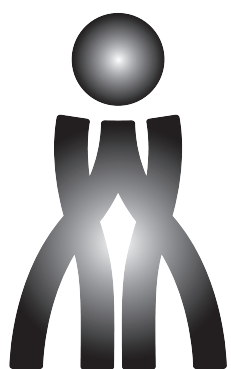


東北大学  
多元物質科学研究所  
研究業績・活動報告

2022年(令和4年)12月



東北大学 多元物質科学研究所

**IMRAM**

INSTITUTE OF MULTIDISCIPLINARY RESEARCH  
FOR ADVANCED MATERIALS TOHOKU UNIVERSITY



# 多元物質科学研究所 研究業績・活動報告 目次

研究活動報告 .....	1
有機・生命科学研究部門 .....	1
無機材料研究部門 .....	18
プロセスシステム工学研究部門 .....	40
計測研究部門 .....	54
金属資源プロセス研究センター .....	77
マテリアル・計測ハイブリッド研究センター .....	93
共同研究部門 .....	105
研究会報告 .....	112
学会発表講演目録 .....	130
有機・生命科学研究部門 .....	130
無機材料研究部門 .....	132
プロセスシステム工学研究部門 .....	135
計測研究部門 .....	136
金属資源プロセス研究センター .....	139
マテリアル・計測ハイブリッド研究センター .....	141
共同研究部門 .....	143
研究業績目録 .....	144
有機・生命科学研究部門 .....	144
無機材料研究部門 .....	148
プロセスシステム工学研究部門 .....	156
計測研究部門 .....	161
金属資源プロセス研究センター .....	170
マテリアル・計測ハイブリッド研究センター .....	175
共同研究部門等 .....	181
業績目録著者索引 .....	182

## 【研究活動報告】 生命機能分子合成化学分野 (2022.1~2022.12)

教授：永次 史

准教授：鬼塚和光

助教：岡村秀紀

博士研究員(学振)：山野雄平

事務補佐員：木村理香

技術補佐員：相原 幸、東島祐子

大学院生：アハマド・アブデルハーディ、陈 雨桐、長澤瞭佑(2022年4月~)、  
桑原和貴(2022年4月~)、董 卓昕(~2022年3月)、飯田百香(~2022年3月)、  
佐々木まどか(~2022年3月)、ナディア・シャーラ・スマウイスストラ、  
范文覚、岩田遼平、内田朝理、金山 唯、川森有沙(2022年4月~)、  
矢尾健行(2022年4月~)、藍 平雲(2022年9月~)、オスマン・アッバス・ジャミラ  
(2022年9月~)、アルタン・オーカン(2022年4月~)

本研究分野では、有機化学をベースに機能性分子を設計・合成し、それらを用いて遺伝子発現を化学的に制御する方法論の開発を目指して研究活動を行っている。2022年の本研究所における主な研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. 擬塩基を付与したヌクレオシド類縁体による人工塩基対形成<sup>1)</sup>

DNAは、4種類の核酸塩基 (A, G, T, C) で構成される生体高分子であり、自然界では遺伝情報を保存する生命の設計図としての役割を持つことが古くから知られている。近年、DNAの正確な塩基対形成(A-T, G-C)はナノ構造体の構築など様々なバイオテクノロジーに応用されている。しかし、2対4種類の核酸塩基に限られていることから、様々な応用の多様性拡張には新たな人工塩基対の開発が必要とされる。すでに、複数の研究グループにより、構造の異なる人工塩基対の開発研究が進められているが、塩基選択性と二重らせん構造の熱的安定性を十分に持つ塩基対は現在のところ、まだ開発されていない。本研究では、これら2つの性質を兼ね備えた新たな人工塩基対の創製を目指し、従来とは全く異なる戦略として天然型の核酸塩基とは離れた位置で互いを認識する人工塩基対を設計した。具体的には、スペーサーを介して核酸塩基に類似した構造(擬塩基)を付与した2対の人工塩基対<sup>N</sup>Pu-<sup>O</sup>Pzと<sup>O</sup>Pu-<sup>N</sup>Pzが、DNAの二重らせんの外側で水素結合を形成することで、選択的かつ安定な塩基対を形成すると期待した。

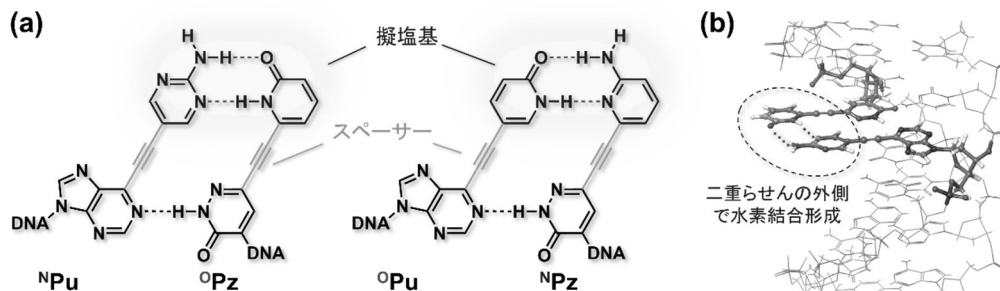


図1 本研究で設計した人工塩基対の構造(a)と二重らせん構造内での予想構造(b)

これらの人工塩基対を含む2本鎖DNAを合成しUV融解温度( $T_m$ )を測定したところそれぞれ天然型のG-C塩基対に匹敵する熱的安定性を示すことを見出した。また、これら4種類の人工塩基は、天然型の核酸塩基とは安定な対を形成せず、高い塩基選択性を示すこともわかった。さらにDNA中の人工塩基対の構造を核磁気共鳴分光法(NMR)と分子動力学計算(MD計算)により詳細に解析した結果、新たに設計した人工塩基対は設計通り、擬塩基同士が二重らせんの外側で水素結合を形成していることを明らかにした。

## 2. 反応性 OFF-ON 型 G-quadruplex アルキル化剤の開発

近年、核酸が形成する高次構造は遺伝子発現制御機構において重要な役割を持つことが分かってきている。特にグアニン4重鎖(G4)は染色体末端構造であるテロメア領域、さらには癌遺伝子のプロモーター領域に見出されており、抗がん剤の標的として注目されている。これらの構造に共有結合を形成する分子はG4構造が関連する遺伝子発現の効率的に制御できる可能性がある。我々の研究室では図2に示すような OFF-ON 型アルキル化プローブとして、キナゾリン誘導體(VQ)を開発している<sup>2)</sup>。今回、脱離基として様々な置換基を導入した本プローブ及び高次構造結合部位であるRの位置に、G4構造選択的に結合するリガンドとしてベルベリンを導入したプローブを合成し、G4構造に対する反応性について検討した。

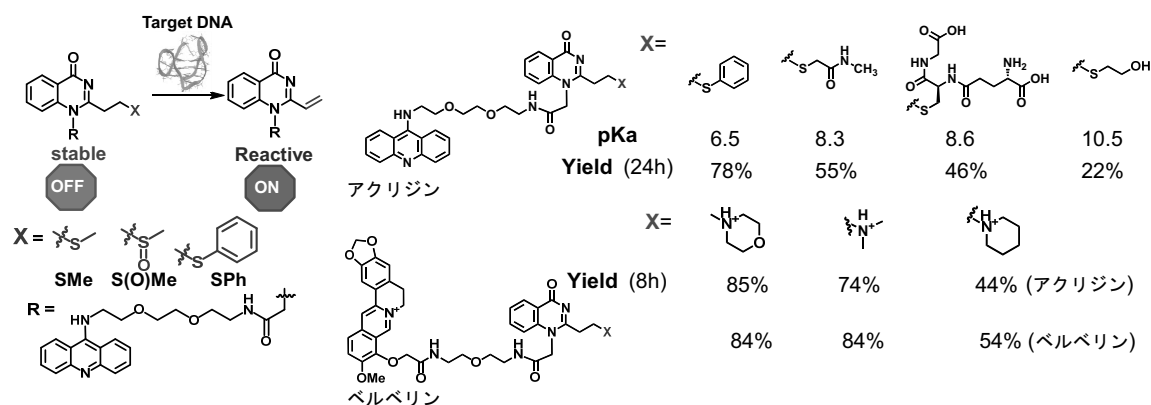


図2 OFF-ON型アルキル化プローブ 図3 今回合成したOFF-ON型アルキル化プローブの構造と反応収率

まず様々なスルフィド基を導入したVQ誘導體では、スルフィド基のpKaが低いほどG4構造に体する反応収率が高いことがわかった。さらにアミノ基として図3に示す置換基を導入したVQ誘導體では、いずれもスルフィド基を導入したVQ誘導體よりも反応速度が速いことがわかった。さらに、アクリジンのかわりにベルベリンを導入した、アミノ基を脱離基として持つVQ誘導體でも同様の反応収率であることから、本反応の一般性も示すことができた<sup>3)</sup>。

- 1) Okamura, H.; Trinh, G. H.; Dong, Z. X.; Masaki, Y.; Seio, K.; Nagatsugi, F. *Nucl. Acids Res.* **50**, 3042-3055 (2022) DOI: 10.1093/nar/gkac140
- 2) Onizuka, K., Hasemi, E.M., Sato, N., Tsuji, G., Ishikawa, S., Ozawa, M., Tanno, K., Yamada, K., Nagatsugi, F., *Nucl. Acids Res.*, **47**, 6578–6589 (2019) DOI: 10.1093/nar/gkz512
- 3) Chen, Y. T.; Onizuka, K.; Hazemi, M. E.; Nagatsugi, F. *Bioconj. Chem.* **33**, 2097-2012 (2022) DOI: 10.1021/acs.bioconjchem.2c00458

## 【研究活動報告】 生命機能制御物質化学研究分野 (2022.1~2022.12)

教 授：和田健彦

准 教 授：荒木保幸

助 教：西嶋政樹、鈴木仁子

研究支援員：佐藤俊幸、南場晃子

事務補佐員：浜田しのぶ

大学院生：陳 碧海、金澤なぎさ、Pandey Sadikshya、東 亮太、石渡 望

Walance Stewart Wu、大林 蓮、藤田一寿、堀内結翔

本研究分野では、癌や COVID-19 等新興感染症治療用核酸医薬基盤技術開発やタンパク質をキラルナリアクターとして活用した超分子不斉光反応系構築など、核酸やタンパク質など生体高分子の次世代インテリジェント型ナノバイオ機能材料への応用展開に取り組んでいる、さらに分子キラリティーに注目し、円偏光発光(CPL)材料開発と光励起状態の動的挙動解明にも取り組み、生命化学から物理化学、光学デバイス開発まで分野横断的に基礎から応用まで幅広い研究活動を展開している。2022年の研究活動は、以下のように概括される。

### 1. COVID-19 等感染症治療技術構築を目指した高効率触媒的標的 RNA 切断機能付与型核酸医薬開発

次世代の分子標的医薬品として注目される核酸医薬は、世界中で精力的に研究されているが一般性を有する治療薬としての展開には”オフターゲット効果”と称される副作用と”細胞内極低濃度に起因する低治療力価”改善が必要不可欠であると指摘されている。現状では両課題共に解決可能な方法論の提案と実証研究に取り組んだ報告は限られている。さらに代表的な核酸医薬戦略の一つであるアンチセンス法において、RNA の構造多様性に起因する標的化可能な一本鎖 RNA 領域の配列制限に対する解決方の提案も待望されてきた。

当研究室ではこれら核酸医薬実用化に向けた喫緊の解決課題改善を目指し、RNase H を活用した触媒的アンチセンス核酸法に注目し、触媒回転数向上に基づく極少量での治療力価の飛躍的な向上が期待される触媒的標的 RNA 切断機能付与型次世代核酸医薬“キメラ人工核酸 (Chimeric Artificial Nucleic Acid, CANA)”の設計・合成に取り組む、その優れた特性を報告してきた。CANA は糖-リン酸アニオン骨格 DNA の 5' 側にペプチド核酸(PNA)等非イオン性ペプチド骨格人工核酸を導入した新規人工核酸で、RNase H への標的 RNA 位置選択的切断機能を付与することが可能で、効率的な切断後複合体解離に基づく触媒回転数の飛躍的な向上を実現する。さらに PNA 導入により、ステム部位など二重鎖構造領域 RNA もストランドインバージョン機能により標的化可能で、標的 RNA 候補配列拡大も期待されている。一方、これまで報告してきた CANA の DNA 部位は天然型 DNA 構造を有し、細胞内に大量に存在する 3'エキソヌクレアーゼ耐性に乏しいという解決課題を有していた。これらの背景を踏まえ、本研究では DNA の 5'側にアミド骨格人工核酸を導入した PDCANA を母骨格とし、ヌクレアーゼ耐性の向上を目指し、DNA 部位への糖部架橋型核酸(LNA)ならびにホスホチオエート(PS)結合で修飾した第 2 世代のキメラ人工核酸の設計・合成に取り組む、酵素耐性機能ならびに複合体安定性とジャンクション付近での切断後複合体安定性へ影響を検討し、RNase H による標的 RNA 切断効率機能を詳細に検討した。

DNA の 3'末端側に LNA を導入した PDL、これに PS 結合を導入した PDLs、LNA ならびにアミド骨格に PRNA<sup>[2]</sup>を導入した P<sub>R</sub>PDL、これに

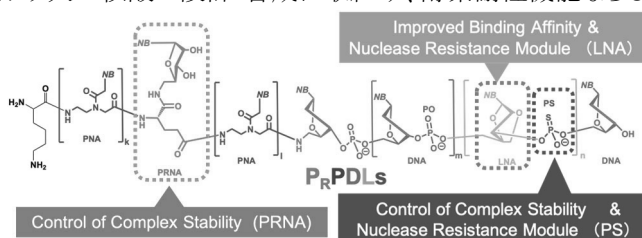


図 PRNA-PNA-DNA-LNA-PS(P<sub>R</sub>PDLs) の構造

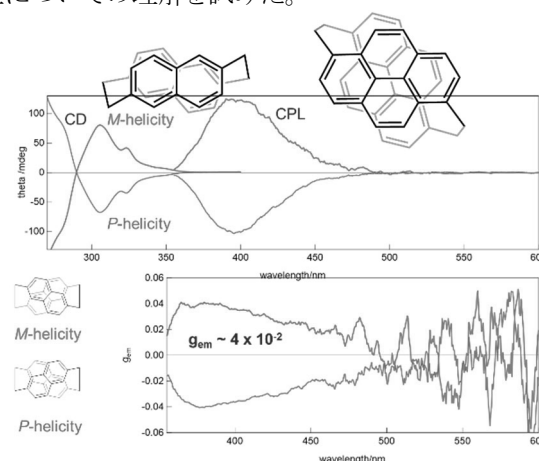
PS 結合を導入した P<sub>R</sub>PDLs(図)を設計し、DNA 自動合成機と Fmoc ペプチド固相合成法を活用した効率的合成法確立に成功した。得られた CANA と相補鎖 DNA ならびに RNA との複合体安定性を融解温度測定によって検討したところ、CANA は RNA とより安定な複合体形成能を示し、核酸医薬として優れた特性を有することが明らかとなった。また核酸医薬実用化に向け重要な解決課題であるヌクレアーゼ耐性に関しても、DNA 部位 3'領域への 2 残基の LNA 導入、そして PS 結合修飾が飛躍的に耐性を向上させ得ることも明らかとした。次に RNase H による標的 RNA 切断機能に大きく影響する CANA と標的 RNA との複合体構造を円二色性スペクトルにより検討し、DNA 部位への LNA 導入ならびに PS 結合修飾した CANA も、標的 RNA との複合体は RNase H の基質として適している A 型の二重らせん構造複合体を形成することを明らかとした。

これらの結果を踏まえ、第二世代 CANA による RNase H を活用した標的 RNA の切断機能を、*in vitro* ならびに *in vivo* 細胞試験により検討し、核酸医薬として優れた特性を有することを明らかとした。

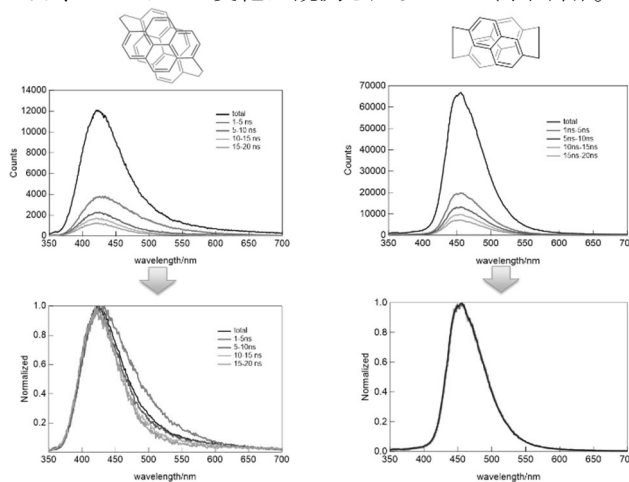
## 2. アセン二分子をエチレン架橋した軸不斉化合物の円偏光発光特性と電子励起状態の特性解明

ピレンを含め π 共役化合物2分子を含むヘキサファンは、2分子の配置によっては軸不斉による光学活性となる。我々はこれらの分子群のキロプティカル特性、とくに円偏光発光のプラットフォームとしての有用性に注目している。そこで我々はこれまでピレン二分子をエチレンで架橋したヘキサファンを合成しその円偏光発光特性を検討してきた。本年度ではそれに加え、アセンとしてナフタレンを用いたヘキサファンを加え総合的にこれら軸不斉により光学活性なヘキサファンの円偏光発光特性についての理解を試みた。

ナフタレンを用いたヘキサファンの発光(蛍光)はブロードであり、かつリファレンスとなるナフタレン単量体と比較し大きくレッドシフトした。また、円偏光発光特性はその異方性因子が  $4 \times 10^{-2}$  と有機小分子のものとして良好な円偏光発光特性を示すことが判明した。これは、これまで検討してきたピレンのヘキサファンが  $10^{-3}$  オーダーの異方性因子であったことと比較しても興味深い。これらヘキサファンの発光特性、さらには円偏光発光特性の解明には、それら分子の励起一重項状態の電子状態の理解が欠かせないと考えられる。



そこで、時間分解蛍光スペクトル測定を行った(下図)。励起波長 355 nm, 20 ps のパルス幅で励起したナフタレン2分子のヘキサファンの発光寿命は 18 ns であり、スペクトルの変化は観測されなかった(下図右)。ピレンの場合、光励起後 2.3 ns の寿命をもつブロードな発光がみられ、17 ns の寿命の比較的シャープな成分(定常蛍光スペクトルに相当)へと変化していった(右図左)。これは、ナノ秒の時間スケールで構造変化に相当していると考えられる。このような構造変化は円偏光発光過程に影響を及ぼしていると考えられるため、今後過渡吸収法などと組み合わせることで、この電子励起状態における構造変化と円偏光発光特性との関係を詳細に検討していく。



## 【研究活動報告】

## 生体分子構造研究分野

(2022.1~2022.12)

教 授：稲葉 謙次

准 教 授：門倉 広

助 教：渡部 聡、天貝 佑太、井澤 俊明

研 究 員：Bui Ba Han

研究支援者：平井 直也、飯田 尚子、井上 万里子

研究補助員：吉田 直子

大学院生：陳 正豪<sup>(D3)</sup>、東 晃太<sup>(D2)</sup>、Cai Xiaohan<sup>(D1)</sup>、Field Harry<sup>(D1)</sup>、WuHao<sup>(M2)</sup>、大山 莉央<sup>(M2)</sup>、佃 竜介<sup>(M2)</sup>、富岡 竜也<sup>(M2)</sup>、QianXiaolin<sup>(M2)</sup>、呉 廣泰<sup>(M1)</sup>、鈴木 琴乃<sup>(M1)</sup>、山本 和奏<sup>(M1)</sup>、李 欧陽<sup>(M1)</sup>

本研究分野では、細胞におけるタンパク質品質管理機構および化学環境恒常性維持機構について、構造生物学、細胞生物学、ケミカルバイオロジー、プロテオミクスなどのアプローチにより研究している。2022年の主たる研究活動は、以下のように概括される。

## 1. クライオ電顕が解明したカルシウムポンプ SERCA2b の反応中間体間の遷移機構

SERCA2b は ATP 依存的に小胞体に  $\text{Ca}^{2+}$  を送り込む膜タンパク質である。我々はこの数年、SERCA2b の様々な反応中間状態の結晶構造とクライオ電顕構造を解き、本カルシウムポンプの活性制御機構に関する多くの情報を得た (Inoue et al., *Cell Reports*, 2019; Zhang et al., *Science Advances*, 2020, *EMBO J*, 2021)。

本研究では、SERCA2b の新たに三つの中間状態のクライオ電顕構造を決定し、さらに得られた構造情報を用いて分子動力学シミュレーションを行った。その結果、SERCA2b の各反応中間状態にはコンフォメーションが異なる複数のサブステートが存在し、しかもサブステートの一つの構造は、次の反応中間状態のサブステートの構造と一致、もしくは酷似していることが示された。すなわち、反応中間状態間の遷移がコンフォメーションを互いにオーバーラップさせることで促進されていることが示唆された (右図)。このことは SERCA2b に限らず他の膜ポンプや酵素においても共通で見られる性質であると推測され、酵素の普遍的なメカニズムとして新たな学説を提唱するに至った (Zhang et al., *Cell Reports*, 2022)。

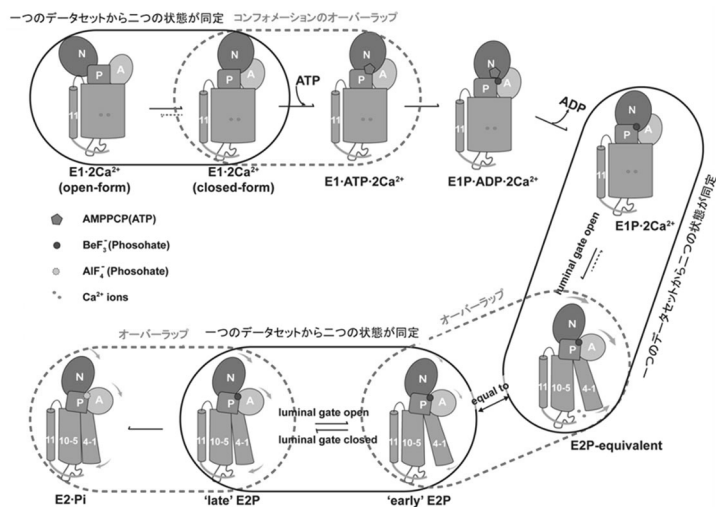


図 SERCA2b の反応サイクルにおける反応中間状態間のコンフォメーションのオーバーラップ

## 2. クライオ電子顕微鏡によるヒト由来のゴルジ体カルシウムポンプ SPCA1a の構造決定

SPCA1a はゴルジ体膜に存在する P 型 ATPase であり、小胞体カルシウムポンプ SERCA と協調して細胞内のカルシウム濃度の維持に寄与する。SPCA1a は、 $\text{Ca}^{2+}$  に加えて、 $\text{Mn}^{2+}$  を輸送することが知られる。これまで、SPCA1a の高分解能構造がなかったため、本ポンプの金属イオン輸送機構は不明であっ



た。我々は nanobody/megabody 及びクライオ電子顕微鏡単粒子解析を用いて、SPCA1a の  $\text{Ca}^{2+}$  結合型、 $\text{Mn}^{2+}$  結合型及びイオン解離型の高分解能構造を世界初めて決定した (Chen et al., *Science Advances* 2023) (右図)。これにより、SPCA1a の金属イオン認識機構および輸送機構に関する重要な知見が得られた。

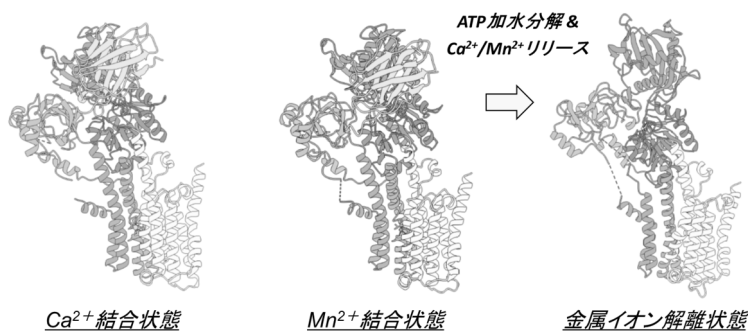


図 ゴルジ体カルシウムポンプ SPCA1a のクライオ電顕構造

### 3. クライオ電子顕微鏡によるヒト由来亜鉛輸送体 ZnT7 の高分解能構造解析

必須微量元素である亜鉛の細胞内濃度は、細胞外や細胞内小器官から細胞質に  $\text{Zn}^{2+}$  を輸送する ZIP ファミリー (SLC39)、および細胞質から  $\text{Zn}^{2+}$  を放出する ZnT ファミリー (SLC30) の双方の働きによって、厳密に維持されている。ゴルジ体上流に局在する ZnT7 は、細胞質からゴルジ体に  $\text{Zn}^{2+}$  を輸送し、ERp44 などの分泌経路中のタンパク質に  $\text{Zn}^{2+}$  を受け渡す。これまでの亜鉛輸送体の構造機能解析は、細菌由来ホモログを中心に行われており、ヒト由来 ZnT ファミリーの構造および亜鉛輸送の分子機構は不明であった。本研究では、ヒト由来 ZnT7 のクライオ電子顕微鏡単粒子解析に取り組んだ。最初に ZnT7 単独での構造解析を試みたが、単体では分子量が小さいため、構造決定に至らなかった。そこで ZnT7 と特異的に結合する Fab フラグメントとの複合体の状態での構造解析を試みた。構造解析の結果、ZnT7 は、外向き型構造を取った二量体を形成しており、細胞質ドメイン間および膜貫通ヘリックス間でタイトに相互作用することが示された。さらに  $\text{Zn}^{2+}$  結合型の ZnT7 の構造を 2.9Å 分解能で決定し、膜貫通ヘリックス中に位置する HDHD モチーフによる亜鉛結合様式が明らかとなった。さらに変異体実験から、ZnT7 に特有の長いヒスチジンループを介して、HDHD モチーフに  $\text{Zn}^{2+}$  を受け渡すモデルが提唱された (Bui et al, in revision)。

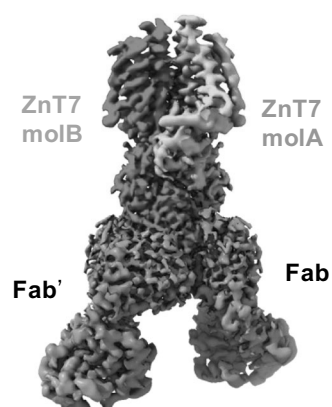


図 ヒト ZnT7-Fab 複合体のクライオ電顕マップ

### 4. RUSH システムを用いた ERp44 の小胞体-ゴルジ体輸送の可視化

ERp44 は小胞体-ゴルジ体間を往来し、構造未成熟タンパク質や小胞体酵素をゴルジ体から小胞体に逆行輸送する役割がある。この逆行輸送において、ERp44 がゴルジ体において  $\text{Zn}^{2+}$  と結合することが重要であることを、我々は過去に見出した (Watanabe, Amagai et al., *Nat. Commun.* 2019)。実際、ゴルジ体内腔に  $\text{Zn}^{2+}$  を輸送する亜鉛輸送体 (ZnT4, ZnT5, ZnT6, ZnT7) が複数存在し、それらが  $\text{Zn}^{2+}$  濃度維持に重要であることを突き止めているが、それらが ERp44 の機能や局在の制御にどう関わるかは不明であった。

そこで、ERp44 の小胞体-ゴルジ体輸送を直接観察するために、RUSH システムを用いた。まず、ストレプトアビジン (Str)-KDEL タンパク質と Str 結合ペプチド (SBP) と HaloTag を融合した ERp44 を同時に発現させ、ライブセルイメージングを行った。SBP-Halo-ERp44 は Str-KDEL と結

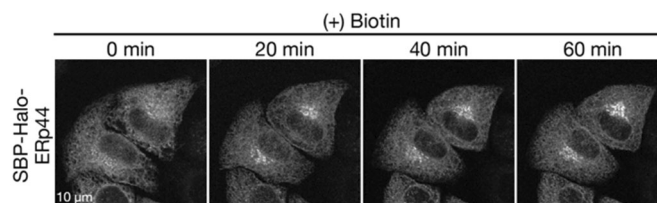


図 ビオチン添加による ERp44 の小胞体からゴルジ体への移行の可視化

合するために小胞体に蓄積するが、ビオチン刺激によってゴルジ体へと移行する様子が観測された(下図)。興味深いことに、ZnT4 や ZnT7 の発現抑制により ERp44 のゴルジ体以降の速度が変化し、ゴルジ体内の Zn<sup>2+</sup>濃度が ERp44 の細胞内輸送を制御する重要因子であることが示された (Amagai et al., in revision)。

本手法は ERp44 のみならず、分泌経路内の他のタンパク質にも適用可能であり、分泌経路に沿ったタンパク質の成熟化や品質管理の解明へ発展することが期待される。

### 5. ヒト小胞体膜タンパク質 LMF1 の機能解析

ヒト細胞の小胞体内において、ジスルフィド結合の形成は PDI ファミリー酵素によって触媒されるが、その際、誤ったシステイン間でのジスルフィド結合形成がしばしば生じる。これを正しいジスルフィド結合へと修復するためには還元力が必要である。近年、LMF1 と呼ばれる小胞体膜タンパク質がサイトゾルに由来する還元力を小胞体内腔に供給することが示唆された。しかし、LMF1 の具体的な機能は明らかになっていない。

そこで我々はまず、LMF1 が小胞体内に還元力を供給することで、小胞体内の酸化還元バランスの維持に関与しているのかを調べた。そのためには、当研究室で開発した、小胞体内のレドックス環境の変化を鋭敏に検出する FLuc\*レポーターを利用した。その結果、LMF1 は小胞体内における還元力を増大させることによって、小胞体内の酸化還元バランスの維持に関与することが分かった。更に、細胞を低濃度の酸化剤あるいは還元剤存在下で培養し、LMF1 の分子内におけるシステインの酸化還元状態を調べた結果、LMF1 は酸化還元活性のあるシステイン対を持つことが明らかとなった。しかも、これらのシステイン対が LMF1 による小胞体への電子の輸送に必要であることが分かった。さらに、マス解析等により LMF1 の基質候補タンパク質を網羅的に同定したところ、その中に PDI ファミリー酵素も含まれていた。以上の結果から、LMF1 が小胞体内に存在するタンパク質に還元力を供給する機能を有していると考察している。

## 【研究活動報告】 細胞機能分子化学研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：水上 進

准教授：松井 敏高

助教：小和田 俊行、高嶋 一平

博士研究員：Zhimin Yang

技術職員：高橋 泰人

技術補佐員：相馬 聡、木下 今日子、越村 聡子

大学院生：間下 貴斗、Ira Novianti、Rong Liu、岩下 誠、Tong He、Bochao Li、Yi Ding、Yuanbin Sui、濱口 聡志、牧 亮太、松尾 章弘、岩崎 功太郎、佐藤 歳三、Muhammad Wildan Saifudin、Yusen Hou、Andrey Soloviev

学部生：Duong Minh Quan

本研究分野では、①バイオイメージングプローブの開発とイメージングに基づく生命現象の解明、②タンパク質-合成分子のハイブリッド型解析手法の開発、に大別される研究を行っている。2022 年には、①については新たな反応制御機構に基づく刺激応答性の生体直交型反応を開発した(項目 1)。さらに、自発的に明滅する新規蛍光色素を開発し、生細胞内高速超解像イメージングに取り組んだ(項目 2)。②についてはタンパク質の構造検討と共に基質分子の合成研究に取り組んだ(項目 3)。これらの成果は以下のように概括される。

### 1. 刺激応答性の生体直交型反応の開発

生体直交型反応(クリック反応)とは、様々な分子が存在する生体内で高速かつ高選択的に進行する反応のことを指す。近年、新たなクリック反応として、高歪みアルケン・アルキンとテトラジンをを用いた逆電子要請型 Diels-Alder (IEDDA) 反応に関する研究が活発に進められている。本年は、この IEDDA 反応の反応性を制御する新たな機構を見出し、刺激応答性 IEDDA 反応を創出した(図 1a)。

IEDDA 反応におけるテトラジンの反応性を評価していたところ、テトラジンの両末端を架橋した環状化合物の反応性が著しく低いことを発見した。この反応性低下の原因を明らかにするために、架橋構造の長さや構成原子の異なる複数の誘導体に対して DFT 計算を行った。その結果、IEDDA 反応が進行するためには遷移状態でテトラジンが歪む必要があり、架橋構造の導入によりこの歪みエネルギー( $\Delta E_{\text{dist}, \text{Tz}}$ )が高くなるために反応が抑制されていることがわかった。この反応制御機構を利用した刺激応答性 IEDDA 反応を開発するために、架橋部位にエステル構造を有する誘導体を開発した(図 1b)。歪みアルケン(TCO-OH)共存下で塩基を添加したところ、期待通り速やかに IEDDA 反応が進行した(図 1c)。架橋構造の切断には酵素反応・光分解反応など

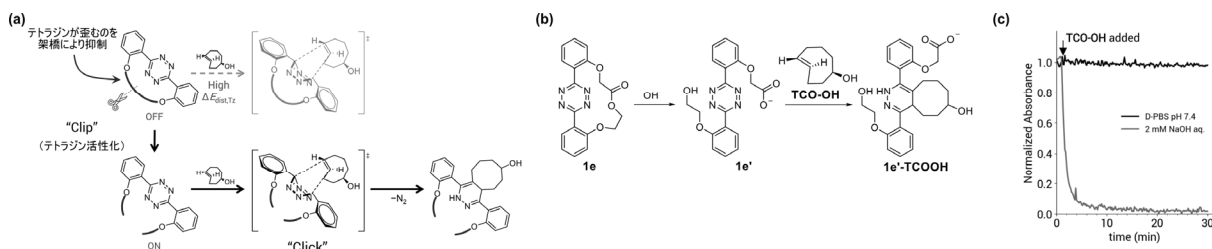


図 1 (a) 架橋構造によるテトラジンの反応性制御と刺激応答性 IEDDA 反応の概念図。(b) 塩基による架橋構造の切断で進行する IEDDA 反応の反応スキーム。(c) 吸光度変化による反応追跡結果。

が利用できると考えられるため、本反応制御機構を利用することで様々な生命現象の詳細解析が可能になると期待される。

## 2. 自発的に明滅する新規蛍光色素の開発と、生細胞内高速超解像イメージングへの応用

通常の光学顕微鏡の空間分解能は光の回折限界で規定されており、可視光を利用する蛍光顕微鏡では約 250 nm が限界である。単一分子局在化顕微鏡法 (SMLM) は、回折限界を超えた空間分解能を実現できる超解像顕微鏡法の一つであり、自発的に明滅を繰り返す蛍光色素が利用される。しかし、現状では生細胞を用いた高速イメージング (1 kHz) に利用可能な蛍光色素はほとんどなく、新たな蛍光色素の開発が望まれている。本年は、様々なアミノメチルシリコンローダミン誘導体 (AMSiRs) を合成し、明滅特性 ( $\tau_{\text{on}}$ ,  $\tau_{\text{off}}$ ) の評価を行った (図 2a)。

スピロ環化反応における電子のおよび立体的効果が与える明滅特性への影響を検証するために、アミノメチル基の隣の炭素上に  $\text{CF}_3$ , 'Pr, 'Bu 基を有する誘導体を合成した。生細胞内に発現させた Cav1-Halo を各 AMSiRs でラベル化し物性を評価したところ、汎用されているシリコンローダミン誘導体 (HMSiR,  $\tau_{\text{on}} = 18$  ms,  $\tau_{\text{off}} = 1629$  ms) と比べて良い明滅特性を示した。中でも AMSiRCF<sub>3</sub>-HTL ( $\tau_{\text{on}} = 1.6$  ms,  $\tau_{\text{off}} = 149$  ms) が一番優れており、細胞骨格の超解像イメージングに成功した (図 2b)。今後、明滅特性・光安定性などをさらに改良することで、生細胞内高速超解像イメージングの達成を目指す。さらに、非常に速い生体分子動態をリアルタイムで追跡することで、生命現象理解に貢献できると期待される。

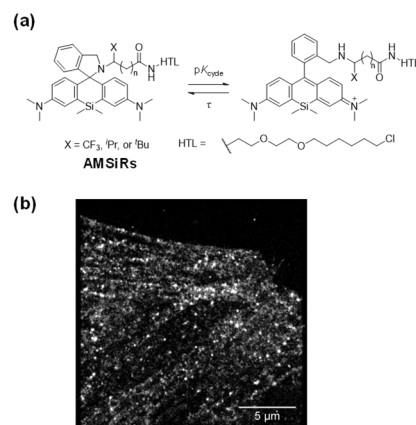


図 2 (a) 新規蛍光色素 AMSiRX-HTL の構造。(b) AMSiRCF<sub>3</sub>-HTL を用いた細胞骨格の超解像イメージング画像。

## 3. 人工改変タンパク質および合成基質を用いた生体内マンガンの選択的検出に関する研究

マンガン ( $\text{Mn}^{\text{II}}$ ) は Irving-Williams 系列で下位に位置し、有機合成したリガンド分子による選択的な検出は困難である。そこで本研究では生体内で存在する  $\text{Mn}^{\text{II}}$  選択的な酵素に着目し、酵素と合成基質によるハイブリッド型の検出法を目指した (図 3a)。本技術では、細胞内に局在させたアポ酵素が  $\text{Mn}^{\text{II}}$  濃度の上昇に伴って活性化し、酵素反応により基質分子から蛍光発光物質を生成することで  $\text{Mn}^{\text{II}}$  の高感度検出を可能とする。

本研究では超好熱性メタン菌 *Jannaschii* のゲノムにコードされるフォスホジエステラーゼ (MJ0936) を採用した。本酵素はジスルフィドで 2 量体を形成するが、分子表面のシステイン (Cys141) を変異して単量体とした。さらに余計な  $\text{Mn}^{\text{II}}$  の配位部位の除去や活性サイトの構造最適化を検討している (図 3b)。一方で、合成基質は他の内因性酵素による非特異応答が懸念されるが、リン酸エステル近傍に立体的に嵩高い構造を導入して非特異反応を回避する分子を合成した。本技術を確立し、細胞内  $\text{Mn}^{\text{II}}$  の詳細な解析を世界に先駆けて実現させる。

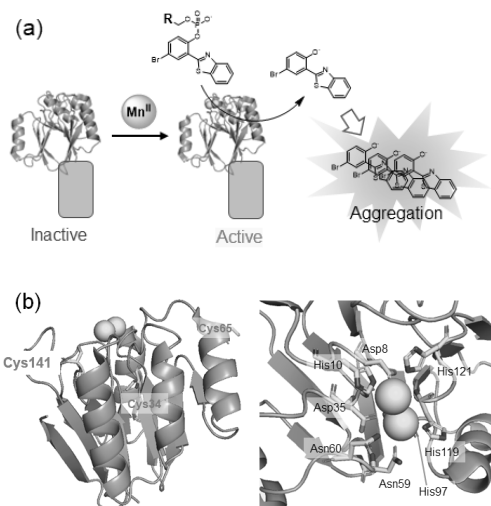


図 3 本研究での  $\text{Mn}^{\text{II}}$  駆動型の酵素反応を介した蛍光検出機構 (a) と MJ0936 (オレンジ色) の結晶構造 (全体; 左下、活性サイト拡大; 右下) (b)。PDB\_1S3N。

## 【研究活動報告】 生物分子機能計測研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：米倉 功治  
 准教授：濱口 祐  
 講師：黒河 博文

本研究分野では、クライオ電子顕微鏡を利用した高分解能単粒子解析や微小結晶構造解析、及びその技術開発を進めている。2022年の研究活動では、下記のような成果が得られている。

### 有機半導体構造解析

高性能な有機半導体特性を示す分子薄膜の結晶構造を電子回折から明らかにした(図1; Inoue et al., *Chem. Mater.* 34, 72–83, 2022)。ここでは、キャリア輸送の元となる剛直な $\pi$ 電子骨格を、柔軟なアルキル基などで非対称に置換した棒状分子の一種、phenylethynyl(PE)-[1]benzothieno[3,2-b][1]benzothiophene (BTBT)-C6を対象にした。有機溶媒に溶かした分子を炭素支持膜上に滴下するという単純な操作で得た薄膜結晶から電子回折を測定し構造決定に至った。その結果、 $\pi$ 電子骨格は乱れることなく層状のヘリンボーンと呼ばれる規則的な配列を形成する一方で、フェニルエチニル基(PE)とアルキル基(C6)の向きは層の上下で完全にランダムであった。このディスオーダー層と規則構造の層が交互に積み重なる従来にない特徴的な構造が明らかになった。これにより、分子配列の秩序と乱れが共存する特性を利用する、新たなソフトマターエレクトロニクスへの展開も考えられる。さらに同種の分子の解析では、硫黄と炭素の原子がその大きさから判別できるような高い精度の解析結果も得ている。

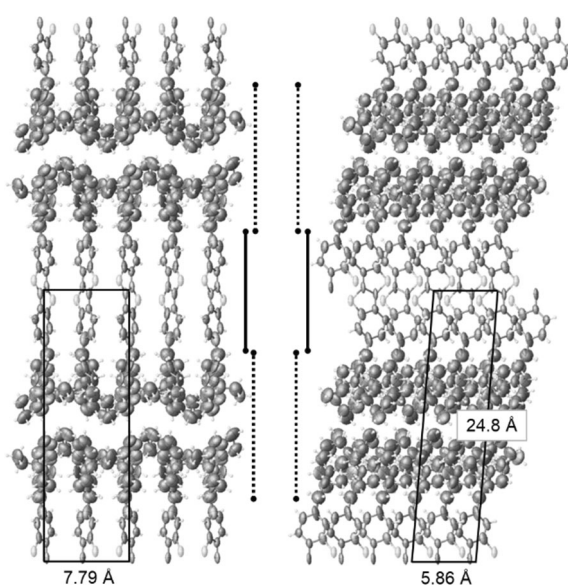


図1 液晶性有機半導体の極薄膜の構造。

### ALSに関わるポリペプチドの構造と発病機構

筋萎縮性側索硬化症(ALS: Amyotrophic lateral sclerosis)を誘起するT-cell intracellular antigen-1 (TIA-1)のプリオン様ドメインのポリペプチドについて構造解析を行った。野生型と、発病に関わる一残基変位型のポリペプチドはどちらも細い繊維状の結晶を形成した。結晶を含む溶液を支持膜上で凍結し、その電子回折測定から構造決定したところ、両者とも逆平行ベータシート構造を形成するが、階層構造には大きな違いがあることが明らかになった。野生型では三角形のハニカム様の粗な並びをとるのに対し、変異型ではベータシートが層状に積み重なった密な積層構造が形成される。変異型の凝縮構造は、不可逆的なアミロイド線維が形

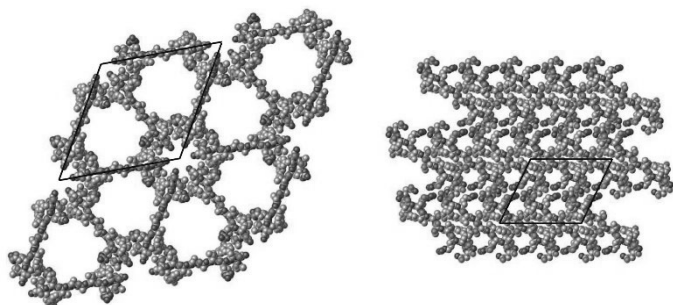


図2 難病のALSに関わるポリペプチドの構造。野生型(左)と病気を引き起こす点変異型(右)。

成される要因になることを示唆され、発病に関わる重要な知見が得られた (Sekiyama et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 119, e2122523119, 2022)。

### 光合成関連蛋白質の単粒子構造解析

原子的な藍藻の光合成系 I の構造を 2.0 Å 分解能で解明し、分子進化の解明に繋がる結果を得た (Kato et al., *eLife*, 11, e73990, 2022) 他、集光アンテナの巨大複合体の構造 (Kawakami et al., *Nat. Commun.*, 13, 3389 2022) と光エネルギーの変換機構、ストレス下で形成される光合成系 II のと特殊な複合体の構造 (Nagao et al., *Nat. Commun.*, 14, 920 (2023)) などを明らかにした。また、2021 年に報告した低いエネルギーの光を光合成に利用できる光合成系 I の構造を基に、量子化学計算によりその機構について検討した (Kimura et al., *J. Phys. Chem. B*, 126, 4009-4021, 2022)。

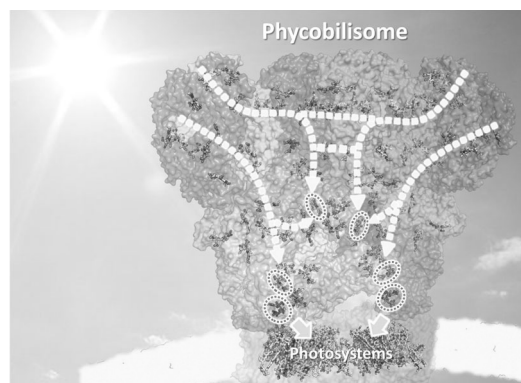


図3 単粒子解析で明らかにしたシアノバクテリアの集光アンテナの巨大複合体の構造。

### 種々のソフトマテリアルのクライオ EM 観察

企業との共同研究も含め、界面活性剤、酒、ポリマー等種々のソフトマテリアルについて凍結条件を検討し、クライオ電子顕微鏡での観察を進めた。

**【研究活動報告】 生命分子ダイナミクス研究分野 (2022.1~2022.12)**

教 授 : 高橋 聡

准 教 授 : 鎌形 清人

助 手 : 伊藤 優志

教育研究支援員 : 鈴木 誠

技 術 職 員 : 高橋 泰人、上林さおり

秘 書 : 木村 理香

技 術 補 佐 員 : 松木 朋子

大 学 院 生 : Shurutarshi Mitra (D3, ~11月, 12月~ 博士研究員)、Trishit Banerjee(D2)、佐野 豊(D2)、  
吉岡 孝広(M2)、遠藤 隼(M2)、草野 諒(M2)、飯藤 淳実(M2)、金田 直也(M1)、洪  
羽星(M1)、森 大晟(M1)

学 部 学 生 : Syamil Muharror Amsanul Husna(B4)

本研究分野では、タンパク質の物性を通して生命現象を理解することを目的として、以下の研究を進めた。第一は、先端的な一分子蛍光観察装置の開発とそれを用いたタンパク質の特性の解明である。第二は、液液相分離を示すタンパク質の特性を解明しさらに相分離の制御方法を開発する研究である。第三は、DNA 結合タンパク質の特性を解明する研究である。第四は、新型コロナウイルスが持つカプシッド形成タンパク質の物性を調べる研究である。

**1. 先端的な一分子蛍光分光法によるタンパク質の物性の解明**

タンパク質にドナーとなる蛍光色素とアクセプターとなる蛍光色素をラベル化し、二つの蛍光色素間の励起状態移動の効率を一分子ごとに計測することで、タンパク質の構造やダイナミクスを計測できる。この測定を精密に行うための交互励起一分子蛍光計測装置(ALEX 測定装置)を改良し、安定した計測を可能にした。

天然変性タンパク質である CytR-DBD を試料として用いて、細胞内における混雑効果が試料の物性にどのような影響を与えるかを解明した。一分子蛍光計測法を用いることで、細胞内を模した PEG などの混雑剤の存在下において、CytR-DBD がよりコンパクトな構造を安定化することを見出した。この効果は、共同研究者が開発した理論により、タンパク質鎖の持つ構造エントロピーが混雑環境において減少するという機構で説明することが可能であった(Dajendran, D. *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett.* 2022, **13**, 3112)。

試料の揺らぎ運動をナノ秒の時間分解能で計測するナノ秒蛍光相関分光測定装置を開発した。ナノ秒蛍光相関計測は長時間の計測が必要だったが、新しい光検出機である HPD を用いることで効率を向上できた。

**2. 液液相分離を示すタンパク質の特性解明と相分離の制御方法の開発**

細胞内で特定のタンパク質が液液相分離を起こすことで集合し、重要な生命現象に関与することが多数知られている。液滴形成を制御する方法として、液滴を形成するタンパク質に特異的に結合するペプチド鎖を設計する手法を開発した。開発したペプチド鎖は、p53 が形成する液滴を増加させたりあるいは、減量させたりできることを示した(Kamagata, K., *et al.*, *Sci. Rep.* 2022 **12**, 13718)。

液液相分離によりタンパク質が形成した液滴には、他のタンパク質や生体分子が取り込まれる。それらのゲストタンパク質が、どのような機構により取り込まれるのか、また、液的内で運動するのかを調べた。FUS という天然変性タンパク質で形成される液滴の場合、折りたたんだタンパク質は大きいタンパク質ほど液滴に取り込まれにくかった。さらに、液滴内における運動性は折りたたんだタンパク質は分子量に大きく依存したが、天然変性タンパク質は大きくは依存しなかった (Kamagata, K., *et al.*, *Sci. Rep.* 2022 **12**, 7101)。

### 3. DNA 結合タンパク質の特性を解明する研究

CytR はシチジンの濃度に応じて DNA のターゲット配列に結合することで、核酸の分解などを引き起こすタンパク質群の発現をコントロールするタンパク質である。CytR の DNA 結合ドメイン (CytR-DBD) は DNA に結合していない条件では変性してゆらいでいるが、DNA に結合した状態では折りたたんでいる。しかし、CytR-DBD がどのようにターゲット配列と非ターゲット配列を区別するのか、未解明のままだった。一分子蛍光分光法を用いることで、CytR-DBD の構造がターゲット配列と非ターゲット配列でわずかに異なることを見出した。さらに、DNA に結合する前の試料の一部が、DNA 結合型と似たコンパクトな構造を持つことも見出した。これらの結果から、CytR-DBD の結合メカニズムを提案した (Mitra, S., *et al.*, *J. Phys. Chem. B.* 2022, **126**, 6136)。

二重鎖 DNA の周囲を取り囲む水の状態をラマン散乱および誘電緩和観測により調べた。DNA の周囲にはハイパーモバイル水と呼ばれる運動性の高い水が存在する。さらに、その周囲に大きく低波数した OH 伸縮運動を示す水があることを見出した (Suzuki M., *et al.*, *J. Phys. Chem. B.* 2023, **127**, 285)。

海外を含む複数の共同研究グループから試料の提供をうけ、基板に片末端を固定した DNA 上を DNA 結合タンパク質が運動する過程を計測した。

### 4. 新型コロナウイルスが持つカプシッド形成タンパク質の物性

新型コロナウイルスは約 3 万塩基もの長さを持つ RNA をウイルス内にコンパクトにパッキングし、遺伝情報として維持している。本来不安定な RNA を安定化しコンパクトに収縮させる役割を持つと考えられるのが、N タンパク質である。N タンパク質と短い RNA が形成する複合体の構造を、一分子蛍光分光法を用いて調べる研究を継続した。数百ベースを超える長鎖 RNA に蛍光色素をラベル化する方法を開発し、RNA のコンパクト化を調べることを可能とした。コロナウイルスの S タンパク質に蛍光色素をラベル化するための努力を継続した。



**【研究活動報告】量子ビーム構造生物化学研究分野** (2022.1~2022.12)

教 授 : 南後恵理子

助 教 : 藤原孝彰

学術研究員 : Enkhasaikhan Giiguulen

大 学 院 生 : 小川陽菜乃<sup>(M2)</sup>, Atika Nur Rochmah<sup>(M2)</sup>, 森内瑛也<sup>(M1)</sup>, Hansel Adriel<sup>(M1)</sup>

本研究分野では、X線自由電子レーザーなどの量子ビームを用いたタンパク質ダイナミクス解析の技術開発及び実際の試料における動的構造解析などの研究活動を行っている。2022年の研究活動としては、以下のよう

に概括される。

**1. 光感受性タンパク質の分子動画解析**

タンパク質の機能と構造は深く関連し、機能を発現する際に三次構造を変化させる。このような動的な構造をフェムト秒~ミリ秒といった時間スケールで原子の動きまで捉えるのは従来の手法では困難であった。最近になって、高強度且つフェムト秒レーザーである X 線自由電子レーザー (XFEL) が実用化され、高速で起こる構造変化を捉えることが可能となった。また、放射線損傷が顕在化する前に回折現象が終了するため、生体温度に近い条件で X 線による損傷の懸念のないタンパク質構造情報を得ることが可能である。

当研究室主宰者は、XFEL を用いたタンパク質動的構造解析手法の開発に取り組み、光感受性試料向けのポンププローブ型実験装置 (*J. Synchrotron Radiat.* **24**, 1086-1091) 及びその方法 (*Science* **354**, 1552-1557) を確立した (図1: 装置全体図)。我々は、この手法を用いて様々な光感受性タンパク質の動的構造解析に取り組み、2022 年度では、DNA 光回復酵素、光反応人工タンパク質などの光反応における構造変化を捉えることに成功した<sup>(1,2)</sup>。代表的な例として、DNA 光回復酵素の時分割研究の例を挙げる<sup>(2)</sup>。DNA 光回復酵素は、青色光を用いて DNA の修復を行う酵素であり、補酵素としてフラビンアデニンジヌクレオチド (FAD) を有する。DNA 光回復酵素は、DNA 修復反応および FAD の光還元反応に青色光を用いる。本時分割研究では、光還元における電子移動反応に続くナノ秒~マイクロ秒における FAD および周辺アミノ酸側鎖の動きを捉えることに成功し、補酵素周辺に位置する Asn 側鎖と Arg-Asp から成る塩橋が、FAD 還元反応に伴う構造変化とプロトン化を制御することが明らかとなった。

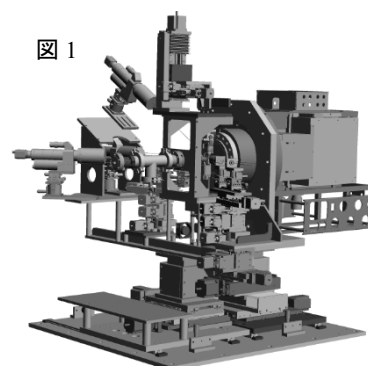


図 1

- (1) Liu, X. et al. Excited-state intermediates in a designer protein encoding a phototrigger caught by an X-ray free-electron laser. *Nat. Chem.* **2022**, *14* (9), 1054-1060.
- (2) Maestre-Reyna, M. et al. Serial crystallography captures dynamic control of sequential electron and proton transfer events in a flavoenzyme. *Nat. Chem.* **2022**, *14* (6), 677-685.

## 2. 光非感受性タンパク質の分子動画解析に向けた基盤構築

酵素や受容体といったほぼ全てのタンパク質は光非感受性であるため、これらの光非感受性タンパク質の分子動画解析に適した反応誘起システムの開発が必要となる。我々は現在、水分子による赤外線の吸収特性と熱放出を利用した昇温手法として知られる温度ジャンプや、微小結晶懸濁液と低分子化合物溶液を迅速に混合する二液混合法に基づく反応誘起システムの開発を進めている。2022 年は、赤外パルスレーザーを用いた光学的加熱による温度ジャンプ法と XFEL をプローブ光として用いる SFX を組み合わせた測定基盤を構築した。そして、リゾチームの微小結晶を実試料として用いた温度ジャンプ型の時分割 SFX を実施することで、当該手法の分子動画解析への適用可能性について検証した。我々は、温度ジャンプ後の状態と基底状態における回折データの各構造因子の差として計算される差フーリエマップをもとに、赤外パルスレーザー照射後数十ナノ秒～数百マイクロ秒におけるリゾチーム分子の動きを高い分解能で捉えることに成功した（現在投稿中、プレプリントにて公開: *bioRxiv*, doi: <https://doi.org/10.1101/2022.06.10.495662>）。例えば、20 ナノ秒後には、Tyr23 の側鎖のコンフォメーションが変化する様子が捉えられ、短い時間で起こる微小な変化であっても十分に観察することが可能であることが証明された（図2上）。また、マイクロ秒オーダーの遅延時間においては、いくつかの原子周辺に特徴的な正と負の差フーリエマップが観測され、主鎖の比較的大きな構造変化に関しても捉えられている。特に顕著な動きとして、200 マイクロ秒後には、活性中心近傍に位置するループに含まれる残基番号 97-100 の主鎖が動く様子が捉えられた（図2下）。また、分子内の温度変化に対する影響の強弱を示した差フーリエマップのピーク強度分布から、温度ジャンプの影響が空間的に伝播する様子も捉えられている。ピーク強度分布から、20 ナノ秒後には既に温度ジャンプの影響がリゾチーム分子全体に及ぶことが示唆された。また、アポ型のリゾチームの構造変化に加えて、阻害剤であるキトビオースが結合したリゾチームの構造変化を捉えることもできた。20 ナノ秒後のピーク強度分布は、アポ型とキトビオース結合型で類似していた一方、200 マイクロ秒後のピーク強度分布は両者で異なっており、キトビオース結合型ではアポ型で見られた構造変化が観測されなかった。キトビオースはリゾチームの構造を閉構造に固定する働きのある阻害剤であり、リゾチームの構造変化が抑制されることと一致する結果であった。以上の結果から、温度ジャンプによる物理的刺激を利用した時分割 SFX は、適用範囲や観測可能な遅延時間の観点から、分子動画解析における有用な手法であることが示された。

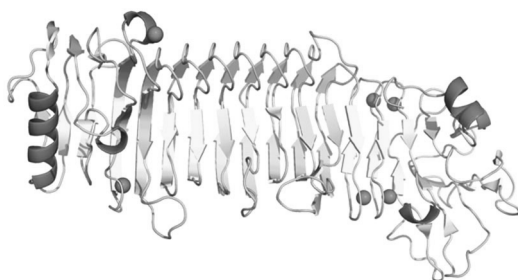


図3 酵素 A の立体構造

また昨年に引き続き、時分割 SFX 測定に向けた種々の標的タンパク質の結晶化、構造解析を実施している。2023 年は新規糖質関連酵素 A の構造を決定し（図3）、異なる 2 つのドメインが一つづきの  $\beta$ -ヘリックスフォールドを形成することを明らかにした（論文準備中）。今後、温度ジャンプ等を用いた各種時分割実験を実施していく予定である。

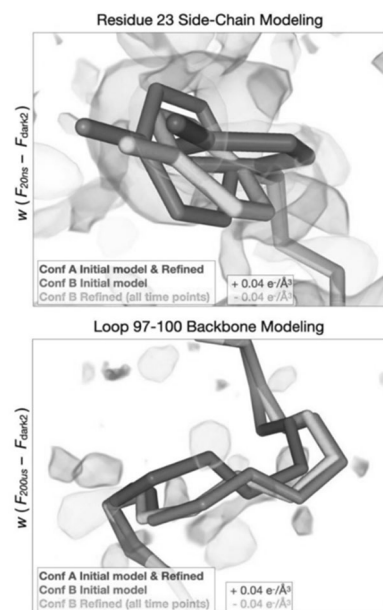


図2 温度ジャンプ型の時分割 SFX で捉えられた動き

## 【研究活動報告】高分子ハイブリッドナノ材料研究分野(2022.1~2022.12)

教授：西堀 麻衣子

講師：真木 祥千子

助教：二宮 翔

大学院生：板本 航輝、王 傑林、梁 哲源、工藤 康大、程田 将士

学部生：佐藤 和樹、辻 潤人

本研究分野では、高分子ハイブリッドナノ材料の合成と放射光分析を駆使した機能発現機構の解明に関する研究活動を行っている。2022年の研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. ポリマーブラシにおけるブラシ-基材界面構造の解明 (図1)

ポリマーブラシは、共有結合やイオン結合を介して基材表面に高分子鎖を密に固定化したもので、その構造から低摩擦特性や高反発特性、サイズ排除特性など特異的な性質を有している。基材表面へのポリマーブラシ修飾については、修飾する高分子や重合法の研究が先行しており、様々な組成のセラミックス粒子へ修飾したブラシの特性に関連する報告は少ない。本研究分野ではポリマーブラシを修飾するプロセスにおける基材組成の影響を理解することを目的として、重合開始基含有シランカップリング剤を固定化した組成の異なるセラミックス基材に対して、表面吸着種の化学状態をX線吸収分光と放射光光電子分光により選択的に評価するとともに、密度汎関数理論に基づいた第一原理計算により基材表面に対する重合開始基の吸着サイトおよびその最安定構造の解明に取り組んでいる。

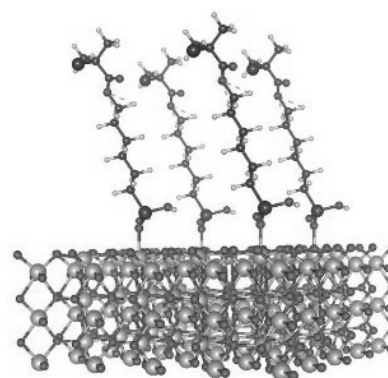


図1 機能性セラミックス上へのポリマーブラシ修飾界面構造のシミュレーション

### 2. 超臨界水熱合成法により合成した有機修飾ナノ粒子の金属-酸素化学結合状態の解明 (図2)

金属酸化物中の酸素空孔は、機能材料の化学的・電子的特性を支配する重要な役割を担っている。中でも $\text{CeO}_2$ は、 $\text{Ce}^{4+}/\text{Ce}^{3+}$ に由来する高い酸素貯蔵容量 (OSC) と高い酸素移動度を有する。超臨界水熱法で合成した $\{100\}$ 面露出単分散 $\text{CeO}_2$ ナノ粒子は、 $150^\circ\text{C}$ 程度の低い温度領域で高いOSC能を示す。この粒子は、粒径が $6\text{ nm}$ 程度以下になるとCe原子位置が大きく変位するとともに、粒子内部まで $\text{Ce}^{3+}$ が存在することが走査型透過電子顕微鏡観察および電子エネルギー損失分光により明らかとなっているものの、これらがOSC能や酸素移動度にもたらす影響は十分理解されていない。本研究分野では、超臨界水熱合成金属酸化物ナノ粒子の特異な機能発現機構を金属-酸素間の化学結合の観点から議論するために、X線吸収/発光分光法により、金属イオンと酸素イオンの結合安定性を議論している。その結果、 $\text{Ce}5d$ 軌道と混成した $\text{O}2p$ 軌道のエネルギー準位がブロード化し

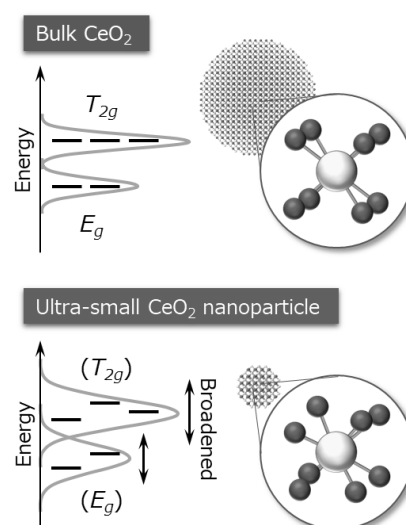


図2 軟X線分光による $\text{CeO}_2$ 局所構造歪の評価

ていることがわかった。これは超臨界水熱合成法で合成した $\text{CeO}_2$ の局所対称性が低下していることを示しており、特に格子酸素位置が大きく歪んでいることが明らかとなった。

### 3. 放射光X線分光による異種金属原子含有ゼオライトの構造解析 (図3)

ゼオライトはオングストロームからナノサイズの細孔をもつ多孔質材料であり、骨格構造や異種金属(ヘテロ)原子置換により分子との相互作用をコントロールできることから、触媒や分子の吸着分離・貯蔵に有用である。ゼオライト骨格内で孤立したヘテロ原子は、通常の酸化物とは異なる特異的な触媒作用を発現し、ヘテロ原子(活性点)位置の制御に着目した研究が盛んに行われている。本研究分野では、放射線X線吸収分光や共鳴X線非弾性散乱により、ゼオライト骨格中のヘテロ原子位置や局所構造を原子レベルで解析する方法の確立に取り組んでいる。

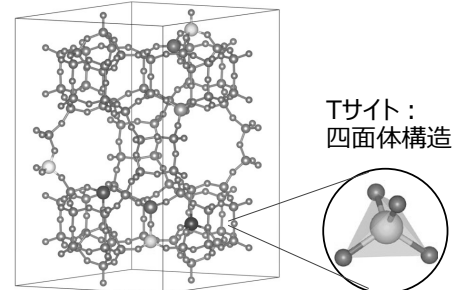


図3 ゼオライト骨格中ヘテロ原子位置

### 4. 放射光を駆使したナノクラスタ形成駆動と階層構造形成機構の解明 (図4)

材料研究は日進月歩しており、有機-無機ハイブリッド材料、酸化物イオン伝導体、ゼオライト触媒などの機能性材料や構造材料が日々開発されている。これらの材料は原子からマクロに至るマルチスケールの階層構造と対応した時間スケールのダイナミクスを有しており、こうした時空間階層構造は材料の物性を支配している。本研究分野では、放射光計測を駆使して熱、光、応力など外場下におけるハイブリッドナノ材料の時空間階層構造をマルチスケールで可視化し、合成メカニズムや機能発現メカニズムの解明に取り組んでいる。これまでの研究から、高温での原子拡散挙動がマイクロスケールの組織形態に強く影響を及ぼすことを明らかにしている。(K. Nino miya, K. Itamoto, H. Setoyama, D. Egusa, E. Abe, M. Yamasaki, M. Nishibori, *J. Alloys Compd.*, **928** (2022) 167101.)

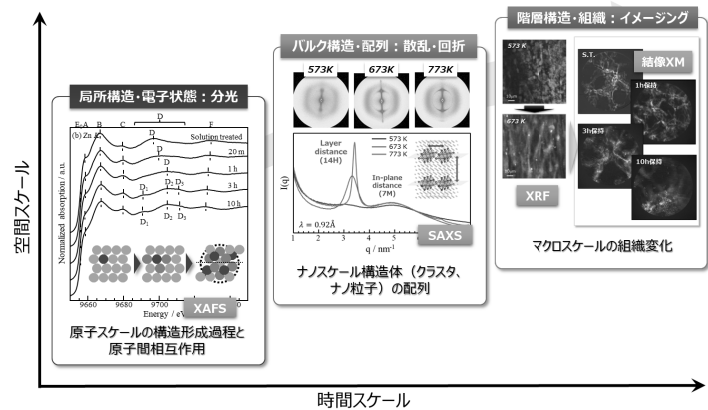


図4 階層的構造材料のマルチスケール構造解析

その他、多元物質科学研究所内の各研究分野や東北大学内附置研究所、他大学、民間企業等と積極的に共同研究を行っており、学術的・実学的に意義のある研究の推進に努めている。

## 【研究活動報告】 無機固体材料化学研究分野 (2022.1~2022.12)

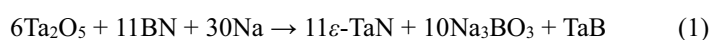
教 授：山田 高広  
 助 教：榎木 勝徳, 研究補助員：長濱 千賀子

本研究分野では、主に非酸化物系の無機化合物を対象として、新規化合物や純良な試料を合成し、それらの物性や材料特性の評価を実験と理論計算の両面から行うことで、熱電材料、硬質セラミックス、金属材料、超伝導体などの新規材料の開拓を進めている。2022年の研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. 固体窒素源に窒化ホウ素を用いた窒化タンタル結晶粒の合成

一般に、金属窒化物は、金属粉末を窒素ガス中で高温加熱する直接窒化法や、金属酸化物と炭素の混合物を窒素ガス中で高温加熱する炭素還元窒化法によって合成される。本研究グループでは、昨年度、窒化チタン(TiN)の最大 100  $\mu\text{m}$  の八面体状の単結晶粒で構成される粉末が、Ti 酸化物と窒化ホウ素(BN)を金属 Na とともに 1100°C の加熱により生成することを見出した。本研究では、この手法を TaN の合成に適用し、Ta 酸化物を原料として得られる試料の生成相や形態を調べた。

Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> または FeTaO<sub>4</sub> 粉末を Na とともに BN 坩堝中で 1100°C、10 h 加熱した後、Na を取り除いて蒸留水で洗浄したところ、Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 粉末から合成された試料は常温安定相である  $\epsilon$ -TaN が主相であった。また、FeTaO<sub>4</sub> から合成された試料は Fe と高压低温相とされる  $\theta$ -TaN のみで構成され、酸洗浄により  $\theta$ -TaN の単相試料を得ることができた。Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 粉末を原料として 1000 および 1100°C で加熱した試料は、図 1a に示すような、長さが 50–150  $\mu\text{m}$  の金属光沢のある黒銀色の針状もしくは柱状結晶で構成され、FeTaO<sub>4</sub> から 1100°C で合成された試料は、図 1b のような 1–30  $\mu\text{m}$  の六角板状結晶の凝集体であった。水洗前の各試料には、前述の結晶相に加えて水溶性のナトリウムホウ酸塩(Na<sub>3</sub>BO<sub>3</sub>, 融点:667°C)が含まれていたことから、各酸化物を原料に用いた TaN の生成反応について、次のような反応式が推定された。



TaN が単結晶粒として生成した要因としては、生成したナトリウムホウ酸塩の液相の関与などが考えられ、異なる結晶相の TaN が生成した原因は、系内の窒素分圧の違いにあると推察された。Na を用いた金属酸化物と固体窒素源(BN)の反応により、これまでの TiN に加えて、TaN も得られたことから、本合成手法は他の金属窒化物の単結晶や粉末の合成にも応用でき、金属窒化物の新しい低温合成法として発展する可能性がある。

【参考文献】 N. Kuge, T. Sekiya, M. Enoki, H. Yamane, T. Yamada, *Ceram. Int.*, **48**, 10817 (2022).

### 2. ノーダルライン半金属 NaAlGe の単結晶合成と物性評価

NaAlGe は、ノーダルライン半金属超伝導体である NaAlSi(転移温度~7 K)と同じ逆 PbFCl 型構造で類似の電子構造を有するノーダルライン半金属であることが理論計算により示されている。実験的には、多結晶試

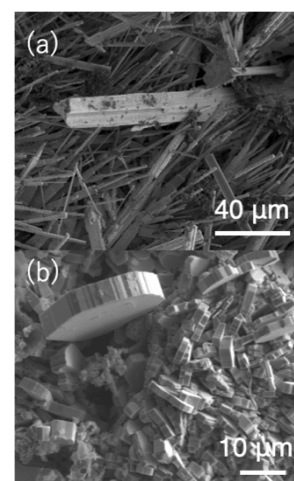


図 1 本合成手法で得られた TaN 単結晶粒の走査電子顕微鏡像。

料を用いた磁化率測定により 1.8 K 以上では超伝導を示さないことが報告されているが、詳細な物性の評価は行われていなかった。本研究では、Na-Ga フラックスを用いて NaAlGe の単結晶を合成し、電気抵抗率、磁化率および比熱測定により物性評価を行なった。

合成された NaAlGe の単結晶の多くは幅約 1–4 mm、厚さ 0.1–0.3 mm の {001} 面が発達した板状の黒色単結晶であった (図 2a)。NaAlGe 単結晶の面内方向の 300 K における電気抵抗率( $\rho$ )は 1.51 m $\Omega$ cm であり、その値は温度低下とともに 200 K 付近まで微減した後に増加に転じ、1.8 K では 23.5 m $\Omega$ cm に達した。この  $\rho$  の温度依存性は、超伝導転移温度まで金属的な伝導性を示す NaAlSi 単結晶 ( $\rho_{300\text{ K}} = 1.66\text{ m}\Omega\text{cm}$ ) のそれとは大きく異なる (図 2b)。また、NaAlGe の高磁場下 (7 T) での磁化率には 75 K 付近にブロードなピークが観測され、比熱から求められる NaAlGe の電子比熱係数( $\gamma$ )は 0.44(2) mJ K<sup>-2</sup> mol<sup>-1</sup> で、NaAlSi の  $\gamma$  値の約 1/5 であった。これらのことから、NaAlGe は低温において擬ギャップの形成により、キャリア濃度が NaAlSi よりも著しく低下しているものと考えられた。

【文献】 T. Yamada, D. Hirai, T. Oguchi, H. Yamane, Z. Hiroi, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **91** 074801 (2022).

### 3. ハイエントロピー合金の規則-不規則変態の解析

ハイエントロピー合金 (HEA) では多数の構成原子に由来するエントロピーおよび、短範囲規則化 (SRO) がもたらす材料物性への影響が重視される。このような SRO の形成は HEA に潜在する規則化に駆動して生じるものと考えられる。本研究では、このような観点から第一原理モンテカルロシミュレーションから HEA の規則-不規則変態温度を評価した。具体的には FCC 格子を基本とする規則構造を多数作成し、第一原理計算を用いてそれらの生成エネルギーを計算した。さらにクラスター展開法によってこの規則構造群から抽出された原子間相互作用を MC 法に適用することで、熱平衡状態の熱力学量を計算した。

図 3 に Co-Cr-Pd 三元系の基底状態における FCC 基準安定規則構造と比熱のピーク温度から求めた規則-不規則変態温度の計算結果を示した。この三元系では組成中央部付近で規則化温度 ( $T_C$ ) が高くなっており、等比組成では 1550 K であった。図中に示した原子配置

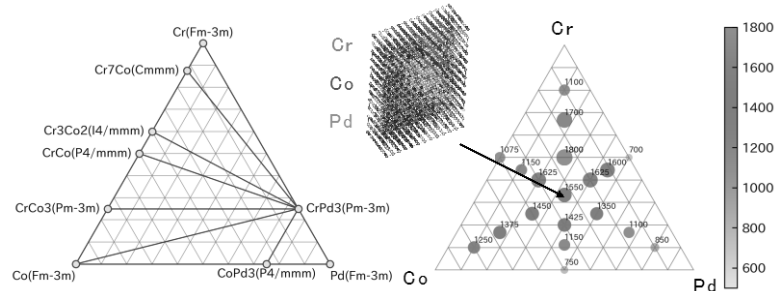


図 3. Co-Cr-Pd 三元系の基底状態における FCC 基準安定規則構造 (左図) と規則-不規則変態温度 (右図) の計算結果。

は等比組成における  $T = 1000\text{ K}$  の MC シミュレーションの結果であるが、この結果から CoCr-rich な領域と Pd の領域に分離していることがわかる。したがって、この温度近傍においては Co-Cr の結合が増える形で SRO が発達するものと示唆される。一方、同様の計算を Co-Cr-Ni に対して行うと組成中央部分の  $T_C$  は 1000 K であり、Co-Cr-Pd 三元系よりも小さいことが明らかとなった。Pd を含む FCC 合金系の強度が高いことが実験的に報告されていることから、このような規則化傾向の強弱が合金強度と相関する可能性が示唆された。

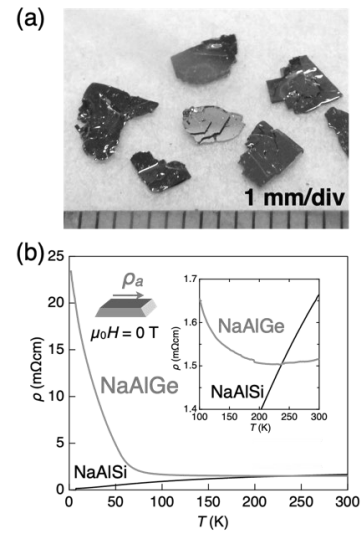


図 2. フラックス法によって合成された NaAlGe の単結晶 (a) と電気抵抗率の温度変化 (b)。

## 【研究活動報告】 スピン量子物性研究分野 (2022. 1~2022.12)

教授：佐藤 卓  
 助教：奥山 大輔 (~2022.3) , 那波 和宏  
 学術研究員：Hung-Cheng Wu (2021.11~ 特任研究員)  
 大学院生：村崎 遼, Pharit Piyawongwattahana, 柴田 将弥 (~2022.3) ,  
 松坂 信之介, 平岡 巧, 下館 凌人

本研究分野では中性子非弾性散乱を主たる実験手法として、固体におけるスピンドYNAMIXの研究を行っている。加えて新物質合成やバルク物性測定等も行う事で、新奇な巨視的量子現象の探索と解明を目指している。2022年4月には下館氏(大学院 M1)を新たにグループに迎えた。

2020年初頭からの新型コロナ感染症が徐々に収束し、本年は海外での中性子散乱実験が再開した。また、東日本大震災で停止していた国内の研究用原子炉 JRR-3 が本格的に稼働し、一年を通して7サイクルのフル稼働を果たした。そこで当グループでは、米国オークリッジ国立研究所、スイスポールシェラー研究所等での中性子散乱実験を実施するとともに、JRR-3 に設置された三軸型分光器 GPTAS を用いた研究も強力に推進した。研究成果としては絶縁体スキルミオン宿主物質  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  における高調波変調の観測と数値計算を併用したスキルミオン変形の解明[1]、キタエフ候補物質の一つである高圧合成  $\text{RuBr}_3$  における結晶構造および磁気構造の研究[2]、量子籠目格子反強磁性体  $\text{Cs}_2\text{Cu}_3\text{SnF}_{12}$  におけるスピン波ブレイクダウン[3]、Znドーパした  $\beta\text{-(Cu,Zn)}_2\text{V}_2\text{O}_7$  の二次元量子磁性の解明[4]等が挙げられる。以下では、代表的な成果として  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  の高調波観測とその理解に関して簡単に記す。

### 絶縁体スキルミオン宿主物質 $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$ における高調波変調の観測とスキルミオン変形

磁気スキルミオンとは(主として強)磁性体中に形成される渦状の磁気テクスチャーであり、2009年に金属カイラル磁性体  $\text{MnSi}$  で初めて観測されて以来、そのトポロジカルな空間構造に興味を持たれ積極的に研究が進められている。本研究では磁気スキルミオンを形成する数少ない絶縁体物質である  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  を取り上げ、中性子小角散乱とモンテカルロシミュレーションを組み合わせることで、この物質のスキルミオン構造の磁場中での変形を解明した。

図1に  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  のスキルミオン相における中性子小角散乱パターンを示す。強度は対数スケールで示されている。データより明らかなように6角形をなす主反射に加えて  $2Q_1$  (200 反射) や  $Q_1 + Q_2$  (110 反射)に対応する反射が明瞭に観測されていることがわかる。詳しい解析により、これらのピークへの多重散乱の寄与は小さく、スキルミオン構造変形に伴う高調波変調であることが示された。200 反射と 110 反射の強度の磁場依存性を比較すると興味深い違いが見られた。200 反射強度は磁場増加に伴い一度増加するものの減少に転じ

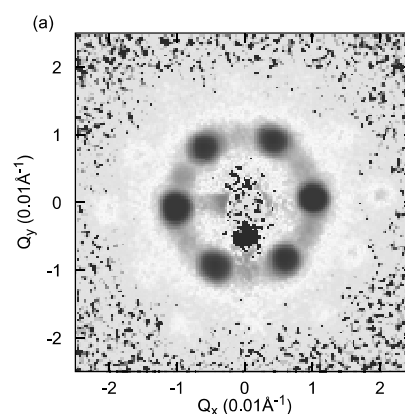


図1:  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  スキルミオン相における中性子小角散乱パターン。強度は対数スケールでプロットされている[1]。

る。一方、110 反射強度は単調に増加する。この結果は、磁場によりスキルミオンが異なる変調を受けることを示している。

この磁場依存性を理解するためある種のモデルハミルトニアンを仮定し数値的モンテカルロシミュレーションを行なった。図 2 には典型的な数値シミュレーション結果とその散乱関数  $S(\mathbf{Q})$  を示す。数値シミュレーションでも高調波反射が明瞭出現していることがわかる。高調波成分の磁場依存性は実験結果をよく再現した。シミュレーションで得られた実空間スピントクスチャーを図 3 に示す。主反射に対応するスキルミオン渦構造に加えて、低磁場側では細かな渦が、高磁場側では比較的荒い渦が形成されていることがわかる。このように数値計算を併用することで、スピントクスチャー変形の詳細を明らかにすることに成功した。

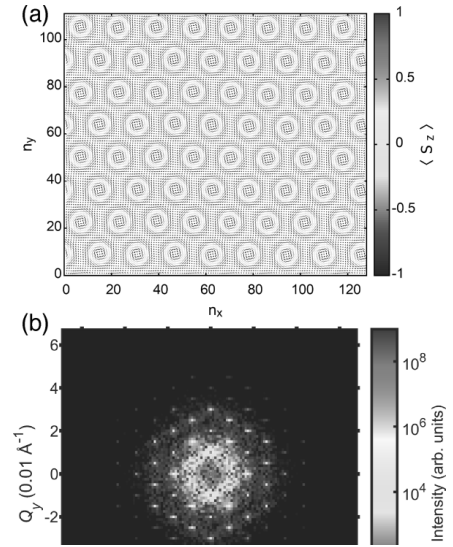


図 2: モンテカルロシミュレーションにより得られた実空間スキルミオンテクスチャーとその散乱関数[1]。

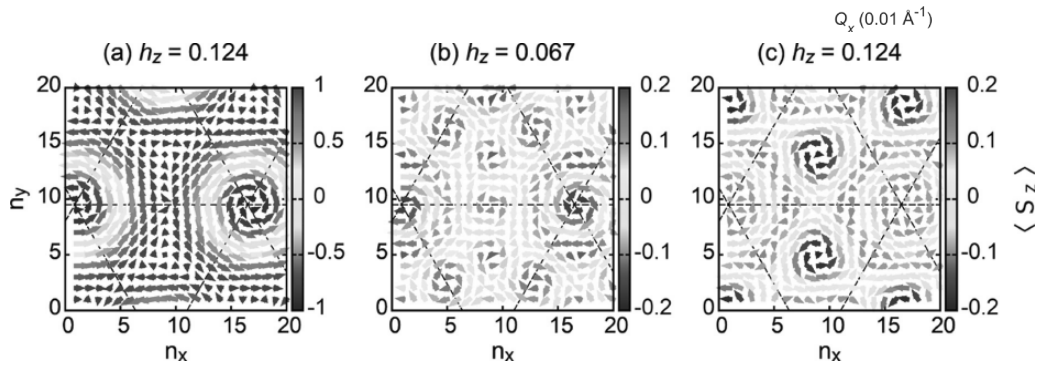


図 3: モンテカルロシミュレーションにより得られた実空間スキルミオンテクスチャーの波数成分分解図。(a)は全波数に対応するテクスチャー、(b), (c) は高調波成分に対応するテクスチャー[1]。

[1] Higher-order modulations in the skyrmion lattice phase of Cu<sub>2</sub>OSeO<sub>3</sub>, Johannes D. Reim, Shinnosuke Matsuzaka, Koya Makino, Seno Aji, Ryo Murasaki, Daiki Higashi, Daisuke Okuyama, Yusuke Nambu, Elliot P. Gilbert, Norman Booth, Shinichiro Seki, Yoshinori Tokura, and Taku J Sato, Phys. Rev. B 106, 104406 (2022) [Editor's Choice].

[2] Zigzag magnetic order in the Kitaev spin-liquid candidate material RuBr<sub>3</sub> with a honeycomb lattice, Yoshinori Imai, Kazuhiro Nawa, Yasuhiro Shimizu, Wakana Yamada, Hideyuki Fujihara, Takuya Aoyama, Ryotaro Takahashi, Daisuke Okuyama, Takamasa Ohashi, Masato Hagihara, Shuki Torii, Daisuke Morikawa, Masami Terauchi, Takayuki Kawamata, Masatsune Kato, Hirotada Gotou, Masayuki Itoh, Taku J. Sato, and Kenya Ohgushi, Phys. Rev. B 105, L041112 (2022) Letter.

[3] Breakdown of linear spin-wave theory and existence of spinon bound states in the frustrated kagome-lattice antiferromagnet, K. Matan, T. Ono, S. Ohira-Kawamura, K. Nakajima, Y. Nambu, and T. J. Sato, Phys. Rev. B 105, 134403 (2022).

[4] Magnetic structure and spin dynamics of the quasi-two-dimensional antiferromagnet Zn-doped copper pyrovanadate, G. Gitgeatpong, Y. Zhao, J. A. Fernandez-Baca, T. Hong, T. J. Sato, P. Piyawongwatthana, K. Nawa, P. Saeun, and K. Matan, Phys. Rev. B 106, 214438 (2022).



## 【研究活動報告】 ナノスケール磁気機能研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：岡本 聡  
 准教授：菊池 伸明  
 助教：石上 啓介  
 学術研究員：李 振庄、大沼 智幸、畑山 正寿  
 技術補佐員：鎌本 梨香  
 大学院生：諏訪 智巳、水谷 聡志、彭 牧天、小野 暢久、鍋田 滉希  
 学部学生：田中 敦也、北原 正梧  
 研究生：応 瑞軒

本研究分野では磁気デバイスの基礎となるスピン動力学と磁気機能性の原理解明を基軸として研究活動を行っている。2022年の研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. 先端永久磁石材料の磁化反転過程の3次元可視化観測

永久磁石は高効率モーターに不可欠であり、カーボンニュートラル実現に向けた重要物質の一つに挙げられる。永久磁石特性の源泉は、磁性材料が有する磁気ヒステリシスにある。磁気ヒステリシスは磁性材料が有する最も基本的かつ重要な性質であるものの、その理解は未だ十分ではない。磁気ヒステリシスは磁性体内部の磁化の向きが異なる領域(磁区)が移動することで生じる現象であるが、複雑な微細組織は不均一な磁気特性の分布を与え、その分応に基づいてナノスケールの核生成を起点としたミクロンスケールの磁区拡大が進行する。つまりマルチスケールの不均一系の問題であり、理論的にも実験的に取り扱いが困難であった。実際の磁区成長の様子を観察する手段として光、X線、電子線などをプローブとして磁区観察が古くから数多く行われているが、これまでは試料表面の磁区形状しか計測することが出来なかった。このような現状に対して、我々は SPring-8 BL39XU で開発された磁気トモグラフィーを永久磁石材料に適用した(図 1(a))。永久磁石材料で磁気トモグラフィーを実施するにあたり、磁石メーカーの協力の下で先端磁石材料の提供を受け、さらに実験上の各種制約の中で磁場印加手法、磁石試料形状など様々な工夫を施し、最終的に図1(b)に示すような3次元磁区構造の取得に成功した。さらに SEM トモグラフィーの測定も実施し、同一観察領域の微細組織構造との対応を取ることに成功した。外部磁場を変えながら測定することで、図 1(c)に示すような磁気ヒステリシスに沿った3次元磁区構造の変化を得ることが出来た。正の飽和状態から反転核が形成され負方向の磁化を持つ

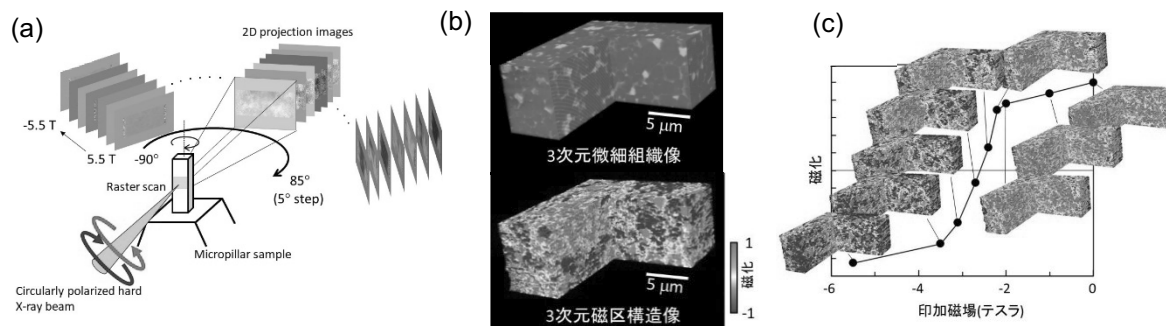


図 1 (a) 磁気トモグラフィー計測系の概略図、(b) 同一領域における 3 次元微細組織像と 3 次元磁区像、(c) 3 次元磁区像の磁気ヒステリシスに沿った変化。

磁区が拡大し、負方向に飽和に至る様子を 3 次元的に捉えることが出来た。微細組織構造との対応を調べることで、特徴的な磁区構造を幾つか見出すことが出来ている。今後は、データ科学手法を活用して、磁気ヒステリシス機構の解明に迫りたいと考えている。

## 2. 高周波スピンドYNAMIXの挙動解明

磁気記録(ハードディスクドライブ)は大容量データストレージデバイスとして、近年のデジタルトランスフォーメーションや情報科学の進展を支えている。身近な身の回りの電子機器ではフラッシュメモリへの置換えが進んでいるものの、膨大なデータを扱うデータセンターでは、ハードディスクは今後もストレージデバイスの主役であり、急増するデータ量に対応すべく記録密度向上が求められ続けている。しかしながら、現行技術の延長では更なる記録密度向上はほぼ限界に達しつつあり、新規記録技術の開発が急務となっている。マイクロ波磁場を用いた新規記録技術であるマイクロ波アシスト磁気記録方式は、熱アシスト磁気記録方式と並ぶ新規記録技術として開発が進められている。我々は、このマイクロ波アシスト磁気記録に早い段階から取り組んでおり、これまでに磁性ドットを用いた原理実験や理論解析などを進め、その原理実証並びに物理特性の解明だけでなく、実際のハードディスクの記録媒体として用いられる磁性グラニューラー膜を用いたマイクロ波アシスト記録の実験にも取り組んできた。その過程において、磁性グラニューラー膜では熱揺らぎの影響がマイクロ波周波数とマイクロ波磁場振幅の影響を強く受けることをこれまでに明らかにした。図 1(a)は磁化反転におけるエネルギー障壁高さのマイクロ波周波数とマイクロ波磁場振幅による変化を計算した結果である。このようにエネルギー障壁高さが計算できれば、実際の磁気記録特性を予測することが可能になる。磁気記録分野では一般的に使われる Sharrock 式と呼ばれる熱揺らぎの解析式が広く使われているが、図 1(a)の計算は Sharrock 式に比べて非常に煩雑である。そのため図 2(a)の挙動を近似してマイクロ波アシスト記録における Sharrock 式を導出することを試みた。その結果が図 2(b)である。得られた解析式はエネルギー障壁高さを十分な精度で予測できていることが分かる。

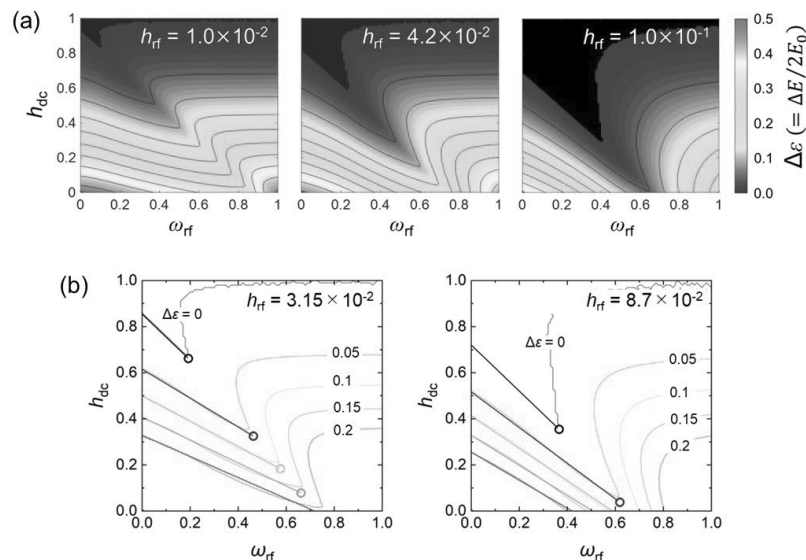


図 2 (a) 各マイクロ波磁場  $h_{rf}$  における磁化反転のエネルギー障壁高さのマイクロ波周波数依存性の計算結果。(b) 各条件におけるエネルギー障壁高さの近似式による予測結果。

## 【研究活動報告】ハイブリッドナノシステム研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：蟹江 澄志  
 講師：松原 正樹  
 研究員：沈 晨  
 技術補佐員：高橋 道子  
 秘書：伊藤 百合子  
 大学院生：山田 幸香, 谷地 赳拓, 野澤 良甫, 浦川 潔, 秋澤 瑞樹,  
 久住 結香, 佐藤 梨奈, 金澤 佑月, 吉田 朱里  
 学部生：江刺家 みらい, 佐野 公亮

本研究分野ではハイブリッドナノ材料の創製に関する研究活動を行っている。2022年の研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. 無機ナノ粒子をコアとする有機無機ハイブリッド dendriマーの創製(図1)

無機ナノ粒子を三次元的に規則配列させることは、無機ナノ粒子の特性のみならず、集合構造に由来する機能が発現する可能性がある。一方で、樹状高分子である有機 dendriマーのなかには、自発的に液晶構造を形成し、温度変化により熱的に液晶相転移するものがある。本研究では、液晶性有機 dendriマーにより半導体量子ドットや磁性ナノ粒子、形状異方性を有するロッド状ナノ粒子などの機能性無機ナノ粒子を表面修飾することで、無機ナノ粒子をコアとする“有機無機ハイブリッド dendriマー”の合成をおこなった。本年度は分岐オリゴチオフェン構造を有する半導体チオフェン dendriマーに着目し、オリゴチオフェンと量子ドット(QDs)からなる有機無機ハイブリッド dendriマーの合成をおこなった。オリゴチオフェンとQDsはどちらもフォトルミネッセンス(PL)を示す化合物であるが、得られたオリゴチオフェンQDs dendriマーは、QDs由来のPLが抑制され、チオフェン由来のPLが支配的であり、QDsからチオフェンにエネルギー遷移が生じたことが示唆された。本研究プロジェクトでは、国内のみならず、University of SheffieldやCase Western Reserve Universityなど国際的な共同研究を展開している。

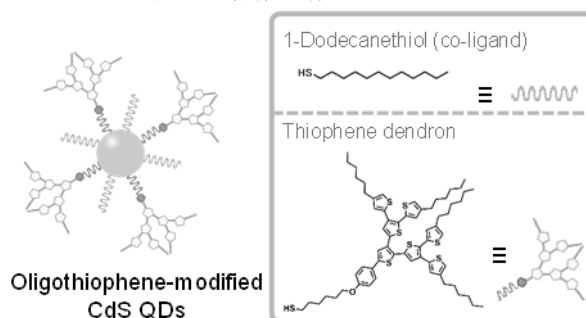


図1 QDsをコアとするオリゴチオフェン dendriマーおよび配位子の模式図。

### 2. ポリマー修飾磁性体 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ナノ粒子の磁場配列およびレオロジー特性解析(図2)

表面開始原子移動ラジカル重合 (SI-ATRP) は、ナノ粒子表面にラジカル重合の開始剤部位を固定化し、ナノ粒子表面から直接ポリマーを合成する手法で均一なポリマー修飾ナノ粒子が得られる。本研究では、SI-ATRPにより六角平盤状およびスピンドル形状であるような $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ナノ粒子表面からポリメタクリル酸メチ

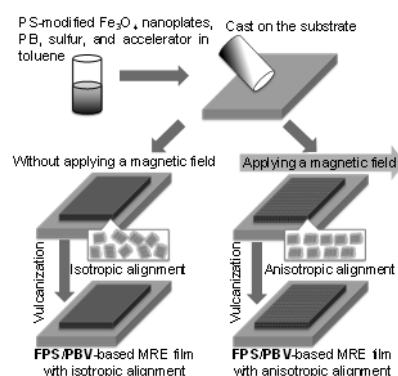


図2 ゴム中にPS修飾 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ナノプレートを添加した磁気粘性エラストマーの模式図。

ル (PMMA) またはポリスチレン (PS) を重合した。得られた形態制御ポリマー修飾 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ナノ粒子はイオン液体中およびゴム中で磁場により形状によらず一軸配向した。

### 3. ミストデポジション法による透明導電性酸化物薄膜の作製(図3)

透明導電性酸化物 (TCO) は、ガラスのような高い透明性と導電性を併せ持つ半導体化合物であり、液晶ディスプレイやタッチパネルの透明電極として広く利用されている。透明導電膜の作製には、ガラス基板上に低抵抗率な酸化インジウムすず (ITO) をスパッタリング法により堆積させているが、インジウム自体がレアメタルで埋蔵量が少なく、スパッタリングによるマテリアロスが大きいことから、新たな薄膜作製技術が求められている。本研究では、ITOやガリウムドープ酸化すず (GZO) のような透明導電性酸化物ナノ粒子および酸化チタン ( $\text{TiO}_2$ ) のような光触媒ナノ粒子を水に分散させ、アトマイザーによりミスト化してガラス基板上に堆積させることで緻密な膜を形成する“ナノ粒子ミストデポジション法”を開発した。放射光施設での小角・超小角放射光散乱測定により、ミスト中のナノ粒子の分散・凝集状態の解析をおこなった。

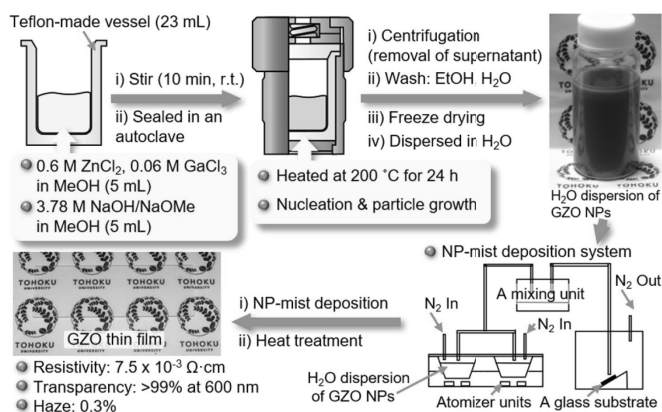


図3 GZOナノ粒子のソルボサーマル合成とミストデポジション法による透明導電膜の作製。

### 4. アミン誘導体化機能性イオン液体を用いた白金族元素の高効率・高選択的抽出(図4)

白金, パラジウム, ロジウムをはじめとする白金族元素 (PGMs) は豊かな文明社会を支える重要な元素であるが、可採埋蔵量が少ないため、いかに効率良く回収・再利用するかが鍵となっている。本研究では、揮発性がなく環境低負荷なイオン液体に着目し、官能基修飾によってそ

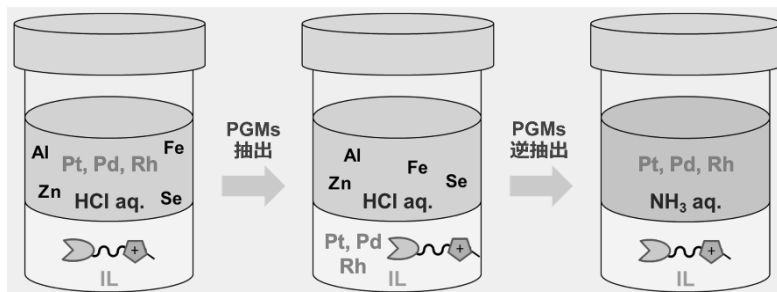


図4 イオン液体を用いた水相からのPGMs抽出。

の機能を精密に制御して、水相のPGMsを高効率かつ高選択的に抽出・逆抽出可能な溶媒抽出プロセスの確立を目指している。これまでの研究からアミノ基やアミド結合部位を有する疎水性官能基を付与することで、イオン液体により高効率でPGMsを抽出できることを見出している。また、逆抽出溶媒として、アニオン種の異なる種々の溶媒を検討し、効率的な逆抽出の手法の確立もおこなった。

その他、多元物質科学研究所内の各研究分野や、金属材料研究所、工学部、あるいは他大学や民間企業等と積極的に共同研究を行っており、学術的・実学的に意義のある研究の推進に努めている。

## 【研究活動報告】 ナノ機能物性化学研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：組頭 広志  
 講師：吉松 公平  
 助教：志賀 大亮 (～2022.3 教育研究支援者枠、2022.4～定員枠)、鈴木 博人 (2021.7～学際科学フロンティア研究所)  
 事務補佐員：高橋麻衣 (～2022.5)、千葉杏子 (2022.6～)  
 大学院生：神田龍彦 (D2)、長谷川直人 (D2)、宮崎悟 (M2 ～2022.3)、成田千春 (M2～2022.3)、  
 CHENG Xianglin (IGPAS M2～2022.9)、和田亜里斗 (M2)、中沢仁 (M2)  
 高田瀬那 (M1 2022.4～)、西翔平 (M1 2022.4～)、増竹悠紀 (M1 2022.4～)  
 学部学生：KIM Taehyun (AMC～2022.9)、Nathawuth WONGUTCHRANUKOUN (AMC2022.8～)

本研究分野では、放射光を用いた先端計測というナノスケールでの電子・スピン・軌道状態を可視化する技術を駆使することで、酸化物を基盤とした機能性ナノ物質について研究活動を行っている。酸化物の中には、高温超伝導や光触媒などの驚くべき機能物性を示すものがあり、これらをナノ構造化・ヘテロ構造化することにより、さらなる多機能性や新奇な機能物性の創成が期待される。そのため、レーザー分子線エピタキシー (MBE) という酸化物ナノ構造を原子レベルで制御しながら「つくる」技術と、放射光を用いた先端計測というナノスケールでの化学・電子状態を「みる」技術とを高いレベルで融合することにより、酸化物の類い希な物性を設計・制御しながら新しい機能性ナノ物質の開拓を推進している。さらには、酸化物ナノ構造を基盤として、有機物質や原子層物質などとのヘテロ構造を設計・合成することで、次世代エレクトロニクスに向けた新機能の創成を目指している。2022 年の研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. 薄膜を用いた $\text{Ti}_2\text{O}_3$ の金属絶縁体転移のメカニズム解明

典型的な遷移金属単純酸化物である  $\text{Ti}_2\text{O}_3$  は、温度幅の広い金属絶縁体転移 (MIT) を示し、MIT 前後で結晶の格子定数比 ( $c/a$  比) が大きく変化する。他の遷移金属酸化物が示す MIT とその振る舞いが大きく異なることから、 $\text{Ti}_2\text{O}_3$  の MIT のメカニズムに興味を持たれている。そこで、基板応力による格子自由度を利用することで  $c/a$  比を自在に変調させた  $\text{Ti}_2\text{O}_3$  薄膜を合成し、MIT メカニズムの解明を

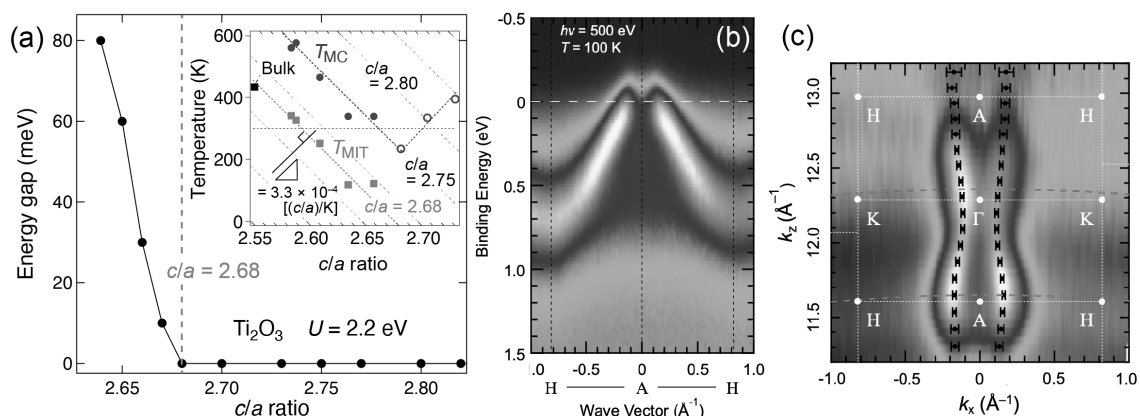


図 1 (a) 密度汎関数法で計算した  $\text{Ti}_2\text{O}_3$  におけるフェルミ準位上のギャップサイズと  $c/a$  比の関係。挿入図は抵抗率の温度依存性から決定した  $\text{Ti}_2\text{O}_3$  薄膜の  $c/a$  比と転移温度の関係。放射光角度分解光電子分光による  $\text{Ti}_2\text{O}_3$  薄膜の (b) A-H 方向のバンド分散と (c)  $\Gamma$ -K-H-A 面におけるフェルミ面。

指した。電気抵抗率の温度依存性から MIT 温度 ( $T_{MIT}$ ) を決定し、熱膨張率を考慮した  $c/a$  比に対してプロットしたところ、 $c/a=2.68$  の特定の格子変形度で MIT が発現する結果が得られた[図 1(a)挿入図]。また  $c/a$  比を変化させた  $Ti_2O_3$  に対して密度汎関数法による電子状態計算を行ったところ、 $c/a \geq 2.68$  でフェルミ準位 ( $E_F$ ) 上のギャップが閉じ、金属状態となる結果が得られた。実験と計算で MIT を示す  $c/a$  比がよく一致しており、このことから  $Ti_2O_3$  の MIT が結晶格子変形を起源とすると考察される<sup>[1]</sup>。

さらに MIT と密接に関係する  $E_F$  近傍の電子状態を明らかとするため、 $Ti_2O_3$  薄膜の放射光角度分解光電子分光 (ARPES) 測定を行った。その結果、明瞭なバンド分散[図 1(b)]やフェルミ面[図 1(c)]が観測され、 $Ti_2O_3$  の運動量空間における電子状態を初めて明らかにした<sup>[2]</sup>。ARPES 測定から決定したバンド構造は理論計算と定性的に良く一致し、電子状態の観点からも MIT の起源が格子変形であることを支持している。

**[1] Evidence of lattice deformation induced metal-insulator transition in  $Ti_2O_3$ ;** K. Yoshimatsu, S. Miyazaki, N. Hasegawa, and H. Kumigashira, *Phys. Rev. B* **106**, L081110 (2022).

**[2] Electronic band structure of  $Ti_2O_3$  thin films studied by angle-resolved photoemission spectroscopy;** N. Hasegawa, K. Yoshimatsu, D. Shiga, T. Kanda, S. Miyazaki, M. Kitamura, K. Horiba, and H. Kumigashira, *Phys. Rev. B* **105**, 235137 (2022).

## 2. 光誘起相転移を示す準安定な $\lambda$ 相 $Ti_3O_5$ の単結晶薄膜合成

$Ti_3O_5$  はパルスレーザー照射により準安定な  $\lambda$  相と最安定な  $\beta$  相との間で、永続的な光誘起相転移を示す。そのため、 $Ti_3O_5$  は光記録媒体への応用が期待されている。しかし  $\lambda$  相  $Ti_3O_5$  は準安定なため、ナノ粒子試料しか得られていない。そこで本研究では、速度論的平衡の強い薄膜形状を用いた  $\lambda$  相  $Ti_3O_5$  の単結晶合成を行った。図 2(a) に  $LaAlO_3$  (110) 基板上に合成した  $\lambda$  相  $Ti_3O_5$  薄膜の対称面 X 線回折パターンを示す。薄膜ピークは  $\lambda$  相  $Ti_3O_5$  の  $h00$  ( $h=2, 4, 6, 8$ ) 回折のみ観測され、面直(100)配向でエピタキシャル成長していることがわかる。非対称面 X 線回折測定から、薄膜は  $\lambda$  相  $Ti_3O_5$  [010] //  $LaAlO_3$  [001] の面内配向を持ち、 $\lambda$  相  $Ti_3O_5$  の単結晶合成が明らかとなった。図 2(b) の薄膜/基板界面の走査型電子顕微鏡像からは、基板直上から  $\lambda$  相  $Ti_3O_5$  に特有の Ti 原子によるハニカム構造が観測された。すなわち、準安定な  $\lambda$  相  $Ti_3O_5$  は界面中間層を形成せずに  $LaAlO_3$  基板上に直接成長していることを示している<sup>[3]</sup>。本研究で得られた大面積かつ単結晶の  $\lambda$  相  $Ti_3O_5$  薄膜試料を用いることで、光記録媒体への応用展開が期待される。

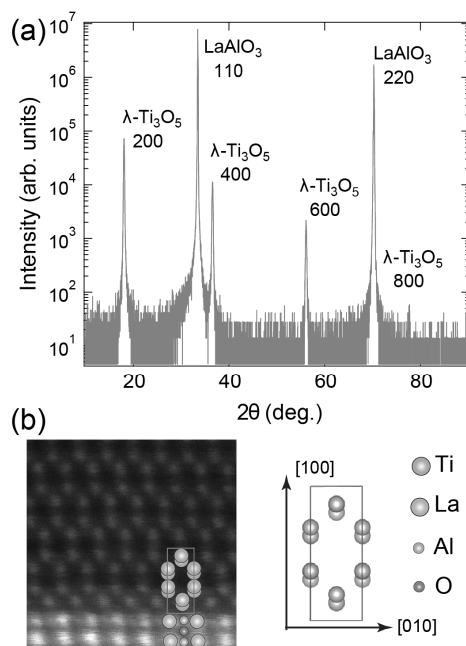


図 2  $LaAlO_3$  (110) 基板上に合成した  $\lambda$  相  $Ti_3O_5$  薄膜の (a) 対称面 X 線回折パターンと (b) 薄膜/基板界面の走査型電子顕微鏡像。

**[3] Direct synthesis of metastable  $\lambda$ -phase  $Ti_3O_5$  films on  $LaAlO_3$  (110) substrates at high temperatures;** K. Yoshimatsu and H. Kumigashira, *Cryst. Growth Des.* **22**, 703 (2022).

## 【研究活動報告】 無機固体材料合成研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：山根 久典

准教授：志村 玲子

助教：高橋 純一

大学院生：鈴木 岳人, 松尾 直樹, 本澤 柊人, 大坂 天心, 久野 優人, 油田 直也

本研究分野では、新規多元系金属酸化物や窒化物を固相反応法等で合成し、それらの結晶構造の解析や諸特性の評価を行うとともに、セラミックス素材の新たな合成法を研究している。2022年の研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. 酸素四面体網目構造の新規酸化物 $\text{LiBa}_2\text{AlO}_4$

酸素配位四面体の骨格構造を有する金属酸化物では、四面体内のカチオン原子の組み合わせにより様々な結晶構造が報告されている。配位四面体自体が対称心を持たず、これにより構成される構造全体でも対称心を持たないことが期待され、実際にこれらの金属酸化物で圧電特性や非線形光学効果を示すものが数多く見いだされている。当研究室では、昨年の  $\text{Li}_7\text{Ba}_3\text{Al}_3\text{O}_{11}$  に続き Li-Ba-Al-O 系で新たに  $\text{LiBa}_2\text{AlO}_4$  を見いだした。2 元系酸化物の混合原料圧粉体を  $900^\circ\text{C}$  で加熱して得られた部分熔融体から新規酸化物の単結晶粒が取り出され、X 線回折(XRD)法により三方晶系( $a = 5.7879(2) \text{ \AA}$ ,  $c = 13.2456(6) \text{ \AA}$ )で空間群が  $P3_121$  の結晶構造が明らかにされた(図 1)。この構造は、ペロブスカイト型酸化物( $\text{ABO}_3$ )の  $\text{BO}_6$  八面体が規則的に  $\text{LiO}_4$  と  $\text{AlO}_4$  の酸素四面体で置換された構造とみなすことができる。 $800^\circ\text{C}$  で合成された  $\text{LiBa}_2\text{AlO}_4$  の多結晶試料について室温、周波数 1 MHz で測定された比誘電率と誘電損失( $\tan \delta$ )は、それぞれ 8.3 と 0.004 であった。 $\text{LiBa}_2\text{AlO}_4$  は石英の 4.5 倍の第二次高調波発生(SHG)強度を示した。

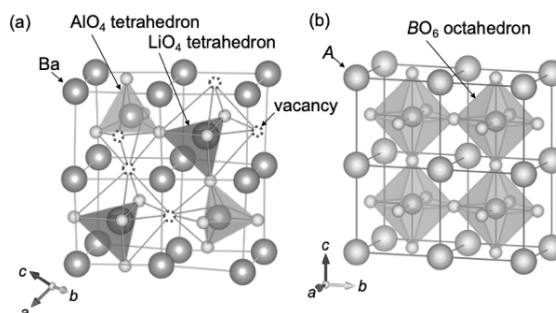


図 1 (a)  $\text{LiBa}_2\text{AlO}_4$  の結晶構造と(b)  $\text{ABO}_3$  ペロブスカイト型構造。

### 2. ダブルペロブスカイト型類似構造を持つタングステン酸塩 $\text{Sr}_9\text{La}_2(\text{WO}_6)_4$

$A_9\text{Ln}_2\text{W}_4\text{O}_{24}$  ( $A$ :アルカリ土類金属元素; $\text{Ln}$ :希土類元素)は蛍光体の母結晶として注目されており、 $\text{Eu}^{3+}$ などの希土類元素を添加した試料の発光特性に関する様々な研究がなされている。当研究室では、アルカリ土類金属元素と希土類元素を含有したタングステン酸塩の系で新規相の探索を行ってきた。本年度は、未解明であった  $\text{Sr}_9\text{La}_2(\text{WO}_6)_4$  の結晶構造を XRD 法により明らかにするため、混合原料粉末の圧粉成型体を  $1200^\circ\text{C}$  で加熱後、 $1400^\circ\text{C}$  での結晶粒成長で単結晶を作製した。構造解析の結果、格子定数が正方晶系  $a = 11.6365(6) \text{ \AA}$ ,  $c = 16.3040(8) \text{ \AA}$ , 空間群が  $I4_1/a$  で、2つの W サイトが孤立した酸素 8 面体の中心で O により 6 配位され、4つの Sr/La の混合サイトがこれらの酸素八面体( $\text{WO}_6$ )の O により 8-12 配位されていることが示された。この結晶構造では Sr/La<sub>2</sub>, Sr/La<sub>3</sub>, Sr/La<sub>4</sub> と(1/2, 3/4, 1/8)にある空孔(□)で構成される(Sr/La, □)<sub>8</sub> の単純格子内に Sr/La<sub>10</sub> 多面体と  $\text{WO}_6$  八面体が交互に配置しており、ダブルペロブスカイト型構造との対応関係が示された。類似の結晶構造の説明は  $\text{Sr}_9\text{Gd}_2(\text{WO}_6)_4$  ( $Fm-3$ ),  $\text{Ba}_9\text{La}_2(\text{WO}_6)_4$  ( $Fm-3$ ),  $\beta\text{-Sr}_3\text{WO}_6$  ( $C1$ )や  $\alpha\text{-La}_2\text{WO}_6$  ( $Pm2_1n$ )

などでもなされている。1200 °Cの加熱で  $\text{Sr}_9\text{La}_2(\text{WO}_6)_4$  の  $\text{La}^{3+}$  の一部を  $\text{Eu}^{3+}$  で置換した試料が得られ、置換率 20 mol%の試料では波長 465 nm の青色光励起により赤色発光の 618 nm にピークを持つ狭帯域のスペクトルが観測された。

### 3. 新規 Eu 付活 Sr-B-Al-Si-N 系赤色蛍光体の合成と結晶構造

近紫外や青色の発光ダイオード光で励起が可能な蛍光体の母体材料に適した新規窒化物の探索が続けられている。本研究では、Sr-B-Al-Si-N 系において、二元系窒化物の混合粉末を圧力 0.85 MPa の  $\text{N}_2$  ガス雰囲気下、2030 °C で 4 h 加熱することにより、三次元骨格構造が  $\text{BN}_3$  三角形と  $(\text{Al}/\text{Si})\text{N}_4$  四面体により形成される新たな窒化物  $(\text{Sr}_{0.93}\text{Eu}_{0.07})_{11}\text{B}_2(\text{Al}_{0.275}\text{Si}_{0.725})_{40}\text{N}_{59}$  (単斜晶系,  $a = 5.6836(4)$  Å,  $b = 46.772(3)$  Å,  $c = 5.6845(4)$  Å,  $\beta = 118.028(2)^\circ$ ) の単結晶が合成された。新規窒化物単結晶の光学顕微鏡写真を図 2(a) に示す。単結晶は淡橙色、薄板状で、長辺の長さは 100~200  $\mu\text{m}$  であった。EPMA で B を除く金属元素の含有量を分析し、TOF-SIMS 分析で結晶構造内の B の存在を確認した。単結晶粒子を波長 450 nm の光で励起したところ、赤色の発光が観測され、波長 616 nm にピークを有し、半値幅が 106 nm の発光スペクトルが得られた(図 2(b))。この赤色発光の最強ピーク強度は温度の上昇とともに減少し、25 °C の値に対し 200 °C で 30 %, 300 °C で 11 % になった。

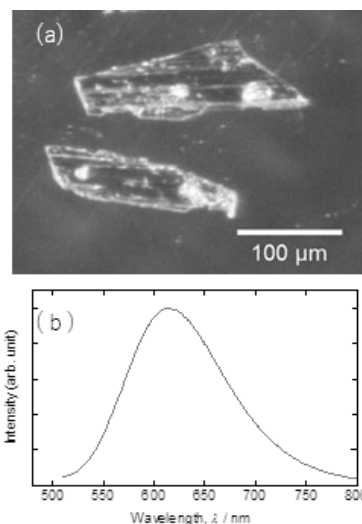


図 2 新規窒化物の単結晶の(a)光学顕微鏡写真と、(b)励起波長 400 nm の光照射で測定された蛍光発光スペクトル。

### 4. $\beta$ - $\text{Si}_3\text{N}_4$ 板状ウィスカーの作製

ウィスカーやナノワイヤー、ナノベルトなど様々な形状の  $\text{Si}_3\text{N}_4$  が直接窒化法や炭素還元窒化法、ジイミド分解法などの方法で合成され、ウィスカー強化セラミックスへの利用の他に、光機能材料や光触媒などへの応用が検討されている。本研究では、 $\alpha$ - $\text{Si}_3\text{N}_4$  と  $\text{B}_2\text{O}_3$  粉末の混合物を  $\text{N}_2$  ガス中、2150 °C で 1 min 加熱することにより無色透明な板状ウィスカーが合成された。板状ウィスカーの長さは最大で 2 mm、幅およそ 10  $\mu\text{m}$ 、厚さ 0.2~0.3  $\mu\text{m}$  で、図 3 に示すように、その先端が細く尖ったものと、先端部分が板状のものが得られた。単結晶 XRD 法により、いずれのウィスカーとも  $\beta$ - $\text{Si}_3\text{N}_4$  (六方晶系  $a = 7.6047(2)$  Å,  $c = 2.90520(10)$  Å) で、 $c$  軸方向に成長していることが示された。ウィスカーの板面は(1-20)で、先端部に成長した板面は(2-10)であった。板状  $\text{Si}_3\text{N}_4$  ウィスカーはしなやかで容易に変形させることができ、板面の方向にほぼ 180°曲げることができた。このときの曲率はおおよそ 170  $\mu\text{m}$  であった。

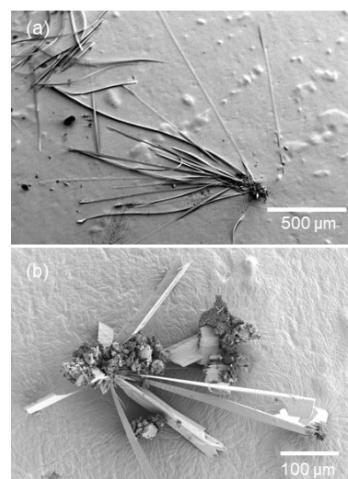


図 3 (a) 先端が尖った  $\beta$ - $\text{Si}_3\text{N}_4$  ウィスカーと(b)先端に板状結晶がついた  $\beta$ - $\text{Si}_3\text{N}_4$  ウィスカーの走査型電子顕微鏡写真。



**【研究活動報告】 金属機能設計研究分野 (2022.1~2022.12)**

教授 : 亀岡 聡  
講師 : 藤田伸尚  
技術職員 : 大橋 諭  
技術補佐員 : 村田聡子  
事務補佐員 : 湯蓋典子  
大学院生 : M2: 岡元駿之介、加藤大暉、黒須望実  
M1: 佐々木和香、須崎泰成、千須和寛輔

本研究分野では、金属学に基づく視点から新たな構造と機能を有する金属・合金に関する基礎研究および材料開発を行っている。大学院前期課程(工学研究科 材料システム工学専攻)の M2: 岡元駿之介、加藤大暉、黒須望実、M1: 佐々木和香、須崎泰成、千須和寛輔が在籍した。また、附田良太が 2022.3 に博士(工学)の学位を取得した。

本研究分野における 2022 年の活動を概括すると以下の通りである。

**1. CeNi<sub>2</sub>の水素吸蔵特性とアセチレン水素化触媒反応**

水素吸蔵合金は水素を吸蔵することでその電子状態が変化し、これまでにない触媒能を発現することが期待されており、その応用の一つとして触媒材料に関する研究が行われている。CeNi<sub>2</sub>は C15 型のラーベス相合金であり、水素を吸蔵すると同時に、結晶からアモルファスへの変態を生じる。すなわち、水素吸蔵に伴い電子状態だけではなく、原子配列も同時に変化させることができるユニークな材料である。アモルファス相の CeNi<sub>2</sub>H<sub>x</sub>が規則相の CeNi<sub>2</sub>よりも不飽和炭化水素 (C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>)の水素化触媒活性が高いことが報告されている。しかし、先行研究では試料を大気中で扱っていたことから、表面酸化の影響が考慮されていないことや、試料の整粒もされていないため、適切な特性評価が行われていない可能性があった。そこで本研究では、CeNi<sub>2</sub>の C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>水素化触媒活性に関して、水素誘起アモルファス化や表面酸化の影響を考慮したより詳細な調査を行った。CeNi<sub>2</sub>は Ar 雰囲気下のアーク溶解で作製した。溶解後の試料に 550 °C、72 時間の均質化の熱処理を施した。結晶構造、組成の分析には、X 線回折および ICP 発光分析法を用いた。触媒試験は、固定床流通式反応装置を用いて、2% C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> / 18% He / 80% H<sub>2</sub> の混合ガスを 30 sccm で試料に導入し、200 °C までの温度域で行った。生成物の分析にはガスクロマトグラフを使用した。比表面積の測定には BET 法を、表面分析には XPS を用いた。はじめに、試料を大気に曝すことなく、グローブボックス内で 25-63 μm に整粒し、触媒試験を行った。次に、大気中で 25-63 μm に整粒した CeNi<sub>2</sub>と 0.35 MPa の水素圧下でアモルファス化させ、後に大気と接触させた CeNi<sub>2</sub>H<sub>x</sub>の触媒特性の評価を行った。作製した CeNi<sub>2</sub>は C15 型のラーベス相に起因する X 線回折パターンを示した。また、ICP による組成は CeNi<sub>1.99</sub>であった。グローブボックス内で調整した CeNi<sub>2</sub>は、200 °C までの触媒試験で活性を示さなかった。反応後の X 線回折パターンより、CeNi<sub>2</sub>は、触媒試験中に水素誘起アモルファス化を生じていたが、触媒活性を示すことはなかった。つまり、水素誘起アモルファス化により触媒作用が発現するのではないことが明らかになった。一方で、大気と接触したアモルファス相の CeNi<sub>2</sub>H<sub>x</sub>および規則相の CeNi<sub>2</sub>はどちらも C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>水素化に触媒活性を示した(図 1)。このことから、触媒活性は、表面酸化相が担っていることが明らかとなった。図 1 より大気と接触したアモルファス相の CeNi<sub>2</sub>H<sub>x</sub>は規則相の CeNi<sub>2</sub>よりも高い触媒活性を示した。この結果は、先行研究の結果と一致した。触媒特性の違いは、アモルファス相の CeNi<sub>2</sub>H<sub>x</sub>が

規則相の  $\text{CeNi}_2$  よりも微細な表面酸化相を形成するためであると考えられる。なお、この成果は、Materials Transactions 誌に掲載された (R. Tsukuda et al., *Mater. Trans.*, **63** (2022) 343-350.)。

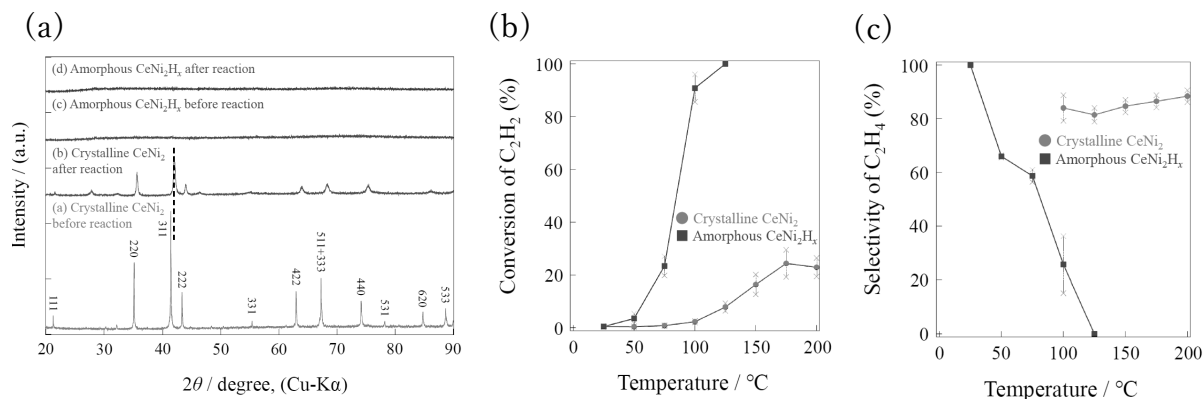


図 1:  $\text{CeNi}_2$  における各種観測結果:(a) XRD、(b)  $\text{C}_2\text{H}_2$  水素化転化率、(c)  $\text{C}_2\text{H}_4$  選択率。

## 2. Al-Pd-Ru ハイパーマテリアルを前駆物質とした非平衡 Pd-Ru 合金の形成

本研究では、ハイパーマテリアルの代表格である準結晶・近似結晶合金の触媒材料への応用展開を目指し、表面構造と触媒特性(“実条件下”での)の相関性を評価・解析することを目的としている。今回、Icosahedral 型 Al-Pd-(Ru, Fe)系準結晶・近似結晶をターゲット材料として、触媒材料としての可能性を探った(①前駆物質としての検討、②準結晶・近似結晶触媒としての検討)。 $\text{Al}_{71}\text{Pd}_{19}\text{Ru}_{10}$  (IQC),  $\text{Al}_{72}\text{Pd}_{16.4}\text{Ru}_{11.6}$  ( $\text{P}_{40}$ ),  $\text{Al}_{70.4}\text{Pd}_{14.7}\text{Ru}_{14.9}$  ( $\text{C}_1$ )を作製し、これらに対して各種触媒反応試験( $\text{CO}$ 酸化反応:  $\text{CO} + 1/2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$ 部分水素化反応:  $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4$ )を行った。また、反応前後の試料に対し適宜キャラクタリゼーション(XRD, XPS, SEM-EDS, TEM, ICP etc.)を行った。

各種 Al-Pd-Ru 系試料を粉砕・微粉末化(20-75  $\mu\text{m}$ )し、20wt% NaOH 水溶液中でリーチング処理(室温, 24h)を行った。これら試料に対して、リーチング処理前・後での XRD 測定を行った結果を図2に示す。リーチング処理により、母合金の回折ピークは消失し、Pd および Ru に起因するブロードなピークに変化した。この結果は、IQC,  $\text{P}_{40}$ ,  $\text{C}_1$  相から形成した Pd-Ru 合金は Pd と Ru が原子レベルで互いに交じり合った状態になっていることを示している。ここで興味深い点は、バルク金属において Pd と Ru は固溶体や金属間化合物を形成しな

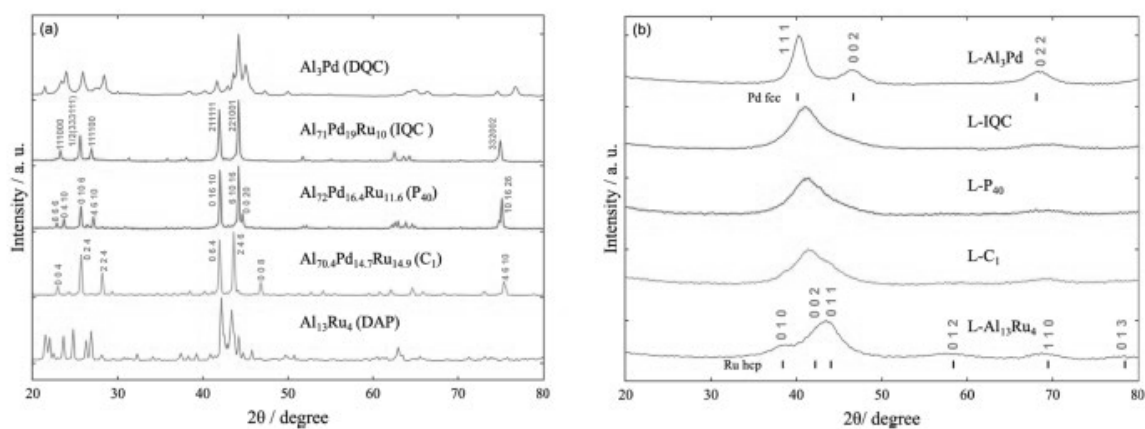


図 2: 各種 Al-Pd-Ru 系準結晶・近似結晶試料の XRD パターン:(a)リーチング処理前、(b)リーチング処理後。

い非固溶系であることから、過飽和固溶状態の Pd-Ru 合金がどのような触媒特性を示すかに興味を持たれ、CO 酸化反応を行った。その結果、L-P<sub>40</sub> > L-C1 > L-IQC > L-DAP > L-DQC となり、P<sub>40</sub>相から作製した Pd-Ru 合金が最も高い CO 酸化活性を示すことが判った。このことは、CO 酸化において、Pd と Ru の役割が異なることから Pd/Ru 比率に最適値が存在すると推察できる。Pd/Ru 比を制御できる触媒合金前駆物質として Al-Pd-Ru 系は有効であると考えられる。なお、この成果は、J. Physics, Conference Series 誌に掲載予定である (T. Fukushima et al., *J. Phys. Conf. Ser.*, in press.)。

### 3. Al-Pd-Mn-Fe 系高次近似結晶の単結晶育成条件の調査

前年度までの調査では、正二十面体準結晶 Al<sub>70</sub>Pd<sub>20</sub>Mn<sub>10</sub> における Mn を Fe で部分置換すると、Al<sub>70</sub>Pd<sub>20</sub>Mn<sub>5</sub>Fe<sub>5</sub> の組成で約 40 Å の格子定数を持つ高次の立方晶近似結晶に転化することを見出した[1]。この高次近似結晶の電子回折図形から、Al-Pd-Cr-Fe 系、Al-Pd-Mo-Fe 系および Al-Pd-Ru 系において我々が既に構造解析を行った高次近似結晶[2-4]と同型構造であることが示唆されている。しかし、単結晶の育成条件が分かっていないため、構造解析はまだ行われていない。高次近似結晶の形成組成を持つ合金を高温で融解し徐冷した場合には、高融点の不純物相が先に析出し目的相の粒成長が阻害される。そこで本研究では、近似結晶の組成より Al-rich 側にずらした組成域で液相との共存状態を狙い、単結晶の育成条件を探索した。その際、Mn を Fe で過度に置換すると不純物相である ε 相が安定化するため、その融点 (Al-Pd-Fe 系では >930°C) が近似結晶の融点と競合しないように組成条件を変えながら探索を行った。

様々な仕込み組成を用いた条件探索の結果、組成 Al<sub>72</sub>Pd<sub>20</sub>Mn<sub>4</sub>Fe<sub>4</sub> の合金を 920°C で等温熱処理した場合に、明瞭なファセットを持つ直径 ~50 ミクロン程度の近似結晶の単結晶粒が得られることを見出した (図 3 は SEM 画像)。また、得られた試料に対する DTA 測定から、この組成では近似結晶の融点は約 930°C、ε 相の融点は約 900°C であり、920°C の等温熱処理では近似結晶と液相の共存状態が実現することで単結晶の成長が促されたことが分かった。今後、熱処理条件を最適化によりさらに大きなサイズの単結晶粒を作製し、単結晶 X 線回折による構造解析を目指している。

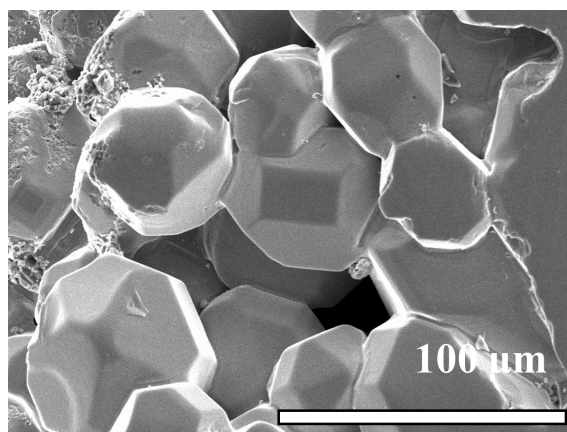


図 3: Al-Pd-Mn-Fe 系高次近似結晶の単結晶.

[1] 福島武, 修士論文 (2020 年度, 東北大学).

[2] N. Fujita, H. Takano, A. Yamamoto & A.-P. Tsai, *Acta Cryst. A* **69**, 322-340 (2013).

[3] Y. Hatakeyama, N. Fujita & A.-P. Tsai, *J. Phys. Conf. Ser.* **809**, 012007 (2017).

[4] N. Fujita & M. Ogashiwa, *Mater. Trans.* **62**, 329-337 (2021).

### 4. 二重化 Ammann-Kramer-Neri タイリングに関する研究

Ammann-Kramer-Neri (AKN) タイリング[1-3]は二種類の菱面体 (鋭角菱面体と鈍角菱面体) から成る、正 20 面体対称性を持つ 3 次元の準周期タイリングであり、正 20 面体準結晶の基本的特性を理論化するための標準模型として用いられている[4]。しかし、その自己相似性やマッチングルールなど、いくつかの基本的性質はま

だ完全には明らかにされていない。本研究では、AKN タイリングの頂点集合とその双対集合を足し合わせた頂点集合を持つ二重化 AKN タイリングと呼ぶ補助的構造を導入し、その基本的性質を明らかにすることで AKN

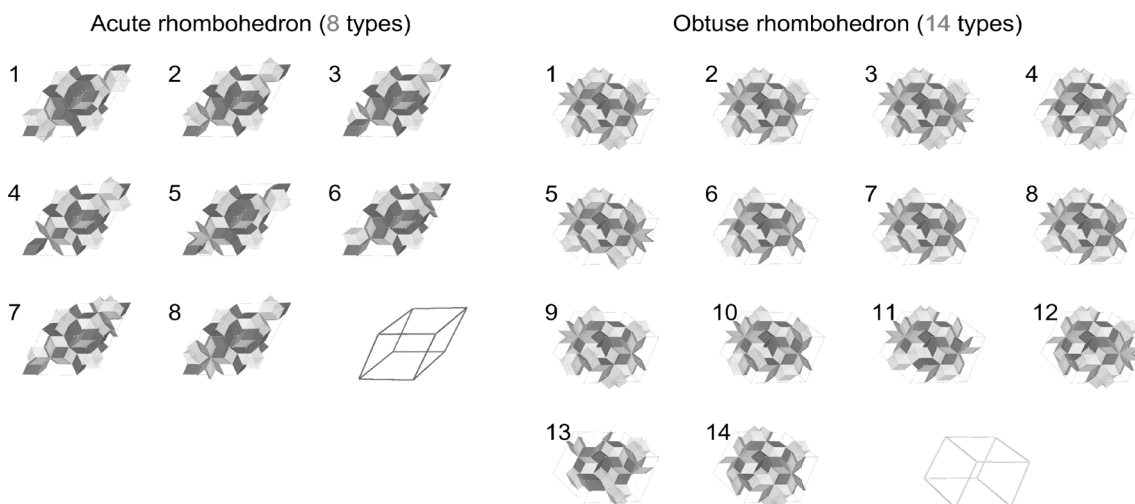


図 4: AKN タイリングの  $\tau^3$  倍の自己相似変換に対する鋭角菱面体および鈍角菱面体の変換様式.

タイリングに関する未解決の問題を解決することを目指している。二重化 AKN タイリングの自己相似比は黄金比  $\tau$  (約 1.618) で与えられ、AKN タイリングのそれが  $\tau^3$  (約 4.236) であるのに比べて十分に小さいことから、はるかに単純な自己相似変換規則を持つことが期待される。昨年度は二重化 AKN タイリングの基本タイルが 11 種類の多面体セルであり、それが 6 種類の辺、8 種類の面を持つことを明らかにした。本年度は各タイルに対する  $\tau$  倍の自己相似変換の解析を進めた結果、各セルを  $\tau$  倍に拡大したのちに新しい頂点を生成する位置を決定する規則を見出した[5]。また、この変換を応用した解析により、AKN タイリングにおける鋭角菱面体および鈍角菱面体の  $\tau^3$  倍の自己相似変換において、各菱面体の局所環境に依存してそれぞれ 8 種類および 14 種類の変換様式が存在することを見出した(図 4)。

- [1] A. L. Mackay, *Sov Phys. Crystallogr.* **26**, 517-522 (1981).
- [2] P. Kramer & R. Neri, *Acta Cryst. A* **40**, 580-587 (1984).
- [3] M. Duneau & A. Katz, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2688-2691 (1985).
- [4] C. L. Henley, *Phys. Rev. B* **34**, 797-816 (1986).
- [5] N. Fujita, *J. Phys. Conf. Ser.*, accepted for publication.

## 【研究活動報告】環境無機材料化学研究分野 (2022.1~2022.12)

教 授：殷 澍

助 教：長谷川 拓哉<sup>(2021.10.1より講師)</sup>、大川 采久

事務補佐員：五十嵐 さとみ

客員研究員：曾 巍<sup>(2022.9~2023.9)</sup>

大学院生：王 靖雯<sup>(D3, ~2022.9)</sup>、薛 羿貝<sup>(D2)</sup>、苗 磊<sup>(D1)</sup>、半谷 泰生<sup>(M2)</sup>、吉澤 千夏<sup>(M2)</sup>、  
楊 明洋<sup>(M2)</sup>、下田 崇史<sup>(M1)</sup>、野田 紗伽<sup>(M1)</sup>、高宮 尚太<sup>(M1)</sup>、  
Rini LARASATI<sup>(M1)</sup>

学部学生：高橋 祐希<sup>(B4)</sup>、佐藤 拓弥<sup>(B4)</sup>

ソルボサーマル反応等の環境にやさしいプロセスを中心に、無機機能性化合物の合成と機能向上を目指している。無機材料の機能性は、化学組成・粒子サイズ・比表面積・粒子形態・結晶面等に強く依存することが知られている。材料の形態・結晶化度・結晶構造・粒子サイズと分布の精密制御を行い、環境調和・エネルギーの高効率利用・フォトンや化学物質による環境応答等の無機機能材料の創製及び機能性高度発現に関する研究を展開している。

### 1. 溶融塩修飾窒化炭素に基づく超高感度室温トルエンセンサー

溶融塩法を利用し、二次元結晶性 $C_3N_4$ (CCN)を空気中でのジシアンジアミドの自己縮合反応を促進することにより得られた。通常加熱で得られた縮合 $C_3N_4$ (PCN)( $9.8 \text{ m}^2/\text{g}$ )と比較し、CCNは大きな比表面積( $77.1 \text{ m}^2/\text{g}$ )と優れた結晶性を有する。さらに、空気中におけるCCNの抵抗は $40 \text{ M}\Omega$ であり、縮合した $C_3N_4$ (PCN)の抵抗( $\sim 50000 \text{ M}\Omega$ )の $1/1250$ である。また、PCNベースのガスセンサーでは、室温の $50 \text{ ppm}$ トルエンガスを導入する際に応答を示さないことに対し、CCNベースのガスセンサーの応答値は $350$ という高い値に達した。CCNベースのガスセンサーが優れたサイクル特性を備えており、60日間或は25サイクル連続して動作した後でも、ガス応答値( $R_g/R_a$ )は $350$ 程度に維持でき、それはCCNの優れた結晶性、最適化された $\pi$ 共役系、増強された層間ファンデルワールス力に由来したと思われる。さらに、窒化炭素の結晶化度がガス応答感度に対する影響についても明らかにし、トルエンガスに対する優れたガスセンシング選択性を示した(Fig.1)。

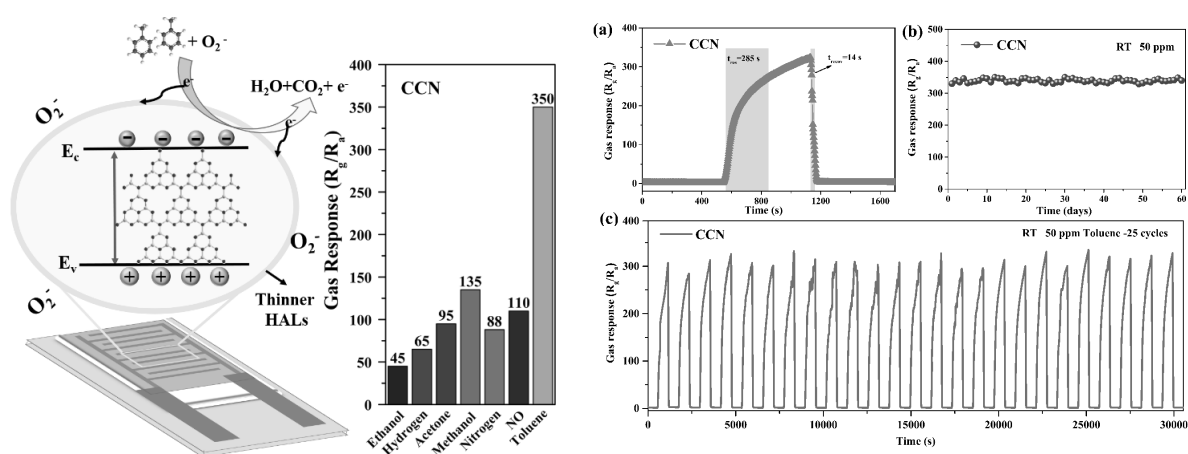


Fig. 1 溶融塩修飾窒化炭素に基づくガスセンサー選択性とサイクル特性

2. SnO-SnO<sub>2</sub>修飾二次元層状MXene Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>の室温アセトンガスセンサー機能

トルエンやアセトン等の揮発性有機化合物(VOC)の迅速的検出は急務である。CuOやSnO<sub>2</sub>等の半導体型センサー材料は、VOCに対する幅広い応答性を示すが、作動温度が高く、応答値が小さく、応答/回復速度が遅く、耐久性が低いという欠点がある。我々は、静電自己組織化による層状化合物Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>(MXene)コンポジットを創製し、二次元複合イオン化合物を用いた環境応答機能開拓について検討した。水熱プロセスによって、約7nmの酸化物ナノ粒子を層状化合物Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>の表面や層間に均一に分散したハイブリッドヘテロ構造の形成に成功し、CuO/Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>はより優れたトルエンガス選択性・応答速度とセンシング性能とを示した。また、SnO-SnO<sub>2</sub>(p-n接合)もMXeneとのナノコンポジットを同様にワンステップ水熱法で合成することに成功し、水熱条件下では、p型SnOの一部が酸化されてn型SnO<sub>2</sub>になり、p-n接合が形成された。サンドイッチ構造を有するSnO-SnO<sub>2</sub>/Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>センサーは、作動温度が大幅に低下し、室温における優れたアセトンガスセンシング機能を示した(Fig.2)。層状化合物MXeneを用いた二次元複合イオン化合物は優れた環境応答性能を示し、VOCガス検知用新規材料として期待される。

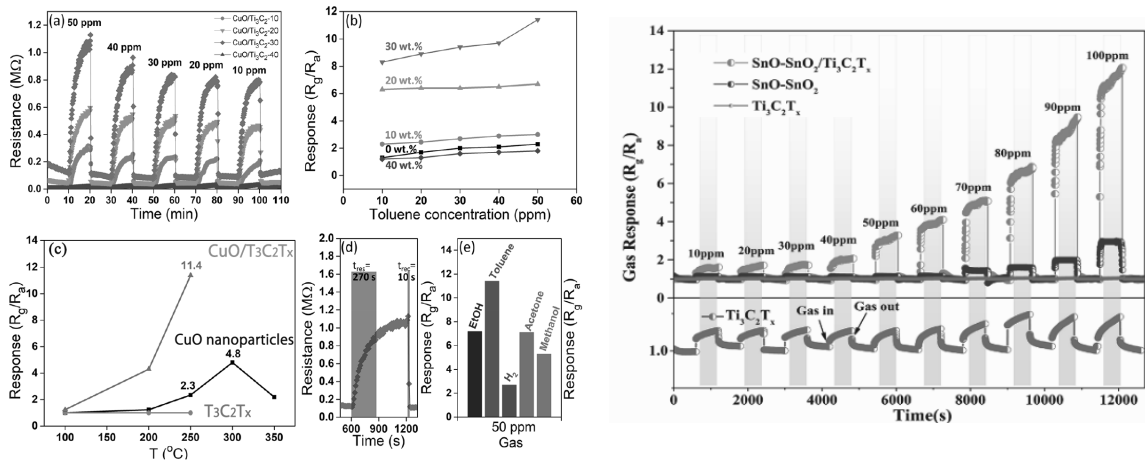


Fig. 2 Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXeneコンポジット((左)CuO/Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>;(右)SnO-SnO<sub>2</sub>/Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>)のガスセンシング機能

3. (Ti, C)-BiOBr/Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXeneナノコンポジットの優れた可視光誘起光触媒NO<sub>x</sub>分解

ソルボサーマル反応を用い、BiOBr/2DTi<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXeneコンポジットの合成を成功した。Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>の部分分解により、BiOBr/Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>ナノコンポジットのinsituドーピングを実現した。(Ti,C)-BiOBr/Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>ナノコンポジットは10分の短い時間で約61%のdeNO<sub>x</sub>光触媒活性を実現し、元のBiOBrおよびP25チタニア光触媒を上回り、複数サイクル後にも安定した性能を維持できることが分かった。

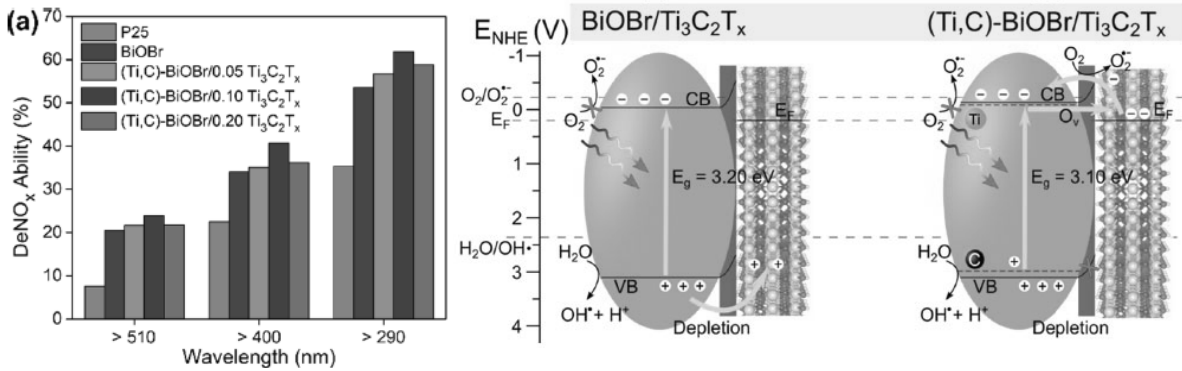


Fig. 3 BiOBr/2DTi<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXeneコンポジットの光触媒活性と光触媒反応メカニズム

#### 4. コロイド合成法によるBiVO<sub>4</sub>光触媒の合成:

コロイド合成法は、目的物の原料である化合物を有機溶液と水溶液にそれぞれ溶解した後、それらを混合して合成する粉末合成法である。本研究では、コロイド合成法において有機溶媒が BiVO<sub>4</sub> の形態に与える影響および、粒子形態が光触媒活性に与える影響を調査した。有機溶媒を用いた場合でも monoclinic 型 BiVO<sub>4</sub> の合成が確認された。オレイン酸(OAc)やオレイルアルコール(OAl)を用いた場合、マイクロサイズの粒子が確認され、一方、オレイルアミン(OAm)の場合は、ナノサイズの星型形態を有する BiVO<sub>4</sub> が得られた。これは、添加溶媒の官能基の Bi との相互作用の違いによると考えられる。カルボキシ基やヒドロキシ基の存在下では Bi を十分に分散させることが出来ず、OAm の持つアミノ基が Bi の分散安定性を向上させたことで、特徴的な星形結晶が生成したと推測される。OAm を用いた場合、比表面積が最大であり、最も高いローダミン B(RhB)の光触媒的分解能を示すことが確認された。

#### 5. WS<sub>2</sub>-WO<sub>3</sub>液相酸化合成及びガスセンシング機能評価

タングステンの酸化物と硫化物である WO<sub>3</sub> と WS<sub>2</sub> がガスセンシング材料として期待されている。さらに、WS<sub>2</sub> と WO<sub>3</sub> の混合体や複合体は、それぞれ p 型半導体と n 型半導体で構成され、p-n 接合によってガスセンシング能が大幅に向上することが期待される。本研究は、ソルボサーマル法に基づく WS<sub>2</sub> の液相酸化により、WS<sub>2</sub>-WO<sub>3</sub> を合成することに成功した。エタノール及び水の混合溶媒の組成及び加熱温度によって酸化物の結晶相及び粒子形態を制御できる可能性が明らかとなった。WS<sub>2</sub> を前駆体として、溶媒の組成や反応温度が酸化挙動や WO<sub>3</sub> の結晶相、粒子形態に与える影響を調査した。また、得られた WS<sub>2</sub>-WO<sub>3</sub> の室温かつ UV 照射条件下でのガスセンシング能を評価した。水分率が 35 vol%、加熱温度 210 °C で合成したサンプルは NO ガスに対して高い応答値を示し、ガス応答選択性も向上したことが明らかになった。

#### 6. 新規タングステン含有層状ペロブスカイト化合物の合成とエレクトロクロミック機能

エレクトロクロミック (EC) 材料には、従来、WO<sub>3</sub> に代表される単純な酸化物材料が用いられてきたが、元素間の相乗効果が期待できないため、近年注目されている多機能 EC 材料には適していない。そこで、多機能 EC 材料の開発に向けて、タングステン含有層状ペロブスカイトを新たに合成し、その光学特性を評価した。X 線回折および X 線吸収微細構造解析の結果、新たに発見したタングステン含有層状ペロブスカイト Bi<sub>2</sub>Na<sub>0.5</sub>La<sub>0.5</sub>TiWO<sub>9</sub> および Bi<sub>2</sub>LaTi<sub>1.5</sub>W<sub>0.5</sub>O<sub>9</sub> は斜方晶系で Aurivillius 型層状ペロブスカイト構造をとることが分かった。既知の Aurivillius 型 Bi<sub>2</sub>W<sub>2</sub>O<sub>9</sub> を含む 3 種類のペロブスカイトを用いて作製した EC デバイスは、電圧非印加時には可視光領域に吸収がないのに対し、+4.5 V の電圧印加時には可視光全域で黒色に吸収されることが確認された。さらに、-4.5 V の電圧を印加すると、透過率は初期状態と同じレベルまで回復し、可逆的な EC 機能があることがわかった。この反応では、ペロブスカイト骨格中のタングステンだけが酸化還元活性種として働き (W<sup>6+</sup>/W<sup>5+</sup>の酸化還元)、他の金属イオンは酸化還元されなかった。この EC 材料をサイクリックボルタンメトリーで電気化学的に分析したところ、還元では-0.2~0.4 V、酸化では+0.1~+0.3 V にそれぞれ酸化還元ピークが観測された。興味深いことに、酸化還元電位はペロブスカイト中の W の含有量と直線的に関連しており、化学組成制御によって調整できることが示された。EC デバイスの発色効率は、調製したペロブスカイト型 EC デバイスで 37.1 cm<sup>2</sup>/C と最高の性能であり、これは WO<sub>3</sub> の典型的な EC 材料と同等である。

#### 7. 色彩制御可能なニオブ酸-タンタル酸セリウム層状ペロブスカイト固溶体の創成

これまでに発見したセリウムを導入した層状ペロブスカイト RbCeTa<sub>2</sub>O<sub>7</sub> は、Ce4f と遷移金属 d 軌道間の金属間電荷移動 (MMCT) 遷移による特異な光吸収を示し、従来の発色機構とは異なる独特の淡緑色の発色を示す。ペロブスカイトユニットに Nb を置換した [Ce(Ta,Nb)<sub>2</sub>O<sub>7</sub>] 層状ペロブスカイトを作製し、それらの結晶構造および光吸収機構を調べた。リートベルト解析と EXAFS 解析により、これ

らの構造は Dion-Jacobson 型層状ペロブスカイトであり、固溶体の発色はニオブ置換量の増加に伴い、淡緑色から暗赤褐色へと変化した。このようなニオブ置換量による固溶体の淡緑色から暗赤褐色へのユニークな着色状態変化挙動は、他の層状ペロブスカイト類似体 (La や Pr 類似体など) では観察されないものである。密度汎関数法に基づく第一原理計算の結果、バンド構造の変化が発色調節の重要な因子であることがわかった。さらに、セリウム系層状ペロブスカイトの特異な機能であるペロブスカイト層の電荷変調による酸化還元能力についても、ニオブ酸[CeNb<sub>2</sub>O<sub>7</sub>]-ペロブスカイト層で調べた結果、積層方向と面内方向に異なる構造変化を伴う Ta 類縁体と同様の異方的格子変化を示すことが分かった。それに伴う電子構造の変化により、光吸収が明確に変化し、暗褐色から黄色へと着色状態が劇的に変化した。



## 【研究活動報告】 物質変換無機材料研究分野 (2022. 1~2022. 12)

教授：加藤 英樹

助教：吉野 隼矢

技術補佐員：大久保 孔明

大学院生：秋山 真之介, 洪 培瑄, 森下 直人, クルトタンヤー, 清宮 亮汰,  
山谷 陽

学部学生：進藤 秀麻, 宮下 智臣

本研究分野では、物質変換反応を駆動する無機材料について、新規材料開拓及び合成プロセス・各種修飾を駆使した高機能化について研究を行っている。2022年の研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. Ba 導入による SrTaO<sub>2</sub>N 光触媒の高活性化

太陽光エネルギーを利用した水素製造法として光触媒を用いた水分解が注目されている。酸窒化物光触媒である SrTaO<sub>2</sub>N は可視光の 600 nm 付近の波長まで吸収するため、太陽光利用のための有力な候補材料であるが、光励起キャリアの電子と正孔の再結合により高活性化は困難となっていた。この解決法として、粒子内にバンドポテンシャル差を生じさせることで、電荷分離と表面へのキャリア移動を促進させることが挙げられる。そこで本年は、ポスト合成処理により、SrTaO<sub>2</sub>N 表面に Ba 置換体を形成させることによる高活性化を試みた。

1-100 wt% の BaCl<sub>2</sub> で SrTaO<sub>2</sub>N を含浸処理し 1000°C-10 min のアンモニア気流下で熱処理することで Ba 置換を行った。XRD では、いずれの Ba 置換試料においても、未処理の SrTaO<sub>2</sub>N に対してメインピークの位置は変化せず、BaCl<sub>2</sub> 処理によってバルクの結晶構造は影響を受けないことが分かった。また、XPS により定量された Ba 組成が、EDS のそれよりも多くなったことから、Ba は SrTaO<sub>2</sub>N の表面に偏在していることが分かった。吸収スペクトルを測定したところ、Ba の導入量の増加に伴い吸収端波長は僅かに長波長側へシフトした。これは、エネルギーギャップが小さい Ba 置換部が SrTaO<sub>2</sub>N 表面に形成されたためと考えられる。含浸法で Co を担持し酸素生成を行ったところ、BaCl<sub>2</sub>(10 wt%) および BaCl<sub>2</sub>(100 wt%) 処理試料は元の SrTaO<sub>2</sub>N よりも高い活性を示した(図 1)。ここで、BaCl<sub>2</sub> の代わりに SrCl<sub>2</sub> で処理しても活性は向上しなかったことから、BaCl<sub>2</sub> 処理により活性が向上することが確認された。ただし、BaCl<sub>2</sub>(1 wt%) の処理では低活性となった。含浸法では Co がランダムに担持されるため、BaCl<sub>2</sub> 処理量が少ない場合、Ba 置換部上に Co が担持されず活性が低下したと考えられる。以上のように、SrTaO<sub>2</sub>N へ Ba を導入することで酸素生成の高活性化に成功した。

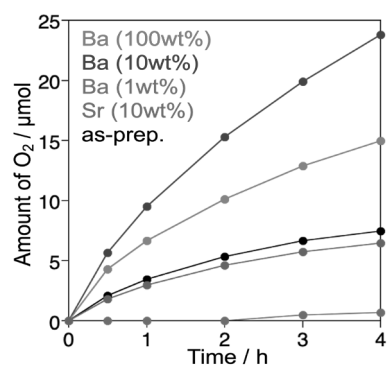


図 1. BaCl<sub>2</sub> もしくは SrCl<sub>2</sub> で処理した SrTaO<sub>2</sub>N の酸素生成. Co (2 wt%, imp), 20 mmol L<sup>-1</sup> AgNO<sub>3</sub>, 0.1 g La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 430 nm LED.

### 2. Z スキーム型水分解のための CuLi<sub>1/3</sub>Ti<sub>2/3</sub>O<sub>2</sub> 光触媒に対する助触媒の検討

当研究室では 580 nm までの可視光を吸収できる CuLi<sub>1/3</sub>Ti<sub>2/3</sub>O<sub>2</sub> 水素生成光触媒を開発している。しかし、本光触媒を用いたイオン電子伝達系での Z スキーム型可視光水分解は実現していなかった。これは、

$\text{CuLi}_{1/3}\text{Ti}_{2/3}\text{O}_2$  の活性の低さや、電子伝達剤の再還元といった逆反応が進行してしまうことなどが原因と考えられる。そこで、Z スキーム型水分解のための  $\text{CuLi}_{1/3}\text{Ti}_{2/3}\text{O}_2$  に対する助触媒種および担持条件の検討を行った。

まず、10 vol% MeOH aq. 中で Ru を光電着した  $\text{CuLi}_{1/3}\text{Ti}_{2/3}\text{O}_2$  に対して  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  を修飾し Z スキーム型水分解を試みたところ、 $\text{Cr}_2\text{O}_3$  修飾することで水分解活性が向上した。これは、 $\text{Cr}_2\text{O}_3$  により Ru/ $\text{CuLi}_{1/3}\text{Ti}_{2/3}\text{O}_2$  上での  $[\text{Co}(\text{bpy})_3]^{3+}$  の再還元が抑制されたためと考えられる。助触媒種の探索のため、 $\text{Cr}_2\text{O}_3/\text{Rh}$ 、 $\text{Cr}_2\text{O}_3/\text{Pt}$ 、 $\text{Cr}_2\text{O}_3/\text{Pd}$ 、 $\text{Cr}_2\text{O}_3/\text{Ru}$  を光電着したところ、 $\text{Cr}_2\text{O}_3/\text{Ru}$  と  $\text{Cr}_2\text{O}_3/\text{Pt}$  を担持したときに高い水分解活性が得られた。しかし、いずれも失活がみられ、特に Pt において顕著だった。これは、Pt 上での電子伝達剤の還元や水生成などの逆反応の影響と考えられる。そこで、Ru の担持法を詳細に検討した。RuCl<sub>3</sub> aq. を助触媒源とし 10 vol% MeOH aq. で光電着 (RuCl<sub>3</sub> aq./10 vol% MeOH と表記)、もしくは RuCl<sub>3</sub>-MeOH 溶液を助触媒源とし 100 vol% MeOH で光電着 (RuCl<sub>3</sub>-MeOH/100 vol% MeOH と表記) することで Ru を担持した。これらを用いて Z スキーム型水分解を行なったところ (図 2(a)), RuCl<sub>3</sub>-MeOH/100 vol% MeOH で担持した試料は、RuCl<sub>3</sub> aq./10 vol% MeOH で担持した試料よりも高い活性を与えた。それぞれの SEM 像を図 2(b), (c) に示す。RuCl<sub>3</sub> aq./10 vol% MeOH では、滑らかな触媒表面に Ru の凝集体が見られた。一方で、RuCl<sub>3</sub>-MeOH/100 vol% MeOH では、触媒表面に凹凸と微粒子が面選択的に存在した。このような触媒表面や助触媒の担持状態の違いが水分解活性に影響を与えたと考えられる。以上のように、 $\text{CuLi}_{1/3}\text{Ti}_{2/3}\text{O}_2$  の Z スキーム型可視光水分解への応用に成功した。

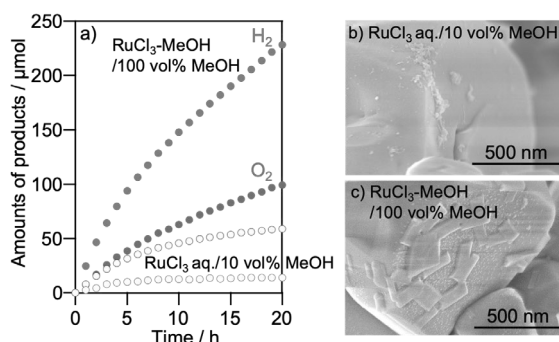


図 2. (a)  $\text{Cr}_2\text{O}_3/\text{Ru}/\text{CuLi}_{1/3}\text{Ti}_{2/3}\text{O}_2$  と  $\text{BiVO}_4$  を組み合わせた Z スキーム水分解。反応溶液: 0.1 mM  $[\text{Co}(\text{bpy})_3]\text{SO}_4$  水溶液, 光源: 300 W Xe ランプ ( $\lambda > 420$  nm). (b) RuCl<sub>3</sub> aq./10 vol% MeOH および (c) RuCl<sub>3</sub>-MeOH/100 vol% MeOH で光電着した Ru/ $\text{CuLi}_{1/3}\text{Ti}_{2/3}\text{O}_2$  の SEM 像。

### 3. 錯体重合法で調製した $\text{SrTiO}_3:\text{Ir}$ の光触媒特性の調査

エネルギーギャップの狭窄化の方法として、遷移金属イオンのドーピングがある。 $\text{SrTiO}_3$  は紫外光にしか応答しないが、Ir をドーピングすることで 800 nm までの光に反応することが報告されている。しかし、 $\text{SrTiO}_3:\text{Ir}$  の高活性化が課題となっている。ここで錯体重合(PC)法は、固相(SSR)法に比べ、均一な組成の微粒子を得る有力な方法として知られている。そこで、PC 法により  $\text{SrTiO}_3:\text{Ir}$  を調製し光触媒特性を調査した。

0.2%-1%のいずれのドーピング量でも PC 法により目的物が単一相で得られていることを XRD から確認した。また、PC 試料の一次粒子径は SSR のそれよりも小さかった。光触媒活性を測定したところ (表 1), PC 試料については、0.5%のドーピング量が水素および酸素生成に対して最適だったが、SSR 試料では、0.2%と 0.5%がそれぞれ水素および酸素生成に適していた。 $\text{SrTiO}_3:\text{Ir}(0.5\%)\text{-PC}$  は、最適化した SSR 試料よりも高い水素生成活性を与えたが、酸素生成では、 $\text{SrTiO}_3:\text{Ir}(0.5\%)\text{-SSR}$  がどの PC 試料よりも高い活性を示した。以上のように、PC 合成により  $\text{SrTiO}_3:\text{Ir}$  の水素生成活性の向上に成功した。

表 1  $\text{SrTiO}_3:\text{Ir}$  の水素および酸素生成

Method	Ir-doping amount	Activity / $\mu\text{mol h}^{-1}$	
		H <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>
SSR	0.2%	40.3	3.1
	0.5%	29.8	6.0
PC	0.2%	29.4	1.2
	0.5%	86.9	2.0
	1%	65.8	1.7

水素生成: 10 vol% MeOH aq., 酸素生成: 10 mM  $\text{AgNO}_3$  aq., 光源: 300 W Xe lamp ( $\lambda > 420$  nm).

## 【研究活動報告】 超臨界ナノ工学研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：阿尻 雅文  
 准教授：筈居 高明、成 基明 (NICHe)、Wahyudiono (NICHe)  
 講師：横 哲 (WPI-AIMR)  
 助教：Ardiansyah Taufik (NICHe)  
 研究員：Chunli Han (WPI-AIMR)  
 技術補佐員：高石 光世、中川 奈穂子、浦山 良一  
 大学院生：尾村 悠希、新井 裕子、カモンヴァラピタック タンヤポン、古屋 洸、  
 大沼 遼香、千葉 信孝、高橋 大希  
 学部学生：川瀬 智暉、関根 裕功

本研究分野では、金属酸化物ナノ粒子の超臨界水熱合成プロセスの開発、ナノ粒子プロセス設計基盤となる化学工学熱力学の創成、結晶面制御酸化物ナノ粒子を利用した新規エクセルギー再生産プロセスの開発を行っている。2022年の主な研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. 錯体を介した金属酸化物ナノ粒子成長メカニズムの解明とサイズ制御合成への優位性検証

超臨界水による有機修飾ナノ粒子合成法では、10 nm 以下の形状制御された均一ナノ粒子を 10 min 以下の短時間で得ることができる。一方で超臨界水による有機修飾合成法では、超臨界水中の有機-無機反応がかかわる結晶成長メカニズム、前駆体反応メカニズムについて明らかでなく、その生成反応が制御できていなかった。前年度の研究において、有機-無機反応により形成された金属錯体が、ナノ粒子生成に寄与していることが分かった。そこで、本年度は、金属錯体を前駆体として使用した場合の、金属酸化物ナノ粒子生成反応メカニズムを明らかにし、流通式による均一ナノ粒子合成法へと展開した。

有機分子と Ce 塩を利用した、有機修飾 CeO<sub>2</sub> ナノ粒子合成の場合、Ce-修飾剤錯体が最終的な反応前駆体である可能性が高い。あらかじめ合成した錯体を使用することでより高速で、副反応を伴わない合成の実現可能性があると考えた。しかし、3 価の Ce 錯体は比較的安定で、CeO<sub>2</sub> 生成時に水による酸化を伴うことがわかった。より不安定だが、前駆体としては存在する 4 価の Ce 錯体では生成機構が異なる可能性がある。そこで本実験ではあらかじめ価数の異なる錯体を合成し、それを超臨界水熱処理して生成物への影響を明らかにした。

まず 3 価のオクタン酸 Ce(III)と、4 価のオクタン酸 Ce(IV)を合成した(オクタン酸: CH<sub>3</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>COOH)。これらの錯体と水を耐圧管に添加し、400° C 10 min 処理した生成物を比較した。図 1 に生成物の XRD パターンと TEM 画像を示す。オクタン酸 Ce(III)から合成した粒子は主成分として Ce(OH)<sub>3</sub> が得られ、CeO<sub>2</sub> はわずかにしか得られなかった。画像中のロッド状粒子は Ce(OH)<sub>3</sub> 由来である。それに対してオクタン酸 Ce(IV)から合成した粒子は不純物のない均一な CeO<sub>2</sub> が得られた(平均径

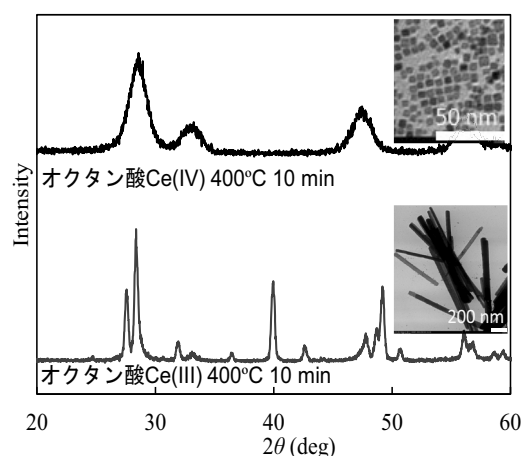


図 1 錯体水熱処理後の XRD パターンと TEM 画像

5.3 nm、変動係数 0.18)。オクタン酸 Ce(III)を前駆体とした場合は中間体として  $\text{Ce}(\text{OH})_3$  が生成し、その結晶成長が酸化による価数変化よりも速いため強固な  $\text{Ce}(\text{OH})_3$  結晶を形成する。それに対してオクタン酸 Ce(IV)を前駆体とした場合は価数変化が必要なく、前駆体の反応後瞬時に  $\text{CeO}_2$  が形成できた。また前駆体の錯体は同一構造の分子として存在するため均一に核生成し、粒度分布の狭いナノ粒子が得られた。

これらの結果をふまえてオクタン酸 Ce(IV)を使用した流通式合成法を開発し、流通式合成においても均一なナノ粒子が得ることができた(図 2)。

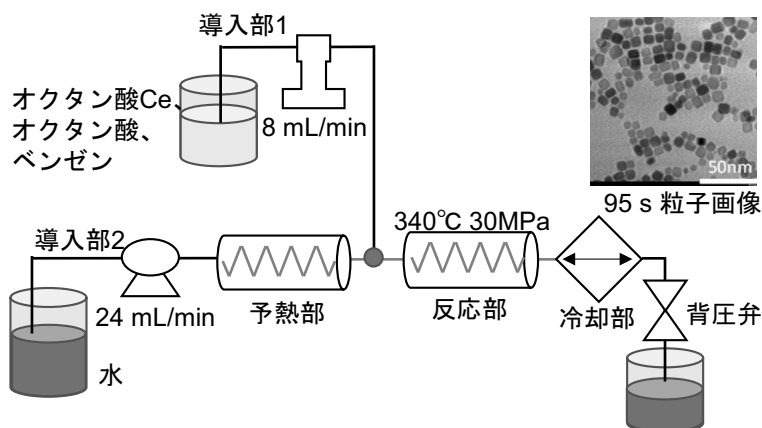


図 2 錯体を使用した流通式合成模式図と生成粒子画像

## 2. 高濃度・非凝集系ナノ粒子分散液の粘性挙動に対する粒子間相互作用の寄与の解明

超臨界流体合成法により、サイズ、表面状態が均一なナノ粒子を合成できたことで、高濃度かつ非凝集なナノ粒子分散液が実現されている。このような高濃度ナノ流体においては、粒子間距離が著しく小さくなり、マイクロ粒子では無視できた粒子間相互作用が顕著となる。これまでに、ナノ粒子分散液中の粒子間の相互作用を理解し、粘性挙動を制御することを目的として、高濃度ナノ流体の濃度依存性や粒子サイズ依存性、さらに温度依存性を評価した。

測定温度を変えて、粒子サイズ 5.6nm の酸化セリウムナノ粒子をシクロヘキサン中に分散させた分散液中の粒子濃度に対する相対粘度を図 3 に示す。分散液中のナノ粒子の濃度が低いと相対粘度はほぼ一致した。一方、濃度が高くなるにつれて、相対粘度は一致しなくなった。これは、低濃度域と高濃度域では、粘性を支配する物理現象の温度依存性が異なることを示す。分散液中の粒子濃度が低いと、測定温度が異なっても相対粘度の値がほぼ一致する。このことは、低濃度域での分散液の粘度は溶媒の粘度に支配されていることを意味する。一方、高濃度領域では、Einstein 式のような粒子分散液の粘度予測式で、粘性の起源として考慮されてきた粒子-溶媒間相互作用よりも、粒子-粒子間相互作用の影響が大きくなるため、分散液の粘度は流体粘度に依存せず、粒子径と充填率のみに依存する。粘度を粒子間距離で整理すると、高濃度領域では同一の曲線近傍にてほぼ多くの点が分布することが分かり、高濃度・非凝集ナノ粒子分散液の粘性が、粒子間相互作用を反映することが強く支持された。

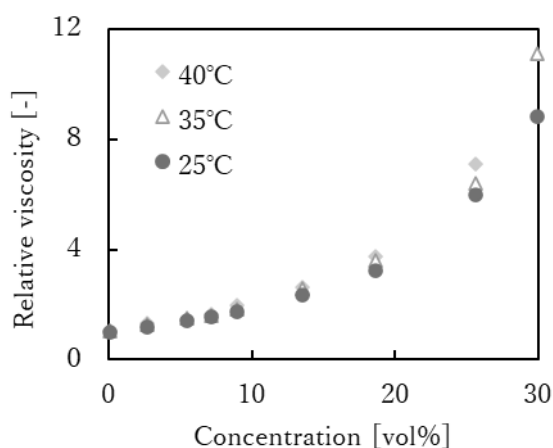


図 3 粒子サイズ 5.6nm における酸化セリウム分散液の濃度の変化に対する相対粘度変化

**【研究活動報告】 光物質科学研究分野 (2022.1~2022.12)**

教 授:佐藤 俊一  
准 教 授:小澤 祐市  
助 教:上杉 祐貴, 田辺 綾乃  
技術補佐員:石川 和香子  
大 学 院 生:大野 剛史, 三輪 泰斗, 上野 瑞己, 門口 尚広, 三浦 祐樹, 久米 大輔,  
小林 哲郎, 津留 志音

本研究分野は、レーザー光が持っている高いポテンシャルを生かした新しい素材・材料・物質のプロセスおよび分析・評価方法の開発を目指している。特に、波長、スペクトル幅、強度、偏光・位相・強度分布などにおいて、格段に優れた特性を持った最先端のレーザー技術の開発とそれらを駆使した物質科学への応用研究を志向している。具体的なテーマとして現在は、高強度レーザー場を用いた物質創製プロセスの開発と新機能発現、ベクトルビームの新機能探索と材料科学への応用展開、光-電子相互作用に基づく電子制御技術の開発を中心に進めている。これらの一部の研究は、国内外の複数の研究機関との共同研究として行っている。今年度の主な研究成果は以下の通りである。

**1. 光ニードルを用いた多光子励起フォトルミネッセンスによる半導体内部欠陥の 3 次元高速可視化法の開発**

窒化ガリウム(GaN)は、シリコン等の他の半導体材料に比べて優れた動作特性・材料特性を示し、次世代パワーデバイスや紫外発光デバイスへの応用が広まりつつある。しかし、一般的に異種基板での成長を必要とする GaN 単結晶基板は、格子不整合のため多数の貫通転位が成長層に発生することが知られている。GaN 中の貫通転位を可視化する方法として、多光子励起フォトルミネッセンスに基づくレーザー走査型顕微鏡法が近年注目されている。本観察法は、試料の 3 次元的な転位分布を非破壊で可視化できるという利点を持つ一方で、異なる観察面での 2 次元像を逐次取得する必要があるため、観察深度の増大に伴って画像取得時間が増大するという原理上の制約がある。現在我々は、多光子励起フォトルミネッセンスに基づく GaN 中の転位を高速に 3 次元可視化する新しいイメージング技術の開発を進めている。本イメージング法は、近赤外域の超短パルスレーザーによる長焦点深度のベッセルビームを励起光とした深さ方向への一斉励起と、自己湾曲性をもつエアリービームに変換された検出光による深さ位置分解を原理とする。これによって、ニードルスポットの 1 回の 2 次元走査のみから 3 次元の転位像取得が可能となる。本年度は、高い屈折率を有する GaN への励起光の集光ならびに紫外波長域のフォトルミネッセンスの検出時に課題となる球面収差の影響を詳細に検討し、収差補正光学系の構築を行った。本イメージングシステムを用いることで、GaN の c 面基板および m 面基板の両方の試料に対しても、基板内に存在する転位分布を 3 次元的に一挙に可視化できることを実証した。現状での可視化深度は数十ミクロン程度となったが、観察深度のさらなる増大と空間分解能の向上を目指した研究を今後も継続する予定である。

**2. 超短パルスレーザーによる単層グラフェン膜の加工**

我々はこれまでに、超短パルスレーザーを用いて厚さがナノメートル程度の薄膜を加工する新技術の開発に取り組んできた。本年度はこれを単層グラフェン膜に展開し、超短パルスレーザーを照射した際に生じる加

工や構造変化の様子を系統的に調査した。その結果、80 nm 以下のナノ穴あけ加工を実証することに成功した。その後、高分解能の透過電子顕微鏡を使ってレーザーを照射したグラフェンを観察したところ、グラフェン結晶中に原子レベルの欠陥や、直径数 nm の微小な穴が形成されていることが判明した。本研究によって、超短パルスレーザーの照射によりグラフェン結晶中に原子欠陥を導入する新手法を得ることができた。加えて、走査電子顕微鏡法を用いてレーザーを照射したグラフェン表面を詳細に観察したところ、レーザー照射領域ではコンタミネーションが有意に低減していることが明らかとなった。グラフェン膜は従来の表面洗浄手法では容易に破損してしまうため、本研究で得られた知見は注目に値する。上記のレーザー加工に限らず、今後も超短パルスレーザーを駆使した新しい要素技術の探索を進める予定である。

### 3. レーザー衝撃波による機械的原子間結合の生成

フェムト秒程度の短い時間幅を持つレーザー光を液体中に集光すると、非線形を含む強い吸収によって急激な膨張が生じ、結果として衝撃波が発生する。市販のフェムト秒レーザー光源でも、焦点近傍に数 100GPa (数百万気圧) の高い圧力を発生させることが可能であると考えられている。われわれは炭化水素化合物である液体アルカン中にレーザー光を集光し、生成物を GC-MS で分析したところ、多種類の分岐したアルカンの生成を確認した。同定した分子種や、生成量のパルスエネルギー依存性などから、この生成過程がレーザー衝撃波によって分子同士間に機械的に C-C 結合が生じ、新たなアルカン分子が生成したと考えられた。また、レーザー照射する試料としてメタノールを選択し、C-C 結合によって生成すると予測される Methoxymethanol と 1,2-ethandiol に加えて、C-O 結合による Ethanol と Dimethyl ether, さらに O-O 結合による Dimethyl peroxide が生成することも見出している。

本年度は、これらの分子の中で特に生成量が多い Methoxymethanol に注目し、その赤外吸収分光を試みた。試料のほとんどは Methanol であるため、最終的には真空蒸留によって Methoxymethanol の濃度を高めた。試料の主な成分である Methanol に対する検量線から、その濃度はおおよそ 23% であり、残りは Methoxymethanol であると推定できた。この濃縮された試料を FT-IR によって測定し、類似した分子の既知の値から、各ピークの振動モードを推定した。

また、エタノールに対する同様の実験を行い、C-C 結合、C-O 結合および O-O 結合によって生成すると予測される分子をすべて検出することができた。一方、ガスクロマトグラムは経時変化を示し、特に 1,1-diethoxyethane が時間とともに増加し、最終的には最も強いピークとなった。CO<sub>2</sub> を溶解した Ethanol 試料では特に顕著であり、この分子はレーザー照射によって直接生成されたのではなく、アセタール化反応によって生成したと考えられた。

**【研究活動報告】 固体イオニクス・デバイス研究分野** (2022.1~2022.12)

教授：雨澤 浩史  
准教授：中村 崇司  
助教：木村 勇太, Hou Xueyan (~2022.03)  
特任研究員：藤崎 貴也  
受託研究員：上川 優貴(~2022.3)  
技術補佐員：松田 康孝, Reyhan Daffa Athariq (~2022.1)  
技術職員：伊藤 千恵, 渡邊 浩美, 新井 葉子  
大学院生：Zhuo Diao<sup>(D3)</sup>, Su Huang<sup>(D2)</sup>, 佐藤 郁奈<sup>(D1)</sup>, 吉岡 輝紀<sup>(M2)</sup>,  
勝又 琢也<sup>(M2)</sup>, 織田島 和樹<sup>(M2)</sup>, 木幡 壮真<sup>(M1)</sup>, 矢野 裕太郎<sup>(M1)</sup>  
学部学生：田中 舞<sup>(B4)</sup>, 目黒 伶奈<sup>(B4)</sup>, 本原 匠<sup>(B4)</sup>, 池上 美波<sup>(B3)</sup>, 奥平 達裕<sup>(B3)</sup>,  
山内 辰馬<sup>(B3)</sup>  
特別聴講学生：Luangaram Kanpaphol (2022.10~)

本研究分野では、主に環境問題、エネルギー問題を解決に資する、燃料電池やリチウムイオン二次電池など、環境にやさしいエネルギー変換デバイスの実現・普及のための基盤研究を展開している。特に、固体でありながらその中をイオンが高速移動できる固体イオニクス材料に着目し、イオン輸送、界面反応、欠陥構造についての学理を探究している。また、固体イオニクスデバイスにおける材料、反応に関わる理解を深化させるべく、高温/制御雰囲気/通電といった特殊環境下での「その場測定」を可能とする高度分析技術の開発も行っている。以上の研究を通し、固体イオニクス材料を利用した環境調和型エネルギー変換デバイスの開発ならびに高性能化・高信頼性を指向した研究開発を展開している。

2013年度より採択された JST ALCA 次世代蓄電池事業では、固体の酸化物 Li イオン伝導体を電解質に利用した全固体 Li イオン二次電池 (ASSLIB) における局所オペランド分析手法の開発と、それを用いた高性能電池の設計指針確立について研究を行っている。科学研究費補助金によるプロジェクトにおいては、2019年度より、新学術領域研究「蓄電固体界面科学」にて全固体電池への応用を意図した固体電解質界面現象に関する研究を進めている。さらに次世代の SOFC や Li イオン二次電池 (LIB) の高性能化を達成するため、局所的な機械的応力が固体イオニクスデバイスおよびそれらに用いられる材料の特性に及ぼす影響について研究している。2020年度より NEDO 燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業に参画し、次世代の中低温作動燃料電池の高性能正極開発を進めている。さらに 2018年度より JST 未来創造事業プロジェクトに参画し、超高エネルギー密度全固体アニオン蓄電池の固体電解質材開発を進めている。また同プロジェクトにおいて新たな研究テーマを立ち上げ、マルチスケール/モーダル、三次元で、デバイス内部の化学状態分布をオペランド分析できる化学分析プラットフォームの開発を進めている。2020年度より JST さきがけ「電子やイオン等の能動的制御と反応」領域に参画し、固体電解質を介した化学ポテンシャルの能動制御を利用した材料合成技術の開発を開始した。さらに固体電気化学デバイスの要素研究について、国内企業数社との共同研究も実施した。さらに、附置研究所アライアンス「物質・デバイス領域共同研究拠点」の枠組みでの共同研究や東北大学高等大学院博士後期課程学生挑戦的研究支援プロジェクトへの参加など、学内外での共同研究、教育活動にも力を注いでいる。本研究分野の 2022 年度の研究活動は、以下のように概括される。

### 1. 高輝度放射光を利用した固体イオニクス材料・デバイスの高度分析手法開発に向けた研究

固体酸化物形燃料電池 (SOFC) や Li イオン二次電池 (LIB), 全固体蓄電池 (ASSB) などのエネルギー貯蔵・変換デバイスの性能向上および設計指針の構築に向け, 動作中のデバイスを直接観察可能な「Operando 計測技術」の開発を行った. 本技術を活用する事で, デバイス実作動状態における部材の化学・物理状態を明らかにし, 内部で進行している電気化学反応の様子を理解すると共に, それらの知見に基づいて高性能化のための適切な材料選択, 構造や運転条件の最適化を行うことが可能となる. しかし, 特殊環境下 (SOFC: 高温・酸化/還元雰囲気, LIB: 不活性雰囲気または還元性電解液中, ASSB: 固体電解質上での電気化学反応中) で作動する SOFC, LIB, ASSB を直接観察するには, 汎用の分析技術の適用が困難な場合が多い. 本研究分野では, 主に大型放射光施設における X 線吸収分光法を活用して, 従来にはない「その場計測技術」の開発に注力してきた. 例えば, 高温, 特殊雰囲気, 通電状態においてサブマイクロメートルの位置分解能で X 線吸収分光測定可能な Operando 計測システムを構築し, 燃料電池内部の化学ポテンシャル分布の変調を直接観察することに成功した. デバイス内部のポテンシャル変調はイオン-電子の両極性拡散により説明できるものであることが分かった. 以上の結果は, 燃料電池や全固体電池などの固体イオニクスデバイスにおいて, 電解質の微小な電子伝導が, デバイス設計を左右する重要なパラメーターであることを強く示唆する結果である. こうした知見は, より高性能で高信頼性なエネルギー変換・貯蔵デバイスを構築するための重要な基礎学術的な知見である.

また X 線 CT 測定と X 線吸収分光測定 (XAFS) を組み合わせた CT-XAFS 技術を開発し, 全固体電池コンポジット電極内における充放電反応の進行を 3 次元的に可視化する技術を開発した. これまで開発してきた投影型 CT-XAFS 法の高度化を進めることで, 空間分解能: 約  $3\mu\text{m}$ , 時間分解能: 約 30 分で, ASSB のコンポジット電極内の数百  $\mu\text{m}$  四方の領域の反応進行状況の Operando 分析が可能となった (図 1a). さらに結像型 CT-XAFS 技術を開発し, 空間分解能を飛躍的に向上させることに成功した. 測定用の模擬 ASSB セルを微小化するなどの工夫を重ねることで, 空間分解能:  $100\text{ nm}$  で数十  $\mu\text{m}$  四方の観察領域の計測 (計測時間約 150 分) が可能となった. 測定対象の ASSB 模擬セルの作りこみが必要であるが, 本技術により ASSB コンポジット電極内に存在する数百から数千個の活物質粒子各々の反応状態を, 同時かつオペランドで 3 次元観察することが可能となった (図 1b). 以上の技術は, ASSB をはじめとする電気化学デバイスの性能を制限する要因および劣化要因を特定する上で重要な知見を与えるとともに, 最適な活物質粒子性状, 微細構造, 運転条件などを決定する上でも有用となる. したがって, 電気化学デバイスの実用化・高性能化を進める上で, 強力なツールとなることが期待される.

なお, これらの研究は, 京都大学, 高輝度光科学研究センター, 理化学研究所, 産業技術総合研究所,

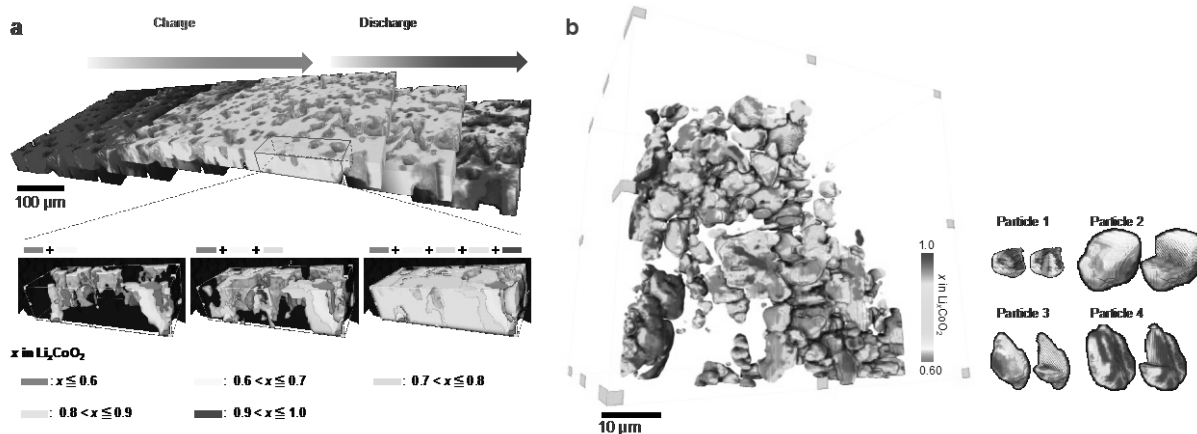


図 1 (a)投影型 CT-XAFS 法, (b)結像型 CT-XAFS 法による ASSB コンポジット電極の反応分布の 3 次元オペランド観察



物質・材料研究機構, ワシントン大学および本学環境科学研究科, 理学研究科, 工学研究科, 流体科学研究科, 金属材料研究所との共同研究として実施した。

## 2. 固体イオニクス材料における結晶・欠陥構造, イオン輸送特性に関する研究

固体におけるイオン伝導・物質輸送特性は, 固体の結晶構造や, 固体中に内在する空孔や格子間原子などの点欠陥の種類や量によって大きく変化する。典型的な固体イオニクス材料の場合, これらの欠陥種・量は異種元素の添加によって制御されることが多いが, 材料によっては温度や雰囲気依存するものもある。このような結晶性固体における結晶・欠陥構造は, 新規材料はもちろん, 既存材料であっても, 未解明の部分が多い。本分野では, 高温微量天秤や高温 X 線回折, クーロン滴定, 導電率測定などの各種実験的手法を用いて, 各種固体イオニクス材料の結晶・欠陥構造の精密評価を行ってきた。また上記実験手法に加えて, X 線吸収分光法および X 線発光分光法を併用し, 従来法では得られなかった電子状態などの情報を直接的に評価することも行っている。

次世代高エネルギー密度電池として期待されるフッ化物イオン電池において, 高いフッ化物イオン伝導性と優れた安定性を両立する固体電解質の開発は重要な技術課題である。当グループでは, 複合アニオン型材料への欠陥導入による新規フッ化物イオン伝導性材料の開発に従事している。これは既存のフッ化物イオン伝導性材料の開発方針とは異なる開発戦略であり, 革新的な固体電解質の発見が期待できる。一連の検討を通して, 酸フッ化物材料に対する欠陥制御により高いイオン導電率が発現することを見出した。以上の結果に基づき, フッ化物イオン伝導性材料開発における新たな候補材料群を提案した。

新規エネルギー機能材料の開発に向けて, 電気化学的アニオン複合化技術の開発を進めている。アニオン欠陥の自在な制御を目指し, 固体電解質により構成される電気化学リアクターを開発し, 対象材料への異種アニオン欠陥導入を検討した。触媒として注目されるペロブスカイト酸化物  $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$  やリチウムイオン電池正極材料  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$  に対して電気化学的フッ素ドープ処理を施したところ, 対象材料に F 欠陥を導入することができることを実証した。本技術はアニオン機能の活用という新しい戦略に基づいた材料開発, ひいてはエネルギー機能材料の革新に繋がる重要な技術である。

これらの研究は, 東京大学, 京都大学, 大阪大学, 九州大学, 徳島大学, 日本大学, 高知大学, 千葉工業大学, ファインセラミックスセンター, 立命館大学, 本学環境科学研究科, 理学研究科, 工学研究科との共同研究として実施した。

## 3. 全固体電池における界面現象に関する研究

全固体電池は優れた電池特性と安全性を両立し得るエネルギー貯蔵デバイスであり, 移動体用電源や再生可能エネルギー平準化用電源としての応用を目指して研究開発が精力的に進められている。全固体電池の高度化には, 低抵抗かつ安定な「界面」を構築することが必要不可欠であり, 高機能界面の実現に向けた基礎科学の確立が望まれている。こうした背景のもと, 当グループでは特に全固体電池の電極/電解質界面における物理化学現象の解明を目標として研究を進めている。

固体電解質界面近傍の電子状態・化学状態を高い空間分解能で分析可能な高度計測技術として, 深さ分解 X 線吸収分光法を高度化し, 深さ分解能: 約 2 nm という極めて高い空間分解能を有した計測技術を開発した。本技術を用いて  $\text{LiCoO}_2$  正極薄膜電極を  $\text{Li}(\text{Al}, \text{Ti})(\text{PO}_4)_3$  (LATP) 基板上に製膜し, 充放電に伴う  $\text{LiCoO}_2$ /LATP 界面の局所的な変調を分析した。充放電の際, 特定の電圧を超えると電解質材料 (LATP) が変質すること, また数 nm 程度の極薄の保護層を設けることで電解質の変調を抑制できることを明らかにした。これは安定な固体電解質界面の構築につながる重要な知見である。

また固体/固体界面では大きな歪みが生じることが知られているが、こうした「歪み」が電気化学特性に与える影響は深く理解されていない。そこで当グループは、 $\text{LiCoO}_2$  緻密膜電極に大きさ・方向を制御した応力を印加し、かつその際の  $\text{LiCoO}_2$  の Li 化学ポテンシャル変調を定量評価できる実験システムを構築し、応力と化学ポテンシャルの平衡論的關係性を明らかにした。

これらの研究は、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学、高輝度光科学研究センター、理化学研究所、産業技術総合研究所、物質・材料研究機構、本学材料科学高等研究所、工学研究科との共同研究として実施した。

**【研究活動報告】 環境適合素材プロセス研究分野** (2022.1~2022.12)

教授：埜上 洋

准教授：夏井 俊悟

助 教：丸岡 伸洋

大学院生：高 翔宇、佐藤 丘郭、塚田 大智、田中 瑞樹(3月修了)、金 政仁(D3)、  
後藤 優子(D2)、山本 玲維、吉川 颯、和田 大輝、王 笑語(M2)、  
花田有生、本田隆翔、松田琉生、守 光太(M1)

技術補佐員：伊藤 昭久、早坂 未穂

現代社会は高機能性材料や構造材料など幅広い材料の利用によって成り立っているが、その製造には多量の資源およびエネルギーが使用されている。近年、高品位資源の逼迫や地球温暖化問題の顕在化などにより各種素材の製造プロセスには種々の制約が課せられるようになっている。このような状況の下で高品質素材を社会に安定に供給するためには、素材製造プロセスの高機能化、高効率化および高精度制御、あるいはプロセス自体の転換が必要であり、そのためにはプロセス特性の定量的な理解とそれに基づく革新的な原理設計が不可欠である。本研究分野では生産量および資源・エネルギー使用量の膨大さから社会へのインパクトの大きな素材の代表である鉄鋼および基盤素材の製造プロセスを主な対象としてプロセスの内部現象の解明およびシミュレーション手法の確立などを進めている。また熱の回収・貯蔵・利用技術の開発も進めている。2022年の研究活動は以下のように概括される。

**1. 基盤素材高温製錬プロセスの高度解析技術の開発**

鉄鋼や銅といった建造物や通信インフラストラクチャーとして社会を支える基盤素材の高効率かつ安定な製造は、資源、環境、温暖化などの問題が顕在化する中で、実現すべき重要な課題である。これらの素材の多くは長い歴史を持つ高温製錬プロセスを通じて製造されている。これらのプロセス反応器内部は高温・高圧・毒性ガス雰囲気、未だに未知の部分が多く存在する。製錬プロセスを極限まで高度化するためには、その理論構築が必要となるため、ブラックボックスの解消と内部現象の定量・定式化を目指した反応解析および可視化技術の開発および反応性熱流体工学的な研究を進めている。

**1.1 高温製錬プロセス内部の可視化と反応解析**

銅製錬に用いられる自熔炉内では、銅精鉱の微粉が、急峻な温度および酸素分圧勾配が形成されたシャフト空間内を飛行しながら高速に反応し、マットおよびスラグを生成する。2022年には銅精鉱および試薬試料を微小な小塊として微細な熱電対に懸垂し、組成を調整した気流中に挿入して高速度ビデオカメラ観察下で反応させる懸垂小塊燃焼試験により詳細な反応経路同定を実施した。

**1.2 炭素基質充填層における固体分散相の運動と充填構造解析**

高温製錬プロセスの内部には、粗粒子や微粉体、融体および反応ガスなどが同時に流通しており、その流通経路や流動特性がプロセスの反応・エネルギー効率を決定する重要な因子となり、一方でこれらがプロセスの不安定性発現の要因ともなり得る。2022年は製鉄用高炉下部のコークス充填層を対象として、(A) レースウェイと呼ばれる高炉燃焼帯内部のコークス粗粒子運動の冷間模型による測定と定量化、(B) コークス粗粒子の空間を気流に同伴されて流通する微粉の流動と蓄積の解析、および (C) コークス粗粒子の破碎と粉発生の生じる充填層の構造と通気性評価を主に進めた。

## 2. 高温融体の生成過程と形態の動力学解析およびセンシング技術の開発

高温融体を含む系に含まれる分散相の挙動の理解と制御は鉄鋼・非鉄の製錬プロセスに共通かつ環境問題および経済の面から非常に重要である。本年は下記の研究展開を試みた。

### 2.1 電析カロリメトリによる熔融塩電解中の不純物による電解効率低下の定量化

熔融塩化物中に電析する活性金属相を対象として、電気化学測定と同期した高速イメージング熱分析を実施した。本分析法により、水分を含む高温塩化物融体中で電気化学反応が進行する際の水素ガスと水素化反応による生成物発生量をその場で定量化し、電流効率を推算することを報告した。また、電極の回転操作や超音波印可など機械的操作による  $\text{TiO}_2$  還元効率への影響も検討した。

### 2.2 高温プロセス内原料軟化・滴下挙動可視化技術の開発

系内に複数の相が存在するマルチフィジックス問題に対して、非定常場の包括的な現象理解のために Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法をベースとしたシミュレーションを実施して、高温場での非定常解析ツール開発を継続して実施した。本年度は特に、Shape Matching 法を導入して、実際の焼結した鉄鉱石内部の不均一な還元分布を考慮した高温軟化変形解析を可能とした。

### 2.3 高温酸化物-熔融鉄界面の電位制御による新奇製錬プロセスの創成

鉄よりも貴な元素が鋼中に混入した場合、従来法ではその除去は困難であるが、熔融鉄-熔融酸化物界面を適切にアノード分極することで界面流動を誘起して、これらの溶鉄からスラグへの除去プロセスを考案した。本年度は特に、電気化学測定に基づく本法の基礎的メカニズムを検討した。

## 3. 製錬現象理解へのデータセントリック解析の応用

製錬プロセスには未だ数多くの未解明現象が包含されており、データ駆動型解析はそれら現象理解の支援技術となる可能性を秘めている。2022年には以下の適用を試みた。

### 3.1 多孔性炭素基質材料の熱間強度と破壊形態が充填特性に及ぼす影響解析

多様化する製鉄原料の性状がプロセス特性に及ぼす影響を解明するため、コークス粗粒子の高炉内の反応と機械的破壊現象を評価する従来の熱間強度試験法に 3D-scan 技術を導入して粒子単位の形状変化を時系列追跡した。得られた変化を multi-sphere 型離散要素解析に反映して実形状の充填層を再現し、充填層内の不規則な空間形状をトポロジー解析技術・Burn アルゴリズムを導入して解析することで、充填層総体としての挙動を定量的に記述した。

### 3.2 ディープラーニングによる銅精鉱燃焼過程のパターン分類

1.1 で示した反応中の銅精鉱粒子の温度と形態の同時計測により収集した詳細な燃焼データから、銅精鉱の燃焼時における形態の分類を目的とした、詳細な画像の時系列データを処理する方法を提案した。Deep Neural Network(DNN)を利用して銅精鉱の燃焼・変形過程を認識させ(教師有り学習)、未知の銅精鉱燃焼過程のテストデータから組成を予測して、燃焼形態の支配因子推定を実施した。

## 4. 反応・伝熱操作高速化のための境膜制御

各種素材製造プロセスにおいては、異相界面における物質移動を伴う反応操作および伝熱操作が数多く見られる。このような操作において、異相界面付近に物質濃度や温度の急峻な勾配を含む境膜(境界層)と呼ばれる領域が形成され、この境膜が物質や熱の移動に対する大きな抵抗となっている。通常、この抵抗を低減するため、境膜近傍の流体流速を増加させる操作が行われるが、本研究では回転円筒面を利用して境膜を制御することで、飛躍的に反応・伝熱操作を向上させることを試みている。実用化を視野に入れた実証的研究を開始した。

**【研究活動報告】 材料分離プロセス研究分野 (2022.1~2022.12)**

教 授：柴田 浩幸  
准 教 授：助永 壮平  
助 教：川西 咲子  
技 術 職 員：田代 公則  
博士課程学生：申 勝煥(D3) (~2022.3)  
修士課程学生：(M2)五十嵐 壮太, 橋本 一輝, 藤田 真由  
(M1)小里 文太, 高草木 寧緒, 塚原 優希  
外国人研究者：Yong Wang (JSPS 欧米短期特別研究員, 2022.10.11~)  
研 究 生：Huang Qiao (2022.11~)

2022年3月には1名が博士課程を, 3名が修士課程を修了し, 就職した。4月には3名の修士課程の学生が研究室に加わり, 10月および11月には外国人の研究者および研究生も加わった。Covid-19による行動制限の緩和が進み, 対面で開催される学会が増えた。2022年の研究活動は以下のように概括される。

**1. 鉄鋼プロセスに関する研究**

鉄鋼の製造時の副産物である製鋼スラグの主成分は生石灰(CaO)であり, 水との反応によりアルカリを呈するため, リサイクル時の弊害となっている。よって, 製鋼スラグの安定的な利用のためには, 水へのカルシウムの溶出抑制指針の確立が必要である。そこで, カルシウムを含有する種々のケイ酸塩鉱物を用い, ミクロスケールでの溶解メカニズムの解明を進めている。今年度は,  $\alpha$ -CaSiO<sub>3</sub> および $\beta$ -CaSiO<sub>3</sub> が水に溶解する際の OH<sup>-</sup> および Ca<sup>2+</sup> の同時イメージングにより得られた溶出挙動を解析し, 本溶解が各鉱物相表面での Ca<sup>2+</sup> の拡散により律速される現象であることを明らかにした。また, Ca の半分を Mg で置換した CaMgSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub> 相では著しく Ca<sup>2+</sup> 溶出量が低減することを明らかにし, 表面に形成される変質層の評価から, 溶出量の低減機構を推測した。

また, 溶鋼の凝固過程でのマイクロ偏析に伴う現象の理解に向け, モデル材料を用いた蛍光イメージングによる評価を進めている。固液各相での溶質の拡散と凝固時の溶質の平衡分配を仮定したマイクロ偏析の挙動のモデル化に成功した。加えて, 冷却速度が凝固過程に及ぼす影響を調査し, 冷却速度の増大に伴う一次 dendrite arm 間隔の減少と, 溶質濃化の抑制を確認した。

**2. 高品質シリコンカーバイドの溶液成長に関する研究**

シリコンカーバイドは省エネパワーデバイス用の基盤材料として注目されるが, 高品質かつ安価なバルク結晶の育成法は確立されていない。そこで, 現在主流の昇華再結晶法の代替法として, 溶液成長法に着目し, 高品質結晶の育成に向けた検討を進めている。成長に伴う溶液組成の変動は品質低下の主要因の一つであることから, 組成変動の抑制に向け, 通常使用される黒鉛坩堝に代わり SiC を塗布した坩堝の使用を検討している。そこで, 高純度かつ緻密な SiC 坩堝の作製手法の確立を目指し, Si の反応性含浸法による SiC 成型体の作製を実施した。炭素原料や粒径の最適化により, 最高で 90% を超える高い SiC 率の成型体の作製に成功した。

**3. 銅製錬プロセスの現象の解明に向けた研究**

自熔炉を用いた銅製錬時には, 精鉱の燃焼過程で生成したマグネタイトがマツトースラグ間界面に存在し,

反応効率を低下させることがある。マグネタイトは自熔炉内で熱力学的には非平衡相であるが、反応速度が不十分であることから、その要因を明らかにすべく 1200°Cでのマツトーマグネタイト間のその場観察像より反応挙動の解析を行った。マグネタイトの溶解時に生じる SO<sub>2</sub> ガスの発生量を画像解析により評価した結果、マグネタイトの溶解によりマツト中に存在する Fe<sup>3+</sup>の一部が Fe<sup>2+</sup>に還元されることに伴いガスが発生したと推測された。自熔炉における反応効率の向上には、攪拌等によりマグネタイトの溶解界面近傍で発生したガスを効率よく除去することが有効であることを提言した。

#### 4. カルシウムケイ酸塩系複合アニオン融体の粘度に関する研究

鋼の連続 casting プロセスにおいて、カルシウムケイ酸塩フラックスは鑄型/鑄片間の断熱材や潤滑剤として重要な役割を担っており、その機能性が半製品である鑄片の品質に影響する。フラックスの潤滑性を評価する上で粘度は、重要な物性値である。フラックスにはフッ化物や窒化物など酸化物以外の成分が含まれるが、フッ素や窒素を酸素と置換した際の粘度への影響は曖昧な理解にとどまっていた。本研究では、カルシウムケイ酸塩融体中の酸素の一部をフッ素や窒素で置換し、粘度測定を行なった。その結果、フッ素は粘度低下に寄与し、窒素は粘度上昇に寄与することを定量的に明らかにした。また、同ガラス中のフッ素および窒素近傍の局所構造を明らかにし、これらの陰イオンの構造的役割から粘度の組成依存性の発現機構を説明した。

#### 5. 放射性廃棄物ガラス固化処理に関する研究

##### 低レベル放射性廃棄物:

福島第一原子力発電所事故における炉心冷却のため、放射性物質を含む汚染水が発生している。汚染水中の放射性元素除去のため、様々な吸着剤が用いられており、吸着剤は使用後に二次廃棄物として排出される。これらの吸着剤系廃棄物を安定に長期保管するため、廃棄物にシリカや酸化ホウ素などの成分を添加・溶解し、化学的安定性の高いガラス固化体を得るプロセスが検討されている。本研究では、吸着剤成分の一つである酸化チタンに適したガラスマトリックスの開発を目指して、廃棄物のガラス中への含有限界濃度を決定した。今後、チタニウムイオンの局所構造と含有限界濃度の相関を明らかにし、酸化チタン系廃棄物に適したガラスマトリックスの組成設計を行う。

##### 高レベル放射性廃棄物:

原子力発電所から発生する使用済燃料を再処理した際に発生する高レベル放射性廃棄物中には、核分裂生成物としてモリブデンが含まれる。酸化モリブデンは、一般的にボロシリケート系融体に対する溶解度が低く、分相や耐水性の低いモリブデン酸塩の結晶化が起りやすい。化学的に安定なガラス固化体を製造するため、ガラスマトリックスの組成設計が重要であるが、基本組成である Na<sub>2</sub>O-SiO<sub>2</sub>-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(NSB)系における MoO<sub>3</sub>の含有限界濃度や溶解形態は不明な点が多い。NSB 系の幅広い組成範囲における MoO<sub>3</sub>の含有限界濃度とモリブデンイオンの酸素配位数が相関することを見出した。

#### 6. マグネシウム合金燃料空気電池の開発およびリサイクルに関する研究

マグネシウム循環社会推進協議会(一社)に協力し、マグネシウム合金をエネルギーキャリアとして用いるサステナブル社会構築への啓蒙活動を引き続き実施した。海水由来のマグネシウムを金属に製錬する実証試験を実施した。再生可能エネルギーを用いたマグネシウム製錬プロセスを中心とする創エネルギープロセスの可能性を検討した。

## 【研究活動報告】ハイブリッドナノ粒子プロセス研究分野 (2022.1~2022.12)

教 授：村松 淳司

助 教：大須賀 遼太

技術補佐員：鈴木 深紀，相馬 美穂，照井 裕子

秘 書：伊藤 百合子

研 究 員：羽澤 萌々子

大学院生：鄧 子建，今西 佳保，山崎 祐輔，陳 夢瑤，諏訪 修平，道信 亮真

学 部 生：飯野 哲平，富木 優介

本研究分野ではナノハイブリッド素材の創製について研究活動を行っている。2022年の研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. メカノケミカル法を用いたゼオライト合成と触媒としての応用(図1)

触媒は化学工業プロセスにおいて重要な役割を担っている。その中でも固体触媒は、反応後の分離・回収・再利用が容易であるため、グリーンケミストリーの観点からも注目を集めている。本研究では、結晶性の多孔質材料である「ゼオライト」に着目している。ゼオライトは特異的な3次元細孔構造に起因する様々な分子形状選択性を示すため、石油化学等の分野で広く用いられてきた。本研究分野では、ゼオライト合成において、メカノケミカル反応と水熱合成を組み合わせた「メカノケミカル法」という独自のゼオライト合成手法を確立している。また、本手法を用いて合成したゼオライトが従来の手法を用いて合成したゼオライトとは異なる触媒特性を示すことを見出している。

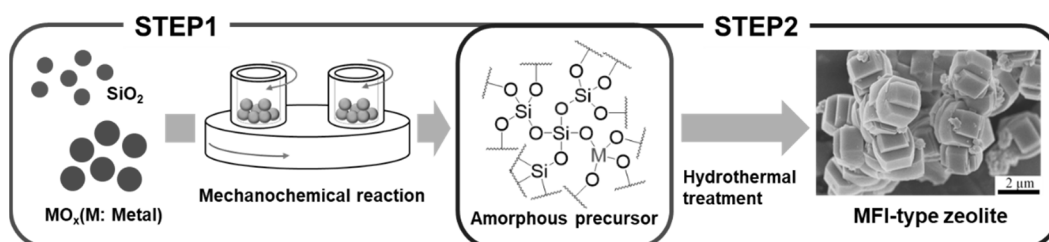


図1 メカノケミカル法によるゼオライト合成

### 2. メタンを低級オレフィンへと転換可能なゼオライト触媒の開発(図2)

シェールガス革命を契機に、極めて安定な分子であるメタンを、化学工業における基幹化合物へと温和な(低温・低圧)条件で変換するための触媒開発が切望されている。本研究では、メタンを低級オレフィンへと転換するための固体触媒の創製を目指し、研究を推進している。そのための触媒材料候補として、ゼオライトに着目した。近年では、本研究分野独自のメカノケミカル法によりゼオライト骨格中に様々な金属元素を導入すること

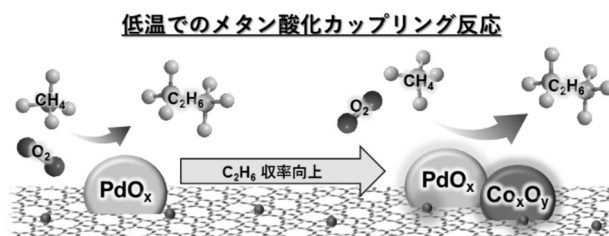


図2 メタン転換反応を志向した新奇ゼオライト触媒の合成

で高活性な触媒が合成できることを報告している。また、液相還元選択析出法によって本ゼオライト触媒上に金属超微粒子を担持することで更なる高機能化を目指している。現在は、メタンの高難度酸化反応として知られる、酸化的カップリング反応による $C_2$ 化合物の合成（エタン，エチレン）に取り組んでいる。また、本研究プロジェクトでは、ゼオライトをはじめとする無機材料合成や計算化学等の専門家と連携した分野横断型の共同研究となっている。

### 3. 放射光を利用した固体触媒の局所構造解析(図3)

種々のキャラクタリゼーションを駆使して、触媒の特性を明らかにすることは、固体触媒を設計する上で重要な過程である。本研究分野では、放射光を利用することで、固体触媒の局所構造解析に取り組んでいる。特に、先に述べたゼオライト触媒に関して精力的に検討を行っている。本研究分野で確立したメカノケミカル法によって合成されたゼオライト触媒は、従来のゼオライト触媒とは異なるユニークな触媒特性を示すことが分かっている。そのユニークな触媒特性が発現する要因を解明するため、X線吸収微細構造（X-ray absorption fine structure: XAFS）測定により、ゼオライト中に含まれる金属種の局所構造解析に取り組んでいる。Ce含有ゼオライトの場合、メカノケミカル法によって合成することで、従来の合成手法に比べて、Ce種を高分散な状態で導入することができ、その結果、酸化的メタンカップリング反応に対する触媒活性が向上することを明らかにしている。

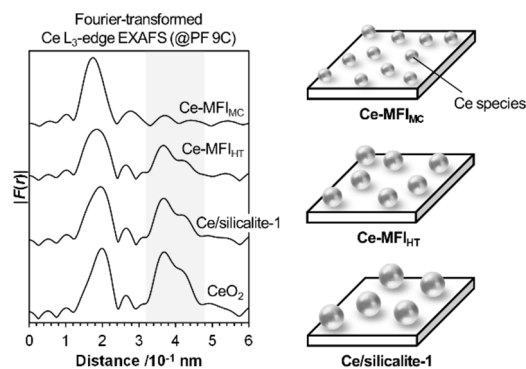


図3 XAFS測定による  
金属含有ゼオライトの局所構造解析

### 4. 温和な条件下でのスズドープ酸化インジウム薄膜の作成(図4)

スズドープ酸化インジウム（Indium Tin Oxide: ITO）は、その高い導電性と透明性を活かして、液晶ディスプレイやタッチパネル内の透明導電膜として利用されている。本研究分野では、これまでに、粒子形態の制御に基づき、添加剤を用いずとも水中で安定に分散可能なITOナノ粒子の合成に成功している。最近では、このようにして得られたITOナノ粒子の分散液を用いたミストデポジション法により、可視光領域において高透明かつ低抵抗なITO薄膜をフレキシブルプラスチックフィルム上に形成できることを見出している。本手法は、大気圧条件下で合成可能であり、高価な製造装置や環境負荷の高い物質を使用しないため、SDGsへの貢献も期待できる。

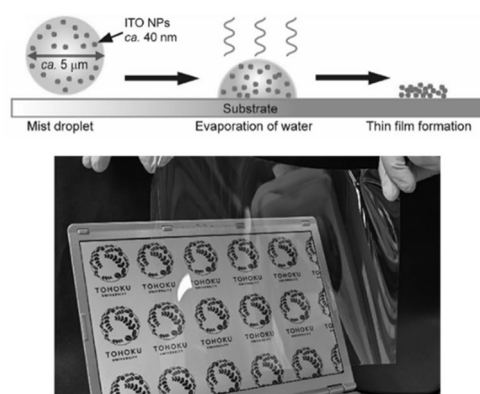


図4 ミストデポジション法によるITO薄膜の作成

その他、多元物質科学研究所内の各研究分野や、工学部、あるいは他大学や民間企業等と積極的に共同研究を行っており、学術的・実学的に意義のある研究の推進に努めている。



## 【研究活動報告】 量子ビーム計測研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：百生敦  
 准教授：關義親 (2022.4~)  
 助教：上田亮介  
 大学院生：蔡铭鑑、小林伸次、永友勇蔵  
 研究生：房怡晨 (2022.10~ 大学院生)

本研究分野では量子ビーム画像計測、特に位相計測に基づく高感度撮影技術について、基礎および応用の両面において研究活動を行っている。当研究分野で創始したX線位相イメージング技術について、特にX線顕微鏡応用への展開を進めると共に、レーザー照射下の材料ダイナミクスなどを可視化するための高速X線位相イメージング/CTの開発を進めた。また、当該技術の中性子ラジオグラフィへの展開を進めている。

### 1. 引張応力下の高分子材料に対する in situ X線位相イメージング

X線位相イメージングは一般的な吸収コントラストでは撮影が難しい高分子材料や生体軟組織などの軽元素からなる物質に有効である。その応用は、静的な状態にある材料のみならず、外場によって変化する動的挙動を対象としたものにも展開可能である。本研究は、そのような展開の一環として、引張試験中の高分子材料を撮影し、strain-stress 曲線を計測しつつ、X線位相イメージングで可視化される材料の構造変化を追跡する実験を行なった。図1に、一例としてテスト試料(ポリスチレン)について得られた結果を示す。マイクロフォーカスX線源と組み合わせた Talbot 干渉計を用い、引張方向と干渉計の感度方向が平行となる条件での結果である。散乱画像において、試験片伸長に伴い画像信号がほぼ一様に増加し、破断後にそれが大きく減少する様子が捉えられている。マイクロクラックが高密度に生成し、破断による応力解放でマイクロクラックが閉じたことによると考えられる。今後、様々な試料(高分子材料は複合材料)の破壊に関する研究に資する撮影手法として活用できると期待される。

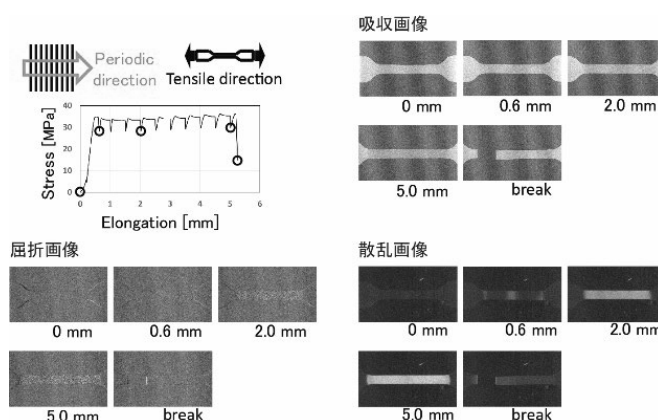


図1 引張試験中の in situ X線位相イメージング結果。テスト試料はポリスチレン。

### 2. 中性子位相イメージングの金属積層造形試料への適用

X線位相イメージングのコンセプトは、中性子ラジオグラフィにもそのまま展開でき、従来では不可能であった新規なイメージングを可能とする。我々は、京都大学研究用原子炉(KUR)に中性子 Talbot-Lau 干渉計を設置し、中性子位相イメージングの応用展開を進めている。図2は、積層造形(3Dプリント)法によるニッケル基合金インコネル 718 ロッドに対して得られた屈折・散乱画像である。一般にレーザー照射による

金属粉末熔融積層造形では、造形物内部に数  $\mu\text{m}$  程度の欠陥（空隙）が生じるために、後処理として熱間等方圧加圧（Hot Isostatic Pressing; HIP 処理）が施される。HIP 処理が実施された試料と実施されていない試料の屈折画像を比較すると、射影プロファイルはよく一致しており、加圧によって大局的な密度変化は生じていないことがわかる。一方、散乱画像では HIP 処理後の試料において散乱コントラストの回復が観察された。このことは、ここでの測定感度（微細構造の自己相関長） $4 \mu\text{m}$  程度の空隙が圧縮され減少したことを示唆している。HIP 処理後の試料については、自己相関長  $0.3 \mu\text{m}$  の条件で散乱コントラストでの CT 撮像も行い、従来の高エネルギー吸収 X 線 CT の空間分解能では確認できなかったサブ  $\mu\text{m}$  の空隙分布を明らかにした。

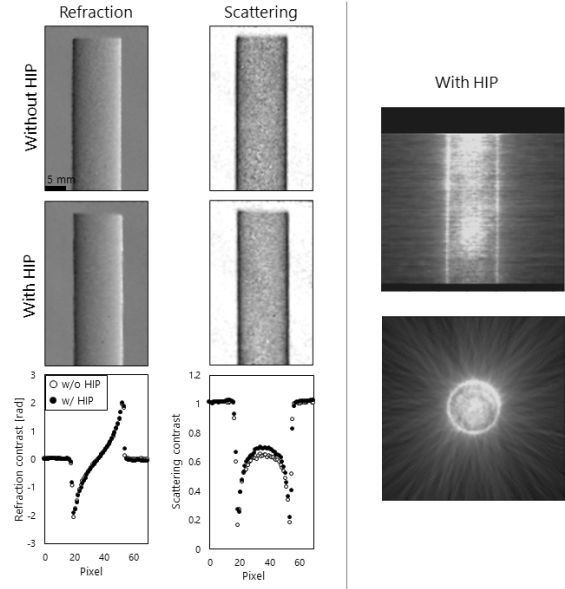


図2 中性子位相イメージングで撮影した積層造形インコネル 718 ロッドの屈折・散乱画像（左）と散乱 CT 像（右）。

### 3. パラボラ位相格子を用いたX線位相イメージング

透過格子を用いるX線位相イメージングでは、格子製作技術の観点から矩形位相格子が一般的に用いられる。これに対し、レンズ作用を有するパラボラ形状の位相格子を採用した場合のX線位相イメージングのポテンシャルに注目してきた。これによる従来にはない新機能のひとつとして、超解像X線位相イメージングがある。パラボラ位相格子が形成する焦点配列の位置に試料を配置して且つスキャンする。適度な距離だけ下流に配置した画像検出器により、各焦点を通ったビームレットの強度、重心、広がりを解析し、吸収、屈折、散乱による画像を生成する(図3)。空間分解能は焦点サイズ(サブ  $\mu\text{m}$ )相当が達成可能であり、且つ、広い視野の撮影が可能である。もうひとつのポテンシャルとして、感度増幅X線位相イメージングがある。このためには、X線 Talbot 干渉計の矩形位相格子を凹凸のパラボラ位相格子の組に置き換える。矩形格子を用いる場合、微分位相(屈折)感度は格子周期に反比例し、位相格子・吸収格子の間隔に比例する。前者には現時点での格子製作技術上の限界がある。後者には、光学系の長大化およびより空間的干渉性の高い X 線の使用要求が伴う。凹凸パラボラ格子を使用すれば、これらの問題を回避して感度のみを増幅できる。原理実証を終えており、詳細な光学原理の理解を進めている。パラボラ格子は、ドイツ KIT との国際共同研究により LIGA で製作したものである。さらに、二光子リソグラフィによる回転放物面アレイの開発も進めている。

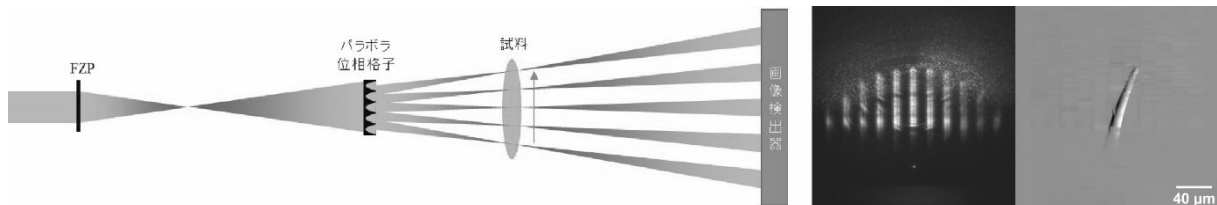


図3 超解像X線位相イメージング光学系 (@SP8) と撮影例。

## 【研究活動報告】 構造材料物性研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：木村宏之、(兼)佐藤 卓  
 助教：坂倉輝俊、山本 孟  
 大学院生：上山幸子(2021.4 修士課程進学)  
 学部学生：山元洸生

本研究分野では、X線・放射光・中性子・ミュオンなどの量子ビームの相補的・融合的な利用と、超高压合成法を用いた新規物質探索により、様々な機能性物質が示す新奇物性の構造的起源(構造物性)についての研究活動を行っている。また、そのための計測技術や装置の開発も行っている。2022年の研究活動を、以下のように概括する。

### 1. イルメナイト型バナジウム酸化物における V-V 二量体の形成 [1]

イルメナイト型バナジウム酸化物  $MVO_3$  ( $M = Mg^{2+}, Mn^{2+}, Co^{2+}$  など) は、4-8 万気圧 (GPa)・900-1100°C の超高压・高温条件で生成する化合物である。1970 年代に合成は報告されていたが、結晶構造や物性の詳細は不明であった。そこで今回、多元研に設置された Walker 型超高压合成装置を用いて  $MgVO_3$  の純良な試料を合成し、SPring-8 BL02B2 において放射光 X 線回折を行い、精密な結晶構造解析を行った。 $MgVO_3$  の結晶構造中では、4 価のバナジウムイオンがハニカム格子を形成する。結晶構造解析の結果から、ハニカム格子は正六角形から歪んでおり、隣接するバナジウムイオンが接近して二量体を作ることが分かった。V-V 二量体はハニカム格子ではしご状に整列する(図 1)。この二量体は 500 K 以上で消失し、500 K 以下になると再び出現する。二量体の形成と崩壊に伴って、金属絶縁体転移と非磁性化が起こることから、二量体の起源はバナジウムイオン間に形成される分子軌道であることを明らかにした。

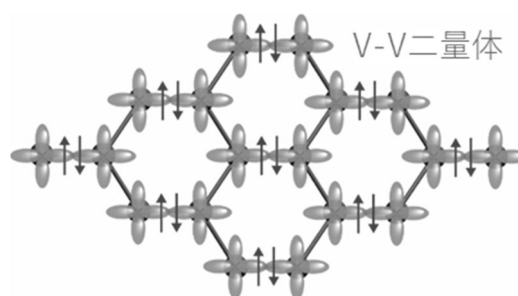


図 1 放射光 X 線回折で明らかにした  $MgVO_3$  における V-V 二量体の配置

[1] **Hajime Yamamoto\***, **Sachiko Kamiyama**, Ikuya Yamada, and **Hirovuki Kimura** J. Am. Chem. Soc. 144, 3, 1082–1086 (2022). (オンライン公開は 2021/12/17)

### 2. イルメナイト型 $CoVO_3$ における V-V-二量体の形成と磁気状態制御の可能性 [2]

イルメナイト型構造を持つ  $CoVO_3$  においても、 $MgVO_3$  と同様に、V-V 二量体化が起こる。 $CoVO_3$  に含まれる 2 価のコバルトイオンは、その配位環境によって磁気基底状態が変化することが知られている。イルメナイト型構造を持つ  $CoTiO_3$  では、結晶構造に由来する三方対称性により、 $J_{\text{eff}} = 1/2$  の状態が基底状態となる。一方で  $CoVO_3$  では、2 価のコバルトイオンは  $S = 3/2$  の状態が基底状態となることを、本研究で明らかにした(図 2)。V-V 二量体の形成により、結晶

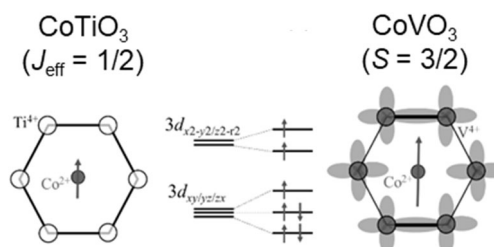


図 2  $CoVO_3$  における磁気基底状態と二量体の関係

構造の対称性は菱面体晶系から三斜晶系へと低下する。対称性の低下に伴って  $3d$  軌道の縮退が解消されることで、磁気基底状態の変化が起こったと結論付けた。この発見から、 $\text{CoVO}_3$  において V-V 二量体の有無を切り替えることで、磁気基底状態を制御できると考えられ、新しい磁気記録の原理として研究を進めている。

[2] **Sachiko Kamiyama**, Ikuya Yamada, Masayuki Fukuda, Yuichi Okazaki, Takashi Nakamura, Takumi Nishikubo, Masaki Azuma, **Hiroyuki Kimura**, and **Hajime Yamamoto\*** Inorganic Chemistry 61, 20, 7841–7846 (2022).

### 3. イルメナイト型 $\text{MgVO}_3$ 焼結体における負熱膨張現象 [3]

イルメナイト型構造を持つ  $\text{MgVO}_3$  を焼結体にする事で、負の熱膨張特性（温めると縮む）が現れることを発見した(図 3)。イルメナイト型構造において、V-V 二量体ははしご状に整列する。ある一方向に二量体が形成されることから、異方的な結晶格子の変形が起こる。焼結体の形態で結晶が異方的な変形をすると、焼結体中に存在する間隙を埋めるような効果が働き、焼結体の体積が収縮することが知られている。 $\text{MgVO}_3$  焼結体では、V-V 二量体の形成と崩壊が起こる前後の温度において、およそ-0.7%の比較的大きな負熱膨張を示すことが分かった。このような物質は、熱膨張の制御材料などへの応用が期待される。

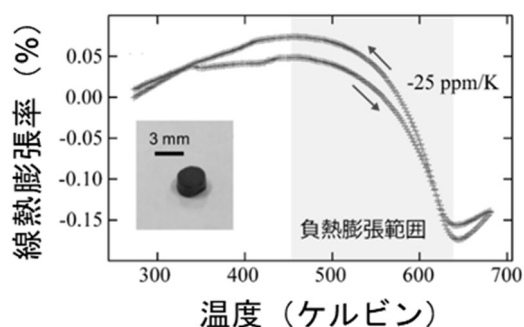


図 3  $\text{MgVO}_3$  が示す負の熱膨張特性

[3] **Hajime Yamamoto\***, **Sachiko Kamiyama**, Takumi Nishikubo, Masaki Azuma, Ikuya Yamada and **Hiroyuki Kimura** Applied Physics Letters 120, 201901 (2022).

### 4. Nano Terasu での電子状態解明につながる、高圧下での単結晶育成 (イルメナイト型 $\text{MnVO}_3$ ) [4]\*

高圧下での単結晶育成は、拡散速度の低さや合成容器の制約などから、一般的に困難である。今回、地球深部における鉱物結晶の成長をヒントに、イルメナイト型構造を持つ  $\text{MnVO}_3$  の単結晶の育成に成功した(図 4)。KEK-PF の BL-8A と BL-14A で行った放射光 X 線回折より、単結晶試料でも V-V 二量体の形成と崩壊が起こることを明らかにした。今後 Nano Terasu において、この単結晶試料を用いた共鳴非弾性 X 線散乱 RIXS や角度分解光電子分光 ARPES を行うことで、V-V 二量体の形成メカニズムを明らかにしていく。

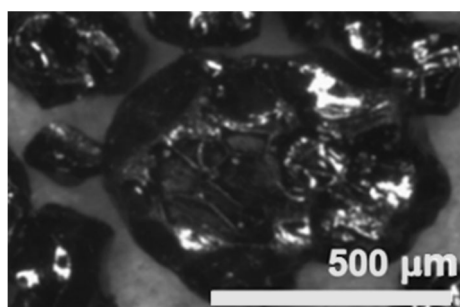


図 4 超高压下で育成した  $\text{MnVO}_3$  単結晶

[4] **Sachiko Kamiyama**, **Terutoshi Sakakura**, **Hiroyuki Kimura**, Shunji Sagayama, Hajime Sagayama, Ikuya Yamada, and **Hajime Yamamoto\*** Crystal Growth & Design (2023) オンライン公開 (\*公開されたのは 2023 年なので、参考までに記載した。)

**【研究活動報告】 高分子物理化学研究分野 (2022.1~2022.12)**

教授：陣内 浩司  
講師：丸林 弘典  
助教：宮田 智衆、王 孝方  
技術補佐員：熊谷 明美、今崎 篤、森 正、小林 祥子  
大学院生：渡邊 大介、狩野見 秀輔、青木 惇聖、東 宏一、木下 空  
学部学生：佐藤 匠、渡辺 壮之亮

本研究分野では、高分子材料設計の基礎となる複雑なナノ構造の自己組織化やその変形・破壊挙動について、透過型電子顕微鏡(TEM) や X 線散乱により解明を行っている。2022 年の研究活動は以下のように概括される。

**1. 高分子球晶の光・電子相関顕微鏡解析と畳み込みニューラルネットワークを用いた球晶の自動検出**

高分子材料は軽量性・加工性・柔軟性などの特性から、繊維・フィルム・容器など産業的に広く使われている。ポリエチレンなどの結晶性高分子の内部には、nm から  $\mu\text{m}$  に渡る階層構造が形成されており、 $\mu\text{m}$  の領域では、微結晶が球状に自己組織化した「球晶」が形成されることがある。球晶が小さくなると材料の透明性や耐衝撃性が向上するといったように、球晶の数と大きさ、それらの分布は物性と密接に関係している。これまでは偏光顕微鏡(POM)による球晶の観察が主流であったが、POM では可視光を光源としているため数  $\mu\text{m}$  以下の大きさの球晶を観察することは困難であった。そこで我々は、POM と透過型電子顕微鏡(TEM)を組み合わせた相関顕微鏡法(CLEM)により、数  $\mu\text{m}$  の微細な球晶まで観察するとともに、その構造パラメータの自動検出の検討を行った。

試料としてポリ(L-乳酸)(PLLA)を用いた。精製した PLLA をスライド・カバーガラスに挟んで 200 °C で熔融後、120 °C で 1 分間熱処理して結晶化させた。この試料をまず直行偏光条件の POM で観察した。その後、試料をスライド・カバーガラスから回収し、POM の観察視野を含むようにマイクロームで 200 nm 厚の超薄切片を調製し、SiN チップ上に回収した。これを加速電圧 120 kV の TEM (JEM-1400Flash with Limitless Panorama) で観察した。自動モニタージュシステムにより 702

枚の TEM 像を繋ぎ合わせ、広域 TEM 像(数 100  $\mu\text{m}$  四方)を作成し、畳み込みニューラルネットワークを用いた物体検出システム(YOLO)により球晶の自動検出を行った。

POM 観察では、負の複屈折を有する PLLA の球晶が観察された。結晶化が完了していないため、孤立した球晶、互いに衝突した球晶、非晶領域が混在していた。同一視野の POM 像と広域 TEM 像を比較すると、TEM 試料では超薄切片化による試料の変形が確認された。そこで、POM 像を参照することで補正を行い、試料変形の無い広域 TEM 像を得ることに成功した(図1)。POM 像と広域 TEM 像との相関を解析し、POM の分子配向情報、TEM の詳細な形態情報など、各手法の長所を組み合わせることで、数 100  $\mu\text{m}$  の粗大な球晶から数  $\mu\text{m}$  の微細な球晶まで検出することを可能にした。さらに、広域 TEM 像から球晶を高速に検出することに

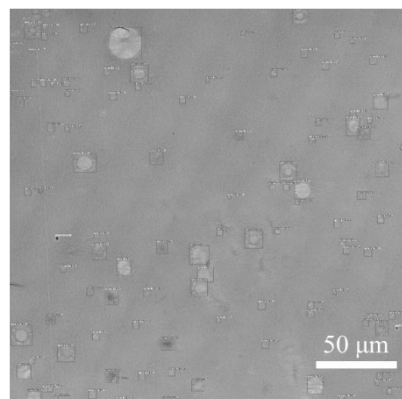


図 1: 広域 TEM 像(250  $\mu\text{m}$  四方)から高分子球晶を自動検出した結果. 赤枠は検出された球晶とその幅・高さを示す.

成功し(100 個の検出に 3 秒)、その大きさの分布と空間充填率(相対結晶化度)を算出した(図1)。以上より、CLEM は材料中に不均一に分布した結晶を分析する際に有効であり、例えば、複合材料中の添加剤表面で形成される結晶の観察・分析も期待される。また、球晶の自動検出法は高速で強力であるため、大量の画像データの解析が必要な動的観察や 3 次元観察において威力を発揮すると期待される。

## 2. ブロック共重合体の構造転移の時間分解電子線トモグラフィによる直接観察

2 種類の高分子を共有結合で連結したブロック共重合体は、数~数十 nm の構造周期をもつ規則構造を自己組織化することが知られている。その自己組織化ナノ構造は、2 種類の高分子の相対的な長さの比により決定されるが、温度(あるいは圧力)を変化させることによって、他の種類のナノ構造に転移させることができる。このような構造の転移を構造-構造転移(Order-Order Transition, OOT)と呼ぶ。OOT は、ブロック共重合体のナノ構造の制御のための基礎的な知見であり、ナノ構造の応用においても重要である。しかし、過去数十年にわたり精力的に研究が進められてきたにも関わらず、OOT の詳細についてはよく分かっていない。これは、計算機シミュレーションによる(OOTに伴う)構造の組み替えは多様な OOT について予測されていたものの、その変化を実験的に観察する術が無かったことに原因がある。

本研究では、ポリスチレン-ポリ(2-ビニルピリジン)ブロック共重合体(PS-*b*-P2VP)における六方充填円柱状(シリンダー)構造(HEX) から六方穿孔層状構造(Hexagonally perforated layer, HPL)への OOT について、その構造変化を時間分解電子線トモグラフィにより実空間観察した(図2)。その結果、この OOT は核生成と成長プロセスを介して進行することが明らかとなった。核生成段階では、円柱状ドメインは初期の準安定状態から熱揺らぎにより遷移します。シリンダー界面に浪

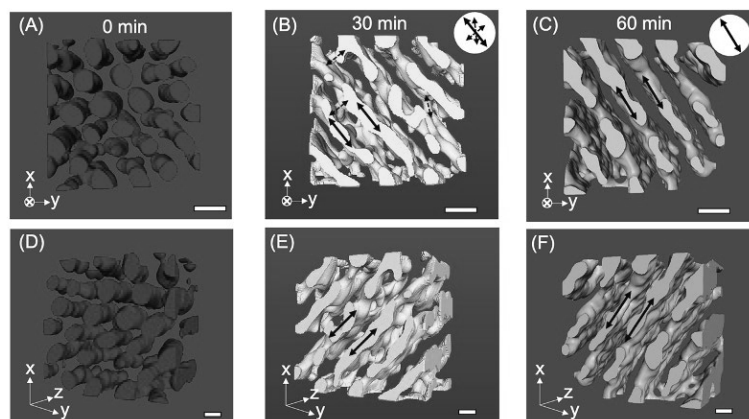


図2: PS-*b*-P2VP の OOT における構造変化。(A,D)は加熱前のシリンダー構造、(B,E)180°Cで 30 分加熱後、(C,F)さらに 60 分まで加熱後、の 3 次元画像。上段と下段は同じ構造を異なる方向から見た構造で、スケールバーは 25nm である。図中の矢印は層構造の合体方向を表す。

打が生じ、隣接する波打ち界面をもつシリンダードメインが合体して波状構造となり、六角形状に穴が開いた層状の核が形成される。成長段階では、各々の核が臨界サイズを超えた後、隣接する中間体が合体して AB 型スタッキング (P63/mmc 空間群) をもつ HPL 構造に変化する。結晶粒内の HPL 配向は、OOT の途中過程で次第に整ってくる様子も観察された。このような HEX から HPL への OOT のメカニズムはこれまで報告されておらず、ドメインの組み替えの様子を、試料の同一視野で観測した初めての例である(図3)。

このような OOT 速度論的経路を理解することは、ブロック共重合体の形態学的進化や、多様なナノテクノロジー用途向けの秩序だった構造を得るために適切な遷移経路を設計するのに役立つと考えられる。

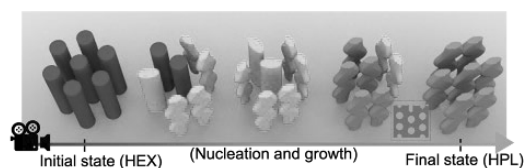


図3: PS-*b*-P2VP の OOT を表す模式図。

**【研究活動報告】 量子フロンティア計測研究分野 (2022.1~2022.12)**

教授：矢代 航

准教授：山本 達(2022.10~)

助教：梁 暁宇

学部学生：大門 雅治(M1), 那須川 蓮(B4), 鴻 唯(B4), 生方 鈴乃(B3) (2022.5~),  
本間 丈晴(B3) (2022.5~)

我々が生きている三次元 (3D) + 時間という「4D 世界」には、最先端の計測テクノロジーでもアクセスできない広大なマイクロの世界が広がっている。当研究分野では、X線などの高エネルギービームの量子性、先端的なマイクロ・ナノファブリケーション技術、データサイエンス技術を駆使することにより、従来の限界を飛躍的に超える新たなイメージング技術を開発し、マイクロメートルオーダー以下、かつミリ秒以下という前人未踏の4D世界のフロンティアの開拓に挑んでいる。2022年の研究活動を以下にまとめる。

**1. ミリ秒4DX線CTの開発**

本研究室では世界に先駆けてミリ秒時間分解能のX線トモグラフィ (CT) に成功している。最近、JST CREST「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用」領域の研究代表者チームとして、シンクロトロン放射光をマルチビーム化する光学素子を開発し、圧縮センシングと呼ばれるデータサイエンス技術を駆使して、試料を回転することなく、1ミリ秒でX線CTが実現できることも実証している。

図1は、試料回転なし放射光4DX線CTとしては世界最高である8ms時間分解能の原理実証を行った結果である<sup>1)</sup>。実験はSPring-8の偏向電磁石ビームラインであるBL28B2で行った。偏向電磁石光源からの横長ビーム (約50mm (水平) × 約5mm (鉛直)) のビームを、独自に開発した三段双曲柱型単結晶マルチビーム光学素子<sup>2)</sup>により、約30ビームに分割し、それぞれのビームの投影像を撮影した。投影像の撮影にも、独自に開発した有効画素サイズ20 $\mu\text{m}$ の間接撮像型のマルチビーム画像検出器を用いた<sup>3)</sup>。試料としては、直径50 $\mu\text{m}$ のタングステンワイヤーを用いた。図1は、このワイヤーを曲げ

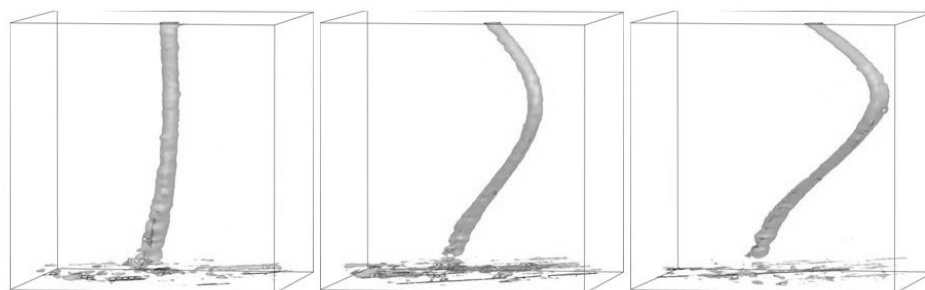


図1 直径50 $\mu\text{m}$ のタングステンワイヤーをゆっくり曲げた様子の4DX線CT (時間分解能: 8ms, 4,000ms ほどの3D画像)<sup>1)</sup>。

ながら 4DX 線撮影した結果であり, 4,000 ms おきの 3 コマのみ示してある. この原理実証実験では, 空間分解能  $38 \mu\text{m}$ , 時間分解能  $8 \text{ms}$  であったが<sup>1)</sup>, 現時点では, 画素サイズ  $10 \mu\text{m}$  で, さらなる空間分解能, 時間分解能の向上も達成できている.

## 2. 鉛直偏光型マルチビーム光学系の開発

文献 2) のマルチビーム光学系は, 水平偏光の白色放射光に対して, 水平面内にビームを集めたため, 散乱角が  $90^\circ$  に近づくと, 反射強度が極端に低下するという問題があった (散乱角  $90^\circ$  は, いわゆるブリュースター角に対応). すなわち, CT 再構成を行う際に,  $90^\circ$  付近に角度欠損が生じてしまう欠点があった. 高エネルギー加速器

研究機構の世界で唯一の縦型ウイグラーを利用すれば, 鉛直偏光の白色放射光が利用でき, 単結晶によるスキュー反射を利用すれば, ほぼ水平面内にビームを集めることができることが期待され, かつ, 散乱角  $90^\circ$  付近の角度欠損も生じないことが期待された. 図 2 に縦型ウイグラー用に開発したマルチビーム光学系を, 図 3 に, 直径  $50 \mu\text{m}$  のタングステンワイヤーのあるスライスの CT 再構成像を示す<sup>4)</sup>. 投影像の撮影に  $40 \mu\text{m}$  厚の多結晶 GADOX を用いたため, 図 1 に比べると空間分解能が悪いが, 原理実証に成功しているのが分かる.

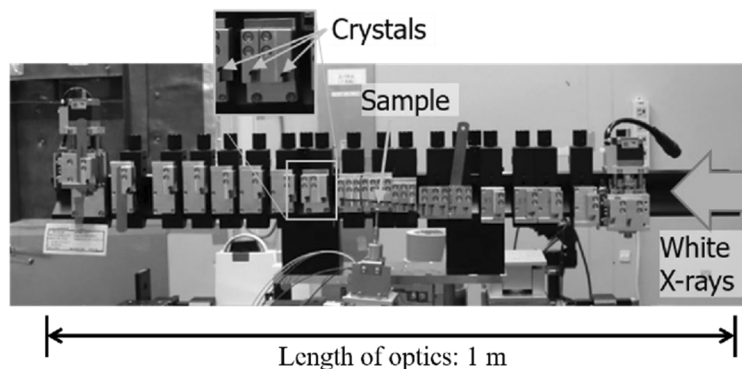


図 2 縦型ウイグラー用に開発されたマルチビーム光学系の写真<sup>3)</sup>.

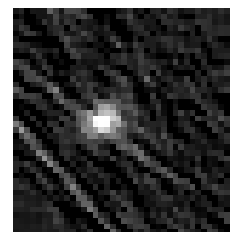


図 3 図 2 のマルチビーム光学系により得られた直径  $50 \mu\text{m}$  のタングステンワイヤーの CT 再構成像 (視野:  $0.8 \text{mm} \times 0.8 \text{mm}$ )<sup>4)</sup>.

1) W. Yashiro, X. Liang, W. Voegeli, E. Arakawa, T. Shirasawa, K. Kajiwara, K. Fujii, K. Hashimoto, and H. Kudo, “Millisecond-Order Temporal-Resolution Synchrotron X-ray Tomography without Sample Rotation”, J. Phys.: Conf. Ser. 2380 (2022) 012121.

2) W. Voegeli, K. Kajiwara, H. Kudo, T. Shirasawa, X. Liang, and W. Yashiro, “A Multi-beam X-ray optical system for high-speed tomography”, Optica 7 (2020) 514-517.

3) T. Shirasawa, X. Liang, W. Voegeli, E. Arakawa, K. Kajiwara, and W. Yashiro, “High-speed multi-beam X-ray imaging using a lens coupling detector system”, Appl. Phys. Express 13 (2020) 077002.

4) W. Voegeli, X. Liang, T. Shirasawa, E. Arakawa, K. Kajiwara, K. Hyodo, H. Kudo, W. Yashiro, “Development of multi-beam optics for time-resolved X-ray tomography: from  $\pi$ -polarization to  $\sigma$ -polarization”, J. Phys.: Conf. Ser. 2380 (2022) 012063.



## 【研究活動報告】 量子光エレクトロニクス研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：秩父 重英  
 助 教：嶋 紘平  
 学術研究員：石黒 徹  
 技術職員：森 直(2022.9,10)、向田 彰(2022.11~)  
 技術補佐員：瀬川 靖子(~2022.7)、山田 由美(2022.7~)  
 大学院生：Liyang Li、粕谷 拓生、王 伯元、Wu Leiyu (2022.10~)  
 学部学生：江波 侑哉  
 研究生：Wu Leiyu (~2022.9)

本研究分野では、GaN、AlN、AlGaIn、AlInN、BN、ZnO、NiO 等の禁制帯幅( $E_g$ )が大きい(WBG)窒化物・酸化物半導体材料・デバイスの研究を進めている。超臨界アンモニアを用いる GaN 単結晶成長や WBG 半導体単結晶薄膜のエピタキシャル成長を軸とする量子構造形成を行う一方、フェムト秒レーザやフェムト秒レーザ励起パルス電子線を励起源に用いる時間・空間分解分光計測法を開発して局所発光ダイナミクスの研究を行い、理工学の学際発展に寄与する。拠点活動以外にも多くの企業や機構と共同研究を展開している。

### 1. 低圧酸性アモノサーマル(LPAAT)法による 2 インチ径 $c$ 面バルク GaN 単結晶の成長

WBG 半導体 GaN の大きな  $E_g$  と高い電界飽和速度による高耐圧・高周波応答特性を活かしたパワーデバイスは、既存の Si や SiC デバイスより省エネ性能に優れ SDGs 達成に貢献できる。その実現には大口径で反りやモザイクの無い GaN 単結晶基板が必須であり、本分野は、企業と共同で量産に適する LPAAT 法を開発し、直径 2 インチ相当のバルク GaN 単結晶の成長に成功した。当該 GaN 結晶は外観が透明かつ表面が平坦で結晶のモザイク性も低く純度も高いことが確認された(自由励起子によるバンド端発光が支配的であった)。高品質な LPAAT 成長 GaN 基板は信頼性が高い縦型 GaN パワー素子の実現に貢献できると期待されている。

[K. Kurimoto, Q. Bao, K. Shima, T. Ishiguro, S. F. Chichibu 他, Appl. Phys. Express **15**, 055504 (2022).]

### 2. $c$ 面 GaN 基板と格子整合する組成近傍の $Al_{1-x}In_xN$ 薄膜( $0.11 \leq x \leq 0.21$ )の室温非輻射再結合寿命

$Al_{1-x}In_xN$  ( $x$ : InN モル分率)は、 $E_g$  に対応する波長を深紫外(DUV)から赤外まで変化させられる非混和性の疑似二元系固溶体である。波長 280 nm 以下の DUV 光は、殺菌・ウイルス不活化だけでなく各種励起光源としての応用価値が高く、既存光源の置換による省エネ・小型化も可能で SDGs 達成に貢献できる。加えて、GaN に格子整合する  $x$  の  $Al_{0.82}In_{0.18}N$  は横方向に電流を流すパワースイッチング素子のバ

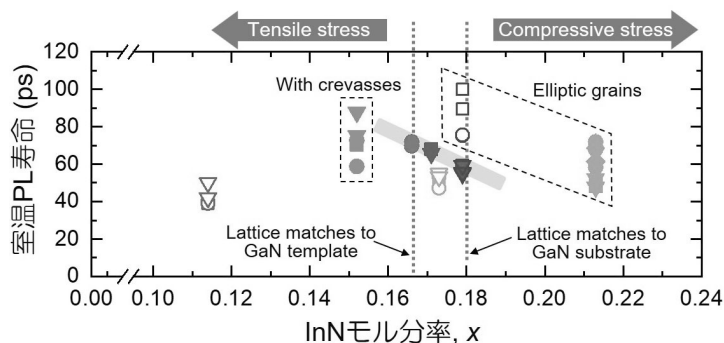


図 1. 2 インチ GaN 基板および GaN テンプレート上に成長させた  $Al_{1-x}In_xN$  薄膜の室温  $\tau_{PL}$  の InN モル分率依存性

リア層として利用できるため省エネに大きく貢献する。本分野は、有機金属気相エピタキシャル法を用い  $c$  面 GaN 基板上に成長させた  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$  薄膜 ( $0.11 \leq x \leq 0.21$ ) の室温発光寿命をフェムト秒レーザ励起時間分解フォトルミネッセンス (PL) により計測し、 $x$  および基板の貫通転位密度が、禁制帯中央近くに準位を持つ再結合中心 (MGRC) の濃度に与える影響を明らかにした。図 1 に示すように、GaN 基板上の  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$  では  $x$  の増加に従い室温 PL 寿命 ( $\tau_{\text{PL}}$ ) が減少したため MGRC 濃度が増加したと考えられる。その原因として、蒸気圧の高い In を結晶中に多く取り込むため成長温度を低下させた結果表面マイグレーションが不足し、MGRC である空孔型欠陥の濃度が増加したと考えられる。また、表面形態に関わらず  $x$  が高い試料の室温  $\tau_{\text{PL}}$  は比較的短かく表面欠陥よりもバルクの MGRC 濃度に制限されていることが分かった。貫通転位密度が高い GaN テンプレート上に成長させた  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$  の室温  $\tau_{\text{PL}}$  は GaN 基板上の薄膜より短かく、貫通転位密度の増加により空孔型欠陥等の濃度が増加したと考えられる。以上の検討結果から、 $c$  面  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$  薄膜成長において、高い成長温度および低い貫通転位密度の基板の使用により MGRC 濃度の低い薄膜成長が可能であることが示された。

[L. Y. Li, K. Shima, M. Yamanaka, T. Egawa, T. Takeuchi, M. Miyoshi, S. Ishibashi, A. Uedono, and S. F. Chichibu, *J. Appl. Phys.* **132**, 163102 (2022).]

### 3. 化学気相成長させた六方晶窒化ホウ素薄膜における間接遷移励起子の発光ダイナミクス

二次元ハニカム構造の BN 層が積層された六方晶 (h)BN は、室温で  $E_g$  が約 6 eV の WBG 半導体である。hBN は間接遷移型バンド構造ながら波長 215 nm 付近の強い発光を呈するため、DUV 発光素子用材料として期待できる。本分野では、炭素を含まない分子構造の原料を用いサファイア基板上に化学気相堆積 (CVD) 成長させた高純度 hBN 薄膜における、間接遷移励起子 (iX) の再結合による発光の時間分解 PL および空間分解カソードルミネッセンス (CL) 計測を行った。図 2 に示すように、CL スペクトルにおける支配的な発光ピークは iX 再結合のフォノンレプリカ (5.7-5.9 eV) であり、炭素由来と報告されている 4.0 eV 付近の発光帯の強度は 1 桁以上低かった。iX の  $\tau_{\text{PL}}$  は約 54 ps と短く、MGRC によりキャリアが捕獲され再結合してしまう過程に支配されている。連続励起時の iX の CL 強度は、100 K 以上において温度とともに増加した。この結果は半導体発光材料としては特異であり、バンド構造に由来する iX の高い状態密度と強い束縛性、強い励起子フォノン相互作用が寄与していると考えられる。一方、多型であるグラファイト構造 BN 相からの発光 (12 K において 6.035 eV) を CVD 薄膜において初めて発見し、hBN の iX と同程度の発光効率と温度依存性を呈することを明らかにした。

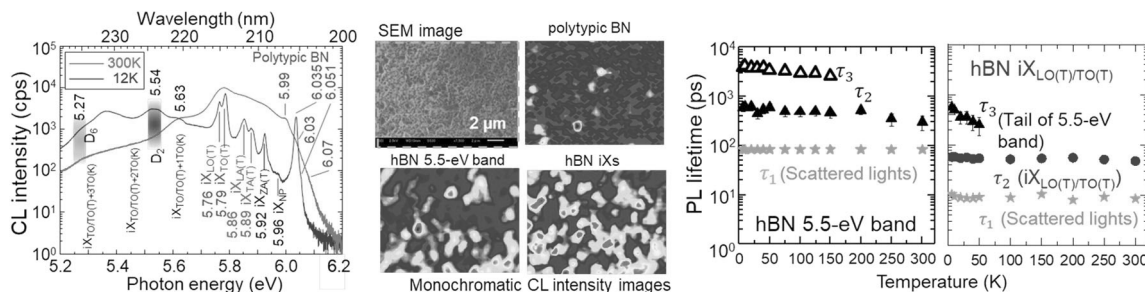


図 2. CVD 成長 BN 薄膜の CL スペクトル、空間分解 CL 発光マッピング、 $\tau_{\text{PL}}$  の温度依存性

[S. F. Chichibu, K. Shima, K. Kikuchi, N. Umehara, K. Takiguchi, Y. Ishitani, and K. Hara, *Appl. Phys. Lett.* **120**, 231904 (2022). Selected as Featured Article]

## 【研究活動報告】 放射光可視化情報計測研究分野 (2022.1~2022.12)

教 授 : 高橋 幸生

准 教 授 : 篠田 弘造

助 教 : 石黒 志

大 学 院 生 : 阿部 真樹、上松 英司、高澤 駿太郎、戸塚 務、佐々木 雄平

本研究分野では、先進的 X 線光学技術を駆使した放射光イメージング・分光法の開発を基軸とし、それを様々な実用材料の観察に応用し、データ科学的アプローチを活用することで、材料の構造-機能相関を解析する研究を行っている。2021 年の研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. テンダー X 線スペクトロタイコグラフィによる含硫黄高分子粒子内部の硫黄化学状態の可視化

硫黄やリンなどの軽元素は、電池材料や生体が機能を発現する際に重要な役割を果たすことが知られている。それらの軽元素が機能発現にどのように関与しているかを正しく理解するためには、物質中での分布や化学状態を非破壊かつ高分解能で観察できる計測手法が必要である。当研究室では、干渉性に優れた X 線を用いて物質の微細構造と化学状態を高分解能で観察する X 線スペクトロタイコグラフィの計測を硫黄やリンなどの K 吸収端が含まれるテンダー X 線のエネルギー領域で実施可能なシステムを大型放射光施設 SPring-8 において開発してきた。本研究では、本システムによる硫黄化学状態イメージングの実証実験として、リチウム硫黄電池の正極材料として新たに開発された硫黄変性ポリブチルメタクリレート(主要構成元素:硫黄、炭素)の粒子(直径約 5  $\mu\text{m}$ )を硫黄の K 吸収端(~2.47 keV)近傍である 2.46-2.50 keV の 30 点で計測した。走査型電子顕微鏡像と同様の形状を示す吸収像の再構成に成功したほか、吸収像より取得した空間分解 X 線吸収スペクトルが試料粉末から得られた参照スペクトルと相似形状を示したことから、計測精度の高さを確認できた(図 1 上段)。粒子内の元素分布や化学状態

について詳細に解析するため、位相シフト量や空間分解 X 線吸収スペクトル中の硫黄-硫黄(S-S)結合と硫黄-炭素(S-C)結合の量を反映するピーク強度を硫黄量で規格化し、二次元的にマッピングした(図 1 下段)。これらの分布は一貫して粒子の中心付近ほど炭素が多く、表面付近ほど硫黄が多い傾向を示唆しており、この結果は電子顕微鏡により得られた別粒子の断面における元素分布とも整合していた。このことは、試料内部における硫黄の化学状態を非破壊かつ高空間分解能で観察可能なテンダー X 線タイコグラフィの有用性を示すものである。

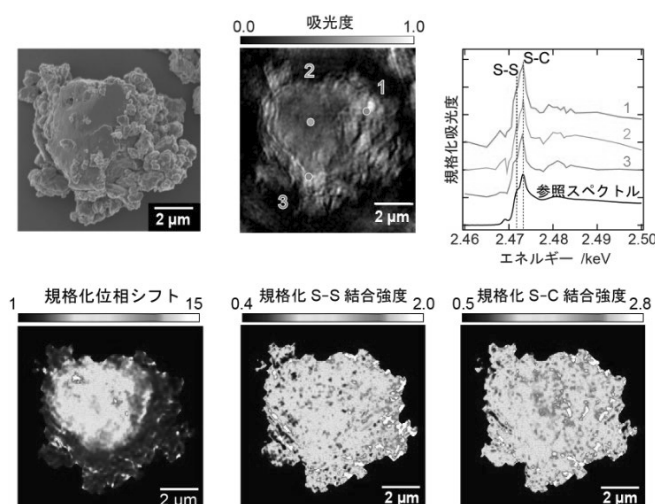


図 1 テンダー X 線タイコグラフィによる含硫黄高分子粒子の測定結果。

## 2. Kramers-Kronig 関係の性質を利用したスパース X 線スペクトロタイコグラフィの提案

X 線スペクトロタイコグラフィは試料の高空間分解化学状態イメージを提供するが、現状、マイクロメートルサイズの試料の 2 次元空間分解 XANES を得るのに 6-8 時間、EXAFS に至っては数日と時間がかかる。この課題はハード面では低エミッタンス光源の利用で解決できるが、ソフト面での計測効率化も望まれている。本研究では、少エネルギー点数の X 線スペクトロタイコグラフィ計測データから XAFS スペクトルを復元可能なアルゴリズムを提案・実証した。X 線タイコグラフィの特徴の一つに、吸収像と位相像が同時に再構成できる点が挙げられ、空間分解 XAFS・位相スペクトルは吸収・位相像をエネルギー軸方向に発展させることで得られる。XAFS と位相スペクトルとの間には Kramers-Kronig 関係(KKR)が成り立ち、一方のスペクトルは他方と相補的關係であるため、計測エネルギー点間のスペクトル情報を潜在的に含んでいる。この KKR の性質に注目し、少エネルギー点からの XAFS・位相スペクトルを復元するアルゴリズムを構築した。まず、MnO 結晶データと FEFF 9.6 から生成した EXAFS 領域( $k \sim 18 \text{ \AA}^{-1}$ )の XAFS・位相スペクトルについて復元アルゴリズムの計算機シミュレーションを行った。その結果、エネルギー点間隔を  $\Delta k = 0.8 \text{ \AA}^{-1}$  に間引いたデータに対しても、Mn-O、Mn-Mn 配位の定量解析が可能なスペクトルの復元に成功した。また、X 線スペクトロタイコグラフィ実験から得られた MnO 粒子の EXAFS データ ( $k \sim 10 \text{ \AA}^{-1}$ )についても  $\Delta k \sim 0.4 \text{ \AA}^{-1}$  程度まで点数を間引いても定量的 EXAFS 解析可能なスペクトルを復元することができた。本アルゴリズムにより、X 線スペクトロタイコグラフィの計測時間の短縮・効率化に貢献できると考えられる。

## 3. 高リン鉄鉱石中のリン存在状態分析とオキシ水酸化鉄固体表面へのリン酸イオン吸脱着挙動解析

良質な鉄鉱石資源の枯渇、品位低下とともに問題となることが予想されるのがリン品位上昇である。豪州産鉄鉱石に対してはリン品位上昇への対応が喫緊の課題である。これらの鉄鉱石は酸化鉄、オキシ水酸化鉄を主成分とするが、リンの多くは後者の微細結晶集合組織中に、リン酸イオン吸着体あるいはリン酸化合物のかたちで存在する。本研究においては、鉄鉱石中リンの省エネ除去プロセス開発やそれに付随する包括的な課題に対応する研究プロジェクトの一環として、鉄鉱石中に存在するリンの存在状態評価、および複数の異なる状態で存在するリンの各々を模擬した合成試料の作製とリン酸イオン吸着、脱離回収プロセス条件の検討を進めている。鉄鉱石中リン存在状態解析においては、放射光を用いた微小領域 P K 端 XAFS 測定実験および解析を通じ、鉱物集合組織や Al, Si などの共存元素濃度との相関を示す結果を得た。また鉄鉱石中のオキシ水酸化鉄が Fe に対して数%程度 Al で置換されていることを確認したので、一部 Al 置換したオキシ水酸化鉄粒子を液相合成により取得し、その水への溶出特性およびリン酸イオン吸着特性を系統的に調査した。結果、Fe の一部を Al が置換することにより、置換のない場合と比べより高 pH 条件で Fe および Al イオンの溶出が起きること、それに伴ってリン酸イオン固定量が増加すること、高 pH 液へのリン脱着回収容易であることを見出した。鉄鉱石に対する熱還元気化やアルカリ焙焼による液相抽出など、脱リン・回収プロセス開発において有用な知見を得た。

## 4. 酸化物融体中の金属化学状態と物性の関係解明

ケイ酸塩ベースの酸化物融体は、金属製錬工程で生成するスラグや放射性廃棄物の熔融固化工程で生成する融体の主成分である。その中に酸化物として含まれる遷移金属は条件により異なる化学状態(酸化数)をとり、その構成比が融体の様々な物性に影響を与える重要な因子となる。融体の物性のなかでも特に粘度は、

融体の流動性や結晶化挙動などを支配するもののひとつである。そこで、熔融スラグ等の融体を急冷ガラス固化した試料に対して、Fe など金属元素の化学状態分析を各元素の吸収端における X 線吸収分光測定を通じて実施した。結果、他の化学種成分組成や熔融時の酸素分圧等の条件に応じて金属化学状態が異なり、それが粘度などの物性値と関係していることを確認した。

## 【研究活動報告】 固体表面物性研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：虻川 匡司

准教授：星野 大樹 (2022.10~)

助教：小川 修一

事務補佐員：高橋 麻衣 (~2022.5)、鈴木 薫 (2022.5~)

大学院生：遊佐 龍之介 (~2022.3)、青山 大晃、リ ハクガン

学部学生：前木 皓太

本研究分野では固体表面の物性について研究活動を行っている。2022年の研究活動としては、以下のよう  
に概括される。

### 1. ナノ表面構造解析のための新たな表面構造解析手法の開発と応用

結晶表面の機能や物性は、直接的には表面の電子状態が担っているが、その電子状態は表面の原子配  
列、すなわち表面構造から導き出されるものである。我々は、表面に対する感度の高い電子回折法を用いて、  
より高い確度で表面の原子配列を決定できる表面構造解析法の開発を行っており、振動相関熱散漫散乱法  
(CTDS)、ワイゼンベルグ反射高速電子回折法(W-RHEED)など、独自手法の開発に成功している。それらを半  
導体ナノ構造、電池電極、触媒など現実の機能を発現する微小な表面の解析に適用するために、走査電子  
顕微鏡のナノ電子ビームを用いて、微小領域の表面構造を解析できる手法の開発を行っている。特に本年  
度は、試料を大気中から超高真空実験槽に移送するシステムを構築し、多くの試料を効率よく測定できるよ  
うにした。今後、触媒や電池電極のような不均一な材料のナノ表面の構造解析を行う予定である。

### 2. 未解明の Si 表面構造の決定

トランジスタは単結晶シリコンを 3 次元的なナノ  
構造に加工することで高密度化が進められてお  
り、微細な 3 次元構造は、様々な方位のナノメー  
トルサイズの面で囲まれることになる。また、サイ  
ズが小さくなるに従って表面の割合が増加し、表面  
の理解が性能向上の鍵になる。シリコンには基本  
的な面として、(001)、(111)、(110)面があり、殆ど  
の 3 次元構造はこの 3 種類の面で囲まれている。  
(001)面と (111)面に関しては、長年の研究により  
その複雑な表面の原子配列が決定され理解が進  
んでいるが、(110)面は、未だに表面構造が解明  
されていない。我々は、(110)面に 1/3 原子層の Bi  
を吸着させた Si(110)3x2-Bi 表面、Sb を吸着させ

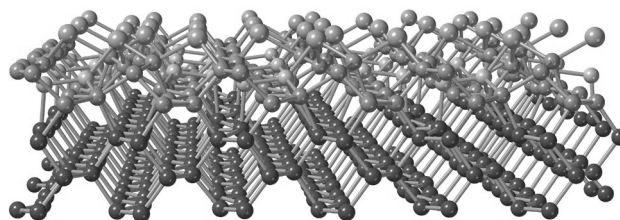
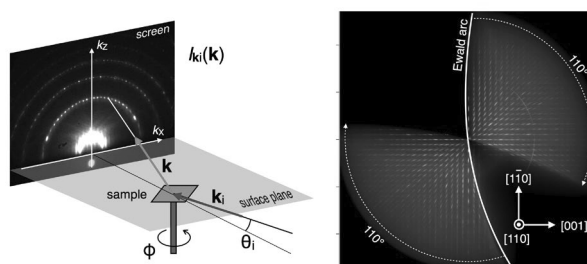


図 1. W-RHEED によって決定された Si(110)3x2-Bi 表面構造

た Si(110)3x2-Sb 表面に対し、独自に開発したワイゼンベルグ反射高速電子回折法(W-RHEED)を適用し、表  
面から 1nm の深さに含まれる 62 個の原子位置を 5 ピコメートルの精度で決定した。その結果は、これまでの予

想を覆し、Si 原子配列にも大きな構造の乱れ(再配列)が生じており、複雑な表面構造をとっていることが分かった。より詳細な解析を進めシリコンの(110)表面が複雑な構造をとる起源の解明を進めている。

### 3. 2次元原子層物質の成長プロセスの研究

グラフェン、単層のh-BNなど二次元原子層物質は、2次元特有の物性を持ち、その応用が期待されている。しかしながら、原子数個分の厚さしか持たないため、その観察・研究は容易ではなく、表面を感度良く計測できる顕微鏡法が欠かせない。我々は、1. で開発したナノビーム回折法を用いて表面上に成長した微細な層状物質の方位や構造解析を行っている。また、紫外線を照射することで発生する光電子を観察する光電子顕微鏡を用いて、原子層物質の成長プロセスをリアルタイムで観測して、成長プロセスの研究を行っている。図2は、Ni(110)表面上に成長したグラフェンを観測した光電子顕微鏡像である。光電子顕微鏡は物質の仕事関数や電子状態に敏感なコントラストで表示されるため、形態を描き出す通常の電子顕微鏡では得られない表面の機能や性質で像を描くことのできる有効な手法である。本年度は、多結晶Ni箔の裏側に塗布した、h-BNがどのように表面に拡散して表面上に成長するのかを理解するための研究を行った。高分解SEMによる結晶粒方位の観察と組み合わせることで、Ni(111)方位面に特異的にhBNが成長することが分かった。これらの研究の一部は、物質・材料研究機構、兵庫県立大学、金沢大学、産総研との共同研究として実施されている。

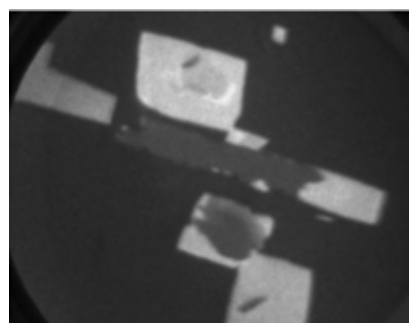


図2. Ni 基板の上に成長したグラフェンの光電子顕微鏡像

### 4. K 修飾グラフェンのK 濃度定量評価法の開発

SiO<sub>2</sub>/Si ウェハ上のグラフェンは、SiO<sub>2</sub> 膜中の固定電荷や基板の表面粗さによる散乱のため、電子移動度が著しく低下する。これを解決するため、グラフェンのカリウム(K)原子修飾が提案されている。K原子修飾グラフェンは、グラフェンをKOH溶液に浸すことで容易に実現できるが、作製したグラフェン中のK原子濃度は不明であった。そこで本研究では、高輝度放射光によるXPSでn型K修飾グラフェン中のK原子の濃度を測定した。

K修飾グラフェンのC 1sとK 2pスペクトルを図3(a)に示す。K 2p光電子ピークとC 1s光電子ピークの強度比からK濃度を算出した。一方で、測定時間の経過にともない、図3(b)に示すようにK濃度の減少が見られた。これはXPS測定のためのX線照射によって修飾K原子が脱離していることを示唆している。K原子の脱離曲線を指数関数で近似することでX線照射前のK原子濃度を求めることができ、その結果、X線照射前のK原子濃度は1.0%と求められた。一方で、このK原子脱離がX線照射による光刺激脱離で生じているのかどうかは現時点で断定できないため、今後さらなる研究が必要とされている。

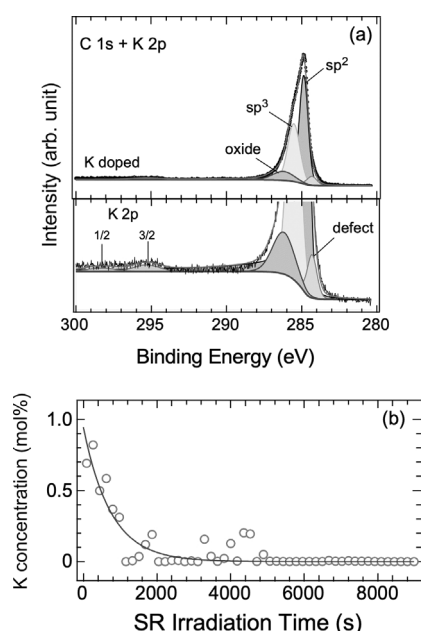


図3 (a) K 修飾グラフェンのC 1s/K 2p 光電子スペクトルのピークフィッティング解析結果、(b) K 原子濃度の放射光照射時間依存

## 【研究活動報告】 電子線干渉計測研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：佐藤俊一（兼）

講師：赤瀬善太郎

学術研究員：佐藤隆文

本研究分野では、電子線ホログラフィーとローレンツ顕微鏡法による先端材料の電氣的・磁氣的構造の解析を実施している。最近は、電子線照射環境における絶縁体試料の帯電に伴う2次電子の集団運動に関する解析や、軟磁性材料における磁壁移動の動的観察に取り組んでいる。2022年の具体的な研究活動は、以下のように概括される。

### 1. 軟磁性材料の動的磁場下における磁区構造変化その場観察

軟磁性材料は添加元素や熱処理などを通して微細組織や磁気特性が調整され、エネルギーロスの低減といった性能の改善が図られているが、電子顕微鏡のスケールにおいて磁壁が粒界や介在物からどのような作用を受けながら移動するのかという点は、動的な磁場下での観察例が少ないため、基礎的な研究を必要としている。外部磁場の変化に伴う磁区構造変化を調べる手段としては、静的な外部磁場をわずかずつ変化させながら観察するという手段も考えられるが、静止画から得られる情報では、磁壁がピンングセンタから外れて瞬時に移動する様子といった、まさにエネルギーロスが生じる瞬間を捉えることは難しく、議論を深めるには連続的な動的磁場下におけるその場観察手段が望ましい。そこで当研究グループでは、透過電子顕微鏡内で試料に動的磁場を印加して磁壁を駆動させ、その移動の様子をローレンツ顕微鏡法（フレネル法）でその場観察する手法を開発し、現在、軟磁性材料の磁区構造観察に応用している。この手法ではローレンツ顕微鏡観察（フレネル法）に必要なデフォーカス条件において、試料に印加する磁場とビーム振り戻し磁極の磁場を同期させ、その時の磁場の強度比を像の移動が最小になるように調整して動画の撮影を行う。科研費基盤研究(A)21H04608の助成を受けて昨年度末に記録系に高速動作をする透過電子顕微鏡用CMOSカメラ（OneViewIS）を導入したことで、2048×2048ピクセルの解像度でフレームレート100 fpsの定量的なデータ取得も可能となった。以下にCMOSカメラの導入により得られた観察の例を示す。

#### 1.1 ノイズフィルタ用MnZnフェライトでの粒界における磁壁ピンングのその場観察

図1にMnZnフェライトの動的磁場印可時の一連のローレンツ顕微鏡像より、0.01 s間に1.6 Oe (128 A/m)の外部磁場を増加させたときのスナップショットを示す。図中橙色の実線は粒界の位置、白と黒の破線はローレンツ顕微鏡像の磁壁のコントラスト位置を示しており、図中左上の粒界に引っかかっていた180度磁壁が、粒界から外れる瞬間を捉えたものである。

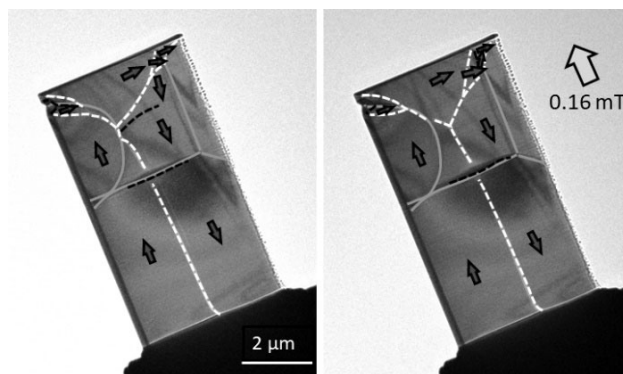


図1 動的磁場下にあるMnZnフェライトのローレンツ顕微鏡像。外部磁場の周波数は1.0 Hz、振幅は±40 Oe。右の像は左の像の0.01秒後のもの。

#### 1.2 無方向電磁鋼板中の転位が多数存在する領域での磁壁移動のその場観察

図2に無方向性電磁鋼板の電解研磨TEM試料のローレンツ顕微鏡像を示す。視野内には粒界や、孔、窒化アルミの介在物のほか多数の転位のコントラストがみられる。この試料に外部磁場を図中太い矢



印の方向に9.6 Oe/sで増大させた時の、一点鎖線上の粒界と磁壁の間の距離 $x$ をプロットしたものを図3に示す。磁壁が断続的に移動し階段状に磁化が進んでいることがわかる。

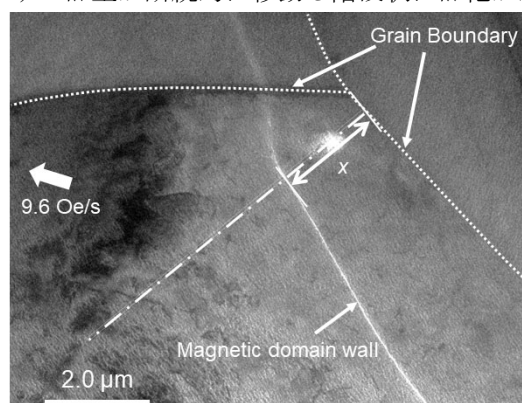


図2 動的磁場下にある無方向性電磁鋼板のローレンツ顕微鏡像。太い矢印の方向に9.6 Oe/sで外部磁場を印加している。

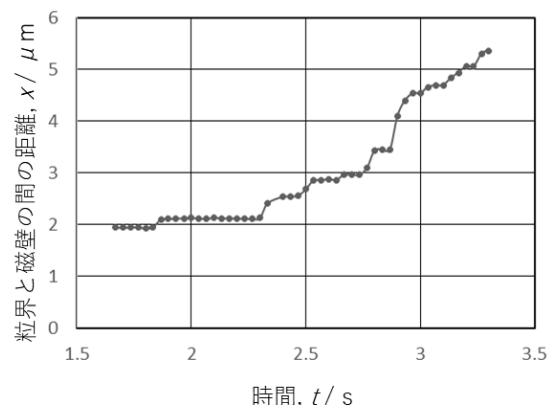


図3 磁場印加に伴う磁壁の移動距離。

## 2. 電子線ホログラフィーによるコンケーブ型 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ナノ粒子の磁化分布の直接観察

軟磁性と生体適合性を示す $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ナノ粒子は、医療分野で活発に研究されている。特にコンケーブ型 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ナノ粒子は高い発熱効率を示すことから、磁気ハイパーサーミアへの応用が期待されている。しかし球状や立方体型の粒子は精力的に研究されているが、コンケーブ型粒子の磁気特性の詳しい知見は得られていない。そこで、電子線ホログラフィーを用いた磁化分布の直接観察を行い、コンケーブ型ナノ粒子における安定な磁化状態を検討した。図4(a),(b)にそれぞれ明視野像および時期ポテンシャルによる位相変化を示す。粒子は一次元鎖状に $[100]$ 方向に配向する傾向を持つとともに、一次元鎖の長軸方向に平行な磁化分布を持っている様子が観察された。本研究は岩手大学小林教授らとの共同研究であり、文部科学省先端基盤共用促進事業(先端研究設備プラットフォームプログラム)JPMXS0450200722の成果である。

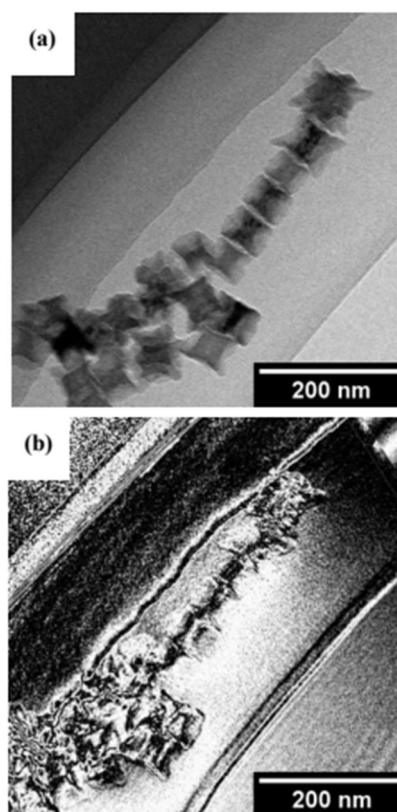


図4 コンケーブ型 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ナノ粒子の(a)明視野像および(b)磁気ポテンシャルによる位相像。位相は10倍増幅。

## 3. 時間分解ストロボ電子線ホログラフィーによるイオン液体の分極ダイナミクス観察

理化学研究所の岩崎技師、進藤チームリーダーらとの共同研究で、電子線ホログラフィーにストロボ撮影法を応用した時間分解電子線ホログラフィーを実現した。試料に変調電圧を印加しながら電子干渉像を蓄積し、2チャンネル信号発生器を用いてビームを同期ゲートすることにより、電子線ホログラムのストロボ観測を行った。交流電界を印加したイオン伝導体試料の電気分極を観察し、50マイクロ秒ごとに極性を変えても分極が電界に応答しないことを実証することに成功した。本成果はY. Iwasaki et al.,

“Time-Resolved Electron Holography and Its Application to an Ionic Liquid Specimen”としてMicroscopy誌に掲載された(2023年1月4日受理。 <https://doi.org/10.1093/jmicro/dfad003>)。

## 【研究活動報告】 電子回折・分光計測研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：寺内正己

准教授：佐藤庸平

助教：森川大輔

大学院生：中根正勝, Shafiqul Islam (~2022.9), 斎藤興也, 戎 凌吾, 大澤優太 (2022.4~)

学部学生：羽田有希 (2022.4~)

本研究部では、電子顕微鏡法を基盤とした物質の局所領域の結晶構造・電子構造の解析手法の開発とその物性物理学への基礎的応用を行っている。2022年度の研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. プラズモンq分散測定によるMg合金中の電子挙動の解明

非弾性散乱電子の運動量移送(q)依存性の計測技術を構築し、プラズモンq分散を観測することによって、金属材料中の電子の特性を評価する技術の開発を行っている。

長周期積層構造(LPSO)を持つMg-Zn-Y合金は、次世代軽金属強化材料として注目されている。しかし、合金の電子特性はほとんど明らかにされていないため、角度分解電子エネルギー損失分光法を用いて、プラズモンエネルギーのq分散測定を行い、合金中の電子特性の解明を行った。

図1(a)はLPSO型Mg合金(Mg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Y<sub>2</sub>, Mg<sub>85</sub>Zn<sub>6</sub>Y<sub>9</sub>, Mg<sub>75</sub>Zn<sub>10</sub>Y<sub>15</sub>)とMg金属のプラズモンエネルギーのq依存性である。Mg<sub>85</sub>Zn<sub>6</sub>Y<sub>9</sub>およびMg<sub>75</sub>Zn<sub>10</sub>Y<sub>15</sub>のプラズモンエネルギー-q依存性は、Mg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Y<sub>2</sub>合金とMg金属と比べて、q=0.8 Å<sup>-1</sup>分以上でプラズモンエネルギーが低く観測された。電子回折測定により、積層構造の秩序度は、Mg<sub>85</sub>Zn<sub>6</sub>Y<sub>9</sub>およびMg<sub>75</sub>Zn<sub>10</sub>Y<sub>15</sub>のほうが高いことが明らかになり、低いエネルギー分散は高秩序なLPSO構造に起因していると考えられる。積層面内に異方的に電子が動きやすい電子ガスモデルを構築しプラズモン分散のシミュレーションを行ったところ、実験を再現したことから、LPSO型Mg合金中の電子は異方的な挙動を示すことが明らかになった。

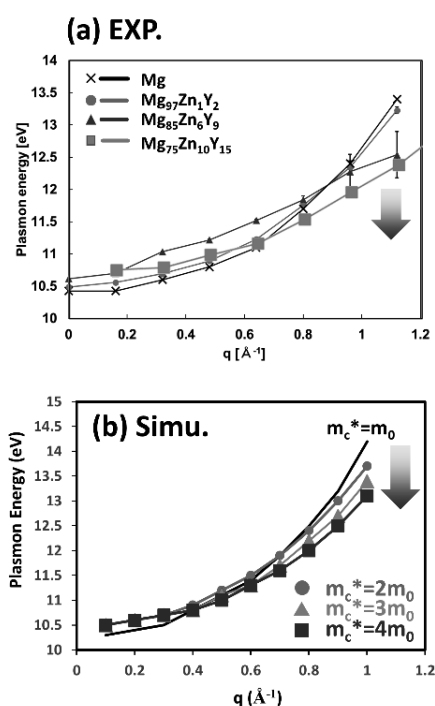


図1: (a)Mg-Zn-Y合金のプラズモンq分散. (b)異方的電子ガスモデルを用いたプラズモン分散シミュレーション.

### 2. 収束電子回折法と第一原理計算の併用による結晶構造解析

収束電子回折(CBED)法は局所領域の結晶構造や空間群決定に有用であるが、適切な初期構造が与えられない際には解析が困難となる場合がある。一方、第一原理計算による構造最適化は、与えられた初期構造に対してエネルギー的に最安定な構造を導出することが可能であるものの、初期構造への依

存から得られた結果が真の構造である根拠が別途必要となる。CBED図形は結晶構造の $pm$ オーダーの変化に敏感であるため、第一原理計算によって得られた複数の構造候補を用いたシミュレーションを実験と比較することで、真の構造を同定することが可能となる。

$A$ サイト秩序型ペロブスカイト型構造 $RMn_2O_6$  ( $R$ :希土類元素) は、 $A$ サイト原子のランダムネスの抑制によって磁気秩序相や電荷整列相が無秩序型と比較して高温まで安定であり、また元素置換による物性のコントロールと併せて複雑な相図を示す。特に $NdBaMn_2O_6$ は磁気秩序相と電荷軌道整列相の相境界に位置しており、単相の同定や精密な構造解析が困難であるため、先行研究においては異なる構造が提案されていた。そこでまずはCBED図形の対称性から室温相の空間群を $C2mm$ と決定した。これは放射光X線によって報告された $Cmmm$ と異なっている。次に空間群 $C2mm$ で許される様々な原子変位を加えたモデル構造を作成し、第一原理計算コードのQuantum Espressoを用いて構造最適化を行い、大別して2種類の結晶構造を得た。そ

れぞれを用いたCBED図形のシミュレーションと実験と比較し、特に高次反射の強度分布をよく再現したモデルを真の結晶構造と決定した(図2)。このCBED法と第一原理計算の併用による結晶構造解析は、特に単相の合成が困難な新規材料や混晶の解析に強力な手法であると期待される。(Phys. Rev. B **105**, 174114 (2022))

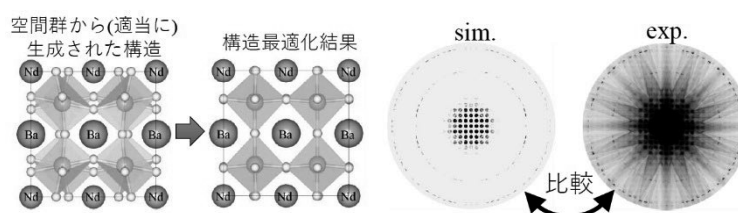


図2: 収束電子回折法によって決定した空間群から許される原子変位を加えた構造を複数生成し、第一原理計算によって構造を最適化した。それぞれの構造を用いたシミュレーション結果と実験データの比較することで真の構造を決定した。

### 3. 軟X線発光分光による低融点Au-Si合金の溶融状態における電子状態の研究

Au-Si合金系は、組成比 Au:Si=81:19において単体の融点 (Au : 1064°C, Si : 1414°C) から1000°C近くも融点が低くなり363°Cとなる。この特殊な低融点状態においてAuとSiがどのように相互作用して溶融状態を形成しているかは明らかとなっていない。そこで、オリジナルの試料加熱ホルダを製作し、電子顕微鏡内で溶融状態を実現し、その軟X線発光分光測定を行った。その結果、複数の構造が観測され、単なるSiとAuの混合状態ではないことが明らかとなった。そこで、理論的検討から予測されていた複数の局所構造候補について、スペクトル強度分布に対応する価電子の状態密度分布計算を行い実験スペクトルとの比較を行った。その結果、Si原子にAu原子8個が配位した局所構造の場合に実験スペクトルの特徴を再現できることが明らかとなった (Microscopy **71**, 34-40 (2022))。

### 4. 新たな電子顕微鏡技術の普及活動

産学官連携で商品化した電子顕微鏡用軟X線発光分析システムの普及のため、日本電子(株)主催のSXESスクール(11月に対面開催)において「SXESの基礎知識とその利用法—何がどう見えているのか?—」という講演を行った。また、多元研に導入されたクライオ電子顕微鏡利用普及のため、宮城県主催のKCみやぎセミナーにおいて「クライオ電子顕微鏡—産業界での利活用—」という講演を行った。

**【研究活動報告】 走査プローブ計測技術研究分野** (2022.1~2022.12)

教 授: 米田 忠弘

講 師: 高岡 毅

助 教: 道祖尾 恭之、Shahed Syed Fakruddin

技術補佐員: Ara Ferdous

大学院生: 和泉 廣樹、Nasir Uddin、Md. Arafat Ali、Uttam Chowdhury、佐藤 碧、  
Shishir Kumar Dey、坂下 晃輔、Zhipeng Wang、伊藤 拓馬

本研究分野においては表面の原子レベルでの物性評価のための先端的な走査プローブ顕微鏡開発と、それを用いて明らかにされた物性をデバイスで実現する研究を行っている。2022年の代表的研究例を下記に紹介する。

**研究の背景**

量子コンピューターの物理的単位を担うキュービット(qubit)の開発競争が高まっている。分子スピンをキュービットとして用いた量子情報処理のデモンストレーション(ショアのアルゴリズム)はすでに2000年に行われており、他のqubit候補に対する優位性は示されている。分子の優れた特性と電子スピン共鳴(ESR)・核磁気共鳴(NMR)電子機器の精度の高さが成功の理由としてあげられる。しかし、測定には10億個の分子の集団が要求され、大型なESR/NMR装置が必要なことと合わせて、次世代の量子コンピューター利用には課題となっている。

**研究の成果**

単一分子に電流を用いてESR/NMRと同様の量子操作が行えれば、分子スピンは一挙にqubitの最有力候補となる可能性を持っている。本実験では単分子で磁石のようにスピンの方向を保持できる単分子磁石、テルビウム・フタロシアニン錯体( $\text{TbPc}_2$ )分子を用いて、磁場中に置かれたトンネル接合にラジオ波(RF波)を入射しその共鳴を得ることで、単分子について従来のESRと同等の信号を得ることに成功し、分子の結晶で得られるESR情報とは異なる単分子の化学状態を観察した。本手法は量子コンピューターに応用するのに十分なエネルギー精度をもっており電流を用いた分子スピンのキュービット応用への道をひらくと期待される。

単分子で磁石の性質を示す単分子磁石である、テルビウム(Tb)原子を上下から環状化合物のフタロシアニン(Pc)配位子でサンドイッチした分子( $\text{TbPc}_2$ 分子)を用、磁場中のトンネル接合に配置し、RF波を入射することで、従来化学分析に用いられるESRと同等のエネルギー精度を持つ信号を単一分子から検出することに成功した。<sup>1</sup>

ESR手法は化学のスピンの分析の標準的な手法として広く用いられ、かつエネルギー分解能やスピンの制御精度は非常に高く、すでに量子コンピューターに用いるに十分であることが実証されている。しかし多数ビットや小型化に対応するためには、必要とされる分子が多数すぎる(10億個以上)ことや、装置が大型であるなどの課題が、次世代の量子コンピューターへの応用を阻害している。

本実験では、走査型トンネル顕微鏡を用いてトンネル接合におかれた分子を再現した(図1)。トンネル電位にRF信号が印加されている(図1(a))。NaCl薄膜の上に蒸着された $\text{TbPc}_2$ 分子をサンプルに用いた(図1(b)(c)) RFの周波数を掃引すると共鳴位置にトンネル電流に鋭いピークが出現する(図1(d))。図2に見るように明瞭な磁場依存性が観察され、単一分子のESR分析に成功した。

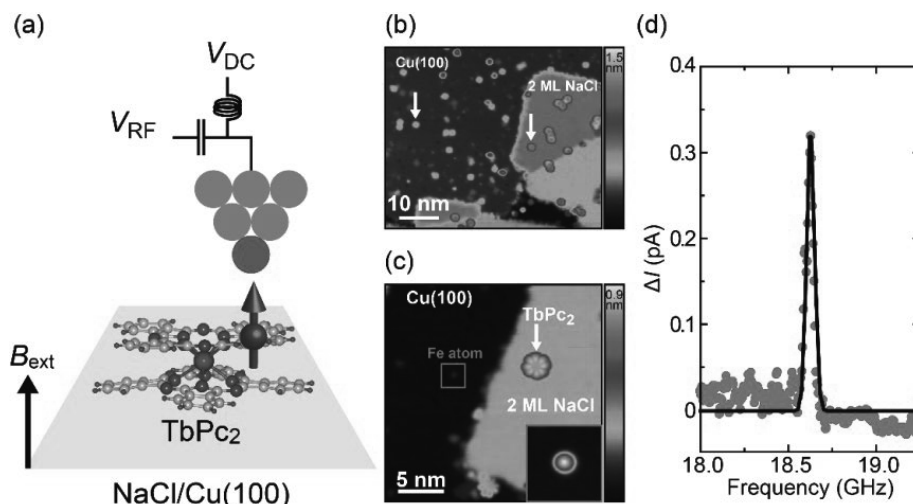


図1 単一分子ESR

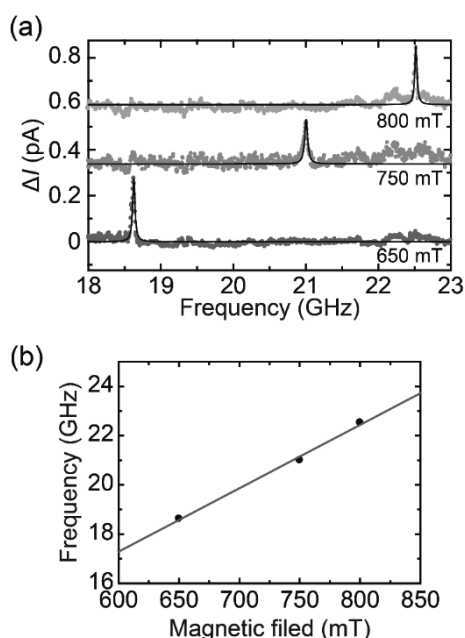


図2 単一分子ESRの磁場依存性。磁気共鳴によるゼーマンシフトを観察

磁気共鳴は様々な場面で化学分析に用いられ、特に医療の分野ではMRIはすでに欠かせない手法となっています。しかし必要とされるスピンの数の多さや、空間分解能には多くの課題がある。単一分子ESRはこれらの課題を解決する手法として考えられ、同時に、分子スピンのキュービット応用への幅広い利用の可能性が期待される。

Reference

1. Kawaguchi, R.; Hashimoto, K.; Kakudate, T.; Katoh, K.; Yamashita, M.; Komeda, T. *Nano Lett.* **2023**, *23*, (1), 213-219.

## 【研究活動報告】 放射光ナノ構造可視化研究分野 (2022.1~2022.12)

教 授：高田 昌樹  
 准 教 授：江島 丈雄、山本 達(～2022. 9. 30)  
 特任准教授：渡邊 真史  
 助 教：羽多野 忠

本研究分野では、次世代放射光施設 NanoTerasu の計画・推進の他、光学素子開発とその応用としての軟X線顕微鏡開発および軟X線顕微鏡による軽元素試料観察を行っている。2022 年の研究活動は、以下のよう

### 1 SBR/BR 界面における化学結合状態

タイヤに使用されるゴム材料は、一般的に2種類以上のエラストマーを配合し必要とされる特性を得る。例えば、Styrene Butadiene Rubber (SBR) と Butadiene Rubber (BR) の組み合わせは、SBR の Styrene 含有量が高いとタイヤのウェットスキッド特性や転がり抵抗特性が向上する一方、ガラス転移温度(Tg)が高くなるため低温性能が低下する。一方で cis-1,4 結合 butadiene の含有量が高い高 cis-BR は Tg が非常に低く、SBR に高 cis-BR を加えて Tg を制御することで低温性能を改善することができる。以上から、エラストマー材料を混合し添加物を加えて素材とすることは応用上重要であるが、エラストマーの選定、混合比などのパラメータを制御し必要とされる力学的性能を得るには、経験則に頼らざるを得ない。本研究では、典型的なエラストマー材料として SBR および BR を選び、張り合わせと混練による界面構造を作製し、その界面における C-K 吸収端の吸収スペクトルを取得した。図に界面構造とそれぞれの吸収スペクトルを示す。

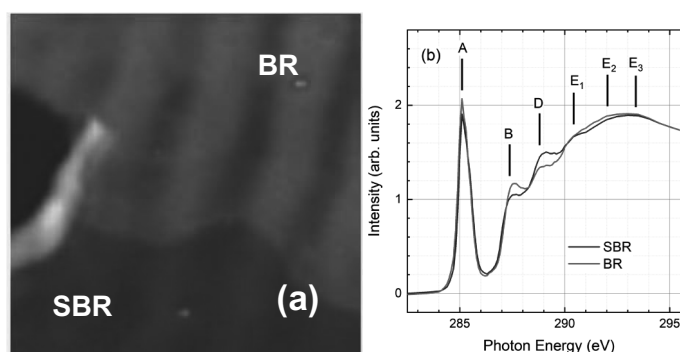


図 1：(a) SBR/BR 界面における軟 X 線吸収像、  
 (b) 各相の吸収スペクトル。

### 2. 次世代放射光施設 NanoTerasu におけるフロントエンド建設

フロントエンド(FE)は蓄積リング内の挿入光源から発せられる光が取り出された直後に配置され、ビームライン(BL)の先端部にある。挿入光源からの放射光に空間的制限を加え、利用実験に供される光だけを安全かつ安定に光学系・輸送系に導くための超高真空装置である。主な機能と役割は、1)放射光の遮断および下流への導入、2)加速器からビームラインまでの超高真空の維持、3)ビーム成形と高熱負荷処理、4)ビームモニタである(図 2)。また、通常立ち入ることが出来ないリングトンネル部に設置されるため、耐放射線性を含めた信頼性が求められる。ナノテラスは 24 年度までに PhoSIC 分 7 本、QST 分 3 本の計 10 本ビームラインが建設され、それぞれのビームラインに1本ずつフロントエンドが建設されることになっている。

22 年 3 月から始まったフロントエンド建設はまず  $\mu\text{m}$  精度の精密測量を行い建屋内の位置決めを行った。次に架台用の墨出し位置決め、架台の設置を行い、基準線に沿って精密測量を行いながら架台の上に各真

空装置を並べていった。次に並べた装置を真空中に引き、ベーキングを行って超高真空中に到達させた。23年3月上旬までに PhoSIC 分 7 本のフロントエンド分の機器類を並べ終え、すべての機器が超高真空中に引かれている。今後、最終アライメントを行い、光軸調整に備える。

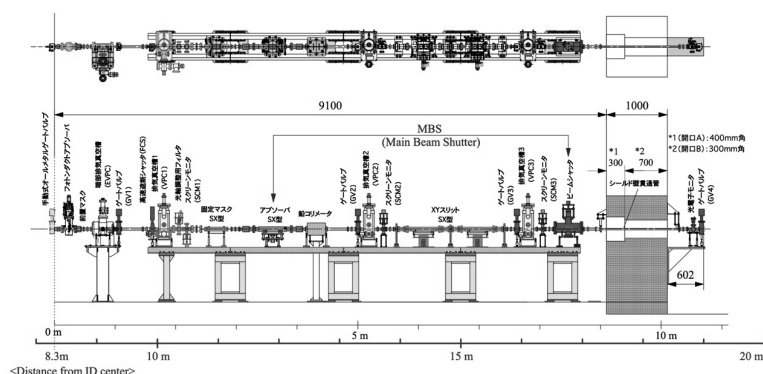


図 2 : SX/EUV 用フロントエンドの機器レイアウト。

### 3. 次世代放射光施設 NanoTerasu における放射線遮蔽ハッチの製作

NanoTerasu に一般財団法人光科学イノベーションセンター (PhoSIC) が初期計画で建設する 7 本の BL で、放射線遮蔽ハッチの製作に関わる技術指導を行なった。放射線遮蔽ハッチとは、放射線源となり得る BL 輸送光学系および測定機器を覆う構造物であり、実験ホールを「放射性同位元素等の規制に関する法律」が規定する放射線非管理区域の規制放射線レベル以下に保つことを目的とするものである。輸送光学系が格納される光学ハッチ 7 室と測定機器が収納される実験ハッチ 10 室が製作されている。NanoTerasu 実験ホール内における PhoSIC のハッチの配置を図 3 に示す。光学ハッチ (紺色) と実験ハッチ (水色) で色分けした。ハッチの要件は、人および装置が出入りする入退扉・搬入扉を有し、水・液体窒素・圧搾空気等の配管を常時通し、電力・通信用ケーブルを常時通し、振動遮断のためリング収納壁との間に隙間を有し、かつ遮蔽を維持することである。本研究分野は 20 年 9 月より構想設計、21 年 12 月より詳細設計に参加し、22 年 7 月に開始した NanoTerasu 施設での製作現場における指導を行なっている。

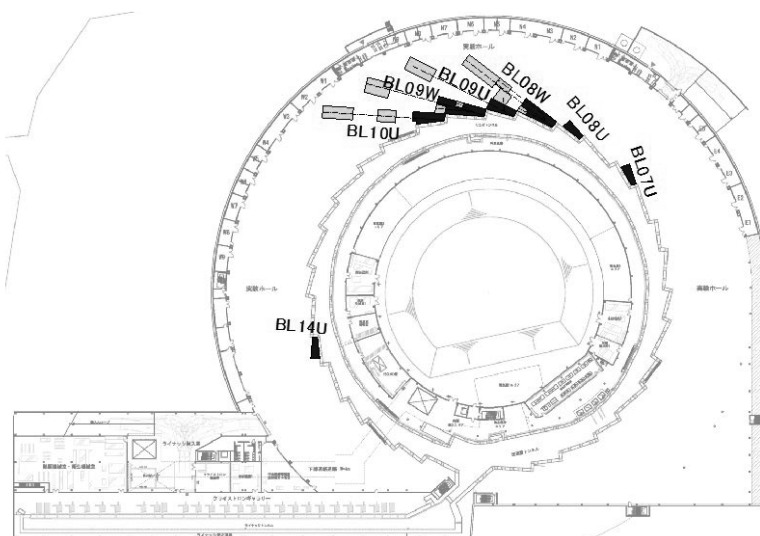


図 3 : NanoTerasu で製作中の PhoSIC BL 放射線遮蔽ハッチ。

**【研究活動報告】 高温材料物理化学研究分野 (2022.1~2022.12)**

教授：福山博之

准教授：大塚誠

講師：安達正芳

特任研究員：朴珉秀

技術補佐員：東英生、佐々木美和

大学院生：李森、宮田麟太郎、得地悠希、永作太一、正岡諒也、飴井千晃、  
新井佑梨、小笠原遼

学部学生：新野田剛、長草生真、南里駿也

本研究分野では、高温の材料物理化学を学理とし、材料創製プロセス開発に関する研究、および高温融体の熱物性測定に関する研究について、研究活動を行っている。2022年の研究活動としては、以下のように概括される。

**1. Si-Ge 融体の垂直分光放射率測定**

SiGe 単結晶は、次世代の高速・低消費電力電子デバイスの基板材料として期待されている。Si-Ge は全率固溶型合金であり、特に応用が期待される Si-50 mol%Ge の組成において液相線温度と固相線温度に 160 K 以上の差が存在するため、均一な単結晶育成が難しい。近年、Traveling Liquidus Zone 法により 0.1 mm/h の速度で 2 インチ径の単結晶が育成されているが、結晶の大型化および高速成長化のためには、数値シミュレーションによる結晶成長場の解析が不可欠となる。しかしながら、融体内の熱輸送を支配する Si-Ge 融体の熱伝導率の報告はこれまでになく、純 Si と Ge の熱伝導率から予測しているのが現状である。そこで当研究室では、静磁場印加電磁浮遊法を用いた Si-Ge 融体の熱伝導率測定を目的とした研究を行っている。浮遊法を用いた熱伝導率測定では、レーザー周期加熱カロリメトリー法を用いるため、まず、融体の熱容量を測定する必要がある。本研究では、熱容量測定に必要なレーザー吸収率を得るため、Si-50 mol%Ge 融体の垂直分光放射率  $\varepsilon$  の測定を行った。

**2. Ti-Nb 系合金融体の垂直分光放射率測定**

金属 3D プリント技術は特に人工骨のように個々人で要求される形状が異なる製品の作製において有効な製造プロセスであり、生体材料分野での応用が期待されている。この金属 3D プリント技術の向上のためには、使用する材料の熔融・結晶成長プロセスを理解することが重要である。金属 3D プリント技術ではレーザーや電子線による局所的な加熱を利用しているため結晶成長速度は極めて速く、また大きな温度勾配とともに、局所的な高温部や深い過冷却部が熔融プール内に形成される。そのため、使用する材料の熱物性値およびその温度依存性が過冷却領域を含む広い温度範囲に対して不可欠である。そこで、当研究室では、静磁場印加電磁浮遊法を用い、広い温度領域で 3D プリントに使用する材料の熱物性値を測定することを目的とした研究を行っている。本研究では、Ti-Nb 系合金の垂直分光放射率の測定を行った。

**3. 黒体放射型超高温熱分析法による B<sub>4</sub>C 含有 SUS316L の熔融挙動**

ナトリウム冷却高速炉の炉心損傷事故時には、制御棒材 (B<sub>4</sub>C) と原子炉構造材 (ステンレス鋼: SUS316L



(SS))との共晶反応による複雑な炉心損傷の様相を呈する。この共晶反応メカニズムを分析するためには  $B_4C$ -SS 系の熔融挙動や凝固過程の解明が必要であるが、高濃度  $B_4C$  を含有する SS は液相線温度が高く、既存の測定装置での熱分析は困難である。当研究室では、高融点材料の熱分析に向けた黒体放射型超高温熱分析法を開発している。本研究では、高濃度  $B_4C$ -SS 材料への同熱分析法の適用性を検討するため、9–11mass% $B_4C$  含有 SS の熔融挙動の熱分析を行った。

#### 4. 電磁浮遊法によるその場観察と急冷法を組み合わせた $B_4C$ 含有 SUS316L の凝固過程の解明

ナトリウム冷却高速炉の炉心損傷事故時には、制御棒材 ( $B_4C$ ) と原子炉構造材 (ステンレス鋼: SUS316L (SS)) との共晶反応による複雑な炉心損傷の様相を呈する。この共晶反応挙動を模擬するためには、熔融した  $B_4C$ -SS 系融体の熱物性値が必要であるため、当研究室では、昨年度まで、電磁浮遊法と静磁場を組み合わせ、超高温熱物性計測システムを用いて、 $B_4C$ -SS 系融体の高温液体物性データを取得してきた。本年度は、SS- $B_4C$  系の共晶反応メカニズムを詳細に分析するため、電磁浮遊法によるその場観察と急冷法を用いて 9–11 mass% $B_4C$  含有 SS 溶融物の凝固挙動の解明を行った。

#### 5. Fe-10 at.%Ga および Fe-20 at.%Ga 融液の熱物性測定

Fe-Ga 系合金は、磁歪合金の中でも特に大きな磁歪を示すため、振動発電デバイス用の材料として期待されている。これまで、福田結晶技術研究所と東北大学のグループでは、チョクラルスキー法による Fe-Ga 基合金の単結晶製造技術を開発しており、また、作製された単結晶が振動発電デバイス材料として求められる特性を満足することを明らかにしている。近年、この単結晶製造技術において、融液内の過冷却現象が高性能単結晶成長に関係していることが示されているが、その結晶成長メカニズムについては明らかになっていない。当研究室では、熔融金属の熱物性値の高精度測定を目的として静磁場印加電磁浮遊装置を開発し、研究を行ってきた。本研究では、Fe-Ga の結晶成長のメカニズムの解明に資するデータを取得することを目的とし、静磁場印加電磁浮遊法を用いて Fe-10 at.%Ga および Fe-20 at.%Ga 融液の密度、垂直分光放射率および表面張力の測定を行った。

#### 6. ガスジェット浮遊法を用いた $Cu_2S$ -FeS 融体の表面張力測定

銅の乾式製錬における熔錬工程において、銅精鉱は  $Cu_2S$ -FeS 系マット融体と FeO-SiO<sub>2</sub> 系スラグ融体に沈降分離される。この工程において、微細なマット融体がスラグ中に懸垂し、残留することで生じるマットの収率低下がいわゆる銅ロスとして長年の課題となっている。熔錬工程で発生する SO<sub>2</sub> ガスの気泡が懸垂するマット融体に付着する場合、スラグ中に懸垂するマットの形態は、マット融体とスラグ融体の表面張力および界面張力に支配される。また、ガスと付着していないマット融体の液滴の沈降速度は Stokes の式で表され、マット融体の液滴径だけでなくその密度、スラグ融体の密度および粘性に支配される。このように、マット融体の沈降現象はマット融体およびスラグ融体の熱物性値に支配されており、マット融体の沈降現象の理解や予測のためには、それら融体の正確な熱物性値が不可欠である。しかしながら、既報のマット融体の熱物性値には、不確かさが大きく、信頼性の高いマットの沈降現象の予測には至っていない。そこで、当研究室では、非接触法を用いたマット融体およびスラグ融体の熱物性値の高精度測定を目指しており、まず、ガスジェット浮遊法を用いた  $Cu_2S$ -FeS 融体の表面張力測定を行った。

## 【研究活動報告】 基盤素材プロセッシング研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：植田滋  
 特任研究員：岩間崇之  
 学術研究員：佐々木康、井上亮  
 技術補佐員：小原恵  
 大学院生：〈博士課程〉Deng Junyi、篠田泰成(東工大から研修)(5~6)  
 〈修士課程〉加藤瑞喜、三田祐作、三吉野治、熊地亮人(長坂研)、  
 星加拓海、菅野辰哉、水谷晴紀、梅田龍太郎

鉄鋼に代表されるベースメタル製造プロセスは、人類社会の発展を支える基盤素材として、その立場はゆるぎないものがあるが、環境調和社会、ゼロカーボン社会に向けて新たな技術変革の時にある。本研究分野では、このベースメタルプロセッシング技術の新展開を支える基盤技術に関する研究活動を行っている。本年度は、博士課程大学院生 Deng Junyi 君および修士課程大学院生、星加拓海君、菅野辰哉君、水谷晴紀君、梅田龍太郎君が配属され、博士課程1名、修士課程8名体制となった。また、客員研究員として谷文鳳君(重慶大学)が来日した。また、工学研究科の禹華芳特任助教と引き続き研究協力を行っている。2022年の研究活動は以下のように概括される。

### 1. 高濃度に $P_2O_5$ を含むスラグからのリンの浸出回収(岩間崇之, 井上亮)

リン資源を持たない日本では製鋼スラグ中のリンが代替資源として注目されており、製鋼スラグから純粋なリン酸資源を分離・回収するために、多くのプロセスが提案されている。その中で、高リン溶銑を酸化脱リンすることにより、スラグにリンを濃化する方法がある。通常製鋼スラグからのリンの分離には高い選択性によってリンを分離できる酸浸出法が検討されているが、リン濃縮スラグと製鋼スラグは組成や構成鉱物相が大きく異なるため、リンの溶出挙動が異なる可能性がある。本研究ではリン濃縮スラグの溶出挙動に及ぼす冷却速度、酸化処理、スラグ組成、クエン酸濃度、浸出温度、スラグ/浸出液比の影響を調べた(図1)。

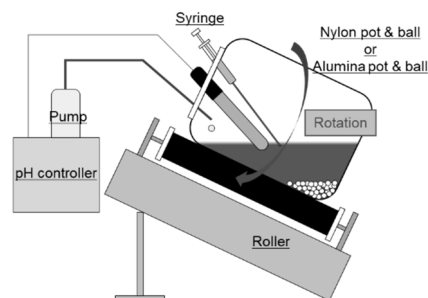


図1 ポットミルを用いた粉砕と酸浸出を同時に行う浸出装置

高温で生成されたリン濃縮スラグを急冷し次いで酸化焙焼することで、リンの溶出率が上昇することが分かった。また、クエン酸濃度は高いほど、スラグ/浸出液比は低いほどリンの溶出率は上昇する一方で、浸出温度の影響は小さかった。さらにスラグの  $\text{mass\%CaO}/\text{mass\%P}_2\text{O}_5$  比率は 1.18 以上とすることリンの溶出を促進できることが分かった。リンの溶出挙動はリン濃縮相である  $3\text{CaO}\cdot\text{P}_2\text{O}_5$  相中の  $\text{SiO}_2$  と  $\text{FeO}$  の固溶濃度が影響すると考えられる。

### 2. 固体表面の液滴移動に対する界面反応と形状の影響(植田滋)

充填層内の反応を伴う高温金属製錬プロセスでは、充填層内の気液流れを円滑にする必要がある。本研究では製鉄に用いる高炉内のコークス充填層内の熔融酸化物および溶銑の滴下を促進するために、溶銑の転落角に対するコークス液相間の反応およびコークスの表面形状の影響を実験により調査した。Fe-C 合金および実溶銑試料をコークスおよびグラファイト上で溶融し、炭材基板を傾け、転落角を定量した。グラファイト上の 0.3g 試料はどの組成においても、浸炭反応等により基板に張り付き、傾斜

による転落は発生しなかった。コークス上では転落角は小さく、炭素濃度および硫黄の含有の有無により転落角が変化した。飽和炭素に近い炭素濃度 4%程度の試料の転落角が、2%程度の溶鉄試料に大きくなり、平衡状態からの組成の差と動的濡れ性の関係は酸化物と異なる結果となった。

### 3. Mg-Cr-O 相系鉱物相における Cr(VI)から Cr(III)への変化 (三吉野治、水谷晴紀)

製鋼スラグは主に路盤材や土木材料に用いられるが、Cr(III)酸化物が含まれる場合にはCr(III)が酸化されて有害なCr(VI)になる可能性がある。この製鋼スラグが雨水や地下水と接触することによりCr(VI)が溶出することから、Cr(VI)の生成と溶出の両者を抑制する技術の開発は重要である。本研究では含Cr製鋼スラグの長期安定性を確保して、新たな利用先を見出すために、スラグ中の含Cr鉱物相である $MgCr_2O_4$ 中にCr(VI)が存在する温度範囲を実験的に求めた。TG-DTAを用いて温度と $MgCrO_4(s)$ の重量変化率の関係を図に示す。実験終了後の試料をXRDによって同定したところ、 $MgCr_2O_4$ とMgOが認められ、加熱中600℃前後でCr(VI)→Cr(III)が進行する。

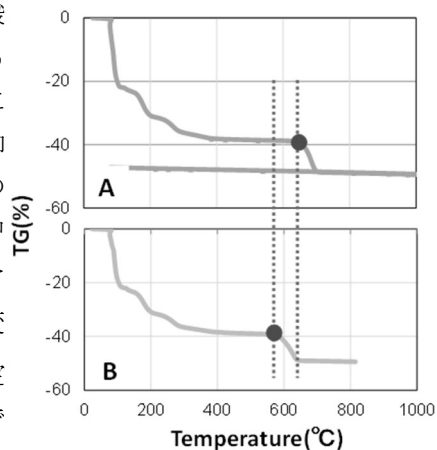


図2 TGによる $MgCrO_4(s)$ の温度変化による重量変化率測定結果

### 4. Cu-スラグ間のPbの分配平衡 (加藤瑞喜)

高温プロセスを用いた非鉄金属リサイクルにおいて、リサイクル原料に含まれる多種の有価金属は $FeOx-SiO_2-CaO-Al_2O_3$ 系スラグとCuを主成分としたメタルに分配される。有価金属の一つであるPbはスラグ中PbOの還元を強化することでメタル相に多く含ませることができるが、その際にFeOxも還元され不純物であるFeがCu中に入り込む可能性があるため、PbOのみを還元する操業条件を知る必要がある。

図3に示すように、1300℃においてCO-CO<sub>2</sub>混合ガスを吹き付けながら、Fe坩堝内で $FeOx-SiO_2-CaO-Al_2O_3$ 系スラグ融体と熔融Pbを平衡させ、スラグ中Pb濃度からPbO活量係数およびFeOx活量係数の導出を行った。また、PbOの還元反応速度の解析を進めている。

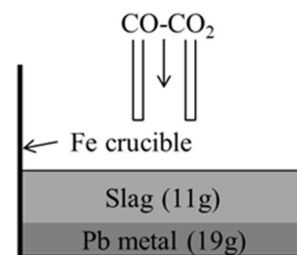


図3 実験試料の概略図

### 5. 気液共存流体中の固体粒子の沈降挙動 (三田祐作)

転炉操業における溶鉄の脱炭反応で発生したCOによりスラグは発泡し、フォーミングスラグを形成する。スラグに巻き込まれた粒鉄はフォーミングスラグ中で沈降・分散を繰り返すが、脱炭終了後にスラグ内の粒鉄が沈降分離しなかった場合には、鉄の歩留まり低下につながる。本研究では、転炉スラグ内部の粒鉄の沈降現象の解明を目的として、落球法による室温における気液共存流体中での固体粒子の沈降挙動の観察と気液共存流体見かけ粘度の導出を行う。落球法をフォーミングスラグに対して用いた場合回転法と異なる見掛け粘度となることが知られている。回転子や落球等の動体速度の気液混相流体の見掛け粘度への影響を検討し、非ニュートン流体であることを示した。測定時の動体の速度と見掛け粘度の関係の評価を進めている。

### 6. 製鋼スラグ抽出水溶液からのリン回収ーリンと鉄の分離ー (熊地亮人)

リンは農業、医療、工業等の多くの分野で使われており、不可欠な元素になっているが、我が国ではリン鉱石の全量を輸入しているため、その供給にリスクを抱えている。一方、鉄鋼業で生成する製鋼ス

ラグには輸入リン鉱石の総量に匹敵するリンが含まれることが知られており、製鋼スラグからのリン回収が注目されている。これまでに酸による製鋼スラグからのリン抽出には成功しているが、抽出液には Ca、Si、Fe 等も溶存しているため、リンの単離が必要になる。本研究では製鋼スラグを酸抽出処理した溶液を対象とした“リンの単離・回収プロセス”の検討の一環として、リンと鉄の分離プロセスを提案し(図4)、pH 制御条件の検討を行っている。

### 7. 鉄鋼スラグを原料とした LFP 生成 (Deng Junyi, 禹華芳)

鉄鋼スラグからりんを回収しりん酸鉄リチウムイオンの原料とすることを目的に、りんの抽出と、得られた水溶液からのりん酸鉄結晶の生成を実験的に検討している。6.におけるりと Ca、Si 等の共存元素の分離技術を応用し、スラグからのりん酸鉄結晶の生成を実証した。回収率および純度の向上を検討している。

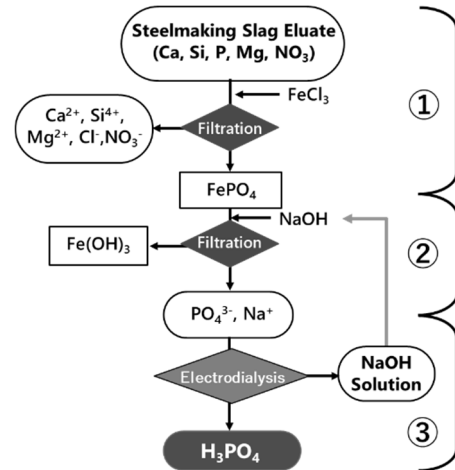


図4 スラグからのリン酸回収プロセスのフロー

### 8. 酸化ペレットの水素還元挙動解析 (星加)

製鉄のカーボンニュートラル化に必要な還元材水素化に向け、水素による焼結鉱、ペレット等の手鉱石の還元挙動の解析を実験的に進めている。還元により生成する鉄による高炉内での鉱石の強度維持機構および粒子内で生成するスラグの状態を観察し、水素還元挙動のモデル化を検討している。

### 9. 原子炉内事故進展解析 (菅野辰也)

東日本大震災により被害を受けた福島第一原子力発電所の廃炉における燃料デブリの取り出しに向け、デブリの状態の把握が必須である。デブリの状態は事故進展に依存するため、メルトスルー前の圧力容器内での落下物の熔融挙動および組成変化の把握が燃料棒や制御棒の熔融挙動に関する詳細な知見が必要であるとなっている。原子炉燃料棒は  $\text{UO}_2$  とジルカロイ管から、制御棒は  $\text{B}_4\text{C}$  とステンレス鋼 (SUS316L, SUS304) 管から構成される。事故時にはまず融点の低いステンレス鋼が溶解して  $\text{B}_4\text{C}$  と共に圧力容器下部に落下し、これに燃料棒が混ざり合っ燃料デブリが生成すると考えられている。本研究では、圧力容器下部におけるいったん滞留した金属融体の組成変化を明らかにするため、ステンレス鋼融体と  $\text{B}_4\text{C}$  およびジルカロイの反応挙動を実験的に求めている。

### 10. 固液共存スラグを利用した希土類金属元素の回収 (梅田龍太郎)

天然資源に乏しい日本では、特に先端材料にとって不可欠な希土類金属元素について、外部環境に影響されないリサイクル技術を独自に開発することは極めて重要である。希土類金属元素は製鋼スラグ中の含リン鉱物相に濃化することが報告されている。また、リンはメタル/スラグ融体間のリン分配にスラグ融体/含リン鉱物相間のリン分配を重ねることによって、メタルから効率よく含リン鉱物相にリンを濃縮できることが知られている。そこで、本研究では、含リン鉱物相を固相とする固液共存スラグを用い、メタル/スラグ融体/含リン鉱物相間の希土類金属元素の分配を利用して、希土類金属元素を含リン鉱物相に効率よく濃化することを目的としている。また、濃縮に影響する因子(スラグ組成、分配促進剤)とその理由を明らかにする。

**【研究活動報告】 機能性粉体プロセス研究分野 (2022.1~2022.12)**

教 授：加納 純也  
助 教：石原 真吾、久志本 築、英 穂波(SAKURAプロジェクト)  
技術職員：櫻井 美里  
技術補佐員：木村 里香  
研 究 員：荒川 駿、渡邊 千明  
大 学 院 生：鈴木 太久哉(M2)、蛭田 大稀(M1)  
学 部 生：網中 ゆり(B4)、望月 陽生(B4)、BAE JONG HYUN(B3)

地球環境保全に貢献する環境粉体工学の創成を目指して、機能性粉体プロセスの創成とシミュレーションによる粉体プロセスの高度化に関する研究を行っている。2022年の研究活動は以下のように概括される。

**1. 粉体プロセスの高度化****1.1 湿潤粉体成形体の構造評価と強度予測**

湿潤状態での粉体挙動や機械的特性を把握および予測することは、自然界や産業界において重要である。固気液三相からなる湿潤粉体成形体の弾性率は、構造不均一性が要因となり予測が困難とされてきた。本研究では、位相的データ解析を導入することで構造の不均一性を数値化し、粉体の充填構造と弾性率の関係を明らかにすることで弾性率の予測式を提案した。

飽和度(水分量)と成形体の弾性率の関係を把握するため、粒子径の異なる二種のアルミナ粉体を原料として鋳込成形により成形体を作製し、一軸圧縮試験を行った(図1)。飽和度が増加すると弾性率は減少した。二種のアルミナ粉体を混合した場合、最も成形体密度が大きくなったのは混合比率0.7のときであったが、湿潤状態での弾性率は成形体密度の大小とは単純に相関しなかった。成形体の充填構造を評価するため、パーシステントホモロジーを用いて構造均一性の指標(index H)を算出した。算出した構造均一性および表面張力、比表面積、空隙率の四つの因子を考慮し、弾性率の予測式を提案した。予測式による計算値は実験値とほぼ一致し、湿潤成形体の弾性率の理論的な予測を可能にした。

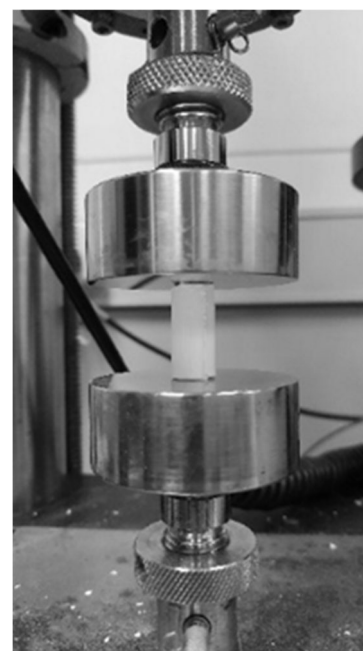


図1 成形体の圧縮試験の様子

**1.2 高粘度分散媒がボールミル粉碎に及ぼす影響**

湿式ボールミル粉碎はサブミクロンオーダーの微小な粒子径を持つ粉体を大量に生産可能な粉体プロセスである。ボールミルを制御する上で回転速度やボール径、固体濃度など多くの操作パラメータが存在するが、スラリー粘度はミル内部のボール挙動に大きな影響を及ぼすことが知られており、安定的な粉碎操作を行うためにはその影響を把握することが重要である。高粘度分散媒を用いた場合のボールミル粉碎において、実験

でのボール挙動を低計算負荷で再現するため、潤滑力モデルを提案した。潤滑力モデルでは、二粒子が接近するときの間に存在する流体の圧力増加による反発力や、反対に離反するときの引力をモデル化したものである。潤滑力モデルにより、転動ミルにおけるボール挙動観察実験で得られたCascading, Cataracting, Sticking, Centrifugingのそれぞれの挙動を再現することができた(図2)。

高粘度分散媒としてグリセリンを用いた粉砕実験を行い、粒子径変化を測定しシミュレーションから得られる衝突エネルギーと比較した。粉砕実験では、分散媒の粘度が高いほど粉砕速度が低下したが、粉砕限界の粒子径は減少し、より微粉砕が可能であることが示された。シミュレーションで算出される衝突エネルギーによって高粘度分散媒での粉砕においても粉砕速度を予測可能であることを確認し、ミル内部の分散媒粘度を推算できる可能性が示唆された。また、高粘度分散媒を用いた粉砕では、粉砕媒体であるボールの摩耗量が低減した。このことから、高粘度条件での粉砕は粉砕速度が低下するものの、コンタミネーションの発生を抑制しながら、低粘度粉砕よりも微細な粒子径に到達可能であることがわかった。

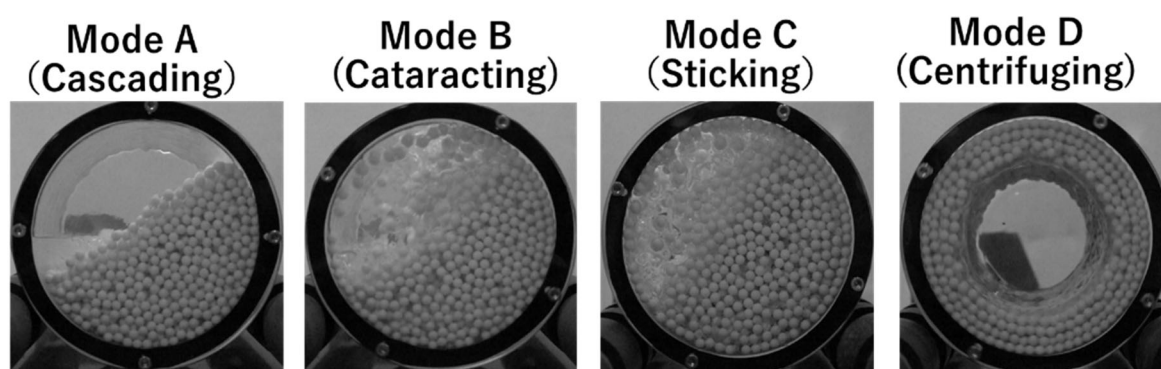


図2 転動ミルにおいて異なる特徴を持ったボール挙動

## 2. 粉体プロセスの創成

### 2.1 廃プラスチックからの新奇水素製造技術の開発

廃プラスチックを原料とした水素製造に関する研究開発を行っている。汚れた廃プラスチックは再資源化が難しいため、単に焼却処分や埋め立て処分されており、ほとんどエネルギー回収されていない。廃プラスチックを原料とする水素製造という新しいエネルギー回収方法によって、再資源化が特に難しい汚れた廃プラスチックの新たな有効利用方法を見出し、エネルギー回収と減容化を同時達成できるプロセスの創成を目指している。

### 2.2 銅精錬工程からの有価金属回収

銅精錬工程における副生成物には有価金属が少なからず存在していることが知られており、これらの効率的回収は資源競争力強化の立場から非常に重要である。副生成物の成分分析を行ったところ、転炉から採取される煙灰に有価金属である錫が比較的多量に含まれていることから、転炉煙灰からの錫の分離回収について検討を行った。煙灰に含まれる成分の帯電挙動に着目し、電気力による分離を試み、その分離の可能性を見出した。

煙灰中で錫は酸化物の状態が存在しており、同族元素である鉛も同様に酸化物であり、これらの分離が困難であるとされてきたが、カルボキシル基を有する化合物を添加剤とすることで錫に選択的に吸着する傾向が観察され、前処理である粉砕条件と合わせて操作条件を最適化することで高い品位での錫の分離に成功した。

**【研究活動報告】 エネルギー資源プロセス研究分野 (2022.1~2022.12)**

教授：桐島陽

助 教：秋山大輔

大学院生：中角弘樹， 越野陽也， 三島大輝， 武居真秀， 井野広海

学部学生：井野良美， 海老澤青輝， 砂原壮汰， 金子祐樹， 岩原聖樹

本研究分野では、2022年10月に金子祐樹君と岩原聖樹君を新たなメンバーとして迎えた。本研究室では、基幹エネルギーである原子力の利用に関するプロセス化学の基盤となる研究を展開しているが、2011年3月の東日本大震災以降は、福島第一原発の廃止措置への貢献を目指した研究も精力的に行っている。今年度は、燃料デブリの状態評価や処理プロセスの研究を継続するとともに、プルトニウムを含む放射性廃棄物処分の実現を目指した基礎研究も実施した。また、レアメタルグリーンイノベーション研究開発拠点のレアメタル含有放射物質取扱研究施設を利用して放射性レアメタル資源のプロセス開発を行った。2022年の研究活動としては、以下のように概括される。

**1. アクチノイド化学に関する基礎研究**

アクチノイド化合物の高温合成および構造解析などの固体化学研究および、溶解度、錯体生成定数決定、熱力学量決定といった溶液化学に関する基礎研究を行っている。アクチノイド化合物の合成法を継続的に開発しその物理化学的な性質を調べており、(IV)~(VI)の価数の異なるウランと遷移金属元素の複合酸化物について、KEKおよびSPring-8でXAFS測定を行い、系統的なデータを取得している。この一環として、近い将来我が国で余剰在庫の処分法の検討が必要になるとみられる、プルトニウムの安定固定化を目指したセラミック合成プロセスのための基礎研究を開始した。ここでは、プルトニウムの代替としてセリウムを用いて、大気雰囲気下での乾式低温処理かつ、従来よりも低温かつ短時間による加熱で模擬MOX粉末及びMOX燃料組成を模擬したブラネライト化合物の合成を試みた。また、合成したブラネライト試料について、浸漬試験を行い水や酸に対する化学的安定性を評価した。今後も本開発研究は継続する予定である。また、量子科学技術研究開発機構 放射線医学総合研究所と進めている共同研究では、生体内での放射能毒性の高いアクチノイドの挙動解明や体内除染剤開発のための基礎的知見獲得を目的とした、ウランとアミノ酸分子の相互作用の熱力学データ整備を継続した。ここでは本研究分野が長年にわたり行ってきた、溶液カロリメトリの技術を中心に研究を進めており、本年度はアミノ酸の一緒であるセリン、フェニルアラニン、システインとウラニルイオンの基本熱力学量 ( $\Delta G$ ,  $\Delta H$ ,  $\Delta S$ ) の決定を行った。

**2. 福島第一原発の廃止措置に資する基礎研究**

重大事故を起こした福島第一原発の廃止措置に資する基礎研究として、原子炉内に発生した燃料デブリの性状把握および経年変化に関する研究を継続的に進めている。ここでは、燃料物質と被覆管や構造材金属を酸化または不活性雰囲気中で高温加熱処理を行い、反応により生成した模擬デブリの相関係を整理している。また、合成した模擬デブリからの重要核種の溶出挙動や水中での安定性などの評価を行い、核種溶出挙動とデブリ結晶構造の相関を整理した。本年度はこれまで進めてきた京都大学や日本原子力研究開発機構との共同研究「合金相を含む燃料デブリの安定性評価のための基盤研究」の成果をとりまとめ、5報の論文として発表した。このうち1報に関しては出版に伴い「固溶体化が燃料

デブリの「その後、」を決める～核燃料デブリの安全な保管や処理・処分に関わる新たな化学的知見～」と題してプレスリリースを行い、河北新報はじめ新聞等で報道された。さらにこの研究のスピノフ的研究として、合成法を確立した高純度の $\text{FeUO}_4$ を共同研究者と共に高分解能XANESで測定を行ったところ、U(V)の電子構造に関する新たな基礎的知見が得られ、米国化学会Inorganic Chemistry誌で発表した。

### 3. 使用済燃料直接処分のための基礎研究

原子力利用におけるシステムの柔軟性を確保しつつ今後のバックエンド対策を着実に進めていくためには、これまでに蓄積されてきたガラス固化体の処分に関する技術的知見に加え、代替処分オプションに関する技術的な調査・検討を行っておくことが必要である。そこで本研究では、前年度から継続して再処理を行っていない使用済核燃料を直接地層処分する、いわゆる直接処分オプションの我が国での成立性を評価するための一環となる基礎研究を日本原子力研究開発機構と共同で進めている。具体的にはわが国における使用済燃料直接処分の安全評価のための長期的な燃料溶解速度を設定することを目的として、還元条件下での二酸化ウランの溶解速度に及ぼす炭酸イオンの影響調べている。本年度はマトリクス溶解の指標物質として安定同位体 $^{26}\text{Mg}$ を微量添加した高密度 $\text{UO}_2$ 焼結体を合成し、これを一面を除いてアクリル樹脂により被覆することで水との接触面を規定できる状態としたうえで、高炭酸塩環境での溶出試験を実施した。濃縮安定同位体を用いたことによりバックグラウンド影響を大幅に減少させかつ、水との接触面積が規定できた燃料マトリクスの溶解速度が得られた。今後この手法により長期間の燃料溶解速度の評価を進める予定である。

### 4. 高レベル放射性廃液ガラス固化プロセス安定化のための基礎研究

高レベル放射性廃液のガラス固化技術は日本原燃六ヶ所再処理工場や、JAEA東海再処理工場で用いられている技術であるが、両工場ともに固化処理中の白金族元素の堆積現象や、溶解性モリブデン酸塩（イエローフェイズYP）の析出の問題を抱え、工学プロセスとして安定した運転ができていない。そこで、本研究では後者のYP問題の根本的解決法開発の一環として、ガラス固化工程に、煨焼行程を導入した際の水溶性YP成分の生成メカニズムおよび抑制方法について検討した。模擬高レベル廃液乾固物を用いた加熱試験の結果、煨焼炉中においても水溶性YP成分は生成する可能性が高いことが確認され、その生成は $\text{NaNO}_3$ の熱分解が進行する約 $500\text{ }^\circ\text{C}$ から始まることがわかった。そこで、この水溶性YP成分の発生抑制方法について、検討した結果、 $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ の添加が最も水溶性YPである $\text{Na}_2\text{MoO}_4$ の発生を抑制できることが確認できた。この知見を元に、模擬高レベル廃液乾固物にも $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ を添加して加熱を行い、水溶性YP発生抑制効果を調べたところ、効果的に水溶性YPの発生を抑制することが出来た。



**【研究活動報告】 エネルギーデバイス化学研究分野** (2022.1~2022.12)

教授：本間 格  
講師：小林 弘明  
助教：岩瀬 和至  
研究員：Sven Stauss (~2022.11)  
技術職員：雁部 祥行  
大学院生：飯村 玲於奈, 立花 慎之介, 平野 杜萌, 上村 赳之, 小瀧 崇太  
学部学生：川崎 栞, 山田 拓哉

本研究分野では 21 世紀の科学技術が取り組む最重要課題である，地球持続技術・循環型社会構築の為にナノテクノロジーを利用した再生可能エネルギー技術のフロンティア開拓を行う。低環境負荷プロセスと機能性ナノ材料開発をコア技術として，二酸化炭素変換，次世代二次電池，キャパシタ，燃料電池等の革新的エネルギーデバイスを創生し，再生可能エネルギー普及と地球温暖化対策のイノベーションを起こすことを研究室の目標としている。

革新的エネルギーデバイスを実現するために，単原子層材料（グラフェン，層状金属化合物），ナノ粒子，ナノポーラス物質，多元組成化合物，準安定相，擬似固体電解質，超臨界流体・水熱電解プロセス技術や放射光オペランド分析等の先端的な材料科学を探索し，それらの先端的なナノ材料科学を基礎学理として高容量・高出力型ポストリチウムイオン電池，大容量キャパシタ，燃料電池，太陽電池など低炭素化社会構築と産業競争力強化に資するエネルギーデバイスの研究開発を行っている。

2010 年 4 月に多元研サステナブル理工学研究センター所属の研究分野としてスタートしたエネルギーデバイス研究分野は開始から 13 年目の現在，金属資源プロセス研究センター所属の総勢 12 名の研究室として順調に研究活動を行っている。2022 年の研究活動としては，以下のように概括される。

### 1. 高電圧有機物蓄電池の開発

現行のリチウムイオン二次電池正極材料にはコバルト等のレアメタルが使用されていることから資源的制約があり，更にリチウムも産出国が限られていることからサプライチェーンリスクを抱える。これらの背景からポストリチウムイオン二次電池として，資源量やエネルギー密度に優れる有機分子を正極材料に用いた有機リチウムイオン電池，有機ナトリウムイオン二次電池の開発を進めた。課題であった有機分子の電解液溶出を解決するため有機分子とカルボキシ基修飾カーボンナノチューブの界面制御を行い，4 V 級有機リチウムイオン電池、3.5 V 級有機ナトリウムイオン二次電池の高電位動作実証，及びサイクル特性向上に成功した。有機ナトリウムイオン電池では正極活物質あたりの初回エネルギー密度  $430 \text{ Wh kg}^{-1}$  を示し，既存のリチウムイオン二次電池に匹敵するエネルギー密度を完全なレアメタルフリーの構成材料で達成した。

### 2. 二酸化炭素還元電極触媒の開発

電気化学的二酸化炭素還元反応(CO<sub>2</sub>RR)は，常温常圧という比較的温和な条件で二酸化炭素の還元再資源化を進行させることが可能であることから注目されている。CO<sub>2</sub>RR では，目的とする生成物を高い電流効率，並びに低い過電圧で得ることが重要である。以上の背景のもと本研究では，金属間化合

物電極触媒, Ag 修飾 Cu 触媒を CO<sub>2</sub>RR 触媒に展開した. 特に, 金属間化合物の一種であるホイスラー合金触媒において, 合金化効果により CO<sub>2</sub>RR 活性が大きく変化すること, メカニカルアロイにより Ag-Sn 金属間化合物触媒が合成可能であり, 合成した Ag-Sn 触媒が CO<sub>2</sub>RR 活性を示すこと, Cu 触媒に Ag を担持することでエチレンの生成効率が向上することを見出した. また, Cu 触媒のガス拡散電極への触媒担持量を変化させることで, CO<sub>2</sub>RR における多電子還元生成物であるメタン, エチレンの選択性が大きく変化することを見出した.

### 3. 酸素発生電極触媒の開発

酸素発生反応(OER)は, 種々の電解反応のアノード反応として重要である. 本研究では, 酸化物からなる無機 OER 触媒の開発を目的に研究を行った. 研究の過程で, (1)超臨界流体を用いた第一遷移金属 5 元素からなる多元系スピネル酸化物ナノ粒子の合成に初めて成功し, 合成した多元系スピネルが従来の触媒と比較して最も小さいターフェル勾配を有する高活性 OER 触媒として機能することを明らかにした. また, (2)ペロブスカイト酸化物とフッ素含有高分子触媒を混合し熱処理することで, 触媒粒子全体に均一にフッ化物イオンがドーピングされた触媒が合成できることを明らかにした. また, 合成した F ドーピング OER 触媒では, 金属イオンが還元され, 価数が増加したことにより OER 活性が 4 倍以上に大きく向上することを見出した. 同手法が OER 活性を決める重要な因子である金属イオンの電子状態を制御する手法として有用であることを明らかにした.

### 4. アニオンレドックス利用型高容量正極材料の開発

酸化リチウム Li<sub>2</sub>O を基本骨格とする逆蛍石型酸化物は, 従来型の遷移金属レドックスではなく固体内の酸素レドックス反応を利用することで, 現行リチウムイオン電池の約 7 倍のエネルギー密度向上を可能とする次世代正極材料である. これまでの研究で Co や Fe を置換した逆蛍石型酸化物で大きな可逆容量を示すことを報告しているが, 酸素レドックス反応の低サイクル性が課題であった. 本研究ではメカノケミカルプロセスにより, P や Si など酸素を安定化させる元素を固溶させた材料を開発し, 酸素レドックス反応の可逆性向上, 高エネルギー化を達成した.

### 5. マグネシウム金属電池正極材料の開発

現行のリチウムイオン電池の代替材料として安価かつ安全, 高エネルギー密度なマグネシウム電池が注目されている. マグネシウム蓄電池正極にはトンネル構造を有する  $\alpha$  型二酸化マンガンが注目されているが, ナノ粒子化が課題となっている. 本研究ではアルコールを反応溶媒に用いた新規プロセスを開発し,  $\alpha$  型二酸化マンガンのナノ粒子化に成功し, 可逆容量の増大を見出した.

**【研究活動報告】 金属資源循環システム研究分野** (2022.1~2022.12)

教授：柴田 悦郎

准教授：飯塚 淳

助教：安達 謙

JSPS特別研究員：HO Hsing-Jung

研究員：小野寺 直美、山本 裕美、高橋 美由紀、本田 亜由美、劉 玉慶、  
小山 諭美子、相場 絵美(～2022.9)、南場 晃子、井上 藍、勝又 素子(2022.6～)、  
今川 陽絵(2022.8～)、後藤直子(2022.10～)

事務補佐員：渡邊 道代、服部 洋子(2022.12～)

大学院生：Abdul Fakhreza(2022.10～)、篠崎 崇智、曳地 海斗、木村 太郎

学部学生：竹添 涼一、山内 泰智

本研究分野は、国内産業の持続的発展に必要不可欠である非鉄製錬業の活発な状態での持続と金属資源の効率的な循環に向けた研究活動を行っている。具体的には、非鉄金属製錬業を基盤とする金属資源リサイクル、二次原料の前処理技術、廃棄物の無害化処理技術、不純物対応技術、製錬過程における副産物からの金属資源回収、環境負荷元素の安定固定化技術の開発等を行っている。主に化学熱力学を学問ベースとした研究開発を行っているが、その他にも新規的な物理選別技術など化学熱力学のみでは対応できない技術課題へも積極的に取り組んでいる。2022年の研究活動としては、以下のように概括される。

**1. 新鉱物資源の製錬プロセスの開発**

非鉄金属資源を含有した海底鉱物資源を対象とした製錬プロセス開発に関する活動を行っている。海底鉱物は新鉱物資源として期待されているが、陸上鉱物資源とは物理的・化学的性質が異なることから改めて製錬技術の開発が必要である。本年度は、海底鉱物資源の具体的な製錬プロセスフローの構築に向けた基礎的検討を行った。

**2. 高リン鉄鉱石の資源化技術の開発**

未利用の高リン鉄鉱石の資源化を目的とした脱リン技術に関する研究を行っている。高効率の脱リンと鉄資源回収を達成する乾式製錬技術に関して検討を行っている。本研究は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の助成事業の一環(JPNP12004)として行っている。

**3. ショット状アノードを用いた新規銅電解精製法に関する研究**

二次原料主体の銅製錬所で製造される粗銅は不純物や貴金属が高濃度に含有されているため、電解精製法ではアノードの不動態化により電気銅の製造が出来ない。そのため、一旦、硫酸中に高温高圧下で酸化浸出された後に電力使用原単位が大きい電解採取法で電気銅が製造されている。そこで、本研究では、小径ショット状アノードを用いることにより不動態化を問題としない銅電解精製技術の開発を行っている。

**4. スコロダイト合成による砒素の安定固定化に関する研究**

高濃度As(V)含有の硫酸第一鉄(FeSO<sub>4</sub>)溶液中にヘマタイト(Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)等の酸化鉄(III)粉末を添加すること

でより効率的にファセット状の粗大スコロダイト粒子が合成されることを明らかとしている。本年度は、安定同位体鉄を用いたスコロダイト生成機構の解明ならびにマグネタイト( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ )添加法によるスコロダイト生成機構の解明とプロセス最適化を検討した。また、本反応におけるヘマタイトの役割をより明確にするため、電気化学的手法を用いるプロセス解析を行った。

## 5. 量子化学計算支援による難処理鉱物用の新規浮選剤の開発

本研究では、第一原理計算に基づく熱力学分配平衡計算のための手法であるCOSMO-RS (COnductor-like Screening MOdel for Realistic treatment of Solvents)を利用し、銅鉱石あるいは銅ヒ素鉱石に高い選択性を有する新規浮選剤の分子構造の抽出を行うことを目的に検討を進めている。実際の鉱物の表面を反映することに焦点を当て、実験で得られる化学物質の鉱物への吸着挙動と第一原理計算で得られる化学物質の表面電荷情報を重回帰分析することで、化学物質の表面電荷情報のみを利用した吸着挙動の予測モデルの構築を行っている。2022年は、化学物質の鉱物への吸着データの測定を進め、吸着挙動予測モデルの精度をさらに高めると共に、予測モデル式から推測された浮選剤候補物質の基礎的な評価を行った。

## 6. 塩基性廃棄物の炭酸塩鉱物化によるカーボンリサイクル技術の開発

地球温暖化対策のため二酸化炭素を有価物として再利用するCCU技術に注目が集まっている。これらの技術の中で、塩基性の廃棄物や鉱物を利用して二酸化炭素の鉱物化を行う技術は、カーボンフリーの水素を必要とせず、反応のGibbsエネルギー変化が負であり、また得られる炭酸塩、骨材、コンクリート製品等の市場規模が比較的大きい等の特徴を有する。本研究では、コンクリート等の塩基性廃棄物を主要な対象とし、複数の検討を進めている。

## 7. バイポーラ膜電気透析法を利用した水処理に関する研究

複合膜の一種であるバイポーラ膜を利用した電気透析法による水処理に関する研究を進めている。バイポーラ膜電気透析を用いることで、薬剤の添加を行わずに、処理水のpHを電氣的に効率よく変化させながら排水中のイオンの分離が可能となる。また、電気透析槽に流通させる溶液に体積差を付けることで分離対象物質の高度濃縮が可能となると期待される。特に排水中に希薄に含有されるリンやヒ素の分離と高度濃縮を目的とした検討を進めている。

## 8. 高電圧パルス破碎による高効率物理選別技術に関する研究

太陽光発電パネルは複合材料であり、多種の材料を高効率で分離しつつリサイクルに回せるような要素技術が求められている。本研究では、近年効率的な装置が開発され、複合材料の選択的破碎を可能とする要素技術である高電圧パルス破碎を、太陽光発電パネル等の複雑な複合材料のリサイクルに適用し、かつその他の物理選別技術と組み合わせることで、パネル中の多種材料を選択的に分離回収する手法を確立することを目的としている。2022年は、フレキシブルタイプの太陽光発電パネルや合わせガラスを対象とした基礎的な検討を進めた。

## 9. 非水系や擬水系の溶媒を用いる金属電析プロセスの開発

湿式製錬や電気めっきなどの金属電析プロセスの多くは電解質水溶液を反応場とするため、水の電気分解反応は主反応の効率低下を招く。また、液中pHの局所的な変化による不溶性固体の析出など、水の電気分解に由来するトラブルも多い。本研究ではそのような水の電気化学的不安定性に由来する課題の解決のため、水を含まない非水系や、水分量の少ない擬水系の反応場を用いる電析プロセスの開発に取り組む。水溶液系とは異なるこれらの系における金属の電析挙動を調査し、その反応機構についても溶液化学に基づく

解析を行った。

#### 10. 金属資源循環システムに関する外部機関での講義

当該分野での人材育成のために以下のような講義を行った。

- ・ 国際資源大学校 2022年度製錬・リサイクル研修 共通基礎コース 講義: 貴金属・レアメタル等の精・製錬, 2022/5/17
- ・ 国際資源大学校 2022年度資源開発研修(第14期) 講義: 製錬(乾式及び湿式), 2022/8/12 (オンライン)
- ・ 国際資源大学校 2022年度製錬・リサイクル研修 専門コース 講義: 非鉄製錬の不純物・有害物処, 2022/11/8
- ・ 資源・素材学会「資源・素材塾」 講義: 非鉄金属製錬概論, 亜鉛・鉛製錬プロセス, 2022/8/24,29 (オンライン)

## 【研究活動報告】 原子空間制御プロセス研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：小俣 孝久

助教：鈴木 一誓，アルンクマール ドライ

大学院生：鈴木 惇市，アマン シャルマ，松尾 蘭太郎，後藤 真也，  
野上 大一，工藤 咲季，朱 鵬博，奥石 尚己

学部生：後藤宗太郎，白岩 拓真

研究生：冨 科

本研究分野では、無機固体材料を中心に新規化合物の設計とその合成プロセスの開発、新規材料の素子化に関する研究活動を行っている。現在は、環境適応型太陽電池の開発、非鉄製錬副産物を利用した機能材料開発、中温作動型燃料電池用リン酸塩ガラス電解質とそれに適した電極材料、電池およびその要素材料の NMR を使用した解析などを主な研究課題として取り組んでいる。2022 年の研究活動は、以下のように概括される。

### 1. SnS の界面におけるバンド屈曲

硫化錫(II)(SnS)は安価で豊富な元素からなる化合物半導体であり、薄膜太陽電池の材料として期待されている。これまで 20 年ほどにわたってその素子化が研究されてきたが、得られる開放電圧が低いことから、変換効率は 4% 台に留まっている。開放電圧が低いのは、界面における SnS のフェルミ準位が特定のエネルギーでピン止めされる現象(フェルミ準位ピンニング)が原因であると理解されている。本研究グループは、n 型 SnS 単結晶の上に MoO<sub>3</sub> 薄膜を堆積し、界面における電子状態を光電子分光法により観察し、界面近傍で SnS のバンドが 1 eV も曲がることを明らかにした(図 1)。従来の SnS 太陽電池では開放電圧が 0.3 V 程度であったが、本結果は SnS 太陽電池から 0.7-0.8 V の大きな開放電圧が得られる可能性があることを示している。また、従来のフェルミ準位ピンニングが生じる界面と本素子の界面とを比較することで、高い変換効率の太陽電池を実現するには、SnS 薄膜中の硫黄欠損の抑制や、p 型層および n 型層のどちらにも SnS を用いたホモ接合構造の採用が有効であることを提案した。

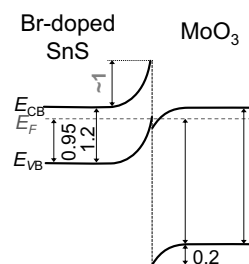


図 1. Br-doped SnS 単結晶と MoO<sub>3</sub> 薄膜の界面におけるバンド構造。図中の数字の単位はすべて eV。

### 2. 電気化学的陽イオン置換法を用いた Cu<sub>3</sub>AsO<sub>4</sub> の合成

非鉄製錬における鉱石の品位低下に伴い、副産物として産出されるヒ素やカドミウムなどの有害元素の量は近年増加の一途をたどっている。これらの有害元素を含む機能性材料を開発し、有害元素の「出口」を確保することは、非鉄製錬の安定した操業のために必要不可欠であり、また資源の有効活用という観点からも必要なアプローチである。ヒ素を含むエナジャイト型 Cu<sub>3</sub>AsO<sub>4</sub> は熱力学的な安定相ではないものの、準安定相として得られる可能性が高いこと、太陽電池に適し

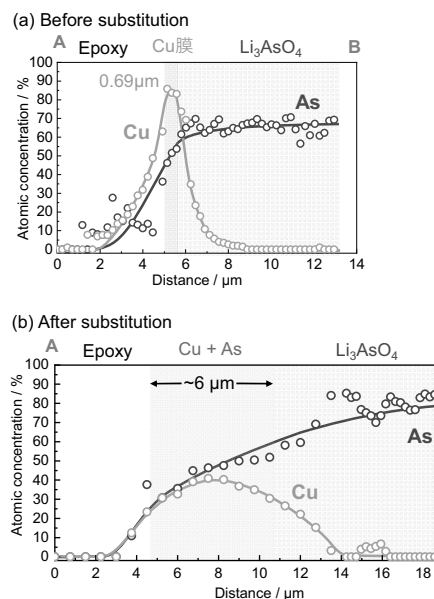


図 2. Cu 膜を堆積した Li<sub>3</sub>AsO<sub>4</sub> ペレットの組成分布。(a)イオン置換前および(b)イオン置換後。

た光学特性を有することなどが第一原理計算により示されている。本研究ではヒ素を含有する機能材料の合成という観点から、エナジャイト型  $\text{Li}_3\text{AsO}_4$  を前駆体とした  $\text{Cu}_3\text{AsO}_4$  の合成に取り組んだ。 $\text{Li}_3\text{AsO}_4$  のペレットにアノードとして Cu 膜を堆積し、熔融 Sn をカソードとして電圧を印加し、 $\text{Li}^+$  と  $\text{Cu}^+$  との電気化学的な置換（電気化学的陽イオン置換）によりエナジャイト型  $\text{Cu}_3\text{AsO}_4$  の合成を試みた。イオン置換により同定できない新たな相が出現したものの、エナジャイト型  $\text{Cu}_3\text{AsO}_4$  は生成しなかった。これは、 $\text{Li}^+$  イオンが  $\text{Cu}^+$  イオンに置換されると同時に、エナジャイト型構造が不安定化したため推察している。イオン置換処理後の試料の組成や Cu の価数を調べたところ、Li 量が減少した深さ範囲では Cu 量が増加していること（図 2）、および、Cu は試料中に  $\text{Cu}^+$  で存在することが示された。これらの結果は、 $\text{Li}^+$  と  $\text{Cu}^+$  の置換が期待通りに生じていることを示しており、電気化学的陽イオン置換法が新しい化合物の合成法として有効であることが示唆された。

### 3. 中温作動型燃料電池用リン酸塩ガラス電解質

250～500℃の温度域で作動する中温作動型燃料電池は、固体酸化物型燃料電池や固体高分子型燃料電池の抱える課題を克服する次世代燃料電池として期待されている。本研究グループでは、高密度プロトンキャリアを含有するリン酸塩系ガラスを作製する方法を独自に開発し、中温作動型燃料電池の要素材料開発を行っている。2021 年に  $\text{GeO}_2$  がガラスのプロトン伝導度を向上することとその起源を解明した。2022 年は  $\text{GeO}_2$  と  $\text{SiO}_2$  との類似性に注目し、 $30\text{HO}_{1/2}-12\text{SiO}_2-58\text{PO}_{5/2}$  ガラスで  $\text{SiO}_2$  の効果を研究した。 $30\text{HO}_{1/2}-12\text{SiO}_2-58\text{PO}_{5/2}$  ガラスのプロトン伝導度（図 3）は、これまで報告されているリン酸塩ガラスと比べても低く、また、伝導の活性化エネルギー（1.43 eV）は従来報告されている値（0.7～1.0 eV）に比べ大きかった。IR スペクトルに観察される O-H 結合の伸縮振動は  $2750\text{ cm}^{-1}$  であり、O-H 結合の強さは従来ガラスと同程度であったことから、このガラスの低い伝導度と大きな活性化エネルギーは、O-H 結合から解離し自由となった  $\text{H}^+$  の移動のエネルギー障壁が大きいためであると推察された。XRD, Raman,  $^{29}\text{Si}$  MAS-NMR から、ガラス中で Si は 6 配位で存在し、鎖状リン酸イオン  $(\text{PO}_3^-)_n$  を架橋していることが示され、 $\text{H}^+$  の移動のエネルギー障壁が大きいの、酸素との共有結合性が大きく、かつ、価電子が 4 個の Si が 6 配位で存在するために、6 本の酸素との結合のうち 2 本は配位結合となり、 $\text{SiO}_2$  八面体が負の電荷を有する  $\text{SiO}_6^{2-}$  となり（図 4）、それが  $\text{H}^+$  を静電的に捕獲するためであることが明らかとなった。

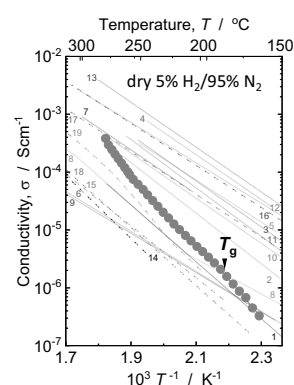


図 3.  $30\text{HO}_{1/2}-12\text{SiO}_2-58\text{PO}_{5/2}$  ガラスのプロトン伝導度の温度依存性。実線および破線は、従来報告されているリン酸塩ガラスのプロトン伝導度。

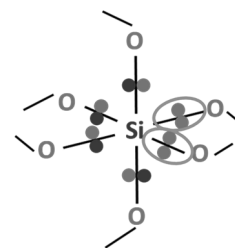


図 4.  $\text{SiO}_6^{2-}$  ユニットの模式図とその電子配置。青い丸は Si の、赤い丸は酸素の価電子をそれぞれ表す。

### 4. プロトン-電子混合伝導体のプロトン部分伝導度の評価法開発

2018 年に本研究グループが見出した  $36\text{HO}_{1/2}-4\text{NbO}_{5/2}-2\text{BaO}-4\text{LaO}_{3/2}-4\text{GeO}_2-1\text{BO}_{3/2}-49\text{PO}_{5/2}$  ガラス（36H ガラス）は、300℃で  $2 \times 10^{-3}\text{ S cm}^{-1}$  の高いプロトン伝導性を有し、かつ、300～400℃のホットプレスにより様々な材料との接合体が作製できるという特徴を有する。2022 年度は、36H ガラスを電子ブロッキング電極として使用し、プロトン-電子混合伝導体のプロトン部分伝導度の直接測定法の開発を行った。プロトン-電子混合伝導体として知られている  $\text{H}_x\text{WO}_3$  と 36H ガラスを接合し、直流および交流インピーダンス法で  $\text{H}_x\text{WO}_3$  のプロトン部分伝導度を評価した。直流法と交流インピーダンス法から評価された伝導度に、いくらかのずれが生じという課題が残ったが、プロトン部分伝導度の評価法は概ね確立することができた。

## 【研究活動報告】

## 量子電子科学研究分野

(2022.1~2022.12)

教 授：高橋 正彦

准 教 授：渡邊 昇

助 教：鬼塚 侑樹

事務補佐員：佐川 藍

大 学 院 生：龍 思涵、金谷 諭、鈴木 優太

学 部 学 生：財津 大樹

本研究分野は、反応性や機能性の起源の解明を目指して、電子散乱を利用した新規計測法の開発とその多元物質科学への応用を進めている。2022年の主たる研究活動は、以下のように概括される。

## 1. 原子運動量分光法の分子分光法としての定量化

原子運動量分光法は、物質を構成する原子の運動を、元素種ごとに観測するユニークな手法である。本年は、昨年から引き続き H<sub>2</sub> 分子を対象とした運動量分布観測法としての本手法の定量化に加え[1.1-2]、新たに HD 分子を対象として、本手法の元素種ごとの運動量分布観測が可能であるという質量分析法としての実証を行った。図 1 に実験で得られた H 原子と D 原子の運動量分布を示す。両原子の運動量分布は、強度・バンド形状双方についてよい一致を示した[1.3]。これは、元素ごとに運動量分布の観測が可能であることでだけでなく、元素ごとの存在比も決定することができることを意味する。以上より、原子運動量分光法を質量分析法と運動量測定法を兼ね備える分子分光法として確立した。

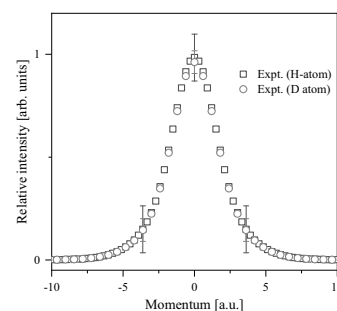


図 1. HD 分子の中の H 原子と D 原子の運動量分布

[1.1] Y. Onitsuka, Y. Tachibana, M. Takahashi, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24**, 19716 (2022).

[1.2] Y. Tachibana, Y. Onitsuka, H. Kono, M. Takahashi, *Phys. Rev. A* **105**, 052813 (2022).

[1.3] Y. Tachibana, Y. Onitsuka, S. Kanaya, H. Kono, M. Takahashi, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25**, 6653 (2023).

## 2. フロント軌道形状に基づく新規薬理学的類似指標の開発

現代創薬における基本概念である「鍵と鍵穴理論」の反例である、類似した分子構造を持つ分子の薬理効果が大きく異なる Activity cliff と呼ばれる系の薬理効果予測法の開発を行った。具体的には、分子の反応性を支配する原子核から遠く離れた分子軌道(フロント軌道)を第一原理計算により計算し、その運動量空間における形状の類似性を求め、薬理効果との相関を探索した。本年は、カルバミン酸類[2.1]・ダイオキシシン酸類[2.2]を対象に予備的研究を行った。図 2 に、カルバミン酸類の毒性の報告値と占有軌道(HOMO, HOMO-1)や非占有軌道(LUMO, LUMO+1)の形状の

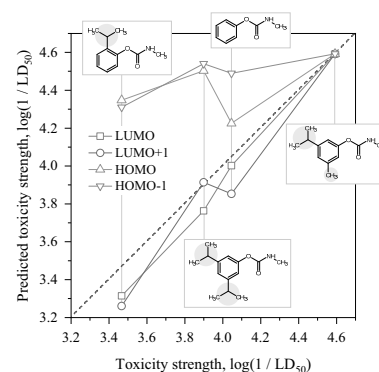


図 2. カルバミン酸類の毒性予測結果



類似性から予測された値を示す。非占有軌道を用いた場合のみ、高い精度で予測できていることがわかる。現状では様々な系への適用や指標の改良等の余地はあるが、フロンティア軌道形状を用いて薬理効果の予測が可能であるという力強い成果を得た。

[2.1] S. Long, Y. Onitsuka, S. Nagao, and M. Takahashi, *in preparation*.

[2.2] Y. Onitsuka, S. Long, S. Nagao, and M. Takahashi, *in preparation*.

### 3. 分子振動による電子波動関数の歪みの研究

分子振動と電子運動との相関である振電相互作用が、分子の性質にしばしば顕著な影響を与えることが知られている。我々は分子軌道形状を運動量空間で可視化する電子運動量分光を用いることで、振電相互作用の起源である核変位に伴った電子波動関数の歪みそのものを観測しうることを示してきた。本年は分子スイッチのモデル系であるスチルベン分子を対象に、二つのフェニル基のねじれと分子軌道形状の関係を精査した[3.1]。さらに、電子波動関数の歪みが  $\text{CH}_3\text{Cl}$  と  $\text{CF}_3\text{Cl}$  [3.2]および  $\text{CCl}_4$  [3.3]の電子励起確率に与える影響を理論の観点から詳細に調べている。 $\text{CCl}_4$  に対する結果の一例を図 3 に示す。非対称伸縮振動による価電子励起確率の大幅な増大が示され、 $\text{CCl}_4$  の光解離による上層大気中での  $\text{Cl}$  放出に分子振動効果が大きく寄与することが明らかとなった。

[3.1] N. Watanabe, K. Kume, and M. Takahashi, *J. Electron Spectrosc.* **259**, 147240 (2022).

[3.2] N. Watanabe and M. Takahashi, *J. Phys. B* **55**, 015201 (2022).

[3.3] N. Watanabe and M. Takahashi, *J. Phys. Chem A* **127**, 1866 (2023).

### 4. 配向分子の電子エネルギー損失分光法の開発

励起電子波動関数の 3 次元的形状の探索と電子・分子衝突の立体ダイナミクスの研究を目的に、配向分子の電子エネルギー損失分光の開発を進めてきた。本手法では非弾性散乱電子に加え、生成励起分子の後続解離過程で生じる解離イオンを同時計測し、その反跳方向から電子衝突時における分子の空間配向を特定する。本年は  $\text{N}_2$  および  $\text{SF}_6$  のイオン化過程を調査した。図 4 に電子衝突で  $\text{N}_2$  から生じた  $\text{N}^+$  イオンの放出角度分布を、イオンの反跳方向と移行運動量ベクトル  $\mathbf{K}$  とが成す角  $\phi_{\mathbf{K}}$  の関数として示す。 $\text{N}_2$  がもつ反転対称性にも拘わらず、エネルギー損失  $E$  が 32-34 eV において、 $\text{N}^+$  は  $-\mathbf{K}$  方向よりも  $+\mathbf{K}$  方向へ高い割合で放出されている。この結果は、電離電子のクーロン場が親分子イオン内の電子分布に偏りを生むことで解離が非対称になるという、我々の見出した新規機構[4.1]の影響が顕著に表れた例である。

[4.1] N. Watanabe and M. Takahashi, *Phys. Rev. A* **104**, 032812 (2021).

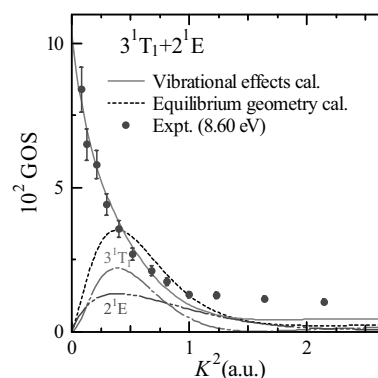


図 3.  $\text{CCl}_4$  における  $3^1T_1$  と  $2^1E$  状態への遷移に対する一般化振動子強度分布

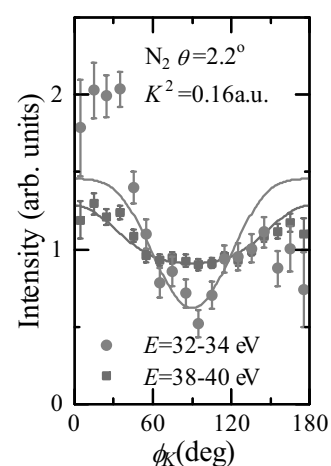


図 4.  $\text{N}_2$  の解離性イオン化で生成した  $\text{N}^+$  の放出角度分布

**【研究活動報告】 ナノ・マイクロ計測化学研究分野 (2022.1~2022.12)**

教授：火原 彰秀

講師：福山 真央

助教：玄 大雄(2022.4-)

特任研究員：Grasianto(2022.8)

技術職員：小倉 祐

事務補佐員：大窪 和子

技術補佐員：丸山 洋子、丹野 里佳、高橋 綾香(2022.7-)

大学院生：小川 真季(2023.3)、LIU Hao、小澤 大樹(2022.4-)、五十嵐 友梧、

BAPTISTA Carlos (2022.10-)

学部生：BAPTISTA Carlos(2022.9)、張 義澤(2022.4-)

本研究分野では、ナノ・マイクロ空間を利用した化学・生化学の集積化と高度化に関する研究分野開拓を中心に研究を進めている。具体的には、マイクロ流体デバイスやマイクロ液滴を利用する分析前処理操作集積化手法の研究、その分析応用研究などを推進している。流路内や液滴内などナノ・マイクロスケールの空間制約下での反応や流体挙動などの特性を明らかにする基礎化学研究も重要である。そのための研究ツールとして、顕微イメージング法、顕微レーザー分光法などの高度計測手法の開発も進めている。2022年の主たる研究活動は、以下のように概括される。

**1. タンパク質濃縮相からのアミロイド核生成の定量的解析法の確立**

アミロイド形成は筋萎縮性側索硬化症 (ALS) など様々な疾患で見られる。アミロイド形成では、最初期の核生成が起こりにくい現象であるが、一旦核が生成すると不可逆的にアミロイドが成長する。そのため、アミロイド核生成メカニズムの解明が疾患発症/抑制の理解につながると考えられている。近年、様々なアミロイド形成タンパク質が膜を持たないオルガネラ(Membraneless organelle, タンパク質濃縮相、細胞内液滴ともよばれる)を形成することが報告された。さらにタンパク質濃縮相はタンパク質濃度が非常に高く(～数十%)、アミロイド核生成の場になりうるということがわかってきた。しかし、アミロイド核生成は低頻度かつ数-数十分子の微細な集合状態変化であるため、その定量的計測が困難だった。本研究では、タンパク質濃縮相からのアミロイドの核生成機構の理解を目指している。

本年度は、共焦点顕微鏡画像の自動解析法を確立し、酵母プリオンタンパク質 Sup35 にてタンパク質濃縮相からのアミロイドの核生成定量的解析を実証した。アミロイドの核生成頻度は  $10^7/m^3/s$  と求めた。これはタンパク質濃縮相からのアミロイド核生成速度を世界で初めて計測した例である。他のヒト疾患関連タンパク質( $\alpha$ シヌクレイン)等についても現在アミロイド核生成速度計測を検討中である。また、より高精度の反応速度論的議論を可能にするために、濃縮相サイズを制御するためのマイクロ流体デバイスの開発を行っている。

**2. 可搬型蛍光偏光解消法デバイスの開発**

ナノ・マイクロ流体化学デバイスの応用には、微小空間検出に適した検出法の研究が欠かせない。蛍光偏光解消法は、直線偏光で励起した蛍光プローブが発する「励起光の偏光に垂直な偏光をもつ成分の蛍光 $I_{\perp}$ 」と「励起光の偏光に垂直な偏光をもつ成分の蛍光 $I_{\parallel}$ 」の差が、蛍光プローブ周りのマイクロ環

境を反映する原理を利用し、免疫アッセイの検出法などに利用されている。一般には、デスクトップサイズ以上の機器で、一点を計測できるだけであり、その場分析を指向した可搬・多点分析装置の実現には、偏光光学系の集積化が課題であった。われわれは、偏光光学系として液晶ディスプレイパネルを利用する新しい蛍光偏光分析装置を、北海道大学渡慶次学教授や企業と共同で開発した。2022年は、これまで進めてきた分析をより低濃度で実現するための検討を行った。低濃度試料を測定するときには蛍光レーザー濃度を低くする必要があるが、蛍光強度が低くなるため、PDMS からのバックグラウンド自家蛍光が問題となることを明らかにした。また、その補正法を計測原理にしたがって導き、よく補正されることを確認した。試料やレーザーの壁面への吸着を防ぎつつ、バックグラウンド補正可能な低濃度定量条件を見いだした。

### 3. ナノ・マイクロ流体界面計測法の開発

ナノ・マイクロサイズの気液界面や液液界面といった「自由界面」は、ナノ・マイクロ流体化学デバイス内での流体操作・化学操作に用いられるだけでなく、エマルション・エアロゾル・マイクロバブルの特性に重要な作用をすることが知られている。自由界面の特性を決める重要なパラメータに「界面張力」がある。ナノ・マイクロスケールの界面張力を光学的に計測できる手法があれば、「デバイス内その場で」あるいは「エアロゾル・マイクロバブルをそのまま」計測することができるようになり、界面化学の発展に大きな寄与ができる。われわれは、自由表面振動の自発共鳴を利用して、光学的に界面張力を計測する準弾性レーザー散乱法（QELS 法）を研究している。

2022年は、電気力学天秤（EDB）を用いた新しい単一水滴トラップ法装置を構築し、EDB-QELS法を実現した。この方法は、光トラップ法よりも簡便で、長期安定性も高い手法であり、環境試料測定などに非常に有用になる。大気化学でよく用いられる無機塩や有機化合物の水溶液の表面張力を測定したところ、文献値とよく一致した。さらに名古屋大学宇宙地球環境研究所の持田陸宏教授と共同研究を進め、環境エアロゾル試料の測定にも成功した。

## 【研究活動報告】ハイブリッド炭素ナノ材料研究分野 (2022.1~2022.12)

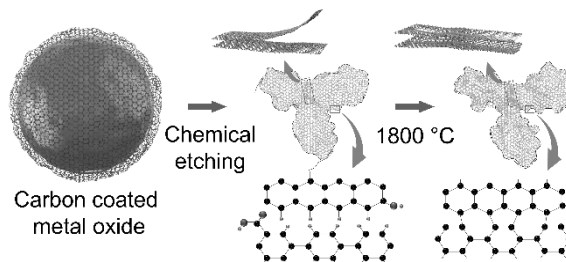
教授: 西原 洋知  
 助 教: 吉井 丈晴、Zhengze Pan、Wei Yu、Rui Tang  
 特任教授(客員): 伊藤 仁、戸崎 善博  
 特任准教授(客員): 伊藤 徹二  
 特任研究員: 水内 和彦、井上 真隆  
 JSPS 特別研究員: Alex GAL AZIZ  
 技術補佐員: 大和田 真生  
 事務補佐員: 佐藤 奈穂、小山 由樹子、柳沼 智子  
 大学院生: Kritin Pirabul、Liu Hongyu、千田 晃生、東條 朗子、刘 天舒、金丸 和也、  
 西川 銀河、Liu Minghao、若林 佳吾、佐山 裕美、Xia Tian、Shen Zhaohan、  
 郭 陸人  
 研究生: 王 鵬、張 夢璇、田 夢麗、周 含章  
 学部学生: 篠塚 亮輔、清水 俊介

本研究分野では、従来は構造制御も構造描写も困難であった非晶質を主体とするカーボン系材料に関し、有機合成や化学気相蒸着の手法を用いて原子・分子レベルからのボトムアップ的な材料合成を行い、種々の新しいカーボン系構造体および複合材料の調製を進めている。また、先進のカーボン材料分析技術を利用し、カーボン系材料の反応性、耐食性、触媒能等、様々な化学的特性を分子論的に理解し、その精密制御を行っている。さらに、調製した新規材料を様々なエネルギーデバイス、機能性吸着材、触媒、ヘルスケアなど幅広い分野へ応用する検討を、国内外の多数の研究機関および企業と連携しつつ進めている。2022年の研究活動は以下のように概括される。

### 1. Structural Engineering of Graphene-Based Frameworks

High-temperature annealing ( $\sim 1800\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) is often used to enhance the crystallinity and eliminate the O- and H-terminal functional groups of graphene-based nanocarbon materials. However, most nanocarbons encounter severe structural change at such a high temperature. Over the past one year, we tried to elucidate the crucial structural factors that determine the thermal stability of graphene-based nanocarbon materials.

We defined the structure retention degree (SRD) based on the change in the basal plane surface area of nanocarbons when they are subjected to heat treatment at  $1800\text{ }^{\circ}\text{C}$ . The larger the amount of graphene-stacking structure becomes, the lower the SRD becomes. Additionally, we differentiated two types of stacking structures, *i.e.*, tight stacking and loose stacking. The tight stacking is formed by the bottom-up growth of graphene during the chemical vapor deposition process, whereas the loose stacking is generated by capillary shrinkage after template removal. We found that loosely stacked structures triggered extra stackings via the epitaxial effect at high temperatures (**Fig. 1**). Moreover, we demonstrated that the threshold of the inner space size that triggers the thermal-induced structural change is about 4-7 nm. These results offer a fundamental understanding of the solid-state chemistry of nanocarbons under thermal annealing, and is crucial for engineering graphene-based frameworks.



**Fig. 1** The structural change of templated nanocarbon.

## 2. 種々の単核金属を含有した規則性炭素化物構造体の調製

規則性炭素化物構造体(ordered carbonaceous framework, OCF)は、アセチレンやジアセチレン部位を導入した金属ポルフィリンの熱重合・炭素化により得られる材料である。OCFは金属有機構造体のような3次元的規則構造・ミクロ多孔性を有する上、熱・化学的安定性や高導電性といった炭素材料としての特性を持ち併せている。また、OCF中には金属種が原子状分散して固定化されており、電極触媒材料として応用が有望視されている。しかし、既報のOCFの中心金属はNiやFeなどの単一の単核金属を含有したものに限定されていた。さらなる触媒応用展開には、OCF中の単核金属の種類の拡張および、複数種類の単核金属を含有したOCFの調製が望まれる。そこで、C/Cu二種単核金属を含有するOCFの調製を検討した。

CoおよびCuポルフィリンからOCFを合成した結果、それぞれのOCFが互いに同一の規則性を有していることが明らかとなった。そこでCo/Cu二元分子結晶を合成し、CoとCuを共に含有するOCFの調製を試みた。8つのエチニル基が導入されたポルフィリン分子を合成し、金属挿入を行うことにより金属ポルフィリン前駆体M(Co, Cu)-P<sub>8e</sub>を得た(Fig. 2a)。等モル量のCoおよびCu-P<sub>8e</sub>をジクロロメタンに溶解し、再結晶法により二元分子結晶Co/Cu-P<sub>8e</sub>を調製した。これをN<sub>2</sub>雰囲気、500°Cで熱処理することで規則性炭素化物構造体Co/Cu-P<sub>8e</sub><sub>500</sub>を合成した。得られた試料はPXR、SEM、TEM、高角散乱環状暗視野走査透過型電子顕微鏡(HAADF-STEM)、X線吸収微細構造(XAFS)、窒素吸脱着測定により評価した。

CoおよびCu-P<sub>8e</sub>の合成はMALDI-TOF-MSにより確認した。Fig. 2bに示されるようにPXR測定において、Co-P<sub>8e</sub>、Cu-P<sub>8e</sub>およびCo/Cu-P<sub>8e</sub>は6.5°付近にシャープなピークを示し、互いに同じ結晶構造を有することが分かった。本ピークは500°Cでの熱処理後においても観測され、ポルフィリン結晶由来の長周期規則性が炭素化後においても維持されることが示された。Co/Cu-P<sub>8e</sub><sub>500</sub>についてHAADF-STEM観察を行うと、PXRパターンで示されたピークに対応する $d = 1.31$  nmの縞が観測された(Fig. 3a)。Fig. 3b-dに示すEDSマッピング像から、CoおよびCuは熱処理後もそれぞれ偏析なく高分散していることが分かった。さらに、CoおよびCu K-edge XAFS測定から、Co/Cu-P<sub>8e</sub><sub>500</sub>において両金属種ともポルフィリン由来の窒素4配位構造が維持され、単核で固定化されていることが明らかとなった。また、Co/Cu-P<sub>8e</sub><sub>500</sub>の窒素吸脱着等温線はI型を示し、そのBET比表面積は375 m<sup>2</sup>/gと算出され、炭素化に伴いミクロ孔が発達することが分かった。以上のように、Co/Cu二元分子結晶を用いることで、二種金属を含有した多孔性OCFの調製に成功した。単核のCoおよびCu種はそれぞれCO<sub>2</sub>還元能、CO還元能を有することが知られている。よって、本材料を触媒として用いることで、CO<sub>2</sub>からCOを経由したC1, C2化合物の直接合成の実現が期待される。

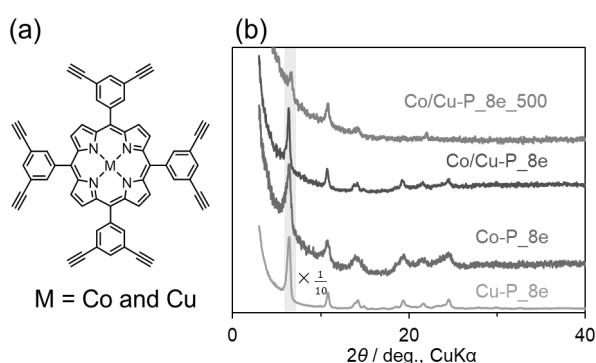


Fig. 2 (a) Molecular structure of M-P<sub>8e</sub> (M; Co and Cu). (b) PXRD patterns of Co, Cu-P<sub>8e</sub>, Co/Cu-P<sub>8e</sub> and Co/Cu-P<sub>8e</sub><sub>500</sub>.

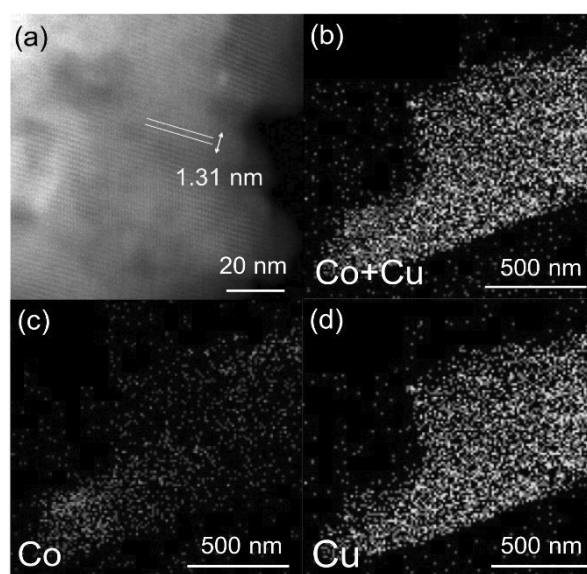


Fig. 3 (a) HAADF-STEM image and (b-d) EDS element mapping images of Co/Cu-P<sub>8e</sub><sub>500</sub>.

## 【研究活動報告】 ハイブリッド材料創製研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：芥川 智行

助教：武田 貴志

大学院生：張 雲雅、溝上 諒平、三部 宏平、瀬戸 信也、笠原 遥太郎、

清水 裕太、林 あかり、井出 瞭、林 雨禎、佐藤 千慧、斉藤 元輝

学部学生：對馬 敏高、増子 美侑

本研究分野では、有機分子の設計自由度に着目した分子集合体の多重機能性の開拓を試みている。有機合成化学、錯体化学、物性化学の手法を駆使して、導電性・磁性・発光・強誘電性・強弾性の観点から、分子性材料の電子スピン構造や動的な運動自由度を設計し、その集合状態と機能発現を制御する事で、マルチファンクショナル材料に関する研究を行っている。新規なプロトン伝導性分子性結晶、一次元カラムナードメイン強誘電体のナノスケール化、発光センサ、有機単結晶熱伝導材料、ダイナミックなイオン運動ユニットを含む導電性結晶、電子-イオン伝導度スイッチングを示す有機半導体などに関する研究を実施した。2022年度の研究活動の中から一方向分子回転ユニットを有する低エネルギー駆動型の有機強誘電体の開発に関する研究実施例を紹介する。

### キラル液晶性化合物の強誘電性と低エネルギー駆動スイッチング

アミド基に疎水性のアルキル基が導入されたアルキルアミド鎖 ( $-\text{CONHC}_n\text{H}_{2n+1}$ ) は、分子間アミド水素結合を用いた機能性分子集合体の形成に利用される特徴的な構造ユニットである。アルキルアミド基は、置換された $\pi$ 電子系の HOMO や LUMO レベルを大きく変化させる事が無いために、電子構造制御の観点からは有効では無いが、オルガノゲルや液晶相形成の観点から、特に一次元分子集合体の創製に重要な構造ユニットである。ディスコチックヘキサゴナルカラム ( $\text{Col}_h$ ) 液晶相の熱的安定性を劇的に向上させる化学的手法が、松永義夫 (1929 1.2~2022 4.2.) らにより 1986 年に報告された。ベンゼンの 1, 3, 5-位にアルキルアミド基を導入した  $N, N', N''$ -Trialkyl-1,3,5-benzenetricarboxamides (**3BC**) 誘導体で 100~200°C に及ぶ広い温度域で  $\text{Col}_h$  液晶相が出現する事が報告された。アルキルアミド鎖はベンゼンカラム方向に多重の 1 次元  $\text{N-H}\cdots\text{O}=\text{O}$  水素結合を形成し、カラム構造の熱的安定性を劇的に向上させる。同時に、**3BC** が  $\text{Col}_h$  液晶相で電場印加により、アルキルアミド鎖の分極反転による電場一分極 ( $P-E$ ) 曲線に強誘電体に特徴的なヒステリシスを出現させる。我々は、**3BC** のベンゼン部位をピレンなどの機能性 $\pi$ 電子骨格に拡張した分子系における強誘電性を報告してきた。一方、 $\pi$ 電子系に加えてアルキル鎖の設計の観点から、機能性材料開発へのアプローチが可能である。

アルキルアミド鎖へのキラリティの導入は、分子集合体構造と液晶性に大きな影響を与える。**3BC** 誘導体の側鎖にキラルな  $S$  および  $R$ -3, 7-ジメチルオクチル基を導入した  $S$ -**3BC** および  $R$ -**3BC** を合成し、その相転移挙動・分子集合体構造・強誘電性をラセミ体と比較検討した(図 1)。 $S$ -**3BC** および  $R$ -**3BC** を、それぞれ 1:1 で混合し、 $rac$ -**3BC** を調整した。 $S$ -**3BC**、 $R$ -**3BC** および  $rac$ -**3BC** は、それぞれアルキル鎖長と分子量が等価である事から、その相転移挙動と分子集合体構造を比較検討する事で、キラリティの効果が議論可能となる(図 1)。実際に、 $R$ -**3BC** および  $S$ -**3BC** 体と  $rac$ -**3BC** は、DSC 測定において同様な相転移挙動を示す事が確認された。また、温度可変 XRD 測定においても、同様な反射パターンを示し  $\text{Col}_h$  液晶相の形成が確認された。一方、 $rac$ -**3BC** の混合様式に

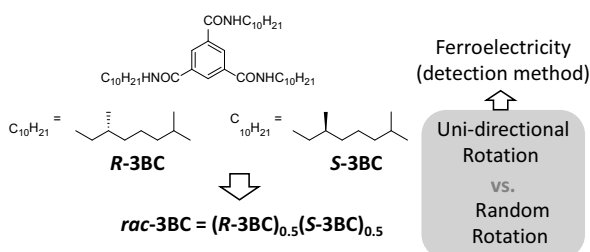


図1 キラル $S$ -**3BC**と $R$ -**3BC**の分子構造およびその1:1混合物が形成するラセミ分子集合体。一方向分子回転を強誘電性から検出するための方法論の確立。

は大きく分けて二通りの場合が考えられ、*R-3BC* または *S-3BC* が独立に一次元カラムを形成する場合と、*R-3BC* と *S-3BC* が一次元カラム内で交互配列した-*R-S-R-S*-型のカラム構造を形成する場合である(図2)。この2つの混合状態について、 $\text{Col}_h$  液晶相における XRD パターンから評価したところ、*R-3BC* と *rac-3BC* で  $\text{Col}_h$  液晶相の 100 反射に僅かな相違が観測された。従って、一次元カラム内で *R-3BC* と *S-3BC* は交互積層カラム構造を形成していると結論できた。次に、*R-3BC* および *rac-3BC* の誘電率の周波数-温度依存性を測定したところ、どちらも  $\text{Col}_h$  液晶相に相転移後の昇温により低周波数領域の誘電率実部  $\epsilon_1$  が顕著に増加した。また、 $\text{Col}_h$  液晶相における 343 K の *P-E* 曲線の測定から、*R-3BC* では約  $1.71 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$  で抗電場が出現するに対して、*rac-3BC* では  $23.1 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$  とその値は大きく増加し、抗電場の値が *R-3BC* において約 20 倍も減少する事実が判明した(図3)。一方、残留分極値は *rac-3BC* の方が約 2 倍大きな値を示した。

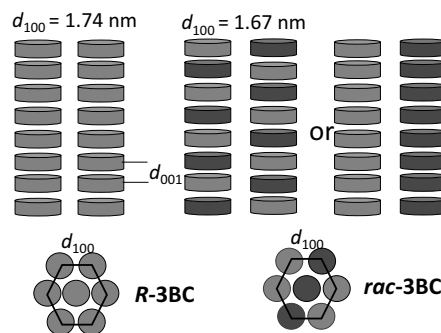


図2 *R-3BC*と*rac-3BC*における分子集合体構造。*R-3BC* (左)と*rac-3BC* の混合積層構造 (左)。

*R-3BC* と *rac-3BC* の強誘電状態において *P-E* ヒステリシスに大きな相違が見られた理由を考察した。*R-3BC*と*rac-3BC*の抗電場は、それぞれ  $1.71 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$ と  $23.1 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$ であり、*R-3BC*と*rac-3BC*の *P-E* 曲線における周波数応答は  $f=0.1$  と  $5.0 \text{ Hz}$  で明確なヒステリシスが観測された。さらに、誘電率の温度-周波数依存性では、*R-3BC* よりも *rac-3BC* の方が大きな誘電応答が出現している。これらの結果から、以下の分極反転メカニズムが想定される。*rac-3BC* では *R-3BC*と*S-3BC* が交互積層した一次元カラムを形成し、アミド基の分極反転運動は右回転と左回転がランダムになるか右回転と左回転が交互になると考えられる(図4)。それに対して、*R-3BC* の場合は、側鎖アルキル鎖のキラリティによる立体障害の存在の為、アミド基の回転方向が制限を受け一方向回転運動となる。すなわち、分子のキラリティに応じて右回転もしくは左回転運動によるアミド基の分極反転が生じる。一方向回転運動の存在は、ATPase などの生物分子モーターで実現している回転様式と同様であり、実際の仕事を行う事が可能なモーターの必修条件である。この一方向双極子回転運動が、分極反転に必要な外場エネルギー  $E$  を大幅に減少させたと考えられる。キラルアルキルアミド鎖の導入による回転運動の制御は、低エネルギー駆動のメモリーデバイス創製の重要な鍵を握ると考えられ、キラル有機強誘電体は分子集合体の興味深い探索ターゲットである。

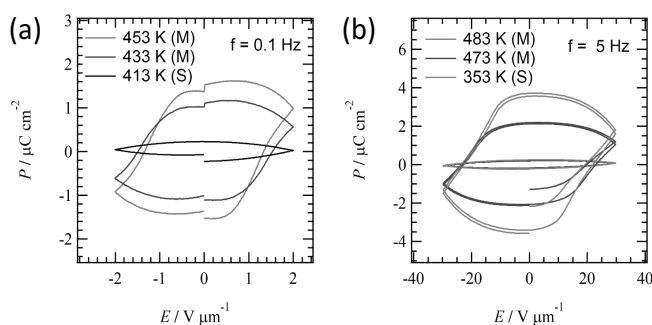


図3 *P-E*ヒステリシス曲線。(a)  $f = 0.1 \text{ Hz}$  で測定した*R-3BC* および(b)  $f=5.0 \text{ Hz}$ で測定した*rac-3BC*。両者の横軸は、 $\pm 2.0$ と $\pm 30 \text{ V}$ である。

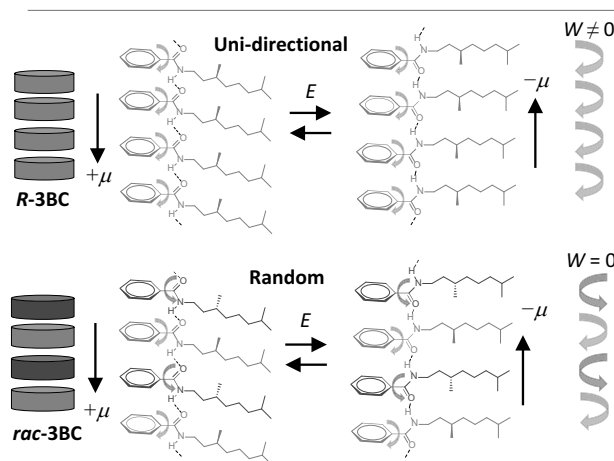


図4  $\text{N-H}\cdots\text{O}$ 水素結合のキラル体(上)およびラセミ体(下)における双極子反転のメカニズム。

のメモリーデバイス創製の重要な鍵を握ると考えられ、キラル有機強誘電体は分子集合体の興味深い探索ターゲットである。

## 【研究活動報告】 光機能材料化学研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：中川 勝

准教授：押切 友也 (2022.3~)

助教：新家寛正

補佐員：大沼 晶子, 大森 敏行 (~2022.3), 瀬戸 陽子, 在原裕美 (~2022.3),  
秋山敏憲 (~2022.11), 淡路 智子 (2022.4~)

大学院生：吉田 健, 川崎 貫太, 藤井 永時, 佐々木 渡, 木暮真之祐

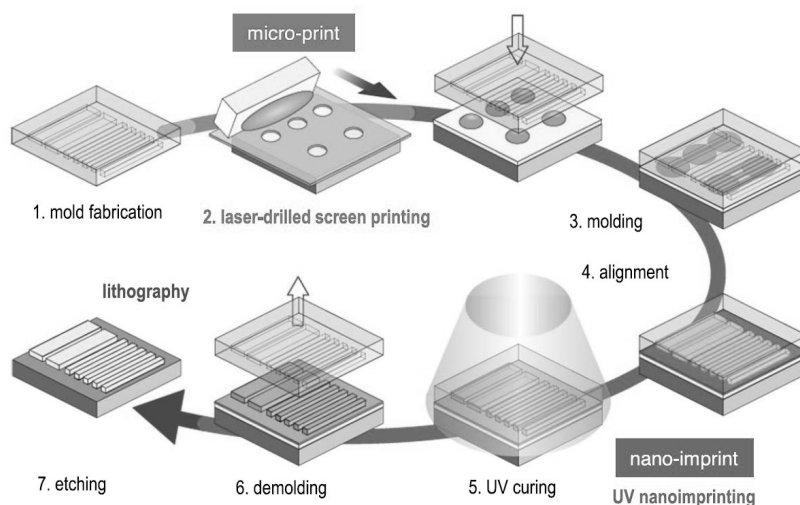
学部学生：高野 修綺, 手塚 隆博

本研究分野では、有機分子や高分子と無機の酸化物や金属との界面を分子レベルで設計して新機能を創製することを目的とし、界面分子の科学を追究するとともに最先端の微細加工に関わる工法や計測法を立案して、ものづくりにおける極限ナノ造形・構造物性の工学の創成を目指している。特に、電子線リソグラフィ、マスクレスリソグラフィ、ナノインプリントリソグラフィ(NIL)の微細加工技術を基に研究を展開し、各微細加工法での新規な材料とプロセスの開発や、中規模生産に適した NIL デバイスの応用研究を進めている。これらを利用し、新たな光学・電子機能を示すシングルナノからマイクロ領域のデバイスや、金属・誘電体ナノ構造近傍で生じる未知の光物理化学現象の研究を進めている。2023年の研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. マイクロプリントーナノインプリントを組み合わせたナノ造形法の開発

UV-NIL では、モールド(鋳型)により UV 硬化レジストの成形体を基板表面に配置し、成形体マスクを介して基板表面にナノ造形を転写する。従来のスピン塗布ではレジスト成形体の残膜厚みがモールド凹構造の粗密により不均一となる課題があった。本工法では、レーザー加工孔版による光硬化性液体の位置選択的な定量配置で不均一化の問題の解消を目指している(Fig. 1)。超短パルスレーザー照射によりポリイミドフィルムに貫通孔を形成させ、繰り返し

返し周波数の調節により孔径を制御した。このレーザー加工孔版により、粘度  $0.1\sim 260\text{ Pa}\cdot\text{s}$  の光硬化性液体の取扱が可能となった。蛍光色素を含有させたレジスト成形体の蛍光顕微鏡観察から、残膜厚の均一化が認められた。本工法を用いて、実際にメタ表面として期待されるシリコンなどの誘電体や金などのプラズモン金属のナノ構造の作製を論証した。

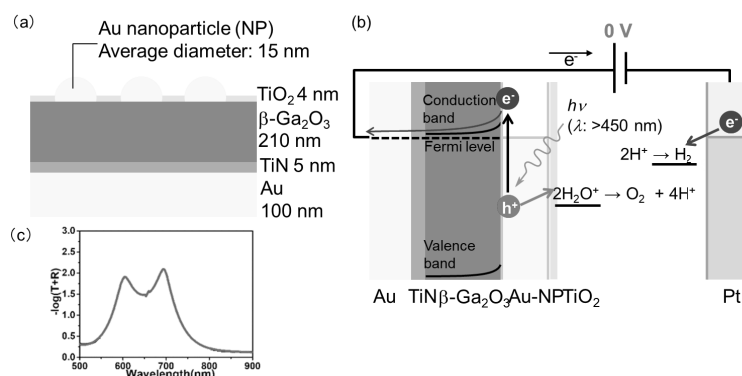


**Fig. 1.** Schematic illustration of the micro-print and nano-imprint method that combines laser-drilled screen printing and UV-NIL.



## 2. 超ワイドバンドギャップ半導体である酸化ガリウムを用いた強結合下での可視光応答性水分解反応

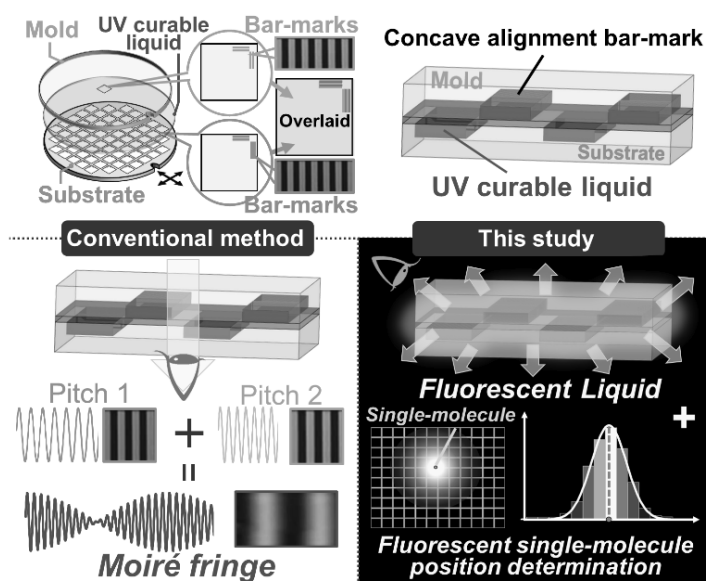
酸化ガリウム( $\text{Ga}_2\text{O}_3$ )は一般に4~5 eV程度と極めて広いバンドギャップを有し、次世代のパワーデバイスの基材として囑望されている。これを光触媒に転用すれば、その負な伝導体電位によって高効率な還元反応が進行するため、 $\text{Ga}_2\text{O}_3$ を用いた二酸化炭素などの還元反応が報告されている。一方、 $\text{Ga}_2\text{O}_3$ は原理的にごく短波長の深紫外光しか利用できず、太陽光エネルギー変換の観点からは実用的でない。本研究ではこのジレンマを解決すべく、酸化ガリウム薄膜を窒化チタン/金反射層の上に成膜し、その上に金ナノ粒子を担持し、数 nm の酸化チタン層で被覆することで強結合  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  電極を作製した(Fig. 2)。その結果、局在プラズモンと薄膜共振器との強結合に基づき、550~750 nm の広範囲な可視光域で高効率な光吸収を達成した。さらに、該当電極にゼロバイアス下で可視光を照射したところ、水の分解反応が進行することが明らかとなった。



**Fig. 2.** Schematic (a), energy diagram (b), and absorption spectrum (c) of  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  strong coupling electrode.

## 3. 光ナノインプリントにおけるモールドと基板の原子スケール超精密位置合わせ法の提案

UV-NIL による精密 3 次元積層体の作製には、成形体の型となるモールドと基板との精密な位置ずれ検出・位置合わせ技術が必須である。従来、基板とモールドの各々の表面に配置した異なる周期の棒状配列体のアライメントマークを重ね合わせて生じるモアレ縞から、微小な位置ずれを拡大して光学的に検出する方法が採用されてきた。位置合わせ工程でモールド/基板間での紫外線硬化性液体の屈折率整合により光学検出が困難となる問題やモアレ縞の長周期化に伴うマーク領域の面積の増大の問題があった。本研究では、凹型マークに充填された可視蛍光を呈する紫外線硬化液体からの蛍光を検出し、単一蛍光分子追跡における分子位置決定の原理に周期構造による積算効果を応用することで新たな位置ずれ検出法を考案した(Fig. 3)。サブ 10 nm スケールにあった従来の位置ずれ検出能を改善し、シミュレーションにより原子スケールの超精密位置合わせ技術になる可能性を示した。



**Fig. 3.** Comparison between conventional and our methods for precise detection of the misalignment between a mold and a substrate.

用することで新たな位置ずれ検出法を考案した(Fig. 3)。サブ 10 nm スケールにあった従来の位置ずれ検出能を改善し、シミュレーションにより原子スケールの超精密位置合わせ技術になる可能性を示した。

## 【研究活動報告】 有機・バイオナノ材料研究分野 (2022.1~2022.12)

教授：笠井 均

助教：小関 良卓、Anh Thi Ngoc Dao、鈴木 龍樹、有田 稔彦

研究員：Sanjay Kumar、Oves Mohammad

民間等共同研究員：神島 堯明、中辻 博貴、谷田 恵太、丸岡 清隆

大学院生：柴田 暁貴、戸田 成美、上原 満季、木村 大翔、楊 孟衡、劉 智翔、程 偉、數井 武藏、水谷 明日香、劉 泰宇菲

学部学生：富永 征宏、西原 大貴

研究生：陳 顕逸

本研究分野では、ドラッグデリバリーシステムの新しい概念としてナノ・プロドラッグを提唱し、分子デザインとナノ粒子作製プロセスの最適化、薬理効果の検証を行っている。また、バイオマス資源の積極的な利用を目指し、高付加価値な化合物への変換を検討した。2022年の研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. 抗がん剤の副作用を軽減させることを目的としたナノ・プロドラッグの開発

ナノ粒子 (NP) を用いたドラッグデリバリーは、化学療法薬の治療効率を高め、重篤な副作用の緩和が期待されている。10~200 nm にサイズ制御されたナノ粒子は、enhanced permeability and retention (EPR) 効果により、腫瘍近傍に選択的に集積する。我々は、これまで、強力な抗がん作用を持つ天然のトポイソメラーゼ II 阻害剤であるポドフィロトキシンを二量体化したプロドラッグ (PPTD-NP) について、キャリアフリーのプロドラッグ NP を作製している。しかし、PPTD-NP は生体内においてコロイドの分散安定性が低いため、生体実験への応用には課題があった。そこで、NP の分散安定性を向上するため、安定剤として高い生体適合性と低毒性で知られるポリエチレングリコール (PEG) によりナノ粒子を表面修飾を検討した。一般的に、PEG と NP の表面修飾は、粒子表面にある官能基を化学結合にさせることで表面修飾される。しかし、PPTD-NP は、粒子表面に明確な官能基を持たないため、物理吸着により表面修飾をする必要があった。

そこで本研究では、PEG と疎水性の蛍光剤 BODIPY FL を結合させ、PEG-BODIPY (PB) を合成した。疎水性の BODIPY FL は、疎水性-疎水性相互作用を介して疎水性表面をもつ PPTD-NP に吸着することが可能である。また、BODIPY FL は強く発光するため、ナノ粒子の細胞イメージングへの応用も期待できる。以上より、本研究では、PB で表面修飾した PPTD-NP (PB@PPTD-NP) を作製し、分散安定性と抗がん作用の評価および細胞イメージングへ応用を行った。

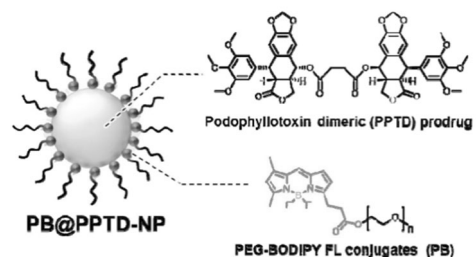


図. PB@PPTD-NP の構造

PB の合成は、異なる分子量の PEG (分子量：2k, 5k, 10k) について行い、<sup>1</sup>H NMR、吸収スペクトル、発光スペクトルの評価から、それぞれ合成できたことを確認した。以降、異なる分子量をもつ PB をそれぞれ、PBnK (n=2, 5, 10) と呼ぶ。続いて、PB@PPTD-NP は、PPTD と合成した PEG の DMSO 混合溶液を水中に注入することで再沈澱させ得た。いずれも、PB の濃度は臨界ミセル濃度よりも低いため、PB だけの粒子は観察されてなかった。いずれの PBnK においても、PB の濃度を PPTD に対し 30 wt%以上にするすることで、良好な分散安定性を

示した。しかし、PB濃度を10 wt%にした際には、PB5K及びPB10Kでは凝集が生じた。これは、PB中のBODIPY FLの割合が相対的に下がり、ナノ粒子表面への相互作用が弱くなるためと考察した。実際、BODIPY FLを持たないPBについて同様にナノ粒子化を検討したところ、粒子は直ちに凝集した。これは、PPTD-NP表面へのPBの吸着には疎水性のBODIPY FLが必要であることを示している。また、生理食塩水(0.9%NaCl溶液)中への分散を検討したところ、PB5KとPB10Kを濃度100 wt%以上で添加した場合でのみ良好に分散安定性が得られた。生体環境中におけるNPの凝集を防ぐためにはPEGによる十分な被覆量が必要であるという知見と一致する結果となった。

続いて、PB@PPTD-NPについてA549(ヒト肺ガン細胞)を用いて細胞増殖抑制試験を行った。PB@PPTD-NPは、臨床的に使用されているPPTの水溶性プロドラッグであるエトポシドと比較して、有意に高い細胞毒性を示した。PBのみで検討した場合、高い生存率を示したことから、PB@PPTD-NPではPPTD-NPから薬剤が放出されたことを示している。また、マウス血清中において薬剤の放出量を評価したところ、PBの修飾によらずPPTの放出速度に大きな変化は見られなかった。すなわち、PPTD-NPのPBによる表面修飾は、NPの抗がん作用効率に影響を与えないことがわかった。

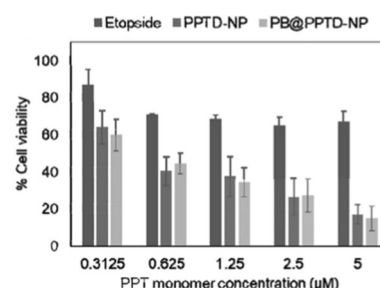
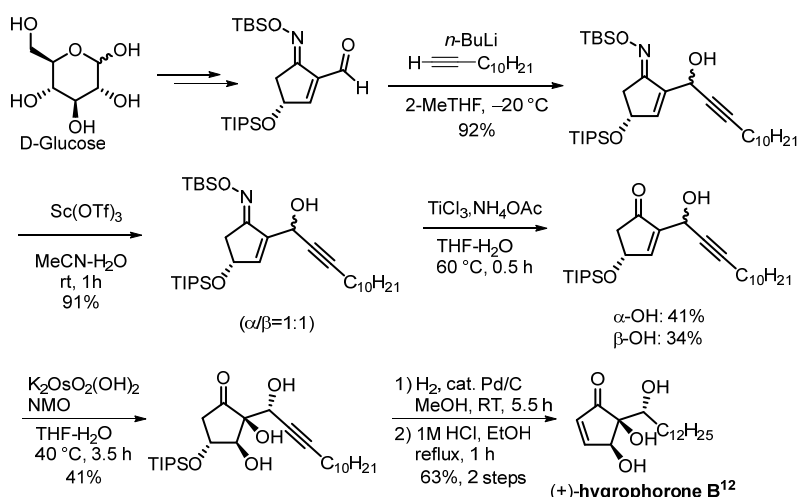


図. 細胞毒性評価

さらに、PB@PPTD-NPと共に培養したA549細胞を共焦点レーザー顕微鏡で観察したところ、培養から24時間後にはがん細胞内で強いBODIPY FL蛍光シグナルが観察され、さらに48時間後には細胞内のナノ粒子量が有意に増加した。この結果から、蛍光を示すPBを用いてPPTD-NPの表面修飾を施すことで、細胞内の薬物ナノ粒子のイメージングが可能であることがわかった。

## 2. バイオマスの高度利用化に向けた検討

近年、薬剤耐性菌(AMR)の出現率が増加傾向にあり、新しい抗菌剤の開発が強く求められている。自然界から発見された炭素五員環骨格を持つハイグロホロン類は、キノコの一種であるHygrophorus属から単離された化合物であり、新しい抗菌剤のリード化合物として注目されている。本研究では、D-グルコースから数工程で炭素五員環を構築し、アルキン付加により側鎖を導入後、二段階の反応によるオキシム除去、ジヒドロキシ化、水素添加による還元、酸性条件によるエノンの形成を経ることで、ハイグロホロン類の一つであるハイグロホロン B<sup>12</sup>の全合成を達成した。同化合物を用いて、薬剤感受性菌を用いた抗菌活性試験を行った結果、メチリチン耐性黄色ブドウ球菌(MRSA)などのグラム陽性菌に対して非常に強力な抗菌作用を示すことが明らかとなった。



同化合物を用いて、薬剤感受性菌を用いた抗菌活性試験を行った結果、メチリチン耐性黄色ブドウ球菌(MRSA)などのグラム陽性菌に対して非常に強力な抗菌作用を示すことが明らかとなった。

**【研究活動報告】 非鉄金属製錬環境科学研究部門** (2022.1~2022.12)

教授（共同研究統括・兼任）： 福山博之  
教授（兼任）： 村松淳司  
教授（兼任）： 柴田浩幸  
准教授： 打越雅仁  
客員教授： 小笠原修一  
技術補佐員： 前嶋恵美子

本研究部門は、住友金属鉱山株式会社との共同研究部門であり、非鉄金属製錬業界全体の利益に資する共同研究テーマの推進、次世代人材育成、社会への啓発活動を目的とする。本研究部門では、金属資源プロセス研究センターと密接に連携を取り、二次原料、工程内廃棄物などの多様な製錬原料からの有価金属の効率的回収、非鉄金属製錬技術の先進化、忌避金属の用途開発を目的とした共同研究を展開する。さらに、金属製錬工程における基礎熱力学データの検証と拡充、イオン交換法・溶媒抽出法、プラズマアーク熔融法を基にした金属の高純度化手法の研究開発を行なっている。2022年の研究活動は、以下のように概括される。

**1. 銅製錬の基礎反応解析**

解明の不十分な自溶炉の反応機構を解析する。超高温熱物性計測システム-PROSPECT-を駆使して、反応に与かる高温溶融物質の物性の解明にあたる。解析対象試料の作製に成功し物性解明に取り組んでいる（福山博之研究室）。自溶炉反応機構として2粒子モデルが提案されている。鉄鋼製錬分野で培われたシミュレーション技術を導入し、自溶炉反応機構の再現を目指す。独自に開発した解析装置による精緻な観察を基にして、深層学習を取り入れた反応解析を行なっている（埜上洋研究室）。

**2. スラッグの物性解析**

銅製錬スラッグには懸垂マットと呼ばれる硫化銅が懸濁し、歩留まりの低下を招く。懸垂マットの量は、スラッグの物性に依存するが、懸垂マットとスラッグ物性の関係は未解明である。核磁気共鳴、X線吸収分光、スラッグ物性を解析する。マット/スラッグ界面に存在するマグネタイトはマット沈降を阻害する。歩留まり向上のために阻害要因を取り除くために、マットとマグネタイトの反応性をその場観察により解明する（柴田浩幸研究室）。

**3. 忌避金属の有効活用・用途開発**

As、Cd、Pbなどの環境負荷元素の廃棄は難しい。処理方法として、忌避金属を用いて付加価値を有する機能性材料を開発、実用化すること望ましく、忌避金属の化合物半導体、太陽電池への応用が期待されている。第一原理計算を用いたスクリーニングにより得られた実現可能性の高い化合物について、課題の抽出を行い、合成実験を行なっている（小俣孝久研究室）。

**4. 銅電解の貴金属収率改善**

銅電解精製の際、貴金属元素はアノードスライムとして回収される。しかし、銀は一部がカソードに

電着し、銅製品の混入物として出荷されてしまう。この銀の損失を防ぐために、銅電解液からの銀の回収を、イオン液体を用いる溶媒抽出法やイオン交換法により試みる。溶媒抽出では効率向上のために官能基の改良を行い、イオン交換ではカラム法による分離試験を行った（村松淳司研究室・蟹江澄志研究室・共同研究部門）。

## 5. 銅製錬工程における未回収有価金属の回収

近年の銅製錬の原料には従来からの鉱石に加えて、低品位鉱石やプリント基板廃材などの2次原料が使用される。そのため、低品位鉱石・プリント基板廃材由来の有価金属の品位が上昇している。有価金属はスラグ、煙灰などに含まれ、その多くが廃棄されている。スラグ、煙灰を物理的、化学的に処理し、有価金属を回収する技術を開発する。破碎技術に加えて、浮遊選鉱、電気力分離などを組み合わせて高効率の回収技術を開発している（加納純也研究室）。

## 6. 塩化物水溶液を用いる金属製錬に関する基盤研究

塩化物水溶液は、金属元素相互の分離に大変有効である。塩化物水溶液中では塩素配位数の異なる金属塩化物錯体が分布し、塩素濃度により正負に帯電する錯イオンの割合を制御できる。さらに錯形成能は金属元素により異なるため、各元素の分布の差を利用して、溶媒抽出やイオン交換法により、精緻な相互分離が実現できる。

吸着や脱離には、水溶液中での金属イオンの化学状態が密接に関わっており、反応を理解するためには必要不可欠の知見である。従来は、配位結合しないとされる配位子（例えば $\text{ClO}_4^-$ イオン）によりイオン強度を調整した水溶液中での分布解析が報告されていた。イオン強度を調整すると調整しない場合に比較してイオンの活量が大きくなり、 $\text{Cl}$ 配位数のより大きな錯体が形成される。結果として、陰イオン錯体が支配的と考えられている遷移金属が一定数あるが、実際の陰イオン交換挙動とは整合性がない。官能基の選択性が挙動の不整合の原因とされている。陰イオン錯体が支配的とされるのは、イオン強度が調整された水溶液であるのに対し、通常分離精製に使用されるのはイオン強度が無調整の水溶液であり、考察の基となる分布が異なっている。

近年、解析方法の発達により、より正確な化学状態を求められるようになった。そこで、錯体分布・構造に関する熱力学パラメータの検証、拡充をし、イオン交換反応考察の基礎的知見を得ることを目的として研究を展開している。

[塩化物水溶液中の金属塩化物錯体の分布と構造] 遷移金属イオンを含んだ塩酸水溶液の紫外可視吸収スペクトルの熱力学モデルによるフィッティング解析を行い、物理的・化学的に意義のある熱力学パラメータを得る。得られたパラメータの妥当性の確認のために、X線吸収分光を用いた構造解析と第一原理計算による検証を実施する。

本年は、 $\text{Cr(III)}$ 、 $\text{Fe(III)}$ 、 $\text{Co(II)}$ 塩化物錯体分布を報告した。 $\text{Cr(III)}$ については、水和過程解析も実施し、平衡状態では観察されない錯体を經由していることが明らかとなった。

## 【研究活動報告】 製鉄プロセス高度解析技術(JFE スチール) 共同研究部門 (2022.1~2022.12)

教授 (共同研究統括・兼任)	: 埜上 洋
特任教授	: 三木 祐司 (JFE スチール)
准教授 (兼任)	: 夏井 俊悟
助教 (専任)	: Andrey Stephan Siahaan
民間等共同研究員	: 松永 亮太郎, 井川 大輔 (JFE スチール)

本共同研究部門は、2020年にJFEスチール(株)と共同で3年間の予定で設置された。

製鉄業は最も多量に二酸化炭素を排出する産業の一つであり、パリ協定・グラスゴー気候合意に定められた目標を実現するためには、従来のプロセス効率改善に加えて従来技術に縛られない製鉄法の開発が急務の課題である。製鉄プロセスは高温高压反応器の中で気・固・液を同時に処理するため、装置の内部情報を獲得することが非常に困難であり、また生産量の膨大さから実装置での試験に対する制約が非常に大きい。このような状況の下、プロセスの数理解析技術は、近年の数値解析技術の進展に伴って、診断や予測にとどまらずプロセス内部の現象理解の手段としての期待が高まっている。その一方で、実用的なプロセス解析技術の実現には、企業の持つ実プロセスの膨大なデータの解析と大学の持つ最先端の数理解析技術を有機的に結びつけた協業が不可欠である。

本研究部門は、このような背景の下、JFEスチール株式会社と東北大学の密接な情報および人材の交流による連携により、極低炭素次世代製鉄プロセスの開発に資する数理解析の応用研究と新規基盤解析技術の確立を推進する事を目的に設置されたものである。設置第二年度も、新型コロナウイルス感染症の世界的な流行が継続して、様々な活動が制約される社会状況となったが、前年9月から本年3月まで東北大に常駐していた松永研究員に引き続き9月からは井川研究員が東北大学に常駐して、研究開発に参画している。以下に2022年の研究活動を以下に示す。

### 1. 高炉プロセスシミュレータの高度化と実操業展開

鉄鉱石中の酸化鉄を還元して溶銑に転換する高炉は鉄鋼製造の基幹プロセスである。高炉はこれまでに開発された製鉄プロセスの中で最もエネルギー効率の高いプロセスであるが、還元材として主に石炭およびコークスを使用するため、必然的に二酸化炭素の排出を伴う。社会基盤の構築に必要な鉄鋼材料は世界で年間約15億トン製造されており、高炉の低炭素化は、環境への二酸化排出量を低減させるための喫緊の課題である。低炭素化の実現のため、混合装入、高反応性コークスの活用や新規装入原料の使用などが提案されているが、それらの効果を安定操業が求められる実機で検証することは困難である。このため、様々な条件での高炉プロセス操業の予測に適用できる実用シミュレータへの期待が高まっている。本共同研究部門では、設定する操業条件や、シミュレーションにより解明すべき事項にきめ細かく対応すべく、二種類の手法による高炉プロセスシミュレータの高度化と展開を進めている。

#### 1.1 Euler-Lagrange型の数値解析方法を用いた高炉プロセスシミュレータ

高炉に装入される鉄鉱石やコークスなどの製鉄原料は粒状物質であり、炉内を上向きに流通する還元ガスとは向流で接触しつつ移動層を形成する。高炉の低炭素操業ではプロセス駆動力の余裕度が低

下し、棚釣りやスリップと言った粒子充填層に特有な現象の発生が予想される。このような装入物の分散相としての特徴や確率論的な現象発生の予測を可能とするため、個別の装入物粒子を追跡し、連続相である還元ガスの熱流動と連成する Euler-Lagrange 連成型の枠組みを用いた高炉プロセスシミュレータの開発を進めた。

## 1.2 多流体理論に基づく高炉プロセスシミュレータ

高炉内には前項で述べた鉄鉱石やコークスなどの製鉄原料および還元ガスと共に、炉内で生成した溶銑と熔融スラグに加えて装入原料の破碎によって発生した微粉体が流通している。これらの物質はそれぞれ異なる流動機構により、互いに熱・物質および運動量を交換しつつ炉内を運動している。これらの物質の運動をそれぞれ連続体として近似して構築した「四流体」高炉シミュレータの開発が、多元物質科学研究所で進められてきている。このシミュレーション技術をより高度化すると共に実操業での応用展開を図るための検討を進めた。

## 2. 高炉操業に及ぼす原料条件の影響に関する理論検討

地球温暖化問題への対応のため、製鉄プロセスは炭素系還元材から水素系還元材への転換が余儀なくされ、また途上国の発展に伴う世界的な鉄鋼需要の急上昇に伴い、製鉄原料の劣質化が進行しつつある。このような状況下において、製鉄原料の鉱物組成や脈石成分が高炉の操業状態に及ぼす影響を適格かつ定量的に評価する手法への要望が高まっている。このため、(A) 単一の鉱石粒子内の反応進行を任意の粒子形状および内部の鉱物相分散の条件の下で解析可能な三次元反応解析技術、および (B) 高炉内に充填された原料層の反応進行を追跡するための新たなシミュレーションの枠組みの構築を進めている。

## 3. 回転強度試験における時系列 3D scanning とマルチフィジックス解析によるコークス変形が及ぼす充填層内流れ特性評価

高炉内に装入されたコークス粒子は、還元材および熱源といったプロセス駆動力としての役割に加えて、炉内充填層の通気・通液性を確保する役割を担う。しかし、多孔性のコークス粒子は、炉内での化学反応および機械的な荷重と衝撃により一部が破碎して変形すると共に、微粉を発生して通気・通液性の悪化を招く。鉄鋼業界には CSR と呼ばれるコークスの反応性と強度の評価指標が存在するが、高温反応下のコークス充填層の通気性との関連は明らかではない。本研究では、異なる CSR を示すコークスを対象に破碎・粉化に伴う個別コークス粒子の変形挙動について、回転強度試験に基づいた測定と 3D-scan 技術の組み合わせにより、実形状変化を反映してコークス充填層を数値的に構成する。これをマルチフィジックス解析にインプットすることにより、内部の通気性・通液性と CSR との関連を定量化する取り組みを進めた。得られた計算結果の幾何的データ解析により、充填層構造中の不均一な粉化による操業不安定化に関する評価法確立を目指している。

## 4. 鉄石還元進行による不均一な熱変形挙動の評価方法

気相還元中の鉄鉱石は外殻から還元が進行し、還元部は金属鉄を多く含む高融点でポーラスな鉄殻となる。一方内部は、未還元で液相線温度が低い。そのためある温度域では、外殻が半固体の鉄殻となり、内部が流動性のある固液共存のスラグ相となる。融着帯における固液共存の鉄鉱石の変形挙動を明らかにするため、鉄殻とスラグ相を異なる 2 相とみなした鉄鉱石が、充填層内で軟化変形する過程の動力学モデルを新たに考案し、実鉱石データとの合わせ込みを実施した。

## 【研究活動報告】次世代電子顕微鏡技術共同研究部門 (2022.1~2022.12)

教授：寺内正己，陣内浩司，米倉功治，高倉 優  
 特任教授：小池雅人 (2022.5~)  
 客員教授：米倉さおり (2022.5~)  
 准教授：佐藤庸平  
 講師：丸林弘典  
 助教：森川大輔，宮田智衆，羽多野忠 (2022.4~)

本共同研究部門では、次世代に向けた新たな電子顕微鏡技術の開発を目的とし、エネルギー分析技術、ソフトマテリアル対応電子顕微鏡技術、クライオ電子顕微鏡技術などについて研究活動を行っている。2022年の研究活動としては、以下のように概括される。

### 1. プラズモン $q$ 分散測定によるMg合金中の電子挙動の解明

非弾性散乱電子の運動量移送( $q$ )依存性の計測技術を構築し、プラズモン  $q$  分散を観測することによって、金属材料中の電子の特性を評価する技術の開発を行っている。

長周期積層構造(LPSO)を持つ Mg-Zn-Y 合金は、次世代軽金属強化材料として注目されている。しかし、合金の電子特性はほとんど明らかにされていないため、角度分解電子エネルギー損失分光法を用いて、プラズモンエネルギーの  $q$  分散測定を行い、合金中の電子特性の解明を行った。

図1(a)はLPSO型Mg合金( $Mg_{97}Zn_1Y_2$ ,  $Mg_{85}Zn_6Y_9$ ,  $Mg_{75}Zn_{10}Y_{15}$ )とMg金属のプラズモンエネルギーの $q$ 依存性である。 $Mg_{85}Zn_6Y_9$ 、および $Mg_{75}Zn_{10}Y_{15}$ のプラズモンエネルギー $q$ 依存性は、 $Mg_{97}Zn_1Y_2$ 合金とMg金属と比べて、 $q=0.8\text{Å}^{-1}$ 分以上でプラズモンエネルギーが低く観測された。電子回折測定により、積層構造の秩序度は、 $Mg_{85}Zn_6Y_9$ 、および $Mg_{75}Zn_{10}Y_{15}$ のほうが高いことが明らかになり、低いエネルギー分散は高秩序なLPSO構造に起因していると考えられる。積層面内に異方的に電子が動きやすい電子ガスモデルを構築しプラズモン分散のシミュレーションを行ったところ、実験を再現したことから、LPSO型Mg合金中の電子は異方的な挙動を示すことが明らかになった。

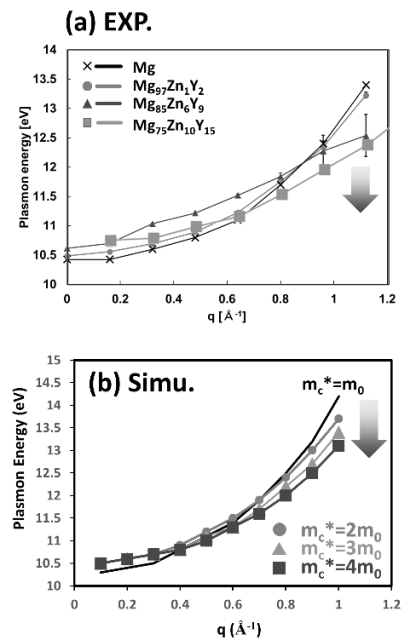


図1: (a)Mg-Zn-Y合金のプラズモン $q$ 分散. (b)異方的電子ガスモデルを用いたプラズモン分散シミュレーション.

### 2. 軟X線発光分光による低融点Au-Si合金の溶融状態における電子状態の研究

Au-Si合金系は、組成比 Au:Si=81:19において単体の融点(Au:1064°C, Si:1414°C)から1000°C近くも融点が低くなり363°Cとなる。この特殊な低融点状態においてAuとSiがどのように相互作用して溶融状態を形成しているかは明らかとなっていない。そこで、オリジナルの試料加熱ホルダを製作し、電子顕微鏡内で溶融状態を実現し、その軟X線発光分光測定を行った。その結果、複数の構造が観測され、単なるSiとAuの混合状態ではないことが明らかとなった。そこで、理論的検討から予測されていた複数の局所構造候補につい



て、スペクトル強度分布に対応する価電子の状態密度分布計算を行い実験スペクトルとの比較を行った。その結果、Si 原子に Au 原子 8 個が配位した局所構造の場合に実験スペクトルの特徴を再現できることが明らかとなった (*Microscopy* **71**, 34-40 (2022))。

### 3. 高分子球晶の光・電子相関顕微鏡解析と畳み込みニューラルネットワークを用いた球晶の自動検出

高分子材料は軽量性・加工性・柔軟性などの特性から、繊維・フィルム・容器など産業的に広く使われている。ポリエチレンなどの結晶性高分子の内部には、nm から  $\mu\text{m}$  に渡る階層構造が形成されており、 $\mu\text{m}$  の領域では、微結晶が球状に自己組織化した「球晶」が形成されることがある。球晶が小さくなると材料の透明性や耐衝撃性が向上するといったように、球晶の数と大きさ、それらの分布は物性と密接に関係している。これまでは偏光顕微鏡 (POM) による球晶の観察が主流であったが、POM では可視光を光源としているため数  $\mu\text{m}$  以下の大きさの球晶を観察することは困難であった。そこで我々は、POM と透過型電子顕微鏡 (TEM) を組み合わせた相関顕微鏡法 (CLEM) により、数  $\mu\text{m}$  の微細な球晶まで観察するとともに、その構造パラメータの自動検出の検討を行った。

試料としてポリ(L-乳酸) (PLLA) を用いた。精製した PLLA をスライド・カバーガラスに挟んで 200 °C で熔融後、120 °C で 1 分間熱処理して結晶化させた。この試料をまず直行偏光条件の POM で観察した。その後、試料をスライド・カバーガラスから回収し、POM の観察視野を含むようにマイクロームで 200 nm 厚の超薄切片を調製し、SiN チップ上に回収した。これを加速電圧 120 kV の TEM (JEM-1400Flash with Limitless Panorama) で観察した。自動モニタージュシステムにより 702 枚の TEM 像を繋ぎ合わせ、広域 TEM 像 (数 100  $\mu\text{m}$  四方) を作成し、畳み込みニューラルネットワークを用いた物体検出システム (YOLO) により球晶の自動検出を行った。

POM 観察では、負の複屈折を有する PLLA の球晶が観察された。結晶化が完了していないため、孤立した球晶、互いに衝突した球晶、非晶領域が混在していた。同一視野の POM 像と広域 TEM 像を比較すると、TEM 試料では超薄切片化による試料の変形が確認された。そこで、POM 像を参照することで補正を行い、試料変形の無い広域 TEM 像を得ることに成功した (図 2)。POM 像と広域 TEM 像との相関を解析し、POM の分子配向情報、TEM の詳細な形態情報など、各手法の長所を組み合わせることで、数 100  $\mu\text{m}$  の粗大な球晶から数  $\mu\text{m}$  の微細な球晶まで検出することを可能にした。さらに、広域 TEM 像から球晶を高速に検出することに成功し (100 個の検出に 3 秒)、その大きさの分布と空間充填率 (相対結晶化度) を算出した (図 2)。以上より、CLEM は材料中に不均一に分布した結晶を分析する際に有効であり、例えば、複合材料中の添加剤表面で形成される結晶の観察・分析も期待される。また、球晶の自動検出法は高速で強力であるため、大量の画像データの解析が必要な動的観察や 3 次元観察において威力を発揮すると期待される。

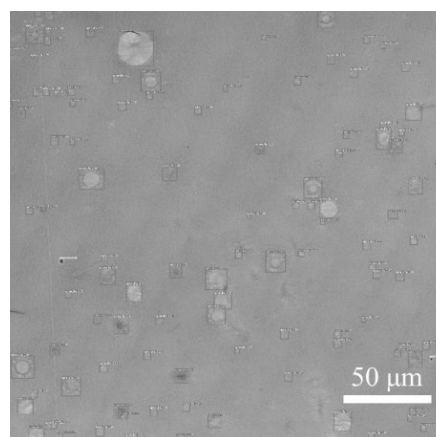


図 2: 広域 TEM 像 (250  $\mu\text{m}$  四方) から高分子球晶を自動検出した結果。赤枠は検出された球晶とその幅・高さを示す。

### 4. 種々のソフトマテリアルのクライオEM観察

企業との共同研究も含め、界面活性剤、酒、ポリマー等種々のソフトマテリアルについて凍結条件を検討し、クライオ電子顕微鏡での観察を進めた。

## 5. ALSに関わるポリペプチドの構造と発病機構

筋萎縮性側索硬化症(ALS: Amyotrophic lateral sclerosis)を誘起する T-cell intracellular antigen-1 (TIA-1)のプリオン様ドメインのポリペプチドについて構造解析を行った。野生型と、発病に関わる一残基変位型のポリペプチドはどちらも細い繊維状の結晶を形成した。結晶を含む溶液を支持膜上で凍結し、その電子回折測定から構造決定したところ、両者とも逆平行ベータシート構造を形成するが、階層構造には大きな違いがあることが明らかになった。野生型では三角形のハニカム様の粗な並びをとるのに対し、変異型ではベータシートが層状に積み重なった密な積層構造が形成される。変異型の凝縮構造は、不可逆的なアミロイド線維が形成される要因になることを示唆され、発病に関わる重要な知見が得られた (Sekiya et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **119**, e2122523119 (2022))。

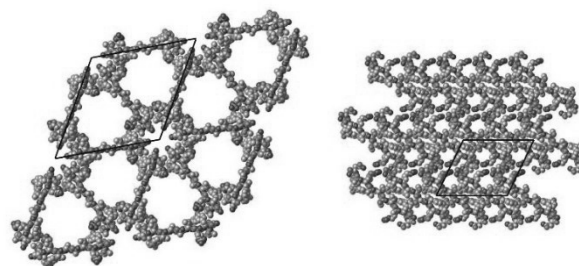


図3: 難病の ALS に関わるポリペプチドの構造. 野生型(左)と病気を引き起こす点変異型(右).

## 6. 光合成関連蛋白質の単粒子構造解析

原子的な藍藻の光合成系 I の構造を 2.0 Å 分解能で解明し、分子進化の解明に繋がる結果を得た (Kato et al., *eLife*, **11**, e73990 (2022)) 他、集光アンテナの巨大複合体の構造 (Kawakami et al., *Nat. Commun.*, **13**, 3389 (2022)) と光エネルギーの変換機構、ストレス下で形成される光合成系 II のと特殊な複合体の構造 (Nagao et al., *Nat. Commun.*, **14**, 920 (2023)) などを明らかにした。また、2021 年に報告した低いエネルギーの光を光合成に利用できる光合成系 I の構造を基に、量子化学計算によりその機構について検討した (Kimura et al., *J. Phys. Chem. B*, **126**, 4009-4021 (2022))。

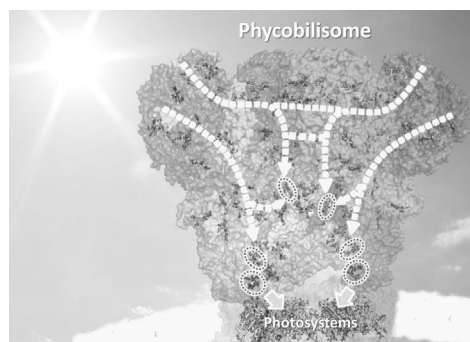


図4: 単粒子解析で明らかにしたシアノバクテリアの集光アンテナの巨大複合体の構造。

## 7. 微小結晶構造解析

低・中分子の微小結晶構造解析のため、電子回折と X 線自由電子レーザー(XFEL)を相補的に用いる新しい技術を開発し、有機蛍光物質のローダミンの微小結晶から2つの線源でそれぞれ構造を決定した。得られた構造から水素原子結合長の結合タイプへの依存性と線源による水素原子位置の違いを明らかにした (Takaba, Maki-Yonekura et al., *Nat. Chem.*, doi: 10.1038/s41557-023-01162-9 (2023))。

## 8. 高性能SXES装置の試作研究

今年度より、ニーズの応えるため次期 SXES 装置の試作研究をスタートした。まずは、100eV 以下の測定領域の拡大 (~35eV まで) と検出効率の向上を目指した回折格子試作を行った。SEM へ附設した SXES 装置への実装テストを行い、目的とする性能向上がほぼ達成できていることを確認できた。

# 研究会報告目次

## 2022(令和4)年1月-12月

[06/01-03]	第37回化学反応討論会	113
[06/17]	第21回東北大中性子セミナー・第31回QLCセミナー・第22回ハイパーマテリアルセミナー	114
[06/29]	2022年度マテリアル・計測ハイブリッド研究センターシンポジウム	114
[07/08]	第4回非鉄金属製錬セミナーオンライン	115
[07/19]	The 8th Seminar on Nano-Micro Chemical Measurements	115
[09/26-30]	The 13th Asian Thermophysical Properties Conference(ATPC2022)	116
[10/07]	第1回無機材料研究部門講演会	117
[10/11]	マテリアル・計測ハイブリッド研究センター講演会	118
[10/13]	第22回東北大中性子セミナー	118
[10/25]	第23回東北大中性子セミナー	119
[10/26]	令和4年度金属資源プロセス研究センターシンポジウム	120
[11/02]	第9回ナノ・マイクロ計測化学セミナー	120
[11/02]	第10回ナノ・マイクロ計測化学セミナー	121
[11/03]	英国王立協会と日本学術会議によるネットゼロに向けた科学技術対話	122
[11/16]	第24回東北大中性子セミナー・第34回QLCセミナー	126
[11/25]	日本顕微鏡学会 ソフトマテリアル分科会 2022年度第1回講演会	127
[11/28]	東北大学-台北科技大学ジョイントシンポジウム 2022	127
[11/30]	第11回ナノ・マイクロ計測化学セミナー	128
[12/07]	多元物質科学研究所客員教授講演会& 日本分析化学会東北支部特別講演会	128
[12/14]	第25回東北大中性子セミナー	129

## 第37回化学反応討論会

日時 : 2022年06月1日-3日  
 場所 : 片平さくらホール  
 主催 : 第37回化学反応討論会実行委員会  
 共催 : 東北大学多元物質科学研究所、(公財)インテリジェント・コスモス学術振興財団  
 参加者 : 152名

Day &amp; Timetable "SCKD37"

Day 1, June 1 (Wed) 9:30 - 17:00 (JST)	Day 2, June 2 (Thu) 9:00 - 17:20 (JST)	Day 3, June 3 (Fri) 9:00 - 15:30 (JST)
	9:00 - 9:50 (JST) Chair: MINEMOTO, Shinichirou	9:00 - 9:50 (JST) Chair: YAMAZAKI, Kaoru
9:30 - 9:45 (JST) Opening remarks	2A1 MIZUNO, Tomoya	3A1 MIZUNO, Yuta
9:45 - 10:50 (JST) Chair: OHSHIMA, Yasuhiro	2A2 HISHIKAWA, Akiyoshi	3A2 TSUTSUMI, Takuro
1A1 ITO, Yuri	9:50 - 10:55 (JST) Chair: HISHIKAWA, Akiyoshi	9:50 - 10:55 (JST) Chair: TAKETSUGU, Tetsuya
S1 LEE, Yuan-Pern	S3 JONES, Darryl	S5 MAEDA, Satoshi
10:50 - 11:40 (JST) Chair: HORIO, Takuya	2A3 INOUE, Tomoya	3A3 MURAKAMI, Tatsuhiro
1A2 YAMAZAKI, Kaoru	10:55 - 11:15 (JST) Break	10:55 - 11:15 (JST) Break
1A3 TAMURA, Yoshiaki	11:15 - 12:20 (JST) Chair: ITAKURA, Ryuji	11:15 - 12:05 (JST) Chair: OKINO, Tomoya
11:40 - 11:50 (JST) Sponsor talk session1 Spectra-Physics K.K.	S4 LOH, Zhi-Heng	3A4 NISHI, Takanori
11:50 - 13:20 (JST) Lunch time	2A4 YAMAMOTO, Yo-ichi	3A5 NIKAIIDO, Makoto
13:20 - 14:50 (JST) Chair: KINO, Yasushi	12:20 - 14:00 (JST) Lunch time	12:05 - 13:35 (JST) Lunch time
S2 SATO, Tetsuya K.	14:00 - 15:30 (JST) Poster session 2 2P01 - 2P22	13:35 - 15:05 (JST) Chair: MISAIZU, Fuminori
1A4 HITACHI, Akira		S6 FUJII, Asuka
1A5 STEMBO, Garrek		3A6 MATSUMOTO, Yoshiteru
14:50 - 15:00 (JST) Sponsor talk session2 Phototechnica K.K.		3A7 ISHIKAWA, Haruki
15:00 - 15:30 (JST) Break	15:30 - 15:50 (JST) Break	15:05 - 15:15 (JST) Group photo shoot
15:30 - 17:00 (JST) Poster session 1 1P01 - 1P22	15:50 - 17:20 (JST) Poster session 3 3P01 - 3P21	15:15 - 15:30 (JST) Closing remarks



37th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics  
 1-3 June 2022, Sakura Hall, Katahira campus, Tohoku university (Sendai Japan)

第21回東北大中性子セミナー・第31回QLCセミナー  
・第22回ハイパーマテリアルセミナー

日時 : 2022年06月17日  
場所 : 東北大学多元物質科学研究所 西一号館2階セミナー室  
講演者 : Marc de Boissieu (Université Grenoble Alpes, CNRS, SIMaP, Grenoble France)  
題目 : Thermal conductivity and lattice dynamics in structurally complex materials

要旨 :

The lattice thermal conductivity of many different materials are displaying a 'glass like behavior' [1], with a relatively small value of the lattice thermal conductivity at ambient temperature and an almost independent temperature dependence in the range 20 to 300 K. This is the case for disordered crystals [1], for clathrates [2], but also for aperiodic crystals [3] such as the icosahedral quasicrystal i-AlPdMn [4], and the Rb<sub>2</sub>ZnCl<sub>4</sub> phase that displays an incommensurately modulated phase between 190 and 300 K [5]. The detailed understanding of this behavior and the relationship between the phonon spectrum/phonon lifetime and the thermal conductivity is still a matter of debate.

In this presentation I will introduce the two main aspects of structural complexity, namely number of atom in the unit cell and disorder. On one hand, the structural complexity may be characterized by the number of atoms in the unit cell, which goes to infinity in the case of aperiodic crystals. On the other hand disorder may occur as chemical site disorder or lattice displacement. By reviewing some recent results in this field I will show the relative importance of structure and disorder [6]. A simple model of a phonon lattice gaz, as developed for Ge based clathrates [2] will be used to interpret some of the data.

[1] D. G. Cahill, S. K. Watson, and R. O. Pohl, Physical Review B 46, 6131 (1992).

[2] P.-F. Lory et al., Nature Communications 8, 491 (2017).

[3] T. Janssen, G. Chapuis, and M. de Boissieu, Aperiodic Crystals. From modulated phases to quasicrystals (second edition) (Oxford University Press, Oxford, 2018), Vol. 20, IUCr Monographs on Crystallography.

[4] M. A. Chernikov, A. Bianchi, and H. R. Ott, Physical Review B 51, 153 (1995).

[5] D.-M. Zhu and A. C. Anderson, J. Low Temp. Phys. 94, 117 (1994).

[6] P. F. Lory et al., Physical Review B 102, 024303, 024303 (2020).

---

## 2022年度マテリアル・計測ハイブリッド研究センターシンポジウム

日時 : 2022年06月29日(水)  
場所 : 多元物質科学研究所 南総合研究棟2号棟 大会議室 (ZOOMによるハイブリッド開催)  
参加者 : 69名



京都大学 畠山琢次 先生



北海道大学 関川太郎 先生



名古屋大学 伊藤伸太郎 先生

## 第4回非鉄金属製錬セミナーオンライン

主催：住友金属鉱山共同研究ユニット 非鉄金属製錬環境科学研究部門  
 協力：住友金属鉱山株式会社  
 日時：2022年07月08日  
 場所：オンライン開催  
 参加者：学部生2名、大学院生20名

学生への非鉄金属製錬業の啓発活動、人材育成を目的として、住友金属鉱山共同研究ユニット主催行事として非鉄金属製錬セミナーを開催している。第1回は独立行政法人石油天然ガス・金属鉱物資源機構金属資源技術研究所（秋田県鹿角郡小坂町）、第2回は住友金属鉱山株式会社東予工場（愛媛県西条市・新居浜市）、三菱マテリアル株式会社直島製錬所（香川県香川郡直島町）へ訪問して開催した。第3回および今回（第4回）は、コロナ禍のため、感染拡大を防止するためオンラインで開催した。

14:40	はじめに	多元物質科学研究所 教授 村松淳司
14:45	住友金属鉱山会社紹介	人材開発部 松本祐輔
14:55	東予工場紹介（ビデオ視聴）	金属事業本部
	【東北大OB 東予工場若手技術者による講義・質疑応答】	
15:20	銅製錬概論	東予工場製錬課 小林純一
15:50	東予工場における硫酸製造プロセスについて	東予工場製錬課 大野真武
16:20	東予工場における銅電解精製プロセスについて	東予工場製金課 有満雅人
16:50	おわりに	東予工場 工場長 川中一哲

参加学生の学年別の内訳は、大学院生が9割、学部生が1割だった。専攻別では、マテリアル・開発系が8割、環境科学研究科が2割だった。

セミナー受講前後で、非鉄金属製錬業界への関心度は変わらなかった。元々関心のある学生が大半だった。

セミナーを通じて企業における現状の課題などを伝えることができた。工場見学が困難な状況で、擬似的な工場見学の機会が得られたことが良かった、現場技術者の話を聞く機会が持てて良かった、とする感想が多くあった。完成した技術と考えていた銅製錬にもまだまだ改善すべきところがあると知って興味深かったとの感想もあり、できるだけ多くの学生に非鉄金属製錬について知ってもらおうという共同研究部門の目的の一つを果たすことができた。

## Seminar of Materials-Measurement Hybrid Research Center (The 8th Seminar on Nano-Micro Chemical Measurements)

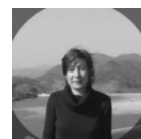
Date : July 19th, 2022

Room : S247, IMRAM West #1 Bldg. (+online(hybrid))

9:00 Reactive of atmospheric aerosol particles: a single particle point of view

**Dr. Sophie Sobanska**

Institut des Sciences Moléculaires, Université de Bordeaux, UMR CNRS 5255



10:00 Laser Trapping and Spectroscopy of Single Water Droplets in Air

**De. Shoji Ishizaka**

Hiroshima University



The lecturers are specialists in laboratory experiments for atmospheric chemistry, especially for spectroscopic measurements of the trapped single aerosol droplet.

Host: Akihide HIBARA & Masao GEN, IMRAM, Tohoku University

Contact: hibara@tohoku.ac.jp 022-217-5616

## The 13th Asian Thermophysical Properties Conference(ATPC2022)

日時 : 2022年9月26日(月)~30日(金)  
場所 : オンライン形式(一部ハイブリッド開催)  
実行委員長 : 福山博之

9月26日から5日間に亘り、第13回アジア熱物性会議(ATPC2022)を開催。オンライン形式であったが、オープニングセレモニーやプレナリー講演など、可能な範囲で仙台にてハイブリッド開催とした。参加者数は353名(うち外国人125名)、17か国よりご参加いただき、講演数は184件と、コロナ禍でありながら、無事成功裡に終えることができた。

(主催団体等)

Organized by : 日本熱物性学会

Co-organized by :

Asian Union of Thermal Science and Engineering (AUTSE)

Japan organization for supporting thermal science research

公益社団法人日本伝熱学会

一般社団法人青葉工学振興会

東北大学多元物質科学研究所

東北大学工学研究科・工学部

Sponsored by :

日本学術振興会 科研費

International Journal of Thermophysics (IJT)

企業広告・展示 :

アドバンス理工(株)、(株)東栄科学産業、ネッチ・ジャパン(株)、ベテル(株)

(講演数)

口頭発表 184件

Plenary 講演 : 3件

Keynote 講演 : 16件

Invited 講演 : 30件

一般講演 : 138件

Poster 発表 : 29件

OS 数 : 17

## 第1回無機材料研究部門講演会

- 日時 : 2022年10月7日(金) 10:00~11:30  
 場所 : 東北大学片平キャンパス 材物棟 1F 大会議室  
 (コロナ禍による定員 24名)  
 講師 : Prof. Richard Dronskowski  
 無機材料研究部門 客員教授 (2022.9.20 - 12.20)  
 (Chair of Solid-State and Quantum Chemistry)  
 (RWTH Aachen University, Aachen, Germany)  
 講演題目 : The Crystal Structure of Carbonic Acid  
 主催 : 無機材料研究部門  
 参加者 : 22名

講演要旨 : Ubiquitous carbonic acid,  $\text{H}_2\text{CO}_3$ , a key molecule in biochemistry, geochemistry, and also extraterrestrial chemistry, is known, at least in principle, from various physicochemical studies but is often considered, even up to the present day, a somewhat mysterious “non-existing” molecule. In fact, the molecule has never been directly seen, the reason being that high pressure is needed to stabilize it, as easily shown by electronic-structure theory. After an eight-years research study, the crystal structure of carbonic acid has now been determined from neutron-diffraction data on a deuterated sample in a specially built hybrid clamped cell using “Russian alloy”. At 1.85 GPa,  $\text{D}_2\text{CO}_3$  crystallizes in the monoclinic space group  $P2_1/c$  with  $a = 5.392(2)$ ,  $b = 6.661(4)$ ,  $c = 5.690(1)$  Å,  $\beta = 92.66(3)^\circ$ ,  $Z = 4$ , with one symmetry-inequivalent anti-anti shaped  $\text{D}_2\text{CO}_3$  molecule forming dimers, as previously predicted. Quantum chemistry evidences  $\pi$  bonding within the  $\text{CO}_3$  molecular core, very strong hydrogen bonding between the molecules, and a massive increase of the crystal field on all bonds; phonon calculations emphasize the locality of the vibrations, being rather insensitive to the extended structure. Now that carbonic acid has been firmly established, this may be important for other fields, for example  $\text{CO}_2$  “sequestration” and its the chemical consequences. Likewise, carbonic acid probably plays a role in our solar system, say, on outer gas planets such as Uranus or Neptune and, also, on the Jupiter moon Europa. Finally, many chemistry textbooks must be rewritten because the simplest molecule consisting of water and carbon dioxide actually exists.



**無機材料研究部門講演会(第1回)**

日時: 2022年10月7日(金) 10:00~11:30  
 場所: 東北大学片平キャンパス 材物棟1F 大会議室

講師 **Prof. Richard Dronskowski**

Chair of Solid-State and Quantum Chemistry  
 RWTH Aachen University, Germany  
 東北大学多元物質科学研究所 客員教授

題目: **The Crystal Structure of Carbonic Acid**



## マテリアル・計測ハイブリッド研究センター講演会

- 日時 : 2022年10月11日(火) 15:00~16:30  
場所 : 東北大学片平キャンパス 東2号館 2F セミナー室  
※オンサイト開催(定員18名)
- 講師 : Teresa J. Bandosz 教授  
(The City College of The City University New York)
- 題目 : Beyond Adsorption and Because of Adsorption: Exploring the silent aspect of carbon porosity
- 要旨 : In this talk we would like to provide an insight into our perspectives on the new applications of nanoporous carbons that were inspired by the graphene features and its presence in these carbonaceous materials. A significant advancement to the “new” science of the “old” nanoporous carbons is in their new application such as gas sensing and ORR and CO<sub>2</sub>RR catalysis. In these applications both surface chemistry and porosity are crucial factors determining the specific performance. The mechanism of specific processes based on an involvement of porosity will be proposed. Our inspiration by the science of graphene combined with the comprehensive knowledge of activated carbons surface chemistry, texture, morphology and adsorptive/reactive adsorptive properties directed us to look at carbons from another perspective; from the perspective of nanotechnology. The results obtained by us and briefly addressed here are new and many questions have arisen, and are left unanswered, and many approaches need improvements. One has to take into consideration that explaining the complex phenomena in nanoporous carbons is not easy owing to the combination of the porosity and surface chemistry effects. Practically either one cannot exist without another and they add up to that’s specific and unique synergy provided only by these materials. One thing is certainly true: “adventurous” graphene features can be found in nanoporous carbons and they deserve to be explored and used to their full extent.

## 第22回東北大中性子セミナー

- 日時 : 2022年10月13日(木) 15時  
場所 : 東北大学多元物質科学研究所 西一号館 大会議室
- 講演者 : Maxim Avdeev (ANSTO)
- 題目 : Atomistic modelling as a complementary tool for diffraction studies
- 要旨 : Diffraction experiments typically provide clear picture of a crystal structure and basis for understanding material properties. However, for data of poor quality or in case of materials with high static or dynamic disorder and/or weakly occupied atomic sites, diffraction may struggle to distinguish several alternative models yielding similar  $\chi^2$ . In that case, atomistic modelling may be very useful to identify the correct model. I will present several recent examples of studies of disordered oxide-ion and cation conductors, where empirical and ab initio static and geometry optimization calculations and molecular dynamics simulations not only helped to validate neutron diffraction analysis but also revealed the mechanism driving the disorder.

## 第23回東北大中性子セミナー

日 時 : 2022年10月25日(火)午後15:00-16:30  
 場 所 : 東北大学多元物質科学研究所 西一号館2階セミナー室  
 講演者 : 池田 進 高エネルギー加速器研究機構(KEK) / KEK ダイヤモンドフェロー  
 題 目 : Neutron Compton 散乱研究—開拓と派生—

### 要 旨

1970年頃、東北大学で世界最初に誕生し、次いで北海道大学でも開発された電子加速器駆動型パルス中性子源の科学技術は、1980年、世界が競合する中、両大学の協力によって、世界初の陽子加速器駆動型パルス・スポレーション中性子源施設 KENS を KEK に開花させた。KENS では、当時の中性子散乱研究を躍進させる最新の中性子実験装置が開発され、その培われた技術とアイデアは、今日の J-PARC/MLF 施設の礎となっている。

KENS 中性子実験装置の一つが、eV 領域の中性子 (eV-neutron) を使って Neutron Compton Scattering(NCS) 研究を可能とし、超流動 4He 中のボーズ凝縮量  $n(0)$  の直接観測を目指した装置 RAT であった。KENS 中性子源は TOF 法に必要なパルス時間幅の狭い eV-neutron を RAT に供給できたが、超流動 4He の NCS 実験は、当時、未踏の  $Q > 100 \text{ \AA}^{-1}$  での実施が期待されており、eV 領域の中性子共鳴吸収を利用した新しい中性子分光法の 確立が必須であった。1987年、RAT はこの問題を克服し、 $Q > 100 \text{ \AA}^{-1}$  での  $n(0)$  の観測に初めて成功した。

その後、この NCS を用いて、水素結合型誘電体の相転移機構、水素貯蔵合金、水素結合メカニズムで決定的な役割を持つ水素の基底状態の研究が行われた。さらに、ここで開発された中性子共鳴吸収法は、凝集体内の元素毎の実効温度 ( $T_{\text{eff}}$ ) を計測できる新しい実験装置 (DOG & EZO) を派生させ、元素毎のデバイ温度 ( $\theta D$ ) の決定や  $\theta D$  の方向依存性の観測、物体内部の温度分布の計測などを可能とさせた。

なお、2006年、KENS 施設は J-PARC / MLF 開設に伴いシャットダウンしたが、NCS 技術は、英国 ISIS 施設で更に改良され、He、H、Li、Ne、Na、ガラス状態などの研究に活躍している。

KEK より池田進先生をお迎えし、中性子コンプトン散乱に関するセミナーをして頂いた。研究室内外から十数人の参加者に参加頂き、パルス中性子源に関する歴史、共鳴吸収を利用した eV オーダーのエネルギーを有する中性子の分光手法、同手法を利用した水素原子の原子振動の観測結果等に関して議論した。



## 令和4年度金属資源プロセス研究センターシンポジウム カーボンニュートラルが求められる鉄鋼業の動向

- 主催：東北大学多元物質科学研究所金属資源プロセス研究センター  
 協賛：日本鉄鋼協会東北支部  
 内容：現在 CO<sub>2</sub> 排出削減は全産業の課題であり、鉄鋼業においても脱炭素を目標として転換期を迎えている。これまで、鉄鋼業では国家プロジェクトや様々な枠組みで、低炭素化への研究開発が行われてきた。同時に、関連する基礎研究も学術的に行われており、同じ目標に対して、数多くの異なるアプローチが進展している。産学での取り組みを互いに理解し、今後のカーボンニュートラル製鉄に向けて、今アカデミアに必要とされる研究は何か？をディスカッションした。
- 日時：2022年10月26日（水） 10:00-17:00  
 場所：東北大学多元物質科学研究所 さくらホール

### プログラム

10:00-10:10	開会挨拶	多元物質科学研究所 寺内 正己
10:20-11:00	日本鉄鋼業におけるカーボンニュートラルへの取り組みと課題	日本製鉄 村上英樹
11:00-11:40	社会基盤金属素材のフローに随伴するマイナー元素の問題	東北大学 大野肇・盧鑫・長坂徹也
13:00-13:40	JFE スチールにおけるカーボンニュートラルへの取り組みとカーボンニュートラル製鉄プロセスにおける製鋼技術の課題	JFE スチール 岸本康夫
13:40-14:20	KOBELCO グループにおけるカーボンニュートラルに向けた取り組み	神戸製鋼所 坂本浩一
14:40-15:20	鉄スクラップの利用促進と今後の課題	東京大学 醍醐市朗
15:20-16:00	電気炉製鋼設備の動向について	大同特殊鋼 堀哲
16:00-16:40	鉄鋼カーボンニュートラル：国際機関・各国政府・業界団体等の動向と日本鉄鋼協会の取り組み	日本鉄鋼協会 小澤純夫
16:40-16:50	総合討論	
16:50-17:00	閉会挨拶	金属資源プロセス研究センター長 本間格

## 第9回ナノ・マイクロ計測化学セミナー

- 演題：超分子センサーの未来  
 ～センシングからイメージングへの展開～
- 講師：福原 学  
 東京工業大学理学院化学系 准教授
- 日時：2022年11月2日（水）14:00～15:00  
 場所：多元物質科学研究所科研S棟大会議室  
 主催：多元物質科学研究所ナノ・マイクロ計測化学研究部門



福原先生は、超分子化学・光化学・高分子化学や感圧応答センサーの研究分野で世界的に活躍されている研究者です。本セミナーでは、シグナル増幅が可能な化学センサーの開発からイメージング技術に応用展開された経緯について講演していただきます。

連絡先多元物質科学研究所 火原彰秀 (022-217-5616)

## 第10回ナノ・マイクロ計測化学セミナー

- 演題 : X線で見える  
講師 : 原田 誠  
東京工業大学理学院化学系 助教  
日時 : 2022年11月2日(水) 16:00~17:00  
場所 : 多元物質科学研究所 科研S棟 大会議室  
主催 : 多元物質科学研究所ナノ・マイクロ計測化学研究部門



原田先生は、シンクロトロン放射光を用いたX線吸収測定を元に、界面や溶液中での分子構造解析を進めてきた研究者です。本セミナーでは、氷試料内部に存在する種々のイオンについてXAFS、SAXS、XRFイメージングなどX線を用いたアプローチについて講演していただきます。

連絡先多元物質科学研究所火原彰秀 (022-217-5616)

## 英国王立協会と日本学術会議によるネットゼロに向けた科学技術対話

## RS-SCJ Net Zero Policy Exchange

1. 日時 令和4年11月3日(木)9:30-17:30

2. 会場 日本学術会議 会議室

3. 開催趣旨

2050年までのネットゼロ達成にむけて重要視される技術の開発普及に際し、直面する研究課題について、日英両国の専門家間で議論する。商用化を含む具体的な社会実装につながる研究開発(二国間共同研究を含む)領域や研究開発の課題を特定するとともに、議論の結果をいかに政策に反映できるか、今後の研究・協働の可能性などについて討議する。

4. プログラム(予定。詳細検討中)

9:30-10:45	プレナリー・セッション1: ・ オープニング ・ 日英の研究・イノベーション政策に関する報告及び討議
10:45-11:00	Break
11:00-12:30	セッション1: 水素
12:30-13:30	昼食
13:30-15:30	セッション2: バッテリー セッション3: エネルギー・キャリアー(アンモニア・合成燃料) (上記のセッション2とセッション3を並行開催)
15:30-15:45	Break
15:45-17:30	プレナリー・セッション2: ・ ブレイクアウト・セッションの報告 ・ 討議(分野共通課題、政策課題及び二国間協力の展望など)

※ワークショップ終了後、夕食会を開催予定(18時30分頃より)

5. 参加者(敬称略)

(英国王立協会からの参加予定者)

氏名	所属
1. Peter Bruce	Physical Secretary/Vice President of The Royal Society, Wolfson Professor of Materials at the University of Oxford
2. Nigel Brandon	Chair, Sustainable Development in Energy and Dean, Faculty of Engineering, Imperial College London
3. Anthony Kucernak	Professor of Physical Chemistry in the Department of Chemistry, Imperial College London
4. Bill David,	Professor of Materials Chemistry, Inorganic Chemistry Laboratory, University of Oxford
5. Claire Grey	Royal Society Research Professor, Department of Chemistry, University of Cambridge) and Principal Investigator at the Faraday Institution
6. Elizabeth Surkovic	Head of Policy, Resilient Futures, The Royal Society 事務局

7. Alan Gregory	Policy Adviser, International Affairs – East Asia, The Royal Society 事務局
-----------------	--

(日本学術会議等からの参加予定者) ※○:双方の専門家間でのリード役をお願いします

バッテリー	
1. ○本間 格	東北大学多元物質科学研究所金属資源プロセス研究センター長・教授
2. 菅野 了次	東京工業大学科学技術創成研究院特命教授
3. 一杉 太郎	東京大学大学院理学系研究科化学専攻教授
水素	
4. 堂免 一成	信州大学先鋭領域融合研究群先鋭材料研究所特別特任教授、東京大学大学院工学系研究科教授
5. 佐々木 一成	九州大学大学院工学研究院機械工学部門主幹教授／連携会員
6. ○中村 優美子	国立研究開発法人産業技術総合研究所創エネルギー研究部門総括研究主幹／連携会員
アンモニア	
7. 江口 浩一	京都大学名誉教授
8. ○永岡 勝俊	名古屋大学院工学研究科化学システム工学専攻先進化学工学システム教授
合成燃料	
9. 椿 範立	富山大学大学院理工学研究部教授／連携会員
10. ○山内 美穂	九州大学先導物質化学研究所分子集積化学部門無機物質化学分野教授／連携会員
触媒	
11. 関根 泰	早稲田大学先進理工学研究科教授
12. 富重 圭一	東北大学大学院工学研究科・工学部応用化学専攻 エネルギー資源化学分野教授
13. 梶田 隆章	日本学術会議会長
14. 菱田 公一	日本学術会議副会長(政府、社会及び国民等との関係担当)
15. 高村 ゆかり	日本学術会議副会長(国際活動担当)
16. 吉村 忍	日本学術会議第三部長
17. 北川 尚美	日本学術会議第三部幹事

**RS-SCJ Net Zero Policy Exchange** Thursday, November 3<sup>rd</sup>, 2022. 9:30-17:30 (SCJ, Tokyo)  
Itaru HONMA (Tohoku), Ryoji KANNO (TIT), Taro HITOSUGI (Tokyo)

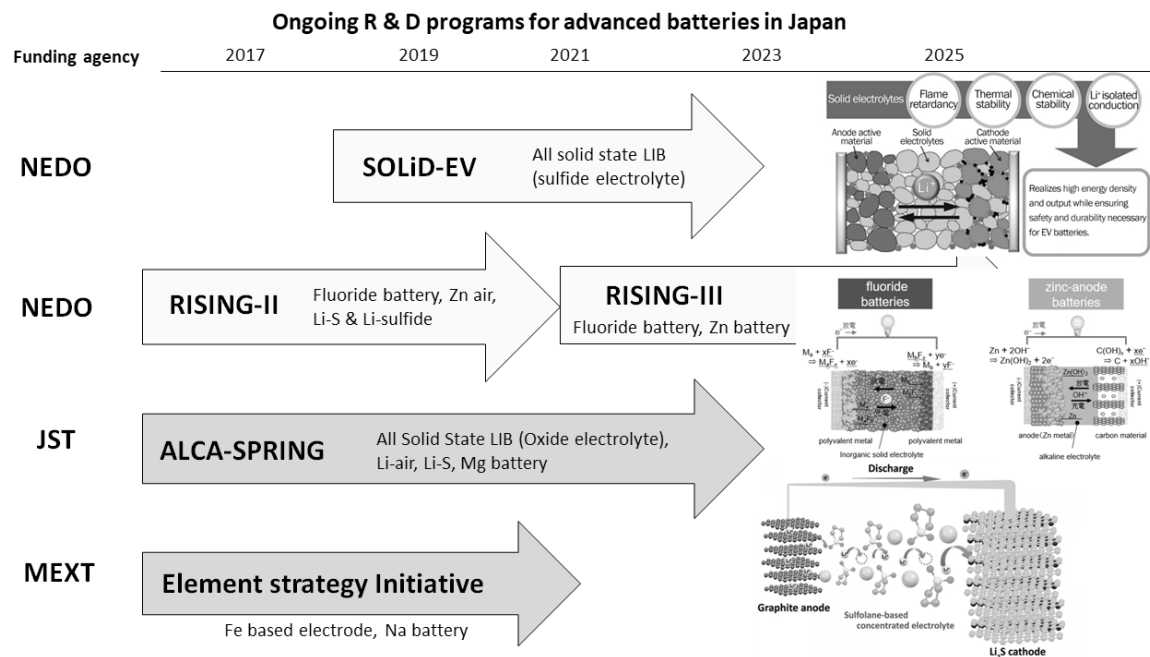
**Agenda of UK/Japan bilateral scientific dialogue on battery**

1. Consider research, development and innovation in these technologies over recent years – what has worked and what didn't and why.  
Summarized in supplement 1
2. Discuss the major scientific challenges and difficulties that remain, posing barriers to achieving the net zero target of 2050
  - ◆ **Scientific challenges**
    1. **Devices**: High power and high capacity, faster charging, safer, lower cost, longer lifetime.
    2. **Science & Technology**: Battery health monitoring. High throughput experiment/simulation methods via robotics/supercomputing. Multidimensional nanoscale characterization with higher time and spatial resolutions. Data -driven exploration of new metastable materials through AI, deep learning and informatics. Understanding complex system's physics and chemistry from nano to micron scale. Modelling of dynamics, nonequilibrium and material interactions under cell operations. Self-healing materials, interfaces and device structures for cell's longevity.
    3. **Sustainability**: use of recyclable or earth abundant materials, free of critical minerals such as Li, Co, Ni, etc., to avoid supply chain risks and minimize an environmental impact.
  - ◆ **Barriers to the 2050 target**
    1. **Mass fabrication** with reinforced supply chain and low cost, but lower CO<sub>2</sub> emissions.
    2. **Infrastructure** of ubiquitous charge stations and grid networks to EV by low electricity rate.
    3. **Circular economy** of used LIB for reuse and recycles to minimize environmental impacts
3. Identify what changes to research, development and innovation (in terms of structure /funding /co-ordination/policy etc.) would facilitate overcoming the challenges identified above.
  1. **Multidisciplinary research** among physics, chemistry, electrical/chemical engineering, materials science and even to mathematics! AI and materials informatics are becoming more important and helpful for accelerating innovations of novel battery systems.
  2. **Standardization of the experimental data** on crystallographic/optoelectronic analysis, electrode properties, electrochemical analysis and battery performance are necessary for making versatile and accessible materials big-data base under comprehensive formats.
  3. **Platform of sharable data base (battery material Genome)** for materials informatics, deep learning and simulations. Vitalization of sleeping data in the individual laboratories around the world and input those to battery Genome data base, which are supposed to be open access.
  4. **Internationally collaborated network research** from individual laboratories to big scientific facilities such as synchrotron with bilateral student exchange for human resources development.
4. Where they arise, propose areas where future co-operation between the UK and Japan (at academic, industrial or governmental levels) could assist in overcoming those barriers.
  - ◆ **Characterization**: Further tools need to be developed to probe battery health in batteries operating in real-life conditions. Better tools are also needed to characterize the material interactions within batteries.  
Operando CT measurement with a high-3D spatial/time resolution, using quantum beam such as synchrotron hard-/soft-X-ray, electron, and neutron. Operando single particle/thin film model electrode analysis. STEM analysis of Li, Na, O,,,. Data-driven and AI-assisted device analysis.
  - ◆ **Development of low-cost battery chemistries for very large scale/long period energy storage**  
Critical minerals' supply chain risk-free batteries. Using Na, K, Mg, Ca, Zn, Al carrier ions and not using Li. Using naturally abundant Fe, Mn, etc., and not using Co, Ni for electrodes.  
Redox flow and/or other aqueous battery systems. Organic batteries and other novel systems made by biomass or recyclable resources.

**supplement 1**

what has worked ?

National R & D bridging programs are proceeding intensively on all solid state LIB employing novel sulfide electrolytes (prof. R. Kanno) which are expected to be implemented in near-future advanced EV/PHVs. Alternative choices such as Li-air, Li-S, Mg-battery, Zn-air, fluoride battery and oxide-based all solid state LIB are funded by public programs (NEDO, JST, MEXT).



what didn't and why?

Small investments on supercapacitors/electrochemical capacitors, redox flow system, aqueous battery, organic and/or anion redox electrodes, because those are scarcely implemented in EVs.

Japanese delegate members

Name	Title/affiliation
<b>Itaru HONMA</b>	Prof. & Director of Center for Mineral Processing and Metallurgy, Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University e-mail: itaru.homma.e8@tohoku.ac.jp/ +81-022-217-5815
<b>Ryoji KANNO</b>	Prof. & Director of Research Center for All-Solid-State Battery, Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology e-mail: kanno@echem.titech.ac.jp/ +81-45-924-5401
<b>Taro HITOSUGI</b>	Prof. Taro Hitosugi, Department of Chemistry, The University of Tokyo e-mail: hitosugi@g.ecc.u-tokyo.ac.jp/ +81-3-5841-4353



## 第24回東北大中性子セミナー・第34回QLCセミナー

日時 : 2022年11月16日(水)午後15:00-16:30  
場所 : 東北大学多元物質科学研究所 西一号館 2階セミナー室  
講演者 : 児玉佑樹(原子力機構中性子センター)  
題目 : スピン1/2三角格子反強磁性体の磁化過程と磁気励起

## 要旨

スピン1/2三角格子反強磁性体(S=1/2 TLAF)とは三角格子上に局在したスピンの隣接スピンと相互作用する系のことである。三角格子は最もシンプルな二次元格子の一つであるが、S=1/2 TLAFは多彩な量子現象を引き起こす。例えば、磁化過程においては量子ゆらぎのcollinear状態安定化によって磁化プラトー現象[1, 2]が、磁気励起においては分散関係が極小値を持つ roton-like minimum[3]が確認されている。実験的アプローチから見れば、S=1/2 TLAFには比較的理想的な候補物質がBa<sub>3</sub>CoSb<sub>2</sub>O<sub>9</sub>をはじめとしていくつか見つかっている。S=1/2 TLAFは理論・実験の比較がしやすく量子磁性体の解析手法を洗練するのによい研究対象であるといえる。本発表では、私のこれまでの研究を中心に、S=1/2 TLAFの候補物質・磁化過程・磁気励起について様々な理論と比較しながら検討を行う。

本発表では主にBa<sub>3</sub>CoSb<sub>2</sub>O<sub>9</sub>、Ba<sub>2</sub>CoTeO<sub>6</sub>、Ba<sub>2</sub>La<sub>2</sub>CoTe<sub>2</sub>O<sub>12</sub>について紹介する。これらの物質はNeel温度以下でS=1/2 TLAFの基底状態の特徴として知られる120度構造の磁気秩序状態を示し、磁化過程には幅広い磁化プラトーが確認されている[2,4,5]。Ba<sub>3</sub>CoSb<sub>2</sub>O<sub>9</sub>はS=1/2 TLAFの最も一般的な候補物質として知られており、これまで多くの実験が行われてきた。今回の発表では私が最近行った常磁性相における非弾性中性子散乱実験の結果を含めて報告を行う。Ba<sub>2</sub>CoTeO<sub>6</sub>はS=1/2 TLAF層とスピン1/2ハニカム格子Ising型反強磁性層が交互に積層し、それらが独立に振舞うユニークな特徴を持つ[4]。Ba<sub>2</sub>CoTeO<sub>6</sub>の磁気励起にはBa<sub>3</sub>CoSb<sub>2</sub>O<sub>9</sub>の磁気励起とほとんど同じスペクトルが確認され、これらはS=1/2 TLAFに共通した振る舞いであることが示唆される[6]。Ba<sub>2</sub>La<sub>2</sub>CoTe<sub>2</sub>O<sub>12</sub>は強い容易面型の異方性を持ったS=1/2 TLAFであり、S=1/2 TLAFにおける異方性の効果を検証することのできる数少ない物質である[5]。

[1] A. V. Chubukov and D. I. Golosov, J. Phys.: Condens. Matter 3, 69 (1991).

[2] Y. Shirata et al., Phys. Rev. Lett. 108, 057205 (2012).

[3] J. Ma et al., Phys. Rev. Lett. 116, 087201 (2016).

[4] P. Chanlert et al., Phys. Rev. B 93, 094420 (2016).

[5] Y. Kojima et al., Phys. Rev. B 98, 174406 (2018).

[6] Y. Kojima, et al., Phys. Rev. B 105, L020408 (2022).

## 日本顕微鏡学会 ソフトマテリアル分科会 2022 年度第 1 回講演会

主 催 : 公益社団法人 日本顕微鏡学会 ソフトマテリアル分科会  
 責任者 : 東北大学 多元物質科学研究所 陣内 浩司  
 日 時 : 令和 4 年 11 月 25 日 (金) 13:00 - 17:30  
 場 所 : 東北大学 東京分室 及び オンライン参加  
 参加者 : 50 名  
 テーマ : 「様々な“その場観察”技法とソフトマテリアルへの展望」  
 内 容 : 陣内が代表を務める日本顕微鏡学会 ソフトマテリアル分科会の 2022 年度第一回講演会を下記の通り行った。

- ・株式会社 日立ハイテク 許斐 麻美 (チュートリアル講演)  
「ソフトマテリアルの試料作製とアーティファクト第一回 染色とその注意点」
- ・浜松医科大学 針山 孝彦  
「NanoSuit® による生体の生きたまま・濡れたままの電子顕微鏡観察とその応用」
- ・産業技術総合研究所 佐藤 主税  
「腸内細菌とバイオフィルム・腸管粘膜系の aldehyde 固定サンプルの親水環境での観察」
- ・大阪大学 吉田 秀人  
「環境制御型透過電子顕微鏡法とその応用」
- ・コニカミノルタ株式会社 成毛 章容  
「加熱ステージ AFM を用いたポリマーブレンドの解析」
- ・東北大学 陣内 浩司  
「架橋ゴム複合材料の延伸その場観察」

## 東北大学-台北科技大学ジョイントシンポジウム 2022 Tohoku University & National Taipei University of Technology 2022 Online Joint Symposium

主 催 : 国立台北科技大学、東北大学多元物質科学研究所  
 日 時 : 2022 年 11 月 28 日 月曜日 9:45 - 17:15 (日本時間)  
 形 式 : オンライン (Zoom)

2018 年に多元研と台北科技大工程院との部局間協定が締結され、それ以降、毎年ジョイントシンポジウムが開催されてきた (開催場所: 第 1 回台北科技大、第 2 回多元研、第 3, 4 回オンライン)。今回で 5 回目となり、昨年と同様に新型コロナ禍のためオンラインで開催した。特に、今回は 2019 年に東北大学と台北科技大学との大学間協定が締結されたことから、“東北大学-台北科技大学ジョイントシンポジウム 2022”として多元研以外に学際科学フロンティア研究所、材料科学高等研究所からの研究者も加わり、研究交流と共同研究に繋げられる研究テーマに関する話題提供等が活発になされた。参加人数は両大学合わせて 50 名程度 (オンライン&対面合わせて) であった。

Keynote 講演 (学際フ 津田健治教授 “Nanometer-scale local crystal structure analysis using convergent-beam electron diffraction”)、共同研究プロジェクト講演 (多元研 笠井 T、芥川 T、大須賀遼太助教、亀岡 T)、招待講演 (多元研 小林弘明講師 “Development of ultraporous and ultras-small spinel cathodes toward room temperature magnesium rechargeable battery”、吉井丈晴助教 “Advanced temperature-programmed desorption: a new analytical method for carbon materials for energy applications”、長谷川拓哉講師 “Development of NIR-luminescent nano-phosphor materials for enhancement of photovoltaic efficiency of c-Si solar cell”) による講演、両大学学生 (13 名) による Poster Competition が行われた。なお、台北科技大の審査員により東北大側の優秀 Poster 発表賞として Minghao Liu 君 (多元研・AIMR 西原研)、斎藤興也君 (多元研 寺内研)、Zijan Deng 君 (多元研・SRIS 村松研) が選ばれ表彰された。



参加者と会場の様子（台北科技大側）

## 第11回ナノ・マイクロ計測化学セミナー

- 演題：分子動力学法を用いた分子集合体のシミュレーション  
 講師：水口 朋子  
 京都工芸繊維大学 准教授  
 日時：2022年11月30日（水）16:30～18:00  
 場所：多元物質科学研究所 科研S棟 大会議室（S247）  
 主催：多元物質科学研究所 ナノ・マイクロ計測化学研究部門



水口朋子先生は、分子動力学シミュレーションをご専門とされています。脂質膜やミセルのような分子の自己集合体は、形を保ちながら柔軟に変化することが可能であり、その特性を生かして、物質の分配や輸送を実現します。溶媒やイオンを含めた分子間相互作用を理解することにより、物質の分配・輸送を制御する方法を見つけ出すことは、ドラッグデリバリーをはじめ、様々な分野で強く求められています。本講演では、分子動力学シミュレーションを用いて、主に分子集合体への物質の分配に関わる研究を紹介していただきます。具体的には、ミセルへの小分子の分配や、脂質二重膜に結合したタンパク質の安定性について講演を行っていただきます。さらに、自己集合体ではないですが、ポリマーブラシ界面の水の振る舞いについても紹介していただきます。

連絡先多元物質科学研究所 福山真央（022-217-5396）

## 多元物質科学研究所客員教授講演会 日本分析化学会東北支部特別講演会

- 演題：常識と限界を超え未来を切り拓く分析化学  
 講師：馬場 嘉信  
 名古屋大学大学院工学研究科 教授  
 量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 所長  
 日時：2022年12月7日（水）14:30～15:30  
 場所：青葉山キャンパス 理学研究科合同C棟 青葉サイエンスホール  
 主催：多元物質科学研究所（客員教授受入世話人：火原彰秀）  
 日本分析化学会東北支部

馬場嘉信先生は、ナノ・マイクロ分析化学やナノバイオ分野で活躍する研究者です。2021年紫綬褒章、2021年日本化学会賞、2021年化学とマイクロ・ナノシステム学会賞、2016年文部科学大臣表彰科学技術賞、2015年日本分析化学会賞、2015年クロマトグラフィー科学会賞など、多くの受章・受賞をされています。本講演では、分析化学やナノバイオ分野の未来についてお話を頂きます。

連絡先多元物質科学研究所火原彰秀 (022-217-5616)

## 第25回東北大中性子セミナー

日時 : 2022年12月14日(水) 15時30分  
場所 : 東北大学多元物質科学研究所 西一号館 大会議室  
講演者 : 森山広大(京都大学理学研究科)  
題目 : 遍歴電子磁性体  $\text{SrCo}_2(\text{Ge}_{1-x}\text{P}_x)_2$  におけるスピン揺らぎと量子臨界現象

### 要旨 :

$\text{ThCr}_2\text{Si}_2$  型構造を有する  $\text{AT}_2\text{X}_2$  は、重い電子系超伝導 ( $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$ [1]) や鉄系超伝導 ( $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  の固溶系 [2,3]) などの多様な物性の舞台として研究が展開されている物質群である。 $\text{TX}_4$  四面体が稜共有で2次元的に連なったTX層とA層からなる積層構造を有するが、隣接したTX層間のX-X化学結合の有無によって格子定数比  $c/a$  の値が大きく異なり、それぞれ collapsed Tetragonal (cT) 相, uncollapsed Tetragonal (ucT) 相と呼称される。Xサイトを15族元素が占める場合、TサイトがFeの物質ではFeX層内に反強磁性揺らぎを有することが多いが、TサイトがCoの場合は強磁性揺らぎを有しやすい。中でも、 $\text{SrCo}_2\text{P}_2$  については磁化率の温度依存性におけるピークや遍歴電子メタ磁性転移などの異常が見られ [4]、擬2次元的な強磁性量子臨界点近傍物質として注目を集めている。

本発表では、 $\text{SrCo}_2\text{Ge}_2$ (cT相) と  $\text{SrCo}_2\text{P}_2$ (ucT相) の固溶系  $\text{SrCo}_2(\text{Ge}_{1-x}\text{P}_x)_2$  の物性を紹介する。多結晶試料を用いた先行研究 [5] によれば、 $0 \leq x < 0.325$ ,  $0.7 < x \leq 1$  がいずれもパウリ常磁性を示す一方で、 $0.325 \leq x \leq 0.7$  では低温で強磁性相が出現し、cT相とucT相のみからなる単純な構造相図からは磁気相図の説明が付かない。我々はCoGe自己フラックス法を用いることで様々な置換率の単結晶試料の合成に初めて成功し、磁化測定や比熱測定、 $^{31}\text{P}$ -NMR測定などを用いて詳細な物性を調べた。その結果、X-X化学結合を組むX元素のランダムネスの影響によりcT相とucT相との間に幅広い中間構造相が存在することが判明した。また強磁性の相境界にあたる  $x=0.39$ ,  $0.58$  付近については、中間構造相における連続的な構造変化の影響により、低温での磁気比熱が  $-\log T$  に比例する量子臨界現象が観測された。発表では本系のスピン揺らぎについてSCR理論などを用いて解析した結果も交えながら、本系の特異な磁気相図について議論する。

[1] F. Steglich, et al., Phys. Rev. Lett. 43, 1892 (1979).

[2] M. Rotter, et al., Phys. Rev. Lett. 101, 107006 (2008).

[3] S. Kasahara, et al., Nature (London) 486, 382 (2012).

[4] M. Imai, et al., Phys. Rev. B 90, 014407 (2014).

[5] S. Jia, et al., Phys. Rev. B 80, 165107 (2009).

## 学会発表講演目録

2022(令和4)年1月-12月

(有機・生命科学研究部門)  
生命機能分子合成化学研究分野

(国際発表、全7件)

- Kazumitsu Onizuka, Kazuki Kuwahara, Sayaka Yajima, Yuuhei Yamano, Fumi Nagatsugi: “*Pseudorotaxane and catenane formation via the slipping process*”, ISNAC2022 (2022.11.02-04)
- Ahmed Mostafa Abdelhady, Kazumitsu Onizuka, Tatsuki Masuzawa, Shinichi Sato, Keita Nakane, Takanori Oyoshi, Fumi Nagatsugi: “*Selective photo-catalytic proximity labeling of G4 DNA interacting proteins for the interaction proteomes of G4 DNA*”, ISNAC2022 (2022.11.02-04)
- Hidenori Okamura: “*Expanding the toolbox of non-natural nucleosides for functionalization of oligonucleotides*”, FIBER International Summit for Nucleic Acids 2022 (2022.07.14)

(国内発表、全25件)

- 永次史「機能性オリゴヌクレオチドの開発」、日本核酸医薬学会 第7回年会 (2022.08.01-04)
- 岡村秀紀, 飯田百香, 金山唯, 永次史「光感受性オキシムの特異な反応性に着目した新規光環化反応の開発」、第16回バイオ関連化学シンポジウム (2022.09.11)
- 鬼塚和光, 長澤瞭佑, 小松リチャード馨, 宮下映見, 岩田遼平, 小澤眞美子, 齊藤博英, 永次史「RNA-蛍光指示薬間相互作用大規模解析とRNA結合分子探索」、第16回バイオ関連化学シンポジウム (2022.09.10-12)

## 生命機能制御物質化学研究分野

(国際発表、全11件)

- Takehiko WADA: “*Novel Design Strategy of DNA-Artificial Nucleic Acid Chimera Toward Enhancement of Target RNA Cleavage Activities: Application for COVID-19 Therapeutics-*”, 8th Annual Data Science in Engineering and Life Sciences Symposium, (2022.08.08)
- Yasuyuki Araki: “*Circularly Polarized Luminescence (CPL) from the Photo-excited Dimer*”, International CREST-CPL Conference in Awaji, JAPAN (2022.03.03-04)
- Takehiko WADA: “*Remarkable Enhancement of RNaseH Cleavage Activities of RNA Complexed with Chimeric DNA-Peptide Ribonucleic Acid (PRNA)*”, Oligonucleotide Therapeutics Society Symposium, Tokyo, Japan (2022.08.01)

(国内発表、全26件)

- 和田健彦「高効率標的RNA切断機能付与型次世代核酸医薬の開発」、JSPS FoS シンポジウム (2022.05.10)
- 和田健彦「COVID-19治療薬開発を指向した触媒的標的RNA切断機能付与型キメラ人工核酸の開発」、第71回高分子討論会 (2022.09.06)
- 東亮太, 金澤なぎさ, 松橋由佳, 中瀬生彦, 山本剛史, 西嶋政樹, 荒木保幸, 山吉麻子, 和田健彦「MMP; 活性を利用した新規がん細胞選択的細胞内導入システムの構築; PDIの細胞内導入効率と細胞機能への影響」、第71回高分子討論会 (2022.09.05)

## 生体分子構造研究分野

(国際発表、全5件)

- Kenji Inaba: “*Molecular basis of zinc-dependent protein quality control at the ER-Golgi interface*”, 10th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference (2022.11.29)
- Kenji Inaba: “*Molecular basis of redox-, pH-, and metal ion-dependent protein quality control at the ER-Golgi interface*”, KPPS symposium 2022 (2022.06.28)
- Kenji Inaba: “*Molecular basis of redox- and zinc-dependent protein quality control at the ER-Golgi interface*”, Redox week in Sendai (2022.10.31)

(国内発表、全22件)

- 渡部 聡, 木瀬孔明, 米澤 健人, 清水 伸隆, 濡木 理, 稲葉 謙次「クライオ電子顕微鏡で明らかになったカーゴ受容体 ERGIC-53の柔らかな全長構造」、第22回蛋白質学会年会 (2022.06.10)
- 稲葉 謙次「小胞体とゴルジ体間のコミュニケーションによる新たなタンパク質品質管理機構」、第95回日本生化学会 (2022.11.15)
- 門倉 広「ヒト PDI ファミリー酵素によって触媒されるタンパク質のジスルフィド結合形成機構」、第23回酵素応用シンポジウム 研究奨励賞受賞講演 (2022.06.10)

## 細胞機能分子化学研究分野

(国際発表、全 5 件)

- Rong Liu, Toshiyuki Kowada, Toshitaka Matsui, Shin Mizukami: “*Quantitative Mapping of Subcellular Labile Zn<sup>2+</sup> Concentrations Using Localizable Small-Molecule Fluorescent Probes*”, 10th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference (AsBIC10) (2022.11.28-12.03)
- Toshiyuki Kowada, Risa Ito, Makoto Iwashita, Toshitaka Matsui, Shin Mizukami (Speaker): “*Time-Lapse Ratiometric Imaging of Mitochondrial pH during Mitophagy Using a Localizable Fluorescent Probe*”, 10th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference (AsBIC10) (2022.11.28-12.03)
- Toshitaka Matsui: “*Mechanism of formaldehyde release in the heme degradation by IsdG from Staphylococcus aureus*”, The 10th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference (AsBIC10) (2022.11.28-12.03)

(国内発表、全 17 件)

- 水上 進「Visualization and control of live cell functions by integrating organic chemistry and light」、東京大学理学系研究科化学専攻雑誌会セミナー (2022.12.08)
- 小和田 俊行「細胞内遊離亜鉛イオンの定量解析を可能とする小分子蛍光プローブの開発」、第 60 回生物物理学会年会 (2022.09.28-30)
- 松井敏高「酵素の Chemistry を解明して何が言えるだろうか?」、*「生命金属科学」令和 4 年度夏の合宿* (2022.09.03-05)

## 生物分子機能計測研究分野

(国際発表、全 6 件)

- Koji Yonekura: “*Two-way application of cryo-EM to high-resolution single particle analysis and 3D ED*”, 1st Tohoku-Bordeaux-Geneva universities Joint Workshop (2022.11.11)
- Koji Yonekura: “*Two-way Application of Single Particle Cryo-EM and 3D ED for High-resolution Structure Analyses*”, AsCA 2022 (2022.10.31)

(国内発表、全 20 件)

- 米倉 功治「クライオ EM、3D ED による高度解析」、未踏分析技術イノベーションウェビナー～日本発未踏技術を世界の産業活性にテイクオフさせる必見企画～ (2022.12.06)
- 米倉 功治, 濱口 祐, 高場 圭章, 川上 恵典, 眞木 さおり「CYP を対象とした Cryo-EM」、CBI 学会 2022 年大会 (2022.10.25-27)
- 米倉 功治「クライオ電顕の最前線 — 水素の可視化とその先の解析 —」、コロイド先端技術講座 2021 先端バイオ計測技術・研究から学び、コロイド界面化学のあらたな見方を探る (2022.02.08)

## 生命分子ダイナミクス研究分野

(国際発表、全 1 件)

- Kiyoto Kamagata: “*Single-molecule characterization of DNA-binding protein action on DNA and engineering of genome editing protein Cas9 for improving its function*”, European Nucleic Acids 2022 (2022.02.18)

(国内発表、全 15 件)

- 高橋 聡「AlphaFold 時代にこそ重要性を増すアンサンブルおよび一分子蛍光分光法の基礎」、第 22 回日本蛋白質科学会年会 (2022.06.07-09)

## 量子ビーム構造生物化学研究分野

(国際発表、全 5 件)

- Eriko Nango: “*Toward understanding of enzyme reaction mechanism: serial crystallography using mixing injectors*”, 2022 SSRL/LCLS USERS’ MEETING (2022.09.28)
- Eriko Nango: “*3D Movies of Structural Changes in Proteins Captured by X-ray Free Electron Lasers*”, AsBIC10(10th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference) (2022.11.28-12.03)
- Eriko Nango: “*Time-resolved serial femtosecond crystallography of microbial rhodopsins*”, ICRP2022 (2022.11.01)

(国内発表、全 13 件)

- 南後恵理子「高速分子動画で観るタンパク質構造変化」、第 95 回日本生化学会大会 (2022.11.11)
- 南後恵理子「X 線自由電子レーザーによる 高時空間分解能タンパク質分子動画」、第 8 回電子状態理論シンポジウム (2022.11.16)
- 南後恵理子「X 線自由電子レーザーを用いた膜タンパク質分子動画解析」、バイオインタストーリー協会「発酵と代謝研究会」第 1 回勉強会 (2022.07.06)

## 高分子ハイブリッドナノ材料研究分野

(国際発表、全 11 件)

- M. Nishibori, K. Ninomiya, R. Osuga, G. Tanaka, M. Yabushita, S. Maki, K. Kanie, A. Muramatsu: “*X-ray absorption fine structure analysis of Fe-substituted zeolites synthesized by mechanochemical method*”, Asia-Oceania International Conference on Synchrotron Radiation Instruments (AO-SRI) 2022 (2022.11.12)
- Kakeru Ninomiya, Akira Yoko, Yuki Omura, Susumu Yamamoto, Gimyeong Seong, Takaaki Tomai, Tadafumi Adschiri, Maiko Nishibori: “*Electronic structure investigation of ultrafine CeO<sub>2</sub> nanoparticles by synchrotron X-ray spectroscopy*”, Asia Oceania International Conference on Synchrotron Radiation Instruments 2022 (2022.11.09-12)
- Koki Itamoto, Kakeru Ninomiya, Michiaki Yamasaki, Kiyofumi Nitta, Oki Sekizawa, Hiroyuki Setoyama, Maiko Nishibori: “*Multi-scale in-situ observation of metallographic structure during heat treatment by synchrotron X-ray techniques*”, Asia-Oceania International Conference on Synchrotron Radiation Instruments (AO-SRI) 2022 (2022.11.12)

(国内発表、全 25 件)

- 西堀麻衣子「放射光 X 線によるナノ材料の可視化」、ナノ学会第 20 回大会 (2022.05.21)
- 西堀麻衣子, 二宮翔, 宮野陽, 片山章太郎「放射光 X 線分光による無機・有機界面相互作用へのアプローチ」、第 41 回無機高分子研究討論会 (2022.11.17)
- 二宮翔「軟 X 線吸収分光による低炭素鋼の低温時効硬化挙動と炭素クラスター形成過程の追跡」、日本鉄鋼協会 第 183 回講演大会 (2022.03.15-17)

(無機材料研究部門)  
無機固体材料化学研究分野

(国際発表、全 6 件)

- 榎木 勝徳, 大谷博司: “*Thermodynamic Analysis on a Formation Mechanism of Metastable Carbides During Tempering of Fe-C Martensite*”, 2022 MRS Fall Meeting (2022.11.28)
- Takahiro Yamada: “*Synthesis and characterization of intermetallic compounds with anti-PbFCl type structure*”, International Workshop on Physics and Chemistry of Electronic Materials (2022.12.12-13)
- Takahiro Yamada, Daigorou Hirai, Toshiya Ikenobe, Hisanori Yamane, Zenji Hiroi: “*Single crystal growth and physical properties of a topological nodal-line semimetal candidate NaAlSi*”, APAC-Silicide 2022 (2022.07.30-08.01)

(国内発表、全 28 件)

- 榎木 勝徳, 大谷博司「第一原理クラスター展開を用いた合金中の SRO と MSAD の評価」、第 32 回日本 MRS 年次大会 (2022.12.05)
- 山田 高広, 平井 大悟郎, 小口 多美夫, 山根 久典, 広井 善二「NaAlGe 単結晶の合成と物性特性評価」、2022 年第 83 回応用物理学会秋季学術講演会 (2022.09.20-23)
- Takahiro Yamada「逆 PbFCl 型構造を有する金属間化合物の合成と特性評価」、第 23 回日本 MRS 年次大会 (2022.12.05-07)

## スピン量子物性研究分野

(国際発表、全 9 件)

- Kazuhiro Nawa: “*Magnetic excitations in the spin-1/2 anisotropic triangular lattice antiferromagnet Ca<sub>3</sub>ReO<sub>5</sub>Cl<sub>2</sub>*”, 4th international workshop on quantum matter - quantum many-body dynamics (2022.08.22-26)
- Taku J Sato: “*Long-range magnetic order in quasicrystalline magnets*”, Taiwanese Neutron Scattering Society Annual Meeting, Kinmen, Taiwan (2022.11.18)
- Taku J Sato: “*Magnetism research with continuous neutron sources; Magnetic skyrmion and quasicrystalline magnets*”, Neutron scattering on continuous sources –future developments– US-Japan Workshop (2022.09.19)

(国内発表、全 25 件)

- 佐藤卓「準結晶と近似結晶の磁性」、第 26 回準結晶研究会 (オンライン) (2022.02.21-23)
- 那波和宏, 柴田将弥, 佐藤卓「J1-J2 フラストレート正方格子磁性体 2VO<sub>5</sub>O<sub>4</sub>·D<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>·D<sub>2</sub>O の磁気相互作用制御」、日本物理学会 2022 年秋季大会 (2022.09.12-15)
- 那波和宏「4G GPTAS のトリセツ」、日本中性子科学会 2022 年次大会 (2022.10.26-28)

## ナノスケール磁気機能研究分野

(国際発表、全 6 件)

- Satoshi Okamoto: “*Ultra-low loss magnetic materials for innovative power electronics*”, International Power Electronics Conference, IPEC-Himeji 2022 (2022.05.16)
- Satoshi Okamoto: “*Approaches of Ultra-Low Iron Loss in Magnetic Materials and Devices for Power Electronics*”, ICFPM2022 (2022.10.20)

(国内発表、全 13 件)

- Satoshi Okamoto 「Ultra-low loss magnetic materials for innovative power electronics」、International Power Electronics Conference, IPEC-Himeji 2022 (2022.05.16)
- 岡本 聡 「次世代パワーエレクトロニクスに向けた 軟磁性材料および磁気デバイス開発」、日本金属学会 2022 年秋期講演 (2022.09.21)
- 岡本 聡 「次世代パワエレに向けた高磁束密度・低損失磁性材料 およびデバイス創成への挑戦」、INNOPEL シンポジウム 2022 (2022.12.14)

## ハイブリッドナノシステム研究分野

(国際発表、全 11 件)

- Kiyoshi Kanie, Kenji Funaki, Chisato Hanzawa, Atsushi Muramatsu: “Amino-substituted Ionic Liquids for Selective and Reversible Extraction/Back-Extraction of Platinum-Group Metal Ions”, Tohoku-Melbourne Joint Workshop in Materials Science (2022.11.24)
- Chen Shen, Masaki Matsubara, Atsushi Muramatsu, Kiyoshi Kanie: “Magnetorheological Elastomer Films Based on Polystyrene-Modified Magnetite Nanoplates with Controlled Anisotropic Alignment”, 第 73 回コロイドおよび界面化学討論会 (2022.09.20)
- Takehiro Yachi, Masaki Matsubara, Xiangbing Zeng, Goran Ungar, Atsushi Muramatsu, Kiyoshi Kanie: “Liquid-crystalline dendron-modified iron oxide nanoparticles with thermal-responsive array”, ACS FALL 2022 (2022.08.24)

(国内発表、全 18 件)

- 蟹江澄志 「サイズ・形態制御無機ナノ粒子の液相合成とハイブリッド材料への展開」、第 59 回粉体に関する討論会 (2022.12.22)
- 蟹江澄志 「ナノ粒子のサイズ・かたち・配列の制御に由来した 色彩とその応用」、芸術と粉体工学に関するワークショップ (2022.05.16)
- 蟹江澄志 「機能性ナノ粒子をコアとする 有機無機ハイブリッドデンドリマー」、第 71 回高分子討論会 (2022.09.05)

## ナノ機能物性化学研究分野

(国際発表、全 3 件)

- K. Yoshimatsu: “Modulation of superconductivity using Li-ion secondary battery technique”, International Congress on Pure and Applied Chemistry (ICPAC) Kota Kinabalu 2022 (2022.11.22-25)
- Hiroshi KUMIGASHIRA: “Development of Resonant-Tunneling Mott Transistor Using Synchrotron-Radiation Spectroscopy”, Summit of Materials Science 2022 and GIMRT User Meeting 2022, Sendai International Center (2022.03.02-03)
- K. Yoshimatsu: “Metal-insulator transitions in titanium-sesquioxide films”, Global Experts Meet on Condensed Matter Physics 2022 (2022.06.16-18)

(国内発表、全 12 件)

- 組頭広志 「放射光計測に立脚した共鳴トンネルモットトランジスタの開発」、日本表面真空学会 東北・北海道支部 関東支部合同セミナー「原子レベル積層技術が拓く物性探索の新展開」(2022.07.30)
- 志賀大亮, 楊以理, 長谷川直人, 神田龍彦, 徳永凌祐, 吉松公平, 湯川龍, 北村未歩, 堀場弘司, 組頭広志 「VO<sub>2</sub> 極薄膜における電子・結晶構造の膜厚依存性: 協調的モット-パイエルズ転移の抑制」、第 69 回応用物理学会春季学術講演会 (2022.03.23)
- 吉松公平, 長谷川直人, 組頭広志 「密度汎関数法による Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub> の金属絶縁体転移」、第 83 回応用物理学会秋季学術講演会 (2022.09.20-23)

## 無機固体材料合成研究分野

(国際発表、全 3 件)

- Naoki Matsuo, Takahiro Yamada, Masanori Enoki, Hisanori Yamane: “Synthesis, crystal structures, and thermoelectric properties of NaMgX (X = Sb and Bi)”, APAC-Silicide 2022 (2022.07.30-08.01)
- Takahiro Yamada, Daigorou Hirai, Toshiya Ikenobe, Hisanori Yamane, Zenji Hiroi: “Single crystal growth and physical properties of a topological nodal-line semimetal candidate NaAlSi”, APAC-Silicide 2022 (2022.07.30-08.01)
- Toshiya Ikenobe, Daigorou Hirai, Takahiro Yamada, Hisanori Yamane, Zenji Hiroi: “Possible Surface Superconductivity in the Nodal-Line Semimetallic Superconductor NaAlSi”, 29th International Conference on Low Temperature Physics (2022.08.18-24)

(国内発表、全 28 件)

- 山根久典, 鈴木祐子, 渡邊 展 「B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> と α-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> の混合粉末からの β-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 板状ウイスキーの作製」、日本セラミックス協会 2022 年年会 (2022.03.12)
- 志村玲子, 澤村恭輔, 山根久典 「Zn/AlO<sub>4</sub> 四面体フレームワークを持つ新規酸化物 Ba<sub>4</sub>Zn<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>9</sub> の結晶構造」、日本セラミックス協会 2022 年年会 (2022.03.10)
- 西田勇貴, 北浦守, 志村玲子, 山根久典 「Li-Ba-Al-O 系の新規化合物の合成と結晶構造、特性評価」、第 60 回セラミックス基礎科学討論会 (2022.01.08-09)



## 金属機能設計研究分野

(国際発表、全 5 件)

- Nobuhisa Fujita: “*Self-similarity of the doubled Ammann-Kramer-Neri tiling*”, The 10th International Conference on Aperiodic Crystals (Aperiodic 2022) (2022.06.20-24)
- S. Kameoka: “*Advanced metallic materials for catalysis*”, Tohoku University & National Taipei University of Technology 2022 Online Joint Symposium (2022.11.28)
- Nobuhisa Fujita: “*A comparative study of electronic eigenstates in rhombic decagonal tilings with different long-range characteristics: The emergence of pseudo-localized states in non-Penrose type systems*”, GIMRT, REIMEI and IRN Aperiodic joint international workshop: Superconductivity, Structural Complexity and Topology of  $UTe_2$  and Aperiodic Crystals (2022.11.30-12.02)

(国内発表、全 20 件)

- 亀岡聡「金属間化合物の活性化処理による新奇触媒材料の創製」、S8 シンポジウム 金属表面の材料化学—めっき・耐食性・耐酸化性・触媒研究の新展開—日本金属学会 2022 年春期講演大会 (2022.03.15-17)
- 藤田伸尚「大域の性質の異なる菱形デカゴナル準格子上の電子状態」、日本物理学会 2022 年秋季大会 (2022.09.12-15)
- 藤田伸尚, 畠山勇輔, 高倉洋礼「Al-Pd-遷移金属系正二十面体相に対する高次近似結晶の構造」、日本金属学会 2022 年秋季大会 (2022.09.20-23)

## 環境無機材料化学研究分野

(国際発表、全 11 件)

- S. Yin, T. Hasegawa: “*Process Design for the Synthesis of Homogeneous Inorganic Nanomaterials*”, The 9th Advanced Functional Materials & Devices (AFMD) & The 4th Symposium for Collaborative Research on Energy Science and Technology (SCREST) (2022.03.04-05)
- Shu YIN: “*Synthesis of inorganic nanomaterials for the infrared light response applications*”, The Functional Materials Society Meeting 2022 (Suzhou China) (2022.07.29-31)
- T. Hasegawa, S. Yin: “*A New Structural Form in Layered Perovskites: Charge-Neutral Perovskite Layer Composed from Tetravalent Cerium*”, International Congress on Pure & Applied Chemistry Kota Kinahalu Sahah Malaysia (ICPAC KK 2022, Malaysia) (2022.11.22-27)

(国内発表、全 19 件)

- 殷澍「赤外線応答機能を有する無機ナノ材料の創製と機能性評価」、セラミックス協会マテリアル・ファブリケーション・デザイン研究会 (2022.03.14)
- 長谷川拓哉「結晶構造・電子構造に着目したセリウム含有酸化物の光機能創出」、日本セラミックス協会第 35 回秋季シンポジウム (2022.09.14-16)
- 殷澍「赤外線応答に基づく無機ナノ材料のプロセッシングと機能開拓」、2022 セラミックス協会秋季シンポジウム (徳島) (2022.09.13-16)

## 物質変換無機材料研究分野

(国際発表、全 5 件)

- Hideki Kato: “*Effects of cocatalysts deposited on perovskite-oxynitrides utilized in Z-scheme water splitting as  $O_2$ -evolving photocatalysts*”, International Congress on Pure and Applied Chemistry 2022 (2022.11.20-27)
- Shunya Yoshino, Wasusate Soontornchaiyakul, Yuichi Yamaguchi, Akihiko Kudo: “*Photocatalytic  $CO_2$  reduction to form  $CH_4$  using water as an electron donor over a cocatalyst-loaded  $NaTaO_3:Sr$  photocatalyst*”, The 9th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology (TOCAT9) (2022.07.24-29)
- Hideki Kato, Tsuyoshi Sekine, Naoto Morishita, Ryosuke Aoyagi, Kosaku Kato, Akira Yamakata, Hiromu Kumagai: “*Influences of cocatalysts deposited on perovskite-type oxynitrides as  $O_2$ -evolving photocatalysts in Z-scheme water splitting*”, The 9th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology (TOCAT9) (2022.07.24-29)

(国内発表、全 9 件)

- 宮崎健志郎, 奥野和哉, 加藤康作, 山方啓, 熊谷啓, 加藤英樹「 $BiVO_4$  へのボールミル処理効果」、日本化学会第 102 春季年会 (2022.03.23-26)
- Hung Pei Hsuan, 吉野 隼矢, 熊谷 啓, 加藤 英樹「錯体重合法で合成した  $SrTiO_3:Ir$  の光触媒活性」、第 130 回触媒討論会 (2022.09.20-26)
- 森下 直人, 吉野 隼矢, 加藤 英樹「元素置換した  $SrTaO_2N$  の光触媒特性」、第 130 回触媒討論会 (2022.09.20-26)

(プロセスシステム工学研究部門)  
超臨界ナノ工学研究分野

(国際発表、全 15 件)

- Adschiri, T.: “Waste and biomass valorization by supercritical hydrothermal processing”, The 9th International Conference on Engineering for Waste and Biomass Valorisation (WasteEng2022) (2022.06.29)
- Adschiri, T.: “Chemical reactions in supercritical water and their applications”, The 13th International Symposium on Supercritical Fluids (ISSF2022) (2022.05.17)
- Adschiri, T.: “Process science project - Designing basis of nano particles technologies”, International Symposium for Advancement of Supercritical Fluids 2022 (2022.09.22-25)

(国内発表、全 2 件)

- 阿尻雅文「札幌宣言—人々の「健康、安心、幸福」のための化学工学— Efficiency から Sufficiency へ」、化学工学会第 87 年会 (2022.03.16-08)

光物質科学研究分野

(国際発表、全 2 件)

- T. Tahara, Y. Kozawa, A. Ishii, R. Okamoto: “Holography for full-color 3D imaging of natural light with single-path interferometer”, International Symposium on Imaging, Sensing, and Optical Memory 2022 (ISOM'22) (2022.07.31-08.05)
- Yuichi Kozawa, Yuuki Uesugi, and Shunichi Sato: “Rapid Three-Dimensional Imaging Using Visible Bessel Beams Eliminating Side Lobe Effects”, The 15th Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics(CLEO-PR2022) (2022.08.01)

(国内発表、全 19 件)

- Yuichi Kozawa, Tomoya Nakamura, Yuuki Uesugi, Shunichi Sato 「Wavefront Engineered Light-Needle Microscopy Utilizing Multiplexed Computer-Generated Holograms」、第 83 回応用物理学会秋季学術講演会 (2022.09.20-23)
- 門口尚広, 三輪泰斗, 上杉祐貴, 小澤祐市, 佐藤俊一「フェムト秒レーザーによる自立した単層グラフェン膜の加工」、第 69 回応用物理学会春季学術講演会 (2022.03.23)
- 佐藤俊一, 小澤祐市「構造化した光による超解像イメージング」、レーザー学会学術講演会第 41 回年次大会 (2022.01.12)

固体イオニクス・デバイス研究分野

(国際発表、全 12 件)

- Koji Amezawa, Katsuya Nishidate, Zhuo Diao, Teruki Yoshioka, Yuta Kimura, Takashi Nakamura, Keiji Yashiro, Tatsuya Kawada: “Mechanism of Cathodic Reaction in Proton-Conducting Ceramic Fuel Cells Investigated By Patterned Model Electrodes”, 242nd ECS Meeting (2022.10.09-13)
- Yuta Kimura, Su Huang, Takashi Nakamura, Nozomu Ishiguro, Oki Sekizawa, Kiyofumi Nitta, Tomoya Uruga, Tomonari Takeuchi, Toyoki Okumura, Mizuki Tada, Yoshiharu Uchimoto, Koji Amezawa: “3D Operando High-Resolution Imaging of Inhomogeneous Electrochemical Reaction in Composite Solid-State Battery Electrodes”, 23rd International Conference on Solid State Ionics (SSI 23) (2022.07.17-22)
- Takashi Nakamura, Xueyan Hou, Yuta Kimura, Yusuke Tamenori, Kiyofumi Nitta, Hirona Yamagishi, Koji Amezawa: “Investigation of Lattice Oxygen Stability of Lithium-Ion Battery Cathode  $\text{Li}(\text{NiMn})\text{O}_2$ ”, 23rd International Conference on Solid State Ionics (SSI 23) (2022.07.17-22)

(国内発表、全 33 件)

- 中村崇司, Xue-Yan Hou, 勝又琢也, 木村勇太, 雨澤浩史「エネルギー材料におけるアニオン欠陥の機能解明とその応用」、(公社)日本セラミックス協会 第 35 回秋季シンポジウム (2022.09.14-16)
- 雨澤浩史「全固体電池の電極/電解質界面をどう考えるか? ~固体イオニクスの観点からの提言~」、第 48 回固体イオニクス討論会 (2022.12.06-08)
- 木村勇太, 黄溯, 中村崇司, 石黒志, 有吉欽吾, 奥村豊旗, 竹内友成, 関澤央輝, 新田清文, 宇留賀朋哉, 唯美津木, 内本喜晴, 雨澤浩史「全固体電池の高空間分解オペランド 3 次元反応分布計測に基づく活物質粒子パラメータのデータ駆動最適化」、第 48 回固体イオニクス討論会 (2022.12.06-08)

環境適合素材プロセス研究分野

(国際発表、全 4 件)

- Jeong-In Kim, Shusei Kubota, Andrey Stephan Siahhaan, Shungo Natsui, Hiroshi Nogami: “3-Dimensional Analysis of Single Iron Ore Particle Having Irregular Shape”, The 1st International Symposium on Iron Ore Agglomerates (SynOre2022) (2022.11.20-26)
- Hiroshi Nogami, Shungo Natsui, Shinsuke Taya, Seiya Ueda: “Dynamic analysis of raceway formation”, 8th European Coke and Ironmaking Congress and the International Conference on Science and Technology of Ironmaking 2022 (2022.08.29-09.02)
- Jun-ichi Takahashi, Shungo Natsui, Akihisa Itoh, Hiroshi Nogami: “Examination of reaction mechanism by in-situ observation of combustion behavior of copper concentrate granules”, Copper 2022 (2022.11.13-17)

(国内発表、全 24 件)

- 夏井俊悟, 桒上洋「高速度イメージングと Deep Learning 支援による銅マット-スラグ形成場マルチフィジックスの開拓」、資源・素材学会 2022 年度春季大会 (2022.03.07-09)
- 和田大輝, 夏井俊悟, 桒上洋「冷間模型実験および数値解析による 高炉レースウェイの不安定挙動の動力学的解析」、日本学術振興会製鉄第 54 委員会第 201 回研究会 (2022.12.01-02)
- 夏井俊悟, 佐藤丘郭, 伊藤昭久, 岩間崇之, 植田滋, 桒上洋「銅を含む炭素飽和溶融鉄-溶融酸化物界面におけるアノード反応挙動」、日本鉄鋼協会第 183 回春季講演大会 (2022.03.15-17)

## 材料分離プロセス研究分野

(国際発表、全 5 件)

- Sohei Sukenaga, Issei Takahashi, Kozo Shinoda, Daniel R. Neuville, Sakiko Kawanishi, Hiroyuki Shibata: “Viscosity of silicate melts containing transition metal cations”, The 13th Asian Thermophysical Properties Conference ATPC2022 (2022.09.26.30)
- Sakiko Kawanishi, Shingo Terashima, Sohei Sukenaga, Hiroyuki Shibata: “Time-resolved fluorescence imaging of microsegregation and inclusion precipitation during solidification”, 8th International Congress on the Science and Technology of Steel-making (2022.08.03)
- Seung-Hwan Shin, Sakiko Kawanishi, Sohei Sukenaga, Junichi Takahashi, Hiroyuki Shibata: “In-situ observation of  $SO_2$  gas formation at the magnetite/matte interface at 1200 °C”, TMS2022 (2022.02.27-03.14)

(国内発表、全 25 件)

- 川西咲子「顕微鏡を用いた高温反応界面の可視化技術」、R026 先端計測技術の将来設計委員会 第 9 回研究会 (2022.07.05)
- 助永壮平「ケイ酸塩融体の物性と構造の相関 (粘度、熱伝導度)」、ニューガラスフォーラム 2022 年度第 1 回ガラス科学技術研究会「高温融体と関連物質の構造・物性と解析技術の展開」(2022.07.13)
- 助永壮平, 小川将幸, 築場豊, 安東真理子, 柴田浩幸「ケイ酸塩融体の粘度に及ぼすフッ素および窒素添加の影響」、日本鉄鋼協会 第 183 回春季講演大会 (2022.03.15-17)

## ハイブリッドナノ粒子プロセス研究分野

(国際発表、全 10 件)

- Atsushi Muramatsu: “Outline of Next Generation Synchrotron Radiation Facility, NanoTerasu, and Strategy of Tohoku University”, 4th International Symposium on Porous Materials 2022 (2022.10.14)
- Ryota Osuga: “Synthesis of high-silica CHA-type aluminosilicates by the seed-assisted aging treatment without fluoride media”, 4th International Symposium on Porous Materials 2022 (2022.10.12)
- Ryota Osuga, Atsushi Neya, Motohiro Yoshida, Mizuho Yabushita, Shuhei Yasuda, Sachiko Maki, Kiyoshi Kanie, Toshiyuki Yokoi, Atsushi Muramatsu: “Creation of concerted active sites for improvement of catalytic performance of Ce-MFI-supported Pd catalysts in low-temperature methane oxidation”, ACS FALL 2022 (2022.08.24)

(国内発表、全 14 件)

- 村松 淳司, 藪下 瑞帆, 大須賀 遼太, 真木 祥千子, 西堀麻衣子「ゼオライト骨格構造評価への放射光計測のアプローチ」、第 128 回触媒討論会 (2022.09.15)
- 大須賀 遼太, 藪下 瑞帆, 松本 剛, 蟹江 澄志, 横井 俊之, 村松 淳司「メカノケミカル法による Ce 骨格導入ゼオライトの合成およびメタン転換活性評価」、第 37 回ゼオライト研究発表会 (2022.12.03)
- 今西 佳保, 肖 婷, 大須賀 遼太, 藪下 瑞帆, 真木 祥千子, 蟹江 澄志, 横井 俊之, 村松 淳司「[Ce]-MFI 担持 Pd 触媒を使用したメタンカップリング反応」、石油学会 第 63 回年会 (2022.05.25)

## (計測研究部門)

### 量子ビーム計測研究分野

(国際発表、全 2 件)

- Atsushi Momose, Zhuoxuan Zhao, Ryosuke Ueda, Minjian Cai, Hidekazu Takano, Yanlin Wu, Katsumasa Ikematsu, Hiroki Kawakami, Pouria Zangi, Pascal Meyer, Martin Börner, Otto Markus, Joachim Schulz: “Development of Grating-Based Super-Resolution X-Ray Phase Imaging”, 15th International Conference on X-ray Microscopy (XRM2022) (2022.06.19-24)
- Atsushi Momose, Ryosuke Ueda, Mingjian Cai, Zhuoxuan Zhao, Sam Kalirai, Jeff Irwin, Koichi Matsuo, Hiroki Kawakami, Pouria Zangi, Pascal Meyer, Martin Börner, Otto Markus, Joachim Schulz: “Recent progress in grating-based microscopic X-ray phase tomography”, SPIE Optical Engineering + Applications 2022 (2022.08.20-24)

(国内発表、全 10 件)

- 上田亮介, 木村賢二, 高野秀和, 星野真人, 百生敦「ピンクビーム X 線位相イメージングによるレーザー加工の動的観察」、第 35 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2022.01.07-09)
- 上田 亮介, 角田 幸翼, 百生 敦「X 線 Talbot 干渉計による高分子材料の引張試験観察」、第 69 回応用物理学会春季学術講演会 (2022.03.24)
- 上田 亮介, 關 義親, 星野 真人, 百生 敦「Talbot 干渉計を用いた 4DCT によるポリマー材料に対するレーザー接合の観察」、第 83 回応用物理学会秋季学術講演会 (2022.09.20-23)

## 構造材料物性研究分野

(国際発表、全 2 件)

- S. Kamiyama, H. Yamamoto, T. Nakamura, H. Kimura, I. Yamada, Y. Okazaki, M. Fukuda, M. Azuma, T. Nishikubo: “V-V Bonding and its Effects on Magnetism in Ilmenite-type  $\text{CoVO}_3$ ”, 6th International Symposium on Frontiers in Materials Science (FMS 2022) (2022.11.21-23)
- Hajime Yamamoto: “Crystal structures and electronic properties of vanadium oxides”, 6th International Symposium on Frontiers in Materials Science (FMS 2022) (2022.11.21-23)

(国内発表、全 5 件)

- 山本 孟, 上山 幸子, 山田 幾也, 東 正樹, 西久保 匠, 木村 宏之「イルメナイト型酸化物  $\text{MgVO}_3$  における構造相転移と負熱膨張」、日本セラミックス協会 第 35 回秋季シンポジウム (2022.09.14-16)
- 山本孟「超高压合成法を駆使した革新的な電子機能物質の創成」、第 63 回高压討論会 (2022.12.13-15)
- 上山 幸子, 山本 孟, 福田 真幸, 岡崎湧一, 中村 崇司, 西久保 匠, 東 正樹, 山田 幾也, 木村 宏之「 $\text{CoVO}_3$  における V-V 二量体化と磁気基底状態」、日本セラミックス協会 第 35 回秋季シンポジウム (2022.09.14-16)

## 高分子物理化学研究分野

(国際発表、全 11 件)

- Tomohiro Miyata, Yohei Sato, Kaname Yoshida, Hsin-Hui Huang, Teruyasu Mizoguchi, Katsumi Hagita, Masashi Mizukami, Hiroshi Jinnai: “Compositional Changes at Epoxy-resin/inorganic Interfaces Revealed by 1-nm Resolution Electron Spectroscopy”, 2022 MRS Fall Meeting (2022.11.27-12.02)
- Hiroshi Jinnai: “Nano-diffraction Imaging of Polymer Crystals”, 33rd International Symposium of Polymer Analysis and Characterization (ISPAC) 2022 (2022.06.05-08)
- Hiroshi Jinnai: “Nanoscale stress distribution and crack propagation in rubber-based nano-composites under stretching”, The 11th International Conference on Materials Science and Technology (2022.08.29-31)

(国内発表、全 33 件)

- 陣内浩司「新世代電子顕微鏡によるソフトマテリアルの静的・動的ナノスケール計測」、JAIMA 「未踏分析技術イノベーションウェビナー」 (2022.12.06)
- 陣内浩司「高分子系における液-液相分離構造の 3 次元形態観察とトポロジー解析」、第 127 回 日本解剖学会総会・全国学術集会 (2022.03.27-29)
- 陣内浩司「原子分解能観察によるソフト/ハード界面の接着・破壊機構の解明」、CREST/さきがけ「ナノ力学」領域 第 1 回公開シンポジウム (2022.10.22-23)

## 量子フロンティア計測研究分野

(国際発表、全 5 件)

- Wataru Yashiro: “Synchrotron X-ray Tomography with Millisecond-Order Temporal Resolution”, 14th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation (SRI2021) (2022.03.28-04.01)
- Wataru Yashiro: “Recent Advances and Future Potential of Synchrotron X-ray Tomography with Millisecond-Order Temporal Resolution”, The 6th QST International Symposium (2022.11.14-15)
- Wataru Yashiro: “Millisecond-order 4D X-ray Tomography”, The Asia Oceania International Conference on Synchrotron Radiation Instruments 2022 (AO-SRI 2022) (2022.11.09-12)

(国内発表、全 30 件)

- 矢代航「次世代放射光施設の計測データ解析」、UDAC キックオフシンポジウム (2022.12.26-27)
- 矢代航「ミリ秒オーダー時間分解能 X 線トモグラフィの開拓的研究」、Optics & Photonics Japan 2022 (OPJ2022) (2022.11.13-16)
- 矢代航「高輝度放射光による 4D 時空間フロンティアの開拓」、第 350 回日本材料学会疲労部門委員会研究討論会 (2022.08.08)

## 量子光エレクトロニクス研究分野

(国際発表、全 18 件)

- S. F. Chichibu, K. Shima, K. Kojima, S. Takashima, R. Tanaka, K. Ueno, M. Edo, H. Iguchi, T. Narita, K. Kataoka, S. Ishibashi, A. Uedono: “Impacts of vacancy clusters on the recombination dynamics in Mg-implanted GaN on GaN structures for power devices”, Compound Semiconductor Week (CSW) 2022 (2022.06.01-03)
- S. F. Chichibu, K. Shima, N. Umehara, K. Takiguchi, Y. Ishitani, K. Hara: “Emission dynamics of indirect excitons in hexagonal BN epilayers containing polytypic segments grown by chemical vapor deposition using carbon-free precursors”, 11th International Workshop on Nitride Semiconductors (IWN2022) (2022.10.09-14)
- K. Shima, K. Furusawa, S. F. Chichibu: “Room-temperature cavity-polaritons in planar ZnO microcavities fabricated by a top-down process”, The 3rd International Workshop on Materials Science and Advanced Electronics Created by Singularity (IWSingularity 2022) & The 2nd International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation (ISWGPDs 2022) (2022.01.11-13)

## (国内発表、全 11 件)

- 栗本浩平, 包全喜, 三川豊, 嶋紘平, 石黒徹, 秩父重英「低圧酸性アモナーマル法による GaN 単結晶製造技術の開発」、日本学術振興会 産業イノベーションのための結晶成長 第 R032 委員会キックオフ研究会 (オンライン開催) (2022.03.04)
- 嶋紘平, 櫻井秀樹, 石橋章司, 上殿明良, Michal Bockowski, 須田淳, 加地徹, 秩父重英「超高压アニールによる Mg イオン注入 p 型 GaN のルミネッセンス評価」、第 83 回応用物理学会秋季学術講演会 (2022.09.20)
- 秩父重英, 嶋紘平, 小島一信, 高島信也, 上野勝典, 江戸雅晴, 井口紘子, 成田哲生, 片岡恵太, 石橋章司, 上殿明良「エピタキシャル成長及びイオン注入により作製された GaN 基板上 Mg 添加 p 型 GaN の室温フォトルミネッセンス寿命 (第 43 回応用物理学会優秀論文賞 JJAP 論文賞受賞記念講演)」、2022 年春季応用物理学会 (2022.03.21-26)

## 放射光可視化情報計測研究分野

## (国際発表、全 19 件)

- Yukio Takahashio: “Visualization of nanoscale structures and chemical states by coherent X-ray diffraction imaging”, The 6th QST International Symposium “Innovation in Science and Technology from NanoTerasu” (2022.11.14-15)
- Nozomu Ishiguro: “Nano-scale Chemical State Visualization of Functional Materials Using Hard X-ray Spectroscopic Ptychography”, Coherence 2022: International Conference on Phase Retrieval and Coherent Scattering (2022.05.05-09)
- Yukio Takahashi: “Development and Application of Spectroscopic Ptychography in Hard and Tender Energy Ranges at SPRING-8”, XRM 2022 (2022.06.22)

## (国内発表、全 22 件)

- 高橋幸生「X 線タイコグラフィによる蓄電固体材料のナノスケール微細構造・化学状態イメージング」、2022 電気化学会秋季大会 (2022.09.08)
- 石黒志「X 線スペクトロタイコグラフィ法による機能性材料粒子のナノ化学状態イメージング」、2022 年顕微鏡学会第 78 回学術講演会 (2022.05.11-13)
- 篠田弘造, 豊島展, 村尾玲子, 鈴木茂「蛍光収量 XAFS による鉄鉱石中リン賦存状態分析」、第 58 回 X 線分析討論会 (2022.11.10-11)

## 固体表面物性研究分野

## (国際発表、全 7 件)

- Shuichi Ogawa, Yasutaka Tsuda, Yuki Okigawa, Tomoaki Masuzawa, Akitaka Yoshigoe, Tadashi Abukawa, Takatoshi Yamada: “Potassium desorption from K-doped stacked graphene”, The 22nd International Vacuum Congress (2022.09.11-16)
- Ryunosuke Yusa, Hiroaki Aoyama, Tetsuya Shimizu, Shuichi Ogawa, Tadashi Abukawa: “In-situ PEEM study of h-BN growth on Ni foil using backside to surface diffusion”, The 22nd International Vacuum Congress (2022.09.11-16)
- Hiroaki Aoyama, Tadashi Abukawa: “Structures of the group 15 metal adsorbed Si(110)3 × 2 surfaces determined by W-RHEED”, The 22nd International Vacuum Congress (2022.09.11-16)

## (国内発表、全 12 件)

- 小川修一「リアルタイム光電子分光法による表面反応キネティクスの複合解析」、令和 3 年度日本表面真空学会東北・北海道支部学術講演会 (2022.03.03-04)
- 小川修一「光電子分光法によるナノ炭素材料の電子状態/化学状態評価」、表面分析研究会第 58 回研究会 (2022.06.23-24)
- 虻川匡司「放射光光電子分光と光電子顕微鏡による表面分析」、令和 3 年度日本素材物性学会 第 1 回研究会 (2022.03.02)

## 電子線干渉計測研究分野

## (国際発表、全 0 件)

## (国内発表、全 6 件)

- 赤瀬善太郎「軟磁性材料に適した動的磁場下 TEM 観察技術」、日本金属学会 2022 年秋季第 171 回公演大会 (2022.09.20-23)
- 赤瀬善太郎, 佐藤隆文, 真柄英之, 安原聡, 三角彰太, 村井健一「磁区構造変化その場観察のための CMOS カメラの導入」、日本顕微鏡学会第 78 回学術講演会 (2022.05.11-13)
- 野田千晶, 小林悟, 小野和輝, 松尾咲琴, 赤瀬善太郎, 葛西裕人「電子線ホログラフィーによるコンケーブ型 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> ナノ粒子の磁化分布の直接観察」、日本磁気学会第 46 回学術講演会 (2022.09.06-08)

## 電子回折・分光計測研究分野

## (国際発表、全 6 件)

- Md S. Islam, D. Morikawa, S. Yamada, K. Tsuda, M. Terauchi: “Charge orbital ordering in A-site ordered NdBaMn<sub>2</sub>O<sub>6</sub> perovskite”, APS March meeting (2022.03.17)
- Daisuke Morikawa, Kenji Tsuda: “Local structure analysis of interface and polar nano domains using convergent-beam electron diffraction”, Third Japan-Canada Microscopy Societies Joint Symposium 2022 (2022.11.05)

- Yohei K. Sato, Daisuke Egusa, Hidetoshi Miyazaki, Koji Kimura, Mitsuhiro Itakura, Masami Terauchi, Eiji Abe: “*Electronic structure of Mg-Zn-Y cluster in dilute Mg alloys studied by STEM-EELS*”, The 5th International Symposium on Long-Period Stacking/Order Structure and Miile-feuille Structure (LPSO/MFS2022) (2022.12.11-14)

(国内発表、全 30 件)

- 寺内正己, 佐藤庸平, 横山隆臣, 村野孝訓 「3d 遷移金属 L 発光スペクトルの吸収効果を用いた電子状態解析」、日本物理学会 (2022.09.14)
- 森川大輔 「収束電子回折法を用いた局所構造解析手法の開発と界面やその場観察への応用」、日本顕微鏡学会 (2022.05.12)
- 佐藤庸平, 寺内正己 「AR-EELS を用いた LaB<sub>6</sub> キャリア電子の電子交換相関効果の研究」、日本顕微鏡学会第 78 回学術講演会 (2022.05.11)

## 走査プローブ計測技術研究分野

(国際発表、全 6 件)

- Tadahiro Komeda: “*Atomic Scale Analysis of Spin State of Single-Molecule Magnets (TbPc<sub>2</sub>) Adsorbed on Superconductor Substrates*”, The 4th Asia-Pacific Symposium on Solid Surfaces (APSSS-4) (2022.09.18)
- Tadahiro Komeda: “*Magnetic Molecules with Scanning Tunneling Microscopy*”, THE 22ND INTERNATIONAL VACUUM CONGRESS IVC-22 (2022.09.11)
- Tadahiro Komeda: “*Magnetic Molecules with Scanning Tunneling Microscopy*”, 国際ポリフィリン・フタロシアニン会議 (2022.07.10)

(国内発表、全 14 件)

- 道祖尾恭之, 伊藤拓馬, Zhipeng Wang, 米田忠弘, 川上竜平, 佐藤宇史 「二層グラフェン上に成長した VTe<sub>2</sub> 薄膜の走査トンネル顕微鏡による構造観察」、第 83 回応用物理学会秋季学術講演会 (2022.09.20-23)
- 高岡毅, 和泉廣樹, NasirUddin, 道祖尾恭之, 安藤 淳, 米田忠弘 「MoS<sub>2</sub>-FET 電気特性に対する液相アルコールの効果」、2022 年第 83 回応用物理学会秋季学術講演会 (2022.09.20-23)
- 高岡 毅, 高橋 巧成, 和泉 廣樹, Uddin Nasir, 道祖尾 恭之, 安藤 淳, 米田 忠弘 「アルコール流体存在下における MoS<sub>2</sub>-FET の電気特性」、2022 年第 69 回応用物理学会春季学術講演会 (2022.03.22-26)

## 放射光ナノ構造可視化研究分野

(国際発表、全 8 件)

- Masaki Takata: “*SLIT-J project - a unique collaboration between industry and public funding and utilization.*”, The 14th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation (SRI 2021) (2022.03.28-04.01)

(国内発表、全 11 件)

- 高田 昌樹 「精密工学との協創が拓くイノベーションインフラとしての次世代放射光」、精密工学会東北支部 産官学出前塾 ～次世代放射光技術と精密工学～ (2022.04.22)
- 高田 昌樹 「次世代放射光施設 (NanoTerasu) の精密工学との共創 - ナノの可視化とコアリションが支援する DX・GX 時代のモノづくり -」、2022 年度 (公社) 精密工学会秋季大会関連事業「新技術講演会ー産学・産産連携への集いー」 (2022.09.08)
- 高田 昌樹 「DX・GX 時代の NanoTerasu (ナノテラス) 活用」、2022 年電気化学会 東北支部・東海支部合同シンポジウム (2022.11.20-21)

## (金属資源プロセス研究センター)

### 高温材料物理化学研究分野

(国際発表、全 10 件)

- Manabu Watanabe, Masayoshi Adachi, Hiroyuki Fukuyama: “*Thermophysical property measurements of Ti melt using EML with a static magnetic field*”, The 13th Asian Thermophysical Properties Conference(ATPC2022) (2022.09.26-30)
- Hiroyuki Fukuyama: “*High-Temperature Processes and Measurements using PROSPECT*”, International Research Conference on Structure and Thermodynamics of Oxides/carbides/nitrides/borides at High Temperature(STOHT 2022) (2022.10.07-19)
- Masayoshi Adachi, Masahito Watanabe, Makoto Ohtsuka, Jun-ichi Takahashi, Hiroyuki Fukuyama: “*Surface tension measurement of copper matte melts using an aerodynamic levitation technique*”, The 13th Asian Thermophysical Properties Conference(ATPC2022) (2022.09.26-30)

(国内発表、全 21 件)

- 安達正芳, 川又透, 熊谷毅, 福田承生, 鈴木茂, 福山博之 「静磁場印加電磁浮遊法を用いた Fe-10at.%Ga および Fe-20 at.%Ga 融液の熱物性測定」、第 51 回結晶成長国内会議 (JCCG-51) (2022.10.31-11.02)
- 福山博之, 東 英生, 大塚 誠, 安達正芳, 山野秀将 「ナトリウム冷却高速炉の炉心損傷事故時の制御棒材の共晶溶解挙動に関する研究 (31) 電磁浮遊法によるその場観察と急冷法を組み合わせた 9-11mass%B<sub>4</sub>C 含有 SUS316L の凝固過程の解明」、日本原子力学会 2022 年秋の大会 (2022.09.07-09)
- 大塚 誠, 朴 珉秀, 福山博之 「固体 BN を利用した Ni-Al 溶融合金からの AlN 合成における高温反応挙動」、日本金属学会 2022 年秋期第 171 回講演大会 (2022.09.20-28)

## 基盤素材プロセッシング研究分野

(国際発表、全 6 件)

- IWAMA Takayuki, DU Chuan-ming, GAO Xu, KIM Sun-joong, KITAMURA Shin-ya, UEDA Shigeru: “Phosphorus Recovery from Steelmaking Slag by Selective Leaching and Precipitation”, PERM5 (2022.06.22)
- Shigeru Ueda, Takayuki Iwama, Huafang Yu, Ryo Inoue: “Fundamentals Study of Slag Property Control for CO<sub>2</sub> Emission Reduction in Iron and Steelmaking”, 4th International Conference on Science and Technology of Ironmaking and Steelmaking (2022.12.13-16)
- Shigeru Ueda, Takayuki Iwama, Huafang Yu and Ryo Inoue: “Control of fluid properties for blast furnace operations required to be carbon neutral”, Platinum Jubilee Conference on Perspectives in Materials Research (2022.12.21-23)

(国内発表、全 5 件)

- 星加拓海, 植田滋, 岩間崇之, 禹華芳, 井上亮「高炉内鉱石軟化溶融における多種鉱石間の相互作用」、鉄鋼協会秋季講演大会 (2022.09.21-23)
- 岩間崇之, 井上亮, 植田滋, 中瀬憲治「リン濃縮スラグからのリンの溶出挙動」、一般社団法人日本鉄鋼協会 第 183 回春季講演大会 (2022.03.15-17)
- 植田滋「低炭素社会に向けた鉄づくり」、ものづくり技術研究センター特別講演会 (2022.11.11)

## 機能性粉体プロセス研究分野

(国際発表、全 8 件)

- Takuya Suzuki, Kizuku Kushimoto, Shingo Ishihara, Junya Kano: “Prediction of the milling speed under highly viscous condition with DEM simulation”, The 7th International Conference on the Characterization and Control of Interfaces for High Quality Advanced Materials and the 57th Summer Symposium on Powder Technology (ICCCI2022) (2022.11.15-18)
- Shingo Ishihara, George Franks, Junya Kano: “Effect of packing structure on the relationship between saturation and elastic modulus by persistent homology”, The 7th International Conference on the Characterization and Control of Interfaces for High Quality Advanced Materials and the 57th Summer Symposium on Powder Technology (ICCCI2022) (2022.11.15-18)
- Daiki Hiruta, Kizuku Kushimoto, Shingo Ishihara, Junya Kano: “Shear thickening mechanism analysis of concentrated slurry by Coupled DEM and CFD simulation”, The 7th International Conference on the Characterization and Control of Interfaces for High Quality Advanced Materials and the 57th Summer Symposium on Powder Technology (ICCCI2022) (2022.11.15-18)

(国内発表、全 17 件)

- 久志本築, 加納純也「湿式ボールミリングにおける砕料粒子再凝集メカニズム」、第 59 回粉体に関する討論会 (2022.12.21-23)
- 和田知也, 大崎和友, 塩見浩之, 石原真吾, 加納純也「乾式粉碎によるセルロース非晶質化度予測技術の開発と非晶質化プロセスの工業化」、化学工学会第 87 年会 (2022.03.16-18)
- 石原真吾, 久志本築, 加納純也, 浅野聡「電気力分離による銅製錬副産物からの有価金属分離手法の開発」、資源・素材 2022 (福岡) (2022.09.06-08)

## エネルギー資源プロセス研究分野

(国際発表、全 1 件)

- Daisuke Akiyama, Kirishima Akira: “IMMOBILIZATION OF RADIOACTIVE WASTE BY AN ALUMINUM SILICATE MATRIX FORMED FROM FLY ASH OR BENTONITE”, The 2022 Research Center for Radiation Disaster Medical Science 6th International Symposium Confirmation (2022.02.07)

(国内発表、全 9 件)

- 中角 弘樹, 秋山 大輔, 桐島 陽「ウラン-ジルコニウム酸化物の化学的安定性評価のための逐次抽出法の開発」、日本原子力学会 2022 年春の年会 (2022.03.16-18)
- 桐島 陽, 秋山 大輔, 佐藤 修彰, 佐々木 隆之, 渡邊 雅之, 熊谷 友多, 日下 良二「合金相を含む燃料デブリの安定性評価のための基盤研究 (14) 模擬デブリからの MA 核種の溶出挙動評価および全体まとめ」、日本原子力学会 2022 年春の年会 (2022.03.16-18)
- 秋山 大輔, 中角 弘樹, 岡本 芳浩, 野村 光生, 池田 素之, 桐島 陽「異なる結晶相の (U,Zr)O<sub>2</sub> 固溶体の合成と相分析」、日本原子力学会 2022 年秋の大会 (2022.09.07-09)

## エネルギーデバイス化学研究分野

(国際発表、全 9 件)

- Itaru HONMA: “Research activities overview of Honma Laboratory at Tohoku University”, Tohoku University–University of Melbourne Joint Collaboration Workshop (2022.06.29)
- Hiroaki Kobayashi: “Solid-State Oxygen Redox in Antifluorite-type Cathode Materials”, The 83rd GREEN Seminar (2022.12.26)
- Kazuyuki Iwase, Itaru Honma: “Supercritical Hydrothermal Synthesis of High Entropy Spinel Oxide Nanoparticles as Oxygen Evolution Electrocatalysts”, 2022 MRS Fall Meeting and Exhibit (2022.11.27-12.02)

(国内発表、全 25 件)

- 小林弘明「先端的プロセッシングに基づく次世代二次電池材料の開発」、エネルギー材料研究会セミナー (2022.04.22)
- 本間格「ナノ界面制御によるレアメタルフリー高性能電極の開発」、第12回CSJ化学フェスタ2022 (2022.10.18)
- 岩瀬和至「Synthesis of novel nanomaterials and additive manufacturing of electrochemical energy storage devices」、令和4年度化学系学協会東北大会 (2022.09.17-18)

## 金属資源循環システム研究分野

(国際発表、全3件)

- Etsuro Shibata, Atsushi Iizuka: “Investigation of chemical stability of metallic aluminum piece trapped in molten fayalite slag”, Copper2022 (2022.11.13-17)
- Atsushi IIZUKA: “Mineral carbonation using alkaline waste to reduce CO<sub>2</sub> emission”, Tohoku University Environmental Studies Seminar 2022 (2022.12.13)
- Hsing-Jung Ho, Atsushi Iizuka, Etsuro Shibata, Tunde Ojumu: “Circular indirect carbonation of alkaline waste for CO<sub>2</sub> sequestration and utilization”, The 16th International Symposium on East Asian Resources Recycling (EARTH2022) (2022.10.31-11.01)

(国内発表、全6件)

- 曳地 海斗, 安達 謙, 飯塚 淳, 柴田 悦郎「スコロダイト合成プロセスにおける電気化学反応の解析」、資源・素材学会2022年度春季大会 (2022.03.07-09)
- 木村 太郎, 樋口 健, 当摩 悠希, 安達 謙, 飯塚 淳, 柴田 悦郎「ヒ素含有銅鉱物の分離を目的とした新規浮選剤探索のための鉱物表面への吸着予測式の構築」、資源・素材2022 (福岡) (2022.09.06-08)
- 篠崎 崇智, 工藤 克之, 安達 謙, 飯塚 淳, 柴田 悦郎「バスケット電解法を適用した低品位粗銅アノードを用いる電解精製プロセス」、資源・素材学会2022年度春季大会 (2022.03.07-09)

## 原子空間制御プロセス研究分野

(国際発表、全3件)

- I. Suzuki, S. Kawanishi, S. R. Bauers, A. Zakutayev, M. Kim, H. Yanagi, T. Omata: “N-type SnS and its application to homo-junction solar cells”, 33rd. the International Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-33) (2022.11.13-17)
- T. Omata, A. Sharma, I. Suzuki, T. Ishiyama, J. Nishii: “Proton conductivity and thermal stability of anhydrous silico- and germano-phosphoric acid glasses”, 23rd International Conference on Solid State Ionics (SSI-23) (2022.07.17-22)
- A. Sharma, I. Suzuki, T. Omata: “Experimental study of the effect of WO<sub>3</sub> on proton mobility and thermal stability of proton conducting phosphate glasses”, 17th Asian Conference on Solid State Ionics (ACSSI-2020) (2022.09.12-15)

(国内発表、全21件)

- 鈴木一誓「n型SnSの作製とホモ接合太陽電池への展開」、2022年度多元系化合物・太陽電池研究会 年末講演会 (2022.12.16)
- 鈴木一誓, 小俣孝久, 渡邊寛人, 浅野聡「副産物の有効利用に向けた機能材料開発: 太陽電池材料 Enargite 型 Cu<sub>3</sub>AsO<sub>4</sub> の電気化学的陽イオン置換による合成」、資源・素材2022 (2022.09.06)
- 小俣孝久, Aman Sharma, 鈴木一誓, 石山智大, 西井準治「新たな擬固体リン酸ポリマー-アルコール流体存在下における MoS<sub>2</sub>-FET の電気特性無水シリコリン酸・ゲルマノリン酸ガラスのプロトン伝導性と中温域での安定性」、第48回固体イオニクス討論会 (仙台) (2022.12.06-08)

## (マテリアル・計測ハイブリッド研究センター)

### 量子電子科学研究分野

(国際発表、全6件)

- Masahiko Takahashi: “Electron-atom Compton scattering: A new and unique tool for imaging intramolecular atomic motion”, 18th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2022) (2022.10.26-29)
- Noboru Watanabe, Masahiko Takahashi: “Symmetry breaking in electron-impact dissociative ionization of CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>”, 37th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (2022.06.02-03)
- Yuuki Onitsuka, Masahiko Takahashi: “Establishment of electron-Compton scattering as a molecular spectroscopy to directly observe intramolecular atomic motion”, International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces (MPS 2022) (2022.06.15-17)

(国内発表、全11件)

- 鬼塚侑樹, 高橋正彦「電子-原子コンプトン散乱を用いた化学反応中に分子内原子に働く力の可視化に向けて」、化学系学協会東北大会 公益社団法人 日本化学会東北支部 (2022.09.17-18)
- 金谷諭, 立花佑一, 鬼塚侑樹, 渡邊昇, 高橋正彦「多原子分子に対する原子運動量分布の量子化学計算法の開発」、日本物理学会第77回年次大会 (2022.03.15-17)
- 渡邊昇, 高橋正彦「対称分子の電子衝撃イオン化解離に現れる対称性の破れ」、第16回分子科学討論会 (2022.09.19-22)



## ナノ・マイクロ計測化学研究分野

(国際発表、全 3 件)

- Akihide Hibara, Mao Fukuyama: “One-step fluorescent immunoassay for rapid protein analysis”, International Congress on Pure & Applied Chemistry Kota Kinabalu (2022.11.23-27)
- Grasiyanto, Mao Fukuyama, Motohiro Kasuya, Masao Gen, Carlos Baptista, Shin-Ichi Kondo, Akihide Hibara: “SIMPLE ANION DETECTION ON MICROFLUIDIC PAPER ANALYTICAL DEVICE”, MicroTAS 2022 (2022.10.24)
- Yui Sasaki, Atsushi Matsuki, Masao Gen: “Hydrolysis reaction of NO<sub>2</sub> promoted by high ionic strength in aerosol particles”, 11th International Aerosol Conference (2022.09.04-09)

(国内発表、全 16 件)

- 玄 大雄, 火原 彰秀「EDB-QELS 法による単一エアロゾル粒子の表面張力測定」、第 27 回大気化学討論会 (2022.11.16-18)
- 粕谷素洋, William Lee, 火原彰秀「電子線グラフト重合によりプラスチック表面に修飾した高分子電解質ブラシの潤滑挙動評」、第 73 回コロイドおよび界面化学討論会 (2022.09.24)
- 福山 真央, 西奈美 卓, 富田 峻介, 大橋 祐美子, 粕谷 素洋, 茶谷 絵理, 丸山 洋子, 白木 賢太郎, 火原 彰秀「液液相分離相からのアミロイド形成速度のサイズ依存性」、化学とマイクロ・ナノシステム学会 第 45 回研究会 (2022.05.21)

## ハイブリッド炭素ナノ材料研究分野

(国際発表、全 37 件)

- Hiromoto Nishihara: “Graphenemesosponge: A New Carbon Material with High Porosity and High Durability for Battery Applications”, 241st ECS Meeting (2022.06.01)
- Nishihara, Hiromoto: “Multi-functional nanoporous carbon based on single-walled graphene walls”, 2022 Spring Meeting of the European Materials Research Society (E-MRS) (2022.05.30-06.03)
- Nishihara, Hiromoto: “AtomDeC project: the renaissance of carbon-material research”, AtomDeC 2nd International Symposium (2022.11.02-04)

(国内発表、全 29 件)

- 西原洋知「電池性能を UP させるグラフェンメソスポンジ」、第 2 回ナノカーボン未来技術講演会, Web 開催 (2022.10.05)
- 西原洋知「テンプレートロジーに基づく高機能カーボン材料」、日本化学会第 102 春季年会 (2022.03.23-26)
- 西原洋知「カーボン新素材で、未来を切り拓く」、サイエンスキャスル 2021, Web 開催 (2022.03.20)

## ハイブリッド材料創製研究分野

(国際発表、全 19 件)

- Tomoyuki Akutagawa: “Dynamic Molecular Assemblies toward Ferroelectric Molecular Assemblies”, KJF-International Conference on Organic Materials for Electronics and Photonics (KJF-ICOMEPE2022) (2022.09.02)
- Tomoyuki Akutagawa: “Dynamic Molecular Assemblies toward Ferroelectricity”, International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC KK) (2022.11.20-27)
- Tomoyuki Akutagawa: “Ionic crystal lattice of semiconducting NDIs coupled with molecular sorption behavior”, Strasbourg-Japan USIAS symposium on Condensed Conjugation, Stasbourg (France) (2022.09.22)

(国内発表、全 56 件)

- 芥川智行「ダイナミックな分子集合体を用いた機能性超分子材料の開発」、第 18 回バイオオプティクス研究会 (2022.12.16-17)
- 芥川智行, 武田貴志「アルキルアミド鎖のダイナミクスを利用した液晶性有機強誘電体」、2022 年日本液晶学会 (2022.09.15)
- 芥川智行「有機結晶中のプロトンダイナミクスと機能発現」、ハイドロジェノミクス研究会 (2022.10.16)

## 光機能材料化学研究分野

(国際発表、全 9 件)

- Tomoya Oshikiri, Xu Shi, Masaru Nakagawa, Hiroaki Misawa: “Efficient hot-hole transfer on metal/semiconductor interface under modal strong coupling condition”, The 13th Asia-Pacific Conference on Near-Field Optics (2022.07.29-31)
- Hiromasa Niinomi: “Nanostructured Plasmonic Metasurface Gives a ‘Hand’ to Chiral Self-Assembly”, Photomask Japan 2022 (2022.04.26)
- Kanta Kawasaki, Akiko Onuma, Hiromasa Niinomi, Masaru Nakagawa: “Selection of adhesive molecular layers with monomer-repulsion and chemisorption for a shape-fixed residual layer in UV nanoimprint lithography”, Nanoimprint and Nanoprint Technology Conference 2022 (NNT 2022) (2022.10.05-07)

(国内発表、全 18 件)

- 新家寛正「キラリティ増強近接場によるキラリ結晶化制御」、青葉工学振興賞等受賞者講演会 (2022.12.15)
- 吉田 健, 大沼 晶子, 新家 寛正, 中川 勝「光硬化性微小液滴の平板押印成形体の蛍光顕微鏡観察」、第 71 回高分子討論会 (2022.09.05-07)
- Yocef Hattori, Xu Shi, Tomoya Oshikiri, Hiroaki Misawa「Plasmonic nanoparticles decorated photocathode under modal coupling condition」、2022 年光化学討論会 (2022.09.13-15)

## 有機・バイオナノ材料研究分野

(国際発表、全 10 件)

- Yoshitaka Koseki, Hitoshi Kasai: “Development of SN-38 nano-prodrugs toward anticancer drug delivery”, ICONO13/ICOPE2022 (2022.11.08-11)
- Ryuju Suzuki: “Carotenoid-based nanoparticles change their optical properties utilizing molecular distortion”, ICPAC Kota Kinabalu (2022.11.22-27)
- Hitoshi Kasai: “Drug Delivery System Using Nano-Prodrugs as A New Strategy”, KJF-ICOMEF 2022 (2022.08.31-09.03)

(国内発表、全 23 件)

- 楊 孟衡, 小関良卓, 鈴木龍樹, ティンゴックアングオ, 笠井均「Development of Injectable Silk Hydrogels for Targeted Delivery of Nanoprodrugs」、2022 年度高分子学会東北支部研究発表会 (2022.11.17-18)
- 鈴木龍樹, 丸岡清隆, Anh. T.N. Dao, 小関良卓, 笠井均「食用青色キノコに含まれるグアイアズレン誘導体の全合成および微粒子化」、超異分野学会 山形フォーラム 2022 (2022.08.20)
- 小関良卓, 神島亮明, 笠井均「Synthesis of natural products from glucose via hydrothermal reaction」、令和 4 年度化学系学協会東北大会 (2022.09.17-18)

(共同研究部門)

## 非鉄金属製錬環境科学研究部門

(国内発表、全 3 件)

- 打越雅仁, 渡邊 寛人, 浅野聡「多段陰イオン交換カラム法による銅電解液からの銀の回収」、資源・素材 2022 (福岡) – 2022 年度資源・素材関係学協会合同秋季大会 – (2022.09.06-08)
- 打越雅仁「紫外可視吸収分光を用いる塩酸浴中クロム塩化物錯体分布解析」、一般社団法人資源・素材学会 2022 年度 春季大会 (2022.03.07-09)
- 打越 雅仁, 秋山 大輔, 君島 堅一, 篠田弘造「クロム (III) 塩化物錯体の分布と構造と水和過程」、資源・素材 2022 (福岡) – 2022 年度資源・素材関係学協会合同秋季大会 – (2022.09.06-08)

## 製鉄プロセス高度解析技術共同研究部門

(国際発表、全 1 件)

- Jeong-In Kim, Shusei Kubota, Andrey Stephan Siahahan, Shungo Natsui, Hiroshi Nogami: “3-Dimensional Analysis of Single Iron Ore Particle Having Irregular Shape”, The 1st International Symposium on Iron Ore Agglomerates (SynOre2022) (2022.11.20-26)

(国内発表、全 3 件)

- 夏井 俊悟, Andrey Stephan Siahahan, 埜上 洋, 田中 瑞樹, 本田隆翔「還元率を考慮した焼結鉄鋼塑性変形・流動の動力学モデル」、日本鉄鋼協会第 184 回秋季講演大会 (2022.09.21-23)
- 松永亮太郎, 柏原佑介, 廣澤寿幸, 三木裕司, 埜上 洋, 夏井俊悟「3 次元 DEM-CFD を用いたコークス混合による鉄石層の還元性向上」、日本鉄鋼協会第 184 回秋季講演大会 (2022.09.21-23)
- 岩永大熙, 照井光輝, 廣澤寿幸, 深田喜代志, 三木祐司, 夏井俊悟, Andrey Stephan Siahahan, 埜上洋「シャフト炉における水素多量吹込み時の 3 次元 DEM-CFD 反応解析」、日本鉄鋼協会第 183 回春季講演大会 (2022.03.15-17)

## 次世代電子顕微鏡技術共同研究部門

(国際発表、全 8 件)

- Yohei K. Sato, Daisuke Egusa, Hidetoshi Miyazaki, Koji Kimura, Mitsuhiro Itakura, Masami Terauchi, Eiji Abe: “Electronic structure of Mg-Zn-Y cluster in dilute Mg alloys studied by STEM-EELS”, The 5th International Symposium on Long-Period Stacking/Order Structure and Miile-feuille Structure (LPSO/MFS2022) (2022.12.11-14)
- Daisuke Morikawa, Kenji Tsuda: “Local structure analysis of interface and polar nano domains using convergent-beam electron diffraction”, Third Japan-Canada Microscopy Societies Joint Symposium 2022 (2022.11.05)
- Tomohiro Miyata, Yohei Sato, Kaname Yoshida, Hsin-Hui Huang, Teruyasu Mizoguchi, Katsumi Hagita, Masashi Mizukami, Hiroshi Jinnai: “Compositional Analysis on Epoxy-resin/inorganic Interfaces using Scanning Transmission Electron Microscopy”, Microscopy and microanalysis 2022 (2022.07.31-08.04)

(国内発表、全 36 件)

- 米倉功治「クライオ EM と ED による高精度解析—水素の可視化とその先へ」、CBI 研究機構 量子構造生命科学研究所 中性子産業利用推進協議会 生物・生体材料研究会 合同シンポジウム (2022.03.04)
- 陣内浩司「エラストマーの延伸挙動の直接その場観察」、日本ゴム協会 関東支部 2 月技術講演会 (2022.02.04)
- 寺内正己「顕微 SXES の実用化とその材料研究への応用について」、応用物理学会 光機能研究会 (2022.02.25)

多元物質科学研究所業績目録  
令和4(2022)年1月-12月

(P: Paper、M: Misc、B: Book)

## (有機・生命科学研究部門)

## 生命機能分子合成化学研究分野 (永次 史 研究室)

- P01-01 Reactivity Modulation of Reactive OFF-ON Type G-Quadruplex Alkylating Agents  
Yutong Chen, Kazumitsu Onizuka, Madoka E. Hazemi, Fumi Nagatsugi  
Bioconjugate Chemistry, **33(11)** 2097-2102 (20221116) [10.1021/acs.bioconjchem.2c00458]
- P01-02 Selective Chemical Modification to the Higher-Order Structures of Nucleic Acids.  
Fumi Nagatsugi, Kazumitsu Onizuka  
Chemical record (New York, N.Y.), e202200194 (20220916) [10.1002/tcr.202200194]
- P01-03 Photochemical Labeling of Nucleic Acid by Photocatalyst Tethered DNA Probe  
Yuuhei Yamano, Kazumitsu Onizuka, Madoka Sasaki, Shinichi Sato, Fumi Nagatsugi  
Chemistry Letters, **51(12)** 1121-1124 (20221021) [10.1246/cl.220397]
- P01-04 o-Nitrobenzyl oxime ethers enable photo-induced cyclization reaction to provide phenanthridines under aqueous conditions  
Hidenori Okamura, Momoka Iida, Yui Kaneyama, Fumi Nagatsugi  
ChemRxiv (20221124) [10.26434/chemrxiv-2022-gjn1v]
- P01-05 Synthesis of Crosslinked 2'-OMe RNA Duplexes Using 2-Amino-6-Vinylpurine and Their Application for Effective Inhibition of miRNA Function  
Ahmed Mostafa Abdelhady, Yu Hirano, Kazumitsu Onizuka, Hidenori Okamura, Yasuo Komatsu, Fumi Nagatsugi  
Current Protocols, **2(3)** e386 (20220300) [10.1002/cpz1.386]
- P01-06 Selective and stable base pairing by alkynylated nucleosides featuring a spatially-separated recognition interface  
Hidenori Okamura, Giang Hoang Trinh, Zhuoxin Dong, Yoshiaki Masaki, Kohji Seio, Fumi Nagatsugi  
Nucleic Acids Research, **50(6)** 3042-3055 (20220408) [10.1093/nar/gkac140]
- P01-07 Development of a selective ligand for G-G mismatches of CGG repeat RNA inducing the RNA structural conversion from the G-quadruplex into a hairpin-like structure  
Hirotaka Murase, Fumi Nagatsugi, Shigeki Sasaki  
Organic & Biomolecular Chemistry, **20(16)** 3375-3381 (20220000) [10.1039/d2ob00279e]
- P01-08 Hybridization-specific chemical reactions to create interstrand crosslinking and threaded structures of nucleic acids  
Kazumitsu Onizuka, Yuuhei Yamano, Ahmed Mostafa Abdelhady, Fumi Nagatsugi  
Organic & Biomolecular Chemistry, **20(23)** 4699-4708 (20220615) [10.1039/d2ob00551d]
- P01-09 Rapid Alkene-Alkene Photo-Cross-Linking on the Base-Flipping-Out Field in Duplex DNA  
Ahmed Mostafa Abdelhady, Kazumitsu Onizuka, Kei Ishida, Sayaka Yajima, Eriko Mano, Fumi Nagatsugi  
The Journal of Organic Chemistry, **87(5)** 2267-2276 (20220102) [10.1021/acs.joc.1c01498]
- P01-10 メジャーグループで互いを認識する人工塩基対の創製  
岡村 秀紀  
日本核酸化学会誌, **6** 16-21 (20221102)
- M01-01 離れた場所で互いを認識：新たなタイプの人工塩基対の開発  
岡村秀紀  
Chem-Station スポットライトリサーチ (20220400)
- M01-02 Roots 生命起源への旅  
岡村秀紀  
NHK-BS 番組 (20220200)

## 生命機能制御物質化学研究分野 (和田 健彦 研究室)

- P02-01 Selective Photo-Crosslinking Detection of Methylated Cytosine in DNA Duplex Aided by a Cationic Comb-Type Copolymer.  
Atsuhiko Kojima, Juki Nakao, Naohiko Shimada, Naoki Yoshida, Yota Abe, Yu Mikame, Tsuyoshi Yamamoto, Takehiko Wada, Atsushi Maruyama, Asako Yamayoshi  
ACS biomaterials science & engineering, **8(5)** 1799-1805 (20220309) [10.1021/acsbiomaterials.2c00048]
- P02-02 Amphiphilic Perforated Honeycomb Films for Gravimetric Liquid Separation  
Bihai Chen, Takehiko Wada, Hiroshi Yabu  
Advanced Materials Interfaces, **9(1)** 2101954 (20220100) [10.1002/admi.202101954]
- M02-01 触媒的標的 RNA 消化を目指した新規キメラ人工核酸の設計・合成と RNase H による切断活性の検討  
石渡望, 矢野輝, 稲垣雅仁, 西嶋政樹, 林宏典, 鈴木康弘, 荒木保幸, 児玉栄一, 佐藤靖史, 和田健彦  
日本化学会春季年会講演予稿集 (Web), **102nd** (20220000)

- B02-01 高分子材料の事典  
中條 善樹, 大山 俊幸, 古賀 毅, 佐藤 尚弘, 原口 和敏, 和田 健彦, 青島 真人  
“刺激応答性人工核酸”, 朝倉書店 (20221101) [ISBN: 9784254252729]
- B02-02 高分子材料の辞典  
中條善樹, 大山俊幸, 和田健彦  
“人工核酸”, p.114-118, 高分子材料の辞典 (20221101) [ISBN: 978-4-254-25272-9]
- B02-03 水中有機合成の開発動向  
和田健彦  
シーエムシー出版、監修：小林修、北之園拓 (20220300) [ISBN: 9784781316635]

### 生体分子構造研究分野（稲葉 謙次 研究室）

- P03-01 Organelle-level labile Zn<sup>2+</sup> mapping based on targetable fluorescent probe  
Liu, R., Kowada, T., Du, Y., Amagai, Y., Matsui T., Inaba, K., and Mizukami, S.  
ACS Sensors, **7(3)** 748-755 (20220300) [10.1021/acssensors.1c02153]
- P03-02 Structural basis of the conformational and functional regulation of human SERCA2b, the ubiquitous endoplasmic reticulum calcium pump  
Yuxia Zhang, Kenji Inaba  
BioEssays, **44(7)** 2200052 (20220700) [10.1002/bies.202200052]
- P03-03 Multiple sub-state structures of SERCA2b reveal conformational overlap at transition steps during the catalytic cycle  
Zhang Y, Kobayashi C, Cai X, Watanabe S, Tsutsumi A, Kikkawa M, Sugita Y, Inaba K  
Cell Reports, **41(10)** 111760 (20221200) [10.1016/j.celrep.2022.111760]
- P03-04 Active Expression of Genes for Protein Modification Enzymes in Habu Venom Glands  
Akiko Isomoto, Eiichi Shoguchi, Kanako Hisata, Jun Inoue, Yinrui Sun, Kenji Inaba, Noriyuki Satoh, Tomohisa Ogawa, Hiroki Shibata  
Toxins, **14(5)** 300 (20220400) [10.3390/toxins14050300]
- P03-05 ヒト細胞内で翻訳途上のタンパク質にジスルフィド結合が形成される仕組み: タンパク質立体構造形成の新規メカニズムを発見  
門倉 広  
化学と生物, **60(11)** 557-559 (20221101) [10.1271/kagakutoseibutsu.60.557]
- M03-01 クライオ電子顕微鏡がもたらす新しいタンパク質構造の知見  
稲葉 謙次, 張 玉霞  
実験医学, **40(12)** 213-220 (20220800)
- M03-02 芳香族化合物による酸化的タンパク質フォールディング促進効果  
松本陽佑, 松崎元紀, 稲葉謙次, 奥村正樹, 村岡貴博  
日本化学会春季年会講演予稿集 (Web), **102nd** (20220000)
- M03-03 小胞体ジスルフィド結合形成ネットワークを支える酵素群の構造基盤  
金村 進吾, 稲葉 謙次, 奥村 正樹  
日本結晶学会誌, **64** 209-211 (20220900)
- M03-04 酸化型ガレクチン 1 の分子構造基盤  
金村進吾, 岡田莉奈, 黒井邦巧, 松崎元紀, 齋尾智英, 山口宏, 伊藤大, 李映昊, 中林孝和, 稲葉謙次, 奥村正樹  
日本蛋白質科学会年会プログラム・要旨集, **22nd (Web)** (20220000)

### 細胞機能分子化学研究分野（水上 進 研究室）

- P04-01 Autocitrullination and Changes in the Activity of Peptidylarginine Deiminase 3 Induced by High Ca<sup>2+</sup> Concentrations  
Mizuki Sawata, Hiroki Shima, Kazutaka Murayama, Toshitaka Matsui, Kazuhiko Igarashi, Kazumasa Funabashi, Kenji Ite, Kenji Kizawa, Hidenari Takahara, Masaki Unno  
ACS Omega, **7(32)** 28378-28387 (20220816) [10.1021/acsomega.2c02972]
- P04-02 Organelle-Level Labile Zn<sup>2+</sup> Mapping Based on Targetable Fluorescent Sensors  
Rong Liu, Toshiyuki Kowada, Yuyin Du, Yuta Amagai, Toshitaka Matsui, Kenji Inaba, Shin Mizukami  
ACS Sens., **7(3)** 748-757 (20220303) [10.1021/acssensors.1c02153]
- P04-03 Quantitative and Repetitive Control of Subcellular Protein-Protein Interaction Using a Photochromic Dimerizer  
Takato Mashita, Toshiyuki Kowada, Hayashi Yamamoto, Satoshi Hamaguchi, Toshitaka Matsui, Shin Mizukami  
ChemRxiv (20221109) [10.26434/chemrxiv-2022-7vq8s-v2]
- P04-04 Clip to Click: Controlling Inverse Electron-Demand Diels-Alder Reactions with Macrocyclic Tetrazines  
Ira Novianti, Toshiyuki Kowada, Shin Mizukami  
Org. Lett., **24(17)** 3223-3226 (20220400) [10.1021/acs.orglett.2c01010]
- P04-05 Flexible Target Recognition of the Intrinsically Disordered DNA-Binding Domain of CytR Monitored by Single-Molecule Fluorescence Spectroscopy  
Shrutarshi Mitra, Hiroyuki Oikawa, Divya Rajendran, Toshiyuki Kowada, Shin Mizukami, Athi N. Naganathan, Satoshi Takahashi  
The Journal of Physical Chemistry B, **126(33)** 6136-6147 (20220825) [10.1021/acs.jpcc.2c02791]

M04-01 若手研究者からのメッセージ  
小和田 俊行  
日本化学会バイオテクノロジー部会 NEWS LETTER, **25(2)** 15-20 (20220200)

B04-01 ヘムタンパク質の科学: 生理機能の理解とその展開に向けて  
城 宜嗣, 青野 重利, 齋藤 正男  
“ヘム分解酵素の多様な分子機構”, エヌ・ティー・エス (20220513) [ISBN: 4860437780]

### 生物分子機能計測研究分野 (米倉 功治 研究室)

P05-01 Emerging Disordered Layered-Herringbone Phase in Organic Semiconductors Unveiled by Electron Crystallography  
Satoru Inoue, Kiyoshi Nikaïdo, Toshiki Higashino, Shunto Arai, Mutsuo Tanaka, Reiji Kumai, Seiji Tsuzuki, Sachio Horiuchi, Haruki Sugiyama, Yasutomu Segawa, Kiyofumi Takaba, Saori Maki-Yonekura, Koji Yonekura, Tatsuo Hasegawa  
Chemistry of Materials, **34(1)** 72-83 (20220111) [10.1021/acs.chemmater.1c02793]

P05-02 Structural basis for the absence of low-energy chlorophylls in a photosystem I trimer from *Gloeobacter violaceus*  
Koji Kato, Tasuku Hamaguchi, Ryo Nagao, Keisuke Kawakami, Yoshifumi Ueno, Takehiro Suzuki, Hiroko Uchida, Akio Murakami, Yoshiki Nakajima, Makio Yokono, Seiji Akimoto, Naoshi Dohmae, Koji Yonekura, Jian-Ren Shen  
eLife, **11** e73990 (20220411) [10.7554/elife.73990]

P05-03 Core and rod structures of a thermophilic cyanobacterial light-harvesting phycobilisome  
Keisuke Kawakami, Tasuku Hamaguchi, Yuu Hirose, Daisuke Kosumi, Makoto Miyata, Nobuo Kamiya, Koji Yonekura  
Nature Communications, **13(1)** 3389 (20220600) [10.1038/s41467-022-30962-9]

P05-04 ALS mutations in the TIA-1 prion-like domain trigger highly condensed pathogenic structures  
Naotaka Sekiyama, Kiyofumi Takaba, Saori Maki-Yonekura, Ken-ichi Akagi, Yasuko Ohtani, Kayo Imamura, Tsuyoshi Terakawa, Keitaro Yamashita, Daigo Inaoka, Koji Yonekura, Takashi S. Kodama, Hidehito Tochio  
Proceedings of the National Academy of Sciences, **119(38)** e2122523119 (20220920) [10.1073/pnas.2122523119]

P05-05 Theoretical Model of the Far-Red-Light-Adapted Photosystem I Reaction Center of Cyanobacterium *Acaryochloris marina* Using Chlorophyll *d* and the Effect of Chlorophyll Exchange  
Akihiro Kimura, Hirotaaka Kitoh-Nishioka, Toshimichi Aota, Tasuku Hamaguchi, Koji Yonekura, Keisuke Kawakami, Kyoko Shinzawa-Itoh, Natsuko Inoue-Kashino, Kentaro Ifuku, Eiki Yamashita, Yasuhiro Kashino, Shigeru Itoh  
The Journal of Physical Chemistry B, **126(22)** 4009-4021 (20220526) [10.1021/acs.jpcc.2c00869]

P05-06 電子線三次元結晶構造解析/3D ED/マイクロ ED の解析例と展望  
米倉功治, 眞木さおり, 高場 圭章  
顕微鏡, **57(3)** 118-123 (20221200) [10.11410/kenbikyo.57.3\_118]

### 生命分子ダイナミクス研究分野 (高橋 聡 研究室)

P06-01 Giant Carbon Nano-Test Tubes as Versatile Imaging Vessels for High-Resolution and In Situ Observation of Proteins  
Tracy T. Chuong, Toshihiko Ogura, Norihito Hiyoshi, Kazuma Takahashi, Sangho Lee, Keita Hiraga, Hiroki Iwase, Akira Yamaguchi, Kiyoto Kamagata, Eriko Mano, Satoshi Hamakawa, Hiroto Nishihara, Takashi Kyotani, Galen D. Stucky, Tetsuji Itoh  
ACS Applied Materials & Interfaces, **14(23)** 26507-26516 (20220615) [10.1021/acsami.2c06318]

P06-02 Single-nucleosome imaging reveals steady-state motion of interphase chromatin in living human cells  
Shiori Iida, Soya Shinkai, Yuji Itoh, Sachiko Tamura, Masato T. Kanemaki, Shuichi Onami, Kazuhiro Maeshima  
Science Advances, **8(22)** eabn5626 (20220603) [10.1126/sciadv.abn5626]

P06-03 Structure-dependent recruitment and diffusion of guest proteins in liquid droplets of FUS.  
Kiyoto Kamagata, Nanako Iwaki, Saori Kanbayashi, Trishit Banerjee, Rika Chiba, Virginie Gaudon, Bertrand Castaing, Seiji Sakamoto  
Scientific reports, **12(1)** 7101 (20220502) [10.1038/s41598-022-11177-w]

P06-04 Rational peptide design for regulating liquid-liquid phase separation on the basis of residue-residue contact energy  
Kiyoto Kamagata, Maulana Ariefai, Hiroto Takahashi, Atsumi Hando, Dwiky Rendra Graha Subekti, Keisuke Ikeda, Atsushi Hirano, Tomoshi Kameda  
Scientific reports, **12(1)** 13718 (20220812) [10.1038/s41598-022-17829-1]

P06-05 Flexible Target Recognition of the Intrinsically Disordered DNA-Binding Domain of CytR Monitored by Single-Molecule Fluorescence Spectroscopy  
Shrutarshi Mitra, Hiroyuki Oikawa, Divya Rajendran, Toshiyuki Kowada, Shin Mizukami, Athi N. Naganathan, Satoshi Takahashi  
The Journal of Physical Chemistry B, **126(33)** 6136-6147 (20220825) [10.1021/acs.jpcc.2c02791]

P06-06 Quantification of Entropic Excluded Volume Effects Driving Crowding-Induced Collapse and Folding of a Disordered Protein  
Divya Rajendran, Shrutarshi Mitra, Hiroyuki Oikawa, Kulkarni Madhurima, Ashok Sekhar, Satoshi Takahashi, Athi N. Naganathan  
The Journal of Physical Chemistry Letters, **13(13)** 3112-3120 (20220407) [10.1021/acs.jpcclett.2c00316]

P06-07 Hyper-mobile Water and Raman 2900 cm<sup>-1</sup> Peak Band of Water Observed around Backbone Phosphates of Double Stranded DNA by High-Resolution Spectroscopies and MD Structural Feature Analysis of Water  
Makoto Suzuki, Akira Tsuchiko, Yoshiyuki Tanaka, Nobuyuki Matubayasi, George Mogami, Nobuyuki Uozumi, Satoshi Takahashi  
The journal of physical chemistry. B, **127(1)** 285-299 (20221227) [10.1021/acs.jpcc.2c06952]

- M06-01 疾患関連相分離タンパク質をターゲットとしたペプチドバインダーの設計  
鎌形清人  
日薬理誌, **157(6)** 392-395 (20221101) [10.1254/fpj.22016]

### 量子ビーム構造生物化学研究分野（南後 恵理子 研究室）

- P07-01 Structural snapshot of glycoside hydrolase family 8 endo-beta-1,4-glucanase capturing the state after cleavage of the scissile bond  
Takaaki Fujiwara, Ayumi Fujishima, Yui Nakamura, Kenji Tajima, Min Yao  
Acta Crystallographica Section D, **78(2)** 228-237 (20220200) [10.1107/s2059798321012882]
- P07-02 Serial femtosecond X-ray crystallography of an anaerobically formed catalytic intermediate of copper amine oxidase  
Takeshi Murakawa, Mamoru Suzuki, Kenji Fukui, Tetsuya Masuda, Michihiro Sugahara, Kensuke Tono, Tomoyuki Tanaka, So Iwata, Eriko Nango, Takato Yano, Katsuyuki Tanizawa, Toshihide Okajima  
Acta crystallographica. Section D, Structural biology, **78(Pt 12)** 1428-1438 (20221201) [10.1107/S2059798322010385]
- P07-03 Crystal structure of CmABCB1 multi-drug exporter in lipidic mesophase revealed by LCP-SFX  
Dongqing Pan, Ryo Oyama, Tomomi Sato, Takanori Nakane, Ryo Mizunuma, Keita Matsuoka, Yasumasa Joti, Kensuke Tono, Eriko Nango, So Iwata, Toru Nakatsu, Hiroaki Kato  
IUCrJ, **9(Pt 1)** 134-145 (20220101) [10.1107/S2052252521011611]
- P07-04 Serial crystallography captures dynamic control of sequential electron and proton transfer events in a flavoenzyme  
Manuel Maestre-Reyna, Cheng-Han Yang, Eriko Nango, Wei-Cheng Huang, Eka Putra Gusti Ngurah Putu, Wen-Jin Wu, Po-Hsun Wang, Sophie Franz-Badur, Martin Saft, Hans-Joachim Emmerich, Hsiang-Yi Wu, Cheng-Chung Lee, Kai-Fa Huang, Yao-Kai Chang, Jiahn-Haur Liao, Jui-Hung Weng, Wael Gad, Chiung-Wen Chang, Allan H. Pang, Michihiro Sugahara, Shigeki Owada, Yuhei Hosokawa, Yasumasa Joti, Ayumi Yamashita, Rie Tanaka, Tomoyuki Tanaka, Fangjia Luo, Kensuke Tono, Kai-Cheng Hsu, Stephan Kiontke, Igor Schapiro, Roberta Spadaccini, Antoine Royant, Junpei Yamamoto, So Iwata, Lars-Oliver Essen, Yoshitaka Bessho, Ming-Daw Tsai  
NATURE CHEMISTRY, **14(6)** 677-685 (20220400) [10.1038/s41557-022-00922-3]
- P07-05 Excited-state intermediates in a designer protein encoding a phototrigger caught by an X-ray free-electron laser  
Xiaohong Liu, Pengcheng Liu, Hongjie Li, Zhen Xu, Lu Jia, Yan Xia, Minling Yu, Wenqin Tang, Xiaolei Zhu, Chao Chen, Yuanlin Zhang, Eriko Nango, Rie Tanaka, Fangjia Luo, Koji Kato, Yoshiki Nakajima, Shunpei Kishi, Huaxin Yu, Naoki Matsumura, Shigeki Owada, Kensuke Tono, So Iwata, Long-Jiang Yu, Jian-Ren Shen, Jianguyun Wang  
Nature chemistry, **14(9)** 1054-1060 (20220900) [10.1038/s41557-022-00992-3]
- P07-06 Conformational alterations in unidirectional ion transport of a light-driven chloride pump revealed using X-ray free electron lasers  
Toshiaki Hosaka, Takashi Nomura, Minoru Kubo, Takanori Nakane, Luo Fangjia, Shun-Ichi Sekine, Takuhiro Ito, Kazutaka Murayama, Kentaro Ihara, Haruhiko Ehara, Kazuhiro Kashiwagi, Kazushige Katsura, Ryogo Akasaka, Tamao Hisano, Tomoyuki Tanaka, Rie Tanaka, Toshi Arima, Ayumi Yamashita, Michihiro Sugahara, Hisashi Naitow, Yoshinori Matsuura, Susumu Yoshizawa, Kensuke Tono, Shigeki Owada, Osamu Nureki, Tomomi Kimura-Someya, So Iwata, Eriko Nango, Mikako Shirouzu  
Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, **119(9)** (20220301) [10.1073/pnas.2117433119]
- M07-01 私が想像する 30 年後の構造生物学における XFEL 利用研究  
藤原孝彰  
SACLA User's meeting 2022 (20220300)
- M07-02 アルギン酸分解・変換酵素 AlgE の立体構造解析  
藤原 孝彰, 南後 恵理子  
日本応用糖質科学会 2022 年度大会要旨集 (20220800)
- M07-03 X 線自由電子レーザーを用いた高速分子動画像解析法の開発と展望  
南後 恵理子, 藤原 孝彰, Luo Fangjia, 岩田 想  
日本結晶学会誌, **64(4)** 290-293 (20221200)
- M07-04 光解離性化合物結合型 AMPA 受容体細胞外ドメインのシリアルフェムト秒結晶構造解析  
藤原孝彰, Hansel Adriel, 曾我恭平, 清中茂樹, 南後恵理子  
令和 4 年 (2022 年) 度日本結晶学会年会要旨集 (20221100)

### 有機ハイブリッドナノ結晶材料研究分野（火原 彰秀 (兼) 研究室）

- P08-01 Semicrystalline Structural Correlations of Conductivity in Conjugated Polymer Thin Films Surface-Doped by Vapor Phase Method  
Kai Futamata, Tsunenobu Onodera, Shunsuke Yamamoto, Masaya Mitsuishi, Hidetoshi Oikawa  
ACS Applied Electronic Materials, **4(2)** 755-760 (20220200) [10.1021/acsaem.1c01150]
- P08-02 Photocatalytic hydrogen generation using polydiacetylene crystal nanostructures  
Tsunenobu Onodera, Yosuke Miyashita, Hidetoshi Oikawa  
Molecular Crystals and Liquid Crystals, **743(1)** 72-76 (20220000) [10.1080/15421406.2022.2048221]
- P08-03 Polymeric Functionalization of Podophyllotoxin Carrier-free Drug Nanoparticles for Enhancing Bioavailability and In Vitro Cellular Imaging  
Farsai Taemaitree, Masamichi Tamada, Yoshitaka Koseki, Tsunenobu Onodera, Hidetoshi Oikawa, Hitoshi Kasai  
Molecular Crystals and Liquid Crystals, **743(1)** 89-95 (20220000) [10.1080/15421406.2022.2052491]

- P08-04 Nonlinear optical properties of polydiacetylene nanofibers modified with Ag nanoparticles  
Tsunenobu Onodera, Nayu Kuniyama, Rodrigo Sato, Yoshihiko Takeda, Hidetoshi Oikawa  
Molecular Crystals and Liquid Crystals, **743(1)** 96-102 (20220000) [10.1080/15421406.2022.2052492]
- P08-05 Structural Correlations of Nonlinear Optical Response in Polydiacetylene Nanotubes Hybridized with Gold Nanoparticles  
Wakana Ito-Washiyama, Tsunenobu Onodera, Masaki Ageishi, Rodrigo Sato, Boyi Zhang, Satoshi Kato, Akito Masuhara, Hitoshi Kasai, Hiroaki Mamiya, Hiroshi Jinnai, Yoshihiko Takeda, Hidetoshi Oikawa  
The Journal of Physical Chemistry C, **126** 2763-2771 (20220100) [10.1021/acs.jpcc.1c08884]

### 高分子ハイブリッドナノ材料研究分野 (西堀 麻衣子 研究室)

- P09-01 Characterization of Soft Materials by Synchrotron Radiation X-ray Based Scattering and Spectroscopic Techniques  
Atsushi Takahara, Ryohei Ishige, Tomoyasu Hirai, Maiko Nishibori, Yuji Higaki, Kosuke Yamazoe, Yoshihisa Harada  
Bunseki Kagaku, **71(9)** 461-469 (20220000) [10.2116/bunsekikagaku.71.461]
- P09-02 Electronic Structure of Carbon Dioxide in Sylgard-184 Evaluated by Using X-ray Emission Spectroscopy  
Ryosuke Matsuno, Yokajaksusri Nutthon, Akira Miyano, Kakeru Ninomiya, Maiko Nishibori, Hisao Kiuchi, Shigenori Fujikawa, Yoshihisa Harada, Atsushi Takahara  
Chemistry Letters, **51(6)** 650-653 (20220600) [10.1246/cl.220113]
- P09-03 Improvement of Catalytic Activity of Ce-MFI-Supported Pd Catalysts for Low-Temperature Methane Oxidation by Creation of Concerted Active Sites  
Ryota Osuga, Atsushi Neya, Motohiro Yoshida, Mizuho Yabushita, Shuhei Yasuda, Sachiko Maki, Kiyoshi Kanie, Toshiyuki Yokoi, Atsushi Muramatsu  
Industrial & Engineering Chemistry Research, **61(27)** 9686-9694 (20220627) [10.1021/acs.iecr.2c01410]
- P09-04 Chemical interactions of solute atoms during  $L1_2$  cluster formation in Mg-Zn-Gd alloys with long-period stacking ordered structure  
Kakeru Ninomiya, Koki Itamoto, Hiroyuki Setoyama, Daisuke Egusa, Eiji Abe, Michiaki Yamasaki, Maiko Nishibori  
Journal of Alloys and Compounds, **928** 167101 (20221220) [10.1016/j.jallcom.2022.167101]
- P09-05 Uniform Organically Modified  $CeO_2$  Nanoparticles Synthesized from a Carboxylate Complex under Supercritical Hydrothermal Conditions: Impact of Ce Valence  
Yuki Omura, Akira Yoko, Gimyeong Seong, Maiko Nishibori, Kakeru Ninomiya, Takaaki Tomai, Tadafumi Adschiri  
Journal of Physical Chemistry C, **126(13)** 6008-6015 (20220400) [10.1021/acs.jpcc.2c00088]
- P09-06 Thermal transformation of cubic-shaped  $MSn(OH)_6$  ( $M=Ca, Mn, Co, \text{ and } Zn$ ) hydroxides to  $SnO_2MO_x$  mixed oxides  
Hiroyuki Yamaura, Emiri Tajima, Maiko Nishibori, Syuhei Yamaguchi, Kengo Shimano, Hidenori Yahiro  
Journal of the Ceramic Society of Japan, **130(8)** 715-722 (20220801) [10.2109/jcersj2.21170]
- P09-07 Development of Synthetic Route for Fe-substituted MWW-type Zeolites Using Mechanochemical Method  
Ryota Osuga, Ginpei Tanaka, Mizuho Yabushita, Kakeru Ninomiya, Sachiko Maki, Maiko Nishibori, Kiyoshi Kanie, Atsushi Muramatsu  
Journal of the Japan Petroleum Institute, **65(2)** 67-77 (20220000) [10.1627/jpi.65.67]

### (無機材料研究部門)

#### 無機固体材料化学研究分野 (山田 高広 研究室)

- P10-01 Preparation of faceted TaN grains by heating Ta-containing oxides in BN crucible with Na  
Naoya Kuge, Toru Sekiya, Masanori Enoki, Hisanori Yamane, Takahiro Yamada  
Ceramics International, **48(8)** 10817-10820 (20220400) [10.1016/j.ceramint.2021.12.297]
- P10-02 Electronic structure and optical properties of NaSi  
Motoharu Imai, Takahiro Yamada, Hisanori Yamane  
Japanese Journal of Applied Physics, **61(3)** 31004 (20220301) [10.35848/1347-4065/ac4d45]
- P10-03 Crystal structure and superconductivity of  $NaAlSi_{1-x}Ge_x$  single crystals  
Takahiro Yamada, Daigorou Hirai, Toshiya Ikenobe, Hisanori Yamane, Zenji Hiroi  
Journal of Physics: Conference Series, **2323(1)** 12004 (20220801) [10.1088/1742-6596/2323/1/012004]
- P10-04 Unusual Resistive Transitions in the Nodal-Line Semimetallic Superconductor NaAlSi  
Daigorou Hirai, Toshiya Ikenobe, Takahiro Yamada, Hisanori Yamane, Zenji Hiroi  
Journal of the Physical Society of Japan, **91(2)** 24702 (20220215) [10.7566/jpsj.91.024702]
- P10-05 Pseudogap Formation in the Nodal-Line Semimetal NaAlGe  
Takahiro Yamada, Daigorou Hirai, Tamio Oguchi, Hisanori Yamane, Zenji Hiroi  
Journal of the Physical Society of Japan, **91(7)** 74801 (20220715) [10.7566/jpsj.91.074801]
- P10-06 Fermi surface and mass enhancement in the topological nodal-line semimetal NaAlSi  
Shinya Uji, Takako Konoike, Yuya Hattori, Taichi Terashima, Tamio Oguchi, Takahiro Yamada, Daigorou Hirai, Zenji Hiroi  
Physical Review B, **105(23)** 235103 (20220603) [10.1103/physrevb.105.235103]

#### スピン量子物性研究分野 (佐藤 卓 研究室)

- P11-01 Experimental Determination of Deviation from Spherical Electron Densities of Atoms in Benzene Molecules in the Liquid State  
Yasuo Kameda, Misaki Kowaguchi, Yuko Amo, Takeshi Usuki, Daisuke Okuyama, Taku J. Sato  
Bulletin of the Chemical Society of Japan, **95(12)** 1680-1686 (20221215) [10.1246/bcsj.20220271]

- P11-02 First-principles study of the crystal and magnetic structures of multiferroic  $\text{Cu}_2\text{OCl}_2$   
Peter Tsung-Wen Yen, Hung-Cheng Wu, Shin-Ming Huang  
Journal of Physics: Condensed Matter, **34(33)** 335602 (20220617) [10.1088/1361-648x/ac75a2]
- P11-03 Unique multiferroics with tunable ferroelastic transition in antiferromagnet  $\text{Mn}_2\text{V}_2\text{O}_7$   
H.J. Chen, C.H. Yeh, T.W. Kuo, D. Chandrasekhar Kakarla, H.C. Wu, T.W. Yen, S.M. Huang, H. Chou, M.C. Chou, H.W. Chen, S.W. Kuo, Y.C. Chuang, C.K. Chang, U. Eckstein, N.H. Khansur, K.G. Webber, H.D. Yang  
Materials Today Physics, **23** 100623 (20220300) [10.1016/j.mtphys.2022.100623]
- P11-04 Breakdown of linear spin-wave theory and existence of spinon bound states in the frustrated kagome-lattice antiferromagnet  
K. Matan, T. Ono, S. Ohira-Kawamura, K. Nakajima, Y. Nambu, T. J. Sato  
Physical Review B, **105(13)** 134403-1-134403-8 (20220406) [10.1103/physrevb.105.134403]
- P11-05 Zigzag magnetic order in the Kitaev spin-liquid candidate material  $\text{RuBr}_3$  with a honeycomb lattice  
Yoshinori Imai, Kazuhiro Nawa, Yasuhiro Shimizu, Wakana Yamada, Hideyuki Fujihara, Takuya Aoyama, Ryotaro Takahashi, Daisuke Okuyama, Takamasa Ohashi, Masato Hagihala, Shuki Torii, Daisuke Morikawa, Masami Terauchi, Takayuki Kawamata, Masatsune Kato, Hirotada Gotou, Masayuki Itoh, Taku J. Sato, Kenya Ohgushi  
Physical Review B, **105(4)** L041112-1-L041112-6 (20220126) [10.1103/physrevb.105.1041112]
- P11-06 Higher-order modulations in the skyrmion lattice phase of  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$   
Johannes D. Reim, Shinnosuke Matsuzaka, Koya Makino, Seno Aji, Ryo Murasaki, Daiki Higashi, Daisuke Okuyama, Yusuke Nambu, Elliot P. Gilbert, Norman Booth, Shinichiro Seki, Yoshinori Tokura, Taku J Sato  
Physical Review B, **106(10)** 104406-1-104406-12 (20220907) [10.1103/physrevb.106.104406]
- P11-07 Magnetic structure and spin dynamics of the quasi-two-dimensional antiferromagnet Zn-doped copper pyrovanadate  
G. Gitgeatpong, Y. Zhao, J. A. Fernandez-Baca, T. Hong, T. J. Sato, P. Piyawongwatthana, K. Nawa, P. Saeau, K. Matan  
Physical Review B, **106(21)** 214438 (20221227) [10.1103/physrevb.106.214438]
- P11-08 Spin-lattice-charge coupling in quasi-one-dimensional spin-chain  $\text{NiTe}_2\text{O}_5$   
Ajay Tiwari, D. Chandrasekhar Kakarla, G. Macam, C. H. Hsu, F. C. Chuang, H. C. Wu, T. W. Kuo, Arkadeb Pal, H. Chou, D. P. Gulo, H. L. Liu, Y. C. Chuang, Y. C. Lai, C. A. Lee, Mitch M. C. Chou, H. D. Yang  
Physical Review Materials, **6(4)** 44409 (20220421) [10.1103/physrevmaterials.6.044409]
- P11-09 Chiral Spin Liquid Ground State in  $\text{YBaCo}_3\text{FeO}_7$   
W. Schweika, M. Valldor, J. D. Reim, U. K. Rößler  
Physical Review X, **12(2)** 21029 (20220504) [10.1103/physrevx.12.021029]
- M11-01 Detecting powder diffraction peaks from Gd-based magnetic quasicrystals  
T. J. Sato, D. Okuyama, K. Nawa, R. Tamura  
Activity Report on Neutron Scattering Research: Experimental Reports (2021) (20220800)
- M11-02 Fractional spin excitations in the Kitaev candidate compound  $\text{RuBr}_3$   
K. Nawa, T. Hiraoka, Y. Imai, K. Ohgushi, T. J. Sato  
Activity Report on Neutron Scattering Research: Experimental Reports (2021) (20220800)
- M11-03 Magnetic Excitation of the Low-dimensional Antiferromagnet  $\text{Cu}_2(\text{MoO}_4)(\text{SeO}_3)$   
P. Piyawongwatthana, K. Nawa, D. Okuyama, T. J. Sato  
Activity Report on Neutron Scattering Research: Experimental Reports (2021) (20220800)
- M11-04 Short-range magnetic correlations in  $\text{Ba}_3\text{Yb}(\text{BO}_3)_3$   
S. Matsuzaka, D. Okuyama, K. Nawa, T. J. Sato  
Activity Report on Neutron Scattering Research: Experimental Reports (2021) (20220800)
- M11-05 Spinon Rashba splitting on the quantum spin chain  
K. Nawa, R. Murasaki, S. Asai, T. Masuda, D. Hirai, Z. Hiroi, T. J. Sato  
Activity Report on Neutron Scattering Research: Experimental Reports (2021) (20220800)
- M11-06 キタエフスピン液体に着目した新物質開発：高圧合成法を用いた新しいルテニウムハライド  $\text{RuBr}_3$ ,  $\text{RuI}_3$  の発見—固体物理〈キタエフスピン液体の新展開〉特集号；新物質開発  
今井良宗, 大串研也, 那波和宏, 佐藤卓, 清水康弘, 山地洋平  
固体物理 / アグネ技術センター [編], **57(11)** 725-744 (20221100)
- M11-07 Kitaev スピン液体候補物質  $\text{RuBr}_3$  の非弾性中性子散乱測定  
平岡巧, 那波和宏, 今井良宗, 藤原秀行, 村崎遼, PIYAWONGWATTHANA Pharit, 古府麻衣子, MOLE Richard, 後藤弘匡, 大串研也, 佐藤卓  
日本物理学会講演概要集 (CD-ROM), **77(1)** (20220000)
- M11-08 Neutron inelastic scattering measurement of Kitaev spin candidate material  $\text{RuBr}_3$   
平岡巧, 那波和宏, 今井良宗, 藤原秀行, 村崎遼, PIYAWONGWATTHANA Pharit, 古府麻衣子, MOLE Richard, 後藤弘匡, 大串研也, 佐藤卓  
日本物理学会講演概要集 (CD-ROM), **77(1)** (20220000)
- M11-09 AONSA 近況  
佐藤卓  
波紋, **32(1)** 47 (20220200)
- M11-10 AONSA 近況  
佐藤卓  
波紋, **32(3)** (20220800)



## ナノスケール磁気機能研究分野（岡本 聡 研究室）

- P12-01 Temperature dependence of site-resolved Fe magnetic moments in ThMn<sub>12</sub>-type Sm(Fe<sub>1</sub>-Co)<sub>12</sub> compounds studied via synchrotron Mössbauer spectroscopy  
D. Ogawa, T. Fukazawa, S. Li, T. Ueno, S. Sakai, T. Mitsui, T. Miyake, S. Okamoto, S. Hirose, Y.K. Takahashi  
Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **552** 169188 (20220200) [10.1016/j.jmmm.2022.169188]
- P12-02 Magnetic Domain Structure Observation for Initial Magnetization and Demagnetization Processes of a Nd-Fe-B Hot-Deformed Magnet Using Soft X-ray Magnetic Circular Dichroism Microscopy  
M. Takeuchi, T. Yomogita, N. Kikuchi, K. Toyoki, S. Kobayashi, Y. Kotani, T. Nakamura, K. Hioki, S. Okamoto  
Journal of the Japan Institute of Metals and Materials, **86(1)** 1-7 (20220101) [10.2320/jinstmet.j2021041]
- P12-03 Real picture of magnetic domain dynamics along the magnetic hysteresis curve inside an advanced permanent magnet  
Makoto Takeuchi, Motohiro Suzuki, Shintaro Kobayashi, Yoshinori Kotani, Tetsuya Nakamura, Nobuaki Kikuchi, Anton Bolyachkin, Hossein Sepehri-Amin, Tadakatsu Ohkubo, Kazuhiro Hono, Yasuhiro Une, Satoshi Okamoto  
NPG Asia Materials, **14(1)** 70 (20220819) [10.1038/s41427-022-00417-0]
- P12-04 Thickness-dependent electronic and magnetic states of Mn and Co atoms at Mn-rich Co<sub>2</sub>Mn<sub>1.20</sub>Ge<sub>0.38</sub>/MgO interfaces via soft x-ray magnetic circular dichroism  
S. Jena, M. Zzaman, V.K. Verma, K. Ishigami, G. Shibata, T. Ishikawa, G.f. Li, M. Yamamoto, R. Shahid, T. Koide, A. Fujimori, V.R. Singh  
Physica B: Condensed Matter, **627** 413619 (20220200) [10.1016/j.physb.2021.413619]
- P12-05 Cr doping-induced ferromagnetism in the spin-glass Cd<sub>1</sub>-Mn Te studied by x-ray magnetic circular dichroism  
V.K. Verma, S. Sakamoto, K. Ishikawa, V.R. Singh, K. Ishigami, G. Shibata, T. Kadono, T. Koide, S. Kuroda, A. Fujimori  
Physica B: Condensed Matter, **642** 414129 (20221000) [10.1016/j.physb.2022.414129]
- P12-06 Thermal activation in microwave-assisted magnetization switching and its effect on the switching behavior of granular media  
Nobuaki Kikuchi, Katsunari Sato, Satoshi Okamoto, Osamu Kitakami, Takehito Shimatsu, Hirofumi Suto  
Physical Review B, **105(5)** 54430 (20220225) [10.1103/physrevb.105.054430]
- P12-07 Spintronic Materials and Their Properties Investigated by Synchrotron Radiation  
Teruo ONO, Satoshi OKAMOTO, Daichi CHIBA, Masaki MIZUGUCHI, Ko MIBU  
Vacuum and Surface Science, **65(5)** 218-223 (20220510) [10.1380/vss.65.218]
- M12-01 放射光 X 線磁気トモグラフィによる永久磁石材料内部の 3 次元磁区構造観察  
鈴木基寛, 岡本 聡  
まぐね, **17** 187-193 (20220700)

## ハイブリッドナノシステム研究分野（蟹江 澄志 研究室）

- P13-01 Magnetorheological Elastomer Films with Controlled Anisotropic Alignment of Polystyrene-Modified Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> Nanoplates  
Chen Shen, Masaki Matsubara, Tomomi Masui, Hiroyuki Kishimoto, Shinya Yamanaka, Atsushi Muramatsu, Kiyoshi Kanie  
ACS APPLIED POLYMER MATERIALS, **4(10)** 7240-7249 (20221000) [10.1021/acsapm.2c01096]
- P13-02 Highly concentrated solvothermal synthesis of sub-10-nm BaTiO<sub>3</sub> nanoparticles for optical applications  
Yukika Yamada, Masaki Matsubara, Atsushi Muramatsu, Shin-ichi Takeda, Kiyoshi Kanie  
ADVANCED POWDER TECHNOLOGY, **33(8)** 103660 (20220800) [10.1016/j.appt.2022.103660]
- P13-03 Fluoride-free synthesis of high-silica CHA-type aluminosilicates by seed-assisted aging treatment for starting gel  
Ryota Osuga, Mizuho Yabushita, Takeshi Matsumoto, Masato Sawada, Toshiyuki Yokoi, Kiyoshi Kanie, Atsushi Muramatsu  
Chemical Communications, **58(82)** 11583-11586 (20220000) [10.1039/d2cc04032h]
- P13-04 Characterization of Aluminum Oxide Thin Films Formed on Surfaces of FeCo-V Alloys by Annealing under a Low Partial Pressure of Oxygen  
Kiyoshi Urakawa, Motohiro Kasuya, Kiyoshi Kanie, Hiroyuki Shibata, Takenobu Sato, Takashi Ebata, Shigeru Suzuki  
e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, **20** 150-154 (20220611) [10.1380/ejssnt.2022-026]
- P13-05 Improvement of Catalytic Activity of Ce-MFI-Supported Pd Catalysts for Low-Temperature Methane Oxidation by Creation of Concerted Active Sites  
Ryota Osuga, Atsushi Neya, Motohiro Yoshida, Mizuho Yabushita, Shuhei Yasuda, Sachiko Maki, Kiyoshi Kanie, Toshiyuki Yokoi, Atsushi Muramatsu  
Industrial & Engineering Chemistry Research, **61(27)** 9686-9694 (20220627) [10.1021/acs.iecr.2c01410]
- P13-06 Development of Synthetic Route for Fe-substituted MWW-type Zeolites Using Mechanochemical Method  
Ryota OSUGA, Ginpei TANAKA, Mizuho YABUSHITA, Kakeru NINOMIYA, Sachiko MAKI, Maiko NISHIBORI, Kiyoshi KANIE, Atsushi MURAMATSU  
Journal of the Japan Petroleum Institute, **65(2)** 67-77 (20220301) [10.1627/jpi.65.67]
- P13-07 Fabrication and performance evaluation of full-inkjet-printed dielectric-barrier-discharge plasma actuators  
Shintaro Sato, Kazuki Nishida, Toshimitsu Hirai, Masaki Ito, Hirofumi Teramae, Masaki Matsubara, Kiyoshi Kanie, Naofumi Ohnishi  
Sensors and Actuators A: Physical, **344** 113751 (20220900) [10.1016/j.sna.2022.113751]

## ナノ機能物性化学研究分野（組頭 広志 研究室）

- P14-01 Synthesis of High-Entropy Layered Oxide Epitaxial Thin Films: LiCr<sub>1/6</sub>Mn<sub>1/6</sub>Fe<sub>1/6</sub>Co<sub>1/6</sub>Ni<sub>1/6</sub>Cu<sub>1/6</sub>O<sub>2</sub>  
Kaidong Wang, Kazunori Nishio, Koji Horiba, Miho Kitamura, Kurei Edamura, Daisuke Imazeki, Ryo Nakayama, Ryota

- Shimizu, Hiroshi Kumigashira, Taro Hitosugi  
Crystal Growth and Design, **22(2)** 1116-1122 (20220202) [10.1021/acs.cgd.1c01076]
- P14-02 Direct Synthesis of Metastable  $\lambda$ -Phase  $\text{Ti}_3\text{O}_5$  Films on  $\text{LaAlO}_3$  (110) Substrates at High Temperatures  
Kohei Yoshimatsu, Hiroshi Kumigashira  
Crystal Growth & Design, **22(1)** 703-710 (20220105) [10.1021/acs.cgd.1c01214]
- P14-03 Electronic phase diagram of Cr-doped  $\text{VO}_2$  epitaxial films studied by in situ photoemission spectroscopy  
D. Shiga, X. Cheng, T. T. Kim, T. Kanda, N. Hasegawa, M. Kitamura, K. Yoshimatsu, H. Kumigashira  
arXiv:2211.14146 (20221125) [10.48550/arXiv.2211.14146]
- P14-04 Design, Synthesis, and Optoelectronic Properties of the High-Purity Phase in Layered  $\text{AETMn}_2$  (AE = Sr, Ba; TM = Ti, Zr, Hf) Semiconductors  
Akihiro Shiraishi, Shigeru Kimura, Xinyi He, Naoto Watanabe, Takayoshi Katase, Keisuke Ide, Makoto Minohara, Kosuke Matsuzaki, Hidenori Hiramatsu, Hiroshi Kumigashira, Hideo Hosono, Toshio Kamiya  
Inorganic Chemistry, **61(17)** 6650-6659 (20220502) [10.1021/acs.inorgchem.2c00604]
- P14-05 High-Mobility Metastable Rock-Salt Type (Sn,Ca)Se Thin Film Stabilized by Direct Epitaxial Growth on a YSZ (111) Single-Crystal Substrate  
Xinyi He, Jinshuai Chen, Takayoshi Katase, Makoto Minohara, Keisuke Ide, Hidenori Hiramatsu, Hiroshi Kumigashira, Hideo Hosono, Toshio Kamiya  
ACS Applied Materials and Interfaces, **14(16)** 18682-18689 (20220414) [10.1021/acsami.2c01464]
- P14-06 Giant spin-to-charge conversion at an all-epitaxial single-crystal-oxide Rashba interface with a strongly correlated metal interlayer  
Shingo Kaneta-Takada, Miho Kitamura, Shoma Arai, Takuma Arai, Ryo Okano, Le Duc Anh, Tatsuro Endo, Koji Horiba, Hiroshi Kumigashira, Masaki Kobayashi, Munetoshi Seki, Hitoshi Tabata, Masaaki Tanaka, Shinobu Ohya  
Nature Communications, **13(1)** (20221200) [10.1038/s41467-022-33350-5]
- P14-07 Development of a versatile micro-focused angle-resolved photoemission spectroscopy system with Kirkpatrick-Baez mirror optics  
Miho Kitamura, Seigo Souma, Asuka Honma, Daisuke Wakabayashi, Hirokazu Tanaka, Akio Toyoshima, Kenta Amemiya, Tappei Kawakami, Katsuaki Sugawara, Kosuke Nakayama, Kohei Yoshimatsu, Hiroshi Kumigashira, Takafumi Sato, Koji Horiba  
Review of Scientific Instruments, **93(3)** (20220301) [10.1063/5.0074393]
- P14-08 Low-temperature-processable amorphous-oxide-semiconductor-based phosphors for durable light-emitting diodes  
Keisuke Ide, Naoto Watanabe, Takayoshi Katase, Masato Sasase, Junghwan Kim, Shigenori Ueda, Koji Horiba, Hiroshi Kumigashira, Hidenori Hiramatsu, Hideo Hosono, Toshio Kamiya  
Applied Physics Letters, **121(19)** (20221107) [10.1063/5.0115384]
- P14-09 Photoinduced transient states of antiferromagnetic orderings in  $\text{La}_{1/3}\text{Sr}_{2/3}\text{FeO}_3$  and  $\text{SrFeO}_{3-\delta}$  thin films observed through time-resolved resonant soft x-ray scattering  
Kohei Yamamoto, Tomoyuki Tsuyama, Suguru Ito, Kou Takubo, Iwao Matsuda, Niko Pontius, Christian Schüßler-Langeheine, Makoto Minohara, Hiroshi Kumigashira, Yuichi Yamasaki, Hironori Nakao, Youichi Murakami, Takayoshi Katase, Toshio Kamiya, Hiroki Wadati  
New Journal of Physics, **24(4)** (20220400) [10.1088/1367-2630/ac5f31]
- P14-10 Rocksalt-type PrO epitaxial thin film as a weak ferromagnetic Kondo lattice  
H. Shimizu, D. Oka, K. Kaminaga, D. Saito, T. Yamamoto, N. Abe, N. Kimura, D. Shiga, H. Kumigashira, T. Fukumura  
Phys. Rev. B, **105** 14442 (20220131) [10.1103/physrevb.105.014442]
- P14-11 Two-dimensional superconductivity in single-band correlated 2H-type  $\text{NbO}_2$  layers  
Takuto Soma, Kohei Yoshimatsu, Koji Horiba, Hiroshi Kumigashira, Akira Ohtomo  
Physical Review B, **105(10)** 104504 (20220307) [10.1103/physrevb.105.104504]
- P14-12 Development of magnetism in Fe-doped magnetic semiconductors: Resonant photoemission and x-ray magnetic circular dichroism studies of (Ga,Fe)As  
Takahito Takeda, Shoya Sakamoto, Le Duc Anh, Yukiharu Takeda, Shin Ichi Fujimori, Miho Kitamura, Koji Horiba, Hiroshi Kumigashira, Atsushi Fujimori, Masaaki Tanaka, Masaki Kobayashi  
Physical Review B, **105(19)** 195155 (20220515) [10.1103/PhysRevB.105.195155]
- P14-13 Intervalence charge transfer and charge transport in the spinel ferrite ferromagnetic semiconductor Ru-doped  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$   
Masaki Kobayashi, Munetoshi Seki, Masahiro Suzuki, Ryo Okano, Miho Kitamura, Koji Horiba, Hiroshi Kumigashira, Atsushi Fujimori, Masaaki Tanaka, Hitoshi Tabata  
Physical Review B, **105(20)** 205103 (20220515) [10.1103/PhysRevB.105.205103]
- P14-14 Electronic band structure of  $\text{Ti}_2\text{O}_3$  thin films studied by angle-resolved photoemission spectroscopy  
N. Hasegawa, K. Yoshimatsu, D. Shiga, T. Kanda, S. Miyazaki, M. Kitamura, K. Horiba, H. Kumigashira  
Phys. Rev. B, **105(23)** 235137 (20220627) [10.1103/physrevb.105.235137]
- P14-15 Anomalously large spin-dependent electron correlation in the nearly half-metallic ferromagnet  $\text{CoS}_2$   
Hirokazu Fujiwara, Kensei Terashima, Junya Otsuki, Nayuta Takemori, Harald O. Jeschke, Takanori Wakita, Yuko Yano, Wataru Hosoda, Noriyuki Kataoka, Atsushi Teruya, Masashi Kakihana, Masato Hedo, Takao Nakama, Yoshichika Ōnuki, Koichiro Yaji, Ayumi Harasawa, Kenta Kuroda, Shik Shin, Koji Horiba, Hiroshi Kumigashira, Yuji Muraoka, Takayoshi Yokoya  
Physical Review B, **106(8)** 85114 (20220815) [10.1103/PhysRevB.106.085114]

- P14-16 Rocksalt CeO epitaxial thin film as a heavy-fermion system transiting from p -type metal to partially compensated n -type metal by 4f delocalization  
Nobuto Abe, Daichi Oka, Kenichi Kaminaga, Daisuke Shiga, Daichi Saito, Taku Yamamoto, Noriaki Kimura, Hiroshi Kumigashira, Tomoteru Fukumura  
Physical Review B, **106(12)** 125106 (20220915) [10.1103/PhysRevB.106.125106]
- P14-17 Electronic structure reconstruction by trimer formation in CsW<sub>2</sub>O<sub>6</sub> studied by x-ray photoelectron spectroscopy  
R. Nakamura, D. Takegami, A. Melendez-Sans, L. H. Tjeng, M. Okawa, T. Miyoshino, N. L. Saini, M. Kitamura, D. Shiga, H. Kumigashira, M. Yoshimura, K. D. Tsuei, Y. Okamoto, T. Mizokawa  
Physical Review B, **106(19)** 195104 (20221115) [10.1103/PhysRevB.106.195104]
- P14-18 Evidence of lattice deformation induced metal-insulator transition in Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub>  
K. Yoshimatsu, S. Miyazaki, N. Hasegawa, H. Kumigashira  
Physical Review B, **106(8)** L081110 (20220815) [10.1103/PhysRevB.106.L081110]
- P14-19 Polarity-dependent charge density wave in the kagome superconductor CsV<sub>3</sub>Sb<sub>5</sub>  
Takemi Kato, Yongkai Li, Kosuke Nakayama, Zhiwei Wang, Seigo Souma, Miho Kitamura, Koji Horiba, Hiroshi Kumigashira, Takashi Takahashi, Takafumi Sato  
Physical Review B, **106(12)** (20220915) [10.1103/PhysRevB.106.L121112]
- P14-20 Fermiology and Origin of Tc Enhancement in a Kagome Superconductor Cs(V<sub>1-x</sub>Nb<sub>x</sub>)<sub>3</sub>Sb<sub>5</sub>  
Takemi Kato, Yongkai Li, Kosuke Nakayama, Zhiwei Wang, Seigo Souma, Fumihiko Matsui, Miho Kitamura, Koji Horiba, Hiroshi Kumigashira, Takashi Takahashi, Yugu Yao, Takafumi Sato  
Physical Review Letters, **129(20)** (20221111) [10.1103/PhysRevLett.129.206402]
- P14-21 Crystal structure and electronic property modification of Ca<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> thin films via fluorine doping  
Shota Fukuma, Akira Chikamatsu, Tsukasa Katayama, Takahiro Maruyama, Keiichi Yanagisawa, Koji Kimoto, Miho Kitamura, Koji Horiba, Hiroshi Kumigashira, Yasushi Hirose, Tetsuya Hasegawa  
Physical Review Materials, **6(3)** (20220323) [10.1103/PhysRevMaterials.6.035002]
- P14-22 Fermiology of a topological line-nodal compound CaSb<sub>2</sub> and its implication to superconductivity: Angle-resolved photoemission study  
Chien Wen Chuang, Seigo Souma, Ayumi Moriya, Kosuke Nakayama, Atsutoshi Ikeda, Mayo Kawaguchi, Keito Obata, Shanta Ranjan Saha, Hidemitsu Takahashi, Shunsaku Kitagawa, Kenji Ishida, Kiyohisa Tanaka, Miho Kitamura, Koji Horiba, Hiroshi Kumigashira, Takashi Takahashi, Shingo Yonezawa, Johnpierre Paglione, Yoshiteru Maeno, Takafumi Sato  
Physical Review Materials, **6(10)** (20221000) [10.1103/PhysRevMaterials.6.104203]
- P14-23 Signature of topological band crossing in ferromagnetic Cr<sub>1/3</sub>NbSe<sub>2</sub> epitaxial thin film  
Bruno Kenichi Saika, Satoshi Hamao, Yuki Majima, Xiang Huang, Hideki Matsuoka, Satoshi Yoshida, Miho Kitamura, Masato Sakano, Tatsuto Hatanaka, Takuya Nomoto, Motoaki Hirayama, Koji Horiba, Hiroshi Kumigashira, Ryotaro Arita, Yoshihiro Iwasa, Masaki Nakano, Kyoko Ishizaka  
Physical Review Research, **4(4)** (20221000) [10.1103/PhysRevResearch.4.L042021]
- P14-24 Room-Temperature Preparation of Ta Ions-Containing Ionic Liquid and its Vapor Deposition toward Ta-Oxide Film Coating  
N. Hozuki, K. Kaminaga, S. Maruyama, D. Shiga, H. Kumigashira, H. Takato, M. Kondo, Y. Matsumoto  
J. Electrochem. Soc., **169** 13504 (20220127) [10.1149/1945-7111/ac48c5]
- P14-25 Surface proton conduction below 100 °C of Ce<sub>0.80</sub>Sm<sub>0.20</sub>O<sub>2-δ</sub> thin film with oxygen vacancies  
Go Notake, Daiki Nishioka, Hideaki Murasawa, Makoto Takayanagi, Yoshiaki Fukushima, Hiroki Ito, Tomoasa Takada, Daisuke Shiga, Miho Kitamura, Hiroshi Kumigashira, Tohru Higuchi  
Japanese Journal of Applied Physics, **61** SD1017 (20220600) [10.35848/1347-4065/ac4feb]
- P14-26 Enhancement of transparency in epitaxially-grown p-type SnO films by surface-passivation treatment in a Na<sub>2</sub>S aqueous solution  
Suguri Uchida, Takuto Soma, Miho Kitamura, Hiroshi Kumigashira, Akira Ohtomo  
Japanese Journal of Applied Physics, **61(5)** (20220500) [10.35848/1347-4065/ac56fa]
- P14-27 新しい準安定酸化チタン λ 相 Ti<sub>3</sub>O<sub>5</sub> ~多彩な相転移と薄膜合成~  
吉松公平  
光技術コンタクト, **60(5)** 12-20 (20220520)
- P14-28 新しい準安定酸化チタン 多彩な機能と合成法  
吉松公平  
化学と工業, **75(4)** 264-265 (20220400)

### 無機固体材料合成研究分野 (山根 久典 研究室)

- P15-01 Preparation of faceted TaN grains by heating Ta-containing oxides in BN crucible with Na  
Naoya Kuge, Toru Sekiya, Masanori Enoki, Hisanori Yamane, Takahiro Yamada  
Ceramics International, **48(8)** 10817-10820 (20220415) [10.1016/j.ceramint.2021.12.297]
- P15-02 Zn/Al-centered tetrahedral framework oxide Ba<sub>4</sub>Zn<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>9</sub>  
Rayko Simura, Kyosuke Sawamura, Hisanori Yamane  
Journal of Solid State Chemistry, **307** 122830 (20220300) [10.1016/j.jssc.2021.122830]
- P15-03 Synthesis, crystal structure, and photoluminescence of the new nitridoboroaluminosilicate phosphor  
(Sr<sub>0.93</sub>Eu<sub>0.07</sub>)<sub>11</sub>B<sub>2</sub>(Al<sub>0.275</sub>Si<sub>0.725</sub>)<sub>40</sub>N<sub>59</sub>  
Fumitaka Yoshimura, Makoto Nagasako, Hisanori Yamane  
Journal of Solid State Chemistry, **312** 123222 (20220800) [10.1016/j.jssc.2022.123222]

- P15-04 Hydrothermal synthesis and crystal structure of a novel double-perovskite-type bismuth oxide with 3:1 ordering at the B-site  
Khandaker Monower Hossain, Md Saiduzzaman, Nobuhiro Kumada, Takahiro Takei, Hisanori Yamane  
New Journal of Chemistry, **46(8)** 3595-3601 (20220100) [10.1039/d1nj05648d]
- P15-05  $\text{Na}_3\text{MgB}_{37}\text{Si}_9$  : an icosahedral  $\text{B}_{12}$  cluster framework containing  $\{\text{Si}_8\}$  units  
Haruhiko Morito, Takuji Ikeda, Yukari Katsura, Hisanori Yamane  
Acta Crystallographica Section E Crystallographic Communications, **78(2)** 203-206 (20220201)  
[10.1107/s2056989022000494]
- P15-06  $\text{Sr}_9\text{La}_2(\text{WO}_6)_4$  containing  $[\text{WO}_6]$  octahedra  
Rayko Simura, Tomoki Watanabe, Hisanori Yamane  
Acta Crystallographica Section E Crystallographic Communications, **78(8)** 766-769 (20220801)  
[10.1107/s2056989022006648]
- P15-07  $\text{BaY}_{16}\text{Si}_4\text{O}_{33}$  containing  $\text{Ba}(\text{SiO}_4)_4$  orthosilicates  
Shuto Motozawa, Hiromitsu Kimura, Junichi Takahashi, Rayko Simura, Hisanori Yamane  
Acta Crystallographica Section E Crystallographic Communications, **78(12)** 1249-1252 (20221201)  
[10.1107/s2056989022011057]
- P15-08 Occupancies of Y in garnet-type  $\text{Ca}_{0.8}\text{Y}_{3.4}\text{Zr}_{0.8}\text{Ga}_{3.0}\text{O}_{12}$  crystal  
Rayko Simura, Kyosuke Sawamura, Hisanori Yamane, Terutoshi Sakakura  
Journal of the Ceramic Society of Japan, **130(5)** 359-362 (20220501) [10.2109/jcersj2.22003]
- P15-09  $\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$  whiskers prepared by heating a mixture of  $\text{B}_2\text{O}_3$  and  $\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$   
Hisanori Yamane, Yuko Suzuki, Hiromu Watanabe  
Journal of the Ceramic Society of Japan, **130(4)** 303-307 (20220401) [10.2109/jcersj2.22010]
- P15-10 Atomic positions and displacements in piezoelectric materials  $\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  and  $\text{Ca}_3\text{TaGa}_{1.5}\text{Al}_{1.5}\text{Si}_2\text{O}_{14}$  investigated by  $\text{Ta-L}_{\alpha}$  X-ray fluorescence holography  
Mamoru Kitaura, Artoni Kevin R. Ang, Yuta Yamamoto, Naohisa Happo, Koji Kimura, Kouichi Hayashi, Shinta Watanabe, Yuui Yokota, Yuji Ohashi, Kei Kamada, Akira Yoshikawa, Hisanori Yamane, Akimasa Ohnishi  
Frontiers in Materials, **9** (20220902) [10.3389/fmats.2022.977371]
- P15-11 Electronic structure and optical properties of NaSi  
Motoharu Imai, Takahiro Yamada, Hisanori Yamane  
Japanese Journal of Applied Physics, **61(3)** 31004 (20220301) [10.35848/1347-4065/ac4d45]
- P15-12 実験室系異常散乱 X 線単結晶構造解析システム  
志村 玲子  
日本結晶学会誌, **64(2)** 111-112 (20220531) [10.5940/jcersj.64.111]
- P15-13 Unusual Resistive Transitions in the Nodal-Line Semimetallic Superconductor NaAlSi  
Daigorou Hirai, Toshiya Ikenobe, Takahiro Yamada, Hisanori Yamane, Zenji Hiroi  
Journal of the Physical Society of Japan, **91(2)** (20220215) [10.7566/jpsj.91.024702]
- P15-14 Pseudogap Formation in the Nodal-Line Semimetal NaAlGe  
Takahiro Yamada, Daigorou Hirai, Tamio Oguchi, Hisanori Yamane, Zenji Hiroi  
Journal of the Physical Society of Japan, **91(7)** (20220715) [10.7566/jpsj.91.074801]
- M15-01 EXAFS 実験による  $\text{Mg}_2\text{Si}$  単結晶の局所構造解析  
谷本拓, 北浦守, 渡邊真太, 伊奈稔哲, 今井基晴, 鶴殿治彦, 石崎学, 山根久典, 大西彰正  
応用物理学会春季学術講演会講演予稿集 (CD-ROM), **69th** (20220000)

### 金属機能設計研究分野 (亀岡 聡 研究室)

- P16-01 Promotional effects of  $\text{Pt-CeO}_2$  fabricated by hydrothermal leaching of  $\text{Al}_7\text{Ce}_{22-x}\text{Pt}_x$  ( $x=0, 0.1$ ) intermetallic compound for efficient catalytic CO oxidation  
U.N. Murthy, S.F. Wang, S. Kameoka  
Journal of Solid State Chemistry, **309** 122984 (20220000) [10.1016/j.jssc.2022.122984]
- P16-02 Catalytic Hydrogenation of  $\text{C}_2\text{H}_2$  over Amorphous  $\text{CeNi}_2\text{H}_x$  and Crystalline  $\text{CeNi}_2$ : Effects of Hydrogen-Induced Amorphization and Oxidation  
R. Tsukuda, S. Ohhashi, Y. Xu, C. Nishimura, S. Kameoka  
Materials Transactions, **63(3)** 343-350 (20220301) [10.2320/matertrans.MT-M2021202]

### 環境無機材料化学研究分野 (殷 澍 研究室)

- P17-01 Utility of  $\text{NaMoO}_3\text{F}$  as a Precursor for Homogeneous Distribution of Cobalt Dopants in Molybdenum Oxynitrides  
Yusuke Asakura, Takuya Hasegawa, Shu Yin  
Chemistry - An Asian Journal, **17(10)** (20220406) [10.1002/asia.202200143]
- P17-02  $\text{In}_2\text{S}_3$  nanosheets growing on sheet-like  $\gamma\text{-C}_3\text{N}_4$  as high-performance photocatalyst for  $\text{H}_2$  evolution under visible light  
Bingrong Guo, Bin Liu, Xinqiang Zhang, Junhong Lu, Chaoli Wang, Yuhua Wang, Shu Yin, Weihua Han  
International Journal of Energy Research, **46(7)** 9138-9149 (20220308) [10.1002/er.7791]
- P17-03 Synthesis and color tuning of titanium oxide inorganic pigment by phase control and mixed-anion co-doping  
Jindi Cao, Takuya Hasegawa, Yusuke Asakura, Peng Sun, Shuo Yang, Bin Li, Wenbin Cao, Shu Yin  
Advanced Powder Technology, **33(5)** 103576 (20220500) [10.1016/j.apt.2022.103576]

- P17-04 Synthesis and characterization of BiFeO<sub>3</sub>/LaFeO<sub>3</sub>/graphene composites as persulfate activator for removal of 4-nitrophenol  
Rosari Saleh, Saskia Andiane Hidayat, Muhammad Yose Rizal, Ardiansyah Taufik, Shu Yin  
Advanced Powder Technology, **33(10)** 103752 (20221000) [10.1016/j.appt.2022.103752]
- P17-05 Removal of multiple pollutants from water using noble Ag/Au/magnetite/graphene/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> system under light and ultrasound irradiation  
Rosari Saleh, Saskia Andiane Hidayat, Ardiansyah Taufik, Shu Yin  
Arabian Journal of Chemistry, **15(7)** 103881 (20220700) [10.1016/j.arabjc.2022.103881]
- P17-06 S-scheme Ti<sub>0.7</sub>Sn<sub>0.3</sub>O<sub>2</sub>/γ-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> heterojunction composite for enhanced photocatalytic pollutants degradation  
Bingrong Guo, Bin Liu, Chaoli Wang, Yuhua Wang, Shu Yin, Muhammad Sufyan Javed, Weihua Han  
Journal of Environmental Chemical Engineering, **10(2)** 107118 (20220400) [10.1016/j.jece.2021.107118]
- P17-07 Morphology and facet tailoring of CaSnO<sub>3</sub> assembled in molten salt with defect-mediated photocatalytic activity  
Jingwen Wang, Yusuke Asakura, Takuya Hasegawa, Shu Yin  
Journal of Environmental Chemical Engineering, **10(5)** 108169 (20221000) [10.1016/j.jece.2022.108169]
- P17-08 Self-healing ability, strength enhancement, and high-temperature oxidation behavior of silicon carbide-dispersed ytterbium disilicate composite for environmental barrier coatings under isothermal heat treatment  
A. Okawa, S.T. Nguyen, J.P. Wiff, H.-W. Son, T. Nakayama, H. Hashimoto, T. Sekino, T.M.D. Do, H. Suematsu, T. Suzuki, T. Goto, K. Niihara  
Journal of the European Ceramic Society, **42(13)** 6170-6181 (20220500) [10.1016/j.jeurceramsoc.2022.05.057]
- P17-09 Boosting photocharge separation in Z-schemed γ-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/RGO/In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> photocatalyst for H<sub>2</sub> evolution and antibiotic degradation  
Bingrong Guo, Bin Liu, Chaoli Wang, Junhong Lu, Yuhua Wang, Shu Yin, Muhammad Sufyan Javed, Weihua Han  
Journal of Industrial and Engineering Chemistry, **110** 217-224 (20220600) [10.1016/j.jiec.2022.02.056]
- P17-10 Surface modification of Ag<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> using the alginate for highly active photocatalyst under visible light irradiation  
Uyi Sulaeman, Yusvirza Khairullah Gandasasmita, Hartiwi Diastuti, Ponco Iswanto, Isnaeni Isnaeni, Ardiansyah Taufik, Shu Yin  
Surfaces and Interfaces, **28** 101672 (20220200) [10.1016/j.surfin.2021.101672]
- P17-11 Electrochromic Behavior Originating from the W<sub>6</sub>+/W<sub>5</sub>+ Redox in Aurivillius-type Tungsten-Based Layered Perovskites  
Reona Imura, Takuya Hasegawa, Shu Yin  
Inorganic Chemistry, **61(5)** 2509-2516 (20220123) [10.1021/acs.inorgchem.1c03364]
- P17-12 Cerium(III) Niobate Layered Perovskites: Abnormal Optical Absorption Modulations by Tuning of B-Site Composition and Perovskite Layer Charge Control  
Takuya Hasegawa, Tadaharu Ueda, Yusuke Asakura, Shu Yin  
Inorganic Chemistry, **61(50)** 20636-20646 (20221202) [10.1021/acs.inorgchem.2c03550]
- P17-13 Impact of Surface Faceting on Gas Sensing Selectivity of NiO: Revealing the Adsorption Sites of Organic Vapors on the 111 Facet  
Angga Hermawan, Adie Tri Hanandriyo, Kenta Hongo, Ryo Maezono, Shu Yin  
The Journal of Physical Chemistry C, **126(18)** 8037-8046 (20220512) [10.1021/acs.jpcc.2c00092]
- P17-14 Mechanism investigation of the enhanced oxygen storage performance of YBaCo<sub>4</sub>O<sub>7+δ</sub> synthesized by a glycine-complex decomposition method  
Ting Ru Chen, Takuya Hasegawa, Sung Hun Cho, Tomoyo Goto, Tohru Sekino, Masato Kakihana, Shu Yin  
Chemical Communications, **58(17)** 2822-2825 (20220000) [10.1039/d1cc06157g]
- P17-15 WS<sub>2</sub>/In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> composite photocatalyst for photocatalytic H<sub>2</sub> generation and pollutant degradation  
Bingrong Guo, Bin Liu, Chaoli Wang, Yuhua Wang, Shu Yin, Weihua Han  
New Journal of Chemistry, **46(16)** 7366-7373 (20220000) [10.1039/d2nj00190j]
- P17-16 Element doping: a marvelous strategy for pioneering the smart applications of VO<sub>2</sub>  
Yibei Xue, Shu Yin  
Nanoscale, **14(31)** 11054-11097 (20220000) [10.1039/d2nr01864k]
- P17-17 Slag resistance mechanism of CaO · 6Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> refractory and its effect on inclusions of aluminum deoxidized steel  
Jie Liu, Bin Li, Yuanping Jia, Junhong Chen, Jisheng Feng, Bo Ren, Shu Yin, Zhijiao Zhang, Diansheng Gong  
International Journal of Applied Ceramic Technology, **19(6)** 3323-3333 (20221100) [10.1111/ijac.14156]
- P17-18 Coprecipitation synthesis of Ca<sub>14</sub>Al<sub>10</sub>Zn<sub>6</sub>O<sub>35</sub> : Mn<sup>4+</sup> deep-red phosphor and silica-modified waterproofing ability  
Ayu Nakagawa, Hirotohi Nakabayashi, Yoshinori Nishiwaki, Shuhei Ogo, Tadaharu Ueda, Takuya Hasegawa  
Journal of the American Ceramic Society (20220000) [10.1111/jace.18831]
- P17-19 Synthesis of star-like BiVO<sub>4</sub> photocatalysts by organic-aqueous hetero-phase reaction: Interaction between bismuth and amino group of oleylamine  
Taisei Hangai, Namiki Uchiyama, Takuya Hasegawa, Yusuke Asakura, Shu Yin  
Functional Materials Letters, **15(4)** (20220500) [10.1142/s1793604722500205]
- P17-20 Surface engineering of Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXene by oxygen plasma irradiation as room temperature ethanol sensor  
Zijing Wang, Fen Wang, Angga Hermawan, Jianfeng Zhu, Shu Yin  
Functional Materials Letters, **15(1)** (20220100) [10.1142/s1793604722510079]
- P17-21 Morphology Control of Transition Metal Oxides by Liquid-Phase Process and Their Material Development  
Shu Yin, Takuya Hasegawa  
KONA Powder and Particle Journal, **2022(40)** 2023015 (20221100) [10.14356/kona.2023015]

- P17-22 The Enrichment of Silver Ions in  $\text{Ag}_3\text{PO}_4$  through the Morphology Changes and Their Photocatalytic Activities  
Uyi Sulaeman, Khusnul Afifah, Hartiwi Diastuti, Shu Yin  
*Molekul*, **17(1)** 10-18 (20220316) [10.20884/1.jm.2022.17.1.5606]
- P17-23 Electrochemical antioxidant capacity measurement: a downsized system and its application to agricultural crops  
Hiroki Ishida, Naoki Yamasaki, Yuuki Otsuka, Daichi Mori, Tomoko Shimamura, Takuya Hasegawa, Shuhei Ogo, Tadaharu Ueda  
*Analytical Sciences*, **38(1)** 151-156 (20220100) [10.2116/analsci.21P217]
- P17-24 Recent Advances in Ternary Metal Oxides Modified by N Atom for Photocatalysis  
Jingwen Wang, Takuya Hasegawa, Yusuke Asakura, Shu Yin  
*Catalysts*, **12(12)** 1568 (20221202) [10.3390/catal12121568]
- P17-25 Reaction Mechanism of  $\text{CA}_6$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  and  $\text{CA}_6\text{-Al}_2\text{O}_3$  Refractories with Refining Slag  
Jie Liu, Zheng Liu, Jisheng Feng, Bin Li, Junhong Chen, Bo Ren, Yuanping Jia, Shu Yin  
*Materials*, **15(19)** 6779 (20220930) [10.3390/ma15196779]
- P17-26 室温でのガスセンサー性能の向上に資する  $\text{MoS}_2$  の結晶相と表面構造エンジニアリング  
アーディアンサトーフック, 朝倉 裕介, 長谷川 拓哉, 加藤 英樹, 垣花 真人, ロサリ サレー, 関野 徹, 殷 澍  
*粉体工学会誌*, **59(7)** 338-347 (20220710) [10.4164/sptj.59.338]
- M17-01 セリウム導入層状ペロブスカイトと電荷中性層の創成  
長谷川拓哉  
*セラミックス*, **57(8)** 507-510 (20220800)
- M17-02 ダイバーシティについて考える  
殷 澍  
*無機マテリアル学会*, **29(2)** 57-59 (20220200)

### 物質変換無機材料研究分野 (加藤 英樹 研究室)

- P18-01 Acid-Base Property of Tetragonal  $\text{YNbO}_4$  with Phosphate Groups and Its Catalysis for the Dehydration of Glucose to 5-Hydroxymethylfurfural  
Daniele Padovan, Koichiro Endo, Takeshi Matsumoto, Toshiyuki Yokoi, Atsushi Fukuoka, Hideki Kato, Kiyotaka Nakajima  
*Small Structures*, 2200224 (20221116) [10.1002/ssstr.202200224]
- P18-02 Photocatalytic  $\text{CO}_2$  reduction by a Z-scheme mechanism in an aqueous suspension of particulate  $(\text{CuGa})_{0.3}\text{Zn}_{1.4}\text{S}_2$ ,  $\text{BiVO}_4$  and a Co complex operating dual-functionally as an electron mediator and as a cocatalyst  
Tomiko M. Suzuki, Shunya Yoshino, Keita Sekizawa, Yuichi Yamaguchi, Akihiko Kudo, Takeshi Morikawa  
*Applied Catalysis B: Environmental*, 121600 (20220600) [10.1016/j.apcatb.2022.121600]
- P18-03 Fabrication of high-efficiency YAG :  $\text{Ce}^{3+}$  phosphors via concurrent optimization of firing atmosphere and fluxing agent  
Shinnosuke Akiyama, Riho Moriyama, Ryo Miya, Takehiro Tanaka, Junya Tanaka, Yasushi Sato, Koji Tomita, Masato Kakihana, Hideki Kato  
*Optical Materials*, **128** 112386 (20220600) [10.1016/j.optmat.2022.112386]
- P18-04  $\text{CO}_2$  Reduction Using Water as an Electron Donor over Heterogeneous Photocatalysts Aiming at Artificial Photosynthesis  
Shunya Yoshino, Tomoaki Takayama, Yuichi Yamaguchi, Akihiko Kudo  
*Accounts of Chemical Research*, **55(7)** 966-977 (20220405) [10.1021/acs.accounts.1c00676]
- P18-05 Photocatalytic Systems for  $\text{CO}_2$  Reduction: Metal-Complex Photocatalysts and Their Hybrids with Photofunctional Solid Materials  
Hiromu Kumagai, Yusuke Tamaki, Osamu Ishitani  
*Accounts of Chemical Research*, **55(7)** 978-990 (20220405) [10.1021/acs.accounts.1c00705]
- P18-06 Photocatalytic  $\text{CO}_2$  Reduction Using Water as an Electron Donor under Visible Light Irradiation by Z-Scheme and Photoelectrochemical Systems over  $(\text{CuGa})_{0.5}\text{ZnS}_2$  in the Presence of Basic Additives  
Shunya Yoshino, Akihiko Iwase, Yuichi Yamaguchi, Tomiko M. Suzuki, Takeshi Morikawa, Akihiko Kudo  
*Journal of the American Chemical Society*, **144(5)** 2323-2332 (20220209) [10.1021/jacs.1c12636]
- P18-07 Durable photoelectrochemical  $\text{CO}_2$  reduction with water oxidation using a visible-light driven molecular photocathode  
Ryutarō Kamata, Hiromu Kumagai, Yasuomi Yamazaki, Masanobu Higashi, Ryu Abe, Osamu Ishitani  
*Journal of Materials Chemistry A*, **9(3)** 1517-1529 (20220000) [10.1039/d0ta07351b]
- P18-08 Influences of pulverization and annealing treatment on the photocatalytic activity of  $\text{BiVO}_4$  for oxygen evolution  
Kazuya Okuno, Hiromu Kumagai, Junie Jhon M. Vequizo, Kosaku Kato, Makoto Kobayashi, Akira Yamakata, Masato Kakihana, Hideki Kato  
*Sustainable Energy & Fuels*, **6(7)** 1698-1707 (20220000) [10.1039/d2se00065b]
- P18-09 Crystal-phase and Surface-Structure Engineering of  $\text{MoS}_2$  for Improving Gas Sensor Performance at Room Temperature  
Ardiansyah Taufik, Yusuke Asakura, Takuya Hasegawa, Hideki Kato, Masato Kakihana, Rosari Saleh, Tohru Sekino, Shu Yin  
*Journal of the Society of Powder Technology, Japan*, **59(7)** 338-347 (20220710) [10.4164/sptj.59.338]
- M18-01 活性サイトの周辺環境の設計による  $\text{O}_2/\text{CO}_2$  還元活性への影響  
熊谷啓  
*触媒*, **64(1)** (20220131)

## (プロセスシステム工学研究部門)

## 超臨界ナノ工学研究分野 (阿尻 雅文 研究室)

- P19-01 Supercritical Hydrothermal Synthesis of Organic-Modified  $Ce_{1-x}Zr_xO_{2-\delta}$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) Nanoparticles as a Low-Temperature Oxygen Carrier  
Akira Yoko, Thunyapong Kamonvarapitak, Gimyeong Seong, Takaaki Tomai, Tadafumi Adschiri  
CHEMNANOMAT, **8(4)** (20220400) [10.1002/cnma.202100495]
- P19-02 One-Pot Solvothermal Synthesis of Spinel  $MgFe_2O_4$  Nanoparticles as a Promising Cathode Material for Rechargeable Mg-ion Battery  
Vinay Gangaraju, Kunal Roy, Mahesh Shastri, Navya Rani Marilingaiah, Manjunath Shetty, Hiroaki Kobayashi, Takaaki Tomai, Prasanna D. Shivaramu, Dinesh Rangappa  
Springer Proceedings in Materials, 99-112 (20220403) [10.1007/978-981-16-7554-6.8]
- P19-03 Utilization of Sub- and Supercritical Water for Nano-Catalyst Synthesis and Waste and Biomass Processing  
Akira Yoko, Gimyeong Seong, Takaaki Tomai, Tadafumi Adschiri  
Waste and Biomass Valorization, **13(1)** 51-66 (20220100) [10.1007/s12649-021-01483-1]
- P19-04 Rapid, one-step fabrication of  $MoS_2$  electrocatalysts by hydrothermal electrodeposition  
Yuta Nakayasu, Hiroaki Kobayashi, Shusuke Katahira, Takaaki Tomai, Itaru Honma  
Electrochemistry Communications, **134** 107180 (20220100) [10.1016/j.elecom.2021.107180]
- P19-05 Energy intensity in applying low-temperature chemical looping in steam reforming  
Thor Alexis Sazon, Teruyuki Shimizu, Yasuhiro Fukushima, Tadafumi Adschiri, Yasunori Kikuchi  
Process Safety and Environmental Protection, **159** 850-861 (20220100) [10.1016/j.psep.2022.01.057]
- P19-06 Uniform Organically Modified  $CeO_2$  Nanoparticles Synthesized from a Carboxylate Complex under Supercritical Hydrothermal Conditions: Impact of Ce Valence  
Yuki Omura, Akira Yoko, Gimyeong Seong, Maiko Nishibori, Kakeru Ninomiya, Takaaki Tomai, Tadafumi Adschiri  
The Journal of Physical Chemistry C, **126(13)** 6008-6015 (20220324) [10.1021/acs.jpcc.2c00088]
- P19-07 Graphene and Polyethyleneimine Bilayer Wrapping onto Quinone Molecular Crystal Cathode Materials for Aqueous Zinc-Ion Batteries  
Hiroaki Kobayashi, Kotaro Oizumi, Takaaki Tomai, Itaru Honma  
ACS Applied Energy Materials, **5(4)** 4707-4711 (20220425) [10.1021/acsam.2c00134]
- P19-08 One-Pot Super Critical Fluid Synthesis of Spinel  $MnFe_2O_4$  Nanoparticles and its Application as Anode Material for Mg-ion Battery  
Vinay Gangaraju, Tathagata Sardar, Kunal Roy, Mahesh Shastri, Manjunath Shetty, Murthy Muniyappa, Hiroaki Kobayashi, Takaaki Tomai, Ananda Kumar C S, Prasanna D. Shivaramu, Dinesh Rangappa  
Asian Journal of Chemistry, **34(4)** 989-994 (20220000) [10.14233/ajchem.2022.23642]
- M19-01 PS と PVK を母材としたプラスチックシンチレータの開発と混合比率の影響  
小松崎崇介, 渡邊晶斗, 佐藤敦史, 越水正典, 横哲, SEONG Gimyeong, 筈居高明, 阿尻雅文, 岸本俊二, 藤本裕, 浅井圭介  
応用物理学会春季学術講演会講演予稿集 (CD-ROM), **69th** (20220000)
- M19-02  $ZrO_2$  ナノ粒子装荷液体シンチレータにおけるナノ粒子の分散濃度向上を企図した修飾剤の仕込み比検討  
渡邊晶斗, 越水正典, 横哲, SEONG Gimyeong, 筈居高明, 阿尻雅文, 林大和, 藤本裕, 浅井圭介  
応用物理学会春季学術講演会講演予稿集 (CD-ROM), **69th** (20220000)
- M19-03 二重  $\beta$  崩壊探索実験用液体シンチレータの開発に向けた二種分子修飾  $ZrO_2$  ナノ粒子の合成  
渡邊晶斗, 越水正典, 横哲, SEONG G., 筈居高明, 阿尻雅文, 林大和, 藤本裕, 浅井圭介  
日本セラミックス協会年会講演予稿集 (Web), **2022** (20220000)
- B19-01 実例で学ぶ化学工学 - 課題解決のためのアプローチ  
化学工学会教科書委員会  
丸善出版 (20220100)

## 光物質科学研究分野 (佐藤 俊一 研究室)

- P20-01 Roadmap of incoherent digital holography  
Tatsuki Tahara, Yaping Zhang, Joseph Rosen, Vijayakumar Anand, Liangcai Cao, Jiachen Wu, Takako Koujin, Atsushi Matsuda, Ayumi Ishii, Yuichi Kozawa, Ryo Okamoto, Ryutaro Oi, Teruyoshi Nobukawa, Kihong Choi, Masatoshi Imbe, Ting-Chung Poon  
Applied Physics B, **128** 193 (20221000) [10.1007/s00340-022-07911-x]
- P20-02 Single-scan volumetric imaging throughout thick tissue specimens by one-touch installable light-needle creating device  
Ching-Pu Chang, Kohei Otomo, Yuichi Kozawa, Hirokazu Ishii, Miwako Yamasaki, Masahiko Watanabe, Shunichi Sato, Ryosuke Enoki, Tomomi Nemoto  
Scientific Reports, **12(1)** 10468 (20220621) [10.1038/s41598-022-14647-3]
- P20-03 Properties of electron lenses produced by ponderomotive potential with Bessel and Laguerre-Gaussian beams  
Yuuki Uesugi, Yuichi Kozawa, Shunichi Sato  
Journal of Optics, **24(5)** 54013 (20220501) [10.1088/2040-8986/ac6524]
- P20-04 Wavefront engineered light needle microscopy for axially resolved rapid volumetric imaging  
Yuichi Kozawa, Tomoya Nakamura, Yuuki Uesugi, Shunichi Sato  
Biomedical Optics Express, **13(3)** 1702-1717 (20220217) [10.1364/boe.449329]

- P20-05 Single-path single-shot phase-shifting digital holographic microscopy without a laser light source  
Tatsuki Tahara, Yuichi Kozawa, Ryutaro Oi  
Optics Express, **30(2)** 1182-1194 (20220117) [10.1364/oe.442661]
- P20-06 Harmonically mode-locked laser pulse accumulation in a self-resonating optical cavity  
Yuya Koshiba, Seiya Otsuka, Koki Yamashita, Chikara Fukushima, sakae araki, Alexander Aryshev, Tsunehiko Omori, Konstantin Popov, Tohru Takahashi, Nobuhiro Terunuma, Yuuki Uesugi, Junji Urakawa, Masakazu Washio  
Optics Express, **30(24)** 43888-43899 (20221108) [10.1364/oe.472917]
- P20-07 Synthesis of Noble Metals and Their Alloy Nanoparticles by Laser-induced Nucleation in a Highly Intense Laser Field  
Takahiro Nakamura, Yuki Yamazaki, Shunichi Sato  
KONA Powder and Particle Journal (20220110) [10.14356/kona.2022002]
- M20-01 Properties of electron lenses produced by ponderomotive potential with Bessel and Laguerre-Gaussian beams  
Yuuki Uesugi, Yuichi Kozawa, Shunichi Sato  
arXiv (20220100)
- M20-02 3次元像を1回の2次元走査のみから取得する新しいレーザー走査型蛍光顕微鏡法を開発  
小澤 祐市  
セラミックス, **57(6)** 425 (20220600)
- M20-03 レーザー誘起化学反応：水中 CO<sub>2</sub> 分子からの有機物生成  
西 哲平, 佐藤 俊介, 大嶋 文子, 中村 貴宏, 佐藤 俊一, 森川 健志  
フォトニクスニュース, **7(4)** (20220300)
- M20-04 3次元情報を高速に取得するレーザー走査型顕微鏡技術  
小澤 祐市  
化学工業, **73(5)** 285-290 (20220500)
- B20-02 レーザ加工の最新動向  
小澤祐市  
“第18章 強く集光したベクトルビームによるレーザー微細加工”, シーエムシー出版 (20221130) [ISBN: 9784781316833]

### 固体イオニクス・デバイス研究分野（雨澤 浩史 研究室）

- P21-01 V-V Dimerization and Magnetic State of Cobalt Ions in Ilmenite Type CoVO<sub>3</sub>  
Sachiko Kamiyama, Ikuya Yamada, Masayuki Fukuda, Yuichi Okazaki, Takashi Nakamura, Takumi Nishikubo, Masaki Azuma, Hiroyuki Kimura, Hajime Yamamoto  
Inorganic Chemistry, **61** 7841-7846 (20220500) [10.1021/acs.inorgchem.2c00382]
- P21-02 Thermodynamic Analysis Enables Quantitative Evaluation of Lattice Oxygen Stability in Li-Ion Battery Cathodes  
Xue-Yan Hou, Yuta Kimura, Yusuke Tamenori, Kiyofumi Nitta, Hirona Yamagishi, Koji Amezawa, Takashi Nakamura  
ACS Energy Letters, **7** 1687-1693 (20220415) [10.1021/acsenrgylett.2c00353]
- P21-03 Fast fluoride ion conduction of NH<sub>4</sub>(Mg<sub>1-x</sub>Li<sub>x</sub>)F<sub>3-x</sub> and (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(Mg<sub>1-x</sub>Li<sub>x</sub>)F<sub>4-x</sub> assisted by molecular cations  
Kota Motohashi, Yosuke Matsukawa, Takashi Nakamura, Yuta Kimura, Naoaki Kuwata, Yoshiharu Uchimoto, Koji Amezawa  
Scientific Reports, **12(1)** 5955 (20220408) [10.1038/s41598-022-09835-0]
- P21-04 High-temperature ionic logic gates composed of an ionic rectifying solid-electrolyte interface  
Takashi Nakamura, Miri Honda, Yuta Kimura, Koji Amezawa  
RSC Advances, **12(29)** 18501-18506 (20220600) [10.1039/d2ra00710j]
- P21-05 非負値行列因子分解による2次元X線吸収スペクトルデータの解析  
青西 亨, 谷本 寛樹, 徐 宏坤, 水牧 仁一朗, 妹尾 与志木, 内和田 純平, 山上 遼, 熊添 博之, 岩満 一功, 木村 勇太, 雨澤 浩史, 赤井 一郎  
日本神経回路学会誌, **29(1)** 3-14 (20220305) [10.3902/jnns.29.3]
- P21-06 放射光 X 線を用いた全固体電池における反応分布の三次元オペランド分析  
雨澤 浩史, 木村 勇太  
電気化学, **90(1)** 32-38 (20220305) [10.5796/denkikagaku.22-fe0008]
- P21-07 Revealing Impacts of Anion Defect Species on Fluoride-Ion Conduction of Ruddlesden-Popper Oxyfluoride Ba<sub>2</sub>ScO<sub>3</sub>F  
Kota MOTOHASHI, Takanori SANADA, Takashi NAKAMURA, Yuta KIMURA, Yoshiharu UCHIMOTO, Koji AMEZAWA  
Electrochemistry, **90(12)** 127005 (20221220) [10.5796/electrochemistry.22-00114]
- M21-01 酸化物正極材料における酸素欠陥とその能動制御に向けた取り組み  
中村 崇司, 太田 健斗, Xueyan Hou, 木村 勇太, 雨澤 浩史  
電池技術 2022, **34** 23-29 (20221000)
- M21-02 リチウム電池モデル電極の充電過程を計測した高次元スペクトルイメージの片側直交非負値行列因子分解とベイズ分光法による解析  
赤井一郎, 内和田純平, 山上遼, 熊添博之, 岩満一功, 谷本寛樹, HONGKUN X., 青西亨, 水牧仁一朗, 妹尾与志木, 木村勇太, 雨澤浩史  
日本物理学会講演概要集 (CD-ROM), **77(1)** (20220000)
- M21-03 顕微 XAFS データの非負値行列因子分解で得られた XANES スペクトルのベイズ分光 II  
内和田純平, 山上遼, 岩満一功, 熊添博之, 谷本寛樹, 徐宏坤, 青西亨, 水牧仁一朗, 妹尾与志木, 木村勇太, 雨澤浩史, 赤井一郎  
日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (Web), **35th** (20220000)



## 環境適合素材プロセス研究分野（埜上 洋 研究室）

- P22-01 Dynamic Model of High-Temperature Sintered Iron Ore Plastic Deformation Considering Reduction Degree  
Shungo Natsui, Mizuki Tanaka, Andrey Stephan Siahhaan, Hiroshi Nogami  
Metallurgical and Materials Transactions B, **53(6)** 3842-3855 (20221200) [10.1007/s11663-022-02646-8]
- P22-02 Quantification of the impact of residual H<sub>2</sub>O on cathodic behavior in molten CaCl<sub>2</sub> electrolysis  
Shungo Natsui, Ryota Shibuya, Ryosuke O. Suzuki, Tatsuya Kikuchi, Akihisa Ito, Takahiro Sato, Rei Yamamoto, Hiroshi Nogami  
Journal of Sustainable Metallurgy, **8** 532-540 (20220200) [10.1007/s40831-022-00516-w]
- P22-03 Impact of high-temperature non-uniform degradation on fines clogging and gas flow in a coke bed  
Shungo Natsui, Azuma Hirai, Koki Terui, Yusuke Kashihara, Akinori Murao, Yuji Miki, Hiroshi Nogami  
Chemical Engineering Journal, **427** 131484 (20220100) [10.1016/j.cej.2021.131484]
- P22-04 Droplet behavior analysis on inclined, highly sticky, or slippery superhydrophobic nanostructured surfaces by observation and SPH simulation  
Shungo Natsui, Kazui Tonya, Daiki Nakajima, Tatsuya Kikuchi, Hiroshi Nogami  
Chemical Engineering Science, **248** 117214 (20220200) [10.1016/j.ces.2021.117214]
- P22-05 Formation of Bright White Plasma Electrolytic Oxidation Films with a Uniform Maze-Like Structure by Anodizing Aluminum in Ammonium Tetraborate Solutions  
Tatsuya Kikuchi, Miu Sato, Mana Iwai, Daiki Nakajima, Junji Nunomura, Yoshiyuki Oya, Shungo Natsui  
Journal of The Electrochemical Society, **169(4)** 43505 (20220408) [10.1149/1945-7111/ac62bc]
- P22-06 Long-term Experiment of Hot Spring Heat Recovery Using Rotary Heat Exchanger by Controlling Precipitation  
Nobuhiro Maruoka, Takuya Yamamoto, Satoshi Endo, Tadanobu Aizawa, Toshimitsu Ono, Hiroshi Sasaki, Katsuhiko Oyama  
ISIJ International, **62(12)** 2529-2535 (20221215) [10.2355/isijinternational.isijint-2022-152]
- P22-07 Gas Permeability Evaluation of Granulated Slag Particles Packed Bed during Softening and Melting Stage with Fanning's Equation  
Ko-ichiro Ohno, Yoshiki Kitamura, Sohei Sukenaga, Shungo Natsui, Takayuki Maeda, Kazuya Kunitomo  
Tetsu-to-Hagane, **108(10)** 703-712 (20220000) [10.2355/tetsutohagane.tetsu-2022-025]
- P22-08 簡易数学モデルによるロータリーキルン内固形装入物の伝熱・反応シミュレーション  
小出 俊介, 水野 等, 山口 一良, 埜上 洋, 長坂 徹也  
エネルギー・資源学会論文誌, **43(5)** 216-224 (20220910) [10.24778/jjser.43.5\_216]
- P22-09 回転円筒式蓄熱型ボイラの研究開発  
丸岡伸洋  
ボイラ研究, **435** 9-14 (20221000)
- M22-01 Examination of reaction mechanism by in-situ observation of combustion behavior of copper concentrate granules  
Jun-ichi Takahashi, Shungo Natsui, Akihisa Itoh, Hiroshi Nogami  
Copper2022 (copper international conference) Vol.3: The Igor Wilkomirsky Symposium on Pyrometallurgy, edited by Instituto de Ingenieros de Minas de Chile (IIMCh), 635 (20221100)
- M22-02 熱流動解析による境界剥ぎ取り型熱交換器内の伝熱促進機構の検討  
吉川颯, 菊池亮, 立谷大輔, 金井智哉, 夏井俊悟, 河合秀樹, 埜上洋  
化学工学会 第 53 回秋季大会 研究発表要旨集, AC102 (20220900)
- M22-03 鋼材切断時あるいは溶接時に発生する Hume 微粒子の飛散流動シミュレーション  
河合秀樹, 後藤 義宏, 吉成 哲, 大石義彦, 佐藤 森, Stephan Siahhaan Andrey, 埜上 洋  
化学工学会 第 87 年会 研究発表要旨集, **87th** PB264 (20220300)
- M22-04 ファニングの式による軟化溶融を伴うスラグ粒子充填層の通気性評価  
大野 光一郎, 前田 敬之, 国友 和也, 喜多村 佳輝, 助永 壮平, 夏井 俊悟  
材料とプロセス, **35** 1 (20220300)
- M22-05 銅を含む炭素飽和溶融鉄-溶融酸化物界面におけるアノード反応挙動  
夏井俊悟, 佐藤 丘郭, 伊藤昭久, 岩間崇之, 植田滋, 埜上 洋  
材料とプロセス, **35** 39 (20220300)
- M22-06 シャフト炉における水素多量吹込み時の 3 次元 DEM-CFD 反応解析  
岩永大熙, 照井光輝, 廣澤寿幸, 三木祐司, 夏井俊悟, 埜上 洋  
材料とプロセス, **35** 56 (20220300)
- M22-07 粒子-流体シミュレーションによるレースウェイの不安定挙動の動力学的解析  
和田 大輝, 夏井 俊悟, 埜上 洋  
材料とプロセス, **35** 510 (20220900)
- M22-08 3 次元 DEM-CFD モデルを用いたコークス混合による鉱石層の還元性向上  
松永亮太郎, 柏原佑介, 廣澤寿幸, 深田喜代志, 三木祐司, 夏井俊悟, Andrey Stephan Siahhaan, 埜上洋  
材料とプロセス, **35** 522 (20220900)
- M22-09 溶融塩電解を用いた TiO<sub>2</sub> 還元反応に対するカソード電極への回転印加の影響  
山本玲維, 夏井俊悟, 埜上 洋  
材料とプロセス, **35** PS-18 (20220300)

- M22-10 境界剥ぎ取り型熱交換器内の温度分布解析による伝熱促進機構の検討  
吉川 颯, 夏井俊悟, 埜上 洋  
材料とプロセス, **35** PS-20 (20220300)
- M22-11 高炉レースウェイの模型実験による粒子旋回挙動の解析  
和田大輝, 夏井俊悟, 埜上 洋  
材料とプロセス, **35** PS-21 (20220300)
- M22-12 高温酸素気流中における各種硫化物の燃焼挙動  
埜上 洋, 西村 伊織, 伊藤 昭久, 王 笑語, 夏井 俊悟  
資源・素材 2022 (福岡) 2022 年度資源・素材講演集, **9(2)** 1201-08-02 (20220900)
- M22-13 シリカ含有銅精鉱小塊の燃焼パターン解析  
夏井 俊悟, 埜上 洋  
資源・素材 2022 (福岡) 2022 年度資源・素材講演集, **9(2)** 2103-09-05 (20220900)
- M22-14 高速度イメージングと Deep Learning 支援による銅マット-スラグ形成場マルチフィジックスの開拓  
夏井俊悟, 埜上 洋  
資源・素材学会 2022 年度 春季大会 - 2022 年度資源・素材関係学協会合同春期大会概要集一, 3K0101-08-06 (20220300)
- M22-15 乾式製錬炉内液滴合一挙動解析に向けた SPH 法計算モデルの一検討  
後藤 優子, 夏井 俊悟, 埜上 洋  
資源・素材学会 2022 年度 春季大会 - 2022 年度資源・素材関係学協会合同春期大会概要集一, 3K0301-06-06 (20220300)
- M22-16 熔融  $\text{CaCl}_2\text{-CaO}$  中  $\text{TiO}_2$  電解還元およびカソード電極への振動・回転印加の影響  
山本玲維, 夏井俊悟, 埜上 洋  
第 54 回電気化学会溶融塩化学討論会講演要旨集, (**2A10**) 50-52 (20220900)
- M22-17 ケミカル冷熱生成による排熱利用型オンデマンド空調の基礎検討  
梶本小春, 中曾浩一, 三野泰志, 後藤邦彰, 丸岡伸洋, 埜上 洋  
第 59 回 日本伝熱シンポジウム講演論文集, E135 (20220500)
- M22-18 気流存在下の充填層内粉体挙動の基礎的検討  
塚田大智, 夏井俊悟, Andrey Stephan Siahhaan, 河合秀樹, 埜上 洋  
日本鉄鋼協会高温プロセス部会「次世代水素富化高炉における塊状帯制御研究会」中間報告会資料, 6-7 (20220900)
- M22-19 還元率を考慮した焼結鉄塑性変形の動力学モデル  
夏井 俊悟, 田中 瑞樹, Andrey Stefan Siahhaan, 埜上 洋  
日本鉄鋼協会第 184 回秋季講演大会シンポジウム「次世代水素富化高炉における塊状帯制御」研究会 中間報告会配付資料, 22-23 (20220900)
- M22-20 高炉充填層内狭小流路における粉体の運動と蓄積挙動  
埜上 洋, 夏井俊悟, 塚田大智  
日本鉄鋼協会第 184 回秋季講演大会シンポジウム「次世代水素富化高炉における塊状帯制御」研究会 中間報告会配付資料, 6-7 (20220900)
- B22-01 熱エネルギーの有効活用に向けた蓄熱技術開発  
鈴木洋, 大越慎一, 吉清まりえ, 中嶋孝宏, 中曾浩一, 平野聡, 石田豊和, 堀部明彦, 春木直人, 丸岡大佑, 郷右近展之, 中村洸平, 熊野寛之, 小林敬幸, 相場康広, 鈴木基啓, 麓耕二, 鈴木正哉, 万福和子, 宮原英隆, 川南剛, 丸岡伸洋, 日出間るり, 栗原潤一, 田坂太一, 添田晴生, 高村秀紀, 松村良夫, 劉醇一, 黒沢諒, 竹内雅人, 能村貴宏, 川上理亮, 鎌田美志, 谷野正幸, 定塚徹治, 稲垣照美, 板谷義紀  
“4 伝熱面の機械的更新による高速熱交換器/潜熱蓄熱槽の開発”, シーエムシー出版 (20220404) [ISBN: 978-4-7813-1665-9]

### 材料分離プロセス研究分野 (柴田 浩幸 研究室)

- P23-01 Inhibitory Effect of  $\text{MgO}$ ,  $\text{FeO}$ ,  $\text{CaF}_2$ , and  $\text{Al}_2\text{O}_3$  Additives on the Dissolution Behavior of Ca from Silicate Mineral Phases into Water  
Fang Ruan, Sakiko Kawanishi, Sohei Sukenaga, Hiroyuki Shibata  
Metallurgical and Materials Transactions B, **53(1)** 407-417 (20220200) [10.1007/s11663-021-02376-3]
- P23-02 Variation in viscosity of aluminosilicate melts with  $\text{MgO}/\text{CaO}$  molar ratio: Influence of five-fold coordinated aluminum  
Kyung-Ho Kim, Sohei Sukenaga, Masanori Tashiro, Koji Kaneshashi, Sinichiro Yoshida, Hiroyuki Shibata  
Journal of Non-Crystalline Solids, **587** 121600 (20220700) [10.1016/j.jnoncrysol.2022.121600]
- P23-03 Avoiding Fermi Level Pinning at the SnS Interface for High Open-Circuit Voltage  
Issei Suzuki, Binxiang Huang, Sakiko Kawanishi, Takahisa Omata, Andreas Klein  
The Journal of Physical Chemistry C, **126(48)** 20570-20576 (20221208) [10.1021/acs.jpcc.2c04212]
- P23-04 Ultrafast Nanocrystallization of  $\text{BaF}_2$  in Oxyfluoride Glasses with Crystal-like Nanostructures: Implications for Upconversion Fiber Devices  
Kenji Shinozaki, Yoshiki Ishii, Sohei Sukenaga, Koji Ohara  
ACS Applied Nano Materials, **5(3)** 4281-4292 (20220325) [10.1021/acsanm.2c00205]
- P23-05 Direct evaluation of hole effective mass of SnS-SnSe solid solutions with ARPES measurement  
Issei Suzuki, Zexin Lin, Sakiko Kawanishi, Kiyohisa Tanaka, Yoshitaro Nose, Takahisa Omata, Shin-Ichiro Tanaka  
Physical Chemistry Chemical Physics, **24(2)** 634-638 (20220100) [10.1039/d1cp04553a]
- P23-06 Current status of n-type SnS: paving the way for SnS homojunction solar cells  
Issei Suzuki, Sakiko Kawanishi, Takahisa Omata, Hiroshi Yanagi  
Journal of Physics: Energy, **4(4)** 42002 (20221001) [10.1088/2515-7655/ac86a1]

- P23-07 Contribution of the Sn 5s state to the SnS valence band: direct observation via ARPES measurements  
Issei Suzuki, Sakiko Kawanishi, Kiyohisa Tanaka, Takahisa Omata, Shin-ichiro Tanaka  
Electronic Structure, **4(2)** 25004 (20220601) [10.1088/2516-1075/ac6ea8]
- P23-08 Incorporation limit of MoO<sub>3</sub> in sodium borosilicate glasses  
Sohei Sukenaga, Hiroki Unozawa, Yuki Chiba, Masanori Tashiro, Sakiko Kawanishi, Hiroyuki Shibata  
Journal of the American Ceramic Society, **106(1)** 293-305 (20220908) [10.1111/jace.18760]
- P23-09 Characterization of Aluminum Oxide Thin Films Formed on Surfaces of FeCo-V Alloys by Annealing under a Low Partial Pressure of Oxygen  
Kiyoshi Urakawa, Motohiro Kasuya, Kiyoshi Kanie, Hiroyuki Shibata, Takenobu Sato, Takashi Ebata, Shigeru Suzuki  
e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, **20** (20220000) [10.1380/ejsnt.2022-026]
- P23-10 Reduction of crystal size of silicalite-1 synthesized in fluoride-containing media via multi-stage heating with intermediate stirring  
Kenta IYOKI, Takako ONISHI, Mariko ANDO, Sohei SUKENAGA, Hiroyuki SHIBATA, Tatsuya OKUBO, Toru WAKIHARA  
Journal of the Ceramic Society of Japan, **130(1)** 187-194 (20220101) [10.2109/jcersj2.21139]
- P23-11 First Principles Calculation of Electrical and Optical Properties of Cu<sub>3</sub>AsO<sub>4</sub>: Promising Thin-Film Solar Cell Absorber from Nonferrous Metal Manufacturing By-Products  
Issei Suzuki, Sakiko Kawanishi, Naoki Ohashi, Aiga Gomi, Junya Kano, Hiroto Watanabe, Satoshi Asano, Takahisa Omata  
MATERIALS TRANSACTIONS, **63(1)** 73-81 (20220101) [10.2320/matertrans.m-m2021851]
- P23-12 Na-Si-O-N-F 系融体の粘度：酸素、窒素およびフッ素の混合効果  
助永 壮平, 小川 将幸, 築場 豊, 安東 真理子, 柴田 浩幸  
鉄と鋼, **108(3)** 175-190 (20220000) [10.2355/tetsutohagane.tetsu-2021-108]
- P23-13 高纯净度クロム鋼溶液を目的とするスラグ制御のための溶存金属酸化物の化学状態分析  
篠田弘造, 助永壮平  
鉄と鋼, **108(8)** 455-460 (20220800) [10.2355/tetsutohagane.tetsu-2021-113]
- P23-14 Contribution of Dislocations in SiC Seed Crystals on the Melt-Back Process in SiC Solution Growth  
Sakiko Kawanishi, Hiroyuki Shibata, Takeshi Yoshikawa  
Materials, **15(5)** 1796 (20220227) [10.3390/ma15051796]
- P23-15 Exploring Hydrothermal Synthesis of SAPO-18 under High Hydrostatic Pressure  
Raquel Simancas, Masamori Takemura, Yasuo Yonezawa, Sohei Sukenaga, Mariko Ando, Hiroyuki Shibata, Anand Chokkalingam, Kenta Iyoki, Tatsuya Okubo, Toru Wakihara  
Nanomaterials, **12(3)** 396 (20220126) [10.3390/nano12030396]
- M23-01 Viscosity of silicate melts containing transition metal cations  
Sohei Sukenaga, Issei Takahashi, Kozo Shinoda, Daniel Neuville, Sakiko Kawanishi, Hiroyuki Shibata  
Abstract of the 13th Asian Thermophysical Properties Conference, ATPC2022, OS12-3-04 (20220900)
- M23-02 ケイ酸塩系複合アニオン融体の粘度  
助永壮平  
ふえらむ, **27(4)** 210-213 (20220400)
- M23-03 Na<sub>2</sub>O-SiO<sub>2</sub>-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 三元系における酸化モリブデンの見かけの溶解度評価  
助永壮平, 宇野澤大槻, 田代公則, 川西咲子, 柴田浩幸  
国際ガラス年 2022(IYoG2022) 記念行事「第3回放射性廃棄物固化体討論会」予稿集, NWG2021-19 (20220100)
- M23-04 アルカリケイ酸塩融体の粘度に及ぼす AlO<sub>1.5</sub>/SiO<sub>2</sub> 比の影響  
助永壮平, 生駒諒太, 田代公則, 川西咲子, 柴田浩幸  
材料とプロセス, **35(2)** 468 (20220900)
- M23-05 ケイ酸塩融体の粘度に及ぼすフッ素および窒素添加の影響  
助永壮平, 小川将幸, 築場豊, 安東真理子, 柴田浩幸  
材料とプロセス, **35** 113 (20220300)
- M23-06 銅溶錬マットへのマグネタイトの溶解挙動に及ぼすガス発生の影響  
申勝煥, 川西咲子, 助永壮平, 高橋純一, 柴田浩幸  
材料とプロセス, **35** 315 (20220300)
- M23-07 アルカリ土類鉄ケイ酸塩融体および過冷却液体の粘度  
助永壮平, 高橋一誠, 篠田弘造, 川西咲子, 柴田浩幸  
材料とプロセス, **35** 317 (20220300)
- M23-08 熔融 Si-Cr 合金中窒素の熱力学量の評価  
川西咲子, 八野田将吾, 助永壮平, 柴田浩幸  
材料とプロセス, **35** 320 (20220300)
- M23-09 ファニングの式による軟化溶融を伴うスラグ粒子充填層の通気性評価  
大野光一郎, 前田敬之, 国友和也, 喜多村佳輝, 助永壮平, 夏井俊悟  
材料とプロセス, **35** 97 (20220300)
- M23-10 銅製錬スラグの粘度測定  
助永 壮平, 高橋 一誠, 田代 公則, 川西 咲子, 柴田 浩幸  
資源・素材講演集, **9(2)** 1201-08-04 (20220800)

- M23-11 放射性廃棄物の減容化に向けたガラス固化技術基盤研究 ガラスマトリックスの開発 2021 年度成果概要  
大和久 耕平, 塚田 毅志, 兼平 憲男, 菅原 透, 助永 壮平, 柴田 浩幸, 矢野 哲司, 齊藤 敬高, 中島 邦彦  
第 4 回放射性廃棄物固化体討論会 要旨集, NWG2022-02 (20221000)
- M23-12  $\text{Na}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$  系ガラスへの  $\text{MoO}_3$  の含有限界濃度に及ぼす  $\text{B}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$  比の影響  
助永 壮平, 宇野澤 大槻, 田代 公則, 川西 咲子, 柴田 浩幸  
第 4 回放射性廃棄物固化体討論会 要旨集, NWG2022-08 (20221000)
- M23-13 窒素またはフッ素を含有するカルシウムケイ酸塩融体における粘度の剪断速度依存性  
橋本 一輝, 助永 壮平, 柴田 浩幸  
第 63 回ガラスおよびフォトニクス材料討論会, 35-36 (20221200)
- M23-14 ファニングの式による軟化溶融を伴うスラグ粒子充填層の通気性評価  
大野 光一郎, 喜多村 佳輝, 助永 壮平, 前田 敬之, 国友 和也  
鉄と鋼, **108(10)** 703-712 (20221000) [10.2355/tetsutohagane.tetsu-2022-025]
- M23-15  $\text{CaO}-\text{SiO}_2$  系スラグ中の金属酸化物の価数分配に及ぼすスラグ組成および  $\text{MgO}$  添加の影響  
篠田 弘造, 助永 壮平  
日本学術振興会製鋼第 19 委員会 製鋼計測化学研究会提出資料 19 委-13094 製鋼計測化学 VIII-121, 1-5 (20220500)
- M23-16  $\text{SiC}$  飽和条件下での溶液成長による  $\text{SiC}$  微結晶由来マクロ欠陥の抑制  
三谷 武志, 川西 咲子, Didier Chaussende, 吉川 健  
日本金属学会講演概要集, 50 (20220900)
- M23-17  $\text{SiC}/\text{C}$  圧粉体への  $\text{Si}$  の反応性含浸による高かさ密度  $\text{SiC}$  作製  
五十嵐 壮太, 川西 咲子, 三谷 武志, Didier Chaussende, 吉川 健, 柴田 浩幸  
日本金属学会講演概要集, 51 (20220900)
- M23-18 カルシウムケイ酸塩融体の粘度に及ぼす窒素またはフッ素添加の影響  
橋本 一輝, 助永 壮平, 柴田 浩幸  
日本鉄鋼協会 第 56 回学生ポスターセッション概要集, 7 (20220900)
- M23-19 蛍光イメージング法による  $\text{CaSiO}_3$  及び  $\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$  の溶出機構の検討  
藤田 真由, 川西 咲子, 川野 潤, 助永 壮平, 柴田 浩幸  
日本鉄鋼協会 第 56 回学生ポスターセッション概要集, 8 (20220900)

### ハイブリッドナノ粒子プロセス研究分野 (村松 淳司 研究室)

- P24-01 Selective synthesis of 5-hydroxymethylfurfural over natural rubber-derived carbon/silica nanocomposites with acid-base bifunctionality  
Satit Yousatit, Ryota Osuga, Junko N. Kondo, Toshiyuki Yokoi, Chawalit Ngamcharussrivichai  
Fuel, **311** 122577 (20220300) [10.1016/j.fuel.2021.122577]
- P24-02 Surfactant-Assisted Direct Crystallization of CON-Type Zeolites with Particle Size and Acid-Site Location Controlled  
Masato Sawada, Takeshi Matsumoto, Ryota Osuga, Shuhei Yasuda, Sungsik Park, Yong Wang, Junko N. Kondo, Hiroaki Onozuka, Susumu Tsutsuminai, Toshiyuki Yokoi  
Industrial & Engineering Chemistry Research, **Accepted** (20220000) [10.1021/acs.iecr.1c04447]
- P24-03 Clarification of acid site location in MSE-type zeolites by spectroscopic approaches combined with catalytic activity: Comparison between UZM-35 and MCM-68  
Hiroto Toyoda, Ryota Osuga, Yong Wang, Sungsik Park, Koji Yazawa, Hermann Gies, Christopher J. Gilbert, Bilge Yilmaz, Chandrashekhara P. Kelkar, Toshiyuki Yokoi  
Physical Chemistry Chemical Physics, **Accepted** (20220000) [10.1039/D2CP00215A]
- P24-04 Supported Nickel Zeolite Catalyst for Oxidative Conversion of Methane: Effect of Heteroatoms in the Zeolite Framework on Its Physicochemical and Catalytic Properties  
Shuhei Yasuda, Yusuke Kunitake, Ryota Osuga, Kengo Nakamura, Takeshi Matsumoto, Keita Sago, Junko N. Kondo, Mizuho Yabushita, Atsushi Muramatsu, Toshiyuki Yokoi  
Chemistry Letters, **51(1)** 46-49 (20220105) [10.1246/cl.210563]
- P24-05 メカノケミカル法を用いた Fe 置換 MWW 型ゼオライトの合成  
Ryota Osuga, Ginpei Tanaka, Mizuho Yabushita, Kakeru Ninomiya, Sachiko Maki, Maiko Nishibori, Kiyoshi Kanie, Atsushi Muramatsu  
Journal of the Japan Petroleum Institute, **65(2)** 67-77 (20220300) [10.1627/jpi.65.67]
- P24-06 Flexible and Semi-Transparent Antenna for ISM Band Fabricated by Direct Laser Writing  
Ashiqur Rahman and Akira Watanabe  
Journal of Photopolymer Science and Technology, **34(2)** 149-153 (20220000) [10.2494/photopolymer.34.149]

### (計測研究部門)

#### 量子ビーム計測研究分野 (百生 敦 研究室)

- P25-01 A novel nuclear emulsion detector for measurement of quantum states of ultracold neutrons in the Earth's gravitational field  
N. Muto, H. Abele, T. Ariga, J. Bosina, M. Hino, K. Hirota, G. Ichikawa, T. Jenke, H. Kawahara, S. Kawasaki, M. Kitaguchi, J. Micko, K. Mishima, N. Naganawa, M. Nakamura, S. Rocchia, O. Sato, R.I.P. Sedmik, Y. Seki, H.M. Shimizu, S. Tada, A. Umemoto  
Journal of Instrumentation, **17(7)** P07014 (20220701) [10.1088/1748-0221/17/07/p07014]

- P25-02 Recent progress in grating-based microscopic x-ray phase tomography  
Atsushi Momose, Ryosuke Ueda, Mingjian Cai, Zhuoxuan Zhao, Sam Kalirai, Maderych Stan, Jeff Irwin, Hiroki Kawakami, Pouriya Zangi, Pascal Meyer, Martin Börner, Joachim Schulz  
Proceeding of SPIE, **12242** 1224210 (20221014) [10.1117/12.2636393]
- P25-03 Neutron lifetime experiment with pulsed cold neutrons at J-PARC  
Go Ichikawa, Yasuhiro Fuwa, Takuro Hasegawa, Masahiro Hino, Katsuya Hirota, Takashi Ino, Yoshihisa Iwashita, Masaaki Kitaguchi, Jun Koga, Shun Matsuzaki, Kenji Mishima, Takanori Mogi, Koki Morikawa, Hiroki Okabe, Hidetoshi Otono, Yoshichika Seki, Daiichiro Sekiba, Tatsushi Shima, Haruki Shimizu, Hirohiko M. Shimizu, Naoyuki Sumi, Hirochika Sumino, Satoru Yamashita, Kodai Yano, Tamaki Yoshioka  
Proceedings of Particles and Nuclei International Conference 2021 — PoS(PANIC2021) (20220302) [10.22323/1.380.0457]
- P25-04 Improvement of systematic uncertainties for the neutron lifetime experiment at J-PARC  
Takanori Mogi, Takuro Hasegawa, Katsuya Hirota, Go Ichikawa, Sei Ieki, Takashi Ino, Yoshihisa Iwashita, Shogo Kajiwaru, Yu Kato, Masaaki Kitaguchi, Ryunosuke Kitahara, Jun Koga, So Makise, Shun Matsuzaki, Kenji Mishima, Koki Morikawa, Naoki Nagakura, Hiroki Okabe, Hidetoshi Otono, Yoshichika Seki, Daiichiro Sekiba, Tatsushi Shima, Haruki Shimizu, Hirohiko M. Shimizu, Yuki Sugisawa, Naoyuki Sumi, Hirochika Sumino, Tomohiko Tanabe, Tatsuhiko TOMITA, Hideaki Uehara, Takahito Yamada, Satoru Yamashita, Kodai Yano, Tamaki Yoshioka  
Proceedings of Particles and Nuclei International Conference 2021 — PoS(PANIC2021) (20220302) [10.22323/1.380.0458]
- P25-05 Demonstration of Neutron Phase Imaging Based on Talbot-Lau Interferometer at Compact Neutron Source RANS  
Hidekazu Takano, Yanlin Wu, Tetsuo Samoto, Atsushi Taketani, Takaoki Takanashi, Chihiro Iwamoto, Yoshie Otake, Atsushi Momose  
Quantum Beam Science, **6(2)** 22 (20220600) [10.3390/qubs6020022]
- P25-06 Simulation study of Pixel Super-Resolution X-ray phase Imaging with Triangular Phase Grating  
Ryosuke Ueda, Atsushi Momose  
Proceedings of the 41st JSST Annual International Conference on Simulation Technology (20220900)
- M25-01 中性子位相イメージング法による機械要素内潤滑油挙動の可視化  
平山朋子, LIN Sun, 關義親, 篠原武尚, 日野正裕, 中村吏一朗  
KURNS-EKR (Web), **(15)** (20220000)
- M25-02 X線 Talbot 干渉計による高分子材料の引張試験観察  
上田亮介, 角田幸翼, 百生敦  
応用物理学会春季学術講演会講演予稿集 (CD-ROM), **69th** (20220000)
- M25-03 構造化 X線源を用いた高エネルギー X線位相ラミノグラフィ  
上田亮介, PAN Haojie, 百生敦  
応用物理学会春季学術講演会講演予稿集 (CD-ROM), **69th** (20220000)
- M25-04 三角位相格子を用いた実験室 X線位相イメージング装置のピクセル超解像化 III  
上田亮介, ZHAO Zhuoxuan, CAI Mingjian, 百生敦, 川上博己, ZANGI Pouriya, BOERNER Martin, MARKUS Otto, SCHULZ Joachim  
応用物理学会春季学術講演会講演予稿集 (CD-ROM), **69th** (20220000)
- M25-05 X線の眼  
百生敦  
光学, **51(8)** (20220800)
- M25-06 ピンクビーム X線位相イメージングによるレーザー加工の動的観察  
上田亮介, 木村賢二, 高野秀和, 星野真人, 百生敦  
日本放射光学学会年会・放射光科学合同シンポジウム (Web), **35th** (20220000)

### 構造材料物性研究分野 (木村 宏之 研究室)

- P26-01 V-V Dimerization and Magnetic State of Cobalt Ions in Ilmenite-Type  $\text{CoVO}_3$   
Sachiko Kamiyama, Ikuya Yamada, Masayuki Fukuda, Yuichi Okazaki, Takashi Nakamura, Takumi Nishikubo, Masaki Azuma, Hiroyuki Kimura, Hajime Yamamoto  
Inorganic Chemistry, **61(20)** 7841-7846 (20220500) [10.1021/acs.inorgchem.2c00382]
- P26-02 Cation Dimerization in a  $3d^1$  Honeycomb Lattice System  
Hajime Yamamoto, Sachiko Kamiyama, Ikuya Yamada, Hiroyuki Kimura  
Journal of the American Chemical Society, **144(3)** 1082-1086 (20220126) [10.1021/jacs.1c10977]
- P26-03 Large negative thermal expansion induced by cation dimerization in ilmenite-type vanadate ceramic  
Hajime Yamamoto, Sachiko Kamiyama, Takumi Nishikubo, Masaki Azuma, Ikuya Yamada, Hiroyuki Kimura  
Applied Physics Letters, **120** 201901 (20220500) [10.1063/5.0092198]
- P26-04 Bulk charge density wave and electron-phonon coupling in superconducting copper oxychlorides  
L. Chaix, B. Lebert, H. Miao, A. Nicolaou, F. Yakhou, H. Cercellier, S. Grenier, N. B. Brookes, A. Sulpice, S. Tsutsui, A. Bosak, L. Paolasini, D. Santos-Cottin, H. Yamamoto, I. Yamada, M. Azuma, T. Nishikubo, T. Yamamoto, M. Katsumata, M. P. M. Dean, M. d' Astuto  
Physical Review Research, **4(3)** (20220705) [10.1103/physrevresearch.4.033004]
- P26-05 Occupancies of Y in garnet-type  $\text{Ca}_{0.8}\text{Y}_{3.4}\text{Zr}_{0.8}\text{Ga}_{3.0}\text{O}_{12}$  crystal  
Rayko Simura, Kyosuke Sawamura, Hisanori Yamane, Terutoshi Sakakura  
Journal of the Ceramic Society of Japan, **130(5)** 359-362 (20220501) [10.2109/jcersj2.22003]

- P26-06 Quest for Colossal Negative Thermal Expansion Materials  
Masaki AZUMA, Kengo OKA, Hajime YAMAMOTO, Yuki SAKAI  
Journal of the Japan Society of Powder and Powder Metallurgy, **69(8)** 356-361 (20220815) [10.2497/jjspm.69.356]
- M26-01 Crystal Structure and Magnetism of Natural Mineral Henmilite from Fuka Mine, Okayama Prefecture  
Hajime Yamamoto Terutoshi Sakakura Hiroyuki Kimura  
Photon Factory Highlights 2021 (20220000)
- M26-02 電子密度計測の理論限界への挑戦-APD 検出器を用いた計測システム-  
坂倉輝俊, 岸本俊二, 木村宏之  
セラミックス, **57(9)** 605-608 (20220900)
- M26-03 岡山県産鉱物「逸見石」が示す量子物性—放射光 X 線精密結晶構造解析でひも解く磁性の起源—  
山本孟, 坂倉輝俊, 木村宏之  
日本結晶学会誌, **64(4)** 261-262 (20221215) [10.5940/jcrsj.64.261]

### 高分子物理化学研究分野 (陣内 浩司 研究室)

- P27-01 Nanoscale TEM Imaging of Hydrogel Network Architecture  
Ryuji Kiyama, Masahiro Yoshida, Takayuki Nonoyama, Tomas Sedlacik, Hiroshi Jinnai, Takayuki Kurokawa, Tasuku Nakajima, Jian Ping Gong  
Advanced Materials, **35(1)** 2208902 (20221118) [10.1002/adma.202208902]
- P27-02 Real-time observation of microcrack growth in thin film microtomed from rubber/nanocellulose composite sheets, during tensile deformation  
Hiroshi Jinnai, Toru Noguchi, Akemi Kumagai, Morinobu Endo, Akira Isogai  
Polymer Compos., **43(9)** 6310-6319 (20220727) [10.1002/pc.26939]
- P27-03 Demonstration of reinforcement in polymer composite with rings penetrating the diamond-lattice network  
Katsumi Hagita, Takahiro Murashima, Hiroshi Jinnai  
Polymer, **243** 124637 (20220300) [10.1016/j.polymer.2022.124637]
- P27-04 Compositional Analysis on Epoxy-resin/inorganic Interfaces using Scanning Transmission Electron Microscopy  
Tomohiro Miyata, Yohei Sato, Kaname Yoshida, Hsin-Hui Huang, Teruyasu Mizoguchi, Katsumi Hagita, Masashi Mizukami, Hiroshi Jinnai  
Microscopy and Microanalysis, **28(S1)** 2522-2524 (20220800) [10.1017/s1431927622009643]
- P27-05 Structural Correlations of the Nonlinear Optical Response in Polydiacetylene Nanotubes Hybridized with Gold Nanoparticles  
Wakana Ito-Washiyama, Tsunenobu Onodera, Masaki Ageishi, Rodrigo Sato, Boyi Zhang, Satoshi Kato, Akito Masuhara, Hitoshi Kasai, Hiroaki Mamiya, Hiroshi Jinnai, Yoshihiko Takeda, Hidetoshi Oikawa  
The Journal of Physical Chemistry C, **126(5)** 2763-2771 (20220210) [10.1021/acs.jpcc.1c08884]
- P27-06 Direct Visualization of Interfacial Regions between Fillers and Matrix in Rubber Composites Observed by Atomic Force Microscopy-Based Nanomechanics Assisted by Electron Tomography  
Makiko Ito, Haonan Liu, Akemi Kumagai, Xiaobin Liang, Ken Nakajima, Hiroshi Jinnai  
Langmuir, **38(2)** 777-785 (20220118) [10.1021/acs.langmuir.1c02788]
- P27-07 Curving and Twisting in Self-Assembly of Triblock Terpolymers Driven by a Chiral End Block  
Po-Ting Chiu, Yu-Chuan Sung, Kai-Chieh Yang, Jing-Cherng Tsai, Hsiao-Fang Wang, Rong-Ming Ho  
Macromolecules, **55(4)** 1185-1195 (20220208) [10.1021/acs.macromol.1c02421]
- P27-08 Ring-Filling Effect on Stress-Strain Curves of Randomly End-Linked Tetra-Arm Prepolymers  
Katsumi Hagita, Takahiro Murashima, Takahiro Ohkuma, Hiroshi Jinnai  
Macromolecules, **55(15)** 6547-6561 (20220809) [10.1021/acs.macromol.2c00451]
- P27-09 Dislocation-Induced Defect Formation in a Double-Gyroid Network  
Tomohiro Miyata, Hsiao-Fang Wang, Takafumi Suenaga, Daisuke Watanabe, Hironori Marubayashi, Hiroshi Jinnai  
Macromolecules, **55(18)** 8143-8149 (20220912) [10.1021/acs.macromol.2c01298]
- P27-10 Morphologies of polymer chains adsorbed on inorganic nanoparticles in a polymer composite as revealed by atomic-resolution electron microscopy  
Tomohiro Miyata, Yoshiaki Kawagoe, Tomonaga Okabe, Hiroshi Jinnai  
Polymer Journal, **54(11)** 1297-1306 (20220810) [10.1038/s41428-022-00690-4]
- P27-11 Electron microscopy for polymer structures  
Hiroshi Jinnai  
Microscopy, **71(Supplement\_1)** i148-i164 (20220218) [10.1093/jmicro/dfab057]
- P27-12 Correlative light and electron microscopy of poly(L-lactic acid) spherulites for fast morphological measurements using a convolutional neural network  
Yuji Konyuba, Hironori Marubayashi, Tomohiro Haruta, Hiroshi Jinnai  
Microscopy, **71(2)** 104-110 (20220400) [10.1093/jmicro/dfab058]
- P27-13 Electron irradiation damage of amorphous epoxy resin at low electron doses  
Kaname Yoshida, Hsin-Hui Huang, Tomohiro Miyata, Yohei K Sato, Hiroshi Jinnai  
Microscopy (20221210) [10.1093/jmicro/dfac068]

- P27-14 Characterization of Microplastics by Advanced Analytical Techniques  
Tomoko KAJIWARA, Ying Jun AN, Adchara PADERMSHOKE, Akemi KUMAGAI, Hironori MARUBAYAH, Yuka IKEMOTO, Hiroshi JINNAI, Atsuhiko ISOBE, Atsushi TAKAHARA  
BUNSEKI KAGAKU, **71(10.11)** 541-547 (20221005) [10.2116/bunsekikagaku.71.541]
- P27-15 Efficient Compressed Database of Equilibrated Configurations of Ring-Linear Polymer Blends for MD Simulations  
K. Hagita, T. Murashima, M. Ogino, M. Omiya, K. Ono, T. Deguchi, H. Jinnai, T. Kawakatsu  
Scientific Data, **9** 40 (20220208) [10.6084/m9.figshare.18742097]
- M27-01 先端分析法によるマイクロプラスチックのキャラクタリゼーション  
梶原 朋子, YingJun AN, Adchara PADERMSHOKE, 熊谷 明美, 丸林 弘典, 池本 夕佳, 陣内 浩司, 磯辺 篤彦, 高原  
BUNSEKI KAGAKU, **71(10.11)** 541-547 (20221005) [10.2116/bunsekikagaku.71.541]
- M27-02 Topology-Transformable Block Copolymers Based on a Rotaxane Structure: Change in Microstructures and Bulk Properties with the Same Composition  
H. Marubayashi, H. Sato, D. Aoki, S. Uchida, H. Sogawa, S. Nojima, X. Liang, K. Nakajima, T. Hayakawa, T. Takat  
Photon Factory Highlights 2021, **1** 24-25 (20221100)

### 量子フロンティア計測研究分野 (矢代 航 研究室)

- P28-01 Hydrogen absorption and diffusion behaviors in cube-shaped palladium nanoparticles revealed by ambient-pressure X-ray photoelectron spectroscopy  
Jiayi Tang, Okkyun Seo, David S. Rivera Rocabado, Takanori Koitaya, Susumu Yamamoto, Yusuke Nanba, Chulho Song, Jaemyung Kim, Akitaka Yoshigoe, Michihisa Koyama, Shun Dekura, Hirokazu Kobayashi, Hiroshi Kitagawa, Osami Sakata, Iwao Matsuda, Jun Yoshinobu  
Applied Surface Science, **587** 152797 (20220600) [10.1016/j.apsusc.2022.152797]
- P28-02 Functionalization of the MoS<sub>2</sub> basal plane for activation of molecular hydrogen by Pd deposition  
Fumihiko Ozaki, Shunsuke Tanaka, Wataru Osada, Kozo Mukai, Masafumi Horio, Takanori Koitaya, Susumu Yamamoto, Iwao Matsuda, Jun Yoshinobu  
Applied Surface Science, **593** 153313 (20220800) [10.1016/j.apsusc.2022.153313]
- P28-03 Role of Fe substitution for Co on thermal stability and glass-forming ability of soft magnetic Co-based Co-Fe-B-P-C metallic glasses  
Junpeng Ren, Yanhui Li, Xiaoyu Liang, Hidemi Kato, Wei Zhang  
Intermetallics, **147** (20220800) [10.1016/j.intermet.2022.107598]
- P28-04 Effect of P addition on soft magnetic properties of Fe-Si-B-P-Cu-C nano-crystalline alloys  
Ziyan Hao, Linzhuo Wei, Lei Gao, Yaocen Wang, Xiaojun Bai, Xing Tong, Xiaoyu Liang, Noriharu Yodoshi, Rie Umetsu, Yoshiyuki Kawazoe, Yan Zhang, Chongde Cao  
Intermetallics, **151** (20221200) [10.1016/j.intermet.2022.107713]
- P28-05 Nanoimprinting of magnetic FeCo-based metallic glass thin films  
Xiaoyu Liang, Parmanand Sharma, Yan Zhang, Hidemi Kato  
Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **542** 168455 (20220115) [10.1016/j.jmmm.2021.168455]
- P28-06 Structural origin of magnetic softening in a Fe-based amorphous alloy upon annealing  
Xing Tong, Yan Zhang, Yaocen Wang, Xiaoyu Liang, Kai Zhang, Fan Zhang, Yuanfei Cai, Haibo Ke, Gang Wang, Jun Shen, Akihiro Makino, Weihua Wang  
Journal of Materials Science & Technology, **96** 233-240 (20220100) [10.1016/j.jmst.2021.01.098]
- P28-07 Hole Dynamics in Photoexcited Hematite Studied with Femtosecond Oxygen K-edge X-ray Absorption Spectroscopy  
Yohei Uemura, Ahmed S. M. Ismail, Sang Han Park, Soonnam Kwon, Minseok Kim, Hebatalla Elnaggar, Federica Frati, Hiroki Wadati, Yasuyuki Hirata, Yujun Zhang, Kohei Yamagami, Susumu Yamamoto, Iwao Matsuda, Ufuk Halisdemir, Gertjan Koster, Christopher Milne, Markus Ammann, Bert M. Weckhuysen, Frank M. F. de Groot  
The Journal of Physical Chemistry Letters, **13(19)** 4207-4214 (20220519) [10.1021/acs.jpcclett.2c00295]
- P28-08 Surface Exchange Reaction of Mixed Conductive La<sub>0.65</sub>Ca<sub>0.35</sub>FeO<sub>3-δ</sub> during Oxygen Evolution and Incorporation as Traced by Operando X-ray Photoelectron Spectroscopy  
Isao Kagomiya, Tomohiro Hirano, Yutaro Yagi, Ken-ichi Kakimoto, Susumu Yamamoto, Iwao Matsuda  
ACS Applied Materials & Interfaces, **14(42)** 48194-48199 (20221026) [10.1021/acsami.2c10700]
- P28-09 Report on Remote Experiments from the JSSRR Ad-Hoc Committee  
Toyohiko Kinoshita, Yoshio Watanabe, Yusuke Yamada, Makina Yabashi, Takashi Kumasaka, Yoshiki Seno, Masayuki Inaba, Takayuki Harano, Hiroshi Hamamatsu, Koji Yamaguchi, Takuji Kume, Nobuyuki Ichikuni, Hiroshi Kondoh, Mikihiro Takenaka, Hiroki Wadati, Yasuhiro Inada, Wataru Yashiro, Kiyotaka Asakura, Wang-Jae Chun, Tetsuya Nakamura  
Synchrotron Radiation News, **35(2)** 49-51 (20220600) [10.1080/08940886.2022.2066450]
- P28-10 Materials Science Research by Ambient Pressure X-Ray Photoelectron Spectroscopy Systems at Synchrotron Radiation Facilities in Japan: Applications in Energy, Catalysis, and Sensors  
Susumu Yamamoto, Yasumasa Takagi, Takanori Koitaya, Ryo Toyoshima, Masafumi Horio, Iwao Matsuda, Hiroshi Kondoh, Toshihiko Yokoyama, Jun Yoshinobu  
Synchrotron Radiation News, **35(3)** 19-25 (20220600) [10.1080/08940886.2022.2082168]
- P28-11 Formation of L10-FeNi hard magnetic material from FeNi-based amorphous alloys  
Yaocen Wang, Ziyan Hao, Yan Zhang, Xiaoyu Liang, Xiaojun Bai, Chongde Cao  
Chinese Physics B, **31** (20220000) [10.1088/1674-1056/ac280a]

- P28-12 Development of multi-beam optics for time-resolved X-ray tomography: from  $\pi$ -polarization to  $\sigma$ -polarization  
Wolfgang Voegeli, Xiaoyu Liang, Tetsuroh Shirasawa, Etsuo Arakawa, Kentaro Kajiwara, Kazuyuki Hyodo, Hiroyuki Kudo, Wataru Yashiro  
Journal of Physics: Conference Series, **2380** 12063 (20221200) [10.1088/1742-6596/2380/1/012063]
- P28-13 Millisecond-Order Temporal-Resolution Synchrotron X-ray Tomography without Sample Rotation  
Wataru Yashiro, Xiaoyu Liang, Wolfgang Voegeli, Etsuo Arakawa, Tetsuroh Shirasawa, Kentaro Kajiwara, Katsuya Fujii, Koh Hashimoto, Hiroyuki Kudo  
Journal of Physics: Conference Series, **2380** 12121 (20221200) [10.1088/1742-6596/2380/1/012121]
- P28-14 Resolving decay-time dependent photoluminescence induced by phonon-dressed excitons in ZnO  
Ryu Yukawa, Susumu Yamamoto, Ren Arita, Yuki Minami, Kohei Yamanoi, Kenichi Ozawa, Kazuyuki Sakamoto, Toshihiko Shimizu, Nobuhiko Sarukura, Iwao Matsuda  
Physical Review Materials, **6(10)** (20221021) [10.1103/physrevmaterials.6.104607]
- P28-15 トモグラフィ画像再構成の基礎とトレンド～解析的再構成法から圧縮センシングを経て深層学習まで～  
工藤博幸, 藤井克哉, 橋本康, 矢代航, ヴォルフガング フォグリ  
まてりあ, **61(1)** 7-14 (20220101) [10.2320/materia.61.7]
- P28-16 ゴム破壊現象の高速 3D 観察  
矢代航, 梁暁宇, 梶原堅太郎, 橋本康, 工藤博幸, 間下亮, 尾藤容正, 岸本浩通  
**0, 95** 359-362 (20220000) [10.2324/gomu.95.359]
- P28-17 Sub-second multi-energy X-ray tomography using a multi-beam optical system and detector  
Wolfgang Voegeli, Tetsuroh Shirasawa, Etsuo Arakawa, Kentaro Kajiwara, Xiaoyu Liang and Wataru Yashiro  
Japanese Journal of Applied Physics, **61(9)** 9802 (20220830) [10.35848/1347-4065/ac88aa]
- P28-18 雰囲気軟X線光電子分光を用いた触媒表面反応のオペランド計測  
山本達, 小坂谷貴典, 松田巖, 吉信淳  
日本放射光学会誌「放射光」, **35(3)** 182-190 (20220500)
- M28-01 放射光による 4DX 線 CT の最前線  
矢代航, 間下亮, 尾藤容正, 岸本浩通  
Isotope News, **779** 24-28 (20220200)
- M28-02 X 線・極端紫外光における真の回折限界に向けて  
籠島靖, 上杉健太郎, 亀島敬, 高橋幸生, 武市泰男, 竹内晃久, 原田哲男, 松本浩典, 三村秀和, 矢代航  
光学 (日本光学会誌), **51(4)** 167-168 (20220400)
- M28-03 湾曲単結晶による高速 X 線 CT  
矢代航, 梁暁宇, Wolfgang Voegeli, 荒川悦雄, 白澤徹郎, 梶原堅太郎, 藤井克哉, 橋本康, 工藤博幸  
光学 (日本光学会誌), **51(8)** 351-356 (20220800)
- M28-04 CT 技術の新しい方向性: スパースビュー CT, インテリア CT, マルチビーム CT  
工藤博幸, 藤井克哉, 橋本康, 矢代航, Wolfgang Voegeli  
日獨医報 (日独医報), **66** 91-101 (20220400)

### 量子光エレクトロニクス研究分野 (秩父重英研究室)

- P29-01 Dual-peak electroluminescence spectra generated from  $\text{Al}_{n/12}\text{Ga}_{1-n/12}\text{N}$  ( $n=2, 3, 4$ ) for AlGaN-based LEDs with nonflat quantum wells  
Y. Nagasawa, K. Kojima, A. Hirano, M. Ippommatsu, Y. Honda, H. Amano, S. F. Chichibu  
Journal of Physics D: Applied Physics, **55(25)** 255102 1-11 (20220329) [10.1088/1361-6463/ac5d03]
- P29-02 Identifying the mechanism of formation of chlorinated silane polymer by-products during chemical vapor infiltration of SiC from  $\text{CH}_3\text{SiCl}_3/\text{H}_2$   
N. Sato, Y. Fukushima, K. Shima, Y. Funato, T. Momose, M. Koshi, Y. Shimogaki  
International Journal of Chemical Kinetics, **54** 300-308 (20220100) [10.1002/kin.21559]
- P29-03 Effect of Ultra-High-Pressure Annealing on Defect Reactions in Ion-Implanted GaN Studied by Positron Annihilation  
Akira Uedono, Hideki Sakurai, Jun Uzuhashi, Tetsuo Narita, Kacper Sierakowski, Shoji Ishibashi, Shigefusa F. Chichibu, Michal Bockowski, Jun Suda, Tadakatsu Ohkubo, Nobuyuki Ikarashi, Kazuhiro Hono, Tetsu Kachi  
physica status solidi (b), **2200183** 1-12 (20220520) [10.1002/pssb.202200183]
- P29-04 Enhanced quantum efficiency of a self-organized silica mixed red phosphor  $\text{CaAlSiN}_3$  : Eu  
Masatsugu Oishi, Shohei Shiomi, Koji Ohara, Fumito Fujishiro, Yoichiro Kai, Shao-Ju Shih, Toshihiro Moriga, Shigefusa F. Chichibu, Aiko Takatori, Kazunobu Kojima  
Journal of Solid State Chemistry, **309** 122968 1-8 (20220200) [10.1016/j.jssc.2022.122968]
- P29-05 Recombination dynamics of indirect excitons in hexagonal BN epilayers containing polytypic segments grown by chemical vapor deposition using carbon-free precursors  
S. F. Chichibu, K. Shima, K. Kikuchi, N. Umehara, K. Takiguchi, Y. Ishitani, K. Hara  
Applied Physics Letters, **120(23)** 231904-1-7 (20220606) [10.1063/5.0090431]
- P29-06 Room-temperature nonradiative recombination lifetimes in c-plane  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$  epilayers nearly and modestly lattice-matched to GaN ( $0.11 < x < 0.21$ )  
L. Y. Li, K. Shima, M. Yamanaka, T. Egawa, T. Takeuchi, M. Miyoshi, S. Ishibashi, A. Uedono, S. F. Chichibu  
Journal of Applied Physics, **132(16)** 163102-1-10 (20221000) [10.1063/5.0106540]



- P29-07 High-speed solar-blind optical wireless communication enabled by DUV LED  
Yuki Yoshida, Kazunobu Kojima, Masaki Shiraiwa, Atsushi Kanno, Akira Hirano, Yosuke Nagasawa, Masamichi Ippommatsu, Naokatsu Yamamoto, Shigefusa F. Chichibu, Yoshinari Awaji  
Light-Emitting Devices, Materials, and Applications XXVI (20220309) [10.1117/12.2608459]
- P29-08 High-energy computed tomography as a prospective tool for in situ monitoring of mass transfer processes inside high-pressure reactors - a case study on ammonothermal bulk crystal growth of nitrides including GaN  
S. Schimmel, M. Salamon, D. Tomida, S. Neumeier, T. Ishiguro, Y. Honda, S. F. Chichibu, H. Amano  
Materials 15 (17), 6165 1-17 (20220905) [10.3390/ma15176165]
- P29-09 Reactive RF magnetron sputtering epitaxy of NiO thin films on (0001) sapphire and (100) MgO substrates  
Keisuke Nishimoto, Kohei Shima, Shigefusa F. Chichibu, Mutsumi Sugiyama  
Japanese Journal of Applied Physics, **61(2)** 025505-1-5 (20220224) [10.35848/1347-4065/ac4392]
- P29-10 Impacts of Si-doping on vacancy complex formation and their influences on deep ultraviolet luminescence dynamics in  $Al_xGa_{1-x}N$  films and multiple quantum wells grown by metalorganic vapor phase epitaxy  
Shigefusa F. Chichibu, Hideto Miyake, Akira Uedono  
Japanese Journal of Applied Physics, **61(5)** 050501 1-14 (20220427) [10.35848/1347-4065/ac46b1]
- P29-11 Precise determination of deformation potentials in InGaN alloy material in semipolar and nonpolar InGaN quantum wells  
Shigeta Sakai, Kazunobu Kojima, Shigefusa F. Chichibu, Atsushi A. Yamaguchi  
Japanese Journal of Applied Physics, **61(6)** 061003 1-6 (20220601) [10.35848/1347-4065/ac62e4]
- P29-12 Low-pressure acidic ammonothermal growth of 2-inch-diameter nearly bowing-free bulk GaN crystals  
Kouhei kurimoto, Quanxi Bao, Yutaka Mikawa, Kohei Shima, Tohru Ishiguro, Shigefusa F. Chichibu  
Applied Physics Express, **15(5)** 055504 1-4 (20220513) [10.35848/1882-0786/ac67fc]
- P29-13 Weak metastability of  $Al_xGa_{1-x}N$  ( $x = 13/24, 15/24, 17/24$ ) shown by analyzing AlGaN grown on AlN with dense macrosteps  
Akira Hirano, Yosuke Nagasawa, Masamichi Ippommatsu, Hideki Sako, Ai Hashimoto, Ryuichi Sugie, Yoshio Honda, Hiroshi Amano, Kazunobu Kojima, Shigefusa F. Chichibu  
Applied Physics Express, **15(7)** 075505 1-5 (20220701) [10.35848/1882-0786/ac79a1]
- P29-14 全方位フォトルミネセンス (ODPL) 分光法による半導体結晶の評価  
小島一信, 嶋紘平, 秩父重英  
日本結晶成長学会誌, **48(4)** 1-9 (20220100) [10.19009/jjacg.48-4-03]
- B29-01 次世代パワーエレクトロニクスの課題と評価技術  
栗本浩平, 包全喜, 三川豊, 嶋紘平, 石黒徹, 秩父重英  
“第2章第2節 大口径・高純度 GaN 単結晶基板の量産法と結晶評価, pp.60-67”, S& T 出版, 岩室憲幸監修 (20220727) [ISBN: 9784907002930]
- B29-02 次世代パワーエレクトロニクスの課題と評価技術  
小島一信, 嶋紘平, 秩父重英  
“第2章第8節 全方位フォトルミネセンス (ODPL) 分光法を用いた GaN 自立結晶の評価, pp.119-125”, S& T 出版, 岩室憲幸監修 (20220727) [ISBN: 9784907002930]
- B29-03 次世代パワー半導体の開発・評価と実用化  
三川豊, 秩父重英, 栗本浩平  
“第2章 GaN パワー半導体 第3節 酸性アモノサーマル法による GaN 単結晶製造技術, pp.81-89”, (株) エヌ・ティー・エス, 岩室憲幸監修 (20220225)
- B29-04 大口径・高純度 GaN 単結晶基板の量産法と結晶評価  
栗本浩平, 包全喜, 三川豊, 嶋紘平, 石黒徹, 秩父重英  
pp.60-67, S& T 出版「次世代パワーエレクトロニクスの課題と評価技術」(20220700) [ISBN: 9784907002930]
- B29-05 全方位フォトルミネセンス (ODPL) 分光法を用いた GaN 自立結晶の評価  
小島一信, 嶋紘平, 秩父重英  
pp.119-126, S& T 出版「次世代パワーエレクトロニクスの課題と評価技術」(20220700) [ISBN: 9784907002930]

### 放射光可視化情報計測研究分野 (高橋 幸生 研究室)

- P30-01 Variation of Local Structure and Reactivity of Pt/C Catalyst for Accelerated Degradation Test of Polymer Electrolyte Fuel Cell Visualized by Operando 3D CT-XAFS Imaging  
Hirosuke Matsui, Nozomu Ishiguro, Yuanyuan Tan, Naoyuki Maejima, Yuta Muramoto, Tomoya Uruga, Kotaro Higashi, Duong-Nguyen Nguyen, Hieu - Chi Dam, Gabor Samjeské, Mizuki Tada  
ChemNanoMat, **8(4)** (20220308) [10.1002/cnma.202200008]
- P30-02 Synthesis of Electromagnetic Wave-Absorbing Co-Ni Alloys and Co-Ni Core-Shell Structured Nanoparticles  
Masanao Ishijima, Tsukasa Takada, Jhon L. Cuya Huaman, Takuya Mizutomi, Osamu Sakai, Kozo Shinoda, Masahito Uchikoshi, Hiroaki Mamiya, Kazumasa Suzuki, Hiroshi Miyamura, Jeyadevan Balachandran  
Inorganic Chemistry, **61(43)** 17144-17153 (20221031) [10.1021/acs.inorgchem.2c02633]
- P30-03 Visualization of Sulfur Chemical State of Cathode Active Materials for Lithium-Sulfur Batteries by Tender X-ray Spectroscopic Ptychography  
Masaki Abe, Fusae Kaneko, Nozomu Ishiguro, Tatsuya Kubo, Fumiya Chujo, Yusuke Tamenori, Hiroyuki Kishimoto, Yukio Takahashi  
The Journal of Physical Chemistry C (20220811) [10.1021/acs.jpcc.2c02795]

- P30-04 Speciation of chromium aqua and chloro complexes in hydrochloric acid solutions at 298 K  
Masahito Uchikoshi, Daisuke Akiyama, Ken'ichi Kimijima, Kozo Shinoda  
RSC Advances, **12(5)** 32722-32736 (20220000) [10.1039/d2ra06279h]
- P30-05 Method for restoration of X-ray absorption fine structure in sparse spectroscopic ptychography  
Nozomu Ishiguro, Yukio Takahashi  
Journal of Applied Crystallography, **55(4)** 929-943 (20220801) [10.1107/s1600576722006380]
- P30-06 The Distribution and Structures of Ferric Aqua and Chloro Complexes in Hydrochloric Acid Solutions  
Masahito Uchikoshi, Daisuke Akiyama, Ken'ichi Kimijima, Kozo Shinoda  
ISIJ International, **62(5)** 912-921 (20220515) [10.2355/isijinternational.isijint-2021-323]
- P30-07 Microscopic Rotation Behaviours of Crystals in Polycrystalline Bcc High Purity Iron  
Masahito UCHIKOSHI, Kengo MATSUDA, Yusuke ONUKI, Kozo SHINODA, Shigeru SUZUKI  
ISIJ International, **62(5)** 970-976 (20220500) [10.2355/isijinternational.ISIJINT-2021-402]
- P30-08 Chemical State Analysis of Metal Oxides for Slag Control on Smelting of High-Quality Chromium Steel  
Kozo Shinoda, Sohei Sukenaga  
Tetsu-to-Hagane, **108(8)** 455-460 (20220000) [10.2355/tetsutohagane.tetsu-2021-113]
- P30-09 Synthesis of porous  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> from scorodite synthesized using ultrasound irradiation and evaluation of its battery performance  
Yuya Kitamura, Hirokazu Okawa, Kozo Shinoda, Takahiro Kato, Katsuyasu Sugawara  
Japanese Journal of Applied Physics, **61(SG)** SG1056 (20220701) [10.35848/1347-4065/ac4ada]
- P30-10 X線/紫外可視吸収分光の熱力学モデル解析による塩酸水溶液中コバルト塩化物錯体の分布と構造の決定と第一原理計算による検証  
打越雅仁, 篠田弘造, 松本高利  
X線分析の進歩, **53** 97-117 (20220300)
- P30-11 X線吸収分光による白金合金系触媒の前処理中酸化還元変化解析  
篠田弘造, Balachandran Jeyadevan, 佐藤王高  
SPRING-8/SACLA 利用研究成果集, **10(2)** 176-180 (20220428)
- M30-01 長期利用課題報告 テンダー X線タイコグラフィの基盤技術開発とその応用展開  
高橋 幸生, 阿部 真樹, 石黒 志, 金子 房恵, 岸本 浩通, 松本 崇博, 工藤 統吾, 初井 宇記, 為則 雄祐  
SPRING-8/SACLA 利用者情報, **27(4)** 336-341 (20221100)
- M30-02 X線・極端紫外光における真の回折限界に向けて  
籠島 靖, 上杉 健太郎, 亀島 敬, 高橋 幸生, 武市 泰男, 竹内 晃久, 原田 哲男, 松本 浩典, 三村 秀和, 矢代 航  
光学, **51(4)** 167-168 (20220400)
- M30-03 X線ナノ動画撮像を目指して 三角形開口を用いたコヒーレント X線回折イメージング  
高澤 駿太郎, 姜 正敏, 阿部 真樹, 上松 英司, 石黒 志, 高橋 幸生  
光学, **51(6)** 272 (20220600)
- M30-04 X線タイコグラフィによる三次元微細構造イメージング  
高橋幸生  
光技術コンタクト, **6(8)** 24-29 (20220800)
- M30-05 X線スペクトロタイコグラフィ法による 機能性材料粒子のナノ化学状態イメージング  
石黒 志  
日本顕微鏡学会 第78 学術講演会 要旨集 (20220500)

### 固体表面物性研究分野（虻川 匡司 研究室）

- P31-01 Evaluation of Doped Potassium Concentrations in Stacked Tow-Layer Graphene using Real-time XPS  
Shuichi Ogawa, Yasutaka Tsuda, Tetsuya Sakamoto, Yuki Okigawa, Tomoaki Masuzawa, Akitaka Yoshigoe, Tadashi Abukawa, Takatoshi Yamada  
Applied Surface Science, **605** 154748 (20220900) [10.1016/j.apsusc.2022.154748]
- P31-02 Roles of excess minority carrier recombination and chemisorbed O<sub>2</sub> species at SiO<sub>2</sub>/Si interfaces in Si dry oxidation: Comparison between p-Si(001) and n-Si(001) surfaces  
Yasutaka Tsuda, Akitaka Yoshigoe, Shuichi Ogawa, Tetsuya Sakamoto, Yoshiki Yamamoto, Yukio Yamamoto, Yuji Takakuwa  
The Journal of Chemical Physics, **157(23)** 234705/1-21 (20221219) [10.1063/5.0109558]
- P31-03 Strong suppression of graphene growth by sulfur superstructure on a nickel substrate  
Keisuke Sagisaka, Jun Nara, Jill K. Wenderott, Ryo Kadowaki, Akane Maruta, Tadashi Abukawa, Daisuke Fujita  
Physical Review Materials, **6(3)** 34007 (20220300) [10.1103/PhysRevMaterials.6.034007]
- P31-04 Multilayer Deposition of Octakis(octylxy) Phthalocyanine Observed by Scanning Tunneling Microscopy, Scanning Electron Microscopy, Transmission Electron Microscopy, and X-ray Diffraction  
Rio Yoneda, Masaki Ageishi, Shuichi Ogawa, Tadashi Abukawa, Tomohide Takami  
e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, **20(3)** 145-149 (20220602) [10.1380/ejsnt.2022-023]
- P31-05 Development of Dual Ion-selective Electrodes in Double-Barrel Glass Pipette at One Micrometer for Simultaneous Measurement of Sodium and Potassium Ions  
Tomohide Takami, Yusuke Akutsu, Naoki Kaneko, Rio Yoneda, Hideyuki Magara, Shuichi Ogawa, Tadashi Abukawa  
e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, **21(1)** 17-23 (20221027) [10.1380/ejsnt.2023-003]

- P31-06 Observation of Chemisorbed O<sub>2</sub> Molecule at SiO<sub>2</sub>/Si(001) Interface During Si Dry Oxidation  
Yasutaka Tsuda, Akitaka Yoshigoe, Shuichi Ogawa, Tetsuya Sakamoto, Yuji Takakuwa  
e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, **21(1)** 30-39 (20221105) [10.1380/ejsnt.2023-005]
- P31-07 単層 CVD グラフェンの酸素ガスバリア特性  
山田 貴壽, 小川 修一  
膜, **47(2)** 92-97 (20220414) [10.5360/membrane.47.92]
- P31-08 X 線光電子分光によるガス雰囲気中の表面反応観察 : 歴史、応用、課題、将来展望  
高桑雄二, 小川修一, 吉越章隆  
放射光, **35(3)** 158-171 (20220500)

### 電子線干渉計測研究分野 (佐藤 俊一 (兼) 研究室)

- P32-01 Magnetic flux in soft magnetic Fe-Si-B-P-Cu amorphous alloy containing nanocrystallites analyzed by electron holography  
Zentaro Akase, Kenta Kimura, Tomohiro Saito, Kodai Niitsu, Toshiaki Tanigaki, Yoh Iwasaki, Parmanand Sharma, Akihiro Makino, Daisuke Shindo  
Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **541** 168519 (20220100) [10.1016/j.jmmm.2021.168519]

### 電子回折・分光計測研究分野 (寺内 正己 研究室)

- P33-01 Topological Melting of the Metastable Skyrmion Lattice in the Chiral Magnet Co<sub>9</sub>Zn<sub>9</sub>Mn<sub>2</sub>  
Victor Ukleev, Daisuke Morikawa, Kosuke Karube, Akiko Kikkawa, Kiyohito Shibata, Yasujiro Taguchi, Yoshinori Tokura, Takahisa Arima, Jonathan S. White  
Advanced Quantum Technologies, 2200066 (20220913) [10.1002/qute.202200066]
- P33-02 Nickel-aluminium bronze cast into 3D sand printed moulds: Kappa II phase and segregation of phosphorus  
S. Nusen, T. Chairuangsi, D. Morikawa, K. Tsuda, J.T.H. Pearce  
Materialia, **26** 101631 (20221200) [10.1016/j.mtla.2022.101631]
- P33-03 Coexisting Z-type charge and bond order in metallic NaRu<sub>2</sub>O<sub>4</sub>  
Arvind Kumar Yogi, Alexander Yaresko, C. I. Sathish, Hasung Sim, Daisuke Morikawa, Juergen Nuss, Kenji Tsuda, Yukio. Noda, Daniel I. Khomskii, Je-Geun Park  
Communications Materials (20220100) [10.1038/s43246-022-00224-8]
- P33-04 Evaluation of exchange-correlation effects on the heat-shielding performance of carrier electrons in LaB<sub>6</sub> using momentum-transfer resolved electron energy-loss spectroscopy  
Yohei K. Sato, Junichi Kamoi, Masami Terauchi  
Journal of Applied Physics, **131(6)** 63104 (20220214) [10.1063/5.0076692]
- P33-05 In situ observation of the chemical bonding state of Si in the molten state of eutectic Au-Si alloy of Au<sub>81</sub>Si<sub>19</sub> by using a soft X-ray emission spectroscopy electron microscope  
Masami Terauchi, Naoya Umemoto, Yohei K. Sato, Masaki Ageishi, An-Pang Tsai  
Microscopy, **71(1)** 34-40 (20220129) [10.1093/jmicro/dfab029]
- P33-06 Analytical technique for self-absorption structure of iron L-emission spectra obtained by soft X-ray emission spectrometer  
Takaomi D Yokoyama, Hideyuki Takahashi, Shogo Koshiya, Takanori Murano, Masami Terauchi  
Microscopy, **71(3)** 169-174 (20220217) [10.1093/jmicro/dfac009]
- P33-07 Characteristics and exchange interactions observed in L-emission spectra of Fe, Mn and their oxides by using a high-energy-resolution soft X-ray emission spectroscopy instrument  
Masami Terauchi, Ryogo Ebisu, Yohei K Sato, Masato Koike  
Microscopy (20221121) [10.1093/jmicro/dfac062]
- P33-08 Electron irradiation damage of amorphous epoxy resin at low electron doses  
Kaname Yoshida, Hsin-Hui Huang, Tomohiro Miyata, Yohei K Sato, Hiroshi Jinnai  
Microscopy (20221210) [10.1093/jmicro/dfac068]
- P33-09 Space group determination and first-principles structure optimization of the A-site ordered perovskite-type manganite NdBaMn<sub>2</sub>O<sub>6</sub>  
Md Shafiqul Islam, Daisuke Morikawa, Shigeki Yamada, Bikas Aryal, Kenji Tsuda, Masami Terauchi  
Physical Review B, **105(17)** 174114 (20220531) [10.1103/PhysRevB.105.174114]
- P33-10 Zigzag magnetic order in the Kitaev spin-liquid candidate material RuBr<sub>3</sub> with a honeycomb lattice  
Yoshinori Imai, Kazuhiro Nawa, Yasuhiro Shimizu, Wakana Yamada, Hideyuki Fujihara, Takuya Aoyama, Ryotaro Takahashi, Daisuke Okuyama, Takamasa Ohashi, Masato Hagihara, Shuki Torii, Daisuke Morikawa, Masami Terauchi, Takayuki Kawamura, Masatsune Kato, Hirotada Gotou, Masayuki Itoh, Taku J. Sato, Kenya Ohgushi  
Physical Review B, **105(4)** L041112 (20220126) [10.1103/physrevb.105.1041112]
- P33-11 極点紫外線 (EUV) 域低入射角高回折効率ラミナー型回折格子の設計  
小池雅人, 村野孝訓, 越谷翔悟, 羽多野忠, ピロジコフ, S. アレキサンダー, 垣尾翼, 林信和, 長野哲也, 近藤公伯, 寺内正己  
X 線分析の進歩, **53** 69-76 (20220300)
- P33-12 X 線 / 紫外可視吸収分光の熱力学モデル解析による 塩酸水溶液中コバルト塩化物錯体の分布と構造の決定と 第一原理計算による検証  
打越雅仁, 篠田弘造, 松本高利  
X 線分析の進歩, **53** 97-117 (20220124)

- M33-01 Total electronic structure analysis realized with soft X-rays  
Masami Terauchi  
Research Features Magazine, **141** 10-13 (20220500)

### 走査プローブ計測技術研究分野 (米田 忠弘 研究室)

- P34-01 Large difference of doping behavior of tetracyanoquinodimethane (TCNQ) and 2,3,5,6-Tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane (F4-TCNQ) on field effect transistor with channel of atomic layer MoS<sub>2</sub>  
Hiroki Waizumi, Muhammad Shamim Al Mamun, Tsuyoshi Takaoka, Md Iftekharul Alam, Yudai Tanaka, Atsushi Ando, Zhipeng Wang, Ryuichi Arafune, Tadahiro Komeda  
Applied Surface Science, **571** 151252 (20220100) [10.1016/j.apsusc.2021.151252]
- P34-02 Ligand Rotation Induced Oxidation State Change and Spin Appearance of the Bis(phthalocyaninato)cerium (CePc<sub>2</sub>) Molecule on the Au(111) Surface  
Islam Saiful, Mohammad Ikram Hossain, Keiichi Katoh, Masahiro Yamashita, Ryuichi Arafune, Syed Mohammad Fakruddin Shahed, Tadahiro Komeda  
The Journal of Physical Chemistry C, **126(40)** 17152-17163 (20220929) [10.1021/acs.jpcc.2c04234]
- P34-03 Spatially Resolving Electron Spin Resonance of pi-Radical in Single-molecule Magnet  
Ryo Kawaguchi, Katsushi Hashimoto, Toshiyuki Kakudate, Keiichi Katoh, Masahiro Yamashita, Tadahiro Komeda  
NANO LETTERS (20221200) [10.1021/acs.nanolett.2c04049]
- P34-04 Observation of Yu-Shiba-Rusinov States and Inelastic Tunneling Spectroscopy for Intramolecule Magnetic Exchange Interaction Energy of Terbium Phthalocyanine (TbPc) Species Adsorbed on Superconductor NbSe<sub>2</sub>  
Syed Mohammad Fakruddin Shahed, Ferdous Ara, Mohammad Ikram Hossain, Keiichi Katoh, Masahiro Yamashita, Tadahiro Komeda  
ACS Nano, **16(5)** 7651-7661 (20220524) [10.1021/acsnano.1c11221]
- P34-05 Observation of a Yu-Shiba-Rusinov state originating from the magnetic moment in a curved monolayer island of 1T-phase NbSe<sub>2</sub>  
Hossain Mohammad Ikram, Ara Ferdous, Shahed Syed Mohammad Fakruddin, Zhipeng Wang, Tadahiro Komeda  
Nanoscale, **32(7)** (20220600) [10.1039/d2nr02007f]
- P34-06 原子層電界効果トランジスタを用いた分子検出—電流特性で探る分子物性・化学反応  
米田 忠弘, 高岡 毅  
化学, **77(6)** 64-65 (20220518)

### 放射光ナノ構造可視化研究分野 (高田 昌樹 研究室)

- P35-01 Metagenomic mining and structure-function studies of a hyper-thermostable cellobiohydrolase from hot spring sediment  
Migiwa Takeda, Seiki Baba, Jiro Okuma, Yoshitsugu Hirose, Asuka Nishimura, Masaki Takata, Kohei Oda, Daisuke Shibata, Takashi Kumasaka, Yasuhiro Kondo  
Communications Biology, **5(1)** (20220322) [10.1038/s42003-022-03195-1]
- P35-02 Measuring the shock stage of Itokawa and asteroid regolith grains by electron backscattered diffraction, optical petrography, and synchrotron X-ray diffraction  
Michael Zolensky, James Martinez, Scott Sitzman, Takashi Mikouchi, Kenji Hagiya, Kazumasa Ohsumi, Mutsumi Komatsu, Tomoki Nakamura, Atsushi Takenouchi, Haruka Ono, Hikari Hasegawa, Kotaro Higashi, Yasuko Terada, Naoto Yagi, Masaki Takata, Hikaru Ozawa, Yuta Taki, Yuta Yamatsuta, Arashi Hirata, Ayaka Kurokawa, Shoki Yamaguchi  
Meteoritics & Planetary Science, **57(5)** 1060-1078 (20220500) [10.1111/maps.13808]
- P35-03 Hydrogen bonding propagated phase separation in quasi-epitaxial single crystals: a Pd-Br molecular insulator  
Takefumi Yoshida, Shinya Takaishi, Laurent Guérin, Tatsuhiro Kojima, Hiroyoshi Ohtsu, Masaki Kawano, Tatsuya Miyamoto, Hiroshi Okamoto, Kenichi Kato, Masaki Takata, Yuka Hosomi, Shoji Yoshida, Hidemi Shigekawa, Hisaaki Tanaka, Shin-ichi Kuroda, Hiroaki Iguchi, Brian Breedlove, Zhao-Yang Li, Masahiro Yamashita  
0 (20220511) [10.21203/rs.3.rs-1579855/v1]
- P35-04 X線は電子のプローブである—放射光科学と最大エントロピー法による錯体構造化学の革新—  
高田昌樹  
Bulletin of Japan Society of Coordination Chemistry, **79** 101-105 (20220700) [10.4019/bjsgcc.79.100]
- P35-05 極端紫外 (EUV) 域低入射角高回折効率ラミナー型回折格子の設計  
小池 雅人, 村野 孝訓, 越谷 翔悟, 羽多野 忠, ビロジコフ S. アレキサンダー, 垣尾 翼, 林 信和, 長野 哲也, 近藤 公伯, 寺内 正己  
X線分析の進歩, **53** 69-76 (20220331)
- M35-01 次世代放射光施設 NanoTerasu (ナノテラス) におけるコアリジョン構想とイノベーション・エコシステム  
高田昌樹  
月刊 経団連, **12** 68-70 (20221201)
- M35-02 コアリジョン軟 X線ビームラインについて  
山根宏之, 松田 巖, 原田 慈久, 江島 丈雄, 中村 哲也  
日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (Web), **35th** (20220000)
- M35-03 軟 X線励起発光 Eu:GGG における誘導放出  
江島 丈雄, 金田 凌祐, 中山 勇冬, 小川 純里, 東口 武史  
日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (Web), **35th** (20220000)

## (金属資源プロセス研究センター)

## 高温材料物理化学研究分野 (福山 博之 研究室)

- P36-01 Thermal processes of miniature thermomagnetic generators in resonant self-actuation mode  
Joel Joseph, Makoto Ohtsuka, Hiroyuki Miki, Manfred Kohl  
*iScience*, **25(7)** 104569-1-104569-13 (20220700) [10.1016/j.isci.2022.104569]
- P36-02 Normal spectral emissivity, specific heat capacity, and thermal conductivity of type 316 austenitic stainless steel containing up to 10 mass% B<sub>4</sub>C in a liquid state  
Hiroyuki Fukuyama, Hideo Higashi, Hidemasa Yamano  
*Journal of Nuclear Materials*, **568** 153865 (20220900) [10.1016/j.jnucmat.2022.153865]
- P36-03 Densities of Au-X (X = Cu, Ni and Pd) binary melts and thermodynamic correlations  
Manabu Watanabe, Masayoshi Adachi, Hiroyuki Fukuyama  
*Journal of Molecular Liquids*, **348** 118050 (20220200) [10.1016/j.molliq.2021.118050]
- P36-04 Phase relation in Ga-Al-N<sub>2</sub> systems and nitrogen solubilities in Ga-Al melts equilibrated with aluminum nitride  
Zaka Ruhma, Masayoshi Adachi, Hidekazu Kobatake, Hiroyuki Fukuyama  
*Materials Science and Engineering: B*, **281** 115747 (20220700) [10.1016/j.mseb.2022.115747]
- P36-05 In situ observations of the dissolution of an AlN film into liquid Al using a high-temperature microscope  
Masayoshi Adachi, Keigo Fujiwara, Ryuta Sekiya, Hidekazu Kobatake, Makoto Ohtsuka, Hiroyuki Fukuyama  
*Materials Science in Semiconductor Processing*, **142** 106469 (20220500) [10.1016/j.mssp.2022.106469]
- P36-06 Thermophysical properties of liquid Co-Cr-Mo alloys measured by electromagnetic levitation in a static magnetic field  
Manabu Watanabe, Yuki Takahashi, Sayaka Imaizumi, Yufan Zhao, Masayoshi Adachi, Makoto Ohtsuka, Akihiko Chiba, Yuichiro Koizumi, Hiroyuki Fukuyama  
*Thermochimica Acta*, **708** 179119 (20220200) [10.1016/j.tca.2021.179119]
- P36-07 Density, surface tension, and viscosity of Co-Cr-Mo melts measured using electrostatic levitation technique  
Manabu Watanabe, Yuki Watanabe, Chihiro Koyama, Takehiko Ishikawa, Sayaka Imaizumi, Masayoshi Adachi, Makoto Ohtsuka, Akihiko Chiba, Yuichiro Koizumi, Hiroyuki Fukuyama  
*Thermochimica Acta*, **710** 179183 (20220400) [10.1016/j.tca.2022.179183]
- P36-08 Influence of sputtering power on optical, electrical properties and structure of aluminum-doped indium saving indium-tin oxide thin films sputtered on preheated substrates  
S. Petrovska, R. Sergiienko, B. Ilkiv, T. Nakamura, M. Ohtsuka  
*Molecular Crystals and Liquid Crystals* (20220000) [10.1080/15421406.2022.2073534]
- P36-09 Emissivity-free radiation thermometry for high-temperature metals using the dual-wavelength reflectance-ratio method  
Hidekazu Kobatake, Yuma Kurokawa, Masaya Iwabuchi, Masayoshi Adachi, Makoto Ohtsuka, Hiroyuki Fukuyama, Naohiko Sasajima, Yu Yamaguchi, Yoshiro Yamada  
*Measurement Science and Technology*, **34(1)** 15010 (20221020) [10.1088/1361-6501/ac8ca3]
- P36-10 XPS Investigation of Indium-Saving Indium-Tin Oxide (ITO) Thin Films  
S. Petrovska, B. Ilkiv, O. Khyzhun, M. Ohtsuka, R. Sergiienko, L. Voisin, T. Nakamura  
*Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **20(2)** 305-320 (20220600) [10.15407/nnn.20.02.305]
- P36-11 Optical, Electrical Properties and Structure of Multilayer Iron-Doped Indium-Tin Oxide Thin Films Sputtered on Preheated Glass Substrates  
Makoto Ohtsuka, Ruslan Sergiienko, Svitlana Petrovska, Takashi Nakamura  
*MATERIALS TRANSACTIONS*, **63(2)** 224-231 (20220201) [10.2320/matertrans.mt-m2021133]
- P36-12 Molar heat capacity of liquid Ti, Al<sub>20</sub>Ti<sub>80</sub> and Al<sub>50</sub>Ti<sub>50</sub> measured in electromagnetic levitation  
Juergen Brillo, Johanna J. Wessing, Hidekazu Kobatake, Hiroyuki Fukuyama  
*High Temperatures-High Pressures*, **51(2)** 145-164 (20220000) [10.32908/hthp.v51.1169]
- B36-01 Metallurgy in Space: Recent Results from ISS (The Minerals, Metals & Materials Series)  
Hiroyuki Fukuyama (Editors: Fecht, Hans-Jörg, Möhr, Markus)  
"Chapter 11 Levitation Research in Japan", p.235-260, Springer (20220401) [ISBN: 3030897834]

## 基盤素材プロセッシング研究分野 (植田 滋 研究室)

- P37-01 Chemical interactions between ZrO<sub>2</sub>/α-Zr structured Zircaloy-4 and 316 stainless steel-B<sub>4</sub>C melt at 1300°C  
Lichun Zheng, Feiyu Wang, Huabing Li, Zhouhua Jiang, Shigeru Ueda  
*Journal of Nuclear Materials*, **559** (20220200) [10.1016/j.jnucmat.2021.153416]
- P37-02 A proposed formation mechanism of the Type-A radiocaesium-bearing microparticles released from Units 2/3 during the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant accident  
Lichun Zheng, Baiqiang Yan, Bo Peng, Huabing Li, Zhouhua Jiang, Shigeru Ueda  
*JOURNAL OF NUCLEAR MATERIALS*, **563** (20220500) [10.1016/j.jnucmat.2022.153623]
- P37-03 Recovery of high-quality phosphate from steelmaking slag by a hydrometallurgical process  
Chuan ming Du, Xu Gao, Shigeru Ueda, Shin ya Kitamura  
*Science of the Total Environment*, **819** (20220501) [10.1016/j.scitotenv.2022.153125]
- P37-04 Extraction of Rare Earth Metal Oxide Inclusion Particles in Steel  
Kouki Maeda, Shigeru Ueda, Ryo Inoue  
*ISIJ International*, **62(5)** 904-911 (20220000) [10.2355/isijinternational.ISIJINT-2021-424]

- P37-05 Dissolution Behavior of Mg and Ca from Dolomite Refractory into Al-killed Molten Steel  
Ying Ren, Chunyang Liu, Xu Gao, Lifeng Zhang, Shigeru Ueda, Shin Ya Kitamura  
Tetsu-To-Hagane/Journal of the Iron and Steel Institute of Japan, **108(8)** 491-500 (20220800) [10.2355/tetsutohagane.TETSU-2021-114]
- M37-01 Dissolution of Chromium from Steelmaking Slag-Cr-containing Mineral Phases and Synthetic Slags  
Takayuki Iwama, Shigeru Ueda, Ryo Inoue  
Tetsu-To-Hagane/Journal of the Iron and Steel Institute of Japan, **108(11)** 803-810 (20221100) [10.2355/tetsutohagane.TETSU-2022-060]
- M37-02 電炉操業におけるエネルギーバランスと CO<sub>2</sub> 排出抑制の最適化に関する一考察  
山口一良, 長坂徹也, 植田滋  
ふえらむ, **27(1)** 44-48 (20220100)
- M37-03 特集「カーボンニュートラルが求められる鉄鋼業の動向」特集にあたって  
植田滋  
金属, **92(10)** 999 (20221000)

### 機能性粉体プロセス研究分野 (加納 純也 研究室)

- P38-01 Development of a method for estimating particles mixing curves in short DEM simulation time  
Yuta Kato, Kizuku Kushimoto, Shingo Ishihara, Junya Kano  
Advanced Powder Technology, **33(12)** 103841 (20221200) [10.1016/j.appt.2022.103841]
- P38-02 Mechanical Synthesis of Lithium Titanate Hydrate in Liquid Phase Using a Bead Mill  
Akira Kondo, Takahiro Kozawa, Toshihiro Ishii, Junya Kano, Makio Naito  
Journal of the Society of Powder Technology, Japan, **59(7)** 324-330 (20220710) [10.4164/sptj.59.324]
- M38-01 下水汚泥からの新しい水素製造法の実用化に向けて  
加納 純也  
再生と利用, **46(169)** 6-11 (20220300)
- M38-02 特集「カーボンニュートラル」を企画して  
大矢仁史, 黒川 卓, 金井和章, 下坂厚子, 不動寺浩, 加納純也  
粉体技術, **14(7)** 14 (20220700)
- B38-01 高分子微粒子の最新技術動向  
久志本 築  
シーエムシー出版, 監修:川口正剛 (20220700) [ISBN: 9784781316710]

### エネルギー資源プロセス研究分野 (桐島 陽 研究室)

- P39-01 Deep groundwater physicochemical components affecting actinide migration  
Akira Kirishima, Mariko Terasaki, Kazuya Miyakawa, Yoshihiro Okamoto, Daisuke Akiyama  
Chemosphere, **289** 133181 (20220200) [10.1016/j.chemosphere.2021.133181]
- P39-02 Speciation on the reaction of uranium and zirconium oxides treated under oxidizing and reducing atmospheres  
Akihiro Uehara, Daisuke Akiyama, Atsushi Ikeda-Ohno, Chiya Numako, Yasuko Terada, Kiyofumi Nitta, Toshiaki Ina, Shino Takeda-Homma, Akira Kirishima, Nobuaki Sato  
Journal of Nuclear Materials, **559** 153422 (20220200) [10.1016/j.jnucmat.2021.153422]
- P39-03 Structure, Stability, and Actinide Leaching of Simulated Nuclear Fuel Debris Synthesized from UO<sub>2</sub>, Zr, and Stainless-Steel  
Akira Kirishima, Daisuke Akiyama, Yuta Kumagai, Ryoji Kusaka, Masami Nakada, Masayuki Watanabe, Takayuki Sasaki, Nobuaki Sato  
Journal of Nuclear Materials, **567** 153842 (20220600) [10.1016/j.jnucmat.2022.153842]
- P39-04 Study on the relation between the crystal structure and thermal stability of FeUO<sub>4</sub> and CrUO<sub>4</sub>  
Daisuke Akiyama, Ryoji Kusaka, Yuta Kumagai, Masami Nakada, Masayuki Watanabe, Yoshihiro Okamoto, Takayuki Nagai, Nobuaki Sato, Akira Kirishima  
Journal of Nuclear Materials, **568** 153847 (20220600) [10.1016/j.jnucmat.2022.153847]
- P39-05 Immobilization of Radioactive Waste by an Aluminum Silicate Matrix Formed from Fly Ash or Bentonite  
Daisuke Akiyama, Charles Duhamel, Akira Kirishima  
Journal of Nuclear Materials, **574** 154151 (20221100) [10.1016/j.jnucmat.2022.154151]
- P39-06 Application of High-Energy-Resolution X-ray Absorption Spectroscopy at the UL<sub>3</sub>-Edge to Assess the U(V) Electronic Structure in FeUO<sub>4</sub>  
Takumi Yomogida, Daisuke Akiyama, Kazuki Ouchi, Yuta Kumagai, Kotaro Higashi, Yoshihiro Kitatsuji, Akira Kirishima, Naomi Kawamura, Yoshio Takahashi  
Inorganic Chemistry, **61(50)** 20206-20210 (20221200) [10.1021/acs.inorgchem.2c03208]
- P39-07 Speciation of chromium aqua and chloro complexes in hydrochloric acid solutions at 298 K  
Masahito Uchikoshi, Daisuke Akiyama, Ken'ichi Kimijima, Kozo Shinoda  
RSC Advances, **12(50)** 32722-32736 (20221200) [10.1039/d2ra06279h]
- P39-08 Uranium dissolution and uranyl peroxide formation by immersion of simulated fuel debris in aqueous H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> solution  
Yuta Kumagai, Ryoji Kusaka, Masami Nakada, Masayuki Watanabe, Daisuke Akiyama, Akira Kirishima, Nobuaki Sato, Takayuki Sasaki  
Journal of Nuclear Science and Technology, **59(8)** 961-971 (20220803) [10.1080/00223131.2021.2023055]

- P39-09 Raman identification and characterization of chemical components included in simulated nuclear fuel debris synthesized from uranium, stainless steel, and zirconium  
Ryoji Kusaka, Yuta Kumagai, Masayuki Watanabe, Takayuki Sasaki, Daisuke Akiyama, Nobuaki Sato, Akira Kirishima  
Journal of Nuclear Science and Technology, 1-11 (20221028) [10.1080/00223131.2022.2128460]
- P39-10 The Distribution and Structures of Ferric Aqua and Chloro Complexes in Hydrochloric Acid Solutions  
Masahito Uchikoshi, Daisuke Akiyama, Ken'ichi Kimijima, Kozo Shinoda  
ISIJ International, **62(5)** 912-921 (20220515) [10.2355/isijinternational.isijint-2021-323]
- M39-01 合金相を含む燃料デブリの安定性評価のための基盤研究  
桐島 陽, 秋山大輔, 佐藤修彰, 渡邊雅之, 熊谷友多, 日下良二, 佐々木隆之, 小林大志  
JAEA-Review, **2022(009)** (20220600) [10.11484/jaea-review-2022-009]
- M39-02 燃料デブリの分析精度向上のための技術開発 2020 年度成果報告 (廃炉・汚染水対策事業費補助金)  
池内 宏知, 小山 真一, 逢坂 正彦, 高野 公秀, 中村 聡志, 小野澤 淳, 佐々木 新治, 大西 貴士, 前田 宏治, 桐島 陽, 秋山 大輔  
JAEA-Technology, **2022-021** (20221000) [10.11484/jaea-technology-2022-021]
- M39-03 オールジャパンでとりくむ地層処分のいま 第 6 回 処分場閉鎖後の安全評価 (その 2)  
館 幸男, 齊藤 拓巳, 桐島 陽  
日本原子力学会誌 ATOMO Σ, **64(5)** 290-295 (20220500) [10.3327/jaesjb.64.5\_290]
- M39-04 燃料デブリの過酸化水素による酸化劣化に関する研究  
熊谷 友多, 日下 良二, 中田 正美, 渡邊 雅之, 秋山 大輔, 桐島 陽, 佐藤 修彰, 佐々木 隆之  
放射線化学, **113** 61-64 (20220400)
- B39-01 トリウム, プルトニウムおよび MA の化学  
佐藤修彰, 桐島陽, 渡邊雅之, 佐々木隆之, 上原章寛, 武田志乃, 北辻章浩, 音部治幹, 小林大志  
東北大学出版会 (20220400) [ISBN: 9784861633706]

### エネルギーデバイス化学研究分野 (本間 格 研究室)

- P40-01 Macro- and Nano-Porous 3D-Hierarchical Carbon Lattices for Extraordinarily High Capacitance Supercapacitors  
Yuto Katsuyama, Nagihiro Haba, Hiroaki Kobayashi, Kazuyuki Iwase, Akira Kudo, Itaru Honma, Richard B. Kaner  
Advanced Functional Materials, **32(24)** 2201544 (20220610) [10.1002/adfm.202201544]
- P40-02 Are Redox-Active Organic Small Molecules Applicable for High-Voltage (< 4V) Lithium-Ion Battery Cathodes?  
Yuto Katsuyama, Hiroaki Kobayashi, Kazuyuki Iwase, Yoshiyuki Gambe, Itaru Honma  
Advanced Science, **9(12)** 2200187 (20220400) [10.1002/advs.202200187]
- P40-03 Copper Aluminum Layered Double Hydroxides with Different Compositions and Morphologies as Electrocatalysts for the Carbon Dioxide Reduction Reaction  
Kazuyuki Iwase, Tomo Hirano, Itaru Honma  
ChemSusChem, **15(2)** e202102340 (20220121) [10.1002/cssc.202102340]
- P40-04 A 3D-Printed, Freestanding Carbon Lattice for Sodium Ion Batteries  
Yuto Katsuyama, Akira Kudo, Hiroaki Kobayashi, Mingwei Chen, Itaru Honma, Richard B. Kaner  
Small, **18(29)** 2202277 (20220620) [10.1002/sml.202202277]
- P40-05 Electrochemical microwell sensor with Fe-N co-doped carbon catalyst to monitor nitric oxide release from endothelial cell spheroids  
Kaoru Hiramoto, Kazuyuki Iwase, Yoshinobu Utagawa, Yuji Nashimoto, Itaru Honma, Kosuke Ino, Hitoshi Shiku  
Analytical Sciences, **38(10)** 1297-1304 (20221000) [10.1007/s44211-022-00160-0]
- P40-06 First-principles study of the reconstruction of  $MgM_2O_4$  ( $M = Mn, Fe, Co$ ) spinel surface  
Tomoaki Kaneko, Yui Fujihara, Hiroaki Kobayashi, Keitaro Sodeyama  
Applied Surface Science, **613(15)** 156065 (20221217) [10.1016/j.apsusc.2022.156065]
- P40-07 Sintering behaviors of highly sinterable Al-doped  $Li_7La_3Zr_2O_{12}$  powder prepared by polymerized-complex method  
Noriko Saito, Shoichi Sugata, Ken Watanabe, Akio Watanabe, Hajime Haneda, Yosuke Suzuki, Itaru Honma  
Ceramics International, **48(15)** 22262-22268 (20220801) [10.1016/j.ceramint.2022.04.224]
- P40-08 A higher redox potential of solid state oxygen redox in  $Li_4SiO_4$ - $LiCoO_2$  nano composite cathode  
Daisuke Okuda, Hiroaki Kobayashi, Masashi Ishikawa  
Ceramics International, **48(23)** 35733-35739 (20220713) [10.1016/j.ceramint.2022.07.093]
- P40-09 Rapid, one-step fabrication of  $MoS_2$  electrocatalysts by hydrothermal electrodeposition  
Yuta Nakayasu, Hiroaki Kobayashi, Shusuke Katahira, Takaaki Tomai, Itaru Honma  
Electrochemistry Communications, **134** (20220100) [10.1016/j.elecom.2021.107180]
- P40-10 Self-activation effect in bimetallic  $MgMn_2O_4$  and boosting its electrochemical performance using metal-organic framework template for magnesium-ion battery cathodes  
Cheng Dong, Hiroaki Kobayashi, Itaru Honma  
Materials Today Energy, **30** 101143 (20220915) [10.1016/j.mtener.2022.101143]
- P40-11 Graphene and Polyethyleneimine Bilayer Wrapping onto Quinone Molecular Crystal Cathode Materials for Aqueous Zinc-Ion Batteries  
Hiroaki Kobayashi, Kotaro Oizumi, Takaaki Tomai, Itaru Honma  
ACS Applied Energy Materials, **5(4)** 4707-4711 (20220425) [10.1021/acsaem.2c00134]

- P40-12 High-Entropy Spinel Oxide Nanoparticles Synthesized via Supercritical Hydrothermal Processing as Oxygen Evolution Electrocatalysts  
Kazuyuki Iwase, Itaru Honma  
ACS Applied Energy Materials, **5(8)** 9292-9296 (20220822) [10.1021/acsami.2c01751]
- P40-13 Examining Electrolyte Compatibility on Polymorphic MnO<sub>2</sub> Cathodes for Room-Temperature Rechargeable Magnesium Batteries  
Xiatong Ye, Hongyi Li, Takuya Hatakeyama, Hiroaki Kobayashi, Toshihiko Mandai, Norihiko L. Okamoto, Tetsu Ichitsubo  
ACS Applied Materials & Interfaces, **14(51)** 56685-56696 (20221215) [10.1021/acsami.2c14193]
- P40-14 Series module of quinone-based organic supercapacitor (> 6V) with practical cell structure  
Yuto Katsuyama, Takayuki Takehi, Shu Sokabe, Mai Tanaka, Mizuki Ishizawa, Hiroya Abe, Masaru Watanabe, Itaru Honma, Yuta Nakayasu  
Scientific Reports, **12(1)** (20221200) [10.1038/s41598-022-07853-6]
- P40-15 Activity switching of Sn and In species in Heusler alloys for electrochemical CO<sub>2</sub> reduction  
Kazuyuki Iwase, Takayuki Kojima, Naoto Todoroki, Itaru Honma  
Chemical Communications, **58(31)** 4865-4868 (20220322) [10.1039/d2cc00754a]
- P40-16 One-Pot Super Critical Fluid Synthesis of Spinel MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> Nanoparticles and its Application as Anode Material for Mg-ion Battery  
Vinay Gangaraju, Tathagata Sardar, Kunal Roy, Mahesh Shastri, Manjunath Shetty, Murthy Muniyappa, Hiroaki Kobayashi, Takaaki Tomai, Ananda Kumar C S, Prasanna D. Shivaramu, Dinesh Rangappa  
Asian Journal of Chemistry, **34(4)** 989-994 (20220310) [10.14233/ajchem.2022.23642]
- P40-17 Suppressing Electrolyte Decomposition at Cathode/Electrolyte Interface towards Room-Temperature Magnesium Rechargeable Battery Operation  
Reona Iimura, Hiroaki Kobayashi, Itaru Honma  
Electrochemistry, **90(6)** 67002 (20220512) [10.5796/electrochemistry.22-00045]
- B40-01 Recent Trends in Electrochemical Science and Technology  
U. Kamachi Mudali, S. T. Aruna, H. P. Nagaswarupa, Dinesh Rangappa  
“One-Pot Solvothermal Synthesis of Spinel MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> Nanoparticles as a Promising Cathode Material for Rechargeable Mg-ion Battery”, Springer (20220000) [ISBN: 9789811675546]

### 金属資源循環システム研究分野 (柴田 悦郎 研究室)

- P41-01 Direct Aqueous Carbonation of Dephosphorization Slag Under Mild Conditions for CO<sub>2</sub> Sequestration and Utilization: Exploration of New Dephosphorization Slag Utilization  
Hsing-Jung Ho, Atsushi Iizuka, and Hironari Kubo  
Environmental Technology & Innovation, **28** 102905 (20220000) [10.1016/j.eti.2022.102905]
- P41-02 Circular indirect carbonation of coal fly ash for carbon dioxide capture and utilization  
Hsing-Jung Ho, Atsushi Iizuka, Etsuro Shibata, Tunde Ojumu  
Journal of Environmental Chemical Engineering, **10(5)** 108269 (20220700) [10.1016/j.jece.2022.108269]
- P41-03 Comparative Study of Acid Mine Drainage Neutralization by Calcium Hydroxide and Concrete Sludge-Derived Material  
Atsushi Iizuka, Hsing-Jung Ho, Takeshi Sasaki, Hiroyuki Yoshida, Yasuyuki Hayakawa, Akihiro Yamasaki  
Minerals Engineering, **188** (20220000) [10.1016/j.mineng.2022.107819]
- P41-04 Removal of Fluoride Ions from Aqueous Solution by Metaettringite  
Atsushi Iizuka, Hsing-Jung Ho, Akihiro Yamasaki  
PLOS ONE, **17(3)** e0265451 (20220314) [10.1371/journal.pone.0265451]
- P41-05 Investigation of the Scorodite Formation Mechanism in As(V) Solution Containing Fe(II) with Hematite Addition Using a Stable Iron Isotope  
Atsushi Iizuka, Ken Adachi, Etsuro Shibata  
MATERIALS TRANSACTIONS, **63(4)** 655-661 (20220401) [10.2320/matertrans.m-m2022801]
- P41-06 pH Dependence of Scorodite Formation in As(V) Solution Using Magnetite as the Solid Iron Source  
Ken Adachi, Takumi Anezaki, Tomoro Karube, Atsushi Iizuka, Etsuro Shibata  
MATERIALS TRANSACTIONS, **63(9)** 1287-1293 (20220901) [10.2320/matertrans.m-m2022806]
- P41-07 Fundamental Application of Basket Electrolysis Method for Black-Copper Anode  
Takatoshi Shinozaki, Ken Adachi, Katsuyuki Kudo, Atsushi Iizuka, Etsuro Shibata  
MATERIALS TRANSACTIONS, **63(11)** 1583-1589 (20221101) [10.2320/matertrans.m-m2022811]
- M41-01 環境化学工学・大気環境  
飯塚淳  
化学工学, **86(10)** 524-525 (20221000)
- M41-02 COVID-19 による世界的なロックダウンは大気汚染にどのように影響したか?  
飯塚淳  
化学工学, **86(9)** 455 (20220900)
- B41-01 CO<sub>2</sub> の分離回収・有効利用技術  
飯塚淳, 何星融  
p.245-249 (20220628) [ISBN: 978-4-86428-284-0]



- B41-02 CO<sub>2</sub> の分離・回収・貯留技術の開発とプロセス設計  
飯塚淳  
p.393-396 (20221000) [ISBN: 978-4-86104-902-6]
- B41-03 化学技術のフロンティアシリーズ① サークュラー・バイオエコノミーを支える分離技術  
公益社団法人新化学技術推進協会グリーン, サステイナブルケミストリーネットワーク会議  
“第3部第1章 1.4.1 「炭酸塩鉱物」”, p.100-102, 学術研究出版 (20220202)
- B41-04 二酸化炭素利活用技術～CO<sub>2</sub> 削減に向けた最新研究～  
飯塚淳  
“第4章第2節第6項「炭酸塩製造、コンクリート製品等への二酸化炭素の利用」 pp.205-209”, 情報機構 (20220121)

### 原子空間制御プロセス研究分野 (小俣 孝久 研究室)

- P42-01 Anhydrous Silicophosphoric Acid Glass: Thermal Properties and Proton Conductivity  
Takahisa Omata, Aman Sharma, Issei Suzuki, Tomohiro Ishiyama, Shinji Kohara, Koji Ohara, Madoka Ono, Yang Ren, Khurelbaatar Zagarzusem, Masaya Fujioka, Gaoyang Zhao, Junji Nishii  
ChemPhysChem, **23(3)** (20220100) [10.1002/cphc.202100840]
- P42-02 Visualization of polysulfide dissolution in lithium-sulfur batteries using in-situ NMR microimaging  
Arunkumar Dorai, Junichi Kawamura, Takahisa Omata  
Electrochemistry Communications, **141** 107360 (20220800) [10.1016/j.elecom.2022.107360]
- P42-03 Phase Transformation of Metastable Cu<sub>2</sub>ZnGeO<sub>4</sub> with a Wurtz-Kesterite Structure at Elevated Temperatures  
Masao Kita, Issei Suzuki, Noriyuki Wada, Takahisa Omata  
Inorganic Chemistry (20220000) [10.1021/acs.inorgchem.2c00480]
- P42-04 Site-Dependent Tb<sup>3+</sup> Luminescence by Energy Transfer from Ce<sup>3+</sup> in Ce<sup>3+</sup>-Tb<sup>3+</sup> Codoped LaLuO<sub>3</sub>  
Shoichiro Nagashima, Kazushige Ueda, Takahisa Omata  
The Journal of Physical Chemistry C, **126(14)** 6499-6504 (20220405) [10.1021/acs.jpcc.2c01074]
- P42-05 Avoiding Fermi Level Pinning at the SnS Interface for High Open-Circuit Voltage  
Issei Suzuki, Binxiang Huang, Sakiko Kawanishi, Takahisa Omata, Andreas Klein  
The Journal of Physical Chemistry C, **126(48)** 20570-20576 (20221208) [10.1021/acs.jpcc.2c04212]
- P42-06 Electrolytes for Room-Temperature Rechargeable Fluoride Shuttle Batteries  
Shigehiro Kawauchi, Hirofumi Nakamoto, Reiji Takekawa, Tetsuro Kobayashi, Takeshi Abe  
ACS Applied Energy Materials, **5** 2096-2103 (20220209) [10.1021/acsaem.1c03623]
- P42-07 Direct evaluation of hole effective mass of SnS-SnSe solid solutions with ARPES measurement  
Issei Suzuki, Zexin Lin, Sakiko Kawanishi, Kiyohisa Tanaka, Yoshitaro Nose, Takahisa Omata, Shin-Ichiro Tanaka  
Physical Chemistry Chemical Physics, **24(2)** 634-638 (20220000) [10.1039/d1cp04553a]
- P42-08 Fast divalent conduction in MB<sub>12</sub>H<sub>12</sub> · 12H<sub>2</sub>O (M = Zn, Mg) complex hydrides: effects of rapid crystal water exchange and application for solid-state electrolytes  
Kazuaki Kisu, Arunkumar Dorai, Sangryun Kim, Riku Hamada, Akichika Kumatani, Yoshiko Horiguchi, Ryuhei Sato, Kartik Sau, Shigeyuki Takagi, Shin-ichi Orimo  
Journal of Materials Chemistry A, **10(46)** 24877-24887 (20221100) [10.1039/d2ta06060d]
- P42-09 Growth of β-NaGaO<sub>2</sub> thin films using ultrasonic spray pyrolysis  
Issei Suzuki, Shunichi Suzuki, Tatsuya Watanabe, Masao Kita, Takahisa Omata  
Journal of Asian Ceramic Societies (20220403) [10.1080/21870764.2022.2082049]
- P42-10 Current status of n-Type SnS: Paving the way for SnS homojunction solar cells  
Issei Suzuki, Sakiko Kawanishi, Takahisa Omata, Hiroshi Yanagi  
Journal of Physics: Energy, **4(4)** 42002 (20220803) [10.1088/2515-7655/ac86a1]
- P42-11 Contribution of the Sn 5s state to the SnS valence band: direct observation via ARPES measurements  
Issei Suzuki, Sakiko Kawanishi, Kiyohisa Tanaka, Takahisa Omata, Shin-ichiro Tanaka  
Electronic Structure, **4(2)** 25004 (20220601) [10.1088/2516-1075/ac6ea8]
- P42-12 Drug formulation augments the therapeutic response of carboplatin administered through a lymphatic drug delivery system  
Radhika Mishra, Ariunbuyan Sukhbaatar, Arunkumar Dorai, Shiro Mori, Kiyoto Shiga, Tetsuya Kodama  
Cancer Science, **114(1)** 259-270 (20221014) [10.1111/cas.15599]
- P42-13 Origin of the Temperature Dependence of Proton Conductivity in Phosphate Glass Prepared by Alkali-Proton Substitution Technique  
Tomohiro Ishiyama, Takuya Yamaguchi, Junji Nishii, Toshiharu Yamashita, Hiroshi Kawazoe, Takahisa Omata  
Journal of The Electrochemical Society, **169(3)** 34517 (20220301) [10.1149/1945-7111/ac5793]
- P42-14 Proton-conducting phosphate glass: Recent development as an electrolyte in intermediate temperature fuel cells  
Tomohiro ISHIYAMA, Takuya YAMAGUCHI, Takahisa OMATA  
Journal of the Ceramic Society of Japan, **130(1)** 1-9 (20220101) [10.2109/jcersj2.21110]
- P42-15 First Principles Calculation of Electrical and Optical Properties of Cu<sub>3</sub>AsO<sub>4</sub>: Promising Thin-Film Solar Cell Absorber from Nonferrous Metal Manufacturing By-Products  
Issei Suzuki, Sakiko Kawanishi, Naoki Ohashi, Aiga Gomi, Junya Kano, Hiroto Watanabe, Satoshi Asano, Takahisa Omata  
MATERIALS TRANSACTIONS, **63(1)** 73-81 (20220101) [10.2320/matertrans.m-m2021851]

- M42-01 中温作動電気化学デバイスのためのプロトン伝導性リン酸塩ガラス電解質  
石山智大, 小俣孝久  
セラミックス, **57** 715-719 (20220000)

(マテリアル・計測ハイブリッド研究センター)

量子電子科学研究分野 (高橋 正彦 研究室)

- P43-01 A joint experimental and theoretical study of the valence electron momentum distributions of trans-stilbene  
Noboru Watanabe, Kenichi Kume, Masahiko Takahashi  
Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, **259** 147240 (20220800) [10.1016/j.elspec.2022.147240]
- P43-02 Asymptotic behavior of the electron-atom Compton profile due to the intramolecular H-atom motion in H<sub>2</sub>  
Yuuki Onitsuka, Yuichi Tachibana, Masahiko Takahashi  
Physical Chemistry Chemical Physics, **24** 19716-19721 (20220706) [10.1039/d2cp02461f]
- P43-03 Theoretical study of generalized oscillator strengths for the low-lying electronic excitations of CH<sub>3</sub>Cl and CF<sub>3</sub>Cl  
Noboru Watanabe, Masahiko Takahashi  
Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, **55** 15201 (20220105) [10.1088/1361-6455/ac4a22]
- P43-04 Direct and precise mapping of intramolecular H-atom motion in H<sub>2</sub> by an electron-atom Compton scattering experiment  
Yuichi Tachibana, Yuuki Onitsuka, Hirohiko Kono, Masahiko Takahashi  
Physical Review A, **105** 52813 (20220531) [10.1103/physreva.105.052813]

ナノ・マイクロ計測化学研究分野 (火原 彰秀 研究室)

- P44-01 Photochemical Reactions of Glyoxal during Particulate Ammonium Nitrate Photolysis: Brown Carbon Formation, Enhanced Glyoxal Decay, and Organic Phase Formation  
Ruifeng Zhang, Masao Gen, Zhancong Liang, Yong Jie Li, Chak Keung Chan  
Environmental Science & Technology (20220113) [10.1021/acs.est.1c07211]
- P44-02 Decay Kinetics and Absorption Changes of Methoxyphenols and Nitrophenols during Nitrate-Mediated Aqueous Photochemical Oxidation at 254 and 313 nm  
Yalin Wang, Wanyi Huang, Linhui Tian, Yuchen Wang, Fangbing Li, Dan Dan Huang, Ruifeng Zhang, Beatrix Rosette Go Mabato, Ru-Jin Huang, Qi Chen, Xinlei Ge, Lin Du, Ying Ge Ma, Masao Gen, Ka In Hoi, Kai Meng Mok, Jian Z. Yu, Chak K. Chan, Xue Li, Yong Jie Li  
ACS Earth and Space Chemistry (20220328) [10.1021/acsearthspacechem.2c00021]
- P44-03 Development of spray-drying-based surface-enhanced Raman spectroscopy  
Chigusa Matsumoto, Masao Gen, Atsushi Matsuki, Takafumi Seto  
Scientific Reports, **12**(1) (20220300) [10.1038/s41598-022-08598-y]
- P44-04 Particulate nitrate photolysis in the atmosphere  
Masao Gen, Zhancong Liang, Ruifeng Zhang, Beatrix Rosette Go Mabato, Chak K. Chan  
Environmental Science: Atmospheres (20220000) [10.1039/d1ea00087j]
- P44-05 Non-competitive fluorescence polarization immunosensing for CD9 detection using a peptide as a tracer.  
Kazuki Takahashi, Shunsuke Chida, Thanawat Suwatthanarak, Mikiko Iida, Min Zhang, Mao Fukuyama, Masatoshi Maeki, Akihiko Ishida, Hirofumi Tani, Takao Yasui, Yoshinobu Baba, Akihide Hibara, Mina Okochi, Manabu Tokeshi  
Lab on a chip, **22**(16) 2971-2977 (20220617) [10.1039/d2lc00224h]
- P44-06 Filtration of aerosol particles by parallel and staggered filter arrays  
Manabu Nishimura, Yajiao Liu, Masao Gen, Takafumi Seto, Yoshio Otani  
Aerosol Science and Technology, 1-10 (20220520) [10.1080/02786826.2022.2080042]
- P44-07 Bioanalytical Technologies for Safety Control of Fish and Seafood by Sensitive Rapid Tests for Phycotoxins  
S A Eremin, A V Zherdev, M Tokeshi, A Hibara  
IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, **988**(4) 42041 (20220201) [10.1088/1755-1315/988/4/042041]
- P44-08 Kinetic quantitative analysis reveals the suppression of Sup35NM amyloid fibril nucleation by liquid-liquid phase separation.  
Mao Fukuyama, Suguru Nishinami, Yoko Maruyama, Taiki Ozawa, Shunsuke Tomita, Yumiko Ohhashi, Motohiro Kasuya, Masao Gen, Eri Chatani, Kentaro Shiraki, Akihide Hibara  
Analytical Chemistry (20221101) [10.26434/chemrxiv-2022-tp1cm]
- P44-09 SIMPLE ANION DETECTION ON MICROFLUIDIC PAPER ANALYTICAL DEVICE  
Grasianto, Mao Fukuyama, Motohiro Kasuya, Masao Gen, Carlos Baptista, Shin-Ichi Kondo, Akihide Hibara  
Proceedings of MicroTAS 2022, 1107-1108 (20221000)
- M44-01 液液相分離相からのアミロイド形成速度のサイズ依存  
福山真央, 西奈美卓, 富田峻介, 大橋祐美子, 粕谷素洋, 茶谷絵理, 丸山洋子, 白木賢太郎, 火原彰秀  
化学とマイクロ・ナノシステム, **21**(2) 13-16 (20220000)
- M44-02 自然乳化を利用した微量試料前処理操作の開発  
福山真央, 火原彰秀  
分析化学, **71**(7.8) 391-397 (20220805) [10.2116/bunsekikagaku.71.391]

## ハイブリッド炭素ナノ材料研究分野 (西原 洋知 研究室)

- P45-01 Regulating Li-ion Flux through a Dense yet Highly Ionic Conductive Interlayer for Stable Li Deposition  
Zhijia Huang, Zhiyuan Han, Baozheng Jiang, Yunbo Zhang, Sichen Gu, Chen Zhang, Zhengze Pan, Hiroto Nishihara, Quan-Hong Yang, Wei Lv  
ADVANCED MATERIALS INTERFACES, **9(17)** (20220600) [10.1002/admi.202200457]
- P45-02 Nanoscale characterization of the site-specific degradation of electric double-layer capacitor using scanning electrochemical cell microscopy  
Yusuke Kawabe, Yosuke Miyakoshi, Rui Tang, Takeshi Fukuma, Hiroto Nishihara, Yasufumi Takahashi  
Electrochemical Science Advances, **2(3)** e2100053 (20220600) [10.1002/elsa.202100053]
- P45-03 Bimetallic ordered carbonaceous frameworks from Co- and Cu-porphyrin bimolecular crystals  
Koki Chida, Takeharu Yoshii, Norihito Hiyoshi, Tetsuji Itoh, Jun Maruyama, Kazuhide Kamiya, Masataka Inoue, Fumito Tani, Hiroto Nishihara  
Carbon, **201** 338-346 (20220900) [10.1016/j.carbon.2022.09.017]
- P45-04 Synthesis and electrocatalysis of ordered carbonaceous frameworks from Ni porphyrin with four ethynyl groups  
Koki Chida, Takeharu Yoshii, Mao Ohwada, Yuichiro Hayasaka, Joe Komeda, Ryota Sakamoto, Jun Maruyama, Kazuhide Kamiya, Masataka Inoue, Fumito Tani, Hiroto Nishihara  
Catalysis Today, 113830 (20220700) [10.1016/j.cattod.2022.06.045]
- P45-05 Coordination chemistry for innovative carbon-related materials  
Ryota Sakamoto, Ryojun Toyoda, Guan Jingyan, Yuta Nishina, Kazuhide Kamiya, Hiroto Nishihara, Tomoki Ogoshi  
COORDINATION CHEMISTRY REVIEWS, **466** (20220900) [10.1016/j.ccr.2022.214577]
- P45-06 Capacitance of edge-free three-dimensional graphene: New perspectives on the design of carbon structures for supercapacitor applications  
Rui Tang, Keita Nomura, Kazutoshi Inoue, Motoko Kotani, Takashi Kyotani, Hiroto Nishihara  
Electrochimica Acta, **429** 141009 (20221000) [10.1016/j.electacta.2022.141009]
- P45-07 Giant Carbon Nano-Test Tubes as Versatile Imaging Vessels for High-Resolution and In Situ Observation of Proteins  
Tracy T. Chuong, Toshihiko Ogura, Norihito Hiyoshi, Kazuma Takahashi, Sangho Lee, Keita Hiraga, Hiroki Iwase, Akira Yamaguchi, Kiyoto Kamagata, Eriko Mano, Satoshi Hamakawa, Hiroto Nishihara, Takashi Kyotani, Galen D. Stucky, Tetsuji Itoh  
ACS Applied Materials & Interfaces, **14(23)** 26507-26516 (20220615) [10.1021/acsmi.2c06318]
- P45-09 In-Depth Analysis of Key Factors Affecting the Catalysis of Oxidized Carbon Blacks for Cellulose Hydrolysis  
Atsushi Gabe, Akira Takatsuki, Masahiko Hiratani, Masato Kaneeda, Yoshiaki Kurihara, Takayuki Aoki, Hiroki Mashima, Takafumi Ishii, Jun-ichi Ozaki, Hiroto Nishihara, Takashi Kyotani  
ACS Catalysis, **12(2)** 892-905 (20220121) [10.1021/acscatal.1c04054]
- P45-10 Ordered carbonaceous frameworks: a new class of carbon materials with molecular-level design  
Takeharu Yoshii, Koki Chida, Hiroto Nishihara, Fumito Tani  
CHEMICAL COMMUNICATIONS, **58(22)** 3578-3590 (20220300) [10.1039/d1cc07228e]
- P45-11 Helically aligned fused carbon hollow nanospheres with chiral discrimination ability  
Jun Maruyama, Shohei Maruyama, Yukiyasu Kashiwagi, Mitsuru Watanabe, Tsutomu Shinagawa, Toru Nagaoka, Toshiyuki Tamai, Naoya Ryu, Koichi Matsuo, Mao Ohwada, Koki Chida, Takeharu Yoshii, Hiroto Nishihara, Fumito Tani, Hiroshi Uyama  
Nanoscale, **14(10)** 3748-3757 (20220000) [10.1039/d1nr07971a]
- P45-12 Porous nanographene formation on  $\gamma$ -alumina nanoparticles via transition-metal-free methane activation  
Masanori Yamamoto, Qi Zhao, Shunsuke Goto, Yu Gu, Takaaki Toriyama, Tomokazu Yamamoto, Hiroto Nishihara, Alex Aziz, Rachel Crespo-Otero, Devis Di Tommaso, Masazumi Tamura, Keiichi Tomishige, Takashi Kyotani, Kaoru Yamazaki  
Chemical Science, **13(11)** 3140-3146 (20220000) [10.1039/d1sc06578e]
- P45-13 Synthesis of microporous polymers with exposed  $C_{60}$  surfaces by polyesterification of fullerene  
Hiroto Nishihara, Akio Harigaya, Alberto Castro-Muñiz, Mao Ohwada, Takashi Kyotani, Yuta Nishina  
Chemical Communications, **58(50)** 7086-7089 (20220000) [10.1039/d2cc00728b]
- P45-14 The carbon chain growth during the onset of CVD graphene formation on  $\gamma$ - $Al_2O_3$  is promoted by unsaturated  $CH_2$  ends  
Qi Zhao, Masanori Yamamoto, Kaoru Yamazaki, Hiroto Nishihara, Rachel Crespo-Otero, Devis Di Tommaso  
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, **24(38)** 23357-23366 (20221000) [10.1039/d2cp01554d]
- P45-15 Aligned Macroporous Monoliths by Ice-Templating  
Zheng-Ze Pan, Wei Lv, Quan-Hong Yang, Hiroto Nishihara  
BULLETIN OF THE CHEMICAL SOCIETY OF JAPAN, **95(4)** 611-620 (20220400) [10.1246/bcsj.20220022]
- P45-16 Synthesis of hexa-aminated trinaphtho[3.3.3]propellane and its porous polymer solids with alkane adsorption properties  
Kenichi Kato, Nobuyoshi Seto, Koki Chida, Takeharu Yoshii, Motohiro Mizuno, Hiroto Nishihara, Shunsuke Ohtani, Tomoki Ogoshi  
Bulletin of the Chemical Society of Japan, **95(9)** 1296-1302 (20220713) [10.1246/bcsj.20220180]
- P45-17 The Onset of CVD Graphene Formation on  $\gamma$ - $Al_2O_3$  is Promoted by Unsaturated  $CH_2$  End  
Qi Zhao, Masanori Yamamoto, Kaoru Yamazaki, Hiroto Nishihara, Rachel Crespo-Otero, and Devis Di Tommaso  
ChemRxiv (20220000) [10.26434/chemrxiv-2022-78cvz]

- P45-18 Adsorption properties of templated nanoporous carbons consisting of 1-2 graphene layers  
Hiroto Nishihara, Hong-Wei Zhao, Kazuya Kanamaru, Keita Nomura, Mao Ohwada, Masashi Ito, Li-Xiang Li, Bai-Gang An, Toshihide Horikawa, Takashi Kyotani  
Carbon Reports, **1**(4) 123-135 (20220000) [10.7209/carbon.010301]
- P45-19 Pore-size control of soft mesoporous carbon by hot pressing  
Kazuya Kanamaru, Masashi Ito, Masanobu Uchimura, Yasushi Ichikawa, Kazuki Sone, Ami Ikura, Hiroto Nishihara  
Carbon Reports, **1**(4) 214-222 (20221201) [10.7209/carbon.010402]
- M45-01 新しい物質群「3D カーボン構造体」の創成  
坂本良太, 仁科勇太, 神谷和秀, 西原洋知, 生越友樹  
化学, **77**(3) 29-33 (20220300)
- M45-02 ナノ粒子表面への有機修飾による触媒機能開拓  
吉井丈晴  
化学工学会東北支部 NEWS LETTER, **118** 6-9 (20220700)
- M45-03 有機分子結晶から調製した規則性高分子および炭素材料の粉末 X 線回折による結晶構造解析  
吉井丈晴, 千田晃生  
九州シンクロトロン光研究センター県有ビームライン利用報告書, 2109083S (20221111)
- B45-01 固体表面キャラクタリゼーション 機能性材料・ナノマテリアルのためのスペクトロスコーピー (KS 化学専門書)  
西原洋知, 吉井丈晴  
“16.3 鋳型ポーラス炭素”, 講談社、編著: 山下 弘巳, 吉田 寿雄, 田中 庸裕 (20220330) [ISBN: 4065261260]

### ハイブリッド材料創製研究分野 (芥川 智行 研究室)

- P46-01 Solid-State Fluorescence of Excited-State Cation-Anion Intermolecular Proton Transfer in 2-(2-Hydroxypyridyl)benzothiazole  
Keigo Takahashi, Kohei Sambe, Yotaro Kasahara, Takashi Takeda, Norihisa Hoshino, Ken-ichi Sakai, Tomoyuki Akutagawa  
Advanced Optical Materials, **10**(11) 2200134 (20220600) [10.1002/adom.202200134]
- P46-02 Proton Conduction at High Temperature in High-Symmetry Hydrogen-Bonded Molecular Crystals of Ru<sup>III</sup> Complexes with Six Imidazole-Imidazolate Ligands  
Makoto Tadokoro, Masaki Itoh, Ryota Nishimura, Kensuke Sekiguchi, Norihisa Hoshino, Hajime Kamebuchi, Jun Miyazaki, Fumiya Kobayashi, Motohiro Mizuno, Tomoyuki Akutagawa  
Chemistry – A European Journal, **28**(47) (20220822) [10.1002/chem.202201397]
- P46-03 Benzenetriimide-Based Molecular Conductor with Antiferro- to Ferromagnetic Switching Induced by Structural Change of  $\pi$ -stacked Array  
Shohei Koyama, Yoji Horii, Tetsu Sato, Shinya Takaishi, Norihisa Hoshino, Tomoyuki Akutagawa, Hiroaki Iguchi  
ChemPhysChem, **23**(19) (20221006) [10.1002/cphc.202200322]
- P46-04 Dynamic supramolecular cations in conductive and magnetic [Ni(dmit)<sub>2</sub>] crystals  
Kiyonori Takahashi, Takayoshi Nakamura, Tomoyuki Akutagawa  
Coordination Chemistry Reviews, **475** 214881 (20221200) [10.1016/j.ccr.2022.214881]
- P46-05 Fabrication and characterization of pore-selective silver-functionalized honeycomb-patterned porous film and its application for antibacterial activity  
Shahkar Falak, Bo Kyoung Shin, Hiroshi Yabu, Do Sung Huh  
Polymer, **244** (20220323) [10.1016/j.polymer.2022.124646]
- P46-06 Thermal Conductivities and Figures of Merit of Tetracyanoquinodimethane-Based Thermoelectric Materials Consisting of Cations Exhibiting Order-Disorder Transitions  
Norihisa Hoshino, Tomoyuki Akutagawa  
Crystal Growth & Design, **22**(5) 3359-3364 (20220504) [10.1021/acs.cgd.2c00161]
- P46-07 Thermosolvent Effect of 5-Fluorobenzoyl-4-(4-methoxyphenyl)ethynyl-1-methylimidazole without Phase Transition  
Youhei Miura, Takashi Takeda, Naoki Yoshioka, Tomoyuki Akutagawa  
Crystal Growth & Design, **22**(10) 5904-5911 (20221005) [10.1021/acs.cgd.2c00547]
- P46-08 Supramolecular Complexation and Collective Optical Properties Induced by Linking Two Methyl Salicylates via a  $\sigma$ -Bridge  
Miku Takahashi, Ken-ichi Sakai, Kohei Sambe, Tomoyuki Akutagawa  
The Journal of Physical Chemistry B, **126**(16) 3116-3124 (20220428) [10.1021/acs.jpcc.2c00842]
- P46-09 Ferroelectrics Coupled with Unidirectional Rotation in Liquid Crystals  
Jianyun Wu, Takashi Takeda, Norihisa Hoshino, Tomoyuki Akutagawa  
The Journal of Physical Chemistry C, **126**(8) 3864-3871 (20220222) [10.1021/acs.jpcc.1c10313]
- P46-10 Effects of Hydride Transfer Ring-Opening Reaction on B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>3</sub> Catalyzed Polymerization of D<sub>4</sub><sup>H</sup> Cyclosiloxane and Di-alkoxysilanes toward Thermally Stable Silsesquioxane-Siloxane Hybrid Materials  
Huie Zhu, Shogo Hiruta, Ali Demirci, Soyeon Kim, Norihisa Hoshino, Tomoyuki Akutagawa, Masaya Mitsuishi  
Macromolecules (20221024) [10.1021/acs.macromol.2c00948]
- P46-11 Structural Transformable Coulomb Lattice of n-Type Semiconductors for Guest Sorption  
Ayumi Kawasaki, Takashi Takeda, Norihisa Hoshino, Wakana Matsuda, Shu Seki, George K. H. Shimizu, Tomoyuki Akutagawa  
ACS Applied Materials & Interfaces, **15**(1) 1661-1674 (20221221) [10.1021/acsami.2c17979]
- P46-12 Bridging pico-to-nanonewtons with a ratiometric force probe for monitoring nanoscale polymer physics before damage.  
Ryota Kotani, Soichi Yokoyama, Shunpei Nobusue, Shigehiro Yamaguchi, Atsuhiko Osuka, Hiroshi Yabu, Shohei Saito  
Nature communications, **13**(1) 303 (20220113) [10.1038/s41467-022-27972-y]

- P46-13 Heterospin frustration in a metal-fullerene-bonded semiconductive antiferromagnet  
Yongbing Shen, Mengxing Cui, Shinya Takaishi, Hideyuki Kawasoko, Kunihisa Sugimoto, Takao Tsumuraya, Akihiro Otsuka, Eunsang Kwon, Takefumi Yoshida, Norihisa Hoshino, Kazuhiko Kawachi, Yasuhiko Kasama, Tomoyuki Akutagawa, Tomoteru Fukumura, Masahiro Yamashita  
Nature Communications, **13(1)** (20221200) [10.1038/s41467-022-28134-w]
- P46-14 Simple molecular ferroelectrics: *N,N'*-dialkyl-terephthalamide derivatives in the solid phase  
Moeko Kawana, Ryohei Mizoue, Takashi Takeda, Norihisa Hoshino, Tomoyuki Akutagawa  
Journal of Materials Chemistry C, **10(11)** 4208-4217 (20220209) [10.1039/d1tc05001j]
- P46-15 Tuning the dielectric response by co-crystallisation of sumanene and its fluorinated derivative  
Minghong Li, Xi Chen, Yumi Yakiyama, JianYun Wu, Tomoyuki Akutagawa, Hidehiro Sakurai  
Chemical Communications, **58(64)** 8950-8953 (20220000) [10.1039/d2cc02766f]
- P46-16 Chemical design of organic ferroelectrics using dynamics of alkylamide chains  
Takashi Takeda, Tomoyuki Akutagawa  
Chemical Communications, **58(85)** 11898-11912 (20221000) [10.1039/d2cc04120k]
- P46-17 Large electric piezoresistance of the flexible molecular semiconductive crystal Q(TCNQ)<sub>2</sub> during bending  
Norihisa Hoshino, Tomoyuki Akutagawa  
CrystEngComm, **24(29)** 5234-5237 (20220000) [10.1039/d2ce00571a]
- P46-18 Tetranitro- and tetraamino-dibenzo[18]crown-6-ether derivatives: complexes for alkali metal ions, redox potentials, crystal structures, molecular sorption, and proton conducting behaviours  
Yuta Shimizu, Takashi Takeda, Norihisa Hoshino, Tomoyuki Akutagawa  
CrystEngComm, **24(31)** 5570-5579 (20220000) [10.1039/d2ce00582d]
- P46-19 Slider-crank mechanism in a molecular crystal: conversion of linear thermal expansion of a lattice to circular rotation of a coordination chain  
Ryo Tsunashima, Naomi Fujikawa, Misaki Shiga, Sayu Miyagawa, Shiori Ohno, Atsuko Masuya-Suzuki, Tomoyuki Akutagawa, Kiyonori Takahashi, Takayoshi Nakamura, Sadafumi Nishihara  
CrystEngComm, **24(33)** 5865-5869 (20220000) [10.1039/d2ce00768a]
- P46-20 The strong correlations between thermal conductivities and electronic spin states in the crystals of Fe(III) spin crossover complexes  
Norihisa Hoshino, Akari Hayashi, Tomoyuki Akutagawa  
Dalton Transactions, **51(33)** 12698-12703 (20220000) [10.1039/d2dt01597h]
- P46-21 Room-temperature magnetoresistance in Ni<sub>78</sub>Fe<sub>22</sub>/C8-BTBT/Ni<sub>78</sub>Fe<sub>22</sub> nanojunctions fabricated from magnetic thin-film edges using a novel technique  
Mizuki Matsuzaka, Yuma Sasaki, Kyohei Hayashi, Takahiro Misawa, Takashi Komine, Tomoyuki Akutagawa, Masaya Fujioka, Junji Nishii, Hideo Kaiju  
Nanoscale Advances, **4(22)** 4739-4747 (20221100) [10.1039/d2na00442a]
- P46-22 Dielectric response of 1,1-difluorosumanene caused by an in-plane motion  
Minghong Li, JianYun Wu, Kohei Sambe, Yumi Yakiyama, Tomoyuki Akutagawa, Takashi Kajitani, Takanori Fukushima, Kazunari Matsuda, Hidehiro Sakurai  
Materials Chemistry Frontiers, **6(13)** 1752-1758 (20220000) [10.1039/d2qm00134a]
- P46-23 Bifunctional rare metal-free electrocatalysts synthesized entirely from biomass resources  
Hiroshi Yabu, Kosuke Ishibashi, Manjit Singh Grewal, Yasutaka Matsuo, Naoki Shoji, Koju Ito  
Science and Technology of Advanced Materials, **23(1)** 31-40 (20220000) [10.1080/14686996.2021.2020597]
- P46-24 Adsorption Kinetics and Self-Assembled Structures of *Aspergillus oryzae* Hydrophobin RoIA on Hydrophobic and Charged Solid Surfaces  
Yuki Terauchi, Megumi Nagayama, Takumi Tanaka, Hiroki Tanabe, Akira Yoshimi, Kei Nanatani, Hiroshi Yabu, Toshihiko Arita, Takeshi Higuchi, Tomoshi Kameda, Keietsu Abe  
Applied and environmental microbiology, **88(6)** e0208721 (20220322) [10.1128/AEM.02087-21]
- P46-25 Insight into the Gd-Pt Bond: Slow Magnetic Relaxation of a Heterometallic Gd-Pt Complex  
Takefumi Yoshida, Ahmed Shabana, Haitao Zhang, David Chukwuma Izuogu, Tetsu Sato, Kentaro Fuku, Hitoshi Abe, Yoji Horii, Goulven Cosquer, Norihisa Hoshino, Tomoyuki Akutagawa, Alex J. W. Thom, Shinya Takaishi, Masahiro Yamashita  
Bulletin of the Chemical Society of Japan, **95** 513-521 (20220210) [10.1246/bcsj.20210429]
- P46-26 Chalcogen Bond versus Halogen Bond: Changing Contributions in Determining the Crystal Packing of Dihalobenzochalcogenadiazoles  
Yusuke Ishigaki, Kai Shimomura, Kota Asai, Takuya Shimajiri, Tomoyuki Akutagawa, Takanori Fukushima, Takanori Suzuki  
Bulletin of the Chemical Society of Japan, **95(3)** 522-531 (20220000) [10.1246/bcsj.20220008]
- M46-01 安価で高性能な燃料電池・空気電池用非白金触媒の実現に向けて  
藪浩  
クリーンエネルギー, **31(5)** 40-43 (20220500)
- M46-02 エチルスルフォネート基を導入したナフタレンジイミド誘導体の分子集合体と電子輸送特性  
井手瞭, 川崎渉, 武田貴志, 星野哲久, 松田若菜, 関修平, 芥川智行  
日本化学会春季年会講演予稿集 (Web), **102** (20220000)

- M46-03 アルキルアミド置換 R-BTBT-NHCOC<sub>14</sub>H<sub>29</sub> (R=H, C<sub>8</sub>H<sub>17</sub>) を用いた強誘電性有機半導体の開発  
 三部宏平, 武田貴志, 星野哲久, 松田若菜, 辻田香奈瑛, 丸山伸伍, 山本俊介, 関修平, 松本祐司, 芥川智行  
 分子科学討論会講演プログラム&要旨 (Web), **16** (20220000)
- M46-04 柔軟なアニオン性アームを有するナフタレンジイミド誘導体の結晶構造と物性  
 井手瞭, 武田貴志, 星野哲久, 松田若菜, 関修平, 芥川智行  
 分子科学討論会講演プログラム&要旨 (Web), **16** (20220000)
- B46-01 アルキルアミド鎖のダイナミクスを利用した有機強誘電体の開発  
 武田貴志, 芥川智行  
 “Vol. 26, No. 4, 217-232”, 液晶 (20221000)
- B46-02 ダイナミックな超分子カチオン構造を利用した金属錯体結晶の機能開拓、フロンティア「ナノ金属錯体化学」  
 芥川智行, 中村貴義  
 “1.3 章 p.38-62”, 三共出版 (20220800)

### 光機能材料化学研究分野 (中川勝研究室)

- P47-01 Boosting Hydrogen Evolution at Visible Light Wavelengths Using a Photocathode with Modal Strong Coupling between Plasmons and a Fabry-Pérot Nanocavity  
 Tomoya Oshikiri, Haruki Jo, Xu Shi, Hiroaki Misawa  
 Chemistry – A European Journal (20220220) [10.1002/chem.202200288]
- P47-02 Heteroepitaxial fabrication of binary colloidal crystals by a balance of interparticle interaction and lattice spacing  
 Jun Nozawa, Satoshi Uda, Akiko Toyotama, Junpei Yamanaka, Hiromasa Niinomi, Junpei Okada  
 The Journal of Colloid & Interface Science, **608** 873-881 (20220200) [10.1016/j.jcis.2021.10.041]
- P47-03 Low- and High-Density Unknown Waters at Ice-Water Interfaces  
 Hiromasa Niinomi, Akira Kouchi, Tetsuya Hama, Hiroki Nada, Tomoya Yamazaki, Yuki Kimura  
 JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS, **13(19)** 4251-4256 (20220500) [10.1021/acs.jpcllett.2c00660]
- P47-04 Heteroepitaxial Growth of Colloidal Crystals: Growth Mode Dependence on the Interparticle Interactions and Lattice Spacing  
 Jun Nozawa, Satoshi Uda, Hiromasa Niinomi, Junpei Okada, Kozo Fujiwara  
 The Journal of Physical Chemistry Letters, **13(30)** 6995-7000 (20220700) [10.1021/acs.jpcllett.2c01707]
- P47-05 Improved water splitting efficiency of Au-NP-loaded Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> thin films in the visible region under strong coupling conditions  
 Yaguang Wang, Xu Shi, Tomoya Oshikiri, Hiroaki Misawa  
 Nanoscale Advances (20220000) [10.1039/d2na00768a]
- P47-06 Feasibility of control of particle assembly by dielectrophoresis in liquid-cell transmission electron microscopy  
 Tomoya Yamazaki, Hiromasa Niinomi, Yuki Kimura  
 Microscopy, **71(4)** 231-237 (20220400) [10.1093/jmicro/dfac021]
- P47-07 Nondestructive X-ray reflectivity analysis of Al distributions of ultraviolet-cured spin-coated resist films hybridized with trimethylaluminum  
 Kohei Chiba, Masaru Nakagawa  
 Journal of Vacuum Science & Technology B, **40(3)** 32601 (20220500) [10.1116/6.0001747]
- P47-08 Fluorescence Alignment Simulation for Atomic-Scale Position Adjustment in Ultraviolet Nanoimprint Lithography  
 Hiromasa Niinomi, Subaru Harada, Toshiaki Hayakawa, Masaru Nakagawa  
 Journal of Vacuum Science & Technology B, **40(6)** 62602 (20221000) [10.1116/6.0002099]
- P47-09 Micro-print and nano-imprint methods combining laser-drilled screen printing and ultraviolet nanoimprint lithography: a review  
 Masaru Nakagawa  
 Japanese Journal of Applied Physics, **61(SD)** SD0805 (20220601) [10.35848/1347-4065/ac575f]
- P47-10 Chiral Ice Crystals in Space  
 Akira Kouchi, Takashi Shimonishi, Tomoya Yamazaki, Masashi Tsuge, Naoki Nakatani, Kenji Furuya, Hiromasa Niinomi, Yasuhiro Oba, Tetsuya Hama, Hiroyasu Katsuno, Naoki Watanabe, Yuki Kimura  
 Chirality - New Insights [Working Title] (20220822) [10.5772/intechopen.106708]
- M47-01 Nanostructured Plasmonic Metasurface Gives a “Hand” to Chiral Self-Assembly  
 Hiromasa Niinomi  
 Phoromask Japan 2022 abstracts (20220400)
- M47-02 レーザー加工印刷を新機軸としたナノインプリント技術 Micro-print and Nano-imprint 法  
 中川勝  
 クリーンテクノロジー, **(10)** 66-72 (20220100)
- M47-03 ナノインプリントにおける離型処理技術  
 中川勝  
 月刊トライボロジー, **(1)** 25-29 (20220100)
- M47-04 キラリティ増強近接場によるキラリ結晶化制御  
 新家寛正  
 翠巒, **(37)** (20221200)
- M47-05 ナノ触診原子間力顕微鏡によるナノインプリント用光硬化薄膜のナノ力学物性  
 梁曉斌, 中川勝  
 物質・デバイス領域共同研究拠点 ダイナミックアライアンス 研究成果報告書 (20220200)

- B47-01 Chirality - New Insights "Chiral ice crystals in space"  
Akira Kouchi, Takashi Shimonishi, Tomoya Yamazaki, Masashi Tsuge, Naoki Nakatani, Kenji Furuya, Hiromasa Niinomi, Yasuhiro Oba, Tetsuya Hama, Hiroyasu Katsuno, Naoki Watanabe, Yuki Kimura  
IntechOpen (20220000) [ISBN: 9781803568409]
- B47-02 メタマテリアルの設計、作製と新材料、デバイス開発への応用  
中川勝  
"1 章 1 節 ナノインプリントリソグラフィによる可視光応答メタマテリアルの作製", 技術情報協会 (20220331) [ISBN: 978-4-86104-876-0]
- B47-03 高分子材料の事典  
中川勝  
"2 応用編 光学用・情報記録・表示用 2-67 ナノインプリント", 朝倉書店, (編) 高分子学会, 中條 善樹, 大山俊幸, 古賀 毅, 佐藤尚弘, 原口和敏, 和田健彦, 青島真人 (20221101) [ISBN: 978-4-254-25272-9]

## 有機・バイオナノ材料研究分野 (笠井 均 研究室)

- P48-01 Ir-Catalysed Cascade Reaction Promotes the Formation of Geometrically Selective Enones from Bis-allyl Alcohols  
Takaaki Kamishima, Yoshitaka Koseki, Hirotaka Nakatsuji, Sanjay Kumar, Keita Tanita, Hitoshi Kasai  
European Journal of Organic Chemistry, **2022(43)** e202201002 (20221011) [10.1002/ejoc.202201002]
- P48-02 Development of Camptothecin Nano-Prodrugs based on Trimethyl Lock Groups toward Selective Drug Release in Cancer Cells  
Aki Shibata, Yoshitaka Koseki, Keita Tanita, Ryuju Suzuki, Anh Thi Ngoc Dao, Hitoshi Kasai  
Tetrahedron Letters, **103** 153989 (20220709) [10.1016/j.tetlet.2022.153989]
- P48-03 Effect of Molecular Distortion on the Optical Properties of Carotenoid-Based Nanoparticles  
Ryuju Suzuki, Kazuma Yasuhara, Shigeru Deguchi  
The Journal of Physical Chemistry C (20220121) [10.1021/acs.jpcc.1c08572]
- P48-04 Structural Correlations of the Nonlinear Optical Response in Polydiacetylene Nanotubes Hybridized with Gold Nanoparticles  
Wakana Ito-Washiyama, Tsunenobu Onodera, Masaki Ageishi, Rodrigo Sato, Boyi Zhang, Satoshi Kato, Akito Masuhara, Hitoshi Kasai, Hiroaki Mamiya, Hiroshi Jinnai, Yoshihiko Takeda, Hidetoshi Oikawa  
The Journal of Physical Chemistry C, **5(126)** 2763-2771 (20220127) [10.1021/acs.jpcc.1c08884]
- P48-05 Novel Filler-Filled-Type Polymer Electrolyte Membrane for PEFC Employing Poly(vinylphosphonic acid)-b-polystyrene-Coated Cellulose Nanocrystals as a Filler  
Tomohiro Nohara, Toshihiko Arita, Keisuke Tabata, Takaaki Saito, Ryuichiro Shimada, Haruki Nakazaki, Yukina Suzuki, Ryota Sato, Akito Masuhara  
ACS Applied Materials & Interfaces (20220122) [10.1021/acsami.1c18695]
- P48-06 Total synthesis and antimicrobial evaluation of (+)-hygrophorone B12 and its analogues  
Takaaki Kamishima, Masato Suzuki, Koichi Narita, Yoshitaka Koseki, Toshiyuki Nonaka, Hirotaka Nakatsuji, Hideo Hattori, Hitoshi Kasai  
Scientific Reports, **12(1)** 7471 (20220506) [10.1038/s41598-022-11608-8]
- P48-07 Proton conductivity dependence on the surface polymer thickness of core-shell type nanoparticles in a proton exchange membrane  
Keisuke Tabata, Tomohiro Nohara, Haruki Nakazaki, Tsutomu Makino, Takaaki Saito, Toshihiko Arita, Akito Masuhara  
Nanoscale Advances (20220000) [10.1039/d2na00450j]
- P48-08 Polymeric functionalization of podophyllotoxin carrier-free drug nanoparticles for enhancing bioavailability and in vitro cellular imaging  
Farsai Taemaitree, Masamichi Tamada, Yoshitaka Koseki, Tsunenobu Onodera, Hidetoshi Oikawa, Hitoshi Kasai  
Molecular Crystals and Liquid Crystals, **743(1)** 89-95 (20220324) [10.1080/15421406.2022.2052491]
- P48-09 Design of guaiazulene derivatives-conjugated podophyllotoxin nano-prodrug toward anticancer drug delivery  
Kiyotaka Maruoka, Yoshitaka Koseki, Anh Thi Ngoc Dao, Ryuju Suzuki, Anudari Batbayar, Nagaki Sugeno, Hirohito Umezawa, Hitoshi Kasai  
Molecular Crystals and Liquid Crystals, **744(1)** 1-9 (20220325) [10.1080/15421406.2022.2056384]
- P48-10 Adsorption Kinetics and Self-Assembled Structures of *Aspergillus oryzae* Hydrophobin RoIA on Hydrophobic and Charged Solid Surfaces.  
Yuki Terauchi, Megumi Nagayama, Takumi Tanaka, Hiroki Tanabe, Akira Yoshimi, Kei Nanatani, Hiroshi Yabu, Toshihiko Arita, Takeshi Higuchi, Tomoshi Kameda, Keietsu Abe  
Applied and environmental microbiology, **88(6)** e0208721 (20220322) [10.1128/AEM.02087-21]
- P48-11 Versatile Conversions of Substituents in Guaiazulene: Synthesis of Carboxylic Acid Derivatives with Controlled Regiospecific Reactivities  
Kiyotaka Maruoka, Takaaki Kamishima, Yoshitaka Koseki, Ryuju Suzuki, Anh Thi Ngoc Dao, Toshihiro Murafuji, Hitoshi Kasai  
Bulletin of the Chemical Society of Japan, **95(8)** 1169-1177 (20220615) [10.1246/bcsj.20220122]
- P48-12 Conversion of 2,5-Bis(hydroxymethyl)furan to Highly Oxidized Cyclopentenones under Catalyst-Free Condition in Water  
Hirotaka Nakatsuji, Takaaki Kamishima, Toshiyuki Nonaka, Yoshitaka Koseki, Hitoshi Kasai  
Chemistry Letters, **51** 497-499 (20220301) [10.1246/cl.220027]
- P48-13 17T223A, a new spiroximicin family compound from *Streptomyces* sp.  
Toshikazu Komoda, Yoshitaka Koseki  
The Journal of General and Applied Microbiology, **68(4)** 193-199 (20220520) [10.2323/jgam.2022.03.001]

- P48-14 Proton conductive polymeric ionic liquids block copolymer of poly(vinylphosphonic acid)/1-propylimidazole-b-polystyrene for polymer electrolyte membrane fuel cell  
Yukina Suzuki, Tomohiro Nohara, Keisuke Tabata, Ryohei Yamakado, Ryuichiro Shimada, Haruki Nakazaki, Takaaki Saito, Tsutomu Makino, Toshihiko Arita, Akito MASUHARA  
Japanese Journal of Applied Physics (20220203) [10.35848/1347-4065/ac51c2]
- M48-01 細胞内で高分子を合成する  
小関 良卓  
化学と工業, **75** 704-705 (20221001)
- M48-02 完熟トマトはなぜあんなに赤い？カロテノイド微粒子の歪んだ現実  
鈴木龍樹, 安原主馬, 出口茂  
現代化学, **7** 37-39 (20220700)

### (共同研究部門等)

#### 非鉄金属製錬環境科学研究部門

- P49-01 Synthesis of Electromagnetic Wave-Absorbing Co-Ni Alloys and Co-Ni Core-Shell Structured Nanoparticles  
Masanao Ishijima, Tsukasa Takada, Jhon L. Cuya Huaman, Takuya Mizutomi, Osamu Sakai, Kozo Shinoda, Masahito Uchikoshi, Hiroaki Mamiya, Kazumasa Suzuki, Hiroshi Miyamura, Jeyadevan Balachandran  
Inorganic Chemistry, **61(43)** 17144-17153 (20221031) [10.1021/acs.inorgchem.2c02633]
- P49-02 Speciation of chromium aqua and chloro complexes in hydrochloric acid solutions at 298 K  
Masahito Uchikoshi, Daisuke Akiyama, Ken'ichi Kimijima, Kozo Shinoda  
RSC Advances, **12(50)** 32722-32736 (20221200) [10.1039/d2ra06279h]
- P49-03 The Distribution and Structures of Ferric Aqua and Chloro Complexes in Hydrochloric Acid Solutions  
Masahito Uchikoshi, Daisuke Akiyama, Ken'ichi Kimijima, Kozo Shinoda  
ISIJ International, **62(5)** 912-921 (20220500) [10.2355/isijinternational.ISIJINT-2021-323]
- P49-04 Microscopic Rotation Behaviours of Crystals in Polycrystalline Bcc High Purity Iron  
Masahito Uchikoshi, Kengo Matsuda, Yusuke Onuki, Kozo Shinoda, Shigeru Suzuki  
ISIJ International, **62(5)** 970-976 (20220500) [10.2355/isijinternational.ISIJINT-2021-402]
- P49-05 X線/紫外可視吸収分光の熱力学モデル解析による塩酸水溶液中コバルト塩化物錯体の分布と構造の決定と第一原理計算による検証  
打越雅仁, 篠田弘造, 松本高利  
X線分析の進歩, **53(1)** 97-117 (20220300)
- M49-01 湿式の注目文献 塩化物イオンを利用する湿式プロセス  
打越雅仁  
季刊資源と素材, **7(2)** 37-40 (20220500)
- B49-01 先端の分析法  
打越雅仁  
“組成および微量分析法”, エヌ・ティー・エス, 監修: 沢田嗣郎 (20220100) [ISBN: 9784860437374]

#### 次世代電子顕微鏡技術共同研究部門

- P51-01 Emerging Disordered Layered-Herringbone Phase in Organic Semiconductors Unveiled by Electron Crystallography  
Satoru Inoue, Kiyoshi Nikaïdo, Toshiki Higashino, Shunto Arai, Mutsuo Tanaka, Reiji Kumai, Seiji Tsuzuki, Sachio Horiuchi, Haruki Sugiyama, Yasutomo Segawa, Kiyofumi Takaba, Saori Maki-Yonekura, Koji Yonekura, Tatsuo Hasegawa  
Chemistry of Materials, **34(1)** 72-83 (20220111) [10.1021/acs.chemmater.1c02793]
- P51-02 Structural basis for the absence of low-energy chlorophylls in a photosystem I trimer from *Gloeobacter violaceus*  
Koji Kato, Tasuku Hamaguchi, Ryo Nagao, Keisuke Kawakami, Yoshifumi Ueno, Takehiro Suzuki, Hiroko Uchida, Akio Murakami, Yoshiki Nakajima, Makio Yokono, Seiji Akimoto, Naoshi Dohmae, Koji Yonekura, Jian-Ren Shen  
eLife, **11** (20220411) [10.7554/elife.73990]



業績目録著者索引  
令和4(2022)年1月-12月

Staff Member Only

[P: Paper, M : Misc, B : Book]

Abukawa, Tadashi	P31-01	P31-03	P31-04	P31-05						
Adachi, Ken	P41-05	P41-06	P41-07							
Adachi, Masayoshi	P36-04	P36-05	P36-06	P36-07	P36-09					
Adschiri, Tadafumi	P19-01	P19-03	P19-05	P19-06	B19-01					
Akase, Zentaro	P32-01									
Akiyama, Daisuke	P39-01 M39-01	P39-02 M39-02	P39-03 M39-04	P39-04	P39-05	P39-06	P39-07	P39-08	P39-09	P39-10
Akutagawa, Tomoyuki	P46-01 P46-14 P46-26	P46-02 M46-02	P46-03 M46-03	P46-04 P46-17 M46-04	P46-06 P46-18 B46-01	P46-07 P46-19 B46-02	P46-08 P46-20	P46-09 P46-21	P46-10 P46-22	P46-13 P46-25
Amagai, Yuta	P03-01									
Amezawa, Koji	P21-02	P21-03	P21-04	P21-05	P21-06	P21-07	M21-01	M21-02	M21-03	
Araki, Yasuyuki	M02-01									
Arita, Toshihiko	P48-05	P48-07	P48-10	P48-14						
ASHIQUR, RAHMAN	P24-06									
Chichibu, Shigefusa	P29-01 P29-12	P29-03 P29-13	P29-04 P29-14	P29-05 B29-01	P29-06 B29-02	P29-07 B29-03	P29-08	P29-09	P29-10	P29-11
Dao, Anh Thi Ngoc	P48-02	P48-09	P48-11							
Dorai, Arunkumar	P42-02	P42-08	P42-12							
Ejima, Takeo	M35-02	M35-03								
Enoki, Masanori	P10-01									
Fujiwara, Takaaki	P07-01	M07-01	M07-02	M07-03	M07-04					
Fukuyama, Hiroyuki	P36-02	P36-03	P36-04	P36-05	P36-06	P36-07	P36-09	P36-12	B36-01	
Fukuyama, Mao	P44-05	P44-08								
Gen, Masao	P44-01	P44-02	P44-03	P44-04	P44-06					
Hamaguchi, Tasuku	P05-02	P05-03	P05-05							
Hasegawa, Takuya	P17-01 P17-24	P17-03 P17-26	P17-07 M17-01	P17-11	P17-12	P17-14	P17-18	P17-19	P17-21	P17-23
Hatano, Tadashi	P35-05									
Hibara, Akihide	P44-05	P44-07	P44-08	P44-09	M44-01	M44-02				
Honma, Itaru	P40-01 P40-14	P40-02 P40-15	P40-03 P40-17	P40-04	P40-05	P40-07	P40-09	P40-10	P40-11	P40-12
Hoshino, Norihisa	P46-09	P46-13								
Iizuka, Atsushi	P41-01 B41-02	P41-02 B41-03	P41-03 B41-04	P41-04	P41-05	P41-06	P41-07	M41-01	M41-02	B41-01
Inaba, Kenji	P03-01	P03-02	P03-03	P03-04	M03-01	M03-02	M03-03	M03-04		
Ishigami, Keisuke	P12-04	P12-05								
Ishiguro, Nozomu	P30-01	P30-03	P30-05	M30-05						
Ishihara, Shingo	P38-01									
Itoh, Yuji	P06-02									
Iwama, Takayuki	M37-01									
Iwase, Kazuyuki	P40-01	P40-02	P40-03	P40-05	P40-12	P40-15				
Jinnai, Hiroshi	P27-01 P27-12	P27-02 P27-13	P27-03 P27-14	P27-04 P27-15	P27-05	P27-06	P27-08	P27-09	P27-10	P27-11
Kadokura, Hiroshi	P03-05									
Kamagata, Kiyoto	P06-01	P06-03	P06-04	M06-01						
Kameoka, Satoshi	P16-01	P16-02								
Kanie, Kiyoshi	P13-01	P13-02	P13-03	P13-04	P13-05	P13-06	P13-07			

Kano, Junya	P38-01	P38-02	M38-01	M38-02							
Kasai, Hitoshi	P48-01	P48-02	P48-04	P48-06	P48-08	P48-09	P48-11	P48-12			
Kato, Hideki	P18-01	P18-03	P18-08	P18-09							
Kawanishi, Sakiko	P23-01 M23-06	P23-03 M23-07	P23-05 M23-08	P23-06 M23-10	P23-07 M23-12	P23-11 M23-16	P23-14 M23-17	M23-01 M23-19	M23-03	M23-04	
Kikuchi, Nobuaki	P12-02	P12-03	P12-06								
Kimura, Hiroyuki	P26-02										
Kimura, Yuta	P21-02	P21-03	P21-04	P21-05	P21-06	P21-07	M21-01	M21-02	M21-03		
Kirishima, Akira	P39-01 M39-03	P39-02 M39-04	P39-03 B39-01	P39-04	P39-05	P39-06	P39-08	P39-09	M39-01	M39-02	
Kobayashi, Hiroaki	P40-01 B40-01	P40-02	P40-04	P40-06	P40-08	P40-10	P40-11	P40-13	P40-16	P40-17	
Komeda, Tadahiro	P34-01	P34-02	P34-03	P34-04	P34-05	P34-06					
Koseki, Yoshitaka	P48-01	P48-02	P48-06	P48-08	P48-09	P48-11	P48-12	P48-13	M48-01		
Kowada, Toshiyuki	P04-02	P04-03	P04-04	P04-05	M04-01						
Kozawa, Yuichi	P20-01	P20-02	P20-03	P20-04	P20-05	M20-02	M20-04	B20-02			
Kumagai, Hiromu	P18-05	P18-07	P18-08	M18-01							
Kumigashira, Hiroshi	P14-01 P14-12 P14-22	P14-02 P14-13 P14-23	P14-04 P14-14 P14-24	P14-05 P14-15 P14-25	P14-06 P14-16 P14-26	P14-07	P14-08	P14-09	P14-10	P14-11 P14-21	
Kushimoto, Kizuku	P38-01	B38-01									
Liang, Xiaoyu	P28-03	P28-04	P28-05	P28-06	P28-11	P28-12	P28-13	P28-16	P28-17		
Maki, Sachiko	P09-03	P09-07									
Marubayashi, Hironori	P27-09	M27-01	M27-02								
Maruoka, Nobuhiro	P22-06	P22-09	B22-01								
Masaki, Matsubara	P13-01	P13-02	P13-07								
Matsui, Toshitaka	P04-01	P04-02	P04-03	B04-01							
Matsumoto, Takatoshi	P33-12										
Miyata, Tomohiro	P27-04	P27-09	P27-10	P27-13							
Mizukami, Shin	P04-02	P04-03	P04-04	P04-05							
Momose, Atsushi	P25-02	P25-05	M25-02	M25-03	M25-04	M25-05	M25-06				
Morikawa, Daisuke	P33-01	P33-02	P33-03	P33-09	P33-10						
Nagatsugi, Fumi	P01-01	P01-02	P01-03	P01-04	P01-05	P01-06	P01-07	P01-08	P01-09		
Nakagawa, Masaru	P47-07	P47-08	P47-09	M47-02	M47-03	M47-05	B47-02	B47-03			
Nakamura, Takashi	P21-01	P21-02	P21-03	P21-04	P21-07	M21-01					
Nango, Eriko	P07-02	P07-03	P07-04	P07-05	P07-06						
Natsui, Shungo	P22-01 M22-07 M22-18	P22-02 M22-08 M22-19	P22-04 M22-09	P22-05 M22-10	P22-07 M22-11	M22-01 M22-12	M22-02 M22-13	M22-04 M22-14	M22-05 M22-15	M22-06 M22-16	
Nawa, Kazuhiro	P11-02 M11-06	P11-03 M11-07	P11-05	P11-07	P11-08	M11-01	M11-02	M11-03	M11-04	M11-05	
Niinomi, Hiromasa	P47-02	P47-03	P47-04	P47-06	P47-08	P47-10	M47-01	M47-04	B47-01		
Ninomiya, Kakeru	P09-02	P09-04	P09-05	P09-07							
Nishibori, Maiko	P09-01	P09-02	P09-04	P09-05	P09-06	P09-07					
Nishihara, Hirotomo	P45-01 P45-12	P45-02 P45-13	P45-03 P45-14	P45-04 P45-15	P45-05 P45-16	P45-06 P45-17	P45-07 P45-18	P45-09 P45-19	P45-10 M45-01	P45-11 B45-01	
Nogami, Hiroshi	P22-01 M22-07 M22-17	P22-02 M22-08 M22-19	P22-03 M22-09 M22-20	P22-04 M22-10	P22-08 M22-11	M22-01 M22-12	M22-02 M22-13	M22-03 M22-14	M22-05 M22-15	M22-06 M22-16	
Ogawa, Shuichi	P31-01	P31-02	P31-04	P31-05	P31-06	P31-07	P31-08				
Ohtsuka, Makoto	P36-01	P36-05	P36-06	P36-07	P36-08	P36-09	P36-10	P36-11			
Oikawa, Hiroyuki	P06-05	P06-06									
Okamoto, Satoshi	P12-01	P12-02	P12-03	P12-06	P12-07	M12-01					
Okamura, Hidenori	P01-05	P01-06	P01-10	M01-01	M01-02						

Okawa, Ayahisa	P17-08										
Omata, Takahisa	P42-01 P42-14	P42-02 P42-15	P42-03 M42-01	P42-04	P42-05	P42-07	P42-09	P42-10	P42-11	P42-13	
Onitsuka, Yuuki	P43-02	P43-04									
Onizuka, Kazumitsu	P01-01	P01-02	P01-03	P01-05	P01-08	P01-09					
Onodera, Tsunenobu	P08-01	P08-02	P08-03	P08-04	P08-05						
Oshikiri, Tomoya	P47-01	P47-05									
Osuga, Ryota	P24-01	P24-02	P24-03	P24-04	P24-05						
Sakakura, Terutoshi	P26-05	M26-02	M26-03								
Sato, Shunichi	P20-02	P20-03	P20-04	P20-07	M20-03						
Sato, Taku J	P11-01 M11-10	P11-04	P11-05	P11-06	P11-07	P11-09	M11-06	M11-07	M11-08	M11-09	
Sato, Yohei	P33-04	P33-07	P33-08								
Seki, Yoshichika	P25-01	P25-03	P25-04	M25-01							
Shibata, Etsuro	P41-02	P41-05	P41-06	P41-07							
Shibata, Hiroyuki	P23-02 M23-05	P23-08 M23-06	P23-09 M23-07	P23-10 M23-08	P23-12 M23-10	P23-14 M23-11	P23-15 M23-12	M23-01 M23-13	M23-03 M23-18	M23-04 M23-19	
Shiga, Daisuke	P14-03	P14-10	P14-14	P14-16	P14-17	P14-24	P14-25				
Shima, Kohei	P29-02	P29-05	P29-06	P29-09	P29-12	P29-14	B29-04	B29-05			
Shinoda, Kozo	P30-02	P30-04	P30-06	P30-07	P30-08	P30-09	P30-10	P30-11			
Simura, Rayko	P15-02	P15-06	P15-07	P15-08	P15-12						
Sukenaga, Souhei	P23-01 M23-04 M23-14	P23-02 M23-05 M23-15	P23-04 M23-06 M23-18	P23-10 M23-07 M23-19	P23-12 M23-08	P23-13 M23-09	P23-15 M23-10	M23-01 M23-11	M23-02 M23-12	M23-03 M23-13	
Suzuki, Issei	P42-01	P42-03	P42-05	P42-07	P42-09	P42-10	P42-11	P42-15			
Suzuki, Ryuju	P48-02	P48-03	P48-09	P48-11	M48-02						
Takahashi, Junichi	P15-07										
Takahashi, Masahiko	P43-01	P43-02	P43-03	P43-04							
Takahashi, Satoshi	P06-05	P06-06	P06-07								
Takahashi, Yukio	P30-03	P30-05	M30-01	M30-02	M30-03	M30-04					
Takaoka, Tsuyoshi	P34-01										
Takata, Masaki	P35-01	P35-02	P35-03	P35-04	M35-01						
Takeda, Takashi	P46-01	P46-07	P46-09	P46-11	P46-14	P46-16	P46-18				
Takekawa, Reiji	P42-06										
Terauchi, Masami	P33-04	P33-05	P33-06	P33-07	P33-09	P33-10	P33-11	M33-01			
Tomai, Takaaki	P19-01	P19-02	P19-04	P19-06	P19-07	P19-08	M19-01	M19-02	M19-03		
Uchikoshi, Masahito	P49-01	P49-02	P49-03	P49-04	P49-05	M49-01	B49-01				
Ueda, Ryosuke	P25-06	M25-02	M25-03	M25-04	M25-06						
Ueda, Shigeru	P37-01	P37-02	P37-03	P37-04	P37-05	M37-01	M37-02	M37-03			
Uesugi, Yuki	P20-03	P20-04	P20-06	M20-01							
Wada, Takehiko	P02-01	P02-02	B02-01	B02-02	B02-03						
Wang, Hsiao Fang	P27-07	P27-09									
Watanabe, Noboru	P43-01	P43-03									
Watanabe, Satoshi	P03-03										
Yabu, Hiroshi	P46-05	P46-12	P46-23	P46-24	M46-01						
Yamada, Takahiro	P10-01	P10-02	P10-03	P10-04	P10-05	P10-06					
Yamamoto, Hajime	P26-01	P26-02	P26-03	P26-04	P26-06	M26-01	M26-03				
Yamamoto, Susumu	P28-01	P28-02	P28-07	P28-08	P28-10	P28-14	P28-18				
Yamane, Hisanori	P15-01 P15-11	P15-02 P15-13	P15-03 P15-14	P15-04 M15-01	P15-05	P15-06	P15-07	P15-08	P15-09	P15-10	
Yashiro, Wataru	P28-09	P28-12	P28-13	P28-15	P28-16	P28-17	M28-01	M28-02	M28-03	M28-04	
Yin, Shu	P17-01 P17-12	P17-02 P17-13	P17-03 P17-14	P17-04 P17-15	P17-05 P17-16	P17-06 P17-17	P17-07 P17-19	P17-09 P17-20	P17-10 P17-21	P17-11 P17-22	

	P17-24	P17-25	P17-26	M17-02				
Yonekura, Koji	P05-01	P05-02	P05-03	P05-04	P05-05	P05-06	P51-01	P51-02
Yoshii, Takeharu	P45-10	P45-11	P45-16	M45-02	M45-03	B45-01		
Yoshimatsu, Kohei	P14-02	P14-07	P14-11	P14-14	P14-18	P14-27	P14-28	
Yoshino, Shunya	P18-02	P18-04	P18-06					



---

令和5年 4月 20日 印刷

令和5年 5月 1日 発行

---

## 東北大学多元物質科学研究所

出版者 研究所長 寺内正己

〒980-8577 仙台市青葉区片平二丁目1番1号

電話 022(217)5204 (総務課総務係)

<非売品>

---

編集：多元物質科学研究所 広報情報室