

第36回「研究費の助成」研究概要

No.	所属/役職	申請者	研究課題
22101	兵庫県立大学 大学院工学研究科 助教	松本 歩	シリコン表面の微細構造を利用した微量溶液の高感度レーザー分析
	同学 教授	八重 真治	
	レーザーアブレーションで生成するプラズマの発光スペクトルを測定することにより、試料の元素を「その場で」「瞬時に」同定することができる。この手法をレーザー誘起ブレークダウン分光(LIBS)と呼び、極限環境における現場分析や工業プロセスのモニタリングのための技術として期待されている。本研究では、金属援用エッチングにより作製した多孔質シリコン基板をLIBSに応用し、微量溶液の高感度分析を試みる。多孔質シリコンの孔内に試料溶液をトラップさせた状態でレーザーを照射し、プラズマを生成することで、微量溶液中の成分を高感度かつ定量的に検出できる手法を開発する。		
22102	東京理科大学 研究推進機構・総合研究院 准教授	石田 直哉	化学酸化法を利用したマグネシウム二次電池正極材料の探索と結晶構造解析
	本研究は2019年ノーベル化学賞に選ばれたリチウムイオン電池(LIB)に対して次世代に相当するマグネシウム二次電池に関する研究を行う。LIBの正極材料は層状構造の酸化物が利用されている。私はこれまでに、既報の高容量LIB正極材料に対して、化学酸化法によってリチウムを脱離して、リチウム脱離量と結晶・電子構造の関係を明らかにしてきた。さらにリチウムが脱離して生成した空孔を利用することでマグネシウム二次電池正極材料として利用できることを明らかにしてきた。本研究では、既報の材料から脱却して新規化学組成におけるマグネシウム二次電池正極材料の探索と、結晶構造解析に基づく充放電機構の解明を実施する。		
22103	物質材料研究機構 研究員	鄧 驍	膜小胞による嫌気鉄腐食の加速効果とその機構に関する研究
	嫌気鉄腐食は、地下や海底に埋設された石油・天然ガスパイプラインで進行し、工業化国で年間数百億ドルの経済損失を引き起こしている。嫌気鉄腐食は、主に硫酸還元菌の代謝活動によって引き起こされるが、腐食機構に関しては未解明な部分が多い。近年、複数の硫酸還元菌において、固体電子源からの電子引き抜き(Extracellular Electron Uptake, EEU)能力が発見された。EEUによる電氣的腐食機構は、局所的且つ急速な腐食現象を説明できるだけでなく、新規な腐食検出法と防食技術の開発に向けた知見を与えるため、大いに注目されている。本研究では、EEUを行う細菌において酸化還元活性を持つ膜小胞が分泌されるという現象に着目し、膜小胞が電氣的腐食を加速するという仮説を提案し、検証する。		
22104	新潟大学工学部工学科化学システム工学プログラム 教授	金子 隆司	テトラヘドラルに分歧した剛直な高スピン共役ポリラジカル構造体の構築と等方的磁気機能膜への展開
	分子磁性材料はビルドアップ型のナノ磁性材料として近年研究が活発化している。ナノ磁性材料では、スピン偏極電流、スピン液体、単分子磁石、低次元磁性体、などメソスコピックな領域で見られる新奇な物性とスピンエレクトロニクスや量子コンピュータなどそれに関わる新しい技術的应用に注目が集められている。申請者は共役ポリマー骨格に安定ラジカルが規則的に導入されたポリラジカルを合成し、 $\pi$ 共役系を介した分子内での強固なスピン整列を実現している。本研究では、この成果のさらなる展開を目指し、高スピン共役ポリラジカルを構成要素とする磁気多孔質芳香族構造(Magnetic Porous Aromatic Framework: MPAF)を構築し、上記の物性や応用の萌芽となる基盤構造体の実現を目指した。		
22105	大阪府立大学大学院工学研究科 教授	平井義彦	ディープリンングによるナノインプリント用材料・プロセス設計システムの開発
	同学 准教授	安田雅昭	
ナノインプリント技術は、AR用ガラスなどの光学素子を中心に、多様な能性材料を直接ナノ加工するダイレクトナノインプリントへの応用が進められています。ここでは、多様な樹脂材料に対し、その成型性が材料のガラス転移温度で表現できることを検証し、力学的特性が未知の材料に対する成型性を予測・検証します。さらに、格子構造のような単純構造だけではなく、多様な構造に対する成型性についても、シミュレーション予測を行い、その結果を学習させるとともに、欠陥要因となる応力発生についても予測・学習させます。これにより、未知材料と形状に対して、より欠陥の少ないプロセスならびに材料条件を効率的に提案するシステムを構築します。			
22106	琉球大学理学部海洋自然科学科化学系 助教	滝本大裕	ナノ空間を駆使したレドックスフロー電池用流動電極の開発
	本研究では、ナノ空間を駆使したレドックスフロー電池用流動電極の開発が目的であります。レドックスフロー電池の電極材料として注目されているキノン誘導体分子の課題は、電子伝導性が乏しいため、電池性能を左右する酸化還元応答が乏しい点であります。この課題に対して研究代表者は、1 nm未満のナノ空間にキノン誘導体を埋め込む(束縛させる)ことで、酸化還元応答が大きく改善されることを見出しました。この発見を本研究に活かし、高速電気化学応答を導き出せる分子とナノ空間の特徴を明らかにし、適切な流動電極を開発する点に注目しております。本研究が成功した暁には、将来的な大容量蓄電池の開発に貢献できる可能性を秘めております。		
22107	横浜国立大学大学院工学研究院機能の創生部門 准教授	稲垣怜史	電気化学CO <sub>2</sub> 吸脱着システムのための規則性多孔質カーボン電極の調整
	「カーボンサイクル」の実現には、その前段の工程である省エネルギー型のCO <sub>2</sub> 分離回収システムが必須です。本研究では、既存のtemperature-swing adsorptionやpressure-swing adsorptionではなく、最近、新たに提案されたelectro-swing adsorption(ESA)に注目し、ESA電極の規則性多孔質炭素材料を開発します。具体的には、電極に「規則性多孔質カーボン」を採用し、その細孔内のみアントラキノンを含むイオン液体を電解液とするESAシステムを構築することを目的としています。本法では、電解液が浸透している規則性多孔質カーボンの粒子同士の隙間にCO <sub>2</sub> を含むガスを流通させて気相/電解液界面を最大限広くすることで、電解液へのCO <sub>2</sub> の溶解を効率よく進めることができます。		
22108	兵庫県立大学 高度産業科学技術研究所 准教授	山口明啓	生体分解性プラスチックの分解・生体代謝機構の分子追跡の試み
	近年、海洋に流入する海洋プラスチックによる生体環境への影響が懸念されている。そのため、生分解性プラスチックの研究開発が進み、環境負荷を減少させる取り組みが行われている。ただ、生分解性プラスチックの分解・生体代謝機構に関して、まだ不明な点も多い。本研究では、マイクロ化学システムを基盤として、プラスチック材料に含まれる添加剤や分解過程(太陽光などによる分解や生分解など)で生じる分子を分析・追跡するプラットフォームを創出して、分解過程の分子レベルからの理解を深める。これらの知見をフィードバックして、材料開発への指針を提言するための評価機構の創製を行う。		
22109	横浜国立大学大学院工学研究院システムの創生部門 准教授	井上史大	形態制御めっき技術を用いた低温Cu-SiCNハイブリッド接合技術の開発
	DXによる高度な最終アプリケーションの実現はもはや単一デバイスの微細化による高集積化のみでは達成できず、「3Dヘテロデバイス技術」が必要とされている。3DヘテロデバイスではDie-to-Wafer(D2W)接合技術の開発が重要である。従来のD2W接合は溶剤の共晶反応を利用した熱圧着接合が使用されている。しかし熱圧着接合では狭ピッチでの信頼性、アライメント精度の限界を迎えている。そこでCuハイブリッド接合が有力な次世代接合技術として大きな注目を集めている。本研究では(111)高配向Cu膜をウェットプロセスによって形成、さらにそのメカニズム解明を行い、ピッチ1 $\mu$ m以下におけるボトムアップを両立する条件/添加剤を見出し、狭ピッチハイブリッド接合の低温下達成を目指す。		

22110	奈良先端科学技術大学院大学データ駆動型サイエンス創造センター・物質創成科学領域准教授	宮尾和幸	データ駆動によるファーマコフォアポイントの再定義
	ファーマコフォアポイントとは、低分子と標的マクロ分子との分子間相互作用に重要な「低分子内の部分構造(または原子)の空間的な位置や配置」を意味し、構成する部分構造はファーマコフォアポイントと呼ばれる。現状では、低分子の化学構造に対して(部分構造などの)ルールに基づいて、ファーマコフォアポイントが指定される。しかし、このような画一的なルールでは低分子の分子構造を考慮できない。本研究では、低分子-マクロ分子のX線結晶構造データベースからデータマイニングと機械学習を行うことで、任意の低分子に対して、より精度の高いファーマコフォアポイントを与える手法を開発する。		
22111	名古屋工業大学先進セラミックス研究センター 特任助教	加藤邦彦	貴金属触媒反応・電気化学反応を介さない次世代遷移金属プロンズ室温合成技術の開発
	同学 准教授	白井 孝	
遷移金属プロンズはその優れた光学的・電気的特性から、エネルギーデバイス、スマートウィンドウ、触媒など多岐に渡る応用が検討されている。従来手法では貴金属触媒や電気化学的反応を用いた手法が知られているが、低コストかつ大規模合成に不向きであった。先行研究において、酸化タングステン/高分子材料混合物に機械的処理を短時間行うだけで酸化タングステンプロンズが合成できることを新たに発見した。本研究課題では、安価でありふれた元素で構成された原料のみを使ってスケラブルで室温合成可能な革新的手法を確立するとともに、持続可能エネルギーである光吸収により水質浄化などの触媒作用を示す光触媒材料への応用展開を目指す。			
22112	東北大学大学院環境科学研究科先端環境創成学専攻 助教	栗田大樹	三次元造形した生分解性ポリマーの分解過程における引張特性変化
	同学 教授	成田史生	
本研究は、水環境分解も期待できる生分解性プラスチックである酢酸セルロースの引張試験片を熱溶解積層(FDM)式3Dプリンタによって作製する。そして、国際規格ISO 17556に準拠して生分解試験を実施する。そして、引張試験および観察、有限要素解析を実施し、分解過程における酢酸セルロースの力学特性変化を明らかにする。最終的に、分解過程における力学特性変化の評価および構造用生分解性プラスチックとしての新たな基準(〇〇日間は、作製直後の力学特性の××%以上を維持すること、など)を提案する。			
22113	神奈川県立産業技術総合研究所川崎技術支援部 研究員	戸邊智之	ペロブスカイト太陽電池のn型半導体電極に関するラジカル量・トラップ密度の測定と劣化の関係について
	同研究所 研究員	濱田健吾	
有機・無機ハイブリッドペロブスカイト結晶を光活性層に有するペロブスカイト太陽電池(PSC)は、真空プロセスが不要で、溶液塗布による製膜が可能であり25%を超える高い光電変換率が得られることから次世代の太陽電池として注目されている。しかし、PSC成膜の際に使用される金属酸化物半導体、特にTiO <sub>2</sub> は、光触媒能によって有機物を分解することが懸念されている。本研究では、PSCの一つの劣化要因であると考えられる金属酸化物半導体の粉末を用いてラジカル量、トラップ密度を測定し、PSCデバイスの劣化挙動を明らかにする。これにより、PSCの実用化に貢献する。			
22114	静岡県立大学薬学部薬科学科 教授	眞鍋 敬	触媒の特性を活用する含窒素芳香族化合物の位置選択的アリール化反応の開発
	同学 助教	山口深雪	
医薬品等の有用化合物の多くにはアリール基が含まれており、そのためこれまで多くの触媒的アリール化反応が開発されてきた。特に含窒素芳香族化合物のアリール化は極めて重要な反応である。しかし含窒素芳香族化合物の位置選択的アリール化は未だ発展途上であり、さらなる発展が望まれる。本研究の目的は、触媒の特性を活かした含窒素芳香族化合物の位置選択的アリール化反応の新手法を開発することである。特に我々が独自に開発したDHTPおよび類似の設計指針に基づく配位子を組み込んだ触媒等を活用し、種々の化合物の位置選択的アリール化を開発する。本研究で開発する手法は、これまでの含窒素環状化合物合成法を大きく改良・発展させる可能性をもつ。			
22115	名古屋市立大学大学院理学部理学情報専攻 教授	雨夜 徹	新奇特ポロジカルカーボンアーキテクチャの創成
	フラーレンやカーボンナノチューブ、グラフェン等に代表されるカーボン類はその特徴的な「かたち」と特異な機能から注目を集めている。本分野のさらなるブレークスルーのために、有機合成手法による未踏なトポロジーを有するカーボンアーキテクチャの創成とその特性解明が期待されている。また、トポロジー的にユニークなカーボンアーキテクチャの合成は挑戦的課題であり、合成化学的な観点からも意義深い。そのような背景の下、本研究では、結び目構造、カテナン構造、メビウス構造、織り構造などの構造モチーフを有する新奇なトポジカルカーボンアーキテクチャの創成に取り組む。		
22116	東京都立大学都市環境学部環境応用化学科 助教	伊藤正人	ESIPTを活用した高効率シングレットフィッシュン分子の創製
	シングレットフィッシュンは、1つの光子によって2つの三重項励起子を生成できることから、太陽電池をはじめとした機能性材料の発展に大きく貢献すると期待されている。しかし、分子自体の不安定性や理想的なエネルギー関係の構築などが課題として挙げられ、高い安定性と効率を兼ね備えた新たな分子系の創出や戦略の確立は現在においても求められている。そこで本研究では、励起状態における分子内プロトン移動に着目し、安定かつ高効率な新規分子系の創出に取り組む、得られた知見をもとに、さらなる機能性の獲得を目指し、電子構造をより緻密に制御した分子の造り込みを行う。		
22117	神奈川県立産業技術総合研究所電子技術部 統括専門研究員	金子 智	シリコン基板表面での機能性材料成長における化学的安定性の評価
	台湾成功大学 教授	吉村昌弘	
シリコン基板上への新機能材料合成には、基板上での材料の熱的安定性や結晶格子の整合性などのため、材料選択や合成条件の検討なども含めて試行錯誤が繰り返されている。そこで、シミュレーションを導入し結晶成長の予測を行うことで、材料選択時の参考とする。本研究では、基板表面と合成材料との界面での安定性について分子動力学を用いた考察を行う。シミュレーションでは各種材料の安定性について吸着エネルギーを用いて評価し、その結果を広く公開することで、シリコン基板上での材料合成のための大きな指標となり得る。また、シミュレーションで得られた最適な材料を実際にシリコン基板上に成膜し、シリコン結晶面と材料合成の関係などの実証も行う。			
22118	関東学院大学理工学部理工学科機械学系 教授	柳生裕聖	厚膜高分子レジストの粗視化分子動力学モデルの作成と機械的性質の評価
	MEMSにおけるデバイスの構造材料としてSU-8やTMMRなどの化学増幅型ネガレジストが使用されている。このレジストはマイクロデバイス上の構造体やマイクロ流体デバイスの流路形成などに応用されており、その加工プロセスではフォトリソグラフィ加工における露光、熱処理条件に対し柔軟に対応するために架橋度による機械的性質の変化が小さいレジストが必要である。このようなレジストを開発するにはレジストの分子構造と機械的性質の関係を把握する必要がある。申請者は既に粗視化分子動力学法(粗視化MD法)によるTMMRレジストのモデル化を報告している。本研究ではレジストの引張試験の結果と、粗視化MD法を用いた1軸伸張シミュレーション結果を比較することにより、モデルパラメータの最適化を検討する。		

	物質・材料研究機構国際ナノアーキテクニクス研究拠点 主任研究員	江口美陽	負電荷の置換による分子電荷分布への影響および配位反応の加速
22119	<p>我々はカチオン性ポルフィリンのカウンターアニオンを層状アルミノシリケートの表面負電荷に換えることで、ポルフィリンの金属配位反応が加速することを見出した。層状表面によって分子の片側を被覆されている構造は配位反応には不利であると予想されたが、それを覆す結果となった。これは、表面負電荷への交換により分子内電荷分布が大きく変化したことを示唆する。本研究では、活性化エネルギーや頻度因子の決定を含む各種測定や理論計算などにより負電荷の交換による分子内電荷分布変化の様子を観察し、反応性への影響を明らかにする。同時に、無機層状物質の表面により加速される化学反応の例を探索する。</p>		