	
			2017B1638	BL19B2	中西 洋平	
			2022A1461	BL40B2	川本 純	

### Polymer Testing

45953	Yuka Kojima	128 (2023) 108242	2018A7012	BL33XU	木村 英彦	Synchrotron Radiation X-ray Laminography of Internal Damage in Short-fiber-reinforced Polyamide 6 under Cyclic Tensile Loading
			2019A7012	BL33XU	木村 英彦	
			2019B7012	BL33XU	木村 英彦	
			2020A7012	BL33XU	木村 英彦	
			2021A7012	BL33XU	木村 英彦	

## Polymers

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
46236	Tomoya Okada	15 (2023) 4663	2020A1046	BL19B2	松葉 豪	Morphologies of Comb-like Polyacrylic Acid/Polyacrylate Copolymers as Functions of the Degree of Derivatization with $n$ -C <sub>22</sub> H <sub>45</sub> Side Chains
			2020A1427	BL43IR	松葉 豪	
			2020A1262	BL40B2	松葉 豪	
			2021A1628	BL19B2	松葉 豪	
			2021A1195	BL43IR	松葉 豪	
2021A1196	BL40B2	松葉 豪				

## Proceedings of the 8th Asian Particle Technology Symposium

45864	Takeshi Suyama	(2021) 218	2019A1011	BL47XU	達 隆伸	Visualization of Internal Structure of Granule and Calculation of Packing Density of a Granule using X-ray Phase Contrast Tomography
			2020A0797	BL47XU	綿野 哲	

## The Protein Journal

46175	Kyosuke Ohnuma	42 (2023) 698-708	2022A2719	BL41XU	山下 敦子	Investigating the Effect of Substituting a Single Cysteine Residue on the Thermal Stability of an Engineered Sweet Protein, Single-Chain Monellin
-------	----------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

## Protein Science

45956	Dan Sato	26 (2017) 1224-1230	2015A6535	BL44XU	原田 繁春	Structural and Mechanistic Insights into Homocysteine Degradation by a Mutant of Methionine $\gamma$ -lyase Based on Substrate-assisted Catalysis
			2015B6535	BL44XU	原田 繁春	
			2016A6635	BL44XU	原田 繁春	

## Quantum Beam Science

46322	Yasufumi Miura	8 (2023) 1	2021A5051	BL16XU	野口 真一	Stress Measurement of Stainless Steel Piping Welds by Complementary Use of High-Energy Synchrotron X-rays and Neutrons
			2022A5051	BL16XU	野口 真一	

## Review of Scientific Instruments

46184	Satoshi Yasuno	94 (2023) 115113	2022A1651	BL46XU	安野 聡	Development of Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy using Synchrotron Radiation X-ray up to 30 keV
			2022A1774	BL46XU	安野 聡	
			2022B1627	BL46XU	安野 聡	
			2022B1878	BL46XU	安野 聡	

## Science of The Total Environment

46287	Takashi Fujimori	908 (2024) 168297	2018A1643	BL01B1	豊巻 治也	Lead Speciation in Body Tissues, Gastrointestinal Contents, and Feces of Lead-exposed Wild Rats ( <i>Rattus rattus</i> )
-------	------------------	----------------------	-----------	--------	-------	--

## Scripta Materialia

46308	Jianwei Tang	239 (2024) 115804	2021B1123	BL20XU	戸田 裕之	Stress Corrosion Cracking Induced by the Combination of External and Internal Hydrogen in Al-Zn-Mg-Cu Alloy
			2022A1005	BL20XU	戸田 裕之	
			2022B1158	BL20XU	戸田 裕之	

## Separation and Purification Technology

46007	Tomoya Suzuki	308 (2023) 122943	2018B3736	BL22XU	鈴木 智也	Selective Adsorption of Pd(II) over Ag(I) in Nitric Acid Solutions using Nitrogen-donor-type Adsorbents
			2019A3738	BL22XU	鈴木 智也	
			2019B3738	BL22XU	鈴木 智也	
			2020A3737	BL22XU	鈴木 智也	
			2021A3739	BL22XU	鈴木 智也	
2021B3741	BL22XU	鈴木 智也				

## Small

46300	Kazuki Shun	(2023) Online published 10 Dec. 2023	2022B1807	BL01B1	森 浩亮	Specific Hydrogen Spillover Pathways Generated on Graphene Oxide Enabling the Formation of Non-Equilibrium Alloy Nanoparticles
			2022A1076	BL01B1	森 浩亮	

## Small Science

46281	Patience A. Kotei	(2023) Online published 13 Dec. 2023	2022A8066	BL2	Schriber Elyse	Engineering Supramolecular Hybrid Architectures with Directional Organofluorine Bonds
-------	-------------------	--	-----------	-----	----------------	---



**Soil Science Society of America Journal**

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
45914	Noriko Yamaguchi	87 (2023) 821-832	2021B1113	BL27SU	山口 紀子	Speciation and Microscale Distribution of Phosphorus Compounds Accumulated in Continuously Fertilized Greenhouse Soils

**Spectrochimica Acta Part B**

45866	Hibiki Komatsu	209 (2023) 106785	2022B1337	BL37XU	西脇 芳典	Characterization of Metal Components in White-based Polyester Single Fibers by X-ray Fluorescence Spectrometry and X-ray Absorption Fine Structure Analysis Utilizing Synchrotron Radiation for Forensic Discrimination
-------	----------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

**Structural Dynamics**

45999	Philip Heimann	10 (2023) 054502	2021A8039	BL3	Heimann Philip	Non-thermal Structural Transformation of Diamond Driven by X-rays
			2019B8070	BL3	Heimann Philip	

**Synlett**

45957	Hang Xu	(2023) Online published 13 Oct. 2023	2023A1896	BL01B1	山口 渉	Efficient Protosilylation of Unsaturated Compounds with Silylboronates over a Heterogeneous Cu <sub>3</sub> N Nanocube Catalyst
-------	---------	--	-----------	--------	------	---

**Tectonophysics**

46138	Maki Semba	868 (2023) 230081	2019A1527	BL04B1	平内 健一	Effects of Hydrothermal Alteration on Shear Localization and Weakening in the Mantle Lithosphere
-------	------------	----------------------	-----------	--------	-------	--

**エアロゾル研究 (Journal of Aerosol Research, Japan)**

46057	Ryosuke Matsumoto	37 (2022) 268-274	2017A1179	BL20B2	松本 亮介	Frosting Phenomena on Heat Exchanger and Frost Micro Structure —Novel Development on the Frost Research by Using Radiography Technique—
-------	-------------------	----------------------	-----------	--------	-------	---

**高分子 (Kobunshi, High Polymers, Japan)**

46117	Atsushi Yamamoto	72 (2023) 62-63	2021B7259	BL03XU	山本 渥史	Dynamics in the Curing Process of Thermosetting Epoxy Resins by X-ray Photon Correlation Spectroscopy
			2020A7209	BL03XU	山本 渥史	

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

46134	Kenji Suzuki	72 (2023) 821-827	2020A1605	BL02B1	山崎 泰広	Unsteady Thermal Stresses of Thermal Barrier Coatings under Cyclic Heating
			2021B1716	BL02B1	山崎 泰広	
			2022A1101	BL02B1	鈴木 賢治	

**材料と環境 (Zairyo-to-Kankyo)**

45943	Takahiro Ozawa	70 (2021) 187-191	2019B5020	BL16XU	北原 周	Synchrotron $\mu$ -XRD Analysis of Corrosion Products on Exposed Steel Using Measurement Informatics
			2020A5020	BL16XU	北原 周	

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

46259	Hiroki Yamada	64 (2022) 219-224	2019B0155	BL04B2	脇原 徹	Elucidation of the Crystallization Mechanism of Zeolites by using Pair Distribution Function Analysis
-------	---------------	----------------------	-----------	--------	------	---

**メディカル サイエンス ダイジェスト (Medical Science Digest)**

45851	Kengo Kitadokoro	49 (2023) 486-487	2020A6512	BL44XU	北所 健悟	On Elucidating the Mechanism by which Anti-obesity Drugs Inhibit Virulence Factors of <i>Staphylococcus aureus</i> .
			2021A6611	BL44XU	北所 健悟	
			2021B6611	BL44XU	北所 健悟	
			2022A6710	BL44XU	北所 健悟	
			2022B6710	BL44XU	北所 健悟	
			2023A6809	BL44XU	北所 健悟	

**博士論文 (King's College London)**

45856	Michaeljohn Kalakoutis	(2017)	2016A1062	BL45XU	Ochala Julien	Specific Force in Human Single Muscle Fibres with Specific Reference to Ageing
-------	------------------------	--------	-----------	--------	---------------	--

### 博士論文 (Victoria University of Wellington)

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
45939	Jackson Miller	(2022)	2020A1250	BL39XU	Trodahl Joe	Rare-earth Nitride Solid Solutions

### 博士論文 (名古屋工業大学)

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
45927	Naoko Takahashi	(2023)	2017A5071	BL16XU	高橋 直子	Study on Elucidation of Friction Characteristics by Chemical Structure Analysis of Boundary Lubrication Film
			2017B5071	BL16XU	高橋 直子	
			2018A5071	BL16XU	高橋 直子	
			2018B5071	BL16XU	高橋 直子	

### 課題以外の成果として登録された論文

#### Acta Crystallographica Section F

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
45863	Vladimir Timofeev	73 (2017) 369-375		BL41XU	Crystal Structure of Recombinant Phosphoribosylpyrophosphate Synthetase 2 from <i>Thermus thermophilus</i> HB27 Complexed with ADP and Sulfate Ions
46115	Satoshi Fukuhara	74 (2018) 810-816	理研	BL32XU	Crystal Structure of the <i>Agrobacterium tumefaciens</i> Type VI Effector-immunity Complex
				BL41XU	
46144	Walter R. P. Novak	74 (2018) 664-668		BL38B1	Re-refinement of <i>Plasmodium falciparum</i> Orotidine 5'-monophosphate Decarboxylase Provides a Clearer Picture of an Important Malarial Drug Target
46181	Vladimir I. Timofeev	74 (2018) 402-409		BL41XU	Crystal Structure of <i>Escherichia coli</i> Purine Nucleoside Phosphorylase Complexed with Acyclovir
46182	Vladimir I. Timofeev	74 (2018) 355-362		BL41XU	Crystal Structure of <i>Escherichia coli</i> Purine Nucleoside Phosphorylase in Complex with 7-deazahypoxanthine

#### The Journal of Biological Chemistry

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
45862	Satomi Inaba-Inoue	292 (2017) 1052-1060		BL41XU	Crystal Structures and Thermodynamic Analysis Reveal Distinct Mechanisms of CD28 Phosphopeptide Binding to the Src Homology 2 (SH2) Domains of Three Adaptor Proteins
45901	Takashi Matsui	292 (2017) 9117-9135		BL41XU	2-Alkylquinolone Alkaloid Biosynthesis in the Medicinal Plant <i>Evodia rutaecarpa</i> Involves Collaboration of Two Novel Type III Polyketide Synthases

#### Molecular Cell

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
45893	Takashi Yamano	67 (2017) 633-645		BL41XU	Structural Basis for the Canonical and Non-canonical PAM Recognition by CRISPR-Cpf1
45903	Hiroshi Nishimasu	67 (2017) 139-147		BL41XU	Structural Basis for the Altered PAM Recognition by Engineered CRISPR-Cpf1

#### Molecules and Cells

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
46033	Kyungjin Min	41 (2018) 331-341	理研	BL26B1	Structural Basis for Recognition of L-lysine, L-ornithine, and L-2,4-diamino Butyric Acid by Lysine Cyclodeaminase
46076	SangJae Lee	41 (2018) 545-552	理研	BL26B1	Crystal Structures of Spleen Tyrosine Kinase in Complex with Two Novel 4-Aminopyrido[4,3-d] Pyrimidine Derivative Inhibitors

#### Nature Communications

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
45894	Atsuhiko Tomita	8 (2017) 148		BL41XU	ATP-dependent Modulation of MgtE in Mg <sup>2+</sup> Homeostasis
46106	Chandrika N. Deshpande	9 (2018) 3075	理研	BL32XU	Calcium is an Essential Cofactor for Metal Efflux by the Ferroportin Transporter Family

#### Photosynthesis Research

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
45883	Fumio Shinohara	134 (2017) 281-289		BL41XU	Structural Basis for the Isozyme-specific Interactions of Ferredoxin and Ferredoxin: NADP <sup>+</sup> Oxidoreductase: an Evolutionary Switch between Photosynthetic and Heterotrophic Assimilation
45955	Jessica M. Wiczar	134 (2017) 175-182		BL44XU	Chlorophyll <i>a</i> with a Farnesyl Tail in Thermophilic Cyanobacteria

### Acta Crystallographica Section D

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
46101	Yota Fukuda	74 (2018) 769-777	理研	BL32XU BL44XU	Crystallographic Study of Dioxygen Chemistry in a Copper-containing Nitrite Reductase from <i>Geobacillus thermodenitrificans</i>

### Advanced Science

46142	Terumasa Shimada	(2023) Online published 20 Nov. 2023	理研	BL44B2	Long Time CO <sub>2</sub> Storage Under Ambient Conditions in Isolated Voids of a Porous Coordination Network Facilitated by the "Magic Door" Mechanism
-------	------------------	--	----	--------	---

### Archaea

46133	Hisanori Kondo	2018 (2018) 7571984		BL38B1	Crystal Structures of the Putative Isocitrate Dehydrogenase from <i>Sulfolobus tokodaii</i> Strain 7 in the Apo and NADP <sup>+</sup> -Bound Forms
-------	----------------	------------------------	--	--------	--

### Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects

45940	Emmanuel Balogun	1861 (2017) 2830-2842		BL44XU	Glycerol Kinase of African Trypanosomes Possesses an Intrinsic Phosphatase Activity
-------	------------------	--------------------------	--	--------	---

### Cell Structure and Function

46087	Takuya Sumi	43 (2018) 15-23	理研	BL26B2	Structural Insights into the Altering Function of CRMP2 by Phosphorylation
-------	-------------	--------------------	----	--------	--

### Chemical Communications

46090	Keita Omura	54 (2018) 7892-7895	理研	BL26B2	Reconstitution of Full-length P450BM3 with an Artificial Metal Complex by Utilising the Transpeptidase Sortase A
-------	-------------	------------------------	----	--------	--

### Chemical Science

45933	Paolo Mellini	8 (2017) 6400-6408		BL41XU	Potent Mechanism-based Sirtuin-2-selective Inhibition by an <i>in situ</i> -generated Occupant of the Substrate-binding Site, "Selectivity Pocket" and NAD <sup>+</sup> -binding Site
-------	---------------	-----------------------	--	--------	---

### ChemistryOpen

46102	Naomi Ohbayashi	7 (2018) 713-719	理研	BL32XU	Structural Basis for the Inhibition of Cyclin G-Associated Kinase by Gefitinib
-------	-----------------	---------------------	----	--------	--

### Crystallography Reports

45900	Konstantin Boyko	62 (2017) 909-911		BL41XU	Purification, Isolation, Crystallization, and Preliminary X-ray Diffraction Study of the BTB Domain of the Centrosomal Protein 190 from <i>Drosophila melanogaster</i>
-------	------------------	----------------------	--	--------	--

### eLife

46132	Xiao-Man Liu	7 (2018) e41237	理研	BL32XU	Lipidation-independent Vacuolar Functions of Atg8 Rely on its Noncanonical Interaction with a Vacuole Membrane Protein
-------	--------------	--------------------	----	--------	--

### Epigenetics

46086	Lusy Handoko	13 (2018) 410-431	理研	BL26B2	JQ1 Affects BRD2-dependent and Independent Transcription Regulation without Disrupting H4-hyperacetylated Chromatin States
-------	--------------	----------------------	----	--------	--

### Extremophiles

46211	Tatiana E. Petrova	22 (2018) 877-888		BL41XU	Structural Characterization of Geranylgeranyl Pyrophosphate Synthase GACE1337 from the Hyperthermophilic Archaeon <i>Geoglobus acetivorans</i>
-------	--------------------	----------------------	--	--------	--

### Genes to Cells

45884	Masato Noguchi	22 (2017) 535-551		BL41XU	Ternary Complex of Human RORγ Ligand-binding Domain, Inverse Agonist and SMRT Peptide Shows a Unique Mechanism of Corepressor Recruitment
-------	----------------	----------------------	--	--------	---

### The Journal of Biochemistry

46098	Satoshi Inouye	164 (2018) 247-255	理研	BL26B2	Slow Luminescence Kinetics of Semi-synthetic Aequorin: Expression, Purification and Structure Determination of <i>cf3</i> -aequorin
-------	----------------	-----------------------	----	--------	---

### Journal of Biomolecular Structure and Dynamics

研究成果番号	主著者	雑誌情報		ビームライン	タイトル
46212	Valery Akparov	36 (2018) 956-965		BL41XU	Structure of the Carboxypeptidase B Complex with N-sulfamoyl-L-phenylalanine – a Transition State Analog of Non-specific Substrate

### Journal of Molecular Biology

46258	Masaya Yamaguchi	430 (2018) 249-257		BL41XU	Atg7 Activates an Autophagy-Essential Ubiquitin-like Protein Atg8 through Multi-Step Recognition
-------	------------------	-----------------------	--	--------	--

### The Journal of Physical Chemistry C

46141	Koichi Yatsuzuka	127 (2023) 22457-22463	理研	BL17SU	A Non-Rate-Determining Redox Process Dictates the Oxygen Evolution Tafel Slope of MnO <sub>2</sub>
-------	------------------	---------------------------	----	--------	--

### Molecules

46089	Hideaki Niwa	23 (2018) 1538	理研	BL26B2	Crystal Structure of LSD1 in Complex with 4-[5-(Piperidin-4-ylmethoxy)-2-( <i>p</i> -tolyl)75yridine-3-yl]benzonitrile
-------	--------------	-------------------	----	--------	--

### Nature

46130	Hideaki E. Kato	561 (2018) 349-354	理研	BL32XU	Structural Mechanisms of Selectivity and Gating in Anion Channelrhodopsins
-------	-----------------	-----------------------	----	--------	--

### Nonlinear X-Ray Spectroscopy for Materials Science

46244	Iwao Matsuda	(2023)		SACLA 全般	Nonlinear X-Ray Spectroscopy for Materials Science
-------	--------------	--------	--	----------	--

### Photonics

45934	Vladimir Lipp	10 (2023) 948		XFEL	Advantages of Using Hard X-ray Photons for Ultrafast Diffraction Measurements
-------	---------------	------------------	--	------	---

### Physical Review Accelerators and Beams

45998	Hiroshi Yamaguchi	26 (2023) 092401		加速器	Design and Demonstration of Low Current Density dc Septum Magnet
-------	-------------------	---------------------	--	-----	--

### Physical Review Research

46053	Shuntaro Takazawa	5 (2023) L042019	理研	BL29XU	Coupling X-ray Photon Correlation Spectroscopy and Dynamic Coherent X-ray Diffraction Imaging: Particle Motion Analysis from Nano-to-micrometer Scale
-------	-------------------	---------------------	----	--------	---

### Protein Expression and Purification

46096	Kazushige Katsura	150 (2018) 92-99	理研	BL26B2	Phosphorylated and Non-phosphorylated HCK Kinase Domains Produced by Cell-free Protein Expression
-------	-------------------	---------------------	----	--------	---

### Science Signaling

46084	Gareth S. A. Wright	11 (2018) eaaq0825	理研	BL45XU	Architecture of the Complete Oxygen-sensing FixL-FixJ Two-component Signal Transduction System
			理研	BL26B2	

### Scientific Reports

46060	Yasuhiro Isogai	8 (2018) 16883	理研	BL26B1	Tracing Whale Myoglobin Evolution by Resurrecting Ancient Proteins
			理研	BL38B1	

### Viruses

46260	Nina N. Sykilinda	10 (2018) 309		BL41XU	Structure of an <i>Acinetobacter</i> Broad-Range Prophage Endolysin Reveals a C-Terminal $\alpha$ -Helix with the Proposed Role in Activity against Live Bacterial Cells
-------	-------------------	------------------	--	--------	--

## 専用ビームラインにおける評価・審査の結果について

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用推進部

専用施設審査委員会において、京都大学の専用ビームラインを2023年11月に中間評価、産業用専用ビームライン建設利用共同体の専用ビームラインを2023年12月に事後評価し、それらの結果を2024年2月開催のSPring-8選定委員会に諮り、承認されましたので報告いたします。

### 記

#### 中間評価

- ・先端蓄電池基盤技術開発ビームライン (BL28XU)  
(設置者：京都大学)

#### 事後評価

- ・サンビーム BM ビームライン (BL16B2)
- ・サンビーム ID ビームライン (BL16XU)  
(設置者：産業用専用ビームライン建設利用共同体)

詳細は、以下に示す各施設の評価報告書をご覧ください。



## 先端蓄電池基盤技術開発ビームライン (BL28XU) 中間評価報告書

先端蓄電池基盤技術開発ビームライン (BL28XU) は、国立大学法人京都大学によって設置・運用されている専用ビームラインである。国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の委託事業 (RISING、RISING2、RISING3) のもとで2009年度から設置され、革新型蓄電池開発に向けた研究が行われている。2021年度からの RISING3 の開始に先だって京都大学より再契約の申請があり、2020年12月4日の第32回専用施設審査委員会で5年間 (第3期) の再契約を認めるとともに、契約期間の中頃に中間評価を行うことを勧告した。この勧告を受けて京都大学から中間報告書が提出され、2023年11月6日の第37回専用施設審査委員会で中間評価を行った。

京都大学より提出された中間報告書および口頭によるプレゼンテーションにもとづき、「装置の構成と性能」「施設運用及び利用体制」「研究課題、内容、成果」「今後の計画」の4項目について評価を行った。革新型蓄電池開発の重要性に加え、プロジェクトの目的に沿った実験装置が着実に整備されている点などを高く評価し、契約の継続が妥当と判断した。ただしいくつかの重要な指摘・提案もあったので、それらを踏まえた今後の運営に期待する。

以下に、各評価項目について評価結果をまとめる。

### 1. 「装置の構成と性能」に対する評価

BL28XU は、光源として真空封止型テーパードアンジュレータを備えており、光学ハッチ、実験ハッチ 1 (EH1)、および実験ハッチ 2 (EH2) を実験ホールに有している。光学ハッチのビーム輸送光学系として、1対の横集光ミラーと2組のコンパクト分光器 (チャンネルカット結晶分光器) があり、ピンクビームと 4-50 keV の単色ビームの利用が可能となっている。コンパクト分光器は高速エネルギースキャンが可能であり、テーパードアンジュレータの広帯域ビームと組み合わせた時間分解測定に利用されるなど、このビームラインを特徴づけるものとなっている。

EH1 には 1 対の縦集光ミラー、グローブボックス付回折計、大型多軸回折計が設置されており、XAFS、

XRD、共焦点 XRD、SAXS、X 線反射率測定などを実施することができる。電池動作下でのオペランド計測を中心に活発に利用されており、XAFS、XRD、SAXS については複合計測も可能となっている。EH2 には HAXPES 装置の他にフリースペースが設けられており、持込装置を用いた多様な実験が可能となっている。HAXPES 装置群の一部の移転によりフリースペースが増えたことで、より自由度の高い実験が可能になった。

上記装置の大半は第 2 期までに整備されていたものであるが、第 3 期では RISING3 の目的に沿う形で高度化と新規測定手法への応用が進められている。局所的な回折像を高速に取得できるピンクビーム共焦点 XRD や共焦点全散乱法の開発については、まだ課題は残っているものの、実証実験で良好な結果が得られるなど、概ね順調に進んでいる。高度化が進められている回折・分光複合測定システムは、フッ化物全固体電池などの複雑な反応機構を解明するためのマルチプローブ・オペランド計測に有効であり、早期に本格的な利用が開始されることを期待したい。他にも、共通試料セルの開発、測定のオートメーション化、電池材料のコンビナトリアル合成とハイスループット評価基盤の構築など、より効率的な研究開発に向けた取り組みも高く評価できるものである。このように、蓄電池研究に特化した専用ビームラインとして特色のある装置群を有し、RISING2 から RISING3 への移行による開発ターゲットの変更にも柔軟に対応して高度化を進めており、適切な整備と運用がなされている。今後は速やかに本格利用の段階に移行し、多くの成果が生まれることを期待する。

一方で、中間報告では当初計画に対する達成度が明確に示されず、整備の進捗に関する評価が困難であった。また、BL28XU だけで技術開発を進める計画のように見受けられ、必ずしも効率的なプロジェクト遂行につながっていないことが懸念される。実際に少し遅れが見られる開発項目もあるため、他のビームラインの装置や技術的アプローチの活用も検討していただきたい。具体的な例としては、USAXS 装置の整備や、共焦点測定でゲージボリュームに制限をかける方法などがあげられる。革新的蓄電池開発は国家的なプロジェクトとして進められている重要なものであり、共

通的な課題については施設も巻き込んで取り組むことが期待される。

## 2. 「施設運用及び利用体制」に対する評価

2021年度から RISING3 に引き継がれた際に、ビームラインの運用面でも大きな変更が加えられた。まず、外部普及枠として、全ビームタイムの20%を上限として蓄電池に関係する他のプロジェクトやコンソーシアムに対して共同利用が開始された。運営組織に関しては、RISING2 までの運用を引き継ぐ組織として、京都大学産官学連携本部のもとに「RISING ビームライン運営委員会」が設置されている。また、外部普及枠に関連する利用を管理するための「量子ビームライン運営協議会」が発足した。こういった取り組みは、一連の RISING プロジェクトを継続的に推進するだけでなく、ユーザーの裾野拡大や人材育成の観点からも有効なものとして高く評価できる。また、RISING3 メンバーによる利用と外部利用を管轄する組織が明確に分かれており、よく整理された組織となっている。さらに、外部団体である「量子ビーム分析アライアンス」と共同し、外部利用枠の活用、量子ビーム関連手法の利用促進および人材育成を進めている点も高く評価する。ただし、外部普及枠の利用については、現状では初心者への教育に偏っているように見受けられる。人材育成に活用されることは非常に重要であるが、プロジェクトとは異なる先端的な研究テーマも幅広く取り込めるようになると、本来の趣旨に沿ったものとなるであろう。

課題選定に関しては、申請課題数が順調に増えて不採択課題が出てきているものの、ほとんどの申請課題が採択されている状況が続いている。プロジェクトの遂行に必要なビームタイムが十分に確保されていると肯定的に捉えられる反面、課題選定が適切に行われているか不明瞭である。この点については、一方では成果公開を基本としたオープンな課題選定プロセスを建て前としながらも、他方では熾烈な国際競争の中でトップダウン的な研究遂行が求められる状況があり、運営にひずみが生じていることが懸念される。オープンな課題については申請課題数を増やす取り組みを継続しつつも、トップダウン的に実施する研究テーマについては成果専有利用も積極的に活用すべき

である。また、プロジェクト内に限定して成果を共有し、対外的には非公開とする成果専有利用の形も検討するなど、より戦略的な運営にむけた取り組みを期待する。

ビームラインの維持管理およびユーザー支援については、京都大学のスタッフを中心に問題なく行なわれている。プロジェクト枠利用は RISING3 参画メンバーによって、外部普及枠は量子ビーム研究部門のスタッフによってユーザー支援が行われており、適切な支援体制となっている。安全管理の観点からも、化学物質管理や緊急体制などを含めて、十分に配慮された運用がなされていると評価された。

## 3. 「研究課題、内容、成果」に対する評価

RISING3 が扱う革新型蓄電池の開発に対して、共焦点 XRD 法など有用となりえる放射光分析技術の整備と導入を行い、研究の加速が期待できる成果が示されたことは大いに評価できる。また、プロジェクトが進む中で新たに必要となったオペランド測定用セルの再開発への対応がなされ、その結果が新規電極材の設計指針を与えた点など、多くの取り組みに対する努力に敬意を表す。多岐に渡る要素技術の開発により、個別の成果が着々と得られている段階にあると見受けられる。一方、これらの重要性は理解できるものの、プロジェクト全体の達成目標に対する位置づけが明確に示されなかったため、研究成果においても現時点での達成度が十分に評価できないという点が委員会で指摘された。BL28XU は、蓄電池研究に関して特色のある専用ビームラインとして認められることから、プロジェクトの目的達成において、より包括的かつ戦略的な利用推進の検討を期待する。

具体的に成果面に踏み込むと、前契約期間(2016～2020年度)の最終評価以降に Spring-8 に登録されている公開論文(査読付き)は20報に留まっており、決して多い数とは言えない。また、2023年度の論文に関しては、報告された成果登録が皆無であった。さらに、RISING3 として新聞・雑誌等で成果が公表され、特許取得に至っているものの、BL28XU での実施結果を含まない成果がほとんどである。これまでに BL28XU で多くの結果が得られているので、これらが着実に刈り取られ、実りとなるよう、プロジェクトで

あることを活かした取り組みが求められる。

また、前述したように、京都大学に量子ビームコンソーシアムを設置して研究を推進していることと、量子ビーム分析アライアンスで利用成果が得られていることは高く評価できる。革新型蓄電池の開発を多角的に推進するのみならず、量子ビームの相補利用を促す点で歓迎すべきことである。しかし、放射光と中性子の相補利用による成果は未だ限定的で、体系だった成果も見えておらず、得られている個別成果が如何にプロジェクト推進の動力として貢献しているかが必ずしも明確ではない。この点に関して、RISING3 プロジェクトの目標達成に対するビームライン活用の位置づけや成果の意義をより明確にし、強いリーダーシップの下に大所高所から課題解決を遂行されることが重要であると考え。今後は、苛烈な世界競争の中で、専用ビームラインを存分に活用したからこそ得られる先進的な成果（非公開成果を含む）の創出、SPring-8 における他のビームラインとの連携による効率的なプロジェクト推進にも期待する。高く評価されている RISING3 プロジェクトであり、BL28XU における成果の十分なアピールが、プロジェクト全体の理解や推進の後押しにもなると考える。高度化されたビームラインから発出される成果の報告を大いに期待するものである。

#### 4. 「今後の計画」に対する評価

革新的蓄電池の研究開発が世界的な競争にあるなかで、RISING、RISING2 の成果を引き継いだ RISING3 のもと、専用ビームラインとして設置されている BL28XU の意義は極めて大きい。BL28XU では、これまでに蓄電池開発に特化した基盤技術の改良や高度化などを進め、一定の研究成果をあげてきた。今回の計画では、これらの開発された測定技術や手法、および、プロジェクトで得られた知識を基盤とした、装置のさらなる高度化や測定のハイスループット化が掲げられている。革新的蓄電池開発の促進と目標とされる電池性能の達成へ向け、広い時間と空間の領域でマクロ反応分布・固体内反応・界面反応を解明するという放射光分析の役割も示されており、総じて妥当な内容であると評価される。ただし、プロジェクトの後半になる今後は、成果の刈り取りと RISING3 で掲

げるブレイクスルー技術の創出が BL28XU においても重要である。そのために、優先的に取り組むべき課題や実用化する技術を絞り込んで、集中的に取り組むことの検討をいただきたい。また、他のビームラインとの連携や外部普及枠による核心テーマの取り込みなども含め、プロジェクト全体の最適化がなされることが重要であると考え。強いリーダーシップによるプロジェクト・マネジメントと施設側との密なコミュニケーションにより計画が着実に推進し、日本の蓄電池関連産業と量子ビーム利用技術の発展に資する成果が得られることを期待する。

以上

### サンビームBM・ID ビームライン (BL16B2・16XU) 契約期間満了に伴う専用施設事後評価報告書

産業用専用ビームライン建設利用共同体は民間 12 企業と 1 グループ (13 社) が任意団体の共同体を形成し、BL16XU および BL16B2 の 2 本のビームラインを建設して運営してきた。同共同体は電機、自動車、通信、情報、電力、素材などを基幹ビジネスとする企業から構成されている。SPring-8 利用の活動開始は SPring-8 創設間もない 1998 年であり、一貫して 13 社の資金拠出、利用時間配分などすべて平等の原則で運営を行っている。第一期契約期間 (1998 年 8 月～2008 年 8 月)、第二期契約期間 (2008 年 8 月～2018 年 3 月) を経て、現在、第三期契約期間 (2018 年 4 月～2024 年 3 月) の終わりを迎えており、第三期の終了をもって 2 本のビームラインの専用施設としての利用を終了する旨申し出があった。これに基づき 2023 年 12 月 21 日に第三期の事後評価を行った。

第二期終了時の次期計画の評価 (2017 年 10 月 24 日評価会開催) において、「利用成果の公開が必ずしも十分とは言えず、提案された次期計画では利用成果創出の実現に懸念がある」「産業利用を標榜するビームラインとして成果専有課題、成果非専有課題を適切に判断したうえで実施することが必要である」等の強い意見が出されていた。今回の事後評価報告書はこれらを念頭に置いた活動結果が報告され、評価委員会として産業界の利用者として十分妥当な成果をあげることができたと結論付けた。

○第三期の活動について

設備については、第三期の期初の2018年度および2019年度に合計で2.1億円(1社あたり1,600万円)の投資を行い、共焦点X線顕微鏡、分光マイクロX線CT装置、ノイズフリーX線イメージングシステム、多素子検出器、大気非暴露実験装置の5点について整備を行っている。参画企業は研究設備投資を4年償却で進めているため、2020年度以降は2023年度末の活動終了を見据えて設備投資はゼロに抑えられており、運営管理費のみの拠出になっている。これらの新規設備を用いた成果あるいは日常的な成果として、評価会において各企業1件ずつの成果が報告されたが、とくにScientific Report誌に掲載された論文も1件紹介された。

2017年の評価で問題となっていた原著論文の数はSPring-8/SACLA利用成果集への掲載も含め、2018～2022年度の年平均で28.8件、2023年度予測を含めると年平均30.3件であり、第二期の年平均10.9件を大きく上回ったほか、成果専有利用時間も半年毎の利用期あたり平均350時間以上と第二期の同平均30時間弱の10倍以上の実績となっていた。原著論文の絶対数はそれほど多いとは言えないが、学術機関に比べて論文作成が必ずしも評価されない産業界の利用において、さらに成果専有利用分を差し引いて考えれば十分な実績であると考えられる。また、第三期中における取得特許の件数は11件、審査中、計画中の案件も含めると36件、プレス発表の件数は1件で、直接的ではないが関連するものを含めると9件との報告があった。プレス発表など戦略的にさらに工夫が必要と考えられる部分もあるが、これらは総じて第二期終了時の指摘を踏まえて十分な成果を上げられたと評価された。

運営体制は、各社平等に共同体の委員を務める原則で1年毎に各委員を輪番でまわしていくシステムが取られている。第二期終了時の評価として、利用成果創出に向けた運用見直しの検討の必要性を指摘され、一部の利用時間を緊急利用枠として、各社成果に応じた配分枠として運用を行った。コロナ禍の影響で利用予定がキャンセルされた利用時間もこの枠で活用できたと報告された。また、第二期終了時において、第3者の研究機関との連携による成果が明確でない、と

の指摘があったが、第三期においては、コロナ禍あるいは新規設備導入の停止などの要素があったにも関わらず13社の共同作業として行う機器整備などの作業を中心に第3者との連携を増加させ、その成果のいくつかは原著論文として登録された。

第三期においては、コロナ禍の問題のほか、BL16XUのアンジュレータの真空漏れ、BL16B2のFE真空値異常など、老朽化に伴うと考えられる大きなトラブルにも見舞われ、停止期間がそれぞれ53日間、11日間に及んでいる。これらにも関わらず上記のような成果をあげている点は評価できる。第三期の中間評価(2021年6月1日評価会開催)における「取り組みが格段に進んだことが見受けられ、専用施設審査委員会(以下、本委員会)は第三期後半も当該ビームラインの設置と運用を「継続」することを勧告することが妥当である」との評価に引き続き、第三期全体を通して産業界の利用として十分な成果をあげることができたと評価する。

○第一期～第三期を通じて、および今後の活動について

本委員会の責務は第三期の活動と成果を評価することであるが、委員会において全活動期間を通じて、あるいは今後の課題についての言及もあったので、それらについて記す。

本共同体の活動は1998年から通算で26年間に及ぶ。活動の当初は放射光の産業利用はまだ一般的とは言えなかった。また、SPring-8の運営にも変化があり、共同体においても今回の報告のように運営に変化が必要であった部分もある。このような中で民間企業の共同体という形態で継続的にここまで活動し、各社に放射光利用の力を、ひいては材料解析の基礎力を養成してきたことは高く評価されて良い。

今後に向けて委員会で指摘のあった点は以下のとおりである。

(1) 放射光科学の一翼を担うメンバーとして、納税者(一般市民)という大きな対象に対してその効果をアピールする努力を行って欲しい。

(2) 第二期の終了時にあった指摘は共同体内部からの問題意識の中で挙がってきてもおかしくないと考えられる。安全維持活動に見られるような、自身を自ら律する自律的な文化をより一層醸成して欲しい。

しい。

なお、一部の委員から、サンビームの運営は担当者の頑張りに（過度に）依存しているのではないかと、この意見もあったことを付記しておく。サンビームは第三期において独自の努力だけで論文数および成果専有利用時間の増加を果たされたが、今後、各案件に取り組まれる際は、他の専用ビームラインにも共通の課題であるが、施設側とのコミュニケーションを強化しながら無理のない運営が進められる仕組みの構築を目指すなど、今後の活動で考慮すべき点と思われる。

今後、サンビームはビームラインの運営を理研に移管し、あらたな形態で活動を継続する予定とのことである。上記の点を踏まえて活動を継続し、産業界としての成果をあげていかれることを期待する。

以 上



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 先端分光計測チーム

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  
片山 真祥

1. はじめに

分光推進室 先端分光計測チームは X 線吸収微細構造 (XAFS) 法、硬 X 線光電子分光 (HAXPES) 法、赤外分光 (IR) 法の共用ビームラインを担当し、基礎から応用にわたる様々な分野からの利用ニーズに応えるべく、実験ステーションの運用・高度化に取り組んでいる。メンバーは 2023 年 11 月現在、研究系 8 名、技術系 3 名、兼務 1 名の 12 名で構成されている。装置は BL01B1 XAFS I、BL09XU HAXPES I、BL43IR 赤外物性の 3 本のビームラインを中心に、関連するビームラインとも連携をとりながら活動している。

XAFS は SPring-8 の多くのステーションで実験される手法であり、偏向電磁石光源では BL01B1 と BL14B2 の 2 つのステーションが共用に供されている。BL14B2 は旧産業利用ビームラインであり、現在も産業利用・産学連携推進室が担当しているが、分光推進室が担当する BL01B1 と連携することで運用の効率化を進めている。

BL09XU は BL47XU で運用されてきた HAXPES 装置を受け入れ、核共鳴散乱実験装置を BL35XU に移設することで、実験ハッチ (EH) 1・2 とともに光電子分光装置を備えた HAXPES の専用ビームラインとして再整備が行われた<sup>[1, 2]</sup>。HAXPES に関しては、BL46XU でも BL36XU の装置を集約する再編が完了し<sup>[3]</sup>、BL09XU と BL46XU の 2 ビームラインで合わせて 4 つの光電子分光装置を運用している。

BL43IR は SPring-8 唯一の赤外領域の放射光を利用するビームラインであり、実験室光源では実現し得ない高輝度赤外光を利用して主に顕微分光に活用されている。温度や圧力、湿度など幅広い試料環境に対応している。

次に、各ビームラインにおける最近の状況と SPring-8-II に向けた取り組みなどを紹介する。

2. XAFS ビームライン BL01B1

BL01B1 (写真 1) は SPring-8 供用開始時から運用されている 3.8~103 keV をカバーする XAFS ビームラインである<sup>[4, 5]</sup>。光学系としては縦平行化ミラー、可変傾斜型二結晶分光器、縦集光ミラーを備えており、測定エネルギー領域を変える際のミラーへの入射角度変更に対応するため、縦平行化ミラーから縦集光ミラーまでの光学装置が大型の傾斜架台に、縦集光ミラーより下流の装置が昇降架台に乗っているのが特徴である。第 3 世代放射光施設においても、広いエネルギースペクトルをもつ偏向電磁石からの放射光は、XAFS 測定に極めて有効である。対応するエネルギー領域の広さは測定可能な元素に対応しており、BL01B1 は Ca より重い全ての元素の XAFS 測定が可能である。



写真 1 BL01B1 外観。左側手前には計測機器類が並ぶ。中央が EH の出入口扉であり、ビームライン下流側 (右奥) にガスボンベキャビネットおよび排ガス処理装置が設置されている。

XAFS からは吸収原子の電子状態や局所構造の解析が可能であるが、X線回折で情報が得にくいナノ粒子、非晶質、希薄試料に適用されることが多く、触媒化学、電気化学、環境科学などの分野の利用が盛んである。特に触媒化学分野においては XAFS が必須のツールとなっており、反応ガス雰囲気や反応温度条件での金属触媒の状態解析が常に行われている。

反応ガスを利用した実験において、ビームタイムごとに EH で頻繁にガス供給・排気ラインを設置・撤去することは、測定に使える時間を浪費するだけでなく安全上の点からも問題がある。BL01B1 ではハッチ内の実験定盤まで反応ガス供給配管を敷設し、利用者が専用のポートから測定用の反応容器への繋ぎ込みをすれば、容易に実験が開始できる環境を整えている。また、ガスボンベについても利用頻度の高い O<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>、CO、CO<sub>2</sub> を常設しておくことで利便性を高め、その他のガス種についても納入後、速やかに実験開始できる体制を整えている。反応ガスと試料の反応により生じた生成物については、四重極型質量分析計とマイクロガスクロマトグラフを備えた可搬式ガス分析装置(写真2)を利用した追跡ができる。また、試料上の吸着種や表面状態の解析には XAFS と拡散反射赤外フーリエ変換分光(DRIFTS)の同時測定システムが利用可能である<sup>16)</sup>。

微量元素や薄膜試料の測定に利用されている ORTEC 社製 19 素子 Ge 半導体検出器はプリアンプ



写真2 BL01B1 で利用可能な可搬式ガス分析装置。中段に四重極型質量分析装置、下段にマイクロガスクロマトグラフが固定されている。分析対象となるガス供給と排ガスのラインを繋ぐことで利用可能。

等の劣化が深刻で、全ての素子は利用できない状況である。2022 年度には信号処理系の更新により Quick スキャンモードへの本格対応が完了しており、今年度には抜本的な老朽化対策として 36 ピクセル Ge 半導体検出器への更新を進めている。

SPring-8-II に向けては、BL01B1 と BL14B2 の関係者を中心とする汎用 XAFS ビームライン再編 WG において議論を進めている。6 GeV 化により偏向磁石光源のカバーするエネルギー帯は低エネルギー側にシフトすることになるが、利用動向や利用者からの要望をもとに、より良い実験環境が引き続き構築できるよう検討を進めている。

### 3. HAXPES ビームライン BL09XU

2021 年度に実施したビームライン再編により、BL09XU (写真3) は HAXPES 専用ビームラインとして運用を再開した。ビームライン再編では 2 台の光電子アナライザーを EH1 と 2 に配置するとともに、高エネルギー分解能、集光、偏光利用実験に最適化した光学系へと一新した。分光器としては、従来の二結晶分光器に加えて高分解能チャンネルカットモノクロメータ (CCM、Si 333/444/555 反射を選択) およびダブルチャンネルカットモノクロメータ (DCCM、Si 220/311 反射を切替) が利用可能である。また、広いエネルギー範囲で高い縦偏光度を実現する 2 連のダイヤモンド移相子 (DXPR) も導入された。

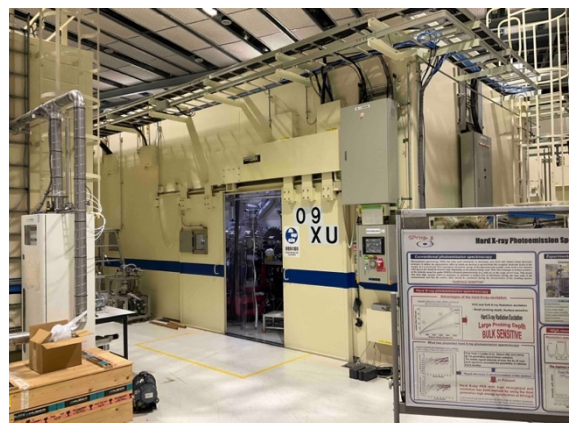


写真3 BL09XU 外観。中央は EH2 の出入り口扉。ビームライン下流側(写真右側)に制御用 PC 類が並ぶ。



EH1 の光電子アナライザーは元々BL09XU EH2 で運用されていた装置を移動させたものであり、エネルギー掃引が必要な共鳴 HAXPES 実験にはビーム高さが変動しない DCCM が活用されている。5.9 keV から 9.5 keV の広いエネルギー範囲で 0.9 以上の高い偏光度を持つ DXPR の導入により、偏光制御した共鳴 HAXPES 計測が可能になった。EH2 には BL47XU で運用されていた広角対物レンズを有する光電子アナライザーが移設され、長尺 K-B ミラーからの  $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$  のビームを活用し、角度分解すなわち試料の深さ分解と二次元スキャンを合わせた三次元空間分解計測に利用されている。EH2 での実験時には EH1 内の装置を光軸から退避させる必要があり、再調整作業を必要とするが、再編で EH1 には再集光時の再現性が高い Wolter 集光ミラーが導入され、迅速な調整、かつ、その後の安定なビーム性能を実現できた。また、EH2 での実験時に EH1 への入室が可能なアクセスモードも導入しており、事前の試料準備や評価が可能である。

BL09XU におけるビームライン機器の制御は従来方式から BL-774 へ移行しており<sup>7)</sup>、SPring-8-II で自動計測・リモート計測を実施するためのソフトウェア環境の構築も順次進めている。これらのビームライン制御や測定に関わるソフトウェアを BL46XU や BL39XU へと展開し、共通化による開発の省力化とユーザービリティの向上へ繋げることを目指している。

BL09XU においては、近年の液体ヘリウム価格の高騰とそれに伴い低温実験が敬遠されていることが課題の一つである。そのため、ヘリウム再凝縮装置を導

入し、ビームライン内で循環系を構築することにより液体ヘリウム消費量を抑えて低温実験が可能となるよう整備を進めている。また、グローブボックス (写真 4) をはじめとする試料準備環境の整備も進めているので、実験の際にはぜひご活用いただきたい。

#### 4. 赤外物性ビームライン BL43IR

BL43IR (写真 5) の光源は偏向電磁石であり、 $100 \sim 10000 \text{ cm}^{-1}$  (0.01~1 eV) の広帯域の高輝度赤外光を活かした顕微分光が行われている<sup>8)</sup>。もともと BL43IR はユーザー団体からの提案で建設されたビームラインであり、導入された経緯などは本誌の過去の記事をご参照いただきたい<sup>9, 10)</sup>。現在の BL43IR は長作動距離顕微鏡、磁気光学顕微鏡、高空間分解顕微鏡の 3 つのステーションで実験が行われている<sup>11)</sup>。近年は特に高空間分解顕微鏡ステーションで対応可能な試料環境の整備・拡充を進めており、低温・高温、加湿、高圧、溶液、延伸、UV 照射など様々な条件での実験が可能になっている。最近では、試料延伸用のステージを全反射測定法 (ATR) での測定にも適用できるよう、装置の改良を施した。なお、BL43IR では市販の赤外分光装置ではあまりカバーされない遠赤外領域までの ATR 測定も可能である。

対応する試料環境の整備を進めたことにより、ユーザーの分野も拡大・変化しており、特に近年では水が存在する環境で機能を発現する材料 (水圏機能材料) をはじめとする、水分子の関与する試料についての測定が増加傾向にある。BL43IR の成果には、毛髪を対



写真 4 BL09XU の試料準備用グローブボックス。循環精製装置を増設したのち、運用開始予定。



写真 5 BL43IR 外観。収納部天井から外壁 (赤色のラダー一部) を通り赤外光が取り出され、各ステーションに導かれている。

象とした産業界の研究など、放射光ユーザーではない一般の方に身近に感じていただけるような応用事例も多く、広報にも一役買っている。

長らく放射光赤外分野を牽引してきたBL43IRであるが、残念ながら SPring-8-II においてはリングを構成する磁石列の設計上、赤外光を取り出すポートの設置ができなくなる。現在の放射光赤外ユーザーのアクティビティを継続させるための方策について、関係者で議論を進めている。2023年9月には SPring-8 と UVSOR のユーザーグループが共同でシンポジウムを開催し、BL43IR の実験環境の UVSOR への移設の可能性について議論が行われた。引き続きユーザーグループと協力し、BL43IR のアクティビティを適切に移行できるよう協議を進めていく予定である。

## 5. まとめ

遠赤外線から硬 X 線領域のビームラインを担当する先端分光計測チームは、JASRI において最も守備範囲の広いチームである。ユーザーの分野も幅広く、対象は物質を扱うほぼ全ての研究分野と言っても過言ではない。「汎用」というと広く浅くのイメージになりがちではあるが、ビームライン担当者は XAFS、HAXPES、IR それぞれの手法のエキスパートとして研究活動を行い、その深い見識を持って利用支援にあたっている。SPring-8-II に向けてビームラインや施設が大きく変わりつつある時期でもあり、ユーザーの皆様からもビームラインや施設への要望、高度化に関する提案などお気軽に担当者までお寄せいただくと幸いである。

チームの運営としては、それぞれのビームラインに研究系職員を担当者として配置し、技術系職員にはそれぞれの得意な分野を中心にビームラインを横断的にサポートしてもらっている。個々の能力を最大限に発揮できる環境というにはまだ至らないところもあるため、メンバー間の連携や技術支援業務の体制などに関して、さらなる業務の最適化・効率化を図ってきたい。

## 謝辞

動的分光イメージングチームや技術支援グループをはじめとする多くの方々に、日々の業務において多大なご支援・ご協力をいただいています。この場をお借りして感謝申し上げます。

## 参考文献

- [1] A. Yasui, Y. Takagi, *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **30** (2023) 1013-1022.
- [2] 保井晃、高木康多: SPring-8/SACLA 利用者情報 **26** No.4 (2021) 445-447.
- [3] 安野聡、ソオツキユン、高木康多、保井晃: SPring-8/SACLA 利用者情報 **28** No.4 (2023) 434-438.
- [4] 宇留賀朋哉、谷田肇: SPring-8/SACLA 利用者情報 **4** No.2 (1999) 21-25.
- [5] T. Uruga, H. Tanida, *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **6** (1999) 143-145.
- [6] S. Kikkawa, K. Teramura, K. Kato, *et al.*: *ChemCatChem* **14** (2022) e202101723.
- [7] K. Nakajima, K. Motomura, *et al.*: *J. Phys. Conf. Ser.* **2380** (2022) 012101.
- [8] H. Kimura, T. Moriwaki, *et al.*: *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A: Accel. Spectrom. Detect. Assoc. Equip.* **467-468** (2001) 441-444.
- [9] 木村洋昭、森脇太郎: SPring-8/SACLA 利用者情報 **4** No.6 (1999) 26-32.
- [10] 難波孝夫、木村洋昭: SPring-8/SACLA 利用者情報 **4** No.3 (1999) 65-67.
- [11] 森脇太郎、池本夕佳、木下豊彦: SPring-8/SACLA 利用研究成果集 **3** (2015) 258-264.

片山 真祥 KATAYAMA Misaki

(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 : misaki.katayama@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 数理工物質系物理学域 エネルギー物質科学研究センター

西堀 英治

2024 年が幕を開けた元日、石川県で令和 6 年能登半島地震が起きました。この地震による被害により亡くなられた方々に謹んで哀悼の意を表しますとともに、SPRUC 会員にも関係者が多数いらっしゃると思われる被災された皆様、またその関係者の方々にお見舞いの意を表します。被災地の一日も早い復旧と復興をお祈り申し上げます。

2023 年の第 7 回 Spring-8 秋の学校、Spring-8 シンポジウム 2023 どちらも現地の対面開催の形で無事終了しました。SPRUC の活動もコロナ禍からの活動回復が順調に進んでいます。今後も、順調に活動再開が続いていくことを期待します。

2023 年に起こった Spring-8、SPRUC に関する最も必要なこととして、「Spring-8-II 計画」の実現に向けた急速な進展が挙げられます。2023 年 5 月に連絡を受け、Spring-8-II に関する情報の報告を急遽 Spring-8 シンポジウムに盛り込みました。それ以外にも 8 月に東京で行われた Spring-8-II シンポジウムなど様々な関連の研究会やシンポジウムが開催されています。私は、2012 年の SPRUC 発足以来、幹事や委員会のメンバーを務めてきました。私からみた SPRUC と Spring-8-II 計画について過去を振り返って述べたいと思います。

2011 年まで Spring-8 のユーザー団体として活動していた Spring-8 利用者懇談会は、活動を終了し、2012 年から新しい Spring-8 のユーザー団体として SPRUC が立ち上がりました。当時、年間ユーザー数が 1 万人を超えていたのに対し、利用者懇談会の会員数は 1,200 人程度であり、Spring-8 の次期計画などユーザー全体の意見を集める際に、SPRUC 立ち上げの要因の一つだったと記憶しています。その SPRUC の最初の全体的な活動として Spring-8 シンポジウム 2012 を大阪

大学で開催しました。その時のパネル討論の様子が SPRUC のホームページにあります。([http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc/panel\\_discussion\\_1208.html](http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc/panel_discussion_1208.html)) これを見ると、この時点での議論として、3 GeV クラスのリング光源の必要性や、Spring-8 次期計画について議論されています。この時点から SPRUC の最も重要な活動の目的が Spring-8 次期計画 (Spring-8-II) の早期実現にあることが良くわかります。その後、SPRUC では、2014 年に「放射光科学将来ビジョン白書 中間報告」を 2014 年時点での Spring-8 ユーザーコミュニティの観点でまとめています。([http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc/WG\\_report\\_201404.pdf](http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc/WG_report_201404.pdf)) その中に“国内施設群における長年の懸案事項である中エネルギー領域のギャップを埋めるべく、3 GeV クラスの高輝度蓄積リング計画を早急に実現し、それに続く形で、5~8 年後を目処に世界最高性能の座を奪回する Spring-8 の次期計画を実現させることを強く提案する。”とあります。今の状況へ読み替えると 3 GeV クラスのリングが 2024 年 4 月に利用が開始される NanoTerasu であり、次期計画が Spring-8-II 計画になります。SPRUC が 10 年前にあたる 2014 年に取りまとめたグランドビジョンが今、まさに実現しようとしていると言えると思います。

現在、SPRUC が行うべきことは、進行中の計画を全力で支援、応援していくことです。SPRUC 会員の皆様には、2023 年 12 月にあった「利用ニーズアンケート」など、施設からの依頼事項に答えるとともに、研究会単位での Spring-8-II 計画に関する要望、希望の作成や、「Spring-8-II 計画」に関連させた研究会、シンポジウム開催など活発な活動をお願い致します。

最後に、私の会長としての任期がこの 3 月までです。次期会長は関西学院大学の藤原明比古教授が就任予



定です。この2年間ご協力をいただいた会員、幹事の皆様には大変お世話になりました。この場を借りて御礼申し上げます。私の任期中の最後の行事として、第6回のBLs アップグレード検討ワークショップが2月29日に SPring-8 放射光普及棟大講堂・中講堂（+オンライン配信）で行われます。皆様の参加の程宜しくお願い致します。

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

## SPRUC 第6回 BLs アップグレード検討ワークショップ 開催のご案内

### 【趣旨抜粋】

将来にわたって放射光による顕著な成果を生み出し、科学技術として社会に還元していくためには、SPring-8 ビームラインでのサイエンスや産業利用の方向性、必要とされる光源性能や計測手法の高度化について、ユーザーと施設との間での緊密な議論が欠かせません。このような議論の場を提供するため、SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) では、2018 年度から SPring-8 シンポジウムに加え、BLs アップグレード検討ワークショップ (WS) を開催しています。過去5回のWSを通じて、SPring-8-II を見据えた共用・理研・専用ビームライン全体の再編計画に関する議論が成熟してきました。また、現在、数本のビームラインのアップグレードが完了し、後続ビームラインのアップグレードも進行中です。

今回、下記の要領で、第6回目となる BLs アップグレード検討ワークショップを開催します。SPRUC 会員全体を対象とし、BL アップグレードの進捗、データセンター構想などの最新情報を施設側と共有します。また、先行してアップグレードを完了したいくつかのビームラインについては、関連する SPRUC 研究会がユーザーの立場からフィードバックを提示します。施設との密接な意見交換を通じて、SPring-8-II へと繋がる今後の BL アップグレードをさらに効果的なものとするを目的とします。多数のご参加と将来に向けた自由闊達な議論を期待します。

【共 催】 SPring-8 ユーザー協同体  
(国研) 理化学研究所 放射光科学研究センター  
(公財) 高輝度光科学研究センター

【開 催 日】 2024 年 2 月 29 日 (木)

【会 場】 SPring-8 普及棟大講堂・中講堂、およびオンライン配信

【参 加 費】 無料

【詳細情報】 <http://www.spring8.or.jp/ja/science/meetings/2024/240229/>  
プログラム等随時更新します。

【問い合わせ先】 SPring-8 ユーザー協同体事務局  
e-mail : users@spring8.or.jp

## SACLA Users' Meeting 2024

The SACLA Users' Meeting 2024 will be held in person this year. This annual meeting provides unique opportunities for our user community to familiarize themselves with the latest capabilities of SACLA, establish connections, and engage in discussions about future research. The meeting also allows the facility members to receive constructive feedback from participants, enabling the development of effective strategies for future facility upgrades.

SACLA has regularly expanded its research capabilities and opportunities for users after launching user operations in March 2012. The significant achievements to date are because of the close collaboration between the user community and the facility. Your input during the meeting is crucial for fostering continuous progress and advancing scientific research activities in the future.

**Scope:**

- Facility updates and future capabilities
- New instrument and experimental capability developments
- Featured researches
- Future directions of science at SACLA

**Date:**

March 11 and 12, 2024

**Meeting Webpage:**

<http://xfel.riken.jp/usersmeeting2024/index.html>

**Contact:**

SACLA Users Community Office

e-mail: [saclauc@spring8.or.jp](mailto:saclauc@spring8.or.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
	松末恵理子	利用推進部

## SPring-8/SACLA 利用者情報

Vol.29 No.1 Winter 2024

### SPring-8/SACLA Information

発行日 2024年2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<sup>こうと</sup>1-1-1  
[研究支援部] TEL 0791-58-0950 FAX 0791-58-0955  
[利用推進部] TEL 0791-58-0961 FAX 0791-58-0965  
e-mail : sp8jasri@spring8.or.jp  
SPring-8 Web Site : <http://www.spring8.or.jp/>