

物構研 News

大学共同利用機関法人
高エネルギー加速器研究機構
物質構造科学研究所

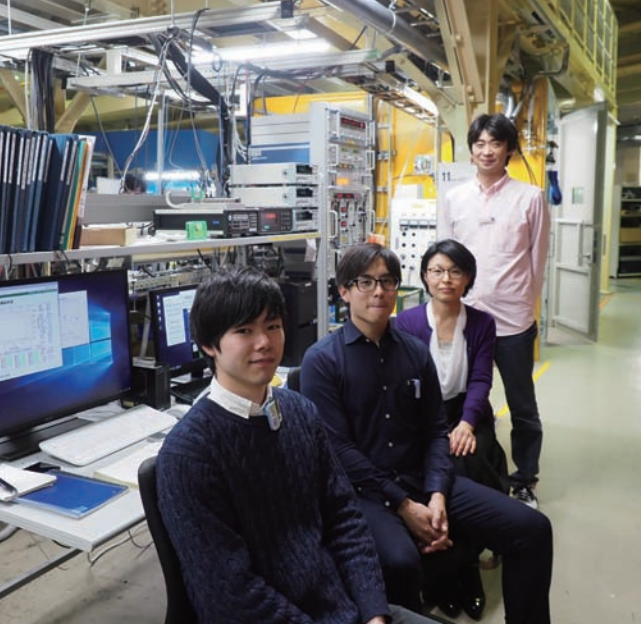
2018.2 No. 23



高効率人工光合成への挑戦

緑の髪を持ち、光合成ができる少女が登場するSF小説があった。人が光合成するなんて、夢のようなお話だと思った。いまや人工光合成の研究は盛んに行われている。葉緑素のように可視光でも光合成ができる材料を開発している研究グループについてご紹介する。

ギリシャ神話の工芸と教育を司る知恵の女神アテナと
筑波山、フォトンファクトリー 画：大島 寛子



フォトンファクトリー BL-9Aにて

京都工芸繊維大学 電気電子工学系 応用物質科学グループ 今田 早紀 准教授らの研究グループは、フォトンファクトリーでのX線吸収端微細構造（X-ray Absorption Fine Structure：XAFS）測定によって、高効率人工光合成光電極材料として有望な3d遷移金属添加窒化アルミニウムの結晶構造を解明した。

高効率人工光合成への挑戦 太陽光を無駄なく利用して人工光合成を



マルチバンドギャップ

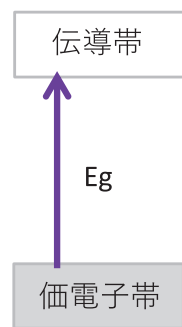
半導体はそれぞれ固有のバンドギャップをもち、バンドギャップエネルギーより大きなエネルギーの光を吸収する。これは、価電子帯*にあった電子が光のエネルギーを得て、高いエネルギー状態の伝導帯*へ移るからである（下図 左の紫の矢印）。伝導帯に移った電子は自由に動き回るようになる。一方、価電子帯にできた電子の抜け穴（正孔）も自由に動き回るようになる。このように、光を吸収して自由に動き回れる電荷（自由電荷）を生成することを光電変換と呼ぶ。

一方、半導体はバンドギャップより小さなエネルギーの（波長の長い）光は透過してしまい、自由電荷を生成することができない。

そこで、半導体のバンドギャップの中に幅の狭い伝導帯と価電子帯を作ろうというのがマルチバンドギャップ物質作成の概念である。中間にあるバンドを介して、階段を上がるように電子を伝導帯に到達させようというのだ。

半導体

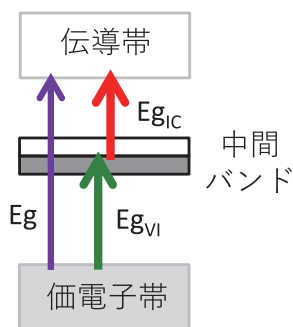
Eg ひとつ



Eg: Energy gap バンドギャップエネルギー

マルチバンドギャップ物質

Eg 複数



マルチバンドギャップ物質は、価電子帯から中間バンド、中間バンドから伝導帯へのエネルギーに対応する光も吸収する

*価電子帯…結合にあずかる電子の存在するエネルギー帯。電子で埋まっている。
*伝導帯…電子が存在することが許されるエネルギー帯であるが、電子がほとんど存在していない。

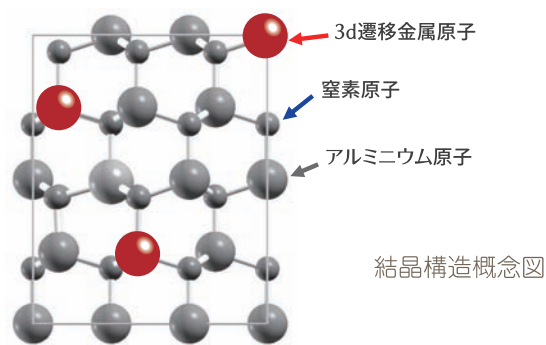


紫の光しか昇れない階段も、二段に分ければ緑と赤の光で昇れる！



窒化アルミニウム AlN の可能性

AlNはバンドギャップが約6 eV(約200 nm)で、大気に吸収され地表に届かない光のエネルギー領域（真空紫外域）にある（右のグラフを参照）。つまり、AlNは地球表面に届く太陽光では自由電荷を生み出せないのだが、中間バンドを作れば、地球表面に届く太陽光でも光電変換ができるようになる可能性がある。

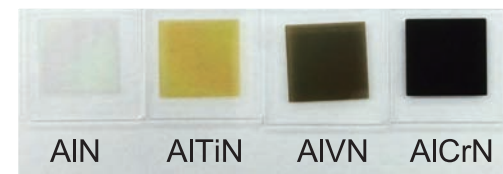


結晶構造概念図

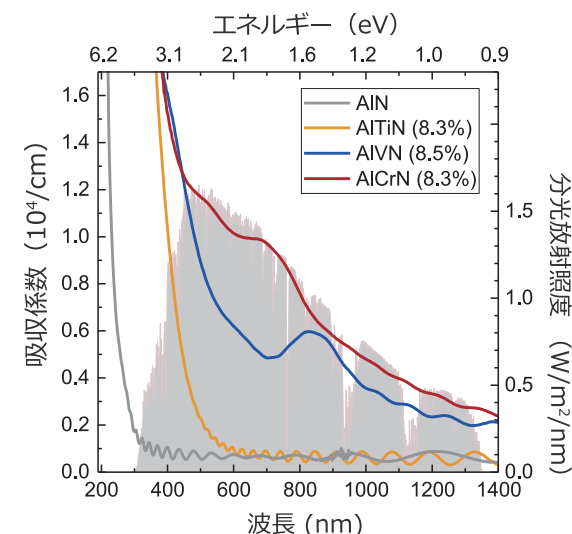
研究グループは、AlN中のAl原子の1割程度をチタンTiやバナジウムVやクロムCrなど(3d遷移金属*)で置き換えた結晶構造をとるとき、その物質はマルチバンドギャップ物質になることを理論的に予測し、実際に合成をおこなった。

マルチバンドギャップ物質は高効率光電変換の可能性から注目されており、さまざまな半導体をマルチバンドギャップ化する研究が盛んになっているが、この研究のように、真空紫外にバンドギャップを持つAlNを母体としたものは、理論的にも実験的にもこれまでに報告されていない。

研究グループはTi、V、Crをそれぞれ添加したAlN (AlTiN、AlVN、AlCrN)を合成し、太陽光放射スペクトル領域の光を吸収できること、また、吸収構造が遷移金属種に依存することを見いだした。これらの物質中の遷移金属元素近傍の結晶構造をフォトンファクトリー BL-9A、BL-12CでのXAFS実験で調べたところ、マルチバンドギャップ化する結晶構造をとっていることが明らかになった。



試料の写真
遷移金属濃度：約9%、膜厚：約1 μm



各材料の光吸収スペクトル
右の縦軸と薄いグレーのグラフは、中緯度地帯の地上における平均的な太陽光放射スペクトルを表す

AlTiN、AlVN、AlCrNは、普遍的に存在する元素のみで構成され、液晶パネルや太陽電池製造に広く使われている技術で合成することができる。また、ドリルなどのコーティング材料として利用されるなど大変強い材料として知られている。

本成果は、3d遷移金属添加AlNが、添加金属の濃度によっては高効率光電変換可能な物質になることを示唆するもので、太陽電池や人工光合成デバイスへの適用により高効率化が期待される。尚、研究グループは、他の3d遷移金属についても実験を続けているという。報告が待たれる。

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
----	----	---	----	----	----	----	----	----

論文情報：N. Tatemizo, S. Imada, Y. Miura, K. Nishio, and T. Isshiki, "Crystallographic and electronic properties of AlCrN films that absorb visible light", *AIP Advances*, 7, 055306 (2017).

N. Tatemizo, Y. Miura, K. Nishio, S. Hirata, F. Sawa, K. Fukui, T. Isshiki, and S. Imada, "Band structure and photoconductivity of blue-green light absorbing AlTiN films", *Journal of Material Chemistry A*, 5, 20824 (2017).

N. Tatemizo, S. Imada, Y. Miura, K. Nishio, and T. Isshiki, "Crystallographic properties and electronic structure of V-doped AlN films that absorb near ultraviolet-visible-infrared light", *Journal of Applied Physics*, 123, 161546 (2018).

研究者がわくわくするような 材料を創りたい

今の仕事が一番楽しいと笑う今田先生は、窒化薄膜開発を専門とする物性物理学者である。

今田研究室では、大学内のラボで新規窒化物薄膜の合成・分析・理論計算を行い、ラボでできない分析を外部の実験施設で行う。よく勉強し、自分の作った材料の評価は、できるかぎり自分の手でやってみたいというのが今田先生の希望だ。

こだわりの理由

今田先生はかつて、民間企業の子材料開発者だった。非常に珍しく有用な新規材料を開発し注目されたが、それは自分ではない専門家の手によって最先端の分析をされ世に出て行った。当時を振り返り、「自分の勉強不足で、自分の作った材料の分析結果を十分に理解できたとは言えない状態で研究が進んでいった」と語る。

合成した材料には自信がある。誰も知らない材料を合成して世に出すには、合成条件と物性の関係を一番よく知っている者が正確に伝えるべきだと考えている。自分が生み出した材料を、自分の手で分析できるようになるにはどうしたらいいか。想いを叶えるため、会社を辞め、大学に戻って勉強を続けた。大阪大学で博士（理学）を取得し、まもなく京都工芸繊維大学で職を得た。

しかし、ここでもう一つの壁が立ち塞がる。自分の作った材料のもっとも基本的な情報のひとつである添加元素の局所結晶構造は、大学のラボだけでは調べられないのだ。ラボで出せるX線はとても弱く、波長も限定されているためだ。自分の作る材料の分析に適した光源は放射光施設にあることは分かっていた。放射光施設なら電磁波の波長を連続的に変えて実験することができる。しかし、どうしたら放射光を使った結晶構造分析実験ができるのか分からず、ハードルの高さを感じながら数年を過ごしたという。



フォトンファクトリー (PF) との縁

きっかけはある放射光施設への申請で不採択になったことだった。「萌芽期の研究で、放射光実験の経験もない場合は、PFのP型申請がよいのでは」とアドバイスを受けた。PFの担当グループに連絡を取ると、すぐに申請打合せの日程を確保してくれた。全く経験がないこと、研究室がとても小さく、一人で実験しなければならないことなどを恐る恐る伝えたが、「そんな人はたくさんいるから心配なくてよい」と、その場で組成から実験時間を見積もり、よい申請書を書くためのポイントを指導してくれた。

2013年、初めて課題が採択され、つくばへ。使い方を一から教えてもらい、24時間ひたすら実験を続けた。何もかも初めてでひとりぼっちの実験だったが、PFのスタッフが支えてくれたから頑張れた。

今田先生がまだ実験に慣れていない頃に指導を担当し、今も実験や解析の相談に乗っているのは技師の丹羽 尉博だ。

「PFのスタッフの中でも、特に気にかけてくださったのが、丹羽さんでした。呼びに行かなくても『どうですか〜?』と様子を見に来てくれたので、気軽に相談ができたし、とても心強く感じていました。

『試料がとても良いから、きれいなデータになるはず』と、その場でさささと解析。『ね、きれいな構造が見えているから、この調子でいいですよ』って。材料合成を自身の手でやっている者からしたら、こんなにうれしいことはないです」

PFスタッフはヒーロー?

放射光施設での実験は時間との闘いだ。与えられた時間の中で、信頼性の高いデータがどれだけとれるか、割り当てられた時間は一瞬足りとも無駄にできない。

実験のためのセットアップはできるだけ効率的にやりたい、という希望に応え、XAFSのシステムはどんどん使いやすくなっている。

「システム担当のスタッフが自動化を図ってくれていたり、訪れる度にきめ細かい工夫をしてユーザーの負担を軽減させてくれていると感じます」交代で休憩を取り、実験は昼夜を問わず続く。ときには、装置がうまく動かなくなり、自分たちではどうしても対処できないときもある。もちろんトラブルは深夜にも起こる。

「そんなときでも、丹羽さんは駆けつけてくれて、実験が軌道に乗るまで見届けてくれて」今田先生が言うと、「そうなんです、夜中まで付き合ってくれて何もなかったように爽やかに去っていくんです。もうカッコよくて」と大学院生の立溝さんが口を揃える。ビームタイムを最大限有効に使いたいユーザーにとって、ピンチを救うスタッフの姿は、颯爽と登場するヒーローだ。

京都からPFを使いにくるのは、PF放射光のエネルギー領域が実験に適しているから、それだけではない。今田先生は「『未来の仕事をこれか

ら選択する学生たちに、プロフェッショナルの仕事が見える場所で研究をさせたい』という希望が叶う場所だから」と言う。学生たちには、自分の研究を通して、いろいろなところでさまざまな人に会い、交流して、自分がどんな研究者・エンジニアになりたいか、見つけだしてもらいたいと願っている。

XAFS分析の第一人者である北海道大学の朝倉清高教授の「息の長い、ひとりの人が成功しなくてもチャレンジし続けられる環境、すなわち学術としての科学は大切だと思う」という言葉に共感する。今田先生自身は、基礎物理・物性の研究者にも、デバイス開発者にもわくわくしてもらえるような材料を創り出すという役割を担いたいと考えている。そして、正確な情報発信ができるよう、どんどん新しい分析手法を身につけていこうと考えている。基礎物理をやっている人の知性を刺激するような材料を作りたい。そのための実験をしているとき、論文を書いているとき、喜びで顔が自然に緩む。

こんな幸せな職業人を間近で見ている学生は、それだけで貴重な人生体験をしているのではないかと感じた。いつまでも材料開発の現場で自分の研究を続けていきたいと語る今田先生のこれからの研究成果と、先生のもとで学ぶみなさんの将来が楽しみでならない。

(執筆：深堀 協子)

左から、今田 早紀 准教授、立溝 信之 さん、森 龍太郎 さん、丹羽 尉博 技師
XAFS 討論会会場にて (2017 年 8 月撮影)



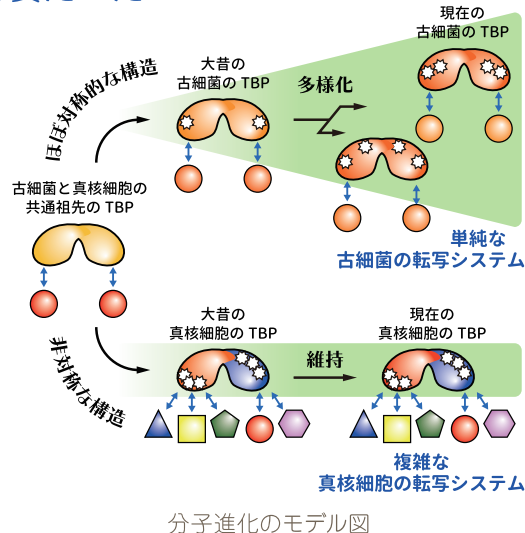
最近の研究成果から

タンパク質構造の非対称性と遺伝子制御システムの複雑性

～生物の分子の進化には、対称性の崩れが必要だった～ - 2017/12/27 -

DNA に書き込まれている遺伝情報が読み出される最初の反応を転写といいます。転写開始に必須で全遺伝子の9割の発現を制御する転写開始因子TBPは、バクテリアにはなく真核細胞と古細菌に存在します。真核細胞のシステムが進化の過程でどのように複雑化したかは、いかに遺伝情報の読み出しシステムの複雑性を獲得したかにかかっていると考えられます。

物構研 構造生物学研究センターの千田 俊哉 教授・安達 成彦 特別助教は、東京大学 分子細胞生物学研究所、理化学研究所と共同で、進化の過程で形成されたタンパク質構造の非対称性を、独自に開発した分子進化の指標などによって定量しました。その結果、真核細胞TBPは甚だしく非対称な立体構造を持つため、相互作用因子を増やせたこと、さらにそれが真核細胞の複雑化につながったであろうことを明らかにしました。

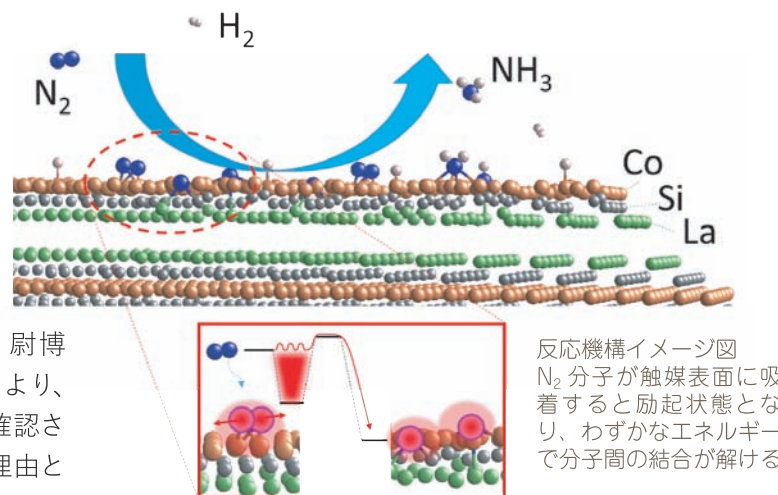


貴金属を使わない高性能アンモニア合成触媒を開発

～新しい窒素分子の活性化機構を示唆～ -2018/1/22-

東京工業大学の 細野 秀雄 教授を中心とする研究グループは、KEK 物構研と共同で、貴金属を使わない高性能のアンモニア合成触媒 LaCoSi を開発しました。LaCoSi は、ランタン La とコバルト Co の金属間化合物です。Co はルテニウム Ru に次ぐ活性を持つことが知られていましたが、LaCoSi はこれまで報告されてきた Co 系触媒でアンモニア合成において最高の活性を示します。

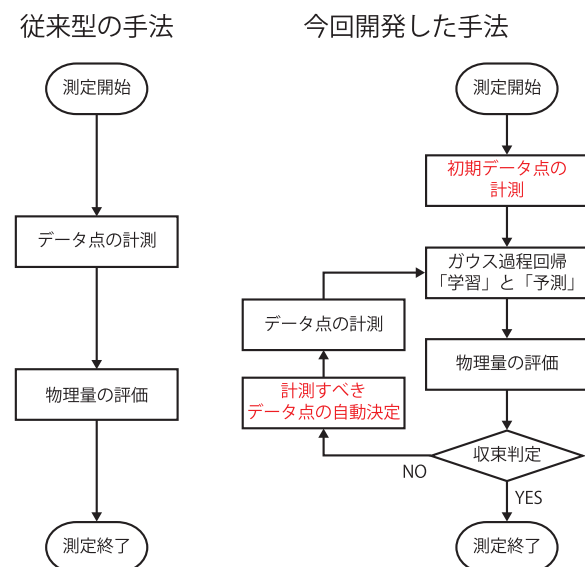
この共同研究には、PF の阿部 仁 准教授と、丹羽 尉博 技師が参加し、X線吸収分光法 (XAFS) 実験により、LaCoSi 内での La から Co への電子の受け渡しが確認されました。この電子の授受が新触媒の活性が高い理由と考えられています。



機械学習により実験計画の自動決定が可能に ～「学習」と「予測」でX線スペクトル測定の高効率化に成功～ -2018/1/22-

KEK 物構研の小野 寛太 准教授と量研 (QST) の上野 哲朗 主任研究員を中心とする研究グループは、人工知能 (AI) 技術の一種である機械学習を用いて、X線スペクトル測定を高効率化する手法を開発しました。

この手法では、計測データの学習によってスペクトルを予測し、さらに次の計測データ点を自動的に決定します。これにより、従来の5分の1程度の測定時間で、これまでと同等の精度で物理量を決定することが可能になりました。本手法は様々なスペクトル測定に応用することが可能であり、実験時間の短縮と実験コストの削減により物質・材料研究の加速化に貢献します。



イベント報告

物質構造科学研究所 設立 20 周年記念シンポジウム 「物質構造科学の過去・現在・未来」を開催

2017 年 12 月 27 日、KEK つくばキャンパス 研究本館 小林ホールにて、物構研設立 20 周年記念シンポジウムが開催され、東海キャンパスでのテレビ会議を通じた参加者も含め、149 名が参加しました。

山田 和芳 物構研所長の挨拶、野村 昌治 KEK 理事の講演に続いて、19 名の物構研に関わる KEK 内外の中堅・若手研究者が講演を行いました。物構研の4つのプローブ（放射光・中性子・ミュオン・陽電子）に関し、利用研究の展望や将来の施設運営について、さらには加速器の将来展望についての熱弁が続き、会場からは各講演に対し質問の手が挙がりました。

最後に、物構研 次期所長である分子科学研究所 小杉 信博 教授が登壇、物構研の未来について語りました。



講演の質疑応答の様子

つくばにて

第 31 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム 開催

今年設立 30 年の「而立」を迎えた日本放射光学会は、1 月 8 日～10 日 つくば国際会議場にて、第 31 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウムを開催しました。地元つくばでの開催ということで、本会の実行委員会には物構研 PF の職員が多数参加しました。今後 10 年、そしてその先に放射光学会がどのような役割を果たすべきかを考える特別企画講演「日本放射光学会三十而立」が開催されました。また、今回「放射光科学賞」が創設され、フォトンファクトリー・アドバンストリング PF-AR で世界初の真空封止アンジュレーターの開発に成功した北村 英男 氏が受賞しました。



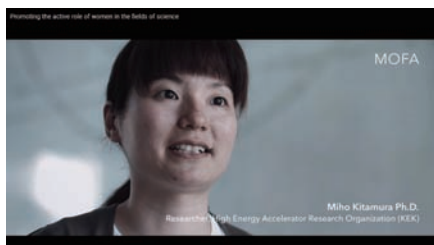
30 周年特別企画講演「日本放射光学会三十而立」の様子

日本放射光学会 市民公開講座 「放射光で輝く！女性研究者」開催

1 月 8 日午後、放射光科学の分野で活躍する女性研究者を招き、市民に開かれた講座が開催されました。唯 美津木 教授（名大）、南後 恵理子 研究員（理研）の講演に続き、癸生川 陽子 准教授（横国大）、永村 直佳 研究員（物材機構）、保倉 明子 教授（東京電機大）、村尾 玲子 主任研究員（新日鐵住金）らが、研究の魅力や放射光実験の様子、研究者生活などを交えたショートトークを行いました。会場からは「研究職を希望していますが、大学や研究所など、所属機関によってどんな違いがありますか？」「娘に勧められる職業でしょうか？」などの質問が寄せられ、研究者たちはそれぞれの立場や経験を踏まえて丁寧に答えていました。



市民公開講座の様子



映像のタイトルは "Promoting the active role of women in the fields of science"

YouTube 映像は
こちらから



外務省広報用映像に フォトンファクトリーの 北村 未歩さんが出演

外務省が開催している国際女性会議 the World Assembly for Women (WAW!) の広報用映像に、物構研 放射光科学第一研究系の 北村 未歩さんが出演しています。

撮影は、つくばキャンパス 4 号館 およびフォトンファクトリーで行われました。インタビューでは、北村さんの研究テーマ「磁性を持たない酸化物同士の界面で生まれる強磁性」のほか、女性が働きやすい社会が話題になりました。北村さんは、自分が若い女性研究者の生き方のモデルの一つになればと話していました。



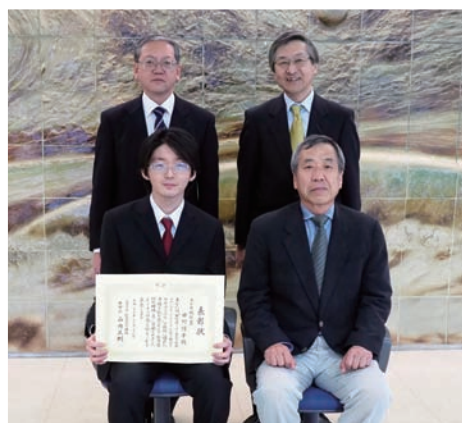
フォトンファクトリーのビームライン MUSASHI (BL-2A) にて真空チャンバー内でサンプルをやりとりするためのロッドを動かしているところ



ミュオン科学研究系の中村 惇平氏 平成 29 年度 KEK 技術賞を受賞

課題名

「超低速ミュオン発生を実現させたコヒーレント
ライマンα 光の輸送と強度測定技術」

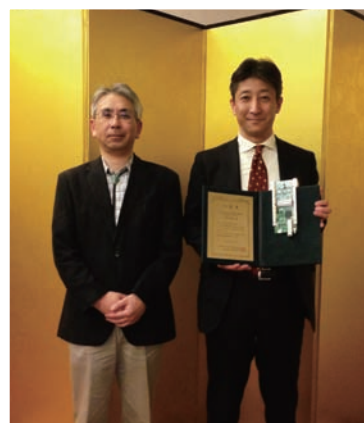


小山 篤 技術調整役 野村 昌治 KEC 理事
中村 惇平 准技師 山田 和芳 物構研所長

ミュオン科学研究系の小嶋 健児氏 高エネルギー加速器科学研究奨励会 小柴賞を受賞

研究題目

「高集積陽電子検出器システム Kalliope の開発と実用化」



推薦者
門野 良典 教授 小嶋 健児 准教授

