

Sat. Mar 25, 2023

## K401

Symposium | Co-Innovation Program (CIP) | Data acquisition and utilization on chemistry and materials science

## [K401-4am] Award Presentations, Special Lectures

Chair, Symposium organizer: Hiroaki Iino, Ryo Koga, Tsuneo

Kashiwagi, Yasunobu Ando

9:00 AM - 11:30 AM K401 (K401, Lecture Hall Bldg. [4F])

## [K401-4am-01] MI and DX

” WAVEBASE” DX platform for Material R&amp;D

○Tetsuya Shoji<sup>1</sup> (1. Toyota Motor Corporation)

9:10 AM - 10:00 AM

## [K401-4am-02] Digital Transformation of Advanced Experiments with Synchrotron Radiation to Promote Materials Development

○Iwao Matsuda<sup>1</sup> (1. the University of Tokyo)

10:10 AM - 10:40 AM

## [K401-4am-03] Research cases and prospects of energy-materials DX

○Junichiro Shiomi<sup>1</sup>, Shoichi Matsuda<sup>2</sup>, Koji Tsuda<sup>1</sup> (1. The Univ of Tokyo, 2. NIMS)

10:40 AM - 11:10 AM

## [4K40101-03-6add] Incubation Time

11:10 AM - 11:30 AM

## K405

Symposium | Co-Innovation Program (CIP) | The role of thermal energy engineering in realization of low-carbon society

## [K405-4am] The role of thermal energy engineering in realization of low-carbon society

Chair, Symposium organizer: Eiji Hosono, Koichi Tokudome, Michihiro Ohta, Nagatoshi Koumura

9:00 AM - 11:20 AM K405 (K405, Lecture Hall Bldg. [4F])

## [K405-4am-01] Development of order-made materials for thermo-chemical energy storage and future issues

○Junichi Ryu<sup>1</sup> (1. Chiba University)

9:15 AM - 9:45 AM

## [K405-4am-02] High-temperature thermochemical energy storage / chemical heat pump system toward low-carbon society

○Itoko Saita<sup>1</sup> (1. AIST)

9:45 AM - 10:15 AM

## [K405-4am-03] Importance of the Second Law of

## Thermodynamics and Heat Transfer in Effective Utilization of Thermal Energy

○Yoichi Murakami<sup>1</sup> (1. Tokyo Institute of Technology)

10:15 AM - 11:05 AM

## [4K40501-03-5add] Incubation Time

11:05 AM - 11:20 AM

## K401

Symposium | Co-Innovation Program (CIP) | Data acquisition and utilization on chemistry and materials science

## [K401-4pm] Data acquisition and utilization on chemistry and materials science

Chair, Symposium organizer: Hiroaki Iino, Ryo Koga, Tsuneo Kashiwagi, Yasunobu Ando

1:00 PM - 3:40 PM K401 (K401, Lecture Hall Bldg. [4F])

## [K401-4pm-01] Digital transformation of inorganic thin-film materials research using autonomous synthesis system

○Ryota Shimizu<sup>1</sup> (1. Tokyo Institute of Technology)

1:00 PM - 1:30 PM

## [K401-4pm-02] Materials database creation and integrated data application

○Masashi Ishii<sup>1</sup> (1. National Institute for Materials Science)

1:30 PM - 2:00 PM

## [4K40104-07-3add] Incubation Time

2:00 PM - 2:20 PM

## [K401-4pm-03] Ideals and Challenges in Utilizing Research Data in the Materials Science Field

○Yoko Shinoda<sup>1</sup> (1. National Institute for Materials Science)

2:20 PM - 2:50 PM

## [K401-4pm-04] Toward construction of Measurement and Characterization Platform -Concept and standardization of common data format-

○Shingo Ichimura<sup>1</sup> (1. Waseda University)

2:50 PM - 3:20 PM

## [4K40104-07-7add] Incubation Time

3:30 PM - 3:40 PM

## K405

Symposium | Co-Innovation Program (CIP) | The role of thermal energy engineering in realization of low-carbon society

### [K405-4pm] The role of thermal energy engineering in realization of low-carbon society

Chair, Symposium organizer: Eiji Hosono, Koichi Tokudome, Michihiro Ohta, Nagatoshi Koumura

1:30 PM - 3:30 PM K405 (K405, Lecture Hall Bldg. [4F])

#### [K405-4pm-01] Thermoelectric Materials with Low-environmental Impact for Waste Heat Power Generation Applications

○Michitaka Ohtaki<sup>1</sup> (1. Kyushu University)

1:30 PM - 2:20 PM

#### [K405-4pm-02] Current Situations and Issues of Thermophysical Property Measurement of Solid Materials

○Megumi Akoshima<sup>1</sup> (1. AIST)

2:20 PM - 2:50 PM

#### [K405-4pm-03] Overviewing the world of thermoelectric materials by materials informatics

○Yukari Katsura<sup>1,2</sup> (1. National Institute for Materials Science, 2. RIKEN)

2:50 PM - 3:20 PM

## C1311

Symposium | Asian International Symposium | Asian International Symposium - Photochemistry -

### [C1311-4am] Asian International Symposium - Photochemistry -

Chair, Symposium organizer: Kiyoshi Miyata, Nobuhiro Yanai  
9:00 AM - 11:40 AM C1311 (1311, Bldg. 13 [1F] + Zoom)

#### [C1311-4am-01] Versatile Post-nanoencapsulation Strategy for the Preparation of Robust and Extremely Uniform TTA-UC Nanocapsules

○Jaehyuk Kim<sup>1</sup> (1. Pusan National University)

9:05 AM - 9:35 AM

#### [C1311-4am-02] Lasing & spin-orbit coupled polariton condensates in lead halide perovskite microcavities

○Yongping Fu<sup>1</sup> (1. Peking University)

9:35 AM - 10:05 AM

#### [C1311-4am-03] Single-molecule study of plasmon-induced chemical reactions of O<sub>2</sub> using photon STM

○Emiko Kazuma<sup>1,2</sup> (1. The University of Tokyo, 2. RIKEN)

10:05 AM - 10:25 AM

#### [C1311-4am-04] Energy transfer between Singlet, triplet and doublet

○Feng Li<sup>1</sup> (1. Jilin University)

10:25 AM - 10:55 AM

#### [C1311-4am-05] Delayed Fluorescence from Energetically Inverted Singlet and Triplet Excited States

○Naoya Aizawa<sup>1</sup> (1. Osaka University)

10:55 AM - 11:15 AM

#### [C1311-4am-06] Highly Efficient invisible electroluminescence from organic light-emitting diodes

○Hajime Nakanotani<sup>1</sup> (1. Kyushu University)

11:15 AM - 11:35 AM

## K102

Symposium | Special Program | Protein Dynamics Chemistry: Chemistry and Materials Science for Visualizing and Manipulating Protein Dynamics

### [K102-4am] Protein Dynamics Chemistry: Chemistry and Materials Science for Visualizing and Manipulating Protein Dynamics

Chair, Symposium organizer: Takahiro Muraoka, Tomohide Saio  
9:00 AM - 11:40 AM K102 (K102, Lecture Hall Bldg. [1F])

#### [K102-4am-01] Protein conformational changes investigated by NMR and ESR using paramagnetic lanthanide tags

○Tomohide Saio<sup>1</sup> (1. Tokushima University)

9:05 AM - 9:30 AM

#### [K102-4am-02] Understanding the dynamic assembly of protein disulfide isomerase enzymes during their catalytic reaction

○Masaki Okumura<sup>1</sup> (1. FRIS, Tohoku univ.)

9:30 AM - 9:55 AM

#### [K102-4am-03] Protein Folding Promotion by Kinetically Controlled Multistep Reactions

○Takahiro Muraoka<sup>1,2</sup> (1. Tokyo Univ. of Agriculture and Technology, 2. KISTEC)

9:55 AM - 10:20 AM

#### [K102-4am-04] Visualizing the microscopic dynamics of biorelevant molecules by computational science

○Go Watanabe<sup>1,2</sup> (1. Kitasato Univ., 2. KISTEC)

10:20 AM - 10:45 AM

#### [K102-4am-05] Regulation of Spatio-Temporal Dynamics

of Engineered Proteins in Vivo and Its  
Application for Ischemic Stroke Therapy  
○Itsuki Ajioka<sup>1,2</sup> (1. Tokyo Medical and Dental  
Univ., 2. KISTEC)  
10:45 AM - 11:10 AM

[K102-4am-06] Regulation of cytoskeletal dynamics in  
new neurons for brain regeneration  
○Naoko Kaneko<sup>1</sup> (1. Doshisha University)  
11:10 AM - 11:35 AM

---

Symposium | Special Program | Luminescence Chemistry Ensemble: New  
Developments in Luminescent Sensing for Super Smart Society

[K102-4pm] Luminescence Chemistry Ensemble:  
New Developments in Luminescent  
Sensing for Super Smart Society  
Chair, Symposium organizer: Jumpei Ueda, Junpei Yuasa,  
Shunpei Hitosugi, Suguru Ito, Toshikazu Ono, Yousuke Ooyama  
1:00 PM - 3:40 PM K102 (K102, Lecture Hall Bldg. [1F])

---

[K102-4pm-01] Development of luminochromic systems  
and film-type sensors based on  
excitation-driven complexes  
○Kazuo Tanaka<sup>1</sup> (1. Kyoto University)  
1:05 PM - 1:35 PM

[K102-4pm-02] Electrofluorochromic Devices based on  
Photo-electro Functional Molecules  
○Kazuki NAKAMURA<sup>1</sup> (1. Chiba University)  
1:35 PM - 2:05 PM

[K102-4pm-03] Static electricity luminescence sensing  
technology  
○Kazuya Kikunaga<sup>1</sup> (1. AIST)  
2:05 PM - 2:35 PM

[K102-4pm-04] Development of pyrene-based bright  
probes for *in vivo* multi-photon excited  
fluorescence microscopy imaging  
○Yosuke Niko<sup>1</sup> (1. Grad. Sch. of Int. Art. and  
Sci., Kochi Univ.)  
2:35 PM - 3:05 PM

[K102-4pm-05] Application of flexible infrared-emissive  
surface light source to biological sensing  
technology  
○Ryo Nakabayashi<sup>1</sup>, Noriko Ueda<sup>1</sup>, Shusaku  
Kon<sup>1</sup> (1. KONICA MINOLTA, INC.)  
3:05 PM - 3:35 PM

---

Symposium | Co-Innovation Program (CIP) | Data acquisition and utilization on chemistry and materials science

## [K401-4am] Award Presentations, Special Lectures

Chair, Symposium organizer: Hiroaki Iino, Ryo Koga, Tsuneo Kashiwagi, Yasunobu Ando

Sat. Mar 25, 2023 9:00 AM - 11:30 AM K401 (K401, Lecture Hall Bldg. [4F])

---

- [K401-4am-01] MI and DX  
” WAVEBASE” DX platform for Material R&D  
○Tetsuya Shoji<sup>1</sup> (1. Toyota Motor Corporation)  
9:10 AM - 10:00 AM
- [K401-4am-02] Digital Transformation of Advanced Experiments with  
Synchrotron Radiation to Promote Materials Development  
○Iwao Matsuda<sup>1</sup> (1. the University of Tokyo)  
10:10 AM - 10:40 AM
- [K401-4am-03] Research cases and prospects of energy-materials DX  
○Junichiro Shiomi<sup>1</sup>, Shoichi Matsuda<sup>2</sup>, Koji Tsuda<sup>1</sup> (1. The Univ of Tokyo, 2.  
NIMS)  
10:40 AM - 11:10 AM
- [4K40101-03-6add] Incubation Time  
11:10 AM - 11:30 AM



## MI と DX マテリアル研究 DX プラットフォーム WAVEBASE

(トヨタ自動車株式会社) 庄司 哲也

Material Informatics and Digital Transformation, WAVEBASE: Material R&D DX Platform  
(Toyota Motor Corporation) Tetsuya Shoji

Recent rapid evolution of computational power and generalization of AI technology enables information extraction from variety types of data. Commonly, material researchers and engineers tend to recognize AI technology as tools for machine learning in their material R&D scene. But most important point of material informatics is how we become able to access meaningful descriptor buried in high dimensional data which is difficult to quantify. Moreover, material data have multi-scale and multi-modal problem. This fact makes data utilization more difficult. In order to get over this situation, we focused on wave number “q-space” expression for handling multi scale structural data, as shown in **Figure 1**. Using q-space expression, we can connect from atomistic diffraction information to structural scattering information based on principle of diffraction and scattering. Moreover, small angle scattering information is almost equivalent to power spectrum of microscope image. Based on this fact, we can recognize that we can express multi-scale structural information in one curved line which is consist of scattering, or power spectrum, and diffraction<sup>1)</sup>. Using superposition principle of wave, we can aware that all structural information is overlapped in this curved line. To extract information from multiscale dataset, we utilize dimensionality reduction technique for high dimensional multiscale data. For example, we start with 35 different composition and nanostructure Light Rare Earth alloyed nano structured  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  rare-earth magnet samples and measure X-ray diffraction (XRD)<sup>2)</sup>. One XRD data consists of 3500 dimensions. Commonly known that XRD spectrum consist of diffraction information from atomistic configuration and small angle scattering information from nano

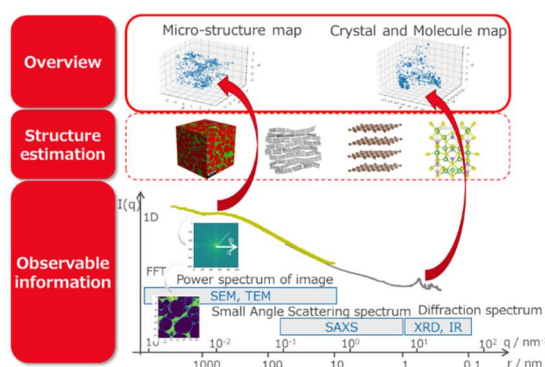


Figure 1 q-space expression of multiscale expression and corresponding measurement.

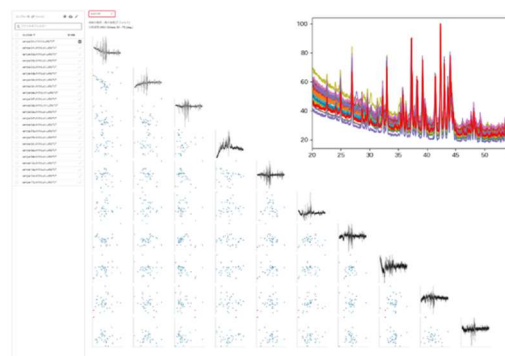


Figure 2 35 XRD data of Nd reduced rare earth magnet and 10 decomposed vectors by PCA analysis

and microstructure. To extract feature from these 35 XRD data, we use PCA, principal component analysis, to decompose 10 independent vectors as shown in **Figure 2**. In this case cumulative contribution ratio is more than 0.95 with these 10 vectors. Looking at decomposed vector with

knowledge of diffraction and small angle scattering, one can understand meaning of each vector. In this case, 1<sup>st</sup> principal component (PC) corresponds to difference of scattering by nanostructure and part of peak shape change and 2<sup>nd</sup> PC corresponds to peak shift of RE<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B phase, this means that change of lattice parameter by alloying Light Rare Earth element in Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B phase. 3<sup>rd</sup> PC represent change of peak width. Then we use coefficient of each PC as descriptor for magnetic performance machine learning model. Coefficient of PC seems to work well as good descriptor as shown in **Figure 3**. This is only one example, but we already confirmed this like analysis may hold in other materials, such as catalyst, battery materials, lubricant oil etc., and other spectrum data, such as FT-IR or GC-MS etc.

Based on our achievement of material informatics research include feature extraction by dimensionality reduction, we deployed Data storage and Data analysis platform “WAVEBASE” on AWS and started Material R&D DX support service business<sup>(3)</sup>. Using this system, users can store their data on same place in their limited community, or company and can extract feature information from proper dataset and analyze correlation against objective parameters, or target properties, by machine learning algorithms without coding. Furthermore, SINET6, high speed data transfer network, will become in service, massive data from quantum beam facilities, such as SPring-8, become able to transfer to AWS immediately for analyze measured data on site. IT environment evolution may lead transformation of analytics of massive data and efficient usage of beam time.

Our attempt is just one of option for users. This like SaaS business will become mainstream for data analytics in material R&D, I think. Most important thing for engineers and researchers is understand underlying theory, not only material itself but measurement principles and data analytics.

*Keywords : Material informatics; Digital transformation; feature extraction; Dimensionality reduction;*

- 1) S. Koizumi et al; *J. Appl. Cryst.* (2019). **52**, 783-790
- 2) A. Kato et al; *Mater.* (2021) **60**, 1, 57-59
- 3) URL: <https://www.toyota.co.jp/wavebase/>

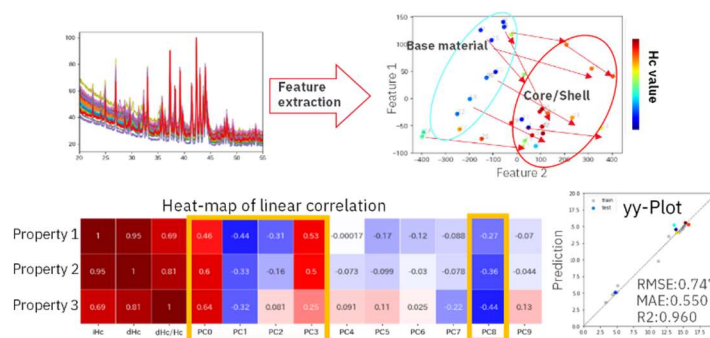


Figure 3 Correlation of properties and PC coefficient.

## 材料開発を促進する先端放射光実験の DX 化

(東大物性研) 松田 巖

Digital Transformation of Advanced Experiments with Synchrotron Radiation to Promote Materials Development (*The Institute for Solid State Physics, the University of Tokyo*)

Iwao Matsuda

An X-ray has been significant probe in materials science to characterize atomic structure, chemical character, and electronic states of samples. A synchrotron radiation (SR) facility provides such an X-ray beam with high-brilliance and makes users to conduct experiments with high-resolution and multi-dimensional information. Furthermore, recent advanced in the measurement techniques have allowed us to probe functional materials with spatiotemporal resolutions under the *operando* conditions. Frontiers of the SR research have now required to pioneer a combination of such advanced experiments with the DX technologies including informatics and robots. We have been developing a system of *in situ* sample reparations and the characterization with X-ray nanospectroscopy that operates in process informatics. In this presentation, I will introduce our design and status of the development.

**Keywords :** *synchrotron radiation, X-ray spectroscopy, materials science, synthesis*

材料科学において、X 線は試料の原子構造、化学的性質、電子状態を直接調べる事ができる重要なプローブです。このような X 線ビームを用いた実験は現在、放射光施設で誰でも使用が可能であり、さらに近年のビーム高輝度化によって測定データはより高分解能かつ多次元的になってきました。最近では測定技術の急激な進歩に伴い、材料が実際に動作している様子を時空間分解で「その場」観察するオペランド測定も可能です。このような放射光の先端計測手法に対して現在、インフォマティクスやロボットなどの DX 技術との組み合わせたシステム開発に注目が集まっています。我々はこれまでプロセスインフォマティクスで動作する X 線ナノ分光の実験システムを開発してきました。本講演では先端放射光実験を解説すると共に、インフォマティクスやロボットなどの技術を組み合わせた我々の DX 化の取り組みについて紹介します。

## エネルギー材料 DX の研究事例と展望

(東大院工<sup>1</sup>・NIMS<sup>2</sup>・東大新領域<sup>3</sup>) ○塩見 淳一郎<sup>1</sup>・○松田 翔一<sup>2</sup>・津田 宏治<sup>3</sup>  
Research cases and prospects of energy-materials DX (<sup>1</sup>Graduate School of Engineering, The University of Tokyo, <sup>2</sup>National Institute for Materials, <sup>3</sup>Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo) ○Junichiro Shiomi,<sup>1</sup> Shoichi Matsuda,<sup>2</sup> Koji Tsuda.<sup>3</sup>

マテリアルズ・インフォマティクス(MI)は材料開発のリードタイムを低減する手法として期待されている。塩見と津田らは2015年から2020年まで実施された情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(Mi<sup>2</sup>i)で伝熱材料のMI研究に取り組み、計算科学(熱輸送計算など)と機械学習(ベイズ最適化など)を組み合わせた手法を開発することを通じて、ナノ構造化結晶材料の効率的な構造最適化を実現し、実験で実証した<sup>(1-4)</sup>。また、ファクタライゼーションマシンと量子アニーラを用いた最適化を実現し、より巨大な探索空間での構造最適化を可能にした<sup>(5)</sup>。その後にJST-CRESTプロジェクトとして取り組んでいる準安定で不秩序な材料の開発では、計算科学による直接的な物性予測が困難である上にプロセスパラメータが材料の物性に大きく影響するため、実験プロセスを最適化ループに入れたMIを実践している。

このようなMIの方法論は他の物性にも適用でき、文部科学省の「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト」の「再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点」(略称DX-GEM)では、松田らとともに、データサイエンス的手法を取り入れたデータ駆動型の先進的な研究手法を開発し、大容量、低コストの蓄電池と水電解システムを実現する材料の革新に取り組んでいる。なお、当該活動においては、文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ(ARIM)と連携している。

DX-GEMで松田らは、蓄電池用電解液の調整・評価を、人手よりはるかに高速に実験を行うことができる実験ロボットを開発している<sup>(6,7)</sup>。これを使えば、50種類以上の化合物を組み合わせる様々な組成の電解液の作製から、その電池特性を評価する作業に至るまで、全てを自動で行うことができる。人が行っていたときには1日10サンプル程度の評価しかできなかったものを、本実験ロボットを用いることで1日1000サンプル以上の評価が可能になる。さらに、取得した大量の実験データに対して、ベイズ最適化に代表されるデータ科学的手法を適用することで、より効率的に高機能電解液を探索することが可能となる。

本公演では、以上のMIプロジェクトの流れに沿って、いくつかの研究事例やデータベース構築の試みなどを紹介する。

- 1) Designing nanostructures for phonon transport via Bayesian optimization. S. Ju, T. Shiga, L. Feng, Z. Hou, K. Tsuda, J. Shiomi, *Physical Review X*. **2017**, 7, 021024.
- 2) Multifunctional structural design of graphene thermoelectrics by Bayesian optimization. M. Yamawaki, M. Ohnishi, S. Ju, J. Shiomi, *Science Advances*. **2018**, 4, eaar4192.
- 3) Machine-learning-optimized aperiodic superlattice minimizes coherent phonon heat conduction. R. Hu, S. Iwamoto, L. Feng, S. Ju, S. Hu, M. Ohnishi, N. Nagai, K. Hirakawa, J. Shiomi. *Physical Review X*. **2020**, 10, 021050.
- 4) Ultranarrow-band wavelength-selective thermal emission with aperiodic multilayered metamaterials designed by Bayesian optimization. A. Sakurai, K. Yada, T. Simomura, S. Ju, M. Kashiwagi, H. Okada, T. Nagao, K. Tsuda, J. Shiomi. *ACS Central Science*. **2019**, 5, 319.
- 5) Designing metamaterials with quantum annealing and factorization machines. K. Kitai, J. Guo, S. Ju,

S. Tanaka, K. Tsuda, J. Shiomi, R. Tamura, *Physical Review Research*. **2020**, 2, 013319.

6) High-throughput combinatorial screening of multi-component electrolyte additives to improve the performance of Li metal secondary batteries. S. Matsuda, K. Nishioka, S. Nakanishi, *Scientific Reports*. **2019**, 9, 6211.

7) Data-driven automated robotic experiments accelerate discovery of multi-component electrolyte for rechargeable Li–O<sub>2</sub> batteries. S. Matsuda, G. Lambard, K. Sodeyama, *Cell Reports Physical Science*. **2022**, 3, 100832.

11:10 AM - 11:30 AM (Sat. Mar 25, 2023 9:00 AM - 11:30 AM K401)

[4K40101-03-6add] Incubation Time

---

Symposium | Co-Innovation Program (CIP) | The role of thermal energy engineering in realization of low-carbon society

## [K405-4am] The role of thermal energy engineering in realization of low-carbon society

Chair, Symposium organizer: Eiji Hosono, Koichi Tokudome, Michihiro Ohta, Nagatoshi Koumura

Sat. Mar 25, 2023 9:00 AM - 11:20 AM K405 (K405, Lecture Hall Bldg. [4F])

---

- |                   |  |
|-------------------|--|
| [K405-4am-01]     | Development of order-made materials for thermo-chemical energy storage and future issues<br>○Junichi Ryu <sup>1</sup> (1. Chiba University)<br>9:15 AM - 9:45 AM                                       |
| [K405-4am-02]     | High-temperature thermochemical energy storage / chemical heat pump system toward low-carbon society<br>○Itoko Saita <sup>1</sup> (1. AIST)<br>9:45 AM - 10:15 AM                                      |
| [K405-4am-03]     | Importance of the Second Law of Thermodynamics and Heat Transfer in Effective Utilization of Thermal Energy<br>○Yoichi Murakami <sup>1</sup> (1. Tokyo Institute of Technology)<br>10:15 AM - 11:05 AM |
| [4K40501-03-5add] | Incubation Time<br>11:05 AM - 11:20 AM   |

## オーダーメイド型化学蓄熱材の開発と今後の課題

(千葉大院工<sup>1</sup>) ○劉 醇一<sup>1</sup>

Development of order-made materials for thermo-chemical energy storage and future issues  
(<sup>1</sup>Graduate School of Engineering, Chiba University) ○Junichi Ryu<sup>1</sup>

In recent years, there is a strong demand for the construction of energy systems that do not depend on fossil resources, and the need for heat storage technology to effectively utilize unused thermal energy such as industrial waste heat and solar heat is increasing.

Chemical heat storage technology is a technology that stores and releases thermal energy using endothermic/exothermic phenomena in reversible chemical reactions. Chemical heat storage technology has a higher thermal energy storage density than latent heat storage technology, which has been put to practical use. However, the reaction rate for heat storage operation and heat output operation is slow, which is a problem for practical use.

The authors have discovered that chemically modifying magnesium hydroxide can lower the temperature of heat storage in chemical heat storage. In this presentation, I will introduce order-made chemical heat storage materials that we are working on and future issues.

**Keywords :** Thermo-chemical energy storage, Gas-solid reaction, Alkaline earth hydroxide

近年、化石資源に依存しないエネルギーシステムの構築が強く求められており、産業排熱や太陽熱などの未利用熱エネルギーを有効利用するための蓄熱技術のニーズが高まっている。化学蓄熱技術は、可逆的な化学反応における吸熱／発熱現象を用いて熱エネルギーの貯蔵や放出を行う技術である。化学蓄熱技術は、実用化が進んでいる潜熱蓄熱技術と比べて高い熱エネルギー貯蔵密度がある。しかし、蓄熱操作や熱出力操作のための反応速度が遅く、実用化に向けた課題となっている。

筆者らは、水酸化マグネシウムを化学的に修飾することによって、化学蓄熱における蓄熱操作温度の低温化が可能であることを見出してきた。本講演では、筆者らが進めているオーダーメイド型化学蓄熱材<sup>1-10)</sup>と、今後の課題について紹介する。

- 1) R. Kurosawa and J. Ryu, *J. Chem. Eng. Jpn.*, **52**, 152-158 (2019).
- 2) R. Kurosawa, M. Takeuchi and J. Ryu, *ACS Omega*, **4**, 17752-17761 (2019).
- 3) A. Maruyama, R. Kurosawa and J. Ryu, *ACS Omega*, **5**, 9820-9829 (2020).
- 4) R. Kurosawa, M. Takeuchi and J. Ryu, *RSC Adv.*, **11**, 24292-24311 (2021).
- 5) R. Kurosawa, M. Takeuchi and J. Ryu, *J. Phys. Chem. C*, **125**, 5559-5571 (2021).
- 6) A. Kondo, R. Kurosawa, J. Ryu, M. Matsuoka and M. Takeuchi, *J. Phys. Chem. C*, **125**, 10937-10947 (2021).
- 7) M. Takeuchi, R. Kurosawa, J. Ryu and M. Matsuoka, *ACS Omega*, **6**, 33075-33084 (2021).
- 8) S. Kono, R. Kurosawa and J. Ryu, *Chem. Lett.*, **51**, 614-617 (2022).
- 9) M. Takeuchi, R. Kurosawa and J. Ryu, *J. Raman Spectrosc.*, **53**, 1793-1804 (2022).
- 10) N. Kobayashi, R. Kurosawa and J. Ryu, *ISIJ Int.*, **62**, 2551-2558 (2022).

【謝辞】本研究の一部は、NEDO GI 事業 (JPNP21014)、鉄鋼環境基金、谷川熱技術振興基金の助成を受けて行われました。



## 低炭素社会に向けた高温蓄熱技術・ケミカルヒートポンプの研究開発

(産総研) ○齊田 愛子

High-temperature thermochemical energy storage / chemical heat pump system toward low-carbon society

(AIST) ○Itoko Saita

Thermochemical energy storage (TCES) enables large capacity of heat storage comparing to sensible heat storage. This study focused on utilization of reversible reaction between metals and hydrogen for TCES at a temperature higher than 600°C. Titanium hydride formation ( $\text{Ti} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{TiH}_2$ ) was employed for a TCES test module and demonstrated.

*Keywords : Hydrogen storage alloy, Metal hydride, High-temperature thermochemical energy storage, Chemical heat pump*

再生可能エネルギーの普及拡大のためには、出力が変動する再生可能エネルギーを貯蔵し、需要に応じて供給する蓄エネルギー技術が重要である。そのため電池や水素エネルギーなどの蓄エネルギー技術の研究開発が進められているが、低コストかつ大規模な蓄エネルギーを実現する技術として蓄熱が注目されている。蓄えた熱は、熱として利用されるだけでなく、電力に変換して利用する、カルノーバッテリーと呼ばれる技術の研究開発も活発化している。また、これまで活用が困難であった高温の産業排熱を回収し有効利用するためにも、高温での熱回収と蓄熱が重要視されている。

蓄熱技術の一種である化学蓄熱は、可逆反応に伴う反応熱を利用して蓄熱・放熱し、反応を制御することによって長期蓄熱が可能である。また、反応系を制御することにより吸熱反応（蓄熱）よりも高温で発熱反応（放熱）を行い、ヒートポンプ（ケミカルヒートポンプ）として利用することも可能である。化学蓄熱およびケミカルヒートポンプに利用される反応において、水素吸蔵合金と水素との間に生じる反応は反応速度が大きいことが知られており、熱需要に対する高い応答性が期待できる。

本研究では水素吸蔵合金の一種であるチタンを利用して600°C以上の高温で作動する蓄熱・ケミカルヒートポンプシステムを考案し、小型試作機にて性能を評価した。このシステムを利用して、蓄熱操作に必要な加熱や気体用ポンプの動力を再生可能エネルギーから供給すれば、再生可能エネルギーを貯蔵することが可能となる。放熱操作によって得られる熱を高温の産業プロセスやカルノーバッテリーに利用すれば、再生可能エネルギー由来の熱および電力を需要に応じて供給することが可能となり、低炭素社会の実現に貢献できる。

1) 秋谷・川崎, 日本海水学会誌, 40-3 (1986), 159.

謝辞 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「クリーンエネルギー分野における革新的技術の国際共同研究開発事業／革新的蓄電・蓄熱等エネルギー貯蔵技術の開発／革新的高温蓄熱技術の国際共同研究開発」（JPNP20005）として実施した。

## 熱エネルギー有効活用における熱力学第2法則と伝熱学の重要性

(東工大 ゼロカーボンエネルギー研) 村上 陽一

Importance of the Second Law of Thermodynamics and Heat Transfer in Effective Utilization of Thermal Energy (*Laboratory for Zero-Carbon Energy, Tokyo Institute of Technology*)

○Yoichi Murakami

Although thermal energy is ubiquitous, its understanding is elusive. To make proper advances in R&D of thermal energy utilizations, it is important to understand (i) thermodynamics regarding the quality of thermal energy, especially the relation between exergy, entropy, and dissipation, and (ii) heat transfer discipline that is indispensable for descriptions of the rate of heat flow and the temperature field. In this lecture, these issues are explained exemplifying, e.g., the forced-flow thermoelectrochemical conversion<sup>1-3)</sup> and a thermoelectrochemical cell<sup>4)</sup> that have been studied by the lecturer, and a direct air capture (DAC) of CO<sub>2</sub> that has recently drawn attention.

*Keywords : Thermodynamics; Heat Transfer; Thermoelectrics*

熱エネルギーは普遍的だが分かりにくい側面をもつ。熱エネルギー有効活用の研究開発を適切に推進するには、熱エネルギーの質を表現するエクセルギー、エントロピー、散逸の相互関係などに関する熱力学、および、熱輸送レートと温度場の描写に不可欠な伝熱学への理解が重要となる。これらの事項を、講演者が研究してきたフロー熱電発電<sup>1-3)</sup>、熱化学電池<sup>4)</sup>や、最近注目を集めるCO<sub>2</sub>の直接空気回収(Direct Air Capture, DAC)などを題材にしつつ説明する。

- 1) Integration of thermo-electrochemical conversion into forced convection cooling. Y. Ikeda, K. Fukui, Y. Murakami, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, *21*, 25838. DOI: [10.1039/c9cp05028k](https://doi.org/10.1039/c9cp05028k)
- 2) Thermogalvanic energy harvesting from forced convection cooling of 100–200 °C surfaces generating high power density. Y. Ikeda, Y. Cho, Y. Murakami, *Sustain. Energ. Fuels* **2021**, *5*, 5967. DOI: [10.1039/D1SE01264A](https://doi.org/10.1039/D1SE01264A)
- 3) 冷やしながら発電する「フロー熱電発電」の開発. 村上陽一, 池田寛, *応用物理* **2022**, *91*, 755. DOI: [10.11470/oubutsu.91.12\\_755](https://doi.org/10.11470/oubutsu.91.12_755)
- 4) Thermoelectrochemical Seebeck coefficient and viscosity of Co-complex electrolytes rationalized by the Einstein relation, Jones–Dole *B* coefficient, and quantum-chemical calculations. Y. Cho, S. Nagatsuka, Y. Murakami, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2022**, *24*, 21396. DOI: [10.1039/D2CP02985E](https://doi.org/10.1039/D2CP02985E)

11:05 AM - 11:20 AM (Sat. Mar 25, 2023 9:00 AM - 11:20 AM K405)

[4K40501-03-5add] Incubation Time

---

Symposium | Co-Innovation Program (CIP) | Data acquisition and utilization on chemistry and materials science

## [K401-4pm] Data acquisition and utilization on chemistry and materials science

Chair, Symposium organizer: Hiroaki Iino, Ryo Koga, Tsuneo Kashiwagi, Yasunobu Ando

Sat. Mar 25, 2023 1:00 PM - 3:40 PM K401 (K401, Lecture Hall Bldg. [4F])

---

- [K401-4pm-01] Digital transformation of inorganic thin-film materials research using autonomous synthesis system  
○Ryota Shimizu<sup>1</sup> (1. Tokyo Institute of Technology)  
1:00 PM - 1:30 PM
- [K401-4pm-02] Materials database creation and integrated data application  
○Masashi Ishii<sup>1</sup> (1. National Institute for Materials Science)  
1:30 PM - 2:00 PM
- [4K40104-07-3add] Incubation Time  
2:00 PM - 2:20 PM
- [K401-4pm-03] Ideals and Challenges in Utilizing Research Data in the Materials Science Field  
○Yoko Shinoda<sup>1</sup> (1. National Institute for Materials Science)  
2:20 PM - 2:50 PM
- [K401-4pm-04] Toward construction of Measurement and Characterization Platform -Concept and standardization of common data format-  
○Shingo Ichimura<sup>1</sup> (1. Waseda University)  
2:50 PM - 3:20 PM
- [4K40104-07-7add] Incubation Time  
3:30 PM - 3:40 PM

## 自律成膜システムを活用した無機薄膜材料研究のDX化

(東工大物質理工) ○清水 亮太

Digital transformation of inorganic thin-film materials research using autonomous synthesis system (School of Materials and Chemical Technology, Tokyo Institute of Technology) Ryota Shimizu

To accelerate and deepen materials science research, introduction of artificial intelligence (AI) and robot technology into materials research attracts much attention. Since the properties of inorganic materials strongly rely on the fabrication processes, elaborate techniques are required to introduce AI and robotics into practical synthesis processes. Accordingly, the synthesis method of inorganic materials has suffered from high-throughput synthesis and automation. Here, I introduce an autonomous system with AI and robots utilizing Bayesian optimization to expand the search space for inorganic compounds. This approach will usher in the next paradigm shift in materials research and beyond. I will talk about the utilization of real experimental data from the autonomous system in terms of process informatics.

**Keywords :** *Autonomous synthesis; Robot; Artificial intelligence; inorganic materials*

現在の物質開発の場では探索範囲が急拡大しており、より一層の効率化が望まれている。合成条件の最適化には研究者・技術者の判断(勘や経験)が必要であり、拡大する探索空間において各パラメータの微細な制御にもはや対応できない。近年、このプロセスを人工知能(AI)とロボットに任せ、広い空間においても「自律的」に物質探索することが可能になってきた。しかしながら、このような自律的な研究スタイルは、固体物質ではいまだ例が少ない。

そこで本講演では、我々が薄膜を対象に開発した無機固体物質の自律的な開発スタイルを紹介する(図)<sup>1)</sup>。この自律合成システムの運用例を紹介しながら、研究者こそが注力すべきことについて議論する。また、システム利用を通じて得られる大量のリアルな実験データをどのように活用すべきか、実例をもとに紹介する。

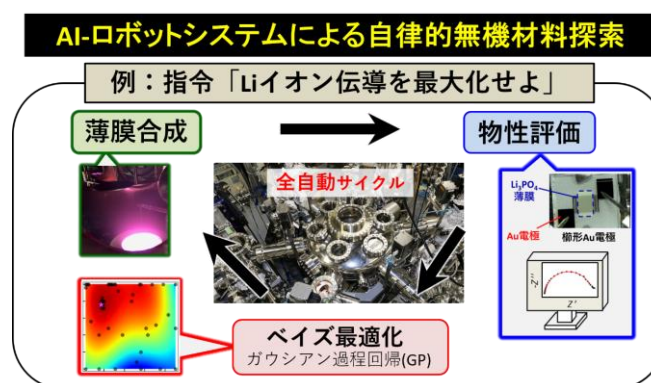


図: Li 伝導体探索を例とした AI-ロボット合成システムを活用した自律的材料探索の模式図。

1) Autonomous materials synthesis by machine learning and robotics. R. Shimizu, S. Kobayashi, Y. Watanabe, Y. Ando, and T. Hitosugi *et al.*, APL Mater. **8**, 111110 (2020).

## 材料データベース構築とデータの統合活用

(物材機構) 石井 真史

Material database construction and integrated utilization of data (*MaDIS, National Institute for Materials Science*) ○Masashi Ishii

NIMS has been constructing various databases on the background of data-driven R&D. In addition to the strengthening of the historical database called MatNavi, we are planning to promote data integration and knowledge creation to go beyond the limit of activities of a single institute, aiming to provide an overview of materials science and induce topical innovations everywhere. The goal is to induce localized innovations everywhere. We present our efforts to realize data structure and data linkage including huge background knowledge, which is the base of machine learning and artificial intelligence.

*Keywords : Database; Data-driven; Data Structuring; Data Integration; Knowledge Base*

NIMS で公開しているデータベース MatNavi (<https://mits.nims.go.jp/>) は、遠く過去を振り返ると、NIMS の前身である金属材料技術研究所 (National Institute for Materials, NRIM) の原子力材料、超伝導材料、構造材料 (クリープ、疲労、宇宙材料関連強度および腐食)に関するプロジェクト、新技術開発事業団 (現 科学技術振興事業団(JST)) の高機能物質、研究情報のデータベース化事業を受け継ぎ、2003 年に一つの材料データ基盤として web 公開され、現在まで構築を続けてきた。この間のコンピュータ、データベース、通信技術の発展は、データベースの提供方法はもちろん、データ構造自体にも大きな影響を与え、巨大データになればなるほど、過去と現在の技術的な整合に苦勞し、一方では新しい技術の導入方法を模索してきたといえる。特に最近のデータ駆動型研究への対応は、データベースの在り方に、大きな変化をもたらした。ここでは、いくつかのトピックスを挙げて、最近の NIMS の取り組みを紹介する。

### (1) MDR XAFS データベース (<https://doi.org/10.48505/nims.1447>)

どのインフォマティクスにおいても良質なデータの確保は、その後の数理的なデータ処理の大前提であるが、容易ではないと考えられている。化学分析分野でもデータの流通・再利用を検討する動きは少なくないが、X 線吸収分光 (X-ray Absorption Fine Structure, XAFS) については、手法の性質上データの比較が必須であり、データ共有の声が高いため、NIMS の材料データリポジトリ (Materials Data Repository, MDR) を高度に利用したデータベース MDR XAFS DB の構築が進んでいる。ここでは、放射光施設や関連の大学から XAFS スペクトルデータを提供いただき、横断検索・一括ダウンロードなどができるような仕組みを構築した。データをそのまま登録するだけでは単なるオンラインストレージに過ぎず、解読不能なスペクトルが使うあてがないまま放置されてゆく傾向があるが、本取り組みでは機械可読なメタデータの付与、材料名の辞書による名寄せを実現し、機関の違いを感じることがない検索性が極めて高いデータベースを実現した<sup>1)</sup>。一旦こうした仕組みが出来上がると、同様な取り組みをしている外部のデータベースとの連携が可能になる。実際、HAXPES データベ

ス、XANES Bibliography などと連携し、内殻を俯瞰する知識基盤構築に向けて動き始めている。こうした統合データベースの考え方は、今後の化学分析におけるデータ駆動の基礎技術になると考えている。

## (2) 高分子データベース PoLyInfo の知識ベース化

PoLyInfo (<https://polymer.nims.go.jp/>) は、2023 年 1 月現在データ数では、ホモポリマー数 18,697、コポリマー数 7,736、物性ポイント数 494,837、文献データ数 21,055 の世界でもあまり例がない、まとまった高分子データを収録したデータベースである。平易な PoLyInfo と機械学習の解説は、ちょうど発刊される参考文献<sup>2)</sup>をご覧ください。くのが良いと思うが、その中で述べた通り PoLyInfo をデータ駆動研究に活用するには、いくつか課題があると考えている。PoLyInfo は主に一次構造を重視したデータベースであり、化学的に新しいポリマーの探索などには向いている反面、高次構造の機械可読化は十分ではない。また、複合材料といった産業上重要な領域になると、おそらく外部のデータベースのほうが優れていると考えている。こうした状況にあって本データベースは、これまでのデータ収集方針は維持しつつ、将来的な展開を試みている。言い換えるならば PoLyInfo の独自性は保ちつつ、連携できる部分では連携し拡張的にデータ駆動研究の基盤を作ることと考えている。具体的には

- ・ 生分解など、環境への負荷を低減するためのデータ提供  
生分解性を持つ細菌と分解対象のポリマーの組み合わせの定式化。細菌を含む生物科学系の外部の大きなデータベース（例えば NCB, The National Center for Biotechnology Information）および関連データベースと PoLyInfo との統合検索環境の構築と検証
- ・ バイオポリマーとの共創的研究基盤の構築  
Spider silk などバイオポリマーと PoLyInfo の合成ポリマーとの比較からの課題抽出など広い観点での材料科学の俯瞰。複合材料を含めた生体材料との親和性の向上。
- ・ データベースの知識基盤化  
PoLyInfo が持つ高分子物性や構造情報の網羅性を機械可読化することで高分子オントロジーを構築し、データを知識として扱えるようにすること  
を進めている。

最初に述べた通り、データベースは技術の進歩とともに形を変えてきた。情報爆発ともいわれた、大量のデータや情報の全世界的な発信は、明らかに現在のデータベースに新しい役割や再生を求めている。殊に日本はデータ活用において、一歩遅れを取っているという意見も多い。データを創出する側も、公開する側も、統合や連携を意識した新しい視点が求められているであろう。

## 参考文献

- 1) M. Ishii, et. al., “Integration of X-ray absorption fine structure databases for data-driven materials science”, to be published.
- 2) 高分子科学最近の進歩「PoLyInfo と機械学習」石井真史、高分子 Vol. 72、2 月号 (2023).

2:00 PM - 2:20 PM (Sat. Mar 25, 2023 1:00 PM - 3:40 PM K401)

[4K40104-07-3add] Incubation Time



## 材料分野の研究データ利活用における理想と課題

(物質・材料研究機構) ○篠田陽子

Ideals and Challenges in Utilizing Research Data in the Materials Science Field  
(National Institute for Materials Science) ○Yoko Shinoda<sup>1</sup>

The National Institute for Materials Science (NIMS) has been developing a materials data platform, DICE (<https://dice.nims.go.jp/>), which contributes to the promotion of data-driven research in materials science. The DICE is a system that handles materials data from their points of entry (data collection) to their points of exit (data service). In this presentation, I would like to introduce some examples of DICE and provide some topics on the utilization of research data based on the open-close strategy of data.

*Keywords : research data, data utilization, open data, share closed data, data platform*

物質・材料研究機構（NIMS）では材料分野におけるデータ駆動型研究の促進に貢献する材料データプラットフォーム DICE (<https://dice.nims.go.jp/>) の構築に取り組んでいる。DICE は材料データの入り口（収集）から出口（利活用）までを一貫して扱うシステムであり、取り扱う研究データの来歴や性質は多岐にわたる。

本発表では DICE での事例を紹介しつつ、データのオープン・クローズ戦略をふまえた研究データの利活用についての話題を提供したい。

## 計測分析プラットフォームの構築に向けて-共通データフォーマット構想と標準化-

(早稲田大学研究戦略センター) ○一村信吾

Toward construction of Measurement and Characterization Platform -Concept and standardization of common data format- (*Research Strategy Center, Waseda University*)

○Shingo Ichimura

What should we consider toward the construction of measurement/characterization platform? As the chair of the two committees relating measurement and characterization in JSPS (Japan Society for the Promotion of Science), I have discussed the subject with committee members from industry and academia. One of the outputs through the discussion is the concept of CPS-type combined/synthetic analysis. Realizing CPS-type analysis and building big data for MI/DX requires a data format common for various measurement instrument. We concluded that such a format must have sufficient information to reproduce the experiments from multiple aspects. We have developed an XML-based data structure called MaiML to realize this "independent availability" also implementing modern mechanisms such as falsification-proofing and partial encryption. MaiML format is now in the process of JIS standardization.

*Keywords : common data format, instruments for measurement/characterization, standardization*

計測分析技術は科学技術・産業技術の基盤的位置づけを持ち、関連分野の技術創造・革新に貢献している。計測技術、分析技術の開発がノーベル賞の受賞業績に繋がった例が多いことも、基盤的技術としての重要性を裏付けている。このように基盤性の高い計測分析技術において、今後はどのような特性を考慮すべきか、またその際に構築すべきプラットフォームとはどのようなものか。講演者は、日本学術振興会（学振）の「イノベーション創出に向けた計測分析プラットフォーム戦略の構築に関する研究開発専門委員会」（設置期間：2014年10月から2017年9月）、「計測分析プラットフォーム第193委員会」（設置期間：2018年4月～2023年3月）活動を展開して、計測分析機器のメーカーとユーザを含む産業界、アカデミアの委員の方々と議論を重ねてきた。

今後の計測分析を特徴付けるキーワードとして提示したのは、CPS（Cyber-Physical System）型複合計測分析である。これは、高度な材料機能の発現・制御に向けて適用が進むマルチスケール/マルチモーダルな計測分析結果を、サイバー空間に集約し統合解析する計測分析手法を意味する。我々は、それを実現するための基盤（プラットフォーム）として、計測分析装置のデータフォーマットの共通化を構想した。計測分析装置のデータ構造は各メーカー（システム担当者）固有の考え方に基づいて設計されているのが常であり、各社の秘密情報（ノウハウの対象）と言える。その制約を考慮し、各計測分析装置内部のデータ構造は秘密情報のままで、出力に際して共通データフォーマット形式にコンバートすることを目指した。

右の枠内に示したのは、委員会活動に並行して集めた産業界（計測分析装置ユーザ）の声をまとめたものである。化学材料などの MI (Materials Informatics) /DX (Digital Transformation) の推進では、様々な性能を持つ計測分析装置を駆使して得られたデータの活用が主要な位置を占める。機器種によらない共通データフォーマットの実現・採用は、計測分析におけるビッグデータ解析、AI 解析の推進に寄与するものとして産業界の期待が高いことが伺えよう。

MI/DX の推進に寄与する共通フォーマットには“多様な観点からみて実験を再現できるすべての情報が、アクセス可能な形でデータファイルに記載される”ことが必要である。我々は、独立可用性<sup>1)</sup>と概念定義したこの特性を備え、共通化に向けた五原則（信頼性、可視化、デジタル化、再現性、追跡可能性）を満たす共通データフォーマットを2つのプロジェクト展開<sup>2)</sup><sup>3)</sup>を通してXMLベースで開発した。さらに経済産業省の国際標準化事業<sup>4)</sup>において、改竄防止や部分的暗号化などの現代的機能を加え、MaiML (Measurement, Analysis, Instrument Markup Language) と名付けた計測分析データ共通フォーマットの標準化を推進中である。2023 年度中の JIS 標準化を目指し、その後の国際標準化 (ISO 化) も視野に入れている。

#### 計測分析装置ユーザ企業の声（現場ヒアリングから）

- 社内にデータは多くあるがフォーマットが異なるためAIを活用できない状態。実測データの解析に価値がある（シミュレーション結果とは別物）
- 現在データは個人の頭の中や手元に留まっており、活用の限界を感じている。既に自社でも動いているが、一部に限られている。
- 複数の計測分析機器のデータ共有に向けすでに議論を進めている。
- 計測分析機器のデータ連携については、独自の考えで先行中。
- 最終製品の測定だけでなく、材料、中間体などの物性データ、測定環境データ、製造装置データなどデータが多岐、多数。これらがつながる事が重要。
- データの共通化については、研究部門に比べて事業部門の方が保守的でガードが固く、オープン化が難しい
- データ共通化（外部との接続）はハードルは高いが、より広がる価値がある。データ共通化は協調領域、データ活用については競争領域として区別できる考えもある。

1) 「イノベーション創出に向けた計測分析プラットフォーム戦略の構築」に関する研究開発専門委員会報告書（日本学術振興会、平成 29 年 9 月）

2) 「ビッグデータ適応型の革新的検査評価技術の研究開発」最終報告書、NEDO No. 20190000000536 (2018)

3) 「省エネ製品開発の加速化に向けた複合計測分析システム研究開発事業」最終報告書、NEDO No. 20200000000670 (2020)

4) 戦略的国際標準化加速事業「計測分析装置の計測分析データ共通フォーマット及び共通位置合わせ技術に関する JIS 開発」（令和 2 年度～4 年度）。

3:30 PM - 3:40 PM (Sat. Mar 25, 2023 1:00 PM - 3:40 PM K401)

[4K40104-07-7add] Incubation Time

---

Symposium | Co-Innovation Program (CIP) | The role of thermal energy engineering in realization of low-carbon society

## [K405-4pm] The role of thermal energy engineering in realization of low-carbon society

Chair, Symposium organizer: Eiji Hosono, Koichi Tokudome, Michihiro Ohta, Nagatoshi Koumura

Sat. Mar 25, 2023 1:30 PM - 3:30 PM K405 (K405, Lecture Hall Bldg. [4F])

---

### [K405-4pm-01] Thermoelectric Materials with Low-environmental Impact for Waste Heat Power Generation Applications

○Michitaka Ohtaki<sup>1</sup> (1. Kyushu University)

1:30 PM - 2:20 PM

### [K405-4pm-02] Current Situations and Issues of Thermophysical Property Measurement of Solid Materials

○Megumi Akoshima<sup>1</sup> (1. AIST)

2:20 PM - 2:50 PM

### [K405-4pm-03] Overviewing the world of thermoelectric materials by materials informatics

○Yukari Katsura<sup>1,2</sup> (1. National Institute for Materials Science, 2. RIKEN)

2:50 PM - 3:20 PM

## 未利用廃熱エネルギー発電のための低環境負荷熱電変換材料の開発

(九州大院総理工<sup>1)</sup>) ○大瀧 倫卓<sup>1</sup>

Thermoelectric Materials with Low-environmental Impact for Waste Heat Power Generation Applications (<sup>1</sup>*Interdisciplinary Graduate School of Engineering Sciences, Kyushu University*)  
○Michitaka Ohtaki<sup>1</sup>

More than half of the primary energy supply in our society is rejected as unused waste heat. Thermoelectric power generation has been expected to be promising to utilize this huge potential energy resource we already have. However, a large-scale implementation of the thermoelectric conversion in our society apparently requires cost-effective and environment-friendly novel materials. This keynote talk reviews guiding principles and criteria for R&D of oxide- and sulfide-based thermoelectric materials aiming at power generation applications. *Keywords : Thermoelectric material; Oxide thermoelectric ceramics; Thermoelectric power generation; Waste heat energy harvesting; Bulk nanostructure*

現代社会が消費している一次エネルギー供給の半分以上は、有効利用されことなく廃熱として環境に捨てられている。この廃熱エネルギー量を単純に電力に換算すると、100 万 kW 級原発 180 基以上の年間発電量に相当し、昨今のエネルギー価格の高騰や我が国のエネルギー政策の将来像を鑑みれば、この膨大な潜在的エネルギー資源を座視することは到底できない。

廃熱エネルギーを利用する上での課題は、エネルギー源が広く分散し（平均的エネルギー密度が低い）、環境との温度差が一般に小さく（エクセルギーが小さい）、一言で言えばエネルギーとしての質が低いことである。熱電変換は、わずか 1 °C の温度差でも固体素子を用いて発電可能であり、低質の廃熱エネルギーを使い勝手のよい電気エネルギーに直接変換できるアップグレード技術として期待されている。しかし、未利用廃熱エネルギーを社会全体で有効利用するためには、熱電変換のエネルギー変換効率の向上に加えて、広範な社会実装を可能とする低環境負荷・資源戦略適合型の低コストな熱電変換材料が必要である。

地殻中の存在量が潤沢な酸素や硫黄を主要な構成元素とする酸化物・硫化物系熱電変換材料は、いずれも第 13 族元素が主要構成アニオンであるという共通点があり、社会実装の観点から有望性が高いが、その開発においては、かなり異なるアプローチが必要となる。例えば、両者はともに高温で固-気相平衡に基づくアニオン欠損を生じ、これによるキャリア濃度の変化や原子空孔によるフォノン散乱は熱電物性に大きく影響するが、実利用条件における対処方法は、様々な理由によって両者で大きく異なる。酸化物系と硫化物系の熱電変換材料としての開発指針を従来材料を含む他の材料系と比較しつつ、最近の材料開発動向や、発電応用を指向するうえでのいくつかの重要な観点について議論する。

## 固体材料の熱物性値計測の現状と課題

(産総研<sup>1</sup>) ○阿子島 めぐみ<sup>1</sup>

Current Situations and Issues of Thermophysical Property Measurement of Solid Materials  
(<sup>1</sup>National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

○Megumi Akoshima

Toward the realization of a low-carbon society, there is a need to solve social issues related to heat and energy and the reliability of the thermophysical properties used for this purpose. Typical thermophysical properties include coefficient of thermal expansion, thermal conductivity, thermal diffusivity, and specific heat capacity. There are various measurement methods and techniques, and it is important to select the measurement method/technique that is appropriate for the object to be measured and to master the use of the measurement device. The thermal diffusivity measurement by the flash method provides reliable results with two significant digits by simple operation, but National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST) has achieved reliability with three significant digits by examining methods to obtain material-specific thermal diffusivity through uniform pulse light intensity distribution, analysis considering heat loss, and pulse heating intensity dependence. The National Metrology Institute of Japan (NMIJ), AIST, has developed and provided various reference materials with this refined measurement technology.

*Keywords : Thermal Diffusivity, Thermal Conductivity, Laser Flash Method, Certified Reference Materials*

低炭素社会の実現に向けて、電子機器の高集積化、各種機器の省エネ設計、モビリティの電動化、住宅の快適性・エネルギー高効率化、発電所や工場、航空・宇宙産業における安全性やエネルギー効率を考慮した熱設計、地球環境問題などへの取り組みでは、熱物性値を使用したシミュレーションが行われ、温度と熱物性値から熱の流れを推測して新しい機種やシステムが設計・開発されている。また、熱的な機能を向上させた新しい材料の開発も盛んであり、その材料評価の一環で多様な熱物性値の測定が行われている。すなわち、低炭素化社会実現には、熱・エネルギーに関する社会課題解決とそれに利用される熱物性値の信頼性が必要とされている。

ここでは、主にバルクの固体材料の熱拡散率・熱伝導率の計測について紹介する。固体材料の熱伝導率は、フラッシュ法[2]で熱物性値は“熱に関わる物質の性質”であり、材料の基本特性である。代表的な熱物性値には、温度変化による伸び縮み易さを示す熱膨張率、熱の伝わり易さを示す熱伝導率や熱拡散率、温まり易さを示す比熱容量がある。これらの熱物性値の測定方法・測定技術は様々なものがあるが、信頼できる熱物性値を得るためには、測定対象に合った測定方法・測定技術の選択と測定装置の使いこなしが重要である。測定結果の信頼性は、測定方法や測定装置の健全性評価や標準物質を用いた妥当性評価で確認することができる。現在、産業技術総合研究所計量標準総合センターから各種熱物性値計測装置の妥当性評価や校正に使用できる標準物質を提供している[1]。

計測された熱拡散率に、比熱容量と密度を掛けて算出されることが多い。フラッシュ法では、レーザーまたはキセノンランプからのパルス光を厚さ  $d$  [mm]の平板試料の表面に照射して加熱し、照射面の反対面（裏面）の温度の時間変化を非接触の温度センサーで観測する。裏面の温度がどのくらい速く上昇したか（熱拡散時間 $\tau_0$  [s]）を測定することで熱拡散率 $\alpha$  [m<sup>2</sup>/s]= $d^2/\tau_0$ が得られる（図 1）。フラッシュ法は非接触・短時間測定という利点から広く普及している。測定原理が簡潔なので、測定装置に平板試料（例えば、直径 10 mm 厚さ 1 mm）をセットしてスイッチを押せば結果が得られるような実用測定装置を用いて簡単な測定を実施しても有効数字 2 桁の信頼性は容易に確保できる。一方で、社会課題解決に向けてはより高精度な測定結果が求められており、産総研では国家標準の開発の一貫として取り組んできた。熱拡散率は長さや時間の関数であるので、試料形状は整っていて厚さが十分な精度で（マイクロメートルの桁まで）測定する必要がある。また、熱拡散時間を求める際には、裏面温度の時間変化が理想に近い状態で得られるように、パルス光の強度分布の均一化や熱損失を考慮した理論式の適用等の最適化を検討してきた[3]。更に、熱拡散率は温度に依存する物性値であることから、測定が行われた温度も精確に定義することが重要である。パルス加熱によって測定中は試料の温度が変化するが、産総研では、パルス加熱強度を変えて得た熱拡散率をプロットしてパルス加熱強度ゼロに外挿することで温度上昇をさせない時の熱拡散率、すなわち測定条件の一つであるパルス加熱に依存しない材料固有の熱拡散率を求める方法を提案して実証した[4]（図 2）。このような精密な技術の積み上げにより、フラッシュ法による熱拡散率測定は拡張不確かさが約 3 %、すなわち有効数字 3 桁目までの信頼性確保を実現し[5]、標準物質も開発している。

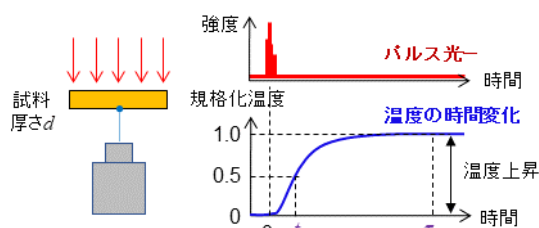


図 1 フラッシュ法の原理図

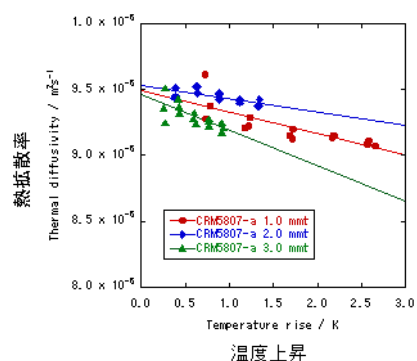


図 2 材料固有の熱拡散率を得る方法

- 1) <https://unit.aist.go.jp/qualmanmet/refmate/>
- 2) W. J. Parker, R. J. Jenkins, C. P. Butler, G. L. Abbott: J. Appl. Phys., 32 (1961) 1679-1684.
- 3) T. Baba, A. Ono, Measurement Science and Technol., 12 (2001) 2046-2063.
- 4) M. Akoshima, B. Hay, M. Neda, M. Grelard, Int. J. Thermophys., 34 (2013) 778-791.
- 5) M. Akoshima, T. Baba, Int. J. Thermophys., 27 (2006) 1189 - 1203.



## Materials Informatics による熱電変換材料の世界の俯瞰

(物材機構<sup>1</sup>・理研<sup>2</sup>) ○桂ゆかり<sup>1,2</sup>

Overviewing the world of thermoelectric materials by materials informatics (<sup>1</sup>National Institute for Materials Science, Japan, <sup>2</sup>RIKEN) ○Yukari Katsura<sup>1,2</sup>

The real value of materials informatics lies in the development of technologies by using large data sets. This reproduces long-held intuitions of researchers, and draws inspirations from them. The Starrydata project we launched in 2015 used our proprietary Starrydata2 web system<sup>1)</sup> to manually extract experimental data from the graphs in the paper. The costs for these data collectors were obtained from the project research funds and from joint research funds with companies that want to use open data. By releasing this data set as open data, it is being used to discover new concepts and develop data-driven property prediction techniques in the form of citations in papers by researchers around the world.

Thermoelectric conversion materials are capable of interconverting heat and electricity. High dimensionless figure of merit  $ZT=S^2\sigma T$  ( $S$ : Seebeck coefficient [V/K],  $\sigma$ : electrical resistivity [S/m],  $T$ : temperature [K]) results in high power generation/cooling efficiencies. Since the thermoelectric properties comprising  $ZT$  vary greatly depending on the carrier concentration and microstructure, it is difficult to select the promising base material by looking only at the  $ZT$  of a few samples. Therefore, in this presentation, we attempted to visualize the dependence of thermoelectric properties on the parent material by analyzing this data independently and to provide a bird's-eye view of the world of thermoelectric materials.

**Keywords :** Materials informatics; Database; Literature data mining; Thermoelectric materials

Materials Informatics の真価は、大規模データを活用することで研究者の長年の勘を再現したり、研究者のインスピレーションを引き出すことにある。我々が 2015 年に立ち上げた Starrydata プロジェクトでは、独自開発の Starrydata2 web システム<sup>1)</sup>を用いて、論文中のグラフから人の手によって実験データを抽出した。このデータ収集者らの人件費は、プロジェクト研究費やオープンデータを使用したい企業との共同研究費から得ている。このデータセットをオープンデータとして公開することで、世界の研究者の論文に引用される形で、新たなコンセプトの発見や、データ駆動型特性予測技術の開発に利用されている。

熱電変換材料は熱と電気を相互変換できる材料であり、無次元性能指数  $ZT=S^2\sigma T$  ( $S$ : ゼーベック係数[V/K],  $\sigma$ : 電気抵抗率[S/m],  $T$ : 温度[K]) が大きいほど発電効率および冷却効率が高くなる。だが  $ZT$  を構成する熱電特性はキャリア濃度や微細組織に大きく依存してばらつくため、少数試料の  $ZT$  だけを見ても、本質的に有望な母物質がどれか判断することは難しかった。そこで本講演ではこのデータを独自に解析することで、熱電特性の母物質依存性を可視化して、熱電材料の世界の俯瞰を試みた。

1) Data-driven analysis of electron relaxation times in PbTe-type thermoelectric materials, Y. Katsura, M. Kumagai, T. Kodani, M. Kaneshige, Y. Ando, S. Gunji, Y. Imai, H. Ouchi, K. Tobita, K. Kimura, K. Tsuda, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **2019**, 20, 511-520.

---

Symposium | Asian International Symposium | Asian International Symposium - Photochemistry -

## [C1311-4am] Asian International Symposium - Photochemistry -

Chair, Symposium organizer: Kiyoshi Miyata, Nobuhiro Yanai

Sat. Mar 25, 2023 9:00 AM - 11:40 AM C1311 (1311, Bldg. 13 [1F] + Zoom)

---

### [C1311-4am-01] Versatile Post-nanoencapsulation Strategy for the Preparation of Robust and Extremely Uniform TTA-UC Nanocapsules

○Jaehyuk Kim<sup>1</sup> (1. Pusan National University)

9:05 AM - 9:35 AM

### [C1311-4am-02] Lasing & spin-orbit coupled polariton condensates in lead halide perovskite microcavities

○Yongping Fu<sup>1</sup> (1. Peking University)

9:35 AM - 10:05 AM

### [C1311-4am-03] Single-molecule study of plasmon-induced chemical reactions of O<sub>2</sub> using photon STM

○Emiko Kazuma<sup>1,2</sup> (1. The University of Tokyo, 2. RIKEN)

10:05 AM - 10:25 AM

### [C1311-4am-04] Energy transfer between Singlet, triplet and doublet

○Feng Li<sup>1</sup> (1. Jilin University)

10:25 AM - 10:55 AM

### [C1311-4am-05] Delayed Fluorescence from Energetically Inverted Singlet and Triplet Excited States

○Naoya Aizawa<sup>1</sup> (1. Osaka University)

10:55 AM - 11:15 AM

### [C1311-4am-06] Highly Efficient invisible electroluminescence from organic light-emitting diodes

○Hajime Nakanotani<sup>1</sup> (1. Kyushu University)

11:15 AM - 11:35 AM

## Versatile Post-nanoencapsulation Strategy for the Preparation of Robust and Extremely Uniform TTA-UC Nanocapsules

(Department of Civil and Environmental Engineering, Pusan National University) ○  
Jaehyuk Kim

**Keywords:** Upconversion; Nanocapsule; Post-encapsulation; Hollow mesoporous silica; Triplet-fusion

Upconversion (UC) refers to a photon-frequency amplification process in which the energy absorbed by UC media from two or more incident photons is combined and one photon with higher energy is subsequently emitted, resulting in an anti-Stokes shift. In this presentation, some introductory stories about TTA-UC including basics of the photon energy, mechanisms involved in TTA-UC, achievement and limitation of previous researches will be given first. Then the latest development in our lab – novel vehicle for UC-oil laden hollow mesoporous silica and its biophotonic applications – will be introduced. The details are as bellows:

A recyclable, aqueous-phase functioning, and biocompatible photon upconverting system is developed. Hollow mesoporous silica microcapsules (HMSMs) with ordered radial mesochannels were employed, for the first time, as vehicles for the post-encapsulation of oil-phase triplet-triplet annihilation upconversion (TTA-UC), capable of homogeneous suspension in water. In-depth characterization of such upconverting oil-laden HMSMs (UC-HMSMs) showed that the mesoporous silica shells reversibly stabilized the encapsulated UC oil in water to allow efficient upconverted emission, even under aerated conditions. In addition, due to the lipophilic nature of the encapsulated UC oil, UC-HMSMs were found to be actively bound on the surface of human mesenchymal stem cells (hMSCs) without significant cytotoxicity, providing a new concept for integrating TTA-UC and stem-cell therapy. These findings reveal the great promise of UC-HMSMs to serve as ideal vehicles not only for ultralow-power in vivo imaging but also for stem cell labeling to facilitate the tracking of tumor cells in animal models.

## **Lasing & spin-orbit coupled polariton condensates in lead halide perovskite microcavities**

Spin-orbit coupling (SOC) is responsible for a range of spintronic and topological processes in condensed matter. Here, we show photonic analogs of SOC in exciton-polaritons and their condensates in microcavities composed of birefringent lead halide perovskite single crystals. The presence of crystalline anisotropy coupled with splitting in the optical cavity of the transverse electric and transverse magnetic modes gives rise to a non-Abelian gauge field, which can be described by the Rashba-Dresselhaus Hamiltonian near the degenerate points of the two polarization modes. With increasing density, the exciton-polaritons with pseudospin textures undergo phase transitions to competing condensates with orthogonal polarizations. Unlike their pure photonic counterparts, these exciton-polaritons and condensates inherit nonlinearity from their excitonic components and may serve as quantum simulators of many-body SOC processes.

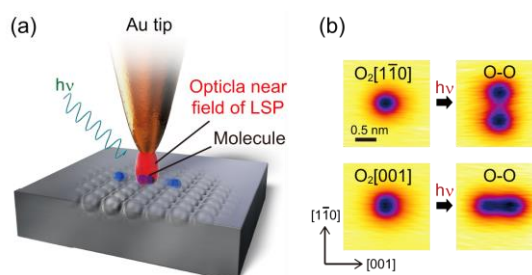
## Single-molecule study of plasmon-induced chemical reactions of O<sub>2</sub> using photon STM

(<sup>1</sup>*School of Engineering, The University of Tokyo*, <sup>2</sup>*SISL, RIKEN*) ○Emiko Kazuma<sup>1,2</sup>

**Keywords:** Plasmon chemistry; Single Molecule; STM; Oxygen; Metal surface

Chemical reactions induced by localized surface plasmons are attracting increased attention as novel photocatalytic reactions. Among many kinds of chemical reactions, the dissociation of O<sub>2</sub> molecules is an important initial step for plasmon-induced oxidation reactions. The mechanistic understanding of the dissociation of O<sub>2</sub> molecules is crucial not only for the precise control of oxidation reactions but also for the development of various heterogeneous oxidation catalysts. However, the reaction mechanism is still controversial because it is difficult to directly observe and analyze the chemical reactions in the plasmonic field strongly localized near the metal surface. To obtain mechanistic insights, we have developed an experimental method using a scanning tunneling microscope combined with light irradiation (photon STM) to investigate plasmon-induced chemical reactions at a single molecule level.<sup>1</sup>

O<sub>2</sub> molecules chemisorbed on Ag(110) have two different adsorption orientations and electronic structures. We observed and analyzed the dissociation of a single O<sub>2</sub> molecule induced by the plasmon generated at the nanogap between a plasmonic gold STM tip and the sample, and distinguished the difference in the reaction efficiency between two types of O<sub>2</sub> on Ag(110) (Fig. 1).<sup>2</sup> A combination of quantitative analysis by the STM and DFT calculations revealed that the hot carriers generated through the decay of LSP are transferred to the antibonding orbitals of O<sub>2</sub> strongly hybridized with the metal states. Furthermore, it was revealed that the dominant pathway and the reaction yield are determined by the electronic structures formed by the molecule–metal chemical interaction. The detailed mechanism for the dissociation of O<sub>2</sub> through the excitation of molecular vibration (O–O stretching mode) has also been unveiled at the single-molecule level.<sup>3,4</sup> In addition to the dissociation reaction, molecular motions such as rotation and hopping were also observed, which is accessible by the transfer of plasmonic hot carriers to adsorbate states.



**Figure 1** (a) Schematic illustration of the plasmon-induced catalytic reaction of a single O<sub>2</sub> molecule using the STM. (b) STM images of a O<sub>2</sub>[110] and O<sub>2</sub>[001] molecule before and after the plasmon excitation by light irradiation.

1) E. Kazuma, J. Jung, H. Ueba, M. Trenary, Y. Kim, *Science* **2018**, 360,521. 2) E. Kazuma, M. Lee, J. Jung, M. Trenary, Y. Kim, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 7960. 3) M. Lee, E. Kazuma, *et al*, *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, 12, 9868. 4) M. Lee, E. Kazuma, *et al*, *Chem. Rec.* **2022**, e202200011 (1-12).

## Energy transfer between Singlet, triplet and doublet

Feng Li<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup> State Key Laboratory of Supramolecular Structure and Materials, College of Chemistry, Jilin University, Qianjin Avenue 2699, Changchun, 130012, P. R. China

\*Corresponding author. Email: lifeng01@jlu.edu.cn

Förster-type and Dexter-type energy transfers between singlet, triplet and doublet excitons can effectively occur in principle. But there are almost no experimental results about the energy transfers due to the scarcity of stable luminescent radicals. Since we firstly reported the doublet electroluminescent in 2015, a number of stable luminescent radicals with high PLQEs have been developed. Using these radicals, we have studied the energy transfers between singlet, triplet and doublet excitons [1-3]. In this talk, I will show and discuss some experimental results about the energy transfers between singlet, triplet and doublet excitons.

[1] F. Li<sup>#</sup>, A.J. Gillett<sup>#</sup>, Q. Gu, J. Ding, Z. Chen, T.J.H. Hele, W.K. Myers, R.H. Friend\*, E.W. Evans\*, Singlet and triplet to doublet energy transfer: improving organic light-emitting diodes with radicals, *Nature communications*, 13 (2022) 2744.

[2] Y. Chen, L. Yang, Y. Huang, A. Obolda, A. Abdurahman, Z. Lu\*, F. Li\*, Highly Efficient Fluorescent Organic Light-Emitting Devices Using a Luminescent Radical as the Sensitizer, *The journal of physical chemistry letters*, 10 (2019) 48-51.

[3] J. Han, Y. Jiang, A. Obolda, P. Duan\*, F. Li\*, M. Liu\*, Doublet-Triplet Energy Transfer-Dominated Photon Upconversion, *The journal of physical chemistry letters*, 8 (2017) 5865-5870.

## Delayed Fluorescence from Energetically Inverted Singlet and Triplet Excited States

(<sup>1</sup>Graduate School of Engineering, Osaka University) ○Naoya Aizawa

**Keywords:** Delayed Fluorescence, Singlet–Triplet Inversion, Organic Light-Emitting Diodes

Hund's multiplicity rule states that for a given electronic configuration, a higher spin state has a lower energy. Rephrasing this rule for molecular excited states predicts a positive energy gap between singlet and triplet excited states ( $\Delta E_{ST}$ ). Although there is general agreement that  $\Delta E_{ST}$  must be positive, the potential for negative  $\Delta E_{ST}$  in phenalene analogues, such as cycl[3.3.3]azine and heptazine has been discussed during the last two decades<sup>1–4</sup>. Here we report a fluorescent heptazine analogue HzTFEX<sub>2</sub> that disobeys Hund's rule, possessing negative  $\Delta E_{ST}$  of –11 meV (Fig. 1)<sup>5</sup>. The energy inversion of the singlet and triplet excited states results in delayed fluorescence with short time constants of 0.2  $\mu$ s, which anomalously decrease with decreasing temperature due to the emissive singlet character of the lowest-energy excited state. Organic light-emitting diodes using this molecule exhibit a fast transient electroluminescence decay with a maximum external quantum efficiency of 17%, demonstrating potential implications for optoelectronic devices.

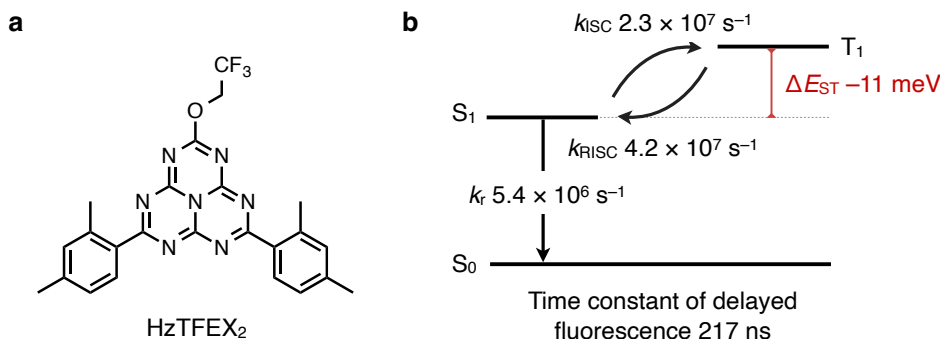


Fig. 1. **a**, Molecular Structure of HzTFEX<sub>2</sub>. **b**, Excited-state kinetics of HzTFEX<sub>2</sub> at 300 K.

- 1) W. Leupin, J. Wirz, *J. Am. Chem. Soc.* **1980**, *102*, 6068–6075.
- 2) W. Leupin, D. Magde, G. Persy, J. Wirz, *J. Am. Chem. Soc.* **1986**, *108*, 17–22.
- 3) J. Ehrmaier, E. J. Rabe, S. R. Pristash, K. L. Corp, C. W. Schlenker, A. L. Sobolewski, W. Domcke, *J. Phys. Chem. A* **2019**, *123*, 8099–8108.
- 4) P. de Silva, *J. Phys. Chem. Lett.* **2019**, *10*, 5674–5679.
- 5) N. Aizawa, Y.-J. Pu, Y. Harabuchi, A. Nihonyanagi, R. Ibuka, H. Inuzuka, B. Dhara, Y. Koyama, K. Nakayama, S. Maeda, F. Araoka, D. Miyajima, *Nature* **2022**, *609*, 502–506.

## Highly efficient invisible electroluminescence from organic light-emitting diodes

(Center for Organic Photonics and Electronics Research (OPERA), Kyushu University)

○Hajime Nakanotani

**Keywords:** near-infrared electroluminescence; organic light-emitting diodes; thermally-activated delayed fluorescence

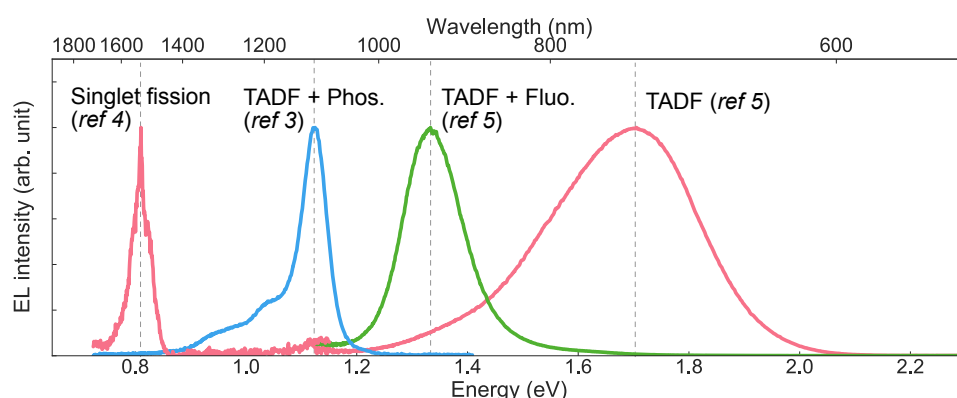
The research and development of organic light-emitting diodes (OLEDs) for uses beyond display technology has gained increasing attention in recent years, particularly in the realm of near-infrared (NIR) electroluminescence (EL) for applications such as sensing. While the study of NIR-OLEDs has progressed over the past two decades (1), the recent rapid increase in demand in the sensing market, and the successful commercialization of OLEDs in displays have led to attention being focused on material design for NIR emitters for high-performance NIR-OLEDs. By merging high-performance NIR-OLEDs with the accumulated know-how from OLED display technologies, such as ultra-fine-patterning, driver circuit design, and encapsulation technologies, high-performance NIR-OLEDs will enable advanced OLED applications beyond the display.

However, NIR-OLEDs suffer from low external EL quantum efficiency (EQE) caused by unbalanced charge trapping, aggregation-caused quenching, and accelerated nonradiative deactivation of the excitons through a vibration coupling with a ground state, *i.e.*, energy-gap law. Although recently developed NIR emitters, such as platinum complexes that emit beyond 900 nm (2), have achieved relatively high PLQYs of over 10%, highlighting the clear potential for creating highly efficient NIR-OLEDs, there are enormous challenges in designing highly efficient NIR emitters that can compete with the EL performance of visible OLEDs. In addition to developing highly-emissive materials, to maximize the EQE of NIR-OLEDs, harvesting of low-energy dark triplet excitons as EL before nonradiative decay is crucial because triplet excitons in organic emitters are directly generated in every charge carrier recombination event. Further, the practical use of NIR-OLEDs requires low power consumption, high operational stability, and high tolerances, such as elevated temperatures, in addition to high external EL quantum efficiency (EQE). Therefore, a comprehensive study on NIR-OLEDs is greatly needed.

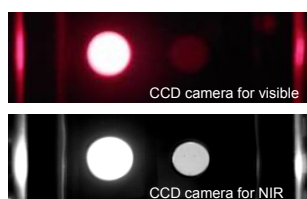
We have recently investigated triplet harvesting technologies, such as TADF assisted fluorescence and singlet fission, to demonstrate high-performance NIR-OLED for future applications (3-5). Specifically, we demonstrated a highly efficient NIR emitter exhibiting thermally activated delayed fluorescence (TADF) and its application to NIR-OLEDs. The designed NIR-TADF emitter, TPA-PZTCN, has a high photoluminescence quantum yield of over 40% with a peak wavelength at 729 nm even in a highly doped co-deposited film. The EL peak wavelength of the NIR-OLED is 734 nm with an EQE of over ten percent, which is



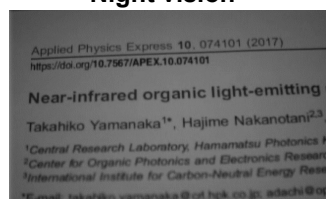
unprecedented among rare-metal-free NIR-OLEDs in this spectral range. Further, TPA-PZTCN can sensitize a deep NIR fluorophore to achieve a peak wavelength of approximately 900 nm, resulting in an EQE of over 1% in a TADF-sensitized NIR-OLED with high operational device durability ( $LT_{95} > 600$  hr.). In this presentation, we will discuss our ongoing efforts to develop highly efficient fluorescence-based NIR-OLEDs for practical applications (6).



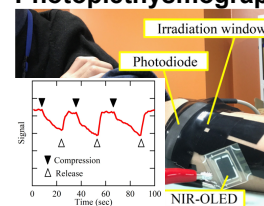
#### Invisible EL from OLED



#### Night vision



#### Photoplethysmography



1) Zampetti, A., et al., *Adv. Funct. Mater.*, **29**, 1807623 (2019). 2) Wei, Y.-C. et al., *Nat Photonics* **14**, 570–577 (2020). 3) Nagata, R., *Adv. Mater.*, **29**, 1604265 (2017). 4) Nagata, R., *Adv. Mater.*, **30**, 1801484 (2018). 5) Balijapalli, U. et al., *Angewandte Chemie Int Ed.*, **60**, 8477–8482 (2021). 6) Yamada, N., et al., (submitted)

---

Symposium | Special Program | Protein Dynamics Chemistry: Chemistry and Materials Science for Visualizing and Manipulating Protein Dynamics

## [K102-4am] Protein Dynamics Chemistry: Chemistry and Materials Science for Visualizing and Manipulating Protein Dynamics

Chair, Symposium organizer: Takahiro Muraoka, Tomohide Saio

Sat. Mar 25, 2023 9:00 AM - 11:40 AM K102 (K102, Lecture Hall Bldg. [1F])

---

### [K102-4am-01] Protein conformational changes investigated by NMR and ESR using paramagnetic lanthanide tags

○Tomohide Saio<sup>1</sup> (1. Tokushima University)

9:05 AM - 9:30 AM

### [K102-4am-02] Understanding the dynamic assembly of protein disulfide isomerase enzymes during their catalytic reaction

○Masaki Okumura<sup>1</sup> (1. FRIS, Tohoku univ.)

9:30 AM - 9:55 AM

### [K102-4am-03] Protein Folding Promotion by Kinetically Controlled Multistep Reactions

○Takahiro Muraoka<sup>1,2</sup> (1. Tokyo Univ. of Agriculture and Technology, 2. KISTEC)

9:55 AM - 10:20 AM

### [K102-4am-04] Visualizing the microscopic dynamics of biorelevant molecules by computational science

○Go Watanabe<sup>1,2</sup> (1. Kitasato Univ., 2. KISTEC)

10:20 AM - 10:45 AM

### [K102-4am-05] Regulation of Spatio-Temporal Dynamics of Engineered Proteins in Vivo and Its Application for Ischemic Stroke Therapy

○Itsuki Ajioka<sup>1,2</sup> (1. Tokyo Medical and Dental Univ., 2. KISTEC)

10:45 AM - 11:10 AM

### [K102-4am-06] Regulation of cytoskeletal dynamics in new neurons for brain regeneration

○Naoko Kaneko<sup>1</sup> (1. Doshisha University)

11:10 AM - 11:35 AM

## ランタノイドタグを用いた NMR と ESR によるタンパク質のコンフォメーション解析

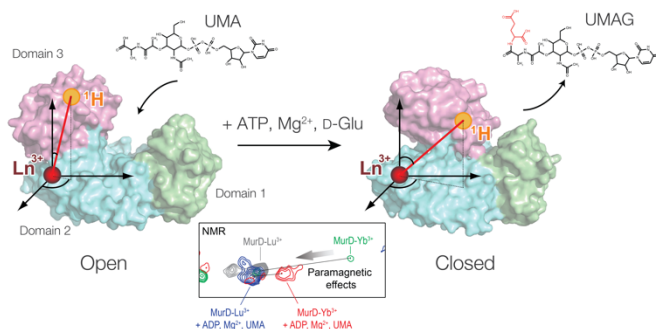
(徳島大先端酵素<sup>1)</sup> ○齋尾 智英<sup>1</sup>

Protein conformational changes investigated by NMR and ESR using paramagnetic lanthanide tags (<sup>1</sup>*Institute of Advanced Medical Sciences, Tokushima University*) ○Tomohide Saio<sup>1</sup>

Despite the dynamic features of proteins in solution, the structural variations and changes of proteins in solution are poorly understood mainly because of the scarcity of the effective methods in solution structural study. Here in this study, paramagnetic lanthanide ions were exploited in NMR and ESR to investigate conformational variations and changes of a multidomain protein enzyme MurD. Paramagnetic lanthanide ions were immobilized on specific sites in MurD by a lanthanide-binding tag. In NMR, long-range structural information extracted from the paramagnetic effects highlighted ligand-driven conformational change of the protein. In ESR, the distance distribution between the lanthanide ions attached on the two different sites in MurD showed conformational variation of MurD.

**Keywords :** Protein conformational change; multi-domain protein; paramagnetic lanthanide ion; NMR; ESR

溶液中のタンパク質は動的であり、リガンド結合や翻訳後修飾などによって立体構造を変化させながら機能している。そのため、タンパク質の動的な姿を理解することは、そのタンパク質のメカニズムの理解に重要であるが、一方で、有効な手法の欠如のために、多くのタンパク質について動的な特性は十分に理解されていない。本研究では、常磁性ランタノイドイオンを用いた NMR と ESR によって、マルチドメインタンパク質 MurD の構造解析に取り組んだ。NMR 実験では、常磁性効果に基づいて、リガンド結合に伴う MurD のコンフォメーション変化を解析した<sup>1)</sup>。ESR 実験では、2箇所に導入した常磁性ランタノイドイオン間の距離分布を計測することにより、マルチドメインタンパク質のコンフォメーション分布を解析した<sup>2)</sup>。



1) Ligand-driven conformational changes of MurD visualized by paramagnetic NMR. Saio T, Ogura K, Kumeta H, Kobashigawa Y, Shimizu K, Yokochi M, Kodama K, Yamaguchi H, Tsujishita H, Inagaki F. *Sci Rep.* **2015**, 5, 16685.

2) Conformational ensemble of a multidomain protein explored by Gd<sup>3+</sup> electron paramagnetic resonance. Saio T, Hiramatsu S, Asada M, Nakagawa H, Shimizu K, Kumeta H, Nakamura T, Ishimori K. *Biophys. J.* **2021**, 120, 2943-2951.

## 基質触媒における PDI 酵素群の動的会合体形成の理解

(東北大学際研<sup>1)</sup>) ○奥村 正樹<sup>1</sup>

Understanding the dynamic assembly of protein disulfide isomerase enzymes during their catalytic reaction (<sup>1</sup>*Frontier Research Institute for Interdisciplinary Sciences, Tohoku University*)○Masaki Okumura<sup>1</sup>

In mammalian cells, nearly one-third of nascent proteins are destined to insert into the endoplasmic reticulum (ER) where they undergo disulfide bond formation, isomerization and reduction with the aid of more than 20 members of the Protein Disulfide Isomerase (PDI) family (PDIs). One likely reason for the presence of such a high number of PDI family chaperone/enzyme is the need to deal with a wide variety of secretory proteins under various conditions to maintain protein homeostasis in the secretory pathway. Therefore, recent structural and physiological studies on the diverse proteostasis network constituted by PDIs have been extensively undertaken.

So far, we have been accumulating the molecular actions of PDI family members by an interdisciplinary approach such as crystallography, SAXS, NMR, and high-speed AFM<sup>1-2)</sup>. In this symposium, I introduce how the dynamic assembly of PDIs with distinct functions are regulated to guide client folding in the ER.

**Keywords :** PDI family; oxidative folding; structural dynamics

シャペロンや酵素は生理学的機能調節のため時折その会合状態を変調させ、環境に応答する。これまで小胞体内局在のフォールディング補助因子 PDI family の構造機能相関研究を進めた。近年ではこれら補助因子が自身の会合状態を変えることでフォールディング触媒に適した空間を創出し、基質のフォールディング状態を制御する反応場を提供することがわかった。異なる機能を持つ PDI family の動的会合体の形成機序について発表する。

1) A unique leucine-valine adhesive motif supports structure and function of protein disulfide isomerase P5 via dimerization. M. Okumura, S. Kanemura, M. Matsusaki, M. Kinoshita, T. Saio, D. Ito, C. Hirayama, H. Kumeta, M. Watabe, Y. Amagai, Y.H. Lee, S. Akiyama, K. Inaba K, *Structure*. **2021**, 29, 1357.

2) Dynamic assembly of protein disulfide isomerase in catalysis of oxidative folding. M. Okumura, K. Noi, S. Kanemura, M. Kinoshita, T. Saio, Y. Inoue, T. Hikima, S. Akiyama, T. Ogura, K. Inaba K, *Nat Chem Biol*. **2019**, 15, 499.

## 速度論効果を利用する多段階蛋白質フォールディング促進

(東農工大院工<sup>1</sup>・神奈川産技総研<sup>2</sup>) ○村岡 貴博<sup>1,2</sup>

Protein Folding Promotion by Kinetically Controlled Multistep Reactions (<sup>1</sup>*Graduate School of Engineering, Tokyo University of Agriculture and Technology*, <sup>2</sup>*Kanagawa Institute of Industrial Science and Technology*)○Takahiro Muraoka,<sup>1,2</sup>

Folding is a critical reaction of proteins to acquire the biological functions. In the oxidative protein folding, disulfide bond formation between the native cysteine pairs allows for folding to the native forms, while misfolded forms are produced by the disulfide bonding between non-native cysteine pairs. Therefore, promotion of not only disulfide bond formation but also its shuffling is important for encouraging the folding into the native forms. In this study, thiol-based synthetic protein folding promoters have been developed. Inspired by protein disulfide isomerase (PDI), an enzyme promoting oxidative protein folding, synthetic compounds bearing activated thiol units with enhanced nucleophilicity and oxidizability have been designed. These chemical characteristics of the thiol unit are effective for prompting the protein folding, which afforded the native form proteins with significantly high yields. Molecular design and biochemical characterizations of the thiol compounds will be presented.

**Keywords :** Thiol; Protein Folding; Kinetic Effect; Disulfide; Redox

タンパク質は生命活動の中心を担う生体高分子であり、近年では、医薬品開発の主要物質としても注目を集める。遺伝子改変技術や、計算科学など、タンパク質構造の精密エンジニアリングを可能にする生物学・物理学アプローチが進展しつつある。タンパク質の機能発現には、その立体構造が密接に関わる。立体構造形成（フォールディング）を制御、促進する技術は、遺伝子改変技術によって設計された一次構造を、計算科学で予測される三次構造へ導くものであり、目的の生化学的機能を得る上で必要不可欠である。我々は、タンパク質のフォールディングプロセスを有機化学的にとらえ、低分子化合物を基盤とする化学的なフォールディング促進技術の構築を目指している<sup>1)</sup>。

タンパク質フォールディングは、水素結合や疎水性相互作用などの非共有結合形成に加え、複数のシステイン残基を有する場合、共有結合であるジスルフィド(SS)結合形成を伴う。SS結合形成を伴うフォールディングは酸化的フォールディングと呼ばれ、SS結合を組むシステインペアによりタンパク質の立体構造は操作される。天然型システインペアによるSS結合形成は天然構造を与える一方、非天然型システインペアによるSS結合形成は非天然構造に導き、時に凝集体を形成する。SS結合を有するタンパク質は、抗体やインスリンなど多種に及び、その効率的なフォールディング促進は、学術、産業分野において重要である。

細胞内では、複数酵素が段階的に翻訳タンパク質に作用し、そのフォールディングを促進していることが近年報告されている<sup>2)</sup>。中でも、主に次の2つの素反応の連携が示されている。

i) SS 結合導入の促進 : ERp46 が触媒。粗雑ながらタンパク質に SS 結合を迅速に組み込む。

ii) SS 結合組替えの促進 : PDI が触媒。非天然型 SS 結合を天然型へと組み替える。

タンパク質が高濃度に密集する細胞内環境で酵素による多段階反応が行われており、我々はこの仕組みが、疎水部を表面露出した還元変性タンパク質の凝集を抑え、迅速なフォールディングを進めることに効果的であると着想した。つまり、ERp46 の作用により基質タンパク質を迅速に折り畳み、表面疎水性を低下させた後、PDI の作用により天然構造形成に至る多段階反応触媒の機序である。そこで本研究では、ERp46 と PDI それぞれ類似の作用を示す化合物を開発し、それらを連携させることで、凝集しやすい濃縮環境においてもフォールディングを促進する反応システムの構築を目指した。

Bovine Pancreas Trypsin Inhibitor (BPTI)をモデルタンパク質に用い、逆相 HPLC 分析によりフォールディング過程をモニターした。ERp46 模倣分子を加えたところ、添加後 1 分で還元変性体に対して迅速に SS 結合を導入する作用が観察されたが、殆どは非天然型へのジスルフィド結合の導入であった。PDI 模倣分子を用いたところ、ERp46 模倣分子と比較しゆっくりと還元変性体が減少し、60 分時点の天然構造収率が 66% まで向上した。興味深いことに、ERp46 模倣分子と PDI 模倣分子を段階的に加えることで、天然構造の収率が 98% まで飛躍的に向上し、両化合物の連携による相乗効果が示された。

次に、BPTI 濃度を 10 倍増加させた濃縮環境におけるフォールディング促進効果を評価した。還元変性体に対する PDI 模倣分子のみの添加では、反応開始直後に凝集体が形成された一方、ERp46 模倣分子添加では凝集が抑えられた。その後、PDI 模倣分子を添加すると、天然構造の収率が大きく向上した。単一化合物を用いる従来法に比べ、高い天然構造形成の収率だけでなく、高濃度条件でもフォールディングを促進する点で、本多段階反応システムの高い効果が示された。

1) S. Okada, M. Matsusaki, K. Arai, Y. Hidaka, K. Inaba, M. Okumura, T. Muraoka, *Chem. Commun.*, **55**, 759 (2019).

2) R. Kojima, M. Okumura, S. Masui, S. Kanemura, M. Inoue, M. Saiki, H. Yamaguchi, T. Hikima, M. Suzuki, S. Akiyama, K. Inaba, *Structure*, **22**, 431 (2014).

## 計算科学で生体関連分子のマイクロダイナミクスを視る

(北里大理<sup>1</sup>・KISTEC<sup>2</sup>) ○渡辺 豪<sup>1,2</sup>

Visualizing the microscopic dynamics of biorelevant molecules by computational science  
(<sup>1</sup>School of Science, Kitasato University, <sup>2</sup>KISTEC)

To understand the structure and function of biomolecules and artificial polymers possessing biocompatibility, it requires capturing those detailed dynamics at atomic or molecular level. All-atom molecular dynamics (MD) simulation is known as one of the useful tools to investigate the microscopic dynamics of the molecules. We present several important insights to elucidate the mechanism of function and related structural changes of biorelevant molecules by means of MD simulations.

**Keywords** : biomolecules; biocompatible polymer; molecular dynamics simulation

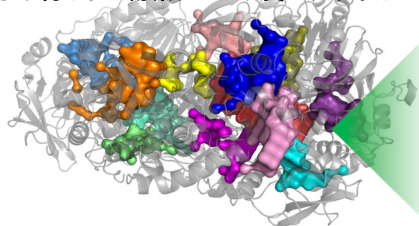
ポリペプチドや蛋白質などの生体分子、生体親和性を有する人工高分子材料において構造や機能を理解するためには、原子・分子レベルでのダイナミクスを詳細に捉える必要がある。その際の有用なツールの一つとして、分子動力学(MD)シミュレーションが挙げられる。特に、分子を構成する全ての原子をあらわに扱う全原子モデルを用いることで、各原子の動きを可視化できる。

例えば、巨大な酵素タンパク質における生成物や反応物の移動経路は、X線構造解析や生化学実験では明確にすることが困難であるが、MDシミュレーションを活用した自由エネルギー解析を基にして明らかにしている(下図)<sup>1)</sup>。

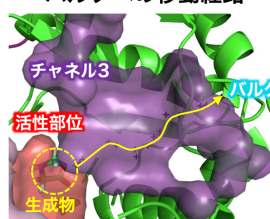
また、水中における超分子性ペプチドの自己集合化過程の追跡、集合構造の安定性評価をMDシミュレーションによって行ってきた<sup>2), 3)</sup>。

本講演では、全原子 MD シミュレーションを基盤とした計算科学的手法によって得られた、生体関連分子の機能発現機序の解明に関わる重要な知見を紹介する。

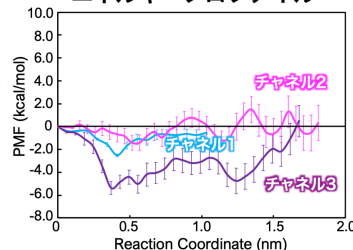
分子動力学シミュレーションと機械学習により得られた酵素タンパク質のチャンネル



生成物の活性部位からバルクへの移動経路



各移動経路における生成物のエネルギープロファイル



- 1) S. Yoneda, T. Saito, D. Nakajima, and G. Watanabe, *Proteins* **2021**, 89, 811.
- 2) A. Ishida, G. Watanabe, M. Oshikawa, I. Ajioka, and T. Muraoka, *Chem. Euro. J.* **2019**, 25, 13523.
- 3) A. Ishida, M. Oshikawa, G. Watanabe, H. Hiramatsu, N. Uchida, C. Hara, N. Kaneko, K. Sawamoto, T. Muraoka, and I. Ajioka, *Nat. Commun.* **2021**, 12, 6623.

## 蛋白質の生体内局所放出ダイナミクス制御と脳梗塞治療への展開

(医科歯科大・脳統合機能研究センター<sup>1</sup>・神奈川県立産業技術総合研究<sup>2</sup>) ○味岡 逸樹<sup>1,2</sup>

Regulation of Spatio-Temporal Dynamics of Engineered Proteins in Vivo and Its Application for Ischemic Stroke Therapy (<sup>1</sup>*Center for Brain Integration Research, Tokyo Medical and University*, <sup>2</sup>*Kanagawa Institute of Industrial Science and Technology (KISTEC)*) ○Itsuki Ajioka,<sup>1,2</sup>

Slow-releasing desired growth factors in the injured area is crucial for achieving cell-free regenerative therapy. Although chemically-crosslinked materials can regulate slow release, they become chemically-unidentified degradation products in vivo. For this reason, chemically-crosslinked materials face a problem in clinical application. In contrast, a self-assembling peptide hydrogel is widely used in clinical applications because of its biodegradability into chemically-identified non-toxic peptides. However, due to the requirement of incompatible molecular design for achieving growth factor binding and release, peptidic materials that slowly release growth factors for injured tissue regeneration have been critically lacking. In this session, I would like to introduce a novel peptidic supramolecular material that slowly releases growth factors and demonstrates therapeutic effects on the subacute-chronic phase of brain stroke, one of the most extensive unmet medical needs.

**Keywords :** *Self-assembling peptide; Ischemic Stroke; Regenerative Medicine; Cerebral Cortex; Angiogenesis*

セルフ再生医療を実現するためには、所望の成長因子を損傷領域局所で徐放させることが重要な技術基盤となる。化学架橋された材料は徐放性を調節することができるが、生体内での分解産物の分子構造同定が難しく、臨床応用が困難な状況である。一方、自己組織化ペプチド水素ゲルは、生体内での分解産物が元のペプチドに分解されるため、臨床応用に広く用いられている。しかし、成長因子の結合・放出を実現するためには、これら2つの相容れない機能を発揮する分子設計が要求されるため、損傷組織の再生促進を目的とした、成長因子を徐放するペプチド材料の開発は遅れている。本セッションでは、成長因子を徐放する新規超分子ペプチドゲルを紹介し、アンメットメディカルニーズの一つである亜急性期-慢性期の脳梗塞モデルマウスに対する治療効果を紹介する。

参考論文) Yaguchi A et al., Efficient protein incorporation and release by a jigsaw-shaped self-assembling peptide hydrogel for injured brain regeneration, *Nature Commun* 12:6623, 2021



## 傷害脳を再生するニューロンの細胞骨格ダイナミクス制御

(同志社大院脳科学<sup>1)</sup>) ○金子 奈穂子<sup>1</sup>

Regulation of cytoskeletal dynamics in new neurons for brain regeneration

(<sup>1</sup>Graduate School of Brain Science, Doshisha University) ○Naoko Kaneko<sup>1</sup>

In the adult brain, neurons are produced only in specific areas. The newly-generated immature neurons migrate rapidly within the mature brain tissue by actively changing the cytoskeleton of themselves and the glial cells in their migration pathway, and then mature at their final destination. Using a mouse model for ischemic stroke, we found that enhancing the neuronal migration toward the injured area led to efficient neuronal rewiring, suggesting that controlling neuronal migration is important for successful brain regeneration.

*Keywords : Cytoskeleton; Neuronal regeneration*

成熟した脳内では、特定の領域でしか新たな神経細胞（ニューロン）は産生されない。新しいニューロンは幼若な期間だけ移動能力があり、自身や移動経路に存在するグリア細胞の細胞骨格を活発に変化させて成熟した脳内を移動し、最終的な定着位置で成熟する<sup>1)</sup>。我々は、脳梗塞モデルマウスを用いて、新生ニューロンの傷害部へ移動を促進することにより、神経機能の再生効率が向上することを見出した<sup>2)</sup>。これらの結果から、新生ニューロンの移動制御は、脳傷害に対する再生医学的アプローチの確立に重要なステップであることが示唆される。

- 1) New neurons clear the path of astrocytic processes for their rapid migration in the adult brain. Kaneko N, Marín O, Koike M, Hirota Y, Uchiyama Y, Wu J, Lu Q, Tessier-Lavigne M, Alvarez-Buylla A, Okano H, Rubenstein J, Sawamoto K, *Neuron*. **2010**, 67, 213-23.
- 2) New neurons use Slit-Robo signaling to migrate through the glial meshwork and approach a lesion for functional regeneration. Kaneko N, Herranz-Pérez V\*, Otsuka T\*, Sano H\*, Ohno N\*, Omata T, Nguyen HB, Thai TQ, Nambu A, Kawaguchi Y, García-Verdugo JM, Sawamoto K., *Sci. Adv.* **2018**, 4, eaav0618.

---

Symposium | Special Program | Luminescence Chemistry Ensemble: New Developments in Luminescent Sensing for Super Smart Society

## [K102-4pm] Luminescence Chemistry Ensemble: New Developments in Luminescent Sensing for Super Smart Society

Chair, Symposium organizer: Jumpei Ueda, Junpey Yuasa, Shunpei Hitosugi, Suguru Ito, Toshikazu Ono, Yousuke Ooyama

Sat. Mar 25, 2023 1:00 PM - 3:40 PM K102 (K102, Lecture Hall Bldg. [1F])

---

### [K102-4pm-01] Development of luminochromic systems and film-type sensors based on excitation-driven complexes

○Kazuo Tanaka<sup>1</sup> (1. Kyoto University)

1:05 PM - 1:35 PM

### [K102-4pm-02] Electrofluorochromic Devices based on Photo-electro Functional Molecules

○Kazuki NAKAMURA<sup>1</sup> (1. Chiba University)

1:35 PM - 2:05 PM

### [K102-4pm-03] Static electricity luminescence sensing technology

○Kazuya Kikunaga<sup>1</sup> (1. AIST)

2:05 PM - 2:35 PM

### [K102-4pm-04] Development of pyrene-based bright probes for *in vivo* multi-photon excited fluorescence microscopy imaging

○Yosuke Niko<sup>1</sup> (1. Grad. Sch. of Int. Art. and Sci., Kochi Univ.)

2:35 PM - 3:05 PM

### [K102-4pm-05] Application of flexible infrared-emissive surface light source to biological sensing technology

○Ryo Nakabayashi<sup>1</sup>, Noriko Ueda<sup>1</sup>, Shusaku Kon<sup>1</sup> (1. KONICA MINOLTA, INC.)

3:05 PM - 3:35 PM

## 励起駆動型錯体を基盤とした発光クロミズム機構の構築とフィルムセンサーへの応用

(京大院地環・京大院工) ○田中一生

Development of luminochromic systems and film-type sensors based on excitation-driven complexes (Graduate School of Global Environmental Studies, Graduate School of Engineering, Kyoto University) ○Kazuo Tanaka

Sensor development is attracting attention as one of the post-organic EL technologies. In order to achieve this, it is essential to develop solid-state luminescent materials with environmental responsiveness. However, it is still difficult to design desired organic materials due to concentration quenching.

Heteroatom-containing molecules that can move in the excited state are called excitation-driven complexes. In this presentation, recent examples on the development of luminochromic systems based on boron-containing excitation-driven complexes and applications of these complex-containing polymers for film-type sensors.

**Keywords :** Boron Complex; Luminescent Chromism; Film-type Sensor; Aggregation-Induced Emission; Polymer

ポスト有機 EL の技術の一つとしてセンサー開発が注目を集めている。その実現のためには、固体状態で環境変化を鋭敏に察知して発光特性を変える材料の開発が重要となる。一方、一般的な有機発光色素は固体状態では濃度消光により発光特性が失われ易い。特に、濃度消光の原因となる非特異的な分子間相互作用を阻害するために立体的な置換基を発光団に導入するという汎用的な戦略が挙げられるが、環境応答性が低下することから、現状では固体発光性と環境応答性の両立は困難な場合が多い。

励起状態で動くヘテロ元素含有分子を励起駆動型錯体と呼ぶ。励起状態の分子の運動性は環境に大きく影響をうけるため、従来の材料では実現困難な弱い刺激を検知するセンシング材料を得ることができる。我々は最近、固体発光性の励起駆動型錯体を用いると様々な刺激応答性固体材料を得ることができた。本講演では、主にホウ素を含む機能性発光材料を紹介すると共に、これらを高分子化することでフィルムセンサーを得たので、それらの設計について説明する。



1) Concept of Excitation-Driven Boron Complexes and Their Applications for Functional Luminescent Materials, Gon, M.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2019**, 92(1), 7–18.

## 光・電気化学機能分子によるエレクトロフルオロクロミックデバイス

(千葉大院工) ○中村一希

Electrofluorochromic Devices by Using Photo-Electrochemical Functional Materials  
(Graduate School of Engineering, Chiba University) ○Kazuki Nakamura

Electrofluorochromism is a phenomenon that controls photoluminescence through a change in the redox states of functional molecules, metal complexes, polymeric films, etc. Electrofluorochromic materials are considered prospective innovative materials because they can convert electrical input into intuitive visual signals. The electrofluorochromic reactions are mainly caused by energy/electron transfer process between redox active moiety and luminescent moiety. In this paper, the EFC devices investigated by our group will be introduced. **Keywords :** *Electrofluorochromism; Photoluminescence; Redox reaction; Energy transfer;*

電気化学的な酸化還元によって発光性（発光強度・発光波長）が変化する現象をエレクトロフルオロクロミズム（EFC）と呼び、化学・バイオセンサーや表示媒体などへの応用が期待されている。EFCは、物質の電子状態の変化や電子・エネルギー移動などによって引き起こされ、二電極系のシンプルな構成での電気化学素子構築が可能である。我々はこれまで、エレクトロクロミック（EC）材料と発光材料を組み合わせることで、電気化学的刺激により吸収や発光特性を多様に制御する電気化学デバイスを構築してきた。これらのデバイスでは、発光分子から着色状態EC分子への励起エネルギー移動を電気化学反応により制御することで光学特性の制御を可能とした。本発表では、複数の発光分子とEC分子の混合系において、発光波長（発光色）を酸化還元反応によって制御可能なEFCデバイス（Fig. 1）に関して紹介する<sup>2,3)</sup>。

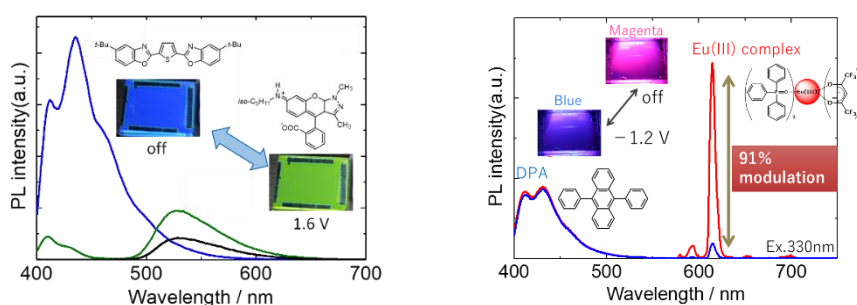


Fig. 1 Electrochemical luminescence control by controlling excitation energy transfer between luminescent materials and EC molecules.

- 1) Electrochemical photoluminescence modulation of functional materials and their electrochemical devices, K. Nakamura, K. Kanazawa, N. Kobayashi, *J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev.*, **2022**, 50, 100486.
- 2) Electrochemical control of luminescence color using luminescent leuco dye derivatives, K. Nakamura, N. Yanagawa, N. Kobayashi, *J. Soc. Inf. Display*, **2022**, 30, 15.
- 3) Magenta-Blue Electrofluorochromic Device Incorporating Eu (III) Complex, Anthracene Derivative, and Viologen Molecule, K. Nakamura, N. Yanagawa, N. Kobayashi, *Materials*, **2022**, 15, 5202.

## 目に見えない静電気の発光センシング技術

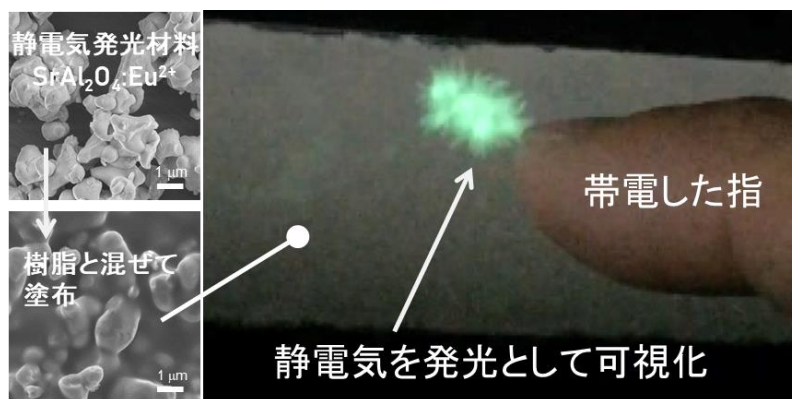
(産総研) ○菊永 和也

Static electricity luminescence sensing technology (*National Institute of Advanced Industrial Science and Technology*) ○Kazuuya Kikunaga

Invisible static electricity may be a source of malfunction of electronic components and even cause explosion and fire. So far, there have been no reports on luminescent materials being responsive to low-energy charges under atmospheric pressure. We have reported on the technology of luminescence sensing of charge using  $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Eu}^{2+}$  luminescent material<sup>1,2)</sup>. The light-emitting particles are the smallest sensors existing in the world that emit light when charges are detected without requiring a power source. In this study, we introduce luminescence sensing technology targeting static electricity using such luminescent materials.

**Keywords :** Static electricity; luminescence; sensing; Visualization; Charge

目に見えない静電気は電子部品の故障、爆発や火災の原因になる。これまで大気圧下で低エネルギーの電荷に反応して発光する蛍光体の報告はなかった。そこで様々な蛍光体と電荷の関係を調査したところ、コロナ放電照射に伴って高輝度で発光する蛍光体(静電気発光材料:  $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Eu}^{2+}$ )を発見した<sup>1,2)</sup>。このような発光材料は粒径が数  $\mu\text{m}$  であり、電源を必要とせずに電荷を検知して光を出力することができる世界最小の電荷検出センサーである。この微粒子を塗布することで対象物にセンサー機能を持たせることが可能である。本講演ではこのような発光材料を使用して、静電気を対象とした発光センシング技術について報告する。また静電気発光は高電圧環境にも関係が深い現象であり、静電気発光を用いた新たなセンシング技術の可能性についても紹介する。



- 1) Demonstration of Static Electricity Induced Luminescence has been reported. K. Kikunaga and N. Terasaki, *Sci. Rep.* **2022**, 12, 8524.
- 2) 産総研プレスリリース：目に見えない静電気分布を発光させることにより直接的な可視化に成功(2022/6/2) [https://www.aist.go.jp/aist\\_j/press\\_release/pr2022/pr20220602/pr20220602.html](https://www.aist.go.jp/aist_j/press_release/pr2022/pr20220602/pr20220602.html)

## 高輝度ピレン誘導体の開発と *in vivo* 多光子蛍光イメージングへの応用

(高知大院総合<sup>1)</sup>) ○仁子 陽輔<sup>1</sup>

Development of pyrene-based bright probes for *in vivo* multi-photon excited fluorescence microscopy imaging (<sup>1</sup>*Graduate School of Integrated Arts and Sciences Kochi University*)

○Yosuke Niko<sup>1</sup>

*In vivo* fluorescence imaging enables visualizing the living cells, tissues, and organs in model animals with high spatio-temporal resolution. However, what can be observed through the technique strongly depends on the performance of the fluorescent probes in use. In this presentation, the author will introduce recently developed bright probes based on pyrene and their application to *in vivo* imaging.

**Keywords :** Pyrene; *In vivo* Fluorescence Imaging; Multi-photon Fluorescence Microscopy

生体 (*in vivo*) 蛍光イメージングとは、動物体内の生きた細胞・組織・器官を低侵襲的に観察する技術の一つであり、その高い時空間分解能や複数の標的を同時に捉える多重染色性に特徴がある。中でも、蛍光プローブ（蛍光色素）の二光子吸収（あるいは多光子吸収）現象を利用した *in vivo* 二光子励起蛍光イメージング (*in vivo* 2PM) は生体深部の観察に優れ、さらに三次元的光学断層像の取得を可能とすることから、生物・医学分野を中心に広く利用されている。

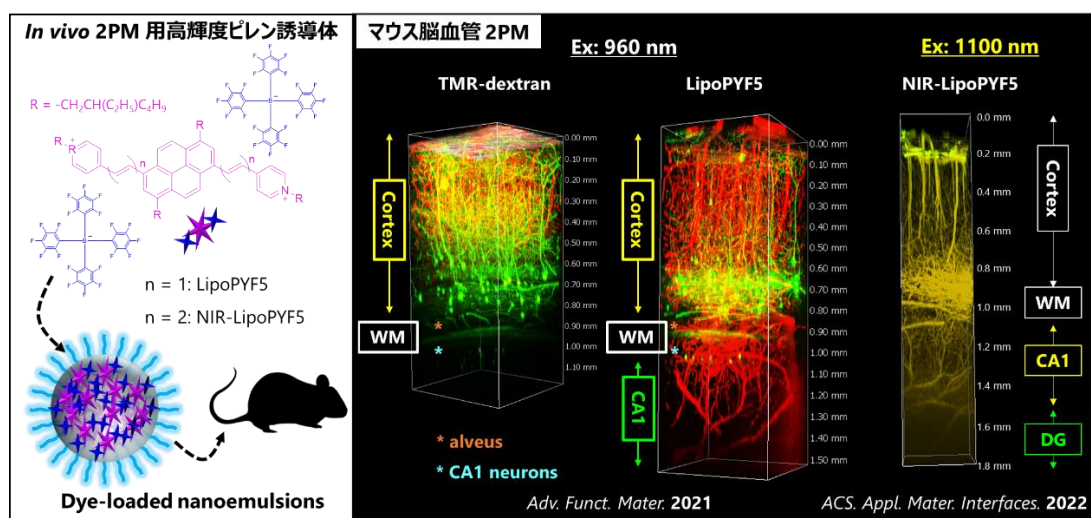
*In vivo* 2PM における重要な標的の一つとして、マウスの脳血管が挙げられる<sup>1)</sup>。脳血管動態（血流速度、血管径など）は近傍の神経活性に応じて変化することが知られており、それらを詳細に観察する技術を開発することは神経-血管相互作用の理解とそれに関連する神経疾患や虚血性脳梗塞、悪性腫瘍等の病態解明、および治療法開発に繋がると期待されている。しかし、従来の *in vivo* 2PM ではマウスの脳新皮質領域（脳表面から 0.8 mm 程度）の血管を観察することができても、記憶・学習を司る海馬領域 (> 1.0 mm) の血管を観察することは非常に難しい。仮に観察できたとしても、1 画像を取得するのに 1 秒以上かかってしまう (< 1 frame/s (fps)) 場合が多く、血管動態の観察に十分な時間分解能を得られない点に問題がある。

上記の問題を解決するためのアプローチの一つとして、『高輝度な蛍光プローブを開発・利用する』ことが挙げられる。高輝度なプローブを用いることで、生体深部に侵達した微弱な励起レーザー光でも十分な蛍光シグナルを得ることができ、観察深度が向上すると予想される。特に、生体組織透過性が高い > 900 nm の領域で高い輝度（＝二光子励起発光効率：二光子吸収断面積×蛍光量子収率）を示し、さらに検出器の高感度帯で蛍光を放射できる色素を集積させた新規蛍光プローブが得られれば、*in vivo* 2PM における観察深度や時間分解能を飛躍的に向上できると期待される。

本講演者はこれまで、ピレンを基盤とした様々な *in vivo* 2PM 用高輝度蛍光プローブを開発してきた（下図参照）。2021 年には、ジカチオン性ピレン誘導体 LipoPYF5 を開発した<sup>2)</sup>。LipoPYF5 は、*in vivo* 2PM に汎用されるテトラメチルローダミン (TMR)



誘導体と比較して 25 倍以上の輝度を有することが明らかになっており、また汎用の蛍光検出器 (GaAsP) の高感度帯にマッチした赤色蛍光を示す。同色素を高密度集積したナノエマルジョンを作成し、マウスに静脈投与することで、マウス脳表面から約 1.5 mm の血管を可視化することに成功した。また、レゾナントスキャナーを用いた高速イメージング (120 fps) を実施したところ、最深で脳表面から 1.1 mm の血管を観察することができ、当時世界で初めて、2PM によるマウス脳海馬 CA1 域の血流を直接観察することに成功した。なお、TMR を用いた場合の観察深度は 0.6~0.8 mm 程度であり、したがって本成果は高輝度蛍光プローブの開発・利用が *in vivo* 2PM の性能 (観察深度・時間分解能) の向上に対する重要なアプローチであることを支持している。2022 年には、生体透過性の高い第二近赤外光 (1100 nm) で効率的な二光子励起発光性を示すピレン誘導体 NIR-LipoPYF5 を開発した。同色素を高密度集積したナノエマルジョンを作成し、マウスへと静脈投与することで、神経新生の場である海馬歯状回領域 (脳表面から約 1.8 mm) の血管の観察に成功した他、海馬 CA1 領域 (1.1~1.5 mm 程度) 全層の毛細血管を明瞭に描出することにも成功している<sup>3)</sup>。



本講演者はこれまでに、上記した脳血管に加え、骨髄や皮膚組織など、様々なものを標的とした *in vivo* 2PM を実施してきた。本講演では、これまでに開発してきたピレンを基盤とした蛍光プローブとそれらを活用した *in vivo* イメージング、そして今後の展望について紹介したい。

- 1) K. Kisler, D. Lazic, M. D. Sweeney, S. Plunkett, M. El Khatib, S. A. Vinogradov, D. A. Boas, S. Sakadži, B. V. Zlokovic, *Nat. Protoc* 2018, 13, 1377.
- 2) M. Takezaki, R. Kawakami, S. Onishi, Y. Suzuki, J. Kawamata, T. Imamura, S. Hadano, S. Watanabe, Y. Niko, *Adv. Funct. Mater.* 2021, 31, 1.
- 3) H. Matsuura, R. Kawakami, M. Ise, M. Hoshihara, Y. Minami, K. Yatsuzuka, T. Tsuda, M. Murakami, Y. Suzuki, J. Kawamata, T. Imamura, S. Hadano, S. Watanabe, Y. Niko, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2022, 14, 404810.

## 近赤外発光フレキシブル面光源の生体センシング技術への応用

(コニカミノルタ株式会社) ○中林亮・植田則子・金周作

Application of flexible infrared-emissive surface light source to biological sensing technology  
(KONICA MINOLTA, INC.) ○Ryo Nakabayashi, Noriko Ueda, Shusaku Kon

Near-infrared (NIR) light has been used as the light sources of biological sensing including pulse oximeters owing to its excellent permeability for biological tissues. Organic light-emitting diode (OLED) possess great potential for biological sensing because of its thinness, high flexibility, and low joule heating. However, the application of OLEDs in those fields remains difficult due to the low quantum efficiency of the OLEDs emitting NIR light, and the elevated voltage under a high output condition.

In this work, we developed a NIR-light emitting flexible area light source by the combination of a newly developed organic film emitting NIR light and our commercially available flexible OLED panel emitting red light. This light source can convert red (630 nm) light to NIR (761 nm, 799 nm, or 834 nm) light. In this presentation, we report the properties of the light source and the application using it in the field of biological sensing.

**Keywords :** Organic semiconductor devices; Near-infrared; Down-conversion; Biological sensing

近赤外光は高い生体透過性を有しており、パルスオキシメーターなど生体センシング用の光源に用いられている。一方で、有機 EL は薄さ、柔軟性、低い熱発生などの特性から、生体センシングにおける新たな価値を秘めているが、近赤外発光では量子収率の低下、高出力時の駆動電圧上昇や素子寿命の低下などの課題があった。

そこで我々は新規開発した近赤外発光フィルムと、既に商品化している赤色発光フレキシブル有機 EL パネルを組み合わせることで、近赤外発光フレキシブル面光源を開発した。また、開発したフレキシブル面光源は 3 種類の近赤外発光フィルムを使い分けることで、630 nm の有機 EL の赤色光をそれぞれ 761 nm, 799 nm, 834 nm の光にダウンコンバートすることが可能である。本発表では、開発した近赤外発光フレキシブル面光源の特徴と生体センシング分野における展開について報告する。

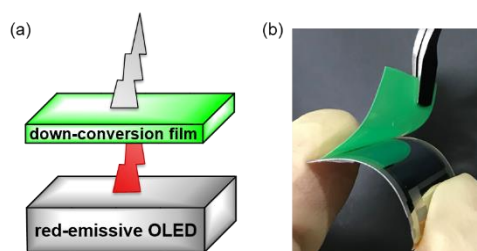


Fig.1 (a) Illustration and (b) picture of a near-infrared flexible surface light source by down-conversion film and red-emissive OLED.

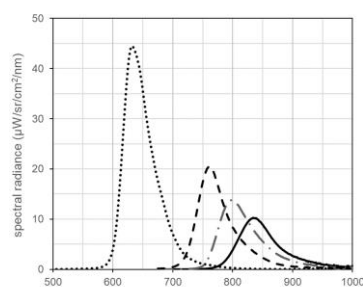


Fig.2 Emission spectra of red-emissive OLED (· · ·) and red-emissive OLED covered with film A (- - -), B (- · -), and C (-) at 17.8 mA/cm<sup>2</sup>.