

## 大学院生提案型課題（長期型）の事後評価について

登録施設利用促進機関

公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用推進部

大学院生提案型課題（長期型）は、放射光科学を支え、更に発展させる人材の育成に資することを目的として、2022A期から運用しています。厳正な審査を経て採択された大学院生は、博士後期課程の期間と連動するかたちで複数年の安定かつ計画的なビームタイムを確保することができます。

大学院生提案型課題（長期型）は、実施期間終了後に利用研究課題の実施結果に対して大学院生利用審査委員会による事後評価を行うこととされており、事後評価に合わせて、大学院生をエンカレッジすることを目的として、優れた成果/取り組みと行ったと認められた大学院生に対して「SPring-8大学院生課題優秀研究賞」を授与することとしています。

今回は、第12回大学院生利用審査委員会（2025年2月28日開催）において、2024B期に実施期間が終了した2022A期に採択された大学院生提案型課題（長期型）のうち2課題と、2023B期に採択された大学院生提案型課題（長期型）のうち1課題について、事後評価が行われました。

事後評価は、実験責任者である大学院生が研究課題の実施結果の発表を行った後、質疑応答を行う形で実施されました。事後評価の着眼点は、「独創的、挑戦的、意欲的な研究成果であること」、「実験責任者として、研究立案、遂行を主体的に行ったこと」、「優れた成果/取り組みと認められること」とされています。質疑応答においては、育成の観点も含めた様々な視点で質問がなされるなど、大学院生利用審査委員会が大学院生に求める水準が非常に高いと感じられる場面もありましたが、総じて独創的で挑戦的な課題を遂行し、優れた博士論文が創出されたと評価されました。また、この評価結果を受け、各課題の実験責任者である原武史氏、森悠一郎氏、夏井文凜氏の3名には、公益財団法人高輝度光科学研究センターより「SPring-8大学院生課題優秀研究賞」

が授与されました。

以下に各課題の評価結果を示します。研究内容については本誌の「最近の研究から」に実験責任者による紹介記事を掲載しています。

課題名	強相関分子性導体の物性解明を目指した価電子密度解析手法の確立
実験責任者（所属）	原武史（名古屋大学）
採択時課題番号	2022A0304
ビームライン	BL02B1
利用時間/配分総シフト	2022A～2024B/72シフト

### [評価結果]

コア差フーリエ合成法は、実験的に価電子密度分布を可視化する手法として注目されている。本研究課題では、強相関分子性導体の物性を価電子密度分布の解析によって明らかにすることを目指し、この手法を発展させる試みとして放射光結晶回折実験の高精度測定ならびに量子化学計算を導入した電子密度分布解析の高度化が実施された。

申請時の評価では、コア差フーリエ合成法は概ね完成しており、技術的な挑戦でなく単なる適用に終わるのでは、という審査員の懸念があった。しかし、課題実施初期に適用試料の測定データ取得において技術的な困難に直面した。具体的には、原子の熱振動による分解能低下やピクセルアレイ検出器による回折強度測定精度の問題である。これらの問題を、低温測定環境整備による振動の抑制や、数え落としの問題を回避するための測定法およびデータ解析法の導入によって克服した。その結果、軽元素のみからなる有機低分子である glycine および cytidine の結晶構造において、価電子密度の可視化に成功した。

特筆すべき点として、この解析でノードの検出が

可能となるほどの精密な密度分布を明らかにしたことが挙げられる。この結果は、量子化学計算と直接比較が可能となるレベルの実験結果が取得できたことといえ、高く評価できる。一方、手法の高度化に時間を要したため、当初の計画の到達点は変更せざるを得ず、課題名にある強相関分子性導体等の機能性分子材料結晶に関する解析の詳細は述べられていない。しかし、機能性分子材料結晶の解析にも着手しており、将来の展開が期待できる。

以上の点から、本課題の実験責任者である原氏には研究者としての資質が強く感じられ、放射光科学、物性科学における今後のさらなる活躍が期待される。また、定期的にSPring-8の利用機会を確保できる長期課題の利点を有効に活用した成果と言える。

[成果リスト]

(査読付き論文)

- [1] SPring-8 publication ID = 48734  
原武史: “Research on Molecular Crystals by Precise Valence Electron Density Analysis Using Synchrotron X-ray Diffraction”  
名古屋大学博士論文
- [2] SPring-8 publication ID = 47317  
T. Hara *et al.*: “Pseudo-one-dimensional Ribbon Chain Cluster Realized under High Pressure in 1 [itlc] T [/itlc] – VSe[sbcs]2[/sbcs]” *Physical Review B* **110 No2.** (2024) L020103
- [3] SPring-8 publication ID = 47995  
T. Hara *et al.*: “Diffuse Scattering and Low-Temperature Crystal Structure of  $\tau$ -Type Molecular Conductor” *Journal of the Physical Society of Japan* **94 No2.** (2025) 024602
- [4] SPring-8 publication ID = 48411  
T. Hara *et al.*: “Unveiling the Nature of Chemical Bonds in Real Space” *Journal of the American Chemical Society* **146 No34.** (2024) 23825-23830
- [5] SPring-8 publication ID = 45510  
N. Katayama and T. Hara *et al.*: “Observation of Local Atomic Displacements Intrinsic to the Double Zigzag Chain Structure of 1 [itlc] T [/itlc] – [itlc] M [/itlc] Te[ sbcs] 2 [/sbcs] ([itlc] M [/itlc]

= V, Nb, Ta)” *Physical Review B* **107 No24.** (2023) 245113

課題名	地球核の組成解明を目指したFe-H-Si三成分系の相図の推定並びに水素誘起体積膨張係数の決定
実験責任者 (所属)	森悠一郎 (東京大学)
採択時課題番号	2022A0314
ビームライン	BL04B1
利用時間/配分総シフト	2022A~2024B/54シフト

[評価結果]

当初の目的は、地球に多量に存在する元素である水素、ケイ素が地球核の主成分である鉄に入った際の密度変化を調べる事で、地球形成過程などに繋がる情報を得ようとする課題であった。実施段階で試料側の相共存による困難のため三元の相関係を探る方向は早期にあきらめ、もう一つの主題であった水素による体積膨張係数の決定に集中して課題を実施した。水素の固溶による鉄の格子定数の増大は、少量のケイ素を固溶させた際に顕著になり、地球核中の水素濃度に関する従来の見積りに対して見直しを迫るような知見を与えたことは評価に値する。

地球惑星科学の観点では重要な成果を挙げたと評価できるが、鉄の水素誘起体積膨張に関する温度・圧力・磁歪・組成効果の研究においては、物性物理学的な観点からの議論が求められる。体積変化の背景にある物理的な起源についての検討が、水素化・磁歪両方において不十分であった点はやや残念であった。

今後、更に物理的な検討を進め、一層の成果を期待したい。

[成果リスト]

(査読付き論文)

- [1] SPring-8 publication ID = 48739  
森悠一郎: “Effects of Hydrogen on Elastic Properties of the Deep Earth’s Materials”  
東京大学博士論文
- [2] SPring-8 publication ID = 46868

Y. Mori *et al.*: “Hydrogenation of Silicon-bearing Hexagonal Close-packed Iron and its Implications for Density Deficits in the Inner Core” *Earth and Planetary Science Letters* **634** (2024) 118673

[3] SPring-8 publication ID = 48067

Y. Mori *et al.*: “Unusual Thermal Expansion and Curie Temperature Variation in dhcp-iron Hydride under High Pressure” *arXiv* (2025) 2501.08937

課題名	大規模S波低速度領域の結晶方位選択配向発達の理解へ向けたLLSVP構成候補鉱物の下部マントル圧力条件下での高温高压大歪変形実験
実験責任者（所属）	夏井文凜（東京科学大学）
採択時課題番号	2023B0312
ビームライン	BL10XU/BL47XU
利用時間/配分総シフト	2023B~2024B/36シフト

[評価結果]

本課題は、地球下部マントルの大規模S波低速度領域（LLSVP）の構成候補鉱物について、高压下での変形による結晶方位選択配向の発達と地震波異方性との関連、ならびに鉄のスピン転移が変形特性へ与える影響の解明を目的として実施された。SPring-8においては、回転式ダイヤモンドアンビルセル（rDAC）を用いてフェロペリクレース [(Mg, Fe)O] およびブリッジマナイト [(Mg, Fe, Al)SiO<sub>3</sub>] のX線回折測定が行われた。rDACにより地球の最下部マントルの高温高压環境を再現するとともに試料に剪断応力を印加し、変形中の鉱物のその場観察に成功している。課題申請の段階では技術的課題となっていた高温での測定も実現しており、課題を解決しながら計画された実験を着実に行った点が特に高く評価された。実験結果は、下部マントルで支配的な結晶面すべり系について貴重な知見を与えるもので、地球科学研究において重要な成果である。

一連の実験で貴重なデータが得られているので、解析と結果の解釈についても、さらなる検討と発展を期待したい。複雑な応力環境の影響も考慮して結果を整理することで、得られた実験結果とLLSVP

との関連について考察がさらに進むと思われる。また、そういった考察の結果、より適切な実験条件の探索や装置の改善点など、今後の研究を進展させるための課題が明確になるとと思われる。

上記のように今後に向けた課題は残っているものの、申請者はrDACを用いた独創的で挑戦的な研究を主体的に行い、地球科学的に重要なデータを得ることに成功した。したがって、研究目的は達成され、十分な研究成果があったと評価された。

[成果リスト]

(査読付き論文)

[1] SPring-8 publication ID = 48746

夏井文凜: “Large-strain deformation experiments on the Earth’s lower mantle minerals in situ at high pressure–temperature conditions: Towards understanding the origin of seismic anisotropy in Large Low Shear Velocity Provinces”  
東京科学大学博士論文

[2] SPring-8 publication ID = 48688

B. Natsui *et al.*: “Crystallographic Preferred Orientation of (Mg,Fe) O up to 125 GPa Inferred from Torsional Deformation Experiments using a Rotational Diamond Anvil Cell” *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **366** (2025) 107392



写真1 右から、JASRI 両宮慶幸 理事長、原武史 氏、JASRI 中村唯我 研究員 (BL02B1 担当)、久保田康成 利用推進部長、JASRI 井上哲也 常務理事。なお、都合により、森 氏、夏井 氏については直接授与することが叶わず、賞状とクリスタルを送付しています。