

約 60 年ぶり 2 例目の単純立方構造の単体結晶を発見

～電子線を用いた結晶生成により不安定な結晶構造の観察を実現～

ポイント

- ・電子線による分解反応を利用して、単純立方構造を持つ未知の銀結晶の形成に成功。
- ・生成過程とその後の変化を連続的に観察することで、発見した結晶の高い反応性を確認。
- ・未知の機能や性質を持つ革新的マテリアル探索への貢献に期待。

概要

北海道大学低温科学研究所の榊原雅也博士、山崎智也准教授、木村勇氣教授らの研究グループは、鳥取大学学術研究院工学系部門の灘 浩樹教授、北海道大学大学院工学研究院附属エネルギー・マテリアル融合領域研究センターの國貞雄治准教授と共同で、高分解能の透過電子顕微鏡^{*1} (TEM) を用いて、電子線照射による化学反応で銀結晶が生成する様子を原子レベルで直接観察することに成功しました。この観察により、ナノサイズの銀結晶ではこれまで知られていなかった単純立方構造^{*2} が形成されることを明らかにしました。

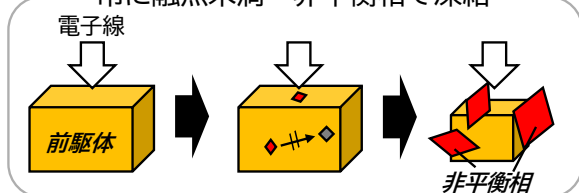
研究グループは、TEM 内でヨウ化銀 (AgI) に電子線を照射して分解することで、銀の結晶が融点よりも極めて低温の環境で生成する様子をその場観察しました。その結果、AgI の分解では、通常の銀がとる面心立方構造とは異なり「単純立方構造」をとる銀ナノ粒子が生成することを突き止めました。また、生成した結晶の TEM 連続観察から単純立方構造の銀結晶は安定相である面心立方構造の銀結晶に比べて高い化学反応性を示すことが確認されました。さらに、分子動力学シミュレーション^{*3} 及び第一原理計算^{*4} から、単純立方構造は孤立した銀結晶では安定でなく、ナノサイズに特有の表面/界面効果によって安定化されている可能性が明らかになりました。本成果は、物質が形成される瞬間を観察しながら未知の結晶構造を探索する新たなアプローチを示すものであり、今後の新材料探索につながることを期待されます。

なお、本研究成果は、日本時間 2026 年 10 月 21 日 (水) 公開の Nano Letters 誌にオンライン掲載されました。

徐々に冷却→熱力学的安定相が形成される



常に融点未満→非平衡相で凍結



本研究の概念図。従来の準静的な結晶生成では安定相が選択されるが、本研究では低温での電子線分解を用いることで安定性の低い非平衡相の凍結・観察を実現した。

【背景】

物質は、原子が規則正しく並ぶことで結晶と呼ばれる構造を作ります。同じ組成を持っていても、原子の並び方が異なると、物質の性質が大きく変わることがあります。このように、同じ物質が異なる結晶構造をとる現象は「結晶多形」と呼ばれます。例えば、同じ炭素からできていても、原子の並び方が異なるダイヤモンドと黒鉛では硬さや電気の流れやすさが大きく異なります。

近年では、物質をナノメートル（10 億分の 1 メートル）程度まで小さくすると、表面や他の物質との境界面の影響が大きくなり、通常の大さの物質では安定に存在できないような結晶構造が一時的に現れることが分かってきました。このため、ナノサイズの物質は、これまで知られていなかった新しい結晶構造を探索する場として注目されています。

一方で、このような特殊な構造は、温度や周囲の環境が変化すると、より安定な構造へと変化したり、化学反応によって別の物質へ変化したりすることがあります。そのため、形成された未知の構造を、その状態のまま取り出して調べることは容易ではありません。特に、時々刻々と変化する非平衡状態で短時間だけ現れる構造については、どのような構造が、どのように生まれ、どのように変化するのかを明らかにすることが、これまでの大きな課題となっていました。

【研究手法及び研究成果】

研究グループは、透過電子顕微鏡（TEM）を用いて、物質を変化させながら、その原子の並び方を直接観察する手法に着目しました。TEM では、電子線を試料に照射することで、原子レベルの構造を観察できます。また、電子線には物質の化学結合を切断したり、化学反応を引き起こしたりする作用があります。

本研究では、銀とヨウ素からなるヨウ化銀（AgI）に電子線を照射し、AgI が分解して銀が生成する過程を、原子レベルで連続的に観察しました。その結果、通常の銀で知られている面心立方構造とは異なる、「単純立方構造」の銀が形成されることを発見しました（図 1）。単純立方構造をとる単体は極めて珍しく、これまでの報告例は 1966 年に確認された放射性元素であるポロニウム（Po）の低温相に限られていました。

さらに観察を続けることで、この単純立方構造の銀は、 γ -AgI と呼ばれる AgI の準安定結晶相からのみ選択的に形成されることが分かりました。一方、より安定な構造の AgI からは、通常の面心立方構造の銀結晶の形成が確認されました。また、分子動力学シミュレーション及び第一原理計算を用いて、単純立方構造の銀が形成される条件について理論的に調べました。その結果、単純立方構造は銀結晶だけが孤立して存在する場合には安定な構造ではなく、ナノサイズに特有の表面や他の物質との界面の影響によって、その構造が安定化されている可能性が示されました。

また、単純立方構造の銀は通常の銀とは異なり、大気圧の 100 億分の 1 という高真空環境でも酸化反応が進行するなど、特徴的な化学的性質を示しました（図 2）。これらの結果から、ナノサイズの表面効果と、電子線によって引き起こされる非平衡な物質形成過程を組み合わせることで、通常の条件では現れない未知の結晶構造を形成・観察できることが明らかになりました。

【今後への期待】

本研究は、これまで知られていなかった結晶構造を、物質が変化していく過程を直接観察しながら発見できることを示したものです。特に、ナノサイズの表面/界面効果と電子線による非平衡な物質形成を組み合わせることで、通常の条件では安定に存在しない構造にもアクセスできる可能性が示されました。今回の成果は、未知の物質や材料を探索するための新たな方法を提示するものであり、将来

的な新材料の開発に向けた基礎的な研究基盤となることが期待されます。

今後は、今回発見した単純立方構造の銀がどのような物理的・化学的性質を持つのかさらに明らかにされるとともに、異なる元素や化合物にも本手法を適用することで、これまで見つかっていなかった結晶構造の探索が進められることが期待されます。物質を「作ってから調べる」のではなく、「作られる瞬間を観察しながら新しい構造を見つける」というアプローチを発展させることで、未知の物質・材料を開拓する新たな研究手法につながる可能性があります。

【謝辞】

本研究は JSPS 科研費「特別研究員奨励費（課題番号：JP25KJ0003）」、JST 戦略的創造研究推進事業 ACT-X「トランススケールな理解で切り拓く革新的マテリアル（課題番号：JPMJAX25D9）」、公益社団法人日本顕微鏡学会 若手研究者研究奨励金及び JSPS J-PEAKS プログラム (JPJS00420230001) の支援を受けたものです。本研究の一部は株式会社日立ハイテクの支援を受けて行われました。

論文情報

論文名	Electron-Beam-Assisted Formation of Simple-Cubic Silver（電子線照射による単純立方構造をもつ銀結晶の生成）
著者名	榊原雅也 ¹ 、灘 浩樹 ² 、國貞雄治 ³ 、山崎智也 ¹ 、木村勇氣 ¹ （ ¹ 北海道大学低温科学研究所、 ² 鳥取大学学術研究院工学系部門、 ³ 北海道大学大学院工学研究院附属エネルギー・マテリアル融合領域研究センター）
雑誌名	Nano Letters（米国化学会が発行するナノサイエンスの専門誌）
D O I	10.1021/acs.nanolett.6c03635
公表日	2026 年 10 月 21 日（水）（オンライン公開）

お問い合わせ先

【研究内容に関すること】

北海道大学低温科学研究所 教授 木村勇氣（きむらゆうき）

T E L 011-706-7666 F A X 011-706-7142 メール ykimura@lowtem.hokudai.ac.jp

U R L <https://www2.lowtem.hokudai.ac.jp/astro/ykimura/index.html>

【JST 事業に関すること】

科学技術振興機構戦略研究推進部先進融合研究グループ 白石淳子（しらいしじゅんこ）

T E L 03-6380-9130 F A X 03-3222-2066 メール act-x@jst.go.jp

配信元

北海道大学社会共創部広報課（〒060-0808 札幌市北区北 8 条西 5 丁目）

T E L 011-706-2610 F A X 011-706-2092 メール jp-press@general.hokudai.ac.jp

鳥取大学広報・基金室（ブランディング推進室 広報企画係）（〒680-8550 鳥取市湖山町南 4 丁目 101 番地）

T E L 0857-31-5006 F A X 0857-31-5018

メール toridai-kouhou@ml.adm.tottori-u.ac.jp

科学技術振興機構広報課（〒102-8666 東京都千代田区四番町 5 番地 3）

T E L 03-5214-8404 F A X 03-5214-8432 メール jstkoho@jst.go.jp

【参考図】

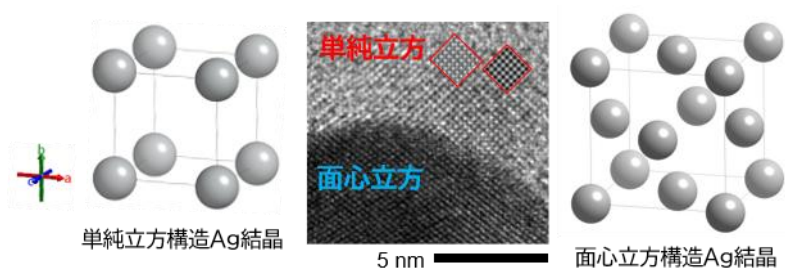


図 1. 観察された単純立方構造の銀結晶。構造モデル（左：単純立方、右：面心立方）と TEM 像（中）。通常の面心立方構造（TEM 像下部）に比べて密度が低いことを反映した低コントラスト像が像上部に見られている。

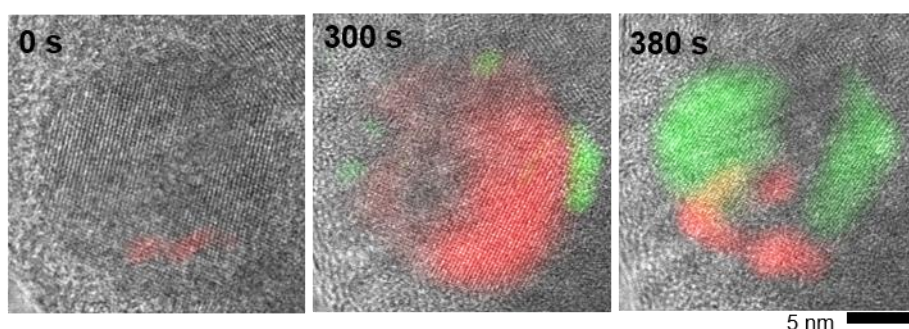


図 2. 単純立方構造の銀結晶における酸化反応。 γ -AgI 結晶に高真空環境で電子線を照射することで単純立方構造の銀結晶（赤色）が生成し、その後、酸化銀（緑色）へと徐々に変化する様子が観察された。

【用語解説】

- * 1 透過電子顕微鏡 … 光より波長の短い電子線を用いる顕微鏡で、物質を透過してきた電子線により像を結ぶことによって物質の構造を原子レベルで可視化できる。
- * 2 単純立方構造 … 結晶構造の一つ。立方体の各頂点に原子が配置された単位構造が 3 次元的に繰り返された構造。単体結晶としては極めて珍しく、1966 年に報告された放射性元素ポロニウムの低温相のみが知られている。
- * 3 分子動力学シミュレーション … 原子・分子の運動をコンピュータ上でシミュレーションし、物理・化学的な挙動を解析する手法。
- * 4 第一原理計算 … 量子力学の原理に基づいて、物質の電子状態やエネルギーをコンピュータ上で正確に予測・計算する手法。