



【講座・研究室名】 反応解析学講座・量子化学研究室
 《キャッチコピー》 ～ 化学反応を理論と計算で予測する ～
 【担当教員】 (理学研究院)



教授 武次 徹也



准教授 小林 正人



助教 岩佐 豪

【研究室の目標】

電子状態計算に基づき化学反応機構とダイナミクスを調べる理論計算スキームの確立を目指し、IRC を超えた反応経路動力学、ab initio MD 法、先進電子状態理論、インフォーマティクス、近接場分光理論などの理論・プログラム開発を進めています。さらに実験研究と連携し、光反応機構解明や元素戦略に基づく触媒提案などの課題に取り組んでいます。

【主な研究テーマ】

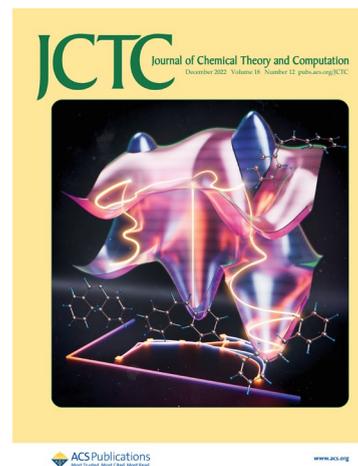
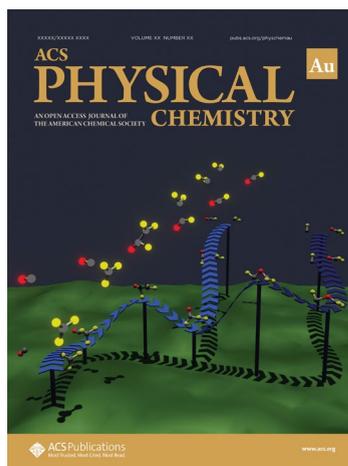
光化学反応経路・ダイナミクス解明のための新しい分子理論開発
 理論計算化学が先導する元素戦略ベースの触媒提案

【主な授業科目】 分子化学 A (分子理論化学)、実践的計算化学

【大学院生数】 修士 11名、博士 6名

【教育・研究成果】

<学生 activity>アンビシャス博士人材フェローシップ3名、DX博士人材フェローシップ2名、スマート物質科学を拓くアンビシャスプログラム2名、<受賞>2022 HPC Innovation Excellence Awards (Lyalin特任准教授)、化学系学協会北海道支部2023年冬季研究発表会で優秀講演賞 (口頭発表部門) (高井範行B4) <主な外部資金>JST CREST (武次教授)、JST未来社会創造研究 (武次教授)、JST さきがけ (岩佐助教) など、<プレス発表> 1件、<論文数> 原著論文21報、総説・解説 2報、著書 3編



【代表的な発表論文・著書】

K. Oda, T. Tsutsumi, S. Keshavamurthy, K. Furuya, P. B. Armentrout, and T. Taketsugu, "Dynamically hidden reaction paths in the reaction of $\text{CF}_3^+ + \text{CO}$," *ACS Physical Chemistry Au*, **2022**, 2, 388.

S. Ebisawa, T. Tsutsumi, and T. Taketsugu, "Extension of Natural Reaction Orbital Approach to Multiconfigurational Wavefunctions," *J. Chem. Phys.*, **2022**, 157, 084118.

T. Tsutsumi, Y. Ono, and T. Taketsugu, "Multi-State Energy Landscape for Photoreaction of Stilbene and Dimethylstilbene," *J. Chem. Theory Comput.*, **2022**, 18, 7483.

K. Toda, Y. Hirose, E. Kazuma, Y. Kim, T. Taketsugu, and T. Iwasa, "Excited states of metal-adsorbed dimethyl disulfide: A TDDFT study with cluster model," *J. Phys. Chem. A*, **2022**, 126, 4191.

小林正人, 米山亮, 能條小夜子, 田代啓介, 武次徹也 「アニーリング計算機と機械学習を用いた高精度電子相関計算法の開発」 *J. Comput. Chem. Jpn.*, **2023**, 21, 96.



【講座・研究室名】 反応解析学講座・理論化学研究室
 【キャッチコピー】 ～ 理解と予測が先導する化学の実現 ～

【担当教員】 (理学研究院)



教授 前田 理



助教 原 潤 祐

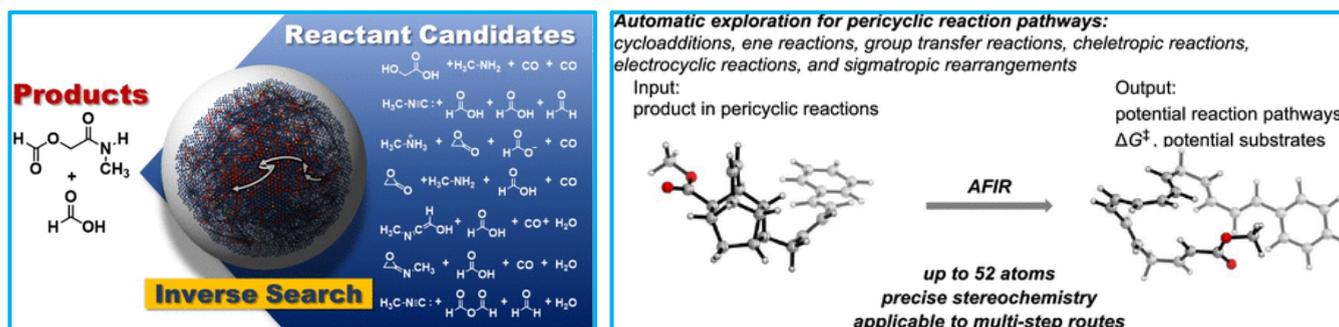
【研究室の目標】

理論化学研究室では、量子化学計算を駆使し、反応経路ネットワークに基づく反応・物性の系統的理解、反応経路自動探索による未知の化学反応予測、バーチャル配位子アシストスクリーニングを用いた触媒探索などに取り組んでいます。

【主な研究テーマ】

反応経路自動探索法による化学反応の理解と予測

バーチャル配位子アシストスクリーニングを用いた触媒探索



【主な授業科目】

分子理論化学 (量子化学研究室および触媒理論研究室との分担)

【大学院生数】 修士 11名、博士 7名

【教育・研究成果】

<学生 activity> 日本学術振興会DC1 1名、DX博士人材フェローシップ 2名、アンビシャス博士人材フェローシップ 3名

<受賞> 第37回化学反応討論会ベストポスター賞 (D2 伊藤琢磨)、第37回化学反応討論会ベストポスター賞 (D2 名畑孝志)、第16回分子化学討論会優秀ポスター賞 (D2 岡田拓明)

<主な外部資金> WPI-ICReDD (前田教授)、JST-ERATO (前田教授)、JST-CREST (高橋准教授) など、

<論文数> 原著論文 24報、総説 1報

【代表的な発表論文・著書】

1. T. Mita, H. Takano, H. Hayashi, W. Kanna, Y. Harabuchi, K. N. Houk, S. Maeda, Prediction of High-Yielding Single-Step or Cascade Pericyclic Reactions for the Synthesis of Complex Synthetic Targets., *J. Am. Chem. Soc.*, **2022**, *144*, 22985-23000.
2. H. Takano, H. Katsuyama, H. Hayashi, W. Kanna, Y. Harabuchi, S. Maeda, T. Mita, A theory-driven synthesis of symmetric and unsymmetric 1, 2-bis (diphenylphosphino) ethane analogues via radical difunctionalization of ethylene., *Nat. Commun.*, **2022**, *13*, 7034.
3. H. Hayashi, H. Katsuyama, H. Takano, Y. Harabuchi, S. Maeda, T. Mita, In silico reaction screening with difluorocarbene for N-difluoroalkylative dearomatization of pyridines., *Nat. Synth.*, **2022**, *1*, 804-814.
4. N. Aizawa, Y.-J. Pu, Y. Harabuchi, A. Nihonyanagi, R. Ibuka, H. Inuzuka, B. Dhara, Y. Koyama, K.-i. Nakayama, S. Maeda, F. Araoka, D. Miyajima, Delayed fluorescence from inverted singlet and triplet excited states., *Nature*, **2022**, *609*, 502-506.
5. Y. Sumiya, Y. Harabuchi, Y. Nagata, S. Maeda, Quantum chemical calculations to trace back reaction paths for the prediction of reactants., *JACS Au*, **2022**, *2*, 1181-1188.



【講座・研究室名】 反応解析学講座・物理化学研究室
 《キャッチコピー》 ～新しいエネルギー変換プロセスの開拓～

【担当教員】 (理学研究院・国際連携機構 ISP)



教授 村越 敬
(理学研究院)



講師 福島 知宏
(理学研究院)



助教 周 睿風
(国際連携機構 ISP)



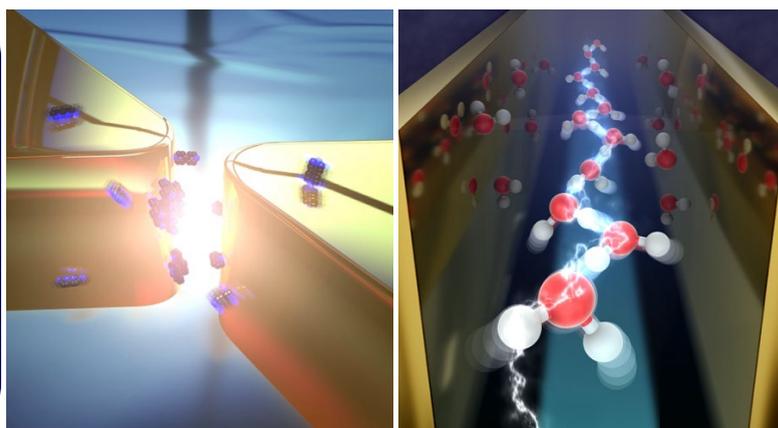
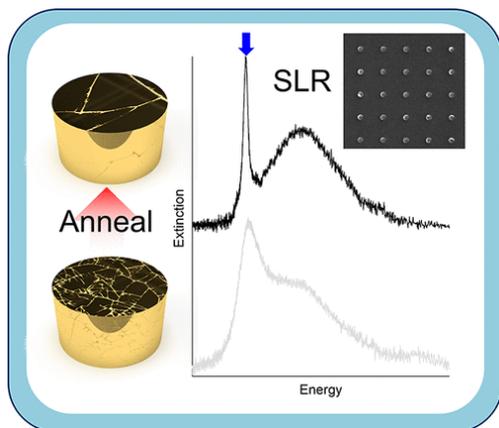
助教 高橋 幸裕
(理学研究院)
R4.6.30 転出

【研究室の目標】

物理化学をベースにナノからメソスコピック領域にある無機・有機材料の新規合成、及び物性開拓を行っています。これにより、電子・光・イオンの流れを自在に制御する系を創出し、既存の物質系の性質に縛られないエネルギーの極限利用を実現する学理を追求しています。

【主な研究テーマ】

電気化学界面の高精度幾何構造決定と超高感度分光計測
 電気化学手法を駆使した新規光物質相の創成、及び精密制御



【主な授業科目】

分子化学(先端物理化学)、マイクロ・ナノ化学、基礎物理化学特論

【大学院生数】

修士 5名、博士 3名 (R5.5現在)

【教育・研究成果】

<学生 activity>学振特別研究員 2名、優秀学生発表賞 (国内 3件)

<主な外部資金>JST未来社会創造事業(村越教授)、科研費・基盤B(村越教授)、科研費・萌芽(村越教授)など

<論文数>原著論文 5報、総説・解説 3報

【代表的な発表論文・著書】

N. Oyamada, H. Minamimoto, K. Murakoshi "Room-Temperature Molecular Manipulation via Plasmonic Trapping at Electrified Interfaces" *J. Am. Chem. Soc.*, 144, 2755 (2022).

T. Fukushima, D. Ashizawa, K. Murakoshi "Rapid Detection of Donor-dependent Photocatalytic Hydrogen Evolution by NMR Spectroscopy" *RSC Adv.*, 12, 12967-12970 (2022).

T. Fukushima, S. Yoshimitsu, K. Murakoshi "Inherent Promotion of Ionic Conductivity via Collective Vibrational Strong Coupling of Water with the Vacuum Electromagnetic Field" *J. Am. Chem. Soc.*, 144, 27, 12177-12183 (2022).

S. Oikawa, H. Minamimoto, K. Murakoshi "Low-Temperature Annealing of Plasmonic Metal Arrays for Improved Light Confinement" *J. Phys. Chem. C*, 126, 1188 (2022).



【講座・研究室名】 反応解析学講座・分析化学研究室
 《キャッチコピー》 ～ 光による電子状態の変調と反応場の創成 ～

【担当教員】 (理学研究院)



教授 上野 貢生



准教授 龍崎 奏



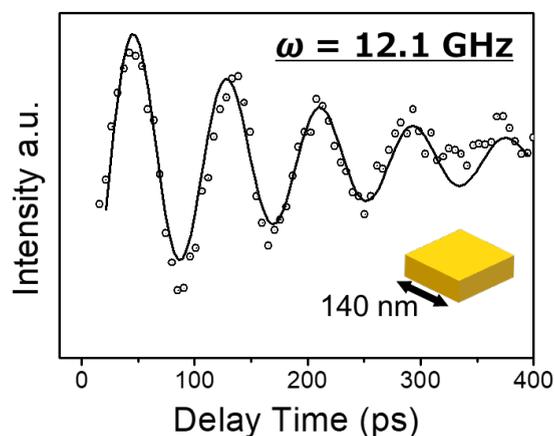
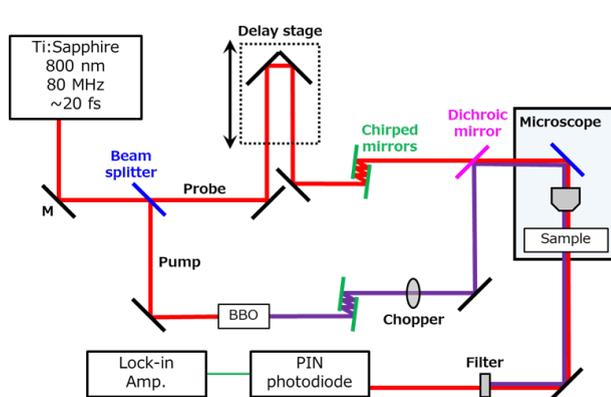
助教 今枝 佳祐

【研究室の目標】

分析化学研究室では、ナノ空間における強い光場によって分子の電子状態や振動緩和のダイナミクスを制御するとともに、ナノ構造により促進される光化学反応の素過程を時間分解レーザー分光計測により解明する研究に取り組んでいます。

【主な研究テーマ】

- 赤外プラズモンによる振動緩和ダイナミクスの制御と振動分光
- 2次元層状化合物の光物性
- 近接場カップリングによるプラズモンダイナミクスの制御
- プラズモンと励起子強結合光反応系の超高速ダイナミクス
- 1粒子/1分子解析技術を用いたナノバイオデバイス



【主な授業科目】 分子化学(光化学)、マイクロ・ナノ化学

【大学院生数】 博士 1名, 修士 13名 (R5.10現在)

【教育・研究成果】

<主な外部資金> 科研費・学術変革A (代表 上野教授)、科研費・基盤研究 B (代表 上野教授)、科研費・基盤研究A (分担 上野教授)、科研費・基盤研究B (分担 上野教授)、科研費・学術変革A (分担 上野教授)、基盤研究B (代表 龍崎准教授)、科研費・基盤研究B (分担 今枝助教)、若手研究 (代表 今枝助教) <論文数> 原著論文 4報、Proceedings 1報

【代表的な発表論文・著書】

P. P. F. da Rosa, Y. Kitagawa, S. Shoji, H. Oyama, K. Imaeda, N. Nakayama, K. Fushimi, H. Uekusa, K. Ueno, H. Goto, Y. Hasegawa, "Preparation of photonic molecular trains via soft crystal polymerization of lanthanide complexes", *Nat. Commun.*, **2022**, *13*, 3660-1-8.

H. Ago, S. Okada, Y. Miyata, K. Matsuda, M. Koshino, K. Ueno, K. Nagashio, "Science of 2.5 dimensional materials: paradigm shift of materials science toward future social innovation", *Sci. Technol. Adv. Mater.* **2022**, *23*, 275-299.

C. Kojima, A. Noguchi, T. Nagai, K.-I. Yuyama, S. Fujii, Sho; K. Ueno, N. Oyamada, K. Murakoshi, T. Shoji, Y. Tsuboi, "Generation of ultralong liposome tubes by membrane fusion beneath a laser-induced micro bubble on gold surfaces", *ACS Omega*, **2022**, *7*, 13120-13127.

H. Takeuchi, J. Yue, K. Imaeda, K. Ueno, "Near-field spectral properties and ultrafast dynamics of coupled plasmonic nanostructures", *Proceedings of the 2022 Conference on Lasers and Electro-Optics Pacific Rim*, **2022**, doi.org/10.1364/CLEOPR.2022.P_CM16_12.



【講座・研究室名】 反応制御学講座・反応有機化学研究室
 《チャッチコピー》 ～ 効率的な反応・新しい構造を通して化学をより面白く！ ～

【担当教員】 (工学研究院)



准教授 仙北 久典



准教授 猪熊 泰英



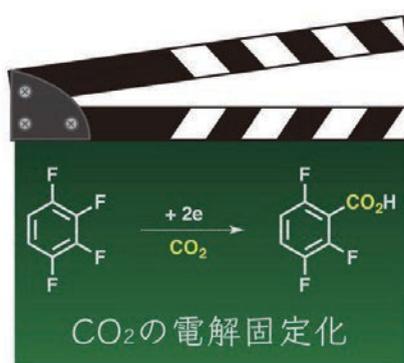
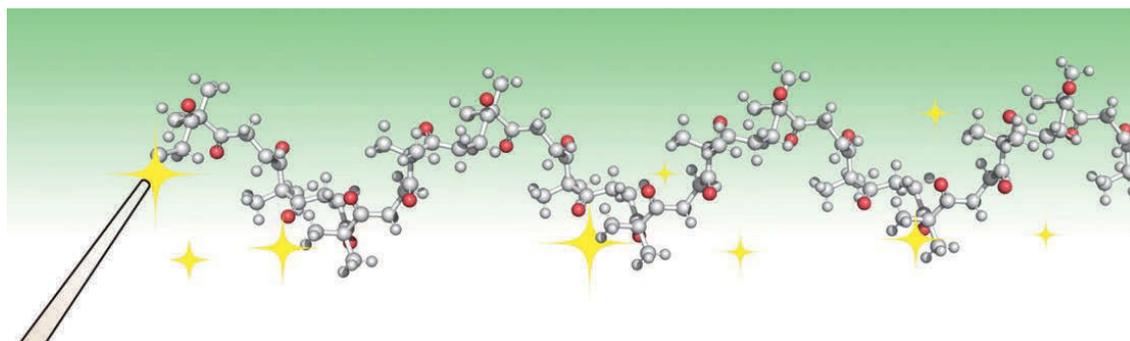
助教 米田 友貴

【研究室の目標】

- ・ 構造有機化学を主軸とした機能性分子の合成と構造解析。
- ・ 電子移動反応を利用する効率的分子変換反応（有機電解反応）と二酸化炭素の電解固定化反応。

【主な研究テーマ】

カルボニル化学の新展開・美しい分子構造の構築と構造解析・環縮小ポルフィリノイドの化学・機械学習と有機化学の融合・有機電解合成・二酸化炭素の電解固定化反応による有用カルボン酸の合成



【主な授業科目】 化学 II, 有機化学 I, 有機化学 III, 応用化学学生実験 V, 有機合成化学, 超分子化学

【大学院生数】 博士 3 名、修士 4 名 (R4.5現在)

【教育・研究成果】

<主な外部資金>、基盤研究 (B)、創発的研究支援事業、挑戦的研究 (萌芽) (猪熊准教授)、基盤研究 (C) (仙北准教授)
 <論文数> 原著論文数 8 報

【代表的な発表論文・著書】

Y. Inaba, J. Yang, Y. Kakibayashi, T. Yoneda, Y. Ide, Y. Hijikata, J. Pirillo, R. Saha, J. L. Sessler, Y. Inokuma, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202301460.

Y. Ide, Y. Manabe, Y. Inaba, Y. Kinoshita, J. Pirillo, Y. Hijikata, T. Yoneda, K. I. Shivakumar, S. Tanaka, H. Asakawa, Y. Inokuma, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 9848-9854.

H. Senboku, M. Hayama, H. Matsuno, *Beilstein J. Org. Chem.* **2022**, *18*, 1040-1046.



【講座・研究室名】 反応制御学講座・有機元素化学研究室
 《キャッチコピー》 ～ 元素を活用して化学の世界を広げよう ～

【担当教員】 (工学研究院)



教授 伊藤 肇



准教授 石山 竜生



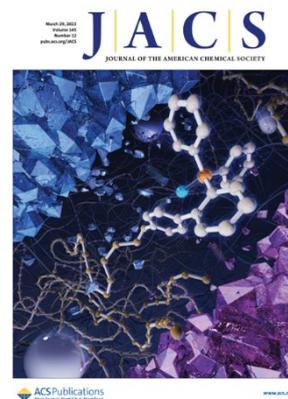
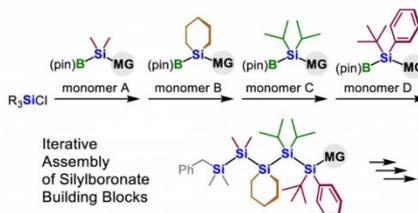
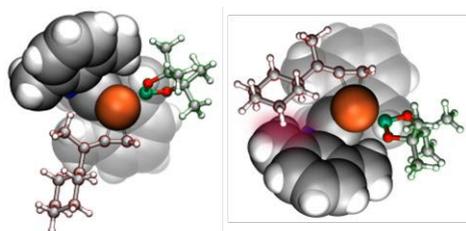
准教授 久保田 浩司

【研究室の目標】

さまざまな元素の特性を理解し、さらにその独創的な活用で、新しい有機合成反応、触媒反応ならびに機能性物質の創出を行う。有機金属化学、ヘテロ元素化学、錯体化学を包括した新たな学問領域である有機元素化学を研究すると共に、第一級の人材育成を目指す。

【主な研究テーマ】

遷移金属触媒をもちいた有機ホウ素・ケイ素化合物の合成と反応
 メカノケミストリーを用いた固体有機合成化学
 有機金属錯体の動的挙動の理解と機能性物質の開発



【主な授業科目】 有機化学Ⅰ、有機化学Ⅱ、実践的計算化学、有機化学特論、分子化学A（有機金属化学）

【大学院生数】 修士 9名、博士 8名（R4.5現在）

【教育・研究成果】

〈学生 activity〉口頭発表賞・国内 1件、〈主な外部資金〉科研費・基盤研究A(代表・伊藤教授)、科研費・挑戦的研究(開拓)(代表・伊藤教授)、JST・CREST(代表・伊藤教授)、科研費・基盤研究B(代表・久保田准教授)、科研費・学術変革領域研究デジタル有機合成(代表・久保田准教授)、JST・創発的研究支援事業(代表・久保田准教授)、科研費・基盤研究C(代表・石山准教授)〈論文〉原著論文 13 報

【代表的な発表論文・著書】

- [1] "Conformationally Fixed Chiral Bisphosphine Ligands by Steric Modulators on the Ligand Backbone: Selective Synthesis of Strained 1,2-Disubstituted Chiral cis-Cyclopropanes"
Iwamoto, H.; Ozawa, Y.; Hayashi, Y.; Imamoto, T.; Ito, H. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 10483–10494.
- [2] "Mechanochemistry-Directed Ligand Design: Development of a High-Performance Phosphine Ligand for Palladium-Catalyzed Mechanochemical Organoboron Cross-Coupling"
Seo, T.; Kubota, K.; Ito, H. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 6823–6837.
- [3] "Mechanochemically Generated Calcium-Based Heavy Grignard Reagents and Their Application to Carbon–Carbon Bond-Forming Reactions"
Gao, P.; Jiang, J.; Maeda, S.; Kubota, K.; Ito, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202207118.



【講座・研究室名】 反応制御学講座・有機合成化学研究室
 《キャッチコピー》 ～ 精密ナノマシン分子触媒を創る ～

【担当教員】 (工学研究院)



教授 大熊 毅



准教授 新井 則義



助教 百合野大雅

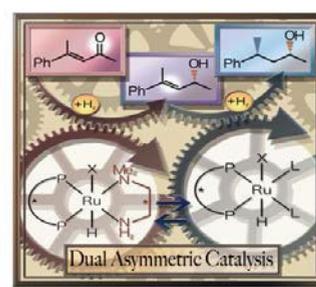
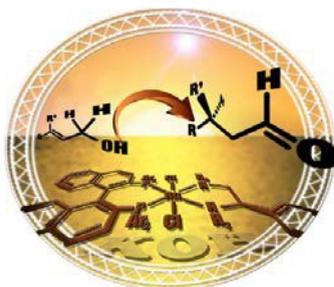
【研究室の目標】

人々の健康な暮らしに欠かせない医薬、農薬等の原料となる有機化合物を安価かつ大量に合成する反応の開発に取り組んでいます。「ナノサイズのロボット」と称される高機能性「分子触媒」を駆逐することで、画期的な分子構築メソッドの創出を目指します。医薬中間体の合成で、すでに実用化実績があります！

【主な研究テーマ】

- ・不斉水素化反応の開発：金属-配位子協働触媒
- ・触媒的イソシアノ化反応の開発：アンビデント求核剤の位置選択的付加
- ・シリルシアノメタラート錯体を触媒に用いる反応の開発：反応系中で可逆的に生成する金属種の利用
- ・新規アリル位・ベンジル位・プロパルギル位置置換反応の開発：大気下の簡便合成法
- ・不斉シアノ化反応の開発：ルテニウム-リチウム複合金属触媒
- ・光反応によるユニークな分子合成ルートの開発

精密ナノマシン「分子触媒」による有機合成



力量のある触媒的合成反応の開拓を目指す！

- 不斉合成：100%に迫る光学純度達成！
- 実用的合成：医薬中間体合成で工業化に成功！
- 高活性触媒：毎分35,000回働く高機能を実現！

【主な授業科目】 有機反応・構造論、有機化学特論

【大学院生数】 修士 4名 (R4.5現在)

【教育・研究成果】

〈主な外部資金等〉 産学共同研究 3件 (大熊教授)、産学共同研究 1件 (新井准教授)、豊田理研スカラー スカラー共同研究 (代表) NEDO 官民による若手研究者発掘支援事業 (代表) (百合野助教)、〈社会貢献〉 *Comprehensive Chirality, 2nd Edition* (Elsevier) Volume Editor、*Catalysts* 誌 Editorial Board Member (大熊教授)、〈論文〉 原著論文 2編、総説 1編、特許出願 1件

【代表的な発表論文・著書】

Ishikawa, H.; Yurino, T.; Komatsu, R.; Gao, M.; Arai, N.; Touge, T.; Matsumura, K.; Ohkuma, T. "Asymmetric Hydrogenation of α -Amino Esters into Optically Active β -Amino Alcohols through Dynamic Kinetic Resolution Catalyzed by Ruthenabicyclic Complexes", *Org. Lett.* **2023**, *25*, 2355.

Yurino, T.; Yamashita, H.; Shan, Y.; Wu, Z.; Ohkuma, T. "Potassium Alkoxide as an Efficient Catalyst for Nucleophilic Perfluoroalkylation: Attempt at Anion-Controlled Enantioselective Insertion of a Trifluoromethyl Group", *Synlett* **2022**, *33*, 1739.



【講座・研究室名】

《キャッチコピー》 ～ クロスカップリングと触媒的不斉付加による炭素—炭素結合形成法の開発～

【担当教員】（工学研究院/フロンティア化学教育研究センター/化学反応創成研究拠点（WPI-ICReDD））



特任准教授 山本靖典

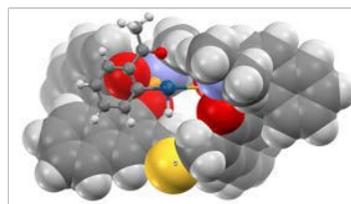
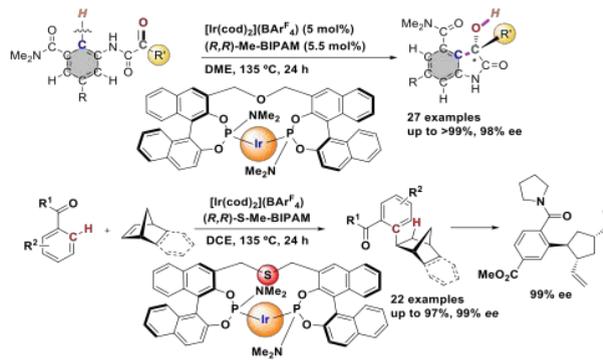
【研究室の目標】

遷移金属触媒反応を利用した有機化合物の自在変換を目指す。特に、クロスカップリング反応および付加反応などの炭素—炭素結合形成法の開発により、有用有機化合物の高効率、高選択的合成を達成する。これら反応に必要な新しい触媒と有機ホウ素反応剤の開発を行う。

【主な研究テーマ】

有機ホウ素化合物のクロスカップリング反応/触媒的不斉付加反応の開発、キラル触媒プロセスの開発

- ・カチオン性イリジウム触媒を用いた不飽和結合の不斉アリール化反応の開発
- ・ルテニウム/二座ホスホロアミダイト触媒を用いた有機ボロン酸の不斉付加反応の開発
- ・パラジウム触媒を用いた β -ジアリールエステル及び α -アリールエステルの不斉合成
- ・カチオン性ロジウム/二座ホスホロアミダイト触媒を用いる不斉アリール化反応の開発
- ・ロジウム触媒による末端アルキンのZ選択的ヒドロホウ素化反応
- ・環状トリオールボレート塩の開発とクロスカップリング反応/触媒的不斉付加反応による有機化合物の合成
- ・トリフルオロメチルトリオールボレート塩を用いたカップリング反応ならびに付加反応の開発



C-H結合活性化の遷移状態モデル

キラル有機化合物の迅速合成技術の開発

【主な授業科目】分子化学A（有機金属化学）

【大学院生数】修士 3名（R4.5現在）

【教育・研究成果】

＜外部資金＞技術指導（1件）

＜論文数＞原著論文 2報

【代表的な発表論文・著書】

Shirai, T.; Yamamoto, Y., "Cationic Iridium/Chiral Bidentate Phosphoramidite Catalyzed Asymmetric Hydroarylation", *Synthesis* **2022**, 54, 4764-4772.Nonami, R.; Morimoto, Y.; Kanemoto, K.; Yamamoto, Y.; Shirai, T., "Cationic Iridium-Catalyzed Asymmetric Decarbonylative Aryl Addition of Aromatic Aldehydes to Bicyclic Alkenes", *Chem. A Eur. J.* **2022**, 28, e202104347 (DOI: 10.1002/chem.202104347)



【講座・研究室名】 反応制御学講座・有機金属化学研究室
《キャッチコピー》 ～有機合成化学を革新する画期的な化学反応の発見～
 【担当教員】 (WPI ICReDD・理学研究院・国際連携機構 ISP)



教授 澤村正也

(WPI ICReDD・理学研究院)



准教授 清水洋平

(WPI ICReDD・理学研究院)



助教 増田侑亮

(WPI ICReDD・理学研究院)



助教 アルティアガ* アルティアガ* フェルナント*

(国際連携機構 ISP)

【研究室の目標】

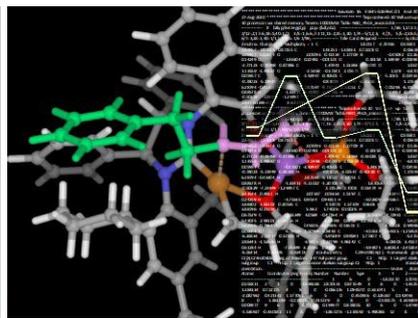
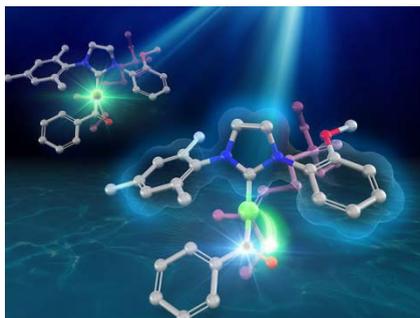
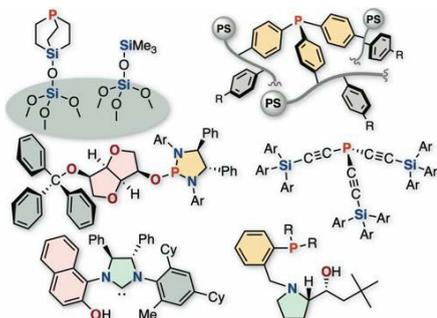
医薬や機能有機材料を生み出す有機合成化学を革新する画期的な化学反応の開発が私たちの夢です。有機化学、錯体化学、コンピューターグラフィックス、量子化学計算を組み合わせ、新分子を設計・開発する私たちは、分子のクリエイターです。有機化学の殻に閉じこもらず、生命科学や物理化学などの周辺分野や新しい学術領域からも多くを学ぼうとする「謙虚さと好奇心」、「勇気と情熱」を持って研究しています。

【主な研究テーマ】

新しい配位子の設計・合成と反応開発

光が駆動する革新的化学反応の開発

量子化学計算による不斉合成触媒の設計



【主な授業科目】 分子化学 A (有機金属化学)

【大学院生数】 修士 9名、博士 7名 (R4.5現在)

【教育・研究成果】

＜学生 activity＞学振特別研究員 1 名、ALP プログラム生 1 名、DX博士人材フェローシップ 1 名 ＜受賞＞日本化学会北海道支部奨励賞 (清水准教授) ＜主な外部資金＞科研費・基盤研究 (A) (代表) (澤村教授)、科研費・基盤研究B (代表)、科研費・挑戦的研究萌芽 (代表)、科研費・学術変革領域A公募 (代表) (清水准教授)、科研費・若手研究 (代表)、科研費・学術変革領域A公募 (代表) (増田助教) など ＜論文＞原著論文 5 報

【代表的な発表論文・著書】

Rawat, V. K.; Higashida, K.; Sawamura, M. "Construction of Heterobimetallic Catalytic Scaffold with a Carbene-Bipyridine Ligand: Gold-Zinc Two-Metal Catalysis for Intermolecular Addition of O-Nucleophiles to Non-activated Alkynes", *ACS Catal.*, **2022**, *12*, 8325-8330.

Yoshida, M.; Sawamura, M.; Masuda, Y. "Photoinduced Alcoholic α -C-H Bond Anti-Markovnikov Addition to Vinylphosphonium Bromides Followed by Wittig Olefination: Two-step Protocol for α -C-H Allylic Alkylation of Alcohols", *ChemCatChem.*, **2022**, *14*, e202200744.

Sakai, S.; Fujioka, A.; Imai, K.; Uchiyama, K.; Shimizu, Y.; Higashida, K.; Sawamura, M. "Silver-Catalyzed Asymmetric Aldol Reaction of Isocyanooacetic Acid Derivatives Enabled by Cooperative Participation of Classical and Nonclassical Hydrogen Bonds", *Adv. Synth. Catal.*, **2022**, *364*, 2333-2339.

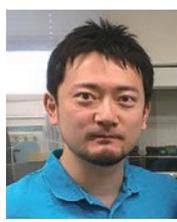
【講座・研究室名】 反応制御学講座・有機化学第一研究室
 『キャッチコピー』 ～北大から有機化学の世界を一！～



【担当教員】 (理学研究院)



教授 鈴木 孝紀



准教授 石垣 侑祐

【研究室の目標】

構造有機化学は、近未来の機能性有機化合物の創製の為の Think Tank としての役を担う、魅力ある研究分野である。ポテンシャルの高いこの分野に於いて、新たな研究カテゴリーの提案や常識を覆す特性を示す化合物群の創製を行い、次世代材料化学の潮流を作り出すことを目標とする。

【主な研究テーマ】

世界一長い炭素-炭素結合
 呼べば答える応答性分子：単一分子メモリの実現
 安定な開殻種を与える新規な窒素複素環化合物
 異なる刺激に応答する多重クロミック分子
 光/熱で酸化特性の完全制御が可能な分子スイッチ
 加熱/冷却で酸化特性スイッチングが可能な分子

炭素-炭素結合「不可能な長さ」実現



「化学に興味を」「研究にはロマンある」



【主な授業科目】 構造有機化学、有機構造化学特論

【大学院生数】 修士 8名、博士 5名

【教育・研究成果】

〈学生 activity〉 ALP 学生 2名、JSPS特別研究員 4名、学会ポスター賞 6件
 〈主な外部資金〉 科学研究費(基盤B、萌芽：鈴木； 基盤B、学術変革、豊田理研、イオン工学；石垣)。
 〈受賞〉 文部科学大臣表彰若手科学者賞、北海道大学ディスティングイッシュトリサーチャー(石垣)。
 〈論文数等〉 原著論文 8編、総説 1編。

【代表的な発表論文・著書】

1) "Redox-Active Hydrocarbons: Isolation and Structural Determination of Cationic States toward Advanced Response Systems," T. Harimoto, Y. Ishigaki, *ChemPlusChem* **2022**, *87*, e202200013 (Review; Cover). 2) "Geometrical and Electronic Structure of Cation Radical Species of Tetraarylanthraquinodimethane: An Intermediate for Unique Electrochromic Behavior," Y. Ishigaki, R. Fukagawa, K. Sugawara, T. Harimoto, T. Suzuki, *Chem. Asian J.* **2022**, *17*, e202200914. 3) "Near-Infrared Electrochromic Behavior of Dibenzothiepin Derivatives Attached by Two Michler's Hydrol Blue Units," Y. Ishigaki, M. Takata, T. Shimajiri, L. Wu, W. Zeng, D. Ye, T. Suzuki, *Chem. Eur. J.* **2022**, *28*, e202202457 (Hot Paper). 国際共著論文 (南京大学) *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202209248 & *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202111759. 4) "Solid-State Assembly by Chelating Chalcogen Bonding in Quinodimethane Tetraesters Fused with a Chalcogenadiazole," Y. Ishigaki, K. Asai, H.-P. Jacquot de Rouville, T. Shimajiri, J. Hu, V. Heitz, T. Suzuki, *ChemPlusChem* **2022**, *87*, e202200075. 国際共著論文 (ストラスブール大学) .



【講座・研究室名】 反応制御学講座・化学反応創成研究室 (R5. 10. 1設置)
《キャッチコピー》 ～ 計算・情報・実験科学を駆使した化学反応の設計・発見～

【担当教員】 (化学反応創成研究拠点)



特任教授 LIST BENJAMIN



准教授 HUANG CHUNG-YANG



准教授 SIDOROV PAVEL



准教授 陳 旻究



准教授 高 敏



助教 赤間 知子

【研究室の目標】

計算・情報・実験科学を駆使した化学反応の設計・発見及び有用物質・材料の迅速開発

医薬や機能有機材料を生み出す化学反応を革新する画期的な化学反応の開発が私たちの夢です。有機化学、錯体化学、量子化学計算、化学情報学を組み合わせ、新しい反応を設計・開発しています。

【主な研究テーマ】

有機触媒を用いた新規反応開発

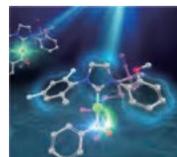
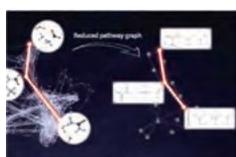
有機分子・金属錯体化合物からなる分子結晶を基盤に計算・情報科学を融合した機能性固体材料の開発

計算・情報科学を活用した有機合成反応開発及び機能性有機分子の合成と応用

化学情報学を基盤とした、化学反応経路データベースや機械学習を用いた化学反応の予測

理論計算化学を基盤とした、有機合成反応の反応機構解析・反応予測、複雑系への反応経路自動探索法の開発

大規模系のための電子状態ダイナミクスシミュレーション手法の開発



【主な授業科目】

【教育・研究成果】

<外部資金> JSPS・基盤研究B: 1件 (代表: List Benjiaming教授) 基盤研究B: 2件 (分担: Sidorov Pavel)・JSPS・研究活動スタート支援: 1件 (代表: Huang Chung-Yang 准教授) JSPS・若手研究: 1件 (代表: 陳旻究 准教授) JSPS・基盤研究C: 1件 (代表: 高敏 准教授) 民間企業との共同研究: 1件 (高敏 准教授) <論文数> 原著論文: 13 報

【代表的な発表論文・著書】

- Zhou, H.; Han, J.; Nothling, N.; Lindner, M.; Jenniches, J.; Kuhn, C.; Tsuji, N.; Zhang, L.; List*, B. "Organocatalytic Asymmetric Synthesis of Si-Stereogenic Silyl Ethers" *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, 144, 10156-10161.
Kuntze, K.; Viljakka, J.; Virkki, M.; Huang, C.-Y.; Hecht, S.; Priimagi, A. "Red-light photoswitching of indigos in polymer thin films" *Chem. Sci.* 2023, 14, 2482-2488.
- Kitagawa, Y.; Moriake, R.; Akama, T.; Saitou, K.; Aikawa, K.; Shoji, S.; Fushimi, K.; Kobayashi, M.; Taketsugu, T.; Hasegawa, Y. "Effective photosensitization in excited-state equilibrium: Brilliant luminescence of TbIII coordination polymers through ancillary ligand modifications", *ChemPlusChem* 2022, 87, e202200151.
- Wang, B.; Ito, M.; Gao, M.; Nogochi, H.; Uosaki* K.; Taketsugu*, T. "Identifying substrate-dependent chemical bonding nature at molecule/metal interfaces using vibrational sum frequency generation spectroscopy and theoretical calculations" *J. Phys. Chem. C* 2022, 126, 11298-11309.
- Jin, M.*; Ando, R.; Jellen, M. J.; Garcia-Garibay, M.A.; Ito, H.* "Encapsulating N-Heterocyclic Carbene Binuclear Transition-Metal Complexes as a New Platform for Molecular Rotation in Crystalline Solid-State" *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, 143, 1144-1153.
- Tsuji, N.; Sidorov, P.; Zhu, C.; Nagata, Y.; Gimadiev, T.; Varnek, A.; List, B. "Predicting Highly Enantioselective Catalysts Using Tunable Fragment Descriptors", *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, 62, e202218659.



【講座・研究室名】 触媒反応学講座・物質変換研究室

《キャッチコピー》 ～ 精密設計した固体触媒によるSDGsの達成 ～

【担当教員】 (触媒科学研究所)



教授 福岡 淳



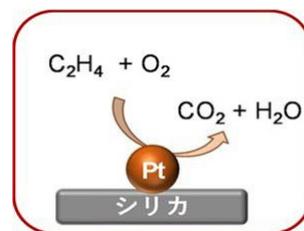
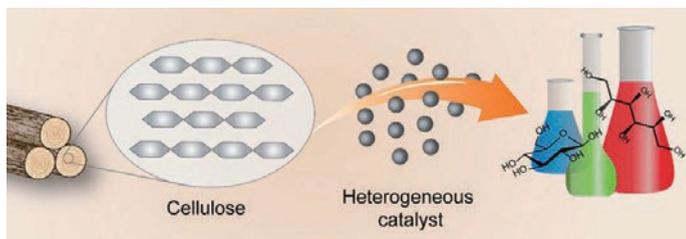
助教 ショロリ アキンブト

【研究室の目標】

固体触媒を分子レベルで設計し、多様なエネルギー源・化学資源の利活用に応用するとともに、フードロス削減のための触媒開発を行い、SDGsに貢献することを目指している。特に、バイオマス（セルロース、キチン）の分解と化学品合成、青果物鮮度保持用エチレン酸化触媒の開発、メタンとCO₂変換に関する研究を推進している。

【主な研究テーマ】

- ・ 触媒によるセルロースとキチンの分解
- ・ 固体触媒によるバイオマス由来糖類からのC₄化合物の高選択合成
- ・ シリカ担持金属触媒による低温エチレン酸化（鮮度保持触媒）
- ・ CO₂の選択的還元反応



【主な授業科目】 分子化学（物質変換化学）、総合化学特論、先端総合化学特論 I

【大学院生数】 修士 1名、博士 4名（R4.5現在）

【教育・研究成果】

<外部資金> JSPS・基盤研究B：1件（代表：福岡淳 教授）， 民間企業との共同研究：4件（内 4件 福岡淳 教授，<論文数> 原著論文：10 報，解説・総説・著書：2件

【代表的な発表論文・著書】

1. Boonyakarn, T.; Wiesfeld, J. J.; Asakawa, M.; Chen, L.; Fukuoka, A.; Hensen, E. J. M.; Nakajima, K. “Effective Oxidation of (5-Hydroxymethyl)furfural to 2,5-Diformylfuran by an Acetal Protection Strategy”, *ChemSusChem* **2022**, *15*, e202200059.
2. Mori, T.; Shigyo, T.; Nomura, T.; Osanai, Y.; Nakajima, K.; Fukuoka, A. “Ethylene oxidation activity of silica-supported platinum catalysts for the preservation of perishables”, *Catal. Sci. Technol.* **2022**, *12*, 3116-3122.
3. Sagawa, T.; Kobayashi, H.; Murata, C.; Shichibu, Y.; Konoshi, K.; Hashizume, M.; Fukuoka, A. “Catalytic Synthesis of Oxazolidinones from a Chitin-Derived Sugar Alcohol”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2022**, *95*, 1054-1059.



【講座・研究室名】 触媒反応学講座・高分子機能科学研究室
 《キャッチコピー》 ～ キラル高分子の合成と機能 ～

【担当教員】 (触媒科学研究所)



教授 中野 環



准教授 宋 志毅



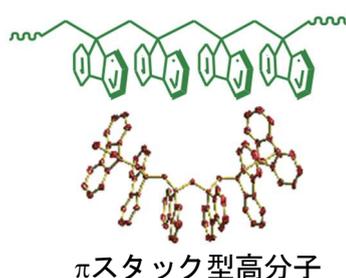
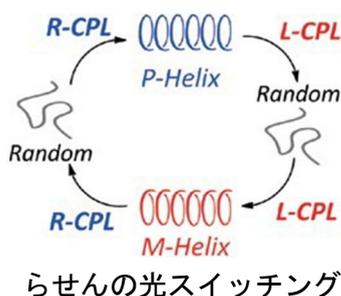
助教 坂東 正佳

【研究室の目標】

キラルな高分子鎖構造の精密制御に基づいて機能性材料を開発する。特に、らせん・ π スタック型・ハイパーブランチ型 等の特異な構造の構築に重点を置いて分子鎖を設計・合成し、触媒機能、光電子機能、分離機能、薬理活性等の発現を目指す。

【主な研究テーマ】

- ・光を用いたらせん高分子の合成とスイッチングとキラル触媒、不斉識別材料への応用
- ・ π スタック型高分子の合成、構造および機能
- ・キラルなハイパーブランチ型高分子の合成と発光特性解析
- ・キラルな架橋ゲルの合成と応用
- ・高分子医薬品の合成と機能開発



【主な授業科目】 高分子機能科学

【大学院生数】 修士4名、博士2名 (R4.5現在)

【教育・研究成果】

<学生 activity>、<主な外部資金>

<論文>原著論文数 11 報

【代表的な発表論文・著書】

M. Bando, W. Zhu, S. Shimoda, E. Hamanishi, N. Sano, C. Trombini, N. Naga, N. Haraguchi, S. Itsuno, M. Nishida and T. Nakano, *Chem. Lett.*, 2022, **51**, 5-9.

P. Wu, A. Pietropaolo, M. Fortino, S. Shimoda, K. Maeda, T. Nishimura, M. Bando, N. Naga and T. Nakano, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 2022, **61**, e202210556.

P. Wu, T. Nishimura, K. Maeda, K. Fujii, S. Hayano, H. Nageh, N. Naga and T. Nakano, *Chem. Lett.*, 2022, **51**, 1058-1061.

N. Naga, T. Takenouchi and T. Nakano, *ACS Macro Lett.*, 2022, **11**, 603-607.

N. Naga, M. Jinno, Y. Wang and T. Nakano, *Sci. Rep.*, 2022, **12**.

Q. Y. Wang, Z. Y. Song, M. Bando, T. Harada, Y. Imai, H. Toda, N. Naga and T. Nakano, *Macromolecules*, 2022, **55**, 5390-5402.



【講座・研究室名】触媒反応学講座・触媒材料研究室

《キャッチコピー》～新規触媒の開発を通して持続可能社会の実現に貢献～

【担当教員】（触媒科学研究所）



教授 清水 研一



准教授 古川 森也



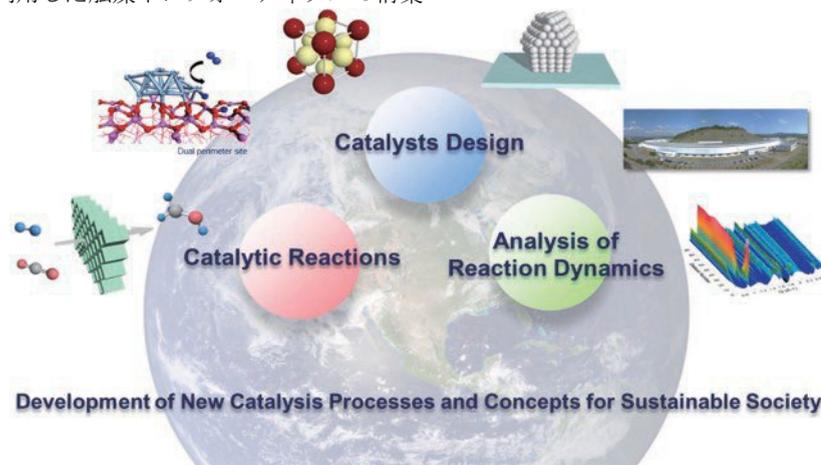
助教 鳥屋尾 隆

【研究室の目標】

様々な分光法・計算化学・情報科学を駆使して固体触媒の設計指針を構築します。
持続可能社会の実現に必要な固体触媒・反応を開発します。

【主な研究テーマ】

二酸化炭素、シエールガス、バイオマスを高付加価値品に変換する固体触媒反応の開発
自動車排ガス浄化触媒の開発と作用機構解明
計算化学・情報科学を利用した触媒インフォマティクスの構築



【主な授業科目】応用分子化学 A（触媒設計）

【大学院生数】

修士10名、博士13名（R4.5現在）

【教育・研究成果】

<主な外部資金> JST/CREST(代表)(清水教授)、JST/創発的研究支援事業(代表)(鳥屋尾助教)、科研費・基盤研究A(代表)(清水教授)、科研費・基盤研究B(代表)(古川准教授)、科研費・基盤研究B(代表)(鳥屋尾助教)

<論文数等> 原著論文 23報

【代表的な発表論文・著書】

H. Kubota, S. Mine, T. Toyao, Z. Maeno, K. Shimizu, Redox-Driven Reversible Structural Evolution of Isolated Silver Atoms Anchored to Specific Sites on γ -Al₂O₃, *ACS Catalysis*, **2022**, 12, 544

Y. Jing, K. Taketoshi, N. Zhang, C. He, T. Toyao, Z. Maeno, T. Ohori, N. Ishikawa, K. Shimizu, Catalytic Decomposition of N₂O in the Presence of O₂ through Redox of Rh Oxide in a RhOx/ZrO₂ Catalyst, *ACS Catalysis*, **2022**, 12, 6325

F. Xing, Y. Nakaya, S. Yasumura, K. Shimizu, S. Furukawa, Ternary platinum-cobalt-indium nanoalloy on ceria as a highly efficient catalyst for the oxidative dehydrogenation of propane using CO₂, *Nature Catalysis*, **2022**, 5, 55

F. Xing, J. Ma, K. Shimizu, S. Furukawa, High-entropy intermetallics on ceria as efficient catalysts for the oxidative dehydrogenation of propane using CO₂, *Nature Communications*, **2022**, 13, 5065



【講座・研究室名】

触媒反応学講座・触媒理論研究室

《キャッチコピー》 ～ 理論計算を用いて触媒原理を明らかにする ～

【担当教員】（触媒科学研究所）



教授 長谷川 淳也



准教授 飯田 健二

【研究室の目標】

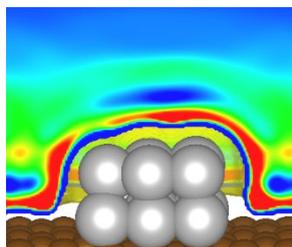
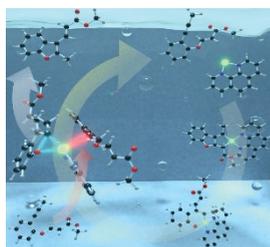
触媒はエネルギー・環境・物質変換など持続的な社会発展のための重要な科学技術です。複雑な触媒反応系の電子状態、分子構造、動力学、統計的描像を明らかにするための理論計算手法を開発し、触媒原理の解明と触媒設計指針の提案を目指します。

【主な研究テーマ】

均一系・不均一系触媒の反応メカニズムの理論的研究

光や電圧を利用する不均一系触媒に関する理論的研究

外力を導入した計算手法の開発による系間交差反応機構、メカノケミストリ原理の解明



【主な授業科目】 分子理論化学、実践的計算化学、物質変換化学

【大学院生数】 修士 1名、博士 2名 (R5.9現在)

【教育・研究成果】

＜主な外部資金＞NEDO, 基盤研究B（長谷川教授）、NEDO（飯田准教授） ＜論文数＞原著論文 19報

【代表的な発表論文・著書】

R. Miyazaki, K. Iida, S. Ohno, T. Matsuzaki, T. Suzuki, M. Arisawa, J. Hasegawa, “Substrate-Assisted Reductive Elimination Determining the Catalytic Cycle: Theoretical Study on the Ni-Catalyzed 2,3-Disubstituted Benzofurans Synthesis via C–O Bond Activation”

Organometallics **2022**, *41*, 3455.

D. De Chavez, J. Hasegawa, “Revisiting Activity Tuning using Lattice Strain: CO Decomposition in Terrace Ru(0001) and Stepped Ru(1015) Surfaces”

J. Phys. Chem. C **2022**, *126*, 9324.

M. Ratanasak, S. Tanaka, M. Kitamura, J. Hasegawa, “Asymmetric Dehydrative Cyclization of Allyl Alcohol to Cyclic Ether Using Chiral Brønsted Acid/CpRu(II) Hybrid Catalysts: DFT Study of the Origin of Enantioselectivity”

J. Org. Chem. **2022**, *87*, 13062.

K. Iida, “Atomic-Scale Picture of the Electric Double Layer around a Heterogeneous Solid–Liquid Interface Based on 3D-RISM-SCF Theory”

J. Phys. Chem. C, **2022**, *126*, 9466.

Y. Ueda, Y. Masuda, T. Iwai, K. Imaeda, H. Takeuchi, K. Ueno, M. Gao, J. Hasegawa, M. Sawamura, “Photoinduced Copper-Catalyzed Asymmetric Acylation of Allylic Phosphates with Acylsilanes”

J. Am. Chem. Soc. **2022**, *114*, 2218.



【講座・研究室名】 プロセス工学講座・化学システム工学研究室

《キャッチコピー》 ～ゼロカーボン社会に向けた効率的なエネルギー・物質変換システムの研究～

【担当教員】 (工学研究院)



教授 菊地 隆司



助教 多田 昌平

【研究室の目標】

再生可能エネルギーを有効利用するための水素やアンモニア、メタンといったエネルギーキャリアを合成する新規手法の開発やエネルギーキャリアから直接発電する燃料電池の研究、ならびにCO₂排出量削減や炭素資源の循環利用に向けて、固体触媒を用いたCO₂と水素からの燃料や化成品原料といった有用物質合成にも取組み、ゼロカーボン社会の構築を目指しています。

【主な研究テーマ】

- ・ エネルギーキャリア直接発電燃料電池の研究
- ・ グリーン水素製造方法の研究
- ・ アンモニアの電気化学的合成法の研究
- ・ CO₂水素化による有用化学物質合成法の研究
- ・ 炭化水素の有用化学物質への電気化学的変換

【主な授業科目】

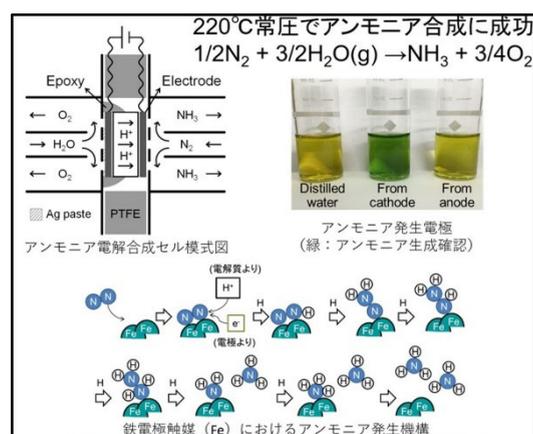
化学工学熱力学特論

【教育・研究成果】

＜主な外部資金＞ NEDO・先導研究（菊地），NEDO・先導研究（菊地），NEDO・未踏チャレンジ2050（多田）など＜論文数等＞ 原著論文・総説・解説・著書など：13報＜受賞＞ 菊地隆司（教授）・石油学会 論文賞，多田昌平（助教）・文部科学省 科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞，石油学会奨励賞，新化学技術推進協会 GSC賞奨励賞

【代表的な発表論文・著書】

- N. Fujiwara, S. Tada, R. Kikuchi*, "Direct conversion of carbon dioxide and steam into hydrocarbons and oxygenates using solid acid electrolysis cells", *iScience* 25 (2022) 105381. (日本経済新聞電子版掲載)
- S. Tada*, N. Ochiai, H. Kinoshita, M. Yoshida, N. Shimada, T. Joutsuka, M. Nishijima, T. Honma, N. Yamauchi, Y. Kobayashi, K. Iyoki*, "Active Sites on Zn_xZr_{1-x}O_{2-x} Solid Solution Catalysts for CO₂-to-Methanol Hydrogenation", *ACS Catalysis* 12 (2022) 7748-7759. (科学新聞掲載)
- M. Kondo*, T. Joutsuka*, K. Fujiwara, T. Honma, M. Nishijima, S. Tada*, "Catalysis of surface dispersed Cu²⁺ species on *t*-ZrO₂: Square-planar Cu catalyzed cross-coupling of arylboronic acid and imidazole", *Catalysis Science & Technology* 13 (2023) 2247-2254. (化学工業日報掲載)





【講座・研究室名】 プロセス工学講座・材料化学工学研究室
 《キャッチコピー》 ～ 高機能材料の開発・製造・普及 ～

【担当教員】 (工学研究院)



教授 向井 紳



准教授 中坂佑太



助教 岩村 振一郎



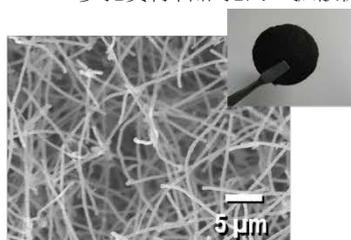
助教 岩佐 信弘

【研究室の目標】

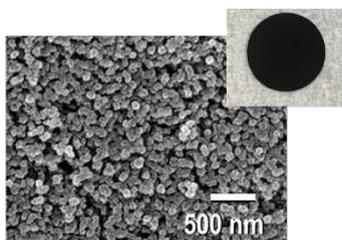
当研究室は化学工学的な手法による効率的な材料開発を目指している研究室です。材料そのものの機能だけではなく、それを効率よく製造するプロセスやその新規用途まで視野に入れて開発に取り組んでいるのが研究室の特徴です。

【主な研究テーマ】

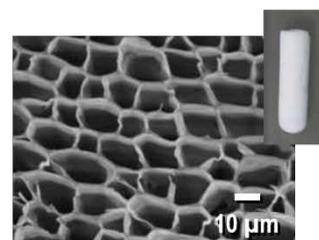
- LPI法による繊維状炭素の高効率製造
- CVD法による炭素・無機ナノ複合材料の合成
- リチウム空気電池正極材料開発
- マイクロハニカム構造体の製造と利用
- マイクロ波を利用したプロセスの高効率化
- 多孔質材料細孔内の拡散機構解明



シート状カーボンナノファイバー



カーボングェルモノリス



シリカマイクロハニカム

【主な授業科目】

分離プロセス工学, 反応工学特論

【大学院生数】

修士 13名、博士 4名 (R4.5現在)

【教育・研究成果】

<学生 activity> 口頭発表賞・国内 5件、<主な外部資金> JST・ALCA-SPRING、科研費・基盤B (代表) (向井教授)、
 科研費・基盤C (代表) (岩村助教) など、<論文数等> 原著論文 7報

【代表的な発表論文・著書】

Nagaishi, S.; Funahashi, H.; Iwamura, S.; Mukai, S. R., "Investigation of the influence of carbon surface properties on the cathode behavior of Lithium-air batteries using electrospun carbon nanofibers", *Carbon Reports*, **2023**, 2, 60-66. DOI: doi.org/10.7209/carbon.020102

Nagaishi, S.; Iwamura, S.; Ishii, T.; Mukai, S. R., "Clarification of the Effects of Oxygen Containing Functional Groups on the Pore Filling Behavior of Discharge Deposits in Lithium-Air Battery Cathodes Using Surface-Modified Carbon Gels", *J. Phys. Chem. C*, **2023**, 127, 2246-2257. DOI: doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c08443

Nakasaka, Y.; Kushima, K.; Yasumura, S.; Shimizu, K.; Totani, K.; Shibata, G.; Masuda, T; "Experimental studies on intracrystalline diffusion of NO and NH₃ in Cu-CHA", *Catal. Today*, **2023**, 411-412, 113797. DOI: doi.org/10.1016/j.cattod.2022.06.038



【講座・研究室名】プロセス工学講座・触媒反応工学研究室
《キャッチコピー》～ マイクロとマクロの世界をつなぐ化学工学 ～

【担当教員】（工学研究院）



准教授 荻野 勲

【研究室の目標】

化学工学を機軸とした分野横断型のアプローチを使い、マイクロとマクロスケール両方の観点から研究を進めています。反応工学、輸送現象そして熱力学に関連する技術要素を基盤とし、触媒化学、表面化学さらに物質合成化学などの要素を積極的に取り込み、エネルギーや環境にかかわる問題の根本的な解決に資すること、そして革新的な化学プロセス開発に貢献することを目指します。

【主な研究テーマ】

電池向け白金代替触媒の合成プロセス開発
原子状金属担持触媒の合成プロセス開発
二酸化炭素吸着材の合成プロセス開発
マイクロ孔反応場制御プロセス

【主な授業科目】分離プロセス工学

【大学院生数】修士3名（R5.5現在）

【教育・研究成果】

【代表的な発表論文・著書】

- 1) I. Ogino, "Understanding Atomically Dispersed Supported Metal Catalysts," In *Catalysis: Volume 31*. Spivey, J. J., Yi-Han Fan, Y.-H., Shekhawat, D. Eds., The Royal Society of Chemistry: Cambridge, UK, PP. 166–197 (2019).
- 2) J. Wang, G. O. Kayode, Y. Hirayama, D. Shpasser, I. Ogino, M. M. Montemore, O. M. Gazit "Enhanced Dry Reforming of Methane Catalysis by Ni at Heterointerfaces between Thin MgAlO_x and Bulk ZrO₂," *ChemCatChem*, *in press* (selected as cover art)
- 3) I. Ogino, Y. Hirayama, S. R. Mukai, "Intercalation Chemistry and Thermal Characteristics of Layered Double Hydroxides Possessing Organic Phosphonates and Sulfonates," *New J. Chem.*, 44 (2020) 100022–10010. (selected as inside front cover art)
- 4) I. Ogino, R. Tanaka, S. Kudo, S. R. Mukai "The Impact of Thermal Activation Conditions on Physicochemical Properties of Nanosheet-derived Mg-Al Mixed Oxides," *Microporous Mesoporous Mater.* 263 (2018) 181–189.
- 5) I. Ogino, Y. Suzuki, S. R. Mukai, "Esterification of Levulinic Acid with Ethanol Catalyzed by Sulfonated Carbon Catalysts: Promotional Effects of Additional Functional Groups," *Catal. Today* 314 (2018) 62–69.
- 6) I. Ogino, "X-ray Absorption Spectroscopy for Single-Atom Catalysts: Critical Importance and Persistent Challenges," *Chin. J. Catal.* 38 (2018) 1481–1488. (invited)
- 7) I. Ogino, Y. Suzuki, S. R. Mukai, "Tuning the Pore Structure and Surface Properties of Carbon-Based Acid Catalysts for Liquid-Phase Reactions," *ACS Catal.* 5 (2015) 4951–4958.



【講座・研究室名】プロセス工学講座・エネルギー変換システム設計研究室
 《キャッチコピー》～ 資源・エネルギー・環境の三問題を化学の力で解決 ～

【担当教員】(工学研究院)



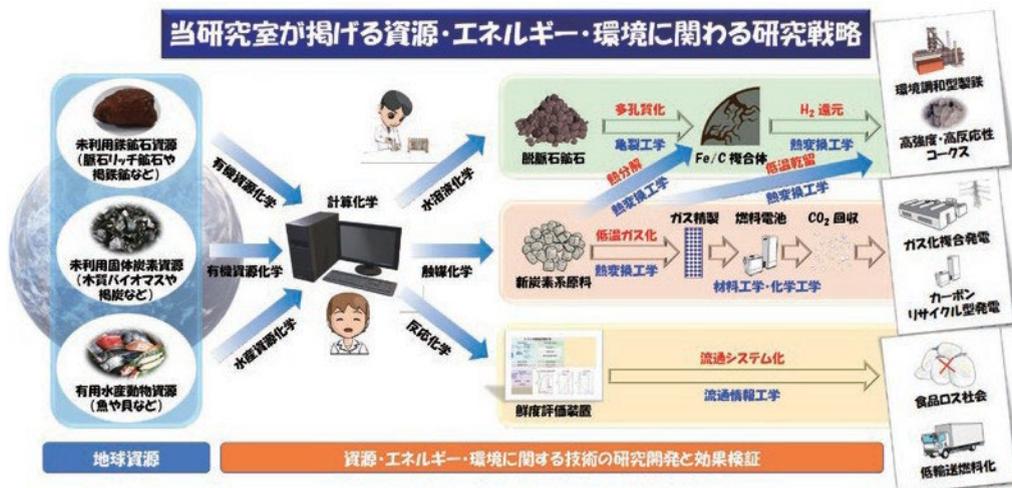
准教授 坪内 直人

【研究室の目標】

化学の力により「資源・エネルギー・環境」に係わる問題の解決を目指し、主に劣質・未利用化学資源の高度利用法の開発を進めている。具体的には、現在未利用の炭素資源をクリーンエネルギーや高価値化学原料に効率よく変換できるプロセス、劣質な鉄鉱石資源をアップグレーディングし製鉄原燃料化するシステムおよび排出された CO₂ を再利用する技術の開発を行っている。また、食品ロス等の視点から海洋生物資源の鮮度管理システムに関する研究も進めている。

【主な研究テーマ】

ガス化燃料電池発電用触媒の開発、劣質炭素資源コークス化技術の確立、低品位鉄鉱石アップグレーディング法の構築、製鋼スラグ中のリンの分離回収技術の開発、炭素循環型発電システムの確立、魚介類の食べ頃の見える化装置の構築



【主な授業科目】応用分子化学 (化学エネルギー変換)

【大学院生数】修士2名、博士1名 (R4.5 現在)

【教育・研究成果】

<主な外部資金> 科研費・基盤研究 B (代表)、科研費・挑戦的研究 (萌芽) (代表)、NEDO・戦略的省エネルギー技術革新プログラム (分担) 等、<受賞> 鉄鋼環境基金理事長賞、<論文数> 原著論文 6 報、著書 (分担) 2 編、特許出願 6 件 (国内 2、海外 4)

【代表的な発表論文・著書】

Naoto Tsubouchi*, Ken Fukuyama, Natsumi Matsuoka, Yuuki Mochizuki, Removal of Hydrogen Chloride from Simulated Coal Gasification Fuel Gases Using Honeycomb-Supported Natural Soda Ash, *Fuel* **2022**, 317, 122231.

Yuuki Mochizuki, Javzandolgor Bud, Enkhsaruul Byambajav, Naoto Tsubouchi*, Preparation and Evaluation of Activated Carbon from Low-Rank Coal via Alkali Activation and Its Fundamental CO₂ Adsorption Capacity at Ambient Temperature under Pure Pressurized CO₂, *Reaction Chemistry & Engineering* **2022**, 7, 1429-1446.

Yuuki Mochizuki, Javzandolgor Bud, Enkhsaruul Byambajav, Naoto Tsubouchi*, Influence of Ammonia Treatment on the CO₂ Adsorption of Activated Carbon, *Journal of Environmental Chemical Engineering* **2022**, 10, 107273.

Javzandolgor Bud, Yuuki Mochizuki, Naoto Tsubouchi*, Evolution of Mercury from Iron Ores in Temperature-Programmed Heat Treatments, *ISIJ International* **2022**, 62, 20-28.

Javzandolgor Bud, Yuuki Mochizuki, Naoto Tsubouchi*, Evaluation of Mercury Form in Iron Ore through Sequential Leaching and Temperature-Programmed Heat Treatment Methods, *Fuel* **2022**, 308, 121953.