



文部科学省 マテリアル先端リサーチインフラ 令和6年度技術スタッフ表彰 若手技術奨励賞 Pythonプログラムを用いた実験および業務支援ツール

受賞者 量子科学技術研究開発機構 放射光科学研究センター 浅井 祐希氏に聞く

文部科学省が2021年度より開始したマテリアル先端リサーチインフラ（ARIM：Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan）[1]は、これまでのナノテクノロジープラットフォーム事業（2012～2021年度）で実施してきた最先端装置の共用、高度専門技術者による技術支援を発展的に継承した事業である。材料開発のための高度な先端装置の共用や技術支援の提供に加え、装置利用に伴い創出されるマテリアルデータを利活用しやすくした上で提供する、データの収集・利活用という新たな視点が加わった。新たにリモート・自動化・ハイスループット対応型の先端設備の導入も進められている。

ARIMは、7つの重要技術領域として、1. 高度なデバイス機能の発現を可能とするマテリアル、2. 革新的なエネルギー変換を可能とするマテリアル、3. 量子・電子制御により革新的な機能を発現するマテリアル、4. マテリアルの高度循環のための技術、5. 次世代バイオマテリアル、6. 次世代ナノスケールマテリアル、7. マルチマテリアル化技術・次世代高分子マテリアルを挙げている。

これら7領域に対し、それぞれに強みを持つ先端装置群を提供するハブ機関と、特徴的な装置・技術を持つスポーク機関からなるハブ&スポーク体制で、利用者の研究開発を支援する。共用する装置は3つの横断技術領域（1. 計測・分析、2. 加工・デバイスプロセス、3. 物質・材料合成プロセス）で整理されている[1]。2025年度には、ARIM半導体基盤プラットフォームを[2]立ち上げ、半導体分野の研究開発・人材育成の底上げと裾野拡大を目指している。またARIMには、本事業全体の運営事務局等を担うセンターハブが設けられている。

最先端共用設備の有効活用には、高度な専門技術を有する技術スタッフの支援が不可欠であり、技術スタッフの貢献に報い、その育成を図ろうと、ナノテクノロジープラットフォーム事業では2014年度より技術スタッフ表彰を始めた。この技術スタッフ表彰はARIMにも引き継がれ、2025年1月29日に東京ビッグサイトで開催された第24回国際ナノテクノロジー総合展・技術会議(nano tech 2025)で、5件の技術スタッフ表彰が行われた[3]。同表彰式で『Pythonプログラムを用いた実験および業務支援ツール』と題する量子科学技術研究開発機構（以下、QST）[4]放射光科学研究センターの浅井 祐希（あさい ゆうき）氏に若手技術奨励賞が贈られた。今回Web取材により、どの様な支援が実施されたか、またそのご苦労、成果について浅井氏に伺った。取材には、QST放射光科学研究センター装置・運転管理室の菅原 健人主任技術員、片山 芳則室長、寺岡 有殿様、水素材料科学研究グループの内海 伶那様にも同席いただいた。



表彰式パネル前で浅井氏



1. QSTにおけるARIM事業の概要[5]

1.1 QST-ARIM事業の共用装置

QSTは、2016年に放射線医学総合研究所と日本原子力

研究開発機構（JAEA）の量子ビーム部門及び核融合部門とが再編・統合されて設立された。量子科学技術基盤に立脚した4つの研究分野（量子技術イノベーション、量子医学・医療、量子エネルギー、量子ビーム科学）を中心に、先進的かつ独創的な研究開発を展開している。QSTには、10の研究組織があり、その一つ関西光量子科学研

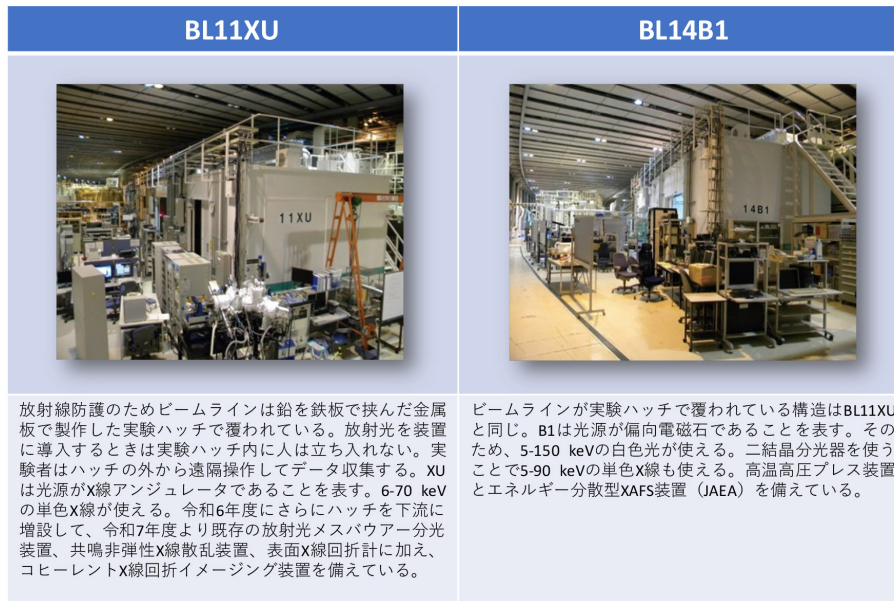


図1 QSTの専用放射光ビームライン

装置名 (装置ID)	装置の写真	装置の特徴
放射光メスbauer分光装置 (QS-111)		<ul style="list-style-type: none"> 放射光から超高輝度14.4 keVのγ線を発生する核共鳴分光装置を用いて、物質・材料の磁気相互作用、電子状態やスピン配列を局所的に調べることができる。 集光γ線を用いて試料の顕微分析や超高压下の研究ができる。 斜入射配置を用いて機能性磁性薄膜の局所磁性探査ができる。 鉄以外の元素については要相談。
共鳴非弾性X線散乱装置 (QS-112)		<ul style="list-style-type: none"> 入射X線、散乱(発光) X線の双方で最高0.1 eV程度のエネルギー分解能の分光実験が可能。 通常のXAFSよりも高エネルギー分解能のXAFS (HERFD-XAFS) やX線発光分光 (XES) により、触媒等の詳細な電子状態のオペランド観察が可能。 共鳴非弾性X線散乱 (RIXS) により、強相関電子系物質等の電子励起の運動量依存性の測定、ガス雰囲気下での測定。 10 Kから800 Kまでの測定。
表面X線回折計 (QS-113)		<ul style="list-style-type: none"> 半導体ヘテロ構造や多層膜、半導体量子ドット結晶やナノワイヤなどの成長過程について、原子が一層ずつ積み上がってゆく様子を、表面X線回折法によってリアルタイム観察できる。 原子状態素を利用する分子線エピタキシー法により、GaNやInNなどの窒化物半導体の成長を行うことができる。 良質な電子材料の作製をサポート。
コヒーレントX線回折イメージング装置 (QS-114)		<ul style="list-style-type: none"> 微小結晶粒 (粒径: 数十nm~数μm) を対象に、形状だけでなく、電子顕微鏡では観察が困難な内部構造 (歪分布や欠陥、空洞、ドメイン等) を非破壊で3次元可視化できる装置。 硬X線領域のブラッグ反射を用いたコヒーレントX線回折イメージング法を利用する。 各種ナノ材料の評価をサポート。 試料温度は室温~1100°Cの範囲で設定可能。 その他の試料環境制御は要相談。
高温高圧プレス装置 (QS-141)		<ul style="list-style-type: none"> 高温高圧下での材料の状態変化や反応の進行を、白色X線を用いたエネルギー分散型X線回折法によって観察できる装置。 圧力10万気圧まで、温度2000°C程度までの発生が可能。 材料の高温高圧合成をサポート。 10万気圧、1000°C程度までの超高压高温の水素雰囲気発生もできて、高温高圧下の金属水素化反応のその場観察による新規水素貯蔵材料の探査に活用。
高速2体分布関数計測装置 (QS-222)		<ul style="list-style-type: none"> 結晶の平均構造からのずれや局所構造を評価できる原子2体分布関数 (PDF) の導出に必要な測定を高速に行う装置。 最高70 keVの高エネルギーX線の利用により、最大$Q = 27 \text{ \AA}^{-1}$までのX線全散乱測定が可能。約100 Åまでの距離相関のPDFが導出可能。 低温測定や1 MPa未満の水素雰囲気でのその場観察が可能。 計測一点につき数分程度。

図2 QST-ARIM 事業の共用登録装置

研究所の放射光科学研究センター（播磨地区）は、大型放射光施設 SPring-8[6] において放射光を用いた先端計測技術を開発し活用する役割を担っている。QSTは発足時、JAEA から SPring-8 に設置していた4本の専用放射光ビームラインのうち2本のビームライン（図1）と6台の計

測装置（図2）を継承した。これらを外部に共用装置として公開している。

研究支援事業として、JAEA 時代より、文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業等を受託し、微細構造解析プラットフォームの実施機関のひとつとして産官

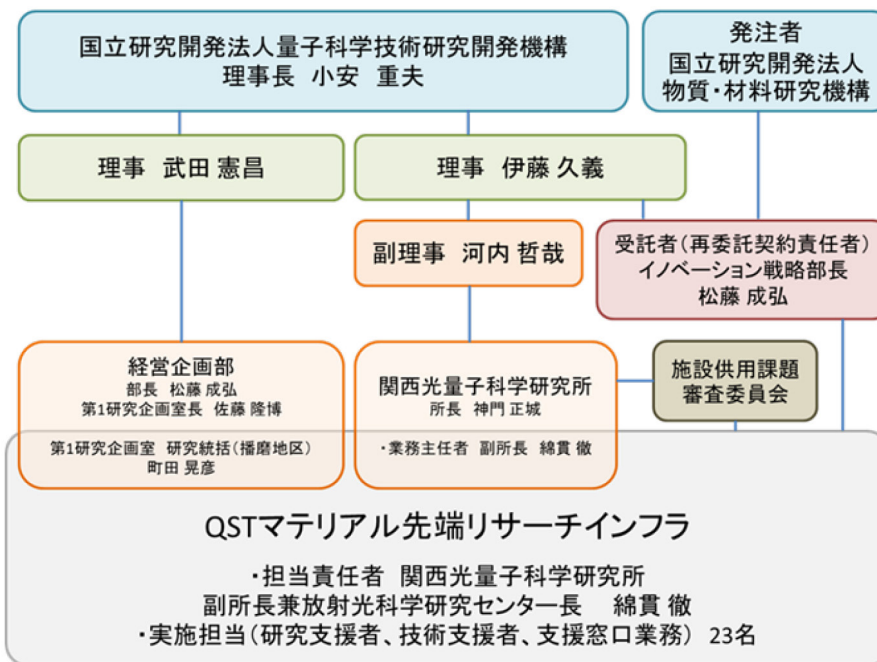


図3 QSTの2025年度ARIM事業実施体制

学支援に取り組んできた。2021年度からQSTはARIM事業を受託し、量子・電子制御により革新的な機能を発現するマテリアル領域のスポーク機関の一つとして研究支援を継続している。ARIM事業では、SPring-8の専用放射光ビームライン(図1)で、高輝度硬X線による非破壊・顕微・オペランド計測を特色としたナノ構造観察から精密磁性・電子状態分析にわたる6台の装置群(図2)を、我が国の研究・開発と産業の競争力強化に活用している。装置の共用に加えて、得られたデータの共用(登録と利活用)にも取り組んでいる。

図3はQST-ARIM事業の実施体制で、ARIM事業を担っているのは主として関西光量子科学研究所の放射光科学研究センター(播磨地区)である。放射光科学研究センターと経営企画部(播磨地区)に所属する研究者、技術者、事務職員のほとんどがARIM事業に参画している。副所長兼放射光科学研究センター長の下、23名の実施担当者が研究、技術、窓口業務を分担している。計測装置は全てQSTの研究者が特別仕様で製作したものであるため、共同研究形態での利用となっている。そのため、各装置を担当する研究者も実験に参加し、解析もサポートしている。

1.2 QST-ARIM事業の利用状況

QST-ARIMの共用装置を利用したい方には、随時無料で利用相談に応じている。利用相談後、ARIM登録装置を利用し、ARIM利用報告書を提出してもらう場合は、ARIM課題として支援を行う。一方、ARIM利用報告書の提出を求めないQSTの自主事業も運用している。利用申し込みは多く、課題審査委員会で審査し、ARIM課題としての採

否と利用時間を決めている。利用料金は、1日(24時間)の利用で6万円程である。支援後、ARIM利用報告書を提出し、次年度にARIM事業のウェブサイトで開催される。得られたデータは、利活用しやすい形に構造化されて蓄積される。

2024年度の利用状況は、外部利用日数211日、外部共用率57%(43%はQSTの自主事業・自主研究)、利用件数47件であった。外部共用のうち民間企業が占める割合は4%と少ないが、民間企業の多くが自主事業での支援を希望したためである。



2. 浅井氏のQST-ARIM事業での担当業務

浅井氏は、2022年6月にQSTに着任した。情報系の技術者であり、自然言語処理やPythonプログラミングは7~8年の経験を積んでいた。QST-ARIM(図3参照)には5名の技術支援者がいて、その内3名が情報系で、浅井氏はその一人である。

ここでPythonとはオープンソース(無料)で公開されているプログラミング言語で、文法がシンプルで分かりやすい点の特徴である。1991年にオランダ人のガイド・ヴァンロッサムによって開発され、今では世界中で最も人気のある言語の一つである[7]。

浅井氏の担当業務は、Pythonを用いた共用設備の実験支援ツール、データカタログ作成を含むデータ登録の作業効率化プログラム、設備共用事務作業の自動化ツール、などの開発である。以下、これらの受賞対象になった支援業務の詳細を伺った。



3. 若手技術奨励賞の支援業務

3.1 実験支援ツール

SPring-8のBL14B1ビームラインに設置された高温高圧プレス装置では、材料の状態変化や反応の進行を、白色X線を用いたエネルギー分散型X線回折測定によって観察できる。例えば、材料の水素化反応は高温高圧下より進行するので、本装置を用いると温度圧力条件を変えながら、水素化物の合成を放射光X線回折測定によりその場観察しながら進行させる実験が可能である。最近の成果としては、東京工業大学（現東京科学大学）グループとの共同研究である「高温高圧下におけるバナジウム酸水素化物のアニオン秩序—無秩序相転移のメカニズム解明」が挙げられる [8]。

図4に、白色X線による水素吸蔵材料の高温高圧下回折実験系の構成と写真を示す。左上の蓄積リング（円周長1,436m）の偏向電磁石から発生する白色X線をBL14B1ビームラインに取り出す。白色X線を高温高圧プレス装置内の試料に入射させ、試料で回折されたX線をGe半導体検出器で検出する。試料は直径1mmのペレットで、左下に示したアンビル（試料に圧力を加えるための基盤部材）中央に設置、印加圧力は0～9 GPa、加熱温度は室温～900℃で設定できる。1分毎に圧力・温度の条件を変えながら、一つの試料について数百～千個の回折パターンデータを取得する。

浅井氏がQSTに着任する以前は、回折パターンの確認や、典型的な回折パターンを並べて比較するグラフの作成には、それぞれ専用のソフトや別個のプログラムを取り扱う必要があった。すなわち、複数のソフトの操作を利用者に習得してもらう、また操作を教えるという負担があった。さらには実験データ登録に必要な手入力項目の省力化が課題であった。そこで、こうした負担を軽減するために、浅井氏はPythonを用いて、一つのソフトで

容易に複数の操作ができる実験支援ツールを開発した。

Pythonを用いた理由は、無料で使用できるライブラリが、

- 実験データを図示する matplotlib
- 数千のデータフレームを管理する pandas
- 複雑な数値計算を行う numpy
- GUI操作を実現する tkinter

など豊富にあり、浅井氏としても以前から習熟していたためである。

図5は、開発したPythonソフトで、温度荷重グラフ上で指定したポイントの回折パターンを表示した例である。図5上が温度荷重グラフで、横軸は時間（12:00～15:00）、青線が荷重で左側縦軸に対応、赤色丸が温度で右側縦軸に対応している。荷重は90 tonから開始して、30分後に減圧を始め、2時間かけて0 tonにしている。温度は室温から30分かけて740℃まで上げた後、600℃に2時間保持してから、室温に急降下させている。温度の赤丸は、1分毎の温度変化をプロットしている。

図5左下の回折パターンは、図5上の温度荷重グラフ上で時刻が12:33のポイントをクリックして表示したもので、実験開始後34分、荷重90 ton、温度742.9℃で得られたデータである。横軸はX線のエネルギー、縦軸はX線強度を示す。温度荷重グラフ上で一つのポイントを選択し、[←][→]によりポイントを移動させる操作により、温度荷重条件を1分毎に変化させた回折パターンを表示できる。

図5右下は、実験開始後1分、13分、26分、31分の4つのデータを拾い上げ、それぞれの回折パターンを比較しようとリストボックスに入れた状態を表示している。比較したい回折パターンのデータは、ドラッグ&ドロップで任意に並び替えできる。

図6は、リストボックスをダブルクリックして、荷重90 ton一定、4つの異なる温度条件下で得られた回折パターンを表示したものである。下から赤線が実験開始1分後（44℃）、緑線が13分後（415℃）、橙線が26分後

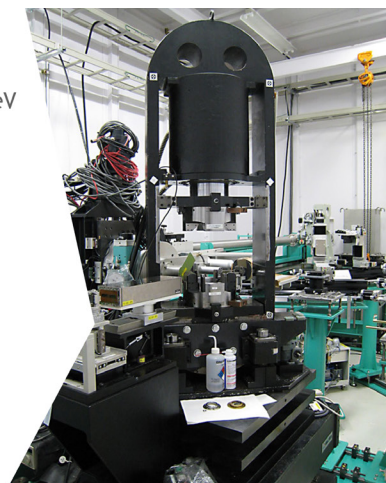
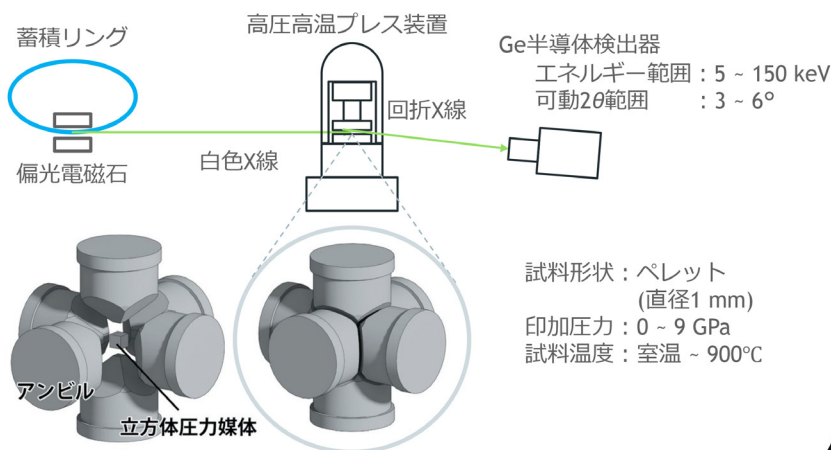


図4 白色X線による水素吸蔵材料の高温高圧下回折実験

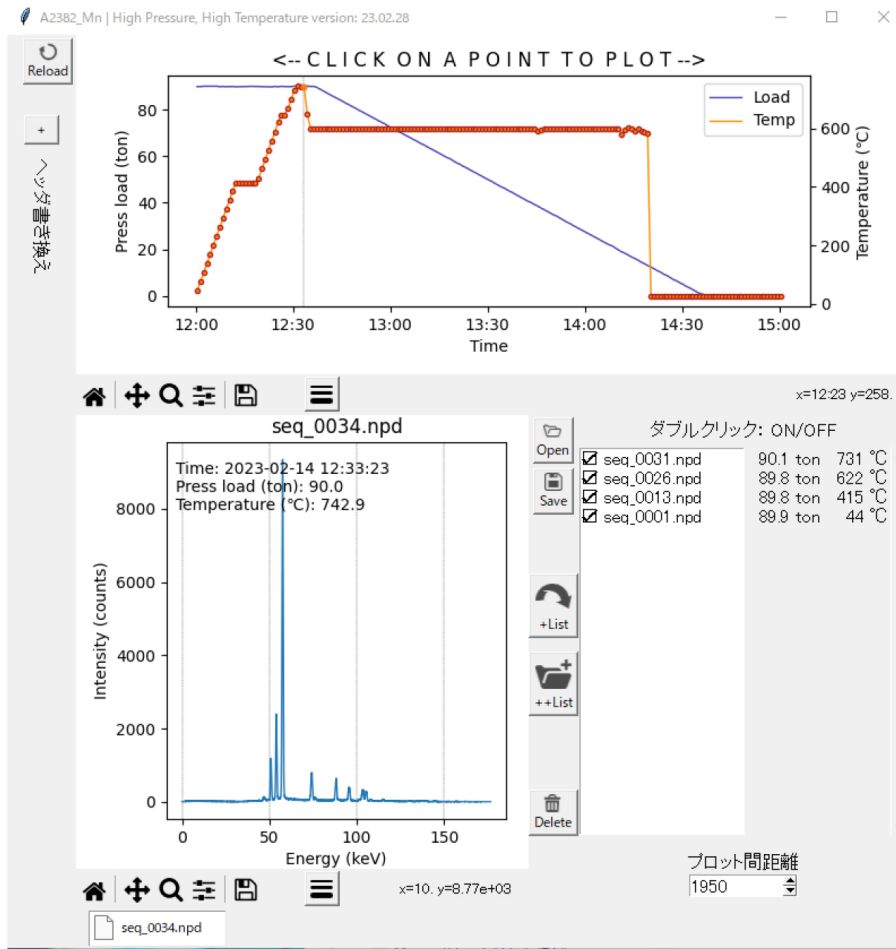


図5 温度荷重グラフ上で指定したポイントの回折パターン表示

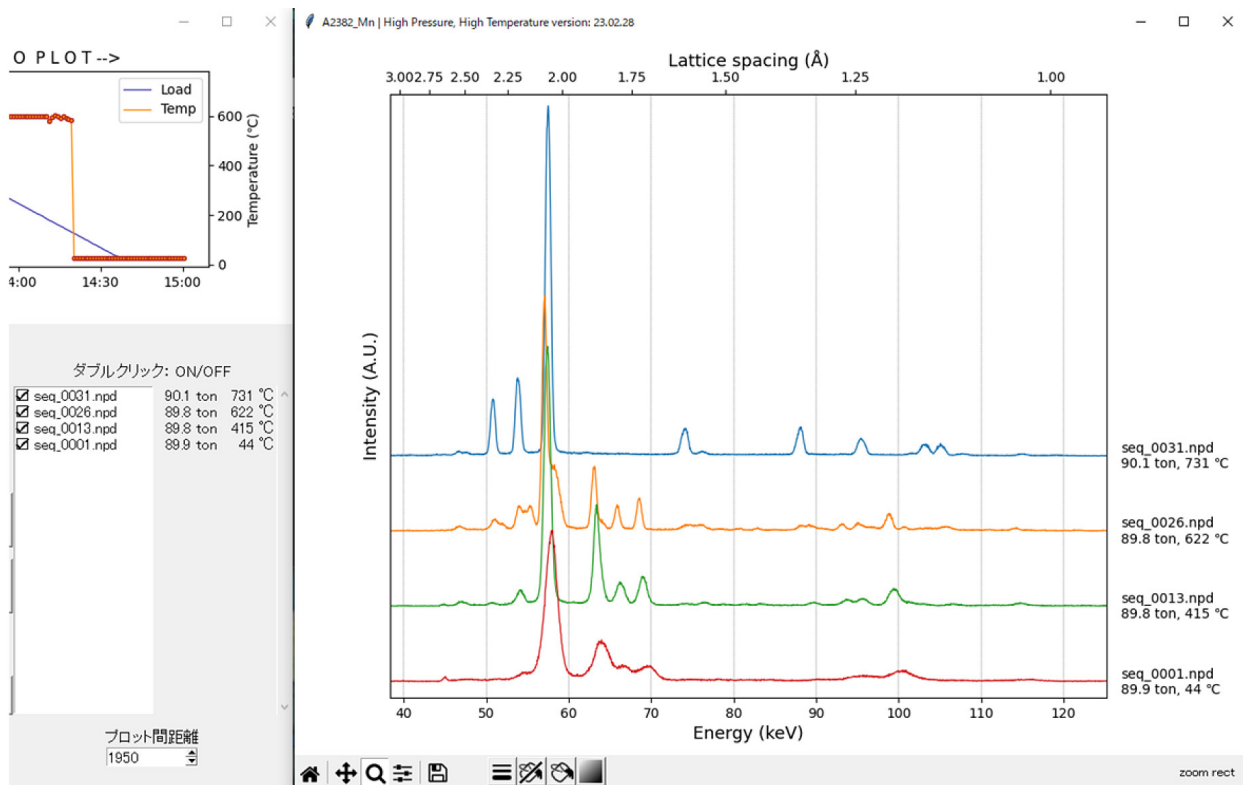


図6 異なる温度荷重条件下での複数回折パターンを比較表示

(622℃), 青線が 31 分後 (731℃) の回折パターンであり, 温度の上昇に伴って回折パターンが変化している様子が読み取れる. 逆に温度一定で荷重を 90 ton ~ 0 まで変化させた場合の回折パターンを表示することも, 図 5 上の温度荷重グラフ上で 12:30 ~ 14:30 の時間帯から複数ポイントでデータを拾うことで行える. このように様々な条件下での回折パターンの比較から, 水素化物の最適合成条件を見出すことができる.

図 6 の複数の回折パターン表示では, 線幅や色の設定, 温度荷重の単位変更, 複数の回折パターンの縦間隔のマウスホイールでの調整, 数値入力でのトリミング, など利用者の要望に応じて表示デザインを設定できるようにした. また, 次節で述べるデータ共有作業の効率化に向けて, 回折パターンデータからデータ構造化用の Excel ファイルを出力できるようにした.

上記した実験ツールの Python ソフト開発には, 約 1 ヶ月を要した. 基本的な機能は比較的短期間に実装できたが, GUI の操作を直観的にする部分は苦勞し, 利用者とやり取りしながら改良していった.

3.2 データ共有作業の効率化

材料研究における新たなアプローチとして, データ駆動型研究が注目されている. 大量のデータを活用して新しい材料の発見や特性を予測・設計するもので, 従来の実験や理論に基づく研究に加え, 機械学習や人工知能 (AI) などのデータ科学的手法を取り入れて研究の効率化や精度良い新材料の発見を目指す.

ARIM 事業では, 全国 26 機関の共用装置利用に伴って創出されるマテリアルデータを利活用しやすくした上で提供するために, NIMS で開発したデータ構造化システム (RDE: Research Data Express[9]) を用いている.

QST でも RDE システムでのデータ共有に向けて, 共用装置の担当者や QST-ARIM 事務局が利用者 と連携しながら,

- ・研究チームの作成 / データセットの開設
- ・データ登録

を行っている. こうした RDE の操作はマニュアルを読み込んだ上で行うが, 誤った操作をした際の対応, データ構造化処理での待機などが負担になっていた. 共用すべきデータは大量であり, できるだけ短時間にデータ登録を正確に実行するプログラムの開発が求められていた.

そこで浅井氏は, Python を用いたデータ登録作業の効率化ツールの開発に取組んだ. Python のライブラリとしては,

- ・Excel ファイルを読み取る openpyxl
- ・ブラウザ操作をプログラムから行う Selenium

を用いた. Selenium の使用に関しては今回 NIMS の許可を経て開発を行った.

図 7 に, Python を用いた RDE 研究チーム作成 / データセット開設プログラムの概要を示す. 先ず, 共用装置のユーザーから課題メンバのメールアドレスほかの情報を, 採択課題などの基本情報が記載されたデータ登録申請書 (Excel ファイル) として QST-ARIM 事務局が受け取る. 事務局は, このファイルを浅井氏が作成した Python による自動作成プログラムに投入することで, ユーザーから受け取ったデータを RDE 入力用に変換して RDE システムに自動入力し, RDE 内に研究チームおよびデータセットを開設する. 作成した研究チームとデータセットの情報は, 課題の受け入れ装置担当者とユーザーに自動でメールから通知される. メールにはデータ登録プログラムに用いる Excel ファイルを添付する. また事務局側では, 各課題のデータセット開設状況を確認できる.

図 8 に, Python による RDE データ登録プログラムの概要を示す. ユーザーや共用装置担当者は, データ登録送り状に用いる共用装置の実験情報を, 専用書式の Excel ファイルに追記し, そのファイルをデータ登録プログラムに読ませる. 中継用 PC へ保存された実験データはセキュリティデバイス CYTHEMIS™[10] を経由して, RDE システムに登録される. RDE へのデータ登録操作は, デー

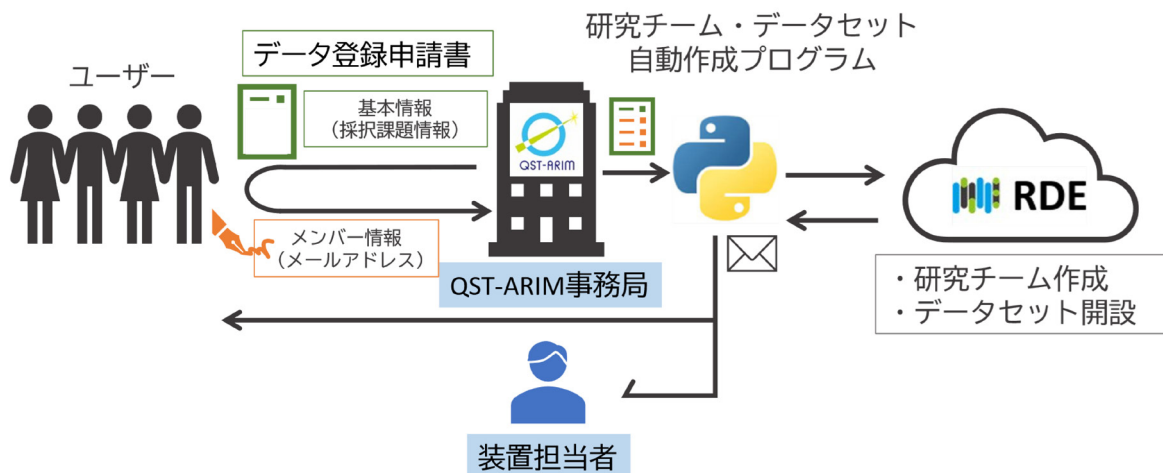


図 7 RDE 研究チーム作成 / データセット開設プログラムの概要

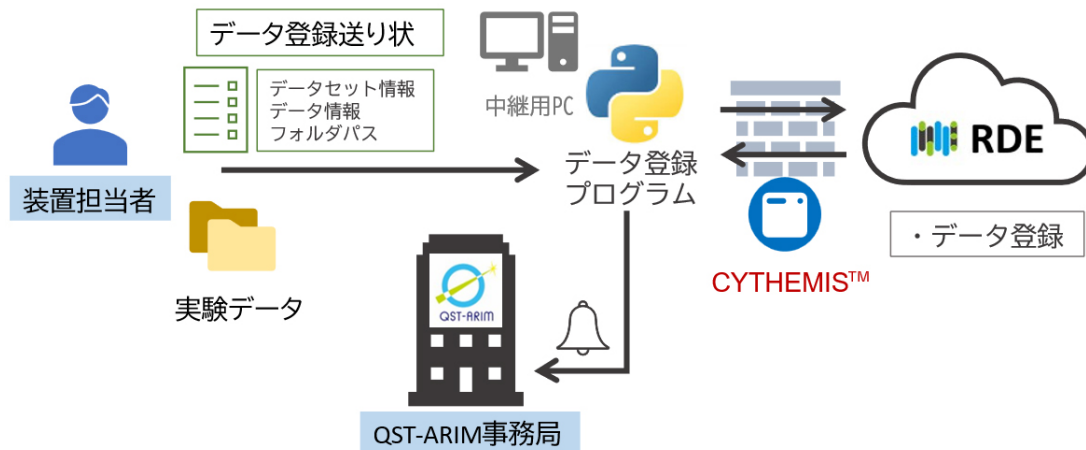


図8 RDE データ登録プログラムの概要

データ登録プログラムが代行して行う。

登録操作が完了した後は、登録の正常終了 / 異常終了をプログラムが自動監視する。このフローの状態によって中継用 PC 上にある各データは「未登録 / 異常終了」「登録操作完了 / 監視中」「正常終了」の3つのディレクトリを行き来する。この監視処理を半自動化された登録操作処理と並列で行うことで、データ登録者が逐一正常終了を待つことなく、データの投入のみに注力できる。登録が正常終了となれば通知が QST-ARIM 事務局に自動的に送られるため、事務局側も登録状況を把握できる。

上記のデータ登録作業効率化ツールについて、ARIM 参加機関の技術支援者が定期的集まるデータ構造化 Meet-

up というオンライン交流会で浅井氏が説明したところ、RDE システムを開発・運営している物質・材料研究機構 (NIMS) が関心を示し、RDE システムへのデータ登録に伴う WEB 上の操作の手間をかなり削減できるメリットがあるということで、NIMS で活用されることになった。

3.3 設備共用事務作業の自動化

従来の設備共用課題の申請・採択審査・利用結果報告の書類作成では、QST-ARIM 事務局が利用者や装置担当者、審査担当者間を往復しながら、主に Word ファイル形式を用いて、情報のやりとりを実施していた。この工程で

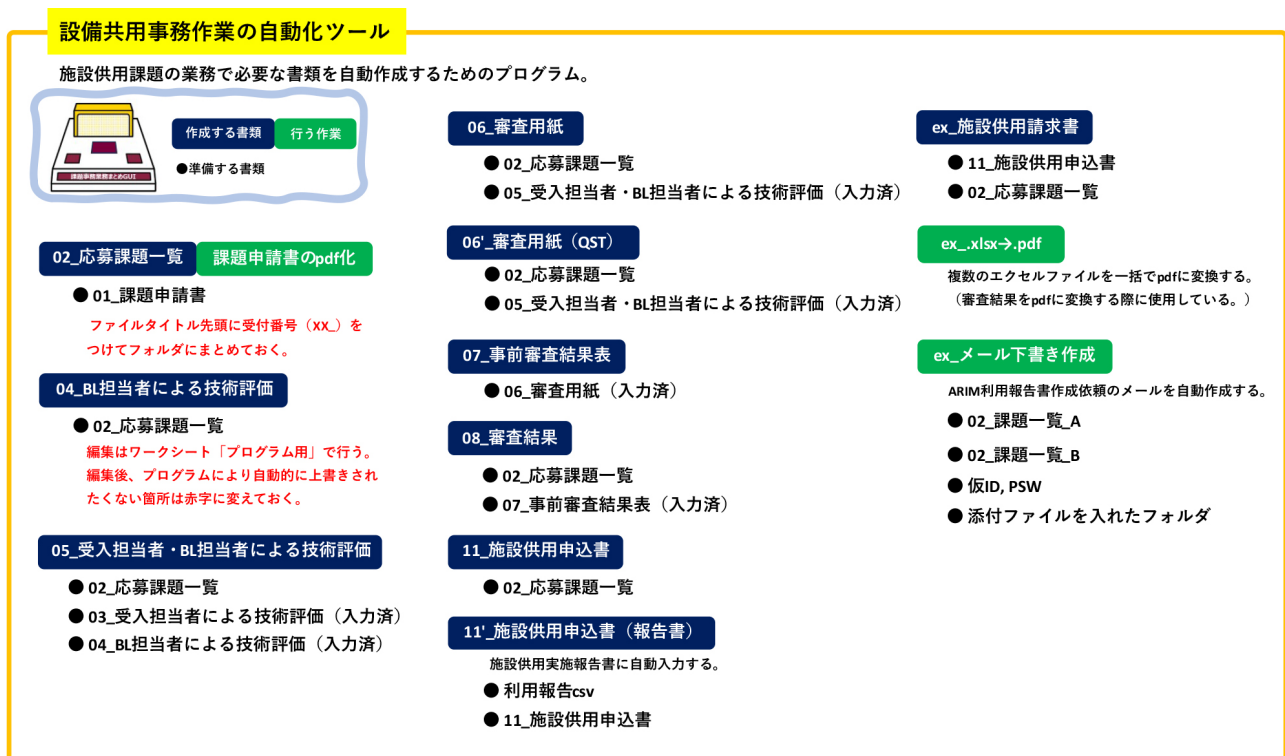


図9 設備共用事務作業の自動化ツール

は繰り返しの手作業が負担となっており、事務担当の作業負担とヒューマンエラーの低減が課題になっていた。

そこで、浅井氏はPythonプログラムを用いてExcelファイルの入出力を行う設備共用事務作業の省力化に取り組んだ。図9にリストアップされた設備共用事務作業で扱う様々な書類のうち：01_課題申請書，02_応募課題一覧，03_受入担当者による技術評価，04_BL担当者による技術評価，06_審査用紙，07_事前審査結果表，11_施設共用申込書（報告書），施設共用請求書などを，図9左上のPythonプログラムで一括して自動作成する。

本自動化ツールを仮実装後，望ましいExcelファイル出力となっているか事務担当者で確認・修正を繰り返すたびに，時間を要していた。この課題の解決のため，書類ファイルごとに対応する処理プログラムを分割してモジュール化し，最新の修正版プログラムを随時的にモジュールとして読み込むことで，迅速な更新や機能の追加を容易に行なえるようにした。これに付随して，事務担当者がGUIで書類の選択，および，入力Excelファイルの指定を担うプログラムを設けることで，視覚的に業務を行やすくした。



4. 今後の抱負

取材の締めくくりに，浅井氏に今後の抱負を伺った。「これからもプログラミング関係の技能の向上に努め，ユーザーの視点に立って操作がしやすい，保守性の高いプログラムを心がけ，ユーザーからの様々な要望に応えていきたい。生成AIを用いたコーディングについては，ARIMの技術支援者間の研修交流の場で他機関から試してみても有用だったとの議論がなされている。QSTでも，以前は慎重な姿勢であったが，今は前向きに取り組もうとしている」と語った。

今回の若手技術奨励賞では，QST内部での実験・業務支援ツールとしてだけでなく，ARIM全体にも貢献するPythonプログラムを開発されていることに感銘を受けた。浅井氏が今後益々活躍され，QSTやARIM全体の発展に結びつくことを期待したい。



参考文献

- [1] 文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ (ARIM) : <https://nanonet.go.jp/>
- [2] ARIM 半導体基盤プラットフォーム : <https://nanonet.go.jp/seti/>
- [3] ARIM 令和6年度技術スタッフ表彰 : https://nanonet.go.jp/page/awards_for_technical_staff_R06.html
- [4] 量子科学技術研究開発機構 : <https://www.qst.go.jp/site/about-qst/1306.html>
- [5] QST マテリアル先端リサーチインフラ : <https://www.qst.go.jp/site/arim/>
- [6] SPring-8 大型放射光施設 : <http://www.spring8.or.jp/ja/>
- [7] Python とは? : <https://docs.python.org/3/faq/general.html>
ゼロからのPython入門講座 : <https://www.python.jp/train/index.html>
- [8] Jinya Suzuki, Hiroyasu Okochi, Naoki Matsui, Teppei Nagase, Haruki Tochizawa, Hiroki Sahara, Takumi Nishikubo, Yuki Sakai, Takuya Ohmi, Zhao Pan, Takashi Saito, Hiroyuki Saitoh, Atsunori Ikezawa, Hajime Arai, Ryoji Kanno, Takafumi Yamamoto and Masaki Azuma, "Selective Synthesis of Perovskite Oxyhydrides Using a High-Pressure Flux Method", J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 30, 16398-16405: <https://doi.org/10.1021/jacs.3c02240>
- [9] ARIM のデータ構造化システム (RDE) : https://nanonet.go.jp/data_service/page/technical_note.html
- [10] CYTHEMIS™ (サイテムリス) とは : <https://www.global.toshiba/jp/products-solutions/security-automation/iot-security/about-cythemis.html>

図は全て浅井氏から提供された

(尾島 正啓)