



【講座・研究室名】 分子物質化学講座・情報化学研究室 (R4. 11. 16設置)

《キャッチコピー》 ～ 実験・理論・計算・データが融合したインフォマティクスによる材料発見 ～

【担当教員】 (理学院)



教授 高橋 啓介



助教 高橋 ローレン ニコール

【研究室の目標】

研究者を介さない人工知能が主体となった自立実験・解析 による完全自動化した材料・触媒開発を実現する。

【主な研究テーマ】

触媒インフォマティクスによる固体触媒開発

ハイスループット実験・計算による材料・触媒データベース構築

機械学習による材料設計と理解

触媒開発プラットフォームの開発

対象: メタン酸化、CO₂還元、水電解、太陽電池、2次元材料、太陽電池、ハイエントロピー合金



【主な授業科目】

材料化学

【教育・研究成果】

<学生 activity> 国費外国人留学生DC2 1名、日本学術振興会特別研究員 DC2 1名

<主な外部資金> JST-CREST (高橋教授)、NEDO (高橋教授)、JST-Mirai分担 (高橋教授)、JST-ERATO分担 (高橋教授)、WPI-ListPlatform (高橋教授) など

<論文数> 原著論文 24報

【代表的な発表論文・著書】

1. T. Taniike, K. Takahashi, "The value of negative results in data-driven catalysis research", *Nat. Catal.*, **2023**, 6, 108-111
2. K. Takahashi, L. Takahashi, S. D. Le, T. Kinoshita, S. Nishimura, J. Ohyama, "Synthesis of Heterogeneous Catalysts in Catalyst Informatics to Bridge Experiment and High-Throughput Calculation", *J. Am. Chem. Soc.*, **2022**, 144, 34, 15735
3. L. Takahashi, T. N. Nguyen, S. Nakanowatari, A. Fujiwara, T. Taniike, K. Takahashi, "Constructing catalyst knowledge networks from catalyst big data in oxidative coupling of methane for designing catalysts", *Chem. Sci.*, **2021**, 12, 12546.



【講座・研究室名】 分子物質化学講座・データ数理研究室

《キャッチコピー》～化学反応概念の普遍性を究める：自然は学問の垣根を知らない～

【担当教員】（電子科学研究所）



教授 小松崎 民樹



助教 水野 雄太



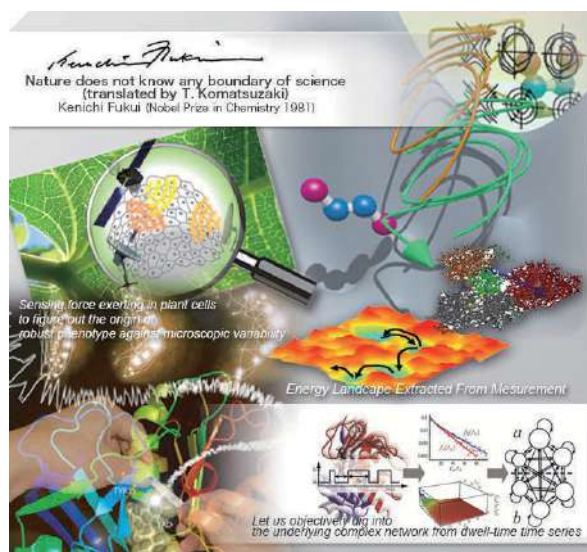
助教 西村 吾朗

【研究室の目標】

なぜ反応が生じるのか、真にサイコロ振り（確率論）的に決定されるのかという根本原理を明らかにするとともに、ハミルトニアンを想定できない複雑な系に対する実践型理論化学を創出し、化学概念の普遍性を追求する。化学だけでなく、物理、数学、生物、情報学からも広く研究者を擁し、異分野高度融合型研究を展開し、これらの問いに挑戦する。

【主な研究テーマ】

化学反応の相空間幾何学と実在分子系への応用。計測データから複雑分子系の反応ネットワークを構成するデータ駆動科学。社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出。新概念コンピューティング。



【主な授業科目】

物質化学、化学特別講義

【大学院生数】

修士 2名、博士 4名

【教育・研究成果】

＜主な外部資金＞JST/CREST（代表）（小松崎）、JST/START(分担)、AMED創薬（分担）（小松崎）、JST/さきがけ（代表）（水野）

＜論文数等＞原著論文 11 報、解説 2 報

【代表的な発表論文・著書】

- 1) Koji Tabata, Hiroyuki Kawagoe, J Nicholas Taylor, Kentaro Mochizuki, Toshiki Kubo, Jean-Emmanuel Clement, Yasuaki Kumamoto, Yoshinori Harada, Atsuyoshi Nakamura, Katsumasa Fujita, Tamiki Komatsuzaki **On-the-fly Raman microscopy guaranteeing the accuracy of discrimination** *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **121**, e2304866121, (2024)
- 2) Yuta Mizuno, Tamiki Komatsuzaki. **Finding Optimal Pathways in Chemical Reaction Networks Using Ising Machines.** *Physical Review Research* **6**, pp.013115-1-013115-24 (2024)
- 3) Xun Sun, Jonas Alfermann, Hao Li, Maxwell B. Watkins, Yi-Tsao Chen, Thomas E. Morrell, Florian Mayerthaler, Chia-Ying Wang, Tamiki Komatsuzaki, Jhih-Wei Chu, Nozomi Ando, Henning D. Mootz, Haw Yang. **Subdomain dynamics enable chemical chain reactions in non-ribosomal peptide synthetases.** *Nature Chemistry*, **16**, 259–268 (2024)

【講座・研究室名】分子物質化学講座・教育担当研究室
《キャッチコピー》～ 基礎理学教育、化学の教育 ～

【担当教員】（理学研究院）



准教授 中富 晶子



特任講師 竹内 浩



特任講師 丸田 悟朗

【研究室の目標】

教育プログラムの企画運営、化学に関連する教育科目の講義・実験の実施

【主な研究テーマ】

理学部および関連大学院での新教育システムの調査と研究、教育プログラムの立案と運営。

化学に関連する全学教育科目の講義—化学Ⅰ・化学Ⅱ—の内容の検討。理学部の化学に関連する科目—化学のための数学、熱・統計力学ⅠとⅡ—の教育内容の検討。大学院共通科目の教育内容の検討。

【主な授業科目】基礎物理化学特論（丸田特任講師）、物理化学先端講義（竹内特任講師）、キャリアマネジメント特別セミナー、実践的データ科学（中富准教授）



【講座・研究室名】無機物質化学講座・無機化学研究室

《キャッチコピー》 ～蓄電池を革新する固体イオニクス材料の創製～

【担当教員】（理学研究院・国際連携機構）



教授 松井 雅樹
(理学研究院)



准教授 小林 弘明
(理学研究院)



助教 奈須 滉
(理学研究院)



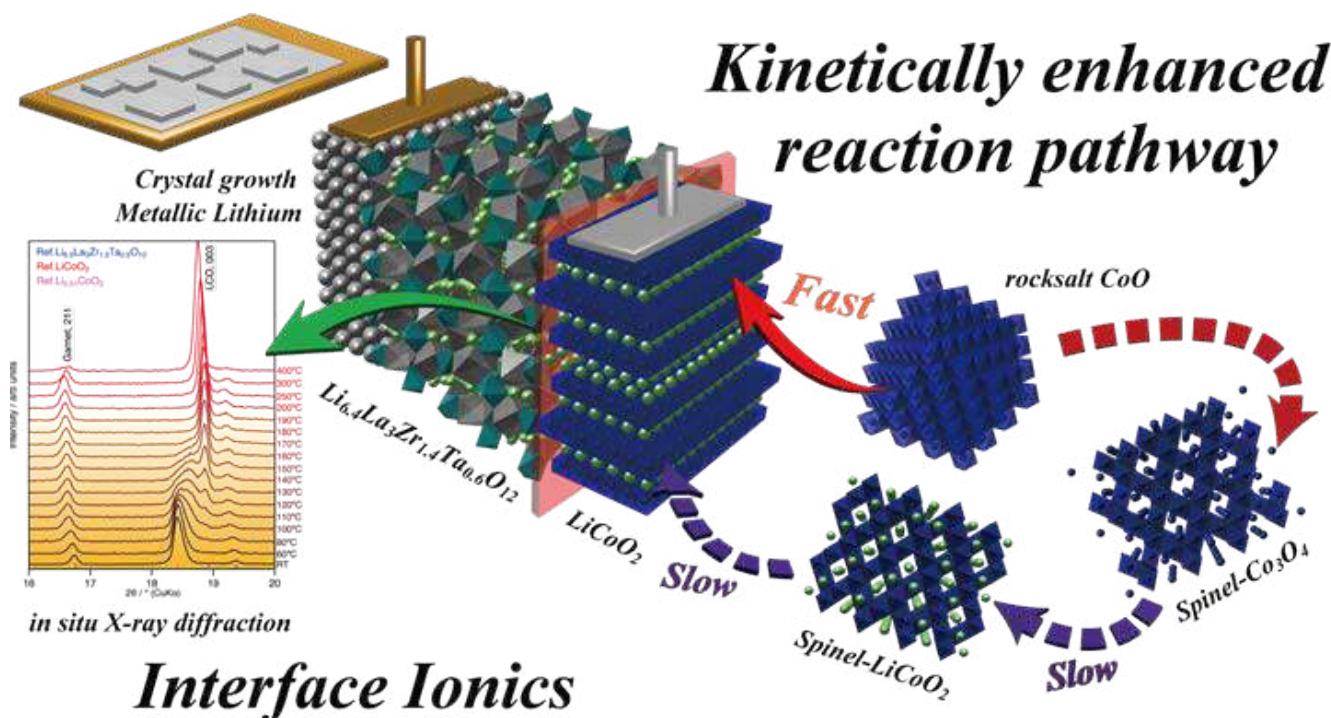
助教 孫 宇
(国際連携機構)

【研究室の目標】

新規固体イオニクス材料の創製と次世代蓄電池への応用

【主な研究テーマ】

マグネシウム・ナトリウム蓄電池用新規固体イオニクス材料の探索、複合金属酸化物・硫化物の相関係と低温合成プロセスの開発、卑金属電析における結晶成長機構の理解とその制御



【主な授業科目】無機化学先端講義、世界を先導する分子化学 IIIA (HSI)

【大学院生数】修士7名、博士1名

【教育・研究成果】

<主な受賞>電池技術委員会賞、電気化学会進歩賞（佐野賞）、Best Poster Presentation Award (ACSSI-2024) <主な外部資金>科研費：基盤研究(B)・若手研究・新学術領域研究（計画研究）；JST：GteX・未来社会創造事業(探索加速型)；NEDO：SOLiD-Next・官民による若手研究者発掘支援事業；ERCA：環境研究総合推進費 <論文>原著論文9報、著書（分担）2編

【代表的な発表論文・著書】

- Trigger of the Highly Resistive Layer Formation at the Cathode–Electrolyte Interface in All-Solid-State Lithium Batteries Using a Garnet-Type Lithium-Ion Conductor. Kana Onoue, Akira Nasu, Kazuhiko Matsumoto, Rika Hagiwara, Hiroaki Kobayashi, Masaki Matsui,* *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **15**, 52333–52341 (2023).
- Kinetically Enhanced Reaction Pathway to Form Highly Crystalline Layered LiCoO₂ at Low Temperatures Below 300 °C. Rannosuke Maeda, Ryo Nakanishi, Minoru Mizuhata, Masaki Matsui,* *Inorg. Chem.*, **62**, 18830–18838 (2023).
<プレスリリース>蓄電池材料を省エネルギーで合成する手法の開発に成功



【講座・研究室名】 無機物質化学講座・構造無機化学研究室
《キャッチコピー》～ 窒素と酸素を制御する無機固体～

【担当教員】（工学研究院）



特任准教授 樋口 幹雄



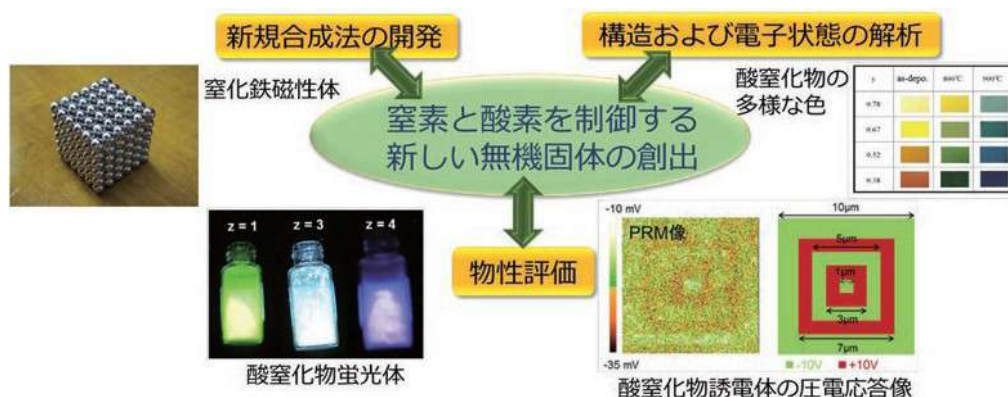
准教授 鱒淵 友治

【研究室内の目標】

新しい無機固体である金属窒化物、酸窒化物および複金属酸窒化物を創出する。それらがもつ大きな磁性や誘電性、特異な超伝導性、様々な蛍光の発現機構を、その結晶構造および微構造、電子構造などと関連付けて理解する。

【主な研究テーマ】

機能性セラミックス材料の創製、セラミックスの形態制御と構造・機能評価、酸窒化物の創製と結晶構造解析および光学的・電磁氣的・化学的機能の評価



【主な授業科目】 無機材料化学特論、応用物質化学

【大学院生数】 修士 7名

【教育・研究成果】

＜主な外部資金＞ 英知を結集した原子力科学技術・人材育成推進事業(樋口准教授)、科研費学術変革A公募、研究助成金・旭硝子財団、(鱒淵准教授)、など

＜論文数＞ 原著論文 6 報

【代表的な発表論文・著書】

Y. Masubuchi, "Novel synthetic approaches and morphological design of perovskite-type oxynitrides in powder and ceramic form." Prog. Solid State Chem., 73 (2024) 100440/1-9.

A. Hosono, Y. Masubuchi, M. Higuchi, S. Kikkawa, "Ferroelectric BaTaO₂N perovskite - Towards structure-property relationship study on high-quality crystals and ceramics prepared with the aid of liquid phase." Solid State Sci., 144 (2023) 107310/1-10.

H. Sibuya, Y. Masubuchi, M. Higuchi, "Effect of BaCl₂ flux on low temperature synthesis of Ba₃Si₆O₁₂N₂:Eu phosphors from BaCN₂ and SiO₂." J. Ceram. Soc. Jpn., 131 (2023) 565-568.

A. Wakabayashi, Y. Masubuchi, M. Higuchi, J. Ueda, S. Tanabe, "Temperature Dependence of Luminescence Color of Mn²⁺-doped ZnCN₂ Phosphor." Mater. Lett., 346 (2023) 134555/1-3

H. Takeuchi, D. Miyamoto, Y. Masubuchi, M. Higuchi, K. Ishii, T. Uchikoshi, "Preparation of thick dense ceramic films of dielectric BaTaO₂N through electrophoretic deposition," Ceram. Int., 46 (2023) 21825-21829.



【講座・研究室名】無機物質化学講座・無機合成化学研究室
《キャッチコピー》～ 高機能無機材料創製 ～

【担当教員】（工学研究院）



教授 忠永 清治



准教授 三浦 章



助教 藤井 雄太

【研究室の目標】

環境・エネルギー問題の解決に貢献できる高機能なセラミックスの創製を目指しています。材料設計による新規組成無機材料の創製や、液相を中心とする様々な合成法を駆使した、薄膜、複合体、焼結体、微粒子などの様々な形態の無機材料の合成と高機能発現を目指しています。

【主な研究テーマ】

- ・全固体リチウム二次電池用無機材料の合成と評価
- ・新規無機化合物の開発
- ・溶液法による機能性薄膜の合成
- ・窒化物・酸窒化物の低温合成
- ・電極触媒用材料の開発



【主な授業科目】無機材料化学特論、物質構造解析学特論、応用化学学生実験Ⅱ

【大学院生数】修士 11名、博士 2名

【教育・研究成果】

＜学生 activity＞ALPプログラム生1名 ＜受賞＞2023年度 フロンティア材料研究所学術賞（研究奨励部門）（三浦准教授）、2024年電気化学会論文賞（中里亮介・博士研究員他）、2023年日本セラミックス協会年会ポスター発表賞・優秀賞（中里亮介・博士研究員）、日本セラミックス協会秋季シンポジウム特定セッション優秀若手発表賞（牧紘太郎・M2）など ＜主な外部資金＞科研費・基盤研究B（代表）・JST- SICORP日本-EU共同研究（代表）・JST革新的GX技術創出事業(GteX) 革新的要素技術研究（代表）（忠永教授）、JSTさきがけ（代表）・科研費・基盤研究B（代表）・国際共同研究加速 基金（国際共同研究強化(B)）（代表）・JST革新的GX技術創出事業(GteX) 蓄電池領域（分担）（三浦准教授）など ＜論文＞原著論文13 報、総説1編、著書（分担執筆）2編

【代表的な発表論文】

1. Synthesis of lithium oxy-thiophosphate solid electrolytes with $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ structure by a liquid phase process using 2-propanol, S. Shiba, A. Miura, Y. Fujii, K. Tadanaga, K. Terai, F. Utsuno, H. Higuchi, *RSC Adv.*, **13**, 22895-22900 (2023).
2. CO_2 Electrochemical Reduction with Zn-Al Layered Double Hydroxide-Loaded Gas-Diffusion Electrode, R. Nakazato, K. Matsumoto, N. Yamaguchi, M. Cavallo, V. Crocella, F. Bonino, M. Quintelier, J. Hadermann, N.C. Rosero-Navarro, A. Miura, K. Tadanaga, *Electrochemistry*, **91**, 097003 (2023).
3. Stability and Metastability of Li_3YCl_6 and Li_3HoCl_6 , H. Ito, Y. Nakahira, N. Ishimatsu, Y. Goto, A. Yamashita, Y. Mizuguchi, C. Moriyoshi, T. Toyao, K. Shimizu, H. Oike, M. Enoki, N.C. Rosero-Navarro, A. Miura, K. Tadanaga, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **96**, 1262-1268 (2023).
4. Nitrogen-Rich Molybdenum Nitride Synthesized in a Crucible under Air, M. Demura, M. Nagao, C.H. Lee, Y. Goto, Y. Nambu, M. Avdeev, Y. Masubuchi, T. Mitsudome, W. Sun, K. Tadanaga, A. Miura, *Inorg. Chem.*, **63**, 4989-4996 (2024).



【講座・研究室名】 無機物質化学講座・固体反応化学研究室
 《キャッチコピー》 ～ 新しい構造・機能を持つ固体とデバイスをつくる ～

【担当教員】 (工学研究院)



教授 島田 敏宏



助教 横倉 聖也



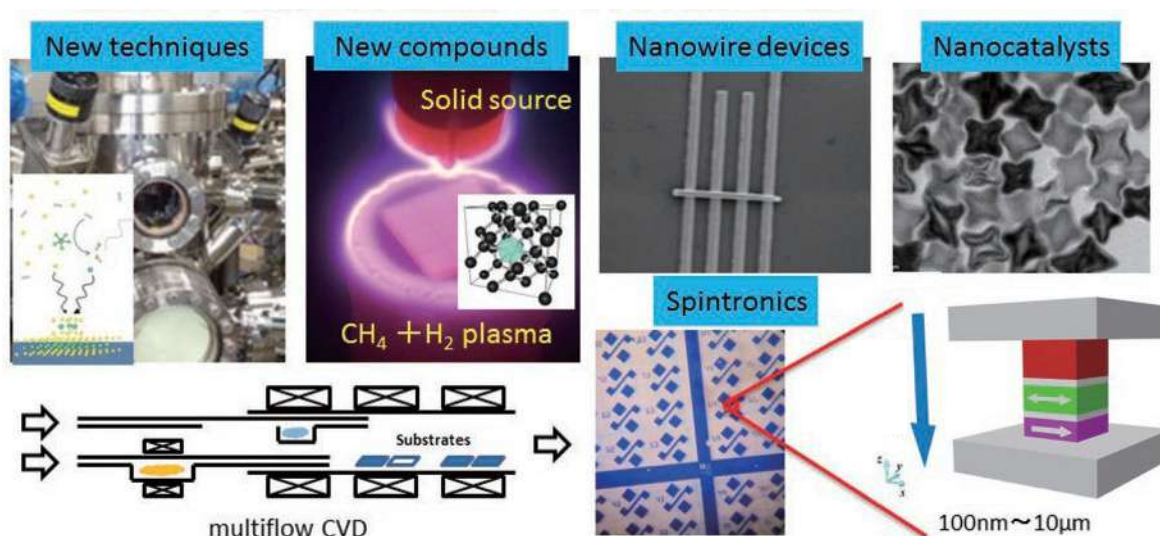
助教 和泉 廣樹

【研究室の目標】

新しい構造・機能を持つ固体の合成法を開拓する。原子レベルで制御した結晶成長技術を用いてデバイスを作製し新機能・新現象を追求する。

【主な研究テーマ】

新しい炭素同素体および関連物質の実験的探索、スピントロニクス、層状物質薄膜・ナノチューブの合成法の開発とデバイス応用、有機および無機デバイスにかかわる新現象の探究



【主な授業科目】 応用化学特別講義 (Hokkaido Summer Institute) 3件(1件分担)
 応用物質化学A (機能固体化学), 実践的計算化学(分担)

【大学院生数】 修士 8名、博士 2名

【教育・研究成果】

<学生activity> 日本学術振興会特別研究員 1名 <受賞> なし <外部資金> NEDO (島田教授)、科研費・若手研究 (横倉助教) <論文数等> 原著論文8 報、総説・解説1報

【代表的な発表論文・著書】

Yuki, T.; Yokokura, S.; Jin, M.; Waizumi, H.; Nagahama, T.; Shimada, T., Pitched π -stacking crystal structure and two-dimensional electronic structure of acenaphtho[1,2-k]fluoranthene analogues with various substituents, *Crystal Growth and Design* 24, 1849-1856 (2024).

Yanase, T.; Ebashi, M.; Takamura, K.; Chikamatsu, A.; Hirose, Y.; Ise, W.; Waizumi, H.; Shimada, T., Unidirectional growth of epitaxial tantalum disulfide triangle crystals grown on sapphire by chemical vapour deposition with a separate-flow system, *CrystEngComm* 26, 341-348 (2024).

Tanoguchi, H.; Yuki, T.; Yokokura, S.; Yanase, T.; Jin, M.; Ito, H.; Nagahama, T.; Shimada, T., Single Crystal Growth of Cyclopenta-Fused Polycyclic Aromatic Hydrocarbon by the Naphthalene Flux Method: 2D Ambipolar Charge Transport Properties and NIR Absorption, *ACS Applied Electronic Materials* 5, 6266-6274 (2023).



【講座・研究室名】

無機物質化学講座・光電子ナノ材料研究分野

《キャッチコピー》 ～ナノ構造と光・電子が結びつく界面を利用した新デバイス・新材料の創成～

【担当教員】（電子科学研究所）



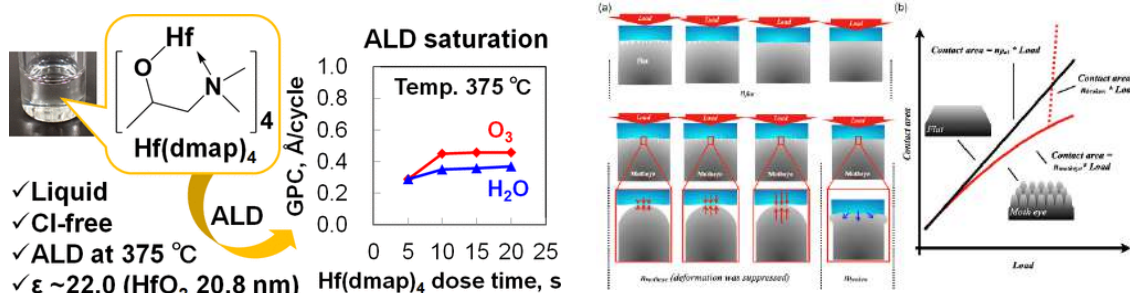
教授 松尾保孝

【研究室の目標】

様々な微細加工法により界面/表面にマイクロ～ナノメートルスケールの微小構造を作製し、光や電子を結びつけることで新規の高誘電体材料の創製、特殊な物理化学現象を誘起するデバイスの開発を目指しています。

【主な研究テーマ】

ナノ加工技術を用いた新規のナノ構造表面/界面によるレーザー誘起質量分析チップの開発。超撥水・低摩擦等の物理現象を誘起するナノ構造表面の創製。原子層堆積法による新規の酸化物・窒化物薄膜の創製。



【主な授業科目】物質化学Ⅲ（ナノフォトンクス材料論）、ナノ物性化学

【大学院生数】修士 3名、博士 2名

【教育・研究成果】

＜主な外部資金＞科研費・基盤研究S「量子コヒーレント強結合を発現する革新的光反応場の構築とその学理攻究」（分担・松尾教授）、科研費・挑戦的萌芽研究「全バイオマス由来ナノ血炭電極触媒の創製と次世代電池への展開」（分担・松尾教授）

＜論文数等＞ 原著論文数 9報

【代表的な発表論文・著書】

Y. Shimada, K. Tsujioka, Y. Matsuo, M. Shimomura, Y. Hirai: "Influencing role of anisotropic metal microstructures on friction force", *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 768 (5): 158–167 (2024)

Di Zhang, Yutaro Hirai, Koki Nakamura, Koju Ito, Yasutaka Matsuo, Kosuke Ishibashi, Yusuke Hashimoto, Hiroshi Yabu, Hao: "Benchmarking pH-field coupled microkinetic modeling against oxygen reduction in large-scale Fe-azaphthalocyanine catalysts", *Chemical Science*, 15 (14): 5123–5132 (2024)

Kuang-Li Lee, Hsien-San Hou, Xu Shi, Meng-Lin You, Ming-Yang Pan, Yasutaka Matsuo, Ji-Yen Cheng, Hiroaki Misawa: "Aluminum-Coated Nanoridge Arrays with Dual Evanescent Wavelengths for Real-Time and Label-Free Cellular Analysis", *The Journal of Physical Chemistry C*, 128 (8): 3384–3392 (2024)

Akihiro Nishida, Tsukasa Katayama, Yasutaka Matsuo: "Atomic Layer Deposition of HfO_2 Films Using Tetrakis(1-(N,N-dimethylamino)-2-propoxy)hafnium [$\text{Hf}(\text{dmap})_4$] for Advanced Gate Dielectrics Applications", *ACS Appl. Nano Mater.*, 6: 18029–18035 (2023)

Akihiro Nishida, Tsukasa Katayama, Yasutaka Matsuo: "Atomic layer deposition of Y_2O_3 films using a novel liquid homoleptic yttrium precursor tris(sec-butylcyclopentadienyl)yttrium [$\text{Y}(\text{sBuCp})_3$] and water", *RSC Adv.*, 13: 27255–27261 (2023)



【講座・研究室名】 無機物質化学講座・ナノセラミックス研究室（連携分野）

《キャッチコピー》 ～ マルチスケール解析による高機能セラミックス創製～

【担当教員】（国立研究開発法人 物質・材料研究機構）



客員教授 桑田 直明



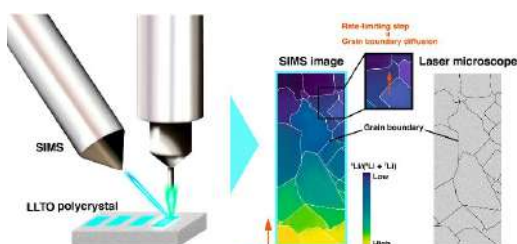
客員准教授 久保田 圭

【研究室の目標】

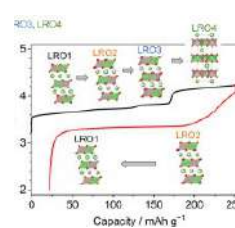
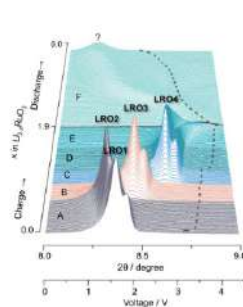
リチウムイオン電池、全固体電池などに利用されているセラミックス材料の機能を飛躍的に向上させるために、ナノからマイクロオーダーでのマルチスケール解析による機能発現機構の解明を行っています。さらに、その知見を基にした新物質の探索やイオン輸送材料の根幹となるイオンダイナミクスの解明にも精力的に取り組んでいます。

【主な研究テーマ】

全固体電池の界面制御、イオンダイナミクス解明、蓄電池劣化機構解明、オペランド計測、新奇セラミックス材料合成、結晶構造解析



リチウム同位体拡散の可視化
J. Mater. Chem. A, 12, 731 (2024).



オペランドXRD測定
Energy Storage Mater., 63, 103051 (2023).

【主な授業科目】 応用物質化学（応用材料化学II）

【大学院生数】 博士 2名

【教育・研究成果】

＜主な外部資金＞ 科研費基盤(B)（代表）（桑田教授），科研費新学術（分担）（桑田教授），JST GteX（分担）（桑田教授・久保田准教授），NEDO SOLiD Next（分担）（桑田教授），文科省マテリアライズ（分担）（桑田教授），JST 共創の場（分担）（桑田教授）

＜論文数等＞ 原著論文 10報 レビュー 0 報

【代表的な発表論文・著書】

1. K. Kubota, T. Asari and S. Komaba, *Adv. Mater.*, **35**, 2300714 (2023).
2. D. Igarashi, Y. Tanaka, K. Kubota, R. Tatara, H. Maejima, T. Hosaka and S. Komaba, *Adv. Energy Mater.*, **13**, 11 (2023).
3. M. Calpa, K. Kubota, E. Mizuki, M. Ono, S. Matsuda and K. Takada, *Energy Storage Mater.*, **63**, 7, 103051 (2023).
4. T. Hosaka, K. Kubota and S. Komaba, “7.04 - Electrode materials for K-ion batteries”, *Comprehensive Inorganic Chemistry III (Third Edition)*, J. Reedijk and K. R. Poepelmeier Editors, p. 83, Elsevier, Oxford (2023).
5. G. Hasegawa, N. Kuwata, K. Hashi, Y. Tanaka, K. Takada, “Lithium-Ion Diffusion in Perovskite-Type Solid Electrolyte Lithium Lanthanum Titanate Revealed by Pulsed-Field Gradient Nuclear Magnetic Resonance”, *Chem. Mater.*, **35** (2023) 3815-3824.
6. N. Masuda, K. Kobayashi, F. Utsuno, N. Kuwata, “Electrochemical Stability of $\text{Li}_{5.4}(\text{PS}_4)(\text{S}_{0.4}\text{Cl}_{1.0}\text{Br}_{0.6})$ in an All-Solid-State Battery Comprising LiNbO_3 -Coated $\text{Li}(\text{Ni}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1})\text{O}_2$ Cathode and Lithium Metal Anode”, *J. Electrochem. Soc.*, **170** (2023) 090529.
7. N. Yoshida, N. Kuwata, G. Hasegawa, K. Takada, “Liquid phase penetration sintering of garnet-type solid electrolyte LLZTO”, *Solid State Ionics*, **403** (2023).
8. G. Hasegawa, N. Kuwata, T. Ohnishi, K. Takada, “Visualization and evaluation of lithium diffusion at grain boundaries in $\text{Li}_{0.29}\text{La}_{0.57}\text{TiO}_3$ solid electrolytes using secondary ion mass spectrometry”, *J. Mater. Chem. A*, **12** (2024) 731-738.



【講座・研究室名】 無機物質化学講座・応用材料化学研究室（連携分野）

《キャッチコピー》 ～エネルギー・環境材料の応用化学，データ駆動型のフロープロセス開発～

【担当教員】（産業技術総合研究所）



客員教授 木嶋 倫人



客員教授 陶 究

【研究室の目標】

国立研究開発法人産業技術総合研究所 省エネルギー研究部門では、材料特性と結晶構造との関係について理解を深めながら無機固体化学を基礎とした材料設計を行い、新しいエネルギー・環境材料の開拓とそのナノ材料合成技術の研究を行っています。また、化学プロセス研究部門では、ナノ粒子、ポリマーコンポジット、化成品など機能性材料のフロー製造プロセスの開発をデータ駆動により高速化するための研究を進めています。

【主な研究テーマ】

ナノ酸化物材料の液相合成技術とエネルギー・環境材料への応用

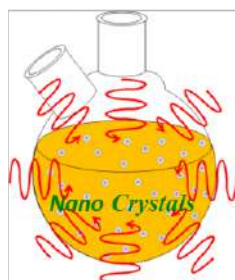
電池材料等に使用される新規結晶材料の開拓と結晶構造解析・特性評価

機能性材料開発を高速化するための自動運転と自動データ蓄積が可能な独自フローシステムの開発

材料製造プロセス開発に不可欠な流体物性の測定や計算技術の開発

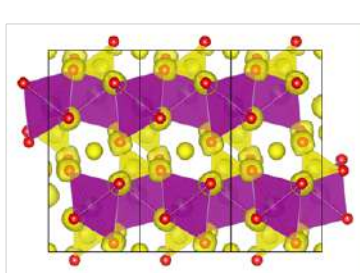
エネルギー・環境材料の応用化学

マイクロ波 ソルボサーマル合成

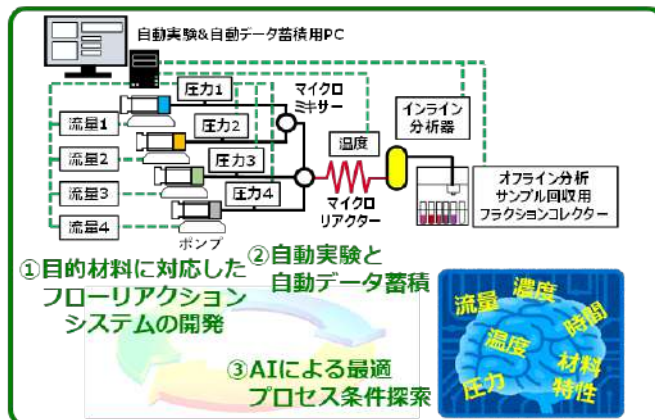


結晶構造解析

X-ray and Neutron Diffraction



データ駆動型のフロープロセス開発



【主な授業科目】 応用物質化学（応用材料化学Ⅰ）

【教育・研究成果】

省エネルギー研究部門 <https://unit.aist.go.jp/ieco/>

化学プロセス研究部門 <https://unit.aist.go.jp/cpt/>

【代表的な発表論文・著書】

T. Ono, Y. Takebayashi, T. Kashiwagi, K. Sue, “Data-Driven Optimization of Au Nanoparticle Synthesis with Automated Flow Microreaction System”, *Journal of Chemical Engineering of Japan*, **2023**, 56(1), 2211125.

K. Sue, A. Kölbl, M. Kraut, R. Dittmeyer, “A Microstructured Cover Flow Mixer for Hydrothermal Synthesis of ZnO Nanoparticles in Supercritical Water”, *Journal of Chemical Engineering of Japan*, **2023**, 56(1), 2197465.

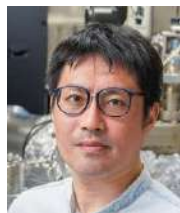
物質化学コース

エネルギー材料化学研究室

【講座・研究室名】 先端物質化学講座・エネルギー材料化学研究室

【キャッチコピー】 ～ 無機イオニクスデバイスによる低炭素技術課題の解決 ～

【担当教員】（工学研究院）



教授 青木 芳尚



特任准教授 田地川 浩人

【研究室の目標】

エネルギー分野で使用される無機イオン伝導体や半導体材料などを対象とし、無機材料化学、分光学的手法、および量子化学計算により、新規材料の創製とそれらを用いた電気化学デバイスの高機能化により、革新的な低炭素技術の開拓を行う。

【主な研究テーマ】

ヒドライドイオン/プロトン-パイポーラー無機イオン伝導体の創製／フォトイオニクスデバイス創製／無機固体酸化物セルを用いた水蒸気電解によるグリーン水素生成／無機固体電解セルによる水を水素源とした CO_2 →合成燃料転換／量子動力学法による新規電子化学材料の分子設計／分子軌道計算による導電性電子材料の理論設計

【主な授業科目】

【大学院生数】 博士1名、修士 5名

【教育・研究成果】

<学生 activity>国内外での国際会議参加数（7） <論文数等>原著論文数（10）

【代表的な発表論文・著書】

(1) H. Tachikawa: C-C Bond Formation Reaction Catalyzed by a Lithium Atom: Benzene-to-Biphenyl Coupling

ACS Omega 8, 11, 10600 (2023)

DOI: 10.1021/acsomega.3c00520

(2) H. Tachikawa, Y. Izumi, T. Iyama, S. Abe and I. Watanabe: Aluminum-Doping Effects on the Electronic States of Graphene Nanoflake: Diffusion and Hydrogen Storage Mechanism

Nanomaterials 13, 2046 (2023)

DOI: 10.3390/nano13142046

(3) H. Kawabata and H. Tachikawa: Theoretical study of the relationship between the electronic structure of carbon nanotube surface and its hydrogenation sites

App. Phys. Express 16, 061006 (2023)

DOI: 10.35848/1882-0786/acddcb

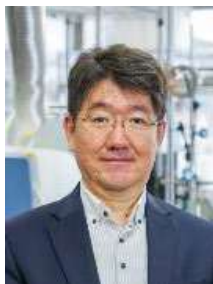


【講座・研究室名】 先端物質化学講座・界面電子化学研究室
《キャッチコピー》 ～ 機能性薄膜・ナノ材料の創製 ～

【担当教員】 〈工学研究院〉



教授 幅崎 浩樹



准教授 伏見 公志



助教 岩井 愛



特任助教 北野 翔

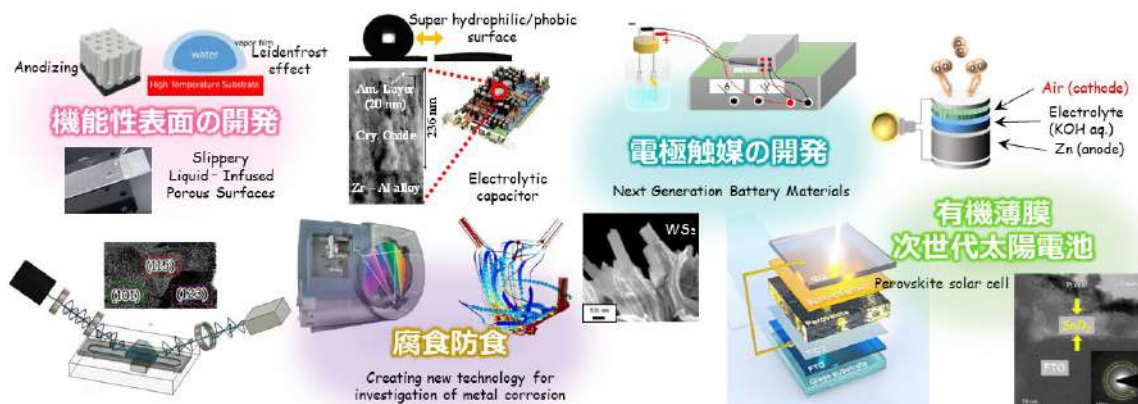
【研究室の目標】

電気化学および化学的手法を用いて機能性酸化物ナノ薄膜・酸化物ナノポーラス膜・ナノ材料を合成し、また先端電気化学計測評価技術を開発し、環境・エネルギー・資源問題解決への貢献を目指しています。

【主な研究テーマ】

次世代燃料電池・蓄電池用材料の創製

金属のアノード酸化を利用した機能性薄膜の創製とその生成機構に関する研究超撥水・超撥油表面の創製と応用
 高強度金属材料の実用化、社会インフラ維持管理に貢献する先駆的電気化学計測・評価技術の開発と適用



【主な授業科目】 エネルギー材料特論，応用物質化学（界面電子化学）

【大学院生数】

修士 10名、博士 3名

【教育・研究成果】

〈学生 activity〉 ALPプログラム生 1名〈受賞〉優秀講演賞4件，〈主な外部資金〉科研費、JST GteX、文科省プロジェクト 等、〈論文数〉12報

【代表的な発表論文・著書】

- T. Kondo, H. Matsuya, H. Habazaki, "Element Distribution in Porous Ga Oxide Obtained by Anodizing Ga in Phosphoric Acid", J. Electrochem. Soc. 170 (2023) 081501.
 H. Matsuya, D. Quintero, S. Kitano, H. Habazaki, "Structure and Electric Properties of Anodized Aluminum with PEDOT:PSS Conductive Polymer Cathode", ECS J. Solid State Sci. Technol. 12, 073002 (2023).
 L. Fadillah, D. Kowalski, M. Vincent, C. Zhu, S. Kitano, Y. Aoki, H. Habazaki, Lithiation of anodic magnetite-hematite nanotubes formed on iron, ACS Appl. Mater. Interfaces, 15 (2023) 52563-52570.
 A. Fujimura, S. Shoji, Y. Kitagawa, Y. Hasegawa, T. Doi, K. Fushimi, "Investigation of the dissolution/passivation mechanisms on Fe-Cr alloys in acidic Na₂SO₄ solution using online ICP-OES", Electrochim. Acta, 463 (2023) 142843.
 K. Fushimi, H. Yanagimoto, S. Nakatsuji, S. Shoji, Y. Kitagawa, Y. Hasegawa, K. Baba, "Initiation of Sulfide Stress Cracking Using Potentiostatic Liquid-Phase Ion Gun", J. Electrochem. Soc., 170 (2023) 041508.
 K. Fushimi, T. Takano, Y. Govindaraj, R. Saito, M. Sakairi, "Miniature pH Detection Probe for In-situ Monitoring of Cement Paste Inside", Electrochim. Acta, 441 (2023) 141776.



【講座・研究室名】 先端物質化学講座・先端材料化学研究室
 《キャッチコピー》～ 光化学と電気化学を駆使した材料開発・解析 ～

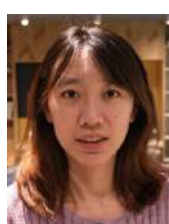
【担当教員】（工学研究院）



教授 長谷川 靖哉



准教授 北川 裕一



特任助教 WANG MENGFEI

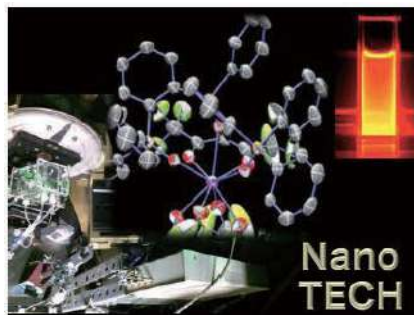
【研究室内の目標】

現代社会は多くの先端科学技術によって支えられています。この先端科学技術を発展させるため、光化学を基盤とした先端材料化学の研究を推進しています。

【主な研究テーマ】

光機能を有する物質開発（錯体、配位高分子）、特異な発光特性を示す光学材料の開発

【主な授業科目】



化学計測学特論、応用物質化学（先端材料化学）

【大学院生数】

修士 10名、博士 2名

【教育・研究成果】

＜学生 activity＞口頭発表賞・国内 3件、ポスター賞・国内 5件 国際 0件、＜主な外部資金＞ 基盤研究B(長谷川教授)、基盤研究B(北川准教授) など、＜論文数＞原著論文 15報、総説・解説 1報、特許出願 1件

【代表的な発表論文・著書】

M. Tsurui, R. Takizawa, Y. Kitagawa, M. Wang, M. Kobayashi, T. Taketsugu, Y. Hasegawa, Chiral Tetrakis Eu(III) Complexes with Ammonium Cations for Improved Circularly Polarized Luminescence, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, e202405584.

M. Wang, M. Kono, Y. Yamaguchi, J. Islam, S. Shoji, Y. Kitagawa, K. Fushimi, S. Watanabe, G. Matsuba, A. Yamamoto, M. Tanaka, M. Tsuda, S. Tanaka Y. Hasegawa, Structure-changeable Luminescent Eu(III) Complex as a Human Cancer Grade Probing System for Brain Tumor Diagnosis, *Sci. Rep.* **2024**, 14, 778.

Y. Kitagawa, K. Shima, T. Nakai, M. Kumagai, S. Omagari, P. P. F. da Rosa, S. Shoji, K. Fushimi, and Y. Hasegawa, Thermally-Assisted Photosensitized Emission in a Trivalent Terbium Complex, *Communications Chemistry* **2023**, 6, 122.

【講座・研究室名】 先端物質化学講座・物質化学研究室

《キャッチコピー》 ～ 分子情報操作が生み出す新機能材料 ～



【担当教員】（理学研究院）



教授 佐田 和己



准教授 三浦 篤志



准教授 小林 厚志



助教 松岡 慶太郎



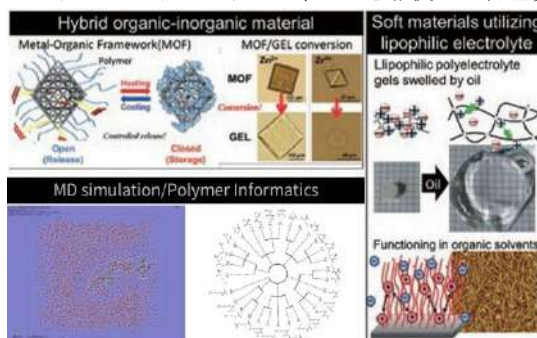
助教 堤 拓朗

【研究室の目標】

我々は積極的に数種ないしは十数種類の化合物から成る混合物を作り、それぞれの成分単独ではなし得ることができない機能・構造・反応を作り出すこと（創発）を目指し研究を行っています。そのために、有機化学・高分子化学・物理化学・計算化学などの知識を総動員して、「複雑系」にチャレンジし、生命の本質に迫ろうと思っています。

【主な研究テーマ】

刺激応答性高分子のデノボデザイン、親油性電解質を用いたソフトマテリアルの開発、多孔性結晶の事後修飾による結晶架橋法、計算化学・マテリアルズインフォマティクスを駆使した物理現象の発見と理解



【主な授業科目】基礎物理化学、物質電子論、物質化学A（ナノ物質化学）、無機化学特論

【大学院生数】修士 10名、博士 2名

【教育・研究成果】

<学生 activity> 口頭発表賞 国内 0件、国際 0件、ポスター賞 国内 2件<主な外部資金> 基盤研究（B）（佐田教授）、（小林准教授）、若手研究、JST ACT-X（堤助教）<論文数> 原著論文 10報、総説・解説・著書 1件

【代表的な発表論文・著書】

H. Inaba, Y. Hori, M. R. Kabir, A. Kakugo, K. Sada, K. Matsuura, “Construction of Silver Nanoparticles inside Microtubules Using Tau-Derived Peptide Ligated with Silver-Binding Peptide” *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **96**, 1082-1087. (2023).

H. Kuramochi, T. Tsutsumi, K. Saita, Z. Wei, M. Osawa, P. Kumar, L. Liu, S. Takeuchi, T. Taketsugu, T. Tahara, “Ultrafast Raman observation of the perpendicular intermediate phantom state of stilbene photoisomerization” *Nat. Chem.*, **16**, 22-27 (2024)

A. Kobayashi, “Photoredox Cascade Catalyst for Efficient Hydrogen Production with Biomass Photoreforming” *Angew. Chem. Int. Ed.*, **62**, e202313014 (2023)



【講座・研究室名】 先端物質化学講座・インタラクション機能材料研究室
 《キャッチコピー》 人や環境と相互作用する電子材料・デバイスを科学する

【担当教員】（電子科学研究所）



教授 長島 一樹 助教 ナラトン ケマシリ

【研究室の目標】

当研究室では、化学情報の収集と活用へ向けて、堅牢性と分子認識能を兼ね備えたインタラクティブなエレクトロニクス材料・デバイスを原子・分子レベルで設計・創出すると共に、マテリアル・デバイス・データに跨る融合サイエンスを展開し、化学情報による新しい価値の創造に挑戦します。

【主な研究テーマ】

空間選択的自己集合による無機ナノ材料の構造-組成-機能設計とデバイス展開，堅牢性と分子認識能を兼ね備えた無機/有機ナノセンサ材料の開発，集積化人工嗅覚センサおよび匂いのデジタル化，匂いによる生体化学情報の収集-解析-利活用



【主な授業科目】 総合化学特論 I

【大学院生数】 修士 0 名、博士 0 名

【教育・研究成果】

<学生 activity>学会発表国際 6 件・国内 2 件 (B4 学生 2 名の業績) <受賞>Best Poster Award・The 24th RIES-Hokudai International Symposium (風間勇汰(B4)) <主な外部資金>基盤研究 B, 挑戦的研究(萌芽), JST AIP 加速課題 (長島一樹), 研究活動スタート支援 (ナラトン ケマシリ) <論文数等>原著論文 5 報, 総説・解説・著書 3 件

【代表的な発表論文・著書】

K. Sitthisuwannakul, R. Sukthai, Z. Zhu, K. Nagashima, K. Chattrairat, S. Phanthanawiboo, A. Klamchuen, S. Rahong, Y. Baba and T. Yasui, “Urinary dengue NS1 detection on Au-decorated ZnO nanowire platform”, *Biosens. Bioelectron.* **2024**, 254, 116218.

長島一樹, “生体センシング技術開発の現状と研究開発のポイント” 第 5 章 第 1 節: 呼気センシングによる生体認証の技術開発 pp145-156. (情報機構)



【講座・研究室名】 物質機能化学講座・界面エネルギー変換材料化学研究室（連携分野）
 《キャッチコピー》 ～ 固／液／生体界面を科学する ～

【担当教員】（物質・材料研究機構）



客員教授 野口 秀典



客員教授 岡本 章玄

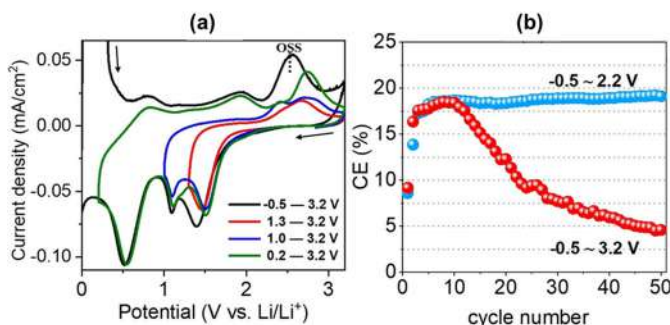
【研究室の目標】

界面エネルギー変換材料化学研究室では、電子移動が主役を演じる固体/溶液/生体界面で化学反応を主な対象として、電極触媒、二次電池関連電極反応、および生体機能に着目した触媒材料の開発、ならびに電気細菌そのものを電極触媒とした固液界面エネルギー変換反応に関する基礎的研究を行っています。このような界面反応への基礎的理解を通して、エネルギー問題の解決を目指します。

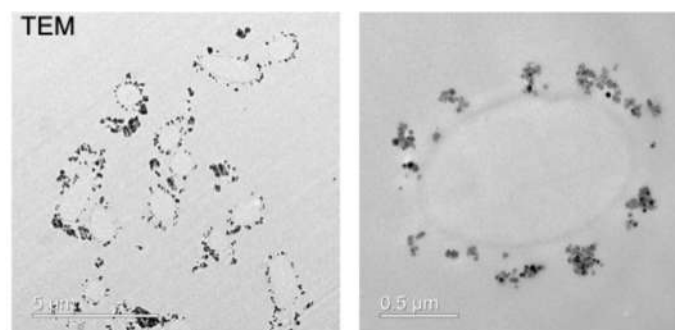
【主な研究テーマ】

- ・ 燃料電池用電極触媒の構築と特性評価
- ・ 次世代二次電池の正極、負極反応の解明
- ・ 超高速分光法による界面電子移動過程の追跡
- ・ 発電細菌を用いた生体電子移動機構の解明
- ・ 病原細菌の電気化学的制御法の開発

無負極リチウム金属電池用エーテル系希薄電解液における リチウムめっき/剥離効率に関する研究



- (a) Li||Cu セルの 50 サイクル CV カーブ。電位範囲：-0.5~3.2V 対 Li/Li⁺、スキャンレート：10 mV s⁻¹。
 (b) c) 50 サイクルまでの 2 つの電位範囲（-0.5~3.2 V および -0.5~2.2 V vs. Li/Li⁺）における CE 性能。



開発した磁性ナノビーズが電気細菌の表面に付着していることを示す透過型電子顕微鏡像。このナノ材料を用いることで、環境サンプルから電気細菌を従来の100倍以上の時間で濃縮することに成功した。

【主な授業科目】 先端総合化学特論II

【大学院生数】 博士4名

【教育・研究成果】

＜学生 activity＞国際シンポジウム 0件、＜主な外部資金＞＜論文数＞原著論文 5報、総説・解説 2報

【代表的な発表論文・著書】

1. “Li Plating/Stripping Efficiency in Ether-based Dilute Electrolyte for Anode-free Lithium-metal Batteries: Effect of Operating Potential Range on Subsequent SEI Layer Structure” Yushen Wang, **Hidenori Noguchi** Batteries & Supercaps.6 e202300359 (2023).
2. “Osmium-grafted magnetic nanobeads improve microbial current generation via culture-free and quick enrichment of electrogenic bacteria” Chia-Lun Ho, Mohammed Y Emran, Sota Ihara, Wenyan Huang, Satoshi Wakai, Wei-Peng Li, **Akihiro Okamoto**, Chemical Engineering Journal 466, 142936 (2023).



【講座・研究室名】 機能物質化学講座・超伝導材料化学研究室（連携分野）
 《キャッチコピー》 ～ 革新的材料の探求と挑戦 ～

【担当教員】（物質・材料研究機構）



客員教授 山浦 一成



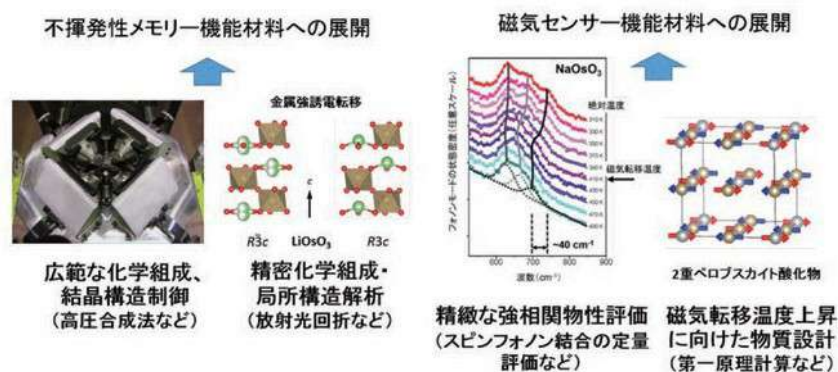
客員准教授 辻本 吉廣

【研究室内の目標】

固体酸化物などの結晶構造、化学組成、結晶形態を先進的な物質合成、精密構造解析、特性評価等を通じて多彩に変化させ、超伝導性、電子物性、磁性、ハーフメタル性などの機能性を向上させる。それらの学理を探究し、革新的な新材料のシーズを開拓する。

【主な研究テーマ】

重い金属元素を含む酸化物の機能向上と機構解明、混合アニオン化物の新物質開拓と材料化学、マルチフェロイック酸化物の機能向上



【主な授業科目】 化学特別講義（集中講義）

【大学院生数】 博士 4名

【教育・研究成果】

〈主な外部資金〉 新学術領域研究(研究領域提案型)（代表：山浦）、大倉和親記念財団（代表：山浦）、JSPS=国間交流事業（代表：山浦）、住友財団基礎科学研究助成（代表：辻本）

【代表的な発表論文・著書】

- Yan, H.; Fujii, K.; Kabbour, H.; Chikamatsu, A.; Meng, Y.; Matsushita, Y.; Yashima, M.; Yamaura, K.; Tsujimoto, Y., La₄Ga₂S₈O₃: A Rare-Earth Gallium Oxysulfide with Disulfide Ions. *Inorg. Chem.* **2023**, *62* (26), 10481-10489.
- Scatena, R.; Liu, R.; Shvartsman, V. V.; Khalyavin, D. D.; Inaguma, Y.; Yamaura, K.; Belik, A. A.; Johnson, R. D., Hybrid Improper Ferroelectricity in Columnar (NaY)MnMnTi₄O₁₂. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62* (29), e202305994.
- Kang, X.; Ishikawa, R.; Belik, A. A.; Tsujimoto, Y.; Kawata, S.; Yamaura, K., Promising Approach to Achieving a Large Exchange Bias Effect in Bulk Materials with Small Cooling Fields. *Chem. Mater.* **2023**, *35*, 8621-8628.
- Kang, X.; Ishikawa, R.; Belik, A. A.; Tsujimoto, Y.; Arai, M.; Kawata, S.; Yamaura, K., Cd₂FeReO₆: A High-*T_c* Double Perovskite Oxide with Remarkable Tunneling Magnetoresistance. *Inorg. Chem.* **2023**, *62*, 18474-18484.
- Hayashi, H.; Shirako, Y.; Xing, L.; Belik, A. A.; Arai, M.; Kohno, M.; Terashima, T.; Kojitani, H.; Akaogi, M.; Yamaura, K., Large anomalous Hall effect observed in the cubic-lattice antiferromagnet Mn₃Sb with kagome lattice. *Phys. Rev. B* **2023**, *108* (7), 075140-1-9.
- Chen, J.; He, J.; Zhang, Y.; Chariton, S.; Prakapenka, V.; Yamaura, K.; Lin, J.-F.; Goodenough, J. B.; Zhou, J. S., In situ structural determination of 3d and 5d perovskite oxides under high pressure by synchrotron x-ray diffraction. *Phys. Rev. B* **2023**, *108* (13), 134106-1-13.
- Kazama, K.; Sakano, M.; Yamagami, K.; Ohkuchi, T.; Ishizaka, K.; Tadano, T.; Kozuka, Y.; Yoshizawa, H.; Tsujimoto, Y.; Yamaura, K.; Fujioka, J., Charge transport and thermopower in the electron-doped narrow gap semiconductor Ca_{1-x}LaxPd₃O₄. *Phys. Rev. Materials* **2023**, *7* (8), 085402-1-6.

物質化学コース ナノ物性科学研究室



【講座・研究室名】 機能物質化学講座・ナノ物性科学研究室（連携分野）

《キャッチコピー》 ～「ナノ」と「光」をキーワードに新デバイス・物性を開拓～

【担当教員】（物質・材料研究機構）



客員教授 北浦 良



客員教授 白幡 直人

【研究室内の目標】

当研究室ではナノ材料・物性科学・デバイス科学を基盤とし、洗練された物質デザイン・合成、最先端の観測・計測により、ナノサイエンス・ナノテクノロジー分野に貢献する革新的な光・電子機能材料の開発、物性探索とデバイス化および医療材料応用に関する研究を行う。

【主な研究テーマ】

強発光ナノ粒子を活性層に具備するデバイス創製と該発光を導くキャリアダイナミクス
波長選択的な受光特性を示す新規量子ドットの化学合成とフォトディテクター創製
近赤外光を熱や光にエネルギー変換する水溶性量子ドットの合成と医療材料への展開
低次元ナノ構造に潜む新奇励起状態の解明
ポテンシャル制御に基づく新規量子光源の開拓
新たな自由度の制御に基づく量子技術の基盤構築

【主な授業科目】 Leading and Advanced Materials Chemistry and Engineering III (Solid State and Surface/Interface Nano Chemistry)

【大学院生数】 博士 5名

【教育・研究成果】

<主な外部資金> 科研費基盤B（白幡）、科研費基盤S（北浦）、学術変革A（北浦）

<論文数等> 原著論文数 16報、総説 3報、解説記事 2報

【代表的な発表論文・著書】

- S. Chatterjee, K. Nemoto, B. Ghosh, H. T. Sun, N. Shirahata, "A Solution-Processed InSb Quantum Dot Photodiodes for Short-Wave Infrared Sensing", *ACS Applied Nano Mater.* **2023**, 6, 15540–15550
- B. B. Zhang, J. K. Chen, C. Zhang, N. Shirahata, H. T. Sun "Mechanistic Insight into the Precursor Chemistry of Cesium Tin Iodide Perovskite Nanocrystals", *ACS Mater. Lett.* **2023**, 5, 1954–1961
- X. Huang, H. Yamada, H. T. Sun, N. Shirahata, "Solution-Processed UV Photodiodes Based on $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.35}\text{Na}_{0.65}\text{InCl}_6$ Perovskite Nanocrystals", *ACS Appl. Nano Mater.* **2023**, 6, 20389–20397
- H. Sun, N. Shirahata, "Metal–Organic Framework Scintillators Detect Radioactive Gases", *Nature Photon.* **2023**, 17, 646–647.
- Mengsong Xue, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Ryo Kitaura, "Gate-modulated reflectance spectroscopy for detecting excitonic states in two-dimensional semiconductors", *Applied Physics Letters*. **2023**, 123 [6] 063101
- Yuto Urano, Mengsong Xue, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Ryo Kitaura, "Assessment of valley coherence in a high-quality monolayer molybdenum diselenide", *Applied Physics Express* **2023**, 16 [6] 065003
- Shaochun Zhang, Mina Maruyama, Susumu Okada, Mengsong Xue, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Kazuki Hashimoto, Yasumitsu Miyata, Ruben Canton-Vitoria, Ryo Kitaura, "Observation of the photovoltaic effect in a van der Waals heterostructure. Nanoscale", **2023**, 15 [12] 5948–5953



【講座・研究室名】 機能物質化学講座・ナノ組織化材料化学研究室

《キャッチコピー》 ～ 調べる・考えるに基づく機能性材料及びデバイス構築～

【担当教員】 (物質・材料研究機構)



客員教授 吉尾 正史



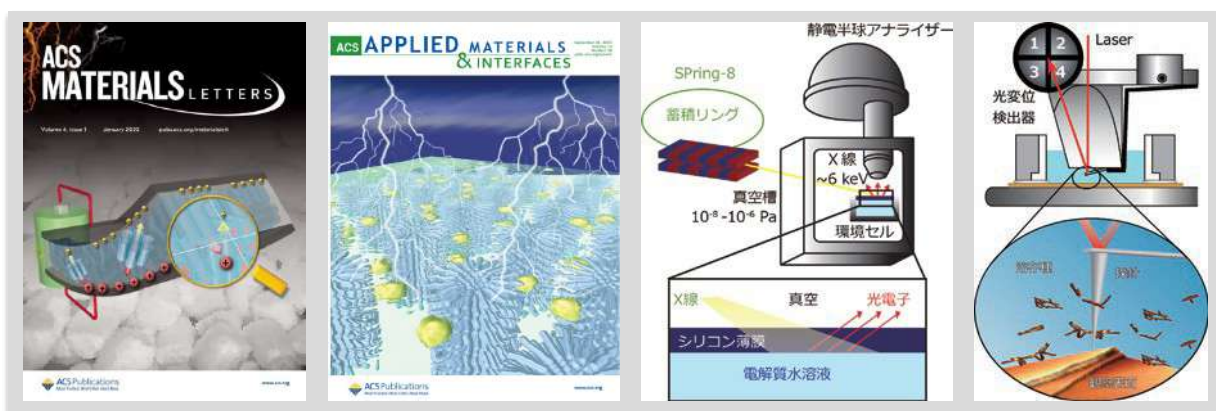
客員教授 増田 卓也

【研究室の目標】

有機高分子化学、電気化学および表面計測科学を基盤に、自己組織化能を有するイオン・電子・光機能性材料を合成し、アクチュエータ、燃料電池、二次電池および電子デバイスへの応用を目指している。独自の計測技術によって、機能発現時における幾何・電子・分子構造を解析し、機構理解に基づいた材料開発を推進する。

【主な研究テーマ】

液晶性イオン伝導体と液晶性半導体の開発、界面その場計測技術の開発と燃料電池・二次電池への応用



【主な授業科目】 Leading and Advanced Materials Chemistry and Engineering III

【大学院生数】 博士 6名 (R5.5現在)

【教育・研究成果】 <受賞>なし <主な外部資金>NEDO 燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産官学連携研究開発事業(増田)、JST 共創の場形成支援プログラム(増田)、文部科学省 Materealizeプロジェクト(増田)、JST GteX(増田)、JSPS 科研費 基盤研究(B)(吉尾)、JST さきがけ(吉尾) <論文数等>原著論文10報、総説2報、著書1報、招待講演4件など

【代表的な発表論文・著書】

R. P. Putra, K. Matsushita, T. Ohnishi, T. Masuda, “Operando Nanomechanical Mapping of Amorphous Silicon Thin Film Electrodes in All-Solid-State Lithium-Ion Battery Configuration during Electrochemical Lithiation and Delithiation”, Journal of Physical Chemistry Letters, 15 [2] (2024) 490-498.

C. Liu, S. Cao, M. Yoshio, “Ion-Conducting Non-Flammable Liquid Crystal-Polymer Composites for High-Frequency Soft Actuators”, Advanced Functional Materials, 33 [25] (2023) 2300538.