

### 「2018年度量子ビームサイエンスフェスタ 第10回 MLF シンポジウム 第36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 小野寛太

2018年度量子ビームサイエンスフェスタ、第10回 MLF シンポジウム、第36回 PF シンポジウムは、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- ユーザアソシエーション (PF-UA)、J-PARC MLF 利用者懇談会の共同主催で、茨城県、つくば市、東海村の後援と21の学術団体の協賛のもと、2019年3月12日(火)、13日(水)の2日間につくば市のつくば国際会議場(エポカルつくば)にて開催されました。2015年からは名称を「量子ビームサイエンスフェスタ」として開催しておりますが、この名称もすでにユーザーの皆様にも定着したものだと思えます。量子ビームサイエンスフェスタでは、放射光、中性子、ミュオン、低速陽電子などの多彩なプローブを用いた量子ビーム利用研究の推進とサイエンスの発展を目的として、量子ビーム利用ユーザーと量子ビーム施設のスタッフが一堂に会し、プローブの垣根を超えて交流し議論できる場を目指して開催しております。今回も約580名にご参加いただき、複数の量子ビームを利用したマルチプローブ研究や、量子ビーム科学と情報科学との融合により展開される新しいサイエンスなど、量子ビームサイエンスフェスタならではのテーマで盛んな議論が行われました。

3月12日(火)の量子ビームサイエンスフェスタは開会宣言ののち、小杉信博構研所長の開会挨拶から始まりました。基調講演では、近年進展の著しい物質・生命科学と情報科学との協奏についてお二人の先生にご講演いた



図1 大ホールでの基調講演の様子



図2 基調講演を行う豊田中央研究所・武市憲典博士(上)と東京大学・吉川雅英教授(下)

きました。豊田中央研究所の武市憲典博士には、「マテリアルズ・インフォマティクスの現状と展望」と題し、新たな機械学習を用いたデータ駆動型の材料開発手法、マテリアルズ・インフォマティクス(MI)について、MIは真に役立つ技術なのかという疑問に始まり、単なる工期短縮やコストダウンに留まらず、循環型社会の実現に向けて産業界が果たすべき役割と、そのために必要なMIの位置づけについての期待と責務について、最新の研究成果を交えて非常に明解なご講演をしていただきました。東京大学の吉川雅英教授には、「クライオ電子顕微鏡は2Åに達するのになぜ30年もかかったか?」という興味深い内容についてご講演いただきました。電子顕微鏡を用いた生体分子の構造解析の高分解能化に至る道筋について、「水」の問題にフォーカスし、これらを解決してきた凍結技術、クライオステージ、電子線直接検知型カメラ、高度な画像解析などについて分かりやすくご説明いただいたのち、今後のクライオ電子顕微鏡法の発展の可能性と、解決すべき問題についてご講演いただきました。マテリアルズ・インフォマティクスとクライオ電子顕微鏡は量子ビーム利用ユーザーの誰もが興味を持っている話題であり、研究の第一線で活躍されている武市先生、吉川先生の分かりやすい基調講演により参加者の皆様の理解が深まったことと確信しています。続く来賓挨拶では、文部科学省・量子研究推進室の奥室長(大榎室長補佐代読)および山内正則 KEK 機構長からご挨拶がありました。その後、参加者全員でステージ上に上がり恒例の記念撮影が行われました。

午後にはポスターセッションとパラレルセッションが行われました。ポスターセッションでは量子ビーム科学の多岐にわたる分野から300件を超える発表があり、二つの会場のあちこちで熱い議論が交わされました。学生によるポスター発表についてPF-UA、J-PARC MLF 利用者懇談会に



図3 PFシンポジウムでの様子

よる審査が行われ、奨励賞として優秀な発表が6件選出されました。パラレルセッションでは以下の6つのセッションが開催されました。(A1) 量子ビーム × 情報科学 (生命科学), (A2) 量子ビーム × 情報科学 (物質科学), (B1・B2) 産業利用, (C1) 強相関物質科学, (C2) ソフトマター研究。サイエンスフェスタは、従来のプローブやサイエンス分野の垣根を超えて新しい分野を切り開くことを目的としており、今回のサイエンスフェスタでは「情報科学と量子ビームとの共奏」をテーマに、基調講演と合わせて新しいサイエンスの方向性を参加者全員で議論できるようにセッションを構成しました。

セッション終了後には、つくば国際会議場のアトリウムで懇親会が開かれました。物構研の小杉信博所長の開会挨拶により始まり、文部科学省・素核室の轟室長よりご挨拶を、また山田修東海村村長より乾杯のご挨拶を頂きました。懇親会中には学生奨励賞の授賞式が行われ、その中で受賞者が一言ずつ喜びを語ったのちに、清水敏之 PF-UA 会長と久保謙哉 MLF 利用者懇談会会長からお言葉を頂きました。審査委員の方々のご尽力により、迅速に受賞者を決定

し、受賞者全員に授賞式に参加して頂くことが出来ました。審査委員をお引き受け頂いた方々に感謝いたします。参加者で量子ビーム科学について大いに懇談したのち、日本原子力開発機構の三浦理事に続き、CROSS 中性子科学センターの横溝センター長よりご挨拶をいただきました。最後に MLF 金谷ディビジョン長より閉会の挨拶とともに、来年度は水戸で開催することと来年度の実行委員長の紹介があり、懇親会は終了いたしました。

3月13日(水)には第10回 MLF シンポジウムと第36回 PF シンポジウムと MLF シンポジウムが平行で開催されました。MLF シンポジウムでは、金谷 MLF ディビジョン長の挨拶に続き、山梨大学の犬飼潤治教授による「量子ビームを用いた固体高分子燃料電池の解析」と題した基調講演が行われました。その後、施設報告と2つのサイエンスセッションののち三宅康博 MLF 副ディビジョン長から閉会の挨拶がありました。PF シンポジウムでは清水敏之 PF-UA 会長の挨拶に続き、PF の施設報告、将来計画、施設・センター報告が行われ、最後に小杉物構研所長から挨拶がありました。

来年度のサイエンスフェスタは2020年3月12日(木)～14日(土)に水戸の茨城県立県民文化センターで開催予定です。今後の量子ビーム科学研究の益々の発展のために本サイエンスフェスタが貢献できるよう、PF スタッフ、MLF スタッフ一同で頑張る所存でございますので、今後ともよろしく願いいたします。最後になりましたが、サイエンスフェスタ開催にあたっては、事前準備から当日まで、献身的に活動していただいた実行委員の方々、当日一生懸命手伝って下さったアルバイトの学生の皆様、そして、サイエンスフェスタ運営に関し、事務手続きから運営まで全てを円滑に進めて頂き、本サイエンスフェスタを献身的に支えて下さいました事務局の皆様に深く御礼申しあげます。



図4 集合写真

## 「2018年度量子ビームサイエンスフェスタ」に参加して

弘前大学大学院理工学研究科  
博士前期課程二年 上出晴輝

つくば市のつくば国際会議場で3月12日(火)13日(水)に2018年度量子ビームサイエンスフェスタ第10回MLFシンポジウム/第36回PFシンポジウムが開催されました。

12日は合同セッション、13日はパラレルセッションが行われ、筆者は12日の合同セッションのみ参加しました。12日は晴れ。寒さを感じながらも春の陽気に包まれるサイエンスフェスタ当日でした。今回はつくば国際会議場が会場となり、つくばセンターからバスや徒歩で来られた方も多いようでした。筆者はKEKに宿泊中であつたので、会場直送の送迎バスを利用しました。

会場は吹き抜けで、一般展示室、小ホール、大ホール等があり、1000人規模の収容が可能だそうです。初参加ということもあり、慣れない空気感の中、新鮮な気分がいっぱいでした。ここまで多くの研究者が一堂に会する場に触れることがなかったため、放射光に関わるイベントの規模に驚き、感動しました。

筆者はポスターセッションで発表も行いました。ポスターセッションでは学生対象のポスター賞の審査があり、筆者も参加しました。1時間程度の短い時間に分野の異なる方々と意見を交わす貴重な機会となりました。

筆者の研究するペロブスカイトに関する発表を聞くことも出来ました。ペロブスカイト  $\text{CaMn}_{1-x}\text{Sb}_x\text{O}_3$  の結晶構造と磁気構造とプロトン導電性層状ペロブスカイト  $\text{Sr}_2\text{Ti}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_{4.6}$  ( $\text{M}=\text{Fe}, \text{Al}$ ) の結晶構造は特に勉強になりました。

ポスター賞はその後のパラレルセッションに発表があり、受賞者は多くの関係者を前に表彰されました。評価の機会は貴重であり、筆者を含む学生にとってモチベーションや成長のきっかけになると感じました。

午前に行われた基調講演では、マテリアルズ・インフォマティクスの現状と展望、クライオ電子顕微鏡は2 Åに達

するのになぜ30年もかかったのか、という題の講演が行われました。前者は近年注目されている機械学習による材料開発であり、未だ発展途中でポテンシャルを秘めているが、その位置づけを議論するものでした。MI研究では不要と思われる領域のデータにも積極的に研究を行うことができるという話を聞き、興味深いと感じました。後者はクライオ電子顕微鏡について測定精度、測定時間の技術的改善があったことが分かりました。このような高度な技術をひとつの施設のように利用できることに驚きました。

PFリングは利用開始から30年以上が経過しPF-ARなどを含めると約50本のビームラインで3,000名を超えるユーザーが利用していますが、引き続き厳しい予算と電気料金の値上がりで加速器運転時間が減少しており、ビームライン運営費の節約に加え、産業利用促進運転やPF-ARの消費電力を抑制する5 GeV運転が試行されるそうです。筆者に関わる研究でも昨年に続き、自動測定による実験の効率化が行われ、ビームタイムの効率的利用、産業利用促進などを取り入れることでユーザー実験時間の確保が進んでいます。

2018年度運営報告の特記事項としてPFとPF-ARの同時トップアップ運転の開始、BL-19の建設、PF-AR 5 GeV運転スタディの実施、産業利用促進運転制度の試行があげられました。

これらの報告より、PFとPF-ARについて予算の制約はあるが、計画が縮小するものではなく、むしろ規模の拡大や技術開発、技術導入など前進する姿勢を感じ取りました。

サイエンスフェスタを通して、様々な性質の光源を学問に利用できる環境、放射光に関わる意見を交わす環境の重要性を実感しました。各分野の研究はそれぞれ一見異なるようで、物質のミクロな構造や振る舞いを評価する点で共通するもので、その中でこんなにも多分野で様々な内容が発表されていることに驚きました。

また、私は懇親会に参加しませんでした。特に懇親会は分野、年齢の垣根を越えて交流できる貴重な機会だと思います。分野が違っても、知識だけでなく見えている世界の違いにも気付かされます。満足していること、不足していることを共有することで置かれている環境を評価することができます。学術的なことを超えた情報を得ることもできます。年齢が違うことが特段交流しにくいということはないですが、年齢が近いと交流しやすいと感じることが度々あります。学生という枠組みで交流する場のようなものがあれば、積極的に参加したいと思いました。

最後に、執筆の機会を頂いた編集委員の方々に感謝申し上げます。

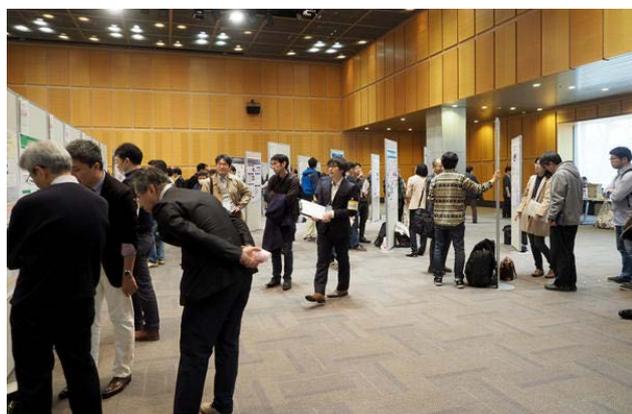


図1 ポスターセッションの様子

## 「第1回クライオ電顕解析初心者講習会 ～データ処理～」開催報告

放射光科学第二研究系 湯本史明

タンパク質の構造生物学分野は、近年のクライオ電子顕微鏡（クライオ電顕）技術の発展により、大きく様変わりしている最中にある。それは、クライオ電顕の装置や技術である電子直接検出器、位相板、解析ソフトウェアにおいて革新が相次ぎ、結晶化が困難であったようなタンパク質や超分子複合体であっても近原子分解能での立体構造解析が行われるようになってきたためである。この分解能革命と呼ばれる時代に突入したのは6年ほど前、2013年初頭に、Chang グループ（カリフォルニア大学サンフランシスコ校）が電子直接検出器 K2 Summit（Gatan 社）を使って、膜タンパク質 TRPV1 チャンネルの構造を分解能 3.4 Å で決定し、報告したことが大きな転機の一つとなっていた。その後、世界各地で最新鋭の電子顕微鏡の導入が相次ぎ、最近では、著名誌にて毎週のようにクライオ電顕による構造決定が報告される状況となっている。

このような状況のもと、高エネルギー加速器研究機構（KEK）・物質構造科学研究所（物構研）・構造生物学研究センターにおいても、2018年3月に200 kVの電子顕微鏡 Talos Arctica（Thermo Fisher Scientific 社）や電子直接検出器 Falcon 3 が導入され、同年10月から共同利用が開始された。このクライオ電顕施設では、物構研の安達成彦氏、川崎政人氏が中心となって測定支援が行われ、日々、アカデミアや産業界のユーザーによる構造解析用サンプルのスクリーニングやデータ測定が進められている。このようにデータ測定の環境は整ってきた背景のもとで、ユーザーコミュニティの中で、クライオ電顕の単粒子解析のデータ処理について学ぶ機会の必要性が顕になってきた。

そこで、2018年12月13日（木）～14日（金）、KEK つくばキャンパスにおいて、クライオ電顕解析の初心者講習会を開催した。参加対象者を、クライオ電顕によるタンパク質の単粒子解析に興味はあるものの、自身では解析されたことがない方（定員25名）とさせていただいたとこ



図2 会場の様子

ろ2倍近くの応募があり、データ解析に対する関心の高さが伺えた。なお、今回はアカデミアから20名（博士課程学生1名）、企業から5名参加されており、X線結晶構造解析をツールとして研究室を主宰されている先生方も多くが参加されていた。残念ながら、解析環境の数に限りがあったために参加できなかった方々には、次回の講習会において優先的にご参加いただく予定である。

今回の講習会の講師は、九州工業大学の安永卓生氏に務めていただいた。安永研究室は、クライオ電顕の解析ソフトウェアとして世界のスタンダードとなっている Relion（Sjors Scheres 博士, MRC-LMB）について、開発者本人の承諾を得た上で日本語解説ウェブサイトを開発されており、Relion を使ったデータ処理を行われてきた方の多くも参考にされている。また、安永研究室は顕微鏡学会・生体解析分科会においても Relion 講習会を複数回開催した実績をもたれている。今回の KEK での講習会では開催時の最新バージョンである Relion 3.0beta を題材として、単粒子解析法における理論的な背景から実習までをご指導いただいた。また実習においては、理化学研究所/放射光科学研究センター・重松秀樹氏、物構研・守屋俊夫氏、Tietz Video & Image Processing Systems GmbH・荒牧慎二氏にインストラクターを務めていただいた。

講習会のはじめには、物構研・千田俊哉氏が KEK クライオ電顕施設の現状や本講習会の意義について説明され、次に物構研・山田悠介氏がクラウド上での解析環境のセットアップ方法を紹介された。物構研・構造生物学研究センターでは山田氏が中心となって構造解析環境のクラウド化が進められている。今回の講習会はその一環として、クラウド環境でクライオ電顕解析環境を人数分整え、提供する形として開催された。クライオ電顕の解析環境設定は、Linux OS、ドライバー、CUDA、GPU といった様々な要素に対応してセットアップする必要があり、実際に Relion を動かすためには相応の経験と知識を要するものとなっている。これはノートパソコンに CCP4 や Phenix といったパッケージをダウンロードし、インストールするだけで解析環境が整う X線結晶構造解析とは大いに異なっており、各大学や企業グループで単粒子解析解析環境構築を困難に



図1 安永氏による解説の様子

している要因の一つであろう。本講習会では、守屋氏の尽力で参加人数分の Relion 解析環境が構築され、提供された。実際の講習会では、クラウド上の GPU を搭載した解析環境に各自がログインすることによって、全ての参加者が同時に Relion を使って、チュートリアルで使われている  $\beta$  ガラクトシダーゼの単粒子解析を行うことができた。

実際の講習では、安永氏が講義と解析実演を交互に行い、それらを参考に参加者が 1 ステップずつ解析を進めていく形を取った。講義では、安永氏が懇切丁寧に準備された資料に基づいて、3次元電子顕微鏡法について解説をしていただいた。具体的には、クライオ電顕を使った画像解析の流れとして、画像補正(ドリフト補正, CTF 変調等の決定(補正), 粒子像の改善), 前処理(粒子の抽出, 構造の分類), 3次元再構成(投影向きの決定, 構造の分類, 3次元再構成), 画像の解釈といった全てのプロセスについて、また、中央断面定理の説明など理論的背景についても解説していただいた。

解析実習の合間には、重松氏からは実例として世界におけるクライオ電顕の単粒子解析分野の状況や解析例、さらにはご自身の解析例についてご紹介いただいた。また、守屋氏からは同氏がドイツ・マックスプランク研究所において開発に携われたクライオ電顕単粒子解析パッケージ SPHIRE について紹介いただくと共に、本パッケージと Relion との違いなどについてお話いただいた。

1日目の最後に行われた懇親会では講師、インストラクター、参加者の皆さんにご歓談いただいたが、やはり各自の研究グループで解析環境をどのように構築するかという課題についての話題が多かったように思う。

これら2日間の講習会は参加者がそれぞれの分解能で最終的な3次元再構成マップを得る構成となっており、電顕画像から分子のマップを得るまでに至る一連の操作を自ら行った参加者の表情は、充実感に満ちているように見られた。また、最終的に、全く同じデータセットからスタートしたにもかかわらず、参加者それぞれに最高到達分解能にはかなりの開きが見られたこともあり、それぞれのステップごとに“取りこぼしなく”進めていくことの大切さを再認識させられた講習会でもあった。

以上のように、本講習会は、PFでX線結晶構造解析に取り組まれてこられた方々のご尽力によって、クライオ電顕における近年の発展を実践的に学びたいという、新たに単粒子解析を始めようとしている方々のニーズに答えることができた。これも2日間にわたり講師をお務めいただいた安永氏、そして解析指導をいただいた重松氏、守屋氏、荒牧氏、クラウド環境構築で尽力いただいた山田氏、さらには会の開催にあたっての事務手続きで支援いただいた物構研の増田千穂氏、鮎川理恵子氏、高橋良美氏の尽力のお陰であり、この場を借りて感謝の意を表したい。

## 「タンパク質結晶構造解析初心者向け講習会」開催報告

放射光実験施設 松垣直宏

2019年1月31日、2月1日の二日にかけて、タンパク質結晶構造解析初心者向け講習会が開催されました。本講習会はタンパク質結晶構造解析の未経験者を対象として、タンパク質の結晶化から回折実験・構造解析までの一連の流れを理解してもらうことを目的としており、過去数年来毎年開かれています。今回は本研究所の構造生物学研究センター、および国立研究開発法人日本医療研究開発機構(AMED)の創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム(BINDS)の共催により行われました。

講義・実習は、構造生物学研究センターのスタッフが担当しました。参加者は大学および公的研究機関から11名、茨城大学の学生8名(同大学では、本講習会参加で大学院での単位が取得できます)の計19名でした。講習会初日は講義と結晶化スクリーニング装置のデモが行われました。BINDSの概要と利用方法などを筆者(松垣)が説明した後、タンパク質X線結晶構造解析概論、結晶化スクリーニングについての講義が山田悠介氏、加藤龍一氏からそれぞれ行われました。その後、構造生物実験準備棟に設置された全自動結晶化ロボットのデモ(希望者に対しては持ちこみ試料の結晶化)と、事前に用意されたタンパク質結晶を使っての凍結保存実習が4班にわかれて行われました。

講習会二日目は、放射光ビームラインにおける回折データ測定に対する解説が引田理英氏より行われた後、ビームライン(BL-5A, 17A)に移動して、初日に凍結保存された結晶を用いた回折データ測定のデモを実施しました。運転停止期間であるためX線ビームを用いた実験は出来ませんでしたが、試料結晶の装着から位置合わせ(アライメント)などを実際のビームライン制御ソフトウェアを操作して行いました。また、タンパク質結晶の様子をカメラ画像で確認し、試料凍結状態の良し悪しを議論しました。昼食



図1 構造解析実習(二日目)の様子

後はデモ用回折データを使った構造解析実習で、データセットの処理から構造決定までの流れを標準ソフトウェアの操作を通して体験してもらいました。

二日間を通して、タンパク質結晶構造解析の現場でどのようなことが行われているかということ、そして測定や解析の自動化によってかなりの部分が省力化されているということを感じていただけたのではないかと思います。本講習会をひとつの契機として構造生物学分野に踏み込む研究者が増えていくことを期待します。

## 「XAFS 講習会」(2018 年度) 開催報告

放射光科学第二研究系 木村正雄, 阿部仁,  
武市泰男, 渡邊稔樹  
放射光実験施設 仁谷浩明, 丹羽尉博, 山下翔平,  
若林大佑, 君島堅一  
Nanotech CUPAL KEK 事務局 伴 弘司, 宇津野恵美

2019年3月7-8日の2日間にわたり、PFでXAFS講習会を開催しました。本講習会は、「Nanotech CUPAL 第8回 KEK 放射光利用技術入門コース」および「物質化学グループ XAFS 講習会」との共同開催として実施致しました。新規ユーザーの開拓、既存ユーザーのXAFSの理解、および測定技術の向上を目的とし、受講者の所属を限定せず大学・国研・民間企業等と広く募集致しました。

放射光実験の普及にとともに、様々な分野でXAFS実験は強力な分析ツールの一つとして認識され、一般化しつつあります。一方で、XAFS実験は放射光の利用が実質的に必須であり、初めて実験を行うまでにどのようにすればよいか分からない等、放射光実験になじみのない研究者にとっては敷居が高いのも事実です。今回の講習会では、XAFSの基礎的な理論から、実験および解析に亘る講義と、実際のビームラインでの実習を通じて、「XAFSがどのような原理に基づいて、どのような測定を実際に行い、デー



図1 講義の様子



図2 ビームライン実習の様子

タを解釈することによって、何がわかるか」ということを理解できるようなプログラム構成としました。また、講義後に講習参加者、講師の先生、ビームライン担当者の交流会を実施しました。講義には19名、ビームライン実習は17名の方にご参加頂きました。

1日目は、KEKつくばキャンパス4号館において、XAFSに関する講義を行いました。講師として、分子科学研究所の横山利彦教授、名古屋大学の田淵雅夫教授、京都大学の朝倉博行特定講師をお招きしました。

横山先生には「XAFS基礎」と題してXAFSの基礎的な原理から講義して頂きました。物質と光の相互作用の説明から、ご自身の研究であるInvar合金の系を実例として実際の材料における測定まで、幅広い内容を分かりやすくご講義頂きました。田淵先生には「XAFS実験」と題して、ビームラインの光学系・検出器の説明から、実際に実験を行うにあたって注意しなければいけないこと、陥りやすい失敗についてご講義頂きました。朝倉先生には「XAFS解析」として、XAFSの解析ソフトであるAthenaとArtemisを使って、XAFSの生データの解析の流れを演習形式でご講義頂きました。この演習では、参加者に持ち込んで頂いたPCで、標準試料のデータ解析、さらにナノ粒子のデータ解析を行いました。また、KEK物構研も実施機関の一員となっている光ビームプラットフォームおよびCUPALの制度の説明を行いました。

2日目は、主に物質化学グループのメンバーが講師となり、PF BL-9A, 9C, 12Cの3つのビームラインを使って実習を行いました。午前は、透過法XAFS実験の基礎として、参加者が実際に操作しながら、X線ビーム位置と試料位置などの光学系の調整、モノクロメーターのエネルギー較正、試料の測定を行いました。高調波の影響など、誤った測定条件で得られるスペクトルの特徴などについても説明しました。午後は、ビームライン毎に特徴的な測定手法の実習を行いました。BL-9Aと12Cでは、多素子半導体検出器を用いた蛍光収量XAFS法による測定実習を、BL-9Cでは高温 *in situ* セルを用いた酸化還元反応の時分割

測定を行いました。

事後アンケートからは、講習内容について概ね満足頂けたようですが、実習の時間が足りないなどのご意見を頂きました。今後の講習会へ反映させたいと考えています。

硬X線 XAFS の講習会は今後も定期的に開催したいと考えていますので、興味をお持ちの方はぜひご参加下さい。詳細は、硬X線 XAFS ビームラインのホームページ (<https://pfxafs.kek.jp/>) やメーリングリスト (xsj, <https://pfxafs.kek.jp/others/xsj-ml>) など案内する予定です。最後になりますが、大変お忙しい中、ご講義頂きました先生方、サポート下さいました秘書、事務の方々、放射線管理室の方々に、この場を借りてお礼申し上げます。ありがとうございました。

## 【プログラム】

### 2019年3月7日(木) 1日目

- 09:00 - 09:25 受付  
09:25 - 09:30 事務連絡  
(KEK 物構研 伴弘司 学術フェロー)  
09:30 - 10:40 講義「XAFS の基礎」  
(分子科学研究所 横山利彦 教授)  
10:40 - 10:45 (休憩)  
10:45 - 11:55 講義「XAFS 実験」  
(名古屋大学 田淵雅夫 教授)  
11:55 - 13:30 (お昼休憩)  
13:30 - 16:45 解析実習  
「Athena, Artemis を用いた XAFS 解析」  
(京都大学 朝倉博行 特定講師)  
16:45 - 17:00 事務連絡  
17:00 - 17:30 交流会

### 2019年3月8日(金) 2日目

#### 午前の実習 09:00 - 11:45

安全関係説明、光学系の調整、基本的な透過測定方法の実習

#### 午後の実習 13:15 - 15:00

ビームライン毎 (9A, 9C, 12C) に異なる内容を実習

- ・9A, 12C: 多素子半導体検出器を用いた測定
- ・9C: 高温 *in situ* 測定 (銅の酸化還元反応の時分割測定)

### KEK 公開講座「生物学におけるクライオ電子顕微鏡」開催報告

深堀協子（物構研 広報室）

6月29日（土）KEK つくばキャンパス小林ホールにて、KEK 公開講座「生物学におけるクライオ電子顕微鏡」が開催されました。あいにくの梅雨空でしたが130名以上の方が集まり、KEK 物構研 構造生物学研究センター（SBRC）の2名の講師による講演に耳を傾けました。

#### 「生き物の『部品の形』と『働く仕組み』」

千田俊哉（SBRC センター長・教授）

1953年にワトソンとクリックがDNAの二重らせん構造を発見し、20種のアミノ酸の配列、つまりタンパク質の設計図こそが遺伝情報だったことが分かりました。アミノ酸の配列が違えば違うタンパク質となり、違う性質と機能を持ちます。タンパク質は細胞社会の要であり様々な働きを持っていますが、それぞれのタンパク質が分子としてできることは、大きく3つあります。

結合する：形がはまる。あるべき場所に存在する

動く：スライドしたり、構造変化を起こしたりする

触媒する：正しい位置に配置されると化学反応が起きるつまり、かたちが重要で、タンパク質の機能を知るにはかたちを知る必要があります。そこで、SBRCでは、タンパク質を結晶にし、強いX線（フォトンファクトリーの放射光）をあてて得られる像を解析して、分子の立体構造を調べています。

タンパク質の結晶構造解析の実例を挙げましょう。人の胃に棲みつくピロリ菌が作るタンパク質のかたちを明らかにしたら、なぜ東アジアに胃がんが多いか説明することができました。東アジアのピロリ菌が作るタンパク質は、欧米のそれと異なり、ヒトのタンパク質にぴったりはまり込んで外れにくいかたちをしていたことが分かったのです。

#### 「クライオ電子顕微鏡で生体分子の形を明らかにする」

安達成彦（SBRC 特別助教）

タンパク質分子1つができることはそんなに複雑ではないので、タンパク質は集まって複合体で働きます。しかし、複合体は構造が複雑で結晶になりにくい、つまりX線で調べることは難しいのです。そこで、タンパク質が溶けた水溶液を凍結させて見るクライオ電子顕微鏡（クライオ電顕）という技術が開発されました。開発に至るまでには、長年にわたる科学者たちの創意工夫があり、2017年、その功労者3名にノーベル化学賞が授与されました。クライオ電顕では、様々な向きのタンパク質の写真を数多く撮って、似たものを分類し解析することで、タンパク質のかたちを



図1 千田俊哉センター長による講演の様子



図2 安達成彦特別助教による講演の様子

明らかにします。

2017年、SBRCへのクライオ電顕導入が決定し、翌年3月に搬入と組み立てが行われ、4月には運転が開始されました。クライオ電顕が導入されてよかったことは、タンパク質の結晶を作るといった難問を解かなくてもタンパク質のかたちを知ることができるようになったことです。詳細な構造を知るといった点ではX線にはかないませんが、クライオ電顕で見ることができるタンパク質のサイズはだんだん小さくなっていて、クライオ電顕の普及により構造生物学研究は大いに発展するでしょう。

会場からは「結晶化したタンパク質と実際に動いているタンパク質では違うのでは？」「タンパク質が結晶化する条件を見つけることは難しいというお話がありましたが、タンパク質の精製も難しいのですか？」など多くの質問が寄せられ、講師はそれぞれに丁寧に回答していました。

2つの講演内容が互いに関連し合い、続けて聴くことで理解が深まる講演会でした。

物構研トピックス『KEK 公開講座「生物学におけるクライオ電子顕微鏡」を開催』

<https://www2.kek.jp/imss/news/2019/topics/0701KEKkouza/>

### PF 研究会「BioSAS が拓く生体高分子の分子間相互作用解析の最前線」開催報告

KEK 物構研 清水伸隆  
京都大学 井上倫太郎, 杉山正明  
奈良先端科学技術大学院大学 上久保裕生

近年のタンパク質科学研究においてはより複雑な生体システムが対象となり、離合集散を伴う準安定な相互作用システムの構造解析を実現すべく、様々な測定技術においてパラダイムシフトが起きています。その中でも溶液状態の生体高分子試料を測定対象とする小角散乱法 (Biological Small-Angle Scattering=BioSAS) は、古典的な手法でありながら時代の変化に追従し、BioSAXS (Biological Small-Angle X-ray Scattering) や BioSANS (Biological Small-Angle Neutron Scattering) と呼ばれ、タンパク質構造解析の一般的な手法として認知されています。その理由に、様々な構造解析手法を組み合わせる広い時空間スケールで相互作用システムを理解しようとする相関構造解析 (Hybrid approach) の中で、BioSAS は溶液と結晶/凍結状態、物理化学量と構造を結びつける唯一の手法と考えられていることが挙げられます。相関構造解析が推進される近年の潮流と共に放射光や中性子施設の SAS ビームラインでは、ビームライン自体や試料周辺装置の高度化が求められています。Photon Factory では、国立研究開発法人日本医療研究開発機構 (AMED) の創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業におけるプラットフォーム事業 (PDIS/BINDS) 等の基でビームラインと測定環境の整備・高度化を進め、現在では BioSAXS の国内における一大拠点を形成しつつあります。ハードウェアの高度化は測定法にも大きな進展をもたらし、ゲル濾過クロマトグラフィーと組み合わせた SEC-SAXS/SANS 法 (Size-Exclusion Chromatography SAXS/SANS) が開発され、これまで不可能だった多分散状態の試料を単離しながら計測することが可能になっています。一方で、SEC-SAXS/SANS に関しては測定後のデータ解釈が単純では無く、その道のエキスパートですら解析上の困難に直面することから、ソフトウェアによる解析の充実を図る必要があります。さらに世界に目を向けると、新規の反復構造因子回復アルゴリズムによって SAXS のデータから Ab initio 法で電子密度を導出するプログラム DENSS なども公開され、BioSAS の解析技術は新たな局面を迎えています。

このような状況から、BioSAXS/BioSANS を利用する生命科学研究者が集い、最新の測定と解析に対する新たな視点での相互理解・更なる融合発展を果たすために、2019 年 9 月 11 日 (水)、12 日 (木) の 2 日間にわたって、PF 研究会「BioSAS が拓く生体高分子の分子間相互作用解析

の最前線」を KEK4 号館セミナーホールにおいて開催しました。国内では九州から北海道まで、さらには韓国からの参加者もあり、合計 63 名の参加者と共に活発な議論が行なわれました。本会は 3 部で構成され、初日の第 1 部では「測定・解析手法 /New Methods in BioSAS」と題した SEC-SAXS 法やマイクロ流路セルを用いた滴定 SAXS 法などの最新の測定解析法に関するセッションが、初日の第 2 部では「BioSAS 関連の相関解析 /Hybrid approach using BioSAS」と題し、BioSAS を活用した相関構造解析に関する講演が行なわれました。2 日目の第 3 部は「Special & Keynote Lecture」と題し、ソフトウェア DENSS に関する特別講演と国内の BioSAS エキスパートの研究者による基調講演が行なわれました。第 1 部と第 2 部は日本語で行なわれ、講演 30 分、質疑応答 10 分と比較的長めの時間配分で細かい内容まで分かりやすく講演頂くと共に、BioSAS 初心者からもたくさんの質問が受けられるようにしました。第 3 部は英語で講演が行なわれ、特別講演は 60 分、基調講演は 45 分の講演時間に対して 10 分の質問時間を設けることで、詳細な内容を余すところなくお話し頂くと共に、質問も幅広く受けることができるように配慮しました。

初日は KEK 物構研の千田俊哉教授 (構造生物学研究センター長) による開式の挨拶で始まり、相関構造解析研究の推進と BioSAS の有用性に関して提言がありました。第 1 部の最初の講演は、米国カリフォルニア州にある SLAC 国立加速器研究所の放射光施設である Stanford Synchrotron Radiation Lightsource (SSRL) の松井勉博士 (スタンフォード大, Staff Scientist) から、SSRL の BioSAXS ビームライン BL4-2 における SEC-SAXS 実験の現状に関する発表がありました。BL4-2 の SEC-SAXS システムの紹介だけでなく、そもそもの汎用の BioSAXS はもちろん SEC-SAXS を実行する上での測定・解析上の注意点に至るまで詳細な説明が行なわれました。続いて KEK 物構研の清水伸隆教授から、PF における BioSAXS ビームラインと SEC-SAXS 実験の現状に関して発表がありました。PF で



図 1 会場の様子

は実験システムのハードウェア整備だけではなく、SEC-SAXSの全自動解析を行なうソフトウェア Serial Analyzerを開発・公開しており、その詳細に関して紹介されました。京都大学複合原子力科学研究所の井上倫太郎准教授からは、ラボソースのBioSAXS装置に向けて開発整備されたSEC-SAXSシステムの現状に関して発表が行なわれました。さらに、溶液中の分子量分布を解析可能な分析超遠心法 (Analytical Ultracentrifugation=AUC) と組み合わせたAUC-SAXSに関しても、その有用性に関して実際の解析例も合せて紹介されました。第1部最後はKEK物構研の米澤健人研究員から、奈良先端科学技術大学院大学とKEK物構研が共同でPFに整備中であるマイクロ流路セルを利用した滴定SAXSシステムの発表が行なわれました。滴定SAXSシステムはゲル濾過法では単離できない、すなわちSEC-SAXSで解析困難な不安定状態の解析に威力を発揮する新しい測定技術で、発表ではシステムの基本構成やテスト測定例などが示されると共に、共同研究ベースではあるが、整備が完了して2019年4月から共同利用が開始されたと報告されました。

第2部では、最初に北海道大学大学院理学研究院の斉尾智英助教から、マルチドメインタンパク質MurDの溶液中における構造ダイナミクスを理解するために、MurDに複数のランタノイドイオンを結合させてNMRやSAXSの解析に活用した結果が発表されました。それぞれの手法で解析されたランタノイドイオン間の距離や構造分布がリガンド結合に伴い変化することが示され、タンパク質の構造変化解析に対する有用性が実証されました。次に東京大学定量生命科学研究所の深井周也准教授からは、遺伝性てんかんの一つである常染色体優性外側側頭葉てんかんの原因遺伝子産物として知られる神経細胞の分泌タンパク質LG11とその受容体である膜結合型金属プロテアーゼADAM22について、LG11-ADAM22複合体の構造解析結果が発表されました。この研究では、多角度静的光散乱、BioSAXS、クライオ電子顕微鏡、X線結晶構造解析を組合せた相関構造解析により多面的な議論が行なわれ、複合体形成メカニズムに基づく機能発現機構が提唱されました。第2部最後には横浜市立大学生命医科学研究科の池口満徳教授から、MDシミュレーションの歴史、ならびに先日運用を終えたスーパーコンピュータ「京」、後継として開発中の次世代スーパーコンピュータ「富岳」に関する紹介に加えて、MDと実験の連携の重要性と共にその実証例としてビタミンD受容体リガンド結合ドメインのリガンド結合メカニズムの解明に向けたMD-SAXS相関構造解析について発表されました。さらに、現在開発中のマルコフ状態遷移モデル(MSM)をベースとしたMSM-SAXSや、粗視化MD(Coarse-Grained MD)によるCGMD-SAXSに関する解析例なども紹介されました。第2部終了後、研究本館ラウンジにて40名近い参加者にて懇親会が開催され、おいしい料理とお酒等を味わいつつ、初日の講演内容を肴に歓談は大いに盛り上がりました。

2日目の第3部では、最初に特別講演としてニューヨー



図2 集合写真

ク州立大学バッフアロー校のThomas Grant博士 (Research Assistant Professor) から、ソフトウェアDENSの開発や詳細に関して講演が行なわれました。小角散乱の基礎理論の説明に始まりDENS開発の経緯、最新の反復位相回復アルゴリズムの考え方、DENSの解析アルゴリズムの流れや実際の適用例など非常に多面的に、かつ詳細に紹介されました。質疑応答では、アルゴリズムの基礎的な考え方に対してだけではなく、今後の応用や発展の可能性についても質問が行なわれました。続いての基調講演では、自然科学研究機構分子科学研究所の秋山修志教授から、シアノバクテリアの概日時計システムのメカニズム解明に向けた生化学、構造生物学、進化生物学といった様々な観点からの膨大な研究とその成果に関して説明が行なわれました。生体システムの理解に向けた広い時空間スケールに渡る分子間相互作用、離合集散のダイナミクス解析の重要性が改めて提唱されました。本研究会の最後には京都大学複合原子力科学研究所の杉山正明教授から、技術革新が進むクライオ電子顕微鏡を始めとして、結晶解析、NMR、ネイティブ質量分析、分子動力学計算といった手法に加えて、SAXSやSANSも合わせたハイブリッドアプローチ・相関構造解析の重要性に関して改めて提言がありました。さらに、SANSに関する手法の特徴の詳細とSAXS/SANSを活用した $\alpha$ クリスタリン複合体の構造ダイナミクス研究についても紹介されました。本研究会の翌日9月13日(金)には、サテライト研究会「Marriage of Computational and Experimental Techniques for Solution Small-angle Scattering」が京都大学複合原子力科学研究所で開催され、情報科学とBioSAXS解析との融合を目指した議論が活発に行なわれました。

以上をもってプログラムは全て終了しましたが、BioSAXS初心者からの様々な疑問点が寄せられただけではなく、エキスパート同士の解析や研究戦略に関する論戦なども繰り広げられ、質疑応答時間はもちろん、懇親会やコーヒーブレイクの時間帯も含めて会全体を通して非常に活発な議論が行なわれました。本会の目的は「手法の相互理解・更なる融合発展」でありましたので、その役割を十分に果たせたと考えます。また、さらに複雑な相互作用状態(構造)や生体システムの解明に挑むという構造生命科学の共通の目的が本会を通じて改めて確認され、

BioSAS は相関構造解析の中で様々な手法を繋ぐ中心的な役割を担い、今後も益々活用されることが期待されます。

本研究会の開催に当たっては、事務局としてサポート頂いた小角散乱ビームライン秘書の小針美由紀さん、PF 秘書室の高橋良美さん、林陽子さんに深く感謝致します。また、当日の運営・会場設営でサポートをお願いした五十嵐教之教授と小角散乱ビームラインの業務委託スタッフの皆さん、また講演者の写真撮影をお願いした宮本洋佑さん(京都大学大学院理学研究科修士1年)にも、この場を借りて御礼申し上げます。

## VUVX19に参加して

放射光実験施設 若林大佑

2019年7月1-5日に米国カリフォルニア州のサンフランシスコにて、The 40th International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics (VUVX19)が開催された。この会議は、真空紫外(VUV)からX線までの広い波長領域の光をテーマに3年に1回のペースで開催されており、実験手法、光源開発から応用研究に至るまで、様々なトピックで議論が行われている。元々はVUVの学会として開催されていたところにX線の学会が合流し、合併後の開催としては今回で4回目となる。筆者のような放射光施設のスタッフや研究者に限らず、レーザーやプラズマ光源の技術者や検出器の開発者など、欧米を中心に300名を超える参加者がおり、専門を超えて活発な議論が行われていた。

ホストであるAdvanced Light SourceのOhltag博士の挨拶に続き、二つのPlenary Talkで会議は開始した。VUVの学会が母体となっていることもあって会議全体のX線領域の発表は決して多くなかったが、最初のPlenary TalkはいずれもX線領域がテーマとなっていて、より広い波長領域の研究者を呼び込みたいという意図が感じられた。会場となったWestin St. Francis Hotelは、1904年に建てられた歴史的にも価値の高いホテルで、細かな装飾が施されたホ



図1 VUVX19会場の様子



図2 Conference Dinnerにおける特別講演の様子

ールは見た目にも美しかった(図1)。口頭発表は2セッションに分かれて平行に行われ、参加者はそれぞれの興味に合わせて自由に二つの隣接するホールを行き来することができた。筆者は、InstrumentationやMaterials Scienceセッションの手法開発に関する発表を中心に聴いていたが、普段触れることの少ない放射光以外の話題はどれも新鮮で刺激的に感じられた。特に、数10eVの極紫外線に対して屈折レンズとして機能するGas lensの開発に関する発表は興味深く、強く印象に残っている。

筆者は、ポスターセッションにおいて、昨年度より建設を進めてきたBL-19の現状と今後の展望に関する報告を行った。BL-19では、Aランチに設置された走査型透過X線顕微鏡(STXM)のユーザー実験が今年度から開始され、SiのK吸収端(2 keV)までのXAFSイメージングが可能になっている。近くのパスターが他の放射光施設のSTXMに関するものだったこともあり、新規ユーザーの開拓というよりはシステム開発に関する情報交換が主であった。会期中ずっと振る舞われていたStarbucks Coffeeを片手に、終始和やかな雰囲気の中で交流を楽しむことができた。同じ会場では企業展示が行われていて、検出器や光学素子に関する相談や情報収集を行うこともできた。

3日目の夜には会場のホテルの最上階にあるGolden Gate RoomにてConference Dinnerが開かれた。その名の通り、サンフランシスコの象徴である金門橋まで一望できる素晴らしい眺めで、参加者の多くは窓際で熱心にカメラのシャッターを切っていた。料理が一段落した頃、NASAのBristow博士による火星探査についての特別講演が行われた。“The First X-ray Diffraction Experiment on Another Planet”と題された発表では、実際に火星で測定されたX線回折データを示しながら火星探査機Curiosityの最新の動向が紹介された(図2)。筆者は元々地球科学分野の出身だったこともあり、懐かしい興奮とともに発表を聴いていたが、他の参加者からも多くの質問が寄せられて大いに盛り上がっていた。

学会とは別の部分でも、印象に残っていることが幾つかあるので紹介したい。まず、日本が梅雨時だったということもあり、空港を降りたときからカリフォルニアの乾燥した空気が爽快で、会期中は快適に過ごすことができた。また、サンフランシスコに到着した日曜日は、LGBTの大き



図3 到着日に開催されていた San Francisco Pride の様子

なお祭りである San Francisco Pride が開催されていて、極彩色の過激な衣装に包まれた人々が街中を闊歩していて目のやり場に困ってしまった(図3)。一方で、放射光施設のスタッフである筆者は、LGBTの象徴のレインボーフラッグを眺めながら回折格子による分光を連想していた。とある講演で、まさに筆者の連想と同じ話題が出されて会場が沸く場面があり、似たようなことを考えた同業者は少なくなかったようだ。会期中の木曜日は米国の独立記念日に当たっており、夜に花火大会が行われることが会場でもアナウンスされていた。同僚と花火に備えて高台に登ったのだが、7月とは言え夜は気温も下がって濃い霧が出ており、米国の有名登山用品店 Patagonia で購入したアウター(日本の価格よりもはるかに安い!)が大活躍した。ところが、場所が悪かったのか肝心の花火はほとんど見えず、骨折り損になってしまったのが残念であった。

次回は、2022年にブラジルにて開催予定で、放射光施設 Sirius への見学ツアーも行われるとのことだ。複数年に一度開催される学会は、その期間で得られた成果のハイライトを発表する絶好の機会である。3年後には目覚ましい成果を持ってブラジルのビーチを楽しめるように、日々の研究・開発に精進していきたいと思う。

## 対称性・群論トレーニングコース開催報告

放射光実験施設 五十嵐教之

令和元年の夏に KEK つくばキャンパスで、8回目となる基礎コース、及び初めての英語基礎コースを開催しました。本コースは、結晶学と直結する対称性や群論について、5日間の合宿形式で、座学やトレーニングを通じて学ぶものです。結晶学は物質構造研究に欠かせない重要な学問ですが、対称性・群論の知識を学ぶ機会は圧倒的に不足しているため、2014年の世界結晶年(IYCr2014)の企画として、放射光科学研究施設主催、日本結晶学会共催で開催しました。その企画が非常に好評であったために、その後も継続

的に開催し、今回で基礎コースは8回目となりますが、申し込み開始から1週間ほどで満員となる人気コースとなっています。2016年には基礎編を修了した人だけが参加できる、応用を学ぶアドバンスコースも実施しました。今回は英語コースを初めて開催し、さらに広がりが出てきています。運営についても、第2回からは日本結晶学会と物質構造科学研究所の共同主催に、第3回は大阪大学蛋白質研究所の全面協力を得ての関西圏での開催、第5回からは総合研究大学院大学の公開講座にも指定され、今回からは総合研究大学院大学高エネルギー加速器科学研究所の共通講義となるなど、広く参加できるようになってきており、結晶学、ひいては物質構造研究における啓蒙活動として、確固たる位置付けになったと言っても過言では無いのではないかと思います。

さて、今回は7月22日(月)~26日(金)に、KEK 研究本館会議室1にて英語コースを、7月29日(月)~8月2日(金)に、KEK 4号館2階輪講室にて日本語コースを開催しました。詳細は以下のウェブページを参照ください。

### [英語コース]

<http://pfwww.kek.jp/trainingcourse/8th/engcourse/index.html>

### [日本語コース]

<http://pfwww.kek.jp/trainingcourse/8th/index.html>

内容はどちらのコースも同様で、結晶学のデータブックである、International Tables for Crystallography, Vol.Aに記載されていることを、非常に基礎的なところから体系的に学んで行き、最後には結晶構造解析の結果考察の例を示しながら、学んだことを生かして一緒に考えるなどの実践的なところまで網羅するものです。講義では、座学だけでなく適宜演習の時間が設定され、その演習では参加者に考えてもらっただけでなく、講師が参加者のところを周り、個別に指導を行います。参加者の理解度を確認しながら講義を進める形式なので、講師の負担は大きいのですが、参加者にとっては非常に教育的なコースになっているかと思います。ここ何年かは猛暑だったため、参加者、関係者の体調



図1 授業中の様子(英語コース)

管理が心配だったのですが、今年は気温も上がらず、比較的快適な環境で実施することができました。ただ、初めての2週連続開催（しかも英語と日本語！）ということで、講師のネスポロ・マッシモ（NESPOLO Massimo）教授（フランス・ロレーヌ大学結晶学教室）への負担は相当大きかったかと思います。実は今回、マッシモ教授はこの直前に上海で同様の講義に参加し、直後にも高野山大学で講義をするという大変なハードスケジュールでした。なので、やる前は本当に大丈夫なのか心配していましたが、持ち前のベータンパワーと教育への情熱で乗り切り、最後まで非常に熱のこもった講義をしてくださいました。昼の講義だけでなく、夕食後もKEK 宿舎の談話室を借りて夜遅くまで個別相談会を開催し、参加者からの個別の質問や相談にも、全て丁寧に対応してくださいました。見ていて本当に頭の下がる思いでした。

英語の基礎コースについては、初めての開催ということもあり、どの程度集まるか分からなかったため、希望者数が少ない場合には開催中止もあるという中途半端な事前案内となりました。最終的には16名の申し込みがあり、無事開催にこぎつけることができました。参加者は非常にバリエーションに富んでおり、国籍も中国、韓国、台湾、メキシコ、インドネシア、インド、ネパール、フランス、ポーランドと様々な方が参加されました。どんなものかも分からない第1回に申し込んでくるだけあって、皆さん本当にやる気があり、講義が終わった後も列を作って質問をしているような状況でした。宿舎での質問会でも毎晩聞きに来る参加者も居て、人数が少ないながらも非常に熱心な人たちが集まっていたと思います。所属もバラバラだったのですが、参加者同士で分からないところを教えあったり、一緒に食事休憩に行ったり、すぐに仲良くなった様子でした。同じ志を持つ仲間として良い交流になったのではと思います。長いコースなので、実行委員会ではリフレッシュできる飲み物やお菓子などを休憩時間に提供していましたが（日本結晶学会の支援によるものです）、我々実行委員にこれは何だと尋ねてきたり、参加者同士でこれは美味しいとか情報交換したりと、色々興味を持って日本の飲み物やお菓子を楽しそうに体験していたのも印象的でした。コース終了後、参加者にアンケートをお願いするのですが、



図2 授業中の様子（日本語コース）



図3 懇親会の様子（日本語コース）

ほとんどの人が回答してくださり、評判も良かったので、見切りでしたが開催して良かったと思いました。英語コースの今後の開催についても前向きに検討したいと考えています。

日本語コースについては、8回目ということもあり、関係各所に浸透してきているようで、今回も定員を超える46名の参加者を受け付けました。ただ、これまでは様々な履歴を持つ人が参加していたのですが、今回の参加者分布は少し偏っており、比較的若い学生さん、それも研究室から複数名で参加されている人が多かったようです。そのせいかこれまでよりも参加者の反応が淡泊に感じました。質問に来る人も限定的で、夜の質問会も参加者が居なくて中止にすることもあったぐらいでした。アンケートの結果も、理解度や満足度があまり高く無く、今後の募集方法や事前チェックをどうするか、いくつか課題を感じました。ところで日本語コースの方は参加者が多いため、日本結晶学会の支援を受けて学会員の補助をお願いしています。今回は東北大学金属材料研究所から、徳田誠先生と川又透先生が1週間滞在してくださり、講義や演習の手伝いや、参加者からの問い合わせ対応、場合によっては質問や相談などにも乗ってくださいました。お二人のご協力のお陰で、円滑に運営することができました。この場をお借りして、厚く御礼申し上げます。

来年の開催については、東京オリンピックがあるため通常よりも1週早めて、7月中旬の開催を予定しています。内容については、英語コースやアドバンスコースも含めて検討中です。開催要項が決まりましたら、以下のトレーニングコースホームページや、各種情報案内、SNSなどでアナウンスいたしますので、ご興味をお持ちの方はぜひチェックをお願いします。

#### 【トレーニングコースホームページ】

<http://pfwww.kek.jp/trainingcourse/index.html>

（最新情報だけでなく、過去の開催や報告なども掲載しておりますので、ぜひご確認ください。）

最後になりましたが、本コースの開催を全面的に支援してくださいました、高エネルギー加速器研究機構の関係の

方々に御礼申し上げます。特に、事務局を一人で切り盛りしてくださいました高橋良美秘書には大変感謝しております。紙面をお借りしまして感謝申し上げます。本当にありがとうございました。

## Impression on the 8th Training Course on Symmetry and Group Theory

Graduate School of Science, The University of Tokyo  
Special Research Student (D1) Xuejing HE

The 8th Training Course on Symmetry and Group Theory was held by the Crystallographic Society of Japan and the Institute of Material Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization (KEK) from July 22nd to 26th.

The lectures were given by Professor Massimo Nespolo from the Université de Lorraine, who is a great expert of crystallography. Courses were arranged properly from the mathematical foundations to crystallographic knowledge. First, basic notions such as group, vector space, mapping, and homomorphism were given for reviewing, and then we moved on to two-dimensional point groups, three-dimensional point groups and space groups, symmetry operations, reciprocal lattice, and X-ray diffraction step by step. Exercise problems were also provided every now and then so that we could digest abstract theories through practicing. Students could also join the FAQ every evening after class to ask the professor questions and redo the exercises. A clear overview of crystallography and useful takeaway tips were got at the end of the training. Although it's hard to understand every detail and make a huge progress during five days, the course actually provided me with helpful ways to analyze problems in research.

Life in the KEK campus was convenient. The lecture room is quite near to the dormitory, and cafeterias and convenient stores are also nearby, which helped a lot in saving time for busy study every day.

I recommend you to seize the opportunity to join next Training Course on Symmetry and Group Theory, and get a promotion in crystallography.



図1 講師から修了証を受け取る筆者（左）

## FEL2019 会議報告

加速器第六研究系 加藤龍好, 本田洋介

International Free-Electron Laser Conference (FEL2019) が、ドイツのハンブルクで開催された。39回目を数えるこの会議は、自由電子レーザー (FEL) に関して、施設報告から、ビームダイナミクス、FEL の理論、応用に至るまで、を扱う国際会議で、FEL の分野に関係する世界中の研究者が一同に会し、最新の情報を交換する場となっている。近年の話題の中心は、やはり大型施設による XFEL であるが、小型の施設による長波長の FEL や、コヒーレント放射に関する研究の発表も行われている。今年はハンブルク大学を会場とし、DESY がホストである。EuXFEL が本格的なユーザー運転に入ったタイミングでもあり、最終日にはその施設見学も行われた。近年、世界各地に XFEL の施設が次々と建設され短波長 FEL の分野は活況を極めているが、一方で国内ではこの分野の研究がそれほど活発では無いので、我々にとっては最新の情報に直接触れられる貴重な機会であった。

今回のハイライトは、やはりこの2年で本格稼働に入った EuXFEL に関する話題だろう。EuXFEL は超伝導加速空洞による SASE 型 X 線 FEL である。元々 DESY を中心にリニアコライダーを目指して開発を行ってきた TESLA 計画の技術を転用し、欧州の共同計画として進められているもので、DESY の敷地から始まる長さ 3.4 km の地下トンネルに建設された巨大な施設である。電子ビームのエネルギーは最大で 17.5 GeV である。ILC の 1/10 スケールとえば一部の人には分かりやすいかもしれない。アンジュレータのビームラインは、硬 X 線を発生する SASE1 と SASE2、及び、軟 X 線を発生する SASE3、の 3 つが既に稼働している。一つのマクロビームパルスのなかでビームを切り替えて、3 つの SASE で同時にユーザー運転を確立していることが報告された。

XFEL の分野はこれまで常伝導加速空洞による施設で開発的研究がなされてきた。2009 年に SLAC の LCLS が世界初の XFEL の発振に成功して以来、日本の理研の SACLA がこれに続き、さらに韓国の PAL-FEL とスイスの Swiss-FEL が建設された。とくに LCLS は、レーザーヒーター、セルフシード、スロットフォイル、など多くのアイデアを次々と提案し、実証してきており、単にユーザー施設としてだけでなく、この分野の発展に中心的役割を果たしてきた。EuXFEL は初めての超伝導加速空洞による XFEL である。超伝導空洞では RF パワーの損失が非常に小さくなるので、エネルギー効率が良く、ビームデュティを上げることが出来る。このため、ビーム強度、つまり取得できるデータの量で従来の常伝導の施設を大きく上回ることになる。建設は大掛かりになるが、ひとたび運転に入ると、パルスあたりの費用という観点からは、超伝導が圧倒的に有利である。一方で常伝導加速空洞は技術的な障壁は低く、建設にかかる費用も抑えられる点は、依然メ

リットがある。超伝導 FEL が本格稼働する時代において、常伝導の施設がどのように特徴を出していくか、は今後の課題である。常伝導空洞を低損失化し、繰り返しを上げることのできる可能性のある、誘電体アシストや銅の低温冷却のアイデアについても紹介された。

EuXFEL はデューティ 1/100 のパルス運転であるが、連続運転 (CW) の XFEL の建設計画が現在進行中である。SLAC の LCLS2 および上海の SHINE、また EuXFEL も CW 化のアップグレード計画がある。2025 年頃には世界の 3 拠点で CW-XFEL が稼働し、MHz の高繰り返し運転が標準になる時代が来る。長波長の FEL の場合は共振器型のスキームが一般的なのに対して、既存の XFEL は全て単一パスのスキームである。高繰り返し化の実現が近づくなか、XFEL での共振器型のスキームを検討する発表が増加傾向にあった。いわゆる再生増幅型 (RAFEL) や XFELO、あるいは共振器と増幅器を組み合わせてシード化をしようとするもの、などが議論されていた。X 線の利用側では、液体ジェットでサンプルを流しながら測定を行うことになるが、X 線パルスの照射によって液体ジェット中に発生する衝撃波が、次のサンプルに影響しうる、という高繰り返しならではの議論もなされた。

国内では最近、SACLA でセルフシードに成功し、SASE と比較して線幅が改善された X 線が利用できるようになったのが話題である。SACLA から、反射型セルフシードの開発とユーザー運転の報告が行われた。また、PAL-FEL から、透過型セルフシードに成功した報告があった。とくに加速器上流部にレーザーヒーターを導入し、ビーム不安定性の発生を抑えることができたため、X 線のパルスエネルギーが向上し、セルフシードの安定性も、線幅も大きく改善している。レーザーヒーターの技術は、LCLS の初期に開発され、現在では X 線から紫外の短波長 FEL で標準的になっているものである。

EUV から軟 X 線にかけては、外部シード型 FEL 全盛の時代である。イタリアの FERMI では、これまでのカスケード HGHG (High Gain Harmonic Generation) から EEHG (Echo-Enabled Harmonic Generation) にも対応できるように施設を改造し、EEHG によって、HGHG と比較して線幅が改善されたとの報告があった。上海の軟 X 線 FEL の試験施設でも、EEHG およびカスケード HGHG に成功し、もうじきユーザー施設への拡張に入るとのことである。ちなみに、会期中に FEL 賞の発表がなされるのが恒例であるが、今年は EEHG やシード FEL の研究を行って来た 3 名が受賞し、近年のシード型 FEL の著しい発展を伺わせるものである。

開拓的テーマとして、アト (サブフェムト) 秒の X 線パルスの発生の話も増えて来ている。電子ビームの分布の一部からのみ発振させる、という小技的なものから、外部レーザーによって局所的な密度変調を導入する、ESASE と呼ばれる手法が議論された。とくに、ESASE は SLAC で XLEAP と呼ばれる計画が立ち上がっているほか、同様のアイデアに基づいたいくつかの発表が見られた。また、

日本からは QST らのグループで始まった、赤外共振器 FEL を用いた HHG (High harmonic generation) によるアト秒 X 線発生計画の発表があった。

長波長側で多くの発表がみられたのはテラヘルツ (THz) の施設である。既存の高強度光源が無い帯域で、小型の施設でも特徴を出しやすい、ということもあるのだろう。特に、超伝導加速空洞による大電流ビームを用いて大強度 THz 光源をめざす施設がいくつか提案されている。ドイツの ELBE が既存の代表的な施設である。

近年、レーザーとの相互作用などを利用して、ビームに変調をつける技術が確立してきた。これを応用して、放射波長の周期でプリバンチされたビームを予め生成し、アンジュレタなどに入射すると、超放射や誘導放射という現象が起こる。通常の FEL の効率を大きく改善する原理であり、UCLA の TESSA (Tapering enhanced stimulated superradiant amplification) のグループなどが積極的に開発を行っている。チュートリアル講演の一つは、これをテーマとしたものであった。KEK の cERL で我々がやっている THz 回折放射による誘導放射の実験もこの原理と関係したもので、興味を引くテーマである。

KEK からは ERL 型の FEL 光源の話題の発表があった。EUV リソグラフィの産業応用光源を目標に、赤外 FEL の実証試験を行う。エネルギー回収のスキームを利用して大電流運転を実現し、光源としてのエネルギー効率を上げようというものである。ある意味、技術的には CW-FEL よりさらに難しいもので、実機の実現まではまだいくつかの段階が必要であろう。

今回は、日本からの参加者は約 8 名と少なく、とくに若手が全く居なかった。人数は少ないながらも、いくつかのアイデアは注目されていたが、やはり新しい FEL の建設計画が無いのが寂しいところである。たいして目立つのは中国で、上海はシード FEL で既に世界最先端の実績を示し、CW-XFEL を目下建設中である。多くの参加者がおり、とくに若手が目立ったのが印象的であった。

例年、この会議は 8 月の最終週に行われ、暑い日本から脱出できて丁度良いのであるが、今年は異常気象でハンブルクで気温が 32 度を超えたうえに、会場は冷房が無く、しかもポスター発表は灼熱の屋外の仮設テント、という過酷な状況であった。超伝導の話をしながらかの暑さは皮肉なものであった。

## 第 22 回 XAFS 討論会に参加して

富山大学大学院理工学教育部 ナノ新機能物質科学専攻  
博士課程 2 年 太田路子

2019 年 9 月 2 日から 4 日の 3 日間、京都大学吉田キャンパスの国際科学イノベーション棟で開催された第 22 回 XAFS 討論会に参加しました。XAFS 討論会は毎年夏に開催され、XAFS の理論や実験、産業への応用など多岐に渡

る研究発表と討論が行われています。私自身は、2017年8月に姫路で行われた第20回 XAFS 討論会、2018年9月に札幌で行われた第21回 XAFS 討論会にどちらも口頭発表で参加しており、今回は3回目の参加でした。

1日目、学会前はいつもバタバタと時間ギリギリまで準備をしていますが、今回も例に漏れず、前日は遅くまでスライドを直したり、話すことを考えたりしていました。当日は朝9時に富山駅を出発し、指導教員と後輩と3人で京都に向かいました。私の発表順は1日目の夕方ということで、電車の中で考えようと思っていたことがいくつかあったのですが、前日遅くまで起きていたこともあり、気づいたら京都駅に着いていて、京都大学に向かいながら焦っていたのを覚えています。結局、発表の合間の15分休憩に最後の準備をし、緊張する際は10分程しかなく、自分の順番を迎えました。今回は「Full-potential 多重散乱理論による偏光方向平均された分子座標系光電子角度分布の理論研究」というタイトルで発表をさせていただきました。この研究は、量子化学計算と Full-potential 多重散乱計算を組み合わせて光電子角度分布をより精度良く計算し、多重散乱理論の観点から光電子角度分布の構造を議論するという内容です。発表直前には、19枚も用意してしまったスライドを時間内に話し切ることができるか不安に思っていたのですが、いざ発表を始めると、次々にスライドが進んでいき、スムーズに発表を終えることができたように思います。発表が終わり、質疑応答の時間には4つの質問をいただきました。計算に関する質問についてははっきりと答えることができたと思うのですが、ある質問に対しては、数式やその意味をうまく言葉で説明できず、クリアでない答えになってしまったなど、反省する点もありました。

夕食は、指導教員と後輩2人と一緒に、実行委員の高谷光先生に教えていただいた居酒屋さんへ行き、人生で初めて鰻を食べました。昨年富山に住み始め、美味しい魚にはさほど驚かなくなったつもりでいましたが、それでも京都の鰻は衝撃的なおいしさでした。ホテルに戻ったあとは、シャワーのお湯が出ず少し困りましたが、それ以外は問題なく、前日からの疲れと、自分の発表が終わった安心感で、あっという間に眠りに落ちました。

2日目と3日目には、口頭発表、そして2日目の午後にはポスターセッションがありました。自分の発表が終わっ



図1 京都の鰻



図2 横山利彦日本 XAFS 研究会会長（左）と学生奨励受賞学生3名（右から2番目が筆者）。写真は第22回 XAFS 討論会実行委員会よりご提供いただいた。

て安心したこともあり、2日目と3日目の発表は最初から落ち着いて聞くことができました。自分の研究と近い理論研究の発表はもちろんのこと、普段詳細にお話を聞かせていただく機会が少ない実験に関する研究についても興味深く聞かせていただきました。また、最近よく耳にする機械学習を使った研究や、企業での利用例の紹介もあり、一口に XAFS を使った研究といっても研究目的や対象とする系は様々であること、そして XAFS の応用範囲の広さを実感しました。一方で、それぞれの発表を聞きながら理解しきれない部分も多く、自分の勉強不足をひしひしと感じる時間でもありました。ポスターセッションでは、30人以上の方が発表され、どのポスターの前でも熱心に議論が行われており、私も何人かの参加者の方にお話を聞かせていただきました。1対1でじっくりと質問をしたり、意見を交換したりできるというのは、口頭発表にはない、ポスター発表の良さだと思います。私自身は XAFS 討論会でポスター発表を行ったことはないのですが、機会があればポスター発表での参加もしてみたいと思いました。

2日目の夜には懇親会が行われました。この懇親会で学生奨励賞の3名が発表され、大変光栄なことに、私の発表もそのうちの1つに選出させていただきました。今回発表した研究には修士1年の頃から取り組んでいて、毎年少し進んでは、XAFS 討論会で発表してきました。そういった経緯もあり、今回の XAFS 討論会で学生奨励賞に選んでいただけたことに対しては特別な思いがあり、とても嬉しく、そして大変有り難く思います。懇親会では、多くの先生方や他大学の学生の方、研究者の方ともお話しすることができ、楽しい時間を過ごすことができました。

今回の XAFS 討論会参加を通して、XAFS を使った様々な研究を知ることができ、また、自分の研究について客観的に見ることができました。学生奨励賞にいただけたことで、自分の研究に自信を持つことができた一方、やはりまだまだたくさん勉強しなければいけないことがあると感じました。今回の経験を糧に、今後もよりいっそう勉強と研究に励みたいと思います。

### PF 研究会「X線分光理論の新展開：構造・電子状態解析から磁性研究まで」開催報告

富山大学 畑田圭介

2019年10月3日(木)、4日(金)に小林ホールにおいて標記の研究会を、弘前大学理工学部 宮永崇史 教授、東京大学理学部 岡林潤 准教授、そして私、富山大学理学部 畑田圭介がオーガナイザーとなり開催した。会の冒頭、物質構造科学研究所の小杉信博所長にご挨拶をいただいた。

本シンポジウムでは国内外の放射光理論研究、特にX線による内殻電子の励起スペクトルについて、その理論開発および理論プログラムの開発を行っている研究者の方々に集まっていた。PFでこのような理論シンポジウムは初めての試みであるとのことだ。今回は、理論研究者の中でも、物理のバンド計算寄り、量子化学計算寄りの電子状態計算に基づく方々、モデルハミルトニアンを用いた計算をされる方、配位子場理論計算の方、そして散乱理論と、様々な異なるアプローチの研究者の方々に講演いただいた。

基調講演は Diamond Light Source の Gerrit van der Laan 氏、CNRS-Rennes 第一大学 Didier Sebilliau 氏、千葉大学名誉教授藤川高志氏らによって行っていた。van der Laan 氏は、Carra, Schutz と共に 2000 年に EPS Europhysics Prize を XMCD の研究で受賞されており、非常にレベルの高い講演を行っていた。氏は日本のうなぎが好物とのことで、来日後すぐに、Didier 氏と 3 人でつくば駅近くの鰻屋にて、非常に美味しいうなぎをぶどう山椒とともに食べました(図1)。

本シンポジウムでは、講演並びにポスターセッションは全て英語で行なっていた。講演者は全 13 名で、そのうち 4 名が欧州人、女性は 1 名、学生は 1 名であった。シンポジウムの参加者は事前登録者が 59 名で、大変盛況



図1 研究会前夜、つくば駅近傍の鰻屋にて(左から、Gerrit 氏、著者、Didier 氏)



図2 集合写真

であった。ポスターセッションは、千葉大 Kruger 教授の発案で、懇親会を兼ねて、飲食をしながらの欧米スタイルでリラックスしたものであった。

シンポジウム終了後にプログラムのチュートリアルを 4 時間行なった。この参加者は 23 名で、日本語により私が行なった。私が欧州で開発したフルポテンシャル多重散乱(FPMS)プログラムについて、基本的な考え方から、使用方法までの説明を行なった。

理論、特に理論プログラム開発は、開発が長期にわたり、1、2 年はゆうにかかる。そのために論文を出版する機会になかなか恵まれず、理論研究者は育ちにくい。今後このような交流を行うことで、意見交換を行い、業界の活性化を図りたく思う。今回の参加者の半数以上が実験屋の方々であったが、今後はこのような交流を通して、共同プロジェクトの立ち上げの一助とすることができればと願っている。

最後に、本シンポジウムで、友人からの意見として色々意見をしてくださった、千葉大学の Peter Kruger 教授、そして PF 側の受け入れ担当者として支えてくださった、雨宮健太教授と阿部仁准教授、そして事務的裏方として活躍していただいた、高橋良美様、林陽子様にご挨拶を述べさせていただきます(研究会ホームページ：<https://www2.kek.jp/imss/pf/workshop/kenkyukai/20191003/>)。

## PF 研究会「XAFS・X線顕微鏡分光分析分野でのIMSS, PF 戦略的利用に関する研究会」開催報告

名古屋大学 田淵雅夫

2019年の年の瀬、12月17日と18日の二日間にわたって「XAFS・X線顕微鏡分光分析分野でのIMSS, PF 戦略的利用に関する研究会」と題するPF研究会が開催されました。この会は、XAFS ユーザーグループとX線顕微鏡分光ユーザーグループが共同で企画・開催しました。公開されている趣旨文にありますように、本会の趣旨は下記の通りです。「XAFS・X線顕微鏡分光は、エネルギー関連材料(触媒、電池)、地球惑星環境関連材料、有機材料、社会インフラ材料、等、広い分野で、様々な観点で、国内外の様々な量子ビーム施設で広く研究が進められている。そのような背景を踏まえ、これらの分野のユーザーが、IMSS, PF を如何に戦略的に利用していくかについて、(1) 研究推進、(2) 計測手法の高度化、(3) データ解析の高度化(情報科学等)、(4) 利用制度、の観点から議論する。両分野だけでなく、放射光以外の量子ビーム、情報科学、等の分野から、トピックス紹介を頂くセッションと、小グループでの自由討議のセッションを交互に組み合わせることにより、brain storming を進めて議論を掘り起こしたい。」つまり、計測手法そのものと、計測対象あるいは研究分野の両方が多様な広がりを見せている状況に対して、様々な事例を概観した上で、今後より効率的に研究を推進し、測定手法の発展を促すためには何をしていけばよいかを議論したいというのがこの会を開催した主な動機でした。口頭での御講演は先端的な研究をご紹介頂く御講演と、先端的な計測手法をご紹介頂く御講演を中心に、データ解析やデータベース構築の話題を含め16件のご講演を頂きました。

「XAFS を用いた触媒開発の効率化 - 活性サイトを知る重要性 -」 一國伸之(千葉大)

「波長分散型 XAFS を応用した測定手法の開発」

片山真祥(立命)、丹羽尉博(KEK)、稲田康宏(立命)  
「PF におけるコヒーレント軟X線回折イメージングの現状とその可能性」 中尾裕則(KEK)

「PF での STXM 顕微鏡観察」 武市泰男(KEK)

「SPring-8 での XAFS を中心とした複合同時計測等の高度化」(宇留賀朋哉(JASRI))

「データ駆動型 XANES 解析」 溝口照康, 清原慎(東大)

「超伝導検出器を用いた X 線分析」

志岐成友, 藤井剛, 浮辺雅宏(産総研)

「PF での XAFS 高度化, マルチスケール顕微鏡, データ集積・解析」 木村正雄(KEK)

「地球科学試料への蛍光 XAFS の利用: TES の利用や高エネルギーマイクロ XAFS」 高橋嘉夫(東大)

「XAFS と SAXS の併用による金ナノ粒子の構造解析と成長過程追跡」 畠山義清(群馬大), 西川恵子(豊田理研)

「触媒動作中の活性点三次元構造決定のためのオペランド偏光全反射蛍光 XAFS 法の開発」

高草木達, 魯邦, 城戸大貴, 佐藤優太, 朝倉清高(北大)

「MLCF 法による 2D/3D XAFS の計測時間短縮」

田淵雅夫(名大)

「電気化学デバイスの放射光によるオペランド計測」

内山智貴, 山本健太郎, 松永利之, 内本喜晴(京大)

「XAFS による精密合成した金属クラスターの構造・物性解明」 山添誠司(首都大)

「光電子ホログラフィーと蛍光 X 線ホログラフィーによるドーパントの原子構造の可視化」

松下智裕(奈良先端大, JASRI)

「実験データ転送システム BENTEN を活用した XAFS 実験データベースの構築」

松本崇博, 横田滋, 松下智裕, 大淵博宣, 本間徹生(JASRI)

また、ポスター発表としては PF の関連ビームラインの話題だけでなく、一般からお申込み頂いたご発表を加え、合計 12 件のご発表がありました。

「PF における時間分解 XAFS の現状とその可能性」

野澤俊介(KEK)

「カーボンナノチューブ内に包摂されたカルコゲン元素の構造」 池本弘之(富山大)

「レーザー誘起パラジウム微粒子化反応の DXAFS 研究」

佐伯盛久(QST)

「高分解能 2D-XANES 法によるリチウムイオン電池の電極反応の分布観察」 渡邊稔樹(KEK)

「TREXS を軸とした表面の複合実験環境の開発」

阿部仁(KEK)

「二刀流ビームラインのための薄膜ビームスプリッターの提案」 阿部仁(KEK)

「高温での XAFS/XRD 同視野計測」 君島堅一(KEK)

「硬 X 線 XAFS ビームラインでのラウンドロビン実験」 君島堅一(KEK)

「PF 分光分析ビームラインにおけるデータパイプライン構想」 仁谷浩明(KEK)

「PF BL-19A STXM における大気非暴露搬送システムの構築」



図1 集合写真

山下翔平 (KEK)

「NW2A における時間分解 Dispersive XAFS の現状」

丹羽尉博 (KEK)

「データの類似度に基づいた X 線吸収スペクトルの解析」

鈴木雄太 (KEK・総研大)

いずれのご講演、ご発表もきわめて興味深く、XAFS や X 線顕微分光を取り巻く技術が本研究会を企画した時の想定を超えてより高度に発展しつつあることを実感しました。またこれらの手法を駆使することで進められている多くの先端的なご研究の話と、ご研究の中で放射光を使った実験が如何に重要な役割を果たしたかを伺うことで、改めて放射光を使うことの意義や重要性を感じました。

本会の特徴として、これら多くのご講演・ご発表を受けて、初日と二日目それぞれの締めくくりには総合討論の時間をとりました。それぞれ「コミュニティとして取り組むべきこと」、「コミュニティからの提案」というサブタイトルを設け、以下の観点で議論できればと考えました。1) 研究分野としても手法としても従来の垣根を越えて複合的な取り組みが行われる中、PF のビームラインがどの様に整備されていくことが望ましいか、2) 予算/ビームタイムの緊縮が続く中ビームタイムという資源をどのように配分するのが望ましいのか（評点差による配分の在り方、最低時間保証の必要性有無等）、3) ビームタイムの緊縮を打ち破り増大に転じるためにコミュニティとして行いうる活動は何か。多くの方にご参加いただいたとは言え、非常に多い XAFS、顕微分光分野の研究者の数からすれば一部でしかない本会参加者の間の議論だけではもちろん結論を出すことはできませんでしたが、放射光施設を使わせてもらうユーザーとして自らも主体的に考え行動することの種にはなかったのではないかと考えています。

今後も機会を捉えて、XAFS ユーザーグループ、X 線顕微分光ユーザーグループ、さらにはこれら二つのグループを超えた放射光ユーザー全体の発展を考えて継続的に議論を続け、定期的な研究会を企画していきたいと考えていますので、皆様のご協力をお願いしたいと思います（研究会ホームページ：<https://www2.kek.jp/imss/pf/workshop/kenkyukai/20191217/>）。

## PF 研究会「量子ビームを活用した食品科学」開催報告

物構研中性子 瀬戸寿紀

人々にとっての「生きる糧」であり、日々の生活に密接に関係している食品。人類が狩猟と採集の時代から抜け出すためには、素材を「あるがまま」の状態から「食べられる状態」に加工することが必要だったことを考えると、「食品の科学」は猿から人間に進化した時から始まった、とも言うこともできる。食品の科学は味や栄養、嗜好など多岐

にわたって多くの研究が行われており、これらが分子の構造や組成などと密接に関連していることが知られているが、食品のほとんど全てが多量の物質からなる複雑な系であり、構造を解析すると言ってもそう簡単ではない。その上、食品の咀嚼や消化、食品加工のプロセスは全て非平衡過程が絡むため、構造解析自体が困難を極める場合が多い。従って、原子スケールからセミマクロスケールに至る階層構造を実時間で測定できる量子ビーム利用の要求が高まっている、と言える。そのような観点から、今回は放射光だけでなく中性子等の他のプローブも含めた量子ビームを活用した食品科学の現状と将来展望について議論するため、表記の研究会を 1/28 (火) ~ 29 (水) に開催した。

本研究会は 1 日目の午後に 3 つ、2 日目の午前中に 2 つ、午後に 1 つのセッションを行い、15 件の口頭発表と 10 件のポスター発表があった。最初のセッションでは山梨大の谷本守正教授が「乳と乳製品製造過程による乳タンパク質カゼインの挙動」と言うタイトルで、牛乳が固まることを利活用した食品の構造と制御に関わる研究の全体像についてレビューした。牛乳が固まる、と言う現象は乳タンパク質カゼインの凝集による高次構造の変化として捉えることができるが、その高次構造は長年にわたって様々な研究者によって研究されているにも関わらず、まだ良く分かっていないことが理解できた。

続く 2 つの講演では、KEK 物構研の高木秀彰特別助教と北海道大の大沼正人教授が、それぞれ小角 X 線散乱 (Small-Angle X-ray Scattering=SAXS) を用いたカゼインミセルの構造解析の結果について報告した。高木氏はカゼインミセルの構造として有力視されていた「サブミセルモデル」と「ナノクラスターモデル」を用いて実験結果を解析しようとしたものの説明できず、最新の低温電子顕微鏡写真を基に球状ミセル内に水のドメインとリン酸カルシウム粒子の存在を仮定して解析したところ、実験で得られたプロファイルと一致したとの結果を示した。一方の大沼氏は牛乳がチーズに変化するプロセスを SAXS で解析して、コロイド状リン酸カルシウムの凝集状態の変化が見られているとの結果を示した。この中で大沼氏が示した数日かかりの時間変化を見る実験は研究室の X 線発生装置を利用しており、放射光などの大型施設ではスケジュール的に不可能な「スローオペランド実験」と称していたのが印象的だ



図 1 会場の様子

った。

2つ目のセッションの最初は香川大の合谷祥一教授で、「X線を利用した食品系の微細構造解析」と言うタイトルで、「乳化剤の微細構造と乳化の関係」「デンプンの糊化及び老化の解析」「マイクロCTによる油調済みパン粉の微細構造解析」の3つの実験結果を紹介した。それぞれ SAXS、広角 X 線散乱 (Wide-Angle X-ray Scattering=WAXS)、X 線マイクロCT を用いた実験結果で、X 線を用いた食品の構造解析が様々な観点から可能であることが明らかになった。続いて登壇した京大複合研の佐藤信浩助教は、SAXS と小角中性子散乱 (Small-Angle Neutron Scattering=SANS) を用いて小麦や大豆に含まれるタンパク質の凝集状態を解明した、と言う結果を示した。この中でグルテンに含まれるグリアジンとグルテニンの凝集状態の精密解析のために、重水中で小麦を育てることにより重水素化グリアジンが得られつつある、との結果は印象的であった。続いて帝京平成大の前田竜郎教授は、民間企業に勤務していた時代から取り組んでいる製パン過程における「捏ね」の重要性を紹介するとともに、その際に形成されるグルテンの網目構造中のデンプン粒を解明するために行った蛍光染色観察法による実験結果と、グルテンのナノスケールの構造を明らかにするために行った SANS の実験結果を示した。2つの講演セッションの後に集合写真を撮影し、引き続き行われたポスターセッションでは、各ポスター前では活発な議論が行なわれた。初日の最後には、お酒や料理などの「食品」を実際に味わいながら、それぞれの立場からの食品科学研究に関する交流を行った。

2日目は早朝の大雨の影響で到着が遅れた柴山充弘教授(東大)に代わって、酪農学園大の金田勇教授が「高アミロース米粉ゲルの力学特性とナノ構造」と言うタイトルで、北海道で開発された加工用米であるキタミズホの特徴的な力学物性発現の要因について、レオロジー測定と SAXS 及び走査電子顕微鏡 (Scanning Electron Microscope=SEM) 測定の結果を比較しながら、特徴的なゲル物性の発現機構について説明した。続いて山形大の松葉豪教授が、デンプンと水の懸濁液を加熱・冷却して作る「わらびもち」の構造形成過程を調べた SAXS 実験の結果を紹介した。また、データ解析途中の SANS の結果も示して、量子ビームの相補利用の可能性について議論した。そして2日目第一セッションの最後は30分遅れで到着した柴山教授で、卵白に含まれるタンパク質の主成分であるオブアルブミン(OVA)のゲル化過程を、タンパク質凝集に重要な役割を果たしていると考えられているN末端の両親媒性部位を切除したタンパク質 pOVA の変化と比較した結果を示し、食品科学における SANS と動的散乱 (Dynamic Light Scattering=DLS) の有用性を示した。

2日目の第二セッションでは、最初に広島大学の山上聡教授が「食品油脂におけるオレオゲルの研究・開発の現状」と言うタイトルで、マーガリンを初めとする食品油脂に含まれる固体脂の作成法の変遷と今後の課題について紹介した。続いて防衛大の根本文也助教が中性子反射率装置



図2 集合写真

SOFIA と in-situ でずり流動測定が可能になるレオメーターを設置したことを紹介し、チョコレートにずり流動をかけることにより V 型結晶が形成された、との実験結果を示した。そして3番目の講演では原子力機構の中川洋主任研究員が、食品関連物質に水和する水の状態について中性子準弾性散乱を用いて調べた結果を示して、乾燥食品の保存性の指標となる「水分活性」と水和水のダイナミクスとの関係を調べた結果を示した。

昼食を挟んで行われた最後のセッションでは、まず京大の松村康生教授が「食品の品質を決定する構造的要因の解明 - 量子ビーム活用の可能性 -」と言うタイトルで、多成分からなる分散系と考えることのできる食品の微細構造を解明することにより、食品の美味しさや物理的・化学的安定性、消化・吸収性等の品質制御に繋がることを示しつつ、量子ビーム応用に対する期待の言葉を述べた。続いて農研機構の加藤悦子研究員が、固体 NMR を用いることで、米の物性と高次構造の相関を明らかにすることができた、と言う結果を紹介した。そして最後には KEK 物構研 / 茨城大の阿部仁准教授が、XAFS でハウレンソウ中のカルシウムの存在形態を明らかにして25年前からの謎を解明できた、と言う結果から、XAFS の食品科学への応用の可能性を示した。

本研究会が行われた1/28、29の関東地方は天気が大きく崩れる可能性が示唆されており、実際に1/28の夜半過ぎから降った雨により KEK 構内を含むつくば市内の各所が冠水するなど大変な状況があったが、それでも予想を大きく超える71名もの参加者があったことは、食品科学に量子ビームを応用することに対する期待の高さの現れだった、と言えるだろう。今回の研究会によって多くの食品科学の研究者が量子ビーム利用に関心を示すと同時に、放射光や中性子施設にいる研究者が食品科学の面白さを知り、今後の「量子ビームの活用による食品科学」のきっかけを作ることができたものと思われる。

本報告の最後に、本研究会の開催にあたって、事務局として尽力頂いた PF 秘書室の高橋良美さん、林陽子さん、当日の受付を対応頂いた PF 小角散乱ビームライン秘書の小針美由紀さん、会場設営等をお手伝い頂いた PF 小角散乱ビームラインの業務委託メンバーの皆さんには多大なご協力を頂いたことに対し、世話人を代表してお礼の言葉を述べたい (研究会ホームページ: <https://www2.kek.jp/imss/pf/workshop/kenkyukai/20200128/>)。