

3年間の活動を振り返って

PF-UA 会長 平井光博
PF-UA 庶務幹事 近藤寛

この3年間、PF-UAの運営を、幹事、運営委員、会員の皆様方に支えていただき、心より感謝申し上げます。また、村上先生をはじめとします施設スタッフの皆様にご支援頂きましたことを改めて感謝いたします。

特に、この3年間は「KEK放射光計画」の立案・推進がPF-UAとしての主要なミッションでした。3年前に前会長の佐藤衛先生を中心に纏められたPF-UA白書をきっかけとして作成されましたPF将来計画検討委員会最終報告書、その後の山内正則機構長が主導されましたKEK-PIPの策定、ロードマップの改定に基づいて、機構、研究所、施設スタッフと共に、KEK放射光計画を進めてまいりました。この計画は、産業、イノベーションの基盤である学術研究の多様性を保証し、将来を担う有為の学生を育て、世界に冠たる挑戦的な研究が行える拓かれた施設を次世代に引き継ぐことを目的としたものであり、大学共同利用機関法人KEKのミッションであると同時に、現PFユーザー、関係者の皆様方の「世代の責任」であるとの強い思いを担ったものです。

次期計画に関してはQST（量子科学技術研究開発機構）を国の主体として進められる3 GeV計画に当面協力することとなりましたが、その間、次期光源計画をさらにブラッシュアップしながら、施設スタッフ、ユーザーが協力して現有施設を可能な限り高度化し、研究と教育・人材育成の実績を継続することが、今後最も重要であると考えております。

KEK放射光計画に関するPF-UAの活動の経緯を改めてまとめさせていただきます。

平成28年

- 拡大ユーザーグループ・ミーティングにおけるKEK放射光計画の議論を開始（3月14日）。
- 第33回PFシンポジウムにおけるKEK放射光計画の公表に基づき、PF-UA総会で「all-Japanでの協力体制構築」を決議（3月16日）。
- PF-UA戦略・将来計画検討小委員会の開催（4月25日）。3つの「KEK放射光計画推進に関するPF-UA検討委員会」（運営形態検討委員会、ビームライン検討委員会、ビーム利用検討委員会）と、各委員会の構成、ミッションなどを協議。
- PF-UA幹事会・運営委員会での審議（6月8日）。KEK放射光検討委員会の方針、構成、人選方法などの協議と承認。
- PF-UA幹事会・PF-UA戦略・将来計画検討小委員会の

開催、およびKEK放射光検討委員会準備会の開催（7月17日）。KEK放射光検討委員会の構成、ミッションの協議と承認。KEKロードマップの改定公開後に、その他施設等の委員の推薦と依頼を開始し、KEK放射光ワークショップを開催することを承認。

- 他施設等の委員就任依頼、ビーム利用検討委員会におけるCDR原稿の依頼、原稿の収集と校閲・修正の開始（7月20日～）。
- KEK放射光CDR（暫定版ver2.1）の公開（9月9日）。
- PF-UA幹事会・運営委員会の開催、第1回KEK放射光ビームライン検討委員会・運営形態検討委員会の開催（9月11日）
- 第1回KEK放射光ワークショップを開催（9月11～12日）。KEK放射光CDR（暫定版）を分野ごとに詳細検討、改定、修正案のとりまとめ、総合討論。
- KEK放射光CDR ver.1の公開（10月31日）。
- 第2回KEK放射光ビーム利用検討委員会を開催（12月21日）。3月改訂に向けて、CDRサイエンスのアピールポイント、サイエンスケース・産業利用の委員会からの追加提案、一般からの募集、マルチプロープ提案等に関する協議。

平成29年

- 第2回KEK放射光ワークショップを開催（3月13日）
- KEK放射光CDR ver.1.1の公開（5月22日）

上記の三つのPF-UA「KEK放射光検討委員会」には、PF-UA会員、施設スタッフ、他の放射光施設関係者、産業利用関係者、有識者の方々に委員としてご参画いただきました。下記委員の方々に御礼申し上げます。（以下、敬称省略。重複あり）

【運営形態検討委員会】

委員長：佐藤衛、施設代表：足立伸一

朝倉清高、足立伸一、阿部仁、雨宮健太、雨宮慶幸、稲田康宏、大友季哉、尾嶋正治、門野良典、河田洋、木下豊彦、木村正雄、熊井玲児、組頭広志、腰原伸也、小林幸則、小山篤、近藤寛、櫻井伸一、佐々木聡、佐藤衛、清水敏之、辛埴、瀬戸秀紀、千田俊哉、竹田美和、田淵雅夫、中川敦史、朴三用、林眞琴、兵藤一行、兵頭俊夫、平井光博、藤森淳、船守展正、本田融、三木邦夫、水木純一郎、村上洋一、百生敦、渡邊健夫

【ビームライン検討委員会】

委員長：腰原伸也、施設代表：五十嵐教之

雨宮健太、五十嵐教之、岩住俊明、植草秀裕、内海裕一、奥田浩司、奥部真樹、片山真祥、岸本俊二、北島昌史、北島義典、腰原伸也、小菅隆、小林寿夫、小山篤、近藤敏啓、齋藤智彦、櫻井伸一、島田賢也、清水敏之、清水伸隆、高橋嘉夫、武市泰男、田中信忠、田淵雅夫、豊島章雄、中尾

裕則, 長嶋泰之, 仁谷浩明, 平尾直久, 平野馨一, 堀場弘司, 間瀬一彦, 松垣直宏, 松下昌之助, 松田巖, 山口博隆, 山本勝宏, 横谷明德, 吉朝朗, 吉信淳, 米山明男, 渡邊信久
オブザーバー: 足立伸一, 加藤龍好, 小林幸則, 鈴木芳生, 土屋 公央, 原田健太郎, 船守展正, 本田融, 宮内洋司, 村上 洋一

【ビーム利用検討委員会】

委員長: 近藤寛, 施設代表: 中尾裕則

足立純一, 阿部仁, 市川創作, 植草秀裕, 宇佐美徳子, 大友季哉, 奥田浩司, 奥部真樹, 小澤健一, 小田切丈, 門野良典, 上久保裕生, 神田一浩, 岸本俊二, 熊井玲児, 組頭広志, 小林寿夫, 小森文夫, 近藤敏啓, 近藤寛, 齋藤智彦, 酒巻真粧子, 櫻井伸一, 清水敏之, 清水伸隆, 瀬戸秀紀, 千田俊哉, 高野秀和, 高橋 嘉夫, 武市泰男, 田渕雅夫, 手塚泰久, 中尾裕則, 長嶋泰之, 野澤俊介, 兵藤一行, 兵頭俊夫, 船守展正, 松下昌之助, 宮脇律郎, 山口博隆, 山田悠介, 遊佐斉, 横谷明德, 米山明男, 若林裕助
オブザーバー: 足立伸一, 雨宮健太, 五十嵐教之, 加藤龍好, 木村正雄, 小林幸則, 鈴木芳生, 土屋公央, 原田健太郎, 本田融, 村上洋一

また, KEK 放射光計画の推進, CDR の作成, ホームページ作成, シンポジウム開催等に関しまして, 検討委員会委員, 施設スタッフ, PF-UA 会員, 事務関係スタッフの皆様方に大変ご尽力頂きました。心より感謝申し上げます。

今後は, CDR に関して放射光学会特別委員会で指摘されました課題を十分に検討すると同時に, それを踏まえて, 各ユーザーグループ, ユーザー個人が参加可能な先端光源利用サイエンスケース等を議論する場を PF-UA 幹事会・運営委員会が主導して定期的に開催し, また, 各ユーザーが所属するコミュニティ, 各学会等でも先端放射光光源と他の量子プローブ, その他の手法を複合的に利用した新たなサイエンスなどを議論可能なインフォーマルミーティング等を積極的に開催して, ユーザー主体の広域的なコミュニティの形成を図ることが, 次期光源計画推進の上で大変重要であると考えております。

さて, 4 月からは, 新所長として小杉信博先生をお迎えし, 足立伸一先生が副所長に就任され, 研究所および施設は新たな執行部体制で出発いたします。また, PF-UA におきましても, 4 月から新会長の清水敏之先生のもと, 新たな幹事・運営委員の体制で出発いたします。「KEK 放射光」ホームページに掲げられました理想を堅持しつつ, 計画推進におきまして施設, 研究所, 機構と培いました, PF 利用者との厚い信頼関係を継続的に維持・強化するためにも, 今後とも皆様方の一層のご協力を切にお願い申し上げます。

2017 年度量子ビームサイエンスフェスタ 学生奨励賞について

J-PARC MLF 利用者懇談会事務局担当幹事 大原高志
PF-UA 行事幹事 植草秀裕

2018 年 3 月 2 日～4 日の日程で開催された量子ビームサイエンスフェスタでは 6 件の学生奨励賞が授与されました。この奨励賞は 2011 年の第 28 回 PF シンポジウムから始まったもので, 今回も若手研究者の優秀な研究に対して「学生奨励賞」を授与することとし, 対象を「学生が筆頭著者のポスター発表」で, 放射光, 中性子, ミュオン, 低速陽電子などを利用して得られた研究成果としました。奨励賞応募ポスター数は 73 件と, 昨年度 (66 件) を上回る数の応募がありました。今年度は初の試みとして水戸市の茨城県立県民文化センターでの開催となりましたが, このように多くの応募があったこと, 関係者一同感謝いたします。

審査のためのコアタイムは特に設けず 3 名の審査員が自由に訪問する形式で発表者のプレゼンテーションと質疑応答による審査を行いました。発表者は必ずしも同じ専門とは限らない審査員の先生方に全力で研究の説明をし, 審査員はそこに鋭く質問するという真剣勝負が多くポスターで繰り広げられました。

審査項目は多岐にわたっており, 研究内容の将来性, 本人の貢献度, 成果の達成度, 研究方法の新規性や独創性, 内容を明確に伝える分かりやすい発表か, 質疑応答の内容, などを重点的に審査しました。審査には最終的に 52 名の審査員が参加しました。いずれの発表も力作ぞろいであり, 僅差で複数の発表が並びましたが, 審査項目の合計点から上位 6 名を受賞者としてしました。発表タイトルと受賞者名を下記に掲載しました。

授賞式は懇親会中に行われ, 幸いなことに全員の受賞者を招待することができました。それぞれに賞状と記念のトロフィーが平井 PF-UA 会長, 久保 J-PARC MLF 利用者懇談会会長から授与されました。

審査員の先生方には限られた時間の中, 多くの審査をお願いしたにも関わらず, 非常に熱心に審査をいただき, 大変感謝しております。また, ポスター発表全般, 並びに奨励賞に関して事務局の方々にも大変お世話になりました。なお, 本学生奨励賞は PF-UA と J-PARC MLF 利用者懇談会の共催で, 大原高志 (MLF 利用者懇談会 / JAEA), 植草秀裕 (PF-UA / 東工大), 大井元貴 (JAEA), 引田理英 (KEK-PF), 川崎卓郎 (JAEA) が担当いたしました。

<学生奨励賞受賞者>

◆奥村拓馬 (東京工業大学大学院理工学研究科)

『しきい光電子源を用いた超低エネルギー電子 -HD 衝突全断面積の測定』

◆志賀翔多 (山形大学大学院理工学研究科)

『ループ再設計による Outer surface protein A (OspA) のドメ



学生奨励賞授賞式（左から）平井光博 PF-UA 会長（群馬大教授）、奥村拓馬氏（東工大）、志賀翔多氏（山形大）、野中洋亮氏（東大）、味戸聡志氏（群馬大）、藤牧拓郎氏（山梨大）、清水光氏（東大）、久保謙哉 MLF 利用者懇談会長（ICU 教授）

インスワッピング』

◆野中洋亮（東京大学大学院理学系研究科）

『Si(111) 面上に作製した CoFe_2O_4 の膜厚に依存した磁気異方性の変化』

◆味戸聡志（群馬大学大学院理工学府）

『WAXS と SANS を利用した糖溶液におけるタンパク質の構造、水和、安定性の研究』

◆藤牧拓郎（山梨大学大学院医学工学総合教育部）

『宇宙線 μSR ラジオグラフィ法の開発—巨大建造物の化学的物理的状態の診断—』

◆清水光（東京大学大学院薬学系研究科）

『新規グアニンヌクレオチド交換因子 SmgGDS による RhoA 認識機構の構造基盤』

平成 29 年度第 3 回 PF-UA 幹事会・運営委員会議事録

日時：平成 30 年 3 月 3 日（土）12:10 ～ 13:20

場所：茨城県立県民文化センター集会室 1,2

出席者：〔幹事会〕平井光博（会長）、近藤寛（庶務）、植草秀裕（行事・書記）、田中信忠（会計）、阿部善也（編集）、奥部真樹（推薦・選挙管理）、上久保裕生（共同利用）
〔運営委員会〕齋藤智彦、鈴木昭夫、田淵雅夫、櫻井伸一、横谷明德、中山敦子、沼子千弥、木村千里、若林裕助、佐藤衛、雨宮健太、足立伸一、千田俊哉、村上洋一

・会長挨拶（平井会長）

【報告事項】

・施設報告（村上施設長）

この 10 年の施設整備、予算関係、運転時間予定、課題数・論文登録数の推移、お知らせ（有償利用、全自動測定、UG ヒアリング、次期執行部）について報告を行った。また AR の運転時間、KEK 内の予算配分について質疑を行った。

・PF シンポジウム（量子ビームサイエンスフェスタ）報告（植草行事幹事）

2017 年度量子ビームサイエンスフェスタ（第 9 回 MLF シンポジウム／第 35 回 PF シンポジウム）の開催とフェスタ内 PF-UA 関連行事を紹介した。

・会計報告（田中会計幹事）

今年度の予算の執行について報告した。サイエンスフェスタにおける賛助会員、企業展示、広告が増加し、260,141 円の黒字となった。

・PF-UA 活動報告（平井会長）

これまでの PF-UA の活動について包括的報告を行った。最近の主な活動、PF-UA 要望書の骨子、KEK 放射光検討委員会の活動経緯、推進体制、今後の計画推進について説明した。

・次期 PF-UA 幹事報告（近藤庶務幹事）

2018 年度から 2020 年度の次期 PF-UA 幹事を報告した。

・次期運営委員の選出結果の報告（奥部推薦・選挙管理幹事）

2018 年 2 月 5 日から 27 日まで次期運営委員（PF 外）の選挙を行い、得票により 25 名を選出した結果を報告した。また選挙方法について検討事項を説明した。

【協議事項】

・会員資格・その他についての会則改訂について（足立運営委員）

会員情報、個人情報の厳密な取扱いのために、会則の改訂が必要であることを説明した。議論の結果、必要な会則改訂を進めることとした。情報管理システムに関する点は、引き続き施設側と相談する。

・PF-UA の財政基盤の強化について（近藤庶務幹事）

賛助会員、展示企業について対応を行ってきたことを説明した。賛助会員となる企業、展示を行う企業が新規に増えていないため、今後の対応が必要である。また意義のある用途での支出を行うことも重要であるとした。

・平成 30 年度以降の量子ビームサイエンスフェスタについて（近藤庶務幹事）

PF と MLF との交互開催の方針であり、次年度はつくば開催の予定であることを確認した。日程も今回とは変わる可能性がある。

・施設の事務局担当について（近藤庶務幹事）

PF-UA から施設への窓口となる担当者が必要であることを確認した。

・量子ビーム科学ユーザーコミュニティ（QuBUC）の設立と PF-UA からの参加に関して（本田孝志 KEK 物構研）

QuBUC の設立について説明があった。PF-UA ではこれに関する情報をメンバーに提供する。

- ・PF-UA 総会議事確認（近藤庶務幹事）
PF-UA 総会（3月4日）の議事予定を承認した。

平成 29 年度 PF-UA 総会 議事録

日時：平成 30 年 3 月 4 日（日）13:30 ～ 14:30
場所：茨城県立県民文化センター 大ホール

- ・総会の定足数・成立確認（近藤庶務幹事）
定足数を満たしていること、および総会が成立していることを確認した。総会の議長指名を行い、植草（東工大）を総会議長に指名した。

- ・会長挨拶（平井会長）

【報告事項】

- ・会計報告（田中会計幹事）
今年度の予算の執行について報告した。サイエンスフェスタにおける賛助会員，企業展示，広告が増加し，260,141 円の黒字となった。

- ・PF-UA 活動報告（平井会長）
平成 29 年度 PF-UA 活動報告，主な活動について報告した。PF-UA 要望書の骨子，KEK 放射光計画の活動経緯，KEK 放射光計画を進めるに当たってのこれまでの反省点と今後の PF-UA としての可能な対応を説明した。

- ・次期 PF-UA 幹事報告（清水次期会長）
2018 年度から 2020 年度の次期 PF-UA 幹事を報告した。

- ・次期運営委員の選出結果の報告（奥部推薦・選挙管理幹事）
2018 年 2 月 5 日から 27 日まで次期運営委員（PF 外）の選挙を行い，得票により 25 名を選出した結果を報告した。

- ・次期 PF-UA 会長挨拶（清水次期会長）
清水敏之（東京大学大学院薬学系研究科）次期会長が挨拶を行った。

【その他】

- ・PF-UA の課題と将来に向けての総合討論（平井会長）
PF-UA アンケートの結果を報告し，PF-UA の将来に向けての提言を行った。
- ・量子ビーム科学ユーザーコミュニティ（QuBUC）の発足について説明があり（本田孝志・KEK 物構研），関連した質疑応答を行った。

ユーザーグループ一覧

2018 年 4 月 1 日現在

1	XAFS	田渕 雅夫	名古屋大学
2	タンパク質結晶構造解析	海野 昌喜	茨城大学
3	小角散乱	櫻井 伸一	京都工芸繊維大学
4	放射線生物	横谷 明德	量子科学技術研究開発機構
5	粉末回折	植草 秀裕	東京工業大学
6	高圧	高橋 博樹	日本大学
7	構造物性	有馬 孝尚	東京大学
8	表面科学	吉信 淳	東京大学
9	固体分光	齋藤 智彦	東京理科大学
10	原子分子科学	小田切 丈	上智大学
11	核共鳴散乱	小林 寿夫	兵庫県立大学
12	位相計測	百生 敦	東北大学
13	低速陽電子	長嶋 泰之	東京理科大学
14	医学利用	松下昌之助	筑波技術大学
15	X線発光	手塚 泰久	弘前大学
16	表面界面構造	近藤 敏啓	お茶の水女子大学
17	マイクロビーム X 線分析応用	高橋 嘉夫	東京大学
18	物質物理	奥部 真樹	東北大学
19	X線トポグラフィー	山口 博隆	産業技術総合研究所
20	動的構造	腰原 伸也	東京工業大学
21	鉱物・合成複雑単結晶	吉朝 朗	熊本大学
22	産業利用	米山 明男	（株）日立製作所中央研究所

PF-UA 幹事名簿

庶務幹事：植草秀裕（東京工業大学）

名簿管理担当庶務副幹事：田中信忠（兼務，昭和大学）

書記担当庶務副幹事：北島昌史（兼務，東京工業大学）

会計幹事：田中信忠（昭和大学）

行事幹事：北島昌史（東京工業大学）

伏信進矢（東京大学）

編集・広報担当幹事

編集幹事：前川雅樹（量子科学技術研究開発機構）*

広報幹事：山本勝宏（名古屋工業大学）

戦略・将来計画担当幹事：朝倉清高（北海道大学）

平井光博（群馬大学）

推薦・選挙管理担当幹事：沼子千弥（千葉大学）

阿部善也（東京理科大学）

共同利用担当幹事：上久保裕生（奈良先端科学技術大学）

米山 明男（㈱日立製作所中央研究所）

教育担当幹事：市川創作（筑波大学）

奥田浩司（京都大学）

任期：2018 年 4 月 1 日～ 2021 年 3 月 31 日

（* 編集幹事の任期は 1 年）

PF-UA 運営委員名簿

任期：2018 年 4 月 1 日～ 2021 年 3 月 31 日

朝倉 清高	北海道大学触媒科学研究所
東 善郎	上智大学理工学部
一國 伸之	千葉大学大学院工学研究科
植草 秀裕	東京工業大学理学院
奥田 浩司	京都大学大学院工学研究科
奥部 真樹	東北大学 金属材料研究所
鍵 裕之	東京大学大学院理学系研究科
小林 寿夫	兵庫県立大学大学院物質理学研究科
腰原 伸也	東京工業大学理学院
近藤 寛	慶應義塾大学理工学部
齋藤 智彦	東京理科大学理学部
佐々木 聡	東京工業大学
佐藤 宇史	東北大学大学院理学研究科
佐藤 友子	広島大学大学院理学研究科
佐藤 衛	横浜市立大学大学院生命医科学研究科
志村 考功	大阪大学大学院工学研究科
鈴木 昭夫	東北大学 大学院理学研究科
田淵 雅夫	名古屋大学シンクロトン光研究センター
手塚 泰久	弘前大学大学院理工学研究科
沼子 千弥	千葉大学大学院理学研究科
増田 卓也	物質・材料研究機構
松村 浩由	立命館大学生命科学部
宮脇 律郎	国立科学博物館地学研究部
山口 博隆	産業技術総合研究所
横谷 明德	量子科学技術研究開発機構
足立 伸一	物質構造科学研究所・放射光科学研究施設
雨宮 健太	物質構造科学研究所・放射光科学研究施設
木村 正雄	物質構造科学研究所・放射光科学研究施設
千田 俊哉	物質構造科学研究所・放射光科学研究施設
船守 展正	物質構造科学研究所・放射光科学研究施設

PF-UA 報告

庶務幹事 植草秀裕

平成 30 年 4 月より清水敏之 PF-UA 新会長の下、新しい幹事会、運営委員会の活動がスタートいたしました。PF-UA ホームページには清水会長の「会長挨拶」が掲載されておりますので、ご覧いただければと思います。PF-UA には、その活動を支える 7 つの小委員会がありますが、それぞれ幹事を委員長、運営委員をメンバーとして組織されました。庶務小委員会は庶務の統括や PF との連絡、行事小委員会は各種学会会合や講習会、また量子ビームサイエンスフェスタや、JSR（日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム）の運営、広報小委員会は PF ニュース等を利用した情報発信、戦略・将来計画検討小委員会は PF-UA や PF の将来計画への提言、推薦・選挙管理小委員会は運営委員会および次期会長の選挙管理、共同利用小委員会は PF ユーザーやユーザーグループに関する意見集約、教育小委員会は講習会などを含む広く教育に関係する事項を扱います。

先日開催されました第 1 回幹事会、第 1 回運営委員会の議事録が PF-UA のホームページまた、本号に掲載されております。

その中で特に PF-UA 会則・細則の検討が行われました。この数年、会則・細則の細かい改定が行われてきましたが、最近の個人情報保護の観点から、より現実にあった方法で会員資格を定め、会員名簿を作成・管理する必要があります。このためには、PF-UA 会則・細則の大きな改定を行う必要があります、年度末の PF-UA 総会に向けてしっかりと議論を行います。また、PF と PF-UA の間の覚え書きについても、会則・細則に合った現実的な形に改定し、早期に取り交わします。

会員増強、特に企業の皆様にも賛助会員として PF-UA の活動に興味を持っていただくこと、また PF-UA、あるいは UG をさらに活性化させる新しい活動の検討も行います。PF-UA、PF を取り巻く環境も常に注視し、両組織が今後も発展できるよう、PF と緊密な連携をとりながら UA の運営を行うことは言うまでもありません。

PF-UA 会員の皆様におかれましても、PF や PF-UA の活動についてご意見、疑問点などございましたら、PF-UA 事務局または庶務幹事までお知らせいただければ幸いです。PF-UA の活動は会員の皆様のご協力により初めて成り立つものです。今後とも皆様からのご支援を心よりお願い申し上げます。

PF-UA 小委員会メンバー

任期： 2018 年 4 月 1 日～2021 年 3 月 31 日

庶務小委員会：植草秀裕（委員長）、近藤寛、鈴木昭夫、田中信忠、田淵雅夫、船守展正

行事小委員会：伏信進矢（委員長）、北島昌史（委員長）、千田俊哉、増田卓也、松村浩由、横谷明德

広報小委員会：前川雅樹（委員長）、山本勝宏（委員長）、雨宮健太、一國伸之、佐藤宇史、宮脇律郎

戦略・将来計画検討小委員会：朝倉清高（委員長）、平井光博（委員長）、足立伸一、鍵裕之、腰原伸也、小林寿夫、佐々木聡、佐藤衛

推薦・選挙管理小委員会：沼子千弥（委員長）、阿部善也（委員長）、奥部真樹、齋藤智彦、船守展正

共同利用小委員会：上久保裕生（委員長）、米山明男（委員長）、雨宮健太、齋藤智彦、松村浩由、山口博隆

教育小委員会：市川創作（委員長）、奥田浩司（委員長）、東善郎、木村正雄、佐藤友子、志村考功、田淵雅夫、手塚泰久

平成 30 年度第 1 回 PF-UA 幹事会議事録

日時：5 月 29 日（火）13 時～15 時

場所：KEK4 号館 1 階セミナーホール

参加者：清水敏之（PF-UA 会長）、植草秀裕（庶務）、田中信忠（会計）、伏信進矢（行事）、朝倉清高（戦略・将来計画）、平井光博（戦略・将来計画）、沼子千弥（推薦・選挙管理）、奥田浩司（教育）、船守展正（運営委員）、伴弘司（オブザーバー）、小杉信博（物質構造科学研究所所長）

議事次第に従い、庶務幹事を司会として平成 30 年度第 1 回幹事会を行った。

会長挨拶（清水 会長）

所長挨拶（小杉 所長）

【報告事項】

- 1) 幹事紹介
- 2) 各幹事の用務内容の確認
会則に記載の各小委員会について用務を確認した。
- 3) 小委員会メンバーの確定
- 4) 会計報告（田中 会計幹事）

平成 29 年度会計報告を行った。単年度黒字を次年度に繰り越す。

5) PF と PF-UA の覚え書きの確認

毎年、PF と PF-UA の覚え書きを取り交わしている。現状に即した内容に修正し、早期に取り交わす予定であることを報告した。

6) 施設報告（船守 運営委員）

【協議事項】

1) 会則の変更について

2) PF-UA 予算（田中 会計幹事）

3) 今後の予定

4) その他

平成 30 年度第 1 回 PF-UA 運営委員会 議事録

日時：5 月 29 日（火）15 時～17 時

場所：KEK4 号館 1 階セミナーホール

参加者：朝倉清高*、植草秀裕*、奥田浩司*、鍵裕之、腰原伸也、近藤 寛、佐々木聡、鈴木昭夫、手塚泰久、沼子千弥、山口博隆、横谷明德、足立伸一、雨宮健太、木村正雄、千田俊哉、船守展正、伏信進矢**、田中信忠**、平井光博**、清水敏之（PF-UA 会長）、小杉信博（物質構造科学研究所所長）、伴弘司（オブザーバー）、兵藤一行（オブザーバー）* 幹事兼任、** 幹事

議事次第に従い、庶務幹事を司会として平成 30 年度第 1 回運営委員会を行った。

会長挨拶（清水会長）

所長挨拶（小杉所長）

【報告事項】（庶務幹事）

1) 幹事紹介

幹事・運営委員構成について紹介した。

2) 小委員会メンバーの確定

各幹事を委員長とする小委員会編成を確定した

3) 会計報告（田中 会計幹事）

平成 29 年度会計報告を承認した。単年度黒字を次年度に繰り越す。

4) PF と PF-UA の覚え書きの確認

毎年、PF と PF-UA の覚え書きを取り交わしている。現状に即した内容に修正し、早期に取り交わす予定であることを報告した。

5) 施設報告（船守 運営委員）

H30 年度 PF・PF-AR 運転予定、運転時間推移、運転予定の詳細、課題数・ユーザー数・論文数推移、BL-19 整備、宿舍建設について報告した。

【協議事項】（庶務幹事）

1) 会則の変更について

第 2 章第 5 条の会員資格について、会員が複数年 PF-UA 会員となる方式が好ましいことを確認した。さらに個人情報管理や第 2 項会員制度が機能するように、修正することを確認し、修正内容について議論を行った。また会則・細則を現状に合うように修正することを確認した。今後は会長、庶務幹事を中心に、施設側とも十分に協議をしながら改定案を策定し、幹事会、運営委員会に報告することとした。

2) PF-UA 予算（田中 会計幹事）

平成 30 年度予算案を承認した。

3) 今後の予定

会則の改定に関連し、第 2 回以降の幹事会、運営委員会を開催する。2019 年 1 月に JSR で PF-UA の集いを行う、2019 年 3 月の量子ビームサイエンスフェスタで PF-UA 総会を行う予定を紹介した。

4) その他

特に会則の改定内容について、意見交換を行った。

SAXS-UG 紹介

京都工芸繊維大学・櫻井伸一（SAXS-UG 代表）
 奈良先端大学院大学・上久保裕生（SAXS-UG 副代表）
 名古屋工業大学大学院・山本勝宏（SAXS-UG 副代表）
 京都大学大学院・奥田浩司（SAXS-UG 副代表）

1. はじめに

小角散乱ユーザーグループ（SAXS-UG）は、その前身である酵素回折計 UG、（旧）小角散乱 UG が合併され、2012 年 4 月に発足しました。2013 年 4 月に BL-9C の SAXS 利用が終了したことともない、その運営を担っていた BL-9C SAXS ユーザーチームが合流し、現在の体制となりました。酵素回折計 UG の活動を含めると、35 年間という、PF-UG の中でも非常に長い歴史を持つ UG です。会員数は現時点で約 90 名、北は北海道大学から南は長崎大学に至るまで、また、会員の研究分野は無機、金属、生物・生命関連、有機、高分子など、ハードからソフトマターに至るまで、多岐にわたっています。昨年 1 年間の発表論文登録数は 59 報（原著論文 53 報、総説・解説記事 6 報）であり、図 1 に示した新 SAXS-UG 発足以来の登録論文数の年次推移を見ると、増加傾向にあることがわかります。小角散乱ビームライン（BL-6A, BL-10C, BL-15A2）の全有効課題数が 120 ですので、そのほぼ半数の論文発表が昨年 1 年間で発表されている計算で、1 つの課題有効期間 2 年の間に課題あたり平均 1 報、という現状です。このように、比較的高いアクティビティに加えて、施設側が行う SAXS ビームラインの高度化に対してユーザー側からも積極的に意見提供や具体的なプランの提案を行うだけでなく、実際に測定解析技術開発を共同で行うなど、その高度化に強くコミットしています。本稿では、このような種々の活動の中から、次の 3 つの項目に絞ってご紹介致します。

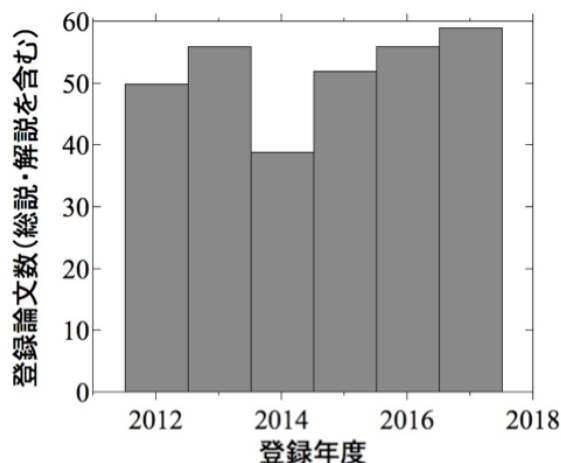


図 1 SAXS-UG にかかる登録論文数の年次推移

- ① データサイエンスに基づく材料寿命予測のための X 線散乱計測の高度化
- ② 蛋白質の構造 / 相互作用解析を指向した μ 流路型自動サンプリングシステムの導入
- ③ Tender X 線利用による GISAXS（微小角入射 X 線小角散乱）測定技法の高度化

2. データサイエンスに基づく材料寿命予測のための X 線散乱計測の高度化

近年、様々な分野で人工知能（AI）による将来予知が可能となってきています。将来予知に関係のありそうなたくさんの情報をもとに、現象発現との因果律を分析して、その現象が起こる確率を割り出します。AI による予知が高精度であっても、多くの場合、因果律に特別の理由がなく、種々の条件が重なった時に、当該の結果が発現する確率が高まる、という類いのものです。科学的に因果律を説明する必要があることは疑う余地はありませんが、支配的因子が数多く存在する場合は、決定論的な予知はほぼ不可能で、確率論的予知がむしろ重要であるということだといえます。このような場合、データサイエンスに基づく手法が有効であることが知られています。時々刻々変化するパラメータを将来予知のシミュレーションの初期値として使うことによって、近未来の予知精度を高めることができます。このような手法は「データ同化」と呼ばれ、典型的な成功例が近年の天気予報の的中精度の向上です。我々はこのようなデータ同化手法を材料破壊に応用することを目指して、ビームライン担当者のご協力を得ながら、データサイエンスの研究者と材料破壊の計算機シミュレーションを専門に研究を行なっている研究者とともにチームを結成して、このプロジェクトを進めています。

本プロジェクトでは、一軸延伸や圧縮変形、曲げ変形といった外的刺激が加えられた時の構造変化を X 線散乱測定によってつぶさに調べ、破壊につながる構造変化のプロセ

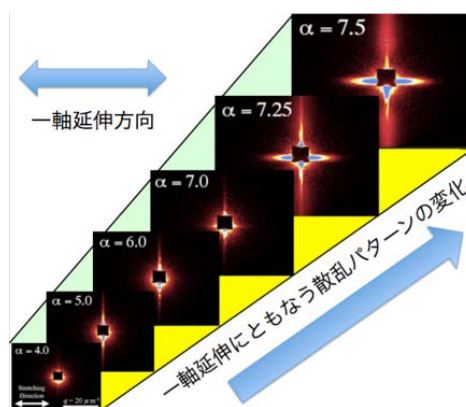


図 2 高分子材料の一軸延伸に伴う超小角 X 線散乱パターンの変化

ス（X線散乱パターンの変化（一例として図2に示す））を明らかにします。このようなプロセスは無数にあるかもしれませんが、案外、少ないかも知れません。いずれにしても、破壊に至るルートはたった一つしかないという訳ではないことだけは確かです。そこで、材料を変形させて行く過程でX線散乱パターン（小角散乱と広角散乱の同時測定）を時分割測定することが、本プロジェクトのねらいですが、同時に、色々な場所における構造変化（空間分布）も明らかにする必要があります。つまり、X線散乱パターンの時間変化と空間分布を同時に調べる必要がある訳です。

本プロジェクトはまだ始まったばかりで、外部資金を獲得するために今年度の科研費に申請を予定しています。材料の破壊予知・寿命予測は、安全・安心な社会構築のために非常に重要ですが、本プロジェクトで目指す目標が達成されれば、色々な重要課題に応用が期待されるため、施設側で進められる技術開発に対してUG側も積極的に関与し、測定解析法の確立に向けて共同で高度化を進めているところです。

3. 蛋白質の構造 / 相互作用解析を指向した μ 流路型自動サンプリングシステムの導入

蛋白質溶液試料を対象としたSAXS（BioSAXS）は、各国の放射光施設でしのぎを削って整備が進められています。近年、欧米ではサイズ排除クロマトグラフィー（Size Exclusion Chromatography, SEC）とSAXSを組み合わせたSEC-SAXSが盛んに行われるようになってきました。当初は、SECによって精製された直後の試料を用いることで経時的に形成される凝集体を完全に除去し、単分散の蛋白質からの散乱を測定することを目的としていました。溶液を流しながら測定することによって、放射光によるサンプルの放射線損傷を低減することが可能となり、相乗的な効果によってデータの信頼性は劇的に向上しました。さらに、低ノイズ・大面積の時間分解測定可能なPhoton counting 検出器の導入が進むにつれ、SECから溶出される試料を高い時間分解能で連続測定することで、凝集体の除去のみならず、分離が難しい混合溶液中の単一複合体に由来する散乱曲線を分離することが可能となり大きな成果を上げています。現在では、SEC-SAXSが測定できる環境は放射光におけるBioSAXSにおいて必須の要件となっています。PFにおいても、2016年から本格的にSEC-SAXSシステムがユーザーに公開され、現在では多くの課題で標準的に利用されるようになっていきます。一方で、比較的弱い相互作用によって形成される、複数の蛋白質からなる複合体においては、交換反応が速い解離会合平衡状態にあるため、SECによって複合体からなる画分を得ることが原理的に困難となります。このような弱い相互作用で関連付けられた分子複合系を対象とした構造・相互作用解析を実現するため、2013～2017年度新学術領域研究（動的秩序と機能）において μ 流路を活用した自動サンプリングデバイスが開発され、現在、PFへの導入が進められています。このデバイスは（i）Inlet channel, （ii）Mixing channel, （iii）

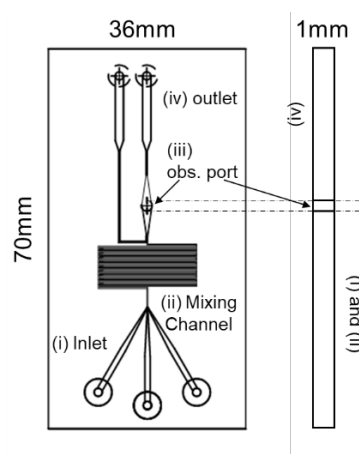


図3 自動サンプリング用 μ 流路デバイス

Observation port, (iv) Outlet channelの4カ所の部位によって構成されています（図3）。

図3に示したデバイスは3つのInlet channelを有しており、シリンジポンプによって流速を制御した3種類の溶液を独立に流入させることができます。このデバイスの最大の特徴は（ii）Mixing channelにあります。この部分には、全長400mmの流路（内容量8 μ L）が折り畳まれています。溝の幅が狭い場合、複数の溶液を1つの流路に合流させると、合流した後もこれらの溶液は混ざり合うことなく層流を形成し、Mixing channelの最下流では各層の幅に比例した割合で溶質が拡散混合した混合溶液が調製されます。各層の幅はInlet channelに流し込まれる溶液の送液速度に比例するため、この混合比率は流速によって任意の値に制御することができます。デバイスの特性上、微小溶液をただそれだけ取り出し測定に供することはできません。代わりに、一般に販売されているシリンジポンプ等を用い、 μ 流路に送液する各溶液の流速を変調させることで、希釈率を連続的に変化させた溶液を調製することが可能です。調製された溶液は、順次、観測部に流入し散乱曲線を連続測定することで、結果的に、様々な濃度比率で混合された溶液の散乱曲線を多数収集することができます。図4に一方に蛋白質溶液、他方に緩衝液を送液した2液混合の実例を示します。

図4aのようにシリンジポンプの流速を調整すると、35分から120分の間に元の蛋白質溶液の5%から97.5%に線形的に順次希釈された溶液が調製され、それに応じた散乱曲線の変化が測定されます（図4b）。散乱曲線の積分強度を計算し時間に対してプロット（図4c）すると、実測値と予測値の間の残差の割合は、低濃度領域で $\pm 2\%$ 程度、高濃度領域で $\pm 0.5\%$ であることがわかります。一般的な分注機の精度は数%であることを考えると、高い精度で濃度が制御されていることがわかります。使用した蛋白質溶液はたかだか100 μ L程度であるにもかかわらず、85点にも上る溶液からの散乱曲線を自動的に収集することができます。ここで示した例は、単に蛋白質を希釈しただけの結果ですが、異なる複数の蛋白質を送液すると、散乱曲線

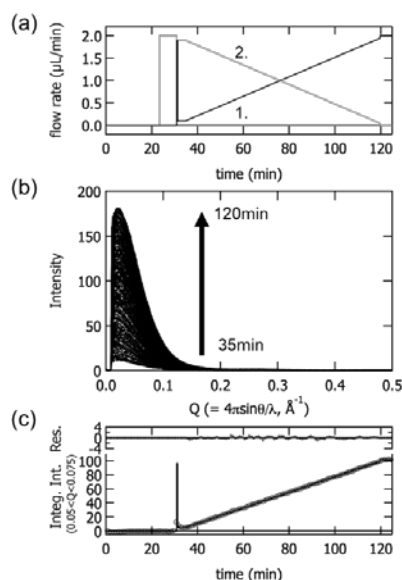


図4 2液混合の応用例。(a) Pump 流速チャート, (b) 自動サンプリングされたオブアルブミン由来の散乱曲線, (c) 積分強度の時間依存性。

を指標とした多次元の滴定実験が可能になり、複合体の構造のみならず、その相互作用（解離定数 K_d ）を評価できます。すでに、PFにおいても SEC-SAXS の測定例は数多く蓄積されつつありますが、複合体が遊離蛋白質と分離できない観測例（ K_d が μM 程度の場合）が数多く見受けられます。このような場合、複合体の構造評価のみならず、その相互作用の解析が可能な本システムは極めて有効であるといえます。現在、施設側で同システムの導入が進められており、UG 側から技術供与を行っています。

4. Tender X 線利用による GISAXS 測定技法の高度化

2014 年に BL-15A2 がアンジュレータービームラインとしてリニューアル整備され、SAXS としては比較的に長いカメラ長とテンダー X 線（2.1-4 eV）の利用が可能になりました。テンダー X 線は、主に GISAXS 法（PF では 2009 年頃の BL-11B での Imaging Plate を使った試行実験が発端）を活用した薄膜の構造解析に利用され、通常の硬 X 線（8-14 keV 程度）にはない、テンダー X 線の利点を活かした研究が実施できます。テンダー X 線を用いた GISAXS の特長は、①薄膜表面から膜厚方向への深さ分解構造解析（ソフトマテリアルに対して数 10 nm ~ 数 100 nm の分解能）が可能、②臨界角が比較的大きいことに起因して入射角を大きく取れることからフットプリントが小さくなる、③X 線吸収端近傍の元素選択的構造解析が可能（BL-15A2 では K 吸収端として以下の元素 P: 2.145 keV, S: 2.472 keV, Cl: 2.822 keV, K: 3.068 keV, Ca: 4.038 keV を対象にすることが可能）、ということが挙げられます。

2014 年秋の利用開始から現在に至る間、施設側によりいくつかの問題点が改善され、利便性が向上してきました。さらに先端研究への展開を目指した高度化を行うため、外部資金の獲得へ向けて、ユーザー有志と施設側との共同

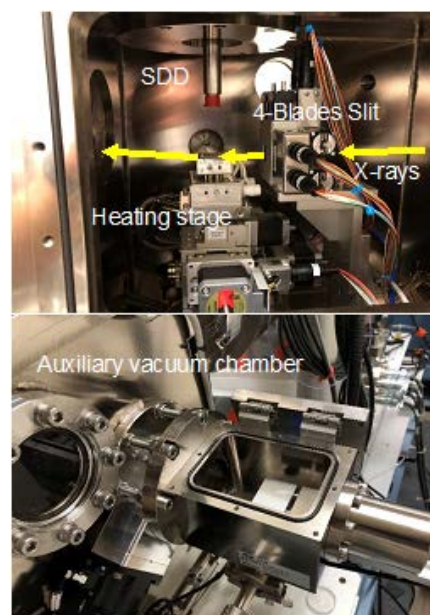


図5 新試料チャンバー。上：試料部，下：試料交換用の副室。

研究が始動し、めでたく 2017 年度から科研費（基盤研究 B: 17H03065）を原資にした高度化をスタートさせました。まず第 1 に従来の試料チャンバーを撤去し新たにデザインしたチャンバーを導入しました（図 5）。新チャンバーにはサンプル交換用の副室を含むサンプル交換機構が装備されており（図 5 下）、試料交換時はこの小さな副室のみを大気開放すればいいため、交換効率が向上しています。また、上流からの寄生散乱をカットするために試料の直前に 4 象限スリットを設置し、試料ステージの稼働軸の増強も行いました。さらに、上記のテンダー X 線を用いた GISAXS の特長③の利点を活かす目的で、新チャンバーには、真空対応のシリコンドリフト検出器（SDD）を導入し、蛍光 X 線の同時検出も可能にしました。ユーザーとの協力で、試料加熱用のヒートステージも以前より導入されており、新チャンバーでも引き続き利用することが可能です。これらのハードウェアのアップグレードに加えて、測定制御ソフトウェアの改良も計画されています。試料面の自動アライメント機能、X 線の斜入射角の自動スキャン機能、異常分散測定のための測定エネルギーの自動スキャン機能などは既に実装されていますが、さらなる自動化に向けてユーザー側の利用経験等を施設側のシステム開発にフィードバックさせるなど、UG 側からも積極的に情報提供、意見交換を行っているところです。

5. 今後の活動

小角散乱 UG では、12 月 20, 21 日に PF 研究会「多様な物質・生命科学研究に広がる小角散乱～多（他）分野の小角散乱を学ぼう！」を企画しています。小角散乱は、無機・金属・生物・高分子など、多くの分野でなくてはならないツールとなっています。しかしながら、初心者

意見を聞くことが多く、また、ともすれば、熟練したユーザーでも小角散乱の種々の有効性を活かすことなく、お決まりの解析方法で満足し研究を慢性的に続けている、という場合があることも否めません。他の分野で実施されている実験やデータ解析の方法、あるいは研究内容自体を知ることが、研究者自身の今後の研究展開の刺激になり、研究の殻を打ち破る良い機会になると思いますが、なかなか、ご自身が所属しておられる学協会以外の研究発表の場には、参加する機会がなく、そのような機会を作ることも困難です。分野の裾野の広がり著しい小角散乱グループのユーザーが一堂に会して、たくさんの研究発表を一つの講演会場で座して聴講できる機会を持つことは、非常に有効であると考え、この PF 研究会を企画致しました。小角散乱 UG の次世代を担う若手～中堅の研究者の方々、ならびに、当 UG で中核的な役割を担っておられる研究者の方々に加え、中性子を用いた研究を展開しておられる研究者にも講演をお願いしております。皆様の積極的なご参加を心よりお待ちしております。

タンパク質結晶構造解析グループ (PX-UG) 紹介

茨城大学・海野昌喜 (PX-UG 代表)
 北海道大学・尾瀬農之 (PX-UG 幹事)
 東京理科大学・西野達哉 (PX-UG 幹事)
 産業技術総合研究所・沼田倫征 (PX-UG 幹事)
 京都大学・藤橋雅宏 (PX-UG 幹事)
 量子科学技術研究開発機構・平野優 (PX-UG 幹事)
 東京大学・鯨井智也 (PX-UG 幹事)
 富士フイルム株式会社・藤川乃り映 (PX-UG 幹事)

1. PX-UG の歴史

タンパク質結晶構造解析グループ (PX-UG) は、1999 年度に三木邦夫先生 (京都大学・現名誉教授) を代表として発足しました。その当時、PF 所内には坂部知平先生のグループがあり、タンパク質結晶用ビームラインのユーザーには仮想的なグループ意識はあったようですが、正式にユーザーグループを立ち上げることになったようです。三木先生はその後 2016 年 3 月まで長きにわたって PX-UG の代表を務められましたが、その年の量子ビームサイエンスフェスタの時に、清水敏之先生 (東京大学) に代表職が引き継がれました。また、そのタイミングで若手ユーザーを中心とした「幹事会」が発足し、ユーザー側の意見や要望を吸い上げ実質的に PF の装置グループに伝えたり、装置グループと協力して講習会を企画・開催するようになりました。幹事会は、全国の大学や研究機関の若手、企業のユーザー 8 名で構成されました。幹事会では PX-UG のホームページを作製し、活動記録や講習会の資料を適宜公開して、ユーザーが情報を共有できるようにしました。清水先生が PF-UA 会長に就任された 2018 年 4 月からは海野 (茨城大学) が PX-UG の代表を仰せつかっております。また同時に、幹事会のメンバーのうち 3 名が入れ替わり、現在、第二期の新たな幹事会 (上記) を構成しています。今後、一定期間ごとにメンバーを少しずつ入れ換えながら多くのユーザーに活動に関心を持っていただき、活動の幅を広げていきたいと考えています。

2. PX-UG の活動

PX-UG は PF-UA の下にあるユーザーグループの中でも最大の会員数から構成されています。正確なメンバー数を把握することはできませんが、有効課題数を参考に換算すると、700 名程度であると考えられます。これまで PX-UG では量子ビームサイエンスフェスタの開催に合わせて会合を開いてきましたが、その他に幹事会を中心として企画した講習会も開催してきました。

PX-UG のホームページの URL は (<http://research.kek.jp/group/pxpflug/>) で、そこにも紹介しておりますが、現在まで 3 回の「中級者講習会」を開催しました (表 1)。

中級者講習会には、毎回 100 名程度の人が参加します。学生も教員も研究員も、まさに「今更聞けない」ことを貪欲に学びたいという方々が集まります。写真は 2018 年 10 月に開催した第 3 回の中級者講習会の様子です (図 1)。今年は新たな試みとして、プログラムのインストールや実際にソフトウェアを使って実践的な構造解析を体験しました。参加者の皆さんには大好評だったと思います。この活動は今後も続けていきたいと思っています (本誌 p.22 参照)。

3. タンパク質結晶構造解析用ビームライン

PF, PF-AR には 5 本のタンパク質結晶構造解析用ビームライン (BL-1A, BL-5A, BL-17A, AR-NE3A, AR-NW12A) があります。それぞれのビームラインの特徴は以



図 1 第 3 回タンパク質結晶構造解析ビームラインユーザー中級者講習会の様子 (2018 年 10 月)

表 1 タンパク質結晶構造解析ビームライン中級者講習会

開催年月日	会場	講習会内容	講習会 HP
2016 年 6 月 24 日	東京医科歯科大学 湯島キャンパス	第 1 回「今更聞けないビームラインの使い方」	http://pfwww.kek.jp/tanpaku/chukyu/1st.html
2017 年 10 月 25 日	東京大学薬学部	第 2 回「今更聞けないデータ処理プログラムの使い方、上手な回折データの取り方」	http://pfwww.kek.jp/tanpaku/chukyu/2nd.html
2018 年 10 月 27 日	東京理科大学 葛飾キャンパス	第 3 回「タンパク質結晶構造解析ソフトウェアの使い方について学ぶ」	http://pfwww.kek.jp/tanpaku/chukyu/3rd.html

下です。

- ・BL-1A, BL-17A: 微結晶用および低エネルギー SAD (単波長異常分散) 法用ビームライン
- ・BL-5A, AR-NE3A, AR-NW12A: 巨大分子 (大型格子) 用・高分解能用・ハイスループット用ビームライン

タンパク質のX線結晶構造解析には、特徴的に格子定数が大きいことやX線による照射損傷の問題があります。また、反応を触媒する酵素の場合には、ただ単にタンパク質の構造を解明するだけではなく反応中間体など様々な状態の構造を明らかにする必要がある場合があります。それに加えて、結晶構造解析の普遍的な課題である「位相問題」があるため、これらのビームラインをうまく選択し駆使して構造を解析していきます。通常、タンパク質のX線結晶構造解析を行う場合、回折実験で用いる入射X線の波長は1 Å 近辺のものです。位相問題を解決するために波長を変更して使います。また、重原子等、タンパク質結晶中に導入した特殊な元素由来の吸収端波長を実験的に求めるため、各ビームラインには蛍光X線検出器が備え付けられています。さらに、タンパク質中の天然の硫黄の異常散乱を利用したい時には長波長X線を用います。BL-1Aでは最長3.3 Åの波長のX線を利用することもできます。また、酵素の反応中間体やタンパク質結晶のX線照射ダメージを観察するため、AR-NW12Aでは、ビームライン近くに結晶用の分光光度計が備えられています。

各ビームラインには、低温窒素吹付装置の他、結晶マウント用のロボットが標準で装備されており、それを制御するためのソフトウェアもGUIでユーザーが簡単に使えるようになっています。また、現在は全てのビームラインにピクセルアレイ型検出器が導入され、より速くより高感度にデータを収集することができるようになってきています。

4. 構造生物学分野を取り巻く状況とこれからのPX-UG

タンパク質結晶構造解析は「構造生物学」分野の中で最も強力な手法の一つです。構造生物学分野では2002～2006年度の文科省のプロジェクト「タンパク3000」、2007～2011年度の「ターゲットタンパク研究」、2012～2016年度の「創薬等支援技術基盤プラットフォーム(PDIS)」、2017年度～「創薬等先端技術支援プラットフォーム(BINDS)」というように大きなプロジェクトが動くことによって、装置や手法・ソフトウェアの高度化など、分野全体の進展がありましたし、現在も発展し続けています。特に、2013年にクライオ電子顕微鏡(クライオEM)でのタンパク質構造解析において電子の直接検出カメラの導入などもあり「分解能革命」が起こったことで、構造生物学分野の様相が変わってきました。ご存知のように2017年には「クライオ電子顕微鏡の開発」がノーベル化学賞を受賞しています。PX-UGもこれに無関係ではなく、(溶液)小角散乱やクライオEM、各種分光学的手法や量子化学計算・ビッグデータなどを相補的・複合的に使うことをより一層意識するようになってきました。PX-UGのメンバーは、加速する「生命の神秘の解明」に深くかかわっていると言

えます。

タンパク質の結晶構造解析には、より速くより精密に構造を可視化することが求められていると思います。PFでは構造生物学研究センターおよびビームライン担当者、PF施設側の不断の努力によって、ルーティンの測定については完全自動化が行われるようになりました。また、リモート制御における遠隔実験も行われています。今後、この流れは一層加速していくと思われます。

タンパク質結晶構造解析において放射光施設の利用は必要不可欠なものであります。しかしながら、予算削減に伴うビームタイムの減少はユーザーの皆が実感しているところではないかと思っています。ビームタイムの減少は、論文数にも反映されており、欧米と比較して遅れを取っていると言えますし、アジアの中の地位も相対的に下がってきているのが現状です。将来にわたって安定的に放射光施設を利用するためにも現在我々が真剣に考えていかなければならない問題が山積しています。PX-UGは設立の目的にもありますように、お互いの交流を通して構造生物学研究を推進することを第一の目的としていますが、このような昨今の状況にも目を向けざるを得ません。今後も高いアクティビティを保っていくためにも、PX-UGとして多くのユーザーの意見を集約して積極的に発言をしていく必要も出てくると思います。また、他のPF-UAのグループや新たな手法を用いるコミュニティとも積極的に交流し、情報を取り入れ、PX-UGを益々発展させていく必要があります。

X線発光ユーザーグループ紹介

弘前大学 手塚泰久

1. 概要

X線発光ユーザーグループ(UG)は、設立当初「軟X線発光UG」でしたが、後に硬X線発光ユーザーも含めて現在のUGになりました。現在使用している軟X線発光分光器は、1996年に物性研グループがS課題でBL-2Cに建設し維持管理していたものです[1]。それを、2003年に手塚が代表を務める軟X線発光UGが引き継いで今に至ります[2]。以降、発光分光器の維持管理及び共同利用の対応は、軟X線発光ユーザーグループが行っています。また、UGの有志メンバーによって装置の改造がなされ、データ取得の効率化や、使いやすさの向上が図られました。2010年からはBL-2Cの発光分光器をUG運営ステーションとして運営していましたが、BL-2Cの廃止とともに終了しています。その後、発光分光器は移動可能に改造され、BL-16やBL-13での実験を行っています。PFでの共同利用実験に関しては引き続きUGが運営をしています。PFでの責任者として足立純一さんに維持管理をお引き受けていただいています。

硬X線発光分光装置(通称エスカルゴ)は、BL-2Cの発光分光器とほぼ同時期に当時PFの職員だった岩住さん(大

阪府立大)によって建設されました。しばらくは共同利用に供されていましたが、岩住さんが異動されるとともに、維持管理をUGが行うこととし、UG名も広くX線発光UGとすることにしました。ここでもPFでの責任者を杉山弘さんにお引き受けいただいています。以前は、BL-28やBL-15での実験も行っていましたが、現在はBL-7Cでの利用のみになっています。

軟X線発光、硬X線発光共にUGが維持管理を行い、共同利用への提供にも尽力しています。装置の利用には移動・立ち上げが必要なためUGの関与が必要であることや、共同利用のやり方が外から見えづらいこともありますので、発光分光器の利用をお考えの方はUGにご相談いただければと思います。以下、これまでの成果をかいつまんでご紹介します。発光分光は、photon-in/photon-outの実験ですので、試料の伝導性が必要なく、絶縁体や表面処理が難しいナノ粒子の電子構造の研究に適しています。

2. 軟X線発光

BL-2Cの発光分光器は、偏光依存性測定のために作られた分光器です[3]。BL-2Cは直線偏光のアンジュレータビームラインでしたので、偏光依存性を測定するために発光分光器は放射光ビームを軸に回転するように作られています。励起光と同じ偏光を含んでいる発光(偏光保存/polarized)と、同じ偏光を含まない発光(偏光非保存/depolarized)の2配置で測定できます。ただし、現在は偏光可変のビームラインで実験していますので、分光器の回転は使用していません。

図1は、 Ti_2O_3 のTi 2p共鳴発光スペクトルの偏光依存性です[4]。(a)はTi 3d $\rightarrow$ 2p発光(図のエネルギー範囲)をプローブする部分発光収量法で測定したTi 2p吸収スペクトル(PPY)とそこに含まれている弾性散乱成分を除いたもの(EEPY)です。それぞれ、実線が偏光保存(pol.)配置、青丸が偏光非保存(depol.)配置でのスペクトルを示しています。(b), (c)は吸収の各エネルギーで励起した発光スペクトルで、それぞれ偏光保存と偏光非保存配置での測定結果を等高線表示にしたものです。図の横軸は励起エネルギー、縦軸が発光エネルギーで、図を縦にスライスしたものが、個々の発光スペクトルに対応しています。吸収端以上の励起エネルギーで観測される蛍光線($L\alpha_{1,2}$, $L\beta$)が発光エネルギー一定で観測されているのに対して、ラマン散乱が励起エネルギーの変化とともに発光エネルギーを変化させて観測されています。弾性散乱ピークは、(b)の偏光保存配置でのみ観測され、偏光非保存配置では観測されていません。ラマン散乱には2種類の励起が観測されており、低エネルギーの励起はdd励起、やや高エネルギーに観測されているのは電荷移動(CT)励起とみなされ、それぞれさらに複数のピークが観測されています。これらのデータから、特定の蛍光線の部分だけを切り取れば、寿命フリーの高分解能吸収スペクトルが得られ、ラマン散乱の素励起の部分を取り除くとその素励起の励起エネルギー依存性が得られます。吸収スペクトルだけでは判然としない

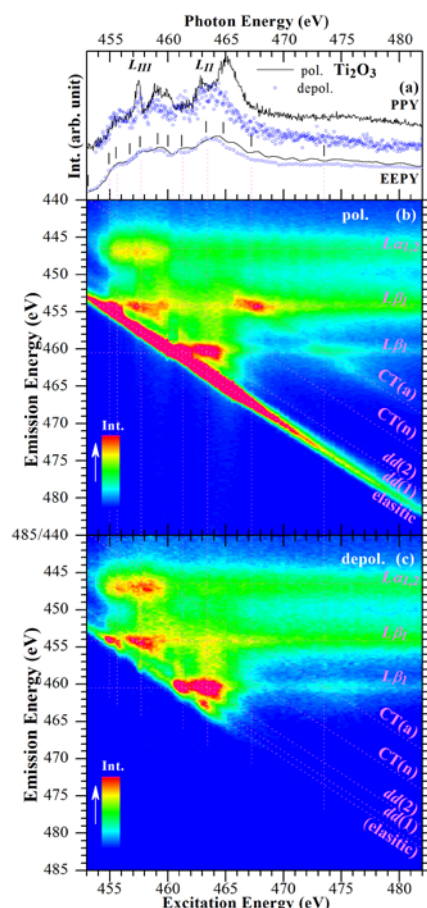


図1 Ti_2O_3 のTi 2p共鳴X線発光スペクトル。異なる偏光配置で測定したスペクトルを等高線表示にしてある。

素励起の挙動が明らかになり、物性研究上貴重な情報が得られます。

この結果は、以前にビームラインとの同期が取れていたBL-2Cで測定したもので、現在はこのような細かい測定はできないのが現状です。今後、BL-16やBL-13でもビームラインとの同期の可能性を探り、また詳細測定が可能になるように努めていきたいと考えています。一方で、BL-2Cは直線偏光のみであり、偏光依存性は分光器を回転させることで測定しました。現在BL-13やBL-16は偏光可変のビームラインですので、分光器との同期が取ればより精度の高い実験が可能になると考えられます。

図2は、酸化バナジウム V_2O_3 ナノ結晶(粒径: 10 nm程度)の、O K XAS(発光収量)とSXESスペクトルです[5]。同時に測定したミクロン粒子については、室温と低温(65 K)のXASスペクトルで明瞭なスペクトルの変化が見られ、約160 Kで起こる金属絶縁体転移の発現が確認できる一方で、ナノ結晶については、室温と低温(58 K)でスペクトルに変化が見られず、金属絶縁体転移が消失していることが示されました。また、ナノ結晶では、530 eVのV 3d a_{1g} ピークの幅が大きく変化しており、低エネルギーの e_g^* バンドとの重なりを大きくし、金属相の安定化を促し、金属絶縁体転移を消失させたと考えられます。

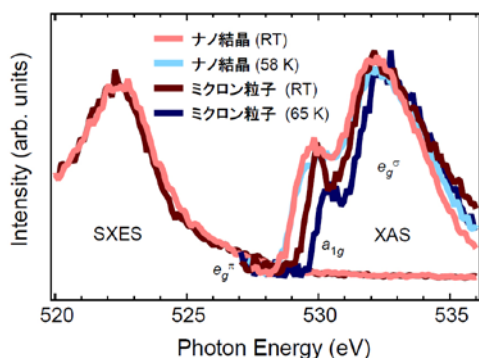


図2 V_2O_3 ナノ結晶の、O K XAS と共鳴 SXES スペクトル。

3. 硬X線発光

図3は、硬X線発光分光装置で測定した、 TiO_2 のTi K 共鳴X線ラマン散乱 (XRS) の結果と種々の分光スペクトルの比較です [6]。(e)は、以前に測定した逆光電子スペクトルですが、XAFS スペクトルと構造が対応していて、電気双極子遷移 (ED) と言われている構造がバンドの3d 構造に対応していることがわかります。(d)がTi K 端におけるXAFS スペクトルです。主構造はTi 4p の状態を示していますが、吸収端にはTi 3d への四重極遷移 (EQ) が観測されています。その吸収端直下と、更に4 eV 低いエネルギーで励起したXRS が、それぞれ (b) と (c) に示されています。(b)は3d 状態への共鳴条件で、(c)は非共鳴条件に近いスペクトルになります。このラマン散乱で観測している素励起は、内殻2p から非占有準位への励起で、エネルギー損失は450 eV 程度になります。エネルギーが一定である内殻からの励起を観測することで、非占有準位の状態密度を反映したスペクトルが得られます。ラマン散乱の選択側から非共鳴条件では非占有4p への励起 (単極子) が観測され、3d に共鳴したときには本来禁制である3d への

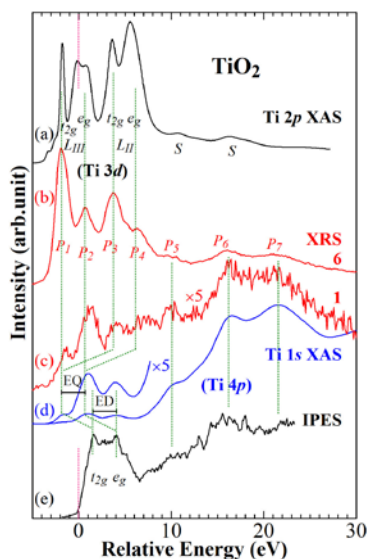


図3 TiO_2 のTi K 共鳴X線ラマン散乱スペクトルと種々の分光スペクトルとの比較。

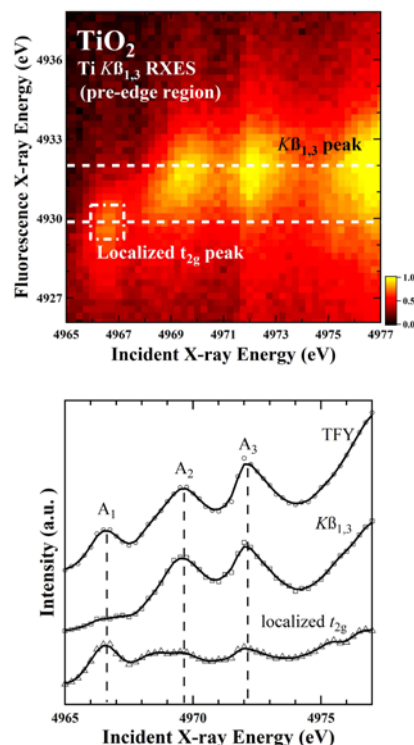


図4 TiO_2 のTi $L\beta_{1,3}$ 共鳴発光スペクトルの二次元強度図(上図)と、全蛍光収量 (TFY) および各蛍光線強度で得られるX線吸収スペクトルの比較 (下図)。

励起 (双極子) が活性化され共鳴増大しています。(a)のスペクトルは、Ti 2p 吸収スペクトルで非占有3d 状態を示していますが、(b)のスペクトルが非常に似ていることがわかります。このように内殻励起によるXRS 測定は、非占有準位の状態密度の測定に有効で、異なる状態を同じ条件下で測定できることが大きな利点であります。また、XAFS スペクトルでは高エネルギー側にEXAFS 振動が重なりますが、XRS ではそれがなく、生のバンド構造が観測されていると考えられます。XRS は、単結晶の測定ができたり、絶縁体の測定ができたりすることを考えると、応用範囲はかなり広く、物性研究に有効に適応できるものと考えています。

硬X線発光では最近、自動測定が可能になりました。広島大の中島さんを中心に、PF の野澤さんの協力のもと、ビームラインとの同期がとれるようになり、連続で発光スペクトルの測定が可能です。図4は TiO_2 での結果です。上図は、Ti K 端のプリエッジ近傍で観測したTi $L\beta_{1,3}$ スペクトルを、入射光エネルギーを横軸に、蛍光X線エネルギーを縦軸にして示したカラーマップです。下図は、全強度を横軸 (入射X線軸) に射影して得られる全蛍光収量スペクトル (TFY) と、 $L\beta_{1,3}$ 線近傍の強度だけをトレースしたスペクトル、さらに局在3d t_{2g} 準位近傍の強度だけをトレースしたスペクトルです。蛍光X線を高分解能で測定することで、これまで実験的に明らかにできずにいた局在的な電子状態などを効率的に選別して議論することが可能になります。これはHERFD-XAFS (High energy resolution

fluorescence detection XAFS) として、昨今欧米を中心に、新たな物性研究へのアプローチとして利用されています。

- [1] Y. Harada, *et al.*, J. Synchrotron Rad. **5**, 1013 (1998).
- [2] PF NEWS Vol. **27** No. 1 MAY 2009
- [3] http://pfwww.kek.jp/users_info/station_spec/apparatus/softxray_bunkoki.html
- [4] Y. Tezuka, *et al.*, J. Soc. Phys. Jpn. **86**, 124713 (2017).
- [5] Y. Ishiwata, *et al.*, Phys. Rev. **B86**, 035449 (2012).
- [6] Y. Tezuka, *et al.*, J. Soc. Phys. Jpn. **83**, 014707 (2014).

平成 30 年度第 2 回 PF-UA 幹事会・運営委員会 議事録

日時：平成 30 年 11 月 12 日 15:00 ～ 17:00

場所：高エネルギー加速器研究機構つくばキャンパス
4 号館 1 階セミナーホール

出席者：[幹事会] 清水敏之（会長）、植草秀裕（庶務）、伏信進矢（行事）、平井光博（戦略・将来計画）、阿部善也（推薦・選挙管理）、上久保裕生（共同利用）、奥田浩司（教育）、北島昌史（書記・行事）[運営委員会] 東善郎、一國伸之、鍵裕之、小林寿夫、腰原伸也、佐藤友子、志村考功、鈴木昭夫、手塚泰久、宮脇律郎、山口博隆、横谷明德、足立伸一、雨宮健太、船守展正

・会長挨拶（清水 会長）・議事次第紹介（植草 庶務幹事）

【報告事項】

- ・行事報告
 - ・量子ビームサイエンスフェスタ（QBSF）日程 3/12 ～ 13 会場 エポカルつくば
 - ・PF-UA の集い 日程 1 月 11 日 会場 JSR2019 福岡国際会議場
- ・編集・広報報告 PF news の PF-UA だよりでの UG 紹介を掲載再開
- ・施設報告
 - ・PF highlight2017, 年報 2017 を公開
 - ・平成 30 年度 PF, PF-AR の運転時間
 - ・PF-AR の 5 GeV 運転の検討について
 - ・PF BL-19 建設について
 - ・物構研と加速器の改組について

【協議事項】

- ・新 UG 設立申請
 - ・原子力基盤研究 UG の新設について PF 側担当者より説明があり、承認された。
- ・PF-UA 会則・細則について、下記の方針に従った改定案が提案され協議を行った。
 - ・個人情報の取扱の厳格化
 - ・会員資格の整理、実態に即した項目、文言の整理・修正協議の結果、改定案に示された改定の方角性を認め、引き

続き細部の検討を進めることとした。

- ・今後の予定
- ・会則・細則の改定について、意見を 12 月中に集約し、運営委員会による改定案を決定
- ・2019 年 3 月の総会で改定案議決
- ・JSR2019 で PF-UA の集い開催（2019 年 1 月 11 日）
- ・量子ビームサイエンスフェスタ（2019 年 3 月）にて PF-UA 総会開催

平成 30 年度第 3 回 PF-UA 幹事会・運営委員会 議事録

日時：平成 31 年 1 月 11 日 10:30 ～ 11:30

場所：福岡国際会議場 会議室 1 (404)

出席者：[幹事会] 清水敏之（会長）、植草秀裕（庶務）、奥田浩司（教育）[運営委員会] 横谷明德、手塚泰久、雨宮健太、足立伸一、船守展正

- ・会長挨拶（清水 会長）に続き、庶務幹事が議事次第を紹介し、進行役を務めた。

【報告事項】

- ・行事報告
 - 2018 年度 量子ビームサイエンスフェスタ (<http://qbs-festa.kek.jp/2018/>) の開催について報告した。日程は 2019/3/12 ～ 13、場所はつくば国際会議場である。3/11 に UG ミーティング、3/12 に幹事会・運営委員会、3/13 に総会を予定している。企業展示・協賛会員の現状について報告した。
- ・施設報告（船守 委員）
 - PF-AR の 5 GeV 運転、次年度の運転に係る事項、物構研と加速器の改組について、BL-19 整備状況について報告した。
- ・PF-UA の集いの議事の確認
 - 1/11 日午後に開催される PF-UA の集いの議事を確認した。

【協議事項】

- ・PF-UA 会則・細則について
 - 2018 年 11 月 12 日の PF-UA 幹事会・運営委員会で協議し改定の方角を認めた原案について、さらに細部を検討して改定案とし、2019/1/7 まで運営委員による意見を集約した経緯を紹介した。協議の結果、先の改定案を PF-UA 総会に提出することとした。総会に先立って改定案は PF-UA ホームページで公開する。
- ・IMSS と PF-UA の相互協力に関する覚書について
 - 覚書の内容を紹介し、会則・細則の改定後に物質構造科学研究所所長と取り交わすこととした。
- ・その他
 - 総合討論を行い、今後の予定を確認した。

平成 30 年度 PF-UA の集い 議事録

日時：平成 31 年 1 月 11 日 12:00 ～ 13:00

場所：福岡国際会議場 C 会場

- ・ 会長挨拶（清水 会長）に続き、庶務幹事が進行役を務めた。
- ・ 2018 年度 量子ビームサイエンスフェスタ (<http://qbs-festa.kek.jp/2018/>) の開催について報告した。
- ・ PF-AR の 5 GeV 運転，次年度の運転に係る事項，物構研と加速器の改組について，BL-19 整備状況について報告した。
- ・ PF-UA 会則・細則改定について，運営委員会における協議の経緯と改定の概要を説明した。改定案は PF-UA ホームページに公開される。
- ・ IMSS と PF-UA の相互協力に関する覚書について紹介した。
- ・ その他総合討論を行った。