

日本—V4 国際共同研究「先端材料」 2023 年度 年次報告書	
研究課題名（和文）	新常態社会に資する原子レベルで構造デザインしたカーボン系材料の開発
研究課題名（英文）	Atomic design of carbon-based materials for new normal society
日本側研究代表者氏名	西原 洋知
所属・役職	東北大学 材料科学高等研究所・教授
研究期間	2021 年 11 月 1 日 ～ 2024 年 10 月 31 日

1. 日本側の研究実施体制

氏名	所属機関・部局・役職	役割
西原 洋知	東北大学・材料科学高等研究所・教授	研究の総括
吉井 丈晴	東北大学・多元物質科学研究所・助教	カーボン材料の分析
中辻 博貴	東北大学・多元物質科学研究所・助教	八二カム調製
余 唯	東北大学・材料科学高等研究所・助教	エネルギー貯蔵
Kritin Pirabul	東北大学・多元物質科学研究所・博士課程 3 年生	グラフェン被覆
刘 宏宇	東北大学・多元物質科学研究所・博士課程 3 年生	多孔体の調製
千田 晃生	東北大学・多元物質科学研究所・博士課程 2 年生	カーボン材料の触媒応用

2. 日本側研究チームの研究目標及び計画概要

これまでに得られた成果として以下の論文発表を行う。(1) 炭素材料中の窒素種の新しいバルク分析手法として、超高温昇温脱離法を提案。(2) 表面修飾シリカ上でのグラフェン成長機構の解明。(3) 植物由来八二カム材料を用いた高性能フィルター・マスクの開発。(4)

持続可能な鋳型を用いたグラフェンメソスポンジ（GMS）の合成。(5) GMS の微粒子化とコロイド安定性。研究進捗の目標は以下に示す通りである。(1) B ドープカーボンの基礎物性評価。(2) S ドープカーボンの機能評価。(3) シリカ鋳型真球状 GMS の機能評価。(4) コロナウィルスを分解可能な新触媒の開発。

3. 日本側研究チームの実施概要

2023 年度は、WP2, WP3, WP5 とサンプル交換を活発に行い、各国のチームとは毎月のウェブ会議を重ねつつ、緊密に連携を取りながら共同研究を進展させた。日本チームにおける主要な成果を以下に列記する。

- ・炭素材料中の窒素種の新しいバルク分析手法として超高温昇温脱離法を完成させ論文発表した。
- ・表面被覆シリカ上でのグラフェン成長のメカニズムを解明し論文発表した。
- ・植物由来ハニカム材料を用いた高性能フィルター・マスクを開発して論文発表を行った。
- ・持続可能な鋳型を用いたグラフェンメソスポンジ製造法を確立し論文発表を行った。

GMS の微粒子化とコロイド安定化については WP3 と連携しつつ進めているが、まだ時間がかかっている。さらに、B ドープカーボンの基礎物性評価、S ドープカーボンの機能評価、シリカ鋳型真球状 GMS の機能評価、コロナウィルスを分解可能な新触媒の開発に関しても検討を重ね、それぞれ研究が進捗した。

2023 年度は以下の 4 つの実施項目、並びに他グループとの連携を行った。

T1.1 原子レベルで構造デザインしたヘテロ原子ドープカーボンの合成

WP4 との連携により確立した世界初の昇温脱離による炭素中窒素の定量・定性分析に関する論文投稿を共同で行った。窒素はカーボン材料中にて、ピロール型、ピリジン型、グラファイト型など異なる化学形態で存在しているが、従来の分析法とは異なり、昇温脱離を利用すればバルクで異なる窒素種の定量が可能となる。しかも、分析感度は 9ppm レベルまで可能であり、ニードルコークス等への応用も可能である。本成果に関する論文は、**Cell Press の Chem 誌から出版**された。B ドープ GMS 合成に関しては、再現性確保に時間を要したが、2024 年度中には論文投稿を目指す。

T1.2 原子レベルで構造デザインした機能性複合材料の合成

植物由来ハニカム材料を用いた超低圧力損失のフィルター材の開発および、これを利用した高通気性マスクの作製に関するデータを取りまとめ、論文の投稿を行った。微小開口ハニカム材の機械的強度と耐湿性を高め、マスク等への応用を目指した研究である。従来の不織布に比べ、圧力損失が 1/5 以下のフィルターを形成することができる。本成果に関する論文は、**ASC Applied Materials & Interfaces 誌に受理**されている。また、TMS 表面処理したシリカ表面におけるグラフェン成長のメカニズム解析に関するデータを纏めて論文投稿を行い、**Wiley の Small 誌より出版**された。グラフェンで均一被覆したシリカから調製した真球状 GMS の特異的物性についても検討を重ね、2023 年度末に論文を投稿した。高密度ペレットについては、2024 年度初旬に論文を投稿できる見込みである。

T1.3 先端カーボン系材料の持続可能な合成ルートの開拓

持続可能な鋳型材として CaCO_3 を利用した GMS の合成に関する検討を行った。このうち、 CaCO_3 を熱分解して得られる CaO 表面におけるメタンのグラフェンへの転換反応のメカニズム解明と、鋳型を除去して得られるカーボンの特異的な電解賦活の挙動に関する論文

は、**RSC の Green Chemistry 誌に受理**されている。さらに、このグラフェン生成反応を利用した GMS の合成に関する論文は、**Elsevier の Catalysis Today 誌から出版**された。

T1.4 原子レベルで構造デザインしたグラフェン類似物質の合成

2023 年度に、これまでブラックボックスであった $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 材料の原子レベルでの構造解析として、超高温昇温脱離による分析を行ったが、実験結果の精査に時間を要していた。このため、2024 年度前半で結果を纏め、論文投稿を行う予定である。

他 WP の研究への貢献

WP2、WP3、WP5 には GMS を提供し、複合材料の調製、溶媒分散性の検討、固体電解質を利用したキャパシタに関する研究を進めている。また、WP4 とは窒素含有カーボン材料を加熱した際に窒素種が分解・ガス化する過程を DFT 法にて理論計算する検討を共同で進め、**Chem 誌に共著論文を発表**した。