

大西 洋（教授（クロスアポイントメント*））（2021 年 11 月 1 日着任）

栗田 佳子（事務支援員）

*神戸大学大学院理学研究科

A-1) 専門領域：界面分子科学，触媒科学

A-2) 研究課題：

a) 有限厚さをもつ固液界面のオペランド計測：創／省エネルギーを支えるサイエンスの構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 創エネルギーと省エネルギーという社会ニーズに応えるために，高収率の半導体光触媒と低摩擦の潤滑油が最近 20 年のあいだに次々と開発されてきた。これら新材料をオペランド計測する手法に工夫をこらして有限の厚さ（1 μm –1 nm）をもつ液体–固体界面が機能を発現するしくみを理解する。液体分子と固体分子が接触する場所（分子論的な界面）でおきる現象と，分子論的な界面へ物質とエネルギーを入出力する場所（外界との接続領域）でおきる現象を同時に計測し一体として理解することの重要性を半導体光触媒（物質変換）と液体潤滑（エネルギー散逸）というケーススタディをとおして世界へ発信する。①電子励起状態にあるタンタル酸ナトリウム光触媒の量子化学シミュレーション②氷と不凍液体が接する界面をナノ力学計測するために原子間力顕微鏡を冷却する技術の開発が本年度の主な成果である。

B-1) 学術論文

R. MORIMOTO, H. URATANI, H. ONISHI and H. SATO, “Dopant Distributions and Band-Edge Positions in Sr-Doped NaTaO₃: A First-Principles Study,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **28(8)**, 5111–5118 (2026). DOI: 10.1039/D5CP04385A

H. URATANI and H. ONISHI, “Quantum-Chemical Molecular Dynamics Study of Polaron Formation in Perovskite NaTaO₃ as a Water-Splitting Photocatalyst,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27(28)**, 14748–14753 (2025). DOI: 10.1039/D5CP01859E

Z. LU, R. YANAGISAWA, S. MORIGUCHI, T. UEDA, K. NAKAMOTO, T. MINATO and H. ONISHI, “Frequency-Modulation AFM in Sub-Zero Antifreeze Liquid,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **64(5)**, 05SP05 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/adcccc

M. YANAGI, J. CASANOVA-CHÁFER, T. HARA, Y. H. CHEW, T. YOSHIDA, H. ONISHI, C. BITTENCOURT and N. ICHIKUNI, “Calcination-Driven Co⁴⁺ Incorporation in Hydrothermally Synthesized NaTaO₃,” *Chem. Lett.* **54(4)**, upaf053 (2025). DOI: 10.1093/chemle/upaf053

B-4) 招待講演

大西 洋, 「半導体光触媒による酸素生成反応：マイクロ電極計測と酸素拡散シミュレーションの融合」, 電気化学会北陸支部秋季大会, 富山大学, 富山, 2025 年 11 月.

大西 洋, 「半導体光触媒による水分分解反応：どうしてそんなに収率が高いのか？」, 日本学術会議公開シンポジウム「カーボンニュートラルに向けた水素の多面的な利活用～第1回水素を作る～」, 東京(ハイブリッド開催), 2025 年 8 月.

大西 洋,「非水液体中での原子間力顕微鏡 (AFM) 計測」, 埼玉大学, さいたま, 2025 年 6 月.

大西 洋,「表面科学研究者から見たトライボロジー」, 分子研研究会「トライボロジーの分子科学」, 岡崎, 2025 年 4 月.

H. ONISHI, “High-speed analysis of oxygen evolution kinetics in water using microamperometry,” 2nd RIST International Symposium: Carbon Value Science & Technology, Noda, March 2026.

H. ONISHI, “Transient Amperometry for Unveiling the Fundamental Nature of Water-Oxide Interactions in Photocatalysis,” 107th Workshop IUUSTA-ZCAM-UNIZAR Oxides for Energy Applications: Bridging Experiment and Theory to Understand Functionality, zaragoza (spain), July 2025.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

(社) 応用物理学会薄膜・表面物理分科会幹事 (2006–).

学会の組織委員等

33rd International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM33) 実行委員長 (2025–2026).

16th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-16) / 34th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM34) プログラム委員会委員長 (2025–2027).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構創発的研究支援事業アドバイザー (創発 AD) (2023–).

北海道大学触媒科学研究所運営協議会委員 (2024–).

学会誌編集委員

日本表面真空科学会電子ジャーナル委員 (2002–).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (A), 「半導体光触媒による水の 4 電子酸化: 水中オペランド計測によるミリ秒反応化学の解明」, 大西 洋 (2025 年度–2028 年度).

科研費基盤研究 (S), 「境界潤滑の科学–添加剤吸着層の構造・物性に基づく低摩擦現象の本質的理解」 (代表者: 平山朋子), 大西 洋 (研究分担者) (2023 年度–2027 年度).

C) 研究活動の課題と展望

【光触媒】水–光触媒界面ですすむ物質変換に焦点を絞った研究を展開していく。従来の光触媒ダイナミクス研究はフェムト秒からマイクロ秒で進む電子のうごき (電子励起と電荷分離) に注目してきた。有限の厚さをもつ水–光触媒界面で物質輸送を含むミリ秒の反応化学の解明をめざす。

【潤滑油】液体–固体界面 (不凍液–氷界面と潤滑油–固体界面) におけるエネルギー散逸の鍵となる分子運動性を定量評価するために原子間力顕微鏡を用いたナノ力学計測を進めていく。