

Annual Report
2017

平成29年度・2017 年報

TREMS

Tsukuba Research Center for Energy Materials Science

TIMS

Tsukuba Research Center for Interdisciplinary Materials Science



筑波大学 エネルギー物質科学研究センター (TREMS)

学際物質科学研究センター (TIMS)



はじめに

TREMS センター長 鍋島達弥

エネルギー物質科学研究センター (TREMS) は、その前身である学際物質科学研究センター (TIMS) が数理物質融合科学センター (CiRfSE) 環境エネルギー材料研究拠点との融合により改組され、組織体制および人員も刷新された研究センターとして 2017 年 10 月 1 日に、数理物質系および筑波大学の研究力の強化を目的に設立されました。TIMS では工学と理学の枠を超えた融合による未来型機能性物質群の創成を理念に活動を行ってきましたが、2011 年に「環境エネルギー分野」に軸足を置いた研究力を強化するため改組され、その後も、多くの外部資金の獲得、数多くの国際一流誌での論文発表、多数の受賞など、大きな成果を挙げてきました。また数理物質系においては、2014 年に数理物質融合科学センター (CiRfSE) の中に「物質変換材料研究部門」と「エネルギー変換・貯蔵物質研究部門」の二つの部門からなる「環境エネルギー材料研究拠点」を立ち上げ、筑波大学のプレゼンスの向上に大きく貢献することができました。TIMS と CiRfSE の拠点が融合した TREMS においては、構成員および研究体制を見直し、つくば地区及び海外の研究機関との連携強化を同時に効率よく推進できる仕組みの構築を図っています。さらに 2017 年からは概算要求 (機能強化経費) による支援もあり、連携研究者の増強など、目的のセンター構想の実現に向けて、具体的かつ実効的な取り組みを行っています。本研究センターの核となるミッションの「革新的な環境エネルギー材料の創製」は、現代社会の喫緊の課題であり、言うまでもなく「持続可能な社会の構築」にも深く関わります。本センターにおける、学理と応用の一貫貫型の連携体制・融合研究によって、これを大きく発展させることができると考えています。本センターは、数理物質系の強みである基礎力のさらなる強化を最も重視していますが、応用面への展開も円滑に行えるよう、つくばの地の利を活かした産学官連携による基礎研究の実用化を重視している点も特徴の一つとなっています。このように TREMS は筑波大学の中期目標・中期計画にも謳われている「能動的産学連携活動」や「国際的な産学連携活動」を積極的に推進することで、つくば地区におけるエネルギー物質科学の新しい拠点として社会に貢献すべく活動を行って参ります。

目次

はじめに

1.	設置趣旨と沿革	1
1.1	設置の趣旨	1
1.2	沿革	1
1.3	歴代センター長	2
1.4	TREMS・TIMS ロゴ	3
2.	組織	4
2.1	構成員	4
2.2	委員会	5
2.3	学内委員会	6
2.4	組織図	6
2.5	部門	8
2.6	WEB	11
2.7	所在地	11
3.	センター活動報告	12
3.1	運営委員会等	12
3.2	TREMS・TIMS セミナー、シンポジウム等開催記録	13
3.3	TIMS・TREMS 実績報告	18
3.4	TREMS が関わるその他の活動	23
4.	研究活動報告	26
4.1	TREMS	27
	(1) マテリアル分子設計部門	27
	(2) エネルギー物質部門	61
	(3) 電気エネルギー制御部門	80
4.2	TIMS	97
4.3	競争的資金獲得状況	124
4.4	共同研究	128
4.5	研究生等の受け入れ	133
4.6	受賞	134
4.7	学会活動・各種委員など	135
4.8	新聞報道・特記事項他	138

1.設置の趣旨と沿革

1.1 設置の趣旨

本センターの前身となる学際物質科学研究センター(TIMS)は白川英樹名誉教授のノーベル化学賞受賞を記念して平成15年に設立されました。その理念は、工学と理学の枠を超えた融合による革新的な機能性物質群の創成ですが、平成23年4月からはさらなる研究力強化を目的に、現代社会の喫緊の課題である環境エネルギー分野を研究領域のコアと定め、「物質創成」、「集積物性」、「ナノグリーン機能」の三つの研究コアを設置し、より視野の広い「グリーンイノベーション」「革新的な環境エネルギー材料の創製」をキャッチフレーズとして研究を推進することになりました。

さて平成26年9月に、TIMSの中で特に社会的要請を考慮し、系内の高い研究力をもつ研究グループを抽出して、数理物質融合科学センター(CiRfSE)の中に「物質変換材料研究部門」と「エネルギー変換・貯蔵物質研究部門」の二つの部門からなる「環境エネルギー材料研究拠点」を立ち上げました。独創的な研究には集中とダイバーシティーの両方が不可欠ですが、ダイバーシティーを重視したTIMSと、集中を重視したCiRfSEの拠点はその両輪をなすもので、実際、TIMSとCiRfSEの有機的連携により行われた共同研究によって優れた基礎研究の成果が数多く得られました。しかしそうした基礎研究の独創的シーズを熟成し、社会に還元できる材料やデバイスを創製するには、さらに次の二つが不可欠となります。一つは、上述した強い研究力の高い研究グループと異分野との共同研究推進、もう一つは、基礎と応用をつなぐ学理の確立を可能とする人材の確保と体制です。これに加えてさらに、つくば地区の強みを活かすことのできる他の研究機関との連携強化、つまりTIAなどの特徴あるつくば地区の重点プロジェクトを活かした、有機的なつくば連携による研究成果、装置、人材の交流をより活発にすることができれば、飛躍的な研究力強化が期待されます。

以上のことを鑑み、TIMS、CiRfSEおよび数理の研究力の高い環境エネルギー分野の教員が一つの組織の構成員となることで、異分野融合、学内連携、つくば連携、オールジャパン連携、さらにはグローバル連携の拠点として研究交流を活性化し、筑波大学の当該分野での存在感を高めるために、TIMSを改組しエネルギー物質科学研究センター(TREMS)設立の運びとなりました。

1.2 沿革

2000年	11月	「白川記念学際物質科学研究センター」(仮称)WGの発足
	12月	白川英樹博士ノーベル化学賞受賞
2001年	9月	「学際物質科学研究センター」WGの発足
2002年	11月	概算要求事項の申請
2003年	2月	学際物質科学研究センター設置準備委員会の発足
	4月	1日 学際物質科学研究センターのスタート(4研究コア)
	5月	19日 センター看板上掲式(共同研究棟A)
	6月	17日 スタートアップシンポジウム(つくば研究交流センター)
	11月	10・11日 開所式、記念講演会(筑波大学大学会館)
2004年	6月	15日 TIMS客員研究員として1名採用
	10月	1日 融合物質生命コアが加わり、5研究コアとなる。
2006年	4月	三大学連携融合事業「アトミックテクノロジー」の開始
2007年	3月	16・17日 アトミックテクノロジー国際シンポジウム(ISAT-2007)の開催
	10月	1・2日 第2回アトミックテクノロジー国際シンポジウム(ISAT-2)の開催
	11月	筑波大プレ戦略イニシアティブ学際物質科学研究拠点に採択

2008年	3月	13・14日	第1回学際物質科学国際シンポジウム (ISIMS-1) の開催
	3月	25日	ネブラスカ大学バイオメディカルセンターとの部局間協定締結
	7月		学際物質科学研究拠点「戦略イニシアティブ(A)」に昇格
2009年	1月	20日	台湾国立清華大学との合同ワークショップ開催
	3月	5・6日	第3回アトミックテクノロジー国際シンポジウム (ISAT-3) の開催
	3月	9・10日	第2回学際物質科学国際シンポジウム (ISIMS-2) の開催
	10月	10~12日	第2回筑波-新竹合同シンポジウム (TSAMS-2009) の開催
	11月	18・19日	第4回アトミックテクノロジー国際シンポジウム (ISAT-4) の開催
2010年	3月	18日	TIMS 客員研究員を1名採用
	4月	2・3日	第3回筑波-新竹合同ワークショップ (TSAMS-2010) の開催
2011年	3月	9・10日	第3回学際物質科学国際シンポジウム (ISIMS-2011) の開催
	4月	1日	TIMS 改組 新体制スタート (3分野9研究コア)
2012年	12月	1日	TIMS 客員研究員として新たに5名採用
	12月	17・18日	第4回筑波大-台湾国立清華大合同シンポジウムの開催
2013年	8月	1日	TIMS 客員教員として、新たに10名の教授・准教授の採用
	8月	26日~	筑波大学開学 40+101 周年記念事業として「つくば物質科学週間 2013」を共催
	9月	6日	
2014年	1月	6・7日	2014 CENIDE-CNMM-TIMS Joint Symposium on Interdisciplinary Nano-Science and Technology の開催
	8月	~翌3月	共同研究棟A耐震工事により10部屋を同棟1階へ移転
	9月	1日	新発足の数理物質融合科学センター (CiRfSE) 内に環境エネルギー分野の2部門を設置し、TIMS 教員が担当
2015年	3月	16・17日	2015 CENIDE-CNMM-TIMS Joint Symposium on Nanoscience and -technology の開催
	9月	30日	筑波大学がつくば国際会議場エポカルにおいて開催した TGSW2015 に共催としてセッションを開催
	12月	4日	若手准教授3名が TIMS 協力教員としてメンバーに加入
2016年	4月		共同研究棟 A 1階の TIMS 実験室が VBL 棟の1階・2階・3階に移転
	9月		客員教員2名を新たに採用
	9月	17~19日	筑波大学がつくば国際会議場エポカルにおいて開催した TGSW2016 に共催としてセッションを開催
2017年	3月	10・11日	2017 TIMS-CENIDE-NTHU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology を筑波大学で開催
	9月	25~27日	筑波大学がつくば国際会議場エポカルにおいて開催した TGSW 2017 に共催としてセッションを開催する
	10月	1日	学際物質科学研究センターと数理物質融合科学センター環境エネルギー材料拠点との融合により、エネルギー物質科学研究センター (TREMS) が設立 3部門27名、基礎融合リサーチグループ11名
2018年	3月	8・9日	2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives) を筑波大学で開催

1.3 歴代センター長

TIMS

2003年4月~2006年1月

赤木和夫 (物質工学系)

2006年2月~2010年3月

大塚洋一 (物理学専攻)

2010年4月～2013年3月
2013年4月～2015年3月
2015年4月～2017年9月
TREMS
2017年10月～

鍋島達弥 (物質創成先端科学専攻)
中村潤児 (物質工学域)
鍋島達弥 (化学域)
鍋島達弥 (化学域)

1.4 TREMS/TIMS ロゴマーク



2.組織

2.1 構成員

TREMS (2017.10.1～)

センター長	鍋島達弥	教授	(数理物質系、化学域)
副センター長	神原貴樹	教授	(数理物質系、物質工学域)

マテリアル分子設計部門

*中村潤児	教授	(数理物質系、物質工学域、部門長)
*神原貴樹	教授	(数理物質系、物質工学域)
*鍋島達弥	教授	(数理物質系、化学域)
山本泰彦	教授	(数理物質系、化学域)
*山本洋平	教授	(数理物質系、物質工学域)
*近藤剛弘	准教授	(数理物質系、物質工学域)
*辻村清也	准教授	(数理物質系、物質工学域)
*桑原純平	講師	(数理物質系、物質工学域)
*中村貴志	助教	(数理物質系、化学域)

エネルギー物質部門

*守友浩	教授	(数理物質系、物理学域、部門長)
岡田晋	教授	(数理物質系、物理学域)
都倉康弘	教授	(数理物質系、物理学域)
*西堀英治	教授	(数理物質系、物理学域)
*初貝安弘	教授	(数理物質系、物理学域)
柳原英人	教授	(数理物質系、理工学域)
*笠井秀隆	助教	(数理物質系、物理学域)
*小林航	助教	(数理物質系、物理学域)
丹羽秀治	助教	(数理物質系、物理学域)

電気エネルギー制御部門

上殿明良	教授	(数理物質系、理工学域、部門長)
岩室憲幸	教授	(数理物質系、理工学域)
佐々木正洋	教授	(数理物質系、理工学域)
只野博	教授	(数理物質系、理工学域)
梅田享英	准教授	(数理物質系、理工学域)
*櫻井岳暁	准教授	(数理物質系、理工学域)
蓮沼隆	准教授	(数理物質系、理工学域)
関場大一郎	講師	(数理物質系、理工学域)
奥村宏典	助教	(数理物質系、理工学域)

基礎融合リサーチグループ

伊藤良一	准教授	(数理物質系、理工学域)
*神田晶申	教授	(数理物質系、物理学域)
末松崇	教授	(数理物質系、理工学域)
都甲薫	准教授	(数理物質系、理工学域)
*丸本一弘	准教授	(数理物質系、物質工学域)
重田育照	教授	(数理物質系、物理学域)
*松岡亮太	助教	(数理物質系、化学域)
所裕子	准教授	(数理物質系、物質工学域)
藤谷忠博	研究チーム長	(産業技術研究所)
崔準哲	研究チーム長	(産業技術研究所)

客員教員	*加納英明	准教授	(数理物質系、理工学域)
	*雨宮健太	客員教授	(高エネルギー加速器研究機構)
	*荒川裕則	客員教授	(東京理科大学 名誉教授)
	*駒場慎一	客員教授	(東京理科大学)
	*坂田修身	客員教授	(物質・材料研究機構)
	*竹口雅樹	客員教授	(物質・材料研究機構)
	*松尾豊	客員教授	(University of Science and Technology of China 東京大学)
客員研究員	*森利之	客員教授	(物質・材料研究機構)
	*安田弘之	客員教授	(産業技術総合研究所)
	*大谷 実	客員准教授	(産業技術総合研究所)
	*尾坂 格	客員准教授	(広島大学)
	*安田 剛	客員准教授	(物質・材料研究機構)
	*新井正男	客員准教授	(物質・材料研究機構)
	*則包恭央	客員准教授	(産業技術総合研究所)

*印は、TIMS のメンバー

TIMS (～2017.9.30)

専任教員	新井達郎	教授	(数理物質系、化学域)
	木島正志	教授	(数理物質系、物質工学域)
	藤田淳一	教授	(数理物質系、理工学域)
	一戸雅聡	准教授	(数理物質系、化学域)
	後藤博正	准教授	(数理物質系、物質工学域)
	小林伸彦	准教授	(数理物質系、理工学域)
	西村賢宣	准教授	(数理物質系、化学域)
	中本真晃	講師	(数理物質系、化学域)
	百武篤也	講師	(数理物質系、化学域)

事務職員	*太田啓一	(主任)
	*大森恵美子	(技術補佐員)(～ 2017.8)
	*石井かおり	(事務補佐員)(2017.8 ～)

2.2 委員会

TREMS 運営委員会 (2017.10.1～)

鍋島達弥 (センター長、TREMS)	神原貴樹 (副センター長、TREMS)
中村潤児 (部門長、TREMS)	守友浩 (部門長、TREMS)
上殿明良 (部門長、TREMS)	西堀英治 (TREMS)
佐々木正洋 (TREMS)	

TREMS 運営協議委員会 (2017.10.1～)

鍋島達弥 (センター長、TREMS)	神原貴樹 (副センター長、TREMS)
中村潤児 (部門長、TREMS)	守友浩 (部門長、TREMS)
上殿明良 (部門長、TREMS)	伊藤雅秀 (数理物質系長)
佐藤一彦 (産業技術総合研究所)	岸本直樹 (審議役、物質・材料研究機構)
西堀英治 (TREMS)	佐々木正洋 (TREMS)

TIMS 運営委員会 (～2017.9.30)

鍋島達弥 (センター長、TIMS)	神田晶申 (TIMS)
藤田淳一 (TIMS)	初貝安弘 (TIMS)

守友 浩 (TIMS・物理学専攻長)	西堀英治 (TIMS)
神原貴樹 (TIMS)	木島正志 (TIMS)
中村潤児 (TIMS)	新井達郎 (TIMS)
加藤久男 (数学専攻長)	山本泰彦 (化学専攻長)
日野健一 (物性・分子工学専攻長)	佐々木正洋 (電子・物理工学専攻長)
黒田眞司 (ナノサイエンス・ ナノテクノロジー専攻長)	伊藤雅英 (数理物質系長)

TIMS 運営協議会 (～2017.9.30)

鍋島達弥 (センター長、TIMS)	神田晶申 (TIMS)
藤田淳一 (TIMS)	初貝安弘 (TIMS)
守友 浩 (TIMS)	西堀英治 (TIMS)
神原貴樹 (TIMS)	木島正志 (TIMS)
中村潤児 (TIMS)	新井達郎 (TIMS)
伊藤雅英 (数理物質系長)	

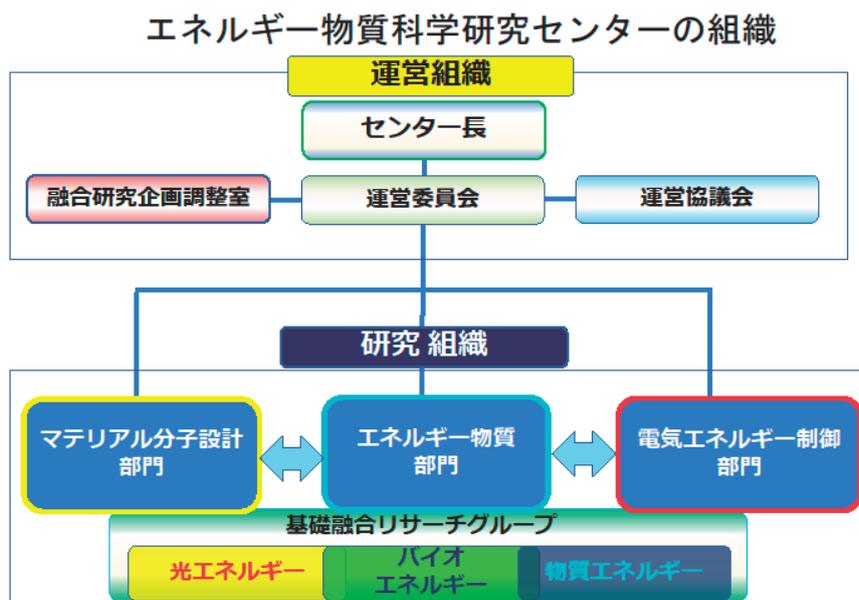
TIMS 推進会議 (～2017.9.30)

鍋島達弥 (センター長、TIMS)	神田晶申 (TIMS)
藤田淳一 (TIMS)	初貝安弘 (TIMS)
守友 浩 (TIMS)	西堀英治 (TIMS)
神原貴樹 (TIMS)	木島正志 (TIMS)
中村潤児 (TIMS)	新井達郎 (TIMS)

2.3 学内委員等

サブネットワーク管理委員会	委員長	鍋島達弥
環境安全管理室	廃棄物管理責任者	鍋島達弥

2.4 組織図

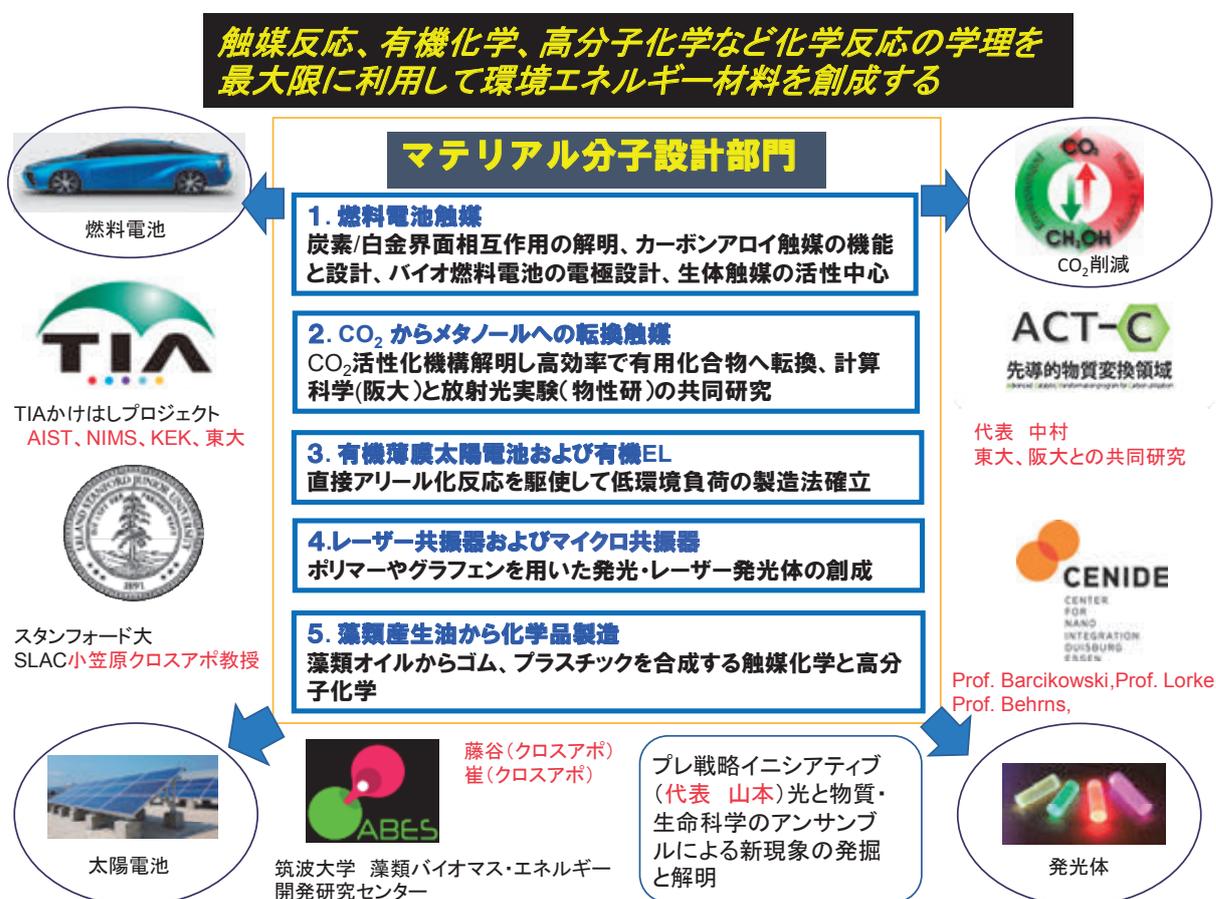




2.5 部門

マテリアル分子設計部門

マテリアル分子設計部門では、レアメタルの白金に代わる燃料電池炭素触媒、CO₂ のメタノールへの触媒的転換、 π 共役分子の設計を基本とする電子・光機能性高分子の創製、四重鎖 DNA と鉄ポルフィリン錯体であるヘムの酸化触媒作用、生体分子の電極触媒、ホウ化水素シートの生成に関する研究で成果を挙げ、SCIENCE (コメント)、Nature Commun.、JACS、Angewandte Chemie、Scientific Reports など著名学術誌に論文が掲載された。また、2016 年度に SCIENCE 誌に発表した窒素ドープカーボン触媒の活性点に関する論文は引用件数が 700 回を超えた。本論文の焦点となったピリジニック窒素に関する研究は世界的に活発となり、研究の波及効果が極めて大きい。大型研究費による研究が進んでおり、代表的なものとして、JST ACT-C、科研基盤 A 3 件、国際共同研究加速基金が挙げられる。受賞として、文部科学大臣表彰若手科学者賞、日本表面科学会学会賞、農芸化学奨励賞、高分子学会日立化成賞 2 件、Polymer Journal 賞があり、学会において業績が高く評価された。TIA かけはしプロジェクト「白金フリー燃料電池カーボン触媒イノベーション」、「最先端光材料・光テクノロジー国際研究拠点形成に向けた TIA 連携」を進めておりコンソーシアム設立および起業 (株式会社プリウエイズ) の準備を進めた。国際共同研究が活発に進められており、Simon Fraser 大学、Duisburg-Essen 大学、Heidelberg 大学、Strasbourg 大学、Cambridge 大学、Malaga 大学、Leibniz 光学研究所、Max-Planck 高分子研究所、Linz 大学、国立清華大学、ミュンヘン工科大学、Grenoble Alpes 大学、Aix-Marseille 大学、Bordeaux 大学、Queensland 大学と共同研究を行った。



エネルギー物質部門

本部門の使命は、(1)エネルギーサイエンスの推進と(2)エネルギーイノベーションの実現の二つです。エネルギーサイエンスとは、エネルギー現象(光電気変換、熱電池変換、物質電気変換、蓄電、等)を電子論的・微視的に解明することです。そのためには、典型物質または理想物質に着目し、基盤研究のための材料開発・デバイス開発、放射光 X 線やナノプローブを駆使した先端計測、第一原理計算による物性予測、等を組み合わせる必要があります。我々は、エネルギーイノベーションの実現を実現するにはエネルギー現象を根源的に理解する必要がある、と考えています。根源的な理解の上には、高機能材料開発の指針だけでなく、異分野融合による新デバイスの提案が可能になります。実際に本部門では、二次電池と熱電変換を融合した熱発電セルを提案し、その実現を目指しています。

エネルギー物質部門

1. 物質、計測、計算を融合したエネルギー・マテリアル・サイエンス(EMS)の発信
2. EMSに根差したエネルギー・イノベーションの実現

他の部門との協力関係

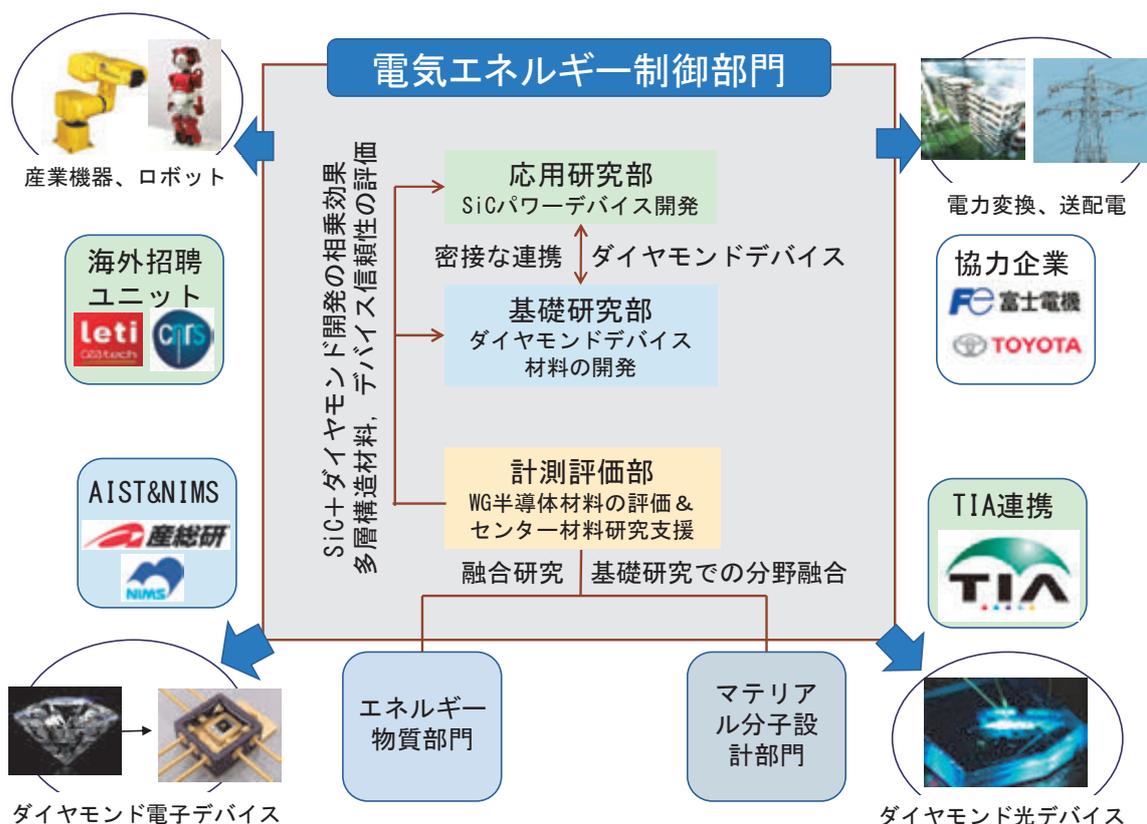
1. EMS手法の分子物質、半導体物質への転用
2. 強相関物質と分子物質、半導体物質を融合したエネルギー・イノベーションの実現

 雨宮	構成員 守友 浩、小林 航、丹羽秀治(物質開発 → デバイス提案・試作) 西堀英治、笠井秀隆(新規計測手法 → 性能の起源解明) 岡田 晋(計算物質開発 → 性能予測)	 Di-Jing
 神山	学内連携 初貝安弘(層状物質計算) 神田晶申(層状物質デバイス) 丸本一弘(太陽電池)、櫻井岳暁(太陽電池) 柳原英人(磁性材料)、小島 隆(人工光合成)	 Iversen
 重田	 竹口、三石、坂田 梅沢、韓、Islam	 山本、周、大谷
	 大石	 EMC UMR6508 Pralong

電気エネルギー制御部門

「変換」、「貯蔵」したエネルギーを社会に活かすためには電気エネルギーを経る必要があるが、その過程を担うのがパワーエレクトロニクスである。電気エネルギー制御においては、エネルギーを制御する際の損失をできるだけ少なくすべきであり、実際、これがシステム全体の効率を決める要素となることも多い。一方、エネルギーの有効利用は、使用材料の物性値だけで制限されるわけではなく、それを使うシステムとのマッチング、例えばその材料を用いたデバイス構造やシステム構成等にも依存する。パワーエレクトロニクスの研究は社会インフラを担う重要な技術であるが、従来からシリコンがパワーエレクトロニクス材料として使用されてきた。近

年は、炭化シリコン(SiC)を用いたデバイスが使用されるようになってきたが、SiC と SiC デバイスに関連した材料については、まだ十分な伸びしろがあり、その性能向上が期待されている。電気エネルギー制御部門では、SiC と SiC デバイス関連材料を、材料基礎からシステムまで見据えた俯瞰的な立場から研究する。加えて、究極のパワーエレクトロニクス材料と言われるダイヤモンドの研究にいち早く着手し、パワーエレクトロニクスへの応用だけでなく、量子情報デバイスや高機能センサーとしてのダイヤモンドの利用についても基礎から応用までをカバーし研究を行う。



基礎融合リサーチグループ

「光エネルギー」「バイオエネルギー」「マテリアルエネルギー」の三つの大きな分野に関わる基礎研究を行うアクティブな研究者からなるリサーチグループで、グループ内の融合・共同研究を推し進めるだけでなく、三つの主要部門とも連携することで、単独の研究者では発想できない観点からの新しい研究の萌芽を創出することを目的とします。これにより、研究ピークとダイバーシティによる独創的研究の推進に寄与します。できるだけ若手研究者をメンバーに加え、将来の新しい部門の設立も視野に入れて活動し、センターはこれを支援します。また上述の三つの主要部門とのメンバーの入れ替えも適宜行うなど、柔軟な組織として運用します。

2.6 WEB

TREMS <http://www.trems.tsukuba.ac.jp/>

TIMS <http://www.tims.tsukuba.ac.jp/>

2.7 所在地

センター固有の建物は未整備のため、以下の共同利用スペースを借用して活動している。

総合研究棟 B 201(センター事務室)、222、223、224、225、226、1225、1226、1227、022-1

共同研究棟 D 103、104-1、104-2、201-1、201-2、202-1、202-2、302-1、302-2、303-1、303-2、304



総合研究棟 B



共同研究棟 D



学内地図



3.センター活動報告

3.1 運営委員会等

・平成 29 年度学際物質科学研究センター第 1 回運営委員会

(平成 29 年 6 月 22 日(木) 開催)

1. 平成 28 年度臨時運営委員会議事録の確認
2. 平成 29 年度 TIMS 教員、客員教員、客員研究員、職員について
3. 平成 29 年度研究室使用予定について
4. 平成 28 年度決算案、平成 29 年度予算案、概算要求
5. 平成 29 年度 RA 経費、平成 29 年度 TGSW 事業費について
6. 2017 TIMS-CENIDE-CNMM Joint Symposium 開催報告
7. TIMS 共通機器管理者および使用講習会の開催実施報告
8. 第 17 回機能性分子シンポジウム開催報告
9. ノルウェー科学技術大学来訪報告
10. 共同研究棟 D201-2 室スクリーン設置について
11. パワエレ共用システムについて
12. 平成 29 年度 TIMS 今後のスケジュールについて
 - ・第 5 回 TIA ナノグリーンサマースクール
 - ・TGSW 2017
13. 新センターの設置について
14. その他

・学際物質科学研究センター研究推進室会議

原則として、毎月 1 回研究推進室会議を開催し、TIMS の研究推進全般に関して緊密な意見交換を行い、センター活動の活性化を図っている。平成 29 年度は、4/11(火)、5/11(火)、6/8(木)、7/13(木)、9/14(木)、の計 5 回開催した。

・平成 29 年度第 1 回エネルギー物質科学研究センター運営協議会

(平成 29 年 11 月 25 日(土) 開催)

1. エネルギー物質科学研究センター細則について
2. 平成 29 年度 TREMS 教員、職員について
3. 平成 29 年度 TREMS 研究室使用予定について
4. 平成 29 年度予算
5. TREMS 共通機器管理者について
6. 平成 29 年度 TREMS 今後のスケジュールについて
 - ・ジョイントシンポジウムの開催について
 - ・TIA ナノグリーン・サマースクールについて
 - ・大学院共通科目について
7. その他
 - ・グルノーブル大学との連携について
 - ・CENIDE との連携について

- ・NIMS エネルギー・環境材料研究拠点との連携について
- ・TGSW2017 について
- ・エネルギー物質科学研究センター運営委員会

原則として、毎月1回運営委員会を開催し、TREMS の運営全般に関して緊密な意見交換を行い、センター活動の活性化を図っている。平成 29 年度は、10/12(木)、11/16(木)、12/13(木)、1/18(木)、2/28(水)、の計 5 回開催した。

3.2 TREMS・TIMS セミナー、シンポジウム 等開催記録

TREMS/TIMS セミナー・講演会

- 2017/4/6 超分子化学講演会 (TIMS 講演会) : Prof. Christoph A. Schalley (Freie Universität Berlin) “Systems Chemistry: From Logic Gates based on Supramolecular Gels to Supramolecular Polymer Transporters” (共催)
会場: 筑波大学総合研究棟 B0110 世話人: 鍋島達弥
- 2017/8/3 超分子化学講演会 (TIMS 講演会) : Prof. Wim Dehaen (Dept. of Chemistry, KU Leuven (Belgium) “New methodologies to postfunctionalize BODIPY dyes” (共催)
会場: 筑波大学総合研究棟 B0108 世話人: 鍋島達弥
- 2017/11/10 超分子化学講演会 (TREMS 講演会) : 久保孝史 (大阪大学大学院理学研究科・教授) 「 π 電子系有機ラジカル種に関する最近の研究 電子系有機ラジカル種に関する最近の研究」(共催)
会場: 総合研究棟 B0110 世話人: 鍋島達弥
- 2017/12/14 理工学域専攻セミナー: 田中真伸 (高エネルギー加速器機能機構素粒子原子核研究所・教授) 「半導体と加速器科学」(共催)
会場: 筑波大学 工学系学系棟 3F800 世話人: 上殿明良

シンポジウム・ワークショップ

- 2017/4/22 第 17 回機能性分子シンポジウム(大饗シンポジウム) (主催)
会場: 筑波大学 1D 棟 204 室
村岡宏樹(岩手大学)「含窒素複素芳香環をコアユニットに用いた星形D- π -A分子の合成と物性」
仲程司(近畿大学)「ポリチオフエンナノチューブハイブリッド材料の合成と特性」
中村貴志(筑波大学化学域)「超分子システムの精密構築と機能開拓」
- 2017/9/10 Interdisciplinary Workshop on Science and Patents 2017 (IWP2017) - High School Section
世話人: 後藤博正
(共催: 日本化学会、日本磁気科学会、TIMS)
会場: 筑波大学 春日講堂
Rafaël H. L. Kiebooms (European Patent Office, Dr., MBA, Patent Lawyer)
参加高校名: 日立第一高等学校(茨城)、水戸第一高等学校(茨城)、緑岡高等学校

(茨城)、竜ヶ崎第一高等学校(茨城)、牛久栄進高等学校(茨城)、常総学院高校(茨城)、東京都立国際高等学校(東京)、宝仙学園高等学校(東京)

2017/09/25-27 Tsukuba Global Science Week 2017 (TGSW 2017)

会場: つくば国際会議場エポカルつくば

September 25

Session 7-2: Student Poster Presentation on Materials Research (NIMS Collaborative Doctoral Program & TIMS) (主催)

場所: 会議室 202B

セッション・オーガナイザー: 迫田和彰(NIMS)、鍋島達弥(筑波大学)

Poster Session 52 件(内 17 件が学際物質科学研究センターからの発表)

September 26

Session 8-1: Interdisciplinary Workshop on Science and Patents TGSW2016-IWP (共催)

場所: 会議場 101, 102

セッション・オーガナイザー: 後藤博正(筑波大学)

Opening address : Rafaël H. L. Kiebooms (European Patent Office)

Oral presentation

Rafaël H. L. Kiebooms (European Patent Office) “Protecting your Intellectual Property by Means of Patents”

Rafaël H. L. Kiebooms (European Patent Office)

Hisaya Imai (Univ. of Tsukuba) “the procedure to obtain the grant of a European patent”
“The Seven Deadly Sins of the Inoventor”

Poster session

Closing ceremony: Comment on TGSW-IWP2017 and Awaeding

Address and Closing Declaration: Ken-ichi Hino (Univ. of Tsukuba)

September 27

Session 2-2: Catalytic science and technology for energy innovation (共催)

場所: 会議室 202A

セッション・オーガナイザー: 中村潤児(筑波大学)

Junji Nakamura (Univ. of Tsukuba) “Introductory talk”

Prof. Liming Dai (Case Western Reserve Univ.) “Carbon-based metal-free catalysts for efficient energy conversion and storage”

Prof. Takahiro Kondo (Univ. of Tsukuba) “Active sites in nitrogen-doped carbon materials for oxygen reduction reaction”

Yuanjian Zhang (Southeast Univ.) “Carbon-based non-precious electrocatalysts: preparation and structure-activity correlations studies”

Yuta Nabae (Tokyo Institute of Technology) “Oxygen reduction performance and mechanism of Fe/N/C cathode catalyst prepared from polyimide nano-particles”

Plamen Atanassov (The University of New Mexico) “Platinum Group Metal-free Catalysts for Fuel Cells: Successes and Challenges”

Toshiyuki Mori (National Institute for Materials Science) “Interface design of Pt-CeO_x /C electro-catalysts for fuel cell application”

Iryna V. Zenyuk (Tufts Univ.) “Synchrotron X-ray Computed Tomography for Catalysts Characterization and Design”

Hirohisa Tanaka (Kwansei Gakuin Univ.) “Platinum-free Direct Hydrazine Fuel Cell ~Collaboration with Daihatsu Motor~”

Junji Nakamura (Unive. of Tsukuba) “Closing remarks”

2017/11/25

エネルギー物質科学研究センター スタートアップミーティング

会場：筑波大学総合研究棟B0110

鍋島達弥 (TREMS センター長)「開会挨拶・センターの説明」

中村潤児 (TREMSマテリアル分子設計部門長)

マテリアル分子設計部門の紹介 / 「マテリアル分子設計部門のミッション」

近藤剛弘 (TREMS)「水素社会に貢献する触媒開発研究」

神原貴樹 (TREMS)「直接的アリアル化重合:簡便で環境に優しい高分子半導体の合成・設計技術の開発」

鍋島達弥 (TREMS)「超分子を基盤とする分子機能の創出」

山本泰彦 (TREMS)「四重鎖DNAとヘムが拓く物質科学」

守友浩 (TREMSエネルギー物質部門長)エネルギー物質部門の紹介 / 「新しい熱発電デバイス」

西堀英治 (TREMS)「Quantum Crystallography(量子結晶学)によるエネルギーマテリアルサイエンス」

初貝安弘 (TREMS)「トポロジカル物質による環境エネルギーデバイスの可能性」

都倉康弘 (TREMS)「エネルギー／熱輸送デバイスにおける量子効果」

岡田晋 (TREMS)「計算物質科学によるエネルギーデバイスに資する物質設計」

上殿明良 (TREMS 電気エネルギー制御部門長)電気エネルギー制御部門の紹介

只野博・岩室憲幸 (TREMS)「SiCパワーエレクトロニクス研究の現状と今後」

牧野俊晴・山崎聡 (TREMS)「ダイヤモンドデバイスの基盤研究」

櫻井岳暁 (TREMS)「パワー半導体の物性評価研究」

蓮沼隆 (TREMS)「蓮沼研究室におけるSiC上SiO₂膜に関する研究紹介」

関場大一郎 (TREMS)「高感度・高分解能ERDAの開発と界面の軽元素分析」

佐々木正洋 (TREMS) 電気エネルギー制御部門の活動—まとめ—

2018/1/14

つくば理科学シンポジウム(共催) 世話人:後藤博正

会場:つくばアルスホール(つくば市立図書館)

岳川有紀子(大阪市立図書館主任学芸員)講演会

ラジオ工作教室

2018/3/8-9

2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology

(Workshop of Pre-Strategic Initiatives)

会場：筑波大学総合研究棟B0110 公開講義室 他

March 8th, 2018 (Thursday)

Tatsuya Nabeshima (TREMS): Opening Remarks

Junji Nakamura (TREMS): “Catalytic Conversion of CO₂ to Methanol on Cu”

Stefanie Tjaberings, Andrea Steinhaus, Tai-Lam Nghiem, André H. Gröschel (CENIDE)
“Block Copolymer Templates for Energy Applications”

Eunji Lee, Huiyeong Ju, Shim Sung Lee (Gyeongsang National University, Jinju, South Korea)
“Calixcrowns versus Pillarcrowns: Old and New Ditopic Building Blocks in Supramolecular Coordination Chemistry”

Yasuhiko Yamamoto Tomokazu Shibata, Yusaku Nakayama Ryosuke Shinomiya and Haruka Araki (TREMS, Department of Chemistry, TARA Center, University of Tsukuba)
“Characterization of Complexes between Heme and G-quadruplex DNAs”

Seiya Tsujimura (TREMS) “Enzymatic Biofuel Cells”

Stefan Hecht (Humboldt University of Berlin) “Photoswitches to Control Materials and Devices”

Hisaki Sawahata, Mina Maruyama, and Susumu Okada (TREMS) “Energetics and electronic structure of in-plane heterostructures of graphene and BN”

Yutaka Moritomo (TREMS) “Thermal Power Generation in Heat Cycle near Room Temperature”

Martin Bremholm (Aarhus University) “Materials Chemistry and Structural Studies at High Pressure”

Hideto Yanagihara (TREMS) “Strain-controlled Spinel Ferrites for New Permanent Magnets”

Yasuo Norikane (AIST) “Photoinduced Solid-liquid Phase Transition and Dynamic Motion of Azobenzene Crystals”

Takashi Nakamura, Yuya Kaneko, Tatsuya Nabeshima (TREMS) “A Large Macrocyclic That Binds Molecules by Multipoint Metal-ligand Coordination”

Dana Westmeier, Shirley K. Knauer, and Roland Stauber (University of Mainz, University Duisburg-Essen) “Nanomaterial-based Antimicrobial Therapies: Principles and Limitations”

Takahiro Kondo (TREMS) “Hydrogen Boride Sheets Derived from MgB₂ by Cation Exchange”

Yohei Yamamoto (TREMS) “Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers”

Kazunori Takada (NIMS) “Interfaces Governing the Performance of Solid-state Batteries”

Takaki Kanbara (TREMS) “Synthesis of Conjugated Polymers via C-H bond Functionalization Strategy”

Dana Westmeier, Roland Stauber and Shirley K. Knauer (University Medical Center of Mainz, CENIDE) Small Meets Smaller - Nanoparticle Microbiome Interactions”

March 9th, 2018

Yasuhiro Hatsugai (TREMS) “New Paradigm of Topological Materials”

Ashraful Islam (NIMS) “Perovskite Solar Cell for Next Generation Photovoltaics”

Chikashi Nishimura, Hideo Yoshinaga, Seiji Sakurai, Koji Nakagawa, Hiroshi Yukawa, Yoshihisa Matsumoto (NIMS, Taiyo Koko Co. Ltd., Nagoya University, National Institute of Technology, Oita College, National Institute of Technology, Suzuka College) “Separation of High-purity Hydrogen Using Vanadium Alloy Membranes from Gas Mixtures of Nitrogen and Hydrogen”

Priyanka Jood, Michihiro Ohta, Mercouri G. Kanatzidis, Atsushi Yamamoto (AIST, Northwestern University and Argonne National Laboratory) “High Efficiency Thermoelectric Materials and Modules from Nanostructured PbTe.”

Eiji Nishibori, Hidetaka Kasai, Venkatesha Rama Hathwar, Bo Iversen (TREMS) “Accurate Charge Density Study for Quantum Crystallography”

Tsung-Yu Huang, Ruei-Han Jiang, Chi Chen, Ding-Zheng Lin, Jian-Hui Lin, Tung Lee, He-Chun Chou, Jen-You Chu, Ta-Jen Yen (National Tsing Hua University, Industrial technology and research institute, Hsinchu, Research Center for Applied Sciences, Academia Sinica) “Seeing is Believing!? A super plasmonic probe and a Harry Potter’s invisible cloak”

Jeppe Vang Lauritsen (Aarhus University) “Scanning Tunneling Microscopy Studies of Metal Oxide Catalysts for Electrochemical Water Splitting”

Akira Uedono (TREMS) “Study of Vacancy-type Defects in Materials for Widegap Semiconductor Devices by Using Positron Annihilation”

Jyh Ming Wu (National Tsing Hua University) “Piezo-Catalytic Effect on the Enhancement of the Ultra-High Degradation Activity in the Dark”

Gheeraert Etienne (University Grenoble Alpes) “Diamond electronic devices for power electronics”

Noriyuki Iwamuro, Junjie An and Masaki Namai (TREMS) “Investigation of Short-circuit Failure Mechanism of SiC MOSFETs”

Takahide Umeda, Mitsuo Okamoto, Ryouji Kosugi, Shinsuke Harada, Shinobu Onoda, Takeshi Ohshima, Noriyuki Taoka, Mitsu Shimizu, Hiromitsu Kato, Toshiharu Makino, Satoshi Yamasaki (TREMS, AIST, QST) “Electron-spin-resonance Characterization on Wide-band-gap Semiconductor MOS interfaces”

Aboulaye Traore, Toshiharu Makino, Akira Nakajima, Hiromitsu Kato, Masohiko Ogura, Yukako Kato, Satoshi Yamasaki (AIST, University of Tsukuba) “Electrical Properties of High-voltage Diamond p-i-n diodes”

C. Vallée, and C. Mannequin (University Grenoble Alpes, University of Tsukuba) “Atomic Layer Processing for Next Generation of Microelectronic Devices”

Ryu Hasunuma (TREMS) “Characterization of SiO₂ Films on SiC”

Hiroshi Yano (University of Tsukuba) “Characterization and Control of Interface Properties in SiC MOSFETs”

Joel Bleuse, Yoann Curé, Frédérique Ducroquet, Louis Grenet and Henri Mariette (University Grenoble Alpes, CEA / INAC, Grenoble INP, CEA / LITEN, CNRS / Néel Institute) “Study of Potential Fluctuations in CZTSSe thin film solar cells by Optical and Admittance Spectroscopy”

Yutaka Moritomo (TREMS): Closing Remarks

特別プログラム・研修コース・講習会等の開催

2017/08/29-31 TIA 連携大学院サマー・オープン・フェスティバル 2017

第 5 回 TIA ナノグリーン・サマースクール (主催)

会場: 筑波大学 総合研究棟 B 他

安田剛 (物質・材料研究機構) 雨宮健太 (高エネルギー加速器研究機構)

荒川裕則 (東京理科大学) 安田弘之 (産業技術総合研究所)

松尾豊 (東京大学) 坂田修身 (物質・材料研究機構)

竹口雅樹 (物質・材料研究機構)

参加者: 大学院生、学部生

3.3 エネルギー物質科学研究センター・学際物質科学研究センター実績報告

学際物質科学研究センターは、「物質創成」「集積物性」「ナノグリーン機能」の 3 分野、9 研究コアからなり、グリーンイノベーションの基礎と応用に関する研究の推進と、グローバルな視野と競争力を持つ若手研究者の育成、及びつくば地区の研究拠点となるべく活動を行っており、基礎的な研究成果の社会還元や国際研究協力にも努めてきた。10 月に改組により、エネルギー物質科学研究センター (TREMS) となり、活動はますます広範囲となった。11 月に TREMS スタートアップミーティングを開催し、各分野教員の交流を行った。学内行事との連携としては、昨年度と同様に「TGSW2017」において三つのシンポジウムを企画し、多くの参加者を集めた。3 月にはドイツの Duisburg-Essen 大学 Center for Nanointegration (CENIDE)、台湾の国立清華大学 (NTHU) とのジョイントシンポジウムを開催するなど、国際的な活動において今まで以上の活発な交流を行うことができた。平成 29 年度の総計としては、シンポジウム・ワークショップの主催・共催が 6 回、セミナー・講習会は (共催含む) 5 回となった。さらに教育的な観点から継続しているナノグリーン・サマースクールも例年通りに開催し、TIMS 教員・客員教員が講義及びポスター発表等の指導を行ってナノグリーン分野の若手研究者の育成を推進した。その他、多くの外部資金の獲得や受賞、国内外の学会での発表、国際一流誌における

多数の論文発表など、平成 29 年度も本センターの活動は極めて順調であり、筑波大学のプレゼンスの向上に少なからず貢献することができた。

第 17 回機能性分子シンポジウム(2017 大饗シンポジウム)

4 月 22 日(土)筑波大学内において、「第 17 回機能性分子シンポジウム」を開催した。機能性分子における最新研究について講師 2 名の招待講演を行った。また、学内の若手研究者による講演もおこなった。国内広域からの参加者で会は大盛況のうちに終えることができた。

日時:2017 年 4 月 22 日(土) 14:30~16:35

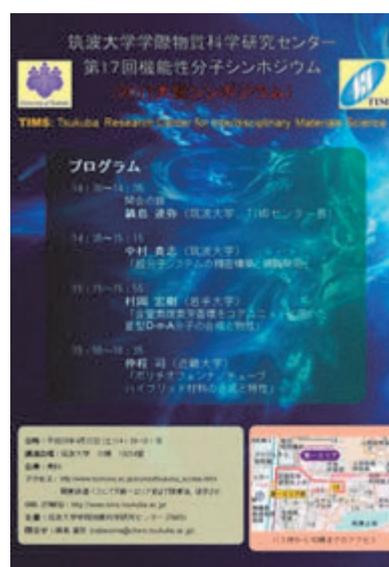
場所:筑波大学 1D 棟 1D204 室

出席者:38 名

招待講演者:村岡宏樹(岩手大学)

仲程 司(近畿大学)

中村貴志(筑波大学)



ノルウェー科学技術大学 来訪 ～物質・情報グループ意見交換会～

ノルウェー科学技術大学(NTNU)から Kari Melby 副学長他 15 名が来訪され、ベントン・キャロライン・ファーン副学長(国際担当)を表敬訪問された。今回の来訪は、物質科学・情報科学分野及び医学分野についての交流の可能性を模索することが目的であるため、席上では、北川博之システム情報工学研究科長及び鈴木博章数理物質科学研究科長から同研究科の紹介をされた。また、ノルウェー科学技術大学(NTNU) Melby 副学長からは大学概要プレゼンテーションが行われ、NTNU の国際的な取組みや先端的研究の紹介がされた。

分野別のグループに分かれての意見交換がされ、物質・情報系グループは、学際物質科学研究センター(TIMS)鍋島達弥センター長をはじめとする研究者と研究紹介や意見交換を行った。今回の来訪により、ノルウェー科学技術大学と本学の交流推進が期待される。

日時:2017 年 4 月 26 日(水) 14:45~15:30

場所:総合研究棟 B 棟 609-1

出席者:16 名

第 5 回 TIA ナノグリーン・サマースクール

8 月 29 日~31 日の日程で環境エネルギー分野のイノベーション、いわゆるグリーンイノベーションに貢献す

る人材育成教育プログラムとして、第5回TIAナノグリーン・サマースクールを開催した。対象はナノグリーンに興味を持つ大学院生及び社会人で、今年の受講者は22名であった。そのうち筑波大学以外からの参加者も3名で、幅広い研究交流の場となった。本サマースクールのプログラムの根幹は、ナノグリーンに関する基礎から先端研究までを含む講義である。TIMS 客員教員8名(産総研、NIMS、東京理科大、東大、KEK)が講義を担当し、太陽電池、燃料電池、先端計測についての講義を行った。また、TIA ナノエレクトロニクス・サマースクールとの合同ポスターセッション、レポート作成などを通じて、将来グリーンイノベーションに貢献する人材を育成するために実践的なトレーニングを課した。最終日には物質・材料研究機構(NIMS)の見学等もあり大学内にとどまらない有意義な教育プログラムとなった。

日時:2017年8月29日(火)~31日(木)
 主催:筑波大学大学院数理物質科学研究科
 筑波大学学際物質科学研究センター
 会場:筑波大学 総合研究棟B 他
 参加者:22名
 内訳:大学院生 21名
 学部生 1名
 表彰者:ポスター奨励賞 4名



○カリキュラム内容

有機デバイスⅠ 安田 剛(物質・材料研究機構)
 先端計測Ⅰ 雨宮健太(高エネルギー加速器研究機構)
 太陽光エネルギー交換 荒川裕則(東京理科大学)
 触媒Ⅱ 安田弘之(産業技術総合研究所)
 有機デバイスⅡ 松尾 豊(東京大学)
 先端計測Ⅱ 坂田修身(物質・材料研究機構)
 燃料電池Ⅰ 森 利之(物質・材料研究機構)
 先端計測Ⅲ 竹口雅樹(物質・材料研究機構)
 ナノエレ・ナノグリーン合同ポスターセッション
 施設見学 物質・材料研究機構
 ナノエレ・ナノグリーン合同交流会



Tsukuba Global Science Week 2017 (TGSW 2017)

2017年9月25日(月)~27日(水)につくば国際会議場エポカルにおいてTsukuba Global Science Week 2017 (TGSW 2017)が開催された。学際物質科学研究センターでは3名のTIMS 教員がオーガナイザーを務めるシンポジウム2件と、物質・材料研究機構と筑波大学の連携大学院による学生発表会を開催した。

Session 7-2: Student Poster Presentation on Materials Research
(NIMS Collaborative Doctoral Program & TIMS)

日時:2017年9月25日(月) 14:00~17:00

場所:つくば国際会議場エポカルつくば 会議室 202B

セッション・オーガナイザー:迫田和彰(NIMS)、鍋島達弥(TIMs)

・参加者総数: 約 100 名

発表者 約 50 名

その他の参加者 約 50 名

物質・材料工学専攻(専攻長:迫田和彰)と学際物質科学研究センター(センター長:鍋島達弥)の共催で、金属、磁性体、セラミックス、半導体、高分子、生体材料等、材料科学全般に関して大学院生による研究発表会を開催した。発表はすべて英語によるポスター発表で行った。発表総数は52件で、このうち約17件が学際物質科学研究センターからの発表、その他が物質・材料工学専攻(博士後期課程)および物質・材料工学コース(博士前期課程)からの発表であった。

物質・材料工学専攻は筑波大学と物質・材料研究機構の第2号連携による連携大学院で、所属する大学院生は物質・材料研究機構で研究指導を受けることから、普段の研究活動で筑波大学本体の大学院生と交流する機会が少ない。その点、今回の発表会は学生が互いに研究紹介を行う良い機会になった。また、英語によるポスター制作や発表練習の機会にもなり、有意義だった。

教員による採点で、全52件の中から優秀賞(Best Poster Award)3名と奨励賞(Excellent Poster Award)4名を選んで表彰状を贈呈した。このうち、優秀賞は3日目に開催のレセプションで、学長から手渡しで贈呈していただいた。

Session 8-1: TGSW-Interdisciplinary Workshop on Science and Patents2017

日時:2017年9月26日(水) 11:00~17:00

場所:つくば国際会議場エポカルつくば 会議室 101

セッション・オーガナイザー:後藤 博正

・参加者総数: 約 200 名

講演者 約 82 名

その他の参加者 約 100 名

本セッションは昨年に続く、2回目の開催となった。物理、化学、ロボット工学と情報科学、および生物学の分野から学際的な研究発表が行われた。

まず、特許と科学の2分野において口頭英語で発表がなされた。次にポスターの発表が行われた。オープニングに始まり、ヨーロッパの特許庁のキーブームス博士(MBA、ヨーロッパ特許弁護士)から挨拶があった。特許の部ではキーブームス博士よりヨーロッパの知的財産活動と国際化について講演があった。研究発表の部では82件の発表があった。主として筑波大学博士課程大学院生と首都大学東京、千葉工業大学からの研究発表がなされた。口頭発表の後、キーブームス博士より講評と、それに続いてクラシック音楽を背景にキーブームス博士より、Rafael Kiebooms賞、TGSW-IWP Materials Science・President・数理物質科学研究科物性・分子工学専攻長日野健一教授より閉会の辞が行われた。本会の司会進行、発表、閉会式とともに英語で行われた。筑波大学所属の世界各国からの留学生の幅広い科学分野からの発表があり、学際性および国際性の非常に高いものとなった。レセプションパーティーでは永田学長よりTGSW2017-IWP Prizeの表彰が行われた。当セッションでは特別にトロフィーを用意し、受賞者を応援した。学長からの表彰にはアシスタントとして、白手袋をまとい学長に賞状とトロフィーを渡す係りを任命し、厳粛な表彰式を備えた。本セッションでは効果的な発表研究を応援することができたと思える。

Session 2-2: Catalytic science and technology for energy innovation

日時:2017年9月27日(木) 9:30~16:50

場所:つくば国際会議場エポカルつくば 会議室 202A

セッション・オーガナイザー:中村潤児

・参加者総数: 約 50 名

講演者 約 8 名

その他の参加者 約 42 名

触媒はエネルギーイノベーションに深くかかわる物質である。現在燃料電池の普及が期待されているが、高価な白金触媒の使用が大きな課題である。本セッションでは、安価なカーボン触を用いた白金代替触媒の焦点を絞り、トップレベルの研究者を招きサイエンスとテクノロジーの両面から論議の展開をした。特に、Prof. Atanassov は世界的の著名な当該分野をリードする研究者である。他の講演者も皆線一線で活躍する研究者であり、研究内容は表面科学的基礎研究から燃料電池MEA応用研究までバランス良く繋がるように留意した。この機会を利用してカーボン触媒研究拠点形成の端緒にしようとする狙いもある。

エネルギー物質科学研究センター(TREMS)スタートアップミーティング

11月25日(土)、筑波大学総合研究棟 B0110 室において、「平成 29 年エネルギー科学研究センター (TREMS スタートアップミーティング)」を開催した。マテリアル分子設計部門、エネルギー物質部門、電気エネルギー制御部門の各部門の紹介と、各研究内容の紹介を行った。

日時:2017年11月25日(土)

13:30~17:00

場所:筑波大学総合研究棟

B0110 公開講義室

懇親会会場:本部棟 1F レストラン

主催:筑波大学エネルギー物質

科学研究センター

参加者:34名

内訳:一般 34名(外部6名)



2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology

(Workshop of Pre-Strategic Initiatives)

2018年3月8日(木)~9日(金)ドイツのDuisburg-Essen 大学Center for Nanointegration (CENIDE)、台湾の国立清華大学(NTHU)とのジョイントシンポジウムを筑波大学において開催した。このジョイントシンポジウムは国立清華大学とは2009年より、CENIDEとは2014年より三大学が持ち回りとなって開催する国際シンポジウムである。今回は、プレ戦略イニシアティブ「光と物質・生命科学のアンサンブルによる新現象の発掘と解明」のワークショップを兼ねて開催された。シンポジウムでは研究者・学生が積極的に研究交流を行い、すでに共同研究として顕著な成果を残す研究もある。さらにシンポジウムを契機とした若手研究者や大学院生の派遣による共同研究も進んでいる。三大学は今後もグローバルなナノテクネットワークを構築することを確認した。

日時: 2018 年 3 月 8 日(金)～9 日(土)

主催: シンポジウム

筑波大学エネルギー物質科学研究センター(TREMS)

デュースブルク・エッセン大学(CENIDE)

国立清華大学(NTHU)

ワークショップ

プレ戦略イニシアティブ「光と物質・生命科学のアンサンブルによる新現象の発掘と解明」

会場: 筑波大学総合研究棟B0110 公開講義室、他

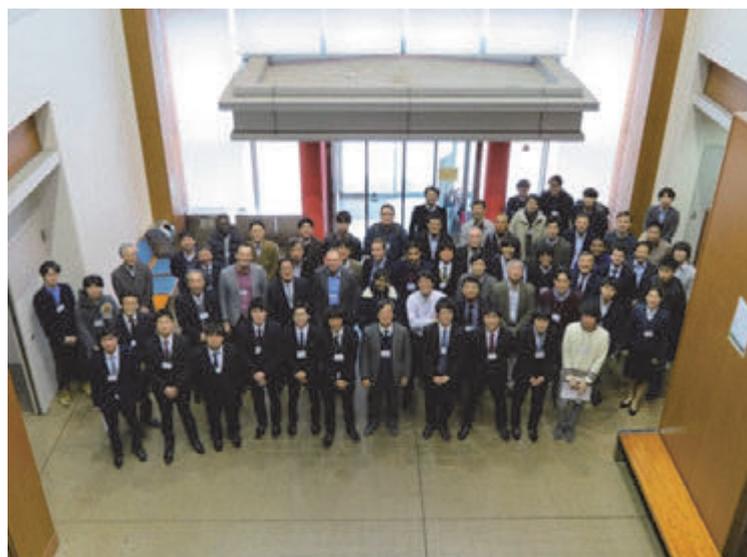
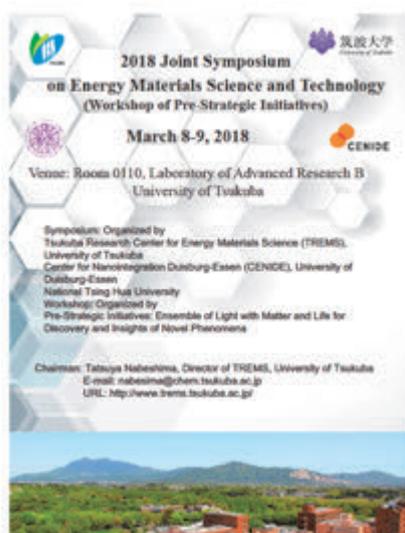
懇親会: 2018 年 3 月 8 日(金) OKURAFORNTIER HOTEL TSUKUBA (Café terrace CAMELLIA)

・シンポジウム参加人数: 98 名

内訳: 招待講演者(学外) 18 名

教員・一般研究者(学内招待講演者含む) 33 名

学生 47 名



3.4 TREMS が関わるその他の活動

- ・ 平成 28 年度採択プレ戦略イニシアティブ「光と物質・生命科学のアンサンブルによる新現象の発掘と解明」(拠点代表者: 山本洋平) 継続

新しい光技術の開発とそれらを用いた物質科学・生命科学研究への展開に対する期待が高まっており、また、物質・生命科学研究を行う上で最先端光計測技術の利用は必要不可欠となっている。本拠点では、最先端光技術を駆使して新しい物質科学・生命科学研究を展開し、未知なる現象の発掘と新原理の解明に向けた研究を推進する。また、さらなる光計測技術の開発を進め、世界オンリーワンの光物質科学研究拠点の形成を目指す。

- 平成 29 年度採択ブレ戦略イニシアティブ「次世代物質・デバイス戦略開発拠点」(拠点代表者:守友浩)
次世代物質・デバイス戦略開発拠点では、技術革新の源である機能物質を戦略的に開発することを目的とする。特に、(1)既存デバイスの飛躍的な高性能化、(2)新しい原理に基づくデバイスの創出、(3)新しい機能を示す生体物質等、の開発を目指す。
- 平成 29 年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」:最先端光材料・光テクノロジー国際拠点に向けた TIA 連携 (代表者:山本洋平)
光化学研究国際コンソーシアムの形成に向けた調査研究を実施する。筑波大学のソフト光機能材料研究と、NIMS・AIST による光物性評価・デバイスの構築、さらに企業や海外の研究機関との連携研究を推進し、産官学によるソフト光材料・光テクノロジー研究拠点形成に向けた活動を推進する。
- 平成 29 年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」:温度変化で発電するモバイル発電器 (研究代表者:守友浩)2016 年度から継続
二次電池技術を転用した新しいタイプの発電変換素子(熱発電セル)を提案する。このセルでは二次電池の正極と負極に熱起電力の符号の異なるレドックス物質を配置する。このセルは温度変化を電力に変換するため、モバイル発電等、様々な用途で活用できる。本デバイス実現に向けて、巨大熱発電起電力を示すレドックス材料の開発を行う。
- 平成 29 年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」:放射光 X 線解析に基づく革新的クリーンエネルギー材料の設計へ向けた調査研究 (丹羽秀治 研究代表者:細野英司(AIST))
二次電池を中心に、放射光分析を軸に理論的解析から材料合成までを包括した研究開発により、理論に基づいた新奇な開発指針、設計指針を擁立する。
- 平成 29 年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」:ダイヤモンド電子デバイス実用化のための調査研究:企業参画の加速 (上殿明良 研究代表者:山崎聡(AIST))2016 年度より継続
ダイヤモンド半導体は、絶縁破壊電界や熱伝導率などの素晴らしい特性を持ち、加えて、他の半導体にはないユニークな物性を持っている。この特性を使い、他半導体を凌駕する特性の電気デバイスを作製するため、共同研究体制を構築する。
- 平成 29 年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」:高性能発電材料の創成と量子ビームの解析 (西堀英治 研究代表者:神山崇(KEK))
高効率の熱電材料の創生には、基礎となる結晶構造、電気伝導率を向上させるための電子状態、熱伝導度を低下させるための格子ダイナミクス、の 3 つの理解と制御が鍵である。量子ビームを用いた微視的な物性評価を結びつけることにより、熱電材料基礎研究の推進力を高めスピード化を目指す。
- 平成 29 年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」:白金フリー燃料電池カーボン触媒イノベーション (中村潤児)
燃料電池自動車の本格普及には高価な白金を使用しない触媒開発が必須である。本計画では、白金フリーカーボン触媒の基礎研究から産業化まで繋ぐ国内初の大規模研究拠点の設立を目指す。

申請代表者の基礎研究成果を発展させ、さらに実用化へ結びつけるために、TIA5 研究機関を含む TIA の 5 研究機関を含む組織が協同して、戦略構築、産業界との交流、情報収集、探索実験、ワークショップ開催および大型プロジェクト申請を行う。

- 平成 29 年度筑波大学・ドイツ学術交流会 (DAAD) パートナーシップ・プログラム: グリーンテクノロジーのための日本 - ドイツ共同研究 - 太陽電池、パワーデバイス及び低消費電力デバイスの研究- (上殿明良)
本取り組みは、筑波大学と DAAD との共同イニシアティブで、DAAD および筑波大学が共同で出資提供を行うプログラムであり、個人およびグループの人的交流のための資金提供を通じて筑波大学とドイツの高等教育機関との長期的な協力関係の促進を目的としている。上殿が 9 月 3-8 日 ミュンヘン工科大学、10 月 14-20 日 ボーフム大学、ハレ大学、櫻井が 10 月 7-15 日 ハレ大学を訪問し、TUR および MLU の研究者と共同で陽電子消滅を用いた物性評価を実施し、成果を上げた。
- 筑波大学海外教育研究ユニット招致プログラム: オーフス大学材料結晶学センター研究室 (西堀英治)
スーパーグローバル大学創成支援の一環として海外の世界トップレベルの大学、研究所機関の外国人研究者を Principal Investigator (PI) および副 PI として招致し、本学内に世界トップレベルの教育機関拠点を実現することにより国際共同研究の強化、国際共著論文の増加、海外の大学または研究機関との教育および研究の連携強化等を図ることを目的としている。

4.研究活動報告

4.1 TREMS

(1) マテリアル分子設計部門	27
(2) エネルギー物質部門	61
(3) 電気エネルギー制御部門	80

4.2 TIMS

(1) 物質創成分野 ハイブリッド物質コア	97
(2) 物質創成分野 ナノ構造物性コア	100
(3) 物質創成分野 量子物性コア	108
(4) 集積物性分野 分子・物質変換コア	
(5) 集積物性分野 強相関機能コア	
(6) 集積物性分野 機能性高分子コア	112
(7) ナノグリーン機能分野 機能性カーボンコア	116
(8) ナノグリーン機能分野 エネルギー変換コア	120
(9) ナノグリーン機能分野 分子光機能コア	123

但し

- (4) 集積物性分野 分子・物質変換コア
- (5) 集積物性分野 強相関機能コア

については、それぞれ、

マテリアル分子設計部門 鍋島達弥

エネルギー物質部門 守友浩および西堀英治

で記載

4.1 TREMS

(1) マテリアル分子設計部門

中村潤児, 近藤剛弘

<研究成果>

マテリアル分子設計部門では燃料電池の白金触媒を代替する新規炭素材料の開発や、二酸化炭素からメタノールへの転換を実現する高活性触媒の開発及び触媒反応メカニズムの解明に向けた研究を中心に行っています。また、これと合わせて、ホウ素を用いた新たな二次元物質の開発や新しい精密分光測定法の開発などにも取り組んでいます。ここでは、平成 29 年度に論文報告を行った窒素ドーブ炭素触媒の新規ボトムアップ合成に関する内容と、新しいホウ素の二次元材料の生成に関する内容について報告します。

【 1 】白金を代替する窒素ドーブ炭素触媒の新規ボトムアップ合成

窒素ドーブ炭素材料が燃料電池のカソード電極で必要となる酸素還元反応 (ORR, $4\text{H}^+ + \text{O}_2 + 4\text{e}^- \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$) に対する触媒として機能することが 2009 年に報告されて以降、現在の白金を代替する安価な金属フリーの触媒材料として注目を浴び、更なる性能向上に向けた触媒開発が世界的な競争となっています。しかしながら、炭素材料にドーブされている窒素種には様々な種類の窒素が存在しており、どのような窒素種を導入することが最も大事であるか、即ち触媒活性点がどのような窒素によって形成されているかが明らかとはなっておりませんでした。特に、炭素と結合を二つ持つピリジン型窒素と、炭素と結合を三つ持つグラファイト型窒素のどちらの窒素種が活性点を形成して

いるかが明らかとなっておらず、論争となっていました。2016 年に我々はモデル触媒と実触媒を用いた精密な検討により、ピリジン型窒素が炭素材料に活性点を形成しているということ特定し *Science* 誌に報告いたしました。これは、ピリジン型窒素の導入が重要であるという、金属フリーの窒素ドーブ炭素触媒の設計指針が示されたことを意味しています。我々はこの設計指針を基に窒素ドーブ炭素触媒をボトムアップ的に合成する方法を新たに構築いたしました。ここではその成果について簡単に報告いたします。

本研究で行ったボトムアップ合成の概念図を図 1(a)に示します。我々はピリジン型窒素を保有する芳香族炭素分子に着目し、これを電気伝導性のある炭素材料の表面に密に配列させることにより活性点が高密度に配列した新規触媒を構築することを考えました。この構想を実現するため、本研究ではピリジン型窒素を含有する分子としてジベンゾアクリジン (dibenz[a,c] acridine, DA) 分子に着目し、これを高配向性熱分解グラファイト (HOPG) に吸着させてモデル触媒の作成とその触媒機能の評価を試みました。

室温・大気圧下でジクロロメタンと混合させた DA 分子を HOPG 表面に滴下させて乾燥させた後に行った X 線光電子分光 (XPS) の結果を図 1(b)に示します。N1s 内殻 XPS ピークとして 398.5 eV のピークが現れています。これは DA 分子がピリジン型窒素構造を保ったまま HOPG に吸着していることを示しています。また、XPS 測定において帯電が見られていないことから DA 分子が電気的な接触の良い状態で HOPG 表面に吸着していることも示しています。

DA 分子を吸着させた HOPG 表面 (DA/HOPG) を走査トンネル顕微鏡 (STM) により原子分解能で観察した結果を図 2(a-d)に示します。グラファイト表面の炭素原子よりも 6~8 倍周期の大きい規則的な輝点の配列構造が観測されました。図 2a より 46 nm 四方に数個の欠陥しかないこともわかります。吸着構造を詳細に調べるため、図 2c をフーリエ変換した結果を図 2e に示します。共に示してある白×

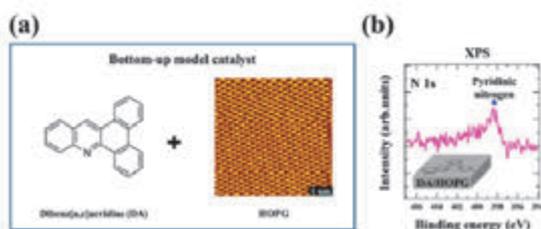


図 1 (a)ボトムアップ合成の概念図：窒素含有分子をグラファイト表面に規則的に吸着させる、(b)グラファイトにジベンゾアクリジン (DA) 分子を吸着させた表面の X 線光電子分光スペクトル、DA 分子に存在するピリジン型窒素が状態を変化させずに保たれていることが示されている。

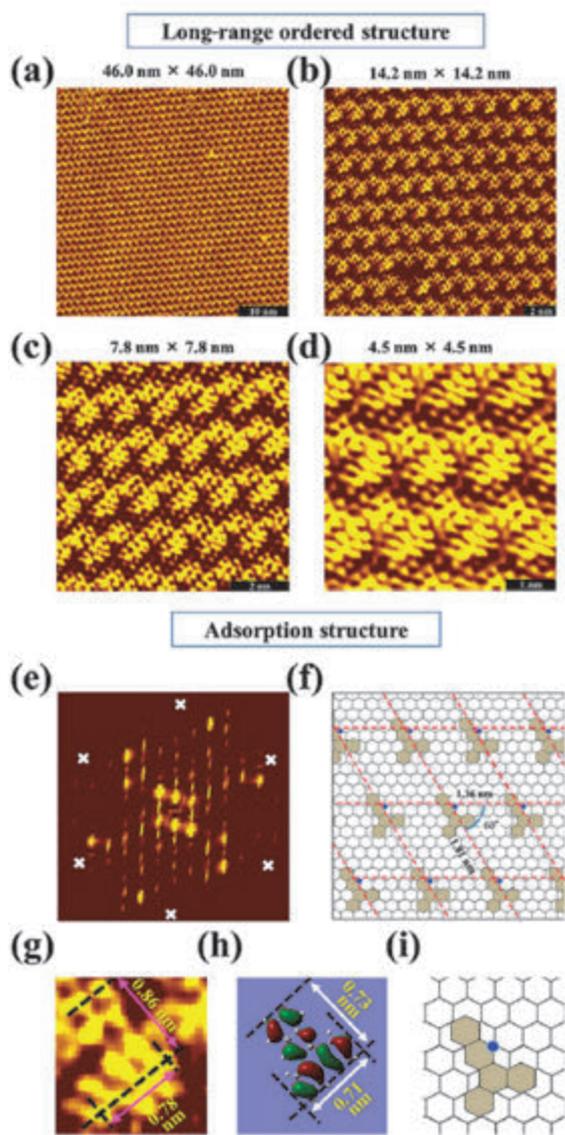


図2 (a-d)DA/HOPGのSTM像(バイアス電圧-95 meV、トンネル電流3.1 nA)、(e)STM像cのフーリエ変換像、(f)DA/HOPGの吸着モデル、(g)HOPG上のDA分子を拡大したSTM像、(h)ガウシアンで計算したDA分子のHOMOの空間分布、(i)HOPGのDA分子の吸着モデルを拡大した像

印は下地のグラファイトをフーリエ変換した結果となっています。図の解析により下地のグラファイトの炭素原子の周期に対して $\sqrt{31} \times \sqrt{54}$ 倍の周期で吸着DA分子が吸着しており、グラファイト格子と同じ方位を保ちながら吸着していることがわかりました。具体的に得られた吸着構造を図2fに示します。DA分子がグラファイト表面の局所的な電子状態分布の

違いの影響を受けながら配列していることを示唆しています。

DA分子1つを拡大したSTM像を図2dに示します。複数の輝点が見られます。これらは図2hに示したDA分子の最高占有準位(HOMO)軌道の計算結果と形や個数や距離が比較的良い一致をしていることから、DA分子のHOMO軌道を反映して現れた輝点であると考えられます。この結果はDA分子が図2iに示すようにグラファイト表面と分子軸を平行にして吸着していることを示しています。

次にDA分子がグラファイト表面において原子1層だけで吸着しているのか、多層で吸着しているのかを明らかにするためにSTMとXPSの測定結果を基に見積もられるDA分子の量の比較を行いました。STMは最表面のみの分子を見ているのに対してXPSでは表面数層の情報を観測していますのでXPSとSTMの結果を比較することでDA分子層の厚みがわかります。XPSで脱出深さや測定感度などの補正を行って得られたN1sの原子数密度は1.5 at%であり、STM像から得られた1.2 at%と良い一致を示しました。この結果より、DA分子は分子一層でグラファイト表面に吸着していることがわかりました。すなわちグラファイト表面に高分散に且つ3次元的な凝集をすることなくDA分子が吸着していることが明らかとなりました。

このようにして得られたDA/HOPGモデル触媒の触媒活性をORR測定(0.1 MLの硫酸中、室温)により調べた結果を図3(a)に示します。DAの吸着量が増加するに従い、電流密度の増加が多くなっていることがわかります。図3(b)に示すように、0.3、0.2、0.1(V vs.RHE)における電流密度が窒素量の増加とともに線形に増加しており、DA分子が吸着することでORR活性点が形成していることが明らかとなりました。DA分子1つにはピリジン型窒素が1つ存在しますので(図1)、ピリジン型窒素1つあたりでどのくらいORR活性があるかを見積もることができます。図3の結果を基に見積もった結果、DA/HOPGでは $0.08 \text{ e s}^{-1} \text{ pyriN}^{-1}$ であることがわかりました。これは、我々が以

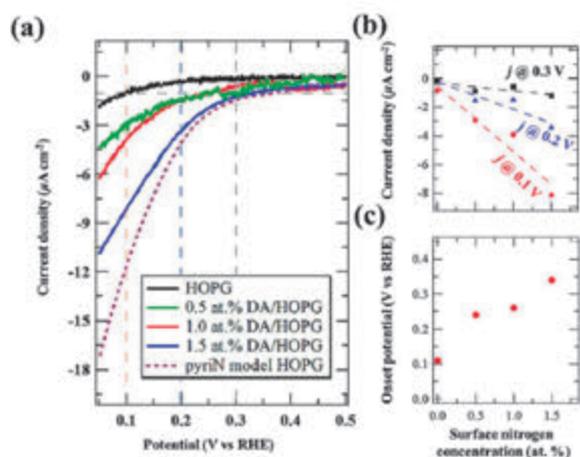


図3 (a) DA/HOPG の ORR 測定結果 (DA 分子吸着量依存性)、(b) 電流密度(j)の窒素濃度依存性、(c) ORR 開始電位 (V vs. RHE@ -1μ A/cm) の窒素濃度依存性

前モデル触媒や実触媒で報告している $0.07-0.14 \text{ e s}^{-1} \text{ pyriN}^{-1}$ と同程度であり、今回調製した DA/HOPG がピリジン型窒素を保有した窒素ドーピング炭素触媒として機能しており、吸着している DA 分子それぞれが触媒活性を発現していることが示されました。

次に DA/HOPG の熱的な安定性を調べるため、DA/HOPG を真空中で加熱しながら XPS 測定を行いました(図 4a)。この結果、 398.5 eV に現れる DA 分子のピリジン型窒素に由来する $\text{N}1\text{s}$ ピークの形状と強度は 400 K 付近まで変化をしておらず、その後 700 K までの加熱によりピークの形状は保持されたまま強度のみが徐々に減少していくということがわかりました(図 4a,b)。これは DA 分子が HOPG から脱離する温度が 400 K 以上であり、脱離をする際には分解をせずに分子構造を保ったまま脱離することを示しています。現行の燃料電池の動作温度が $353-373 \text{ K}$ ですので、DA/HOPG は十分な熱的安定性を保持しているといえます。

我々はこのように DA 分子が比較的安定に HOPG 上で吸着している要因が DA 分子と HOPG との間に働く π -CH 相互作用によるものであると考えています。 π -CH 相互作用は正に帯電した CH 基の水素と非局在した π 電子との間に働くクーロン相互作用に由来する

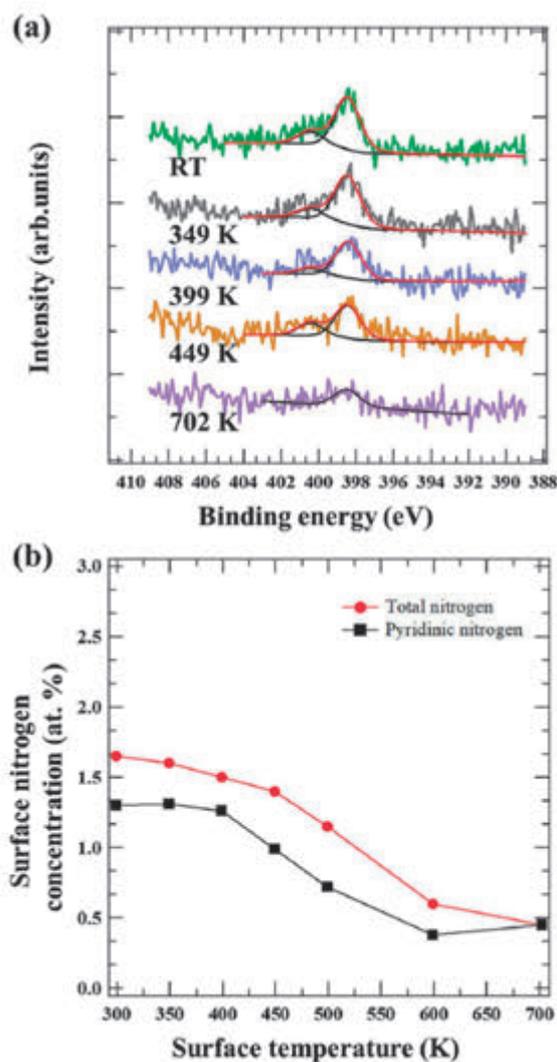


図4 (a) DA/HOPG の XPS 測定結果 (温度依存性)、(b) XPS で見積もられた窒素量およびピリジン型窒素量の温度依存性

相互作用で、理論計算では 2 kcal/mol 程度であると報告があります。HOPG との相互作用を考えた場合、小さい水素原子は強い正の静電場をグラファイトとの間に構築し、この結果、 π 電子との間に相互作用が発現していることが考えられます。例えば、HOPG に吸着した Ovalene 分子は 490 K で脱離することが知られているため、およそ 29 kcal/mol の吸着エネルギーを持っていると概算できますが、これは Ovalene 分子の 14 個の CH 基と π 電子との間の π -CH 相互作用により構成されていると理解することができるのです。同様に考えますと、DA 分子は 13 個の CH 基がありますので 26

kcal/mol 程度の吸着エネルギーであると見積もることができます。これは、図 4 で見られた、400K までの熱的安定性と対応する結果となっています。このように π -CH 相互作用が最大限に発揮できているのは、図 2 の STM 観測で明らかとなったように DA 分子がグラファイト表面と平行に吸着しているためと考えることができます。

本研究により、今後の燃料電池白金代替炭素触媒の設計に向けて、次の 3 つの点が明らかとなりました。1) グラフェンシートのような広い表面積を持った電気伝導性のある担体に活性なピリジン型窒素を有する分子を高密度で配列させることにより触媒をボトムアップ的に設計 (加熱をせずに簡便に設計) することが可能、2) 局所構造の異なるピリジン型窒素を有する芳香族炭素分子を用い、本研究と同様にモデル触媒を作成して触媒活性を調べることにより、ピリジン型窒素周りの最適な局所構造を特定することが可能、3) モデル触媒を用いることで ORR の反応メカニズムを明らかにすることが可能。我々は今後、これらの知見を基にボトムアップ的に白金代替触媒を設計していく予定です。

【 2 】新しいシート状物質「ホウ化水素シート (ボロファン)」の誕生～優れた水素吸蔵性能を有する新材料～

炭素原子一層からなるグラフェンに代表されるような、原子一層から数層の非常に薄い厚さで構成される二次元物質と呼ばれる物質群は、通常の三次元物質に比べて表面積が大きく、機械的柔軟性があり、特異な電子状態を持っている場合が多く、新しい電子材料や触媒材料の候補として期待が高まっています。また、種類の異なる二次元物質を組み合わせると、さらなる新しい性質が発現することが見いだされており、二次元物質は様々な用途に応用できる大きな可能性を持った新しい物質であり、世界中で活発に研究が行われてきました。そんな中、ホウ素と水素のみで構成される二次元物質 (ボロファン) について理論的な研究が行われ、グラフェンを凌駕する優れた電子材料特性や水素吸蔵特性を有するという予想が、2011 年と

2016 年に報告されました。ホウ素を含む二次元物質としては、2015 年に、ホウ素のみで構成される二次元物質 (ボロフェン) が、単結晶の銀の表面上への真空蒸着で生成できることが報告されてはいましたが、ボロファンの方は理論予測のみにとどまっていました。

本研究グループは、ボロファンを作成するための母材として二ホウ化マグネシウム (MgB_2) という材料に着目しました。 MgB_2 は 2001 年に超伝導であることが見出されて以降、超伝導材料としての研究が盛んに行われています。ホウ素は物質内に於いて屈強な sp^2 混成軌道と呼ばれる共有結合をした平面構造を構築しています。このホウ素のハニカム構造骨格が負の電荷を帯び、マグネシウムの正のイオンがホウ素骨格間に存在している物質が MgB_2 です。我々はこの MgB_2 のマグネシウムの正イオンを水素の正イオン (プロトン) と交換し、層状の 3 次元構造をバラバラなシート構造にすることで、これまでに誰も実現したことがなかったホウ化水素シートの生成に成功しました。

1. ホウ化水素シートの生成

本研究で行ったホウ化水素シートの生成手順を図 5A に模式的に示します。大気圧の窒素雰囲気中で、 MgB_2 とイオン交換樹脂を室温のメタノールまたはアセトニトリル中で混ぜたのち、沈殿物を取り除いて乾燥させると、平均収率 42.3% で黄色い粉末状のホウ化水素シートが得られることがわかりました。この粉末を走査型電子顕微鏡 (SEM) で観察すると、しわのあるシート状の構造であることがわかります (図 5B)。スタート物質に含まれるマグネシウム (Mg) はイオン交換の過程でイオン交換樹脂に回収されているため、このシート状物質中に Mg は存在していません。このことは図 5C に示した X 線光電子分光 (XPS) の測定結果からわかります。スタート物質である MgB_2 (図 5C 上) とイオン交換後に得られたシート状物質 (図 5C 下) の XPS 測定結果を比較すると、イオン交換後には Mg が存在していないため、Mg に由来する光電子ピークが消失しています。また、188 eV 付近にあるホウ素 (B) の光電子ピークは、B が負に帯電していること

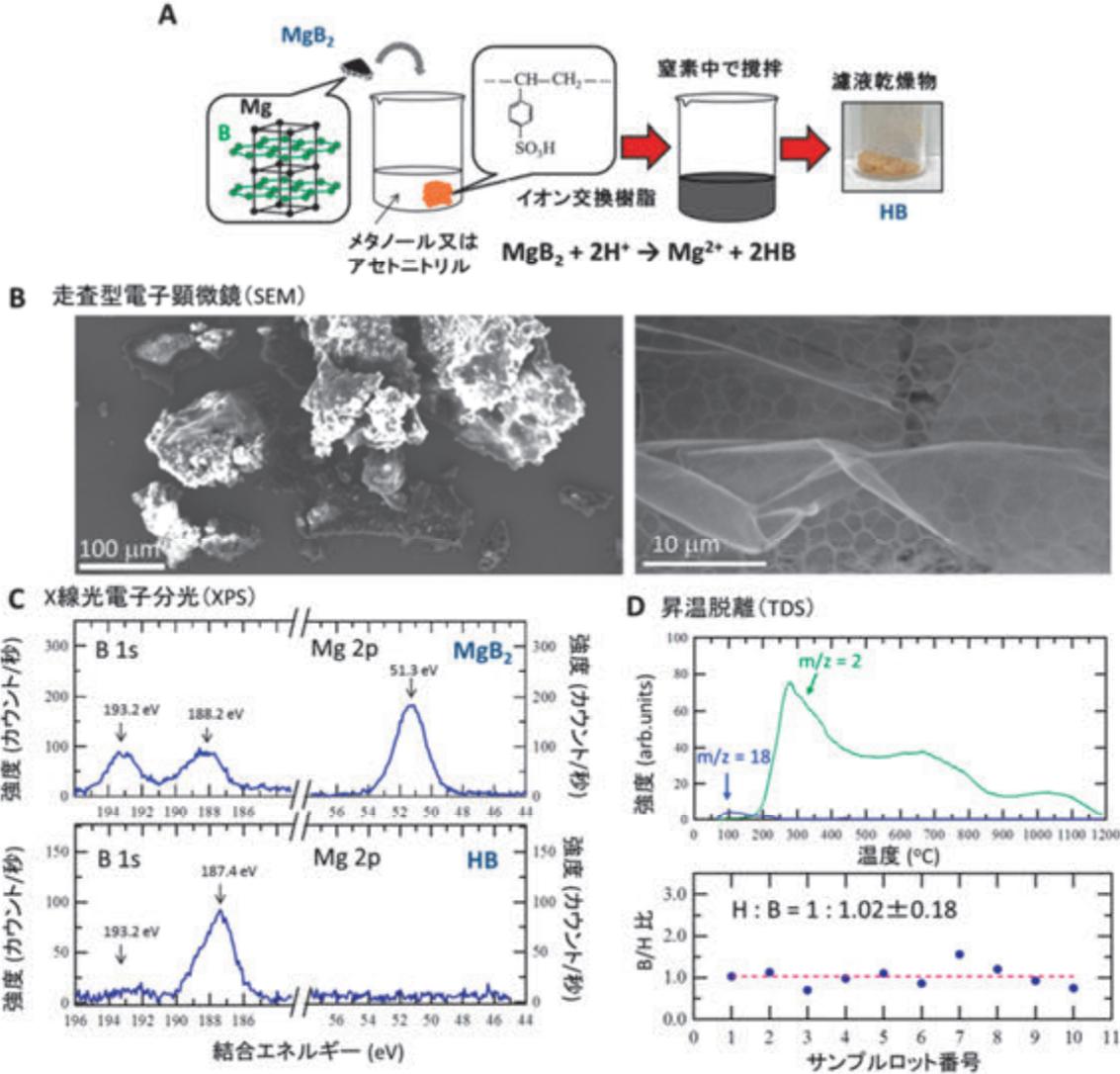


図 5 ホウ化水素(HB)シートに関する(A)生成方法の模式図、(B)走査型電子顕微鏡像、(C)X線光電子分光スペクトル、(D)昇温脱離測定結果と算出した B/H 比

を示すもので、イオン交換後もこのピークが支配的です。すなわち、イオン交換後の粉末試料では正の Mg イオンが存在していないにもかかわらず、B が負に帯電したままになっています。これは、正の Mg イオンが、XPS では観測できないプロトンとイオン交換していることを示唆しています。なお、スタート物質に含まれる 193.2 eV の光電子ピークは、MgB₂ 表面に存在している酸化物 (不純物) に由来しており、試料調製時に沈殿物となり分離される成分に由来するピークです。さらに、イオン交換後の試料に存在する水素の量を調べるために、真空中で試料を加熱し、この際に放出するガス

を分析した結果 (昇温脱離測定, TDS)、図 5D 上に示すように、200°C から 1200°C までの幅広い範囲で水素分子が多量に放出されることがわかりました。また、別々に作成した複数の試料に対して、放出される水素分子の総量と、加熱前の試料の重さから試料の組成比をそれぞれ算出したところ、どの試料も、比較的再現性良く、H : B がおよそ 1 : 1 であることがわかりました (図 5D 下)。以上の結果から、MgB₂ + 2H⁺ → Mg²⁺ + 2HB という反応式で示されるイオン交換反応により、H : B が 1:1 の組成比であるホウ化水素シートが形成することが明らかとなりました。

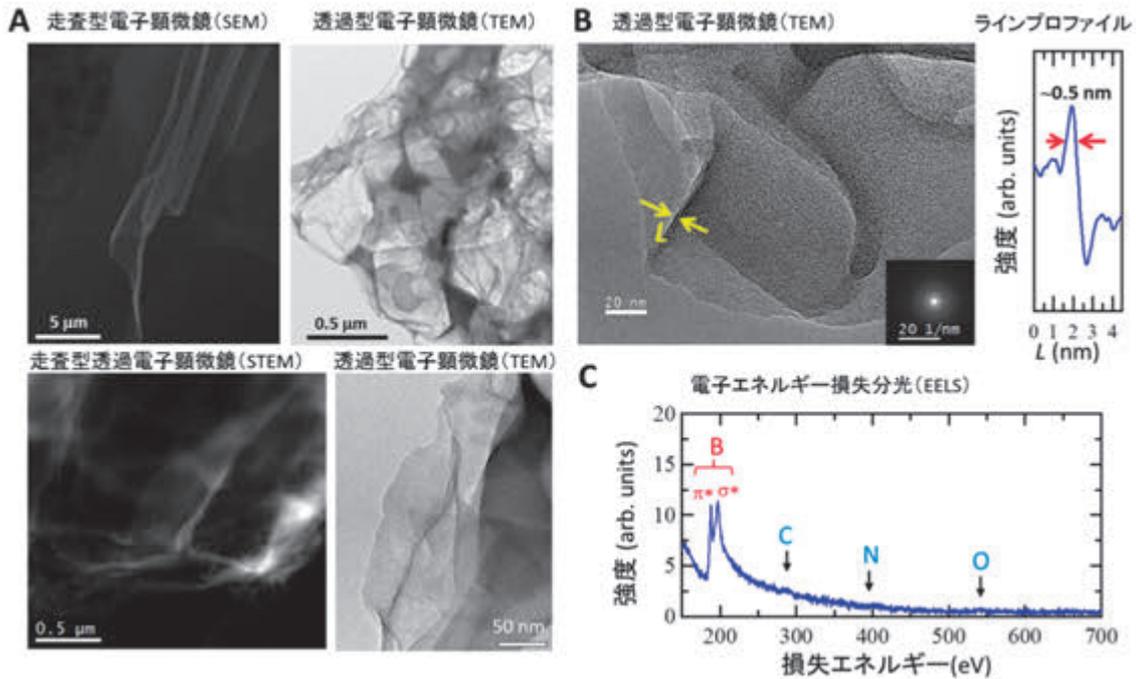


図 6 ホウ化水素(HB)シートの(A)走査型電子顕微鏡像、透過型電子顕微鏡像、および走査型透過電子顕微鏡像、(B)透過電子顕微鏡像とラインプロファイル、(C)電子エネルギー損失分光スペクトル

興味深いことに、1923 年～1924 年および 1959 年に発表された研究成果に、本研究と類似の物質が生成されていることを示す記述があります。水素とホウ素で構成されるガスが特定の条件下で、水素とホウ素の組成比がおよそ 1 : 1 の黄色い固体物質になることが報告されていますが、水素の放出温度が 200°C よりも低く、また後述する水素の結合状態が本研究とは異なるため、これらはホウ化水素シートとは別の物質であると考えられます。

2. ホウ化水素シートの構造

ホウ化水素シートの構造をより詳細に調べるために、透過型電子顕微鏡 (TEM) で観察しました (図 6A)。シート断面のプロファイル (図 6B) からシートの厚さが高々数原子層程度であることがわかりました。また、TEM 観察中に電子エネルギー損失分光 (EELS) という測定を行った結果 (図 6C)、シートを構成している B に由来するピークが 190–200 eV 付近に 2 つに分かれて鋭く現れており、炭素 (C) や窒素 (N) や酸素 (O) に由来するピークは

現れていないことから、このシートが確かに B で構成されていることがわかりました。B の 2 つのピークは π^* と σ^* と呼ばれるピークであり、これらの存在は、ホウ化水素シート中の B が、 sp^2 混成軌道と呼ばれる平面構造を構成する共有結合性の軌道で結合していることを意味します。これは図 5A に示した MgB_2 中の B のハニカム構造の平面状の骨格構造が、イオン交換後のホウ化水素シートにおいても保たれて存在していることを示しています。

また、ホウ化水素シートに対して電子線回折を行うと、規則構造に起因するような回折スポットは観測されず (図 6B)、また X 線回折では幅の広いピークだけが観測されました (図 7B)。これらの結果はホウ化水素シートの構造に長距離秩序が無いことを示唆しています。しかしながら、ホウ素と水素のように軽い原子で構成される物質の場合、電子線回折を測定する際の電子線の照射で試料の構造が壊れて、本来存在するはずの長距離秩序構造が観測できていない可能性があるほか、グラフェンシートのような柔軟性のある二次元結晶の場合には X

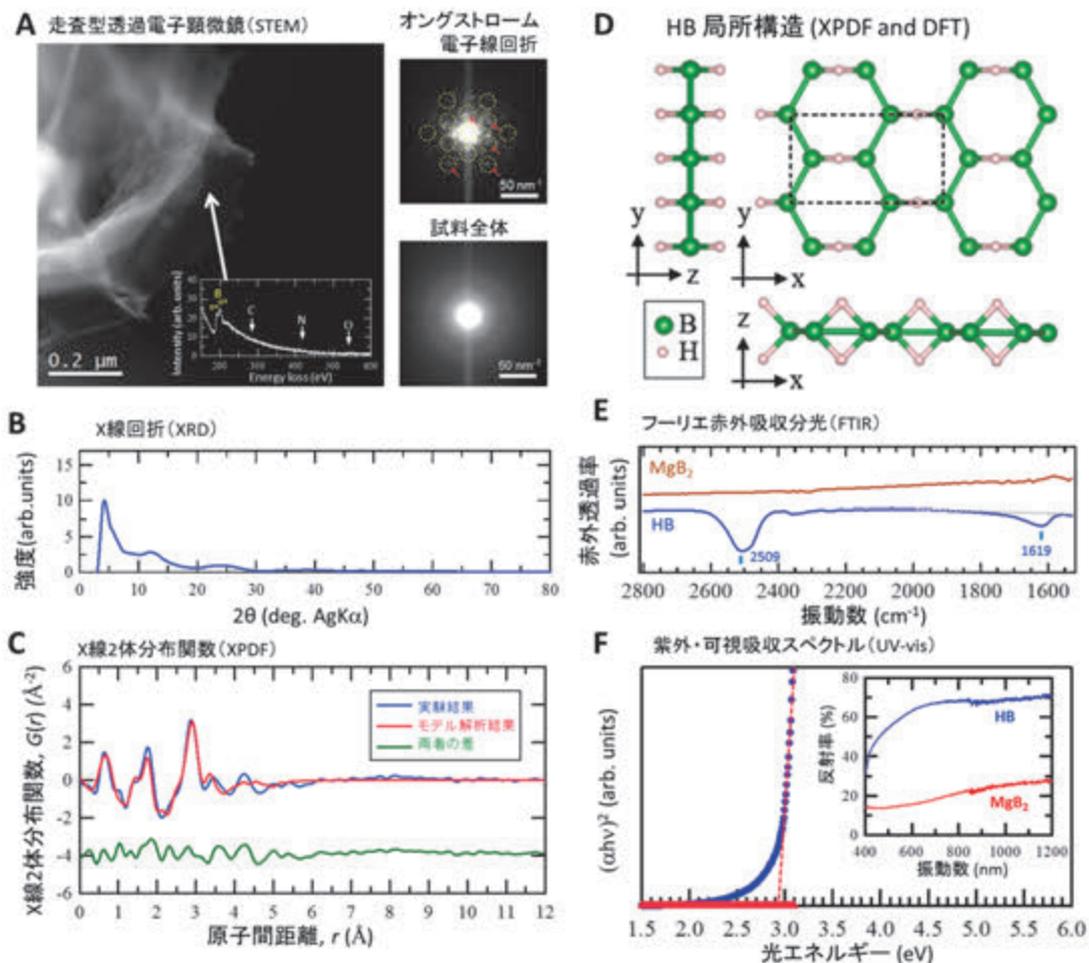


図7 ホウ化水素(HB)シートの(A)走査型透過電子顕微鏡像、電子線回折像、(B)X線回折、(C)X線2体分布関数、(D)局所構造モデル、(E)フーリエ赤外吸収分光スペクトル、(F)紫外・可視吸収スペクトル

線回折でピークが現れない事例が知られていることなどから、これらの結果だけでは、長距離秩序が無いと結論づけることはできません。そこで、1 ナノメートルほどの電子線スポットにおいて 0.1 ピコアンペア程度の低強度の電子ビームを用い、微小領域の電子線回折の観察を試みました。この結果、わずかではありますが、局所的な結晶構造の回折に由来する信号が観察されました (図 7A 右上)。これは試料全体で取得した電子線回折像 (図 7A 右下) には見られない信号であり、本研究で得られたホウ化水素シートは本質的に、局所的には短距離秩序を持つが、長距離秩序を持たない構造であることがわかりました。

3. ホウ化水素シートの局所構造

次に、ホウ化水素シートはどのような局所構造で構成された短距離秩序を有しているのかを明らかにするために、X線回折結果 (図 7B) をフーリエ変換して得られる X線二体分布関数 (XPDF) の解析を行いました。実験的に得られた XPDF (図 7C) と、モデル局所構造でシミュレートした XPDF (図 7D) を比較すると、両者はよく一致しており、ホウ化水素シートの局所構造が図 7D のような構造であることが示されました。なお、理論予測で報告されている他の構造や、様々な種類のホウ素と水素のガス (ボラン) やサイズの小さい既存の水素化ホウ素分子構造でも比較を行いましたがいずれも実験結果を再現できず、図 7D の構造の

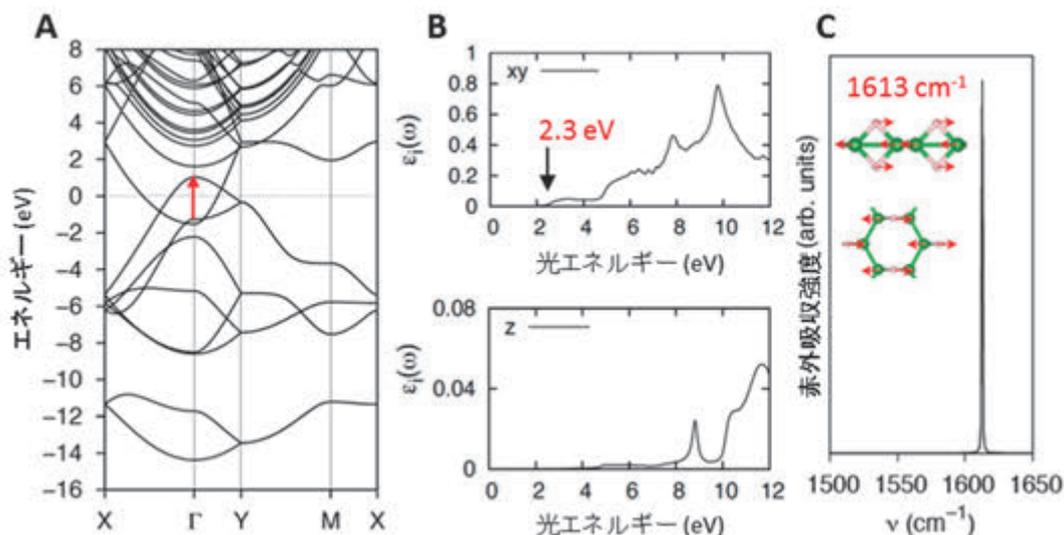


図 8 密度汎関数法で計算した図 7D で示すホウ化水素シートモデル構造の(A)バンド図、(B)光吸収スペクトル、(C)赤外吸収スペクトル

みが、良い一致を示しました。図 7D の構造はスタート物質の MgB_2 に含まれるハニカム構造のホウ素の骨格が残っており、イオン交換の観点で対応が取れており、また図 6C の EELS が示している B の平面構造の存在と対応しています。また、この構造に存在する B-H-B 結合部分の伸縮振動が、フーリエ赤外吸収分光 (FTIR) で 1619 cm^{-1} に観測されており、密度汎関数法 (DFT) により計算したこの構造における B-H-B の振動吸収ピーク (図 8C) 1613 cm^{-1} と良い一致を示しています。さらに紫外・可視吸収スペクトルで見られた 2.9 eV の光吸収や XPS で得られた結合エネルギーも、この構造に対する DFT 計算の値と一致します。図 7D のモデル構造から予想される電子線回折スポットが図 7A の右上で観測された回折スポット位置と一致することも分かりました。以上の結果から、本研究で得られたホウ化水素シートは局所構造として図 7D に示すような構造を有していることがわかりました。

長距離秩序が無く、短距離秩序のみがある理由は、イオン交換反応が起こる際のイオン交換サイトのランダム性で説明できます。図 7D では、H の位置は規則正しく特定の B と B の間を橋掛けるように位置して結合していますが、実際にイオン交換が起こる際は MgB_2 の端や表面から一斉に反応が進行していると考えら

れるため、特定の方向の B と B の間にだけ H が結合するのではなく、様々な B-B 間に全体の電荷バランスが保たれるように結合します。いったん B-H-B 結合が形成されると、その部分の B-B 間距離が変化するので、H の結合位置が不規則であれば試料には長距離秩序が無い状態となります。このため、本研究で得られたホウ化水素シートは B の骨格構造が保たれており、局所構造を有しながらも全体としては長距離秩序がない、特異な構造をしていると考えられます。

まとめ

本研究で生成したホウ化水素シートはプロトンを保持しており、 $200 \text{ }^\circ\text{C}$ から $1200 \text{ }^\circ\text{C}$ の幅広い温度範囲で水素分子を放出するため、理論予測されていた電子材料や水素吸蔵材料としての応用以外にも、固体燃料や固体酸触媒として応用できる可能性があります。今後、既存材料との組み合わせにより資源・エネルギー・環境に関する様々な問題を解決する新しい材料として有望であるほか、他の二ホウ化金属や得られたホウ化水素シートをスタート物質として用いて別のイオン交換を行うことにより、別の新しい二次元物質群の生成も期待されます。

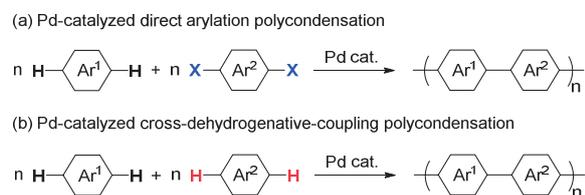
神原貴樹, 桑原純平

<研究成果>

当研究室では、環境・省エネルギー関連の電子・光機能物質の創製と応用を共通のターゲットとして研究を行っている。本年度は新しい機能性高分子・分子材料の設計と合成技術の開発に関する研究を中心に行った。

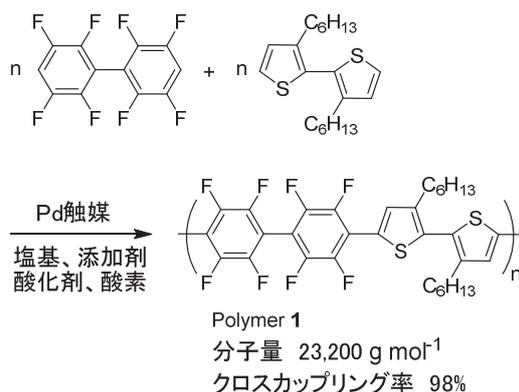
【1】脱水素型クロスカップリング反応を利用した高分子半導体の合成

π 共役高分子は高分子半導体として機能することから、近年、有機 EL 素子や有機薄膜太陽電池などの光電子デバイスへの応用が期待され、国内外で広範な研究が進められている。我々は近年、芳香族化合物の C-H 結合を直接反応点として利用する炭素-炭素結合生成反応に注目し、 π 共役高分子を効率よく合成する手法の開発に取り組んでいる。本年度は、本年度は、2 種類の芳香族モノマーの脱水素型クロスカップリング反応を利用して、高分子半導体を得る新しい重合法の開発を行った (Scheme 1)。



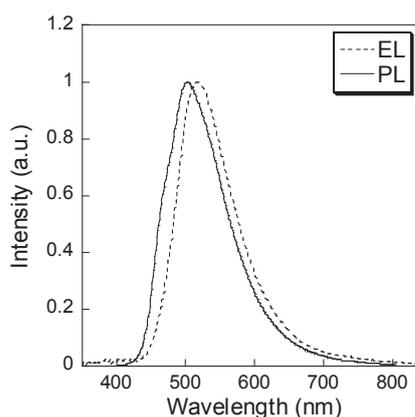
Scheme 1 (a)直接的アリール化重合と(b)脱水素型クロスカップリング重合

対象モノマーとして 2,2',3,3',5,5',6,6'-octafluorobiphenyl と 3,3'-dihexyl-2,2'-bithiophene を選択して重合を連続的に行ったところ、目的のポリマー (Polymer 1)を得ることができた (Scheme 2)。重合条件の検討の結果、触媒系に塩基を加えることで、クロスカップリング反応が効率よく進行するようになり、ホモカップリング反応が抑制できることが分かった。さらに、酸素を最終酸化剤として利用することで、酸化剤を効率よくリサイクルできるとともに、主な副生成物は無害な水となり、試薬の使用量と廃棄物が大幅に削減できた。得られたポリマーは有機 EL 素子の発光材料として機能することも確認し、この合成法が高分子半導体の合成技術として利用可能であることを実証した (図 1)。



Scheme 2 脱水素型クロスカップリングによる Polymer 1 の合成

(a)



(b)



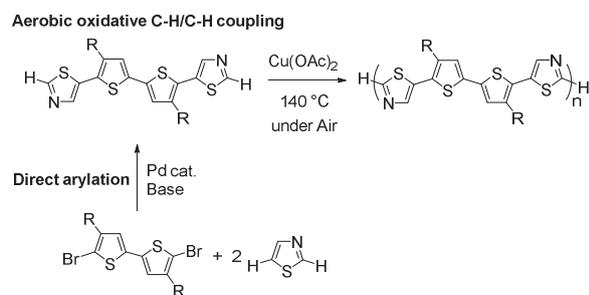
図 1 (a) Polymer 1 薄膜の蛍光スペクトルと EL 素子の発光スペクトル。(b) 実際に実装した有機 EL 素子の動作写真。

この手法では、2種類の芳香族モノマーに、有機金属、ハロゲンのいずれの官能基も導入する必

要がない。すなわち、事前のモノマー合成の工程を削減できることから、従来法よりもさらに省資源・低環境負荷な高分子半導体の合成技術として期待できる。

【 2 】酸素酸化重合を用いた高分子半導体の合成

安価な銅触媒を用いた酸素酸化カップリング重合を開発した (Scheme 3)。この反応は、酸化剤として空気中の酸素を用いた C-H/C-H 結合間のホモカップリングを利用しているため、副生成物が水のみになる。そのため、簡便かつ低環境負荷な合成手法となる。さらに、モノマー合成にも C-H 結合の直接アリール化反応を利用することで、様々な誘導体を短工程で合成することができる。この方法論では、Pd 触媒がチアゾールの 5 位の C-H 結合のカップリングに有効であり、銅触媒が 2 位の C-H 結合のカップリングに適していることを明らかにしており、材料合成の手法として利用できることを明らかにした。



Scheme 3 銅触媒による酸素酸化重合

【 3 】外部環境にตอบสนองして発光色が変化する発光性金属錯体

白金錯体は高い発光効率を有するため、有機 EL の材料や発光センサーとしての利用が期待されている。平面性の高い白金錯体は集積しやすく、集積に伴って大きな発光特性の変化がもたらされる。本研究では、分子間の相互作用を利用して溶液状態における集積構造および発光特性の制御を目指した。それに向け、水結合を形成する

アミド部位と低極性溶媒との相溶性の高いアルキル鎖を導入した白金錯体を設計、合成した (図 2)。水素結合を形成しないカウンターアニオンを有する $\text{Pt}\cdot\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4$ では通常の色発光を示すのに対し、アミドと水素結合を形成するカウンターアニオン (Cl^-) を有する $\text{Pt}\cdot\text{Cl}$ は黄色発光を示した。これは、 $\text{Pt}\cdot\text{Cl}$ が溶液中において Cl^- を介した水素結合によって連結された集合構造に由来していることを明らかにした。 $\text{Pt}\cdot\text{Cl}$ をヘキサンに溶解するとさらに長波長の発光を示した。これは低極性溶媒であるヘキサンの疎溶媒効果によって白金錯体が凝集しているためである。このように、同一の発光部位でありながら、カウンターアニオンや溶媒などの外部環境にตอบสนองして集積構造と発光色を制御することが可能となった。

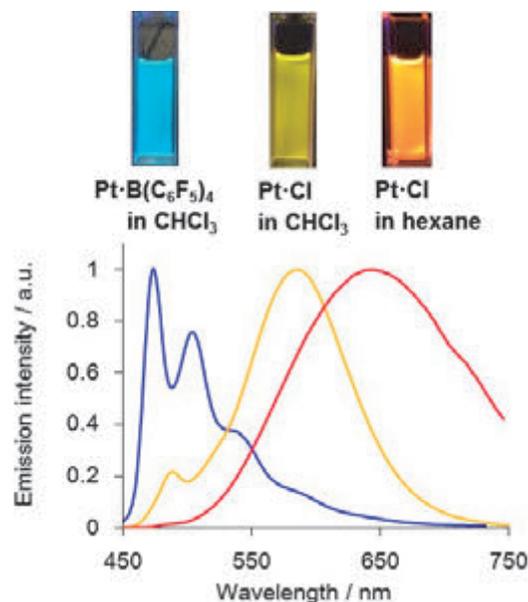
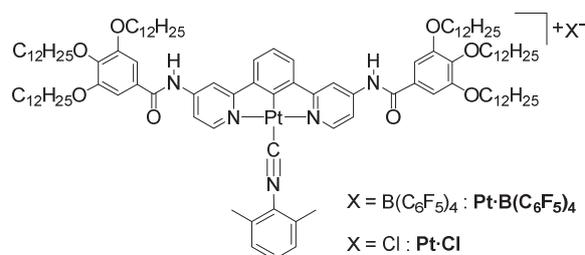


図 2 白金錯体の構造と外部環境に応じた発光

鍋島達弥, 中村貴志, 松岡亮太

<研究成果>

高機能な分子系および超分子系の構築を目的に、内側に複数の金属イオンを配置した大環状ホストの合成と外部刺激応答性の分子集積と分子認識、および近赤外領域に発光を示す分子の合成や一重項酸素増感作用の発現などを達成した。

【1】多点配位結合で分子を捕捉する大環状亜鉛錯体の結合モードの制御

複数の配位サイトを集積した空間は、配位結合の方向性と可逆性を生かした特徴的な分子捕捉能を発揮する。これまで我々は、大環状亜鉛錯体 Zn-hexapap (図 1a) が非対称化を伴う配位駆動自己集合で独特の波状積層構造を形成すること、および多点での配位結合によりジカルボン酸であるピメリン酸2分子をその内孔に捕捉することを見出していた。Zn-hexapap の波状積層2量体は、合計 12 個の亜鉛の 20 個の交換可能な配位サイトが内孔に集積された構造をとり、配位結合によって捕捉される分子の数や位置を制御することは挑戦的な課題である。我々は、酸/塩基によってジカルボン酸の分子結合モードを制御し、さらにその構造変化の詳細を明らかにすることに成功した(図 1b,c)。Zn-hexapap の2量体の内孔に捕捉されるピメリン酸の数は、ピメリン酸を過剰量添加しても2分子のままであった。しかし、強酸であるトリフルオロメタンスルホン酸を加えることで、結合様式を変化させ、計4分子のピメリン酸を捕捉した構造に変換することができた。もともと亜鉛イオンに結合していたヒドロキッド配位子もしくはメキッド配位子がプロトン化されて脱離することが変換のトリガーとなると考えられる。4分子結合体の構造は、NMR や質量分析、単結晶X線回折(図 1c)により決定した。さらに塩基を加えると、ピメリン酸を放出し、ゲスト分子を持たない状態に戻ることも示された。以上、複数の配位部位の中で特定の位置において分子を認識し、化学刺激により分子認識のモードを制御できる新しいタイプの巨大かつ異方的な超分子金属錯体の創製を実現した。

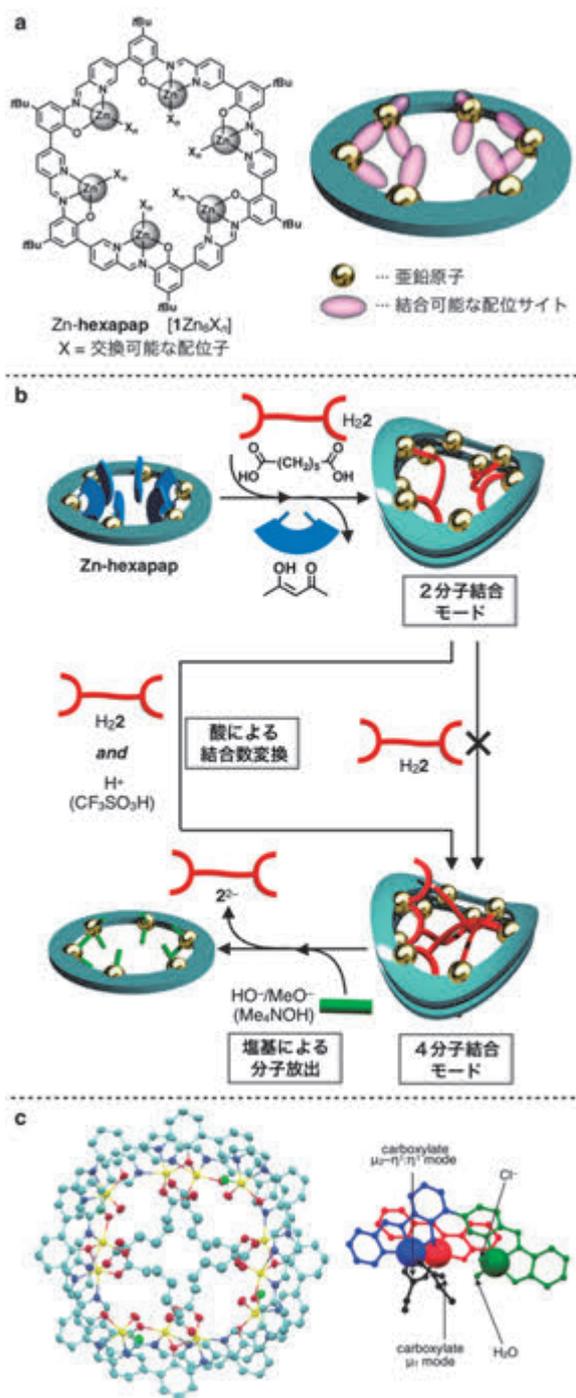


図 1 (a) 大環状亜鉛錯体 Zn-hexapap の構造 (b) 酸/塩基の刺激を用いた、多点での金属との配位結合による分子認識モードの制御 (c) X線結晶構造解析により得られた4分子結合体の構造

【 2 】制御酵素様の戦略によるらせん反転の応答速度制御

生物システムにおいては、化学シグナルが一連の化学反応を引き起こすシグナル伝達のカスケードが存在している。そのような連続的な反応システムは、その機能を初期段階に位置する制御酵素によって精密にコントロールできる利点がある。しかし、今まで開発された人工の応答性分子のほとんどは一段階の反応を用いており、その応答速度を外部刺激で制御することは難しかった。

我々は、制限酵素様の戦略で応答速度を制御できる2段階の構造変換システムを実現した (図 2)。このシステムでは、フッ化物イオンの添加によりらせん分子に配位しているシロキシカルボン酸の脱シリル化が起こり、それによって続くらせん反転が引き起こされる。らせん反転の応答速度はシロキシカルボン酸イオンの反応性に依存しており、反応性の穏やかなシロキシカルボン酸イオンを用いることで、らせん反転の速度を脱シリル化によって制御することができた。これは、らせん反転という主たる構造変換ステップの応答速度を初期の制御段階でコントロールすることに成功した初めての人工の応答性分子である。

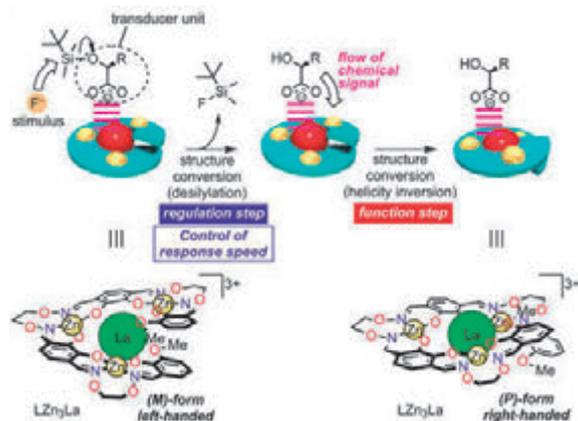


図 2 シロキシカルボン酸イオンの脱シリル化を制御段階とする人工のらせん反転システム

【 3 】ユニークな光学特性をもつセレンOFEN BODIPY 誘導体とその鎖状多量体の合成

ジピリンのホウ素錯体である BODIPY は、強い吸収/蛍光特性と高い化学的安定性を有することから、バイオイメージングや太陽電池などへの応用に期待が持たれている色素であり、特に赤色から近赤外領域 (650 – 900 nm) に吸収/蛍光を有する誘導体の開発が求められている。また、光照射により一重項酸素を発生する色素は、光線力学療法などに用いることができ、生体透過性の高い赤色から近赤外の光をこの用途に用いることができればさらに有用である。

我々は、セレンOFEN環を置換基にもつ BODIPY 単量体およびセレンOFEN環で連結した BODIPY 鎖状多量体を合成した (図 3)。合成した一連の BODIPY 単量体は赤色領域に吸収/蛍光を示し、セレンOFEN環が吸収/蛍光の長波長化に有用であることが示された。さらに、3,5-ジクロロ BODIPY に対してセレンOFENを C-H 活性化クロスカップリングにより反応させることで得た BODIPY の鎖状多量体は、その吸収/蛍光がさらに長波長シフトして近赤外領域にまで達した。また、ヨウ素をセレンOFEN環に導入した BODIPY は、高い発光量子収率 ($\Phi_F = 0.51$) と一重項酸素発生量子収率 ($\Phi_F = 0.30$) とを併せ持つ興味深い分子であることが明らかとなった。

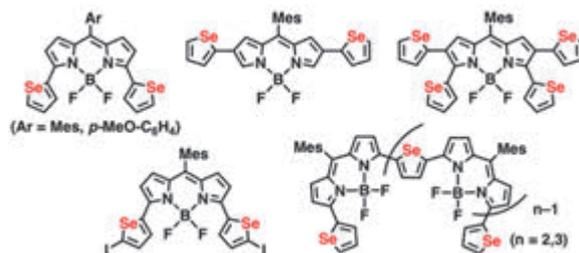


図 3 セレンOFEN環を有する BODIPY 単量体および鎖状多量体

山本泰彦

<研究成果>

体内で酸素の運搬を担っているヘモグロビンをはじめ、生物界にはヘム(図 1A)を含むヘムタンパク質と呼ばれる生体分子が遍在している。ヘムは、ヒトの染色体の末端部位テロメアなどに見いだされる四重鎖 DNA に特異的に結合して安定なヘム-DNA 複合体を形成する。テロメアは、細胞の老化やガン化などに関連していると考えられていることから、ヘム-DNA 複合体の研究は抗がん剤の開発に寄与することが期待されている。

ヘムは四重鎖 DNA の G カルテットに結合する。G カルテットはグアニン4つが同一平面内で水素結合により環状に連結した構造(図 1B)のことであり、その平面性と大きさはヘムとの相互作用に適している。ヘム-DNA 複合体は、

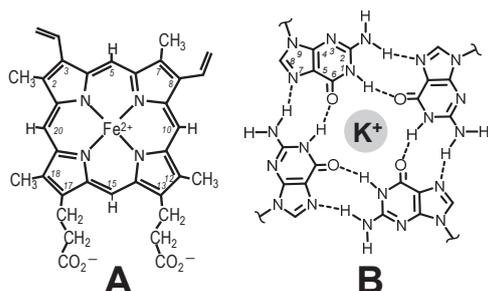


図1. ヘム(A)と G カルテット(B)の構造

酸化触媒作用などの機能を示すことが示されている。遺伝情報を担う分子である DNA がヘムと複合化することにより触媒に変換されるということであり、ヘムタンパク質でヘムの機能がタンパク質の立体構造を通して調節されるように、DNA の立体構造を通してヘムの機能を調節することが可能であることが明らかとなった。ヘム-DNA 複合体とヘムタンパク質では、ヘムは共通であるものの、ヘムを包み込む高分子が DNA とポリペプチドと全く異なることから、ヘム-DNA 複合体が示す触媒作用はヘムタンパク質とは異なる分子機構で発現していることが予想される。したがって、ヘム-DNA 複合体での触媒作用が発現する分子機構を解明すれば、ヘム鉄の反応性を調節する新規な分子機構の発見につながると考えられる。さらに、DNA 鑑定などで知られている通り、DNA の合成はポリペプチドの合成よりもはるかに簡便であることから、

ヘム-DNA 複合体を触媒として実用化することが可能である。私共は、ヘム-DNA 複合体の研究を通して、環境調和型であると共に、高効率かつ高選択的な化学反応を可能にするマテリアル分子の設計と創製を行っている。

【 1 】テロメア類似の DNA 塩基配列が形成する四重鎖 DNA とヘムの複合体の調製

テロメアと類似の DNA 塩基配列が形成する四重鎖 DNA とヘムの相互作用を解析し、一本鎖 DNA が折りたたまれて生じる四重鎖 DNA の 3' 末端 G カルテットにヘムは特異的に結合することを明らかにした。

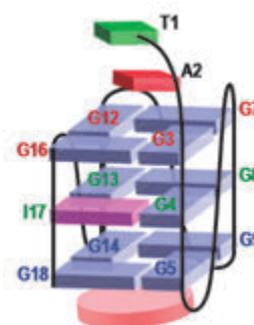


図2. テロメア類似の DNA 塩基配列が形成する四重鎖 DNA とヘムの複合体の構造;直方体は DNA 塩基、最下部の円盤状の平面はヘムをそれぞれ示す。

【 2 】ヘム-DNA 複合体における酸化触媒作用を機構

ヘム-DNA 複合体の酸化触媒作用が、DNA 塩基配列、ヘムの化学修飾を通して調節できることを実証した。ヘム-DNA 複合体の酸化触媒作用はヘム鉄の電子密度の減少に伴って低下することが明らかとなり、ヘム-DNA 複合体の酸化触媒作用は、酸化酵素であるペルオキシダーゼと同様であることが示唆された。

山本洋平

<研究成果>

マテリアル設計部門(山本 G)では、 π 共役有機分子やポリマーの自己組織化により形成するマイクロ構造体の構築と光機能について研究を進めている。今年度は、 π 共役ポリマーからのマイクロ球体形成メカニズム、マイクロ球体からの WGM レーザー発振、近赤外 WGM 発光特性、および π 共役 dendrimer からのポーラス結晶形成について発表を行った。これらの成果について概説する。

【 1 】 π 共役ポリマー球体からの WGM レーザー発振

有機光エレクトロニクスにおける挑戦的課題の一つに、有機 EL 素子からのレーザー発振の実現が挙げられる。これまでに様々な共振器素子構造がその候補として試されてきたが、有機半導体材料への電荷注入によるレーザー発振が実現された例はない。一方、共振器として期待される構造の一つに、マイクロメートルサイズの球状構造体が挙げられる。マイクロ球体中に光が閉じ込められると、ウィスパーリングギャラリーモード(WGM)が誘起される。WGM は光の閉じ込め効率が高いため光の損失が少なく、レーザー発振の低閾値化が期待できる。しかしながら、これまでに報告されたポリマーマイクロ球体は、いずれも電荷の注入ができない非共役系ポリマーに蛍光色素を添加した系であり、共役ポリマーのみから形成するマイクロ球体によるレーザー発振の報告はなかった。

本グループはこれまでに、共役ポリマーが自己組織化によりマイクロサイズの球体を形成すること、および、発光が球体内部に閉じ込められて自己干渉により共鳴する WGM 発光が観測されることを報告してきた。しかし、使用していたポリマーは光耐久性が低く、励起光強度を上げることによる反転分布状態が実現できないため、レーザー発振現象の観測には至っていなかった。

今回、新たにミニエマルジョン法を用いて、様々な共役ポリマーのマイクロ球体を作製した。その中で、光耐久性や発光特性が高い高分子材料の一つであるポリフルオレン(F8)から作製したマイクロ球体1粒子に対してフェムト秒パルスレーザーを照射して、発光スペクトルを計測した結果、 $1.5 \mu\text{J}/\text{cm}^2$ の低閾値での青色レーザー発振が観

測された。この値は、自己組織化で作製されたポリマー球体に蛍光色素を添加した系と比較して、同程度の低いレーザー発振閾値になる。また、この共役ポリマー球体は、4 万パルス以上の連続的な光照射後にも十分なレーザー発振強度を示し、高い光耐久性を示した。同様に、他の種類の共役ポリマー(F8BT, MDMOPPV)球体からも、フェムト秒パルスレーザー励起によりそれぞれ緑色、赤色のレーザー発振が確認された(図1)。

光耐久性向上およびレーザー発振の低閾値化について検討した結果、酸化チタンで F8 球体を被覆することで、レーザー発振強度の半減値が 4 万パルスから 12 万パルスまで向上し、それに伴い、材料破壊が起こるダメージ閾値(P_d)も向上した。これは色素分散系も含めた現存の有機レーザー材料の中で最も高い耐久性である。さらに、銀薄膜基板に固定化した F8 球体において、レーザー発振閾値を約 4 分の 1 ($0.37 \mu\text{J}/\text{cm}^2$) にまで低下させることに成功した。FDTD シミュレーションより、銀基板による反射効果により基板への光の漏れ出しが低減した結果であることが明らかになった。今後、軽量・フレキシブルな光回路やマイクロレーザー光源、電極からの電荷注入による有機電界発光レーザーの実現が期待される。

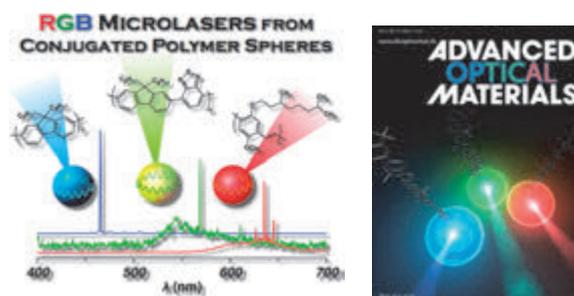


図 1(左) π 共役ポリマー球体からの WGM レーザー発振スペクトル。(右) Advanced Optical Materials 誌に掲載された表紙絵。

【 2 】 π 共役ポリマーからの球体形成メカニズムの解明

凝集状態における共役高分子の集積構造の制御は、高移動度トランジスタや高効率有機薄膜太陽電池など、ハイパフォーマンスな有機デバイス特性を得る上で重要である。電荷輸送特性を向上させるためには、ポリマー主鎖の結晶性を高め

ることが重要であり、そのためには、 π 共役平面のスタッキングに加え、側鎖の相互貫入 (interdigitation) による主鎖の lateral な方向の周期構造の形成も物性に大きく作用する。一方、発光特性に注目すると、一般に π 共役系の拡張や π スタッキングにより、発光の赤方偏位やエキシマ形成、消光などがおこるため、エキシマを局在させる戦略が必要となる。 π 共役ポリマーに関していえば、共役長を短くするような分子設計、例えば、主鎖を大きく twist させ共役を短くすることで、より低波長域での高い発光特性が実現する。

本研究では、 π 共役ポリマー **1** の自己組織化、および溶解過程を詳細に検討する中で、貧溶媒の拡散に伴ってポリマー主鎖間での凝集が起こるに先立ち、ポリマー主鎖内で folding が起こっていることを、凝集過程における吸収スペクトル、発光スペクトル、および $^1\text{H-NMR}$ スペクトルより明らかにした。この分子内 folding の結果、主鎖の平面性が低下し、さらなる貧溶媒の添加により、folding したポリマーがアモルファスに凝集するという2段階の凝集が起こっていることを明らかにした (図1)。共役ポリマーの集合様式の制御は、最適な物性を引き出す上で重要であり、本研究はポリマーフォトンクスおよびエレクトロニクス研究における重要な指針を与えると考えられる。



図2 (a) π 共役ポリマー **1** の分子構造. (b) 蒸気拡散法による自己組織化の模式図. (c) 得られたマイクロ球体の電子顕微鏡写真. (d) 直鎖状のポリマーがフォルダマーを形成し、それらが凝集してマイクロ球体を形成する集合様式の模式図.

【3】ポリマーブレンド球体内 FRET による近赤外 WGM 発光

近赤外光は生体透過性に優れることから、バイ

オイメージングやバイオセンシングなどの応用に向けて近赤外領域に鋭い発光を示す材料の研究開発が活発に行われている。しかしながら、一般に近赤外発光は熱失活による無輻射失活の影響が大きく、また凝集状態では濃度消光による蛍光量子有率の低下も懸念される。一方、最近、希土類金属や有機分子を用いて、赤～近赤外領域に鋭い共鳴ピークを示す WGM 共振器やマイクロロッドによる Fabry-Perrot 共振器による近赤外レーザー発振の報告もなされている。

本研究では、2 種類の共役ポリマー (**P1**, **P2**, 図3) のブレンドからなる WGM 共振器について報告する。この二種類のポリマーは、互いにエネルギー供与体・受容体のエネルギー状態の関係にある。**P2** は溶液では近赤外に発光を示すが、凝集状態ではほぼ発光を示さない。また、それ単体では球体の形成もしないことから、球体を形成しやすい **P1** への添加を行った。その結果、**P1** から **P2** への効率的な FRET による近赤外 WGM 発光を実現した。エネルギー移動と WGM の特性は、アクセプターの混合比に敏感で、混合比が 4wt% の時に最も FRET 効率がが高く、それ以上になるとアクセプターポリマーの凝集により FRET 効率が低下することを明らかにした。FRET を利用して効率的にアクセプターポリマーを分散させる手法は、近赤外発光を効率的に取り出す手法として有効であり、今後のバイオ応用に向けた材料設計指針となり得る。

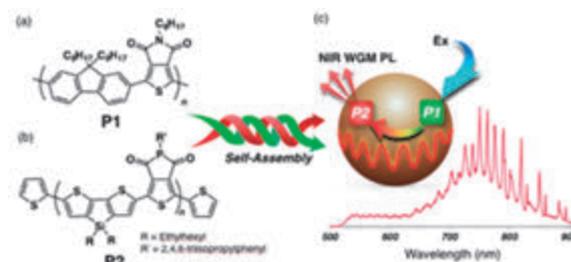


図3 (a, b) エネルギー供与性ポリマー **P1** とエネルギー受容性ポリマー **P2** の分子構造. (c) 球体内 FRET を介した近赤外 WGM 発光スペクトルと模式図.

【4】 π 共役 dendrimer の自己組織化によるポーラス結晶形成と蛍光センシング

蛍光プローブは、神経ガスや重金属イオン、蛋

白質、遺伝物質など、さまざまな分子の識別に用いられる。蛍光センシングの方法は、蛍光消光、蛍光発現 (turn-on)、蛍光強度変化、励起エネルギー移動型など、いくつかのタイプに分けられます。とりわけ、turn-on 型で、なおかつ固体状態で使用可能な蛍光センサーは実用的に重要である。さらに、発光色変化を伴う蛍光センシングは、複数の検体を識別可能であることから、そのような特性をもつ材料の探索が活発に進められている。特に、表面積が大きくてナノメートルサイズのチャンネルを有する多孔性材料は、ガスや蒸気のセンシングに適していると考えられる。

本研究では、 π 共役 dendrimer とよばれる巨大分子から、多孔質の結晶性ファイバーを作成した (図4)。Dendrimer のコア部位は電子受容性のトリアジン、シェル部位は電子供与性のカルバゾール dendron からなる。この dendrimer は、熱活性化遅延蛍光 (TADF) 特性を示すことから、塗布型有機 EL 素子のホール輸送層/発光層としての応用が検討されている分子である。Dendrimer の溶液中における自己組織化挙動を詳細に調査した結果、蒸気拡散法により dendrimer はファイバー状の構造体を形成することを明らかにした。一方、蒸気拡散の際の初濃度を 1/10 にまで下げると同様の方法で自己組織化を行うと、アモルファスな球体が形成した。ファイバーの単結晶および粉末 X 線回折測定から、このファイバーは長軸方向に1次元のナノサイズのチャンネルを有することが明らかになった。窒素ガス吸着測定より、このファイバーは $650 \text{ m}^2/\text{g}$ 以上もの BET 表面積を示した。そこで、この多孔性ファイバーを様々な溶媒蒸気に晒して蛍光観察を行った結果、ほとんどの溶媒蒸気に対して蛍光強度の顕著な増大 (turn-on) が観測され、さらに溶媒の種類により蛍光色が大きく変化することが明らかになった。この分子は TADF 特性をもつことから、大気中では3重項酸素により蛍光の大部分が消光してしまうが、溶媒分子が細孔内部に吸着し、酸素を追い出すことで蛍光が turn-on する。また、この発光は電荷移動 (CT) 発光であり、励起状態のエネルギーは極性分子の吸着により大きく安定化するため、溶媒の極性に伴う大きな蛍光色変化が起こる。さらに、このナノ細孔には、気体や溶媒蒸気だけでなく、昇華した有機分子も導入可能であり、例えば電子受

容性分子である TCNQ を昇華して導入することで、蛍光が完全に消光する。

電子供与性-受容性 dendrimer を用いることで、揮発性ガスや有機分子を高感度に識別可能な多孔性結晶は、新しい分子識別材料としての応用が期待できる。また、爆発性のニトロ化合物や有毒な揮発性分子などの識別においても、この多孔性 dendrimer 結晶は大きな威力を発揮することが期待できる。

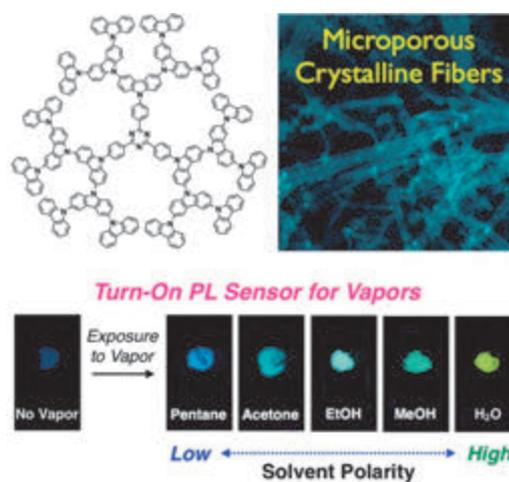


図4 π 共役 dendrimer の分子構造、自己組織化ポラスファイバーの蛍光顕微鏡写真、および各溶媒蒸気に晒したときの蛍光色変化。

辻村清也

<研究成果>

酵素の電極触媒活性, 利用効率, 安定性の革新的な向上を達成することで, 生体エネルギー変換系を模倣したバイオエネルギー変換デバイスの創生を進める.

【1】スクリーン印刷型新規バイオ燃料電池の構築

スクリーン印刷により酵素を電極触媒に用いる電池を作製しその特性評価を行った. 2013年に最初の紙に印刷した電池(単セル)を開発した.

電池の印刷技術はその簡便な製造プロセスであり, 電池の低コスト化に欠かすことのできない技術である. さらに, 電池のデザインを自由にアレンジすることができ, 必要とする電力に合わせて電池の設計することができる. 2017年度では2つのアレイ型タイプの電池を発表した. いずれも既存の電子機器を作動するのに必要な起電力(電力)を向上させるためにデザインされたものである.

(1) 円形に5つのセルを連結した電池 (A screen-printed circular-type paper-based glucose/O₂ biofuel cell)

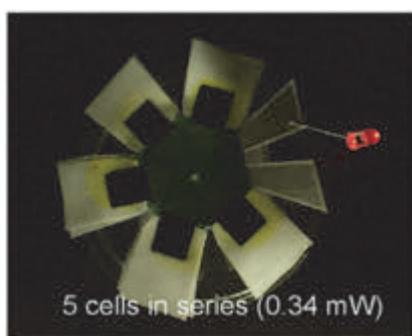


図 1.1 5つのセルが直列接続したセル

アノードには, グルコースオキシダーゼ, テトラチアフルバレンをメディエータに用いている. カソードにはビリルビンオキシダーゼを用いている.

酵素を担持する炭素には, ケッチェンブラックを用いている. まず, 紙に導電性炭素インクを用い, 導電層を印刷し, その上に, 多孔質炭素層を印刷した(図 1.2). セルのアノードとカソードは向かい合うように紙を張り合わせている. また, セルの直列に接続するために銀インクで配線を印刷している. 余分な箇所を切り落とし, 最後に酵素とメ

ディエータ液を滴下して電池の作動を確認した(図 1.3).

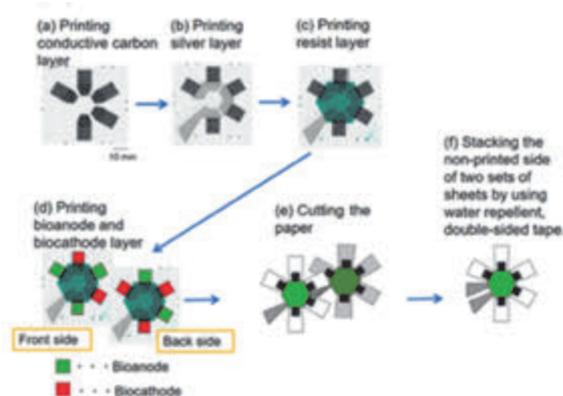


図 1.2 電池の作製プロセス

電池起電力は 2.6V であり, 最大出力 0.35mW を示した. これにより, いくつかの電子デバイス, 例えば LED を昇圧回路などの補器を必要とせずに作動させることが可能となる.

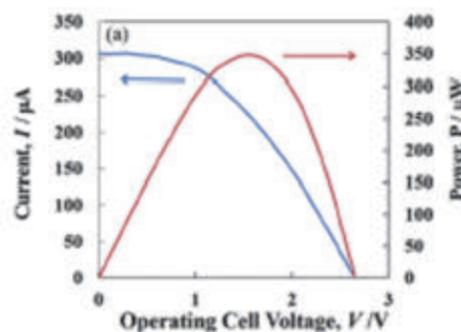


図 1.3 アレイ型電池の出力特性

(2) 4x4 の 1mW 級の電池 (Toward Wearable Energy Storage Devices: Paper-Based Biofuel Cells based on a Screen-Printing Array Structure)

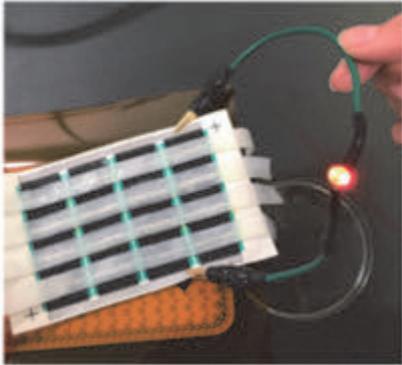


図 1.4 電池の外観

本研究では、4x4 型の電池を開発した(図 1.4). 1で報告した円形のセルは、電池のアノードとカソードを向かい合うように張り合わせている. 本電池は一枚のシートの片面に電池を印刷している.

また、(1)の電池よりも高出力を目指した電池のデザインを検討した. すなわち、サイズの小さな電池を横に連結していくことで、その起電力はつないだ分だけ増える. 電圧の制御はこの方法で可能となる(図 1.5).

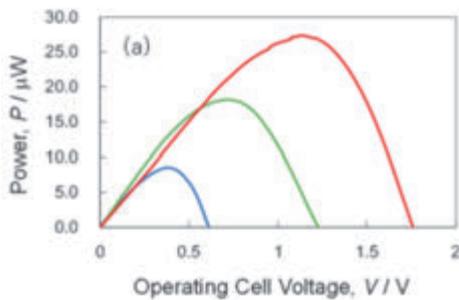


図 1.5 片面に印刷された電池の直接接続
青 単セル, 緑 2 直列接続, 赤 3 直列接続

しかし、電流値を大きくするためには、電極面積を大きくする必要が出てくる. しかし、電極を大きくすると、反応が進行するに従い、燃料の供給が追い付かず、燃料濃度の濃淡が電池の内部で生じてしまう. 燃料の拡散速度と電極での消費速度を考慮したデザインは求められる. そこで、有限要素法を活用した電池内での燃料の濃度分布を様々な電池形状、配置のもとで計算し、最適な電池デザインを決定した(図 1.6).

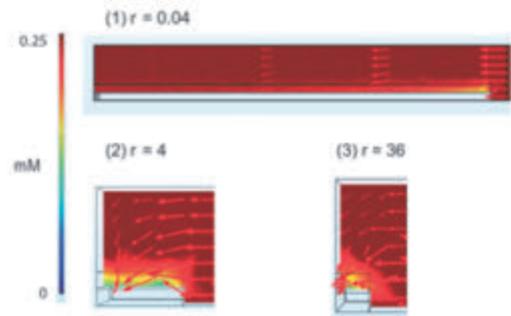


図 1.6 有限要素法によるシミュレーション

これにより電池サイズ、正極負極間距離を検討し、図 1.7 の電池を作製した. 材料などは(1)と同じである.

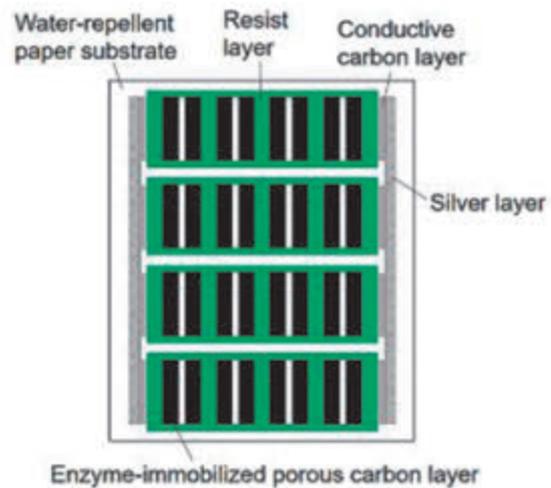


図 1.7 4x4 セルアレイの模式図

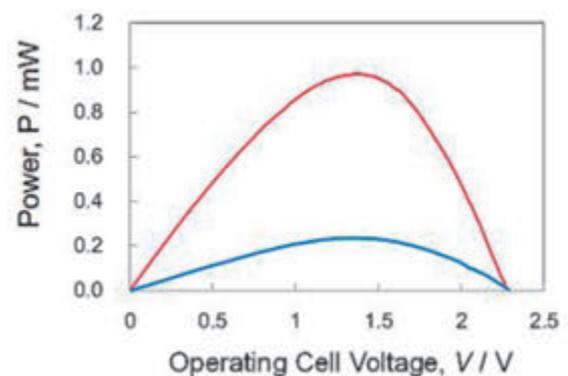


図 1.8 1x4(青)と4x4(赤)セルの出力特性

電池は 1mW の最大出力、2.8 V の起電力を有していた(図 1.8). 並列、直接に接続した電池の数に応じ、出力は増加し、4 セルから 16 セルに並列

につなぐ数を増やすと出力も 4 倍となり、大きくすることによる、燃料供給やイオン移動などによるロスを最小限にすることができていると考えられる。

【 2 】グルコース脱水素に適したメディエータの開発:新規キノ誘導体の合成

辻村らによって最初に報告された FAD 依存性脱水素酵素はグルコースを酸化する電極触媒として高い注目を集めている。基礎特性評価が参加に研究がすすめられている。この酵素の最もできたメディエータもまた明らかになっていない。辻村らは、各種色素やキノとの反応性をしらべ、その速度の電位差(酵素メディエータ間の電位差)の依存性を報告してきた。本研究では、その情報をもとに、新規キノ誘導体の開発を行った。キノに官能基をつけた誘導体の電位は、導入した官能基の電子特性によって変化する。そこで、DFT 計算によりキノの LUMO レベルを計算することで溶液中の酸化還元電位を予め予測し、それを実験的に確認した。また、キノの合成には Ag(I) を酸化剤として用いるが、その効率の向上と再利用を目的として、様々な担体を検討した結果、グラフェンが最適であることがわかった。

Table 2 The scope of different carboxylic acids and substrates^a

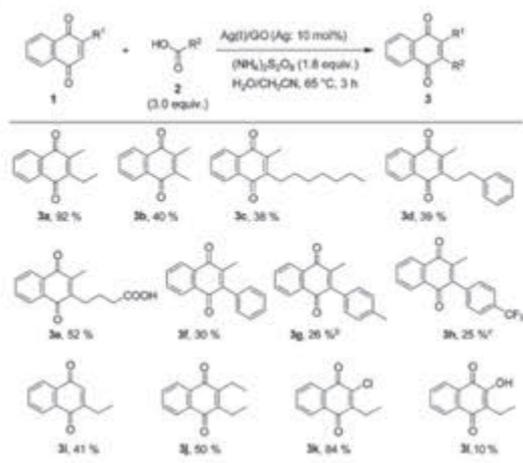


図 2.1 基本的な合成スキームと今回合成したキノ誘導体

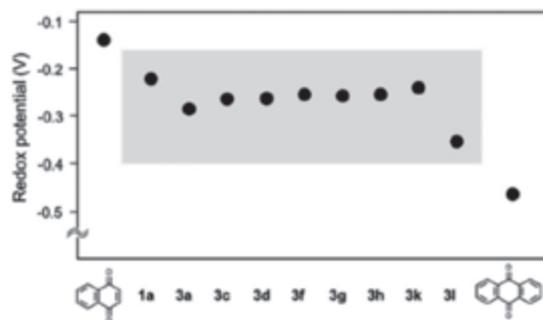


図 2.2 キノ誘導体の酸化還元電位

【 3 】水素を電気化学的に酸化するヒドロゲナーゼ反応におよぼす細孔サイズの影響 (Pore size effect of MgO-templated carbon on enzymatic H₂ oxidation by the hyperthermophilic hydrogenase from Aquifex aeolicus)

ヒドロゲナーゼとは水素酸化あるいは水素発生を行うことができる酵素である。一部の微生物の代謝を担っている。このヒドロゲナーゼを活用した新たなエネルギー変換あるいは、ヒドロゲナーゼを模倣し触媒の開発が盛んである。図 3.1 に示すのは水素の電気化学的酸化反応のボルタモグラムである。-0.5V という非常に負側の電位から電流が立ち上がるのが観察されている。ヒドロゲナーゼは非常に優れた触媒であることがわかる。図の赤および黒のカーブはそれぞれ 40nm と 150nm の細孔を有する炭素に酵素を修飾させたときのボルタモグラムである。囲みの平坦な電極に比べ、10 倍以上の大きな電流値を達成することができているが、大きい細孔の場合、酵素の吸着量は増え、大きな電流値を得ることができる。

ただし、酵素の溶液中の耐久性はそれほど良くなく、その活性は、30°C の条件では 10 時間でその活性は半減する(図 3.2)。

しかし、酵素を多孔質炭素に吸着させた場合、細孔サイズが小さい(40nm)場合、電流値の減少速度は溶液に酵素を溶かした場合と比較して、非常になだらかであり、10 時間経過しても 90% 以上の電流を維持していた(図 3.3)。興味深いことに、150nm の細孔を有する炭素の場合、10 時間で電流値は半減し、細孔による酵素の安定化の効果はないということがいえる。安定化のメカニズムを明らかにする研究を継続していく予定である。

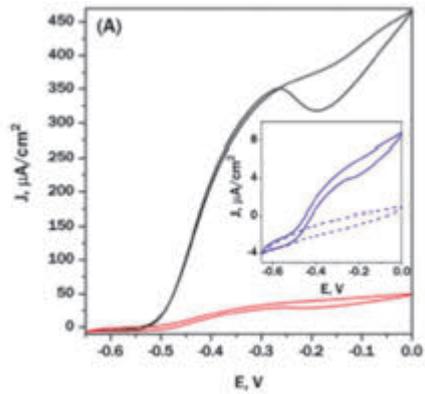


図 3.1 ヒドロゲナーゼによる水素酸化

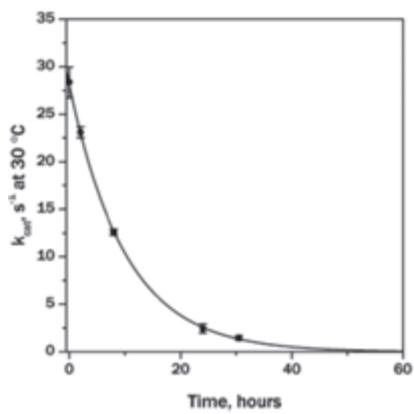


図 3.2 ヒドロゲナーゼの溶液中での酵素の安定性

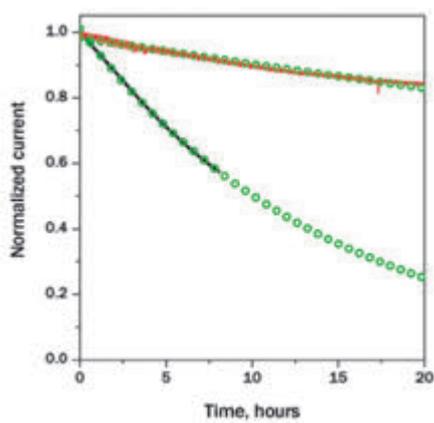


図 3.3 多孔質炭素に吸着した酵素の活性
(赤, 40nm の細孔を有する炭素, 黒; 150nm の細孔を有する炭素)

< 論文 >

1. Riku Shibuya, Takahiro Kondo, Junji Nakamura : Bottom-up design of nitrogen-containing carbon catalysts for the oxygen reduction reaction, *ChemCatChem*, **10** 卷, 2019~2023, 2018
2. Chi-Cheng Lee, Baojie Feng, Marie D'angelo, Ryu Yukawa, Ro-Ya Liu, Takahiro Kondo, Hiroshi Kumigashira, Iwao Matsuda, and Taisuke Ozaki : Peculiar bonding associated with atomic doping and hidden honeycombs in borophene, *Phys. Rev. B* **97** 卷, 075430, 2018.
3. Hiroaki Nishino, Takeshi Fujita, Nguyen Thanh Cuong, Satoshi Tominaka, Masahiro Miyauchi, Soshi Iimura, Akihiko Hirata, Naoto Umezawa, Susumu Okada, Eiji Nishibori, Asahi Fujino, Tomohiro Fujimori, Shin-ichi Ito, Junji Nakamura, Hideo Hosono, Takahiro Kondo : Formation and characterization of hydrogen boride sheets derived from MgB₂ by cation exchange. *J. Am. Chem. Soc.* **139** 卷, 13761~13769, 2017.
4. Jun-ichi Fujita, Takaki Hiyama, Ayaka Hirukawa, Takahiro Kondo, Junji Nakamura, Shin-ichi Ito, Ryosuke Araki, Yoshikazu Ito, Masaki Takeguchi, and Woei Wu Pai : Near room temperature chemical vapor deposition of graphene with diluted methane and molten gallium catalyst. *Scientific Reports* **7** 卷, 12371-1~12371-10, 2017.
5. Hiroaki Nishino, Takeshi Fujita, Akiyasu Yamamoto, Tomohiro Fujimori, Asahi Fujino, Shin-ichi Ito, Junji Nakamura, Hideo Hosono, Takahiro Kondo : Formation Mechanism of Boron-Based Nanosheet through the Reaction of MgB₂ with Water, *J. Phys. Chem. C* **121** 卷, 10587~10593, 2017.
6. Tsukasa Mizutaru, Galina Marzun, Sebastian Kohsakovski, Stephan Barcikowski, Dachao Hong, Hiroaki Kotani, Takahiko Kojima, Takahiro Kondo, Junji Nakamura, and Yohei Yamamoto : Peptide Crosslinkers: Immobilization of Platinum Nanoparticles Highly Dispersed on Graphene Oxide Nanosheets with Enhanced Photocatalytic Activities, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9** 卷, 9996~10002, 2017.
7. Takahiro Kondo : Recent progress in boron nanomaterials. *Sci. Technol. Adv. Mater.* **18** 卷, 780~804, 2017
8. Junji Nakamura, Tadahiro Fujitani, Sebastian Kuld, Stig Helveg, Ib Chorkendorff, Jens Sehested : Comment on "Active sites for CO₂ hydrogenation to methanol on Cu/ZnO catalysts", *Science*, **357**, 6534, 2017.
9. Hitoshi Saito, Jieran Chen, Junpei Kuwabara, Takeshi Yasuda, and Takaki Kanbara, Facile One-pot Access to π -Conjugated Polymers via Sequential Bromination/Direct Arylation Polycondensation, *Polym. Chem.*, **8**, 3006-3012 (2017).
10. Junpei Kuwabara, Tomomi Namekawa, Eiko Sakabe, Masa-aki Haga, and Takaki Kanbara, Luminescent Ir(III) complexes bearing benzothiazole or benzoxazole-based pincer ligand, *J. Organomet. Chem.*, **845**, 189-195 (2017).
11. Junpei Kuwabara, Kaho Yamaguchi, Kazuma Yamawaki, Takeshi Yasuda, Yoshinobu Nishimura, and Takaki Kanbara, Modulation of the emission mode of a Pt(II) complex via intermolecular interactions, *Inorg. Chem.*, **56**, 8726-8729 (2017).
12. Soh Kushida, Osamu Oki, Hitoshi Saito, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, Motomichi Tashiro, Michio Katouda, Yutaka Imamura, and Yohei Yamamoto, From Linear to Foldamer and Assembly: Hierarchical Transformation of Coplanar Conjugated Polymer into Microsphere, *J. Phys. Chem. Lett.*, **8**, 4580-4586 (2017).
13. Hideaki Aoki, Hitoshi Saito, Yuto Shimoyama, Junpei Kuwabara, Takeshi Yasuda, and Takaki Kanbara, Synthesis of Conjugated Polymers Containing Octafluorobiphenylene Unit via Pd-Catalyzed Cross-Dehydrogenative-Coupling Reaction, *ACS Macro Lett.*, **7**, 90-94 (2018).
14. Osamu Oki, Soh Kushida, Annabel Mikosch, Kota Hatanaka, Youhei Takeda, Satoshi Minakata, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, Thang D. Dao, Satoshi Ishii, Tadaaki Nagao, Alexander J. C. Kuehne, Felix Deschler, Richard Friend, and Yohei Yamamoto, FRET-mediated near infrared whispering gallery modes: Studies on the relevance of intracavity energy transfer with Q-factor, *Mater. Chem. Front.*, **2**, 270-274 (2018).
15. Kaho Yamaguchi, Kazuma Yamawaki, Takuya Kimura, Junpei Kuwabara, Takeshi Yasuda, Yoshinobu Nishimura, and Takaki Kanbara, Multi-molecular emission of a cationic Pt(II) complex through hydrogen bonding interaction, *Dalton Trans.*, **47**, 4087-4092 (2018).
16. 藤本 信貴, 桑原 純平, 神原貴樹, 塗装工学, 日本塗装技術協会, **52**, 17-22 (2017).
17. Takashi Nakamura, Yuya Kaneko, Eiji Nishibori and Tatsuya Nabeshima "Molecular recognition by multiple metal coordination inside wavy-stacked macrocycles" *Nature Commun.*, **8**, 129 (2017).
18. Michio Shimamura, Masaki Yamamura, Tatsuya Nabeshima, Naoki Kitano, Peter van den Elzen, Hasan Yesilkaya, Peter Andrew and Petr Illarionov "Activation of invariant natural killer T cells stimulated with microbial α -mannosyl glycolipids" *Sci. Rep.*, **7**, 9703 (2017).
19. Shiho Sairenji, Shigehisa Akine and Tatsuya Nabeshima "Response speed control of helicity inversion based on a "regulatory enzyme"-like strategy" *Sci. Rep.*, **8**, 137 (2018).
20. Daisuke Taguchi, Takashi Nakamura, Hiroaki Horiuchi, Makoto Saikawa and Tatsuya Nabeshima "Synthesis and Unique Optical Properties of Selenophenyl BODIPYs and Their Linear Oligomers" *J. Org. Chem.*, **83**, 5531-5337 (2018).

21. T. Shibata, Y. Nakayama, Y. Katahira, H. Tai, Y. Moritaka, Y. Nakano, and Y. Yamamoto, "Characterization of the interaction between heme and a parallel G-quadruplex DNA formed from d(TTGAGG)", *Biochim. Biophys. Acta*, **1861**, 1264-1270 (2017).
22. Y. Kanai, A. Harada, T. Shibata, R. Nishimura, K. Namiki, M. Watanabe, S. Nakamura, F. Yumoto, T. Senda, A. Suzuki, S. Neya, and Y. Yamamoto, "Characterization of Heme Orientational Disorder in a Myoglobin Reconstituted with a Trifluoromethyl-Group-Substituted Heme Cofactor", *Biochemistry*, **56**, 4500-4508 (2017).
23. C.-D. Xiao, T. Shibata, Y. Yamamoto, and Y. Xu, "An Intramolecular Antiparallel G-quadruplex Formed by Human Telomere RNA", *Chem. Commun.*, **54**, 3944-3946 (2018).
24. Y. Yamamoto and T. Shibata, "NMR of Paramagnetic Compounds", *Experimental Approaches of NMR Spectroscopy. Methodology and Application to Life Science and Materials Science*, A. Naito, T. Asakura, I. Shimada, K. Takegoshi, and Y. Yamamoto, eds., pp. 491-518, Springer, 2018.
25. Sae Nakajima, Ken Albrecht, Soh Kushida, Eiji Nishibori, Takashi Kitao, Takashi Uemura, Kimihisa Yamamoto, Uwe H. F. Bunz, Yohei Yamamoto, A fluorescent microporous crystalline dendrimer discriminates vapour molecules, *Chem. Commun.*, **54**, 2534-2537 (2018).
26. Osamu Oki, Soh Kushida, Annabel Mikosch, Kota Hatanaka, Youhei Takeda, Satoshi Minakata, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, Thang Dao, Satoshi Ishii, Tadaaki Nagao, Alexander Kühne, Felix Deschler, Richard Friend, Yohei Yamamoto, FRET-mediated near infrared whispering gallery modes: studies on the relevance of intracavity energy transfer with Q-factor, *Mater. Chem. Front.*, **2**, 270-274 (2018).
27. Soh Kushida, Osamu Oki, Hitoshi Saito, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, Motomichi Tashiro, Michio Katouda, Yutaka Imamura, Yohei Yamamoto, From Linear to Foldamer and Assembly: Hierarchical Transformation of a Coplanar Conjugated Polymer into a Microsphere, *J. Phys. Chem. Lett.*, **8**, 4580-4586 (2017).
28. Yusuke Wakikawa, Tadaaki Ikoma, Yohei Yamamoto, Takanori Fukushima, Kimio Akiyama, Temperature Dependence of Magnetophotoconductance in One-dimensional Molecular Assembly of Hexabenzocoronene, *ACS Omega*, **2**, 3260-3266 (2017).
29. Soh Kushida, Daichi Okada, Fumio Sasaki, Zhan-Hong Lin, Jer-Shing Huang, Yohei Yamamoto, Low-Threshold Whispering Gallery Mode Lasing from Self-Assembled Microspheres of Single-Sort Conjugated Polymers, *Adv. Opt. Mater.*, **5**, 1700123 (2017). (Inside Cover Picture)
30. A Screen-printed Circular-type Paper-based Glucose/O₂ Biofuel Cell
Shitanda I., Nohara, S., Hoshi, Y., Itagaki, M., Tsujimura, S.,
J Power Sources, **360**, 516-519 (2017)
31. Toward Wearable Energy Storage Devices: Paper-based Biofuel Cells based on a Screen-printing Array Structure
Shitanda, I., Momiyama, M., Watanabe, N., Tanaka, T., Tsujimura, S., Hoshi, Y., Itagaki, M.,
ChemElectroChem, **4**(10), 2460-2463 (2017)
32. Tuning the Redox Potential of Vitamin K3 Derivatives by Oxidative Functionalization Using Ag(I)/GO Catalyst
El-Hout, S.I., Suzuki, H., El-Sheikh, S.M., Hassan, H.M.A., Harraz, F.A., Ibrahim, I.A., El-Sharkawy, E. A., Tsujimura, S., Holzinger, M., and Nishina, Y.,
ChemComm, **53**, 8890-8893 (2017)
33. Pore size effect of MgO-templated carbon on enzymatic H₂ oxidation by the hyperthermophilic hydrogenase from *Aquifex aeolicus*
Mazurenko, I., Clement, R., Byrne-Kodjabachian, D., de Poulpique, A., Tsujimura, S., Lojou E.,
J. Electroanal. Chem. **812**, 221-226 (2018)
34. バイオ燃料電池の基礎と多孔性炭素の構造制御による高性能酵素多孔性電極の開発
辻村清也
Adsorption News, **31**(4), 12-18, (2018)
35. 印刷型バイオ燃料電池の開発と自己駆動型センサへの応用
四反田功, 相川達夫, 辻村清也
ケミカルエンジニアリング, **63**(1), 14-19 (2018)
36. "ウェアラブル機器の開発とマーケット・アプリケーション・法規制動向", 監修: 三林 浩二, 八村 大輔, R&D 支援センター(2017/07/26), ISBN 978-4-905507-21-5
第2章 通信・ネットワーク・エネルギー技術、第3節 ウェアラブルデバイスのためのバイオ燃料電池
四反田功, 辻村清也
37. "生体情報センシングとヘルスケアへの最新応用 ~ウェアラブル、非侵襲・非接触計測、連続モニタリング~", 情報技術協会 (2017/06/30) ISBN 978-4-86104-661-2
第14章 センサネットワーク向け電源、電池の開発動向、第4節 印刷技術を用いたバイオ燃料電池の開発と自己駆動型センサへの応用
四反田功, 辻村清也

< 著書 >

1. 藤本 信貴, 桑原 純平, 神原貴樹, 触り心地”(分担, 第13節 290-296頁), 技術情報協会 (2017).
2. *Experimental Approaches of NMR Spectroscopy. Methodology and Application to Life Science and Materials Science*, A. Naito, T. Asakura, I. Shimada, K. Takegoshi, and Y. Yamamoto, eds., Springer, 2018.

< 総説・解説 >

1. 松岡 亮太
「結び目を持つ大環状有機分子の合成」*有機合成化学協会誌*, **76**, 360-361 (2018).
2. 「有機ソフトマテリアルレーザーの最新動向」山本 洋平, 共役ポリマーからなる自己組織化マイクロ球体共振器とレーザー発振, *レーザー研究* **46**, 25-29 (2018).
3. Fabrication Protocols of Polymer Microspheres for Application to Optical Resonators and Lasers, Yohei Yamamoto, Daichi Okada, Soh Kushida, Zakarias Seba Ngara, Osamu Oki, *J. Vis. Exper. (JoVE)*, e55934 (2017).

< 学会発表 >

国際会議

1. Junji Nakamura: Fuel cell catalysts using graphene, The 18th International Symposium on Laser Precision Microfabrication (LPM2017), Toyama International Conference Center (Toyama, Japan), 2017.6.7 (**Invited**).
2. Junji Nakamura: Adsorption of CO₂ and O₂ on nitrogen-doped graphitic carbons, Carbon 2017, Melbourne Convention and Exhibition Centre (Australia), 2017.7.24
3. Junji Nakamura, Riku Shibuya, Yuto Shimoyama, Takahiro Kondo: Oxygen reduction reaction by pyridinic nitrogen-containing carbon electrocatalysts, 33rd European Conference on Surface Science (ECOSS-33), The Congress Centre of the University of Szeged (Hungary), 2017.8.29
4. Junji Nakamura: Kinetics, dynamics and mechanism of methanol synthesis on Cu catalysts, The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8), Tsukuba International Congress Center (Tsukuba, Japan), 2017.10.23 (**Invited**)
5. Takahiro Kondo: Active sites, Lewis basic sites and local electronic structure of nitrogen-doped graphitic carbon catalysts, International union of materials research society-International conference of advanced materials (IUMRS-ICAM 2017), Univ. Kyoto (Japan), 2017.8.28 (**Invited**)
6. Takahiro Kondo: Active sites in nitrogen-doped carbon materials for oxygen reduction reaction, Tsukuba Global Science Week (TGSW) 2017, Tsukuba International Congress Center (Tsukuba), 2017.9.27
7. Hiroaki Nishino, Takeshi Fujita, Nguyen Thanh Cuong, Satoshi Tominaka, Masahiro Miyachi, Soshi Iimura, Akihiko Hirata, Naoto Umezawa, Susumu Okada, Eiji Nishibori, Asahi Fujino, Tomohiro Fujimori, Shin-ichi Ito, Junji Nakamura, Hideo Hosono, Takahiro Kondo: Hydrogen Boride Sheets Derived from MgB₂ by Cation Exchange, 5th Ito International Research Center Conference "Forefront of Molecular Dynamics at Surfaces and Interfaces: from a single molecule to catalytic reaction", Ito international Research Center (IIRC), Hongo, Tokyo, 2017.11.21
8. Hiroaki Nishino, Takeshi Fujita, Nguyen Thanh Cuong, Satoshi Tominaka, Masahiro Miyachi, Soshi Iimura, Akihiko Hirata, Naoto Umezawa, Susumu Okada, Eiji Nishibori, Asahi Fujino, Tomohiro Fujimori, Shin-ichi Ito, Junji Nakamura, Hideo Hosono, Takahiro Kondo: Hydrogen Boride Sheets Derived from MgB₂ by Cation Exchange, 2017 Materials Research Society (MRS) Fall Meeting, Hynes Convention Center, Boston, USA, 2017.11.27
9. Riku Shibuya, Takahiro Kondo, Junji Nakamura: Oxygen Reduction Reaction of Graphite Decorated by the Pyridinic-Nitrogen Contained Molecules with High Density, American Vacuum Society (AVS) 64th International Symposium & Exhibition, Tampa Convention Center, USA, 2017.10.31
10. Jiamei Quan, Takahiro Kondo, Taijun Kozarashi, Tomoyasu Mogi, Junji Nakamura: Quantitative Molecular Beam Study for CO₂ Hydrogenation on Cu (111) and Cu(100) Surfaces, American Vacuum Society (AVS) 64th International Symposium & Exhibition, Tampa Convention Center, USA, 2017.11.1
11. Riku Shbiuya, Donghui Guo, Shunsuke Saji, Chisato Akiba, Takahiro Kondo, Junji Nakamura: Bottom-up design of N-containing carbon catalyst for oxygen reduction, 5th Ito International Research Center Conference "Forefront of Molecular Dynamics at Surfaces and Interfaces: from a single molecule to catalytic reaction", Ito international Research Center (IIRC), Hongo, Tokyo, 2017.11.20 Surface & Interface Spectroscopy Students Prize (SISSP) 受賞
12. Jiamei Quan, Takahiro Kondo, Fahdzi Muttaqien, Taijun Kozarashi, Tomoyasu Mogi, Hiroyuki Oshima, Yuji Hamamoto, Yoshitada Morikawa and Junji Nakamura: Bending-mode induced CO₂ hydrogenation on Cu catalysts via Eley-Rideal type mechanism, 5th Ito International Research Center Conference "Forefront of Molecular Dynamics at Surfaces and Interfaces: from a single molecule to catalytic reaction", Ito international Research Center (IIRC), Hongo, Tokyo, 2017.11.21
13. Taijun Kozarashi, Jiamei Quan, Tomoyasu Mogi, Takahiro Kondo, Junji Nakamura: Reaction dynamics of formate synthesis on Cu single crystal surfaces using supersonic CO₂ molecular beam, The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8), Tsukuba International Congress Center, Tsukuba Japan, 2017.10.26
14. Riku Shibuya, Yuto, Shimoyama, Takahiro Kondo, Junji Nakamura: Graphite decorated by aromatic molecules adlayer works as electrochemical catalyst for oxygen reduction reaction, The 8th International

- Symposium on Surface Science (ISSS-8), Tsukuba International Congress Center, Tsukuba Japan, 2017.10.24
15. X. Zhang, W. Ooki, Y.R. Kosaka, A. Okonogi, T. Kondo, J. Nakamura : One-pot synthesis with size-control of palladium nanoparticles on reduced graphene oxide by spontaneous redox deposition, 253rd ACS National Meeting & Exposition, Moscone Center, USA, 2017.4.4.
 16. Donghui Guo, Riku Shibuya, Yuto Shimoyama, Takahiro Kondo, Junji Nakamura : Active sites of nitrogen-doped carbon materials for oxygen reduction reaction, 16th Korea-Japan Symposium on Catalysis & 3rd International Symposium of Institute for Catalysis, Sapporo, Hokkaido, Japan, 2017.05.17.
 17. Hiroaki Nishino, Takeshi Fujita, Nguyen Thanh Cuong, Satoshi Tominaka, Masahiro Miyauchi, Akiyasu Yamamoto, Soshi Imura, Akihiko Hirata, Naoto Umezawa, Susumu Okada, Eiji Nishibori, Asahi Fujino, Tomohiro Fujimori, Shin-ichi Ito, Junji Nakamura, Hideo Hosono, Takahiro Kondo : Boron-Based Sheets Derived From MgB₂, The Tenth International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC-10), Mielparque-Yokohama, Yokohama, Japan, 2017.8.2
 18. Asahi Fujino, Hiroaki Nishino, Shin-ichi Ito, Junji Nakamura, Hideo Hosono, Takahiro Kondo : Catalytic property of boron hydride sheets, The Tenth International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC-10), Mielparque-Yokohama, Yokohama, Japan, 2017.8.2 (Poster)
 19. Guo Panyu, Junpei Kuwabara, Masahiko Saito, Itaru Osaka, Takaki Kanbara, "Synthesis of Fluorinated Conjugated Polymers via Direct Arylation Polycondensation", TGSW2017, Tsukuba, Japan, September 26, 2017 (poster).
 20. Takaki Kanbara, "Synthesis of fluorene-based conjugated polymers via direct arylation polycondensation", University of Tsukuba-University of Grenoble-Alpes Joint Symposium 2017, Tsukuba, September 26, 2017 (invited).
 21. Kazuhisa Ohtake, "Synthesis of Novel Polyolefins from Oleic Acid ", 13th IUPAC International Conference on Novel Materials and their Synthesis (NMS-X III) , Nanjing, China, October 17, 2017 (invited).
 22. Junpei Kuwabara, "Facile Synthetic Approach to Conjugated Polymers", π -System Figuration German-Japanese Workshop, Heidelberg, Germany, November 13, 2017.
 23. Junpei Kuwabara, "Direct Arylation Polycondensation: Facile Synthetic Approach to Organic Photovoltaic Materials", 2017 GLOBAL RESEARCH EFFORTS ON ENERGY AND NANOMATERIALS, Taipei, Taiwan, December 23, 2017 (invited).
 24. Kazuhisa Ohtake, Yusuke Onose, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, "Synthesis of a thermo-cross-linkable polyolefin from oleic acid by Zrmetallocene catalysts", 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives), Tsukuba, Japan, March, 8, 2018 (poster).
 25. Takaki Kanbara, "Synthesis of Conjugated Polymers via C-H Bond Functionalization Strategy", 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology, Tsukuba, March 8, 2018 (invited).
 26. Tatsuya Nabeshima, "Highly Functional Oligomeric Dipyrin Complexes with Typical Element" *The 12th International Conference of Heteroatom Chemistry (ICHAC-12)*, The University of British Columbia, Vancouver, Canada, June 11-16, 2017 (Oral)
 27. Takashi Nakamura, Hikaru Kimura, Tatsuya Nabeshima "Chiral supramolecules constructed from helical metal complexes" *The 29th International Symposium on Chirality (Chirality 2017; ISCD-29)*, Waseda University International Conference Center, Shinjuku, Tokyo, July 9-12, 2017 (Oral)
 28. Takashi Nakamura, Yuya Kaneko, Eiji Nishibori, Tatsuya Nabeshima, "Wavy-Stacked Macrocyclic Hexanuclear Complex Capturing Guest Molecules via Multipoint Coordination" *The 6th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC6)*, the Melbourne Convention Centre, Melbourne, Australia, July 23-28, 2017 (Oral)
 29. Tatsuya Nabeshima "Formation of Helical Supramolecular Complex and Self-Assembly Responding to External Stimuli" *IUMRS-ICAM 2017*, Kyoto University, Kyoto, August 27-September 1, 2017 (Invited)
 30. Tatsuya Nabeshima "Highly Cooperative Formation and Functions of Metallosupramolecules" University of Tsukuba-University of Grenoble-Alpes Joint Symposium, University of Tsukuba, Tsukuba, September 26, 2017 (依頼講演)
 31. Tatsuya Nabeshima "Selective Guest Recognition and Switching Functions of BODIPY and Its Analogs" *2017 Global Research Efforts on Energy and Nanomaterials (GREEN 2017)*, Gis Taipei Tech Convention Center, Taipei, Taiwan, December 21-24, 2017 (Invited)
 32. Takashi Nakamura, Yuya Kaneko, Tatsuya Nabeshima "A Large Macrocyclic That Binds Molecules by Multipoint Metal-Ligand Coordination" *2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives)*, University of Tsukuba, Tsukuba, March 8-9, 2018 (Invited)
 33. Yuto Kawashima, Takashi Nakamura, Tatsuya Nabeshima "Multinuclear Zinc Complex that Accumulates Labile Coordination Sites in an Orderly Fashion" *2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives)*, University of Tsukuba, March 8-9, 2018 (Poster)

34. Shinnosuke Tsukuda, Takashi Nakamura, Tatsuya Nabeshima “A Macrocyclic Saloph-Belt Ligand and Its Manganese Complex” *2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives)*, University of Tsukuba, Tsukuba, March 8-9, 2018 (Poster)
35. Akira Nagai, Takashi Nakamura, Tatsuya Nabeshima “Studies on Size-Selective Synthesis of Macrocycles with Amphiphilic Chains” *2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives)*, University of Tsukuba, Tsukuba, March 8-9, 2018 (Poster)
36. Takuma Morozumi, Ryota Matsuoka, Tatsuya Nabeshima, “Supramolecular Self-assembly Composed of Tetraphenylmethane-appended Helical Metal Complexes” *2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives)*, University of Tsukuba, Tsukuba, March 8-9, 2018 (Poster)
37. Sota Yonemura, Takashi Nakamura, Tatsuya Nabeshima “ β -Cyclodextrin Derivatives with 7 Amide Groups and Its Unique Structure” *2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives)*, University of Tsukuba, Tsukuba, March 8-9, 2018 (Poster)
38. K. Namiki, T. Shibata, S. Neya, A. Suzuki, and Y. Yamamoto, “Characterization of peroxidase cycle through a change in electron density of heme atom”, *6th Georgian Bay International Conference on Bioinorganic Chemistry*, Ontario, Canada, 2017.05.23-27 (poster).
39. Y. Yamamoto, T. Shibata, Y. Katahira, K. Ochi, Y. Nakayama, H. Tai, A. Watanabe, T. Nakao, S. Yanagisawa, T. Ogura, H. Hemmi, M. Hagihara, A. Suzuki, and S. Neya, “Heme-DNA Complexes”, 14th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry (ISABC14), Toulouse, France, 2017.06.7-10 (Oral).
40. T. Shibata, K. Ochi, H. Araki, Y. Nakayama, R. Shinomiya, S. Yanagisawa, T. Ogura, H. Hemmi, D. Sen, and Y. Yamamoto, “Characterization of Complexes between heme and G-Quadruplex DNAs Formed from Human Telomere-Related Sequences”, *The second international symposium on biofunctional chemistry (ISBC2017)*, Kyoto, Japan, 2017.12.14-16 (Poster).
41. R. Shinomiya, T. Shibata, S. Yanagisawa, T. Ogura, A. Suzuki, S. Neya, D. Sen, and Y. Yamamoto, “Characterization of Peroxidase Activities and Structures of Complexes between Chemically Modified Hemes and All Parallel G-Quadruplex DNA formed from d(TTAGGG)”, *The second international symposium on biofunctional chemistry (ISBC2017)*, Kyoto, Japan, 2017.12.14-16 (Poster).
42. A. Asaithambi, D. Okada, G. Prinz, Y. Yamamoto, A. Lorke, “Rydberg like states in organic semiconductor rods”, DPG spring meeting, Berlin, Germany, March 12-16, 2018.
43. D. Braam, G. Prinz, K. Tabata, S. Kushida, D. Okada, Y. Yamamoto, A. Lorke, “Whispering Gallery Modes in Self-Assembled Microspheres of Highly Fluorescent Polymers”, DPG spring meeting, Berlin, Germany, March 12-16, 2018.
44. Yohei Yamamoto, “Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers” 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology, Univ. Tsukuba, Japan, March 8-9, 2018.
45. Amandeep Jindal, Suddhasatwa Basu, Neha Chauhan, Tomofumi Ukai, Sakthi Kumar, Yohei Yamamoto, “Microfluidic Fuel Cell Fabrication with Non-Precious Carbon Nitride Nanofibers as Cathode Catalyst”, 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology, Univ. Tsukuba, Japan, March 8-9, 2018.
46. Daichi Okada, Zhan-Hong Lin, Yusuke Kitayama, Masakazu Morimoto, Fumio Sasaki, Jer-Shing Huang, Masahiro Irie, Yohei Yamamoto, “Self-assembled photo-switchable micro-resonator from fluorescent diarylethene” 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology, Univ. Tsukuba, Japan, March 8-9, 2018.
47. Osamu Oki, Soh Kushida, Annabel Mikosch, Kota Hatanaka, Youhei Takeda, Satoshi Minakata, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, Thang D. Dao, Satoshi Ishii, Tadaaki Nagao, Alexander J. C. Kuehne, Felix Deschler, Richard Friend, Yohei Yamamoto, “Near-Infrared Whispering Gallery Mode Photoluminescence from Conjugated Polymer Blend Microresonators” 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology, Univ. Tsukuba, Japan, March 8-9, 2018.
48. Yusuke Kitayama, Yusuke Aikyo, Takeo Minari, Xuying Liu, Masakazu Morimoto, Masahiro Irie, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, Yohei Yamamoto, “Emission color switching with self-assembled polymer microdisk array” 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology, Univ. Tsukuba, Japan, March 8-9, 2018.
49. Yoo Jooyoung, Sae Nakajima, Ken Albrecht, Youhei Takeda, Satoshi, Minakata, Kimihisa Yamamoto, Yohei Yamamoto, “Donor-Acceptor Dendrimer Crystals that Exhibit Sensitive Fluorescence Color Change with External Stimuli” 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology, Univ. Tsukuba, Japan, March 8-9, 2018.
50. Daichi Okada, Hiroki Nishioka, Anna Ichimura, Hayato Tsuji, Fumio Sasaki, Eiichi Nakamura, Yohei Yamamoto, “Wavelength Tunable Organic Microcrystal Lasers”, CEMSupra 2018, Univ. Tokyo, Japan, January 9-10, 2018.
51. Zakarias Seba Ngara, Daichi Okada, Osamu Oki, Yohei Yamamoto, “Whispering gallery modes from self-assembled microspheres of π -conjugated polymers coordinated with Eu^{3+} ions”, Univ. Tokyo, Japan, January 9-10, 2018.

52. Osamu Oki, Soh Kushida, Annabel Mikosch, Kota Hatanaka, Youhei Takeda, Satoshi Minakata, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, Thang D. Dao, Satoshi Ishii, Tadaaki Nagao, Alexander J. C. Kuehne, Felix Deschler, Richard Friend, Yohei Yamamoto, "Near infrared whispering gallery modes from conjugated polymer blend microresonators", Univ. Tokyo, Japan, January 9-10, 2018.
53. Sae Nakajima, Soh Kushida, Ken Albrecht, Youhei Takeda, Satoshi Minakata, Kimihisa Yamamoto, Eiji Nishibori, Uwe H. F. Bunz, Yohei Yamamoto, "Microporous Crystalline Dendrimers for Fluorescence Sensing", Univ. Tokyo, Japan, January 9-10, 2018.
54. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in Max Planck Institute for Polymer Research, Mainz, Germany, December 7, 2017
55. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in Leibniz Institute (IWF), Dresden, Germany, December 1, 2017
56. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in Fribourg University, Fribourg, Swiss, November 21, 2017
57. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Organic Semiconductor Microlasers", π -Figuration German-Japanese Workshop Heidelberg, Heidelberg, Germany, November 13-14, 2017
58. Daichi Okada, Hiroki Nishioka, Anna Ichimura, Hayato Tsuji, Fumio Sasaki, Eiichi Nakamura, Yohei Yamamoto, "Wavelength Tuning in Carbon-Bridged Phenylenevinylene Cocystal Microcavity Lasers", π -Figuration German-Japanese Workshop Heidelberg, Heidelberg, Germany, November 13-14, 2017, (Poster)
59. Airong Qiagedeer, Fumitaka Ishiwari, Takanori Fukushima, Yohei Yamamoto, "Aggregation-induced-emission polymer-based whispering gallery mode resonators for gas and humidity sensing", π -Figuration German-Japanese Workshop Heidelberg, Heidelberg, Germany, November 13-14, 2017 (Poster)
60. Yusuke Kitayama, Yusuke Aikyo, Takeo Minari, Xuying Liu, Masakazu Morimoto, Masahiro Irie, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, Yohei Yamamoto, "Selective color switching with self-assembled polymer microdisk array", π -Figuration German-Japanese Workshop Heidelberg, Heidelberg, Germany, November 13-14, 2017 (Poster)
61. Sae Nakajima, Soh Kushida, Ken Albrecht, Kimihisa Yamamoto, Eiji Nishibori, Yohei Yamamoto, "Microporous Crystal from Carbazole Dendrimers", π -Figuration German-Japanese Workshop Heidelberg, Heidelberg, Germany, November 13-14, 2017 (Poster)
62. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in Imperial College London, London, UK, November 3, 2017
63. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in Oxford University, Oxford, UK, November 2, 2017
64. Yohei Yamamoto, "Collaboration and Exchange between Germany and Japan ~ Research is a series of encounters! ~", Alumni meeting of the German delegations to the Super Science High School (SSH) Student Fair 2012-2017, Berlin, Germany, October 21, 2017
65. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in University of Potsdam, Potsdam, Germany, October 16, 2017
66. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in Leibniz Institute for Optical Technology, Jena, Germany, October 12, 2017
67. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in Institute of Macromolecular Chemistry, Praha, Czech, October 9, 2017
68. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in Johannes Kepler University, Linz, Austria, October 6, 2017
69. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in INF, Port, Portugal, September 25, 2017 (Oral)
70. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in Universitat d'Alicante, Alicante, Spain, September 22, 2017 (Oral)
71. Yohei Yamamoto, "Interdisciplinary Joint Research in Chemistry and Physics Since 150-th Anniversary of German-Japanese Relations", Japan Tag, Bochum Univ, Germany, July 22, 2017
72. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in Technical University München, Munich, Germany, July 18, 2017 (Oral)
73. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", JEX 2017 Workshop, Munich, Germany, July 15, 2017 (Poster)
74. Yohei Yamamoto, Self-assembled microcavities from conjugated macromolecules and polymers for optical and laser applications, 13th International Conference on Materials Chemistry (MC13), Liverpool, UK, July 10-13, 2017 (Oral)
75. Yohei Yamamoto, "Whispering gallery mode lasing from self-assembled conjugated polymer microspheres",

- Electrical and Related Properties of Organic Solids (ERPOS2017), St. Andrews, UK, July 9-13, 2017 (Oral)
76. Yohei Yamamoto, "Self-assembled microspheres from conjugated molecules and polymers for optical cavities and lasers", International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (ISMSC) in conjunction with ISACS: Challenges in Organic Materials & Supramolecular Chemistry, Cambridge, UK, July 2-6, 2017 (Poster)
 77. Osamu Oki, Soh Kushida, Youhei Takeda, Satoshi Minakata, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, Thang Dao, Satoshi Ishii, Tadaaki Nagao, Yohei Yamamoto, "Near-Infrared Whispering Gallery Mode Photoluminescence from Conjugated Polymer Blend Microresonators via Intrasphere FRET", International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (ISMSC) in conjunction with ISACS: Challenges in Organic Materials & Supramolecular Chemistry, Cambridge, UK, July 2-6, 2017 (Poster)
 78. Yohei Yamamoto, "Whispering Gallery Mode Lasing from Self-Assembled Conjugated Polymer Microsphere Resonators", XXXVI Reunión BIENAL de la Real Sociedad Española de QUÍMICA (BIENAL2017), Sitges, Spain, June 25-29, 2017 (Oral)
 79. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in University of Malaga, Malaga, Spain, June 23, 2017 (Oral)
 80. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in Eindhoven University of Technology, Eindhoven, Netherland, June 14, 2017 (Oral)
 81. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in DWI, Aachen, Germany, June 13, 2017 (Oral)
 82. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in University of Heidelberg, Heidelberg, Germany, June 1, 2017 (Oral)
 83. Yohei Yamamoto, "Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", E-MRS 2017 Spring Meeting, Strasbourg, France, May 22-26, 2017 (Poster)
 84. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers", Seminar in University of Strasbourg, University of Strasbourg, May 22, 2017 (Oral)
 85. Yohei Yamamoto, "Self-Assembled Conjugated Polymer Whispering Gallery Mode Microcavities for Lasing", Frontiers in Polymer Chemistry, Seville, Spain, May 17-19, 2017 (Poster)
 86. Seiya Tsujimura (Univ. Tsukuba), "Porous carbon materials for enzymatic biofuel cells" XXIV International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, BES2017, Lyon, 2017, July, 4, (Keynote)
 87. Seiya Tsujimura (Univ. Tsukuba), "Meso/macro porous carbon for enzyme electrode", Energy and electron transfers in molecular engineered materials, Strasbourg, 2017, June, 27
 88. Seiya Tsujimura (Univ. Tsukuba) "Enzymatic biofuel cells" 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology(Workshop of Pre-Strategic Initiatives), Tsukuba, 2018, March 8
 89. Shuji Ishii, Hiroto Funabashi, Seiya Tsujimura (Univ. Tsukuba), "Bilirubin oxidase-catalyzed oxygen reduction cathode using MgO-templated carbons", The 68th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, Providence, 2017. Aug. 28.
 90. Seiya Tsujimura, Kazunori Sugihara, Tsubasa Adachi, and Kazuki Murata (Univ. Tsukuba), "Stabilization of redox enzymes by kosmotropic anions with ammonium ion for applications to bioelectrochemical devices", The 68th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, Providence, 2017. Aug. 28.
- 国内会議
1. 中村潤児, モデル触媒の活性サイトと反応メカニズム, 2017 年真空・表面科学合同講演会, 横浜市立大学金沢八景キャンパス(神奈川), 2017.8.18. (学会賞受賞記念講演)
 2. 中村潤児, 白金フリー燃料電池の実用化前進:炭素触媒の活性点解明, 2017 年真空・表面科学合同講演会, 横浜市立大学金沢八景キャンパス(神奈川), 2017.8.18. (招待講演)
 3. 中村潤児, 酸素還元反応に対する窒素ドーブ炭素触媒の活性点, 第 120 回触媒討論会, 愛媛大学城北キャンパス(愛媛), 2017.9.12. (特別講演)
 4. 近藤剛弘, 白金代替窒素ドーブ炭素触媒と新規ホウ素触媒, 2017 年度触媒学会北海道支部札幌講演会「~固体表面反応場の新しい描像~」, 北海道大学(北海道), 2017.12.4. (招待講演)
 5. 近藤剛弘、郭東輝、渋谷陸、秋葉千聖、佐治俊輔、中村潤児, 酸素還元反応に対する窒素ドーブ炭素材料の触媒活性点, 平成 29 年度 高難度選択酸化反応研究会シンポジウム, 東京工業大学蔵前会館 3F 手島精一記念会議室 AB, 2018.1.26. (招待講演)
 6. 近藤剛弘, ホウ化水素(ボロファン)シートの生成と機能, 第 63 回 GREEN オープンセミナー, 物質・材料研究機構 並木地区 WPI-MANA 棟 1F Auditorium, 2018.2.23. (招待講演)
 7. 近藤剛弘, ボロファンシートの生成と機能, 第 16 回 Pring-8 ユーザー協同体 顕微ナノ材料科学研究会, 第13回 日本表面科学会 放射光表面科学研究部

- 会, 第2回 日本表面科学会 プローブ顕微鏡研究部会, 合同シンポジウム, 東京大学柏キャンパス物性研究所, 2018.3.27. (招待講演)
8. 渋谷陸, 下山 雄人, 近藤剛弘, 中村潤児: 窒素含有共役系分子で修飾したグラファイト電極の酸素還元活性, 2017年真空・表面科学合同講演会 第37回表面科学学術講演会・第58回真空に関する連合講演会, 横浜市立大学金沢八景キャンパス, 2017.8.18. (講演奨励賞 スチューデント部門 受賞)
 9. 白石一真, 近藤剛弘, 藤谷忠博, 中村潤児: 藻類産生油由来スクアレンの常圧接触クラッキングによるイソプレン製造, 第120回触媒討論会, 愛媛大学城北キャンパス(愛媛), 2017.9.12.
 10. 朱博, 近藤剛弘, 藤谷忠博, 中村潤児: ホウ素ドーパしたグラファイト炭素モデル触媒の調製と反応性, 第120回触媒討論会, 愛媛大学城北キャンパス(愛媛), 2017.9.13. (ポスター発表)
 11. 丹治頭人, 近藤剛弘, 藤谷忠博, 中村潤児: 金触媒でのCO酸化のメカニズム, 第120回触媒討論会, 愛媛大学城北キャンパス(愛媛), 2017.9.13. (ポスター発表)
 12. 茂木智泰, 古晒大絢, 全家美, 近藤剛弘, 中村潤児: 超音速CO₂分子線を用いたCu表面でのフォルメート生成反応ダイナミクスの解析, 第120回触媒討論会, 愛媛大学城北キャンパス(愛媛), 2017.9.14.
 13. 藤野朝日, 伊藤伸一, 西野弘晃, 中村潤児, 細野秀雄, 近藤剛弘: エタノールの脱水反応に対する水素化ホウ素シートの触媒特性, 第120回触媒討論会, 愛媛大学城北キャンパス(愛媛), 2017.9.14.
 14. 渋谷陸, 下山雄人, 近藤剛弘, 中村潤児: 窒素含有共役系分子で修飾したグラファイト電極の酸素還元活性, 第120回触媒討論会, 愛媛大学城北キャンパス(愛媛), 2017.9.14.
 15. 木村和哉, 中村潤児, 藤谷忠博: 藻類産生油由来スクアレンの常圧接触クラッキングによるイソプレン製造, 日本化学会秋季事業 第7回CSJ化学フェスタ2017, タワーホール船堀(東京), 2017.10.17. (ポスター発表)
 16. 西野弘晃, 藤田武志, Nguyen Thanh Cuong, 富中悟史, 宮内雅浩, 飯村壮史, 平田秋彦, 梅澤直人, 岡田晋, 西堀英治, 藤野朝日, 藤森智博, 伊藤伸一, 中村潤児, 細野秀雄, 近藤剛弘: ホウ化水素シートの生成と機能, 第12回日本ホウ素・ホウ化物研究会(JSBB2017) 国士舘大学 世田谷キャンパス メープルセンチュリーホール(MCH) 1階 大講義室, 2018.2.24.
 17. 木村和哉, 白石一真, 近藤剛弘, 中村潤児, 藤谷忠博: 藻類産生油由来スクアレンの常圧接触クラッキングのイソプレン製造, 日本化学会第98春季年会2018, 日本大学船橋キャンパス(千葉), 2018.3.20.
 18. 古晒大絢, 全家美, 茂木智泰, 近藤剛弘, 中村潤児: 超音速CO₂分子線を用いた単結晶Cu表面でのフォルメート生成反応メカニズムとダイナミクス, 2017年真空・表面科学合同講演会 第37回表面科学学術講演会・第58回真空に関する連合講演会, 横浜市立大学金沢八景キャンパス, 2017.8.19.
 19. 桑原 純平, 土田 渉, 神原 貴樹「Pd/Cu二元系触媒を用いたクロロチオフェン類をモノマーとする直接アリアル化重縮合」第66回高分子学会年次大会、千葉、2017年5月29日(Poster).
 20. 齋藤 仁志、陳 捷然、桑原 純平、安田 剛、神原 貴樹「連続的な臭素化→直接的アリアル化重合により合成した高分子半導体のデバイス機能評価」第66回高分子学会年次大会、千葉、2017年5月30日(Poster).
 21. 青木 英晃、齋藤 仁志、桑原 純平、神原 貴樹「脱水素型クロスカップリング反応による共役系高分子の合成」第66回高分子学会年次大会、千葉、2017年5月29日(Poster).
 22. 市毛 明斗、齋藤 仁志、桑原 純平、神原 貴樹「水分・酸素に対して安定な直接的アリアル化重縮合の開発」第66回高分子学会年次大会、千葉、2017年5月29日(Poster).
 23. 大石 修平、桑原 純平、神原 貴樹「硫黄-藻類オイル共重合体の合成とその物性評価」第66回高分子学会年次大会、千葉、2017年5月30日(Poster).
 24. 神原 貴樹「直接的アリアル化重縮合: 高分子半導体の製造プロセスを志向した合成手法の開発」有機EL討論会第24回例会、東京、2017年6月16日(招待講演).
 25. 神原 貴樹「直接的アリアル化重縮合: 簡便で環境に優しい高分子半導体製造プロセスの開発」関東高分子若手研究会 2017 春の講演会、和光、2017年6月24日(招待講演).
 26. 山口 佳歩、山脇 和馬、桑原 純平、安田 剛、西村 賢宣、神原 貴樹「超分子相互作用によるNCNピンサー型白金錯体の発光特性変化」錯体化学会第67回討論会、札幌、2017年9月17日.
 27. 桑原 純平「直接アリアル化重縮合による共役高分子材料の新規環境調和型合成」第66回高分子討論会、松山、2017年9月21日(受賞講演).
 28. 齋藤 仁志、桑原 純平、安田 剛、神原 貴樹「脱水素型直接的アルケニル化重縮合によるポリアリーレンビニレンの合成」第66回高分子討論会、松山、2017年9月20日.
 29. 大嶽 和久、桑原 純平、神原 貴樹「オレイン酸を原料とした新規ポリオレフィンの創出」第66回高分子討論会、松山、2017年9月20日.
 30. Alanna Faradhiyani, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, "Synthesis of dye-containing polymers

- using polycondensation via aerobic oxidative coupling reaction”, 第 66 回高分子討論会, 松山, 2017 年 9 月 20 日.
31. 大石 修平、桑原 純平、面田 亮、相原雄一、渡辺 秀夫、渡邊 信、神原 貴樹「単体硫黄と藻類オイルを原料とする高分子の合成と特性評価」第 66 回高分子討論会, 松山, 2017 年 9 月 22 日.
 32. 青木英晃、齋藤仁志、桑原純平、神原貴樹「大気中の酸素を利用した脱水素型クロスカップリング反応による共役系高分子の合成」第 7 回 CSJ 化学フェスタ 2017、東京、2017 年 10 月 19 日(Poster).
 33. 小野瀬悠佑、大嶽和久、桑原純平、神原貴樹「オレイン酸を原料とした新規ポリオレフィンの開発」第 7 回 CSJ 化学フェスタ 2017、東京、2017 年 10 月 18 日(Poster).
 34. 下山雄人、齋藤仁志、桑原純平、神原貴樹「脱水素型クロスカップリング反応における添加剤効果の解明」第 7 回 CSJ 化学フェスタ 2017、東京、2017 年 10 月 18 日(Poster).
 35. 神原 貴樹「直接的アリアル化重縮合: 簡便で環境に優しい高分子半導体製造プロセスの開発」第 3 回材料相模セミナー、綾瀬、2017 年 10 月 18 日(招待講演).
 36. 桑原純平、山口佳歩、山脇和馬、安田 剛、西村賢宣、神原貴樹「二種類の分子間相互作用による Pt 錯体の発光色制御」第 32 回高分子学会関東支部茨城地区「若手の会」交流会、つくばみらい、2017 年 10 月 31 日(Poster).
 37. 大嶽 和久、桑原 純平、神原 貴樹「植物油を原料とした新規ポリオレフィンの創製」第 32 回高分子学会関東支部茨城地区「若手の会」交流会、つくばみらい、2017 年 10 月 30 日(Poster).
 38. 下山雄人、齋藤仁志、桑原純平、神原貴樹「脱水素型クロスカップリング反応の反応メカニズムの解明」第 32 回高分子学会関東支部茨城地区「若手の会」交流会、つくばみらい、2017 年 10 月 30 日(Poster).
 39. 出口 理沙、桑原 純平、神原 貴樹「ビチアズールポリマーを用いた OLED 発光材料の開発」第 32 回高分子学会関東支部茨城地区「若手の会」交流会、つくばみらい、2017 年 10 月 30 日(Poster).
 40. 青木 英晃、齋藤 仁志、桑原 純平、神原 貴樹「酸素を利用した脱水素型クロスカップリング反応による共役系高分子の合成」第 32 回高分子学会関東支部茨城地区「若手の会」交流会、つくばみらい、2017 年 10 月 30 日(Poster).
 41. 市毛 明斗、齋藤 仁志、桑原 純平、神原 貴樹「水分・酸素に対して安定な直接的アリアル化重縮合の開発」第 32 回高分子学会関東支部茨城地区「若手の会」交流会、つくばみらい、2017 年 10 月 30 日(Poster).
 42. 小野瀬 悠佑、大嶽 和久、桑原 純平、神原 貴樹「オレイン酸を原料とした新規ポリオレフィンの開発」第 32 回高分子学会関東支部茨城地区「若手の会」交流会、つくばみらい、2017 年 10 月 30 日(Poster).
 43. 田中 智恵、青木 英晃、齋藤 仁志、桑原 純平、神原 貴樹「脱水素型クロスカップリング重縮合の基質適用範囲の拡張」第 32 回高分子学会関東支部茨城地区「若手の会」交流会、つくばみらい、2017 年 10 月 30 日(Poster).
 44. 大井 香穂、大石 修平、渡辺 秀夫、渡邊 信、桑原純平、神原 貴樹「藻類オイル(Race B)—硫黄ハイブリッドポリマーによる赤外光学用材料の開発」第 32 回高分子学会関東支部茨城地区「若手の会」交流会、つくばみらい、2017 年 10 月 30 日(Poster).
 45. 桑原 純平「分子間相互作用を利用した Pt 錯体の発光色制御」 π 造形科学 第 4 回公開シンポジウムプログラム、東京、2017 年 10 月 19 日.
 46. 大嶽 和久、桑原 純平、神原 貴樹「オレイン酸を原料とした新規ポリオレフィンの創出」平成 29 年度第 2 回 ABES 研究発表会、2017 年 12 月 1 日.
 47. 桑原 純平、山口 佳歩、山脇 和馬、安田 剛、西村賢宣、神原 貴樹「複数の分子間相互作用による Pt 錯体の発光色制御」 π 造形科学若手研究会、横浜、2017 年 12 月 15 日(Poster).
 48. 下山 雄人、齋藤 仁志、桑原 純平、神原 貴樹「脱水素型クロスカップリング反応の反応メカニズムの解明」 π 造形科学若手研究会、横浜、2017 年 12 月 15 日(Poster).
 49. 下山 雄人、桑原 純平、神原 貴樹「脱水素型クロスカップリング反応における銀塩の役割」日本化学会第 98 春季年会、船橋、2018 年 3 月 22 日.
 50. 桑原 純平、大石 修平、面田 亮、相原 雄一、高橋 利和、崔 準哲、渡辺 秀夫、渡邊 信、神原 貴樹「硫黄と藻類産生オイルを原料とする高分子材料の合成」日本化学会 第 98 春季年会、船橋、2018 年 3 月 20 日(Poster).
 51. 中村貴志「超分子システムの精密構築と機能開拓」第 17 回機能性分子シンポジウム(2017 大饗シンポジウム)、筑波大学筑波キャンパス、つくば、2017 年 4 月 22 日(依頼講演)
 52. 永井瑛・中村貴志・鍋島達弥「複数のシッフ塩基をもつ両親媒性環状多量体配位子の合成と性質」第 15 回ホスト-ゲスト・超分子化学シンポジウム(SHGSC2017)、立命館大学びわこ・くさつキャンパス、草津、2017 年 6 月 3-4 日(ポスター)
 53. 北條智大・中村貴志・松岡亮太・鍋島達弥「大きな空孔を有する大環状ジピリン誘導体の合成と機能」第 15 回ホスト-ゲスト・超分子化学シンポジウム(SHGSC2017)、立命館大学びわこ・くさつキャンパス、草津、2017 年 6 月 3-4 日(ポスター)

54. 武藤圭汰・中村貴志・松岡亮太・鍋島達弥 「三重らせん錯体の自己集積による巨大正四面体型ホモキラル超分子の合成」 第15回ホスト・ゲスト・超分子化学シンポジウム(SHGSC2017)、立命館大学びわこ・くさつキャンパス、草津、2017年6月3-4日(ポスター)
55. 野田卓夢・齊川誠・中村貴志・松岡亮太・鍋島達弥 「ねじれた不斉構造を持つ環状ジピリン錯体の合成と性質」 第28回基礎有機化学討論会、九州大学伊都キャンパス、福岡、2017年9月7-9日(ポスター)
56. 武藤圭汰・松岡亮太・中村貴志・鍋島達弥 「シッフ塩基形成による自己集積を利用した正四面体型ケージ分子の合成と機能」 第28回基礎有機化学討論会、九州大学伊都キャンパス、福岡、2017年9月7-9日(ポスター)
57. Yuto Kayashima, Takashi Nakamura, Tatsuya Nabeshima "Triangular Multinuclear Zinc Complex that Inwardly Accumulates Labile Coordination Sites and Its Supramolecular Structure" 錯体化学会第67回討論会、北海道大学札幌キャンパス、札幌、2017年9月16-18日(ポスター)
58. 鍋島達弥 「ジピリン典型元素錯体を元素ブロックとする新規機能性分子の創製」 第66回高分子討論会、愛媛大学常北キャンパス、松山、2017年9月20-22日(依頼講演)
59. Takumu Noda, Makoto Saikawa, Ryota Matsuoka, Takashi Nakamura, Tatsuya Nabeshima "Synthesis and Properties of Heteronuclear Dipyrrin Complexes with a Figure-of-8 Structure" *TGSW2017*, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, September 25-27, 2017 (Poster)
60. Akira Nagai, Takashi Nakamura, Tatsuya Nabeshima "Selective Synthesis of Amphiphilic Macrocyclic Ligands and Their Complexes Utilizing Reversibility of Imine Bonds" *TGSW2017*, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, September 25-27, 2017 (Poster)
61. Tomohiro Hojo, Takashi Nakamura, Ryota Matsuoka, Tatsuya Nabeshima "Synthesis and Functions of Expanded Macrocyclic Dipyrrin Complexes" *TGSW2017*, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, September 25-27, 2017 (Poster)
62. Keita Muto, Ryota Matsuoka, Tatsuya Nabeshima "Synthesis of Tetrahedral Cage Molecules Utilizing Self-assembly of Triple Helicates" *TGSW2017*, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, September 25-27, 2017 (Poster)
63. 牛坊勇貴・松岡亮太・中村貴志・鍋島達弥 「非対称な平面性 BODIPY の合成と光学特性」 第7回 CSJ 化学フェスタ 2017、タワーホール船堀、東京、2017年10月17-19日(ポスター)
64. 野田卓夢・齊川誠・松岡亮太・中村貴志・鍋島達弥 「8の字型不斉構造をもつ環状ジピリン錯体の合成と性質」 第7回 CSJ 化学フェスタ 2017、タワーホール船堀、東京、2017年10月17-19日(ポスター)
65. 川島侑人・中村貴志・鍋島達弥 「2,2'-ジピリジンを導入したトリサレン錯体による金属原子の置換活性部位の秩序的な集積」 第7回 CSJ 化学フェスタ 2017、タワーホール船堀、東京、2017年10月17-19日(ポスター)
66. 永井瑛・中村貴志・鍋島達弥 「両親媒性環状多量体の選択的合成と性質」 第7回 CSJ 化学フェスタ 2017、タワーホール船堀、東京、2017年10月17-19日(ポスター)
67. 北條智大・松岡亮太・中村貴志・鍋島達弥 「大きな空孔を有する大環状ジピリン錯体の合成と機能」 第7回 CSJ 化学フェスタ 2017、タワーホール船堀、東京、2017年10月17-19日(ポスター)
68. 武藤圭汰・松岡亮太・中村貴志・鍋島達弥 「シッフ塩基形成による巨正四面体型ケージ分子の合成」 第7回 CSJ 化学フェスタ 2017、タワーホール船堀、東京、2017年10月17-19日(ポスター)
69. 牛坊勇貴・松岡亮太・中村貴志・鍋島達弥 「N₂O 型非対称ジピリンの合成と性質」 第47回複素環化学討論会、高知県立県民文化ホール、高知、2017年10月26-28日(ポスター)
70. 鍋島達弥 「段階的構造変換を利用した創発機能性超分子の構築」 近畿大学平成29年度大学員総合理工学研究科「学際研究」・「課外セミナー」、近畿大学理工学部、東大阪、2017年11月13日(招待講演)
71. 牛坊勇貴・鍋島達弥 「特異な不斉構造をもつ BODIPY 類の合成と光学特性」 第74回有機合成化学協会関東支部シンポジウム(新潟シンポジウム)、新潟大学五十嵐キャンパス、新潟、2017年11月18-19日(口頭)
72. 北條智大・松岡亮太・中村貴志・鍋島達弥 「特異な構造を有する大環状 BODIPY 多量体の合成と性質」 第74回有機合成化学協会関東支部シンポジウム(新潟シンポジウム)、新潟大学五十嵐キャンパス、新潟、2017年11月18-19日(口頭)
73. 鍋島達弥 「錯形成を利用した階層的超分子形成と協同的機能」 錯体化学若手の会関東支部後期勉強会 2017、東京理科大学神楽坂キャンパス、東京、2017年12月2日(依頼講演)
74. 田口大介・中村貴志・鍋島達弥 「カルコゲノフェンを含む BODIPY 類の合成と性質」 第44回有機典型元素化学討論会、東京工業大学大岡山キャンパス、東京、2017年12月7-9日(ポスター)
75. 武藤圭汰・松岡亮太・鍋島達弥 「三重らせん錯体の自己集積による巨大正四面体型ケージ超分子の合成と性質」 第44回有機典型元素化学討論会、東京工業大学大岡山キャンパス、東京、2017年12月7-9日(ポスター)

76. Takashi Nakamura, Yuto Kawashima, Yuya Kaneko, Tatsuya Nabeshima, "Synthesis of Multinuclear Macrocyclic Complexes that Orderly Assemble Labile Coordination Sites and Its Supramolecular Structure" 日本化学会 第 98 春季年会 (2018)、日本大学船橋キャンパス、船橋、2018 年 3 月 20-23 日 (口頭)
77. 牛坊勇貴・鍋島達弥 「N₂O 型キラル BODIPY のダイマーの合成と性質」 日本化学会 第 98 春季年会 (2018)、日本大学船橋キャンパス、船橋、2018 年 3 月 20-23 日 (口頭)
78. 田口大介・鍋島達弥 「複数のカルコゲノフェンを有する BODIPY 類の合成と機能」 日本化学会 第 98 春季年会 (2018)、日本大学船橋キャンパス、船橋、2018 年 3 月 20-23 日 (口頭)
79. 佃真之介・中村貴志・鍋島達弥 「大環状サロフェルト錯体の合成と機能」 日本化学会 第 98 春季年会 (2018)、日本大学船橋キャンパス、船橋、2018 年 3 月 20-23 日 (口頭)
80. 永井瑛・中村貴志・鍋島達弥 「内孔に配位サイトをもつ大環状六核パラジウム錯体の合成および分子結合によるその構造変化」 日本化学会 第 98 春季年会 (2018)、日本大学船橋キャンパス、船橋、2018 年 3 月 20-23 日 (口頭)
81. 北條智大・松岡亮太・鍋島達弥 「環状ジピリンを配位子とした亜鉛錯体の合成と性質」 日本化学会 第 98 春季年会 (2018)、日本大学船橋キャンパス、船橋、2018 年 3 月 20-23 日 (口頭)
82. 武藤圭汰・松岡亮太・鍋島達弥 「三重らせん金属錯体を用いた正四面体型ケージ超分子の構築」 日本化学会 第 98 春季年会 (2018)、日本大学船橋キャンパス、船橋、2018 年 3 月 20-23 日 (口頭)
83. 両角拓磨・松岡亮太・鍋島達弥 「テトラポッド型アンカーを有する三重らせん金属錯体の超分子集積」 日本化学会 第 98 春季年会 (2018)、日本大学船橋キャンパス、船橋、2018 年 3 月 20-23 日 (ポスター)
84. 米村颯太・中村貴志・鍋島達弥 「7つのアミド基をもつシクロデキストリン誘導体の合成および水素結合によるその特異な分子構造」 日本化学会 第 98 春季年会 (2018)、日本大学船橋キャンパス、船橋、2018 年 3 月 20-23 日 (ポスター)
85. 中村俊平、中井佑生、原田彩佳、柴田友和、西村龍、並木孝介、渡邊美帆、湯本史明、千田俊哉、鈴木秋弘、根矢三郎、山本泰彦、「ミオグロビンにおけるヘム配向の決定機構の解明」、第 44 回生体分子科学討論会、秋田市、2017.06.23-24(口頭)。
86. 長谷川和康、齋藤真器名、瀬戸誠、小林康浩、太田雄大、柳澤幸子、小倉尚志、山本泰彦、柴田友和、根矢三郎、鈴木秋弘、「ミオグロビンのオキシ体における共鳴混成体の解析」、錯体化学会 第 67 回討論会、札幌市、2017.09.16-18(ポスター)。
87. 渡邊美帆、金井佑生、西村龍、柴田友和、松尾貴史、廣田俊、柳澤幸子、小倉尚志、鈴木秋弘、根矢三郎、山本泰彦、「ヘムの電子構造および遠位アミノ酸変異がミオグロビンの機能調節に与える影響」、錯体化学会 第 67 回討論会、札幌市、2017.09.16-18(ポスター)。
88. Yasuhiko Yamamoto, 「Heme as a Prosthetic Group of DNAszymes」, *The First University of Tsukuba and University of Grenoble-Alpes Joint Symposium*, つくば市、2017.09.25-26(Oral)。
89. 山本泰彦、田口耕太朗、鳥澤真鈴、渡邊美帆、西村龍、柴田友和、鈴木秋弘、根矢三郎、逸見光、「ヘム軸配位子ヒスチジンの電子構造における共鳴がミオグロビンの外部配位子識別に与える影響」、第 56 回 NMR 討論会(2017)、八王子市、2017.11.14-16(ポスター)。
90. 山本泰彦、「四重鎖 DNA とヘムが拓く物質科学」、エネルギー物質科学研究センター(TREMS)スタートアップミーティング、つくば市、2017.11.25(口頭)。
91. 山本泰彦、「四重鎖 DNA とヘムの相互作用が拓く物質科学」、第一回プレ戦略研究会「次世代物質・デバイス戦略開発拠点」、つくば市、2017.12.11(口頭)。
92. 山本泰彦、「ヘムタンパク質の電子論」、生命の機能とかたち、連携セミナーシリーズ第4回、つくば市、2018.03.7(口頭)。
93. Yasuhiko Yamamoto, Tomokazu Shibata, Yusaku Nakayama Ryosuke Shinomiya and Haruka Araki, 「Characterization of Complexes between Heme and G-quadruplex DNAs」, *2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives)*, つくば市、2018.03.8-9 (Oral)。
94. Ryo Shinomiya, Tomokazu Shibata, Takashi Ogura, Sachiko Yanagisawa, Akihiro Suzuki, Saburo Neya, Dipankar Sen, and Yasuhiko Yamamoto, 「Characterization of Peroxidase Activities and Structures of Complexes between Chemically Modified Hemes and G-Quadruplex DNA formed from d(TTAGGG)」, *2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives)*, つくば市、2018.03.8-9 (Poster)。
95. Shunpei Nakamura, Yuki Kanai, Ayaka Harada, Tomokazu Shibata, Ryu Nishimura, Fumiaki Yumoto, Toshiya Senda, and Yasuhiko Yamamoto, 「Characterization of Heme Orientational Disorder in a Myoglobin Reconstituted with a fluorinated Heme Cofactor」, *2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives)*, つくば市、2018.03.8-9 (Poster)。
96. 山本泰彦、荒木はるか、中山優作、越智健太郎、柴田友和、逸見光、萩原正規、Sen Dipankar、「ヒトテロメア類似塩基配列の四重鎖 DNA とヘム複合体の

- NMR 分光法による構造解析」、日本化学会 第98 春季年会 (2018)、船橋市、2018.03.20-23 (口頭)。
97. 荒木はるか、中山優作、越智健太郎、篠宮僚介、柴田友和、逸見光、萩原正規、小倉尚志、柳澤幸子、鈴木秋弘、根矢三郎、Sen Dipankar、山本泰彦、「ヒテロメア類似塩基配列の四重鎖 DNA とへム複合体のペルオキシダーゼ活性と構造の關係の解析」、日本化学会 第 98 春季年会 (2018)、船橋市、2018.03.20-23 (口頭)。
 98. 篠宮僚介、柴田友和、小倉尚志、柳澤 幸子、鈴木秋弘、根矢三郎、Sen Dipankar、山本泰彦、「化学修飾へムと四重鎖 DNA [d(TTAGGG)]₄ の複合体のペルオキシダーゼ活性およびへム配位構造の解析」、日本化学会 第 98 春季年会 (2018)、船橋市、2018.03.20-23 (口頭)。
 99. 山本洋平「最先端光材料・光テクノロジー国際研究拠点形成に向けた TIA 連携」第 17 回 NANOTECH 総合展、東京、2018 年 2 月 14-16 日 (ポスター)
 100. 山本洋平「共役ポリマー光共振器の開発」化学特別講演、東京、2017 年 12 月 20 日
 101. 岡田大地、山本洋平「共役系有機材料によるマイクロレーザー共振器の開発」第 15 回環境研究シンポジウム、東京、2017 年 11 月 22 日
 102. 中嶋紗英、アルブレヒト建、武田洋平、南方聖司、山元公寿、山本洋平「圧力および温度に敏感な色変化を示す π 共役分子集合体」第 32 回高分子学会関東支部茨城地区若手交流会、茨城、2017 年 10 月 30-31 日 (ポスター)
 103. Airong Qiagedeer, Fumitaka Ishiwari, Takanori Fukushima, Yohei Yamamoto “Aggregation-induced-emission polymer-based whispering gallery mode resonators for humidity sensing” 第 32 回高分子学会関東支部茨城地区若手交流会、茨城、2017 年 10 月 30-31 日 (ポスター)
 104. Zakarias S. Ngara, Daichi Okada, Oki Osamu, Yohei Yamamoto, “Whispering Gallery Mode Lasing from π -Conjugated Polymer Microspheres with Europium Metal Complex” 第 32 回高分子学会関東支部茨城地区若手交流会、茨城、2017 年 10 月 30-31 日 (ポスター)
 105. 山本洋平「発光性ポリマーマイクロ光共振器の開発～研究は出会いの連続～」物質科学セミナー、茨城、2017 年 10 月 25 日
 106. Airong Qiagedeer, Fumitaka Ishiwari, Takanori Fukushima, Yohei Yamamoto, “AIE polymer-based WGM resonators for gas and humidity sensing” 第 4 回 π 造形公開シンポジウム、東京、2017 年 10 月 19-20 日 (ポスター)
 107. 中嶋紗英、アルブレヒト建、岡崎真人、武田洋平、南方聖司、山元公寿、山本洋平「圧力および温度に敏感な色変化を示す π 共役 dendrimer 結晶」第 4 回 π 造形公開シンポジウム、東京、2017 年 10 月 19-20 日 (ポスター)
 108. Zakarias S. Ngara, Daichi Okada, Oki Osamu, Yohei Yamamoto, “Whispering Gallery Mode Lasing of microsphere from the self-assembly π -Conjugated Polymer Microspheres Coordinated with Eu^{3+} ion doped polystyrene” 第 4 回 π 造形公開シンポジウム、東京、2017 年 10 月 19-20 日 (ポスター)
 109. 大木理、櫛田創、畑中宏太、武田洋平、南方聖司、桑原純平、神原貴樹、Thang Dao、石井智、長尾忠昭、山本洋平「共役ポリマーブレンド共振器内 FRET を介した近赤外 WGM 発光」第 4 回 π 造形公開シンポジウム、東京、2017 年 10 月 19-20 日 (ポスター)
 110. Zakarias S. Ngara, Daichi Okada, Oki Osamu, Yohei Yamamoto, “Whispering Gallery Mode Lasing from π -Conjugated Polymer Microspheres Coordinated with Eu^{3+} ions” 第 6 回 CSJ 化学フェスタ、船橋、2017 年 10 月 17-19 日 (ポスター)
 111. 中嶋紗英、アルブレヒト建、武田洋平、南方聖司、山元公寿、山本洋平「体温付近で敏感な発色および発光変化を示す π 共役ドナーアクセプター dendrimer 結晶」第 6 回 CSJ 化学フェスタ、船橋、2017 年 10 月 17-19 日 (ポスター)
 112. Daichi Okada, Hiroki Nishioka, Anna Ichimura, Hayato Tsuji, Fumio Sasaki, Eiichi Nakamura, Yohei Yamamoto, “Laser Oscillation and Wavelength Control of Carbon-Bridged Oligophenylenevinylene Microcavities” 第 66 回高分子討論会、愛媛、2017 年 9 月 20-22 日
 113. Osamu Oki, Soh Kushida, Kota Hatanaka, Youhei Takeda, Satoshi Minakata, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, Thang Dao, Satoshi Ishii, Tadaaki Nagao, Yohei Yamamoto, “Efficient Near-Infrared Whispering Gallery Mode Photoluminescence from π -Conjugated Polymer Blend Microsphere resonators” 第 66 回高分子討論会、愛媛、2017 年 9 月 20-22 日
 114. 岡田大地、森本正和、佐々木史雄、Dao Duy Thang, 石井智、長尾忠昭、山本洋平「蛍光性フォトクロミック分子によるマイクロ光共振器アレイの形成と共振モード分裂」第 66 回高分子討論会、愛媛、2017 年 9 月 20-22 日 (ポスター)
 115. 中嶋紗英、アルブレヒト建、武田洋平、南方聖司、山元公寿、山本洋平「圧力および温度に敏感な色変化を示す π 共役 dendrimer 集合体」第 66 回高分子討論会、愛媛、2017 年 9 月 20-22 日 (ポスター)
 116. 岡田大地、西岡拓紀、辻勇人、中村栄一、佐々木史雄、山本洋平「炭素架橋フェニレンビニレンマイクロ結晶からのレーザー発振と波長変調」第 78 回応用物理学会秋季学術講演会、福岡、2017 年 9 月 5-8 日
 117. 岡田大地、森本正和、佐々木史雄、Dao Duy Thang, 石井智、長尾忠昭、入江正浩、山本洋平「蛍光性ジアリールエテン自己組織化マイクロ共振器とモード分

裂」第 78 回応用物理学会秋季学術講演会、福岡、2017 年 9 月 5-8 日

118. Zakarias S. Ngara, Daichi Okada, Osamu Oki, Yohei Yamamoto, “Whispering Gallery Mode Lasing from π -Conjugated Polymer Microspheres Coordinated with Europium Complex” 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会、福岡、2017 年 9 月 5-8 日

119. Yusuke Kitayama, “ π -conjugated polymer micro disk array” ナノグリーンサマースクール、つくば、2017 年 8 月 29 日

120. Kota Takahashi「化学気相蒸着による 2 次元共役高分子合成」ナノグリーンサマースクール、つくば、2017 年 8 月 29 日

121. 根本 美貴, 安立 翼, 梶原 和法, 辻村 清也, “FAD 依存性グルコースデヒドロゲナーゼの安定性に対する電解質効果”, 2017 年電気化学会秋季大会, 長崎大学, 2017 年 9 月 10 日

122. 竹内 聖詞, 辻村 清也, “レドックスハイドロゲル修飾酸化マグネシウム鋳型炭素電極応答の炭素細孔構造の影響”, 2017 年電気化学会秋季大会, 長崎大学, 2017 年 9 月 10 日.

123. 辻村清也, “酵素型バイオ燃料電池にむけた材料開発”, ConBio2017, 神戸ポートアイランド, 2018 年 12 月 6 日,

124. 辻村清也, “酵素型バイオ燃料電池への応用を目指した多孔質炭素の開発” CPC 研究会, 東京, 2017 年 12 月 15 日

125. 辻村清也, “酵素電池のためのナノ構造の制御”, 岡山大学 次世代研究コア形成支援事業 シンポジウム: ナノ材料の合成・計測・新機能開拓, 岡山大, 2018 年 1 月 6 日

126. 辻村清也, “先端炭素の応用事例(バイオ燃料電池)”, 炭素協会主催平成 30 年度ニューカーボン部会講演会, 大阪(東洋炭素本社), 2018 年 2 月 2 日

127. 石居 周二, 船橋 広人, 辻村 清也, “ピリルビンオキシダーゼ酸素還元カソードに適した酸化マグネシウム鋳型炭素電極の細孔サイズと表面修飾の検討”, 電気化学会第 85 回大会, 東京理科大, 2018 年 3 月 11 日

128. 竹内 聖詞, 辻村 清也, “ハイドロゲル修飾グルコース酸化電極に適した酸化マグネシウム鋳型炭素の細孔構造の検討”電気化学会第 85 回大会, 東京理科大, 2018 年 3 月 11 日

129. 根本 美貴, 安立 翼, 新山 歩, 梶原 和法, 辻村 清也, “バイオ燃料電池の作動安定性を向上させる電解質に関する検討”, 電気化学会第 85 回大会, 東京理科大, 2018 年 3 月 11 日

130. 根本 美貴, 安立 翼, 梶原 和法, 辻村 清也, “FAD 依存性グルコース脱水素酵素の安定性に対する電

解質の影響”, 日本農芸化学会 2018 年度大会, 名城大, 2018 年 3 月 17 日

131. 辻村清也, “酸化還元酵素担持用多孔質炭素”, 日本農芸化学会 2018 年度大会. 名城大, 2018 年 3 月 16 日

<メンバー>

専任教員:

中村潤児(数理物質系・物質工学域・教授)
神原貴樹(数理物質系・物質工学域・教授)
鍋島達弥(数理物質系・化学域・教授)
山本泰彦(数理物質系・化学域・教授)
山本洋平(数理物質系・物質工学域・教授)
近藤剛弘(数理物質系・物質工学域・准教授)
辻村清也(数理物質系・物質工学域・准教授)
桑原純平(数理物質系・物質工学域・講師)
中村貴志(数理物質系・化学域・助教)
松岡亮太(数理物質系・化学域・助教)

研究員:

張曉瑞(研究員)
全家美(研究員)
Santosh K. Singh(研究員)
松山 英治(技術職員)
Amandeep Jindal(博士研究員)
林里香(技術補佐員)
松井暁子(技術補佐員)

大学院生:

洪谷陸(数理物質科学研究科・D3)
齋藤仁志(数理物質科学研究科・D3)
高槻小百合(数理物質科学研究科・D3)
大嶽和久(数理物質科学研究科・D2)
黒澤史也(数理物質科学研究科・D2)
牛坊勇貴(数理物質科学研究科・D2)
野田卓夢(数理物質科学研究科・D2)
岡田大地(数理物質科学研究科・D2)
Zakarias Seba Ngara (数理物質科学研究科・D2)
Qiagedeer Airong (数理物質科学研究科・D1)
田畑頭一(数理物質科学研究科・D1)
古晒大絢(数理物質科学研究科・M2)
白石一真(数理物質科学研究科・M2)
朱博(数理物質科学研究科・M2)
西野弘晃(数理物質科学研究科・M2)
松元慶一郎(数理物質科学研究科・M2)
丹治頭人(数理物質科学研究科・M2)
藤野朝日(数理物質科学研究科・M2)
茂木智泰(数理物質科学研究科・M2)
青木英晃(数理物質科学研究科・M2)
江幡篤(数理物質科学研究科・M2)
山口佳歩(数理物質科学研究科・M2)
ALANNA FARADHIYAN(数理物質科学研究科・M2)
郭攀瑜(数理物質科学研究科・M2)
川島侑人(数理物質科学研究科・M2)

田口大介(数理物質科学研究科・M2)
田下紘(数理物質科学研究科・M2)
任和(数理物質科学研究科・M2)
中山優作(数理物質科学研究科・M2)
並木孝介(数理物質科学研究科・M2)
長谷川和康(数理物質科学研究科・M2)
渡邊美帆(数理物質科学研究科・M2)
中嶋紗英(数理物質科学研究科・M2)
高橋昂太(数理物質科学研究科・M2)
齋藤一貴(数理物質科学研究科・M2)
新山歩(数理物質科学研究科・M2)
安立翼(数理物質科学研究科・M2)
市毛明斗(数理物質科学研究科・M1)
大石修平(数理物質科学研究科・M1)
小野瀬悠佑(数理物質科学研究科・M1)
丸山啓輔(数理物質科学研究科・M1)
江鑫(数理物質科学研究科・M1)
出口 理沙(数理物質科学研究科・M1)
下山 雄人(数理物質科学研究科・M1)
佃真之介(数理物質科学研究科・M1)
永井瑛(数理物質科学研究科・M1)
檜森宗(数理物質科学研究科・M1)
北條智大(数理物質科学研究科・M1)
武藤圭汰(数理物質科学研究科・M1)
篠宮僚介(数理物質科学研究科・M1)
中村俊平(数理物質科学研究科・M1)
早坂公佑(数理物質科学研究科・M1)
大木理(数理物質科学研究科・M1)
Yoo Jooyoung(数理物質科学研究科・M1)
北山雄介(数理物質科学研究科・M1)
石居周二(数理物質科学研究科・M1)
内田真世(数理物質科学研究科・M1)
竹内聖詞(数理物質科学研究科・M1)
根本美貴(数理物質科学研究科・M1)

(2) エネルギー物質部門

守友浩, 小林航, 丹羽秀治

<研究成果>

本部門の使命は、(1)エネルギーサイエンスの推進と(2)エネルギーイノベーションの実現の二つです。エネルギーサイエンスとは、エネルギー現象(光電気変換、熱電池変換、物質電気変換、蓄電、等)を電子論的・微視的に解明することです。そのためには、典型物質または理想物質に着目し、基盤研究のための材料開発・デバイス開発、放射光 X 線やナノプローブを駆使した先端計測、第一原理計算による物性予測、等を組み合わせる必要があります。我々は、エネルギーイノベーションの実現を実現するにはエネルギー現象を根源的に理解する必要があります、と考えています。根源的な理解の上には、高機能材料開発の指針だけでなく、異分野融合による新デバイスの提案が可能になります。実際に本部門では、二次電池と熱電変換を融合した熱発電セルを提案し、その実現を目指しています。

【 1 】ペロブスカイト酸化物の遷移金属周りの局所構造[1]

ペロブスカイト層状酸化物は、遷移金属サイトを部分置換すると物性性能が著しく変化することが知られている。しかしながら、遷移金属周りの局所構造がどうになっているか、系統的に調べたら例はない。われわれは、一連のペロブスカイト酸化物を合成し、EXAFS 局所構造解析により、M-O 結合長を決定した。その結果、ゲスト遷移金属周りの M-O 結合長は、ホスト格子の M-O 結合長ではなく、ゲスト遷移金属しか含まない層状酸化物の M-O 結合長に近いことがわかった。ただし、格子歪を緩和するために、ホストの M-O 結合長に近づいていることが分かった。

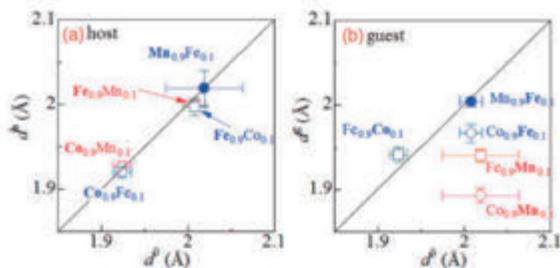


図1: ペロブスカイト酸化物中の(a)ホストおよび(b)ゲスト遷移金属周りの M-O 長。横軸はゲスト遷移金属しか含まない層状酸化物の M-O 長。

【 2 】プルシャンブルー類似体の遷移金属周りの局所構造[2]

プルシャンブルー類似体(PBA)は、遷移金属サイトを部分置換すると物性性能が著しく変化することが知られている。しかしながら、遷移金属周りの局所構造がどうになっているか、系統的に調べられた例はない。われわれは、一連のペロブスカイト酸化物を合成し、EXAFS 局所構造解析により、M-O 結合長を決定した。その結果、ゲスト遷移金属周りの M-O 結合長は、ホスト格子の M-O 結合長ではなく、ゲスト遷移金属しか含まない層状酸化物の M-O 結合長にほぼ一致していることがわかった。

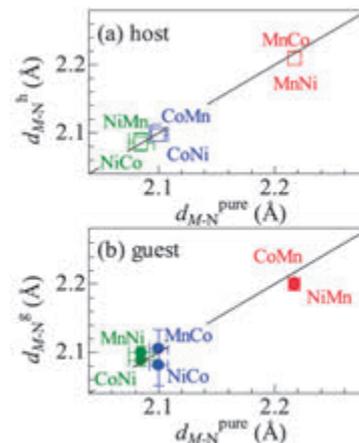


図2: PBA 中の(a)ホストおよび(b)ゲスト遷移金属周りの M-O 長。横軸はゲスト遷移金属しか含まない層状酸化物の M-O 長。

【 3 】ポテンシャルの温度係数の差を利用した熱発電[3]

我々は、二次電池材料のポテンシャルの温度係数の差を利用することにより熱発電が可能であることを提唱している。温度係数の異なる二種類のPBAを正極と負極に配置した熱セルを作成し、295K と 323K の温度サイクルで熱発電に成功した。熱効率は 1%であり、この効率はカルノー効率の 11%に対応する。

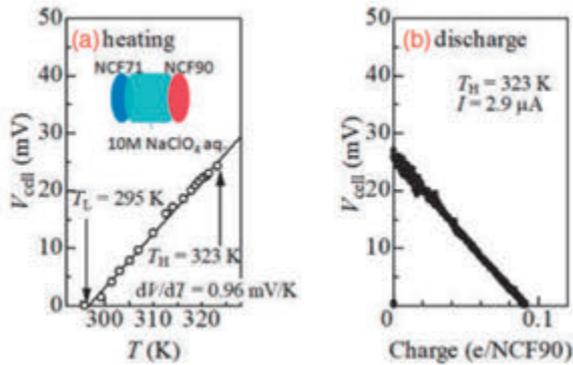


図 3:(a)温度変化による熱セルの充電、(b)充電された電力の取り出し

【 4 】層状酸化物へのホール導入と電子状態の変化-酸素 K 吸収端スペクトルと第一原理計算の比較-[4]

ナトリウムイオン電池の正極材料として、層状酸化物(Na_xCoO₂)は有望視されている。しかしながら、ホール導入に伴う電子状態の変化はよくわかっていない。我々は、酸素 K 吸収端スペクトルと第一原理計算を組み合わせることにより、酸素 p 軌道にホールが導入されることを明らかにした。電池材料の電子状態の理解にとって、酸素 K 吸収端スペクトルと第一原理計算の組み合わせは極めて有効であると考えられる。

図4:酸素 K 吸収端スペクトルのプリエッジ部分の拡大図:(a)Na_{0.91}CoO₂ と(b)Na_{0.66}CoO₂

【 5 】剛体球モデルによる層状酸化物の異方的熱膨張係数の理解 [5]

二次電池の正極材料として、層状酸化物は極めて有望である。我々は、この化合物系の異方的熱膨張係数を系統的に決定した。その結果、熱膨張係数の異方性は2で、遷移金属サイトのイオン半径にあまりよらないことが分かった。さらに、剛体球モデルを適用し、フィッティングパラメーターなしで、この異方性(α_c/α_a)を再現することに成功した。さらに、この剛体球モデルは、フィッティングパラメーターなし、結晶構造の異方性(c/a)を再現する。

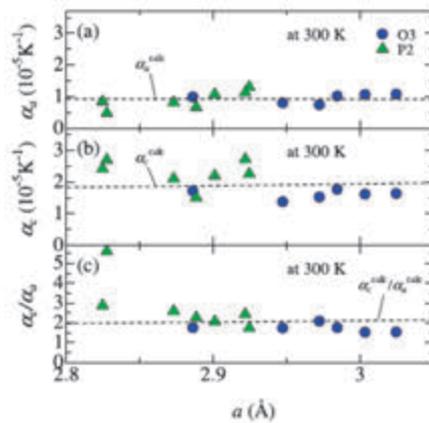
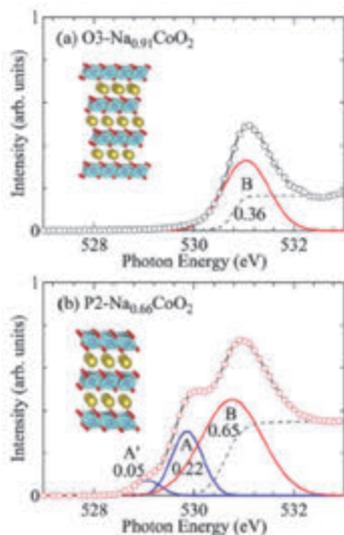


図5:層状酸化物の熱膨張係数:(a) a 軸方向(α_a)、(b)c 軸方向(α_c)、(c) 異方性(α_c/α_a)



岡田晋

<研究成果>

ナノスケール構造を持つ物質においては、その物性は系のサイズ、表面(端)形状等に非常に大きく依存することが知られている。このことは、他方において、既存の物質においても、物質のサイズをナノメートルオーダーとし、その形状を制御することにより、新奇物性、新機能発現を誘起させることが可能であることを示唆している。実際、興味深い物性を示す種々のナノスケール炭素物質群の合成が近年盛んになされている。例えば、有限幅のグラファイト断片(グラファイトリボン)はその端形状に依存して、端を構成する原子にスピン分極が生じる事が知られている。本グループでは、ナノサイズ炭素系(ナノチューブ、フラーレン、グラファイト)の電子物性を理論的に解析することによって、サイズ、形状が誘起する特異な電子物性発現の可能性を探索する事を目的としている。

【 1 】グラフェンの圧縮/伸張による C60 分子膜への電荷移動と極性制御

グラフェンと C60 分子はともに、sp³ 混成をした炭素原子から構築される炭素同素体で、それぞれ2次元と0次元のネットワーク構造を有する。両者の違いは、C60 に含まれる 12 個の五角形にあり、このため C60 は閉じた籠状構造をとる。また、五角形の存在は C60 分子が他の環状炭化水素分子と比べて非常に深い最低空状態の起源となっている。このため、グラフェンの上に C60 分子を2次元的に敷き詰めた、C60 とグラフェンからなるヘテロ層状物質では、グラフェンから C60 への電荷移動の可能性が期待される。本研究では、グラフェンに等方的な圧縮歪みを印加することで、グラフェンのディラック点が C60 の最低空状態の上にシフトし、グラフェンから C60 への電荷移動が生じることを明らかにした。また、C60 とグラフェン間の相互作用もグラフェンに印加された圧縮/伸張歪み強く依存することを明らかにし、グラフェンの構造延長による、物性制御の可能性を予言した。

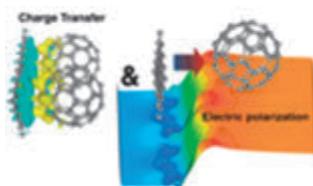


図 1・1 図 1:C60 分子膜とグラフェンからなる vdW ヘテロ構造における電荷移動と分極

【 2 】電界印加下における PCBM 分子の電子構造

C60 をはじめとするフラーレン分子は、ナノスケールの表面曲率に起因する適度な化学反応性を有しており、種々の化学官能基の分子表面への吸着が可能である。化学官能基化は表面の π 電子系の形状を変調させるため、これらの化学官能基化フラーレン誘導体は非修飾フラーレンとは異なります。これらの、化学官能基化フラーレンは、その深い非占有状態から、誘起薄膜光電変換素子(太陽電池)の電子受容体として用いられている。ここでは、[6,6]-phenyl-C61-butylric acid methyl ester fullerene と silylmethylfullerene に着目し、電子ドープ下での蓄積電子分布とフラーレン分子近傍の静電ポテンシャル分布の解析を行った。電子ドープは平行平板からなる対向電極から行った。計算の結果、蓄積電子の分布はフラーレン分子種には依存せず、フラーレン分子の対向電極に対する配向につよく依存することが明らかになった。このため、分子近傍の電界も分子配向に依存し、特に電極とフラーレン部位が正対している場合、非常に強い電界集中が誘起されることを示した。

都倉康弘

<研究成果>

微細な系におけるエネルギーの授受のプロセス、特にエントロピー生成などの散逸過程や、光・マイクロ波吸収／放出などの動的過程について検討を進めた。

【 1 】量子系の過剰エントロピー生成

ナノシステムにおいては定電圧バイアス、あるいは一定の温度差の境界条件においては、電流や熱流などが定常的に系を流れる「非平衡定常状態」が実現している。ここではエントロピーが定常的に発生している。もしこの場合に、電圧や温度差などの外部パラメタ／境界条件をゆっくり変化させると、定常的に発生するエントロピーに加え過剰なエントロピー生成が避けられない。本研究では量子効果が重要な系においてこの過剰エントロピーをマスター方程式を用いて解析して、普遍的な関係式を得た。[論文 40]

【 2 】配向したカーボンナノチューブの光吸収特性

配向したカーボンナノチューブ系は光吸収特性に大きな偏光依存性を持つ。従来ディラック点近傍にフェルミ面があるカーボンナノチューブ系ではナノチューブ方向の電場成分が主に吸収されることが分かっていた。しかし、電荷ドープを行うことにより、その吸収偏光特性が90度回転する事を理論的に示した。[論文 37]

西堀英治, 笠井秀隆

<研究成果>

エネルギー物質部門西堀グループでは、放射光を利用した回折法による構造計測に基づき部門のミッションであるエネルギー物質科学に貢献することを目指している。大型放射光施設 SPring-8 にて、パートナーユーザー課題を複数実施し、放射光 X 線回折で国内外の先導する研究を進めている。本年度は国際共同研究、TIA 連携、学内連携を推し進め 6 件のプレスリリースにつながる成果を創出した。それらのうち、いくつかについて下記に記述する。

【 1 】原子のシート間にはたらく相互作用の観測に成功 ～層状物質の機能発現に關与する電子分布を可視化する～

近年、炭素原子のシートであるグラフェンに代表されるような、原子のシートやそれらが積み重なった層状物質が注目され、研究が盛んに行われている。これらの物質の重要な性質の一つは、「ファンデルワールス力」と呼ばれる原子のシートとシート間の弱い相互作用であり、この力が弱いために、黒鉛のグラファイトからスコッチテープで 1 枚の原子からなるシートであるグラフェンをはがすことができる。また、異なる原子のシートを積み重ねたり、原子シート間に原子や分子を挟んで、様々な機能を発現させることもできる。こうした材料設計のためには、原子のシート間の相互作用を正確に予測・観測することが重要である。

理論計算は、現代の物質の設計、機能予測に不可欠であり、中でも、物質科学において現在広く使われている密度汎関数理論は、基底状態の電子密度の計算によって多くの物質の性質の予測に成功しており、例えば、グラフェンが筒状に丸まったカーボンナノチューブの原子配列によって電気的性質が異なることを、実験より先に予測している。密度汎関数理論は汎関数の改善によって精度が向上し、実験データ解析に理論計算で得たパラメータを用いるほどになってきている。

しかしながら、現状の理論計算方法は、ファンデルワールス力の予測には適していない。シート状物質においてファンデルワールス力が生じる原因は、電子分布の瞬間的なゆらぎが離れた原子の電子分布の偏りを誘起することが1つ挙げられる。こうした瞬間的なゆらぎによる長距離の電子相関は、安定した電子の分布に基づく理論では予測が難しく、いまだ

手法の開発が続けられている。また、開発した手法の成否は、実験による証明が望ましいものの、このような弱い力を原子や電子のスケールで観測した例はまだ報告されておらず、現時点では、シート間の距離や、シートのはがしやすさから推察することどまっている。

本研究では、世界最高性能の放射光を発生することができる SPring-8 の放射光により、原子のシート間にはたらく相互作用の観測を行った。

大型放射光施設 SPring-8 の単結晶構造解析ビームライン BL02B1 の大型湾曲イメージングプレートカメラを用いて、波長 0.248Å の高エネルギー X 線により、層状物質 TiS₂ の単結晶 X 線回折データを測定した。多極子展開解析を用いて TiS₂ 全体の電子密度分布を観測し、トポロジカル解析などの解析手法により化学結合を評価した。また、観測値を検証するために、理論計算でも TiS₂ の電子密度分布を求め、観測値と同じ手法で解析した。

図 1 に(a)実験と(b)理論計算で観測されたシートを構成する Ti 原子と S 原子の電子の分布を示す。Ti 原子から S 原子の方向に電子のピークがあり、S 原子から Ti 原子の方向にも電子のピークがある。このピークは実験と理論の両方で存在する。ピークとピーク間の原子間の鞍点の電子密度の値は観測値が 0.429 e/Å³ で理論計算が 0.421 e/Å³ であり、高い精度で一致した。このことから、観測した電子の分布が 0.1 立方ナノメートルの空間中に電子 1 個の精度であることと、理論予測の正確性が裏付けられた。

図 1 に(c)実験と(d)理論計算で観測されたシート間の電子分布を示す。実験にはシート間の S 原子の間に電子のピークがある。一方、理論ではシート間の S 原子の間から少しずれたところにピークがある。原子間の鞍点の電子密度の値は観測値が 0.086 e/Å³ で理論計算が 0.058 e/Å³ であり、その差は 0.03 e/Å³ である。実験の方が理論よりもシート間の S 原子同士の電子のつながりが強いことがわかった。また、トポロジカル解析からは S 原子の電荷の偏りが 10 倍異なることも観測された。

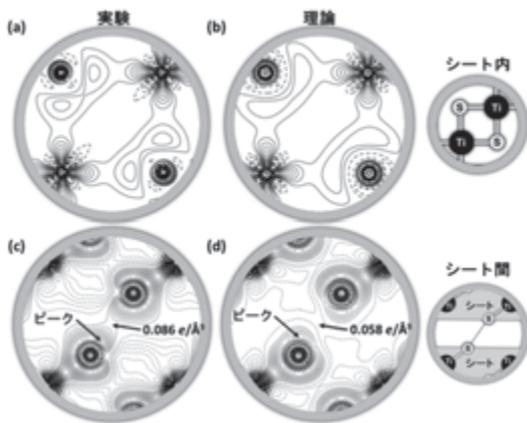


図1 図1 に(a, c)実験と(b, d)理論計算で観測されたシート内およびシート間の電子分布

【 2 】溶媒蒸気の識別が可能な新しい分子集合体材料を作成 —取り込む分子に応じて蛍光が大きく変化する多孔性 dendrimer 結晶—

蛍光プローブは、神経ガスや重金属イオン、蛋白質、遺伝物質など、さまざまな分子の識別に用いられる。蛍光センシングは、蛍光消光、発現、強度変化、励起エネルギー移動型などのタイプに分けられる。蛍光発現型で、固体状態で使用可能な蛍光センサーは実用的に重要である。発光色変化を伴う蛍光センシングは、複数の検体を識別可能であることから、その特性をもつ材料開発が進められている。特に、表面積が大きくてナノメートルサイズのチャンネルを有する多孔性材料が、ガスや蒸気のセンシングで期待されている。

物質工学域の山本洋平教授の研究グループは、 π 共役 dendrimer とよばれる巨大分子から、多孔質の結晶性ファイバーを作成した。Dendrimer のコア部位には電子受容性のトリアジンが、シェル部位には電子供与性のカルバゾール dendron が用いられている。この分子は、熱活性化遅延蛍光を示し、塗布型有機 EL 素子のホール輸送層／発光層の応用が検討されている。溶液中における自己組織化挙動を検討した結果、蒸気拡散法によりファイバー状の構造体を形成することが分かった。

ファイバーの単結晶および粉末 X 線回折を SPring-8 の BL02B1、BL02B2、BL26B2 の複数のビームラインを使用して行った。その結果、ファイバーは長軸方向に1次元のナノサイズのチャンネルを有することが明らかになった。

窒素ガス吸着測定より、このファイバーは 650 m²/g 以上の BET 表面積を示した。この多孔性ファイバーを様々な溶媒蒸気に晒して蛍光観察を行ったところ、ほとんどの溶媒蒸気で蛍光発現が観測され、溶媒の種類により色が変化することがわかった。

本研究は Chem. Comm 誌に掲載され、筑波大学でプレスリリースが行われた。

【 3 】高効率な熱電変換を可能にする新しいタイプの大振幅原子振動の検出

エネルギー問題の解決法として、光・熱・振動などを利用する発電技術の研究開発が盛んに行われている。熱電発電は、熱電材料(固体)を用いて未利用廃熱を電力として回収する技術であり、省スペース・長寿命などの長所がある。高効率な熱電発電には、ゼーベック係が大きく、電気伝導率は高く、熱伝導率は低い材料が必要である。

産総研と北陸先端科学技術大学院大学、広島大、九大、理研などのグループは天然に存在する硫化銅鉱物のテトラヘドライト(Cu₁₂Sb₄S₁₃)が高効率な熱電材料であることを発見した。さらに、この材料ではイオウ原子からなる三角形内の銅原子が面外方向にラットリングすることが低い熱伝導率の起源であると提案した。しかし、何故ラットリングが生じるのか原因は分からなかった。

今回、4種類のテトラヘドライト Cu₁₂Sb₄S₁₃、Cu₁₀Zn₂Sb₄S₁₃、Cu₁₂As₄S₁₃、Cu₁₀Zn₂As₄S₁₃を合成し、それらの結晶構造を大型放射光施設 SPring-8 の BL02B2 における粉末X線回折実験で、格子振動を大強度陽子加速器施設 J-PARC の BL14 AMATERAS における粉末中性子非弾性散乱実験で調べた。さらに、電子状態を第一原理計算で調べた。

これらの実験から、すべての試料で Cu 原子はS原子の三角形(S3 三角形)に垂直な方向にラットリングし、振幅とエネルギーが試料ごとに異なることが分かった。結晶構造パラメーターとラットリングの振幅を比較したところ、S3 三角形の面積が小さいほど、振幅の大きさを表す原子変位パラメーターが大きいことが分かった。また、S3 三角形の面積が小さいほど、ラットリングエネルギーが下がることも分かった。これらの結果から、テトラヘドライトにおける Cu 原子のラットリングは、S3 三角形内で化学的圧力を受けた Cu 原子が三角形の面外に逃げようとして生じたものと

判明した。

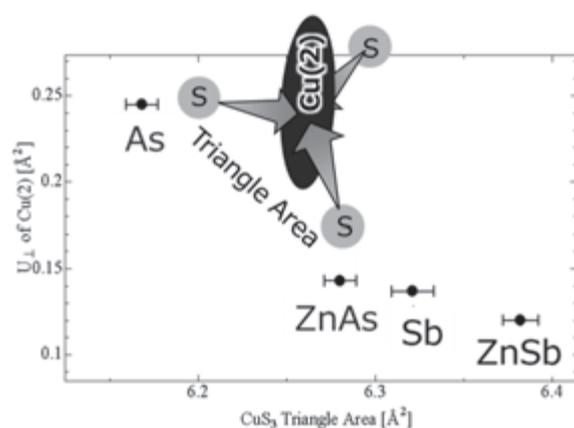


図 2 S3 三角形面積と熱振動の関係

また、Cu 原子の振幅が大きくなると、振動の先に位置する Sb 原子または As 原子の振幅も大きくなることも観測された。第一原理計算により Sb 原子や As 原子がローンペアを持つことが知られている。このローンペアを介して Cu 原子のラットリングが Sb および As 原子を揺らしていると考えられる。以上のように、Cu 原子のラットリングとローンペアを介した原子振動によって格子振動が乱され熱が散乱されることが、テトラヘドライトの熱伝導率が低いことの原因と考えられる。

この研究は *Advanced Materials* 誌に掲載され、JST でプレスリリースが行われた。

【 4 】多数の金属で分子を捕まえる大環状分子の構造決定

他の分子を捕まえる能力を持つ分子はホスト分子と呼ばれ捕まえる分子(ゲスト分子)に合う、形・大きさのポケットを持つことが知られている。適切な設計により、狙ったゲスト分子との特異的な相互作用を生み出すことができ、物質の選択的な分離や反応、化学センサー、薬物送達システムなどに利用されている。天然および人工のホスト分子の多くは、水素結合など弱い相互作用を分子認識に使用する。より強い結合や相互作用を組み合わせれば精密な分子認識が可能になる反面、反応性が高くなり合成が困難になる。

筑波大学数理物質系化学域の鍋島教授のグループは *o*-アミノフェノールと 2-ホルミルピリジンから作られる 3 座のキレート配位部位 *pap* を 6 つもつ大環状配位子 *hexapap* を設計・合成した。この大型分子の

構造決定を SPring-8 の生体高分子用ビームライン BL26B2 で行った。

その結果、明らかにした構造から大環状分子 *Zn-hexapap* は、特定の長さのジカルボン酸を配位結合で捕まえると、双極放物面状に歪んだ形で 2 分子が積み重なる興味深い構造をつくることがわかった。元の *Zn-hexapap* は対称性の高い分子で六角形とみなすことができ、6 つの亜鉛原子はそれぞれ同一の結合状態にある。波状に積層した構造を作ることで、*Zn-hexapap* の亜鉛原子は分子内で 3 種類の異なる結合状態におかれ、亜鉛原子はそれぞれ異なった様式でジカルボン酸分子と相互作用することができることが分かった。*Zn-hexapap* の 2 量体の内孔には 12 個の亜鉛と 20 個の結合可能な配位サイトが集積されていた。2 分子のジカルボン酸は、そのうち特定の亜鉛原子の配位サイトに選択的に結合していた。

この研究は、*Nature Communications* に掲載され、2017 年 7 月に筑波大学よりプレスリリースされた。

【 5 】SPring-8 パートナーユーザー活動

SPring-8 において、粉末回折ビームライン BL02B2 および単結晶 X 線回折ビームライン BL02B1 でパートナーユーザーに指定され活動を行っている。装置の高度化とユーザー利用の拡大が主目的である。本年度は 2015 年より立ち上げに協力してきた粉末回折ビームラインにおいて、新しいピクセル型半導体検出器 MYTHEN の立ち上げに一区切りをつけ、論文発表を行った。

単結晶 BL では、今年度で最終年度であった。昨年筑波大学でワークショップを行い、意見を集約して施設に要求してきた新しい半導体検出器の納入が決定した。このため、単結晶のパートナーユーザー課題をさらに 1 年延長することになった。来年度 1 年間の計画を施設に提出した。

【 6 】海外教育研究ユニット招致

デンマーク・オーフス大学材料結晶学センター (Center for Materials Crystallography: CMC) のセンター長 Bo Iversen 教授を筑波大学海外教育研究ユニット招致の PI として承知し研究を進めている。本年度 7 月に笠井秀隆助教が国際テニユアトラック教員としての派遣期間を終了し日本に戻った。笠井は派遣期間中に放射光施設の装置の立ち上げ、ドイツ

Petra-III での超臨界ナノ材料合成その場観察、構造研究、電子密度研究など多くの研究成果を上げた。

今年も、Spring-8 のパートナーユーザー活動を始め多くの国際連携を行った。今年度の 10 月にはデンマークで CMC の Annual Meeting が開催され、西堀、笠井、出口(大学院生)、佐々木(大学院生)が参加した。西堀、笠井、出口は口頭発表を行い CMC のメンバーとの親交を深めた。また、CMC で進められている超臨界ナノ材料合成その場観察のプロジェクトを日本で立ち上げ、開始した。

初貝安弘

＜研究成果＞

TREMS エネルギー物質部門初貝研究室では、現代の物性物理学の知見を集約し、将来的な新機能環境エネルギーデバイスにつながる新しい機能、特性をもった物質を理論的に探索、提案することをひとつの大きな目的とした研究活動を行っている。

近年は、物性物理学において急速に進展しつつあるトポロジカル物質を用いた新機能につながる基礎的な研究を進めている。特にトポロジカル物質の特性であるエッジ状態と呼ばれる系の境界や不純物近傍に局在する状態とバルクのトポロジカル相との普遍的な関係である「バルクエッジ対応」に関する研究を進めている。

【 1 】フォトニック結晶によるトポロジカル相

量子系以外のトポロジカル相としてフォトニック結晶におけるトポロジカル数を 3 次元系に対して特定の波数を固定したセクションチャーン数として計算し、ワイル点と呼ばれる特異分散の波数を確定した。また、系のエッジ状態との関連を研究し、フォトニック結晶におけるバルク・エッジ対応を確認した。

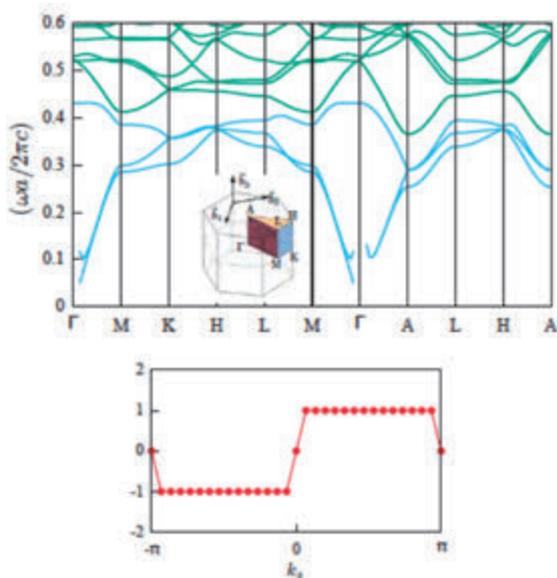


図1 ウッドパイル構造のフォトニックバンドとセクションチャーン数(大野修平氏 2018 年学位論文より引用)

【 2 】力学系におけるトポロジカル相の研究

ハニカム格子ならびにダイヤモンド格子上の力学系はカイラル対称性をもち、非量子系のトポロジカル物質となる典型的な系である。本年度は特に 3 次

元系に関して、線状の特異分散並びにカイラル対称性の破れにともなうワイル点に関して、トポロジカル数の理論計算並びにエッジ状態との比較をおこない理論的な整合性を確立した。

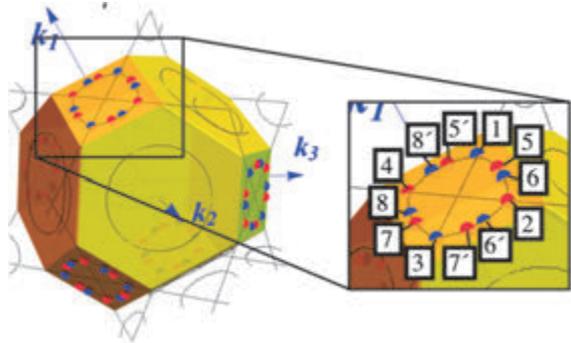


図2 ダイヤモンド格子上の力学系のワイル点の対生成, 対消滅 (Y. Takahashi, T. Kariyado, Y. Hatsugai "Weyl points of mechanical diamond", arXiv:[1801.06784](https://arxiv.org/abs/1801.06784))

【 3 】新しいトポロジカル数による3次元トポロジカル絶縁体の研究

我々が数年前から2次元の模型に対して開発してきた新しいトポロジカル数の計算手法を3次元に拡張することでエンタングルメントハミルトニアンワイル点の個数がトポロジカル絶縁体の特性と強く関係していることを示した。今後は、同様の手法を模型でなくより物質に近い第一原理計算を併用することで具体的な物質群に対して適用する予定である。

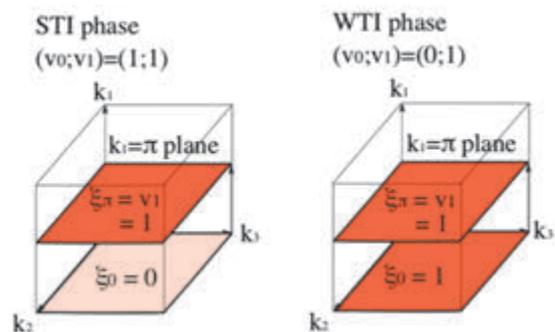


図3 強いトポロジカル絶縁体と弱いトポロジカル絶縁体(H.Araki, T. Kariyado, Y. Hatsugai "Entanglement Chern number for three-dimensional topological insulators: Characterization by Weyl points of entanglement Hamiltonians", Phys. Rev. B96, 165139 (2018))

【 4 】磁場下の擬ポテンシャルによる格子上のトポロジカル相の電子相関の研究

トポロジカル絶縁体など格子上のトポロジカル相における電子間相互作用の研究に必須の擬ポテンシャルの手法を格子上で確立し、分数量子ホール効果に適用しその有効性を確立した。

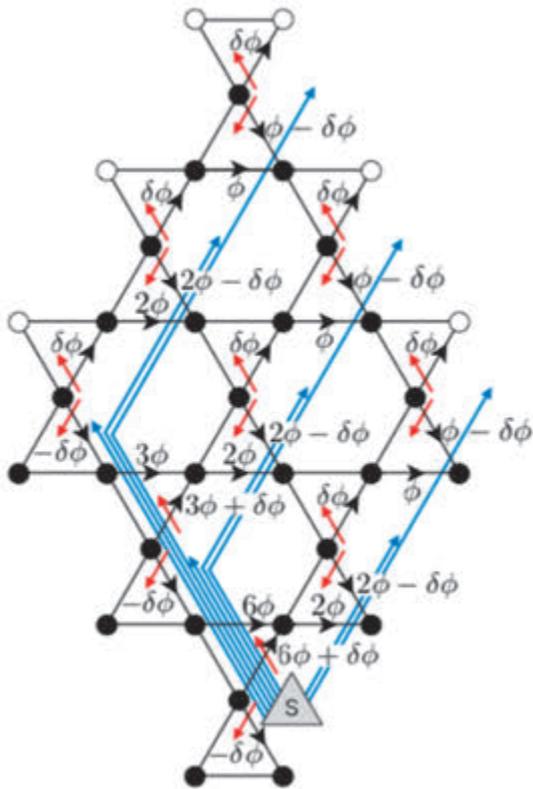


図4 格子上でランダウ準位に射影した擬ポテンシャルを構成するためのストリングゲージ:カゴメ格子の例 (K. Kudo, T. Kariyado, Y. Hatsugai, " Many-Body Chem Numbers of $\nu=1/3$ and $1/2$ States on Various Lattices", J. Phys. Soc. Jpn. 86, 103701 (2017))

柳原英人

<研究成果>

スピネルフェライト薄膜における格子歪と置換イオン種に関する高磁気異方性化の指針を確立することを目的として、コバルトフェライト(CFO)薄膜において、格子不整合を利用した正方歪の導入に関する制御をおこなった。誘導磁気異方性の最大値を実際に示すことを目指し、CFO に大きなエピタキシャル歪を導入するのに最適な下地層(緩衝層)の開発を行った。

計5種類の酸化物、窒化物を緩衝層の候補材料とし、実際に薄膜化に際してその成長条件の検討をおこなった。その結果、今回緩衝層として導入した NaCl 型酸化物/窒化物上に CFO(001)がエピタキシャル成長した場合は、十分なエピタキシャル歪は導入されず、結果として誘導される磁気異方性も格子定数の差から期待されるほど大きなものは得られなかった。一方で CFO と同じスピネル構造である $Mg_2SnO_4(001)$ 薄膜上に CFO(001)を成長させた場合には、すでに $Ku=2.4MJ/m^3$ の大きな磁気異方性が生じることを確認していたが、厚い Mg_2SnO_4 下地層を成膜しなければならぬことから、緩衝層と CFO 薄膜の格子定数を分離して評価することが困難であったそこで、 $MgO(001)$ 基板上に極薄の $Mg_2SnO_4(001)$ 緩衝層を成膜する条件を詳細に検討した。

【1】極薄 $Mg_2SnO_4(001)$ 緩衝層の成膜

大きな格子不整合を持つ基板上に極薄 $Mg_2SnO_4(001)$ 緩衝層を成膜するために熱処理による格子緩和の導入を試みた。酸素導入しながら RF マグネトロンスパッタリング法を用いて Mg と Sn の同時スパッタを行ない 10 nm の膜厚の $Mg_2SnO_4(001)$ 緩衝層を成膜した。この膜を一度大気中に取り出し、1000°C、10 分間のポストアニールを行ったところ、 $MgO/Mg_2SnO_4(001)$ 界面付近にミスフィット欠陥が導入されることを確認した。

【2】極薄 $Mg_2SnO_4(001)$ 緩衝層上に成長した CFO(001)エピタキシャル膜の磁性

X 線回折の結果、CFO が 5-7 nm 程度のときは面内の格子定数が MSO 下地のそれとほぼ一致しており、コヒーレントにエピタキシャル成長していることが確認できた。一方で 15 nm、23 nm のときは格子緩和が生じていることも見える。

図1にこれらの膜厚の異なる CFO 試料のトルク曲線を示す。トルク測定は室温にて 90kOe の磁場を、膜面垂直方向を含む軸に対して 360°回転させて行った。単位体積あたりの磁気トルクは膜厚の薄い試料の方が大きな値を示しており、前述のエピタキシャル歪の CFO 膜厚依存性の結果と矛盾しない。また外挿法を用いて評価した磁気異方性の値は、最大で $60.6Merg/cm^3$ となり、 $Nd_2Fe_{14}B$ のそれに匹敵するものであった。

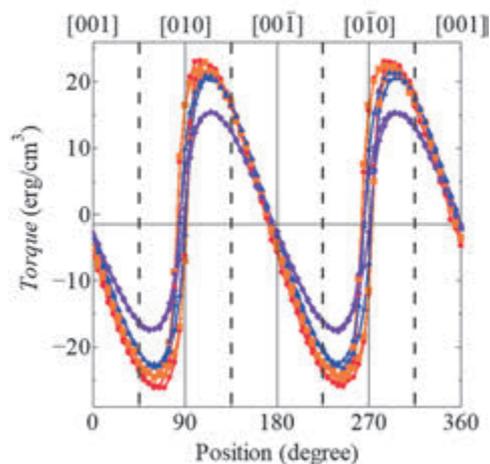


図1 MSO 上に成長した CFO(001)の磁気トルク曲線

<論文>

1. S. Akama, W. Kobayashi, H. Niwa, T. Uchiyama, and Y. Moritomo, "Local distortion around the guest ion in perovskite oxides", *Appl. Phys. Express*. **19** (2017) 051101
2. H. Niwa, W. Kobayashi, T. Shibata, H. Nitani, and Y. Moritomo, Invariant nature of substituted element in metal-hexacyanoferrate, *Sci. Reps.* **7**, 13225 (2017).
3. T. Shibata, Y. Fukuzumi, W. Kobayashi, and Y. Moritomo, Thermal power generation during heat cycle near room temperature, *Appl. Phys. Express*. **11**, 078101 (2018).
4. H. Niwa, K. Higashiyama, K. Amaha, W. Kobayashi, Y. Moritomo, Electronic states in oxidized Na_xCoO_2 as revealed by X-ray absorption spectroscopy coupled with ab initio calculation *J. Power Source*, (2018), **384**, 156-158
5. W. Kobayashi, A. Yanagita, T. Akaba, T. Shimono, D. Tanabe, and Y. Moritomo, Thermal Expansion in Layered Na_xMO_2 , *Sci. Reps.*, (2018) **8**, 3988.
6. Z. C. Wang, X. Y. Zhong, L. Jin, X. F. Chen, Y. Moritomo, J. Mayer, "Effects of dynamics diffraction condition on magnetic parameter detection in a double perovskite $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ using electron energy-loss magnetic chiral dichroism", *Ultramicroscopy* (2017), **176**, 212-217.
7. Z. Wang, A. H. Tavabi, L. Jin, J. Rusz, D. Tyutyunnikov, H. Jiang, Y. Moritomo, J. Mayer, R. E. Dunin-Borkowski, R. Yu, J. Zhu and X. Zhong, Atomic scale imaging of magnetic circular dichroism by achromatic electron microscopy, *Nature Materials* (2018).**17**, 221-225,
8. F. Pfaff, H. Fujiwara, G. Berner, A. Yamasaki, H. Niwa, H. Kiuchi, A. Gloskovskii, W. Drube, J. Gabel, O. Kirilmaz, A. Sekiyama, J. Miyawaki, Y. Harada, S. Suga, M. Sing, and R. Claessen, "Raman and fluorescence contributions to resonant inelastic soft x-ray scattering on $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ heterostructures", *Phys. Rev. B*, **97** (2018) 035110.
9. Y.-T. Cui, Y. Harada, H. Niwa, T. Hatanaka, N. Nakamura, M. Ando, T. Yoshida, K. Ishii, D. Matsumura, H. Oji, H. Ofuchi, M. Oshima, Wetting Induced Oxidation of Pt-based Nano Catalysts Revealed by In Situ High Energy Resolution X-ray Absorption Spectroscopy, *Sci. Rep.* **7** (2017) 1482.
10. K. Ishii, T. Tohyama, S. Asano, K. Sato, M. Fujita, S. Wakimoto, K. Tustsui, S. Sota, J. Miyawaki, H. Niwa, Y. Harada, J. Pelliciani, Y. Huang, T. Schmitt, Y. Yamamoto, and J. Mizuki, "Observation of momentum-dependent charge excitations in hole-doped cuprates using resonant inelastic x-ray scattering at the oxygen K-edge", *Phys. Rev. B* **96** (2017) 115148.
11. Y. Harada, J. Miyawaki, H. Niwa, K. Yamazoe, L.G.M. Pettersson, A. Nilsson, "Probing the OH Stretch in Different Local Environments in Liquid Water", *J. Phys. Chem. Lett.* **8** (2017) 5487.
12. J. Miyawaki, S. Suga, H. Fujiwara, M. Urasaki, H. Ikeno, H. Niwa, H. Kiuchi and Y. Harada, "Dzyaloshinskii-Moriya Interaction Induced Magnetic Circular Dichroism in SX-RIXS", *Phys. Rev. B* **96** (2017) 214420.
13. Ken Kishimoto and Susumu Okada, "Fermi level pinning for the carrier accumulation in bilayer graphene with atomic defects by an external electric field", *Applied Physics Letters* Vol. **110**, 011601 (2017).
14. Manaho Matsubara and Susumu Okada, "Effect of a charged impurity on carrier accumulation into graphene by an external electric field", *Applied Physic Express* Vol. **10**, 025101 (2017).
15. Nguyen Thanh Cuong and Susumu Okada, "Suppression of conductivity deterioration of Cu thin films by coating atomic layer materials", *Applied Physics Letters* Vol. **110**, 131601 (2017).
16. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada, "Polarity control of h-BN nanoribbon edges by strain and edge termination", *Physical Chemistry Chemical Physics* Vol. **19**, 9113-9117 (2017).
17. Sho Furutani and Susumu Okada, "Electronic properties of electron-doped [6,6]-phenyl-C61-butyric acid methyl ester and silylmethylfullerene", *Chemical Physics Letters* Vol. **678**, 5-8 (2017).
18. Yanlin Gao and Susumu Okada, "Electrostatic potential barrier for electron emission at graphene edges induced by the nearly free electron states", *Applied Physics Express* Vol. **10**, 055104 (2017).
19. Yanlin Gao and Susumu Okada, "Energetics and electronic structures of thin films and heterostructures of a hexagonal GaN sheet", *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. **56**, 065201 (2017).
20. Ken Kishimoto and Susumu Okada, "Electronic structure of bilayer graphene with defects under an external electric field", *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. **56**, 06GE01 (2017).
21. Jun-ya Sorimachi and Susumu Okada, "Porous hydrocarbon networks of pyramidal molecules", *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. **56**, 06GE03 (2017).
22. Taketo Kochi and Susumu Okada, "Electronic Structure of CNT Thin Films with Nanoscale Interfaces under an Electric Field", *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. **56**, 06GE02 (2017).
23. Taketo Kochi and Susumu Okada, "Asymmetric carrier accumulation in double-walled carbon nanotube by an external electric field", *Applied Physics Express* Vol. **10**, 075101 (2017).
24. Manaho Matsubara and Susumu Okada, "Carrier injection in nonbonding states of N-doped graphene by an external electric field", *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. **56**, 075101 (2017).
25. Satoshi Yasuda, Ryosuke Takahashi, Ryo Osaka, Ryota Kumagai, Yasumitsu Miyata, Susumu Okada, Yuhei Hayamizu, and Kei Murakoshi, "Out-of-Plane Strain Induced in a Moire Superstructure of Monolayer MoS_2 and MoSe_2 on $\text{Au}(111)$ ", *Small* Vol. **13**, 1700748 (2017).
26. Remi Taira, Ayaka Yamanaka, and Susumu Okada, "Electronic structure and polarity of edge functionalized graphene nanoribbons", *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. **56**, 085103 (2017).

27. Jun-ya Sorimachi and Susumu Okada, "Electron filling control of Kagome flat band in 2D hydrocarbon networks of sp² and sp³ C atoms", *Physical Review B* Vol. 96, 024103 (2017).
28. Yamato A. Saucier, Susumu Okada, and Mina Maruyama, "Strain-induced charge transfer and polarity control of a van der Waals heterosheet comprising C60 and graphene", *Applied Physics Express* Vol. 10, 095101 (2017).
29. Miki Akiba and Susumu Okada, "Mechanical properties of nano-rotors: Energetics of triptycene derivatives", *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. 56, 105201 (2017).
30. Terunobu Nakanishi, Ryo Kitaura, Takazumi Kawai, Susumu Okada, Shoji Yoshida, Osamu Takeuchi, Hidemi Shigekawa, Hisanori Shinohara, "Modulation of the Local Density of States of Eu-Nanowires Encapsulated in Carbon Nanotubes as Observed by Scanning Tunneling Microscopy and Spectroscopy", *The Journal of Physical Chemistry C* Vol. 121, 18195-18201 (2017).
31. Yuya Nagasawa and Susumu Okada, "Energetics and electronic structures of inclusion compounds of large fullerenes and cycloparaphenylenes", *Journal of the Physical Society of Japan* Vol. 86, 104702 (2017).
32. Mina Maruyama and Susumu Okada, "Interplay between Kagome Flat band and Dirac cone in porous graphitic networks", *Carbon* Vol. 125, 530-535 (2017).
33. Hiroaki Nishino, Takeshi Fujita, Nguyen Thanh Cuong, Satoshi Tominaka, Masahiro Miyauchi, Soshi Iimura, Akihiko Hirata, Naoto Umezawa, Susumu Okada, Eiji Nishibori, Asahi Fujino, Tomohiro Fujimori, Shin-ichi Ito, Junji Nakamura, Hideo Hosono, and Takahiro Kondo, "Formation and Characterization of Hydrogen Boride Sheets Derived from MgB₂ by Cation Exchange", *Journal of the American Chemical Society* Vol. 139, 13761--13769 (2017).
34. Hiroki Kinoshita, Il Jeon, Mina Maruyama, Kenji Kawahara, Yuri Terao, Rika Matsumoto, Kazu Suenaga, Susumu Okada, Yutaka Matsuo, and Hiroki Ago, "Highly Conductive and Transparent Large-Area CVD-Grown Bilayer Graphene Sheets Realized by MoCl₅ Intercalation", *Advanced Materials* Vol. 29, 1702141 (2017).
35. Tomoe Yayama, Yanlin Gao, Susumu Okada, and Toyohiro Chikyow, "Polarization control of nanotrenches in GaN(0001)/(000-1) by surface hydrogenation", *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. 56, 111002 (2017).
36. Manaho Matsubara and Susumu Okada, "Geometric structures of Al nanoparticle adsorbed on graphene under the external electric field", *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. 56, 125101 (2017).
37. K. Sasaki and Y. Tokura, "Theory of a Carbon-Nanotube Polarization Switch", accepted for publication in *Phys. Rev. Applied* 9, 034018 (2018).
38. A. E. Svetogorov, M. Taguchi, Y. Tokura, and D. M. Basko, "Theory of coherent quantum phase-slip in Josephson junction chains with periodic spatial modulations", *Phys. Rev. B* 97, 104514 (2018).
39. M. Inui, T. Tojo, K. Takeda, and Y. Tokura, "Spin-flip quantum transition driven by the time-oscillating Rashba field", *J. Phys. Commun.* 2, 015021 (2018).
40. S. Nakajima and Y. Tokura, "Excess entropy production in quantum system: Quantum master equation approach", *J. Stat. Phys.* 169, 902-928 (2017).
41. Sae Nakajima, Ken Albrecht, Soh Kushida, Eiji Nishibori, Takashi Kitao, Takashi Uemura, Kimihisa Yamamoto, Uwe H. F. Bunz, Yohei Yamamoto. A fluorescent microporous crystalline dendrimer discriminates vapour molecules. *Chemical Communications* 54, 2534-2537, 2018.
42. H. Kasai, K. Tolborg, M. Sist, J. Zhang, V. R. Hathwar, M. Ø.Filso, S. Cenedese, K. Sugimoto, J. Overgaard, E. Nishibori and B. B. Iversen. X-ray electron density investigation of chemical bonding in van der Waals materials, *Nat. Mater.*, 17, 249, 2018. Feb.
43. K. Suekuni, C. H. Lee, H. I. Tanaka, E. Nishibori, A. Nakamura, H. Kasai, H. Mori, H. Usui, M. Ochi, T. Hasegawa, M. Nakamura, S. Ohira-Kawamura, T. Kikuchi, K. Kaneko, H. Nishiate, K. Hashikuni, Y. Kosaka, K. Kuroki and T. Takabatake. Retreat from Stress: Rattling in a Planar Coordination. *Adv. Mater.*, inpress.
44. T. Usuki, M. Shimada, Y. Yamanoi, T. Ohto, H. Tada, H. Kasai, E. Nishibori, and H. Nishihara. Aggregation-Induced Emission Enhancement from Disilane-Bridged Donor-Acceptor-Donor Luminogens Based on the Triarylamine Functionality. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, in press.
45. H. Kasai, L. Song, H.L. Andersen, H. Yin & B.B. Iversen. Multi-temperature structure of thermoelectric Mg₂Si and Mg₂Sn. *Acta Crystallographia B* 73, 1158, 2017
46. Hiroaki Nishino, Takeshi Fujita, Nguyen Thanh Cuong, Satoshi Tominaka, Masahiro Miyauchi, Soshi Iimura, Akihiko Hirata, Naoto Umezawa, Susumu Okada, Eiji Nishibori, Asahi Fujino, Tomohiro Fujimori, Shin-ichi Ito, Junji Nakamura, Hideo Hosono and Takahiro Kondo. Formation and Characterization of Hydrogen Boride Sheets Derived from MgB₂ by Cation Exchange. *J. Am. Chem. Soc.* 139, 13761-13769, 2017.
47. K. Tolborg, M. R. V. Jørgensen, S. Christensen, H. Kasai, J. Becker, P. Walter, A.-C. Dippel, J. Als-Nielsen & Bo B. Iversen. Accurate charge densities from powder X-ray diffraction - a new version of the Aarhus vacuum imaging-plate diffractometer. *Acta Crystallogr. B* 73, 521, 2017.
48. Takamasa Tsukamoto, Risa Aoki, Ryota Sakamoto, Ryojun Toyoda, Masaki Shimada, Yohei Hattori, Yasutaka Kitagawa, Eiji Nishibori, Masayoshi Nakano and Hiroshi Nishihara. Mechano-, thermo-, solvato-, and vapochromism in bis(acetato-κ¹O) [4'-(4-(diphenylamino)phenyl)-] (2,2':6,2"-terpyridine-κ³N, N', N'')zinc(II) and its polymer. *Chem. Comm.* 53, 9805-9808, 2017.
49. Shogo Kawaguchi, Michitaka Takemoto, Keiichi Osaka, Eiji Nishibori, Chikako Moriyoshi, Yoshiki Kubota, Yoshihiro Kuroiwa, and Kunihisa Sugimoto. High-throughput powder diffraction measurement system consisting of multiple MYTHEN detectors at beamline BL02B2 of SPring-8. *Rev. Sci. Instr.* 88, 085111, 2017.
50. Shunsuke Kitou, Tatsuya Fujii, Tadashi Kawamoto, Naoyuki Katayama, Sachiko Maki, Eiji Nishibori, Kunihisa Sugimoto, Masaki Takata, Toshikazu Nakamura, and Hiroshi Sawa. Successive Dimensional Transition in (TMTTF)₂PF₆

Revealed by Synchrotron X-ray Diffraction. Phys. Rev. Lett. 119, 065701, 2017.

51. T. Nakamura, Y. Kaneko, E. Nishibori, T. Nabeshima, Molecular recognition by multiple metal coordination inside wavy-stacked macrocycles. Nature Communications, 8, 129, 2017 doi: 10.1038/s41467-017-00076-8.2017.
52. M. Tsuchiya, R. Sakamoto, M. Shimada, Y. Yamanoi, Y. Hattori, K. Sugimoto, E. Nishibori, H. Nishihara, beta-IminoBODIPY oligomers: facily accessible pi-conjugated luminescent BODIPY arrays. Chem. Comm. 53, 3509-7512, 2017.
53. T. Kariyado, T. Morimoto and Y. Hatsugai, "Z_N Berry Phases in Symmetry Protected Topological Phases", Phys. Rev. Lett. 120, 247202 (2018), (arXiv: 1709.01546)
54. K. Kudo and Y. Hatsugai, "Fractional Quantum Hall Effect in n= 0 Landau Band of Graphene with Chern Number Matrix", J. Phys. Soc. Jpn 87, 063701 (1-5) (2018), DOI: 10.7566/JPSJ.87.063701, (arXiv: 1803.09978)
55. Yuta Takahashi, T. Kariyado and Y. Hatsugai, "Weyl points of mechanical diamond", arXiv:1801.06784 (1-8)
56. K.-I. Imura, Y. Yoshimura, T. Fukui and Y. Hatsugai, "Bulk-edge correspondence in topological transport and pumping", Journal of Physics: Conf. Series 969, 012133 (1-6) (2018), DOI:10.1088/1742-6596/969/1/012133 (arXiv:1706.04493)
57. H. Araki, T. Fukui and Y. Hatsugai, "Entanglement Chern number for three-dimensional topological insulators: Characterization by Weyl points of entanglement Hamiltonians", Phys. Rev. B 96 (1-8), (2017), DOI:10.1103/PhysRevB.96.165139, (arXiv: 1708.03722)
58. K. Kudo, T. Kariyado and Y. Hatsugai, "Many-Body Chern Numbers of $\nu=1/3$ and $1/2$ States on Various Lattices", J. Phys. Soc. Jpn 86, 103701 (1-4) (2017), DOI:10.7566/JPSJ.86.103701, (arXiv:1707.06722)
59. Hawa Latiff, Mikio Kishimoto, Sonia Sharmin, Eiji Kita, Hideto Yanagihara, and Takashi Nakagawa, "Enhanced Anisotropy in Tetragonalized (Cu,Co)Fe₂O₄ Particles via the Jahn-Teller Effect of Cu²⁺ Ions", IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS, VOL. 53, 9402304(2017).
60. Mitsuharu Matsumoto, Sonia Sharmin, Jun-ichiro Inoue, Eiji Kita, and Hideto Yanagihara, "Large Negative Uniaxial Magnetic Anisotropy in Epitaxially Strained Nickel Ferrite Films", IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS, VOL. 53, 2503604(2017).
61. Mikio Kishimoto, Hawa Latiff, Eiji Kita, and Hideto Yanagihara, "Characterization of FeCo particles synthesized via co-precipitation, particle growth using flux treatment and reduction in hydrogen gas", Journal of Magnetism and Magnetic Materials, VOL. 432, 404-409(2017).

< 書籍 >

1. 初貝安弘, 「特集:物理学と数学のつながり, 物理学と線形代数」~量子力学での展開~, 数理科学 55, 5月号 15-22 (2017) サイエンス社
2. 初貝安弘, 「トポロジカル物質におけるバルク・エッジ対応」科研費 NEWS, vol.3 8-8, (2017) 日本学術振興会
3. 初貝安弘, 「2016年ノーベル物理学賞について/物質中に普遍的に存在するトポロジカルな構造」数学セミナー4月号-666, 36-41 (2017) 日本評論社
4. 初貝安弘, 「コラム:メイドインジャパン物理用語 物性編 TKNN 数」, パリティ 32, 7月号 41-41 (2017) 丸善
5. 初貝安弘, 「特集:トポロジーによる新しい物性物理, 物質内部と表面状態の深い関係:バルクエッジ対応」, パリティ 32, 7月号 14-18 (2017) 丸善

< 学会発表 >

国際会議

1. (Invited) Y. Moritomo, "Prussian blue analogues as battery material for energy science", EuroChem2017, Barcelona, Spain, 2017/5/11-1
2. (Invited) Y. Moritomo "Thermal power generation in heat cycle near room temperature", TREMS symposium, Tsukuba, 2018/3/8
3. Y. Fukuzumi, W. Kobayashi, and Y. Moritomo, "Size Dependent Ion Diffusion in Na₂Ti₃O₇ and Na₂Ti₆O₁₃", 8th Lithium Battery Discussions (LiBD2017), le Palais des Congrès d'Arcachon, France, 2017/6/11-16
4. W. Kobayashi, R. L. Magnússon, Y. Okazaki, Y. Fukuzumi, and Y. Moritomo, "Electrochemical thermoelectric effects in several intercalation compounds", Lithium Battery Discussions - Electrode Materials (LiBD2017), le Palais des Congrès d'Arcachon, France, 2017/6/11-16
5. W. Kobayashi, S. Iouno, K. Amaha, S. Akama, and Y. Moritomo, "Pressure effect on battery voltage in layered NaMO₂", Lithium Battery Discussions - Electrode Materials (LiBD2017), 2017/6/11-2017/6/16, Arcachon, France
6. H. Niwa, M. Takachi, J. Okamoto, W.-B. Wu, D.-J. Huang, Y. Moritomo, "Local electronic states of Co-Fe Prussian blue analogues for Na-ion battery cathodes investigated by Co L-edge RIXS", 10th International Conference on Inelastic X-ray Scattering (IXS2017), DESY, Hamburg, Germany, 2017/8/30
7. Y. Fukuzumi, Wataru Kobayashi, and Yutaka Moritomo, "Thermal Coefficient of Redox Voltage in Na_xCoO₂", TGSW Student Poster Presentation on Materials Research, Epochal Tsukuba, 2017/9/25 (poster)
8. Y. Fukuzumi, Wataru Kobayashi, and Yutaka Moritomo, "Thermoelectric Coefficient of Redox Voltage in Na_xCoO₂", TGSW Interdisciplinary Workshop on Science and Patents 2017 (TGSW-IWP2017), Epochal Tsukuba, 2017/9/26 (poster)

9. Y. Fukuzumi, A. Kaoru, W. Kobayashi, H. Niwa, and Y. Moritomo, "Temperature Coefficient of Electrode Potential of Prussian Blue Analogues", 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives), University of Tsukuba, 2018/3/8-9 (poster)
10. M. Maruyama, S. Okada, "Magnetic properties of porous graphene networks", 28th International Conference on Diamond and Carbon Materials, 3 - 7 September 2017, Gothia Towers (Gothenburg)
11. Y. Gao, S. Okada, "Electrostatic potential barrier for electron emission at graphene edges induced by the nearly free electron states", 28th International Conference on Diamond and Carbon Materials, 3 - 7 September 2017, Gothia Towers (Gothenburg)
12. Mina Maruyama and Susumu Okada, "Magnetism and Electronic Polarity of Two-Dimensional Network Consisting of C40 Fullerene", 9th International Conference on Recent Progress in Graphene and 2D Material Research, September 19-22, 2017, Singapore (Singapore).
13. Yanlin Gao and Susumu Okada, "Electrostatic properties of edge-functionalized graphene nanoribbon under the lateral electric field", 9th International Conference on Recent Progress in Graphene and 2D Material Research, September 19-22, 2017, Singapore (Singapore).
14. Manaho Matsubara and Susumu Okada, "Fermi level tuning of N-doped graphene by an external electric field", 9th International Conference on Recent Progress in Graphene and 2D Material Research, September 19-22, 2017, Singapore (Singapore).
15. Sho Furutani and Susumu Okada, "Electronic properties of two-dimensional molecular sheets of chemically decorated fullerenes under an external electric field", 9th International Conference on Recent Progress in Graphene and 2D Material Research, September 19-22, 2017, Singapore (Singapore).
16. Hisaki Sawahata, Mina Maruyama, and Susumu Okada, "Energetics and electronic properties of B3N3-doped graphene: Semiconducting graphene heterostructures", 9th International Conference on Recent Progress in Graphene and 2D Material Research, September 19-22, 2017, Singapore (Singapore).
17. Airi Yasuma, Ayaka Yamanaka, and Susumu Okada, "Stability of edge oxidized graphene nanoribbons", 9th International Conference on Recent Progress in Graphene and 2D Material Research, September 19-22, 2017, Singapore (Singapore).
18. Yanlin Gao and Susumu Okada, "Field Emission Properties of Edge-Functionalized Graphene Nanoribbon", MNC2017, 30th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, November 6 -9, 2017, Ramada Plaza Jeju, (Jeju).
19. Sho Furutani and Susumu Okada, "Energetics and Electronic Structures of Chemically Decorated C60 Chains", MNC2017, 30th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, November 6 -9, 2017, Ramada Plaza Jeju, (Jeju).
20. Airi Yasuma, Ayaka Yamanaka, and Susumu Okada, "Energetics of Edge Oxidization of Graphene Nanoribbons", MNC2017, 30th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, November 6 -9, 2017, Ramada Plaza Jeju, (Jeju).
21. Hisaki Sawahata, Mina Maruyama, Ngyen Thanh Cuong, Haruka Omachi, Hisanori Shinohara, and Susumu Okada, "Energetics and Electronic Structure of Graphene Heterostructures via Substitutional Doping with B3N3", MNC2017, 30th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, November 6 -9, 2017, Ramada Plaza Jeju, (Jeju).
22. Hisaki Sawahata, Mina Maruyama, Ngyen Thanh Cuong, Haruka Omachi, Hisanori Shinohara, and Susumu Okada, "Band-Gap Engineering of Graphene Heterostructures via Substitutional Doping with B3N3", 2017 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS), November 26-December 1, 2017, Hapuna Beach Prince Hotel (Hawaii).
23. Yanlin Gao and Susumu Okada, "Electrostatic Potential Properties of Edge-Functionalized Graphene Nanoribbon Under the External Electric Field", 2017 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS), November 26-December 1, 2017, Hapuna Beach Prince Hotel (Hawaii).
24. Manaho Matsubara and Susumu Okada, "Geometric Structures of Al Nanoparticles Adsorbed on Graphene Under an External Electric Field", 2017 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS), November 26-December 1, 2017, Hapuna Beach Prince Hotel (Hawaii).
25. Mina Maruyama, Nguyen Thanh Cuong, and Susumu Okada, "Coexistence of Dirac Cones and Kagome Flat Bands in Porous Graphene", 2017 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS), November 26-December 1, 2017, Hapuna Beach Prince Hotel (Hawaii).
26. Nguyen Thanh Cuong and Susumu Okada, "High Thermoelectric Power of Borazine (B3N3)-embedded Graphene", 2017 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS), November 26-December 1, 2017, Hapuna Beach Prince Hotel (Hawaii).
27. Y. Tokura, "Excess entropy production in quantum systems", APS March Meeting 2018, Los Angeles, California, USA Mar. 5-9 (2018).
28. K. Asai, and Y. Tokura, "Non-unitary Transformation of the Square Root of Density Matrices", poster presentation. International School and Symposium on Nanoscale Transport and photonics (ISNTT) 2017, NTT Atsugi R&D Center, Atsugi, Japan, 14 Nov. (2017).
29. Eiji Nishibori, "Accurate structural studies of functional materials using synchrotron radiation X-ray powder diffraction" The International Conference on High-Performance Ceramics (CICC-10), Crowne Plaza Nanchang Riverside, Nanchang, China. 4-7, Nov. 2017 (**Plenary lectures**)
30. Eiji Nishibori, "Observation of π electron in metal hexaboride through X-ray charge density". 2nd International Conference on Applied Crystallography, Hilton Chicago North Shore Conference Center, Chicago, USA, October 16-17, 2017
31. Eiji Nishibori, "High resolution charge density of metal hexaborides." 24th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Hyderabad

- International Convention Centre, Hyderabad, India. 21-28 August 2017.
32. Yuka Deguchi, "Accurate structures of diamond under high-pressure and temperature." 24th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Hyderabad International Convention Centre, Hyderabad, India. 21-28 August 2017.
 33. Hidetaka Kasai, "Charge density study of van der waals-layered MoS₂ and TiS₂" 24th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Hyderabad International Convention Centre, Hyderabad, India. 21-28 August 2017.
 34. Tomoaki Sasaki, "Ultra-high reciprocal resolution X-ray diffraction of Al and Cu" 24th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Hyderabad International Convention Centre, Hyderabad, India. 21-28 August 2017.
 35. Yuka Deguchi, "High pressure studies of Diamond", Center for Materials Crystallography, Annual Meeting, Aarhus University, DK-8000 Aarhus C, Denmark, October 2nd – 3rd, 2017
 36. Eiji Nishibori, "Accurate structural studies using SPring-8 data.", Center for Materials Crystallography, Annual Meeting, Aarhus University, DK-8000 Aarhus C, Denmark, October 2nd – 3rd, 2017
 37. Hidetaka Kasai, "Charge density of ZnSb", Center for Materials Crystallography, Annual Meeting, Aarhus University, DK-8000 Aarhus C, Denmark, October 2nd – 3rd, 2017
 38. Hidetaka Kasai, "X-ray Electron Density Investigation of van der Waals Gap Interaction in TiS₂", APS March Meeting 2018, Los Angeles Convention Center (LACC), Los Angeles, CA, March 5-9, 2018
 39. (基調講演) Y. Hatsugai, "Welcome! Bulk edge correspondence : quantum Hall effects to mechanics", Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts (BEC2018)/2018-01-04–2018-01-08, Tsukuba, Japan
 40. (基調講演) Y. Hatsugai, "Welcome speech", Trends in Theory of Correlated Materials (TTCM2017)/2017-10-10–2017-10-13, Tsukuba, JAPAN
 41. (招待講演) Y. Hatsugai, "Uses of edge states of topological material and meta-material", JSPS-EPSRC core to core program seminar/2017-07-10–2017-07-11, Paris, France
 42. (招待講演) K. Shiraishi, A. Hattori, S. Tanaya, K. Yada, M. Araidani, Y. Hatsugai, M. Sato and Y. Tanaka, "Electronic Structures of Group IV Two Dimensional Materials", 13th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids - DSL/2017/2017-06-26–2017-06-30, Vienna, Austria
 43. (招待講演) S. Oono and Y. Hatsugai, "Topological edge modes in broken inversion 3D photonic crystals", EMN Summer Meeting 2017/2017-05-04–2017-05-07, Havana, Cuba
 44. (招待講演) Y. Hatsugai, "New Paradigm of Topological Materials", 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology/2018-03-08–2018-03-08, Tsukuba, Japan
 45. 口頭発表, K. Koji, Y. Hatsugai, "Chern matrices associated with chiral basis for FQH system in graphene", APS March Meeting 2018/2018-03-05–2018-03-09, Los Angeles, USA
 46. 口頭発表, H. Araki, T. Fukui and Y. Hatsugai, "Weyl Points of the Entanglement Spectrum for Topological Insulators from First Principles", APS March Meeting 2018/2018-03-05–2018-03-09, Los Angeles, USA
 47. 口頭発表, S. Takahashi, S. Oono, S. Iwamoto, Y. Hatsugai and Y. Arakawa, "Optical Weyl Points below the Light Line in Semiconductor Chiral Woodpile Photonic Crystals", Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO)/2017-05-14–2017-05-19, San Jose, USA
 48. ポスター, T. Kariyado, T. Morimoto and Y. Hatsugai, "ZN Berry phase as a topological index for correlated systems: application to SU(N)", "Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts (BEC2018)" /2018-01-04–2018-01-08, Tsukuba, Japan
 49. ポスター, H. Araki, T. Fukui and Y. Hatsugai, "Section entanglement Chern number for Bi and Sb based on first principles calculations", Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts (BEC2018)/2018-01-04–2018-01-08, Tsukuba, Japan
 50. ポスター, K. Koji and Y. Hatsugai, "Chern matrices associated with chiral basis for FQH system in graphene", Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts (BEC2018)/2018-01-04–2018-01-08, Tsukuba, Japan
 51. ポスター, Yuta Takahashi, T. Kariyado and Hatsugai, "Weyl points and edge states of mechanical diamond", Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts (BEC2018)/2018-01-04–2018-04-08
 52. ポスター, S. Fubasami and Y. Hatsugai, "Sequential topological transitions of J1-J2 integer spin chain characterized by Z₂", Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts (BEC2018)/2018-01-04–2018-01-08
 53. ポスター, K. Kudo, and Y. Hatsugai, "The fractional quantum hall effect and chirality on honeycomb lattice", Novel Quantum States in Condensed Matter 2017 (NQS2017)/2017-10-30–2017-11-03
 54. ポスター, H. Araki, T. Fukui and Y. Hatsugai, "Section entanglement Chern number for strong and weak topological insulators", Novel Quantum States in Condensed Matter 2017 (NQS2017)/2017-10-30–2017-11-03
 55. ポスター, H. Araki, T. Fukui, Y. Hatsugai, "Section entanglement Chern number for the Fu-Kane-Mele model and the Wilson-Dirac model", Trends in Theory of Correlated Materials (TTCM2017)/2017-10-10–2017-10-13

56. ポスター, K. Kudo and Y. Hatsugai, "Many-body states of a nearly flat band with kagome lattice", Trends in Theory of Correlated Materials (TTCM2017)/2017-09-10–2017-09-13
57. ポスター, H. Araki, T. Fukui and Y. Hatsugai, "Characterization of topological phases by the Weyl points of the entanglement Hamiltonian", 28th International Conference on Low Temperature Physics/2017-08-09–2017-08-16
58. ポスター, K. -I. Imura, Y. Yoshimura, T. Fukui and Y. Hatsugai, "Bulk-edge correspondence in topological transport and pumping", 28th International Conference on Low Temperature Physics/2017-08-09–2017-08-16
59. ポスター, K. Kudo and Y. Hatsugai, "Characterization of topological phases by the Weyl points of the entanglement Hamiltonian", 22nd International Conference on Electronic Properties of Two Dimensional Systems (EP2DS-22)/2017-07-31–2017-08-04
60. ポスター, T. Kawarabayashi, H. Aoki, Y. Hatsugai, "Topological Description of Tilted Dirac Fermions with/without Mass", 22nd International Conference on Electronic Properties of Two Dimensional Systems (EP2DS-22)/2017-07-31–2017-08-04
61. ポスター, S. Oono, S. Takahashi, S. Iwamoto, Y. Hatsugai and Y. Arakawa, "Topological edge modes of light in all dielectric chiral woodpile structures stacked with $\pi/4$ in-plane rotation", 18th International Conference on Physics of Light-Matter Coupling in Nanostructures (PIMCN18)/2017-07-09–2017-07-14
62. ポスター, K. Kudo; T. Kariyado and Y. Hatsugai, "Projected electron-electron interaction of Landau-Hofstadter bands on several lattices", Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts, startup meeting/2017-06-25–2017-06-25
63. ポスター, T. Kariyado and Y. Hatsugai, "ZN Berry phase and symmetry protected topological phase in spin chain", International conference on topological materials science 2017/2017-05-09–2017-05-13
64. Hideto Yanagihara (University of Tsukuba), "Lattice distortion and magnetic anisotropy of spinel ferrites: towards developing novel magnets without rare-metals", Tunisia-Japan Symposium on Science, Society and Technology (TJASSST 2017), Tunisia, 2017/11/24-26
65. Hawa Latiff, Mikio Kishimoto, Sonia Sharmin, Eiji Kita, Hideto Yanagihara, and Takashi Nakagawa, "Enhanced Anisotropy in Tetragonalized (Cu,Co)Fe₂O₄ Particles via the Jahn-Teller Effect of Cu²⁺ Ions", InterMag 2017, Dublin, Ireland, 2017/4/24-28 (ポスター).
66. Mitsuharu Matsumoto, Sonia Sharmin, Jun-ichiro Inoue, Eiji Kita, and Hideto Yanagihara, "Large Negative Uniaxial Magnetic Anisotropy in Epitaxially Strained Nickel Ferrite Films", InterMag 2017, Dublin, Ireland, 2017/4/24-28 (ポスター).
- 国内会議
- 小林 航, R. L. Magnússon, 岡崎慶彦, 福住勇矢, 守友 浩「インターカレーション化合物における電気化学熱電効果」第15回環境研究シンポジウム、学術総合センター、2017/11/22、
 - 守友 浩「新しい熱発電デバイス」エネルギー物質科学センタースタートアップシンポジウム、筑波大学総合研究棟 B0110、2017/11/25
 - 守友 浩「排熱をエネルギー変換する熱発電セル」第一回プレ戦略研究会「次世代物質・デバイス戦略開発拠点」、筑波大学、2017/12/11
 - 丹羽秀治「エネルギー材料の X 線分光」、第一回プレ戦略研究会「次世代物質・デバイス戦略開発拠点」、筑波大学、2017/12/11
 - 福住勇矢, 小林航, 丹羽秀治, 守友浩「プルシャンブルー類似体の熱起電力係数」第3回プレ戦略研究会/第2回かけはし研究会、筑波大、2018/01/15
 - 丹羽秀治, 小林航, 柴田恭幸, 仁谷浩明, 守友浩「遷移金属置換したプルシャンブルー類似体の XAFS 解析」第31回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム、つくば国際会議場、2018/1/9 (poster)
 - 丹羽秀治「ナトリウム電池正極用プルシャンブルーの局所構造解析」、平成29年度 CORE ラボ 研究成果報告会、東北大学片平キャンパス、2018/3/14
 - 丹羽秀治「ナトリウム電池正極用配位高分子錯体の局所構造解析」TIA かけはしミニシンポジウム「量子ビームを用いた熱電変換素子の解析技術」、KEK、2018/2/14
 - 柴田 恭幸, 福住 勇矢, 小林 航, 守友 浩「プルシャンブルー類似体を用いた二次電池構造型熱発電セルの作製とその評価」第65回応用物理学学会春季学術講演会、早稲田大学、2018/3/17
 - 福住勇矢, 天羽薫, 小林航, 丹羽秀治, 守友浩「プルシャンブルー類似体の酸化還元電位の温度係数」第65回応用物理学学会春季学術講演会、早稲田大西早稲田キャンパス、2018/3/17.
 - 丹羽 秀治, 小林 航, 柴田 恭幸, 仁谷 浩明, 守友 浩「遷移金属置換したプルシャンブルー類似体の不変的な局所構造」第65回応用物理学学会春季学術講演会、早稲田大西早稲田キャンパス、2018/3/19 (poster)
 - 柴田恭幸, 福住勇矢, 小林航, 守友浩「プルシャンブルー類似体を用いた二次電池型熱セルにおける熱発電」日本物理学会第73回年次大会、東京理科大学(野田キャンパス)、2018/3/23
 - 樋口翔馬, 東山和幸, 守友浩「Cs 吸着 Pd(110)1×2 再構成表面の第一原理計算」日本物理学会第73回年次大会、東京理科大学野田キャンパス、2018/3/22
 - 小林航, 福住勇矢, 丹羽秀治, 守友浩「プルシャンブルー類似体の電気化学熱電係数」日本物理学会第37回年次大会(2018年)、東京理科大野田キャンパス、2018/3/23

15. 福住勇矢, 小林航, 丹羽秀治, 守友浩「プルシアンブルー類似体の電気化学熱電係数」日本物理学会第 37 回年次大会 (2018 年)、東理科大野田キャンパス、2018/03/23
16. 中嶋慧、都倉康弘「量子マスター方程式による過剰エントロピー生成の解析的研究:経路依存性と BSN ベクトル」、日本物理学会第 73 回年次大会、2018 年 3 月 22 日、東京理科大野田キャンパス、千葉。
17. 鈴木遼介、加藤澄也、吉田恭、都倉康弘「電流ゆらぎの量子フィードバック制御プロセス」、日本物理学会第 73 回年次大会、2018 年 3 月 23 日、東京理科大野田キャンパス、千葉。
18. Eiji Nishibori, Bo Iversen et al, “Application of synchrotron radiation in materials crystallography”, SPring-8 シンポジウム 2017, 広島大学 東千田未来創生センター、平成 29 年 9 月 4-5 日
19. 笠井秀隆, X-ray Electron Density Investigation of Weak Interlayer Interaction in TiS_2 , 平成 29 年度日本結晶学会年会、JMS アステールプラザ (広島市) 平成 29 年 11 月 23-24 日
20. 出口裕佳”量子結晶学によるダイヤモンドの精密構造決定”平成 29 年度日本結晶学会年会、JMS アステールプラザ (広島市) 平成 29 年 11 月 23-24 日
21. 中村篤”熱電材料テトラヘドライト $\text{Cu}_{12}\text{Sb}_4\text{S}_{13}$ の Zn 置換によるディスオーダー構造”平成 29 年度日本結晶学会年会、JMS アステールプラザ (広島市) 平成 29 年 11 月 23-24 日
22. Venkatesha Hathwar, “Unravelling low-temperature crystal structures of thermoelectric materials, $\text{Cu}_{12}\text{Sb}_4\text{S}_{13}$ and $\text{Cu}_{12}\text{As}_4\text{S}_{13}$ ”, 平成 29 年度日本結晶学会年会、JMS アステールプラザ (広島市) 平成 29 年 11 月 23-24 日
23. 西堀 英治 “放射光X線粉末回折による確度の高い構造因子の計測および未知構造決定”平成 29 年度日本結晶学会年会、JMS アステールプラザ (広島市) 平成 29 年 11 月 23-24 日 (学術賞受賞講演)
24. 笠井秀隆 “超臨界水熱合成によるナノ粒子生成のその場観察”第 31 回放射光学会年会放射光科学合同シンポジウム つくば国際会議場、つくば、平成 30 年 1 月 10 日
25. 基調講演) 初貝 安弘, 「はじめに:バルク・エッジ対応の多様性と普遍性」, Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts, startup meeting/2017-06-25--2017-06-25, Tokyo, Japan
26. (招待講演) 初貝 安弘, "Device design and new functions based on bulk-edge correspondence", Pre-Strategic Initiatives: Strategic Development Center of Next generation Material & Device workshop/2018-01-16--2018-01-16, Tsukuba, Japan
27. 口頭発表, 工藤 耕司; 初貝 安弘, 「Chem 行列によるグラフエンの分数量子ホール相の特徴付け」, 日本物理学会第 73 回年次大会 /2018-03-22--2018-03-25, 東京理科大, 千葉
28. 口頭発表, 文挾 彰太, 初貝 安弘, 「J1-J2 整数スピン鎖における逐次量子相転移の Z2 ベリー位相による特徴づけ」, 日本物理学会第 73 回年次大会 /2018-03-22--2018-03-25, 東京理科大, 千葉
29. 口頭発表, 河原林 透, 石井 航太, 初貝 安弘, 「カゴメ格子上の異方的 XXZ スピン系における量子相とベリー位相」, 日本物理学会第 73 回年次大会 /2018-03-22--2018-03-25, 東京理科大, 千葉
30. 口頭発表, 荒木 広夢, 福井 隆裕, 初貝 安弘, 「第一原理計算に基づくエンタングルメントハミルトニアンによるトポロジカル絶縁体の分類」, 日本物理学会第 73 回年次大会 /2018-03-22--2018-03-25, 東京理科大, 千葉
31. 口頭発表, 荒木 広夢, 福井 隆裕, 初貝 安弘, 「3次元トポロジカル絶縁体相のエンタングルメント・ハミルトニアンによる特徴付け」, 日本物理学会 2017 年秋季大会 /2017-09-21--2017-09-24, 岩手大学, 盛岡
32. 口頭発表, 工藤 耕司, 初貝 安弘, 「カゴメ格子の平坦バンドにおける電子間相互作用」, 日本物理学会 2017 年秋季大会 /2017-09-21--2017-09-24, 岩手大学, 盛岡
33. 口頭発表, 河原林 透, 青木 秀夫, 初貝 安弘, 「フラットバンド格子型におけるディラック電子系の代数的変形」, 日本物理学会 2017 年秋季大会 /2017-09-21--2017-09-24, 岩手大学, 盛岡
34. 口頭発表, 高橋 雄太, 苅宿 俊風, 初貝 安弘, 「メカニカルダイヤモンドのワイル点とエッジ状態」, 日本物理学会 2017 年秋季大会 /2017-09-21--2017-09-24, 岩手大学, 盛岡
35. 口頭発表, 大野 修平; 高橋 駿, 岩本 敏, 初貝 安弘, 荒川 泰彦, 「ウッドパイル型カイラルフォトニック結晶における構造変形とバルク・エッジ対応」, 日本物理学会 2017 年秋季大会 /2017-09-21--2017-09-24, 岩手大学, 盛岡
36. 口頭発表, 高橋 雄太, 苅宿俊風, 初貝安弘, 「メカニカルグラフエンの多様なエッジ状態とそのトポロジカルな起源」, 日本物理学会 2016 年秋季大会/2017-09-13--2017-09-16, 岩手大学, 盛岡
37. ポスター, 荒木 広夢, 初貝 安弘, 「エンタングルメントチェーン数とそのトポロジカル絶縁体の相分類への適用」, 第 62 回物性若手夏の学校/2017-07 (基調講演)
38. H. Yanagihara, “Strain-induced magnetic anisotropy in spinel ferrites”, 第 41 回日本磁気学会学術講演会, 20aC-2, 2017/9/19-22 (招待).
39. 小野田浩成, 井上順一郎, 介川裕章, S. Sharmin, 柳原英人, 「緩衝層膜によるコバルトフェライト薄膜の歪と磁気異方性制御」, 第 41 回日本磁気学会学術講演会, 21aB-6, 九州大学, 2017/9/19-22 (口頭).
40. 重澤 遼, H. Lati, 岸本幹雄, 喜多英治, 柳原英人, 「Mn フェライト微粒子の作製と磁気特性評価」, 第 41 回日本磁気学会学術講演会, 20pB-3, 九州大学, 2017/9/19-22 (口頭).

41. 小島 泰介, 柳原 英人, 「スパッタリング法による金属薄膜成膜時の RHEED 振動の観察」, 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, 20a-C103-9, 早稲田大学, 2018/3/17-20 (口頭).

藤田知樹(数理物質科学研究科・M1)
文挾彰太(数理物質科学研究科・M1)
鈴木仙里(数理物質科学研究科・M1)
西沢駿(数理物質科学研究科・M1)

<メンバー>

専任教員:

守友浩(数理物質系・物理学域・教授)
岡田晋(数理物質系・物理学域・教授)
都倉康弘(数理物質系・物理学域・教授)
西堀英治(数理物質系・物理学域・教授)
初貝安弘(数理物質系・物理学域・教授)
柳原英人(数理物質系・理工学域・教授)
笠井秀隆(数理物質系・物理学域・助教)
小林航(数理物質系・物理学域・助教)
丹羽秀治(数理物質系・物理学域・助教)
Hathwar Rama Venkatesha(数理物質系・物理学域・助教)

研究員:

丸山実那(数理物質系・物理学域・研究員)

客員研究員:

新井正男(NIMS 主幹研究員)

大学院生:

米沢宏平(数理物質科学研究科・D3)
大野修平(数理物質科学研究科・D3)
高燕林(数理物質科学研究科・D2)
松原愛帆(数理物質科学研究科・D2)
佐々木友彰(数理物質科学研究科・D2)
田結荘 健(数理物質科学研究科・D2)
Hawa Latiff(数理物質科学研究科・D2)
福住勇矢(数理物質科学研究科・D1)
荒木広夢(数理物質科学研究科・D1)
天羽 薫(数理物質科学研究科・M2)
中田光彦(数理物質科学研究科・M2)
樋口翔馬(数理物質科学研究科・M2)
古谷匠(数理物質科学研究科・M2)
長澤裕也(数理物質科学研究科・M2)
伊王野慎司(数理物質科学研究科・M1)
岡崎慶彦(数理物質科学研究科・M1)
浅井海因(数理物質科学研究科・M2)
小沢帆太郎(数理物質科学研究科・M2)
唐津修一(数理物質科学研究科・M2)
中村篤(数理物質科学研究科・M2)
工藤耕司(数理物質科学研究科・M2)
高橋雄太(数理物質科学研究科・M2)
保田和馬(数理物質科学研究科・M2)
小野田浩成(数理物質科学研究科・M2)
澤畑恒来(数理物質科学研究科・M1)
米山和文(数理物質科学研究科・M1)
安間愛莉(数理物質科学研究科・M1)
鈴木遼介(数理物質科学研究科・M1)
加藤澄也(数理物質科学研究科・M1)
出口裕佳(数理物質科学研究科・M1)

(3) 電気エネルギー制御部門

上殿明良

<研究成果>

陽電子消滅 γ 線ドップラー拡がり測定を用いて、GaN-on-Si、イオン注入 GaN、MOCVD や HVPE により成膜された GaN、各種のバルク GaN を評価した。この結果、陽電子消滅を用いて光照射により励起された電子が、空孔型欠陥へ捕獲、ないしは捕獲後放出される過程を観測することにより、キャリア捕獲機構や欠陥準位について詳しい知見が得られることがわかった。

【 1 】

GaN-on-Si 中の空孔のキャリア捕獲を評価した結果を図 1 に示す。S パラメーターは、陽電子が欠陥に捕獲されると大きくなるパラメーターで、これを光エネルギーの関数として測定している。また、図 1(a)には PL の結果を示す。図中の数字は GaN 中の C 濃度 ([C]) である。[C]= $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ の試料は、S 値が 1.8 eV、2.7 eV、3.2 eV で上昇する。一方、N に置換にした負電荷及び中性の C から電子を脱離させるのに必要なエネルギーはそれぞれ 2.7 eV と 3.2 eV である。よって、 $C_N^{(0/-)} + I^+ \rightarrow C_N^{(+0)} + I^0$ の反応が起こっていると考えられる。

【 2 】

Mg イオン注入した GaN の欠陥とその電子捕獲を評価した。試料は、MOVPE を用いて GaN バルク基板上に 4 ミクロン厚の GaN 層を成長させたも

のを使用した。表面から 500 nm 近傍まで箱型の Mg 分布を作るため、エネルギーを 20 keV から 430 keV まで変化させながらイオン注入を実施した。箱型領域の Mg 濃度は、 1×10^{17} 、 1×10^{18} 、 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ である。注入後、厚さ 300 nm の AlN を試料表面に形成、1000°C から 1300°C まで、窒素雰囲気中で 5 分焼鈍した。陽電子消滅及び PL 測定は、AlN をエッチングした後に実施した。図 2 に Mg 注入後及び 1300°C で焼鈍した試料について、S パラメーターを陽電子打ち込みエネルギー (E) の関数として測定した結果を示す。

横軸上には、陽電子平均打ち込み深さを示している。欠陥濃度が陽電子の検出限界以下の場合、S 値は 0.441 となる。Mg 濃度 10^{17} cm^{-3} の試料 (as-implanted) に着目すると (図 2(a))、 $E=5-15 \text{ keV}$ 付近の S 値は上記の S 値より高いため、イオン注入により導入された空孔型欠陥中で陽電子が消滅していると判断できる。1300°C 焼鈍後は、 $E=7-8 \text{ keV}$ で S 値が上昇するが、これは、焼鈍により空孔形欠陥が集合し、そのサイズが大きくなったためである。測定された S 値、また W 値、陽電子寿命測定から、焼鈍前の欠陥種は Ga 空孔 (V_{Ga}) と N 空孔 (V_{N}) の複合体 ($V_{\text{Ga}}V_{\text{N}}$) であること、また、1300°C 焼鈍後は、より大きな空孔集合体 ($(V_{\text{Ga}}V_{\text{N}})_n$ ($n=3$) 等) が導入されていることがわかった。

図に示すように、1300°C 焼鈍した試料を He-Cd レーザーで照射しながら測定すると S 値は上昇した。この原因は上記の空孔集合体への陽電子捕獲率が上昇したためである。陽電子が電荷を持った空孔に捕獲される場合、正に荷電した空孔への捕獲率は非常に小さい。一方、正に荷電した空孔が光照射により励起された電子を捕獲すると ($I^+ + e^- \rightarrow I^0$)、電荷が中性ないしは、負へ変化するため、陽電子は空孔に捕獲されるようになる。よって、上記の空孔集合体の一部は暗黒下では正電荷となっており、光照射により作られた電子を捕獲し、S 値が上昇したと考えることができる。ただし、図 2(b)、(c) に示した様に、光照射の効果は Mg 濃度が上昇すると抑制されることがわかった。これは、活性化されていない Mg が光照射により導入された電子を捕獲してしまい、空孔が電子を捕獲する確率が減少するためである。

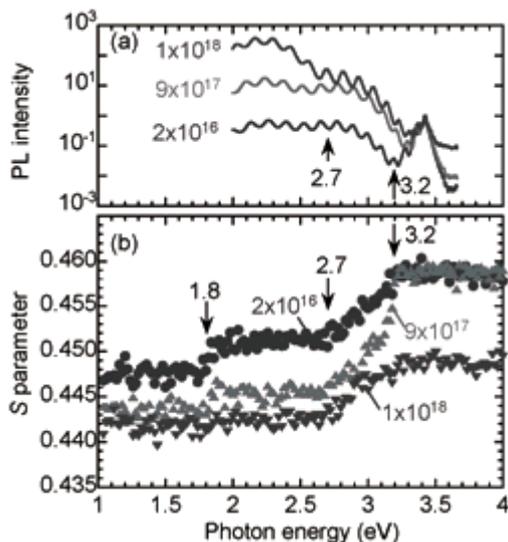


図 1. GaN-on-Si の S 値の光照射エネルギー依存性。同一試料の PL 測定の結果も示した。

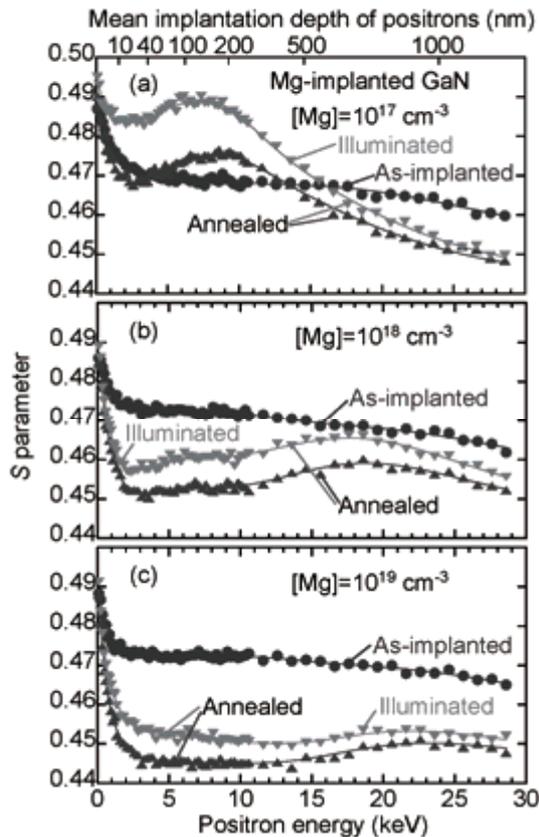


図 2. Mg 注入 GaN の焼鈍前後で測定した S パラメーター (E) の陽電子打ち込みエネルギー依存性. 注入した Mg の濃度 $[Mg]$ は 10^{17} , 10^{18} , 10^{19} cm^{-3} である (図中 (a), (b), (c)). 焼鈍した試料については光照射しながら測定した結果も示した.

図 3 に 10K で測定した PL と S 値を光エネルギーの関数として測定した結果を示す. PL では, Ga 位置に入った Mg に帰属できる ABE (acceptor-bound excitons) や UVL (ultraviolet luminescence) が観測されている. Mg 濃度 10^{17} cm^{-3} の試料では, S 値は 2.6 eV から上昇し, 3.1 eV でほぼ飽和する. よって, バンドギャップ中の空孔の準位は, 価電子帯から上記のエネルギー位置にある可能性がある. 3.4 eV 以上で光照射すると, 電子は一旦, 伝導帯に上がってから空孔に捕獲されていると考えられる. ただし, 2.1 eV から 2.6 eV の範囲の S 値は照射前の S 値より小さい. したがってこのエネルギーでは, 電子が空孔から放出されるため空孔の電荷が正へ移動していると

考えられる. よって, このエネルギーに対応する準位にも空孔が存在すると思われる.

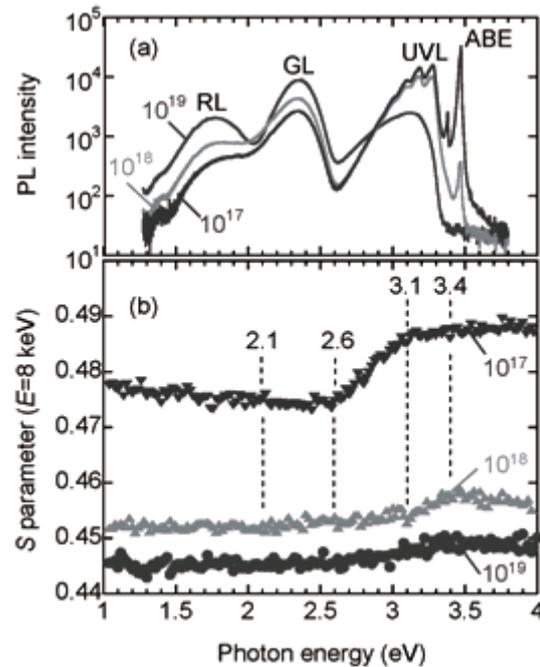


図 3. Mg 注入 GaN について 1300°C 焼鈍後の (a) 低温 PL 測定結果, 及び (b) S 値の光照射エネルギー依存性.

<研究成果>

SiC-MOSFET の素子破壊耐量に関し、n チャネルだけでなく p チャネル素子について実測ならびにシミュレーションで評価解析、Si パワーデバイスでは見られない SiC 特有の素子破壊メカニズムを解明した。また、SiC-MOSFET の特性を決める MOS チャネル部の界面特性評価を行い、特にバンド端近傍の界面準位密度の評価と界面近傍酸化膜トラップの評価を中心に行った。

【 1 】(1) a) n チャネル素子:1200V 耐圧 SiC nMOSFET を用い、素子破壊耐量を評価、併せてデバイスシミュレーションによりその破壊メカニズムを解析した。その結果、Si デバイスでよく知られている素子内発熱による熱暴走破壊に加え、SiC-MOSFET では低 DC bus 電圧印加時に i)ゲート酸化膜ダメージによる破壊 ii)Al 電極ダメージによる破壊、ならびに iii)ノーマリオン現象による破壊があることが判明した。これらは、SiC が Si に比べ高温に耐えられるという特徴による。

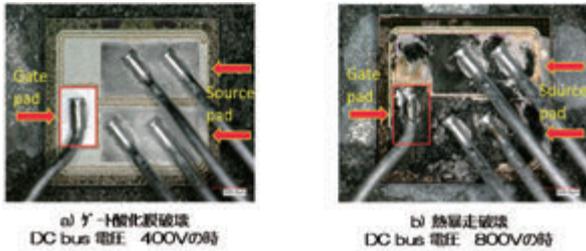


図 1 SiC n-MOSFET 破壊試験後の素子写真

b) 3×3mm²角の 600V 耐圧縦型 SiC pMOSFET を世界で初めて試作、それを用い破壊耐量を評価し、併せてデバイスシミュレーションによりその破壊メカニズムを解析した。その結果 SiC pMOSFET は SiC nMOSFET に比べ破壊耐量大きいことが判明した。その理由として i)高アバランシェ耐量と ii)ゲート酸化膜での低もれ電流によるところ大きいことが挙げられる。

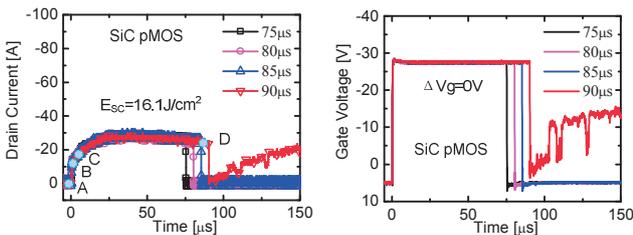


図 2 SiC p-MOSFET 負荷短絡耐量評価結果

【 2 】(1)SiC-MOSFET のホール効果測定と Split CV 法を組み合わせることにより、伝導帯近傍における界面準位密度の評価法を考案した。窒化処理を行うことで、界面準位密度は低減されるが、ホール効果測定より求まる可動キャリアの移動度(ホール移動度)は処理条件には大きく依存しないことが分かった。つまり、窒化による電界効果移動度(I_d - V_g 特性の傾き)の改善はキャリア移動度の改善より可動キャリア密度の向上によることが明らかとなった。

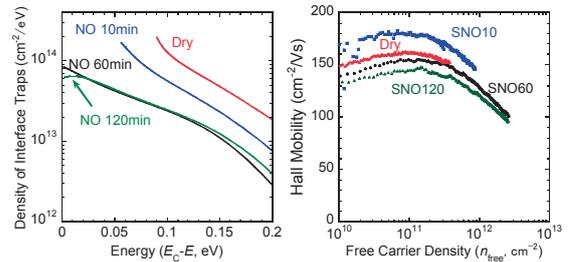


図 3 伝導帯近傍の界面準位密度とホール移動度の可動キャリア密度依存性

(2)SiC-MOS 界面における界面近傍酸化膜トラップ (Near-Interface trap; NIT) を分布定数回路モデルを用いて解析した。トラップ分布を界面からの距離に対して指数関数的に減少するプロファイルを仮定すると、MOS キャパシタの容量およびコンダクタンスの周波数依存性を説明できる。また、窒化により NIT 密度が減少していることを定量的に示すことに成功した。

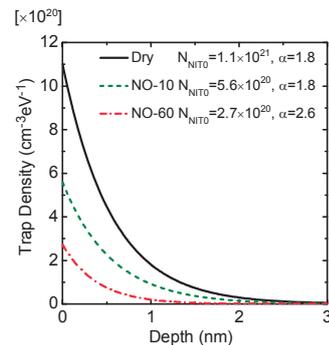


図 4 NIT 密度分布の酸化膜形成条件依存性

佐々木正洋

<研究成果>

【 1 】SiC 単結晶の高品質化

産総研の SiC 溶液成長グループとともに、表面科学の寄与の可能性についてについて検討を行い、共同研究を進めることに合意した。これをもとに、つくば産学連携強化プロジェクト(筑波大学・産総研・農研機構 合わせ技ファンド(第5回))に申請し、採択された。

【 2 】高精度エッチング技術への支援

グルノーブル大学とのダブルディグリープログラムの学生受入を契機として、海外教育研究ユニット招致の研究グループとの連携強化を図った。研究室での合同の報告会を開始している。

【 3 】表面現象の基礎過程の理解と制御

エレクトロニクスに関わる表面現象の理解をめざす研究を継続的に行っている。本年度は、次世代有機エレクトロニクスの重要な要素技術であるドーピングの機構解明を目的とした。このために、構造が均一な高品位有機薄膜を独自に作製し、これにドーピングを施した試料の構造と電子状態をその場で計測する、独自の研究手法を採った。研究対象に、多彩な電子状態変化を示す、アルカリ元素をドーピングした芳香族分子に特に着目した。いずれもドーピングに伴い分子膜の構造変化と電子状態変化とが誘起され、分子配列変調の重要性が見出された。同時に、未ドーピングの均一有機薄膜についても、分子配列制御による電子状態や光物性の制御を研究した。以上から、次世代有機材料開発における分子配向の精緻な制御の重要性を明らかにした。

【 4 】電子放出理解のための基礎検討

特に炭素系材料に注目し、その電子放出機構の解明をめざしている。有機半導体分子、グラフェンからの電子放出において新たな現象を見いだすと共に、グラフェンを用いた電子放出素子を提案した。

只野 博

<研究成果>

回路設計グループでは、SiC を中心とした新しいパワー半導体デバイスを用いた高性能電力変換回路の研究を実施した。それぞれのデバイスの特徴、特性に最適化した回路を用いることで、デバイスの特性を十分に引き出した回路開発、システム展開が可能となる。

【 1 】SiC パワーデバイスを用いたインピーダンスソースインバータの研究

パワーデバイスの電気的特性を生かした回路方式の検討を行った。Si のスーパージャンクションデバイスや SiC-MOSFET は、高性能であるが内蔵ダイオードを利用しにくいデバイスである。この欠点を補う回路方式として、インピーダンスソースインバータ(図 1-1)との組み合わせを検討し、それぞれの特徴にあった回路が実現できた。

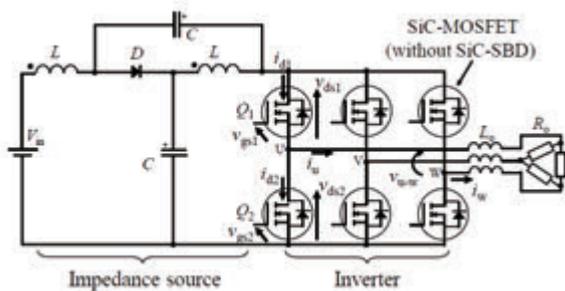


図 1-1 インピーダンスソースインバータの回路例

【 2 】GaN パワーデバイスを用いた電力変換装置の研究

GaN パワー半導体デバイスは、高速駆動が可能なデバイスである。この特徴を最大限生かす回路方式として、電流不連続モードを用いた系統連系インバータの検討を行った。動作周波数1MHzでの系統連系インバータを試作し(図 1-2)、小型のチップインダクタが適用可能であることを明らかにし、電力変換装置の小型高性能化の可能性を示した。



図 1-2 GaN を用いた試作高周波インバータ

梅田享英

<研究成果>

同部門・計測評価部・梅田研究室では、電子スピン共鳴分光 (ESR) を用いたパワーエレクトロニクス半導体デバイス (炭化ケイ素 4H-SiC、窒化ガリウム GaN、ダイヤモンド) の欠陥評価を行っている。特に Metal-Oxide-Semiconductor (MOS) 界面欠陥の同定に焦点を当てている。

【 1 】SiC-MOS 界面欠陥

4H-SiC で作られる MOSFET では界面欠陥による移動度劣化やしきい値シフトが大きな課題となっている。4H-SiC(0001)面 (通称 Si 面) の MOS 界面欠陥の ESR 観察と定量に成功し、熱酸化によって”界面炭素欠陥”と名前をつけた欠陥が $2\text{--}4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ の密度で発生し、これが電子トラップとなることで MOSFET の電界効果移動度を下げていることが判明した (国際会議発表 27 など)。

他方、4H-SiC(000 $\bar{1}$)面 (通称 C 面) では、負のしきい値シフトの原因となる”C 面固有欠陥”を電流検出 ESR 法によって明らかにした。この界面欠陥は C 面にだけ発生し ($\leq 15 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$)、酸化膜中にも分布して正孔トラップとして働くことを明らかにした (論文 26 など)。

【 2 】SiC-MOS 界面の単一光子源

単一光子源 (Single Photon Source: SPS) は光読み出し可能な量子ビットであり、量子コンピューティングや量子センシングの基本要素となる。最も有名な SPS はダイヤモンドの NV センターであるが、最近、SiC においても室温動作可能な SPS が見つかって研究が進展している。

私達は 4H-SiC MOSFET のチャネル領域の 4H-SiC/SiO₂ 界面において”界面 SPS”と呼ぶべき新たな SPS を発見し (面密度 $1 \times 10^7 \text{ cm}^{-2}$)、その室温動作や電界制御をデモンストレーションした (論文 25 など)。

【 3 】ダイヤモンド MOS 界面欠陥

2016 年にダイヤモンドでもついに反転層

MOSFET の実証が行われ、SiC や GaN と同様に MOS 界面欠陥の研究が重要になってきた。

梅田研ではいち早くダイヤモンド MOS 界面欠陥の ESR に着手し、産業技術総合研究所先進パワーエレクトロニクス研究センター (TREMS 電気エネルギー制御部門の基礎研究部を兼任している) で作製されたダイヤモンド(111)/Al₂O₃ 界面欠陥の ESR 検出に初めて成功した。面密度は 10^{12} cm^{-2} 台で同界面の移動度劣化に影響しているものと推測される。ESR 分光情報を利用しての起源の同定を進めている (国際会議発表 30 など)。

櫻井岳暁

<研究成果>

当研究室では半導体素子（パワー半導体素子、太陽電池、光触媒）の電気光学特性の評価、ならびに特性を左右する欠陥準位の解析を行い、デバイスの特性改善にフィードバックすることを目標に研究を進めている。

【 1 】 4H-SiC/SiO₂ 界面の構造解析

4H-SiC を基板に用いたパワーMOS 半導体素子は優れた物性を有しており、Si を凌駕する特性を示すことから注目を集めている。しかし、熱酸化膜 SiO₂ と 4H-SiC 基板界面には多数の欠陥が存在し、理想的な電気特性を示さない。この元となる起源を調べるため、共焦点ラマン分光法を用い界面ひずみを検出した。その結果、4H-SiC/SiO₂ 界面には 100MPa ほどの面内ひずみが存在し、SiO₂ のエッチングにより膜厚が薄くなるとひずみが開放されることが明らかになった。2つの材料の熱酸化時の熱膨張係数差がこの大きな原因と予想されるが、他に基板からの炭素元素の脱離の可能性も指摘されており、今後起源については詳細を調べて行く予定である。また、理論的な解析と合わせ、キャリア産卵に与える影響も今後考察する。

【 2 】 光容量法によるダイヤモンドの欠陥検出

ダイヤモンドはパワー半導体や量子デバイスとしての応用が期待されており、このデバイス特性を決める欠陥準位の評価は、開発に不可欠である。ダイヤモンドはバンドギャップが 5.5 eV と巨大であり、熱的な手法より光学的な手法の方が欠陥検出には有効である。そこで、今年度から産業技術総合研究所と共同研究を開始し、バンドギャップ内欠陥準位密度の定量解析を目標に光容量計測システムの構築を開始した。変調周波数を下げる必要性が明らかになり、現在 1-10 kHz の変調周波数での光容量測定系を構築している。

【 3 】 Cu(In, Ga) (S, Se)₂ 太陽電池の再結合解析

Cu(In, Ga) (S, Se)₂ 太陽電池は多結晶薄膜であるにもかかわらず、小面積セルで 22.9 % と高

い変換効率を示し、さらなる高効率化が期待されている。この高効率化プロセスでは他のカルコゲン系太陽電池材料と同様アルカリ金属処理を採用しているが、処理が Cu(In, Ga) (S, Se)₂ の欠陥の挙動にどのように影響を及ぼしているのか明らかでなかった。当研究室では、Cu(In, Ga) (S, Se)₂ 太陽電池について、アドミッタンススペクトロスコピー法、光容量法、蛍光寿命測定などを用い、アルカリ（カリウム）処理前後の欠陥準位分布の違い、捕獲断面積の評価、再結合過程の相違について評価を行なった。その結果、アルカリ処理後には (1) キャリア濃度の拡大に対応する活性化エネルギー 0.25 eV の準位の形成、(2) 界面改質、ならびに (3) バルクでの再結合抑制が起こり、高効率化に寄与しているという知見を得た

【 4 】 Z スキーム光触媒 BiVO₄ の IV 属元素ドープ効果

Zr, Hf もしくは Mo をドープした BiVO₄ 試料では、H₂O の分解反応 (BiVO₄ では酸素発生) が促進されることを確認している。したがって、当研究ではなぜこのような特徴的な IV 族, VI 族元素で触媒活性が上がるのかを突き止めるため、物性研究を進めた。まず金属ドープ BiVO₄ 試料の構造物性を調査した結果、Mo と Zr をドープした試料ではどちらも

- (1) V-O に関連したラマンピーク (840 cm⁻¹) が低波数側にシフト
- (2) X 線回折で単斜晶と異なるピークが出現
- (3) バンドギャップが 2.51 eV から 0.02-0.04 eV 縮む

など全て系統的に変化することが明らかになった。また、ケルビンプローブ測定では、フェルミ準位がほぼ伝導帯近傍に存在することが判明し、ドープした金属はドナーとして働いていることが明らかになった。この原因について考察を行った。Zr は IV 属、Mo は VI 属元素であり、V を置換するのであれば Mo はドナー、Zr はアクセプタとして働くはずである。一方、米国再生エネルギー研究所 (NREL) の計算結果では、V⁵⁺ はイオン半径が 0.52Å と小さく、Mo⁶⁺ (イオン半径 0.42Å) は置換できるが Zr⁴⁺ (イ

オン半径 0.78\AA) では置換できない。逆に、 Bi^{3+} はイオン半径が 1.08\AA と大きいため、Zr で置換されうると報告されており、どちらのドーブ元素もドナーとして働くであろうことが明らかになった。構造変化が誘起されたのは、構成元素よりも若干小さな不純物が入ったためであると推測される。一方、今回二つのドーブ試料では、蛍光寿命も短くなった。このため、不純物の導入に伴い欠陥も導入されたと予想される。この欠陥生成がおそらく反応を活性化しているものと思われる。電子ドーブのどちらが反応性を向上させているのかまでは突き止めることができなかつたため、今後も研究を継続させる必要がある。

蓮沼隆

<研究成果>

SiC は絶縁破壊耐性、熱伝導率が優れていることから低損失パワーデバイス材料として期待されている。Siと同様に熱酸化によって容易に絶縁膜が形成可能であることも大きなメリットの一つであるが、様々な欠陥が多く含まれ、膜の信頼性には多くの課題が残されている。我々はSiC上熱酸化膜中あるいは界面における欠陥生成機構を探るとともに、低欠陥プロセスの構築を目指している。

SiC上ウェット熱酸化膜界面の電気特性評価

SiC上に形成した熱酸化膜においては界面準位が多く存在し、FETのキャリア移動度が極めて小さくなる原因の一つと考えられている。ただし界面欠陥量は酸化プロセスに依存し、特にC面基板上に水蒸気雰囲気で作製したウェット酸化膜では界面準位密度が大幅に低減する。しかし、ウェット酸化膜を用いたデバイスにおいては電気的ストレス印加時の経時劣化が大きく、デバイス使用時の閾値変動が大きい。我々はウェット酸化膜の経時劣化の原因を探るべく、以下のような評価を行った。

[実験手順]

n型4H-SiC C面を使用した。標準的なRCA洗浄後、8.1% H₂O/Ar 雰囲気にて1200°Cで約30nmの熱酸化膜を形成した。熱酸化膜形成後にAr100%の雰囲気にて1200°Cで60minの熱処理を行った。一部の試料に対してさらに乾燥酸素雰囲気にて650°Cで300minの追加熱処理を行った。乾燥酸素熱処理の前後で膜厚の変化が無いことを分光エリプソメトリで確認した。また、100%O₂雰囲気にて形成したドライ熱酸化膜を比較対象として形成した。その後酸化膜上にAl電極を形成し、構造を作製した。各MOSキャパシタの容量-電圧特性を評価した。

[結果]

容量特性から、界面欠陥における電子の捕獲・放出特性が酸化膜作製方法に依存しており、それぞれの時定数が異なることがわかった。図1は(a)形成後にAr熱処理を行ったウェット酸化膜、(b)その後さらに乾燥酸素雰囲気にて熱処理を行ったウェット酸化膜(c)乾燥酸素酸化膜の単位面積当たりの界面準位数である。白いバーと黒いバーはそれぞれ電子を捕獲および放出した準位の数を表している。乾燥酸素酸化

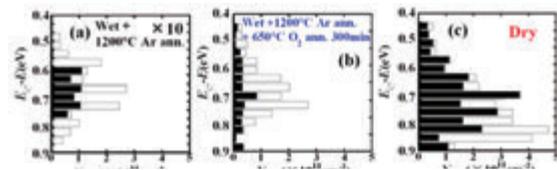


図1 界面準位密度分布。(a) ウェット酸化膜、(b) 酸素中の追加熱処理がされたウェット酸化膜、(c) 乾燥酸素酸化膜

膜では捕獲された電子の70%以上が放出されるのに対して、低温での追加乾燥酸素熱処理を行ったウェット酸化膜では捕獲された電子のわずか30%しか放出されないことが分かった。また、Ar熱処理だけを行ったウェット酸化膜の電子捕獲および放出特性は、やりとりする電子の量が少ないものの追加乾燥酸素熱処理を行った水蒸気酸化膜と類似している。これらの結果は、①SiC伝導帯下端0.6-0.9eV程度の深い準位に比較的多量の準位密度が存在する、②ウェット酸化後の低温酸素熱処理によって準位密度が増加する、③追加酸素熱処理の有無に関わらず、水蒸気酸化膜においては放出時定数が大きい、にまとめられる。放出時定数が大きいことから、ウェット酸化膜においては界面のみならず、酸化膜中に欠陥準位が分布していることが示唆される。また、650°Cでの低温であるにもかかわらず、追加熱処理によって準位密度が増加していることから、ウェット酸化膜には作製直後ではおそらく水素によって終端されている深い界面近傍欠陥が本質的に存在し、酸素熱処理によって活性化されることが示唆される。図2は得られた結果から想像される界面欠陥分布を模式的に表したものである。膜中に分布した欠陥はウェット酸化膜に見られる大きな閾値変動の要因の一つとなり得る。

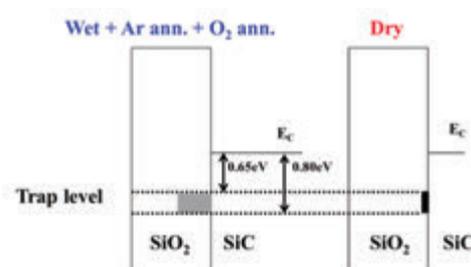


図2 界面欠陥分布の模式図

< 論文 >

1. A. Uedono, S. Takashima, M. Edo, K. Ueno, H. Matsuyama, W. Egger, T. Koschine, C. Hugenschmidt, M. Dickmann, K. Kojima, S. F. Chichibu, and S. Ishibashi, "Carrier trapping by vacancy-type defects in Mg-implanted GaN studied using monoenergetic positron beams", *Phys. Stat. Sol. B* 2017, 1700521(1-9). [DOI: 10.1002/pssb.201700521]
2. L. V. Devi, S. Sellaiyan, T. Selvalakshmi, H.J. Zhang, A. Uedono, K. Sivaji, S. Sankar, "Synthesis, defect characterization and photocatalytic degradation efficiency of Tb doped CuO nanoparticles", *Adv. Powder Tech.* 28, 3026-3038 (2017). [DOI: 10.1016/j.apt.2017.09.013]
3. S. R. Aid, T. Uneme, N. Wakabayashi, K. Yamazaki, A. Uedono, and S. Matsumoto, "Carrier activation in Mg implanted GaN by short wavelength Nd:YAG laser thermal annealing", *Phys. Stat. Sol. A* 214, 1700225(1-5) (2017). [DOI: 10.1002/pssa.201700225]
4. A. Uedono, T. Tanaka, N. Ito, K. Nakahara, W. Egger, C. Hugenschmidt, S. Ishibashi, and M. Sumiya, "Electron capture by vacancy-type defects in carbon-doped GaN studied using monoenergetic positron beams" *Thin Solid Films* 639, 78-83 (2017). [DOI: 10.1016/j.tsf.2017.08.021]
5. A. Uedono, M. Imanishi, M. Imade, M. Yoshimura, S. Ishibashi, M. Sumiya, and Y. Mori, "Vacancy-type defects in bulk GaN grown by the Na-flux method probed using positron annihilation", *J. Cryst. Growth* 475, 261-265 (2017). [DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2017.06.027]
6. L. V. Devi, T. Selvalakshmi, S. Sellaiyan, A. Uedono, K. Sivaji, S. Sankar, "Effect of La doping on the lattice defects and photoluminescence properties of CuO", *J. Alloys & Comp.* 709, 496-504 (2017). [DOI: 10.1016/j.jallcom.2017.03.148]
7. H. J. Zhang, S. Sellaiyan, T. Kakizaki, A. Uedono, Y. Taniguchi, K. Hayashi, "Effect of Free-Volume Holes on Dynamic Mechanical Properties of Epoxy Resins for Carbon-Fiber-Reinforced Polymers", *Macromolecules* 50, 3933-3942 (2017). [DOI: 10.1021/acs.macromol.7b00472]
8. Y. Mizushima, Y. Kim, T. Nakamura, A. Uedono, and T. Ohba, "Behavior of copper contamination on backside damage for ultra-thin silicon three dimensional stacking structure", *Microelectronic Engineering* 167, 23-31 (2017). [DOI:10.1016/j.mee.2016.10.010]
9. F. Inoue, A. Jourdain, L. Peng, A. Phommahaxay, J. De Vos, K. J. Rebibis, A. Miller, E. Sleenckx, E. Beyne, and A. Uedono, "Influence of Si wafer thinning processes on (sub)surface defects", *Applied Surface Science* 404, 82-87 (2017). [DOI: 10.1016/j.apsusc.2017.01.259]
10. S. F. Chichibu, K. Kojima, A. Uedono, and Y. Sato, "Defect-Resistant Radiative Performance of m-Plane Immiscible Al_{1-x}In_xN Epitaxial Nanostructures for Deep-Ultraviolet and Visible Polarized Light Emitters", *Advanced Materials* 29, 1603644 (2017). [DOI: 10.1002/adma.201603644]
11. S. Ishibashi, H. Kino, A. Uedono, T. Miyake, and K. Terakura, "Prediction of positron-annihilation parameters for vacancy-type defects in ternary alloy semiconductors by data-scientific approach", *J. Phys.: Conf. Ser.* 791, 012023(1-5) (2017). [DOI: 1088/1742-6596/791/1/012023]
12. K. Kojima, S. Takashima, M. Edo, K. Ueno, M. Shimizu, T. Takahashi, S. Ishibashi, A. Uedono, and S. F. Chichibu, "Nitrogen vacancies as a common element of the green luminescence and nonradiative recombination centers in Mg-implanted GaN layers formed on a GaN substrate", *APEX* 10, 061002 (2017). [DOI: 10.7567/APEX.10.061002]
13. A. Yamazaki, K. Sasa, S. Ishii, M. Kurosawa, S. Tomita, Y. Shiina, S. Shiki, G. Fujii, M. Ukibe, M. Ohkubo, A. Uedono, and E. Kita, "Development of a microbeam PIXE system for additive light elements in structural materials", *Nucl. Inst. Method B* 404, 92-95 (2017). [DOI: 10.1016/j.nimb.2017.01.050]
14. J. An, M. Namai, H. Yano, and N. Iwamuro, "Investigation of Robustness Capability of -730 V P-Channel Vertical SiC Power MOSFET for Complementary Inverter Applications," *IEEE Trans. Electron Devices*, Vol. 64, No. 10, pp. 4219-4225, Oct. 2017, doi: 10.1109/TED.2017.2742542.
15. J. An, M. Namai, D. Okamoto, H. Yano, H. Tadano, and N. Iwamuro, "Investigation of Maximum Junction Temperature for 4H-SiC MOSFET during Unclamped Inductive Switching Test," *Electronics and Communications in Japan*, vol. 101, no. 1, pp. 24-31, 2018, doi: 10.1002/ecj.12018.
16. 岡本大, 矢野裕司, 「異原子導入によるSiC MOSFETの特性改善」応用物理, Vol.86, No.9, pp.781-785 (2017).
17. X. Zhang, D. Okamoto, T. Hatakeyama, M. Sometani, S. Harada, R. Kosugi, N. Iwamuro, and H. Yano, "Characterization of Near-Interface Traps at 4H-SiC Metal-Oxide-Semiconductor Interfaces Using a Modified Distributed Circuit Model", *Appl. Phys. Express*, Vol. 10, No. 6, pp.064101/1-4 (2017).
18. M. Okamoto, M. Sometani, S. Harada, H. Yano, and H. Okumura, "Dynamic Characterization of the Threshold Voltage Instability under the Pulsed Gate Bias Stress in 4H-SiC MOSFET", *Mater. Sci. Forum*, Vol. 897, pp.549-552 (2017).
19. T. Hatakeyama, Y. Kiuchi, M. Sometani, S. Harada, D. Okamoto, H. Yano, Y. Yonezawa, and H. Okumura, "Characterization of Traps at Nitrided SiO₂/SiC Interfaces near the Conduction Band Edge by using Hall Effect Measurements", *Appl. Phys. Express*, Vol. 10, No. 4, pp. 046601/1-4 (2017).
20. "Well-Ordered 4CzIPN ((4s, 6s)-2, 4, 5, 6-tetra (9 Hcarbazol- 9- Yl) isophthalonitrile) Layers: Molecular Orientation, Electronic Structure, and Angular Distribution of Photoluminescence", Hasegawa, Yuri; Yamada, Yoichi; Sasaki, Masahiro; Hosokai, Takuya;

- Nakanotani, Hajime; Adachi, Chihaya, *J. Phys. Chem. Lett.*, **9**, pp853-867 (2018).
21. “Well-ordered films of disk-shaped thermally activated delayed fluorescence (TADF) molecules”, Hasegawa, Yuri; Minami, Hayato; Kanada, Satoru; Yamada, Yoichi; Sasaki, Masahiro; Hosokai, Takuya; Nakanotani, Hajime; Adachi, Chihaya, *J. Photon Energy* **8**, 032110 (2018).
 22. “Interface-induced perpendicular magnetic anisotropy of Co nanoparticles on single-layer h-BN/Pt(111)”, Takahiro Watanabe, Yoichi Yamada, Akihiro Koide, Shiro Entani, Songtian Li, Zakhar I. Popov Pavel B. Sorokin, Hiroshi Naramoto, Masahiro Sasaki, Kenta Amemiya, and Seiji Sakai, *Appl. Phys. Lett* **112**, 022407 (2018).
 23. “Electron emission properties of graphene-oxide-semiconductor planar-type electron emission devices”, Katsuhisa Murakami, Shunsuke Tanaka, Takuya Iijima, Masayoshi Nagao, Yoshihiro Nemoto, Masaki Takeguchi, Yoichi Yamada, Masahiro Sasaki, *J. Vac. Sci. Technol. B* **36**, 032110 (2018).
 24. 飯嶋竜司, 磯部高範, 只野博 「SiC-MOSFET を用いた Z ソースインバータの上下短絡動作によるボディアイオード無通電運転」 電気学会論文誌 D, Vol.138, No.3, pp.1-8, 2018
 25. Y. Abe, T. Umeda, M. Okamoto, R. Kosugi, S. Harada M. Haruyama, W. Kada, O. Hanaizumi, S. Onoda, and T. Ohshima “Single photon sources in 4H-SiC metal-oxide-semiconductor field-effect transistors” *Appl. Phys Lett.*, **112**, 031105 (2018).
 26. T. Umeda, M. Okamoto, H. Yoshioka, G.-W. Kim, S. Ma, R. Arai, T. Makino, T. Ohshima, and S. Harada “Interface defects in C-face 4H-SiC MOSFETs: An electrically-detected-magnetic-resonance study” *ECS Trans.* **80**, 147-153 (2017).
 27. “Depth Profile of Impurity Phase in Wide Bandgap $Cu(In_{1-x}Ga_x)Se_2$ Film Fabricated by 3-stage Process”. S. Wang, H. Hagiya, T. Nazuka, Y. Takabayashi, S. Ishizuka, H. Shibata, S. Niki, M. M. Islam, K. Akimoto, and T. Sakurai. *Journal of Electronic Materials*, (2018), doi.org/10.1007/s11664-018-6120-1.
 28. “Charge transfer induced by MoO_3 at boron subphthalocyanine chloride/ α -sexithiophene heterojunction interface”. A. L. Foggatto and T. Sakurai. *Japanese Journal of Applied Physics*, **57**, 03EE01 (2018).
 29. “Impact of carrier doping on electrical properties of laser-induced liquid-phase-crystallized silicon thin films for solar cell application”, H. Umishio, T. Matsui, H. Sai, T. Sakurai, K. Matsubara, *Japanese Journal of Applied Physics* **57**, 021302 (2018)
 30. “Characterization of defect properties in wide-gap $CuGaSe_2$ thin-film solar-cells”. M. M. Islam, S. Ishizuka, H. Shibata, S. Niki, K. Akimoto, and T. Sakurai. *Nanoscience and Nanotechnology Letters*, in press.
 31. “Deep level emission in polycrystalline $CuGaSe_2$ thin-films observed by micro-photoluminescence”. M. M. Islam, S. Wang, S. Ishizuka, H. Shibata, S. Niki, K. Akimoto, and T. Sakurai. *Japanese Journal of Applied Physics*, Accepted in press.
 32. “Relation between bandgap grading and carrier recombination for $Cu(In,Ga)Se_2$ -based solar cells”. Y. Ando, S. Ishizuka, S. Wang, J. Chen, M. M. Islam, H. Shibata, K. Akimoto, and T. Sakurai. *Japanese Journal of Applied Physics*, Accepted in press.
 33. “Influence of KF treatment on electronic properties of CIGSSe solar cells studied by admittance spectroscopy”. S. Wang, X. Hao, M. M. Islam, K. Akimoto, T. Kato, H. Sugimoto, and T. Sakurai. *Japanese Journal of Applied Physics*, Accepted in press.
 34. “An optimized photolithography recipe for $Cu(In_{1-x}Ga_x)(S_ySe_{1-y})_2$ (CIGSSe) solar cells”. X. Hao, S. Wang, K. Akimoto, T. Kato, H. Sugimoto, and T. Sakurai. Proceeding of IEEE 44th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2017.
 35. “Study of defect properties in $CuGaSe_2$ thin-film solar-cells using Admittance Spectroscopy”. M. M. Islam, S. Ishizuka, H. Shibata, S. Niki, K. Akimoto, and T. Sakurai. Proceeding of the IEEE 44th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC-44), 2017.
 36. “Electrodeposition of Si-layer through reduction of diatomaceous earth for the application of solar-cells”. M. M. Islam, I. Abdellaoui, T. Sakurai, S. Hamzaoui, and K. Akimoto. Proceeding of the IEEE 44th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC-44), 2017.
 37. R. Hasunuma, H. Kawamura, and K. Yamabe, “Reliability Factors of Ultrathin Dielectric Films Based on Highly Controlled SiO_2 Films” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **57**, 06KB05 (2018).
- < 著書 >
1. アドミッタンススペクトロスコピー法を用いた化合物薄膜太陽電池の欠陥準位検出, 櫻井岳暁(分担執筆), 「次世代の太陽電池・太陽光発電—その発電効率向上, 用途と市場の可能性—」, 技術情報協会, 2018(in press).
- < 学会発表 >
- 国際会議
1. H. Okumura, S. Suihkonen, J. Lemettinen, A. Uedono, T. Palacios, “AlN metal-semiconductor field-effect transistors using Si-ion implantation”, 2017 Material Research Society Fall meeting, Boston, USA, 27th November 2017.
 2. S. Ishibashi and A. Uedono, “Theoretical calculation of

- positron annihilation parameters for defects in UV materials (AlN, ZnO, Ga₂O₃)”, Int. Workshop on UV Materials and Devices, Fukuoka, Japan, 16th November 2017.
3. S. Iwashita, T. Moriya, T. Kikuchi, N. Noro, T. Hasegawa, and A. Uedono, “Correlation between ion energies in CCRF discharges and film characteristics of titanium oxides fabricated via plasma enhanced atomic layer deposition” AVS 65th Int. Sym. & Exhibition, Long Beach Convention Center Long Beach CA, USA, 21th October 2018.
 4. A. Uedono, “Behaviors of free volumes during curing processes of epoxy resins for CFRP studied by positron annihilation” Joint Sym. 3rd Innovative Measurement and Analysis for Structural Materials and TIA-Fraunhofer workshop, AIST, Tsukuba, Japan, 4th October 2017.
 5. H. Okumura, S. Suihkonen, J. Lemettinen, A. Uedono, and T. Palacios, “AlN metal-semiconductor field-effect transistors using Si-ion implantation”, 2017 International Conference on Solid State Devices and Materials, Sendai, Japan, 20th September 2017.
 6. S. Ishibashi, A. Uedono, H. Kino, T. Miyake, and K. Terakura, “Computational study of correlation between local structures and positron annihilation parameters for cation vacancies in nitride semiconductor alloys”, The International Workshop on Positron Studies of Defects 2017 (PSD-17), Dresden, Germany, 6th September 2017.
 7. S. Ishibashi and A. Uedono, “Theoretical calculation of positron annihilation parameters in group-III nitrides”, 29th Int. Conf. Defects in Semiconductors, Matsue, Japan, 1st August 2017.
 8. S. F. Chichibu, K. Kojima, S. Takashima, M. Edo, K. Ueno, M. Shimizu, T. Takahashi, S. Ishibashi, and A. Uedono, “Role of point defects on the luminescent properties of epitaxial and ion-implanted Mg-doped GaN fabricated on a GaN substrate”, 12th Int. Conf. Nitride Semiconductors, Strasbourg Convention Center, Strasbourg, France, 24th July 2017.
 9. M. Namai, J. An, H. Yano, and N. Iwamuro, “Experimental and Numerical Demonstration and Optimized Methods for SiC Trench MOSFET Short-Circuit Capability,” in *Proceedings of International Symposium on Power Semiconductor Devices & ICs (ISPSD) 2017*, pp.363-366, (2017).
 10. Y. Karamoto, X. Zhang, D. Okamoto, M. Sometani, T. Hatakeyama, S. Harada, N. Iwamuro, and H. Yano, “Analysis of Fast and Slow Responses of Interface Traps in p-type SiC MOS Capacitors by Conductance Method”, 2017 International Workshop on Dielectric Thin Films for Future Electron Devices - Science and Technology - (2017IWDTF), Nara (Japan), S8-3, pp.145-146, 2017/11/22.
 11. X. Zhang, D. Okamoto, T. Hatakeyama, M. Sometani, S. Harada, N. Iwamuro, and H. Yano, “Impact of Oxide Thickness on the Density Distribution of Near-interface Traps in 4H-SiC MOS Capacitors”, 2017 International Workshop on Dielectric Thin Films for Future Electron Devices - Science and Technology - (2017IWDTF), Nara (Japan), S8-5, pp.149-150, 2017/11/22.
 12. Y. Kiuchi, M. Sometani, D. Okamoto, T. Hatakeyama, S. Harada, H. Yano, Y. Yonezawa, and H. Okumura, “Comparison between Conduction Mechanisms of Leakage Current in Nitrided Thermal SiO₂ Strates on 4H-SiC Si- and C-face Substrates”, 2017 International Workshop on Dielectric Thin Films for Future Electron Devices - Science and Technology - (2017IWDTF), Nara (Japan), S9-1, pp.151-152, 2017/11/22.
 13. M. Sometani, M. Okamoto, T. Hatakeyama, Y. Iwahashi, M. Hayashi, D. Okamoto, H. Yano, S. Harada, Y. Yonezawa, and H. Okumura, “Accurate Evaluation of Fast Threshold Voltage Shift for SiC MOS Devices Under Various Gate Bias Stress Conditions” (Invited), 2017 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2017), Sendai (Japan), O-1-01, pp.687-688, 2017/9/20.
 14. M. Hayashi, M. Sometani, T. Hatakeyama, H. Yano, and S. Harada, “Hole Trapping in SiC-MOS Devices Evaluated by Fast-CV Method”, 2017 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2017), Sendai (Japan), O-1-05, pp.695-696, 2017/9/20.
 15. T. Hatakeyama, Y. Kiuchi, M. Sometani, D. Okamoto, S. Harada, H. Yano, Y. Yonezawa and H. Okumura, “Characterization of Traps at SiO₂/ SiC (000-1) near the Conduction Band Edge by Using Hall Effect Measurements”, The 2017 International Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ICSCRM 2017), Washington D.C. (USA), TU.B1.2, 2017/9/19.
 16. M. Sometani, Y. Iwahashi, M. Okamoto, S. Harada, Y. Yonezawa, H. Okumura, and H. Yano, “Evaluation of Drain Current Decrease by AC Gate Bias Stress in Commercially Available SiC MOSFETs”, The 29th International Symposium on Power Semiconductor Devices & ICs (ISPSD2017), Sapporo (Japan), SiC-P14, 2017/5/31.
 17. “Field Emission from Adsorbed Fullerene Molecules (oral)”, Masahiro Sasaki+, Yoichi Yamada, Ken Asanagi, Manabu Adachi, Yuji Nishiyama, 30th International Vacuum Nanoelectronics Conference (IVNC-2017), Regensburg, Germany, July 10-14, 2017
 18. “Field emission from carbon-related materials (invited)”, Masahiro Sasaki, 2017 YOUNG RESEARCHERS IN VACUUM MICRO, NANO ELECTRONICS, Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint Petersburg, Russia, Oct. 5-6, 2017.
 19. “Controlling magnetic property of metal nanoparticles utilizing single layer h-BN”, T. Watanabe, Y. Yamada, M. Sasaki, A. Koide, S. Entani, K. Amemiya and S. Sakai, 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8) Oct. 22, 2017, Tsukuba
 20. “Fabrication of Highly Oriented Molecule Films Utilizing Well-ordered Monolayer as Template”, C. Zhang, Y. Hasegawa, Y. Wakayama, Y. Yamada and M.

- Sasaki, 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8) Oct. 22, 2017, Tsukuba
21. "Doping to surface by adsorption of CuPc/ F16CuPc on surface superconductor of Si(111)-($\sqrt{7 \times \sqrt{3}}$)-In", N. Sumi, Y. Yamada, M. Sasaki, S. Yoshizawa and T. Uchihashi, 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8) Oct. 22, 2017, Tsukuba
 22. "Band structure of highly ordered Picene and DNTT thin film on Ag(110)", Y. Hasegawa, Y. Yamada and M. Sasaki, 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8) Oct. 22, 2017, Tsukuba
 23. "Exciton Dynamics at the Controlled Interface of C60 and Pentacene", M. Iwasawa, Y. Hasegawa, T. Hosokai, H. Matsuzaki, Y. Nakayama, R. Tsuruta, Y. Yamada and M. Sasaki, 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8) Oct. 22, 2017, Tsukuba
 24. "Hydrogen absorption on Pd(110), (210) studied with STM and HAS", M. Tominaga, T. Maeda, R. Shoji, R. Miyagi, Y. Yamada and M. Sasaki, 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8) Oct. 22, 2017, Tsukuba
 25. Daichi Yamanodera, Takanori Isobe, Hiroshi Tadano, "Application of GaN Device to MHz Operating Grid-Tied Inverter Using Discontinuous Current Mode for Compact and Efficient Power Conversion" IEEE PEDS 2017, Honolulu, USA, 2017.11.12-15 (oral)
 26. R. Iijima, T. Isobe and H. Tadano, "Optimized Short-Through Time Distribution for Inductor Current Ripple Reductions in Z-Source Inverter" IEEE APEC2018, Texas, USA, 2018.3.4-8 (poster)
 27. G.-W. Kim, T. Okuda, T. Kimoto, T. Umeda, "Interface carbon defect at Si-face 4H-SiC/SiO₂ interfaces detected by electron spin resonance" *Int. Conf. Silicon Carbide and Related Materials 2017*, Washington, DC, USA, 2017.9.17-22 (poster)
 28. Y. Abe, T. Umeda, M. Okamoto, R. Kosugi, S. Harada, M. Haruyama, W. Kada, O. Hanaizumi, S. Onoda, and T. Ohshima, "Oxidation-process dependence of single photon sources embedded in 4H-SiC MOSFETs" *Int. Conf. Silicon Carbide and Related Materials 2017*, Washington DC, USA, 2017.9.17-22 (oral)
 29. T. Umeda "Interface defects related to threshold-voltage shift in C-face 4H-SiC MOSFETs: An EDMR study" *232nd Electrochemistry Society Meeting*, National Harbor, USA, 2017.10.01-06 (invited)
 30. C. Shinei, H. Kato, T. Makino, S. Yamasaki, and T. Umeda "Observation of interface defects in free standing epitaxial diamond substrate with Al₂O₃ atomic-layer deposition studied by electron spin resonance" *Int. Workshop on Dielectric Thin Films 2017*, Nara, Japan, 2017.11.20-22 (poster)
 31. (招待講演) "Relation of Thin-Film Growth with defect Generation in High Efficiency Cu(In,Ga)Se₂ based Solar Cells" T.Sakurai, 2017 Global Research Efforts on Energy and Nanomaterials (GREEN 2017), Taipei, Taiwan, December 23, 2017.
 32. (招待講演) "Relation of thin-film growth on defect generation in Cu(In,Ga)Se₂" T.Sakurai, The 6th Global Conference on Materials Science and Engineering (CMSE 2017), Beijing, China, October 25, 2017.
 33. "Depth Profile of Impurity Phase in Wide Bandgap Cu(In_{1-x}Ga_x)Se₂ Film Fabricated by 3-stage Process". S. Wang, H. Hagiya, T. Nazuka, Y. Takabayashi, S. Ishizuka, H. Shibata, S. Niki, M. M. Islam, K. Akimoto, and T. Sakurai., The 17th International Conference DRIP (Defects-Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors), Valladorid, Spain, October 12, 2017.
 34. "Study of defect properties in CuGaSe₂ thin-film solar-cells using Admittance Spectroscopy". M. M. Islam, S. Ishizuka, H. Shibata, S. Niki, K. Akimoto, and T. Sakurai. The 44th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Washington, D.C, June 25-30, 2017.
 35. "An optimized photolithography recipe for Cu(In_{1-x}Ga_x)(S_ySe_{1-y})₂ (CIGSSE) solar cells". X. Hao, S. Wang, K. Akimoto, T. Kato, H. Sugimoto, and T. Sakurai. The 44th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Washington, D.C, June 25-30, 2017.
 36. "Electrodeposition of Si-layer through reduction of diatomaceous earth for the application of solar-cells". M. M. Islam, I. Abdellaoui, T. Sakurai, S. Hamzaoui, and K. Akimoto. The 44th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Washington, D.C, June 25-30, 2017.
 37. "Charge transfer induced by MoO₃ at boron subphthalocyanine chloride/ α -sexithiophene heterojunction interface". A. L. Foggatto and T. Sakurai. The 9th International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE9), Kanazawa, Japan, June 26-28, 2017.
 38. "Charge transfer induced by MoO₃ at organic-organic heterojunction interface". A. L. Foggatto and T. Sakurai. Tsukuba Global Science Week, Tsukuba, Japan, September 25-27, 2017.
 39. "Relation between bandgap grading and carrier recombination for Cu(In,Ga)Se₂-based solar cells". Y. Ando, S. Ishizuka, S. Wang, J. Chen, M. M. Islam, H. Shibata, K. Akimoto, and T. Sakurai. The 27th Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC27), Shiga-ken, Japan, November 12-17, 2017.
 40. "Influence of KF treatment on electronic properties of CIGSSE solar cells studied by admittance spectroscopy". S. Wang, X. Hao, M. M. Islam, K. Akimoto, T. Kato, H. Sugimoto, and T. Sakurai. The 27th Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC27), Shiga-ken, Japan, November 12-17, 2017.
 41. "Deep level emission in polycrystalline CuGaSe₂ thin-films observed by micro-photoluminescence". M. M. Islam, S. Wang, S. Ishizuka, H. Shibata, S. Niki, K. Akimoto, and T. Sakurai. The 27th Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC27), Shiga-ken,

- Japan, November 12-17, 2017.
42. "Nanocrystalline Silicon Layer Obtained through Magnesiothermic Reduction of Solid Silica-substrate". M. M. Islam, T. Sakurai, and K. Akimoto. The 27th Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC27), Shiga-ken, Japan, November 12-17, 2017.
 43. "Electrodeposition of silicon layer through electrochemical reduction of diatomous-earth on metal substrates". M. M. Islam, I. Abdellaoui, T. Sakurai, S. Hamzaoui, and K. Akimoto. Tunisia-Japan Symposium on Science, Society & technology (TJASSST 2017), Nov. 24-26, 2017, Gammarth, Tunisia.
 44. "Novel metal additive for improved photocatalytic water splitting activity in BiVO_4 ". M. Remeika, T. Sakurai, S. Ikeda, C. Budich. 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology, Tsukuba, Japan, March 8-9, 2018.
 45. "Performance improvement of CIGSSe solar cell by alkali metal". S. Wang, X. Hao, J. D. Chen, M. M. Islam, K. Akimoto, T. Kato, H. Sugimoto, and T. Sakurai. 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology, Tsukuba, Japan, March 8-9, 2018.
 46. "Residual strains at $\text{SiO}_2/\text{4H-SiC}$ interface measured by Confocal Raman Microscopy". F. Wei, A. Kobayashi, H. Yano, S. Harada, and T. Sakurai. 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology, Tsukuba, Japan, March 8-9, 2018.
 47. "A recombination analysis of the incident light wavelength dependence of the open-circuit voltage in Cu(In,Ga)(S,Se)_2 solar cells." J. Chen, S. Wang, X. Hao, M. M. Islam, T. Kato, H. Sugimoto, K. Akimoto, and T. Sakurai. 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology, Tsukuba, Japan, March 8-9, 2018.
 48. "Influence of the work function of the substrate in the energy-level alignment at $\text{SubPc}/6\text{T}$ interface". A. L. Foggiatto, T. Ueba, S. Kera, and T. Sakurai. 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology, Tsukuba, Japan, March 8-9, 2018.
 49. N. Iitsuka and R. Hasunuma, "Electrical Analysis on the Interface Defects of SiO_2 Films Fabricated by Wet Oxidation Processes on SiC (000-1)" 2017 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ELECTRON DEVICES: SCIENCE AND TECHNOLOGY, Nara, Japan, 2017.11.20-22 (poster).
 50. K. Yamabe and R. Hasunuma, "Reliability Factors of Ultrathin Dielectric Films Based on Highly Controlled SiO_2 Films" 2017 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ELECTRON DEVICES: SCIENCE AND TECHNOLOGY, Nara, Japan, 2017.11.20-22 (Invited).
- 国内会議
1. 上殿明良, 石橋章司, 角谷正友, "陽電子消滅による窒化物半導体中 0 次元特異構造(点欠陥)のキャリア捕獲の評価", 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, 早稲田大学, 東京, 2018 年 3 月 19 日. (招待講演)
 2. A. Uedono, M. Sumiya, and S. Ishibashi, "Carrier trapping by vacancy-type defects in group-III nitrides studied by means of positron annihilation", Third DAE-BRNS Trombay Positron Meeting, Bhabha Atomic Research Centre, Mumbai, India, 23th March 2018. (招待講演)
 3. S. F. Chichibu, K. Kojima, A. Uedono, and Y. Sato, "Vacuum-fluorescent-display devices emitting polarized deep-ultraviolet and visible lights using m-plane AlIn_xN epitaxial nanostructures", 11th Int. Sym. Semiconductor Light Emitting Devices, Banff, Alberta, Canada, 10th October 2017. (招待講演)
 4. A. Uedono, "Study of point defects in nitrides and oxides by means of positron annihilation", 5th Int. Conf. Light-Emitting Devices and Their Industrial Applications, Pacifico Yokohama, Yokohama, Japan, 21st April 2017. (招待講演)
 5. 角谷正友, 福田清貴, 上田茂典, 浅井祐哉, Cho Yujin, 関口隆史, 上殿明良, 尾沼猛儀, Sang Liwen, 本田徹, "III-V 族窒化物の価電子帯構造およびギャップ内準位の評価", 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, 早稲田大学, 東京, 2018 年 3 月 20 日.
 6. 嶋紘平, 井口紘子, 成田哲生, 片岡恵太, 上殿明良, 小島一信, 秩父重英, "Mg イオン注入 N 極性面 GaN の時間分解フォトルミネッセンス評価", 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, 早稲田大学, 東京, 2018 年 3 月 19 日.
 7. 高島信也, 田中亮, 上野勝典, 松山秀昭, 江戸雅晴, 小島一信, 秩父重英, 上殿明良, 中川清和, "Mg イオン注入 GaN MOSFET のチャネル特性向上", 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, 早稲田大学, 東京, 2018 年 3 月 19 日.
 8. 松木伸行, 松井卓矢, 満汐孝治, オローク ブライアン, 大島永康, 上殿明良, "a-Si:H/c-Si ヘテロ界面近傍ボイド構造の高速評価ーボイドサイズと光学パラメータの相関普遍性に関する考察ー", 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, 早稲田大学, 東京, 2018 年 3 月 18 日.
 9. 秩父重英, 小島一信, 嶋紘平, 高島信也, 江戸雅晴, 上野勝典, 石橋章司, 上殿明良, "GaN 基板上 Mg 添加 GaN の時間分解フォトルミネッセンス評価", 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会, 福岡国際会議場, 福岡, 2017 年 9 月 7 日.
 10. 松木伸行, オローク ブライアン, 大島永康, 上殿明良, "a-Si:H/c-Si ヘテロ界面近傍ボイド構造の高速評価ーボイドサイズ・水素結合・Si 結合角ゆらぎの相互相関ー", 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会, 福岡国

際会議場, 福岡, 2017年9月6日.

11. W. Fu, A. Kobayashi, H. Yano, S. Harada, and T. Sakurai, "Stress distribution at SiO₂/4H-SiC interface studied by Confocal Raman Microscopy", 第65回応用物理学会春季学術講演会, 早稲田大学西早稲田キャンパス, 18p-P14-11, 2018/3/18.
12. X. Zhou, D. Okamoto, T. Hatakeyama, M. Sometani, S. Harada, Y. Karamoto, X. Zhang, N. Iwamuro, and H. Yano, "Impact of passivation treatments on channel mobility for p-channel 4H-SiC MOSFETs", 第65回応用物理学会春季学術講演会, 早稲田大学西早稲田キャンパス, 18p-P14-17, 2018/3/18.
13. 根本宏樹, 岡本大, 染谷満, 木内祐治, 畠山哲夫, 原田信介, 岩室憲幸, 矢野裕司, 「pチャネル 4H-SiC MOSFET における酸化膜リーク電流伝導機構の解析」第65回応用物理学会春季学術講演会, 早稲田大学西早稲田キャンパス, 20p-D103-13, 2018/3/20.
14. 北島魁人, 岡本大, 矢野裕司, 岩室憲幸, 「メタルアニール工程を省いた 4H-SiC イオン注入 n+層オーミックコンタクト実現の検討」, 平成30年電気学会全国大会, 九州大学 伊都キャンパス, 4-011, 2018/3/15 (3/14-16).
15. Xufang Zhang, Dai Okamoto, Tetsuo Hatakeyama, Mitsuru Sometani, Shinsuke Harada, Noriyuki Iwamuro, and Hiroshi Yano, "Difference of NIT Density Distribution in 4H-SiC MOS Interfaces for Si- and C-faces", 電子デバイス界面テクノロジー研究会—材料・プロセス・デバイス特性の物理—第23回研究会, 東レ研修センター, P-22, pp.199-202, 2018/1/19. (1/19-20).
16. 矢野裕司, 「SiC MOS デバイスにおける界面欠陥と信頼性」(招待講演), 第37回ナノテスティングシンポジウム, 千里ライフサイエンスセンター, II, pp.189-193, 2017/11/9, (11/8-10)
17. Xufang Zhang, Dai Okamoto, Tetsuo Hatakeyama, Mitsuru Sometani, Shinsuke Harada, Noriyuki Iwamuro, and Hiroshi Yano, 「4H-SiC MOS 界面における NIT 密度分布の膜厚依存性」, 先進パワー半導体分科会 第4回講演会, 名古屋国際会議場, IA-11, 2017/11/1. (11/1-2).
18. 畠山哲夫, 木内祐治, 染谷満, 岡本大, 原田信介, 矢野裕司, 米澤喜幸, 奥村元, 「窒化 SiO₂/SiC 界面の伝導帯近傍の界面準位密度に対する面方位の効果」, 先進パワー半導体分科会 第4回講演会, 名古屋国際会議場, IIA-11, 2017/11/2.
19. 木内祐治, 染谷満, 岡本大, 岡本光央, 畠山哲夫, 原田信介, 矢野裕司, 米澤喜幸, 奥村元, 「長時間ストレス印加時のしきい値電圧変動に対する測定法の影響」, 先進パワー半導体分科会 第4回講演会, 名古屋国際会議場, IIB-20, 2017/11/2.
20. 唐本祐樹, 張旭芳, 岡本大, 染谷満, 畠山哲夫, 原田信介, 岩室憲幸, 矢野裕司, 「コンダクタンス法による p 型 SiC MOS 界面の高速及び低速応答準位の解析」, 先進パワー半導体分科会 第4回講演会, 名古屋国際会議場, IIB-24, 2017/11/2.
21. 山田敬一, 藤掛伸二, 岩橋洋平, 原田信介, 矢野裕司, 奥村元, 「三次元アトムプローブを用いた SiO₂/SiC 界面窒素の評価」, 第78回応用物理学会秋季学術講演会, 福岡国際会議場, 5a-A203-3, 2017/9/5.
22. Xufang Zhang, Dai Okamoto, Tetsuo Hatakeyama, Mitsuru Sometani, Shinsuke Harada, Noriyuki Iwamuro, and Hiroshi Yano, "Verification of density distribution of near-interface traps in 4H-SiC MOS capacitors with different oxide thicknesses", 第78回応用物理学会秋季学術講演会, 福岡国際会議場, 5a-A203-5, 2017/9/5.
23. 畠山哲夫, 木内祐治, 染谷満, 岡本大, 原田信介, 矢野裕司, 米澤喜幸, 奥村元, 「窒化 SiO₂/SiC 界面の伝導帯近傍の界面準位密度に対する面方位の効果」, 第78回応用物理学会秋季学術講演会, 福岡国際会議場, 5a-A203-6, 2017/9/5.
24. 唐本祐樹, 張旭芳, 岡本大, 染谷満, 畠山哲夫, 原田信介, 岩室憲幸, 矢野裕司, 「コンダクタンス法による p 型 SiC MOS キャパシタ界面特性の解析」, 第78回応用物理学会秋季学術講演会, 福岡国際会議場, 5a-A203-8, 2017/9/5.
25. 木内祐治, 染谷満, 岡本大, 畠山哲夫, 岡本光央, 原田信介, 矢野裕司, 米澤喜幸, 奥村元, 「長時間ストレスによるしきい値電圧変動予測に対する測定法の影響」, 第78回応用物理学会秋季学術講演会, 福岡国際会議場, 5a-A203-10, 2017/9/5.
26. 「ペンタセン単結晶上の C60/Pn 積層膜の界面制御と励起子ダイナミクス」岩澤証人, 長谷川友里, 細貝拓也, 松崎弘幸, 中山泰生, 鶴田諒平, 山田洋一, 佐々木正洋 2017年真空・表面科学合同講演会 横浜市立大学金沢八景 2017年8月17日~19日
27. 「高配向 Picene および DNIT 分子膜の電子状態」長谷川友里, 山田洋一, 佐々木正洋 2017年真空・表面科学合同講演会 横浜市立大学金沢八景 2017年8月17日~19日
28. 「C60 からの電界電子放出パターンに関する研究」西山裕二, 安達学, 麻薙健, 山田洋一, 佐々木正洋 2017年真空・表面科学合同講演会 横浜市立大学金沢八景 2017年8月17日~19日
29. 「TADF 分子膜の配向制御及び発光特性計測」南颯人, 佐々木正洋, 山田洋一, 細貝拓也, 中野谷一, 安達千波矢, 長谷川友里 2017年真空・表面科学合同講演会 横浜市立大学金沢八景 2017年8月17日~19日
30. 「水素吸蔵過程における Pd(110),(210)表面の STM 計測及び HAS 計測」富永 正人, 前田 拓郎, 庄司 陸人, 宮城 良世, 山田 洋一, 佐々木 正洋 2017年第

- 78 回応用物理学会秋季学術講演会(福岡国際会議場)
31. 「高配向 TADF 分子膜の分子レベル構造計測」長谷川 友里、山田 洋一、細貝 拓也、佐々木 正洋、中野谷 一、安達 千波矢 2017 年 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会(福岡国際会議場)
32. 「単層 h-BN を用いた金属ナノ粒子の磁性制御」渡邊 貴弘、山田 洋一、佐々木 正洋、小出 明広、圓谷 志郎、雨宮 健太、境 誠司 2017 年 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会(福岡国際会議場)
33. 「ペンタセン単結晶上の C60/Pn 積層膜の界面制御と励起子ダイナミクス」岩澤 柁人、長谷川 友理、細貝 拓也、松崎 弘幸、鶴田 諒平、中山 泰生、山田 洋一、佐々木 正洋 2017 年 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会(福岡国際会議場)
34. 「低真空・低電圧で動作するグラフェンを用いた高効率平面型電子源」村上 勝久、宮路 丈司、古家 遼、安達 学、飯島 拓也、長尾 昌善、根本 善弘、竹口 雅樹、鷹尾 祥典、山田 洋一、佐々木 正洋、根尾 陽一郎、三村 秀典 2018 年第 65 回応用物理学会春季学術講演会(早稲田大学)
35. 「高配向 4CzIPN 分子膜の分子配列, 電子状態, および PL 角度依存性」長谷川 友里、南 颯人、金田 悟、山田 洋一、細貝 拓也、佐々木 正洋、中野谷 一、安達 千波矢 2018 年第 65 回応用物理学会春季学術講演会(早稲田大学)
36. 鴨志田直樹, 飯嶋竜司, 磯部高範, 只野博 「Superjunction-MOSFET を適用した Z ソースインバータの昇圧動作に伴う損失の解析」電気学会産業応用部門電力変換技術研究会, 和歌山, 2017.9.7-8
37. 山野寺大地, 磯部高範, 只野博 「GaN デバイスを用いた電流不連続モード系統連系インバータの MHz 運転における動作検証および損失の解析」電気学会産業応用部門電力変換技術研究会, 鹿児島, 2017.11.20-21
38. 鴨志田直樹, 飯嶋竜司, 磯部高範, 只野博 「SJ-MOSFET を適用した QZSI の回路方式・デバイス間での損失評価」電気学会全国大会, 福岡, 2018.3.14-16
39. 梅田享英, 阿部裕太, 岡本光央, 原田信介, 春山盛善, 加田渉, 花泉修, 小野田忍, 大島武 「4H-SiC MOSFET チャネルの単一光子源のゲート電圧制御」第 78 回応用物理学会秋季、博多、2017.9.5-8(口頭)
40. 阿部裕太, 岡本光央, 小野田忍, 大島武, 春山盛善, 加田渉, 花泉修, 原田信介, 鹿児島山陽平, 梅田享英 「4H-SiC MOSFET チャネル中の単一光子源に対する水素の影響」第 78 回応用物理学会秋季、博多、2017.9.5-8(口頭)
41. 梅田享英, 染谷満, 原田信介 「 ^{15}NO ポストアニール後の 4H-SiC MOS 界面の窒素ドーピングの ESR 定量」第 65 回応用物理学会春季、東京、2018.3.17-20(ポスター)
42. “*Optimization of photolithography process for high performance CIGS solar cells*”. S. Wang, X. Hao, K. Akimoto, T. Kato, H. Sugimoto, and T. Sakurai. 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会, 福岡国際会議場, 2017 年 9 月 5 日-8 日.
43. “*Charge transfer induced by MoO₃ at SubPc/6T heterojunction interface*”. A. L. Foggianto and T. Sakurai. 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会, 福岡国際会議場, 2017 年 9 月 5 日-8 日.
44. “*禁制帯グレーディング制御を行った Cu(In,Ga)Se₂ 太陽電池の再結合解析*”. 安藤佑太, Shenghao Wang, Jingdong Chen, Muhammad Monirul Islam, 石塚尚吾, 柴田肇, 秋本克洋, 櫻井岳暁. 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会, 福岡国際会議場, 2017 年 9 月 5 日-8 日.
45. “*Micro-photoluminescence study of the polycrystalline CuGaSe₂ thin-films evaporated by three-stage process*”. M. M. Islam, S. Wang, S. Ishizuka, H. Shibata, S. Niki, K. Akimoto, and T. Sakurai. 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会, 福岡国際会議場, 2017 年 9 月 5 日-8 日.
46. “*Electrochemical reduction of diatom for the formation of silicon-film on silver-substrate*”. M. M. Islam, I. Abdellaoui, T. Sakurai, S. Hamzaoui, and K. Akimoto. 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会, 福岡国際会議場, 2017 年 9 月 5 日-8 日.
47. “*Influence of the wavelength of incident light on open-circuit voltage for Cu(In,Ga)(S,Se)₂ based solar cells*”. J. Chen, S. Wang, X. Hao, M. M. Islam, T. Kato, H. Sugimoto, K. Akimoto, and T. Sakurai. 平成 29 年度応用物理学会「多元系化合物・太陽電池研究会」年末講演会, 龍谷大学 瀬田学舎 REC ホール, 2017 年 11 月 18 日.
48. “*禁制帯グレーディング制御を行った Cu(In,Ga)Se₂ 太陽電池の再結合解析 II*”. 安藤佑太, Shenghao Wang, Jingdong Chen, Muhammad Monirul Islam, 石塚尚吾, 柴田肇, 秋本克洋, 櫻井岳暁. 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, 早稲田大学・早稲田キャンパス, 2018 年 3 月 17 日-20 日.
49. “*Influence of the work function of the substrate in the energy-level alignment of organic-organic heterojunction interface*”. A. L. Foggianto, T. Ueba, S. Kera, and T. Sakurai. 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, 早稲田大学・早稲田キャンパス, 2018 年 3 月 17 日-20 日.
50. “*Nb Additive Incorporation for Enhanced Z-Scheme Photocatalytic Activity in BiVO₄*”. M. Remeika, T. Sakurai, S. Ikeda, C. Budich. 第 65 回 応用物理学会春季学術講演会, 早稲田大学・早稲田キャンパス, 2018 年 3 月 17 日-20 日.
51. “*Stress distribution at SiO₂/4H-SiC interface studied by*

Confocal Raman Microscopy". F. Wei, A. Kobayashi, H. Yano, S. Harada, and T. Sakurai. 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, 早稲田大学・西早稲田キャンパス, 2018 年 3 月 17 日-20 日.

52. "Recombination analysis of Cu(In,Ga)(S,Se)₂ solar cells using monochromatic incident light". J. Chen, S. Wang, X. Hao, M. M. Islam, T. Kato, H. Sugimoto, K. Akimoto, and T. Sakurai. 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, 早稲田大学・西早稲田キャンパス, 2018 年 3 月 17 日 - 20 日.

53. 川村 浩晃、蓮沼 隆、山部 紀久夫
「TEOS-CVD-SiO₂ 膜の熱処理に伴う界面酸化膜厚の評価」第 78 回応用物理学会秋季学術講演会、福岡、2017.9.5-8

54. 飯塚 望、蓮沼 隆 「SiC C 面上に水蒸気雰囲気
で形成した熱酸化 SiO₂/SiC 界面欠陥低減の機構」
第 78 回応用物理学会秋季学術講演会、福岡、
2017.9.5-8

<メンバー>

専任教員:

上殿明良(数理工学系・物理工学域・教授)
岩室憲幸(数理工学系・物理工学域・教授)
佐々木正洋(数理工学系・物理工学域・教授)
只野博(数理工学系・物理工学域・教授)
矢野裕司(数理工学系・物理工学域・准教授)
梅田享英(数理工学系・物理工学域・准教授)
櫻井岳暁(数理工学系・物理工学域・准教授)
蓮沼隆(数理工学系・物理工学域・准教授)
SELLAIYAN SELVAKUMAR(数理工学系・物理工学域・助教)
岡本大(数理工学系・物理工学域・助教)
秋本克洋(数理工学系・特命教授)

連携教員:

磯部高範(数理工学系・物理工学域・准教授)
山田洋一(数理工学系・物理工学域・講師)

研究員:

Remeika Mikas(数理工学系研究科・外国人特別研究員)
Wang Shenghao(数理工学系・研究員)

大学院生:

安俊傑(数理工学系研究科・D3)
張旭芳(数理工学系研究科・D3)
長谷川友里(数理工学系研究科・D3)
Zhang, ChungYan(数理工学系研究科・D2)
海汐寛史(数理工学系研究科・D3)
飯嶋竜司(数理工学系研究科・D2)
鹿児山陽平(数理工学系研究科・D2)
Alexandre Foggiato Lira(数理工学系研究科・D2)
安藤佑太(数理工学系研究科・D2)

渡邊貴弘(数理工学系研究科・D1)

真栄力(数理工学系研究科・D1)

Fu Wei(数理工学系研究科・D1)

陳敬東(数理工学系研究科・D1)

生井正輝(数理工学系研究科・M2)

唐本祐樹(数理工学系研究科・M2)

庄司陸人(数理工学系研究科・M2)

安達学(数理工学系研究科・M2)

前田拓郎(数理工学系研究科・M2)

角直也(数理工学系研究科・M2)

飯島拓也(数理工学系研究科・M2)

鴨志田直樹(数理工学系研究科・M2)

山野寺大地(数理工学系研究科・M2)

阿部裕太(数理工学系研究科・M2)

飯塚望(数理工学系研究科・M2)

川村浩晃(数理工学系研究科・M2)

浅井祐哉(数理工学系研究科・M1)

酒匂薫(数理工学系研究科・M1)

中山香介(数理工学系研究科・M1)

富永正人(数理工学系研究科・M1)

西山裕二(数理工学系研究科・M1)

宮城良世(数理工学系研究科・M1)

南颯人(数理工学系研究科・M1)

岩澤証人(数理工学系研究科・M1)

露木智裕(数理工学系研究科・M1)

郭俊傑(数理工学系研究科・M1)

吉川元気(数理工学系研究科・M1)

4.2 TIMS

(1) 物質創成分野 ハイブリッド物質コア

教員 一戸雅聡 (数理物質系化学域 准教授)

中本真晃 (数理物質系化学域 講師)

大学院生 菊池結衣 (数理物質科学研究科 M2)

ハイブリッド物質コアでは、有機化合物の中心的元素である炭素と同族の高周期典型元素であるケイ素やゲルマニウムなどに着目し、基礎的且つ重要な反応性中間体の単離、構造解析、化学的・物理的性質の解明に取り組み、新たな「低配位及び多重結合高周期典型元素化合物の創製と物性の解明」を目指して研究を行ってきた。

【 1 】 オリゴシラン鎖で連結したジ (シリルラジカル) 種に関する研究

炭素と同族元素であるケイ素原子上に不対電子を持つ常磁性化学種「シリルラジカル」は、有機ケイ素化学における基本的な反応活性種の一つと古くから認識され、1960年代における常磁性共鳴 (EPR) 分光法による直接観測を機に、その構造化学的理解が進んだ。1980年代中頃より立体的に嵩高い置換基を導入することによる長寿命シリルラジカル種が報告されるようになり、2001年には著者らの研究グループが初めての単離可能なシリルラジカルであるシクロテトラシレニルラジカルの合成、単結晶X線結晶構造解析による分子構造の決定に成功した。これ以降、著者らのグループでは、種々の安定シリルラジカル種の合成、単離に成功してきた (図1・1)。

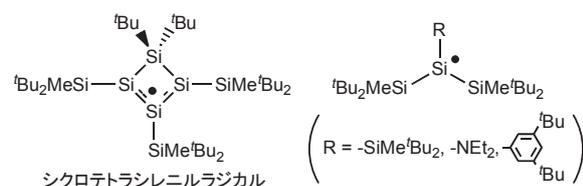


図1・1 単離可能な安定シリルラジカル種の例

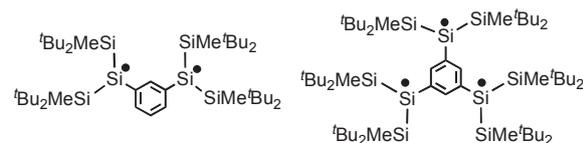


図1・2 ベンゼン環を連結子とするオリゴ (シリルラジカル)

また、モノシリルラジカル種に関する合成手法がある程度確立出来たことで、複数のシリルラジカル部位をベンゼン環上に連結したオリゴ (シリルラジカル) の合成にも成功し、その構造や反応性に関する研究も進めてきた (図1・2)。

本年度は、オリゴシラン鎖で連結したジ (シリルラジカル) 種に関する研究を行った。ケイ素-ケイ素単結合で繋がったオリゴシラン類は、炭素-炭素 π 軌道に匹敵する高い占有軌道準位を示すケイ素-ケイ素 σ 軌道間の相互作用 (σ 共役) を示す特異な化合物である。オリゴシラン鎖で二つのシリルラジカル部位を連結した化学種における σ 共役鎖を介したシリルラジカル間の相互作用やスピン状態、構造や反応性に興味を持たれることから、それらの合成を検討した。

最も単純なジシラン鎖で二つのシリルラジカル部位を連結したジ (シリルラジカル) **1** を、対応する 1,4-ジブromoテトラシラン **2** の KC_8 による還元的脱臭素化で合成することに成功し (図1・3)、その分子構造をX線結晶構造解析により決定した (図1・4)。

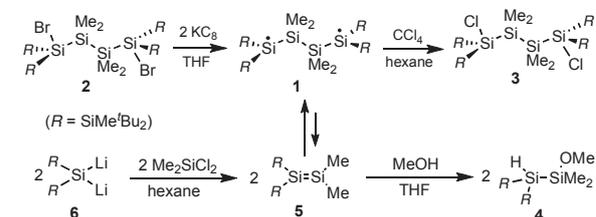


図1・3 ジシラン連結ジ (シリルラジカル) **1** の合成および反応性

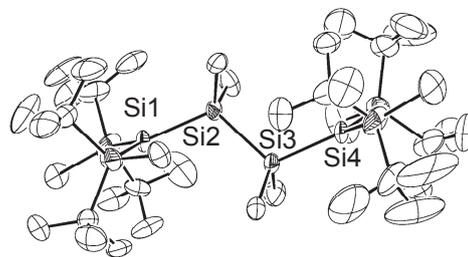


図1・4 ジシラン連結ジ (シリルラジカル) **1** の分子構造

3配位ケイ素原子 Si1、Si4 とそれを連結しているケイ素原子2個からなるテトラシラン鎖は、二面角 167 度のトランス配座をとり、かつ3配位ケイ素上の 3p 軌道とテトラシラン鎖中央の Si2-Si3 間の σ 軌道が相互作用可能な構造である。さらに、EPR スペクトルの解析により、ジ (シリルラジカル) **1** は基底一重項分子で、一重項—三重項のエネルギー差が約 2.5 kJ/mol あると見積もられた。

ジ (シリルラジカル) **1** は興味深い反応性を示すことも分かった (図 1・3)。シリルラジカルの良い捕捉剤である四塩化炭素と反応して対応する塩素付加体 **3** を与えるが、一般にはシリルラジカルが反応しない MeOH とも容易に反応し、メトキシジシラン **4** を与えた。メトキシジシラン **4** は、ジ (シリルラジカル) **1** のテトラシラン鎖中央の Si-Si 結合が解裂して生じるジシレン **5** の捕捉生成物である。ジリチオシラン **6** と Me₂SiCl₂ との反応によりジシレン **5** を発生させた反応混合物に対する捕捉実験でジ (シリルラジカル) **1** の捕捉実験と同じ生成物が得られることも明らかになり、ジ (シリルラジカル) **1** とジシレン **5** の間に解離平衡が存在することも分かった

また、対応する 1,5-ジブromoペンタシラン **7** および 1,6-ジブromoヘキサシラン **8** の KC₈ による還元的脱臭素化でトリシラン鎖、テトラシラン鎖で連結したジ (シリルラジカル) **9**、**10** をそれぞれ合成することにも成功した (図 1・5)。

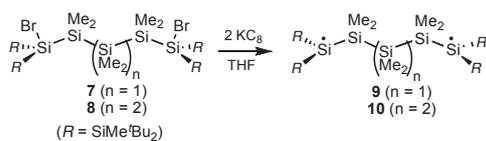


図 1・5 トリシランおよびテトラシラン連結ジ (シリルラジカル) **9**、**10** の合成

ジシラン連結ジ (シリルラジカル) **1** が室温でも十分に安定であることとは対照的に、トリシランおよびテトラシラン連結ジ (シリルラジカル) **9**、**10** は -30°C 以下でも徐々に分解するほど不安定であり、単離は困難で単結晶 X線解析による分子構造の解明には至らなかった。しかし、粗生成物での EPR スペクトルの解析から、ジ (シリルラジカル) **9**、**10** も基底一重項種で、一重項—三重項のエネルギー差がそれぞれ約 1.6 kJ/mol、約 0.1

kJ/mol と見積もられた。ジシラン連結ジ (シリルラジカル) **1** に関する解析結果も含めて、連結子のケイ素鎖長が伸びると σ 共役を介したスピン間相互作用が小さくなることが分かった。

【 2 】 励起三重項種の実験的観測に関する研究

炭素 4員環 4 π 電子系化合物であるシクロブタジエンは、正方形型三重項状態より Jahn-Teller 効果で長方形型に歪んだ一重項状態の方が安定であることが知られており、実験的に合成、単離された種々のシクロブタジエンはいずれも基底一重項状態である。一方、近年の高精度理論計算によると、不安定な正方形型三重項状態 (基底一重項状態より 10 数 kcal/mol だけ高いエネルギー状態にある励起三重項状態) の存在も予測されており、その実験的検出も試みられてきた。しかし、これまでに合成されていたシクロブタジエンの高反応性や熱的安定性の悪さに起因して、シクロブタジエンの励起三重項状態を直接観測するには至っていなかった。

著者らのグループでは、シリル基を置換基とするシクロブタジエンの合成、構造、および反応性に関する研究を進めており、シリル基の立体電子的効果によりシクロブタジエンの熱的安定性が飛躍的の向上することを見出していた。そこで、4 つのトリメチルシリル基で完全に置換されたシクロブタジエン **11** (図 2・1) を用いて熱励起三重項状態の常磁性共鳴 (EPR) による直接観測を試みた。

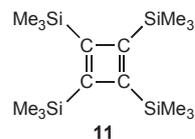


図 2・1 シリル置換シクロブタジエン

粉末状態におけるシクロブタジエン **11** の 350~395 K (77~122 °C) の EPR 測定において、三重項状態に特有の EPR シグナルを観測することに成功した (図 2・2)。EPR シグナルの強度の温度依存性から、シクロブタジエン励起三重項状態は基底一重項状態より約 14 kcal/mol 高いエネルギー状態にあると見積もられた (図)。

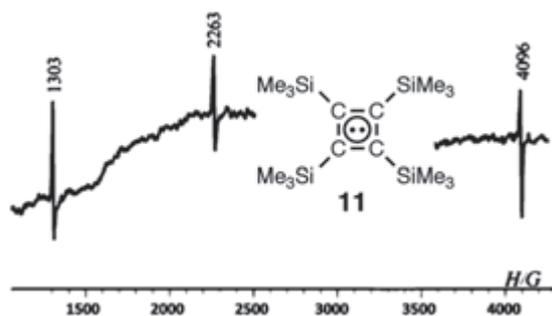


図2・2 395 Kにおけるシリル置換シクロブタジエン **11** の励起三重項状態のEPR スペクトル ($\Delta M_S = \pm 2$, 1303 G; $\Delta M_S = \pm 1$, 2263, 4096 G)

また、シリル置換ジシレン **12** は極めて高いシリル基 (Bu_2MeSi 基) の立体反発により、著しく捻れたケイ素=ケイ素二重結合を持っており、直交した励起三重項状態とのエネルギー差が十分に小さいと予測されていた(図2・3)。ジシレン **12** についても同様なEPR測定を行うことで、基底一重項—励起三重項間のエネルギー差 7.3 kcal/mol の励起三重項状態を直接観測することにも成功した。

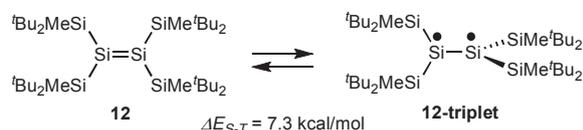


図2・3 シリル置換ジシレン **12** における熱励起平衡

<学位論文>

1. 菊池 結衣: リチオシラシクロプロパン誘導体を用いた低配位および多重結合ケイ素化合物の発生 (数理物質科学研究科 化学専攻, 修士論文, 2018.3)

<論文>

1. A. Kostenko, B. Tumanskii, Y. Kobayashi, M. Nakamoto, A. Sekiguchi, Y. Apeloig, "Spectroscopic Observation of the Triplet Diradical State of a Cyclobutadiene" *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 10183-10187 (2017).
2. 中本真晃・Yitzhak Apeloig, 関口章 "正方形型シクロブタジエンの初観測に成功" *化学* **72**, 32-36, (2017).

<学会発表>

国内会議

1. 菊池 結衣, 関口 章, 一戸 雅聡「リチオシラシクロプロパン誘導体の反応性」, 第21回ケイ素化学協会シンポジウム, 宮城蔵王ロイヤルホテル, 平成29年10月27日.
2. 菊池 結衣, 関口 章, 一戸 雅聡「トリリトシランおよびリチオシラシクロプロパン誘導体を用いた低配位および多重結合ケイ素化合物の合成検討」, 第44回有機典型元素化学討論会, 東京工業大学 大岡山キャンパス, 平成29年12月8日.
3. 日々 風弥, 一戸 雅聡「シリル基とアルキル基で非対称に置換されたジシレンの合成とその還元反応」, 日本化学会 第98春季年会, 日本大学 船橋キャンパス, 平成30年3月21日.
4. 菊池 結衣, 関口 章, 一戸 雅聡「リチオシラシクロプロパン誘導体とTip置換ジクロロ(メチル)シランの反応によるシリル置換シリレンおよびジシレンの発生」, 日本化学会 第98春季年会, 日本大学 船橋キャンパス, 平成30年3月21日.

(2) 物質創成分野 ナノ構造物性コア

教員 藤田淳一 (数理物質系理工学域 教授)
 伊藤良一 (数理物質系理工学域 准教授)
 加納英明 (数理物質系理工学域 准教授)
 小林伸彦 (数理物質系理工学域 准教授)
 石井宏幸 (数理物質系理工学域 助教)

ナノ構造物性コアではナノ構造物性コアでは、炭素系をはじめとする様々な機能性ナノ構造体の創出と物性評価、さらにデバイス応用を目的として、最先端のナノテク技術を駆使した Topdown 型の材料合成技術の開発と理論計算予測を組み合わせることで研究を推進している。本年度は、触媒反応機構の解明には微視的スケールにおける電子の授受つまり担持体および触媒表面での電子状態の理解を目的として、超高感度の電子線偏向角度検出機構を開発し、超高感度局在場検出技術を創出した。さらに、液体 Ga 触媒を用いた室温での高品位グラフェン合成に成功した。

また、原子レベルからのマルチスケール伝導理論解析を行っており、ナノカーボン系、有機分子、有機半導体、磁性半導体の電気・熱伝導特性や熱電変換理論の研究を行った。さらに、ラマン分光を応用した高感度生体細胞機能の分光学的イメージング技術可視化技術分野にも研究領域を拡大推進している。

【1】液体 Ga を用いた室温グラフェン合成

液体金属 Ga の触媒作用を調査中に、偶然にもメタンが液体 Ga 中に溶け込むこと、さらにグラフェン核の周囲でのエッジ成長は、ほぼ室温の低温環境でもエッジ成長が進行する事を見出した。室温近傍の低温領域でもガリウム表面で炭化水素が分解される触媒反応が進行する。特に液体金属触媒 Ga と基板との固液界面でのグラフェン成長では、分解生成された炭素が界面のグラフェン成長端まで輸送され、グラフェンのエッジ成長が継続することを見いだした。

Ga と基板との界面におけるグラフェン成長の模式図を図 1-1(a)に示す。反応管内に設置された基板 (サファイヤ) の上にはガリウムの液滴が設置されている。グラフェン核の原料となるのは炭素同位体 ^{13}C -メタン ($^{13}\text{CH}_4$) である。(b)に示すようにガスがガリウム表面に到達すると、メタンは分解されて炭化水素の原料が液体 Ga 中を拡散し、

基板との界面に凝集する。Ga 中を拡散した炭素によって初期のグラフェン核が形成される。グラフェン核形成の後に、新鮮な Ga に乗せ換えて低温合成温度にセットし、再度原料ガスを供給してグラフェンの低温合成を行った (protocol A)。一方で、核形成後の Ga 液滴を液体窒素で固化させ、ポリカーボネートの上に乗せ換える。この状態でグラフェンエッジ成長を行うと、図 1-1(c)の示すように、室温近傍でのプラスチック上へ直接グラフェン成長・転写が実現する。

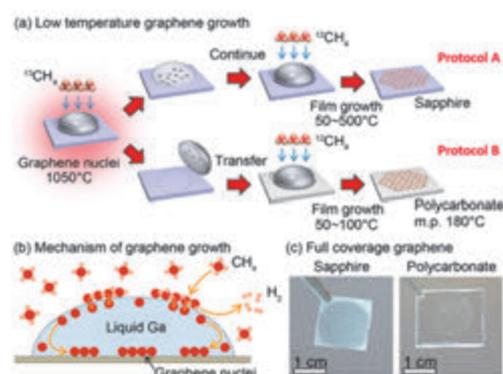


図 1-1 室温グラフェン成長模式図

これらの試料のラマンマップを図 1-2(a)に、また典型的なラマンスペクトルを(b)に、さらに室温(50°C)で成長させたグラフェンのラマンマップを(c)に示す。ラマンスペクトル(d)から、成長したグラフェンはほぼ単層グラフェンであり、 1350cm^{-1} に現れる欠陥由来の D ピーク強度が低く、高品質グラフェンが成長していることがわかる。この図 1.2 の SEM 像において黒いコントラストで現れているのは、実は図 1-2(e)に示すような六角形のグラフェンのスパイラル成長核である。次に、低温合成で得られたグラフェンのラマンマッピングにおいて(b)は 2D/G 比を、(c)は G/D 比による色分けとなっている。つまり、全体が赤であれば膜全面に渡って高い 2D/G 比を持ち、膜面全体が単層グラフェンであることを示す。また、全体が青であることは、膜全面にわたって D ピークが小さく欠陥が少ない高品位グラフェン膜であることがわかる。これらのラマンマッピングは $80\mu\text{m}$ 角で計測しているため、少なくとも $80\mu\text{m}$ 角の範囲においては高品位グラフェンが得られていることになる。また、温度依存のラマンピークからも、 400°C での

合成温度でもほぼ単層の高品位グラフェンが得られていることがわかる。

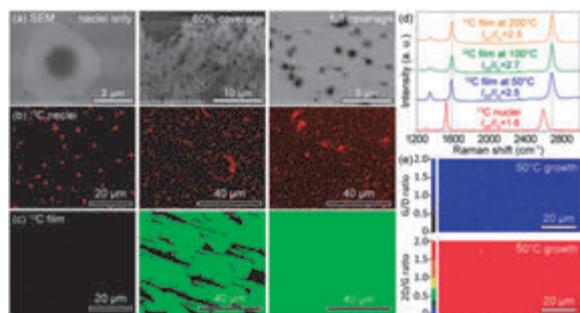


図 1-2 Raman マッピング

このような低温合成で得られたグラフェン膜の高分解能 TEM 像を図 1.3 に示す。図 1-3(a)と(b)は制限視野法によるグラフェン膜のドメイン構造を示したものである。ドメイン自体は、1 ミクロン～数ミクロンのサイズとなっている。これは、初期の核密度が比較的高いために単結晶グラフェンが数ミクロン成長後にドメイン同時がぶつかり合い、粒界を形成したものと考えられる。グラフェンの格子構造はラマン散乱スペクトルからも示唆されるように非常に高品質であり、HR-TEM 像においてもきれいな六員環格子像が観測される。また、粒界では六員環格子の整合性が乱れ、五員環と七員環によって粒界界面が形成されていることがわかる。

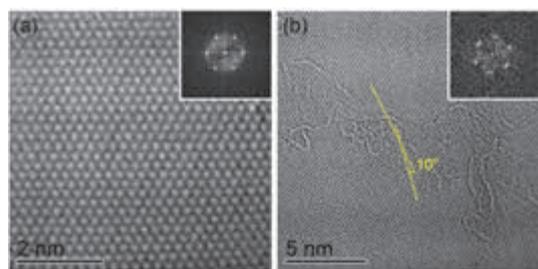


図 1-3 HR-TEM 像

図 1-4 には、グラフェン成長速度から見積もった活性化エネルギーを示す。400°C以上の高温領域では、他の合成手法での報告値とほぼ同じ約 0.6eV であるものの、低温領域では 0.1eV 程度と低くなり、これが低温での合成実現の起源となっている。メタンが液体 Ga に固溶過程、つまりガス状態から液中での分散状態への遷移でエンタルピーを得

し、見かけの成長活性化エネルギーを低減させていると思われる。さらに液体 Ga 触媒との近接距離揺らぎが原子状炭素生成確率を増やし、室温でのグラフェン合成に寄与していると想定される。

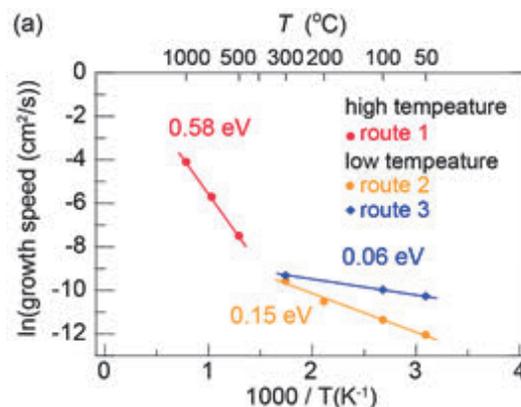


図 1-4 グラフェン成長の活性化エネルギー

【 2 】原子レベルからの輸送特性理論

量子論を用いた詳細な電子状態計算に基づいた輸送特性理論研究を行っている。原子レベルからのマルチスケール伝導理論のための理論的方法論の開発とその応用研究として、ナノカーボン系、有機分子、有機半導体、磁性半導体の電気・熱伝導、熱電特性の理論研究を行った。

(1) 有機半導体のキャリア輸送理論

第一原理電子状態理論に基づいた、精密な伝導理論として時間依存波束拡散法を開発してきた。この方法により 1 億原子系電気伝導計算が可能でナノスケールからマイクロスケールでの解析が原子レベルから可能であるとともにさまざまな有機半導体の輸送特性を明らかにすることができる。並列計算による電子格子相互作用の高効率高精度計算を可能とするとともに、アセン系、DNIT 系、BTBT 系 DNBDT 系などさまざまな有機半導体に適用して移動度やその温度依存性の解析を行った。そこで、この手法により高性能有機半導体の理論設計が可能であることを実証した。

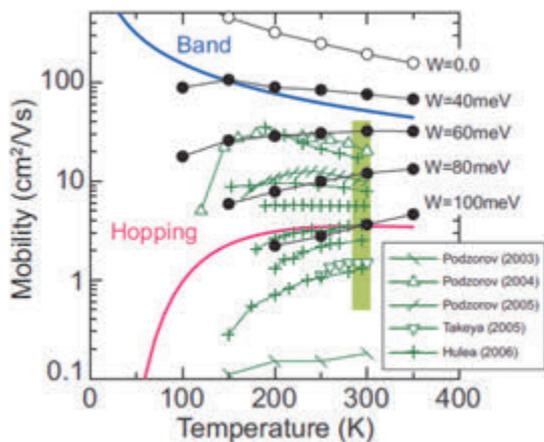


図 2-1 ルブレン結晶の移動度理論
Phys. Rev. B 95, 035433 (2017)

(2) 磁性半導体の熱電特性理論

局在基底を用いた電子状態計算、非平衡グリーン関数法を用いた電気・熱伝導、熱電特性解析を中心として、密度汎関数理論に基づく第一原理計算理論、計算プログラムの開発整備を行ってきた。原子レベルから輸送特性を解析することによって、バルクと異なるナノスケール系の輸送特性を明らかにしてきた。これらの手法により並列コンピュータを用いて高効率なシミュレーションを行うとともに、ナノ構造、薄膜・界面制御による輸送特性制御・設計を行ってきた。磁性半導体における熱電特性理論解析を行い、不純物ドーピングによる性能増強予測設計を行った。

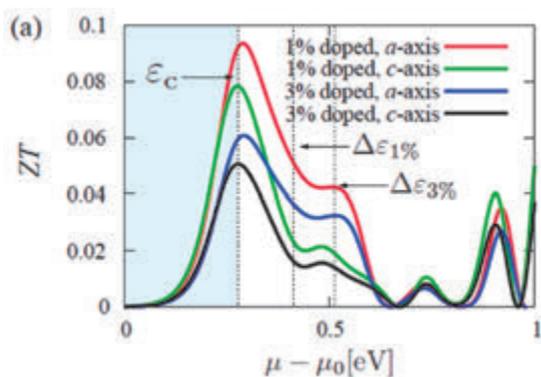


図 2-2 磁性半導体 CuFeS_2 の熱電変換性能指数とドーピング効果の理論
Materials Today Physics 3 (2017) 85e92.

【3】生体計測

(1) 工業材料としてのセルロースフィルム

セルロースは自然界に豊富に存在するバイオマス資源として有用であり、シンプルな化学反応により容易に改良することができる。これまでに、セルロースを使った様々な機能材料が開発されてきた。化学修飾されたセルロースの最も有名なもののひとつがセルロイドである。セルロイドは過去に、非常に有用な樹脂として使用されていたが、その高い可燃性のために、現在は欧米で製造禁止となっている。セルロイドの代替材料として産業用途で注目された樹脂の一つがセルロースアセテート (CA) である。CA の最も価値ある用途は、液晶ディスプレイ (LCD) 用の光学フィルムである。LCD では反射防止フィルムや、位相差フィルム、偏光フィルムなど、いくつかの種類の機能性光学フィルムが使われるが、全て CA フィルムを利用することができる。CA フィルムのアセチル基の置換度や延伸度を変えることによって、それぞれのフィルムに求められる光学特性を付与することができる。従来は、ポリエチレン (PE)、ポリエチレンテレフタレート (PET)、ポリカーボネート (PC)、シクロオレフィンポリマー (COP)、セルロース (CA) のような熱可塑性樹脂が LCD に用いられてきたが、これらの樹脂の中で、特に CA は、屈折率値を精密に調整できる、耐熱性が高い、透明性が高い、という点で最良の樹脂である。CA をより汎用的に用いる、例えば、装飾フィルム、スクリーンフィルム、窓用フィルムなどに適用範囲を広げたいと考えると、耐水性の高い CA の開発が非常に望ましい。

工業用 CA フィルムの耐水性を改良する手段の一つとして、汎用的には耐水剤が添加されている。いくつかの耐水剤は熱可塑性樹脂の可塑性を改良する方法としても確立されている。このような可塑剤を CA に添加すると、ガラス転移温度が低下する。同時に、この方法は樹脂の柔軟性および機械的強度を増加させる効果もある。

本研究においては、耐水剤 (water-proof agent; WPA) として知られている疎水性フェノール誘導体である m-ターフェニル(m-TP)を添加した

CA フィルムの水浸透プロセスについて CARS 技術を用いて調べた。

CARS 技術の高速データ収集により、リアルタイムで、m-TP 含有 CA フィルムの水浸透プロセスを検出することに成功した。

(2) 耐水材入り CA フィルムの CARS 測定

CA フィルムは溶液キャスト法で作成した。CA 樹脂と m-TP フェニル (10mol%) を塩化メチレンとエタノールに溶解し、#14 ワイヤバーコーターを用いてガラス板上に塗布し、室温で5分間乾燥させた。更に、120 °Cで20分間加熱した。乾燥させた CA フィルムを Fig.1 に示すように2枚のピース (5 mm×15 mm) に切り出し、スライドガラスとカバーガラスの間にシリコン接着剤を使用して接着した。試料の端部から水を垂らし、2枚のフィルムの間に入り込むように配置した。

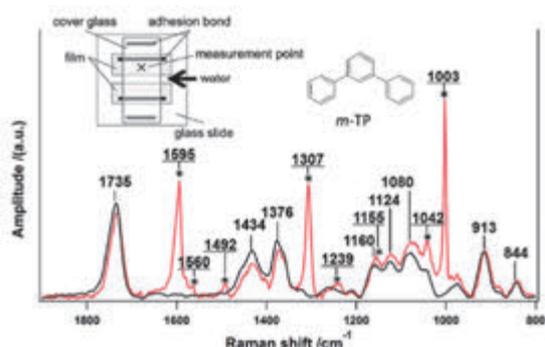


図 3-1 m-TP 含有 (赤)、非含有 (黒) CA フィルムの $\text{Im}[\chi^{(3)}]$ スペクトル

初めに、m-TP 含有 CA フィルムの含水率を乾燥減量法によって測定した。m-TP 含有 CA フィルムの含水率は、水浸透前で 1.1%、水浸透後で 9.8%であった。これらの値は m-TP を含有しない CA フィルムの含水率と比較すると、水浸透前 (2.4%) で 2.2 倍、水浸透後 (13.6%) で 1.4 倍小さい値となっている。

次に、m-TP 含有 CA フィルムの、水浸透前の定常スペクトルを測定した。図 3-1 に m-TP を含有する CA フィルムと m-TP を含有しない CA フィルムの $\text{Im}[\chi^{(3)}]$ スペクトルを示す。スペクトルプロファイルは m-TP の有無によらず、大きな違いは見られなかった。CA 由来の振動バン

ドは文献値とよく一致した。m-TP 由来の振動バンドは 1595 cm^{-1} (芳香環)、1562 cm^{-1} (芳香環)、1492 cm^{-1} (C=C 伸縮)、1307 cm^{-1} (CC 伸縮)、1239 cm^{-1} (CC 伸縮)、1155 cm^{-1} (CC 伸縮)、1042 cm^{-1} (CH 変形)、1003 cm^{-1} (環呼吸)である。

続いて、m-TP 含有 CA フィルムの時間分解 CARS を測定した (図 3-2(a))。サンプル測定位置は同一の場所である。測定位置は図 3-1 の挿入図にあるように、フィルムの端から 3 mm の場所である。データ取得開始から約 50 秒後に水を導入した。スペクトルプロファイル全体としては、600 秒までの範囲では大きな変化はなかった。

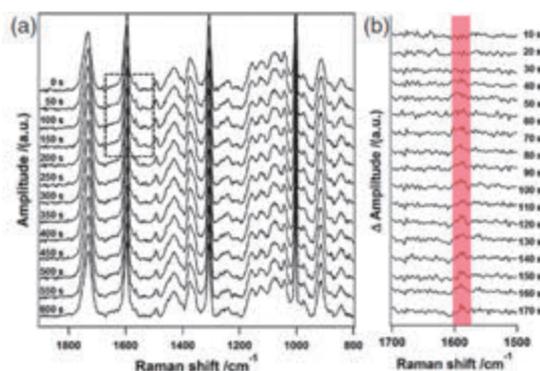


図 3-2 (a)m-TP 含有 CA フィルムの時間分解 $\text{Im}[\chi^{(3)}]$ スペクトル、(b) 1500-1700 cm^{-1} の間の差スペクトル

より詳細に CARS スペクトルを解析するために、 $\text{Im}[\chi^{(3)}]$ スペクトルの差を計算した。水浸透前に得られたスペクトルプロファイル (0~195 ミリ秒の範囲の平均 (20 スペクトル)) から $\text{Im}[\chi^{(3)}]$ スペクトルプロファイルを差し引くことによって計算した。

図 3-2(b)に 1500 から 1700 cm^{-1} の間の差スペクトルを示す (図 3-2(a)の点線の範囲)。1600 cm^{-1} 付近のバンドが、水浸透後 (約 50 秒) に出現し、徐々に減少していることが分かる。これわでの我々の研究により、このバンドは水素結合している水分子の OH 変角振動に由来するバンドであるとアサインできる。ピーク位置が 1593 cm^{-1} 、FWHM が $20 \pm 3 \text{ cm}^{-1}$ である。このバンドのピーク位置は、WPA なしの未延伸 (1603 cm^{-1}) および延伸 (1606 cm^{-1}) CA フィルムと比

較して、わずかにレッドシフトしていた。本研究で得られたデータと耐水材無しのフィルムとの最も顕著な違いの一つは、m-TP を含有しない未延伸 CA フィルムで 1663 cm^{-1} に、m-TP を含有しない延伸 CA フィルムで 1656 cm^{-1} に見られた、もう一つの OH 変角振動がないことである。このバンドは水と水素結合しているピラノース環上の水酸基由来の OH 変角振動に対応することから、m-TP 含有 CA フィルムでは、浸透した水分子は m-TP を含有しない CA フィルムとは異なる位置に存在しているものと予想される。

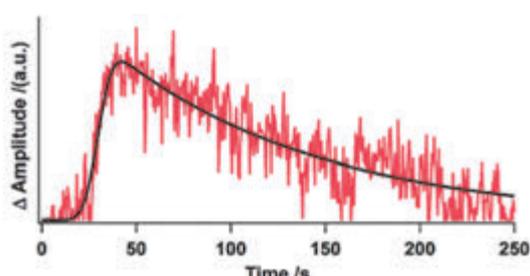


Fig.3 OH変角振動の振幅の時間的プロファイル(赤)、フィッティング曲線(黒)

図 3-3 OH 変角振動の振幅の時間変化 (赤) とフィッティング結果 (黒)

図 3-3 に、OH 変角振動の振幅の時間的プロファイルを示す。時間プロファイル (黒線) は、ガウス関数と指数関数の畳み込みからなる関数を用いてフィットした。ガウス関数の FWHM と減衰時間はそれぞれ、 14 ± 1 、 109 ± 4 秒であった。減衰時間は m-TP を含有しない未延伸 CA フィルムの減衰時間 (20 ± 5 秒) よりもかなり大きく、m-TP を含有しない延伸 CA フィルム (113 ± 2 秒) とほぼ同等であった。

以上のように、耐水剤として m-TP を含有する CA フィルムのリアルタイム CARS 解析の結果から、耐水剤のない CA フィルムとは時間的および分光的な挙動の明確な違いが明らかとなった。m-TP の効果は、OH 伸縮モードの振幅が 1593 cm^{-1} であり、伸張されていない CA フィルムよりも、はるかに緩やかな減衰ダイナミクスを示した。 1593 cm^{-1} の OH 変角振動が水の浸透過程を監視するのに有用であることは再確認された。

<論文>

1. Samuel Jeong, Yoshikazu Ito, Gary Edwards, Jun-ichi Fujita, High-sensitivity visualization of localized electric fields using low-energy electron beam deflection, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 2018, 57, 065201.
2. Yoshikazu Ito, Tatsuhiko Ohto, Daisuke Hojo, Mitsuru Wakisaka, Yuki Nagata, Chen Linghan, Kailong Hu, Masahiko Izumi, Jun-ichi Fujita, Tadafumi Adschiri, Cooperation between holey graphene and NiMo alloy for hydrogen evolution in acidic electrolyte, *ACS Catal.* 2018, 8, 3579-3586
3. J. Fujita, "Visualization of Localized Field using deflection of Low-Energy Electron Beam with SEM/STEM". *J. Vac.Soc.Jpn.*60, 397-405 (2017). [tutorial paper]
4. J. Fujita, T. Hiyama, A. Hirukawa, T. Kondo, J. Nakamura, S. Ito, R. Araki, Y. Ito, M. Takeguchi, & W. W. Pai, "Near room temperature chemical vapor deposition of graphene with diluted methane and molten gallium catalys", *Scientific Reports*, 7, 12371 (2017).
5. Y. Kubo, A. Mizoguchi, and J. Fujita, "High-resolution identification of chemical states in individual metal clusters in an insulating amorphous polymer", *Analytical Chemistry* 88, 5225-5233 (2016).
6. K. Miyazaki, K. Shibuya, M. Suzuki, K. Sakai, J. Fujita, and A. Sawa, "Chromium-niobium co-doped vanadium dioxide films: Large temperature coefficient of resistance and practically no thermal hysteresis of the metal-insulator transition", *AIP Advances* 6, 055012 (2016).
7. J. Fujita, M. Tachi, N. Ito1, K. Murakami, and M. Takeguchi, "Graphitic cage transformation by electron-beam-induced catalysis with alkali-halide nanocrystals", *Jpn. J. Appl. Phys.* 55, 055102 (2016).
8. K. Murakami, S. Tanaka, A. Miyashita, M. Nagao, Y. Nemoto, M. Takeguchi, and J. Fujita, "Graphene-oxide-semiconductor planar-type electron emission device", *Appl. Phys. Lett.*, 108, 083506 (2016).
9. T. Hikata, S. Okubo, Y. Higashi, T. Matsuba, R. Utsunomiya, S. Tsurekawa, K. Murakami, and J. Fujita, "Growth of bridging carbon nanofibers in cracks formed by heat-treating iron oxide thin sheets in acetylene gas", *AIP Advances* 3, 042127 (2016).
10. H. Ishii, N. Kobayashi, K. Hirose, Charge transport calculations by a wave-packet dynamical approach using maximally localized Wannier functions based on density functional theory: Application to high-mobility organic semiconductors, *Phys. Rev. B* 95, 035433 (2017)
11. A. Yamamoto, Y. Murata, C. Mitsui, H. Ishii, M. Yamagishi, M. Yano, H. Sato, A. Yamano, J. Takeya, and T. Okamoto, Zigzag-Elongated Fused pi-Electronic Core: A Molecular Design Strategy to Maximize Charge-Carrier Mobility, *Adv. Sci.* 2017 1700317 (2017).
12. C. Mitsui, H. Tsuyama, R. Shikata, Y. Murata, H. Kuniyasu, M. Yamagishi, H. Ishii, A. Yamamoto, Y. Hirose, M. Yano, T. Takehara, T. Suzuki, H. Sato, A. Yamano, E. Fukuzaki, T. Watanabe, Y. Usami, J. Takeya and T. Okamoto, High performance solution-crystallized

thin-film transistors based on V-shaped thieno[3,2-f:4,5-f']-bis[1] benzothiophene semiconductors, *J. Mater Chem. C* 5, 1903 (2017)

13. Kobayashi, H. Takaki, M. Shimono, N. Kobayashi, and K. Hirose, Electronic Band Structure of TiN/MgO Nanostructure, *Jpn. J. Appl. Phys.* 56, 04CK06 (2017)
14. H. Takaki, K. Kobayashi, M. Shimono, N. Kobayashi, K. Hirose, N. Tsujii, and T. Mori, Thermoelectric properties of a magnetic semiconductor CuFeS₂, *Materials Today Physics* 3 (2017) 85e92
15. H. Takaki, K. Kobayashi, M. Shimono, N. Kobayashi, K. Hirose, Enhancement of thermoelectric properties in surface nanostructures, *J. Elec. Materi.* 46 5593 (2017).
16. H. Takaki, K. Kobayashi, M. Shimono, N. Kobayashi, K. Hirose, N. Tsujii, and T. Mori, First-principles calculations of Seebeck coefficients in a magnetic semiconductor CuFeS₂, *Appl. Phys. Lett.* 110, 072107 (2017)
17. Rie Fujisawa, Tomoya Ohno, Philippe Leproux, Vincent Couderc, Kiyoshi Fukusaka, Hiroshi Kita, and Hideaki Kano, "Effect of a waterproofing agent on the penetration process of water into a cellulose acetate film by time-resolved coherent anti-Stokes Raman scattering (CARS) microspectroscopy", *Chemistry Letters* 46(6), 833-836 (2017), DOI: 10.1246/cl.170120.
18. Shogo Oki, Kazuki Iwashita, Masahiro Kimura, Hideaki Kano, Kentaro Shiraki, "Mechanism of co-aggregation in a protein mixture with small additives", *International Journal of Biological Macromolecules* 107, 1428-1437 (2018).
19. Erwan Capitaine, Nawel O. Moussa, Christophe Louot, Sylvia M. Bardet, Hideaki Kano, Ludovic Duponchel, Philippe Lévêque, Vincent Couderc, and Philippe Leproux, "Fast epi-detected broadband multiplex CARS and SHG imaging of mouse skull cells", *Biomedical Optics Express* 9(1), 245-253 (2018).
5. H. Takaki, K. Kobayashi, M. Shimono, N. Kobayashi, K. Hirose, N. Tsujii, and T. Mori, First-principles calculations of thermoelectric properties in a magnetic semiconductor CuFeS₂, *IUMRS-ICAM*, Kyoto, 2017.8.27-9.1
6. H. Takaki, K. Kobayashi, M. Shimono, N. Kobayashi, K. Hirose, N. Tsujii, and T. Mori, First-principles calculations of phonon and magnon coupling effects for thermoelectric properties of a magnetic semiconductor CuFeS₂ *IUMRS-ICAM* 2017, Kyoto, 2017.8.27-9.1
7. K. Kobayashi, H. Takaki, M. Shimono, N. Kobayashi, and K. Hirose, Electronic Band Structure of TiN/MgO-4x4 Superlattices, *The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8)*, Tsukuba, 2017.10.22-26
8. S. Sato, Y. Kishi, H. Ishii and N. Kobayashi, Electronic states and intermolecular interactions of phenacene crystals, *The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8)*, Tsukuba, 2017.10.22-26
9. S. Oka, H. Ishii and N. Kobayashi, Analysis of SAMO orbitals of C₆₀ using density functional theory, *The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8)*, Tsukuba, 2017.10.22-26
10. H. Takaki, K. Kobayashi, M. Shimono, N. Kobayashi, K. Hirose, N. Tsujii, and T. Mori, First-principles calculations of phonon and magnon coupling effects for thermoelectric properties of magnetic semiconductor CuFeS₂ thin films, *The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8)*, Tsukuba, 2017.10.22-26
11. Y. Kishi, T. Maeda, H. Ishii, S. Yanagisawa, Y. Wakabayashi, R. Eguchi, Y. Kubozono and N. Kobayashi, Analysis of Crystal Structures of [n]phenacenes by First-Principles Calculations, *The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8)*, Tsukuba, 2017.10.22-26
12. Y. Kuroda, H. Ishii and N. Kobayashi, Electronic State Calculations of 5,15-bis(trisopropylsilyl) ethynyltetrabenzoporphyrin, *The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8)*, Tsukuba, 2017.10.22-26

<学会発表>

国際会議

1. Samuel Jeong, Gary Edwards and Jun-ichi Fujita, "High sensitive visualization of localized electric field using low energy electron beam deflection", *EIPBN conference*, 2017 May 30 - June 2, Disney Colorado Spring Resort, FL., USA (Oral)
2. J. Fujita, T. Hiyama, A. Hirukawa, T. Kondo, J. Nakamura, S. Ito, M. Takeguchi, Woei Wu Pai, "Near Room Temperature Graphene-Edge Growth with Diluted Methane Cvd and Molten Gallium Catalys", *2-AVS-2, PSROC2017*, Jan.16- Jan.18, TamKang Univ., Taiwan, Invited.
3. N. Kobayashi, Theory of charge and heat transport at the atomistic level, *25th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy*, Atagawa, 2017.12.7-9 (Invited)
4. N. Kobayashi, Electrical and thermal transport calculations at the atomistic level, *Energy Materials Nanotechnology 2D Materials*, Lyon, France, 2017.8.8-12 (Invited)
13. Hideaki Kano, "Label-free Live Cell Imaging using a White-light Laser Source", *ISPlasma2018/IC-PLANTS2018*, Nagoya, 2018.3.4-8 (invited)
14. Tsubasa Kobayashi, Yuichi Kaji, Tetsuo Oshika, Philippe Leproux, Vincent Couderc, Hideaki Kano, "Label-free imaging of acanthamoeba using multimodal nonlinear optical microscopy", *SPIE BIOS 2018*, San Francisco, USA, 2018.1.27-29
15. Hideaki Kano, Toshihiro Akiyama, Akihito Inoko, Tsubasa Kobayashi, Philippe Leproux, Vincent Couderc, Yuichi Kaji, Tetsuo Oshika, "CARS molecular fingerprinting using a sub-nanosecond supercontinuum light source", *SPIE BIOS 2018*, San Francisco, USA, 2018.1.27-29
16. Takumi Iwamura, Yuichi Kaji, Tetsuo Oshika and Hideaki Kano, "EX-vivo imaging of arcus senilis of human cornea using nonlinear optical microscopy", *The 24th*

- Congress of the International Commission for Optics, sinjuku,2017.8.22
17. Tsubasa Kobayashi, Yu-Rok Cha, Yuichi Kaji, Tetsuo Oshika and Hideaki Kano, "Label-free imaging of acanthamoeba using multimodal nonlinear optical microscopy", The 5th Taiwan International symposium on Raman Spectroscopy and Taiwan Association of Raman Spectroscopy (TISRS & TARS 2017), Chiayi,Taiwan,2017.6.27-30
 18. Yusuke Chiba, Kei Ishitsuka, Masaki Yoshida, Makoto M Watanabe and Hideaki Kano, "Multimodal nonlinear optical imaging of *Aurantiochytrium* in the early stage of cell culture", The 5th Taiwan International symposium on Raman Spectroscopy and Taiwan Association of Raman Spectroscopy (TISRS & TARS 2017), Chiayi,Taiwan,2017.6.27-30
 19. Takumi Iwamura, Yuichi Kaji, Tetsuro Oshika and Hideaki Kano, "EX-vivo imaging of arcus senilis of human cornea using nonlinear optical microscopy", The 5th Taiwan International symposium on Raman Spectroscopy and Taiwan Association of Raman Spectroscopy (TISRS & TARS 2017), Chiayi,Taiwan,2017.6.27-30
 20. Yoshiharu Yamada and Hideaki Kano, "Temperature Measurement Using Hyper-Raman Microspectroscopy", The 5th Taiwan International symposium on Raman Spectroscopy and Taiwan Association of Raman Spectroscopy (TISRS & TARS 2017), Chiayi,Taiwan,2017.6.27-30
 21. Hideaki Kano, "CARS spectroscopic imaging of living cell and tissues using a supercontinuum light source", 9 th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy(ICAVS-9), Victoria, Canada ,2017.6.11-16 (invited)
- 国内会議
1. 菊池 優、鄭 サムエル、伊藤 良一、藤田 淳一、"オフセット HAADF-STEM による局在電場可視化", 応用物理学会 早稲田大学西早稲田キャンパス,2018 年 3 月 20 日,20p-B303-3
 2. 鄭サムエル、菊池優、伊藤良一、藤田淳一、 "低加速電子線偏向を用いた局在電界の可視化", 応用物理学会 早稲田大学西早稲田キャンパス,2018 年 3 月 20 日,20p-B303-
 3. 鄭サムエル、Gary Edwards, 藤田淳一、"低加速電子線偏向を用いた高感度局在電界可視化", 応用物理学会パシフィコ横浜,2017 年 3 月 14 日,14p-424-5
 4. 小林伸彦, 大規模計算による有機半導体の熱・電荷輸送, 日本物理学会第 73 回年次大会シンポジウム「柔らかな界面における熱・電荷輸送」東京理科大、2018.3.22-25
 5. 高木博和, 小林一昭, 下野昌人, 小林伸彦, 広瀬賢二, 辻井直人, 森孝雄 第一原理計算による磁性半導体の熱電物性におけるフォノン、マグノン相互作用, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 岩手大学, 2017.9.21-24
 6. 石井宏幸, 小林伸彦, 広瀬賢二, 波束拡散法によるカーボンナノチューブと有機半導体の電子伝導計算, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 岩手大学, 2017.9.21-24
 7. 黒田悠暉, 石井宏幸, 小林伸彦, 有機半導体の有効質量における NHOMO の効果, 日本物理学会第 73 回年次大会, 東京理科大, 2018.3.22-25
 8. 石井宏幸, 新津直幸, 小林伸彦, 広瀬賢二, 渡邊峻一郎, 岡本敏宏, 竹谷純一, 低分子系および高分子系有機半導体におけるキャリア伝導計算, 日本物理学会第 73 回年次大会, 東京理科大, 2018.3.22-25
 9. 新津直幸, 石井宏幸, 小林伸彦, 広瀬賢二, 熊谷翔平, 鶴見淳人, 渡邊峻一郎, 岡本敏宏, 竹谷純一, 機械学習による有機半導体の構造研究, 日本物理学会第 73 回年次大会, 東京理科大, 2018.3.22-25
 10. 高木博和, 小林一昭, 下野昌人, 小林伸彦, 広瀬賢二, 辻井直人, 森孝雄 熱電半導体 CuFeS₂ の熱電特性, 日本物理学会第 73 回年次大会, 東京理科大, 2018.3.22-25
 11. 加納英明, 「生細胞・生体組織を染めずに見る ～スーパーコンティニューム光を用いたラベルフリー・マルチモーダル・イメージング～」, 第 4 回超高速光エレクトロニクス (UFO) 研究会, 仙台, 2018.3.2 (招待講演)
 12. Tsubasa Kobayashi, Yu-Rok Cha ,Yuichi Kaji, Tetsuo Oshika and Hideaki Kano,"Multimodal nonlinear spectroscopic imaging of acanthamoeba causing keratitis", 第 15 回医用分光学研究会,つくば,2017.11.29-30
 13. 木村将大,米山弘亮,江川麻里子,細井純一,加納英明,"マルチプレックス CARS 顕微鏡を用いたヒト皮膚の分光イメージング",第 15 回医用分光学研究会, つくば,2017.11.29-30
 14. 加納 英明, 「脂肪を燃焼する褐色脂肪細胞のラマン分光イメージング」, 第 9 回 TIA シンポジウム、東京、2017.10.2
 15. 山田 慶春, 加納 英明, "波長可変レーザーを用いたハイパーラマン顕微分光装置の開発と二酸化チタンへの応用Ⅲ",第 11 回分子科学討論会,仙台,2017.9.15-17
 16. 千葉 祐介, 石塚 圭, 吉田 昌樹, 渡邊 信, 加納 英明, "培養初期におけるオーランチオキトリウム (*Aurantiochytrium*)の非染色非線形光学イメージング", 第 11 回分子科学討論会, 仙台,2017.9.15-17
 17. 木村 将大, 米山 弘亮, 加納 英明, "マルチプレックス CARS 顕微鏡を用いたヒト皮膚の分子分光イメージング",第 11 回分子科学討論会, 仙台,2017.9.15-17
 18. 加納 英明,"脂肪を燃やす褐色脂肪細胞のラマン分光イメージング", 第 1 回 TIA かけはし 成果報告会,文京区,2017.7.4
 19. Hideaki Kano, Yu-rok Cha, Tsubasa Kobayashi, Yuichi Kaji, Tetsuro Oshika , "Multimodal nonlinear optical imaging of Acanthamoeba causing keratitis", H29 年度日本分光学会

年次講演会,新宿,2017.5.23-25

20. 千葉祐介, 石塚圭, 吉田昌樹, 渡邊信, 加納英明, “培養初期におけるオーランチオキトリウム (*Aurantiochytrium*) のマルチモーダル非線形光学イメージング”, H29 年度日本分光学会年次講演会, 新宿, 2017.5.23-25
21. 岩村拓海, 加治優一, 大鹿哲郎, 加納英明, “非線形光学過程を用いたヒト角膜老人環の *ex-vivo* イメージング”, H29 年度日本分光学会年次講演会, 新宿, 2017.5.23-25

(3)物質創成分野 量子物性コア

教員 神田晶申 (数理物質系物理学域 教授)
研究員 友利ひかり (科学技術振興機構さきがけ
専任研究者)
大学院生 梅本匡敏 (数理物質科学研究科 M2)
園田大樹 (数理物質科学研究科 M2)
中村和史 (数理物質科学研究科 M2)
堀江彩叶 (数理物質科学研究科 M2)
矢部大輔 (数理物質科学研究科 M2)
星 直樹 (数理物質科学研究科 M1)

量子物性コア神田グループでは、グラフェン等の原子層物質や層状超伝導体薄膜における新規メゾスコピック物性の開拓と、そのデバイス応用のための基盤技術開発を目的とした研究を行った。

【 1 】グラフェンのひずみ効果

炭素の2次元原子層膜であるグラフェンには、格子ひずみがベクトルポテンシャルと同等の効果を持つという特殊な性質がある。ひずみの空間変化の結果生じる擬似磁場をうまく使うと、グラフェンを高速電子デバイスに応用するために不可欠となる質の良いバンドギャップを生成できることが理論予測されているが、これまで実現されてない。我々は、格子ひずみを使ってグラフェンに実用化可能な大きさのバンドギャップを生成することを目的とした研究を行っている。

昨年度までの研究で、周期ひずみ構造、局所ひずみ構造のそれぞれを持つ電界効果トランジスタにおいて、伝導ギャップを観測することにはじめて成功した。さらに、実用化可能な大きさの伝導

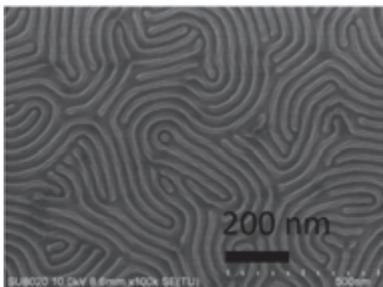


図1：PS-*b*-PMMA のラメラ構造を用いて形成したポリスチレンの凹凸構造。

ギャップを実現するためには、周期ひずみ構造に

おいて、ひずみ周期を微細化する手法が適していることを明らかにした。今年度は、電子線リソグラフィなどの半導体微細加工技術では実現不可能な微細な周期ひずみ構造を形成することを目指し、ポリスチレンとポリメタクリル酸メチルのブロック共重合体(PS-*b*-PMMA)からなる自己組織化膜を用いてグラフェンに周期ひずみ構造を導入する方法を考案し、実際に、PS-*b*-PMMA のラメラ構造(図1)を用いてグラフェンに周期40 nmの(準)周期ひずみを導入できることを顕微ラマン分光で確認した。現在、電気伝導測定の準備を進めている。

【 2 】グラフェンの超伝導近接効果

グラフェンと超伝導体との界面では、通常とは異なる超伝導近接効果(鏡面アンドレーエフ反射)が起こることが理論予測されているが、現在まで実験では観測されていない。我々は、その主たる原因として、超伝導体とグラフェンの仕事関数差に起因する電荷ドーピングに着目している。今年度は、この電荷ドーピングが電気伝導特性に与える影響を子細に検討し、低温物理国際会議(LT28)で口頭発表すると共にプロシーディングス論文として公表した。また、昨年度理論を構築したクリーンな2層グラフェン/超伝導接合の鏡面アンドレーエフ反射を実験で観測すべく、新しい作製法を用いた試料の電気伝導を測定した。その結果、理論予測と一部定性的に合致する非対称な電流電圧特性やゲート電圧依存性における共鳴ピーク構造が見られた。今後、さらに試料作製法を改良し、鏡面アンドレーエフ反射の有無を検証する。

【 3 】メゾスコピック超伝導体における少数渦糸状態の制御と量子デバイス応用の検討

微小な第2種超伝導体では、量子磁束(渦糸)の配置は試料形状や磁場に依存し、巨大渦糸状態や多重渦糸状態(図2)といった新しい渦糸状態が生じる。我々はこれまで、独自に開発した微小トンネル接合法を用いて、新規渦糸状態の様々な性質を明らかにしてきた。特に、局所電流注入による渦糸状態間転移の観測に成功し、これまで古典的に扱われてきた渦糸状態の量子トンネルを示唆する実験結果を得た。通常、渦糸の移動はエネ

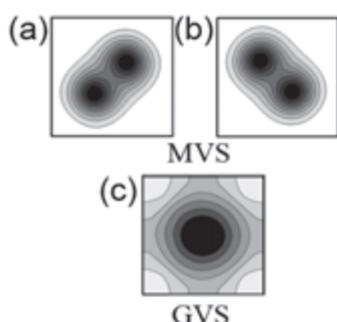


図2：正方形薄膜超伝導体の渦度 $L=2$ の渦糸状態。(クーパー対密度の等高線表示。黒が中心核。)
(a)(b)多重渦糸状態、(c)巨大渦糸状態。

ルギー散逸を伴うために量子トンネルの確率は小さいと考えられるが、メゾスコピック超伝導体特有の巨大渦糸状態をうまく制御すると、巨視的量子コヒーレンスを実現し、量子デバイスに応用できる可能性がある。ここで、従来の超伝導体の蒸着膜に代えて、原子オーダーで厚さが均一であり臨界温度の高い層状超伝導体の劈開膜を用いることで、渦糸状態の制御性が格段に向上すると期待される。今年度は、理論研究者と渦糸状態の量子性について検討すると共に、層状超伝導体の劈開膜を用いた実験のための基盤技術の開発を以下のとおり行った。

(1) 層状超伝導体劈開膜の超伝導特性

昨年度に引き続き、層状超伝導体を用いたメゾスコピック試料を作製する上で重要となる、試料作製プロセスが超伝導特性に与える影響を調べた。今年度は、産総研の収束イオンビーム(FIB)装置を用いて膜厚 10 nm 程度の層状超伝導体 NbSe₂ の加工を行い、加工前後の超伝導特性の比較を行った。その結果、FIB 加工による超伝導転移温度の減少、転移幅の増大、臨界磁場の減少が観測された。

(2) 層状高温超伝導体 BSCCO 薄膜の超伝導探索

昨年度に引き続き、層状高温超伝導体 Bi2212 を劈開法によって薄膜化した試料の超伝導転移の観測を試みたが、様々な構造を持つ試料のすべてで、絶縁体的な振舞いが見られた。バルク試料の測定において、115 K、80 K における抵抗の跳びと低温における絶縁体的振舞いが見られたことから、用いた結晶には Bi2223 相、Bi2212 相、絶縁

相が混在していることがわかった。劈開法で、絶縁相が選択的に得られると推察される。

(3) NbSe₂ における渦糸侵入・排出の観測

劈開法で得た層状超伝導体 NbSe₂ の微細な薄片に微小なトンネル接合を取り付け、微小トンネル接合法による渦糸の侵入・排出の検出を行った。Al 試料の場合と同様、渦糸の出入りに伴う電圧の変化が観測されたが、その特徴は Al の場合とは大きく異なるものであった。これは、NbSe₂ が多バンド超伝導体であることを反映している可能性がある。

<学位論文>

- ・ 梅本匡敏：動的応答測定によるグラファイト上単原子層ヘリウム異常比熱の解明(数理解物質科学研究科、物理学専攻、修士論文、2017.3)
- ・ 園田大樹：劈開法で得た高温超伝導体薄膜の電気伝導(数理解物質科学研究科、物理学専攻、修士論文、2017.3)
- ・ 中村和史：格子ひずみを導入したグラフェンの物性評価(数理解物質科学研究科、物理学専攻、修士論文、2017.3)
- ・ 堀江彩叶：折り曲げたグラフェンの低温・強磁場における電気伝導(数理解物質科学研究科、物理学専攻、修士論文、2017.3)
- ・ 矢部大輔：劈開法で得た層状超伝導体 NbSe₂ の超伝導特性とグラフェンとの接合における超伝導近接効果(数理解物質科学研究科、物理学専攻、修士論文、2017.3)

<論文>

1. K. Yarimizu, H. Tomori, K. Watanabe, T. Taniguchi, and A. Kanda, "Electron transport in a bilayer graphene/layered superconductor NbSe₂ junction: effect of work function difference", J. Phys: Conf. Ser. 969 (2018) 012147 (5 pages). DOI: 10.1088/1742-6596/969/1/012147
2. Y. Takane, K. Yarimizu, and A. Kanda, "Andreev Reflection in a Bilayer Graphene Junction: Role of Spatial Variation of the Charge Neutrality Point", J. Phys. Soc. Jpn 86, 064707 (2017). (8 pages) DOI: 10.7566/JPSJ.86.064707
3. Y. Takane and A. Kanda, "Andreev reflection in a proximity junction of graphene: Influence of a naturally formed pn junction", J. Phys: Conf. Ser. 969 (2018) 012155 (5 pages) doi:10.1088/1742-6596/969/1/012155

<学会発表>

国際会議

1. Akinobu Kanda, “Search for unusual Andreev reflection in a graphene/superconductor interface”, Collaborative Conference on Material Science (CCMR 2017), Jeju Island (Korea), Jun. 26-30, 2017. (招待講演)
2. K. Yarimizu, H. Tomori, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. Kanda, “Electron transport in a bilayer graphene/layered superconductor NbSe₂ junction”, 28th International Conference on Low Temperature Physics (LT28), Gothenburg (Sweden), Aug. 9-16 (2017). (oral)
3. Y. Takane, A. Kanda, “Andreev reflection in a proximity junction of graphene: influence of a naturally formed pn junction”, 28th International Conference on Low Temperature Physics (LT28), Gothenburg (Sweden), Aug. 9-16 (2017). (poster)
4. H. Tomori, M. Hayashi, H. Yoshioka, K. Watanabe, T. Taniguchi, Y. Ootuka, A. Kanda, “Introducing uniaxial local strain to graphene encapsulated with hBN”, 28th International Conference on Low Temperature Physics (LT28), Gothenburg (Sweden), Aug. 9-16 (2017). (poster)
5. H. Tomori, R. Hiraide, Y. Ootuka, A. Kanda, “Gap formation by periodic strain in graphene field effect devices”, 28th International Conference on Low Temperature Physics (LT28), Gothenburg (Sweden), Aug. 9-16 (2017). (poster)
6. Kazushi Nakamura, Hikari Tomori, Akinobu Kanda, “Simplified estimation of crystallographic orientation of strained graphene by micro-Raman spectroscopy”, The 2nd International Symposium on Hybrid Quantum Systems (HQS2017), Zao (Miyagi), Sep. 10 – 13 (2017). (poster)
7. D. Yabe, K. Yarimizu, H. Sonoda, Y. Ootuka, H. Tomori, K. Watanabe, T. Taniguchi, K. Ueno, A. Kanda, “Process Dependence of Superconducting Transition of Thin Layered Superconductor NbSe₂”, The 2nd International Symposium on Hybrid Quantum Systems (HQS2017), Zao (Miyagi), Sep. 10 – 13 (2017). (poster)
8. H. Tomori, R. Hiraide, K. Nakamura, N. Hoshi, T. Kichikawa, T. Tanaka, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. Kanda, “Graphene strain engineering for band gap opening”, The 2nd International Symposium on Hybrid Quantum Systems (HQS2017), Zao (Miyagi), Sep. 10 – 13 (2017). (oral)
9. Naoki Hoshi, Hiroki Sonoda, Daisuke Yabe, Hikari Tomori, Akinobu Kanda, “Detecting Vortices in Thin Layered Superconductor NbSe₂ Using Small Tunnel Junctions”, The 9th annual Recent Progress in Graphene and Two-dimensional Materials Research Conference (RPGR2017), Singapore, Sep. 19-22 (2017). (poster)
10. Kazushi Nakamura, Hikari Tomori, Akinobu Kanda, “Simplified estimation of crystallographic orientation of strained graphene by micro-Raman spectroscopy”, The 9th annual Recent Progress in Graphene and Two-dimensional Materials Research Conference (RPGR2017), Singapore, Sep. 19-22 (2017). (poster)
11. Hiroki Sonoda, Daisuke Yabe, Katsuhide Yarimizu, Hikari Tomori, Yoshihiko Tanano, Akinobu Kanda, “Atmosphere Dependence of Normal State Resistance of BSCCO Thin Films Obtained with Micromechanical Exfoliation”, The 9th annual Recent Progress in Graphene and Two-dimensional Materials Research Conference (RPGR2017), Singapore, Sep. 19-22 (2017). (poster)
12. D. Yabe, K. Yarimizu, H. Sonoda, H. Tomori, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. Kanda, “Superconducting Transition of Thin Layered Superconductor NbSe₂: Influence of Device Structures”, The 9th annual Recent Progress in Graphene and Two-dimensional Materials Research Conference (RPGR2017), Singapore, Sep. 19-22 (2017). (poster)
13. Akinobu Kanda, Katsuhide Yarimizu, Daisuke Yabe, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Hikari Tomori, “Search for Unusual Andreev Reflection in a Bilayer Graphene/Layered Superconductor NbSe₂ Junction”, The 9th annual Recent Progress in Graphene and Two-dimensional Materials Research Conference (RPGR2017), Singapore, Sep. 19-22 (2017). (oral)
14. Hikari Tomori, Rineka Hiraide, Youiti Ootuka, Akinobu Kanda, “Band gap formation in graphene by periodic strain”, Graphene Week 2017, Athens (Greece), Sep. 25-29 (2017). (poster)

国内会議

1. 友利ひかり, 神田晶申, 「グラフェンのひずみ効果」, グラフェン-量子ドット研究会, 茨城大学工学部 (茨城県日立市), 2017.4.2. (招待講演)
2. 園田大樹, 矢部大輔, 鎌水勝秀, 友利ひかり, 渡邊賢司, 谷口尚, 高野義彦, 神田晶申, 「劈開法で得た層状超伝導体 BSCCO 薄膜の常伝導抵抗の雰囲気依存性」, 第78回応用物理学会秋季学術講演会 (福岡県福岡市), 2017.9.5-8. (ポスター)
3. 中村和史, 友利ひかり, 神田晶申, 「顕微ラマン分光を使ったグラフェンのひずみ方位の簡単な決定法」, 第78回応用物理学会秋季学術講演会 (福岡県福岡市), 2017.9.5-8. (ポスター)
4. 矢部大輔, 鎌水勝秀, 園田大樹, 友利ひかり, 渡邊賢司, 谷口尚, 神田晶申, 「層状超伝導体 NbSe₂ 薄膜の超伝導特性のデバイス構造依存性」, 第78回応用物理学会秋季学術講演会 (福岡県福岡市), 2017.9.5-8. (ポスター)
5. 神田晶申, 友利ひかり, 星直樹, 「メゾスコピック超伝導体を用いた量子渦糸操作の可能性」, 新学術領域「ハイブリッド量子科学」第五回領域会議, 大阪府大阪市, 2017.10.12-13. (口頭発表)
6. 矢部大輔, 鎌水勝秀, 園田大樹, 友利ひかり, 渡邊賢司, 谷口尚, 神田晶申, 「層状超伝導体 NbSe₂ 薄膜の超伝導特性の デバイス構造依存性」, 新学術領域「ハイブリッド量子科学」第五回領域会議, 大阪府大阪市, 2017.10.12-13. (ポスター)
7. 友利ひかり, 中村和史, 田中貴弘, 神田晶申, 「グラフェンにおけるひずみエンジニアリング」, 新学術領域「ハイブリッド量子科学」第五回領域会議, 大阪府大阪市, 2017.10.12-13. (ポスター)

8. 神田晶申、友利ひかり、矢部大輔、星直樹、林正彦、「メゾスコピック超伝導体における渦糸状態操作の可能性」, 第 25 回渦糸物理国内会議, 沖縄科学技術大学院大学 (沖縄県国頭郡), 2017.11.27-29. (口頭発表)
9. 神田晶申, 「原子膜積層化により形成した超伝導システムの物性探索」, 新学術領域研究「原子層科学」最終回全体会議, 東北大学理学部 (宮城県仙台市), 2018.2.19-21. (口頭発表)
10. 矢部大輔, 鎌水勝秀, 友利ひかり, 神田晶申, 渡邊賢司, 谷口尚, 高根美武, 「2層グラフェン/層状超伝導体 NbSe₂ 接合の超伝導近接効果」, 日本物理学会第 73 回年次大会, 東京理科大学 (千葉県野田市), 2018.3.22-25. (口頭発表)
11. 友利ひかり, 平出璃音可, 大塚洋一, 神田晶申, 「周期ひずみによるグラフェンへのバンドギャップ生成」, 日本物理学会第 73 回年次大会, 東京理科大学 (千葉県野田市), 2018.3.22-25. (口頭発表)

(6)集積物性分野 機能性高分子コア

教員 木島正志 (数理物質系物質工学域 教授)

川島英久 (数理物質系物質工学域 助教)

大学院生 奥田勇樹 (数理物質科学研究科 M2)

彭 文莉 (数理物質科学研究科 M2)

麻生史拓 (数理物質科学研究科 M1)

陈 逸飞 (数理物質科学研究科 M1)

徐 芸菲 (数理物質科学研究科 M1)

機能性高分子コアでは π 共役分子の設計を基本とする電子・光機能性高分子の創製と応用を共通のターゲットとして研究を行っている。本年度は新しい機能性高分子・分子材料の設計と合成ならびに分子集合体に関する研究を中心に行った。

【 1 】 共役主鎖にフェノール性水酸基を有するポリ(2,7-カルバゾール)類の合成と物性評価

・ポリ(2,7-カルバゾール)類は、高い熱安定性と優れた半導体特性を有する代表的な共役系高分子である。本研究ではポリカルバゾールの3,6位に水酸基を導入したポリ(3,6-ジヒドロキシ-2,7-カルバゾール)類の合成を検討した。これらはカルバゾール9位のN原子に対しパラ位である3,6位に水酸基をもつため、ポリ(2,7-カルバゾール)の主鎖共役系を崩すことなく主鎖骨格内での酸化還元活性を示すことが可能で、半導体特性とレドックス性の両方の特質を併せ持つポリマーとなることが予想された。そこで、新たに導入したフェノール性水酸基によるポリマー物性への影響を検討・考察し、機能探索を行った。

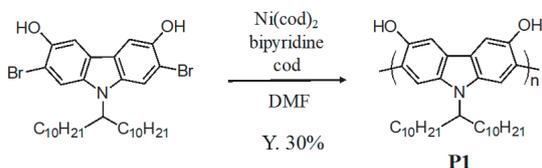


図 1-1 3,6-ジヒドロキシカルバゾールの重合

モノマーの水酸基は保護せず、山本法により重合を行ったところ分子量800~3000 g/mol のホモポリマー**P1**が収率30%で得られた(図 1-1)。サイクリックボルタンメトリーにより**P1**の酸化還元挙動をメタノール中で観察したところ、ヒドロキノンに特徴的な酸化還元波が確認された(図 1-2)。

これはカルバゾールのN原子を利用して、そのパラ位に位置するフェノール性水酸基を持つカルバゾールがヒドロキノンと同様の酸化還元挙動を示したものと考えられる。

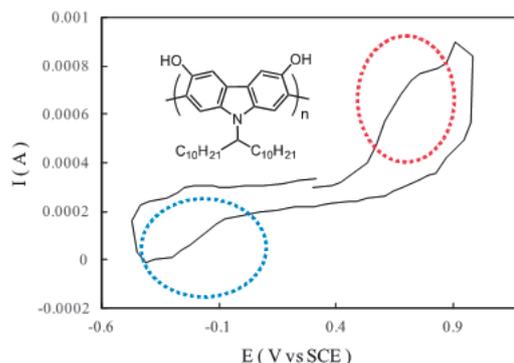


図 1-2 **P1** のサイクリックボルタンモグラム

次に、**P1**の紫外可視吸収スペクトル及び蛍光スペクトルを測定した(図 1-3)。極大吸収波長に相当する315 nmの単色光で励起を行ったところ、ポリカルバゾール特有の400 nm付近の青色蛍光発光が確認された。また、**P1**は塩基を加えることによりフェノール性水酸基がアニオン化し、分子全体の共役の広がりに影響を与えることが予想された。そこで**P1**のDMSO溶液中に塩基としてテトラブチルアンモニウムフルオリドを加え同様の測定を行ったところ、吸収、発光ピーク共に大きく長波長側にシフトした(図 1-4)。蛍光は従来のポリカルバゾールでは見られない黄緑色を発した。これらの結果から、合成した**P1**はフェノール構造特有の性質を有していることが明らかとなった。

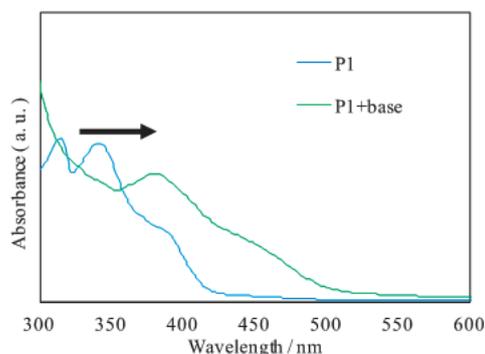


図 1-3 DMSO 中の**P1**の紫外可視吸収スペクトルと塩基添加効果

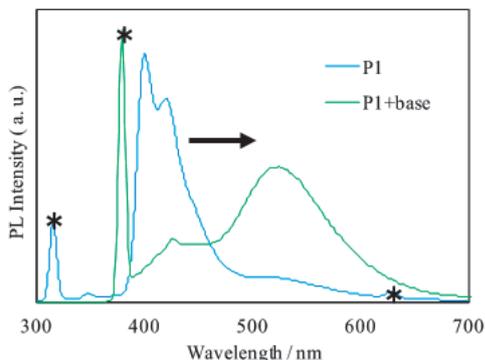


図1-4 DMSO中のP1の蛍光スペクトルと塩基添加効果

【2】液晶性ポリ(4-アルコキシ-9-アルキル-2,7-カルバゾール)類の合成とその性質

Carbazole-based conjugated polymers that have semiconducting properties have attracted great interest due to the high fluorescence quantum yield and good chemical and environmental stability. Novel liquid crystalline poly(2,7-carbazole)s whose chemical structures are summarized in Figure 2-1 were attempted to synthesize by introducing different groups (R) of linear long chains and branched ones at the 4 and 9-positions.

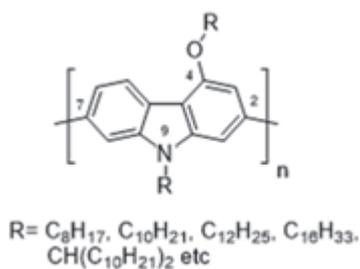


図2-1 4,9-ジ置換ポリ(2,7-カルバゾール)

All the polymers were synthesized by the Ni-catalyzed Yamamoto method from corresponding 2,7-dibromo monomers. For comparison, several poly(2,7-carbazole)s having the R substituent at 9-position were similarly synthesized. They were soluble in common organic solvents such as THF and CHCl₃. Their average molecular weights were measured by gel permeation chromatography (vs. polystyrene standards using CHCl₃ as an eluent).

Photoabsorption, fluorescence, and X-ray diffraction spectra were measured to characterize these polymers. Their phase transition behaviors were investigated by differential scanning calorimetry (DSC) and polarized optical microscopy.

Optical properties of these polymers were basically same, showing strong absorption bands at 390 – 402 nm due to π - π^* transition of the conjugated main chains. Intense PL bands were observed at 421 – 437 nm in CHCl₃ solution and film state. A typical example of poly(4-dodecyloxy-9-dodecyl-2,7-carbazole) (PDDCz) with 111 kg mol⁻¹ of a number average molecular weight (M_n) ($M_w/M_n = 2.80$) showed the UV-vis absorption maximum at 390 nm in the CHCl₃ solution and at 402 nm in the thin solid film state. The photoluminescence maximum values were 421 nm in the CHCl₃ solution and 437 nm for the film, suggesting that it emits blue fluorescence.

The DSC thermograms of PDDCz (Figure 2-2) showed two endothermic peaks at 104 °C and 185 °C in second heating process, which might be due to phase transitions from a glassy state to a mesophase and from the mesophase to isotropic liquid. The successive second cooling scan showed two exothermic peaks at 168 °C and 154 °C, which might correspond to phase transitions from isotropic liquid to a mesophase and from the mesophase to glassy state. Unidentifiable textures with birefringence were observed by the thermo-controlled polarizing optical microscopy for PDDCz, which also supports presence of liquid crystalline states.

The X-ray Diffraction patterns of PDDCz of cast film and annealed one were shown in Figure 2-3. The

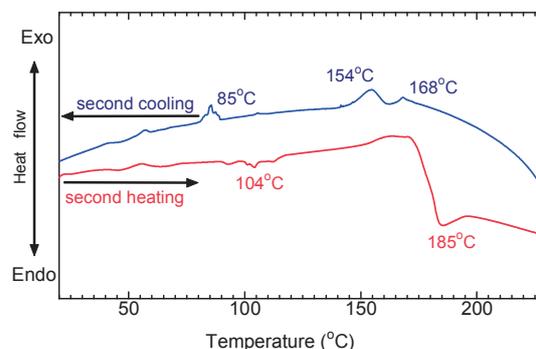


図2-2 PDDCzのDSC結果

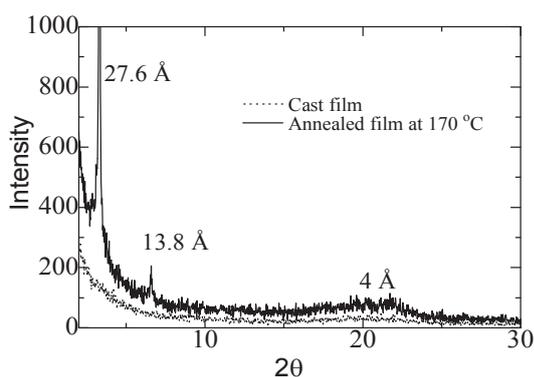


図 2-3 PDDCz キャストフィルムと熱処理サンプルの XRD パターン。

appearance of an intense signal at ca. $2\theta = 3^\circ$ suggested that the polymer takes a smectic-like layered structure with 27.6 Å distance between polymer main chains separated by the R side-chains and π - π stacking distance about 4 Å between polycarbazole planes.

< 学位論文 >

- ・ 奥田勇樹：不均一触媒系における過酸化水素を用いたスクアレンのエポキシ化 (数理解物質科学研究科、物性・分子工学専攻、修士論文、2018.3)
- ・ 彭文莉：Synthesis and characterization of orientational 4,9-substituted poly(2,7-carbazole)s (数理解物質科学研究科、物性分子工学専攻、修士論文、2018.3)

< 論文 >

1. K. Shibasaki, T. Yasuda, Y. Yamamoto, M. Kijima, "Dual substitution at 4,9-positions of carbazole in donor-p-acceptor copolymer enhances performance of bulk-heterojunction organicsolar cells," *Polymer*, **108**, 305-312 (2017).
2. K. Shibasaki, T. Yasuda, M. Kijima, "Organic Photovoltaics based on poly(3,4-phenylenedioxy-2,5-thienylenevinylene)s," *Electrochemistry*, **85**, 241-244 (2017).

< 学会発表 >

国際会議

1. Yifei Chen, Masashi Kijima, Hidehisa Kawashima, "Synthesis of poly(peryleneimide)s with poly(ethylene oxide) main segments" *Tsukuba Global Science Week (TGSW), Interdisciplinary Workshop on Science and Patents (IWP2017)*, Tsukuba, Japan, 2017. 09.26, (Poster).
2. Wenli Peng, Kawashima Hidehisa, Kijima Masashi, "Synthesis and Characterization of Liquid Crystalline Poly(4-alkoxy-9-alkyl-2,7-carbazole)s", *Tsukuba Global Science Week (TGSW), Interdisciplinary Workshop on Science and Patents (IWP2017)*, Tsukuba, Japan, 2017. 09.26,

(Poster)

3. Yifei Xu, Hidehisa Kawashima, Masashi Kijima, "Separation of algal components from a botryococcus residue after removing hydrocarbons", *Tsukuba Global Science Week (TGSW), Interdisciplinary Workshop on Science and Patents (IWP2017)*, Tsukuba, Japan, 2017. 09.26, (Poster)
4. Yuki Okuda, Hidehisa Kawashima, Junchul Choi, Masashi Kijima, "Catalytic epoxidation of squalene using hydrogen peroxide", *Tsukuba Global Science Week (TGSW), Interdisciplinary Workshop on Science and Patents (IWP2017)*, Tsukuba, Japan, 2017. 09.26, (Poster)
5. Kang Seongjip, Hidehisa Kawashima, Masashi Kijima, "Properties of carbonized cyclodextrin microcube doped by iodine", *Tsukuba Global Science Week (TGSW), Interdisciplinary Workshop on Science and Patents (IWP2017)*, Tsukuba, Japan, 2017. 09.26, (Poster)
6. Kazuhiro Yoshikawa, Hidehisa Kawashima, Masashi Kijima, "Epoxidation and hydrosilylation of botryococcene", *Tsukuba Global Science Week (TGSW), Interdisciplinary Workshop on Science and Patents (IWP2017)*, Tsukuba, Japan, 2017. 09.26, (Poster).
7. Fumihiko Aso, Hidehisa Kawashima, Masashi Kijima, "Redox behavior of polycarbazoles bearing 3,6-dihydroxy groups", *Tsukuba Global Science Week (TGSW), Interdisciplinary Workshop on Science and Patents (IWP2017)*, Tsukuba, Japan, 2017. 09.26, (Poster).
8. Moe Saito, Hidehisa Kawashima, Masashi Kijima, "Synthesis of macromolecular botryococcene derivatives using hydrosilylation", *Tsukuba Global Science Week (TGSW), Interdisciplinary Workshop on Science and Patents (IWP2017)*, Tsukuba, Japan, 2017. 09.26, (Poster).

国内会議

1. 麻生 史拓、川島 英久、木島 正志、「共役主鎖にフェノール性水酸基を有するポリ(2,7-カルバゾール)類の合成と物性評価」第 66 回高分子討論会、幕張、2017.5.29-31 (ポスター)
2. 川島 英久、梅沢 真実、齊藤 萌、木島 正志「ヒドロシリル化反応による藻類炭化水素ボトリオコクセンの高分子化」第 66 回高分子討論会、愛媛、2017.9.20-22 (ポスター)
3. 麻生 史拓、川島 英久、木島 正志「ポリ(3,6-ジヒドロキシルカルバゾール)類の合成と性質」第 66 回高分子討論会、愛媛、2017.9.20-22 (ポスター)
4. 彭 文莉、川島 英久、木島正志「液晶性ポリ(4-アルコキシ-9-アルキル-2,7-カルバゾール)類の合成とその性質」第 66 回高分子討論会、愛媛、2017.9.20-22 (ポスター)
5. 姜 聲集、川島 英久、木島 正志、畑 俊充「ヨウ素ドープ処理した γ -シクロデキストリンマイクロキューブの炭素化合物の性質」第 44 回炭素材料学会年会、桐生、2017.12.6-8 (ポスター)
6. 徐 芸 菲、川島 英久、木島 正志、畑 俊充「産生オイ

ルを除去した微細藻類炭化物の物性評価」第44回炭素材料学会年会、桐生、2017.12.6-8 (ポスター)

7. 姜 聲集、木島 正志、川島 英久「 γ -シクロデキストリンマイクロキューブのナノ構造化炭素化反応に及ぼす昇温速度の効果」第98日本化学会春季年会、船橋、2018.3.20-23 (ポスター)
8. Yifei Xu, Hidehisa Kawashima, Masashi Kijima “Separation of component materials from an oil-extracted Botryococcus residue by hydrothermal reaction” 第98日本化学会春季年会、船橋、2018.3.20-23 (ポスター)

(7) ナノグリーン機能分野 機能性カーボンコア

教員 後藤博正 (数理物質系物質工学域 准教授
大学院生 工藤友紀 (数理物質科学研究科 D3
林宏 紀 (数理物質科学研究科 D2)
沈 皓月 (数理物質科学研究科 D2)
江口直人 (数理物質科学研究科 D1)
伊藤蒨杏 (数理物質科学研究科 M2)
山辺康平 (数理物質科学研究科 M2)
菊池亮介 (数理物質科学研究科 M2)
大瀧雅士 (数理物質科学研究科 M1)
廣川翔大 (数理物質科学研究科 M1)

当研究室では導電性高分子ポリアニリンの可能性の開拓を行ってきた。昨年は海洋生物学と導電性高分子の融合研究を行い、海洋生物の形態を転写したポリアニリンコンポジットを合成した。今年度は生体物質をマトリックスとして新しい形態をもつポリアニリンを合成した。また、導電性高分子の伝導を担うキャリアが他の高分子のラジカル重合開始剤として機能する現象を見出した。これは導電性高分子および汎用高分子のラジカル重合の研究分野に新しい反応系を提供するユニークな手法である。今後、新しい高分子医薬品の開発にもつながると思われる。

本研究の終わりとして、「クオラムセンシング」化合物と金属を組み合わせ、**生物活性物質/金属触媒**を作製した。これを用いて白川先生以来のTIMSにおける当グループの永年の目標であった**シス-シソイダル構造をもつヘリカル置換型ポリアセチレン合成とそのキャラクタリゼーション**に辿り着いた。

【 1 】 ポーラロンラジカル重合

導電性を担うポーラロンのラジカルを用いてポリスチレンを合成した。濃度等の条件を変えた比較実験等の結果から、ポリアニリン主鎖内に存在するラジカルがこの反応を推進していることを確認した。ポリスチレン鎖はポリアニリンのN位から伸長していることがわかった。スチレンとアクリロニトリルのコポリマーを得ることもできた。分子量や溶解性、熱的安定性はベンゾイルペルオキシドをラジカル開始剤として用いた一般的なポリスチレンとほぼ同等であり、ラジカル重合によってポリアニリン鎖の周囲にポリスチレン鎖が伸長したことを確認した。これにより新概念「ポー

ロンラジカル重合」を確立した。

【 2 】 高分子液晶中における共役系高分子の電解重合

高分子液晶ヒドロキシプロピルセルロース中で、3,4-エチレンジオキシチオフェンの二量体をプレ配向させた後、電解重合を行い、光学活性を有するポリマーフィルムを作製を行った。生成したポリマー鎖はヒドロキシプロピルセルロースに絡みつくように存在しコンポジットになっていることを確認した。偏光顕微鏡および走査型電子顕微鏡による観察から、平滑な台地と谷の状の特徴的な構造がみられた。

【 3 】 粘土鉱物存在下でのポリアニリン合成

ポリアニリンとモンモリロナイトの有機/無機複合材料を合成した。赤外吸収スペクトル、走査型電子顕微鏡観察、X線回折の結果から、ポリアニリンはモンモリロナイトの層間に存在することを確認した。

【 4 】 クオラムセンシングによるポリマーの合成

分子生物学の分野で微生物コロニー間のコミュニケーション手段となるクオラムセンシング分子を配位子とし、Rh及びPd触媒を用いて、ポリフェニルアセチレンの合成を行った。赤外吸収スペクトル測定と¹H-NMRの測定結果の解析を行い、得られたポリアセチレン中のcis含有量を得た。非常に結晶性の高いcis-cisoid構造を有するPPAを合成、単離した。

<論文>

1. Kohei Yamabe, Hiromasa Goto, Synthesis and surface observation of montmorillonite/polyaniline composites, *Journal of Composite Science*, 2, 15 (2018). doi:10.3390/jcs2010015
2. Kohei Yamabe, Hiromasa Goto, Polarons radical polymerization, Kohei Yamabe, Kuniharu Nakajima, Hiromasa Goto, *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry*, 56, 1099-0518 (2018) DOI: 10.1002/pola.28956
3. Kohei Yamabe, Hiromasa Goto, A new form of polyaniline: Polyaniline whiskers prepared in a bio-surfactant reaction field, *Macromolecular Research* accepted.
4. Kohei Yamabe, Qin Zhiyong, Hiromasa Goto, Electrochemical preparation of poly(1,3-dinaphthyl isothianaphthene), *Futurum*, 28-34- (2018).
5. Toshinori Nagai, Hiromasa Goto, Selective Detection of

Chiral Materials with Electrochemical Method, *Futurum*, 32-33 (2018).

- Naoto Eguchi, Hiromasa Goto, *Electrochemistry of 4,4-Dimethyl-2,2'-bithiophene*, *Futurum*, 20-31 (2018).
- Aohan Wang, Mikihide Demura, Makoto M. Watanabe, Kotaro Ohara, Takanari Kashiwagi, Kazuo Kadowaki, Eiji Kita, Jiuchao Dong, and Hiromasa Goto, *Surface Observation and Magnetism of Oil-Extracted Botryococcus braunii Residues before and after Carbonization*, *C-Carbon Research Journal*, 4, 10 (2018).
- Kohei Yamabe, Hiromasa Goto, *Electrosynthesis of Conducting Polymers in Lecithin Liquid Crystal Reaction Field*, *Fibers and Polymers*, 19, 248-253 (2018). doi.org/10.1007/s12221-018-7692-8
- N. Eguchi, K. Kawabata, Hiromasa Goto, *Synthesis of electro-optically active polymer composite of poly[2,2'-bis(3,4-ethylenedioxythiophene)-alt-fluorene]/hydroxypropyl cellulose showing liquid crystal structure*, *EXPRESS Polymer Letters*, 11, 846-851(2017).
- Yuki Kaitsuka, Hiromasa Goto, *Synthesis of Conductive Cocoon Silk Composites*. *FIBRES & TEXTILES in Eastern Europe* 25, 1(121), 17-22 (2017). DOI: 10.5604/12303666.1227877 (2017.3 publish)
- Hiroki Hayashi, Tomokazu Iseki, Shigeki Nimori, Hiromasa Goto, *Vapour-Induced Liquid Crystallinity and Self-Recovery Mechanochromism of Helical Block Copolymer" for publication*, *Scientific Reports*, 7, 3978 (2017).
- Jiuchao Dong, Shigeki Nimori, Kohsuke Kawabata, Hiromasa Goto, *Induction of helical structure by sesamin, and production of oriented helical polymer with liquid crystal magneto-electrochemical polymerization*, *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry*, 55, 1894-1899 (2017). DOI: 10.1002/pola.28560 (2017.3)
- Aohan Wang, Hiromasa Goto, *Carbon Material with Fibonacci Parastichy Structure*, *Soft*, 5, 1-8 (2017).
- Naoto Eguchi, Kohsuke Kawabata, Hiromasa Goto, *Chiral-Electroactive Low-Bandgap Polymer Composite*, *Journal of Materials Science and Chemical Engineering*, 5, 1-10 (2017).
- Aohan Wang, Mikihide Demura, Makoto Watanabe, Hiromasa Goto, *Hexagonal disk structures obtained during carbonization of Botryococcus braunii residues*, *Journal of Materials Science and Chemical Engineering*, 2017, 5, 22-34
- Naoto Eguchi, Kohsuke Kawabata, Hiromasa Goto, *Lyotropic Liquid Crystal Electrochemical Polymerization of Thiophene-Based Monomers: Polymerization in Cholesteric Liquid Crystal and Columnar Phase*, *Soft*, 5, 9-19 (2017) (2017.6)
- Naoto Eguchi, Kohsuke Kawabata, Hiromasa Goto, *Electrochemical Polymerization of 4-Dimethyl-2,2'-Bithiophene in Concentrated Polymer Liquid Crystal Solution*, *Journal of Materials Science and Chemical Engineering*, 5, 64-70 (2017).

<学会発表>

国際会議

- Takuya Yonehara, Hiroki Hayashi, Hiromasa Goto, *Helical alignment of semiconducting random copolymer films enabled by electrochemical polymerization in cholesteric liquid crystal*, *Polymers: Design, Function and Application*, 21-23 March 2018, Barcelona. Barcelona Univ. (Poster)
- Masashi Otaki, Hiromasa Goto, *Synthesis of photo-responsive optically active conjugated polymers and photo-reaction field*, 255th ACS national meeting & exposition. [Session] [POLY] Division of Polymer Chemistry, Photochemistry & Polymers, Hall E, Ernest N. Morial Convention Center, New Orleans, USA, 3.20. 18:00-20:00 (Poster)
- Aohan Wang, Hiromasa Goto, *A carbon material with Fibonacci structure*, IOP Publishing Young Researchers' Meeting: Frontiers in Fundamental and Applied Physics, Auditorium 5F, Faculty of Science - Chemistry Building, University of Tokyo (Hongo Campus), 2017.2.21.(Poster)
- Aohan Wang, Mikihide Demura, Makoto M. Watanabe, Hiromasa Goto, *Carbon Hexagon*, IOP Publishing Young Researchers' Meeting: Frontiers in Fundamental and Applied Physics, Auditorium 5F, Faculty of Science - Chemistry Building, University of Tokyo (Hongo Campus), 2017.2.21.(Poster)
- Hiroki Hayashi, Hiromasa Goto, "One-handed helically stacked polymer films prepared in chiral liquid crystalline medium", *Chirality 2017 ISCD-29* (Waseda University, International Conference Center, July 10, 2017) (Poster)
- Marcel Albrecht, Naoya Sakamoto, Masaki Yamamura, Markus Albrecht, Tatsuya Nabeshima, "Synthesis of novel dipyrin ligands and their application as sensor systems for rare earth metals " *245th ACS National Meeting & Exposition*, New Orleans, USA, 2013.04.7-11 (poster)

国内会議

- 林 宏紀, 二森茂樹, 後藤博正, 蒸気や圧力を"可視化"する 革新的薄膜ポリマーセンサの開発, SAT テクノロジー・ショーケース 2018 (つくば国際会議場, 2018.2.8)(口頭、ポスター)
- 菊池 亮介, 後藤博正, らせん物質および磁場を利用したナノ物質のコントロール, SAT テクノロジー・ショーケース 2018 (つくば国際会議場, 2018.2.8)(口頭、ポスター)
- 廣川 翔大, 後藤博正, 植物繊維からつくった「電波を吸いとるカーボンコイル」 SAT テクノロジー・ショーケース 2018 (つくば国際会議場, 2018.2.8)(口頭、ポスター)
- 山辺 康平, 後藤博正, 微生物間の意思伝達物質 autoinducer を配位子とした触媒の検討 SAT テクノロジー・ショーケース 2018 (つくば国際会議場,

- 2018.2.8)(口頭、ポスター)
5. 大瀧雅士、後藤博正、光でかたちを変えるらせん高分子染料の開発 SAT テクノロジー・ショーケース 2018 (つくば国際会議場, 2018.2.8)(口頭、ポスター)
 6. (invited) 後藤博正、直線偏光二色性をもつ π 共役系高分子の液晶中磁場電解合成、2018.3.17-20 (3.19発表)、応用物理学会、早稲田大学
 7. 大瀧雅士、後藤博正、有機らせん磁性高分子の合成、応用物理学会・磁気科学研究会、2017年度研究会、東京(秋葉原) 首都大学東京、秋葉原サテライトキャンパス: 2017年11月29日(poster)
 8. 沈 皓月、後藤博正、アルキル側鎖で修飾したポリアニリンの性質、応用物理学会・磁気科学研究会、2017年度研究会、東京(秋葉原) 首都大学東京、秋葉原サテライトキャンパス, 2017年11月29日(poster)
 9. 林宏紀、後藤博正、液晶性および磁場配向性を誘起する棒状らせん高分子、応用物理学会・磁気科学研究会 2017年度研究会、東京(秋葉原) 首都大学東京、秋葉原サテライトキャンパス, 2017年11月29日(poster)
 10. 林宏紀、二森茂樹、後藤博正、溶媒蒸気誘起液晶性と異方的磁気感受率を有するらせん高分子の磁場配向、(Magnetic orientation of helical polymers with vapor-induced liquid crystallinity and anisotropic magnetic susceptibility), 第 12 回日本磁気科学会年会11月14 日(火) 京都大学百周年時計台記念館
 11. 林 宏紀、二森茂樹、後藤博正、溶媒蒸気や圧力に対しクロミズムを示す刺激応答性ポリマー材料の開発、第7回CSJ化学フェスタ2017(タワーホール船堀, 2017.10.17)
 12. 大瀧雅士、後藤博正、“主鎖にアゾベンゼンを有した光学機能性ポリマーの合成” 第7回CSJ化学フェスタ2017(タワーホール船堀, 2017.10.17)(poster)
 13. 林 宏紀、二森茂樹、後藤博正、“蒸気・圧力に対する高感度センサーを指向した刺激応答性半導体ポリマーの開発、第12回有機デバイス・物性院生研究会(京都大学 北部キャンパス 理学研究科セミナーハウス, 2017.7.27)
 14. Masashi Otaki, Hiromasa Goto, Synthesis of azobenzene main-chain type polymers
Tsukuba Global Science Week-Interdisciplinary Workshop on Science and Patents 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Sep 26, 2017 (poster).
 15. Kohei Yamabe, Nobuhiko Nomura, Hiromasa Goto, Coupling reaction of conjugated polymers by quorum sensing catalysts, Tsukuba Global Science Week-Interdisciplinary Workshop on Science and Patents 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Sep 26, 2017 (poster).
 16. Naoto Eguchi, Kohsuke Kawabata, Hiromasa Goto, Electrochemically synthesized conjugated polymer films showing color and optical activity change reversibly with application of voltage, Tsukuba Global Science Week-Interdisciplinary Workshop on Science and Patents 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Sep 26, 2017 (poster).
 17. Haoyue Shen, Hiromasa Goto, Chiral Sources Exhibit Opposite Helical Twisting Power by Different Chemical Modifications, Tsukuba Global Science Week-Interdisciplinary Workshop on Science and Patents 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Sep 26, 2017 (poster).
 18. Hiroki Hayashi, Shigeki Nimori, Hiromasa Goto, Flexible Semiconducting Polymers: Molecular Conformation and Aggregation Changes upon Solvent Vapor and Mechanical Stress, Tsukuba Global Science Week-Interdisciplinary Workshop on Science and Patents 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Sep 26, 2017(poster).
 19. Takuya Yonehara, Hiroki Hayashi, Hiromasa Goto, Synthesis of a meta-substituted poly(phenyl isocyanides), Tsukuba Global Science Week-Interdisciplinary Workshop on Science and Patents 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Sep 26, 2017 (poster).
 20. Shota Hirokawa, Hiromasa Goto, Creation of helical carbon coil using with plant helical vessels, Tsukuba Global Science Week-Interdisciplinary Workshop on Science and Patents 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Sep 26, 2017 (poster).
 21. Roan Ito, Hiromasa Goto, Synthesis of liquid crystalline conjugated polymers with optical activity prepared by Migita-Kosugi-Stille type polycondensation, Tsukuba Global Science Week-Interdisciplinary Workshop on Science and Patents 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Sep 26, 2017 (poster).
 22. Ryosuke Kikuchi, Hiromasa Goto, Making fullerene nanowire by using helical liquid crystalline polyisocyanide, Tsukuba Global Science Week-Interdisciplinary Workshop on Science and Patents 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Sep 26, 2017 (poster).
 23. Kohei Yamabe, Hiromasa Goto, Radical Polymerization by Conducting Polymer Polyaniline, Tsukuba Global Science Week, Sep 25, 2017 (poster).
 24. Masashi Otaki, Hiromasa Goto, Synthesis of "chiral magnetic" conjugated polymer bearing phenoxy radical, Tsukuba Global Science Week, Sep 25, 2017 (poster).
 25. Haoyue Shen, Hiromasa Goto, A Liquid Crystal Shows Chessboard-like Texture on Polarizing Microscope, Tsukuba Global Science Week, Sep 25, 2017 (poster).
 26. Naoto Eguchi, Kohsuke Kawabata, Hiromasa Goto, Electro-Optical Active Conjugated Polymer Film Synthesized in Hydroxypropyl Cellulose, Tsukuba Global Science Week, Sep 25, 2017 (poster).
 27. Shota Hirokawa, Hiromasa Goto, Synthesis of Conductive Polymer Composite Using With Helical Plant Structure, Tsukuba Global Science Week, Sep 25, 2017 (poster).
 28. Hiroki Hayashi, Shigeki Nimori, Hiromasa Goto, Multi-responsive chromic block copolymers: solvent

- vapor- / mechanical stress-induced color changes, Tsukuba Global Science Week, Sep 25, 2017 (poster).
29. Roan Ito, Hiromasa Goto, Synthesis of a series of conjugated polymers having optical activity and liquid crystallinity, Tsukuba Global Science Week, Sep 25, 2017 (poster).
 30. Ryosuke Kikuchi, Hiroki Hayashi, Hiroamsa Goto, Self-assembly of Fullerene into Nanowire in the Presence of Polyisocyanide, Tsukuba Global Science Week, Sep 25, 2017 (poster).
 31. 山辺 康平、後藤 博正、ポリアニリン分子内ラジカルカチオンによる重合反応、第 66 回高分子討論会、2017 年 9 月 20 日 (水) ~22 日 (金)、愛媛大学 城北キャンパス (poster)
 32. 大瀧 雅士、後藤 博正、キラル側鎖を有するアゾベンゼン主鎖型ポリマーの合成、第66回高分子討論会、2017年9月20日 (水) ~22日 (金)、愛媛大学 城北キャンパス (poster)
 33. 山辺 康平、野村 暢彦、後藤 博正、クオラムセンシング化合物をベースとした共役系高分子合成触媒の開発、第66回高分子討論会、2017年9月20日 (水) ~22日 (金)、愛媛大学 城北キャンパス (poster)
 34. 伊藤 蒨杏、後藤 博正、ピネン側鎖による光学活性を持つ共役系高分子の合成、第66回高分子討論会、2017年9月20日 (水) ~22日 (金)、愛媛大学 城北キャンパス (poster)
 35. 廣川 翔大、後藤 博正、植物の螺旋道管を用いたヘリカルカーボンコイルの作成、第 66 回高分子討論会、2017 年 9 月 20 日 (水) ~22 日 (金)、愛媛大学 城北キャンパス (poster)
 36. 林 宏紀、二森 茂樹、後藤 博正、溶媒蒸気誘起液晶性および異方的磁気感受率を有するらせん高分子、第 66 回高分子討論会、2017 年 9 月 20 日 (水) ~22 日 (金)、愛媛大学 城北キャンパス (poster)
 37. 大瀧 雅士、後藤 博正、キラル磁性を有するチオフェン誘導体の合成、第66回高分子討論会、2017年9月20日 (水) ~22日 (金)、愛媛大学 城北キャンパス (poster)
 38. 山辺 康平、後藤 博正、共役系高分子ポリアニリン複合材料の合成と基礎物性、第66回高分子討論会、2017年9月20日 (水) ~22日 (金)、愛媛大学 城北キャンパス (口頭)
 39. z林 宏紀、二森茂樹、後藤 博正、共役系高分子と主鎖らせん高分子からなる溶媒蒸気・機械刺激・磁場応答性材料の開発、第66回高分子討論会、2017年9月20日 (水) ~22日 (金)、愛媛大学 城北キャンパス (口頭)
 40. 大瀧 雅士、後藤 博正、フェノキシラジカルを有するキラル磁性共役系ポリマーの合成と磁気的性質、第66回高分子討論会、2017年9月20日 (水) ~22日 (金)、
 - 愛媛大学 城北キャンパス (口頭)
 41. 後藤博正、第 66 回高分子年次大会、英語セッション「高分子機能」座長 2017.5.30
 42. 菊池亮介、林宏紀、二森茂樹、後藤博正、液晶性ポリイソシアニドによるフラーレンの自発的ナノワイヤー化および磁場配向、第 66 回高分子年次大会、千葉県千葉市幕張メッセ、2017 年 5 月 31 日 (ポスター)
 43. 江口直人、後藤博正、導電性高分子/高分子液晶 (合成金属液晶ポリマーアロイ) の光学特性、第 66 回高分子年次大会、千葉県千葉市幕張メッセ、2017 年 5 月 31 日 (口頭)
 44. 山辺康平、後藤博正、ヒドロキシプロピルセルロース液晶中で電解重合した導電性高分子薄膜とその性質、第 66 回高分子年次大会、千葉県千葉市幕張メッセ、2017 年 5 月 29 日 (ポスター)
 45. 山辺康平、後藤博正、レシチン液晶構造内でのポリアニリンの合成、第 66 回高分子年次大会、千葉県千葉市幕張メッセ、2017 年 5 月 29 日 (ポスター) 山辺康平、後藤博正、ポリアニリン分子内ラジカルによるスチレンの重合、第 66 回高分子年次大会、千葉県千葉市幕張メッセ、2017 年 5 月 31 日 (ポスター)
 46. 大瀧雅士、後藤博正、アゾベンゼン主鎖型光学活性ポリマーの合成、第 66 回高分子年次大会、千葉県千葉市幕張メッセ、2017 年 5 月 31 日 (ポスター)
 47. 大瀧雅士、後藤博正、チオフェン誘導体を用いた光学活性らせん磁性体の合成、第 66 回高分子年次大会、千葉県千葉市幕張メッセ、2017 年 5 月 30 日 (ポスター)
 48. 廣川 翔大、後藤 博正、らせん構造表面上への導電性高分子化合物の合成、第 66 回高分子年次大会、千葉県千葉市幕張メッセ、2017 年 5 月 31 日 (ポスター)
 49. Hiroki Hayashi, Tomokazu Iseki, Shigeki Nimori, Hiromasa Goto, Vapor-Induced Liquid Crystallinity of Polythiophene-b-Polyphenylisocyanide Block Copolymer Film, 第 66 回高分子年次大会、千葉県千葉市幕張メッセ、2017 年 5 月 30 日 (英語口頭)
 50. 林 宏紀、井関 友和、後藤 博正、自発的回復メカノクロミズムを有する π 共役-主鎖らせんブロック共重合体、第 66 回高分子年次大会、千葉県千葉市幕張メッセ、2017 年 5 月 30 日 (ポスター)

(8) ナノグリーン機能分野 エネルギー変換コア

教員 丸本一弘 (数理物質系物質工学域 准教授)
大学院生 今野俊生 (数理物質科学研究科 D1)
大澤文也 (数理物質科学研究科 M2)
渡邊孝弘 (数理物質科学研究科 M2)
浅井遥香 (数理物質科学研究科 M1)
勝俣潤哉 (数理物質科学研究科 M1)
神谷晨平 (数理物質科学研究科 M1)
薛 冬 (数理物質科学研究科 M1)
常友菜穂 (数理物質科学研究科 M1)

エネルギー変換コアでは光電、熱電、化学物質への変換など各種のエネルギー変換材料探索、変換メカニズムの研究およびエネルギー変換デバイスの開発を行っている。太陽光発電材料に関する研究を主なテーマに取り上げ結晶欠陥や界面の電子構造、劣化機構に関する研究を進めた。

【 1 】 ペロブスカイト太陽電池の電荷状態の直接観測と劣化機構の解明

ペロブスカイト太陽電池は高効率かつ低コストで作製できる次世代太陽電池として現在注目されている。変換効率は22%を超え、現在主流となっているシリコン系太陽電池に匹敵する性能を達成している。実用化に向けては高効率化以外に素子の劣化機構を解明し、長寿命の素子を作製することが重要である。素子性能の劣化原因としては、外因的要因と内因的要因がある。外因的な要因としては、酸素や水による影響があり、外因的な要因が引き起こす劣化の研究は盛んに行われている。一方、内因的な劣化の原因としては素子動作中において、ペロブスカイト中のヨウ素が移動して欠陥を生じるといった議論がされているが、未だ内因的な劣化については未解明な部分が多い。本研究ではペロブスカイト太陽電池の劣化機構の解明のため、光誘起 ESR 法を用いて素子動作中のペロブスカイト太陽電池の素子内部の電荷状態を観測し、素子の劣化機構の解明を行った。

光誘起 ESR 法は光生成された電荷のスピンを観測する手法であり、得られるパラメーター g 値からは分子種、線幅からはスピンの状態、積分強度からはスピンの数を得られる。本研究では、素子動作状態で疑似太陽光を照射しながら ESR 信号を観測する手法により、電荷蓄積と素子特性の相関の過渡応答特性を研究した。

素子の光活性層に $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 構造のペロブスカイト、正孔輸送層に spiro-OMeTAD (2,2',7,7'-Tetrakis-(N,N-di-4-methoxyphenylamino)-9,9'-spirobifluorene) を用い、quartz/ITO (150 nm)/compact TiO_2 (20 nm)/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (~300 nm)/spiro-OMeTAD (~300 nm)/Au (100 nm) 構造の素子を作製した。素子性能の向上のため、spiro-OMeTAD には Li-TFSI (lithium bis(trifluoromethylsulfonyl)-imide)、TBP (4-tert-butylpyridine)、FK102 (tris(2-(1H-pyrazol-1-yl)pyridine)cobalt(II) di[hexafluorophosphate]) がドーピングされている。素子を ESR 試料管に N_2 雰囲気下で封入した後、素子動作状態で ESR 信号および素子特性の同時測定を疑似太陽光照射下で行った。また、得られた信号の解析を行うために素子の低温測定および単層試料 (ITO/spiro-OMeTAD) や積層試料 (ITO/compact $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{spiro-OMeTAD}$) の測定を行った。

ペロブスカイト太陽電池を短絡状態及び開放状態に保持し、ESR 測定と素子性能の同時測定を行った。その結果、光照射時間の増加に伴って信号強度が大きくなり、蓄積電荷数が増加していくことが観測された。また、得られた g 値は、ITO/spiro-OMeTAD の単膜試料から測定された値や先行研究の値と一致していることから、素子において電荷蓄積が生じている材料は正孔輸送材料である spiro-OMeTAD であると同定できた。また、他の材料は低温でなければ ESR 観測できないため、素子を疑似太陽光照射後に 4 K に冷却し測定することで他の層での電荷蓄積の有無を測定した。その結果、spiro-OMeTAD 以外の信号は石英基板しか観測されなかったため電荷蓄積は spiro-OMeTAD のみで生じていることが確認された。

得られた ESR 信号からスピン数 N_{spin} を導出した。短絡状態保持の場合は短絡電流密度 J_{sc} 、開放状態保持の場合は開放電圧 V_{oc} との比較を行った。短絡状態では J_{sc} が光照射直後に急激に低下したのち緩やかに増加し続けたことから電荷蓄積によって J_{sc} が変化することが示された。一方 V_{oc} は光照射直後から緩やかに減少し続けたことから電荷蓄積によって V_{oc} の減少が引き起こされていることが観測された。以上の結果より、ペロブスカイ

ト太陽電池の正孔輸送層中の電荷状態が素子特性に大きな影響を与えることが立証された。

今後これらの電荷状態を制御することで長寿命かつ高効率な素子の開発が発展することが期待される。

<論文>

1. T. Konno, T. Wakahara, K. Miyazawa and K. Marumoto, "Dramatically improved tensile strength of fullerene needle-like crystals", *New Carbon Materials*. (in press)
2. Y. Sakurai, D. Matsumoto and K. Marumoto, "Electrically controlled dimensionality of magnetic systems in organic materials", *Applied Magnetic Resonance*. (in press)
3. M. Bharti, A. Singh, S. Samanta, A. K. Debnath, K. Marumoto, D. K. Aswal, K. P. Muthe, S. C. Gadkari, "Elucidating the mechanisms behind thermoelectric power factor enhancement of poly(3,4-ethylenedioxythiophene):poly(styrenesulfonate) flexible films", *Vacuum*, **153**, 238-247 (2018).
4. G. Sato, D. Son, T. Ito, F. Osawa, Y. Cho and K. Marumoto, "Direct Observation of Radical States and the Correlation with Performance Degradation in Organic Light-Emitting Diodes During Device Operation", *Physica Status Solidi A*, **215**(7), 1700731-1-1700731-10 (2018). Cover Picture
5. K. Marumoto, T. Fujimori and Y. Yamaki, "Investigation of Degradation Mechanism of Pentacene/C₆₀ Heterojunction Solar Cells", *Journal of Photopolymer Science and Technology*, **30**(5), 569-575 (2017).
6. T. Kusumi, T. Kuwabara, K. Fujimori, T. Minami, T. Yamaguchi, T. Taima, K. Takahashi, T. Murakami, V. A. S. A. Rachmat and K. Marumoto, "Mechanism of Light Soaking Effect in Inverted Polymer Solar Cells With Open-Circuit Voltage Increase", *ACS Omega*, **2**(4), 1617-1624 (2017).
7. K. Marumoto, A. Kosuga, D. Liu, O. Takeuchi and H. Shigekawa, "Dependence of the device performance of polymer solar cells on the insertion of metal nanoparticle layers at the electron-collecting electrodes", *Electrochemistry*, **85**(5), 272-275 (2017).

<学会発表>

国際会議

1. <Invited> K. Marumoto, "Direct Observation of Charge States in Organic and Perovskite Solar Cells During Device Operation Using Electron Spin Resonance Spectroscopy", BIT's 4th Annual World Congress of Smart Materials-2018 (WCMSM-2018), Osaka, Japan, March 6-8, 2018.
2. <Invited> K. Marumoto, "Electrically controllable spin states in single-layer graphene: direct observation by ESR spectroscopy", 15th Annual Congress on Materials Research and Technology (Materials Research 2018), Holiday Inn

Paris, Paris, France, February 19, February 19-20, 2018.

3. K. Marumoto, M. Namatame, Y. Ogomi, S. Hayase, "Direct Observation of dramatically enhanced hole formation in a perovskite-solar-cell material spiro-OMeTAD by Li-TFSI doping", Asia-Pacific Hybrid and Organic Photovoltaics conference (AP-HOPV 18), Kitakyusyu, Japan, January 28-30, 2018.
4. <Invited> K. Marumoto, "Direct Observation of Charge States in Perovskite Solar Cells using Electron Spin Resonance Spectroscopy", Global Research Efforts on Energy and Nanomaterials (GREEN 20017), GIS Tech Convention Center, Taipei, Taiwan, December 21-24, 2017.
5. K. Marumoto, "Electrically Controllable Spin States and ESR Spectroscopy in Single-Layer Graphene", Global Research Efforts on Energy and Nanomaterials (GREEN 20017), GIS Tech Convention Center, Taipei, Taiwan, December 21-24, 2017.
6. <Keynote> K. Marumoto, "Charge states and ESR spectroscopy in perovskite solar cells and their materials", International Workshop on Advanced Materials and Device Technology (IWAMD-2017), Anna University, Chennai, India, November 22-24, 2017.
7. <Invited> K. Marumoto, "Electron spin resonance (ESR) study of single-layer graphene: basics of ESR and its application along with interpretation", Pure and Applied Chemistry Seminar, University of Kota, Kota, India, November 21, 2017.
8. <Plenary> K. Marumoto, "Direct observation of electrically controllable spin states in single-layer graphene using electron spin resonance spectroscopy", 2nd World Congress and Expo on Graphene & 2D Materials, H4 Hotel Frankfurt Messe, Frankfurt, Germany, November 6-7, 2017.
9. <Invited> K. Marumoto, "Investigation of the Degradation Mechanism of Pentacene/C₆₀ Heterojunction Solar Cells and the Improvement of Lifetimes by Inserting Buffer Layers", The 34th International Conference of Photopolymer Science and Technology (ICRST-34), International Conference Hall Makuhari Messe, Chiba, Japan, June 26-29, 2017.

国内会議

1. 常友菜穂、井口翔平、ウォン ユサン、ホ シネ、ジョン イェスル、若山裕、丸本一弘、「MoS₂ 薄膜を用いた電気二重層トランジスタの ESR 分光研究」、第 65 回応用物理学会春季学術講演会、東京、2018.3.17-20
2. 薛冬、神谷晨平、斎藤慎彦、尾坂格、丸本一弘、「光誘起 ESR 分光を用いた PTzNTz 高分子太陽電池における電荷状態の解明」、第 65 回応用物理学会春季学術講演会、東京、2018.3.17-20
3. 神谷晨平、渡邊孝弘、斎藤慎彦、尾坂格、丸本一弘、「PNTz4T 高分子太陽電池における電荷蓄積状態の光誘起 ESR 分光」、第 65 回応用物理学会春季学術講演会、東京、2018.3.17-20
4. 勝俣潤哉、大澤文也、佐藤豪、三輪一元、小野新平、

- 丸本一弘、「発光電気化学セルの電荷状態の ESR 直接観測と素子動作機構の微視的解明」、第 65 回応用物理学会春季学術講演会、東京、2018.3.17-20
5. 浅井遥香、薛冬、神谷晨平、桑原純平、神原貴樹、丸本一弘、「高分子太陽電池の特性に与える高分子末端構造の効果の光誘起 ESR 研究」、第 65 回応用物理学会春季学術講演会、東京、2018.3.17-20
 6. 常友菜穂、井口翔平、ウォン ユサン、ホ シネ、ジョン イェスル、若山裕、丸本一弘、「MoS₂ 薄膜電界効果トランジスタの ESR 研究」、第 56 回電子スピンスサイエンス学会年会、東京、2017.11.2-4.
 7. 神谷晨平、渡邊孝弘、斎藤慎彦、尾坂格、丸本一弘、「p 型半導体 PNTz4T を用いた逆構造型有機薄膜太陽電池の光誘起 ESR 分光」、第 56 回電子スピンスサイエンス学会年会、東京、2017.11.2-4.
 8. 浅井遥香、薛冬、神谷晨平、斎藤慎彦、神原貴樹、丸本一弘、「光誘起 ESR 分光を用いた高分子太陽電池における電荷蓄積状態の解明」、第 56 回電子スピンスサイエンス学会年会、東京、2017.11.2-4.
 9. 勝俣潤哉、大澤文也、佐藤豪、三輪一元、小野新平、丸本一弘、「発光電気セルの電荷状態の ESR 分光研究」、第 56 回電子スピンスサイエンス学会年会、東京、2017.11.2-4.
 10. 薛冬、神谷晨平、斎藤慎彦、尾坂格、丸本一弘、「高安定性高分子太陽電池における電荷状態の光誘起 ESR 分光」、第 56 回電子スピンスサイエンス学会年会、東京、2017.11.2-4.
 11. <招待講演> 丸本一弘、「有機半導体光デバイスにおける電荷状態と素子性能の劣化機構のマイクロ解析」、第 66 回高分子討論会、松山、2017.9.20-22
 12. <招待講演> 丸本一弘、「電子スピン共鳴分光を用いた有機エレクトロニクス材料およびデバイスのマイクロ解析と素子特性向上」、住友化学講演会、つくば、2017.7.24

(9) ナノグリーン機能分野 分子光機能コア

教員 新井達郎 (数理物質系化学域 教授)
西村賢宜 (数理物質系化学域 准教授)
百武篤也 (数理物質系化学域 講師)

大学院生 松本尚人 (数理物質科学研究科 D3)
櫻井弘哉 (数理物質科学研究科 D3)
東ヶ崎慶 (数理物質科学研究科 M2)
篠田知幸 (数理物質科学研究科 M2)
石田優佳 (数理物質科学研究科 M2)
佐藤勇磨 (数理物質科学研究科 M2)
清水桂花 (数理物質科学研究科 M2)
高山 塊 (数理物質科学研究科 M2)
宮崎誠太 (数理物質科学研究科 M2)
間宮倫孝 (数理物質科学研究科 M2)

分子光機能コアでは光と物質の相互作用、並びにそれによって引き起こされる化学反応の機構の解明、機能性の研究を行っている。芳香族-ウレア化合物を中心とする光応答性化合物を合成し、レーザー分光を用いることで光化学反応ダイナミクスの追跡を行う。

【1】光応答性化合物の一つであるアントラセン-ウレア化合物(1PUA)を使ったアニオンセンシングの反応機構は次の図に示すスキームにしたがっていることを明らかにしてきた。

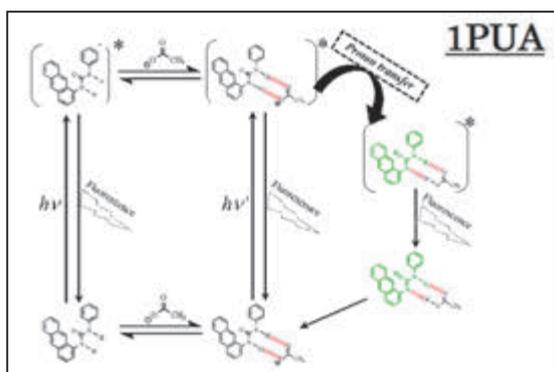
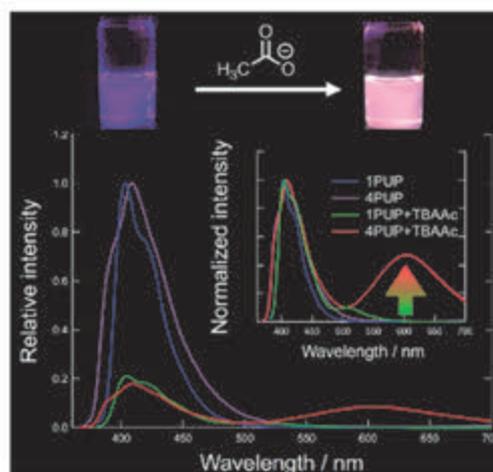


図1; 1PUA とアニオンの基底状態および励起状態における反応機構

ウレア化合物はアニオンと選択的に結合することによって会合体を形成し、この会合体を光励起することで励起状態分子間プロトン移動が起こり、生成した互変異性体から異なる蛍光が得られる。

【2】ピレン-ウレア化合物における蛍光量子収率の大幅な改善が見られ、アニオンセンサーとして視認性の高い化合物を作り出すことに成功した。



<論文>

1. Matsumoto Hisato, Ikeda Satomi, Tosaka Tekeyuki, Nishimura Yoshinobu, Arai Tatsuo : Kinetic analysis of tautomer forms of aromatic-urea compounds with acetate ions: solvent effect of excited state intermolecular proton transfer, *Photochemical & photobiological sciences*, DOI: 10.1039/C8PP00018B.
2. Matsumoto Hisato, Nishimura Yoshinobu, Arai Tatsuo : Excited-state intermolecular proton transfer dependent on the substitution pattern of anthracene-diurea compounds involved in fluorescent ON1-OFF-ON2 response by the addition of acetate ions, *Org. Biomol. Chem.*, 15, 6575-6583 (2017)
3. Matsumoto Hisato, Nishimura Yoshinobu, Arai Tatsuo : Fluorescence Sensor with A New ON1-OFF-ON2 Switching Mechanism Using the Excited State Intermolecular Proton Transfer Reaction of An Anthracene-diurea Compound, *Photochem. Photobiol.*, 93, 1187-1192 (2017)

4.3 競争的資金獲得状況（平成 29 年度）

研究者	予算区分	種目	研究課題	予算額 (千円)	備考
中村潤児	受託研究	(独)科学技術振興機構(ACT-C)	エネルギー選別型反応制御とナノカーボン担持触媒設計	15,000	
中村潤児	受託研究	NEDO 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト	藻類産生油のクラッキング	1,000	
中村潤児	科学研究費補助金	基盤研究(A)	窒素ドーブカーボン触媒の機能解明とボトムアップ合成	11,700	
中村潤児	科学研究費補助金	特別研究員奨励費	3D グラフェンおよび非金属ナノ粒子からなる白金フリー燃料電池電極触媒	500	
中村潤児	研究助成	TIA 連携プログラム調査研究(かけはし)	白金フリー燃料電池カーボン触媒イノベーション	400	
近藤剛弘	科学研究費補助金	基盤研究(B)	ホウ素を基盤とした新規 2 次元化合物の創成	4,400	
近藤剛弘	科学研究費補助金	新学術領域研究(公募研究)	単層ボロンシートの合成	1,800	
近藤剛弘	科学研究費補助金	挑戦的萌芽研究	超高感度ヘテロダイン走査トンネル分光の実現	1,400	
神原貴樹	科学研究費補助金	基盤研究(B)	繰り返し構造秩序の制御を可能にする酸化クロスカップリング重合法の開発	6,400	
神原貴樹	受託事業費	JSR(株)	機能性色素の開発に関する学術指導	300	
神原貴樹	共同研究	東京工業大学(物質・デバイス領域共同研究拠点)	藻類産生油成分からプラスチックを合成する錯体触媒に関する研究	100	
桑原純平	科学研究費補助金	新学術領域研究(研究領域提案型)	三成分連結反応を用いた多様な π 電子系の構築	2,000	
桑原純平	科学研究費補助金	基盤研究(C)	共役高分子材料の開発を加速する効率的合成	1,900	
桑原純平	共同研究	日立化成	アリアルアミンポリマ合成に関する研究	600	
桑原純平	研究助成	フジクラ財団	有機顔料の特性を活かした有機半導体材料の創製	800	
鍋島達弥	研究助成	Nanoview(株)	機能性色素材料の開発	800	
鍋島達弥	研究助成	三菱財団	らせん型ジピリン典型元素錯体を利用した不斉情報発信分子素子の創製	2,700	
鍋島達弥	共同研究	太陽油脂(株)エサンデス	ハンドクリームの成分分析	534.4	
中村貴志	科学研究費補助金	新学術領域	非対称化を伴う配位駆動自己集積による複雑巨大分子の構築と機能開拓	2,000	
中村貴志	科学研究費補助金	若手(B)	置換活性な配位サイトを集積したナノ空間の創出と特異的分子変換	1,700	
中村貴志	研究助成	徳山科学技術振興財団	配位結合による分子多点認識に基づく環状分子の波状積層体構造と機能開拓	2,000	
中村貴志	研究助成	日産化学工業(株)	剛直な環状骨格を有する多重修飾シクロデキストリンの合成と分子認識場の創出	500	
松岡亮太	科学研究費補助金	研究活動スタート支援	可逆に剛直性が変化する金属錯体ナノワイヤ・ナノシートの開発	1,100	
松岡亮太	研究助成	マツダ財団	鎖の撚りあわせにより可逆に剛直性が変化する機能性ナノシートの開発	1,500	
松岡亮太	研究助成	小笠原科学技術振興財団	分子のねじれで可逆に機能を変えるナノワイヤ・ナノシートの開発	1,000	
山本泰彦	科学研究費補助金	基盤研究(B)	水分子によるヘム核酸複合体の酸化触媒作用調節機構の解明と機能設計への応用	3,300	
山本泰彦	日本学術振興会	二 国 間 交 流 事 業 共 同 研 究 / セ ミ ナ ー	ヘム- DNA 複合体における酸化触媒作用発現機構の解明と新規機能性核酸の創製	2,400	
山本洋平	科学研究費補助金	基盤研究(A)	光機能性ポリマー球体の高次連結による光学メタマテリアルの開発	8,500	
山本洋平	科学研究費補助金	国際共同研究加速基金	発光性および強誘電性ポリマーナノ粒子による新しいフォトニック結晶の構築	6,500	
山本洋平	科学研究費補助金	新学術領域研究(公募研究)	様々な励起プロセスを介した π 電子球体への発光閉じ込めと共鳴発光の変調	2,900	

山本洋平	研究助成	旭硝子財団若手継続 Grant	導電性高分子マイクロ共振器への電荷注入と共鳴電界発光	1,500	
山本洋平	研究助成	かけはし	最先端光材料・光テクノロジー国際研究拠点形成に向けた TIA 連携	1,500	
山本洋平	研究助成	筑波大学・DAAD パートナシッププログラム	エネルギー変換や光活性メタマテリアルのための革新的ナノ材料の開発	741	
山本洋平	研究助成	プレ戦略イニシアティブ	光と物質・生命科学のアンサンブルによる新現象の発掘と解明	500	
辻村清也	科学研究費補助金	研究成果最適展開支援プログラム (A-STEP)	バイオ燃料電池を搭載したウェアラブルヘルスケアデバイスの創成	7,693	
辻村清也	科学研究費補助金	基盤研究(B)	運動時の汗に含まれる糖・乳酸・電解質の自己駆動リアルタイムモニタリングシステム	700	
辻村清也	科学研究費補助金	挑戦的萌芽研究	メタン生成触媒を用いた革新的バイオガス生産システムの創製	1,000	
辻村清也	科学研究費補助金	挑戦的萌芽研究	バイオ燃料電池用電極の分子デザイン	500	
辻村清也	平成 29 年度徳山科学技術振興財団	国際交流助成		250	
辻村清也	共同研究		電気化学式バイオセンサに関する研究	1,200	
辻村清也	寄附金		臨床診断用酵素の電気化学的評価および評価	900	
辻村清也	寄附金		バイオ燃料電池の研究に対する研究助成	500	
辻村清也	共同研究		微生物燃料電池高効率化のための電極修飾技術の開発	982	
辻村清也	学術指導			460	
守友 浩	科学研究費補助金	基盤研究(A)	イオン注入に伴い局所構造をその構造発展の解明	5,800	
守友 浩		TIA かけはし	温度変化で発電するモバイル発電器	800	
守友 浩		プレ戦略	次世代物質・デバイス戦略開発拠点	2,000	
守友 浩	委任経理金	矢崎財団	配位高分子を用いたナトリウムイオン電池材料の開発 (H27-J29)	2,000	
守友 浩	委任経理金	谷川財団	電池型熱発電素子の開発と排熱利用 (h28-h29)	21,200	
丹羽秀治	科学研究費補助金	若手(B)	非白金燃料電池触媒の活性点分布の解明	2,100	
丹羽秀治		TIA かけはし	放射光 X 線解析に基づく革新的クリーンエネルギー材料の設計へ向けた調査研究	300	
岡田 晋	科学研究費補助金	新学術領域研究	計算科学による原子層物質の新物性デザインとデバイス設計指針の提示	2800	
都倉康弘	科学研究費補助金	基盤研究(A)	量子ホールエッジチャネルの非平衡電荷ダイナミクス	1,207	
都倉康弘	研究助成	チーム型研究 (CREST)	光子-電子スピン量子変換理論	10,000	
西堀英治	科学研究費補助金	挑戦的萌芽研究	弾性・非弾性散乱データ同時解析による計測物質科学の創成	2,700	
西堀英治	科学研究費補助金	新学術領域研究 (公募研究)	先端 X 線利用による回折結晶学の再構築	2,900	
西堀英治	受託研究	二国間交流事業共同研究	先端量子ビームによるエネルギー材料の構造科学研究	5,000	
西堀英治	助成金	公益財団法人カシオ科学振興財団	粒子内原子配列の実空間モデリングによる階層構造科学の創成	5,000	
西堀英治	助成金	公益財団法人住友電工グループ社会貢献基金	金属材料の電子密度分布からの機能構造相関抽出法の開発	1,100	
初貝安弘	科学研究費補助金	基盤研究(S)	トポロジカル相でのバルク・エッジ対応の多様性と普遍性: 固体物理を越えて分野横断へ	45,370	
初貝安弘	科学研究費補助金	基盤研究(A)	トポロジカル相でのバルク・エッジ対応の多様性と普遍性: 固体物理を越えて分野横断へ	16,640	基盤研究 (S) 採択により辞退
初貝安弘	科学研究費補助金	挑戦的萌芽研究	四次数のトポロジカル相での意義の解明への挑戦: 多体問題と時間反転の破れ	1,040	

初貝安弘	日本学術振興会 二国間交流事業	オープンパートナーシップセミナー	Trends in Theory of Correlated Materials (TTCM2017)	2,400	
初貝安弘	国際研究集会開催経費の一部援助	井上科学振興財団	Trends in Theory of Correlated Materials (TTCM2017)	400	
柳原英人	科学研究費補助金	基盤研究(B)	人工磁壁における非線形電気磁気効果の観測	2,000	
柳原英人	委託研究	JST 産学共創基盤 基盤研究プログラム	電子論に基づいたフェライト磁石の高磁気異方性化指針の確立	13,853	
柳原英人	委託研究	JST ASTEP	高速スイッチング電源用パワーインダクタ開発のための講習は磁気測定装置の開発	7,000	
上殿明良	科学研究費補助金	新学術領域研究 (研究領域提案型)	陽電子消滅による結晶特異構造のキャリア捕獲・散乱ダイナミクスの評価	8,200	
上殿明良	新エネルギー・産業技術総合開発機構	低炭素社会を実現する次世代パワーエレクトロニクスプロジェクト	研究開発項目④ GaNパワーデバイス等の実用化加速技術開発(2) GaN等の新規用途開拓の推進 GaN 物性を最大限に発揮させる最適なパワーデバイス構造の確立とその工業的な製造プロセスに繋がる絶縁膜形成技術の研究開発	6,000	
上殿明良	内閣府	戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)	次世代パワーエレクトロニクス/GaN に関する拠点型共通基盤技術開発/GaN 縦型パワーデバイスの基盤技術開発 陽電子消滅法による GaN パワーデバイスプロセスの評価	10,000	
上殿明良	内閣府	戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)	構造材料の未活用情報を取得する先端計測技術開発 イオン加速器を中心とした先端計測技術開発	28,000	
上殿明良	文科省	省エネルギー社会の実現に資する次世代半導体研究開発	陽電子消滅を用いた空孔型欠陥の評価手法の開発	8,580	
岩室憲幸 矢野裕司	受託研究	SIP/次世代パワーエレクトロニクス	SiC 高耐圧デバイス基礎設計ならびに SiC 酸化膜界面の基礎物性解明	26,422	
矢野裕司	科学研究費補助金	基盤研究(B)	低損失 p 型 SiC 超接合パワー MOSFET の基盤技術開発	4,200	
佐々木正洋	科学研究費補助金	基盤研究(B)	有機半導体のドーピングにおける分子レベル構造変化と電子物性改質の相関	1,635	
佐々木正洋	つくば産学連携強化プロジェクト	合わせ技ファンド	原子層物質を利用した超高効率平面型電子放出素子の創出	1,000	
佐々木正洋	TIA 連携プログラム探索推進事業	かけはし	真空排気技術の革新的展開:長寿命低活性化温度非蒸発ゲッターコーティングの開発	100	
只野博	科学研究費補助金	基盤研究(C)	可変容量直列補償回路を用いた高効率非接触給電システム	1,717	
磯部高範	科学研究費補助金	基盤研究(B)	強磁性ナノ粒子を用いた高効率ガン局所焼灼	2,000	
只野 博	受託研究	SIP	高電圧高密度高効率モータ駆動回路の研究開発	8,698	
藤ノ木享英 (梅田享英)	科学研究費補助金	基盤研究(B)	ワイドギャップ半導体 (SiC および GaN) MOS 界面欠陥の電子スピン共鳴分光同定	7,900	
大島 武	科学研究費補助金	基盤研究(A)	炭化ケイ素半導体デバイス中の単一光子源の量子状態計測	1,000	筑波大配分額
清水三聡	助成金	NEDO	GaN 物性を最大限に発揮させる最適なパワーデバイス構造の確立とその工業的な製造プロセスに繋がる絶縁膜形成技術の研究開発	6,000	筑波大配分額

櫻井岳暁	受託研究	NEDO「高性能・高信頼性太陽光発電の発電コスト低減技術開発／太陽電池セル、モジュールの共通基盤技術開発」	CIS太陽電池高性能化技術の研究開発(結晶欠陥の検出と同定、欠陥密度低減化技術開発支援)	20,125	
櫻井岳暁	科学研究費補助金	基盤研究(C)	光・磁気局所解析法による有機半導体粒界物性評価ならびに粒界エンジニアリング	910	
櫻井岳暁	科学研究費補助金	特別研究員奨励費	Zスキーム型 BiVO4 光触媒における不純物添加効果の物理機構解明	500	
一戸雅聡	科学研究費補助金	基盤研究(C)	高周期14族元素ポリラジカル種の合成、構造、および物性に関する研究	1,100	TIMS
中本真晃	科学研究費補助金	基盤研究(C)	歪共役系分子の化学:高歪み炭素 σ 骨格および4π 反芳香族分子の構築と物性の解明	1,800	TIMS
藤田淳一	科学研究費補助金	基盤研究(A)	超高感度局在場可視化技術創出による触媒機能発現機構解明と高機能触媒の開発	5,400	TIMS
藤田淳一	科学研究費補助金	萌芽研究	マイクロ電解セルの創出による電解反応機構解明とデバイス応用	600	TIMS
小林伸彦	科学研究費補助金	新学術領域計画研究	有機半導体の活性サイトの理論	6,900	TIMS
小林伸彦	科学研究費補助金	新学術領域総括班 分担	3D活性サイト科学のプラットフォーム構築による総括と研究支援	270	TIMS
小林伸彦	科学研究費補助金	国際共同研究加速基金 国際活動支援班 分担	3D活性サイト科学の海外拠点・国際ネットワーク構築	250	TIMS
小林伸彦	科学研究費補助金	基盤研究(B)	キャリア輸送理論による有機半導体設計	5,900	TIMS
小林伸彦	科学研究費補助金	基盤研究(S) 分担	単結晶有機半導体中電子伝導の巨大応力歪効果とフレキシブルメカノエレクトロニクス	4,100	TIMS
小林伸彦	受託研究	JST 戦略的創造研究推進事業 CREST	電荷とスピン輸送および熱輸送の計算機シミュレーション技術による材料設計	8,800	TIMS
石井宏幸	科学研究費補助金	若手研究(A)	低分子系および高分子系有機半導体のための大規模電子伝導計算理論	5,100	TIMS
石井宏幸	科学研究費補助金	基盤研究(B) 分担	分子間振動の抑制を基軸とした次世代有機半導体材料の創製	300	TIMS
加納英明	科学研究費補助金	挑戦的萌芽研究	脂肪を燃やす褐色脂肪細胞における熱産生過程の非染色分子イメージング	600	TIMS
加納英明	受託研究	JST	汎用・普及型超解像顕微鏡の開発	2,900	TIMS
神田晶申	科学研究費補助金	新学術領域研究	原子層積層化により形成した超伝導システムの物性探索	2,800	TIMS
神田晶申	科学研究費補助金	新学術領域研究	電荷／スピンハイブリッド量子科学の研究	5,900	TIMS
神田晶申(友利ひかり)	共同研究	JST 戦略的創造研究推進事業さきがけ	ひずみ誘起ゲージ場を用いた単原子層膜の伝導制御とエレクトロニクス応用	4,900	TIMS
後藤博正	科学研究費補助金	基盤研究(C)	生命体・液晶を用いた組織転写重合による機能性高分子の開発	3,120	TIMS
丸本一弘	科学研究費補助金	挑戦的萌芽研究	ペロブスカイト太陽電池のスピン形成・電荷蓄積の直接観測と特性向上	1,000	TIMS
丸本一弘	研究助成	科学技術振興機構／戦略的創造研究推進事業 ALCA	環境負荷の少ない高性能ペロブスカイト系太陽電池の開発	3,000	TIMS
丸本一弘	研究助成	村田学術振興財団	高効率有機太陽電池の長寿命電荷状態の解明とその制御	1,800	TIMS
丸本一弘	研究助成	住友電工グループ社会貢献基金	有機太陽電池の素子特性劣化機構の解明と高効率化・長寿命化	1,200	TIMS
丸本一弘	研究助成	筑波大学つくば産学連携強化事業	蒸着型ペロブスカイト太陽電池の高効率化・長寿命化のための欠陥状態の解析	1,000	TIMS
丸本一弘	研究助成	筑波大学産学連携強化事業	有機エレクトロニクス素子中での励起子・ラジカルの解析	500	TIMS

丸本一弘	共同研究	住友化学株式会社	有機エレクトロニクス素子中での励起子・ラジカルの解析	1,080	TIMS
丸本一弘	業務委託	次世代化学材料評価技術研究組合 (CEREBA)	ペロブスカイト太陽電池の ESR 測定業務	1,000	TIMS
丸本一弘	技術指導	株式会社サムスン日本研究所	トラップ解析の指導と素子特性に関する考察	1,000	TIMS
丸本一弘	技術指導	日産化学工業株式会社	電界注入 ESR によるデバイス構造特性の評価	1,000	TIMS

4.4 共同研究

研究者	相手先	期間	内容	備考
中村潤児	南開大学(中国)	2003～現在	金属表面での触媒反応の理論的研究	
中村潤児	産業技術総合研究所	2011～現在	炭素系触媒の機能解析	
中村潤児	物質・材料研究機構	2015～現在	炭素系触媒の機能解析	
中村潤児	慶應義塾大学	2016～現在	炭素系触媒の機能解析	
中村潤児	東京大学	2012～現在	メタノール合成触媒の表面科学的研究	
中村潤児	大阪大学	2012～現在	メタノール合成触媒の表面科学的研究	
中村潤児	デュースブルク・エッセン大学(ドイツ)	2012～現在	金属ナノ粒子の触媒応用	
近藤剛弘	東京工業大学	2015～現在	ホウ素の2次元シートに関する研究	
近藤剛弘	物質・材料研究機構	2015～現在	ホウ素の2次元シートに関する研究	
近藤剛弘	東北大学	2015～現在	ホウ素の2次元シートに関する研究	
近藤剛弘	東京農工大学	2017～現在	ホウ素の2次元シートに関する研究	
近藤剛弘	東京大学	2017～現在	ホウ素の2次元シートに関する研究	
神原貴樹	東京工業大学	2007～現在	新奇有機金属錯体及び機能性高分子の開発に関する研究	
神原貴樹	富山大学	2007～現在	高選択的分離機能性樹脂・配位子の開発に関する研究	
神原貴樹	物質・材料研究機構	2012～現在	高分子半導体のデバイス機能評価に関する研究	
神原貴樹	産業技術総合研究所	2015～現在	藻類オイルのバイオリファイナリーに関する研究	
桑原純平	物質・材料研究機構	2014～現在	高品質な共役高分子材料の低コスト製造と特性評価	
鍋島達弥	Nanoview 株式会社	2016～現在	機能性色素材料の開発	
鍋島達弥	太陽油脂株式会社 エサンデス	2017～2018	ハンドクリームの成分分析	
鍋島達弥	群馬大学	2017～現在	一重項酸素増感剤の合成	
鍋島達弥	福岡大学	2017～現在	カルコゲノフェンを持つ機能性分子の合成	
鍋島達弥	広島大学	2016～現在	機能性 BODIPY の合成	
中村貴志	九州大学	2017～現在	大環状錯体の機能化研究	
鈴木秋弘	長岡工業高等専門学校	2000～現在	化学修飾を通じたヘムの電子構造調節とヘム関連分子の研究への応用	
廣田 俊 松尾貴史	奈良先端科学技術大学院大学	2010～現在	ヘムタンパク質の機能解析	
根三三郎	千葉大学	2012～現在	化学修飾ヘムを用いたヘム関連分子の機能発現機構の解明	
柳澤幸子	兵庫県立大学	2014～現在	共鳴ラマン分光法によるヘム関連分子の研究	
千田俊哉 湯本史明	高エネルギー加速器研究機構	2016～現在	ヘム関連分子のX線結晶構造解析	
徐 岩	宮崎大学	2016～現在	四重鎖 RNA の研究	

Dipankar Sen	Simon Fraser Univ. (カナダ)	2017～現在	機能性核酸の創製	
山本洋平	物質・材料研究機構	2012～現在	ペプチド固相合成と自己組織化	
山本洋平	物質・材料研究機構	2014～現在	孤立共役高分子の自己組織化	
山本洋平	物質・材料研究機構	2014～現在	高分子マイクロ球体の顕微蛍光計測	
山本洋平	物質・材料研究機構	2014～現在	高分子マイクロディスクアレイ	
山本洋平	東京工業大学	2014～現在	π 共役 dendrimer の自己組織化	
山本洋平	東京工業大学	2017～現在	AIE ポリマーマイクロ共振器の化学センシング	
山本洋平	大阪大学	2012～現在	高分子集合体のマイクロ波電導度測定	
山本洋平	大阪大学	2015～現在	近赤外発光ポリマー共振器	
山本洋平	大阪大学	2016～現在	ドナーアクセプター分子の集合化	
山本洋平	産業技術総合研究所	2015～現在	高分子マイクロ球体のフェムト秒分光	
山本洋平	神奈川大学	2015～現在	有機マイクロ結晶レーザー	
山本洋平	立教大学	2016～現在	マイクロ共振器の光スイッチング	
山本洋平	関西学院大学	2016～現在	円偏光発光分子の自己組織化	
山本洋平	九州大学	2016～現在	レーザー色素の自己組織化	
山本洋平	防衛大学校	2017～現在	柔軟性結晶分子の光機能	
山本洋平	Duisburg-Essen 大学(ドイツ)	2012～現在	高分子球体の顕微蛍光計測	
山本洋平	Duisburg-Essen 大学(ドイツ)	2014～現在	金属ナノ粒子とペプチドの複合化	
山本洋平	Heidelberg 大学	2017～現在	ポーラス分子集合体による化学センサー	
山本洋平	Leibniz 光学研究所	2016～現在	マイクロ共振器のプラズモン効果	
山本洋平	Aachen 大学	2017～現在	マイクロ共振器の発光特性	
山本洋平	Cambridge 大学	2017～現在	共役ポリマーの電界発光	
山本洋平	Eindhoven 工科大学	2017～現在	円偏光発光ポリマーの自己組織化	
山本洋平	Malaga 大学	2017～現在	共役ポリマー集合体のラマン分光	
山本洋平	Strasbourg 大学	2017～現在	マイクロ結晶共振器の時間分解発光特性	
山本洋平	Max Planck Inst. Polymer Research	2017～現在	蛍光色素の自己組織化	
山本洋平	台湾国立清華大学	2015～現在	共役ブロックコポリマーの自己組織化	
辻村清也	東京理科大	2011～現在	ウェアラブルデバイスの研究開発	
辻村清也	理化学研究所	2015～現在	酸化還元酵素の開発	
辻村清也	群馬大学	2011～現在	多孔質炭素に関する研究	
辻村清也	東京農工大	2014～現在	酵素電極に関する研究	
辻村清也	CNRS(フランス)	2016～現在	酵素電極に関する研究	
辻村清也	クイーンズランド大学(オーストラリア)	2014～現在	微生物燃料電池に関する研究	
辻村清也	グルノーブル・アルプ大(フランス)	2015～現在	分子技術を活用した酵素燃料電池に関する研究	
辻村清也	佐賀大学	2016～現在	分子技術を活用した酵素燃料電池に関する研究	
辻村清也	CNRS ポールバスカル研究所(フランス)	2011～現在	レドックスポリマーに関する研究	
辻村清也	産業技術総合研究所	2016～現在	補酵素の電気化学に関する研究	
辻村清也	産業技術総合研究所	2016～現在	レドックスフロー電池に関する研究	

辻村清也	岡山大学	2016～現在	分子技術を活用した酵素燃料電池に関する研究	
守友 浩	群馬高専	2015～現在	熱発電セル	
守友 浩	高エネルギー加速器研究機構	2015～現在	X線吸収	
守友 浩	生産技術総合研究所	2015～現在	熱発電セル	
守友 浩	物質・材料研究機構	2015～現在	ナノプローブ	
守友 浩	物質・材料研究機構	2015～現在	熱発電セル	
守友 浩	高輝度光科学研究センター	2015～現在	時間分解回折	
守友 浩	高輝度光科学研究センター	2015～現在	X線マイクロプローブ	
守友 浩	高輝度光科学研究センター	2015～現在	EXAFS	
守友 浩	台湾放射光	2015～現在	RIXS	
丹羽秀治	高輝度光科学研究センター	2015～現在	RIXS	
丹羽秀治	台湾放射光	2015～現在	RIXS	
丹羽秀治	生産技術総合研究所	2016～現在	二次電池の放射光解析に関する研究	
丹羽秀治	東京大学物性研究所	2016～現在	同上	
丹羽秀治	高エネルギー加速器研究機構	2016～現在	同上	
丹羽秀治	物質・材料研究機構	2016～現在	同上	
丹羽秀治	量研機構	2015～現在	高分解能 XAFS による二次電池材料の研究	
小林 航	物質・材料研究機構	2015～現在	TEM を用いた正極材の局所構造観察	
小林 航	CRISMAT 研究所(フランス)	2015～現在	新規な酸化物正極材の研究	
西堀英治	西オーストラリア大学(オーストラリア)	2014～現在	実験電子密度の解析法開発の研究	
西堀英治	オーフス大学(デンマーク)	2000～現在	エネルギー材料の放射光を利用した構造科学研究	
西堀英治	桂林電子科技大学(中国)	2013～現在	VO ₂ ナノ粒子および熱電変換材料の構造評価	
西堀英治	東京大学	2005～現在	ドナー・アクセプター共役接合錯体の構造決定の研究	
西堀英治	東京大学	2014～現在	単成分からなる分子性金属の物理と構造相関	
西堀英治	日本大学	2008～現在	単成分からなる分子性金属の物理と構造相関	
西堀英治	理化学研究所	2014～現在	スキルミオン結晶の圧力効果	
西堀英治	広島大学、九州大学	2015～現在	天然鉱物熱電変換材料の構造研究	
西堀英治	東北大学	2016～現在	超臨界ナノ材料合成のその場観察	
初貝安弘	東京大学、産総研	2008～現在	バルク・エッジ対応の理論	
初貝安弘	茨城大学	2011～現在	バルク・エッジ対応の理論	
初貝安弘	東邦大学	2007～現在	トポロジカル系の数値的研究	
初貝安弘	広島大学	2013～現在	トポロジカル絶縁体の研究	
初貝安弘	京都大学	2014～現在	冷却原子系のトポロジカル現象の研究	
初貝安弘	東京大学	2017～現在	フォトニック結晶とフォノン結晶のトポロジカル現象の研究	
初貝安弘	物質・材料研究機構	2008～現在	電子状態計算におけるトポロジカルな量の理論	
上殿明良	SONY 株式会社	2017	陽電子消滅法による半導体結晶欠陥に関する研究	

上殿明良	株式会社トクヤマ	2017	陽電子消滅法による単結晶 AlN の欠陥評価に関する研究	
岩室憲幸	富士電機株式会社	2016～2017	SiC を用いた直流回路多頻度開閉器に関する研究	
岩室憲幸 矢野裕司	トヨタ自動車株式会社	2015～2017	SiC-pMOSFET 作製および SiC 相補型回路に関する研究	
岩室憲幸 矢野裕司	産業技術総合研究所 (TPEC)	2017～現在	SiC-MOSFET 特性改善に関する研究	
磯部高範	A 社	2016～現在	インバータの研究	
只野 博	B 社	2016～現在	パルス回路の研究	
磯部高範	C 社	2016～2017	AC/AC 変換装置の研究	
只野 博	D 社	2016～2017	寄生インダクタンスの研究	
磯部高範	E 社	2017～2018	DC/DC コンバータの研究	
只野 博	F 社	2017～現在	破壊に関する研究	
只野 博	G 社	2017～2018	ノイズの研究	
只野 博	H 社	2016～2018	デバイス構造に関する研究	
梅田享英	産業技術総合研究所先進パワーエレクトロニクス研究センター (SiC)	2011～現在	SiC-MOS 界面欠陥評価	
梅田享英	産業技術総合研究所先進パワーエレクトロニクス研究センター (GaN)	2017～現在	GaN-MOS 界面欠陥評価	
梅田享英	富士電機株式会社	2016～現在	GaN-MOS 界面欠陥評価	
梅田享英	量子科学技術研究開発機構	2011～現在	SiC の照射欠陥および単一光子源の研究	
梅田享英	京都大学	2014～現在	SiC-MOS 界面欠陥評価	
梅田享英	大阪大学	2017～現在	SiC-MOS 界面欠陥評価	
梅田享英	物質・材料研究機構	2015～現在	SiC-MOS 界面欠陥評価(理論計算)	
梅田享英	物質・材料研究機構	2016～現在	ダイヤモンド欠陥評価	
櫻井岳暁	プリンストン大学 (アメリカ)	2015～現在	有機薄膜太陽電池界面の研究	
櫻井岳暁	産業技術総合研究所	2004～現在	カルコゲン系太陽電池の欠陥の研究	
櫻井岳暁	ソーラーフロンティア株式会社	2012～現在	カルコゲン系太陽電池の欠陥の研究	
櫻井岳暁	甲南大学	2017～現在	光触媒に関する研究	
蓮沼 隆	東芝メモリ株式会社	2016～現在	SiO ₂ 膜および SiN 膜の信頼性に関する研究	
Yitzhak Apeloig	イスラエル工科大学	2014～2017	三重項シクロプロタジェンの EPR 観測	TIMS
藤田淳一	住友電気工業株式会社	2005～現在	カーボンナノ材料の基礎物性、成長メカニズムと加工に関する研究	TIMS
加納英明	アトナープ株式会社	2014～現在	小型・高性能コヒーレントラマン分析装置の開発	TIMS
加納英明	コニカミノルタ株式会社	2014～現在	CARSを用いたイメージング材料の物性評価	TIMS
加納英明	株式会社資生堂	2015～現在	表皮細胞イメージングの研究	TIMS
加納英明	株式会社アサヒビジョン	2016～現在	水晶体の光学的検査によるタンパク質変性疾患の早期診断法の研究	TIMS
加納英明	株式会社日立製作所	2017～現在	コヒーレントラマン顕微鏡法の研究	TIMS
神田晶申	アントワープ大学 (ベルギー)	2004～現在	メゾスコピック超伝導体における量子渦糸状態に関する研究	TIMS
神田晶申	物質・材料研究機構	2005～現在	原子層物質の電気伝導に関する研究	TIMS

神田晶申	秋田大学	2006～現在	グラフェンの電気伝導に関する研究	TIMS
神田晶申	奈良女子大学	2009～現在	グラフェンの電気伝導に関する研究	TIMS
神田晶申	九州大学	2010～現在	グラフェンの電気伝導に関する研究	TIMS
木島正志	京都大学生存圏研究所	2012～現在	木質起源物質の化学修飾と炭素化物への物質変換	TIMS
木島正志	京都大学生存圏研究所	2014～現在	熱分解制御下の炭素化により生成するナノ構造化炭素の解析	TIMS
木島正志	三菱レイヨン株式会社	2014～現在	機能性 AN モノマーの合成	TIMS
後藤博正	高エネルギー加速器研究機構	2017～現在	加速器利用	TIMS
後藤博正	茨城県工業センター	2017～現在	繊維研究	TIMS
後藤博正	物質・材料研究機構	2017～現在	微細構造評価・磁気利用	TIMS
後藤博正	山口大学	2017～現在	微生物研究	TIMS
丸本一弘	名古屋大学	2006～現在	ESR 法を用いた有機トランジスタ等のマイクロ評価に関する研究	TIMS
丸本一弘	産業技術総合研究所	2008～現在	有機半導体材料の理論解析に関する研究	TIMS
丸本一弘	東京大学	2010～現在	ESR 法を用いた有機トランジスタ等のマイクロ評価に関する研究	TIMS
丸本一弘	産業技術総合研究所	2011～現在	ESR 法を用いた有機系太陽電池材料のマイクロ評価および素子の劣化機構に関する研究	TIMS
丸本一弘	愛知工業大学	2012～現在	ESR 法を用いた有機発光ダイオードのマイクロ評価に関する研究	TIMS
丸本一弘	神戸大学	2013～現在	ESR 法を用いた有機薄膜太陽電池のマイクロ評価に関する研究	TIMS
丸本一弘	九州工業大学	2013～2017	ESR 法を用いたペロブスカイト有機—無機ハイブリッド太陽電池の機構解明に関する研究	TIMS
丸本一弘	次世代化学材料評価技術研究組合(CEREBA)	2014～2017	有機系太陽電池の光劣化に関する評価技術の研究開発	TIMS
丸本一弘	株式会社 JEOL RESONANCE	2014～現在	有機薄膜素子評価用電子スピン測定試料ホルダーの開発	TIMS
丸本一弘	住友化学株式会社	2015～現在	有機系太陽電池および発光ダイオードの劣化解析に関する研究	TIMS
丸本一弘	物質・材料研究機構	2015～現在	遷移金属ダイカルコゲナイド電気二重層トランジスタの ESR による研究	TIMS
丸本一弘	筑波大学	2015～現在	有機発光電気化学セルの特性評価に関する研究	TIMS
丸本一弘	電力中央研究所	2016～現在	ESR 法を用いた有機発光電気化学セルの動作機構解明に関する研究	TIMS
丸本一弘	広島大学	2016～現在	ESR 法を用いた有機太陽電池の劣化機構に関する研究	TIMS
センター内連携				
神原貴樹 桑原純平 安田剛(客員)		2012～現在	高分子半導体のデバイス機能評価に関する研究	
神原貴樹 桑原純平 西村賢宣		2012～現在	りん光発光性金属錯体の研究	
鍋島達弥 山本洋平		2015～現在	機能性ホウ素錯体の合成	
鍋島達弥 山本洋平 中村貴志		2015～現在	発光性ジピリン錯体含有高分子の研究	

山本洋平 神原貴樹 桑原純平	2012～現在	共役ポリマー光共振器の開発	
山本洋平 中村潤児 近藤剛弘	2014～現在	酸化グラフェン-ペプチド-金属ナノ粒子複合体による光触媒効果	
山本洋平 西堀英治	2015～現在	π 共役 dendrimer 結晶の構造解析	
守友 浩 丹羽秀治	2015～現在	太陽電池	
守友 浩 丹羽秀治	2015～現在	構造解析	
守友 浩 丹羽秀治	2015～現在	触媒	
西堀英治 鍋島達弥	2016～現在	大型分子性物質の構造解析に関する研究	
西堀英治 山本洋平	2015～現在	dendrimer の構造決定に関する研究	
西堀英治 近藤剛弘 中村潤児	2015～現在	ボロン新材料の構造評価に関する研究	
西堀英治 守友 浩	2014～現在	電池材料の電子密度解析に関する研究	
矢野裕司 櫻井岳暁	2017～現在	SiC-MOS 界面評価に関する研究	
梅田享英 産業技術総合研究所先進パワーエレクトロニクス研究センター(ダイヤモンド)・電気エネルギー制御部門基礎研究部	2016～現在	ダイヤモンド MOS 界面欠陥評価	
梅田享英 磯谷順一	2017～現在	ダイヤモンド NV センターの研究	
梅田享英 上殿明良	2017～現在	GaN およびダイヤモンドの欠陥評価	
櫻井岳暁 牧野俊晴(産業技術総合研究所)	2017～現在	ダイヤモンドの欠陥の研究	
丸本一弘 神原貴樹 桑原純平	2017～現在	ESR 法を用いた有機太陽電池の電荷蓄積に関する研究	TIMS
丸本一弘 中村潤児 近藤剛弘	2017～現在	ESR 法を用いたカーボン材料のスピン状態に関する研究	TIMS
木島正志 丸本一弘	2016～現在	有機 EL 発光デバイスに関する研究	TIMS

4.5 研究生等の受け入れ

受入教員	氏名・職名・学年	国籍	受け入れ期間	備考
中村潤児	Manuel Heimann(博士課程学生)	ドイツ	2017年7月～8月	
中村潤児	Friedrich Waag(博士課程学生)	ドイツ	2017年7月、 2017年9月～10月	
中村潤児	Andreas Hüttner(博士課程学生)	ドイツ	2017年11月～12月	
中村潤児	Fatih Özcan(博士課程学生)	ドイツ	2018年3月	
神原貴樹	周宗揚(外国人研究生)	中国	2017年4月～2018年3月	
神原貴樹	陳熹(外国人研究生)	中国	2017年10月～2018年3月	
鍋島達弥	童洁雯(外国人研究生)	中国	2016年10月～2018年3月	
鍋島達弥	呂加豪(外国人研究生)	中国	2016年10月～2018年3月	
鍋島達弥	冯瑞雲(外国人研究生)	中国	2017年10月～2018年3月	
山本洋平	Zhong Rui(外国人研究生)	中国	2016年10月～2018年3月	

山本洋平	Cui Yuanyuan (外国人研究生)	中国	2017年10月～2018年1月	
山本洋平	Aswin Vijai Asaithambi (PhD student, Univ. Duisburg-Essen)	ドイツ	2017年8月～2017年10月	共同研究
山本洋平	Svetlana Sirotinskaya (PhD student, Univ. Duisburg-Essen)	ドイツ	2017年11月～2017年12月	共同研究
山本洋平	Dr. Niels Benson (Researcher, Univ. Duisburg-Essen)	ドイツ	2017年12月～2017年12月	共同研究
山本洋平	櫛田創 (PhD student, Univ. Heidelberg)	ドイツ	2017年12月～2018年1月	共同研究
山本洋平	Prof. Axel Lorke (Professor, Univ. Duisburg-Essen)	ドイツ	2018年3月	共同研究
辻村清也	平賀健太郎, 東京農工大, 修士2年	日本	2018年3月～2018年4月	
矢野裕司	周星炎 (外国人研究生)	中国	2017年10月～2018年3月	
矢野裕司	姚凱倫 (外国人研究生)	中国	2017年10月～2018年3月	
櫻井岳暁	張凱 (外国人研究生)	中国	2017年10月～2018年3月	
櫻井岳暁	何余露 (外国人研究生)	中国	2017年10月～2018年3月	
櫻井岳暁	Imane Imme (外国人研究生)	アルジェリア	2017年10月～2018年3月	
櫻井岳暁	Abu Bakar Muhammad Hafi (外国人研究生)	マレーシア	2017年10月～2018年3月	
櫻井岳暁	Hasan Iqbal (外国人研究生)	バングラデシュ	2017年10月～2018年3月	
木島正志	芮嘯天 (外国人研究生)	中国	2017年10月～2018年3月	TIMS
木島正志	周璐 (外国人研究生)	中国	2017年10月～2018年3月	TIMS
丸本一弘	Januardana Hanung Pradita (外国人研究生)	インドネシア	2016年10月～2018年2月	TIMS
丸本一弘	鄒湘濤 (外国人研究生)	中国	2017年10月～2018年9月	TIMS

4.6 受賞

受賞者	賞	受賞理由	受賞年月日	備考
中村潤児	日本表面科学会 学会賞	受賞業績:「モデル固体触媒の活性サイトと反応メカニズムの研究」 表面科学において相当期間にわたって高い水準の業績を挙げることにより、本会に貢献した (HP 抜粋)	2017.5.20	
中村潤児	2017 Best Faculty Member 表彰		2018.2.19	
渋谷陸	Surface & Interface Spectroscopy Students Prize (SISSP)	Bottom-up design of N-containing carbon catalyst for oxygen reduction reaction	2017.11.22	
全家美	Chinese Government Award for Outstanding Self-Financed Students Abroad (2017年度国家優秀自費留学生奨学金(中国政府))		2018.2.9	
渋谷陸	第37回表面科学学術講演会 講演奨励賞	窒素含有共役系分子で修飾したグラファイト電極の酸素還元活性性能	2018.2.13	
古晒大絢	筑波大学数理物質科学研究科 物性・分子工学専攻 2017年度修士論文発表優秀賞	Cu 表面でのフォルメート生成ダイナミクスにおける CO ₂ 振動励起効果	2018.3.24	
白石一真	筑波大学数理物質科学研究科 物性・分子工学専攻 2017年度修士論文発表優秀賞	藻類産生油由来スクアレンからイソプレンへの接触分解	2018.3.24	
西野弘晃	筑波大学数理物質科学研究科 長賞表彰	イオン交換法によるホウ化水素シートの形成と評価	2018.3.24	
青木英晃	第66回高分子学会年次大会 優秀ポスター賞	脱水素型クロスカップリング反応による共役系高分子の合成	2017.6.21	

大嶽和久	高分子学会茨城地区若手会優秀ポスター賞	植物油を原料とした新規ポリオレフィンの創製	2017.10.31	
桑原純平	高分子学会日立化成賞	直接アリアル化重縮合による共役高分子材料の新規環境調和型合成	2017.9.21	
松岡亮太	第33回マツダ研究助成奨励賞	鎖の撚りあわせにより可逆に剛直性が変化する機能性ナノシートの開発	2017.9	
野田卓夢	第28回基礎有機化学討論会 優秀ポスター賞	ねじれた不斉構造を持つ環状ジピリン錯体の合成と性質	2017.9.9	
武藤圭汰	Tsukuba Global Science Week (TGSW) 2017 Excellent Poster Award	Synthesis of Tetrahedral Cage Molecules Utilizing Self-assembly of Triple Helicates	2017.10	
川島侑人	第7回CSJ化学フェスタ2017 優秀ポスター賞	2,2'-ジピリジンを導入したトリサレン錯体による金属原子の置換活性部位の秩序的な集積	2017.11	
中嶋紗英	第32回高分子学会関東支部茨城地区若手交流会 優秀ポスター賞	圧力および温度に敏感な色変化を示す π 共役分子集合体	2017.10	
中嶋紗英	第7回CSJ化学フェスタ 優秀ポスター発表賞	体温付近で敏感な発色および発光変化を示す π 共役ドナーアクセプターデンドリマー結晶	2017.10	
高橋昂太	第5回TIAナノグリーン・サマースクール 奨励賞	化学気相蒸着による2次元共役高分子合成	2017.08	
北山雄介	第5回TIAナノグリーン・サマースクール 奨励賞	π -conjugated polymer micro disk array	2017.08	
辻村清也	農芸化学奨励賞	バイオエレクトロカタリシスの基礎と応用の新展開	2018.3.15	
守友 浩	BESTFACULTY MEMBER	熱発電セル、等	2018.2.19	
福住勇也	TGSW-IWP2017 Award Student Presentations	熱発電セル	2017.9.26	
西堀英治	日本結晶学会学術賞	放射光 X 線粉末回折による確度の高い構造因子の計測および未知構造決定	2017.11.23	
高橋勇紀	電気学会優秀論文発表賞	電気学会全国大会での優秀な研究発表に対して受賞	2018.3.15	
陳敬東	応用物理学会 多元系化合物・太陽電池研究会年末講演会・講演奨励賞	化合物薄膜太陽電池の欠陥評価技術について優れた発表を行ったため	2017.11.18	
菊池亮介	茗溪賞	社会貢献	2018.3.23	TIMS
林宏紀	TGSW Student Poster Presentation on Materials Research	Multi-responsive chromic block copolymers: solvent vapor- / mechanical stress-induced color changes	2017.9	
江口直人	TGSW-IWP2017 refaël Kiebooms Award	Electrochemically synthesized conjugated polymer films showing color and optical activity change reversibly with application of voltage	2017.9	

4.7 学会活動・各種委員など

氏名	役職など	組織	任期	備考
中村潤児	協議員	公益社団法人日本表面科学会	2016.6～2018.3	
中村潤児	Surface Science 誌 Editorial Board	Elsevier	2012.1～現在	
中村潤児	Surface Science Report 誌 Editorial Board	Elsevier	2012.1～現在	
中村潤児	触媒学会東日本支部幹事	一般社団法人 触媒学会	2012～現在	
中村潤児	技術指導・コンサルティング	㈱村田製作所	2016.1～2017.5	
中村潤児	代議員	一般社団法人 触媒学会	2017.3～2018.2	
中村潤児	会議委員	TIA ナノグリーン MG 会議	2017.4～現在	

中村潤児	つくば3E フォーラムタスクフォース	つくば3E フォーラム	2017.8～現在	
近藤剛弘	研究振興局 学術調査官	文部科学省	2017.8～現在	
近藤剛弘	科学技術動向研究センター専門調査員	文部科学省 科学技術・学術政策研究所	2014.4～現在	
近藤剛弘	領域7 運営委員	日本物理学会	2016.10～2017.10	
近藤剛弘	出版委員	日本表面科学会	2016.4～現在	
近藤剛弘	企画委員	日本表面科学会	2016.4～現在	
近藤剛弘	The 8th International symposium on Surface Science 実行委員	日本表面科学会	2016.4～2018-3	
近藤剛弘	平成29年度触媒学会つくば地区講演会 世話人	触媒学会	2017.4～2018.3	
神原貴樹	関東支部茨城地区幹事	高分子学会	2007～現在	
神原貴樹	客員研究員・兼任	産業技術総合研究所	2009～現在	
桑原純平	客員研究員・兼任	産業技術総合研究所	2009～現在	
鍋島達弥	関東支部幹事	有機合成化学協会	2016.2～現在	
鍋島達弥	常任理事	基礎有機化学会	201.9～現在	
鍋島達弥	会長	ホスト-ゲスト・超分子化学研究会	2008.5～現在	
鍋島達弥	外部評価委員	ナノ・バイオサイエンス研究センター 私立大学戦略的研究基盤形成事業	2015～現在	
鍋島達弥	組織委員	第15回ホスト・ゲスト・超分子化学シンポジウム SHGSM2017	2017.6	
鍋島達弥	国内組織委員	第18回新芳香族化学国際会議 (ISNA-18)	2016～現在	
鍋島達弥	Associate Editor	Frontiers In Chemistry	2017～現在	
山本泰彦	評議員	日本核酸化学会	2017.11～現在	
山本洋平	客員研究員	物質・材料研究機構	2011～現在	
山本洋平	客員研究員	産業技術総合研究所	2013～現在	
山本洋平	科学技術・学術政策研究所 科学技術予測センター	科学技術専門調査員	2016～現在	
山本洋平	Visiting Professor	Duisburg-Essen 大学	2017.6～2017.8	
山本洋平	Visiting Professor	Heidelberg 大学	2017.10～2017.12	
山本洋平	代表取締役	株式会社ブリュエイズ	2018～現在	
辻村清也	電気化学会関東支部幹事	電気化学会	2012.7～現在	
辻村清也	電気化学会編集幹事	電気化学会	2016.2～2018.2	
辻村清也	電気化学会電力貯蔵技術研究会幹事	電気化学会	2016.11～現在	
辻村清也	評議員	日本ポーログラフ学会	2005.1～現在	
辻村清也	客員准教授	東京理科大学	2015.4～現在	
辻村清也	客員研究員	産業技術総合研究所	2017.4～現在	
辻村清也	運営委員	TIA-EXA	2017.11～現在	
辻村清也	編集委員	Heliyon (Elsevier)	2017.6～現在	
守友 浩	客員研究員	高エネルギー加速器研究機構	2017	
守友 浩	外来研究員	高輝度光科学研究センター	2017	
守友 浩	中性子散乱実験審査委員会委員	東京大学物性研究所	2017	
守友 浩	利用課題審査委員会分科会委員	高輝度光科学研究センター	2017	
守友 浩	J-PAXCR 課題審査委員	総合科学研究機構 CROSS	2017	
守友 浩	PF 実験課題審査委員	高エネルギー加速器研究機構	2017	
守友 浩	中性子共同利用実験審査委員会委員	高エネルギー加速器研究機構	2017	
小林 航	外来研究員	高輝度光科学研究センター	2014.4～現在	
小林 航	外来研究者	物質・材料研究機構	2015.6～現在	
小林 航	評議員	日本熱電学会	2012.7～現在	
小林 航	世話人	化合物新磁性材料研究会	2008.12～現在	

西堀英治	councilor	Asian Crystallographic Association	2011.4～現在	
西堀英治	Membership	Commission on Charge, Spin and Momentum Densities, International Union of Crystallography	2014.8～2017.7	
西堀英治	Membership	Commission on Quantum Crystallography, International Union of Crystallography	2017.8～	
西堀英治	評議員	日本結晶学会	2017.4～2019.3	
西堀英治	客員研究員	理化学研究所	2014.5～現在	
西堀英治	外来研究員	高輝度光科学研究センター	2012.4～現在	
西堀英治	企画委員長	SPring-8 ユーザー協同体	2016.4～2018.3	
初貝安弘	東北大学特任教授	国際集積エレクトロニクス研究開発センター	2014.5.1～2019.3.31	
初貝安弘	Member of Editorial Board	Progress of Theoretical and Experimental Physics	2013～現在	
上殿明良	運営委員	結晶加工と評価技術 145 委員会	2017～現在	
岩室憲幸	電気学会 電子デバイス技術委員会 1号委員	電気学会	2017.5～現在	
岩室憲幸	電気学会シリコンならびに新材料パワーデバイス技術調査専門委員会 委員長	電気学会	2014.4～2017.3	
岩室憲幸	IEEE Power Device Technical Committee	IEEE Electron Device Society	2017.1～現在	
岩室憲幸	ISPSD2017 実行委員会委員	電気学会	2016.4～2017.12	
岩室憲幸	SSDM2018 論文委員会委員	応用物理学会	2017.10～現在	
岩室憲幸	JJAP 編集委員	応用物理学会	2017.10～現在	
岩室憲幸	The Asia-Pacific Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2018 Chair	IAWBS(Innovation Association of Wide Bandgap Semiconductor Technology)	2018.4～現在	
矢野裕司	プログラム編集委員	応用物理学会	2014.4～現在	
矢野裕司	会計幹事 企画幹事	応用物理学会 先進パワー半導体分科会	2014.1～2016.3 2016.4～現在	
矢野裕司	Technical Program Committee Member	ICSCRM2017	2016.11～2017.9	
矢野裕司	組織委員会 委員 出版委員会 委員長 プログラム委員会 委員	ICSCRM2019	2017.11～現在	
櫻井岳暁	幹事	応用物理学会多元系化合物・太陽電池研究会	2013.4～現在	
櫻井岳暁	Symposium Organizer	2016 European Materials Research Society (E-MRS) Spring Meeting: Symposium V	2015.6～2016.5	
櫻井岳暁	Area Co-chair	44th IEEE Photovoltaic Specialist Conference (PVSC) : Area 2	2016.10～2017.7	
櫻井岳暁	Guest Editor	Thin Solid Films	2016.5～2017.5	
蓮沼 隆	応用物理学会 シリコンテクノロジー分科会 幹事	応用物理学会	2012～現在	
蓮沼 隆	International Microprocesses and Nanotechnology Conference 論文委員	International Microprocesses and Nanotechnology Conferenc	2010～現在	
一戸雅聡	理事	ケイ素化学協会	2008.4～現在	TIMS
藤田淳一	技術開発部ピアレビュアー	NEDO	2013～現在	TIMS
小林伸彦	Supercomputer Project Advisory Committee	東京大学物性研究所附属物質設計評価施設	2007.4～現在	TIMS
小林伸彦	客員研究員	物質・材料研究機構	2012～現在	TIMS
石井宏幸	客員研究員	物質・材料研究機構	2012～現在	TIMS
石井宏幸	化学フェスタ実行委員	日本化学会	2015～現在	TIMS

神田晶申	委員	日本学術振興会 先端・ナノデバイス・材料テクノロジー第151委員会	2010～現在	TIMS
神田晶申	プログラム編集委員	応用物理学会	2012.4～現在	TIMS
木島正志	炭素誌編集委員長	炭素材料学会	2017～現在	TIMS
木島正志	関東支部茨城地区幹事	高分子学会	2014～現在	TIMS
木島正志	先進素材開発解析システム全国国際共同利用専門委員会委員	京都大学生存圏研究所	2014～現在	TIMS
後藤博正	関東支部部長	日本磁気科学会	2017.4～現在	TIMS
丸本一弘	理事(財務担当)	電子スピンスサイエンス学会	2018.1～現在	TIMS
丸本一弘	代議員	電子スピンスサイエンス学会	2016.1～現在	TIMS
丸本一弘	電子スピンスサイエンス学会誌編集委員	電子スピンスサイエンス学会	2008.4～現在	TIMS
丸本一弘	電子スピンスサイエンス学会誌編集委員長	電子スピンスサイエンス学会	2015.11～2017.11	TIMS
丸本一弘	12th International Conference on Nano-Molecular Electronics (ICNME2016), Conference Committee, Member	12th International Conference on Nano-Molecular Electronics (ICNME2016)	2016.1～2017.11	TIMS
丸本一弘	客員研究員	産業技術総合研究所 太陽光発電工学研究センター	2013.10～現在	TIMS
丸本一弘	世話人	フロンティア太陽電池セミナー(旧薄膜太陽電池セミナー)	2016.10～現在	TIMS
丸本一弘	実行委員	第56回電子スピンスサイエンス学会年会(SEST2017)	2016.11～2017.11	TIMS
丸本一弘	Editorial Board Member	Scientific Reports	2017.2～現在	TIMS

4.8 新聞報道・特記事項他

日付	新聞・雑誌名	報道内容	備考
2017.9.26	プレリリース 筑波大学 東北大学 物質・材料研究機構 東京工業大学	新しいシート状物質「ホウ化水素シート(ボロファン)」の誕生 ～優れた水素吸蔵性能を有する新材料～(近藤剛弘)	
2017.9.28	化学工業日報	ホウ化水素シート創製 筑波大など 水素吸蔵などに応用 (近藤剛弘)	①
2017.9.28	マイナビニュース	筑波大など、優れた水素吸蔵性能を持つホウ化水素シートの生成に成功 (近藤剛弘) https://news.mynavi.jp/article/20170928-a223/	WEB 掲載
2017.9.28	鉄鋼新聞	物材研など、「ホウ化水素シート開発」優れた水素吸蔵性能新材料 (近藤剛弘)	②
2018.1.5	プレリリース 筑波大学 物質・材料研究機構	簡便で環境に優しいクロスカップリング重合法を開発 ～有機電子光デバイス用の高分子開発に有用な新技術～ (神原貴樹・桑原純平・安田剛) http://www.tsukuba.ac.jp/attention-research/p201801051400.html	
2018.1.10	EE Times Japan	有機電子光デバイス用高分子、新合成法を開発(神原貴樹・桑原純平・安田剛) http://eetimes.jp/ee/articles/1801/10/news088.html	WEB 掲載
2018.1.13	つくばサイエンスニュース	高分子半導体に新合成法(神原貴樹・桑原純平・安田剛) http://www.tsukuba-sci.com/?p=3663	WEB 掲載
2018.1.16	スマートジャパン	有機薄膜太陽電池の生産負荷を軽減、新しい高分子半導体の製造技術(神原貴樹・桑原純平・安田剛) http://www.itmedia.co.jp/smartjapan/articles/1801/16/news028.html	WEB 掲載
2018.1.18	日経テクノロジーOnline	高分子半導体を簡便に合成、有機太陽電池に応用も(神原貴樹・桑原純平・安田剛) http://tech.nikkeibp.co.jp/dm/atcl/news/16/011810498/	WEB 掲載

2018.2.2	科学新聞	「環境負荷小さく簡単」クロスカップリング重合法 (神原貴樹・桑原純平・安田剛)	
2018.2.16	Chem-Station スポット ライトリサーチ	脱水素型クロスカップリング重合法の開発(青木英晃・下山雄人) https://www.chem-station.com/blog/2018/02/c-hpoly.html	WEB 掲載
2017.7.25	プレスリリース 筑波大学	多数の金属で分子を捕まえる大環状分子を開発(鍋島達弥・西堀英治・中村貴志)	
2017.4.28	Chem-Station スポット ライトリサーチ	生体分子を活用した新しい人工光合成材料の開発(山本洋平) https://www.chem-station.com/blog/2017/04/peptidecrosslinkers.html	WEB 掲載
2017.5.19	プレスリリース 筑波大学	共役ポリマーのみからなるマイクロ球体からのレーザー発振に成功 (山本洋平)	
2017.5.19	つくばサイエンスニュー ース	共役ポリマーから成るマイクロ球体からレーザーを発振 —電荷注入 によるレーザー発振に道:筑波大学(山本洋平) http://www.tsukuba-sci.com/?p=2156	WEB 掲載
2017.5.22	オプトロニクスオンラ イン	筑波大、共役ポリマーのマイクロ球体からレーザー発振(山本洋平) http://www.optronics-media.com/news/20170522/46791/	WEB 掲載
2018.3.5	化学工業日報	光る dendrimer を作成 —筑波大など 溶媒蒸気の識別可能(山本 洋平)	③
2018.3.20	現代化学 研究ハイ ライト	結晶化する dendrimer (佐藤健太郎)	
2018.2.13	プレリリース 筑波大学 高輝度光科学研究セ ンター	原子のシート間にはたらく相互作用の観測に成功 ～層状物質の機能発現に関与する電子分布を可視化する～(笠井 秀隆・西堀英治)	
2018.3.9	科学新聞	原子シート間の相互作用(笠井秀隆・西堀英治)	④
2017.6.26	Compound Semiconductor	Making a debut: the p-type SiC MOSFET(岩室憲幸) https://compoundsemiconductor.net/article/101899/Making_A_Debut_The_P-type_SiC_MOSFET	WEB 掲載
2017.7.6	プレリリース 筑波大学	正方形型シクロブタジエンの観測に世界で初めて成功 —理論上の 予測を実験的に証明—(関口章・中本真晃)	TIMS

①

化 学 工 業 日 報

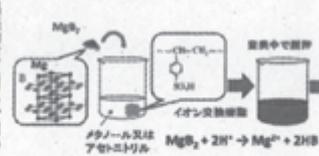
ホウ化水素シート創製 など 水素吸蔵などに応用

筑波大

筑波大、東北大、京工業大の共同研究グループは、世界で初めてホウ化水素シート（ホウファン）の創製に成功した。水素とホウ素だけで構成されている原子層が数層の二次元物質で、二ホウ化マグネシウム（Mg₂B₂）を原料に用いた、水素のプラズマオン（プラズマ）を保持しており、2000以上の水素分子を

放出する。電子材料や水素吸蔵材料、固体燃料、固体酸触媒などへの応用を期待する。

室温・大気圧下という温和な条件でMgとBのマグネシウムプラズマオンとプラズマを発生させて生成した。MgとBのイオン交換樹脂をエタノールまたはアセトニトリル中で混合、沈殿物を除去して乾燥させると、水素とホウ素の組成比が1対1の粉末状のホウ化水素シートが得られる。平均吸蔵量は4.3%だった。2000度から1200度までの幅広い温度域で水素分子が多量に放出されることも分かった。電子材料や水素吸蔵材料への応用だけでなく、固体燃料や固体酸触媒に活用できる可能性もあやうい。また、他の二ホウ化金属や今回生成したホウ化水素シートを



Mg₂ + 2H⁺ → Mg₂⁺ + 2H₂

出発物質を用い、別のイオン交換を繰り返して、新しい二次元物質群の生成も期待できる。

MgとBのマグネシウムプラズマオンとプラズマを交換して生成

グラフェンなどの二次元物質は三次元物質に比べて表面積が大きく、機械的柔軟性をもち、特異な電子状態などを有することが多い。ホウファンもその一つで、グラフェンを類する電子材料特性や水素吸蔵特性が予想されていた。ホウ素だけの二次元物質（ホウファン）は銀単結晶表面への真空蒸着により生成が成功しているが、これまでホウファンは実現できていなかった。

②

物材研など、「ホウ化水素シート」開発

優れた水素吸蔵性能新材料

2017/9/28 12:56 | 10/26 18:12 updated
©株式会社物材研新聞社

物質・材料研究機構（NIMS）は、筑波大学、東北大学、京工業大と共同で、二ホウ化マグネシウムを原料に用いて、優れた水素吸蔵性能を有する新材料「ホウ化水素シート（ボロファン）」の生成に成功したと発表した。電子材料や水素吸蔵材料以外にも固体燃料や固体酸触媒としての応用が期待できるとしている。

ホウ化水素シートは、ボロファンという通称名で理論的にその存在が予測されており、新しい水素吸蔵材料や電子材料としての優れた特性が期待されていたが、今回の研究は同物質の生成を初めて実現した。同研究グループでは、二ホウ化マグネシウムに含まれるマグネシウムの正イオンを水素の正イオンと交換することで水素とホウ素のみで構成される新しい二次元物質が、室温・大気圧下という温和な条件で生成することを見出した。

ホウ化水素シートは、2000度から1200度の幅広い温度範囲で水素分子を放出するため、理論予測されていた電子材料や水素吸蔵材料以外にも固体燃料や固体酸触媒として応用できる可能性がある。また、既存材料との組み合わせにより、資源・エネルギー・環境に関するさまざまな新材料として有望であるほか、他の二ホウ化金属や得られたホウ化水素シートをスタート物質として用いて別のイオン交換を行うことにより、別の新しい二次元物質群の生成も期待できるとしている。

'18.3.5

(6) 光るデンドリマー作成 筑波大など 溶媒蒸気の識別可能

筑波大学などの研究グループは、光るデンドリマー（Dendrimer）の構造を制御することで、溶媒蒸気の識別が可能であることを報告した。この研究成果は、化学センサーや環境モニタリングなどに応用できる可能性がある。

デンドリマーは、樹木のような分岐構造を持つ高分子で、その表面に特定の官能基を導入することで、特定の分子と選択的に結合する性質を持つ。研究グループは、この特性を利用して、異なる溶媒蒸気に対する発光強度の差を生み出すことに成功した。

実験では、異なる溶媒蒸気（エタノール、メタノール、酢酸エチルなど）をデンドリマー溶液に導入すると、発光強度がそれぞれ異なる程度に変化した。これは、溶媒蒸気とデンドリマーの相互作用によって、発光体の励起状態が変化するためと考えられる。

この研究成果は、溶媒蒸気のリアルタイムでの識別や、微量検出に役立つ可能性がある。また、この技術を応用して、特定の有害物質の検出や、環境モニタリングにも応用できる。研究グループは、さらなる応用研究を進めている。

③

④

原子のシート間の相互作用 筑波大など観測成功

筑波大学などの研究グループは、原子のシート間の相互作用を観測することに成功した。この研究成果は、材料科学やナノテクノロジーの発展に大きく貢献する可能性がある。

原子のシートは、グラフェンや二硫化炭素（MoS₂）などの二層構造を持つ材料で、その層間には弱いファンデルワールス力が作用している。研究グループは、この相互作用を高精度で観測し、その強さや方向性を明らかにした。

実験では、原子力顕微鏡（AFM）を用いて、原子のシート間の距離や相互作用の強さを測定した。その結果、異なる材料間では相互作用の強さが大きく異なることがわかった。これは、原子の配列や電子状態の違いによるものと考えられる。

この研究成果は、原子のシートを構成する材料の設計や、層間相互作用を利用した新材料の開発に役立つ。また、この技術を応用して、ナノスケールでの材料特性の制御にも応用できる。研究グループは、さらなる応用研究を進めている。

平成 29 年度年報

筑波大学エネルギー物質科学研究センター

Tsukuba Research Center for Energy Materials Science

筑波大学学際物質科学研究センター

Tsukuba Research Center for Interdisciplinary Materials Science

〒305-8571 茨城県つくば市天王台 1-1-1

University of Tsukuba, 1-1-1 Tennodai Tsukuba, Ibaraki 305-8571, JAPAN

URL: <http://www.trems.tsukuba.ac.jp/> TREMS

<http://www.tims.tsukuba.ac.jp/> TIMS

Phone & Fax : 029-853-8085 (担当事務)

平成29年度・2017 年報
筑波大学 エネルギー物質科学研究センター
筑波大学 学際物質科学研究センター

Tsukuba Research Center for Energy Materials Science (TREMS)
Tsukuba Research Center for Interdisciplinary Materials Science (TIMS)

〒305-8571 茨城県つくば市天王台1-1-1

University of Tsukuba, 1-1-1 Tennodai, Tsukuba, Ibaraki 305-8571, Japan

Tel: 029-853-8085 (担当事務) Fax: 029-853-8085

<http://www.trems.tsukuba.ac.jp/>