



2025年報

TREMS

Annual Report

2025

Tsukuba Research Center for Energy Materials Science

はじめに

TREMS センター長 西堀英治

エネルギー物質科学研究センター（TREMS）は、数理物質系および筑波大学の研究力の強化を目的に、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 日に設立されました。2017 年の設立時には、「質の良いエネルギーを取り出すための先進エネルギーの学理」を創造することをセンターの共通の目標として、「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 3 部門を設置しました。2020 年からのコロナ禍など社会情勢の急激な変革がありました。その間に“つくばスマートシティ構想”が立ち上がるなど TREMS を取り巻く環境も変化しました。TREMS はつくばスマートシティ構想を支えるスマートエネルギーソースの基盤研究を推進することを目的とし 2023 年 4 月 1 日に改組を行いました。筑波大学で培ってきた独創性の高い物質科学を 3 つの柱となるデバイス部門とし、それらを支え、新分野の創成への人材・研究成果の循環を目指す 3 つの基盤的部門を設置し、スマートエネルギー分野における連携拠点の核となることを目指します。

特筆すべきことの一つは、センターのメンバーが機構長を務める「有機無機スピンスサイエンス研究機構」が立ち上がったことです。この機構では、企業や研究所による物質・材料・デバイス・装置の社会実装を目指します。また、2022 年度に立ち上がった、センターのメンバーがセンター長を務める開発研究センター「ゼロ CO2 エミッション機能性材料開発研究センター」については、2024 年度の概算要求で採択された高等研究院に関連し、新たに R3 センター「ホウ化水素研究センター」が立ち上がりました。「ゼロ CO2 エミッション機能性材料開発研究センター」は 2025 年 10 月にこのセンターに包含されました。今後の益々の研究の発展を祈願します。国際連携では、ドイツ Duisburg-Essen 大学やデンマークオーフス大学、東南アジア諸国の著名な大学（バンドン工科大学、マレーシア国民大学、ペトロナス工科大学、キングモンクット工科大学トンブリー校、フィリピン大学ディリマン校等）とのグローバルコミュニティの拡大に努めました。センターメンバーが世話人教員を務めたオーフス大学とのユニット招致が 2024 年度～2026 年度の予定で新たに開始されました。また、センター構成教員の多くが、TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」の代表もしくはメンバーとして参画し、つくば地区における共同研究に取り組んでいます。

このような活動を通じて、筑波大学の指定国立大学法人構想における「国際水準の研究の推進」や「研究成果の社会実装」を積極的に推進することで、TREMS はつくば地区におけるエネルギー物質科学の重要な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. 設置の趣旨と沿革	
1.1 設置の趣旨	1
1.2 沿革	3
1.3 歴代センター長	4
1.4 TREMS ロゴマーク	4
2. 組織	
2.1 構成員	5
2.2 委員会	6
2.3 学内委員等	6
2.4 組織図	7
2.5 部門	8
2.6 WEB	13
2.7 所在地	13
3. センター活動報告	
3.1 運営協議会等	14
3.2 TREMS セミナー、シンポジウム等開催記録	14
3.3 実績報告	19
3.4 TREMS が関わるその他の活動	21
4. 研究活動報告	
4.1 (1) エネルギーハーベスト部門	23
(2) 光エネルギー変換部門	40
(3) 電気エネルギー制御部門	66
(4) マテリアル分子設計部門	86
(5) サブナノ領域評価部門	107
(6) 基礎融合グループ部門	129
4.2 競争的資金獲得状況	157
4.3 共同研究	165
4.4 研究生等の受入れ	175
4.5 受賞	176
4.6 学会活動・各種委員等	180
4.7 新聞報道・特記事項他	186

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 2003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、2011 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。

2014 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、2017 年 10 月に「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。

2017 年度の末にはドイツのデュースブルクエッセン大学 Center for Nanointegration Duisburg-Essen（CENIDE）および台湾国立清華大学との合同シンポジウムを開催し、そこから芽吹いた国際共同研究活動は、2018 年度の CENIDE と筑波大学数理物質系との部局間協定の締結に繋がっています。2021 年度には、ポーランド科学技術アカデミーの高圧物理研究所（UNIPRESS）と本学数理物質系との部局間協定締結にも大きく貢献しました。その他にもデンマークのオーフス大学融合材料研究センターからの海外教育研究ユニット招致や東南アジアとの国際シンポジウム（SACSEM）を行うなど、国内外の連携に向けてその活動を加速させています。

2023 年 4 月より TREMS が進めてきた先進エネルギーの基礎研究をスマートエネルギーソースの開発に展開するグリーンイノベーション基盤研究拠点を構築するために、継続・新設も含めて重点研究課題を更新し、各部門の再編とセンター教員構成の改編・メンバー増強を行いました。具体的には、未来社会のエネルギー基盤を構築するために物質機能を極限まで引き出した革新的エネルギーソースの提供を目指す主要 3 部門（エネルギーハーベスト、光エネルギー変換、電気エネルギー制御）を新

設し、専門領域横断的な新物質・デバイス開発やそれらの評価・解析の新手法の開発を担う 2 部門（マテリアル分子設計、サブナノ領域評価）を設置しました。今後は、学内他部局との連携・TIA 連携・海外連携を強化し、スマートエネルギー分野におけるつくば連携研究拠点の核となるとともに、5年後の新たな開発研究センター設立への貢献を目指します。また、筑波大学における研究環境のダイバーシティを活かして、物質科学の先端技術の産業展開を円滑に実践する仕組みを構築すべく、研究成果の情報発信に取り組んでいきます。

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	11月		筑波大ブ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	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が戦略イニシアティブ(A)に昇格
2010年	3月	18日	TIMS 客員研究員を1名採用
2011年	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
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
2014年	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	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A1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
2017年	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	4月	1日	基礎融合リサーチグループに9名を新たに採用
	7月	1日	客員教員2名を新たに採用
	10月	16日	客員教員1名を新たに採用
2019年	1月	1日	エネルギー物質部門に1名を新たに採用
			基礎融合リサーチグループに1名を新たに採用
	5月	1日	客員教員1名を新たに採用
2020年	2月	1日	客員教員1名を新たに採用
	6月	1日	客員教員1名を新たに採用
		30日	基礎融合リサーチグループに2名を新たに採用
	10月	28日	マテリアル分子設計部門に1名を新たに採用
	12月	24日	基礎融合リサーチグループ2名を新たに採用
2021年	8月	1日	客員教員1名を新たに採用
2022年	9月	1日	客員教員1名を新たに採用
2023年	1月	1日	客員教員1名を新たに採用
2023年	4月	1日	エネルギー物質科学研究センター(TREMS)3部門25名から6部門28名へ内部組織再編

2024年	1月	1日	連携融合リサーチグループに1名を新たに採用
2024年	5月	1日	客員教員1名を新たに採用
2025年	2月	1日	客員教員1名を新たに採用
2025年	4月	1日	客員教員1名を新たに採用
2025年	9月	29日	連携融合リサーチグループに1名を新たに採用

1.3 歴代センター長

TIMS

2015年4月～2017年9月	鍋島達弥	(化学域)
2013年4月～2015年3月	中村潤児	(物質工学域)
2010年4月～2013年3月	鍋島達弥	(物質創成先端科学専攻)
2006年2月～2010年3月	大塚洋一	(物理学専攻)
2003年4月～2006年1月	赤木和夫	(物質工学系)

TREMS

2023年4月～	西堀英治	(物理学域)
2019年4月～2023年3月	神原貴樹	(物質工学域)
2017年10月～2019年3月	鍋島達弥	(化学域)

1.4 TREMS ロゴマーク



2. 組織

2.1 構成員

センター長 西堀英治 教授 (数理物質系、物理学域)

エネルギーハーベスト部門

守友浩	教授	(数理物質系、物理学域、部門長)
辻村清也	教授	(数理物質系、物質工学域)
二瓶雅之	教授	(数理物質系、化学域)
柳原英人	教授	(数理物質系、理工学域)
丹羽秀治	助教	(数理物質系、物理学域)

光エネルギー変換部門

末益崇	教授	(数理物質系、理工学域、部門長)
櫻井岳暁	教授	(数理物質系、理工学域)
都甲 薫	教授	(数理物質系、理工学域)
所裕子	教授	(数理物質系、物質工学域)
梅田享英	准教授	(数理物質系、理工学域)

電気エネルギー制御部門

岩室憲幸	教授	(数理物質系、理工学域、部門長)
三俣千春	教授	(数理物質系、理工学域)
矢野裕司	教授	(数理物質系、理工学域)
磯部高範	准教授	(数理物質系、理工学域)
奥村宏典	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)

マテリアル分子設計部門

笹森貴裕	教授	(数理物質系、化学域、部門長)
大谷実	教授	(計算科学研究センター、数理物質系、物理学域)
岡田晋	教授	(数理物質系、物理学域)
近藤剛弘	教授	(数理物質系、物質工学域)
石塚智也	准教授	(数理物質系、化学域)

サブナノ領域評価部門

西堀英治	教授	(数理物質系、物理学域、センター長、部門長)
上殿明良	教授	(数理物質系、理工学域)
羽田真毅	教授	(数理物質系、理工学域)
丸本一弘	教授	(数理物質系、物質工学域)

基礎融合グループ部門

山本洋平	教授	(数理物質系、物質工学域、部門長)
中村貴志	教授	(数理物質系、化学域)
桑原純平	准教授	(数理物質系、物質工学域)
山岸 洋	准教授	(数理物質系、物質工学域)
久保 敦	講師	(数理物質系、物理学域)

連携融合リサーチグループ

石田政義	教授	(システム情報系、エネルギー・環境学域)
神原貴樹	教授	(数理物質系、物質工学域)
都倉康弘	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)
福田直也	教授	(生命環境系、農学域)
菅又功	准教授	(数理物質系、化学域)
大木理	助教	(数理物質系、物質工学域)
正田浩一朗	助教	(数理物質系、化学域)

客員教員	大島武	客員教授	(量子科学技術研究開発機構)
	小笠原寛人	客員教授	(SLAC 国立加速器研究所)
	坂田修身	客員教授	(高輝度光科学研究センター)
	竹口雅樹	客員教授	(物質・材料研究機構)
	筒井智嗣	客員教授	(高輝度光科学研究センター)
	松尾 豊	客員教授	(名古屋大学)
	安田弘之	客員教授	(産業技術総合研究所)
	韓礼元	客員教授	(上海交通大学)
	大島永康	客員教授	(産業技術総合研究所)
	DAUDIN Bruno	客員教授	(フランス原子力・代替エネルギー庁 (CEA))、 (フランス国立科学研究センター (CNRS))
	齋 均	客員教授	(産業技術総合研究所)
	Brian Yulianto	客員教授	(バンドン工科大学)
	守屋剛	客員教授	(東京エレクトロンテクノロジーソリューションズ株式会社)
	高谷光	客員教授	(帝京科学大学)
	腰原伸也	客員教授	
特令教授	鍋島達弥		
事務職員	太田啓一	(主任)	2013. 4. 1～2026. 3. 31
	森下由美子	(事務補佐員)	2024. 10. 1～2026. 3. 31

2.2 委員会

TREMS 運営委員会

西堀英治 (センター長、部門長)	守友浩 (部門長)
末益崇 (部門長)	岩室憲幸 (部門長、融合研究企画調整室長)
笹森貴裕 (部門長)	山本洋平 (部門長)

TREMS 運営協議会

西堀英治 (センター長、部門長)	守友浩 (部門長)
末益崇 (部門長)	岩室憲幸 (部門長、融合研究企画調整室長)
笹森貴裕 (部門長)	山本洋平 (部門長)
初貝安弘 (数理物質系長)	吉田郵司 (産業技術総合研究所)
高田和典 (物質・材料研究機構)	

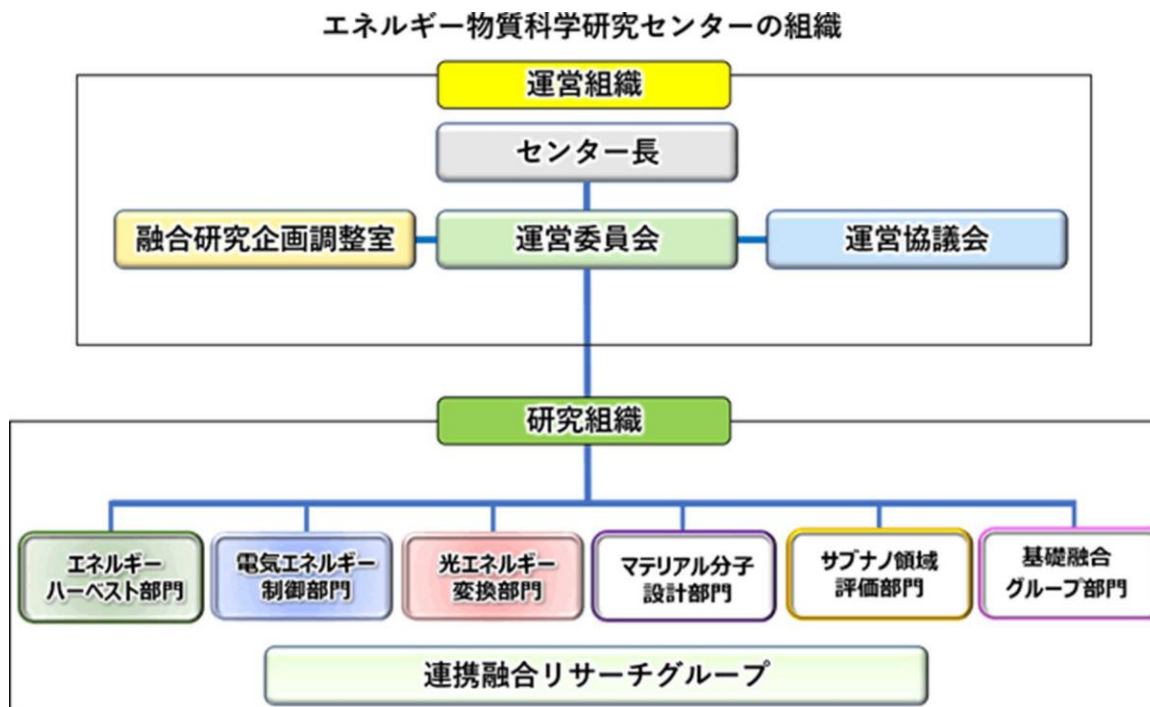
2.3 学内委員等

サブネットワーク管理委員会

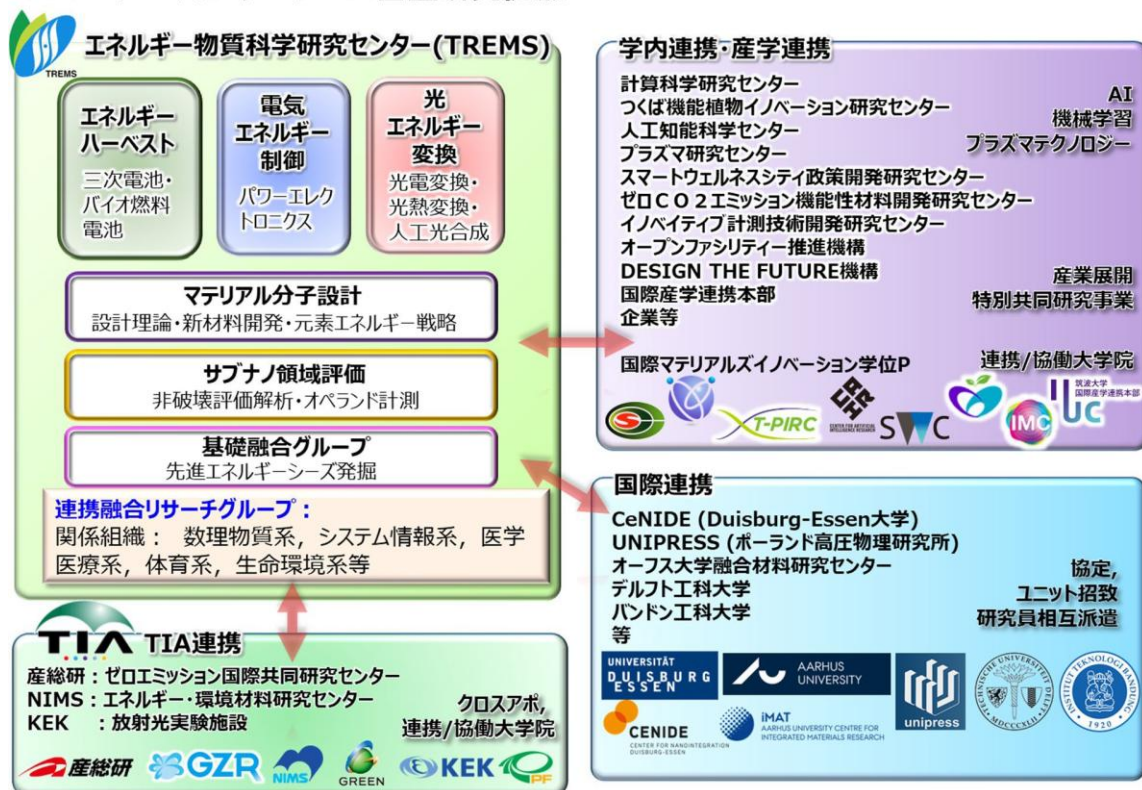
委員長

西堀英治

2.4 組織図



スマートエネルギーソース基盤研究拠点

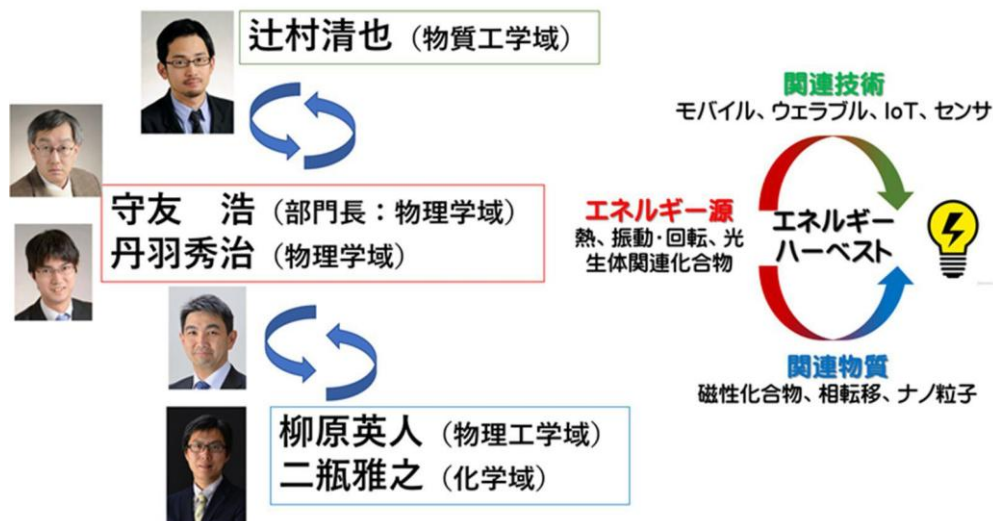


2.5 部門

エネルギーハーベスト部門

本部門の使命は、SDGs の実現や IoT 社会の構築に資する革新的なエネルギーハーベスト物質・技術およびその関連技術を確立することです。エネルギーハーベストとは、熱、振動・回転、光、生体関連物質、等といった身近なエネルギー源から使いやすい電気エネルギーを得ることです。本部門では、(1) エネルギーハーベストの学理開拓と高性能化、(2) 関連技術の提案と実証、そして、(3) 関連物質の開拓・開発、を推進します。特に、関連物質の開拓・開発を通じて、新しいエネルギーハーベストの提案につなげます。本部門では、国プロの推進や民間企業との共同研究を通じて、創出された技術の社会実装も目指します。

エネルギーハーベスト部門の構成員

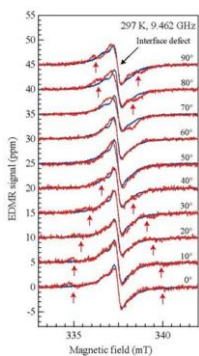


光エネルギー変換部門

光エネルギー変換部門のミッションは、新しい光エネルギー変換物質を創成し、または既存の材料との新しい組み合わせにより、光エネルギーを高効率に変換する wearable/flexible なデバイスを実現することにある。光エネルギーの変換には多くの種類があり、光のエネルギーを太陽電池により電気エネルギーに直接変換することに留まらず、水の電気分解により化学エネルギーに変換したり、特定波長の光（電磁波）照射により物質の磁気構造を変えたり、半導体を金属に相転移させるなど、さまざまな現象が応用可能であり、多くの変換ルートがある。また、光（電磁波）照射により物質の電子状態が変化することを利用して、物質中の様々な欠陥の評価が可能である。さらに、光（電磁波）エネルギーを変換することとは逆方向に、磁性体中の磁化の歳差運動によるサブ THz 波の発振にも注力していきたい。今後も、各研究者の自由な発想を協働の中で伸ばし、光（電磁波）にかかわる研究を推進する。

TREMS光エネルギー変換部門

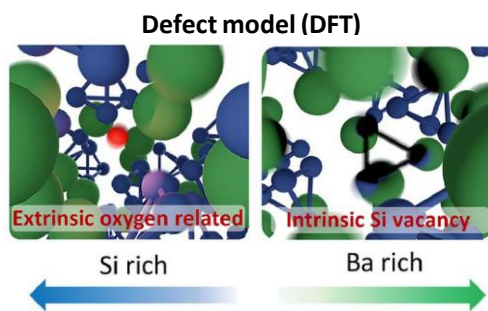
1. Wearable/Flexibleな高効率光エネルギー変換物質、デバイス
2. 光変換現象の根源的理解に基づく材料設計と新物質の創成
3. 光変換にかかわる既存材料との新しい組み合わせ
4. 光を利用した様々な物質操作、計測



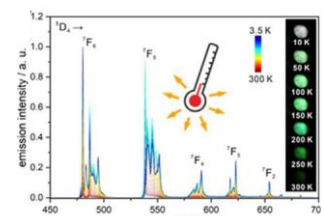
電氣的検出ESR



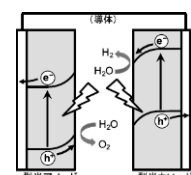
GaAs膜/plastic



BaSi₂
New material for solar cells



Luminescent温度計



Z-scheme水分解

NIMS 国立研究開発法人 物質・材料研究機構
National Institute for Materials Science

UNIVERSITÉ
Grenoble
Alpes

TU Delft

UNIVERSITI
KEMANGSAAN
MALAYSIA
National University
of Malaysia

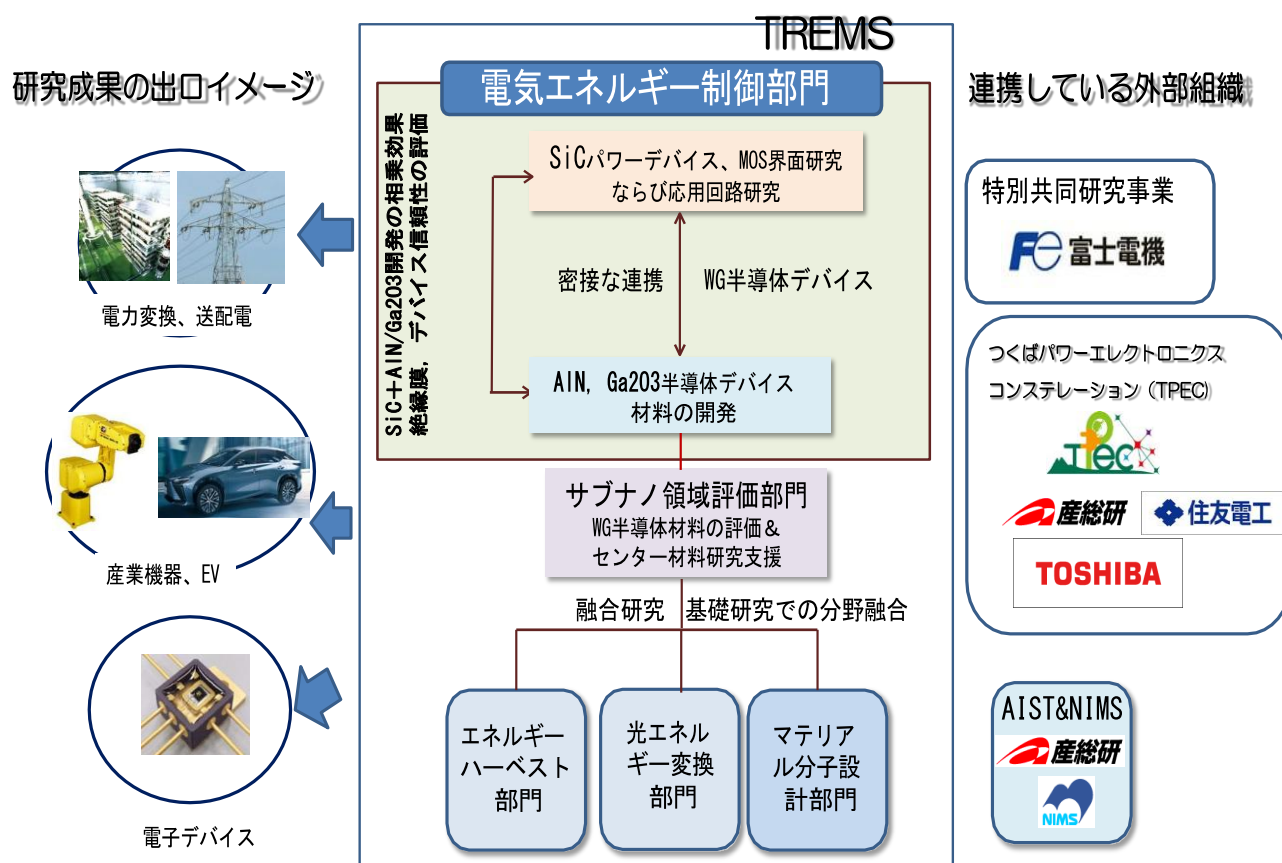
PF
NEEL
institut

産総研

spintec
MINI IN ELECTRONICS

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) デバイスが普及し始めるようになってきたが、SiC デバイス動作の学理に関してはわからないことが依然として多くあり、その特性改善にはまだ十分な伸びしろがある。電気エネルギー制御部門では、SiC ならびに 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、究極のパワー半導体材料と言われる超ワイドバンドギャップ半導体材料である酸化ガリウム (Ga_2O_3) や窒化アルミ (AlN) などの研究にもいち早く着手し、パワーエレクトロニクスへの応用を中心に基礎から応用までをカバーし研究を行う。



マテリアル分子設計部門

マテリアル分子設計部門

ミッション

- ・触媒反応、有機化学、有機元素化学など化学の学理を最大限に活用
👉 元素資源の活用、環境エネルギー材料創製へと繋ぐ。
- ・社会のニーズの高い環境エネルギー材料開発の学術基盤構築
👉 企業が実施できないような基礎研究に注力し、イノベーションを達成。
- ・材料機能や作用メカニズムを、原子レベル・電子レベルで研究
👉 社会からの要望に、適切・迅速に応える材料設計・物質創製。

部門長：笹森貴裕（化学） 元素科学・元素戦略

岡田晋（物理学） 量子力学に立脚した計算物質化学

大谷実（計算科学研究センター） 表面・界面の微視的な物理現象の計算物質化学

近藤剛弘（物質工学） 水素社会・カーボンニュートラルに貢献する新物質開発

石塚智也（化学） 資源枯渇問題解決のための革新的触媒開発

マテリアル分子設計部門のミッションは、触媒反応、有機反応、重合反応など化学反応を最大限に利用して環境エネルギー材料を創製することである。社会のニーズの高い環境エネルギー材料について、企業が実施できないような基礎研究に注力し、求められる機能をもつ新物質を、迅速かつ適切に創り出すための盤石な知の基盤を形成する一方、基礎知見をイノベーションに繋げるための分子科学を推進する。研究アプローチの特色は、材料機能や作用メカニズムを最先端の放射光分光、プローブ顕微鏡および第一原理量子力学計算によって、原子レベル・電子レベルで研究すると同時に、材料設計・物質合成を行うところにある。物理化学、固体物性、電気化学、有機化学、元素化学、高分子化学、触媒化学、放射光科学、炭素材料科学などの分野融合的な共同研究チームを構成する。さらに、研究成果の産業化を目指して、産業技術総合研究所、藻類バイオマス・エネルギー開発研究センター、企業との密接な関係を保ち、シーズを実用化に導く体制を構築する。具体的には、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、高分子半導体として機能する共役高分子材料の簡便な合成手法の開発、新規な設計指針に基づく光機能をもつ分子群の合成、 π 共役有機分子マイクロ結晶共振器からのレーザー発振、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を進めている。さらには、マテリアル分子設計部門のメンバーがセンター長を務め、2022年度に設立した、筑波大学ゼロCO₂エミッション機能性材料開発研究センターと協働し、白金などの貴金属を使わずに水素を安価に製造、貯蔵・輸送する技術や、銅など安価な卑金属を新たな触媒材料として活用する方法など、元素戦略・カーボンニュートラル社会実現に資する研究を推進する。

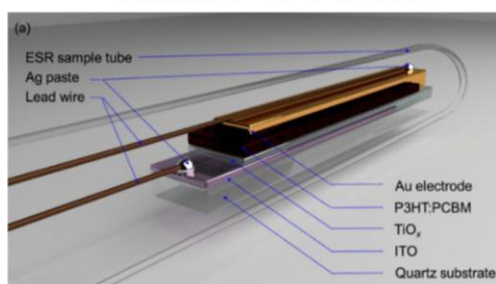
サブナノ領域評価部門

サブナノ領域評価部門は、デバイスの原子、電子スケールの構造を評価する先端的な計測研究を推進する。メンバーは、放射光計測の西堀、笠井、陽電子消滅の上殿、電子スピン共鳴の丸本、時間分解電子線回折の羽田からなる。先端放射光、陽電子消滅、デバイスの電子スピン共鳴、時間分解電子線回折の筑波大学が強みを有する特徴的な計測法の先鋭化を進めるとともに、それら手法のエネルギーデバイスへの応用研究を進めている。

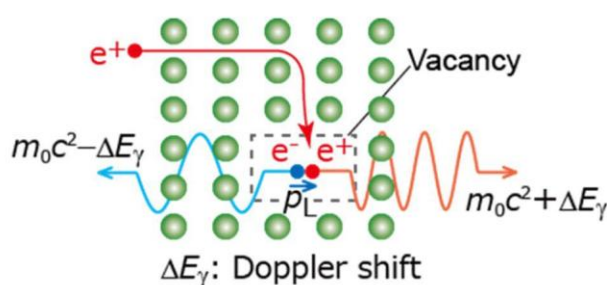
先端放射光 (SPRING-8/SACLA XFEL)



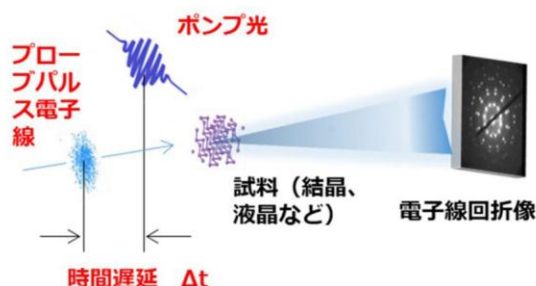
光誘起オランダESR



陽電子消滅

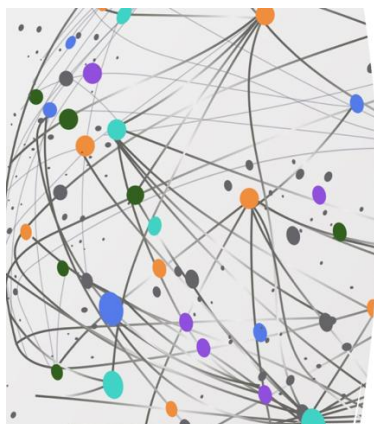


超高速時間分解電子線回折



基礎融合グループ部門

基礎融合グループ部門は、自己組織化による機能材料設計や超分子化学など独自の基礎研究を発展させます。加えて触媒反応の表面科学による理解など社会ニーズの高い基礎研究も推進します。他の部門の研究者との有機的な連携により、新しい分野の創成を目指します。



基礎融合グループ部門

- 山本洋平 数理物質系 物質工学域 教授
- 中村貴志 数理物質系 化学域 教授
- 桑原純平 数理物質系 物質工学域 准教授
- 山岸 洋 数理物質系 物質工学域 准教授
- 久保 敦 数理物質系 物理学域 講師

2.6 WEB

TREMS <https://www.trems.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

共同研究棟 D 103、104-1、104-2、201-1、201-2、202-1、202-2、301-1、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 運営協議会等

運営協議会

2025 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

開催：2026 年 3 月 10 日（火）

1. 2024年度第 1 回 TREMS 運営協議会議事要旨の確認
2. 2025 年度 TREMS 教職員について
3. TREMS 研究室について
4. 2025年度予算執行状況について
5. TREMS 共用装置設置場所及び管理者について
6. 2025 年度 TREMS 活動報告
7. 研究センター中間評価について

運営委員会

原則として、毎月 1 回、近年は隔月で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諮っている。

2025 年度は 5/8（木）、7/9（水）、9/26（金）、11/26（水）、1/26（月）の計5回開催した。

3.2 TREMS セミナー、シンポジウム 等開催記録

TREMS セミナー・講演会

- | | |
|-----------|---|
| 2025/4/ 2 | 物質科学セミナー（共催）講演者:柏木隆成（筑波大学数理物質系物質工学域）
「高温超伝導体単結晶デバイスを用いた次世代電波技術の創出」
会場：オンライン（Zoom）
世話人：山岸洋 |
| 2025/6/ 4 | 超分子化学講演会（共催）講演者：Prof. Dr. Guido Clever（TU Dortmund, Germany）
「From Heteroleptic Coordination Cages to Complex Molecular Systems」
会場：総合研究棟B112
世話人：中村貴志 |
| 2025/6/18 | 物質科学セミナー（共催）講演者：Dr. Vadivel S MSc, PhD（SRM Institute of Science and Technology）「Engineering Multifunctional Bismuth-Based Materials for Sustainable Energy Conversion and Storage」
会場：総合研究棟B310
世話人：山岸洋 |
| 2025/6/18 | 物質科学セミナー（共催）講演者：高鍾斌博士（Max Planck Institute for Sustainable Materials）「高速生産可能な新合金の設計とマルチスケールにおける変形機構の調査」
会場：オンライン（Teams）
世話人：山岸洋 |

- 2025/6/23 物質科学セミナー（共催）講演者：中谷圭太郎（パリ・サクレ大学）
「フォトクロム反応のpH制御と連鎖反応」
場所：3B213 プレゼンテーションルーム
世話人：山岸洋
- 2025/6/25 物質科学セミナー（共催）講演者：Dr. Joshua Foo（University of Waterloo）
「Probing foundations of quantum theory with AMO platforms」
会場：オンライン（Teams）
世話人：山岸洋
- 2025/7/ 8 第16回元素化学セミナー 講演者：Prof. Dr. Arturo Espinosa Ferao（スペイン・ムルシア大学）「Three-Membered Rings with p-Block Elements: Scope, Ring Strain and Aromaticity」
会場：総合研究棟B110
世話人：笹森貴裕
- 2025/7/10 物質科学セミナー（共催）講演者：Dr. Rekha Goswami Shrestha（Planet Savers Inc.）「Sensing, Capture, Storage and Reduction of CO₂ to Value Added Chemicals」
会場：オンライン（Teams）
世話人：山岸洋
- 2025/7/15 TREMSセミナー（共催）講演者：Dr. Joost Kimpel（Department of Chemistry and Chemical Engineering, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden）「開放系・室温下における混合イオン・電子伝導体の共役ポリマー合成」
会場：総合研究棟B112
世話人：桑原純平
- 2025/7/31 セミナー（共催）講演者：平原佳織（千葉大学工学研究院物質科学コース）
「透過電子顕微鏡を用いた単一カーボンナノチューブおよび単一界面の熱動態計測」
会場：総合研究棟B204
世話人：近藤剛弘
- 2025/8/ 6 物質科学セミナー（共催）講演者：Dr. Susmita Roy（Department of Materials Science, University of Tsukuba）「Supramolecular Assembly Materials for Next-Generation Energy Storage Applications」
会場：オンライン（Zoom）
世話人：山岸洋

- 2025/9/ 9 物質科学セミナー（共催）講演者：佐々木陽一（九州大学工学研究院応用化学部門准教授）「有機分子の励起三重項を活用した光エネルギー変換」
会場：3B213 プレゼンテーションルーム
世話人：山岸洋
- 2025/9/22 物質科学セミナー（共催）講演者：Dr. Muhammad Rezki (Doctoral Program in Materials Innovation Degree Programs in Pure and Applied Sciences, Graduate School of Science and Technology, University of Tsukuba) 「Engineering Biomolecule–Material Interfaces for Next-Generation Bioelectronic Devices」
会場：オンライン (Zoom)
世話人：山岸洋
- 2025/10/ 2 物質科学セミナー（共催）講演者：Dr. Boniface Fokwa (Chemistry Department, University of California, Riverside) 「Designing Earth-Abundant Bulk and Nano-Electrocatalysts for Hydrogen Production」
会場：総合研究棟B310
世話人：山岸洋
- 2025/11/ 6 物性論セミナー（共催）講演者：Dr. Mohammad Hafezi (University of Maryland) 「Nonlinear topological photonics」
会場：自然系学系棟D 301
世話人：溝口知成
- 2025/11/18 物質科学セミナー（共催）講演者：Prof. Jinn P. Chu (Department of Materials Science and Engineering, National Taiwan University of Science and Technology, Taipei 106335, Taiwan) 「Superhydrophilic Metallic Coating: PVD Fabrication and Applications」
会場：総合研究棟B310
世話人：近藤剛弘
- 2025/11/27 物質科学セミナー（共催）講演者：吉田巧博士（英国セントアンドリュース大学物理学学科）「ディスプレイだけじゃない有機EL ― 光通信と電流駆動レーザーへの展開―」
会場：3F 600
世話人：山岸洋
- 2025/12/18 セミナー（共催）講演者：末國晃一郎准教授（九州大学）「熱電変換材料のフロンティア：高性能化戦略と新規化合物探索」
会場：自然系学系棟D301
世話人：西堀英治

- 2026/1/19 トポロジ領域 合同セミナー（共催）講演者：富永淳二（産業技術総合研究所名誉リサーチャー）「カルコゲン超格子薄膜のトポロジカル絶縁体とその物性」、岩本敏（東京大学先端科学技術研究センター／生産技術研究所教授）「光グラフェン構造を活用した光導波路とその可能性」、高橋駿（京都工芸繊維大学電気電子工学系 准教授）「三次元フォトニック結晶における近赤外トポロジカルヒンジ状態の観測」、小林伸聖（公益財団法人電磁材料研究所研究開発事業部研究主監）「金属-絶縁体ナノグラニューラ材料におけるトンネル伝導と多様な機能性」、伊藤耕三（東京大学特別教授／物質・材料研究機構フェロー）「高分子にとってのトポロジとサーキュラーエコノミーへの挑戦」、山本洋平（筑波大学数理物質系教授）「自己組織化トポロジカル有機レーザーとオプトケミストリーへの展開」、吉岡宏晃（九州大学大学院システム情報科学研究院准教授）「プリンテッド有機マイクロナノ構造を用いたトポロジカル光デバイス」、山下兼一（京都工芸繊維大学電気電子工学系 教授）「室温トポロジカルポラリトンの物性とデバイス」
会場：総合研究棟B110（ハイブリット開催）
世話人：山本洋平
- 2026/1/30 第17回元素化学セミナー（共催）講演者：Prof. Dr. François Gabbai (Texas A&M University, (USA)) 「Carbenium -containing Platforms in Organoelement Chemistry」
会場：総合研究棟B110
世話人：笹森貴裕
- 2026/2/19 物質科学セミナー（共催）講演者：Michael T. Pettes, Ph.D. (Deputy Group Leader and Staff Scientist, Center for Integrated Nanotechnologies, Materials Physics and Applications Division, Fellow of the ASME) 「Controlling Heat Conduction in Graphene and Carbon Nanomaterials by Strain and Isotope Engineering」
会場：総合研究棟B310
世話人：山岸洋
- 2026/2/24 物質科学セミナー（共催）講演者：Professor Hye Jin Lee (Department of Chemistry, Kyungpook National University) 「Nanobiohybrid Material-Driven Biosensors for Biomedical and Environmental Applications」
会場：総合研究棟B108
世話人：山岸洋
- 2026/3/11 第18回元素化学セミナー（共催）講演者：Prof. Dr. Jan J. Weigand (TU University Dresden (Germany)) 「Modular Silver-Phosphinidenide Clusters as Building Blocks for Multidimensional Metal-Organic Frameworks」
会場：総合研究棟B110
世話人：笹森貴裕

シンポジウム・ワークショップ・研究会

- 2025/9/10 第13回TIAナノグリーン・サマースクール（共催）
～9/12 講演者：坂田修身（高輝度光科学研究センター）、高谷光（帝京科学大学）、雨宮健太（高エネルギー加速器研究機構）、竹口雅樹（物質・材料研究機構）、齋均（産業技術総合研究所）、安田弘之（産業技術総合研究所）、則包恭央（産業技術総合研究所）、松尾豊（名古屋大学）
会場：筑波大学総合研究棟 B112
世話人：大谷実

2025/12/22

第2回有機無機量子スピンサイエンス・テクノロジー研究会（共催）

講演者：丸本一弘（数理物質系）「有機無機量子スピンサイエンス・テクノロジー研究センター（OIQSST）の紹介」、大野裕三（数理物質系）「GaAs/AlGaAs(110)超格子におけるスピン緩和」、羽田真毅（数理物質系）「超高速電子回折法による物質の構造ダイナミクス計測と計測装置開発のさらなる進展」、庄司光男（計算科学研究センター）「アミノ酸のホモキラリティ起源についての理論的探求」、所裕子（数理物質系）「物質と水の相互作用を利用した磁気状態のスイッチング」、丸岡照幸（生命環境系）「電子スピン共鳴法の地球科学・環境科学への応用」、小林伸彦（数理物質系）「有機半導体の結晶構造予測と輸送理論」、竹谷純一（東京大学）「有機エレクトロニクス科学」

会場：ホテル日航つくば別館 1 階「昴中の間」

世話人：丸本一弘

2026/3/10

TREMS ワークショップ成果報告会（主催）

エネルギーハーベスト部門

辻村清也（数理物質系物質工学域教授）「電気化学バイオセンサへの応用を志向した酵素電極設計」

光エネルギー変換部門

都甲薫（数理物質系物理工学域教授）「タンデム太陽電池の低コスト化に向けたボトムセルの研究」

電気エネルギー制御部門

矢野裕司（数理物質系物理工学域教授）「SiC MOSFETの信頼性課題：ゲートAC駆動時のしきい値電圧変動」

奥村宏典（数理物質系物理工学域准教授）「窒化アルミニウムを用いた高温デバイス」

マテリアル分子設計部門

石塚智也（数理物質系化学域准教授）「芳香族サーキットにsp²窒素原子を含む四重縮合ポルフィリンの多段階プロトン共役電子移動」

サブナノ領域評価部門

上殿明良（数理物質系物理工学域教授）「陽電子消滅によるGaNへのイオン注入により導入された欠陥評価」

基礎融合グループ部門

久保敦（数理物質系物理学域講師）「Space-time表面プラズモンポラリトンの時間分解観察とスピンテクスチャ」

会場：総合研究棟 B110

世話人：西堀英治

3.3 エネルギー物質科学研究センターの実績報告

エネルギー物質科学研究センター（TREMS）は、エネルギー物質科学に係わる研究を推進するとともに、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いる。2025年度も引き続き対面をできるだけ活用して、学内外の最新の研究トピックスの紹介・意見交換を積極的に行い、学内外における連携・共同研究を促進する活動に努めた。海外の研究機関とのジョイントシンポジウムもオンライン会議として開催し、国際的な連携強化の推進を図った。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3回、セミナー・講習会は（共催含む）23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・サマースクールも対面形式で開催し、TREMS教員・客員教員が講義及びポスター発表等の指導を実施することで、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、国際一流誌への多数の論文発表など、2025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13回 TIA ナノグリーン・サマースクール

TIA 連携大学院サマー・オープンフェスティバル2025の一環として、2025年9月10日から12日までの3日間、第13回TIA ナノグリーン・サマースクールが開催された。本スクールはナノグリーン分野の研究に関心をもつ学生および社会人を対象とし、今年度は書類選考を経て参加者を受け入れた。

講義には世界の第一線で活躍する8名の講師をお招きし、それぞれ90分間で先端計測、化学変換、放射光分析、光機能性有機材料、太陽電池、バイオマス利用など、ナノグリーン分野に広く関わる基礎から応用研究まで幅広い内容の講義を行った。また参加者にはグリーンイノベーションに関する3つの課題から一つを選び、考察をまとめるレポートを提出してもらい、筑波大学教員が評価を行った。



日時：2025年9月10日（水）～ 9月12日（金）

主催：筑波大学大学院数理物質科学研究群、エネルギー物質科学研究センター（TREMS）

会場：筑波大学総合研究棟 B 棟 112 室

実施内容：

9月10日（水）

始業式、対面講座（90分）3コマ

9月11日（木）

対面講座（90分）3コマ、ナノグリーンプレゼンテーションセッション

9月12日（金）

対面講座（90分）2コマ、修了式

評価： レポートにより評価し優秀賞 2名を選考

担当教員： 大谷実（TREMS）、久保敦（TREMS）、丹羽秀治（TREMS）

講師：

坂田修身（高輝度光科学研究センター、筑波大学客員教授）

高谷 光（帝京科学大学、筑波大学客員教授）

雨宮健太（高エネルギー加速器研究機構、筑波大学客員教授）

竹口雅樹（物質・材料研究機構、筑波大学客員教授）

齋 均（産業技術総合研究所、筑波大学客員教授）

安田弘之（産業技術総合研究所、筑波大学客員教授）

則包恭央（産業技術総合研究所、筑波大学客員教授）

松尾 豊（名古屋大学、筑波大学客員教授）

TREMS ワークショップ（成果報告会）

2026年3月10日（火）に「エネルギー物質科学研究センターTREMSワークショップ（成果報告会）」を総合研究棟 B110 室にて開催した。エネルギーハーベスト部門、光エネルギー変換部門、電気エネルギー制御部門、マテリアル分子設計部門、サブナノ領域評価部門、基礎融合グループ部門の本年度の研究成果とトピックスの紹介を行った。

開催日時：2026年3月10日（火）12:30 ～ 18:00

会場：総合研究棟 B110 室

参加人数： 33名

3.4 TREMS が関わるその他の活動

- ・2025年度学術センター形成支援事業：有機無機量子スピンサイエンス・テクノロジー研究センター（OIQSST）（研究代表者：丸本一弘）

本事業では、半導体材料やデバイス、複合構造材料、生体物質、地球物質等で生じる諸現象を微視的視点から統一的に解析し、これら物質・材料・デバイスの性質・機能・性能を支配する要因を解明することで、量子マテリアルへの展開も図る有機無機量子スピンサイエンス・テクノロジー研究センターを形成する。電子スピンや核スピンを活用して分子・原子・原子核レベルの視点から解析・解明する技術に革新をもたらすために、本センター内で新たな共同研究も進める。異分野融合研究によりブレークスルーをもたらし、世界最先端研究を行い、本センターを通してサイエンスを深化させて社会実装を推進する。開発した革新的技術を国内と国際で共同利用可能にするためのセンター化を進める。

2025年度は、有機・無機ハイブリッド材料を基盤とした量子スピン物性の解明と応用研究を推進してきた。特に、分子磁性体やスピントロニクス材料における量子相関の制御、新奇スピン機能の発現機構解明などで顕著な成果を挙げ、量子デバイス応用への展開を先導している。

2025年12月22日、「第2回有機無機量子スピンサイエンス・テクノロジー研究会」および「意見交換会」をホテル日航つくばにて開催し、約50名が参加した。中核教員をはじめ、東京大学竹谷教授、東北大学小野教授、新潟大学増田教授、住友化学小暮主席研究員、日本電子岡野研究リーダーらを交えて、現在の最先端の研究成果である7つの講演に対して、共同研究を着想し、活発な議論を行う場となった。その議論は、今後の研究の進捗に多大な影響を与えうるものである。また、本拠点形成から生まれた有機無機量子スピンサイエンスの有益な研究成果を内外に広く配信する場とする目的も達成した。さらに、意見交換会では、出席した学生も交えて、カジュアルな形で、活発な意見交換を行い、有意義な会になった。

研究会プログラム

1. 丸本 一弘（数理物質系）有機無機量子スピンサイエンス・テクノロジー研究センター（OIQSST）の紹介
2. 大野 裕三（数理物質系）GaAs/AlGaAs(110) 超格子におけるスピン緩和
3. 羽田 真毅（数理物質系）超高速電子回折法による物質の構造ダイナミクス計測と計測装置開発のさらなる進展
4. 庄司 光男（計算科学研究センター）アミノ酸のホモキラリティ起源についての理論的探求
5. 所 裕子（数理物質系）物質と水の相互作用を 利用した磁気状態のスイッチング
6. 丸岡 照幸（生命環境系）電子スピン共鳴法の地球科学・環境科学への応用
7. 小林 伸彦（数理物質系）有機半導体の結晶構造予測と輸送理論
8. 竹谷 純一（東京大）有機エレクトロニクス科学

意見交換会プログラム

司会：石井 宏幸先生（筑波大学数理物質系物質工学域）

1. ご挨拶：竹谷 純一先生（東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻）
2. 乾杯のご挨拶：服部 利明先生（筑波大学数理物質系理工学域、前数理物質系長）
3. 意見交換会
4. 閉会のご挨拶：小林 伸彦先生（筑波大学理工学群応用理工学類長）

主催：有機無機量子スピンサイエンス・テクノロジー研究センター（OIQSST）

共催：リサーチユニット「有機無機スピンエレクトロニクス」

エネルギー物質科学研究センター（TREMS）

- ・筑波大学海外教育研究ユニット招致プログラム：オーフス大学融合材料研究センター研究室（西堀英治）

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。2022 年度にいったん終了したが 2024 年度 7 月より再開している。10月には副 PI を務める Xu Zhihao 助教が着任した。

4. 研究活動報告

4.1

(1) エネルギーハーベスト部門

教員：

守友浩（数理物質系・物理学域・教授）

丹羽秀治（数理物質系・物理学域・助教）

大学院生：

Qifa Gao（数理物質科学研究群・物理学学位プログラム・D1）

越川竜（数理物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

久保貴弘（数理物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

羽田共晴（数理物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

佐藤翔哉（数理物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

渡邊涼太（数理物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

山本裕陶（数理物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

福田荘志（数理物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

山田悠（数理物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

嶋津簾（数理物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

Tian Run（数理物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

守友浩、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ある。エネルギーサイエンスとは、エネルギーデバイス（エネルギーハーベスト、熱電変換、太陽電池、蓄電、等）中のエネルギー現象を電子論的・微視的に解明することである。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る。

他方、エネルギーイノベーションを実現するために、熱—電気エネルギー変換を中心としたエネルギーハーベストデバイスの開発を推進している。本部門では、温度変化で充電される三次電池(TB)を提案し、その開発を推進している。また、液体熱電変換 (LTE) の媒質を水溶液から有機溶液に拡張し、より広い視点からのデバイスの理解と開発を推進している。これらのデバイスを社会実装するために民間企業との共同研究を精力的に推進している。

【 1 】ゼラチン塗布による巨大な電位シフトとその起源

液体熱電変換素子 (LTE) の性能を決定づける重要なパラメータの一つは電位の温度係数 α である。近年、ゼラチンや PVA 等を加えた電解液を用いた LTE が巨大な α ($\sim$ 十数—数十 mV) を占めることが報告されている。我々は、ゼラチンの働きを深く理解するために、ゼラチンが電極電位自体に与える影響を調べた。図 1 (a)に示すように片方の電極にゼラチン等を塗布して、ゼラチン塗布による電位シフトは二つの電極の電位差として測定することができる。図 1(b)の赤線は、ゼラチンを塗布した電極の電位シフトである。-0.5V という巨大な電位差が発生していることが分かる。点線は何も塗布しない場合の電位差である。

我々は電解液の溶質種類と濃度を系統的に変えて、電位シフトを調べた。その結果電位シフトが電解液の pH にスケールすることが分かった。さらに、電位シフトの pH 依存性は、ゼラチンの表面電荷の pH 依存性に類似している。我々は、巨大な電位シフトをゼラチンの正の表面電荷で解釈した。

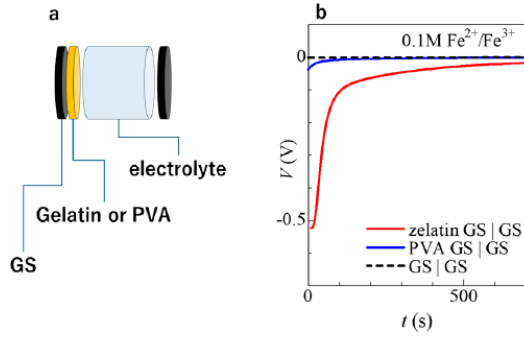


図 1: (a)電極配置図。(b)電位差の時間変化。電解液は $0.8MFe^{2+}/Fe^{3+}$ 水溶液である。

【 2 】 対流が LTE の抵抗成分に及ぼす効果

LTE に温度差を印可すると、浮力による電解液の対流が起こる。対流が LTE の素子抵抗の R の成分に及ぼす効果を回転電極法で調べた。角速度 ω で電極が回転すると、電極表面の電解液は遠心力で外側に押し出され、バルク領域から電極表面に向かって対流が起こる。回転電極法では、拡散層の厚さ δ は $\delta = 1.61D^{1/2}\nu^{1/6}\omega^{-1/2}$ と表される。 D 、 ν は拡散係数、動粘性係数である。抵抗成分は、溶液抵抗 R_s 、電荷移動抵抗 R_{ct} 、拡散抵抗 R_{dif} の三つであり、複素インピーダンスの等価回路解析で評価できる。図 2 に、(a)溶液抵抗 R_s 、(b)電荷移動抵抗 R_{ct} 、(c) 拡散抵抗 R_{dif} の $\omega^{1/2}$ 依存性を示す。 ω は回転電極の角速度である。 R_s と R_{ct} は ω に依存せず一定であった。

他方、 $\omega^{1/2}$ の増加に R_{dif} は急激に低下した。(c)の曲線は、 $A/\omega^{1/2}$ (A は定数) での最小自乗フィットの結果である。 A は $43.5\Omega s^{-1/2}$ と求まった。 R_{dif} は電極方面での反応物の濃度変化 (ΔC) を用いて、 $R_{dif} = 2k_B T \Delta C / eIC$ と表される。 k_B 、 T 、 e 、 I 、 C はボルツマン定数、温度、素電荷、電流、バルクでの反応物濃度である。拡散層での拡散速度と電流のバランスより、 $I = AFD\Delta C/\delta$ が得られる。 A 、 F は電極面積、ファラデー定数である。これらを用いて、 $R_{dif} = (3.22k_B TD^{-2/3}\nu^{1/6}/AeFC)\omega^{-1/2}$ が得られる。係数は $30.9\Omega s^{-1/2}$ である、観測値をよく再現している。以上により、 δ の低下という描像で R_{dif} の低下を定量的に説明できることが分かった。

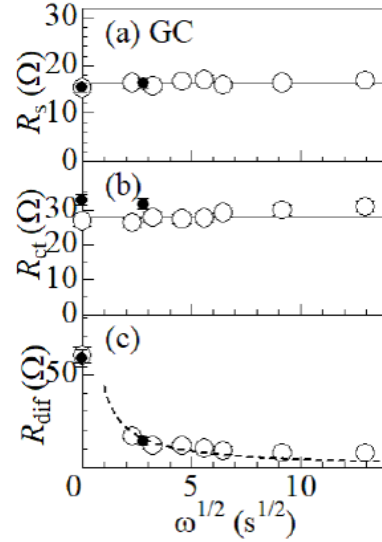


図 2 : (a)溶液抵抗 R_s 、(b)電荷移動抵抗 R_{ct} 、(c)拡散抵抗 R_{dif} の $\omega^{1/2}$ 依存性。 ω は回転電極の角速度。(a)と(b)の直線は定数での最小自乗の結果。

【 3 】 対流が熱伝導率に及ぼす効果

LTE の電解液に対流が起こると、対流熱伝達により有効熱伝導率 κ_{eff} が増大する。そこで、事前対流（ベレーナ対流）が κ_{eff}/κ に及ぼす影響を調べた。自然対流の基礎方程式は、レイリー数 Ra のみで記述できる。 Ra は電極間距離 d の三乗と温度差 ΔT に比例する。我々は、実験的に、 Ra と κ_{eff}/κ との関係を調べ、 $\kappa_{eff}/\kappa \propto Ra^{0.38}$ の経験則を得た。さらに、電解液中に物理的障害物を挿入することで、 κ_{eff}/κ を低減できることを実証した。

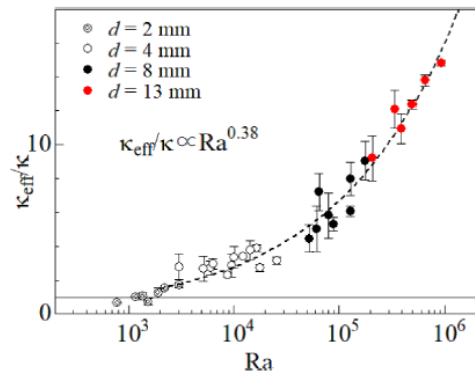


図 3: レイリー数 Ra と κ_{eff}/κ との関係。電極間距離の異なる 4 種対のセルを用いて実験を行った。点線は冪関数を用いた最小二乗フィットの結果。

【 4 】 拡散層の形成過程

LTE に一定電流を流すと、電極表面で電荷移動が起こる。電極表面での反応物濃度が低下は、バルク領域からの反応物の拡散を誘起する。やがて、厚さ δ の拡散層が形成され、濃度勾配は定常的になる。我々は、拡散層が形成プロセスの時間スケールを探るため、起電力の時間変化を調べた (図 4)。電流を流してから 40 秒までの間に、起電力が急激に減少した。これは、電極表面での反応物濃度が低下による平衡電位のシフトである。その後、起電力はなだらかに変化し、16 時間以降はほぼ一定になる。したがって、拡散層の形成は 16 時間程度かかることが分かる。

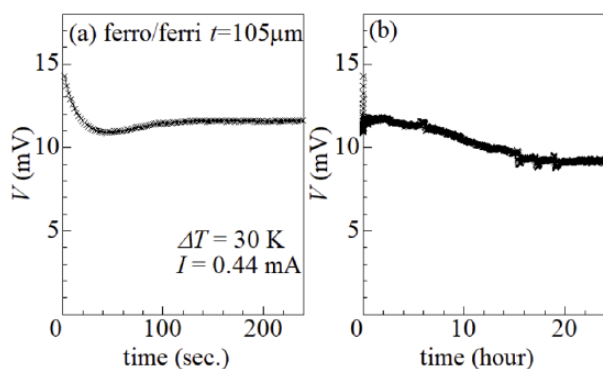


図 4 : LTE の起電力の時間変化 : (a)短時間領域、(b)長時間領域。

【 5 】 溶液抵抗の低減と LTE の出力増大

LTE の出力を増大するには素子抵抗の低減が重要である。我々は、溶液抵抗 R_s が電解液の粘度 η に比例することを利用して、 R_s の小さな溶媒を探索した。まず、水、メタノール、アセトン、PHF、PC の 5 種類の溶媒と 1 : 1 混合溶媒に 0.8M $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ を溶解した。15 種類の溶液の η を測定し、 η の低い 6 種類の溶液を選んだ。図 5 に示すように、溶媒の種類や温度に依存せず、 R_s は η に比例した。6 種類の溶液で LTE を試作し最大出力 $W_{\max}$ を評価した。水-アセトン LTE の $W_{\max}$ は、水 LTE の $W_{\max}$ をより、29%大きかった。

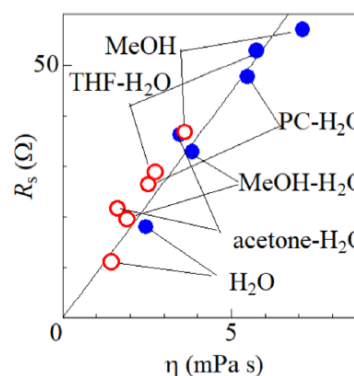


図 5 : 粘度 η と溶液抵抗 R_s との相関。赤丸は 20°C、青丸は 50°C のデータ。直線は最小二乗フィットの結果。

< 論文 >

1. S. Sato, and Y. Moritomo, Electrode potential modified by gelatin surface charge, RSC Adv., in press
2. R. Koshikawa, H. Niwa, and Y. Moritomo, Convection effect on resistance components in liquid thermoelectric converter, J. Phys. Soc. Jpn., in press
3. T. Yamaguchi, S. Fukuda, and Y. Moritomo, Convection Effect on Heat Transfer in Liquid Thermoelectric Converter, J. Phys. Soc. Jpn. 95, 025002 (2026)
4. S. Fukuda and Y. Moritomo, Resistance components of liquid thermoelectric converter composed of $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}/[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ aqueous electrolyte and graphite-dispersing electrodes, RSC Adv. 15, 43304 (2025).
5. H. Yamada, T. Aiba and Y. Moritomo, A liquid thermoelectric converter composed of acetone-water mixed solution with reduced solution resistance, Sustain. Energy Fuel, 9, 3927 (2025).
6. T. Aiba, H. Yamada, and Y. Moritomo, Methanol-based thermoelectric conversion device with high power, Ind. Chem. Mater. 3, 223 (2025).

7. E. Ozaki, T. Shibata, I. Nagai, I. H. Ohnuki, and Y. Moritomo, Current dependence of output voltage and discharge capacity of a tertiary battery, AIP Adv. 14, 0550004 (2025).
8. R. Miyama, Y. Mori, D. Inoue, and Y. Moritomo, Role of strong electrolytes on resistivity components in a liquid thermoelectric converter, Jpn. J. App. Phys. 65, 017001 (2026).
9. Y. Bao, R. Shimazu, Y. Moritomo, Reduced internal resistance in thermorechargeable batteries with heavy active materials, Future Batteries, 6, 100063 (2025).
10. Y. Sakamoto and Y. Moritomo, Enhanced discharge capacity of thermorechargeable battery composed of Cd-PBA and potential-matched PBA, Sustain. Energy Fuels 9, 2294 (2025).
2. (招待) 守友 浩「電気化学を活用した熱エネルギーハーベスト」2025 年度第四回エネルギーハーベスト・コンソーシアム (EHC) 総会第二部、東京 (オンライン)、2026/3/10
3. (招待) 守友 浩「電気化学を活用した熱エネルギーハーベスト」プライムコア研究会、つくば、2026/2/24
4. 山口智紀、福田壮志、守友 浩「液体熱電変換素子の有効熱伝導率に対する対流効果」応用物理学会春季学術講演会、東京、2026/3/16
5. 福田壮志、守友 浩「 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}/[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$ 液体熱電変換素子の抵抗成分解析」応用物理学会春季学術講演会、東京、2026/3/16
6. 守友 浩、越川 竜、丹羽秀治「LTE の抵抗成分に及ぼす対流効果」応用物理学会春季学術講演会、東京、2026/3/16

<特許>

1. 守友 浩「発電素子用電極、発電素子」特願 2025-282230、筑波大学、2025/12/25
2. 守友 浩、柴田恭幸、内澤慎太郎「三次電池、IoT 素子」特許 7781384、筑波大学、株式会社フォーカスシステムズ、2025/11/28
3. 守友 浩「電極とその製造方法、および液体熱電変換素子」特願 2025-139647、筑波大学、2025/8/25
7. 佐藤翔哉、守友 浩「ゼラチンの表面電荷に誘起された電極電位のシフト」応用物理学会春季学術講演会、東京、2026/3/16
8. (招待) 守友 浩「温度変化で充電できる三次電池とその展望」応用物理学会秋季学術講演会シンポジウム「熱流れの中で発電する新しい熱エネルギー変換について語る」、名古屋、2025/9/9

<学会発表>

国際会議

1. (invited) Y. Moritomo, High power liquid thermoelectric converter using viscosity-controlled electrolyte, PacificChem symposium, Hawaii, 2025/12/20
2. (invited) Y. Moritomo, Reduction of resistance component in liquid thermoelectric converter, IWTED2025, Tokyo, 2025/12/16
9. 山田 悠、守友 浩、Adhyapak Parag, Karpe Sachin, Patil Anisha, Kulkarni Milind 「巨大な起電力を示す熱電変換素子」応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025/9/10
10. 宮間 遼、森 義浩、井上 大、守友 浩「酸化還元を示さない溶質が $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 液体熱電変換に与える効果」応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025/9/10

国内会議

1. (招待) 守友 浩「令和 7 年度エネルギーハーベスト部門活動報告」TREMS シンポジウム、つくば、2026/3/10

エネルギーハーベスト部門

教員：

辻村清也（数理物質系・物質工学域・教授）

大学院生：

大山真紀子（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D3）

DENG Yi（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D3）

熊健（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D3）

LU Jiaci（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D3）

Rezki Muhammad（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D3）

WU Meng（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D2）

大栗由希（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D1）

杉本章（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

嶋田和真（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

Muhammad Hafizh Shidqi（数理物質科学研究群・国際マテリアルイノベーション学位プログラム・M2）

細井敬人（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

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 】水系導電性インクを用いた印刷型酵素電極の開発

本研究では、酵素バイオ燃料電池およびウェアラブルバイオセンサへの応用を目的として、水系導電性インクを利用した印刷型酵素電極の開発を行った。酵素電極のスクリーン印刷では、印刷

プロセス中の酵素失活や、印刷後の酵素活性低下が大きな課題となっている。特に、有機溶媒を含む従来インクでは酵素安定性が低下しやすく、簡便かつ高性能な印刷型酵素電極の実現が困難であった。

本研究では、水系グラファイトインクに着目し、キトサンをバインダーとして利用した酵素インクを設計した。さらに、グリセロールを添加することで、印刷適性および膜安定性を向上させた。作製したインクは、酵素およびメディエータを直接混合した状態でスクリーン印刷可能であり、単一工程で酵素電極を形成できることを示した。また、電気化学特性およびレオロジー特性を詳細に解析することで、インク組成が電子移動特性や酵素活性保持に与える影響を明らかにした。

作製した印刷型酵素電極は、高い電流応答と良好な安定性を示し、バイオ燃料電池電極として有効に機能した。本成果は、水系プロセスによる低コスト・大量生産型の酵素電極形成技術として重要であり、自己駆動型ウェアラブルバイオセンサや紙基板デバイスへの応用が期待される。

ACS Applied Engineering Materials, 4, 2, 1054–1061 (2026)

【 2 】紙基板バイオ燃料電池を利用した自己駆動型溶存酸素センサの開発

本研究では、外部電源を必要としない自己駆動型センサの実現を目的として、紙基板バイオ燃料電池を利用した溶存酸素検出システムを開発した。近年、環境モニタリングや簡易分析デバイスにおいて、低消費電力かつ小型なセンシング技術への需要が高まっている。特に、紙基板を利用した分析デバイスは、低コスト、軽量、柔軟性、毛細管輸送機能など多くの利点を有しており、次世代ディスプレイセンサとして注目されている。

本研究では、紙基板上に酵素電極を形成し、酸素還元反応を利用したバイオ燃料電池型デバイスを構築した。カソードにおける酸素還元電流を利用することで、溶存酸素濃度に応答した電気信号を得ることに成功した。また、紙基板特有の毛細管現象を利用することで、外部ポンプを用いずに試料溶液を自律的に輸送できることを示した。

さらに、発電機能とセンシング機能を同時に利用できることから、自己駆動型分析デバイスとして有効に機能することを明らかにした。

電気化学測定の結果、溶存酸素濃度に対して安定かつ再現性の高い応答を示し、紙基板デバイスとして十分なセンシング性能を有することが確認された。本成果は、自己駆動型センサの新たな設計指針を与えるものであり、環境分析、食品管理、医療診断など幅広い分野への応用が期待される。

RSC Advances, 16, 6502–6506 (2026)

【 3 】イオン選択性電極を利用した単一オープンバイポーラ電極の電位制御法の開発

本研究では、アレイ型バイポーラ電気化学システムにおいて、単一のオープンバイポーラ電極の電位を選択的に制御する新規手法を提案した。バイポーラ電気化学は、外部配線を必要としないシンプルな電極駆動法として注目されているが、複数電極を集積化した際には、個別電極の独立制御が困難であるという課題が存在していた。本研究では、イオン選択性電極および Ag/AgCl 電極を組み合わせた閉回路系を導入することで、特定のバイポーラ電極に対して選択的に電位差を付与することに成功した。これにより、アレイ中の単一電極のみで電気化学反応を誘起できることを実証した。また、電極配置や溶液条件が電位分布および反応選択性に与える影響を詳細に解析した。

さらに、本手法を利用することで、従来困難であったアレイ型デバイスにおける個別信号制御や選択的センシングが可能となることを示した。本成果は、高集積型電気化学デバイス、多点同時計測、マイクロ流体分析システムなどへの展開が期待されるものであり、バイポーラ電気化学の新たな制御技術として重要な知見を提供するものである。

Electrochemistry, 94, 027016 (2026)

【 4 】MOF 内包酵素の電気化学活性と Prussian Blue ナノ粒子によるタンデム触媒機構の解明

本研究では、金属有機構造体 (MOF) に内包

した酵素のバイオ電極反応機構を解析するとともに、Prussian Blue ナノ粒子との組み合わせによるタンデム触媒反応について検討を行った。MOF は高比表面積および多孔性を有することから、酵素固定化材料として注目されているが、MOF 内部での電子移動や基質拡散機構については未解明な点が多かった。

本研究では、酵素を MOF 内部に固定化した電極を構築し、電気化学測定および構造解析を通じて、MOF 内部における酵素反応場の特徴を明らかにした。さらに、電極表面に Prussian Blue ナノ粒子を導入することで、酵素反応で生成する過酸化水素を効率的に還元できることを示した。このタンデム触媒系により、低電位での高感度センシングが可能となり、従来よりも高い選択性を実現した。

また、MOF 構造が酵素活性保持や基質輸送に重要な役割を果たしていることを示し、MOF ベース酵素電極の設計指針を与えた。本成果は、高性能バイオセンサおよびバイオ燃料電池の開発に向けた基盤的知見として重要であり、MOF を利用した新規バイオエレクトロニクス材料開発への展開が期待される。

Biosensors and Bioelectronics, 296, 118326 (2025)
(国際共著)

【 5 】発汗中乳酸の連続モニタリングを可能とするウェアラブル自己駆動型バイオセンサの開発

本研究では、汗中乳酸をリアルタイムで連続計測可能なウェアラブル自己駆動型バイオセンサを開発した。乳酸は運動負荷や疲労状態を反映する重要な代謝指標であり、非侵襲的に連続測定できるウェアラブル技術への期待が高まっている。一方で、従来のウェアラブルセンサでは外部電源や複雑な配線が必要であり、長時間計測や装着性に課題があった。

本研究では、酵素バイオ燃料電池を利用することで、センシングと発電を同時に行う自己駆動型デバイスを構築した。乳酸酸化酵素を利用したアノード反応と酸素還元カソードを組み合わせることで、汗中乳酸濃度に応答した電気信号を得ることに成功した。また、柔軟基板および微小流体

構造を導入することで、皮膚への高い追従性と安定した汗輸送を実現した。

実際の装着試験では、運動中の乳酸濃度変化をリアルタイムで計測可能であることを示し、ウェアラブルデバイスとして良好な安定性を確認した。本成果は、自己駆動型ウェアラブルバイオセンサの実用化に向けた重要な成果であり、スポーツ科学、健康管理、遠隔医療などへの応用が期待される。

ChemElectroChem, 12, e202500222 (2025)

【 6 】 有限要素法シミュレーションによるバイオセンサ試験紙内部拡散挙動の可視化

本研究では、有限要素法 (Finite Element Method: FEM) シミュレーションを用いて、電気化学バイオセンサ試験紙内部における物質拡散挙動を解析し、センサ性能を決定する因子を検討した。使い捨て型バイオセンサでは、電極構造や流路設計が応答速度や感度に大きく影響するが、内部拡散挙動を実験的に直接観察することは困難であった。

本研究では、試験紙内部における濃度分布や拡散プロファイルを数値解析により可視化し、試料導入後の時間変化を詳細に解析した。その結果、電極配置や流路構造が拡散場形成に強く影響することを明らかにした。また、シミュレーション結果と実験結果を比較することで、モデルの妥当性を検証した。

さらに、センサ応答に対する拡散制限や反応領域形成の影響を解析することで、高感度化および高速応答化に向けた設計指針を提示した。本成果は、POCT デバイスやディスプレイ型電気化学センサの最適設計に向けた基盤研究として重要であり、シミュレーションを活用したセンサ開発の有効性を示すものである。

Sensors & Diagnostics, 4, 839–845 (2025)

【 7 】 メディエータ固定化を安定化した MOF 型多酵素カスケード電極の開発

本研究では、多酵素カスケード反応を利用した高性能酵素電極の開発を目的として、MOF を利用したメディエータ固定化型ハイブリッド電極

を構築した。多酵素カスケード反応では、酵素間電子移動および反応中間体輸送を効率化することが重要であるが、メディエータの溶出や反応場の不安定化が大きな課題となっていた。

本研究では、レドックス活性分子を MOF 内部に固定化することで、メディエータの安定保持と効率的電子移動の両立を実現した。さらに、導電性高分子との複合化により、酵素間電子移動ネットワークを形成した。その結果、従来系と比較して高い電流応答と優れた安定性を示すことを明らかにした。

また、多酵素反応における基質変換効率が向上し、複数酵素を利用したカスケード型バイオ電極として有効に機能することを確認した。本成果は、高性能バイオ燃料電池や高感度バイオセンサ開発に向けた新たな材料設計戦略を示すものであり、MOF を利用した酵素電極研究の発展に寄与する成果である。

Chemical Communications, 61, 12309–12312 (2025)

【 8 】 超分子固定化レドックスメディエータを用いた高安定酵素電極界面の構築

本研究では、超分子相互作用を利用してレドックスメディエータを高安定に固定化した酵素電極界面を構築し、高出力かつ長寿命なバイオ電極反応を実現した。酵素電極では、電子移動メディエータの溶出や失活が長期安定性を制限する主要因となっており、メディエータ固定化技術の高度化が求められている。

本研究では、カチオン性色素分子と導電性高分子を組み合わせることで、超分子相互作用を利用した安定な電子移動ネットワークを形成した。これにより、メディエータ溶出を抑制しながら高効率な電子移動を実現した。また、酵素固定化構造との相互作用について詳細に解析し、長期間安定動作する反応場を形成できることを示した。

電気化学測定では、高い電流密度と優れた連続運転安定性を示し、従来系を大きく上回る耐久性を達成した。本成果は、ウェアラブルバイオセンサやバイオ燃料電池など、長寿命化が重要となるバイオエレクトロニクス分野への応用が期待されるものであり、超分子化学を利用した新たな酵素電極設計指針を提供する成果である。

ACS Applied Materials & Interfaces, 17, 44101-44111 (2025)

<論文>

1. Influence of pyrolysis temperature on pineapple peel derived-porous biochar for electrochemical detection of bisphenol A, Mokhtar, M. A. M., Abdul-Aziz, A., Abang Zaidel, D. N., Rasit Ali, R., Tsujimura, S., Lei, Z., Biomass and Bioenergy, 210, 109098 (2026)
2. Enzyme Ink Formulation with Water-Based Binders Retains Enzymatic Activity for Biofuel Cells, Shitanda, I., Omori, M., Shimizu, I., Loew, N., Suzuki-Nagata, K., Mikawa, T., Tsujimura, S., Watanabe, H., Itagaki, M., Hanasaki, M., ACS Applied Engineering Materials, 4, 2, 1054-1061 (2026)
3. Self-powered cathodic detection of dissolved oxygen using a paper-based biofuel cell, Shitanda, I., Ohkura, R., Loew, N., Watanabe, H., Tsujimura, S., Itagaki, M., RSC Advances, RSC Adv., 16, 6502-6506 (2026)
4. Potential Control of a Single Open Bipolar Electrode in an Array Device Using an Ion-Selective Electrode and Ag/AgCl Electrode, Deng, Y., Ab Mutalib, N. A., Xiong, J., Suzuki, H., Tsujimura, S., Electrochemistry, 94 027016 (2026)
5. Mechanistic insights into bioelectrocatalytic activity of encapsulated enzyme in metal-organic frameworks and its tandem catalysis with Prussian-blue nanoparticles, Rezki, M., Aymard, C., Zebda, A., Tsujimura, S., Biosens. Bioelectron., 296, 118326 (2025)
6. Wearable Self-Powered Biosensor for Continuous Lactate Monitoring in Sweat, Shitanda, I., Samori, T., Satake, M., Loew, N., Motosuke, M., Mukaimoto, T., Yanagita, S., Suzuki, T., Mikawa, T., Tsujimura, S., Watanabe, H., Itagaki, M., ChemElectroChem, 12, e202500222 (2025).
7. Insights into the Performance-Determining Aspects of Electrochemical Biosensor Strips by Diffusion Profile Visualization using Finite Element Method Simulation, Shitanda, I., Mizuno, M., Loew, N., Watanabe, H., Itagaki, M., Tsujimura, S., Sens. Diagn. 4, 839-845 (2025)

8. MOF-Based Hybrid Electrodes for Multi-Enzyme Cascade Reactions with Stabilized Mediator Immobilization, Ariga, K., Rezki, M., Suzuki-Nagata, K., Mikawa, T., Tsujimura, S., Chem Comm, 61, 12309-12312 (2025)

9. Hybrid Bioelectronic Interfaces with Supramolecularly Immobilized Redox Mediators for Ultra-Stable and High-Performance Enzyme Electrodes, Rezki, M., Tsujimura, S., ACS Appl. Mater. Interfaces, 17, 31, 44101-44111 (2025)

<著書>

1. "Future Approaches to Electrochemical Sensing of Neurotransmitters", RSC, ISBN 978-1-83767-123-6, 284 pages Edited by K S Shalini Devi; Seiya Tsujimura, (2025/June/13)

<総説・解説>

1. Recent advances in graphene quantum dots: Chemistry of synthesis, surface modifications, and improved properties for biomedical applications, Panda, S., KSS Devi, Tsujimura, S., Kumar, S., Jakmunee, J., Prakash, J., TrAC Trends in Analytical Chemistry, 118293 (2025)

<学会発表>

国際会議

1. 辻村 清也, "Designing Electrode Materials for Enzyme-Based Electrochemical Biosensors" (基調講演), Biosensors2025, 2025年5月19日-22日, リスボン, ポルトガル.
2. 辻村 清也, "Developpement de biocapteurs portables auto alimentes" (招待講演), Journee Diabete, 2025年6月4日, Medyttec, La Tronche, France.
3. Jeyaraj Vinoth Kumar, Seiya Tsujimura, "Construction of Electrochemical Aptamer-based Biosensor for Neurotoxic Pesticide Fenitrothion Detection in Real Samples", 2nd International

- Workshop on Bioelectrochemistry, The Bioelectrochemistry Society, 2025 年 9 月 24 日 - 26 日, 広島, 日本.
- Seiya Tsujimura, “Designing Redox Mediators for FAD-dependent Glucose Dehydrogenase and Lactate Oxidase toward Wearable Applications”, Pacificchem 2025, 2025 年 12 月 20 日, Hawaii, USA.
 - Kazuma Shimada, Seiya Tsujimura, Satoshi Furota, Daijiro Takeshita, Kensuke Igarashi, “Development of an Electrochemical System for Coenzyme F420 Using Immobilized F420-Dependent Sulfite Reductase”, ISMET9, 2025 年 9 月 16 日 - 19 日, Leipzig, Germany.
 - M. Hafizh Shidqi, M. Rezki, S. Tsujimura, “Water Soluble Enzyme-Containing MOF Inks for Screen-Printed Electrochemical Biosensors”, 2nd International Workshop on Bioelectrochemistry, The Bioelectrochemistry Society, 2025 年 9 月 24 日 - 26 日, 広島, 日本.
 - S. Sugimoto, S. Tsujimura, T. Akamatsu, “Porous Carbon Sheet for Bioelectrochemical Devices”, 2nd International Workshop on Bioelectrochemistry, The Bioelectrochemistry Society, 2025 年 9 月 24 日 - 26 日, 広島, 日本.
 - Jialei Lu, Jian Xiong, Yi Deng, Meng Wu, Seiya Tsujimura, “Synergistic (K/Na)-Ion Modulation in Mn-Integrated Carbon Anodes for Enhanced Performance in Microbial Fuel Cells”, 2nd International Workshop on Bioelectrochemistry, The Bioelectrochemistry Society, 2025 年 9 月 24 日 - 26 日, 広島, 日本.
 - Seiya Tsujimura, “Engineering Enzyme Electrodes Interface for Biosensors and Biofuel Cells”, 2nd International Workshop on Bioelectrochemistry, The Bioelectrochemistry Society, 2025 年 9 月 24 日 - 26 日, 広島, 日本.
 - 辻村 清也 (筑波大学), 「MOF の酵素を用いた電気化学バイオセンサへの応用」, 電気化学会第 93 回大会, 2026 年 3 月 17 日 - 19 日, 東京理科大学, 野田, 日本.
 - 辻村 清也, 杉本 章 (筑波大学), 「湿式抄造法を用いたフレキシブルな多孔質炭素シート状電極の開発」, 電気化学会第 93 回大会, 2026 年 3 月 17 日 - 19 日, 東京理科大学, 野田, 日本.
 - 嶋田 和真, 辻村 清也, 風呂田 郷史, 竹下 大二郎, 五十嵐 健輔, 「酵素修飾電極を用いたメタン生成菌の補酵素 F420 の電気化学反応」, 有機地球化学シンポジウム, 2025 年 11 月 4 日 - 5 日, 千葉, 日本.
 - 有賀 古都子, 美川 務, 〇辻村 清也, 「酵素カスケード電極反応の高効率化: 乳酸酸化系を例に」, 電気化学会 2025 年秋季大会, 2025 年 9 月 4 日 - 5 日, 鳥取大学, 鳥取, 日本.
 - レツキ ムハンマド, 辻村 清也, “Engineering Enzyme Electrodes with Metal-Organic Frameworks for Enhanced Stability and Electron Transfer”, 電気化学会 2025 年秋季大会, 2025 年 9 月 4 日 - 5 日, 鳥取大学, 鳥取, 日本.
 - 辻村 清也, 「生命科学と電気化学: 総合討論」, 電気化学会 2025 年秋季大会, 2025 年 9 月 4 日 - 5 日, 鳥取大学, 鳥取, 日本.
 - 辻村 清也, 「特別講演に関する総合討論」, 電気化学会 2025 年秋季大会, 2025 年 9 月 4 日 - 5 日, 鳥取大学, 鳥取, 日本.
 - 嶋田 和真, 辻村 清也, 風呂田 郷史, 竹下 大二郎, 五十嵐 健輔, 相樂 隆正, 「酵素修飾電極によるメタン生成菌の補酵素 F420 の電気化学的還元」, ポーラログラフィーおよび電気分析化学討論会, 2025 年 10 月 22 日 - 23 日, 宮崎, 日本.

国内会議

- 辻村 清也, 「バイオセンサとバイオ燃料電池のための酵素電極の開発(1)」(招待講演), 日本 MRS, 2025 年 11 月 10 日 - 12 日, 北九州国際会議場, 北九州, 日本.

エネルギーハーベスト部門

教員：

二瓶雅之（数理物質系・化学域・教授）
志賀拓也（数理物質系・化学域・准教授）
三原のぞみ（数理物質系・化学域・助教）

大学院生：

鈴木大成（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・D2）
小田嶋欧（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・D1）
吉武輝（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・D1）
青谷春佳（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）
阿部怜（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）
内山颯馬（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）
大澤皓成（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）
鈴木宥司（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）
武藤美佑（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）
山田知英（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）
奥西結（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M1）
北村優太郎（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M1）
長島壮汰（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M1）
羽柴あかり（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M1）
藤澤藍子（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M1）
村田丈芽（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M1）
SHEN ZHENGAO（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M1）

二瓶雅之、志賀拓也、三原のぞみ

<研究成果>

当研究室では、エネルギーハーベストに資する分子性相転移材料やナノ粒子合成、分子磁性材料について、研究を行っている。本年度は主に、多段階の磁気相転移変化を示す鉄(II)錯体に関する研究と、3f-4f ヘテロメタル多核錯体の磁氣的性質に関する研究を行った。

【 1 】 多段階の磁気相転移変化を示す鉄(II)錯体

鉄(II)スピנקロスオーバー錯体は、反磁性 LS 状態と常磁性 HS 状態の間のエントロピー駆動スピン転移を示し、結晶中では比較的大きな構造変化に基づく構造相転移を示すことから、分子性相転移材料として広く研究が行われている。スピנקロスオーバー挙動におけるスピン転移温度($T_{1/2}$)は、 t_{2g} 軌道と e_g 軌道のエネルギー差(配位子場分裂エネルギー)などに由来する転移エンタルピーとスピン多重度や結合振動などの変化に基づく転移エントロピーによって支配される。溶液中では、配位子の置換基効果などの電子的効果を考慮することで転移温度を論理的に制御することができる。一方で、結晶のような固体中では、分間相互作用に基づく様々な要素によってスピנקロスオーバー挙動は大きく変化する。代表的要素として、水素結合による電子的効果と化学圧力による構造的な効果がある。化学圧力については、比較的小さい分子体積を持つ LS 状態を安定化させるとともに、強い分子間相互作用に基づく協同効果をもたらす、スピנקロスオーバー現象は一次の構造相転移として現れることがある。本研究では、水素結合供与部位を持つ三座配位子 (L1) からなる鉄 (II) 錯体 ($[\text{Fe}(\text{L1})_2(\text{BF}_4)_2 \cdot 3\text{VN}]$ (1·3VN、VN: バレロニトリル)における多段階スピנקロスオーバー挙動変化について検討を行った。

1·3VN の単結晶構造解析の結果を図 1 に示す。結晶中において 1·3VN は、鉄(II)錯体カチオンと 2 つの対アニオンに加えて、3 分子のバレロニトリルを溶媒分子として含む。ここで、2 つの VN 分子は配位子 L1 の水素結合供与基

と水素結合を形成し、残りの1つは部分分子間相互作用を示さない。

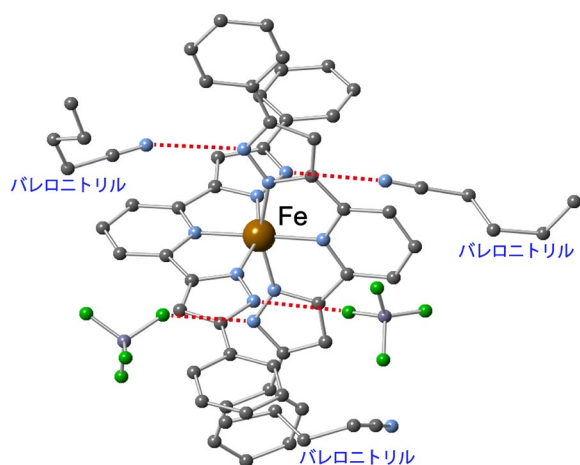


図1 1·3VNの単結晶構造解析結果

温度依存磁化率測定の結果、1·3VNは $T_{1/2}$ = 約 210 K で急激なスピントロソオーバー挙動を示す(図2)。一方、320 K までの過熱によるVN分子の脱離により生成する1·2VNは、より高い $T_{1/2}$ を示すとともに、より広いヒステリシスを示す。さらに、345 K まで加熱すると、1·1VNの生成に伴い $T_{1/2}$ の低下とヒステリシス幅の増大が観測された。以上より、1·3VNは段階的な溶媒分子の脱離により、多段階のスピントロソオーバー挙動の変化を示すことを明らかにした。

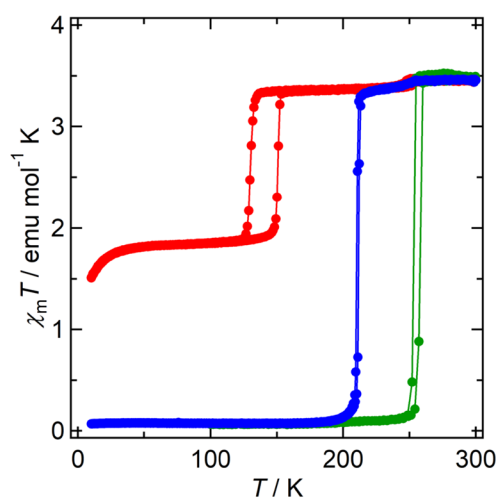


図2 1·nVN(n = 3 (青), 2 (緑), 1 (赤))の温度依存磁化率

粉末X線構造解析と熱重量分析などを詳細に検討した結果、1·3VNの多段階スピントロソ

オーバー挙動の変化はVNと錯体カチオンとの階層的な分子間相互作用に基づくことが分かった。1·3VNから1·2VNの変換においてはVN分子の脱離に伴う化学圧力の増大が転移温度の増大を引き起こしている。一方1·2VNから1·1VNへの変換では水素結合の消失による電子の効果が支配的である。以上より、階層的な分子間相互作用が構造相転移挙動に極めて大きなインパクトを与えることを明らかにした。

【2】3d-4fヘテロメタル多核錯体の磁気的性質

固体冷却材料として、常磁性スピンの磁化に伴うスピンエントロピーの損失を利用した磁気冷凍効果が注目されている。磁気冷凍効果における主要パラメータである磁気エントロピー変化- DS_m を大きくするためには、等方的な常磁性スピンを集積化することが有効であることが知られている。一方で、より高い温度で動作する磁気冷凍材料を得るためには、スピン間の磁気的相互作用を適切に設計することが重要となる。3d金属イオンと4f金属イオンからなる威嚇金属多核錯体は、優れた磁気冷凍効果を示すことが知られているが、それらを交互に規則正しく配列することは、これまで困難とされてきた。本研究では異なる複数の多座配位部位をもつ配位子(L2)をもちいた一連の新規3d-4f 5核錯体間($[M^{II}_3Gd^{III}_2(L2)_4(NO_3)_4(H_2O)_8]$ (M_3Gd_2 , $M = Cu, Ni, Co$))を合成し、それらの磁気的性質および磁気エントロピー変化について明らかにした。

単結晶構造解析により明らかにした M_3Gd_2 の構造を図3に示す。 M_3Gd_2 は、二つの $[M^{II}Gd^{III}(L2)_2]^-$ 二核錯体ユニットが中心のM(II)イオンで架橋された構造をもつ。二核錯体ユニット中で、M(II)イオンはL2のO2キレートサイト、Gd(III)はONOキレートサイトを占めており、配位環境の違いを利用した直線架橋構造が形成されている。 $[M^{II}Gd^{III}(L2)_2]^-$ 二核錯体ユニットは、L2配位子の末端カルボキシ基で中心金属イオンに配位することで、直線型のM-Gd-M-Gd-M配列を実現している。以上よ

り、異なる多座配位部位と末端架橋性カルボキシ基を併せ持つ L2 配位子をもちいることで、直線 5 核構造をもつ一連の 3d-4f 錯体を系統的に得ることに成功した。

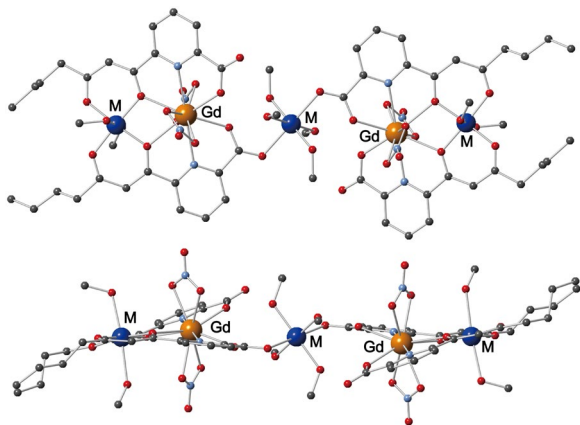


図3 M_3Gd_2 錯体の分子構造

M_3Gd_2 錯体($M = Cu, Ni, Co$)の温度依存磁化率測定を行った。その結果、いずれの錯体においても分子内強磁性相互作用による磁化率の増大が観測された。すなわち、 $[M^{II}Gd^{III}(L2)_2]$ 二核錯体ユニット内では、高い平面性を持つ架橋構造に由来した分子強磁性的相互作用が発現することが分かった。一方、に核錯体ユニット間の相互作用は極めて弱いことが分かった。低温における磁化測定から磁気エントロピー変化 $-DS_m$ を計算し、温度に対してプロットしたものを図4に示す。いずれの錯体においても、分子内強磁性的相互作用に由来して比較的大きな $-DS_m$ が比較的高い温度(6 K程度)におい手も観測された。 $-DS_m$ の最大値は、 $[Cu_3Gd_2]$ において $18.2 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 、 $[Ni_3Gd_2]$ および $[Co_3Gd_2]$ ではそれぞれ $17.6 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 、 $18.2 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ と見積もられた。いずれの錯体においても分子性材料として比較的大きな値を示した。これは、3d イオンと Gd イオンを交互に規則的に配列し、かつ比較的小さい分子間相互作用で結合したことによると考えられる。以上より、優れた磁気冷凍効果を示す 3d-4f 金属多核錯体の合理的な合成法を見出した。

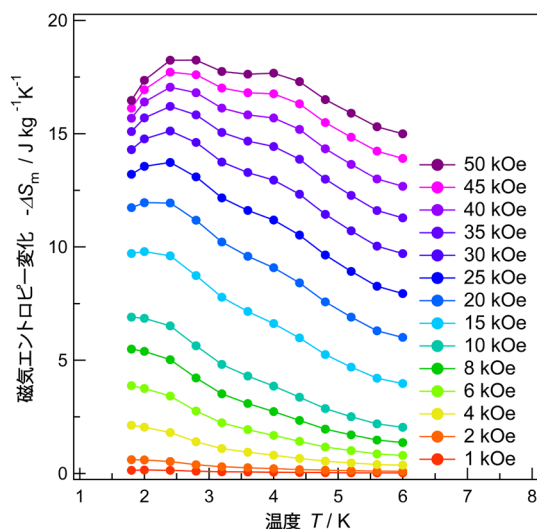
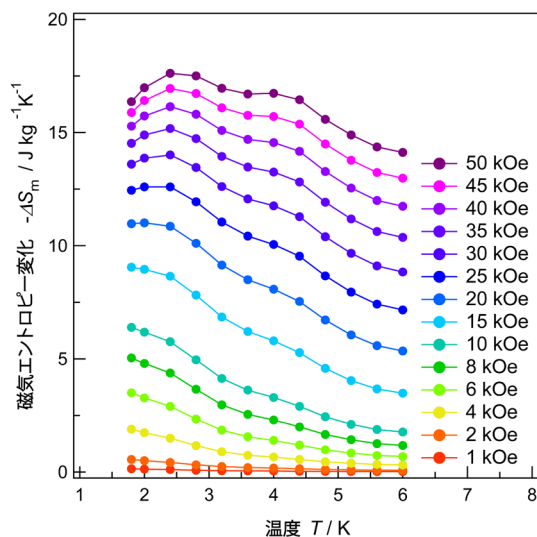
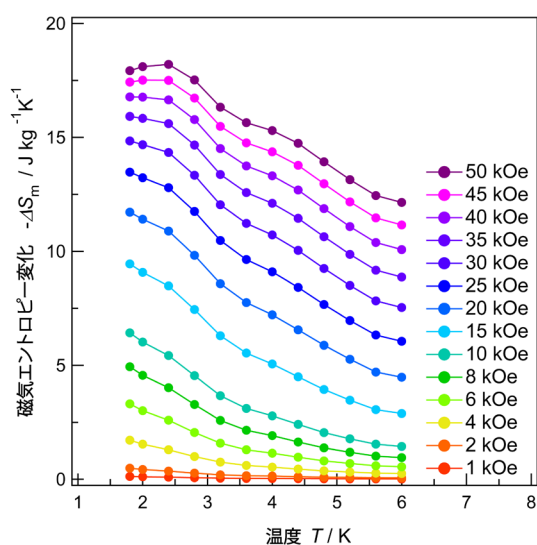


図4 M_3Gd_2 錯体の磁気エントロピー変化 ($M = Cu$ (上)、 Ni (中)、 Co (下))

<論文>

1. A. Sonoda, N. Nihei, N. Shinkawa, E. Kakizaki, N. Yukawa "Perls' Prussian blue staining and chemistry of Prussian blue and Turnbull blue" *Forensic Sci. Int.: Synergy*, **11**, 100627 (2025).
2. D. Tauchi, A. Kanesaka, S. Yokomori, T. Shiga, T. Akutagawa, N. Kuwabara, M. Hasegawa, H. Nishikawa "Synthesis and Physical Properties of Salphen-Conjugated TTF-Metal Complex [Cu^{II}(TTF-Salphen)]₂PF₆" *Asian J. Org. Chem.*, **14**, e00590 (2025).

<学会発表>

国際会議

1. Masayuki Nihei, "Metal Accumulation within the Nanospace of Organic Cage Molecules", Modern Trends in Molecular Magnetism and Spins in Molecular Systems, Bangaluru, India, 2024.11.4-11.9 (Invited)
2. Masayuki Nihei, "Dynamic structural conversion of chiral low-dimensional assemblies triggered by intramolecular electron transfer", The 10th Asian Conference on Coordination Chemistry, Hanoi, Vietnam, 2025.10.23-10.26 (Invited)
3. Masayuki Nihei, "Molecular Prussian Blue Analogues: From Bulk to Molecules and Low-dimensional Aggregates", The 19th Conference of Asian Crystallographic Association 2025, Taipei, Taiwan, 2025.12.1-12.5 (Invited)
4. Miu Muto, Daiki Ito, Nozomi Mihara, Takuya Shiga, Masayuki Nihei, "Molecular encapsulation regulates a cooperative binding of lanthanum ions by a tetrahedral organic cage molecule" *ISMSC2025 (19th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry)*, ROHM Theater Kyoto and Miyako Messe, Japan, 2025.05.25-30 (oral)
5. Tatsuya Higaki, Kanata Tanaka, Hitoshi Izu, Shunya Oishi, Koki Kawamoto, Mizuki Tada, W. M. C. Sameera, Ryo Takahata, Toshiharu Teranishi, Soichi Kikkawa, Seiji Yamazoe, Takuya Shiga, Masayuki

Nihei, Tatsuhisa Kato, Roger E. Cramer, Zihan Zhang, Karsten Meyer, Yasuhiro Ohki, "An Icosahedral [Fe₅₅] Paired with an Octahedral [Fe₆]" *Colloquium MADEMAT-2025*, Rennes, France, 2025.07.8-11 (oral)

6. Kanata Tanaka, Shunya Oishi, Koki Kawamoto, Mizuki Tada, W. M. C. Sameera, Ryo Takahata, Toshiharu Teranishi, Soichi Kikkawa, Seiji Yamazoe, Takuya Shiga, Masayuki Nihei, Tatsuhisa Kato, Roger E. Cramer, Zihan Zhang, Karsten Meyer, Hitoshi Izu, Tatsuya Higaki, Yasuhiro Ohki, "A 1.2 nm Icosahedral 55-Atom Iron Hydride Cluster" *22nd International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis*, Hotel Granvia Kyoto, Japan, 2025.09.1-5 (poster)
7. Hikaru Yoshitake, Nozomi Mihara, Takuya Shiga, Masayuki Nihei, "Synthesis of a chiral cubic porphyrin cage and complexation at vertices" *International Main Group Element Chemistry Seminar 2026*, University of Tsukuba, Japan, 2026.03.11 (poster)
8. Nozomi Mihara, "Cage molecules with metal ion-binding sites exhibiting protein-like properties", 3rd Kyoto Advanced Porous Science Symposium (KAPS3), Kyoto University, iCeMS, June 2025.
9. Nozomi Mihara, "Cage molecule with metal ion-binding sites exhibiting protein-like properties", 10th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC10), Hanoi National University of Education, Vietnam, October 2025.
10. Nozomi Mihara, "Cage molecules with protein-like properties: Cooperativity and inorganic synthesis", *International Main Group Chemistry Seminar 2026 (IMECS-2026)*, University of Tsukuba, March 2026.

国内会議

1. 檜垣達也、田中奏多、角南康平、伊豆仁、大石峻也、川本晃希、唯美津木、W. M. C. Sameera、高畑遼、寺西利治、吉川聡一、山添誠司、志賀拓也、二瓶雅之、加藤立久、Roger E. Cramer、Zihan Zhang、

- Karsten Meyer、大木靖弘「金属ヒドリドメタセシスによる鉄族ナノクラスターの合成と反応性探索」 ナノ学会第23回大会、東京都立大学 南大沢キャンパス、2025.5.14-16（口頭）
2. 鈴木 大成・志賀 拓也・三原 のぞみ・二瓶 雅之「水素結合ドナー部位を持つ Fe(II)スピנקロスオーバー錯体の合成と物性」 錯体化学若手の会夏の学校 2025、京都竹の郷温泉 万葉の湯 ホテル京都エミナース、2025.8.27-29（ポスター）
 3. 小田嶋 欧・志賀 拓也・三原 のぞみ・二瓶 雅之「SCO に伴う構造変化を利用した新しい機能性分子の開発」 錯体化学若手の会夏の学校 2025、京都竹の郷温泉 万葉の湯 ホテル京都エミナース、2025.8.27-29（ポスター）
 4. 吉武 輝・三原 のぞみ・志賀 拓也・二瓶 雅之「頂点に配位サイトを有する立方体型ポルフィリンケージの合成と構造・性質」 錯体化学若手の会夏の学校 2025、京都竹の郷温泉 万葉の湯 ホテル京都エミナース、2025.8.27-29（ポスター）
 5. 志賀拓也、岡本有輝子、伊藤帆奈美、宮本晴佳、三原のぞみ、二瓶雅之「基底スピン状態 $S = 11$ をもつ Mn_3Gd 錯体の磁気熱量効果の研究」 第19回分子科学討論会、広島国際会議場、2025.9.9-12（口頭）
 6. 小田嶋欧、志賀拓也、奥山大輔、熊井玲児、三原のぞみ、二瓶雅之「配位構造と周辺プロピル基の立体配座の協奏的变化による Fe(II)スピン転移の圧力応答性の向上」 第19回分子科学討論会、広島国際会議場、2025.9.9-12（口頭）
 7. Yu Odashima, Takuya Shiga, Daisuke Okuyama, Reiji Kumai, Nozomi mihara, and Masayuki Nihei「Variable Spin States of Iron(II) Complexes depending on the Peripheral Alkyl Chains」 錯体化学会第75回討論会、長崎大学 文教キャンパス、2025.9.15-17（口頭）
 8. 鈴木 宥司、志賀 拓也、三原 のぞみ、二瓶 雅之「カルボキシ基をもつ非対称3座配位子を用いた Fe(II)スピנקロスオーバー錯体の合成と物性」 錯体化学会第75回討論会、長崎大学 文教キャンパス、2025.9.15-17（ポスター）
 9. 嘉藤幹也、福井智也、志賀拓也、二瓶雅之、福島孝典「トリプチセン三座配位子を用いた一次元ラントノイド配位高分子の合成と性質」 錯体化学会第75回討論会、長崎大学 文教キャンパス、2025.9.15-17（ポスター）
 10. 長島 壮汰、志賀 拓也、三原 のぞみ、二瓶 雅之「キラルなチューブ状ポルフィリン錯体の合成と性質」 錯体化学会第75回討論会、長崎大学 文教キャンパス、2025.9.15-17（ポスター）
 11. 大澤 皓成、志賀 拓也、三原 のぞみ、二瓶 雅之「直径 3 nm の内部空間に配位サイトを有する亜鉛ポルフィリンケージの合成と錯形成反応」 錯体化学会第75回討論会、長崎大学 文教キャンパス、2025.9.15-17（ポスター）
 12. 内山 颯馬、志賀 拓也、三原 のぞみ、二瓶 雅之「溶液中における $[Co_2Fe_2]$ 錯体のキラルな集積構造の形成」 錯体化学会第75回討論会、長崎大学 文教キャンパス、2025.9.15-17（口頭）
 13. 新妻友理子、石高永進、小内貴祥、山田知英、志賀拓也、二瓶雅之、石井あゆみ、伊藤哲明「Type-II 交替磁性候補物質 1 次元キラル磁性体 $MnCl_2(H_2O)(S-HEP)_2$ における、単結晶 1H -NMR 測定及び群論的考察」 日本物理学会、広島大学、2025.9.16-19（口頭）
 14. 吉武 輝・三原 のぞみ・志賀 拓也・二瓶 雅之「キラルな立方体型ポルフィリンケージの合成とキロプティカル特性変換」 第3回メゾヒエラルキー若手会、愛知県 西浦温泉 ホテルたつき、2025.10.17-18（ポスター）
 15. 北村 優太郎・三原 のぞみ・志賀 拓也・二瓶 雅之「固液界面における立方体型ポルフィリンケージの集積構造制御」 第3回メゾヒエラルキー若手会、愛知県 西浦温泉 ホテルたつき、2025.10.17-18（ポスター）
 16. 長島 壮汰・三原 のぞみ・志賀 拓也・二瓶 雅之「キラルなポルフィリンチューブの合成と集積化」 第3回メゾヒエラルキー若手会、愛知県 西浦温泉 ホテルたつき、2025.10.17-18（ポスター）
 17. 長島 壮汰、志賀 拓也、三原 のぞみ、二瓶 雅之「キラルなポルフィリンチューブの合成と集積化」 第52回有機典型元素化学討論会、つくば国際会議場、2025.12.4-6（ポスター）
 18. 大澤皓成、志賀 拓也、三原 のぞみ、二瓶 雅之「亜

- 鉛ポルフィリンケージの合成と直径 3 nm の内部空間における金属イオン集積」 第 52 回有機典型元素化学討論会、つくば国際会議場、2025.12.4-6 (ポスター)
- 2025.
19. 志賀 拓也「分子スピンを利用した熱量効果材料の研究」 第 1 回次世代分子スピン研究会、福岡大学、2026.2.23-24 (口頭)
 20. 鈴木 大成・大川 夏実・志賀 拓也・三原 のぞみ・奥山 大輔・熊井 玲児・二瓶 雅之「溶媒脱離に伴うスピנקロスオーバー挙動の多段階変換」 第 1 回次世代分子スピン研究会、福岡大学、2026.2.23-24 (ポスター) ポスター賞受賞
 21. 小田嶋 欧・志賀 拓也・奥山 大輔・熊井 玲児・三原 のぞみ・二瓶 雅之「Fe(II)スピנקロスオーバー現象に伴う構造変化と圧力熱量効果」 第 1 回次世代分子スピン研究会、福岡大学、2026.2.23-24 (口頭) ポスター賞受賞(Chemistry Letters Young Researcher Award)
 22. 沈 正皓・土岐 恵莉佳・志賀 拓也・三原 のぞみ・二瓶 雅之「アルキル基修飾鉄(II)SCO 錯体の構造および圧力・温度誘起スピン転移挙動」 日本化学会第 106 春季年会(2026)、日本大学理工学部 船橋キャンパス、2026.3.17-20 (ポスター)
 23. Hikaru Yoshitake, Nozomi Mihara, Takuya Shiga and Masayuki Nihei 「Synthesis of a chiral cubic porphyrin cage and complexation at coordination sites」 日本化学会第 106 春季年会(2026)、日本大学理工学部 船橋キャンパス、2026.3.17-20 (口頭)
 24. 小内貴祥、廣木大介、新妻友理子、石高永進、古川哲也、山田知英、志賀拓也、二瓶雅之、石井あゆみ、伊藤哲明「有機-無機ハイブリッド 1 次元キラル磁性体[MnCl₂(H₂O)(*S*-HEP)₂]における Type-II 交替磁性」 日本物理学会 2026 年春季大会、オンライン、2026.3.23-26 (口頭)
 25. 三原のぞみ, “配位サイトを持つケージ分子 —協同性と内部空間での無機合成—”, 錯体化学若手の会関東支部 2025 年度後期勉強会, 日本大学津田沼キャンパス, 2025 年 11 月
 26. Nozomi Mihara, “Controlled inorganic synthesis within organic cage molecules”, Workshop on Functional Inorganic Clusters, University of Tokyo, November

エネルギーハーベスト部門

教員：

柳原英人（数理物質系・理工学域・教授）

大学院生：

田中大暁（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D1）

Jung Sebin（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

大沼樹生（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

竹尾昂起（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

須賀俊介（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

平山晃太郎（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

堀江一真（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

早稲田龍太郎（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

Juan Bebetho（数理物質科学研究群・国際マテリアルズ学位プログラム・M1）

柳原英人

<研究成果>

当研究室では、スピネル型フェライトを始めとする酸化物磁性体や遷移金属窒化物について、エネルギー材料としての可能性を探索している。薄膜、微粒子形態の試料に対して格子歪を導入したり、イオン種の置換や規則化等を行ったりすることで生じる様々な磁気特性を調べている。また、良質な薄膜成長のために成膜プロセスについても研究対象としています。さらに熱や動力から電気へのエネルギー変換の観点から、磁性材料を中心とした新奇な材料の開拓および評価装置の開発を行っている。

【 1 】 MHz 帯における磁性材料の動的磁化過程評価技術の開発

近年、GaN をはじめとする次世代パワー半導体の発展に伴い、パワーエレクトロニクス機

器の動作周波数は MHz 帯へと急速に高周波化している。それに伴い、トランスやインダクタなどに用いられる軟磁性材料についても、高周波・大振幅磁場条件下での低損失動作が強く求められている。しかしながら、磁性材料の磁化過程は磁壁移動やスピン回転など複数の非線形過程から成り立っており、高周波領域では渦電流損失や異常損失の寄与も顕著となる。そのため、実際の動作条件に近い MHz 帯・大振幅磁場下で磁化過程を直接評価する技術の重要性が高まっている。

一方、従来広く用いられてきた二巻線法では、高周波化に伴う励磁コイルのインピーダンス増大により、大振幅磁場を印加することが難しい。また、透磁率の低い材料では漏れ磁束の影響により測定精度が低下する問題もある。さらに、伝送線路法など GHz 帯測定に用いられる手法では、印加可能な磁場振幅が小さいため、実用磁性材料の完全なヒステリシスループを評価することは困難である。これらの課題から、MHz 帯で大振幅磁場を発生しながら、磁化過程を直接計測可能な新しい磁力計技術が求められている。

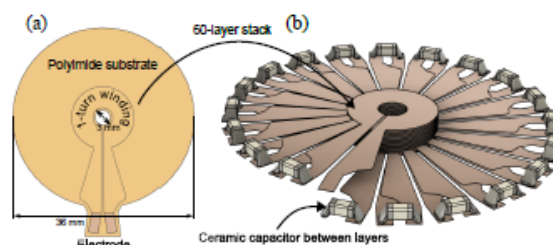


図 1 開発した LC 共振型励磁コイルの概念図

磁化検出には一次微分型ピックアップコイルを用い、試料磁化変化に起因する信号のみを高感度に検出した。また、常磁性 Dy_2O_3 粉末を利用した位相遅れ補正、および YIG 単結晶球を用いた磁場・磁化較正法を導入することで、MHz 帯においても高精度な動的 M-H 測定を可能とした。特に、電流信号と磁化信号の時間遅れを ns オーダーで補正することで、エネルギー損失評価の信頼性向上を実現している。

さらに、本装置を用いて市販 Ni-Zn フェライトの 1.2 MHz における完全な動的 M-H ループ測定を実証した。最大 0.55 T の交流磁場印加

下において磁化飽和まで観測でき、MHz 帯における磁化過程の直接評価が可能であることを示した。外部磁場と磁化を独立に測定できるため、内部磁場補正を含めた B-H 特性評価にも展開可能であり、高周波磁性材料開発における有力な評価技術として期待される。

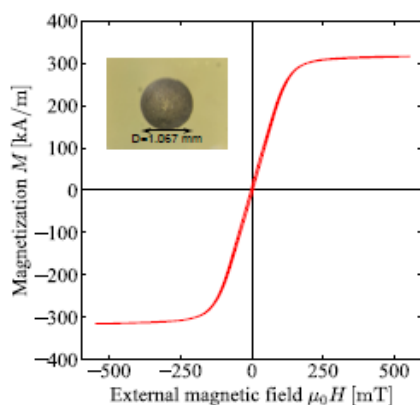


図 2 Ni-Zn フェライトの 1.2 MHz 動的 MH ループ

<論文>

1. Rintaro Minami, Eiji Kita, Chiharu Mitsumata, and Hideto Yanagihara, "Estimation of valence state and growth rate using principal component analysis of plasma emission in reactive sputtering deposition" *Science and Technology of Advanced Materials: Methods* 5 2544523 (2025) (13 pages).
2. H. Tanaka, T. Mannen, T. Isobe, E. Kita and H. Yanagihara, "A Magnetometer for Dynamic Full M-H Loop Measurements in the Megahertz Range" *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 75, pp. 1-6, Art no. 6001606 (2026).

<学会発表>

国際会議

1. Sebin Jung, and Hideto Yanagihara, "The voltage-controlled magnetic anisotropy at the interface of Fe and NiO" International Conference of Asian Union of Magnetism societies 2025, Okinawa, Japan, 2025.4.21-24 (poster).
2. Tatsuki Onuma, and Hideto Yanagihara, "Thermal

transport of angular momentum at the interface of insulative orbital ferrimagnet/non-magnet" International Conference of Asian Union of Magnetism societies 2025, Okinawa, Japan, 2025.4.21-24 (poster).

3. H. Tanaka, T. Mannen, T. Isobe, E. Kita, and H. Yanagihara, "Iron loss measurement in high-frequency large-amplitude magnetic field" International Conference of Asian Union of Magnetism societies 2025, Okinawa, Japan, 2025.4.21-24 (poster).
4. Ryutaro Waseda, Eiji Kita and Hideto Yanagihara, "Growth of FeO thin films by reactive RF magnetron sputtering" Materials Research Meeting 2025, Yokohama, Japan, 2025.12.8-13.
5. K. Horie, A. Hirata, M. Kishimoto and H. Yanagihara, "La-Co substituted strontium ferrite particles synthesized by heat treatment in molten potassium bromide flux" International Conference on Materials and Systems for Sustainability 2025, Nagoya, Japan, 2025.12.12-14.

国内会議

1. 竹尾 昂起「酸素雰囲気アニールによるスピネルフェライト薄膜の逆位相境界の低減」第49回日本磁気学会学術講演会、愛媛、2025.9.16-19 (oral) .
2. 平田充人, 岸本幹雄, 柳原英人「KBr 熔融塩を用いた W 型 SrZn_xFe_{18-x}O₂₇ 微粒子の作製」第49回日本磁気学会学術講演会、愛媛、2025.9.16-19 (oral) .

(2) 光エネルギー変換部門

教員：

末益崇（数理物質系・物理工学域・教授）

大学院生：

安田智裕（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D3）

旗手蒼（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D1）

齋藤太助（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D1）

Md. Ariful Islam（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・D1）

梶原君円（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D1）

中村新（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

深谷友香（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

林洸希（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

Nurfauzi Addillah（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・M2）

Ammara Firdous（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・M2）

林洸希（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

曾布川優樹（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

秋田宗志（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

石黒雄路（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

平井瑞紀（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

末益崇

<研究成果>

持続可能な社会の実現に向け、太陽光発電技術の重要性が増している。現在、結晶シリコン

(c-Si) 太陽電池は世界市場の 95%以上を占め、研究レベルでは変換効率が 27%を超えている。しかし、光吸収係数が小さくバンドギャップ E_g が比較的小さい ($E_g = 1.1 \text{ eV}$) ため、ウェハーベースのデバイス構造が不可欠であり、設置は平坦面に限定される。こうした状況下で、我々は半導体 BaSi_2 に注目してきた。 BaSi_2 は無毒かつ豊富な元素で構成され、約 1.3 eV という適切な E_g をもつ。また、1.5 eV において $3 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ という高い光吸収係数を示し、少数キャリア寿命が 10 μs を超えるなど優れた特性を有している。真空蒸着法で形成された p- BaSi_2 /n-Si ヘテロ接合ダイオードは、AM1.5 照射下で現在までにエネルギー変換効率 10.62% を達成している。しかし、 BaSi_2 は高い光吸収係数を有するため、表面層に使用すると BaSi_2 の欠陥による顕著な寄生吸収が生じる。この問題を解決するため、 BaSi_2 吸収層を広い E_g をもつ電子輸送層 (ETL) と正孔輸送層 (HTL) で挟んだ PIN 型薄膜太陽電池構造を考えている。その場合、HTL の候補材料には、 BaSi_2 のイオン化ポテンシャル ($IP=4.5 \text{ eV}$) に近いワイドギャップ半導体が求められる。このような状況下で、HTL 候補材料として E_g が約 3.8 eV の BaS を選んだ。BaS はアルカリ土類カルコゲナイド (IIa-VIb) 半導体であり、図 1 に示すように NaCl と同じ結晶構造 (空間群 $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$) を有し、格子定数は約 0.64 nm である。これまでの研究で、BaS の IP は 4.9 eV と報告されている。しかし、薄膜形成の例が殆どなく、報告された物性値は、 BaCO_3 または BaSO_4 を還元して形成した BaS バルク結晶に基づくものであり、デバイスに不可欠な薄膜で評価された報告例はない。

我々は種々の薄膜成長法の中から、高周波 (RF) スパッタリングを選択した。RF スパッタリングで形成した BaSi_2 薄膜が最近 15 A/W という BaSi_2 膜で最大の分光感度を達成しており、BaS 膜も RF スパッタ法で形成できれば、 BaSi_2 成膜後に BaS 薄膜を連続で形成することが可能となる。本年度は、スパッタ法による BaS 薄膜作製と特性評価を行った。

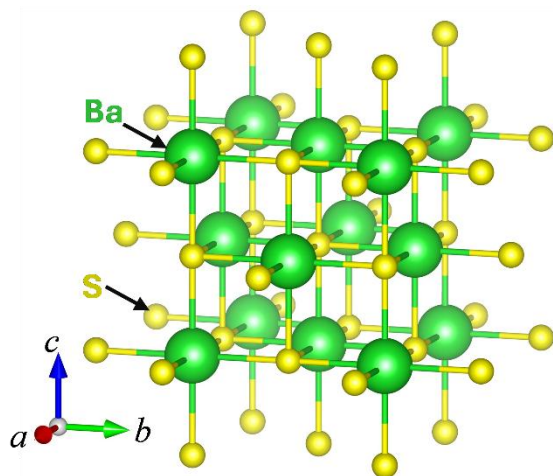


図 1. BaS の結晶構造

1 インチ BaS ターゲットを用いて、RF マグネトロンスパッタリング (ULVAC MB00-1040) 法で、抵抗率 $\rho < 0.01 \Omega \text{ cm}$ の Czochralski 法 n^+ -Si (111) 基板の上に堆積した。成膜時の基板温度 (T_s) は 300–600°C の範囲に設定した。また、Ar ガス圧力は 0.5 Pa に設定した。堆積後、試料の酸化防止のため、厚さ 3 nm のアモルファス Si (a-Si) キャップ層で被覆した。

図 2 に試料の薄膜 X 線回折パターンを示す。比較のため、計算された BaS および BaSi₂ の回折パターンも示す。基板温度が 475°C のとき、破線で示すように BaS の回折ピークが見られ、500°C のときに強度が強まった。525°C のときには、赤色 (▼) で示す位置に BaSi₂ の回折が現れた。さらに基板温度が上がり 600°C になると BaS のピークが消失した。これらの結果から、基板温度 500°C が最適と判断できる。

図 3 に、基板温度 500°C で堆積した BaS 膜の分光エリプソメータで評価した屈折率 (n) と消衰係数 (κ) を示す。消衰係数は、光吸収係数 (α) と波長 (λ) を介して、 $\alpha = 4\pi\kappa\lambda^{-1}$ の関係がある。図 4 に $(ah\nu)^{1/2}$ と $h\nu$ の関係を示す。これより、光学吸収端は約 3.6 eV といえる。

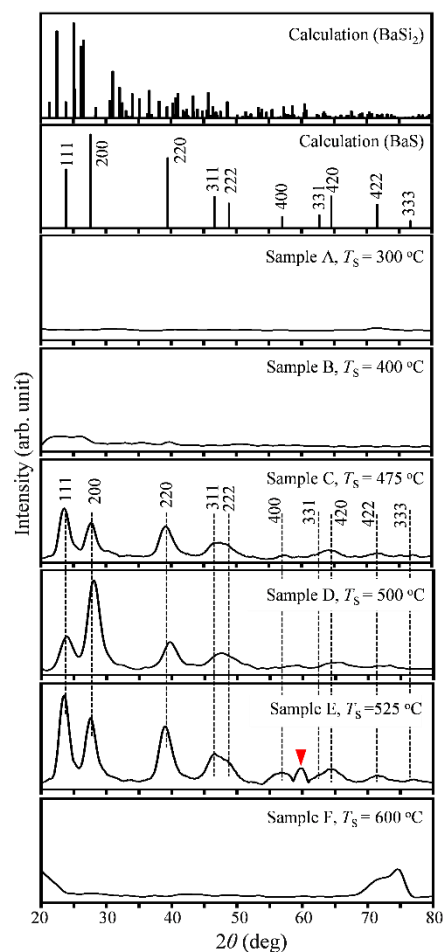


図 2. 堆積時の基板温度 T_s を変えて堆積した膜の薄膜 X 線回折パターン

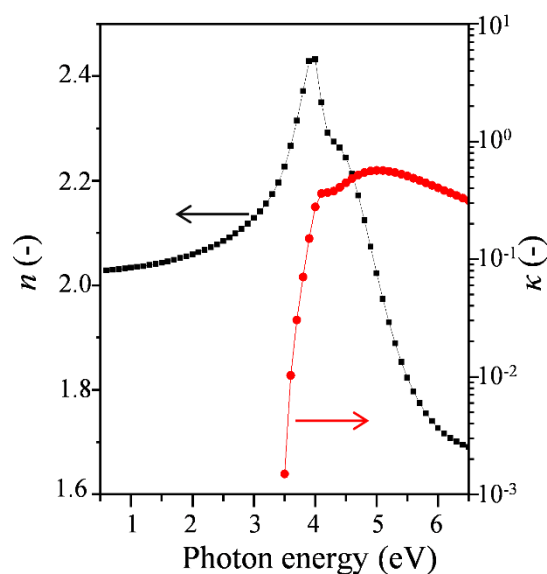


図 3. BaS の屈折率と消衰係数

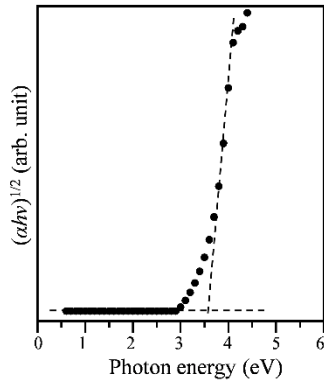


図 4. BaS の光吸収スペクトル

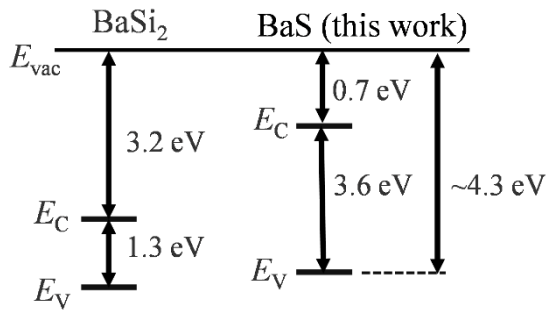


図 5. BaS の UPS スペクトル

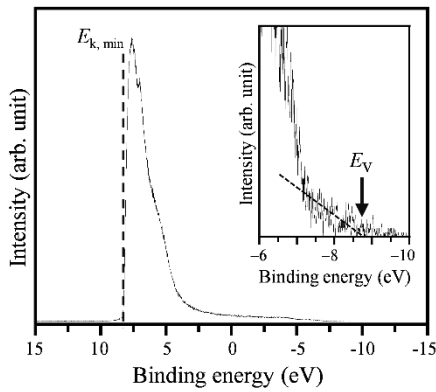


図 6. BaS と BaSi2 のバンドアライメント

図 5 に、He I 線(21.22 eV)を用いて測定した紫外線光電子(UPS)スペクトルを示す。 $E_{k,min}$ (= 8.2 eV)は、真空準位の障壁を超えて到達した最低エネルギーを示し、拡大図の E_v (= -8.7 eV)は、価電子帯頂上の電子が検出される様子を示している。エネルギー幅は 16.9 eV であり、これから $IP = 4.3$ eV と求まる。この値は、BaSi₂ の

IP (= 4.5 eV)より少し小さい値であった。以上の結果から、BaS 薄膜の形成に初めて成功した。図 6 に示す通り $E_g = 3.6$ eV、 $IP = 4.3$ eV であることから、BaSi₂ の HTL 材料として、適切な特性を有することが明らかになった。

<論文>

1. Y. Fukaya, K. Toko, and T. Suemasu, "Formation of low work function metal layers for BaSi₂ solar cell applications," *Materials Science in Semiconductor Processing* **209**, 110576 (2026).
2. S. Akita, T. Yasuda, K. Amemiya, and T. Suemasu, "Mn_{4-x}Pd_xN epitaxial thin films: Magnetic compensation at room temperature, Pd preferential site, and various magnetic properties," *Physical Review Materials* **9**, 094411 (2025).
3. T. Sato, Y. Cao, M. Imai, J.-M. Mouesca, T. Suemasu, S. Gambarelli, "Defects in BaSi₂ by EPR, PL and DFT," *Japanese Journal of Applied Physics* **64**, 120802 (2025).
4. Nurfauzi Abdillah, S. Aonuki, Y. Fukaya, K. Toko, and T. Suemasu, "First-principles insights into the incorporation of arsenic in BaSi₂ thin films grown by molecular beam epitaxy," *Applied Surface Science* **711**, 164119 (2025).
5. Y. Sobukawa, T. Yasuda, K. Amemiya, and T. Suemasu, "Magnetic compensation and preferential substitution site for Ag in Mn_{4-x}Ag_xN epitaxial thin films," *Physical Review Materials* **9**, 064408 (2025).
6. Y. Fukaya, S. Aonuki, K. Kajihara, K. Toko, and T. Suemasu, "Suppression of oxygen diffusion from MoO_x to BaSi₂ by hydrogenated amorphous Si layers," *Materials Science in Semiconductor Processing* **197**, 109732 (2025).
7. K. Kajihara, T. Ishiyama, Y. Koda, M. Mesuda, S. Honda, K. Toko, and T. Suemasu, "Ba₂AgSi₃ thin films: Growth, thermoelectric properties, and control of their conductivity type via impurity doping using first-principles calculations," *ACS Applied Energy Materials* **8**, 6713-6722 (2025).
8. T. Sato, Islam Md. Ariful, K. Hayashi, Y. Fukaya, R. Du, M. Hirai, Y. Koda, M. Mesuda, K. Toko, and T. Suemasu, "Fabrication of high-photoresponsivity BaSi₂ films by sputtering and photogenerated carrier separation in BaSi₂/n⁺-Si heterojunction diodes with n⁺-Si as electron transport layers," *Japanese Journal of Applied Physics* **64**, 12SP13 (2025).
9. K. Hayashi, S. Aonuki, H. Takenaka, Y. Koda, M. Mesuda, K. Toko, and T. Suemasu, "Photogenerated carrier separation by built-in potential in sputter-deposited MoO_x/BaSi₂ heterojunction diodes with MoO_x as hole transport layers," *Japanese Journal of Applied Physics* **64**, 11SP34 (2025).

10. M. Hirai, Y. Fukaya, Y. Koda, M. Mesuda, K. Toko, and T. Suemasu, "Evaluation of fundamental properties and hole transport characteristics of 3,3'-Bi[1,4]benzoxazino[2,3,4-kl]phenoxazine (HN-D2) thin films for BaSi₂ solar cell applications," Japanese Journal of Applied Physics 64, 11SP19 (2025).
11. Y. Ishiguro, S. Aonuki, K. Hayashi, K. Toko, and T. Suemasu, "Investigation of hole transport layer materials by simulation for BaSi₂ heterojunction solar cells," Japanese Journal of Applied Physics 64, 11SP14 (2025).
12. Nurfaulzi Abdillah, K. Toko, and T. Suemasu, "First-principles study on the dissociation of As₂ on BaSi₂ (100) surface," Japanese Journal of Applied Physics 64, 10SP07 (2025).
7. Ammara Firdous, Koko Hayashi, Nurfaulzi Abdillah, K. Toko, T. Suemasu, "Investigation of BaS as a Hole Transport Layer for BaSi₂," APAC Silicide 2025, P-10, Sendai, Jul. 19 (2025). (Poster)
8. Y. Fukaya, N. Abdillah, K. Toko, and T. Suemasu, "Increase in Oxygen Composition x of MoO_x HTL in MoO_x/BaSi₂ Heterostructures by Introduction of a-Si:H Interface Layers for BaSi₂ Solar Cells," APAC Silicide 2025, P-07, Sendai, Jul. 19 (2025). (Poster)
9. K. Hayashi, Y. Ishiguro, Y. Koda, M. Mesuda, K. Toko, and T. Suemasu, "Examination of passivation layers fabricated by sputtering for BaSi₂ heterojunction solar cells," APAC Silicide 2025, P-08, Sendai, Jul. 19 (2025). (Poster)
10. T. Suemasu, "Research Progress on Ba-Si compound thin films for energy applications," 7th Asian School Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials (ASCO-NANOMAT 2025), Plenary 03, Vladivostok (online) July 12, (2025).

<特許>

1. 召田雅実、末益崇, "珪化バリウム系積層基板," 特許第 7689668 (2025 年 5 月 30 日)

<学会発表>

国際会議

1. S. Akita, T. Yasuda, Y. Sobukawa, K. Toko, T. Suemasu "Epitaxial growth of (001)-oriented ultrathin continuous Pt films on MgO(001) and SrTiO₃(001) substrates," SSDM2025, H-3-04, yokohama, Sep. 17 (2025). (Oral)
2. A. Hatate, K. Amemiya, and T. Suemasu, "Crystal Orientation Dependent Magnetic Structure of Mn₄N Films Proved by XMCD," The 23rd International Vacuum Congress (IVC-23), TuL-TF-4, Sydney, Sep. 16 (2025). (Oral)
3. T. Sato, K. Hayashi, Y. Fukaya, R. Du, K. Toko, and T. Suemasu, "Formation of high-photoresponsivity BaSi₂ films by sputtering and solar cell operation of BaSi₂/n⁺-Si heterojunction diodes under AM1.5 illumination," APAC Silicide 2025, Sun-a-O1, Sendai, Jul. 20 (2025). (Oral)
4. Y. Ishiguro, S. Aonuki, K. Hayashi, K. Toko, and T. Suemasu, "Investigation of HTL materials by simulation for BaSi₂ hetero-junction solar cells," APAC Silicide 2025, Sun-a-O2, Sendai, Jul. 20 (2025). (Oral)
5. K. Kajihara, T. Ishiyama, Y. Koda, M. Mesuda, S. Honda, K. Toko, T. Suemasu, "Thin Film Growth and Characterization of AgBa₂Si₃ and Dopant Exploration via First-Principles Calculation," APAC Silicide 2025, Sat-p-O3, Sendai, Jul. 19 (2025). (Oral)
6. Nurfaulzi Abdillah, Kaoru Toko, and Takashi Suemasu "First-Principles Evaluation on Epitaxial As-doped BaSi₂ Thin Films," APAC Silicide 2025, P-09, Sendai, Jul. 19 (2025). (Poster)
1. 秋田 宗志, 石山隆光, 都甲薫, 末益崇, "特徴量抽出による磁化反転予測モデル構築", 多結晶材料情報学研究会, プラサヴェルデ沼津, Oct. 30 (2025).
2. 林洗希, 石黒雄路, 幸田陽一朗, 召田雅実, 都甲薫, 末益崇, "BaSi₂ 太陽電池への応用に向けたスパッタ法による MoO_x 膜の導入", 薄膜材料デバイス研究会第 22 回研究集会, 23p-P14, 京都, Oct. 23 (2025).
3. Y. Sobukawa, T. Yasuda, S. Akita, K. Amemiya, T. Suemasu, "Reconsideration of the magnetic compensation in Mn_{4-x}Ga_xN epitaxial films," 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 8a-N304-9, オンライン, Sep. 8 (2025).
4. S. Akita, T. Yasuda, K. Amemiya, D. Ogawa, T. Suemasu "Deposition temperature dependence of magnetic properties of ferrimagnetic Mn₄N epitaxial thin films on Pt/Fe/SrTiO₃(001)," 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 8a-N304-10, オンライン, Sep. 8 (2025).
5. 林洗希, 石黒雄路, 幸田陽一朗, 召田雅実, 都甲薫, 末益崇, "BaSi₂ ヘテロ接合型太陽電池に向けた HTL/BaSi₂ 間の界面調査" 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 7a-N403-5, 名城大, Sep. 7 (2025).
6. 深谷 友香, Nurfaulzi Abdillah, 都甲 薫, 末益 崇 "BaSi₂ 太陽電池への応用に向けた界面層 a-Si:H の作製と評価" 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 7a-403-1, 名城大, Sep. 7 (2025).
7. 平井瑞紀, 深谷友香, 安田剛, 幸田陽一朗, 召田雅実, 都甲薫, 末益崇 "BaSi₂ 太陽電池に向けた HN-D2 薄膜のホール輸送特性評価" 第 86 回応用物理

国内会議

学会秋季学術講演会, 7a-N403-3, オンライン, Sep. 7 (2025).

8. 石黒雄路, 青貫翔, 林洸希, 都甲薫, 末益崇 “BaSi₂ ヘテロ接合型太陽電池に向けたシミュレーションによる HTL 材料の探索” 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 7a-N403-2, オンライン, Sep. 7 (2025).
9. Md Ariful Islam, Yuka Fukaya, koki Hayashi, Mizuki Hirai, Yoichiro Koda, Masami Mesuda, Kaoru Toko, Takashi Suemasu, “Search for Efficient Hole Transport Layer for Sputter-Deposited BaSi₂ Solar Cells,” 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 8p-N206-11, Sep. 8 (2025).
10. Ammara Firdous, Koki Hayashi, Nurfauzi Abdillah, Yoichiro Koda, Masami Mesuda, Kaoru Toko, Takashi Suemasu, “Investigation of BaS hole transport layer for BaSi₂ thin film solar cells,” 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 7a-N403-4, Sep. 7 (2025).
11. 梶原君円, 石山隆光, 都甲薫, 幸田陽一朗, 召田雅実, 本多周太, 末益崇 “新規熱電材料 Ba₂AgSi₃ の薄膜作製と第一原理計算を用いたドーパントの探索 “2025 年度半導体エレクトロニクス部門委員会 第 1 回研究会, 6, 信州大学, Aug. 2 (2025).
12. 深谷 友香, Nurfauzi Abdillah 都甲 薫 末益 崇, “BaSi₂ 太陽電池に向けた HTL/BaSi₂ 構造の作製と界面の評価” 第 22 回「次世代の太陽光発電システム」シンポジウム (第 5 回日本太陽光発電学会学術講演会), PD-4, 東京理科大学, Jul. 3 (2025).
13. 林 洸希, 石黒 雄路, 幸田 陽一朗, 召田 雅実, 都甲 薫, 末益 崇 “BaSi₂ 太陽電池に向けたパッシベーション層の検討” 第 22 回「次世代の太陽光発電システム」シンポジウム (第 5 回日本太陽光発電学会学術講演会), PD-12, 東京理科大学, Jul. 3 (2025).
14. 石黒 雄路, 青貫 翔, 林 洸希, 都甲 薫, 末益 崇 “BaSi₂ ヘテロ接合型太陽電池に向けたシミュレーションによる HTL 材料の検討” 第 22 回「次世代の太陽光発電システム」シンポジウム (第 5 回日本太陽光発電学会学術講演会), PD-8, 東京理科大学, Jul. 3 (2025).
15. 平井瑞紀, 深谷友香, 安田剛, 幸田陽一朗, 召田雅実, 都甲薫, 末益崇 “有機 HTL 材料 HN-D2 の BaSi₂ への応用に向けた基礎物性調査” 第 22 回「次世代の太陽光発電システム」シンポジウム (第 5 回日本太陽光発電学会学術講演会), PD-10, 東京理科大学, Jul. 3 (2025).

光エネルギー変換部門

教員：

櫻井岳暁（数理物質系・教授）

Muhammad Monirul Islam（数理物質系・准教授）

研究員：

Yadav Anuja Arun（JSPS 外国人特別研究員）

Cao Siliang（数理物質系研究員）

Jia Yun（数理物質系研究員）

大学院生：

Gardin Muhammad Andika Saputra（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・M2）

Nicha Hirankarn（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・M1）

朝倉翔也（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

櫻井岳暁

<研究成果>

当研究室では光触媒薄膜や薄膜太陽電池などの光エネルギー変換デバイスの電気光学特性の評価、欠陥準位の解析を行い、デバイス特性改善を目標に研究を進めている。2025 年度は以下の主要な研究成果を得た。

【 1 】ペロブスカイト/CIGS タンデム太陽電池のエネルギー損失解析

ペロブスカイト/CIGS タンデム型太陽電池（図 1）のトップセル（ペロブスカイト：バンドギャップ $E_g = 1.68 \text{ eV}$ ）、ボトムセル（ Cu(In,Ga)Se_2 （CIGS） $E_g = 1.1 \text{ eV}$ ）に加え、その中間にある再結合層におけるエネルギー損失を理解し、エネルギー変換効率 30%を超えるデバイス作製プロセスにフィードバックすることを目標とし、タンデム型太陽電池の電気・光学特性評価によるエネルギー損失解析に取り組んだ。

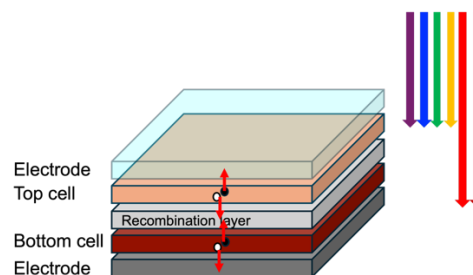


図 1. タンデム構造太陽電池の概念図（本研究の試料はトップセルがペロブスカイト、ボトムセルが CIGS からなり、東京都市大と産総研より提供を受けた）

太陽光をデバイスに照射すると電子ならびに正孔が生成し、擬フェルミ準位が暗状態でのエネルギー位置から移動（分裂）する。太陽光の照射により生成するキャリア数は、反転分布（誘導放出）を起こす条件よりもはるかに小さいことから、キャリアは分裂した擬フェルミ準位を基準として、熱平衡状態時の分布を保つことになる。よって、太陽光と同一光子数の励起光を用いた蛍光（photoluminescence: PL）スペクトル分布は、熱輻射式（プランク分布）を変形した以下の式で表される。

$$\phi_{PL}(E) = \frac{2\pi}{h^3 c^2} \frac{E^2}{\exp\left(\frac{E - \Delta\mu}{k_B T}\right) - 1} \quad (1)$$

この $\Delta\mu$ をフェルミ準位分裂（Quasi Fermi Level Splitting: QFLS）と呼ぶ。入射光は試料の奥深くまで到達し、このため PL スペクトルはバルクでのキャリア再結合に敏感である。QFLS はバルクの非輻射再結合により影響を受け（非輻射再結合が増すと、QFLS が減少）、理想的には開放起電圧と一致する。ただし、実際のデバイスはバルク再結合のみならず界面再結合が関与するため、ずれが生じる。また、ペロブスカイト薄膜や CIS 薄膜には、構成元素の化学量論的組成からのずれや結晶の不完全性に起因する裾準位があり、再結合に影響を及ぼす。本研究では（1）式を変形し、裾準位の重み付け $G(\Delta E)$ をした以下の式（Katahara–Hillhouse（K-H）モデル（J.K.Katahara, et al., J. Appl. Phys. 116, 173504 (2014)）を変形）

$$\phi_{PL}(E) = \frac{2\pi}{h^3 c^2} \frac{E^2}{\exp\left(\frac{E - \Delta\mu}{k_B T}\right) - 1} \times \left\{ 1 - \exp\left[-G(\Delta E)\alpha_0 d \left(1 - \frac{2}{\exp\left(\frac{E - \Delta\mu}{2k_B T}\right) + 1}\right)\right]\right\} \quad (2)$$

$$G(\Delta E) = \frac{1}{2E_u \Gamma(1 + 1/\theta)}$$

$$\int_{-\infty}^{\Delta E} \exp\left(-\left|\frac{\Delta E}{E_u}\right|^\theta\right) \times \sqrt{\Delta E - \Delta E * d\Delta E} \quad (3)$$

により、蛍光スペクトルをフィッティングし、QFLS より開放起電圧損失を評価した。ここで E_u はバンド揺らぎを表すアーバックエネルギー、 θ は裾準位の広がり物理式で表した指数関数 (θ は 1 から 2 の範囲) を示す。また、 α_0 は吸収係数、 d は厚みである。

図 2 に CIGS 層の PL スペクトルと QFLS のフィッティングパラメータを示す。従来の QFLS 評価では裾準位の存在を考慮しておらず、抽出した温度 T が測定温度 300 K よりはるかに高くなった。これに対し、サブバンドギャップ間吸収、すなわち裾準位を考慮することで、温度 T が 300 K に漸近することが示された。よって、裾準位を考慮した QFLS 評価により、開放起電圧損失の一貫した評価が可能であることが示された。

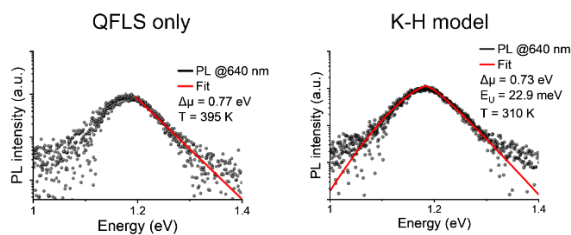


図 2. CIGS 層の PL スペクトルを用いた QFLS 解析結果 (左: (1)式、右: (2)(3)式を用いて QFLS を抽出)

図 3 に波長 640 nm の励起光源で取得した、ペロブスカイト CIGS タンデム型太陽電池 ((a) 変換効率 22.7% の試料、(b) 劣化試料) の PL スペクトル、ならびに QFLS 解析結果を示す。CIS タンデム型太陽電池の分光感度特性を参照すると、600-750 nm の波長範囲の入射光はトップセルとボトムセル、どちらの光電流生成にも寄与する。これより波長 640 nm の励起光源で取

得した PL スペクトルは、トップセル、ボトムセル両層の QFLS 評価が可能となる。

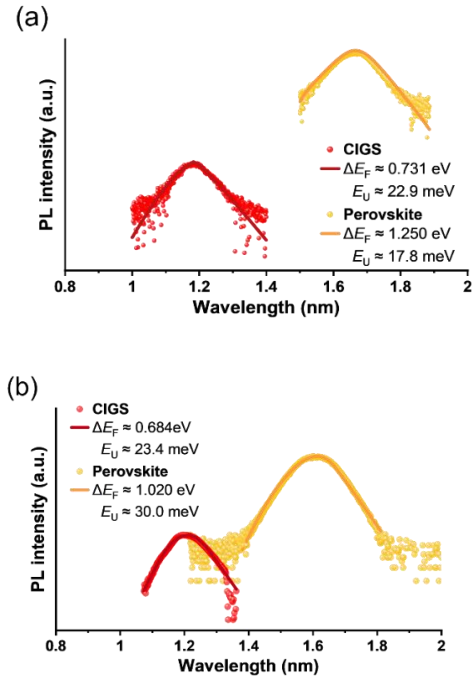


図 3. CIS タンデム型太陽電池の PL スペクトルならびに QFLS 解析結果 ((a) 変換効率 22.7% の試料、(b) 劣化試料)

試料(a)の CIGS/ペロブスカイトタンデム太陽電池は、バンドギャップ約 1.1 eV の CIGS ボトムセルと 1.68 eV のペロブスカイトトップセルから構成され、開放起電圧 V_{oc} 1.91 V、変換効率 22.7% を示す。この試料について(2),(3)式を用いて QFLS を抽出した結果、ペロブスカイトトップセルの QFLS が約 1.25 eV、 E_u が 17.8 meV、CIGS ボトムセルの QFLS が 0.731 eV、 E_u が 22.9 meV となった。二つの層の QFLS の合算値 1.98 eV とデバイスの開放起電圧 $qV_{oc} = 1.91$ eV はほぼ一致し、各光吸収層の光学特性がデバイス特性に直結していることがわかる。QFLS と qV_{oc} の 70 meV のずれは裾準位の影響やセル界面での接続損失(エネルギー準位接続やキャリア再結合)に起因すると予想しているが、引き続き検証中である。組成無秩序や欠陥の影響を示唆する E_u は、ペロブスカイト層より CIS 層の方が大きく、過去の報告と同じ傾向であることも明らかになった。よって、タンデム構造太陽電池の QFLS 測定は、各セルのエネルギー

ギー損失をより詳細に分析するのに役立つ。

一方、性能が劣化した試料(b)では、ペロブスカイトトップセルの QFLS が約 1.02 eV、 E_u が 30.0 meV、CIGS ボトムセルでは QFLS が 0.684 eV、 E_u は 23.4 meV を示した。これを試料(a)の結果と比較すると、特にペロブスカイト層の QFLS や E_u の値が大幅に劣化していることがわかる。タンデム構造太陽電池の長期信頼性の確保にはペロブスカイト層の劣化抑制が重要になると結論づけた。

【 2 】 Mg_2Sn 薄膜への銀ドーピングによる熱電特性制御

当研究室では、汎用材料ながら高い出力因子を示す $\text{Mg}_2(\text{Sn},\text{Ge})$ 薄膜を対象とし、熱電特性と欠陥の相関について研究を進めてきた。1) 点欠陥を高感度に検出し、空孔型欠陥種を同定することの可能な陽電子消滅法、2) 透過電子顕微鏡、共焦点顕微分光法や X 線リートベルト解析を活用した異相検出、また、3) 電気特性評価法により検出した欠陥導入にかかわる理論を駆使することにより、熱伝導度と欠陥の相関を系統的に評価してきた。本年度は、製膜時の銀 Ag を Mg を置換する p 型ドーパントとして導入し、この混入量を変化させた際、熱電特性がどのように変わるか調査を行った。Mg 系熱電材料では Ag のドーピングが有効な傾向があることが知られるため (図 5)、これを $\text{Mg}_2(\text{Sn},\text{Ge})$ 薄膜に適用すべく研究を実施した。

サファイヤ単結晶基板上に分子線エピタキシー法により Mg_2Sn 単結晶薄膜を形成し、同時に Ag 分子線を照射することにより Ag ドープ膜を形成した。X 線回折を測定したところ、薄膜のエピタキシャル構造に起因する強い $\text{Mg}_2\text{Sn}(111)$ ピークが確認された。ただし、Ag のドーピング濃度が高い場合 ($x \geq 0.025$)、過剰な濃度に起因し、ロックンカーブにおけるピークの広がり (図 4) ならびに MgAg の二次相も観測された。一方、Ag ドープ薄膜では、 Mg_2Sn エピタキシャル薄膜の p 型キャリア伝導が向上し、熱電特性が向上した。特に $\text{Mg}_{1.99}\text{Ag}_{0.01}\text{Sn}$ は 354 K において $1.21 \times 10^{-3} \text{ W/mK}^2$ という薄膜としては極めて高い出力因

子達成した。ただし、この値は Li や Ga のドーピング試料よりも低い値である (図 5)。

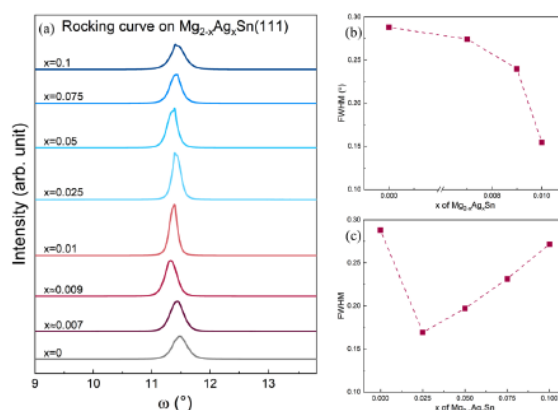


図 4. Mg_2Sn (111)ピークに関する(a)ロックンカーブ計測 (ω - 2θ 計測) (b) (c) ピーク半値幅 (FWHM)

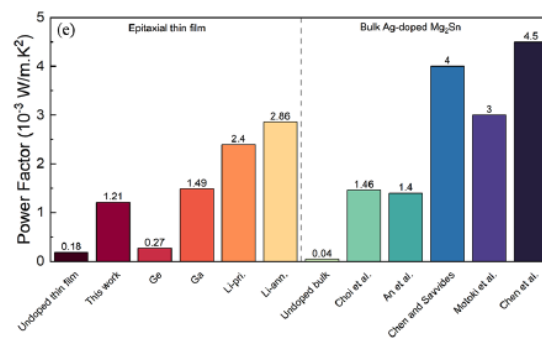


図 5. 出力因子 (This work が 1%Ag ドープ試料)

過去の Ag ドープ Mg_2Sn バルク試料では、出力因子が最大 $4.5 \times 10^{-3} \text{ W/mK}^2$ と高い値を示している。本研究で用いた試料は、高い Ag ドーピング濃度で MgAg 二次相の析出や、結晶性の低下が見られ、これと熱電特性の低下が一致している。すなわち良質な結晶薄膜形成法の開発により、さらに高い熱電性能を示す可能性がある」と結論づけた。

<論文>

- Yun Jia, Yui Sasaki, Aboulaye Traoré, Ryo Morita, Hironori Okumura, Takeaki Sakurai "Influence of Oxygen Partial Pressure on Sputtered NiO_x Film Characteristics and Deep Interface Trap Density in $\text{NiO}_x/\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ Heterojunction Diodes" *ACS Applied Materials & Interfaces*, **18**, 17973-17981 (2026).

2. Y Jia, FF Florena, A Traoré, R Morita, H Okumura, T Sakurai "Influence of acceptor-type trap states on 2DEG density in β -(Al_{0.15}Ga_{0.85})₂O₃/Ga₂O₃ HFET" *Materials Science in Semiconductor Processing*, **203**, 110260 (2026)
 3. KM Senados, T Aizawa, I Ohkubo, M Murata, T Baba, A Ohi, A Uedono, T Sakurai, T Mori "Defect passivation by annealing enables stable transport in Li-doped Mg₂Sn epitaxial films for microfabricated thermoelectric devices" *Journal of Materials Chemistry A*, **14**, 10764-10775 (2026)
 4. CKG Kwok, G Inohana, Y Sato, MM Islam, T Sakurai "Bandgap Engineering of Amorphous ZnO–SnO_x Alloys and Their Favorable Band Offsets with Wide-Gap Cu(In,Ga)Se₂" *ACS Applied Electronic Materials*, **7**, 11090-11098 (2025)
 5. KM Senados, T Aizawa, I Ohkubo, T Baba, A Uedono, T Sakurai, T Mori "Defects modification in thermoelectric Mg₂Sn (Ge) epitaxial thin films through modulation of Mg flux rate in MBE" *Journal of Physics: Energy* **7**, 035001 (2025)
 6. AA Yadav, YM Hunge, S Majumder, MM Islam, T Sakurai "Solar-Powered Supercapacitors: A Review and Outlook on Next-Generation Sustainable Energy Storage Solutions" *Energy & Fuels* **39**, 12323-12366 (2025)
 7. MA Karim, Y He, WI Chowdhury, ME Kayesh, TH Chowdhury, S Ahmmed, T sakurai, A Islam "Surface Stoichiometric Tuning for High-Efficiency and Light Illumination Stability in Sn–Pb Perovskite Solar Cells by PbBr₂ Wet Surface Treatment" *Solar RRL* **9**, 2500225 (2025)
 8. S Gofurov, D Ide, LG Oktariza, MM Islam, S Ikeda, T Sakurai "Enhanced photoelectrochemical performance of Zr-doped BiVO₄ photoanode deposited by co-sputtering" *Thin Solid Films* **819**, 140665 (2025)
 9. S Cao, Y He, MA Karim, S Ahmmed, ME Kayesh, Y Jia, T Sakurai, A Islam "Suppressing Light-Induced Phase Segregation via Dual Interface Modification for High-Performance and Stable Inverted CsPbIBr₂ Perovskite Solar Cells" *ACS Applied Materials & Interfaces* **17**, 34794-34807 (2025)
 10. CKG Kwok, N Masuko, S Ishizuka, R Scheer, MM Islam, T Sakurai "Recombination Effects of Urbach Tails as Trap States in Cu(In, Ga)Se₂ Solar Cells Probed by Temperature-Dependent Junction-Transient Spectroscopies" *Solar RRL* **9**, 2400925 (2025)
- ＜学会発表＞
- 国際会議
- 櫻井岳暁、Kwok Cheuk Kai Gary Impact of defects on energy loss in Cu(In,Ga)Se₂ solar cells, 2025 Korean Physics Society Fall Meeting, 2026.10.21-22、韓国(光州) oral (invited)
- 国内会議
1. Siliang Cao, Genchi Inohana, Ryousuke Ishikawa, Muhammad Monirul Islam, Takeaki Sakurai "Spectroscopic Analysis of Voltage Losses in CIGS and CIGS/Perovskite Tandem Solar Cells" 第73回応用物理学会春季学術講演会、東京、2026.3.15-18 poster (16a-PA5-8)
 2. Yuta Watanabe, Shio Guruge, Takeaki Sakurai, Muhammad Monirul Islam "Synthesis and Characterization of 2D-MoS₂ by Chemical Vapor Deposition (CVD) method" 第73回応用物理学会春季学術講演会、東京、2026.3.15-18 oral (18a-M_178-3)
 3. Yun Jia, Hironori Okumura, Yui Sasaki, Kota Nakano, Takeaki Sakurai "Study of temperature-dependent leakage current mechanisms in β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃ Schottky barrier diodes" 第73回応用物理学会春季学術講演会、東京、2026.3.15-18 poster (18a-PA3-5)
 4. Siliang Cao, Md. Abdul Karim, Md. Emrul Kayesh, Takeaki Sakurai, Ashraful Islam "Grain Surface Passivation for Efficient and Stable Inorganic Ultrawide-Bandgap Perovskite Solar Cells" 第86回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10 oral (10p-S201-10)
 5. 佐々木 結衣、奥村 宏典、Traore Aboulaye, Jia Yun、中野 晃汰、櫻井 岳暁 「 β -Ga₂O₃ MPS ダイオード

に向けた NiO 膜の酸素分圧制御」第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10 oral (7a-N322-7)

6. 朝倉 翔也、佐藤 勇汰、リンガ オクタリザ、櫻井 岳暁、吉野 賢二、吉山 功一、東 智弘「BiVO₄ 光電極上の NiFeOx 助触媒によるオンセットポテンシャルの制御」第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10 poster (8p-P05-5)
7. Yun Jia, Hironori Okumura, Aboulaye Traore, Yui Sasaki, Kota Nakano, Takeaki Sakurai "Deep-level traps in β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃ Schottky barrier diodes studied by deep level transient spectroscopy" 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10 poster (8p-P10-25)

光エネルギー変換部門

教員：

都甲薫（数理物質系・物理学域・教授）

大学院生：

野沢公暉（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D2）

前田真太郎（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D2）

居倉功汰（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D1）

江藤葉（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

清野碩（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

中島丈範（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

都甲薫

<研究成果>

Ge は近赤外域に感度を有する IV 族半導体として、薄膜太陽電池や赤外光検出器などの光デバイス応用が期待されている[1,2]。我々はこれまで、ガラスなどの汎用基板上に形成した多結晶 Ge 薄膜の高品質合成に取り組んできた[3-5]。しかし、膜中に存在する欠陥や粒界がキャリア輸送を阻害し、光電流は依然として小さい。そこで本研究では、Sn を添加した GeSn 薄膜において、さらなる低欠陥化および大粒径化を図り、光デバイス用基盤材料としての可能性を検討した。

W (50 nm)/SiO₂ 基板（分光感度特性評価用）および SiO₂ 基板（電気的特性評価用）に、非晶質 (a-) Si 下地層（~1 nm）と a-GeSn（膜厚：50 nm、Sn 組成 x ：0-2%）を分子線堆積した。ただし、a-GeSn 層は 125 °C で堆積している[3,4]。次に、N₂ 雰囲気中にて熱処理（400 °C）して固相成長（SPC）を誘起した。さらに、この GeSn 層をテンプレートとしたエピタキシャル成長により、GeSn 層（膜厚：450 nm、 x ：0-2%）を形成した。Ar 雰囲気中でポストアニール（500 °C）を行った後、分光感度特性評価のため、表面に ITO 電極（60 nm）を形成した。

電子後方散乱回折法（EBSD）による結晶粒マップから、SPC 層とエピタキシャル成長層は

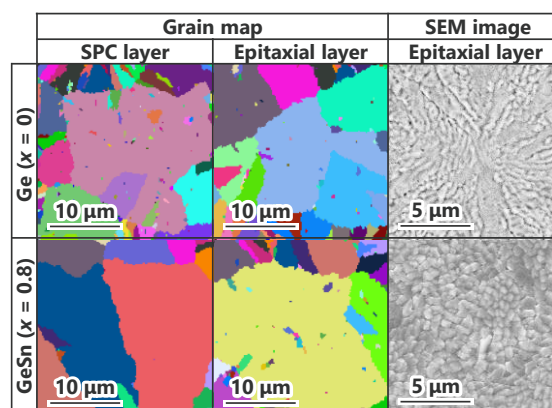


Fig. 1 Crystal grain maps and SEM images of Ge and GeSn (Sn composition $x = 0.8$) films.

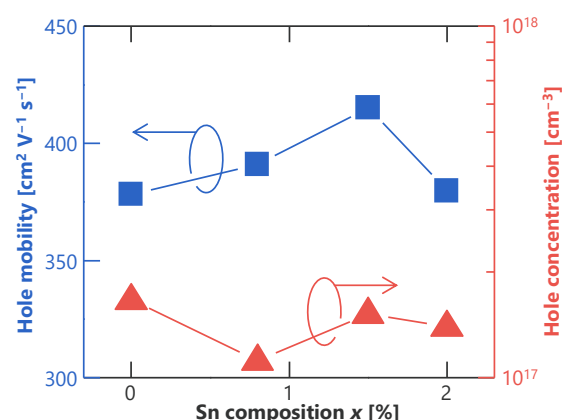


Fig. 2 Sn composition dependence of hole mobility and hole concentration in GeSn films.

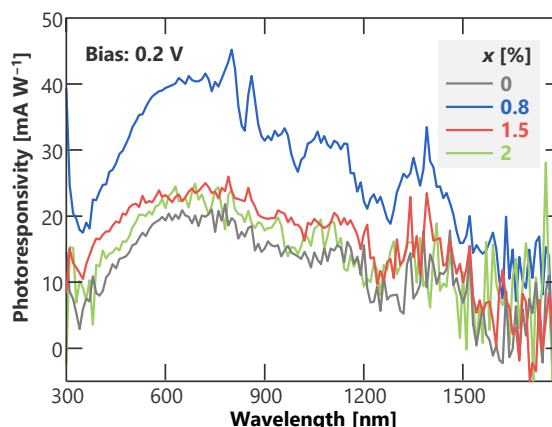


Fig. 3 Sn composition dependence of photoresponse characteristics in GeSn films.

同程度の結晶粒径であり、結晶粒径を引き継ぐように GeSn 層が成長したと考えられる。また、Ge と比較して GeSn 膜において、大粒径化する傾向も見られており、先行研究の報告とも整合する[5,6]。走査電子顕微鏡（SEM）にて表面を観察すると、GeSn 膜表面の凹凸が顕著化しており、Sn 添加によって成長様態が変化した

ことが示唆される。電気的特性を評価した結果を Fig. 2 に示す。すべての試料で膜中のアクセプタ欠陥に起因して p 型伝導を示した[7]。正孔移動度は、Sn 添加によって向上した一方、正孔密度は大きな変化は見られなかった。各組成の GeSn 膜の分光感度スペクトルを Fig. 3 に示す。いずれも 1800 nm 付近から立ち上がりが見られ、近赤外において感度が確認できる。その中でも、 $x=0.8$ において最も高い分光感度が見られた。これは、Sn 添加による結晶粒径の拡大や電気的特性の改善、欠陥補償効果によるものと考えられる[5,6]。GeSn 薄膜の光デバイス応用は活発に研究されてきたが、本研究はガラス上において分光感度が取得された初の成果である。

- [1] R. R. King *et al.*, Appl. Phys. Lett. **90**, 183516 (2007).
- [2] H. Liu *et al.*, Light Sci. Appl. **14**, 9 (2025).
- [3] K. Toko *et al.*, Sci. Rep. **7**, 16981 (2017).
- [4] T. Imajo *et al.*, ACS Appl. Electron. Mater. **4**, 269 (2022).
- [5] S. Maeda *et al.*, ACS Appl. Mater. Interfaces **14** 54848 (2022).
- [6] S. Maeda *et al.*, Cryst. Growth Des. **23**, 5535 (2023).
- [7] T. Imajo *et al.*, Sci. Rep. **8**, 14941 (2022).

<論文>

- 1. K. Nozawa, T. Ishiyama, Y. Kiyono, K. Yabuki, T. Suemasu, and K. Toko “High-rate capability of III-V anodes enabled by machine-learning-guided compositional design” *Journal of Energy Storage* 154, 121199 (2026).
- 2. Y. Eto, K. Nozawa, T. Suemasu, and K. Toko “Interface engineering with Au nanoparticles for stable and high-capacity Si thin-film anodes” *APL Energy* 4, 016101 (6 pages) (2026).
- 3. A. Morimoto, L. Huang, K. Igura, T. Ishiyama, D. Wang, K. Toko, and K. Yamamoto “Demonstration of CMOS inverter on poly-crystalline Ge on glass” *Materials Science in Semiconductor Processing* 207, 110493 (5 pages) (2026).

- 4. Y. Eto, K. Nozawa, T. Suemasu, and K. Toko “Mitigation of mechanical degradation in silicon thin-film anodes via delithiation cut-off voltage control” *Materials Advances* 7, 192 – 197 (2026).
- 5. Y. Eto, K. Nozawa, R. Ito, T. Suemasu, and K. Toko “Effects of metal substrate types on Li-ion battery anode properties of Si thin films” *Discover Materials* 5, 272 (13 pages) (2025).
- 6. K. Nozawa, K. Igura, T. Mizoguchi, N. Saitoh, N. Yoshizawa, T. Suemasu, and K. Toko “Hydrogen passivation effects on polycrystalline germanium thin films” *NPG Asia Materials* 17, 26 (7 pages) (2025).

<著書>

- 1. 都甲薫「半導体ゲルマニウム薄膜の低温形成技術とデバイスへの応用」(『エレクトロニクスステージ 2026 年 3 月号』, 技術情報協会, 54-57 項) 2026 年
- 2. 都甲薫「談話室: 筑波大学 数理物質系 環境半導体・磁性体研究室の紹介」(応用物理学会薄膜・表面物理分科会 News Letter No.192) 2025 年 (9 月発刊)
- 3. 都甲薫「光学応用に向けたゲルマニウム系薄膜の高品質合成」(月刊オプトロニクス 2025 年 7 月号, 6 pages) 2025 年 (7 月 10 日発刊)

<総説・解説>

- 1. K. Toko, K. Moto, T. Imajo, T. Ishiyama, K. Nozawa, S. Maeda, K. Igura, and T. Suemasu “Progress and perspectives on polycrystalline germanium thin films: Advances in solid-phase crystallization” *Applied Physics Reviews* 12, 031318 (17 pages) (2025).

<特許>

- 1. 都甲薫, 中村宗敦, 前田郷司「半導体装置、及び、半導体装置の製造方法」特許第 7765785 号, 令和 7 年 10 月登録 (令和 4 年 7 月出願)

<学会発表>

国際会議

1. (Invited) Kaoru Toko "Polycrystalline Germanium as a High-Mobility Channel Material for Thin-Film Transistors" *EU-Japan Digital Week 2026*, Tokyo, 2026年3月25日
2. (Oral) Koki Nozawa, Takashi Suemasu, Kaoru Toko "Bayesian Optimization-Driven Discovery of Quaternary InGaAsSb Anodes for Ultrafast Charging/Discharging Lithium-Ion Batteries " *MRS2025 Fall meeting*, EN02.07.52, Boston, Dec. 2 (2025).
3. (Oral) Koki Nozawa, Takamitsu Ishiyama, Takashi Suemasu, Kaoru Toko "Vertically Aligned Multilayer Graphene for Flexible Electronics —A Breakthrough in Graphene Architecture " *MRS2025 Fall meeting*, EL09.02.06, Boston, Dec. 2 (2025).
4. (Oral) Yutaka Kiyono, Koki Nozawa, Seo Jisol, Takashi Suemasu, Kaoru Toko "Impact of the precursor conditions on the solid-phase crystallization of amorphous InGaAs thin films on glass substrates" *SSDM2025*, N-6-06, yokohama, Sep. 18 (2025).
5. (Oral) S. Maeda, T. Ishiyama, T. Suemasu, K. Toko "Photovoltaic application of polycrystalline Ge films formed by two-step growth" *The 23rd International Vacuum Congress (IVC-23)*, WL-TF-21, Sydney, Sep. 17 (2025).
6. (Oral) T. Nakajima, T. Ishiyama, S. Maeda, T. Suemasu, K. Toko "Polycrystalline Mg-IV Alloy Thin Films for Eco-friendly Flexible Thermoelectric Devices" *SSDM2025*, E-2-02, yokohama, Sep. 16 (2025).
7. (Oral) Koki Nozawa, Takashi Suemasu, Kaoru Toko "Hardness as a Hidden Key to Durable Ge Anodes: Dopant-Driven Mechanical Softening for Cycle Life Enhancement " *IPST GSC-9*, OC-05, Bogor, Sep. 15 (2025).
8. (Oral) Y. Kiyono, K. Nozawa, S. Jisol, T. Suemasu, K. Toko "Effects of deposition temperature on solid-phase crystallization of InGaAs thin films " *APAC Silicide 2025*, Mon-a-O4, Sendai, Jul. 21 (2025).
9. (Oral) T. Ishiyama, T. Suemasu, K. Toko " Deep

Learning-Based Automated and Fast Analysis of Time-Series Images " *APAC Silicide 2025*, Sun-a-O4, Sendai, Jul. 20 (2025).

10. (Oral) Koki Nozawa, Takashi Suemasu, Kaoru Toko "High Thermoelectric Performance of p/n-type Ge Films Formed by Advanced Solid-phase Crystallization " *APAC Silicide 2025*, Sun-a-O3, Sendai, Jul. 20 (2025).
11. (Oral) Yo Eto, Koki Nozawa, Takashi Suemasu, Kaoru Toko "Enhancing Anode Performance via Substrate Adhesion Control of Si Thin Films " *APAC Silicide 2025*, Sun-a-O5, Sendai, Jul. 20 (2025).
12. (Poster) S. Maeda, T. Ishiyama, T. Suemasu, and K. Toko "Polycrystalline Ge film on glass/plastic substrates as an alternative to single crystal substrates for bottom cell application in multi-junction solar cells" *APAC Silicide 2025*, P-31, Sendai, Jul. 19 (2025).
13. (Poster) Takenori Nakajima, Takamitsu Ishiyama, Shintaro Maeda, Takashi Suemasu, and Kaoru Toko "Sputtering Growth of Polycrystalline Mg-IV Alloys Thin Films for Thermoelectric Applications " *APAC Silicide 2025*, P-29, Sendai, Jul. 19 (2025).
14. (Oral) Koki Nozawa, Takashi Suemasu, Kaoru Toko "High Thermoelectric Performance of p/n-type Ge Films Formed by Advanced Solid-phase Crystallization " *Electronic Materials Conference 2025*, Duke University, Jun. 26 (2025).
15. (Oral) S. Maeda, T. Ishiyama, T. Suemasu, and K. Toko " High quality synthesis of polycrystalline Ge films as infrared light absorbing layers for multi-junction solar cell applications " *53rd IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC 53)*, #1193, Montreal, Jun. 10 (2025).

国内会議

1. [招待講演] 都甲薫、石山隆光「Deep Learning を用いた結晶成長過程の解析」応用物理学会, 名古屋, 2025年9月8日
2. (Oral) 野沢 公暉, 末益 崇, 都甲薫 " Record-Low Carrier Densities in Polycrystalline p- and n-Type Ge Thin Films via Hydrogen Passivation " 第31回 電子デバイス界面テクノロジー研究会, S2-2-5, 三島, Jan. 30 (2026).

3. (Poster) 江藤 葉, 野沢 公暉, 末益 崇, 都甲薫 "Si 薄膜負極における最適な金属基板の選択と特性改善 " SAT テクノロジー・ショーケース 2026, P-8, つくば国際会議場, Jan. 22 (2026).
4. (Oral) 野沢 公暉, 末益 崇, 都甲薫 "水素プラズマ照射による多結晶 p/n-Ge 薄膜の極低キャリア密度化 " 電子情報通信学会 エレクトロニクス ソサイエティ SDM 研究会 令和 7 年 10 月研究会, SDM2025-51, 東北大学, Oct. 31 (2025).
5. (Poster) 清野 碩, 野沢 公暉, Seo Jisol, 末益崇, 都甲薫 "固相成長法によるガラス上高キャリア移動度 InGaAs 薄膜の実証" 第 16 回半導体材料・デバイスフォーラム, P-22, 九州大学 筑紫キャンパス, Oct. 18 (2025).
6. (Oral) 中島丈範, 石山隆光, 前田真太郎, 末益崇, 都甲薫 "Mg₂SiGeSn 薄膜の極低温合成と熱電性能実証" 第 16 回半導体材料・デバイスフォーラム, O-4, 九州大学 筑紫キャンパス, Oct. 18 (2025).
7. (Oral) 野沢 公暉, 末益 崇, 都甲薫 "下地変調層交換による垂直配向多層グラフェンの合成 " 第 61 回炭素材料夏季セミナー, 草津温泉, Sep. 10 (2025).
8. (Oral) 前田 真太郎, 石山 隆光, 末益 崇, 都甲 薫 "フレキシブル多接合太陽電池に向けた赤外吸収 Ge 層の合成" 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 9a-N206-9, 名城大, Sep. 9 (2025).
9. (Oral) 江藤葉, 野沢公暉, 末益崇, 都甲薫 "電圧制御による Si 薄膜負極の特性向上" 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 9a-N206-1, 名城大, Sep. 9 (2025).
10. (Oral) 中島丈範, 石山隆光, 前田真太郎, 末益崇, 都甲薫 "多結晶 Mg₂SiGeSn 薄膜の合成と熱電性能評価" 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 8a-N401-9, オンライン, Sep. 9 (2025).
11. (Oral) 清野 碩, 野沢 公暉, Seo Jisol, 末益崇, 都甲薫 "多結晶 InGaAs 薄膜の固相成長によるキャリア移動度の向上" 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 9a-N305-10, オンライン, Sep. 9 (2025).
12. (Poster) 野沢 公暉, 末益 崇, 都甲薫 "垂直配向多層グラフェンの実証 " 第 86 回秋季応用物理学会, 7a-P05-23, 名城大学, Sep. 7 (2025).
13. (Oral) 江藤葉, 野沢公暉, 末益崇, 都甲薫 "Au ナノ粒子の界面挿入による Si 薄膜負極の特性向上" 2025 電気化学秋季大会, S10_2_18, 鳥取大, Sep. 5 (2025).
14. (Poster) 前田 真太郎, 石山 隆光, 末益 崇, 都甲薫 " フレキシブル多接合太陽電池に向けた多結晶 Ge 膜の分光感度実証 " 第 22 回「次世代の太陽光発電システム」シンポジウム (第 5 回日本太陽光発電学会学術講演会) , PC-1, 東京理科大学, Jul. 3 (2025).

光エネルギー変換部門

教員：

所裕子（数理物質系・物質工学域・教授）

王駿豪（数理物質系・物質工学域・助教）

大学院生：

赤木慎太郎（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D3）

長島俊太郎（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D3）

清木陸（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D2）

小林大輝（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

紺野裕生（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

佐藤颯太（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

山口和也（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

牛嶋晃希（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

酒井知輝（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

土田葵（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

渡邊奈々美（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

所裕子、王駿豪

<研究成果>

【 1 】 Pressure-Induced Water Production in a Copper–Chromium Prussian Blue Analog

Prussian blue analogs (PBAs) are cyano-bridged coordination materials that have attracted considerable attention because of their diverse stimulus-responsive functionalities, porous frameworks, chemical stability, and low synthetic cost. In particular, vacancy-type PBAs contain lattice defects that can accommodate water molecules, making them promising materials for investigating water adsorption and release. Against the background of increasing global water scarcity, especially in inland and arid regions, the

development of on-site water production technologies has become an important challenge. Existing porous materials for water harvesting, such as zeolites, silica gels, and metal–organic frameworks, generally require temperature and/or humidity differences to generate liquid water. In this study, we aimed to demonstrate a new approach to water production by using pressure as the driving force and to clarify the mechanism of pressure-induced water release in a copper–chromium Prussian blue analog (**CuCr PBA**).

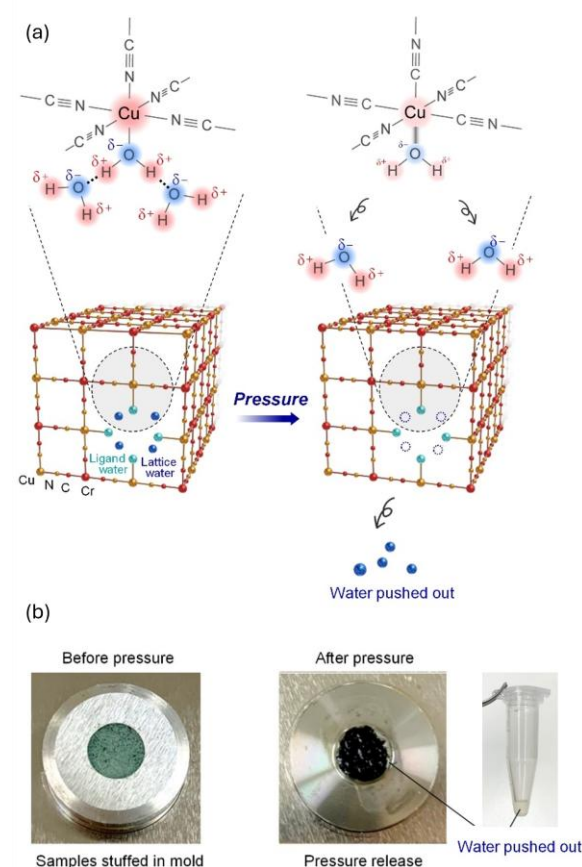


Figure 1. (a) Schematic illustration of the proposed mechanism for the pressure-induced water production of the **CuCr PBA** (a), and the photos of samples mounted in the molds before (left) and after (right) the pressure application (b).

CuCr PBA was synthesized as a vacancy-type cubic framework with the composition $\text{Cu}_{1.5}[\text{Cr}(\text{CN})_6] \cdot 6.4\text{H}_2\text{O}$. Structural analysis showed that water molecules existed as both ligand water

coordinated to Cu at defect sites and lattice water located in vacancies (Figure 1). When a uniaxial pressure of 1 GPa was applied, water droplets were visibly expelled from the sample. Quantitative collection over repeated trials showed that approximately 3.2 ± 0.4 mg of water was obtained from 13.5 mg of sample, corresponding to about 240 ± 30 g of water per 1 kg of **CuCr** PBA. Infrared spectroscopy revealed a drastic decrease in the OH stretching signal after pressure application, confirming that water molecules were removed from the material. At the same time, changes in the CN stretching bands indicated a pressure-induced modification of the Cu–NC–Cr bonding state.

To clarify the origin of this behavior, soft X-ray absorption and emission spectroscopy were used to probe the hydrogen bonding and electronic states. The results showed that pressure decreased the signals associated with hydrogen-bonded water molecules and induced the appearance of an absorption feature assigned to O 2p–Cu 3d hybrid orbitals. This suggests partial electron transfer from the oxygen of ligand water to copper. X-ray absorption measurements further indicated that the valence state of chromium remained unchanged, while the copper-related spectra reflected this local electronic modification. Powder X-ray diffraction and Rietveld analysis showed that the **CuCr** PBA retained its cubic framework after pressure application, with only a very small lattice contraction, while lattice water around the center of vacancy was selectively removed. These results suggest that pressure strengthens the interaction between copper and ligand water, decreases the polarization of ligand water, weakens hydrogen bonding with neighboring lattice water, and induces hydrophobization of pores at defect sites, leading to water expulsion.

This work demonstrates pressure-induced water production in a Prussian blue analog and provides a new concept for designing water production materials that function without relying on temperature or humidity differences.

【 2 】 Crystallite Size Control of the Metal–Semiconductor Transition in Ti_4O_7

Ti_4O_7 is one of the Magnéli phase titanium oxides and is known as a highly conductive metal oxide showing a metal–semiconductor transition. Because this phase transition strongly affects its electronic properties, controlling the transition behavior is important both for understanding the fundamental physics of Ti_4O_7 and for developing advanced functional materials. In particular, previous studies suggested that phase transitions in Ti_4O_7 can be modified by chemical substitution, oxygen vacancies, and reduction of crystallite size. On this basis, the present study aimed to clarify how further reducing the crystallite size influences the metal–semiconductor transition of Ti_4O_7 .

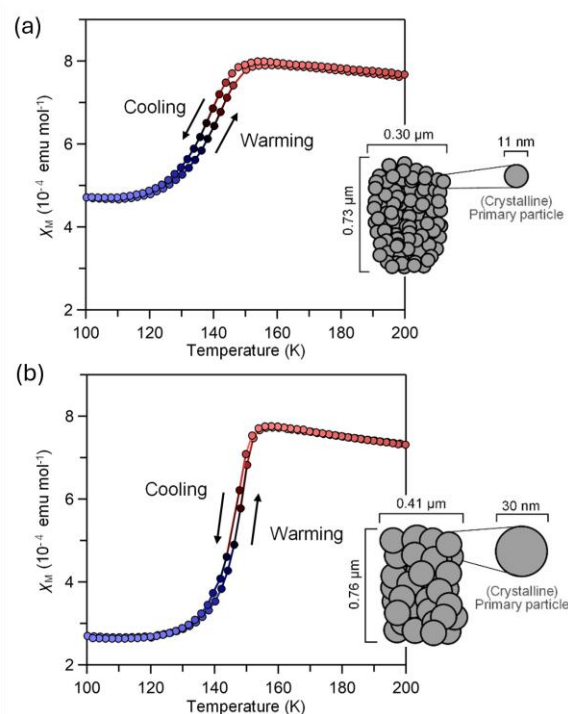


Figure 2. χ_M – T plot on both cooling and heating courses for 11 nm Ti_4O_7 (a) and 30 nm Ti_4O_7 (b) measured under an external magnetic field of 5000 Oe with a temperature sweep rate of 1.0 K min^{-1} . Insets are the schematic representation of particle morphology for 11 nm and 30 nm Ti_4O_7 , respectively.

To address this, nanocrystalline Ti_4O_7 samples with controlled crystallite sizes were synthesized from a titanium chloride precursor. Structural analyses confirmed that both samples were pure Ti_4O_7 , with average crystallite sizes of approximately 11 and 30 nm. Magnetic susceptibility measurements revealed that the sample with the smaller crystallite size showed a markedly suppressed phase transition I (Figure 2). The transition fraction of the 11 nm sample was only about 60% of that of the 30 nm sample, and the transition temperature was also slightly lower. Differential scanning calorimetry (DSC) further showed that the transition enthalpy decreased significantly with decreasing crystallite size, from 850 J mol^{-1} for the 30 nm sample to 302 J mol^{-1} for the 11 nm sample.

To understand the origin of this size-dependent behavior, thermodynamic analysis based on the Slichter–Drickamer model was carried out. The calculations suggested that the suppression of the phase transition arises from surface energy contributions, which reduce the transition enthalpy as the crystallite size decreases. These results demonstrate that crystallite size control is an effective strategy for suppressing the metal–semiconductor transition in Ti_4O_7 , and suggest a possible route toward stabilizing the metallic phase at lower temperatures.

【 3 】 Multiscale Phase Nucleation Driven by Photoinduced Polarons

Photoinduced phase transitions are attracting increasing attention because they offer a route to ultrafast control of material properties for future optoelectronic applications. However, although light can trigger electronic excitation on femtosecond timescales, the mechanism by which these microscopic excitations evolve into a macroscopic phase transformation has remained poorly understood. This collaborated research aimed to clarify this multiscale process in a ferroelastic charge-transfer Prussian blue analogue,

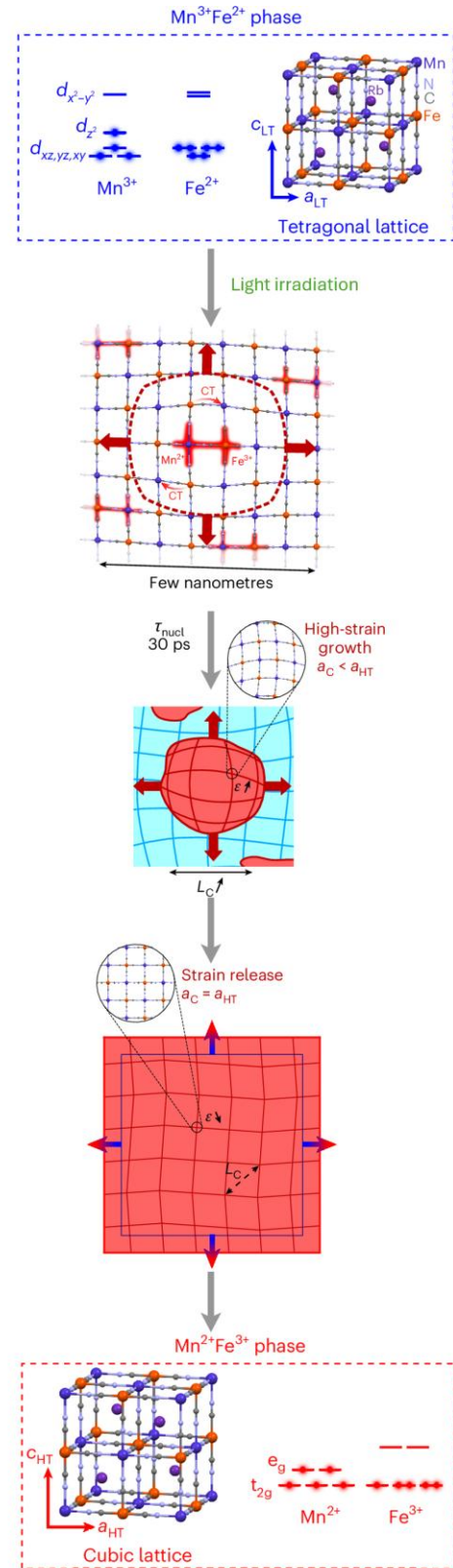


Figure 3. Illustration of Multiscale mechanism of PIPT in $\text{RbMn}_{0.94}\text{Co}_{0.06}\text{Fe}$ from low-temperature phase(top) step-by-step towards high-temperature phase (bottom).

RbMn_{0.94}Co_{0.06}Fe, by combining femtosecond X-ray absorption spectroscopy and time-resolved powder X-ray diffraction.

The results revealed a clear sequential mechanism linking local photoexcitation to macroscopic phase nucleation (Figure 3). First, the initial Mn-centred photoexcitation induced a reverse Jahn–Teller distortion within about 50 fs. This structural reorganization then launched intermetallic charge transfer from Fe to Mn within about 190 fs, producing Mn²⁺-centred charge-transfer polarons. On the picosecond timescale, these polarons equilibrated with the lattice within about 2 ps and generated substantial local strain. Above a threshold fluence, this strain did not simply relax, but instead promoted self-amplified electronic conversion and structural transformation. Time-resolved diffraction further showed that a compressed photoinduced cubic phase nucleated within about 30 ps, followed by lattice expansion within about 60 ps and macroscopic equilibration of the crystal within about 3 ns. The study therefore demonstrates that the phase transition is not instantaneous, but proceeds through a cascade of coupled electronic and structural processes across multiple time and length scales.

A key finding is that photoinduced polarons act as the driving force for cooperative phase nucleation by generating elastic strain in this volume-changing material. This work provides an important mechanistic picture of how microscopic excitations can seed and stabilize macroscopic photoinduced phases, and suggests that elastically driven cooperativity may be a general design principle for efficient photoresponsive functional materials.

<論文>

1. M. Hervé, G. Privault, S. Zerdane, S. Akagi, L.B. Gee, R.D. Ribson, M. Chollet, S. Ohkoshi, H. Tokoro, M. Cammarata, E. Collet "Multiscale phase nucleation driven by photoinduced polarons in a volume-changing material" *Nature Mater.*, 25, 588-594 (2026).
2. T. Kubota, R. Seiki, T. Kondo, V. C. Agulto, M. Nakajima, S. Ohkoshi, H. Tokoro "Suppression of Metal-to-Semiconductor Transition in Nanocrystalline Ti₄O₇ via Crystallite Size Control" *Mater. Advances*, 7, 3247-3253 (2026).
3. S. Akagi, M. Tanaka, J. Wang, H. Kiuchi, Y. Harada, Y. Chen, K. Marumoto, K. Imoto, S. Ohkoshi, H. Tokoro "Pressure-induced water production using a copper - chromium Prussian blue analog" *J. Mater. Chem. A*, 13, 18007-18013 (2025)
4. J. J. Zakrzewski, A. Hoffman, J. Wang, M. Pander, D. Matoga, H. Tokoro, S. Ohkoshi, S. Chorazy "Proton Conduction, Dielectric Relaxation, Photoluminescence, and Photochromism Governed by Humidity and Alcohol Vapors in a Uranyl–Cobalt Framework with Labile Coordination Sites" *Angew. Chem. Int. Ed.*, 64, e202517109 (2025).
5. A. Hoffman, M. Zychowicz, J. Wang, K. Matsuura, F. Kagawa, J. Rzepiela, M. Heczko, S. Baś, H. Tokoro, S. Ohkoshi, S. Chorazy "Photoluminescent, dielectric, and magnetic responsivity to the humidity variation in SHG-active pyroelectric manganese(II)-based molecular material" *Chem. Sci.*, 16, 8979 (2025).
6. R. Mandal, M. Lorenc, M. Cammarata, M. Levantino, S. Zerdane, E. Janod, L. Cario, H. Tokoro, S. Ohkoshi, E. Trzop, M. Servol, G. Huitric, H. Cailleau, V. T. Phuoc, F. Banhart, C. Enachescu, L. Stoleriu, C. Mariette "Picosecond anisotropic phase separation governing photoinduced phase stability in submicron Ti₃O₅ crystals" *Commun. Mater.*, 6, 209/1-10 (2025)

<学会発表>

国際会議

1. Junhao Wang, Jakub J. Zakrzewski, Mikolaj Zychowicz, Hiroko Tokoro, Szymon Chorazy, Shin-ichi Ohkoshi, "Hybrid Luminescence–Absorption Thermometry for Self-Temperature Sensing in Molecule-Based Magnetic Materials" *10th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC10)*, Hanoi, Vietnam, 2025.10.24-27 (oral)
2. Riku Seiki, Tomoko Kubota, Akito Fujisawa, Akhmad

- Fadel Fadilla, Shin-ichi Ohkoshi, Hiroko Tokoro, "Relationship between Heat Storage Properties and Crystallite Size of Lambda-Type Titanium Pentoxide" *27th IUPAC International Conference on Chemical Thermodynamics*, Porto, Portugal, 2025.07.20-24 (poster)
- Shuntaro Nagashima, Daiki Kobayashi, Junhao Wang, Kenta Imoto, Shin-ichi Ohkoshi, Hiroko Tokoro, "Synthesis and spin-crossover behavior of cyanido-bridged Fe(II)–W(IV) complexes incorporating pyridine ligands with different halogen substituents" *19th International Conference on Molecular Magnetism*, Bordeaux, France, 2025.10.27-31 (poster)
 - Shintaro Akagi, Wang Junhao, Kenta Imoto, Shin-ichi Ohkoshi, Hiroko Tokoro "Pressure-induced water harvesting using a molecule-based magnet: CuCr Prussian blue analog" *19th International Conference on Molecular Magnetism*, Bordeaux, France, 2025.10.27-31 (poster)
 - Koki Ushijima, Shintaro Akagi, Junhao Wang, Shin-ichi Ohkoshi, Hiroko Tokoro "Synthesis and crystal structures of Ni^{II} (3-fluoropyridine)-[W^{IV}(CN)₈] complexes" *19th International Conference on Molecular Magnetism*, Bordeaux, France, 2025.10.27-31 (poster)
 - Yuki Konno, Erik Lötstedt, Kaoru Yamanouchi, Hiroko Tokoro "Quantum Computing Analysis of Time Evolution of One-dimensional Ising Spin Systems" *15th International Conference on Chemistry and Chemical Process*, Tokyo, Japan, 2026.03.03-06 (poster)
- 国内会議
- 所裕子「熱力学的双安定性にもとづく新機能物性の開発」 名古屋大学公開講演会、名古屋、2025.11.13 (招待講演)
 - 所裕子「物質と水の相互作用を利用した磁気状態のスitchング」 第2回有機無機量子スピンサイエンス・テクノロジー研究会、つくば、2025.12.22 (招待講演)
 - 清木陸、久保田智子、大越慎一、所裕子「結晶子サイズの調整による Ti₄O₇ ナノ結晶における金属-半導体相転移の制御」 日本物理学会第 80 回年次大会、広島、2025.9.16-19 (ポスター)
 - 清木陸、久保田智子、大越慎一、所裕子「七酸化四チタンナノ結晶の結晶子サイズ調整による金属-半導体相転移の制御」 第 15 回 CSJ 化学フェスタ、名古屋、2025.10.22-24 (ポスター)
 - 清木陸、久保田智子、大越慎一、所裕子「結晶子サイズ調整による Ti₄O₇ ナノ結晶における金属-半導体相転移の抑制」 日本セラミックス協会 2026 年年会、横浜、2026.3.4-6 (ポスター)
 - 清木陸、久保田智子、大越慎一、所裕子「七酸化四チタンナノ結晶の結晶子サイズ調整による金属-半導体相転移の制御」 日本化学会第 106 春季大会、船橋、2026.3.17-20 (ポスター)
 - 長島俊太郎、小林大輝、井元健太、大越慎一、王駿豪、所裕子「Fe(II)-W(IV)オクタシアノ錯体におけるハロゲン置換によるスピントロニクスオーバー協同性の制御」 日本化学会第 106 春季大会、船橋、2026.3.17-20 (口頭)
 - Shintaro Akagi, Mayuko Tanaka, Junhao Wang, Hisao Kiuchi, Yoshihisa Harada, Shin-ichi Ohkoshi, Hiroko Tokoro「Pressure-induced water harvesting using a CuCr Prussian blue analog」 錯体化学会第 75 回討論会、長崎、2025.9.15-17 (口頭)
 - 土田葵、久保田智子、大越慎一、所裕子「アルミニウム置換型七酸化四チタンの合成」 第 15 回 CSJ 化学フェスタ、東京、2025.10.22-24 (口頭)
 - 山口和也、清木陸、大越慎一、所裕子「バナジウム置換型ラムダ五酸化三チタンの合成」 日本物理学会第 80 回年次大会、広島、2025.9.16-19 (ポスター)
 - 佐藤颯太、赤木慎太郎、王駿豪、大越慎一、所裕子「2 種の CsNiW オクタシアノ錯体の結晶構造と磁気特性」 錯体化学会第 75 回討論会、長崎、2025.9.15-17 (口頭)
 - 紺野裕生、Erik Lötstedt、山内薫、所裕子「量子計算による 1 次元イジングスピン系の時間発展挙動」 日本物理学会第 80 回年次大会、広島、2025.9.16-19 (ポスター)
 - 紺野裕生、Erik Lötstedt、山内薫、所裕子「量子コンピューターを用いた 1 次元イジングスピン系の時間発展計算」 第 15 回 CSJ 化学フェスタ、東京、

2025.10.22-24 (口頭)

14. 紺野裕生、Erik Lötstedt、山内薫、所裕子「量子コンピューターによる時間発展計算の qubit 数比較」
ダイキン-ipi シンポジウム、東京、2025.11.25-27(口頭)
15. 紺野裕生、Erik Lötstedt、山内薫、所裕子「Simulation of the time evolution of the one-dimensional Ising model on a quantum device」 日本化学会第 106 春季大会、船橋、2026.3.17-20 (口頭)
16. 小林大輝、赤木慎太郎、井元健太、大越慎一、所裕子「Cu(II)W(V)オクタシアノ(pyridazine)錯体の合成および溶媒による構造次元制御」 錯体化学会第 75 回討論会、長崎、2025.9.15-17 (ポスター)
17. 小林大輝、赤木慎太郎、井元健太、大越慎一、所裕子「溶媒による構造次元制御を可能とする Cu(II)- W(V)オクタシアノ(pyridazine)錯体の合成と磁気特性」 第 15 回 CSJ 化学フェスタ、名古屋、2025.10.22-24 (ポスター)
18. 小林大輝、井元健太、大越慎一、所裕子「Synthesis and Magnetic Properties of Cu^{II}W^V Octacyanido Complexes Using Water and Methanol Solvents」 日本化学会第 106 春季大会、船橋、2026.3.17-20 (ポスター)
19. Koki Ushijima、Shintaro Akagi、Junhao Wang、Shin-ichi Ohkoshi、Hiroko Tokoro 「Synthesis and crystal structures of two types of octacyano-bridged NiW bimetal assemblies」 錯体化学会第 75 回討論会、長崎、2025.9.15-17 (ポスター)
20. 牛嶋晃希、赤木慎太郎、王駿豪、大越慎一、所裕子「Ni-W オクタシアノ・3-フルオロピリジン錯体の光磁気効果」 日本化学会第 106 春季大会、船橋、2026.3.17-20 (ポスター)
21. 酒井知輝、所裕子「プルシアンブルー類似体における機械学習による磁気特性最適化検討」 日本化学会第 106 春季大会、船橋、2026.3.17-20 (ポスター)

光エネルギー変換部門

教員：

梅田享英（数理物質系・物理工学域・准教授）

大学院生：

島袋聞多（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム M2）

小川宇宙（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム M1）

横山義希（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム M1）

梅田享英

<研究成果>

当研究室では、電子スピン共鳴（ESR）分光を用いて半導体デバイスの欠陥分光評価を行っている。ESR 分光は電子スピンをもった欠陥準位を選択的に観察することができる。さらに、その準位の起源同定が可能なことが ESR 分光の最大の特徴となっている。当研究室には半導体デバイス中の欠陥準位を検出することができる電流検出 ESR 分光技術（Electrically Detected Magnetic Resonance：EDMR）があり、半導体デバイスそのものを評価対象とすることができる。本年度は、半導体技術の基本中の基本であるドーピングについての研究結果を紹介したい。テーマは、長年の謎だった「シリコンの水素ドナー」の解明である。

【 1 】 シリコンの水素ドナーの解明

シリコンに水素イオン注入（プロトン注入）をすることによって発生する水素ドナー（Hydrogen-related donors；HDs）は 1971 年に発見され（JJAP 10, 532 (1971)）、以来、半世紀以上にわたって正体が不明だった謎のドナーである。シリコン中で水素がドナーとなる機構を私たちが初めて解明できたので報告する（文献[1]）。

まず HDs の基本から。水素イオン注入はシリコン表面から最も深いところに精密ドーピングすることができるので、現在では縦型のパワーデバイスの作製で標準的に用いられてい

る。発見後の多くの研究によって、通常のドナーのような置換型不純物ではないこと（図 1(a)）、水素とシリコン以外の元素は関係ないこと、イオン注入以外の方法でも発生できること、シリコンに発生した何らかの構造体（欠陥）と水素が結合することでドナーとなること（図 1(b)）、などが明らかになった。骨格となる欠陥さえあれば、あとは水素と結合させることでイオン化エネルギー 30～80 meV の浅いドナーが発生する。通常、水素との結合のためにイオン注入後に 300～400℃の活性化アニールが用いられる。

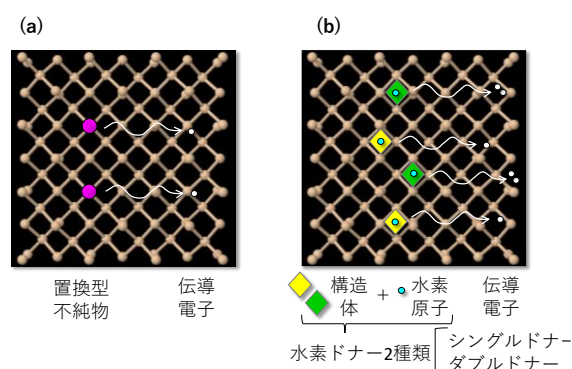


図 1. シリコンのドナー。(a) 標準的な置換型不純物ドナー（シリコンでは P、As、Sb など）。(b) 水素ドナー（HDs）。水素ドナーは構造体（点欠陥）＋水素原子から成る。実験からシングルドナーとダブルドナーの 2 種類の HDs が存在することが分かっている。

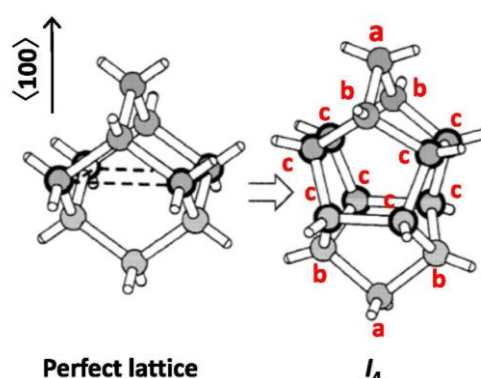


図 2. 水素ドナーHDs の骨格となる点欠陥。I₄ クラスタ。Phys. Rev. B 108, 235201 (2023)から転載。

私たちは HDs を使って Si パワーデバイスを生産している三菱電機株式会社（本件ご担当：清井明さん）とともに HDs の解明に取り組ん

できた。まず、HDs の骨格となる構造体が「格子間原子クラスター (I_4)」(図 2) であることを ESR 分光で決定した (A. Kiyoi, T. Umeda, Phys. Rev. B **108**, 235201 (2023))。さらに、伝導電子を観察できるサイクロトロン共鳴分光と、ドナー電子を観察できる ESR 分光とを同時に測ることで (図 3)、2 種類の HDs が共存し、片方はシングルドナーで、もう片方は **negative- U** (負の実効相関エネルギー) をもつダブルドナーであることも明らかにした。また、 I_4 -水素結合体のドナー電子は ^1H 核スピン超微細分裂を示さないことも報告した。この事実は、ドナー電子と水素原子とが空間的に分離していること (波動関数の重なりが小さいこと) を示唆している。

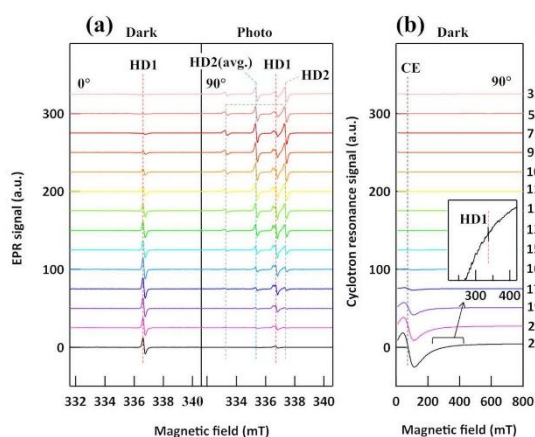


図 3. 水素ドナーHDs の ESR 分光とサイクロトロン共鳴分光。HD1 と HD2 の 2 種類の HDs がある。文献[1]より転載。

以上の事実から一步先に進んで、水素の電子がどのようにしてドナー電子となるのかを解明するために、(1) 電子-核二重共鳴 (Electron-Nuclear Double Resonance : ENDOR) 分光による ^1H 核スピン超微細分裂検出実験と、(2) 第一原理計算 (Quemix 株式会社に依頼、ご担当：西谷侑将さん、松下雄一郎先生) を行った。それぞれ説明する。

(1) ENDOR 実験。ENDOR は ESR 信号線幅に埋もれた核スピン超微細分裂を検出する実験である。ESR を励起しつつ (マイクロ波 9.4GHz による電子スピン励起)、同時に核磁気共鳴を励起する (Nuclear Magnetic Resonance :

NMR)。NMR 励起には RF 帯 1~100 MHz が用いられる。市販 ESR 分光装置 (ブルカー社 E500 装置) の ENDOR オプション+ハイパワーRF アンプ (E&I 社 3200L、300W、250kHz~150MHz) を使って実験した。図 4 が HDs (「MT1/HD1」と呼ばれるタイプ) の ESR 信号を使って検出した ENDOR スペクトル (≡NMR スペクトル) である。 ^{29}Si 核スピン NMR 信号 (共鳴信号中心 2.8 MHz、分裂幅 0.11 MHz) と ^1H 核スピン NMR 信号 (共鳴信号中心 14.3 MHz、分裂幅 0.39 MHz) の 2 つの核スピンが捉えられた。0.39 MHz は磁場換算で 0.16 Gauss (0.016 mT) となるので、この ^1H 超微細分裂は ESR 信号線幅 2 Gauss に完全に埋もれてしまって ESR では見えない。ENDOR だからこそ検出できた信号である。HDs のドナー電子は置換型不純物ドナーのような s 軌道ライクな波動関数ではなく、 $\langle 100 \rangle$ 軸対称の波動関数をもつ。 $\langle 100 \rangle$ 軸上の 2 個の Si 原子上 (図 2 の Si 原子 a) で最大密度を有する。よって波動関数の節に当たる I_4 リング (図 2 の Si 原子 c で作られた四角形) の辺りに水素原子がいれば、 ^1H 超微細分裂が最小になり、実験値のような非常に小さな分裂を示すものと予想される。

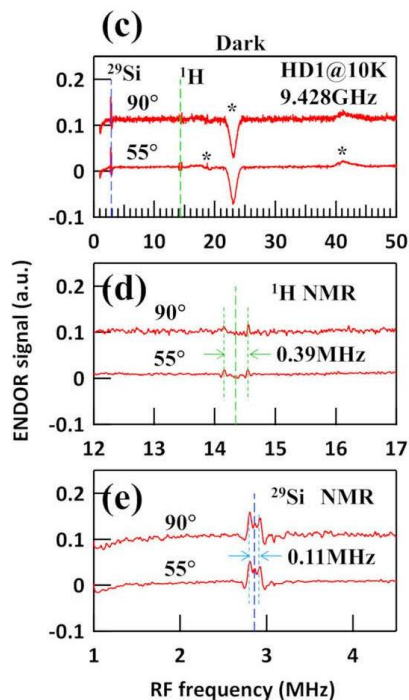


図 4. 水素ドナーHDs の ENDOR 分光。 ^1H 核スピン超微細分裂 0.39 MHz を検出。文献[1]より転載。

(2) 第一原理計算。 I_4 リングの Si-Si 結合の中心に水素を配置する「ボンドセンター型水素 (H_{BC})」を仮定して、 I_4+H 、 I_4+H_2 、 I_4+H_4 、 I_3+H などの第一原理計算を行った。 I_3 は、 I_4 クラスターの前駆体として知られる点欠陥で、 I_3 が 200~300°C のアニールで先行して発生し、次いで I_4 が 300~450°C のアニールで発生することが実験で分かっている。前駆体も水素と結合する可能性があるため I_4 とどのように違うのかを調べてみた。

計算手法は VASP パッケージをベースにし、最終的に HSE06 汎関数を用いた高精度計算を施している。点欠陥としては巨大な I_4 欠陥 (図 2) や、大きく広がったドナー波動関数を計算するために、巨大なスーパーセルを使った大規模計算を行っている (Si 原子数 ≥ 770 個)。この計算はシリコンのバンドギャップ E_g を 1.2 eV とほぼ再現できており、かつ、置換 P ドナーの準位を $E_C - 0.07$ eV (実験値 0.045 eV) と計算できている。ドナー状態を調べるのに十分な精度をもった第一原理計算である。

まず、水素をもたない I_4 のエネルギー準位の計算結果は図 5 のようになる。伝導帯端 E_C (Conduction-Band Edge: CBE) のそばに欠陥準位を作ることが分かる。私たちはこの準位を **near-CBE states** と名付けた。これがドナー準位の素になる。この準位に水素の電子が入れば浅いドナーの完成である。 I_3 に対しても同様の **near-CBE states** が得られる。 I クラスターに共通した性質と推測される。さらに荷電状態 +1 ~ -2 に対して、 I_4 の生成エネルギーのフェルミレベル依存性を調べてみると、図 6 のように (0/-1) 準位と (-1/-2) 準位が極めて接近していることが分かった (接近しているために図では (0/-2) と表示している)。これは -1 荷電と -2 荷電が共存できることを示している。言い換えれば、 I_4 が **negative-U** の性質をもち得ることを示唆しており、「**negative-U** のダブルドナーが共存する」という実験事実をうまく説明することができる。

次に、 I_4 に H_{BC} を追加した計算結果を図 7(a) に表示する。水素の個数に関係なく、**near-CBE states** がほぼ保たれており、さらに、水素の電子が **near-CBE states** に収容されていることが

分かる。図 7(b) は I_4 から離れた位置に H_{BC} を置いたときの計算結果で、この時は、 H_{BC} が作る深い準位に水素の電子が入り、浅いドナーとはならないことを示している。さらに図 7(a) の状態に対して、 1H 核スピン超微細分裂を第一原理計算したところ、実験値とコンシステントな 0.22 MHz の計算結果を得た。

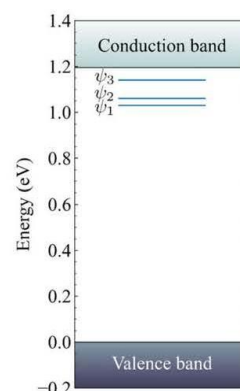


図 5. I_4 の高精度第一原理計算結果。near-CBE states をもつことが特徴。文献[1]より転載。

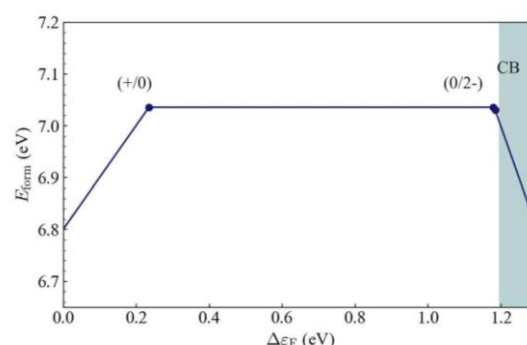


図 6. I_4 の荷電状態のフェルミレベル依存性。中性 (0)、-1、-2 荷電を取りやすい **negative-U** 的な性質が見られ、実験事実を説明できる。文献[1]より転載。

水素の電子が **near-CBE states** に入る過程をもっと詳しく調べてみると図 8(a) のようになる。まず I_4+H_{BC} が **near-CBE states** を作ることは前述の通り。 I_4 が作る **near-CBE states** の波動関数と水素原子の波動関数はほとんど重ならないので (1H 超微細分裂の小ささで実証済み)、**near-CBE states** は H_{BC} を複数個追加してもほぼそのまま保たれる。一方、 H_{BC} からは図に示したような σ_{sp} 、 σ_{sp}^* 、 σ_p 、 σ_p^* の 4 つの準位が発生する。前 2 者は Si-Si 結合の $3p$ 軌道と H_{BC}

の $1s$ 軌道の混成による結合性軌道と反結合性軌道。残りの 2 者は Si-Si 結合の結合性軌道と反結合性軌道から派生した準位である。水素の 1 電子は、この Si-Si 結合由来の σ_p^* 準位に収容される。 σ_p^* の波動関数は、2 個の Si 原子にわたって $+/-+/-$ のような位相で分布しており（したがって反結合性軌道の性質をよく保っている）、 H_{BC} の $1s$ 軌道との重なり積分が完全にゼロになる。したがって、そのエネルギー位置は H_{BC} の挿入の影響を受けない。 I_4 リングの Si-Si 結合は通常結合よりも圧縮されている（図 8(a) の原子モデル参照）。そのために結合性-反結合性分裂が大きくなって CBE を超えた位置に σ_p^* が発生する（図 8(a)）。このために H_{BC} のもつ 1 電子は、下方にある near-CBE states に移動する。これが水素の電子が near-CBE states に移るメカニズムである。仮に、 H_{BC} を I_4 から離れた位置に置いた場合は図 8(b) のようになる。 σ_p^* 準位は $E_V + 0.8$ eV に位置しており、near-CBE states には届かない。その結果、浅いドナーにはならない。これは σ_p^* を形成する結合性-反結合性分裂が小さいためとして説明される。

同じような議論は、同じく圧縮された Si-Si 結合をもつ $I_3 + H_{BC}$ でも成り立つ。 I_3 も near-CBE states を作るので $I_3 + H_{BC}$ も浅いドナーを発生させることができる。しかも、水素原子との結合エネルギーが I_4 よりも I_3 のほうが大きかったため、理論上は $I_3 + H_{BC}$ のほうが安定な水素ドナーになり得る。しかし実験では、水素ドナーは $I_3 + H_{BC}$ の活性化アニール（200～300℃）では発生しない。これは水素ドナーが補償欠陥によって相殺されているためと考えられる。200～300℃ではアニールが不十分で補償欠陥がまだ残っているが、300～450℃アニールで補償欠陥が十分に取り除かれると、 $I_4 + H_{BC}$ の水素ドナーが顕著に見えるようになるものと考えられる。

I_4 リングは最大 4 個までの水素原子を収容することができる。それに応じてシングルドナーになったり（ $I_4 + H_{BC}$ ）、2 個の H_{BC} からの水素供給を受けてダブルドナーになったりすることができる。

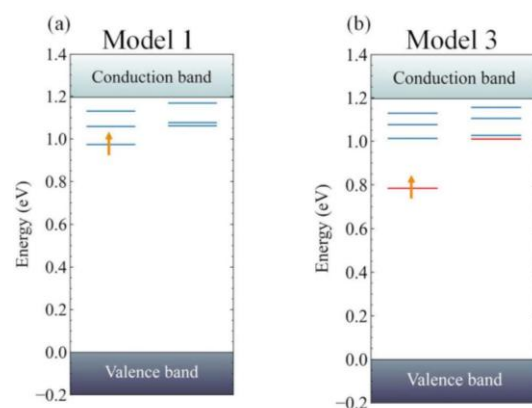


図 7. $I_4 + H_{BC}$ の第一原理計算結果。(a)は I_4 リングに H_{BC} を挿入した場合。(b)では I_4 から離れた位置に H_{BC} を挿入。(a)では near-CBE states に水素原子の電子が収容され、(b)ではそれとは別の深い準位に収容されている。文献[1]より転載。

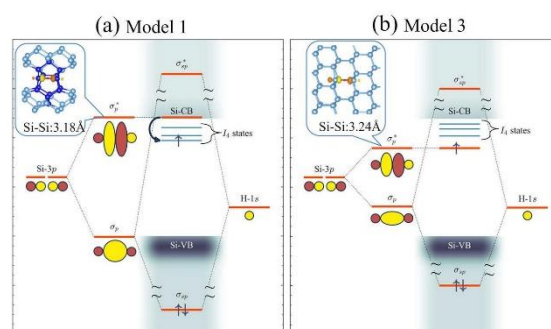


図 8. 水素ドナー発生のメカニズム。 I_4 の作る near-CBE states に水素 H_{BC} の電子が移動して完成する。 H_{BC} の電子を収容する σ_p^* 準位が near-CBE states よりも高い位置にくるのがポイント。(a) I_4 リングに H_{BC} を挿入した場合は σ_p^* 準位が near-CBE states よりも高くなるので、水素から I_4 へ電子の移動が起きるが、(b) I_4 から離れた H_{BC} ではそうはならない。文献[1]より転載。

【 2 】シリコン以外の半導体への水素ドナーの展開

水素ドナーの発生は、near-CBE states を発生させる欠陥と H_{BC} の融合によってもたらされる。このコンセプトはシリコンに限らず、他の半導体でも適用可能ではないかと考えられる。その発展性を調べるために、ダイヤモンド（ $E_g = 5.47$ eV）と AlN（ $E_g = 6.1$ eV）における H_{BC} を第一原理計算で調べてみた。どちらの半導体も p 型ドーピングは容易であるが、 n 型ドーピ

ングに困難を抱えている。前者は置換 P ドナーによる n 型ドーピングが可能であるが、そのイオン化エネルギーは 0.6 eV にも達し、通常の意味でのドナーの域を超えている。AlN では GaN と同様に置換 Si ドナーが n 型ドーピングを可能にしているが、Ga を Al に置換していくにしたがってイオン化エネルギーが 0.015 eV (GaN) から 0.2 eV 以上 (AlN) に深くなっていくことが知られている。これは置換型不純物の「DX センター化」に由来する現象で、イオン性の強い化合物半導体の宿命とも言える性質である。ゆえに解消は難しいとされている。そのため、どちらのワイドギャップ半導体でも水素ドナーのような浅いドナーが発生すれば革新的な技術になり得る。

near-CBE states を作る点欠陥のデザインには、ここでは触れない。基本的にはシリコン同様に格子間原子をベースにしたデザインになると思われる。空孔型欠陥は原則、ダングリングボンドを発生するので、深い欠陥準位を発生させて補償欠陥として働いてしまうからである。near-CBE states のような CBE にごく近い電子状態は、エネルギーバンドそのものを構成する通常結合を少し改変すれば発生させやすいと思われるので、一般論では格子間原子のほうが水素ドナーのデザインに適している。

ここでは第一原理計算を使って、 H_{BC} と格子間位置の水素原子を比較してみた。水素ドナーに必要な H_{BC} が安定かどうか？である。その結果が図 9 にある。ダイヤモンド中の水素原子は元々「 H_{BC} が一番安定」との第一原理計算の報告があり、私たちの計算もそれをなぞっている。ダイヤモンド中の水素原子は、図 9(a) のように C-C 結合に入り込んで H_{BC} となったほうが、格子間位置の孤立状態 (図 9(b)) よりも常に安定であり、したがって、適切な near-CBE states と圧縮された C-C 結合さえあれば、浅い水素ドナーを作ることができると思われ。

他方で、イオン結合性の AlN では H_{BC} は安定ではなかった。格子間位置の水素原子 (図 9(d)) のほうが圧倒的に安定である。さらに問題なのはボンドセンター位置に置いた水素が自動的に N-H 結合のように片方の原子と結びついてしまうことである (図 9(c))。その準位

はたまたま CBE の近くにあるが、(d) の格子間位置の水素原子のほうが圧倒的に電子のエネルギーが低いので (d) の構造に緩和してしまう。以上の簡易的な考察より、共有結合性の半導体では H_{BC} が十分に安定であり、near-CBE states を用意することができれば水素ドナーの可能性が開かれることが分かった。

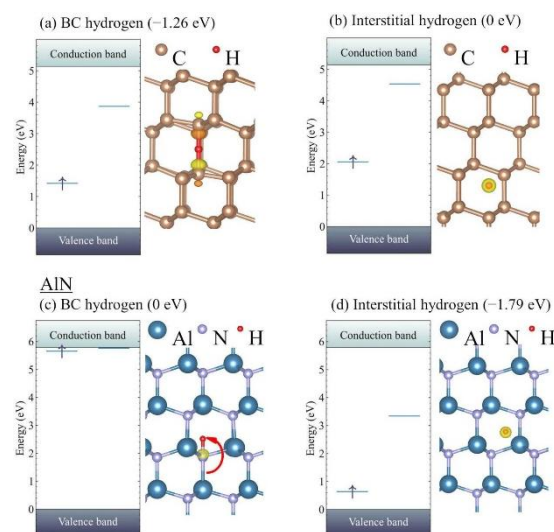


図 9. 他の半導体への水素ドナーの展開可能性を調べる。(a)、(b)ダイヤモンド ($E_g = 5.47\text{ eV}$)。 (c)、(d) AlN ($E_g = 6.1\text{ eV}$)。ダイヤモンドでは H_{BC} が安定的に存在することができ、適切な near-CBE states を作ることができれば浅い水素ドナーの創出が可能である。文献[1]より転載。

<論文発表>

1. A. Kiyoi, Y. Nishiya, Y. Matsushita, T. Umeda, “Advancing N-type doping in semiconductors through hydrogen-defect interactions”, Commun. Mater. 7, 8 (2026).
2. E. Kano, S. Hattori, K. Shiraishi, A. Oshiyama, T. Umeda, T. Narita, T. Kachi, N. Ikarashi, “Structure of the very first atomic layer of Ga oxide on GaN at GaN oxidation front”, Appl. Phys. Lett. 127, 032112 (2025).

<著作物>

1. 「半導体の酸化機構と酸化膜」(応用物理学会半導体分野将来基金委員会編、近代科学社、2026 年 2 月、402 ページ、ISBN: 9784764961340)、「第 7

章・ESR 分光で見る界面欠陥：Si と SiC」、梅田
享英、pp. 212-237.

<学会発表>

国際会議

1. T. Umeda, “Carbon P_b centers at 4H-SiC/SiO₂ interface”, Int. Workshop on Dielectric Thin Films for future electron devices (IWDTF2025) Sendai, Japan, 2025.11.06-11.07 (Invited).

国内会議

1. 島袋聞多、西谷侑将、堀内颯介、染谷満、平井悠久、渡部平司、松下雄一郎、梅田享英「4H-SiC(0001)/SiO₂ 界面の P_{bc} タイプ 2 センター」第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名城大学天白キャンパス、2025.09.07～10（口頭）。
2. 島袋聞多、安達慧悟、染谷満、平井悠久、渡部平司、梅田享英「ドライ酸化とウェット酸化 4H-SiC(0001) MOSFET の界面欠陥の電流検出 ESR 分光による比較」第 73 回応用物理学会春季学術講演会、東京科学大学大岡山キャンパス、2026.03.15～18（口頭）。
3. 清井明、西谷侑将、松下雄一郎、梅田享英「水素関連ドナーにおける水素の役割」第 73 回応用物理学会春季学術講演会、東京科学大学大岡山キャンパス、2026.03.15～18（ポスター）。
4. 梅田享英「MOSFET の欠陥起源同定に向けた電流検出 ESR 分光と新しいテクニック」第 73 回応用物理学会春季学術講演会、東京科学大学大岡山キャンパス、2026.03.15～18（招待講演）。

(3) 電気エネルギー制御部門

教員：

岩室憲幸（数理物質系・物理工学域・教授）

矢野裕司（数理物質系・物理工学域・准教授）

磯部高範（数理物質系・物理工学域・准教授）

大学院生：

鈴木一広（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

鹿志村海音（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

新郷諒介（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

吉田開（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

鈴木陽太（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

岩室憲幸、矢野裕司、磯部高範

＜研究成果＞

当研究室では、次世代パワー半導体デバイスを使いこなすため、回路・制御技術による電力変換器の変換密度向上を軸に、パワーエレクトロニクスシステムの性能向上に関する研究を行った。

半導体デバイスの研究においては、SiC MOSFET のアバランシェ耐量向上のための重要設計パラメータを見出すことを目的とし、トレンチ SiC MOSFET を実測評価し、さらに並行して TCAD シミュレーション解析を実施した。その結果、ゲート電極配線（ゲートランナーと呼ぶ）下の領域にトレンチゲート電極を設けることで、アバランシェ耐量が劣化することを明らかにした。また、モノリシック相補型インバータへの適用を想定して横型 p チャネル SJ MOSFET の寄生容量とスイッチング損失について、TCAD で解析した。意図的にチャージバランスからずれた設計とすることでスイッチング損失が低減できることを明らかにした。パワーエレクトロニクス回路の研究については GaN デバイスを用いた高周波駆動系統連系インバータおよび SST（半導体化変圧器）に用いられる絶縁 DC-DC 変換回路の高効率化など

を行なった。

【 1 】SiC MOSFET のアバランシェ耐量向上に関する研究

(1) はじめに

SiC MOSFET は低オン抵抗特性と高速スイッチング特性を同時に実現することが可能であることから、次世代パワーデバイスとして期待されている。MOSFET の高速スイッチング時には、高 dI_D/dt と寄生インダクタンス L_{stray} によってサージ電圧が発生し、このサージ電圧が MOSFET の耐圧を超えるとアバランシェ動作に突入する。このとき、MOSFET のアバランシェ耐量が大きくないと素子は破壊に至る。今回、このアバランシェ耐量向上のための重要設計パラメータを見出すことを目指し、トレンチならびにプレーナゲート SiC MOSFET を評価解析した。

(2) 実験

評価には、市販もしくは共同研究先で開発中の 1.2-kV トレンチならびにプレーナゲート SiC MOSFET、計 8 種を用いた。アバランシェ耐量は、図 1 に示す一般的な UIS(Unclamped Inductive Switching)試験回路ならびに装置で評価した。アバランシェ期間中、SiC MOSFET で発生するエネルギー E_{ava} は次式で求められる。

$$E_{\text{ava}} = \int_0^{t_{\text{ava}}} V_{\text{DS}} \times I_D dt$$

このアバランシェ耐量試験において、MOSFET が破壊する直前のエネルギー E_{ava} を、素子が耐えうる最大のアバランシェ耐量「UIS耐量」と定義して、各素子を比較評価した。

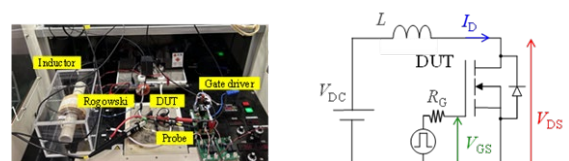


図 1. UIS 試験の測定回路および等価回路図

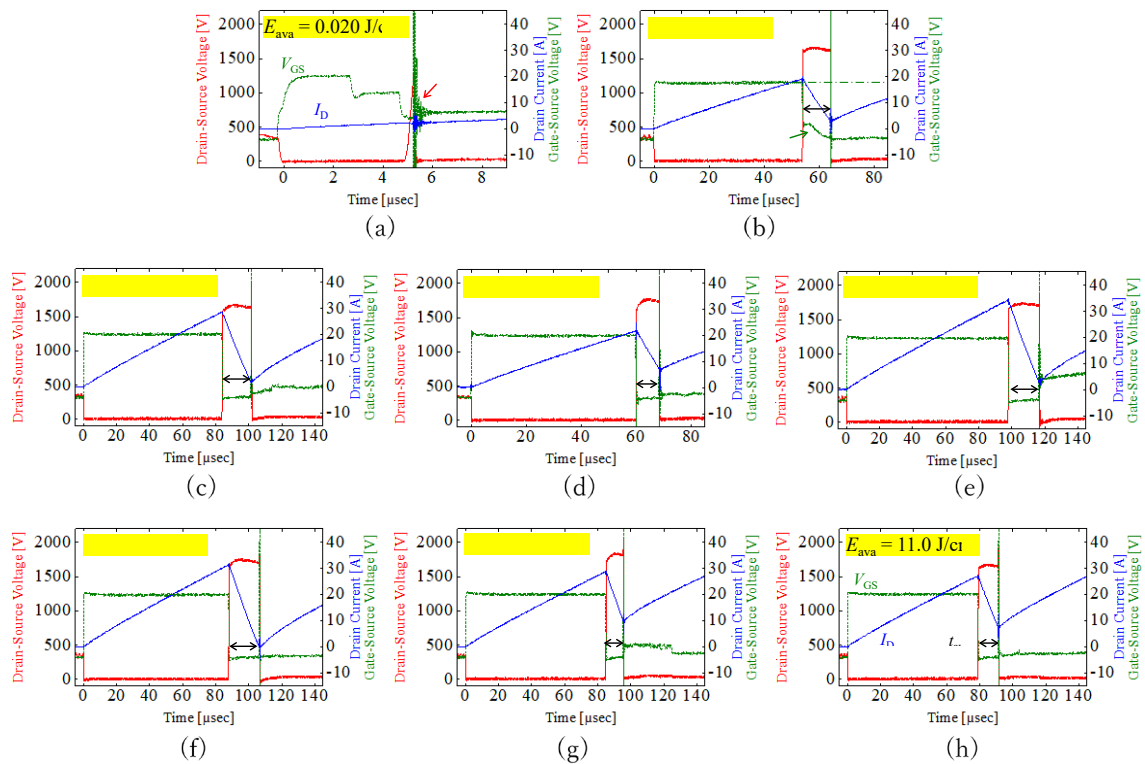


図 2. トレンチならびにプレーナ MOSFETのUIS破壊波形;(a)トレンチ MOSFET: CDT-MOS, (b) トレンチ MOSFET:ADT-MOS, (c)-(f) その他トレンチ MOSFET, (g), (h)プレーナ MOSFET

(3) 結果と考察

UIS試験条件は $V_{GS} = +20 / -4 \text{ V}$ 、 $V_{DC} = 340 \text{ V}$ 、 $R_G = 47 \Omega$ 、 $L = 1 \text{ mH}$ で、すべて室温下で行った。図2に各素子の破壊時のUIS試験波形を示す。ほとんどのデバイスでは 8 J/cm^2 を超えるUIS耐量を示した一方、トレンチMOSFETである、CDT-MOSのUIS耐量は 0.020 J/cm^2 と非常に低い。CDT-MOSではUIS試験時の高電界がトレンチゲート底部に印加され、ゲート・ドレイン間で絶縁破壊することが報告されており、今回の試験でもCDT-MOSはこのメカニズムで破壊したと考えられる。CDT-MOSを改良版で、深いp+層によりトレンチゲート底部の保護能力を高めたADT-MOSでは、 $E_{ava} = 4.5 \text{ J/cm}^2$ とCDT-MOSより改善はしているものの、他素子の E_{ava} の約半分程度である。ここで、ADT-MOSのUIS波形を見ると、 t_{on} 中の V_{GS} は本来 20 V 印加しているが、実際に印加されている電圧は約 18 V とわずかに低くなっている。加えて、 t_{ava} 中に V_{GS} の不自然な上昇が観測されている。図3にADT-MOSと他のトレンチMOSFETの破壊直前

の t_{on} におけるゲートリーク電流測定結果を示す。ADT-MOSのみ、 t_{on} 、 t_{ava} 期間中に数十mAレベルの大きなゲートリーク電流が流れていることが確かめられた。

ADT-MOSのUIS破壊後のチップ表面解析の結果、破壊焼損痕は全てゲートランナ上に確認されたため、この部分がゲートリーク流の発生源の可能性が高い。ここで、活性領域に隣接す

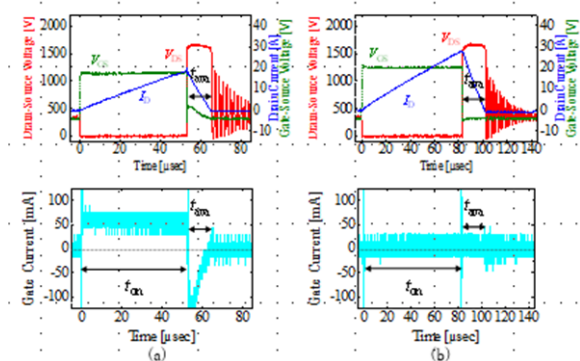


図 3. (a)ADT-MOS と(b)他トレンチ MOSFET のUIS耐量ならびにゲート電流波形比較

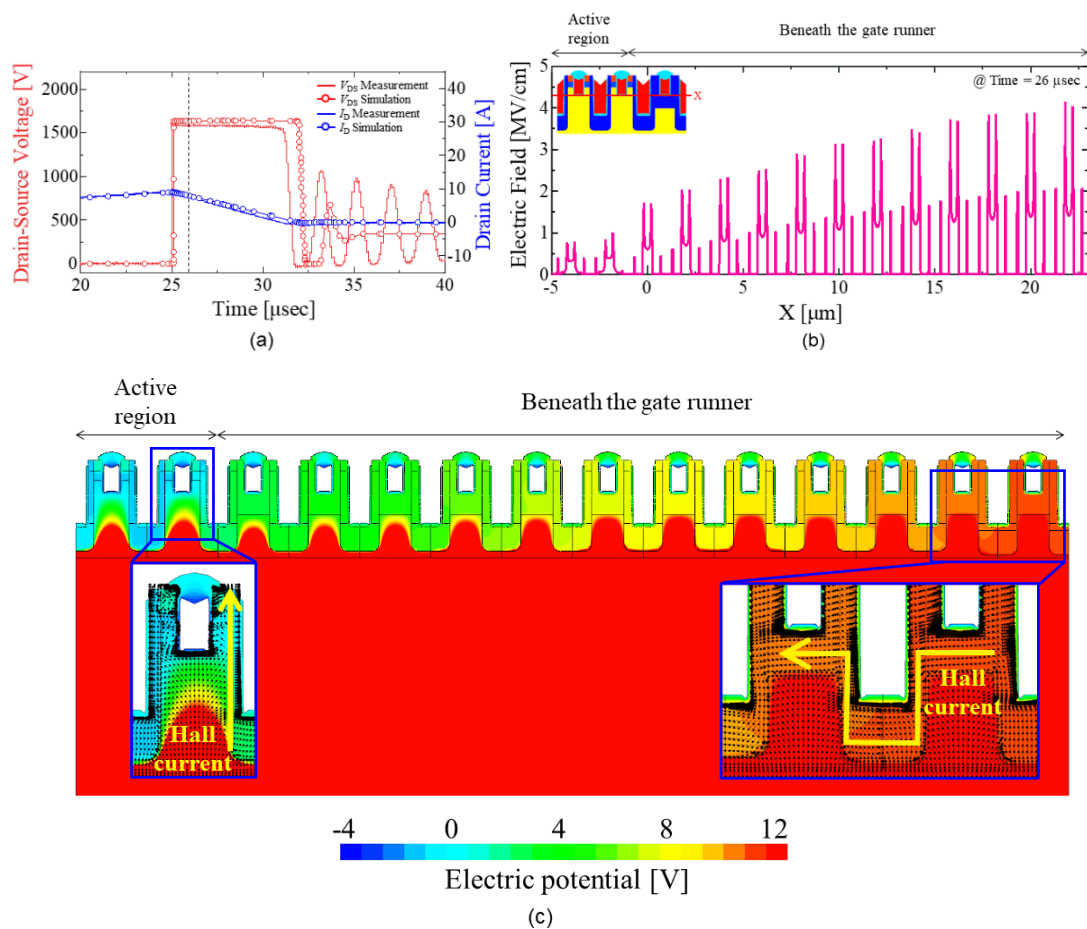


図 4.(a) UIS 波形の合わせこみ結果 (b) ゲート酸化膜底部電界計算結果
(c) 電位分布および正孔電流経路計算結果

るゲートランナ直下にもトレンチゲート構造が形成されている ADT-MOS が、そのトレンチゲート全体を覆うように深い p+層が形成されていることに注目した。この p+層は左右末端においてのみソース電極に接続されている。UIS 試験中にゲートランナ下の p+層を流れるアバランシェ電流の影響を調査するため、UIS 試験をマルチセルにて TCAD シミュレーションを行った。まず、図 4(a)に示すように TCAD シミュレーションと実測はいい一致を示した。図 4(b)に示す酸化膜底部電界の解析結果から、ソース電極から遠ざかる右側セルほど電界が強くなっており、最も遠いセルでは 4 MV/cm にまで達した。デバイス内電位分布を確認すると、右側セルほど高電位になっていた (図 4(c))。これはアバランシェで発生した正孔電流が、ソース電極のある右側セルに向かって p+層内を

流れたためである (図 4(b) 内の黒矢印)。つまり、アバランシェによって発生した正孔電流がソース電極まで流れる際に電位降下が発生し、右側セルで電位が上昇した結果、4 MV/cm という高電界に達してゲートリーク電流の増加につながった。一方、ゲートリーク電流が観測されなかった他のトレンチ MOSFET では、ゲートランナ下部にトレンチゲートが形成されておらず、p+層上部には 140 nm という厚いフィールド酸化膜が存在するのみであった。

(4) まとめ

8 種類のトレンチならびにプレーナ SiC MOSFET の UIS 耐量を評価・解析し、その結果から UIS 耐量向上のための重要設計パラメータについて考察した。その結果、まずゲート酸化膜保護が十分であれば UIS 耐量は大きな耐量を確保できることが判明した。また、特に

トレンチ MOSFET において、ゲートランナ下にトレンチゲート構造を配置することで、アバランシェ電流の導通による電位降下でゲート酸化膜に高電界が印加され、UIS 耐量を劣化することがあることが判明した。このことから、MOSFET セルの設計だけでなくそのレイアウトにも、十分注意を払う必要があることがわかった。

【 2 】TCAD による横型 p チャネル超接合 MOSFET のスイッチング損失に関する研究

(1) はじめに

従来のインバータは上下アームに n チャネル素子を使用するが、下アームを p チャネル素子とすることで相補型インバータとなる。相補型とすることでデッドタイムレス化による高周波・高効率動作が可能になる。さらに、SiC を用いることでモノリシック構造として同一基板上に n チャネルと p チャネル素子の形成が可能となり、配線インダクタンスの低減が期待できる。しかし、p チャネルの SiC MOSFET は低いキャリア移動度やドーパントの高い活性化エネルギーに由来する高いオン抵抗が課題である。そこで、ドリフト層の抵抗低減に有効な超接合 (Super Junction, SJ) 構造に着目した。SJ 構造は適切に設計すれば耐圧向上とオン抵抗低減が可能であるが、電荷不均一状態 (Charge Imbalance: CIB) により耐圧劣化を起こすことが知られている。また、CIB によりスイッチング特性が変化するため、スイッチング損失へ影響を及ぼすことが懸念される。そこで、本研究では TCAD を用いて CIB による MOSFET の帰還容量 (C_{rss}) と出力容量 (C_{oss}) への影響を解析し、容量特性を基に算出したスイッチング損失から CIB の影響を評価した。

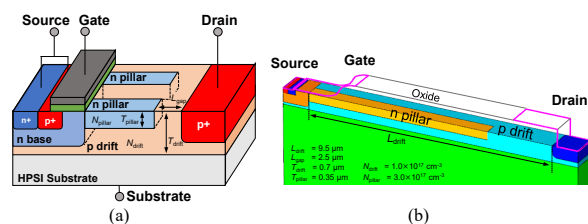


図 5. (a)横型 SJ-MOSFET の模式図と(b)TCAD で設計した構造

(2) デバイス構造

本研究では TCAD による 3 次元解析を行った。本研究で想定した横型 p チャネル SJ MOSFET の模式図と TCAD で設計した構造を図 5 に示す。ドリフト層の長さは $9.5\mu\text{m}$ 、ピラーのピッチ幅は $1.0\mu\text{m}$ とした。デバイス構造は半絶縁性 4H-SiC 基板上にイオン注入により形成することを想定しており、p ドリフト層は Al イオン注入で形成 (深さ $0.7\mu\text{m}$ で不純物濃度 $1.0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$) し、n ピラー層は窒素イオン注入 (深さ $0.35\mu\text{m}$ で不純物濃度 $3.0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$) で形成する。この構造で得られた耐圧は 1061V であった。比較対象として、SJ と等しいセル面積を有する横型 MOSFET(Non-SJ)も設計した。

(3) 結果と考察

SJ および Non-SJ における耐圧が最大となる p ドリフト層の不純物濃度を N_{opt} とすると、 $N_{opt,SJ}=1.0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$ 、 $N_{opt,Non-SJ}=1.8 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$ であ

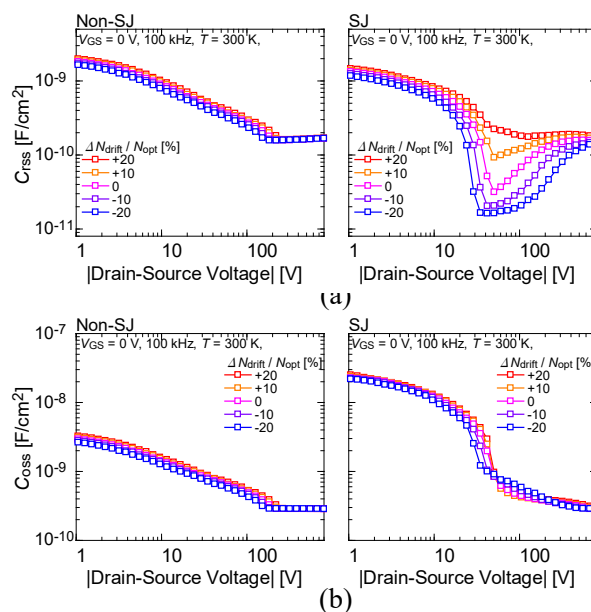


図 6. Non-SJ、SJ に対する(a) C_{rss} と(b) C_{oss} 特性の $\Delta N_{drift}/N_{opt}$ 依存性

った。各構造に対し N_{opt} を基準とし、p ドリフト層の不純物濃度 N_{drift} を変化 ($\Delta N_{drift}=N_{drift}-N_{opt}$) させて最適条件からの変化率を CIB の指標とした。

図 6 に、Non-SJ および SJ の(a) C_{rss} と(b) C_{oss} の特性を示す。SJ では、p ドリフト層の電荷量 Q_p と n ピラー層の電荷量 Q_n を比較すると、 Δ

$N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}} > 0$ の時は $Q_p > Q_n$ 、 $\Delta N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}} < 0$ の時は $Q_p < Q_n$ の関係になる。Non-SJ では C_{rss} 、 C_{oss} とともに $\Delta N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}}$ に対する変動は小さい。一方で、SJ では C_{rss} は $\Delta N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}} > 0$ の時には増加し、 $\Delta N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}} < 0$ の時は減少する傾向が見られた。 C_{oss} の変動は小さいものの、 $\Delta N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}} < 0$ になるほど低電圧側に特性がシフトする傾向が見られる。このような異なる傾向について、TCAD による素子内部の静電ポテンシャル分布より考察を行った。

図 7 に Non-SJ と SJ の V_{ds} を変化させた時の静電ポテンシャル分布を示す。Non-SJ では V_{DS} が印加されるとソース電極側の pn 接合から一方向に空乏層が広がるので寄生容量は単調減少した。この傾向は $\Delta N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}}$ が変化しても変

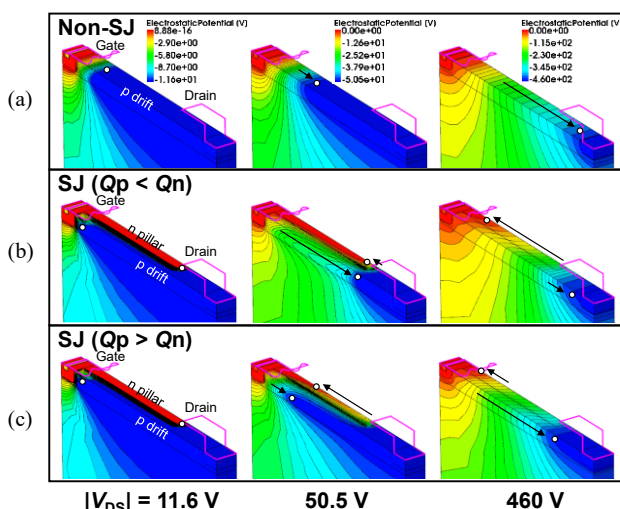


図 7. 角 VDS における静電ポテンシャルの分布
(a)Non-SJ (b)SJ($Q_p < Q_n$) (c)SJ($Q_p > Q_n$)

わらない。一方で、SJ ではピラー間の pn 接合でも空乏化が進むため不従物濃度が低い層ほど空乏化が進みやすくなり、 $\Delta N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}}$ に依存してピラー層とドリフト層の空乏化する順番が変化する。 C_{rss} はゲートドレイン間の容量であり、ゲート電極とドリフト層の結合容量によって決まる。横型 SJ の場合、p ドリフト層が空乏化するとピラー層間の対向面積が減少するため、 C_{rss} は急激に低下する。一方で、n ピラー層が空乏化するとドレイン電極下に新たな結合容量が形成されるため対向面積が増え、 C_{rss} が増加する。このため、 $Q_p < Q_n$ の時は p ドリフト層が先に空乏化するため C_{rss} はいっ

たん減少した後、n ピラー層の空乏化に伴い C_{rss} は増加に転じることになる。これに対し、 $Q_p > Q_n$ の場合、n ピラー層が先に空乏化するため、 C_{rss} の急激な減少は生じない。以上より、SJ の C_{rss} 特性は $\Delta N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}}$ によりピラー層間の空乏化する順番が変わるため変動が大きくなることが分かる。

次に、 C_{oss} 特性の変化について考察した。 C_{oss} は C_{GD} と C_{DS} の和である。 C_{DS} はドリフト層内の容量だけで決まるため、n ピラー層と p ドリフト層の空乏化順序に関係なく $\Delta N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}}$ が変化すると C_{oss} 特性は低電圧側にシフトするはずである。しかし、今回の構造では C_{GD} の影響が大きいため、 $Q_p > Q_n$ となるほど C_{oss} 特性が高電圧側にシフトした。

寄生容量の変動がスイッチング損失に与える影響を評価した。ここでは、誘導性負荷を想定した。スイッチング損失として、電圧と電流の席で決まる VI 積損失と C_{oss} の充放電電流による損失を考慮した。VI 積損失の算出には、TCAD から得られた電流電圧特性と寄生容量特性を用いたスイッチング波形推定モデルを利用した。 C_{oss} に由来する損失は、TCAD で得られた $C_{\text{oss}}-V_{\text{DS}}$ 特性を電荷量 Q_{oss} に換算して算出した。ゲート抵抗 $R_G = 50 \Omega$ 、電流密度

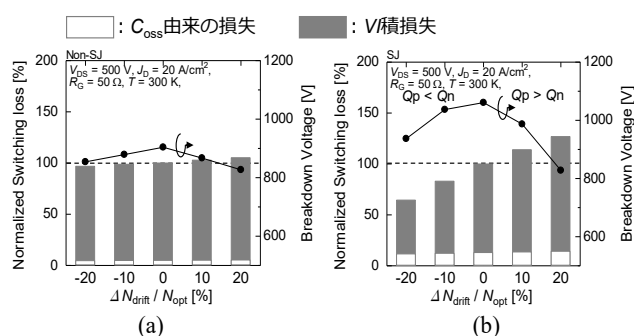


図 8. スwitching 損失と耐圧の $\Delta N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}}$ 依存性
(a)Non-SJ (b)SJ

$J_D = 20 \text{ A/cm}^2$ 、スイッチング電圧 $V_{\text{DS}} = 500 \text{ V}$ の条件で各損失を計算し、 $\Delta N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}} = 0\%$ を基準としたスイッチング損失の結果を、耐圧の変動とともに図 8 に示す。Non-SJ では $\Delta N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}}$ が $\pm 10\%$ 変化してもスイッチング損失の変化は $\pm 2\%$ にとどまるが、SJ では $\Delta N_{\text{drift}}/N_{\text{opt}}$ に対してスイッチング損失が変化しやすく、 $\pm 15\%$ も変

動することが分かった。また、SJ では $Q_p < Q_n$ の領域では耐圧が劣化するものの、スイッチング損失が低減できることが分かる。したがって、ある程度の耐圧劣化を許容した上で p ドリフト層が低い V_{DS} で空乏化する設計にすることで、スイッチング損失を低減して高周波動作に適したデバイス構造が可能になるといえる。

(4) まとめ

TCAD を用いて 4H-SiC 横型 SJ-MOSFET の CIB 特性を解析した。CIB により耐圧劣化だけでなく、寄生容量、特に C_{rss} の特性が大きく変動することが明らかになった。このため、横型 SJ 構造は不純物濃度のずれがスイッチング動作に大きな影響を与え、これにより設計段階で想定した効率から乖離してしまう可能性がある。一方で、チャージバランス状態から意図的にずらした $Q_p < Q_n$ となる条件で設計することで、導通損失は増大するもののスイッチング損失を低減できることがわかり、本構造はモノリシック相補型インバータで期待される高周波動作に適しているといえる。

【 3 】 SST に用いられる絶縁 DC-DC 変換回路の高効率化

本研究では、半導体変圧器 (SST) に用いられるデュアルアクティブブリッジ (DAB) コンバータにおいて、脈動電力変換時の可聴域騒音と軽負荷時の損失増大という課題に着目し、これらを同時に解決する新たな変調・制御手法を提案した。SST は高周波トランスを用いることで小型・高電力密度化が可能である一方、単相系統に起因する 2 倍周波数の脈動電力を扱う必要があり、これを低減するために絶縁 DC-DC 段で能動的に電力を変換する方式が検討されている。しかし、脈動電力を高周波トランスに通過させる場合、励磁状態に低周波成分が重畳し、磁歪に起因する可聴域騒音が発生する可能性がある。また、DAB コンバータでは軽負荷時にゼロ電圧スイッチング (ZVS) が成立しにくく、スイッチング損失が増大することが知られている。

従来の Single-phase-shift (SPS) 制御はトランス励磁条件が一定に保たれるため騒音抑制

の観点では有利であるが、軽負荷時に ZVS が成立しない。一方、Extended-phase-shift や間欠運転などの手法は軽負荷時の損失低減には有効であるが、励磁電流に低周波成分が生じるため騒音特性が悪化する。このように、励磁条件の安定性と ZVS 動作範囲の拡張はトレードオフ関係にある。本研究ではこの点に着目し、SPS 制御を基礎としつつ、トランス励磁条件をほぼ一定に維持したまま全動作領域で ZVS を実現可能な変調方式を提案した。提案手法では、1 スwitchング周期内において電流のピーク値を維持しつつ、寄生容量の充放電過程を利用した実効的な休止区間を形成することで伝送電力を制御する。この結果、励磁電流の振幅および周波数を大きく変化させることなく、軽負荷領域においても ZVS 条件を満たす動作が可能となる。

提案手法の有効性は、3.3 kV 級 SiC-MOSFET を用いた 3.3 kW 級 DAB コンバータにより実験的に検証した。その結果、従来の SPS 制御では約 1.8 kW 以下で ZVS が成立しないのに対し、提案手法では全動作範囲で ZVS が実現可能であることを確認した。また、軽負荷領域における電力損失を測定した結果、提案手法は SPS 制御と比較して損失を低減できることが示された。さらに、脈動電力条件下における音響特性を評価したところ、間欠運転では低周波成分を含む騒音が顕著となるのに対し、提案手法は SPS 制御と同様に励磁電流の周波数を一定に維持するため、騒音成分が主にスイッチング周波数付近に集中し、可聴域騒音が抑制されることが確認された。

以上より、本研究で提案した制御方式は、脈動電力変換を行う SST 用 DAB コンバータにおいて、トランス励磁条件を維持しながら全動作領域で ZVS を達成し、軽負荷時の損失低減と可聴域騒音抑制を同時に実現できることを示した。これにより、従来は両立が困難であった高効率化と低騒音化を同時に達成可能であることが明らかとなった。

<論文>

1. 井手 智也, 永井 一真, 荒木 一司, 平瀬 祐子, 磯部 高範, 「電力系統および連系分散電源のインピーダンス測定のためのフィルタレスインバータによるコンパクトな振動発生装置の開発」, 電気学会論文誌D (産業応用部門誌), 145 巻, 5 号, p. 334-342, 2025 年 5 月
2. C. Huang, T. Mannen and T. Isobe, “Current Ripple Reduction and ZVS Realization With Optimized DCM Modulation Based on Off-Time Discrete Control for Grid-Tied Inverters,” in *IEEE Transactions on Power Electronics*, vol. 40, no. 10, pp. 15835-15851, Oct. 2025.
3. Sora Kawai, Nobutaka Oi, Takanori Isobe, Kosuke Ota, Koji Amazutsumi, Tatsuya Fujishima, Hiroshi Kawarada, “Fast power switching with cascode diamond MOSFET–SiC MOSFET/GaN HEMT complementary half-bridge inverter”, *APL Electronic Devices*, 1 (4): 046103.
4. H. Tanaka, T. Mannen, T. Isobe, E. Kita and H. Yanagihara, “A Magnetometer for Dynamic Full M–H Loop Measurements in the Megahertz Range,” in *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, vol. 75, pp. 1-6, 2026, Art no. 6001606.

<著書>

1. 矢野裕司 「SiC の製造・加工技術 ～結晶成長・加工プロセス技術と各種課題への対応～」 情報機構(2025). (分担：第 5 章 第 3 節 第 1 項 界面特性・欠陥の測定評価法 pp.374-381) 2025.12.9 発行

<総説・解説>

1. 矢野裕司 「半導体物理 後編 –pn 接合から MOSFET まで–」 (基礎講座) 応用物理, Vol. 94, No. 6, pp.326-330 (2025).
2. 矢野裕司 「半導体物理 前編 –結晶構造からキャリア伝導まで–」 (基礎講座) 応用物理, Vol. 94, No. 5, pp.270-274 (2025).
3. 岩室 憲幸 「家電製品も車もこれが無いと動かない –パワー半導体–」 (基礎講座) 応用物理, Vol.

95, No. 1, pp.40-45 (2026).

<学会発表>

国際会議

1. H. Yano (Plenary) “Threshold voltage instability in SiC MOSFETs under gate AC operation” The 6th Asia-Pacific Conference on Silicon Carbide and Related Materials (APCSCRM2025), Zhengzhou (China), 2025/11/26 (11/25-27).
2. H. Yano (Plenary) “Reliability Issues in SiC MOSFETs: Threshold Voltage Instability under Gate AC Operation” The 9th International Symposium on Wide Bandgap Semiconductor 2025 (WBG2025), Busan (Korea), PS5, pp.89-106, 2025/11/20 (11/20).
3. R. Shingo, Y. Enjoji, N. Iwamuro, H. Yano “Mechanism of Threshold Voltage Drift in SiC MOSFETs under Bipolar AC Gate Stress via Photon-Assisted Electron Injection” The 22nd International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2025 (ICSCRM 2025), Busan (Korea), 23B-3, 2025/9/19 (9/14-19).
4. K. Suzuki, H. Yano and N. Iwamuro “Investigation of Optimum Gate Structures for 1.2-kV SiC MOSFETs by Analyzing Avalanche and Short-Circuit Withstanding Capabilities” The 37th International Symposium on Power Semiconductor Devices and ICs (ISPSD2025), Kumamoto (Japan), SiC2-05, pp.393-396, 2025/6/4 (6/1-5).
5. Y. Suzuki, C. Huang and T. Isobe, “Realization of All-Device ZVS at Light Load Operations in DAB Converters Using SPS-Based Partial Power Canceling Modulation,” 2025 International Future Energy Electronics Conference (IFEEC), Bali, Indonesia, 2025, pp. 488-493

国内会議

1. 染谷 満, 平井 悠久, 熊谷 直樹, 矢野 裕司, 磯部 高範, 細井 卓治, 渡部 平司 「量産プロセス適用可能なホットウォール酸化炉を用いた SiC-MOS 界面への CO₂ POA 効果の検証」 第 73 回応用物理学会春季学術講演会, 東京科学大学 大岡山キャンパス, 16p-W8E_101-9, p.13-171, 2026/3/16. (3/15-18).

2. 吉田 開, 岩室憲幸, 矢野裕司「4H-SiC 横型 p-ch SJ-MOSFET のスイッチング損失に及ぼすチャージインバランスの影響解析」令和 8 年電気学会全国大会, 東北学院大学, 4-028, pp.50-51, 2026/3/12 (3/12-14).
3. 内山 颯, 鹿志村快音, 鈴木一広, 矢野裕司, 岩室憲幸「1.2 kV SiC DioMOS チャネル移動度の温度特性解析」令和 8 年電気学会全国大会, 東北学院大学, 4-029, pp.52-53, 2026/3/12 (3/12-14).
4. 鹿志村快音, 矢野裕司, 岩室憲幸「1.2 kV SiC-DioMOS の高温条件下でのオン抵抗-負荷短絡耐量トレードオフ特性」令和 8 年電気学会全国大会, 東北学院大学, 4-030, pp.54-55, 2026/3/12 (3/12-14).
5. 吉田 開, 岩室 憲幸, 矢野 裕司「4H-SiC 横型 p-ch SJ-MOSFET の寄生容量とスイッチング損失の関係」先進パワー半導体分科会 第 12 回講演会, 富山国際会議場, IA-23, pp.109-110, 2025/11/19. (11/19-20)
6. 鈴木 一広, 矢野 裕司, 岩室 憲幸「オン抵抗、アバランシェ耐量、ならびに負荷短絡耐量を同時改善する 1.2-kV SiC MOSFET の最適ゲート構造の検討」先進パワー半導体分科会 第 12 回講演会, 富山国際会議場, IA-24, pp.111-112, 2025/11/19. (11/19-20)
7. 新郷 諒介, 岩室 憲幸, 矢野 裕司「SiC MOSFETにおけるゲートACストレス下の発光観測と AC BTI メカニズムの検討」先進パワー半導体分科会 第 12 回講演会, 富山国際会議場, IB-19, pp.153-154, 2025/11/19. (11/19-20)
8. 新郷 諒介, 岩室 憲幸, 矢野 裕司「ゲート AC 印加時における SiC MOSFET の発光によるしきい値電圧変動」第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 名城大学 天白キャンパス(ハイブリッド開催), 9p-N322-12, p.13-216, 2025/9/9. (9/7-10).
9. 鈴木 一広, 矢野 裕司, 岩室 憲幸「SiC MOSFET の順方向サージ電流耐量向上に関する検討」第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 名城大学 天白キャンパス, 9p-N322-13, p.13-217, 2025/9/9. (9/7-10).
10. 鈴木陽太, Cheng Huang, 磯部高範, 「寄生容量の小さい低圧側デバイスのスイッチングにより実現する SST 向け DAB コンバータの軽負荷領域での全デバイスゼロ電圧スイッチング実現法」, 2025 年電気学会産業応用部門大会, 徳島大学 常三島キャンパス, 2025 年 8 月 19 日～21 日
11. 黄成, 鈴木陽太, 磯部高範, 「脈動電力変換する SST 用 DAB コンバータの高周波トランスから発生する可聴騒音を考慮した軽負荷損失低減手法」, 電力技術/電力系統技術/半導体電力変換合同研究会, 熊本県(天草市), 2026 年 3 月 4 日～5 日

電気エネルギー部門

教員：

三俣千春（数理物質系・応用理工・教授）

三俣千春

＜研究成果＞

当研究室では、磁性材料の特性向上を通してモーターなどパワーマグネティクス関連機器の消費電力軽減をターゲットとしてマテリアルズ・インフォマティクス手法開発の研究を行っている。本年度は、ナノ、薄膜材料の特性評価を効率的に進めるための機械学習モデルの研究を実施した。

【 1 】反応性スパッタリングにおけるプロセス制御を目的としたプラズマ発光スペクトルの機械学習

反応性スパッタリングはスピントロニクスデバイスの製造など様々な用途で利用されているが、スパッタ雰囲気調整による薄膜特性は複雑な変化を示す。そこで製膜プロセス中のプラズマ状態をスペクトル解析することで製膜のリアルタイム制御を実現するための基礎データを機械学習によって解析した。

多変量解析の手法である主成分分析（Principal Component Analysis:PCA）を用いることで多数のチャンネルで計測された発光スペクトルを同時に解析し、抽出した特徴量の関数として製膜速度を線形関数として表現することに成功した。この結果は、プラズマをモニターするだけでプロセス中の製膜速度を決定し、所望の膜厚制御を可能とすることを意味している。これと同時に、PCA によって得られたデータの逆解析によって、薄膜特性の決定において主要因となる発光波長の数理モデルを同定し、プロセス中の発光プラズマのスペクトルを取得するだけで、反応性ガスによる薄膜の組成変化が予測可能であることを示した。[1]

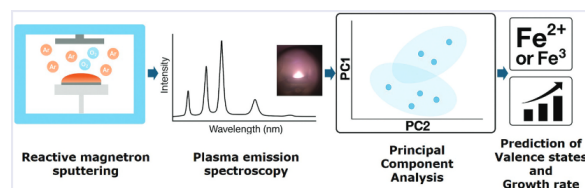


図1 反応ガス（O₂）を用いた酸化鉄薄膜のスパッタリング中における発光スペクトルを利用した機械学習の実施モデル

【 2 】ナノサイズ磁石の実現に向けた走査型スピン偏極トンネル顕微鏡データの機械学習

量子コンピューティングやニューロモルフィックコンピューティングなど次世代の計算機開発において新たな手法が注目されている。我々は、これらに利用されることが期待されるナノサイズ磁石の基礎研究において走査型スピン偏極トンネル顕微鏡の画像データを機械学習によって解析する方法を検討した。

走査型トンネル顕微鏡は原子サイズの分解能を有する顕微鏡であり、特に走査型トンネル分光法は、原子像のみならず各原子の電子状態を計測可能な技術である。原子磁石の材料となりうる MnTe 材料では、磁気特性発現の基となるスピン状態によってエネルギーバンドの形状が変化することを用いて、材料の化学結合状態を分光スペクトルから機械学習によってクラスタリングし、画像データの解釈を容易にする方法を開発した。[2]

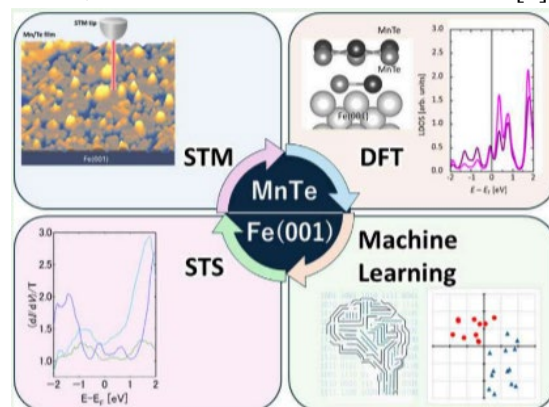


図2 スピン偏極トンネル顕微鏡データの機械学習の実施モデル

【 3 】 磁性材料の磁区構造を数値データ化による特徴量からの磁化反転エネルギーモデルの開発

モーターや変換器に利用される軟磁性材料は磁壁移動が軟磁気特性に深くかかわっている。磁壁移動を決定する要因は、磁化の相互作用によるエネルギー変化や材料の結晶学的要因である磁気異方性や結晶組織の状態である。我々は近年、磁区構造データを数値化し、その機械学習によって新規のエネルギー状態解析が可能となる数理モデルの開発を行ってきた。本年度はこれを利用した軟磁性材料の解析を実施した。

磁区構造のデータから機械学習によって抽出した特徴量を新しい状態変数として特徴空間における自由エネルギーを記述した。物理空間において磁区構造を決定する自由エネルギーは、単純化すると磁気モーメントの向き、それぞれ磁気モーメントの相対的な角度と位置関係、および外場の影響下における許される状態密度によって決定される。ここでは物理空間で表現された自由エネルギーと特徴空間における自由エネルギーの間にある関数変換によって、現実的な磁区構造を左右する要因を抽出された特徴量によって解釈可能であることを示した。この数理モデルの利用によってモーター固定子に用いられるケイ素鋼板の磁壁移動を阻害する要因を可視化することに成功した。[3-5]

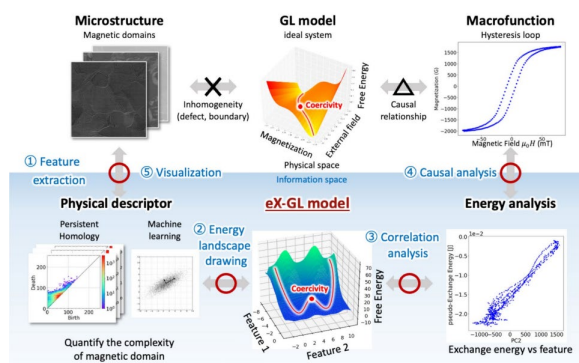


図3 機械学習による特徴空間において表現された自由エネルギー解析の概念図

【 4 】 デンドライト結晶成長の機械学習による成長モードの解析

雪の結晶成長などなどに代表されるデンドライト結晶成長は過冷却状態による非平衡状態によってもたらされ、樹状成長を示す特殊な形状を示す。我々は、この形状の特徴を機械学習によって抽出するとともに、抽出した特徴量の次元解析を実行した。その結果、系のギブズ自由エネルギーを特徴量で微分した計算結果は結晶に作用する力と等価であることが明らかになり、結晶に作用する力の変化が成長モードの分岐に影響していることが分かった。[6]

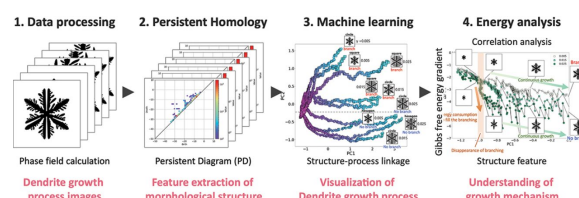


図4 デンドライト結晶成長に対する機械学習モデルの構築

【 5 】 カーボンニュートラル・プロジェクトの運営

分野横断型の研究体制を構築し、大学内におけるカーボンニュートラルを実施するための組織構築を目標としたプロジェクトが DTF 機構の下に設置されている。本年度は組織運営を担う研究コアに参加し、成果の取りまとめおよび今後の研究推進のための意見交換会を企画・運営した。

<論文>

1. Rintaro Minami, Eiji Kita, Chiharu Mitsumata & Hideto Yanagihara, "Estimation of valence state and growth rate using principal component analysis of plasma emission in reactive sputtering deposition" *Science and Technology of Advanced Materials: Methods.*, 5, 2544523 (2025).
2. Haruto Seki, Kenji Nawa, Chiharu Mitsumata, Toyo Kazu Yamada, "Color-Tunable Resonant Photoluminescence and Cavity-Mediated Multistep

Energy Transfer Cascade" *ACS Applied Nano Materials*, **8**, 15662–15672 (2025).

3. Michiki Taniwaki, Ryunosuke Nagaoka, Ken Masuzawa, Shunsuke Sato, Alexandre Foggiatto, Chiharu Mitsumata, Takahiro Yamazaki, Ippei Obayashi, Yasuaki Hiraoka, Yasuhiko Igarashi, Yuta Mizutori, H. Sepehri-Amin, Tadakatsu Ohkubo, Hisashi Mogi, Masato Kotsugi, "Automated identification of the origin of energy loss in nonoriented electrical steel by feature extended Ginzburg–Landau free energy framework", *Scientific Reports*, **15**, 23758 (2025).
4. Yuichiro Shima, Takahiro Yamazaki, Alexandre Foggiatto, Chiharu Mitsumata, Masato Kotsugi, "Anomalous eddy current loss in soft magnetic materials via Maxwell equations-coupled multiscale micromagnetic simulations", *Journal of Applied Physics*, **137**, 123906 (2025).
5. K. Masuzawa, Alexandre Foggiatto, S. Kunii, R. Nagaoka, M. Taniwaki, T. Yamazaki, C. Mitsumata, I. Obayashi, Y. Hiraoka, M. Kotsugi, "Explainable analysis of the complex maze magnetic domain structure through extension of the Landau free energy model by adding an entropy feature", *Scientific Reports*, **not defined yet** (2026).
6. Misato Tone, Shunsuke Sato, Sotaro Kunii, Ippei Obayashi, Yasuaki Hiraoka, Yui Ogawa, Hirokazu Fukidome, Alexandre Lira Foggiatto, Chiharu Mitsumata, Ryunosuke Nagaoka, Arpita Varadwaj, Iwao Matsuda, Masato Kotsugi, "Linking structure and process in dendritic growth using persistent homology with energy analysis", *Science and Technology of Advanced Materials: Methods.*, **5**, 2475735 (2025).

< 学会発表 >

国際会議

1. C. Mitsumata, A. Lira Foggiatto, M. Kotsugi, "Representation of magnetic properties by a data-driven extended free energy model", *International Conference of Asian Union of Magnetic Societies 2025*, Ginowan, Okinawa, 2025.04.21-24 (Oral-Invited)

国内会議

1. 三俣千春「ランダウ模型を用いた初透磁率の表現」
第 49 回日本磁気学会学術講演会、松山、
2015.9.16-19 (oral)

電気エネルギー制御部門

教員：

奥村宏典（数理物質系・物理工学域・准教授）

大学院生：

浦崎圭吾（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

奥村宏典

<研究成果>

宇宙誕生の謎を解く素粒子実験では、新粒子の発見を目指し、加速器の高エネルギー化と高輝度化が進んでいる。加速器実験の進展には、粒子の飛跡検出器の更なる高性能化が不可欠であり、高位置分解能、高放射線耐性、高時間分解能が求められる。様々な検出器があるが、中でも半導体検出器は位置分解能に優れている。放射線耐性に優れた半導体材料として、ワイドギャップ半導体が挙げられる。

ワイドギャップ半導体の中でも窒化ガリウム(GaN)は、電子正孔対の生成数が多いため、大きい信号が得られやすい。また、GaN は、キャリア移動度が多いだけでなく、高い絶縁破壊電界強度を持つため、高電場によるドリフト速度の増大が可能である。高いキャリア移動度とドリフト速度は、検出器の信号の立ち上がり時間の短縮化に繋がり、時間分解能が向上する。GaN 半導体は次世代の飛跡検出器に最も適した材料の一つと言える。

高時間分解能の飛跡検出器として LGAD (low gain avalanche detector)がある。LGAD は、アバランシェ増幅による内部増幅機能を持つ半導体検出器である。Si LGAD は、荷電粒子の応答に対して 30 ps の高い時間分解能に成功しており、光速粒子 1 cm を識別できる。本研究の目的は、GaN LGAD により、放射線耐性の向上、単一粒子の位置検出、10 ps 以下の世界最速応答を全て実現することである。

【 1 】 GaN LGAD 検出器の作製

我々は、QSTにある重粒子線がん治療装置 HIMAC (Heavy Ion Medical Accelerator in Chiba) にて、自作のGaN検出器にXe¹³²粒子線（170 MeV/n, 粒子fluence: $3 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$, パルス: 3.3 sec, ビーム径: 3-5 mm)を照射し、信号強度と放射線耐性の調査実験を行ってきた。図1に示すように、Xe粒子は大気中を1 m通過してからGaN検出器に当たる。検出した電荷量は、64チャンネルのASD (amplifier shaper discriminator) ASICを用いて、ADCピーク値から評価した。

GaN試料は住友化学社より購入した。試料を5 mm×5 mm角に切り出した後、図2に示すように、100 μm ×100 μm 角の電極の内、4×4の16個で構成される2次元(Pixel)検出器を用いた。素子作製は、つくばエリア(筑波大、産総研、NIMS)の共用設備を用いた。



図1:HIMACでのGaN LGADへのXe重粒子照射実験の様子

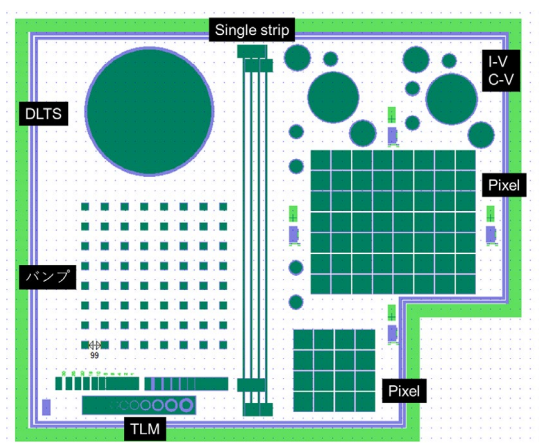


図2: Pixel検出器のパターン

今回作製したGaN LGAD構造を図3に示す。GaN LGAD素子に侵入した荷電粒子は、主にn-GaN層中で電子正孔対を生成する。生成した電子と正孔は、印加電圧によりドリフトし、それぞれカソード電極とアノード電極に到達して信号として検出される。GaNのp型基板は市販されていないため、n型基板を用いる。この場合、表面側がp型層となり、正孔を収集することになる。正孔は、電子と比べてキャリア寿命が短く、ドリフト距離が小さい。LGAD検出器では、PN界面に高電場が生じるため、正孔がn-GaN層で加速してアバランシェ増幅する。出力電流が増大するだけでなく、高電場の恩恵で正孔が高速移動するため、正孔でも信号の応答速度を十分に大きくできる。

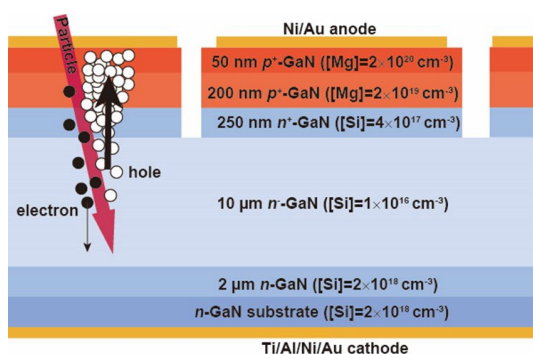


図3: GaN LGAD構造

【 2 】 実験結果

GaN 層中の不純物を 2 次イオン質量分析法

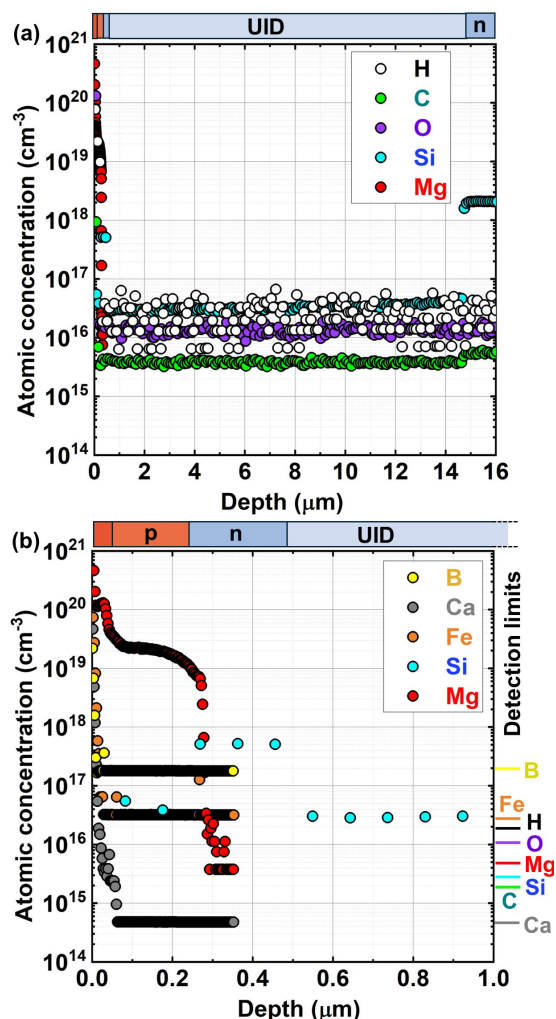


図4: GaN層中の不純物濃度の深さ方向分布

により調べた(図4)。H, C, O, B, Ca, FeはSIMS検出限界以下であった。有機金属気相成長(MOCVD)法を用いた場合、石英管と水素との反応により、意図せずSiがGaN層中に混入する。ドリフト層中のSiドナー濃度は $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ であった。空乏層を更に広げるにはSi不純物濃度の低減が必要である。Mgアクセプタはp層中に想定通りの濃度で取り込まれていた。しかし、MOCVD法でのMg添加時にはメモリ効果を考慮する必要があり、急峻に取り込ませるのが困難である。 10^{19} 乗台のMg濃度がn-GaN増幅層にも侵入していることが分かった。

GaN LGAD 構造の電気的特性を調べた。順方向特性の温度依存性を図5(a)に示す。Turn on電圧は3.1Vであり、GaNのバンドギャップに近い値を示した。3.7Vにおいて 100 A cm^{-2} に

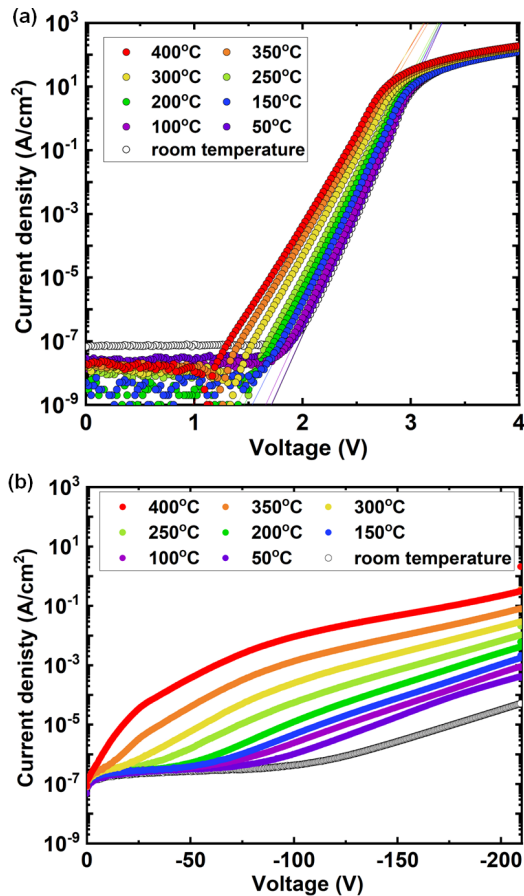


図5: GaN LGAD構造の電気的特性

達し、良好な整流特性が確認された。リーク電流は小さく、整流比は 10^6 以上と非常に高い値を示した。測定温度が高くなるにつれて、理想

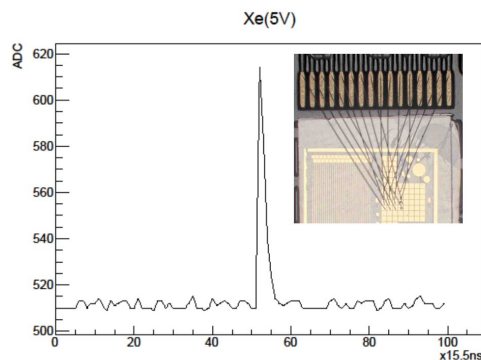


図6: GaN LGAD構造へのXe重粒子照射信号

因子が 2.0 から 1.4 に低下した。これはキャリア密度と拡散電流の増加によるものと考えられる。逆方向特性の温度依存性を図 5(b)に示す。-150 V における暗電流は 10 pA 未満と非常に低い値を示した。GaN 結晶が高品質であるこ

とを示唆する。破壊電圧は 473 V であった。

Xe 粒子を GaN LGAD 構造に照射したところ、逆バイアス 5 V で、図 6 に示すように、信号が得られた。16 ch 全てで信号が得られた。これは、GaN pixel 検出器動作の世界で初めての成果である。しかし、今回、世界で初めて GaN LGAD 作製を試みたが、残念ながら信号の増幅は得られなかった。今後、TCAD シミュレーションを用いて、素子作製前に計算を行い、正確な素子設計を行う。

<論文>

1. H. Okumura, S. Iida, S. Hirose, K. Itabashi, M. Togawa, M. Miyahara, J. Nishinaga, M. Imura, K. Urasaki, and T. Isobe, " GaN radiation detectors with low-gain avalanche diode structure" *Jpn. J. of Appl. Phys.*, **65**, 016501 (2026).
2. K. Itabashi, M. Togawa, J. Nishinaga, M. Miyahara, H. Okumura, M. Imura, and T. Isobe, " Development of high radiation tolerance detector with CIGS" *J. of Instrumentation*, **20**, C06023 (2025).
3. K. Itabashi, S. Fujii, M. Imura, T. Isobe, M. Miyahara, J. Nishinaga, H. Okumura, and M. Togawa, "Study of radiation tolerance of Cu (In, Ga) Se₂ detector" *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, **1067**, 169637 (2024).
4. M. Togawa, S. Fujii, M. Imura, K. Itabashi, T. Isobe, M. Miyahara, J. Nishinaga, H. Okumura, " The CIGS semiconductor detector for particle physics" *J. of Instrumentation*, **19**, C05042 (2024).

<学会発表>

国際会議

1. H. Okumura, "GaN particle detectors with LGAD structure" CERN DRD3, 招待講演, 2026 年 2 月 5 日
2. 奥村宏典, "Radiation tolerance and particle detectors of Gallium Nitride", QGP 国際研究センターキックオフシンポジウム, 招待講演, 2025 年 11 月 25 日
3. H. Okumura, S. Iida, S. Hirose, K. Itabashi, M. Togawa, M. Miyahara, J. Nishinaga, M. Imura, K. Urasaki, and

T. Isobe, “GaN radiation detectors with low-gain avalanche diode structure”, ICNS, (2025) (poster).

国内会議

1. 奥村宏典, “GaN 材料の放射線耐性と粒子検出器”
招待講演, 2025 年 12 月 18 日
2. 飯田哲, 廣瀬茂輝, 奥村宏典, 板橋浩介, 外川学,
宮原正也, 井村将隆, 浦崎圭吾, “窒化ガリウム製
LGAD 検出器の荷電粒子に対する応答評価”, 第
80 回日本物理学会大会.
3. 飯田哲, 廣瀬茂輝, 奥村宏典, 板橋浩介, 外川学,
宮原正也, 井村将隆, 浦崎圭吾, “窒化ガリウム半
導体を用いたピクセル検出器の特性評価”, 2025 年
日本物理学会大会.

電気エネルギー制御部門

教員：

蓮沼隆（数理物質系・物理学域・准教授）

大学院生：

佐藤優（数理物質科学研究群・M2）

蓮沼隆

<研究成果>

微細化にともなって顕著になる短チャネル効果抑制を目指し、極限までチャネル層を薄くすることが可能な 2 次元半導体チャネル FET が注目を集めている。すでに様々な機関から 2 次元半導体チャネル FET の作製・動作に成功した例が報告されているが、集積化の実現にはウェハースケールでの均一な二次元成膜技術の確立、ソース・ドレインコンタクト抵抗の大幅低減、高精度ドーピング技術の確立、ダメージレスなゲート絶縁膜形成技術の確立など多くの課題が残されている。これら課題の解決なしには現在直面しているデバイス特性ばらつきを抑制することは不可能である。また、2 次元であるがゆえにチャネル材料の基礎物性評価がきわめて難しいことも、集積化を目指すうえでの大きなハードルとなっている。我々はこれら課題の中から特に、絶縁膜/2 次元チャネル界面欠陥密度測定手法、2 次元反半導体結晶成長の位置選択性の実現に着目した。後者は FET が作製される領域での選択成長を目指すものであり、上述のウェハースケールでの均一成膜技術の確立と同じインパクトが得られる。

【 1 】 界面欠陥評価のための技術の確立

バルク Si を用いた MOSFET では、MOS キャパシタの電圧-容量特性から界面欠陥密度を求めるのが一般的である。MOS キャパシタの容量はゲート絶縁膜容量と空乏層容量の直列合成容量で表される。MOS キャパシタ微小交流電圧を印加したときの半導体側電荷の増減は空乏層幅の増減および界面欠陥での電荷捕獲・放出によって起こるが、後者は低周波のみ現れる現象である。したがって、高周波と低

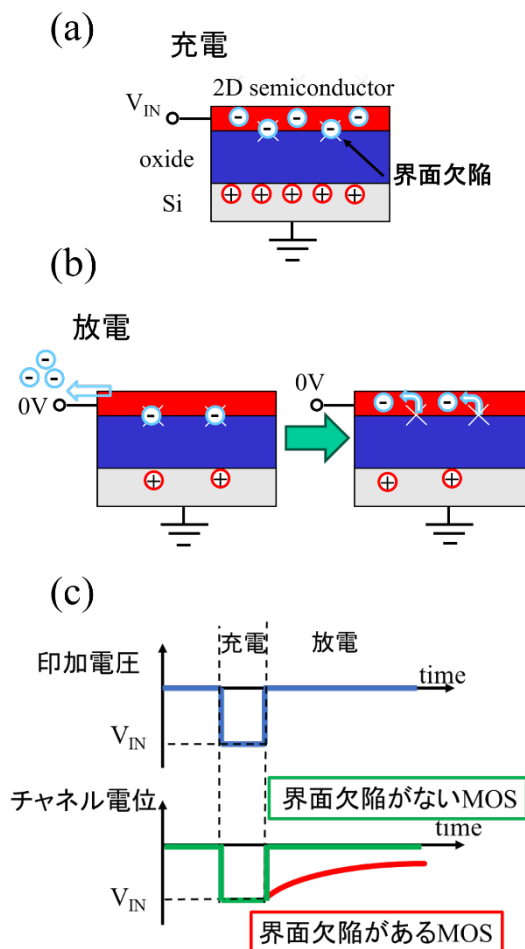


図1 提案した界面欠陥評価手法. (a) 充電時、(b)放電時の電子の流れ、および(c)チャネル電位の時間変化。

周波とで電荷増減が起こる、界面からの距離が異なるため得られるキャパシタ容量に差が生じる。これが、容量から界面欠陥密度を定量することを可能とする理由である。しかし、単層 2 次元チャネルにおいては空乏層が厚さ方向には広がらないため容量に周波数依存性がなく、界面欠陥密度を抽出することが不可能である。

我々は図 1 に示すように、2D チャネル/絶縁膜/Si 基板で構成されるキャパシタへの充放電特性から界面欠陥密度を抽出する方法を提案した。特に放電時においては、伝導帯電子は速やかに排除されるのに対し、界面欠陥に捕獲された電子の放出には欠陥準位の深さに対応した時間を要する。このときのチャネル電位を測定することによってチャネル内に残存する電子数の時間変化を得ることができる。ただし、

測定される放電時定数には界面欠陥からの電子放出過程のみならず、チャネル抵抗、絶縁膜容量、電極下のコンタクト抵抗による RC 遅延も反映されるため、高精度な界面欠陥密度測定を実現するためには RC 遅延が十分に小さくする必要がある。あるいはこれら R、C の値を正確に把握する必要がある。一般的に、チャネル抵抗はソース・ドレイン間抵抗のチャネル長依存性から求められ、またコンタクト抵抗はそこから外挿して求める。しかし二次元半導体チャネルデバイス是一般的に特性ばらつきが非常に大きく、統計的手段をとることが困難である。

我々は多数のデバイスを用いた統計的手段に頼ることなく、①個々のデバイスにおけるチャネル抵抗、コンタクト抵抗を抽出すること、②図 1(c)で示すようにチャネル電位測定を行うことの 2 点を実現するために図 2 に示すデバイスを作製した。はじめに低抵抗 p 型 Si(100) 基板上に厚さ 100nm の熱酸化 SiO₂ 膜を形成した。その上に、あらかじめサファイア基板上に CVD 成膜された単層の MoS₂ 膜を転写し、チャネル長・幅を規定するためのパターンニングを、CF₄ プラズマによるドライエッチングで行った。その後、試料全面に厚さ 20nm の Al₂O₃ 膜を ALD 成長させた。このときの基板温度は

30℃とし、MoS₂ へのダメージ低減を図った。さらにソース・ドレイン領域にコンタクトホールを開け (HF エッチング)、トップ電極を含めたすべての電極をリフトオフで形成した。裏面に真空蒸着法により Al を堆積し、バックゲート電極とした。

図 2(b)は作製したデバイスの光学顕微鏡写真の一例である。本報告書で示される結果はすべて、チャネル幅が 80μm、チャネル長が 840 μm のデバイスについてのものである。測定においてトップ電極は浮遊させ、容量性カップリングにより電極直下のチャネル電位を測定する。電位測定には高入力インピーダンス(10¹³Ω)を有するオペアンプを用いた。

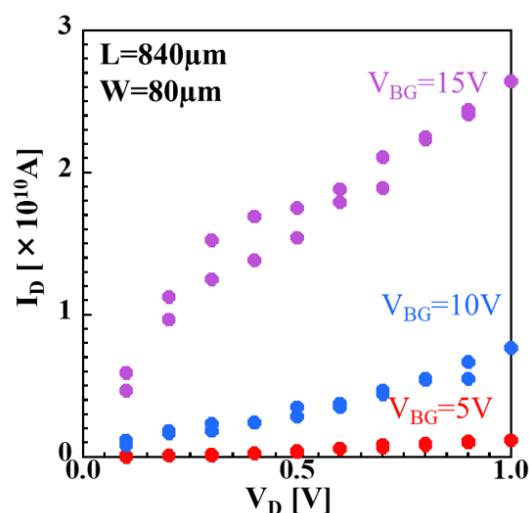


図 3 Id-Vd 特性

図 3 に示す Id-Vd 特性から作製したデバイスが FET 動作をすること、しきい値が 5V 程度であることを確認した。

次に、バックゲート電圧を 15V として FET を ON 状態にしたうえで、ドレイン電圧を 0V で固定、ソース電圧を 0→4V に変化させた後のチャネル電位分布を図 4 に示す。横軸はソース端からの、各トップ電極の中心位置の距離である。3 つのトップ電極で得られたチャネル電位は直線的な分布を示しており、この傾きとチャネル電流 1.33×10^{-10} A から、チャネル抵抗がおおよそ 3.2GΩ/sq と求められた。これは一般的に報告されている値に比べて非常に大きく、キャリア伝導を阻害する多くの欠陥がチャネルに導入されたことが示唆される。また、直線をド

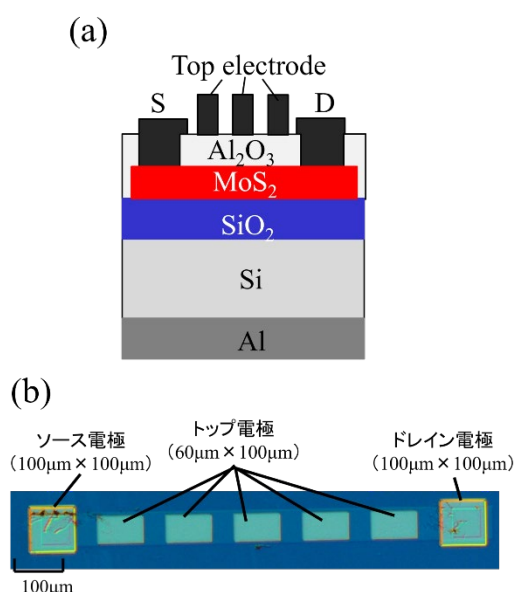


図 2 作製したデバイス構造の(a)断面図と(b)光学顕微鏡写真。

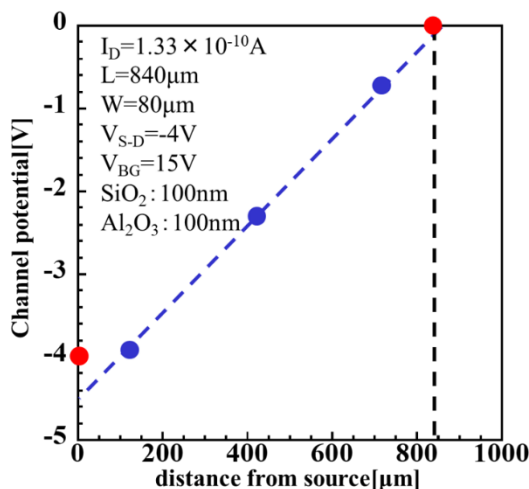


図4 チャンネル電位分布

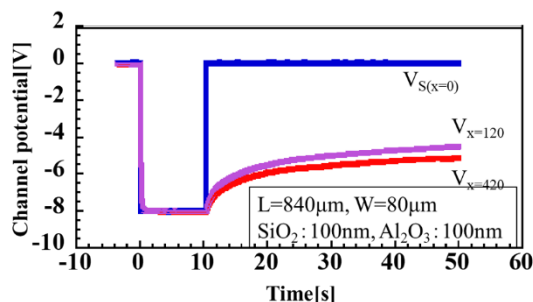


図5 充放電特性

レイン端に外挿して得られる電位からドレインコンタクト抵抗が $210\text{k}\Omega\cdot\text{cm}^2$ と求められた。この値も上述した、界面欠陥からの放出時定数を評価するには不十分である。一方、直線をソース端に外挿して得られる電位がソース電圧 -4V を超えており、このことはソース近傍でのチャンネル内電位勾配が極めて小さいことを示唆しており、今後の解析が必要である。

次に、バックゲート電圧を 0V として FET を OFF 状態にし、ドレイン電極、トップ電極をすべて浮遊させたうえでソース電圧を $0 \rightarrow -8 \rightarrow 0\text{V}$ と変化するパルスを印加したときのチャンネル電位の時間変化を図 5 に示す。時刻 $0 \sim 10\text{s}$ でのチャンネル電位変化から、充電が速やか完了したことが確認できる。一方、時刻 10s 以降の放電時においては電位変化に大きな遅れが生じている。この遅れは先に求めたチャンネル抵抗やコンタクト抵抗から予想される時定数にくらべて大幅に大きく、界面欠陥からの電子

放出過程が反映されているものと推察できる。ただし、電子が排出されるソース端近傍でのチャンネル内の伝導帯ポテンシャル分布によっては排出を阻害するポテンシャル障壁が存在する可能性もあり、さらなる解析が必要である。

【 2 】 二次元結晶膜成長の位置選択性

ウェハースケールでの均一な二次元結晶膜の成膜が困難である現状においては、デバイスが形成される位置周辺での位置選択的結晶膜成長を目指すアプローチが有効である。今回、パターン形成した MoOx 膜および HfO_2 膜の、 MoS_2 結晶成長シードとしての可能性を調査した。まず Si 基板に形成した厚さ 100nm の熱酸化 SiO_2 膜上に、 MoS_2 膜を RF スパッタリングによって成膜した。ただし膜に S はほとんど取

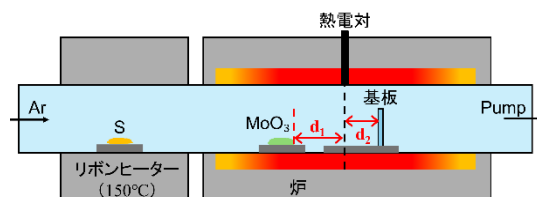


図6 CVD 炉

り込まれず、大気に取り出した後には MoOx 膜となることが確認された。また同じく HfO_2 膜を、原子的に平坦化された C 面サファイア基板上に成膜した。それぞれをリフトオフにより正方形パターンが周期的に並ぶ構造を作製した。 MoS_2 成膜は個体の S、 MoO_3 をソースとした CVD 炉で行った (図 6)。炉は中央に設置した熱電対で温度制御を行い、温度を 800°C とした。 MoO_3 粉末を中心からの距離 d_1 の位置に設置した。距離 d_1 によって粉末温度を変化させることが可能である。また、基板を中心からの距離 d_2 の位置に設置し、同様に d_2 によって基板温度を変化させることができる。固体 S 粉末は上流に設置し、リボンヒーターで加熱する。温度は 150°C とした。

MoOx シード試料においては基板温度が高すぎるとシードパターンが昇華消滅し、低すぎると MoS_2 が成膜されないことがわかった。距離 d_1 、 d_2 がそれぞれ 5 、 4cm のとき、一部のシードは昇華したが、図 7 に示すように残留パタ

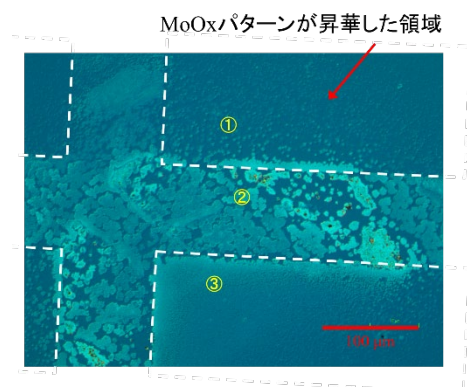


図 7 MoOx パターン近傍の光学顕微鏡像

ーン近傍に吸着物が観察された。図中①～③で示された各領域でのラマン分光測定より、すべての領域で MoS_2 が成膜されたことを確認した。ただしいずれも 2 層以上の積層膜であった。また、期待された MoOx シードを核とした横方向成長が起こっている様子は観察されず、シードパターン近傍での選択的成長は、シードが Mo の供給源として働いたためであると推察される。

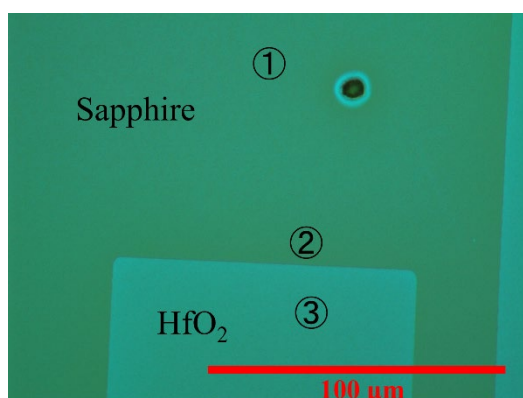


図 8 HfO_2 パターン近傍の光学顕微鏡像

一方、 HfO_2 膜シード試料においてはパターンが昇華せず、すべての領域で残存した。なお、このときの距離 d_1 、 d_2 はそれぞれ 7、0cm である。図 8 に示す、領域①（サファイア表面）および領域③（ HfO_2 表面）において同様にラマン分光測定から MoS_2 が成膜されたことが確認された。一方パターン近傍の、エッジより距離 $10\mu\text{m}$ 程度の範囲（領域②）においては MoS_2 が成膜されなかった。これは HfO_2 膜表面がサ

ファイア表面に比べてより安定な MoS_2 結晶核成長サイトであり、パターン近傍に吸着した

Mo が表面拡散によって HfO_2 膜表面に移動したことに起因する。距離 d_2 を 1.5cm とし、基板温度をわずかに下げた場合ではサファイア表面で MoS_2 が成膜されず、 HfO_2 膜表面でのみ成膜されたことも確認した。原子的に平坦なサファイア表面は MoS_2 膜が比較的成長しやすいことが知られているが、この結果は HfO_2 膜が極めて高い選択性を有することを意味する。

【 3 】 まとめ

新規の界面欠陥密度評価手法を提案し、チャネル上部絶縁膜、上部浮遊電極を用いてチャネル電位の時間変化を測定することができた。しかし今回作製したデバイスにおいては、界面欠陥起因の放電特性を詳細に解析するためにはチャネル抵抗、コンタクト抵抗を大幅に低減する必要があることも明らかとなった。ただし、本手法によりチャネル電位の面内分布を評価することが可能であることも示され、このことは MoS_2 膜の電氣的性質の均一性評価手法としてのポテンシャルを示したものと考えている。例えば、多結晶 MoS_2 膜における粒界が伝導に与える影響、キャリア分布の不均一性などを調べるツールとして極めて有効である。

MoOx パターンが Mo の供給源、 HfO_2 パターンが優先吸着サイトとしてそれぞれ働くことが明らかとなった。どちらも二次元結晶膜の位置選択成長の実現に優位な特性である。特に、あらかじめチャネル形状にパターンニングされた HfO_2 膜を用いることでデバイス作製におけるレジスト工程を減らすことが可能であり、二次元半導体へのダメージ、レジスト残渣等による欠陥形成が抑制されることが期待できる。今後は位置選択性の精度を高めるためのシード材料選択、周辺材料の組み合わせの最適化、結晶膜の単結晶化、チャネル抵抗、コンタクト抵抗の低減に注力し、今回提案した手法による界面欠陥密度の定量化を目指す。

<学会発表>

国内会議

1. 佐藤優、蓮沼 隆「エッチング溶液中 C-V 測定による SiO_2 膜中固定電荷分布評価」第 31 回電子デバイス界面テクノロジー研究会、2026.1.29-30 (ポスター)

(4) マテリアル分子設計部門

教員：

笹森貴裕（数理工学系・化学域・教授）

菅又功（数理工学系・化学域・准教授）

正田浩一朗（数理工学系・化学域・助教）

大学院生：

小林傑（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・D2）

韓子安（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・D2）

浅川哲平（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・D1）

岩崎龍樹（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・D1）

佐藤弘一（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・D1）

安井智紀（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・D1）

荒井真由（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・M2）

大辻駿介（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・M2）

河本美玲（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・M2）

野元彬弘（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・M2）

浜野竜成（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・M2）

石浜亘（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・M1）

伊豆倉夢那（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・M1）

笠井瑞歩（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・M1）

近藤颯汰（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・M1）

田崎秀悟（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・M1）

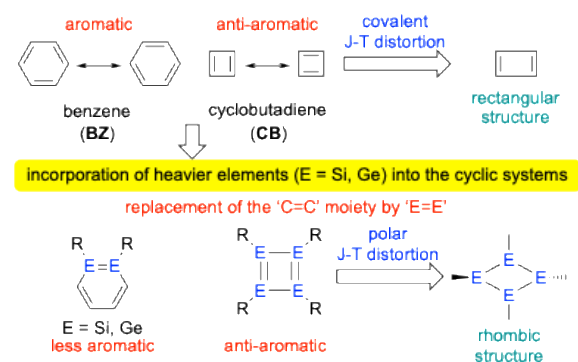
溝奏太（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・M1）

山田隼平（数理工学系科学研究群・化学学位プログラム・M1）

笹森貴裕、菅又 功、正田浩一朗

<研究成果>

当研究室では、全元素有機化学を推進しており、様々な元素特性に基づいて、分子構造・電子状態と分子物性・反応性との相関を明確化し、有機典型元素化学の基本概念を確立することを目指している。高周期典型元素の特異な結合様式・電子状態を有する斬新な化合物を創製し、それらの性質を詳細に調べた上で、新たな光・電子物性の開拓、典型元素触媒機能の開拓を目指して研究を推進しており、中でも特に、高周期典型元素から成る斬新な π 電子系に着目した機能開拓に挑戦している。本年度は、斬新な高周期典型元素 π 電子系として、1,2-ジゲルマシクロブタジエンの合成とその電子状態解析を行った。 4π 電子環状共役系であるにも関わらず、高い芳香族性を示すことが明らかとなった。

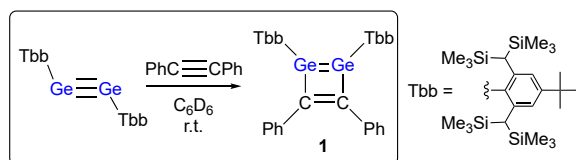


【 1 】 1,2-ジゲルマシクロブタジエンの合成

芳香族性および反芳香族性の概念は、有機化学において極めて重要である。ヒュッケル則に基づき、平面環状の $[4n+2]\pi$ 電子系は芳香族性により安定化される一方、 $[4n]\pi$ 電子系は反芳香族性により不安定化し、高い反応性や構造歪み（ヤーン・テラー歪み）を示す。近年、ベンゼンやシクロブタジエンの炭素原子を高周期14族元素（Si, Ge など）に置換した誘導体の研究が進んでおり、炭素系とは異なるユニークな電子状態が注目されている。

本研究では、かさ高い置換基による速度論的安定化の手法を活用してゲルマニウム π 電子系の創出を目指した。まず、ゲルマニウム間三重結合化合物である「ジゲルミン」を単離し、

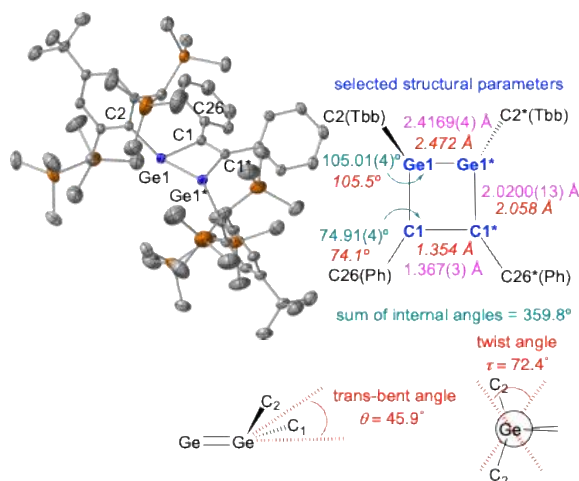
これに対し、ジフェニルアセチレンを反応させた。その結果、[2+2]環化付加反応が進行し、対応する 1,2-ジゲルマシクロブタジエン **1** を合成・単離することに成功した。



【 2 】 1,2-ジゲルマシクロブタジエンの構造

SPring-8 の放射光を用いた単結晶 X 線回折データに基づき、多極子展開法による実験的価電子密度分布 (EDD) 解析を行った。

1,2-ジゲルマシクロブタジエン **1** は、結晶状態で C2 対称軸を持ち、Ge₂C₂ 環は平面構造を有していた。ゲルマニウム上の置換基 (Tbb 基) は、環外の trans 方向に結合していることが分かった。結合長について、C-C 結合 (1.367(3) Å) が典型的な単結合よりも短く、顕著な二重結合性を示した。一方、Ge-Ge 結合 (2.4169(4) Å) も単結合より短縮しているが、結合距離のみから π 結合性を判断するのは困難であった。



【 3 】 1,2-ジゲルマシクロブタジエンの電子密度分布と芳香族性

X線回折データに基づく EDD 解析および Bader の AIM (Atoms in Molecules) 解析の結果、

C-C 結合はベンゼンと同程度の高い電子密度と楕円率を示し、非局在化した π 結合性が確認された。一方、Ge-Ge 結合は、ジゲルメン (Ge=Ge) 結合に見られるような「slipped- π 結合」と呼ばれる弱い結合であり、ゲルミレンダイマー ($>\text{Ge}:\text{Ge}<$) としての性格が強いことが示唆された。

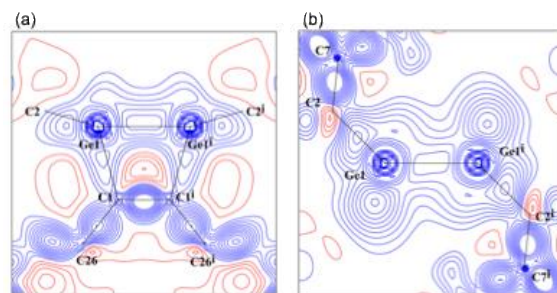


図 1,2-ジゲルマシクロブタジエン **1** の静的モデルマップ。(a) C₂Ge₂ 平均面；(b) Ge-Ge 結合軸を含む平面。青と赤の等高線は、それぞれ正および負の電子密度を示す (0.05 e Å⁻³ 間隔)

DFT 計算を用いた理論的考察から、1,2-ジゲルマシクロブタジエン **1** の芳香族性が詳細に検討された。かさ高い置換基を持つ **1** は C2 対称構造が局所構造で安定であるが、置換基のないモデル分子ではヤーン・テラー歪みにより非対称な構造が最安定構造であった。特筆すべきは、**1** の分子軌道が、ブタジエンの電子環状反応における同旋的環化遷移状態と類似した特徴を示した点である。これは「4 π 電子系メビウス芳香族系」の特徴と一致する。メビウス芳香族性は、4 π 共役系の軌道が位相の反転を持つ場合に芳香族性を示す現象であり、反芳香族性を示す炭素の系とシクロブタジエンとは対照的な結果である。

また、磁氣的指標である NICS (Nucleus-Independent Chemical Shift) の計算によれば、化合物 **1** の芳香族性はベンゼンをも上回ると算出された。また、ACID (Anisotropy of the Induced Current Density) プロットにおいても、メビウス芳香族化合物に特有の透磁性 (diatropic) 環電流が観測された。

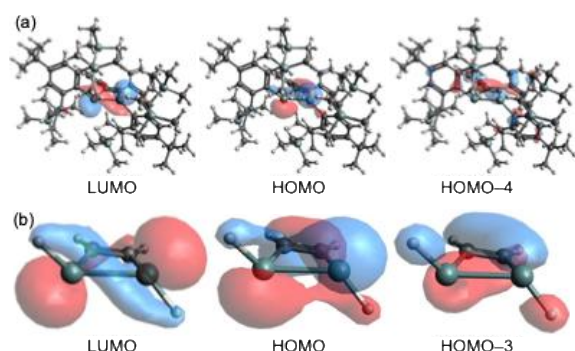


図 1,2-ジゲルマシクロブタジエンのフロンティア軌道

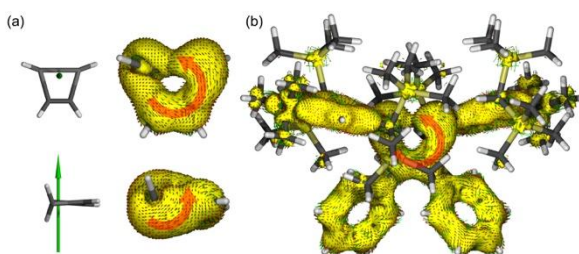
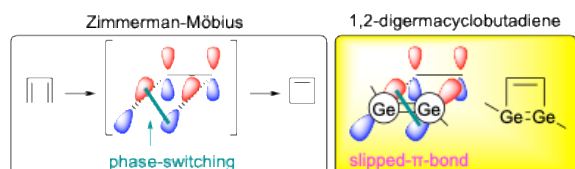


図 1,2-ジゲルマシクロブタジエンの ACID Plots

【 4 】 まとめ

本研究は、単離された 1,2-ジゲルマシクロブタジエン環における 4π 電子の非局在化を、実験的 EDD 解析と理論計算の両面から明らかにした。Ge=Ge 部位の slipped- π 軌道が位相の反転をもたらすことで、この系は顕著なメビウス芳香族性を獲得していると結論付けられる。本成果は、重い主族元素を含む環状共役系の芳香族性に関する議論に、重要な基礎を与えるものである。



<論文>

1. T. Sugahara, D. Hashizume, A. Espinosa Ferao, K. Masada, N. Tokitoh and T. Sasamori, “Experimental and Theoretical Characterization of 4π -Electron Möbius Aromatic System of a 1,2-Digermacyclobutadiene” *Angew. Chem. Int. Ed.*, **64**, e202413426(202413421-202413426) (2025).
2. T. Kuroda, P. Yang, M. Nakamura, R. Hyakutake, H. Fukumoto, T. Oshiki, Y. Nishina, K. Masada, T. Sasamori, Y. Mizuhata, K. Kubo, R. Inoue and T. Agou, “Control of the electronic and optical properties of aminoxyl radicals via boron complexation” *Dalton Trans.*, **54**, 951-956 (2025).
3. D. Mohapatra, P. D. Pattanayak, S. Chatterjee, W. Kaminsky, T. Sasamori, T. Nakamura and R. Dinda, “Unsymmetrical salen-based oxido VIV: Synthesis, characterization, biomolecular interactions, and anticancer activity” *J. Inorg. Biochem.*, **264**, 112818(112811-112819) (2025).
4. T. Anzai, K. Sugamata and T. Sasamori, “Monomeric tri-coordinated bis(ferrocenyl)haloalumanes ” *Dalton Trans.*, **54**, 1360-1364 (2025).
5. K. Komatsu, A. Kostenko, S. Inoue, T. Sasamori and T. Nakamura, “Stereoselective Sequential Diels–Alder Reactions on a Cyclic Furan Trimer for the Construction of an Asymmetric Scaffold” *Org. Lett.*, **27**, 1192-1197 (2025).
6. S. Usuba, S. Morisako, K. Masada, K. Sugamata and T. Sasamori, “A Disila[2]ferrocenophane with a Bridging 9,9'-Bi-9H-9-Silafluorene Moiety” *Molecules*, **30**, 1361(1361-1316) (2025).
7. S.-y. Kawamoto, K. Masada and T. Sasamori, “A Stibonium Stabilized by Intramolecular Coordination from a Phosphine” *Chem. Asian J.*, **20**, e202401871(202401871-202401875) (2025).
8. P. Schmid, K. Bartl, R. Saf, T. Sasamori, V. Y. Lee and F. Uhlig, “(Trialkylsilyl)germanes (tBuMeRSi)GeH₃ (R = Me, tBu)” *Organometallics*, **44**, 1000-1005 (2025).
9. P. Yang, Y. Chen, T. Kuroda, H. Morishita, H. Fukumoto, M. Morita, K. Masada, T. Sasamori, K.

- Kubo, K. Marumoto, R. Inoue, S.-i. Kato and T. Agou, "Dicationic dibenzo[1,4]azaborine with an open-shell electronic structure" *Chem. Commun.*, **61**, 7847-7850 (2025).
10. S. Karwasara, P. C. Brehm, T. Terschueren, M. Ramachandran, R. M. Gomila, G. Schnakenburg, T. Sasamori, O. Schiemann, R. T. Boere, A. Frontera and R. Streubel, "1,4-Phosphagermines: An Anionic 6π -heteroaromatic Biradicaloid and a Persistent π -Delocalized Radical" *Inorg. Chem.*, **64**, 13224-13233 (2025).
11. T. Anzai, K. Sugamata, S. Morisako and T. Sasamori, "Structural characterization of a dicoordinated bis(ferrocenyl)aluminum cation" *Dalton Trans.*, **54**, 10667-10672 (2025).
12. K. Iijima, K. Sugamata and T. Sasamori, "Ferrocenyl Substituted Stannanethione and Stannaneselone" *Molecules*, **30**, 2826 (2821-2814) (2025).
13. A. Nomoto, K. Sugamata and T. Sasamori, "The reactivity of a bis(methylene)phosphane anion" *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **98**, uoaf083 (081-087) (2025).
14. S. Otsuji, K. Masada and T. Sasamori, "Flash Communication: Synthesis and Characterization of a 9,10-Distiba-Dewar-anthracene" *Organometallics*, **44**, 2725-2728 (2025).
15. T. Mori, Y. Sano, T. Ikai, Y. Kawasaki, K. Tomooka, T. Sasamori and S. Yamaguchi, "Dual Circularly Polarized Luminescence from Chiral Boron-Embedded Polycyclic Aromatic Hydrocarbons" *Angew. Chem. Int. Ed.*, **65**, e22746(22741-22749) (2026).
16. S. Kobayashi, T. Sasamori, Y. Nakajima, Y. Minami, K. Iizuka, T. Saeki, A. Toshimitsu, H. Tsuji, S. Yamaguchi, A. Fukazawa, T. Kushida, D. Hashizume and K. Tamao, "1,6-Disila[4.4.4]propellane revisited part 1: improved synthesis by a mechanistically logical fluorosilane route and its structural aspects including linear stacking along the Si-Si bond in the crystalline state" *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **99**, uoaf119 (111-111) (2026).
17. M. Kawamoto and T. Sasamori, "9,10-Difluoro-9,10-disila-9,10-dihydroanthracene" *Inorganics*, **14**, 23(21-14) (2026).
18. S. Das, P. D. Pattanayak, T. Sasamori, T. Nakamura and R. Dinda, "Organotin(IV) Azo Hydrazonates as Lysosome-Targeted Imaging and Anticancer Agents" *Chem. Asian J.*, **21**, e00912(00911-00914) (2026).
- <学会発表>
- 国際会議
1. K. Sugamata, "Selenium- and Tellurium-centered 2-Heteraallenes", *16th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (ICCST-16)*, Germany, 2025. 8.26-8.29. (oral)
2. R. Hamano, K. Sugamata, T. Sasamori, "Preparation of a Bulky Ferrocenyl Ligand Bearing a Selenium-coordinating Moiety and Its Application towards Isolable Organosilylenes", *16th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (ICCST-16)*, Germany, 2025. 8.26-8.29. (oral)
3. K. Sugamata, "Study of Selenium-centered 2-Heteraallene", *The Joint Meeting for 8th Japanese Selenium Research Society and 13th International Symposium on Selenium in Biology and Medicine (Se2025)*, Japan, 2025. 10.31-11.2. (oral)
4. R. Hamano, K. Sugamata, T. Sasamori, "Insertion Reaction of a Silylene into a Selenium-Carbon Bond", *The Joint Meeting for 8th Japanese Selenium Research Society and 13th International Symposium on Selenium in Biology and Medicine (Se2025)*, Japan, 2025. 10.31-11.2. (poster)
5. M. Kasai, K. Sugamata, T. Sasamori, "Insertion Reaction of a Silylene into a Selenium-Carbon Bond", *The Joint Meeting for 8th Japanese Selenium Research Society and 13th International Symposium on Selenium in Biology and Medicine (Se2025)*, Japan, 2025. 10.31-11.2. (poster)
- 国内会議
1. 野元彬弘・菅又功・笹森貴裕「アニオン性 2-ホスファレンを活用した種々の低配位リン化合物の合成」基礎有機化学会 若手オンラインシンポジウム (第 5 回)、オンライン、2025.11.14. (口頭発表)

2. 大辻駿介・正田浩一郎・笹森貴裕「デュワー型 9,10-ジスチバアントラセンの合成と構造」基礎有機化学会 若手オンラインシンポジウム (第 5 回)、オンライン、2025.11.14. (口頭発表)
3. 安済統瑚・菅又功・笹森貴裕「かさ高いフェロセニル基を有する、二配位有機アルミニウムカチオン種の合成と構造」第 35 回基礎有機化学討論会、愛知県名古屋市、2025.9.11. (口頭発表)
4. 野元彬弘・菅又功・笹森貴裕「ビス(メチレン)- λ 5-ホスファンアニオンを活用した種々の低配位リン化合物の合成」第 52 回有機典型元素化学討論会、オンライン、2025.12.4. (口頭発表)
5. 笠井瑞歩・菅又功・笹森貴裕「安定な 2,2-スピロビ(1,3,2-ベンゾジセレナゲルモール)の合成」日本化学会第 106 春季年会、千葉県船橋市、2026.3.18. (口頭発表)
6. 田崎秀悟・菅又功・笹森貴裕「かさ高いアリール基を有するジチオシラカルボン酸二量体の合成と反応」日本化学会第 106 春季年会、千葉県船橋市、2026.3.18. (口頭発表)
7. 山田隼平・笹森貴裕「2,2,3,3-テトラフルオロ-2,3-ジシラ-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレンの合成・構造・反応」日本化学会第 106 春季年会、千葉県船橋市、2026.3.18. (口頭発表)
8. 佐藤弘一・笹森貴裕「2,2,3,3-テトラフルオロ-2,3-ジシラ-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレンの合成・構造・反応」日本化学会第 106 春季年会、千葉県船橋市、2026.3.18. (口頭発表)
9. 近藤颯汰・菅又功・笹森貴裕「かさ高いフェロセニル基を有するホスファ[1]フェロセノファンの合成と構造」日本化学会第 106 春季年会、千葉県船橋市、2026.3.18. (口頭発表)
10. 浜野竜成・菅又功・笹森貴裕「かさ高いフェロセニル基を有する非環状(アミノ)(フェロセニル)シリレンの合成と反応」日本化学会第 106 春季年会、千葉県船橋市、2026.3.18. (口頭発表)

マテリアル分子設計部門

教員：

大谷実（計算科学研究センター・教授）

大谷実

<研究成果>

当研究室では、電極と電解液の界面における電気化学反応をシミュレーションにより理解するための方法論およびプログラムの開発を行っており、それらを活用した応用研究も推進している。本年度は、酸化イリジウム (IrO_2) (1 1 0) 表面における電気化学的窒素還元反応 (NRR) のメカニズム解析を実施した。

【 1 】 IrO_2 (1 1 0) 表面における窒素固定および電気化学的アンモニア合成の理論的解析

カーボンニュートラル社会の実現に向け、再生可能エネルギーを利用したグリーンアンモニア合成技術の確立が求められている。従来のハーバー・ボッシュ法は高温・高圧を要し多大なエネルギーを消費するのに対し、電気化学的窒素還元反応 (NRR) は常温・常圧下での動作が可能であり、持続可能なアンモニア合成の有望な代替手段として注目されている。

我々は、密度汎関数理論 (DFT) と有効遮蔽媒体-参照相互作用点モデル (ESM-RISM) を組み合わせたハイブリッド計算手法を用いて、 IrO_2 (1 1 0) 表面における NRR の反応機構を詳細に解析した。 N_2 分子は Ir_{cus} サイトに end-on 配向で強く吸着 (吸着エネルギー -0.78 eV) し、配位結合と逆供与の相乗効果により N_2 が効果的に活性化されることを明らかにした。NRR の律速過程は $^*\text{N}_2$ から $^*\text{N}_2\text{H}$ へのプロトン化ステップであり、酸性条件 ($\text{pH}=0$) における律速電位は -0.65 V vs. SHE であることを示した。一方、競合する水素発生反応 (HER) の律速電位はより負の値を示し、 IrO_2 (1 1 0) が NRR に対して選択性を持つことを明らかにした。さらに、ESM-RISM により溶媒効果を取り込んだ反応経路の精密評価を行い、NRR および NH_3 収率に関する反応機構サイクルを提

案した。温度プログラム昇温脱離 (TPD) スペクトルのシミュレーションから、酸性条件下で NH_3 生成速度が最大となる温度は約 303 K (室温付近) であることが判明した。また、 TiO_2 担持 IrO_2 (1 1 0) の解析から、 TiO_2 サポートは酸化物の格子構造と界面電場を安定化させる一方で、 Ir_{cus} サイトの電子状態には本質的な影響を与えないことを確認した。

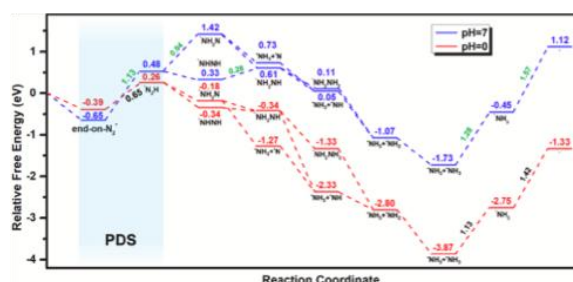


図 1 ESM-RISM を用いた IrO_2 (1 1 0) 表面上の NRR 自由エネルギー図 (0 V vs. SHE)。青線は $\text{pH}=7$ (水)、赤線は $\text{pH}=0$ (硫酸) の結果を示す。

<論文>

1. S-H Pan, M. Otani, T. Miyazaki, J-C Jiang "Unraveling the nitrogen fixation and electrochemical reduction to ammonia on IrO_2 (1 1 0): DFT, ESM-RISM, and microkinetic simulation" *J Catalysis.*, **453**, 116566-1-11 (2026).

<学会発表>

国際会議

1. Minoru Otani, Masaya Ibe, Fumiaki Kuroda, "Accelerated search for C2-selective alloy catalysts for electrochemical CO_2 reduction reaction (e CO_2 RR) using evidence theory and high-throughput DFT Synthesis of novel dipyrin ligands and their application as sensor systems for rare earth metals" *Materials Research Meeting 2025, Yokohama, Japan*, 2025.12.8-13 (oral)

マテリアル分子設計部門

教員：

岡田 晋（数理物質系・物理学域・教授）

岡田 晋

＜研究成果＞

我々のグループでは、ナノサイズ炭素系物質（ナノチューブ、フラーレン、グラファイト）や原子層状物質（遷移金属カルコゲン化合物）等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 】ヤヌス WSe の構造探索とスクロール構造構築の機構解明

遷移金属原子層が異なるカルコゲン原子層によって挟まれたヤヌス遷移金属カルコゲン化合物は、その構造の非対称性からスクロール状のユニークな大局構造を形成することが知られている。ここではヤヌス WSe に注目して、スクロール構造をチューブ状構造でモデル化し、スクロール構造が実現される物理的起源の解析を行った。計算の結果、Se 原子が外層にある曲がった構造では、WSe の直径が 4.5nm より大きくなると平面構造よりも安定化することが明らかになった（図 1）。また、チューブ直径が約 10nm で、曲率構造が最も安定になることを予言した。次に、詳細な原子構造の解析を行った。その結果、この高い安定性は、曲率の印加下で Se-W 間の圧縮歪みと S-W 間の伸長歪みが解消されるためであることを明らかにした。エネルギーの曲率に対する強い依存性に比べて、曲率が WSe の電子状態に及ぼす影響はチューブ直径が極めて小さい領域に限られており、実験的に見られる直径領域では曲率の影響が小さいことが明らかになった。

【 2 】スマネンカラムを用いた遷移金属カルコゲン化合物の電子物性制御

炭化水素分子スマネンは、そのお椀状構造と端の終端水素原子から、お椀鉛直方向に双極子

モーメントを有することが知られている。我々は、これまで 2 層グラフェンの層間へのスマネン分子インターカレーションによる上下グラフェン間での電荷再分布の可能性を提示した。ここでは、スマネンが互いに積層したカラム構造を凝集相として取り得ること、カラムの双極子モーメントが分子の線形和で与えられることに着目し、遷移金属カルコゲン化合物表面へのスマネンカラム吸着による電子物性制御の可能性の探索を行った。密度汎関数理論を用いて、1～4 個のスマネンがスタックしたカラムが吸着した WS₂ のエネルギー論と電子構造の解明を行った。計算の結果、スマネンカラムの向きと長さに依存して、WS₂ のバンド端エネルギーがほぼ線形に制御可能であることが明らかになった [図 2]。また、スマネンカラムを用いた表面部分修飾により、WS₂ に対して有効的な pn 接合界面を構築することが可能であることを予言した。

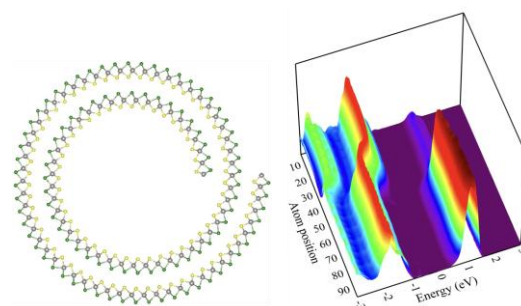


図 1. ヤヌス WSe ナノスクロールの構造と局所電子状態密度(pDOS). 黄色が硫黄原子、緑がセレン原子、灰色がタングステン原子を表す。

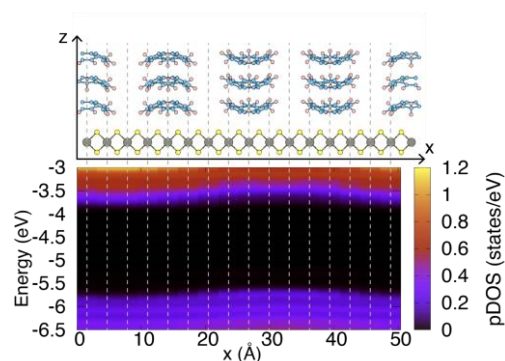


図 2. スマネンカラム吸着による WS₂ バンド端変調.

<論文>

1. Y. Gao, S. Okada, “Energetics and electronic structures of Janus WSe nanoscroll”, ACS Appl. Electron. Mater. 7, 5861 (2025).
2. M. Maruyama, S. Okada, “Band engineering of monolayer WS₂ by sumanene columns”, ACS Appl. Electron. Mater. 7, 6885 (2025).
3. N. Sultana, Y. Gao, M. Maruyama, S. Okada, “Anomalous electrostatic properties of double-walled BN nanotubes”, Jpn. J. Appl. Phys. 64, 065001 (2025).
4. M. Maruyama, Y. Gao, S. Okada, “Band-edge localization of twisted bilayer hBN”, J. Phys. Soc. Jpn. 94, 073702 (2025).
5. M. Maruyama, Y. Gao, S. Okada, “Formation of type-I quantum wells in hexagonal boron nitride bilayers with strain-induced Moiré superlattice”, Jpn. J. Appl. Phys. 64, 75004 (2025).
6. T. Mizoguchi, M. Maruyama, Y. Hatsugai, S. Okada, “Evolution of flat bands in two-dimensional fused pentagon network”, Phys. Rev. B 112, 085421 (2025).
7. Z. Ma, P. Solis-Fernandez, K. Hirata, Y.-C. Lin, K. Shinokita, M. Maruyama, K. Honda, T. Kato, A. Uchida, H. Ogura, T. Otsuka, M. Hara, K. Matsuda, K. Suenaga, S. Okada, T. Kato, Y. Takahashi, H. Ago, “Lattice-guided growth of dense arrays of aligned transition metal dichalcogenide nanoribbons with high catalytic reactivity”, Science Adv. 11, eadr8046 (2025).
8. C. Yang, Q. Lin, Y. Sato, Y. Gao, Y. Zheng, T. Wang, Y. Ma, M. Maruyama, S. Okada, K. Suenaga, S. Maruyama, R. Xiang, “Janus MoSSe nanotubes on one-dimensional SWCNT-BNNT van der Waals heterostructures”, Small 21, 2412454 (2025).
9. K. Kaibara, Y. Yakiyama, M. Maruyama, Y. Gao, S. Okada, H. Sakurai, “Bandgap engineering of graphene by molecular conformation of trioxosumanene”, Jpn. J. Appl. Phys. 64, 075002 (2025).
10. W. Dai, Y. Zheng, A. Kumamoto, Y. Gao, S. Fu, S. Zhao, R. Kitaura, E. I. Kauppinen, K. Otsuka, S. V. Rotkin, Y. Ikuhara, M. Maruyama, S. Okada, R. Xiang, S. Maruyama, “Metallic NbS₂ one-dimensional van der Waals heterostructures”, ACS Nano 19, 32800-32809 (2025).
11. H. Yoshioka, M. Saito, S. Tominaka, S. Okada, M. Maruyama, Y. Gao, B. Slater, S.-i. Ito, M. Hikichi, R. Tsuji, O. Oki, Y. Ikuhara, S.-i. Orimo, H. Hosono, T. Kondo, “Half-Calcium Substitution of the CaB₆ Surface with Hydrogen: Synthesis, Structural Characterization, and Electronic Structure, Small Struc. 6, 2500389 (2025).
12. A. Nagamine, H. Uchiyama, K. Kamiya, M. Maruyama, Y. Gao, S. Okada, Y. Ohno, “Energetics and electronic structures of carbon nanotubes adsorbed with amino acid”, Jpn. J. of Appl. Phys. 64, 125003 (2025).

マテリアル分子設計部門

教員：

近藤剛弘（数理物質系・物質工学域・教授）

大木理（数理物質系・物質工学域・助教）

辻流輝（数理物質系・物質工学域・助教）

研究員：

伊藤伸一（研究員）

Susmita Roy（研究員）

Fasih Aamir（研究員）

引地美亜（技術職員）

韓俊艶（技術職員）

伊藤菜緒子（技術職員）

大学院生：

野口夏未（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・D2）

袁枚（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・D2）

康子豪（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D2）

福田弘清（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D1）

松山英治（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D1）

Noor Alam（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・D1）

李进宇（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・M2）

内田昂伸（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

上野凜平（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

竹下幸佑（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

下里昇平（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

大岩香凜（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・M1）

中山佳汰（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・M1）

川瀬心優（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

櫻井歩（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

寺島陸駆（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

陆晗杰（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

謝昱辰（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

近藤剛弘

<研究成果>

マテリアル分子設計部門近藤グループでは、カーボンニュートラルに貢献する材料の開発やホウ素を用いた新たな二次元物質の開発に取り組んでいる。ここでは、東京科学大学 宮内雅浩教授、山口晃准教授、高知工科大学藤田武志教授、神奈川県立産業技術総合研究所（KISTEC）の砂田香矢乃常勤研究員、小林慶一研究員、永井武上席研究員、石黒斉プロジェクトリーダーらとの共同研究の成果について報告する。

【ホウ化水素シートの新機能：優れた抗菌・抗ウイルス・抗カビ特性】

（概要）

ホウ化水素シートはホウ素と水素の組成比が1:1のナノシートであり、筑波大学の我々の研究グループが中心となり2017年に見出した物質である（*J. Am. Chem. Soc.* 139, 13761, 2017）。ホウ化水素シートは軽元素のホウ素と水素からなり、その質量水素密度は8.5 wt%と極めて高く、爆発のリスクのある水素ガスボンベに代わる軽量で安全な水素キャリアとしての応用が期待されている。本研究では、このホウ化水素シートをガラス基板にコートした透明な膜部材が、優れた抗菌・抗ウイルス・抗カビ機能を示すことを明らかにした（図1）。高性能のメカニズムについて検証した結果、ホウ化水素シートが微生物のタンパク質の変性に寄与することがわかった。新型コロナウイルス感染拡大のようなパンデミックが再び起こる恐れがあるなか、ホウ化水素シートはこうした感染リスク拡大を防止するための部材や繊維類などへの透明コーティング材としての応用が期待

できる。また、抗カビ機能も有することから、身のまわりの清潔を保つための部材や日用品への応用も期待できる。本成果は、4月23日付の「*Journal of Materials Chemistry B*」誌に掲載された。

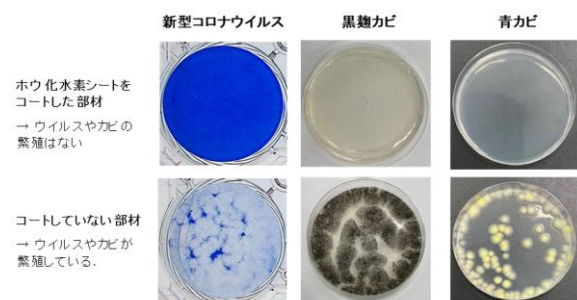


図 1. ホウ化水素シートをコートした部材の抗ウイルス、抗カビ効果：ホウ化水素をコートしておくとうイルスもカビも繁殖しない。

(背景)

新型コロナウイルス感染拡大のようなパンデミックが再び起こる恐れがあるなか、感染予防対策は非常に重要である。特に、生活空間での感染予防のため、固体状で抗菌・抗ウイルス効果が持続し、部材へのコーティングや複合化が可能な材料の開発が求められてきている。また、光触媒に要する光照射や、特殊な装置を用いない、簡便な感染予防技術も求められている。

(研究成果)

ホウ化水素シートは簡便で大量合成可能な溶液プロセスで合成することができる。図2(a)の透過型電子顕微鏡像が示す通り、ホウ化水素シートはナノシート状の二次元物質である。ホウ化水素シート 2.0 mg をガラス基材にコートした薄膜の断面の走査型電子顕微鏡像を図 2 (b) に、コート部材の光透過率を図 2 (c) に示す。コートの膜厚は約 2 μ m で、可視光領域の透過率は 80%以上を示し、肉眼ではほぼ透明である。ホウ化水素シート膜の抗菌・抗ウイルス試験の結果を図 3 に示す。2.0 mg のホウ化水素シートをガラス基材にコートした部材に、黄色ブドウ球菌、大腸菌を接触させると、いずれも 10 分以内で生菌数が検出限界値以下まで減少した。また、新型コロナウイルス、インフルエンザ

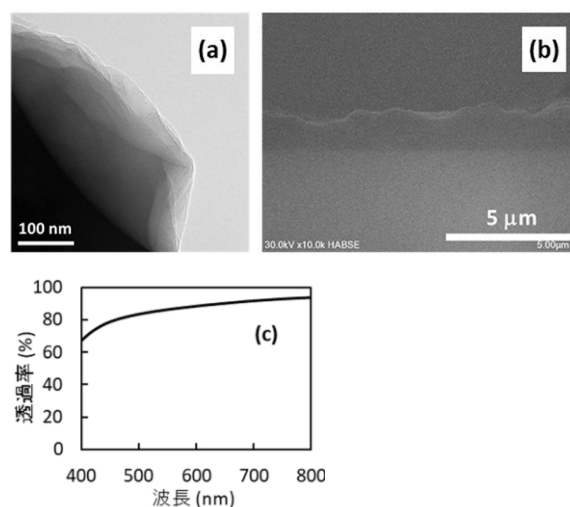


図 2. (a) ホウ化水素シートの透過型電子顕微鏡像、(b) ホウ化水素シートをガラス基材にコートした薄膜断面の走査型電子顕微鏡像、(c) ホウ化水素シートのコート部材の透過率

ウイルス、ネコカリシウイルスを用いて同様の実験を行ったところ、いずれも接触時間 10 分以内でウイルス感染価が検出限界値以下まで減少した。これらの結果から、ホウ化水素シートが高い抗菌・抗ウイルス機能を有することがわかる。

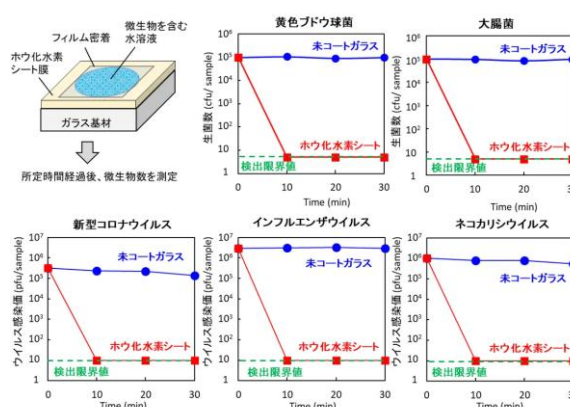


図 3. 抗菌・抗ウイルス試験の結果。ホウ化水素シートをコートしたガラスに菌、ウイルスを接触させたときの菌数、ウイルス数の変化（コートしていないガラスに接触させた場合と比較）

次に、ホウ化水素シートの抗カビ性能を評価した結果を図4に示す。この結果から、黒麹カビ、青カビのいずれに対しても優れた抗カビ効果を発揮することがわかった。カビ抑制効果を活かし、身のまわりの清潔を保つための部材への応用が期待できる。

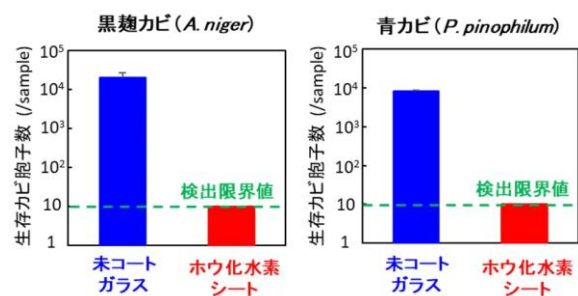


図4. ホウ化水素シートをコートしたガラスに黒麹カビ、青カビを24時間接触させた場合の生存カビ胞子数（コートしていないガラスに接触させた場合と比較）。

ホウ化水素シートの優れた抗菌・抗ウイルス効果のメカニズムについて、赤外吸収分光法やアルカリホスファターゼを用いた酵素活性試験などによって調べた。その結果、ホウ化水素シートは微生物の持つタンパク質を変性させる特性を有し、その結果、菌やウイルスを不活化させることが明らかになった。一方で、動物細胞に対する害への懸念を調べるためホウ化水素シートの細胞毒性も調べたが、特に強い毒性が無いこともわかった。

以上より、ホウ化水素シートは感染リスクを低減するための部材や繊維類などへの透明コーティング材としての応用が期待できる。また、抗カビ機能も有することから、身のまわりの清潔を保つための部材や日用品への応用も期待できる。

今後さまざまな部材に適用するため、バインダーなどと複合化したコーティング剤を開発する予定である。また、安全・安心・健康促進・キレイな環境づくりに貢献できるさまざまな部材の開発につながることを期待している。

<論文>

1. Yukihiro Yasuda, Osamu Oki, Shohei Shimozato,

Kazuho Goto, Natsumi Noguchi, Shin-ichi Ito, Miwa Hikichi, Ryuki Tsuji, Yuki Nakahira, Reina Utsumi, Hiroyuki Saitoh, Satoshi Nakano, Shunsuke Naka, Ikutaro Hamada, Shin-ichi Orimo, Takahiro Kondo*, Interlayer Hydrogen-Hydrogen Spacing Regulates the Formation of Molecular Hydrogen in Hydrogen Boride Nanosheets, *ACS Nano* 20 (2026) 9951-9960.

2. Takeru Nakashima, Yuki Tsujikawa, Takahiro Kondo, Takanori Koitaya, Iwao Matsuda, Yasunobu Ando, Role of Quasi-One-Dimensional B Chains in the Catalytic Properties of CuB/Cu(111), *J. Phys. Chem. C* 130 (2026) 5411-5417.

3. Kun Li, Hiroshi Yamagishi*, Osamu Oki, Takahiro Kondo, Yohei Yamamoto*, Vapor-Induced Negative Expansion of Porous Cross-Linked Polymers Observed by Optical Resonance, *J. Am. Chem. Soc.* 148 (2026) 13674-13681.

4. Tomoko Kubota, Riku Seiki, Takahiro Kondo, Verdad C. Agulto, Makoto Nakajima, Shin-ichi Ohkoshi, Hiroko Tokoro*, Suppression of the metal-to-semiconductor transition in nanocrystalline Ti₄O₇ via crystallite size control, *Mater. Adv.* 7 (2026) 3247-3253.

5. Hirona Ito, Mio Nakai, Akira Yamaguchi, Shin-ichi Ito, Osamu Oki, Takahiro Kondo, Masahiro Miyauchi*, Hideyuki Nakano*, Visible-Light-Driven Hydrogen Release from Layered Hydrogen Silicane, *Advanced Optical Materials*, 14 (2026) e02880. (9 pages)

6. Kazuki Yamaguchi, Heming Yin, Masahito Niibe, Jingmin Tang, Masashige Miyamoto, Yuki Tsujikawa, Haruto Sakurai, Yu Murano, Kenichi Ozawa, Masafumi Horio, Jun-ichi Yamaura, Takahiro Kondo, Iwao Matsuda*, Adhesion between a borophane sheet and a metal substrate by interface bonding, *Applied Surface Science Advances*, 31 (2026) 100918.

7. P. Sujita, Sethumathavan Vadivel*, S. Sarmila, Takahiro Kondo, Manabu Fujii, Electronic Structure Modulation of Borophene via N, S Modification and Iridium Infusion for Superior Oxygen Evolution Reaction, *J. Phys. Chem. C* 130 (2026) 131-140.

8. Riku Kawamura, Reiya Kawamura, Arpita Varadwaj*, Kazuaki Kisu, Rika Tanaka, Akiyasu Yamamoto, Ryota Ishibiki, Shin-ichi Ito, Takeshi Fujita, Tomoharu Tokunaga, Osamu Oki, Yoshitaka Fujimoto, Masayuki

- Toyoda, Susumu Saito, Toyoto Sato, Shin-ichi Orimo, Hideo Hosono, Iwao Matsuda, Masato Kotsugi, Masahiro Miyauchi*, Takahiro Kondo*, Enhanced Hydrogen Release from Hydrogen Boride Nanosheets via Carbon Doping, *Small Structures*, 6 (2025) e202500578.
9. Miwa Hikichi, Jumpei Takeshita, Junyan Han, Shin-ichi Ito, Osamu Oki, Ryuki Tsuji, Akira Hasegawa, Samuel Jeong, Yoshikazu Ito, Iwao Matsuda, Hayato Tsurugi, Masahiro Miyauchi, and Takahiro Kondo*, Enhanced Thermal- and Photostability of Trace Pyrazine-Incorporated Hydrogen Boride Nanosheets, *Small* 21 (2025) e06230.
 10. Karin Oiwa, Ryuki Tsuji, Rimpei Ueno, Jinyu Li, Linghui Li, Myu Kawase, Keita Nakayama, Natsumi Noguchi, Susmita Roy, Osamu Oki, Ryotaro Sakakibara, Ken Sakaushi, Masashi Miyakawa, Takashi Taniguchi, Takahiro Kondo*, Hydrophilicity as a Key Factor in Enhancing OER on rhombohedral Boron Monosulfide/Ni-Foam Electrodes with Carbon Material, *ACS Applied Energy Materials* 8 (2025) 15186–15195. Selected as cover picture.
 11. Hikari Yoshioka, Mitsuhiro Saito, Satoshi Tominaka, Susumu Okada, Mina Maruyama, Yanlin Gao, Ben Slater, Shin-ichi Ito, Miwa Hikichi, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Yuichi Ikuhara, Shin-ichi Orimo, Hideo Hosono, Takahiro Kondo*, Half-Calcium Substitution of the CaB₆ Surface with Hydrogen: Synthesis, Structural Characterization, and Electronic Structure, *Small Structures*, 6 (2025) 2500389. Selected as a front cover picture.
 12. R Hasegawa, A Varadwaj*, A L Foggiatto, M Niibe, T Yamazaki, M Horio, Y Ando, T Kondo, I Matsuda, M Kotsugi*, Automated Elucidation of Crystal and Electronic Structures in Boron Nitride from X-ray Absorption Spectra Using Uniform Manifold Approximation and Projection, *Scientific Reports*, 15 (2025) 37736.
 13. Xiaoni Zhang, Yuki Tsujikawa, Masashige Miyamoto, Kazuki Yamaguchi, Masahito Niibe, Daisuke Nishio-Hamane, Mei Yuan, Kenichi Ozawa, Masafumi Horio, Kunio Yubuta, Takahiro Kondo, and Iwao Matsuda, Electronic structure of the YCrB₄ crystal surface, studied by micro-focused photoemission spectroscopy, *Physical Review Materials*, 9 (2025) 095001 (8pages).
 14. Takeshi Nagai, Andi Mauliana, Keiichi Kobayashi, Akira Yamaguchi, Keisuke Miyazaki, Yue Yang, Jumpei Takeshita, Takeshi Fujita, Kayano Sunada, Hitoshi Ishiguro*, Takahiro Kondo*, Masahiro Miyauchi*, Broad-spectrum antimicrobial effects of hydrogen boride nanosheets, *Journal of Materials Chemistry B*, 13 (2025) 5723-5733.
 15. Mei Yuan, Natsumi Noguchi, Zihao Kang, Shin-ichi Ito, Miwa Hikichi, Osamu Oki, Ryuki Tsuji, Xiaoni Zhang, Iwao Matsuda, Kouji Sakaki, Shin-ichi Orimo, Takahiro Kondo*, Effects of Ball Milling on Hydrogen Release Performance of Titanium Dihydride, *Journal of Physical Chemistry C*, 129 (2025) 6340–6351.
 16. Shruti Saini, Alana Sharma, Takahiro Kondo, Atanu Panda, Borophene and Its Transition Metal Doped Heterostructures: Recent Advancements Toward High-Performance Electrochemical Applications, *Chemistry Select*, 10 (2025) e04119; Correction: *Chemistry Select*, 11 (2025) e72566.
 17. 伊藤 伸一, 引地 美亜, 北川 路子, 野口 夏未, 袁 枚, 康 子豪, 安田 幸広, 福田 弘清, 下里 昇平, 竹下 幸佑, Susmita Roy, 辻 流輝, 大木 理, 後藤 大河, 近藤 剛弘, 熱重量分析器－質量分析器複合システムの構築とホウ化水素 (HB) ナノシートの水素放出特性, *表面と真空*, 68 (2025) 245-250.
 18. 宮内 雅浩, 近藤 剛弘, 軽量・安全・光応答性の水素キャリア「ホウ化水素シート」, *会報光触媒*, 77 (2025) 26-33.
- <特許>
1. 宮内雅浩, 山口晃, 砂田香矢乃, 石黒斉, 永井武, 近藤剛弘, “抗菌・抗ウイルス用ホウ化水素含有シート、抗菌・抗ウイルス用組成物および抗菌・抗ウイルス性部材”, 出願人: 国立大学法人東京工業大学, 地方独立行政法人神奈川県立産業技術総合研究所, 国立大学法人筑波大学, 日本国特許 特許第 7745195 号, 登録日 2025.9.18
 2. 近藤剛弘, 石引涼太, 後藤大河, 伊藤伸一, 木下喜裕, “水素貯蔵放出材料およびその製造方法”出願

人：国立大学法人筑波大学，国立大学法人東京工業大学，特許 07606707 号，米国特許 US12384675，登録日 2025.8.12

<学会発表>

国際会議

1. Takahiro Kondo : Fundamental Research on Materials for Carbon Neutrality, Visiting academic leader equity program at FTMD ITB, Co-working Space 1st Floor FTMD ITB (Indonesia). 2026.1.20. **(Invited talk)**
2. Susmita Roy, Kartik Sahu, Osamu Oki, Keita Nakayama, Natsumi Noguchi, Shohichi Furukawa, Shin-ichi Ito, Kouji Sakaki, Shin-ichi Orimo, Takahiro Kondo: Robust Al(III)-based Metal-organic Framework for high volumetric hydrogen uptake at room temperature, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025; Pacifichem 2025, Hawaii Convention Center (Hawaii) 2025.12.15. (oral)
3. O. Oki, S. Roy, K. Nakayama, N. Noguchi, T. Kondo: Porous materials and their lithium-doped derivatives for room-temperature hydrogen storage, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025; Pacifichem 2025, Hawaii Convention Center (Hawaii) 2025.12.15. (oral)
4. Kosuke Takeshita, Miwa Hikichi, Shin-ichi Ito, Natsumi Noguchi, Shohei Shimozato, Kazuki Yamaguchi, Iwao Matsuda, Shin-ichi Orimo, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Takahiro Kondo: Synthesis and Characterization of Potassium-doped Hydrogen Boride Nanosheets, Materials Research Meeting 2025 (MRM 2025), Pacifico Yokohama, Yokohama (Japan), 2025.12.11. (poster)
5. Takahiro Kondo : New 2D boron materials for hydrogen creation, storage, and usage, **Cluster Keynote**, Materials Research Meeting 2025 (MRM2025), Pacifico Yokohama, Yokohama (Japan). 2025.12.10. **(Invited talk)**
6. Hikari Yoshioka, Mitsuhiro Saito, Satoshi Tominaka, Susumu Okada, Mina Maruyama, Yanlin Gao, Ben Slater, Shin-ichi Ito, Miwa Hikichi, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Yuichi Ikuhara, Shin-ichi Orimo, Hideo Hosono, Takahiro Kondo: Hydrogen Boride Framework Formed on the Surface of Calcium Hexaboride, Materials Research Meeting 2025 (MRM 2025), Pacifico Yokohama, Yokohama (Japan), 2025.12.9. (oral)
7. Shohei Shimozato, Miwa Hikichi, Shin-ichi Ito, Natsumi Noguchi, Yukihiro Yasuda, Kosuke Takeshita, Kazuki Yamaguchi, Iwao Matsuda, Shin-ichi Orimo, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Takahiro Kondo: Synthesis of Na-doped Hydrogen Boride Nanosheets Using Titrimetric Neutralization Reaction, Materials Research Meeting 2025 (MRM 2025), Pacifico Yokohama, Yokohama (Japan), 2025.12.9. (poster) **(MRM2025 Poster Award 受賞, ACS Publications Outstanding Poster Award 受賞)**
8. Karin Oiwa, Rinpei Ueno, Jinyu Li, Linghui Li, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Susmita Roy, Ken Sakaushi, Masashi Miyakawa, Takashi Taniguchi, Takahiro Kondo: Effect of Catalyst Surface Hydrophilicity on Oxygen Evolution Reaction Activity, Materials Research Meeting 2025 (MRM 2025), Pacifico Yokohama, Yokohama (Japan), 2025.12.9. (poster)
9. Susmita Roy, Kartik Sau, Osamu Oki, Nobuko Hanada, Keita Nakayama, Natsumi Noguchi, Shin-ichi Ito, Shohichi Furukawa, Ikutaro Hamada, Kouji Sakaki, Shin-ichi Orimo, Takahiro Kondo: Robust Al(III)-based Metal-organic Framework for high volumetric hydrogen uptake at room temperature, Materials Research Meeting 2025 (MRM 2025), Pacifico Yokohama, Yokohama (Japan), 2025.12.9. (oral)
10. Takahiro Kondo : Recent Progress of Hydrogen Boride and Boron Monosulfide, International Boron Symposium 2025 (Boron2025), Ankara (Turkiye). 2025.12.3. **(Invited talk)**
11. Myu Kawase, Natsumi Noguchi, Shraddha Gupta, Shin-ichi Ito, Miwa Hikichi, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Takeshi Fujita, Ken Sakaushi and Takahiro Kondo: Synthesis and Characterization of Ni and Cu Nanoparticles Supported on Hydrogen Boride Nanosheets, 38th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC), KFC Hall and Rooms, Tokyo (Japan) 2025.11.19, (poster)
12. Miwa Hikichi, Junpei Takeshita, Natsumi Noguchi, Shin-ichi Ito, Yukihiro Yasuda, Luong Thi Ta, Kurt Irvin M. Rojas, Iwao Matsuda, Satoshi Tominaka, Yoshitada Morikawa, Osamu Oki, Ikutaro Hamada, Masahiro Miyauchi, Takahiro Kondo: Controlling

- Photoinduced H₂ Release from Freestanding Borophane Sheets Under UV Irradiation by Tuning B-H Bonds, 38th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC), KFC Hall and Rooms, Tokyo (Japan) 2025.11.19. (poster)
13. Karin Oiwa, Rinpei Ueno, Jinyu Li, Linghui Li, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Susmita Roy, Ken Sakaushi, Masashi Miyakawa, Takashi Taniguchi, Takahiro Kondo: Effect of Catalyst Surface Hydrophilicity on Oxygen Evolution Reaction Activity, 11th Southeast Asia Collaborative Symposium on Energy Materials (SACSEM MALAYSIA 2025), Universiti Kebangsaan Malaysia (Malaysia), 2025.10.28. (poster) **(Best Poster Award 受賞)**
 14. Takanobu Uchida, Kosei Fukuda, Yukihiro Yasuda, Shin-ichi Ito, Miwa Hikichi, Natsumi Noguchi, Susmita Roy, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Takahiro Kondo: Interaction between hydrogen boride sheets and ammonia borane, WORLD HYDROGEN TECHNOLOGY CONVENTION (WHTC) 2025, Clayton Hotel Burlington Road, Dublin (Ireland), 2025.10.21. (poster)
 15. Jinyu Li, Osamu Oki, Fuka Yoshida, Yuya Oaki, Mei Yuan, Natsumi Noguchi, Miwa Hikichi, Ryuki Tsuji, Masashi Miyakawa, Takashi Taniguchi, Takahiro Kondo: Exfoliation of rhombohedral boron monosulfide via liquid-phase route toward 2D BS Nanosheets, 11th Southeast Asia Collaborative Symposium on Energy Materials (SACSEM MALAYSIA 2025), Universiti Kebangsaan Malaysia (Malaysia), 2025.10.28. (poster)
 16. Noor Alam, Takahiro Kondo: In-situ growth, urea-driven morphological evolution of NiCo₂O₄ and MoCo₂O₄ nanostructures on stainless steel mesh: A comparative study, 11th Southeast Asia Collaborative Symposium on Energy Materials (SACSEM MALAYSIA 2025), Universiti Kebangsaan Malaysia (Malaysia), 2025.10.28. (poster)
 17. Natsumi Noguchi, Kazuho Goto, Shin-ichi Ito, Takeshi Fujita, Yasunobu Ando, Yoko Saito, Hideo Hosono, Shin-ichi Orimo, Takahiro Kondo: Formation of highly dispersed Mg on hydrogen-deficient HB nanosheets via solid-state reaction, 11th Southeast Asia Collaborative Symposium on Energy Materials (SACSEM MALAYSIA 2025), Universiti Kebangsaan Malaysia (Malaysia), 2025.10.28. (poster)
 18. Mei Yuan, Natsumi Noguchi, Zihao Kang, Xiaoni Zhang, Iwao Matsuda, Shin-ichi Orimo, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Kouji Sakaki, Takahiro Kondo: The effect of oxide layer and ball milling atmosphere on the hydrogen desorption temperature of ball-milled TiH₂, 11th Southeast Asia Collaborative Symposium on Energy Materials (SACSEM MALAYSIA 2025), Universiti Kebangsaan Malaysia (Malaysia), 2025.10.28. (poster)
 19. Takahiro Kondo : New materials for contributing hydrogen generation, storage, and usage, 11th Southeast Asia Collaborative Symposium on Energy Materials (SACSEM MALAYSIA 2025), Universiti Kebangsaan Malaysia (Malaysia). 2025.10.28. **(Invited talk)**
 20. Jinyu Li, Osamu Oki, Mei Yuan, Natsumi Noguchi, Miwa Hikichi, Ryuki Tsuji, Masashi Miyakawa, Takashi Taniguchi, Takahiro Kondo: Exfoliation of rhombohedral boron monosulfide via liquid-phase route toward 2D BS Nanosheets, MANA International Symposium 2025, Auditorium, WPI-MANA Bldg., Namiki-site National Institute for Materials Science (NIMS), 2025.10.17. (poster)
 21. Andi Mauliana, Osamu Oki, Akira Yamaguchi, Miwa Hikichi, Takahiro Kondo, Masahiro Miyauchi: Stability and Dispersion of Hydrogen Boride Sheets in Solvents, The Fifteenth International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC15), Ookayama Campus, Institute of Science Tokyo, 2025.9.29. (oral)
 22. Takahiro Kondo: New materials for contributing hydrogen generation, storage, and usage, 2025 International Symposium on Micro-Nano Materials and Devices, Minhang Campus of East China Normal University (China), 2025.7.21. **(Invited talk)**
 23. Jinyu Li, Osamu Oki, Mei Yuan, Natsumi Noguchi, Miwa Hikichi, Ryuki Tsuji, Masashi Miyakawa, Takashi Taniguchi, Takahiro Kondo: Liquid phase exfoliation of rhombohedral boron monosulfide (r-BS) to two-dimensional BS nanosheets, 2025 International Symposium on Micro-Nano Materials and Devices, Minhang Campus of East China Normal University (China), 2025.7.21. (oral)

24. Takahiro Kondo : Creating new catalyst materials using boron monosulfide nanosheets, Seminar on Development of Functional Ceramics, NIMS Namiki Site WPI building (Japan), 2025.6.5. (Invited talk)

国内会議

1. 引地 美亜, 竹下 順平, Junyan Han, 伊藤 伸一, 大木 理, 辻 流輝, 長谷川 明, Samuel Jeong, 伊藤 良一, 松田 巖, 劔 隼人, 宮内 雅浩, 近藤 剛弘: 微量ピラジンを導入したホウ化水素ナノシートの耐熱性および耐光性の向上, 日本化学会 第 106 春季年会 (2026), 東京理科大学 野田キャンパス, 2026.3.19. (poster)
2. 井村 聖樹, 張 葉平, 山口 晃, 足田 育之, 近藤 剛弘, 宮内 雅浩: ルイス塩基によるホウ素系ナノシートからの水素生成, 日本化学会 第 106 春季年会 (2026), 東京理科大学 野田キャンパス, 2026.3.19. (poster)
3. 寺島 陸駆, 伊藤 伸一, 野口 夏未, 竹下 幸佑, 下里 昇平, 川瀬 心優, 大木 理, 近藤 剛弘: 亜鉛ナノ粒子を担持したホウ化水素ナノシートの合成と評価, 日本化学会 第 106 春季年会 (2026), 東京理科大学 野田キャンパス, 2026.3.19. (poster)
4. 栗林 高樹, 吉村 篤軌, 竹内 宏充, 梅谷 有亮, 斎藤 広明, 大木 理, 近藤 剛弘: 金属導入によるホウ化水素(HB)シートの高比表面積化検討, 日本化学会 第 106 春季年会 (2026), 東京理科大学 野田キャンパス, 2026.3.17. (oral)
5. 森 寛太, 上野 凜平, Jinyu Li, 大岩 香凜, 大木 理, 谷口 尚, 宮川 仁, 近藤 剛弘: リンをドーブした菱面体硫化ホウ素の合成と評価, 日本化学会 第 106 春季年会 (2026), 東京理科大学 野田キャンパス, 2026.3.17 (oral)
6. 爲我井 和佳, 野口 夏未, Zihao Kang, 福田 弘清, 伊藤 伸一, 引地 美亜, 大木 理, 近藤 剛弘: 配位子残渣を含まないNi添加ホウ化水素ナノシートの合成と特性評価, 日本化学会 第 106 春季年会 (2026), 東京理科大学 野田キャンパス, 2026.3.17. (oral)
7. Kartik Sau, Ikutaro Hamada, Tamio Ikeshoji, Yiming Lu, Susmita Roy, Shohichi Furukawa, Linda Zhang, Hung Ba Tran, Takahiro Kondo, Hao Li, Shin-ichi Orimo: Hybrid Sampling Machine-Learning Potentials for Accurate Hydrogen Adsorption in MOF-303, Spring Meeting of The Japan Institute of Metals and Materials, Tokyo Metropolitan University, Tokyo (Japan). 2026.3.13. (oral).
8. N. Noguchi, K. Goto, S. Shimozato, Z. Kang, M. Yuan, M. Hikichi, S. Ito, O. Oki, M. Miyakawa, T. Fujita, Y. Saito, Y. Ando, H. Hosono, S. Orimo, T. Kondo: Formation of highly dispersed Mg on hydrogen deficient HB nanosheets, 第 18 回日本ホウ素・ホウ化物研究会 (JSBB2025), 東北大学 片平さくらホール (片平キャンパス), 2026.2.21. (oral)
9. 寺島 陸駆, 竹下 幸佑, 下里 昇平, 野口 夏未, 川瀬 心優, 伊藤 伸一, 大木 理, 近藤 剛弘: 還元剤を用いて亜鉛ナノ粒子を担持したホウ化水素ナノシートの合成, 第 18 回日本ホウ素・ホウ化物研究会 (JSBB2025), 東北大学 片平さくらホール (片平キャンパス), 2026.2.21. (poster)
10. 下里 昇平, 竹下 幸佑, 野口 夏未, 引地 美亜, 伊藤 伸一, 大木 理, 山口 寛月, 松田 巖, 折茂 慎一, 近藤 剛弘: ナトリウム添加ホウ化水素の合成と室温での水素吸着特性評価, 第 18 回日本ホウ素・ホウ化物研究会 (JSBB2025), 東北大学 片平さくらホール (片平キャンパス), 2026.2.21. (poster)
11. 山口 寛月, 浜根 大輔, Xiaoni Zhang, 堀尾 眞史, 松田 巖, 立石 幾真, 中嶋 武, 安藤 康伸, 近藤 剛弘: ツイスト二層ボロファンにおける一次元モアレ構造の観察と考察, 第 18 回日本ホウ素・ホウ化物研究会 (JSBB2025), 東北大学 片平さくらホール (片平キャンパス), 2026.2.21. (poster)
12. Yifu Liu, Masafumi Horio, Yu Murano, Heming Yin, Xiaoni Zhang, Kazuki Yamaguchi, Iwao Matsuda, Junyan Han, Takahiro Kondo: Study of Carbon Dioxide (CO₂) Conversions on Hydrogen Boride (HB) Sheets, 第 18 回日本ホウ素・ホウ化物研究会 (JSBB2025), 東北大学 片平さくらホール (片平キャンパス), 2026.2.21. (oral)
13. 近藤 剛弘: 物質科学と材料科学の鍵を握る表面科学, 東京大学物性研究所短期研究会 現代表面科学の到達点とフロンティアを超えて, 東京大学物性研究所 (千葉). 2026.2.17. (Invited talk)
14. 劉 毅夫, 堀尾 眞史, 村野 由羽, Yin HeMing, Zhang Xiaoni, 山口 寛月, 近藤 剛弘, 松田 巖: Carbon Dioxide Conversion to Ethane on Hydrogen Boride Sheets Studied by Ambient-Pressure X-ray Photoelectron, 第 39 回日本放射光学会年会・放射

- 光科学合同シンポジウム, 東北大学百周年記念会館 川内萩ホール, 2026.1.9. (oral)
15. 長谷川 礼佳, Arpita Varadwaj, Alexandre Lira Foggiatto, 新部正人, 山崎貴大, 堀尾眞史, 安藤康伸, 近藤 剛弘, 松田巖, 小嗣真人: 多様体学習による窒化ホウ素の XAS スペクトルの自動解析, 第 39 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 東北大学百周年記念会館 川内萩ホール, 2026.1.9. (oral)
 16. 山口寛月、Heming Yin、新部正人、Jingmin Tang、宮本将成、辻川夕貴、櫻井遥大、村野由羽、小澤健一、堀尾眞史、山浦淳一、近藤 剛弘、松田巖: 軟 X 線吸収分光及び軟 X 線光電子分光によるホウ化水素シートニッケル界面における結合状態の評価, 第 39 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 東北大学百周年記念会館 川内萩ホール, 2026.1.9. (oral)
 17. 新部正人, 廣森慧太, 堀尾眞史, 宮本将成, 中嶋武, 安藤康伸, 小嗣真人, 吹留博一, 近藤 剛弘, 松田巖: 未踏物質探索のための顕微 X 線吸収分光装置の開発, 第 39 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 東北大学百周年記念会館 川内萩ホール, 2026.1.9. (Poster)
 18. 中山 佳汰, 大木 理, Roy Susmita, 伊藤 菜緒子, 辻流輝, 野口 夏未, 古川 翔一, 折茂 慎一, 近藤 剛弘: 有機多孔質材料の室温水素吸蔵特性の評価, 表面界面スペクトロスコーピー2025, 湘南国際村センター, 2025.12.5. (poster)
 19. 下里昇平, 引地美亜, 伊藤伸一, 大木 理, 辻流輝, 野口夏未, 安田幸広, 竹下幸佑, 山口寛月, 松田巖, 折茂慎一, 近藤 剛弘: 滴定中和反応を用いたナトリウム添加ホウ化水素ナノシートの合成, 表面界面スペクトロスコーピー2025, 湘南国際村センター, 2025.12.5. (oral)
 20. 中山 佳汰, 大木 理, Roy Susmita, 伊藤 菜緒子, 辻流輝, 野口 夏未, 古川 翔一, 折茂 慎一, 近藤 剛弘: 有機多孔質材料の室温水素吸蔵特性の評価, 高分子学会関東支部 茨城地区「若手の会」茨城地区高分子学会, 教職員支援機構(つくば), 2025.12.1. (Rising Star 発表賞受賞) (oral)
 21. Kenji Hayashida, Bang Lu, Ravi Singh, Yasuo Yoshida, Takahiro Kondo, Satoru Takakusagi, Kotaro Takeyasu: Carbon defect sites with unpaired electrons as the origin of activity in metal-free ORR catalysts, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.22. (oral)
 22. Tetta Takeuchi, Ryusei Kojima, Ayumu Sakurai, Bang Lu, Tadahiro Fujitani, Takahiro Kondo, Junji Nakamura, Satoru Takakusagi, Kotaro Takeyasu: Steady-State Analysis of CO₂ Hydrogenation over CuZn-Based Single-Crystal and Powder Model Catalysts, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.22. (oral)
 23. Ayumu Sakurai, Tetta Takeuchi, Junji Nakamura, Takahiro Kondo, Kotaro Takeyasu: Adsorption behavior of formaldehyde on Zn/Cu(111) model catalyst, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.22. (oral)
 24. Natsumi Noguchi, Kazuho Goto, Shin-ichi Ito, Takeshi Fujita, Yasunobu Ando, Yoko Saito, Hideo Hosono, Shin-ichi Orimo, Takahiro Kondo: Formation of highly dispersed Mg on hydrogen deficient HB nanosheets, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.22. (oral)
 25. Jinyu Li, Osamu Oki, Mei Yuan, Natsumi Noguchi, Miwa Hikichi, Ryuki Tsuji, Masashi Miyakawa, Takashi Taniguchi, Takahiro Kondo: Liquid phase exfoliation of rhombohedral boron monosulfide (r-BS) to two-dimensional BS nanosheets, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.22. (oral)
 26. Xiaoni Zhang, Yuki Tsujikawa, Masashige Miyamoto, Mei Yuan, Kazuki Yamaguchi, Masafumi Horio, Kenichi Ozawa, Kunio Yubuta, Takahiro Kondo, Iwao Matsuda: Synthesis of novel free-standing atomic layers and research into line-node semimetals, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.22. (Invited talk)
 27. Yuki Tsujikawa, Xiaoni Zhang, Masafumi Horio, Fumio Komori, Takeru Nakashima, Yasunobu Ando, Takahiro Kondo, Iwao Matsuda: Formation and

- electronic structure of boron–metal composite atomic chains on a 2D surface, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.22. (Invited talk)
28. Kazuki Yamaguchi, Ikuma Tateishi, Daisuke Nishino-Hamane, Takeru Nakashima, Yasunobu Ando³, Xiaoni Zhang, Masafumi Horio, Takahiro Kondo, Iwao Matsuda: Emergence of one-dimensional moiré superlattice in twisted bilayer borophane, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.21. (oral) (講演奨励賞 スチューデント部門 受賞)
 29. Rimpei Ueno, Masashi Miyakawa, Takashi Taniguchi, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Masahiro Miyauchi, Takahiro Kondo: Synthesis and Characterization of Heteroatom-Doped Rhombohedral Boron monosulfide (r- BS), Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.21. (poster)
 30. Keita Nakayama, Osamu Oki, Susmita Roy, Naoko Ito, Ryuki Tsuji, Natsumi Noguchi, Shohichi Furukawa, Shin-ichi Orimo, Takahiro Kondo: Evaluation of room temperature hydrogen storage properties of organic porous materials, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.21. (poster)
 31. Miwa Hikichi, Junpei Takeshita, Natsumi Noguchi, Shin-ichi Ito, Yukihiro Yasuda, Luong Thi Ta, Kurt Irvin M. Rojas, Iwao Matsuda, Satoshi Tominaka, Yoshitada Morikawa, Osamu Oki, Ikutaro Hamada, Masahiro Miyauchi, Takahiro Kondo: Controlling UV induced hydrogen release from HB nanosheets by ion exchange mediated BHB/BH ratio modulation, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.21. (poster)
 32. Shohei Shimozato, Miwa Hikichi, Shin-ichi Ito, Natsumi Noguchi, Yukihiro Yasuda, Kosuke Takeshita, Kazuki Yamaguchi, Iwao Matsuda, Shin-ichi Orimo, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Takahiro Kondo: Synthesis of Sodium-doped Hydrogen Boride Nanosheets Using Titrimetric Neutralization Reaction, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.21. (poster)
 33. Myu Kawase, Natsumi Noguchi, Shin-ichi Ito, Miwa Hikichi, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Takeshi Fujita, Ken Sakaushi, Takahiro Kondo: Synthesis and dispersion control of Ni and Cu nanoparticles on Hydrogen Boride Nanosheets, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.20. (poster)
 34. Kosei Fukuda, Shin-ichi Ito, Miwa Hikichi, Iwao Matsuda, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Takahiro Kondo: Ammonia functionalization and surface transformation of hydrogen boride nanosheets, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.20. (poster)
 35. Kosuke Takeshita, Miwa Hikichi, Shin-ichi Ito, Natsumi Noguchi, Shohei Shimozato, Kazuki Yamaguchi, Iwao Matsuda, Shin-ichi Orimo, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Takahiro Kondo: Evaluation of Potassium-doped Hydrogen Boride Nanosheets Synthesized via a Novel Method, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.20. (oral) (講演奨励賞 スチューデント部門 受賞)
 36. Reika Hasegawa, Arpita Varadwaj, Alexandre Lira Foggiatto, Masahito Niibe, Takahiro Yamazaki, Masafumi Horio, Yasunobu Ando, Takahiro Kondo, Iwao Matsuda, Masato Kotsugi: Unsupervised classification of boron nitride structures via UMAP of X-ray absorption spectra, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.20. (poster) (講演奨励賞 スチューデント部門 受賞)
 37. Karin Oiwa, Rinpei Ueno, Jinyu Li, Linghui Li, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Susmita Roy, Ken Sakaushi, Masashi Miyakawa, Takashi Taniguchi, Takahiro Kondo: Effect of Catalyst Surface Hydrophilicity on

- Oxygen Evolution Reaction Activity, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.20. (oral)
38. Zihao Kang, Shin-ichi Ito, Mei Yuan, Kosei Fukuda, Natsumi Noguchi, Iwao Matsuda, Tadahiro Fujitani, Hajime Kawanami, Ikutaro Hamada, Ryuki Tsuji, Osamu Oki, Takahiro Kondo: High selectivity dehydration of formic acid on hydrogen boride, Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.20. (oral)
39. Mei Yuan, Takahiro Kondo: The effect of oxide layer and ball milling atmosphere on the performance of ball-milled TiH_2 , Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025 (JVSS 2025), Tsukuba International Congress Center, 2025.10.20. (Invited talk)
40. 林田健志・魯邦・RAVI, Singh・吉田靖雄・近藤 剛弘・高草木達・武安光太郎, メタルフリー燃料電池触媒における電子状態と活性点構造の相関解析, 第 136 回触媒討論会, 東北大学青葉山コモンズ, 2025.9.17. (oral)
41. 櫻井 歩, 竹内 哲大, 中村 潤児, 近藤 剛弘, 武安光太郎: Zn/Cu(111)モデル触媒におけるホルムアルデヒドの吸着特性, 第 136 回触媒討論会, 東北大学青葉山コモンズ, 2025.9.17. (oral)
42. 竹内哲大・小島隆聖・櫻井歩・魯邦・藤谷忠博・近藤 剛弘・中村潤児・高草木達・武安光太郎: CuZn系粉体モデル触媒を用いた CO_2 -メタノール転換反応の定常状態解析, 第 136 回触媒討論会, 東北大学青葉山コモンズ, 2025.9.17. (oral)

マテリアル分子設計部門

教員：

石塚智也（数理物質系・化学域・准教授）

大学院生：

李天忱（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・D2）

小幡勇淳（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・D1）

竹内将貴（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）

西本健太（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M1）

石塚智也

<研究成果>

小分子基質の酸化・還元反応に対する触媒機能を有する新規遷移金属錯体分子の創出と、ポルフィリン分子の光学特性・酸化還元特性の解明を目的に研究を進めている。本年度は、以下の3つの項目に関して、研究を進めた。

【 1 】 Dodecaphenylporphyrin 誘導体のソルバトクロミズム (*J. Porphyrins Phthalocyanines* **29**, 520-527 (2025))

ポルフィリンのソルバトクロミズムは、その中心金属の軸位への溶媒配位に基づくものと、その励起状態の電荷移動性に基づくものが報告されている。一方、サドル型に歪んだポルフィリンについては、中心金属の軸位への溶媒配

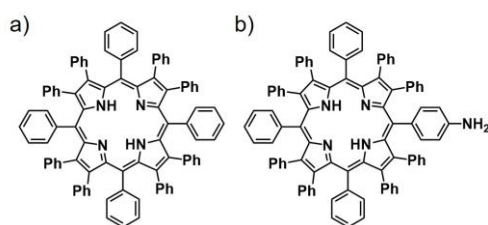


図 1. a) H₂DPP と b) H₂DPP-NH₂ の構造.

位に基づくもののみが報告されている。一方、本研究では、サドル型に歪んだドデカフェニルポルフィリン(H₂DPP; 図 1a)と、そのメソ位アリール基のパラ位にアミノ基を導入した誘導

体(H₂DPP-NH₂; 図 1b)について、複数の溶媒を用いてソルバトクロミズムを検討した。その結果、H₂DPP では、CH₂Cl₂ 中で 468 nm に観測された Soret 帯の吸収極大が、DMSO 中では 486 nm に長波長シフトし、H₂DPPNH₂ では、CH₂Cl₂ 中で 475 nm に観測された Soret 帯の吸収極大が、DMSO 中では 499 nm に長波長シフトした。この結果から、H₂DPP よりも H₂DPP-NH₂ の方が、溶媒の極性に依存して大きな長波長シフトを示すことが分かった。さらに、溶媒の極性に基づく各種パラメータに対するプロットや TD-DFT 計算を通じて、このソルバトクロミズムの起源を明らかにした。

【 2 】 四重縮環ポルフィリンの周辺部における窒素ドーピングと、34 π 芳香族分子を形成するための多段階のプロトン共役電子移動(*J. Am. Chem. Soc.* **148**, 14353-14369 (2026))

近年、新たな分子機能の開発を目的として、 π 共役系分子に窒素などのヘテロ原子を導入する研究が盛んに行われている。以前に我々は、狭い HOMO-LUMO ギャップと高い電子受容性を特徴とする四重縮環ポルフィリン(QFP)の合成を報告した。QFP は、狭い HOMO-LUMO ギャップと高い電子受容性を特徴とする。本研究で我々は、周辺部に4つの配位性イミン窒素を有する QFP 誘導体を合成した(**1**; 図 2)を合成し、**1** のイミン窒素の段階的なプロトン化と酸化還元挙動を調査した。その結果、酸性条件下で還元電位が段階的に正方向へシフトすることを観測した。さらに、**1** の還元種のさらなるプロトン化が、まだプロトン化されていない

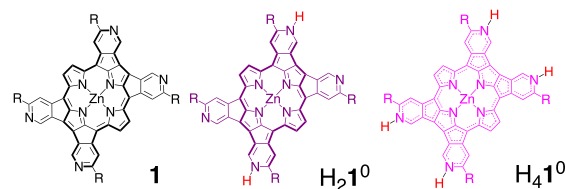


図 2. QFP 誘導体 **1**, H₂**1**⁰, H₄**1**⁰ の構造.

イミン窒素の塩基性の増大を誘起することを解明した。還元種におけるイミン窒素部位における、さらなるプロトン化を含む段階的な

PCET 過程を通じて、**1** の $4\text{H}^+/4\text{e}^-$ 還元を達成した。また NICS および ACID 計算を用いて、**1** の $2\text{H}^+/2\text{e}^-$ および $4\text{H}^+/4\text{e}^-$ 還元種($\text{H}_2\text{1}^0$ および $\text{H}_4\text{1}^0$)の芳香族性を評価した。 $\text{H}_2\text{1}^0$ は、分子全体に広がるエネルギー的に不安定な 32π の反芳香族サーキットを形成するのではなく、孤立した 6π または 10π の芳香族サーキットの形成によって安定化されていた。対照的に、 $\text{H}_4\text{1}^0$ については、単結合と二重結合が交互に並ぶ従来の芳香族環を描くことはできないが、 30π の **1** を 4e^- 還元すると、 $\text{H}_4\text{1}^0$ の 34π 芳香族系が出現する。この発見は、多段階 PCET の実験的実証としては初めてのものである。

<論文>

1. T. Ishizuka, Y. Obata, R. Nishida, S. Yoshida, S. Sato, T. Kojima, “Nitrogen Doping at the Periphery of a Quadruply-Fused Porphyrin and Its Multi-Step Proton-Coupled Electron Transfer to Form a 34π Aromatic Molecule”, *J. Am. Chem. Soc.* **148**, 14353-14369 (2026).
2. T. Kojima, T. Takaoka, Y. Chiba, H. Kotani, H. Fujisaki, T. Ishizuka, S. Yanagisawa, M. Kubo, Y. Shiota, K. Yoshizawa, “Mechanistic Insight into Water Oxidation Catalysis by a Mononuclear Ruthenium Complex”, *Inorg. Chem.* **64**, 8620-8629 (2025).
3. T. Ishizuka, H. Tanaka, T. Kojima, “Solvatochromism of Dodecaphenylporphyrin and Its Derivatives”, *J. Porphyrins Phthalocyanines* **29**, 520-527 (2025).

<著書>

1. Tomoya Ishizuka and Takahiko Kojima, “Catalytic Functionalization of Hydrocarbons Including Methane Using Transition Metal Complexes as Molecular Catalysts”, in *Progress in Inorganic Chemistry*, D. Goldberg, Ed; John Wiley & Sons, Inc., **2026**, in press.
2. Hiroto Fujisaki, Tomoya Ishizuka, Takahiko Kojima, “Iron Complexes as Bio-inspired Catalysts for Efficient and Selective Oxidation of Organic Compounds” in *Iron in Biology: Molecular Structures, Cellular Processes and Living Systems*, Y. Shiro, H.

Sawai, T. Tosha, Eds.; Royal Society of Chemistry, **2025**, 197-215.

<学会発表>

国内会議

1. 田中陽、石塚智也、小谷弘明、酒井隼人、羽曾部卓、小島隆彦、「サドル型に歪んだ Sn(IV)-ポルフィリンとドナー分子により選択的に形成された 1:1 錯体における光誘起電子移動」、日本化学会第 106 春季年会、船橋、2026.3.17-20（一般口頭発表）
2. Yuma Obata, Risa Nishida, Tomoya Ishizuka, Satoshi Yoshida, Sota Sato, Takahiko Kojima, “Impact of Multi-Step Proton-Coupled Electron-Transfer Reduction on the Aromaticity in Extended π -Conjugated Systems with Nitrogen Doping at the Periphery,” 日本化学会第 106 春季年会、船橋、2026.3.17-20（一般口頭発表）
3. 西本健太、石塚 智也、小島隆彦、「自己光増感型 CO_2 還元触媒として機能する Ru(II)二核錯体の置換基効果」、日本化学会第 106 春季年会、船橋、2026.3.17-20（一般口頭発表）
4. 竹内 将貴、石塚 智也、魏 蓮玉、田中 翔悟、小島 隆彦、「疎水性キャビティをもつ Compound I モデル錯体を用いた基質酸化反応の速度論的研究」、日本化学会第 106 春季年会、船橋、2026.3.17-20（一般口頭発表）
5. Hiro Tanaka; Tomoya Ishizuka; Hiroaki Kotani; Yasuko Osakada, Mamoru Fujitsuka, Takahiko Kojima, “Selective formation and photodynamics of a triad made of a saddle-distorted SnIV porphyrin with axially coordinated ferrocene derivative and an electron acceptor,” 錯体化学会第 75 回討論会、長崎、2025.9.15-17（一般口頭発表）
6. 竹内 将貴、石塚 智也、魏 蓮玉、田中 翔悟、小島 隆彦、「疎水性キャビティをもつ Compound I モデル錯体を用いた基質酸化反応」、錯体化学会第 75 回討論会、長崎、2025.9.15-17（一般口頭発表）
7. 小幡勇淳、西田梨紗、佐藤宗太、吉田知史、石塚 智也、小島隆彦、「外周部に配位性イミン窒素有する四重縮環ポルフィリン-亜鉛錯体の合成と多段

「段階プロトン共役電子移動過程の解明」、第 35 回基礎有機化学討論会、名古屋、2025.9.9-11（一般口頭発表）

(5) サブナノ領域評価部門

教員：

西堀英治（数理工物質系・物理学域・教授）

Xu Zhihao（数理工物質系・物理学域・助教）

大学院生：

太田和希（数理工物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

小川瑤介（数理工物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

田中萌鈴（数理工物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

穂刈絵理（数理工物質科学研究群・物理学学位プログラム・M1）

西堀英治

<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、X 線自由電子レーザー-SACLA でも利用課題を実施し、放射光 X 線回折で国内外の先導する研究を進めている。本年度は国内共同研究を中心に複数の成果が得られた。それらのうち、いくつかについて下記に記述する。

【 1 】応力発光半導体でスピンドープ強磁性を発見

固体中の電子の電荷と、電子が持つ小さな磁石のような性質「スピン」の両方を工学的に利用、応用する「スピントロニクス」と呼ばれる分野において「希薄磁性半導体」が注目されている。一般的に、強磁性などをもたらす交換相互作用は隣接原子間距離程度の近接作用に限定されている（金属では伝導電子を媒介した別機構の磁性体の例外が存在する）。一方、相転移のユニバーサル理論であるパーコレーション理論は隣とのパス（磁気転移の場合は隣の磁性原子との結合に相当）が高密度に存在しなければ相転移しないと予測しており、量子スピン系の磁気転移でもこのパーコレーション理論

が厳密に成立することを研究グループは最近実証している。

「交換相互作用は近距離に限定される」「隣接する磁性原子同士の結合が高密度に存在しないと磁気転移しない」という磁性理論の常識が、応力発光半導体でのスピンドープ強磁性を実現した本研究により破れた。佐賀大学、東北大学、九州大学、高エネルギー加速器研究機構の共同研究により、代表的な応力発光物質として知られている $\text{Eu:SrAl}_2\text{O}_4$ において、希薄磁性原子の添加によるスピンドープ強磁性の発現を見出した。通常強磁性を示さない応力発光半導体に新機能を付与したことも応用上興味が持たれる。本成果は、基礎物性物理学への貢献とともに、未踏の力・光・スピントロニクスに道を拓き、エネルギー関連材料の機能革新に大きく寄与する。

【 2 】量子結晶学による L-alanine とタウリンの温度変化の研究

量子結晶学は実験から量子力学的情報を取り出すことを可能にする電子系と格子系の関係を調べることで、原子間の相互作用と熱振動の関係性を明らかにすることが期待されている。

本研究では、SPring-8 で PILATUS3 X CdTe 検出器を使用して、L-アラニン 40、85、100、150、200 K とタウリン 85、150、200 K の単結晶 X 線回折データを測定した。L-アラニン 40 K データは $\sin\theta/\lambda_{\max}=1.6667 \text{ \AA}^{-1}$ で 21 カウントから 670433 カウント、タウリンは $\sin\theta/\lambda_{\max}=1.3736 \text{ \AA}^{-1}$ で 47 から 288398 カウントの高精度・高分解能データの測定に成功した。L-アラニン 200 K は $\sin\theta/\lambda_{\max}=1.2821 \text{ \AA}^{-1}$ で 17 カウントから 683619 カウント、タウリン 200 K は $\sin\theta/\lambda_{\max}=1.1110 \text{ \AA}^{-1}$ で 34 から 235713 カウントであり、多温度の高精度・高分解能データを測定した。

全てのデータに対して量子結晶学的解析 MM、HAR、XCW、NoMoRe を行うことで、多温度の実験データから電子相関による電子構造のわずかな変化を取り出すことに成功した。（図 1）40 K から 200 K の多温度データの

量子結晶学的解析が行えた。多温度データの量子結晶学的解析から温度の分子間相互作用への影響は分子内と比べて結合長で 1 桁大きくなることが分かった。非調和熱振動は 100 K 以上の温度で有意に観測可能となることが分かった。また、量子結晶学的解析により、わずかな双晶の影響でタウリンの硫黄原子周りに差電子密度が現れることが分かった。

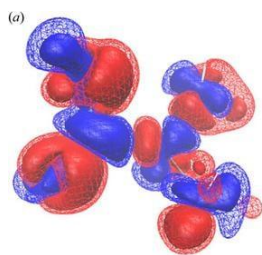


図 1 L-alanine の電子相関による電子密度の変形

【 3 】銀微粒子構造が引き出す常温高性能のフレキシブル熱電フィルム

β - Ag_2Se （セレン化銀）は、その優れた機械的特性と生体適合性から、ウェアラブル型熱電発電素子に非常に有望な材料とされている。しかし、これまで Ag/Se の組成比の調整や第二相の導入といった従来の手法では、電力因子の最適化には限界があった。

本研究では、スパークプラズマ焼結中に金属銀から銀セレン化物へと銀イオンを移動・析出させることで、フレキシブルな $\text{Ag}/\beta\text{-Ag}_2\text{Se}$ 複合膜中に大きくかつ結晶的連続性を持つ Ag リッチナノ析出物を形成する新たな方法を提示した。

その結果、303K（約 30°C）において $4000 \mu\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-2}$ を超える前例のない高い電力因子を達成した。

さらに、最適化された 5 枚のフィルムを用いた熱電モジュールは、26.0 K の温度差で $10.89 \mu\text{Wcm}^{-2}\text{K}^{-2}$ の規格化出力電力密度を示した。

本研究は、 $\beta\text{-Ag}_2\text{Se}$ ベースの熱電材料における電気性能向上の鍵として Ag リッチナノ析出物の形成が極めて有効であることを明確に示した。

【 4 】放射光粉末法による熱電変換材料の精密な原子変位パラメータ決定

本研究では、SPring-8 BL13XU の高計数統計粉末回折データと、新たに導出した多原子系一次熱拡散散乱（TDS）モデルを用いて、熱電材料の精密結晶構造解析を行った。Al の温度依存粉末データを用いて、TDS がバックグラウンド散乱を定量的に説明でき、ADP の温度依存性と整合することを実証した。

その手法を Ag_8SnSe_6 の低温相（複雑な 11 独立原子サイト）に適用し、5 つの Ag サイトのうち $\text{Ag}1, \text{Ag}3, \text{Ag}5$ が非常に大きく、かつ強く異方的な ADP を示すことを明らかにした。これらのサイトでは Se_3 三角面の面積が小さく、温度上昇とともに負の熱膨張的な Ag-Se 距離変化を示し、「retreat from stress」機構に基づく非ケージ型ラトリングが成立することを示した。 $\text{Ag}2$ と $\text{Ag}4$ はほぼ等方的でラトリングは観測されなかった。

この方法により複雑材料でも精密 ADP が得られ、粉末回折における背景散乱解析の重要性が強調された。

【 5 】国際連携等

デンマーク・オーフス大学融合材料研究センター（Aarhus University Centre for Integrated Materials Research: iMAT）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 として招致を 2024 年度 7 月から再開した。2025 年度、Iversen 教授は筑波大を 3 回訪れた。3 月には学生 4 名とスタッフでオーフス大学を訪問し、ミニワークショップを行い活発な交流を行った。また、2025 年 7 月には X 線自由電子レーザー施設 SACLA にて国際共同実験を行った。

<論文>

1. I. Inoue, T. Osaka, V. Tkachenko, T. Hara, K. J. Kapcia, Y. Inubushi, S. Kawaguchi, J. Yamada, E. Nishibori, M. Yabashi, B. Ziaja, High-intensity X-ray pump-monochromatic X-ray probe technique across time zero, Optica, 12, (2025) 2334-2536,

<https://doi.org/10.1364/OPTICA.555433>

2. Y. Yue, Y. Norikane, E. Nishibori, Biomimetic Adhesion/Detachment Using Layered Polymers with Light-Induced Rapid Shape Changes, *Angew. Chem. Int. Ed.* **64**, (2025), e202503748, doi.org/10.1002/anie.202503748
3. M. Hayashi, T. Nishioka, H. Kasai and E. Nishibori, Accurate temperature dependence of structure factors of L-alanine and taurine for quantum crystallography, *IUCrJ.* **12**, (2025), 384-392, <https://doi.org/10.1107/S2052252525002647>
4. A. Sakatani, T. Uchiyama, R. Omori, K. Otonari, G. Yang, E. Nishibori, X-G. Zheng, C-N. Xu, Elastic deformation induced near-infrared mechanoluminescence of ZnO co-doped with Li and Nd, *JCS-Japan*, **133**, **7**, (2025), 349-352, <https://doi.org/10.2109/jcersj2.25016>
5. T. Uchiyama, M. Okamoto, H. Su, E. Nishibori, M. Nishibori, X-G. Zheng, C-N. Xu, Effect of local structural symmetry on mechanoluminescent materials, *JCS-Japan*, **133**, **7**, (2025), 358-362, <https://doi.org/10.2109/jcersj2.25013>
6. J. Gao, J. Li, L. Miao, L. Jia, P. Qiu, T. Yin, S. Zhu, X. Yang, J-C. G, J-L. Chen, X. Wang, E. Nishibori, T. Sato, X. Shi, Coherent Ag-rich nanoprecipitates/ β -Ag₂Se flexible film with unprecedented thermoelectric performance by liquid-like sintering, *Nature Communications*, **16**, (2025), 6010, <https://doi.org/10.1038/s41467-025-61079-4>
7. S. Takahashi, E. Nishibori, Accurate determination of atomic displacement parameters for thermoelectric materials from synchrotron powder diffraction data with sophisticated background treatment, *CrystEngComm*, **27**, (2025), 4922-2931, <https://doi.org/10.1039/D5CE00297D>
8. K. Tanaka, E. Nishibori, Charge Density Study of Simple Inorganic Solids Using Synchrotron Single Crystal X-ray Diffraction, *Cryst. Growth Des.*, **25**, **20**, (2025), 8374-8381,

<https://doi.org/10.1021/acs.cgd.5c00528>

9. X.-G. Zheng, I. Yamauchi, T. Galica, E. Nishibori, T. Kawae, J. G. Nakamura, A. Koda, C.-N. Xu, Superlong-Range Magnetic Coupling and Ferromagnetic Spin Freezing in Mechanoluminescent Semiconductor Eu:SrAl₂O₄, *Advanced Science*, **12**, **38**, (2025), e09474, <https://doi.org/10.1002/advs.202509474>
10. Y-C. Lin, R. Matsumoto, M. G.-Asl, P. S.-Fernandez, E. Nishibori, H. Ago, A. V. Krashennnikov, K. Suenaga, Na Intercalation in Bilayer Graphene: Formation of a Close-Packed Trilayer, *ACS Nano*, **19**, (2025), 40612-40619, <https://doi.org/10.1021/acsnano.5c16881>

<学会発表>

国際会議

1. E. Nishibori, X-ray Diffraction and Scattering Studies Using Advanced X-ray Sources, 1st ECCS International Symposium, Sendai Kokusai Hotel, Japan, January16, 2026 (**Invited**)
2. Y. Ogawa, H. Kasai, T. Koganezawa, H. Ago, E. Nishibori, Layer number dependence of systematic peak shift for graphene by X-ray study at SPring-8, AsCA 2025, Taipei International Convention Center (TICC), Taiwan, December1-6, 2025 (Poster)
3. K. Ota, Y. Ogawa, K. Tanaka, E. Hokari, L. J. Stockler, J. Kang, I. Inoue, B. Brummerstedt-Iversen, E. Nishibori, Improvements of serial femto-second crystallography of simple inorganics Al₂O₃ and BaTiO₃, AsCA 2025, Taipei International Convention Center (TICC), Taiwan, December1-6, 2025
4. K. Tanaka, E. Nishibori, Charge density study of simple tetrahedral coordinate covalent inorganic solids using synchrotron single crystal X-ray diffraction, AsCA 2025, Taipei International Convention Center (TICC), Taiwan, December1-6, 2025
5. E. Hokari, K. Tanaka, S. Kozai, K. Suekuni, E. Nishibori, Multi-temperature synchrotron radiation single-crystal X-ray diffraction of Cu-S based thermoelectrics, Cu₇V_{0.5}Ti_{0.5}Sn₈, AsCA 2025,

Taipei International Convention Center (TICC), Taiwan,
December 1-6, 2025

6. E. Nishibori, Structure of low temperature phase of Ag₈SnSe₆, 2025 mini-workshop on Synchrotron and Electron Scattering for Material Science, Shanghai Institute of Ceramics (SICCAS), April 8, 2025
(Invited)
7. E. Nishibori, H. Kasai, Y. Ogawa, R. Matsumoto, H. Ago, Development of in situ synchrotron X-ray diffraction monitoring of vapor intercalation into multilayer graphene, RPGR2025, Toyama International Conference Center, Toyama, Japan, November 3-7, 2025
8. Y. Ogawa, H. Kasai, T. Koganezawa, H. Ago, E. Nishibori, Layer number dependence of systematic peak shift for graphene by synchrotron X-ray scattering, RPGR2025, Toyama International Conference Center, Toyama, Japan, November 3-7, 2025
9. Z. Xu, H. Kasai, E. Nishibori, Solvent-free Synthesis of δ -CsPbI₃ via Ball Milling and Its Thermal Phase Transition to α -CsPbI₃, PVSEC 2025, Chulalongkorn University, Bangkok, Thailand, November 9 - 14, 2025

国内会議

1. 西堀英治 2.5次元構造の放射光構造計測 2.5次元物質科学第9回領域会議 東京科学大学 大岡山キャンパス 2025年6月12日～13日
2. 小川瑤介、笠井秀隆、西堀英治 放射光マイクロX線回折による2.5次元物質のマルチスケール構造解析 2.5次元物質科学第9回領域会議 東京科学大学 大岡山キャンパス 2025年6月12日～13日 (Poster)

サブナノ領域評価部門

教員：

上殿明良（数理物質系・物理工学域・教授）

上殿明良

<研究成果>

電子の反粒子である陽電子を用いて材料中の原子レベルの空孔やサブ nm オーダーの空隙を検出することができる。陽電子は 1970 年代から材料評価法としての有効性が検討され始めた。当初は、金属のフェルミ面の研究や空孔型欠陥評価方法として着目を浴び多くの成果を上げたが、今日では半導体、絶縁体、高分子等多くの材料に適用され、欠陥や空隙の検出、評価に使用されている。陽電子を材料評価に使用した場合の特徴としては、i) 検出できる欠陥は単一原子空孔からサブ nm サイズの空隙まで、ii) 高感度（原子空孔の検出下限： 10^{15} cm^{-3} オーダー）かつ非破壊、iii) 試料の温度、抵抗率等の制限が無い、iv) 試料表面から数 μm までの欠陥深さ分布検出が可能、等が挙げられる。本報告ではプラズマ励起化学気相成長（Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition: PECVD）により成膜した SiO_2 の評価に陽電子を適用した例を紹介する。

CVD ないしは PECVD により成膜した SiO_2 は低い温度で成膜しても高品質であることから前工程、後工程を問わず半導体プロセスで使用されている。一方、CVD- SiO_2 の密度は、熱酸化膜に比較して低く、膜中にはガスや水が含まれている。これらの不純物の存在状態や焼鈍による脱離過程を掌握することは重要である。本研究では、オルトケイ酸テトラエチル（TEOS）を用いて PECVD により成膜した SiO_2 膜の焼鈍依存性を評価した¹⁾。試料構造は $\text{SiO}_2(90 \text{ nm})/\text{Si}$ で成膜温度は 150°C 、また成膜後の焼鈍は 1000°C まで N_2 雰囲気（5 分）で行った。ラザフォード後方散乱分光法で試料中の Si、O、H の密度を評価したところ、それぞれ濃度の比率は $[\text{Si}]=29.0\%$ 、 $[\text{O}]=63.0\%$ 、 $[\text{H}]=8.1\%$ であった。H が H_2O として存在すると仮定し、この H と結合している分を $[\text{O}]$ から減じると、 $59.5/29.0=2.0$ となり、成膜後の SiO_2

には多くの水が存在することがわかる。

一般に、試料がサブ nm サイズの空隙を含む場合、陽電子は空隙中で電子と水素様の原子であるポジトロニウム（Ps）を形成して消滅する場合がある。Ps のスピン状態は 1 重項（ $p\text{-Ps}$ ）と 3 重項（ $o\text{-Ps}$ ）で、それぞれ 2 本と 3 本の γ 線を放出して消滅する。Ps の陽電子と電子の運動量の和はほぼ 0 なので、 $p\text{-Ps}$ の形成により消滅 γ 線の尖鋭度を示すパラメーターである S パラメーターの値は大きくなる。真空中では、 $p\text{-Ps}$ の寿命は約 0.125 ns 、 $o\text{-Ps}$ は約 142 ns である。空隙中に Ps が捕獲された場合、Ps は空隙壁面と衝突を繰り返すが、この際、陽電子と空隙壁面の電子との間に重なりが生じ消滅が起こる（ピックオフ消滅）。空隙サイズが小さく

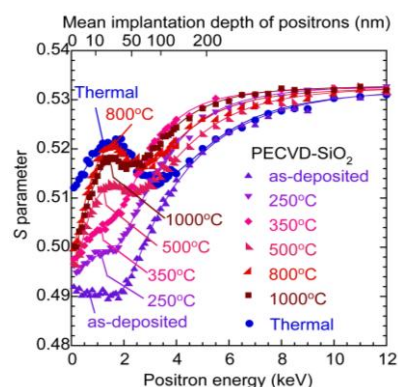


図 1. PECVD により作成した $\text{SiO}_2(90 \text{ nm})/\text{Si}$ の S パラメーターの陽電子打ち込みエネルギー依存性。熱酸化で形成した $\text{SiO}_2(100 \text{ nm})/\text{Si}$ の結果も示している。焼鈍により脱ガスが生じ、空隙が形成されることにより、 S 値が上昇している。

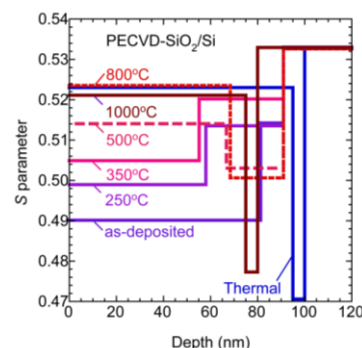


図 2. S - E カーブを解析して得た S 値の深さ分布。図 1 の曲線はフィッティングの結果である。500°C から観測される SiO_2/Si 界面近傍の S 値の低下は SiO_2 のマトリックス構造の変化に伴い Ps 形成率の低下に対応する。

なるほど、衝突が発生する確率は高くなり Ps の寿命は短くなる。この効果は *o*-Ps で顕著であり *o*-Ps の寿命とその相対強度から空隙サイズや空隙密度を推定することができる。

図 1 に PECVD により作成した SiO₂(90 nm)/Si の *S* パラメーターの陽電子打ち込みエネルギー依存性を示す。図 1 において PECVD の *S* 値は $E < 2$ keV である。焼鈍温度が上昇すると *S* 値が上昇するのは、Ps 形成率が上昇しているからである。すなわち、焼鈍温度上昇に伴い、Ps 形成に必要な空隙の密度が上昇している。

図 2 は、得られた *S*-*E* カーブを陽電子拡散方程式を用いた解析を行い、*S* 値の深さ分布を求めた結果である。500°C 焼鈍後から SiO₂/Si 界面の *S* 値が低下し始め、1000°C 焼鈍後に熱酸化により形成した SiO₂/Si 界面と似た状態になることがわかる。

SiO₂ 膜中での陽電子消滅に対応する寿命スペクトルは陽電子消滅様式が 3 種類であるとして解析、得られた結果を *S* 値と共に図 3 に示した。図中、寿命が短い順に τ_i ($i=1,2,3$) と表記、また対応する相対強度を I_i とした。ピックアップ消滅に対応する寿命と相対強度は、図 3 の τ_3 と I_3 に対応する。図 3(a) に示した PECVD-SiO₂ 膜の *S* 値が熱酸化膜より低いことは Ps 形成率が低いことを示す。Ps の多くが空隙で形成されるので、焼鈍前の PECVD-SiO₂ の空隙率は低いと判断できる。焼鈍温度上昇に伴い 900°C まで *S* は連続的に上昇、900°C で熱酸化膜の *S* 値とほぼ同じ値となるが、1000°C 焼鈍後は値が低下する。

図 3(b) に示した τ_3 から推定できる空隙の直径を同図の右縦軸に示した。焼鈍前では、PECVD-SiO₂ 膜の τ_3 は熱酸化膜と同程度であるが (1.4 ns)、 I_3 は熱酸化膜より小さいため[図 3(c)]、熱酸化膜に比較して空隙密度が低いことがわかる。焼鈍温度の上昇により τ_3 は増大、800°C では 2.2 ns に達する。熱酸化膜の空隙と比較すると、体積比で 2.6 倍程度であり、PECVD-SiO₂ では非常に大きな空隙が形成されることがわかる。ただし、1000°C 焼鈍後においても I_3 は熱酸化膜より低い。同試料を昇温脱離ガス分析法により評価したところ、H₂

H₂O, O₂ 等の脱離と空隙サイズや空隙率の温度依存性と密接な関係があることが分かった。これらのガスは、焼鈍前には空隙に捕獲されると考えられる。焼鈍により、空隙からこれらの不純物が脱離すると、陽電子が空隙に捕獲されるようになり Ps が形成される。一方、H は 1000°C 焼鈍時にも残留しており、Si-O の結合を切断することにより空隙サイズの増大の一因となっていると考えられる。

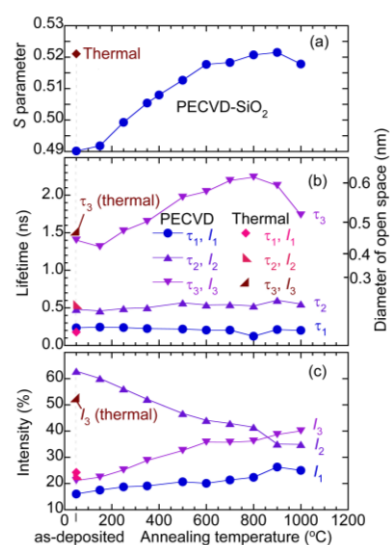


図 3. PECVD-SiO₂ 膜中の (a) *S* 値、(b) 陽電子寿命、(c) 相対強度の焼鈍温度依存性。 τ_3 が Ps のピックアップ消滅に対応する寿命で、この値から推定できる SiO₂ 膜中の空隙サイズを横軸右に示した。

文献

1. A. Uedono, R. Hasunuma, H. Kitagawa, Y. Yoshihara, F. Inoue, K. Mihara, S. Aoki, T. Hare, K. Mori, M. Murugesan, and T. Fukushima, "Defects in Plasma-Activated Amorphous SiO₂ Probed Using Positron Annihilation Spectroscopy," ACS Appl. Electron. Mater. 7, 10761 (2025).

<論文>

1. A. Uedono, R. Hasunuma, H. Kitagawa, Y. Yoshihara, F. Inoue, K. Mihara, S. Aoki, T. Hare, K. Mori, M. Murugesan, and T. Fukushima, “Defects in Plasma-Activated Amorphous SiO₂ Probed Using Positron Annihilation Spectroscopy,” *ACS Appl. Electron. Mater.* **7**, 10761–10767 (2025). [DOI: 10.1021/acsaelm.5c01992]
2. A. Uedono, H. Iguchi, M. Horita, J. Suda, K. Shima, S. F. Chichibu, and S. Ishibashi, “Vacancy-type defects in n-type GaN fabricated by low-dose ion implantation studied by a monoenergetic positron beam,” *Phys. Stat. Sol. B* **2025**, e202500409(1-9) (2025). [DOI: 10.1002/pssb.202500409]
3. A. Uedono, R. Tanaka, S. Takashima, K. Ueno, M. Edo, K. Shima, S. F. Chichibu, J. Uzuhashi, T. Ohkubo, S. Ishibashi, K. Sierakowski, and Bockowski, “Characterization of Vacancy-Type Defects in Mg-and N-Implanted GaN by Using a Monoenergetic Positron Beam,” *IEEE J. Electron Devices Soc.* **13**, 1252-1257 (2025). [DOI: 10.1109/JEDS.2025.3603203]
4. A. Uedono, K. Kawakami, T. Kuribara, R. Hasunuma, Y. Harashima, Y. Shigeta, Z. Ni, R. Yan, H. Nakamura, A. Notake, T. Moriya, K. Michishio, S. Ishibashi, “Vacancy-type defects in HfO₂ layers and their role in amorphous-to-crystalline transition studied by monoenergetic positron beams,” *IEEE Trans. Semicond. Manuf.* **38**, 463-468 (2025). [DOI: 10.1109/TSM.2025.3548450]
5. S. Fujii, S. Shimabukuro, and A. Uedono, “Mechanistic insights into microwave annealing for lattice defect recovery,” *IEEE J. Electron Devices Soc.* **13**, 1258-1266 (2025). [DOI: 10.1109/JEDS.2025.3603559]
6. K. Shima, T. Narita, A. Uedono, M. Bockowski, J. Suda, T. Kachi, and S. F. Chichibu, “Impacts of ultra-high-pressure annealing on undoped and ion-implanted GaN studied by photoluminescence measurements,” *J. Appl. Phys.* **137**, 235702(1-12) (2025). [DOI: 10.1063/5.0266700]
7. K. M. Senados, T. Aizawa, I. Ohkubo, T. Baba, A. Uedono, T. Sakurai, and T. Mori, “Defects modification in thermoelectric Mg₂Sn (Ge) epitaxial thin films through modulation of Mg flux rate in MBE,” *J. Phys. Energy* **7**, 03501(1-10) (2025). [DOI: 10.1088/2515-7655/adc489]
8. H. Kitagawa, R. Sato, S. Ebiko, A. Nagata, C. Ahn, Y. Kim, J. Kang, A. Uedono, and F. Inoue. “Material-Mechanistic Interplay in SiCN Wafer Bonding for 3D Integration,” *ACS Omega* **10**, 27575-27584 (2025). [DOI: 10.1021/acsomega.5c03628]
9. A. Uedono, K. Kawakami, T. Kuribara, R. Hasunuma, Y. Harashima, Y. Shigeta, Z. Ni, R. Yan, H. Nakamura, A. Notake, T. Moriya, K. Michishio, and S. Ishibashi, “Vacancy-Type Defects in HfO₂ Layers and Their Role in Amorphous-to-Crystalline Transition Studied by Monoenergetic Positron Beams,” *IEEE Trans. Semicond. Manufacturing* (1-7) (2025). [DOI: 10.1109/TSM.2025.3548450]
10. S. F. Chichibu, K. Kikuchi, B. Moody, S. Mita, R. Collazo, Z. Sitar, Y. Kumagai, S. Ishibashi, A. Uedono, and K. Shima, “Roles of Al-vacancy complexes on the luminescence spectra of low dislocation density Si-doped AlN grown by halide vapor phase epitaxy,” *Appl. Phys. Lett.* **126**, 111905(1-7) (2025). [DOI: 10.1063/5.0252149]
11. R. Akaike, K. Uesugi, K. Shima, S. F. Chichibu, A. Uedono, T. Nakamura, and H. Miyake “Impacts of homoepitaxial AlN thickness on the qualities of AlGaIn QWs fabricated on the face-to-face annealed sputter-deposited AlN templates,” *Appl. Phys. Exp.* **18**, 065503(1-5) (2025). [DOI: 10.35848/1882-0786/ade2b7]
12. Y. Yuki, J. Fuse, S. Aoki, T. Hare, K. Mihara, T. Miyoshi, N. Yamamoto, S. Teranishi, T. Fukushima, A. Uedono, and F. Inoue, “Assessing queue time in D2W hybrid bonding through precise bond strength measurements,” *IEEE 75th Electronic Components & Tech. Conf. (ECTC)*, 878 - 884 (2025). [DOI:10.1109/ectc51687.2025.00154]
13. 上殿明良, “陽電子消滅を用いた材料評価,” *応用物理* **94**, 478-483 (2025).

[https://doi.org/10.11470/oubutsu.94.9_478]

<学会発表>

国際会議

1. A. Uedono, H. Iguchi, M. Horita, J. Suda, K. Shima, S. F. Chichibu, and S. Ishibashi, "Vacancy-type defects in low-dose Si-implanted GaN probed by positron annihilation," 8th Int. Sym. Growth of III-Nitrides, Tainan, Taiwan, 10 November 2025.
2. A. Uedono, Chao-Hsin Wu, and Gwénolé Jacopin, "Investigation of Defect Characteristics and Their Correlation with Device Performance in Wide Bandgap Semiconductors," Tsukuba Conf., 2 October 2025.
3. K. Awazu, K. Sasa, M. Sataka, and A. Uedono, "Sub-nano order structural change in amorphous silica induced with swift heavy ions," 17th Int. Conf. Phys. Non-crystalline Solids, Tsukuba, Japan, 11 August 2025.
4. A. Uedono, R. Tanaka, S. Takashima, K. Ueno, M. Edo, K. Shima, S. F. Chichibu, J. Uzuhashi, T. Ohkubo, S. Ishibashi, K. Sierakowski, and M. Bockowski, "Characterization of vacancy-type defects in Mg- and N-implanted GaN by using a monoenergetic positron beam," 22nd Int. Workshop Junction Tech. 2025, Kyoto, Japan, 6 June 2025.
5. T. Kimura, J. Ahn, N. Deegan, K. Harmon, C. Wicker, N. Bitner, A. Dibos, J. Zhang, B. Pingault, C. Zhang, G. Galli, A. Uedono, D. Awschalom, and F. J. Heremans, "Comprehensive analysis of formation mechanism of vacancy complexes in 4H-SiC," Mat. Res. Soc. Spring Meeting & Exhibit, Washington, USA, 7 April 2025

国内会議

1. 嶋紘平, 石橋章司, 上殿明良, 秩父重英, "ZnO における反応性イオンエッチング誘起欠陥のルミネッセンス評価", 第 73 回応用物理学会春季学術講演会, 名城大学, 2026 年 3 月 16 日.
2. 栗原辰昇, 俣澤遠, 中村秀雄, ヤン ルオリン, 原田 豪繁, 趙祥勲, 上殿明良, 蓮沼隆, "ZrO₂ 薄膜の強誘電性緩和 第 31 回 電子デバイス界面テクノロジー研究会" 東レ総合研修センター, 静岡, 2026

年 1 月 29 日.

3. 上殿明良, "GaN への Mg/N 注入で生じる空孔型欠陥の焼鈍特性", INNOPEL シンポジウム 2025, 浅草橋ヒューリックホール&カンファレンス, 2026 年 1 月 27 日.
4. 秩父重英, 嶋紘平, 上殿明良, 石橋章, 司田中亮, 高島信也, 上野勝典, 成田哲生, 加地徹, 須田淳, "光学特性評価からみる GaN の p 型活性化と点欠陥の制御", INNOPEL シンポジウム 2025, 浅草橋ヒューリックホール&カンファレンス, 2026 年 1 月 27 日.
5. 嶋紘平, 堀田昌宏, 須田淳, 石橋章司, 上殿明良, 秩父重英, "電子線照射 GaN のルミネッセンス評価", 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 名城大学, 2025 年 9 月 4 日.
6. 西垣有紘, 廣田晴大, 大野峻太郎, 杉本麻水, 新井裕子, 南柚香, 島崎好広, 寅丸雅光, 神好人, 富田一義, 上殿 明良, 今井大地, 宮嶋孝夫, "パルスレーザアニールした Si イオン注入 GaN の電気特性評価", 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 名城大学, 2025 年 9 月 4 日.
7. 嶋紘平, 堀田昌宏, 須田淳, 石橋章司, 上殿明良, 秩父重英, "低ドーズ Si, Al, N イオン注入 GaN のルミネッセンス評価", 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 名城大学, 2025 年 9 月 4 日.

招待講演

1. A. Uedono, K. Shima, S. F. Chichibu, and S. Ishibashi, "Annealing Behaviors of Vacancy-type Defects in GaN and AlN Studied by Positron Annihilation Spectroscopy," Photonics & Electromagnetics Res. Sym., Chiba, Japan, 7 November 2025.
2. A. Uedono, K. Shima, S. F. Chichibu, and S. Ishibashi, "Annealing behaviors of vacancies and their impact on dopant activation in ion-implanted GaN studied by positron annihilation," Int. Conf. Nitride Semiconductors, Malmö, Sweden, 8 July 2025.

サブナノ領域評価部門

教員：

羽田真毅（数理物質系・物理工学域・教授）

腰原伸也（数理物質系・物理工学域・客員教授）

研究員：

Arnaud Arbouet（外国人受託研究員）

Gael Privault（外国人受託研究員）

大学院生：

塩谷海斗（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D1）

野山豪大（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

岩崎ゆい（数理物質科学研究群・国際マテリアルイノベーション学位プログラム・M2）

平晴希（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

長尾梨代（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

羽田真毅

<研究成果>

当研究室では、フェムト秒からピコ秒の時間分解能を持つ超高速時間分解電子線回折法を用いて、分子から材料にわたる幅広い物質の構造ダイナミクス計測を行っている。本年度は、開発研究に注力し、高コヒーレンスかつ極短パルス電子線源の開発を行った。本研究では、探針型フォトカソードと、従来の超高速時間分解電子線回折装置に用いられてきた金属平板型フォトカソードとを比較し、それぞれの電子線の伝播特性（パルス幅、ビーム径、電子密度、コヒーレンス長など）の違いを、シミュレーションおよび実験を通して明らかにした。

実験では、直径が3–10 nmのカーボンナノチューブシートを用いて、得られた回折像から約10 nm程度のコヒーレンス長が得られていることを示し、また粒子シミュレーションによってもこれと一致する結果を得ている。また、電子線のパルス幅はMoTe₂の熱変化より見積もっており、約10 psのパルス幅を持つコヒーレント電子線であることが分かった。この優れ

たコヒーレンス特性と極短パルス性により、従来手法では観測困難であったナノ構造体（ナノメートルオーダーの周期構造を持つタンパク質や超分子など）の動的挙動を高精度に解析することが可能となり、超高速時間分解電子線回折装置の応用範囲が大幅に拡張されることが期待される。さらに、本成果は超高速時間分解電子線回折装置のみならず、透過電子顕微鏡や走査電子顕微鏡などの探針型電子線源を利用する各種顕微鏡における新規電子線源開発に対しても重要な知見を提供するものである。図1に開発した超高速時間分解電子線回折装置の概略図と、装置のパルス幅、コヒーレンス長、ビーム径などのパラメータなどを示す。

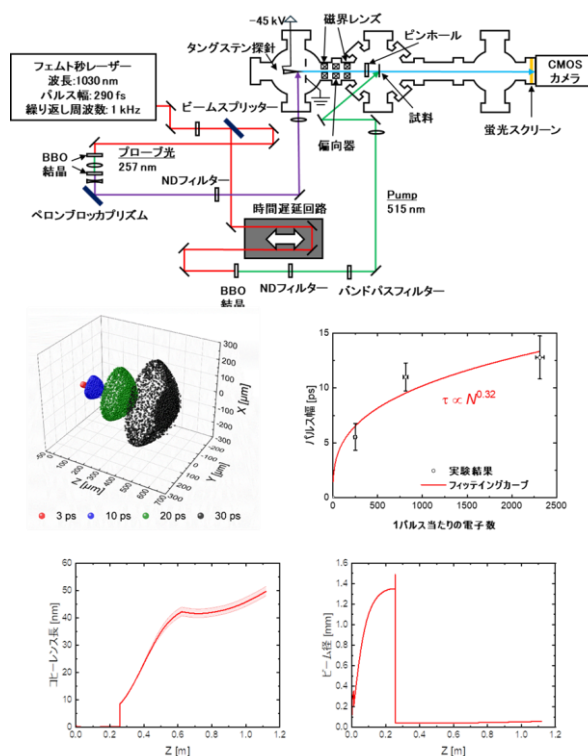


図1．開発した超高速時間分解電子線回折装置の概略図と、装置パラメータ

<論文>

1. V. Rollo, F. Kato, H. Taira, R. Nagao, G. Privault, S. Weber, M. Hada*, A. Arbouet*, Ponderomotive electron-light interactions in multi-electron pulses. New Journal of Physics 28, 024101 (2026).
2. R. Nagao, G. Privault, Y. Arashida, Y. Iwasaki, G.

- Noyama, H. Suzuki, Y. Hayashi, J. Fujita, A. Arbouet*, M. Hada*, Development of a high bunch charge and high transverse coherence ultrafast electron source for structural studies of large-periodicity materials. *The Journal of Chemical Physics* 163, 034201 (2025).
3. G. Noyama, T. Gauthier, Y. Arashida, Y. Iwasaki, R. Nagao, Y. Saida, N. Godin, G. Privault, H. Suzuki, Y. Hayashi, S. Ono*, R. Bertoni*, M. Hada*, Ultrafast dynamics of carrier relaxation determining the quasi-1D and non-1D electronic behaviors in carbon nanostructures. *Carbon Trends* 20, 100510 (2025).
- <総説・解説>
1. 長尾梨代、羽田真毅「高コヒーレンス・極短パルス電子線源の開発」顕微鏡 60, 107-111 (2025).
 2. 羽田真毅「光誘起時間分解電子回折 一装置開発と材料計測一」固体物理 60, 737-745 (2025).
- <学会発表>
- 国際会議
1. M. Hada, Local structural and electronic changes in vdW heterostructures observed by ultrafast complementary measurements. 23rd International Symposium on Correlation, Polarization and Ionization in Atomic and Molecular Collisions (COPIAMC 2025), Tokyo, Japan 2025. (Invited)
 2. M. Hada, Photoinduced dynamics generated by unusual electron transfer channels in a one-dimensional van der Waals heterostructure. Optics & Photonics International Congress 2025 (LSC2025), Yokohama, Japan, 2025. (Invited)
 3. G. Privault, M. Hervé, N. Godin, R. Bertoni, E. Trzop, Y. Watier, I. Chaban, R. G. Torres Ramírez, C. Mariette, A. Volte, M. Cammarata, M. Levantino, S. Akagi, M. Hada, J. Kubicki, S. Zerdane, H. Tokoro, S. Ohkoshi, E. Collet, Streaming powder technique for the study of non-reversible phenomena with X-ray diffraction and Infrared spectroscopy. Optics & Photonics International Congress 2025 (LSC2025), Yokohama, Japan, 2025. (Invited)
 4. G. Privault, M. Hervé, H. Taira, F. Kato, R. Bertoni, C. Mariette, M. Cammarata, M. Levantino, S. Akagi, H. Tokoro, S. Ohkoshi, M. Lorenc, M. Hada, E. Collet, Controlling ultrafast phase transition of Prussian Blue Analogue compounds through X-ray and electron diffraction experiments. Ultrafast Phenomena in Cooperative Systems Gordon Research Conference 2026, Los Angeles, the USA, 2026.(poster)
 5. M. Hada, G. Privault, K. Sano, S. Ohmura, M. Sakamoto, Photoinduced transition from semiconducting to superionic conducting phases in Cu₂S observed by ultrafast time-resolved electron diffraction. Materials Research Meeting 2025 (MRM2025), Yokohama, Japan, 2026 (oral)
 6. G. Privault, M. Hervé, N. Godin, R. Bertoni, E. Trzop, Y. Watier, S. Zerdane, I. Chaban, R. G. T. Ramírez, C. Mariette, A. Volte, M. Cammarata, M. Levantino, S. Akagi, M. Hada, J. Kubicki, H. Tokoro, S. Ohkoshi, M. Lorenc, E. Collet, Coupling X-ray diffraction and Infrared spectroscopy for the study of ultrafast non-reversible phenomena in RbMnFe compounds. 34th International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC2025) Sapporo, Japan 2025 (poster).
 7. R. Nagao, G. Privault, Y. Iwasaki, G. Noyama, Y. Arashida, H. Suzuki, Y. Hayashi, J. Fujita, A. Arbouet, M. Hada. Development of a high-coherence ultrafast electron diffraction setup: propagation of electron beams from plate-type and tip-type photocathodes. 34th International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC2025) Sapporo, Japan 2025 (poster).
 8. H. Taira, R. Nishimori, K. En-ya, G. Noyama, G. Privault, Y. Arasida, K. Takubo, S. Koshihara, S. Yoshida, M. Hada, Determination of an electron pulse duration after compression by using a THz streaking methodology. 34th International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC2025) Sapporo, Japan 2025 (poster).
 9. N. Yamamoto, W. Zhou, G. Privault, R. Nagao, A. Arbouet, S. Koshihara, T. Katayama, M. Hada, Ultrafast structural reorganization monitored by

electron diffraction in BaTiO₃ at room temperature with UV excitation. 34th International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC2025) Sapporo, Japan 2025 (poster).

10. K. En-ya, A. Takada, G. Privault, M. Saigo, Y. Ikabata, K. Miyata, S. Kohata, Y. Saida, H. Suzuki, T. Ishikawa, M. Kuwahara, Y. Yamada, Y. Hayashi, S. Koshihara, H. Goto, H. Nakanotani, K. Onda, C. Adachi, M. Hada, Transient structures of organic molecular crystal observed by time-resolved electron diffraction measurements. Optics & Photonics International Congress 2025 (LSC2025), Yokohama, Japan, 2025. (oral)
11. H. Taira, R. Nishimori, K. En-ya, G. Noyama, G. Privault, Y. Arashida, K. Takubo, S. Koshihara, S. Yoshida, M. Hada, Interaction of Electron Pulse with Terahertz Waves. Optics & Photonics International Congress 2025 (LSC2025), Yokohama, Japan, 2025. (oral)
12. R. Nagao, G. Privault, Y. Iwasaki, G. Noyama, Y. Arashida, H. Suzuki, Y. Hayashi, A. Arbouet, J. Fujita, M. Hada, Development of a high-coherence and ultrashort pulsed electron source. Optics & Photonics International Congress 2025 (LSC2025), Yokohama, Japan, 2025. (oral)

国内会議

1. 平晴希、加藤英字子、塩谷海斗、Privault Gael、Arbouet Arnaud、腰原伸也、嵐田雄介、羽田真毅「THz波によるフェムト秒パルス電子線の偏向制御」レーザー学会学術講演会第46回年次大会 大阪府, 2026 (ポスター)
2. 長尾梨代、山本渚、Privault Gael、藤田淳一、鈴木弘朗、林靖彦、腰原伸也、Arbouet Arnaud、羽田真毅「高コヒーレンス時間分解電子線回折装置を用いたカーボンナノチューブのチューブ間相互作用の観測」レーザー学会学術講演会第46回年次大会 大阪府, 2026 (ポスター)
3. 塩谷海斗、高田亜美、Gaël Privault、西郷将生、五十幡康弘、吉田龍矢、宮田潔志、木幡真太郎、大庭拓也、大浦正仁、齋田友梨、鈴木弘朗、石川忠彦、桑原真人、山田洋一、林靖彦、腰原伸也、後

藤仁志、中野谷一、恩田健、安達千波矢、羽田真毅「有機発光材料の励起状態における構造変化の観測」第44回固体・表面光化学討論会、福島県, 2025 (口頭)

4. R. Nagao, N. Yamamoto, G. Privault, J. Fujita, H. Suzuki, Y. Hayashi, S. Koshihara, A. Arbouet, M. Hada「Direct observation of inter-tube dynamics in photoexcited CNTs」PCOS 2025 静岡県, 2025 (ポスター)
5. Y. Iwasaki, G. Privault, T. Fukuda, M. Hase, Y. Arashida, M. Hada「Observing the hot carrier relaxation in a 2H-MoTe₂ thin film with ultrafast optical transmission measurements」PCOS 2025 静岡県, 2025 (ポスター)
6. 塩谷海斗、高田亜美、Gaël Privault、西郷将生、五十幡康弘、吉田龍矢、宮田潔志、木幡真太郎、大庭拓也、大浦正仁、後藤仁志、中野谷一、恩田健、安達千波矢、羽田真毅「超高速時間分解電子線回折法を用いた有機発光材料の構造変化の観測」第15回 CSJ 化学フェスタ 2025、東京都, 2025 (ポスター)
7. 岩崎ゆい、Privault Gael、福田拓未、長谷宗明、嵐田雄介、羽田真毅「過渡透過率計測による2H-MoTe₂ 薄膜における熱電子緩和の観測」第86回応用物理学会秋季学術講演会 愛知県, 2025 (口頭)
8. 平晴希、西森亮太、加藤英字子、塩谷海斗、野山豪大、Privault Gael、Arbouet Arnaud、腰原伸也、嵐田雄介、羽田真毅「極短パルス電子線の特性評価のためのTHz波光学系の開発」第86回応用物理学会秋季学術講演会 愛知県, 2025 (口頭)
9. 山本渚、Zhou Weikun、Privault Gael、長尾梨代、Arbouet Arnaud、腰原伸也、片山司、羽田真毅「超高速時間分解電子線回折法を用いた紫外光励起によるBaTiO₃ 薄膜単結晶の構造変化の観測」第86回応用物理学会秋季学術講演会 愛知県, 2025 (口頭)
10. 加藤英字子、平晴希、Privault Gael、Rollo Valentin、腰原伸也、羽田真毅、Arbouet Arnaud「高速電子線のポンデロモータビブ相互作用」第86回応用物理学会秋季学術講演会 愛知県, 2025 (口頭)

11. 塩谷海斗、高田亜美、Privault Gaël、西郷将生、五十幡康弘、吉田龍矢、宮田潔志、木幡真太郎、大庭拓也、大浦正仁、齋田友梨、鈴木弘朗、石川忠彦、桑原真人、山田洋一、林靖彦、腰原伸也、後藤仁志、中野谷一、恩田健、安達千波矢、羽田真毅「有機単結晶の過渡構造解析」第86回応用物理学会秋季学術講演会 愛知県, 2025 (口頭)
12. 長尾梨代、Privault Gaël、嵐田雄介、岩崎ゆい、野山豪大、藤田淳一、Arbouet Arnaud、羽田真毅「フォトカソード形状の違いによる極短パルス電子線の伝播・特性の変化」第86回応用物理学会秋季学術講演会 愛知県, 2025 (口頭)

サブナノ領域評価部門

教員：

丸本一弘（数理物質系・物質工学域・教授）

岡本翔（数理物質系・物質工学域・助教）

研究員：

下位幸弘（研究員）

鈴木貴之（研究員）

大学院生：

佐藤睦（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D3）

陳奕舟（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D3）

王佳曦（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D3）

劉李祺（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D2）

何文皓（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D1）

内海雄太（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

金子慎太郎（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

坂口泰基（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

高橋優羽（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

張旭波（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

楊彦秋（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

宗宮若葉（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

五十住武久（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

川久保怜（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

山崎涉吾（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

渡辺陽太（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

丸本一弘、岡本翔

<研究成果>

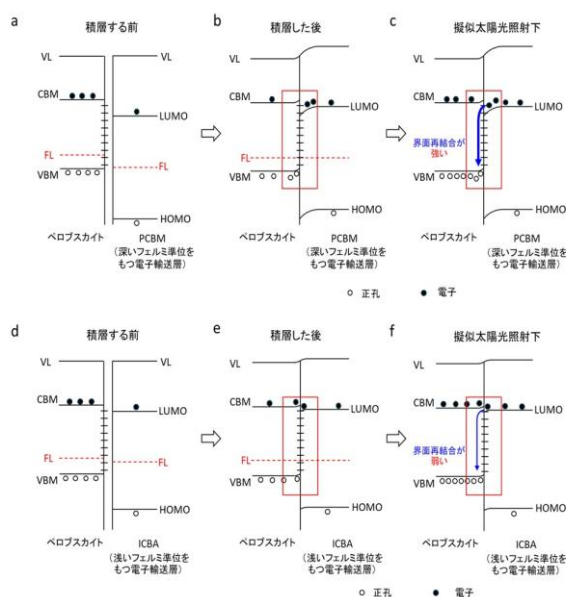
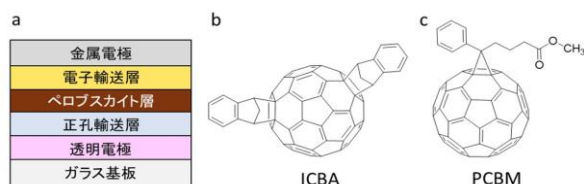
当研究室では、新しい有機半導体や無機半導体およびそれらのデバイスの研究を通して、有機・無機半導体材料をエレクトロニクスへ応用する新しい有機・無機エレクトロニクスの研究を推進している。本年度は、ペロブスカイト太陽電池、有機薄膜太陽電池、発光電気化学セル、有機トランジスタ、有機トランジスタメモリに関する研究を進めた。

【 1 】スズ系ペロブスカイト太陽電池が電子輸送層の改良で高効率化するメカニズムを解明

鉛を含まず環境負荷が少ないペロブスカイト太陽電池として注目されているスズ系ペロブスカイト太陽電池において、電子輸送層の改良でより高い開放電圧が実現されるメカニズムを、電子スピン共鳴法を用いて解明した。スズ系ペロブスカイト太陽電池のさらなる高効率化を目指す上で重要な成果である。

本研究では、電子スピン共鳴法を用いてスズ系ペロブスカイトと電子輸送層の界面の電子拡散を観測し、その界面におけるバンド曲がり調べた。その結果、これまで一般的だったフラーレン誘導体の PCBM を電子輸送層に用いた場合、スズ系ペロブスカイトとの界面において、開放電圧（取り出せる最大電圧）が低下する原因となる電荷再結合が生じやすいバンド曲がりが生じていた。一方、高い開放電圧が得られることが知られている ICBA を用いた場合には、電荷再結合の抑制に有利なバンド曲がりに近づくことが明らかになった。

本研究で得られた知見をもとにすることで、スズ系ペロブスカイト太陽電池のさらなる効率化への取り組みが進むことが期待される。



【 2 】電子スピン共鳴法を用いたペロブスカイトおよび有機薄膜太陽電池の特性向上および劣化機構

本研究では、電子スピン共鳴（ESR）法によるスズペロブスカイト太陽電池および有機薄膜太陽電池の評価から、これらの太陽電池における開放電圧向上機構および劣化機構を明らかにした。スズペロブスカイト/電子輸送層界面における電荷拡散の解析から、最低空軌道準位の浅い電子輸送材料である indene-C₆₀ bisadduct（ICBA）を用いることで、ペロブスカイト/ICBA 界面において開放電圧の向上に不利なバンドベンディングの形成が抑制されることが示された。また、poly(3,4-ethylenedioxythiophene):poly(styrenesulfonate)（PEDOT:PSS）を正孔輸送層に用いたペロブスカイト太陽電池における正孔輸送層の電荷状態の解析から、PEDOT:PSS/ペロブスカイト界面における電子障壁の劣化や

PEDOT:PSS へのホール蓄積が性能劣化に寄与する要因のひとつとして挙げられることを明らかにした。さらに、PM6（別名：PBDB-T-2F）と Y6（別名：BTP-4F）を活性層に用いた非フラーレン型有機薄膜太陽電池における分子配向の解析から、擬似太陽光照射により PM6 および Y6 の分子配向比率が変化することを明らかにした。擬似太陽光照射下における分子配向変化の定量的な解析方法などの本研究で示したペロブスカイトおよび有機薄膜太陽電池の解析方法は、他の解析方法では得られない知見を与えた。

今後、他の評価・解析手法と相補的に組み合わせることにより、ペロブスカイトおよび有機薄膜太陽電池のエネルギー変換効率および耐久性の向上に貢献することが期待される。

【 3 】電子スピン共鳴分光法を用いたラドルステン・ポッパー型スズペロブスカイト太陽電池の界面における電荷輸送機構の解明

本研究では、電子スピン共鳴（ESR）分光法を用いて、RP スズペロブスカイト太陽電池およびその構成材料の電荷状態を調べた。正孔輸送層（HTL）と RP スズペロブスカイトの積層プロセスにおいて、HTL からペロブスカイトへの正孔拡散が観測された。この正孔拡散により、界面において電子障壁が形成され、デバイス性能の向上に寄与すると考えられる。また、擬似太陽光照射下において、紫外線等の短波長光に励起されたホットエレクトロンにより、ペロブスカイトから HTL への逆電子移動が観測された。さらに、素子駆動中の開放電圧および短絡電流密度の向上は、この逆電子移動と強く関連していることが見出された。これらの性能向上は、逆電子移動により、界面における電子障壁が増強され、電界効果パッシベーションが増強された結果、キャリア再結合が抑制されたことに起因すると示唆された。

また、カソードインターレイヤー（CIL）である PDINO を RP スズペロブスカイト太陽電池に導入し、電子輸送層（ETL）側の電荷移動機構の観測を試みた。光照射下において、

PDINO に明瞭な電荷蓄積が観測されなかった。さらに、低温 ESR 測定により、ETL/PDINO/金属電極の積層構造における電子拡散機構および PDINO による界面修飾機構について調べた。積層プロセスにおけるフェルミ準位の一致過程において、PDINO を介した、金属電極から ETL への電子拡散が直接に観測された。また、金属電極の仕事関数が小さくほど、ETL の LUMO が深いほど、この金属電極から ETL への電子拡散が生じやすいことが観測された。これらの結果から、PDINO の界面修飾機構が以下のように示唆される。PDINO が金属電極から ETL に向く界面双極子層を形成することにより、金属電極の実効的な仕事関数を低減させる。その結果、フェルミ準位の一致過程における電子拡散が制御され、界面におけるショットキーバリアが抑制され、オーミック接触が促進される。

本研究で得られた知見は、RP スズペロブスカイト太陽電池の埋もれた界面における電荷移動機構や界面修飾機構に関する理解を深化させ、スズペロブスカイト太陽電池の高効率化・長寿命化に向けた界面設計に知見を提供できると考えられる。

【 4 】スズ鉛ペロブスカイト太陽電池の界面修飾層の ESR 研究

本研究では界面修飾材の単膜、混合膜やその積層膜に対して ESR 分光法を用いて光照射下の電荷状態の調査をおこなった。またその結果を理論計算の点から説明するために、密度汎関数理論 (DFT) 計算もおこなった。

これらの調査から、光照射下で PP から CPTA へ光誘起電子移動が生じることを明らかにした。さらに本研究で得られた ESR 信号の起源は、CPTA 量体のアニオン由来であることが判明した。また光誘起電子移動の起源として、PP と CPTA のカルボキシル基やフラーレン部位との間のファンデルワールス相互作用が重要であることが明らかにし、PP と CPTA による素子の安定性向上メカニズムを解明した。

本研究で得られた界面修飾材料の電荷状態に関する知見は、ペロブスカイト太陽電池の今

後の高性能化に有用であると期待される。

【 5 】ペロブスカイト太陽電池におけるドーパントフリー正孔輸送層の電荷拡散の ESR 研究

本研究では、HTL に PTB7 および PM6、HCL に MoO_x を用いた PSCs に注目して、積層膜試料に対して電子スピン共鳴 (ESR) 分光法を適用し、HTL-HCL 間の電荷状態や電荷拡散をミクロな視点から解明することを目的とした。HTL に PM6 を用いた太陽電池素子が、PTB7 を用いた太陽電池素子よりも優れた性能を示すことを確認した。特に、PTB7 を用いた太陽電池素子の $J-V$ 曲線に S 字カーブが発現した。また、HTL/ MoO_x 積層膜の ESR 測定から、HTL は MoO_x に p 型ドーピングされること、 MoO_x は HTL に還元されることでバンドギャップ内の Gap states が誘起されることを明らかにした。積層膜試料の ESR 測定を基に作製したエネルギーバンド図から、 $\text{FAPbI}_3/\text{PTB7}$ 界面に $\text{FAPbI}_3/\text{PM6}$ 界面よりも大きい正孔障壁が形成される。この正孔障壁の差が、太陽電池性能の差に起因していると考えられる。

これらの知見は、ドーパントフリー-HTM を用いた PSCs の更なる開発にとって極めて重要である。

【 6 】Sn-Ge ペロブスカイト太陽電池における正孔輸送層界面の電荷移動の ESR 研究

本研究では、エタノールアミン (TEA) /N-メチル-2-ピロリドン (NMP) 混合溶媒を用いて作製したメチルアンモニウムスズ・ゲルマニウムヨウ化物 (methyllumonium tin germanium iodide, $\text{MASn}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}\text{I}_3$) ペロブスカイト太陽電池に着目し、界面電荷移動挙動および電子構造の変化を系統的に解明することを目的とした。特に、従来広く用いられてきたジメチルスルホキシド (DMSO) 処理溶媒で作製した素子との比較を通して、TEA 添加が薄膜形成、界面電子状態、および素子動作特性に及ぼす影響を明らかにした。

ITO/PEDOT:PSS (poly(3,4-ethylenedioxy

thiophene):poly(styrene sulfonate), 正孔輸送層) /MASn_{0.5}Ge_{0.5}I₃/C₆₀/BCP (bathocuproine, 電子輸送補助層) /Ag 構造の太陽電池素子を作製し、電子スピン共鳴 (ESR) 分光法を用いて、素子動作中におけるスピンダイナミクスおよび電荷移動挙動を直接観測した。TEA/NMP 溶媒を用いることで、Sn-Ge 前駆体溶液の安定化が促進され、酸化が抑制されるとともに、平滑かつ緻密なペロブスカイト薄膜が形成されることが確認された。これにより、従来の DMSO 処理溶媒を用いた場合と比較して、素子性能の向上が達成された。

暗状態においては、TEA 混合溶媒を用いた素子は、DMSO 処理素子と比較して高いスピン密度 (N_{spin}) および狭い ESR 線幅を示した。この結果は、PEDOT:PSS とペロブスカイト界面におけるフェルミ準位整合が安定化し、過度なバンドベンディングが抑制されていることを示唆している。また、界面における電荷再分布により、ポーラロンおよびバイポーラロン状態の平衡が変化している可能性が示された。

さらに、光照射下におけるオペランド ESR 測定を行った結果、TEA 混合溶媒を用いた素子では、 N_{spin} の増加が抑制され、ESR 信号の時間変化も安定していることが明らかとなった。これは、光励起による過剰な電子移動や電荷蓄積が抑制されていることを示しており、界面における電荷トラップ形成が効果的に抑えられていることを示唆する。一方、DMSO 処理素子では光照射に伴い N_{spin} が顕著に増加し、電荷蓄積および局在スピンの生成が進行していることが確認された。

加えて、オペランド ESR 測定を通じて、長時間光照射下における N_{spin} の増加と、短絡電流密度 (J_{sc}) および開放電圧 (V_{oc}) の低下との間に明確な相関が見いだされた。この結果は、局在スピンの生成および電荷トラッピングが光劣化挙動を支配していることを示しており、界面電荷ダイナミクスが素子安定性を決定づける重要な因子であることを明らかにしている。

以上の結果より、TEA 配位は前駆体化学および界面エネルギー準位の双方を安定化し、Sn-Ge 系ペロブスカイト太陽電池の性能およ

び耐久性を向上させる上で重要な役割を果たすことが示された。また、本研究は、オペランド ESR 測定が鉛フリー型ペロブスカイト太陽電池における電荷移動ダイナミクスをミクロスコピックに解明する有効な手法であることを示すものであり、今後の高安定・高効率デバイス設計に対して重要な指針を与えるものである。

【 7 】 ESR を用いたインドリン色素 D149 増感ダブルペロブスカイト太陽電池の界面電荷状態の解明

本研究では、D149 色素増感 Cs₂AgBiBr₆ 太陽電池における電荷状態および劣化挙動を、微視的観点から検討した。電子スピン共鳴 (ESR) 分光法を用いて、1 SUN 照射下における電子輸送層および正孔輸送層内の電荷キャリアの生成および時間発展を解析した。同時に、長時間光照射中の開放電圧 (V_{oc}) および短絡電流密度 (J_{sc}) の変化を追跡した。その結果、既報のダブルペロブスカイトに存在するトラップ準位に加え、界面電気双極子の形成がデバイス性能劣化を引き起こす要因の一つであることが明らかとなった。D149 の導入により電子抽出が促進され、初期段階では J_{sc} の増加が確認された一方で、光照射の進行に伴い V_{oc} が徐々に低下する挙動が観測された。

以上の結果は、界面における電荷ダイナミクスがデバイス安定性および V_{oc} 特性を支配する重要な因子であることを示しており、高効率かつ高安定なダブルペロブスカイト太陽電池の合理的設計に向けた有用な指針を提供する。

【 8 】 三元系高分子太陽電池材料における電荷蓄積状態と分子配向に関する電子スピン共鳴研究

本研究では、低電圧で駆動可能で、柔軟性を有する有機電気化学トランジスタ (OEET) を用いて、電子スピン共鳴 (ESR) 分光法を生かし、PTzBT 素子内の電荷蓄積状態と分子配向を微視的観点から調べた。その結果、PTzBT 分子中の正孔の観測に成功し、PTzBT のカチ

オン状態の DFT 計算結果および角度変化 ESR 測定から、PTzBT における電荷蓄積は主に face-on 配向で発生することが確認された。3 元系太陽電池と同じの活性層を用いた PTzBT:PC₆₁BM:ITIC の OECT 素子の角度変化 ESR 測定により、電荷注入が少ない場合、電荷蓄積が主に edge-on 配向の分子で発生することに対して、大量の電荷が注入された場合、電荷蓄積は主に face-on 配向の分子で発生することが解明された。

【 9 】ペロブスカイト有機電気化学トランジスタのオペランド ESR 測定による動作機構の解明

本研究では、ペロブスカイトと共役系高分子を積層した構造を応用した有機電気化学トランジスタ (ペロブスカイト OECT) を作製した。電圧印加中のペロブスカイト OECT に ESR 測定を実施して、素子内部の電荷キャリアの様子を直接観測し、素子の電気的特性と微視的な物性の関係性を明らかにした。また、ペロブスカイト OECT の特徴的な動作特性を利用することにより、メモリデバイスとしての応用可能性があることが示された。本研究で得られた知見は、有機薄膜トランジスタの性能向上を目指すうえで、ペロブスカイトを使用した構造の利点を示し、さらなる性能向上を目指すうえで重要である。

【 10 】オペランド ESR 観測による有機半導体の *anti*-/*syn*-構造異性体がトランジスタの電荷輸送特性に与える影響の解明

本研究においては *anti*-/*syn*-DMADT の有機トランジスタに対し、オペランド電子スピン共鳴 (ESR) 計測法を適用した。この手法によりデバイス駆動中のポーラロンを直接観測したところ、C_{2h} 分子対称性を有する *anti*-異性体においては、分裂のない 1 本の明瞭な ESR スペクトルが得られた。しかし、*syn*-異性体では結晶乱れ等が原因と思われる ESR スペクトルの分裂がみられた。これがポテンシャル障壁となり、電荷輸送の妨げとなりうる可能性を示した。

本研究の調査により、有機エレクトロニクスの電荷輸送を妨げるポテンシャル障壁の起源を、オペランド ESR 計測によって特定できる可能性を見出した。有機半導体デバイスの性能向上に貢献し得る微視的観点からの貴重な知見を提供し、将来の有機トランジスタ開発に有用である。

【 11 】多重共鳴 TADF 材料を用いた発光電気化学セルの電荷状態のオペランド ESR 研究

本研究では、LEC の高性能化に向けた指針を得ることを目的として、青色発光 MR-TADF 材料を用いた LEC 素子を作製し、電子スピン共鳴 (ESR) 法により、素子駆動中の電荷状態を非破壊かつ分子レベルで解析した。ESR 測定により得られた信号を密度汎関数理論 (DFT) 計算の結果と比較検討した結果、MR-TADF 材料の正孔ドーピングが進行し、その後に電子ドーピングが生じる過程を明らかにした。

本研究の成果は、MR-TADF 材料を用いた LEC における電荷注入および輸送機構の詳細な理解に寄与するとともに、今後の LEC 素子特性の向上に向けた材料設計およびデバイス設計の指針を与えるものである。

<論文>

1. Y. Shan, H. Kanzawa, J. Huang, T. Yasuda, Y. Shimoi, K. Marumoto, T. Kanbara and J. Kuwabara, "Influence of Phenyl Substitution Position on the Physical Properties of Diazachrysenes", *Asian Journal of Organic Chemistry*, 15, e70356 (2026).
2. W. He, J. Wang, Y. Shimoi and K. Marumoto, "ESR study of charge accumulation in organic photoelectrochemical transistors under gate-voltage sweeps", *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 770, 932-939 (2026).
3. M. Kato, S. Kushida, N. U. Draz, D. Kyotani, E. Smarsly, K. Yoshinaga, W. He, U. H. F. Bunz, K. Marumoto, T. Mori and Y. Yamamoto, "Rational Device Design and Doping-Controlled Performance in Fast-Response π -Ion Gel Transistors", *Advanced*

- Functional Materials*, e21674-1-10 (2026).
4. Y. Chen, A. Sato, S. Yamaguchi, K. Inoue and K. Marumoto, "Charge Transfer at the PEDOT:PSS/Perovskite Interface in RP Sn Perovskite Solar Cells Elucidated by Operando ESR Spectroscopy", *Journal of Photopolymer Science and Technology*, 38, 333-339 (2025).
 5. J. Wang, D. Xue, S. Inai, I. Osaka and K. Marumoto, "Operando ESR Elucidation of Charge Accumulation and Molecular Orientation in Ternary Polymer Solar Cell Materials Using Organic Electrochemical Transistor Structures", *ACS Applied Materials & Interfaces*, 17, 70634-70640 (2025).
 6. J. Ràfols-Ribé, A. Sato, A. Kirch, X. Zhang, S. Jenatsch, C. Larsen, K. Marumoto and L. Edman, "Pinpointing the Dynamic p-i-n Junction", *PRX Energy*, 4, 033015-1-20. (2025)
 7. N. Ishida, Y. Tsuchido, Y. Shimoi, K. Marumoto, T. Kanbara and J. Kuwabara, "Effects of Ring Strain on Molecular Dynamics of Sterically Hindered 4,7-Phenanthroline Unit", *European Journal of Organic Chemistry*, 28, e202500644 (2025).
 8. A. Sato, K. Inoue, Y. Shimoi and K. Marumoto, "ESR Analysis of Charge-Transporting Materials in Non-Fullerene Organic Solar Cells", *Journal of Photopolymer Science and Technology*, 38, 121-12 (2025).
 9. M. Yamazoe, N. Tsunetomo, M. Takahashi, Y. Shimoi and K. Marumoto, "Orientation of Charge-Carrier-Injected Molecules in Ambipolar Organic Semiconductor Devices: An Operando Electron Spin Resonance Study", *ACS Applied Electronic Materials*, 7, 7073-7081 (2025).
 10. A. Sato, S. Yamaguchi, A. Hasegawa, Y. Shimoi, T. Nakamura, A. Wakamiya and K. Marumoto, "Electron diffusion at Sn perovskite/fullerene derivative interfaces and its influence on open-circuit voltage", *npj Flexible Electronics*, 9, 47-1-9 (2025).
 11. S. Akagi, M. Tanaka, J. Wang, H. Kiuchi, Y. Harada, Y. Chen, K. Marumoto, K. Imoto, S. Ohkoshi and H. Tokoro, "Pressure-induced water producing using a copper–chromium Prussian blue analog", *Journal of Materials Chemistry A*, 13, 18007-18013 (2025).
 12. R. Meena, O. P. Nagar, B. Kumar, R. J. Chowdhary, A. Sato, K. Marumoto and N. Chouhan, "Electroless plated loading of NiP₂/SnO₂@rGO for enhanced photocatalytic water splitting", *International Journal of Hydrogen Energy*, 135, 195-212 (2025)
 13. P. Yang, Y. Chen, T. Kuroda, H. Morishita, H. Fukumoto, M. Morita, K. Masada, T. Sasamori, K. Kubo, K. Marumoto, R. Inoue, S. Kato and T. Agou, "Dicationic dibenzo[1,4]azaborine with an open-shell electronic structure", *Chemical Communications*, 61, 7847-7850 (2025).
 14. W. Dai, D. Xue, H. Kimata, X. Zou, T. Nakamura, A. Wakamiya and K. Marumoto, "Performance Improvement Mechanism of Perovskite Solar Cells by Device Interface Control", *Solar RRL*, 9, e2500183-1-11 (2025).
- < 著書 >
1. 丸本一弘、“電子スピン共鳴(ESR)分光法によるペロブスカイト太陽電池の電荷状態の観測—有機薄膜太陽電池・ペロブスカイト太陽電池の開発最前線—”(分担、第3編第1章第4節 521-528 頁)、エヌ・ティー・エス (2025)
- < 総説・解説 >
1. 丸本一弘、スズペロブスカイト太陽電池の性能向上機構の解明、機能材料、第45巻第10号10月号、(2025)
 2. 丸本一弘、スズペロブスカイト太陽電池の性能向上に知見、Optronics、第45巻第522号6月号、(2025)
- < 特許 >
1. 坂口泰基、岡本翔、丸本一弘、“トランジスタ、メモリ、半導体装置、積層体の製造方法及びトランジスタの製造方法”、特願 2025-188908 (令和7年11月10日) 日本

<学会発表>

国際会議

1. Y. Yang, Y. Chen, Y. Shimoi and K. Marumoto, "Deterioration mechanism analysis of double perovskite solar cell using indoline dye D149 as sensitizers", *Materials Research Meeting 2025 (MRM2025)*, PACIFICO Yokohama North, Yokohama, Japan, 2025.12.8-13 (oral).
2. K. Marumoto, "Microscopic Elucidation of Band Bending at Buried Interfaces in Perovskite Solar Cells", *14th Aseanian Conference on Nano Hybrid Solar Cells (NHSC-14)*, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsinchu, Taiwan, 2025.11.23-25 (oral) <Invited>
3. K. Marumoto, "Electron spin resonance of charge diffusion at buried interfaces in perovskite solar cells", *International Conference on "Role of Chemical Sciences in Sustainable Development"*, online, Pacific Academy of Higher Education and Research University, Udaipur, India, 2025.10.8-9 (oral) <Invited>
4. Y. Shimoi, T. Miura and K. Marumoto, "Molecular simulation on covalent-bond dissociation in epoxy resins: implication to in fatigued CFRPs", *The 10th International Conference on Fatigue of Composites (ICFC10)*, Clark Memorial Student Center, Hokkaido University, Sapporo, Japan, 2025.7.1-4 (oral)
5. Y. Chen, S. Yamaguchi, A. Sato, K. Inoue and K. Marumoto, "Charge Transfer at the PEDOT:PSS/Perovskite Interface in RP Sn Perovskite Solar Cells Elucidated by Operando ESR Spectroscopy", *The 42nd International Conference of Photopolymer Science and Technology (ICPST-42)*, Arcrea HIMEJI, Himeji, Japan, 2025.6.24-27 (oral)
6. A. Sato and K. Marumoto, "ESR Analysis of Charge-Transporting Materials in Non-Fullerene Organic Solar Cells", *The 42nd*

International Conference of Photopolymer Science and Technology (ICPST-42), Arcrea HIMEJI, Himeji, Japan, 2025.6.24-27 (oral) <Invited>

7. K. Marumoto, "Spin states of organic and inorganic electronic materials and devices by operando microscopic investigation", *The 10th International Symposium on Organic and Inorganic Electronic Materials and Related Nanotechnologies (EM-NANO 2025)*, Fukui Prefectural Hall, Fukui, Japan, 2025.6.11-14 (oral) <Invited>

国内会議

1. 丸本一弘「応物 有機分子・バイオエレクトロニクス分科会連携シンポジウム『ソフトデバイスの物理と応用』はじめに」日本物理学会 2026 年春季大会、応物 有機分子・バイオエレクトロニクス分科会連携シンポジウム「ソフトデバイスの物理と応用」、東京、2026.3.23（招待講演）
2. 岡本翔、五十住武久、清藤慎太郎、吉野凌平、伊澤誠一郎、丸本一弘「アップコンバージョン型 OLED における電荷状態のオペランド ESR 解析」2026 年第 73 回応用物理学会春季学術講演会、東京、2026.3.15-18
3. 丸本一弘「有機デバイスのオペランド電子スピン共鳴法の開発と基礎学理の探究」第 4 回物質循環電子材料・デバイス講演会、横浜、2026.2.10（招待講演）
4. 丸本一弘「有機無機フレキシブル電子デバイスの電荷スピン状態のオペランド電子スピン共鳴研究」東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻セミナー、柏、2026.1.20（招待講演）
5. 丸本一弘「ペロブスカイト太陽電池の埋もれた界面におけるバンド曲がりと素子性能との相関」オプトロニクスセミナー「日本発のペロブスカイト太陽電池一次なる技術の最前線」、オンライン、2025.12.3（招待講演）
6. 丸本一弘「スズペロブスカイト太陽電池の性能向上機構」技術情報協会セミナー「スズ系ペロブスカイト太陽電池の材料、プロセス技術」、オンライン、2025.12.3（招待講演）

7. 張旭波、劉李祺、陳奕舟、佐藤睦、丸本一弘「正孔輸送層と Sn-Ge ペロブスカイトの界面における電荷移動の ESR 研究」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
8. 佐藤睦、山口世力、尾坂格、丸本一弘「非フラーレン型有機薄膜太陽電池における分子配向の ESR による評価」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
9. 劉李祺、陳奕舟、佐藤睦、山口世力、丸本一弘「PEAI 界面修飾鉛ペロブスカイト太陽電池における界面電荷蓄積の ESR 直接観測」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
10. 陳奕舟、山口世力、井上開渡、佐藤睦、丸本一弘「ペロブスカイト太陽電池の電荷移動に対する PDINO 界面修飾の効果」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
11. 金子慎太郎、佐藤睦、下位幸弘、チョンミンアン、中村智也、若宮淳志、丸本一弘「スズ鉛ペロブスカイト太陽電池の界面修飾層の ESR 研究：安定性向上メカニズムの解明に向けて」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
12. 川久保怜、岡部紗代、坂口泰基、下位幸弘、丸本一弘「PhC₂-BQQDI を用いた n 型有機トランジスタの電荷蓄積と分子配向のオペランド ESR 研究」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
13. 渡辺陽太、金子慎太郎、陳奕舟、佐藤睦、楊彦秋、下位幸弘、丸本一弘「鉛ペロブスカイト太陽電池の電荷状態に対するスルホニウム塩界面修飾効果の ESR 研究」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
14. 山崎渉吾、坂口泰基、何文皓、下位幸弘、丸本一弘「n 型有機半導体 BBL を用いた有機電気化学トランジスタの電荷状態のオペランド ESR 研究」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
15. 内海雄太、佐藤睦、下位幸弘、丸本一弘「鉛ペロブスカイト太陽電池中のドーパントフリー正孔輸送層-正孔収集層間の電荷拡散の ESR 研究」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
16. 五十住武久、高橋優羽、南藤理花、下位幸弘、山岡敬子、アルブレヒト建、丸本一弘「デンドリマー型 TADF を用いた発光電気化学セルのオペランド ESR 計測：動作機構の研究」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
17. 高橋優羽、南藤理花、中島美華、下位幸弘、畠山琢次、丸本一弘「多重共鳴熱活性化遅延蛍光材料を用いた青色発光電気化学セルの電荷状態の研究」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
18. 王佳曦、薛冬、稲井聡志、下位幸弘、尾坂格、丸本一弘「有機電気化学トランジスタを用いた三元系高分子太陽電池材料の電荷挙動および分子配向の ESR 解析」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
19. 宗宮若葉、何文皓、下位幸弘、丸本一弘「有機半導体の構造異性体に依存した電荷状態に関するオペランド ESR 法を用いたマイクロ解明」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
20. 楊彦秋、陳奕舟、下位幸弘、丸本一弘「D149 色素増感ダブルペロブスカイト太陽電池の界面電荷状態のオペランド ESR 観測」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
21. 坂口泰基、岡部紗代、下位幸弘、丸本一弘「ペロブスカイト有機電気化学トランジスタの ESR 測定による電荷蓄積状態の研究」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
22. 何文皓、王佳曦、下位幸弘、丸本一弘「有機光電気化学トランジスタにおけるゲート電圧により蓄積された電荷に関する ESR 研究」第 64 回電子スピンサイエンス学会年会、桐生、2025.11.21-23
23. 丸本一弘「逆構造スズペロブスカイト太陽電池の界面電荷移動の ESR 直接観測」AndTech セミナー「逆構造型ペロブスカイト太陽電池」、オンライン、2025.11.14（招待講演）
24. 丸本一弘「ペロブスカイト太陽電池最前線：ESR による動作メカニズム解明と高効率化・長寿命化への指針」日刊工業新聞社セミナー、オンライン、2025.9.18（招待講演）
25. 内海雄太、佐藤睦、下位幸弘、丸本一弘「ドーパントフリー鉛ペロブスカイト太陽電池における正

- 孔輸送層-正孔収集層間の電荷拡散の電子スピン共鳴研究」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
26. 宗宮若葉、何文皓、下位幸弘、丸本一弘「有機電気化学トランジスタを用いた有機半導体の構造異性体の電荷状態の ESR 研究」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
27. 何文皓、王佳曦、坂口泰基、下位幸弘、丸本一弘「PEDOT:PSS チャネル有機電気化学トランジスタにおけるアスコルビン酸検出過程に関する ESR 研究」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
28. 坂口泰基、岡部紗代、下位幸弘、丸本一弘「ペロブスカイト有機電気化学トランジスタのオペランド ESR 測定による動作機構解明」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
29. 下位幸弘、丸本一弘、水野斎「(チオフェン/フェニレン)コオリゴマー BP2T-CN の結晶多形に関する DFT 計算」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
30. 張旭波、劉李祺、陳奕舟、佐藤睦、丸本一弘「Sn-Ge ペロブスカイト太陽電池の界面における電荷移動の直接観測」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
31. 金子慎太郎、佐藤睦、下位幸弘、チョンミンアン、中村智也、若宮淳志、丸本一弘「スズ鉛ペロブスカイト太陽電池の安定性向上メカニズムの解明に向けた界面修飾層の ESR 研究」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
32. 楊彦秋、陳奕舟、下位幸弘、丸本一弘「D149 色素を用いたダブルペロブスカイト太陽電池の劣化機構解析」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
33. Y. Chen, S. Yamaguchi, K. Inoue, A. Sato, K. Marumoto"ESR Study on PDINO Interfacial Modification Effects at ETL/Metal Interfaces"2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
34. 劉李祺、陳奕舟、佐藤睦、山口世力、丸本一弘「ペロブスカイト太陽電池における PEAI 界面修飾効果の ESR 解明」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
35. 高橋優羽、南藤理花、中島美華、下位幸弘、畠山琢次、丸本一弘「多重共鳴 TADF 材料を用いた青色 LEC のスピン状態のオペランド ESR 研究」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
36. 五十住武久、高橋優羽、南藤理花、下位幸弘、山岡敬子、アルブレヒト建、丸本一弘「黄色発光 dendrimer 型 TADF LEC に対するオペランド ESR を用いた電荷状態の解明」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
37. 川久保怜、岡部紗代、坂口泰基、下位幸弘、丸本一弘「n 型低分子有機半導体 PhC₂-BQQDI を用いた有機電気化学トランジスタの電荷蓄積に関する ESR 研究」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
38. 山崎渉吾、坂口泰基、何文皓、下位幸弘、丸本一弘「n 型高分子 BBL を用いた有機電気化学トランジスタにおける電荷キャリア挙動と分子配向の ESR 研究」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
39. 佐藤睦、山口世力、尾坂格、丸本一弘「太陽電池構造中における非フラーレン型アクセプタの配向性の ESR 分光法を用いた解析」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
40. 渡辺陽太、金子慎太郎、陳奕舟、佐藤睦、楊彦秋、下位幸弘、丸本一弘「スルホニウム塩を界面修飾に用いた鉛ペロブスカイト太陽電池における電荷移動の電子スピン共鳴による直接観測」2025 年第 86 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2025.9.7-10
41. 丸本一弘「ペロブスカイト太陽電池の高効率化」公益財団協和協会・時代を刷新する会 第 383 回 新エネルギー委員会、東京、2025.9.4（招待講演）
42. 丸本一弘「ペロブスカイト太陽電池の動作機構と高性能化」2025 年第 8 回サワケミナー、オンライン、2025.7.30（招待講演）
43. 丸本一弘「有機・無機電子材料・デバイスのスピン状態のオペランド電子スピン共鳴研究」大阪大学工学研究科電気電子情報通信工学専攻有機フレキシブルシステム領域セミナー、吹田、2025.6.17

(招待講演)

44. 丸本一弘「電子スピン共鳴を用いたペロブスカイト太陽電池向け低コスト正孔輸送材料の性能低下の原因の解明」AndTechセミナー「ペロブスカイト太陽電池 電子輸送層・正孔輸送層」、オンライン、2025.5.26 (招待講演)
45. 丸本一弘「ペロブスカイト太陽電池の動作メカニズム：電荷状態のオペランドマイクロ観測による高性能化指針」日刊工業新聞社セミナー、オンライン、2025.5.19 (招待講演)

(6) 基礎融合グループ部門

教員：

山本洋平（数理物質系・物質工学域・教授）

櫛田創（数理物質系・物質工学域・助教）

Vishal Kumar（数理物質系・物質工学域・助教）

研究員：

Heah Wey Yih（研究員）

佐々木史雄（非常勤研究員）

大学院生：

Kun Li（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D3）

Kariana Kusuma（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・D3）

中山颯大（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D2）

Nafees Umar Draz（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・D2）

青柳舜也（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・D1）

加藤雅都（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D1）

Sundas Rani（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・M2）

村上公一（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

奥村慎（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・M1）

高泰亮（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

崔智健（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

井上由崇（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

酒井隼人（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

高野直毅（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

田中結葵（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・M1）

Nina Dijoux（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

<研究成果>

当研究室では、 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、生体機能について研究を進めている。本年度は、（１）液晶分子配向をもつ固体球体からの RGM 円偏光発光のマイクロ観察、（２）インクジェット法により水中で応用可能な単分散でサイズ変調可能な合成ポリマー光共振器、（３）単一の蛍光色素を添加したホモキララルポル乳酸マイクロ球体からの青、緑、赤の誘起円偏光発光、（４）液体状態の電子強結合における流動分子ダイナミクスとエネルギー緩和経路、（５）高速応答 π イオンゲルトランジスタにおける一般性のあるデバイスデザインとドーピング制御特性、（６）光共鳴により観測された蒸気誘起負膨張ポーラスクロスリンクポリマー、について研究発表を行った。それらの内容を以下に示す。

【 1 】 液晶分子配向をもつ固体球体からの RGM 円偏光発光のマイクロ観察

内部にらせん状の液晶（LC）分子秩序を持つ微粒子は、効率的で高密度な円偏光発光（CPL）エミッターとして機能する。しかし、CPL 発光と内部 LC 分子秩序との結合は、単一粒子レベルでは十分に理解されていない。本研究では、LC モノマー RM23 と蛍光色素およびキララル添加剤（R/S-BPy）からマイクロ球を合成し、その CPL 特性を調べた。偏光顕微鏡観察と単一粒子レベルでの角度依存 CPL 観察により、各球内にランダムに分布した片巻きらせんドメインが明らかになり、観察角度に関わらず平均非対称性因子値 $|glum|$ が 0.05 の CPL 発光が得られた。CPL 発光の色は、球にドーブした蛍光色素を変化させることで 450~700 nm の範囲で調整可能である。

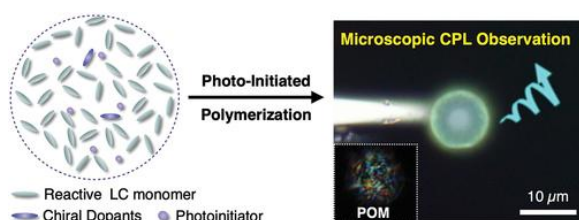


図 1 液晶分子配向をもつ固体球体からの RGM 円偏光発光の模式図。

【 2 】 インクジェット法により水中で応用可能な単分散でサイズ変調可能な合成ポリマー光共振器

インクジェット印刷法を用いて合成ポリマーから、高い単分散性とサイズ可変性を備えた微小球状光共振器を作製した。合成ポリマー粒子の高い表面平滑性と球形性により、水中でのウィスパーリングギャラリーモード (WGM) 光共振を介して粒子内部への効率的な光閉じ込めが実現し、化学および生物学的応用への適性の実証された。

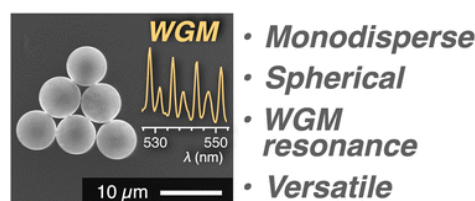


図 2 単分散でサイズ変調可能な合成ポリマー光共振器の電子顕微鏡写真。

【 3 】 単一の蛍光色素を添加したホモキラルポリ乳酸マイクロ球体からの青、緑、赤の誘起円偏光発光

キラルポリマーマトリックスに非キラル蛍光色素をドーピングすることで、円偏光発光 (CPL) を誘起することができる。本研究では、キラルポリ (L-乳酸) (PLLA) と蛍光色素 9,10-ビス(フェニルエチニル)アントラセン(BPEA)の超分子自己組織化により、CPL を発するマイクロ球体が形成されることを実証した。BPEA 濃度が増加するにつれて、蛍光色は青から緑、そして赤へと変化し、BPEA 二量体と J 凝集体の形成を示唆している。最も高い発光非対称性因子 (glum) 3.1×10^{-2} は、BPEA/PLLA

比が 0.1 のマイクロ球体懸濁液から得られた。

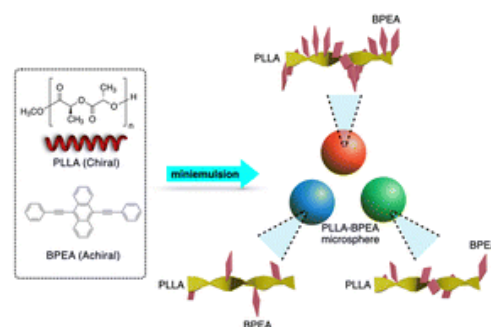


図 3 ホモキラルポリ乳酸マイクロ球体からの青、緑、赤の誘起円偏光発光の模式図。

【 4 】 液体状態の電子強結合における流動分子ダイナミクスとエネルギー緩和経路

近年、光と物質の強結合 (SC) は、分子の光物理ダイナミクスを制御する上で大きな可能性を示している。電子強結合 (ESC) 下でのレーザー誘起超高速ダイナミクスの研究には様々な分子が用いられてきたが、そのほとんどが固体分子試料を対象としたものであり、光と物質の混成状態が液相分子ダイナミクスに及ぼす影響は未解明であった。本研究では、ESC 下における液相分子の超高速ダイナミクスを初めて報告する。過渡吸収分光法による研究から、液相 ESC において高速減衰成分が出現することが明らかになった。これは、キャビティのない同じ液相系では観測されない。さらに、共鳴光カー効果 (ROKE) 分光法によって、脱分極速度が加速されることが示され、エネルギー移動がポラリトン寿命と分子回転時定数の両方よりもはるかに速く起こることが示唆された。これらの知見は、強結合分子の光物理特性に基づいて液相における光化学系を設計する上で重要な洞察を提供する。

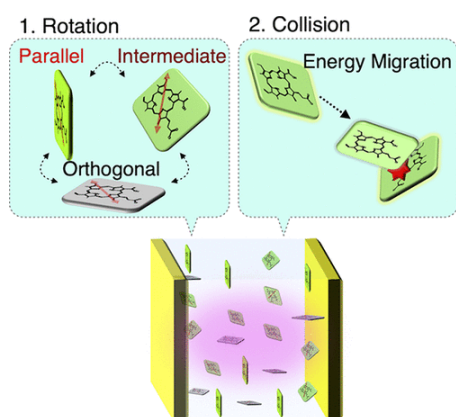


図 4 液体状態の電子強結合における流動分子ダイナミクスとエネルギー緩和経路の模式図。

【 5 】 高速応答 π イオンゲルトランジスタにおける一般性のあるデバイスデザインとドーピング制御特性

有機電気化学トランジスタ (OECT) は、その機械的柔軟性、生体適合性、および低電圧動作により、ウェアラブルデバイスやバイオエレクトロニクスデバイスで大きな注目を集めている。以前の論文では、高速応答超分子トランジスタとして、新しいクラスの OECT である π イオンゲルトランジスタ (PIGT) を紹介した。この概念実証にもかかわらず、電荷輸送と電気化学的性能を支配する構造と特性の関係は不明のままでした。さらに、デバイスの形状、材料の選択、ドーパント効果などの重要な要因は体系的に調査されていなかった。ここでは、PIGT の性能を決定する構造および電子パラメータを包括的に調べます。体積容量分光法により、電気化学的ドーピングメカニズムが明らかになり、ゲートバイアス下での電荷注入の異なる領域が明らかになった。高移動度チャネルポリマーとして位置規則性ポリ(3-ヘキシルチオフェン) (P3HT) を使用すると、PIGT は強化された相互コンダクタンス (2.96 mS) を示す。しかしながら、固有酸化によるオフセット電流によって、オン/オフ比が比較的低くなるという問題が生じる。この問題を解決するため、n 型ドーパントとして 1,3-ジメチル-2-フェニル-2,3-ジヒドロ-1H-ベンズイミダゾール (BIH) を採用したところ、デバイスの安定性とスイッチング特性が大幅に改善された (オン/オフ比

は約 3.4×10^4)。さらに、テラヘルツ時間領域分光法を用いて電荷輸送ダイナミクスを詳細に解析し、電気化学的変調とキャリア伝導との関連性を明らかにした。これらの最適化により、PIGT 向けの堅牢なデバイスプラットフォームが確立され、実用化の可能性が示された。

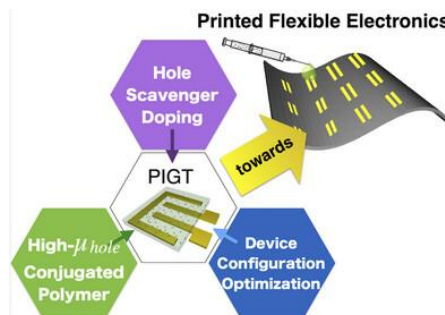


図 5 π イオンゲルトランジスタのデバイスデザインとドーピング制御特性の模式図。

【 6 】 光共鳴により観測された蒸気誘起負膨張ポーラスクロスリンクポリマー

有機蒸気を吸収すると負に膨張するメソポーラス架橋ポリマーマイクロ球 (PMS1:0.5) について報告する。マイクロ球は、架橋可能なモノマーとしてエチレングリコールジメタクリレート (EGDMA)、光開始剤として 2,2-ジメトキシ-2-フェニルアセトフェノン (DMPA)、テンプレートとして (+) -リモネン、蛍光色素としてナイルレッドを含む油相を乳化した後、光硬化と十分な洗浄を行うことで調製した。得られた PMS1:0.5 は、ブルナウアー・エメット・テラー表面積が $193 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ のメソ孔を有する。顕微鏡下で光励起すると、PMS1:0.5 は均一に分散したナイルレッドによる発光を示し、これは全反射によって粒子内に閉じ込められ、フォトルミネッセンススペクトルにおいてウィスパーリングギャラリーモード (WGM) 光共鳴を示す。WGM ピークは n-ヘキサン蒸気に曝されるとブルーシフトし、PMS1:0.5 の直径が -2.2% 収縮することを示している。走査型電子顕微鏡写真と N_2 吸着等温線は、PMS1:0.5 の収縮をさらに裏付けている。低濃度でのわずかなレッドシフトに続き、高濃度での急激なブルーシフトは、メソポア内での蒸気凝縮が細孔壁に対して内向きのラプラス圧を誘発し、それがポ

リママトリックスの弾性力を超えて収縮を引き起こすことを示唆している。

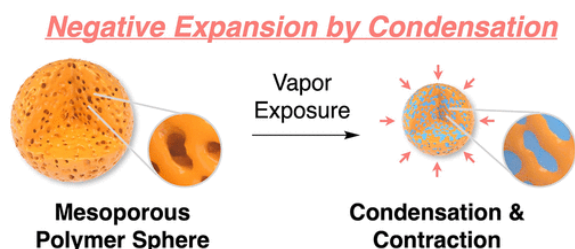


図 6 光共鳴により観測された蒸気誘起負膨張ポーラスクロスリンクポリマーの模式図。

<論文>

1. Kun Li, Chunya Fu, Hiroshi Yamagishi*, Sota Nakayama, Wey Yih Heah, Yixiang Cheng*, Reiko Oda, Wijak Yospanya, Yohei Yamamoto* “Microscopic observations of RGB circularly polarized luminescence from solid microspheres with liquid crystalline molecular order” Sci. Technol. Adv. Mater. 2025,26,2509486.DOI:10.1080/14686996.2025.2509486
2. Kariana Kusuma Dewi, Hiroshi Yamagishi,* Wey Yih Heah, Sooyeon Kim, Asuma Kubono, Yuichi Taniguchi, Yohei Yamamoto* “Monodisperse and size-modulable spherical optical resonators from synthetic polymers by inkjet printing toward applications under water” Mater. Adv. 2025, 6, 5030-5034. DOI: 10.1039/D5MA00176E
3. Suharman, Sota Nakayama, Wijak Yospanya, Piyanan Pranee, Reiko Oda, Hiroshi Yamagishi, Yohei Yamamoto* “Induced blue, green, and red-colour circularly polarized luminescence from single dye-doped homochiral poly(lactic acid) microspheres” J. Mater. Chem. C. 2025, 13, 13659-13663. DOI: 10.1039/D5TC01506E
4. Soh Kushida,* Kuidong Wang, Marcus Seidel, Yohei Yamamoto, Cyriaque Genet, Thomas W. Ebbesen “Fluidic Molecular Dynamics and Energy Relaxation Pathways in Solution-State Electronic Strong Coupling Using a High-Mode-Number Cavity” J. Phys. Chem. Lett.2025,16,8570–8579 .DOI:10.1021/acs.jpcllett.5c02008

5. Masato Kato, Soh Kushida,* Nafces Umar Draz, Dan Kyotani, Emanuel Smarsly, Kyota Yoshinaga, Wenhao He, Uwe H. F. Bunz, Kazuhiro Marumoto, Tatsuya Mori, Yohei Yamamoto* “Rational Device Design and Doping-Controlled Performance in Fast-Response π -Ion Gel Transistors” Adv. Funct. Mater. 2026, e21674. DOI: 10.1002/adfm.202521674
6. Kun Li, Hiroshi Yamagishi, Osamu Oki, Takahiro Kondo, Yohei Yamamoto* “Vapor-induced Negative Expansion of Porous Cross-linked Polymers Observed by Optical Resonance” J. Am. Chem. Soc. accepted Feb. 23, 2026 DOI: 10.1021/jacs.5c20173
7. Xinyue Sun, Zhan Su, Shoujie Ye, Luoting Ynag, Xiaobo Hu, Xiaohua Wang, Vishal Kumar, Guoen Weng* Yohei Yamamoto,* and Shaoqiang Chen* “Picosecond low-threshold random lasing in polymer passivated CsPbBr₃ thin films” APL Mater. 14, 031113 ,2026 DOI: 10.1063/5.0319503

<総説・解説>

1. 山本洋平、櫛田創 「化学」＋「光学」＝「オプトケミストリー」高分子 75 (1) pp29- 34 (2026)
2. 加藤雅都、山岸洋、山本洋平 「インクジェットプリンタによる液滴レーザーディスプレイの開発」 「車載テクノロジー」2025, 12, pp58- 62 技術情報協会 (2025.5)

<特許>

名称: チクソトロピー液体及びその製造方法、並びに、接着剤及び光学コーティング材料

出願人: 筑波大学

発明者: 櫛田創、村上公一、山本洋平

出願番号: 特願 2025-144545 (出願日: 2025.9.1)

<学会発表>

国際会議

1. Meriem Bejaoui, Wey Yih Heah, Aprill Kee Oliva Mizushima, Mitsutoshi Nakajima, Hiroshi Yamagishi, Yohei Yamamoto, and Hiroko Isoda “KERATIN

- MICROSPHERES AS PROMISING TOOL FOR TARGETING FOLLICULAR GROWTH” (Poster) (Best Poster Award) MPIC2025 Kuara Lumpur, Malaysia 2025.4.29-30
2. Yohei Yamamoto “Supramolecular Design of Organic/Polymeric Micro Photoemitters for Optical and Laser Applications” (Plenary) MPIC2025 Kuara Lumpur, Malaysia 2025.4.29-30
 3. Shunya Aoyagi, Hiroshi Yamagishi, Tsuneaki Sakurai, Yoichi Kobayashi, Yohei Yamamoto “High gain, low loss, and low-threshold spherical organic laser based on highly miscible excited-state intramolecular proton transfer dyes” ISMSC 2025 京都 2025.5.25-30
 4. Masato Kato, Hiroshi Yamagishi, Yohei Yamamoto “Electrically Tunable Organic Droplet Laser” ISMSC 2025 京都 2025.5.25-30
 5. Kariana Kusuma Dewi, Hiroshi Yamagishi, Yohei Yamamoto “Size-modulable and monodisperse micro-resonator fabricated by inkjet printing toward applications under water” (Poster) ISMSC 2025 京都 2025.5.25-30
 6. Kuwabara, Takaki Kanbara, Wijk Yospanya, Reiko Oda, Yohei Yamamoto “Near-unity angular anisotropy of circularly polarized luminescence from microspheres of monodispersed chiral conjugated polymer” (Poster) ISMSC 2025 京都 2025.5.25-30
 7. Gao Qinyao, Hiroshi Yamagishi, Yohei Yamamoto “Highly Sensitive Nanoporous Microresonator Sensors for Underwater Chemical Detection International Symposium on Micro-Nano Materials and Devices” East China Normal University, Shanghai, China 2025.7.21
 8. Cui Zhijian, Vishal Kumar, Yohei Yamamoto “2D lead halide perovskite (PEA)₂PbBr₄ micro-crystal for lasing application” International Symposium on Micro-Nano Materials and Devices” East China Normal University, Shanghai, China 2025.7.21
 9. Sundas Rani, Soh Kushida, Yohei Yamamoto Chiral “Poly(phenylene ethynylene)s: Synthesis, Characterization, and Optical Functionality” International Symposium on Micro-Nano Materials and Devices” East China Normal University, Shanghai, China 2025.7.21
 10. Masato Kato, Hiroshi Yamagishi, Yohei Yamamoto “Electrically Switchable Organic Droplet Laser for Laser Display Application” International Symposium on Micro-Nano Materials and Devices” East China Normal University, Shanghai, China 2025.7.21
 11. Kun Li, Yohei Yamamoto “Microscopic observations of RGB circularly polarized luminescence from solid microspheres with liquid crystalline molecular order” International Symposium on Micro-Nano Materials and Devices East China Normal University, Shanghai, China 2025.7.21
 12. Yohei Yamamoto “Supramolecular assembly of π -conjugated and natural polymers for optical and bio applications” International Symposium on Micro-Nano Materials and Devices East China Normal University, Shanghai, China 2025.7.21
 13. Yohei Yamamoto “Supramolecular Design of Organic/Polymeric Micro Photoemitters for Optical and Laser Applications” Workshop on Materials Innovation and Healthcare IIT Bombay, India 2025.7.28
 14. Yuki Tanaka, Wey Yih Heah, Hiroshi Yamagishi, Yohei Yamamoto “Self-assembly of natural polymers” (Poster) SACSEM 2025 UKM Malaysia 2025.10.28-29
 15. Nafees Umar Draz, Soh Kushida, Yohie Yamamoto “Mode Number Dependent Photophysical Dynamics of Strong Coupling” (Poster) SACSEM 2025 UKM Malaysia 2025.10.28-29
 16. Wey Yih Heah, Meriem Bejaoui, Aprill Kee Oliva Mizushima, Mitsutoshi Nakajima, Hiroshi Yamagishi, Yohei Yamamoto, Hiroko Isoda KERATIN MICROSPHERES AS PROMISING TOOL FOR TARGETING FOLLICULAR GROWTH (Poster) SACSEM 2025 UKM Malaysia 2025.10.28-29
 17. Hayato Sakai, Sota Nakayama, Hiroshi Yamagishi, Soh Kushida, Yohei Yamamoto Site-selective formation of twisted-bipolar alignment of chiral conjugated polymer on the colloidal molecules (Poster) SACSEM 2025 UKM, Malaysia 2025.10.28-29
 18. Kariana Kusuma Dewi, Hiroshi Yamagishi, Yohei Yamamoto Monodisperse and size-modulable spherical optical resonators from synthetic polymers by inkjet printing toward biosensing application (Poster) SACSEM 2025 UKM, Malaysia 2025.10.28-29
 19. Sota Nakayama “Chiral polymeric micro-rugby balls”

- (Oral) SACSEM 2025 UKM Malaysia 2025.10.28-29
20. Yohei Yamamoto “Supramolecular Design of Organic/Polymeric Micro Photoemitters for Optical and Laser Applications” SACSEM 2025 UKM, Malaysia 2025.10.28-29
 21. Yohei Yamamoto “Supramolecular Design of Organic/Polymeric Micro Photoemitters for Optical and Laser Applications” IISc-Tsukuba Symposium ベンガロール、インド 2025.11.13-14
 22. Sota Nakayama, Hiroshi Yamagishi, Osamu Oki, Soh Kushida, Junhui Chen, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, Wijak Yospanya, Reiko Oda, Yohei Yamamoto “Near-unity angular anisotropy of circularly polarized luminescence from chiral polymeric microsphere” Pacificchem2025 Honolulu, Hawaii, USA 2025.12.15-20
 23. Soh Kushida, Koichi Murakami, Yohei Yamamoto “Rotational Brownian motion of chiral molecules probed by pump polarization angle-dependent optical Kerr effect spectroscopy” Pacificchem2025 Honolulu, Hawaii, USA 2025.12.15-20
 24. Yohei Yamamoto “Unexplored optical functions from self-assembled chiral organic molecules and polymers” Pacificchem2025 Honolulu, Hawaii, USA 2025.12.15-20
 25. Yohei Yamamoto “Synchronous assembly of chiral skeletal single-crystalline microvessels” Pacificchem2025 Honolulu, Hawaii, USA 2025.12.15-20
 26. Yohei Yamamoto “Supramolecular assembly organic molecules and polymers for optical and bio applications” STTT Bandung Seminar STTT Bandung, Indonesia 2026.1.22
- 国内会議
1. Koichi Murakami, Soh Kushida, Yohei Yamamoto “Pump polarization Angle Dependent Optical Kerr Effect response of chiral molecules” (Poster) Molecular Chirality 2025 MC2025, 名古屋 2025.5.16-17
 2. Sota Nakayama, Hiroshi Yamagishi, Osamu Oki, Soh Kushida, Junhui Chen, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, Wijak Yospanya, Reiko Oda, and Yohei Yamamoto “Near-unity angular anisotropy of circularly polarized luminescence from microspheres of monodispersed chiral conjugated polymer” (Poster) (Best Poster Award) Molecular Chirality 2025 MC2025, 名古屋 2025.5.16-17
 3. Hayato Sakai, Sota Nakayama, Hiroshi Yamagishi, Soh Kushida, Yohei Yamamoto (ポスター) “Site-selective formation of chiral conjugated polymer colloidal molecules” Molecular Chirality 2025 MC2025, 名古屋 2025.5.16-17
 4. Kun Li, Hiroshi Yamagishi, Sota Nakayama, Wey Yih Heah, Yixiang Cheng, Reiko Oda, Wijak Yospanya, Yohei Yamamoto “Site-selective formation of chiral conjugated polymer colloidal molecules” Molecular Chirality 2025 MC2025, 名古屋 2025.5.16-17
 5. Makoto Okumura, Soh Kushida, Kenichi Yuyama, Yohei Yamamoto “Photo-induced Orientation and Rotation of Chiral Polymer Microspheres with Optical Tweezers” (Poster) (Best Poster Award) Molecular Chirality 2025 MC2025, 名古屋 2025.5.16-17
 6. Yohei Yamamoto 「キラル有機分子・高分子の自己組織化と未踏光機能」”Unexplored optical functions from self-assembled chiral organic molecules and polymers” (Invited) Molecular Chirality 2025 MC2025, 名古屋 2025.5.16-17
 7. 阪田響、秋吉一成、高谷光、田中結葵、Heah Wey Yih、山本洋平、佐々木善浩「ナノゲル複合化ケラチンマイクロスフェアを基盤とするハイブリッド細胞スフェロイドの構築」高分子学会年次大会（オンライン） 2025.5.19-23
 8. 山本洋平 「多糖類および生体高分子の自己組織化と光機能・バイオ応用」（招待講演）澱粉研究懇談会（伊東） 2025.6.5-7
 9. 山本洋平「ケラチンマイクロ球体ゲルの発毛・育毛効果と事業化」数理学際セミナー（筑波大学） 2025.7.14
 10. 辻本智行、金水縁、窪野明日磨、谷口雄一、山本洋平、山岸洋「抗体を担持した微小球状粒子の光指紋に基づくプロテオミクス」日本プロテオーム学会 2025 年大会 かずさアカデミアパーク木更津 2025.8.6-8
 11. 山本洋平「食品成分の自己組織化：マイクロ構造体の形成と光・生体機能」（招待講演）日本食品工学会シンポジウム（つくば国際会議場） 2025.8.7-8
 12. 山本洋平、磯田博子「ケラチンマイクロ球体ゲルによる発毛・育毛効果」日本美容皮膚科学会（大阪国際会議場） 2025.8.16-17
 13. Koichi Murakami, Soh Kushida, Yohei Yamamoto

- “Observation of Asymmetric Rotational Brownian Motion of Chiral molecules via Polarization Angle Dependent Optical Kerr Effect spectroscopy” (Poster) 光化学討論会 立教大学 2025.9.4-6
14. Shoma Hino, Soh Kushida, Takuji Hatakeyama, Yohei Yamamoto “Realizing Light-Matter Strong Coupling with High Organic dye Concentrated WGM Resonator” (Poster) 光化学討論会 立教大学 2025.9.4-6
15. KATO, Masato; TAKADA, Naoki; BABA, Soumei; YAMAMOTO, Yohei; YAMAGISHI, Hiroshi “Electrically Tunable Organic Droplet Laser for Full-color Laser Display” 光化学討論会 立教大学 2025.9.4-6
16. 奥村慎、櫛田創、柚山健一、山本洋平「光ピンセットによるキラルポリマー球体の光誘起配向または回転制御」(ポスター) 光化学討論会 立教大学 2025.9.4-6
17. 櫛田創、村上公一、山本洋平「ポンプ偏光角依存光カー効果分光法によるキラル分子の回転ブラウン運動の観測」光化学討論会 立教大学 2025.9.4-6
18. 柚山健一、奥村慎、櫛田創、山本洋平「楕円偏光で光捕捉されたねじれ双極微粒子に働く力の解析」光化学討論会 立教大学 2025.9.4-6
19. Nafees U. Draz, Soh Kushida, Yohei Yamamoto “Mode Number Dependent Photophysical Dynamics of Strong Coupling” (Poster) 光化学討論会 立教大学 2025.9.4-6
20. 加藤 雅都、宮川 順乃介、野口 俊一郎、高田 尚樹、馬場 宗明、Jer-Shing Huang, Ankit Kumar Singh、山本 洋平、山岸 洋 「電氣的にスイッチング可能な有機液滴レーザーの開発とフルカラーレーザーディスプレイへの応用」応用物理学会 名城大学 2025.9.7-10
21. 山 本 洋 平 “Supramolecular Design of Organic/Polymeric Micro Photoemitters for Optical and Laser Applications” (招待講演) 第 75 回錯体化学討論会 長崎大学 2025.9.15-17
22. 山本洋平 「マイクロスケルタル結晶やキラルマイクロ球体の形成」(招待講演) 日本物理学会第 80 回年次大会 広島大学東広島キャンパス 2025.9.16-19
23. 村上 公一、櫛田創、野口 秀一郎、正井 宏、寺尾潤、山本洋平「深共晶溶媒のミクロな粘度とマクロな粘度の逆転現象の解明」(ポスター) 第 74 回高分子討論会 関西大学 2025.9.16-19
24. 村上 公一、櫛田創、山本洋平「偏光角度依存光カー効果分光法を用いたキラル分子の非対称ブラウン回転運動の観測」(口頭) 第 74 回高分子討論会 関西大学 2025.9.16-19
25. 日野翔午、櫛田創、山本洋平「高濃度有機色素含有 WGM 共振器における光物質強結合の実現」(ポスター) 高分子討論会 関西大学 2025.9.16-19
26. 酒井隼斗、中山颯大、山岸洋、櫛田創、山本洋平「キラル共役ポリマーの複合粒子中の分子配向形成」(ポスター) 第 74 回高分子討論会 関西大学 2025.9.16-19
27. Makoto Okumura, Soh Kushida, Ken-ichi Yuyama, Yohei Yamamoto “Control of optical chiral alignment and rotation of twisted bipolar sphere” (ポスター) 第 74 回高分子討論会 関西大学 2025.9.16-19
28. 山本 洋平「ケラチンマイクロ球体ゲルの発毛・育毛効果の発見と事業化」(招待講演) 金沢大学起業家講座 (金沢大学) 2025.10.3
29. 井上由崇、櫛田創、山本洋平「発光性 TTM ラジカル誘導体の光ダイナミクスと WGM 測定」(ポスター) 有機コヒーレントフォトンクス研究会 宮崎婦人会館 2025.10.10-12
30. 勝見耕太郎、山本洋平「AFM 装置を用いた有機分子結晶の位置制御」(ポスター) 有機コヒーレントフォトンクス研究会 宮崎婦人会館 2025.10.10-12
31. 高野 直毅、山本洋平「異なる蛍光のパラシクロファンによるお椀結晶の重ね合わせ」(ポスター) 有機コヒーレントフォトンクス研究会 宮崎婦人会館 2025.10.10-12
32. Nina Dijoux, Katia Mazet, Heah Wey Yih, Yamamoto Yohei “Characterization and optical properties of Alaska pollock-derived gelatin’s microspheres” (ポスター) 有機コヒーレントフォトンクス研究会 宮崎婦人会館 2025.10.10-12
33. Nafees Umar Draz, Soh Kushida, Yohei Yamamoto “Mode Number Dependent PhotoPhysical Dynamics of Electronic Strong Coupling” (ポスター) 有機コヒーレントフォトンクス研究会 宮崎婦人会館 2025.10.10-12
34. 村上公一、櫛田創、山本洋平「アミノ酸由来チクソトロピー性材料の粘度変化機構の解明」(ポスター) 有機コヒーレントフォトンクス研究会 宮崎婦人会館 2025.10.10-12

35. 奥村慎、櫛田創、山本洋平「キラル球体の光誘起回転制御」(口頭)有機コヒーレントフォトンクス研究会 宮崎婦人会館 2025.10.10-12
36. 青柳舜也、Abhrodeep、櫛田創、山本洋平「球体共振器における、トレンチ構造によるモード分裂とQ値の向上」(口頭)有機コヒーレントフォトンクス研究会 宮崎婦人会館 2025.10.10-12
37. 田谷颯大、櫛田創、山本洋平「光カー効果(OKE)分光法を用いたキラル分子の回転ダイナミクスに関する研究」(ポスター)有機コヒーレントフォトンクス研究会 宮崎婦人会館 2025.10.10-12
38. 日野翔午、櫛田創、畠山琢次、山本洋平「有機色素のコヒーレント発光を目指した WGM 共振器での光物質強結合」(ポスター)有機コヒーレントフォトンクス研究会 宮崎婦人会館 2025.10.10-12
39. Vishal Kumar, Soh Kushida, Takeru Inoue, Keisuke Iwata, Hiroshi Yamagishi, Hayato Tsuji, Yohei Yamamoto “Ultrafast Energy Transfer Dynamics and Lasing Application of a Coplanar Donor-Acceptor-Donor Molecule”(口頭)有機コヒーレントフォトンクス研究会 宮崎婦人会館 2025.10.10-12
40. 櫛田創「光カー効果分光法を用いた分子液体の特異な緩和」(口頭)有機コヒーレントフォトンクス研究会 宮崎婦人会館 2025.10.10-12
41. 山本洋平、礪田博子「ケラチンマイクロ球体ゲルの発毛・育毛効果」(一般演題)日本臨床毛髪学会 TKP ガーデンシティ御茶ノ水 東京 2025.11.8-9
42. Koichi Murakami, Soh Kushida, Shun-ichiro Noguchi, Hiroshi Masai, Yohei Yamamoto “Elucidation of the Viscosity Change Mechanism in Deep Eutectic Solvents Derived from Amino Acids”(Poster) CEMSupra 2026 東京大学 東京 2026.1.15-16
43. 山本洋平「自己組織化トポロジカル有機レーザーとオプトケミストリーへの展開」CREST 合同セミナー 筑波大学 つくば 2026.1.19
44. 山本洋平「階層的分子集合構造がもたらす新規光学機能とバイオ応用」 π 分子複雑性第4回融合ワークショップ NIMS つくば 2026.2.4
45. 井上由崇、中村 和宏、アルブレヒト 建、櫛田 創、山本 洋平「発光性ラジカル誘導体のエネルギーダイナミクスと共鳴発光」(ポスター)第73回応用物理学会春季学術講演会 東京科学大学 大岡山キャンパス 2026.3.15-18
46. 奥村慎、櫛田 創、柚山健一、山本 洋平「光ピンセットによるねじれ双極配向微粒子の配向・回転制御」(口頭)第73回応用物理学会春季学術講演会 東京科学大学 大岡山キャンパス 2026.3.15-18
47. 村上公一、櫛田 創、野口 俊一郎、正井 宏、山本洋平「プロリン-乳酸深共晶溶媒におけるバルクと分子スケール粘性の乖離」(口頭)第73回応用物理学会春季学術講演会 東京科学大学 大岡山キャンパス 2026.3.15-18
48. 辻本智行、金水縁、窪野明日磨、谷口雄一、山本 洋平、山岸洋「抗原抗体反応と光指紋を用いた新しいプロテオミクス手法の開発」日本化学会第106回春季年会 日本大学理工学部 船橋キャンパス 2026.3.17-20
49. 鈴木 菜緒・胡 紫薇・中山 颯大・櫛田 創・山本 洋平・ヨッスパンヤー ウィジャック・小田 玲子・神原 貴樹・桑原 純平「キラル側鎖を有するチエノピロールジオン含有共役高分子のキロプティカル特性」日本化学会第106回春季年会 日本大学理工学部 船橋キャンパス 2026.3.17-20

基礎融合グループ部門

教員：

中村貴志（数理物質系・化学域・教授）

研究員：

Alisha Kamra（外国人受託研究員）

大学院生：

Mads Nybo Sørensen（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・D3）

胡高興（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・D2）

上坂守（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・D1）

趙佳晨（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・D1）

川本優也（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・D1）

劉譯夫（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・D1）

李銘泰（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・D1）

遠藤智也（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）

金子竜大（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）

郭焯彤（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）

熊澤和也（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）

椎名彩斗（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）

菅原孝太郎（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）

日置なな実（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M2）

関航太（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M1）

劉席坡（数理物質科学研究群・化学学位プログラム・M1）

中村貴志

<研究成果>

当研究室では、持続可能な社会に貢献できる革新的分子の創出とその機能開拓を推進している。特に、独自の環状多量体をデザイン・合成し、分子認識などの機能を制御して新しい物質を作り出す超分子の研究を行っている。このような超分子は、分子認識に基づくセンサーや分離精製などの用途だけでなく、分子捕捉能を活かした選択的反応を実現する場として、将来の発展が期待される。本年度は、以下の【 1 】【 2 】の研究成果を挙げることができた。

【 1 】 多点での金属原子-炭素原子間の配位結合により天然由来オレフィン化合物を認識する大環状分子^[論文 1]

超分子化学では、ファンデルワールス力・水素結合・配位結合などの可逆な結合や相互作用でゲスト分子を認識するホスト分子が開発されている。その一つとして、剛直な環骨格の内孔に複数の金属の配位サイトを集積した大環状多核錯体は、多点での配位結合によって精密な分子認識を実現できる。例えば、当研究室では、*N,N,O* 型 3 座キレート配位部位である **pap** (pyridilidene-aminophenol) の環状六量体配位子 **hexapap** を合成し、その亜鉛およびパラジウム六核錯体がそれぞれジカルボン酸とジアミンを多点配位結合で認識できることを報告している (*Nat. Commun.* **2017**, *8*, 129; *Inorg. Chem.* **2023**, *62*, 12886)。しかし、**pap** は 1 価の負電荷を持つ配位子であり、2 価の金属イオンとの錯体は正電荷を持つため、極性溶媒にしか溶解せず、ゲスト分子の配位が溶媒と競合する問題が生じていた。そこで本研究では、2 価の金属イオンとの錯体が電氣的に中性となる配位子として *O,N,O* 型 3 座キレート配位部位 **sap** (salicylidene-aminophenol) に着目し、**sap** を繰り返し単位とする環状多量体の合成およびそのパラジウム四核錯体 **Pd-tetrasap** の分子捕捉能について調べた (図 1a)。

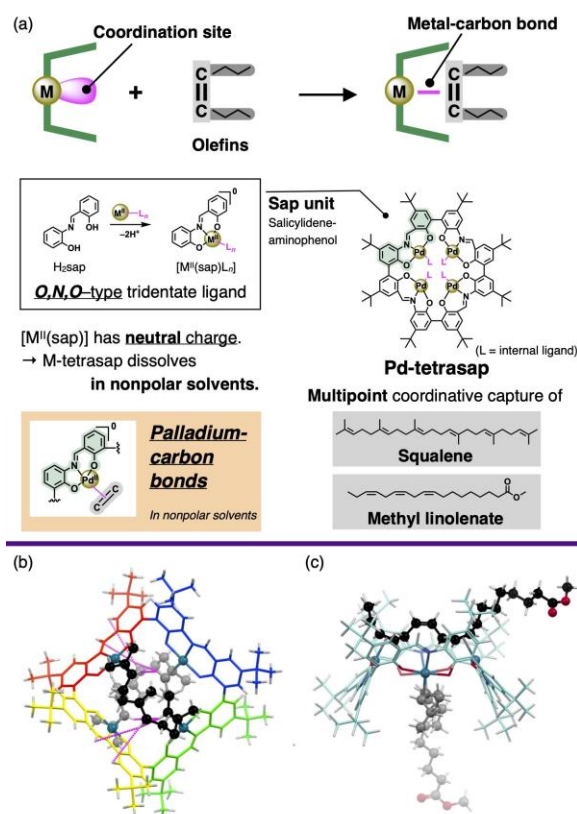


図1 (a) オレフィンと金属原子との配位結合により分子を捕捉する大環状錯体 Pd-tetrasap. (b) スクアレンを捕捉した Pd-tetrasap の構造. (c) リノレン酸メチル 2 分子を捕捉した Pd-tetrasap の構造.

合成した Pd-tetrasap は電気的に中性であるため、クロロホルムやベンゼンなどの配位性の低い溶媒に対して高い溶解性を示した。Pd-tetrasap の配位捕捉能を調べるために、ゲスト分子として、コレステロール生合成の前駆体であり、重要なバイオマス化合物の 1 つである、6 つの C=C 二重結合を持つ直鎖イソプレノイドのスクアレン ($C_{30}H_{50}$) を加えた。その結果、重クロロホルムおよび重ベンゼン中で 1 分子のスクアレンが 1 つの Pd-tetrasap に捕捉された 1:1 ホストゲスト複合体が生成することが 1H NMR 分析および質量分析から判明した。また、単結晶 X 線構造解析から構造を同定したところ、スクアレンの 6 つの C=C 二重結合のうち、末端から 1, 3, 4, 6 番目の 4 つの二重結合がパラジウムに金属炭素結合で配位していることがわかった。スクアレンはらせんを巻くように Pd-tetrasap に捕捉されていることが判明した

(図 1b)。

次に、3 つの *cis* 型 C=C 二重結合を持つ不飽和脂肪酸誘導体であるリノレン酸メチルをゲスト分子として重クロロホルム中で加えると、1:2 ホストゲスト複合体の形成を支持する 1H NMR スペクトルが得られた。2 次元 NMR 分析を用いて 1H NMR シグナルの帰属を行った結果、リノレン酸メチルの 9 位と 15 位の 2 つの C=C 二重結合がパラジウムに金属炭素結合で配位していることがわかった (図 1c)。

以上のように Pd-tetrasap は複数の C=C 二重結合を持つオレフィン化合物を金属炭素結合で精密に捕捉できるため、今後は分子認識能を活かした超分子触媒への展開が期待される。

【 2 】アニオン認識能をもつアミド- α -シクロデキストリン誘導体の合成と二量体形成^[論文 2]

α, β, γ -シクロデキストリン (CD) は、それぞれグルコースの環状 6, 7, 8 量体であり、疎水効果により水中でゲスト分子を認識する。当研究室ではこれまでに、*p*-トリルアミド- β -シクロデキストリンの 7 つのアミド基が非対称な水素結合ネットワークを形成することで、ホスホン酸水素イオンを選択的に認識することを報告している (*Chem. Commun.* **2019**, 55, 3872)。アミドシクロデキストリン (アミド CD) によるアニオン認識では、水素結合ネットワークの形成が重要な要素となるため、アミド基の数や空間的配置は認識特性に強く影響すると考えられる。

近年、複数の分子レセプター部位を連結する手法は、特徴的な複合体を構築し、ゲスト分子の結合状態を制御する戦略として注目されている。ここで、イミン結合は動的共有結合であり、大きな構造体を平衡反応後の安定な生成物として得られる。そのため、イミン結合を用いて複数の分子認識部位を連結することで、互いの認識部位が連動して機能を発揮する性質をもつ超分子の形成が期待される。

本研究では、環状 6 量体であるアミド- α -シクロデキストリン (アミド- α -CD) を合成し、6 つのアミド基に由来するアニオン認識を検

討した。さらに、6つのホルミル基をもつアミド- α -CD とジアミンとのイミン結合形成により二量体を合成し、2つのアニオン認識部位における認識特性の解明を目指した。

はじめに、芳香環のパラ位にそれぞれメチル基、ブロモ基、ホルミル基が結合したアミド- α -CD を合成した (図 2a)。 p -ブロモフェニルアミド- α -CD の単結晶 X 線構造解析から、分子内で隣り合ったアミド基の 3 組のペアが水素結合を形成していることが明らかとなった。また、芳香環は直立して配列した構造をとっていた (図 2b)。

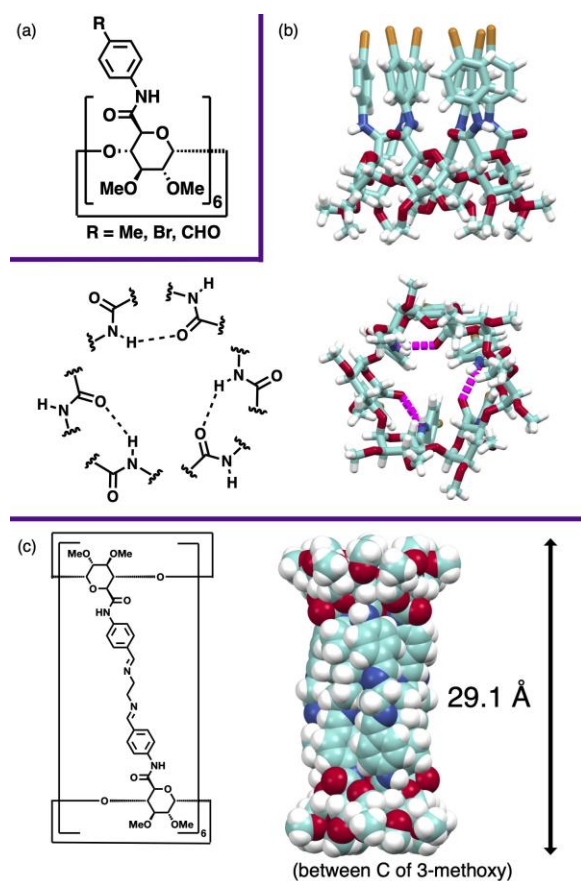


図 2 (a) アミド- α -シクロデキストリンの構造式. (b) p -ブロモフェニル基をもつアミド- α -シクロデキストリンの構造. (c) p -ホルミルフェニル基をもつアミド- α -シクロデキストリンをイミン結合により二量化した二量体の構造.

次に、アミド- α -CD のクロロホルム中でのアニオン認識実験を行った。 p -トリルアミド- α -CD はメチルホスホン酸水素イオンと弱く結合したが、 p -ブロモフェニルアミド- α -CD

1b は酢酸イオン、メチルホスホン酸イオン、硝酸イオン、ハロゲン化物イオンと中程度の強さで結合した。一方、 p -ホルミルフェニルアミド- α -CD **1c** は、アニオンとの親和性が最も強く、酢酸イオン、メチルホスホン酸イオン、硝酸イオン、 p -トルエンスルホン酸イオン、ハロゲン化物イオンを包接した。以上の結果から、芳香環のパラ位に結合した置換基の電子求引性によって、アミドシクロデキストリンのアニオン認識能を調整できることが示された。

続いて、ジアミンとの反応によるイミン結合形成を用いた多量化を行った。6つのホルミル基をもつアミド- α -CD に対してエチレンジアミンまたは p -キシリレンジアミンを 3 当量加え、重クロロホルム中、50 °C で 1 時間加熱したところ、2 分子の CD がイミン結合で連結したホモ二量体を選択的に形成した。さらに、エチレンジイミン二量体の単結晶の X 線構造解析の結果から、隣り合った 2 つのアミド基同士が互いに水素結合を形成しており、芳香環は直立した構造をとることが示された (図 2c)。

重クロロホルム/重アセトニトリル = 5/1 中で、 p -キシリレンジイミン二量体のアニオン認識実験を行った。 p -キシリレンジイミン二量体は、2つのアニオン認識部位において、酢酸イオン、安息香酸イオン、硝酸イオン、メチルホスホン酸イオンと 1:1 包接体および 1:2 包接体を形成したが、塩化物イオンや臭化物イオンとは包接体を形成しなかった。これらのアニオンに対する協働性パラメータ α は 1 に近い値を示し、2つの認識部位におけるアニオン包接がほぼ独立しているか弱く正の協働性があるという結果が示された。なお、同じ溶媒中における p -ホルミルフェニルアミド CD の単量体のアニオン認識実験を行ったところ、単量体は酢酸イオン、安息香酸イオン、硝酸イオン、メチルホスホン酸イオンを包接しただけでなく、 p -キシリレンジイミン二量体が包接しなかった塩化物イオンや臭化物イオンも包接した。以上の結果から、二量体は単量体とは異なる選択性を発現することが明らかになった。

< 論文 >

1. K. Sugawara, K. Omoto, T. Nakamura "Multipoint Coordinative Capture of Olefinic Substrates Utilizing Metal-Carbon Bonds by Macrocyclic Complex" *Angew. Chem. Int. Ed.*, **64**, e202505734 (2025).
2. T. Endo, T. Nakamura "Synthesis and Recognition Properties of Amide- α -Cyclodextrin Derivatives and Their Imine-Bonded Dimers" *J. Org. Chem.*, **90**, 11452–11459 (2025).
3. T. Sugai, M. Oyanagi, T. Nakamura, A. Momotake, N. Kutsumura "An Odorless and Air-Stable Thionating Reagent for Broad Scope Thioamide Synthesis without H₂S Emission" *J. Org. Chem.*, **90**, 14383–14394 (2025).
4. S. Das, P. D. Pattanayak, T. Sasamori, T. Nakamura, R. Dinda "Organotin(IV) Azo Hydrazonates as Lysosome-Targeted Imaging and Anticancer Agents" *Chem. Asian. J.*, **21**, e00912 (2026).
5. T. Nakamura, X. Wang, A. Shiina, M. Kondo "Figure-Eight Macrocyclic Salen Dimers Synthesized from *ortho*-Phenylene-Bridged Bissalicylaldehyde" *Inorg. Chem.*, **65**, 7121–7125 (2026).

< 学会発表 >

国際会議

1. Takashi Nakamura "Multipoint Coordinative Recognition Using Macrocyclic Oligomers of Tridentate Chelate Complexes" *The 19th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry 2025 (ISMSC2025)*, P1B_136, ROHM Theatre Kyoto, Kyoto, Japan (May 25th–30th, 2025). (poster)
2. Yi-Fu Liu, Guzman Gil-Ramirez, Takashi Nakamura "Controlling Coordination Numbers of Lutetium to Regulate Overall Framework of Salen Macrocyclic Complexes" *The 19th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry 2025 (ISMSC2025)*, P2A_45, PNB_4, ROHM Theatre Kyoto, Kyoto, Japan (May 25th–30th, 2025). (poster)
3. Yuya Hokimoto, Takashi Nakamura "Unsymmetric Conversion of Pyridylbenzoxazole Macrocyclic Trimer and Its Metal Complexation" *The 19th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry 2025 (ISMSC2025)*, P2A_73, PNB_15, ROHM Theatre Kyoto, Kyoto, Japan (May 25th–30th, 2025). (poster)
4. Takashi Nakamura "Host-Guest Chemistry of Amide- and Carboxy-Cyclodextrins" *12th Asian Cyclodextrin Conference*, IL-17, Doshisha University, Kyoto, Japan (November 7th–10th, 2025). (oral) (invited)
5. Tomoya Endo, Takashi Nakamura "Anion Recognition by Amide- α -Cyclodextrins and Its Covalent-Bonded Dimer" *12th Asian Cyclodextrin Conference*, OP-16, Doshisha University, Kyoto, Japan (November 7th–10th, 2025). (oral)
6. Takashi Nakamura "Amide cyclodextrins that recognize anions via multiple hydrogen bonding in the cavity" *The 2025 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2025)*, *Anion Recognition Chemistry (ORG001)*, Hilton Hawaiian Village, Honolulu, USA (December 15th–20th, 2025). (oral)
7. Takashi Nakamura "Frontiers of discrete macrocyclic oligomers of Schiff-base metal-chelating units" *The 2025 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2025)*, *Frontier of Discrete Oligomers, Polymers, and Assemblies (MAC016)*, Hawaii Convention Center, Honolulu, USA (December 15th–20th, 2025). (oral) (symposium organizer)
8. Kota Seki, Takashi Nakamura "Controlling the number of metals coordinated by a macrocyclic homooligomer for the synthesis of a heteronuclear complex" *The 2025 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2025)*, *Frontier of Discrete Oligomers, Polymers, and Assemblies (MAC016)*, Board 270, Hawaii Convention Center, Honolulu, USA (December 15th–20th, 2025). (poster) (symposium organizer)
9. Takashi Nakamura "Macrocyclic multinuclear complexes assembling multiple metal coordination sites for precise molecular capture" *The 2025 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2025)*, *Late Transition Metal Complexes*

and Clusters: Novel Structures and Transformations (ING017), Oral Presentation No.13, Hilton Hawaiian Village, Honolulu, USA (December 15th–20th, 2025). (oral)

10. Takashi Nakamura "Precise Coordinative Capture of Bio-Related Aliphatic Substrates by Macrocyclic Complexes" *The 10th Workshop on Radical and Electron Transfer Reactions (RETR-10)*, IL-16, Outrigger Reef Waikiki Resort, Honolulu, USA (December 16th–18th, 2025). (oral) (invited)

国内会議・セミナー

1. 中村 貴志「キレート金属錯体の環状多量体の合成と多点配位を鍵とした分子認識」高分子学会 25-1 超分子研究会「金属錯体の分子内・分子間相互作用を鍵とした分子認識と機能発現」、東京理科大学神楽坂キャンパス、東京、2025 年 5 月 16 日（招待講演）
2. 菅原 孝太郎、尾本 賢一郎、中村 貴志「大環状パラジウム四核錯体を用いた天然由来のオレフィン化合物の金属炭素結合による分子捕捉」第 22 回ホスト-ゲスト・超分子化学シンポジウム (SHGSC2025)、1B12、東京大学駒場 I キャンパス、東京、2025 年 6 月 7 日–8 日（口頭）
3. 遠藤 智也、中村 貴志「二つの認識ポケットをもつアミドシクロデキストリン二量体によるアニオンの選択的結合」第 22 回ホスト-ゲスト・超分子化学シンポジウム (SHGSC2025)、1P30、東京大学駒場 I キャンパス、東京、2025 年 6 月 7 日–8 日（ポスター）
4. 関 航太、中村 貴志「4 つの同一配位部位を有する環状多量体を用いたモリブデン 2 核錯体および異種 4 核錯体の合成」第 22 回ホスト-ゲスト・超分子化学シンポジウム (SHGSC2025)、1P33、東京大学駒場 I キャンパス、東京、2025 年 6 月 7 日–8 日（ポスター）
5. 中村 貴志「金属中心とその配位サイトを秩序配列した大環状多核錯体の合成と精密分子捕捉」錯体化学若手の会 関東支部 2025 年度前期勉強会、東京科学大学大岡山キャンパス、東京、2025 年 6 月 21 日（招待講演）
6. 川本 優也、中村 貴志「位置選択的反応場を指向

したピリジルオキサゾール-パラジウム錯体の合成」錯体化学若手の会夏の学校 2025、P-42、ホテル京都エミナース、京都、2025 年 8 月 27 日–29 日（ポスター）

7. 遠藤 智也「アミド- α -シクロデキストリン二量体による選択的アニオン認識」第 15 回サブウェイセミナー、東京科学大学大岡山キャンパス、東京、2025 年 8 月 29 日（口頭）
8. 椎名 彩斗「二座ホスフィン配位子の環状多量体およびその多核錯体の合成研究」第 15 回サブウェイセミナー、東京科学大学大岡山キャンパス、東京、2025 年 8 月 29 日（ポスター）
9. 金子 竜大「ジイミンおよびサロフ部位を有する大環状分子の合成」第 15 回サブウェイセミナー、東京科学大学大岡山キャンパス、東京、2025 年 8 月 29 日（ポスター）
10. 関 航太「キレート配位部位が複数の配座をとる環状ホモ多量体を用いたヘテロ多核錯体合成」第 15 回サブウェイセミナー、東京科学大学大岡山キャンパス、東京、2025 年 8 月 29 日（ポスター）
11. 金子 竜大、中村 貴志「ジイミン配位部位を辺にもつ環状多量体の合成」第 35 回基礎有機化学討論会、2P-143、名古屋大学東山キャンパス、名古屋、2025 年 9 月 9 日–11 日（ポスター）
12. 菅原 孝太郎、尾本 賢一郎、中村 貴志「多点での金属炭素結合を利用した複数の二重結合をもつオレフィン化合物の分子捕捉」第 35 回基礎有機化学討論会、2P-153、名古屋大学東山キャンパス、名古屋、2025 年 9 月 9 日–11 日（ポスター）
13. Yi-Fu Liu, Guzman Gil-Ramirez, Takashi Nakamura "Selective Formation of Trimeric and Tetrameric Rare-Earth Macrocycles Under External Ligands" 錯体化学会第 75 回討論会、1Ab-06、長崎大学文教キャンパス、長崎、2025 年 9 月 15 日–17 日（口頭）
14. 関 航太、中村 貴志「サリチリデンアミノフェノールの環状ホモ多量体の錯形成反応における核数制御」錯体化学会第 75 回討論会、1PA-054、長崎大学文教キャンパス、長崎、2025 年 9 月 15 日–17 日（ポスター）
15. 中村 貴志「大環状分子による π 分子ユニットの配置複雑性の追究と機能創出への挑戦」学術変革領

- 域 (A)「 π 分子複雑性」第 2 回融合マッチングワークショップ、P-10、筑波大学筑波キャンパス、つくば、2025 年 10 月 4 日 (ポスター)
16. 小柳 瑞貴、須貝 智也、田代 大樹、中村 貴志、百武 篤也、杳村 憲樹「アダマンタン構造を有する環境調和型新規硫化試薬の創製研究」第 54 回複素環化学討論会、3O-14、東京大学本郷キャンパス、東京、2025 年 10 月 9 日-11 日 (口頭)
 17. 遠藤 智也、中村 貴志「デュアルポケットアミドシクロデキストリン二量体の選択的アニオン認識」基礎有機化学会 若手オンラインシンポジウム (第 5 回)、B-10、オンライン、2025 年 11 月 14 日 (口頭)
 18. 椎名 彩斗、中村 貴志「ビスホスフィンのシッフ塩基型環状多量体およびその多核錯体の合成研究」第 52 回有機典型元素化学討論会、P-039、つくば国際会議場、つくば、2025 年 12 月 4 日-6 日 (ポスター)
 19. 日置 なな実、中村 貴志「ジピリンホウ素錯体を置換基としてもつアミドシクロデキストリンの合成と機能探索」第 52 回有機典型元素化学討論会、P-040、つくば国際会議場、つくば、2025 年 12 月 4 日-6 日 (ポスター)
 20. 上坂 守「剛直な骨格を持つ大環状ガリウム 6 核錯体の合成」令和 7 年度第 1 回筑波大学博士後期課程学生支援プロジェクト (SPRING & BOOST) 研究発表会、B020、つくば国際会議場、つくば、2025 年 12 月 11 日-12 日 (ポスター)
 21. 胡 高興「配位結合によるアミドシクロデキストリン多量体の合成と構造解析」令和 7 年度第 1 回筑波大学博士後期課程学生支援プロジェクト (SPRING & BOOST) 研究発表会、B052、つくば国際会議場、つくば、2025 年 12 月 11 日-12 日 (ポスター)
 22. 中村 貴志「構造の非対称化に着目した環状多量体リプログラミング法の開拓」化学構造リプログラミングによる統合的物質合成科学の創成 第 3 回公開シンポジウム、名古屋大学東山キャンパス、名古屋、2026 年 1 月 23 日-24 日 (口頭)
 23. 中村 貴志「構造の非対称化に着目した環状多量体リプログラミング法の開拓」化学構造リプログラミングによる統合的物質合成科学の創成 第 3 回公開シンポジウム、名古屋大学東山キャンパス、名古屋、2026 年 1 月 23 日-24 日 (ポスター)
 24. Takashi Nakamura "Boron and Transition Metal Complexes of Macrocyclic Schiff-Base Ligands" *International Main Group Element Chemistry Seminar 2026 (IMECS-2026)*、筑波大学筑波キャンパス、つくば、2026 年 3 月 11 日 (招待講演)
 25. Ayato Shiina, Takashi Nakamura "Synthetic Investigation of Bisphosphine-Based Cyclic Imine Oligomers" *International Main Group Element Chemistry Seminar 2026 (IMECS-2026)*、P-03、筑波大学筑波キャンパス、つくば、2026 年 3 月 11 日 (ポスター)
 26. Kohtaro Sugawara, Takashi Nakamura "Coordinative Recognition by a Cyclic Tetranuclear Palladium Complex" *International Main Group Element Chemistry Seminar 2026 (IMECS-2026)*、P-14、筑波大学筑波キャンパス、つくば、2026 年 3 月 11 日 (ポスター)
 27. Tomoya Endo, Takashi Nakamura "Structural Versatility of Imine Bonded Amide-Cyclodextrins" *International Main Group Element Chemistry Seminar 2026 (IMECS-2026)*、P-22、筑波大学筑波キャンパス、つくば、2026 年 3 月 11 日 (ポスター)
 28. Yetong Guo, Kohtaro Sugawara, Takashi Nakamura "Synthetic Investigation of Phosphorylated Biphenol-Based Macrocyclic Oligomers" *International Main Group Element Chemistry Seminar 2026 (IMECS-2026)*、P-23、筑波大学筑波キャンパス、つくば、2026 年 3 月 11 日 (ポスター)
 29. Yuya Hokimoto, Takashi Nakamura "Synthetic Investigation of Imidazolium Schiff-Base Macrocyclic toward Macrocyclic N-Heterocyclic Carbene Ligand" *International Main Group Element Chemistry Seminar 2026 (IMECS-2026)*、P-25、筑波大学筑波キャンパス、つくば、2026 年 3 月 11 日 (ポスター)
 30. Mads Nybo Sørensen "Synthesis and Properties of Azobenzene Containing Molecular Cages" 令和 7 年度第 2 回筑波大学博士後期課程学生支援プロジェクト (SPRING & BOOST) 研究発表会、C043、つく

- ば国際会議場、つくば、2026 年 3 月 12 日–13 日（ポスター）
31. 劉 譯夫 "Synthesis of Macrocyclic Salen Rare-Earth Complexes and Their Framework Conversion Regulated by Coordination Sphere Engineering" 令和 7 年度第 2 回筑波大学博士後期課程学生支援プロジェクト (SPRING & BOOST) 研究発表会、D044、つくば国際会議場、つくば、2026 年 3 月 12 日–13 日（ポスター）
 32. 金子 竜大、中村 貴志「ジイミン部位を辺にもつ大環状分子および四面体型ケージ分子の合成」日本化学会第 106 春季年会、E1132-1am-10、日本大学船橋キャンパス、船橋、2026 年 3 月 17 日–20 日（口頭）
 33. 松井 優大、中村 貴志「サリチリデンアミノフェノール配位部位を有するケージ型多量体の合成と酢酸パラジウム三核クラスターの包接」日本化学会第 106 春季年会、E1132-1am-11、日本大学船橋キャンパス、船橋、2026 年 3 月 17 日–20 日（口頭）
 34. 菅原 孝太郎、中村 貴志「環状パラジウム四核錯体によるアミンおよびアルコールの多点配位認識」日本化学会第 106 春季年会、E1131-2pm-04、日本大学船橋キャンパス、船橋、2026 年 3 月 17 日–20 日（口頭）
 35. 竹之内 美来、中村 貴志「異種 2 核サレン環状錯体の合成検討」日本化学会第 106 春季年会、P2-3vn-05、日本大学船橋キャンパス、船橋、2026 年 3 月 17 日–20 日（ポスター）
 36. 椎名 彩斗、中村 貴志「イミン結合で連結されたビスホスフィンの環状多量体およびその多核錯体の合成研究」日本化学会第 106 春季年会、P2-3vn-06、日本大学船橋キャンパス、船橋、2026 年 3 月 17 日–20 日（ポスター）
 37. 川本 優也、中村 貴志「大環状 *N*-ヘテロ環状カルベン多核錯体の合成研究」日本化学会第 106 春季年会、P2-3vn-07、日本大学船橋キャンパス、船橋、2026 年 3 月 17 日–20 日（ポスター）
 38. 日置 なな実、中村 貴志「色素修飾アミドシクロデキストリンの合成と環境応答型光化学機能の探索」日本化学会第 106 春季年会、P2-3vn-08、日本大学船橋キャンパス、船橋、2026 年 3 月 17 日–20 日（ポスター）
 39. 関 航太、中村 貴志「配位認識部位を有するサレン錯体の合成」日本化学会第 106 春季年会、P2-3vn-15、日本大学船橋キャンパス、船橋、2026 年 3 月 17 日–20 日（ポスター）
 40. 遠藤 智也、中村 貴志「イミン結合で架橋されたアミドシクロデキストリンの構造多様性検討」日本化学会第 106 春季年会、P2-3vn-40、日本大学船橋キャンパス、船橋、2026 年 3 月 17 日–20 日（ポスター）
 41. 熊澤 和也、中村 貴志「クマリンを置換基としてもつアミドシクロデキストリンの合成とアニオン認識挙動」日本化学会第 106 春季年会、P2-3vn-41、日本大学船橋キャンパス、船橋、2026 年 3 月 17 日–20 日（ポスター）

基礎融合グループ部門

教員：

桑原純平（数理物質系・物質工学域・准教授）

大学院生：

单元戎（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・D3）

胡紫薇（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション・D1）

尾根田龍吾（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M2）

李伟琪（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション・M2）

片山夏輝（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

中出凌央（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

鈴木菜緒（数理物質科学研究群・応用理工学学位プログラム・M1）

桑原純平

<研究成果>

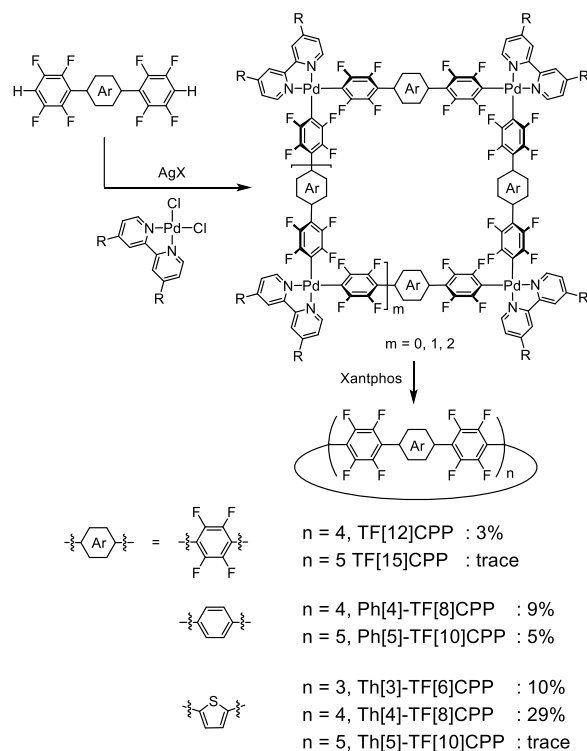
当研究室では、有機半導体材料の効率的な合成手法の開拓と、その手法を用いた材料開発を推進している。本年度は、これまでに開発してきた反応を応用し、環状構造を有する π 共役分子の精密合成と、含窒素多環芳香族化合物の合成と光学特性の調査に関する研究を推進した。

【 1 】環状 Pd 錯体を経由するシクロパラフェニレン誘導体の合成

ベンゼン環がパラ位で環状に連結したシクロパラフェニレン（cycloparaphenylene, CPP）は、その美しい分子構造に加え、歪んだ π 共役に由来する特異な物性や、内部空間を利用したホスト・ゲスト化学の観点から注目を集めてきた。CPP は、 π 共役系を保ったまま環状構造を形成しているため、本来平面構造を有する芳香族化合物が大きく歪んだ立体構造となる。このような環歪の存在により、CPP の合成は一般に困難であることが知られている。そのため、新たな合成手法の開拓は、新規 CPP 誘導体の創

製に向けた重要な課題となっている。本研究では、これまでに蓄積してきた Pd 錯体の反応性に関する知見を基盤とし、まず熱力学的に安定な環状 Pd 錯体を形成させた後、支持配位子の変換によって結合形成を促進するという方法論を確立し、CPP の新たな合成手法を開拓した。

テトラフルオロベンゼンが連結された基質に Ag 塩を作用させた後、ビピリジン配位子を有する Pd 錯体を添加して反応を行った。 ^{19}F NMR により反応を追跡したところ、時間の経過とともに環状錯体に由来するシグナルへと収束していくことが明らかになった（式 1）。その後、環状 Pd 錯体を中程度の収率で単離することに成功した。これらの結果から、Pd-C 間に共有結合を有する環状錯体が自発的に形成されることが示された。



得られた環状 Pd 錯体に Xantphos を加えて加熱したところ、還元的脱離が進行し環状四量体（TF[12]CPP）が生成した。ここで、TF は 1,4-テトラフルオロフェニレンユニットを意味する。これに加えて、ごく少量の環化五量体が生成していることが明らかになった。これは、中間体となる環状錯体に五核錯体が含まれてい

たためだと推測される。また低収率となるのは、全てフッ素化された基質を用いているために還元的脱離が困難であったことが要因として考えられる。同様の手法で、フェニレン (Ph) およびチエニレン (Th) を含む CPP の合成を行ったところ、環化四量体を主生成物とする各種 CPP が、TF[12]CPP よりも良好な収率で得られた。チエニレンを含む場合には、環化三量体 (Th[3]-TF[6]CPP) も得られた。

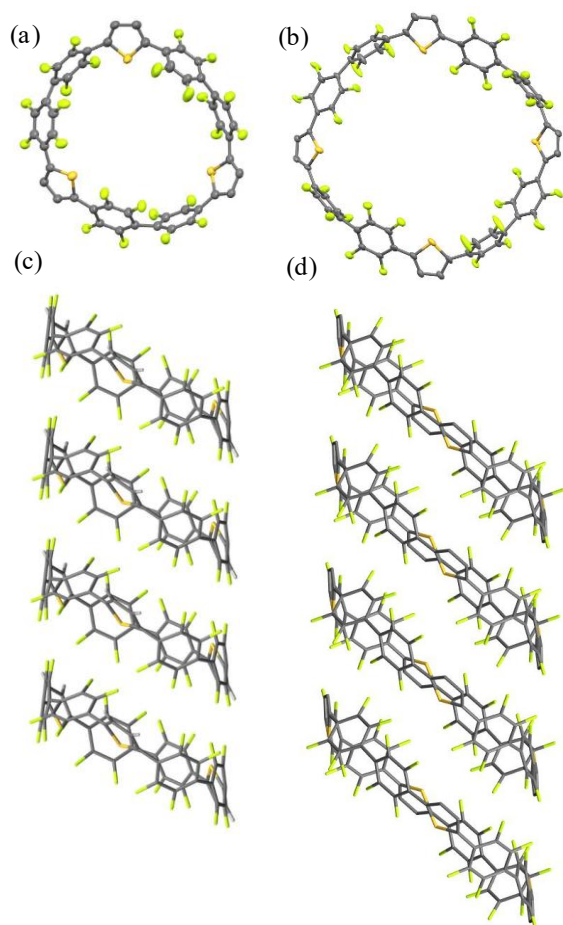


図 1. Thermal ellipsoid plots of the crystal structures of (a) Th[3]-TF[6]CPP and (b) Th[4]-TF[8]CPP. Packing diagrams of (c) Th[3]-TF[6]CPP and (d) Th[4]-TF[8]CPP.

Th[3]-TF[6]CPP および Th[4]-TF[8]CPP について単結晶 X 線構造解析を行った (図 1)。Th[3]-TF[6]CPP の内孔直径は約 12 Å であり、Th[4]-TF[8]CPP では約 16 Å であった。結晶中のパッキング構造を調べたところ、いずれも分子が斜め方向に積層した構造をとっており、内孔が一次的に連結したチャンネル構造を形

成していることが明らかとなった。現在、この一次元チャンネル空間を利用した分子認識に関する検討を進めている。

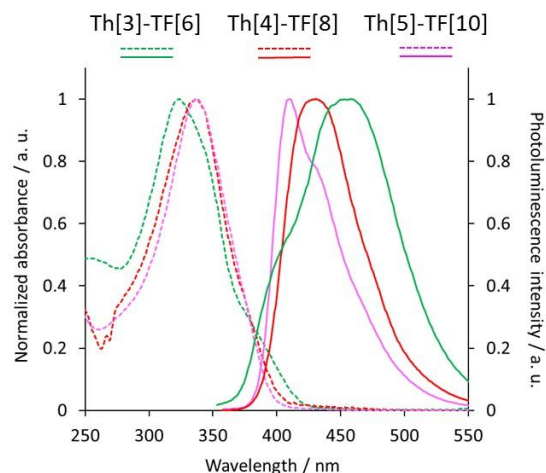


図 2. UV-Vis absorption (dashed line) and photoluminescent (solid line) spectra (CHCl_3 , 2.5×10^{-6} M).

次に、チエニレンユニットで連結された CPP において、環サイズの効果と比較した (図 2)。吸収スペクトルにおいては、環サイズ依存性は比較的小さかったのに対し、発光スペクトルでは顕著な違いが観測された。環サイズが最も大きい Th[5]-TF[10]CPP では、振動構造を有する一般的な形状の発光スペクトルが観測された。一方、環サイズが小さくなるにつれてスペクトルはブロードとなり、発光極大波長は長波長側へシフトした。最も環サイズの小さい Th[3]-TF[6]CPP では、大きなストークスシフト (9078 cm^{-1}) が観測された。これは、励起状態において顕著な構造緩和が生じていることを示唆している。同一の構成要素からなる分子でありながら光学特性に大きな差異が生じるのは、CPP に特有の環歪が電子状態に強く影響しているためである。

【 2 】含窒素多環芳香族化合物の置換基の位置が発光特性に及ぼす影響の調査

含窒素多環芳香族化合物は、窒素原子の導入によって高い電子受容性や優れた酸化耐性を示すことから、機能性有機材料として注目されている。加えて、これらの化合物は窒素ドーブ

グラフェンのモデル化合物としても関心を集めている。これまで我々は、多成分連結反応を利用した合成手法により、多様な含窒素共役構造の構築を行い、電子輸送材料としての応用を検討してきた。一連の化合物の合成および基礎物性の解明を進める過程で、含窒素クリセン(ジアザクリセン)において、フェニル基の導入位置が光学特性に大きな影響を及ぼすことが明らかとなった(図3)。

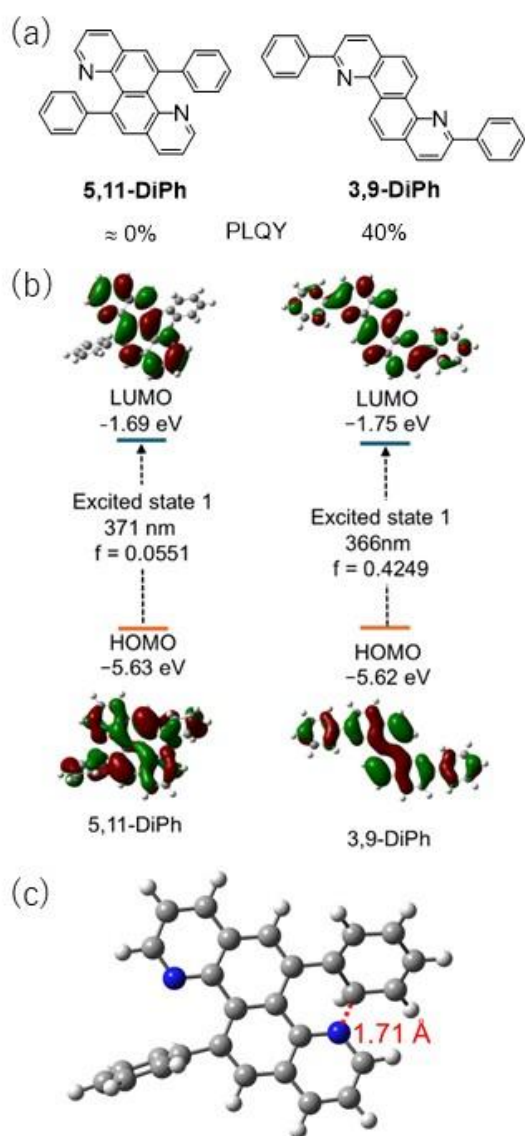


図 3. (a)ジフェニルアザクリセンの構造と発光量子収率 (PLQY)。 (b) HOMO/LUMO の分布および対応する電子遷移の振動子強度。 (c) 励起状態 (S_1) において部分最適化した構造

3,9 位にフェニル基を有する誘導体 (3,9-DiPh) は 40% の発光量子収率を示すのに対し、5,11 位にフェニル基を導入した誘導体 (5,11-DiPh) では発光が観測されなかった。本系の基礎的な特性を理解することは、今後の分子設計指針を得る上で重要であると考え、両誘導体における発光量子収率の差異について考察を行った。単結晶 X 線構造解析の結果、5,11-DiPh ではフェニル基が近接する窒素原子との立体反発により、ジアザクリセン骨格とフェニル基との間に大きなねじれが生じていることが明らかとなった。さらに、DFT 計算による検証を行ったところ、両誘導体において HOMO は分子全体に広がっている一方で、5,11-DiPh ではフェニル基上に LUMO がほとんど分布していないことが示された。この違いにより、HOMO→LUMO 励起に対応する電子遷移の振動子強度 (f) が 0.0551 と小さくなっていると考えられる。電子遷移が起こりにくいこと自体が、5,11-DiPh における低い発光量子収率の一因であると考えられる。さらに、5,11-DiPh においてフェニル基の回転角を変化させながら励起一重項状態 (S_1) におけるエネルギーを評価したところ、フェニル基上の炭素原子が窒素原子に近接した構造の方が、安定であることが明らかとなった。すなわち、図 3c に示すように、励起状態では炭素—窒素間に結合形成を伴う化学反応に励起エネルギーが消費され、その結果として無輻射失活が促進されている可能性が示された。

これらの知見から、発光材料の分子設計という観点では、窒素原子に隣接した位置への芳香族置換基の導入は避けるべきである、という指針が得られた。

<論文>

1. N. Ishida, Y. Tsuchido, Y. Shimoi, K. Marumoto, T. Kanbara, J. Kuwabara, Effects of Ring Strain on Molecular Dynamics of Sterically Hindered 4,7-Phenanthroline Unit, *Eur. J. Org. Chem.*, 28, e202500644 (8 pages) (2025).
2. J. Chen, A. Ichige, T. Cai, J. Kuwabara, T. Yasuda, T. Kanbara, Synthesis of a thiazole *N*-oxide-based

π -conjugated polymer via direct arylation polycondensation under mild conditions, *Polymer*, 337, 129006 (7 pages) (2025).

3. R. Oneda, H. Igarashi, Z. Sheng, T. Kanbara, and J. Kuwabara, Synthesis of Fluorocycloparaphenylenes via Macrocyclic Pd Complexes, *Chem. Eur. J.*, 32, e03461 (7 pages) (2026).
4. Y. Shan, H. Kanzawa, J. Huang, T. Yasuda, Y. Shimoi, K. Marumoto, T. Kanbara, J. Kuwabara, Influence of Phenyl Substitution Position on the Physical Properties of Diazachrysenes, *Asian J. Org. Chem.*, 15, e70356 (9 pages) (2026).

< 著書 >

1. Transition Metal-Catalyzed Polycondensation, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, *Conjugated Polymer Synthesis and Materials Applications* /WILEY-VCH GmbH/pp.1-30, 2026-01

< 総説・解説 >

1. Synthesis of aza-polycyclic aromatic hydrocarbons as organic optoelectronic materials via the Povarov reaction, Yuanrong Shan, Takaki Kanbara, and Junpei Kuwabara, *Tetrahedron Lett.*, 15, 155836 (12 pages) (2026).

< 特許 >

1. 桑原純平、神原貴樹、李ウエイキ “触媒前駆体、パラジウム（0）触媒の製造方法、化合物の反応方法、及び化合物” 特願 2025-100341（2025年6月16日）
2. 桑原純平、神原貴樹、李ウエイキ、金子愛華 “触媒前駆体、パラジウム（0）触媒の製造方法、化合物の反応方法、及び化合物” 特願 2026-008971（2026年1月22日）
3. 加藤 岳仁、西井 圭、植田 泰之、神原 貴樹、桑原 純平 “光電変換素子、光電変換素子の製造方法、及び光電変換層の組成物” 特許 7893501（2026年3月25日）

< 学会発表 >

国際会議

1. Hu Ziwei, Takeshi Yasuda, Takaki Kanbara, Junpei Kuwabara "Synthesis of Terminal Controlled Polymers via Direct Arylation Polycondensation and Elucidation of Emission Properties" The 2nd Korea-Japan on Chemistry with AI for Carbon Neutrality, Korea, 2025. 6. 2 (Poster).
2. Hu Ziwei, Takeshi Yasuda, Takaki Kanbara, Junpei Kuwabara "Synthesis of conjugated polymers with controlled terminal structures by direct arylation polycondensation and correlation between terminal structures and emission properties" The 19th Pacific Polymer Conference, Japan, 2025. 7. 6 (Oral).
3. Hu Ziwei, Takeshi Yasuda, Takaki Kanbara, Junpei Kuwabara " Synthesis of terminal controlled conjugated polymers by direct arylation polycondensation and investigation of their optical properties" 2025 International Symposium on Micro-Nano Material and Devices, Shanghai, 2025. 7. 20 (Poster).
4. Junpei Kuwabara "Synthesis of π -conjugated materials via direct C-H bond functionalization" Advanced Materials and Nanostructures for Future Science and Technologies, Taiwan, 2025. 11. 28 (Oral).

国内会議

1. 胡 紫薇, 神原 貴樹, 桑原 純平「直接アリール化による色素末端を有する共役高分子の合成と光学特性評価」第74回高分子学会年次大会、オンライン、2025.6.2-6.5（口頭発表）
2. 寺内 大智, 桑原 純平, 神原 貴樹「ピラゾロナフチリジン配位子を利用したチオフエン骨格を有するポリアリーレンビニレンの合成」第74回高分子討論会、大阪、2025.9.15-9.18（ポスター発表）
3. 尾根田 龍吾, 神原 貴樹, 桑原 純平「芳香環ユニットを導入したポリフルオロシクロパラフェニレンの合成」第35回基礎有機化学討論会、名古屋、2025.9.9-9.11（ポスター発表）
4. 湯澤 実, 塚原 翔, 馬場 智也, 桑原 純平, 神原 貴樹「Mn 錯体触媒を用いるヒドロアリール化重付加による π 共役系高分子の合成」第15回 CSJ 化学

- フェスタ 2025、東京、2025.10.22–10.24（ポスター発表）
5. 志比奈 花野, 寺内 大智, 桑原 純平, 神原 貴樹
「脱水素型クロスカップリング反応を用いたポリ
スチレンの修飾反応」第 15 回 CSJ 化学フェスタ
2025、東京、2025.10.22–10.24（ポスター発表）
 6. 小野 快時, 笹 敦貴, 桑原 純平, 神原 貴樹「コバ
ルト触媒による環化反応を利用した π 共役高分子
の合成」第 15 回 CSJ 化学フェスタ 2025、東京、
2025.10.22–10.24（ポスター発表）
 7. 中出 凌央, 佐藤 亮太, 安田 剛, 神原 貴樹, 桑原
純平「n 型有機半導体材料を指向した 2,6-ジフェニ
ルアントラセン誘導体の合成と特性評価」
第 15 回 CSJ 化学フェスタ 2025、東京、
2025.10.22–10.24（ポスター発表）
 8. 馬場 智也, 岩森 涼太, 桑原 純平, 神原 貴樹「Ni
触媒を用いた配向基を必要としないヒドロアリー
ル化重付加の開発」第 15 回 CSJ 化学フェスタ 2025、
東京、2025.10.22–10.24（ポスター発表）
 9. Li Weiqi, 神原 貴樹, 桑原 純平「空気中にて安定
で速やかに活性種を生成する Pd 触媒前駆体の開
発」第 15 回 CSJ 化学フェスタ 2025、東京、
2025.10.22–10.24（ポスター発表）
 10. 鈴木 菜緒, 胡 紫薇, 中山 颯大, 櫛田 創, 山本
洋平, ヨッスパンヤー・ウィジャック, 小田 玲子,
神原 貴樹, 桑原 純平「キラル側鎖を有するチエノ
ピロールジオン含有共役高分子のキロプティカル
特性」日本化学会第 106 春季年会、千葉、
2026.3.17–3.20（口頭発表）
 11. 胡 紫薇, 神原 貴樹, 桑原 純平「色素末端を導入
した共役高分子の発光挙動とエネルギー移動」日
本化学会第 106 春季年会、千葉、2026.3.17–3.20（口
頭発表）
 12. 金子 愛華, 李 伟琪, 神原 貴樹, 桑原 純平「還元
的脱離によって円滑に活性種が生成可能な Pd(II)
触媒前駆体の開発」日本化学会第 106 春季年会、
千葉、2026.3.17–3.20（口頭発表）

基礎融合グループ部門

教員：

山岸洋（数理物質系・物質工学域・准教授）

大学院生：

Kun Li（数理物質科学研究群・応用理工学位プログラム・D3）

Kariana Kusuma（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・D3）

青柳舜也（数理物質科学研究群・国際マテリアルズイノベーション学位プログラム・D1）

高泰亮（数理物質科学研究群・応用理工学位プログラム・M2）

辻本智行（数理物質科学研究群・応用理工学位プログラム・M1）

牧原慎吾（数理物質科学研究群・応用理工学位プログラム・M1）

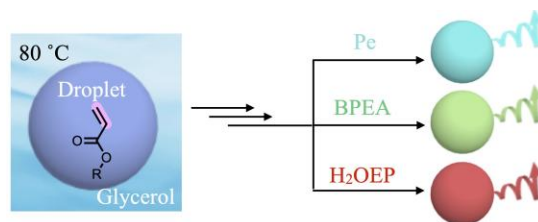
山岸洋

<研究成果>

当研究室では、機能性有機分子を用いた光デバイス・光バイオセンサーの開発、および光化学反応の開拓を進めている。本年度は【 1 】RGB 円偏光発光する微細粒子の開発【 2 】均質なサイズと機能を持つ光共振器の開発【 3 】負の膨張を示す高分子粒子の発見について研究発表を行った。

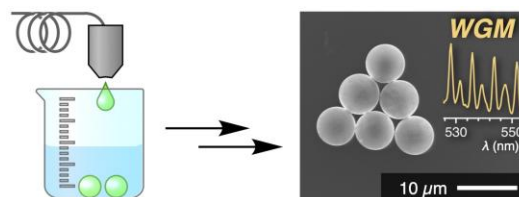
【 1 】RGB 円偏光発光する微細粒子の開発 (*Sci. Technol. Adv. Mater.* 2025)

一般に円偏光を作る際には、直線偏光を波長板に透過させることが多い。本研究では、螺旋状の分子配向を内在する粒子を作成し、その内部における選択反射を利用することにより微小な円偏光発光光源を作成することに成功した。また、粒子へ添加する発光色素を代えることにより、RGB 全ての色について円偏光発光を得ることができた。



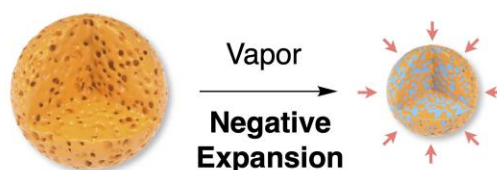
【 2 】均質なサイズと機能を持つ光共振器の開発 (*Mater. Adv.* 2025.)

有機分子の自己組織化によって作られる微粒子のサイズは大きな分散をもつ。本研究では研究用インクジェットプリンターを利用した新たなプロセスを開発し、有機微粒子のサイズ分散を 1 マイクロメートル以下に抑えることに成功した。サイズ分散の低減に伴い、光共振機能についても均質性が高まったことを明らかにした。



【 3 】負の膨張を示す高分子粒子の発見 (*J. Am. Chem. Soc.* 2026.)

一般に、高分子は分子鎖の間に多くのゲスト分子を取り込むことができ、この分子吸着に伴い高分子全体の体積は大きく増えることが知られている。本研究では、分子テンプレート法によって作成した多孔質高分子球体において、ゲスト分子の吸着に伴い、通常とは逆の負の膨張が生じることを見出した。微細孔内部における分子凝集により孔を収縮する方向へ生じるラプラス圧が原因となっていると考えられる。



<論文>

1. K. Li, H. Yamagishi*, O. Oki, T. Kondo, Y. Yamamoto* *Vapor-Induced Negative Expansion of Porous Cross-Linked Polymers Observed by Optical Resonance*.
J. Am. Chem. Soc. **2026**, published online.
2. Suharman, S. Nakayama, W. Yospanya, P. Pranee, R. Oda, H. Yamagishi, Yohei Yamamoto* *Induced blue, green, and red-colour circularly polarized luminescence from single dye-doped homochiral poly(lactic acid) microspheres*.
J. Mater. Chem. C **2025**, 13, 13659–13663.
3. K.K. Dewi, H. Yamagishi*, W.Y. Heah, S. Kim, A. Kubono, Y. Taniguchi, Y. Yamamoto* *Monodisperse and size-modulable spherical optical resonators from synthetic polymers by inkjet printing toward applications under water*.
Mater. Adv. **2025**, 6, 5030–5034.
4. K. Li, C. Fu, H. Yamagishi*, S. Nakayama, W.Y. Heah, Y. Cheng, R. Oda, W. Yospanya, Y. Yamamoto* *Microscopic observations of RGB circularly polarized luminescence from solid microspheres with liquid crystalline molecular order*.
Sci. Technol. Adv. Mater. **2025**, 26, 2509486.
5. V. Kumar*, S. Kushida, T. Inoue, K. Iwata, H. Yamagishi, H. Tsuji*, Y. Yamamoto* *Ultrafast Energy Transfer Induced Lasing From a Coplanar Donor-Acceptor-Donor Molecule in a Microspherical Cavity*.
Adv. Funct. Mater. **2025**, 35, 2502545.
6. S. Aoyagi, Y. Omori, T. Kawamura, T. Sakurai*, M. Shimizu, K. Yamashita, Y. Nagai, Y. Kobayashi, Y. Yamamoto*, H. Yamagishi* *High gain, low loss, and low-threshold spherical organic laser based on highly miscible excited-state intramolecular proton transfer dyes*.
Chem. Commun. **2025**, 61, 5589.

<総説・解説>

1. H. Yamagishi,* *Development and applications of optical resonators based on functional organic materials*.
Chem. Lett. **2025**, 54, upaf067.

<学会発表>

国際会議

1. “Size-modulable and Monodisperse Microresonators Fabricated by Inkjet Printing for Underwater Applications” ISMSC 2025 (Kyoto, Japan) Kariana, Hiroshi Yamagishi, Yohei Yamamoto (oral) 2025/05/25–30
2. “Size-modulable and Monodisperse Microresonators Fabricated by Inkjet Printing for Biosensing Applications” SACSEM2025 (Universiti Kebangsaan Malaysia, Malaysia) Kariana Kusuma Dewi, Hiroshi Yamagishi, Yohei Yamamoto (poster) 2025/10/28-29

国内会議

1. 「光化学平衡反応における離散的応答の実現」日本化学会第 106 回春季年会（日本大学理工学部 船橋キャンパス, 東京）鶴見 颯一郎、山岸 洋（ポスター, 日本語）2026/03/17-20
2. 「抗原抗体反応と光指紋を用いた新しいプロテオミクス手法の開発」日本化学会第 106 回春季年会（日本大学理工学部 船橋キャンパス, 東京）辻本 智行、金 水緑、窪野 明日磨、谷口 雄一、山本 洋平、山岸 洋（口頭, 日本語）2026/03/17-20
3. 「食細胞内部での反応速度検出を目指した光共振バイオプローブの開発」日本化学会第 106 回春季年会（日本大学理工学部 船橋キャンパス, 東京）関 萌歌、金 水緑、窪野 明日磨、谷口 雄一、山岸 洋（ポスター, 日本語）2026/03/17-20
4. 「電場応答自立微小液滴による光線制御デバイスの開発」第 25 回(2025 年度)レーザー学会東京支部研究会（日本大学理工学部 駿河台キャンパス, 東京）牧原 慎吾、山本 洋平、山岸 洋（ポスター, 日本語）2026/02/20

5. 「微小液滴の電場応答変形を基盤とする光線制御デバイスの開発」レーザー学会学術講演会第46回年次大会（大阪南港 ATC O's 棟南館, 大阪） 牧原慎吾、山本 洋平、山岸 洋 （ポスター, 日本語） 2026/01/13
6. 「Expanding the materials scope and processing methodologies of organic lasers for soft optoelectronics」21st Inkjet Technology Conference 2025 (DIC 株式会社, 東京) Hiroshi Yamagishi （招待講演, 日本語） 2025/11/28
7. 「抗体を担持した球状の微小粒子による新しいタンパク質検出手法の開発」CSJ 化学フェスタ 2025（タワーホール船堀, 東京） 辻本智行、金水縁、窪野明日麿、谷口雄一、山本洋平、山岸洋 （ポスター, 日本語） 2025/10/22-24
8. 「抗体を担持した微小球状粒子の光指紋に基づくプロテオミクス」日本プロテオーム学会 2025 年大会（かずさアカデミアホール, 千葉） 辻本智行、金水縁、窪野明日麿、谷口雄一、山本洋平、山岸洋 （ポスター, 日本語） 2025/08/06-08
9. 「自立微小液滴の電氣的にスイッチング可能な光線制御デバイスの開発」トポロジー領域 CREST 合同セミナー（東北大学, 仙台） 牧原慎吾、山岸洋、山本洋平 （ポスター, 日本語） 2025/06/24
10. 「機能性有機分子の集積体に発現する光共振・レーザー機能の開拓」錯体化学若手の会 2025 年度前期勉強会（東京科学大学, 東京） 山岸 洋 （口頭、招待講演） 2025/06/21

基礎融合グループ部門

教員：

久保敦（数理物質系・物理学域・講師）

大学院生：

木原孝太郎（数理物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

元井慧（数理物質科学研究群・物理学学位プログラム・M2）

久保敦

<研究成果>

当研究室では、ストラクチャード化された表面場や、プラズモニック結晶など人工ナノ物質の光励起場における、スピントクスチャやトポロジカル特性、新規な協同励起現象などを研究対象とし、これら固体励起の時空間ダイナミクスを追及するための先端的レーザー光源を利用した新規顕微鏡法の開発、ナノスケール微細構造試料の作製、および、理論的解析を進めている。本年度は、金属表面を非回折伝搬する space-time 表面プラズモン波束のスピントクスチャの理論的解析、および、フェムト秒時間分解観察を行った。

【 1 】Space-time 表面プラズモンポラリトン波束のスピントクスチャ

本研究では、光のスピントクスチャ（spin angular momentum, SAM）を電子運動へと変換する新たな手法として、時空間的に制御された表面プラズモンポラリトン波束（space-time surface plasmon polariton, ST-SPP）を用いた三次元スピン構造の生成とその制御可能性について検討した。金属表面を伝搬する表面プラズモンポラリトン（SPP）は、波数の面直成分が虚数となるエバネッセント場の性質により、伝搬方向に対して面内の右方向を向く横スピントクスチャ（transverse SAM; t -SAM）を有する。また最近の理論研究により、SPP を含む TE および TM 導波モードにおいては、スピントクスチャ $\mathbf{S}$ は電磁場の運動量流の回転成分 $\nabla \times \mathbf{p}$ に比例することが示され、このことから SPP が平面波ではなく、ナノスケール幅の導波路の伝搬

モードなど強い空間閉じ込みのある場合には、電磁場強度の非一様性によりスピントクスチャに非ゼロの面直成分や伝搬軸成分が出現することが判明している。

この原理を用いることで金属表面に 3 次元のベクトル成分をもつスピントクスチャを形成することができる。トポロジカル・プラズモニック・スピンスキルミオンを始めとするトポロジカルプラズモニック準粒子は、この様な 3 次元ベクトル成分からなる SAM テクスチャの代表例である。しかし、プラズモニック準粒子は金属表面に形成した特殊な結合構造への光照射により定まった位置で生成されるものであり、このまま情報処理デバイスのキャリア等に応用することはできない。

そこで、SAM テクスチャが伝搬特性を持つものの探索を目的に、10 フェムト秒級の超短パルス光により金 (Au) 表面に励起されるストライプ型 ST-SPP の電場、磁場、エネルギー流密度、ならびに SAM テクスチャを評価する解析モデルを構築した。このモデルでは、波長範囲 700 nm ~ 880 nm、時間幅約 10 fs のパルス光から整形した ST 光波束を ST-SPP の励起に用いる。波束は約 1300 個の振動数（フーリエ）成分に分割され、成分毎に電場、磁場の 6 元成分を計算する。これらから ST-SPP の電場、磁場が合成され、ポインティングベクトルと SAM が導出される。また、ST-SPP と励起光由来の電場の和から全表面電場が得られ、実験で観察される顕微像のシミュレーションがなされる。

ストライプ周期 $\lambda_x = 10 \mu\text{m} \sim 25 \mu\text{m}$ のストライプ型 ST-SPP に対し、上記の数値モデルを用いて計算した顕微像を、実験で得られた対応する 2 光子蛍光顕微像と併せ、図.1 に示す。両者はよく一致しており、解析モデルの正当性が裏付けられている。 $\lambda_x = 15 \mu\text{m}$ における、同モデルによる ST-SPP の面直電場分布、ポインティングベクトルのベクトル図（各 x - z 、 y - z 、 x - y 平面への投影）、および、SAM の各成分 (S_x, S_y, S_z) の計算結果を図.2 に示す。SAM の主要成分である S_x は負値のみをとり、 x 軸方向に周期 $\lambda_x/2$ で振動する強度を有し、ST-SPP の

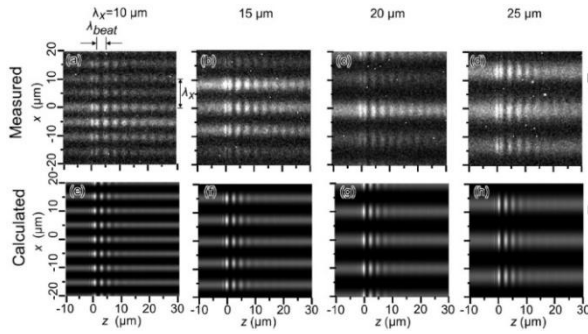


図1 Au表面フェムト秒ストライプ型 ST-SPP の 2 光子蛍光顕微鏡 (上段)、および、数値モデルによるシミュレーション (下段)。

電場強度分布を反映する。これに対し面直成分 S_y は正値・負値の両方をもち S_x と同じ周期で x 軸方向に振動するが、位相が $\pi/2$ 異なる。 S_y は ST-SPP の電場強度の変化が最大になる位置で極値を取っており、場の運動量と SAM との関係： $\mathbf{S} \propto \nabla \times \mathbf{p}$ の成立が直感的に理解できる。同様に、伝搬軸成分 S_z は ST-SPP の強度分布が x 軸方向だけでなく伝搬軸方向にも閉じ込めを持つことで出現しており、フェムト秒の超短波束に固有の SAM 成分といえる。

ST-SPP の電場強度の変化の度合いは λ_x が短いほど大きい。これにより、SAM 成分の相対的な強度は、 λ_x の調整により外的に操作できる。図.3 に示すように、 $\lambda_x \lesssim 2 \mu\text{m}$ の領域では、面直成分である S_y が、SPP の生得的な面内 SAM である S_x を越え、最も大きな強度を持つ。実験的には、 λ_x は ST 光波束合成器によって PC 制

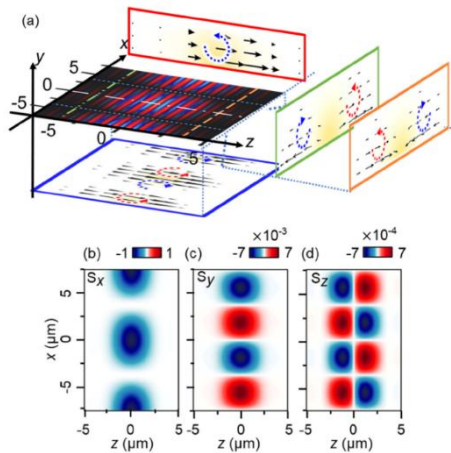


図2 (a)フェムト秒ストライプ型 ST-SPP の面直 (y) 電場分布とポインティングベクトルのベクトル図。(b) SAM の x 成分、(c) y 成分、(d) z 成分。

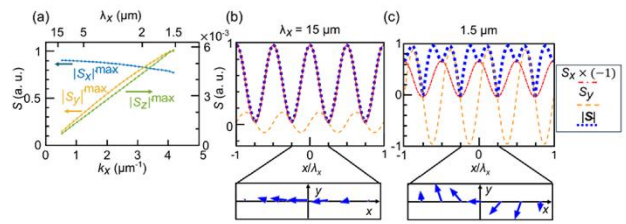


図3 (a)ストライプ型 ST-SPP における SAM の成分強度 (S_x, S_y, S_z) のストライプ周期 (λ_x) 依存性。 $\lambda_x = 15 \mu\text{m}$ (b), および、 $1.5 \mu\text{m}$ (c)における、SAM の面内成分 (S_x)、面直成分 (S_y)、大きさの絶対値 ($|S|$) の x 軸方向の断面図。

御される。SAM の偏極方向に情報を載せるスピンドバイスに、ST-SPP が適用できる可能性がある。

【 2 】Sace-time 表面プラズモンポラリトン波束の時間分解観察

ST-SPP の特性により、波束は構造の複雑性・局在性を保持したまま、回折広がりなしに伝搬する。また、群速度は SPP ライトコーン上のスペクトル領域の取り方に依存し、superluminal (速い光) ~ subluminal (遅い光) 領域に渡り変調可能である。ST-SPP の時間幅が 10 fs 台まで短縮された超短時間領域では、これら ST-SPP の際立った特徴を、時間分解顕微鏡法を用いて明瞭に可視化できる。

我々は、パルス時間幅 10 fs、中心波長 800 nm のレーザーパルス光源に用い、ST 光波束合成器で整形したパルスをポンプパルスに、通常のパルスをプローブパルスに用いた、ポンプ-プローブ時間分解顕微鏡を構築した(図.4)。ST 光波束合成器は二次元空間光変調器 (SLM) を用いた 4f 系で構成される。試料は銀 (Ag) 薄

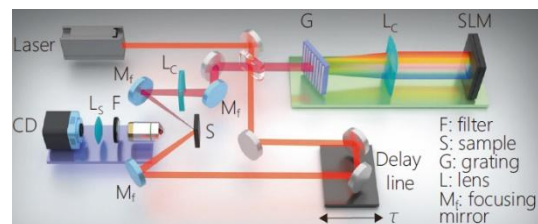


図4 ST 光波束をポンプパルスに用いた、フェムト秒ポンプ-プローブ時間分解二光子蛍光顕微鏡の概略図。

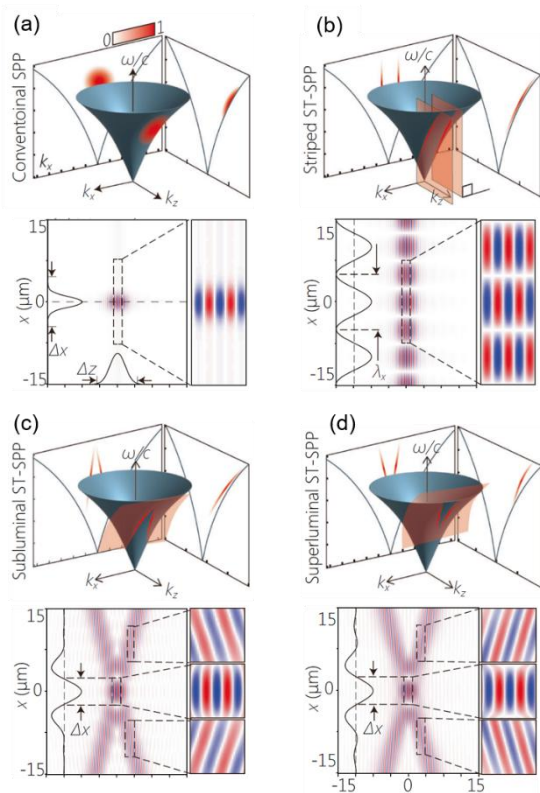


図5 通常型 SPP 波束および ST-SPP のスペクトル領域、ならびに面直電場分布の計算：(a)通常型 SPP 波束、(b)ストライプ型 ST-SPP、(c) subluminal 型 ST-SPP、(d) superluminal 型 ST-SPP。

膜であり、極薄の蛍光膜を表面に塗布する。光-SPP 結合器に直線ナノスリットを形成した。スリット構造の並進対称性により、パルスの各振動数成分に対し、伝搬光と SPP との間に横波数保存則が成立する。これにより、ST-SPP 励起用の ST 光波束を精密に設計することができる。

時間分解観察を行った4種類のスペクトル領域と電場分布計算を図.5に示す。図.5(a)は通常型 SPP 波束であり、幅がマイクロメートル台に絞られたビームで射出され、伝搬に伴う回折広がりを示す。スペクトル領域は SPP ライトコーン上で面状に広がり、波数と振動数の間に一対一の相関はない。図 5(b)はストライプ型 ST-SPP であり、すべての振動数成分が同一の $+k_x$ 、 $-k_x$ 値を取る cosine 波束にあたる。非回折性だが横方向の局在性はなく、空間分布と時間ダイナミクスは分離しており、SPP の自然な群速度で伝搬する。図 5(c,d)は subluminal 型、

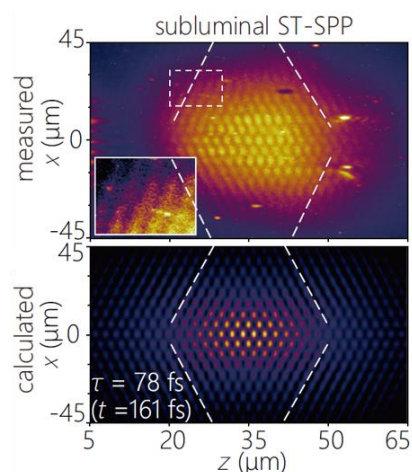


図6 Subluminal 型 ST-SPP の時間分解顕微像（遅延時間 $\tau=78$ fs）：実験（上）、および、対応するシミュレーション（下）。

および superluminal 型の ST-SPP である。これらは k_x 値の連続性により横方向に局在し、空間分布と時間ダイナミクスの相関により群速度が操作可能になる。波束の中心は X 字型の“腕”の交点に位置する。時間分解観察では、これら ST-SPP は伝搬方向/横方向にやや広がった格子パターンを形成する。Subluminal 型 ST-SPP について、ポンプ-プローブ遅延時間約 80 fs で取得した時間分解顕微像を図 6 に示す。波束中心部の格子状のパターンが菱形の波面で縁取られた形状が確認できる。波面の傾きは、計算による“腕”部分の波面の傾きの向きと一致し、subluminal 型の特徴がよく表れている。格子は x 軸方向に $5 \mu\text{m}$ の狭小な間隔であり、約 $100 \mu\text{m}$ の伝搬後にも格子の形状が保たれた波束の非回折性と形状安定性が実験的に確認された。

図.7(a)の時間分解映像の例（ストライプ型 ST-SPP）に示されるように、波束の中心位置の動き（図.7(b)）から波束の群速度が実験的に求められる。ストライプ型 ST-SPP では $v_{\text{SPP}} = 2.22 \times 10^8 \text{ m/s}$ となり、SPP ライトラインの傾きで決まる自然な群速度と一致した。また、superluminal 型 (v_+)、subluminal 型 (v_-) の群速度は、それぞれ $v_+ = 2.28 \times 10^8 \text{ m/s}$ 、 $v_- = 2.18 \times 10^8 \text{ m/s}$ であり、 $v_- < v_{\text{SPP}} < v_+$ の関係を満足しており、ST-SPP による群速度の制御の実現が確認された（図.7(c)）。

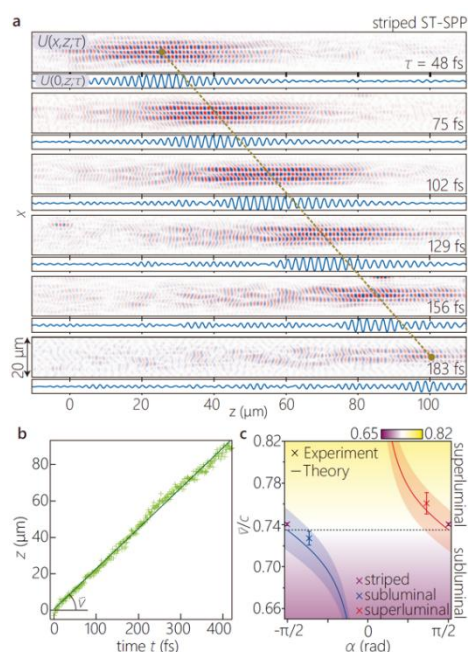


図7 (a)ストライプ型 ST-SPP の複数の遅延時間における時間分解顕微鏡、(b)ストライプ型 ST-SPP の中心位置の時間依存性、(c)ストライプ型、subluminal 型、superluminal 型の各 ST-SPP の群速度 [単位: c (真空中の光速)、 α : スペクトル領域の特徴角度]。

< 論文 >

1. N. Ichiji, H. Kikuchi, M. Yessenov, K. L. Schepler, A. F. Abouraddy, A. Kubo, "Observation of space-time surface plasmon polaritons", *Nat. Commun.* **16**, 10697 (2025)
2. K. Kihara, K. Motoi, N. Ichiji, A. Kubo, "Spin angular momentum of femtosecond striped space-time surface plasmon polaritons", *Opt. Commun.* **593**, 132217 (2025)

< 学会発表 >

国際会議

1. A. Kubo, N. Ichiji, H. Kikuchi, M. Yessenov, K.L. Schepler, A.F. Abouraddy, "Femtosecond imaging of space-time surface plasmon polaritons", AES 2025, The 11th International Conference on Antennas and Electromagnetic Systems, Tangier, Morocco, 2025.07.1-4 (invited)

2. A. Kubo, "Time-Resolved Imaging of Femtosecond Structured Surface Plasmon Polaritons", Workshop on Structured Light and Materials 2025, GIS Taipei Tech Convention Center, Taiwan 2025.11.17-18 (invited)
3. A. Kubo, T. Toyosawa, E. Pyatenko, K. Fukumoto, "Enhanced multi-photon photoemission from Au plasmonic crystal", SPP11, The 11th International Conference on Surface Plasmon Photonics, Hitotsubashi Hall, Tokyo, 2025.05.19-23 (oral)
4. A. Kubo, K. Kihara, K. Motoi, N. Ichiji, "Spin angular momentum of femtosecond space-time surface plasmon polariton wave packet", OMC2025, The 12th Optical Manipulation and Structured Materials Conference, Pacifico Yokohama, Japan, 2025.04.21-25 (oral)
5. A. Kubo, K. Kihara, K. Motoi, N. Ichiji, "Femtosecond imaging and spin-angular momentum analysis of space-time surface plasmon polariton", Pacificchem 2025, Hawaii Convention Center, USA, 2025.12.15-20 (poster)
6. K. Kihara, K. Motoi, N. Ichiji, A. Kubo, "Numerical analysis of Spin Angular Momentum in Space-Time Surface Plasmon Polaritons", Workshop on Structured Light and Materials 2025, GIS Taipei Tech Convention Center, Taiwan 2025.11.17-18 (poster)

国内会議

1. 久保敦「金属表面・メタ構造における構造化表面プラズモンの波束・固有状態・スピントクスチャ」光科学－工学特別研究会、東京大学生産技術研究所、2025.11.6 (招待)
2. 久保敦「フェムト秒光電子顕微鏡による金属メタ構造の探索」第48回 ATTO 懇談会、東京大学駒場リサーチキャンパス先端科学技術研究センター、2025.09.24-25 (招待)
3. 福本恵紀, 久保敦「表面電場ゆらぎを利用する高効率フォトカソードの開発」第73回応用物理学会春季学術講演、東京科学大学、2026.03.15-18 (招待)
4. 元井慧, 竹内孝太郎, 木原孝太郎, 伊知地直樹, 久保敦「伝搬不変型 space-time 表面プラズモンポラリトンの時間分解観察」第73回応用物理学会春季学術講演、東京科学大学、2026.03.15-18 (口頭)
5. 木原孝太郎, 木田遼太, 山根治起, 久保敦「フェムト秒レーザー誘起磁化反転の磁気光学カー効果顕

微鏡による観察」第 73 回応用物理学会春季学術講演、東京科学大学、2026.03.15-18（口頭）

6. 久保敦「Space-time 表面プラズモンボラリトンの時間分解観察とスピントクスチャ」エネルギー物質科学研究センター TREMS ワークショップ、筑波大学、2026.03.10（口頭）
7. 木原孝太郎, 元井慧, 伊知地直樹, 久保敦「Space-time 表面プラズモン波束における三次元スピン角運動量の配向制御」第 86 回応用物理学会秋季学術講演、名城大学天白キャンパス、2025.09.7-10（口頭）
8. 福本恵紀, Pyatenko Elizaveta, 豊澤剛, 久保敦「金属メタ構造を利用するフォトカソードの開発」第 86 回応用物理学会秋季学術講演、名城大学天白キャンパス、2025.09.7-10（口頭）
9. 久保敦「フェムト秒ストラクチャード表面プラズモン波束」第 47 回 ATTO 懇談会、オンライン、2025.07.15（口頭）
10. 久保敦「Space-time 表面プラズモン波束のスピン角運動量テクスチャ」学術変革領域研究 A「キラル光物質科学」 2025 年度第 1 回領域会議、京都大学、2025.10.31-11.1（ポスター）

4.2 競争的資金獲得状況（2025 年度）

研究者	予算区分	種目	研 究 課 題	予算額 (千円)	備考
守友浩	委任経理金	パナック財団	フィルム型電極による液体熱電変換素子の出力向上	1,000	2025 年度 ～ 2026 年度
守友浩	委任経理金	熱・電気エネルギー技術財団	化学吸着を活用した高出力な液体熱電変換の開発	1,000	2025 年度 ～ 2026 年度
守友浩	共同研究	株式会社フォーカスシステムズ	三次電池による IoT センサー駆動電源への適用に向けた研究	6,300	2023 年度 ～継続
守友浩	共同研究	大同メタル	熱電変換素子用電極の開発	500	2025 年度
守友浩	共同研究	大成ロテック株式会社	三次電池・熱電変換に関する研究	2,200	2021 年度 ～継続
守友浩	科学研究費補助金	基盤研究(B)	液体熱電変換のための抵抗成分の支配要因の決定	14,600	2025 年度 ～ 2029 年度
丹羽秀治	科学研究費補助金	基盤研究(B)	充放電特性解明に向けたナトリウム二次電池正極活物質の複合的電子状態解析	13,300	2022 年度 ～ 2026 年度
辻村清也	科学研究費補助金	基盤研究(B)	ウェアラブル不感蒸泄センサの開発	6,100	
辻村清也	科学研究費補助金	基盤研究(B)	体表面ライフセンシングによる深層身体状態	300	
辻村清也	科学研究費補助金	二国間交流事業	MOF と酵素のバイオハイブリッド材料のウェアラブルセンサへの応用	1,000	
辻村清也	科学研究費補助金	特別研究員奨励費	使い捨て紙電極を使用した微小流体デバイスでの細胞外神経伝達物質の分析	1,100	
辻村清也	共同研究		新規電気化学バイオセンサに関する研究	1,000	
二瓶雅之	科学研究費補助金	挑戦的研究(萌芽)	単原子・イオンの精密空間配置と超高密度単原子触媒の開発	5,000	2024 年～ 2026 年度
二瓶雅之	科学研究費補助金	基盤研究(S)(分担)	2 次元性を基盤とするソフトマテリアルサイエンスの開拓	800	2025 年度
二瓶雅之	科学研究費補助金	学術変革領域研究(A)(公募研究)	ナノケーシング包接金属酸化物の表面リプログラミング	2,300	2025 年度
志賀拓也	科学研究費補助金	基盤研究(C)	分子スピンを利用した熱量効果材料の開発	3,600	2023 年～ 2025 年度

志賀拓也	研究助成金	公益財団法人 東京応化科学 技術振興財団 第 39 回「研究 費の助成」	錯体分子を基盤とした分子性磁気冷 凍材料の構築	1,500	2025 年度
志賀拓也	研究助成金	公益財団法人 山田科学振興 財団	分子のスピン状態を利用した熱量効 果材料の開発	2,000	2025 年～ 2026 年度
三原のぞみ	科学研究費 補助金	若手研究	有機分子ケージを利用した金属酸化 物ナノ粒子の形状・サイズ制御合成	3,500	2023 年～ 2025 年度
三原のぞみ	科学研究費 補助金	学術変革領域 研究(A) (公募研究)	固液界面における π 多面体ケージの 二次元・三次元自己組織化	5,800	2024 年～ 2025 年度
三原のぞみ	助成金	花王芸術・科 学財団/花王 Crescent award (研究助成)	カゴ型有機分子を利用した金属ナノ 粒子のサイズ・形状制御合成による高 活性触媒の構築	1,000	2024 年～ 2025 年度
柳原英人	科学研究費 補助金	基盤研究(B) (代表)	酸化物／金属強磁性層間に生じる交 換結合の電氣的制御	2,300	
柳原英人	科学研究費 補助金	基盤研究(S) (分担)	トンネル磁気抵抗効果の新展開：軌道 対称性効果の解明と新規量子デバイ スの創出	4,000	
柳原英人	科学研究費 補助金	基盤研究(A) (分担)	バリスティックスピン伝導制御によ る巨大トンネル抵抗変化の発現	700	
柳原英人	受託研究費	NEDO	B-1. 完全レアアースフリー磁石の成 形技術 B	5,923	
柳原英人	共同研究	株式会社ダイ セル	次世代高温駆動ハード磁石材料に関 する共同	10,380	
末益崇	科学研究費 補助金	国際共同研究 加速基金(海外 連携研究)	不純物添加 Mn_4N フェリ磁性体による 超高速磁壁駆動とサブ THz マイクロ 波発振	5,850	
都甲薫	科学研究費 補助金	基盤研究(A)	フレキシブル多接合太陽電池の革新 ボトムセル技術	6,700	
都甲薫	科学研究費 補助金	挑戦的研究 (萌芽)	多層グラフェンにおける縦型配向現 象の制御と電池負極性能の革新	1,700	
都甲薫	受託研究	NEDO 先導研 究プログラム	低消費電力フレキシブル CMOS の創 製	4,100	
都甲薫	受託研究	JST 創発的研 究	ハイブリッド・チャネル相補型薄膜ト ランジスタ	7,500	
都甲薫	研究助成	東電記念財団	高移動度 IV 族半導体をベースとした 高速フレキシブル・トランジスタの開 発	1,000	
都甲薫	研究助成	新化学技術推 進協会	Yb 系強相間電子材料を用いた薄膜熱 電デバイスの開拓	3,000	
都甲薫	研究助成	つくば産学連 携強化プロジ ェクト	Ge シード技術を用いた高効率フレキ シブル CIGS 太陽電池の開発	3,000	

所裕子	科学研究費補助金	基盤研究(B)	分子磁性体を舞台とした磁区エンジニアリングの開拓	2,200	
所裕子	科学研究費補助金	挑戦的研究(萌芽)	ラムダ型酸化チタンを用いたサステナブル・高活性固体高分子形燃料電池触媒材料の創製	2,400	
所裕子	受託研究費	JST 創発	ナノと双安定性の相関による新奇機能性物質の探索機構の創出	7,000	
所裕子	共同研究費	第一稀元素化学工業 株式会社	外場応答型ジルコニウム酸化物材料の開発	1,600	
Junhao Wang	科学研究費補助金	若手研究	Development of new molecular self-temperature sensing techniques using luminescence-absorption hybrid thermometry	1,300	
赤木慎太郎	科学研究費補助金	特別研究員奨励費	分子磁性体を舞台としたゼロ次元系・強磁性物質の創製と機能性の開拓	700	
長島俊太郎	科学研究費補助金	特別研究員奨励費	磁気化学を基盤とした新規な光磁性体の開発と光磁気ドメインの初解明	1,400	
清木陸	受託研究費補助金	次世代	ラムダ型五酸化三チタンを用いた新エコロジカル固体高分子形燃料電池触媒の創製	500	
岩室憲幸	東芝デバイス&ストレージ(株)	寄附金	SiC MOSFET セル間特性ばらつきが素子破壊耐量に与える影響の研究	500	
磯部高範,	文部科学省(東京都立大学再委託)	革新的パワーエレクトロニクス創出基盤技術研究開発事業	SST の高性能化に向けた回路・デバイス・制御技術の統合技術開発	10,900	
磯部高範	NEDO	2025 年度新産業・革新技術創出に向けた先導研究プログラム	次世代高電圧変換器向け超高耐圧 SiC デバイスの技術開発	1,300	
磯部高範	環境省(再委託)	令和 7 年度革新的な省 CO2 実現のための部材や素材の社会実装・普及展開加速化事業	再エネ導入を促進する蓄電池用高効率インバータ及びシステム制御技術の開発	16,780	
矢野裕司	科学研究費補助金	基盤研究(B)	SiC 横型超接合パワーMOSFET によるワenchipp相補型電力変換器の開発	3,800	
矢野裕司	寄附金	東芝デバイス&ストレージ株式会社 学術奨励制度	SiC MOSFET へのゲート AC ストレス印加時の発光現象と V_{th} 変動メカニズム	500	

矢野裕司	文部科学省 (再委託)	革新的パワー エレクトロニ クス創出基盤 技術研究開発 事業	炭化ケイ素 MOS 界面科学に基づく革 新的製造技術の基盤構築／試作縦型 チップの評価と回路応用による新技 術の優位性実証	3,000	
奥村宏典	助成金	公益財団法人 東電記念財団	波長可変の真空紫外固体発光素子の 開発	7,850	
奥村宏典	受託研究費	K-program (NEDO)	Project to develop β - Ga2O3 wafers, power devices and power modules	33,000	
奥村宏典	科学研究費 補助金	基盤研究(B)	縦型窒化アルミニウム素子の作製技 術の確立	18,590	
奥村宏典	共同研究	東京エレクト ロン株式会社	薄膜材料の研究		
笹森貴裕	科学研究費 補助金	学術変革領域 研究(A)計画班	高周期元素環状 π 共役系を基盤とする 高度 π 分子体の創製	19,200	
笹森貴裕	科学研究費 補助金	挑戦的研究 (萌芽)	6 つのケイ素原子から成る環状共役 系「ヘキサシラベンゼン」の創出	2,500	
笹森貴裕	科学研究費 補助金	基盤研究(B)	小分子変換反応の典型元素触媒を指 向した新規高周期 14 族元素芳香族化 合物の創製	3,100	継続
笹森貴裕	科学研究費 補助金	基盤研究(C) (分担)	ホウ素の元素特性を活用した安定ラ ジカル化合物の開発と機能開拓	100	継続
笹森貴裕	受託研究費	NEDO「グリー ンイノベーション 基金事業 (再委託・分 担)」	設置自由度の高いペロブスカイト太 陽電池の実用化技術開発	5,000	継続
笹森貴裕	補助金	JST CREST [革新的反応]	不安定アニオン種の単離と構造解析	1,000	継続
菅又功	科学研究費 補助金	基盤研究(C)	高周期典型元素を中心とする集積二 重結合物の創製と未踏高反応性 分子の開拓	1,300	
正田浩一郎	科学研究費 補助金	若手研究	配位性側鎖を有する環歪みのあるボ ラベンゼンの合成	1,800	
近藤剛弘	JST	GteX 革新的 GX 技術創出 事業 (基金) 革新水素貯蔵 -水素反応の精 密解析とデジ タル技術の援用-	革新水素貯蔵に向けた材料特性向上	29,770	2025 年度
近藤剛弘	科学研究費 補助金	基盤研究(B)	3 次元フレームワーク構造を持つ新規 ホウ化水素関連物質群の創出	7,280	2025 年度
近藤剛弘	科学研究費 補助金	学術変革領域 研究(A) イオン渋滞学 計画班	イオン流の非平衡性と集団運動の理 解による材料デザイン変革	7,200	2025 年度 配分額分

近藤剛弘	科学研究費補助金	挑戦的研究(萌芽)	ホウ化水素シートを用いた高機能多元素金属ナノクラスター触媒材料群の創出	2,090	2025 年度
近藤剛弘	科学研究費補助金	基盤研究(S)	スマート社会基盤素子に向けた最軽量原子層材料の開発	3,600	2025 年度 (直接経費：筑波大配分額のみ)
近藤剛弘	JST	CREST 未踏探索空間における革新的物質の開発	2 次元ホウ素未踏マテリアルの創製と機能開拓	9,373	2025 年度 (筑波大配分額のみ)
西堀英治	受託研究費	二国間交流事業共同研究	ミクロンサイズ単結晶構造解析に基づく物質科学研究	4,000	2024 年～ 2025 年度
西堀英治	科学研究費補助金	学術変革研(A)計画研究(分担)	2.5 次元構造の分析技術開発	6,150	2025 年度
西堀英治	科学研究費補助金	学術変革研(A)総括班(分担)	2.5 次元物質科学の総括	800	2025 年度
西堀英治	科学研究費補助金	基盤研究(A)	熱電変換材料開発に向けた量子結晶学の構築	6,800	2025 年度
西堀英治	受託研究費	JST CREST	材料創製のための分解前駆現象と機能再生の学理構築	1,000	2025 年度
上殿明良	科学研究費補助金	基盤研究(B)	マイクロ波を用いた半導体デバイス材料の点欠陥焼鈍機構の解	2,900	
上殿明良	受託研究費	革新的パワーエレクトロニクス創出基盤技術研究開発事業(パワーデバイス領域)	a. HVPE による低コストデバイス活性層エピタキシャル成長技術の開発、b. 高制御性・産業適格イオン注入技術の開発、c. 高信頼性 MOS 界面技術の開発	6,996	
羽田真毅	科学技術振興機構	創発的研究支援	高コヒーレンス・極短パルス電子線創出によるナノ構造体の動的構造解析の新展開	3,000	
羽田真毅	科学研究費補助金	基盤研究(B)	THz 波ポンプ電子線回折プローブ実験系の開発と物質の強電場誘起現象の開拓的研究	2,300	
羽田真毅	科学研究費補助金	挑戦的研究(開拓)	水系と非水系の両方で高速輸送機能を発現するロバストなナノチャネル輸送膜の開発	1,000	
羽田真毅	科学研究費補助金	国際共同研究加速基金 国際共同研究強化(A)	超高速回折法と分光法の相補利用で見るファンデルワールスヘテロ構造のエネルギー輸送	4,500	
羽田真毅	科学研究費補助金	特別研究員奨励費	非線形フォノンニクス駆動による構造相転移現象の直接観察	1,000	
丸本一弘	運営費交付金等	教研－重点－研究力強化－イノベーション創出	学術センター形成事業	6,300	

丸本一弘	運営費交付金等	M 実一組織ー研究戦略イニシアティブ推進機構	「真の総合大学」実現に向けた研究 学術センター形成支援	11,858	
丸本一弘	科学研究費補助金	基盤研究(B)	鉛フリーペロブスカイト太陽電池の埋もれた界面電子構造の解明とオペランドスピン計測	4,810	
丸本一弘	受託研究	科学技術振興機構／未来社会創造事業	CFRP 複合材劣化のオペランドマイクロ計測分析法と余寿命推定モデル	19,760	
丸本一弘	受託研究	科学技術振興機構／未来社会創造事業	電子スピン共鳴による太陽電池材料・素子の電荷・スピン状態解析と材料探索	6,500	
丸本一弘	受託研究	新エネルギー・産業技術総合開発機構／グリーンイノベーション基金事業	設置自由度の高いペロブスカイト太陽電池の実用化技術開発	7,605	
丸本一弘	研究助成	東芝エネルギーシステムズ	ペロブスカイト／シリコンタンデムの接合	600	
WANG JIAXI	補助金	フェローシップ	有機電気化学トランジスタ構造を用いた高分子太陽電池材料の電荷蓄積状態と分子配向の ESR 研究	260	
陳奕舟	補助金	次世代研究者挑戦的研究プログラム	ESR 分光法による RP スズペロブスカイト太陽電池の動作機構解明と性能向上	500	
佐藤睦	補助金	次世代研究者挑戦的研究プログラム	非フラーレンアクセプタを用いた高効率有機薄膜太陽電池の劣化解析	500	
劉李祺	補助金	次世代研究者挑戦的研究プログラム	PEAI 界面修飾型ペロブスカイト太陽電池の界面電荷挙動の光誘起 ESR 研究	500	
山本洋平	受託研究費	科学技術振興機構 CREST	自己組織化トポロジカル有機マイクロ共振器の開発	37,159	
山本洋平	科学研究費補助金	基盤研究(A)	超階層構造スケルタル結晶化学とメゾスコピック機能	7,610	
山本洋平	科学研究費補助金	学術変革(A)(公募)	キラル π 共役ポリマーメタ球体からの未踏光機能	2,600	
山本洋平	受託研究費	筑波大学・DAAD パートナースhip・プログラム	トポロジカル有機レーザーの実現に向けた光-物質相互作用に関する 2 国間共同研究	1,575	
櫛田創	受託研究費	科学技術振興機構 ACT-X	分子振動ポラリトン凝縮によるトランススケール材料創成	3,787	
櫛田創	科学研究費補助金	若手研究	光共振器性能が光物質強結合下の光電子特性に及ぼす影響の究明	600	
櫛田創	財団助成金	東洋合成記念財団研究助成	「高分子の複屈折性を利用した新規光共振器の開発	2,000	

櫛田創	財団助成金	村田学術振興・教育財団研究助成	新陳代謝型トランジスタの開発と人工ニューロン応用	5,000	
佐々木史雄	科学研究費補助金	基盤研究(B)(分担)	TPCO 自己キャビティにおける励起子フォノンポラリトンレーザー発振	150	
中村貴志	受託研究費	JST さきがけ	大環状錯体によるバイオマス炭素資源の精密自在変換	15,600	
中村貴志	科学研究費補助金	学術変革(A)公募研究	構造の非対称化に着目した環状多量体リプログラミング法の開拓	2,990	
中村貴志	研究助成	一般財団法人サムコ科学技術振興財団	金属を表面における分子結合部位とするインプリント触媒の開発	2,000	2024 年～2025 年度
中村貴志	研究助成	公益財団法人日揮・実吉奨学会	シクロデキストリン多量体を用いた配位認識人工酵素の創製	2,000	2024 年～2026 年度
中村貴志	研究費	世界で活躍できる研究者戦略育成事業 - TRiSTAR プログラム	金属イオンを並べた大環状分子の専門深化とトランスボーダーによる機能開拓	1,500	2024 年～2025 年度
中村貴志	国内研究助成 1 萌芽的研究(a)	公益財団法人クリタ水・環境科学振興財団	水分子が構造化する逆疎水効果を利用した人工レセプターの創製	1,000	2024 年～2025 年度
川本優也	科学研究費学術研究助成基金	特別研究員奨励費	大環状N-ヘテロ環状カルベン多核錯体による多点カップリング反応の開発	1,100	
桑原純平	共同研究	R 社	有機 EL 用材料の開発	600	
桑原純平	共同研究	K 社	Pd 触媒の開発	600	
山岸洋	受託研究費	科学技術振興機構 創発	細胞内の分子濃度を in situ で検出する有機マイクロレーザーの開発	9,820	
山岸洋	科学研究費補助金	基盤研究(B)	細胞内部でプローブとして機能する生体親和マイクロレーザーの開拓	2,700	
山岸洋	科学研究費補助金	国際共同研究加速基金(分担)	低しきい値有機固体レーザーを指向した剛直平面有機分子の開発	900	
山岸洋	寄附金	公益財団法人天野工業技術研究所	細胞内計測を指向した微小有機レーザー素子の精密作成法の開拓	1,350	
山岸洋	寄附金	公益財団法人クリタ水・環境科学振興財団	水中の微量化合物を超高感度かつリモートに検出する分子ポケット付き有機微小レーザーの開発	1,350	
久保 敦	科学研究費補助金	学術変革領域研究(A)公募研究	スペース・タイム表面プラズモンポラリトン波束によるスピン角運動量制御	5,600	2025 年～2026 年度
久保 敦	科学研究費補助金	基盤研究(B)	構造化表面プラズモンポラリトン場のスピントクスチャによる磁化誘起	15,500	2025 年～2027 年度

久保 敦	受託研究費	文 部 科 学 省 光・量子飛躍フ ラッグシップ プログラム (Q- LEAP)	先端レーザーイノベーション拠点「次 世代アト秒レーザー光源と先端計測 技術の開発」部門	2,000	2025 年度
------	-------	--	---	-------	---------

4.3 共同研究

研究者	相手先	期間	内容	備考
守友浩	NIMS	2020～現在	ペロブスカイト型太陽電池	
守友浩	上海交通大学	2020～現在	ペロブスカイト型太陽電池	
守友浩	SPring-8	2020～現在	強相関化合物	
守友浩	JASRI	2016～現在	X線マイクロビームの利用	
守友浩	東京海洋大学	2020～現在	三次電池の開発	
丹羽秀治	PF	2020～現在	EXAFS	
丹羽秀治	産業技術総合研究所	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	2016～現在	二次電池の放射光解析に関する研究	
辻村清也	東京理科大学	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	東京農工大学	2014～現在	酵素電極に関する研究	
辻村清也	東京薬科大学	2018～現在	電極材料，イオン液体に関する研究	
辻村清也	岡山大学	2015～現在	酵素電極に関する研究	
辻村清也	メルボルン大学（オーストラリア）	2020～現在	微生物燃料電池を活用した廃水処理に関する研究	
辻村清也	グルノーブル・アルプ大（フランス）	2015～現在	電気化学バイオセンサに関する研究	
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，メタン菌の電気化学に関する研究	
辻村清也	NIMS	2018～現在	微生物電気化学に関する研究	
柳原英人	名古屋大学	2023～現在	磁気熱電材料の探索	
柳原英人	物質・材料研究機構	2020～現在	スピントロニクス材料探索とその素子化	

末益崇	デルフト工科大学 (オランダ)	2018～現在	BaSi ₂ 薄膜太陽電池用ホール輸 送層の探索	
末益崇	東ソー株式会社	2022～現在	BaSi ₂ 薄膜太陽電池	
末益崇	産業技術総合研究所	2025～現在	BaSi ₂ 薄膜太陽電池	
末益崇	物質・材料研究機構	2025～現在	Ba ₂ AgSi ₃ 系熱電材料の探索	
末益崇	グルノーブル・アルプ大 学 (フランス)	2018～現在	半導体の欠陥評価	
末益崇	出光興産株式会社	2021～現在	パワー半導体デバイス	
末益崇	Neel 研究所、Spintec 研究 所 (フランス)	2023～現在	スピン軌道トルクによるスピン 流の Mn ₄ N への注入	
末益崇	エーテボリ大学 (スウェーデン)	2024～現在	スピン軌道トルクによるサブ THz 発振の研究	
都甲薫	九州大学	2020～現在	ゲルマニウム薄膜トランジスタ の研究開発	
都甲薫	産業技術総合研究所	2021～現在	新規グラフェンデバイスの研究 開発	
都甲薫	物質・材料研究機構	2023～現在	IV 族材料の高圧合成技術の研究 開発	
都甲薫	Forschungszentrum Jülich	2025～現在	ゲルマニウム薄膜トランジスタ の研究開発	
大越慎一	東京大学	2013～現在	光誘起相転移、蓄熱、バロカロ リック効果を示す機能性相転移 材料の研究	
Eric Collet	University of Rennes (フランス)	2018～現在	相転移の超高速ダイナミクスと その制御に関する研究。	
Szymon Chorazy	Jagiellonian University (ポーランド)	2021～現在	発光、磁性、非線形光学特性を 示す機能性材料の研究。	
重田育照	筑波大学 計算科学研究 センター	2025～現在	磁性金属錯体の磁気軌道に関す る理論研究	
清井明	三菱電機株式会社	2024～現在	シリコンの水素ドナーに関する 研究	
松下雄一郎	Quemix 株式会社	2024～現在	シリコンの水素ドナーに関する 研究	
染谷満	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	2012～現在	炭化ケイ素パワーエレクトロニ クスに関する研究	
渡部平司	大阪大学	2021～現在	炭化ケイ素パワーエレクトロニ クスに関する研究	
五十嵐信之 加地徹	名古屋大学・未来材料・ システム研究所	2019～現在	窒化ガリウムパワーエレクトロ ニクスに関する研究	
牧野俊晴	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	2016～現在	ダイヤモンドパワーエレクトロ ニクスに関する研究	

小野行徳、 堀匡寛	静岡大学・電子工学研究 所	2025～現在	チャージポンピング分光に関する研究	
岩室憲幸 矢野裕司 磯部高範	富士電機株式会社	2022.4～2026.3	富士電機パワーエレクトロニクス特別共同研究事業	
岩室憲幸 矢野裕司 磯部高範	Tsukuba Power Electronics Constellation (TPEC)	2024.4.1～ 2025.3.31	SBD 内蔵 MOSFET の評価, Z ソースインバーター開発など	
岩室憲幸	三菱重工(株)	2024.4.1～ 2026.6.30	SiC MOSFET 特性解析に関する研究	
岩室憲幸	パナソニック(株)	2024.4～ 2027.3.31	SiC 半導体信頼性評価技術に関する技術開発	
三俣千春	東北大学金属材料研究所	2025～現在	磁歪材料の開発	
奥村宏典	高エネルギー加速器研究 機構	2018～現在	放射線耐性に優れた半導体素子の開発	
奥村宏典	東北大学	2020～現在	放射線耐性に優れた半導体素子の開発	
奥村宏典	産業総合技術研究所	2018～現在	放射線耐性に優れた半導体素子の開発	
奥村宏典	物質・材料研究機構	2018～現在	放射線耐性に優れた半導体素子の開発	
奥村宏典	東京理科大学	2023～現在	AlN の光学評価	
奥村宏典	名古屋大学	2023～現在	AlN の物性評価	
奥村宏典	University Sorbonne Paris-Nord (フランス)	2023～現在	Ga2O3 素子の特性評価	
奥村宏典	Massachusetts Institute of Technology (米国)	2024～現在	AlGaIn パワーデバイス	
奥村宏典	University of Grenoble Alpes (フランス)	2024～現在	(AlGa)2O3 の物性評価	
奥村宏典	NTT 物性科学基礎研究所	2025～現在	放射線耐性に優れた半導体素子の開発	
奥村宏典	住友化学株式会社	2025～現在	放射線耐性に優れた半導体素子の開発	
奥村宏典	三菱電機株式会社	2025～現在	Ga2O3 結晶の開発	
奥村宏典	東京エレクトロン株式会社	2025～現在	半導体材料	
奥村宏典	ノベルクリスタルテクノ ロジー株式会社	2025～現在	Ga2O3 結晶の開発	
笹森貴裕	京都大学化学研究所 若宮淳志教授	2021～現在	ペロブスカイト太陽電池の研究	
笹森貴裕	ドレスデン大学 (ドイツ) Jan Weigand 教授	2021～現在	リンおよびケイ素を含む電子受容分子の研究	

笹森貴裕	京都大学理学研究科 依光英樹教授	2020～現在	電子移動反応に関する研究	
笹森貴裕	兵庫県立大学理学部 吾郷友宏教授	2020～現在	励起子制御に立脚した有機ラジカル青色発光体の開発研究	
笹森貴裕	ボン大学（ドイツ） Alessandro Bismuto 教授	2024～現在	リンおよび硫黄ラジカルバッテリーの開発研究	
笹森貴裕	ムルシア大学（スペイン） Arturo Espinosa Ferao 教授	2014～現在	高周期 14 族元素を含む芳香族化合物の構造・物性研究	
近藤剛弘	Stanford University	2025～現在	ホウ化水素シートを用いた固体燃料の研究	
近藤剛弘	京都大学	2024～現在	ホウ化水素シートを用いた核融合燃料の研究	
近藤剛弘	University College London （英国）	2018～現在	ホウ化水素シートの構造と電子状態に関する基礎科学的研究	
近藤剛弘	産業技術総合研究所	2024～現在	水素貯蔵材料に関する研究	
近藤剛弘	東北大学	2024～現在	水素貯蔵材料に関する研究	
近藤剛弘	早稲田大学	2024～現在	水素貯蔵材料に関する研究	
近藤剛弘	QST	2024～現在	水素貯蔵材料に関する研究	
近藤剛弘	Consejo Superior de Investigaciones Científicas （スペイン）	2023～現在	ホウ化水素シートの構造と電子状態に関する研究	
近藤剛弘	KAIST（韓国）	2023～現在	ホウ化水素シートと金属水素化合物を用いた水素貯蔵材料の研究	
近藤剛弘	東京科学大学	2015～現在	共有結合性の新規二次元物質の開発とその基盤研究	
近藤剛弘	東京科学大学	2015～現在	ホウ化水素シートの光応答特性に関する研究	
近藤剛弘	高知工科大学	2015～現在	ホウ素含有物質の構造解析に関する研究	
近藤剛弘	東京科学大学	2016～現在	硫化ホウ素シート合成およびホウ化水素シートの電気特性に関する研究	
近藤剛弘	東京大学	2017～現在	ホウ化水素シートの電子状態に関する研究	
近藤剛弘	物質・材料研究機構	2017～現在	ホウ化水素シートの構造と電子状態に関する研究	
近藤剛弘	東京農工大学	2015～現在	炭素ドープホウ化水素シートの構造と電子状態に関する研究	
近藤剛弘	物質・材料研究機構	2016～現在	硫化ホウ素シート合成に関する研究	

石塚智也	大阪公立大学	2025.04～ 2025.09	四重縮環ポルフィリン 3d 遷移金属錯体を利用した小分子活性化触媒の開発	触媒科学計測共同研究拠点(研究費 10 万円)
石塚智也	九州大学 先導物質科学研究所	2025.4～2026.3	四重縮環ポルフィリン 3d 遷移金属錯体を利用した小分子活性化触媒の開発	物質・デバイス領域共同研究拠点(研究費 14.5 万円)
石塚智也	大阪公立大学	2025.10～ 2026.03	疎水性キャビティを有する遷移金属-ポルフィリン錯体の触媒活性	触媒科学計測共同研究拠点(研究費 10 万円)
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	2014～現在	金属錯体の機能と構造相関	
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	理化学研究所	2018～現在	X 線自由電子レーザーを用いた先端構造解析	
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	
西堀英治	東北大学	2017～現在	新規超伝導体の構造決定	
西堀英治	東北大学	2018～現在	導電性金属錯体の構造決定	
西堀英治	九州大学	2020～現在	グラフェンインタカレーション その場観察	
西堀英治	東京工芸大学	2022～現在	グラフェンインタカレーション その場観察	
西堀英治	大阪大学	2022～現在	グラフェンインタカレーション その場観察	
西堀英治	東京大学	2022～現在	2.5 次元物質デバイスの構造評価	
西堀英治	東京大学	2022～現在	2.5 次元物質デバイスの構造評価	
西堀英治	物質・材料研究機構	2022～現在	TMD 薄膜デバイスの構造評価	
上殿明良	東京エレクトロン株式会社	2020～現在	半導体前工程材料に関する研究	
上殿明良	Interuniversity Microelectronics Centre	2021～現在	半導体後工程材料に関する研究	
上殿明良	Institute of High Pressure Physics - High Pressure Scientific Research	2021.5～現在	高圧物理学に関する研究	

上殿明良	物質・材料研究機構	2024～現在	高分子の自由体積の検出及び温度特性についての研究	
羽田真毅	京都大学（松尾二郎准教授）	2015～現在	時間分解電子線回折装置の開発	
羽田真毅	北海道大学（片山司准教授）	2024～現在	強誘電体の構造ダイナミクス計測	
羽田真毅	九州大学（恩田健教授）	2016～現在	時間分解電子線回折法と時間分解赤外法の融合	
羽田真毅	岡山大学（仁科勇太研究教授）	2014～現在	酸化グラフェンの構造ダイナミクス計測	
羽田真毅	京都大学（齊藤尚平准教授）	2016～現在	FLAP の構造ダイナミクス計測	
羽田真毅	東京大学（加藤隆史教授）	2017～現在	アゾベンゼン液晶の構造ダイナミクス計測	
羽田真毅	岡山大学（林靖彦教授・鈴木弘朗助教）	2019～現在	カーボンナノチューブの局所熱伝導の観測	
羽田真毅	北海道大学（前田理教授）	2019～現在	カーボンナノチューブの局所熱伝導の観測	
羽田真毅	京都大学（坂本雅典准教授）	2021～現在	ハイドロプラナノ粒子の構造ダイナミクス計測	
羽田真毅	University of Toronto (R. J. Dwayne Miller 教授)	2018～現在	時間分解電子線回折法を用いたスピントロニクス物質の構造ダイナミクス計測	
羽田真毅	University of Surrey (S. Ravi P. Silva 教授)	2020～現在	カーボンナノチューブのダイナミクス計測	
羽田真毅	University of Rennes 1 (Roman Bertoni 准教授)	2022～現在	カーボンナノチューブと窒化ホウ素ナノチューブの界面におけるエネルギー輸送計測	
羽田真毅	CNRS (Arnaud Arbouet 博士)	2024～現在	新しい電子線源の開発	
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	
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	
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	
丸本一弘	日本電子株式会社	2022～現在	電子スピン共鳴装置の開発に関する研究	
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	
丸本一弘	京都大学	2017～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	
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	

丸本一弘	東芝エネルギーシステムズ株式会社	2019～現在	ペロブスカイト太陽電池の研究	
丸本一弘	京都大学	2016～現在	ESR 法を用いたペロブスカイト太陽電池の電荷状態に関する研究	
丸本一弘	九州大学	2021～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	
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	高分子マイクロディスクアレイ	
山本洋平	九州大学	2014～現在	π 共役 dendrimer の自己組織化	
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	産業技術総合研究所	2018～現在	フォトクロミック分子の応用	
山本洋平	関西学院大学	2016～現在	キラルシクロファン結晶化	
山本洋平	高知工科大学	2020～現在	柔軟性結晶分子の光機能	
山本洋平	千葉大学	2021～現在	キラル球体からの光渦発生	
山本洋平	東京大学	2021～現在	キラル球体の表面メタサーフェス	
山本洋平	農業・食品産業技術総合研究機構	2019～現在	シルクの自己組織化・機能付与	
山本洋平	Leibniz 光技術研究所 (ドイツ)	2016～現在	マイクロ共振器のプラズモン効果	
山本洋平	Eindhoven 工科大学 (オランダ)	2017～現在	円偏光発光ポリマーの自己組織化	
櫛田創	京都大学	2022～現在	TADF 分子の光機能	
櫛田創	University of Heidelberg(ドイツ)	2023～現在	有機半導体ゲルのデバイス化	
櫛田創	University of Strasbourg(フランス)	2023～現在	光物質強結合	
中村貴志	インド科学大学 (インド)	2025～現在	環状錯体の自己集合システムに関する研究	
中村貴志	長崎大学	2025～現在	炭素-金属配位結合の超分子に関する研究	
鍋島達弥	Nanoview 株式会社	2016～現在	機能性色素材料の開発	
桑原純平	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	

桑原純平	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	小山工業高等専門学校	2020～現在	有機デバイス機能評価に関する研究	
桑原純平	茨城大学大学院 理工学研究科	2022～現在	含フッ素ポリイミドの開発に関する研究	
山岸洋	Leibniz 光技術研究所 (ドイツ)	2023～現在	有機光共振器の電磁場計算	
山岸洋	University of Duisburg-Essen (ドイツ)	2025～現在	微小抗体を利用した光センサーの構築	
山岸洋	産業技術総合研究所	2022～現在	液滴レーザーの外場応答	
山岸洋	株式会社 リガク	2023～現在	分子結晶の構造解析	
山岸洋	九州大学	2023～現在	分子結晶の蛍光発光特性測定	
山岸洋	京都大学	2023～現在	有機光共振器のバイオ応用	
山岸洋	神奈川大学	2023～現在	低しきい値有機レーザーの開発	
山岸洋	産業技術総合研究所	2025～現在	ペプチドの合成	
山岸洋	京都工芸繊維大学	2024～現在	ESIPT 分子の光機能開拓	
山岸洋	立命館大学	2024～現在	有機分子の高速分光解析	
山岸洋	北海道大学	2025～現在	光反応性触媒の合成	
久保 敦	高エネルギー加速器研究機構	2017～現在	フェムト秒光電子顕微鏡の高度化	
久保 敦	東京大学物性研究所	2017～現在	フェムト秒光電子顕微鏡の高度化	
久保 敦	東京大学生産技術研究所	2023～現在	ストラクチャード表面プラズモンポラリトン	
久保 敦	University of Central Florida (米国)	2021～現在	ストラクチャード表面プラズモンポラリトン	
久保 敦	University of Pittsburgh (米国)	2018～現在	トポロジカルプラズモニクス	
久保 敦	秋田産業技術センター	2023～現在	光 - 磁気スピン融合	

センター内連携				
柳原英人	磯部高範	2017～現在	高周波磁化測定装置の開発	

柳原英人	三俣千春	2024～現在	プラズマ発光スペクトルの主成分分析	
西堀英治		2025～現在	磁性金属錯体の結晶構造に関する研究	
丸本一弘		2022～現在	有機無機スピンスイニエンス研究	
近藤剛弘		2023～現在	無機系酸化物の電気化学特性に関する研究	
羽田真毅		2023～現在	酸化チタン薄膜の相転移特性に関する研究	
矢野裕司	梅田享英	2023.4.1～現在	スピン依存チャージポンピング法による SiC MOS 界面の評価	
柳原英人	三俣千春	2024～現在	プラズマ発光スペクトルの機械学習	
奥村宏典	櫻井岳暁	2023～現在	Ga ₂ O ₃ 素子の特性評価	
奥村宏典	上殿明良	2025～現在	(AlGa) ₂ O ₃ の物性評価	NTU-UGA-UT Trilateral Center
笹森貴裕	丸本一弘	2021～現在	ペロブスカイト太陽電池の研究	
近藤剛弘	大木理	2025～現在	研究全般	
近藤剛弘	西堀英治	2017～現在	新物質合成に関する研究	
近藤剛弘	大谷実	2022～現在	菱面体硫化ホウ素の電極触媒性能に関する研究	
近藤剛弘	山本洋平 山岸洋	2025～現在	多孔質材料に関する研究	
近藤剛弘	所裕子	2025～現在	酸化チタンに関する研究	
近藤剛弘	岡田晋	2012～現在	新物質合成に関する研究	
西堀英治	近藤剛弘	2015～現在	ボロン新材料の構造評価に関する研究	
西堀英治	羽田真毅	2021～現在	TADF 物質の単結晶構造解析	
西堀英治	山本洋平	2023～現在	デンドリマーの構造解析	
上殿明良	奥村宏典	2024～現在	ワイドギャップ半導体の空孔型欠陥評価	
羽田真毅	重田育照	2017～現在	FLAP の構造ダイナミクス計測（実験と計算の融合研究）	
羽田真毅	西堀英治	2020～現在	熱活性遅延蛍光物質の超高速構造ダイナミクス計測	
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状態に関する研究	

丸本一弘	所裕子	2022～現在	ESR 法を用いた金属錯体のスピン状態に関する研究	
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	山岸洋 重田育照	2020～現在	お椀状マイクロ結晶のエネルギー計算	
山本洋平	山岸洋 近藤剛弘	2020～現在	シルク-PtNP 複合体の XPS 測定	
山本洋平	山岸洋 近藤剛弘	2024～現在	有機分子結晶の水素吸蔵測定	
山本洋平	山岸洋 西堀英治	2023～現在	分子結晶の構造解析	
中村貴志	笹森貴裕	2020～現在	機能性分子の構造解析に関する研究	
中村貴志	鍋島達弥 西堀英治	2016～現在	大型分子性物質の構造解析に関する研究	
桑原純平	丸本一弘	2020～現在	高機能高性能有機無機スピンエレクトロニクス開発拠点	
山岸洋	山本洋平 近藤剛弘	2024～現在	有機分子結晶のガス吸蔵測定	
久保 敦	山本 洋平	2021～現在	有機マイクロ構造光学	
久保 敦	羽田 真毅	2025～現在	超高速現象科学の研究会	

4.4 研究生等の受け入れ

受入教員	氏名・職名・学年	国籍	受入期間	備考
辻村清也 (物質工学域)	MOHAMAD AIZAD BIN MOHD MOKHTAR マレーシア工科大学 D3	マレーシア	2025.10～2026.03	
辻村清也 (物質工学域)	HUMBERT Tanguy、ENS レンヌ、 修士課程	フランス	2025.06～2025.08	
末益崇 (物理工学域)	Ayushi tyagi (特別研究学生)	インド	2025.09～2025.11	
末益崇 (物理工学域)	Elias Abboubi (特別研究学生)	フランス	2025.08～2025.12	
所裕子 (物質工学域)	Lin Tzu-Hsiang (外国人研究生)	台湾	2024.10～2026.03	
近藤剛弘 (物質工学域)	Sanket Kutiyar・D4	インド	2025.10～2025.12	
近藤剛弘 (物質工学域)	Jilil Qur'ani・M2	インドネシア	2025.09～2025.12	
山本洋平 (物質工学域)	谷垣聡音, B3	日本	2025.05～2026.03	エンブリオ プログラム
山本洋平 (物質工学域)	糸岡来望, B3	日本	2025.05～2026.03	エンブリオ プログラム
山本洋平 (物質工学域)	山下明日香, B1	日本	2025.05～2026.03	エンブリオ プログラム
山本洋平 (物質工学域)	山下明日香, B1	日本	2025.05～2026.03	先導的研究 プログラム
山本洋平 (物質工学域)	Sutrave Siddhi Pankaj,	インド	2025.10～2026.03	
山本洋平 (物質工学域)	Shien Chen (研究生)	台湾	2025.10～2026.03	
山本洋平 (物質工学域)	Mazet Katia, M1	フランス	2025.05～2025.08	インターン (UGA)
中村貴志 (化学域)	Kai Ryo Görlich (特別研究学生)	ドイツ	2025.11～2026.02	
桑原純平 (物質工学域)	宋珮雯 (外国人研究生)	中国	2024.04～2025.03	
山岸洋 (物質工学域)	植木直生, B3	日本	2025.05～2026.02	先導的研究 プログラム
山岸洋 (物質工学域)	上田柚貴, 高校2年生	日本	2025.04～2026.03	GFEST

4.5 受賞

受賞者	賞	受賞理由	受賞年月日	備考
Rezki Muhammad	優秀講演賞	電気化学会秋季大会 鳥取大学にて優れた研究成果発表を行った。	2025.09.05	
杉本章	優秀ポスター講演賞	第二回生物電気化学会国際ワークショップにおいて優れた発表を行った。	2025.09.26	
吉武輝	錯体化学若手の会夏の学校 2025 優秀ポスター賞	研究内容の独創性や新規性、プレゼンテーションのわかりやすさ、研究の理解度が高く評価されたため。	2025.08.27	
鈴木大成	第 1 回次世代分子スピン研究会 ポスター賞	研究内容の独創性や新規性、プレゼンテーションのわかりやすさ、研究の理解度が高く評価されたため。	2026.02.23	
小田嶋欧	第 1 回次世代分子スピン研究会 ポスター賞 (Chemistry Letters Young Researcher Award)	研究内容の独創性や新規性、プレゼンテーションのわかりやすさ、研究の理解度が高く評価されたため。	2026.02.23	
梶原君円	2025 年度半導体エレクトロニクス部門委員会第 1 回研究会 学生優秀講演賞	新規熱電材料 Ba_2AgSi_3 の薄膜作製と第一原理計算を用いたドーパントの探索	2025.08.02	
秋田宗志	XAFS 夏の学校 2025 ポスター賞	$\text{Mn}_{4-x}\text{Pd}_x\text{N}$ 薄膜の磁化補償実証と XANES による構造解析	2025.08.25	
曾布川優樹	数理物質科学研究群長表彰	研究業績優秀のため	2026.03.25	
野沢公暉	第 41 回電気通信普及財団賞テレコムシステム技術学生賞	研究業績優秀のため。	2026.03.11	
都甲薫	第 15 回 RIEC Award	研究業績優秀のため。	2026.02.21	
野沢公暉	第 3 回電子材料界面テクノロジー研究会 服部健雄賞	学会発表優秀のため。	2026.01.22	
野沢公暉	第 16 回 日本学術振興会育志賞	研究業績優秀のため。	2026.01.20	
江藤葉	SAT テクノロジー・ショーケース 2026 ベスト新分野開拓賞	学会発表優秀のため。	2026.01.20	
野沢公暉	MRS2024 Fall Meeting, Best Poster Award	学会発表優秀のため。	2025.12.05	
清野碩	第 15 回 半導体材料・デバイスフォーラム ポスター発表優秀賞	学会発表優秀のため。	2025.10.15	
江藤葉	第 61 回炭素材料夏季セミナー 優秀ポスター賞	学会発表優秀のため。	2025.09.20	
野沢公暉	SSDM, Young Researcher Award	学会発表優秀のため。	2025.09.19	

野沢公暉	APAC Silicide 2025, Young Scientist Award	学会発表優秀のため。	2025.07.27	
野沢公暉	2024 年度 笹川科学研究奨励賞	研究業績優秀のため。	2025.04.20	
野沢公暉	MRS Future Leader	研究業績優秀のため。	2025.04.05	
赤木慎太郎	筑波大学数理物質群長賞 2026(博士論文研究)を受賞	研究業績優秀のため	2026.03.25	
長島俊太郎	筑波大学数理物質群長賞 2026(博士論文研究)を受賞	研究業績優秀のため	2026.03.25	
小林大輝	筑波大学数理物質群長賞 2026(修士論文研究)を受賞	研究業績優秀のため	2026.03.25	
菅又功	Best Oral Award	16th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (ICCST-16)国際会議にて、優れた口頭発表を行った。	2025.08.29	
野元彬弘	優秀講演賞 BSCJ Award	基礎有機化学会 若手オンラインシンポジウムにて、優れた口頭発表を行った。	2025.11.14	
浜野竜成	YIA Poster Award	The Joint Meeting for 8th Japanese Selenium Research Society and 13th International Symposium on Selenium in Biology and Medicine (Se2025)国際会議にて、優れたポスター発表を行った。	2025.11.02	
竹下幸佑	筑波大学 大学院 理工情報生命学術院 数理物質科学研究群 応用理工学学位プログラム 物性・分子工学サブプログラム 修士論文発表優秀賞	修士論文発表で優れた発表をしたため	2026.03.25	指導学生
下里昇平	筑波大学 大学院 理工情報生命学術院 数理物質科学研究群 応用理工学学位プログラム 物性・分子工学サブプログラム 修士論文発表優秀賞	修士論文発表で優れた発表をしたため	2026.03.25	指導学生
田端一輝	筑波大学 理工学群 応用理工学類 学修優秀賞	優秀な学業業績を上げたため	2026.03.25	指導学生
近藤剛弘	筑波大学 2025 Best Faculty member	研究・教育・社会貢献などの分野で極めて優れた業績を挙げたため	2026.02.18	
下里昇平	ACS Publications Outstanding Poster Award	MRM2025 Poster Award の中でもさらに優れた業績と認められたため	2026.02.10	指導学生
下里昇平	MRM2025 Poster Award	MRM2025 において優れた発表を行ったため	2026.02.10	指導学生

中山佳汰	高分子学会関東支部 茨城地区「若手の会」茨城地区高分子学会 Rising Star 発表賞	優れた発表をおこなったため	2025.12.01	指導学生
竹下幸佑	2025 年日本表面真空学会学術講演会 講演奨励賞	2025 年日本表面真空学会学術講演会において優れた講演を行ったため	2025.11.27 (2026.5.30 に授賞式)	指導学生
大岩香凜	11th Southeast Asia Collaborative Symposium on Energy Materials (SACSEM MALAYSIA 2025) Best Poster Award	SACSEM MALAYSIA 2025 において優れた講演を行ったため	2025.10.29	指導学生
袁枚	公益財団法人 日本表面真空学会 女子大学院生優秀賞	TiH ₂ による水素貯蔵材料の水素放出特性の向上に関する優れた研究業績が認められたため	2025.10.21	指導学生
近藤剛弘	公益財団法人 日本表面真空学会 会誌賞	Structure and Electronic State of Boron Atomic Chains on a Noble Metal (111) Surface の論文が優れている為：著者全員が表彰 Yuki Tsujikawa, Xiaoni Zhang, Masafumi Horio, Fumio Komori, Takeru Nakashima, Yasunobu Ando, Takahiro Kondo, Iwao Matsuda	2025.10.21	
近藤剛弘	公益財団法人日本表面真空学会の 2024 年度技術賞	バンドギャップ可変な硫化ホウ素シートの生成と評価 の論文が優れている為	2025.05.31	
A. Uedono, R. Tanaka, S. Takashima, K. Ueno, M. Edo, K. Shima, S. F. Chichibu, J. Uzuhashi, T. Ohkubo, S. Ishibashi, K. Sierakowski, and M. Bockowski	Best paper award	Presentation at 22nd Int. Workshop Junction Tech. 2025	2025.06.06	
平晴希	レーザー学会学術講演会 第 46 回年次大会 優秀ポスター発表賞	優秀な発表を行ったため。	2026.01.14	
長尾梨代	PCOS2025 Poster Award (優秀賞)	優秀な発表を行ったため。	2025.11.28	
塩谷海斗	CSJ 化学フェスタ 最優秀ポスター賞	優秀な発表を行ったため。	2025.11.25	
WANG JIAXI	フェローシップ	有機電気化学トランジスタ構造を用いた高分子太陽電池材料の電荷蓄積状態と分子配向の ESR 研究	2025.04.01	
陳奕舟	次世代研究者挑戦的研究プログラム	ESR 分光法による RP スズペロブスカイト太陽電池の動作機構解明と性能向上	2025.04.01	

佐藤睦	次世代研究者挑戦的研究プログラム	非フラーレンアクセプタを用いた高効率有機薄膜太陽電池の劣化解析	2025.04.01	
劉李祺	次世代研究者挑戦的研究プログラム	PEAI 界面修飾型ペロブスカイト太陽電池の界面電荷挙動の光誘起 ESR 研究	2025.04.01	
宗宮若葉	電子スピンスイエンズ学会 優秀ポスター賞	2025 年会において、発表したポスターが優れていたため	2025.11.22	
内海雄太	筑波大学数理物質科学研究群応用理工学学位プログラム物性・分子工学サブプログラム 修士論文発表優秀賞	修士論文の発表が優れていたため。	2026.03.25	
坂口泰基	筑波大学数理物質科学研究群応用理工学学位プログラム物性・分子工学サブプログラム 修士論文発表優秀賞	修士論文の発表が優れていたため。	2026.03.25	
中山颯大	Molecular Chirality 2025 (MC2025) 優秀学生ポスター賞	単分散キラルポリマーマイクロ球体による角度異方的円偏光発光	2025.05.17	
奥村慎	Molecular Chirality 2025 (MC2025) 優秀学生ポスター賞	光ピンセットによるキラルポリマー球体の光誘起回転	2024.10.04	
関航太	第 22 回 ホスト・ゲスト・超分子化学シンポジウム Organic & Biomolecular Chemistry Poster Prize	4 つの同一配位部位を有する環状多量体を用いたモリブデン 2 核錯体および異種 4 核錯体の合成	2025.06.08	
菅原孝太郎	第 35 回 基礎有機化学討論会 TCI ポスター賞	多点での金属炭素結合を利用した複数の二重結合をもつオレフィン化合物の分子捕捉	2025.09.11	
遠藤智也	基礎有機化学会 若手オンラインシンポジウム (第 5 回)	デュアルポケットアミドシクロデキストリン二量体の選択的アニオン認識	2025.11.14	
遠藤智也	数理物質科学研究群長賞	研究業績優秀のため	2026.03.25	
菅原孝太郎	茗溪会賞	研究業績優秀のため	2026.03.25	
関萌歌	学修優秀賞	微細な光共振バイオプローブを用いた食食過程の反応速度検出	2026.03.25	
加藤 颯	第 25 回 (2025 年春季) 応用物理学会 Poster Award	プラズモニクナノギャップを用いた相変化光変調素子	2025.05.14	
竹内 源太郎	ベストプレゼンテーション賞	優秀な卒業論文発表 (筑波大学理工学群物理学類)	2026.03.25	

4.6 学会活動・各種委員など

氏名	役職など	組織	任期	備考
守友浩	茨城県中性子ビームライン 運営委員	茨城県	2024～2025	
辻村清也	電気化学会 理事	電気化学会	2024.03～現在	
辻村清也	電気化学会関東支部 事務 局長	電気化学会	2024.02～現在	
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	電気化学会男女共同参画推 進委員会委員	電気化学会	2019.02～現在	
辻村清也	生物工学研究会 主査、運 営委員	電気化学会	2021.02～現在	
辻村清也	評議員	日本ポーラログラフ学会	2005.01～現在	
辻村清也	理事	日本ポーラログラフ学会	2022.02～現在	
辻村清也	客員研究員	産業技術総合研究所	2017.04～現在	
辻村清也	シンポジウムオーガナイザ ー	日本 MRS	2018.04～現在	
志賀拓也	次世代分子スピン学会運営 委員	次世代分子スピン学会	2024.12～現在	
志賀拓也	Local Organizing Committee Member	22nd ICMM2030 TOKYO (22nd International Conference on Molecular Magnetism)	2025.09～現在	
志賀拓也	第 52 回有機典型元素化学討 論会実行委員	有機典型元素化学討論会	2024.12～2025.12	
三原のぞみ	BJSCC 編集委員	錯体化学会	2024.07～現在	
三原のぞみ	若手連携推進委員会	錯体化学会	2024.11～現在	
三原のぞみ	錯体化学会 若手の会 関東 支部世話人	錯体化学会 若手の会	2024.04～現在	
三原のぞみ	日本セラミックス協会 ハイ ブリッド化による新材料 開発を目指す会 世話人	日本セラミックス協会	2023.09～現在	
三原のぞみ	第 37, 38 回日本セラミック ス協会秋季シンポジウム オーガナイザー	日本セラミックス協会	2023.09～現在	
三原のぞみ	第 52 回有機典型元素化学討 論会実行委員	有機典型元素化学討論会	2024.12～2025.12	

二瓶雅之	第 52 回有機典型元素化学討論会実行委員	有機典型元素化学討論会	2024.12～2025.12	
二瓶雅之	Local Organizing Committee Member	22nd ICMM2030 TOKYO (22nd International Conference on Molecular Magnetism)	2025.09～現在	
二瓶雅之	プログラム編成小委員会副委員長	日本化学会	2025～現在	
二瓶雅之	常任理事	錯体化学会	2024～現在	
二瓶雅之	副主査	日本化学会 錯体・有機金属ディビジョン	2024～現在	
二瓶雅之	Associate Editor	日本化学会 Bulletin of Chemical Society of Japan	2020～現在	
柳原英人	特任理事	日本磁気学会	2023.06～2025.05	
柳原英人	chapter chair	IEEE Magnetism Society	2025.01～現在	
都甲薫	幹事	薄膜・表面物理分科会	2024.02～現在	
都甲薫	機関誌企画・編集委員	応用物理学会	2023.04～現在	
都甲薫	論文総務	電子材料シンポジウム	2023.04～現在	
都甲薫	Area Chair	SSDM	2022.11～現在	
都甲薫	組織委員	薄膜材料デバイス研究会	2021.12～現在	
都甲薫	Editorial Board Member	Scientific Reports	2021.11～現在	
所裕子	文部科学省科学官	文部科学省	2026.04～現在	
所裕子	東京大学物性研究所協議会委員	東京大学	2024.09～現在	
所裕子	NAO (国代表) of Japan	国際純正応用化学連合 (IUPAC)	2021.01～現在	
所裕子	委員長	日本学術会議 IUPAC 分科会	2020.10～現在	
所裕子	委員	日本学術会議 物理化学・生物物理化学分科会	2020.10～現在	
所裕子	委員	日本学術会議 物理学委員会物性物理学・一般物理学分科会	2020.10～現在	
所裕子	第 24・25・26 期 連携会員	日本学術会議	2017.10～現在	
所裕子	委員	日本学術会議 無機化学分科会	2014.10～現在	

所裕子	男女共同参画推進委員	日本物理学会	2021.04～2025.03	
岩室憲幸	半導体分野将来基金委員	応用物理学会	2024.10～現在	
岩室憲幸	委員	パワーエレクトロニクス MG	2023.10～現在	
岩室憲幸	スクール長	パワエレサマースクール	2002.04～現在	
岩室憲幸	委員長	SiC パワーモジュール国際標準化委員会	2023.04～現在	
岩室憲幸	委員長	NEDO 先導研 研究推進委員会	2023.04～現在	
岩室憲幸	技術委員	NEDO	2023.04～現在	
岩室憲幸	委員	NEDO 調査事業委員会	2025.02～現在	
岩室憲幸	委員	総務省情報通信技術評価委員会	2023.01～現在	
矢野裕司	Technical Program Committee, Member	APWS2024	2023.10～2024.10	
矢野裕司	Program Committee, JJAP Special Issues Editors	SSDM2024	2023.10～2025.03	
矢野裕司	International Steering Committee, Member	ICSCRM	2022.09～現在	
矢野裕司	Technical Program Committee, Member	ICSCRM2024	2023.07～2024.10	
矢野裕司	Technical Program Committee, Member	ICSCRM2025	2024.08～現在	
矢野裕司	Organizing Committee, Member Technical Program Committee, Chair	ICSCRM2026	2025.03～現在	
矢野裕司	編集委員	APEX/JJAP Editorial Board	2021.04～現在	
磯部高範	幹事	電気学会半導体電力変換技術委員会	2019.06～現在	
磯部高範	幹事補佐	電気学会自動車技術委員会	2023.09～現在	
磯部高範	幹事	応用物理学会先進パワー半導体分科会	2019.04～現在	
磯部高範	Chair	IEEE Tokyo-Japan Joint Sections Industry Applications Society Chapter	2024.01～2025.12	
磯部高範	Associate Editor	IEEE Journal of Emerging and Selected Topics in Power Electronics	2021.12～2025.12	
磯部高範	副委員長	IPEC2026 実行委員会	2023.03～現在	

三俣千春	理事・副会長	公益社団法人日本磁気学会	2025.06～現在	
奥村宏典	編集委員	APL Electronic Devices	2025～2026	
笹森貴裕	常任理事	ケイ素化学協会	2017～現在	
笹森貴裕	理事	基礎有機化学会	2024.09～現在	
笹森貴裕	Fellow	英国王立化学会	2018～現在	
笹森貴裕	関東支部幹事	有機合成化学協会	2025.04～現在	
近藤剛弘	次世代エネルギーシステム タスクフォース委員	筑協「つくば3Eフォーラム」 委員会	2022.06～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	2014.04～現在	
近藤剛弘	フェロー	日本表面真空学会	2022.05～現在	
近藤剛弘	出版委員	日本表面真空学会	2018.05～現在	
近藤剛弘	教育委員	日本表面真空学会	2018.05～現在	
近藤剛弘	関東支部幹事	日本表面真空学会	2019.05～現在	
近藤剛弘	38th International Microprocesses and Nanotechnolog Conference (MNC2025) Program Committee Members	日本応用物理学会	2025.04～2025.12	
近藤剛弘	第45回 HESS(水素エネルギー 協会)大会実行委員	HESS(水素エネルギー協会)	2025.04～2025.12	
近藤剛弘	2025 年度 触媒学会 つく ば地区講演会 世話人	触媒学会	2025.04～2025.12	
近藤剛弘	東日本地区代議員	触媒学会	2025.04～現在	
西堀英治	評議員	放射光学会	2023.10～2025.09	
西堀英治	評議員	日本結晶学会	2024.04～2026.03	
丸本一弘	副会長	電子スピンスイエンズ学会	2026.02～現在	
丸本一弘	学長補佐（兼務）	筑波大学学長補佐室	2025.04～現在	
丸本一弘	域長（兼務）	筑波大学数理物質系物質工学 域	2025.04～現在	
丸本一弘	Vice President	Asia Pacific EPR/ESR Society (APES)	2024.10～現在	

丸本一弘	センター長	有機無機量子スピンサイエンス・テクノロジー研究センター	2024.04～現在	
丸本一弘	代議員	電子スピンサイエンス学会	2024.02.～2026	
丸本一弘	12th Asia-Pacific EPR/ESR Society (APES) Symposium, Organizing Committee	Asia-Pacific EPR/ESR Society (APES)	2024.01～現在	
丸本一弘	Special issue in Physica Status Solidi (a) for Nano-Molecular Electronics (ICNME2022), Guest Editors	Physica Status Solidi (a) for Nano-Molecular Electronics	2022.05～現在	
丸本一弘	応用物理学会 プログラム編集委員	応用物理学会	2022.03～現在	
丸本一弘	Organizing Committee Members	2022 International Conference on Nano Molecular Electronics (ICNME2022)	2022.01～現在	
丸本一弘	学識委員（学識会員）	フィルム型太陽電池研究コンソーシアム	2020.10～現在	
丸本一弘	Editorial Board Member	Scientific Reports	2017.02～現在	
丸本一弘	世話人	フロンティア太陽電池セミナー	2016.11～現在	
丸本一弘	協力メンバー	有機太陽電池研究コンソーシアム	2013.03～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	奨学生選考委員	藤井国際奨学財団	2016～現在	
山本洋平	関東支部常任幹事	高分子学会	2018～現在	
山本洋平	関東支部代議員	日本化学会	2019～現在	
山本洋平	トータルバイオミメティクス研究会企画幹事	応用物理学会	2020～現在	
櫛田創	世話人	高分子学会茨城県支部若手会	2024～現在	
中村貴志	Local Organization Committee	19th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (ISMSC-2025)	2023.08～2025.06	
中村貴志	実行委員	第 52 回典型元素化学討論会	2024.12～2025.12	

中村貴志	Symposium organizer	Frontier Of Discrete Oligomers, Polymers, And Assemblies (MAC016), The 2025 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2025)	2024.12～2025.12	
中村貴志	評議員	シクロデキストリン学会	2025.11～現在	
鍋島達弥	客員教授	東京理科大学薬学部	2021～現在	
鍋島達弥	客員研究員	産業技術総合研究所	2021～現在	
山岸洋	Section Editor	Optik, Elsevier	2023～2025	
久保 敦	副査	超高速光エレクトロニクス (UFO) 特別研究専門委員会	2025.06～現在	
久保 敦	客員研究員	産業技術総合研究所	2022.07～現在	

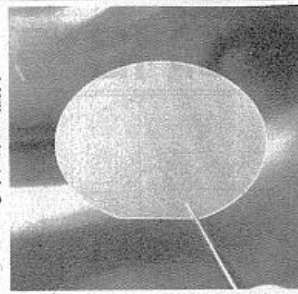
4.7 新聞報道・特記事項他

日 付	新聞・雑誌名	報道内容	備考
2025.08.22	日刊工業新聞	液体熱電セルに塗布型電極－筑波大が手法、出力 38%向上- (守友浩)	①
2025.06.16	日刊工業新聞	圧力で水を抽出 化合物の電子移動で (所裕子)	
2026.01.14	日本経済新聞	シリコンに注入した水素が自由電子を生成するメカニズムを解明 (梅田享英) https://www.nikkei.com/article/DGXZRSP701661_U6A110C2000000/	
2025.01.20	Asia Research News	デンドライト結晶成長の機械学習による成長モードの解析 (三俣千春)	②
2025.08.21	日刊工業新聞	真空紫外線発光素子へ前進 筑波大 サファイアで薄膜成長 (奥村宏典)	③
2025.11.15	ガスレビュー 1068 号	ホウ化水素シートの水素キャリア (近藤剛弘)	④
2025.07.31	日刊工業新聞	電極向けホウ化水素シート開発 (近藤剛弘)	⑤
2025.07.24	日刊工業新聞	水素・ホウ素で安価生成 筑波大、電極向けシート (近藤剛弘)	⑥
2025.05.29	TSUKUBA JOURNAL	スズ系ペロブスカイト太陽電池が電子輸送層の改良で高効率化するメカニズムを解明 (丸本一弘) https://www.tsukuba.ac.jp/journal/technology-materials/20250529180000.html	Web 版の み
2025.05.08	日刊工業新聞	「電子スピン共鳴測定法 駆動中の内部状態 可視化 性能向上 機序導く」(丸本一弘) https://www.nikkan.co.jp/articles/view/00747897	Web 版の み
2025.06.03	Eurek Alert	Enhanced Efficiency in Tin-based Perovskite Solar Cells: Optimizing the Electron Transport Layer (丸本一弘) https://www.eurekalert.org/news-releases/1086214	Web 版の み
2025.07.10	化学工業日報	筑波大、電子輸送層改良でスズ系 PSC 高効率化 (丸本一弘) https://chemicaldaily.com/archives/672967	

真空紫外線発光素子へ前進

筑波大 サファイアで薄膜成長

【水戸】筑波大学の奥村宏典准教授らの研究グループは、絶縁体化ガリウムを添加した酸化アルミニウム（AlGaO）を、5年以内に発光素子として実用化することをめざして、薄膜成長に成功した。真空中紫外線（VUV）領域で発光する固体発光材料。2024年7月に



成長したウエハー

導電を確認したアルミ（Al）による実用化を目指す。今後よりアルミニウム組成率を高めてバンドギャップを大きくした導電性膜を作るほか、薄膜の不純物や欠陥を減らし短波長化と高光度化を進める。

半導体製造の露光装置や分光機器に使われるVUV域光源は、従来水素ランプなどが使われ、安全性や光源寿命に課題があった。奥村准教授は「材料から実用化に向けた橋渡しをしたい」と成果に期待を寄せる。

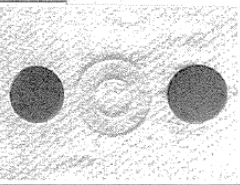
液体熱電セルに塗布型電極

筑波大が手法、出力38%向上

【水戸】筑波大学の守友浩教授らの研究グループは、液体熱電変換セル（LTE）にシート電極比で最大38%高められる電極を厚くして活性表面積を増やすほか酸化還元反応を促進して電荷移動や

拡散の抵抗を減らす。低温度差の環境発電の実用化に弾みをつける。LTEは電解液に与えた温度差によって酸化還元電位に偏りが生じ、その電位差から発電する仕組み。今回は（マイクロは100万

グラファイト粉末と布した塗布電極と、電解液をためるアクリル容器



分の1)の電極で、1平方センチあたり506ワットの出力密度を確認した。今後は、グラファイト以外の粉末も使ってさらなるLTEの出力向上を目指す。塗布法は、二次電池の電極生産で広く普及するため、製造装置や生産工程を流用しやすい。材料も粉末や基板を選ばない。人体熱や工場配管、建材などでの活用を見込む。守友教授は「既存技術の転用で信頼性と汎用性を両立できた。材料探索を進め社会実装につなげたい」と話す。

SCIENCE AND TECHNOLOGY OF ADVANCED MATERIALS: METHODS

UNTANGLING TREES WITHIN FILMS

Understanding how tree-like structures that form in thin films could be the key to next-generation materials for beyond-5G communications technologies.

In materials science, thin films are microscopic layers of conductive material that are coated onto a surface. These are often used in semiconductors or communication devices, but they are hampered by a major problem. Tree-like structures, called dendrites, can form during or after coating and grow as ions move along the film following paths of least resistance. Dendrites affect the structure and function of thin films, inhibiting the flow of electricity and reducing overall performance – a major thorn in the side of ultra-fast communication technology.

A team of researchers from the Tokyo University of Science, led by Masato Kotsugi, has developed a novel method for understanding how and why these structures form, with a view to one day preventing them. For this interdisciplinary study, the team combined topology (the mathematical study of the properties of a geometric object), physics, and machine learning. Their paper was published in *Science and Technology of Advanced Materials Methods*.

The team used a method called persistent homology (PH), a form of topological data analysis that captures the shape of complex surfaces. This enabled them to capture the complex structure of dendrites in ways conventional imaging can't. Next, they used a machine learning technique known as principal component analysis to study how these shapes were related to changes in Gibbs free energy – the energy available in a substance for chemical reactions. They were then able to establish a relationship between structure and process in the growth of dendrites, revealing the energy gradients that drive the branching behaviour.

"What makes this research stand out is the development of a completely new kind of AI model," explains Kotsugi. "Unlike conventional 'black-box' AI, our method is explainable and connects two things that were never directly linked

before the shape of the material's structure and the energy changes that drive its growth."

The team hopes this new approach could help improve the development of next-generation electronics, particularly in high-speed communication technologies that could take us beyond 5G. These faster, more efficient communication technologies are needed to support the rapid growth of autonomous machines and Internet of Things sensing devices, such as wearable tech, smart home devices, and autonomous or connected vehicles.

The researchers plan to broaden their framework to take into account more energy forms than just Gibbs free energy so they can create a more universal model for materials design that links process, structure, and function. "This will allow us to analyse a variety of materials in a unified way," says Kotsugi. "Ultimately, this approach will establish a physics-based, explainable AI for science, paving the way for innovative materials design."

These thin films are very thin conductive material coated onto surfaces of semiconductors or communication devices but dendrites resembling a tree or snowflake can form reducing performance, a major problem for ultra-fast communication technology.

Better. Faster.

Always accelerating materials science development.

STAM Methods

Science and Technology of Advanced Materials: Methods

Leading the way exploring

Methodology · Apparatus · Modeling · Instrumentation
Data mining and analysis · AI · High throughput screening
and other emergent methods and tools

<https://tandfonline.com/stam-m>

Science and Technology of Advanced Materials

National Institute for Materials Science

Empa

Taylor & Francis Group

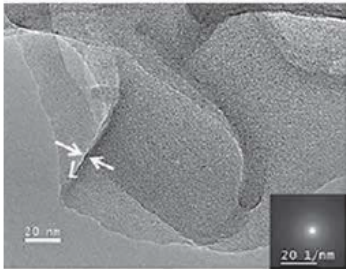
24

Further information: Prof Masato Kotsugi | kotsugi@rs.tus.ac.jp
Tokyo University of Science

STAM-M inquiries | stam_methods@nims.go.jp
STAM Methods Editorial Office

Science and Technology of Advanced Materials: Methods
ISSN 2158-0045 (print) / 2158-0053 (online)
DOI: 10.1080/21580045.2024.2000000

ホウ化水素シート	
密度	109.3kg/m ³
厚さ	ナノメートルほど。肉眼での確認は不可
特長	・半金属のため常温常圧で貯蔵可能 ・毒性無し ・運搬に規制なく簡易的 ・水素貯蔵のみならず、医療や中性子遮断などの用途にも利用可



透過型電子顕微鏡で見たホウ化水素シート

出された水素を回収して再び同シートへ貯蔵する研究を進めていく方針だ。

近藤氏はこれまで、カーボンニュートラルの実現、また水素社会の実現を目的に水素の精製、貯蔵のほか水分解や発電の触媒反応などに使用する材料の研究に取り組んできた。なかでも、水素の貯蔵を中心に研究しており「低温高圧でかつ安全性も考慮しなければならぬ水素を、より軽量で安全に貯蔵することができれば」として、ホウ化水素シートを開発する研究に2015年から取り組んでいる。

ホウ化水素シートとは、ホウ素と水素を1…1で結合さ

せた二次元ナノシートであり、金属と非金属の中間となる半金属である。ホウ化水素シートは厚さがナノメートルであり、肉眼では確認できないが、極薄いシートのような見た目をしている。

近藤氏は「当シートは実測で見積もられた体積水素密度が109・3 kg/m³となっており、アンモニアが120 kg/m³であるため、同じ容積でほぼ同量の水素貯蔵が可能となる。さらに常温・常圧で貯蔵ができ、毒性もなく、持ち運びも簡易的となる」と語る。

このホウ化水素シートの製法はまず、水素の核となるプロトン（H⁺）が含まれているイオン交換樹脂（特定の成分を吸収し、別の成分を放出させる性質をもった合成樹脂）と、二ホウ化マグネシウム（MgH₂）をメタノールに投入。イオン交換樹脂がマグネシウムイオンのみを吸収し、代わりにプロトンがホウ素と結合することで、二次元ナノシート状となった物質が完成する。これを近藤氏がホウ化水素シートと命名した。

また、二ホウ化マグネシウムを形成するマグネシウムとホウ素は、地球上に数多く存在している。近藤氏は「ホウ素は希少元素のレアアースや

貴金属のイリジウムに比べ、約1000万倍の量が地殻に含まれており、海水からもホウ素が採取できるため、コスト低減になる」として採用した。

このホウ化水素シートからは、紫外線、可視光、電解などさまざまな方法で水素を取り出すことが可能。これは近藤氏と長年共同研究を進める東京科学大学の宮内雅治教授が中心となり、近藤氏との共同研究で見出した機能である。今回は3つ紹介する。

初めに、直接シートに強い紫外線を当てることによって水素を放出する方法である。紫外線を直接当てることによってホウ素と水素の化学結合を断裂し、水素のみが放出される仕組みとなっている。室温の大気圧下での放出が可能となるほか、紫外線を止めると水素放出も止まるため、使用量の調節がしやすい特徴がある。

次に、ホウ化水素シートに色素を添加し可視光を当て、水素を放出する方法である。これは同シートに染料分子を装飾し、そこへ光を当てることによって、染料分子が光を吸収して励起電子と呼ばれる電

常温常圧で水素を貯蔵し、様々な方法で水素放出可能なホウ化水素シートの水素キャリア開発に取り組む

筑波大学 近藤剛弘 教授

筑波大学の近藤剛弘教授（以下、近藤氏）は、水素を常温常圧で貯蔵ができ、紫外線や可視光、電解などの方法で水素放出が可能なホウ化水素シートによる水素キャリアの開発に取り組んでいる。同シートは、体積水素密度で比較すると、アンモニアと同量程度の水素貯蔵が可能であり、今後、近藤氏を筆頭とする研究チームは、同シートから水素貯蔵・放出だけでなく、放

出された水素を回収して再び同シートへ貯蔵する研究を進めていく方針だ。

近藤氏はこれまで、カーボンニュートラルの実現、また水素社会の実現を目的に水素の精製、貯蔵のほか水分解や発電の触媒反応などに使用する材料の研究に取り組んできた。なかでも、水素の貯蔵を中心に研究しており「低温高圧でかつ安全性も考慮しなければならぬ水素を、より軽量で安全に貯蔵することができれば」として、ホウ化水素シートを開発する研究に2015年から取り組んでいる。

ホウ化水素シートとは、ホウ素と水素を1…1で結合さ

せた二次元ナノシートであり、金属と非金属の中間となる半金属である。ホウ化水素シートは厚さがナノメートルであり、肉眼では確認できないが、極薄いシートのような見た目をしている。

近藤氏は「当シートは実測で見積もられた体積水素密度が109・3 kg/m³となっており、アンモニアが120 kg/m³であるため、同じ容積でほぼ同量の水素貯蔵が可能となる。さらに常温・常圧で貯蔵ができ、毒性もなく、持ち運びも簡易的となる」と語る。

このホウ化水素シートの製法はまず、水素の核となるプロトン（H⁺）が含まれているイオン交換樹脂（特定の成分を吸収し、別の成分を放出させる性質をもった合成樹脂）と、二ホウ化マグネシウム（MgH₂）をメタノールに投入。イオン交換樹脂がマグネシウムイオンのみを吸収し、代わりにプロトンがホウ素と結合することで、二次元ナノシート状となった物質が完成する。これを近藤氏がホウ化水素シートと命名した。

また、二ホウ化マグネシウムを形成するマグネシウムとホウ素は、地球上に数多く存在している。近藤氏は「ホウ素は希少元素のレアアースや

様々な水素放出

このホウ化水素シートからは、紫外線、可視光、電解などさまざまな方法で水素を取り出すことが可能。これは近藤氏と長年共同研究を進める東京科学大学の宮内雅治教授が中心となり、近藤氏との共同研究で見出した機能である。今回は3つ紹介する。

初めに、直接シートに強い紫外線を当てることによって水素を放出する方法である。紫外線を直接当てることによってホウ素と水素の化学結合を断裂し、水素のみが放出される仕組みとなっている。室温の大気圧下での放出が可能となるほか、紫外線を止めると水素放出も止まるため、使用量の調節がしやすい特徴がある。

次に、ホウ化水素シートに色素を添加し可視光を当て、水素を放出する方法である。これは同シートに染料分子を装飾し、そこへ光を当てることによって、染料分子が光を吸収して励起電子と呼ばれる電

ホウ化水素からの水素放出法

	紫外線による放出	可視光による放出	低電位による放出
方法	シートに直接紫外線を当てること、ホウ素と水素の化学結合を断絶させ、水素のみを放出する方法	シートに色素を添加し、可視光を当てること、染料分子が光を吸収し、励起電子が形成される。この電子と水素原子がくっつき水素分子となり放出される	シートを電解槽に投入し、0.4ボルトの電圧を印加することで水素を放出する
特長	紫外線を当てている時間のみ水素放出が可能であるため、水素放出量が調節しやすい	可視光が紫外線よりも安価であり、コスト低減。また人体に害もなく安全	多くの電力を消費せず、水電解よりも省エネ

子が形成される。この電子によって水素分子が形成して放出する。ただし長時間光を当て続けると染料が酸化するため、持続的な水素放出が困難としている。

最後は、低電位による水素放出である。ホウ化水素シートを水素精製の心臓部となる



近藤氏

電解槽に投入し、0.4ボルト（対Ag/Ag+電極）の低電圧を印加するだけで効率よく水素が放出される仕組み。この低電位での放出は多くの電力を消費する水電解よりも大幅な省エネルギー化を見込める。

近藤氏は今後について「これまででは水素の精製・貯蔵・放出に目を向けてきたが、このホウ化水素シートに水素を再貯蔵できる性質を発見した。現状はまだ100%の再貯蔵が見込めていないが、ここから改良を重ね100%水素を再貯蔵できるようにしたい。加えて、ホウ化水素シートは水素として活用するだけでなく、医療や原子核を構成する中性子の遮断などにも使用できるため、幅広い用途での導入を見込んでいる。すでに多くの方に興味を持っていただけており、迅速な実用化に努めたい」としている。

ホウ化水素シートの医療用途においては、ものをホウ化水素シートでコーティングすることで、抗菌や抗ウイルス、抗カビ性能において優れている。

ることが明らかになった。さらに細胞毒素が無いことが判明しており、人には無害であることもわかっていく。中性子遮断の用途では、ホウ素と水素は中性子を吸収する性質があり、従来の中性子遮断に使用されるホウ素や水素を含んだコンクリートやポリエチレンなど厚くて重いものに比べ、両元素を1…1で高密度に取り入れているホウ化水素シートであれば、軽量化や小型化での中性子遮断が可能となる。そのため中性子が多く存在する宇宙において、宇宙船内壁や宇宙服などに活用される予定だ。

本年4月1日に、筑波大学内にホウ化水素研究センターを設立した。同施設では、ホウ化水素を用いてCO₂削減を目指す「ゼロCO₂エミッシヨン材料部門」、レーザー核融合材料の研究を行う「先進核融合材料部門」、中性子遮断材料の研究をする「中性子遮断材料部門」、医療関係や新材料の研究に取り組む「新規用途材料部門」と4つの研究部門を設け、それぞれを専門とする学者が集まり、更なるホウ化水素シートの可能性の探求と、迅速な製品開発に注力している。

⑤近藤剛弘 2025.07.31 日刊工業新聞

電極向けホウ化水素シート開発

安価な化合物で生成

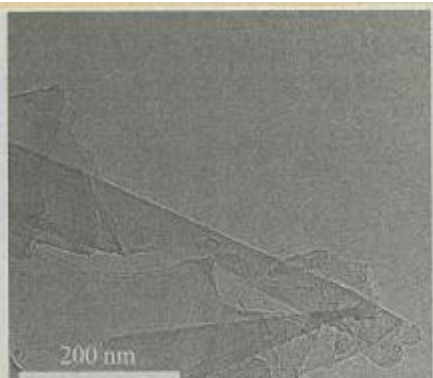
筑波大学の近藤剛弘教授らは、二次電池の電極向けに使えるホウ化水素シートを開発した。水素の一部を金属に置換し、シート形状を維持しながら金属イオンの伝導と保持を可能にした。理論上はグラファイト電極比で数倍の電位容量が期待される。近藤教授は「技術開発が進めば全固体電池向けの電極にも使える可能性が高い。さまざまな業界で活躍できる」と期待する。

ホウ化水素は、水素とホウ素を同比率で混合して得られる安価な化合物で、水素半ヤリアとしても注目される。金属イオンの吸着性を高めたホウ素は軽く、構造はグラフェンに類似した六角格子で、電極材としての利点も大きい。今後は実際の電位容量や耐久性の計測を進める。近藤教授は「ホウ化水素の可能性を広めたい」と語る。

水素・ホウ素で安価生成

筑波大、電極向けシート

【水戸】筑波大学の近藤剛弘教授らは、二次電池の電極向けに使えるホウ化水素シートを開発した。理論上はグラファイト電極比で数倍程度の電位容量を達成できる。水素の一部を金属元素に置換してシート形状を維持したホウ化水素シート



し、金属イオンが伝導・保持できる。近藤教授は「技術開発が進めば全固体電池向けの電極にも使える可能性が高い。さまざまな業界で活躍できるのでは」と期待する。

ホウ化水素は近藤教授らが開発した水素とホウ素を同比率で混合させた化合物。安価で生成でき、水素キャリアとしても注目される。今回は中和滴定により水素とカリウムを置き換えて、原子の大ききの差を使いながらナノシートを生み出す。

同物質はイオン化した水素とホウ素が結合したまま乾燥させるため、その過程でシートが凝集する課題があった。二次電池として使う際に金属イオンが入り込む隙間を確保できなかった。ホウ化水素もグラフェンと同じ六角格子構造だが、電極として使う際は、ホウ素そのものに炭素比で金属イオンが数倍吸着する。

そのほか質量比でもホウ素が軽く、電極材として適しているという。現在は実際の電位容量について計測できていない状況。今後は実測値を求めるほか、耐久性も見極める。

シートの表面積を広げたことで水素貯蔵のほか、二酸化炭素(CO₂)転換の触媒材料としても、性能向上を見込む。近藤教授は「ホウ化水素の可能性を広めたい」と展望する。

2025 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 (TREMS)

〒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: <https://www.trems.tsukuba.ac.jp/>

Phone & Fax : 029-853-8085 (担当事務)

2025 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 (TREMS)

〒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

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

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