

PF 研究会「BioSAS が拓く生体高分子の分子間相互作用解析の最前線」開催報告

KEK 物構研 清水伸隆
京都大学 井上倫太郎, 杉山正明
奈良先端科学技術大学院大学 上久保裕生

近年のタンパク質科学研究においてはより複雑な生体システムが対象となり、離合集散を伴う準安定な相互作用システムの構造解析を実現すべく、様々な測定技術においてパラダイムシフトが起きています。その中でも溶液状態の生体高分子試料を測定対象とする小角散乱法 (Biological Small-Angle Scattering=BioSAS) は、古典的な手法でありながら時代の変化に追従し、BioSAXS (Biological Small-Angle X-ray Scattering) や BioSANS (Biological Small-Angle Neutron Scattering) と呼ばれ、タンパク質構造解析の一般的な手法として認知されています。その理由に、様々な構造解析手法を組み合わせる広い時空間スケールで相互作用システムを理解しようとする相関構造解析 (Hybrid approach) の中で、BioSAS は溶液と結晶/凍結状態、物理化学量と構造を結びつける唯一の手法と考えられていることが挙げられます。相関構造解析が推進される近年の潮流と共に放射光や中性子施設の SAS ビームラインでは、ビームライン自体や試料周辺装置の高度化が求められています。Photon Factory では、国立研究開発法人日本医療研究開発機構 (AMED) の創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業におけるプラットフォーム事業 (PDIS/BINDS) 等の基でビームラインと測定環境の整備・高度化を進め、現在では BioSAXS の国内における一大拠点を形成しつつあります。ハードウェアの高度化は測定法にも大きな進展をもたらし、ゲル濾過クロマトグラフィーと組み合わせた SEC-SAXS/SANS 法 (Size-Exclusion Chromatography SAXS/SANS) が開発され、これまで不可能だった多分散状態の試料を単離しながら計測することが可能になっています。一方で、SEC-SAXS/SANS に関しては測定後のデータ解釈が単純では無く、その道のエキスパートですら解析上の困難に直面することから、ソフトウェアによる解析の充実を図る必要があります。さらに世界に目を向けると、新規の反復構造因子回復アルゴリズムによって SAXS のデータから Ab initio 法で電子密度を導出するプログラム DENSS なども公開され、BioSAS の解析技術は新たな局面を迎えています。

このような状況から、BioSAXS/BioSANS を利用する生命科学研究者が集い、最新の測定と解析に対する新たな視点での相互理解・更なる融合発展を果たすために、2019 年 9 月 11 日 (水)、12 日 (木) の 2 日間にわたって、PF 研究会「BioSAS が拓く生体高分子の分子間相互作用解析

の最前線」を KEK4 号館セミナーホールにおいて開催しました。国内では九州から北海道まで、さらには韓国からの参加者もあり、合計 63 名の参加者と共に活発な議論が行なわれました。本会は 3 部で構成され、初日の第 1 部では「測定・解析手法 /New Methods in BioSAS」と題した SEC-SAXS 法やマイクロ流路セルを用いた滴定 SAXS 法などの最新の測定解析法に関するセッションが、初日の第 2 部では「BioSAS 関連の相関解析 /Hybrid approach using BioSAS」と題し、BioSAS を活用した相関構造解析に関する講演が行なわれました。2 日目の第 3 部は「Special & Keynote Lecture」と題し、ソフトウェア DENSS に関する特別講演と国内の BioSAS エキスパートの研究者による基調講演が行なわれました。第 1 部と第 2 部は日本語で行なわれ、講演 30 分、質疑応答 10 分と比較的長めの時間配分で細かい内容まで分かりやすく講演頂くと共に、BioSAS 初心者からもたくさんの質問が受けられるようにしました。第 3 部は英語で講演が行なわれ、特別講演は 60 分、基調講演は 45 分の講演時間に対して 10 分の質問時間を設けることで、詳細な内容を余すところなくお話し頂くと共に、質問も幅広く受けることができるように配慮しました。

初日は KEK 物構研の千田俊哉教授 (構造生物学研究センター長) による開式の挨拶で始まり、相関構造解析研究の推進と BioSAS の有用性に関して提言がありました。第 1 部の最初の講演は、米国カリフォルニア州にある SLAC 国立加速器研究所の放射光施設である Stanford Synchrotron Radiation Lightsource (SSRL) の松井勉博士 (スタンフォード大, Staff Scientist) から、SSRL の BioSAXS ビームライン BL4-2 における SEC-SAXS 実験の現状に関する発表がありました。BL4-2 の SEC-SAXS システムの紹介だけでなく、そもそもの汎用の BioSAXS はもちろん SEC-SAXS を実行する上での測定・解析上の注意点に至るまで詳細な説明が行なわれました。続いて KEK 物構研の清水伸隆教授から、PF における BioSAXS ビームラインと SEC-SAXS 実験の現状に関して発表がありました。PF で



図 1 会場の様子

は実験システムのハードウェア整備だけではなく、SEC-SAXSの全自動解析を行なうソフトウェア Serial Analyzerを開発・公開しており、その詳細に関して紹介されました。京都大学複合原子力科学研究所の井上倫太郎准教授からは、ラボソースのBioSAXS装置に向けて開発整備されたSEC-SAXSシステムの現状に関して発表が行なわれました。さらに、溶液中の分子量分布を解析可能な分析超遠心法 (Analytical Ultracentrifugation=AUC) と組み合わせたAUC-SAXSに関しても、その有用性に関して実際の解析例も合せて紹介されました。第1部最後はKEK物構研の米澤健人研究員から、奈良先端科学技術大学院大学とKEK物構研が共同でPFに整備中であるマイクロ流路セルを利用した滴定SAXSシステムの発表が行なわれました。滴定SAXSシステムはゲル濾過法では単離できない、すなわちSEC-SAXSで解析困難な不安定状態の解析に威力を発揮する新しい測定技術で、発表ではシステムの基本構成やテスト測定例などが示されると共に、共同研究ベースではあるが、整備が完了して2019年4月から共同利用が開始されたと報告されました。

第2部では、最初に北海道大学大学院理学研究院の斉尾智英助教から、マルチドメインタンパク質MurDの溶液中における構造ダイナミクスを理解するために、MurDに複数のランタノイドイオンを結合させてNMRやSAXSの解析に活用した結果が発表されました。それぞれの手法で解析されたランタノイドイオン間の距離や構造分布がリガンド結合に伴い変化することが示され、タンパク質の構造変化解析に対する有用性が実証されました。次に東京大学定量生命科学研究所の深井周也准教授からは、遺伝性てんかんの一つである常染色体優性外側側頭葉てんかんの原因遺伝子産物として知られる神経細胞の分泌タンパク質LG11とその受容体である膜結合型金属プロテアーゼADAM22について、LG11-ADAM22複合体の構造解析結果が発表されました。この研究では、多角度静的光散乱、BioSAXS、クライオ電子顕微鏡、X線結晶構造解析を組合せた相関構造解析により多面的な議論が行なわれ、複合体形成メカニズムに基づく機能発現機構が提唱されました。第2部最後には横浜市立大学生命医科学研究科の池口満徳教授から、MDシミュレーションの歴史、ならびに先日運用を終えたスーパーコンピュータ「京」、後継として開発中の次世代スーパーコンピュータ「富岳」に関する紹介に加えて、MDと実験の連携の重要性と共にその実証例としてビタミンD受容体リガンド結合ドメインのリガンド結合メカニズムの解明に向けたMD-SAXS相関構造解析について発表されました。さらに、現在開発中のマルコフ状態遷移モデル(MSM)をベースとしたMSM-SAXSや、粗視化MD(Coarse-Grained MD)によるCGMD-SAXSに関する解析例なども紹介されました。第2部終了後、研究本館ラウンジにて40名近い参加者にて懇親会が開催され、おいしい料理とお酒等を味わいつつ、初日の講演内容を肴に歓談は大いに盛り上がりました。

2日目の第3部では、最初に特別講演としてニューヨー



図2 集合写真

ク州立大学バッフアロー校のThomas Grant博士 (Research Assistant Professor) から、ソフトウェアDENSの開発や詳細に関して講演が行なわれました。小角散乱の基礎理論の説明に始まりDENS開発の経緯、最新の反復位相回復アルゴリズムの考え方、DENSの解析アルゴリズムの流れや実際の適用例など非常に多面的に、かつ詳細に紹介されました。質疑応答では、アルゴリズムの基礎的な考え方に対してだけではなく、今後の応用や発展の可能性についても質問が行なわれました。続いての基調講演では、自然科学研究機構分子科学研究所の秋山修志教授から、シアノバクテリアの概日時計システムのメカニズム解明に向けた生化学、構造生物学、進化生物学といった様々な観点からの膨大な研究とその成果に関して説明が行なわれました。生体システムの理解に向けた広い時空間スケールに渡る分子間相互作用、離合集散のダイナミクス解析の重要性が改めて提唱されました。本研究会の最後には京都大学複合原子力科学研究所の杉山正明教授から、技術革新が進むクライオ電子顕微鏡を始めとして、結晶解析、NMR、ネイティブ質量分析、分子動力学計算といった手法に加えて、SAXSやSANSも合わせたハイブリッドアプローチ・相関構造解析の重要性に関して改めて提言がありました。さらに、SANSに関する手法の特徴の詳細とSAXS/SANSを活用した α クリスタリン複合体の構造ダイナミクス研究についても紹介されました。本研究会の翌日9月13日(金)には、サテライト研究会「Marriage of Computational and Experimental Techniques for Solution Small-angle Scattering」が京都大学複合原子力科学研究所で開催され、情報科学とBioSAXS解析との融合を目指した議論が活発に行なわれました。

以上をもってプログラムは全て終了しましたが、BioSAXS初心者からの様々な疑問点が寄せられただけではなく、エキスパート同士の解析や研究戦略に関する論戦なども繰り広げられ、質疑応答時間はもちろん、懇親会やコーヒーブレイクの時間帯も含めて会全体を通して非常に活発な議論が行なわれました。本会の目的は「手法の相互理解・更なる融合発展」でありましたので、その役割を十分に果たせたと考えます。また、さらに複雑な相互作用状態(構造)や生体システムの解明に挑むという構造生命科学の共通の目的が本会を通じて改めて確認され、

BioSAS は相関構造解析の中で様々な手法を繋ぐ中心的な役割を担い、今後も益々活用されることが期待されます。

本研究会の開催に当たっては、事務局としてサポート頂いた小角散乱ビームライン秘書の小針美由紀さん、PF 秘書室の高橋良美さん、林陽子さんに深く感謝致します。また、当日の運営・会場設営でサポートをお願いした五十嵐教之教授と小角散乱ビームラインの業務委託スタッフの皆さん、また講演者の写真撮影をお願いした宮本洋佑さん(京都大学大学院理学研究科修士1年)にも、この場を借りて御礼申し上げます。

VUVX19に参加して

放射光実験施設 若林大佑

2019年7月1-5日に米国カリフォルニア州のサンフランシスコにて、The 40th International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics (VUVX19)が開催された。この会議は、真空紫外(VUV)からX線までの広い波長領域の光をテーマに3年に1回のペースで開催されており、実験手法、光源開発から応用研究に至るまで、様々なトピックで議論が行われている。元々はVUVの学会として開催されていたところにX線の学会が合流し、合併後の開催としては今回で4回目となる。筆者のような放射光施設のスタッフや研究者に限らず、レーザーやプラズマ光源の技術者や検出器の開発者など、欧米を中心に300名を超える参加者がおり、専門を超えて活発な議論が行われていた。

ホストであるAdvanced Light SourceのOhltag博士の挨拶に続き、二つのPlenary Talkで会議は開始した。VUVの学会が母体となっていることもあって会議全体のX線領域の発表は決して多くなかったが、最初のPlenary TalkはいずれもX線領域がテーマとなっていて、より広い波長領域の研究者を呼び込みたいという意図が感じられた。会場となったWestin St. Francis Hotelは、1904年に建てられた歴史的にも価値の高いホテルで、細かな装飾が施されたホ



図1 VUVX19会場の様子



図2 Conference Dinnerにおける特別講演の様子

ールは見た目にも美しかった(図1)。口頭発表は2セッションに分かれて平行に行われ、参加者はそれぞれの興味に合わせて自由に二つの隣接するホールを行き来することができた。筆者は、InstrumentationやMaterials Scienceセッションの手法開発に関する発表を中心に聴いていたが、普段触れることの少ない放射光以外の話題はどれも新鮮で刺激的に感じられた。特に、数10eVの極紫外線に対して屈折レンズとして機能するGas lensの開発に関する発表は興味深く、強く印象に残っている。

筆者は、ポスターセッションにおいて、昨年度より建設を進めてきたBL-19の現状と今後の展望に関する報告を行った。BL-19では、Aランチに設置された走査型透過X線顕微鏡(STXM)のユーザー実験が今年度から開始され、SiのK吸収端(2 keV)までのXAFSイメージングが可能になっている。近くのパスターが他の放射光施設のSTXMに関するものだったこともあり、新規ユーザーの開拓というよりはシステム開発に関する情報交換が主であった。会期中ずっと振る舞われていたStarbucks Coffeeを片手に、終始和やかな雰囲気の中で交流を楽しむことができた。同じ会場では企業展示が行われていて、検出器や光学素子に関する相談や情報収集を行うこともできた。

3日目の夜には会場のホテルの最上階にあるGolden Gate RoomにてConference Dinnerが開かれた。その名の通り、サンフランシスコの象徴である金門橋まで一望できる素晴らしい眺めで、参加者の多くは窓際で熱心にカメラのシャッターを切っていた。料理が一段落した頃、NASAのBristow博士による火星探査についての特別講演が行われた。“The First X-ray Diffraction Experiment on Another Planet”と題された発表では、実際に火星で測定されたX線回折データを示しながら火星探査機Curiosityの最新の動向が紹介された(図2)。筆者は元々地球科学分野の出身だったこともあり、懐かしい興奮とともに発表を聴いていたが、他の参加者からも多くの質問が寄せられて大いに盛り上がっていた。

学会とは別の部分でも、印象に残っていることが幾つかあるので紹介したい。まず、日本が梅雨時だったということもあり、空港を降りたときからカリフォルニアの乾燥した空気が爽快で、会期中は快適に過ごすことができた。また、サンフランシスコに到着した日曜日は、LGBTの大き



図3 到着日に開催されていた San Francisco Pride の様子

なお祭りである San Francisco Pride が開催されていて、極彩色の過激な衣装に包まれた人々が街中を闊歩していて目のやり場に困ってしまった(図3)。一方で、放射光施設のスタッフである筆者は、LGBTの象徴のレインボーフラッグを眺めながら回折格子による分光を連想していた。とある講演で、まさに筆者の連想と同じ話題が出されて会場が沸く場面があり、似たようなことを考えた同業者は少なくなかったようだ。会期中の木曜日は米国の独立記念日に当たっており、夜に花火大会が行われることが会場でもアナウンスされていた。同僚と花火に備えて高台に登ったのだが、7月とは言え夜は気温も下がって濃い霧が出ており、米国の有名登山用品店 Patagonia で購入したアウター(日本の価格よりもはるかに安い!)が大活躍した。ところが、場所が悪かったのか肝心の花火はほとんど見えず、骨折り損になってしまったのが残念であった。

次回は、2022年にブラジルにて開催予定で、放射光施設 Sirius への見学ツアーも行われるとのことだ。複数年に一度開催される学会は、その期間で得られた成果のハイライトを発表する絶好の機会である。3年後には目覚ましい成果を持ってブラジルのビーチを楽しめるように、日々の研究・開発に精進していきたいと思う。

対称性・群論トレーニングコース開催報告

放射光実験施設 五十嵐教之

令和元年の夏に KEK つくばキャンパスで、8回目となる基礎コース、及び初めての英語基礎コースを開催しました。本コースは、結晶学と直結する対称性や群論について、5日間の合宿形式で、座学やトレーニングを通じて学ぶものです。結晶学は物質構造研究に欠かせない重要な学問ですが、対称性・群論の知識を学ぶ機会は圧倒的に不足しているため、2014年の世界結晶年(IYCr2014)の企画として、放射光科学研究施設主催、日本結晶学会共催で開催しました。その企画が非常に好評であったために、その後も継続

的に開催し、今回で基礎コースは8回目となりますが、申し込み開始から1週間ほどで満員となる人気コースとなっています。2016年には基礎編を修了した人だけが参加できる、応用を学ぶアドバンスコースも実施しました。今回は英語コースを初めて開催し、さらに広がりが出てきています。運営についても、第2回からは日本結晶学会と物質構造科学研究所の共同主催に、第3回は大阪大学蛋白質研究所の全面協力を得ての関西圏での開催、第5回からは総合研究大学院大学の公開講座にも指定され、今回からは総合研究大学院大学高エネルギー加速器科学研究所の共通講義となるなど、広く参加できるようになってきており、結晶学、ひいては物質構造研究における啓蒙活動として、確固たる位置付けになったと言っても過言では無いのではと思います。

さて、今回は7月22日(月)~26日(金)に、KEK 研究本館会議室1にて英語コースを、7月29日(月)~8月2日(金)に、KEK 4号館2階輪講室にて日本語コースを開催しました。詳細は以下のウェブページを参照ください。

[英語コース]

<http://pfwww.kek.jp/trainingcourse/8th/engcourse/index.html>

[日本語コース]

<http://pfwww.kek.jp/trainingcourse/8th/index.html>

内容はどちらのコースも同様で、結晶学のデータブックである、International Tables for Crystallography, Vol.Aに記載されていることを、非常に基礎的なところから体系的に学んで行き、最後には結晶構造解析の結果考察の例を示しながら、学んだことを生かして一緒に考えるなどの実践的なところまで網羅するものです。講義では、座学だけでなく適宜演習の時間が設定され、その演習では参加者に考えてもらっただけでなく、講師が参加者のところを周り、個別に指導を行います。参加者の理解度を確認しながら講義を進める形式なので、講師の負担は大きいのですが、参加者にとっては非常に教育的なコースになっているかと思います。ここ何年かは猛暑だったため、参加者、関係者の体調



図1 授業中の様子(英語コース)

管理が心配だったのですが、今年は気温も上がらず、比較的快適な環境で実施することができました。ただ、初めての2週連続開催（しかも英語と日本語！）ということで、講師のネスポロ・マッシモ（NESPOLO Massimo）教授（フランス・ロレーヌ大学結晶学教室）への負担は相当大きかったかと思います。実は今回、マッシモ教授はこの直前に上海で同様の講義に参加し、直後にも高野山大学で講義をするという大変なハードスケジュールでした。なので、やる前は本当に大丈夫なのか心配していましたが、持ち前のベジガンパワーと教育への情熱で乗り切り、最後まで非常に熱のこもった講義をしてくださいました。昼の講義だけでなく、夕食後もKEK 宿舎の談話室を借りて夜遅くまで個別相談会を開催し、参加者からの個別の質問や相談にも、全て丁寧に対応してくださいました。見ていて本当に頭の下がる思いでした。

英語の基礎コースについては、初めての開催ということもあり、どの程度集まるか分からなかったため、希望者数が少ない場合には開催中止もあるという中途半端な事前案内となりました。最終的には16名の申し込みがあり、無事開催にこぎつけることができました。参加者は非常にバリエーションに富んでおり、国籍も中国、韓国、台湾、メキシコ、インドネシア、インド、ネパール、フランス、ポーランドと様々な方が参加されました。どんなものかも分からない第1回に申し込んでくるだけあって、皆さん本当にやる気があり、講義が終わった後も列を作って質問をしているような状況でした。宿舎での質問会でも毎晩聞きに来る参加者も居て、人数が少ないながらも非常に熱心な人たちが集まっていたと思います。所属もバラバラだったのですが、参加者同士で分からないところを教えあったり、一緒に食事休憩に行ったり、すぐに仲良くなった様子でした。同じ志を持つ仲間として良い交流になったのではと思います。長いコースなので、実行委員会ではリフレッシュできる飲み物やお菓子などを休憩時間に提供していましたが（日本結晶学会の支援によるものです）、我々実行委員にこれは何だと尋ねてきたり、参加者同士でこれは美味しいとか情報交換したりと、色々興味を持って日本の飲み物やお菓子を楽しそうに体験していたのも印象的でした。コース終了後、参加者にアンケートをお願いするのですが、



図2 授業中の様子（日本語コース）



図3 懇親会の様子（日本語コース）

ほとんどの人が回答してくださり、評判も良かったので、見切りでしたが開催して良かったと思いました。英語コースの今後の開催についても前向きに検討したいと考えています。

日本語コースについては、8回目ということもあり、関係各所に浸透してきているようで、今回も定員を超える46名の参加者を受け付けました。ただ、これまでは様々な履歴を持つ人が参加していたのですが、今回の参加者分布は少し偏っており、比較的若い学生さん、それも研究室から複数名で参加されている人が多かったようです。そのせいかこれまでよりも参加者の反応が淡白に感じました。質問に来る人も限定的で、夜の質問会も参加者が居なくて中止にすることもあったぐらいでした。アンケートの結果も、理解度や満足度があまり高く無く、今後の募集方法や事前チェックをどうするか、いくつか課題を感じました。ところで日本語コースの方は参加者が多いため、日本結晶学会の支援を受けて学会員の補助をお願いしています。今回は東北大学金属材料研究所から、徳田誠先生と川又透先生が1週間滞在してくださり、講義や演習の手伝いや、参加者からの問い合わせ対応、場合によっては質問や相談などにも乗ってくださいました。お二人のご協力のお陰で、円滑に運営することができました。この場をお借りして、厚く御礼申し上げます。

来年の開催については、東京オリンピックがあるため通常よりも1週早めて、7月中旬の開催を予定しています。内容については、英語コースやアドバンスコースも含めて検討中です。開催要項が決まりましたら、以下のトレーニングコースホームページや、各種情報案内、SNSなどでアナウンスいたしますので、ご興味をお持ちの方はぜひチェックをお願いします。

【トレーニングコースホームページ】

<http://pfwww.kek.jp/trainingcourse/index.html>

（最新情報だけでなく、過去の開催や報告なども掲載しておりますので、ぜひご確認ください。）

最後になりましたが、本コースの開催を全面的に支援してくださいました、高エネルギー加速器研究機構の関係の

方々に御礼申し上げます。特に、事務局を一人で切り盛りしてくださいました高橋良美秘書には大変感謝しております。紙面をお借りしまして感謝申し上げます。本当にありがとうございました。

Impression on the 8th Training Course on Symmetry and Group Theory

Graduate School of Science, The University of Tokyo
Special Research Student (D1) Xuejing HE

The 8th Training Course on Symmetry and Group Theory was held by the Crystallographic Society of Japan and the Institute of Material Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization (KEK) from July 22nd to 26th.

The lectures were given by Professor Massimo Nespolo from the Université de Lorraine, who is a great expert of crystallography. Courses were arranged properly from the mathematical foundations to crystallographic knowledge. First, basic notions such as group, vector space, mapping, and homomorphism were given for reviewing, and then we moved on to two-dimensional point groups, three-dimensional point groups and space groups, symmetry operations, reciprocal lattice, and X-ray diffraction step by step. Exercise problems were also provided every now and then so that we could digest abstract theories through practicing. Students could also join the FAQ every evening after class to ask the professor questions and redo the exercises. A clear overview of crystallography and useful takeaway tips were got at the end of the training. Although it's hard to understand every detail and make a huge progress during five days, the course actually provided me with helpful ways to analyze problems in research.

Life in the KEK campus was convenient. The lecture room is quite near to the dormitory, and cafeterias and convenient stores are also nearby, which helped a lot in saving time for busy study every day.

I recommend you to seize the opportunity to join next Training Course on Symmetry and Group Theory, and get a promotion in crystallography.



図1 講師から修了証を受け取る筆者（左）

FEL2019 会議報告

加速器第六研究系 加藤龍好, 本田洋介

International Free-Electron Laser Conference (FEL2019) が、ドイツのハンブルクで開催された。39 回目を数えるこの会議は、自由電子レーザー (FEL) に関して、施設報告から、ビームダイナミクス、FEL の理論、応用に至るまで、を扱う国際会議で、FEL の分野に関係する世界中の研究者が一同に会し、最新の情報を交換する場となっている。近年の話題の中心は、やはり大型施設による XFEL であるが、小型の施設による長波長の FEL や、コヒーレント放射に関する研究の発表も行われている。今年はハンブルク大学を会場とし、DESY がホストである。EuXFEL が本格的なユーザー運転に入ったタイミングでもあり、最終日にはその施設見学も行われた。近年、世界各地に XFEL の施設が次々と建設され短波長 FEL の分野は活況を極めているが、一方で国内ではこの分野の研究がそれほど活発では無いので、我々にとっては最新の情報に直接触れられる貴重な機会であった。

今回のハイライトは、やはりこの2年で本格稼働に入った EuXFEL に関する話題だろう。EuXFEL は超伝導加速空洞による SASE 型 X 線 FEL である。元々 DESY を中心にリニアコライダーを目指して開発を行ってきた TESLA 計画の技術を転用し、欧州の共同計画として進められているもので、DESY の敷地から始まる長さ 3.4 km の地下トンネルに建設された巨大な施設である。電子ビームのエネルギーは最大で 17.5 GeV である。ILC の 1/10 スケールとえば一部の人には分かりやすいかもしれない。アンジュレータのビームラインは、硬 X 線を発生する SASE1 と SASE2、及び、軟 X 線を発生する SASE3、の 3 つが既に稼働している。一つのマクロビームパルスのなかでビームを切り替えて、3 つの SASE で同時にユーザー運転を確立していることが報告された。

XFEL の分野はこれまで常伝導加速空洞による施設で開発的研究がなされてきた。2009 年に SLAC の LCLS が世界初の XFEL の発振に成功して以来、日本の理研の SACLA がこれに続き、さらに韓国の PAL-FEL とスイスの Swiss-FEL が建設された。とくに LCLS は、レーザーヒーター、セルフシード、スロットフォイル、など多くのアイデアを次々と提案し、実証してきており、単にユーザー施設としてだけでなく、この分野の発展に中心的役割を果たしてきた。EuXFEL は初めての超伝導加速空洞による XFEL である。超伝導空洞では RF パワーの損失が非常に小さくなるので、エネルギー効率が良く、ビームデュティを上げることが出来る。このため、ビーム強度、つまり取得できるデータの量で従来の常伝導の施設を大きく上回ることになる。建設は大掛かりになるが、ひとたび運転に入ると、パルスあたりの費用という観点からは、超伝導が圧倒的に有利である。一方で常伝導加速空洞は技術的な障壁は低く、建設にかかる費用も抑えられる点は、依然メ

リットがある。超伝導 FEL が本格稼働する時代において、常伝導の施設がどのように特徴を出していくか、は今後の課題である。常伝導空洞を低損失化し、繰り返しを上げることのできる可能性のある、誘電体アシストや銅の低温冷却のアイデアについても紹介された。

EuXFEL はデューティ 1/100 のパルス運転であるが、連続運転 (CW) の XFEL の建設計画が現在進行中である。SLAC の LCLS2 および上海の SHINE、また EuXFEL も CW 化のアップグレード計画がある。2025 年頃には世界の 3 拠点で CW-XFEL が稼働し、MHz の高繰り返し運転が標準になる時代が来る。長波長の FEL の場合は共振器型のスキームが一般的なのに対して、既存の XFEL は全て単一パスのスキームである。高繰り返し化の実現が近づくなか、XFEL での共振器型のスキームを検討する発表が増加傾向にあった。いわゆる再生増幅型 (RAFEL) や XFELO、あるいは共振器と増幅器を組み合わせてシード化をしようとするもの、などが議論されていた。X 線の利用側では、液体ジェットでサンプルを流しながら測定を行うことになるが、X 線パルスの照射によって液体ジェット中に発生する衝撃波が、次のサンプルに影響しうる、という高繰り返しならではの議論もなされた。

国内では最近、SACLA でセルフシードに成功し、SASE と比較して線幅が改善された X 線が利用できるようになったのが話題である。SACLA から、反射型セルフシードの開発とユーザー運転の報告が行われた。また、PAL-FEL から、透過型セルフシードに成功した報告があった。とくに加速器上流部にレーザーヒーターを導入し、ビーム不安定性の発生を抑えることができたため、X 線のパルスエネルギーが向上し、セルフシードの安定性も、線幅も大きく改善している。レーザーヒーターの技術は、LCLS の初期に開発され、現在では X 線から紫外の短波長 FEL で標準的になっているものである。

EUV から軟 X 線にかけては、外部シード型 FEL 全盛の時代である。イタリアの FERMI では、これまでのカスケード HGHG (High Gain Harmonic Generation) から EEHG (Echo-Enabled Harmonic Generation) にも対応できるように施設を改造し、EEHG によって、HGHG と比較して線幅が改善されたとの報告があった。上海の軟 X 線 FEL の試験施設でも、EEHG およびカスケード HGHG に成功し、もうじきユーザー施設への拡張に入るとのことである。ちなみに、会期中に FEL 賞の発表がなされるのが恒例であるが、今年は EEHG やシード FEL の研究を行って来た 3 名が受賞し、近年のシード型 FEL の著しい発展を伺わせるものである。

開拓的テーマとして、アト (サブフェムト) 秒の X 線パルスの発生の話も増えて来ている。電子ビームの分布の一部からのみ発振させる、という小技的なものから、外部レーザーによって局所的な密度変調を導入する、ESASE と呼ばれる手法が議論された。とくに、ESASE は SLAC で XLEAP と呼ばれる計画が立ち上がっているほか、同様のアイデアに基づいたいくつかの発表が見られた。また、

日本からは QST らのグループで始まった、赤外共振器 FEL を用いた HHG (High harmonic generation) によるアト秒 X 線発生計画の発表があった。

長波長側で多くの発表がみられたのはテラヘルツ (THz) の施設である。既存の高強度光源が無い帯域で、小型の施設でも特徴を出しやすい、ということもあるのだろう。特に、超伝導加速空洞による大電流ビームを用いて大強度 THz 光源をめざす施設がいくつか提案されている。ドイツの ELBE が既存の代表的な施設である。

近年、レーザーとの相互作用などを利用して、ビームに変調をつける技術が確立してきた。これを応用して、放射波長の周期でプリバンチされたビームを予め生成し、アンジュレタなどに入射すると、超放射や誘導放射という現象が起こる。通常の FEL の効率を大きく改善する原理であり、UCLA の TESSA (Tapering enhanced stimulated superradiant amplification) のグループなどが精力的に開発を行っている。チュートリアル講演の一つは、これをテーマとしたものであった。KEK の cERL で我々がやっている THz 回折放射による誘導放射の実験もこの原理と関係したもので、興味を引くテーマである。

KEK からは ERL 型の FEL 光源の話題の発表があった。EUV リソグラフィの産業応用光源を目標に、赤外 FEL の実証試験を行う。エネルギー回収のスキームを利用して大電流運転を実現し、光源としてのエネルギー効率を上げようというものである。ある意味、技術的には CW-FEL よりさらに難しいもので、実機の実現まではまだいくつかの段階が必要であろう。

今回は、日本からの参加者は約 8 名と少なく、とくに若手が全く居なかった。人数は少ないながらも、いくつかのアイデアは注目されていたが、やはり新しい FEL の建設計画が無いのが寂しいところである。たいして目立つのは中国で、上海はシード FEL で既に世界最先端の実績を示し、CW-XFEL を目下建設中である。多くの参加者がおり、とくに若手が目立ったのが印象的であった。

例年、この会議は 8 月の最終週に行われ、暑い日本から脱出できて丁度良いのであるが、今年は異常気象でハンブルクで気温が 32 度を超えたうえに、会場は冷房が無く、しかもポスター発表は灼熱の屋外の仮設テント、という過酷な状況であった。超伝導の話をしながらかの暑さは皮肉なものであった。

第 22 回 XAFS 討論会に参加して

富山大学大学院理工学教育部 ナノ新機能物質科学専攻
博士課程 2 年 太田路子

2019 年 9 月 2 日から 4 日の 3 日間、京都大学吉田キャンパスの国際科学イノベーション棟で開催された第 22 回 XAFS 討論会に参加しました。XAFS 討論会は毎年夏に開催され、XAFS の理論や実験、産業への応用など多岐に渡

る研究発表と討論が行われています。私自身は、2017年8月に姫路で行われた第20回 XAFS 討論会、2018年9月に札幌で行われた第21回 XAFS 討論会にどちらも口頭発表で参加しており、今回は3回目の参加でした。

1日目、学会前はいつもバタバタと時間ギリギリまで準備をしていますが、今回も例に漏れず、前日は遅くまでスライドを直したり、話すことを考えたりしていました。当日は朝9時に富山駅を出発し、指導教員と後輩と3人で京都に向かいました。私の発表順は1日目の夕方ということで、電車の中で考えようと思っていたことがいくつかあったのですが、前日遅くまで起きていたこともあり、気づいたら京都駅に着いていて、京都大学に向かいながら焦っていたのを覚えています。結局、発表の合間の15分休憩に最後の準備をし、緊張する際は10分程しかなく、自分の順番を迎えました。今回は「Full-potential 多重散乱理論による偏光方向平均された分子座標系光電子角度分布の理論研究」というタイトルで発表をさせていただきました。この研究は、量子化学計算と Full-potential 多重散乱計算を組み合わせて光電子角度分布をより精度良く計算し、多重散乱理論の観点から光電子角度分布の構造を議論するという内容です。発表直前には、19枚も用意してしまったスライドを時間内に話し切ることができるか不安に思っていたのですが、いざ発表を始めると、次々にスライドが進んでいき、スムーズに発表を終えることができたように思います。発表が終わり、質疑応答の時間には4つの質問をいただきました。計算に関する質問についてははっきりと答えることができたと思うのですが、ある質問に対しては、数式やその意味をうまく言葉で説明できず、クリアでない答えになってしまったなど、反省する点もありました。

夕食は、指導教員と後輩2人と一緒に、実行委員の高谷光先生に教えていただいた居酒屋さんへ行き、人生で初めて鰻を食べました。昨年富山に住み始め、美味しい魚にはさほど驚かなくなったつもりでしたが、それでも京都の鰻は衝撃的なおいしさでした。ホテルに戻ったあとは、シャワーのお湯が出ず少し困りましたが、それ以外は問題なく、前日からの疲れと、自分の発表が終わった安心感で、あっという間に眠りに落ちました。

2日目と3日目には、口頭発表、そして2日目の午後にはポスターセッションがありました。自分の発表が終わっ



図1 京都の鰻



図2 横山利彦日本 XAFS 研究会会長（左）と学生奨励受賞学生3名（右から2番目が筆者）。写真は第22回 XAFS 討論会実行委員会よりご提供いただいた。

て安心したこともあり、2日目と3日目の発表は最初から落ち着いて聞くことができました。自分の研究と近い理論研究の発表はもちろんのこと、普段詳細にお話を聞かせていただく機会が少ない実験に関する研究についても興味深く聞かせていただきました。また、最近よく耳にする機械学習を使った研究や、企業での利用例の紹介もあり、一口に XAFS を使った研究といっても研究目的や対象とする系は様々であること、そして XAFS の応用範囲の広さを実感しました。一方で、それぞれの発表を聞きながら理解しきれない部分も多く、自分の勉強不足をひしひしと感じる時間でもありました。ポスターセッションでは、30人以上の方が発表され、どのポスターの前でも熱心に議論が行われており、私も何人かの参加者の方にお話を聞かせていただきました。1対1でじっくりと質問をしたり、意見を交換したりできるというのは、口頭発表にはない、ポスター発表の良さだと思います。私自身は XAFS 討論会でポスター発表を行ったことはないのですが、機会があればポスター発表での参加もしてみたいと思いました。

2日目の夜には懇親会が行われました。この懇親会で学生奨励賞の3名が発表され、大変光栄なことに、私の発表もそのうちの1つに選出させていただきました。今回発表した研究には修士1年の頃から取り組んでいて、毎年少し進んでは、XAFS 討論会で発表してきました。そういった経緯もあり、今回の XAFS 討論会で学生奨励賞に選んでいただけたことに対しては特別な思いがあり、とても嬉しく、そして大変有り難く思います。懇親会では、多くの先生方や他大学の学生の方、研究者の方ともお話しすることができ、楽しい時間を過ごすことができました。

今回の XAFS 討論会参加を通して、XAFS を使った様々な研究を知ることができ、また、自分の研究について客観的に見ることができました。学生奨励賞にいただけたことで、自分の研究に自信を持つことができた一方、やはりまだまだたくさん勉強しなければいけないことがあると感じました。今回の経験を糧に、今後もよりいっそう勉強と研究に励みたいと思います。