

## 4. 放射光科学研究系

---

## 4-1. 表面科学研究部門

雨宮 健太

物質構造科学研究所 放射光科学第一研究系

### 1. 概要

表面科学研究部門は、表面および界面に特有の機能に着目し、放射光をはじめとする様々なプローブを用いた実験手法を駆使して、それらの機能の発現機構を解明するとともに、新たな機能性物質を創成することを目指している。単に既存の手法を利用するだけでなく、放射光実験施設や加速器研究施設・加速器第六研究系と協力して、新たな表面観察手法の開拓も行う。2022 年度のスタッフは下記の表の通りである。

### 2. 活動内容

#### 【働く表面・界面をその場で観る】

原子レベルで制御された磁性薄膜は、垂直磁気異方性や巨大磁気抵抗効果など、バルク磁性体には無い特長を示すことから、いわゆるスピントロニクス材料として利用されている。また、化学反応を促進させるために欠かせない触媒は、その表面において化学種の吸着、拡散、反応、脱離といったプロセスを協奏的に進行させることで、高い選択性と反応速度を実現している。こうした機能性物質において、その性能の鍵を握るのは、動作中の表面・界面の状態である。本グループでは、深さ分解 XAS/XMCD 法、波長分散型 XAS 法など、新たな発想に基づく実験手法を開発し、表面・界面が働いている状態をその場で観る（オペランド観察する）ことによって、磁性薄膜や触媒の機能発現機構を解明するとともに、より高い機能を示す物質を創成することを目指している。また、物質の原子を 1 層ずつ制御する技術を用いて、自然界には存在しない界面状態を人工的に作製したり、表面状態を制御したりすることによって、その表面・界面にこれまでにない新たな電子状態を創り出し、角度分解光電子分光（ARPES）や XAS, XMCD

等の放射光分光に加えて、中性子・ミュオン・低速陽電子など様々なプローブを駆使して観察することで、更なる高い機能を持った表面・界面状態を実現することを目指している。

メンバーは、雨宮、北村、阪田の他に、組頭広志、志賀大亮（いずれも協力研究員、東北大多元研）、堀場弘司（協力研究員、量研機構）、相馬清吾（協力研究員、東北大材料科学高等研究所）、山本涼輔、渋谷昂平（いずれも学際理学講座、東大院理）、神田龍彦、長谷川直人、和田亜里斗（いずれも特別共同利用研究員、東北大多元研）である。

2022 年度はまず、最終年度となる 2019S2-003「軟 X 線深さ分解 XAFS/XMCD 法によるスピントロニクス材料研究の夜明け」を中心に、スピントロニクス材料に利用される薄膜における磁性の深さ分解観察を行った。特に、最も基本的な磁性薄膜の一つである Au/Co/Au について、磁場中での深さ分解 XMCD スペクトルの入射角依存性を測定し、Co/Au 界面における磁気異方性を内部の Co と分離して観察することに成功した [1]。一方で、最近開発した蛍光収量法による波長分散型 XAS 法を用いて、銅の酸化反応が表面から内部へと進行する様子を、リアルタイムで深さ分解して観察し、最初に表面に CuO が生成し、その後内部に Cu<sub>2</sub>O の領域が広がっていくという特異な酸化過程を明らかにした [2]。また、通常角度分解光電子分光測定は困難だとされていた粉状材料に対して、BL-28A で開発を進めてきたマイクロ APRES システムを用いて、微小粉状形状の菱面体硫化ホウ素結晶（結晶 1 つの大きさが ~20 μm 程度の微粒子）の電子バンドのピンポイント計測に成功した [3]。さらに、世界最高効率のスピン流電流変換を実現した高品質の単結晶酸化物 LaTiO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> において界面に発現する 2 次元電子ガスに関して、BL-2A で共

氏名	職位	主な研究内容
雨宮 健太	教授、部門長	新しい表面・界面観察手法の開発 磁性薄膜の化学・磁気状態の深さ分解分析 表面化学反応の実時間観察
北村 未歩	助教	任意に構造制御した酸化物単結晶薄膜の作製 XAS や ARPES による酸化物界面における新奇電子状態の観測 XMCD による酸化物界面におけるスピン状態の解明
阪田 薫穂	博士研究員	軟 X 線 XAS 等による表面・界面物性の解析 電気化学反応中の固液界面のオペランド観察 光触媒の表面物性の解析

鳴角度分解光電子分光測定を行い、伝導を担う Ti 3d 軌道由来のバンド構造を観測するとともに、その結果に基づいて理論計算を行うことで、スピン流電流変換効率の温度依存性を理論的に説明することに成功した [4]。

### 3. 今後の展望

引き続き、主に軟X線を利用した先端的な表面・界面研究を進めるとともに、表面・界面における特異な状態をより多面的に観察するために、軟X線に加えて硬X線、中性子、低速陽電子などを相補的に用いたマルチプローブ利用研究を推進する。このために、放射光、中性子、低速陽電子を用いた測定装置間でホルダー形状を統一し、試料を真空に保持した状態で搬送して各装置で測定できるシステムの開発をさらに進める。また、蛍光収量法による波長分散型 XAS 法をさらに発展させ、準大気圧下での触媒反応や、固液界面における光触媒反応の観察を行うとともに、基板のX線励起可視発光を用いた透過 XAS 法に波長分散X線を組み合わせた新たな時間分解計測法の開発を進め、電池材料などの薄膜デバイスのオペランド計測を行っていく予定である。

### 引用文献

- [1] K. Amemiya and K. Sakata, Phys. Rev. B **106**, 134424 (2022).
- [2] K. Sakata and K. Amemiya, J. Phys. Chem. Lett. **13**, 9573 (2022).
- [3] K. Sugawara, H. Kusaka, T. Kawakami, K. Yanagizawa, A. Honma, S. Souma, K. Nakayama, M. Miyakawa, T. Taniguchi, M. Kitamura, K. Horiba, H. Kumigashira, T. Takahashi, S. Orimo, M. Toyoda, S. Saito, T. Kondo, and T. Sato, Nano Lett. **23**, 1673 (2023).
- [4] S. Kaneta-Takada, M. Kitamura, S. Arai, T. Arai, R. Okano, L. D. Anh, T. Endo, K. Horiba, H. Kumigashira, M. Kobayashi, M. Seki, H. Tabata, M. Tanaka, and S. Ohya, Nat. Commun. **13**, 5631 (2022).

## 4-2. 固体物理学研究部門

熊井 玲児

物質構造科学研究所 放射光科学第一研究系

### 1. 概要

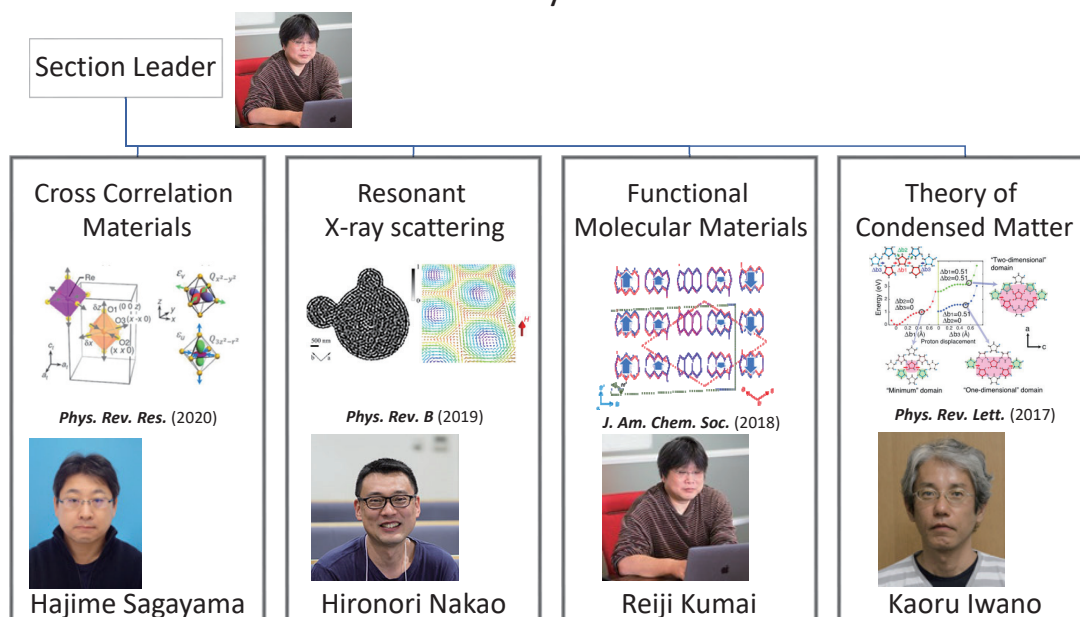
固体物理学研究部門は、物質中のマイクロからメゾスコピックな領域の構造や電子状態から、マクロな物性を理解するために、実験的あるいは理論的な研究を行っている。また、これらの知見をもとに、新奇な物性の開拓や新たな材料の開発を推進している。部門内では4名のPIがそれぞれ研究グループを形成して活動し、研究対象は学術的に興味ある物理現象から、応用面で重要な材料の物性まで広範囲にわたる。実験手法としては精密X線結晶構造解析、共鳴X線散乱、X線磁気散乱などをはじめとした放射光X線の利用に加え、中性子やミュオンなど、物構研の特徴でもあるマルチプローブによる研究を展開している。また、放射光実験施設とも協力して、これらの手法の高度化や、次世代の放射光源も視野にいれた利用法・解析手法の開発もを行っている。

### 2. 活動内容

多数の原子や分子、イオンが集合した「凝縮系」では、それらの集合様式によって示す物性に大きな違いをもつ。物質の性質を理解するためには、これらの物質中で集合化した電子の状態を解明することが必須である。このような観点のもと、部門内の各グループでは、PIを中心に国内外の研究者と共同研究を行いつつ、以下のように多様なサイエンスを展開している。

佐賀山グループは、強相関電子系物質の研究を中心に展開している。スピン、電荷、格子、軌道占有率、軌道角運動量などの複数の自由度に起因するエキゾチックな物理現象がみられる強相関電子系物質における交差相関現象の起源解明のために、放射光、中性子、ミュオンの相補的利用を推進している。中尾グループは、共鳴X線散乱を用いて、凝縮系の様々な興味深い現象の解明を目指している。共鳴X線散乱は、物質の電子状態の空間秩序や相関を観測するための強力なツールであり、様々な系へ応用されている。最近では、第2.5世代光源といわれるフォトンファクトリーでもコヒーレント軟X線が利用可能であることを実証し、共鳴X線散乱とコヒーレンスを組み合わせたイメージング手法の開発を推進している。熊井グループは、分子系のマクロな物性をマイクロな結晶構造から明らかにすることを目的とし、様々な分子性結晶や薄膜の構造から、その機能発現機構の解明を進めている。また、電場や圧力など外場下での物性制御と構造変調の観測にも力を入れている。岩野グループは、強相関電子系物質における光誘起相転移現象における電子的・構造的変化を、超高速時間スケールで理論的に研究するとともに、フォトンファクトリーの実験グループと協力して、産業界からの需要が高い高性能永久磁石の理解に向けた研究を精力的に進めていた。大変残念なことに、岩野講師は病氣療養中のところ、2023年1月27日にご逝去された。物構研では数少ない物性理論を

## Solid State Physics Section



専門とする研究者であり、実験系の研究者と行った数多くの共同研究をはじめとする貢献に感謝するとともに、哀悼の意を表す。

これらの実験的、理論的研究を推進するにあたり、メンバーのうち、中尾、佐賀山、熊井は、フォトンファクトリー内でのX線回折・散乱ビームライン（BL-3A, 4C, 8A, 8B, 14A, ユーザーグループ運営ビームライン BL-4B2, 6C, 10A および所外ステーション BL-18B）において、担当者としてビームラインおよび実験装置の維持、管理、高度化にもあたっている。

また中尾は、軟X線領域での共鳴X線散乱研究を進めるための真空中X線回折計を維持・管理・高度化にあたり、BL-11B, 13A, 16A, 19B において、共同利用実験に供している。

各ビームラインでは、装置の老朽化が進んでおり、ユー

ザー実験を円滑に進めるための維持・管理を中心に行っているが、スタッフおよびユーザー実験のニーズに合わせた高度化も検討している。アウトプットを最大化するための方策を検討しているが、予算的な制約もあるため、外部資金への積極的な応募を推奨している。

### 3. 今後の展望

各グループで推進するサイエンスおよびそのための手法が多岐にわたるが、各グループが外部の研究者と協力して研究を進める一方で、部門内で協力する体制も引き続き整えていきたい。また、PF内のビームラインにおいて、新たな手法開拓や装置・解析手法の高度化、自動化、リモート化なども積極的に行うとともに、将来光源を視野にいれ、展開可能な新たなサイエンス、実験手法の検討を併せて行っていきたい。

氏名	職位	主な研究内容
熊井 玲児	教授, 部門長	精密構造解析および外場下構造解析による物性発現機構の解明
佐賀山 基	准教授	放射光, 中性子, ミュオンの協奏的利用による交差相関物性の微視的解明
中尾 裕則	准教授	共鳴X線散乱を用いた構造物性研究
岩野 薫	講師	モデル計算及び第一原理計算を用いた固体の光励起後の非平衡ダイナミックスの理論研究



## 4-3. 構造生物学研究部門

千田 俊哉

物質構造科学研究所 放射光科学第二研究系

### 1. 概要

構造生物学研究部門は、放射光及びクライオ電子顕微鏡を利用して生体高分子の立体構造を原子分解能で解明し、その構造情報を利用して生命活動が維持されるメカニズムを分子や原子のレベルで理解することを目的としている。この目的を達成するために必要な生化学、分子生物学、生理学的な研究も共同研究を含む形で行う。構造解析の手法開発も、放射光実験施設との協力の下、推進している。

### 2. 活動内容

タンパク質結晶構造解析分野においては、タンパク質の発現、精製、結晶化から、回折データ測定、構造決定まで一貫した研究が可能のように幅広い取り組みを行ってきた。結晶化スクリーニングから回折データの測定に至るまで、各種のロボットを開発するとともに、データベースやソフトウェアも開発整備しユーザーに公開している。構造解析手法としては、(MR-) Native SAD 法の推進を強力に進めている。特に MR Native SAD 法は、効率的な構造解析法として利用されている。このような取り組みのなか、2022 年度は BL-17A に *in situ* 回折データ測定のための結晶化プレートマウントロボットを導入した(図1)。実際の *in situ* 回折データ測定も行われるようになり、企業ユーザーも出てきている。*In situ* 回折データ測定はタンパク質結晶構造解析の全自動化に向けた重要な一歩であり、将来的には全自動の結晶化装置や AI を利用した画像認識による結晶化プレートからの結晶同定などと組み合わせて行く

ことが想定されている。

クライオ電顕分野では、2022 年度はアカデミア 46 グループ、企業 6 社のマシンタイム利用があり、年間 274 日の稼働を達成した。利用の内訳としては、57% がアカデミア利用、21% が企業利用、22% が内部利用である。さらに、2022 年度の 12 月には 300 kV のクライオ電顕である Titan Krios G4 (Thermo Fisher 社) が導入され、KEK のクライオ電顕も遂に 200 kV と 300 kV の 2 台体制になった。2023 年 1 月からは、内部ユーザーを中心に Titan Krios の立ち上げ運転が行われ、共同利用体制の確立に向けて順調なスタートを切っている。また、クライオ電顕データの自動処理に向けた開発 (GoToCloud など) も精力的に行われている。

構造生物学的な研究としては、(1) GTP エネルギー代謝と疾病、(2) 糖鎖と疾病、(3) 感染症、(4) 転写とエピジェネティクス、(5) 酸化還元酵素などのテーマを扱うとともに、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) 事業に参画し、多数の共同研究を行ってきた。2022 年度の代表的な成果としては、クライオ電顕を用いた光収穫複合体 [1] や、シアノフィシン合成酵素 [2] の単粒子解析、新奇トリテルペン合成酵素の X 線およびクライオ電顕を用いた構造解析 [3]、さらにはエンテロウイルスの複製に関するオキシステロール結合タンパク質の構造解析 [4]、結晶構造解析を用いた GTP センサー PI5P4K $\beta$  の分子進化研究 [5] に関する論文が発表されている。

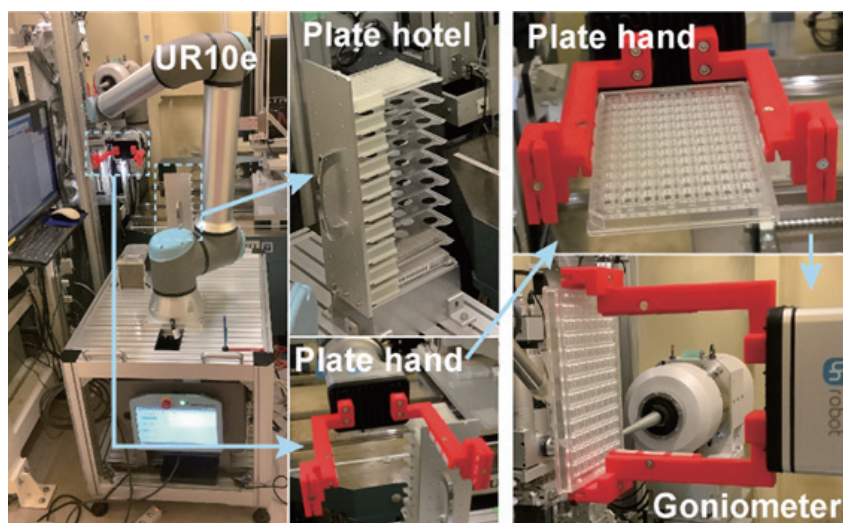


図1 2022 年度末に BL-17A に導入されたプレート交換ロボット

### 3. 今後の展望

現在は、一つのタンパク質を多面的に研究する必要性が高まっており、相関構造解析の手法が欠かすことができない。例えば、結晶構造だけでなく溶液中の構造情報を得るために小角散乱との併用をするような解析をして、その結果をタンパク質の構造と機能の関係の研究にまで発展させることが必要である。自動化に関しても、精製タンパク質の溶液散乱、結晶化、回折データ測定のためのデータベースの統合やAI利用による利便性の向上だけでなく、相関構造解析サポートするという観点でも開発を進める必要がある。

構造生物学の研究においては、引き続き主要分野での研究を行っていくとともに、測定と解析の自動化を最大限に利用した研究を進めることで、全自動解析技術のアピールと普及も行う。また、構造データと生物学的な機能を細胞内の過程を考慮した上で関係付けるために、遺伝子発現、代謝産物、脂質等を網羅的に解析する OMICS データと、構造学的データとを組み合わせながら研究を進め、生体内ネットワークの構造解明の方向へ研究展開を行うとともに、バイオインフォマティクス分野などとの共同作業を積極的に進めたい。

### 引用文献

- [1] M. Kosugi M. Kawasaki Y. Shibata, K. Hara, S. Takaichi, T. Moriya N. Adachi, Y. Kamei, Y. Kashino S. Kudoh, H. Koike and T. Senda, Nat Commun. **14** 730 (2023).
- [2] T. Miyakawa, J. Yang, M. Kawasaki, N. Adachi, A. Fujii, Y. Miyauchi, T. Muramatsu, T. Moriya, T. Senda and M. Tanokura, Nat. Commun. **13**, 5097 (2022).
- [3] H. Tao, L. Lauterbach, G. Bian, R. Chen, A. Hou, T. Mori, S. Cheng, B. Hu, L. Lu, X. Mu, M. Li, N. Adachi, M. Kawasaki, T. Moriya, T. Senda, X. Wang, Z. Deng, I. Abe, J. S. Dickschat and T. Liu, Nature, **606**, 414 (2022).
- [4] J. Kobayashi, M. Arita, S. Sakai, H. Kojima, M. Senda, T. Senda, K. Hanada and R. Kato, ACS Infect. Dis. **8**, 1161 (2022).
- [5] K. Takeuchi, Y. Ikeda, M. Senda, A. Harada, K. Okuwaki, K. Fukuzawa, S. Nakagawa, H. Y. Yu, L. Nagase, M. Imai, M. Sasaki, Y. H. Lo, D. Ito, N. Osaka, Y. Fujii, A. T. Sasaki and T. Senda, Structure **30**, 886 (2022).

氏名	職位	専門分野
千田 俊哉	教授, 部門長	GTP 代謝とレジリエンス, 酸化還元酵素の構造生物学
加藤 龍一	准教授	ウイルス感染の分子機構の構造生物学, 糖鎖の生合成と認識の分子機構の構造生物学, タンパク質の結晶化の高度化
川崎 政人	准教授	クライオ電子顕微鏡単粒子解析
田辺 幹雄	特任准教授	細菌感染症における宿主 / 病原体の相互作用と薬剤耐性機構の解明
守屋 俊夫	特任准教授	クライオ電子顕微鏡単粒子解析のデータ解析, 関連ソフトウェア開発, 計算環境整備
安達 成彦	特任准教授	真核生物の転写基本因子の構造生物学, クライオ電子顕微鏡単粒子解析
山田 悠介	研究機関講師	タンパク質結晶構造解析, 放射光ビームライン開発
引田 理英	助教	タンパク質結晶構造解析ビームラインにおける顕微分光装置の開発
千田 美紀	特任助教	タンパク質の結晶化技術の開発, 酸化還元酵素の構造生物学
高巢 晃	研究員	タンパク質結晶構造解析およびクライオ電子顕微鏡に関する手法開発
長瀬 里沙	研究員	ピロリ菌発がんタンパク質の構造生物学, GTP センサータンパク質の分子進化解析
露口 正人	研究員	糖アルコールリン酸修飾のバイオロジー
于 宏洋	研究員	フィラメント化による GTP 代謝を制御する酵素の構造生物学
池田 聡人	研究員	クライオ電子顕微鏡単粒子解析
稲葉 理美	研究員	膜タンパク質および, クライオ電子顕微鏡単粒子解析

## 4-4. 材料科学研究部門

木村 正雄

物質構造科学研究所 放射光科学第二研究系

### 1. 概要

我々は、人々の生活を豊かにする、材料の創製やプロセス開発、物質の機能発現の理解、に資するサイエンスを目指し、物構研のメンバーはもちろん、国内外の産学公のユーザーと連携して研究を進めている。そのために必要となる観察技術を、関連する部門と協力して研究・開発し、それを活用した研究および共同利用を展開している。具体的には、X線吸収分光 (XAFS)、顕微分光法を軸に、(a) 材料の不均一 (heterogeneity)、(b) 反応の時分割計測 (dynamics)、(c) 表面 / 界面現象 (surface/interface) の3つの視点から、高度の観察技術を用いた研究を進めている (図1) [1]。

#### 【ビームラインの高度化視点】

ビームラインの高度化を進めるに際して、特に以下の四点を重点項目としている。

- (1) 材料の不均一性を明らかにすること (heterogeneity)、
- (2) 材料の時間変化を明らかにすること (dynamics)、
- (3) 表面 / 界面の現象を明らかにすること (surface/interface)、
- (4) 計測基盤技術の高度化 (自動化、標準化を含む)

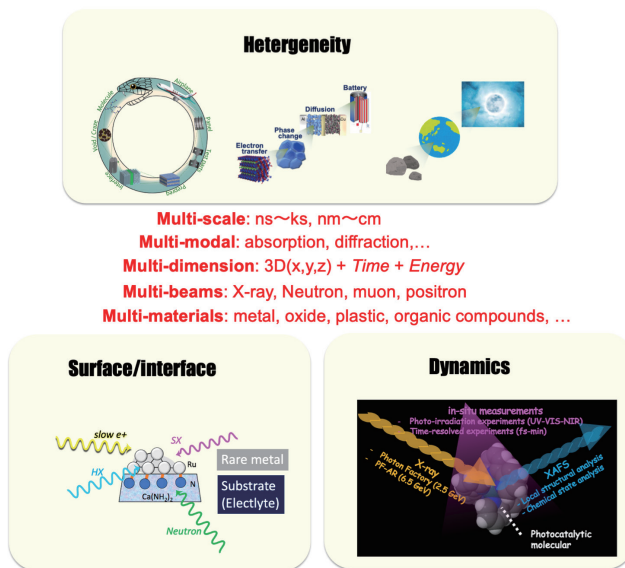


図1 材料科学研究部門の研究ターゲット

### 2. 活動内容

#### 【ビームライン整備】

当グループが放射光実験施設と共同で管理するビームライン [2] は、産学公の様々な研究者が無機 / 有機の多様な材料を持ち込んで実験が行われている。そのため実験環境に対するニーズも年々多様化しており、それに応えるべく様々なビームラインの環境整備を実施している。XAFS実験の効率化のため、in situ ガス自動化システム (@BL-9C, AR-NW10A)、ハイスループット XAFS 実験ステーションの自動測定 (@BL-12C) が順調に稼働している。BL-15A1 ではアンジュレタからの高輝度セミアマイクロビーム (20  $\mu\text{m}$  径) を用いて X線吸収分光 (XAS)、X線蛍光分析 (XRF)、X線回折 (XRD) の同視野観察が可能である。

ここ数年特に X線顕微鏡の整備に力をいれてきた。上述した BL-15A1 での「XAS/XRF/XRD mapping」、BL-19A/B での「走査型透過 X線顕微鏡 (STXM)」、AR-NW2A での「X線吸収分光顕微鏡 (XAFS-CT)」を整備してきた。新たに「広視野での X線吸収分光マッピング (XAS mapping (LFOV))」の導入に取り組んでおり 2021 年 10 月から共用設備として公開を開始し、地球科学や電池の分野で利用が始まった (図2)。さらに、in house X線を用いた X-CT も合わせて、広いエネルギー域 (硬軟 X線)、マルチスケール ([視野; 空間分解能] = [ $\mu\text{m}$ ; 数 10nm] ~ [10mm; 数  $\mu\text{m}$ ]), マルチモーダル (吸収分光, 回折) での顕微鏡が、ひとつのグループで利用できるユニークな体制となっている。そうした特徴を活かして、産学公の様々なニーズに対応して、構造材料 [3]、電池、有機材料、金属材料、地球惑星関連物質 [4]、環境科学、等の分野で研究を展開している。

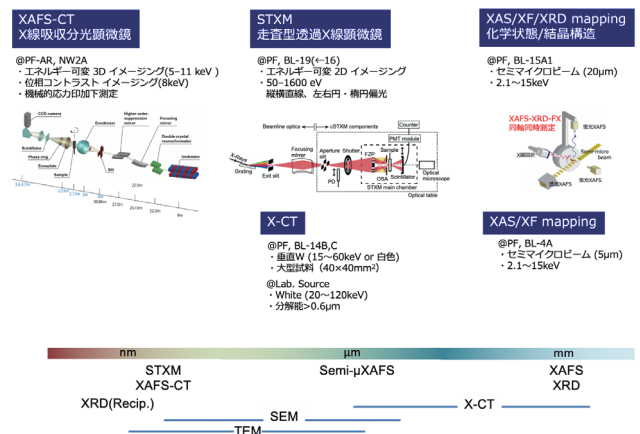


図2 材料科学研究部門が管理・関係している主な X線顕微鏡



ハイスルーブット化とユーザーの対応のためにビームラインの遠隔化を進めた。特に、BL-12Cでは、試料自動交換ロボットにより、透過法での標準的な測定を完全自動化を実現している。

AR-NW14Aでは、衝撃波による試料の変形の時間変化を計測するためのレーザー速度干渉計を設置し、順調に稼働している。これにより、時間分解XRDで計測される材料の相転移過程や破壊のトリガーサイトや、惑星形成に重要な現象である隕石衝突を模擬した岩石の衝撃圧縮状態について圧力履歴を追跡して精密解析することが可能になった[5-7]。また、AR-NW2Aではレーザーによる急速加熱に伴う相転移の観察技術[8]、さらにAR-NW2AとAR-NW14Aの相補利用により、XAFS & XRDのマルチモーダル測定の実現環境整備を行った[9]。

BL-27Bは、2019年度より放射線生物UGと原子力基盤研究UGの共同でのUG運営ステーションとなった。非密封RI(核燃料物質を含む)のXAFSが測定できる実験ステーションとして、福島第一原子力発電所事故後の環境修復や廃炉に関する課題が実施されている。また、XAFS測定のための制御システムを、他のXAFSビームラインと共通のものに更新し、ユーザーの利便性を高めた。

#### 【部門内活動】

必要に応じてグループミーティングを開催し、情報交換、活動報告、研究報告、今後の方針等の議論を行った。

#### 【学会等対外活動】

国際XAFS学会(IXAS) Executive Committee, 国際結晶学連合(IUCr) Commission on XAFS, 日本放射光学会行事幹事等、放射光やXAFS分野の発展のための活動を実施した。また、茨城大学の学生実習等、XAFSを広く知ってもらう活動を行った。さらに、TIAかけはし課題への参加やそのWorkshop等に参加・発表する等して、X線吸収分光を新たな分野へ展開する活動を進めた。

一方、X線吸収分光を軸に、国内の放射光施設連携にも積極的に取り組んでおり、光ビームプラットフォーム事業[10]を契機に始めた活動であるHX-XAFSのラウンドロビン実験、他の放射光施設での実験等、を継続して進めた。国際的な活動も精力的に進めており、国際会議の発表や国内外の施設のXAFS関係者との連携をすすめている。こうした活動が契機となりInternational XAFS Round Robinの話が進んでいる。PFでXAFS分光実験を進めるのに必要な各種情報はじめとして当該分野の研究コミュニティに対する情報発信として、ホームページ[1,11]を整備し様々な情報を提供している。

情報科学を利用した材料研究のための基盤整備のひとつとして、PFで測定されたXAFSスペクトルを集めた「PF XAFS データベース」の整備を進めてきた[12]。これらのデータは、他の施設で測定したXAFSスペクトルデータや、他の様々な材料科学データと合わせて活用することにより、その価値が一層高まると考える。そこで、国内の

放射光施設関係者と連携して、各施設が独自で進めてきたデータベースをNIMSのMDRにdepositして、広く活用してもらう計画を進めた。「PF XAFS データベース」のデータも2022年3月にはNIMSのMDR[13]に公開した。

#### 【推進している研究】

産学公の様々な研究者がユーザーにとって魅力的なビームラインおよび実験環境の整備を行うためには、自らが魅力ある研究を行うことが必要と考え、国家プロジェクトや企業との共同研究をグループとして積極的に推進している。新学術「革新的光物質変換」[14]、新学術「高速分子動画像」[15]、新学術「ソフトクリスタル」[16]、未来社会創造事業「モノの寿命」[17]、CREST「革新反応」[18]、CREST「自在配列システム」[19]等の国家プロジェクトでは研究推進の中心母体とし参画し、関連するビームラインの整備を進めている。

Heterogeneityの分野としては、マルチスケール、マルチモーダルでの顕微鏡法が、ひとつのグループで利用できるという特徴を活かして、産学公の様々なニーズに対応した研究を展開している。具体的には、構造材料のき裂観察、電池のoperando観察、有機材料の微細組織観察、金属材料の微細組織観察、地球惑星関連物質や環境科学での化学状態観察、等の研究を展開している。特に、X線顕微鏡で得られた多次元のビッグデータから情報を引き出すために、微細組織や化学状態の不均一性の「かたち」と「うごき」を応用数学を用いて解析するアプローチの研究を進めており、学術変革領域研究「データ記述」[20]を立ち上げ、材料科学班として活動を進めている。その中で、立命館大、阪大、東北大等と共同で、様々なX線顕微鏡のビッグデータからパーシステントホモロジーを用いて本質的な情報抽出することに取り組んでいる[21]。

Dynamicsの分野としては、AR-NW2AでCWレーザーを放射光と組み合わせ、数10 nsの時間スケールでの急昇降温に伴う構造変化を観察する計測法の高度化を進めている。これにより鉄鋼や金属の相変態を利用した材料設計の指針となる研究を進めている[8]。

Surface/interfaceの分野：in situ XAFSにより、触媒と担体の相互作用、新たな触媒の機能発現メカニズムの解明に取り組んでいる。さらに、表面/界面の反応をXAFS分光を用いて捉える新しい測定手法であるTotal REflection X-ray Spectroscopy (TREXS)の開発を進め、金属表面の酸化等の動的反応観察に展開している。また、マルチビームを使った触媒の表面反応の研究、食品科学分野への展開、等も進めている。

学術研究を進める一方、産学公連携の拠点となるべく企業の放射光利用推進のための活動にも力をいれている。2022年度は、9社の民間企業と共同研究、12機関の施設利用があった。特に、共同研究では、新たなニーズに答えるための計測技術の高度化を進めることにより、企業のイノベーションにつながるフィードバックだけでなく、学術的な成果(学会発表や論文)の創出にもつながっている。

これらのプロジェクトや産業利用で得られた外部資金はそれぞれの研究活動に使われるが、その結果進められた環境整備（新たな計測設備の設置，検出器更新や光学系の整備）は，共通基盤的なビームラインの整備につながり，大学共同利用機関としての研究環境の充実に大きく貢献している。PF に対する運営費交付金が大幅に削減されたために大幅に不足しているビームラインの整備に必要な経費を補うとともに，産業利用促進日制度を通じて，不足する PF 運転時間を延ばすための経費を少しでも確保する一助となっている。

### 3. 今後の展望

今後も，特に以下の点を念頭において，ビームラインや関連設備の環境整備を進めていく。

- (1) 材料の不均一性を明らかにすること (heterogeneity)，
  - (2) 材料の時間変化を明らかにすること (dynamics)，
  - (3) 表面 / 界面の現象を明らかにすること (surface/interface)，
  - (4) 計測基盤技術の高度化
- そして，材料関連の研究の拠点のひとつとして機能することを目指していきたい。

### 引用文献

[1] <https://www2.kek.jp/imss/pf/section/material/>, <http://sip-sm4i.kek.jp/>

[2] <https://pfxafs.kek.jp/beamlies/>

[3] M. Kimura *et al.*, *Comp. Sci. Tech.* **230** (2022) 109332. 10.1016/j.compscitech.2022.109332

[4] T. Nakamura *et al.*, *Science* **379** (2022) 6634. 10.1126/

science.abn8671.

[5] K. Ichiyangi *et al.*, *Sci. Rep.* **9** (2019) 7604. 10.1038/s41598-019-43876-2.

[6] S. Takagi, *et al.*, *J. Synchrotron. Rad.* **27**,(2020)371. 10.1107/S1600577519016084

[7] S. Takagi, *et al.*, *Geophys. Res. Lett.* **47**, (2020) e2020GL089592, 10.1029/2020GL089592

[8] Y. Niwa *et al.*, *ISIJ Int.* **62** (2020) 155. 10.2320/matertrans.mt-m2020301.

[9] Y. Niwa *et al.*, *Mat. Trans.* **62** (2021) 155. 10.2320/matertrans.mt-m2020301. (2021 年日本金属学会論文賞)

[10] <https://photonbeam.jp/>

[11] <https://pfxafs.kek.jp/>

[12] <https://pfxafs.kek.jp/xafsdata/>

[13] <https://mdr.nims.go.jp/collections/qz20st57x>

[14] <http://photoenergy-conv.net>

[15] <https://www.molmovies.med.kyoto-u.ac.jp>

[16] <https://www.softcrystals.iis.u-tokyo.ac.jp/>

[17] <https://www.jst.go.jp/mirai/jp/program/sustainable/theme04.htm>

[18] [https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/project/1111099/1111099\\_2020.html](https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/project/1111099/1111099_2020.html)

[19] [https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/project/1111107/1111107\\_2021.html](https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/project/1111107/1111107_2021.html)

[20] <https://data-descriptive-science.org/>

[21] I. Obayashi and M. Kimura, *JSIAM Lett.* **14** (2022) 151.

[22] S. Takagi, *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **118** (2021) 231901.

氏名	職位	担当手法グループ	専門分野
木村 正雄	教授，部門長	総括，XAFS，X線顕微鏡，ホモロジー解析	材料科学，電気化学，力学工学（特に金属，無機，CFRP）
山本 樹	特任教授	極短周期アンジュレータの開発	放射光科学，X線量子光学
阿部 仁	准教授	表面・界面，触媒 / エネルギー材料	XAFS，表面科学，物理化学
野澤 俊介	准教授	X線時間分解計測技術の高度化	時間分解測定，人工光合成
福本 恵紀	特任准教授	オフライン計測の推進	時間分解 PEEM，有機・無機半導体，超短パルスレーザー
城戸 大貴	特別助教	XAFS，X線顕微鏡，ビッグデータ解析	X線吸収分光，ホモロジー解析
深谷 亮	特任助教	時間分解 XRD の高度化	固体物理，時間分解計測，レーザー分光
春木 理恵	研究員	時間分解 XAFS の高度化	光化学反応，核共鳴散乱
KIM, Youngmin	研究員	時間分解 SAXS・WAXS の高度化	光化学反応，光反応タンパク質