

イオン液体インフォマティクスの発展にむけて

報告：光分子科学研究領域 解良 聡

表題の研究会を9月13日―14日に、岡崎コンファレンスセンターとオンラインのハイブリッドにて開催しました(参加者内訳：現地18名、オンライン19名の計37名)。研究会のタイトルは発起人である東京大学の北田敦先生にご提案いただきました。イオン液体は日本で大きく発展した研究分野で、世界を代表する多くの著名な研究者がおり、またその薫陶を受けた次世代の若手研究者たちが頭角を現しつつあります。「イオン液体」の登場から約30年が経過し、十分な構造物性データが蓄積されてきていますが、そのデータを活用してエネルギー、医療、環境といった地球規模の課題解決をもくろんだ未知機能の探索といった、マテリアルズインフォマティクスの視座に立つイオン液体研究は世界的にも黎明期にあると言えます。

マテリアルズインフォマティクスは、実験科学、理論科学、計算科学、データ科学にまたがる最前線の融合学理であり、またそうであるがゆえに個々の研究者の研究活動で多くの壁を打破することは困難と言えます。特に、一般論として若手研究者は研究ネットワー

ク形成が不十分であり、人的交流による分野の相互理解が欠かせません。そこで各分野の気鋭の研究者がイオン液体やポリマー、無機材料、液晶、濃厚電解液等の多種多様な材料の表現手法について、現状と展望について解説を行いました。各研究者のノウハウとよべる要素技術について現状の知見を持ち寄り、長所短所の相補によってイオン液体の機能物性予測とその実証に関する有効的なアプローチを議論しました。

初日は機械学習を中心に3件の講演がありました。東京工業大学の畠山敏先生は、構造-物性データベースをもとにした、分子構造から物性を予測するプログラムの構築や、生成系AIであるGPT-4を活用した研究を紹介されました(タイムリーに11月10日の日経新聞の記事でご覧になった方もいらっしゃるかもしれません)。また、京都大学の世古敦人先生は、機械学習がむしろ馴染み深いものである無機材料において、量子力学に基づく第一原理計算の多重実行にかかるコスト削減のための機械学習やアルゴリズム論的手法の導入事例を紹介されました。統計数

理研究所の吉田亮先生は、統計的機械学習による準結晶発見の実例とともに、限られたデータの壁を乗り越えるための統計的機械学習の方法論である転移学習や、ポリマー研究における構造物性データ収集のためのコミュニティの取り組みについてご紹介いただきました。二日目は理論計算に関する2件の講演で、北里大の石井良樹先生は、凝縮系の相互作用を考慮した分子モデリングの手法として密度汎関数理論(DFT)計算と分子動力学(MD)計算を自己無撞着に繰り返すことで多体効果を取り込んだ有効的な原子電荷分布を決定する手法とイオン液晶への展開事例を紹介されました。岡山大学の篠田渉先生は、リチウムイオン電池用材料として注目されている濃厚電解液中のLiイオン伝導機構に関して、配位子交換挙動や分極モデル開発などを紹介されました。

対象材料をイオン液体に限定しなかったことにより、異分野での成果や抽出課題をイオン液体研究者が「学習」したと言えます。今後イノベーションの源流を見出す端緒となることを期待したいと思います。



UVSOR-SPring8 赤外ビームライン合同ユーザーズミーティング

報告：極端紫外光研究施設 田中 清尚

2023年9月29日、表題のUVSORとSPring-8の赤外分光分野ではじめての合同研究会を開催いたしました。この二つの放射光施設は、国内のほとんどの放射光赤外ユーザーをカバーしていることから、放射光赤外ユーザーの声を集約した貴重な研究会となりました。研究会は現地（分子研研究棟201号室）とオンラインのハイブリッドで開催され、15件の講演があり、参加者は合計60名を超えました。本研究会では物理、化学分野に加えて、薬学、医学、法科学、地球生命や産業（民間企業）といった幅広い分野の講演者にご参集いただき、それぞれの分野の最前線の研究について紹介していただきました。ユーザー同士の交流を推進すると共に、最先端の研究状況や装置開発について情報を交換するよい機会となりました。また参加者内訳では、10社を超える民間企業からの参加があり、民間利用の観点でも放射光赤外分光への期待を感じました。

講演では、赤外磁気光学スペクトルの解析法の開発や、圧力などの外場環境下での測定など、物理、化学分野の先端分光研究の紹介があった一方、それ以外の分野、特に薬学、医学などの分野で

は空間分布測定や微量不純物の測定など、顕微機能を利用した研究が多く見られました。現在、UVSORとSPring-8では数マイクロメートル

の空間分解能を利用した実験が行われていますが、より高空間分解能での測定や高効率（短時間）での測定を望む声が、特に民間利用のユーザーから寄せられました。本研究会ではneaspex/attocube社の製品紹介の講演と現地での企業展示があり、ナノスケールのプローブ顕微鏡装置の紹介をしていただきました。次期放射光施設を検討するUVSORとしても、ナノ顕微機能の整備が今後の放射光赤外分光の目指すべき方向性の一つと感じました。

またSPring-8では高輝度化を目指してSPring-8 IIへのアップグレードを計画しており、SPring-8 IIでは電子ビームパイプが細くなることで赤外光を取り出す大きな開口部が確保できなくなることが予想され、赤外ビームライン



が消滅する可能性が高い状況となっています。講演会の後には、UVSORの見学会を実施し、これまでUVSORを利用していなかったSPring-8のユーザーにビームラインを紹介するとともに、SPring-8からの装置の移設やユーザーのスムーズなUVSORへの誘導を含めて、今後のSPring-8とUVSORの協力体制についてもSPring-8の担当者と議論を開始いたしました。これからUVSORの赤外ビームラインは大きく変化すると思われます。これまでできなかった新しい測定にも挑戦しますので、ご意見やご要望をお伝えいただければと思います。引き続き皆様の変わらぬご協力をお願いいたします。最後に、研究会開催にあたって、サポートして頂いた方々に深く感謝致します。

分子研研究会「溶液の化学現象の軟X線分光測定の前線」

報告：光分子科学研究領域 長坂 将成

近年の放射光の高輝度化と、液体ジェットや軟X線透過膜などの技術革新により、軟X線分光法による触媒反応、電気化学反応、光化学反応、生化学反応などの溶液中の化学現象のオペ

ランド計測が世界中で盛んに行われるようになってきました。軟X線分光法は、軽元素（C, N, O, Fなど）や遷移金属（Ti, Mn, Fe, Coなど）の元素選択的な電子状態解析が行えますが、軟

X線が大気や水に強く吸収されるため、液体試料への適用が困難でした。分子研UVSOR-IIIの軟X線ビームラインBL3Uでは、透過法による液体の軟X線分光法を開発することで、これまで

多くの共同研究者の方々と共に、軟X線分光法の化学利用を推進してきました。一方、国内における軟X線領域の第三世代放射光施設は、現在建設中のNanoTerasuしかなく、外国と比較して、高輝度でコヒーレンス性も増す軟X線を用いた新たな研究の展開は遅れていました。

そこで、分子研UVSOR-IIIとスウェーデンの第三世代放射光施設「MAX IV」による国際ワークショップを分子研研究会として、岡崎コンファレンスセンターで10月2日～4日の3日間の日程で開催しました。研究会のポスター(図1)にありますように、主題は「軟X線分光法による溶液の化学現象の解明」でして、長坂と徳島高博士(MAX IV)との国際共同研究に関する議論から発案されました。溶液の軟X線分光法に関する日本とスウェーデンの国際共同研究を推進するための意見交換を主な目的としました。

MAX IVからは、3名の研究者が現地参加して、4件の招待講演(2件はオンライン講演)を行いました。液体ジェットの軟X線分光測定と共に、軟X線小角散乱、共鳴非弾性X線散乱、大気圧近傍光電子分光法などの第三世代放射光施設

の特長を活かした研究成果を発表して頂きました。国内からは、溶液の軟X線分光法を中心にして、様々な実験と理論を用いた研究成果の報告を頂きました。また、NanoTerasuで計画中の共鳴非弾性X線散乱測定、高エネルギー加速器研究機構Photon Factoryでの時間分解測定、X線自由電子レーザーSACLAを用いた軟X線分光測定、UVSOR-IIIの軟X線ビームラインBL4Uにおける走査型X線透過顕微鏡、Shenzhen(中国)で計画中の放射光施設などの施設報告をして頂きました。研究会では、25件の招待講演と共に、16件のポスター発表がありました。ポスター発表からはホットピックとして、口頭発表に4件を選出しまして、円偏光を利用したキラル分子の測定など、軟X線分光法の新たな利用の可能性を示して頂きました。集合写真(図2)にありますように、参加者は60名程度となり、とても盛況な研究会になったと思います。また、エクスカーションとして、MAX IVの研究者の方々と、大樹寺と岡崎城を観光しました。大樹寺の三門から岡崎城が展望できる「ピスタライン」を観て頂き、岡崎の歴史的な魅力についても伝えられたと思います。

本研究会は、UVSOR施設長の解良

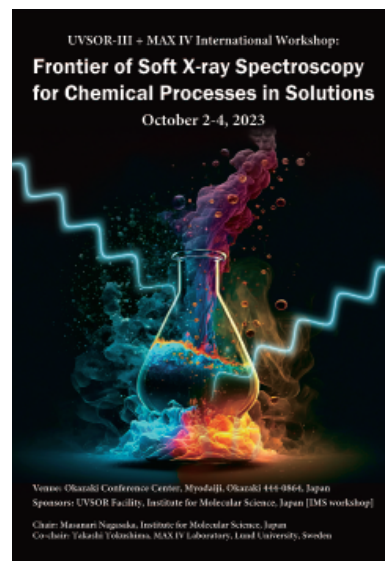


図1 研究会のポスター。広報室に作成して頂きました。

聡先生に所内対応者になって頂くと共に、片柳英樹博士を中心に多くの分子研スタッフの方々にご協力して頂きました。皆様のご協力に感謝申し上げます。研究会ではスウェーデン大使館の方から、日本とスウェーデンの間の国際共同研究に関するファンドについてのご説明も頂きました。本研究会をきっかけとして、軟X線分光法に関する多くの国際共同研究が推進されることを期待しています。



図2 2日目の午後に撮影した集合写真。