

新しい単原子シート「ボロフェン」の中に質量ゼロ粒子を発見

2017年2月20日

東京大学

東京大学物性研究所

高エネルギー加速器研究機構

1. 発表者：

松田 巖（東京大学物性研究所 准教授）

杉野 修（東京大学物性研究所 准教授）

組頭 広志（KEK 物質構造科学研究所 教授）

2. 発表のポイント：

- ◆ 次世代エレクトロニクス動作原理に不可欠な質量ゼロの伝導粒子が、新しい2次元物質であるホウ素の単原子シート「ボロフェン」で発見されました。
- ◆ 従来「質量ゼロ」の伝導粒子の生成には蜂の巣状の原子配列が必要とされてきましたが、その配列を持たない場合でも生成することが理論と実験から実証されました。
- ◆ 本研究は原子シートに基づく新量子デバイス開発に革新的な設計理念を与えます。

3. 発表概要：

東京大学物性研究所の松田巖准教授と杉野修准教授らの研究グループは、中国科学院の Sheng Meng 教授・Kehui Wu 教授の研究グループ、高エネルギー加速器研究機構（KEK）の組頭広志教授の研究グループと共同で、ホウ素の単原子シート「ボロフェン」の中に、「質量ゼロ」粒子を発見しました。これまで、質量ゼロの粒子は炭素の単原子シート「グラフェン」に存在することが知られており、固体物理の中心テーマとして研究されてきました。また最近では、この粒子は電気伝導を担うため、エレクトロニクスの新たな動作原理に従うものとしても注目されています。これまでの研究から、単原子シートにおける質量ゼロ粒子の生成には蜂の巣状の原子配列が必要と考えられていました。しかしながら発見されたばかりの単原子シート「ボロフェン」では、蜂の巣状の配置を持たないのにも関わらず、同様の質量ゼロ粒子が生成することがわかりました。この粒子はまた、シートを支える基板の影響により性質の異なるペアを形成して存在していることも発見しました。

本研究成果は、新材料「ボロフェン」が示す新奇な性質の発見のみならず、次世代材料として注目されている単原子シートに対して新しい物質設計理念を提供します。今後、本研究成果を元に、質量ゼロ粒子による多種多様な原子シート物性の発見と工業利用への促進が期待されます。

本研究成果はアメリカ物理学会の速報誌「Physical Review Letters」に掲載されています（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2017/02/20/pressrelease20170220.pdf> をご覧ください）。

光で強誘電体中の水素原子を動かし、分極を高速に制御～理論と実験の発展的融合～

2017年3月7日

高エネルギー加速器研究機構

科学技術振興機構

【本研究成果のポイント】

- クロコニ酸結晶は有機強誘電体であり、有機デバイス材料として注目されているが、高速の分極制御が難しかった。
- クロコニ酸結晶にフェムト秒パルス光を照射すると、結晶中の水素原子が動いて分極反転を引き起こし、短時間で強誘電分極が変化した。
- 有機強誘電体を利用した高速のスイッチ、変調素子、メモリーなどの開発につながると期待される。

【概要】

クロコニ酸結晶はクロコニ酸分子同士が水素結合によって結びつけられた有機強誘電体であり、特に、常誘電から強誘電への転移温度（400 ケルビン以上）が高いことや、強誘電分極の値が大きいことからキャパシターなどの有機デバイスの材料として注目を集めている。

今回、高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所の岩野薫研究機関講師、東京大学 大学院新領域創成科学研究科の岡本博教授（兼産業技術総合研究所 先端オペランド計測技術オープンイノベーションラボラトリ有機デバイス分光 チームラボチーム長）、宮本辰也助教、産業技術総合研究所 機能材料コンピュータシミュレーション研究センターの下位幸弘研究チーム長らの研究グループは、同物質にフェムト秒パルス光を照射すると、強誘電分極が1ピコ秒（1ピコ秒＝1/1,000,000,000,000秒）以内という極めて短時間で減少し、その後、10ピコ秒の時間スケールで回復する現象を見出した。さらに、理論的な解析により、この現象が、水素原子の移動とクロコニ酸分子の π 電子系の変化による微視的な分極反転に基づくことを明らかにした。本研究は、光誘起による強誘電分極反転を実験と理論の両面から解明したものであり、有機強誘電体を利用した高速の光スイッチ、光変調素子、光メモリーなどの開発につながると期待される。

本成果は、米国物理学会誌 Physical Review Letters のオンライン版で3月13日（米国東部時間）公開予定である。（この記事の続きは <http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2017/03/07/pressrelease20170307.pdf> をご覧ください）。

フォマティクスのための大規模多次元データベースシステムの提案」Vol.2016_DBS_163 No.11, Vol.2016_IFAT_123 No.11, 2016/9/14 に掲載されています（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2017/04/17/pressrelease20170417r.pdf> をご覧ください）。

量子ビーム実験・計算データをウェブ上で高速解析する可視化システムを開発 －自動車用磁性材料開発のための最強ツール－

2017年4月17日

高エネルギー加速器研究機構
高効率モーター用磁性材料技術研究組合

本研究成果のポイント

- 次世代自動車モーター用新規磁性材料の開発を効率化するためのツール「磁性材料データベース可視化システム」を開発
- 量子ビーム実験と大規模シミュレーションのデータを融合して、データベース化し、解析・可視化することに成功
- 巨大になる将来の量子ビーム実験データから、材料開発に必要な情報を抽出できる、効率的な研究開発のプロトタイプとなるシステム

【概要】

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准教授 小野寛太と、高効率モーター用磁性材料技術研究組合（MagHEM）は、量子ビーム実験やシミュレーションの膨大なデータを統合的に扱い、ウェブ上で解析・可視化するシステムを開発した。KEK 計算科学センター内に設置され、3月から MagHEM が自動車モーター用新規磁性材料の研究開発のため利用している。

将来、加速器の高性能化によって量子ビーム実験データが膨大になり、現状の方法ではデータ解析が不可能になると考えられている。また、大量の材料データ群から情報科学的手法を用いて新しい知見を引き出す新たな材料設計技術「マテリアルズ・インフォマティクス」（Materials Informatics = MI）を用いて、量子ビーム実験データやシミュレーションデータから材料データを効率的に抽出する技術の開発が求められている。今回開発したシステムは、大型の放射光施設などで研究の大幅な作業効率化を図るための先駆けとなる技術である。

この成果は、2016年9月14日情報処理学会研究報告「マテリアルズ・インフォマティクスのための大規模多次元データベースシステムの提案」として発表された概念を実用化したもので、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構本（NEDO）の委託事業 未来開拓研究プログラム「次世代自動車向け高効率モーター用磁性材料技術開発」の結果得られたものである。

本成果は、情報処理学会研究報告「マテリアルズ・イン

世界初！光でほどけるらせん状人工ナノ線維の開発に成功～人工細胞からドラッグデリバリーまで幅広い分野への応用に期待～

平成 29 年 5 月 8 日
国立大学法人千葉大学
高エネルギー加速器研究機構

千葉大学大学院工学研究科の矢貝史樹准教授を中心とした研究チームは、光を当てることで「らせん構造」がほどける人工のナノ線維の開発に成功しました。

この成果は、思い通りのタイミングで内包した物質を放出したり、あるいは物質を取り込んだりすることができるナノ材料の開発へと発展することが期待されます。

■背景 ー微小線維とはー

微小線維とは、細胞内に存在し、細胞形状の維持、形の制御、さらには細胞内での物質移動を担っている線維状ナノ構造体です。主にアクチンと呼ばれる粒子状のタンパク質がユニットとなり、らせん状に結合することで形成されます。生体系に見られるような精緻な構造を持つ線維状の微小材料を人工分子で構築することは挑戦的な課題であり、世界中で活発に研究されています。人工の材料を使い様々な機能を持った分子をユニットとして用いることで、生体系にはない独自の機能を実現することができます。

■本研究の成果

研究チームは、今回世界で初めて、光でらせん構造がほどける人工のナノ線維（太さはわずか 10 ナノメートル！）の開発に成功しました。線維の見かけの長さ（末端から末端までの直線距離）は 2 マイクロメートル程度から 10 マイクロメートルまで大きく変化することもわかりました。この新しいナノ線維は、光で折れ曲がる性質を持ったアゾベンゼン分子が結合することで形成されます。研究チームは、アゾベンゼン分子を水素結合によって 6 個集め、「ロゼット」と呼ばれる根生葉の形にすると、ロゼットが次々と連なり、らせん状のナノ線維（超分子ポリマーとも呼ぶ）を形成することを発見しました。ロゼットの「葉」が全て開いている時は、ロゼットは一定の湾曲率を保ちながら結合してゆき、らせん状の線維を形成します。光をあてるとアゾベンゼン分子が異性化するためにロゼットの「葉」が部分的に折れ曲がり、その結果、湾曲性が損なわれます。この局所的な構造変化がらせん構造全体で起こるため、らせん構造がほどけて伸びきった線維へと構造変化するので、このようなナノ線維の構造の変化は、高エネルギー加速器研究機構の X 線小角散乱測定装置などによる計測によ

り明らかになりました。

■今後の展望

近年、様々な刺激を用いて分子の形状を制御することが可能になってきています。しかし、分子より少し大きなサイズ、すなわちナノメートルスケールの物体の形状を外部刺激によって変化させることは未だ困難な課題であり、身近な現象である光の照射によってこれを可能にするという本成果は画期的といえます。

今後は、らせん構造内に内包された薬剤などを患部へ任意のタイミングで放出するドラッグデリバリーシステムや、コンパクトに折りたたまれたらせん構造から網目のような線維ネットワークを一気に広げて物質を捕捉するナノシステムなど、生体機能を高度なレベルで模倣したスマートナノマテリアルへの発展が期待できます。

本研究は、日本学術振興会科学研究費補助金・新学術領域研究『 π 造形科学』（領域代表福島孝典）における研究課題「複合アセンブリー π 造形システム」（研究代表者：矢貝史樹）の一環として行われました。また、本研究の成果は Nature Communications (DOI:10.1038/NCOMMS15254) にて日本時間 2017 年 5 月 10 日（水）午後 6 時に公開されます（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/press20170511.pdf> をご覧ください）。

電場・磁場中で薄膜の深さ方向ナノメーター分解能を実現 ～磁性体デバイス動作中の化学・磁気状態の観察が可能に～

平成 29 年 8 月 8 日
高エネルギー加速器研究機構

■成果のポイント

- 磁気記録デバイス等に用いられる薄膜の深さ方向の化学・磁気状態をナノスケールで観察できる「軟X線深さ分解X線吸収分光法」において、検出方法を変えることで、世界で初めて、磁場中や電場中における観察が可能に。
- 電場によって磁性を制御する次世代のスピン트로ニクス材料をはじめ、様々な薄膜デバイス技術の発展への寄与が期待される。

■発表概要

高エネルギー加速器研究機構（KEK）物質構造科学研究所の酒巻真粧子助教は、雨宮健太教授とともに、磁気記録デバイスなどの薄膜の化学・磁気状態を深さ方向にナノメーター（nm）の分解能で観察する分光法（「軟X線深さ分解X線吸収分光法」以下、「軟X線深さ分解 XAFS 法」）において、従来不可能だった磁場中や電場中での測定を可能にしました。

従来の「軟X線深さ分解 XAFS 法」は、試料に軟X線を当てたときに放出される電子を検出し、電子線の角度によって観察できる深さが異なることを利用して深さ方向の分布を調べる分光法ですが、新たに開発した手法は、試料から放出される蛍光X線を検出することで、従来の手法の利点を生かしたまま、磁場中や電場中で観察ができます。この新手法によって、電場を用いて磁性を制御する次世代のスピン트로ニクス材料をはじめ、様々な薄膜デバイスの動作原理の解明が飛躍的に進むと期待されます。

この研究成果は、8月17日刊行の米国・Review of Scientific Instruments 誌に掲載される予定です。本研究は文部科学省科学研究費補助金若手研究 B（代表：酒巻真粧子）の支援のもとで行われました（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/pressrelease20170808.pdf> をご覧下さい）。

細胞内骨格の賢い「解体屋」～微小管を解体する分子モーターが効率良く働く仕組みを解明～

平成 29 年 9 月 13 日
東京大学／高エネルギー加速器研究機構

■成果のポイント

- 細胞骨格である微小管を脱重合する分子モーター KIF2 が効率良く働く仕組みを明らかにした。
- ATP を加水分解するエネルギーを効率良く使い、微小管と大きな複合体を形成する過程を経て微小管を脱重合することを示した。
- 微小管の脱重合は神経の伸び縮みや細胞の分裂など生命現象の要となる反応であり、その仕組みを明らかにしたことは神経変性疾患や癌の病態解明・創薬ターゲットの重要な基盤となる。

■発表概要

東京大学大学院 医学系研究科の廣川信隆 特任教授と小川覚之助教らの研究グループは、高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所の西條慎也特任助教（研究当時）と清水 伸隆准教授との共同研究によって、細胞内の骨格である微小管の「解体屋」が効率良く働く仕組みを明らかにしました。

微小管は、チューブリンというタンパク質が重合して集まったチューブ状の構造をしています。神経細胞の形成や細胞分裂などの生命現象には、微小管の形成（重合）と解体（脱重合）が秩序立って進められることが重要です。キネシンというタンパク質のひとつである KIF2 がこの微小管の解体を担い、少ない数の KIF2 が、多くのチューブリンからなる巨大な微小管を、先端から順番に解体することは知られていましたが、それがなぜ可能なのかはわかっていませんでした。

研究グループは、KIF2 が微小管を解体する過程を詳細に解析し、生体内のエネルギー源 ATP を加水分解する過程で、KIF2 分子 1 つがチューブリン 2 量体 2 セットを相手にしてまとめて解体することを明らかにしました。KIF2 は、少ない分子数で ATP を効率良く利用し微小管を解体する「省エネモーター」であったのです。

本研究は文部科学省科研費（JP18002013,JP23000013,JP16H06372）、および 2017 年 3 月まで実施された国立研究開発法人日本医療研究開発機構（AMED）創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業（創薬等支援技術基盤プラットフォーム事業）の支援により得られました（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2017/09/13/pressrelease20170913.pdf> をご覧下さい）。

グラフェンの厚さの違いと電子の動きの関係を世界で初めて観察

平成 29 年 9 月 15 日

東京工業大学
高エネルギー加速器研究機構

■成果のポイント

- 電子・光電材料として期待されるグラフェン内の電子移動を高時間・空間分解能（フェムト秒とナノメートル）で初めて観測
- これにより、電子の動きとナノ構造の関係を明らかに
- 素子開発に役立つ欠陥情報の提供など、グラフェンの新規特性評価手法の開拓

■発表概要

高エネルギー加速器研究機構（KEK）物質構造科学研究所の福本恵紀特任助教は、東京工業大学理学院化学系の腰原伸也教授、フランス国立科学研究センター（CNRS）、ピエール・アンド・マリー・キュリー大学の Mohamed Boutchich 准教授らと共同で、グラフェン内の超高速な電子の動きが場所ごとに異なることを世界で初めて観測した。

理想的なグラフェンは炭素原子 1 層の厚さをもつ二次元物質であり、高速デバイスなどへの応用が期待されている。しかし実際に作成されるグラフェンの構造はナノスケールで不均一なため、その構造の違いが電子の運動に影響を与えると予測されている。グラフェンの実用化のためには、デバイスの動作を阻害する構造、また高性能化に利用できる構造を明確にする必要がある。

本研究では、一般的に使われている方法で作成されたグラフェンの結晶構造の違いに由来した電子輸送特性の観察に成功した。具体的には、ラマン顕微鏡を用いて局所的な結晶構造から電子状態を計算し、同じ試料の同じ場所を独自に開発したフェムト秒時間分解光電子顕微鏡法（TR-PEEM）で観察することで、構造と電子輸送特性を直接関連付ける結果を得た。この研究成果は、オランダの科学誌「Carbon（カーボン）」に 8 月 21 日オンライン速報版で公開された。

なお、この研究は、科学技術振興機構（JST）の戦略的創造研究推進事業 CREST「光技術が先導する臨界的非平衡物質開拓」、日本学術振興会 科学研究費助成事業 若手研究（B）（No.15K17677）、及び、JST の ACCEL フィージビリティスタディ「ナノスケール・フェムト秒電子ダイナミクス直接観察装置開発と光電子材料開拓手法の革新」の助成により行われた（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2017/09/15/pressrelease20170915.pdf> をご覧ください）。

ピロリ菌がんタンパク質の 1 アミノ酸多型が日本人胃がん多発の背景に～ピロリ菌の発がん活性を規定する分子構造基盤～

平成 29 年 9 月 20 日

東京大学／高エネルギー加速器研究機構

■成果のポイント

- ピロリ菌がんタンパク質 CagA とその発がん標的分子である SHP2 間の複合体形成を担う結晶構造を解明し、複合体の安定性と発がん活性の連関を明らかにしました。
- 日本を含む東アジアに蔓延するピロリ菌 CagA のみが保有するユニークかつ強力な SHP2 結合様式を発見し、その結合様式が胃がん発症を著しく促すことを解明しました。
- 本研究の成果は、ナノスケールでの胃がん発症機構の理解を前進させるとともに、構造情報を基盤にした革新的な胃がん予防法・早期治療法の開発に繋がるのが期待されます。

■発表概要

ほぼ全ての胃がんはヘリコバクター・ピロリ（ピロリ菌）感染を背景に発症し、その発がん過程にはピロリ菌が産生する病原因子 CagA タンパク質が重要な役割を果たします。東アジア諸国（日本、中国、韓国）は世界的な胃がんの最多発地域として知られています。疫学調査から東アジアで見られるピロリ菌が保有する東アジア型 CagA は、それ以外の地域で見られる欧米型（世界標準型）CagA に比べ、胃がん発症に、より深く関与することが指摘されていますが、これら 2 種の CagA 間の発がん活性の違いが生じる構造基盤は不明でした。今回、東京大学大学院医学系研究科の畠山昌則教授、高エネルギー加速器研究機構の千田俊哉教授らの研究グループは、X線結晶構造解析を通して CagA が標的とする発がんタンパク質 SHP2 との複合体の構造を原子レベルで解明し、東アジア型 CagA と欧米型 CagA の間に存在する 1 つのアミノ酸残基の違いによる立体構造の差異が CagA の SHP2 結合能に大きな影響を与えることを明らかにしました。さらに、東アジア型 CagA が示す欧米型 CagA に比べて圧倒的に強固な SHP2 結合が、SHP2 の酵素活性を著しく増強し、胃の細胞のがん化を促す異常なシグナルを強力に誘導することを見出しました。本研究の成果は、革新的な胃がんの予防法・早期治療法の開発に繋がるのが期待されます。

本研究は、科学技術振興機構・戦略的創造研究推進事業 CREST、文部科学省・科学研究費補助金、日本医療研究開発機構・次世代がん医療創生研究事業、創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム事業ならびに創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業による支援の下に実施されました（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2017/09/20/pressrelease20170920.pdf> をご覧ください）。

なぜ固体中の電子はガラス化するのか？ その謎を初解明自然界に現れるガラス化 現象の統一的理解に期待

平成 29 年 9 月 28 日
東北大学金属材料研究所
東邦大学高輝度光科学研究センター
山梨大学東北大学多元物質科学研究所
東京大学物性研究所
高エネルギー加速器研究機構

■発表のポイント

- 気体・液体・固体のどれとも異なる「ガラス状態」が形成されるメカニズムは物性物理学に残された最大の未解決問題の一つ
- 本研究により固体中の電子がガラス化・結晶化するメカニズムを初めて解明
- 自然界でみられるガラス化現象の統一的理解に期待

■発表概要

窓ガラスなどに代表される「ガラス」物質は、われわれの生活になじみが深いにもかかわらず、その形成メカニズムは未だ完全には理解されていません。そのため、物性物理学に残された最大の未解決問題の一つとされてきました。

東北大学金属材料研究所の橋本顕一郎助教、佐々木孝彦教授の研究グループは、東邦大学理学部、高輝度光科学研究センター（JASRI）、山梨大学工学部、東北大学多元物質科学研究所、東京大学物性研究所、高エネルギー加速器研究機構（KEK）物質構造科学研究所、ゲーテ大学フランクフルト（ドイツ）と共同で、固体結晶中の電子がガラス化・結晶化するメカニズムを解明することに初めて成功しました。

研究グループは、有機固体結晶中の電子のガラス化および結晶化過程を詳細に調べることで、電子のガラス化現象は一般的なガラス形成物質と多くの類似点をもつことを明らかにしました。本研究結果は、自然界で普遍的に現れるガラス化現象への理解をより一層深めるものと考えられます。

本研究結果は、2017年9月29日（米国東部標準時）発行の米科学誌「Science」誌に掲載されます（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/Pressrelease20170929.pdf> をご覧下さい）。

固体と液体の界面での原子の動きをリアルタイムに観察－燃料電池や蓄電池の性能に関わる固液界面現象の解明に期待－

平成 29 年 10 月 25 日
産業技術総合研究所
科学技術振興機構
物質・材料研究機構
東京学芸大学
高エネルギー加速器研究機構

■発表のポイント

- 固体と液体の界面で散乱したX線の強度分布を高速測定する計測技術を開発
- 電気化学反応中の電極表面の原子の動きをリアルタイムに観察可能
- 固液界面での反応機構の解明につながり、燃料電池や蓄電池の性能向上への寄与を期待

■概要

産業技術総合研究所【理事長 中鉢 良治】（産総研）物質計測標準研究部門【研究部門長 高津 章子】ナノ構造化材料評価研究グループ 白澤 徹郎 主任研究員と、国立研究開発法人 科学技術振興機構【理事長 濱口 道成】（JST）、国立研究開発法人 物質・材料研究機構【理事長 橋本 和仁】（NIMS）ナノ材料科学環境拠点【拠点長 魚崎 浩平】（GREEN）増田 卓也 主任研究員ら、国立大学法人 東京学芸大学【学長 出口 利定】教育学部 Voegeli Wolfgang 助教授ら、大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構【機構長 山内 正則】（KEK）物質構造科学研究所 松下 正 名誉教授は、放射光 表面X線回折法を従来比で約 100 倍高速化し、燃料電池などのエネルギー変換に伴う原子の動きをリアルタイムに観察できる技術を開発した。

燃料電池や蓄電池では、固体電極と液体との界面での電気化学反応により、化学エネルギーから電気エネルギーへの変換が行われる。変換効率を飛躍的に高めるには反応機構の理解が不可欠であり、反応機構を反映する電極表面の構造変化を計測できる技術が望まれていた。今回、連続波長をもつ集束X線を利用した表面X線回折法の高速度化技術を開発し、電気化学反応中のモデル電極表面の白金原子の動きをリアルタイムで観察した。この技術によって固液界面での反応機構の解明が進むことで、燃料電池などの性能向上に寄与できると期待される。

なお、この技術の詳細は、2017年10月26日（現地時間）に米国化学会の学術誌 The Journal of Physical Chemistry C にオンライン掲載される（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2017/10/25/pressrelease20171025.pdf> をご覧下さい）。

生物由来合成酵素の分子構造情報に基づく新規生体触媒の開発～創薬に向けた合理的な合成リデザインの一步～

平成 30 年 1 月 9 日

東京大学

高エネルギー加速器研究機構

■発表のポイント：

- X線結晶構造解析により天然物の複雑骨格を構築する多段階反応性酸化酵素の構造を明らかにし、その基質特異性を改変し、触媒能を拡大することに成功した。
- 多段階反応を触媒する酸化酵素の構造解析、機能改変に初めて成功し、天然には存在しない新規化合物を創出した。
- 活性物質を合成する新規生体触媒の創出によって、創薬研究の発展に貢献することが期待される。

■発表概要

天然に存在する生物由来の物質（天然物）は医薬品の原料として有用ですが、構造が複雑なため、これを人工的に合成することは難しいと考えられています。

東京大学薬学系研究科の阿部 郁朗 教授と中嶋 優 大学院生、高エネルギー加速器研究機構の千田 俊哉 教授らの研究グループは、天然物の酵素の構造情報に基づいて、その機能改変を行うことで、驚異的な多段階反応性酸化触媒の創出に成功しました。研究グループはまず、複雑な骨格形成を触媒する酸化酵素に着目し、それらのX線結晶構造解析を行いました。さらに構造情報に基づく機能改変実験を行って、多段階反応を起こす新規酸化触媒を開発しました。

酵素工学の手法を活かし、活性物質を合成する新規生体触媒を用いた物質生産法を開発することで、創薬研究へ貢献することが期待されます。（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/pressrelease20180109.pdf> をご覧ください）。

■雑誌名：Nature communications（1月9日オンライン版掲載予定）

論文タイトル：Structure function and engineering of multifunctional non-heme iron dependent oxygenases in fungal meroterpenoid biosynthesis

著者：Yu Nakashima, Takahiro Mori, Hitomi Nakamura, Takayoshi Awakawa, Shotaro

Hoshino, Miki Senda, Toshiya Senda*, and Ikuro Abe* DOI : 10.1038/s41467-017-02371-w

URL : <http://www.nature.com/ncomms>

ミラー対称性による新型トポロジカル絶縁体を発見 - 高効率電子デバイスの開発に光 -

平成 30 年 1 月 11 日

東北大学大学院理学研究科

東北大学材料科学高等研究所

名古屋大学大学院理学研究科

名古屋大学大学院工学研究科

高エネルギー加速器研究機構

■概要

東北大学大学院理学研究科の佐藤宇史教授、同大学材料科学高等研究所の高橋隆教授、名古屋大学大学院理学研究科の山影相助教、同大学大学院工学研究科の岡本佳比古准教授、高エネルギー加速器研究機構（KEK）の組頭広志教授らの研究グループは、放射光を用いた光電子分光実験により、これまで見つかったトポロジカル（注1）絶縁体とは異なり、結晶自身の持つミラー（鏡映）対称性で特徴づけられる新しいタイプのトポロジカル絶縁体を発見しました。この発見は、現在、精力的に研究が進められている物質のトポロジー（幾何学）に基づく物質科学をさらに発展させるのみならず、新型トポロジカル絶縁体を用いた高効率の次世代電子・スピントロニクス（注2）デバイス開発へ道を開くものです。

本成果は、平成 30 年 1 月 9 日（英国時間）に英国科学誌 Nature 系列の専門誌 npj Quantum Materials のオンライン速報版で公開されました。

（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/pressrelease20180111.pdf> をご覧ください）。

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～

平成 30 年 1 月 22 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

■成果のポイント

- 金属間化合物 LaCoSi が高い触媒活性を実現した。
- ルテニウムなどの貴金属微粒子の担持を必要としない。
- 活性化エネルギーが極めて低く新しい反応機構が示唆された。

■概要

JST 戦略的創造研究推進事業において、東京工業大学 細野秀雄教授、多田朋史准教授、北野 政明 准教授らは、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) の阿部仁准教授らと共同で、貴金属を使わない高性能のアンモニア合成触媒を開発しました。

温和な条件下でアンモニア合成を可能とする触媒は、オンサイトでの合成プロセスを実現するための鍵となります。高温・高圧を必要とするハーバー・ボッシュ法には鉄系触媒が工業的に使われ、より温和な条件下での合成にはルテニウム触媒が研究されています。

今回、ルテニウムなどの貴金属の担持を必要としない高活性触媒を開発しました。電子が陰イオン（アニオン）として働く“電子化物（エレクトライド）”のコンセプトを拡張することで新触媒を検討し、ランタン La とコバルト Co の金属間化合物 LaCoSi が貴金属を用いずに高い活性を示すことを見いだしました。

コバルトはルテニウム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コバルト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。LaCoSi 内での La から Co への電子供与が明らかにされ、それが高活性発現の鍵と考えられます。

また、この触媒を用いた反応の活性化エネルギーは同グループが 2012 年に開発したルテニウム担持 C12A7 エレクトライド触媒よりもさらに低いものでした。つまり、LaCoSi は従来の触媒に比べ窒素分子の切断（開裂）をより速やかに行うことができ、より低温でのプロセスに有利です。この低い活性化エネルギーは、第一原理分子動力学計算などの解析結果から、窒素分子が触媒表面に吸着した際に窒素分子の振動が励起状態にあり、そこから原子への開裂が生じる、窒素分子の新しい活性化機構が示唆されました。

本研究成果は、平成 30 年 1 月 22 日 16 時（英国時間）に科学誌「Nature Catalysis」のオンライン速報版で公開されます。（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/pressrelease20180123.pdf> をご覧ください）。

●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

■概要

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と国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構 (QST) 量子ビーム科学研究部門の上野 哲朗 主任研究員を中心とする研究チームは、人工知能 (AI) 技術の一種である機械学習を用いて物質・材料研究に不可欠な 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。

X 線スペクトル測定は物質・材料の機能や性質を支配する電子状態を調べるための実験手法であり、物質・材料研究において頻繁に用いられています。X 線スペクトル測定の高効率化は、物質設計・物質合成・測定からなる研究サイクルを迅速に回して新たな物質・材料を開発していく上で不可欠です。

本研究では機械学習の一種であるガウス過程回帰を X 線スペクトル測定に応用することで、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する手法を開発しました。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 X 線スペクトル測定のみならず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。

この研究成果は、英国の学術誌「npj Computational Materials」に 1 月 25 日オンライン掲載予定です。（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/pressrelease20180125.pdf> をご覧ください）。

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～

平成 30 年 1 月 22 日
高エネルギー加速器研究機構
量子科学技術研究開発機構

■成果のポイント

- 機械学習によって X 線スペクトル測定の効率が飛躍的に向上、測定時間を 1/5 に短縮
- 計測データを学習し、スペクトルを予測することで実験計画を自動的に決定