

先端研究基盤共用促進事業シンポジウム

2021年1月27日



光ビームプラットフォーム の取組と成果、今後の展望

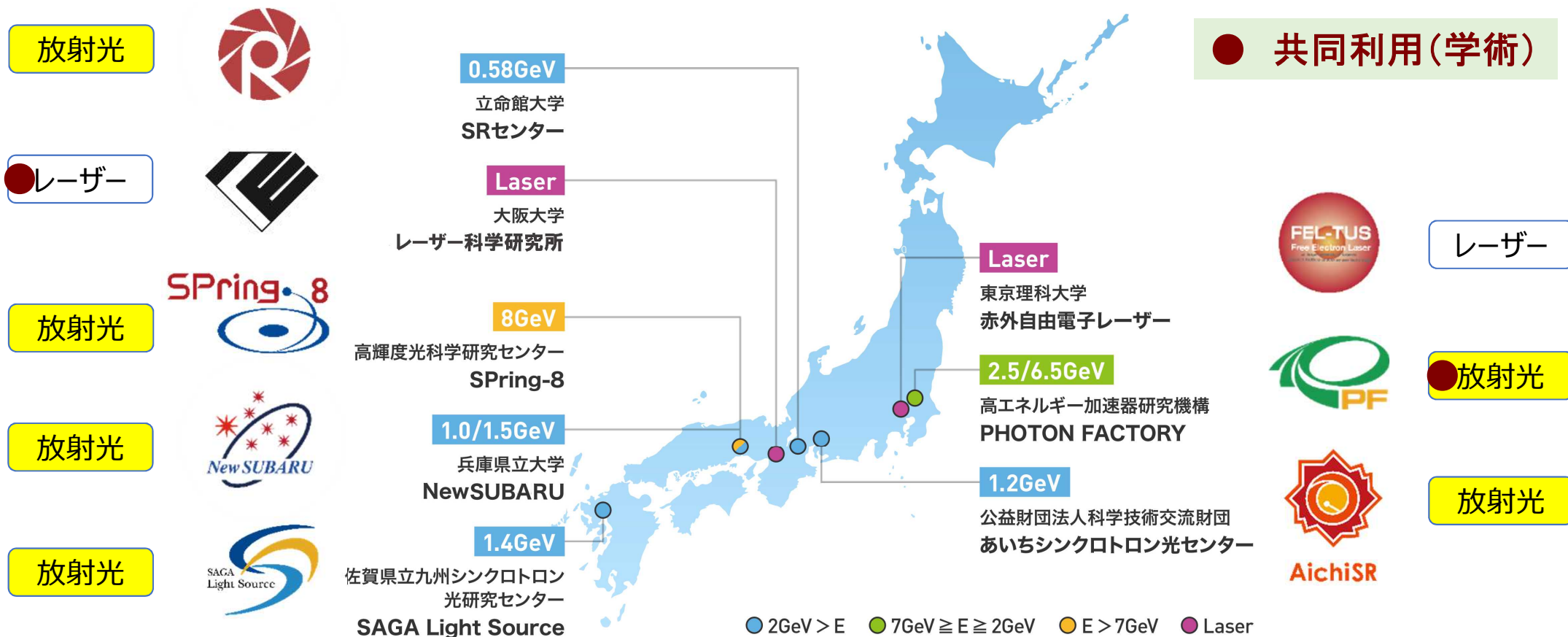
高エネルギー加速器研究機構

物質構造科学研究所

小杉 信博

光ビームプラットフォームの構成

- 放射光施設（6機関）と大型レーザー施設（2機関）の8機関で構成
- 2013年度（先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業）に形成、本事業は2期目
- **イノベーションのための施設間連携による研究インフラ活用と人材育成に注力**



光ビームプラットフォームが必要な理由

光ビームプラットフォームは以下のような利用者が困った場合には、全力で課題解決を支援

- 窓口・講習会等 各施設／プラットフォームの問合せ窓口で対応
- HP ホームページに掲載

初心者に対して

- 放射光でわかりそうだと聞いたが、誰に相談すればいいのか。
- どういう実験をすれば自分の欲しい結果がえられるか、わからない
- どのように申し込めばいいのか、わからない
- 費用や工数はどの程度になるのか、わからない
- どの程度まで実験の支援をしてくれるのか、わからない
- 試料を送ってその測定解析結果を欲しいがどうしたら良いかわからない
- 実習で経験を積みたいが、どうすれば良いか情報が欲しい

- 窓口 ● HP
- 窓口 ● HP
- 窓口 ● HP
- 窓口 ● HP
- 窓口
- 窓口
- 窓口 ● HP

経験者に対して

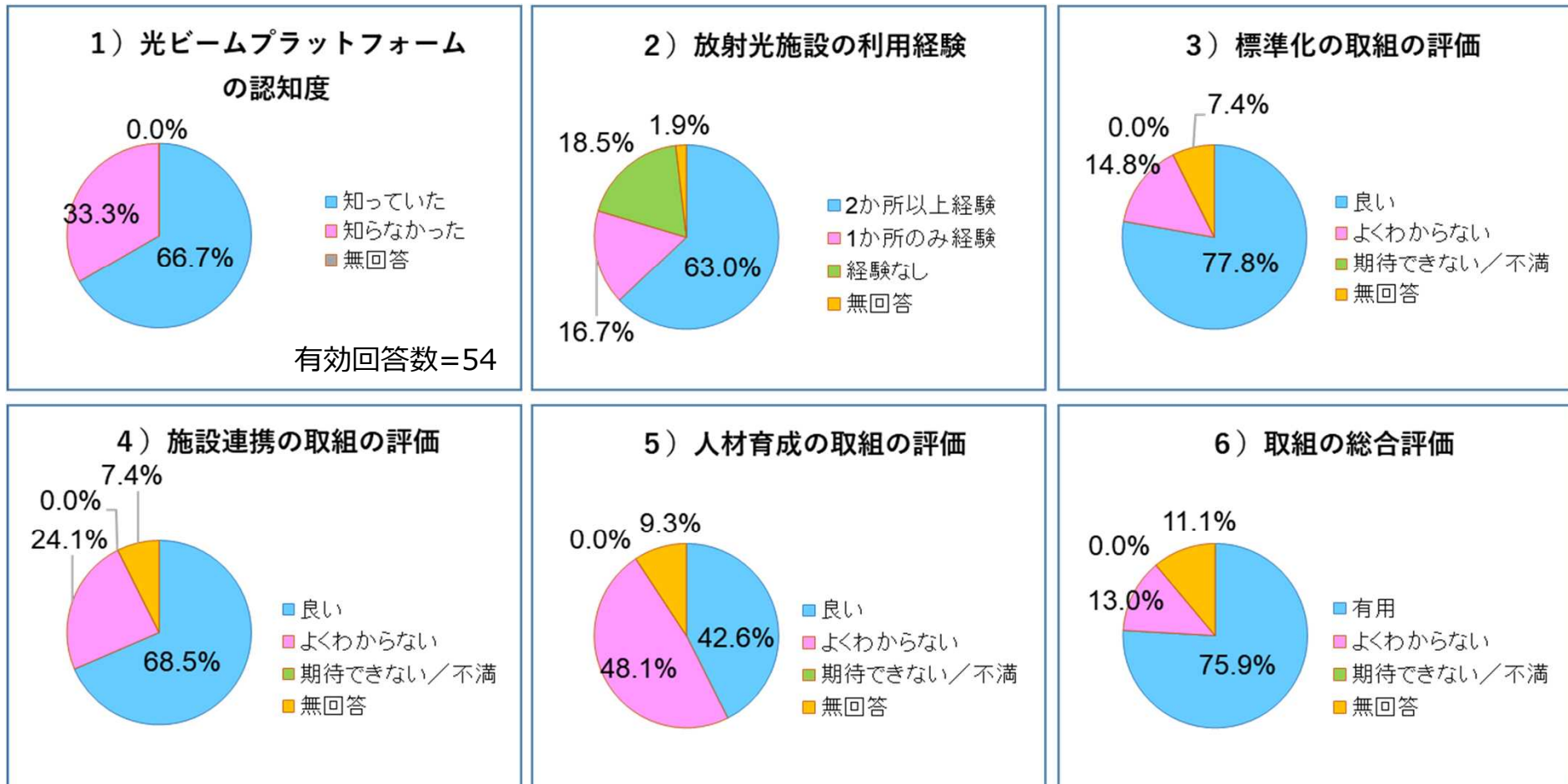
- 最短で間違いなく実験できる施設がどこかアドバイスが欲しい
- 論文にあるような手法、性能、精度はどの施設なら可能か、わからない
- 自分が知っている手法よりも有効な他の手法があれば教えて欲しい
- データの解析は教えてもらえるのか、わからない
- 得られたデータが他と違うように見えるが、どちらを信じて良いかわからない
- 特殊な試料や試料条件に対応してもらえる施設を教えて欲しい。

- 窓口 ● HP
- 窓口 ● HP
- 窓口
- 窓口
- 窓口
- 窓口

光ビームプラットフォームが役目を果たしたか

認知度・取組の評価等に関するユーザー調査

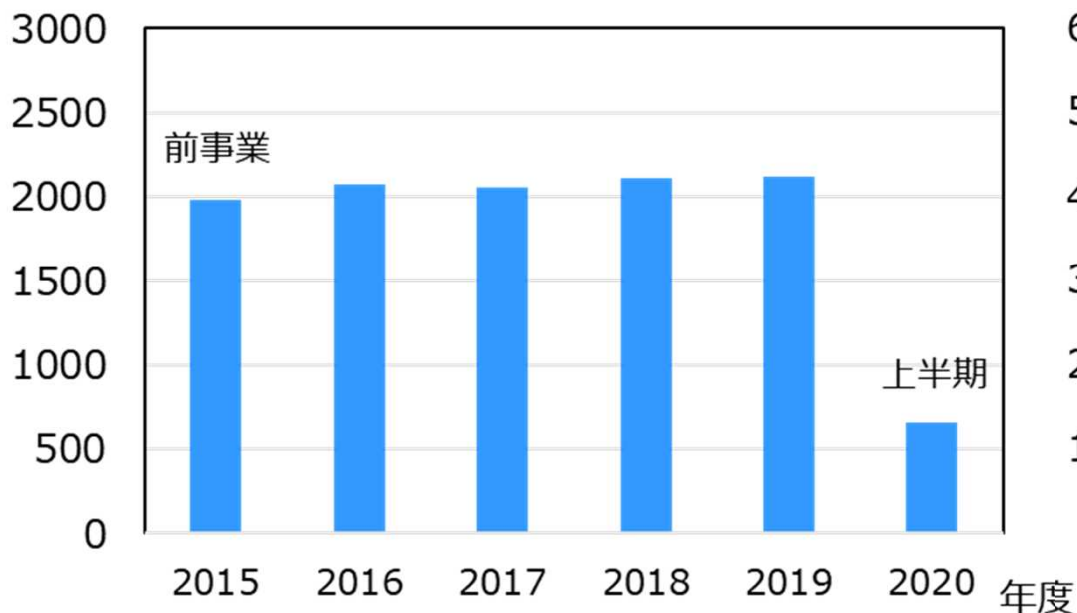
プラットフォームの認知度、放射光施設の利用経験、取組の評価等に関して、2019年度、シンポジウムや展示会等の機会を通してアンケートによるユーザー調査を実施。放射光ユーザーが多い中での調査結果であるが、コミュニティの中ではプラットフォームの認知度は高く、取組についても良い評価を得ていることを確認。但し、一般参加者からは、活動がよく分からないので積極的に広報活動をすべき、とのご意見を頂戴した。



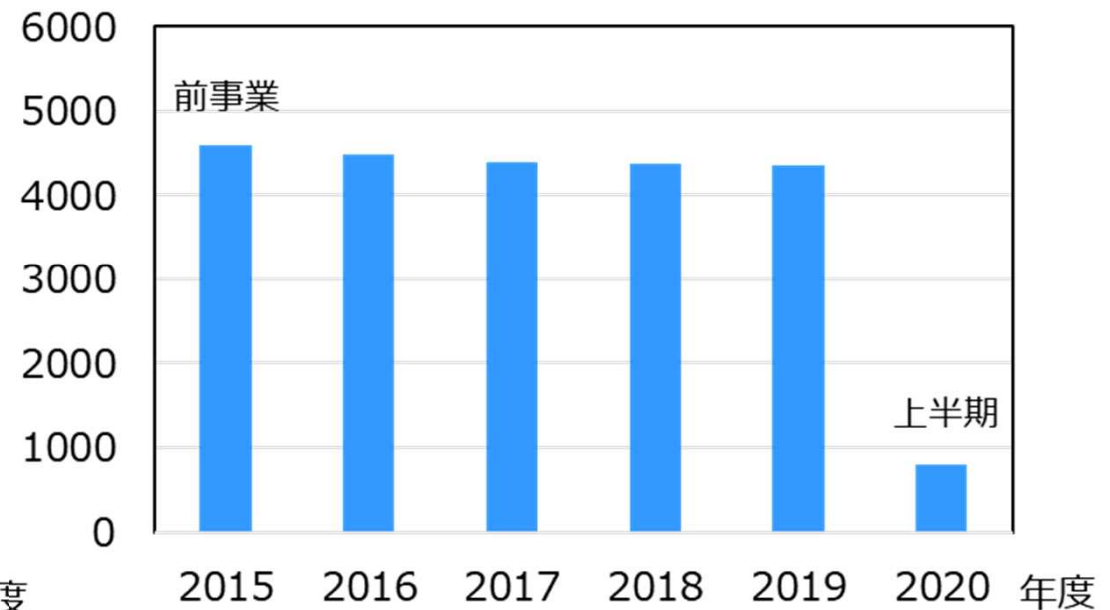
光ビームプラットフォームのための装置の利用状況

- 光ビームプラットフォーム全体としては**利用件数は継続的に増加**。
- **利用者数は微減傾向**にあるが、利用件数は増加していることから、**代行測定や自動化等による効率化**（省力・少人数化）によるものと判断。
- 2020年上半期は4月の緊急事態宣言により、各施設は運転中止や外来ユーザー受入れを中止。代行測定の強化やwith コロナのユーザー対応の整備が行われ、宣言解除後は徐々に通常利用が復帰（代行／遠隔実験の増加を含む）。

施設の利用課題総数



実験に参加した利用者総数（ユニーク数）



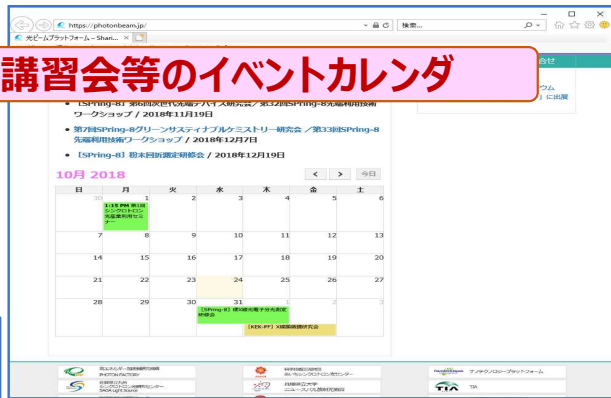
ウェブサイトを通じた情報の一元的な提供によるユーザーの利便性向上

- 本事業ではホームページのコンテンツを大幅に充実化。
- **ユーザーの利便性を高めるために国内放射光施設の一元的な情報提供と利用相談に注力。**たとえば、コロナ禍の緊急事態宣言中の運転情報の集約（わかりやすさが重要）。また、施設とそれぞれの装置の性能などの設備情報やその装置が生み出した公開事例を効率良く検索できる「**施設横断検索**」を制作し、ユーザーが他施設のことでも理解して選択肢を増やすことに成功。

<https://photonbeam.jp>



講習会等のイベントカレンダー



利用制度・利用料金

利用制度と利用料金

各施設は様々な利用制度をご用意しています。下記表では、○は制度の有無を示し、制度名がある場合には『』で付記しました（2019年2月現在）。なお、共同研究や委託研究などの枠組みもいくつかの施設ではご利用がありますが、この表には含まれておりません。

各施設の具体的な利用料金は表中の各施設のリンクをご覧ください。施設によって中小企業や県内企業などの優遇制度があったり、初回の利用料金の割引制度があったり、高度化設備の利用料金の付加等、細かな料金体系があります。また、緊急課題を交付している施設もあります（SPRING-8、KEK-PF）。

なお、ご注意くださいのは、放射光施設はそれぞれが独自に設計されたものであり、光源の特性や強度などが異なるために、料金の多寡を議論しにくい側面があるということです。料金は性能、単価、単位時間でする実験量（※）なども関わります。利用制度の詳細に関しては、各施設に直接お問合せ頂くか、光子プラットフォームのお問合せ窓口にご相談下さい。

費用	無償	有償（減額）	有償（減額）	有償
成果の取扱い	成果公開	成果公開	成果専有非公開	成果専有非公開
SAGA-LS	○『トライアル利用』、利用制限有（初回1日のみ）	○『公共等利用』、『採学先導利用』、『先施創成利用』等	○『佐賀県内企業による』、『一般利用』	○『一般利用』、定期募集（毎月）
JASRI/SPRING-8	○『成果非専有利用課題』年2回定期募集、但し産業利用は各期に複数回募集 緊急課題の特有	○『成果公開優先利用課題』、募集は左記と同じ、利用制限有	—	○『成果専有利用課題』、随時受付、時期指定/測定代行有

施設運転カレンダー



施設横断検索



これまでに延べ10,000以上のアクセス有。
AichiSRIによる制作：
<http://search.astf-kha.jp/Search1.php>

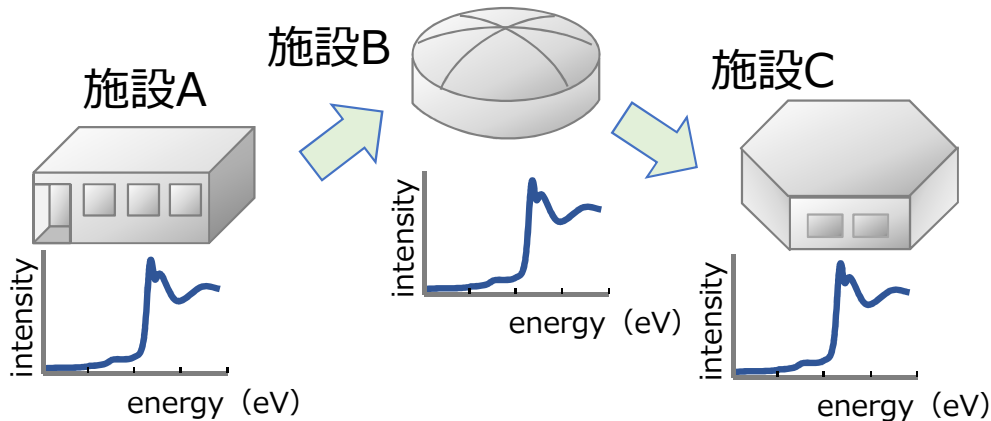
運転情報は閲覧が多い。
各施設運転日程を俯瞰できるように→緊急事態宣言中には特に重要だった。
cf.放射光学会はリンクのみ。

他施設情報・装置性能・担当者スキルの標準化によるユーザー利便性向上

- 放射光施設の装置は一部を除いてカタログ製品はなく、それぞれ独自設計。また、光源性能等が異なることから、ユーザーにとって異なる施設での測定方法、試料取り扱い法の「標準化」に加え、測定データの「信頼性」「互換性・再現性」が不可欠。各施設が同一の標準試料を用いて相互に測定方法や得られた実験データの比較検証や実験条件の較正をした上で、ユーザーに他施設情報も提供・的確に助言できる体制作りのために、各施設スタッフが他施設を巡ってラウンドロビン実験を実施。

ラウンドロビン実験とは

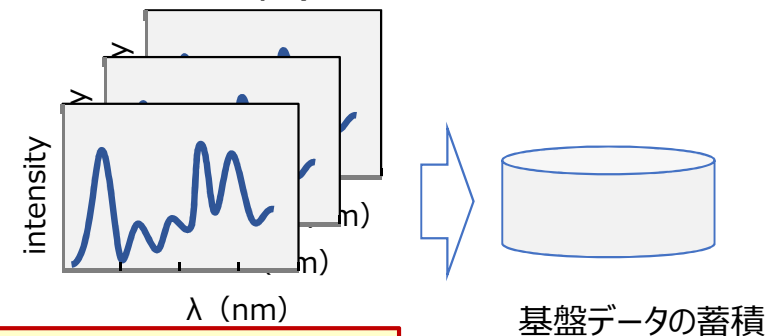
同一の試料を各施設・設備で順次測定
実験データの互換性を比較検証・較正



- 結果をもとに必要に応じて実験条件を較正
- 実験ノウハウの共有による技術力向上、技術導入につながった事例も有*
- 人材育成の面でも効果、施設間でスタッフの交流が活性化
- 各施設では標準試料データベースとして活用、ユーザーの利便性も向上

レーザー施設における活動

実験データを相互に比較検証できる施設が無い
ため、標準試料の実験結果を基盤データとして蓄積し、ユーザー支援に活用（放射光でも比較対象が無い場合は同様）

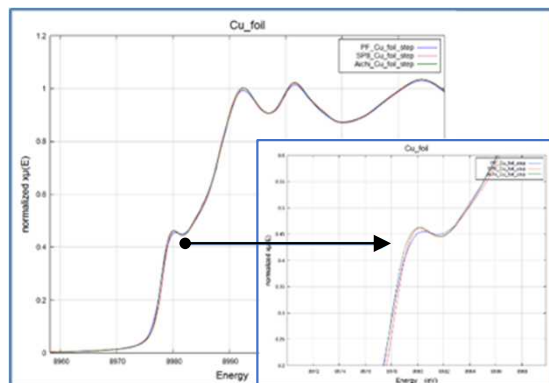


技術・人材の高度化・標準化（2）

- 2016年度の事業開始時、硬X線XAFSと光電子分光の2手法から着手。ユーザーの要望を踏まえつつ、2017年度以降、軟X線XAFSと小角散乱にも取組を拡大。

硬X線XAFS

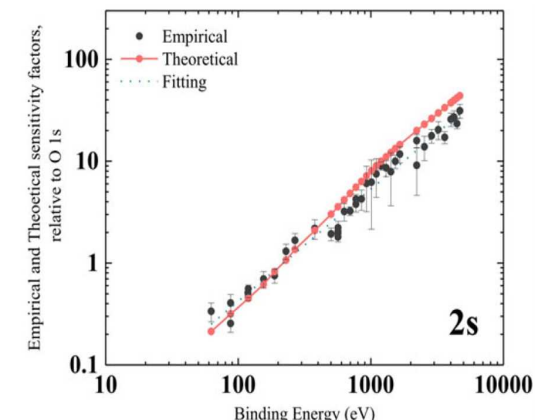
標準的な試料濃度、適切な実験条件であれば結果の同一性は良好（確認）
試料が低濃度の場合や光源強度が弱い波長の場合などの厳しい実験条件ではS/Nの差が現れやすい。低濃度試料、実試料等に検討拡大中。



CU金属箔のXAFS

光電子分光

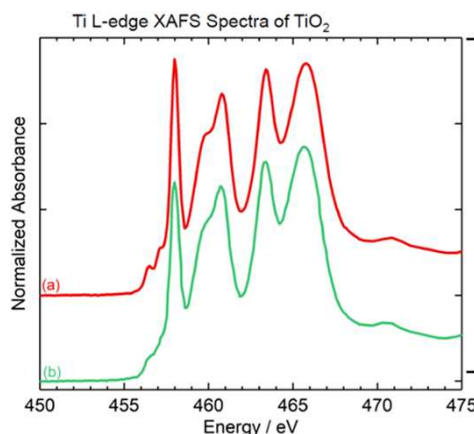
励起エネルギーの違いによる検出深さの検討と、定量分析に必要な高エネルギー励起での相対感度係数の評価を実施。元素の組成分析の基礎データを収集。



8 keV励起2s軌道の相対感度係数

軟X線XAFS

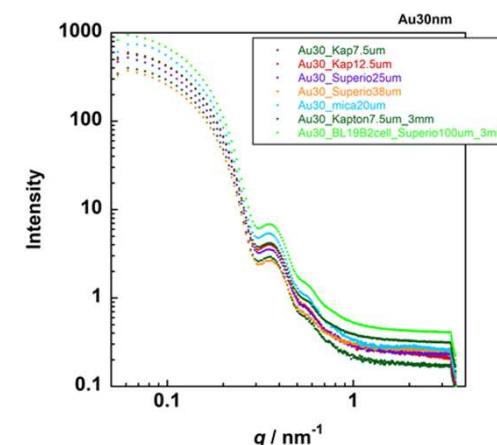
軟X線XAFSの実験では、試料の帯電、光学系のカーボン汚染、高次光の混入、エネルギー基準値の設定等、考慮すべき要因を認識。その上で、実試料への適用性（低濃度試料の検出感度）などを検討中。



異なるビームラインで得られた、TiO2のL端XAFSスペクトル

小角散乱

ナノ粒子溶液を試料とし、散乱強度に対する試料セルの窓材、実験条件、ベースラインの揺らぎ・ノイズ要因などの影響度やそれらの低減方法を検討。



30 nm金コロイド散液のX線散乱プロファイル、窓材依存性

標準化の成果、データの保存活用

- ラウンドロビン実験は硬X線XAFS、光電子分光、軟X線XAFS、小角散乱の4手法で総計70回以上実施
- 実験結果はデータの保存・活用のために公開を各施設で進めるとともに、SPring-8では既存収録データと併せてデータ集DVDを制作・頒布。ラウンドロビンは企業ユーザーから互換性検証の観点で高く評価されており、企業専用ビームラインから実験協力の申し出が着始め、外部に波及しました。
- 成果を国内外の学会で発表。硬X線XAFSのラウンドロビンは日本が主導して、国際会議Q2XAFS、XAFS2018等で発表して議論を進め、国際的なラウンドロビン実験の実施に向けて流れを作った。
- XAFS Database Workshopに協力して、硬X線XAFSデータの全国的な収録を進める動きを作った。放射光施設に蓄積された公開可能な硬X線XAFSデータはNIMS MDRに提供することでさらに拡大を計画中

各施設のウェブサイトを実験データを公開

ラウンドロビン実験報告書ポータル

データ集DVD頒布

The collage displays various web interfaces for synchrotron facilities. Key elements include:

- SPring-8:** Industrial Application Division website showing XAFS data and reports.
- SAGA-LS:** Website for soft X-ray and tender X-ray beamlines, featuring a table of experimental parameters.
- AichiSR:** Website for XAFS data and reports.
- 立命館大SRC:** Website for XAFS data and reports.
- 阪大レーザー研:** Website for XAFS data and reports.
- 兵庫県立大NS:** Website for XAFS data and reports.
- KEK-PF:** Website for XAFS data and reports.
- 東京理科大:** Website for XAFS data and reports.

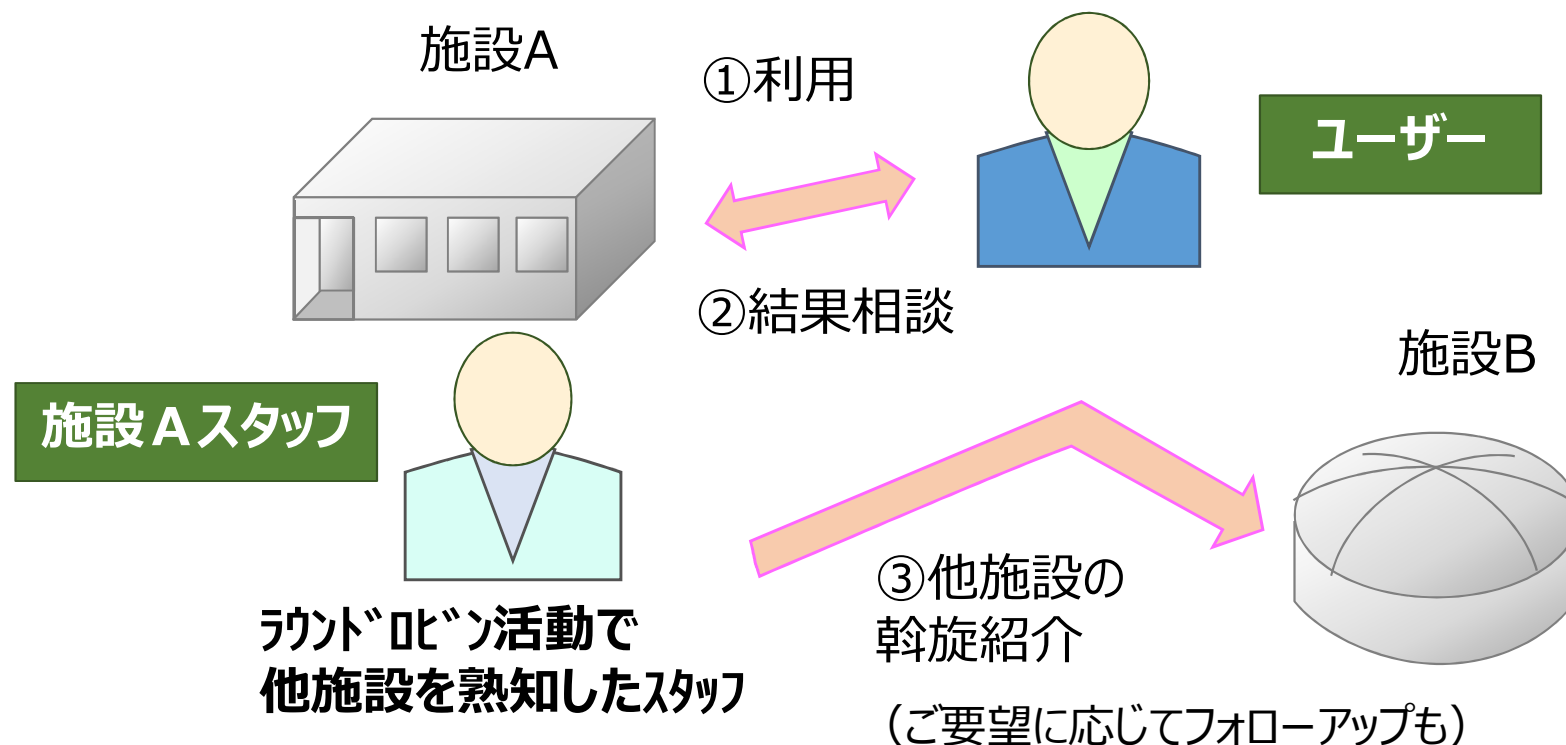
On the right, a CD-ROM is shown with the following text:

PHOTON BEAM PLATFORM
光ビームプラットフォーム
XAFS & HAXPES スペクトルデータ集
© 高エネルギー加速器研究機構, 科学技術交流財団
高輝度光科学研究センター, 物質構造科学研究所
CC BY-ND 2020年10月

施設の連携活用の推進（1）

- 複数施設の活用による課題解決が好ましいと考えられる実験課題に対しては、積極的にユーザーに他施設の斡旋紹介を行い、ソリューション的な解決の支援とともに連携活用の普及を推進。これまでに30例以上実施。
- XAFSとX線CTのような異なる手法の組合せ、TATの早い施設で予備実験を行って本実験を光源性能の高い施設で実施、実験装置が不調の際に他施設を紹介（一種のセーフティネット）などの事例がある。

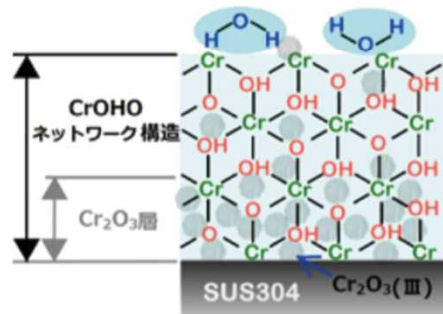
施設の連携活用のスキーム



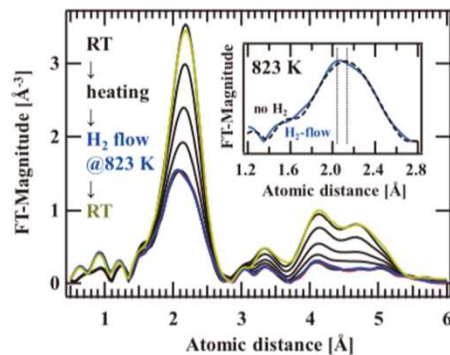
ステンレス鋼の表面状態およびその機能性に関する研究

連携活用

- ステンレス鋼の最大の特徴である高耐食性の起源を明らかにするため、クロム(Cr)が主成分である不動態被膜の詳細な構造を調べた。ラボ装置と放射光を組み合わせることにより、被膜最表面から母材との界面に至るまでの全体に、Cr-O-H-Oのネットワーク構造が存在することを初めて明らかにした。(AichiSRで実施)
- 水素貯蔵・燃料電池流路材料としてステンレス鋼が注目されている。ステンレス鋼の水素吸蔵特性について、水素フロー環境における構成元素の構造変化を、質量分析と組み合わせて観測した。鉄(Fe)原子周りでは、水素吸蔵に伴い一定した格子圧縮が生じるのに対し、ニッケル(Ni)原子周りの格子伸縮は不定周期で且つFe周りの変化の1/10の速度で生じることが分かった。(SPring-8で実施)



分析結果から推定したSUS304不動態被膜の構造モデル



水素フロー雰囲気下でのSUS304中Fe原子周りの動径構造関数

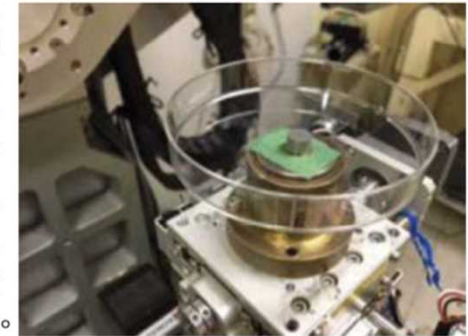
【実験施設: AichiSR / SPring-8】

研究実施者: (株)デンソー

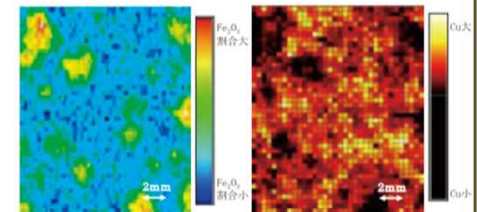
焼結材料における防錆油の挙動観察と腐食過程のin-situ観察

連携活用

- 自動車の軽量化や低コスト化等に対応して使用量が増大している焼結材料は、複雑な形状の部品を容易に作るができる一方、焼結材料には多くの気孔があり、化学組成も不均一であるため錆易いことから、防錆油が塗布される。Baを含む防錆油を用いることでX線CT法によって材料気孔の内部に防錆油が浸透したコントラストを得ることに成功した。(X線CT実験はSPring-8で実施)
- 焼結材料は、溶製材料に比べて腐食し易いが、その腐食メカニズムが明確になっておらず、錆を防止するために塗布する防錆油も適正な選定ができていないのが現状である。防錆油の塗布等の適正な防食対策に結び付けるため、水と酸素に曝された焼結材料の腐食過程のin-situ観察を行った。XAFS法を用いることで、焼結など複数の腐食反応が組み合わさって進行する材料に対して、in-situで把握できる結果が得られた。(硬X線XAFS実験はAichiSRで実施)



X線CT実験の試料配置



Cuでのマップング結果

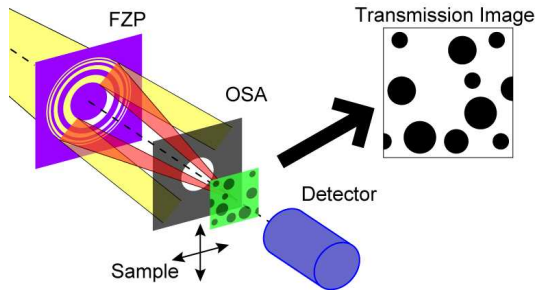
蛍光X線から求めたFe₂O₃の割合

【実験施設: AichiSR / SPring-8】

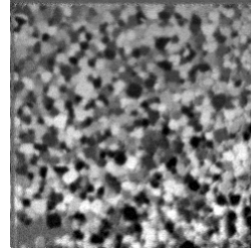
研究実施者: 出光興産(株)

● 共同利用(学術)

走査型透過X線顕微鏡 (STXM)

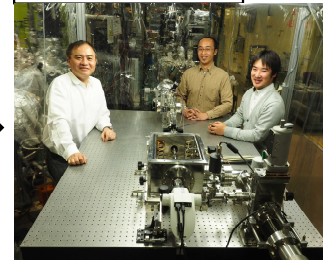


高分解能磁区観察

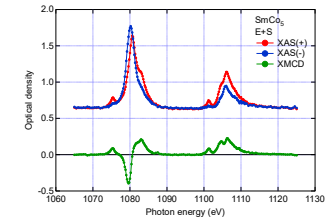


国内で実験可能に！

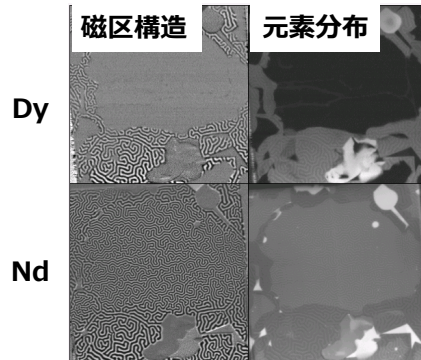
顕微鏡開発



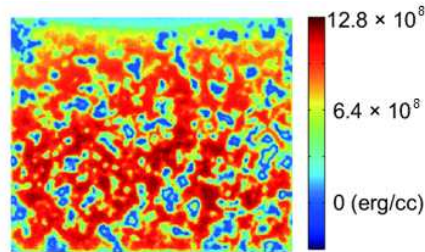
単一結晶粒のXMCD



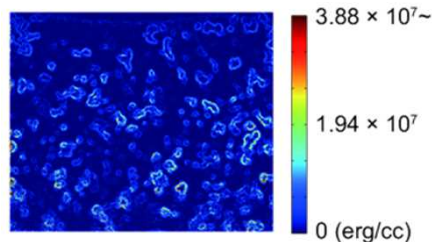
元素識別磁気構造可視化



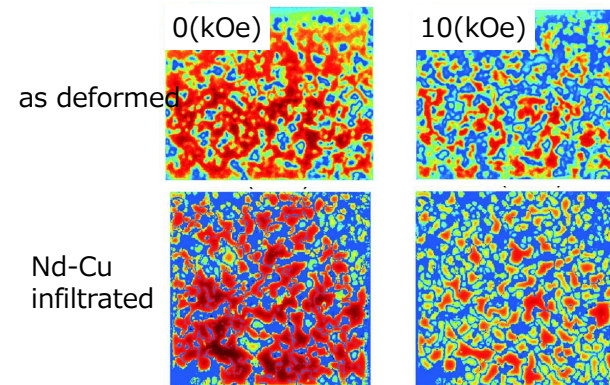
磁気双極子相互作用可視化



交換相互作用可視化



熱間加工磁石の静磁エネルギー可視化



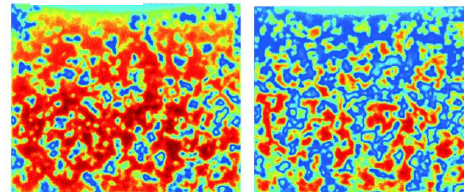
粒界浸透により磁気双極子相互作用が大きく変化し、保磁力増大につながることを見いだした。

現在：放射光や他の量子ビームの併用実験（個別対応）

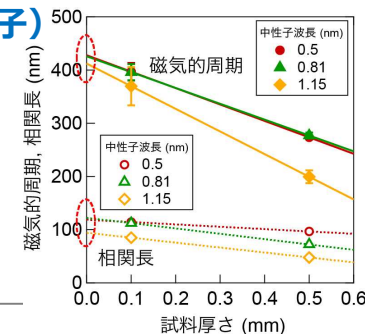
今後：異種ビーム利用のパッケージ化とプラットフォーム化

量子ビーム	特長
放射光	<ul style="list-style-type: none"> ・元素選択的 ・原子構造の観測 ・磁気構造の観測 ・電子状態の観測 ・時間分解計測
中性子	<ul style="list-style-type: none"> ・高い透過力 ・軽元素に対する感度 ・原子構造の観測 ・磁気構造の観測
●ミュオン	<ul style="list-style-type: none"> ・磁気構造の観測 ・非常に高い透過力 ・軽元素深さ方向分布
●低速陽電子	<ul style="list-style-type: none"> ・表面敏感（最表面）

熱間加工磁石の静磁エネルギー可視化（放射光）
0(kOe) 10(kOe)



バルク磁区サイズの定量解析（中性子）



・磁性材料のバルク内部から表面までのマルチスケール観測

・ソフトマテリアルの分析
・構造体中の水素の挙動

・非破壊分析
・ミュオンの捕獲率の差を利用した選択的要素検出

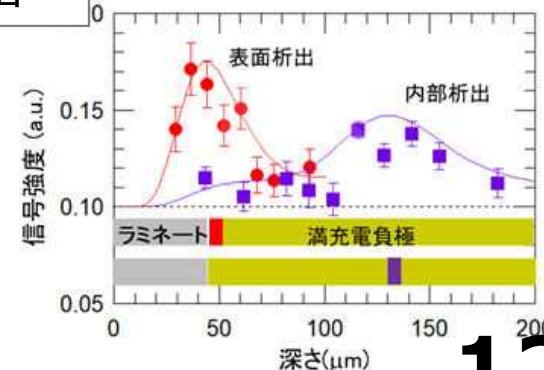
・最表面科学

単原子層の構造解析
低速陽電子



タイヤ・フィラー（ナノ粒子）の表面構造解析（中性子）

LIB内における金属リチウム析出の検出（ミュオン）



● 共同利用(学術)

現在：自動化・遠隔化等の共通基盤技術の確立 (with/afterコロナ)

今後：異種量子ビーム利用・横断利用の推進

・ 自動化・遠隔化技術の開発

①回折, ②散乱, ③吸収, ④放出のそれぞれに対して, 主要施設間で連携協力して, 遠隔・自動測定システムの標準仕様を確立

・ マルチビーム・マルチプローブ利用のための共通の試料環境の実現
異なるビーム・プローブ間で, 温度, 磁場, 圧力などを同じように制御するための標準仕様を設定するとともに, 共通の試料ホルダーを開発

← **新規人材育成必須**
施設人材が機械に置換するわけではない。

遠隔・自動測定で期待される効果

各利用研究グループ
旅費5~8割減

施設スタッフの負担
遠隔化 で5割減
自動測定で8割減

測定効率
2倍~5倍向上

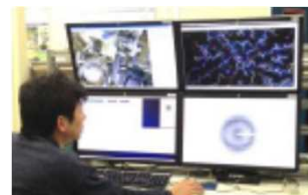
測定+解析効率
5~10倍向上



試料搬送ユニット
(大学等⇒施設)



試料準備
自動・遠隔測定
複合解析



放射光



中性子



試料環境リモート制御システム
遠隔・自動測定
量子ビーム連携ビッグデータ解析システム



ミュオン



陽電子

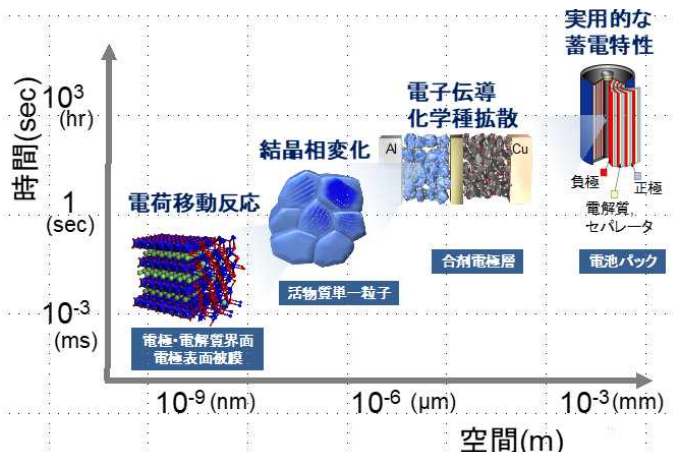
現在：データ科学を用いた測定迅速化・ビッグデータ解析技術の確立

今後：異種量子ビームのデータを横断的に解析

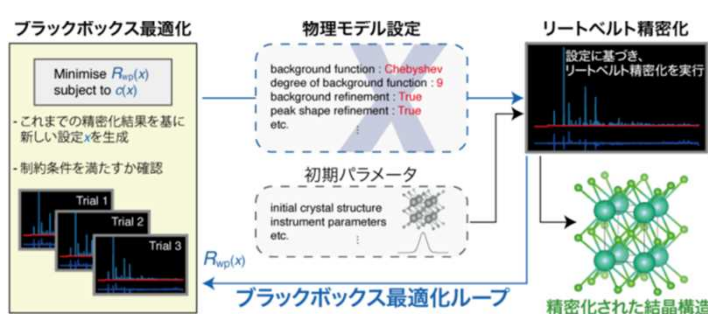
- ①回折, ②散乱, ③吸収, ④放出のそれぞれについて, AI・機械学習を用いた測定迅速化技術を開発し, 自動測定の標準仕様を確立
- 一つの測定試料に対して異種ビームの①②③④の測定データを集めた上でAI機械学習を用いた統合解析技術の基本パッケージを開発

新規人材育成必須

視野絞り込みの自動化(>5倍)
マルチスケール観察(顕微鏡)

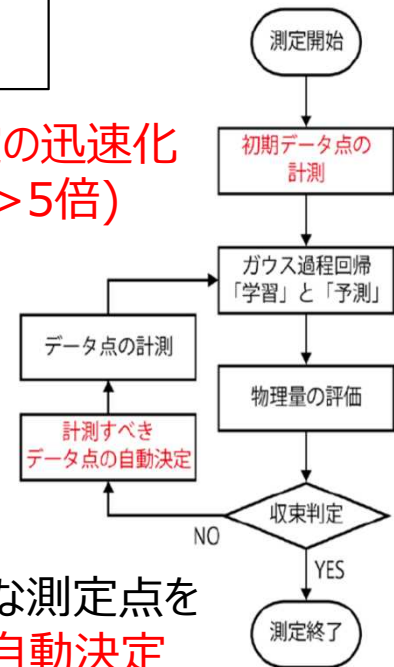


自動解析技術の開発(>10倍)
マルチプローブ複合解析



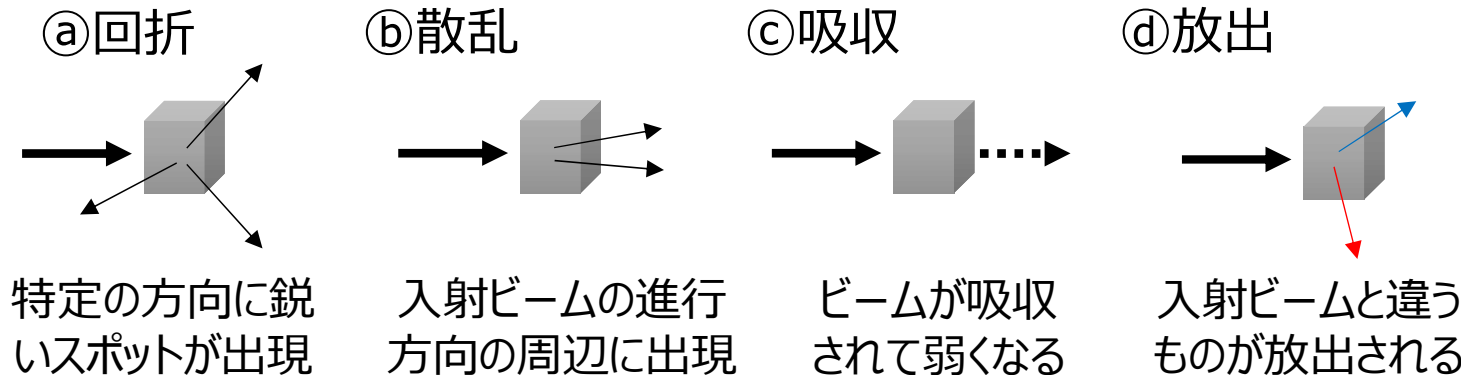
熟練者が1日⇒ノートPCで1時間
新たな結晶構造の候補も発見

測定の迅速化 (>5倍)



最適な測定点をAIで自動決定

量子ビームが引き起こす基礎過程(ビームに依らない物理現象)



※基礎過程が同じなので, ビームの種類によらない共通の原理に基づく測定・解析が可能

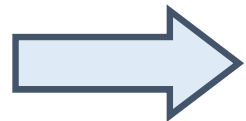
「光ビームプラットフォーム」から「量子ビーム連携プラットフォーム（仮称）」へ

放射光を中心とした「光ビームプラットフォーム」の成果を、物質の構造解析手法として非常に親和性の高い中性子やミュオン等を含めた量子ビームに拡張し、新たな研究様式であるDX、AI技術の共通化・標準化、専門人材育成を図ることで、国内の量子ビーム施設（すべて含めると20施設以上）を有機的・横断的に利用した「量子ビーム連携プラットフォーム（仮称）」の構築を構想。

現行・光ビームPF構成機関

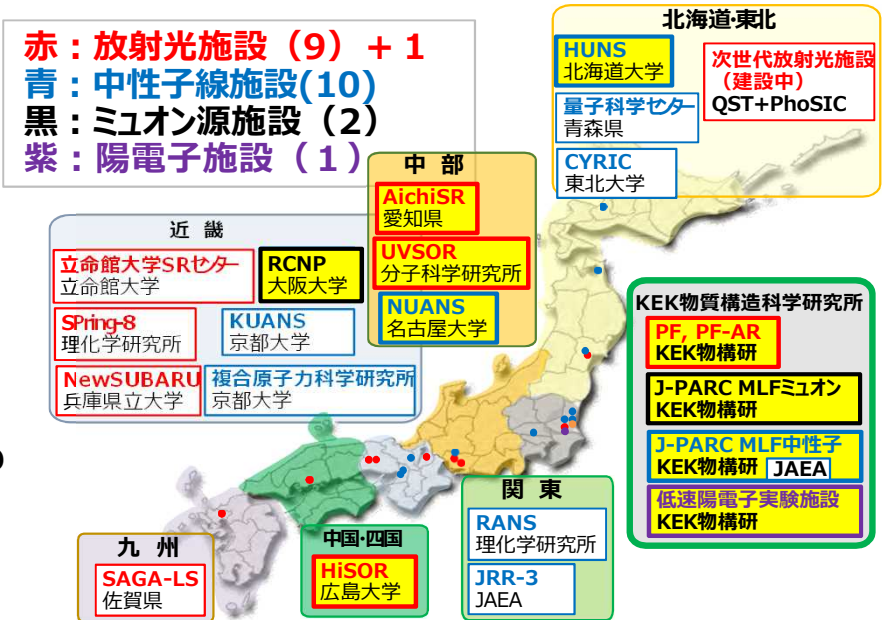


【構成】放射光6施設 + 大型レーザー2施設
 【重点的取組】標準化、複数施設連携、人材育成



- 量子ビームに scope 拡大
- 親和性の高い手法を軸に機関を発展的に再構築
- 従来の協力体制やプラットフォーム運用経験を最大限に活用

量子ビーム連携PFへの発展



学術施設が多い

目標

- ① 自動化・遠隔化に基づく異種量子ビーム利用・横断利用を推進する共通基盤技術の確立
- ② AI・機械学習やデータ科学を用いた測定迅速化技術、ビッグデータ解析技術の確立
- ③ 量子ビーム施設におけるDXの共通化・標準化を推進するための共通基盤技術の確立
- ④ 上記技術開発を進めるための施設間連携の枠組み構築、マルチビーム・マルチプローブ人材の育成

**ご清聴を
ありがとうございました**