

SDGs 実現に向けた高機能性薄膜・結晶の開発とその機能発現機構の解明

研究代表者 朝日 透
(先進理工学部 生命医科学科 教授)

1. 研究課題

デジタル・トランスフォーメーション (DX) を牽引し、身近な生活の質の向上に不可欠となっている薄膜や結晶の高機能性材料の開発とその機能の発現機構の解明に取り組むことにより、SDGs 実現に向けた課題の解決に資する物質科学の研究を実施する。

2. 主な研究成果

2.1 ナノポーラス薄膜研究

キラリティは、分子、結晶、ナノ構造などの物理化学的及び生物学的機能において重要な役割を果たす。生体システムはキラルな偏りを有するため、それぞれのキラル異性体、すなわちエナンチオマーに対して異なる応答を示す。サリドマイドのようなキラル医薬品の場合、エナンチオマー間の薬理作用の違いは、有益な薬効や有害な毒性として現れる。そのため、エナンチオマーを簡便に識別できる手法やデバイスの開発は非常に重要である。

金属ナノ粒子、ナノロッド、メソポーラス構造、サンゴ状薄膜などの金属ナノ構造は、局在表面プラズモン共鳴により著しく増強された光学応答を示す。これらのナノ構造の光学特性は、そのサイズ、形状、元素組成に強く依存する。貴金属のメソポーラスナノ構造は、ブロックコポリマーミセルをソフトテンプレートとして含む電解質溶液を用いた電気化学的手法により合成することができ、多数のナノスケールの先端を有する三次元金属骨格に起因して、分子検出における表面増強ラマン散乱 (SERS) 基板として大きな可能性を示してきた。

本研究では、透明導電性酸化物基板上に電気化学的手法のみを用いて Au サンゴ構造を作製し、その表面にキラル Au ナノ構造を形成した階層的ナノ構造を開発した。キラル Au ナノ構造は、2 段階目の電解析出により Au サンゴ構造上に合成した。電解質組成は、Gu らによって報告されたキラル Au ナノ構造合成法 (I. Gu *et al.*, *Electrochemistry*, **90**, 077006 (2022).) を参考にした。

電解質溶液中における錯体形成および酸化還元反応を考慮することで、キラル光学的性質を示す Au ナノ構造の形態を制御することに成功した。反応過程は、UV-Vis、CD、 $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ NMR、及び XAFS 測定により解析した。さらに、Au サンゴ構造上に形成したキラル Au ナノ構造の SERS スペクトルを測定することで、これらの基板を用いたキラル識別の可能性を検討した。

その結果、Au サンゴ構造上のキラル Au ナノ構造は、SERS の増強因子を向上させ、アミノ酸などのエナンチオマーの SERS によるキラル識別を実証することに成功した。

2.2 フォトメカニカル有機結晶の開発

光を当てると屈曲などの機械的な運動を示すフォトメカニカル有機結晶は学術的に興味深いのみならず、光エネルギーを直接運動エネルギーに変換できるため、光駆動アクチュエータやソフト

ロボットへの応用が期待されている^[1,2]。我々の研究グループは光異性化^[1,2]や光熱効果^[3,4]、光熱共振固有振動^[5,6]に基づいて様々なフォトメカニカル有機結晶を開発してきた。2024年度にはアントラキノン染料のソルベントグリーン3 (SG3) 結晶に注目し、光熱共振固有振動により紫外・可視・近赤外・白色光いずれでも振動させることに成功した^[6]。しかし使用した光源は全て非偏光であり、偏光照射時の動きは不明であった。2025年度はSG3結晶の直線偏光照射時の動きを観察し、偏光方法に応じて異なる大きさで振動することを見出した^[7]。

左端を固定した板状SG3結晶の上面から70 Hzのパルス紫外直線偏光 (375 nm) を照射すると (図 1a)、結晶の長さ方向と直線偏光角 (以下 θ) が75°では屈曲角 $\sim 1.9^\circ$ で大きく振動した一方で (図 1b 赤)、 θ が165°では屈曲角 $\sim 0.9^\circ$ と小さく振動した (図 1b 青)。 θ と屈曲角の関係を調べると、 θ の値を変化させると結晶の振動数は70 Hzで一定であるものの、屈曲角が有意に変化した (図 1c 紫)。さらに照射光の波長を375 nmの紫外光から520 nmの緑色光、638 nmの赤色光に変化させたところ、波長に応じて異なる偏光依存性を示した (図 1c)。具体的には照射光の波長が375 nmでは $\theta=75^\circ$ と 255° 、520 nmでは 165° と 345° 、638 nmでは 45° と 225° で最も大きな屈曲角を示した (図 1c)。

SG3結晶の直線偏光吸光度測定の結果、吸光度の大きさに比例して屈曲角も大きくなることがわかった。さらに量子化学計算の結果、照射光の波長に対応した遷移双極子モーメントの方向に大きな吸光度を示し、結果的に大きな屈曲角を示すことがわかった^[7]。偏光の向きを変えることでフォトメカニカル有機結晶の動きの制御に成功した。

文献

- [1] H. Koshima (ed) Mechanically Responsive Materials for Soft Robotics. (Wiley-VCH, Weinheim, 2020).
- [2] H. Koshima, S. Hasebe, Y. Hagiwara, T. Asahi, Mechanically Responsive Organic Crystals by Light. *Isr. J. Chem.* **61**, 1–15 (2021).
- [3] Y. Hagiwara, T. Taniguchi, T. Asahi, Hi. Koshima, Crystal actuator based on a thermal phase transition and photothermal effect, *J. Mater. Chem. C* **8**, 4876–4884 (2020).
- [4] S. Hasebe, Y. Hagiwara, J. Komiya, R. Ryu, H. Fujisawa, J. Morikawa, T. Katayama, D. Yamanaka, A. Furube, H. Sato, T. Asahi, H. Koshima, Photothermally Driven High-Speed Crystal Actuation and Its Simulation, *J. Am. Chem. Soc.* **143**, 8866–8877 (2021).
- [5] Y. Hagiwara, S. Hasebe, H. Fujisawa, J. Morikawa, T. Asahi, H. Koshima, Photothermally induced natural vibration for versatile and high-speed actuation of crystals, *Nat. Commun.* **14**, 1354 (2023).
- [6] S. Hasebe, Y. Hagiwara, T. Goto, T. Ryu, T. Ehara, T. Ogawa, K. Miyata, K. Onda, R. Morioka, J. Morikawa, T. Asahi, H. Koshima *Adv. Funct. Mater.* **34**, 2410671 (2024),
- [7] S. Hasebe, K. Okano, K. Nakagawa, Y. Hagiwara, T. Asahi, H. Koshima, Polarization Dependence of Photothermally Resonated Natural Vibration in an Aminoanthraquinone Crystal, *ChemPhotoChem*

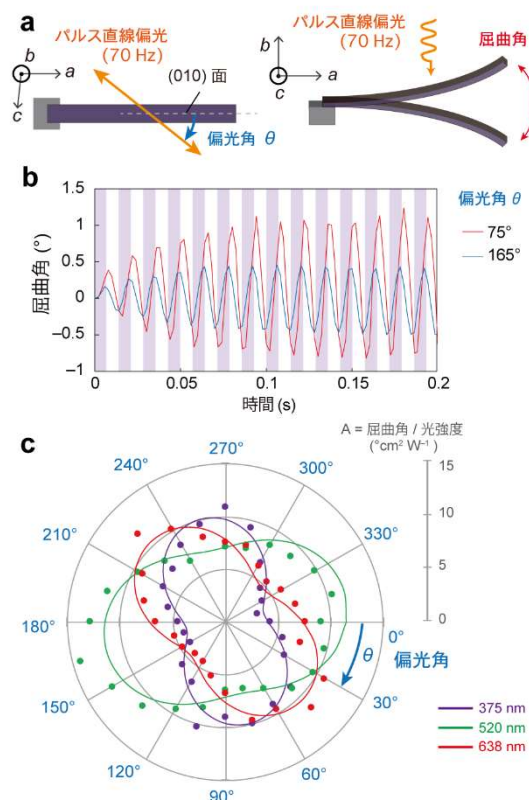


図 1 SG3 結晶の直線偏光照射時の動き (a) 実験系 (b) 70 Hz のパルス紫外直線偏光 (375 nm) 照射時の屈曲角の経時変化 (c) 375 (紫)、520 (緑)、638 nm (赤) のパルス直線偏光照射時の偏光角 θ と動きの関係

2.3 マテリアルズインフォマティクスの研究

マテリアルズインフォマティクス (MI) は、材料科学に機械学習やデータ科学を導入し、膨大な材料・構造・作製条件の候補空間から、有望な条件や材料を効率的に探索する研究分野である。従来の材料研究では、材料組成、分子構造、結晶構造、作製条件など多数の因子を個別に試行錯誤する必要があったが、MI の活用により、複数因子の関係性を体系的に整理し、性能向上に重要な支配因子や探索空間の絞り込み指針を得ることが可能となる。我々はこれまで、主に有機結晶を対象として、機械学習による分子設計とベイズ最適化を組み合わせることで、フォトメカニカル有機結晶の発生力最大化を高効率に実現し、MI による材料設計と実験条件最適化の有効性を示してきた^[1]。

2025 年度は、こうした有機結晶分野における MI 活用を基盤としつつ、対象を有機無機ハイブリッドペロブスカイト薄膜および有機結晶全般の結晶構造予測へと拡張した。まず、ペロブスカイト薄膜研究では、高効率太陽電池材料として注目される一方で、材料性能や安定性が材料組成のみならず、前駆体溶液、添加剤、成膜法、熱処理条件など多様なプロセス条件に強く依存することに着目した。文献データおよび既報研究を基に、ペロブスカイト材料におけるプロセス条件の影響を体系的に整理した結果、同一材料系であってもプロセス条件の違いが性能や耐久性に無視できない影響を与えること、すなわち「何を作るか」と同時に「どう作るか」が重要であることを改めて明確化した。これにより、ペロブスカイト研究において、材料組成探索だけでなくプロセス条件そのものを多因子最適化問題として扱う必要性を示し、MI を材料探索とプロセス設計を接続する基盤として位置づけた^[2,3]。

さらに、有機結晶を対象として結晶構造予測 (Crystal Structure Prediction, CSP) の高効率化にも取り組んだ。従来の有機結晶 CSP では、空間群、格子定数、分子配列など広大な探索空間に起因する計算コストが課題であった。そこで、空間群予測モデルおよび充填密度予測モデルという 2 種類の機械学習モデルを導入し、不適切な候補構造の生成を事前に抑制することで探索空間を効率的に絞り込む手法を開発した。さらにニューラルネットワークポテンシャルによる構造緩和を組み合わせることで、20 種の有機結晶に対して 80% の構造再現成功率を達成し、ランダム探索と比較して約 2 倍の成功率向上を実現した^[4]。この結果は、空間群や充填密度といった結晶学的事前情報を MI によって活用することで、未知結晶構造探索の効率化が可能であることを示している。

以上のように、2025 年度は、既存材料の条件最適化に加え、ペロブスカイト薄膜におけるプロセス条件解析、および有機結晶における構造探索へと MI の適用範囲を拡張した。これにより、単なる物性予測技術に留まらず、材料組成、プロセス、結晶構造という異なる階層を横断して材料開発全体を支援する統合的基盤として MI を発展させている。

文献

- [1] Kazuki Ishizaki, Toru Asahi, Takuya Taniguchi, Machine learning-driven optimization of the output force in photo-actuated organic crystals, *Digital Discovery*, **4**, 1199-1208 (2025).
- [2] Ryo Fukasawa, Toru Asahi, Takuya Taniguchi, Effectiveness and limitation of the performance prediction of perovskite solar cells by process informatics, *Energy Advances*, **3**, 812-820 (2024).
- [3] 谷口卓也, 深澤亮, 朝日透, 機械学習を活用したペロブスカイト薄膜の成膜条件最適化, in プロセスインフォマティクスにおけるデータ解析・モデリングと応用展開, 技術情報協会, 405-411 (2025).
- [4] Takuya Taniguchi, Ryo Fukasawa, Crystal structure prediction of organic molecules by machine learning-based lattice sampling and structure relaxation, *Digital Discovery*, **4**, 3270-3281 (2025).

3. 共同研究者

柳谷 隆彦 (先進理工学部 電気・情報生命工学科 教授)
中川 鉄馬 (総合研究機構 グローバル科学知融合研究所 主任研究員)
小野寺 航 (先進理工学部 生命医科学科 助教)

4. 研究業績

4.1 学術論文

Xiaoqian Wei, Meng An, Xiannong Tang, Jiamin Wei, Peng Yan, Yiwei Qiu, Dong Jiang, Yusuke Asakura, Xiaokai Song, Toru Asahi, Chengzhou Zhu, Yusuke Yamauchi, Near-100% site utilization of single atoms for efficient electrocatalysis, *Nat. Commun.*, 2026, 17,1013 .

DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-025-67756-8>

Shodai Hasebe†, Takashi Ueno†, Yuki Hagiwara, Taiki Goto, Jérémy Odent, Jean-Marie Raquez, Hideko Koshima, Toru Asahi,

Light-driven composite films with photomechanical salicylideneaniline crystals aligned in UV-curing resins for soft actuators, *Mater. Today Commun.*, 2026, 50, 114375.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2025.114375> († co-first)

Shunsuke Takano, Takuya Nakanishi, Kenta Nakagawa and Toru Asahi,

Symmetry and thermodynamic bounds on cross-coupling transport in chiral liquid crystals, *Physical Review E*, 2025, 112, 055429.

DOI: <https://doi.org/10.1103/xd4c-2c5w>

Shodai Hasebe, Komei Okano, Kenta Nakagawa, Yuki Hagiwara, Toru Asahi, Hideko Koshima, Polarization Dependence of Photothermally Resonated Natural Vibration in an Aminoanthraquinone Crystal, *ChemPhotoChem*, 2025, 9, e20250221

DOI: <https://doi.org/10.1002/cptc.202500221>

Shunsuke Takano, Toru Asahi and Ivan I. Smalyukh,

Chirality-assembled on-chip lasers (News & Views), *Nature Photonics*, 2025, 19, 659-661.

DOI: <https://doi.org/10.1038/s41566-025-01711-3>

Yingji Zhao, Zhi Gao, Norman C.-R. Chen, Yusuke Asakura, Ho Ngoc Nam, Quan Manh Phung, Yunqing Kang, Mandy Hei Man Leung, Dong Jiang, Lei Fu, Lijin Huang, Toru Asahi, Yusuke Yamauchi,

Ultrathin Mesoporous Metal-Organic Framework Nanosheets, *Adv. Mater.*, 2025, 2508105.

DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.202508105>

Liyang Zhu†, Yunqing Kang‡, Miharuru Eguchi, Yingji Zhao, Dong Jiang, Xiaoqian Wei, Xingtao Xu, Kenta Nakagawa, Toru Asahi, Tokihiko Yokoshima, Yusuke Yamauchi,

Precise positioning of Au islands within mesoporous Pd–Pt nanoparticles for plasmon-enhanced methanol oxidation, *Chem. Sci.*, 2025, 16, 8309–8318.

DOI: <https://doi.org/10.1039/D4SC07345B> († co-first)

Kazuki Ishizaki, Toru Asahi, Takuya Taniguchi,

Machine learning-driven optimization of the output force in photo-actuated organic crystals, *Digital Discovery*, 2025, 4, 1199–1208.

DOI: <https://doi.org/10.1039/D4DD00380B>

Shodai Hasebe, Yuki Hagiwara, Toru Asahi, Hideko Koshima,

Photomechanical motion of three polymorphic salicylideneaniline crystals with distinct bending directions, speeds, and repeatability, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 2025, 98, uoaf032.

DOI: <https://doi.org/10.1093/bulcsj/uoaf032>

Dong Jiang, Jonathan P. Hill, Joel Henzie, Ho Ngoc Nam, Quan Manh Phung, Liyang Zhu, Jie Wang, Wei Xia, Yingji Zhao, Yunqing Kang, Toru Asahi, Ran Bu, Xingtao Xu, Yusuke Yamauchi, Selective Electrochemical Capture of Monovalent Cations Using Crown Ether-Functionalized COFs, *J. Am. Chem. Soc.*, 2025, 147, 12460–12468.

DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.4c16346>

Ayaka Matsumoto†, Kenta Nakagawa‡, Takuya Nakanishi, Akiko Sekine, Sosuke Kojo, Mizuki Kira, Sota Sato, Norio Shibata, Toru Asahi,

How Temperature Change Affects the Lattice Parameters, Molecular Conformation, and Reaction Cavity in Enantiomeric and Racemic Crystals of Thalidomide, *J. Am. Chem. Soc.*, 2025, 147, 11988–11997.

DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.4c18394> († co-first)

4.2 総説・著書

長谷部 翔大, 朝日 透, 小島 秀子,

有機結晶の光熱共振固有振動, 日本結晶学会誌, 2025, 67(3), 155–156.

DOI: <https://doi.org/10.5940/jcrsj.67.155>

谷口卓也, 深澤亮, 朝日透,

機械学習を活用したペロブスカイト薄膜の成膜条件最適化, in プロセスインフォマティクスにおけるデータ解析・モデリングと応用展開, 技術情報協会, 405–411 (2025).

4.3 招待講演

4.4 受賞・表彰

4.5 学会および社会的活動

5. 研究活動の課題と展望

2026年度は、「ナノポーラス薄膜研究」、「フォトメカニカル有機結晶の開発」、「マテリアルズインフォマティクスの研究」、「センサーデバイスおよびアクチュエータの開発」、「キラル医薬品の研究」、「メタサーフェスデバイスの研究」を推進する。