

関西光科学研究所(2023年1月31日発行)

## メッセージ

関西研のみなさん、明けましておめでとうございます。

今年はずき年、癸卯です。癸は十干の最後の文字ということで物事の終わりと始まりを意味しており、飛躍を表す卯と合わせて、これまで7年間の中長期計画の切り替わりを控えて量研関西研が次期計画に向けて大きく飛躍する、これ以上ないと思われるほど縁起の良い年と言えます。

正月早々の縁起担ぎといえば、多くの方たちにとって神社への初詣がそれに当たるかもしれません。全国にはうさぎに縁がある神社、所謂うさぎ神社が沢山あり、私の自宅の近くにも調(つき)神社という神社があります。その神社には「狛犬」の代わりに「狛うさぎ」を始め、至るところにうさぎが居て、手水舎のところには石でできた巨大なうさぎがいます。巨大なうさぎの口から滔々と吐き出される、もとい流れ落ちる水で手を清めるのですが、初見では京都のうさぎ神社として有名な岡崎神社にある「招き猫」ならぬ「招きうさぎ」と同じくらいインパクトがあります。ちなみに岡崎神社の「招きうさぎ」はお金を招く金満うさぎではなく、出会いを招く縁結びのうさぎのようです。

初詣での私の神様へのお願いはコスパ重視で、毎年お賽銭の額に見合わないくらい沢山の御願いをすることになっています。その中で今年も職場の安全のお祈りもしてきました。うさぎは飛躍を表すと書きましたが、同時に干支のうさぎには穏やかなイメージから安全の象徴の意味もあるようなので、うさぎ年の今年一年、研究所が安全に研究開発を進め、次期中長期計画の素晴らしいスタートが切ることができれば良いなあと思っています。一方で、西洋のイソップ童話の「うさぎと亀」のように、うさぎを例として能力があっても油断すると上手くいかないという教訓もあります。この教訓も忘れることなく、安全に関して油断することなく、機構の成果最大化に向けて一年間皆で力を合わせて頑張ってください。今年もよろしく御願ひ致します。

【関西光科学研究所 所長 河内 哲哉】

## 2023年1月の主な動き

1月7日(土)-9日(月) 第36回日本放射光学学会年会・放射光科学  
合同シンポジウム(立命館大学びわこ・くさつキャンパス)  
1月18日(水) たつの市議会議員研修会(播磨地区)

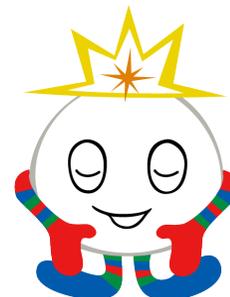
## 今後の主な予定

2月1日(水)-3日(金) 第22回国際ナノテクノロジー総合展・技術会議(東京  
ビッグサイト)に説明員派遣  
2月21日(火) 京大・JAEA・QST解析・計測合同地域セミナー(オンライン)

## 【きつづ光科学館ふおとん】

きつづ光科学館ふおとんの一部再開について:  
課外授業(学習投影)等の場としてご利用いただくため、  
7月23日より、「プラネタリウム上映」と「館内見学」(月・火  
曜日を除く)を再開しております。当面の間は事前予約制と  
なります。  
予約方法等の詳細は、下記Webサイトをご覧ください。

- きつづ光科学館ふおとん  
Webサイト: <https://www.qst.go.jp/site/kids-photon/>  
Youtube: <https://www.youtube.com/channel/UC2xgeump6cehlSreH7zjIBQ>
- 関西光科学研究所 見学等案内Webサイト:  
<https://www.qst.go.jp/site/kansai-overview/2527.html>

↑  
科学館YouTube

関西研ホームページ <https://www.qst.go.jp/site/kansai/>  
関西研だより <https://www.qst.go.jp/site/kansai-topics/2528.html>  
関西研ブログ <https://www.qst.go.jp/site/kansai/31978.html>  
関西研YouTube [https://www.youtube.com/channel/UCGQohC8igUdeiLFTx\\_1KhtA](https://www.youtube.com/channel/UCGQohC8igUdeiLFTx_1KhtA)  
関西研Facebook <https://www.facebook.com/KPSIkouhou/>  
関西研twitter [https://twitter.com/kpsi\\_kizu](https://twitter.com/kpsi_kizu)

# イベント報告

## 第36回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム報告

1月7日(土)から9日(月)にかけて、標記シンポジウムが同組織委員会の主催、量研ほか25学術団体の共催で開催されました。今回は3年ぶりに立命館大学びわこ・くさつキャンパスでのリアル開催となりました。本シンポジウムは放射光を利用した研究成果のみならず、放射光用の加速器、光源、ビームライン、測定器の技術開発、さらには放射光施設の運営も含む、日本における放射光施設と利用に係る総合的な発表と議論の場となっています。

初日は、総会その他、受賞講演、特別講演、一般講演、企画講演会が行われました。2日目および3日目は一般講演、ポスター発表のほか、それぞれ特別企画講演会、ふたつの企画講演会が行われました。施設報告のポスター展示は3日間を通して行われました。高良・佐々木賞の第1回受賞講演も行われました。

量研では令和6年度からの共用開始を目指して、東北大学青葉山新キャンパスにおいて、官民地域パートナーシップによる3GeV高輝度放射光施設(Nano Terasu)の建設を進めています。特別企画講演会において、整備状況、加速器の概要、放射線安全、共用ビームラインの概要、コアリションビームラインの概要、運営組織体制、X線ミラー、CMOS検出器、軟X線イメージング、物性理論からの期待、期待される固体物性研究や顕微分光について、量研、光科学イノベーションセンター、東北大学、東京大学、東京理科大学、大阪大学、広島大学、英国のDiamond Light Sourceから報告されました。

3日目の企画3「硬X線回折・散乱における時分割計測の現状」は、量研の和田グループリーダーらが中心となって企画され、固液界面の吸着平衡、半導体結晶成長(量研の佐々木主幹研究員)、圧電結晶の構造、高圧下でのX線回折など、動的過程の回折・散乱計測の最新技術が紹介されました。

量研からは、以上の企画講演会のほかに、播磨地区の施設報告(右図)、一般口頭・ポスター発表があり、例年通り多くの研究者が参加しました。また、組織委員会とプログラム委員会にも貢献しました(筆者)。来年は姫路市文化コンベンションセンター(アクリエひめじ)での開催が計画されています。

調和ある多様性の創造

国立研究開発法人 量子科学技術研究開発機構  
QST National Institutes for Quantum Science and Technology

量子ビーム科学部門  
Quantum Beam Science Research Directorate

QST QUBS

関西光科学研究所 放射光科学研究センター



### SPring-8量子科学技術研究開発機構専用ビームライン

平成28年4月1日に発足した国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構(量研/QST)の量子ビーム科学部門では、高輝度量子応用研究所と関西光科学研究所を活動の拠点とし、荷電粒子・放射線単位元素(R)、中性子、光子、量子、放射光などの様々な量子ビームの発生・制御やこれらを用いた高精度な加工や観察などに係る最先端の技術開発を行うことを目標としています。この中でも放射光は、量子ビームの観察すなわち「観る」機能の中核を担うものです。同部門の放射光科学センターでは、国立研究開発法人日本原子力研究開発機構(原子力機構)から承継した大型放射光施設SPring-8にある2本の放射光ビームライン(BL11XU, BL14B1)と原子力機構ビームライン(BL22XU)における複数の実験装置を用いて、放射光科学研究を推進しています。

QST極限量子ダイナミクスビームライン(BL11XU)では、先進的放射光利用技術の開発を運用方針とし、その開発技術を用いて機能性材料の性能向上への貢献や基礎物性物理の最前線への寄与を進め、以って革新的成果、シーズの創出を目指しています。QST極限量子ダイナミクスビームラインII(BL14B1)では、物質材料開発を運用方針としています。

また、文部科学省マテリアル先導リサーチインフラ(ARIM)事業を受託し、これらの放射光実験装置を広く産官学の利用に提供するとともに、放射光実験の自動化や収集したデータの共有化を進めています。

#### BL11XU 先進的放射光利用技術の開発

1 原子層単位での超局所磁性探査技術を開発

超高精度γ線のメスバウアー分光で一原子層単位での局所磁性分析

放射光 超超色X線ビーム 0.1 eV ~ 10 keV

核分光器 (<sup>57</sup>Fe/FeO<sub>3</sub>)

目標値よりも10倍位以上も超超精度の工程

In-Situ放射光フロープレーヤーメスバウアー分光システム

超高真空環境のままで一原子層の<sup>57</sup>Feフロー原子を埋め込んだ試料を計測

一原子層単位での分析を実現

最近の成果例

H. Suto, et al., J. Magn. Magn. Mater. 557 (2022) 16974.

Fe-Cr膜の原子配列の微視的不均一性を評価!

STO単結晶(SrTiO<sub>3</sub>)系では、Fe-Cr合金の様な負の分極率(内を示す材料の実用化が困難な) STO系子の候補材であるFe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>のPは理論的に-90%まで大きくなるが、実験値は-10%と小さい。

低分極率と金属組織の両立性を放射光で調査!

Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>薄膜(厚さ=20nm)の内部磁場の分布

Fe-Cr薄膜の低分極率は、組成の不均一性が原因。

高純性には合金組成比の均一性の向上が不可欠である! (設計制御)



#### BL14B1 物質材料開発

アルミニウムと鉄からなるレオタールを要さない新しい水素吸蔵材料の開発

「水素と反応しない金属同士を組み合わせる」という新発想で、汎用金属の代表であり、かつ、典型的な難水素化金属であるアルミニウムと鉄からなる、新規水素吸蔵合金を、高温高圧水素雰囲気下で合成

7万気圧、750℃

半世紀に渡る足跡は、水素化しやすい金属と反応しにくい空気を混ぜた合金

(TiFe, LaNiなど)レオタールを含む

定石に反する、水素化しにくいAlFeの組合せ

高温高圧下で合金が水素化する過程をその場観察しながら、合成条件も迅速に決定

X線中性子を利用して構造決定

Al<sub>2</sub>FeH<sub>2</sub>の結晶構造がわかる

鉄結晶水素化物 Li<sub>2</sub>FeH<sub>2</sub>の結晶構造

特徴は構造ユニットが水素化物を安定化

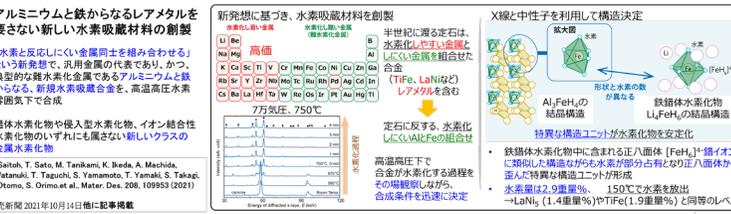
鉄結晶水素化物中に含まれる正八面体 [FeH<sub>2</sub>]<sup>2+</sup>と四面体イオンに類似した配位を有する水素分子占めと約90%正四面体構造に特異な構造ユニットが形成

水素量は2.9重量%、150℃で水素を放出

→LaNi<sub>5</sub> (1.4重量%)やTiFe (1.9重量%)と同等のレベル

Al, Sakah, T. Saito, M. Tamaki, K. Ikeda, A. Machida, T. Watanuki, T. Taguchi, S. Yamamoto, T. Yamaki, S. Takagi, T. Ohtomo, S. Orimoto et al., Mater. Des. 208, 109953 (2021)

発表期間: 2021年10月14日(日)に記事掲載



#### マテリアル先導リサーチインフラ(ARIM)事業への参画

光線検出器を用いたX線フロープレーヤー

データ構造化の取組み

QST-ARIMの登録装置

放射光科学センターへのお問い合わせ: 研究企画部(播磨地区)  
E-mail: qst.arim@qst.go.jp  
Phone: 0791-58-2641 Fax: 0791-58-0311



施設報告で展示した放射光科学研究施設(播磨地区)のポスター

【放射光科学研究センター コヒーレント光利用研究グループ 上席研究員 James Harries】

【受賞】:日本原子力学会 九州支部第41回研究発表講演会 奨励賞 受賞

高強度レーザー科学研究グループの竹本伊吹(QSTリサーチアシスタントが、九州大学大学院)が2022年12月3日に九州大学西新プラザで開催された日本原子力学会 九州支部第41回研究発表講演会において、「シングルピクセルイメージングによる放射線撮像フィルムの高解像度計測の向上」というタイトルで講演し奨励賞を受賞しました。

シングルピクセルイメージングは数年前から急速に開発が進められている数理的画像再現の技術です。その技術を、関西研で進められているレーザー駆動イオン加速の研究において、「大電流イオンビームのエミッタンス診断」を実現するために、フィルム画像の高解像度計測に用いたもので、極めて先駆的な開発内容であることが評価されました。

〈本人コメント〉

「シングルピクセルイメージングによる放射線撮像フィルムの高解像度計測の向上」というタイトルで、Radiochromic film (RCF)の高解像度計測システムの開発に関する研究結果の発表を行いました。この研究は榊泰直 上席研究員のアイデアにより始まり、小島完興 主任研究員やQSTリサーチアシスタントの宮武立彦さんをはじめとして、関西光科学研究所の研究者・技術者の方々からの協力なしでは成しえなかった成果です。この場をお借りして、心よりお礼申し上げます。

竹本君は、大学院修了後は就職することになっていますが、今後も大きな活躍を期待しています！



竹本伊吹リサーチアシスタント  
(九州大学大学院修士2年)

【光量子科学研究部 高強度レーザー科学研究グループ】

## 【受賞】 The 41st JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2022) Student Presentation Award

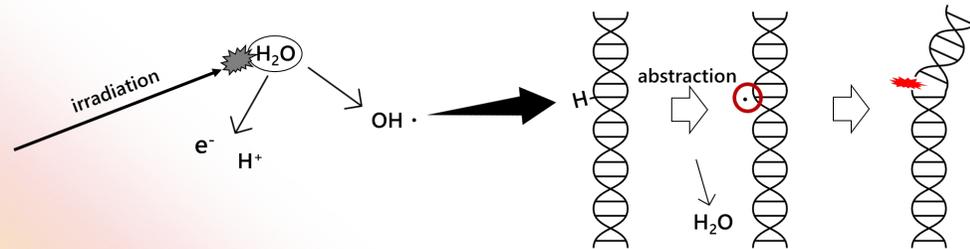
X線レーザー研究グループの川波竜太 (QSTリサーチアシスタント, 京都工芸繊維大学博士課程1年) が、昨年8月に行われたJSST2022にて発表を行った題目『Molecular dynamics study of microscopic mechanism of OH radical-induced DNA damage』によりStudent Presentation Awardを受賞しました。

### <本人コメント>

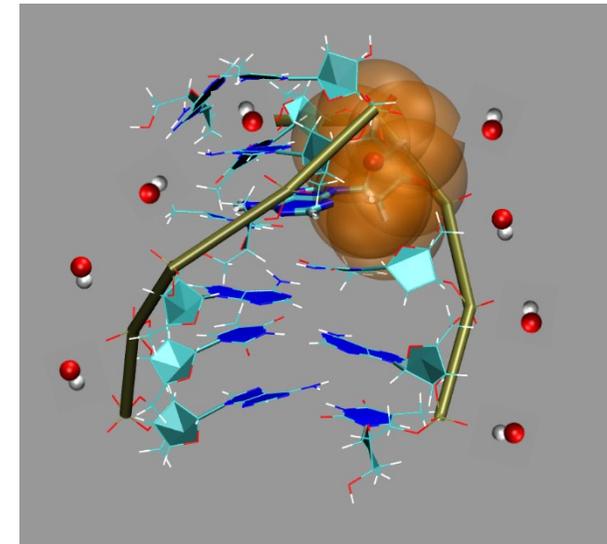
細胞内のDNAを損傷させる活性酸素種のひとつにOHラジカルというものがあります。OHラジカルはミトコンドリアから常に生成されているほか、水分子への電離放射線の照射によっても発生します。通常OHラジカルの寿命は短いですが、DNAの周囲に発生したOHラジカルはDNAの水素原子を引き抜くことがあります。引き抜かれる水素の場所によって、DNA鎖切断等の損傷が引き起こされることがあり、癌や神経疾患などの病気の原因となります。

本研究では、分子動力学シミュレーションを用いて“DNAの水素原子へのOHラジカルの接近のし易さ”を計算し、先行研究で行われた実験値の分子論的な再解釈を行いました。

この度頂いた賞は米谷佳晃主幹研究員をはじめとする関西研の研究員の方々、指導教員である藤原進教授らと、得られた解析結果について議論を重ねた結果です。この場をお借りしてお礼申し上げます。



OHラジカルが発生し、DNAが損傷する模式図



DNAとOHラジカルの分子モデル

【光量子科学研究部 X線レーザー研究グループ】

## 人工知能(AI)技術による放射光計測の効率化・自動化・自律化

近年、人工知能(AI)・機械学習技術と材料科学を融合したマテリアルズ・インフォマティクス、あるいは計測と融合した計測インフォマティクスなど、材料科学や計測において大量データの取得・解析に基づく物質・材料研究が当たり前になりつつあります。またロボット技術(ロボティクス)を活用した材料合成や計測評価など実験の自動化が進んでいます。さらに人工知能とロボティクスを組み合わせることで、機械による単なる「自動化」を超えて、人間の介在なしに実験システム自体が最適な条件を判断しながら実験を行う「自律化」が実現し、国内外で様々な事例が報告されています。このような実験自律化は物質探索や材料開発を飛躍的に加速します。

筆者は数年前から阪大・小野教授、統数研・日野教授、九工大・石橋助教らと共同で、放射光計測をはじめとする計測をAI・機械学習によって効率化する方法を研究してきました。その鍵となるのが機械学習の一種「能動学習」です。我々はこれを放射光計測手法であるX線吸収スペクトル(XAS)測定に適用しました。物質中ではX線が吸収されますが、この吸収量をエネルギーに対して計測することで物質の電子状態を反映したXASを得ることができます。XASのデータに能動学習を適用すると、「次にどのエネルギーで計測するのが良いか?」といった実験条件を自動的に決めることができます。結果的に、従来の連続的にエネルギーをスキャンする方法よりもかなり少ない計測点数で同等の精度のスペクトルを得ることができました。また「どこまで測定したら実験を止めるべきか?」というのは常に悩ましい問題

## メディア掲載

- 日刊工業新聞(2022年11月11日) AI新時代 / 高エネルギー加速器研究機構 放射光計測効率アップ
- ニューススイッチ(2022年12月23日) 成熟の「放射光計測」、AIと自動化で生む次の付加価値  
記事URL: <https://newsswitch.jp/p/35001>

JST未来社会創造事業「共通基盤」領域 本格研究「マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築」

WebサイトURL: <https://meep.nagato-u-tokyo.jp>

ですが、これには能動学習の停止基準を用いることで解決できました。このような計測の効率化・自動化・自律化技術は大型放射光施設SPring-8や3GeV高輝度放射光源NanoTerasuでも活用が期待されます。

本研究はJST未来社会創造事業「共通基盤」領域 本格研究「マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築」(研究開発代表者: 東大・長藤准教授)の一部として実施されています。ここには材料、計測、AI、ロボット等様々な分野の研究者が参画しており、ハイスループット自律探索システム、データ駆動/仮説駆動ハイブリッド型研究、ナレッジシェアリングの概念実証を通して新しい研究開発法を実現しようとしています。

本研究の一部は以前プレスリリース(2018年1月25日)しており、関西研だより2018年1月号、2021年10月号にも関連する記事が掲載されていますので、そちらもご参照ください。

QSTプレスリリース 2018年1月25日

<https://www.qst.go.jp/site/press/1221.html>

関西研だより 2018年1月号

<https://www.qst.go.jp/uploaded/attachment/18545.pdf>

関西研だより 2021年10月号

<https://www.qst.go.jp/uploaded/attachment/24604.pdf>



## 1月の利用状況

社会福祉施設や子育てサークル、ご家族連れにご利用いただきました。和気あいあいの「5家族連れ！」での来館もあり、子ども達は嬉々として展示エリアを巡っていました。

また、団体での見学の際、(体験を)躊躇されている方へ誘い水进行けるためもあってか、どちらかと言うと付添いの方が積極的に体験されている様子が印象的でした。



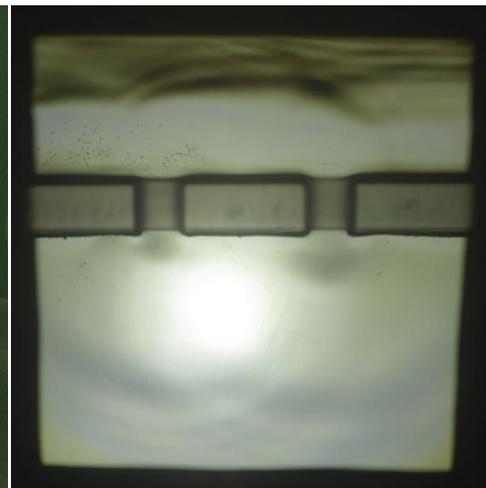
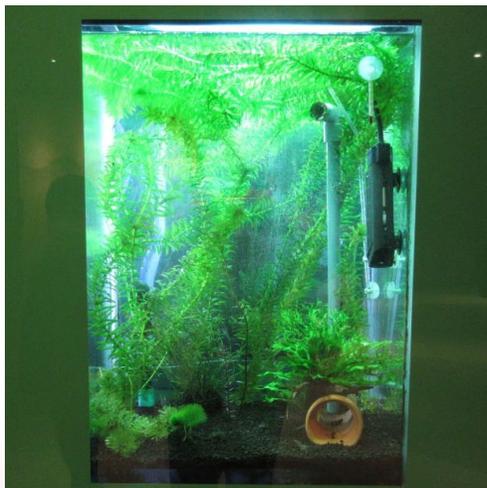
光合成



波のテーブル



レーザーで読む書く



## ギャラリー



今月末の寒波襲来で、木津も播磨も一面真っ白に。(上)木津、(下)播磨

編集後記:

関西研だより、記念すべき2023年第1号です。最近ではリサーチアシスタント等、学生さんの受賞に関するお知らせが続いています。若い方々の活躍している姿は生き生きしていて、とても良いですね。(木津庶務課)