



資料 3
科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会
量子科学技術委員会
量子ビーム利用推進小委員会（第 39 回）
令和 2 年 11 月 26 日

光ビームプラットフォーム から量子ビーム施設連携へ

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所
量子ビーム連携研究センター(CIQuS)

雨宮健太

量子ビーム利用推進小委員会

2020年11月26日

光ビームプラットフォーム

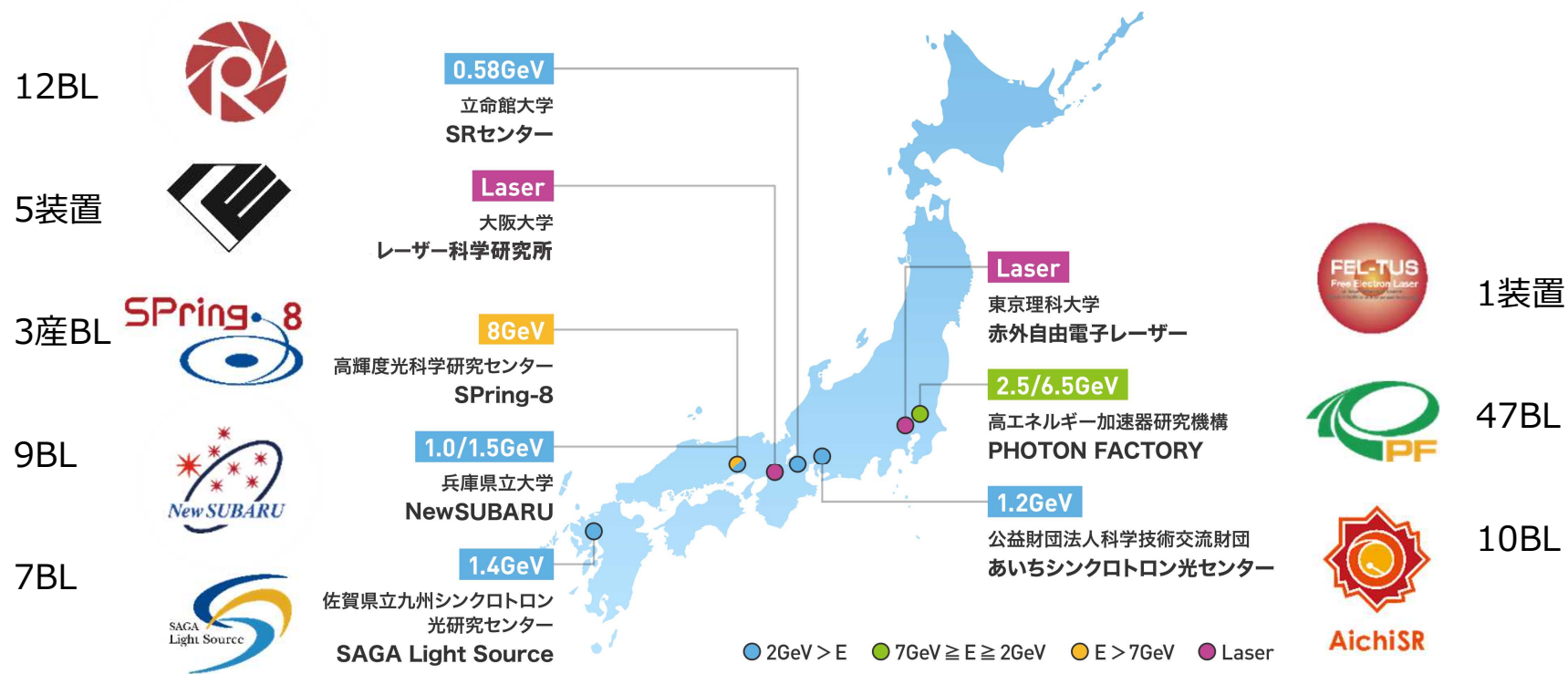
2013～ 【1期目】 5 放射光施設(非共用) + 2大学 レーザー施設

2016～ 【2期目】 + JASRI・産業利用推進室 (SPring-8)

光ビームプラットフォームの構成



- 1期目2013年度～：先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業
- 2期目2016年度～：先端研究基盤共用促進事業の共用プラットフォーム形成支援プログラム
- **産業利用に主眼をおいた施設間連携による共用促進**
- 6放射光施設だけではなく、2大型レーザー施設を加えた8施設で構成
- 計画時、本格的な産業利用（共用）のなかった分子研UVSORと広大HiSORの2学術放射光施設を除外（⇒今は学術施設における先導的開発手法が共用に不可欠になっている）



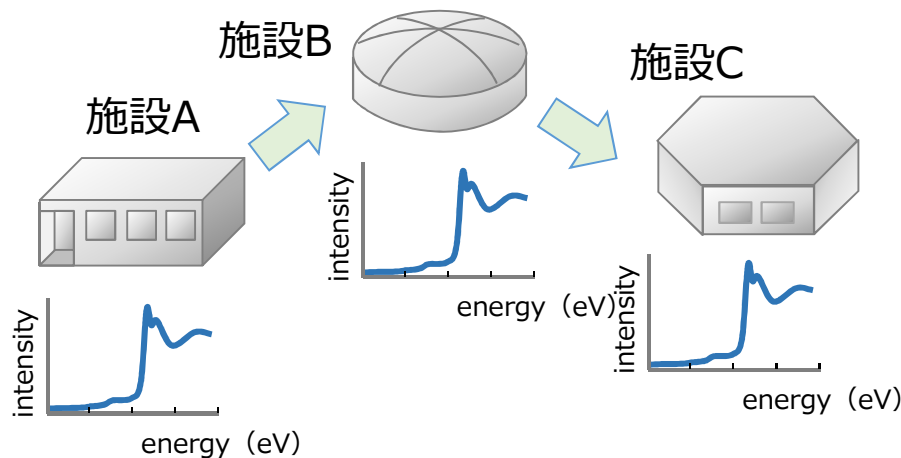
① 標準化：ラウンドロビン実験

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メーカー品はなく、それぞれ独自設計であり、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校正をした上で、各施設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、本事業では各施設の担当者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

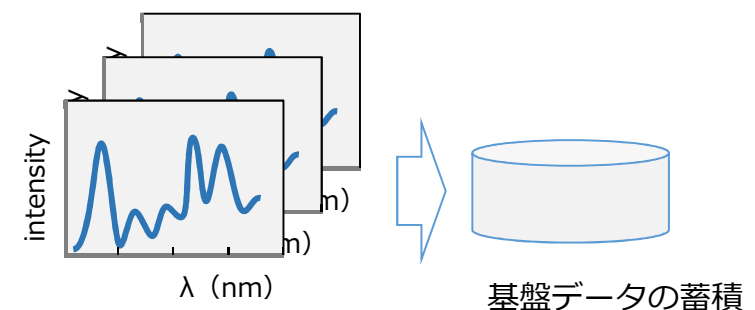
同一の試料を各施設・設備で順次測定
実験データの互換性を比較検証・校正



- 結果をもとに必要に応じて実験条件を校正
- 各施設で標準試料データベースとして活用

レーザー施設における活動

データを比較検証できる施設が無い場合には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



DVDに基礎データを収集し配布

② 施設連携・情報共有

ワンストップサービスによるユーザーの利便性向上

- **ユーザーの利便性を高めるためにホームページによる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集約（わかりやすさが重要）。また、必要な装置を所有する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文献を効率良く検索できる「施設横断検索」の提供により、ユーザーが他施設のこととも理解して選択肢を増やすことに成功。

https://photonbeam.jp

光ビームプラットフォーム

トップページ 事業概要 施設のご利用 技術・Tips 利用事例 BL・文献検索 お問合せ

光ビームプラットフォームは、文部科学省先端研究基盤共用促進事業に基づいて形成された、放射光施設と大型レーザー施設の共用を促進するネットワークです。施設をよりよく活用し、また、このサイトでは施設の利用方法をはじめとする総合的な情報提供を行うとともに、施設紹介やお問合せ先などの連携窓口を行っています。

ピンナップ

- PFとSPRING-8実験ホールのGoogle Map
- JASIS2018開催、及び先端研究施設共用促進事業シンポジウム2018の報告
- XAFS2018でのラウンドロビンの模様

最新ニュース（課題募集・求人・お知らせ等）

2018年10月11日 KEK-PF ニュース
[KEK-PF] フォトンファクトリーの2019年度前期共同利用実装運営委員

講習会等のカレンダー

講習会等のカレンダー

10月 2018

日	月	火	水	木	金	土
	1	2	3	4	5	6
7	8	9	10	11	12	13
14	15	16	17	18	19	20
21	22	23	24	25	26	27
28	29	30	31			

施設運転情報

施設運転情報

各施設の運転日程

2018年度運転計画

2018年度10月～12月

施設横断検索

施設横断検索

光ビームプラットフォーム施設横断検索

あなたは 3768 人目の訪問者です。

(注)英数字は半角でお願いします。

●ビームライン検索(放射光6施設)

検索項目
エネルギー-keV

検索

●公開事例キーワード検索

詳細検索画面へ

検索項目1
AND
OR
検索項目2

検索

●発見量(100件以内)

検索

これまでに約8,000件の施設横断利用検索

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。

③ 人材育成

専門スタッフの育成

- ライトビームの場を施設間で公開とし、70回を超える実験機会を通してOJTでの専門スタッフのスキルアップを行い、人材交流も深めた。

新たな施設系職員育成のための取組

- 人材育成は大阪大学が核となり、放射光とレーザーの融合領域の活性化と次世代人材層の育成を連成させて、セミナーやシンポジウムを開催
 - ・ 大阪大学単位認定の基礎セミナーを開講し、常設化
 - ・ 融合領域に焦点をあてたシンポジウム開催
 - ・ 国際ワークショップ等開催

若手・初心者の速やかな研究スタートアップ

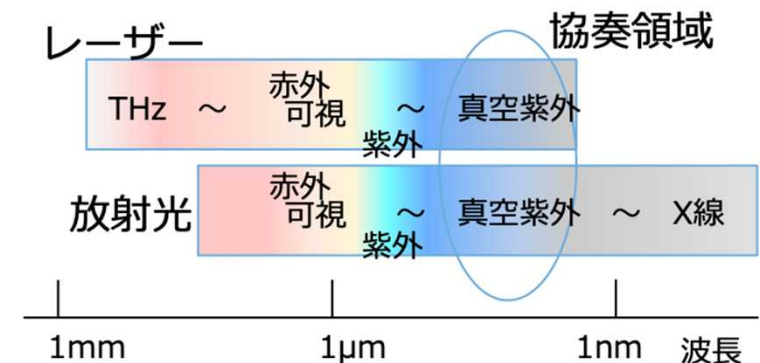
- 各施設で情報共有しながら独自対応
 - ・ 物構研PF： T型（大学院生奨励）、P型（初心者）
 - ・ JASRI/SPRING-8： 大学院生提案型課題
 - ・ 九州SR、あいちSR： 無償トライアルユース：
 - ・ 立命館大学SR： 低額料金設定：



@SPRING-8



@あいちSR



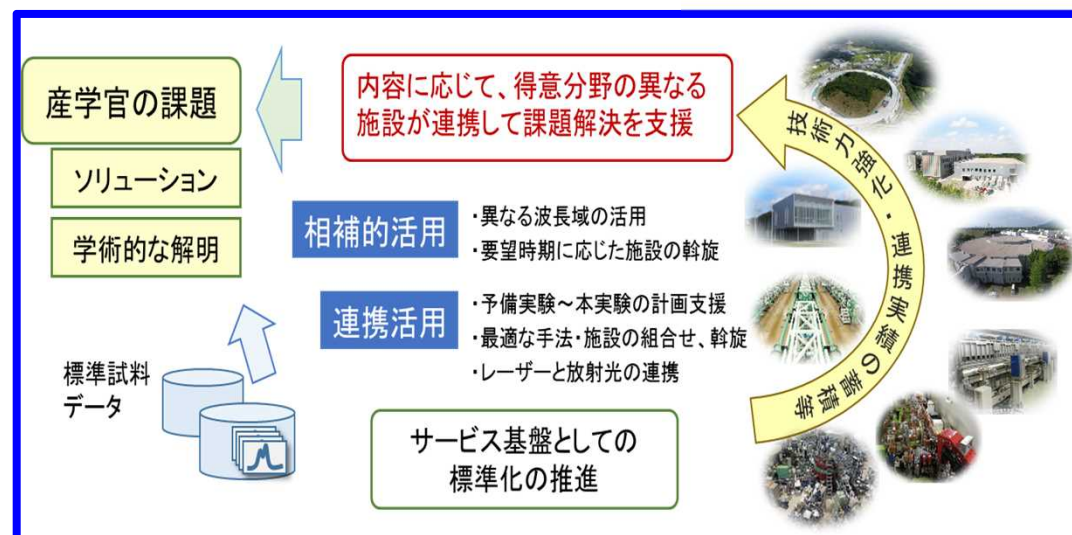
『放射光とレーザーの
連携シンポジウム』



光ビームプラットフォームの実施内容



- 1期目では産業利用のための共用体制を構築（大学共同利用機関では学術研究のための無償の大学共同利用に加えて有償の各種共用を導入）
- 2期目では**施設の連携活動に重点**を置いて以下3項目に注力（共用促進そのものに関する予算はなくなったため）



課題	取組みの具体的内容	今後に向けて
① 標準化高度利用	・ 硬X線吸収：エネルギー較正方法等の整理・文書化 ・ 硬X線光電子分光：相対感度係数推定方法確立 ・ 軟X線吸収：測定データの違いの原因究明(種々の要因) ・ 小角散乱：波数分解能評価、解析用データ様式の考案 ・ 標準試料データベース・ラウンドロビンデータをDVDにまとめ配布データベース化、オープンデータ化に貢献(NIMS,JASRIに協力)	・ 学会との協調活動を通して、各々の標準的手法の確立を進めていく。ただし、学会は現場とは離れており、機動的でもないので、例えば、KEKで取り纏めていくことが必要。 ・ ラウンドロビン等の標準化活動は施設スタッフの共通意識として進める。 ・ 海外施設との連携を拡大し、海外施設で得られた実験データの互換性を高める活動を展開しつつある（KEK）
② 施設連携情報共有	・ 連携活用の実績の蓄積と公開 ・ 施設内コーディネーションから施設間コーディネーションへの展開 ・ ユーザーに円滑な連携サービスを提供できる体制の確立	・ 事業で得たノウハウを活用し、各構成機関が施設連携を主体的にかつ分散協調的に実施 ・ 情報集約の継続性と更なる充実が不可欠（KEK,あいちSR）
③ 人材育成	・ 学生向け基礎セミナーの常設（10名程度） ・ 融合領域・横断領域の国内シンポジウムは毎年、国際ワークショップは隔年で開催し、約50名／年の若手研究者参加 ・ ラウンドロビン活動を通じた施設間横断人材の育成 ・ ユーザーのための施設横断合同研修会の開催	・ 基礎セミナー、シンポジウム、国際会議等を施設間連携で開催（量子ビームサイエンсистなど） ・ 施設間横断を加速する「専任」若手人材育成を自主財源で実施（KEK-大学連携等）

光ビームプラットフォームから学んだこと



① 標準化・高度利用

一つの理想 = どの施設の装置であっても同じ結果が得られる

- ◎ユーザーは近くて便利な施設を利用
- ◎ユーザーは空いている施設を随時利用

★同じ手法であっても同じ装置（メカ）がない中での標準化は非常に時間が掛かる
装置そのものだけでなく試料の扱い、測定手法から解析方法まで関係する

★装置担当者においても、自施設のユーザーの声をきくだけでなく、直接、他施設の装置比較に参加することによる問題意識と解決動機が不可欠

- ⇒ 新たな課題としてDX、AI導入が出てきているが、現時点では施設間で温度差がある
共用促進か教育重視か、無人化か安全・セキュリティ重視か等
- ⇒ 主要施設連携で技術開発、人材育成を主導し、その他の施設へ技術移転、人材輩出する機能が必要

② 施設連携・情報共有

もう一方の理想 = それぞれの施設は特徴ある装置があり、他施設の装置とは相補的

- ◎ユーザーはone stopサービスを受けて各施設の装置を研究目的等に応じて使い分け

★情報提供はユーザー目線で見やすくする必要があり、ユーザーの声が重要
★情報提供しても、そのあとの相補利用の動きの把握が難しい

- ⇒ 受け身のone stopサービスでは相補利用の伸びが鈍化。能動的な仕掛けが必要

③ 人材育成

一つの理想 = 施設系スタッフは装置に張り付かず、施設を横断してユーザー支援ができる

★レーザー・放射光異種ビーム間でユーザーの紹介はできたが、利用横断は進まなかった
★利用者は増えているが、施設系人材の補充が難しく、また、人材難である。

- ⇒ 光以外の量子ビームとの併用が重要（共用施設の存在）。特に放射光・中性子併用の需要が大
利用者に異種ビーム利用を促すためにも、新たに量子ビーム連携人材の育成が必要

光以外も含む量子ビーム連携へ

まずは、KEK物質構造科学研究所（放射光、中性子、ミュー、低速陽電子の4つの異種量子ビーム施設）の共同利用体制の中で組織化(2020～)：

量子ビーム連携研究センター

Center for Integrative Quantum Beam Science (CIQuS)

量子ビームの連携利用（マルチプローブ）が必須の研究例

深さ
0.1 nm

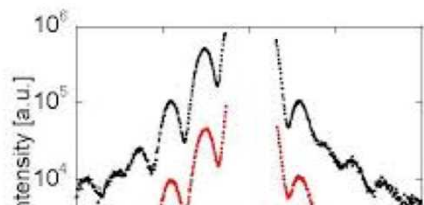
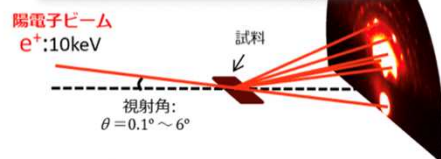
1 nm

10 nm

100 nm

原子配列

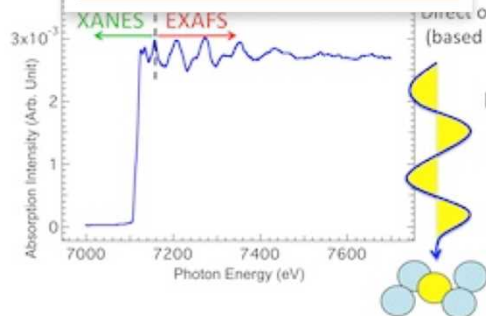
陽電子回折



X線CTR散乱, 表面回折



X線吸収微細構造

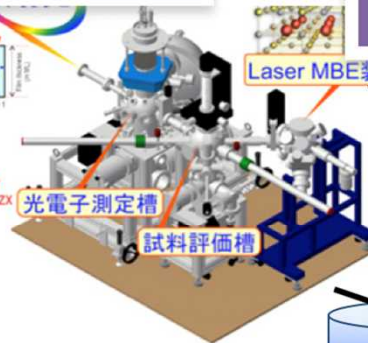
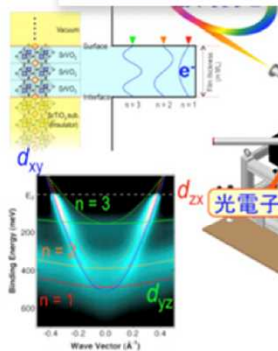


Element specificity
Direct observation of Crystalline anisotropy
(based on polarization dependence)

Local structure
Coordination number
Bond length
Debye-Waller factor, etc.

化学状態

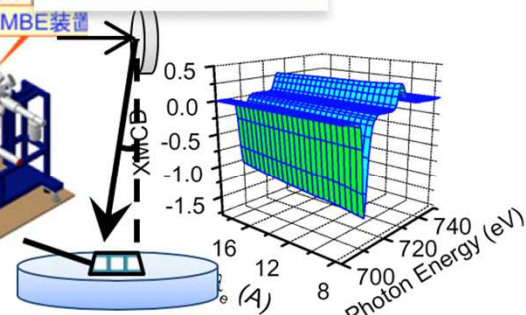
光電子分光



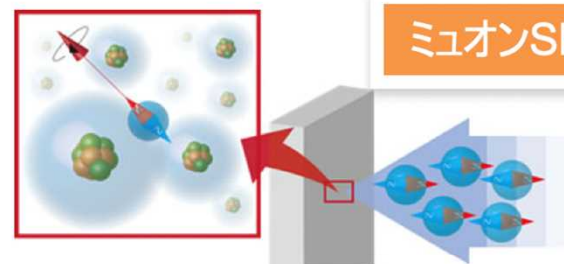
電子状態

スピン状態

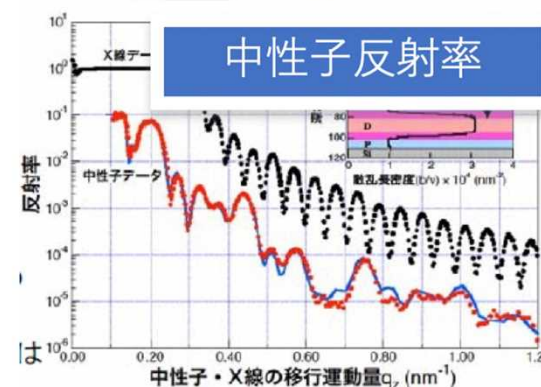
軟X線MCD



ミュオンSR



中性子反射率





発掘型共同利用

「待ちの共同利用」からの転換

各プローブのユーザーが実施している研究の中から、マルチプローブ利用によって発展が期待されるものを発掘し、マルチプローブ利用に誘導する。ユーザーとともに研究内容を検討し、マルチビームに適した試料調製から実験・解析まで、研究実施に対する助言・実験支援を一気通貫に行う。

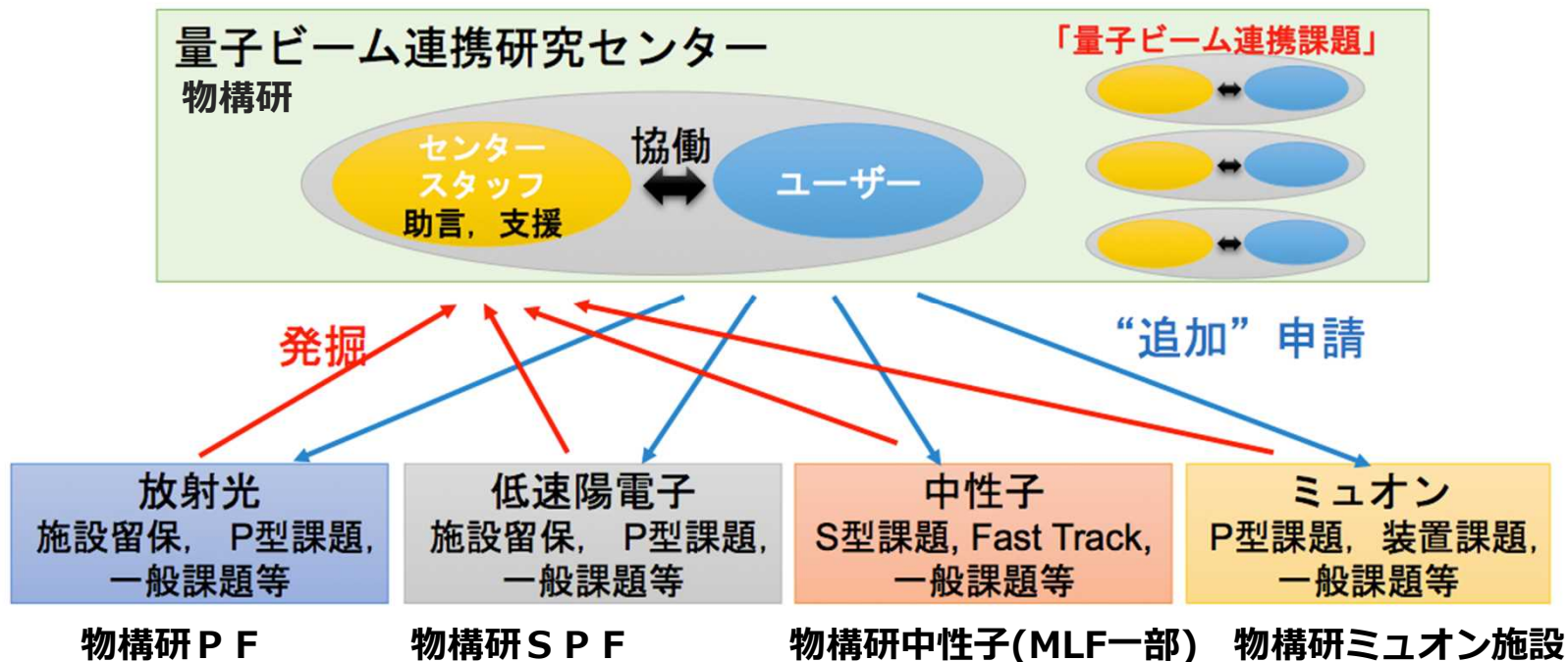
テーマ設定型共同研究

量子ビーム連携によるイノベーション創出

イノベーションに貢献できる量子ビーム連携研究課題：産学官連携・国際連携による課題解決

マルチプローブ若手人材育成

量子ビーム横断利用に対応できる新たな専門
スタッフ育成：発掘型を推進するために不可欠





量子ビーム連携：発掘型共同利用の半年間の試行

放射光と中性子で**共通の手法(回折・反射率)**や**相補的な手法**について、現ユーザーに声をかけて、他方のプローブを試行的に使ってもらう：トライアル等の迅速な受入れ枠が不可欠（物構研内で解決）

- X2N (X線から中性子へ)
- N2X (中性子からX線へ)

11月時点で

打ち合わせ件数：12件 (X2N 2件, N2X 10件, その他1件)

実験実施件数(予定を含む)：7件 (全てN2X)

引き続き増加中・・・

	PFビームライン	MLFビームライン	状況
X2N	BL-8B(X線回折)		回答済
N2X	BL-8B(X線回折)	BL21(中性子回折)	PF実験実施
N2X	BL-8B(X線回折)	BL21(中性子回折)	PF実験実施
N2X	BL-8B(X線回折)	BL21(中性子回折)	PF実験実施
N2X		BL21(中性子回折)	回答済
N2X		BL21(中性子回折)	回答済
N2X, X2N	BL-16A(XMCD)	BL17(偏極反射率)	PF実験実施
N2X	BL-8B(X線回折)		PF実験実施
N2X	BL-8A(X線回折)		PF実験実施
N2X	BL-6A(小角散乱)	BL16(反射率)	PF実験実施
N2X	BL-7C(反射率)	BL16(反射率)	打ち合わせ中
(X2M)	BL-13(光電子分光)	ミュオン	打ち合わせ中

量子ビーム連携統合リモート分析システムの構築

試料の温度・磁場を遠隔で制御できる共通の**試料環境リモート制御システム**を構築するとともに、複数のプローブで測定した膨大なデータを、AI・機械学習を活用した**量子ビーム連携ビッグデータ解析システム**によって統合的に解析。さらに、試料の状態を保持して大学等から各施設へ試料を搬送・装填できる**試料搬送ユニット**を整備し、試料準備から測定・解析までを一貫して行う「**マルチプローブ統合リモート分析**」を整備中。

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

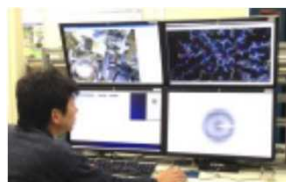
5～10倍向上



**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



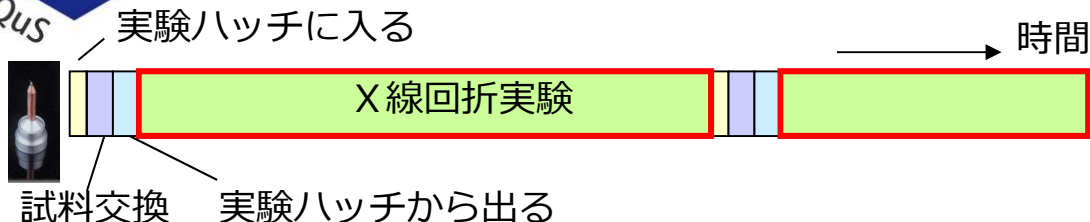
ミュオン



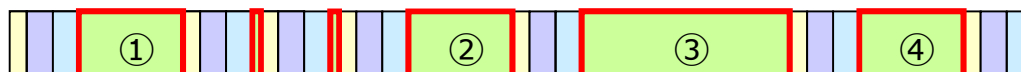
陽電子



量子ビーム連携測定 of 自動化・リモート化・共通化



放射光施設が高度化すると・・・（高輝度ビームライン）



ビームタイムの中でデータ収集以外にかかる時間の割合が増える



ビームタイムの有効活用 to 成功

試料交換システムの導入（実験ハッチの入退出にかかる時間をなくす）



セットアップ

一連の操作を完全自動化

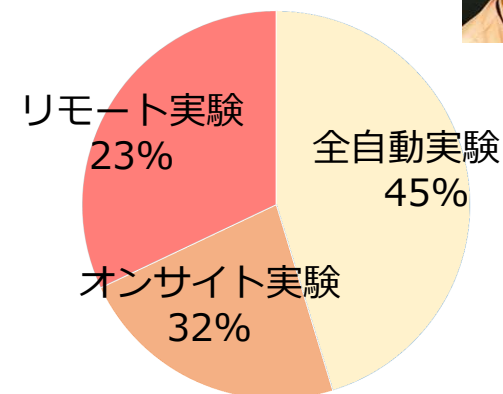
- ・ 試料セット(交換)
- ・ 位置合わせ
- ・ X線回折測定
- ・ データ処理



KEK物質構造科学研究所
構造生物学研究センター(SBRC)

×

KEK共通基盤研究施設(ARL)
機械工学センター



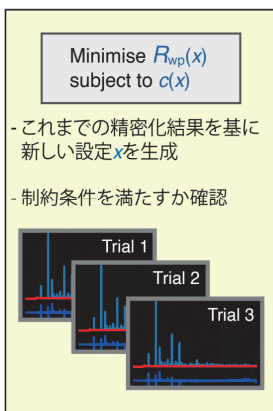
X線回折の例を参考に、各プローブのそれぞれの測定手法(回折・散乱・吸収・放出)に対して、難易度に応じて遠隔・自動測定システムを導入中
⇒ マルチプローブ利用の促進, 測定の効率化

量子ビーム連携ビッグデータ解析：AI/機械学習の活用

Y. Ozaki, K. Ono et al., *npj Comp. Mat.* **6**, 75 (2020)



ブラックボックス最適化



物理モデル設定

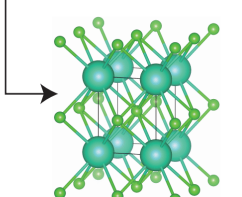
background function : Chebyshev
degree of background function : 9
background refinement : True
peak shape refinement : True
etc.

初期パラメータ

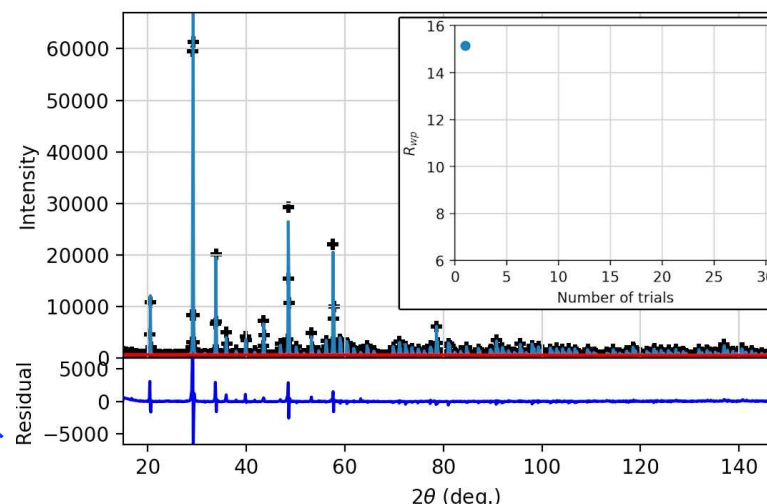
initial crystal structure
instrument parameters
etc.

リートベルト精密化

設定に基づき、リートベルト精密化を実行



Trial 0, bestRwp=15.142%

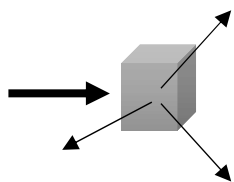


結晶構造解析の完全自動化に成功：数時間～数日 → 数分

熟練研究者を超えるAI/機械学習を活用して、測定を自動化・迅速化するとともに、放射光、中性子、ミュオン、低速陽電子を統合した量子ビーム連携ビッグデータ解析システムを構築し、初心者でもハードルなく利用できるマルチスケール、マルチモーダル構造分析を実施。現在、拡大中

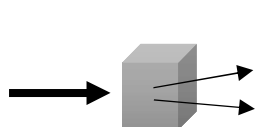
量子ビームが引き起こす基礎過程(ビームに共通)

①回折



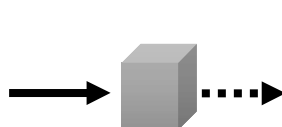
特定方向に鋭いスポットが出現

②散乱



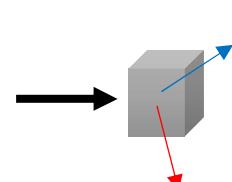
入射ビームの進行方向の周辺に出現

③吸収



ビームが吸収されて弱くなる

④放出



入射ビームと違うものが放出される

※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



CIQuSから見えてきた量子ビーム連携の展望

① 標準化・高度利用 【同種ビーム】 【異種ビーム】

- ⇒ 新たな課題としてDX化、AI導入が出てきているが、現時点では施設間で温度差がある
共用促進か教育重視か、無人化か安全・セキュリティ重視か等
- ⇒ 主要施設連携で技術開発、人材育成を主導し、その他の施設へ技術移転、人材輩出する機能が必要
- ⇒ ⇒ 先行しているDX, AIの取り組みを他に展開：放射光施設間、物構研異種ビーム間、・・・
- ⇒ ⇒ 施設間で役割分担：放射光学術基盤ネットワーク、中性子施設ネットワーク(マスタープラン2020)等をつなぐ
- ⇒ ⇒ 現施設スタッフだけでは無理：特定施設が新たなDX, AI人材を育てて他施設に協力する形が現実的

② 施設連携・情報共有 【異種ビーム】

- ⇒ 受け身のone stopサービスでは相補利用の伸びが鈍化。能動的な仕掛けが必要
- ⇒ ⇒ 特定ビームの利用研究から未経験の異種ビームのトライアル等へ導く発掘型共同利用は非常に有効
- ⇒ ⇒ 異種ビームを利用して課題解決するプログラムの設定も有効：異種施設間連携につなげる

③ 人材育成 【異種ビーム】

- 一つの理想＝施設系スタッフは装置に張り付かず、施設を横断してユーザー支援ができる
- ⇒ 光以外の量子ビームとの併用が重要（共用施設の存在）。特に放射光・中性子併用の需要が大
利用者に異種ビーム利用を促すためにも、新たに量子ビーム連携人材の育成が必要
- ⇒ ⇒ コーディネートするだけではなく、試料調整～データ解析までの一連の支援が利用促進には不可欠
- ⇒ ⇒ 異種ビーム実験の専門的経験＋特定施設の特定装置に拘束されないマルチプラム人材が不可欠