

# ■第35回日本放射光学会年会・放射光科学 合同シンポジウム (JSR2022) 企画講演報告

## 企画講演 1 『次世代放射光施設計画の推進状況』

内海 渉

(量研 量子ビーム科学部門 次世代放射光施設整備開発センター)

### 企画趣旨

令和6年度からの共用開始を目指して、東北大学青葉山新キャンパスにおいて、官民地域パートナーシップによる次世代放射光施設(軟X線向け高輝度3 GeV級放射光源)の整備が進んでいる。基本建屋の建設が着実に進捗しており、令和3年12月からは加速器機器の搬入に向けた作業が開始される予定である。また、共用ビームライン、コアリションビームラインの設計・製作も進んでいる。計画の進捗状況と今後の見通しなどについて学会員に報告する。

企画参加人数 322名

### 講演構成

1. 趣旨説明及び次世代放射光概況 内海 渉 (量研)
2. 基本建屋工事の進捗状況  
鈴木一広 (光科学イノベーションセンター)
3. 加速器進捗状況 西森信行 (量研),  
田中 均 (理研・量研),  
渡部貴宏 (高輝度光科学研究センター・量研)
4. 共用ビームライン進捗状況  
(1) 共用ビームライン概況 高橋正光 (量研)  
(2) 軟X線ナノ光電子分光ビームラインについて  
堀場弘司 (量研)
5. コアリションビームライン進捗状況  
(1) コアリション軟X線ビームラインについて  
山根宏之 (光科学イノベーションセンター)  
(2) コアリションX線ビームラインについて  
西堀麻衣子 (東北大学)
6. 放射線安全について 萩原雅之 (量研)

### 講演概要

はじめに、内海が本企画講演の趣旨および次世代放射光プロジェクトの概況説明を行った後、光科学イノベーションセンターの鈴木一広氏が、基本建屋工事進捗状況についての講演を行った。次世代放射光施設の基本建屋は、地上2階地下1階建ての延床面積約25,300 m<sup>2</sup>、高さ約9.5 mの規模で、ライナック棟と蓄積リング棟から構成されている。2019年3月に敷地造成工事、2020年3月に基本建屋新築工事が、それぞれ着工され、2021年12月末時点での工事進捗率は98.5%に達していること、竣工は2023年3月としているが、2021年12月から加速器の搬入に係る作業を可能にし、2022年2月下旬には建築基準法の検査等を受

検する予定であることなどが報告された。

次に、量研の西森信行氏が発表者を代表して、次世代放射光施設の加速器の設計・製作思想について概要を述べた後、加速器機器の整備進捗状況について、蓄積リング電磁石、真空システム、加速空洞、リング入射部、Cバンド線型加速器、電子源などコンポーネントごとに詳細な報告を行った。2019年度から開始した加速器機器製作は概ね順調に推移しており、蓄積リング用加速空洞など完成機器の動作確認試験が進められている。2021年12月からは、基本建屋へ乗り込みが始まり、建屋測量、樹脂床施工、19インチラック搬入設置等が開始されている。今後、加速器機器の搬入設置・アライメントが本格化し、線型加速器棟では40本のCバンド加速管、蓄積リング棟では16セル分の電磁石架台、真空容器の設置等を約1年かけて順次進める。2023年4月からは線型加速器、2023年7月からは蓄積リングの調整運転を開始予定であり、2024年度から利用運転開始を目指している。

引き続き、ビームラインについて、国(量研)が整備を行っている共用ビームラインとパートナー機関が整備を担っているコアリションビームラインに分けて報告が行われた。まず量研の高橋正光氏が、3本の軟X線共用ビームライン(BL02U, BL06U, BL13U)の概要及び整備進捗状況を発表した。BL02Uは、回折格子によって鉛直方向に分光された分散光を試料に照射し、RIXS分光器で水平方向に分光する二次元RIXSを採用することにより、超高分解能と高効率の両立を図り、エネルギー分解能100,000(1000 eV以下)を目指す。BL06Uでは、50-1000 eVのエネルギー範囲で水平・垂直および左右円偏光の真空紫外光・軟X線を供給し、光学系には平行化光平面回折格子分光器を採用して、ナノ集光ビームを用いたスピン分解角度分解光電子分光(ARPES)を実現することを計画している。また、BL13UはX線磁気円二色性(XMCD)などを目的とするビームラインで、分割型APPLE-IIアンジュレータ光源によって実現される高エネルギー領域での偏光制御性を生かすための光学系が設計されている。引き続き、量研の堀場弘司氏がナノ光電子分光ビームラインの詳細についての報告を行い、本ビームラインの研究目標や仕様、要求性能を満たすための要素技術について発表した。

一方コアリションビームラインについては、3本の軟X線ビームラインについて光科学イノベーションセンターの山根宏之氏が、4本の硬X線ビームラインについて東北大学の西堀麻衣子氏が、それぞれ報告した。BL07UではAPPLE-II型アンジュレータを挿入光源として用い、主

要な測定手法として軟 X 線発光分光 (RIXS) の整備を計画しており、Li から 3d 遷移金属などについてオペランド電子状態解析を可能とする。BL08U は APPLE-II 型アンジュレータを挿入光源として用いる雰囲気軟 X 線光電子分光 (AP-XPS) のビームラインで、任意雰囲気下での化学反応のリアルタイム観測などが可能となる。また、BL14U はツインヘリカルアンジュレーターを挿入光源として用いることで、円偏光の高速ヘリシティ反転を可能とし、軟 X 線顕微鏡による軽元素や遷移金属の元素分布、磁性やダイナミクスを含む高空間分解可視化などの研究が実施できる。残る 4 本はテンダー X 線の利用も含む硬 X 線 BL であり、そのラインナップは、次世代光源の特長を最大限に生かした X 線コヒーレントイメージング (BL10U)、テンダー X 線領域での XAFS/SAXS を対象とした局所構造解析 (BL08W)、白色 X 線を利用した高速 X 線トモグラフィを行う階層構造 (BL09W)、オペランドでの光電子分光を見据えた X 線オペランド分光 (BL09U) となっている。現在すべてのビームラインで、挿入光源、フロントエンドに続いて、遮蔽ハッチ、回折格子分光器などが製作段階に入っており、2022年にはエンドステーション機器の製作が始まるとともに、フロントエンド機器の一部の設置を皮切りに、遮蔽ハッチの建設、挿入光の搬入など、現地での作業が開始される。

最後の講演では、量研の萩原雅之氏により、次世代放射光施設における放射線安全の検討状況が報告された。海外の放射光施設の多くで実験ホールは放射線管理区域から除外されているのに対し、国内の既放射光施設では実験ホール全体が管理区域となっている。次世代放射光施設ではユーザーの利便性向上と産業利用を含む利用分野の拡大を図るため、放射線業務従事者でなくとも可能な限り放射光実験に参加できることを目標としていること、RI 規制法関連業務を所掌する行政機関事務局である原子力規制庁とはこれまでに種々の協議を行い、まもなく本方針に基づいた放射線発生装置使用許可申請書を提出予定であることなどが説明された。

## 企画講演 2 『若手研究者が熱く語る X 線回折・散乱によるこれからの材料、物性研究』

杉本邦久 (高輝度光科学研究センター)

### 企画趣旨

現在、国内では新たな放射光施設の建設やアップグレード計画が進められており、回折・散乱分野においても、これまで観ることが難しかった現象へのアプローチが可能になることが期待される。本企画講演では、次世代を担う若手研究者による柔軟で多様な発想を活かした視点による今後の光源性能の進歩への期待について議論することを目的とし企画した。

企画参加人数 約220名

### 講演構成

1. はじめに 杉本邦久 (JASRI/京大)
2. 放射光回折による d 電子系多極子秩序の観測 平井大悟郎 (東大)
3. 放射光 X 線回折を用いた軌道電子の直接観測 鬼頭俊介 (理研)
4. ハイエントロピーナノ合金触媒開発と放射光による結晶構造・電子状態解析 草田康平 (京大)
5. 水熱合成によるナノ粒子生成その場観察 笠井秀隆 (筑波大)
6. 放射光 X 線異常散乱法を用いた非晶質金属の構造不均一性解析 川又 透 (東北大)
7. 放射光によって構造解析した微小薄片状有機結晶の光応答機能 西村 涼 (立教大)
8. まとめ 坂田修身 (JASRI)

### 講演概要

近年、放射光を用いた回折・散乱に基づく手法は、材料、機能の物性評価において欠かせないツールとなっている。一方、国内外でも放射光施設の建設、アップグレード計画が進行しており、回折・散乱分野においても、新たな光源、装置を用いたパラダイムシフトが期待される。そこで、タイトルにも挙げた通り、放射光の将来に対する回折・散乱分野への期待を若手の研究者に熱く語って頂きたいと考えて本講演を企画したことを企画提案者の杉本が冒頭で説明した。本企画講演では、研究分野の異なる 6 名の若手研究者に講演をお願いした。最初に東大の平井大悟郎氏が、スピンと軌道のもつれが生んだ得意な磁気秩序及び謎の転移の解明について講演し、多極子物理からの光源性能の進歩への期待について述べた。2 番目に理研の鬼頭俊介氏が軌道電子の直接観測について講演し、精密構造解析により 4d, 4f の価電子密度分布を可視化した研究成果を示した。最初の 2 つの研究では、今後の放射光に期待する点として、定量的な議論のためには極めて広いダイナミックレンジを有した回折・散乱計測が必要であること示した。3 番目に京大の草田康平氏が、ハイエントロピーナノ合金による触媒開発について講演し、今後、放射光を用いた解析でナノ粒子化による (表面の) 歪みと多元素化による歪みを識別し、それと物性の相関を議論できないか? 固溶度・相関係数などを実験的に評価することは可能か? との問いを示した。これに対して、聴講者から局所構造解析による解決の可能性についての期待が述べられた。休憩を挟んだ 4 番目に筑波大学の笠井秀隆氏が、水熱合成によるナノ粒子 ( $ZrO_2$ ,  $SnO_2$ ) の生成過程を回折・散乱によりその場観察する研究の詳細について講演があった。今後の放射光に期待する点として、より速い反応 (核生成、秒オーダー) やより微量の生成物 (1 桁少量, 前駆体濃度  $\sim 0.01$  mol/L) の合成へのその場観察の必要性が示された。5 番目の東大の川又透氏は、非晶質金属中に存在する中距離規則構造の解明を目的とした異常散乱法に基づく構造

不均一性解析について講演した。X線異常散乱-逆モンテカルロシミュレーションによる非晶質構造モデリングとCNA-Bernal多面体解析により $Zr_{80}Pt_{20}$ ,  $Pd_{82}Ge_{18}$ 非晶質合金を対象とした中距離秩序構造の定量的評価及び規則化に寄与する構造ユニットの特定に成功したことを示した。6番目に、立教大の西村涼氏が光誘起マルテンサイト変態を示す微小有機結晶を用いた機能性材料の構造解析について講演し、今後の放射光に期待する点として、微小結晶の高精度での構造解析だけでなく、X線によるフォトクロミズム現象を構造変化の実時間で理解を挙げた。最後にJASRIの坂田修身氏により、本企画講演のまとめをおこなって頂いた。

本企画講演での材料、物性研究における若手研究者が放射光の将来に期待するところを以下にまとめる。1915年ブラック親子が食塩の構造解析に成功して以来、長らく専門家が高度な専門知識、特別な装置、ソフトウェアを用いて高速計算機により構造解析をおこなう時代が続いてきた。しかしながら、現在では、大学院生を含む非専門家が汎用の装置、ソフトウェアを使ってパソコン上で構造解析が可能な時代となったが、これは熱力学的に安定な構造を決めているにすぎない。今回、講演していただいた若手研究者が放射光に期待するのは、このような静的な構造解析ではなく、反応、物性の過渡的な状態を瞬時に捉えられる精密・動的構造解析であると理解できる。物質の本質を明らかにするためには、放射光において、このような高度構造解析の推進が重要だと考える。つまり、反応(合成、触媒など)や応答物性(電場、光、磁場など)の構造ダイナミクス計測による物質材料の精密・動的構造解析の解明に期待が集まっているのではないかと思う。今後、各放射光施設における回折・散乱分野の高度化計画において、今回の企画が役立てば幸いである。

以下に本企画講演を通じて感じたことを述べさせてほしい。発表時間は質疑応答を含む20分間であったが、講演者の思いが熱かったせいか、講演時間に議論が収まらない発表もあった。件数を減らして発表時間を拡大し、深い議論となるようにしても良かったか思ったが、結果的に様々な分野の若手研究を拝聴することができ、よかったのではないかと考える。今年の放射光学会年会もオンライン開催となったが、若手研究者への期待からか、200名を超える会員にご参加いただいたこと大変感謝する。オンライン開催ということもあって、比較的気軽に会員でない研究者に旅費の負担をかけず講演を依頼することができた点は良かったと思う。しかしながら、質疑応答については、盛り上がり欠けたところもあるので、早期に新型コロナが収束し、日常であった対面形式の年会に戻ることを切に願っている次第である。

### 企画講演3『進化する軟X線発光分光で挑むサイエンス』 藤井健太郎 (QST)

#### 企画趣旨

放射光光源の高輝度化や、放射光ビームライン・検出器技術の進歩により、軟X線領域の発光分光あるいは共鳴非弾性X線散乱(RIXS)分光装置は、ここ最近目覚ましく発展してきている。海外の放射光施設においては、軟X線領域において数10 meVの分解能を持ったRIXSステーションで多くの成果が出始めている。そんな中、日本においても東北大学青葉山新キャンパス内に建設中の次世代放射光施設において、10 meVを切る分解能を目指したステーションや、これまでにSPring-8において実施されてきた軟X線RIXS分光をさらに高度化した高効率RIXSステーションの建設が予定されている。今回の企画講演では、このような放射光を用いたRIXS分光に加え、中性子散乱やラマン分光といった軟X線RIXSと相補的な手法を活用しながら、今後挑んでいくサイエンスを展望することに主眼を置いた。さらに、近年の理論計算の高度化により、複雑な二次過程においても時分割計算が可能になるなどの進展があり、RIXS研究の大きな推進力となっている。実際、RIXSを用いて超伝導の機構解明、磁性材料・スピントロニクス材料や電池技術のみならず高分子化学や生体分子を対象とした研究も進められている。このような技術進歩の背景から、今後我々がどのような課題に挑んでいくべきかを議論した。

企画参加人数 176人

#### 講演構成

1. 趣旨説明 藤井健太郎 (QST)
2. 超高分解能2D-RIXSで挑むサイエンス 宮脇 淳 (QST)
3. 軟X線RIXS×INSで明らかにするサイエンス 藤田全基 (東北大)
4. 高分解能分光が可能にするスピントロニクス研究の展望 森 道康 (JAEA)
5. 磁性材料研究から軟X線発光分光に期待するもの 梅津理恵 (東北大)
6. 軟X線分光の相補利用による物性研究の展開 小林正起 (東大)
7. 高分解能オペランド RIXSの実現による電池研究の展開 朝倉大輔 (産総研)
8. 超高分解能分光が明らかにする溶液科学 原田慈久 (東大)
9. 顕微ラマン分光によるラベルフリー細胞生物研究 中林孝和 (東北大)

#### 講演概要

はじめに、藤井が「進化する軟X線発光分光で挑むサイエンス」と題して、現状の軟X線発光分光研究に対して、今後どのようなアプローチをしていくべきかを議論した。その中で、今回の企画講演が、軟X線発光分光に加

えて軟 X 線発光分光と相補的な量子ビーム利用、試料環境、理論計算の 3 つのテーマを基軸にしていることを示した。

続いて宮脇淳氏により、世界の軟 X 線発光分光装置の現状と、次世代放射光施設の共用軟 X 線ビームラインにおいて建設予定の RIXS ステーションの概要説明があった。測定効率の低さを解消するため、さらには将来的な発展性を見据えて「2D-RIXS 方式」を採用することが発表された。分解能 10 meV を切る超高エネルギー分解能での RIXS 測定を目指しており、これまでエネルギー分解能の制約のために観測できなかった固体中のマグノンやフォノンなどの素励起やその分散の観測が期待されること、分子の振動観測では比較的エネルギーの高い伸縮振動だけでなく、よりエネルギーの小さい振動・回転準位の観測が期待されることが示された。RIXS の測定環境の自由度の高さを活用すれば、触媒や電池材料など、デバイスのオペランド測定への展開も期待される。

東北大金研の藤田全基氏からは、中性子非弾性散乱実験 (INS) と RIXS 実験の相補的な利用展開について、銅酸化物高温超伝導体におけるスピンと電荷の秩序、およびダイナミクスの研究を例に報告があった。RIXS 実験におけるエネルギー分解能の向上と、大強度中性子源を活用した INS 実験の高効率化により、スピンと電荷が絡み合う 100 meV 程度のエネルギースケールにおける励起状態の複眼的観測が可能になり、スピン・電荷相関の電子・ホール対称性に関する知見が得られていることが紹介された。

続いて原子力機構の森道康氏が、理論の観点から強磁性体に代わるスピントロニクス材料として期待されるフェリ磁性体の研究について紹介し、フェリ磁性体の一種である希土類鉄ガーネットが、高輝度軟 X 線光源を用いた RIXS 測定の対象となりうることを指摘した。多様な磁性材料をスピントロニクスへ応用するためには、バルク物性に加え、界面における時空間変化、薄膜物性などの基礎研究が不可欠である。そこで、バルク磁性体中の磁気励起を測定する INS 実験とともに、界面物性の測定が可能である RIXS 実験の重要性が述べられた。界面におけるスピン流、磁気構造の空間変化、更にはスピン液体のような秩序を持たない系の磁気励起、スピン液体などの四重極に相当する素励起を測定する手段が求められており、高エネルギー分解能の RIXS 実験の重要性がうかがえる発表であった。

次の講演では、東北大金研の梅津理恵氏が、軟 X 線実験の観点から強磁性体ホイスラー合金における研究例を紹介した。RIXS を用いてハーフメタル型電子状態を特徴づけるバンドギャップの存在およびギャップとフェルミレベルの相対位置を明らかにできること、さらにゼーマン分裂のエネルギー幅などの定量的な議論の可能性も示され、今後の更なる高エネルギー分解能化によって、より詳細な議論が可能となるだけでなく、様々な機能性材料の電子状態

観測にも期待が持てることが述べられた。

東大工の小林正起氏の講演は、導入部分で、今後の情報化社会を支えるエレクトロニクス研究の発展が急務であり、従来の半導体や金属だけでなく、新しい電子材料、例えば超伝導体、トポロジカル絶縁体や磁性半導体などを用いてこれまでにない機能性を有するデバイスの開発・実用化を目指した研究が進んでいることが示された。そこで磁性半導体を例に、母体の半導体によるバンド構造と、ドーブした磁性イオンの周りの結晶場や混成を反映した局所的電子構造という 2 種類の電子状態を、角度分解光電子分光と RIXS の相補的な利用によって調べる研究が紹介された。

続いて産総研の朝倉大輔氏から、オペランド RIXS 測定による電池研究の展開についての講演があった。今後のリチウムイオン電池等の二次電池の更なる高性能化に向けて、既存の電極材料における充放電機構を解明し、新材料の開発指針を得ることが重要視されている。朝倉氏のグループでは、RIXS のオペランド分光を開発し、正極材料の  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$  や負極材料の  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  等の電子状態解析を実施してきた。最近では、遷移金属元素の価数変化だけでなく、配位子の酸素との軌道混成や電荷移動の情報も抽出できるようになっており、今後の RIXS の高エネルギー分解能化によって、さらに詳細なメカニズムの解明が期待されている。

東大物性研の原田慈久氏からは、軟 X 線発光分光の溶液科学への展開に対する紹介があった。純水の水素結合構造にミクロな不均一性が見られることが RIXS 実験で示され、そのスペクトルの解釈の是非を巡って 5 年ほど議論がなされてきたが、ごく最近、ミクロ不均一を裏付けるような RIXS の理論計算がなされたことが紹介された。さらに界面水への展開として、液晶高分子膜がイオン選択性を示す際に、水の水和構造を認識している例が示された。最後に、次世代放射光施設に建設予定の高効率 RIXS ステーションにおいて展開されるであろう研究の紹介があった。

東北大薬の中林孝和氏は、顕微ラマン分光によって細胞内分子・タンパク質のラベルフリー解析を行っており、細胞内部の水の密度、液液相分離、細胞内の局所温度に関する研究成果が報告された。細胞内部において核と核外では水の密度が異なり、細胞核内の方が水の密度が高いことが示された。また、液液相分離によって形成される液滴内部の分子の様相について定量的な分析例が紹介された。さらに、細胞内の局所温度を無染色で観測することに成功した例も紹介され、細胞内のラベルフリー分析において、顕微ラマン分光が強力なツールであることが示された。質疑では放射光との相補利用についての議論もなされた。

東北大学キャンパス内に建設中の次世代放射光施設においては、RIXS 実験を行うことができるステーションが 2 本建設予定であり、ビームライン・RIXS ステーションの設計が完了した今こそ、詳細な研究テーマの議論を行うべ

き時期を迎えている。そのような背景の中、今回の企画講演では、これらの施設利用によってどのようなサイエンスを展開することができるかを展望する非常に良い機会となった。

#### 企画講演 4 『放射光リモート実験の課題と将来像—リモート等実験諮問委員会からの提言』

朝倉清高（北海道大学触媒科学研究所）

##### 企画趣旨

2020年春 COVID-19のパンデミックが日本中を襲い、緊急事態宣言が発令され、県境を越える移動が禁止された。これは、大型の放射光施設を共同利用あるいは共用する放射光科学にとって危機的事態であった。しかし、2020年末に、パンデミックが落ち着き、その年のピークタイムを見ると例年とほぼ同程度に実施され、放射光科学は後退しなかった。これは、放射光施設が格段に努力され、リモート実験という新しい放射光利用形態を開始したことによる。このリモート実験は、コロナ禍だけでなく、放射光実験を本質的に改革する力を持っている。すなわち、放射光実験というと、マシンタイムが配分され、それに向けて、サンプルを作り、遠い放射光施設に移動し、昼夜なく働き、疲れ切って実験室に戻るというものである。リモート実験は、実験室でよい材料ができれば、あとはネットでピークタイムを予約し、サンプルを送り、結果が戻ってくるのを待つというスタイルの放射光実験が可能であることを示している。それは、ウィズコロナ時代におけるニューノーマルな放射光実験方式となるだけでなく、放射光科学のあらたなる発展の可能性を秘めている。一方で、問題もある。この機会に放射光学会としてその問題点を洗い出し、今後の議論の出発点となるべく、リモート実験等諮問委員会を立ち上げた。とくに、施設によりリモート実験の名称と定義が異なるため、混乱を生まないように、その形態の分類と名称の統一をリモート実験等諮問委員会に

お願いした。3月に委員会が開始し、9月に答申を得た。本企画は、答申に基づきリモート実験という新しい実験形態について現状を知り、会員相互で議論するとともに、新しい名称を広く使っていただけるようにすることを目的とした。

企画参加人数 225名

##### 講演構成

1. 企画趣旨説明 朝倉清高（北大）
2. SACLA/SPring-8におけるリモート実験 矢橋牧名（理研）
3. KEK-PFにおけるリモート実験 山田悠介（PF）
4. 作業部会の議論およびまとめの報告 木下豊彦（JASRI SP8）
5. パネル討論

##### 講演概要

朝倉が、企画の趣旨を説明し、最も大事な名称について示した（表1）。

矢橋牧名委員からは 緊急事態宣言下における SPring-8のユーザ来所実験の停止、COVID-19対策緊急課題の実施について述べられ、SPring-8でのリモート実験の現状、特に、自動化の進み具合についての報告があった。また、上に示した名称のもととなるリモート実験の分類案が示された。

山田悠介委員は、PFの緊急事態下の5、6月に運転停止されたこととその後のリモート実験を中心とした運転再開されたことについて述べられた。リモートにおけるサンプルの取り扱い（取り違えを防ぐなど）方法やサンプルの共通トランスファーなどについて報告があった。

委員長である木下豊彦委員からは本委員会のとりまとめ、特に表1に基づく名称と委員会の問題になった問題点についての報告があった。すなわち、全自動へ移行するまでの間のリモート実験におけるスタッフ負担軽減、試料搬送システムの共通化、データの扱い、若手人材育成、放射

表1

名称	測定者	実験責任者のリアルタイム参加	試料送付	備考
来所測定	ユーザ	要	不要	放射線登録
遠隔制御測定 (遠隔測定)	ユーザ +ソフトウェア	要	要	リモート制御
スタッフ支援遠隔 参加測定 (支援測定)	施設 スタッフ	要	要	Virtual参加
有人代行測定 (代行測定)	施設 スタッフ	不可	要	おまかせ測定(測定時間帯は任意) 実験内容の事前確認が必須
無人自動代行測定 (無人測定)	施設 ソフトウェア	不可	要	おまかせ測定 Virtual参加なら遠隔測定も？

線従事者登録, 海外からのリモート実験における輸出入安全の問題を議論したことが報告された。

最後に 会場を交えて, パネル討論がなされた。主な議題は, リモートコントロール実験における装置固有のソフトのコントロール法, 共通試料搬送システム, 搬送安全 (ドライシッパなど) へのユーザの意識向上, 企業側がリモートのメリットを感じ, 目的がしっかりしている場合の財政支援もあり得ることなどである。また重要課題である若手人材育成についても放射光のリモート講義やリモート実習など, リモートを通じた若手育成の可能性が指摘された。時間切れで, すべての問題に十分な議論ができなかったことが反省点である。

#### 最後に

リモート実験はまだ始まったばかりである。放射光実験の垣根を下げ, 新しい放射光実験の可能性を秘めているが, まだまだ解決すべき課題がある。このリモート実験等諮問委員会の答申が今後の議論を活発化し, リモート実験を通じて放射光科学が進展することを願いたい。また, 忙しい中, 木下豊彦委員長をはじめ多くの委員がリモート実験の可能性について, 真剣に討議していただいたことに改めて感謝したい。

### 企画講演 5 『高速分子動画で迫る構造ダイナミクス研究の最前線』

山本雅貴 (理研), 足立伸一 (KEK)

#### 企画趣旨

生命機能の理解にとって重要な生体高分子の構造情報の取得に向け, 現在様々な構造解析研究が進められている。放射光による膜タンパク質を初めとした高難度サンプルの結晶構造解析, フェムト秒 XFEL による状態遷移を直接捉える時分割構造解析など X 線による生体高分子の構造解析に加え, 近年ではクライオ電子顕微鏡による複合体やマルチコンフォマーの単粒子解析, さらには計算科学と組み合わせる構造ダイナミクスに迫る相関構造解析が進められている。本企画ではこれら最先端の生体高分子の構造機能解析の特徴を紹介してその相補利用によりどこまで生命機能に迫れるのかを議論した。本企画は, 科学研究費助成事業・新学術領域「高速分子動画」との共催として開催した。

企画参加人数 137名

#### 講演構成

1. 高速分子動画による構造ダイナミクス研究  
岩田 想 (京大)
2. 時間分解顕微分光法による構造ダイナミクス研究  
山田大智 (兵庫県立大)
3. SACLA 分光分析による構造ダイナミクス研究  
片山哲夫 (SACLA)
4. 高速 QM/MM 計算の開発と生体分子ダイナミクスへの応用  
八木 清 (理研)

5. 時分割構造解析から明らかになったチャンネルロドプシンの初期構造変化  
草木迫司 (東大)
6. 二液混合シリアルフェムト秒 X 線結晶構造解析に基づく銅含有アミン酸化酵素触媒機構の解明  
村川武志 (大阪医科大)
7. 中国の構造生物学の躍進と基盤施設の現状と今後の展望  
上海老師 (中国・上海)

#### 講演概要

最初に新学術領域「高速分子動画」の領域代表である岩田想氏から, 「高速分子動画による構造ダイナミクス研究」の演題で本企画の趣旨説明を兼ねて「高速分子動画」の概要が示された。「高速分子動画」は現在の構造解析に求められる分子の動きを原子分解能で実際のタイムスケールでみるという命題に応えるものであり, SACLA の超短パルス X 線レーザーによる実時間に沿った構造解析による分子動画作成への取組みが紹介された。光照射を反応開始のトリガーとしたポンププローブ法による時分割 SFX (tr-SFX) によるバクテリオロドプシン (BR) の解析では, 光照射によるレチナルの構造変化が時間とともにタンパク質の外側に伝わっていく様子を紹介し, 構造変化の過程を直接観察することで弱い相互作用の反応中間体まで解析可能で, 計算科学との組み合わせで定量的な議論に近づいていることが示された。「高速分子動画」による反応過程の可視化は, 構造生物, タンパク質工学, ケミカルバイオロジー等に重要な指針を与え, tr-SFX のスナップショットを計算科学で解析することで構造ダイナミクスに迫れると締め括った。続いて山田大智氏が「時間分解顕微分光法による構造ダイナミクス研究」の演題で分光法による化学状態解析について紹介した。紫外・可視・赤外の振動分光法は, 活性中心の結合次数, 電子状態, プロトン化状態などを高精度に解析可能である。脱窒カビ由来 NO 還元酵素の微小結晶による反応サイクルの時間分解分光法, 計算科学, 結晶構造解析を組合わせた研究を紹介した。顕微分光では独自の顕微分光セルを開発し, 反応開始トリガーに光反応性の Caged-NO を利用した時間分解分光により結晶では溶液に比べ反応が遅くなっていることを明らかにした。SACLA でのクライオトラップによる NO 活性型の無損傷構造解析から, NO 活性型の分子種について QM/MM を行い反応過程の分子種を特定した。分光解析では区別できない反応中間体の分子種を結晶構造解析, 計算科学と組み合わせで解析出来ることを示した。片山哲夫氏から「SACLA 分光分析による構造ダイナミクス研究」の演題で, 化学の視点から SACLA の XFEL 分光分析による原子数100程度の低分子の反応ダイナミクス研究について紹介した。低分子は比較的単純な構造のため結晶は不要であり, 無秩序 (disordered) 系について fs-ps の時間領域が主なダイナミクス研究対象である。溶液中における銅フェナントロリン錯体の光反応について 1ps 以内の擬ヤーン・テラー歪みによる構造変化を解析し, Tr-XANES の微

小振動からコヒーレントな分子振動を抽出することで、分子が呼吸するように振動する様子を明らかにした。今後は、Bio-SAXS のフェムト秒領域への展開や X 線分光で特定原子の局所情報の解析への期待が述べられた。解析手法の最後に八木清氏から「高速 QM/MM 計算の開発と生体分子ダイナミクスへの応用」の演題で、計算科学から生体高分子の構造ダイナミクスに迫る研究を紹介した。計算科学による解析手法として古典力学で効率的に構造ダイナミクスを計算する分子力学計算 (MD) と局所構造や相互作用を高精度に計算可能な量子化学計算 (QM) を紹介し、課題として MD では経験的力場に依存した精度の限界、QM は計算負荷が大きく大きな分子を計算できない点が示された。解決策として、興味のある部分に QM、その他部分を MD で計算する QM/MM が開発され、2013年のノーベル賞を受賞している。構造サンプリングと QM 精度のトレードオフ関係は解消できていないため、八木氏は高速な分子動力学計算ソフト GENESIS に QM/MM を実装することで、長時間の QM/MM-MD を可能にした。応用例として蛍光プローブ分子ローダミンの類縁ながらほぼ無蛍光性の N-Ph ロードミン類の消光効果の解析を紹介した。N-Ph ロードミンの電子励起状態を計算し分子軌道 (HOMO) を可視化してベンゼン環側鎖の回転に伴う電子軌道の偏りが消光原因と解明し、ベンゼン環の回転を止めた新規蛍光プローブの分子設計にも成功した。また、bR の水素結合ネットワークについて、非調和性を考慮した QM による分子振動計算からレチナル異性化に迫る解析も紹介した。

後半の二講演は「高速分子動画」の研究成果としてまず草木迫司氏より「ChR の機能発現機構」を報告した。7 回膜貫通型の光駆動形イオンチャネルであるチャネルロドプシン (ChR) の光反応サイクルにおいて、イオンチャネルの open-close 状態の制御機構を光励起 Tr-SFX によって追跡した。生理学のパッチクランプ法による光励起からチャネル開までの遅延時間測定、微小結晶の結晶化条件検討等の準備を進め、光照射から 4 ms の tr-SFX により、光励起によるレチナルの異性化が TM7 を動かし、さらにレチナルがねじれつつスライドして TM3 が屈曲しながら外側に動く分子動画の解析に成功した。レチナルのねじれや TM3 の屈曲は QM/MM シミュレーションでもサポートされており、TM3、TM7 がイオン透過経路のゲートとして機能するチャネル制御機構を明らかにした。今後の展開として分子全体の構造変化について電子顕微鏡の単粒子解析への期待が述べられた。続いて、基質混合により酵素反応を開始する二液混合型の Tr-SFX の成果として、村川武志氏が「2 液混合系による酵素の構造ダイナミクス研究」を発表した。銅含有アミン酸化酵素 (CuAO) の触媒メカニズムは前半の還元反応と後半の酸化反応からなり、嫌気条件下では前半の還元的半反応のみが進行する。そこで、嫌気条件下で 2 液混合 tr-SFX を行い、還元的半反応の触媒過程を可視化した。500 ms より

も短い反応時間では T 字型混合装置、長い反応時間ではダブルジェット型混合装置と混合装置を使い分けることで、その反応中間体構造を正確に捉える事に成功した。また、この反応過程での格子定数の変化からも反応中間状態を捉えられる可能性が示唆された。

本企画の最後の講演として中国・上海で活躍する日本人研究者の上海老師さん (諸般の事情により匿名) が「中国の構造生物学の躍進と基盤施設の現状と今後の展望」の演題で講演した。まず、中国の放射光施設を紹介の後、タンパク質のアミノ酸配列のみから立体構造を予測するソフトウェア AlphaFold2 による構造ダイナミクス研究の可能性を紹介した。AlphaFold2 は AI を活用して今までに蓄積された膨大なタンパク質構造情報を基に、実験構造と遜色ない高精度構造予測を可能にした。ただ、AlphaFold2 は単一の予測構造のみを返すため、そのままでは構造ダイナミクスの予測には有用とは言えない。現在では AlphaFold2 を用いた複数コンフォメーション予測のプレプリントも公開されるなど、構造ダイナミクス研究への応用も始まっている。講演者は自ら、トランスポーターの輸送サイクル解明に向け、結晶構造解析した内向き構造と対になる構造未知の外向き構造の予測に取組んだ。様々なアミノ酸配列を持つホモログによる構造予測から、機能的に重要そうなアミノ酸を推定した点変異体による活性測定や、特定の反応中間体を固定する Cys 変異体作成が期待できる。今まで実験構造が必要だった MD 計算なども、予測構造ベースで同時並行的に出来るようになった。構造解析に革新をもたらすと期待される AlphaFold2 だが、その予測構造の正確性は検証が必要であり、結晶構造解析等の実験的な構造解析と連携しながら更なる高度化が期待されると締め括られた。

今回、新学術領域「高速分子動画」との共催による企画講演となったが、構造生物学のみならず他分野からも 130 名を超える参加者が得られ、構造生物学への高い関心と期待感が感じられ、高速分子動画や相関構造解析を紹介する良い機会を得られたものと確信している。

## 企画講演 6 『放射光を用いたガラス研究の最前線と未来』

尾原幸治 (JASRI)

### 企画趣旨

2021年5月18日に開かれた国連総会にて、2022年を「国際ガラス年」とする決議案が採択された。身近な工業製品から最先端の科学を支える材料、あるいは造形・美術の領域にいたるまで、現代社会においてガラスは実に幅広い場面で活躍している。一方で、ガラスの物理については未解明の部分も多く残されており、ガラスの原子配列の多様性に起因した種々の物性を解明するべく、最近では、放射光科学における実験、計算、データ駆動科学を駆使した融合研究が検討されている。

本企画講演は、放射光による先端計測を用いた最近のガ

ラス研究に関して、基礎から応用まで幅広く紹介し、今後の当該分野における融合・連携研究を加速させる場とするために企画された。

企画参加人数 121名

#### 講演構成

1. 趣旨説明 尾原幸治 (JASRI)
2. 単純分子ガラスの構造とダイナミクス 山室 修 (東大)
3. 高温高圧処理を施したシリカガラスの X 線回折 小野円佳 (北大/AGC)
4. 遷移金属硫化物ガラス正極材料の充放電メカニズム 作田 敦 (大阪府大)
5. 非周期系原料の結晶化を制御したゼオライト開発 脇原 徹 (東大)
6. 理論・実験・情報科学の融合によるガラスの構造秩序解析 志賀元紀 (岐阜大)
7. おわりに 正井博和 (産総研)

#### 講演概要

はじめに、尾原から本企画講演の開催趣旨、国際ガラス年の制定の経緯を説明し、年内に開催される国際ガラス年に関連する行事の紹介を行った。

続いて東京大学の山室修氏より、単純分子ガラスにおけるガラス転移現象、および、ガラス特有の低エネルギー励起であるボゾンピークの起源に関する研究結果が紹介された。まずはじめに、熱容量測定から求めた構造エントロピーの絶対値より、ガラス転移温度での緩和時間の急激な増加の起源が協同再配置領域の増大にあることが示された。そして、二酸化炭素 ( $\text{CO}_2$ )、二硫化炭素 ( $\text{CS}_2$ )、プロパン ( $\text{C}_3\text{H}_8$ )、プロペン ( $\text{C}_3\text{H}_6$ )、トルエン ( $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$ )、四塩化炭素 ( $\text{CCl}_4$ ) など単純分子を気相から蒸着して得たガラスを対象として、X 線全散乱および逆モンテカルロ法を駆使した構造解析によって、冷却とともに構造中に分子の再配置による配向相関が増加することが示された。さらに、 $\text{CCl}_4$  および  $\text{CS}_2$  の蒸着ガラスの中性子非弾性散乱において観測されるボゾンピークが  $Q$  依存性を示し、ボゾンピークが密度 (~自由体積) だけで決まるものではなく、構造と明確に相関していることが指摘された。

北海道大学/AGC 株式会社の小野円佳氏の講演では、通信用光ファイバの光損失を低減させるために、光ファイバのコア材料として広く用いられるシリカガラス ( $\text{SiO}_2$ ) の構造と光損失の起源となるレイリー散乱との関係を調べた結果が紹介された。 $\text{SiO}_2$  ガラス中の空隙は熔融温度  $1800^\circ\text{C}$  下で  $0.2\text{ GPa}$  まで圧力を印加すると収縮し、光損失が大幅に抑制される。分子動力学シミュレーションからは、その損失が高圧下でさらに低減されると予測されているため、小野氏は様々な高温・高圧条件下の  $\text{SiO}_2$  ガラスの光損失と構造との相関を検討した。その結果、 $\text{SiO}_2$  ガラスの X 線回折データに現れる First Sharp Diffraction Peak をはじめとする低波数ピークの変化と損失に相関があるこ

とが示された。また、陽電子消滅実験から求まる  $\text{SiO}_2$  ガラス中の空隙に関して、海外の研究者チームと連携して、計算科学を基に理論的解明を試みている最近の取り組みが紹介された。

続いて大阪府立大学の作田敦氏より、遷移金属硫化物ガラス正極材料の充放電メカニズムを探索した結果を紹介いただいた。リチウムイオン電池を超える高エネルギー密度を有する二次電池の実現に向け開発された遷移金属多硫化物正極物質においては、充放電時のリチウムの挿入脱離に伴いカチオンとアニオンの比率が劇的に変化し、構造が結晶から非晶へと大きく変化する。このような充放電メカニズムを明らかにするため、X 線二体分布関数 (PDF) 解析によるブラッグピークの有無に依らない構造解析が実施され、充放電時に結晶と非晶が可逆的に構造転移する現象、また、非晶を保持したまま充放電するメカニズムを実空間における二体相関の変化から解明した事例が紹介された。

東京大学の脇原徹氏からは、ゼオライトの合成・設計に結晶化の制御の観点から取り組んできた結果を紹介いただいた。ゼオライトは主に有機分子を含有した非晶質アルミノシリケートを水熱条件下で結晶化させることにより得られるが、効率的なゼオライトの合成を実現するためには、非晶質の結晶化過程での構造変化を解明することが求められている。講演では、X 線 PDF 解析によってゼオライトの結晶化のメカニズムを二体相関の変化から考察した結果が示された。さらに今後の新規ゼオライト材料開発においては、構造モデリングによって構築した 3 次元構造の解析を時分割で行うことで有機構造規定剤や構成元素の動的な役割を明確にし、得られた情報に基づいた材料設計が重要であることが示された。

岐阜大学の志賀元紀氏からは、ガラスの構造秩序の記述に関する研究成果が紹介された。ガラスの構造を記述する指標として、空隙、リング、多面体などが提唱されているが、志賀氏は特にリングに着目し、リングの形状やリング周辺の原子配置をデータ科学の立場から評価する手法を新たに開発した。講演では放射光を中心とする実験データを再現する高密度シリカガラスの大規模 3 次元構造モデルに対してこの手法を適用した結果が紹介され、高密度シリカガラスのネットワーク構造の中に、これまでの解析手法では見出すことができなかった絡み合ったリングという新しい構造が存在することが示された。

最後に、共同企画者の正井博和氏より閉会の挨拶があった。その中で、ガラスの研究において放射光施設における実験データを含めた、精密な実験データの取得と、そのデータを用いた理論計算や数学的解析による融合的研究の重要性が言及され、そのような取り組みが、今後のガラス研究の更なる発展につながることを指摘された。



## 企画講演 7 『動き出した次世代 X 線画像検出器 CITIUS』

今井康彦 (JASRI), 初井宇記 (理研)

### 企画趣旨

CITIUS は計数型検出器の計数限界を大幅に超える600 Mcps/pixel を実現するとともに、17.4 kframe/s の高速性をもつ次世代の X 線画像検出器である。2021年 7月に初めて XPCS 実験が行われ、SPring-8/SACLA, 東北放射光での利用に向けた準備が進められている。本企画講演は、CITIUS の開発・利用の現状について報告するとともに、今後の課題と展望について議論をおこなうことを目的として企画された。

参加人数 約200名

### 講演構成

- 趣旨説明 今井康彦 (JASRI)
- 高速・積分型検出器 CITIUS の開発  
初井宇記 (理研)
- 積分型と計数型の検出器で測定した回折強度の違い—  
単結晶構造解析を例にとって 今井康彦 (JASRI)
- BL29XU に導入された CITIUS 検出器のデータ収集  
システム 平木俊幸 (理研)
- CITIUS による XPCS 実験の現状 星野大樹 (理研)
- SWAXS ビームラインにおける CITIUS 利用に向け  
て 関口博史 (JASRI)
- 総合討論

### 講演概要

はじめに初井から CITIUS の性能の概要、開発の現状、SPring-8/SACLA での整備計画の概要についての発表があった。CITIUS は、積分型画素&高フレームレートという新しい方式の検出器で、超高ダイナミックレンジ・極低系統誤差・分光撮像・高空間分解能・単一光子検出といった機能の実現が期待されている。センサーモジュールの目標性能を表 1 に示す。これらの目標性能は全て達成され、センサーモジュールの量産準備は完了したと報告された。

単一光子検出能力に関しては、宇宙線が作る飛跡パターンの解析によって計数型検出器を超える低ノイズ化が可能であることが示された。開発中の最大構成システムは20.2 Mpixel をもっており、SACLA および SPring-8 のシリアル結晶構造解析への導入に向けた準備が進められている。現在個別アプリケーション毎に共同研究を行い、ソフトウェアや後述する平木の講演で紹介されたデータ収集システムのカスタマイズを実施しているとのことであった。共同研究には海外施設や民間企業が含まれるとのことで今後の利用の広がりが期待される。

今井からは CITIUS と現在広く利用されている計数型検出器との違いをより具体的に議論するため、単結晶構造解析の on-the-fly 測定を例にとりて計数型検出器の数え落としの影響と、その補正、補正の限界が定量的に示された。試料によっては必要な精度のデータを得るために、アッテネータを必要としているのが現状である。したがって、大量の試料を測定したいというユーザーのニーズに応じて、よりハイスループットを目指すには、検出器のアップグレードが欠かせない。原理的に数え落としがなくダイナミックレンジの広い CITIUS を用いると、次期光源においてもアッテネータを必要とせず、ハイスループット化が実現できると期待されている。CITIUS で標準試料のルビーの回折を測定した結果も示された。

平木氏 (理研) からは、CITIUS 検出器のデータ収集システムについての発表があった。積分型画素&高フレームレートの CITIUS では大量のデータから有用な情報 (分光撮像等) を引き出すことで従来にない新しい機能・性能が利用できるようになる。このためデータ収集システムが極めて重要になっている。データ生成レートは最小の280 kpixel で19 GB/s, 最大構成の20.2 Mpixel で1.4 TB/s (24時間の連続測定で120 PB) にも達するため、このようなデータを効率良く収集・保存するシステムの開発が進められている。開発中のデータ収集システムでは、フレーム

表 1 CITIUS 検出器の性能仕様

Parameters		Value		Unit
		SR variant	XFEL variant	
Sensor Module	Thickness	650 (Silicon)		μm
	Pixel Size	72.6		μm
	Pixel Number	0.28		Mpixel/sensor
	Noise	0.027		phs.@8 keV (60 e <sup>-</sup> )
	Peak Signal	3,600	17,000	photons/frame @ 6 keV
	Frame Rate	17.4	5	kHz
	Saturation Count Rate	30 (standard) 600 (extended)	N.A.	Mcps/pixel @ 12 keV
Largest System	Pixel Number	20.2		Mpixel
	Image Area	325×363		mm <sup>2</sup>

選別 (VETO 機能)・積算および平木らが提案している Statistically-Lossless Compression (統計情報を失わない圧縮法)によって、最大構成の20.2 Mpixel に対して最終的なデータレートを10 GB/s まで下げることを目指している。計算コスト削減のために理研が開発した演算加速機能をもつ FPGA カードと CPU を組み合わせたシステムとなっている。最大構成20.2 Mpixel 検出器のデータ収集システムの9分の1のスケールをもつプロトタイプデータ収集システムが既に BL29XUL で稼働しており、840 k および2.2 Mpixel の検出器と接続して利用実験が開始されていることが紹介された。これらの研究開発は富岳の計算科学研究者らと連携して推進していることも紹介された。

星野氏 (理研) からは、コヒーレント X 線散乱を利用したダイナミクス測定手法である XPCS (X 線光子相関分光法, X-ray photon correlation spectroscopy) の現状と次期光源に向けた展望についての発表があった。XPCS は、試料の平均的なダイナミクスだけでなく、動的不均一性といったダイナミクスの揺らぎを、実時間スケールで定量化することができる。評価可能な時間スケールは、検出時間分解能と総測定時間に依存するため、コヒーレント X 線の強度と検出器のフレームレートが肝となる。次期光源への期待と共に、BL29XU で CITIUS を使って測定した液体中に分散させたシリカ粒子のブラウン運動や液晶コロイドのダイナミクスの結果が紹介された。

関口氏 (JASRI) からは、小角 X 線散乱法 (Small-Angle X-ray Scattering: SAXS) と広角 X 線散乱法 (Wide-angle X-ray Scattering: WAXS) の同時計測 (SWAXS) への CITIUS 導入に向けた検討状況と研究展開についての発表があった。広角用 CITIUS-WAXS 2.8M と小角用 CITIUS-SAXS 2.2M の概要設計が既に完了しており、2022年度に詳細設計と製作が予定されている。CITIUS の高フレームレートと広いダイナミックレンジという特徴によって、一過性の高速現象の観測や複合材料などの界面情報の取得が可能になると期待されている。

最後に10分の総合討論の枠が設けられ、完全オンラインの形式ではあったが質問もあり議論が行われた。参加人数は約200名であった。今回は CITIUS の利用が始まったばかりということから、講演者が SPring-8 スタッフのみに限られていたが、今後は国内外での利用が進むと期待される。

## 企画講演 8 『赤外自由電子レーザーによる物質研究の現状と未来展望』

川崎平康 (高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設)

### 企画趣旨

分子振動励起法とは、化学結合の振動モードに共鳴する波長の強い光エネルギーを化合物に与えることにより分子構造を励起する方法である。波長可変、高輝度パルスの特長を併せ持つ赤外自由電子レーザー (IR-FEL) によって

顕著に引き起こされ、照射対象となる物質は固体、液体、気体を問わない。本企画では様々な分野の研究者に IR-FEL を用いた研究成果について紹介して頂き、IR-FEL 利用研究の現状と今後の利用展開について議論する場とした。

企画参加人数 83名

### 講演構成

1. 趣旨説明 川崎平康 (高エネルギー加速器研究機構)
2. 赤外自由電子レーザーの分光学・分子科学への応用  
築山光一 (東京理科大学)
3. 中赤外自由電子レーザー微細構造形成過程のその場観察  
橋田昌樹 (京都大学)
4. 遠赤外・テラヘルツ領域 FEL を用いた物質科学  
入澤明典 (大阪大学)

休憩

5. 自由電子レーザーの歯科分野応用への現状  
河野哲朗 (日本大学)
6. 赤外自由電子レーザーによるアミロイド線維破壊の分子動力学シミュレーション  
奥村久士 (分子科学研究所)
7. 生体物質研究において赤外自由電子レーザーを如何にして用いるか?  
川崎平康 (高エネルギー加速器研究機構)

### 講演概要

はじめに企画提案者の川崎が趣旨説明を行った。2021年5月発行の放射光学会誌特集号「赤外自由電子レーザーの現状、利用研究と展望」に示されたように放射光科学に関わる多くの研究者に赤外自由電子レーザーについて周知して頂くことが本企画の一つの目的であることを述べた。また東京理科大学から KEK に加速器を移設し赤外自由電子レーザー発振施設を新たに立ち上げる計画が進行中であり、本企画講演はその立ち上げに向けたユーザーミーティングとしての位置づけでもあることを述べた。

続いて、前半最初の講演者として東京理科大学の築山光一氏が「赤外自由電子レーザーの分光学・分子科学への応用」と題して講演された。先端出力の極めて高い自由電子レーザーによって顕著に誘導される赤外多光子励起 (IR-MPE: Infra-Red Multi-Photon Excitation) についてその物理化学的原理と IR-MPE を利用した気相分子の励起反応過程の分光学的解析への応用研究を中心に講演された。また物理化学分野ではオランダの FELIX 施設が赤外自由電子レーザーの利用研究のトップを走っていることも紹介された。さらに東京理科大学において約20年間稼働しビーム供給を続けてきた FEL-TUS が2020年度をもってシャットダウンしたことを述べられた。惜しまれる声も聞かれるが、趣旨説明で述べたように将来 KEK で再稼働することを期待したい。

次に、京都大学 (現東海大学) の橋田昌樹氏が、「中赤外自由電子レーザー微細構造形成過程のその場観察」と題

して講演された。固体材料に短パルスレーザーを照射すると試料表面にレーザー波長よりも短い周期の微細構造が形成する。この現象はLIPSSと呼ばれ、その形成メカニズムについては不明な点が多いが、橋田氏はレーザービームの照射条件（波長、パルス幅、偏光、フルエンス等）と周期構造及び材料物性との関係性を網羅的に調べ、さらにX線レーザー等先端量子ビームによるその場観測の手法を用いて微細機構形成のメカニズムを解明された。講演ではシリコンが主であったが、将来的に他の金属やカーボン等の材料についても詳細な微細構造解析が進めば新規材料の創製へと発展が期待される。

前半最後の講演者として、大阪大学の入澤明典氏が「遠赤外・テラヘルツ領域FELを用いた物質科学」と題して講演された。遠赤外光・テラヘルツ波はちょうど光と電波の境界領域に位置し、分光などのプローブ光としての利用からアブレーションなどポンプ光としての利用まで様々な利用用途がある。入澤氏は、プローブ光としては単色性と集光特性を生かした顕微分光や分光イメージングについて、ポンプ光としては半導体の非線形応答や有機物質の構造制御について最新の研究成果を総合的に示された。

休憩5分間を挟み、後半3名の講演が行われた。

日本大学の河野哲朗氏は、「自由電子レーザーの歯科分野応用への現状」と題して歯科分野における赤外自由電子レーザーの利用研究について講演された。歯科領域における従来のレーザー光は硬・軟組織の切削や凝固などの外科的用途の他に、う蝕の診断や創傷治癒促進などにも広く使用されている。しかし特定の波長しか出力できず、その適応には制限がある。河野氏は自由電子レーザーの波長可変性に着目し、近赤外光によるエナメル質への温和なアブレーション法や中赤外自由電子レーザーによる口腔内細菌の死滅方法を見出すなど、歯科領域への新規応用の可能性を示された。特に菌体を死に至らしめる方法は昨今のウイルス禍を制御する方法としても利用展開が期待でき、赤外自由電子レーザーの医療応用として興味深い内容であった。

分子科学研究所の奥村久士氏は、「赤外自由電子レーザー

によるアミロイド線維破壊の分子動力学シミュレーション」と題して講演された。アルツハイマー病はA $\beta$ ペプチドの凝集体であるアミロイド線維が原因で発症する。川崎らは赤外自由電子レーザーを用いてA $\beta$ のアミロイド線維を破壊するという実験結果を示したが、奥村氏はこの実験結果を証明するため非平衡分子動力学シミュレーションを行った。アミロイド線維中のC=OとN-Hが形成する分子間水素結合はレーザーパルスが照射される毎に切断され、その後自然に再形成される。しかしC=OとN-Hの間に水分子が入り込むと水素結合の再形成が阻害され、分子間 $\beta$ シートの全ての水素結合が切断されることが明らかになった。さらに、超音波でアミロイド線維を破壊した場合のシミュレーション結果と比較すると、赤外自由電子レーザーで破壊した方が $\alpha$ ヘリックス構造が多く形成されることも示された。この理由として $\alpha$ ヘリックスの共鳴周波数が分子間 $\beta$ シートのそれと異なるからであることが明らかになった。今後アミロイドーシス疾患への治療技術の開発に弾みがかかることが期待される。

最後に、川崎が「生体物質研究において赤外自由電子レーザーを如何にして用いるか?」と題して講演した。赤外からテラヘルツ領域の自由電子レーザーの特長は、化合物の振動モードに対し波長選択的な振動励起エネルギーを与えることによって化学結合の解離や組み換えを引き起こす点にあり、築山氏の講演に示されたように理論自体は既に確立されている。一方、その応用範囲は幅広く、演者は構造と機能の全く異なる様々な生体関連物質に対する照射効果について紹介した。これにより医療分野、グリーンテクノロジー、バイオマテリアル分野等における赤外自由電子レーザーの利用の可能性を示した。講演タイトルの答えとしては、まさに医療・産業に応用するための有効活用法を見出すことであり、その研究成果が大電力を消費する加速器の社会貢献につながるものと信じている。赤外自由電子レーザーの利用研究が今後益々発展することを願ってやまない。