

PF 研究会「量子ビームと新規合成手法の融合による酸化物の新機能探索」開催報告

東北大学多元物質科学研究所 / KEK 物構研 組頭広志

「量子ビームと新規合成手法の融合による酸化物の新機能探索」と題しました PF 研究会を、2018 年 7 月 3 日（火）、4 日（水）の 2 日間に渡って、KEK4 号館 2 階輪講室において開催いたしました。放射光を初めとする量子ビーム解析技術は、機能性物質・材料の特性にかかわる電荷・スピン・軌道・格子の状態を観測する手法として多大な貢献を果たしてきており、「機能のメカニズムを解明する」段階では、その有用性はほぼ確立されたとも言っても良いと思います。しかしながら、材料開発を行っている方々から見ると、これらはあくまで新物質探索・新機能開発における最終段階での話であり、開発途中の段階では量子ビームが有効に利用されているとは言いがたい点も指摘されています。

このような背景から、今回の研究会では、量子ビーム解析技術と新合成手法の融合による新物質探索手法の確立を目指すために、最先端の量子ビーム研究、インフォマティクスや計算科学による機能探索、新しい合成手法による材料開発、を行っている研究者に最新の研究成果をご紹介頂くとともに、これらの融合によって実現可能となる機能性酸化物研究の新機軸の可能性について議論することを目的としました。特に、「新物質探索・新機能開発の途中段階で量子ビームを有効活用するとしたらどのような形になるのか？」を議論するため、量子ビーム解析を行っている講演者の方には「量子ビームをどのように物質開発中に役立てるのか」、物質開発を行っている方には「物質開発・探索中にどのようなことが量子ビームで知りたいのか」、という観点でのお話をさせていただきました。そのため、プログラムでは、量子ビーム計測と材料開発研究の講演が入れ

籠になるようにいたしました。

7 月 3 日は、初めに PF の両宮健太主幹よりご挨拶を頂いた後、組頭から本研究会の趣旨説明がありました。続いての講演では、まず低速陽電子の話題として、KEK 物構研の兵頭俊夫先生より、全反射高速陽電子回折を用いた結晶最表面の原子配列解析についてのご紹介があり、次いで NIMS の山崎裕一氏からは、コヒーレント軟 X 線回折イメージングとインフォマティクスの融合による新しいデータ解析手法の試みについてご講演頂きました。次に、北大の高草木達氏から、PTRF-XAFS 法による酸化物上金属ナノ構造の 3 次元可視化技術という放射光解析技術と触媒設計への応用という、まさに本研究会の趣旨を実行している内容をお話いただきました。また、最近の触媒インフォマティクスを用いた触媒設計についての試みについてもご紹介いただきました。ここから話題が移り、新合成手法による物質開発を行っている方々からの講演になりました。筑波大学の都甲薫氏から層交換という新合成手法を用いた IV 族材料の薄膜合成について、産総研の中島智彦氏からパルスレーザー光による光結晶化を用いた酸化物薄膜の研究について、東北大の丸山伸伍氏からフラックス法による固液界面を用いた酸化物薄膜合成手法と真空下でのイオン液体の薄膜合成による機能薄膜の研究について、ご紹介頂きました。これらの合成手法によって得られる試料は、基本的に薄膜およびヘテロ構造になりますので、一般的な量子ビーム解析との相性も良く、量子ビーム解析との融合が期待できます。そのため、これらの講演の質疑応答では、具体的な量子ビーム測定に関する活発な意見交換がありました。続いて産総研の白澤徹郎氏から X 線 CTR 散乱法による界面の構造解析、特に結晶成長中の動的構造解析への取り組みについてご紹介いただきました。所謂、「オペランド解析」になりますので、上記の新合成手法を用いている方々から、具体的な測定・解析に関する質問が飛び交い、



図 1 集合写真

かなり時間オーバーして懇親会ぎりぎりでの1日目終了となりました。もちろん、懇親会でも量子ビームと新規合成手法の融合による新機能探索に関するざっくばらんな議論がつづき、大いに盛り上がりました。

2日目の7月4日は、まずKEK物構研の武市泰男氏にSTXMを用いた不均一系の研究についてご紹介いただきました。その後、東大の近松彰氏からトポクティブ反応を用いた複合アニオン酸化物薄膜の合成と新機能探索に関する取り組みについて紹介いただきました。高草木氏の講演と同様、材料設計・開発の要所所で放射光を用いた電子状態解析がとても有効であること強く感じた講演でした。続いて、NIMSの後藤真宏氏からコンビナトリアルスパッタ成膜法による低摩擦係数をもつ酸化物材料開発についてのご講演がありました。コンビナトリアル的に一枚の基板上に幾つもの薄膜をパターンニングしたライブラリーを作製し、実験室での一括物性評価を行うことで物質開発速度を高めている内容で、一括評価の部分で放射光解析が有効に活用できる分野と思いました。

その後、再び量子ビーム解析の講演になり、KEK物構研の小嶋健児氏からミュオンを用いた酸化物内の水素位置・電荷状態の解析手法について、同じくKEK物構研の大友季哉氏から中性子散乱を用いた物質中水素の観測手法についての紹介がありました。近年、物質中の水素の役割と機能が様々な分野で注目されており、これらをどのように計測できるかについてのチュートリアルな内容も含めてお二方にはご講演いただきました。午後からは、ちょうどPF運転中と言うこともあり、希望者に対してPFの見学会を行いました。「百聞は一見にしかず」で、どのように測定しているかを見てもらうことで、実際の測定をイメージしてもらえたかと思います。

本研究会は、ビームタイム中にもかかわらず、34名という多数の方にご参加頂きました。講演者の方々の研究成果はどれも素晴らしいものであり、改めて物質材料研究における量子ビームの重要性を強く認識しました。一方で、量子ビーム計測という非常に有益だがコストが高い実験を、いかに適切に物質開発の途中段階で用いるか、実験室で可能な評価とどのように組み合わせていくか、という物質開発における評価の問題を改めて認識した研究会でした。

最後になりましたが、本研究会の開催にあたり、世話人および秘書室の方々をはじめとした関係者の皆様には多大なご協力を頂きました。深く感謝申し上げます。また、本PF研究会は、応用物理学会機能性酸化物研究会と酸化物研究の新機軸に向けた学際討論会との協賛で行われました。

(研究会ホームページ：<https://www2.kek.jp/imss/pf/workshop/kenkyukai/20180703/index.html>)

SRI2018に参加して

加速器第七研究系 阿達正浩

台北市のランドマークの一つである「台北101」の足元にある国際会議場「Taipei International Convention Center (TICC)」で開催された13th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation (SRI2018)に参加する貴重な機会を得た。本会議は、放射光ユーザーとビームライン開発者、そして光源加速器開発者といった放射光に係る関係者が一堂に会して意見交換ができる貴重な場であり、今回、25カ国から850名(日本から125名)を超える参加者を迎えたとのことだった。

台湾のNational Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC)が会議を主催し、光源リングTaiwan Photon Source (TPS)の見学ツアーや台北市のもう一つのランドマークである「台北圓山大飯店」での懇親会などが実施された。

会場内外に厳重な警護が配される中、ホール入口でセキュリティチェック(筆者はポスター容器の中も確認された)を受けて開会式会場に入った。大太鼓を打ち鳴らす盛大なショーの余韻がホール内に残る中、中華民国副総統陳健仁氏による開会のスピーチが行われた(図1)。続くPlenary Sessionでは、1944年の理論予測から始まる放射光の発展史とその将来展望についての石川哲也氏(理研)の講演が行われ、MAX-IVのC. Quitmann氏からは、今年の3 GeVリング加速器調整で約369 mAのビーム蓄積を達成したことなど、MAX-IVに続く高性能リング計画を後押しするとともに加速器科学の進展を伝えるニュースがもたらされた。なお、数々の実績が各国との共同研究で得られており、次期高性能リングに向けた加速器技術を実機で試す場になっていることが感じられた。

会期中、多くの光源新設・改造計画が紹介された。その中からいくつか紹介させていただきたい。MAX-IVではFemtoMAXラインに設置した磁場周期長15 mm、最小ギャップ2.2 mmのIn-Vacuum Undulator (IVU)の立ちあげ



図1 開会を告げる陳健仁氏によるスピーチ。



図2 TPS ツアーで加速器とビームライン見学する参加者。

が進んでおり、さらに、光子エネルギー 0.25~1 keV、繰り返し 100 Hz、ピーク出力 ~1 GW の FEL のコンセプトデザインが紹介された。建設が進む LCLS の SIRIUS では、5 月 5 日には線形加速器からのビームを初観測し、リング構成要素の各機器の設置も開始しているとのことで、世界初の Round beam 回折限界光源リングの稼働が間近に迫っている。DESY からは、PETRA IV の建設開始を 2024 年に、運転開始を 2026 年に目標に定め、2019 年 4 月の出版を目指して CDR を作成中であることが紹介された。SPring-8 からは、SACLA の高繰り返し化を目指す SACLA-II、そして、電子エネルギーを 6 GeV へ落とすことで省運転電力化を図りつつ、アンジュレータを短周期長化して利用可能な光子エネルギー範囲は維持し、電流増強と 100 pm-rad 程度までエミッタンスを低下させることで輝度をこれまでの 30 倍に高める SPring-8-II、その先には、リング型コヒーレント光源を目指す SPring-8-III などが紹介された。現在の 30 分の 1 となる水平エミッタンス 133 pm-rad を目指す ESRF-EBS では、装置の製造が順調に進み、今年 12 月 10 日から長期シャットダウンに入り、来年 11 月 19 日より加速器調整を、2020 年 3 月 4 日より BL 調整を予定している。2020 年 8 月 25 日からの世界初の大規模回折限界リングのユーザー運転開始が迫っている。58 pm-rad を目指す北京の HEPS は 2018 年 12 月に着工を予定し、2024 年 1 月に加速器調整の開始、2025 年からのユーザー運転開始を目指しているとのことであり、アジア初の大規模回折限界リングの建設がいよいよ始まりつつある。さらに、European-XFEL および Swiss-FEL からは加速器調整、レーザー利用実験、BL 増設計画などについての発表が、LCLS からは、タイトルを変更して LCLS-II とその先の LCLS-II-HE (High-Energy upgrade) 計画が紹介されるなど、FEL 施設からも多数の興味深い発表があった。

さて、筆者は挿入光源を開発するグループの一員である。特に印象深かった挿入光源に関するトピックスをいくつか紹介させていただきたい。本会議では、各施設の次期光源計画を支える最先端の挿入光源として Cryogenic Permanent Magnet Undulator (CPMU) と Super Conducting Undulator

(SCU) に関する講演数が多かったように思える。それぞれの開発チームによる白熱した討論が行われる一幕もあった。CPMU は SOLEIL で開発・運用実績が積み重ねられ、現在は MAX-IV や ESRF-EBS, SPring-8-II 計画, TPS など多くの施設で検討・開発が進められている。2 台の直線偏光型 SCU と 1 台のヘリカル型 SCU を運用する APS からは、開発中の可変偏光型 Super Conducting Arbitrarily Polarizing Emitter (SCAPE) SCU を APS upgrade に設置し、高速偏光スイッチングを供する計画が、具体的な架台設計とともに紹介された。

KEK の山本樹氏からは、周期長 4 mm の極短周期アンジュレータからのアンジュレータ光を東北大学の t-ACTS にて初観測した結果が、SOLEIL の M.E. Couprie 氏からは、レーザープラズマ加速と CPMU を組み合わせて小型自由電子レーザーの開発を目指す COXINEL 計画に関して、アンジュレータ光の観測結果などを交えて今後の FEL 発表への展望が紹介された。

HZB の J. Bahrtdt 氏は、真空封止型の APPLE-II EPU である IVUE-32 の開発と、将来的に Cryogenic in-vacuum APPLE II への発展を検討していることを紹介していた。HEPS では、Cryogenic DELTA 型 (in-air 型) アンジュレータの開発が進められていることが紹介されていたが、in-vacuum 型で実現すれば、SCU に対して大きなアドバンテージとなる可能性を秘めていると感じた。また、P. Vagin 氏からは、磁場周期長を変更可能な Variable period undulators という一際ユニークな提案がなされた。

さて、本会議を主催した NSRRC では、電子エネルギー 3 GeV、蓄積電流 500 mA、周長 518 m の TPS を 2016 年 9 月よりユーザー運転している。エミッタンスは 1.6 nm-rad と、最新の中規模回折限界リングに比べて若干高いものの、挿入光源を設置可能な 12 m の直線部 6 箇所と 7 m の直線部 18 箇所を備えた 24 セル DBA ラテイスリングでは様々な試みが行われている。見学会ではそれらの開発現場を直接見ることができた (図 2)。特に、SOLEIL の真空封止型ウィグラーを彷彿とさせるバネによる磁場分布補償機

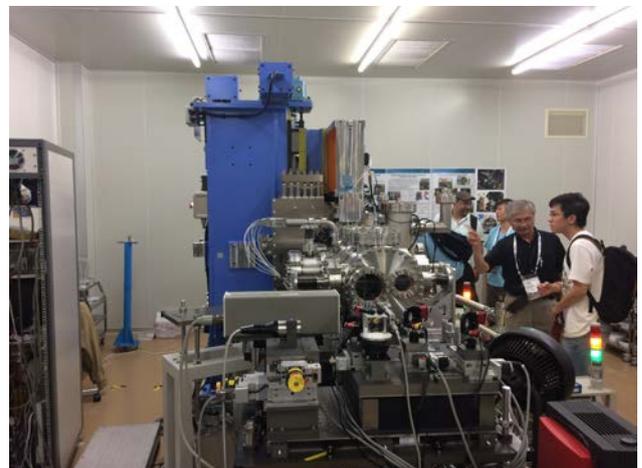


図3 TPS ツアーで CPMU CU15 を見学する参加者。

構と、APSのSCUを彷彿とさせるCryostatを備えたユニークなCPMU CU15の実機を開発システムとともに直接見ることができたことは大変幸運だった(図3)。

さて、会期中、小籠包やマンゴーかき氷といったテッパン台北グルメを楽しみながら南国の雰囲気漂う街を散策した。ガイド本を頼りに訪れた問屋街「迪化街」では、夜遅くに広場で踊るおばちゃん達に驚かされた(1カ所だけではなかったので台北の日常なのだろう)。まだまだ明かりの灯るお茶屋さんやドライフルーツ屋さんなどを巡ったが、どの店でも日本語が目に入り、日本語が通じ、台北にいることを忘れそうになった。

次回、SRI2021は、8/31-9/3にドイツ・ハンブルクのCongress Center Hamburg (CCH)にて開催されることが発表されて会議は終了した。Hamburgは36年前の1982年に最初のSRIが開催された地であるとのことである。今回見聞きした様々な計画や開発の進展、新たなアイデアの提案など、本会議のさらなる発展が期待される。

SRI2018 滞在記

放射光科学第一研究系 山下翔平

2018年6月10日から6月15日の間、13th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation(SRI2018)が開催された。National Synchrotron Radiation Research Center(NSRRC)が主催し、会場は台湾の名所を代表する台北101(地上101階建ての超高層ビル)すぐ横の台北国際会議センターであった。筆者のSRIへの参加は今回が初めてであり、放射光科学全般についての知識は勿論のこと、業務に係わるビームラインの建設やX線イメージングの技術を学ぶために臨んだ。

11日朝からのオープニングの際には、まず会場入口にて厳重なセキュリティチェックを受けた。テロ対策なのかと個人的にやや物々しい雰囲気を感じていたが、台湾の副総統がご登場され警備の厳重さに納得した。参加者の内訳

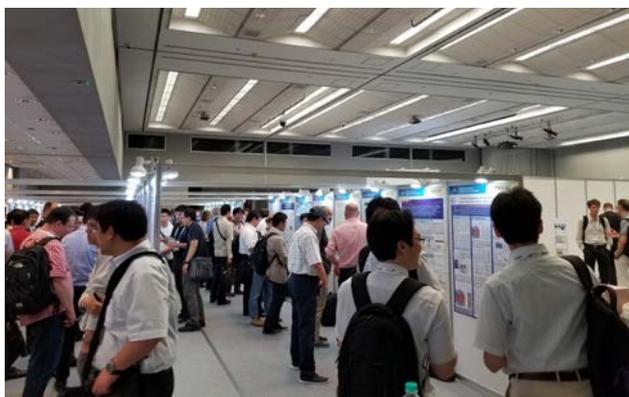


図1 ポスター発表中の会場の1コマ。3日間に渡り行われたポスター発表では終始賑わいを見せていた。



図2 TPSの見学ツアー。リング内やビームラインの各所ではスタッフの方々がポスターやデモ機を使い、丁寧に説明して下さっていた。

は現地台湾、次いでドイツ、日本の順で多いとのこと、少し見渡すと日本の放射光施設の関係の方を見つけられるといった様子であった。

Taiwan Photon Source (TPS)の見学ツアーが予定されている14日までの3日間は、午前中に基調講演が行われ、引き続いてポスター発表、午後からは4会場に分かれて分野ごとのセッションが行われるプログラム構成であった。

筆者が参加したセッションの中でも特に印象に残ったテーマは、コヒーレントX線を使った回折イメージングを利用したX線タイコグラフィーに関する研究発表であった。とりわけ、第三世代放射光施設による実験結果が印象的で、KBミラーやキャピラリによる集光技術や最新の検出器開発、その技術を駆使した材料解析の結果を見て、最先端の技術や世界的な動向を知ることができ感銘を受けた。また、ポスター発表の際には、CTへの応用技術や、オペランドでの実験への工夫点(ナノ材料の測定中の試料の振動を如何に抑えるかなど)を具体的に聞くことができ、今後の研究に役立つ情報を得ることができた。

ポスター会場は2フロアにまたがって2箇所に設置され、日程とポスターの設置場所によっておおまかにテーマが分かれており、関係の研究者との意見交換が活発に行われるとともにそのスペース付近に企業ブースが併設されていることで企業の方とも良い距離感を築いていた(図1参照)。

12日の筆者のポスター発表では、時間分解 Dispersive XAFSの測定技術を応用しNiCu合金触媒中のNiとCuの化学状態変化の情報を同時に取り出すことを目的とした二元素同時測定手法に関する研究について報告した。スペクトル変化の化学的な解釈よりもむしろ測定手法の原理や特徴に関する装置側の質問を多く受けた。同じ会場では、高速動作が可能な結晶分光器で二元素を同時に測定した(正確には二元素分のエネルギー範囲を高速でスキャンした)という内容のポスター(TPSの44AのQ-Mono)も発表されており、お互いの特徴について議論し合い、有意義な時間を過ごした。



図3 会場すぐ隣の台北 101 から見た夜景。筆者は右から 2 番目。

14日の午後からは、企画されていた TPS の見学ツアーに参加した（図2 参照）。リング内やビームラインにはスタッフの方々が待機され、参加者に対して説明して下さった。上記の高速でスキャン可能な結晶分光器（チャンネルカットモノクロ）を見せてもらった。軟X線ビームラインにはタイコグラフィが導入されている高度な技術と周辺の測定環境を直接見て学ぶことができ、非常に良い経験を得た。また、施設の広さに加え、実験ホール上部に窓がある点、ビームラインのすぐ傍にトイレが併設されている点など、細かなところにも魅力を感じた。

限られた時間の中ではあったが、現地の観光も満喫した。筆者は台湾へは初めて訪れたということもあり、気持ちが高ぶり初日 10 日の夜には一人で台北市内を散策した。11 日夜には職場の方々と台北 101 へ登り、夜景を堪能し（図3 参照）、火鍋と台湾ビールを味わった。遠出こそ叶わなかったが、会中の Banquet では、ワインと台湾料理に舌鼓を打ちながら台湾の文化と音楽を楽しんだ。

会全体を通して、放射光科学を代表とする X 線工学や加速器科学、検出器などの様々な分野における国際的なレベルの高さを知れる非常に良い機会となった。