

**質量ゼロのディラック電子の流れを制御できる新しい磁石を発見ー超高速スピントロニクス応用への新機軸ー**

2016年2月1日

東京大学

大阪大学

東北大学

高エネルギー加速器研究機構

理化学研究所

今回、大阪大学大学院理学研究科 酒井英明准教授（研究開始時：東京大学大学院工学系研究科 助教）、東京大学大学院工学系研究科 石渡晋太郎准教授（JST さきがけ研究者兼任）、同研究科 増田英俊大学院生らの研究グループは、ディラック電子を有するビスマス（原子番号 83 の元素）の二次元層とユーロピウム（原子番号 63 の元素）等からなる磁性ブロック層が積層した磁性体の合成（図 1）に成功し、東京大学物性研究所 徳永将史准教授、東京大学大学院工学系研究科 山崎裕一特任講師（理化学研究所創発物性科学研究センター ユニットリーダー兼任）、東北大学金属材料研究所 塚崎敦教授らと共同で、ディラック電子の超高速伝導が磁気状態に依存して劇的に変化することを発見しました。さらにこの効果を利用して、ディラック電子を電気伝導層であるビスマス層（二次元層）内に強く閉じ込めることにより、ディラック電子層が積層したバルクの磁性体において初めて、ホール抵抗値が離散的となる半整

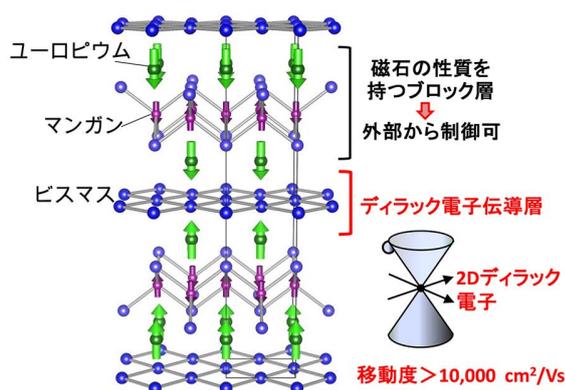


図 ディラック電子と磁性が共存する物質  $\text{EuMnBi}_2$  の結晶構造と磁気構造。正方格子を形成するビスマスがディラック電子状態を含有し、超高速電気伝導を担う。一方、ユーロピウムやマンガンからなる電気を流さない層（ブロック層）が磁石として機能する。各原子上の矢印は磁気モーメントの向きを表し、これらの相対的な角度を外場からの磁場で制御することにより、ディラック電子の電気の流れを劇的に変化させ、ディラック電子をビスマス層に閉じ込めることができるようになった。

数量子ホール効果を実現しました。本研究成果は、ディラック電子の強相関量子伝導現象という新規学術分野の開拓だけでなく、超高速で省エネルギーなエレクトロニクスへの基礎となる超高速スピントロニクス実現に向けた新機軸になると期待されます。

本研究成果は、Science Advances 誌（日本時間 1 月 30 日午前 4 時）に掲載されました（この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/20151208110000/> をご覧ください）。

**反強磁性の影響がない高温超伝導状態を観測**

2016年2月5日

東京大学

上智大学

東北大学

高エネルギー加速器研究機構

銅酸化物高温超伝導体では反強磁性絶縁体である母物質に電子あるいは正孔をドーピングすることで超伝導が発現しますが、電子をドーピングした場合には反強磁性の影響が強く、超伝導状態でも反強磁性が共存しているものと考えられてきました。今回、東京大学大学院理学系研究科物理学専攻の堀尾眞史大学院生、藤森淳教授、上智大学理工学部機能創造理工学科の足立匡准教授、東北大学大学院工学研究科応用物理学専攻の小池洋二教授らの研究グループは、高エネルギー加速器研究機構（KEK）及び広島大学との共同研究で、放射光施設 Photon Factory と広島大学放射光科学研究センター（HiSOR）を用いることによって、反強磁性の影響のない高温超伝導状態を世界で初めて観測し、その超伝導状態が従来考えられていたよりも広い電子濃度領域で、しかもより高温まで実現されていることを明らかにしました。本研究は、超伝導と反強磁性の関係を最重要視してきたこれまでの高温超伝導の物理の根幹部分に見直しを迫る重要な成果です。

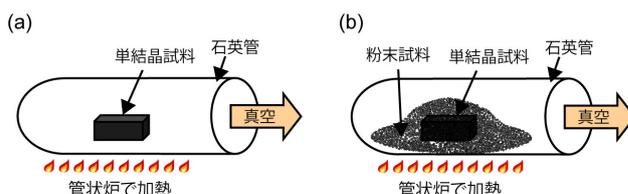


図 (a) 従来のアニール方法の概念図。(b) プロテクト・アニール法の概念図 (T. Adachi et al., J. Phys. Soc. Jpn. 82, 063713 (2013).)。

本成果の詳細は、2016年2月4日に英国科学誌「Nature Communications」でオンライン公開されました（この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/20151208110000/> をご覧下さい）。

## 30年来不明であった光触媒 TiO<sub>2</sub> 表面の原子配置を決定 – 世界最高強度の高輝度陽電子ビームによって表面構造を明らかに –

2016年2月24日  
大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構  
国立大学法人 北海道大学  
国立研究開発法人 日本原子力研究開発機構

高エネルギー加速器研究機構（以下「KEK」）物質構造科学研究所（以下「物構研」）の兵頭俊夫特定教授らのグループと北海道大学触媒科学研究所（以下「北大」）の朝倉清高所長のグループ、日本原子力研究開発機構（以下「原子力機構」）先端基礎研究センターの深谷有喜研究副主幹および量子ビーム応用研究センターの河堀厚男研究主幹グループによる共同研究および KEK 放射光施設共同利用研究（研究代表：北海道大学・朝倉清高教授）は、結晶最表面の原子配置を精度よく決定できる全反射高速陽電子回折（TRHEPD）法を用いて、光触媒としてよく知られているルチル型酸化チタンの、30年にわたり構造（原子配置）が未解明であった(110)-(1×2)超周期構造表面を決定しました（この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/20160224140000/> をご覧下さい）。

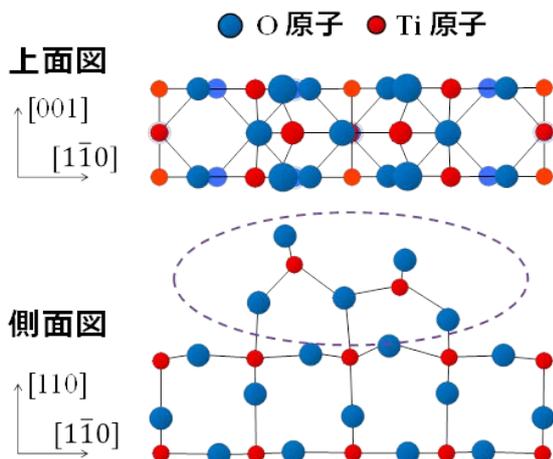


図 本研究で確定したルチル型 TiO<sub>2</sub>(110)-(1×2) 表面の構造（非対称 Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub> モデル）。

## 全反射高速陽電子回折法によりグラフェンと金属との界面構造の解明に成功 – グラフェンを用いた新規材料開発に道 –

平成 28 年 3 月 7 日  
日本原子力研究開発機構  
高エネルギー加速器研究機構

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構（理事長 児玉敏雄、以下「原子力機構」）先端基礎研究センターの深谷有喜研究副主幹らは、高エネルギー加速器研究機構（機構長 山内正則、以下「KEK」）物質構造科学研究所の兵頭俊夫特定教授らのグループとの共同研究により、原子力機構と KEK が共同で開発した全反射高速陽電子回折（TRHEPD）法を用いてグラフェンと金属基板間の境界面の構造（界面構造）を詳細に調べ、金属の元素によるグラフェンとの結合の違いを実験的に明らかにしました。

グラフェンは省エネかつ高速で動作する電子デバイスを実現するための新素材として注目されています。現在、グラフェンの実用に向けた研究が世界中で進められていますが、応用上重要となるグラフェンと他の金属が接合したグラフェン金属複合体の界面構造は、原子 1～2 個分の厚みしかなく、極薄領域の解析の困難さからあまりよくわかっていませんでした。今回私たちは、金属としての性質が異なる銅とコバルトの 2 種類の金属上で合成したグラフェン金属複合体に着目し、極めて高い表面感性を持つ TRHEPD 法を用いて銅とコバルトの上のグラフェンの高さを詳細に解析しました。その結果、金属の元素の違いによるグラフェンとの結合の違いを世界で初めて実験的に明らかにすることに成功しました。グラフェン金属複合体の電子移動度などの物性は、グラフェンの高さに応じて大きく変化することが知られています。今後、これらの知見をもとにして、グラフェンの電子デバイス応用に向けた新規材料開発が期待されます。

本研究成果は、「Carbon」のオンライン版に、3月3日に掲載されました（この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/20160307150000/> をご覧下さい）。



図 全反射高速陽電子回折（TRHEPD）装置の写真。右上から陽電子ビームが輸送され、中央に置かれた超高真空チャンバー内で TRHEPD 実験が行われる。

## 世界初、ポジトロニウム負イオンの共鳴状態の観測に成功～三体量子系の解明への大きな一歩～

平成 28 年 3 月 18 日

科学技術振興機構

自然科学研究機構 分子科学研究所

東京工業大学

京都大学

高エネルギー加速器研究機構

J-PARC センター

東京理科大学、理化学研究所、および高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所の研究チームは、陽電子 1 個と電子 2 個が束縛し合っているポジトロニウム負イオンの共鳴状態を生成し、その分光を行うことに成功しました。誰も容易に実現できるとは考えていなかった、ポジトロニウム負イオンの共鳴状態の生成と観測が可能になりました。

最も単純な三体系であるポジトロニウム負イオンの分光実験が可能になったことで、三体量子系の研究の発展が期待されると同時に、寿命が長い励起状態のポジトロニウムビームの生成への道が開けました。

本成果は、英国の科学雑誌「Nature Communications」2016 年 3 月 17 日（現地時間）にオンライン掲載されました（この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/20160318103000/> をご覧ください）。

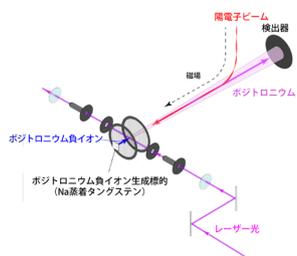


図 ポジトロニウム負イオンの共鳴状態を観測するために開発した装置 (Nature Communications, 7, 11060 より転載)

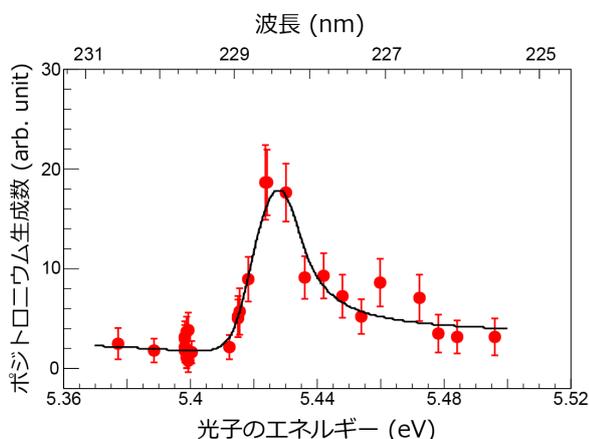


図 得られたデータ。ポジトロニウム生成数を光子のエネルギーに対してプロットしたもの (Nature Communications, 7, 11060 より転載)。

光センサータンパク質の構造を原子レベルで解明 - 神経細胞内の情報伝達物質を光で操作し、軸索の成長促進に成功；再生医療や新薬開発への貢献を期待 -

2016年5月31日  
横浜市立大学  
高エネルギー加速器研究機構

これまで原子レベルでの構造・機能解明がされていなかった光活性化アデニル酸シクラーゼ (PAC) について、ランソウ（藍藻）由来の PAC(OaPAC) を用いて構造を解明しました。また OaPAC を用いて動物・植物に普遍的な情報伝達物質 cAMP 生産を光操作し、マウス海馬の神経軸索の分枝・伸長の誘導に成功しました。

光活性化アデニル酸シクラーゼ (PAC) は光センサータンパク質で、光を感知すると cAMP を作るため、その生産量を光で制御できます。このため PAC は生体内での光スイッチとして医学的な応用が期待されています。PAC はミドリムシから発見され、以後、複数の原核生物からも相同遺伝子が見出されていましたが、これまで原子レベルでの構造・機能解明には至っていませんでした。本共同研究グループは OaPAC を用いることにより、世界で初めて PAC の構造解析に成功しました。これは、医学分野における光遺伝学 (optogenetics) のツール開発につながるため、新しい再生医療や新薬開発の基礎的研究への貢献が期待される成果です。

本研究成果は、アメリカ合衆国の学術雑誌『PNAS』(Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America) (米国科学アカデミー紀要) (日本時間平成 28 年 5 月 31 日付) にオンライン掲載されました。(この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/20160531100000/> をご覧下さい)。

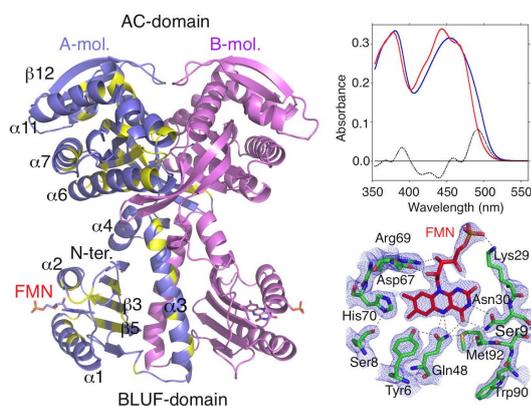


図 OaPAC は BLUF ドメインと III 型アデニル酸シクラーゼの特徴を持つ光応答性酵素。

太陽光による水分解を高効率化するナノコンポジット結晶を開発

2016年6月3日  
東京大学物性研究所  
名古屋大学  
高エネルギー加速器研究機構  
東京理科大学

東京大学物性研究所は、名古屋大学、高エネルギー加速器研究機構、東京理科大学とともに、金属ナノ柱状構造（直径 5 nm、長さ 20 nm）が酸化物の中に埋め込まれた「ナノコンポジット結晶」を簡便に作製するプロセスを新しく開発しました。このナノコンポジット構造を、太陽光の照射によって水を分解して水素を製造する光触媒として利用すると、その水分解光電極反応の効率が著しく向上することを見出しました。ナノ構造を持つコンポジット材料は、より高効率なエネルギー変換材料やデバイスとしての可能性があり、二酸化炭素を排出しないクリーンな水素社会の実現の貢献に繋がることが期待されます。なお、今回の研究成果は、英国科学誌「Nature Communications」のオンラインで公開予定です（この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/20160603182000/>）をご覧ください。

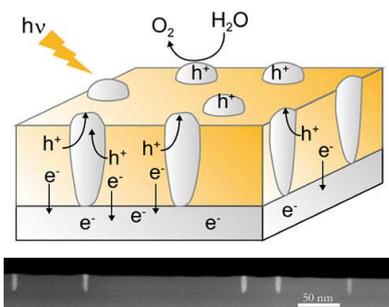


図 ナノコンポジット光電極の模式図と Ir 金属が自己組織化したナノ柱状結晶が埋め込まれた Ir:SrTiO<sub>3</sub> 半導体薄膜の断面 STEM 像。

## 永久磁石材料の内部磁気構造を定量評価する手法を開発

2016年6月30日

国立研究開発法人物質・材料研究機構

大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構

国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS）磁性・スピントロニクス材料研究拠点 元素戦略磁性材料研究拠点（ESICMM）の上野哲朗 NIMS ポスドク研究員と大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構（KEK）物質構造科学研究所の小野寛太准教授を中心とする研究チームは、中性子ビームを用いて永久磁石材料の内部磁気構造を定量評価する手法を開発しました。

ハイブリッド自動車、電気自動車などのモーターに用いられるネオジウム-鉄-ホウ素（Nd-Fe-B）磁石に代表されるように、永久磁石材料は私たちの身の回りで広く用いられています。高い磁気特性をもつ永久磁石材料を用いることでモーターの高効率化、小型化、省エネ化を実現できます。磁気特性の高い永久磁石材料を開発するためには、材料内部の磁気構造を明らかにし、磁気特性との関連を調べる必要があります。これまでは偏光顕微鏡、磁気力顕微鏡などの顕微鏡を用いて材料表面の磁気構造を観察することは可能でしたが、材料内部の磁気構造を定量評価することができない実験手法がありませんでした。

本研究チームは、中性子小角散乱実験により永久磁石材料の内部磁気構造を定量評価する手法を開発しました。中性子小角散乱実験とは、試料に中性子ビームを照射し、試料中で散乱された中性子の強度分布を検出することで試料中の数ナノメートルから数マイクロメートルの大きさにわたる微細構造を調べることができる実験手法です。中性子小角散乱の解析は、中性子が試料中の微細構造によって1回だけ散乱されることを仮定しています。しかし実際は、試料中で中性子が複数回散乱される「多重散乱」と呼ばれる現象が起きています。これまで永久磁石材料では、どのような条件で多重散乱が起きるのか明らかになっておらず、磁気構造を定量的に評価する際の妨げとなっていました。今回、Nd-Fe-B ナノ結晶磁石試料の厚さと中性子ビームの波長を系統的に変えた実験を行い、試料が厚く波長が長いほど中性子が顕著に散乱されることを明らかにしました。この結果をもとに、観測した中性子小角散乱強度から多重散乱の影響を排除して解析したところ、材料内部の磁気構造を定量評価することに成功しました。

今後、本手法を様々な永久磁石材料に適用することで、材料内部の磁気構造と磁気特性の関連を詳細に検討することが可能になり、永久磁石材料の高性能化へ向けた研究開発の加速化が期待できます。

本研究は文部科学省の委託事業である元素戦略磁性材料研究拠点（ESICMM）および高効率モーター用磁性材料技術研究組合（MagHEM）の支援のもと実施されました。

本研究成果は、英科学誌 Scientific Reports（オンライン版）に2016年6月20日18時（日本時間）に掲載されました（この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/20160630144028/> をご覧ください）。

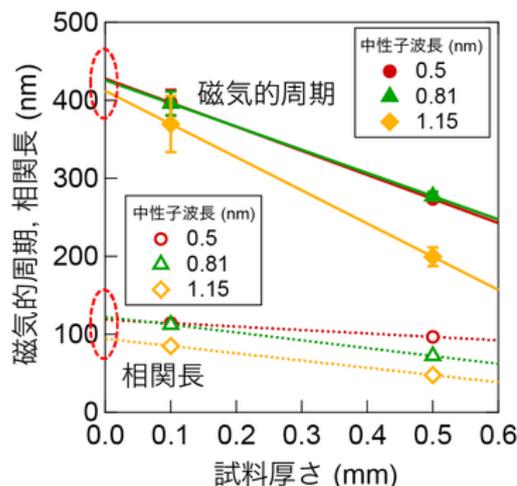


図 理論モデルによる解析から得られた、微細構造を特徴付けるパラメータ（磁気的周期と相関長）の試料厚さと中性子波長に対する依存性。試料厚さ 0 mm への外挿（赤い破線で囲った部分）が多重散乱の影響を排除したパラメータの値を表す。

## 筋ジストロフィー症発症の新たな仕組みを発見

2016年8月4日  
東京都健康長寿医療センター  
高エネルギー加速器研究機構

### 発表内容の概要

東京都健康長寿医療センター研究所の遠藤玉夫副所長、萬谷博研究副部長、高エネルギー加速器研究機構の加藤龍一准教授、桑原直之研究員らの共同研究グループは、先天性筋ジストロフィー症の一種である筋眼脳病の原因となるタンパク質の機能を解明し発症機構を明らかにしました。この研究成果は、今後の病態解明や治療法の開発に大きく貢献するものと期待されます。本研究は、米国科学アカデミー紀要「Proceedings of the National Academy of Sciences of USA (PNAS)」に掲載されるのに先立ち、オンライン版(米国東部時間8月1日午後3時:日本時間2日午前5時)に掲載されました。

### 研究の背景

筋眼脳病は先天性筋ジストロフィー症の一種で全身の筋力が低下する筋ジストロフィーに加えて脳の発達異常を伴うことを特徴とする重篤な遺伝子疾患です。日本に多いことで知られる福山型先天性筋ジストロフィー症と同じ症状を呈する類縁疾患であり、未だ病態には不明な点が多く根本的な治療法はありません。私たちは以前に、筋眼脳病の原因遺伝子 POMGNT1 を発見し、POMGNT1 は糖鎖を作る“糖転移酵素”というタンパク質であり、遺伝子変異で POMGNT1 の酵素活性が失われて糖鎖を作れなくなることが発症要因となることを明らかにしています。しかし、筋眼脳病では、POMGNT1 の酵素活性では作ることができない糖鎖も無くなることから、POMGNT1 の機能を解明し、糖鎖異常と病態の関係を明らかにする必要があります(この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2016/08/04/press20160804.pdf> をご覧ください)。

## オンデマンド光機能酸化物ヘテロ構造の合成に成功～紫外線吸収・透明太陽電池に向けた新素材～

2016年8月31日  
東京大学物性研究所  
高エネルギー加速器研究機構  
東京工業大学

### 1. 発表者:

松田巖(東京大学物性研究所 附属極限コヒーレント光科学研究センター 准教授)

組頭広志(高エネルギー加速器研究機構(KEK) 物質構造科学研究所 教授)

小澤健一(東京工業大学理学院 化学系 助教)

### 2. 発表のポイント:

◆代表的な金属酸化物であるチタン酸ストロンチウム( $\text{SrTiO}_3$ ) 基板上に数原子層のルテニウム酸ストロンチウム( $\text{SrRuO}_3$ ) を積層させたヘテロ接合界面において、 $\text{SrRuO}_3$  の膜厚によって光学応答を任意に制御できることを発見した。

◆本研究成果を元に、光機能に合わせたヘテロ構造をオンデマンドで作製できる。

◆ $\text{SrTiO}_3$  は可視光は透過するが紫外線を吸収する半導体材料であり、 $\text{SrRuO}_3$  層も原子レベルに薄いので高い可視光透過性を持つ。そのため紫外線から守りかつ透明な太陽電池の新素材としての可能性があり、今後の応用が期待される。

### 3. 発表概要:

東京大学物性研究所の松田巖准教授らの研究グループは、高エネルギー加速器研究機構(KEK)の組頭広志教授と東京工業大学の小澤健一助教と共同で、二種類の異なる酸化物を接合させたヘテロ界面において、光学応答の主要な現象の一つである光起電力を人工的に制御できることを発見しました。レーザーを使った原子レベルでの精密結晶成長技術を駆使し、チタン酸ストロンチウム( $\text{SrTiO}_3$ ) 結晶基板上に数原子層厚さのルテニウム酸ストロンチウム( $\text{SrRuO}_3$ ) 超薄膜を成長させて、ヘテロ構造を作製しました。紫外光レーザー照射により光起電力を発生させ、レーザーと同期したシンクロトン放射光でヘテロ構造の電子状態変化を追跡する時間分解光電子分光法により、その緩和過程をリアルタイムで捉えることに成功しました。 $\text{SrRuO}_3$  薄膜の膜厚を変えることでヘテロ界面の電子構造が劇的に変化し、それに合わせて光学応答が200倍も向上し、さらに光起電力の大きさと緩和寿命が敏感に変わります。

した。得られた結果を元に数値シミュレーションを実施したところ、この光学応答の変化に必要な光キャリアの量やダイナミクスを明らかにすることができました。

本研究により酸化物ヘテロ構造における光起電力の発生とその制御の仕組みを定量的に説明することが可能になりました。本成果を元に光機能に合わせたヘテロ構造をオンデマンドで作製できることでしょう。

本研究成果はドイツの学術誌「Advanced Materials Interfaces」に2016年9月5日（現地時間）に掲載予定です（この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2016/09/06/press20160831.pdf> をご覧ください）。

## 新材料ゲルマネンの原子配置に対称性の破れ～省エネ・高速・小型電子デバイス実現に向けた素子開発へ道～

2016年9月13日  
日本原子力研究開発機構  
東京大学  
高エネルギー加速器研究機構

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構（理事長 児玉敏雄，以下「原子力機構」）先端基礎研究センターの深谷有喜研究主幹らは、東京大学物性研究所（総長 五神真）の松田巖准教授らと高エネルギー加速器研究機構（機構長 山内正則，以下「KEK」）物質構造科学研究所の兵頭俊夫特定教授らのグループとの共同研究により、全反射高速陽電子回折（TRHEPD）法を用いて単原子層状物質グラフェンのゲルマニウム版であるゲルマネンの原子配置を決定しました。

ゲルマネンはポストグラフェンとして期待されるナノテクのための新材料です。ゲルマネンはグラフェンとは異なり自然界に存在しませんが、最近の金属基板上での合成の報告を契機に、世界中で精力的に研究されています。これまで、ゲルマネンの原子配置についてはいくつかの提案はされてきましたが、まだ実験的な構造決定の報告はありませんでした。今回本研究グループは、表面敏感なTRHEPD法を用いて、アルミニウム基板上でのゲルマネンについて調べました。その結果、これまでの予想に反し、原子配置の対称性が破れていることが明らかになりました。今回、基板となる原子配置がわかったことにより、ゲルマネンを用いた省エネ・高速・小型の新しい電子デバイスの設計・開発の促進が期待されます。

本研究成果は、9月8日に英国物理学会（IOP）が発行する「2D Materials」誌のオンライン版に掲載されました（この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/pressrelease20160913.pdf> をご覧ください）。

## ビタミンD受容体の不活性型と活性阻害型の構造を解明～創薬ターゲットとなるビタミンD受容体とリガンドとの相互作用機構を原子レベルで明らかに～

2016年9月16日  
昭和薬科大学  
高エネルギー加速器研究機構  
横浜市立大学

### 研究成果のポイント

- ◆ビタミンD受容体リガンド結合ドメインの不活性型と活性阻害型の構造を原子レベルで解明。
- ◆ビタミンD受容体は創薬ターゲットとして知られている核内受容体の一種で、解明した構造・相互作用機構は核内受容体全般への適用が期待できる。
- ◆目的の分子構造をより生体内に近い状態で得る解析手法を確立。分子ダイナミクス、生命機能の解明へ向けた貢献が期待できる。

### 概要

ビタミンD受容体（VDR）は核内受容体の一種で、骨粗しょう症をはじめとする様々な病院と関連していることが知られています。VDRの構造は、不活性型、活性型、活性阻害型の3つに大きく分類されます。安定な活性型VDRは、今までに100以上の結晶構造が報告されてきました。一方、不安定な不活性型と活性阻害型の構造は未解明で、標的タンパク質との相互作用や機能調整がどのくらい行われているか分かりませんでした。本研究グループは、生体内に近い状態である、溶液中におけるタンパク質の構造を解析できるX線小角散乱（SAXS）と、既存の結晶構造を活用する分子動力学計算（MD）を組み合わせる解析した結果、不活性型VDRと活性阻害型VDRの原子レベルの構造を初めて明らかにし、リガンド結合メカニズムを新たに提唱しました。

VDRの活性型、不活性型、活性阻害型の全ての構造が明らかにされたことで、それらの機能の発現・抑制の両方が制御可能となり、その仕組みを用いた創薬デザインの幅が大きく広がられました。

また、SAXSとMDを組み合わせる解析手法は、VDRのように結晶構造解析では困難な、機能発現に動きを伴うタンパク質の原子分解能での解析に威力を発揮すると期待できます。

本研究成果は9月8日にアメリカ化学会の学術雑誌（Journal of Medicinal Chemistry）に掲載されました（この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2016/09/16/pressrelease20160916.pdf> をご覧ください）。

## 低温で高活性なアンモニア合成新触媒を実現

2016年10月7日  
科学技術振興機構（JST）  
東京工業大学  
高エネルギー加速器研究機構

### 研究成果のポイント

- ◆カルシウムアミドにルテニウムを固定した触媒が300°C程度の低温度領域で従来よりも一桁高いアンモニア合成活性を実現した。
- ◆平らな形状の大きさのそろったルテニウムのナノ粒子が自然に形成された。
- ◆約1ヶ月の反応を継続しても触媒活性が劣化しないことがわかった。

### 概要

JST 戦略的創造研究推進事業において、東京工業大学の細野秀雄教授と原亨和教授、北野正明准教授、井上泰徳研究員、高エネルギー加速器研究機構の阿部仁准教授らはカルシウムアミド ( $\text{Ca}(\text{NH}_2)_2$ ) にルテニウムナノ粒子を固定した触媒が300°C程度の低温度領域で、従来の触媒の10倍以上の高い触媒活性を示すことを発見しました。さらに、Ba（バリウム）を3%添加した  $\text{Ca}(\text{NH}_2)_2$  にルテニウムを固定した触媒 ( $\text{Ru}/\text{Ba}-\text{Ca}(\text{NH}_2)_2$ ) では、700時間（約1カ月）以上に亘り反応を行っても触媒活性はほとんど低下せず極めて安定に働く触媒であることも明らかにしました。

アンモニアは窒素肥料原料として膨大な量が生産されており、最近では水素エネルギーキャリアとしても期待が高まっています。本研究成果は、アンモニア合成プロセスの省エネルギー化技術を大幅に促進する結果であるといえます。従来から使われてきたルテニウム触媒の多くは、金属酸化物やカーボン材料などに固定されていました。本触媒では、窒素含有無機化合物であるカルシウムアミドを用いることで、ルテニウムと窒素が結合し、カルシウムアミド上に大きさのそろった平らな微粒子状でルテニウムが固定されます。このことにより低温で高活性かつ安定な触媒活性が発現しました。

本研究成果は米国科学誌「エーシーエス・キャタリシス (ACS Catalysis)」オンライン速報版に2016年10月8日午前0時（日本時間）に公開されます（この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2016/10/06/pressrelease20161008.pdf> をご覧下さい）。

。

### 新しい結合の形成を伴う固体のスピンクロスオーバー現象を観測

2016年11月15日

物質・材料研究機構  
高輝度光科学研究センター  
高エネルギー加速器研究機構

#### 【概要】

1. 国立研究開発法人物質・材料研究機構機能性材料研究拠点の辻本吉廣主任研究員、広島大学大学院理学研究科の石松直樹助教、高輝度光科学研究センターの水牧仁一朗副主幹研究員、河村直己副主幹研究員、日本大学文理学部の川上隆輝准教授らの共同研究グループは、合成が困難であったコバルト酸フッ化物を材料設計および高圧合成法によって作製することにより、圧力でコバルトの高スピン状態が低スピン状態へ転移するスピンクロスオーバー現象を観測しました。さらに、この現象が結合の強い固体でありながら、コバルトイオンとフッ素イオンの間に新しい結合の形成を伴う新規な機構で発現することを明らかにしました。有機分子を含まない固体ではスピンクロスオーバー現象の観測は例が少なく、本成果は、安定性と耐久性に優れた固体のスピンクロスオーバーの設計指針を与え、圧力センサーやメモリーの実用材料としての活用が期待されます。

2. スピンクロスオーバー（もしくはスピン転移）は金属イオンの低スピン状態と高スピン状態が入れ替わる現象で、熱、光、圧力などの外部刺激によって引き起こされます。近年、この特異な現象を利用して、高スピン状態と低スピン状態を1ビット（データの最小単位）と見立てた不揮発性メモリーの媒体としての応用が期待され、世界中で活発に研究されています。このスピンクロスオーバー現象を誘起するためには、低スピン状態と高スピン状態のエネルギーを近接させる必要があり、金属イオンの電子状態に直に影響を与える配位子3の選択が重要になります。これまで報告されているスピンクロスオーバー物質の大半は、配位子の選択肢が多く、異なるスピン状態のエネルギー差を容易に制御できる有機金属錯体系物質でした。一方、酸化物のような固体では異種の陰イオン（アニオン）との結合を好まないために配位環境の設計は制約され、スピンクロスオーバー現象を起こすのは難しいと考えられていました。

3. 本グループは過去に、複合アニオン物質の合成に有効な高温高圧法を用いて、層状構造をもつコバルト酸フッ化物 ( $\text{Sr}_2\text{CoO}_3\text{F}$ ) の合成に成功し、Coイオンは5つの酸素に囲まれた  $\text{CoO}_5$  正方ピラミッド配位を構成し高スピン状

態をとることを明らかにしていました。そこで今回、本物質の結晶構造と電子状態の圧力応答を調べることにしました。まず、高エネルギー加速器研究機構 (KEK)・フोटンファクトリーの BL-18C に設置された高圧X線回折装置4で結晶構造を調べたところ、常圧下では遠く離れていた Co と F の原子間距離が、加圧するにつれて異常に大きな圧縮率で近接し始めました。これはより強固な共有結合の形成を示唆しており、 $\text{CoO}_5\text{F}$  八面体への配位多面体の変換を固体で初めて見出しました。さらに、SPring-8 の BL39XU で X線発光分光法による測定を行い、Co のスピン状態を観察したところ、Co と F 原子の共有結合化に対応して高スピン状態から低スピン状態へ徐々に転移する結果を得ました。

4. これらの結果は、酸化物の複合アニオン化によってスピンクロスオーバー現象を初めて観測したということだけでなく、堅牢な構造からなる酸化物系物質においても配位子の設計次第で、組成と基本構造を変えることなく新しい結合を作りだせることを示しています。今後は、超伝導や強磁性転移等の他の電子磁気物性の発現にも応用できるか検討を行い、機能性デバイスの材料としての可能性を追求していきます。

本研究成果は、11月2日（現地時間）発行の英国 Nature Publishing Group のオンライン科学雑誌「Scientific Reports」に掲載されました。（この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2016/11/15/pressrelease20161115.pdf> をご覧ください）。

### フェムト秒X線光電子回折法により 強レーザー電場中の分子の構造を決定

2016年12月12日

高エネルギー加速器研究機構  
東京大学大学院理学系研究科  
理化学研究所  
高輝度光科学研究センター

#### 【概要】

高エネルギー加速器研究機構 (KEK)、東京大学、立命館大学、千葉大学、京都大学、量子科学技術研究開発機構 (QST)、理化学研究所 (理研)、及び高輝度光科学研究センター (JASRI) の共同研究グループは、X線自由電子レーザー (XFEL) 施設「SACLA」を用いたフェムト秒X線光電子回折法により、赤外パルス強レーザー電場中のヨウ素分子の構造を決定することに成功しました。

これまで、光励起によりピコ秒～フェムト秒の時間領域で物質の構造変化を起こす超高速光化学反応を光電子回折法により可視化した研究例はありません。研究グループは、ナノ秒の赤外パルス YAG レーザー電場で向きを揃えた気相のヨウ素分子にフェムト秒の XFEL パルスを照射して、X線光電子回折像を測定しました。その結果、YAG レーザー電場中のヨウ素分子の原子間距離は、レーザー電場により結合が弱くなるために平衡構造のそれよりも 10% 伸びていることを発見しました。今回は赤外パルス YAG レーザーを用いしましたが、光化学反応を誘起するポンプ用の短パルスレーザーを導入することで、超高速光化学反応を可視化できる可能性があります。この成果により、「分子ムービー」の実現へ大きく前進しました。

本研究は、KEK の柳下明名誉教授、和田健特別准教授、東京大学の酒井広文教授、峰本紳一郎助教、QST の赤木浩主幹研究員、立命館大学の寺本高啓助教、千葉大学の藤川高志名誉教授、水流翔太 DC3、二木かおり助教、京都大学の間嶋拓也助教、吉田慎太郎 DC3、理研放射光科学総合研究センター・ビームライン研究開発グループの矢橋牧名グループディレクター、JASRI・XFEL 利用推進室の富樫格研究員、中嶋享博士研究員らを中心とした共同研究グループの成果です。本研究は、X線自由電子レーザー (XFEL) 施設「SACLA」のビームライン BL3 を利用して行われました。

本成果は、オンライン版の科学ジャーナル『Scientific Reports』の 12 月 9 日号 (現地時間) に掲載されました。(この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2016/12/12/pressrelease20161212.pdf> をご覧ください)。

## 分子の自己集合現象の解明に迫る物質群の存在を発見 ～4 価のゴールドバーク多面体構造の合成に成功～

2016 年 12 月 22 日

東京大学

科学技術振興機構

高輝度光科学研究センター

東北大学原子分子材料科学高等研究機構

高エネルギー加速器研究機構

### 【発表のポイント】

- ◆世界で初めて、4 価のゴールドバーク多面体構造をとる物質群の存在を発見し、人工的に作ることに成功しました。
- ◆これらの物質は、分子の自己集合現象における新たな法則性と、これらが与える新たな幾何形状から導き出された新事実です。
- ◆自己集合の本質に迫る研究であり、タンパク質の超分子構造、あるいはウイルスの骨格構造などの巨大分子構造の設計に役立つことが期待されます。

### 【発表概要】

東京大学大学院工学系研究科の藤田大士特任研究員 (科学技術振興機構さきがけ研究者兼任) と藤田誠教授、およびその共同研究チーム [上田善弘特任研究員 (現: 京都大学化学研究所助教), 佐藤宗太東北大学原子分子材料科学高等研究機構 (WPI-AIMR) 准教授, 水野伸宏研究員, 熊坂崇副主席研究員 (高輝度光科学研究センタータンパク質結晶解析推進室)] らは、世界で初めて、4 価 (それぞれの頂点に 4 つの辺が接続していること) のゴールドバーク多面体構造を有する物質群の存在を発見しました。3 価 (各頂点に 3 つの辺が接続) のゴールドバーク多面体はこれまでも知られていましたが、4 価のゴールドバーク多面体が分子構造として「意味」を持つ事が明らかになったのは今回の研究が世界で初めてです。

4 価のゴールドバーク多面体構造を持つ物質群は、「分子が自発的に組み上がり複合体を形成」する「分子の自己集合現象」(図 2) を詳細に研究する中で、新しい事実として見つかりました。発見された物質群は、言わば自己集合現象が自然の結論として導き出した分子構造であり、自己集合現象の本質と深く関わっています。

今回の研究成果は、一見複雑な現象もシンプルな原理で説明できるという自然の神秘に迫った基礎研究的な側面と、今後、機能を持った巨大分子構造を自己集合させる設計指針として役立つという応用的な側面の双方を兼ね備えた独創性の高いものです。

### 【発表雑誌】

雑誌名: 「Nature」

論文タイトル: Self-assembly of tetravalent Goldberg polyhedra from 144 small components

著者: Daishi Fujita, Yoshihiro Ueda, Sota Sato, Nobuhiro Mizuno, Takashi Kumasaka, Makoto Fujita

(この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2016/12/22/pressrelease20161222.pdf> をご覧ください)。

## 鉄系超伝導体における結晶構造と超伝導の特異な関係を発見

2016 年 12 月 22 日

高エネルギー加速器研究機構

日本大学

### 【概要】

高エネルギー加速器研究機構 (KEK) 物質構造科学研究所 (以下、物構研) の小林賢介特任助教、熊井玲児教授、村上洋一教授らは、東京工業大学 (以下、東工大) の山浦淳一特任准教授、飯村壮史助教、細野秀雄 (ほそのひでお) 教授、日本大学の高橋博樹教授らと共同で、鉄系超伝導体の圧力下における超伝導転移温度 ( $T_c$ ) と結晶構造の関係を放射光 X 線を用いて明らかにしました。その結果、鉄系

超伝導体で広く知られてきた Tc 上昇則に反し、歪みの大きい構造でありながら高い Tc を示すことを発見しました。これは高い Tc を生み出す起源について新たな示唆を与えるものであります。これにより、高温超伝導体の開発に対する新たな設計指針が期待されます。

本成果は、2016 年 12 月 22 日 10 時（現地時間）にネイチャー誌の姉妹誌である学術誌「Scientific Reports」のオンライン版で公開されました。

（この記事の続きは [http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2016/12/22/pressrelease20161222\\_2.pdf](http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2016/12/22/pressrelease20161222_2.pdf) をご覧下さい）。