

2024年度量子ビームサイエンスフェスタ 第16回 MLF シンポジウム／第42回 PF シンポジウム開催報告

量子ビームサイエンスフェスタ 実行委員長 木村正雄
実行副委員長 梅垣いづみ

2025年3月12, 13, 14日にKEK物質構造科学研究所, J-PARC センター, 総合科学研究機構 (CROSS), PF ユーザーアソシエーション (PF-UA), J-PARC MLF 利用者懇談会が主催する量子ビームサイエンスフェスタが開催されました。つくば開催の2年前の量子ビームサイエンスフェスタはハイブリッドでの開催でしたが, 今回はフル対面として開催し565名の方に参加頂きました。期間中にはPF-UA ユーザーグループミーティングが行われ, 会期終了後にもサテライト研究会が開催されました。

初日の3月12日にはMLF シンポジウムが行われ, 午前には, MLF 現状報告に引き続き, 中性子源, 水銀ターゲット, ミュオン, MLF 課題利用制度, それぞれについてより詳細な報告がありました。午後には, MLF ロードマップについて発表・意見交換がありました。MLF ロードマップ現状報告に続いて, 日本中性子科学会, 日本中間子科学会, 中性子産業利用推進協議会, のそれぞれの視点での発表や期待が述べられました。

2日目の3月13日の量子ビームサイエンスフェスタでは, 開会宣言・挨拶の後, 朝倉清高氏(立命館大学)から「量子ビームでみる酸化チタンの構造と触媒特性」, 出村雅彦氏(NIMS)から「マテリアル分野における研究DXの取り組み」と題した基調講演が行われ, 続いて, 来賓・主催者代表による挨拶が行われました。午後の前半はユーザー及び施設による271件のポスター発表が行われました。後半は3会場で平行での口頭発表が行われ, 今回新設された「マテリアルインフォマティクス」のセッションを含む, 「ソフトマター」「デバイス・手法開発」「磁性・強相関」「生命科学」「材料・触媒」の6つのセッションで18件の講演がありました。



図1 基調講演での朝倉清高氏(立命館大学)と出村雅彦氏(NIMS)(左より)

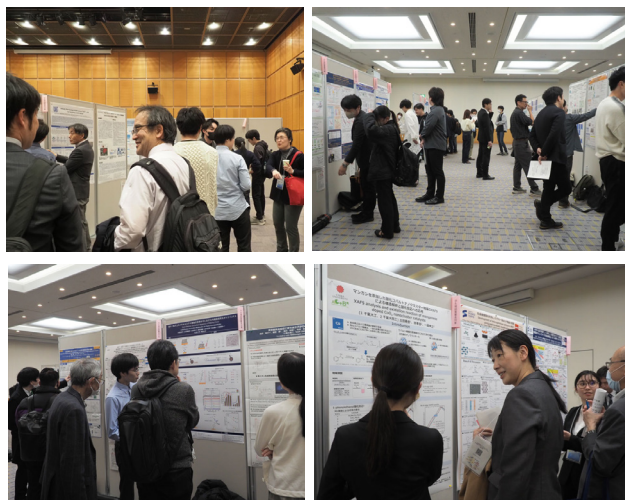


図2 ポスター会場の様子

3日目の3月14日にはPF シンポジウムが行われ, 午前中はPF 施設報告がありました。施設報告の概要の後, 光源, ビームラインの報告に続き, 広波長域軟X線ビームライン建設, 開発研究多機能ビームライン建設について発表がありました。続いてS2型, T型, PF-S型課題の課題責任者によるショートプレゼンの後, 総合討論が行われました。午後は, PF 次期光源計画について報告がありました。PF-HLS計画の紹介の後, 加速器技術検討, サイエンス検討について発表があり, 総合討論を行いました。

2015年度から始まった量子ビームサイエンスフェスタは, 施設スタッフとユーザーの情報交換の場であるだけで



図3 PF シンポジウムの会場の様子



図4 集合写真(量子ビームサイエンスフェスタ会場にて)

はなく、異なるプローブを用いる、あるいは異なる分野の研究者間の交流を通じて新たな研究の発展に繋がる場もあります。対面主体の開催となり、口頭発表やポスター発表で活発な議論が行われ、さらに懇親会も含めて関係者の交流を深めることができました。今回の量子ビームサイエンスフェスタが新たな研究に繋がるきっかけとなれば幸いです。

なお、詳細な報告は物質構造科学研究所のホームページ(下記)をご覧ください。

<https://www2.kek.jp/imss/news/2025/topics/0312qbsf/>

2024 年度量子ビームサイエンスフェスタに参加して 1

東京大学 物性研究所 村野由羽

2025 年 3 月 13 日につくば国際会議場で開催された「2024 年度量子ビームサイエンスフェスタ」に参加した。基調講演に始まり、ポスター発表、口頭発表がその日のうちに完結した。広い分野の研究者が集結し、内容も充実した学会であった。

量子ビームサイエンスフェスタは、私が学部 4 年時(2021 年度)に初めて外部発表を行った場として特別な思いがある。しかし、2021 年度開催は新型コロナウイルスの渦中だったためオンラインでの実施となり、聴衆の表情が分からないまま、覚えた原稿を一方的に発表して終わってしまった記憶しかない。修士 1 年時の 2022 年度開催では対面での実施が再開され、本大会と同じつくば国際会議場にてフォトンファクトリー(PF)での研究成果のポスター発表を行った。しかし、そのときの私のポスターには何故か聴衆が少なく、ポスターの前にただ立っているだけの寂しい思いをした。

今回は博士 1 年となり、T 型(大学院生奨励)課題「マルチモード・オペランド実験システムの開発と Ru 表面上 CO₂ メタン化反応の微視的研究」も採択され、初めて研究課題の責任者として進捗状況の報告を行った。そして審査員の方々が進捗状況の評価のために集まって下さった。発表した各項目に対して建設的な質問とアドバイスを頂き、今後、研究を効果的に進めていくうえで重要なアイデアを得ることができた。また、この数年の間に知り合った表面科学者や研究内容に興味をもって下さった他分野の若手研究者らも聞きに来て下さった。そしてデータの定量的な解析方法に関する専門的な議論に加え、測定手法の根本的な問題点を踏まえ汎用性と応用性を見据えた将来展望について話し合うことができた。ポスター発表時間の最初から最後まで有意義な議論が行われ、研究の進展に重要な多くの本質的なアイデアを得ることができた。大変充実した時間だった。私にとっては、T 型課題の責任者としての立場とともに、コミュニティでの人脈と認知度がわずかでも拡大したことを実感した本大会だった。

量子ビームサイエンスフェスタでは、他の学会では語られない研究の細部が発表に組み込まれている魅力がある。そして参加者は PF か物質・生命科学実験施設(MLF)の関係者であるため、自身の発表として、よりターゲットを絞った構成にすることができる。軟 X 線と硬 X 線とのマルチビームによる同時測定の実現に向けた技術開発など興味深い発表が多数ある中で印象に残ったのは、雨宮健太グループの阪田薫穂博士のご発表であった。「波長分散型軟 X 線 XAS による固液界面のリアルタイム・オペランド測定法の開発および硬 X 線 XAS と組み合わせた触媒電極の観察」というタイトルで、波長分散型軟 X 線 XAS のリアルタイム・オペランド測定のための手法開発の詳細に加え、可変パラメータとスペクトルの変化が可逆的に同期する結果から反応に関わる化学種が明確に示されていた。本内容は日本放射光学会等でお聞きしたことはあったが、今回さらに詳細に踏み込んだ議論に参加することができ、量子ビームサイエンスフェスタならではの発表として貴重な機会となった。反応活性種のリアルタイム観測は、私が課題責任者として取り組んでいる軟 X 線による雰囲気 X 線光電子分光研究でも目指すところであり、聴講者として大変有意義なものとなった。

今回の量子ビームサイエンスフェスタでは、やはり「マルチビーム」というのが一つのキーワードになっていると感じた。PF の更なる発展の要として PF 全体で技術開発が進んでおり、複数のご発表における質疑応答の内容からも取組の重要さがうかがえた。なお、私自身も T 課題において、軟 X 線と赤外線とのマルチビームによる測定技術の開発を目指している。本大会における活発な議論を通じて測定技術の開発とそれによって得られる新たな化学的・物理的知見が我々の科学技術を発展させることを改めて確信した。そして今回、密な情報交換から得られた様々なアイデアを活かし、自身の研究をより良く展開したい。

2024 年度量子ビームサイエンスフェスタに参加して 2

東北大学 材料科学高等研究所 本間飛鳥

私は 2024 年度量子ビームサイエンスフェスタに参加し、Photon Factory の T 型(大学院生奨励)課題「角度分解光電子分光による希土類モノプニクタイトの電子構造の研究」で得られた角度分解光電子分光(ARPES)の成果をポスター発表しました。T 型課題の初年度にもかかわらず、ARPES の研究成果とビームラインの改良についてまとめて報告できたのは、小澤健一教授、佐藤宇史教授、相馬清吾准教授をはじめとする共同研究者の皆様のご協力のおかげです。この場を借りて、心より感謝申し上げます。

私は T 型課題において、放射光 ARPES を用いた反強磁性トポロジカル絶縁体の電子構造の研究を行っています。固体材料の特性はバンド分散を知ることで理解でき

ますが、本研究で用いた ARPES は、そのバンド分散を直接観測できる強力な手法です。ポスター発表では、Photon Factory BL-28A のマイクロ集光 ARPES 装置を使用し、反強磁性ドメインを分離してディラック電子状態を観測した結果を報告しました。その際、多くの質問をいただきましたが、特に印象的だったのは、ARPES とは異なる手法を用いる研究者からの質問や意見でした。私が当たり前だと思っていたことが、実は深い意味を持っていることに気づき、また気に留めていなかったことや、思いつきもしなかった点に新たに気付かされるなど、非常に実りある発表となりました。このような経験は、量子ビームを扱う研究者が一堂に会する量子ビームサイエンスフェスタだからこそ得られるものだと、感じました。

また、量子ビーム技術を活用した研究成果が数多く発表されており、研究会を通じて改めて実感したのは、量子ビームが物質研究、医療、生命科学など、多岐にわたる科学分野において非常に有用であるということです。量子ビームサイエンスフェスタには今回が初めての参加でしたが、ポスター発表の数の多さに驚きました。さらに、上記の分野に加え、加速器や検出器の開発、解析手法の開発に関する発表もあり、どれも非常に興味深く拝見しました。放射光の高輝度ビームが、私のような放射光 ARPES を用いる研究者の研究の発展の基礎となっていることを再確認しました。

量子ビームサイエンスフェスタへの参加は、私にとって非常に有意義な経験となりました。ポスター発表を通じて、異なる分野の研究者と直接交流することで、新たな視点や知見を得ることができました。放射光の可能性を改めて実感し、今後もこの技術を駆使して、さらなる成果を上げていきたいと強く感じています。

PF 研究会「放射光科学での DX : Digital transformation in research using synchrotron radiation」開催報告

放射光科学第二研究系 木村正雄

【開催概要】

日時：2025 年 2 月 6 日（木）

会場：オンサイト（KEK つくばキャンパス 4 号館セミナーホール）、オンライン（ZOOM）のハイブリッド開催

提案者：岡田真人（東京大学）、水牧仁一朗（熊本大学）、木村正雄（KEK）

世話人：城戸大貴、丹羽尉博、木村正雄（KEK）

参加費：無料

重要な締め切り：旅費（参加者については予算次第）2025 年 1 月 17 日（金）

事前参加申し込み：2025 年 1 月 31 日（金）（当日申し込みもあり）

共催：東京大学大学院新領域創成科学研究科、熊本大学理

学部理学科物理コース、学術変革領域研究「データ記述科学を用いた材料解析とそのイノベーション展開」

【プログラム】

10:00 ～ 10:10 主旨説明

10:10 ～ 11:00 「ベイズ計測と放射光科学」

岡田真人（東京大学 大学院新領域創成科学研究科、教授）

11:00 ～ 11:50 「ベイズ統合とベイズ階層モデリング」

水牧仁一朗（熊本大学 理学部、教授）

11:50 ～ 12:20 「ベイズ推定ソフトのライブラリー紹介」

片上舜（東京大学 大学院新領域創成科学研究科）

12:20 ～ 13:30 昼食

13:30 ～ 14:20 「放射光実験のデジタル化を目指した超大規模計測とデータ解析基盤の構築」

小野寛太（大阪大学 工学研究科、教授）

14:20 ～ 15:10 「材料データリポジトリの放射光科学への展開：MDR XAFS DB の取り組み」

石井真史（物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター、主席研究員）

15:10 ～ 15:30 休憩

15:30 ～ 16:20 「X線顕微分光イメージデータのパーシステントホモロジーによる TDA 解析」

木村正雄（高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所、教授）

16:20 ～ 17:00 総合討論・総括

【研究会概要】

放射光を用いた計測法は、その計測法の高度化や測定の高スループット化・自動化が進み、様々な情報を含む多次元データが、空間分解（顕微法）や時間分解で計測可能になっている。そのため、計測プロトコルの最適化や、得られたビッグデータの解析には、従来の人間の経験だけでなく、情報科学や数理科学の視点を入れたアプローチが必要となる。またそのためには、関連分野のデータベースが整備されていることが必須となる。

そこで、本研究会では、そうした取り組みとして、ベイズ計測、インフォマティクス技術を活用した量子ビーム計測、XAFS データベース、パーシステントホモロジーによる位相データ解析、について取り上げ、それぞれの分野で活躍の先生方に講演をお願いした。そして、放射光計測や得られたデータの解析について、今後の展開の新たな視点について議論した。

木村からの趣旨説明に引き続き、岡田先生から「ベイズ計測と放射光科学」についての講演があった。‘データ駆動科学の三つのレベル’の観点からベイズ計測の概要紹介の後、施設での展開例として、SPring-8 全ビームラインベイズ化計画について紹介があった。またスペクトル分解を例としてベイズ計測の詳細説明があった。質疑では、非線

形におけるレプリカ交換法による解の探索、計測における検出器の最適化、分光スペクトル分解、等について議論が交わされた。

水牧先生から「ベイズ統合とベイズ階層モデリング」についての講演があった。ベイズ推定とベイズ統合の枠組み紹介の後、XPSとXASの計測データをベイズ統合した具体例の紹介があり、今後の展開として、種々の計測や科学計算の結果を複合的に用いたマルチモーダル測定の実現性を述べた。後半では、ベイズ階層モデリングの例として、時分割X線回折の結果から反応モデルを推定する例を紹介した。質疑では、データの統合が適・不適であるケースの判断、反応モデルの推定に必要な計算コスト、異種データ結合への展開、等について議論が交わされた。

片上先生からは、「ベイズ計測オープンソースソフトウェアの開発の取り組み」について講演があった。前半では、岡田研究室で進めている、線形回帰の可解ベイズ計測、スペクトル分解、能動学習、についての紹介があった。後半では、実際のデモ計算を含めて、開発を進めているオープンソースソフトウェアについて詳細な説明・紹介があった。質疑では、オープンソースソフトウェアの活用方法やその展開について議論があった。

小野先生からは、「放射光実験のデジタル化を目指した超大規模計測とデータ解析基盤の構築」についての講演があった。X線顕微鏡を用いた材料研究の重要性の紹介の後、それによって得られる‘大規模計測データの解析’について紹介があった。空間＋エネルギーの多次元空間のデータを解析するために、スペクトル空間でのボロノイ分割とクラスタリングによる情報抽出を紹介した。後半では、能動学習による計測の最適化、計測の終了判断、実験計画策定の高速化、について紹介した。質疑では、クラスタリングに用いるデータベースの種類・数の必要量、用いるカーネルの種類、ボロノイ分割の妥当性、等について議論が交わされた。

石井先生からは、「材料データリポジトリの放射光科学への展開：MDR XAFS DBの取り組み」についての講演があった。NIMSで進めているMDR（Material Data

Depository）の概要と、国内の放射光施設で連携して進めたXAFSデータベース（DB）を紹介した。そのXAFS DBの具体的な使い方、DBを活用した材料研究への展開、他のDBとの連携、について詳細に説明があった。質疑では、マルチスケールデータの取り扱い、データの信頼性、MDRの将来展望、等について議論があった。

木村からは「X線顕微分光イメージデータのパーシステントホモロジーによるTDA解析（位相的データ解析）」について講演した。X線顕微分光で得られる‘空間＋エネルギーの多次元データ’から情報を抽出することの重要性・困難さを紹介した後、それを実現する数理的方法としてパーシステントホモロジーによるTDA解析を具体的な研究例（複合鉄酸化物の還元、炭素繊維強化プラスチック(CFRP)の破壊、リチウムイオン電池の充放電）を通じて紹介した。質疑では、還元反応の反応起点の予測の方法、他の手法で予測できないこともわかるか？、パーシステンス図の解釈の仕方、等について議論があった。

最後に、全講演者を含めて、総合討論・総括を行った。その議論の中で、放射光科学のDXは、単に人の代わりとなるツールの開発だけでなく、従来知見に基づく人間の判断では得難い情報（新しい価値）の創出につながることを期待されるということを改めて認識した。それを実際の放射光施設で実現していくためには、多くのユーザーが使えるような環境を整備すること、そして、何より多くのユーザーが使ってみたいと思うような事例（成功例）を、パワーユーザーや施設サイドで示していくことが重要であり、今後も関係者が努力してこの分野の研究展開を進めて行くということである。

本研究会は1日の短期集中で実施したが、短期の告知にもかかわらず、多くの参加があった（参加者：107人（対面36名、オンライン71名）、そのうち、企業は26名）。この分野に対する注目・期待の現れと考える。これも、発表をご快諾頂き、本研究会の趣旨に沿って、重要な各分野での研究の現状・課題・今後の展開についての貴重な講演を頂いた先生方のおかげであり、関係者を代表して改めて感謝申し上げたい。また、参加頂いた皆様には活発な質疑をして頂き、議論を深めることができた。

最後になりますが、開催に協力頂いた関係者の皆様に改めて感謝します。



図1 研究会の様子