

放射光学会 第2回サイエンス将来計画特別委員会

日時：11月13日（土）14：00～17：30

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、（委員）腰原、木村昭夫、野尻、唯、有馬、中川、佐藤衛、初井、原田、（委員会庶務）足立、（会長）尾嶋、（学会事務局）佐藤亜己奈

欠席者（敬称略）：（委員）中迫、西島、矢橋、田中隆次

アジェンダ：

1. 会長挨拶（尾嶋）
2. 特別委員会のミッションと第2回委員会の進め方について（水木）
3. 各委員によるプレゼン（1人15分程度）
4. 今後の進め方について（水木）

1. 会長挨拶（尾嶋）

- 今期の放射光学会の活動方針として、5つの課題を掲げている。特に2番目の「新しい放射光科学の推進、将来計画を含めたビジョン・ロードマップの策定」が、この特別委員会のミッションに関わるものである。
- 放射光源のロードマップについては、雨宮前会長が座長を務めるワーキンググループでの検討が進んでいる。放射光サイエンスのロードマップは、水木委員長を中心として、この特別委員会が担当し、取りまとめを行う。
- 放射光学会のロードマップは、日本学術会議による「学術の大型施設計画・大規模研究計画—企画・推進策の在り方とマスタープラン策定について—」と深く関連している。
- 昨年10月に日本学術会議から、放射光学会に対して、放射光科学の将来計画に対する資料提出の依頼があり、光源ワーキンググループ（雨宮座長）が中心となって資料を取りまとめ、今年1月に日本学術会議に提出した。
- 学術会議での基本的な要件（評価①：研究者コミュニティの合意、計画の実施主体、共同利用体制、計画の妥当性）に関する評価の結果、43計画のうち、18計画にA評価が与えられた。放射光計画はA評価であった。ただし、「緊急性、戦略性、社会や国民の理解」の評価②については、18計画のうち8計画にA評価が与えられ、放射光計画はB評価であった。その理由として、放射光ユーザーの範囲は極めて広いので、引き続き幅広い意見集約が必要であり、産業界も含めた幅広いコミットメントを得ながら計画の実現性を高めるべきと指摘されている。
- 放射光学会としては、光源およびサイエンスについての議論を進め、2011年9月の放射光学会誌に取りまとめた最終報告を掲載する予定である。2011年1月の第24回年会・合同シンポの総会で、中間報告を行う。

- 学術会議に提出した放射光科学の将来計画は、2010年12月10日締め切りで、更新版を提出する。
- この特別委員会では、「放射光科学の将来計画」の中の、科学的な意義の部分について、内容を更新してほしい。同時に、中間報告書の取りまとめを進めてほしい。

2. 特別委員会のミッションと第2回委員会の進め方について (水木)

- 前回のメンバーから、さらに4名が新たに加わっていただいた。新メンバーは、野尻委員（東北大学）、有馬委員（東北大学）、田中隆次委員（理研）、原田委員（KEK）である。
- 第2回は、報告書の取りまとめを想定して、それぞれの分野における先端的な研究の具体的な例と、その将来像についてお話しいただきたい。物質科学、生命科学の順番でお話しいただく。

3. 各委員による提言

生命科学分野：

- タンパク質結晶学で放射光を利用するメリットは、データ収集時間の短縮、データ精度の向上、格子定数の大きな結晶のデータ収集、微小結晶からのデータ収集、異常分散効果の最適化、原子分解能のデータ収集、時間分解測定などが挙げられる。
- Protein Data Bankの登録状況から、登録数の増加とともに、対象となるタンパク質のサイズが大きくなり、膜タンパク質などより解析困難なタンパク質が研究対象となっていることが分かる。
- より複雑な分子という意味では、核膜孔のような生体超分子複合体が今後タンパク質結晶学の対象になるのではないか。また関連して、核膜輸送で重要な Importin、Exportin のようなタンパク質は、生体内で複合体を形成したり、解離したりというプロセスを繰り返す。このような一過性のタンパク質複合体の構造解析も今後重要となるだろう。
- 今後のタンパク質結晶学の方向性としては、より不安定で、より複雑な分子の構造を、より小さな結晶から、より精度よく、より迅速に測定するという方向に進むだろう。その際に、放射線損傷が大きな問題となる。
- これまで知見がなかったナノワールドの原子レベルでの解析をするために、非結晶粒子の構造、例えば細胞1個の3次元構造を0.1 nmの分解能で解析することが期待される。
- 一方で、超高分解能構造解析の方向では、水素の可視化だけではなく、結合電子や孤立電子対など価電子の可視化がターゲットになりつつある。
- XFEL を利用した生命科学のサイエンスとして、1分子構造解析、天然変性タンパク質のダイナミクス研究、タンパク質溶液（1,000分子程度）のナノレベル構造解析、ナノ結晶の結晶構造解析が挙げられる。近年、天然状態で特定の構造を取らず揺らいでいるタンパク質の研究が大きな注目を集めている。天然変性タンパク質は、通常特定の構造を取らない

が、ターゲットとなるタンパク質との相互作用により、フォールドした構造を取るという性質を持つ。このようなタンパク質は、結晶にはなりにくく、結晶になったとしても生理的な条件での構造を反映しているとはいえない。言い換えれば、揺らいでいる構造自体に意味がある。

●複雑分子系の運動を理解するために蛋白質結晶の散漫散乱の解析、計算科学、中性子非弾性散乱との連携が必要となる。

物質科学分野：

●固体系について、 ω - t 空間、もしくは k - r 空間でどのような測定を行うかというのが話の主題である。

●分光学的手法の将来像はエネルギー分解能の向上、運動量分解能の向上、電子スピンの分解、空間分解、時間分解という方向に向うだろう。

●光電子分光の高エネルギー分解能化、高角度分解能化の先には、電子と各種素励起との相互作用の精密化がある。

●高難度・高精度の測定対象、例えば d 電子の軌道秩序、 f 電子の多極子成分が関わる系の電子密度分布の解析は現在研究が今後ますます進むであろう。全電子密度分布から内殻電子を取り除いた価電子密度分布の研究は、理論計算や分光学と絡んでチャレンジングな方向性である。電子スピン密度分布は、中性子回折が得意としてきた分野だが、X線回折を用いた研究も急速に進展している。

●超構造、非周期系、ドメイン分布が本質的に重要な系の解析や、時間分解の測定においても結晶の中の非周期性が重要になるはずである。すなわち「不均一系」の物理が解明されなければならない。

●不均一系の物理として、複数の秩序相の競合（高温超伝導相とストライプ構造、軌道秩序相と金属相、リラクサー強誘電体、形状記憶合金など）、超構造、フェロイクスに伴う分域構造などが注目される。これらを対象としたX線のコヒーレントを利用したイメージング、円偏光を利用した磁気カイラルドメインのイメージングなどが興味持たれる。

●これらは空間不均一の情報を高速に測定するので、検出器開発も非常に重要である。

●不均一系の他の例として触媒があり、単一の手法で表面の構造を捉える事が出来ないために、様々な手法を組み合わせる必要がある。

●触媒の機能活性解析のためには、空間分布、それらの時間変化を \sim nm, \sim nsecで測定することが必要となる。これによりキネティクス ($\sim\mu$ sec)、反応の素過程 (\sim nsec) の議論が可能となる。

●様々な反応が複合的に進行する固体触媒のサイエンスには、不均一である系を測定することが本質的に重要である。100 ナノ \sim 1 ミクロンサイズの中の構造を見たいので、できれば 20nm よりもさらに高い分解能が望ましい。

●XAFS 測定にはエネルギー可変性として 1keV 程度は必要である。光源側としては、線幅

が狭くなる方向ではあるが、何らかの方法で光源のエネルギー可変性（白色性）を確保する必要がある。

- トモグラフィー・イメージングと XAFS の組み合わせが重要となる。
- 深さ方向の分解能は、数 nm である。実際の触媒膜等の測定では、試料表面の凸凹をどう扱うかが、現実的な問題である。
- ナノ秒からフェムト秒にかけての時間分解光電子顕微鏡の開発が期待され、一つのドメインを選択した電子状態の時間発展に関する研究が期待される。
- 静的な物質構造に基づく、これまでの物性研究のパラダイムを超えるものとして、動的な構造変化と物質機能との関わりを探る物性研究が世界的な潮流となりつつある。構造研究の手法としては、X線を用いる測定法が王道であり、放射光のパルスX線を用いた～100フェムト秒の動的構造解析が可能となれば物質科学に関する理解が大きく発展する。
- 研究室サイズで可能なレーザー高次高調波装置と、大規模な放射光施設をどのようにコラボレーションとして結びつけるかが重要であろう。放射光施設のメリットは、軟X線から硬X線のエネルギー領域で高強度であり、エネルギー可変性を持つことである。単に時間分解能でレーザーと勝負するのではなく、放射光の高輝度性を活かした高エネルギー分解能測定、ナノビーム測定が有望な方向性である。
- また、電子線回折も急速に進展している。100フェムト秒程度の電子線パルスが利用できる。有機電荷移動錯体で時間分解電子線回折データが測定できているので、今後は電子線との差別化も考慮して利用を考えていくべきである。
- 放射光を利用した極端条件下（強磁場、高圧力）での物質研究が国内、国外で進められており、局所・表面状態の検出、実時間・コヒーレンス測定、多次元測定、マルチスケール分光などが期待される。
- 多次元測定を行うために、エネルギーが時間的に変化する光源があるとよい。

光基礎・基盤技術分野：

- 放射光学会の目指すべき究極の放射光源は、時間・空間コヒーレンスを持つ、波長幅（アト秒）程度の時間幅のX線光源である。その利用研究を提案・実行することが放射光学会の使命である。
- SASE-XFEL や KEK で提案している ERL はX線領域で横方向の波面が揃った回折限界光となる。さらに将来的には進行方向の位相が揃った真のX線レーザーの実現が期待される。また、X線の波長幅であるアト秒時間幅のパルスX線光源の実現も同時に期待される。
- 時間・空間コヒーレンスを持つX線レーザーの利用研究としては、非線形光学的な応用が挙げられる。さらに、理論の立場からアト秒～フェムト秒オーダーの遅延時間を持つ、時間コヒーレントな2つのX線パルスを利用したX線光子相関分光が提案されている。この手法では、1つ目のX線パルスで特定の電子を非平衡状態に励起し、2つ目のX線パルスで別の電子を励起・検出することにより、2種類の電子間の相互作用の時間発展を測定する

ものである。電子密度分布の時間平均の情報を超えて、「波動関数の直接観測と制御」という新しい方向性が想像される。

- X線レーザーで時間コヒーレンスを実現する努力は多方面で精力的に進められている。SASE-XFELでは、シード光の注入が提案されている。また、ERLを基盤とする共振器型XFELの提案もあり、これらの方向性を放射光コミュニティーとして引き続き追求すべきである。
- 制御・データ処理や検出器への投資が必要である。欧米では素粒子科学の検出器開発と、放射光科学の検出器開発がうまく結びついている。
- X線による非破壊計測から、XFEL利用では今後は破壊計測、物質創造へとつながってゆくのではないか。
- XFELは破壊する能力が圧倒的に高いので、多価イオンの生成など、物質創造につながる可能性を秘めている。多価イオンを利用した新しい加工技術の開発も可能かもしれない。
- XFELでは、空間コヒーレンス、短パルス性という質的な違いが強調されているが、これは、これまでの光源が求めてきた方向性とは異なる方向性である。これまでの光源加速器の歴史で光子のフラックス、実験時間が順調に増加してきたことを考えると、今後も次世代光源にこの方向性を求めなくていいのだろうか。
- ①ユーザー全体が現在より10倍の実験時間を要求する、②より低S/N比の試料を対象とする、③ユーザー数を10倍に増やすといった方向性も重要であり、これらの点からERLやUltra Storage Ring光源(USRLS)が期待される。
- アンジュレータの基本波の拡張のための短周期化を目指した狭ギャップ化、磁場増強などの技術開発が必要である。
- 将来の円形ビーム開口に最適化した形状を持つ磁石列を検討する必要がある。
- XFELでは波長に関してできる限りの汎用化、また蓄積リング型でのビームラインでは光源は波長範囲や偏光特性は特化すべきではないだろうか。

その他共通な項目：

- 教育の充実、若手育成が今後の発展において重要である。
- 人事の流動化を進める方策を考えなければならない。

今後の進め方：

これまで2回の議論に基づいて中間報告書を取りまとめるので、それに対するコメントをいただきたい。また、放射光学会年会で中間報告を行い、その後で公開シンポジウムを開催する予定である。