



文部科学省科学研究費補助金「学術変革領域研究(A)」(令和2~6年度)

# 超秩序構造科学 NewsLetter No. 5 (5号)

URL: <http://www.hyperordered.org/>

## ◆領域代表より◆

月日が経つのは早いもので、学術変革領域研究「超秩序構造科学」も中間地点を通過し後半期に入りました。前半期はグループ間の連携を広げることに注力してきましたが、今後は「連携」を「融合」へと変革させ、領域の目玉となる成果の創出が重要となります。そのためには「超秩序構造」を活かした新規材料合成への道筋を、理論的に設計することも含め果敢に取り組むが求められます。幸い、コロナによる制限も緩和されてきましたので、対面ミーティングも容易になり、後半期の研究を加速的に進められる環境も整いつつあります。領域は新たなフェーズを迎えることとなりますので、再度、初心に帰り、緊張感を持って取り組みたいと思います。

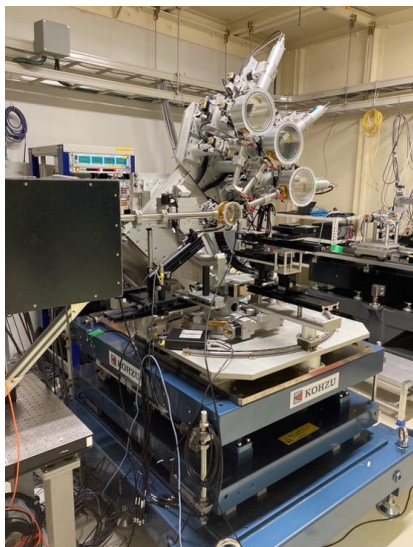
この4月より第二期の公募班メンバーが参加され、4月22日(土)には、キックオフミーティングを行いました。今後、計画班メンバーとの連携が有機的に組み立てられていくことを楽しみにしています。続けて、今年度上半期の行事をいくつか紹介します。まずは、7月22、23日(土・日)に阪大中之島センターで行う第三回「若手の学校」です。初の対面開催となるため、若者の交流促進が期待されます。国際関係では、5月21-23日にドイツのBad HonnefでHERAEUSセミナーを開催しました。また、我々と新学術領域「ハイパーマテリアル」、欧州「IRN-Aperiodic」の3つのプロジェクトの共同企画によって、9月24-29日、フランス・エビアンにて国際会議が開催されます。加えて、9月21-23日にハンガリー・ブダペストで開催される逆モンテカルロ法の国際会議にも関わっています。多くの国際イベントが目白押しですが、いくつかの重要な国際共同研究に発展することを祈っております。



領域代表 林好一  
(名古屋工業大学)

## ◆計画班紹介：A02-1 手法（構造）班◆

我々のミッションは、放射光、中性子、電子線といった量子ビームを横断的に利用し、様々な材料における「超秩序構造」の発掘（計測）を行うことです。



さらに他班との連携により、アモルファス材料をはじめとする機能性材料に潜む「超秩序構造」を正確に決定する手法論を確立し、概念を構築することです。

我々が掲げる課題は

【課題1】量子ビームを用いた極微量・微小領域計測技術の確立

【課題2】マルチスケール元素選択構造計測環境の確立

【課題3】複合装置による極限環境下における計測への挑戦

であり、これまで主に装置開発と計測を行ってきました。

メンバーは、小原真司(研究総括・放射光X線回折)、林好一(蛍光X線ホログラフィー(XFH)・X線異常散乱(AXS))、小野寺陽平(中性子回折)、平田秋彦(オングストローム電子回折)、木村耕治(XFH)、田尻寛男(回折装置開発)、紅野安彦(非晶質構造モデリ



A02-1 班代表 小原真司  
(物質・材料研究機構)

ング) であります。

図1に我々の班で開発を行ったXFH/AXS複合計測装置の写真を示します。この装置の特徴はコンパクトでかつハイスループットXFH/AXS計測を実現する唯一無二の装置です。

これまで他班と連携して高密度シリカガラスの構造解析に成功、温度と圧力によりガラスの構造を自在に制御できることを明らかにしました。世界一構造秩序のある高密度シリカガラスの合成にも成功しております。また、XFHによる高圧下での3次元原子配列の観測にも挑戦しています。今後はこの複合回折計を用いてさらなる超秩序構造の発掘を行い、そして、その概念の確立を行い、さらなる超秩序構造材料の設計に寄与していきたいと思っております。

### ◆論文・受賞など◆

後述の研究ピックアップで紹介する成果も含め、2022年度後半には39報の論文発表がありました。また4件の受賞がありました。詳細は領域ホームページ（研究成果ページは右QRコード）をご覧ください。



### ◆イベント報告◆

#### 1. 報告会

第5回成果報告会（2023年3月13,14日）が名古屋大学にて行われました。今回はほぼ全面的に現地開催となりました。約80名が参加し、対面でのコミュニケーションがますます活発になったように思います。

評価者の先生方からは、国際展開、教科書執筆などのアクティビティについて評価いただいた一方、わくわくするような研究や世界を驚かせるような成果への期待も述べられました。フォレスト賞（若手の優秀ポスター賞）には桑野太郎氏（名古屋大学）と村重博美氏（慶應義塾大学）が選ばれました。



#### 2. 研究会・ワークショップ・チュートリアル

- ・第70回応用物理学会春季学術講演会（2023年3月16日、上智大学）

シンポジウム「物質の超秩序構造とその応用～結晶と非晶質のはざまの科学～」

本シンポジウムは現地開催のみでしたが、会場では「超秩序構造」に関する最新の研究成果について、60名を超える参加者が熱心に耳を傾けていました。また、それぞれの講演後において、今後の展開、連携研究について闊達な議論が交わされ、充実したシンポジウムとなりました。

- ・公募班キックオフミーティング（2023年4月22日、名古屋工業大学）

後頁に示す第2期公募班と計画班による研究紹介が行われました。公募班20名、計画班20人程度が参加しました。完全対面で行われ、第2期から新しく加わった公募班メンバーには領域メンバーとの初顔合わせの場となりました。講演後に連携研究に向けた相談の時間を設けることで、多くの共同研究がスタートしたように思います。

### 3. 国際ワークショップ

#### 788 WE-Heraeus Seminar

#### Beyond Imperfections: New Structure-Property Relationships in Ceramics and Glasses

日時： 2023年5月22日(月)～5月24日(水)

会場： Physikzentrum Bad Honnef (Germany)

本ワークショップは主に誘電体やガラスにおける構造と物性に焦点を当て、計測や計算に関する幅広い講演が行われました。領域 A01-1 班代表の谷口と、名古屋大学の Jens Stelhorn 先生、University Erlangen-Nürnberg の Kyle Webber 先生によりオーガナイズされた国際ワークショップで、領域からも4件の招待講演、これまでのフォレスト賞受賞者5名による若手講演が行われました。会場は伝統ある Physikzentrum Bad Honnef で行われ、講演に加えて宿泊、食事もすべて会場という手厚いサポートのもと、非常に濃厚な3日間の国際研究交流となりました。本ワークショップのポスター賞を、本領域の Anh Khoa Augustin Lu 氏 (National Institute for Materials Science, Japan)、また Nona Mirzamohammadi 氏 (Catalan Institute of Nanoscience and Nanotechnology, Spain)、Cuo Wu 氏 (Forschungszentrum Jülich, Germany) の3名が受賞しました。



#### ◆今後の予定◆

#### 1. 超秩序構造科学 若手の学校

日時： 2023年7月22日(土)～7月23日(日)

会場： 大阪大学中之島センター

超秩序構造科学に関連した講演に加え、光電子ホログラフィー、分子動力学シミュレーション、機械学習のチュートリアルが行われます。ポスター発表(ポスター賞)も企画されています。

#### 2. 国際ワークショップ

#### International conference on complex orders in condensed matter: aperiodic order, local order, electronic order, hidden order

日時： 2023年9月24日(月)～9月29日(金)

会場： Evian les Bains (France)

新学術領域研究「Hyper Materials」、欧州「IRN Aperiodic Society」と合同で国際会議を開催いたします。国内外で注目される複雑なオーダー構造を持つ材料に関連するトピックが議論されます。

#### 3. 第6回成果報告会

日時： 2023年11月17日(金)～11月18日(土)

会場： 東京大学(予定)

#### ◆ニュースレター担当より◆

本ニュースレターでは本領域での活動をできるだけ発信していきたいと考えております。重要な研究成果、関係する研究会の開催予定や活動報告などありましたら、ニュースレター担当までお知らせください。  
(志賀元紀・東北大学) (中田彩子・物質・材料研究機構)

◆第2期公募班が決まりました◆

本年4月から下記20名の方を第2期公募班としてお迎えすることになりました。4月22日の公募班キックオフミーティングにて、それぞれの研究課題の紹介や領域内での連携計画などについて打ち合わせしました。計画班・公募班の強力な連携により超秩序構造科学のさらなる進展を目指します。

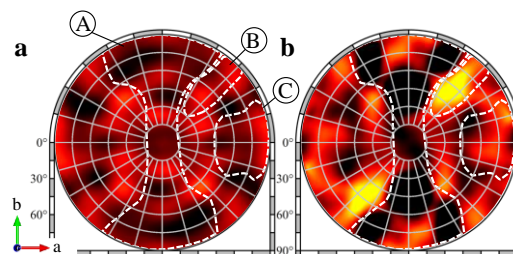
A01 試料		
秋山 了太	東京大学	軽元素添加によって実現する界面超伝導の転移温度高温化
新井 栄揮	量子科学技術研究 開発機構	磁場によって誘導される蛋白質超秩序構造化の機構解明
上沼 睦典	産業技術総合研究所	非晶質領域の局所構造計測に基づくMOS界面制御
菅 大介	京都大学	酸化物中の水素超秩序構造の観測と水素機能の開拓
岸本 史直	東京大学	動的超秩序構造に立脚した『マイクロ波触媒作用』の学理開拓
清水 荘雄	物質・材料研究機構	ウルツ鉱型強誘電体の抗電界低減を可能とする置換カチオン探索
田畑 仁	東京大学	機能性酸化物薄膜における傾斜格子ひずみ誘起超秩序構造と スピン・双極子物性
萩原 学	慶應義塾大学	Bi系リラクサーの誘電応答を支配する超秩序構造の理解と制御
細川 伸也	熊本大学	放射光を用いた機能性ゼオライトの原子配列・電子構造そして ダイナミクスの研究
松田 光弘	熊本大学	バルク金属の多段階精密酸化プロセスによる酸素欠損型超秩序構造 の創製と機能特性評価
焼山 佑美	大阪大学	バタフライ型分子からなる一次元チャンネル含有結晶が作る超秩序 構造の化学
A02 手法		
大窪 貴洋	千葉大学	機械学習によるNMRパラメータの解釈と原子構造推定データ フローの構築
大山 研司	茨城大学	白色中性子ホログラフィーでの高分解能多検出器系の実装による 軽元素超秩序構造の観測
片山 尚幸	名古屋大学	超秩序構造に対するナノビームX線を用いた時間分解回折構造研究
北浦 守	山形大学	電子・陽電子プローブによって解き明かす酸化クロム膜における 超秩序構造の階層性
大門 寛	分子科学研究所	CODELMAの開発と原子ホログラフィー顕微鏡
松尾 拓紀	熊本大学	ペロブスカイト型強誘電体における欠陥双極子の制御と超秩序構造 設計
A03 理論		
旭 良司	名古屋大学	同時ドーピングされた金属酸化物材料の巨大誘電率発現機構の解明と 材料設計
小林 正人	北海道大学	大規模量子分子動力学計算と準安定結晶構造探索に基づく超秩序 構造の理論的研究
渡邊 聡	東京大学	次世代電子素子中の超秩序構造の機械学習ポテンシャルによる 解析法の高度化とその応用

## ◆研究ピックアップ◆

## 1. 光合成をつかさどるタンパク質 Photo system II の活性中心となる超秩序構造を蛍光 X 線ホログラフィーによって解析する手法を確立しました

A. K. R. Ang, Y. Umena, A. Sato-Tomita, N. Shibayama, N. Happo, R. Marumi, Y. Yamamoto, **K. Kimura**, N. Kawamura, **Y. Takano**, **T. Matsushita**, Y. C. Sasaki, J.-R. Shen and **K. Hayashi**  
*J. Synchrotron Rad.* **30**, 368 (2023).

本領域のターゲットの一つであるナノクラスターは金属タンパク質中にも見られます。例えば、植物の光合成に関与する光化学系 II (PSII) では、PSII 内にある  $Mn_4CaO_5$  クラスターの触媒作用によって、S-状態遷移と呼ばれる反応サイクル (Kok サイクル) が生じ、水分解反応が促進されます。 $Mn_4CaO_5$  クラスターは、放射光 X 線回折によって歪んだ椅子型構造をとっていることが知られています。Kok サイクルでは 5 段階の反応により酸化が進行しますが、その際、4 つの Mn のうちの Mn の価数が増えているのかを知る必要があります。我々は  $Mn^{3+}$  と  $Mn^{4+}$  の X 線吸収端のエネルギーの違いを利用したホログラムの計測によって、その課題を解決できると考えました。図は、実験及び計算によって得られた  $Mn_4CaO_5$  クラスターのホログラムですが、パターンがよく一致していることから、ホログラム計測に成功したと分かります。タンパク質は一般的に放射線に弱く、長時間の X 線照射でその構造が変性しますが、我々は X 線の照射位置を変えながら計測を行う方法を確立することにより、この問題を回避しました。このため、常にフレッシュな PSII からのホログラムを観測できたと考えています。次のステップは、この手法を価数選択ホログラムの取得に応用することです。



PSII の  $Mn_4CaO_5$  クラスターからのホログラムパターン。a: 計算値、b: 実験値

## 2. 植物型フェレドキシンの高解像度結晶構造を用いた分子動力学シミュレーションにより、活性中心の還元が超秩序構造に与える影響を明らかにしました

**T. Nakayoshi**, Y. Ohnishi, **H. Tanaka**, G. Kurisu, H. X. Kondo and **Y. Takano**  
*Int. J. Mol. Sci.* **23**, 15913 (2022).

植物型フェレドキシン (Fd) は  $[2Fe-2S]$  クラスターを活性中心とする電子伝達タンパク質です。植物型フェレドキシンと標的タンパク質との親和性は活性中心の酸化還元状態に強く依存しており、これにより極めて円滑な電子伝達を実現しています。植物型 Fd による電子伝達機構を解明するためには酸化還元状態変化に伴う超秩序構造の変化を明らかにすることが不可欠ですが、酸化還元状態の厳密な制御は実験的に困難であり、植物型 Fd の構造や動的挙動の詳細については不明な点が残されています。本研究では、植物型 Fd の高解像度結晶構造をモデルに用いて分子動力学計算を行い、活性中心の還元が構造や動的挙動に与える影響を明らかにしました。活性中心の還元によってその近傍の Cys42 の主鎖カルボニル酸素との静電反発が強まることで極めて短時間のうちに Cys42 と Ser43 の間のペプチド結合が反転し、さらにこれに連動してその周辺の構造変化が惹起されることが示されました (図)。また、活性中心の還元によって活性中心と周辺残基との間の水素結合が強まり、これが原因となって電子伝達に不可欠とされる Phe61 の柔軟性が著しく向上することが示されました。本研究成果は植物型 Fd の円滑な電子伝達機構を解明する一助になることが期待されます。

