

ミクロな見た目の“かたち”で材料の欠陥がわかる～放射光計測と応用数学による世界初の視点～

平成 30 年 2 月 26 日
高エネルギー加速器研究機構
東北大学 材料科学高等研究所
新日鐵住金株式会社

■研究成果のポイント

- 金属酸化物材料中の化学状態が反応により不均一に変化していく様子を、放射光X線顕微法を用いて三次元で解明
- 不均一さの“かたち”の変化を応用数学で解析することにより、材料全体の特性を悪化させる起点を特定することに成功
- 経験や予備知識に頼らず、膨大なデータから材料特性の支配因子を見いだす世界初の研究手法

■発表概要

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木村 正雄 教授、武市 泰男 助教授は、東北大学 材料科学高等研究所(AIMR)の大林一平 助教、平岡 裕章 教授、新日鐵住金株式会社 先端技術研究所の村尾 玲子 主任研究員と共同で、金属酸化物の化学状態が不均一に変化する現象を放射光X線顕微法で観察し、応用数学の手法のひとつ パーシステントホモロジーを活用してその反応起点を特定するという、世界初の研究手法を開発した。

観察された不均一さの発生原因を細かく調べるのが従来の研究アプローチであった。それに対して本手法では、不均一さの“かたち”そのものが様々な反応メカニズムを内包していることに注目し、ミクロな見た目の“かたち”だけから材料の欠陥を見いだす。言わば、「土と草と木が織りなす“かたち”から森全体を特徴づける因子を見つける」新たな研究視点である。さらに、対象物に関する科学的な知見や経験則などは不要で、先端計測手法により得られる膨大なデータから、材料のマクロ特性を支配する因子を簡単に見つけることができる。

今回の事例に限らず様々な反応や分野に展開可能で、今後、機械学習や人工知能(AI)を用いた材料開発に不可欠なアプローチのひとつになると期待される。

この研究成果は、2月23日 Nature Publishing Group の電子ジャーナル Scientific Reports に掲載された(この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/Press201802261400.pdf> をご覧ください)。

タンパク質結晶における動力的回折現象の観察に成功～より高精度な構造解析法の確立に期待～

平成 30 年 3 月 22 日
横浜市立大学
高エネルギー加速器研究機構
高輝度光科学研究センター
横浜創英大学

■研究成果のポイント

- タンパク質結晶において、世界で初めて、結晶の完全性の指標となる動力的回折現象の観察に成功した。
- タンパク質の結晶構造解析において、従来は考慮されていない動力的回折理論の必要性を示した。
- 今後さらにタンパク質分子の構造解析の高精度化が期待される。

■研究の内容

本研究グループは、大型放射光施設の KEK「フォトンファクトリー(PF)」の BL-20B および「SPring-8」の BL38B1 において、酵素タンパク質のひとつであるグルコースイソメラーゼ結晶を用いたX線トポグラフィ測定を行いました。用いた結晶は、そのX線トポグラフィ像より、欠陥がなく、等厚干渉縞の見られる極めて高品質な結晶であることがわかりました。

このような結晶を用いて、回折X線の強度のふるまいを測定するロッキングカーブ測定を行ったところ、振動現象の観察に初めて成功しました。この振動現象は半導体結晶のシリコンのように完全結晶に近い、極めて高品質な結晶でしか観察されていません。今回、この振動現象が動力的回折によるものであることを確かめるため、2つの依存性を確認しました。1つ目は、入射するX線の波長における依存性です。得られた回折強度の振動曲線は、波長が大きくなるほど振動の周期が短くなるという理論から予測されるふるまいと非常に良い一致を示しました。2つ目は、結晶の厚さにおける依存性です。実験では、結晶の厚さが大きくなるにつれて、回折強度曲線の振動の周期が短くなるふるまいが観測され、こちらも理論から予測されるふるまいと非常に良い一致を示しました。以上より、グルコースイソメラーゼ結晶で観察された回折強度の振動現象は回折物理学に基づく動力的回折理論と非常に良い一致を示しました。これは、タンパク質結晶においても動力的回折が起こることを示しています。

本研究は、Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America に掲載されました(この記事の続きは https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/20180322press_imss.pdf をご覧ください)。

超薄膜から薄膜へ膜厚限界を打破～「バナジウムの異常な混合原子価」が導く絶縁体転移～

平成 30 年 4 月 2 日
東京理科大学
高エネルギー加速器研究機構

■研究の要旨

●東京理科大学理学研究科の高柳真 大学院生，並木航 大学院生，樋口透 准教授，物質・材料研究機構の土屋敬志 主任研究員，上田茂典 主任研究員，寺部一弥 MANA 主任研究者，高エネルギー加速器研究機構の蓑原誠人 特別助教（現：産業技術総合研究所），堀場弘司 准教授，組頭広志 特別教授らのグループは，絶縁体転移が観測される限界とされてきた膜厚の 10 倍以上の膜厚において， $\text{Ca}_x\text{Sr}_y\text{VO}_3$ 薄膜を金属から絶縁体へ転移させることに成功しました。

●本研究成果は米国科学雑誌 Applied Physics Letters に 4 月 1 日付け（米国時間）で掲載されました。

■研究の背景

金属 - 絶縁体転移とよばれる相転移 (1) に伴う大きな抵抗変化はメモリやセンサーの開発に利用できることから，新物質の探索，物性研究が活発に行われています。今回の研究対象である強相関電子系 SrVO_3 (SVO) は 3 次元では金属的な性質を示しますが，数 nm 以下まで超薄膜化し，2 次元状態に近づけることではじめて，絶縁体へ転移します。しかし，2 次元状態を実現するための数 nm 以下という超薄膜では実用的な応用には不向きです。そのため，実用上有利である，3 次元のより厚い膜において金属 - 絶縁体転移が発現することが期待されています（この記事の続きは [https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/20180402press\(1\).pdf](https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/20180402press(1).pdf) をご覧下さい）。

わずか 2 分子の厚みの超極薄×大面積の半導体を開発－生体センシングデバイスの開発に期待－

平成 30 年 4 月 26 日
東京大学
産業総合技術研究所
高エネルギー加速器研究機構

■発表のポイント

●細胞膜と同じ 2 分子膜 1 層のみからなる超極薄×大面積×高性能な有機半導体の開発に成功した。

●異なる長さの 2 種の分子を用いた新たな製膜法が単層・高均質化の鍵となる。

●超高感度な分子センサーの実用化に向けた超極薄 TFT 開発への展開が期待される。

■発表の概要

国立大学法人 東京大学【総長 五神 真】（以下「東大」という）大学院工学系研究科物理工学専攻 荒井 俊人 講師，長谷川 達生 教授（兼）国立研究開発法人 産業技術総合研究所【理事長 中鉢 良治】（以下「産総研」という）フレキシブルエレクトロニクス研究センター【研究センター長 鎌田 俊英】総括研究主幹らは，簡易な塗布法を用いて，手のひらサイズ（10 センチメートル×10 センチメートル）の面積全体にわたって分子が規則正しく整列し，かつ有機分子わずか 2 分子分（約 10 ナノメートル）の厚みをたもつ，超極薄×大面積×高性能な有機半導体デバイスを構築する技術を開発しました。

印刷や塗布によりフレキシブルな電子機器を製造するプリンテッドエレクトロニクス技術は，大規模・複雑化したこれまでの半導体製造技術を格段に簡易化できる革新技術として期待されています。常温での塗布により性能を発揮する有機半導体はこのための素材として有力ですが，従来技術では，分子レベルで厚みが均質な半導体の形成は困難でした。そこで極限的に薄い生体の細胞膜にならい，分子を基板上に整然とならべた 2 分子膜 1 層のみからなる半導体を形成する新たなしなかけを考案することで，今回の成果が得られました。この超極薄半導体の結晶性は，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】（以下「KEK」という）物質構造科学研究所 熊井玲児教授と協力し，KEK の放射光科学研究施設（フォトンファクトリー）を用いて確認しました。

本研究成果はドイツの科学誌 Advanced Materials に 2018 年 4 月 25 日（中央ヨーロッパ夏時間）掲載されます（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/20180425press.pdf> をご覧下さい）。

「GaN の結晶欠陥を大面積且つ非破壊で検出・分類する方法を開発」～ 青色 LED から電力制御素子まで、GaN 結晶の高品質化を加速～

平成 30 年 7 月 9 日
一般財団法人ファインセラミックスセンター (JFCC)
高エネルギー加速器研究機構

■概要

① 現状

低炭素社会の実現に向け、電力の変換・制御に使用するパワーデバイスの高効率化が求められています。次世代のパワーデバイス用材料の有力な候補として注目を集めているのは、青色 LED の材料としても活用されている窒化ガリウム (GaN) です。ところが、現行の製法による GaN 結晶には欠陥が多く含まれているので、期待される性能を十分に発揮できていません。欠陥を低減するためには、欠陥分布情報を結晶成長条件にフィードバックすることが必要不可欠であり、欠陥を正確に非破壊で検出・分類する技術が強く求められています。

② 本研究の成果

JFCC は、KEK と共同で GaN 結晶に含まれる様々な欠陥を短い測定時間且つ非破壊で検出する X 線トポグラフィ観察法を確立し、欠陥種類と大面積にわたる各種欠陥の分布を正しく特定することに成功しました。欠陥の周囲は結晶面が湾曲しているため、X 線の回折像が乱れ、スポット像を作ります。欠陥 1 個でスポットが 1 つ作られるので、スポットの分布が欠陥の分布を示します。更に、観察条件を変えてスポットの明暗や形状の変化を調べることで、欠陥の種類を正確に判定することができます。

③ 今後の展開

本成果を利用することにより、大面積の欠陥情報を正確に結晶成長にフィードバックでき、GaN 結晶の低欠陥化が加速されます。また、GaN パワーデバイス・発光デバイスの不良解析と故障原因同定にも役立ちます。高品質 GaN 結晶の実現によって、次世代の高耐圧・大電流・低損失のパワーデバイスの実用化が可能となります。

本成果は 2018 年 4 月 5 日に Springer 「J. Electron. Mater.」電子版で公開されました。本成果は、国立研究開発法人科学技術振興機構スーパークラスタープログラム「GaN 結晶評価技術の開発」の委託研究にて得られたものです。(この記事の続きは https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/20180709pressrelease_imss.pdf をご覧ください)。

ディラック線ノードの直接観測に成功 - トポロジカル量子コンピューター基盤物質を発見 -

平成 30 年 7 月 31 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
東北大学スピントロニクス学術連携研究教育センター
東北大学多元物質科学研究所
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高根大地博士課程院生、木村憲彰准教授、佐藤宇史教授、同材料科学高等研究所の相馬清吾准教授、高橋隆教授、同多元物質科学研究所の組頭広志教授、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堀場弘司准教授らの研究グループは、グラフェンと同じ蜂の巣格子を持つ 2 ホウ化アルミニウム (AlB₂) という物質が、線ノード型のディラック粒子という新しいタイプの電子状態をもつ物質であることを、放射光を用いた角度分解光電子分光実験により発見しました。このアルミニウム (Al) をマグネシウム (Mg) で置き換えた 2 ホウ化マグネシウム (MgB₂) は 39 K で超伝導を示す高温超伝導体であり、この新たに発見されたディラック粒子を超伝導化することによって、今まで極低温でしか実現できていないトポロジカル超伝導体の転移温度を一気に高温化できる可能性があります。この発見は、ノイズに強いトポロジカル量子コンピューターの開発へ新たな道を拓くものです。

本成果は、米国物理学会誌 Physical Review B の速報注目論文 (Rapid Communication & Editors' suggestion) に選ばれ、平成 30 年 7 月 17 日 (米国東部時間) に、オンライン公開されました。(この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/20180731press.pdf> をご覧ください)。

染色体の構造変換を司るタンパク質の構造を解明

平成 30 年 8 月 6 日
東北大学 大学院生命科学研究科
高エネルギー加速器研究機構

■発表のポイント

- ヒトのヒストンシャペロン HIRA の立体構造を X 線結晶構造解析によって世界で初めて解明しました。
- HIRA の三量体形成が、ヒストンや HIRA のパートナータンパク質である CABIN1 との相互作用に必須であることを発見しました。
- HIRA は転写と修復に関わる多くのタンパク質を集積して機能させる構造基盤であるプラットフォームとしての役割を担うと予想されます。

■概要

真核生物の染色体は、ヒストンと呼ばれるタンパク質に DNA が巻き付いた「ヌクレオソーム」という基本構造の繰り返しから構成されています。真核生物の遺伝情報の継承、発現、修復にはヌクレオソームの構造変換を伴います。この構造変換には、ヒストン以外にヒストンシャペロンとよばれるタンパク質群が関わってきます。東北大学大学院生命科学研究科の佐藤優花里助教（研究開始当時：高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 研究員）、高エネルギー加速器研究機構の千田俊哉教授、米国ペンシルベニア大学の M. Daniel Ricketts 博士と Ronen Marmorstein 教授、仏国キュリー研究所の Dominique Ray-Gallet 博士と Geneviève Almouzni 所長らの国際共同研究グループは、ヒストンシャペロンの一つである HIRA がヌクレオソームの形成を制御する仕組みの一部を明らかにしました。本研究では、X 線結晶構造解析により HIRA の立体構造を解明し、またヒト細胞株を用いた実験により HIRA の三量体形成がヒストンや HIRA のパートナータンパク質 CABIN1 との相互作用に必須であることを証明しました。これらの発見は、癌などの疾患の発症機構の解明とその治療法の開発に繋がると期待されます。

本研究成果は、8 月 6 日 10 時（ロンドン時間、日本時間 8 月 6 日 18 時）に英国科学誌の「Nature Communications」（電子版）に掲載されました（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/20180806press.pdf> をご覧下さい）。

自発的に折りたたまれるポリマー材料の開発に成功 - タンパク質の機能を模倣する新素材への応用に期待 -

平成 30 年 8 月 31 日
千葉大学
高エネルギー加速器研究機構

■概要

千葉大学グローバルプロミネント研究基幹の矢貝史樹教授を中心とした研究チームは、外部から刺激を与えなくても自ららせん状に巻き上がるポリマーの開発に成功しました。

この成果は、タンパク質の機能を模倣した新素材の開発へと発展することが期待されます。

■背景 - 超分子ポリマーとは -

分子が共有結合と呼ばれる強い結合で鎖状につながったものはポリマーと呼ばれ、プラスチックに代表されるように私たちの生活を支える重要な材料です。近年、分子が容易に脱着可能な弱い力（非共有結合）でつながることのできるポリマー（超分子ポリマー）が注目されています。超分子ポリマーは、分子が弱い力でつながっているため、外部の刺激に敏感に応答したり、結合が切断されても自己修復できるなど、従来のポリマーにはない性質を持つ次世代ポリマー材料としてその応用が期待されています。一方超分子ポリマーは、分子の鎖（主鎖）がとる形を制御しにくい、という欠点がありました。ポリマーから狙った性質や機能を引き出すためには、主鎖がとる形を制御することが非常に重要です。事実、生体ポリマーであるタンパク質は、決められた数のアミノ酸からなるにもかかわらず、様々な形に折りたたまれることで、実に多様な機能を有します。

■今後の展望

外部から刺激を与えなくとも自ら整った構造へと折りたたまれる現象は、フォールディングと呼ばれるタンパク質の折りたたみ現象に酷似しています。今後、分子の構造を少しずつ変化させることや、異なる分子を混ぜることによって、形だけでなく、認識、触媒、貯蔵、転写、エネルギー変換など、タンパク質の多様な機能までをも模倣できる新素材への発展が期待されます。そのような新素材は、分子コンピュータから医療まで、幅広い分野への応用が期待できます。

本研究の成果は、Science Advances (DOI: 10.1126/sciadv.aat8466) にて日本時間 2018 年 9 月 8 日（土）午前 4 時に公開されます。（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/20180831press1-unlocked.pdf> をご覧下さい）。

鉄系高温超伝導体における新奇な磁性と超伝導の共存の観測に成功

平成 30 年 9 月 25 日

兵庫県立大学
高エネルギー加速器研究機構

■概要

一般的に超伝導状態は、磁場や磁性不純物により阻害され、場合によっては壊れてしまいます。従って磁性と超伝導は競合する関係であると考えられていますが、兵庫県立大学及び高エネルギー加速器研究機構（KEK）を中心とする研究グループは、圧力下の鉄系高温超伝導体 [1] において超伝導によって安定化される磁性相が存在することを初めて観測しました。この初観測は KEK 放射光科学研究施設フォトンファクトリーアドバンスリング（PF-AR）の高輝度 X 線を利用した核共鳴前方散乱実験により得られたものです。

本研究の成果は、2018 年 9 月 18 日に米国科学雑誌『Physical Review B Rapid Communications』でオンライン公開されました。

■研究の背景

ある化合物が超伝導状態になると、電気抵抗はゼロになり、外部から磁場を印加するとその磁場を排除します。さらに印加磁場を強くしていくと、超伝導体は磁場を排除できず、ある臨界磁場を超えると超伝導は破壊されます。従って超伝導と磁性、磁場は相反する関係であると考えられています。

ところが、2008 年に磁性元素である鉄 (Fe) を含む高温超伝導体が発見されました。この鉄系高温超伝導体は、鉄が持つ 3d 電子が磁性と超伝導の双方を担うと考えられており、国内外問わず多くの研究者からこの系の磁性と超伝導の相関が注目されています。そこで、兵庫県立大学、KEK 物質構造科学研究所、高輝度光科学研究センター、日本原子力研究開発機構、及び U.S. Naval Research Laboratory の共同研究グループは、茨城県にある KEK PF-AR と兵庫県にある大型放射光施設 SPring-8 (BL09XU) の高輝度 X 線を利用した核共鳴前方散乱実験により、鉄系高温超伝導体の一つである EuFe_2As_2 に関して、主に鉄サイトの磁性と超伝導の相関について研究を行いました（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/20180925Press.pdf> をご覧ください）。

薬剤耐性の原因「薬剤汲み出しタンパク質」の排出メカニズムを解明～多剤排出トランスポーター MdfA の分子機構～

平成 30 年 10 月 1 日

高エネルギー加速器研究機構
京都大学
東京大学
岡山大学

■本研究成果のポイント

- 細菌に存在する抗菌剤等の薬剤を排出する多剤排出トランスポーターの一つ、MdfA の構造解析に成功し、初めて MdfA の外開き構造を明らかにした。
- 膜内に存在する特定の酸性残基のプロトン化が、外開き構造から内向き構造への引き金となることを明らかにした。
- 精製 MdfA タンパク質を脂質膜に組み込んだ形で初めて薬剤輸送活性を測定し、薬剤輸送に重要なアミノ酸残基を明らかにした。

■概要

細菌が薬剤耐性を引き起こす主な原因は、細菌膜上に存在する多剤排出トランスポーターと呼ばれるタンパク質が、投与された薬剤をポンプのように細菌外に汲み出してしまい、薬剤の効果を無効化することにあります。MFS (Major facilitator superfamily) 型と呼ばれる多剤排出トランスポーターは細菌上に多数存在しますが、どのように薬剤分子を認識して細菌外に排出するのか、その分子機構については明らかになっていません。

そこで高エネルギー加速器研究機構 (KEK) 物質構造科学研究所、マルティン＝ルター大学 Institut für Biochemie und Biotechnologie, HALOm (ドイツ)、京都大学 医学研究科、東京大学 農学生命科学研究科、岡山大学 医歯薬学総合研究科ならびに自然生命科学研究支援センターからなる共同研究グループは、MFS 型多剤排出トランスポーターの一つである MdfA をモデルとした薬剤排出メカニズムの研究を行い、結晶構造解析・輸送活性実験・分子動力学シミュレーションにより、上記の薬剤分子輸送のメカニズムの詳細を明らかにしました。

本知見は、薬剤分子排出への理解を深め、将来的には、多剤排出トランスポーターの働きを抑えることで、薬剤耐性菌に対抗する治療薬の開発に貢献できると考えられます（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/20181002Press.pdf> をご覧ください）。

いつでもどこでも誰でも光をあてるだけで簡単に性質を操ることの出来る材料を開発—溶媒不要の高分子形状リセット法「T・レックス」の実現—

平成30年11月31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

- ・ 高分子形状を思い通りにリセットする新概念「T・レックス」を考案し、T・レックスによって液体状態のまま流動性が変わるシリコン材料を開発しました。
- ・ 光をあてるだけで溶媒を用いることなく高分子の形状を環状から直鎖状にリセットすることにはじめて成功しました。
- ・ T・レックスを応用した潤滑油、グリース、粘接着剤などさまざまな材料開発が期待されます。

■概要

東京大学大学院総合文化研究科の本多智助教らは、高分子形状をいつでも自在にリセットする新概念を考案し、T・レックス (Topology-reset execution) と名付けました。また、紫外光 (UV) をあてて T・レックスを施すことで液体状態を維持したまま流動性が著しく変化する物質を開発しました。この物質に対する T・レックスは、UV をあてるだけで狙ったタイミングで狙った箇所のみ流動性を変化させられるだけでなく、有機溶媒を必要としないことから環境にやさしい側面もあります。

有機・高分子反応の多くはフラスコの中の出来事と思われがちで、普段の生活の中で日常的に利用しているものは多くはありません。しかし、今回研究グループが考案した T・レックスを応用すると、いつでもどこでも誰でも例えば市販のブラックライトをあてるだけで簡単に T・レックスを引き起こすことが出来ます。この研究成果は、Angewandte Chemie International Edition オンライン版の公開に先立ち Early View に掲載されました (この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/751c519297a923f1567ec401aed0cb19.pdf> をご覧ください)。

結晶にも液晶にも液体にも分類されない新物質を発見—分子自己集合体の科学における新知見—

平成31年1月21日
東京工業大学
理化学研究所
高エネルギー加速器研究機構
東北大学

■概要

東京工業大学 科学技術創成研究院 化学生命科学研究所の梶谷孝特任准教授、福島孝典教授らはキラル分子が単結晶のような規則構造をもつ液滴を自発的に形成、さらに構造秩序を崩さずに一方向に回転しながら流れる現象を発見した。側鎖にキラルエステル基を有するトリフェニレン誘導体を設計して相転移挙動と集合構造を調べたところ、この物質の中間相では、ヘリンボーン構造という特徴的な構造からなる二次元シートが積層し、あたかも単結晶のような三次元構造を形成していることが分かった。

分子の自発的な集合化によるナノメートル級の物質作製は可能だが、高性能な有機材料の開発に求められる、数ミリ〜数センチスケールの超長距離構造秩序を実現することは極めて困難だった。通常、単結晶は固い多面体の形状をもつが、この物質は液滴のような形状で、かつ流動性をもつという構造特性と運動性が相矛盾する性質を示した。さらに、この液滴状物質は重力下で構造秩序を維持しつつ、一方向に回転しながら流れ落ちた。精密な解析から、この一方向回転流動は分子のキラリティによってもたらされていることを明らかにした。

この研究は高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 春木理恵研究員、理化学研究所創発物性科学研究センター 橋爪大輔チームリーダー、理化学研究所放射光科学研究センター 引間孝明研究員、東北大学 多元物質科学研究所 高田昌樹教授 (理化学研究所放射光科学研究センターグループディレクター)、(株) JEOL Resonance 矢澤宏次主事、東京大学 物性研究所 柴山充弘教授らのグループと共同で行った。

研究成果は英国時間1月21日16時発行の「Nature Materials (ネイチャーマテリアルズ) 誌」に掲載された (この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/PR20190121.pdf> をご覧ください)。