

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、相対論的効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応用することで、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、熟練者を上回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)。