

乳癌における乳頭温存乳腺全摘術のリスク低減へ！～CTで乳頭内乳管の可視化に成功～

2020年2月20日

名古屋大学
高エネルギー加速器研究機構

■概要

名古屋大学大学院医学系研究科の砂口尚輝准教授、北海道科学大学保健医療学部 島雄大介教授、名古屋医療センター臨床研究センター市原周元研究室長らのグループは、乳癌が基本的に1つの乳腺葉を侵す疾患であること(sick lobe 理論)を、乳癌により全摘された51症例の乳頭をX線暗視野CTにより可視化することで明らかにしました。

近年、乳癌の予防あるいは治療後の外観を維持するために、乳房の乳頭・乳輪・皮膚を残して、乳腺を切除する乳頭温存乳腺全摘術が行われるようになりましたが、乳頭内乳管の3次元配置や乳頭内乳管癌の発生メカニズムについては、まだ完全に分かっておらず、少なからずリスクが存在します。

本研究では、乳頭内の乳管を高感度かつ3次元的可視化できるX線暗視野法を用いて、乳癌のために全摘された51症例の乳頭を撮影し、乳頭内乳管数、乳頭先端における乳管の合流点(開口)数、乳頭内乳管の3次元配置における3つのタイプを明らかにしました。また、9症例(18%)で乳頭内に癌が発見されましたが、そのうち6症例で見つかった乳頭内の非浸潤性乳管癌についてスウェーデンの病理学者 Tibor Tot が提唱した sick lobe 理論どおり、乳癌が1つの乳腺葉で発生したことをCTの3次元観察により明らかにしました。

この研究成果は、令和2年2月15日付け、オランダ誌 Breast Cancer Research and Treatment に掲載されました(この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/3d3f5ca2b2711834b905148c56552707.pdf> をご覧ください。本号「最近の研究から」でも関連の解説記事を掲載しています。併せてご覧ください)。

混ぜると自ら伸びる超分子ポリマーの開発に成功～新しい材料設計に期待～

2020年3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

教授を中心とする国際共同研究チームは、酸素原子が1つ異なる2種類の分子を混ぜると、分子の認識で形成されたユニットが積層するという全く新しい超分子重合を実現しました。さらに、ある温度帯で一気に構造が崩壊するというこれまでになかった熱応答性を示すポリマー材料の創製に成功しました。この成果は、刺激に対して高速で応答して状態を変えるソフトマテリアルの設計指針となることが期待されます。本研究の成果は、「Nature Communications」にて2020年4月1日(水)に公開されます。

なお、この国際共同研究チームには、千葉大学の他、英キール大学、ドイツ連邦材料試験研究所、高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所が参画しています(この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/PR20200331.pdf> をご覧ください)。

低い温度で作動する固体酸化物燃料電池のための極薄電解質膜の開発～100℃以下での物理吸着した水による表面プロトン伝導性～

2020年4月3日

東京理科大学
高エネルギー加速器研究機構
東北大学多元物質科学研究所

■概要

東京理科大学理学部応用物理学科の樋口透准教授、物質・材料研究機構の土屋敬志主幹研究員、高エネルギー加速器研究機構(KEK)物質構造科学研究所の堀場弘司准教授、東北大学多元物質科学研究所の組頭広志教授らの研究グループは、酸素欠陥と結晶格子を制御した Sm-doped CeO_{2-δ} 薄膜(以下:SDC 薄膜)をスパッタ法により作製し、表面構造および特異なイオン伝導性を明らかにしました。

近年、クリーンで高効率な固体酸化物燃料電池(以下:SOFC)に使われる、電解質・電極材料の研究が注目されています。しかしながら、SOFCは動作温度が高く用途が限定されているため、低い温度でイオン伝導性を有する固体電解質膜の開発が待望されています。

樋口准教授の研究グループでは、希土類を置換することで高い酸素イオン伝導性を有し、かつ酸素欠損の生成により電子伝導性を示すことが知られている CeO₂(酸化セリウム, セリア)の研究を行っています。CeO₂においては、近年、表面吸着によるプロトンの伝導も示唆されています。つまり、「酸素イオン、電子、プロトン」の3種類のキャリア制御および伝導性が期待され、SOFCの電解質として利用できる材料の1つです。そこで、当研究グループは、CeO₂に対して同じ希土類金属である元素 Sm(サマリウム)

を化学ドーピングさせた $\text{Ce}_{0.9}\text{Sm}_{0.1}\text{O}_{2.8}$ 薄膜を作製し、プロトン伝導特性を実用水準まで引き上げることはできないかと考えました。その結果、この新規の SDC 薄膜において、物理吸着した水分子による高い表面プロトン伝導性が、 100°C 以下の低温域で生じることが証明されました。この薄膜は、SOFC の動作温度を低下させることができるため、SOFC の用途の拡大やコストの削減に繋がる材料となり得ます。また、SOFC は将来、原子力・火力発電に替わる発電システムになることが期待されます。

なお、この研究成果は、令和 2 年 2 月 17 日付け、Nanoscale Research Letters に掲載されました（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/PR20200403.pdf> をご覧下さい）。

火星コア物質の音速測定に成功～火星コアの組成と火星の起源解明に向けて～

2020年5月13日

東京大学

東北大学

大阪大学

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

■発表のポイント

◆日本が世界に誇る川井型マルチアンビルプレスを用いた高圧発生技術、SPring-8/JASRI および高エネルギー加速器研究機構 フォトンファクトリーの放射光X線により、火星コアの最上部に相当する20万気圧2000度という高圧高温の極限条件下で、液体鉄-硫黄合金の音速（地震波速度）の精密測定に世界で初めて成功しました。

◆従来、火星由来とされる隕石の化学組成から、火星コアは鉄-硫黄合金で出来ていると考えられてきました。現在稼働中のNASAの火星探査機「インサイト」によって、火星コアの地震波速度が測定され、それが本研究で得られた音速と一致すれば、その仮説を実証できます。

◆一方、一致しない場合は、火星の起源を考え直す必要があります。地球のように、原始火星にも微惑星の衝突があったとすれば、コアには別の不純物が含まれている可能性もあります。火星の衛星フォボス・ダイモスの巨体衝突起源説の検証を目的の1つとしている、JAXAの火星衛星探査計画MMXとも関連があります。

本研究成果は国際科学雑誌『Nature Communications』に5月13日に掲載される予定です（この記事の続きは<https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/PR20200513web.pdf>をご覧ください）。

新機構が生み出す過去最小の磁気渦粒子を発見 - 超高密度な次世代情報担体としての活用に期待 -

2020年5月19日

東京大学

理化学研究所

科学技術振興機構

物質・材料研究機構

高エネルギー加速器研究機構

■概要

理化学研究所 創発物性科学研究センターの Nguyen Duy Khanh 特別研究員（現所属：東京大学物性研究所）、中島

多朗研究員（現所属：東京大学物性研究所）、于秀珍チームリーダーと、東京大学の関真一郎准教授（JST さきがけ研究者兼任）、有馬孝尚教授、十倉好紀卓越教授らの研究グループは、物質・材料研究機構、高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所との共同研究を通じて、既知の化合物では過去最小となる直径1.9 nmの磁気スキルミオン（磁性体の中で現れる渦巻き状のスピン構造）を観察することに成功しました。スキルミオンは、幾何学的に保護された安定な粒子としての性質を持つため、次世代の情報担体の候補として盛んに研究が行われています。従来、スキルミオンを生み出すには、対称性の低い結晶構造が必要であると考えられてきましたが、本研究では動き回る電子が媒介する新機構を活用することにより、対称性の高い希土類合金中で過去最小のスキルミオンを実現することに成功しました。今回の発見は、極小サイズのスキルミオンを生み出すための新しい物質設計指針を与えており、超高密度な情報素子への展開に役立つことが期待されます。

本研究成果は2020年5月18日に英国科学誌「Nature Nanotechnology」に掲載されます（この記事の続きは<https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/PR20200520.pdf>をご覧ください）。

遷移元素を含む物質の「隠れた秩序」の観測に成功 - 重い元素の示す奇妙な振る舞いの理解に向けて -

2020年6月4日

東京大学

高エネルギー加速器研究機構

理化学研究所

■概要

東京大学 物性研究所の平井大悟郎助教、廣井善二教授、高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所の佐賀山基准教授、理化学研究所 創発物性科学研究センターの Gao Shang 研究員、放射光科学研究センターの大隅寛幸専任研究員、東京大学大学院 新領域創成科学研究科の有馬孝尚教授（理化学研究所 創発物性科学研究センターチームリーダー）らの研究グループは中国のグループと協力して、遷移元素を含む物質の中に出現することが予測されていた多極子の秩序を世界で初めて観測しました。

白金などの原子番号の大きな遷移元素の中では、相対論的效果によって電子は特殊性質を示すことが近年認識されるようになってきました。多極子の秩序は、この特殊性質によって現れる特徴的な現象として予測されていました。しかし、これまでは多極子の観測に適した研究対象物質が見つかっていなかったこと、および、その観測が難し

いことから、明確な実験的証拠が得られていませんでした。

本研究では、レニウムという重い遷移元素を含む物質に目を付け、純良な結晶に放射光X線を照射することで、原子の位置を1兆分の1メートル（1ピコメートル）という超高精度で測定しました。その結果、予測されていたクローバー型の多極子の整列を観測することに成功、加えて予測されていなかったダンベル型の多極子の整列を発見しました。

原子番号の大きな遷移元素中の電子の特殊性質は、スピントロニクスなどの分野で利用されています。本研究によってこの性質の理解が深まると、よりよい材料の設計指針を立てたり、新しい動作原理を提案したりすることが可能になると期待されます。

本研究成果は、米国物理学会学術誌「Physical Review Research」の2020年6月5日付けオンライン版に速報記事として公開される予定です（この記事の続きは<https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/PR20200604.pdf>をご覧ください）。

結晶構造解析の自動化～ブラックボックス最適化により熟練者を上回る解析精度を達成～

2020年6月5日
高エネルギー加速器研究機構
産業技術総合研究所
総合研究大学院大学
科学技術振興機構

■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量子ビーム連携研究センターの小野寛太准教授を中心とするKEKおよび総合研究大学院大学の研究グループと、国立研究開発法人 産業技術総合研究所 人工知能研究センターの大西正輝社会知能研究チーム長を中心とする研究グループは共同で、数理最適化の一手法であるブラックボックス最適化手法を用いて、物質・材料研究に必要な不可欠な粉末X線回折（PXRD）パターンの解析を自動化・高効率化する手法を開発しました。

PXRD法は、物質・材料の機能と性質を支配する結晶構造の情報を得ることができる、物質・材料研究において最も広く利用されている分析手法の一つです。PXRDの測定結果から結晶構造の情報を得るためには、リートベルト精密化法が広く用いられています。この方法には本来の目的である結晶構造情報以外にも多くのパラメータが含まれ、それらの調整に大きな労力が必要とされています。

本研究では、このような状況が機械学習におけるハイパーパラメータ最適化問題と類似していることに着目し、同問題に対して有効なブラックボックス最適化手法をリートベルト精密化法に应用することで、PXRDパターン解析を

効率化する手法を開発しました。本手法を用いることにより、熟練者を超越するフィッティング精度と解析速度が得られるだけでなく、熟練者がとる典型的な手順では到達できなかった結晶構造の候補を発見することにも成功しました。

本研究のアイデアは、解析結果に影響するパラメータが手作業で調整されている解析手法に応用可能であり、さまざまな分野における計測・シミュレーションデータ解析の効率化が期待できます。さらに、人間の思考の癖や思い込みを排除することで新しい解釈が導かれることも期待され、今後の物質・材料研究の加速と物理現象の理解への貢献が期待されます。

この研究成果は、英国の学術誌「npj Computational Materials」に6月5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/PR20200605.pdf>をご覧ください）。

原子サイズの凹みを持つ金属酸化物クラスターによる分極の誘発とアルカンの臭素化に対する反応性の制御に成功

2020年6月9日
金沢大学
立命館大学
高エネルギー加速器研究機構
科学技術振興機構

■概要

金沢大学 理工研究域物質化学系の菊川雄司准教授、林宜仁教授の研究グループは、立命館大学 総合科学技術研究機構の片山真祥准教授および生命科学部応用化学科の稲田 康宏教授、高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所の山下翔平助教らと共同で、原子1個分の凹みを持つ半球状バナジウム酸化物クラスターに分極活性化された臭素分子を挿入することで、アルカンの臭素化の反応性を制御することに成功しました。臭素分子の分極を分光学的に観測した世界初の成果です。

天然ガスや原油などに多く含まれるアルカンから有用な化成品原料への変換が容易になれば、化学産業・工業の原料として資源の効率的な利用が可能となります。臭素化によって選択性を高めることが鍵となりますが、アルカンは反応性に乏しいことから、反応性の乏しいアルカンを部分的に官能基化するには、適切な反応場を開発する必要があります。

本研究では、ナノサイズの特異的な電荷分布を持ち、半球状のお椀のような構造がつぶれたり膨らんだりする特徴を持つ半球状バナジウム酸化物クラスターに着目し、凹みの中に臭素分子を挿入することで、臭素分子が分極されることを見いだしました。分極した臭素分子はペンタン、ブタンおよびプロパンといったアルカンを臭素化し、通常の

臭素分子による反応とは異なる生成物の選択性を示すことが明らかとなりました。

これらの知見は将来、小分子の分極化材料や高機能性触媒の設計に活用されることが期待されます。

本研究成果は、2020年6月8日にドイツ化学会誌『Angewandte Chemie International Edition』のオンライン版に Accepted Article として掲載されました（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/PR20200609.pdf> をご覧下さい）。

原子が振動しながら共有結合が形成されていく様子を直接観測～光化学反応において、初期の構造変化を10兆分の1秒単位で追跡～

2020年6月23日
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

■概要

高エネルギー加速器研究機構（KEK）、韓国科学技術院（Korea Advanced Institute of Science and Technology, KAIST）、韓国・浦項加速器研究所（Pohang Accelerator Laboratory, PAL）、理化学研究所（理研）、高輝度光科学研究センター（JASRI）は、日韓2つのX線自由電子レーザー（XFEL）施設を用いて、振動を伴って共有結合が形成されていく過程を、初めて直接可視化することに成功しました。

これは、KEK 物質構造科学研究所の野澤俊介准教授、深谷亮特任助教、一柳光平研究員、足立伸一教授、KAIST の Kim Jong Goo 博士、Ihee Hyotcherl 教授、理研 放射光科学研究センター 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 利用研究推進室の片山哲夫主幹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、KEK の放射光実験施設フォトンファクトリー・アドバンストリング（PF-AR）で行われた研究を基盤として、理研のXFEL施設SACLAとPALのXFEL施設PAL-XFELを利用して行われました。この研究は、2015年に科学雑誌Nature誌に掲載された同研究グループによる研究成果を、さらに精密に解析した続編になります。本成果は、Natureのオンライン版（英国時間6月24日16時、日本時間6月25日0時）、印刷版（6月25日付け）に掲載されます（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/PR20200625.pdf> をご覧下さい）。

スピンのねじれが起こす電子の変位を発見～マルチプローブが明らかにするマルチフェロイックの微視的発現機構～

2020年7月2日
高エネルギー加速器研究機構
東北大学

■概要

東北大学 多元物質科学研究所の大学院生 石井祐太氏（研究当時、高エネルギー加速器研究機構（KEK）博士研究員を経て現在は東北大学 大学院理学研究科 助教）、木村宏之教授、KEK 物質構造科学研究所の佐賀山基准教授、中尾裕則准教授、岡部博孝特別助教（研究当時）、幸田章宏准教授、および門野良典教授らの研究グループは、スピンの配列と強誘電性が強く結びつくマルチフェロイック物質 YMn_2O_5 において、強誘電性のミクロな発生機構を放射光X線とミュオンの協奏的利用により明らかにしました。

YMn_2O_5 では、横滑りらせん（サイクロイド）型という特殊なスピン配列の発達と共に強誘電性が現れることが知られています。本研究では、放射光による共鳴X線散乱（RXS）とミュオンスピン回転（ μ SR）を用いて YMn_2O_5 中の酸素イオンのスピン偏極を詳細に調べ、サイクロイド型スピン配列の発達に伴って陽イオンのマンガンから陰イオンの酸素への局所的な電子移動が起きることを発見しました。このような電子の変位は強誘電性を誘起するので、マルチフェロイック物質の強誘電性の発現に電子変位が寄与していることを実験で確認した初めての例となりました。

通常、スピン偏極の観測には、磁化測定や中性子散乱などの手法がよく使われます。しかし、酸素のような陰イオンで生じるスピン偏極は、大きさや密度が小さいために上記の手法では観測が困難です。本研究では酸素を狙い撃ちできるRXSと μ SRを協奏的に組み合わせることで、その空間配置を定量的に評価することに成功しました。これまで観測が困難であった物質中のミクロな現象を捉える上で、マルチプローブ利用が極めて有効であることも同時に示されました。

本研究の成果は米国現地時間の6月29日、学術誌Physical Review Bに掲載され、重要な成果として顕彰されるEditors' suggestion（注目論文）に選ばれました（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/PR20200702.pdf> をご覧下さい）。

先端 X 線分析により原発事故由来の不溶性セシウム粒子の生成・放出過程を解明

2020 年 7 月 21 日

東京大学

金沢大学

筑波大学

高輝度光科学研究センター

日本原子力研究開発機構

電力中央研究所

高エネルギー加速器研究機構

■概要

不溶性セシウム粒子 (CsMP) は、FDNPP から放出された RCs を濃集する微粒子であるが、環境中で採取された数が少ないため、その形成・放出過程、周辺での分布状況、形状や元素組成の系統的理解は進んでいなかった。また、微粒子であるため分析可能な手法が少なく、その完全な性状解明は未だ途上にある。東京大学 大学院理学系研究科の三浦輝大学院生 (研究当時: 修士課程 2 年)・栗原雄一特任研究員 (研究開始時)・高橋嘉夫教授らの研究グループは、効率的な分離手法 (粒子を水に懸濁させて二分割し放射能測定を繰り返す) を開発し、道路粉塵などの環境試料から 67 個に及ぶ多数の CsMP を分離することに成功した。さらに同研究グループは、放射光施設 (SPring-8 および高エネルギー加速器研究機構 フォトンファクトリー) で進める最先端 X 線分析 (マイクロ X 線 CT 分析, マイクロビーム蛍光 X 線分析) を適用することで、主に 50 ~ 400 μm の CsMP (Type-B, 1 号機由来) の内部構造・空隙率や微量元素比を明らかにし、その結果を数 μm の球状粒子である Type-A の CsMP (2, 3 号機由来; 主に 2 号機とみられる) の結果と比較した。その結果, CsMP (Type-B) には球状と不定形の 2 種の形状があり、これらは最大で 50% に及ぶ空隙率を示した。また空隙率を補正した正味の体積当たりの ^{137}Cs 放射能は、球状 Type-A 粒子 > 球状 Type-B 粒子 > 不定形 Type-B 粒子であり、マイクロビーム蛍光 X 線分析から得られた揮発性元素と非揮発性元素の比も考慮すると、(i) 球状粒子は原子炉内気相中で生成した球形シリカ (SiO_2) 粒子が揮発性元素を取り込んだもの、(ii) 不定形粒子は原子炉内の構造物上でメルトが冷えて生成したもので、であると推定された。これらは、CsMP の生成過程、各号機から外部への放出過程、環境中での分布状態の解明に資するとともに、今後の我が国の原発の安全な廃炉作業の推進にも貢献する (この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/PR20200721.pdf> をご覧下さい)。

世界初！「マランゴニ対流」による分子のリズミカルな運動を観測生命活動をつかさどるリズムの起源に迫る

2020年8月11日

近畿大学

東京学芸大学

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

■発表のポイント

近畿大学理工学部（大阪府東大阪市）、東京学芸大学（東京都小金井市）、高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所（茨城県つくば市）、高輝度光科学研究センター（兵庫県佐用郡佐用町）らの研究グループは、液体が表面をできるだけ小さくしようとする性質である表面張力の差によって液体に流れが生じる「マランゴニ対流」という自然現象を、分子レベルで観測することに世界で初めて成功しました。それにより、水面上の分子がまさにスクラムを組むようにしてマランゴニ対流を押し返すリズミカルな運動を数分の周期で繰り返していることを明らかにしました。生命活動には、心臓の拍動や呼吸などのように、リズムを刻む現象が数多く見られます。本研究成果は、生命活動をつかさどるリズムの発生メカニズムの理解につながります。本件に関する論文が、令和2年（2020年）8月6日（木）に、アメリカ化学会発行の学術誌“The Journal of Physical Chemistry Letters”に掲載されました（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/PR0811.pdf> をご覧下さい）。

金属イオン間の電子の授受で極性構造を制御～強誘電体・圧電体材料や負熱膨張材料の開発に新しい知見～

2020年8月25日

東北大学多元物質科学研究所

東京工業大学

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

次世代デバイス開発やエネルギー問題の解決のために、強誘電体・圧電体材料や負熱膨張材料の優れた新素材の開発が求められています。東北大学多元物質科学研究所 山本孟助教、木村宏之教授、戸田薫大学院生（理学研究科）らの研究グループは、特殊な電子状態に起因して極性構造を示すペロブスカイト型酸化物、バナジウム酸鉛（ PbVO_3 ）

とコバルト酸ビスマス（ BiCoO_3 ）の固溶体において、組成変化により、巨大な体積変化を伴う常誘電相への結晶構造変化が起こることを発見しました。また、誘電体特性の1つである自発電気分極の制御にも成功しました。これらの変化の起源は、バナジウムイオンとコバルトイオン間の電子の授受（金属間電荷移動）によるものであることを明らかにしました。この発見は、強誘電体・圧電体材料や巨大負熱膨張材料などの新たな機能性材料の開発につながる成果です。

同研究グループには、東京工業大学 科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所 東正樹教授、重松圭助教、酒井雄樹特定助教（以上3名は神奈川県立産業技術総合研究所併任）、西久保匠研究員、大阪府立大学 山田幾也准教授、高エネルギー加速器研究機構（KEK）物質構造科学研究所 佐賀山基准教授、高輝度光科学研究センター 水牧仁一朗主幹研究員および新田清文研究員が参加しました。

本成果は2020年8月11日（米国時間）に Chemistry of Materials 誌で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/PR20200825.pdf> をご覧下さい）。

隕石衝突の規模を鉱物から探る ～高強度レーザーで再現した隕石衝突の瞬間を超高速X線撮影～

2020年9月7日

高エネルギー加速器研究機構

筑波大学

熊本大学

■概要

高エネルギー加速器研究機構（KEK）、筑波大学、熊本大学は、KEKの放射光実験施設フォトンファクトリーアドバンストリング（PF-AR）において、ジルコニア（ ZrO_2 ）鉱物であるバッデレイアイトについて衝撃実験を行い、衝撃を受けている最中に起きる結晶構造の変化をナノ秒（1ナノ秒＝1億分の1秒）の時間スケールで直接観測することに成功しました。

これは、KEK 物質構造科学研究所の高木壮大研究員、一柳光平研究員、野澤俊介准教授、深谷亮特任助教、船守展正教授、足立伸一教授、筑波大学生命環境系の興野純准教授、熊本大学の川合伸明准教授らを中心とした共同研究グループの成果です。本研究は、KEK PF-ARの時間分解X線回折実験ステーションNW14Aを利用して行われました。

本成果は、アメリカ地球物理学連合（AGU：American Geophysical Union）の発行する科学雑誌『Geophysical

Research Letters』(9月16日号 (Volume47, Issue17)) に掲載されます (この記事の続きは <https://www.kek.jp/wp-content/uploads/2020/09/PR20200907.pdf> をご覧ください)。

酸化物ナノ構造に現れる新しい電子相の発見～二酸化バナジウムを用いたモットトランジスタ開発に新しい知見～

2020年9月17日
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

二酸化バナジウム (VO_2) は室温付近で巨大な金属・絶縁体転移を示すことから、次世代デバイス材料として盛んに研究されている機能性酸化物の一つです。しかし、 VO_2 の示す金属・絶縁体転移においては、デバイス設計に必須となるナノ領域における振る舞いはよく分かっていませんでした。東北大学多元物質科学研究所の志賀大亮大学院生、吉松公平講師、組頭広志教授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北村未歩助教、堀場弘司准教授等と共同で、 VO_2 をナノレベルまで薄くすると従来とは異なる新しい電子相が現れることを明らかにしました。

今後、この知見に基づいて最適なデバイス構造を設計することが可能になり、BeyondCMOS の有力候補であるモットトランジスタの実現が期待されます。

本研究成果は、米国物理学会誌 Physical Review B の注目論文 (Editors' Suggestion) に選ばれ、2020年9月9日にオンライン掲載されました (この記事の続きは <https://www.kek.jp/wp-content/uploads/2020/09/PR20200917.pdf> をご覧ください)。

新奇な磁性トポロジカル絶縁体ヘテロ構造の作成に成功—磁性とトポロジカル物性の協奏現象に新たな知見—

2020年10月8日
東京工業大学
分子科学研究所
広島大学
日本原子力研究開発機構
東京大学 大学院工学系研究科
高エネルギー加速器研究機構
筑波大学

■概要

東京工業大学 理学院 物理学系の平原徹准教授は、分子科学研究所の田中清尚准教授、広島大学放射光科学研究セ

ンターの奥田太一教授、日本原子力研究開発機構の竹田幸治研究主幹、東京大学大学院工学系研究科の小林正起准教授、高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所の兩宮健太教授、筑波大学数理物質系の黒田眞司教授、物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究拠点の佐々木泰祐主幹研究員、ロシア・スペインの理論グループと共同で、トポロジカル絶縁体の表面近傍に複数の規則的な磁性層を埋め込むことに成功し、その表面ディラックコーンのエネルギーギャップが磁化秩序の発現する温度より高い温度で閉じることを実証した。

トポロジカル絶縁体とは、物質内部は絶縁体で電流を通さないが、表面には金属状態が存在し、電流を流すことのできる新しい絶縁体であり、「量子物質」として注目されている。このトポロジカル絶縁体にさらに磁石の性質である磁化秩序を導入することで、輸送特性として量子異常ホール効果が実現する。磁性トポロジカル絶縁体では表面に存在するディラック電子にエネルギーギャップが開くが、これまでの研究では、理論の予想する磁化秩序 (磁性) とディラックコーンのエネルギーギャップの相関が実験的に正しいのか明確でなく、論争になっていた。

今回、トポロジカル絶縁体である Bi_2Te_3 (ビスマステル化合物) 薄膜上にさらに Te (テルル) と磁性元素 Mn (マンガン) を蒸着したところ、表面近傍に Mn と Te が潜り込み、 $\text{Mn}_4\text{Bi}_2\text{Te}_7/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ という新奇な磁性トポロジカル絶縁体ヘテロ構造が形成された。そしてこの物質の表面ディラックコーンのエネルギーギャップは、磁化秩序が消失する温度より一桁高い温度まで存在し、最終的には閉じることが示された。この成果によって量子異常ホール効果がこれまでより高温で実現され、デバイス応用につながるものが期待できる。

本成果は、2020年9月24日に、英国科学誌「Nature Communications (ネイチャー・コミュニケーションズ)」にオンライン掲載された (この記事の続きは <https://www.kek.jp/wp-content/uploads/2020/10/PR20201008.pdf> をご覧ください)。

微小な磁気渦の内部変形が引き起こす渦の配列変化

2020年11月11日

東京大学
理化学研究所
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
科学技術振興機構

■概要

次世代メモリの情報担体の候補として注目されている磁気スキルミオンは、数十ナノメートル（nm、1 nmは10億分の1メートル）程度の渦状の磁気構造体です。磁気スキルミオンはトポロジカル欠陥の一種であり、一度生成されると安定に存在でき、孤立した粒子として扱えることが知られています。これまで磁気スキルミオンは主に三角格子を組んだ状態で観測されてきましたが、最近では試料を急速に冷却すると、準安定状態として磁気スキルミオンを安定化できる温度・磁場範囲が拡大し、スキルミオンの三角格子から正方格子へと配列パターンが変化するという報告がなされています。しかし、この配列変化の起源は明らかになっていません。

東京大学大学院工学系研究科の高木里奈助教、関真一郎准教授らを中心とする研究グループは、理化学研究所、物質・材料研究機構、高エネルギー加速器研究機構（KEK）、高輝度光科学研究センターとの共同研究のもと、磁気スキルミオンの三角格子が正方格子へ配列変化する様子を実験と理論の両面から詳細に調べることで、磁気スキルミオンのコア部分の直径の変化が配列変化の起源となっていることを見いだしました。

今回の発見は、磁気スキルミオンのように内部変形の自由度を持つトポロジカル欠陥の集合体がつくる秩序構造を外場制御できる可能性を示唆しており、トポロジカル欠陥が示す新しい物性・現象の開拓につながることを期待されます。

本研究成果は、2020年11月11日（英国時間）に英国科学誌「Nature Communications」にオンライン掲載されます（この記事の続きは<https://www.kek.jp/wp-content/uploads/2020/11/PR20201111.pdf>をご覧ください）。

X線回折パターンからの対称性予測における知識発見－熟練者の勘・コツの定式化に成功－

2020年12月11日

高エネルギー加速器研究機構
総合研究大学院大学
情報・システム研究機構 統計数理研究所
東京理科大学
科学技術振興機構

■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 量子ビーム連携研究センターの小野 寛太 准教授、総合研究大学院大学 高エネルギー加速器科学研究科鈴木雄太（博士後期課程2年）らの研究グループは、統計数理研究所、東京理科大学と共同で、物質・材料の構造評価に不可欠な計測データである粉末X線回折パターンから機械学習を用いて結晶の対称性を予測する手法を開発しました。

さらに機械学習モデルの解析を通じて、これまで明示されていなかった「粉末X線回折パターンを見ただけでおおよその対称性を推定できる熟練者の経験知」を定式化することに成功しました。この研究で用いた解釈可能な機械学習アプローチにより、熟練者の勘・コツのように研究者間で漠然と共有されていた経験的知識を、計測データの中から発見し定式化することが可能となります。それにより、定式化された知識を用いて誰でも熟練者なみの計測データ解析を効率的に行えるようになり、科学研究を加速することが期待されます。

この研究成果は、英国の学術誌「Scientific Reports」に12月11日オンライン掲載されました（この記事の続きは<https://www.kek.jp/wp-content/uploads/2020/12/PR20201211.pdf>をご覧ください）。

軟X線渦ビームのらせん波面の観測に成功 - 磁性体中のトポロジカル欠陥構造に対する新たな観測手法 -

2020年12月25日

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

■概要

東北大学大学院理学研究科の石井祐太助教、分子科学研究所 山本航平研究員、高輝度光科学研究センター（JASRI）

放射光利用研究基盤センター 横山優一博士研究員、水牧仁一郎主幹研究員、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) 物質構造科学研究所の中尾裕則准教授、理化学研究所創発物性科学研究センター 有馬孝尚チームリーダー、物質・材料研究機構 山崎裕一主任研究員 (兼 KEK 客員准教授) らのグループは、インライン型ホログラフィーの手法を用いて、フォーク型回折格子から生成されたらせん状の軟X線渦ビームの位相分布を観測することに初めて成功しました。更に、ナノメートル (10 億分の 1 メートル) 領域の磁気渦構造であるスキルミオンの格子において、欠陥構造が存在する場合、本手法により欠陥のトポロジカルな構造の推定が可能であることを、シミュレーションにより明らかにしました。これらの結果は、磁性体中に存在するトポロジカルな欠陥構造に対して、本手法が新しい計測手段になり得ることを示しています。

本研究の成果は米国現地時間の 12 月 24 日、学術誌 *Physical Review Applied* に掲載されました (この記事の続きは <https://www.kek.jp/wp-content/uploads/2020/12/PR20201225.pdf> をご覧ください)。

副作用原因タンパク質 hERG チャンネルと薬剤の複合体構造を明らかにすることに成功 - 重篤な副作用の回避にもクライオ電子顕微鏡解析が役立つ -

2021 年 1 月 15 日
千葉大学

高エネルギー加速器研究機構
日本医療研究開発機構

■概要

千葉大学、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) 物質構造科学研究所、企業 5 社 (Axcelead Drug Discovery Partners 株式会社、アステラス製薬株式会社、小野薬品工業株式会社、第一三共 RD ノバーレ株式会社、武田薬品工業株式会社) の共同研究グループは、薬剤の副作用の原因となる hERG チャンネルと、その機能を阻害する薬剤 (アステミゾール) との複合体構造を、クライオ電子顕微鏡単粒子解析により 3.5 オングストローム (Å, 1Å は 100 億分の 1 メートル) 分解能で明らかにしました。

hERG チャンネルを阻害する化合物は心毒性を引き起こすリスクが高いため、hERG チャンネルの働きを阻害しない化合物の創製が必要です。今回の結果は、重篤な副作用の原因となるタンパク質と薬剤の複合体構造をクライオ電子顕微鏡で明らかにできることを示したもので、医薬品開発においてクライオ電子顕微鏡解析を用いた単粒子解析が薬剤による副作用の予測と、それを回避するための基盤技術となることが期待されます。

本研究は、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

(BINDS) の一環として産官学連携のもとで遂行されたプロジェクトです。本研究成果は、2021 年 1 月 15 日 (金) 0 時 30 分 (日本時間) 付で米国科学誌『*Structure*』 (Cell Press) にオンラインで掲載されました (この記事の続きは <https://www.kek.jp/wp-content/uploads/2021/01/PR20210115.pdf> をご覧ください)。

量子液晶と関係した新しい超伝導状態を発見

2021 年 1 月 15 日
東京大学
高エネルギー加速器研究機構

■概要

東京大学大学院新領域創成科学研究科の向笠清隆大学院生、松浦康平大学院生 (研究当時)、橋本顕一郎准教授、芝内孝禎教授、同物性研究所の上床美也教授らは、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) 物質構造科学研究所の熊井玲児教授と共同で、鉄系超伝導体において、量子液晶状態と密接に関係する新しい超伝導状態を発見しました。量子液晶とは、量子力学的な効果によって物質中に現れる、液晶に類似した電子状態を指します。この新しい超伝導状態は、これまで知られていた磁性と関係した超伝導状態とは異なるものであり、鉄系超伝導体のみならず銅酸化物超伝導体などの高温超伝導について、発現機構を理解する上で重要な手がかりとなります。

本研究成果は 2021 年 1 月 15 日付けで、英国科学誌 *Nature Communications* にオンライン掲載される予定です。

本研究は科学研究費新学術領域研究 (研究領域提案型) 「量子液晶の物性科学」 (領域代表: 芝内孝禎教授) [JP19H05824]、基盤研究 A (研究代表者: 上床美也教授) [JP19H00648] 等の助成を受けて行われました (この記事の続きは <https://www.kek.jp/wp-content/uploads/2021/01/PR20210115imss.pdf> をご覧ください)。