

### 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](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  $\text{SrVO}_3$  (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ー生体センシングデバイスの開発に期待ー

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）。