

SPring-8 BL02B2 評価報告

委員長 村上洋一（東北大学大学院理学研究科）
神山 崇（高エネルギー加速器研究機構）
高野幹夫（京都大学化学研究所）
藤井博信
（広島大学自然科学研究支援開発センター）
Matthew J. Rosseinsky
(The Univ. of Liverpool)

1. はじめに

本評価委員会は平成 16 年 10 月 28 日、29 日の 2 日間、SPring-8 で開催された。本委員会には予め、Beamline Report BL02B2 (Powder Diffraction) と SPring-8 Overview の資料が送付され、全委員から事前に個別意見書が提出された。委員会当日には、4 名の国内委員が出席した。施設側からの評価についての概要説明、SPring-8 の全体説明の後、ビームラインの視察を行った。引き続き、ビームライン担当者から装置の概要・研究成果・将来計画の詳細な説明を受け、質疑・応答、意見交換を行った。以下の評価報告書は、国内委員による審議と Rosseinsky 氏からの意見書に基づき取りまとめたものである。

2. ビームライン及び実験装置の技術的状況

* 評価

ビームライン・装置は、高精度データ採取のために細心の注意を払って開発・整備されており、適切に維持・管理できていると判断できる。

- (1) 光学系:ミラーとモノクロメーターは、設計どおりの性能を発揮している。
- (2) デバイ・シェラーカメラ:本カメラは余分な機能をそぎ落とした設計となっており、その達成度は十分に評価できる。イメージングプレート (IP) の様々な補正も適切に行われ、その角度分解能やピークプロファイルは満足いく状態にある。
- (3) 試料まわりの状況:試料準備に関する手法の開発は評価できる。試料温度のコントロールも 3 つの温度領域 ($15\text{K} < T < 300\text{K}$, $90\text{K} < T < 400\text{K}$, $300\text{K} < T < 1000\text{K}$) によって装置を使い分けができています。特に、最低温領域のクライオスタットは試料まわりの工夫は評価できる。試料へのガス導入やレーザー光の導入のシステムは非常にスマートであり、新しい試料環境達成への積極的な取り組みは評価できる。
- (4) 測定及び解析ソフトウェア:全般的にはユーザーフレンドリーなソフトウェアの開発ができています。

* 提言

- (1) より効率のよい測定のためには、ミラーにより水平方向の集光を行い入射 X 線輝度の増強を図ることが望ましい。

3．研究活動

* 評価

質・量ともに十分な成果が挙げられており、非常に高い評価ができる。

- (1) レポート中の Scientific Activity の中に挙げられている研究は、すべて質の高い研究であるが、その中でも下記の研究は特にインパクトのある成果である。(a) 熱電材料 Zn_4Sb_3 の高機能性を MEM 電子密度解析により解明 (b) ナノポーラス金属有機錯体 (CPL - 1) 中での酸素分子 (最近では技術的に検出困難とされていた水素分子) の吸蔵状態の決定 (c) 光励起による低スピン状態から高スピン状態への構造転移の観測 (d) 単層カーボンナノチューブ中への有機分子の内包の直接観測 (e) MgH_2 における水素の化学結合状態の解明 (f) $Sc_2@C_{66}$ における孤立五員環則の破れの発見。
- (2) MEM / リートベルト法の有効性を実証し、広い分野から成果を挙げていることは注目に値する。
- (3) 本ビームラインで行われた研究は、それぞれの分野で最先端であり極めて質の高いものである。これはビームラインスタッフやパワーユーザーが、広い分野から情報を収集、良質の研究を選択し、成果に結びつけるという努力によるものである。

* 提言

- (1) このアクティビティを今後も維持することが重要である。
- (2) 基礎科学分野への貢献は極めて高く、十分な評価が得られている。一方、成果の中には工学的応用に結びつくものが多く見受けられるので、産業界へのアピールも今後は必要になってくるだろう。

4．共同利用支援体制

* 評価

ユーザーにとって十分に満足できる共同利用支援体制となっている。

- (1) 採択率は 60% から 80% の間で適切であるが、一課題に対する平均の配分シフト数が低下してきていることを危惧する。
- (2) 多くの新規ユーザーが参入し続けていることは評価できる。
- (3) 配分されたビームタイムの各分野別のバランスも適切である。
- (4) 名古屋大グループを中心としたパワーユーザーの強力なサポート体制が確立している。

* 提言

- (1) 今後、現状のアクティビティを維持しながら将来計画を立案・実行していくとき、現在のマンパワーでは対応できない。ビームラインスタッフ又はポスドクの人数を現状よりも増加させること勧める。
- (2) 新規ユーザーの増加に伴うビームタイム不足を解消し、より多くの成果を生み出すためには、粉末回折専用のビームラインを増やす必要がある。そのとき二つのビームラインは、時分割実験や特殊環境下での実験 (技術的に新しい開発を要する先端的な研究) を行うものと、測定の迅速化と簡便化を目指したハイスループットのものに役割を分けることが望ましい。
- (3) データ解析に関するより一層の支援が望まれる。例えば、Web 上での MEM

解析の仮想的なトレーニングスクールの開設は、ユーザーにとって多くのメリットがあるだろう。

(4) アジア地区諸外国のユーザー開拓が望まれる。

5. 将来の装置開発と研究の方向性

* 評価

実験装置・手法を中心とした将来の方向性は適切なものである。

- (1) 現在のビームライン・装置は大変満足のいく状況にあるので、これを維持していくことは最低限必要である。
- (2) レポートに書かれた、時間分解測定・測定温度領域の拡大・低温での光・ガス反応・表面回折・簡便迅速測定を目指す方向性は、現在のニーズと合致しており適切な方向性である。

* 提言

- (1) デバイ・シェラーカメラの機能を単純化することにより成功してきたが、今後のハイスループット化のためには、IP の読み取りの自動化や複数試料の自動切換えという装置改良も必要である。
- (2) レポートの「今後5年間の戦略」においては、実験装置や手法の開発を中心に書かれているが、まず目指すべきサイエンスの方向性を明確にして、そのために必要な装置・手法の開発を優先順位をつけて順次考えていくのが良いだろう。
- (3) 目指すべき測定温度領域として、高温はもう少し高めに(1600 K 程度)設定すると、セラミックス関連のユーザーが増える可能性がある。
- (4) すでに提言を行ったように粉末回折のビームラインが増えることが望ましいが、それが実現するまでの間、SPring-8 全体として既存の他ビームラインの有効利用を考えていくべきである。

6. まとめ

本ビームラインは SPring-8 の中で最も成功したビームラインである。すべての点において、本ビームラインの成果は突出しており、非常に高く評価することが出来る。今後、これまでの研究活動と同程度のレベルを維持することが重要である。さらに発展するためには、綿密な将来計画に基づいた、マンパワーとビームラインに関する施設側の積極的なサポートが必要である。