

毎年2月に発行するPFニュースの第4号では、物構研副所長(つくば担当)が「物構研つくばキャンパスだより」を執筆することになっています。つくばキャンパスでは、放射光実験施設の他に低速陽電子実験施設において共同利用を実施しているほか、構造生物学研究センターが運営するクライオ電子顕微鏡や、量子ビーム連携研究センターが運営するX線回折計などのオフライン研究機器が整備されています。昨年完成したクライオ電顕実験棟には、2022年12月に300 kVクライオ電子顕微鏡が導入され、すでに稼働している200 kVクライオ電子顕微鏡とあわせて、利用実験を開始すべく準備が進んでいます。低速陽電子実験施設では、共同利用実験の主力のひとつとして稼働している全反射高速陽電子回折(TRHEPD)装置に加えて、低速電子線回折(LEED)の陽電子版である低速陽電子回折(LEPD)装置の整備が順調に進んでいます。研究設備以外に目を向けると、今年度から利用を開始した共同利用宿舎5号棟は、結露のために1、2階の利用を一時停止していましたが、10月に利用を再開しました。食堂、喫茶室、売店も引き続き営業されていますので、共同利用実験等で来所される際にはぜひご利用ください。

年末年始は例年、文科省からの運営費交付金予算の内示の時期です。PFの運営費は、今年度より大規模学術フロンティア促進事業から外れて基幹経費化されていますので、従来のような年度ごとの大きな増減はありません(機構内での予算配分は、予算ヒアリングを経て決定されます)。設備の整備については別途要求しておりますが、こちらは現時点では大きな動きはありません。一方で、教育研究組織改革として物構研から要求していた「物質構造科学における新領域開拓機能の強化」について、来年度から教員2名が新規に認められました。詳細については今後詰めていきますが、物構研所長直属の組織として「新領域開拓室」を新設し、放射光・中性子・ミュオン・低速陽電子・クライオ電顕を有機的に連携・統括し、全国の量子ビーム施設と連携して分野を横断したマルチプローブ研究の推進と人材育成(特に施設系の人材)を行うものです。具体的な柱(部門)としては、量子ビーム施設連携、AI・DX(2023年度)、イメージング・顕微および非破壊分析(2024年度)を予定しています。このほかの運営費交付金予算として、ミッション実現戦略分があります。こちらは第4期中期計画期間(2022-2027年度)にわたって、KEK全体の合計としては同額が措置され、KEK内で配分されるものです。物構研が直接かわるものとして、「量子ビーム連携研究によるグリーンイノベーションの推進」と「文理融合研究:量子ビーム科学と人文科学の「知」の融合」の二つのプロジェクトが実施されており、前者の予算によって量子ビーム連携研究センターと低速陽電子実験施設の運営費が賄われています。上述した新領域開拓室の新設は、これらのプロジェクトにとっても大きな後押しになりますので、今後

ますます発展させていきたいと考えています。

最後にKEK技術賞についてご報告します。KEKでは技術職員を対象に、業務上特に有益な発明もしくは開発または改良をした個人またはグループに対して、KEK技術賞の表彰を行っています。今年度は、放射光実験施設の田中宏和さんが「中規模放射光施設での時間分解実験に向けた同期型X線チョッパーの開発と実用化」という内容で受賞されました。これは、PFのハイブリッドモードにおいて、孤立バンチ部分だけを切り出して時間分解実験に利用することを可能にしたもので、これによって、蓄積リングの平均電流値を保ったままで、シングルバンチを用いた時間分解実験とマルチバンチを用いた通常の実験の両立を実現しました。また、加速器第六研究系の内山隆司さんが「エネルギー回収型線形加速器(ERL)のための高輝度電子銃および入射部の極高真空システムの構築」という内容で受賞されました。高輝度電子銃はPFの将来計画の有力候補として検討を進めているハイブリッドリングにおいて、その性能の鍵を握る重要な要素の一つです。ERLとハイブリッドリングでは電子銃の仕様も異なりますが、極高真空システムの開発には大きな意味があります。もう一件の受賞は素核研の田中伸晃さんで、「ハドロンホール方式による研究施設の湿度環境改善」という内容です。ハドロンホールはJ-PARCの施設ですが、そこで開発した湿度を低く保つ手法を、つくばにある陽子シンクロトロン施設などに応用したものです。通常、大型施設の湿度を制御するには大規模な空調設備が必要になりますが、この手法では、外気の流入を適切に管理することで、家庭用の除湿器数台程度で湿度を低く保つことを可能にしています。したがってこの技術は、PFや将来の量子ビーム施設における大幅な省エネルギー化につながる可能性があります。このように、KEKにおける共同利用実験は、技術職員の高い技術力によって支えられていることを改めて強調したいと思います。

最後に大変残念なお知らせですが、放射光科学第一研究系講師の岩野薫さんが、病气加療中のところ1月27日にご逝去されました。岩野さんは、1993年に助手としてKEKに着任後、研究機関講師を経て2022年8月に講師に昇任し、長年にわたって物構研では数少ない物性理論の専門家として、量子ビーム利用実験に携わる研究者と多くの共同研究を行ってきました。最近、固体の光励起後のダイナミクスを中心とした理論研究に精力的に取り組むとともに、強磁性体の非一様ドメイン構造に関する研究も行っていました。岩野さんのこれまでの貢献に感謝するとともに、心よりご冥福をお祈りいたします。

入射器の現状

加速器第五研究系研究主幹 惠郷博文
(2023 年 1 月 5 日付け)

運転状況

PF リングに対して 10 月 4 日よりビーム入射調整を始め、10 月 7 日からユーザー運転を開始した。PF-AR は 10 月 12 日より 5 GeV のエネルギー運転調整を始め、10 月 17 日からユーザー運転を行った。節電のため、25 Hz 運転（定格 50 Hz）であったが、ユーザー運転中の PF リングおよび PF-AR への入射は各 1 Hz であるため、運転モードをシェアして RF 電子銃の高電荷ビーム出力試験(SuperKEKB HER 用)や陽電子生成の調整試験(LER 用)も並行して行なった。SuperKEKB は長期改修期間(LS1)に入り、来年の秋までビーム入射運転を行わないため、これらの試験ビームは入射器内のダンプに廃棄する。PF-AR 5 GeV トップアップ入射と PF リング同時入射のスタディを 11 月 7 日に行い、全リングに対して同時トップアップ入射が可能であることを確認した。11 月 8 日から PF-AR への 6.5 GeV 運転調整が行われ、11 月 11 日から 12 月 5 日まで 6.5 GeV のビーム入射を行なった。PF リングは 12 月 2 日よりハイブリッド入射に切り換えて 12 月 26 日まで運転し、2 日間の入射器調整後、12 月 28 日に 2022 年度第 2 期の運転を終了した。今期は光源リング主体の調整ができたため、非常に安定したビーム入射となった。しかしながら、入射器が原因となる入射中断があり（約 610 分：集計期間 10 月 4 日－12 月 15 日）、パルスマグネット制御プログラム関連のトラブルが 75% を占めた。対策として冬期保守期間以降にパルスマグネットのデータ収集や制御プログラムの改良を行う予定である。

加速電界増強ユニット

夏期保守期間にビームエネルギー増強のため、AC_44 ユニットの改造した。加速管 4 本駆動システムから加速管 2 本駆動システムとなっており、従来の 2 倍となる 80 MW 駆動によって、このユニットは約 1.4 倍の加速電圧増となる。新開発の球形空洞型パルス圧縮器(Spherical-Cavity-type Pulse Compressor: SCPC)は周波数調整後、事前試験通りに問題なく高電力運転ができた。図 1 は AC_44 ユニットの改造前と同じ定格電力で調整運転した際、従来型の AC_37 ユニットの(加速管 4 本)と比較したエネルギーゲイン測定データである。AC_44 ユニットのにおいても定格電界 20MV/m のビーム加速ができていたことを確認した。ただし、加速管下流に設置したダミーロード(高周波吸収装置)内に損傷があることが判明したため、運転電力の増強はダミーロードの改修後に行う予定である。

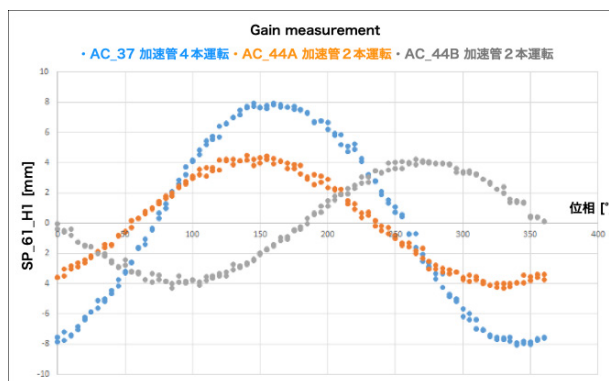


図 1 ビームエネルギーゲイン測定
縦軸：偏向電磁石下流の水平方向ビーム位置測定（位置偏差は加速エネルギー増加量に比例）

ビーム研究

RF 電子銃の高電荷ビーム出力試験(HER 用)では電子銃の陰極に照射するレーザー出力量と 2 ラインのレーザー合成の調整にて、電子銃直後で 5 nC バンチのビーム出力ができた。入射器内のビーム軌道調整を行なった結果、入射器出口で 7 GeV 3.9 nC となる設計電荷量のビーム加速に成功した(図 2)。ただし、現状では電荷量の変動が大きく、エミッタンスも要求値まで到達できておらず、今後調整を深めていく必要があるが、過去最大の電荷ビーム生成を達成できたことは大きな前進である。大電荷ビーム試験後、バンチの高電荷、高繰り返し運転によるレーザー照射用窓の汚染に関するスタディを実施した。

J-arc に設置している 8 電極 BPM (Beam Position Monitor) とスクリーンモニタとの同期測定を行い、スクリーンで得られたビーム位置・形状と 8 電極 BPM で得られたデータ解析結果との相関を調べた。この BPM で得られるビーム位置データはスクリーン位置と線型関係を持ち、また、四重極モーメントから算出したビームサイズの変化は、スクリーンモニタで得た値と同等であり、定量化が可能となれば、2 バンチ運転で非破壊のバンチ独立計測が見込める。

10 月 31 日から 11 月 6 日は SuperKEKB の電子ビーム伝送ライン(BTe)を用いたビームスタディを行なった。3 セクターから 5 セクターにかけて電子ビーム軌道にバンパを与え、加速管通過時に生じるウェイク場の影響を軽減させてエミッタンスを最善化させる試験を行なった。J-arc や BTe の第 3 アーク入口に設置した放射光モニターを使

用してビーム位置や形状、エネルギー分散とバンパ量の相関を確認し、ビーム非破壊計測によるビーム軌道安定化フィードバック制御の見通しを得た。BTeにおいても適正なバンパ軌道を作ることによってCSR（Coherent Synchrotron Radiation）によるエミッタンス増大の抑制が確認された。CSRは大きなビーム劣化を引き起こす要因となっており、今後、シミュレーションと比較してビーム品質改善手法の確立を図る。バンパ電荷量を変えてRF位相と水平方向最小エミッタンスの電荷量依存性も測定した。電荷量とともにエミッタンスは悪化していくが、RF位相が基準値よりもプラス方向でCSRの影響と思われる効果は小さく、マイナス方向で大きくなる傾向あった。また、ビームエネルギー変化によるエミッタンスへの影響も確認した。通常運転で想定される-0.12%から+0.39%の変化量において、垂直方向への影響はなく、水平方向は15%程度変化するが、CSRなどの要因によるエミッタンス増大に比べると小さかった。

このように光源加速器への安定ビーム入射を行うと共にビーム性能向上に向けた入射器改造やビーム解析調整を進めている。

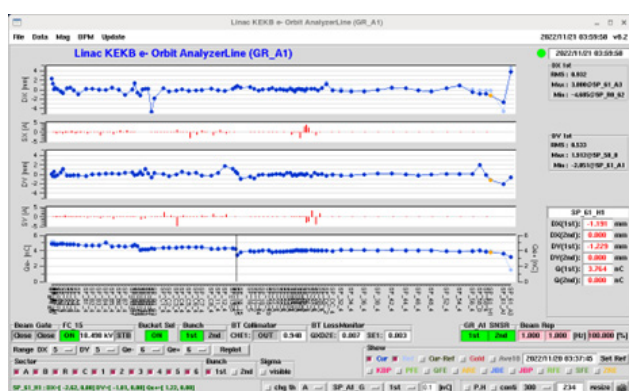


図2 RF電子銃高電荷バンパビーム出力試験（4nCビーム生成）
上：水平方向軌道、中：垂直方向軌道、下：バンパ電荷量
左端：RF電子銃出口、右側黄色点：入射器出口

光源リング運転状況

図 1 に、PF リングにおける立ち上げ日 10 月 4 日 9:00 ～運転停止日 12 月 26 日 9:00 までの蓄積電流値の推移を示す。

立ち上げ調整は、順調に行われた。リングの真空度を確認しながら、徐々に電流値を上げていき、初日に 450 mA に到達し、真空光焼きだとなった。2 日目以降の調整も順調で、予定されていたスケジュール通り、10 月 7 日 17:00 からの光軸確認後ユーザー運転が開始された。

しばらく安定な運転が実施されていたが、10 月 16 日 9:00～9:18 に軌道フィードバック用補正電磁石電源の電流値が最大電流値に近づいたため、チャンネルを閉じユーザー運転を中断して、リセット作業を実施した。

10 月 19 日 11:02 に、軌道フィードバック用補正電磁石設定値過大エラーが発生し、一時的に停止した。しかし、軌道が大きく変動している様子はなかったため、12:00 まで待ってからユーザー運転を中断して復旧作業を行った。作業は、チャンネル閉→フィードバック OFF → COD 補正

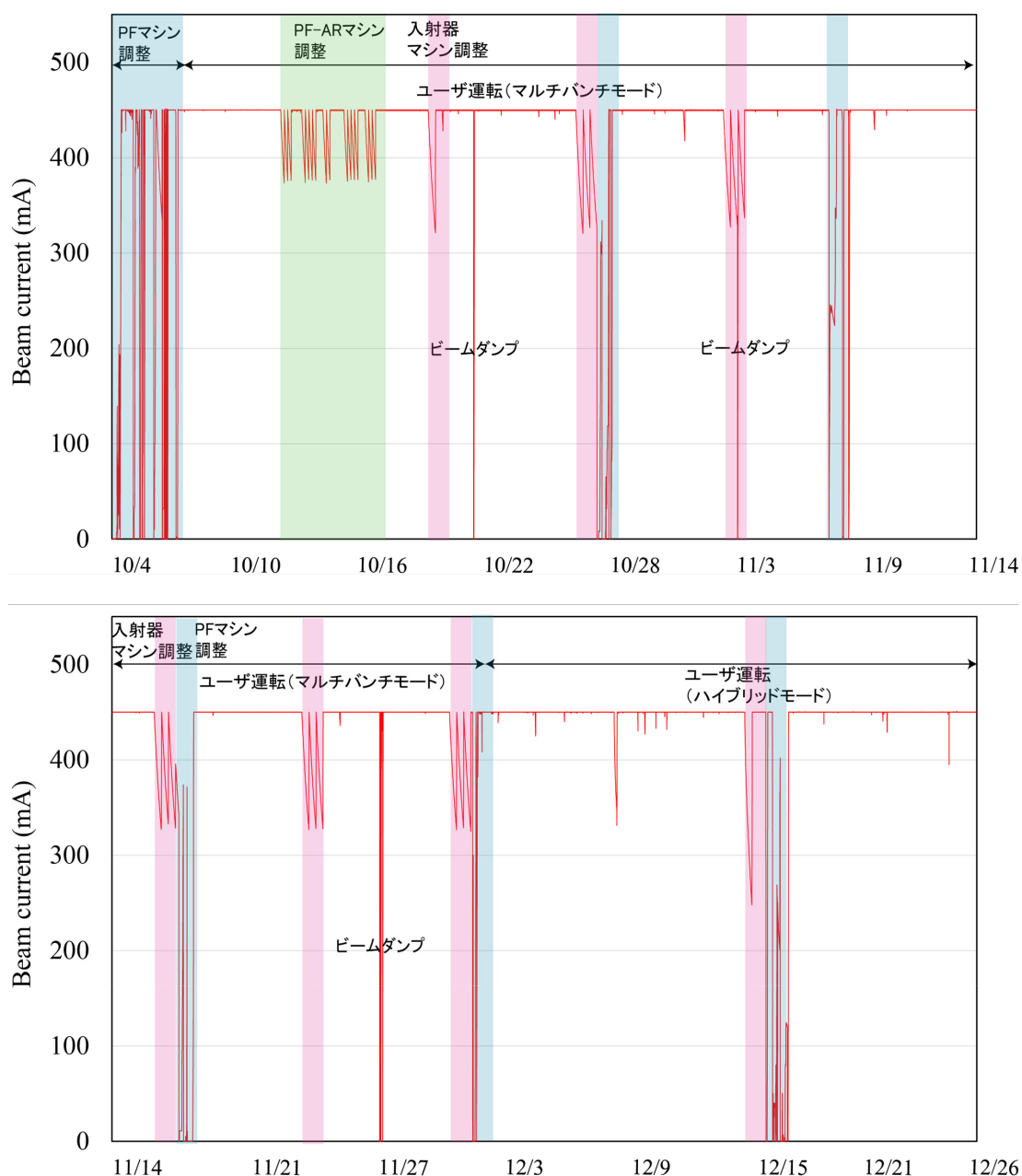


図 1 PF リングにおける運転開始日 10 月 4 日 9:00 ～運転停止日 12 月 26 日 9:00 までの積電流値の推移を示す。

→フィードバック ON という手順を踏み、問題なく復旧したことからユーザー運転を再開した。このトラブルはめったに発生しないトラブルで原因は不明だが、ビーム位置モニター (BPM) の読み値に一瞬異常な値が入ってしまったためと推測された。しばらく様子を見たが再発はしなかった。

10月20日0:46に入射路偏向電磁石電源 (BTBM) の制御に使用している CAMAC のレジスタが故障し、BTBM が突然オフとなった。トップアップモードであったため、インターロックが動作してチャンネル閉となった。原因は制御に使用している CAMAC モジュールのレジスタが故障したためであった。そこで BTBM 電源を現場で立ち上げ直して、ビーム入射を開始し、2:01 にユーザー運転を再開した。10月27日のマシン調整日に故障した CAMAC モジュールの交換作業を実施した。

10月21日1:37から30分程度、5:47から10分程度、垂直方向のビーム不安定性が発生し、垂直方向のビームサイズが通常の2~3倍になっていた。しかしながら、しばらくして自然にビーム不安定性は収まった。後日原因調査を行ったところ、U#15のギャップが4.3 mmの時に同期して、不安定性が発生していたようであるが、ギャップに同期していたのはこの時のみであった。これ以前や以後にギャップを4.3 mmにしていた時もあったが、必ずビーム不安定性が発生しているわけではないようである。現時点では原因は不明であるが、引き続き注意して観測を行った。

10月21日12:32にチャンネルダンプが発生した。トレンチにおいてBL-5のレギュレータ圧空漏れがあったが、ユーザー側からの希望もあり、昼休みに圧空の一次側を止めて対処を行おうとした。しかしながら、MBSが閉まった際にレギュレータ内に残っていた圧力が足らず、バルブが規定時間内に閉まりきらなかった。そのため、インターロックが動作してビームダンプとなってしまった。最初からBL-5だけチャンネルを閉じて作業を行っていればビームダンプを防げたトラブルであることから、今後はそのように対処することとした。

10月22日以降、1シフトに1~2回の頻度で100 μ m を超えるような比較的大きな水平方向の軌道変動が起きはじめた。未だに原因不明の変動であるが、継続して調査を行った。

入射器マシン調整日11月3日1:00のビーム電流の積み上げ入射を行っていた時に、ビームダンプが発生した。原因は、入射用キッカー電磁石3台中1台 (K3) が励磁しなかったことにより、蓄積ビームの軌道が大きくずれてしまったためと判明した。誤動作によるものと推察されるが、ビームダンプ後の再入射は特に問題がなくユーザー運転が再開された。運転停止まで再発はしなかった。

11月24日9:00に軌道フィードバック用補正電磁石電源1台が最大電流値に近づいたため、一旦チャンネルを閉じて、電流値のリセットを行った。リセット後はすぐに運転を再開した。

11月27日0:57 PF 光源棟地下機械室にて水漏れを発見

した。RF #4の集束コイル冷却水配管からの水漏れであることが判明した。チャンネルを閉じて、水漏れ対策の作業を行った。作業が終了して、入射を再開したが、水平方向のビーム不安定性が発生した。個別バンチフィードバックのパラメータを調整して水平方向の不安定性は収まったものの、バンチフィルの乱れから進行方向のビーム不安定性が発生してしまった。パラメータ調整では抑制できず、ビーム電流ゼロからの再入射を行って対処した。その後、ビーム不安定性の再発は起きていない。

12月1日にマルチバンチからハイブリッドモードへの切り替え作業を行った。今期は、シングルバンチ部の電流値を50 mA、マルチバンチ部の電流値を400 mA、合計450 mA とした。12月2日9:00から光軸確認を行って、ユーザー運転を再開した。

12月4日9:00垂直方向の軌道変動が発生した。13:50にチャンネルを閉じて軌道フィードバックのON/OFF 操作を行ったところ変動は収まった。しかし、変動の原因が特定できておらず、様子を見ることとした。

12月5日19:30に垂直方向の軌道変動に対応するため、一旦チャンネルを閉じて、故障していると推測されていた高速軌道フィードバック制御用 DAC ボードを交換した。しかし、その後も軌道変動が発生したため、他の原因であることが判明した。結果として、補正電磁石電源 PV28 の電流値がある閾値を超えると不安定になり、変動が発生することを突き止めた。PV28 近傍の補正電磁石電源 VD36 を調整することで、PV28 の電流値を抑制して対処した。12月6日からは、垂直方向の遅い軌道フィードバック (SOFB) を OFF にすることで、PV28 の電流値ドリフト自体を抑えて運転 (軌道のずれが目立ち始めたら手動で数分間 ON にする) し、その効果により運転終了まで垂直方向の軌道変動は再発しなかった。

この期間ハイブリッドモードの蓄積電流値450 mA (シングルバンチ部50 mA、マルチバンチ部400 mA) でユーザー運転を実施しているが、入射器マシン調整日やトラブルなどで430 mA を下回ると進行方向のビーム不安定性が発生する。不安定性が発生した場合は、RF に位相変調をかけて抑制するようにしているが、ビームラインによっては強度変動として観測されていると推測される。しかしながら、このビーム不安定性を完全に抑制する手段はなく、現状では RF の位相変調に頼らざるを得ない。

12月24日1:23頃、蓄積電流値が407.4 mA まで突如削れるという現象が起きた。同期して RF 空洞パワーの変動が一瞬発生していた。蓄積電流値が低下したことでビーム不安定性も発生したが、RF 位相変調のON/OFF 操作を実施して抑制した。その後も、蓄積ビームが削れる現象が2回起きた。やはり、RF 空洞パワーの変動と関係があるようにも推察されたが、時折生ずる現象で原因の特定には至らなかった。

PF リングは、12月26日9:00に予定通りユーザー運転を終了して、冬の停止期間となった。第3期の運転開始は、2月15日9:00を予定している。

図2に、PF-ARにおける立ち上げ日10月12日9:00～11月7日9:00までの蓄積電流値の推移を示す。10月12日に5 GeVで立ち上げを行った。9:00からパトロール、9:50から入射に関わる総合動作試験1項目を実施し、10:00ごろよりビーム調整を開始した。PF-ARも立ち上げ調整は順調に実施され、

10月17日9:00からの光軸確認後にユーザー運転が開始された。

10月20日8:36に、偏向電磁石B_SE02の流量インターロックが動作して、ビームダンプとなった。リングトンネル内に入域し確認したが特に異常はなかった。インターロックはリセットが効いたことから、誤動作と判断し、再立ち上げを行ってユーザー運転を再開した。

10月25日に入射効率低下のための原因調整を行ったところ、メインバンチ以外のバンチにビームが入ったためビ

ームを捨てて、再入射を実施した。

11月2日に純度が悪化したとの連絡があり、純化調整をせずに様子をみていたが、翌日には純度が回復するということがあった。今期は純度に関連するトラブルが何度か起こっている。メインバンチに対して後ろのバンチを蹴るように純化のタイミングを設定しているが、以前に比べてタイミングのふらつきが大きいことが要因と推測している。しかしながら、ふらつきの原因は不明のため様子を見ているところである。現状では純度が悪化した時にその都度純化調整を行い対応していくこととした。

11月7日9:00より6.5 GeVモードに切り替え、11月11日9:00から光軸確認を実施してユーザー運転を再開した。

11月11日9:00から、6.5 GeVユーザー運転において、測定器開発テストビームライン用内部標的を挿入して、放射光実験と共存する試用運転が開始された。12月5日

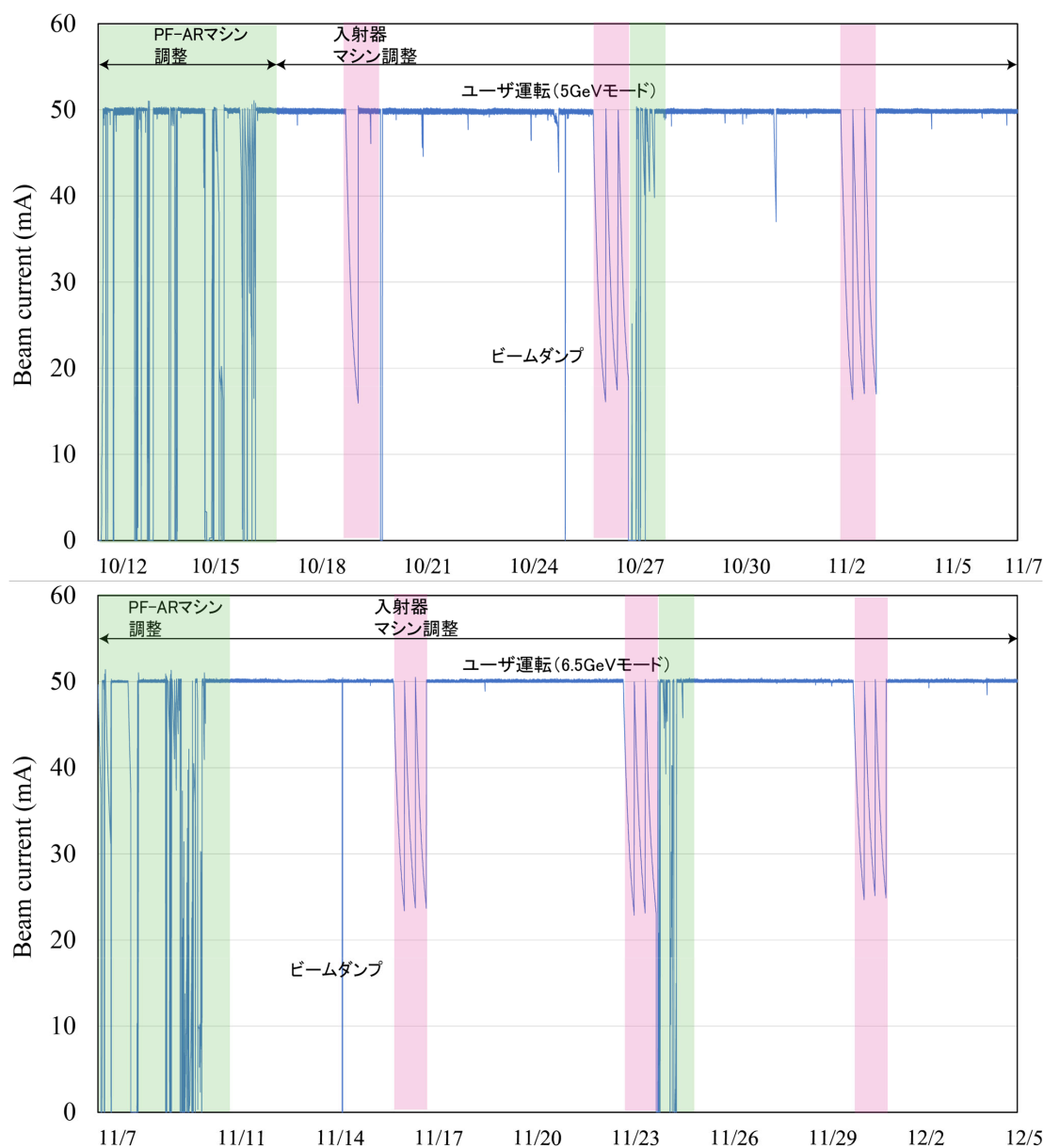


図2 PF-ARにおける運転開始日10月12日9:00～運転停止日12月5日9:00までの蓄積電流値の推移を示す。

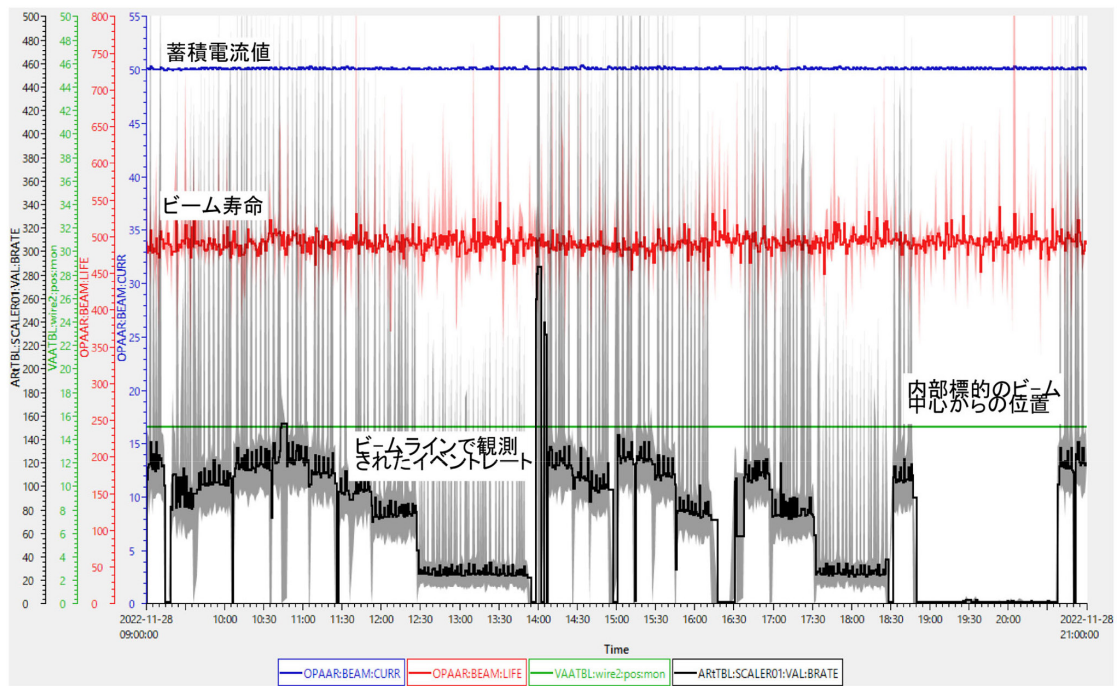


図3 PF-ARにおける11月28日9:00～11月28日21:00までの蓄積電流値（青：単位 mA），ビーム寿命（赤：単位 分）内部標的のビーム中心からの位置（緑：単位 mm），ビームライン側で観測されたイベントレート（黒：単位 Hz）の推移を示す。

9:00の運転停止まで、概ね安定した電子ビームがビームライン側に供給された。測定器開発テストビームラインにおける11月28日9:00から21:00まで12時間のイベントレートの推移をリングの運転状況と合わせて図3に示す。

11月14日19:32 西RF空洞#1で反射が起こり、インターロックが動作してビームダンプとなった。直ちにリセットされ、19:56には運転が再開された。

11月22日、25日にビーム寿命急落があったが、再入射の必要がなく回復した。真空度の悪化も観測されなかった。

12月4日PF-AR電荷制限器のトラブルで一時入射が中断したが、誤動作であることが判明し復旧した。

12月5日9:00予定通りユーザー運転を終了して、冬の停止期間となった。PF-ARの第3期の運転開始はPFリングより5日遅れた2月20日9:00を予定している

PF 研究会「開発研究多機能ビームラインの建設と利用」ですが、前号の『放射光実験施設の現状』で、第 1 回を 11 月 6 日にオンラインで開催したことをご報告しました。今号では、第 2 回を予定通り 2023 年 1 月 5 日～6 日に KEK つくばキャンパス・小林ホールとオンラインのハイブリッドで開催したことをご報告させていただきます。第 1 回では主に施設側からビームラインの検討状況を説明したのに対して、第 2 回では利用者側からサイエンスの提案を受けました。正確な数字は集計していませんが、第 2 回も第 1 回と同様に 150 名を大幅に上回る参加がありました。1 日目には、2 ビーム利用について、PF-UA の各ユーザーグループや個人からの提案についてのパラレルセッション、2 日目にはパラレルセッションの報告や総合討論がシングルセッションで行われました。参加者の皆さんにとっては、ビームラインの建設と利用という具体的な目標のもとに、異分野・異手法の研究者と議論する良い機会になったのではないかと思います。こうした取り組みが、新分野・新手法の創成に繋がることを期待したいと思います。詳細については、本誌記事をご参照ください。

開発研究多機能ビームライン（新 BL-11A, -11B）と広域軟 X 線ビームライン（仮称；新 BL-12A）の建設については、資材の長納期化などの影響もありますが、ほぼ計画した通りに進んでいます。BL-11A, -11B, -11D の利用については、2022 年度第 3 期までとなります。新 BL-12A では、二結晶分光器パス、回折格子分光器パスの順に、建設を進めます。現在のところ、前者を 2023 年度第 2 期に、後者を 2023 年度第 3 期に立ち上げることを目標としています。BL-11A, -11B, -11D を利用している課題については、自動的に新 BL-12A で有効とします。ただし、有効期間の延長はありませんのでご注意ください。新 BL-12A を利用する課題の募集については、2023 年度後期の公募から開始する予定です。建設スケジュールについては、各種の要因で変更になる可能性があります。随時、Web 等でお知らせしますので、ご理解とご協力をお願いいたします。

運転・共同利用関係

2022 年度第 3 期の運転ですが、光熱費の高騰への緊急対応として令和 4 年度第二次補正予算が措置されたことを受け、機構内で調整を行った結果、PF は 2 月 15 日から、PF-AR は 2 月 20 日から、ともに 3 月 13 日まで運転を実施することになりました。PF のハイブリッドモードは 3 月 3 日から 3 月 13 日を予定しています。PF-AR は全期間 6.5 GeV で運転を行います。短い運転期間ですが、ビームタイムを有効にご活用ください。なお、第 3 期の運転計画をお知らせする際に混乱がありました。この場を借りてお詫びさせていただきます。

PF-PAC の全体会議が 1 月 16 日に Web 会議方式で開催され、課題の評点と採否が審議されました。今回の公募から、一定の条件の下、G 型課題（一般）への博士後期課程学生の申請を認めることとしていましたが、3 件の申請がありました。なお、T 型課題（大学院生奨励）に申請された 4 件の内の 3 件については、T 型の要件を満たしていないことから、G 型として審査されました。また、課題採択後の実験ステーション追加に関する審議、現在進行中の BL-11 と BL-12 の再整備に伴う課題の取り扱いに関する審議、レフェリーによる総合評価廃止の影響や S 型課題等の中間・最終評価に関する協議などが行われました。詳細については、本誌記事をご参照ください。

人事異動

放射光実験施設に関する人事異動はありませんでした。

第 40 回 PF シンポジウムは、3 月 14 日につくば国際会議場（エボカル）とオンラインのハイブリッドで開催されます。施設運営や将来計画に関する総合討論、PF-UA の特別企画なども予定されています。積極的なご参加をお願いいたします。

ここ何回かは主に構造生物の分野に関して色々なことを書いてきましたが、今回は材料科学を取り巻く現状についてお知らせしようと思います。今回は材料科学研究部門長の木村正雄教授に XAFS データベースを取り巻く状況について紹介頂きます。

ご存じの通り、材料科学の分野においても DX に関する様々なプロジェクトや活動が国内外で推進されています。Photon Factory (PF) においても、材料科学研究部門と放射光実験施設各部門の XAFS 関係者を中心としたメンバーで、XAFS スペクトルのデータベース¹⁾を作成し、スタッフや有志のユーザーによるデータデポジットを進めてきました。

今までこうしたデータベースは個々の放射光施設や大学で独自に整備されてきていましたが、XAFS データを他の様々なデータと合わせて活用して新材料開発や製造プロセスの最適化等に役立てていくためには、関連する様々な材料物性等のデータと同じデータベースで検索・活用できるにすることが重要です。こうした考えのもと、日本 XAFS 研究会では北海道大学触媒研究所・朝倉清高先生と PF の XAFS/材料科学の関係者(責任者:木村)が、国内の放射光施設の XAFS 関係者や XAFS のヘビーユーザーの方々に呼びかけて有志のワーキンググループを立ち上げ、「XAFS Database Workshop」を 1~2 回/年の頻度で開催して議論・活動を重ねてきました^{2,3)}。(第 1 回は 2018 年 9 月 5 日 第 21 回 XAFS 討論会(@北海道札幌市)の直後に開催)

その中で以下の方向性が確認されました。

- ・ 各機関のデータを集約していく統合したデータベースがあることが望ましい
- ・ そのデータベースは以下の条件を満たすことが必要:
 - (a) 長期にわたりデータベースの維持・保守が可能な組織により管理される,
 - (b) 他の材料科学データとの相互参照ができる,
 - (c) デポジットしたデータが DOI 等の形で参照できる(クレジットが明確になる)。

こうした方向性(理念)を実現すべく、同ワーキンググループのメンバーを中心に活動を進め、物質・材料研究機構(NIMS)の Materials Data Repository(MDR)に「MDR XAFS DB」^{4,5)}という collection を作成し、2022 年 7 月には、JASRI(旧)産業利用推進室、立命館大学 SR センター、北海道大学 触媒研究所、PF の XAFS 関係者グループ、のそれぞれの機関の XAFS データベースに収録されているデータが第一弾として MDR にデポジットされました。さらに、あいち SR が現在デポジット作業中です。これらのデータはどなたでも活用することができますので、是非ご

覧頂ければと思います。

こうした活動の中で、XAFS データに付与されるメタデータの記載方法やその形式の重要性が明らかになってきました。XAFS の場合には吸収端が測定データに含まれているので、最低限「どの元素に関する構造情報か」については自明ですが、データとして活用していくには、試料情報をはじめとした様々な情報がメタデータとして提供されていることが必要です。そこで次の活動として、日本 XAFS 研究会(会長:立命館大・稲田康宏先生)のワーキンググループとして、メタデータに関しての議論を現在進めています。これまでの議論の中で、メタデータは、試料、測定条件、光学系等、様々な情報が記載されているのが望ましいが、(a) 誰がどの様に入力するか(もちろんできるだけ自動生成が望ましい)、(b) 誰が読むのか(機械か人間か? 人間の場合専門性が近いか遠いか?), の二つの視点で最適な記載の方法やファイル形式を決めていくべきとの方向性がまとまりつつあります。そして、YAML 形式での XAFS データの標準的なメタデータの第一案がほぼ完成しつつあります。この活動中に、丁度日本放射光学会のデータ構造化諮問委員会(委員長:北大・朝倉清高先生)での取り組みが始まったこともあり、同委員会のスペクトル分科会とリンクして活動を進めており、まとめたメタデータは同委員会に答申する予定です。

こうした活動の中で強く感じたのは、材料科学・測定技術を取り巻く DX の変化・動きはとても速く、完全かつ最終的な仕組みの完成をまってスタートするというより、走りながら考え修正していくやり方で進めていくことが必要なのではないかということです(オープンソースでのソフトウェアやシステム開発をみれば当然のことですが)。そして何よりも重要なのが、こうした活動が研究者の人に広く理解され活用されること、さらにその有用性を理解してもらい、そのデータベースに多くのデータがデポジットされることです。ご存じの通り構造生物学の分野では、基本的な結晶学的データを PDB で公開することが論文化や研究推進の前提となっています。材料科学の分野でも、arXiv や、各 journal の data deposit site 等、同様の流れがどんどん強くなっています。

論文や特許等の知的財産でのクレジットを明確にしつつ、人類共通の財産として取得した各種データを公開していくことは、そのコミュニティが社会から認知され支援を受け続けていくためにも不可欠と考えます。そのため、PF の XAFS 用ビームラインで取得されたデータについても、PF XAFS DB へのデポジットのお願いをしてきました。「PF XAFS DB での公開の後、NIMS MDR へのデポジット」という環境整備が進みましたので、今後はより多く

の XAFS データをデポジットして頂き、XAFS データベースが様々な材料研究により広く活用されていくことを期待しています。そのため、今まで以上に多くのデータをデータベースにデポジットして頂けるよう研究者の皆様に改めてお願いしたいと思います。我々施設サイドでも、デポジットしたいデータの選択とそのメタデータをできるだけ簡単に PF XAFS Database に登録していただける様に、ソフトウェアをはじめとした制度の整備を進めています。こうした活動への理解と積極的なデータのデポジットのご協力を何卒よろしくお願い申し上げます。最後になりましたが、こうしたデータベース整備の活動に関して、ご意見・ご提案・ご要望ありましたらぜひお聞かせ下さい。よろしくお願い致します。(木村正雄)

- 1) PF XAFS Database: <https://pfxafs.kek.jp/xafsdata/>
- 2) 日 本 XAFS 研 究 会 HP: <https://www.jxafs.org/xafs-database/>
- 3) 日本 XAFS 研究会 XAFS データベースフォーラム : <https://github.com/xafs-db/xafs-discussions/discussions>
- 4) MDR XAFS DB: <https://mdr.nims.go.jp/collections/qz20st57x>, <https://doi.org/10.48505/nims.1447>
- 5) M. Ishii *et al.*, Science and Technology of Advanced Materials: Methods (2023) (under review).

人事異動

最後に放射光科学第一，第二研究系に関する人事異動です。12 月 16 日付けで山田悠介さんが研究機関講師に昇任されました。また，1 月 16 日付けで，城戸大貴さんが特別助教として採用されました。新しい環境での活躍を祈念いたします。