

NEWS LETTER

VOL.1

1TH MARCH, 2023



文部科学省／日本学術振興会
科学研究費助成事業 学術変革領域研究(A)
2022-2026 年度

超セラミックス:分子が拓く無機材料のフロンティア

■ 巻頭言

賢者の石、超セラミックスを求めて



領域代表 前田 和彦

2022年6月、学術変革領域研究A「超セラミックス：分子が拓く無機材料のフロンティア」がスタートしました。本領域では分子を含む無機材料を主たる研究対象としており、陰山洋先生がリードされた新学術領域研究「複合アニオン化合物の創製と新機能」の後継としての位置付けで採択されました。国内外で極めて高い評価を受けた「複合アニオン」の確かな基盤のもと、複合アニオンを含めた従来型のセラミックスを超える新領域を新たに創り出す狙いです。まさに学術変革の名に相応しい領域と確信しています。

分子を取り込んだ無機材料、すなわち超セラミックスの研究では、多くの対象物質群を生み出します。そのため同じ無機化学のカテゴリでも、分子を扱う錯体化学や無機材料を扱う固体化学の狭い分野のみでは研究は立ち行かず、関連する様々な物質科学分野を巻き込んだ展開が必要となります。これまで私は、エネルギー変換型光触媒を中核として、固体や分子の両方を扱った触媒開発に10年近く携わってきました。光触媒という狭い分野の中にあっても、

固体系を扱う研究者と分子系の研究者との間には、サイエンス以上に分野の「ならわし」が当時大きく横たわっていました。こうした状況にあって、本領域の評価委員でもある井上晴夫先生のさきがけ「光エネルギーと物質変換」や新学術「人工光合成」の活動が実を結び、この10年間で異分野融合がかなり進みました。例えば、生来固体系の私が分子触媒を扱うことは普通になり、その逆もまた然りです。光触媒の研究を通じて私が経験してきた固体・分子の異分野融合を、今度は「超セラミックス」を舞台として成し遂げ、ささやかな自身の経験を還元したいと意気込んでいるところです。

来年度からは公募研究が加わりますが、まずは「合成」、「解析・理論」、「物性・機能」の計画研究メンバーがそれぞれの夢・野望を大事にしながら、何よりも学生を含めた若手が中心となって、自由な発想で研究を展開されることを願っています。賢者の石、超セラミックスを探す旅がいよいよはじまります。



■ 全体概要

この10年間での発見や技術革新により、既存のセラミックスにある「硬い」「脆い」「均質」といった価値観が変容しつつあります。例えば、電場印加により生み出される分子アニオン含有無機結晶が生み出す優れた二次電池特性や、無機固体と分子の融合により発現する革新的触媒機能や物性など、従来の無機セラミックス材料では実現できない新たな機能物性獲得の可能性が見えてきました。

本研究領域では、無機材料に分子性のユニット（分子イオン、錯体、クラスター等）を組み込んだ物質群を「超セラミックス」と定義し、幅広いバックグラウンドをもつ研究者が結集した分野横断的研究により、革新的な物性・機能を有する新材料を創製します。これにより、無機材料を中心とした材料科学の学術体系を大きく変革・転換させることを目指します。本研究領域では、研究対象とする超セラミックスを分子性ユニットの組み込み方の違いにより「内圏型」と「外圏型」の2種類に分類し、両タイプの新材料を創製します。

内圏型超セラミックスとは、無機結晶の格子内に分子イオン種を含む新材料のことです。結晶中の狭い空間での強い電子的相互作用に基づき、従来型の分子イオン含有材料では生み出せない新たな物性や機能の創出が期待できます。外圏型超セラミックスでは、無機材料表面の特定の位置に機能性分子を配置することで、無機材料や分子単独では有さない構造・形態および電子状態を新たに作り出すことができます。従来の有機-無機ハイブリッ

ド材料とは異なり、結晶表面あるいは界面からの摂動を最大限活用し、物性変調・機能改変へと繋げる狙いです。

本学術変革領域研究では、計画研究をA合成、B解析・理論、C物性・機能の三本柱の体制とし、AからCにはそれぞれ2つの異なる研究班を配置しました。超セラミックスの合成を担うA班では、A01が新規合成技術の開拓、A02が次元・形態制御を基盤として相互の要素技術を提供しあいながら、新物質合成に挑みます。これにより、将来の実用へとつながる超セラミックスの設計概念、方法論を確立します。B01班では、超セラミックスが作り出される合成の現場や、機能材料として動作する様子を直接観察することで、合成や機能の研究に新たな知見をもたらします。B02班は、第一原理計算による化学状態解析や情報科学的手法を駆使して物質開発を加速させる役割を担います。これらの実験と理論の協働により、超セラミックスの合成と物性機能創出の研究を加速させます。C班では、材料の形・界面を操ることで物性・機能を引き出し、社会を支える新材料創出のための学理構築を目指します。C01班は主として材料の相や形の制御に立脚した新物性開拓を目指します。C02班はセラミックスと分子の融合系において生まれる光電機能・バイオ機能をターゲットに研究を展開します。

■ A01 班「超セラミックスの新規合成法開発」

旧来の無機セラミックス材料は主に金属酸化物であり、触媒、電池、電子デバイスなど広範な用途に用いられています。21世紀に入ってから酸化物を超越した材料として、酸化物結晶中に N^{3-} , F^- , S^{2-} など単原子アニオンを内包する「複合アニオン化合物」が注目され、新学術領域として研究が進められてきました。一方、この新学術領域の研究において萌芽的発見がありました。すなわち、酸化物などのセラミックスに $(OH)^-$, $(O_2)^{2-}$, $(SCN)^-$, $(NCN)^{2-}$, $(BH_4)^-$ などの分子アニオンを内包する化合物群であり、このような無機材料へ分子性ユニット（分子イオン、錯体、クラスター

など）を組み込んだ物質群を「超セラミックス」と定義しました。本計画研究では、「超セラミックス」について、固体化学的視点からのアプローチによる物質創製に向けた新規合成法の確立を目的とします。本研究班では、固体化学の専門家の合成技術を集結し、結晶格子中に分子イオン（アニオン）を組み込んだ新物質を探索します。旧来のセラミックス合成に分子性化合物原料を取り入れた特殊合成法を開発し、分子イオンの異方的形状や動的特性など新たな自由度をもつ結晶性化合物の設計構築指針を示します。

研究代表者	
本橋 輝樹	神奈川大学 工学部 物質生命化学科・教授
研究分担者	
片桐 清文	広島大学 大学院先進理工系科学研究科 応用化学プログラム・教授
Cedric Tassel	京都大学 大学院工学研究科 物質エネルギー化学専攻・准教授
研究協力者	
齋藤 美和	神奈川大学 工学部 物質生命化学科・教務技術職員
小川 哲志	神奈川大学 工学部 物質生命化学科・プロジェクト助教
樽谷 直紀	広島大学 大学院先進理工系科学研究科 応用化学プログラム・助教
陰山 洋	京都大学 大学院工学研究科 物質エネルギー化学専攻・教授



■ A02 班「超セラミックスの次元・形態制御」

無機材料の新物性を開拓し機能性を高めるためには、構造の次元性と結晶形態の制御が欠かせません。これは、電子状態や構造特性が、結晶中での強固な無機骨格の組み上がり方によって制御されると同時に、表面積や露出している結晶面、ドメインサイズといった粒子のもつマクロな因子にも大きな影響を受けるためです。

分子性ユニットを組み込んだ超セラミックスの構造次元性および結晶形態を制御するためには、結晶構造中の分子の配

列と結晶成長を緻密に制御することが不可欠です。そこで本研究班では、分子を高度に扱うことを得意とする錯体化学に立脚した合成開拓を通じて、局所構造設計と分子集積技術による高次構造構築を行い、超セラミックスの構造次元性と結晶形態に着目した構造設計指針の確立を目指します。また、合成された新物質を評価班・機能班と連携して深く掘り下げることで、超セラミックス中の分子の役目を明らかにし革新機能へと繋がります。

研究代表者	
大谷 亮	九州大学 大学院理学研究院 化学部門・准教授
研究分担者	
高橋 雅英	大阪公立大学 大学院工学研究科・教授・学長特別補佐
定金 正洋	広島大学 大学院先進理工系科学研究科 応用化学プログラム・教授
研究協力者	
岡田 健司	大阪公立大学 大学院工学研究科・准教授
深津亜里紗	大阪公立大学 大学院工学研究科・助教
湊 拓生	広島大学 大学院先進理工系科学研究科 応用化学プログラム・助教
津野地 直	広島大学 大学院先進理工系科学研究科 応用化学プログラム・助教

■ B01 班「超セラミックスの高度構造解析」

超セラミックスは、無機材料に分子性のユニットを組み込んだ物質材料を創出することにより触媒や電池等の実用材料に適用可能な新たな物性や機能を発動させます。これらの新規物質群の機能発現の起源を知るためには、直接的な物質理解の基盤となる結晶構造、組成、形態、化学状態等の巨視的・局所的構造と動的構造を正確に理解することが鍵となります。本研究班は、先端計測を駆使した様々な高度構造解析手法を適用することにより、従来のセラミックスでは予想だにしない超セラミックスの新しい化学状態・形態

を解明するとともに、その場計測手法による動作機構を理解する役割を果たします。本領域を遅滞なく推進するためには、構造と化学状態の決定プロセスをいち早く確立することが最優先の課題となります。最終的には、本研究班の研究者が専門とする先端計測手法を駆使して、卓越した構造評価の研究を融合させることにより、超セラミックスが創出する新規物質群の巨視的・局所的構造及び動的な物質構造—機能相関の理解の実現を目指します。

研究代表者	
杉本 邦久	近畿大学 理工学部 理学科・教授
研究分担者	
木内 久雄	東京大学 物性研究所 極限コヒーレント光科学研究センター 軌道放射物性研究施設・助教
南部 雄亮	東北大学 金属材料研究所・准教授
稲田 幹	九州大学 中央分析センター・准教授
木本 浩司	物質・材料研究機構 先端材料解析研究拠点・拠点長
研究協力者	
河口 彰吾	(公財) 高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室・主幹研究員



■ B02 班「計算科学による超セラミックスの設計と物性機能解明」

従来のセラミックス材料では、単原子の「イオン半径」という剛体球近似モデルを用いて構造予測にある程度の指針を与えてきました。一方、 $((\text{CH}_3)_4\text{N})^+$ 、 $(\text{CO}_3)^{2-}$ 、 CN^- のような分子イオンを含む超セラミックス材料の構造は、イオン半径のような単純なパラメーターでは整理できない可能性があります。さらに、分子イオンには「分子と結晶（表面）の幾何学的相対関係」という自由度が加わり、超セラミックス材料における安定構造の支配因子はさらに複雑化すると推察されます。

そこで、本研究班では、第一原理計算を用いて超セラミックス材料における特異な構造多様性とその電子状態を逐次

的に決定することを計画しています。特に、配置多様性に対する網羅的第一原理計算、遺伝的アルゴリズムによる新規相探索、超セラミックス表面における表面/分子間相互作用の理論解析等のテーマを実施する予定です。また、未踏領域である超セラミックス材料を探索するには信頼できる「コンパス(指針)」が必要不可欠です。本研究領域内の班間連携を通じて理論計算と実験に基づく「超セラミックスデータベース」を構築し、マテリアルズインフォマティクス(MI)と人工知能(AI)を駆使することで、高効率かつ予測精度の高い材料設計と物質探索を実施したいと思います。

研究代表者	
桑原 彰秀	ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所・主席研究員
研究分担者	
前園 涼	北陸先端科学技術大学院大学 情報科学系 先端科学技術研究科・教授
辻 雄太	九州大学 総合理工学研究院・准教授
研究協力者	
小川 貴史	ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所・上級研究員
設楽 一希	ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所・研究員
中野 晃佑	北陸先端科学技術大学院大学 情報科学系・助教
市場 友宏	北陸先端科学技術大学院大学 情報科学系・特任助教

■ C01 班「超セラミックスの新物性開拓」

分子性ユニットを導入したセラミックス：超セラミックスに特有の物性と機能を開拓します。特に、従来の単元素から構成されるセラミックスと明確に区別される相転移現象や材料の機械特性を、様々な解析技術を用いて理解、制御することを目標とします。例えば、300℃を下回る融点の発現や、有機高分子並みの柔らかさ（弾性）を示す超セラミックスを顕在化させ、従来のセラミックスの硬い・均質、という考え方を拡張します。これら超セラミックスの優れた特性はバルクや界面で期待されます。伝導性、光学特性、

反応選択性などに代表される機能は、導入された分子性ユニットがもたらす異方性や応答性、また非平衡現象と連動します。ミクロスケールの構造設計にとどまらず、マイクロスケールの材料形状を操り、「固体イオン伝導の整流性」や「無機-有機界面における超伝導」といった新しい現象の発見と理解を深めてゆきます。これら独自の作動原理を持つ超セラミックスは、電池・触媒などエネルギー、環境の問題解決を司る新材料として新たな価値を提供できます。

研究代表者	
堀毛 悟史	京都大学 高等研究院・准教授
研究分担者	
廣井 善二	東京大学 物性研究所・教授
山本 隆文	東京工業大学 フロンティア材料研究所・准教授
研究協力者	
江口 美陽	物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点・主任研究員



■ C02 班「超セラミックスの新機能創出」

資源・エネルギー・健康問題の解決に向け、物質材料科学分野のブレークスルーに期待が高まっています。無機材料に分子性のユニット（分子イオン、錯体、クラスター等）を組み込んだ物質群、すなわち超セラミックスでは、無機材料と分子性ユニットとの創発的融合の結果、それぞれが単独では持ち得ない機能を発揮することです。例えば、固体光触媒 C_3N_4 と Ru 錯体分子の融合により、それぞれ単独では成し得ない常温常圧下での可視光 CO_2 変換が可能となります。またある種の遷移金属酸フッ化物では、結晶内分子イオン種が生成することに起因して、既存のリチウム電池に匹敵する高い電池容量が得られることが明らかとなっています。

本研究班では、分子性コンポーネントに由来する超セラミックスの構造の異方性（階層性）や化学的多様性を活用することで、電子移動の整流性を持つ材料系を合成班と協働して構築します。物性開拓を行う C01 班とも連携して、電子/正孔再結合を抑制した高性能光触媒、高速・高安定駆動する二次電池材料、抗感染性と骨再生能を併せ持つ生体機能材料を開発します。従来のセラミックスでは成し得なかった低濃度二酸化炭素の高選択的変換等、分子性ユニットを含む超セラミックスならではの革新的機能を創出します。さらに、領域内から生み出される新物質群の機能評価を行うことで構造-機能相関を分析し、有望材料の抽出と機能発現のための超セラミックスの設計指針を示します。

研究代表者	
前田 和彦	東京工業大学 理学院・教授
研究分担者	
内本 喜晴	京都大学 大学院人間・環境学研究科・教授
大矢根綾子	(国研) 産業技術総合研究所 ナノ材料研究部門・研究グループ長
研究協力者	
鎌倉 吉伸	東京工業大学 理学院・特任助教
中村 真紀	(国研) 産業技術総合研究所 ナノ材料研究部門・主任研究員
宮治 裕史	北海道大学 大学院歯学研究院・講師

総括班		
研究代表者		
前田 和彦		東京工業大学 理学院・教授
研究分担者		
本橋 輝樹		神奈川大学 工学部・教授
杉本 邦久		近畿大学 理工学部・教授
高橋 雅英		大阪公立大学 大学院工学研究科・教授
廣井 善二		東京大学 物性研究所・教授
桑原 彰秀		ファインセラミックスセンター・主席研究員
片桐 清文		広島大学 大学院先進理工系科学研究科・教授
大谷 亮		九州大学 大学院理学研究院・准教授
堀毛 悟史		京都大学 高等研究院・准教授
研究協力者		
陰山 洋		京都大学 大学院工学研究科・教授
評価者		
井上 晴夫		東京都立大学・名誉教授
垣花 真人		大阪大学 産業科学研究所・特任教授
辰巳砂 昌弘		大阪公立大学・学長
芳賀 正明		中央大学・名誉教授
Thomas E. Mallouk		ペンシルベニア大学 化学科・教授

領域情報をホームページおよび Twitter で発信しています。

領域ホームページ



Twitter アカウント



@SupraCeramics

是非ご覧下さい。



■ 領域メンバー&研究紹介 (A01)

神奈川大学 工学部 物質生命化学科

Department of Materials and Life Chemistry, Kanagawa University

領域所属 A01 班・計画研究
 研究代表者 本橋 輝樹・神奈川大学 工学部物質生命化学科・教授
 研究協力者 齋藤 美和・神奈川大学 工学部物質生命化学科・
 教務技術職員
 研究協力者 小川 哲志・神奈川大学 工学部物質生命化学科・
 プロジェクト助教

専門分野・
 キーワード 固体化学 / 無機材料化学 / 環境・エネルギー関連材料

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

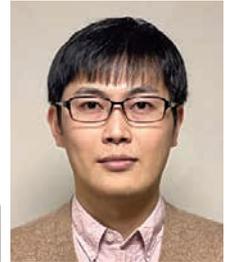
Solid-state chemistry / Inorganic materials chemistry / Environment- & energy-related materials



本橋 輝樹
Teruki MOTOHASHI



齋藤 美和
Miwa SAITO

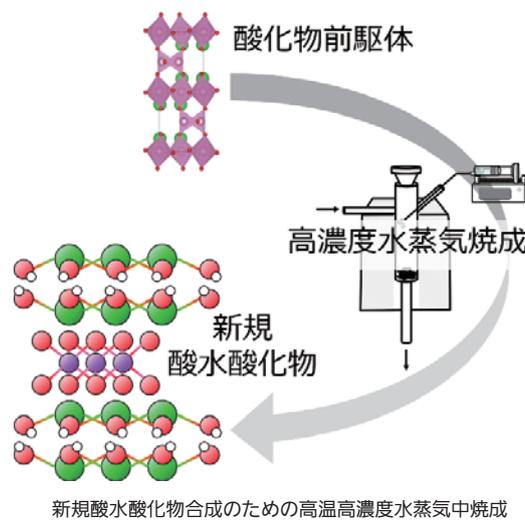


小川 哲志
Satoshi OGAWA

▶ 「内圏型超セラミックス」の合成法開発と新規材料の創製

結晶格子中に分子イオン（アニオン）を内包する「内圏型超セラミックス」の材料探索を担当します。特に、高温高濃度水蒸気中焼成による酸水酸化物合成など、分子イオン化合物創製のための特殊雰囲気合成法の開発を行っています。新規内圏型超セラミックスについて化学組成・結晶構造や熱挙動を調べ、触媒材料や蓄電池電極材料など環境・エネルギー分野への実用化を目指した機能性開拓を目標にしています。

1. 特殊雰囲気合成装置の開発と新規「内圏型超セラミックス」の探索
2. 高温高濃度水蒸気中合成による新規酸水酸化物の創製
3. 内圏型超セラミックスのキャラクタリゼーションと機能性開拓



本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

ニッチで斬新な物質開発を得意としています。領域内の研究者と連携し、アッと驚く革新的な機能性材料の発見を目指して活動していきたいと思っています。

領域メンバー&研究紹介 (A01)

広島大学 大学院先進理工系科学研究科 応用化学プログラム

Applied Chemistry Program, Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University

領域所属 A01 班・計画研究

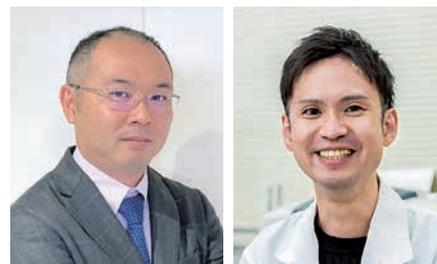
研究分担者 片桐 清文・広島大学 大学院先進理工系科学研究科 応用化学プログラム・教授

研究協力者 樽谷 直紀・広島大学 大学院先進理工系科学研究科 応用化学プログラム・助教

専門分野・キーワード プロアニオン / 金属カルボジイミド化合物 / 液相プロセス / ソルゲル法

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Proanion / Metal carbodiimide compounds / Liquid phase process / Sol-gel method



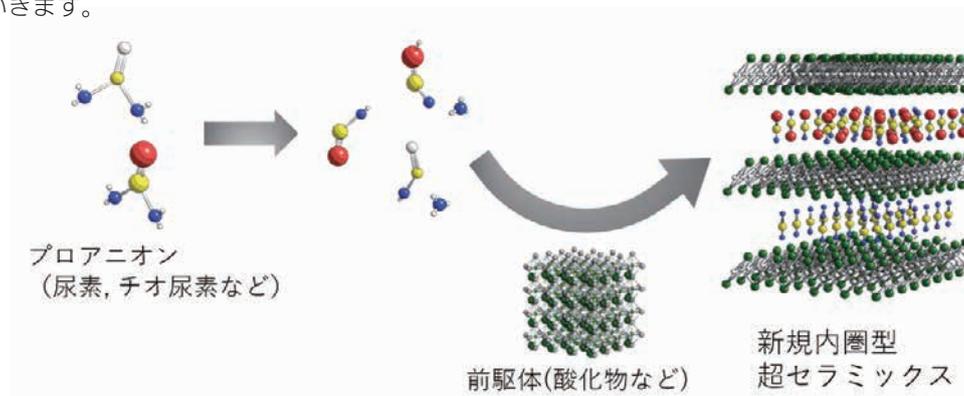
片桐 清文
Kiyofumi KATAGIRI

樽谷 直紀
Naoki TARUTANI

▶ プロアニオンと液相プロセスを活用した超セラミックス合成法開発

A01 班の研究課題「超セラミックスの新規合成法開発」において、固相法と液相法を活用した内圏型超セラミックスの新規合成法の開発を担当しています。反応過程において分子アニオンに変化する物質を「プロアニオン」と定義し、これを用いた分子アニオンを含有する内圏型超セラミックスを合成する手法の開発を主なターゲットとしています。具体的には尿素をプロアニオンに用いた金属（オキシ）カルボジイミド化合物の合成などを検討します。また、前駆体の合成においては、ソルゲル法や錯体重合法などを利用します。B 班との連携で材料設計や反応過程の解析を行うとともに、C 班との連携で得られた材料の機能創出や物性開拓に繋げていきます。

1. 尿素をプロアニオンとする金属（オキシ）カルボジイミド化合物の合成
2. プロアニオンとなる有機化合物の探索とその変換過程の解析
3. 液相プロセスを活用した内圏型超セラミックス合成法の探索
4. 金属水酸化物塩ナノ粒子を用いた超セラミックス合成



プロアニオンや固相法・液相法を駆使した新物質開発

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

内圏型超セラミックスは、新材料の宝庫と期待できる一方で、現時点では合成法に限られています。当チームでは超セラミックスを我が国発の固体化学の新分野とする上で必須となる新合成法の開拓に邁進してまいります。



■ 領域メンバー&研究紹介 (A01)

京都大学 大学院工学研究科 物質エネルギー化学専攻

Kyoto University, Graduate School of Engineering, Department of Energy and Hydrocarbon Chemistry

領域所属 A01 班・計画研究

研究分担者 タッセル セドリック・京都大学 大学院工学研究科 物質エネルギー化学専攻・准教授

研究協力者 陰山 洋・京都大学 大学院工学研究科 物質エネルギー化学専攻・教授

専門分野・キーワード 高圧合成 / トポケミカル反応 / 構造解析 / 複合アニオン / エネルギー材料

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

High-pressure synthesis / Topochemistry / Structural analysis / Mixed anion / Energy materials



タッセル セドリック
Cédric TASSEL

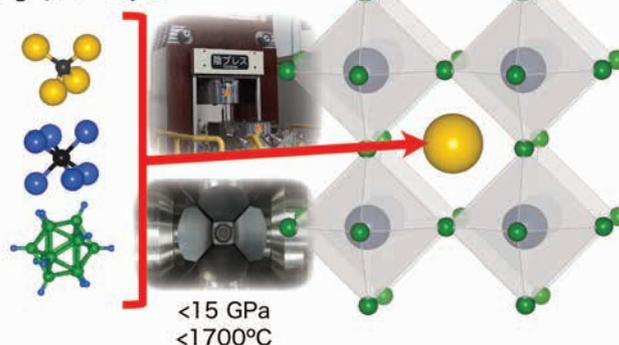
陰山 洋
Hiroshi KAGEYAMA

▶ 新規超セラミックスの高圧合成

A01 班の研究課題「新規合成法」のメンバーとして、高圧を利用して新しい超分子材料を得るための新しい戦略の開発を目指しています。従来のセラミックス構造（ペロブスカイト）に分子アニオンを組み込むことで、その特性を変化させるだけでなく、新しい分子秩序や対称性を誘発し、新しい機能を発揮することが期待できます（非線形光学材料、熱膨張など）。また、他グループとの共同研究により、既存の超セラミックスの高圧下での安定性を調べ、新しい相を生成することも考えています。新物質の形成、対称性、構造ダイナミクス、物性などを調べることで、新しい超セラミックスの背後にある理論をより深く理解することができます。

1. アニオンおよび分子アニオンを含む新規ペロブスカイト構造の開発
2. 新規分子材料の高圧合成とトポケミカル合成
3. 新規分子性セラミックスの結晶構造解析
4. 高温高圧相転移
5. 機能性エネルギー材料としての新規分子セラミックスの開発

新規超セラミックスの高圧合成 分子アニオン



分子陰イオンを含む新規ペロブスカイトの高圧合成

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

合成化学者との交流を進め、新しい分子のセラミックスへの組み込みを模索していきます。また、新材料の特徴を理解し、機能性化合物を開発するために、理論家とも連携していきたいと考えています。

■ 領域メンバー&研究紹介 (A02)

九州大学 大学院理学研究院 化学部門

Department of Chemistry, Faculty of Science, Kyushu University

領域所属 A02 班・計画研究

研究代表者 大谷 亮・九州大学 大学院理学研究院 化学部門・准教授

専門分野・
キーワード

シアノ金属錯体 / 熱膨張 / 極性 / イオン伝導

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Cyanide-based metal complex / Thermal expansion / Polarity / Ion conduction



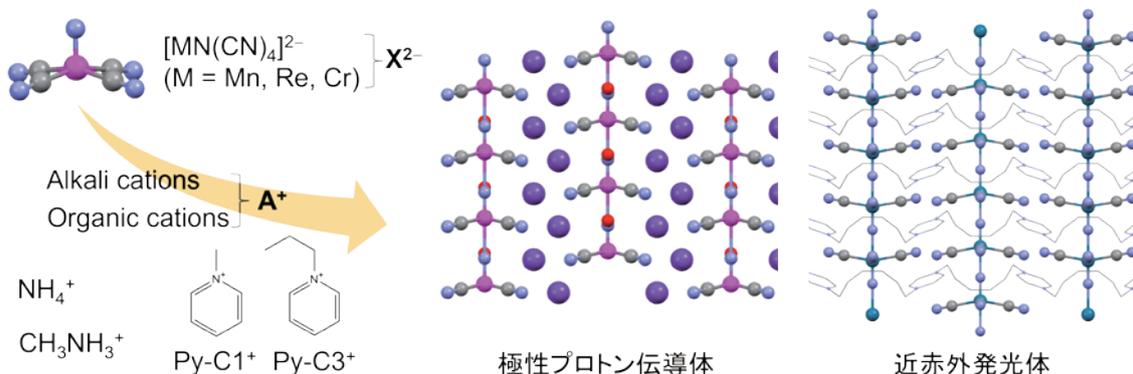
大谷 亮
Ryo OHTANI

▶ 極性一次元超セラミックスの合成と機能開拓

シアノ金属錯体の集積化により得られる極性一次元鎖を構造モチーフとした超セラミックス合成を行っています。特に、極性骨格中をイオンが流れる強誘電イオン伝導体や、相転移に基づく負の熱膨張などの構造機能特性をもつ超セラミックスを創出します。また、A02 班の研究課題「超セラミックスの次元・形態制御」での班内連携により、極性構造を基盤とした薄膜化や高次の異種積層構造体へと展開します。

1. シアノ金属錯体集積による極性一次元構造体の合成
2. 強誘電とイオン伝導がカップルした新機能創出
3. 金属錯体構造体の熱膨張挙動の解明と負の熱膨張特性の開拓
4. 融解するシアノ金属錯体の合成と液体・ガラス化の検討

極性一次元鎖モチーフの配列による超セラミックス合成



五配位錯体分子を構築素子とした一次元超セラミックスの合成

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

今まで錯体化学を主戦場としてきました。固体化学との連携・融合で生み出される全く新しい物質に今からワクワクしています。



領域メンバー&研究紹介 (A02)

大阪公立大学 大学院工学研究科

Graduate School of Engineering, Osaka Metropolitan University

領域所属 A02 班・計画研究
 研究分担者 高橋 雅英・大阪公立大学 大学院工学研究科・教授・学長特別補佐
 研究協力者 岡田 健司・大阪公立大学 大学院工学研究科・准教授
 研究協力者 深津 亜里紗・大阪公立大学 大学院工学研究科・助教

専門分野・ キーワード 有機-無機ハイブリッド / ミクロ多孔体 / 金属有機構造体 / ゾル-ゲル / エピタキシャル界面

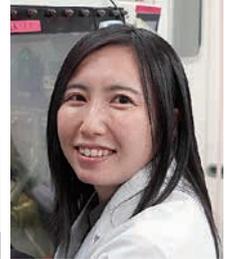
SPECIALIZED FIELD・KEYWORD
 Organic-inorganic hybrid / Micro porous materials / Metal-organic frameworks / Sol-gel / Epitaxial interfaces



高橋 雅英
Masahide TAKAHASHI



岡田 健司
Kenji OKADA

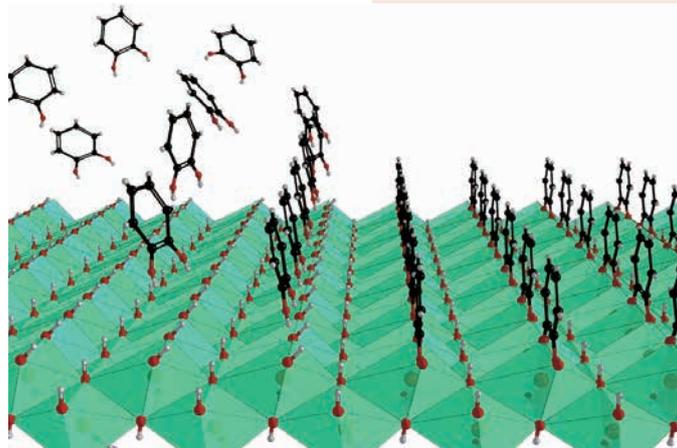


深津 亜里紗
Arisa FUKATSU

▶ 有機分子を合理的に配置／複合化した超セラミックスの創成

A02 班の研究課題「超セラミックスの次元・形態制御」において、セラミックス表面で、機能に対して合理的な配置や方位で分子を集積した外圏型超セラミックス科学を極めます。具体的には、セラミックスの結晶周期性を分子配列に転写することで、分子単独では熱力学的に不安定な配置であっても、機能に対して最適な有機-無機複合エピタキシャル界面を実現します。

1. 有機-無機エピタキシャル界面の設計と制御
2. ミクロ多孔体中での分子配列の実現と解析手法の開拓
3. ミクロ形態により機能が増幅されたハイブリッド材料の実現
4. DNA などの巨大分子の錯形成による三次元構造制御
5. 環境に応答して機能を変調可能なスマートハイブリッド材料の実現



セラミックス表面で配列する分子の様子

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

本領域で基礎から応用、合成から解析のスペクトルを広げ、超セラミックスを操る超研究者を目指していきたい。

領域メンバー&研究紹介 (A02)

広島大学 大学院先進理工系科学研究科 応用化学プログラム

Hiroshima University, Graduate School of Advanced Science and Engineering

領域所属	A02 班・計画研究
研究分担者	定金 正洋・広島大学 大学院先進理工系科学研究科 応用化学プログラム・教授
研究協力者	湊 拓生・広島大学 大学院先進理工系科学研究科 応用化学プログラム・助教
研究協力者	津野地 直・広島大学 大学院先進理工系科学研究科 応用化学プログラム・助教
専門分野・ キーワード	ポリオキシメタレート / 金属酸化物分子ユニット / 金属酸化物ユニット合成 / 有機無機ハイブリッド材料 / 細孔材料



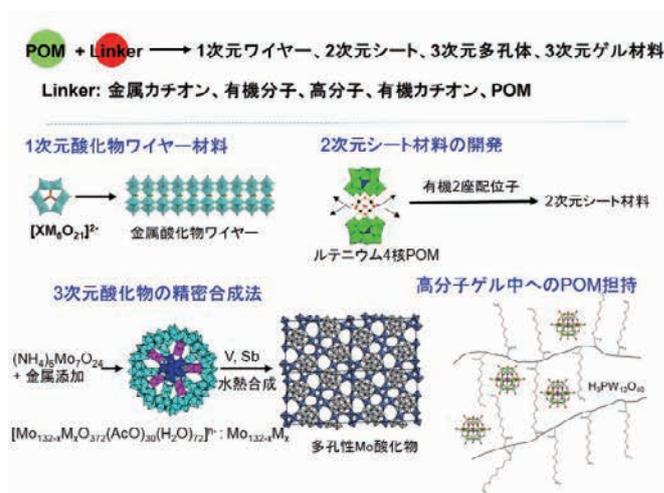
定金 正洋 Masahiro SADAKANE 湊 拓生 Tauro MINATO 津野地 直 Nao TSUNOJI

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Polyoxometalate / Metal oxide molecular unit /
Metal oxides unit synthesis /
Organic-inorganic hybrid materials / Porous materials

▶ 金属酸化物分子ユニットを配列した超セラミックス合成法の開発

A02 班の研究課題「超セラミックスの次元・形態制御」において、金属酸化物分子ユニットを配列させた金属酸化物材料の合成法の開発を担当しています。具体的には、モリブデンやタングステンでは金属酸化物がアルカリ性溶液に溶解してできるポリオキシメタレートと呼ばれるアニオン性金属酸化物分子を用いた研究を行っています。新しい金属酸化物分子の合成およびこのポリオキシメタレートをビルディングブロックとして他の金属カチオン、有機分子および有機カチオンと連結させる新規超セラミックス金属酸化物の合成に取り組んでいます。また、この知見を基にゼオライトの新規合成法にも取り組みます。



ポリオキシメタレート（金属酸化物分子）をビルディングブロックとして用いた超セラミックス材料合成技術の開発

1. 新規ポリオキシメタレート分子の合成技術の開発
2. ポリオキシメタレートユニットを配列させた超セラミックス金属酸化物の合成技術の開発
3. ゼオライトのユニット合成技術の開発

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

本領域で高度な分析技術を持つ研究者、計算科学研究者および卓越した応用研究技術を持つ研究者との連携を進め、金属酸化物分子をビルディングブロックとして用いた超セラミックス材料の開発を目指していきたい。



領域メンバー&研究紹介 (B01)

近畿大学 理工学部 理学科

Kindai University, Faculty of Science and Engineering, Inorganic Chemistry Lab

領域所属 B01 班・計画研究
 研究代表者 杉本 邦久・近畿大学 理工学部 理学科・教授
 研究協力者 河口 彰吾・(公財) 高輝度光科学研究センター 回折・散乱推進室・
 主幹研究員

専門分野・
 キーワード その場観察 / 放射光 / X線構造解析 / 量子結晶学

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD
 In-situ experiment / Synchrotron radiation / X-ray structure analysis /
 Quantum crystallography



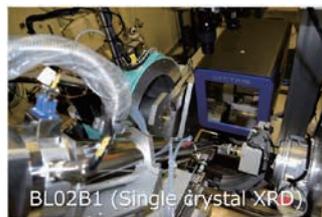
杉本 邦久 河口 彰吾
 Kunihisa SUGIMOTO Shogo KAWAGUCHI

▶ 超セラミックスの高度構造解析

我々のグループでは、X線回折が電子の状態を直接的に観測できることに着目し、放射光X線を用いた高度な構造解析の研究を行なっています。結晶空間の原子間距離・角度だけでなく、結合電子の電子密度分布を可視化によって、新機能の解明を進めています。本研究では、予想だにしない超セラミックスをナノスケールで可視化するだけでなく、B02班との連携によって物性の予測に繋げていきます。また、先端計測手法を協奏的に最大限活用し、研究分担者（木内、南部、稲田、木本）及び研究協力者（河口）との連携により、

合成プロセスや動作時のその場観察構造計測に基づいた超セラミックスの全体像の解明にも挑戦していきます。

1. その場観察による合成プロセス及び動作時の構造解析
2. 巨視的構造及び局所的構造の評価
3. 融合解析スキームによる構造評価
4. 量子結晶学による定量的な構造評価



SPring-8での高度な構造計測により、一気通貫で超セラミックスの創出から機能発現の全体像を解明

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

本領域で合成グループだけでなく、理論計算グループとの連携を進め、マテリアルズ・インフォマティクスを活用したデータ駆動型の材料設計に挑戦し、超セラミックスの学理構築に貢献していきたい。

■ 領域メンバー&研究紹介 (B01)

東京大学 物性研究所 極限コヒーレント光科学研究センター 軌道放射物性研究施設

The University of Tokyo, Institute for Solid State Physics, Laser and Synchrotron Research Center, Synchrotron Radiation Laboratory

領域所属 B01 班・計画研究

研究分担者 木内 久雄・東京大学 物性研究所 極限コヒーレント光科学研究センター 軌道放射物性研究施設・助教

専門分野・
キーワード 放射光 / X線分光 / その場観察

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Synchrotron radiation / X-ray spectroscopy / In situ & operando experiments



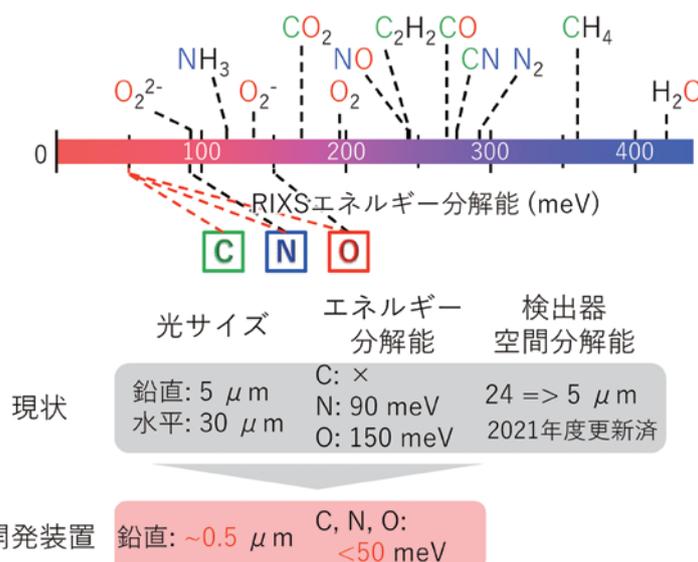
木内 久雄

Hisao KIUCHI

▶ 高エネルギー共鳴非弾性X線散乱(RIXS)装置を用いた超セラミックスの化学状態解析

B01 班の研究課題「超セラミックスの高度構造解析」の分担者として、高エネルギー分解能 RIXS 装置の開発と超セラミックスの化学状態解析を担当します。RIXS は、超セラミックスの機能発現の肝となる分子性ユニットを元素選択的に分析できる強力なツールであり、分子性ユニットの結合次数の変化や無機材料と分子性ユニットの電化のやり取りを捉えることで、超セラミックス内の相互作用を可視化し、その機能を解明するための研究を行っています。

1. 高エネルギー分解能 RIXS 装置の開発
2. RIXS による分子性ユニットの化学状態解析
3. RIXS による超セラミックスの化学状態解析



分子性ユニット候補の振動エネルギーと高エネルギー分解能 RIXS 装置の開発目標

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

これまででは超伝導体や量子物質への適用が多かった RIXS 測定を、多種多様な研究分野が混ざる本領域で、化学反応を基にする物質機能を解明する手法として広く普及させていきたいです。



■ 領域メンバー&研究紹介 (B01)

東北大学 金属材料研究所

Institute for Materials Research, Tohoku University

領域所属 B01 班・計画研究
研究分担者 南部 雄亮・東北大学 金属材料研究所・准教授

専門分野・
キーワード 物性物理学 / 磁性 / 構造解析 / 中性子散乱

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD
Condensed matter physics / Magnetism / Structure refinement / Neutron scattering

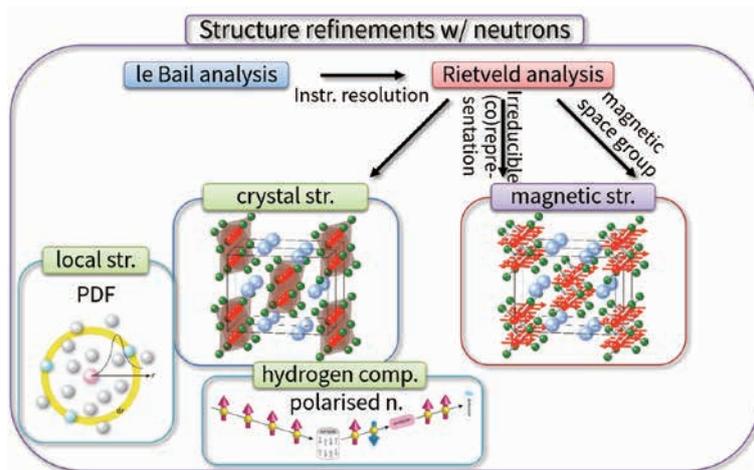


南部 雄亮
Yusuke NAMBU

▶ 中性子を用いた超セラミックスの構造解析

超セラミックスの物性と機能の理解には、構造の理解が鍵となります。「先端計測手法による超セラミックスの構造解析」を課題とする B01 班において、中性子を用いた構造解析を担当しています。中性子には、他プローブでは検出が難しい水素を含む軽元素の原子位置を精度良く決定できる利点があり、Rietveld 解析で決定する平均構造に留まらず、対相関関数解析による局所構造や非弾性散乱による動的構造の同定にも威力を発揮します。領域内で新奇に合成される物質群に対し、B01 班内の多プローブを用いた協奏的な構造解析により機能発現の解明を目的としています。

1. 複合金属酸水素化物、内圏型超セラミックス材料、シアノハイブリッド等の構造解析
2. 正負熱膨張物質における局所構造解析と Debye-Waller 因子の評価
3. 室温磁気抵抗物質の磁気構造解析
4. 分子性フレームワークの動的帯磁率測定



中性子回折を用いた構造同定の模式図

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

化学を主軸とする領域内で数少ない物理屋として構造解析を担当します。「答え」が存在する構造解析を基本としつつ、水素含有物質における偏極中性子を用いた研究への展開などを狙っていきます。

■ 領域メンバー&研究紹介 (B01)

九州大学 中央分析センター

Center of Advanced Instrumental Analysis, Kyushu University

領域所属 B01 班・計画研究
研究分担者 稲田 幹・九州大学 中央分析センター・准教授

専門分野・キーワード 水熱合成 / 酸化物ナノ粒子 / 多孔体 / 機器による構造分析 / 吸着解析

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Hydrothermal synthesis / Oxide nanoparticles / Porous materials / Structural analysis / Adsorption analysis

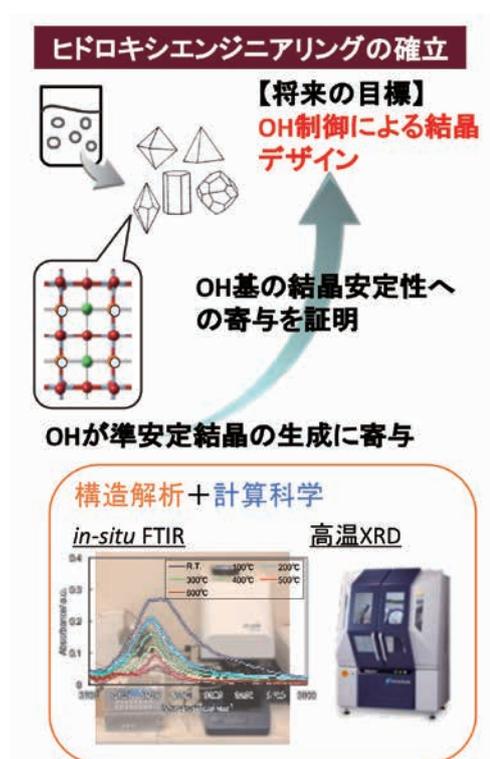


稲田 幹
Miki INADA

▶ 準安定構造に着目した材料合成と高度構造解析

「超セラミックスの高度構造解析」分担者として、材料の組成や化学結合状態を XRF-WDX、XRD、FT-IR、固体 NMR、XPS などにより解析する。高温 in-situ XRD として水蒸気導入可能な 1000℃ までの赤外炉と 1500℃ 加熱可能な白金炉を有し、FT-IR には -80 ~ 600℃ まで温度可変なリンカムを備えており、反応や機能を明らかにするためのその場観察に有効である。また、ガス吸着測定装置による吸着熱・吸着速度解析、多機能プローブ顕微鏡によるプローブ・試料間の物理情報取得ならびに AFM マーキングを用いた同一箇所 SEM-EDS 分析が可能であり、超セラミックスの表面形態・機能解析に活用する。

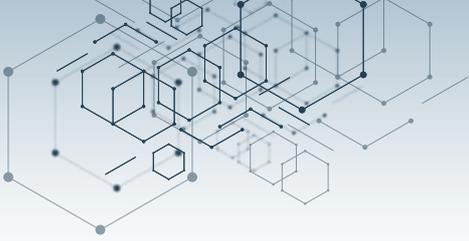
1. 準安定な酸水酸化物結晶の創製
2. 酸水酸化物結晶中の水酸基安定化と状態解析に関する研究
3. 中央分析センター機器による構造解析



水熱合成酸化物への水酸基導入による特異結晶の創製と、計算科学とセンター機器による構造解析

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

一般に高温高圧下で合成するセラミックスを、機能を見極めながら可能な限り低環境負荷で開発できるように、本領域で他(多)分野の研究者と連携したい。セラミックスリサイクル(再資源化)の実現が目標。



■ 領域メンバー&研究紹介 (B01)

物質・材料研究機構 先端材料解析研究拠点

National Institute for Materials Science

領域所属 B01 班・計画研究
研究分担者 木本 浩司・物質・材料研究機構 先端材料解析研究拠点・拠点長

専門分野・
キーワード 透過電子顕微鏡 / 電子エネルギー損失分光法 / 構造解析

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Transmission electron microscopy / Electron energy loss spectroscopy / Structure analysis

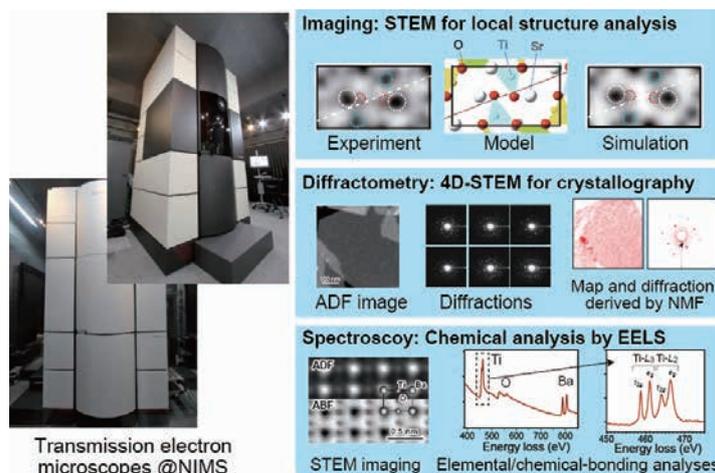


木本 浩司
Koji KIMOTO

▶ 透過電子顕微鏡を用いた結晶構造解析

「先端計測手法による超セラミックスの構造解析」を課題とする B01 班において、透過電子顕微鏡による構造解析を担当します。広義の透過電子顕微鏡法 (TEM) は、拡大観察する結像法、結晶構造解析を行う回折法、元素分析等を行う分光法の 3 要素を含んでいます。様々な手法を組み合わせることにより、超セラミックスの機能発現に係る微細構造を明らかにすることを目指します。特に走査透過電子顕微鏡 (STEM) による局所構造観察、4 次元 (4D) STEM による電子回折図形の解析、電子エネルギー損失分光法 (EELS) による元素・結合状態の解析を行います。取得データの統計処理や機械学習による解析などにも取り組んでまいります。

1. STEM 像観察による結晶構造観察 (結像法)
2. 4D-STEM により取得した電子回折による構造解析 (回折法)
3. 電子エネルギー損失分光法による元素・結合状態解析 (分光法)
4. TEM データ解析例の公開
(<https://www.nims.go.jp/AEMG/DMindex.html>)



TEMによる結像(imaging)・回折(diffractometry)・分光法(spectroscopy)の一例

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

TEM による結像法・回折法・分光法を駆使して、皆さんの新物質の構造について、解析結果を出せるように微力を尽くします。TEM データの取り扱いや解析法について Web 等で分かりやすく情報発信してまいります。

■ 領域メンバー&研究紹介 (B02)

ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所

Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center

領域所属 B02 班・計画研究
研究代表者 桑原 彰秀・ファインセラミックスセンター
 ナノ構造研究所・主席研究員
研究協力者 小川 貴史・ファインセラミックスセンター
 ナノ構造研究所・上級研究員
研究協力者 設楽 一希・ファインセラミックスセンター
 ナノ構造研究所・研究員

専門分野・キーワード 第一原理計算 / 固体化学 / 欠陥化学 / 網羅計算

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD
 First-principles calculation / Solid state chemistry /
 Defect chemistry / Exhaustive computation



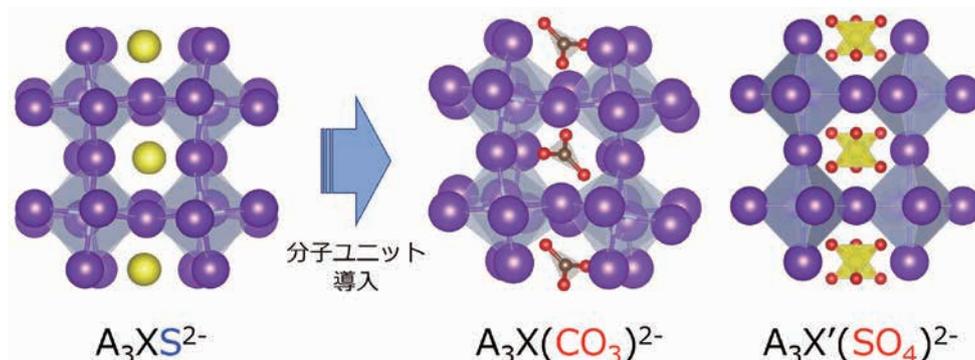
桑原 彰秀 小川 貴史 設楽 一希
 Akihide KUWABARA Takafumi OGAWA Kazuki SHITARA

▶ 超セラミックス材料の構造解析と物質変換反応の計算機シミュレーション

本研究課題においては、内圏型超セラミックス材料における分子イオンの複雑な安定構造の解明に取り組む。従来のセラミックス材料では、単原子の「イオン半径」という剛体球近似モデルを用いて構造予測に指針を与えてきたが、分子イオンを含む超セラミックス材料の構造は、イオン半径のような単純なパラメータでは整理できない可能性がある。また、分子イオンには「分子と結晶（表面）の三次元配置」という自由度が加わり、超セラミックス材料における安定構造の支配因子はさらに複雑化すると推察される。

超セラミックス材料における分子イオンの異方性が安定構造と物性に与える影響を電子状態計算で明らかにし、特異的な物性発現の予測を行う。

1. 超セラミックス材料における安定配置構造の探索
2. 結晶格子中の分子ユニットの振動状態解析
3. 超セラミックス材料における欠陥化学
4. 分子ユニットのサイズ効果



超セラミックスにおける分子ユニットの安定構造

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

セラミックスと分子が融合することで、新しい固体化学の裾野が広がることを期待しています。計算と実験の協働や情報科学的なアプローチにも挑戦していきたいと思えます。



領域メンバー&研究紹介 (B02)

北陸先端科学技術大学院大学 情報科学系

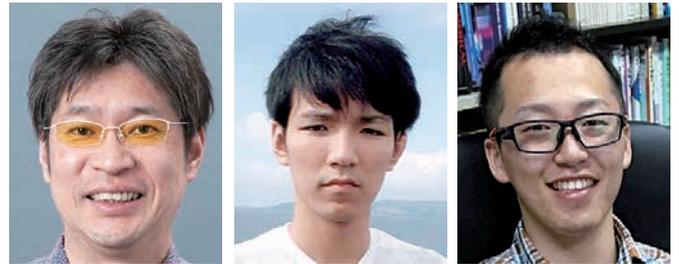
School of Information Science, JAIST

領域所属 B02 班・計画研究
 研究分担者 前園 涼・北陸先端科学技術大学院大学 情報科学系・教授
 研究協力者 中野 晃佑・北陸先端科学技術大学院大学 情報科学系・助教
 研究協力者 市場 友宏・北陸先端科学技術大学院大学 情報科学系・特任助教

専門分野・キーワード 第一原理計算 / マテリアルズインフォマティクス / データ科学 / 構造探索 / スパコン科学

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

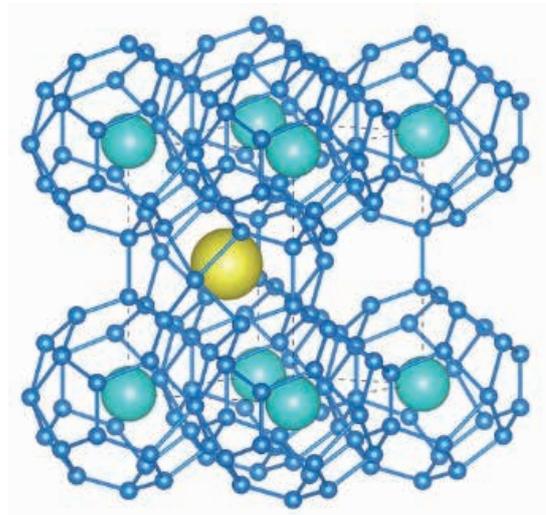
Ab initio / Materials informatics / Data science / Structural search / High performance computing



前園 涼 Ryo MAEZONO
 中野 晃佑 Kousuke NAKANO
 市場 友宏 Tom ICHIBHA

▶ 超セラミックス材料のデータ駆動型物質探索と合成可能性予測

遺伝的アルゴリズムや粒子群アルゴリズムを第一原理電子状態計算と組み合わせて大規模な物質構造探索を行っています。北陸先端大のスパコン能力を駆使して超セラミックス材料における新規物質構造のデータ科学的発見に取り組んでいます。第一原理計算によるフォノン解析や凸包解析により、結晶構造の合成可能性を検討することができます(市場)。現代数学的な組み合わせ論に基づくアルゴリズムを用いて、アニオン置換などを施した固溶体の結晶構造モデルを作成し、第一原理計算を介してXRDピークパターンの照合などを行うことができます(中野)。



データ科学的手法で新たに発見された三元系超伝導体(Y/Ce/H)の構造

1. 遺伝的アルゴリズムによる結晶構造探索
2. 固溶体構造モデルによる第一原理解析
3. 第一原理フォノン解析による合成安定性評価
4. 電子状態計算技法全般の技術移転にむけた共同教育
5. 電子状態解析を高速化するツール開発

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

超セラミックス材料における新規物質構造の発見予測事業を確立したい。領域内においてデータ科学的予測手法をも駆使する若手合成実験家を育成したい。

■ 領域メンバー&研究紹介 (B02)

九州大学 総合理工学研究院

Faculty of Engineering Sciences, Kyushu University

領域所属 B02 班・計画研究
研究分担者 辻 雄太・九州大学 総合理工学研究院・准教授

専門分野・キーワード 理論化学 / 計算化学 / 分子軌道法 / 表面科学 / 触媒

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Theoretical chemistry / Computational chemistry / Molecular orbital method / Surface science / Catalysis



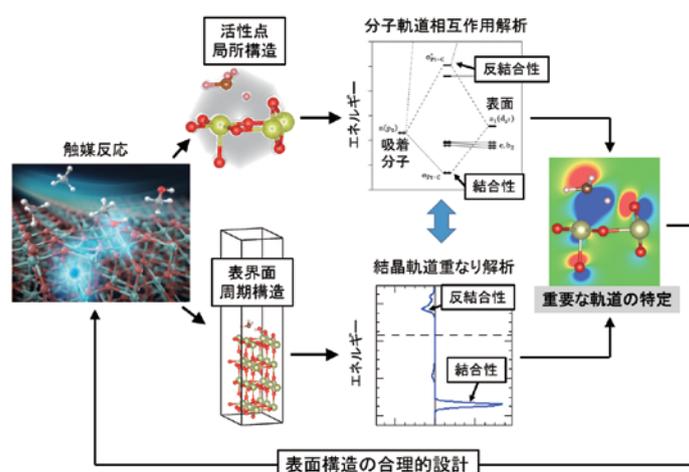
辻 雄太
Yuta TSUJI

▶ 超セラミックス表面の反応と物性の理論的研究

B02 班の研究課題「計算科学による超セラミックスの設計と物性機能解明」において、表面計算や分子軌道計算を担当しています。本研究では、超セラミックス表面（外圏型超セラミックス）の反応と物性に関する課題に分子論的視点でアプローチし、表面構造—機能相関の理解とそれに基づいた新物質設計を行います。主に、表面における触媒反応と表面と分子との間の界面相互作用に関する理論的研究を実施します。C 班とは、表面機能の解明を協働して行い、A 班とは機能性表面の設計を協働して行います。固体化学的な理論計算手法に分子化学的な視点を取り込み、新規物

質の解析と設計を行います。

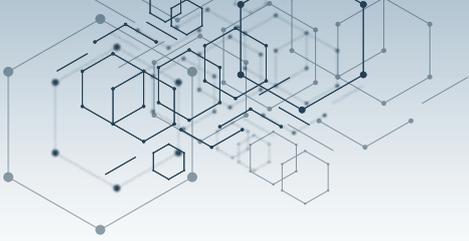
1. 超セラミックス表面構造—反応性相関の解明
2. 表面機能の向上、新規表面機能の創出への理論的アプローチ
3. 軌道原理に基づいた電子状態制御の確立
4. 触媒反応における表面相互作用の解析
5. 電子デバイスや生体機能材料への展開を見据えた界面電子状態解析



固体表面と分子との相互作用への軌道論的アプローチ

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

表界面現象の量子化学計算や軌道相互作用の解析を主に行っております。理論計算化学の観点から超セラミックス材料の物性や反応性の解明に貢献できればと思っています。



領域メンバー&研究紹介 (C01)

京都大学 高等研究院

Institute for Advanced Study, Kyoto University

領域所属 C01 班・計画研究
研究代表者 堀毛 悟史・京都大学 高等研究院・准教授

専門分野・
キーワード 錯体化学 / ガラス / 金属-有機構造体 / 配位高分子 / プロトン伝導

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Coordination chemistry / Glass / Metal-organic frameworks / Coordination polymer / Proton conductivity

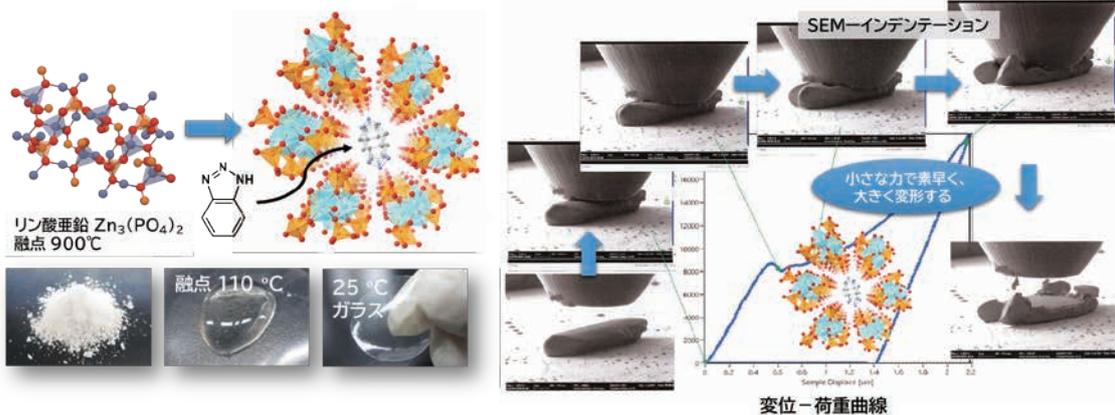


堀毛 悟史
Satoshi HORIKE

▶ 超セラミックスの相転移および不秩序系の開拓

C01 班の研究課題「超セラミックスの新物性開拓」において、物質が示す様々な相変化や不秩序構造の解析や物性発現を担当しています。超セラミックスは分子ユニットが示す運動性や多彩な配座が内在し、凝縮系においてはそれらが相転移や不秩序相の形成に関与します。これら静的・動的な不秩序性や階層性を種々の解析により明らかとし、ユニークな伝導性・光学特性・機械的特性といった物性を引き出すことを目的としています。

1. 粘弾性や熱分析を用いた物質の相変化や機械的特性の評価
2. 放射光 X 線・中性子を利用した不秩序構造の解析
3. 固体 NMR を用いた分子ユニットの運動性や配向の評価
4. 電気化学測定による伝導性の評価



(左) 分子ユニットが入ることによる低温相転移
(右) 機械的特性評価による物質の柔らかさ評価

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

錯体化学を基盤とした固体の研究は行ってきましたが、固体化学者と密接に関わる機会はありませんでした。ぜひ物質の見方や考え方、先端技術を共有し、学術を広げてゆきたいです。

■ 領域メンバー&研究紹介 (C01)

東京大学 物性研究所

Institute for Solid State Physics, University of Tokyo

領域所属 C01 班・計画研究
研究分担者 廣井 善二・東京大学物性研究所・教授

専門分野・
キーワード 固体化学 / 固体物理学

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD
Solid state chemistry / Solid state physics



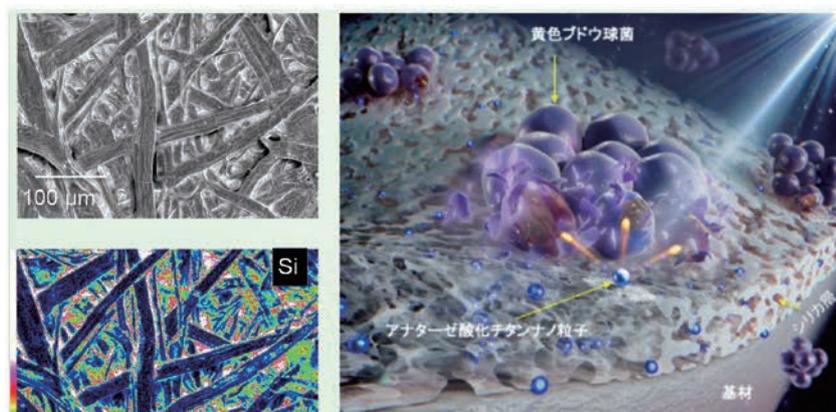
廣井 善二
Zenji HIROI

▶ トポロジカル表面超伝導とシリカ樹脂コーティング

分子性ユニットを導入したセラミックスに特有の物性研究と機能開拓を目指して2つのテーマを研究しています。一つ目は物性物理学分野で注目されているトポロジカル物質に関連してその結晶表面に現れる、バルクとは異なる超伝導です。注目する NaAlSi とその関連物質の表面にあると信じられている超伝導状態を実験的に確立するとともに、分子吸着などの表面状態操作による超伝導状態の制御を目指しています。二つ目は紙やその他の素材にメチル基などを含むシリカ樹脂コーティングを施し、強度や耐水性の向上によりプラスチック代替品を得るための基礎研究です。

含まれるアナターゼ型酸化チタンナノ粒子が適度な抗菌効果を示すことが分かってきました。

1. ノーダルライン半金属 NaAlSi および関連物質における表面超伝導の検証
2. 表面超伝導状態の原子・分子吸着による制御
3. 脱プラスチック技術の開発：シリカ樹脂コーティング（超越コーティング）による紙素材の改質・高機能化
4. 超越コーティングの応用：防汚・抗菌効果の検証



紙を構成するセルロースファイバー表面に形成されたシリカ樹脂層と酸化チタンによる抗菌効果

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

この領域研究への参画を通して、これまで行ってきた理学的な基礎物性研究とは異なる、社会の役に立つ応用研究を目指したい。特に超越コーティング技術の開発がプラスチックごみ問題の解決に繋がると期待している。



領域メンバー&研究紹介 (C01)

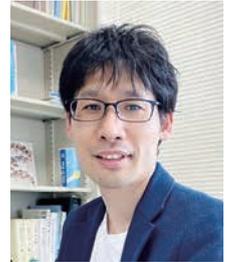
東京工業大学 フロンティア材料研究所

Laboratory for Materials and Structures, Tokyo Institute of Technology

領域所属 C01 班・計画研究
研究分担者 山本 隆文・東京工業大学 フロンティア材料研究所・准教授

専門分野・キーワード 固体化学 / 構造物性 / 超高压 / 有機-無機ハイブリッドペロブスカイト / 分子イオン

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD
Solid-state chemistry / Structural and physical property / High-pressure / Organic-inorganic hybrid perovskite / Molecular ion



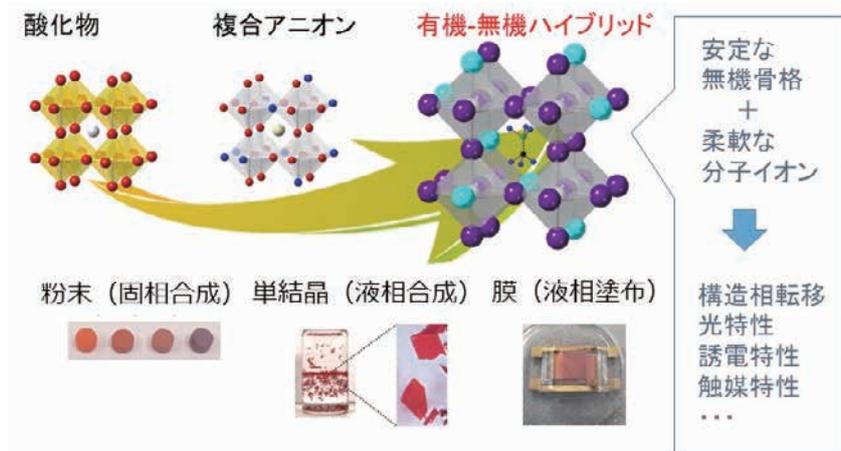
山本 隆文
Takafumi YAMAMOTO

▶ 有機-無機ハイブリッド化合物における新規構造物性開拓

C01 班の研究課題「超セラミックスの新物性開拓」において、内圏型の超セラミックスに分類される有機-無機ハイブリッド化合物の新物性開拓を担当しています。具体的には、メチルアンモニウムイオンなどの分子カチオンや、チオシアン酸イオンなどの分子アニオンを構造中に含む新規の金属ハライド化合物を合成し、その特異な構造に基づく様々な新規物性を開拓することを目指します。特に新しい太陽電池素材として大きな注目を集めている有機-無機ハイブリッドペロブスカイト化合物に対して、酸化物ベースで培われた固体化学の知見を応用し、無機と有機が融合す

る新しい研究を展開することを目指して研究を進めています。

1. 擬ハライドイオンを用いたペロブスカイト構造の安定性向上
2. 局所構造制御による物性制御
3. 異方的な分子イオンに由来する構造物性発現
4. 分子イオンのダイナミクスを利用した新物性開拓
5. 超高压を用いた超セラミックスの構造物性制御



酸化物から有機-無機ハイブリッド化合物への研究展開

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

私自身はこれまで酸化物ベースの無機固体化学研究に取り組んできましたが、そこで学んだ無機化学の知識や経験を生かして、本領域では有機と無機が交わる融合分野の開拓に取り組んでいきます。

■ 領域メンバー&研究紹介 (C02)

東京工業大学 理学院

School of Science, Tokyo Institute of Technology

領域所属 C02 班・計画研究
 研究代表者 前田 和彦・東京工業大学 理学院・教授
 研究協力者 鎌倉 吉伸・東京工業大学 理学院・特任助教

専門分野・キーワード 光化学 / 触媒化学 / 光電気化学 / ナノ材料 / 人工光合成

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD
 Photochemistry / Catalysis / Photoelectrochemistry / Nanomaterials / Artificial photosynthesis

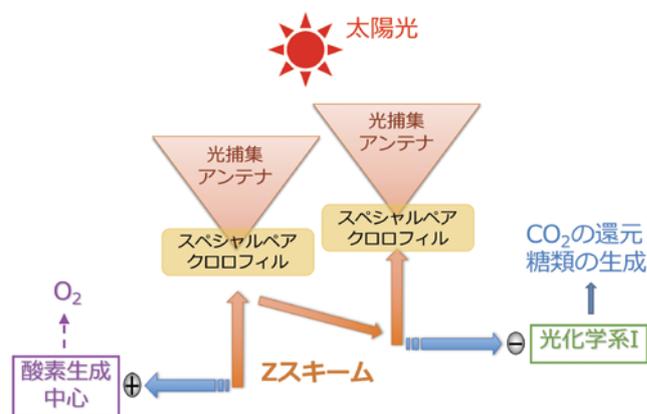


前田 和彦 Kazuhiko MAEDA
 鎌倉 吉伸 Yoshinobu KAMAKURA

▶ 分子含有無機材料を用いた人工光合成系の構築

将来の安定的なエネルギー確保の観点から、太陽光エネルギーを化学エネルギーへと効率的に変換する光触媒が強く望まれています。分子を含む無機材料=超セラミックスは、分子や無機材料それぞれ単独の光触媒では成し得ない高難度物質変換の実現に向け、大きな可能性を有しています。本研究では、分子性ユニットに由来する超セラミックスの構造の異方性（階層性）や化学的多様性を活用することで、電子/正孔再結合を抑制した高性能光触媒を開発します。さらには、従来のセラミックス系光触媒では成し得なかった低濃度 CO₂ の高選択的変換等、分子性ユニットを含む超セラミックスならではの革新的機能を創出し、新たな人工光合成系を構築します。

1. 異方性・階層性を付与した分子 / 半導体融合光触媒による高難度物質変換
2. 分子アニオン種と孤立 ns² 電子含有カチオンを活用した新規光触媒の開発
3. 低濃度 CO₂ を捕集・変換する超セラミックス光触媒の開発



・太陽光の吸収 (光励起キャリアの移動)
 ・触媒反応
 を行うための“部品”が必須

無機材料と分子を活用した超セラミックス光触媒系の構築

超セラミックスで人工光合成系を構築する

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

エネルギー変換型光触媒の研究で培ったこれまでの経験を生かし、領域メンバーのみなさんと協働することで、まだ見ぬ超セラミックス光触媒を創出します。



■ 領域メンバー&研究紹介 (C02)

京都大学 大学院人間・環境学研究科

Graduate School of Human and Environmental Studies, Kyoto University

領域所属 C02 班・計画研究
研究分担者 内本 喜晴・京都大学 大学院人間・環境学研究科・教授

専門分野・キーワード 電気化学エネルギー変換 / 水電解 / 蓄電池 / オペランド計測

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD
Electrochemical energy conversion / Water electrolysis / Battery / Operando analysis

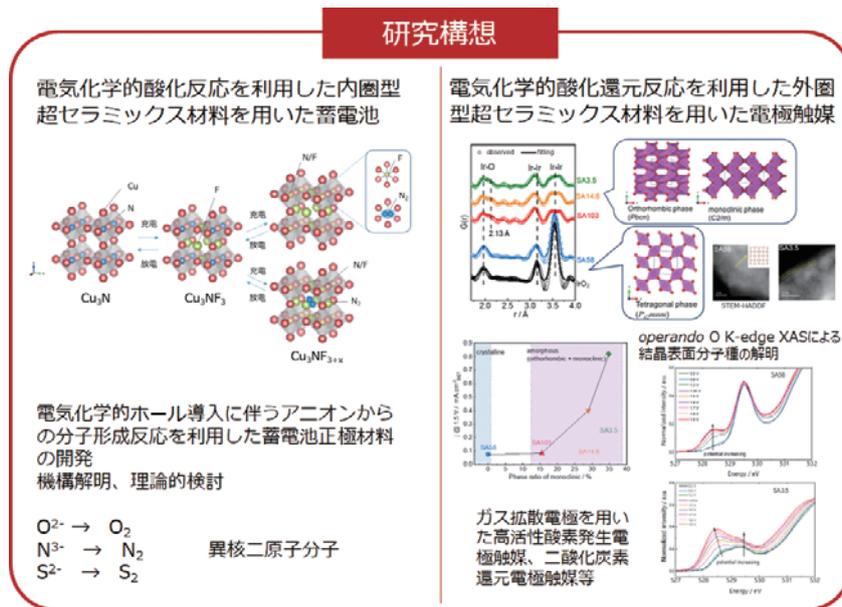


内本 喜晴
Yoshiharu UCHIMOTO

▶ 超セラミックス(内圏型・外圏型)の電気化学デバイス(蓄電池、電極材料)への展開

蓄電技術と水電解技術は将来の日本のエネルギー安定供給に大きく寄与すると考えられています。本研究では、内圏型超セラミックスの無機結晶内部の閉塞空間に生じる分子種を活用した超高容量二次電池材料を開発します。また、内圏型超セラミックスの非対称性、異方性界面を活用した革新的な水電解触媒の創製を目指します。さらには材料の動的構造—特性—機能の相関を系統的に明らかにするための計測手法も提供します。

1. 電気化学的酸化反応を利用した内圏型超セラミックス材料の合成と反応機構解明
2. 内圏型超セラミックス材料を用いた超高エネルギー密度蓄電池の創製
3. 電気化学的酸化還元反応を利用した外圏型超セラミックス電極触媒の創製



超セラミックスで革新的電気化学デバイスを創成する

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

他を圧倒する革新的な蓄電池・電極触媒を創成し、領域メンバーのみなさんと協働することで、本分野の学理構築に繋がります。

■ 領域メンバー&研究紹介 (C02)

(国研) 産業技術総合研究所 ナノ材料研究部門

Nanomaterials Research Institute, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

領域所属 C02 班・計画研究
研究分担者 大矢根 綾子・(国研) 産業技術総合研究所
 ナノ材料研究部門・研究グループ長
研究協力者 中村 真紀・(国研) 産業技術総合研究所
 ナノ材料研究部門・主任研究員
研究協力者 宮治 裕史・北海道大学 大学院歯学研究院・講師
専門分野 生体材料 / リン酸カルシウム /
キーワード 生体模倣 (バイオミメティック) / 組織再生 / 成膜

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Biomaterial / Calcium phosphate / Biomimetic /
 Tissue regeneration / Coating

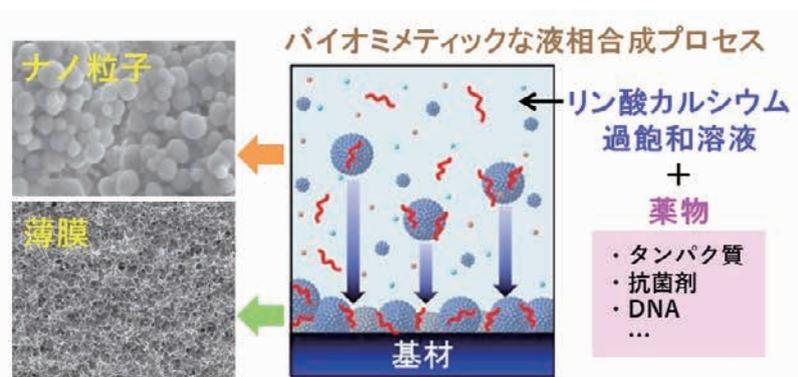


大矢根 綾子 Ayako OYANE
 中村 真紀 Maki NAKAMURA
 宮治 裕史 Hirofumi MIYAJI

▶ バイオ応用のための多機能性リン酸カルシウム材料の創製

C02 班の研究課題「超セラミックスの新機能創出」において、バイオ機能創出を担当しています。具体的には、過飽和溶液を利用したリン酸カルシウム薄膜やナノ粒子の合成技術の高度化を進めるとともに、この合成技術に基づき、優れた生体親和性を示し、かつ様々な薬物（タンパク質、イオン等）を内包・徐放する生体機能性材料を創製しています。薬学系研究協力者（中村）および臨床系研究協力者（宮治）と連携し、創製された材料のバイオメディカル機能を細胞や動物、細菌等を用いて検証することで、超セラミックスのバイオ機能創出・臨床橋渡しに関する研究を進めています。

1. 過飽和溶液法によるリン酸カルシウム薄膜・ナノ粒子合成技術の開発
2. レーザー併用によるリン酸カルシウム成膜技術の高度化
3. リン酸カルシウムと薬物・異種材料・生体組織との複合化技術の開発
4. in vitro/in vivo 機能評価
5. 薬物徐放性リン酸カルシウム複合材料の創製



過飽和溶液法による薬物担持リン酸カルシウムナノ粒子・薄膜の合成

本領域への情熱・意気込み、研究者としての夢など

本領域内の異分野の研究者・学生等との連携・共同研究を通じて、超セラミックスのバイオ機能を開拓していきます。材料研究（理・工）と臨床（医・歯）の橋渡し役としても貢献できればと考えています。



領域ニュース

第1回 キックオフ領域会議

開催日：2022年8月18日

会場：オンライン

2022年8月18日(木)、学術変革領域研究A「超セラミックス：分子が拓く無機材料のフロンティア」の第1回キックオフ領域会議を開催しました。長引くコロナ禍の影響を受け、オンラインでの開催となりましたが、本橋輝樹先生(事務局・A01代表)ならびに本橋関係者の皆様のご尽力により、大変な盛会となりました。

はじめに、領域代表の私前田から、本領域の目指すところを明示し、若手研究者の育成を通じた積極的な領域内共同研究の実施、およびワンチームでの領域運営体制について、全領域メンバーと意識を共有しました。その後、本領域の前身・新学術「複合アニオン」の領域代表を務められた京都大学・陰山洋先生をお招きし、「領域の活性化に向けて」という題目でご講演いただきました。「複合アニオン」を事後評価A+に導いたご手腕に裏打ちされた領域マネージメントのノウハウを具体的を多数あげてご教示いただき、領域メンバーにとって大変有意義な時間となりました。ちなみに陰山先生には、計画研究A01および総括班の協力者

としても本領域にご参画いただくことになっています。

その後の計画研究メンバーの研究発表に先立ち、領域代表の私前田から「オンライン会議だけど、チャット欄を活用して、質問だけでなく思ったこと(つぶやき)を積極的に発信しよう!」と声を掛けるところ、すべての発表に対して、チャット欄が瞬時に埋め尽くされるほどの極めて活発なやりとりが交わされました。計画研究メンバーだけでなく、学生を含む若手からも発言が相次ぎ、それらがきっかけとなって、すでに多数の共同研究が立ち上がっています。キックオフ会議後にオンラインで開催した懇親会でも、引き続き熱い議論が繰り広げられました。領域代表として、まさに「してやったり!」な展開となりました。

評価者の先生方からは、「超セラミックス」領域のスタートダッシュについて高いご評価を受け、同時にたくさんのご助言も頂戴しました。この勢いをそのままに、5年間の研究期間を走り抜け、無機材料のフロンティアへと繋がる道を拓きたいと考えています。



文責：前田 和彦 (領域代表・C02代表/東京工業大学)

第1回 超セラミックス計算解析セミナー

開催日：2022年11月30日～12月2日

会場：北陸先端科学技術大学院大学

2022年11月30日から12月2日までの3日間、北陸先端科学技術大学院大学の前園先生（B02班）の研究室において、第1回超セラミックス計算解析セミナーが開催されました。このセミナーでは、第一原理計算の経験の無い実験系の研究者に、基礎的な第一原理計算の実行と解析技術を習得してもらうことを目的としており、ハンズオン形式で第一原理計算の実習をしてもらいます。今回は広島大学片桐先生（A01班）の研究室から二木翔平君、九州大学稲田先生（B01班）の研究室から三輪大貴君、瀧石寛太君、東京工業大学前田先生（C02班）の研究室から山本悠可君、山本壱成君、森せいらさん、全部で6名の学生が参加しました。またオブザーバーとして、ファインセラミックスセンターの桑原彰秀（B02班）と九州大学の辻先生（B02班）が出席しました。参加者は前園研究室で準備された自作PCを使って、1日目はLinux環境におけるコマンドラインで

の作業（ファイル操作、テキストエディターによる編集など）の習得、2日目はSiO₂の多形をサンプルとして一点計算、状態密度分布およびバンド構造の計算、計算条件のパラメーターに対する出力結果の収束性の確認作業、そして最終日の3日目は密度汎関数計算における電子相関項の取り扱い方、スパコンへのリモートアクセス方法などについて実習を行いました。セミナー中は要所要所で、前園先生から密度汎関数理論の背景についても講義が行われ、理論と実践が行える濃密な3日間となりました。参加者の皆さんには今回の経験を研究室に持ち帰ってもらい、自身の研究テーマに関連した計算を引き続き実施してもらえたらと思います。本セミナーは今後も、年に2回程度の頻度で開催する予定です。また、開催回数がある程度進んだ後は、アドバンスな内容でのセミナーの開催も検討したいと思いますので、奮ってご参加下さい。



文責：桑原 彰秀（B02 代表 / ファインセラミックスセンター）



領域ニュース

領域内留学報告 No.1：前田研 - 辻研

第一原理計算を用いた SrVO₂H 表面に対する CO₂ 分子吸着構造の解析)

東京工業大学 大学院理学院 化学系 修士1年 山本 壱成

指導研究者：前田 和彦（東京工業大学 大学院理学院化学系・教授）

受入研究者：辻 雄太（九州大学 大学院総合理工学研究院・准教授）

留学期間：2022年10月3日～10月5日

領域内留学の一環として、10月3日から3日間、辻研究室を訪問し、SrVO₂H に対する CO₂ 分子吸着構造の解析を行った。学んだことを挙げればキリがないが、印象に残った点をまとめたいと思う。

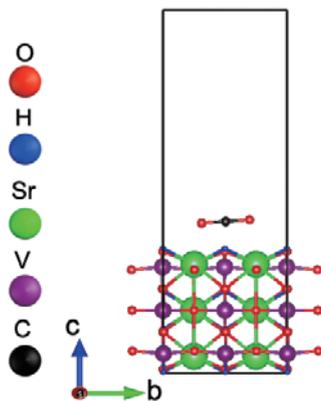
ペロブスカイト型酸水素化物の SrVO₂H は、CO₂ 還元反応のための電極触媒として、電気化学的 CO₂ 還元反応の進行に成功している。この還元能の要因を探るため、九州大学総合理工学研究院の辻研究室を訪問し、吸着構造の解析を中心とした計算をおこなった。

最初に、吸着構造解析に用いる表面構造を設定し、その上に CO₂ 分子を配置した後、最適化計算を行なった。その結果、Sr が活性サイトになっている可能性が示された。そこから推定される反応経路ではギ酸が生成しやすいことが報告されており、実験によりギ酸の生成が確認されていることから計算の妥当性が示された。

計算によって触媒反応機構の可能性の一つが示され、触媒活性向上への手がかりを得ることができた。その一方で、他の結晶面を考慮していないことや、吸着した CO₂ 分子が折れ曲がっていないなど実際の反応条件が反映されていないなど今後の課題も明らかになった。

前田研では実験による触媒活性の評価が中心で、計算を用いた触媒反応の解析にはそれほど力を入れてこなかったが、今回の領域内留学では計算化学が新規触媒の開発に強力なツールであることを思い知り、大きな収穫を得られた。さらに、実習前に行われた総合討論会は、異分野を専門とする方々の活発な議論が行われ、当研究室内では得られない多様な意見が得られる特別な時間であった。

最後に手取り足取り教えて下さった辻先生及び、このような素晴らしい機会を提供して下さい下さった方々に改めて感謝したい。



計算に用いた表面構造



総合討論会の様子

領域内留学報告 No.2 : 本橋研 - 稲田研

複合金属酸水酸化物における O-H 結合状態解析に関する発表およびディスカッション

神奈川大学 大学院工学研究科 工学専攻 応用化学領域 修士 1 年 浅井 祐介

指導研究者 : 本橋 輝樹 (神奈川大学 大学院工学研究科・教授)

受入研究者 : 稲田 幹 (九州大学 中央分析センター・准教授)

留学期間 : 2022 年 10 月 3 日 ~ 10 月 4 日

班内留学制度を利用し、九州大学 中央分析センター 稲田研究室を訪問した。訪問期間中、班内・班間連携強化会議への参加と研究室の見学を行った。会議では、九州大学の辻准教授、大谷准教授を含む 5 件の講演と学生による 6 件の研究発表および全参加者によるディスカッションが行われた。

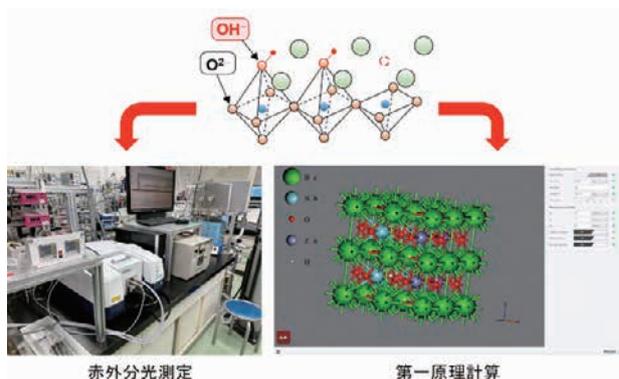
会議当日、「複合金属酸水酸化物におけるその場観察赤外分光分析」の題目で研究発表を行った。酸水酸化物は、結晶格子内に水酸化物イオン (OH⁻) を含む内圏型超セラミックスの一種であり、プロトン源である OH⁻ を多量に内包することからプロトン伝導体としての応用が期待される。私が所属する本橋研究室では、新規複合金属酸水酸化物の合成、評価および解析を精力的に取り組んでいる。中でも私は、酸水酸化物における赤外分光測定を用いた O-H 結合状態のその場観察と第一原理計算を用いたスペクトル解析を行っている。詳細なスペクトル測定・解析を行った結果、OH⁻ に隣接する金属種の違いによって O-H 結合の安定性が異なる

ことや温度変化によってプロトンの再配置が起こることを示すデータが得られた。さらに、第一原理計算を用いた解析結果と併用し、結晶格子内の OH⁻ サイトの帰属と考察にも取り組んでいる。

発表後のディスカッションでは、解析結果や考察の妥当性について貴重な意見や提案、アドバイスをいただいた。その多くは、自身の知識だけでは気が付くことができなかったことであり、有意義な時間を過ごせたと感じている。

研究室の見学では、本橋研究室とは異なった研究環境や人々との関わりを感じ、良い刺激を受けることができた。何よりも他大学の方々と交流することにより、他分野の視点に基づく発想を学ぶことができ、自身の視野を広げることができたと実感している。

最後に、ご多忙の中、快く迎え入れてくださった稲田 幹 准教授をはじめとした参加者の方々、そして貴重な機会を与えてくれた本領域に心より感謝申し上げたい。



複合金属酸水酸化物における赤外分光測定と第一原理計算



訪問時の様子



■ 領域ニュース

国際活動支援報告－海外体験記

色素増感型光触媒に関する研究

東京工業大学 理学院 特任助教 西岡 駿太

受入研究者：Thomas E. Mallouk

(Department of Chemistry, University of Pennsylvania, United States・Professor)

派遣期間：2022年10月17日～10月20日

10月17日から20日の4日間、アメリカ合衆国のペンシルベニア州フィラデルフィアにあるペンシルベニア大学のThomas E. Mallouk教授の研究室を訪問した。Mallouk研究室は、筆者が2021年4月までの2年間在籍していた研究室である。訪問の目的は、色素増感型光触媒の反応メカニズム解明のために、過渡吸収測定を行うことであった。

過渡吸収測定のためにわざわざ渡米したことには理由があり、それは過渡吸収測定の実験条件に由来する。筆者が用いている色素増感型光触媒は粉体であり、光触媒反応は水中に粉末を懸濁させて行っているため、反応メカニズムの解明には、反応条件と類似の粉末懸濁溶液で測定を行う必要があった。Mallouk研究室には、粉末懸濁溶液での可視域の過渡吸収測定を目的として、改造を繰り返してきた装置がある。この装置は、ペンシルベニア州立大学発のベンチャー企業が開発したもので、筆者がMallouk研究室在籍時にその世界第1号機が納入された。そのような経緯から、

開発者とは装置に関するディスカッションを繰り返しており、度重なる改造要望にも柔軟に対応してもらっていた。今回は、これまで測定が行えなかった数十ミリ秒まで時間窓を拡大する改造を依頼し、それが完了したため測定を行い訪問した。詳細は未発表なので掲載できないが、これまでの測定では観測できなかった反応溶液中の変化を観測することに成功し、論文執筆の基盤となる知見が得られた。

ペンシルベニア大学滞在前にジョージア州アトランタで開催された242nd ECS Meetingにも参加したため、アメリカには計2週間滞在した。いずれの滞在所でも、建物内や公共交通機関でのマスク着用義務が撤廃されており、非常に快適な生活だった。今回の旅では、重要な測定結果が得られ、筆者が最も尊敬するMallouk先生や研究室生活をともにしていた友人たちとも再会でき、充実した滞在となった。国際研究活動の旅費支援によって、このような貴重な機会を与えていただいたことに感謝を申し上げる。



過渡吸収測定に使用したサンプル

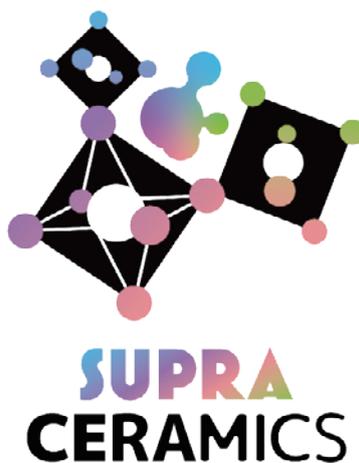


過渡吸収測定装置 (enVISION)

領域ロゴマークについて

学術変革領域研究（A）「超セラミックス」は無機化合物であるセラミックスに分子ユニットを組み込むことで固体の構造に新たな自由度を付与し、新機能の創出を目指す領域です。領域コンセプトを表現するために、ロゴではセラミックスの基本的な構造骨格である「配位多面体」が「分子」を囲むように共存するデザインを採用しました。色のグラデーションはセラミックスと分子の相互作用に

よってその性質が連続的に変化することを表現しています。また、「CERAMICS」の文字は、左側の“硬い”形状から右側へ移るに従って“柔らかい”スタイルへと徐々に変化しています。分子とセラミックスの融合により、新たな物質科学分野が誕生するイメージを感じ取ってもらえればと思います。





■ 領域ニュース

受賞報告

東京工業大学の前田和彦教授（領域代表、C02 代表）がイギリス王立化学会フェロー（FRSC: Fellow of the Royal Society of Chemistry）に選出

前田和彦教授（領域代表、C02 代表）がイギリス王立化学会フェロー（FRSC: Fellow of the Royal Society of Chemistry）に選出されました。イギリス王立化学会は国際的な活動を通じて化学の発展に寄与することを目的とした、180年以上の歴史を誇る化学者のための専門学術協会です。FRSCは、化学研究の発展に顕著な貢献をし、関連組織での運営等に携わった研究者を顕彰するもので、大変栄誉なことです。このたび、前田教授の化学分野における研究業績が認められ、フェローに選出されました。

受賞者コメント

このたびFRSCに選出されたことを嬉しく思います。自身のライフワークとも言えるエネルギー変換型光触媒の研究業績が高く評価されたことを誇りに感じています。FRSCに推薦くださった関係者の方、研究にお力添えくださった国内外の共同研究者の皆様、日々頭を悩ませながら共に研究活動をしている学生諸氏に感謝いたします。これからも知恵を絞って研究を推進していきます。

九州大学の辻雄太准教授（B02 分担）が第 15 回分子科学会奨励賞を受賞

分子科学会奨励賞は、分子科学研究分野において質の高い研究成果を挙げ、分子科学の発展に寄与した若手研究者に対して分子科学会が毎年贈呈している賞です。辻雄太准

教授（B02 分担）は、



業績題目「分子科学的視点に基づく表面反応の理論的研究」に関する顕著な業績によって、2022年度の受賞者に選ばれました。授賞式は9

受賞者コメント

月19日に第16回分子科学討論会にて行われました。

この度は、分子科学会奨励賞を頂き、大変光栄に思います。今回、受賞の対象となった研究内容は、私がかここ数年取り組んできた分子科学的な概念に基づいて表面反応を理解しようとするものです。これは、分子科学と固体化学の融合でもあり、本領域の方向性とも一致します。今回の受賞を励みとして、今後ますます研究に精進していきたいと思えます。

その他の受賞（2022年6月～2022年11月）

- 1 東北大学の南部雄亮准教授（B01 計画研究分担）が PRB Editors' Suggestion を受賞（2022 年 9 月 7 日）
「Higher-order modulations in the skyrmion lattice phase of Cu_2OSeO_3 」
- 2 広島大学の修士 1 年生 住岡大海氏（A01 計画研究分担・片桐研究室）が日本セラミックス協会 第 35 回秋季シンポジウム 特定セッション 若手奨励賞を受賞（2022 年 9 月 16 日）
「水溶液プロセスを活用した金属オキシカルボジイミド化合物の合成とそのキャラクタリゼーション」
- 3 九州大学の辻雄太准教授（B02 計画研究分担）が第 15 回分子科学会 奨励賞を受賞（2022 年 9 月 19 日）
「分子科学的視点に基づく表面反応の理論的研究」
- 4 神奈川大学の修士 2 年生 石村真優子氏（A01 計画研究代表・本橋研究室）が第 130 回触媒討論会 学生ポスター発表賞を受賞（2022 年 9 月 26 日）
「酸フッ化物のメタン酸化カップリング触媒活性」
- 5 九州大学の太谷亮准教授（A02 計画研究代表）が錯体化学会 研究奨励賞を受賞（2022 年 9 月 28 日）
「テトラシアノ金属錯体を用いた異方的かつ動的な構造体に関する研究」
- 6 九州大学の博士 3 年生 柳澤純一氏（A02 計画研究代表・太谷研究室）が令和 4 年度錯体化学会第 72 回討論会 学生講演賞を受賞（2022 年 9 月 28 日）
「Bias Modulative Proton Conductivity in a Polar Crystal of $\text{K}_2\text{MnN}(\text{CN})_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 」
- 7 東京工業大学の修士 1 年生 小菅大輝氏（C01 計画研究分担・山本研究室）が日本セラミックス協会第 35 回秋季シンポジウム 優秀発表賞を受賞（2022 年 10 月 7 日）
「時分割 XRD による $\text{SrCrO}_{3.5}$ におけるトポケミカル反応の観察」
- 8 東京工業大学の修士 1 年生 伊藤龍寿氏（C01 計画研究分担・山本研究室）が日本セラミックス協会第 35 回秋季シンポジウム 優秀発表賞を受賞（2022 年 10 月 7 日）
「 Co^{2+} を利用したチオシアン酸アニオンを含む新規有機 - 無機ハイブリッド化合物の構造と磁性」
- 9 東京工業大学の修士 2 年生 長瀬鉄平氏（C01 計画研究分担・山本研究室）が日本セラミックス協会第 35 回秋季シンポジウム 優秀発表賞を受賞（2022 年 10 月 7 日）
「酸素欠損型ペロブスカイト $\text{SrV}_{0.3}\text{Fe}_{0.7}\text{O}_{2.8}$ における磁気抵抗効果」



■ 領域ニュース

-
- 10 東京工業大学の前田和彦教授（領域代表・C02 計画研究代表）がイギリス王立化学会フェロー（FRSC: Fellow of the Royal Society of Chemistry）を受賞（2022 年 10 月 28 日）
-
- 11 京都大学の山本健太郎特定准教授（現 奈良女子大学・准教授）（C02 計画研究分担・内本研究室）が電池技術委員会賞を受賞（2022 年 11 月 9 日）
「インターカレーション型フッ化物イオン電池用正極材料の開発 9 : Infinite layer 構造を有する (Ca, Sr)FeO₂ 正極の電気化学特性評価」
-
- 12 東京工業大学の鎌倉吉伸特任助教（C02 計画研究代表・前田研究室）が第 41 回 固体・表面光化学討論会 若手優秀講演賞を受賞（2022 年 11 月 16 日）
「非多孔性配位高分子を用いた高選択かつ高効率な CO₂ 還元光触媒の開発」
-
- 13 東京工業大学の修士 2 年生 田中寿弥氏（C02 計画研究代表・前田研究室）が第 41 回 固体表面光化学討論会 学生講演賞を受賞（2022 年 11 月 16 日）
「Ru(II)-Re(I) 二核錯体と C₃N₄ 複合型 CO₂ 還元光触媒への Os(II) 錯体光増感剤の添加効果」
-
- 14 近畿大学の杉本邦久教授(B01 計画研究代表)が 2022 年度日本結晶学会学会賞 学術賞を受賞（2022 年 11 月 26 日）
「放射光回折システムの高機能化と機能性材料の開発研究」
-

論文・書籍 (2022年6月～2022年11月)

論文

1. Tarutani, N.; Kimura, S.; Sakata, T.; Suzuki, K.; Katagiri, K.; Inumaru, K. Metal Hydroxide Salt Monolayer Nanoparticles: Synthesis, Redox Characterization, and Electrochemical Catalytic Performance. *ACS Mater Lett* **2022**, *4*, 1430–1435. <https://doi.org/10.1021/acsmaterialslett.2c00411>
A01 片桐
2. Yanagisawa, J.; Tanaka, K.; Kano, H.; Miyata, K.; le Ouay, B.; Ohtani, R.; Ohba, M. Vapor-Induced Conversion of a Centrosymmetric Organic–Inorganic Hybrid Crystal into a Proton-Conducting Second-Harmonic-Generation-Active Material. *Inorg Chem* **2022**, *61*, 15638–15644. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.2c02555>
A02 大谷
3. Iwai, Y.; Nakaya, M.; Ohtsu, H.; le Ouay, B.; Ohtani, R.; Ohba, M. Zero Area Thermal Expansion of Honeycomb Layers *via* Double Distortion Relaxation in (PPh₄)[Cu₂(CN)₃]. *CrystEngComm* **2022**, *24*, 5880–5884. <https://doi.org/10.1039/D2CE00878E>
A02 大谷
4. Khoiru Wihadi, Muh. N.; Haioka, T.; Kojima, T.; López, X.; Ueda, T.; Sano, T.; Sadakane, M. Synthesis and Structural Characterization of Multi-Molybdenum-Substituted Preyssler-type Phosphotungstates. *Eur J Inorg Chem* **2022**. <https://doi.org/10.1002/ejic.202200533>
A02 定金
5. Kikkawa, J.; Kimoto, K. Optical and Acoustic Phonon Temperature Measurements Using Electron Nanoprobe and Electron Energy Loss Spectroscopy. *Phys Rev B* **2022**, *106*, 195431. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.195431>
B01 木本
6. Cretu, O.; Tang, D.-M.; Lu, D.-B.; Da, B.; Nemoto, Y.; Kawamoto, N.; Mitome, M.; Ding, Z.; Kimoto, K. Nanometer-Level Temperature Mapping of Joule-Heated Carbon Nanotubes by Plasmon Spectroscopy. *Carbon* **2023**, *201*, 1025–1029. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2022.10.006>
B01 木本
7. Sciortino, F.; Cretu, O.; Karanikolas, V.; Grasset, F.; Cordier, S.; Ariga, K.; Kuroda, T.; Kimoto, K. Surface Plasmon Tunability of Core–Shell Au@Mo₆ Nanoparticles by Shell Thickness Modification. *J Phys Chem Lett* **2022**, *13*, 2150–2157. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c03853>
B01 木本
8. Zhang, H.; Jimbo, Y.; Niwata, A.; Ikeda, A.; Yasuhara, A.; Ovidiu, C.; Kimoto, K.; Kasaya, T.; Miyazaki, H. T.; Tsujii, N.; Wang, H.; Yamauchi, Y.; Fujita, D.; Kitamura, S.; Manabe, H. High-Endurance Micro-Engineered LaB₆ Nanowire Electron Source for High-Resolution Electron Microscopy. *Nat Nanotechnol* **2022**, *17*, 21–26. <https://doi.org/10.1038/s41565-021-00999-w>
B01 木本
9. Kang, Y.; Jiang, B.; Malgras, V.; Guo, Y.; Cretu, O.; Kimoto, K.; Ashok, A.; Wan, Z.; Li, H.; Sugahara, Y.; Yamauchi, Y.; Asahi, T. Heterostructuring Mesoporous 2D Iridium Nanosheets with Amorphous Nickel Boron Oxide Layers to Improve Electrolytic Water Splitting. *Small Methods* **2021**, *5*, 2100679. <https://doi.org/10.1002/smt.202100679>
B01 木本
10. Kimoto, K.; Shiga, M.; Kohara, S.; Kikkawa, J.; Cretu, O.; Onodera, Y.; Ishizuka, K. Local Structure Analysis of Disordered Materials *via* Contrast Variation in Scanning Transmission Electron Microscopy. *AIP Adv* **2022**, *12*, 095219. <https://doi.org/10.1063/5.0104798>
B01 木本



領域ニュース

11. Haruta, M.; Kikkawa, J.; Kimoto, K.; Kurata, H. Comparison of Detection Limits of Direct-Counting CMOS and CCD Cameras in EELS Experiments. *Ultramicroscopy* **2022**, *240*, 113577. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2022.113577>
B01 木本
12. Asano, T.; Tezura, M.; Saitoh, M.; Tanaka, H.; Kikkawa, J.; Kimoto, K. Nanoscale Observation of Subgap Excitations in β -Si₃N₄ with a High Refractive Index Using Low-Voltage Monochromated STEM: A New Approach to Analyze the Physical Properties of Defects in Dielectric Materials. *Appl Phys Express* **2022**, *15*, 076501. <https://doi.org/10.35848/1882-0786/ac6e28>
B01 木本
13. Ishii, Y.; Yamamoto, A.; Sato, N.; Nambu, Y.; Ohira-Kawamura, S.; Murai, N.; Ohara, K.; Kawaguchi, S.; Mori, T.; Mori, S. Partial Breakdown of Translation Symmetry at a Structural Quantum Critical Point Associated with a Ferroelectric Soft Mode. *Phys Rev B* **2022**, *106*, 134111. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.134111>
B01 南部
14. Reim, J. D.; Matsuzaka, S.; Makino, K.; Aji, S.; Murasaki, R.; Higashi, D.; Okuyama, D.; Nambu, Y.; Gilbert, E. P.; Booth, N.; Seki, S.; Tokura, Y.; Sato, T. J. Higher-Order Modulations in the Skyrmion Lattice Phase of Cu₂OSeO₃. *Phys Rev B* **2022**, *106*, 104406. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.104406>
B01 南部
15. Nagase, T.; Nishikubo, T.; Fukuda, M.; Sakai, Y.; Shigematsu, K.; Ikeda, Y.; Nambu, Y.; Zhang, Q.; Matsuda, M.; Mibu, K.; Azuma, M.; Yamamoto, T. SrV_{0.3}Fe_{0.7}O_{2.8}: A Vacancy-Ordered Fe-Based Perovskite Exhibiting Room-Temperature Magnetoresistance. *Inorg Chem* **2022**, *61*, 8987–8991. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.2c01137>
B01 南部、C01 山本
16. Oka, K.; Ichibha, T.; Kato, D.; Noda, Y.; Tominaga, Y.; Yamada, K.; Iwasaki, M.; Noma, N.; Hongo, K.; Maezono, R.; Reboredo, F. A. Anionic Ordering in Pb₂Ti₄O₉F₂ Revisited by Nuclear Magnetic Resonance and Density Functional Theory. *Dalton Transactions* **2022**, *51*, 15361–15369. <https://doi.org/10.1039/D2DT00839D>
B02 前園
17. Raghav, A.; Hongo, K.; Maezono, R.; Panda, E. Electronic Structure and Effective Mass Analysis of Doped TiO₂ (Anatase) Systems Using DFT+U. *Comput Mater Sci* **2022**, *214*, 111714. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2022.111714>
B02 前園
18. Sumiya, Y.; Tsuji, Y.; Yoshizawa, K. Shear Adhesive Strength between Epoxy Resin and Copper Surfaces: A Density Functional Theory Study. *Phys Chem Chem Phys* **2022**, *24* (44), 27289–27301. <https://doi.org/10.1039/D2CP03354B>
B02 辻
19. Tsuji, Y.; Yoshida, M.; Kamachi, T.; Yoshizawa, K. Oxidative Addition of Methane and Reductive Elimination of Ethane and Hydrogen on Surfaces: From Pure Metals to Single Atom Alloys. *J Am Chem Soc* **2022**, *144*, 18650–18671. <https://doi.org/10.1021/jacs.2c08787>
B02 辻
20. Tsuji, Y.; Yoshizawa, K. Adsorption Site Preference Determined by Triangular Topology: Application of the Method of Moments to Transition Metal Surfaces. *J of Phys Chem C* **2022**, *126*, 13505–13519. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c04656>
B02 辻
21. Das, C.; Nishiguchi, T.; Fan, Z.; Horike, S. Crystallization Kinetics of a Liquid-Forming 2D Coordination Polymer. *Nano Lett* **2022**, *22*, 9372–9379. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.2c03207>
C01 堀毛

22. Thanaphatkosol, C.; Ma, N.; Kageyama, K.; Watcharatpong, T.; Tiyawarakul, T.; Kongpatpanich, K.; Horike, S. Modulation of Proton Conductivity in Coordination Polymer Mixed Glasses. *Chem Commun* **2022**, *58*, 6064–6067. <https://doi.org/10.1039/D2CC01266A>
C01 堀毛
23. Ma, N.; Ohtani, R.; Le, H. M.; Sørensen, S. S.; Ishikawa, R.; Kawata, S.; Bureekaew, S.; Kosasang, S.; Kawazoe, Y.; Ohara, K.; Smedskjaer, M. M.; Horike, S. Exploration of Glassy State in Prussian Blue Analogues. *Nat Commun* **2022**, *13*, 4023. <https://doi.org/10.1038/s41467-022-31658-w>
C01 堀毛、A02 大谷
24. Horike, S.; Kitagawa, S. The Development of Molecule-Based Porous Material Families and Their Future Prospects. *Nat Mater* **2022**, *21*, 983–985. <https://doi.org/10.1038/s41563-022-01346-7>
C01 堀毛
25. Watcharatpong, T.; Pila, T.; Maihom, T.; Ogawa, T.; Kurihara, T.; Ohara, K.; Inoue, T.; Tabe, H.; Wei, Y.-S.; Kongpatpanich, K.; Horike, S. Coordination Polymer-Forming Liquid Cu(2-Isopropylimidazolate). *Chem Sci* **2022**, *13*, 11422–11426. <https://doi.org/10.1039/D2SC03223F>
C01 堀毛
26. Kurihara, T.; Ohara, K.; Kadota, K.; Izu, H.; Nishiyama, Y.; Mizuno, M.; Horike, S. Three-Dimensional Metal–Organic Network Glasses from Bridging MF₆²⁻ Anions and Their Dynamic Insights by Solid-State NMR. *Inorg Chem* **2022**, *61*, 16103–16109. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.2c02580>
C01 堀毛
27. Ma, N.; Horike, N.; Lombardo, L.; Kosasang, S.; Kageyama, K.; Thanaphatkosol, C.; Kongpatpanich, K.; Otake, K.; Horike, S. Eutectic CsHSO₄-Coordination Polymer Glasses with Superprotonic Conductivity. *J Am Chem Soc* **2022**, *144*, 18619–18628. <https://doi.org/10.1021/jacs.2c08624>
C01 堀毛
28. Bao, Y.; Du, S.; Shibata, K.; Guo, X.; Kamakura, Y.; Feng, Z.; Huang, Y.; Ishitani, O.; Maeda, K.; Zhang, F. Layered β-ZrNBr Nitro Halide as Multifunctional Photocatalyst for Water Splitting and CO₂ Reduction. *Angew Chemie Int Ed* **2022**. <https://doi.org/10.1002/anie.202214273>
C02 前田
29. Kang, U.; Mizuochi, R.; Park, H.; Maeda, K. Photoelectrochemical Water Oxidation Using Cobalt Phosphate-Modified Nitrogen-Doped Titania Nanotube Arrays. *Small Struct* **2022**, *2200229*. <https://doi.org/10.1002/sstr.202200229>
C02 前田
30. Lian, J.; Shibata, K.; Xiao, Y.; Du, S.; Tanaka, T.; Qi, Y.; Ishitani, O.; Maeda, K.; Feng, Z.; Zhang, F. A Band-to-Band Transition Visible-Light-Responsive Anatase Titania Photocatalyst by N,F-Codoping for Water Splitting and CO₂ Reduction. *J Mater Chem A* **2023**, *11*, 141–148. <https://doi.org/10.1039/D2TA08076A>
C02 前田
31. Suppasso, C.; Khamdang, C.; Wannasen, L.; Kanazawa, T.; Miyoshi, A.; Nishioka, S.; Jetsrisuparb, K.; Amnuaypanich, S.; Suthirakun, S.; Maeda, K.; Khaorapapong, N. Visible-Light Driven H₂ Evolution over a Precious Metal-Free Hybrid Photocatalyst Constructed from CuO and NiFe Layered Double Hydroxide. *Catal Sci Technol* **2023**. <https://doi.org/10.1039/D2CY00958G>
C02 前田



領域ニュース

32. Shizuno, M.; Kato, K.; Nishioka, S.; Kanazawa, T.; Saito, D.; Nozawa, S.; Yamakata, A.; Ishitani, O.; Maeda, K. Effects of a Nanoparticulate TiO₂ Modifier on the Visible-Light CO₂ Reduction Performance of a Metal-Complex/Semiconductor Hybrid Photocatalyst. *ACS Appl Energy Mater* **2022**, *5*, 9479–9486. <https://doi.org/10.1021/acsaem.2c01052>
C02 前田
33. Kamakura, Y.; Yasuda, S.; Hosokawa, N.; Nishioka, S.; Hongo, S.; Yokoi, T.; Tanaka, D.; Maeda, K. Selective CO₂-to-Formate Conversion Driven by Visible Light over a Precious-Metal-Free Nonporous Coordination Polymer. *ACS Catal* **2022**, *12*, 10172–10178. <https://doi.org/10.1021/acscatal.2c02177>
C02 前田
34. Nishioka, S.; Hojo, K.; Xiao, L.; Gao, T.; Miseki, Y.; Yasuda, S.; Yokoi, T.; Sayama, K.; Mallouk, T. E.; Maeda, K. Surface-Modified, Dye-Sensitized Niobate Nanosheets Enabling an Efficient Solar-Driven Z-Scheme for Overall Water Splitting. *Sci Adv* **2022**, *8* eadc9115. <https://doi.org/10.1126/sciadv.adc9115>
C02 前田
35. Nakamura, M.; Akamatsu, H.; Fujii, K.; Nambu, Y.; Ikeda, Y.; Kanazawa, T.; Nozawa, S.; Yashima, M.; Hayashi, K.; Maeda, K. Synthesis of Hydride-Doped Perovskite Stannate with Visible Light Absorption Capability. *Inorg Chem* **2022**, *61*, 6584–6593. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.2c00398>
C02 前田、B01 南部
36. Wang, Y.; Takami, T.; Li, Z.; Yamamoto, K.; Matsunaga, T.; Uchiyama, T.; Watanabe, T.; Miki, H.; Inoue, T.; Iba, H.; Mizutani, U.; Sato, H.; Maeda, K.; Kageyama, H.; Uchimoto, Y. Oxyfluoride Cathode for All-Solid-State Fluoride-Ion Batteries with Small Volume Change Using Three-Dimensional Diffusion Paths. *Chem Mater* **2022**, *34*, 10631–10638. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.2c02736>
C02 内本、A01 陰山、C02 前田
37. Oyane, A.; Sakamaki, I.; Nakamura, M.; Koga, K.; Shitomi, K.; Tanaka, S.; Miyaji, H. Fluoridated Apatite Coating on Human Dentin via Laser-Assisted Pseudo-Biomineralization with the Aid of a Light-Absorbing Molecule. *Int J Mol Sci* **2022**, *23*, 15981. <https://doi.org/10.3390/ijms232415981>
C02 大矢根
38. Nakamura, M.; Bunryo, W.; Narazaki, A.; Oyane, A. High Immobilization Efficiency of Basic Protein within Heparin-Immobilized Calcium Phosphate Nanoparticles. *Int J Mol Sci* **2022**, *23*, 11530. <https://doi.org/10.3390/ijms231911530>
C02 大矢根

書籍

39. 松本知大；本橋輝樹．メタンと二酸化炭素～その触媒的化學変換技術の現状と展望 / 1.3.2. 結晶性シリケート触媒によるメタン酸化カップリング；シーエムシー・リサーチ；**2023**；印刷中．
A01 本橋
40. Shunta Nishioka; Kazuhiko Maeda. Water Photo - and Electro - Catalysis: Mechanisms, Materials, Devices and Systems / Solar Energy Conversion by Dye-Sensitized Photocatalysis; Wiley-VCH; in press.
C02 前田

アウトリーチ活動（2022年6月～2022年11月）

2022/7/9 『日本セラミックス協会セラミックス大学（セプロ）』

大矢根綾子博士（C02 計画研究分担）が、日本セラミックス協会主催のセラミックス大学 2022 において講義「セラミックスの使われ方 1: バイオセラミックス」を行いました。

C02 大矢根

2022/7/9 『日本セラミックス協会セラミックス大学（セプロ）』

本橋輝樹教授（A01 計画研究代表）が、日本セラミックス協会主催のセラミックス大学 2022 において講義「物性と評価 1: 導電性」を行いました。

A01 本橋

2022/8/29 『中学校理科体験実験』

杉本邦久教授（B01 計画研究代表）が、近畿大学附属中学校の学生 10 名を受け入れ、色の変化を観察することによって化学反応の進み方を直接理解する体験実習を行いました。

B01 杉本

2022/9/26-30 『高専生のインターンシップ受け入れ』

前田和彦教授（領域代表、C02 計画研究代表）が、都城工業高等専門学校（高専）の学生 1 名を研究室に受け入れ、9 月 26～30 日に渡って水分解光触媒・光電極に関する講義・実験実習を行いました。

C02 前田

2022/10/1 『埼玉県立浦和第一女子高等学校でのスーパーサイエンスハイスクール（SSH）特別実習』

前田和彦教授（領域代表、C02 計画研究代表）が、埼玉県立浦和第一女子高等学校の高校生を対象としたスーパーサイエンスハイスクール（SSH）特別実習を実施し、「光で動く水の電解セル」という題目の模擬講義および体験実習を行いました（高校生 17 名、教員 2 名参加）。

C02 前田

2022/10/22 『応用物理学会・東海支部 基礎セミナー 「電子線を用いた分析法」』

木本浩司拠点長（B01 計画研究分担）が、「走査透過電子顕微鏡法（STEM）や EELS/EDS を用いた分析法」という題目で、走査透過電子顕微鏡法（STEM）による構造観察、電子エネルギー損失分光法（EELS）・エネルギー分散型 X 線分光法（EDS）による分析手法の解説を行いました。

B01 木本

2022/10/22 『物性研究所一般公開 サイエンス・カフェ ここまで見える!最先端のエクス線写真の話』

木内久雄助教（B01 計画研究分担）が、東京大学物性研究所一般公開のサイエンス・カフェ（ここまで見える!最先端のエクス線写真の話、講師：木村隆志准教授）内で中継先の SPring-8 東京大学放射光アウトステーション物質科学ビームライン BL07LSU の実験装置の紹介を行いました。

B01 木内



■ 領域ニュース

2022/10/26 『奈良工業高等専門学校での講演』

内本喜晴教授（C02 計画研究分担）の研究室の博士課程3年生 Cao Zulai 氏が、「Studies on the electrode materials for next-generation Rechargeable Batteries」という題目での講演を行いました。（高専生 10 名）

C02 内本

2022/10/26 『奈良工業高等専門学校での講演』

内本喜晴教授（C02 計画研究分担）の研究室の博士課程3年生 王彦昌氏が、「インターカレーション型フッ化物イオン電池用正極材料の開発」という題目での講演を行いました。（高専生 10 名）

C02 内本

2022/11/9 『つくばサイエンスアカデミー(SAT)』

木本浩司拠点長（B01 計画研究分担）が、「物質・材料研究機構における透過電子顕微鏡を用いた研究」という題目で、走査透過電子顕微鏡（STEM）や電子エネルギー損失分光法（EELS）などを用いた計測例を紹介する講演を行いました。

B01 木本

2022/11/28 『日本顕微鏡学会 第32回電子顕微鏡大学』

木本浩司拠点長（B01 計画研究分担）が、「走査透過電子顕微鏡法（STEM）入門」という題目で、STEM 像の観察原理の概要や軸調整のポイント、観察事例などを紹介する講演を行いました。

B01 木本

