

東北大学多元物質科学研究所の次世代放射光施設での位置づけ To Map the Next Generation SR Facility in the Academic Community in IMRAM, Tohoku Univ.

村松淳司

東北大学多元物質科学研究所

Atsushi Muramatsu

Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University

mura@tohoku.ac.jp

次世代放射光施設は、官民地域パートナーシップという、これまでにない新しい枠組みで整備・運用されることになっている。パートナー側は、宮城県、仙台市、東北経済連合会、東北大学、（一財）光科学イノベーションセンターの5機関によって構成されている。この中で東北大学は、次世代放射光施設の学術利用・産官学連携をリードする役割を担う。

次世代放射光施設では、既存の施設では不可能であった機能の可視化が、高い光源性能で可能となり、活用のサイエンスケースが飛躍的に拡大することが期待されている。特に、元素だけでなく、機能に関わるイオン状態、電子のスピン状態等を可視化することを目指している。学内を見ると東北大学の強みとして基盤を整備してきた、スピントロニクス、エレクトロニクス、磁性材料、農学、生命科学、環境エネルギー等の研究を加速し、さらなる深化をもたらす。

しかし、東北大学の役割は学内だけにとどまらず、産学コミュニティ全般に対するオープンイノベーションの展開によるリサーチ・コンプレックス形成の揺籃となることである。可視化の革新により、産業界のものづくりと放射光の距離が格段に縮まり、東北大学が得意とする、超高圧電子顕微鏡、スパコンによる数値シミュレーション、AIやデータ科学との融合分野が新たに創成されようとする動きがすでに始まっている。

東北大学多元物質科学研究所は、2001年4月、「多元的な物質に関する学理およびその応用の研究」を設立目的に掲げて発足し、異分野融合研究を積極的に進め、物質・材料分野の既成概念を一変させるような新たな物質科学技術の研究を創製・展開し、社会に貢献する成果を発信してきた。また、多元研は、大学間の壁を超えた、全く新たな枠組みの研究拠点である、北大電子研、東工大化生研、阪大産研、九大先導研とのネットワーク型物質・デバイス共同研究拠点を展開し、互いの共同研究のほか、産学官連携を積極的に進め、社会に開かれた研究所としても活動している。さらには、20を越える海外の研究機関との協定を基に、多くの国際共同研究を展開している。多元研は、次世代放射光の新たなサイエンスケースを創成し分野融合を促進する中核として、放射光産学連携準備室を立ち上げた。そして、次世代放射光の新しい活用分野の開拓に、放射光活用の既存活用の経験のない研究者たちによる、我が国で最もエミッタンスの低いSPring-8での試験研究を開始している。さらには、学内連携に加え、全国主要7大学及び東北地区7大学との放射光を中核とするアライアンスを形成する準備も進めている。

講演では、官民地域パートナーシップによる都市型大型研究基盤を中核とするリサーチ・コンプレックス駆動型のイノベーションモデルの構築を目指した、多元研の様々な先導的取り組みについて、紹介する。

次世代放射光に期待される役割

A Role of Next Generation Synchrotron Radiation Facility to Build a New Range of Innovation

高田昌樹

光科学イノベーションセンター (PhoSIC) / 東北大学多元物質科学研究所

Masaki Takata

Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University

masaki.takata.a4@tohoku.ac.jp

Society5.0 を支え、未来を切り拓くイノベーションを創出し、我が国の研究開発の国際競争力を強化するため、“次世代放射光施設建設の整備と推進”が、文部科学省により 2019 年度予算の概算要求に盛り込まれた。これは、東北大学青葉山新キャンパスに、高輝度低エミッタンスの 3 GeV 軟 X 線向き放射光施設を 2023 年度中の完成を目指し建設しようとする計画である。

海外では、2000 年代に 3 GeV 放射光施設が次々と登場し、TPS (台湾)、NSLS-II (米国) を最後に、現世代型の放射光施設の建設が一段落した。そして、次世代に向けて、低エミッタンス放射光施設である MAX-IV (スウェーデン) が完成し、SIRIUS (ブラジル)、HALS(中国; 2.4GeV)などの、新たな施設計画が進められている。大型施設では、ESRF (EU) のアップグレード、ESRF-EBS が、2018 年 12 月より 20 カ月の長期シャットダウンを経て完成する。

加えて、ESRF と GIANT、TPS と新竹サイエンスパーク、SOREILI (フランス) とパリ・サックレー地域、MAX-IV とサイエンス・ビレッジ・スカンジナビアといった、先端放射光施設に隣接するリサーチ・コンプレックスの形成も進められている。

計画では、施設の活用について、次世代の低エミッタンス光源の特徴を活かし、コヒーレンスを活用した可視化の革新、AI、データ科学との融合などに取り組んでいる。同様の動きは国際的にも加速しており、施設の利用開始にフェーズを合わせた戦略的な取り組みが求められている。「放射光施設の利用が研究機関や企業の研究開発を促進する」というオープン・サイエンスを担う役割から、オープン・イノベーションの展開を担う役割が次世代放射光施設に求められている。現時点で 60 社に上る国内主要企業が参画し、コウリション・コンセプトという新しい放射光のイノベーション活用モデルを提案している。参画を検討する企業数は増え続けており、ビジネス・エコシステムの構築を目指し、計画の具体化を進めている。

次世代放射光施設計画の現状と、今後について述べる。

次世代放射光施設を見据えた東京大学の取組

有馬孝尚^{1,*}

¹東京大学 物質系専攻

Taka-hisa Arima¹

¹Department of Advanced Materials Science, University of Tokyo

* arima@k.u-tokyo.ac.jp

軟 X 線領域を中心とする高輝度放射光施設の設立は、日本の放射光科学にとって長年の悲願です。さらには、現在の国際的な産業の状況を考えると、単に放射光科学だけでなく、日本が今後も科学技術を柱として世界的なプレゼンスを持ち続けるための重要なプラットフォームとなることが期待されています。本講演では、東京大学として、この施設からの光を最大限活用するための取り組みのアイデアを議論したいと思っています。

硬 X 線計測が原子配列解明に強みを発揮するのに対し、軟 X 線計測はエネルギー状態の解明においてその真価を発揮してきました。軟 X 線の高輝度化が実現すれば、分光のエネルギー分解能の向上が見込めます。東京大学は、軟 X 線分光手法のエネルギー分解能を室温の熱エネルギー程度に到達させることで、各種軟 X 線分光を物質・生命科学や産業応用に極めて役に立つ計測手法へと進化させたいと考えています。

もう一つの方向性は、分光計測に空間・時間分解能を持たせることです。現在、半導体の最先端では 10 nm を切るようなスケールの素子が作られようとしています。このような産業技術の発展を支えるためには、分光計測としてもエネルギー分解能だけでなく空間分解能が必要となると考えています。そのために、エミッタンスの低さを利用した集光ビームの利用や、コヒーレンスを利用した新規の測定手法の開発を目指します。

次世代放射光源で切り拓くコヒーレント回折イメージングの未来 (Future of coherent diffractive imaging pioneered by the next-generation synchrotron radiation source)

高橋 幸生^{1,*}

¹大阪大学大学院工学研究科

Yukio TAKAHASHI¹

¹Graduate School of Engineering, Osaka University

*takahashi@prec.eng.osaka-u.ac.jp

低エミッタンス電子ビーム光源である次世代放射光源では、コヒーレンス特性の優れたX線が提供される。コヒーレンス利用技術の一つであるコヒーレント回折イメージングは、次世代放射光施設において多くの利用が見込まれている。特に、様々な試料観察への展開が比較的容易な走査型コヒーレント回折イメージング（通称：タイコグラフィ）が中心的な手法となるであろう。タイコグラフィは、数マイクロメートルの視野を有し、厚みのある試料をナノスケールの空間分解能で可視化できる[1]。そして、試料電子密度（構造）、歪み、元素、化学状態、磁性と多様な情報を取得でき、試料をマルチモーダルに解析できる[2,3]。現状の SPring-8 におけるタイコグラフィ測定の問題は、測定時間が長いことである。数マイクロメートルサイズの試料について、そのナノ構造と化学状態を可視化するのに必要なデータ収集に数日を要している。次世代放射光施設では、測定時間が 100 分の 1 以下に短縮され、触媒材料、電池材料、高分子材料、磁性材料など様々な実用機能性材料の高スループット分析が可能となるであろう。そして、多次元イメージングのビッグデータから特徴的な情報を抽出するデータマイニング等の情報科学的なアプローチが多用されるであろう。本講演では、現在、SPring-8 において行われているタイコグラフィ研究を紹介し、次世代放射光施設におけるコヒーレント回折イメージングの新たな展開について議論する。

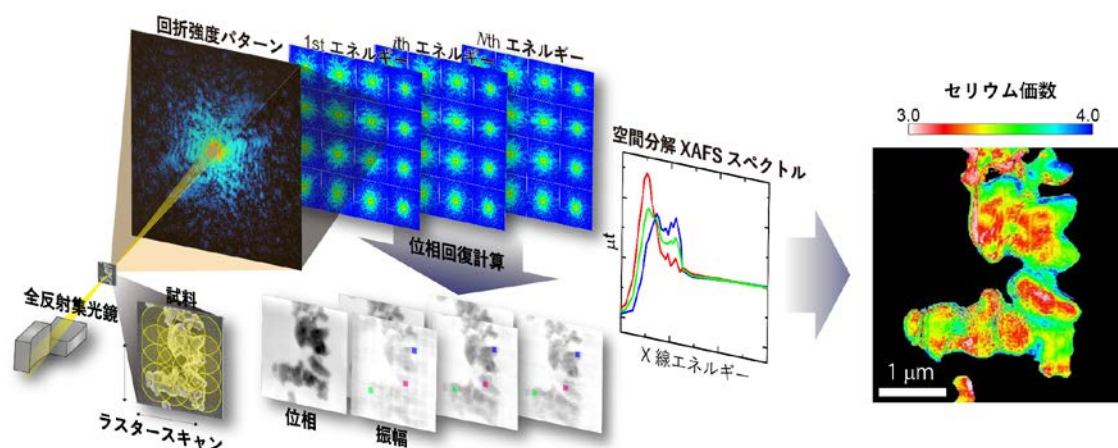


Fig. 1: 次世代放射光施設での実用化が期待されるタイコグラフィ-X線吸収微細構造法の概念図.

参考文献

- [1] 高橋幸生 放射光 31 111 (2018).
- [2] Y. Takahashi et al., *Physical Review B* 87 121201(R) (2013).
- [3] M. Hirose et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 130 1490 (2018).

自動データ処理によるタンパク質微小結晶構造解析の迅速化 Facilitating protein microcrystallography by automated data processing

山下恵太郎^{1,2*}

¹東大理, ²理研 SPring-8

Keitaro YAMASHITA^{1,2}

¹The University of Tokyo, ²RIKEN SPring-8 Center

*keitaro.yamashita@bs.s.u-tokyo.ac.jp

X線結晶構造解析は生体高分子の構造を精密に決定する非常に強力な手法であり、光源・検出器・試料調製技術などの進歩によって構造決定に必要な時間・労力を含むコストは大幅に削減されてきた。しかしながら、生命機能の解明に重要な膜タンパク質等の解析難度は高く、通常の放射光ビームラインで簡便に回折データを収集可能な大きさの結晶を得ることは難しい。近年 SPring-8 の BL32XU や BL41XU 等で利用可能になった高フラックスマイクロビーム X 線によって、数ミクロン程度の微小結晶からのデータ収集も可能になってきたが、放射線損傷の問題から単一の微小結晶では分解能が大きく制限されるため、多数の結晶を用いることが必要になる。我々は BL32XU において微小結晶を用いた構造解析手法の発展に取り組んできた。

多数の微小結晶を用いた解析では、より多くの回折データを収集することが肝要である。シグナルの積算による高分解能化が期待できるほか、結晶間での質のばらつきが存在する場合に均質かつ高品質なデータを抽出することが期待できるからである。そこで、試料ホルダ上に多数存在する微小結晶から、それぞれ 5–10° (small wedge) 程度の振動写真データを集める戦略を取った。まず、微小結晶に正確に X 線を照射するためには X 線による試料ホルダの走査(回折スキャン)が必須である。得られたイメージを迅速に解析する結晶位置探索ソフトウェア SHIKA の開発によって、回折スキャン終了後即座にデータ収集を開始することが可能になった。多数の結晶から収集された回折データは、ソフトウェア KAMO によって自動処理される。KAMO は結晶個別のデータを自動処理し、格子定数に基づいて分類、空間群を判別、さらに階層的クラスタリング法によって同型性による分類を試み、各クラスタについて異常値を示すフレームまたは結晶の棄却を行いながらスケール・マージし、最良クラスタの決定を行う。KAMO によって、数百個以上の結晶を用いた場合でも構造解析を簡便に行えるようになった。KAMO は GitHub 上で公開されており、既に国内外を問わず利用されている[1]。

これら微小結晶解析に不可欠な新規プログラムを開発することで、高難度試料の構造解析に多数貢献することができた。本発表内容は理研 RSC・山本雅貴部長の指導の下、同グループ特に平田邦生専任技師との共同開発によるものである。BL32XU ユーザの皆様ならびに SPring-8 PX-BL のスタッフの皆様にはこの場を借りてお礼申し上げる。

参考文献

[1] K. Yamashita, K. Hirata & M. Yamamoto *Acta Cryst.*, **D74**, 441 (2018).

次世代放射光施設への期待：物性化学・表面科学の立場から (Expectation for Next Generation Synchrotron Radiation Facilities: From the Viewpoint of Physical Chemistry and Surface Science)

吉信 淳*

東京大学物性研究所

Jun Yoshinobu

The Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo

*yoshinobu@issp.u-tokyo.ac.jp

2015 年 9 月に行われた国連サミットにおいて、2016 年から 2030 年までの国際目標として Sustainable Development Goals (SDGs : 持続可能な開発目標) が採択された。SDGs は、持続可能な世界を実現するための 17 のゴール・169 のターゲットから構成され、地球上の誰一人として取り残さないことを誓っている [1]。科学者として積極的に関与し貢献すべきであることは論を待たないが、なかでも化学者の果たす役割は大きい。17 のゴールのうち、目標 6「安全な水とトイレを世界中に」、目標 7「エネルギーをみんなに、そしてクリーンに」、目標 9「産業と技術革新の基盤をつくろう」、目標 13「気候変動に具体的な対策を」などは、化学なくして解決することはできない。一方、日本化学会が 2012 年に作成した「化学の夢ロードマップ」においても、有限の地球上における資源の不足・枯渇、エネルギー問題、気候変動や環境劣化、水や食糧問題、医療・健康・安全などの課題の解決には化学を基盤とする多角的視点からの多様な先進的かつ統合的研究が必要であるという認識に立って、多くの研究テーマが掲げられている [2]。2011 年の世界化学年に Whitesides と Deutch は化学の将来についてエッセーを発表し、「化学は、実際的な問題から始めて、そこから未解決の問題を解明するというアプローチが、基礎的な発見をするためには有効である」と述べた [3]。歴史的に見てもこのような事例は多く、SDGs やロードマップにおいて提起された課題は、アカデミックな化学者にとっても、研究の宝庫であると考えられる。物性化学・表面科学の立場から課題をピックアップすると、有機デバイス、単分子デバイス、太陽電池、蓄電池、燃料電池、CO₂ 固定、常温常圧窒素固定、光触媒、水素製造、バイオマス変換などが具体的課題としてあげられよう。ところで、1990 年代以降、化学は構造から機能に研究の中心が移ったと言われているが [3]、機能を導き出すためには、ほとんどの場合、表面や界面が重要な役割を果たしている。機能発現を確認しながら、そのメカニズムを原子・分子レベルで解明するための同時測定分光をオペランド分光と呼ぶ。近年、放射光を光源としたオペランド分光は急速な発展をとげ、それを用いた研究も活発化している。本講演では、雰囲気光電子分光を利用した我々の研究 [4,5] を含めて現状を紹介し、次世代放射光施設への期待を議論したい。

参考文献

- [1] <https://www.mofa.go.jp/mofaj/gaiko/oda/sdgs/about/index.html>
- [2] <http://www.chemistry.or.jp/roadmap/Roadmap.html#03>
- [3] G. M. Whitesides and J. Deutch, *Nature* **469** (2011) 21.
- [4] T. Koitaya et al., *Topics in Catalysis*, **59** (2016) 526.
- [5] J. Tang et al., *Appl. Surf. Sci.* **463** (2019) 1161.

軟 X 線計測の現状と次世代光源への期待

為則 雄祐^{1,2}

¹公益財団法人高輝度光科学研究センター、²東北大学・多元物質科学研究所

Yusuke Tamenori¹

¹Japan Synchrotron Radiation Research Institute (JASRI), ²Tohoku University

*tamenori@spring8.or.jp

1990 年代の前半に、最初の高輝度第三世代光源としてアメリカの ALS が稼働を始め、そこでは分解能を始めとした軟 X 線の質は飛躍的に向上した。日本国内では(本来は硬 X 線向きの光源である)SPRING-8 において、90 年代後半から高輝度軟 X 線の利用が始まり、一時は軟 X 線領域においても世界最先端の測定環境をユーザーに提供してきた[1]。ところが、その後の 20 年程の間に世界各地で 2 ~ 3 GeV クラスの中型高輝度光源が次々と稼働を始めたことにより、我が国の軟 X 線領域の研究環境は、これらの諸外国と比較して大きく水をあけられることとなった[2]。

2018 年 7 月 3 日、文部科学省が東北大学青葉山新キャンパス（宮城県仙台市）に次世代型放射光施設を建設する方針を発表し、国内でも中型高輝度光源の建設が動き始めた。数年後には、既設の国内施設と比較して圧倒的に高輝度の真空紫外・軟 X 線が利用可能となることが期待されるとともに、これを契機として、国内の各施設において計画されている次期計画などもまた、新たな進展が始まると思われる。

一方、光源に関する情勢の変化に加えて、軟 X 線を用いる計測技術や利用分野も多様化し、この 20 年で大きく変化してきた[3]。従来主流であった高分解能分光に加え、顕微測定を融合した顕微分光測定も今では一般的となり、さらに、散乱・回折やコヒーレンスの利用も活発化している。また、試料環境制御技術が大きく進展したことにより、軟 X 線分野においても実環境・実試料を対象とした利活用も大きな広がりを見せている。このような情勢を鑑みて、多様な視点から今後何をなすべきかを考え、研究を進展させていくことが必要であろう。本講演では、国内外の軟 X 線利用の状況を俯瞰し、現状を整理するとともに、次世代光源への期待と今後の展望について議論したい。

参考文献

[1] Y. Saitoh, *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.* **71**, 3254–3259 (2000) ; K. Ueda, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **36**, R1-R47 (2003), など

[2] V. N. Strocov *et al.*, *J. Synchrotron Rad.* **17** 631-643 (2010). など

[3] 為則 雄祐, *放射光*. **31**, 93-101 (2018).

精密なものづくりで先端技術に貢献する

Contributing advanced technology through precision manufacturing

赤羽優子^{1,*}

¹株式会社ティ・ディ・シー

Yuko Akabane¹

¹TDC Corporation

* yuko@mirror-polish.com

弊社は宮城県の中企業・精密加工業者として切削・研削・研磨を行っており、特に研磨の技術をナノオーダーまで高精度化することで様々な産業分野の研究開発・モノづくりのお手伝いをしている。当社の技術開発や販路開拓の事例をご紹介しますとともに、地元企業の立場から次世代放射光施設に寄せる期待をお伝えしたい。

創業より 65 年にわたり宮城県でものづくりを行ってきた。機械加工の中でも、研磨の技術に特化し、寸法や形状、粗さなどそれぞれナノオーダーの精度を実現可能としている。究極の精度を求める国内外のお客様から加工のご依頼が寄せられる。半導体、自動車、電子機器、医療、ディスプレイなど様々な産業分野のお客様に少量多品種で加工品をお納めしている。「磨く」ことは、ほんのわずかずつの量を除去する加工であり非常にスピードの遅い加工であるが、一方でほんのわずかずつ除去量を制御することによって非常に高精度を作りこむことが容易となる。



Fig. 1: 加工サンプル

近年特に力を入れているのが、自社独自の技術開発である。独自の技術開発と言っても、開発テーマはお客様の「こんな加工ができないかな?」「こんな精度だせないかな?」という声をもとにスタートする。他社をあたっても出来るところがなくて困っているというお話が寄せられれば、当社はそれに向けて技術開発や装置開発を開始する。お客様のお役に立つことと、自社にとってはオンリーワンの技術確立することとを同時に目指している。技術開発のスピードを上げるために積極的に産学連携の枠組みを活用している。

また次世代放射光施設を活用した技術の高度化やオンリーワン技術の開発にも取り組んでいる。これまで放射光施設の利用にはそれなりのハードルを感じていたが、コウリションコンセプトを用いれば地域中企業にも放射光施設活用の裾野を広げることが可能であると考え、現在東北大学、Spring-8 のご指導により FS を行っている。当社はこれまで長く地域に根差して事業を営んできた。特に東日本大震災を経験して以降は地元での雇用創出や地域の活性化への貢献も事業の目標の一つとして捉えている。放射光施設を活用して地域に強い会社が増えることを願っており、現在進めている FS をその先鞭をつける取り組みとしたい。

参考文献

[1] <http://www.mirror-polish.com>