

放射光学会 第1回サイエンス将来計画特別委員会議事録要旨

日時：6月12日（土）14：00～17：00

場所：東大工学部5号館341号室（談話室）

出席者（敬称略）：（委員長）水木純一郎、（委員）腰原伸也、木村昭夫、中迫雅由、西島和三、中川敦史、佐藤 衛、矢橋牧名、初井宇記、（委員会庶務）足立伸一、（会長）尾嶋正治、（学会事務局）佐藤亜己奈

欠席者（敬称略）：（委員）唯美津木、有馬孝尚

1. 以下の順で議論を始めた。

- （1）会長挨拶（尾嶋）
- （2）特別委員会のミッションと進め方について（水木）
- （3）各委員によるプレゼン（1人5分程度）
- （4）今後の進め方について（水木）

以下、それぞれの要点を纏める。

（1）会長から

- 放射光科学のビジョン、ロードマップについて、特に今後20年の放射光サイエンスの方向性を議論し、最終的に提言を取りまとめていただきたい。
- 放射光将来光源計画については、雨宮前会長を主査とするワーキンググループが立ち上がり、各施設の施設長クラスをWGメンバーとして、オールジャパンとしての将来光源計画の議論を進めているところである。本サイエンス委員会とは並行して将来光源の検討が進む予定である。来年1月の放射光学会年会・合同シンポジウムで両委員会が中間報告を行い、来年秋の放射光学会誌に最終報告書を掲載、という日程を予定している。

（2）特別委員会の進め方

- 別のWGで将来光源の議論が並行して行われるが、それとは独立に利用の立場から今後どのような分野が重要であり、どのような光源が必要かという観点でご発表いただきたい。
- 参考資料として、過去に放射光学会として取りまとめた「次世代放射光源に関する考え方」「先端的リング型光源計画に関する報告書」と、米国DOEが取りまとめたBES Workshop and Technical Reportsを挙げた。これらの報告書の内容に引きずられる必要はないが、取りまとめの際に参考にいただきたい。
- 最終案を取りまとめてゆく方向性について、初めに私案として提案しておく。最終提言では、単に将来可能となるサイエンスを羅列するのではなく、社会的なニーズを踏まえ出口を示したうえで、段階的に個々のニーズ・出口をブレークダウンし、そのために

必要不可欠な科学と技術を提示し、そのためのツールとして放射光がどのように役立つのかを明確に示すという論理構成が必要である。

(3) それぞれの委員からの提言のまとめ

生命科学分野：

- ミクロンオーダーの非晶質試料をオングストロームオーダーの空間分解能で解析することが最終的な目標である。
- 放射光教育に対する危機感を抱いている。放射光のユーザーは爆発的に増えたが、一方で放射光発生原理を1から講義できる人材が、ほとんどいないのではないか。構造解析や放射光の基礎についての教育が欠落しているようで、放射光学会としての基礎教育を重視し、次の世代を育ててゆくべきである。
- 結晶にならないものの構造解析、10フェムト秒に届く超高速現象の測定などが対象になるだろう。
- 現在の蛋白質結晶学は、格子定数の大きな結晶、ミクロンオーダーサイズの結晶、異常分散の利用、超高分解能測定、時間分解測定など様々な方向へ広がりを見せている。今後の蛋白質結晶学は、より複雑な生体超分子複合体へ、より超高分解能へ、より小さな結晶でより精度よく、より迅速にといった方向性が推進されるであろう。
- 超高分解能測定では、水素位置、構造のゆらぎ（多形）、水和水、結合電子の観測といった方向の検討が進んでいる。
- XFELが生命科学に与えるインパクトは多大であり、困難を伴うことは承知で、原子分解能での1分子構造解析をぜひ押し進めていただきたい。
- 試料に対する放射線損傷の問題の解決が重要である。第3世代放射光が出現した際には、低温冷却技術が普及することによって問題を回避することが可能になった。XFELを使った原子分解能での1分子構造解析においても、同様な技術的なブレークスルーが不可欠である。
- 結晶構造解析だけではなく、溶液散乱（小角散乱）や計算科学などの他の手法と組み合わせることによって、複雑な蛋白質間相互作用を動的に（Q-t- ω 空間で）解析することが重要である。

物質科学分野：

- 高機能性物質の開発は、物質科学分野の世界的なトレンドとなっているが、それがいつまでも人海戦術、試行錯誤的なものであってはならない。構造と機能相関の考え方から放射光X線が重要であることは言うまでもない。各種測定手法の時分割測定への拡張が必要不可欠で、フェムト秒オーダーの時間分解構造解析が必要となる。
- 急速に進展しつつあるレーザー科学や電子線回折分野はXFELのコミュニティーと

敵対するものではなく、お互いに相補的な協力関係を早急に築くことが重要である。そのため、日本国内で、放射光分野、レーザー科学分野、電子線分野などと大学が提携し、放射光 XFEL 関連分野における次世代人材育成のシステムの構築を急ぐべきである。

●角度分解光電子分光で 3 次元バンド構造を明らかにし、物質の電子状態を明らかにしてきた。さらに電子状態と素励起（フォノン、マグノンなど）との相互作用の研究が進んでいる。これらに関しては、エネルギー分解能:0.3meV、運動量分解能:0.001Å⁻¹が可能となる光源、検出器、分光器などの開発が必要となる。

●触媒科学の発展につながる時間分解・空間分解 XAFS の実現が将来的な課題である。触媒反応における素過程はブラックボックスであることがほとんどであり、新しい触媒開発のためには、その解明が必要とされている。

現状の時間分解測定では、時間分解能 10ms、空間分解能 1μm 程度が実現しているが、将来的には X 線ナノビームを使用することにより、1ns、50nm の時間・空間分解能での計測を実現すべきである。バルクの構造と触媒活性点の構造は全く異なるので、時間分解能だけでなく、局所的な構造を観るための空間分解能が重要である。

産業界分野：

●創薬における蛋白質構造の重要性はこの 20 年間で大きく変化した。しかし、今後の蛋白質構造解析コンソーシアムの在り方としては、ビームラインを持たず、既存の先端的な構造生物ビームラインを利用する方向にシフトするだろう。

●今後の新薬開発の進む方向は、治療満足度の低い薬（抗アルツハイマー、認知症）の改善、解析困難な標的分子への挑戦、動的解析、蛋白質複合体相互作用、作用部位全体のイメージングといった方向性が想定される。疾患メカニズムの解明が重要なテーマとなる。新薬開発のための最先端研究施設として、放射光施設の重要性はさらに高まると予想される。特に XFEL の実現は重要である。

光基礎・基盤技術分野：

●究極の X 線光源として、回折限界かつフーリエ限界を両立する X 線光源の実現を提案し、その光源を使ったサイエンスについて提案したい。

●将来の X 線自由電子レーザーとして、シングルパス XFEL であればフーリエ限界シード光を利用した seeded-XFEL、共振器型 XFEL であればダイヤモンド背面反射により共振器を構成する XFEL が回折限界かつフーリエ限界を両立する X 線光源の候補であり、どちらも極めてチャレンジングな研究課題である。

●XFEL では、サイエンスもさることながら、関連技術開発も重要である。例えば、パルスタイミングの制御や、コヒーレンスの保持、ショット毎のビーム診断などの測

定技術について同時に開発を進めており光が利用できるようになるとますますこの分野の開発が必要となる。高繰り返し XFEL の開発、Seeded XFEL の開発も進められていく。

●制御・データ処理や検出器への投資が必須である。コミュニティーとしてこのような基盤技術者を育てる必要がある。Pilatus の成功は、CERN を中心とする素粒子検出器のネットワークがしっかりしており、放射線耐性の基礎的な研究の蓄積や、若い人材の育成など、検出器開発の土壌があったから。これを考えると、素粒子分野の研究者、産業界、大学の電子工学研究者との連携を図り、放射光分野内にはハブとなりうるグループがおかれるような人員が必要である。

(4) 今後の進め方に関する自由討論

●現在の委員の構成でカバーされていない分野として、極限環境分野、光源技術分野から委員を選び次回からの討論に参加してもらおう。

●本日の議論を委員長と委員会庶務で至急取りまとめ、委員の皆さんのご提案からどのような将来光源が求められているのかを抽出して、再度委員の皆さんにフィードバックして、次回に委員会につなげたい。

●次回の委員会は 10 月か 11 月ごろに開催する。その時には、各委員の分野での最先端の状況とそれを踏まえてその先の進むべき方向を発表してもらおう。

その他、残り時間で自由討論を行ったが委員会としての共通意見としてはまとまっていなかったのでここでは割愛する。

以上。