

二国間交流事業 セミナー報告書

令和4年4月10日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[代表者所属機関・部局]
名古屋大学・工学研究科
[職・氏名]
教授・尾上 順
[課題番号]
JPJSBP 220 209909

1. 事業名 相手国: フランス (振興会対応機関: OP) とのセミナー

2. セミナー名

(和文) エネルギー変換材料の分子レベル解明と高性能化設計に関する日仏ワークショップ

(英文) Japan-France workshop on the molecular-scale understanding and high-performance design
of energy conversion materials

3. 開催期間 2022年3月15日 ~ 2022年3月15日 (1 日間)

4. 開催地(都市名)

Webinar によるミーティング

5. 相手国側セミナー代表者(所属・職名・氏名【全て英文】)

University of Strasbourg • Professor • Jean-Pierre Bucher

6. 委託費総額(返還額を除く) 844,532 円

7. セミナー参加者数(代表者を含む)

	参加者数	うち、本委託費で渡航費または 日本滞在費を負担した場合*
日本側参加者等	4 名	0 名
相手国側参加者等	1 名	0 名

参加者リスト(様式 B2)の合計人数を記入してください。該当がない箇所は「0」または「-」を記入してください。

* 日本開催の場合は相手国側参加者等の日本での滞在等、相手国開催の場合は日本側参加者等の渡航費を本委託費で負担した場合となります。

8. セミナーの概要・成果

- (1) セミナー概要(セミナーの目的・実施状況等。第三国からの参加者(基調・招待講演者等)が含まれる場合はその役割とセミナーへの効果を記載して下さい。関連行事(レセプション、見学(エクスカーション)その他会合(別経費の場合はその旨を明記。))などがあれば、それも記載してください。各費目における増減が委託費総額の50%に相当する額を超える変更があった場合には、その変更理由と費目の内訳を変更しても研究交流計画の遂行に支障がなかった理由を記載してください。)

フランスへの海外渡航の可能性を年度末までに実施できるかギリギリまで見極めていたが、日本政府の再入国規制が緩和されなかったため、オンラインによるセミナーに切り替えた結果、相手国の参加者の都合がなかなか合わず、相手国代表者と日本側とで日程調整することとし、時差(8時間)があるため、フラン時間を2時間程度として、日本側から参加している中堅・若手研究者各自の研究内容の紹介と日仏共同研究の提案(15分)を行い、意見交換(30分)した。

プログラムは以下の通り。

17:30–18:15

“Polymer-mediated ring-like assembly of nanoparticles in the liquid phase”

Ayae Sugawara-Narutaki (Nagoya University)

18:15–19:00

“Creation of metal nanocluster with atomic precision and their electrocatalytic activity”

Tokuhisa Kawawaki (Tokyo University of Science)

19:00–19:45

“Descriptor extraction for materials property prediction by machine-learning regression with first-principles calculations”

Yusuke Noda (Okayama Prefectural University)

(2) 学術的価値(本セミナーにより得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

それぞれの研究内容で意見交換した結果、以下の共同研究の可能性を見出したので、その学術的価値は十分に得られたと考えている。

【鳴瀧】液相で作製されるナノ粒子配列体は、薬剤送達システム、生体分子検出用のデバイス、あるいはバイオイメージング用ツールとして発展性があり、ストラスブール大学でナノ粒子を診断用ツールに用いているグループ(例えば、Dr Andrey Klymchenko のグループ)との共同研究の可能性をさらに探ることとした。さらに、鳴瀧らが開発しているタンパク質ゲルによる細胞培養器材は、ストラスブール大学において細胞三次元培養を展開している研究者(例えば、Christian D. Muller のグループ)との共同研究の可能性がある。

【川脇】金属クラスター(NC)と呼ばれる、原子が数個～数十個集まった多核金属錯体は、原子やイオンと異なり、物性を有して安定的に存在できる材料の最小単位といえる。微細な金属クラスターは、構成原子数及び化学組成に依存して、対応するバルク金属とは異なる物性や機能を示す。従って、その構成原子数を厳密に制御すれば、一つの金属元素にて様々な新規物性を有する物質を創出できる。そのため、機能性ナノ材料の構成単位として、基礎から応用に跨がる幅広い分野にて研究が活発に進んでいる。ここで近年、川脇(東理大)は、一次元(1D)構造の金属クラスター連結体の合成に成功している(図1)。この材料は、金属-金属結合によって、1D構造を形成しており、超微細な電子伝導材料としての利用が期待される。現在、その導電性について、尾上教授(名古屋大)と共同研究にて調査を続けている。さらに、日仏オンラインセミナーにおける、Prof. Bucher(ストラスブール大)とのディスカッションにて、以下のような共同研究の可能性が見出された。1) 同一の骨格構造を有して、配位子のみが異なる5種類のNC(図2)について、STM測定によって、その構造や導電性の違いについて調査する。2) NCの面選択的な導電性の違いと幾何構造の関係について調査する。共同研究によって、これらの知見が明らかになれば、分子の構造と導電性に関する科学がさらに深められ、ひいては、高導電性・誘電性・絶縁性などを有したナノ材料群の創製に繋がると期待される。具体的な実験としては、HOPG基板をスコッチテープではがして、清浄表面を作製し、ドロップキャスト法などにより $\text{Au}_4\text{Pt}_2(\text{SR})_8$ (SR = thiolate) を担持し、高真空下におけるSTM測定を実施することが想定される。これらの実験条件の詳細についても、今後のProf. Bucher(ストラスブール大)とのディスカッ

ションにてさらに検討を進めていく。

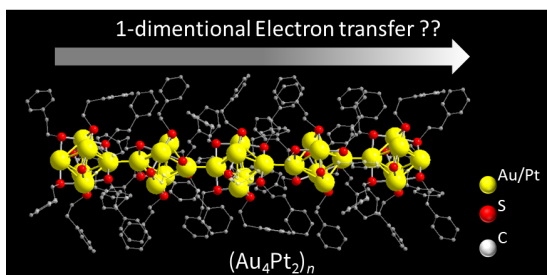


図1 一次元構造を有する NC の幾何構造

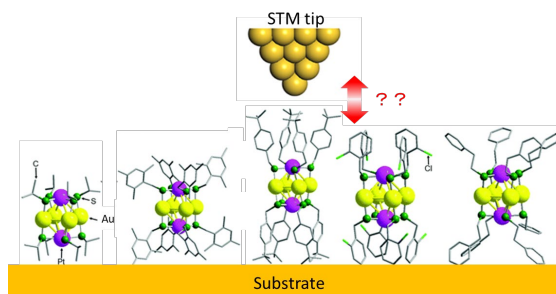


図2 配位子の異なる金属クラスターを用いた STM測定の様式図

【野田】第一原理計算を用いた結晶構造、分子構造、表面構造を対象とする電子状態解析(状態密度、バンド構造の出力)が可能である。特に、表面構造を対象とする第一原理計算では、対応するエネルギー準位の部分電荷密度を計算することで、STM 像に対応する結果を得ることができ、実験結果との比較が可能となる。

(3) 相手国との交流(両国の研究者が協力してセミナーを開催することによって得られた成果)

今回、コロナ禍のため対面でのセミナー開催ができず、Webinar による開催だったため、研究者間の人的交流をすることができなかった。今年度、本セミナーで得られた共同研究の可能性を実現できるように、国際共同研究強化 B などに応募する予定である。

(4) 社会的貢献(社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか)

Bucher 教授と継続している有機太陽電池に関する共同研究において、国際共著論文 2 報を国際的ジャーナルに掲載した。

M. Kato, M. Nakaya, Y. Matoba, S. Watanabe, K. Okamoto, **J.-P. Bucher**, and **J. Onoe**: “Morphological and Optical Properties of α - and β -Phase Zinc (II) Phthalocyanine Thin Films for Application to Organic Photovoltaic Cells”, *J. Chem. Phys.* **153**, 144704 (2020).

A. Benhnia, S. Watanabe, R. Tuerhong, M. Nakaya, **J. Onoe**, and **J.-P. Bucher**: “Resolving site-specific energy levels of small-molecule donor-acceptor heterostructures close to metal contacts”, *Nanomaterials* **11**, 1618/1-10 (2021).

(5) 若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取り組み、成果)

今回、次世代のリーダーを養成する目的で、学位取得後 8 年以内の 30 台前半の若手研究者 2 名をメンバーに加えた。

(6) 将来発展可能性(本セミナーを実施したことにより、今後どのような発展の可能性が認められるか)

セミナーを通じて、今後の共同研究の可能性について、以下の表にまとめた。

	フランスとの共同研究の可能性
鳴瀧	テーマと親和性の高い研究グループとの意見交換から共同研究の可能性を検討。
川脇	Bucher グループの極低温 STM/STS 装置を使った共同研究が即実施可能。
野田	Bucher グループが測定した STM/STS 結果の理論解析での共同研究が即実施可能。

(7) その他(上記(2)～(6) 以外に得られた成果(論文発表等含む)があれば記述してください)

1) M. Kato, M. Nakaya, Y. Matoba, S. Watanabe, K. Okamoto, **J.-P. Bucher**, and **J. Onoe**: “Morphological and Optical Properties of α - and β -Phase Zinc (II) Phthalocyanine Thin Films for Application to Organic Photovoltaic Cells”, *J. Chem. Phys.* **153**, 144704 (2020).

2) A. Benhnia, S. Watanabe, R. Tuerhong, M. Nakaya, **J. Onoe**, and **J.-P. Bucher**: “Resolving site-specific energy levels of small-molecule donor-acceptor heterostructures close to metal contacts”, *Nanomaterials* **11**, 1618/1-10 (2021).