

トピックス

材料に潜む「欠陥」エネルギーを予測する 新 AI 技術を開発

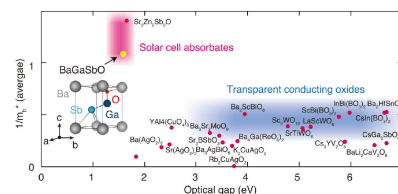
実材料に含まれる欠陥は、電気的、光学的特性や材料安定性を大きく左右する重要因子であるが、その評価には第一原理計算が必要であり、大規模材料探索における計算コストが大きな課題となっていた。本研究では、結晶構造をグラフとして表現するグラフニューラルネットワークを用い、結晶構造情報のみから欠陥形成エネルギーを予測する新しい枠組みを構築した。従来は電荷状態ごとに個別の計算や学習が必要であったが、本手法では電荷情報を共通の表現として導入し、構造情報と統合して学習させることで、多様な欠陥状態の形成エネルギーを予測可能とした。

この手法を非金属酸化物中の酸素空孔に適用した結果、世界最高水準の空孔形成エネルギーの予測精度を達成した。これにより、従来は数日を要していた欠陥形成エネルギー評価を、瞬時に実行できるようになった。さらに、構築したモデルを用いて約 2000 種類の酸化物を対象にスクリーニングを行い、酸素空孔によるホール補償が起こりにくい p 型酸化物候補を抽出した。その後、光学特性やキャリア有効質量を量子力学計算で評価し、32 種類の有望材料を特定した(図)。

本研究は、欠陥を含む現実的な材料系を対象とした高速材料探索を可能にする技術基盤を提示するものであり、AI と第一原理計算を融合した次世代材料設計手法の発展に寄与する成果である。

本成果は、2025 年 12 月に Physical Review Letter 誌に掲載された (DOI: 10.1103/h66h-y5k6)

また本研究は、JSPS 科研費基盤研究 B (JP22H01755, JP25K01486)、JST 創発的研究



支援事業 (JPMJFR235S) の支援を受けて実施された。

[著者連絡先等]

〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1

東北大学金属材料研究所 教授 熊谷 悠

E-mail: yukumagai@tohoku.ac.jp

URL: https://kumagailab.imr.tohoku.ac.jp

[2025 年 12 月 18 日]

水に強くリサイクルできる RAMOF 電極を実証 —水系デバイスの材料としての 幅広い展開に期待—

RAMOF (Redox-Active Metal-Organic Framework) は、金属と有機分子が配位結合によって連続的につながった無数の空孔をもち、材料内に酸化還元して蓄電できる部位をもつ多孔質材料であり、電池の電極材料への応用が期待されている。しかし、RAMOF を構成する配位結合は、水、特に酸で分解されやすいことが多いため、酸性水溶液を用いた水系デバイスの材料への応用は難しいとされていた。

東北大学 多元物質科学研究所の岡 弘樹 准教授、慶應義塾大学 理工学部 応用化学科の芹澤 信幸 准教授らの共同研究チームは、酸性水溶液中でも構造が安定な UiO-66 に、酸化還元活性な μ -ヒドロキノンを導入した RAMOF (UiO-66-(OH)₂) を合成した。本研究では、酸性水溶液を電解液とした水系二次電池の中で、RAMOF が高い耐久性をもち、材料全体で蓄

電でき、電池として使った後に RAMOF を温和に分解し、再使用できること (リサイクル性) を初めて実証した。本研究は、RAMOF の、水系デバイスの材料への幅広い応用を拓くことが期待される。

本研究成果は、2025 年 12 月 1 日付けで、科学誌 Nature Communications に掲載された。R. Akai, S. Kitajima, K. Okubo, N. Serizawa, H. Nishihara, H. Kasai, K. Oka, *Nature Communications*, DOI: 10.1038/s41467-025-65849-y

また本研究は、科研費・学術変革領域研究 (B) 「新奇活イオン液体の設計・合成と「応用電気化学」への展開」(JP23H03827)、科研費・基盤研究 (B) 「持続可能なクリーンエネルギー製造に向けた革新的な有機固体触媒の創製」(JP24K01552)、科研費・特別研究員奨励費「イオン性の高い水素結合に基づく有機ドックス分子の自在な配列制御と機能開拓」(JP24KJ1576) の支援を受けて実施された。

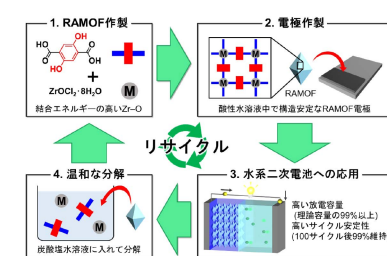


図. RAMOF の合成から電池利用、分解、再使用までの一連の概要 @Kouki Oka

[著者連絡先等]

〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1

東北大学 多元物質科学研究所 准教授 岡 弘樹

E-mail: oka@tohoku.ac.jp

URL: https://researchmap.jp/k.oka

[2025 年 12 月 25 日]

新規銅系抗ウイルス材料の開発と 活性機構の解明

無機系の抗ウイルス材料はウイルスが耐性を持ちにくい強みがあり、公衆衛生の観点から注目が集まっている。しかし、安価で暗所でも使用が可能な無機系の抗ウイルス材料である Cu と Cu₂O は、時間経過とともに抗ウイルス活性が低い CuO へと劣化してしまう課題があった。

東京科学大学の中島章教授らの研究グループは、神奈川県立産業技術総合研究所との共同研究で、Cu や Cu₂O の劣化の課題を克服する目的で、低活性である CuO を La₂O₃ や Y₂O₃ との複合酸化物 (La₂CuO₄ 及び Y₂Cu₂O₅) にする材料設計を行った。設計した複合酸化物はエンベロープ型ウイルスとノンエンベロープ型ウイルスの両方に抗ウイルス活性を示した。とくに、いずれの複合酸化物もノンエンベロープ型ウイルスに対して 4 h で 99.999% 以上のウイルス不活化率を示した。このウイルス不活化率は単独の酸化物 (CuO, La₂O₃, Y₂O₃) の不活化率を凌駕する値であった。

詳細な検討の結果、抗ウイルス活性には静電相互作用による吸着や、タンパク質不活化能力の強化が寄与した可能性が高いことが明らかと

なった。また、これまで抗ウイルス材料の研究に適用されていなかった第一原理計算を用いた評価も実施した結果、静電相互作用による吸着やタンパク質不活化能力の強化には、金属イオンが多い表面が安定化することや、表面に露出した Cu が Cu₂O と同様の状態になっていることが寄与している可能性が高いことが確認された。さらに、第一原理計算により、ノンエンベロープ型ウイルスの不安定化を示唆する結果も得られた。検討した複合酸化物のうち、La₂CuO₄ の長期安定性試験を実施したところ、1 年半経過した後も抗ウイルス活性が大幅には低下せず、Cu₂O よりも大幅に高い長期安定性を持つことが確認された。これらの複合酸化物は Cu や Cu₂O に代わる新たな抗ウイルス材料となることが期待される。

本成果は、2025 年 11 月に米国化学会の ACS Applied Materials & Interfaces 誌 (doi: 10.1021/acsami.5c17978) に掲載された。また、本研究は JST 次世代 AI 人材育成プログラム (Science Tokyo BOOST)、JSPS 科研費 25KJ1253, 23H01680, 25K01498, 22K14471 の助成を受けたものであり、成果の一部は東京科学大学の TSUBAME4.0 の利用により得られたものである。

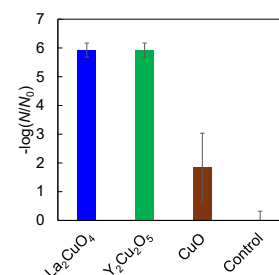


図. ノンエンベロープ型ウイルスの個数の変化 (N_0 が初期ウイルス数、 N は 4 h 後のウイルス数)。複合酸化物が感染力を持ったウイルスを 1/1000000 倍近くまで減少させたことを示唆している。

[著者連絡先等]

〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1 S7-7

東京科学大学大岡山キャンパス 南 7 号館 7 階

東京科学大学 物質理工学院 材料系

教授 中島 章

E-mail: nakajima.aaa@m.titech.ac.jp

[2026 年 1 月 5 日]