

材料に潜む「欠陥」エネルギーを予測する新AI技術を開発

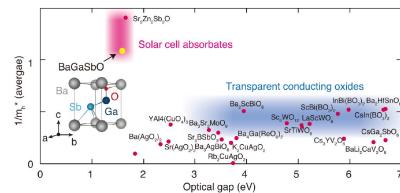
実材料に含まれる欠陥は、電気的、光学的特性や材料安定性を大きく左右する重要な因子であるが、その評価には第一原理計算が必要であり、大規模材料探索における計算コストが大きな課題となっていた。本研究では、結晶構造をグラフとして表現するグラフニューラルネットワークを用い、結晶構造情報のみから欠陥形成エネルギーを予測する新しい枠組みを構築した。従来は電荷状態ごとに個別の計算や学習が必要であったが、本手法では電荷情報を共通の表現として導入し、構造情報と統合して学習させることで、多様な欠陥状態の形成エネルギーを予測可能とした。

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/physrevlett.130.055601)。

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



支援事業(JPMJFR23S)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]

水に強くりサイクルできる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うことが多いため、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、酸化還元活性なカ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を温浴で分解し、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)「新奇活性イオン液体の設計・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レ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。

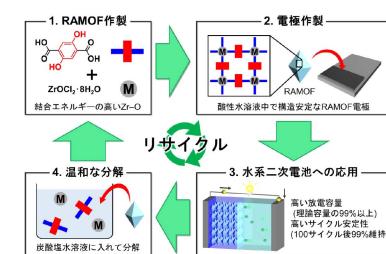


図. RAMOFの合成から電池利用、分解、再使用までの一連の概要 @Kouki Oka

[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4hで99.99%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応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。

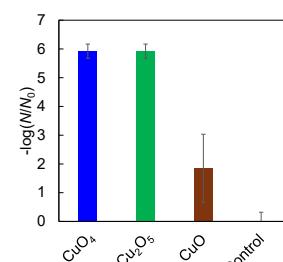


図. ノンエンベロープ型ウイルスの個数の変化 (N_1 が初期ウイルス数、 N は4h後のウイルス数)。複合酸化物が感染力を持ったウイルスを1/1000000倍近くまで減少させたことを示唆している。

[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.a.aa@m.titech.ac.jp
[2026年1月5日]