

# 研究室紹介

令和7年度

京都大学 工学部 理工化学科

理工化学科WEBサイトに掲載しています

京都大学WEBサイト> [学部・大学院]> [工学部]> [理工化学科]>  
理工化学科WEBサイト> [研究室・教員]> [研究室紹介（令和7年度）]



はじめに

新入生のみなさん、ご入学おめでとうございます。理工化学科の教職員を代表して心から歓迎いたします。理工化学科は、その教育・研究分野において世界でも有数の多様性を誇る化学系の学科です。体系的な基礎および専門教育に続いて、化学を中心とした物理・生物学などの広範な分野で先導的な研究を展開しています。その卒業生は、福井謙一博士、野依良治博士、吉野彰博士のノーベル化学賞受賞者はもとより、学術・産業の広い領域で活躍し、今日の日本の科学技術の礎を築き、世界の科学技術の進歩と社会の発展に貢献しています。

この研究室紹介は、理工化学科に関係する全ての研究室の研究内容を簡潔に紹介したものです。研究室の所在地や教員の連絡先などもあわせて記載しています。理工化学科ではチューター制度を設けていますが、みなさんを担当するチューターの連絡先も容易に調べることができます。勉強方法や進路などで疑問あるいは困ったことがあればチューターに相談してください。2年生後半からは創成化学、先端化学、化学プロセス工学の3つのコースにわかれ、それぞれのコースの特徴ある専門教育を受けることとなります。4年生になると研究室に配属されて特別研究を行うこととなります。今後のコース選択や研究室選択の際にも役に立つと思います。

本研究室紹介の各研究室の研究内容を見れば、これまでに学んできた化学という学問分野が、理工化学科で行われている教育・研究のほんの一部に過ぎないことに気づかれると思います。現代の化学は物理学、生物学や情報学等の他分野と融合し、新たな研究領域を開拓しつつあることもわかるでしょう。今後、みなさんの興味が自然科学のどの分野に広がっていったとしても、その好奇心を満たすことのできる分野は、理工化学科の中に必ず見つかるはずです。

大学での授業の形態は高校までのものとはかなり違うので最初は戸惑われるかもしれません。何をどう学ぶかも自由、しかし自由ということは、自分で責任を負うということです。大学では、学問を学ぶ側から創る側へと変質することが求められます。それが大学=Universityの本質です。みなさんが健康で有意義な学生生活を送られることを期待しています。



# 目 次

コース紹介 .....	6
創成化学コース .....	7
先端化学コース .....	11
化学プロセス工学コース .....	17
研究室紹介 .....	20
材料化学専攻	
機能材料設計学研究室 .....	21
無機構造化学研究室 .....	23
応用固体化学研究室 .....	25
有機反応化学研究室 .....	27
天然物有機化学研究室 .....	29
材料解析化学研究室 .....	31
高分子機能物性研究室 .....	33
生体材料化学研究室 .....	35
高分子化学専攻	
先端機能高分子研究室 .....	37
機能高分子合成研究室 .....	39
高分子生成論研究室 .....	41
重合化学研究室 .....	43
生体機能高分子研究室 .....	45
高分子機能学研究室 .....	47
高分子分子論研究室 .....	49
基礎物理化学研究室 .....	51
高分子物質科学研究室 (化学研究所) .....	53
高分子材料設計研究室 (化学研究所) .....	55
高分子制御合成研究室 (化学研究所) .....	57
発生システム制御研究室 (医生物学研究所) .....	59

## 物質エネルギー化学専攻

エネルギー変換化学研究室	61
工業電気化学研究室	63
機能性材料化学研究室	65
基礎炭化水素化学研究室	67
先端医工学研究室	69
触媒機能化学研究室	71
触媒有機化学研究室	73
触媒設計工学研究室	75
有機分子変換化学研究室 (化学研究所)	77
構造有機化学研究室 (化学研究所)	79
遷移金属錯体化学研究室 (化学研究所)	81
有機機能化学研究室 (物質-細胞統合システム拠点 iCeMS)	83

## 分子工学専攻

分子理論化学研究室	85
触媒反応化学研究室	87
光有機化学研究室	89
物性物理化学研究室	91
無機フォトンクス材料研究室 (化学研究所)	93
有機分子材料研究室 (化学研究所)	95
量子分子科学研究室 (福井謙一記念研究センター)	97
細孔物理化学研究室 (物質-細胞統合システム拠点 iCeMS)	99

## 合成・生物化学専攻

有機設計学研究室	101
機能化学研究室	103
物理有機化学研究室	105
有機金属化学研究室	107
生物有機化学研究室	109
分子生物化学研究室	111
生体認識化学研究室	113
生物化学工学研究室	115
分子集合体化学研究室	117

## エネルギー科学研究科

機能固体化学研究室	119
界面エネルギープロセス研究室 (エネルギー理工学研究所)	121

## 化学工学専攻

ソフトマター工学研究室	123
界面制御工学研究室	125
反応工学研究室	127
分離工学研究室	129
エネルギープロセス工学研究室	131
材料プロセス工学研究室	133
プロセスシステム工学研究室	135
環境プロセス工学研究室	137
環境安全工学研究室	139
動的界面化学研究室	141
移動現象論研究室	143

スタッフ名索引 (五十音)	145
---------------	-----

# コース紹介

## 創成化学コース

材料化学専攻  
高分子化学専攻

## 先端化学コース

物質エネルギー化学専攻  
分子工学専攻  
合成・生物化学専攻  
エネルギー科学研究科(エネルギー基礎科学専攻)

## 化学プロセス工学コース

化学工学専攻

# 創成化学コース

材料化学専攻

高分子化学専攻

## 創成化学コースの理念

「化学」という学問は、新しい物質の設計や合成、新しい現象や構造の発見、生体系の機能発現機構の探求、そしてそれらの知見に基づいた新しい材料の開発や新しい機能の付与に貢献します。実際、「化学」はより豊かでより賢明な社会、さらには循環持続する社会の実現を可能とする、人類の貴重な知恵となって発展してきました。「化学」を学び、自然の仕組みを解き明かそうとする人々に共通する感覚は次のように言い表せます。

### **物質探求の学問はますます楽しく、新たな創造の心をかき立てる**

創成化学コースは、化学の新領域の開拓者を目指す皆さんにそのような創成の知恵と文化を伝え、皆さん一人ひとりを次世代の化学と産業を担う人材へと育てることを目指して、化学を中心とする基礎的な知識、物質材料に関する知識、さらには最先端化学の知識を系統的に学ぶ課程と環境を提供します。

## 創成化学コースの教育方針

そう遠くない将来、創成の心を持って化学のフロンティアを切り拓く仲間へと成長していただくため、創成化学コースは常に「**わかる教育**」と「**顔の見える教育**」を目指しています。研究の最前線では、蓄えた知識に基づく的確な状況分析と臨機応変な応用が求められます。それには、課された試験問題を機械的に処理するために断片的知識の無秩序な蓄積に終始した大学入試型の勉強から離れ、ひとつひとつの知識を有機的に結び付け、基本的な原理の上に構築された化学の体系が「わかる」ことが必要です。さらに、他の研究者と協働するためには、円滑に対話できることが要求されます。化学が好きな方であればどなたでも仲間として迎え、求められる能力を伸ばすための指針をわかりやすく示すよう心掛けています。

### **「わかる教育」**

創成化学コースでは厳選された少数の基本科目を履修要望科目として推奨しています。これらの科目は1クラス1名の教員が責任をもって担当し、求められる学習到達度を前もってわかりやすく示すとともに、コース共通の基準で成績を適切に評価することで、皆さん一人ひとりが到達度を実感できるようにしています。化学の知識や法則のみならずその基礎となる周辺領域を無駄なく網羅するわかりやすい講義、物質の創成法・測定法・計算ならびに情報技術を能動的に体験できる実験、さらには問題を発見し解決するための思考力を育む演習を、体系的に配置しています。卒業する時には、化学者・技術者として社会に通用する基礎知識と技術を習得し、新たな時代を先導できる思考力を身に付けた自分を再発見できることと思います。

### **「顔の見える教育」**

創成化学コースでは学生との対話を重視しています。創成化学コースの教育を担当する材料化学専攻と高分子化学専攻の各教員が、各自の個性を活かした授業の中で、学生一人ひとりとお互いに顔の見える関係を築くことを心掛けています。授業以外にも、学生一人ひとりの相談に対応できるように担当教員を配置して定期的に面接を行い、きめ細かな個人指導を行っています。4回生になると、卒業研究を行うために研究室に配属され、それまでも増して間近に教員や大学院生の顔が見える環境の中で研究活動を始めます。それまでに身に付けた知識と考える力を実践の中で磨き、実際に社会で通用する研究者、技術者としての基礎能力を鍛錬します。そして、研究室ではそれぞれの分野で世界第一線の研究が行われていますので、その醍醐味を味わってみてください。

なお、創成化学コースでは、成績情報を個人的に開示した上で、皆さんの希望と自主的な判断を尊重した研究室配属を行っています。

# 材料化学専攻

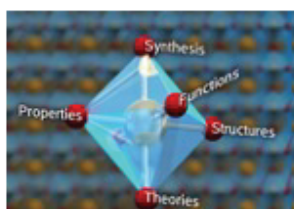
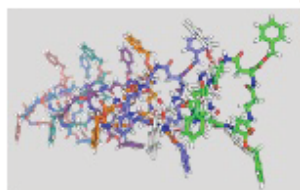
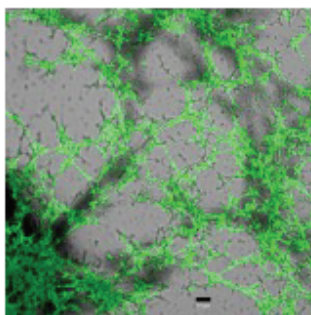
## Department of Material Chemistry

高度な科学技術にもとづく社会の発展にともない、多種多様な新しい物質・材料の開発に対する要請がますます強くなっています。同時に、化学は新物質を作る技術に加えて、物質を構成する分子の生い立ちや性質を調べ、物質特有の機能を探る学問に変貌しつつあります。材料化学専攻では、無機材料、有機材料、高分子材料、を中心に、その構造と性質・反応性を分子レベルおよびナノレベルで解明しながら、新しい機能や性質をもった材料を化学的に設計し、その創製方法を確立することを目的として研究・教育を行っています。また、外国からの学生、研究者の受け入れや、国内外の研究機関との連携も積極的に推進し、材料研究の国際的な研究・教育拠点となるべく、研究・教育環境の整備を図っています。

### 機能材料設計学

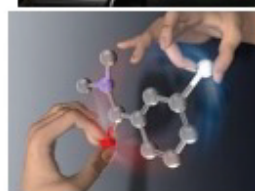
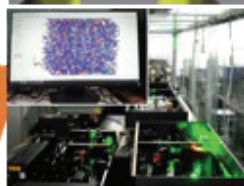
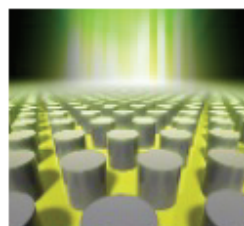
高分子機能物性  
生体材料化学

### 高分子材料化学

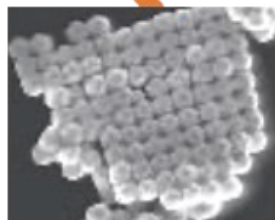
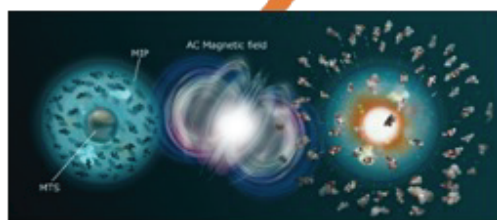


無機構造化学  
応用固体化学

### 無機材料化学



## 材料化学



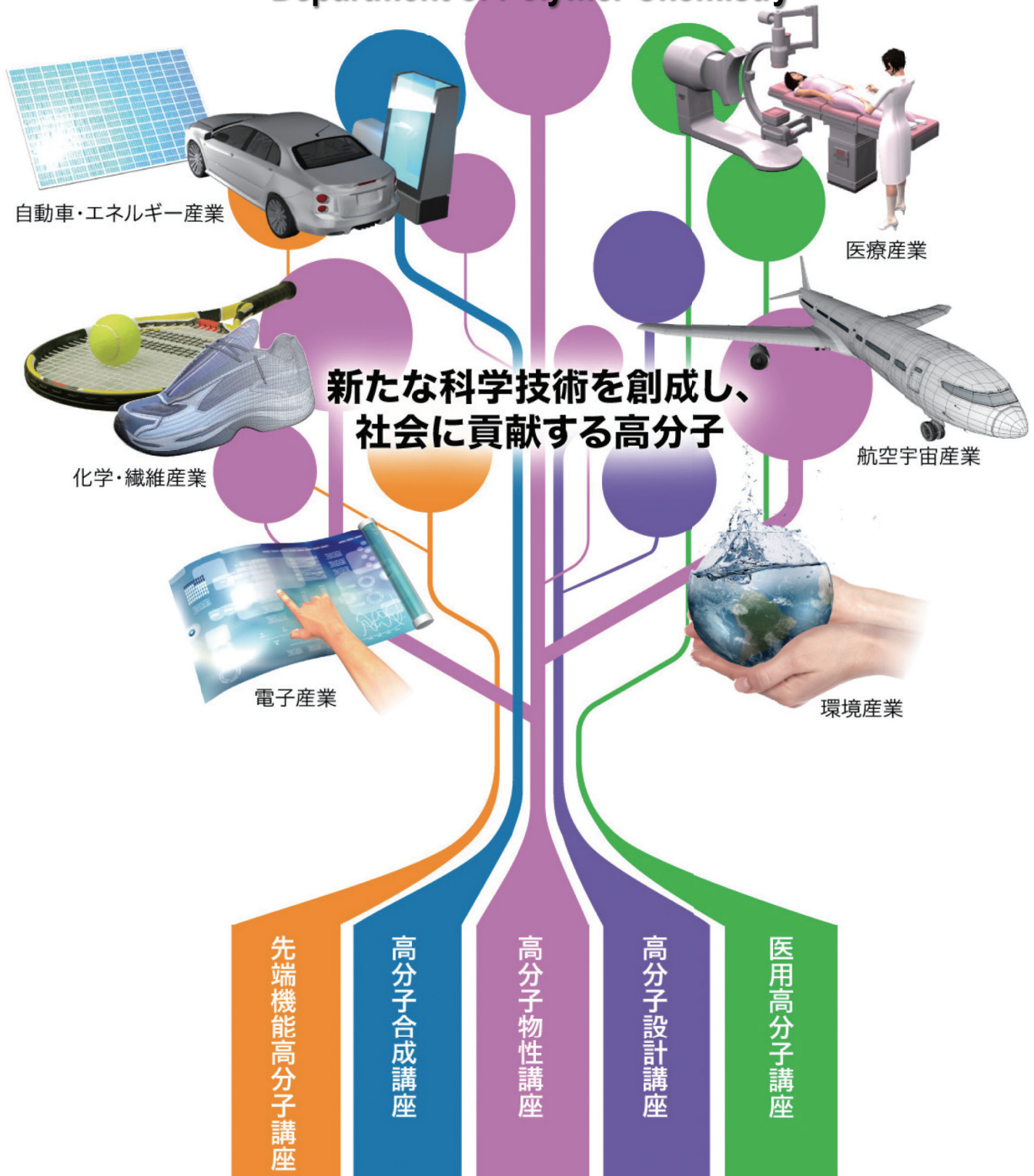
### 有機材料化学

有機反応化学  
天然物有機化学  
材料解析化学



# 高分子化学専攻

Department of Polymer Chemistry



高分子は、人々の日常生活から、産業・医療・先端テクノロジーまで、幅広く現代社会を支えています。高分子化学専攻は、このような基幹材料である高分子を対象として、一分子の精密合成から集合構造の構築・制御、さらにマクロ物性・機能に至るまで、高分子物質の総合的研究に取り組むことにより、世界における高分子研究の中心として、教育研究活動を行っています。

<http://www.pc.t.kyoto-u.ac.jp/ja>



# 先端化学コース

物質エネルギー化学専攻

分子工学専攻

合成・生物化学専攻

エネルギー科学研究科

## 先端化学コースへの招待

「先端化学コース」は、従来の「工業基礎化学コース」の名称が変更されて令和3年に生まれたコースです。

私達の日々の生活は「先端化学」によって支えられており、化学の力がなくては、快適な生活、そして持続可能な社会の構築は不可能と言えるでしょう。我々の普段の生活をあらためて見ても、液晶、繊維、プラスチック、セラミックス、医薬品、リチウムイオン電池など、先端の化学によって生み出された様々な物質や製品に囲まれていることに気づくはずで、さらに、情報産業の基幹となる機能材料や電子材料、様々な物質を合成する触媒、環境浄化技術など、先端化学は「普段は見えない様々な場所」でも生活の根幹を支えており、「ものづくり」だけでなく「快適で健康的な生活を営むため」に欠かせない存在になっています。

そして、我々人類がこの先100年を超えて地球上で暮らし続けるためには、温暖化や海洋汚染などに代表される環境問題、化石燃料やレアメタルなど希少資源の枯渇の懸念など、様々な課題を解決していくことが必要となります。高効率な太陽電池や蓄電池の開発を通じて再生可能エネルギーの利用を拡大する、あるいは革新的なリサイクル技術などを通じて限られた資源を有効に利用する、といった様々な場面で、化学の力を基盤とした課題解決が期待されており、それを実現できる優れた「化学人材」の育成が以前にも増して重要となっています。

このような背景のもと、先端化学コースでは、将来的に企業や大学において、様々な課題を解決する研究開発ができる卓越した人材を育成することを目的とした教育プログラムを用意しています。学部では、将来の自身の礎となる基礎学理をしっかりと身につけ、大学院において、より専門的で高度な研究と勉学に進むのがよいという考えから、基礎化学・基礎科学を特に重視した教育を行います。1981年にノーベル化学賞を受賞された福井謙一先生のお言葉である「本当に重要な基礎研究は、応用研究につながる」「応用をやるなら基礎をやれ」という精神にのっとり、基礎をベースに幅の広い専門科目の勉強をしたい人は、ぜひ先端化学コースに入って、未来の世の中を支えるためのやりがいのある勉強を一緒にしましょう。

## 教育プログラム

### 充実した基礎教育

先端化学コースは、2回生後期から4回生までの2年半の間に、将来、化学のかかわる広い分野で活躍するために必要な基礎・原理を、学生の皆さんがしっかりと身につけることに重点をおいた教育カリキュラムを提供します。教育の特徴は、基礎を確実に身につけるための充実した教育プログラムと、それをベースにした多くの選択科目群の提供です。

先端化学コースのカリキュラムは、2年生前期までのカリキュラムから、より程度の高い内容にスムーズに入っていきように配慮した構成を取っています。この目的のために、物理化学II、有機化学I, II, III, 無機化学I, II, 分析化学I, 生化学I, IIは、それぞれ2クラス(1クラス60人)で開講し、きめ細かい教育を行います。また、物理化学Ia, Ib, IIIは、1クラス(120人)で開講します。

科学英語は3クラス(1クラス40人)で開講します。科学の最先端の論文を正確に読み取る力、それをベースに正確に意味をつたえることができる文章を書く力を、学生の皆さんが身につけることを目的として、少人数のクラスで密度の高い講義を行います。英語によるコミュニケーションスキルを磨くためのプログラムも積極的に取り入れます。

#### 現代化学入門と広く深い専門科目群の提供

上に紹介した基礎教育と同時に、なぜこれらの科目の勉強が必要なのか？それが現在や将来の最先端化学とどう関わっているのか？を明らかにすることを重視した講義をおこないます。2年後期の「最先端の化学入門」、3年前期の「グリーンケミストリー概論」などを通じ、地球環境、生命、社会との関わりの中で、学生の皆さんが化学を学ぶことの意味を考えることが出来る機会を設けます。

基礎から進んでより深い学習をしたい人のために、また広い範囲の知識を吸収したい人のために、3年生からは広い範囲をカバーし、なおかつ主題をしばった専門科目群を提供します。

#### 豊かな教育力とていねいな指導

先端化学コースの教育を担当する教員は、基礎化学から応用化学の広い範囲で、世界を先導する最先端の研究を進めています。この先端がしっかりしているからこそ、基礎を生き生きと、そして基礎の本当の大切さを教えることができるのだと考えています。この意味で、先端化学コースは、質と量ともに豊かな教育力をもった教員が担当します。

教育における質の確保のために、先端化学コースでは、詳細なシラバスを作り、学習の内容と評価の基準を明確にします。質問や相談に気軽に來ることができるよう吉田キャンパスでオフィスアワーを設けるなど、学生と教員とのコンタクトを重視しています。

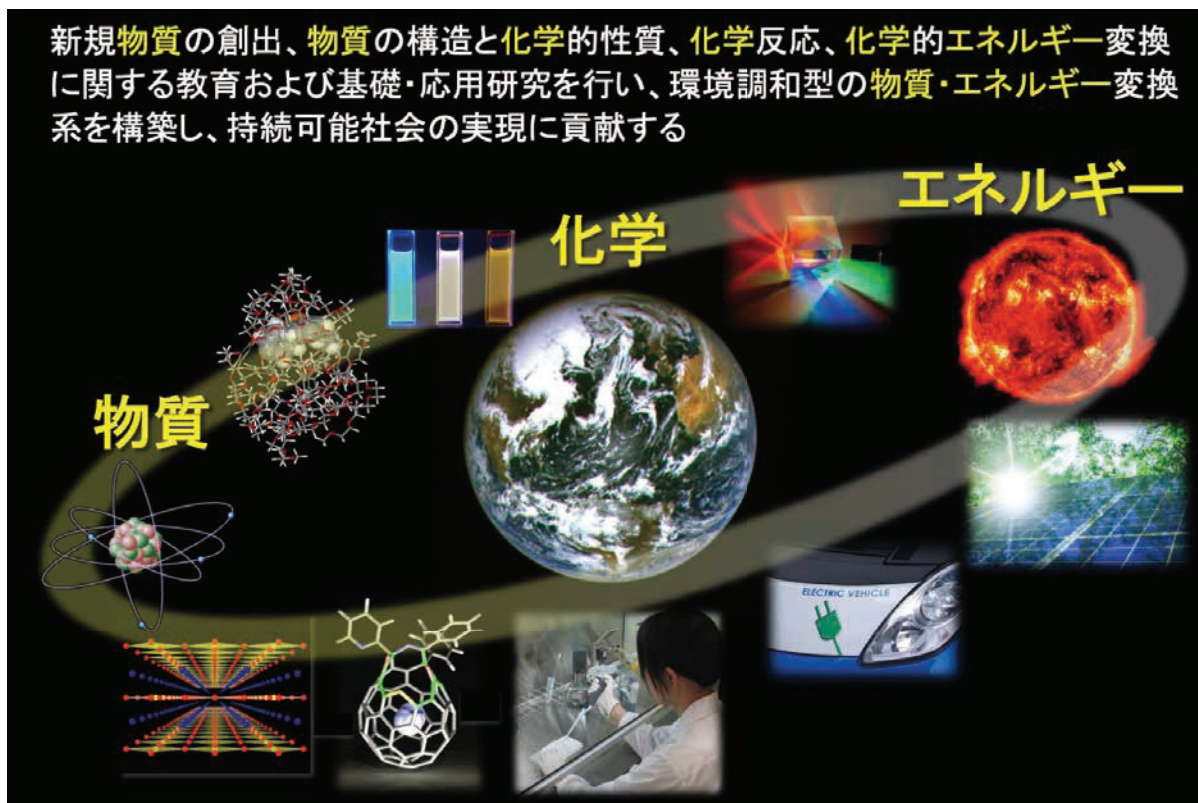
#### 豊富な卒業研究の選択肢

先端化学コースは、卒業研究において、豊富な選択肢を提供します。先端化学コースでは、物質エネルギー化学専攻、分子工学専攻、合成・生物化学専攻の専任・基幹講座の教員、さらにはエネルギー科学研究科エネルギー反応学講座の教員、およびそれに協力する化学研究所、複合原子力科学研究所、エネルギー理工学研究所、福井謙一記念研究センター、地球環境学堂、物質-細胞統合システム拠点(アイセムス)の教員が教育を担当します。これに対応して、これらの教員が行っている最先端の研究は、化学の広い領域をカバーしています。卒業研究を行うにあたっては30以上の研究室の中から、大きな自由度で進路の選択をすることができます。これらの研究室は、大学院では、先端化学専攻群に所属しており大学院においても諸君を歓迎しております。

# 物質エネルギー化学専攻

Department of Energy and Hydrocarbon Chemistry

(<http://www.eh.t.kyoto-u.ac.jp>)



21世紀、文明社会は飛躍的な発展を遂げましたが、その一方で資源の大量消費により、地球環境へ大きな負荷を与えてきました。

様々な環境問題や化石資源の枯渇が現実的になった今、人類社会の持続的発展を可能にするためには、地球環境と調和しうる新たなパラダイムに立った文明の構築が必須であり、科学技術にも大胆な質的転換が求められています。すなわち、有限の天然資源から高効率で有用物質を合成する「物質変換技術」、さらには化石資源を代替するための太陽光などの「エネルギー変換技術」への転換とその革新が強く望まれています。

「物質」と「エネルギー」に関する先端技術の開拓は、社会が要請する最も重要な克服課題であり、「物質変換」と「エネルギー変換」を基盤で支える「化学」はその中心的役割を担う学術領域であることは言うまでもありません。

このような時代の要請に応えるために、物質エネルギー化学専攻では、(1) 基礎化学の効果的な継承と学理の発展、(2) これを基盤とした独創性の高い応用化学の発展と推進、を基軸とし、(3) 新しい環境調和型の物質変換とエネルギー変換技術の実現、を目指した研究に取り組んでいます。

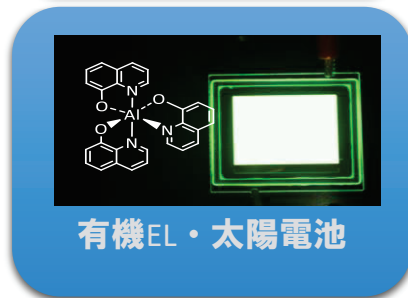
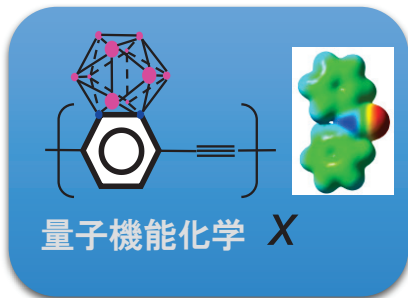
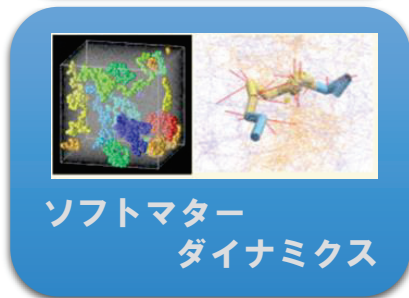
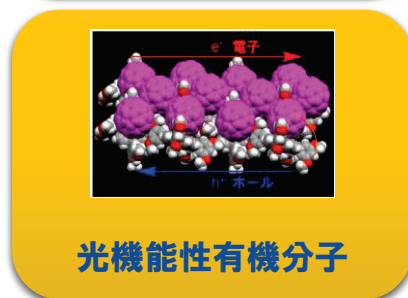
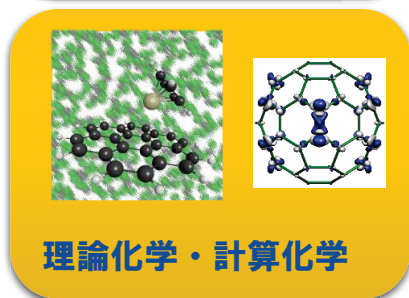
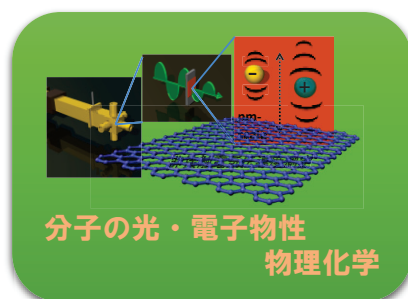
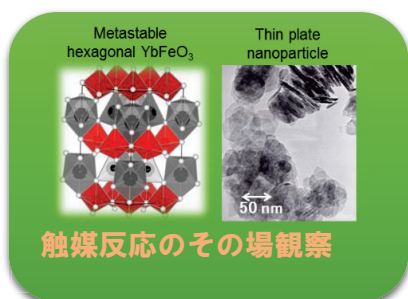
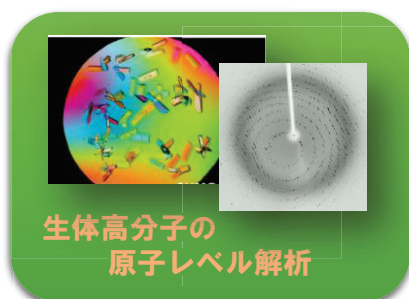


# 分子工学専攻

Department of Molecular Engineering  
<http://www.ml.t.kyoto-u.ac.jp/>

化学は物質の変換を扱う学問であるとともに、物性を電子構造・分子の配列と相互作用などとの関連で論じ、新しい機能をもつ分子や材料の設計を行う学問としてますますその分野をひろげつつあります。分子工学は、原子・分子・高分子などがかわる微視的現象を対象とする基礎学問を支柱として、原子・分子・高分子の相互作用を理論的、実験的に解明し、その成果を分子レベルで直接工学に応用する新しい学問領域であり、その重要性は化学の新しい展開の中で、強く認識されています。特にわが国では、分子工学による先端的技術の発展に大きな期待が寄せられています。新しい電子材料、分子生物学における機能性物質、高性能の有機・無機・高分子材料、高選択性触媒、エネルギー・情報関連材料などの開発は、現在分子工学で対象とすべき重要な研究テーマです。

分子工学専攻は、分子論的視野に立ち、斬新な発想で基礎から応用への展開ができる研究者・技術者を育成します。



# 合成・生物化学専攻

物質とその機能を創り出す学問である合成化学と、生物の機能を解明し利用する生物化学との学際領域分野を開拓し、総合精密科学としての創造性豊かな化学の研究分野を確立することが当専攻の理念であり目的です。そのため合成化学と生物化学に立脚し、物質合成の基礎と応用、生命化学の基礎とその応用としてのバイオテクノロジー、ならびにこれらの物質交換の理論的アプローチについて高いレベルの研究・教育を行っています。当専攻で教育を受けた卒業生は、化学系企業、医薬関連企業、情報・材料関連企業、大学、国立研究機関等で広く活躍しています。

## 合成・生物化学専攻

有機設計学	有機合成化学	機能化学	物理有機化学
有機金属化学	生物有機化学	分子生物化学	生体認識化学
生物化学工学	分子集合体化学 (iCeMS)		



# 化学プロセス工学 コース

化学工学専攻

# 化学プロセス工学コースへの招待

化学プロセス工学コース／化学工学専攻では、化学を基礎に、共通性のある現象・操作をまとめあげ、定量的に考察することを通して、さまざまな生産装置や、その集合体としての生産プロセスをデザインするための理論と技術を学びます。これらは、対象とする系のスケールや物質種を超えて応用できる学問体系なので、卒業生は、ナノ材料・機能材料からエネルギー・地球環境にわたる広範な課題を解決できる能力を身につけ、幅広い業種で社会に貢献しています。さあ、その仲間に加わって、世界で活躍できる技術者・研究者を目指そう！

## 教育理念

化学プロセス工学コースは、化学工学専攻の教員や研究室（講座・分野）で構成される“化学工学”を学ぶためのコースです。

化学工学とは・・・

- ・物質やエネルギーを有効に利用するための方法論を考える学問です。
- ・各種プラントの設計や環境保護などで威力を発揮します。
- ・現在では、地球環境問題やエネルギー問題、先端材料開発、燃料電池・二次電池開発、バイオテクノロジー開発などの分野に貢献しています。

化学工学の特徴は、対象とするプロセスから要素となる現象を抽出し、その本質と動的特性を定量的に捉え、さらに、最適システムを構築して、物質、材料の高機能化と物質、エネルギーの効率的生産のための方法論を探求することです。

この特徴は、(1)人類に有用な機能をもつ物質および材料を化学的変換によって創出する、(2)物質、材料、エネルギーを環境に優しく、効率よく生産する方法を提案する、などの課題に取り組むのにとっても役立ちます。化学プロセス工学コースではこれらの課題を解決できる人材育成を目指して教育を行っています。

## 化学プロセス工学コースにおける教育

- ・少人数教育：学年あたりの学生数は約40名です。教員と学生の間の距離が近く、手厚い教育を実施しています。
- ・総合的な能力の育成：化学だけでなく、数学、物理、経済の考え方も重要であり、多種の問題に対する解決能力の高い人材を育成します。
- ・多様な研究をテーマとし、視野の広い人材を育成します。
- ・ドイツ国での国際インターンシップ（大学院）や交流事業などを通して国際性を育成します。



化学プロセス工学コースの学生は、原子・分子レベルの化学から化学プラントの設計・運転まで幅広い分野で活躍できる応用力を習得します。



# 化学工学専攻

京都大学大学院工学研究科化学工学専攻では、化学産業のみならず、電子産業等を含む基幹産業の構造改革や社会・経済の変化に対応できる学術基盤の構築とそれを支える幅広い視野と総合的な判断力を備えた人材および専門研究者・学際的人材を養成することを目標に教育を行っています。さらに、日本の化学工学の中心として、世界的な学術研究の拠点、研究者養成の中核機関としての位置付けを目指しています。そのために、専攻での教育、研究の充実に加えて工学研究科高等研究院などとの共同研究を通じて、複合的学域の創出・深化に携わる研究者の養成を図っています。

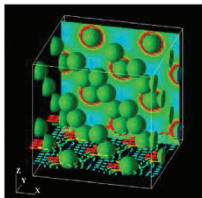


写真 ドイツでの研修の様子

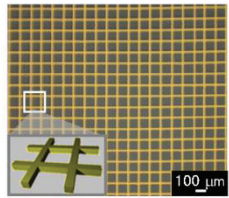
## 化学工学専攻の研究室

ソフトマター工学分野、界面制御工学分野、反応工学分野、移動現象論分野、分離工学分野、エネルギープロセス工学分野、材料プロセス工学分野、プロセスシステム工学分野、環境プロセス工学分野、環境安全工学分野、動的界面化学分野

## 化学工学専攻の研究例



コロイド粒子の直接数値シミュレーション



自己組織化を利用して作成した金ナノ粒子の格子状配列構造



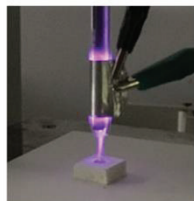
反応工学モデリング実験用水素燃料電池



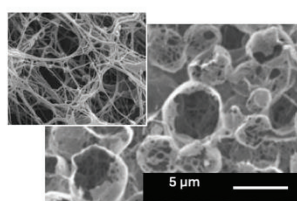
マイクロリアクタ



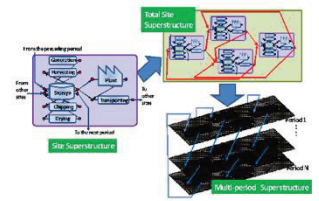
ナノ材料を活用した高効率太陽光発電



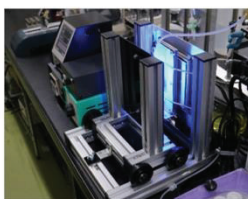
プラズマ照射で単層グラフェン膜から分離膜を作製する様子



ナノセルロースより作製したマイクロカプセル



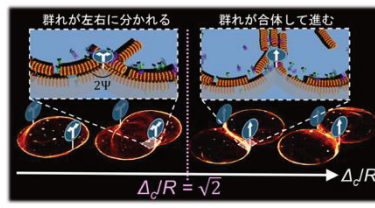
バイオマス利用システムの最適化



青色LEDを利用した流通式液相酸化装置



界面の静・動的な性質を解明



化学エネルギーで動く分子マシンの群れ

*Chemical Engineering for the Future*

# 研究室紹介

創成化学コース

材料化学専攻  
高分子化学専攻

先端化学コース

物質エネルギー化学専攻  
分子工学専攻  
合成・生物化学専攻  
エネルギー科学研究科  
(エネルギー基礎科学専攻)

化学プロセス工学コース

化学工学専攻

# 機能材料設計学研究室

研究内容：機能材料設計・固体化学・無機合成化学・物性化学

所在地：京都市西京区京都大学桂

		電話	email
スタッフ：教授	藤田 晃司 桂 A3-118	(383)2432	fujita.koji.5w@kyoto-u.ac.jp
	准教授 YI Wei 桂 A3-119	(383)2418	yi.wei.5c@kyoto-u.ac.jp

ホームページ：<http://www1.kuic.kyoto-u.ac.jp>

## 未開の分野を切り開く新物質・新材料を開発する

### 研究概要：

金属酸化物は私たちの日常生活に必要不可欠な物質群であり、誘電体、磁性体、電気伝導体、光機能性材料等として広く応用されています。従来の酸化物は高温固相反応により簡便に合成できることもあり研究は大きく発展しましたが、熱力学的に安定な物質相が主な研究対象となっていたため、新物質や物性設計による具現化の可能性は限られていました。一方で、近年の気相合成や液相合成の技術の進展は目覚ましく、これらを活用すると従来法では得られなかった物質や物性を開拓できる余地は大いにあります。

私たちの研究室では、酸化物を主な研究対象として、独自の視点での物質開拓だけでなく、多様な合成手法を駆使して無機材料の設計・合成に取り組んでいます。特に意識していることは次の2点です。

- ・ 準安定・非平衡物質の開拓
- ・ 根源的に新しい機構・原理に基づく機能創出

一連の研究において、「物質合成 – 第一原理計算 – 構造解析 – 物性測定」の有機的な連携を重視しており、物質の精密構造や電子構造を理解し機能発現機構を解明します。これらの取り組みにより新物質・新材料を開発し、卓越した機能や物性を見いだすことが目標です。機能性材料の学理構築を通じて、材料開発におけるブレークスルーとなる新発見や材料科学の新研究領域の開拓を目指して研究を進めています。

### 研究室の特徴：

国内外の多くのグループとの共同研究を推進しており、幅広い専門知識・実験技術を習得することができます。また、学生さんの主体性や積極性を尊重し、自由な発想とそれを支える基礎学力を重視しています。新物質や新現象の発見は、化学・物理をはじめとする基礎科学を大きく発展させるだけでなく、将来の産業発展を促すと期待されます。独自の視点で研究に取り組み、未開の分野を切り拓く新物質・新材料を開発してみませんか。チャレンジ精神が旺盛で意欲にあふれる学生さんを歓迎します。



## 最近の研究成果

### ・新しい原理に基づく強誘電体・圧電体の開発

強誘電体・圧電体は反転対称性が破れた結晶構造もつ物質群であり、携帯電話・パソコン・プリンタなど様々な電子機器に広く用いられています。実用化されている強誘電体・圧電体は  $\text{Pb}(\text{Zr}, \text{Ti})\text{O}_3$  や  $\text{BaTiO}_3$  などのペロブスカイト酸化物です。これらの化合物では、Ti-O 結合の共有結合性や Pb の孤立電子対といった特定の元素に特有の性質により構造が歪み反転対称性が破れます。ただし、このような構造歪みをもたらす元素は限定されるため、膨大なペロブスカイト酸化物の中で強誘電体・圧電体は 5% もありません。また、実用材料の多くには有害な Pb が使用されています。

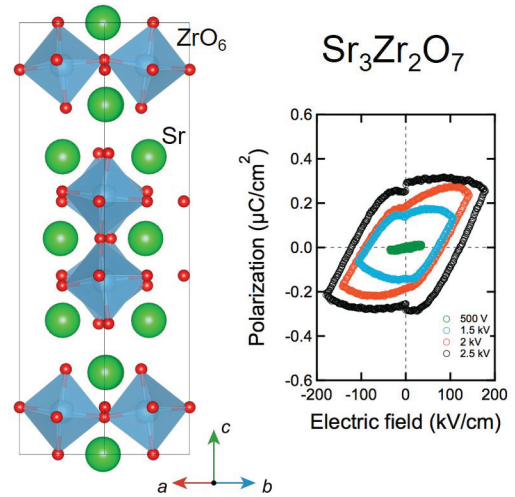
当研究室では、最近、層状ペロブスカイト酸化物を対象に、従来とは異なる新しい機構により強誘電性・圧電性が現れることを発見しました。この成果を発展させるため、「層状ペロブスカイト強誘電体物質科学の新しいパラダイムの構築」というテーマを掲げて研究を進めています。これにより、非鉛強誘電体・圧電体だけでなく、従来では実現困難な新しい特性をもった強誘電体・圧電体の開発を目指しています。

### ・高圧合成法による新規機能性酸化物の開拓

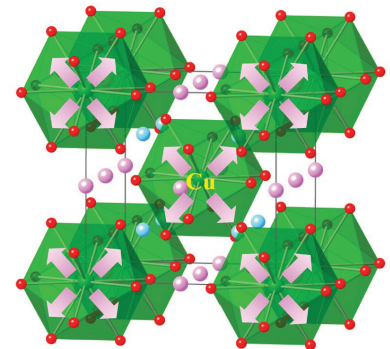
一つの化合物に対する常温・常圧での安定相は 1 種類ですが、圧力下における高密度状態が凍結されると多種類の構造が導かれます。当研究室では、高圧合成法による酸化物準安定相の開拓に取り組んでおり、①室温で強磁性と強誘電性が共存する鉄酸化物 ( $\text{ScFeO}_3$ ,  $\text{InFeO}_3$ ) や②ラットリング現象を示す四重ペロブスカイト酸化物 ( $\text{CuCu}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ ) など、学術的に価値の高い新物質を多数合成することに成功しています。①は低消費電力・高記録密度・不揮発性の次世代メモリデバイス実現のための鍵となる物質群 (マルチフェロイック物質) であり、②は非常に珍しい配位構造 (3d 遷移元素に対する酸素 12 配位正二十面体) を有しており、新しい熱電変換材料となり得る物質群です。このような特異な配位構造の実現と機能性の開拓に挑戦しています。

### ・薄膜成長による準安定物質相の創成

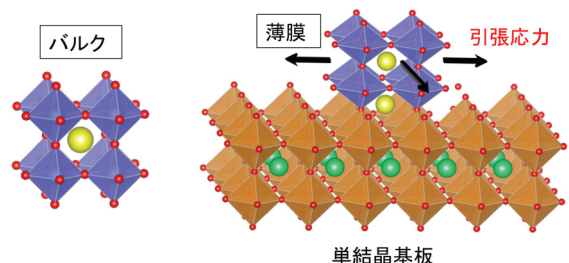
気相合成法に基づく薄膜成長を利用すると、熱平衡状態では不安定な結晶構造・化学組成をもつ準安定結晶を作製することが可能です。当研究室では、基板との「格子不整合」や「電荷不整合」を活用して準安定相薄膜を形成し、特異な物性・機能の発現を目指しています。これまでに、常圧安定相が反強磁性体であるペロブスカイト酸化物を単結晶基板上でエピタキシャル成長させ、体積膨張を伴った歪んだ結晶構造の安定化と強磁性体への変換を実現しました。



層状ペロブスカイト酸化物  $\text{Sr}_3\text{Zr}_2\text{O}_7$  の結晶構造。 $\text{ZrO}_6$  酸素八面体の回転により結晶構造の反転対称性が破れ、強誘電性が現れる。



$\text{CuCu}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$  の結晶構造。 $\text{Cu}^{2+}$  は酸素 12 配位正二十面体の広い空間中で大きな振幅を伴う原子振動 (ラットリング運動) を行っている。



薄膜-基板界面での格子不整合により薄膜の面内に応力が印加され、安定相の結晶構造とは異なった構造が安定化される。

# 無機構造化学研究室

研究内容：無機構造化学・固体化学・光誘起化学・マイクロ-ナノプロセス工学

所在地：京都市西京区京都大学桂

電話

e-mail

スタッフ：教授 三浦 清貴 桂 A3-327 (383) 2464 miura.kiyotaka.2w@kyoto-u.ac.jp

准教授 下間 靖彦 桂 A3-324 (383) 2459 shimotsuma.yasuhiko.3m@kyoto-u.ac.jp

助教 清水 雅弘 桂 A3-328 (383) 2238 shimizu.masahiro.3m@kyoto-u.ac.jp

ホームページ：<http://func.mc.kyoto-u.ac.jp>

## 研究概要

無機固体材料を中心として、物質の物理的・化学的特性を制御することで、情報通信（IT）分野、環境・エネルギー分野などが抱える様々な問題の解決に資する新規機能性材料の創製を目的とした研究に取り組んでいます。具体的には、パルスレーザー光と各種物質との相互作用に関する基礎研究をベースとし、最近では、高次の位相分散を制御したフェムト秒レーザーパルスによるダイヤモンド中の窒素と空孔により形成される窒素空孔中心の形成に関する研究にも着手しています。また、ガラスおよびガラス融液のソレー効果や中距離秩序の緩和過程に関する基礎研究を中心に、計算的手法と実験的手法とを駆使することで、動的物性の発現機構を微視的もしくは熱力学的に明らかにし、ガラス材料の教科書を書き換えることを目標に研究を行っています。

当研究室で、パルスレーザーによる新規現象の発見やそれらを利用した機能性材料開発、さらに新しい化学的および物理的なプロセスによる無機固体材料の合成に関する各種テーマに取り組むことで、スタッフと共に研究の醍醐味を実感して下さい。

## フェムト秒レーザーによる材料プロセッシングの特徴

超短パルスレーザーのみが可能な材料改質の大きな特徴は、物質の特性を局所選択的に三次元的制御できることです。フェムト秒レーザーを1パルス集光照射するだけで、1ピコ秒程度で集光点近傍の温度は数千から1万Kに、圧力は数GPaにも達します。このような条件下、物質内部に様々な構造を誘起させることが可能です。我々は、この特徴を利用し、無機ガラスや結晶あるいは高分子材料内部の三次元構造改質、溶液中に分散させた金属や半導体材料の液相アブレーションや生体材料内部の非熱局所加工等を実現し、多種多様な材料への機能性付与を行っています。フェムト秒レーザーの照射条件と物質との組み合わせにより起こる現象は多種多様であり、新しい現象を発見できる可能性を秘めていることも大きな特徴です。

## 当研究室のシミュレーションとその意義について

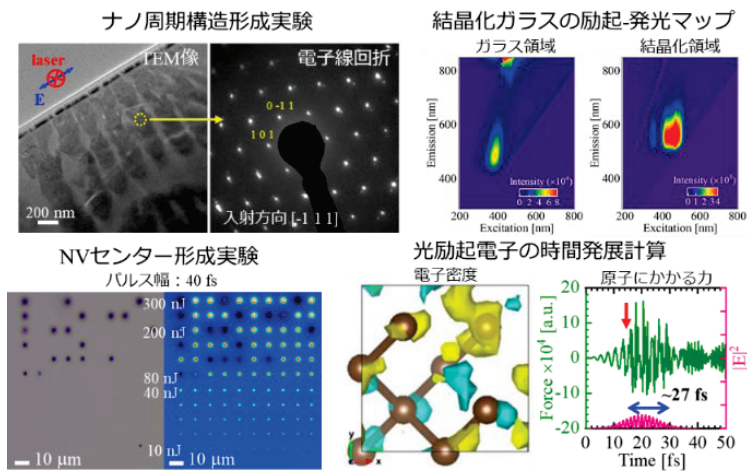
レーザー照射中の物質の原子および電子の励起状態を理解することは、レーザープロセッシング時の最適な照射条件の選択や未知の現象の予言につながるため、当研究室では実験と並行して時間依存密度汎関数法を用いたシミュレーションを行っています。また、ガ

ラスの構造は X 線・中性子回折実験によって一意的に決められないことが問題ですが、原子の三次元座標が得られる分子動力学計算および第一原理計算によって、構造と各種物性の相関を理解したり、未知の構造変化とその原因を予言したりすることができます。シミュレーションと実験を並行することで、仮説の立案、現象の微視的理解、プロセスの最適化、未知の現象の予言と実証を効率よく行うことができます。

### 最近の研究から

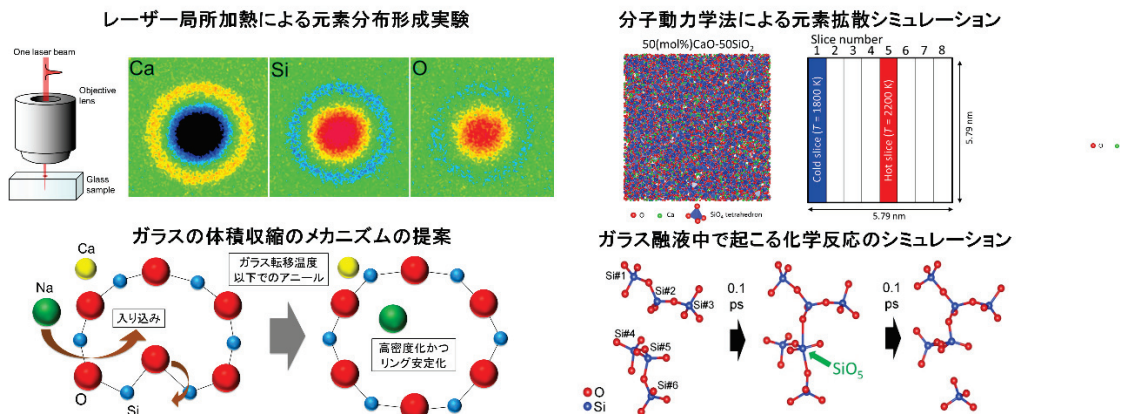
#### パルスレーザー光と各種物質との相互作用に関する基礎研究

フェムト秒レーザーの集光照射によって、石英ガラスなどの誘電体、シリコンなどの間接遷移型半導体の内部にナノ周期構造を形成しました。このナノ周期構造の自己組織化メカニズム解明と構造に由来した光学異方性や導電率・熱伝導率などの局所的な物性制御を利用した新しい機能材料の研究を行っています。ダイヤモンドでは窒素空孔中心 (NV センター) またはグラファイト構造が局所的に形成されます。レーザー光のパルス幅やパルスエネルギーが NV センター形成確率に影響することを明らかにしました。さらにスピン量子ビットや磁場などの超高感度センサーとしての応用を目指した研究を進めています。



#### ガラスおよびガラス融液における動的物性の発現機構解明

酸化物ガラスおよびガラス融液において、動的物性の発現機構の微視的もしくは熱力学的な理解が、巨視的な物性値のより高精度な予測を可能にし、ガラスの機能の向上・開拓や新製造プロセスの開発につながると考え、計算と実験の双方から得られる知見により、法則を見出すことを目的としています。主に分子動力学計算を用いて、非平衡状態・原子配列・電子状態の観点から、原子拡散、粘性流動、熱伝導、構造緩和、結晶化などの動的物性の発現機構の解明に取り組んでいます。





# 応用固体化学研究室

研究内容：固体化学・無機化学・酸化物電子物性・半導体工学・磁気光学

所在地：京都市西京区京都大学桂

				
教授	田中 勝久	桂 A3-018	(383) 2801	tanaka.katsuhisa.4n@kyoto-u.ac.jp

最新情報はホームページを check! : <http://dipole7.kuic.kyoto-u.ac.jp>

本研究室はこのような学生に適しています：

- ✓ 無機化学に興味を持ち、さらに理解を深めたい人
- ✓ 周期表を広く使った材料合成をやりたい人
- ✓ 化学+ $\alpha$  [固体物理学 (電子物性・磁性)、半導体工学、微細加工技術] に興味ある人

私たちは、近年めざましい進歩を遂げている無機固体や材料の科学と工学に寄与するべく、固体化学の立場から、無機固体の基礎物性と機能性材料への応用を研究しています。機能性を期待できる無機固体の合成/設計における重要な視点は、原子やイオンの長範囲的な配列と個々の電子状態に基づく固体の電子構造であり、原子・イオンの種類や価数などの多様性と電子構造を結び付け機能 (電気伝導、誘電性、磁性、光物性、...) を考えます。とりわけ化学結合や原子軌道の概念、電子の局在・非局在状態、また、フォノン、ポーラロン、パラトン、マグノン、プラズモンなどの準粒子の考え方に立脚した考察が重要です。現象の本質を見極めるには、いわゆる化学だけではなく、物理や工学の視点が必要不可欠です。複数の分野を俯瞰する高い視座を持ち、化学 (あるいは科学) の新分野を切り拓いていくことが私たちの目標です。この高い目標に向かってともに汗をかく学生の参加を期待します。

研究モットー：

1. 材料/手法にこだわりを：研究者はオリジナリティが命。卒論研究、修論研究から、自分だけの材料合成と測定手法の組み合わせで自分の色のついた研究にしましょう！
2. 独りよがり禁物：こだわりが固執にならないように、常に頭を柔らかく、心を開き、周りと議論しましょう！
3. データは悲観的に、でも研究は楽観的に：データは常に疑いましょう！疑いを晴らす過程で研究は強くなります。
4. 呼吸するように論文を書く：Publish or perish. 常にアウトプット (卒・修・D論/学会/論文) を意識しましょう！



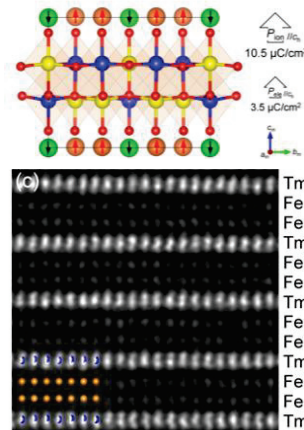
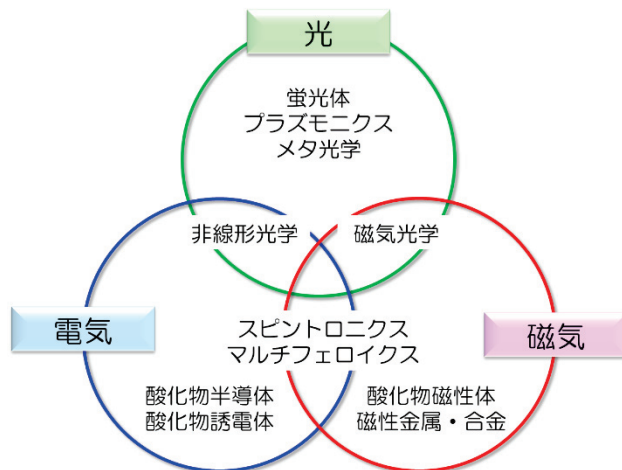
↑ 研究紹介動画へのアクセスはこちら

固体中の電子の電荷やスピンの起源となって現れる巨視的な物性は、基礎科学（固体化学、固体物理学）の観点からきわめて興味深いのみならず、エレクトロニクスやフォトニクスといった産業や日常生活と直接結び付く工学の視点からも重要です。特に金属酸化物固体は金属原子と酸素原子が基本的にはイオン結合で結び付いているものの、元素によっては共有結合性が化学結合に寄与し、また、とりわけ遷移元素であれば多種類の酸化状態が可能となるため、固体の物性は多様なものとなります。ここに金属酸化物の電子物性の面白さがあります。

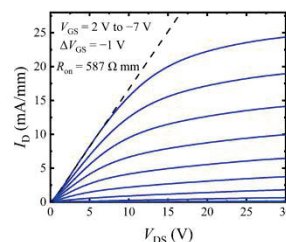
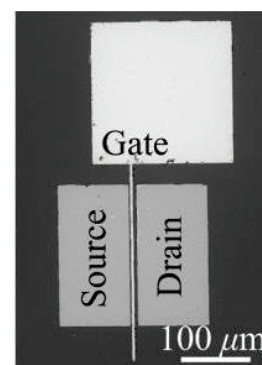
当研究室では磁性体、誘電体、半導体の性質を兼ね備えた遷移金属酸化物について研究を行っています。 $R\text{Fe}_2\text{O}_4$  ( $R$  は原子半径の小さい希土類元素あるいは  $\text{In}$ ) の組成式で表される酸化物では、電荷の秩序・無秩序転移、磁気転移、電場誘起誘電体・半導体転移などの現象が見られます。私たちは、この物質の単結晶育成と基礎物性の解明を行っています。

また、ミスト化学気相成長法を用いた新規酸化物半導体・磁性体の合成にも注力しています。これは原料を霧（＝ミスト）にして基板上に堆積させ酸化物薄膜を得る方法で、従来の手法では得られない準安定構造の結晶が成膜できます。私たちは、高品質なエピタキシャル薄膜の合成条件の探索と構造解析および物性測定に加えて、ダイオードやトランジスターなどのデバイスの作製と性能の評価も行っています。

さらに、磁性体と光の相互作用に基づく材料の開発にも注力しています。この分野は磁気光学と呼ばれ、現象自体は古くから知られているものの、特に可視から紫外域の短波長領域での応用がまだ十分ではありません。私たちは企業との共同研究によって、高濃度の希土類元素を成分として含む新たな酸化物ガラスを作製し、レーザー光源に対応した光アイソレーター（光を一方向にのみ通す素子）を開発しました。



$\text{TmFe}_2\text{O}_4$  では鉄イオンの電荷の秩序化に伴い  $\text{Tm}^{3+}$  が変位して強誘電性を示すという機構を提案しました (上図)。 $\text{TmFe}_2\text{O}_4$  結晶の電子顕微鏡写真。白く見えているのは  $\text{Tm}^{3+}$  (下図)。



$\text{Ge}$  をドーパントとして作製した  $n$  型半導体である  $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$  薄膜に基づく金属-半導体電界効果トランジスター。上図はトランジスターの電子顕微鏡写真。下図はトランジスター特性の一つで、横軸はソースとドレインの間の電圧、縦軸はドレインに流れる電流です。ゲート電圧を変えて測定した結果です。



# 有機反応化学研究室

研究内容：有機合成・創薬・ケミカルバイオロジー

所在地：京都市西京区京都大学桂

スタッフ： 教授 大宮 寛久 桂 A3-307  
ohmiya@scl.kyoto-u.ac.jp

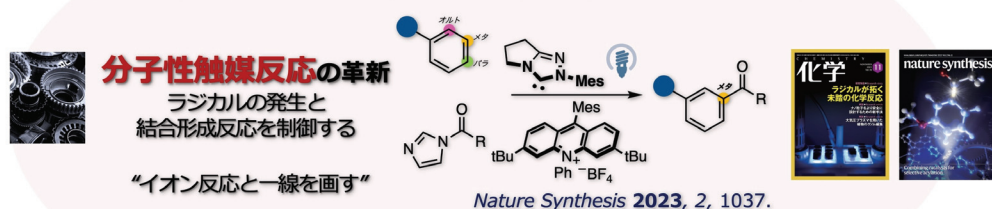
TEL: (383)2440

ホームページ： <https://www.fos.kuicr.kyoto-u.ac.jp>

## 研究概要

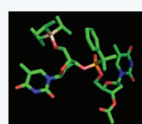
人類が豊かに生存し続けるために必要不可欠な物質である医薬品や機能性材料の多くは、有機分子から成り立っています。これら日常生活と密接に関わる「**価値のある有機分子**」は、さまざまな形・大きさの有機分子を化学反応によって組み立てていく「**有機合成**」によって、生み出されてきました。私たちの目的は、環境負荷の少ない試薬やエネルギーを活用した化学反応により、価値のある有機分子を、レゴブロックのように思い通りに組み立てていくことです。私たちは、環境負荷の少ない小さな分子からなる「**触媒や反応試薬**」を用いて、化学反応の一種であり、有機合成を革新する可能性のある「**ラジカル（不對電子をもつ原子や分子）反応**」を制御する技術を開発し、価値のある有機分子をつくりだしてきました。この技術は、創薬現場において、医薬品候補化合物の合成に積極的に使用され、創薬研究を加速しています。以下に最近の研究成果を紹介します。

## ラジカルが拓く新触媒・新反応・新機能



Organic synthesis by  
designing catalyst  
and chemical reaction  
as well as molecule

**創薬研究に貢献**  
生物機能分子の  
多様性・複雑性の拡張

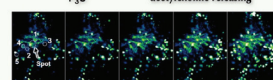
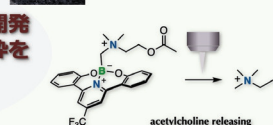


*Nature Commun.* 2023, 14, 6856.

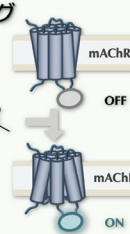
単純なラジカル反応の開発  
にとどまらず、分野の枠を  
超えた研究に挑戦



**生命科学に挑戦**  
分子イメージング



*J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 10651.



■**分子性触媒反応の革新**■ 有機触媒（有機小分子からなる触媒）を用いた反応開発は、2021年のノーベル化学賞（不斉有機触媒の開発）にも明らかのように有機合成の強力なツールとして認知されていますが、そのほとんどが有機分子の酸性、塩基性、水素結合などを利用するイオン反応です。一方、不対電子が支配するラジカル反応は、ラジカルの反応性が高いため、その制御は極めて困難でした。私たちは、ラジカル反応を精密に制御する有機触媒を合理的に設計し、数々のラジカル反応を開発し、これまで到達困難とされてきた、高い付加価値をもつ有機分子の効率的合成に結びました。

■**創薬研究に貢献**■ アンチセンスや siRNA に代表される核酸医薬品は、一般的に十から数十個のヌクレオチドから成るオリゴヌクレオチドであり、化学反応により製造されます。ヌクレオチドの構成成分である、糖の環骨格・ホスホジエステル基・核酸塩基を化学修飾（官能基化）することは、新しい核酸医薬品の創出に繋がります。しかし、複雑かつ混み入った構造をもつ、糖の環骨格・ホスホジエステル基・核酸塩基それぞれのユニットを効率的かつ選択的に官能基化することは、依然として困難を極めます。私たちは、光エネルギーを用いたラジカル反応により、これらユニットを効率的かつ選択的に官能基化し、計30種類以上の新しい化学修飾核酸をつくりだしました。

■**生命科学研究に挑戦**■ ケージド技術は、生物機能分子に対して、光分解性保護基を連結し、一時的に不活化した分子を活用するものであり、イメージングのような生命科学（ケミカルバイオロジー）研究に幅広く活用されています。しかし、これまで開発されてきた、ケージド技術は、光照射により、ヘテロ元素官能基が切り出される設計のため、その適用が、ごく一部の生物機能分子に限られていました。私たちは、可視光により炭素-ホウ素結合が切断されてラジカルが生じる有機ホウ素分子を光分解性保護基として活用することで、分子骨格上の炭素を起点としたケージド技術を開発しました。炭素は全ての有機化合物に含まれるため、従来の構造制限を取り払うと期待されます。たとえば、これまで実現困難であったアセチルコリンのケージド技術を開発し、生細胞条件およびハエの脳を用いた *ex vivo* 条件で自在にアセチルコリン濃度を制御することに成功しました。

私たちの研究・教育を通じて、サイエンスの面白さやサイエンスの無限の可能性を伝えることで、「**化学**」を志す若者、今まさに「**化学**」を学ぶ若者に大きな夢を与えたいと考えています。分子レベルのモノづくり「**有機合成**」を魅力ある学問分野として次世代に繋いでいきます。私たちの研究室は、新しいサイエンスを切り拓こうとする学生皆さんの参加をお待ちしています。

# 天然物有機化学研究室

研究内容：有機合成化学・有機金属化学・有機ケイ素化学  
所在地：京都市西京区京都大学桂

スタッフ： 教授 中尾 佳亮 桂 A3-B420 TEL/FAX: (383)2443/2445  
nakao.yoshiaki.8n@kyoto-u.ac.jp  
助教 柏原 美勇斗 桂 A3-B419 TEL/FAX: (383)2444/2445  
kashihara.myuto.4i@kyoto-u.ac.jp

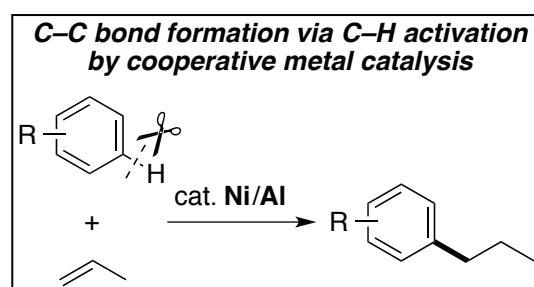
ホームページ：<http://www.npc05.kuic.kyoto-u.ac.jp>

## 研究概要

人類の豊かで便利な現代生活は、有機合成によって得られる多種多様な有機化合物によって支えられています。膨大な数の有機合成反応がすでに知られていますが、それらの多くは、有機金属反応剤や有機ハロゲン化物の利用に代表されるように、分子をあらかじめ官能基化しておく必要があります。そのため、標的とする有機化合物の合成に多段階を要し、その過程で多量の副生成物を排出する問題があります。また、希少な化学物質や元素の利用も少なくありません。我々の研究室では、「有機分子にありふれた結合を直截的に新しい結合に変換する反応」、「自然に豊富に存在する資源を有効活用する反応」、および「有用な新反応を可能にする真に新しい触媒」の開発を通じて、これらの問題にアプローチしています。多彩な反応性を持つ「遷移金属錯体触媒」を軸に、有機合成に利用されているいろいろな触媒（ルイス酸触媒、有機触媒、酵素触媒、固体触媒）を複合的に利用したり、これらの協働作用によって初めて可能になるような有機分子の変換を目指し、「有用」であるだけでなく、「サイエンスとしての新しさと面白さ」も追求しています。また、独自の触媒反応や合成戦略によって、将来、医薬や生命科学研究に応用可能な生物活性天然物を効率よく合成する研究も行っています。以下に最近の研究とその成果を紹介します。

### 1. 有機分子を直截的に変換する

有機分子の大部分を覆っている C-H 結合や、天然由来資源および化学工業における上流製品に多く含まれる C-O 結合、C-N 結合を、直接 C-C 結合に変換してものづくりができれば、この余分な工程を省略できるうえに、「ごみ」もなくなります。しかしそれらの結合は、反応性が低く、簡単に変換することはできません。このような「不活性結合」を選択的に反応させる研究は、有機合成分野の将来の

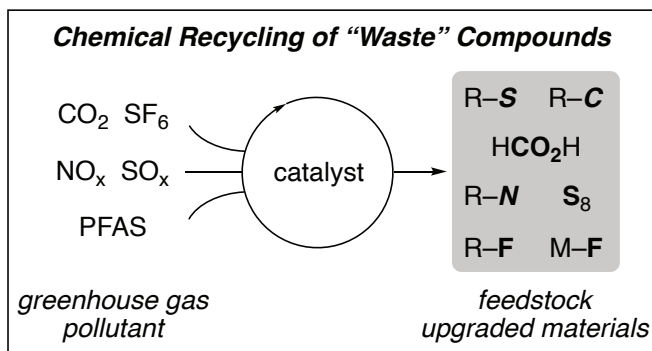


ノーベル化学賞候補として挙げられるほどに、現在世界中で活発に研究されています。われわれの研究室では、異なる二種類の金属触媒の協働作用によって、不活性結合を活性化・変換するための独自の手法を開発しています。このような協働金属触媒によって初めて達成できる反応として、例えば、C-H 結合をアルケンに付加させて、置換ベンゼンをサイトおよび直鎖選択的にアルキル化する触媒反応を開発しました。Friedel-Crafts アルキル化反応と相補的な分子変換です。

### 2. ゴミから有用物質をつくる

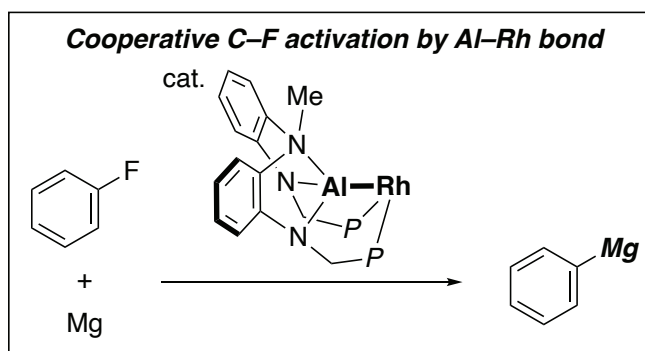
ペットボトルや牛乳パックなど「モノ」のリサイクルが浸透してきた一方で、マイクロな世界でもリサイクルの概念が謳われるようになりました。温室効果ガスや環境汚染物質など、これまでの産業が排出してきた「ゴミ」を原料に使うて有用な物質をつくる、分子レ

ベルでの資源循環を目指そうという動きです。しかし、それらのゴミは言わば「物質の成れの果て」の姿であり、往々にして反応性が低いため、処理が難しいという問題があります。そこで、われわれが得意とする触媒の力を駆使して、そうした難しい分子変換に取り組む研究を行っています。例えば、非常に強力な温室効果ガスである六フッ化硫黄ガスを有機触媒の力で分解し、単体硫黄とフッ化物塩に分ける再資源化反応、さらには分解生成物を用いた有機硫黄化合物や有機フッ素化合物の合成に成功しています。本来こうした反応は無機固体触媒の得意分野ではありますが、有機化学を基盤とする新たな切り口で現代、そして未来の社会に持続的に貢献できる化学を生み出すことを目指しています。



### 3. 新しい触媒を創る

「ゴミ」も含めた有機化合物を直截的に変換して有用物質を合成するうえで、遷移金属触媒は極めて有効です。金属と有機化合物である配位子の組み合わせは無限なので、これからも新しい遷移金属錯体による新しい反応が今後も開発されていくでしょう。しかしながら近年、様々な金属錯体と配位子が市販されて多くの研究者が同じ触媒を使うようになったために、この分野の研究がお互いよく似たものになってしまい、本質的に新しい反応が開発されにくくなっています。独自性の高い触媒反応を開発するためには、真に新しい独自の触媒が必要です。われわれは、これまで述べてきたように、まず既知の金属錯体を複数うまく組み合わせて用いることによって、それらの触媒単独では難しい分子変換を実現してきました。さらに、全く新しい配位子を有する遷移金属錯体を設計・合成し、本質的に新しい素過程（触媒反応を構成する単位反応）を含む新触媒反応の開発にもチャレンジしています。例えば、アルミニウムのルイス酸性による顕著な反応加速効果と同時に、これらの元素を電子供与性配位子として活用できるアルミニウム含有ピンサー型配位子を創出して、同一錯体中に異なる金属を二つ有する新しい複核金属錯体の合成に成功しました。例えば Rh-Al 錯体は、Al のルイス酸性と電子豊富な Rh が協働して、最も反応性の低い結合の一つである C-F 結合を穏和な条件で活性化し、有機フッ素化合物から Grignard 反応剤を得る新反応の触媒になることを明らかにしています。



本質的に新しい反応が開発されにくくなっています。独自性の高い触媒反応を開発するためには、真に新しい独自の触媒が必要です。われわれは、これまで述べてきたように、まず既知の金属錯体を複数うまく組み合わせて用いることによって、それらの触媒単独では難しい分子変換を実現してきました。さらに、全く新しい配位子を有する遷移金属錯体を設計・合成し、本質的に新しい素過程（触媒反応を構成する単位反応）を含む新触媒反応の開発にもチャレンジしています。例えば、アルミニウムのルイス酸性による顕著な反応加速効果と同時に、これらの元素を電子供与性配位子として活用できるアルミニウム含有ピンサー型配位子を創出して、同一錯体中に異なる金属を二つ有する新しい複核金属錯体の合成に成功しました。例えば Rh-Al 錯体は、Al のルイス酸性と電子豊富な Rh が協働して、最も反応性の低い結合の一つである C-F 結合を穏和な条件で活性化し、有機フッ素化合物から Grignard 反応剤を得る新反応の触媒になることを明らかにしています。

有機化学は、われわれの生活向上への貢献度が極めて大きい重要かつ基礎的な学問です。所属メンバーは、自分の研究テーマを中心に、雑誌会や学生主催の勉強会を通じ、有機化学を基礎から応用まで十分に理解しようと熱心に討論し自発的に学習しています。研究成果が科学的興味だけでなく、われわれの生活、環境を豊かにするものづくりや機能発現につながった時に得られる充実感は何物にも代えがたいものです。この喜びは、これまでのわれわれの研究を支えきた駆動力です。新時代を拓く喜びを共有できる学生諸君の参加を待っています。



# 材料解析化学研究室

研究内容：ケミカルバイオロジー・生体分子化学・脳神経化学・電気化学分析

所在地：京都市西京区京都大学桂

スタッフ

電話

e-mail

准教授 野中 洋 桂A3-221

(383)2447

nonaka.hiroshi.3e@kyoto-u.ac.jp

准教授 小山 宗孝 桂ローム記念館 304

(383)3074

oyama.munetaka.4m@kyoto-u.ac.jp

研究概要（野中グループ）：

私たち生命は、化学分子の集合体でできています。これら生体に存在する生体分子の活性・濃度・局在・相互作用・反応により、生命は成り立っています。生命現象の解明は近年進んできているものの、今なお個々の生体分子の機能に関して未解明な点が多いです。私たちのグループでは、「化学」の力で優れた機能をもつ生体探索/制御分子（分子プローブ）をデザインし、生命現象を分子レベルで理解・制御することを目指した研究を行っています。分子を作る「有機化学」、生命現象に化学的にアプローチする「化学生物学」、標的分子に関する情報を集める「分析化学」の知識・経験を動員し、分子プローブを開発し、ヒトやマウスといった生物個体（*In vivo*）での生体機能解析・制御法の開発に挑戦しています。例えば、生きている動物の脳内で重要な機能を発揮している特定のタンパク質の機能を調べたり、精神疾患・神経疾患などに関与が示唆される脳内の特定細胞を解析/機能化したり、疾患に関連するタンパク質の活性を解析したりしています。これらの取り組みにより、未知の生体メカニズム解明・生体分子の情報を基にした医療診断・機能性分子による医療応用を目指しています。

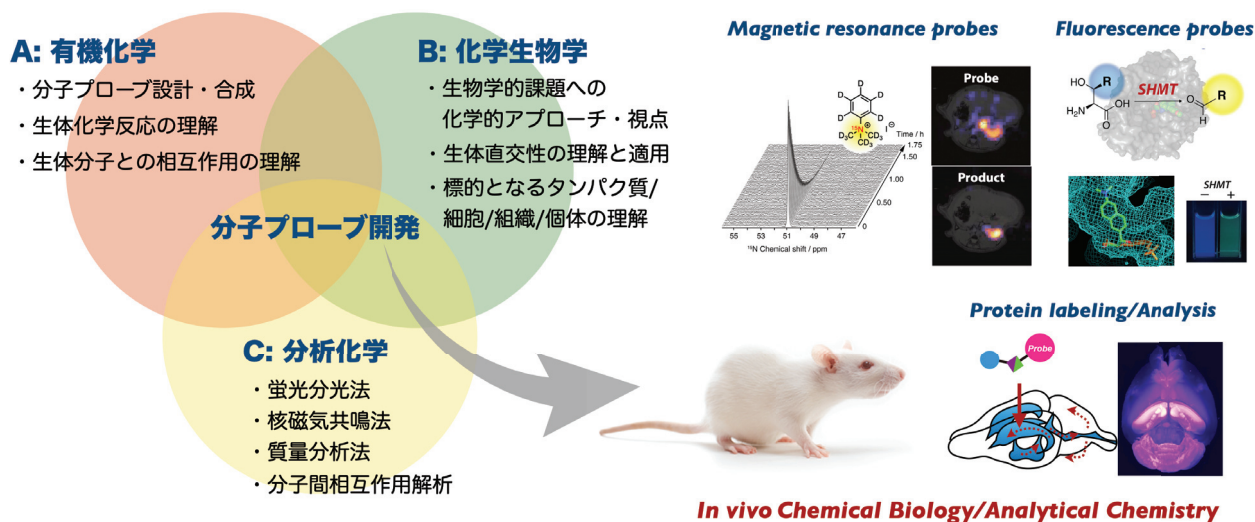


図. 野中グループの研究概要

開発した各種プローブ分子は、私たちのみならず、国内外の共同研究グループでも使用され、生命現象の解明に役立てられようとしています。

(代表的な研究業績)

(1) *Nature Synthesis*, accepted. (2) *Nature Chemical Biology*, 21, 109, 2025. (2) *Science Advances*, 10, eadp2533, 2024. (3) *Chemistry Letters*, 53, upae185, 2024. (4) *PNAS*, 121, e2313887121, 2024. (5) *Chem*, 9, 523, 2023. (6) *Nature Communications*, 10, 876, 2019. (7) *Scientific Reports*, 7, 40104, 2017. (8) *Nature Communications*, 4, 2411, 2013.など

(指導学生の進路)

大学教員：青山学院大学、東京科学大。

企業：旭化成、富士フイルム、花王、信越化学、資生堂、ブリヂストン、アクセンチュア、M3、三菱総研、中外製薬工業、ペプチドリームなど。

研究概要（小山グループ）：

小山グループでは、電気分析化学に関する研究を行っています。特に、ナノスケールで発現する材料の機能や特性に着目し、ナノ局所場での導電性構造と電子移動反応の関係などを解明することにより、新規ナノ材料やナノセンシングデバイスの構築を目指しています。そのために行っている金属ナノ粒子を修飾した導電体界面に関する研究の概要は以下の通りです。

大きさがナノメートルサイズである金属ナノ粒子は、通常の金属材料とは異なる電氣的・磁氣的・光学的性質や高い触媒能を示します。そのため、金属ナノ粒子は、新しい機能性材料として注目を集めています。しかし、それらの性質を利用して光・電子デバイスやセンシングデバイスとして利用していくためには、ナノ構造体を界面に分散させて固定化・集積化することが必須の技術要素となります。これまで、この応用として電気分析化学的研究を行ってきましたが、現在では、酸化還元電位差によって自発的に進行する電子移動反応を利用して、ニッケルなどの卑金属材料表面に貴金属を修飾して電気化学特性を解明することを中心課題としています。国外との関係では、金属ナノ材料の化学調製とデバイス応用に関してはマレーシアのグループと、電気分析化学応用に関しては中国（廈門・武漢）・サウジアラビアの各グループと、それぞれ共同研究を行っています。

# 高分子機能物性研究室

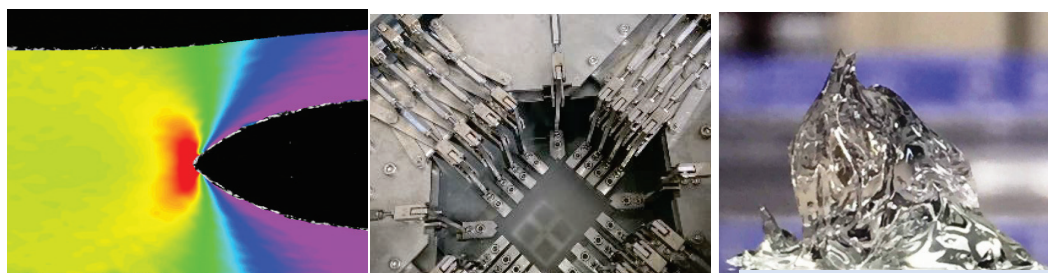
研究内容: ソフトマテリアル・高分子力学物性・レオロジー・多糖材料

所在地: 京都市西京区京都大学桂

スタッフ: 教授 浦山 健治 桂 A3-107  
(383)2453 urayama.kenji.2s@kyoto-u.ac.jp  
准教授 堀中 順一 桂 A3-109  
(383)2454 horinaka.junichi.5c@kyoto-u.ac.jp  
特定助教 Mai Thanh Tam 桂 A3-105  
(383)2455 mai.thanhtam.7t@kyoto-u.ac.jp

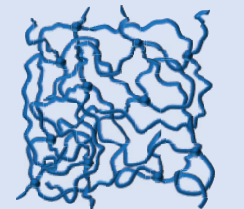
研究室 HP: <http://www-6.polym.kyoto-u.ac.jp/>

研究概要: (研究室 HP トップバナーより)



**Urayama Lab**  
Soft Material Physics and Function

高分子ソフトマテリアルの物性解析と機能創出



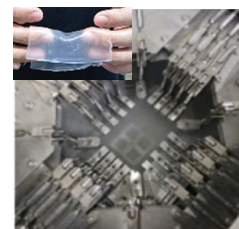
高分子ゲル, ゴム, エラストマーなどの「ソフトマテリアル」とよばれる物質群のユニークな力学物性や刺激応答挙動の解析と創出を主眼とした研究を行なっています。柔らかくて大変形する”しなやかな”特性をもつソフトマテリアルは, 我々の人体をはじめ, 多岐にわたる工業製品(食品, タイヤ, スポーツ用品など)に利用されています。ソフトマテリアルがもつ液体と固体の二面性は, ”しなやかさ”の他にも様々な興味深い物性や現象を生みますが, その複雑性ゆえに原理や機構が不明なものも数多くあります。その解析にはレオロジーや非線形科学を用いたアプローチが必要となります。また, 液体的な性質を利用すると, 外力, 温度変化, 光などに応答して機能を発現する刺激応答性を付与できるため, ソフトマテリアルは機能性材料・アクチュエータの素材として注目されています。

我々は, 様々な高分子ソフトマテリアルの物性と機能性を独自の手法で測定・解析し, 高性能化と新機能の創出につながる学理を探求しています。

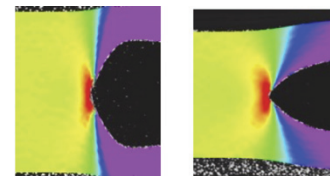
## 1. ソフトマテリアルの力学特性の精密解析と物性創出

**<多軸変形解析>** 材料の力学測定には単純引張や圧縮変形がよく使われますが、特性の一面しか捉えていません。我々は二方向にひずみを自在に与え各方向の張力を測定できる装置を開発し、力学特性の全容を解明する研究をしています。特に、自重で変形するような超ソフトゲル材料の二軸伸長特性を調べられる装置は世界で唯一です。

**<高速で進展するき裂のダイナミクスの解析>** き裂の進展は製品の安全性に直結するため、き裂の発生や進展を抑制する材料設計は重要です。変形された状態でのき裂は時速 100km 超で進展することも珍しくありません。大変形や粘弾性を示すソフトマテリアルのき裂の進展機構は未解明の点が多く残されています。我々はソフトマテリアルを高速で進展するき裂を高速カメラや画像解析で捉えて解析し、進展機構を解明する研究をしています。



自重変形する超ソフト固体用の二軸伸長装置(世界で唯一!?)



時速 100km 超で進むゴム中のき裂の先端部分のひずみの分布

## 2. 液晶性ソフトマテリアルの刺激応答特性の解析と創出

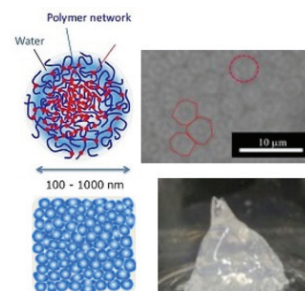
液晶エラストマー(LCE)は、表示材料で有名な液晶の性質をもつゴムで、「分子配向に追随したマクロ変形」、「分子配向のアシストで微小な力で大変形できる」というユニークな特性を示します。LCE は人工筋肉などのアクチュエータの素材として期待され、アイデア次第で様々な刺激応答挙動を創出できます。我々は、温度変化、電場などで生じる LCE の多様な熱変形挙動、ソフト弾性に由来する特異な力学特性、光学応答挙動などを多角的に研究しています。



虹彩色の外観をもつコレステリック液晶エラストマー

## 3. 機能性ゲル微粒子分散系のレオロジー解析

溶媒を含むゲル微粒子は、硬質粒子と異なり変形や体積変化を示し、超高密に充填すると固体と液体の二面性が現れます。体積や相互作用が温度などで変化するゲル微粒子を用いると、環境に応答してレオロジーが劇的に変化する機能性液体となります。微粒子合成の専門家(信大: 鈴木大介研究室)と共同で、ゲル微粒子の基礎物性と機能性に関する研究を行っています。



超高密充填されたゲル微粒子

## 4. 天然高分子系ソフトマテリアルのレオロジー解析

地球環境への意識が高まり、天然由来の高分子材料が注目されています。我々はセルロース、アミロース、キチンなどの多糖に注目し、フィルムやゲルの力学物性、溶液のレオロジー特性などの基礎物性およびその知見を応用した新材料の創製に取り組んでいます。

### <メッセージ>

研究活動は、学生さんと教員と一緒に未知の問題を解き明かしていく共同作業(知的格闘技)です。研究活動は学生さんの想像よりもずっと多面的で、多角的に成長できる絶好の機会です。学生さんの伸びしろと成長には驚かされますが、教員も共に成長できることが醍醐味です。得た成果のプレゼンテーションと文章化のスキルは実社会に出ても非常に重要です。研究成果の学会発表や論文を推奨し、手厚くサポートします。



多糖の高濃度ハイドロゲル



# 生体材料化学研究室

研究内容 : 機能材料設計・生体高分子化学・ペプチド化学・糖鎖工学

所在地 : 京都市西京区京都大学桂 A3 棟

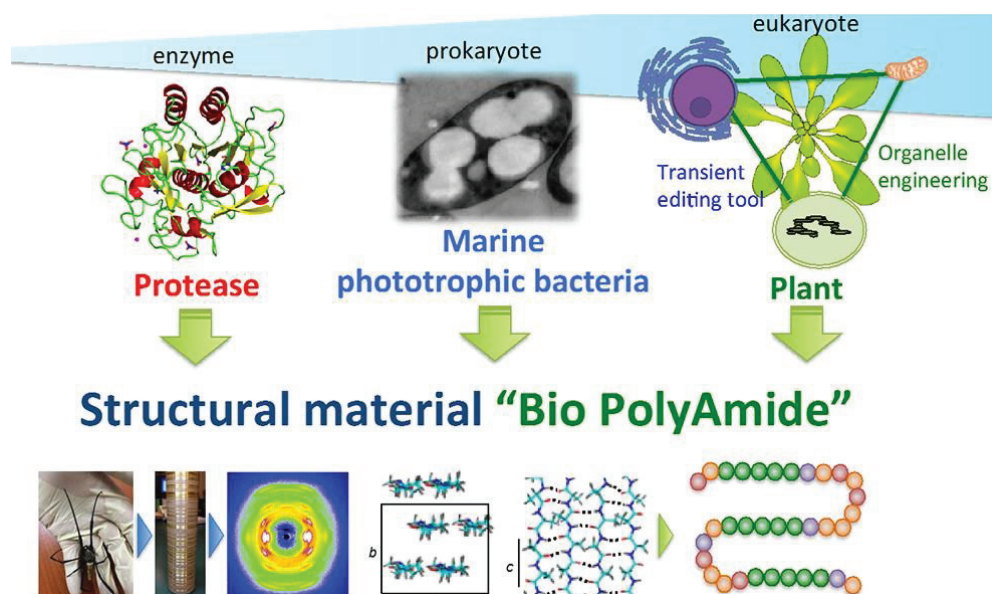
			電話	e-mail
スタッフ	教授	沼田 圭司	桂A3-206 (383)2400	<a href="mailto:numata.keiji.3n@kyoto-u.ac.jp">numata.keiji.3n@kyoto-u.ac.jp</a>
	特定准教授	小田原真樹	桂A3-204 (383)2405	<a href="mailto:odahara.masaki.6a@kyoto-u.ac.jp">odahara.masaki.6a@kyoto-u.ac.jp</a>
	講師	大前 仁	桂A3-204 (383)2403	<a href="mailto:ohmae.masashi.4n@kyoto-u.ac.jp">ohmae.masashi.4n@kyoto-u.ac.jp</a>
	助教	辻 優依	桂A3-204 (383)2405	<a href="mailto:tsuji.yui.3p@kyoto-u.ac.jp">tsuji.yui.3p@kyoto-u.ac.jp</a>
	特定助教	Shamitha Rao Yagi	桂A3-204 (383)2405	<a href="mailto:yagi.shamitharao.2a@kyoto-u.ac.jp">yagi.shamitharao.2a@kyoto-u.ac.jp</a>
	特定助教	寺田 佳世	桂A3-204 (383)2405	<a href="mailto:terada.kayo.4w@kyoto-u.ac.jp">terada.kayo.4w@kyoto-u.ac.jp</a>
	特定助教	野村 幸汰	桂A3-204 (383)2405	<a href="mailto:nomura.kota.7m@kyoto-u.ac.jp">nomura.kota.7m@kyoto-u.ac.jp</a>
	特定助教	OKTAVIANI, Nur Alia	桂A3-204 (383)2405	<a href="mailto:oktaviani.nuralia.5d@kyoto-u.ac.jp">oktaviani.nuralia.5d@kyoto-u.ac.jp</a>

研究室 URL : <http://pixy.polym.kyoto-u.ac.jp>

## 研究概要

我々の研究室では、これまで生体高分子の構造と物性の相関を解明し実用的な材料として利用することを目指して、バイオポリエステルやポリペプチドを研究してきた。研究の最大の独自性は、アミノ酸から構成されるポリアミノ酸（ポリペプチド、構造タンパク質）

を機能材料および構造材料として実用化するために、高分子構造と物性の相関に基づいた材料設計に集約される。構造材料としては天然のクモ糸を模倣した人工シルクの開発を進めており、機能材料としてはペプチドを利用した植物改変を進めている。

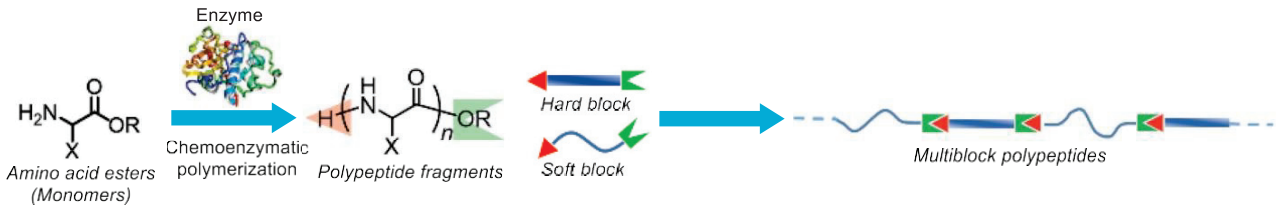


生体関連高分子の精密合成／分子組織化／超分子／機能材料

## 研究内容

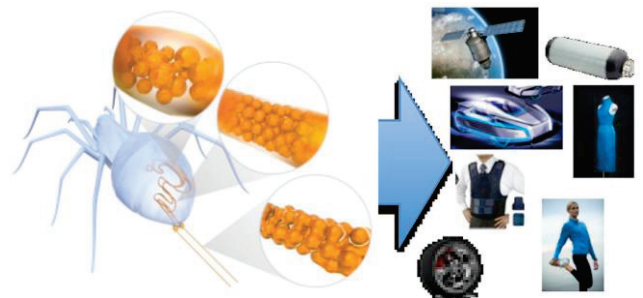
### 1. 化学酵素重合を利用したポリアミノ酸の新規合成法の確立

ポリペプチド・ポリアミノ酸の高機能高分子材料化を目指し、ペプチド分解酵素を用いる化学酵素重合によるポリペプチドの新規合成法確立を目指している。



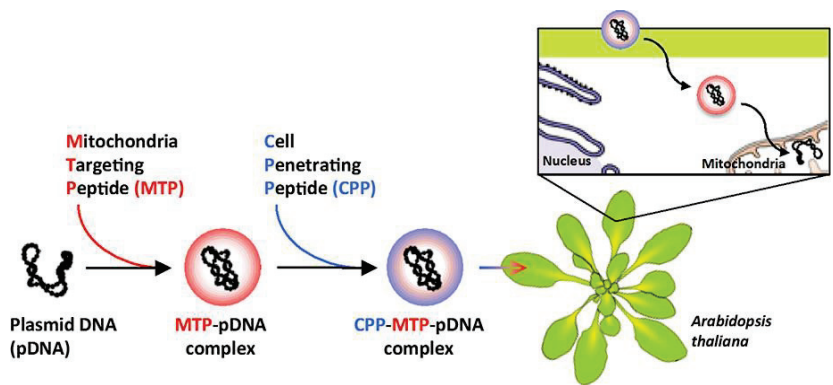
### 2. 天然シルクの機構解明および人工シルクの開発

高機能素材として知られるシルクタンパク質が形成するベータシート構造に着目し、紡糸後のシルク繊維（クモの牽引糸）の延伸過程における結晶構造変化や、非常に早いベータシート結晶の形成過程を明らかにしてきた。これらの新しい知見を基に人工シルクの紡糸機構や材料設計に活用して研究を進めている。



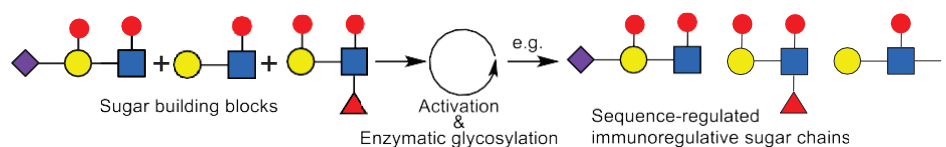
### 3. ポリペプチドを利用したオルガネラ工学の創出

シルクのような高い生体適合性・生分解性を有する構造タンパク質を他の機能性ペプチドと融合させた遺伝子キャリアを作製し、植物オルガネラの遺伝子導入・ゲノム編集や、ミトコンドリアのような細胞小器官への特異的遺伝子導入に成功してきた。現在は葉緑体を含めた複数のオルガネラゲノムの同時改変を可能にする研究を行っている。



### 4. 特定細胞を標的とする配列制御糖鎖リガンドの化学酵素合成

免疫細胞に直接作用して機能制御可能な糖鎖の化学酵素法による配列制御合成を行い、癌やサイトカインストームなどの異常免疫反応を治癒する材料や、免疫系を回避する DDS 材料への展開を目指している。



# 先端機能高分子研究室

研究内容： カチオン重合・精密ポリマー合成・自己組織化・刺激応答性材料

所在地： 京都市西京区京都大学桂

スタッフ：講師 Kira Landenberger 桂A3-010 (383)2620 landenberger.kirabeth.2x@kyoto-u.ac.jp

先端機能高分子研究室はA, B, Cの3つの研究グループに分かれて研究を行っています。

## 先端機能高分子講座A

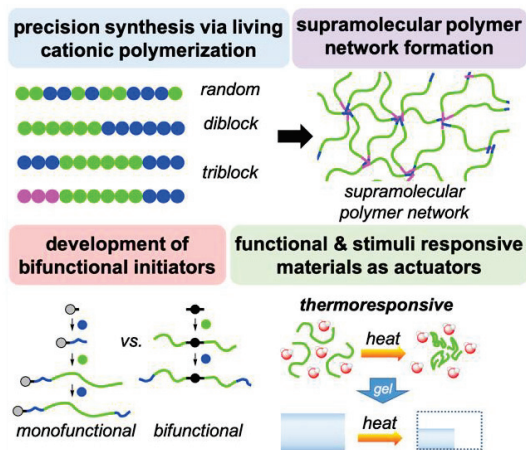
研究概要：

## 先端機能高分子講座B

研究概要：

## 先端機能高分子講座C

研究概要：リビングカチオン重合により、様々な構造・官能基を有するポリマーを合成し、種々の自己組織体の形成と特殊な性質の発現を目指している。目的の一つは、得られるポリマーおよびポリマー混合物の性質に対する分子間相互作用の影響の調査である。相互作用の中でも特にハロゲン結合およびドナー・アクセプター $\pi$ - $\pi$ 結合を検討している。二つ目は、相補的な分子間相互作用により、超分子ポリマーネットワークおよび様々な自己組織体を形成させ、その性質および刺激応答性を検討している。そして、刺激応答性ゲルを利用し、新たなアクチュエータを目指している。



研究テーマ：

- ◆ハロゲン結合相互作用が可能なポリマーを開発し、その特性に対する影響を検討し、超分子ポリマーネットワークおよび様々な自己組織化が可能な高分子構造を研究している。
- ◆カチオン重合により、ドナー・アクセプター $\pi$ - $\pi$ 結合が可能なポリマーを合成し、これにより超分子ポリマーネットワークおよび様々な自己組織化が可能なポリマー構造を研究している。
- ◆前より、簡単にABAトリブロックコポリマーを創生するため、新たな二官能開始剤を研究する。
- ◆刺激応答性が可能な材料を用いているゲルを生成し、アクチュエータを開発する。





## 機能高分子合成研究室

研究内容：超分子ポリマー・特殊構造ポリマー・導電性ポリマー・コロイド

所在地：京都市西京区京都大学桂 A3 棟 3 階

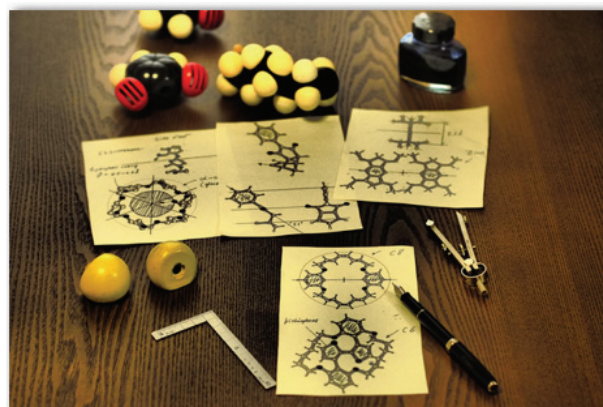
HP：<https://twitter.com/Sugiyasulab>

電話

スタッフ：	教授	杉安 和憲	桂 A3-315	(383)2595
				<a href="mailto:sugiyasu.kazunori.8z@kyoto-u.ac.jp">sugiyasu.kazunori.8z@kyoto-u.ac.jp</a>
	助教	渡邊 雄一郎	桂 A3-312	(383)2598
				<a href="mailto:watanabe.yuichiro.7d@kyoto-u.ac.jp">watanabe.yuichiro.7d@kyoto-u.ac.jp</a>
	助教	深谷 菜摘	桂 A3-312	(383)2598
				<a href="mailto:fukaya.natsumi.6s@kyoto-u.ac.jp">fukaya.natsumi.6s@kyoto-u.ac.jp</a>

### 基本的な考え方：分子設計で分子の可能性を拓く

分子は物質の物性・機能を担う最小単位です。化学者は分子を一まるで建築家や服飾デザイナーがそうするように一デザインすることができます。教科書で習ったよりも、ずっと化学はクリエイティブな学問なのです。新しく創られた分子には、魅力的な物性・機能が潜在するはずです。誰もが思いつかなかったようなオリジナル分子をつくって、新しい化学を切り拓いてみませんか？



### 最近の研究テーマ

- (次ページ 1) 超分子ポリマーの精密合成：リビング超分子重合
- (次ページ 2) 超分子ポリマーの物性研究：階層性超分子材料の創出
- (次ページ 3) 特殊構造ポリマーの合成と機能開拓
- (次ページ 4) 超分子化学、高分子化学、コロイド化学の融合

### 研究室の方針

以下の3つを最優先にします。

**安全：**どこに行っても大事です。気が回る人間になりましょう、ということでもあります。

**成長：**驚いたり、悩んだり、緊張したり。研究を通じて大きく成長してください。

**独創：**「目から鱗が落ちる」ような研究を目指します。

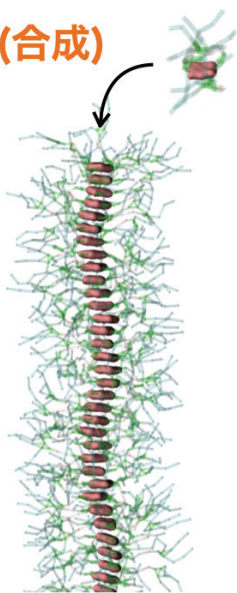
研究室のルールを決める際には、この3つに立ち返って、その効果を最大化できるようにします。

## 杉安研究室で進行中のプロジェクト

### 超分子ポリマー(合成)

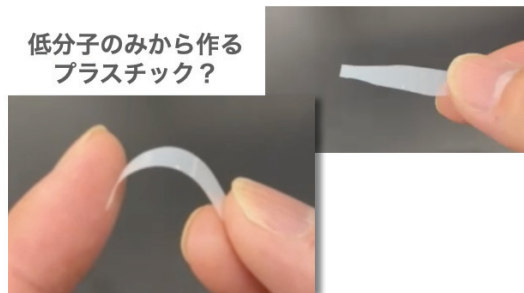
超分子ポリマーとは、モノマー分子が水素結合などの可逆的な分子間相互作用で連結された新しいタイプのポリマーです。

わたしたちは、超分子ポリマーを精密合成するための「リビング超分子重合法」を独自に開発し、さまざまなナノ構造体を作り出すことに成功しています。



### 超分子ポリマー(物性)

低分子のみから作るプラスチック？



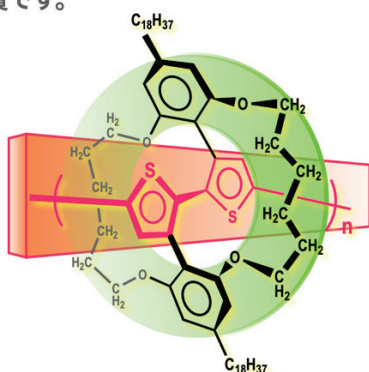
超分子ポリマーは、その可逆的な重合・分解を特長として、リサイクル性に優れた材料として期待されています。

環境問題を意識しつつ、超分子ポリマーの材料化の研究を進めています。

### 共役系ポリマー

$\pi$  電子が非局在化した共役系ポリマーは、発光性や電気伝導性に優れており、機能性材料の創出において有用な物質です。

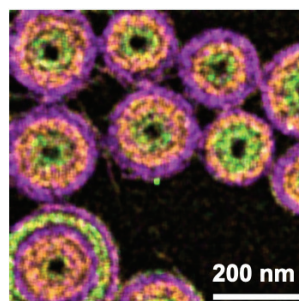
特殊な構造を有する共役系ポリマーを設計・合成し、 $\pi$  電子の新しい特性を引き出すことを目指しています。



### コロイドサイエンス

分子の自己集合を使えば、分子レベルよりも大きなスケールの物質を作り出すことができます。

左上の「リビング超分子重合法」を駆使して、100~1000 nm程度の物質を精密合成し、新しいコロイドサイエンスの開拓に挑戦しています。



## 研究室選びに迷っている人も大歓迎

超分子化学をベースとして、高分子化学やコロイド科学に切り込んでいきます。杉安が『工業化学概論』で少しだけお話ししましたが（レポートのエッセイを楽しく読ませてくださいました）、学部まで『超分子化学』についてはほとんど習いません。自分の興味が定まっていなくても、何かおもしろいことをやってみたい！という気持ちがあれば大歓迎。

2021年12月に、杉安が国立研究開発法人物質・材料研究機構（通称、NIMS）から着任し、研究室を立ち上げました。2025年度で4年目になります。NIMSを含め国内外で共同研究が進行中です。渡邊、深谷も熱血指導します。

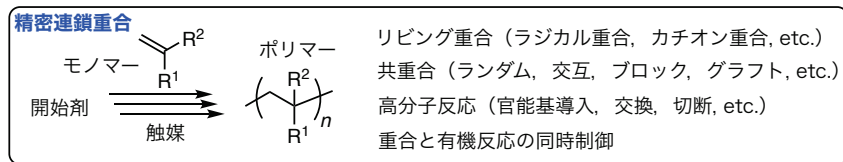
# 高分子生成論研究室

研究内容：精密連鎖重合・精密重合反応設計・重合触媒・機能性高分子の精密合成  
所在地：京都市西京区京都大学桂

スタッフ：教授	大内 誠	桂A 3- 4 1 1	電話 (383)2600	FAX (383)2601
			e-mail: ouchi.makoto.2v@kyoto-u.ac.jp	
	准教授	寺島 崇矢	桂A 3- 4 1 3	(383)2602 (383)2601
			e-mail: terashima.takaya.2e@kyoto-u.ac.jp	
	助教	西川 剛	桂A 3- 4 1 0	(383)2603 (383)2603
			e-mail: nishikawa.tsuyoshi.8n@kyoto-u.ac.jp	

ホームページ： <http://www.living.polym.kyoto-u.ac.jp> (Lab X: @ouchi\_u)

## 1. 研究概要



### 精密連鎖重合によって「高分子性」を追求

一次構造 (分子量, 立体規則性, 配列, トポロジー) の精密制御手法の開発  
集合構造制御, 機能創出のための一次構造制御, オンデマンド分解  
精密にデザインされた構造と特性・機能の相関解明

## 2. 最近の研究テーマ (令和6年度修士課程修了生の修士論文題目)

- 交互グラフト共重合体の精密合成と配列由来の自己組織化挙動
- アクリロニトリル統計的共重合体のマイクロ相分離：ラメラ構造の制御と相転移
- 主鎖に直結したホウ素のルイス酸性とモノマー隣接基効果に基づく刺激応答性高分子の開発
- ウレア結合をつなぎ目に有するブロック共重合体の精密ライブラリー合成：つなぎ目の協調自己組織化による相分離限界の突破
- アクリル酸 Na ランダム共重合体のマイクロ相分離と水を層間を含むラメラ構造材料

## 3. 研究室のモットー

学生の主体性を重んじ、お互いが切磋琢磨して、研究室全体としての成長を目指す。  
世界を驚かす研究を展開する。

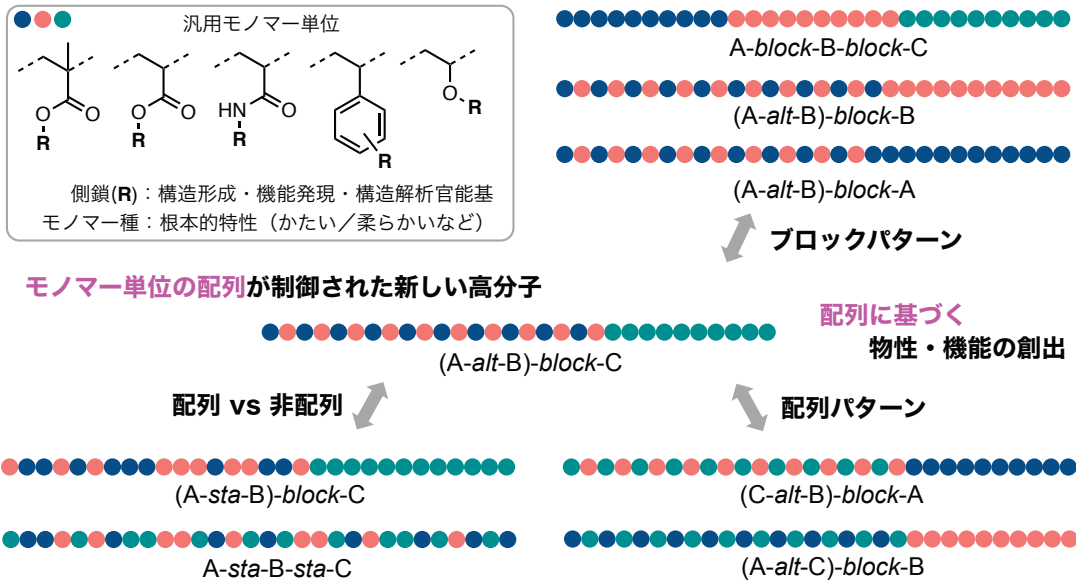
研究面：質の高い**オリジナリティー**のある研究を遂行する。

教育面：研究を通じて**プロ研究者**を育成する。

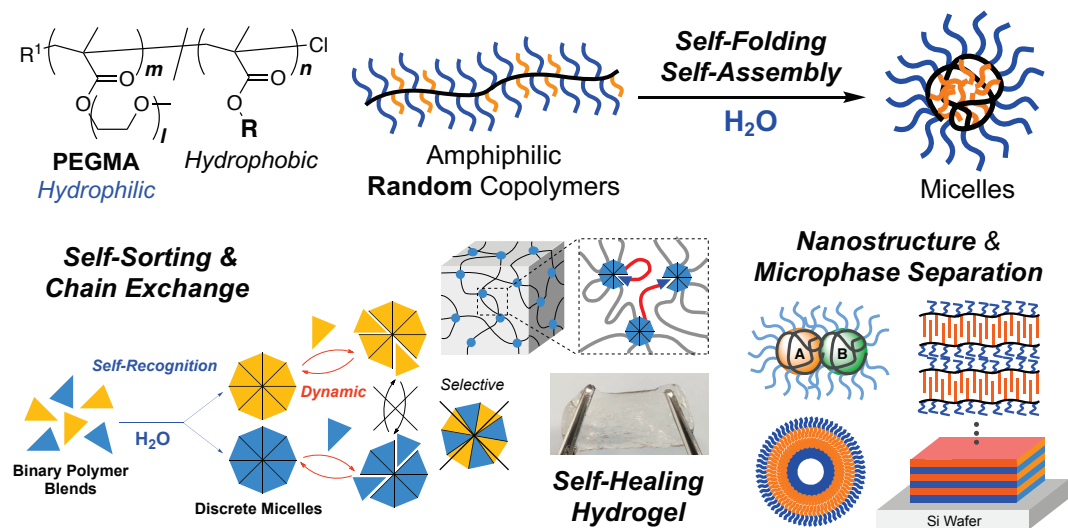
### 当研究室で目指す「プロ研究者」

- 主体性 : 自分の考えで研究を実行できる。
- 幅広い視野 : 他の人の研究にも興味をもち、意見を言える。
- アピール力 : 研究について議論でき、研究の魅力を伝えることができる。
- 論理的思考力 : 論理的な文章で論文を書くことができる。
- 展開能力 : 新たな研究を提案できる。
- 国際力 : 国際的に活躍できる (国際学会発表, 海外研究室への留学)

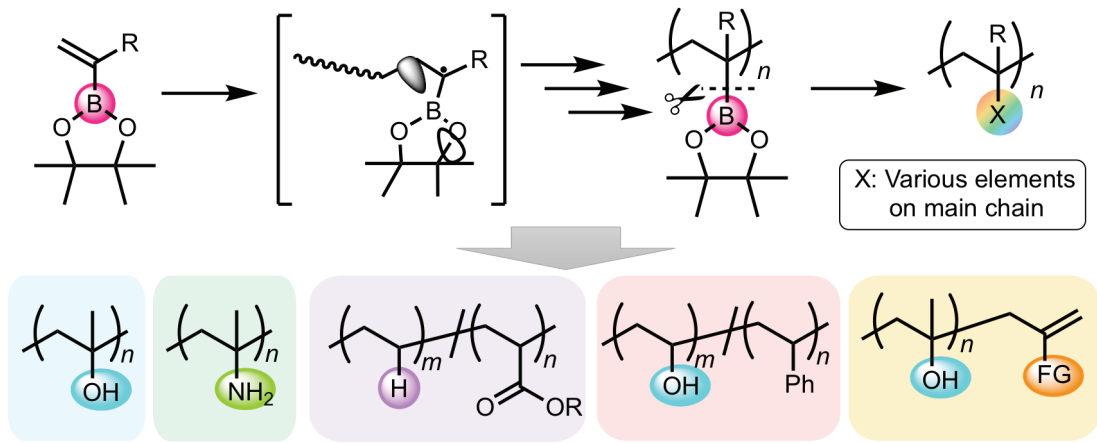
### 研究例 1 配列（シーケンス）の制御された高分子の合成と配列機能



### 研究例 2 両親媒性ランダム共重合体の自己組織化と機能



### 研究例 3 ホウ素モノマーを用いた新しい高分子合成アプローチ



**Boron-based monomers for overcoming the limitation in polymer synthesis**



## 重合化学研究室

研究内容：高分子合成・元素材料・無機高分子・元素ブロック・ハイブリッド材料

所在地：京都市西京区京都大学桂 A3 棟 4F 北東

HP：<http://poly.synchem.kyoto-u.ac.jp>

TEL FAX

スタッフ：教授 田中一生 桂A3-409 (383)2604 (383)2605  
tanaka@poly.synchem.kyoto-u.ac.jp

助教 権 正行 桂A3-407 (383)2610 (383)2607  
gon@poly.synchem.kyoto-u.ac.jp

助教 伊藤峻一郎 桂A3-404 (383)2608 (383)2607  
ito@poly.synchem.kyoto-u.ac.jp

### 研究概要

## Periodic Table of the Elements

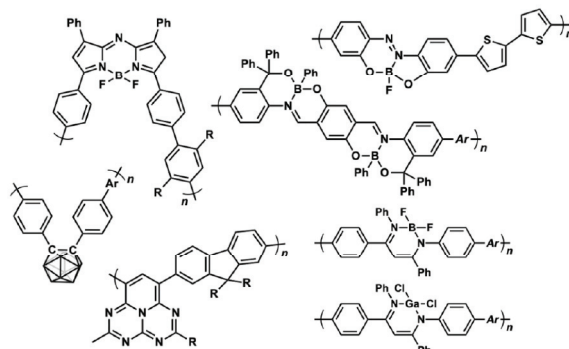
- (1) 様々な元素を活用した新奇材料開発
- (2) 無機物と有機高分子の融合による高機能複合材料の創製
- (3) 元素の新しい特性の探索

高分子材料は我々の身近なところから最先端の素子にいたるまで幅広く実用化されています。しかし、これらの高分子を構成している元素は、炭素や水素、酸素、窒素といった、周期表上のごく一部の種類に限られていませんか？ これまで高分子にはあまり使われてこなかった元素を活用すれば、元素の特徴を反映した電子・光・触媒機能、分子認識能などの新しい機能を持った高分子の創出が期待できます。ですが、このような様々な元素を含む高分子の多くは、世界中の誰も作ったことがありません。周期表の全ての元素を視野に入れた低分子・高分子合成手法や材料設計戦略を確立できれば、次世代の機能性材料開発ができるとともに、まだ見ぬ元素の新しい「顔」を見付けることにつながるかもしれません。当研究室では一人ひとりの自由な発想のもと、それぞれが元素を活用したオリジナルの物質を生み出すことを目的として、精力的に研究に取り組んでいます。

### 代表的な研究テーマ

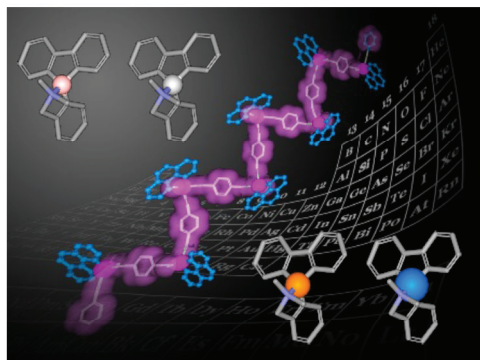
#### ヘテロ元素錯体と共役系ポリマーによる 元素の特徴を活かした機能材料創出

ヘテロ原子や無機元素で構成される機能性ユニットを「元素ブロック」と呼びます。元素ブロックを集積・連結することで新しい機能を有する高分子材料が得られます。私たちは、新奇の元素ブロックの探索と機能性元素ブロック高分子の創出を進めています。



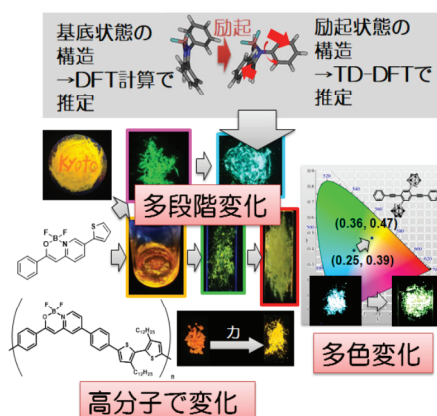
## 元素の高周期化による元素材料探索

メンデレーエフは元素を分類して周期表を作成しました。一方私たちの研究では、同族元素の錯体を同じ配位子で作っても、励起状態での特性は全く違うことや、時には周期表上で遠く離れた元素間で共通性が現れることなど、予測できない現象に次々と出会いました。これらの物性を利用した新しい材料の開発や、これらの新機能から導かれる“励起状態の周期律”を見出すために研究を進めています。



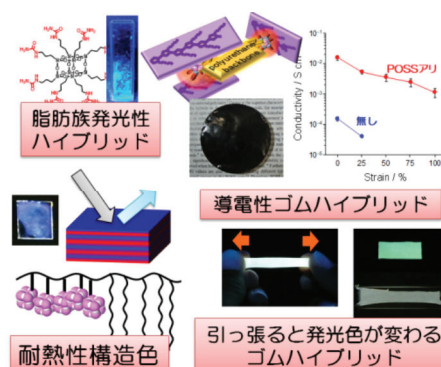
## 凝集誘起型発光・発光クロミズム高分子材料の創出

一般的な有機発光色素はフィルムでは濃度消光により発光しません。最近、ある種の錯体や共役系高分子が、フィルム状態でのみ強く発光することや刺激にตอบสนองして発光色変化を示すことを見出しました。これらの機能は、環境センサーや生体イメージングなどへの応用が期待されます。現在、合成・物性測定・量子化学計算を相補的に組み合わせ、新たな機能性発光材料を設計するために研究を進めています。



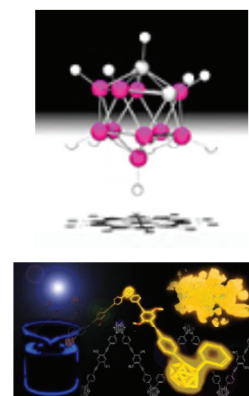
## 有機-無機フレキシブルハイブリッド材料の開発

ポリマーとガラスを分子レベルで均一に混合すると、有機-無機ハイブリッド材料が得られ、ポリマーの柔軟性と無機成分の耐久性を併せ持った材料となります。さらに POSS と呼ばれるキューブ状分子を用いると機能性を付与することができ、ひっぱると電気抵抗が変わったり、発光色が変わったりする次世代のストレッチャブル材料が得られます。



## カルボラン含有共役系の構築

ホウ素と炭素からなる正二十面体構造のクラスター分子をカルボランと呼びます。カルボランを主鎖に持つ高分子は、フィルム状態でのみ強い発光を示すことを見出しました。また、カルボランに芳香環を結合すると特異な光学機能性が現れることを見出しました。例えば、ほぼ100%の効率で光ったり、摩擦や加熱などの刺激で発光色が変わったりします。現在、カルボランが誘起するユニークな分子間相互作用を利用して、新たな機能性発光材料の開発に取り組んでいます。





# 生体機能高分子研究室

研究内容：生体高分子化学・バイオインスパイアード化学、生体膜工学・再生医療

所在地：京都市西京区京都大学桂

電話

e-mail:

スタッフ：教授 佐々木善浩 桂A3-321 (383)2823 sasaki.yoshihiro.8s@kyoto-u.ac.jp

助教 水田涼介 桂 A3-320 (383)2594 mizuta.ryosuke.6w@kyoto-u.ac.jp

HP: <http://biopolym.jp/>

## 研究概要：

本研究室では、生体分子の自己組織化を活用し、ソフトナノ材料の開発とバイオ機能の発現に関する研究を行っています。タンパク質、核酸、多糖といった生体高分子は、生命機能の維持に不可欠な要素であり、「人」と「地球」に深く関わっています。私たちは、生体高分子がどのように自己組織化し、機能を発揮するのかを探究し、その知見を応用して新しいバイオマテリアルの創出を目指しています。

特に、生体膜の構造制御、ナノ・再生医療に向けた高分子設計、環境に応答するバイオナノハイブリッドの創出という 3 つの主要なテーマに取り組んでいます。これらの研究を通じて、医学・薬学・工学分野への貢献を目指しています。

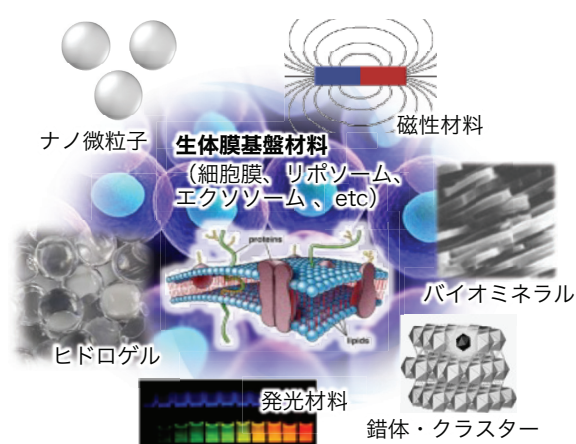


図 1 バイオ応用展開のための生体膜を基盤とするハイブリッドの設計概念

## 1. 生体膜の構造と機能を制御する

細胞膜は生命の基本単位であり、その構造や機能を理解し制御することは、バイオマテリアル開発の重要な鍵となります。本研究室では、人工細胞膜の構築や、膜モルフォジェネシス (membrane morphogenesis) の制御に関する研究を進めています。

例えば、細胞膜にせん断流を加えることで、脂質ナノチューブを簡単に作製できる技術を開発しました。この技術を活用し、人工細胞膜からなる自己集積型バイオチップの構築にも取り組んでいます。これにより、細胞膜の機能を模倣した新しいバイオセンシング技術や、創薬支援ツールの開発が期待されています。

また、膜タンパク質は高度な生体機能を担いますが、その取り扱いが極めて困難です。この問題を解決するために、無細胞タンパク質発現と同時に生体膜へ再構成する技術を開発しました。この技術を活用することで、膜タンパク質の機能を自在にプログラムできる人工細胞の創出を目指しています。

## 2. ナノ・再生医療に向けた高分子集積体の設計

近年、ナノテクノロジーを応用した医療技術が急速に発展しています。本研究室では、ヒドロゲルとナノ微粒子の特性を兼ね備えたナノゲルを開発し、タンパク質や核酸を運搬するナノキャリアとして活用する研究を行っています。特に、がんワクチン療法への応用に向けて、抗原タンパク質の送達技術を開発し、がん免疫療法の新しい手法を提案しています。

さらに、ナノゲルを共有結合させてマクロゲルを作製し、これを再生医療に応用する研究も進めています。例えば、創傷治癒材料、骨再生材料、細胞スフェロイドの基板としての有用性を、臨床医師との共同研究で検証しています。最近の成果として、筋細胞とマクロゲルを組み合わせた複合化ゲルの移植により、舌がん切除後の舌筋を再生できる可能性を示しました。また、糖尿病治療に向けた膵島移植のためのインスリン分泌細胞のハイブリッド開発に関する国際共同研究も進めています。

## 3. 環境に応答するバイオナノハイブリッドの創出

ドラッグデリバリーのキャリアとしてエクソソームが注目されています。本研究室では、エクソソームの工学的利用について研究を行い、人工細胞膜と組み合わせた薬物封入技術や、ナノゲルとの複合化によるエクソソームの効率的な送達を実現しました。

しかし、エクソソームの収率が極めて低いという課題があります。この問題を解決するため、生体膜でコーティングしたナノ粒子（合成エクソソーム）を開発し、創薬分野への応用を進めています。この技術により、従来よりも安定性の高い薬物キャリアを実現できると期待されています。

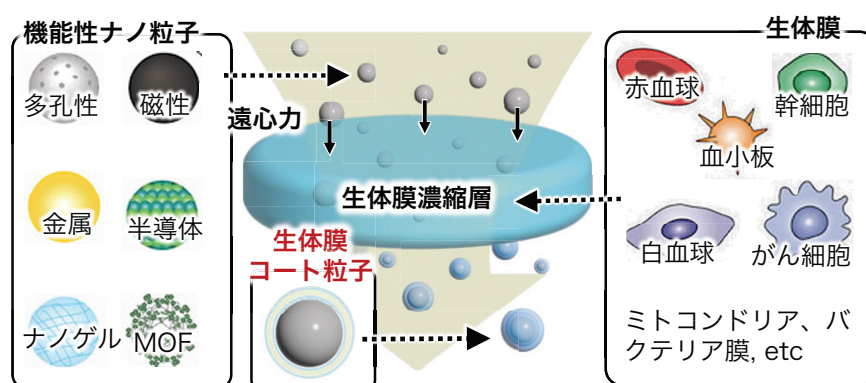


図2 ナノ粒子ディップコート法（NanoDIP法）の展開

さらに、バイオ材料の構造や機能を精密に制御するために、無機物とのハイブリッド化についても研究を進めています。例えば、磁気誘導を利用してタンパク質を細胞内に送達する磁性ナノゲルを開発しました。今後、光・マイクロ波・超音波など多様な刺激に応答するハイブリッド材料を活用し、生体機能の精密制御とその医療応用を目指します。

## 研究のポイント

- ✓ 自己組織化するソフトナノ材料の開発 - 生体分子の特性を活かした材料設計
- ✓ 人工細胞膜を活用したバイオチップ・創薬技術 - 生命システムを模倣した医療応用
- ✓ ナノゲル・マクロゲルを用いた再生医療 - がんワクチン・組織再生への応用
- ✓ エクソソーム・ハイブリッドナノ粒子によるナノ医療 - 新規薬物送達システムの開発
- ✓ 多様な刺激応答型材料による生体機能制御 - 医療・診断・治療への展開



# 高分子機能学研究室

研究内容： 高分子光物理・光化学、高分子光・電子機能、高分子構造・薄膜

所在地： 京都市西京区京都大学桂 A3 棟 214 号室

ホームページ：<https://photo.polym.kyoto-u.ac.jp/>

電話

スタッフ	教授	大北 英生	桂 A3-213	(383)2612 ohkita@photo.polym.kyoto-u.ac.jp
	准教授	山本 俊介	桂 A3-217	(383)2613 syama@photo.polym.kyoto-u.ac.jp
	助教	KIM Hyung Do	桂 A3-217	(383)2613 hyungdokim@photo.polym.kyoto-u.ac.jp

研究概要：

## 分子集合構造の制御が新しい機能を創り出す

本研究室は高分子を基幹材料として、「光」、「電子」、「イオン」の三つのキーワードを軸に研究を行っています。光を使うことによって、光・電子・イオンにまつわる素過程を分子の時間・空間スケールで直接観測し、分子レベルで物性や機能を解明しています。また、最近では地球規模課題の一つであるエネルギー問題の解決に貢献する高分子太陽電池の開発にも取り組んでいます。

### 高分子光・電子機能の創成

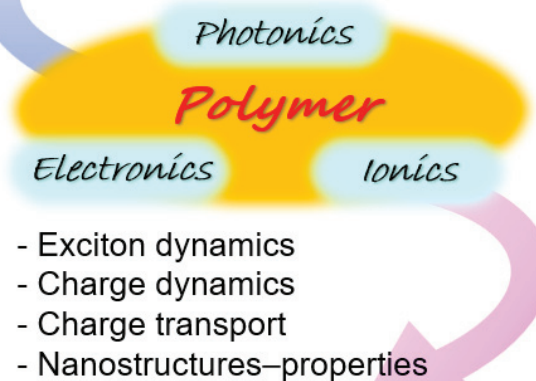
分子間でのエネルギーや電子の移動はわずか数ナノメートル( $10^{-9}$  m)の距離での現象です。そのため材料の構造もナノメートルスケールで制御する必要があります。本研究室では、分子スケールでの構造制御によって分子サイズのデザインによる新しい光・電子機能材料を創成しています。

### 高分子光物理過程の解明

光・電子機能を担う素反応は高速かつ広範な時間スケール( $10^{-15}$  s ~  $10^{-6}$  s)で進行します。本研究室では、超短パルスレーザーを用いてこれらの超高速現象を実時間で観察し、光物理・光化学現象を解明しています。

### 高分子系の光・電子機能

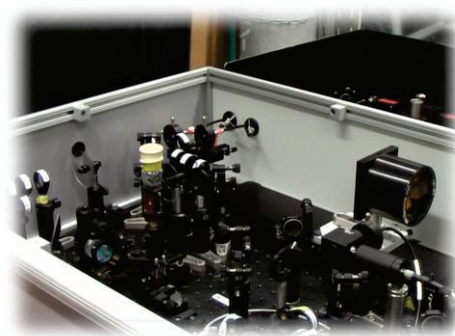
- Polymer solar cells
- Perovskite solar cells
- Organic electrochemical transistor



### 高分子系の光・電子物性

## 共役高分子の光物理・光化学

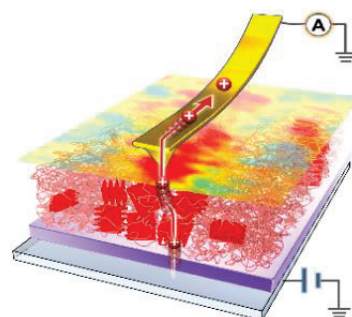
共役高分子は、可視光を吸収するとともに効率のよい発光特性を示すため、有機 EL や高分子太陽電池などの有機エレクトロニクス材料に用いられています。光吸収により生成する励起子を起点とした緒現象は分子の時間スケールで進行するため、本研究室では超短パルスレーザーを用いた時間分解分光測定を駆使することで、分子の時間スケールでの光物理現象を解明しています。



超短パルスレーザー分光法による分子の時間スケールでの光物理素過程の解明

## 共役高分子の光・電子物性

複数の共役系分子材料をブレンドすることで新たな機能が発現しますが、これらの機能や物性は分子スケールでの構造に支配されます。本研究室では分子の空間スケールでの構造を、各種プローブ顕微鏡を駆使して観察・制御し、構造と光・電子物性ならびに機能との関係について研究しています。



電流計測原子間力顕微鏡による分子の空間スケールでの構造・物性の解明

## 高効率高分子太陽電池の開発

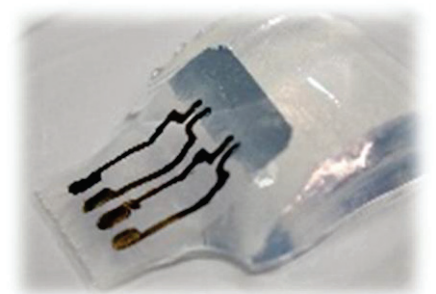
共役高分子を用いた次世代太陽電池として期待されている高分子太陽電池を開発しています。上述の時間分解分光法を駆使することで、「光電流はどのように発生するのか?」、「電荷はどのように輸送されているのか?」といった発電機構を解明しています。解明した機構を基に、より高性能な高分子太陽電池を実現します。



室温で溶液状態の高分子材料を塗布して創るカラフルで軽い次世代太陽電池

## 電気化学高分子ソフトランジスタの開発

電子とイオンの両方を輸送する「混合伝導性高分子」はバイオセンサや、神経の動作を模倣した脳型素子への応用が期待されています。こうした材料を用いたランジスタ素子について、赤外分光や放射光 X 線回折を用いた構造解析を行い、電子物性・デバイス特性との関係について研究しています。



水中で動作するフレキシブルな電気化学ランジスタ素子

# 高分子分子論研究室

研究内容 : 高分子溶液学, 高分子統計力学, 高分子流体力学, 高分子動力学  
分子動力学シミュレーション, 量子化学計算

所在地 : 京都市西京区京都大学桂

			電話	FAX
教授	中村 洋	桂 A3-210	(383)2625	(383)2628
			e-mail: yonaka@molsci.polym.kyoto-u.ac.jp	
准教授	井田 大地	桂 A3-208	(383)2624	(383)2628
			e-mail: ida@molsci.polym.kyoto-u.ac.jp	
助教	領木 研之	桂 A3-209	(383)2626	(383)2628
			e-mail: ryoki@molsci.polym.kyoto-u.ac.jp	

ホームページ : <http://www.molsci.polym.kyoto-u.ac.jp>

研究概要 :

## 高分子溶液物性の分子論的解釈

高分子溶液の粘性, 滲透圧, 散乱光強度などの巨視的性質から, 溶液中の高分子鎖の性質を実験的に決定できる. その鎖の性質の分子量依存性を適切な高分子理論に基づいて解析することで, 高分子鎖の固さ, 太さ, 局所形態, 分枝状態, 分子間相互作用, ダイナミクスに関する分子レベルの情報を得る. 本研究室では, 高分子溶液物性の研究を実験, 理論の両面から発展させ, 高分子と溶媒の組合せによって様々に変化する高分子溶液の物性を分子論的に解釈する枠組の確立を目指す.

このような研究を通して, 以下に示す高分子科学者としての必須の能力を身に付けることができる.

### ○ 高分子試料の合成

種々の重合法, 精製法を駆使して, 極低分子量オリゴマーから超高分子量ポリマーにわたり, 分子量分布が狭く, 立体規則度や分枝状態が制御された高分子試料を調製する.

### ○ 測定原理の理解と精密な測定

種々の測定機器を単なるブラックボックスとして使うのではなく, なぜそのような測定が可能であり, なぜそのような物理量を評価することができるのかを理解する. また, 精度良く測定するために何を工夫すれば良いかを理解する.

### ○ 解析理論の修得・構築

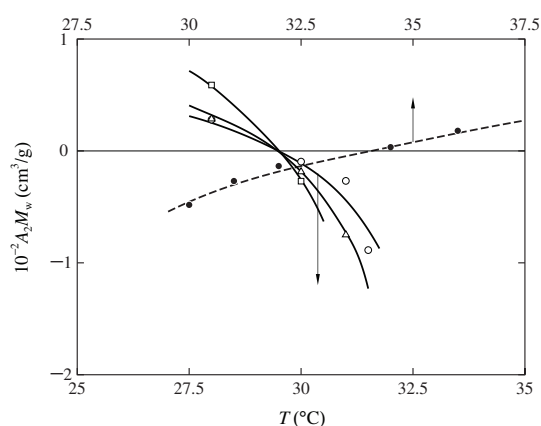
得られた実験データと高分子の分子レベルの性質を関係付けるために必須の高分子理論を修得する. また, 既存の理論では説明できない実験データの挙動を理解するための, 新しい理論を構築する.

最近の研究テーマ：

### 非イオン性水溶性高分子の溶液物性

下限臨界相溶温度型相挙動を示すポリ-*N,N*-ジエチルアクリルアミド (PDEA) やポリメタクリル酸-2-(2-メトキシエトキシ)エチルの水溶液について、稀薄溶液物性の解析から繰返し単位間相互作用の温度依存性などを明らかにし、高分子水溶液物性の分子論的理解を目指す。

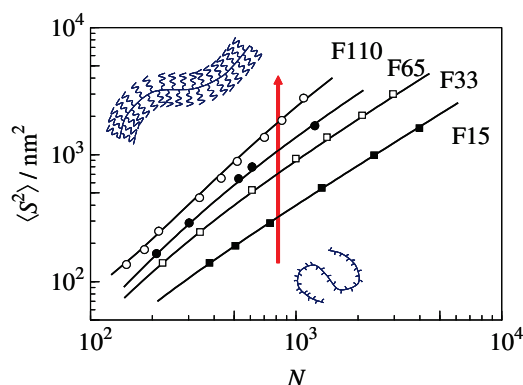
[右図：水中 PDEA の第 2 ビリアル係数  $A_2$  の温度  $T$  依存性 ( $M_w$ ：重量平均分子量，黒印：アタックチックポリスチレン/シクロヘキサン)]



### ポリマクロモノマーの稀薄溶液物性

二重結合などの重合性末端基を持つ高分子（マクロモノマー）を重合して得られる、構造が精密に制御された櫛形高分子（ポリマクロモノマー）の溶液物性と鎖の構造の関係を包括的に明らかにした。

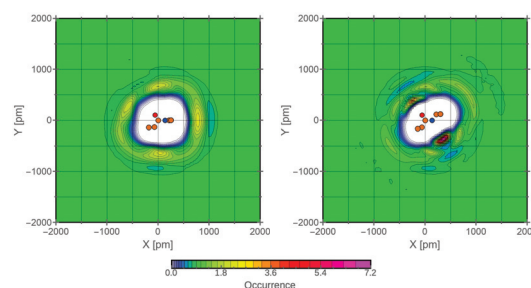
（右図：ポリスチレンポリマクロモノマーについて、主鎖重合度  $N$  が一定の場合に、平均二乗回転半径  $\langle S^2 \rangle$  が側鎖重合度の大きくなるのにもない大きくなる様子）



### 高分子水溶液に関する分子動力学シミュレーション

水溶液中の高分子の分子間相互作用，高分子繰返し単位と水分子の分子間相互作用などの温度変化と水溶液の熱力学的性質を関係を明らかにするために、全原子モデル分子動力学シミュレーションや量子化学計算を行っている。

[右図：水溶液中における PDEA (左) およびポリ-*N*-イソプロピルアクリルアミド (右) の繰返し単位に相当する低分子の重心間動径分布 (50 mol%, 291 K)]



最近の卒業生の就職先：

年度（各年度五十音順）

2024 積水化学工業，堀場製作所，三菱ケミカル

2023 シグママックス，住友ベークライト，東京海上日動，東ソー，日本アムスコ

2022 NTT 西日本，JR 西日本，住友化学，住友電気工業，日本カーバイド工業

2021 シスコシステムズ，GCA，JSR

2020 北海道電力，三菱ケミカル（2名）



# 基礎物理化学研究室

研究内容：高分子理論・計算機シミュレーション・マテリアルズインフォマティクス

所在地：京都市西京区京都大学桂

スタッフ：教授	古賀 毅	桂 A3-115	電話 (383)2705	FAX (383)2706
			e-mail:koga.tsuyoshi.6m@kyoto-u.ac.jp	
講師	小島 広之	桂 A3-113	(383)2709	(383)2709
			e-mail:kojima.hiroyuki.7m@kyoto-u.ac.jp	
助教	古谷 勉	桂 A3-117	(383)7080	(383)2706
			e-mail:furuya.tsutomu.4a@kyoto-u.ac.jp	

ホームページ：<http://www.phys.polym.kyoto-u.ac.jp>

## 高分子の理論・シミュレーション

高分子材料では、分子レベルから巨視的なスケールにわたって階層的に高次構造が形成され、これらが物性や機能に大きな影響を与えているので、材料の物性を制御し、新たな機能を発現させるためには、一次構造を精密に設計するだけでなく、高次構造形成の分子論的機構を理解し、制御することが重要です。当研究室では高分子系における構造形成とダイナミクスに関して統計力学理論やコンピュータ・シミュレーションによる研究を行っています。

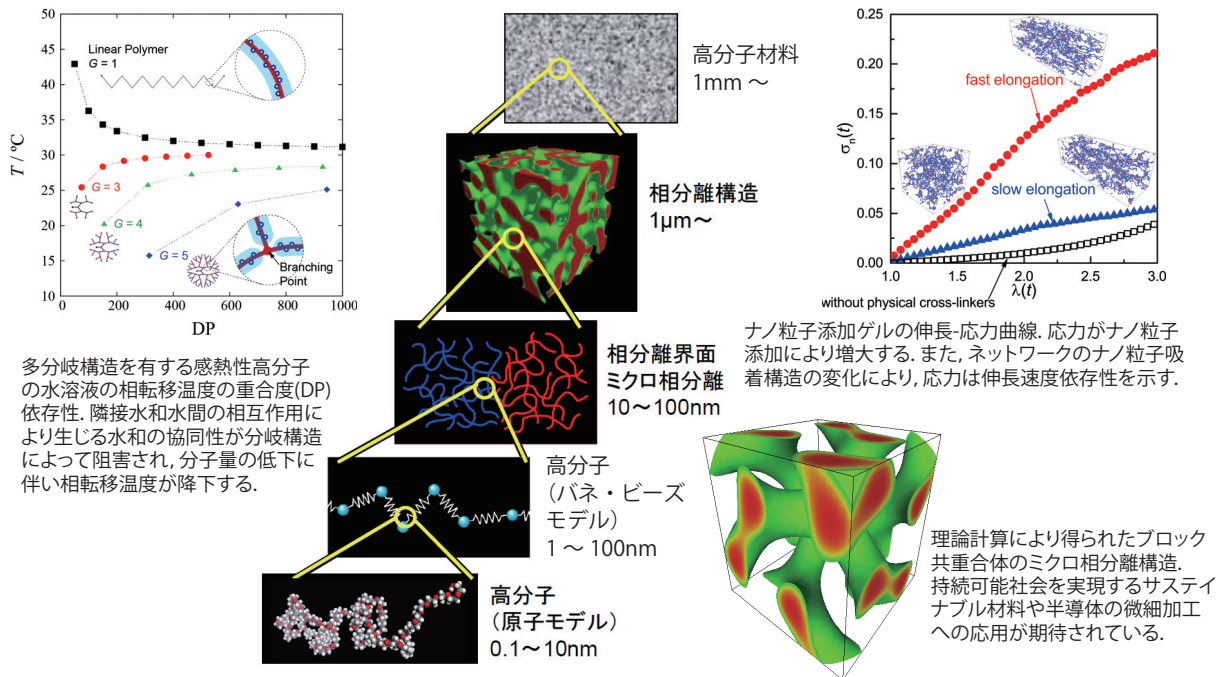


図 1: 高分子系の階層構造と様々な階層における研究成果.

## マテリアルズインフォマティクス (MI) による高分子材料の物性予測

実験と理論を両輪として発展してきた自然科学において、近年「計算科学」が大きな役割を担いつつありますが、特に材料開発においては、「データ科学」を活用した「マテリアルズインフォマティクス (MI)」が注目を集めています。MIでは、所望の物性値(ガラス転移温度、屈折率など)を持つ物質を得る条件(一次構造, 組成, 合成条件など)を機械学習を用いて予測します。高分子材料にMIを適用する「ポリマーインフォマティクス」はまだ黎明期にあり、課題が山積していますが、当研究室ではポリマーインフォマティクスの確立に向けた取り組みも行っています。

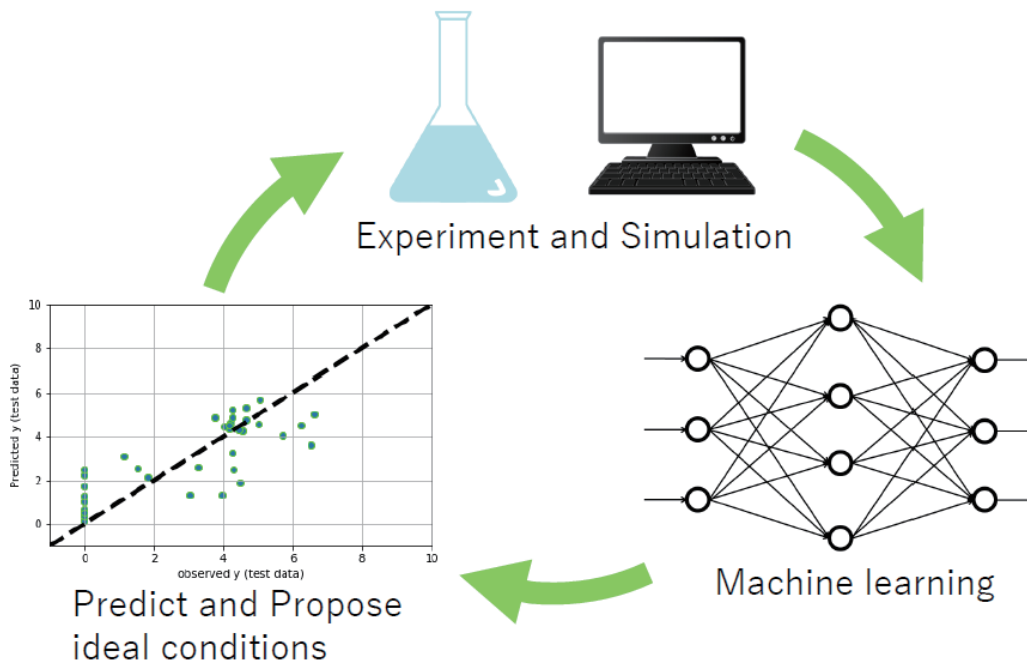


図 2: マテリアルズインフォマティクスの概念図。

## バロプラスチックの分子機構解明

プラスチックの多くは加熱するとやわらかくなる熱可塑性ですが、加圧するとやわらかくなる圧力可塑性のプラスチックが発見され、バロプラスチックと呼ばれています。バロプラスチックは、リサイクル時に熱を加えずに加圧により成型加工が可能なので、リサイクル時のエネルギー消費の削減や二酸化炭素の排出抑制など、持続可能社会の実現に向けた取り組みにおいて有用な材料として注目されています。当研究室では、バロプラスチックに対する自己無撞着場理論、全原子分子動力学シミュレーション、機械学習による研究を行うことで、バロプラスチックの分子機構解明と社会実装に向けた取り組みを実験研究者と共同で進めています。

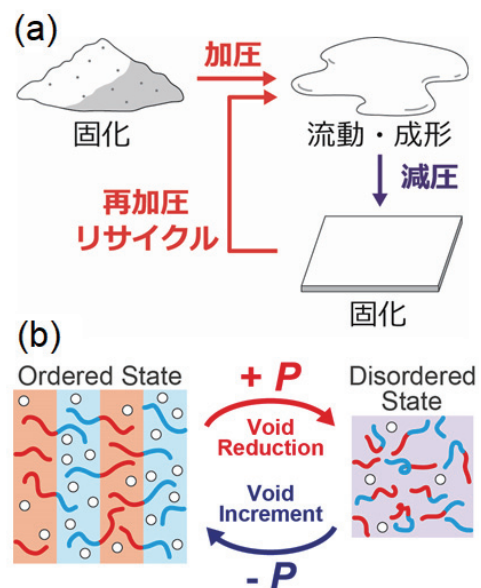


図 3: (a) 圧力によるバロプラスチックのリサイクル. (b) 理論により解明したバロプラスチックの発現機構。

# 高分子物質科学研究室

研究内容：高分子構造・高分子物性・高分子分光学・材料物性基礎

所在地：宇治市五ヶ庄

			電話	FAX
スタッフ：教授	竹中幹人	化学研究所 N-218	0774(38)3140	(38)3146
			e-mail : <a href="mailto:takenaka@scl.kyoto-u.ac.jp">takenaka@scl.kyoto-u.ac.jp</a>	
	准教授	小川紘樹	化学研究所 N-222	0774(38)3141 (38)3146
			e-mail : <a href="mailto:ogawa@scl.kyoto-u.ac.jp">ogawa@scl.kyoto-u.ac.jp</a>	
	助教	中西洋平	化学研究所 N-217	0774(38)3145 (38)3146
			e-mail : <a href="mailto:yohei@scl.kyoto-u.ac.jp">yohei@scl.kyoto-u.ac.jp</a>	
	助教	柴崎和樹	化学研究所 N-214	0774(38)3143 (38)3143
			e-mail : <a href="mailto:shibasak@scl.kyoto-u.ac.jp">shibasak@scl.kyoto-u.ac.jp</a>	

ホームページ：<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp/~polymat/index.html>

## 研究概要

高分子は原子が数千個以上たくさん繋がってできている分子であり、世の中のあらゆるものが高分子で出来ています。例えば、皆さんがコンビニへ買い物に行きますと、ほとんどの容器やパッケージが高分子で出来ています。また、車に乗れば、シート、ハンドル、ダッシュボードなど目につくところの多くのものが高分子で作られています。我々はこれらに代表される高分子材料の自己組織化の研究を行っています。

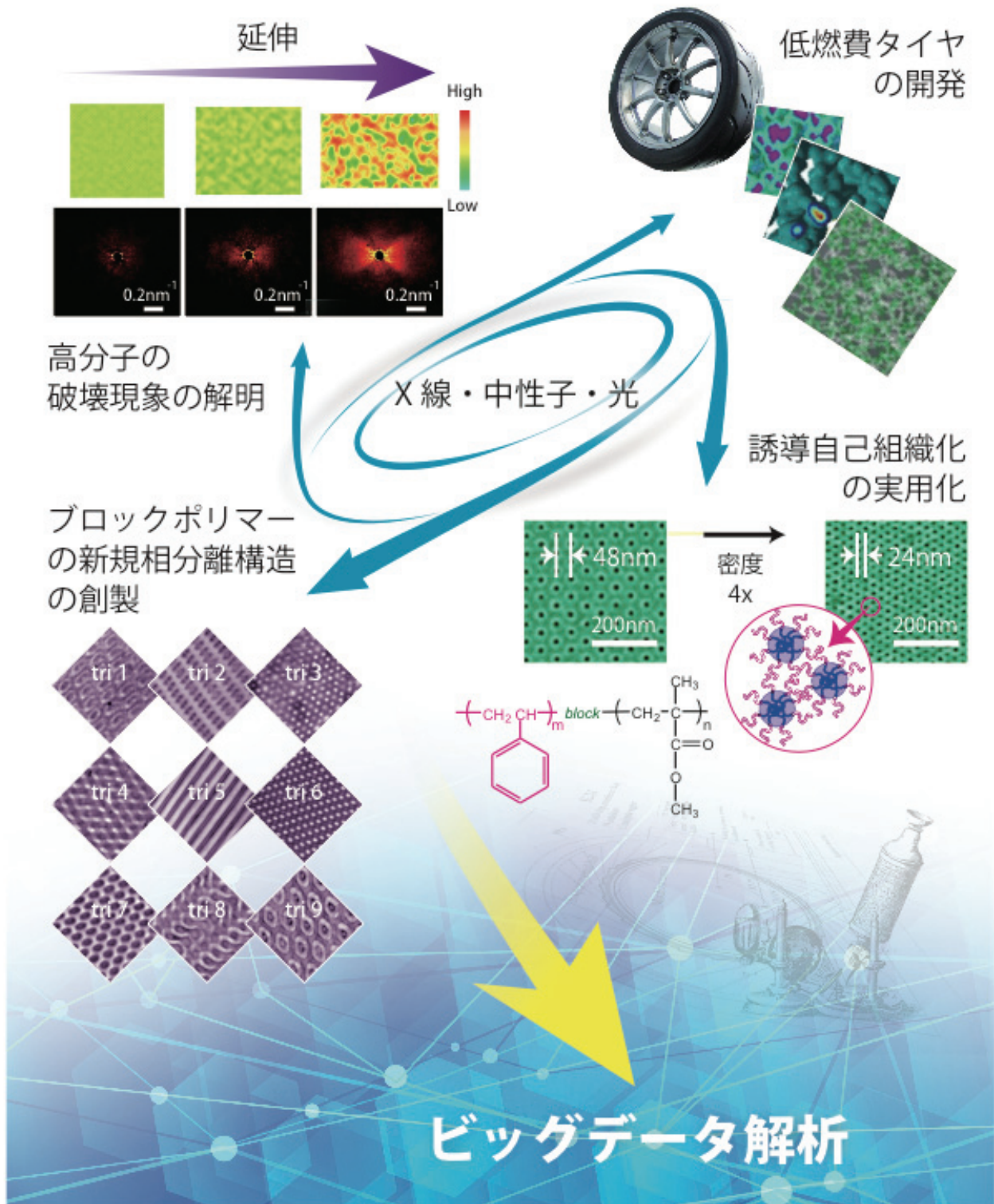
自己組織化とは原子や分子が自ら構造を形成する現象です。高分子はその自己組織化の制御によって、様々な物性を変化させる事が出来ます。例えば、レジ袋などに使われているポリエチレンですが、同じポリエチレンでも加工方法を変えるとピアノ線より10倍の強度を持つ繊維を作る事も出来ます。

我々は、この高分子材料の自己組織化を解明・制御する事によって、様々な分野で使われている高分子材料の高機能化を図るとともにSociety 5.0に向けた高分子材料の新しい分野への応用を目指しています。対象としているものは様々で、タイヤ、有機ガラス、電子デバイス材料と一見関係なさそうなものであっても、いずれも自己組織化により形成される構造の制御が重要であるという点では一緒です。

我々は、これらの自己組織化の機構解明のために、各種の散乱法および顕微鏡法を用いて構造解析をしています。散乱法では速い自己組織化過程を解明するために主にSPring-8などのシンクロトロン放射光施設の強いX線を用いて散乱実験を行い、得られたビッグデータを解析しています。さらに顕微鏡法においては電子線トモグラフィ法と呼ばれる電子顕微鏡法と計算機トモグラフィを組み合わせてナノメートルスケールでの3次元構造を明らかにする事を行っております。



# Society 5.0 に向けた量子ビームによる 高分子4次元構造解析





# 高分子材料設計研究室

研究内容： 高分子合成・高分子物性・機能材料

所在地： 宇治市五ヶ庄 化学研究所

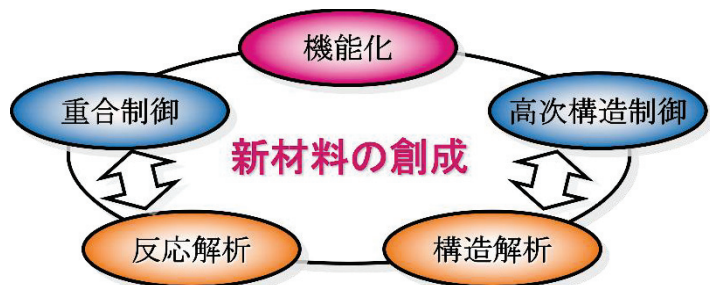
スタッフ： 教授 辻井 敬亘 化学研究所W-213 tel: 0774-38-3162  
e-mail: tsujii@scl.kyoto-u.ac.jp

助教 石田 紘一郎 化学研究所W-217 tel: 0774-38-3164  
e-mail: ishida.koichiro.6u@kyoto-u.ac.jp

ホームページ： <http://www.cpm.kuicr.kyoto-u.ac.jp>

## 研究概要

近年、高分子化合物が汎用的な構造形成材料としてのみならず、高度な機能や性能を有する高付加価値型材料として様々な分野で利用されるようになり、精密な「**高分子材料設計**」の重要性が増しています。当研究室では、新しい機能や性能をもつ高分子材料を創り出すための基礎研究を、**合成から構造・物性、機能解析**に至る幅広い分野に渡り一貫して展開することをモットーとしています。具体的には、各種の重合法や化学修飾法を駆使して構造の明確な高分子化合物を合成し、その分子的な性質と分子集合体（高次構造制御）としての性質をそれぞれ精密に解析することにより両者の相関を明らかにし、これを設計指針として新しい機能性高分子材料の創成を目指しています。近年、**リビングラジカル重合法（LRP）**が汎用性と簡便性に優れる新しい精密合成法として注目されていますが、当研究室では、この重合法の基礎と応用の両面で国内外でも特色ある研究を行っています。



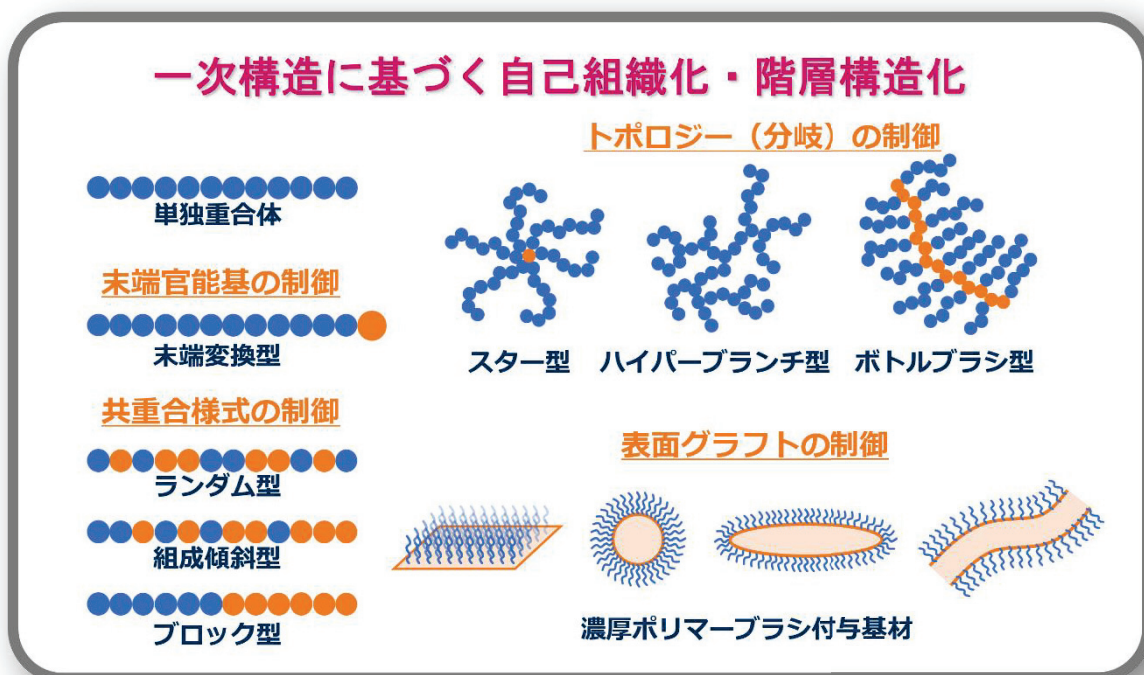
**若い皆さんの自由な発想と旺盛な行動力が、新材料・新現象を生み出します。それらの誕生を経験することこそが、「化学のおもしろさ」を知る第一歩です。高分子を通して、ともに化学を楽しみましょう。**

### 当研究室で開発された新材料の例

- 超高密度グラフト表面（次ページ）
- 構造明確な複合微粒子（光・磁気・医療材料）
- 高いイオン伝導性固体電解質膜（電池材料）
- 強靱かつ極低摩擦な表面（摺動部材・シール材料）
- 軽量高強度な樹脂複合材料（構造材料）

# リビングラジカル重合（LRP）の基礎と応用

LRP などの精密重合法において、**反応機構の精密な解析と理解**を通して、新しい、有用な合成ルートを開拓するとともに、高分子の一次構造制御により高次構造を制御し、従来にない機能をもつ高分子材料を創り出すことを目指しています。超高密度グラフト表面（濃厚ポリマーブラシ）は、当研究室が世界に先駆けてその合成に成功した「**新材料**」の例です。この新材料は、新規コロイド結晶の形成、高性能トライボマテリアルやバイオインターフェースとしての利用など、**合成分野のみならず構造・物性から機能解析の分野へ大きな広がり**を実現しました。



濃厚ブラシ効果（高弾性・サイズ排除・低摩擦特性）を利用した  
新しい秩序構造が生み出す新物性・機能を探究！

キーワード:

精密重合、反応解析、構造・物性制御、グラフト重合、表面・界面制御、ポリマーブラシ、機能性複合微粒子、階層構造、液晶、ゲル、エラストマー、トライボロジー、バイオインターフェース、電池材料、セルロース、モノリス

## 高分子制御合成領域の研究活動

研究内容：高分子合成化学・有機合成化学・分子機能解明・材料科学

所在地：宇治市五ヶ庄 京都大学化学研究所

	電話	e-mail
スタッフ：教授 山子 茂 化研本館 N-212C	0774(38)3060	yamago@scl.kyoto-u.ac.jp
准教授 登阪 雅聡 化研本館 N-228C	(38)3062	tosaka@scl.kyoto-u.ac.jp
助教 秋吉 美里 化研本館 N-201C	(38)3061	

研究室HP：<http://os.kuicr.kyoto-u.ac.jp/>

研究概要：**合成の力で「輝く分子」を創造する**

**合成化学**は新しい分子を自ら設計し、創りだすことができる創造的な学問分野です。新しい分子は反応触媒、新しい材料など、新しい機能分子として我々の未来の生活を豊かにする可能性を秘めています。山子研究室では、重合を制御する新しい分子触媒や新しい機能性材料分子の設計と合成、さらに新しい分子を作る方法の開発を通じて、**未来の社会に輝く分子**を創造することを目指しています。

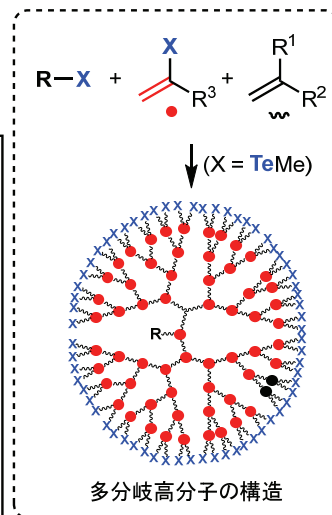
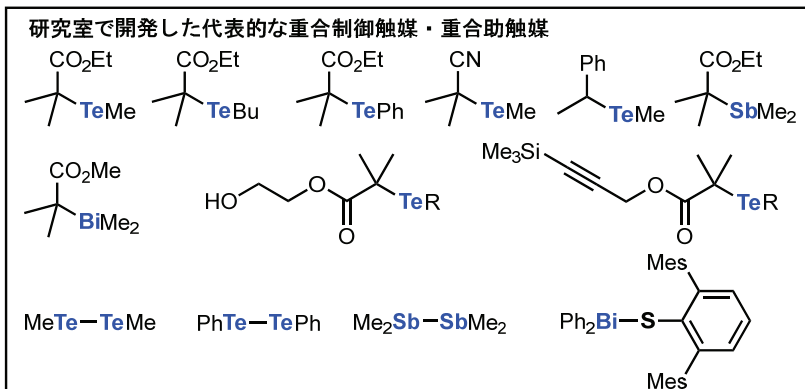
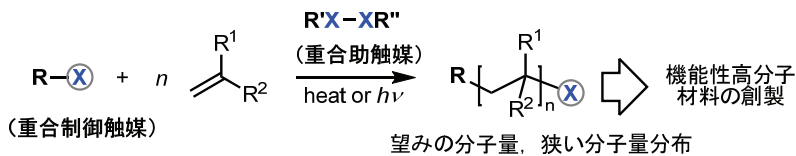
研究の特徴は、**アンチモン**、**テルル**、**白金**、**ビスマス**といった**高周期元素**（周期律表で下の方に位置する元素）を有する化合物群の特徴的な構造や反応性を活用して、炭素—炭素結合の生成反応を制御したり、前人未到の化合物を合成する方法の開発を行っている点です。さらに、これらの新しい反応で初めて合成された化合物をナノサイエンスにおける新材料へと利用する可能性についても研究しています。また、高分子化合物の凝集状態に関する研究も行っています。以下にそのトピックを示します。

**主な関連分野**：有機化学、高分子化学、元素化学、材料科学、高分子構造解析

**キーワード**：ラジカル、リビングラジカル重合、ヘテロ元素、有機金属、歪んだ $\pi$ 共役炭素分子、機能材料、ソフトマテリアル、高分子凝集状態解析、高分子結晶

### リビングラジカル重合触媒・重合助触媒の開発

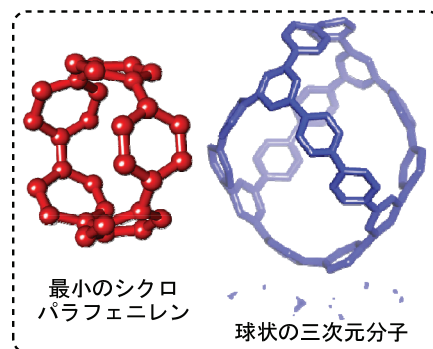
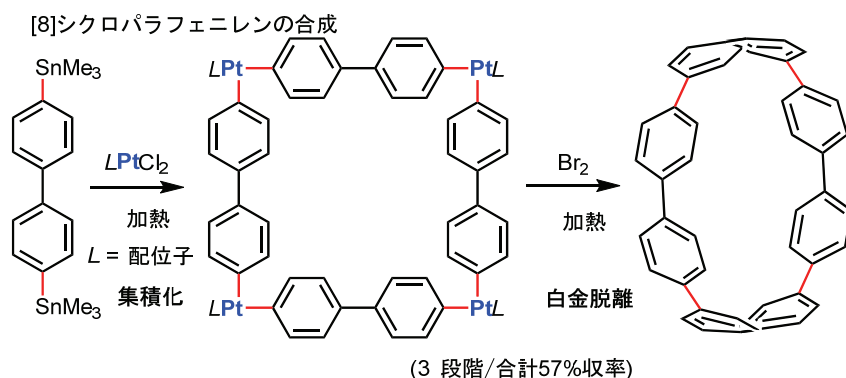
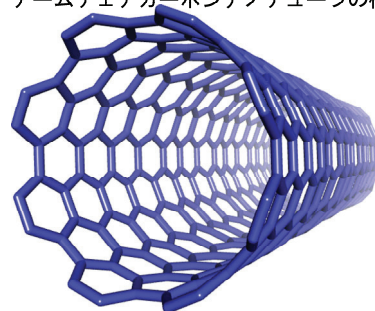
ラジカル重合は高い汎用性を持ち、工業的に最も利用されている高分子合成法です。しかし、重合の制御が難しく、その方法の開発は長い間の課題でした。我々の研究室では、有機テルル・アンチモン・ビスマス化合物を用いる新しいリビングラジカル重合の開発に成功し、その工業化にも成功しています。高い汎用性、高度な重合制御が行える点が特徴です。これを利用することで、最近では、木の枝のような三次元構造の制御された多分岐高分子の合成に成功しています。また、新しい機能性高分子材料の合成についても検討を行っています。



### 含歪みπ共役炭素分子の合成と応用

カーボンナノチューブやフラーレンに代表される環状構造を持つ歪んだπ共役分子は、その興味深い構造のみならず、光材料や電子材料などのナノテクノロジー分野への応用からも多大な興味を集めています。我々は、四角形の構造を持つ白金錯体を中間体に用いることで、カーボンナノチューブの最も単純な構造であるシクロパラフェニレンの選択的な合成に成功しました。この方法を基礎に研究をさらに進め、最小のシクロパラフェニレンや球状の三次元分子の合成等にも世界に先駆けて成功しています。また、大量合成法を確立したことから、それら化合物の有機電子材料への応用も検討しています。

アームチェアカーボンナノチューブの構造



新しい有機電子材料としての応用

### 高分子凝集状態の解析

高分子の物性は結晶組織や分子の配向分布など、凝集構造にも大きく作用されます。我々は様々な高分子結晶について分子の配列状態を直接観察し、局所構造を高い分解能で解析しています。また、高分子の配向をナノ粒子の配列制御に応用する研究も行っています。こうして得られる構造体について、光デバイスやセンサーなどへの応用を目指しています。



# 発生システム制御分野

研究内容：多細胞動態・発生生物学・幹細胞工学・再生医療

所在地：京都市左京区聖護院川原町 53

	電話	e-mail
スタッフ：教授	永樂元次 医師研1号館308 (751) 3810	eiraku@infront.kyoto-u.ac.jp
准教授	大串雅俊 医師研1号館310 (751) 3846	mohgushi@infront.kyoto-u.ac.jp
助教	三井優輔 医師研1号館310 (751) 3846	mii.yusuke.7j@kyoto-u.ac.jp

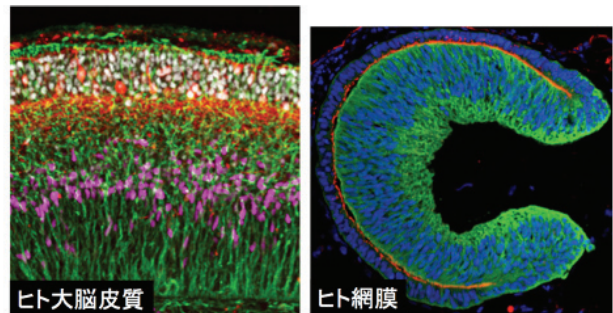
HP：<http://www2.infront.kyoto-u.ac.jp/bs01/>

## 研究概要

脳や心臓などの器官形成過程は細胞の増殖、分化、移動などを伴う極めて複雑な現象です。器官形成を実現するための原理を理解し、試験管内で機能的な器官形成を再現する為に、私たちの研究室では多能性幹細胞（ES細胞/iPS細胞）を用いて *in vitro* での器官形成再現のための技術開発を行なうとともに、その形成過程を解析することで多細胞が協調して機能的な器官を作り上げるメカニズムを明らかにすることを目的として以下の研究テーマに取り組んでいます。

## in vitro での機能的組織形成のための幹細胞制御技術の開発（永樂）

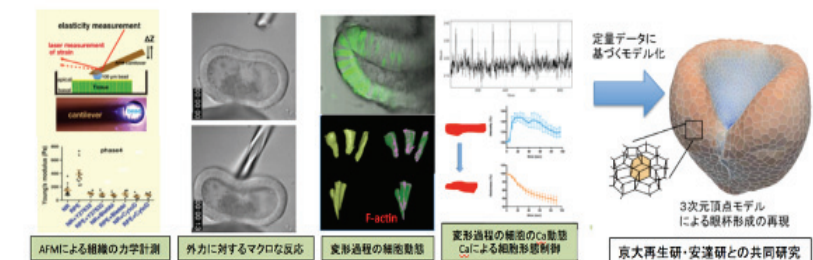
ES細胞やiPS細胞は全ての種類の体細胞と生殖細胞に分化する能力（多能性）を有しており、これらの多能性幹細胞から立体的な生体組織（オルガノイド）形成技術が近年盛んに研究されてきました。これらの新しい技術は再生医療だけでなく、疾患モデル研究や創薬プラットフォームの分野でも注目されています。本研究室ではこれまでに、発生過程において多細胞体が自己組織化的に複雑なパターンや特徴的な立体形状を獲得する性質を利用して、層構造を持った大脳組織や網膜組織をES/iPS細胞から形成する技術を開発してきました。発生システムを制御し複雑な機能性組織を試験管内形成するための新たな技術開発に取り組むとともに、これらの技術を再生医療や創薬などに応用するための基盤研究も行なっています。



ヒト大脳皮質（左）とヒト網膜（右）  
ヒトES細胞から誘導した大脳組織（左）と網膜組織（右）

## 器官形成を実現する多細胞動態原理の解明（永樂）

機能的な臓器を形成する過程における多細胞動態は極めて複雑であり、その分子レベルのメカニズムは不明な点が多く残されています。本研究室ではマウス及びヒトES/iPS細胞からの立体組織形成技術をライブイメージング、数値シミュレーション、オミックスデータ解析等の先端技術と組み合わせることで、組織のパターン形成、細胞移動、形態形成に関与する



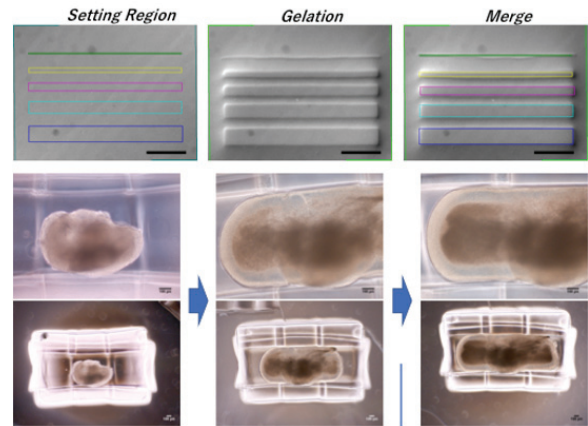
細胞・組織の力学特性の解析+力学特性を制御する分子機構の解析(RNA-seq+細胞生物学)+モデルによる検証  
上皮シートの立体形状を規定する細胞生物学的・力学的機構の理解

上皮シートの力学動態および細胞動態の解析とモデル化

多細胞動態原理に注目して研究を進めています。また、さまざまな種由来の幹細胞を用いて発生過程を再現し、比較解析することで種特異的な発生システムをうむ分子基盤に迫ろうとしています。

## より複雑な臓器を試験管内で形成するための高分子材料の利用（永楽）

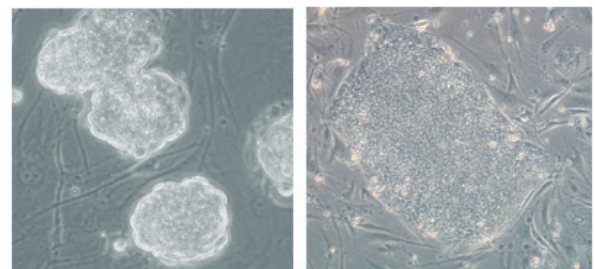
再生医療の実現やより複雑な臓器を幹細胞から安定的に形成するためには、細胞外環境を制御するための生体適合材料の利用が有効です。私たちはヒトオルガノイド系を用いて、臓器の立体形状やパターン形成のより精密な制御を可能にするための高分子材料の開発もおこなっています。これまでに、光硬化性ハイドロゲルを用いて、細胞に障害を与えることなく安全に、網膜オルガノイドの立体形状を制御できる技術などを開発しています。今後は分泌シグナルや細胞への力学刺激などを局所的に制御できる高分子材料の開発を行いたいと考えています。



光硬化性ハイドロゲルを用いた網膜オルガノイドの立体形状制御

## ヒト ES 細胞の特性解析（大串）

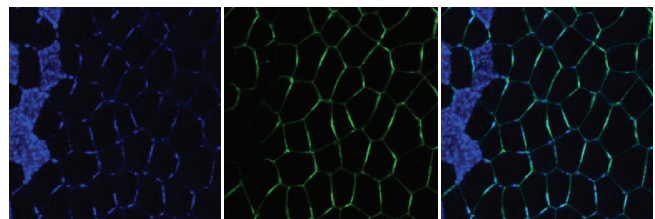
ES 細胞は、私たちヒトを含むいくつかの哺乳類動物で樹立されていますが、歴史的にはまずマウス ES 細胞を用いた研究が先行し、細胞特性や多能性維持の分子機構に関する知見、細胞操作技術のノウハウが蓄積してきました。その後、やや遅れてサルやヒトなどの ES 細胞の研究が進展してきましたが、その結果、霊長類であるサル・ヒト ES 細胞は、齧歯類であるマウス ES 細胞とはかなり異なる形質を持つことが分かってきました。このような背景を踏まえ、分子生物学や細胞生物学、発生学からのアプローチに、新しい遺伝子改変技術や細胞操作法、解析手法を取り入れながら、ヒト ES 細胞の特性解析に取り組んでいます。特に、霊長類の ES 細胞に特徴的な性質に注目し、その分子的基盤や生物学上の意義について理解を深めることを目指しています。このような研究を通じて、ヒト多能性幹細胞を活用した再生医療や創薬の可能性を高めるとともに、生物種によって異なる様々な性質がどのように生じるのかを知るヒントを得たいと考えています。



マウス ES 細胞（左）とヒト ES 細胞（右）

## アフリカツメガエル胚での分泌シグナル・平面細胞極性の解析と培養系での平面細胞極性の再構成（三井）

平面細胞極性（planar cell polarity, PCP）は細胞の方向性の一種で、身近には髪の毛や体毛の流れにも見ることができます。PCP の破綻は二分脊椎などの疾患の原因になる一方、その形成原理の理解は十分ではありません。私たちは受精卵を大量に得られるアフリカツメガエルを用いて、細胞間・タンパク質間の相互作用を可視化することでその原理の解明に取り組んでいます。またこれまで PCP は生体内でのみ研究されてきましたが、元々は明確な方向性を持たない培養細胞を培養皿上で人為的に方向づける実験系を開発し、PCP を「作って理解する」という、新しいアプローチにも取り組んでいます。



分泌シグナル(青)の働きでPCPに関わる因子(緑)が細胞の片側に偏っている。この偏りが細胞の方向性を決めている。

またこれまで PCP は生体内でのみ研究されてきましたが、元々は明確な方向性を持たない培養細胞を培養皿上で人為的に方向づける実験系を開発し、PCP を「作って理解する」という、新しいアプローチにも取り組んでいます。

# エネルギー変換化学研究室

研究内容: 固体化学 所在地: 京都市西京区京都大学桂

教授	陰山 洋	桂 A2-521	(383)2506	kage@scl.kyoto-u.ac.jp
准教授	高津 浩	桂 A2-520	(383)2513	takatsu@scl.kyoto-u.ac.jp
特定准教授	吉田 傑	桂 A2-519	(383)2509	suguru.y@scl.kyoto-u.ac.jp
助教	加藤 大地	桂 A2-519	(383)2509	daichik@scl.kyoto-u.ac.jp
特定助教	Tong Zhu	桂 A2-518	(383)2509	zhu.tong.4e@kyoto-u.ac

この他、秘書、博士課程、修士課程、四回生。フランス、米国、中国などから継続的に留学生を受け入るなど国際色に溢れる研究室です。

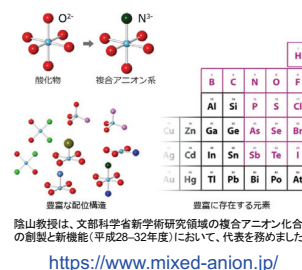
ホームページ: <http://www.ehcc.kyoto-u.ac.jp/eh10/>

## 新しい固体化学の構築

### — アニオン化学による新物質開発と革新的機能 —

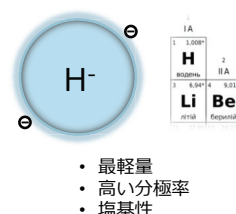
酸化物(セラミックス)材料は、陶器、磁石、誘電体、光触媒など紀元前から現代に至るまで、私たちの生活において最も身近で最も有用な物質で有り続けています。しかし、これらの酸化物は、昨世紀までに金属元素(カチオン)の組み合わせをパラメータとして膨大な物質探索がなされ、新物質の開発には頭打ち感があります。我々の研究室では、「アニオン化学」・「水素化学」というテーマを掲げ、ユニークな物性・機能性を示す新物質の開発を行っています。

「アニオン化学」では、特に複数のアニオンの組み合わせにより生じる「複合アニオン物質」の開発を行っています。従来合成が難しいとされてきた複合アニオン化合物ですが、当研究室では高圧合成・低温合成・電気化学等の手法を用いることで、合理的な物質設計を目指して研究を行っています。また、複合アニオンの特長を活かして新物質を合成し、超伝導、磁性体、光触媒など各分野で革新的機能材料を見出しています。



「水素化学」は、近年注目されている水素社会の実現に欠かせない観点

です。本研究室では、特に負の電荷を有する水素(H<sup>-</sup>)であるヒドリドに着目して、これを含む新物質の探索を行っています。ヒドリドは、高い圧縮率や高い塩基性など、他のイオンには無いユニークな性質を有し、それによってアンモニア合成触媒や磁性など、これまでに無い特性を示すことを見出しています。また、水素のもう一つの顔であるプロトン(H<sup>+</sup>)については、プロトンの電気化学的挿入による物質開発などにより、新しい発見を得ています。水素のユニークな性質を、H<sup>-</sup>・H<sup>+</sup>の両面から理解することで、水素社会の実現に資する次世代のセラミクス材料が得られると考えています。



指導方針としては、新しいことにチャレンジする行動力と自由な発想力を尊重します。今までの学生には海外での研究経験を積ませるなど国際的に通用する人材を育てることを目指しています。新物質の発見は世界を一変させます!「ものづくり」の楽しさを味わって欲しいと思います。



## 最近の研究成果やテーマ等

### 複合アニオン化学の創成

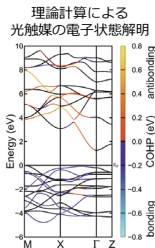
今までの酸化物の化学は、複数のカチオンを組合せる化学といっても過言ではありません。これに対し私たちは、低温合成法や高圧合成法を用いることで複数のアニオンを含む新物質の開拓に挑みます。

#### 超伝導材料

超伝導とは低温で電気抵抗がゼロになる物質です。陰山研では、 $Sb^{3-}$ と $O^{2-}$ という二種類のアニオンを含有する新規超伝導体  $BaTi_2Sb_2O$  を発見しています。

#### 光触媒材料

水分解光触媒は、太陽光と水のみから、水素を生成することができる、理想的な水素製造方法として注目されています。当研究室は、阿部研究室と共同して、酸素( $O^{2-}$ )と塩素( $Cl^-$ )を含む複合アニオン材料が、非常に安定かつ高活性な水分解光触媒材料となることを見出しています。



#### 高圧合成

陰山研究室には、 $\sim 10\text{GPa}$  の高圧・ $\sim 1000^\circ\text{C}$  の高温下で合成できる高圧合成装置が二台あります。高圧下で合成することで、揮発しやすいアニオンを閉じ込めた状態で合成が可能となり、新物質の創製に繋がります。

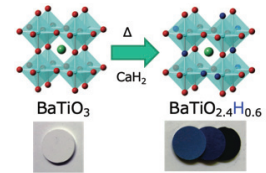


### 水素材料の開発

水素のイオンとして、真っ先に思い浮かべるのはプロトンだと思います。しかし、水素は負の電荷( $H^-$ )の状態も取れるユニークな元素です。我々の研究室では正負の水素を含むセラミクス材料の開発を行っています

#### 酸水素化物の低温合成

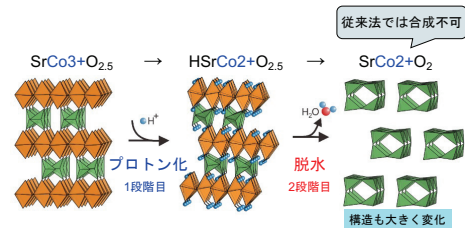
我々は、トポケミカル低温合成という手法で、様々な酸化物のヒドリド( $H^-$ )化に成功しています。例えばパソコンな



どに大量に使われている  $BaTiO_3$  という材料に大量の  $H^-$  を取り込むことに成功しました。本物質は、ヒドリドの高い塩基性・交換能に由来して、高活性なアンモニア合成触媒としても機能することを見出しています。

#### 電気化学的プロトン化と脱水

最近電気化学的プロトン化とその後の脱水反応を組み合わせることで、強力な還元反応になることを見出しています。これにより、今までの還元手法では得られなかった新物質の合成に成功しています。

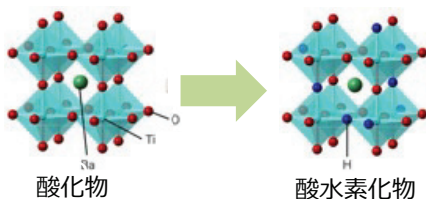


## 未来材料の開拓：水素社会実現へ

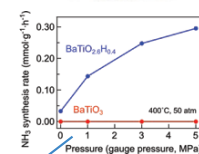
私たちの研究室は「化学」をベースに無機固体に革命を起こしています

複合アニオン化合物の開発で私たちは世界の研究を先導し、新しい学問として確立しようとしています

新しいコンセプトで水素をセラミックス上で操ることを目指す水素材料開発も柱です



成果の一部



- ・石ころが革新的アンモニア合成触媒に：JACS 2017
- ・新しい低温合成法：Nature 2007, Nat Chem 2015, JACS 2021
- ・新概念の電池材料：Nat Commun 2020, Sci Adv 2021
- ・革新的超伝導：JPSJ 2012, Nat Commun 2014
- ・“正電荷”クラスターの発見と酸触媒：Sci Adv 2022





# 工業電気化学研究室

研究内容：電気化学、エネルギー変換化学（二次電池・燃料電池）、炭素材料化学

所在地：京都市西京区京都大学桂

			電話	E-mail
スタッフ：教授	安部武志	桂 A2-421	(383)2487	abe@elech.kuic.kyoto-u.ac.jp
	准教授	宮崎晃平	桂 A2-420	myzkohei@elech.kuic.kyoto-u.ac.jp
	助教	宮原雄人	桂 A2-423	miyhara@elech.kuic.kyoto-u.ac.jp
	特定助教	辻本尚大	桂 A2-423	s.tsujimoto@elech.kuic.kyoto-u.ac.jp
	特定助教	坂本遼	桂船井 202	sakamoto.ryo.6n@kyoto-u.ac.jp

研究室 HP：<http://elech.kuic.kyoto-u.ac.jp/>

（メンバーや研究室紹介動画、最近の研究成果などを掲載しています）

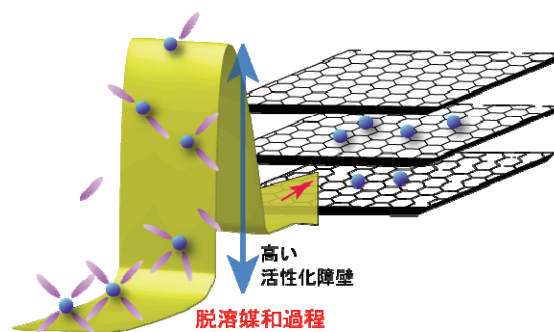
## 研究概要

現代社会が直面する地球環境問題と資源枯渇問題に対処しながらエネルギーの問題を解決する最も実現可能な方法は、限りあるエネルギー資源をクリーンに所望のエネルギーに変換することと、その総合利用効率を高めることです。当研究室では、クリーンで高いエネルギー変換効率が期待できる燃料電池と、電力を貯蔵して電気エネルギーの利用効率を上げる二次電池の発展と進歩を目指して、電気化学的なエネルギー変換に関する基礎研究を行っています。

### 1. リチウムイオン電池 (LIB)

携帯電話、スマートフォンやノート型パソコンなど私たちに身近な情報機器はリチウムイオン電池で駆動しています。これら電子デバイスが広く普及するにつれて、「もっと長時間パワフルに」、「もっと軽く」、「もっと小さく」というユーザーの要求が高まっています。これは、電池という限られた容積の中にかに高密度に電力を貯蔵し、いかに効率よく電力を引き出すか、という問いに繋がります。

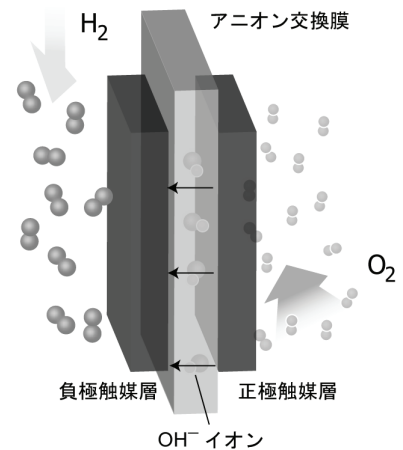
その問いに答えるために、我々の研究室では、トライ・アンド・エラーに代表される経験的な知見に基づく電池研究ではなく、原理原則に基づくサイエンスに立脚した電池研究を目指しています。特に、リチウムイオン電池内で起こる様々な現象を捉えるために、電池活物質のみからなる薄膜電極、界面イオン移動解析、分光学的手法を用いた「その場」測定を駆使して、反応の解明という基礎的かつ大変重要な問題に取り組んでいます。また、これまでの LIB を越えた「アドバンストリチウムイオン電池」として、液体電解質を使わない全固体電池の基盤技術創出を目指して、新規電極材料・電解質材料の基礎研究にも積極的に取り組んでいます。



リチウムイオン挿入反応に伴う活性化障壁

## 2. 新規アルカリ形燃料電池

1839年、イギリスのグローブ卿が白金と硫酸電解液からなる燃料電池の発電に初めて成功してから、燃料電池は電気化学に携わる者にとって長年の夢であり、近い将来に実現すべき科学技術の一つでした。そんな中、2014年末に燃料電池自動車が量産販売され、水素社会の実現に向けて大きな前進がありました。環境負荷が少なく、高効率運転が可能であるというメリットを生かしつつ、当研究室では従来のプロトン伝導性電解質膜ではなく、アニオン交換膜を使ったユニークな「新規アルカリ形燃料電池」に着目して研究を進めています。燃料電池の主要な三要素である「燃料」、「電解質」、「触媒」の研究にそれぞれに新しいアプローチで取り組んでいます。



アニオン交換膜燃料電池

## 3. 次世代蓄電池

すでにLIBの実用化から30年が経過し、今まさに電気自動車用途だけでなく太陽光や風力などの自然エネルギーの蓄電用途などさらなる高エネルギー密度の次世代蓄電池が望まれています。当研究室ではLIBを越えた「ポストリチウムイオン電池」の研究として、「フッ化物イオンシャトル電池」、「亜鉛-空気二次電池」、「ナトリウムイオン電池」の基礎研究に取り組んでおります。また、これまでに報告がない、ユニークな反応を使った電池系の構築にも挑戦しています。非常にチャレンジングな課題ですが世界初の蓄電池構築に向けて研究を進めています。

蓄電池、燃料電池に代表される電気化学エネルギーデバイスは、喫緊のエネルギー問題を解決するために必要不可欠な基盤技術です。電池研究を通じて基礎から応用まで見通せる高い視点から研究開発をともに推進してくれる、意欲ある学生諸君を待っています！

**リチウムイオン電池**

負極/電解液界面反応解析

新規高電位正極の提案

**基礎科学に立脚した新しい電池研究**

電気化学

低炭素社会実現のために必要な電池・燃料電池の研究で、次世代を切り拓く

**次世代二次電池**

**フッ化物イオンシャトル電池**

F伝導性新規電解液の創製

**全固体リチウムイオン電池の短時間充電**

**Naイオン電池**

界面の反応解析

**空気電池**

新たな化合物群による触媒探索

**水系リチウムイオン電池正極の劣化解析**

# 機能性材料化学研究室

研究内容：界面現象の物理化学、電気分析化学、レーザー分光計測

所在地：京都市西京区京都大学桂

	部屋	電話	電子メール
スタッフ 教授	作花哲夫 桂 A2-415 号室	(383)2489	sakka.tetsuo.2a@kyoto-u.ac.jp
准教授	西直哉 桂 A2-418 号室	(383)2491	nishi.naoya.7e@kyoto-u.ac.jp
助教	横山悠子 桂 A2-416 号室	(383)2493	yokoyama.yuko.4e@kyoto-u.ac.jp

ホームページ：<http://www.fm.ehcc.kyoto-u.ac.jp/>

---

## 界面現象の解明と界面機能の利用に向けた基礎研究

液液および固液界面のマイクロメートルから分子レベルまでの構造を対象とし  
熱力学から電子論までを駆使した界面化学過程の実験および理論的解析

**キーワード：** レーザー分光計測、プラズマ溶液界面の科学、  
イオン液体の機能ソフト界面、電気化学 CO<sub>2</sub>還元

### ◆ 背景

界面や界面層を構成している物質は極めて少ないが、その少ない物質が材料の機能やその材料を用いたプロセスの挙動を決定づけることがしばしばあります。界面の機能をさまざまな化学過程や化学分析、あるいは二次元構造形成に利用するためには、界面で起こる複雑な化学現象や物理現象を正確に理解することが必要です。

### ◆ 研究内容概要

当研究室では、物質界面の構造と物性および反応過程に関する研究を行っています。イオン液体の界面でイオンの積層構造ができたり、液液界面にトラップされた微粒子が自発的に規則構造を形成したり、あるいは固液界面でも条件によって希薄なレーザープラズマが生成したりしなかったりというように、界面は不思議だらけです。このような物質界面の不思議な現象を解明し、高い機能を持つ界面を設計・構築できるようになることを目標とし、電気化学、レーザー分光をはじめあらゆる手段で界面の物理化学的特性の解明に挑戦しています。また、界面現象を用いた分析手法の開発も行っています。

### ◆ スタッフより

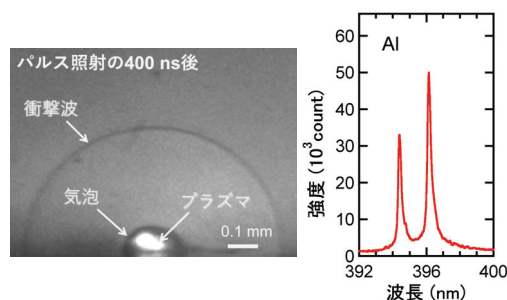
界面の不思議な現象の解明と一緒に情熱を燃やしませんか。当研究室では学生さんの主体的な研究を重視していますが、そのためには物理化学、電気化学の他、分光学、熱・統計力学、量子力学といった学問分野の基礎知識を駆使し、実験と理論の両面から研究を発展させる力が必要です。この研究力を磨きつつ研究にとりくみ、成果を学会や論文で発表してほしいと思っています。一緒に研究できることを楽しみにしています。



## 研究課題

### ■ プラズマを使った元素分析法および新しい反応

(1) レーザーで固体表面層をプラズマ化すると、その発光スペクトルによってターゲット固体を元素分析することが可能です。これを水中に応用し、水からターゲットを取り出すことなくその場元素分析する方法の開発に取り組んでいます(右図)。この分析手法は海底資源探査などへの応用が期待されています。

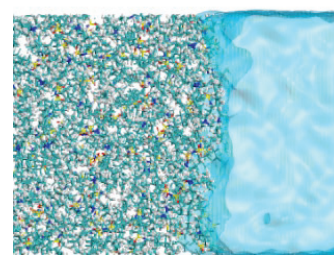
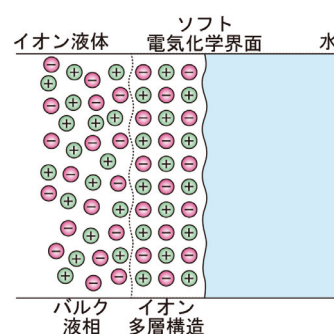


(2) 放電プラズマと水溶液の界面における電荷移動による反応の基礎研究を行っています。プラズマ中の電子やイオンと水溶液溶存種との新しい反応やその反応を制御する方法の開拓を行っています。

レーザーと分光計測にもとづく実験装置を組立て、水中に生成するレーザープラズマをナノ秒の高速撮影などを駆使して調べ(中図)、元素分析に適したスペクトル(右図)を得る方法を研究しています。

### ■ イオン液体の界面の構造・ダイナミクス・機能発現

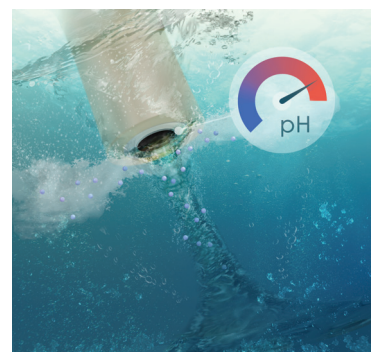
イオン液体(カチオンとアニオンのみからなる液体)は、i)蒸気圧が非常に小さく難燃性、ii)熱的・化学的に安定、iii)水や有機溶媒などの分子性溶媒とは異なる溶媒環境を提供する、という特長を持つことから様々な分野での利用が期待されています。私たちは、特にこの新規材料の界面に注目し、研究を進めています。界面に存在する分子数はバルク(相のおきあい)に存在する分子数に比べて圧倒的に少ないため、界面構造を調べるには特殊な実験手法を用いる必要があります。私たちは、界面分光法(X線反射率法、中性子反射率法、表面プラズモン共鳴法、分光エリプソメトリー)や界面物理化学(界面イオン移動・電子移動の電気化学測定、界面張力測定、分子動力学シミュレーション)を駆使して、イオン液体の界面構造とダイナミクスの解明に取り組んでいます。イオン液体界面の特異性を利用した新奇な界面反応の開発も行っています。



イオン液体界面の構造の模式図(上)と分子動力学シミュレーションのスナップショット(下)

### ■ 電極界面での電解液特性

経済活動の発展に伴う世界的なエネルギー需要の急速な増大と地球環境保全のバランスをとることは、世界的な課題であり、二酸化炭素の還元利用や電気自動車など数々の技術が研究開発されています。これら技術と電気化学は深く関連しており、反応が起こる場である電極表面での電解液の特性把握は、反応性の向上にあたり非常に重要です。電極表面での電解液組成はその場で起こる反応や、その反応物/生成物の増減に伴う溶液バルクからの物質拡散の結果、バルクとは異なる濃度や溶媒和状態になっています。私たちはこの電極表面に着目し、電気化学反応に大きく影響する電極表面 pH の測定などを行っています。



回転リングディスク電極を用いた電極表面局所 pH 測定



# 基礎炭化水素化学研究室

研究内容： 有機合成化学・有機活性種化学・有機金属化学・有機機能性材料化学

所在地： 京都市西京区京都大学桂

			電話	FAX
スタッフ： 教授	大江 浩一	桂 A2-506	(383)2495	(383)2499
			e-mail: ohe@scl.kyoto-u.ac.jp	
准教授	三木 康嗣	桂 A2-502	(383)2497	(383)2499
			e-mail: kojimiki@scl.kyoto-u.ac.jp	
助教	Huiying Mu	桂 A2-504	(383)7053	(383)2499
			e-mail: mu.huiying.3h@kyoto-u.ac.jp	

ホームページ： <http://www.ehcc.kyoto-u.ac.jp/eh31/home/index-j.html>

## 研究概要

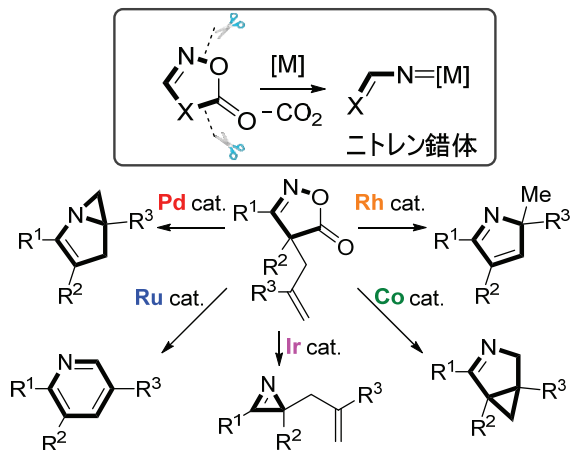
炭化水素を始めとする有機化合物は、その分子構造に由来する高誘電率、電気伝導性、蛍光、生理活性などの多彩な物性や機能を持っています。資源・エネルギー問題が重要性を増す今日では、このような有機化合物を創製するための合理的な設計と効率的な合成手法の開発がますます強く求められるようになってきました。当研究室では、有機化学の反応論と構造論の双方を重視しています。すなわち、有機金属化学的手法（遷移金属による有機活性種の準安定化と触媒作用）と理論計算によるアプローチによって、活性種の反応性を自在に制御した高選択的合成反応の開発と機能性材料の創製に同時に取り組むことにより、有機合成の新しいパラダイムを構築することを目標にかかげ、実践しています。さらに、上述の方法論を基に開発した機能性分子を用いることにより、医学系研究者と連携して腫瘍イメージング材料の創製（がんの可視化・治療）や実用化に関するテーマにも取り組んでいます。

**有機化学を通した「ものづくり」や「新現象の発見」に意欲のある方を心から歓迎します。**

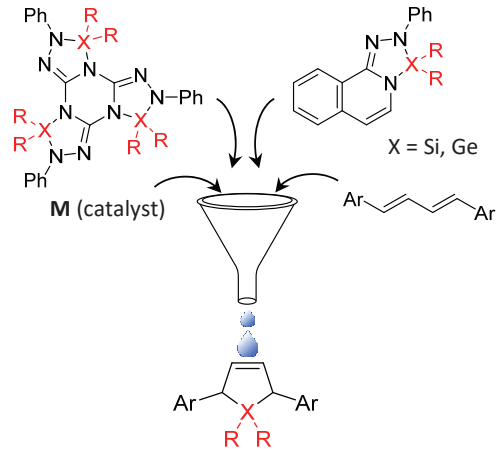
### 1. 遷移金属種による活性種の多様性制御と触媒反応・機能性錯体開発

炭化水素を始めとする有機分子の骨格変換に欠かせない「活性種」と「遷移金属触媒」を鍵として独自の錯体設計を行い、新たな触媒や機能性材料の創出を目指します。

#### ◆ 遷移金属種による活性種の反応多様性制御



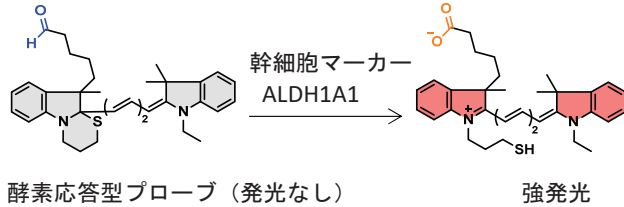
#### ◆ 環状前駆体を活用したテトリレン移動反応の開発



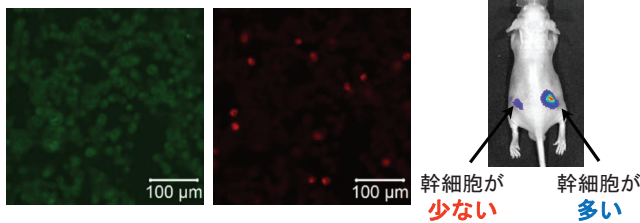
## 2. 分子プローブ・造影剤の開発

細胞中の酵素活性の変化や pH などの環境変化は、疾病の前兆となることが多く、その早期検出は重要な研究課題です。有機合成力を活かし、がんの薬剤耐性の元凶と言われる「がん幹細胞」だけを検出できる分子プローブを開発しました。その他にも脳神経細胞やがん細胞で高発現する酵素検出用の分子プローブの開発も行っています。これらの知見を活かし、がんで発生する酵素やがん周辺の低 pH 環境に反応して、がんだけで信号を発する実用的な造影剤や抗がん剤を開発しています。

### ◆ がん幹細胞を検出できる造影剤

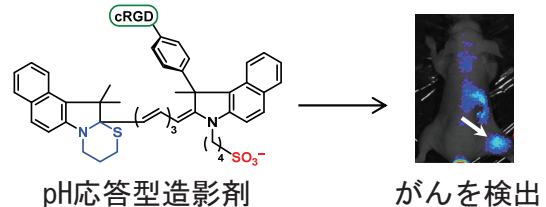


既存のプローブ（視認し辛い） 開発したプローブ（幹細胞のみを可視化）

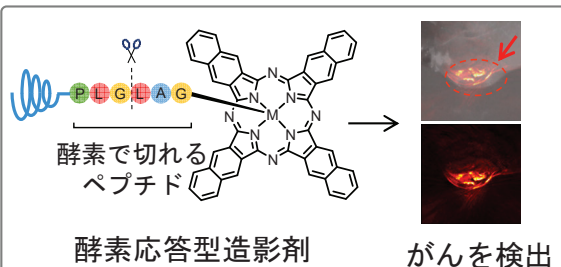


高コントラストにがん幹細胞の検出に成功！

### ◆ がんだけを診る造影剤： pH検出型



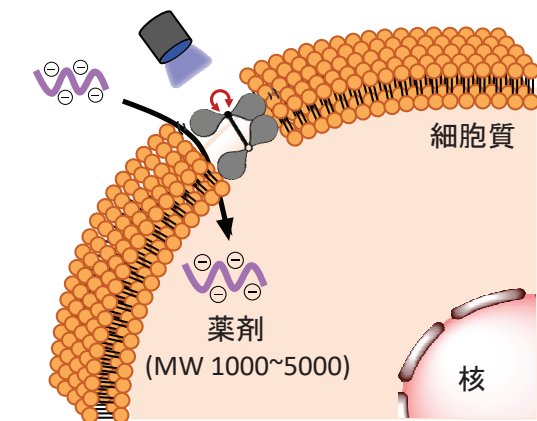
### ◆ がんだけを診る造影剤： 酵素検出型



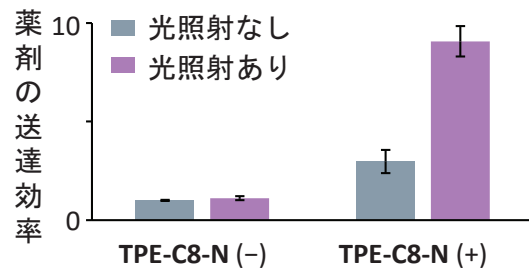
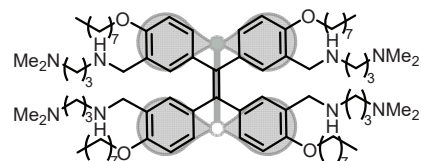
## 3. 薬剤を送達する手法の開発

薬剤は細胞内に送達されることによりその効果が示されるようになります。電荷をもつ高極性な薬剤（ペプチドや核酸医薬）は細胞膜透過性が低く、その実用化の大きな障壁となっています。当研究室では、光照射した際にこれらの薬剤の細胞膜透過を促進させる補助薬（膜モジュレータ分子）の開発に成功しました。光を当てた時に、その箇所だけ薬剤を送達できるオンデマンド性の高い手法として注目されています。

### 光照射による薬剤の細胞膜透過の概念図



・直接的な細胞膜透過 ・薬剤の化学修飾不要



構成と就職状況：令和6年度の当研究室の構成は、D3(2名)、D2(1名)、M2(5名)、M1(5名)、B4(4名)であった。令和7年度はD3(1名)、D1(1名)、M2(5名)、M1(4名)と新4回生である。近年の卒業生の就職先は、旭化成、東ソー、東レ、カネカなどである。

# 先端医工学研究室

研究内容：先端医工学・分子プローブ合成・生体イメージング・有機金属化学

所在地：京都市西京区京都大学桂

電話

e-mail

スタッフ： 教授 近藤 輝幸 桂 A2-516 (383)7055 teruyuki@scl.kyoto-u.ac.jp

准教授 木村 祐 桂 A2-515 (383)7411 ykimura@scl.kyoto-u.ac.jp

助教 三浦 理紗子 桂 A2-513 (383)7554 miura.risako.8x@kyoto-u.ac.jp

HP: <http://www.abe.ehcc.kyoto-u.ac.jp>

## 研究概要

21 世紀に入り、学問の境界は薄れ、異分野融合研究が急速に発展している。当研究室では、工学ならではの視点と手法により、先端医工学研究を推進している。具体的には、高次生体イメージングを実現するために、有機合成化学、有機金属化学、高分子化学、および無機化学に至る様々な“化学”を駆使し、臨床現場で使用できる疾患特異的な革新的“分子プローブ”の設計・合成、および細胞・動物実験による機能評価まで、一貫した研究を行っている。

### ① 高次生体イメージングに必須の分子プローブ型造影剤の設計、合成、および機能評価

“診断”と“治療”とを同時に行う次世代の“セラノスティクス”を実現するため、酸化ガドリニウム( $Gd_2O_3$ )ナノ粒子(磁気共鳴/光音響デュアルイメージングプローブ)に、抗癌剤であるドキソルビシン(DOX)を複合化した新しいプローブの開発に成功した(図1)。

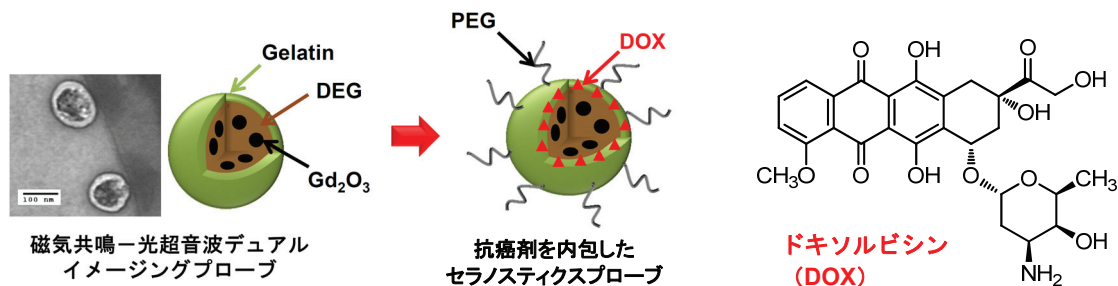


図1. 磁気共鳴-光超音波デュアルイメージングプローブとドキソルビシンとの複合化によるセラノスティクスプローブの開発。

また、MRI 造影能の高いリン酸ガドリニウム( $GdPO_4$ )ナノ粒子に、疾患特異的な抗原に選択的に結合する抗体を複合化し、疾患を早期に検出可能なナノ粒子型 MRI 造影剤の開発を行っている。例えば、 $GdPO_4$  ナノ粒子の表面に、乳がんの分子標的薬として使用されている抗体を修飾することで、乳がん細胞(SKBR3)特異的な早期画像診断が可能になった(図2)。治療効果も期待される。

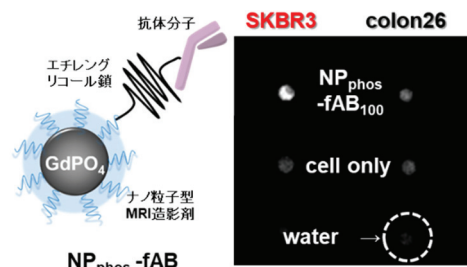


図2. 抗体結合分子プローブによる乳がん細胞(SKBR3)の磁気共鳴イメージング。



## ② EPR 効果を利用した光音響イメージング：近赤外蛍光色素導入ナノ粒子プローブの開発

100 nm 以下にサイズを制御したナノ粒子製剤や高分子製剤が、EPR 効果により、腫瘍組織に集積することが報告されている。当研究室では、生体適合性に優れた双性イオンポリマーを合成し、その末端に近赤外蛍光色素を導入した新しいナノ粒子プローブを開発した。本プローブにより、担癌マウスの腫瘍部位選択的な“光音響 (PA) イメージング”に成功した (図3)。

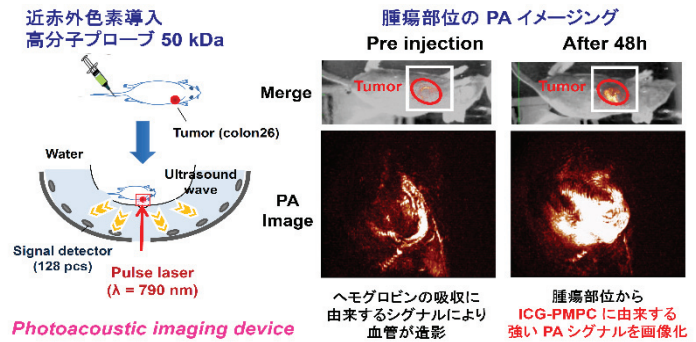


図3. 近赤外色素導入高分子プローブによる腫瘍の光音響イメージング。

## ③ 安定同位元素を集積した高分子プローブの設計・合成と分子標的 MRI 法の開発

【元・近藤研の山田講師 (徳島大学) との共同研究】

タンパク質の構造解析に有効である  $^1\text{H}\text{-}\{^{13}\text{C}\}$  二重共鳴 NMR 法を MRI に応用するため、安定同位元素である ( $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ) が高集積したポリマーナノ粒子プローブの開発に成功した。本プローブを用いる“分子標的 MRI 法”により、担癌マウスの腫瘍部位に高集積したプローブを直接観測できることを明らかにした (図4)。

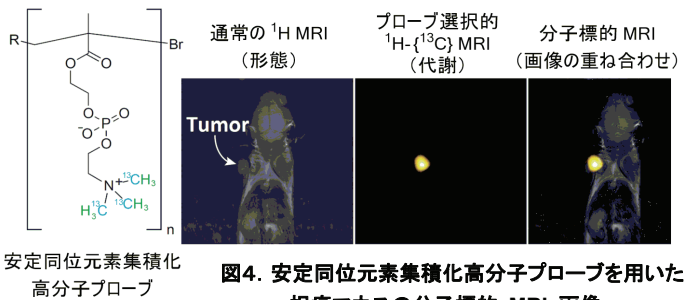


図4. 安定同位元素集積化高分子プローブを用いた担癌マウスの分子標的 MRI 画像。

## ④ 多糖を用いた免疫療法抵抗性腫瘍造影剤の開発

一部の腫瘍は、免疫療法に抵抗性を示す腫瘍免疫環境を有しており、悪性度が高い傾向があることが報告されている。そこで、当研究室では、生体適合性が高い多糖を基盤とし、免疫療法抵抗性を有する腫瘍 (Cold Tumor) を標的とするナノ微粒子型光音響イメージング造影剤の開発を行っている (図5)。

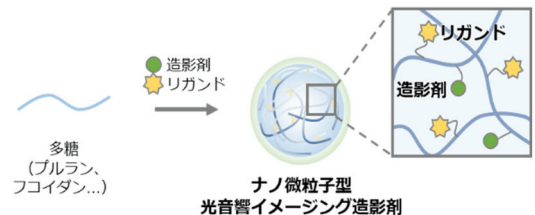


図5. 多糖を用いたナノ微粒子型造影剤の開発。

## ⑤ 未破裂脳動脈瘤のリスク評価を実現するマクロファージイメージングのための新規 MRI 造影剤

くも膜下出血の主要な原因疾患である未破裂脳動脈瘤の病変部位に高集積する炎症性のマクロファージの画像化を実現することを目指し、安定・安全な常磁性金属ナノ粒子造影剤の開発を進めている。本造影剤により、未破裂脳動脈瘤症例の中から、外科的治療が必要な破裂リスクの高い“active”な瘤の選別が可能になる (図6)。さらに、治療薬の開発においても、本造影剤がその薬効評価のためのサロゲートマーカーとして有効であることを示す。

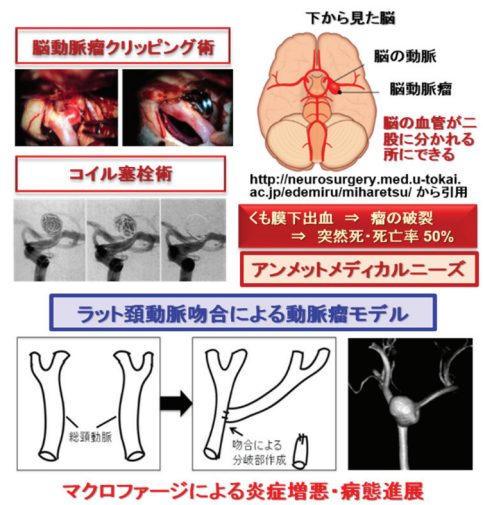


図6. 未破裂脳動脈瘤の病変部のマクロファージイメージングに有効な新規ナノ粒子造影剤の開発とリスク評価。



# 触媒機能化学研究室

研究内容：触媒機能化学・光触媒・環境触媒・無機材料合成  
所在地：京都市西京区京都大学桂

			電話	e-mail	
スタッフ：教授	阿部 竜	桂 A2-405	(383)2478	ryu-abe@scl.kyoto-u.ac.jp	
	講師	中田 明伸	桂 A2-402	(383)7044	nakada@scl.kyoto-u.ac.jp
	助教	富田 修	桂 A2-403	(383)7046	tomita.osamu.6s@kyoto-u.ac.jp
	助教	鈴木 肇	桂 A2-401	(383)7056	suzuki.hajime.7x@kyoto-u.ac.jp

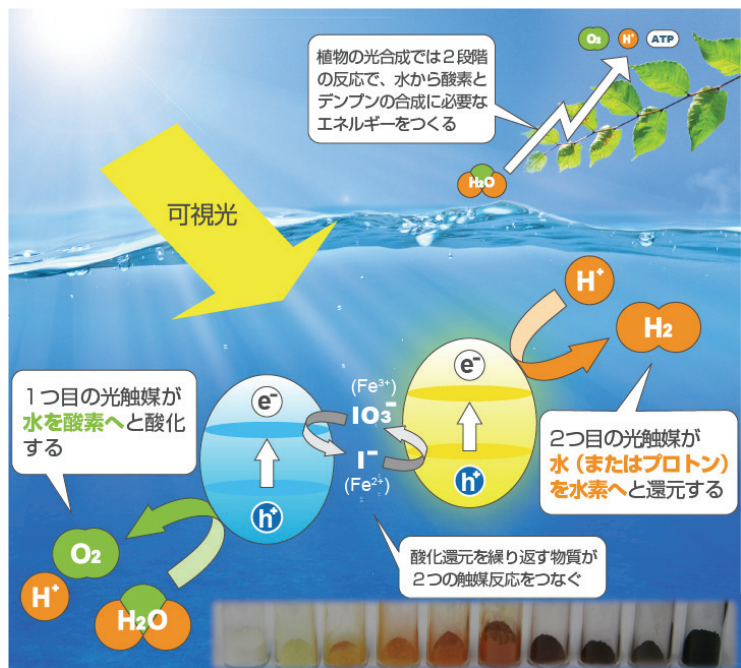
ホームページ： <http://www.ehcc.kyoto-u.ac.jp/eh41/home/abe/>

## 人工光合成と光触媒でエネルギー・環境問題の解決に貢献する

我々人類が「持続可能な社会」を実現するためには、化石資源に代わるクリーンなエネルギーを開発するとともに、二酸化炭素を再資源化する、いわゆる「人工光合成技術」を確立し、産業革命から続く資源消費型社会を循環型へと変革させることが必須となっています。このような背景から、当研究室では無尽蔵とも言える「太陽光エネルギー」を利用して「水から水素を製造」あるいは「二酸化炭素を還元して再資源化」できる革新的な光触媒系、さらには室内の微弱光でも有害物質の除去やウィルスの不活性化ができる新規光触媒系などの開発を進めています。我々と一緒に世界を変える研究をしてみませんか？

### 【研究テーマ1】太陽光水素製造のための可視光応答型光触媒系の開発

地球上に降り注ぐ「太陽光」の総エネルギー量は、人類の総消費エネルギー量の 1 万倍以上とも言われ、我々が現実的に利用可能な量を見積もっても、なお 100 倍近くあるとされています。つまり、この太陽エネルギーの数%を、我々が利用可能なエネルギーへと変換できれば、人類の消費エネルギーの大部分を賄うことも不可能ではありません。我々の研究室では、将来のクリーンエネルギーとして期待される「水素」を、無尽蔵の「太陽光」と「水」から直接製造する「**光触媒水分解**」の研究を精力的に進め、特に太陽光スペクトルの大部分を占める「**可視光**」を有効利用できる、新規光触媒系を開発しています。

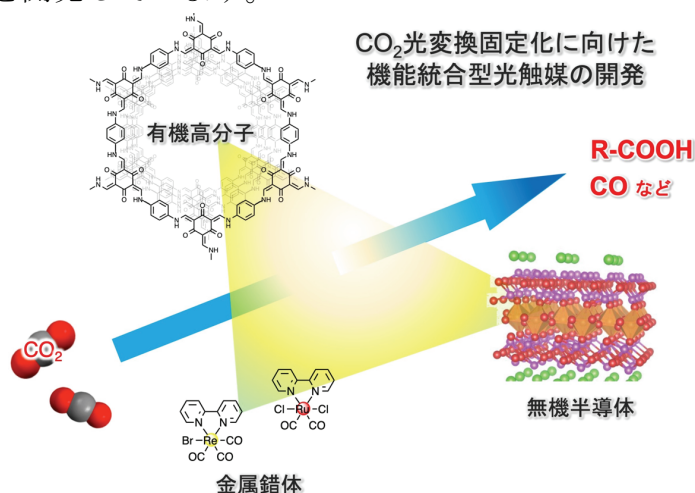


これまで、水を分解できる光触媒系のほとんどが、エネルギーの大きな紫外光の照射を必要としていましたが、我々は植物の光合成がエネルギーの小さな可視光を効率良く利用していることをヒントに、この機構を模倣した「2段階励起型(Z スキーム型)水分解系」を新規に開発し、可視光のみを用いて水を水素と酸素に分解することに世界で初めて成功しました。太陽光水素製造の実現に向けて、さらに広範囲の可視光を吸収できる光触媒材料や水素・酸素の分離生成システムなどの開発を進めています。

## 【研究テーマ2】 二酸化炭素の光変換固定化のための光触媒系の開発

「二酸化炭素」は地球温暖化の一因である「温室効果ガス」として知られていますが、見方を変えれば「各種有機化合物の原料」と考えることもできます。我々の生活を支える材料・燃料・医薬品などの多くは炭素からなる化合物であることから、二酸化炭素を炭素源として、これらの各種有用化合物へと効率良く変換することができれば「地球温暖化」と「炭素・エネルギー資源」問題の一挙解決も期待できます。このような背景から、我々は、光のエネルギーで二酸化炭素を一酸化炭素や炭化水素（燃料の原料）、カルボン酸（医薬品の原料）などに変換する新規光触媒を開発しています。

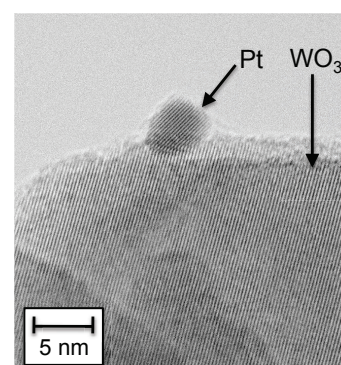
これまでに、「無機半導体」や「金属錯体分子」、最近では「有機高分子」が光触媒材料の有力候補として精力的に研究されてきました。我々は、これら個々の光触媒材料単独では発現できなかった特異な反応の選択性（通常では得られない生成物）や反応効率の飛躍的な向上を目指し、これら材料の特徴を合理的に融合した「機能統合型光触媒」の開発を進めています。



## 【研究テーマ3】 環境浄化のための高効率可視光応答型光触媒の開発

光触媒は、セルフクリーニング・脱臭・抗菌などの「環境浄化」への応用展開が進められていますが、一般的な「酸化チタン」は、紫外光しか吸収できないため、屋内のような紫外光強度の低い環境では十分な効果を発揮できない、という問題を有していました。

我々は水分解用に開発してきた「酸化タングステン」などを改良すると微弱な可視光照射下でも極めて高い活性を示す光触媒になることを見出しました。これらの光触媒は壁に塗布することにより、タバコや糞尿臭の脱臭に高い効果を発揮し、さらには表面に付着した様々な菌やウイルスなどを効果的に死滅させられるため、病院などだけではなく一般家庭にいたるまで広い応用が期待されます。新しい光触媒における反応機構解明などを進めるとともに、企業と共同で実用化に向けた研究も行っています。



# 触媒有機化学研究室

研究内容：有機金属化学・有機化学・錯体化学・計算化学

所在地：京都市西京区京都大学桂 桂キャンパス A2 棟 5 階

スタッフ：

		電話	E-mail
教授	藤原哲晶	桂 A2-510 号室 (383)2515	fujihara.tetsuaki.2w@kyoto-u.ac.jp
講師	仙波一彦	桂 A2-509 号室 (383)2516	semba.kazuhiko.5n@kyoto-u.ac.jp

ホームページ：<http://www.ehcc.kyoto-u.ac.jp/eh42/home/>

## 遷移金属錯体の特徴を活かした均一系触媒反応開発

環境およびエネルギー問題の解決を目指す 21 世紀の科学において、高い変換効率や高い選択性を実現可能にする触媒の開発は必要不可欠な重点課題です。我々の研究グループでは、遷移金属錯体を活用する画期的な有機合成反応の開発を目標に掲げ、多彩で複雑な構造を有する有機化合物を「合理的に設計する指針の確立」や「高効率・高選択的に目的物を得る手法の開発」を目指して、「基礎の裏付けがあってこそ独自の応用が拓ける」という考えのもと、研究を進めています。「明るく、元気に、化学を楽しむ」をモットーに、教員・学生が一丸となって日々研究に励んでいます。

### 研究室の特色：おもろい反応&おもろい配位子

おもろい反応の開発：二酸化炭素を活用する有機合成反応の開発や不飽和炭化水素の高選択的官能基付加反応の開発を進めています。反応開発だけではなく、活性種と考えられる不安定中間体の単離・同定や計算化学による反応機構解析を用いて反応の本質に迫ります。

おもろい配位子の開発：触媒中心から比較的離れた配位子周辺部の修飾による新しい配位子の開発と触媒反応への応用を行っています。配位子の特異な効果について、錯体化学的なアプローチと計算化学によるモデリングを駆使して、その理由を明らかにしていきます。

### 研究室の指導方針：化学を楽しむ！

主体性を身につける：学生さんの主体的な研究を重視し、一人一人の好奇心を契機とする自由な発想や意見を尊重します。それらを綿密に議論することにより研究を成功へと導きます。

基礎知識を身につける：学部の講義で学んだ有機化学や無機化学の基礎知識を、実際の研究に結びつけて確実なものにします。さらに、有機金属化学、錯体化学、計算化学の新しい知識を融合することにより、未知の研究課題と向き合います。

有機合成力を身につける：一般的な有機合成に必要な器具や空気に不安定な化合物を合成する設備は整っています。基本的な合成テクニックや分析手法は、スタッフや先輩が丁寧に指導します。

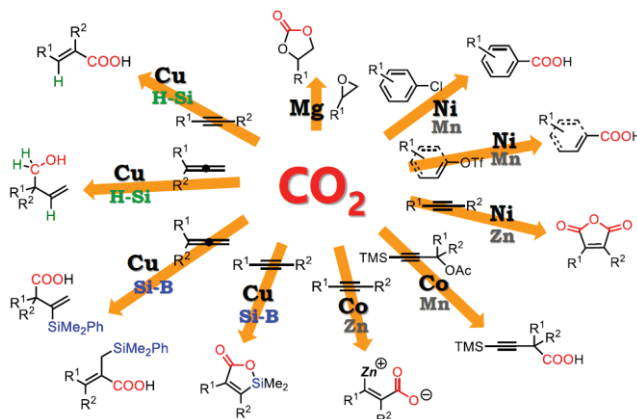
プレゼン力を身につける：自分の研究を自分の言葉で正しく表現し伝える力は、将来社会に出てからも極めて大切な能力です。研究報告会や学会発表の機会を通じて、自身の研究を正しく魅力的に伝える力の習得を目指します。



## 最近の研究テーマ

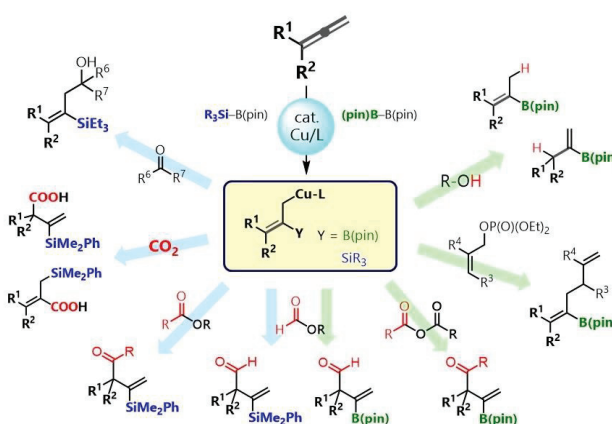
### 二酸化炭素を炭素源とする有機合成反応

炭化水素の最終酸化形態である二酸化炭素を炭素源とする触媒的な有機分子変換法の開発は、二酸化炭素の排出削減とならび、社会の発展に大きく寄与できる重要な研究課題です。我々は、これまでに遷移金属錯体触媒を活用し、二酸化炭素を炭素源とするさまざまな有機合成反応の開発に取り組んでいます。



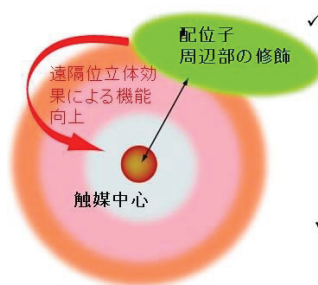
### 高効率・高選択的な有機合成反応の開発

我々は、物質変換や新物質開発の基礎となるような新しい触媒反応の開拓や既存の変換反応を凌駕する高効率かつ高選択的な触媒反応の開発を目指しています。最近では、錯体触媒を利用したホウ素官能基やケイ素官能基の導入を伴う1,2-ジエンならびに1,3-ジエンを基質とする変換反応の開発を精力的に進めています。

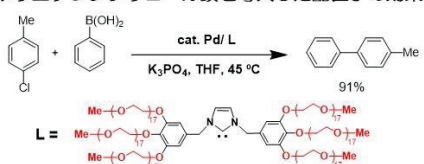


### 配位子周辺部の修飾による巨大配位子の設計・合成と触媒反応への応用

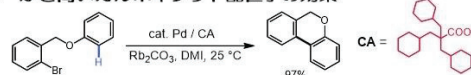
遷移金属錯体を活用する均一系触媒反応において、配位子は重要な役割を担っています。触媒反応中心である金属近傍を修飾し最適化する設計指針により、これまでに数々の高活性・高選択的な反応を実現する配位子が開発されてきました。一方で我々は、触媒中心から比較的離れた配位子周辺部の修飾による触媒機能向上を目指した研究を進めています。有機合成を駆使して新しい配位子を合成し、それらの機能が発現する触媒反応系を探索します。



#### ✓ ポリエチレングリコール鎖を導入した配位子の効果



#### ✓ かさ高いカルボキシラト配位子の効果



☆令和 6 年度研究室構成：スタッフ 2 名，博士後期課程学生 1 名，修士課程学生 7 名，学部 4 回生 4 名，学部 3 回生 1 名。



# 触媒設計工学研究室

研究内容：触媒工学・燃料電池・水素製造・環境触媒

所在地：京都市西京区京都大学桂

スタッフ： 准教授 松井敏明 桂 A2-407 TEL: 383-7060

E-mail: matsui@elech.kuic.kyoto-u.ac.jp

特定助教 成瀬晨司 桂 A2-406 TEL: 383-2523

E-mail: naruse.shinji.5k@kyoto-u.ac.jp

ホームページ： <http://www.eguchi-lab.ehcc.kyoto-u.ac.jp>

研究概要：

エネルギー・環境問題が強く表面化しつつある現在、物質及びエネルギー変換、環境浄化につながる固体触媒材料の開発に重点をおき、機能無機材料の開発と教育を行っている。

## 1. 固体酸化物形燃料電池/電解セル

燃料電池は水素などの燃焼反応を電気化学的に行うことにより電力を得るもので、水の電気分解と逆の反応を利用する。固体酸化物形燃料電池 (SOFC) は安定化  $ZrO_2$  などの酸化物イオン伝導体を用い、燃料の化学エネルギーを電気エネルギーに高効率で直接変換できる無公害な発電方式である。また高温作動であるため、燃料として水素だけでなく炭化水素やアンモニアを直接利用することができる。本研究室では酸化還元による電極性能変化、構成材料間の反応相の生成状態や燃料の内部改質反応の解析などについて、実セルを用いて評価している。また、電極や電解質の3次元構造を取得し、これらの微構造と現象との相関の解明に努めている。

従来の SOFC とは異なるプロトン伝導セラミック燃料電池 (PCFC) の研究も実施している。PCFC はプロトン伝導体を電解質としているため、運転温度の低温化 (600 °C 以下) や燃料利用率の向上が期待されている。一方、空気極での反応が進行しにくいことが問題となっており、高性能な空気極材料の開発が求められている。さらに、固体酸化物形電解セル (SOEC) を用いた高温水蒸気電解や  $CO_2$ - $H_2O$  共電解技術の開発にも取り組んでいる。

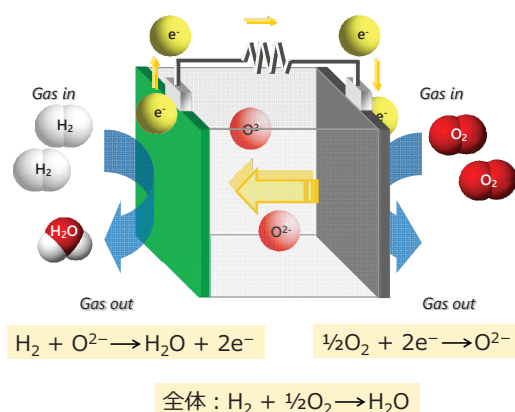


図1. 固体酸化物形燃料電池 (SOFC) の原理. 電解質は酸化物イオン伝導体.

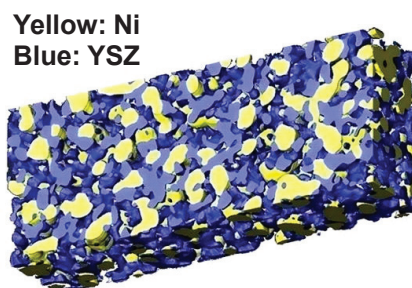


図2. 3次元再構築した Ni-YSZ サーメット電極微構造.

## 2. 中温作動燃料電池

現在開発されている燃料電池の作動温度域は、室温から 200 °C、および 600 °C から 1000 °C 付近である。一方で、200 °C から 600 °C で作動する燃料電池の研究は進んでいない。これは、この中温度域で利用可能な電解質や電極材料が開発されていないためである。本研究室では、中温度域で高いイオン伝導性を示す固体電解質の研究開発を実施しており、300 °C から 400 °C で高いプロトン伝導性を有する候補材料を見出している。本材料について、化学組成や元素置換が導電率や安定性へ与える影響を検討することで、電気化学デバイスへの応用を目指している。また、この電解質材料に適する電極材料を性能や化学的安定性の観点から評価している。中温度域で作動する電気化学デバイスが開発されると、燃料電池への利用だけでなく、電気化学反応に基づく物質合成などの用途に展開できる。

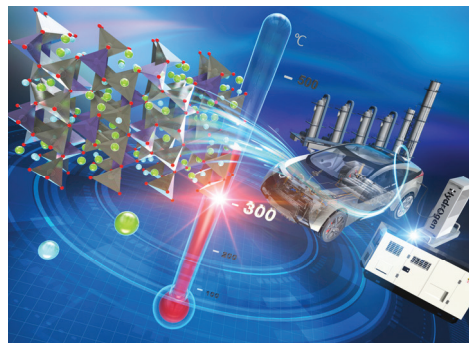


図3. 新規固体電気化学デバイスを用いたアプリケーションのイメージ。

## 3. 水素キャリア

水素は将来のクリーンなエネルギー媒体として期待されているが、液化や圧縮に莫大なエネルギーを必要とするため、貯蔵や輸送において課題がある。そこで、課題解決に向けて、水素を含む、貯蔵・輸送が容易な化合物（水素キャリア）の利用が考えられている。代表的な水素キャリアとしては、有機ヒドライド、アンモニア、メタンが挙げられる。水素キャリアをエネルギー消費地へ輸送し、その場で水素を製造することが想定される。そこで本研究室では様々な燃料種からの水素製造用触媒や水素からの燃料合成用触媒の探索を行っている。メタンは天然ガスの主成分であり、水蒸気改質により一酸化炭素と水素の合成ガスが得られる。また、水素と二酸化炭素から合成することが可能である。アンモニアは、分解後の生成物が窒素と水素のみであり、一酸化炭素や二酸化炭素を生成しないため注目されている。アンモニア分解反応から水素を製造するための触媒開発だけでなく、固体酸化燃料電池の燃料としての可能性についても研究を実施している。有機ヒドライドであるメチルシクロヘキサンについても脱水素反応や燃料電池用燃料としての利用を検討している。

## 4. 無機固体材料の基礎物性評価

無機固体材料の機能物性はエネルギー変換や電子デバイスにおいて特に重要である。また触媒や電極材料の物性は表面電子状態やガス種との相互作用などの他に、化学構造、結晶状態、微細構造などに影響される。本研究室では固体触媒をはじめとする無機材料の基礎物性について X 線光電子分光、高分解能電子顕微鏡、X 線回折、赤外分光、ラマン分光、インピーダンス解析などにより検討を行っている。

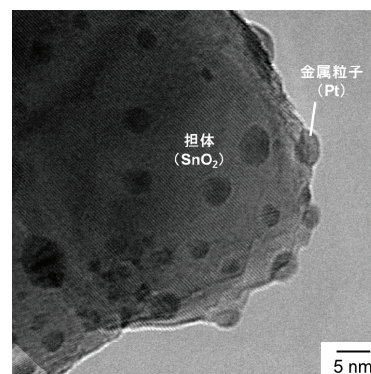


図4. Pt/SnO<sub>2</sub>の透過型電子顕微鏡像。

# 有機分子変換化学研究室

研究内容： 有機合成・分子触媒・超分子/超原子触媒・資源革新・森林共生社会

所在地： [宇治キャンパス](#) (JR 黄檗駅徒歩 5 分)

教員：教授	<b>中村 正治</b>	化学研究所 M472 (0774)38-3180 <a href="mailto:masaharu@scl.kyoto-u.ac.jp">masaharu@scl.kyoto-u.ac.jp</a>
准教授	<b>磯崎 勝弘</b>	化学研究所 M459 (0774)38-3183 <a href="mailto:kisozaki@scl.kyoto-u.ac.jp">kisozaki@scl.kyoto-u.ac.jp</a>
講師	<b>PINCELLA Francesca</b>	化学研究所 M459 (0774)38-3183 <a href="mailto:pincella@scl.kyoto-u.ac.jp">pincella@scl.kyoto-u.ac.jp</a>
助教	<b>中川 由佳</b>	化学研究所 M459 (0774)38-3183 <a href="mailto:nakagawa.yuka.5f@kyoto-u.ac.jp">nakagawa.yuka.5f@kyoto-u.ac.jp</a>
助教	<b>峰尾 恵人</b>	化学研究所 M470 (0774)38-3185 <a href="mailto:mineo.keito.78n@kyoto-u.jp">mineo.keito.78n@kyoto-u.jp</a>
助教	<b>道場 貴大</b>	化学研究所 M459 (0774)38-3183 <a href="mailto:doba@scl.kyoto-u.ac.jp">doba@scl.kyoto-u.ac.jp</a>

ホームページ：<https://www.scl.kyoto-u.ac.jp/~elements/>



「より良い社会・人類の実現に向けて、合成化学を探究する」

*Toward the best synthesis  
for better society & humanity*

化学者はみな心の奥底に夢を持っている。

我々も化学の研究を通じて、自然の摂理をより深く理解し、新しい反応や触媒、新しい物質をつくりだし、よりよい世界を創り出したい。

私たちの夢は化学資源の革新である。稀少金属に替えて普遍性の高い鉄を触媒とする。単一原子の錯体触媒に替えて金属クラスター超原子触媒を開発する。触媒の資源革新と並行して炭素資源革新も進めて行く。石炭・石油・天然ガス，こういった化石資源に替えて，再生可能な森林バイオマスを化学資源として未来の「森林化学産業」を立ち上げたい。



森林資源を炭素資源として活かせれば、活力を失った人工林や里山林が、より生き生きと幸せそうな姿、いのちの賑わいのある場に変化するかもしれない。そんな、産業をうみ出したいと願っている。

### 【新しい反応，新しい分子，新しい機能，新しい価値観】

現在 2 億種類を超える化合物が地球上に存在します。そして学部では、数多くの人名反応，合成反応を習います。新しい化合物を創り出したり，新しい化学反応を開発する必要はあるのでしょうか？

人類社会とそれを取り巻く環境，そしてその構成員である我々自身も刻々と変化しています。工業化学の 150 年の歴史を振り返れば，原料は植物やその抽出物から，石炭・石油・天然ガスなどの化石資源へ，そして今バイオマスなどの再生可能資源へと変遷しています。

目的化合物も，プラスチックなどの汎用材料に加えて，電子材料や医薬品，農薬など生活の質を高める機能性化合物の重要性が増し，また，資源枯渇や環境汚染などの課題への取り組みも重要性を増す一方です。

有機合成化学では，社会的要請に応え，その課題の解決策を提供する化合物を産み出します。

新たな分子変換反応で新たな機能性分子を創出し，その機能を活用することで，社会的課題を解決します。

### 【目指す研究者像】

卒業研究・大学院での研究活動を通して，有機化学を軸とした分子科学の基本知識と合成分析技術が身につきます。合成技術は，オリジナルの分子を創り出し，世界初の化学現象に遭遇すること，そして分析技術はその分子科学を離隔することを可能にします。効果的な発表や論文・レポートの書き方を身に付け，研究者としての第一歩を踏み出すお手伝いもします。「さらに良い機能を出すための分子構造は？」「もっと精確で効率の良い実験手法は？」と，自分で工夫が出来るようになれば，しめたモノ。

知識や技術は，研究活動を楽しんでいると自然に身につきます。最初はスタッフ・先輩の知識や技術に圧倒されるものですが，打ち込んでいくうちに「自分の化学」が見えてきます。夢を叶えるべく，自分の想像する未来を創造する。単なる知識の集積を超えて，新しい知と，価値観を産み出して参りましょう。



「研究の世界に羽ばたきましょう！楽しいですよ！！」



# 構造有機化学 研究室

研究内容： $\pi$  共役系分子・有機合成・ナノカーボン分子・分子錯体・キラル・らせん  
所在地：宇治市五ヶ庄

スタッフ：

化学研究所本館 電話

教授 村田 靖次郎 M-352C (0774) 38-3172  
e-mail: [yasujiro@scl.kyoto-u.ac.jp](mailto:yasujiro@scl.kyoto-u.ac.jp)  
准教授 廣瀬 崇至 N-530C (0774) 38-3173  
e-mail: [hirose@scl.kyoto-u.ac.jp](mailto:hirose@scl.kyoto-u.ac.jp)  
助教 橋川 祥史 M-351C (0774) 38-3174  
e-mail: [hashi@scl.kyoto-u.ac.jp](mailto:hashi@scl.kyoto-u.ac.jp)

ホームページ：<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp/~kouzou/index.html> ◀ Google 検索「有機 教授」で  
トップに出ます！

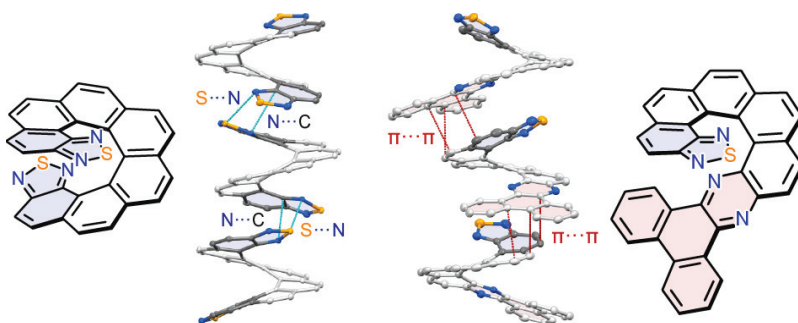
研究概要：化学の醍醐味のひとつは、分子レベルでの「ものづくり」が可能であることである。原子や分子を自在に組立て、新しい物性の期待される物質の構造を設計し合成する。その新物質の構造を精密に測定し、果たして予想された性質が現れるか、あらゆる分析・解析手段で調べ上げる。その結果に理論的解釈を加えて論文発表し、また新しい分子の設計にフィードバックする。この研究サイクルによって、これまでに無い、真に新しい物性をもつ物質を創製する。これが私達の行なっている「構造有機化学」である。対象となる物質は有機化学の根幹となる炭化水素を中心に種々のヘテロ原子を加え、特に $\pi$ 電子が共役した新しい構造をもつ分子である。 $\pi$ 電子は、内殻電子や $\sigma$ 電子と比較してその電子が自在に動き回る性質を有し、さらに他分子と相互作用する結果多様な機能をもっており、極めて興味深い。学術的に「おもしろい分子」を合成し望みの物性を発現させる、という基礎研究が、有機化学の発展と新しい機能性分子誕生の礎となることを目指している。

最近の論文発表：

- (1) “An Open-Cage Bis[60]fulleroid as Electron Transport Material for Tin Halide Perovskite Solar Cells,” Liu, W.; Huang, G.; Chen, C.-Y.; Tan, T.; Fuyuki, H.; Hu, S.; Nakamura, Y.; Truong, M. A.; Murdey, R.; Hashikawa, Y.; Murata, Y.; Wakamiya, A. *Chem. Commun.* **2024**, *60*, 2172-2175. (Inside Front Cover)
- (2) “Reactions of Diaminonaphthalenes with a Cage-Opened C<sub>60</sub> Derivative,” Huang, G.; Sadai, S.; Hashikawa, Y.; Murata, Y. *Asian J. Org. Chem.* **2024**, *13*, e202300634 (5 pages).
- (3) “Synthesis of Inter-[60]Fullerene Conjugates with Inherent Chirality,” Hashikawa, Y.; Okamoto, S.; Murata, Y. *Nat. Commun.* **2024**, *15*, 514 (7 pages).
- (4) “Water in Fullerenes,” Hashikawa, Y.; Murata, Y. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2023**, *96*, 943-967.
- (5) “Circularly Polarized Luminescence of Hetero[n]helicenes with 2,1,3-Thiadiazole Rings at Both Ends: Design of Magnetically-Allowed Electronic Transitions via Heteroatom Embedding,” Zhang, Z.; Murata, Y.; Hirose, T. *Tetrahedron* **2023**, *142*, 133514 (8 pages).
- (6) “ $\pi$ -Extended Open-[70]Fullerenes with a Fused Azaacene,” Sadai, S.; Hashikawa, Y.; Murata, Y. *Org. Lett.* **2023**, *25*, 2815-2819. (Cover Picture)
- (7) “Near-Infrared-Absorbing Chiral Open [60]Fullerenes,” Hashikawa, Y.; Sadai, S.; Okamoto, S.; Murata, Y. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202215380 (7 pages).
- (8) “ $\pi$ -Extended Fullerenes with a Reactant Inside,” Hashikawa, Y.; Fujikawa, N.; Murata, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 23292-23296.

### らせん状化合物の分子配列設計 (廣瀬)

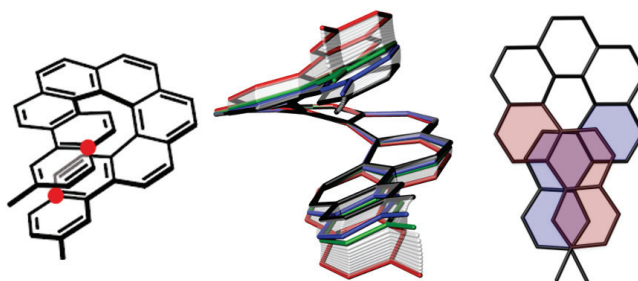
キラルπ共役分子は、スピン選択的な有機半導体や円偏光に応答するキラル有機デバイスへの応用が期待される。しかしながら、らせん状に歪んだπ共役化合物のパッキング構造と分子間相互作用を制御する分子設計指針は限られている。



本研究では、ヘリセン誘導体のらせん末端を化学修飾することで、片方のエナンチオマーのみからなる Face-to-Face のらせん状カラム構造が形成されることを明らかにした。理論計算の結果から、隣接するらせん分子間の大きな重なり面積に由来して、平面π共役分子に匹敵する大きな分子間相互作用 ( $E_{\text{total}} = -113.9 \text{ kJ/mol}$ ) が示唆された。

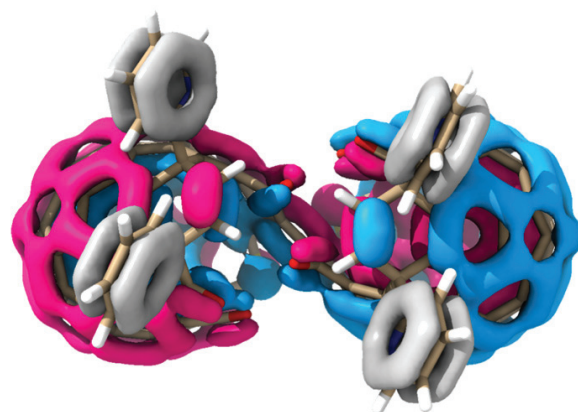
### らせん状π共役骨格に由来する分子ばね特性 (廣瀬)

らせん形状のπ共役分子骨格は「分子ばね」として見なすことができ、「しなやかな」力学物性の発現が期待できる。本研究では、らせん状分子末端に芳香環を縮環した分子の合成を行い、単結晶X線構造解析と理論化学計算を用いた力学特性の調査を行った。密度汎関数法による計算結果から、分子末端部分の分子内相互作用に由来して分子ばね伸長の初期段階で大きな分子ばね定数が観測されるユニークな力学特性が発現することが示唆された。



### キラルな共役フラレン二量体 (橋川、村田)

キラルな開口型フラレンを連結させるとどうなるだろうか？ 有機リン試薬を用いたワンポット反応により、共役および非共役フラレン二量体を合成したところ、前者は特異な6電子還元挙動および世界最大の非対称因子（左右円偏光の吸収の差）を示すことがわかった。一方、後者は溶液および固体中において、ヘテロキラル認識による会合挙動を示した。



この反応の機構を密度汎関数法による計算により検討したところ、まず、有機リン化合物がカルボニル酸素に付加し、生成した炭素アニオンがもう一つの分子におけるカルボニル炭素を求核攻撃し、その後ホスファイトが脱離することを鍵経路とすることが示された。

令和6年度：博士課程学生4名、4回生2名、技術補佐1名、秘書1名

# 遷移金属錯体化学研究室

研究内容：クラスター錯体化学・生物無機化学・分子触媒化学・有機金属化学

所在地：宇治市五ヶ庄

電話

e-mail

スタッフ：教授 大木靖弘 化学研究所 M-272C (0774)38-3035 ohki@scl.kyoto-u.ac.jp

助教 谷藤一樹 化学研究所 M-263C (0774)38-3029 tanifuji@scl.kyoto-u.ac.jp

助教 伊豆仁 化学研究所 M-270C (0774)38-3026 izu.hitoshi.2i@kyoto-u.ac.jp

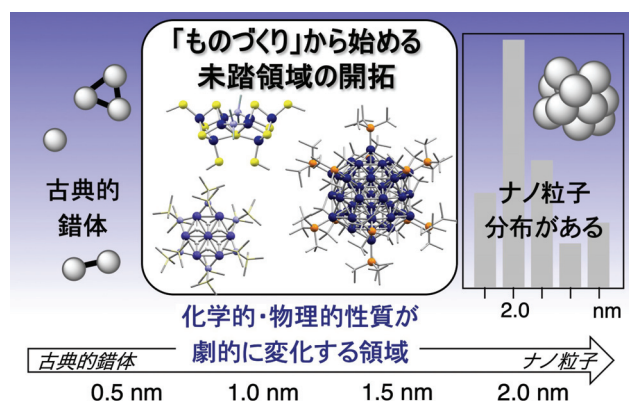
ホームページ：<https://www.om.kuicr.kyoto-u.ac.jp/>

## 「ナノ」と「原子」の間に潜む、新たな機能を探す

効率的なエネルギー貯蔵システムや革新的な物質生産プロセスの開発は、持続可能な社会の達成に向けて化学者の貢献が望まれる大きな課題です。私たちは、複数の金属原子が集まって働く化合物（クラスター）を触媒や機能性材料として用いて、これらの問題にアプローチしようと考えています。当研究室では特に、クラスターを原子レベルで制御して合成する新しい方法を生み出し、得られたクラスターを、CO<sub>2</sub>やN<sub>2</sub>の還元といった高難度反応に応用すべく、研究を進めています。

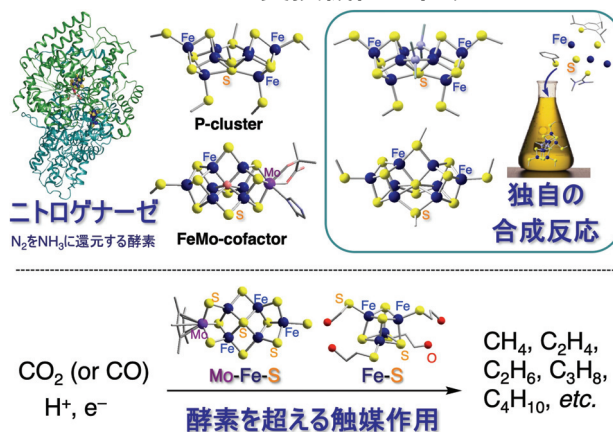
### クラスターとは？

分子を構成する原子の数は、良い意味で“いい加減”に表現できます。例えば金属原子を数える際は、1, 2, ,それ以上は沢山(クラスター)、さらに増えると数えること自体が面倒になりナノ、とサイズと呼ばれ始めます。右に示したように「原子」と「ナノ」の間にあたるのが、「クラスター」と呼ばれる分子群です。



### (1) 酵素の謎に迫る「ものづくり」と自然界を超えるエネルギー変換機能の開発

自然界では、様々な金属を用いたクラスターが、電子伝達や酵素反応などの重要な生体機能を担っています。特に、N<sub>2</sub>を還元してNH<sub>3</sub>を作る、あるいはH<sub>2</sub>Oを酸化してO<sub>2</sub>を作る、といった難しい反応を効率よく進めるには、複数の金属が協同的に働くクラスターが不可欠です。しかしなぜ、どのようにクラスターが機能するのか、という問いに明確な答えは得られていません。私たちは、これら反応の鍵を握るクラスターをこの手で作り、

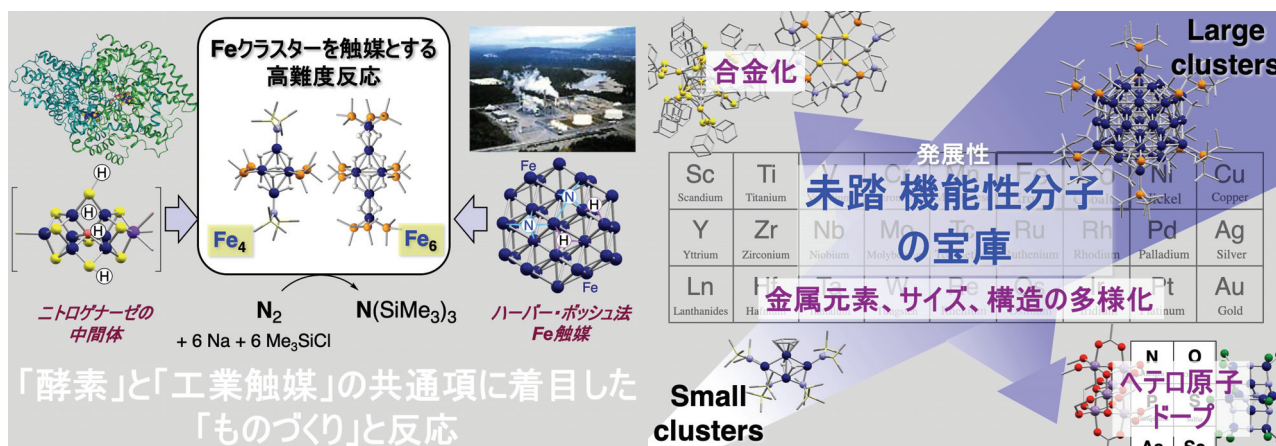




酵素の謎を解明するとともに、酵素を超える機能の開拓を目指しています。例えば、酵素ニトロゲナーゼは、鉄と硫黄からなる複雑なクラスターを使って  $N_2$  を還元します。私たちは、独自の手法でモデルとなるクラスターを化学合成し、自然界は決して魔法のようなトリックを使っているのではなく、化学の言葉で書き下せる仕組みを使うことを、実験化学を通して証明し始めています。また類似の鉄-硫黄クラスターを使って、 $CO_2$  や  $CO$  を燃料となる炭化水素類へ直接変換できることも発見しました。この技術を発展させれば、 $CO_2$  からガソリンを直接生み出す燃料再生サイクルも可能になると、期待しています。

## (2) 鉄やコバルトを自在に組み上げる「ものづくり」と触媒応用

金属原子を集積して得られる金属クラスターは、目に見える金属塊や数 nm 以上のナノ粒子、あるいは金属 1 つ、2 つ程度の古典的な錯体分子とは異なり、構造・組成・原子配列のわずかな違いに応じて性質を大きく変化させます。現在知られる金属クラスターは、その金属元素が安定で反応性の低い金、銀、銅に限られていますが、未知なる機能を目指すには周期表に大きく残された未開拓領域にも目を向ける必要があります。私たちは鉄やコバルトを手始めに、金属原子をコントロールして自在に組み上げる反応を開発しています。



「ものづくり」により得られた金属クラスターのうち、例えば鉄クラスターは、 $N_2$  を還元する酵素と工業触媒の活性種、それらの構造的な特徴を併せ持つ化合物と見ることができ、実際に触媒的な  $N_2$  の還元反応を達成しています。また私たちの「ものづくり」は、鉄やコバルト以外にも様々な金属を、多様なサイズ、構造を持ったクラスターへと導く普遍的方法になりうると考えています。一緒にまだ見ぬ新しい反応性、新しい性質を探してくれる学生諸君の参加を待っています。

## どんな研究室？

化学実験（有機/無機化学など問わず）に興味がある人、カラフルな化合物に興味がある人、錯体化学や無機化学に興味があるけど生物化学や有機化学や物理化学にも興味がある人、いずれも歓迎します。研究室活動は学生生活の集大成ですので、頑張りたいと思える場所を探して下さい。その結果として私たちのグループに加わってもらえれば最高です。スタッフと学生が互いに高め合うことを理想として、スタッフ一同、学生の成長を全力で支援します。



# 有機機能化学研究室

**研究内容：**有機合成化学，構造有機化学，機能性有機材料化学

**所在地：**京都市左京区吉田本町 高等研究院物質－細胞統合システム拠点研究棟・総合研究1号館

居室

Tel

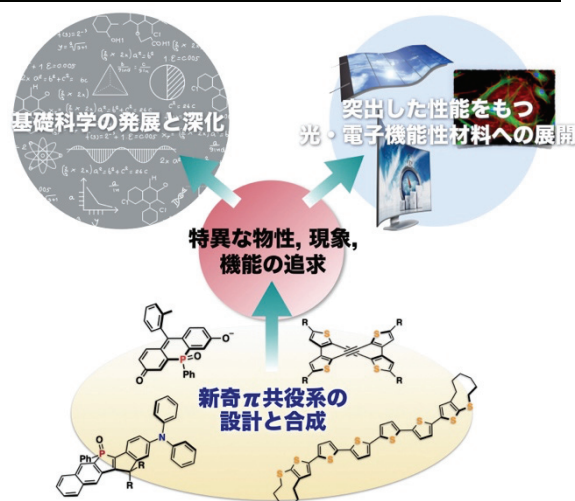
**スタッフ：**教授 深澤 愛子 iCeMS 研究棟 102 号室 075(753)9853

e-mail: afukazawa@icems.kyoto-u.ac.jp

**ホームページ：** <https://www.fukazawa.icems.kyoto-u.ac.jp>

## 【当研究室について】

化学の最大の醍醐味かつ使命の一つは分子レベルのものづくりであり，人類が抱える諸問題の解決に資する新物質を生み出すことに尽きます。中でも私たちは，優れた光・電子機能性をもつ有機材料の創製を目指し，そのための分子設計から合成法の開拓，物性の解明まで包括的に研究しています。有機化合物の光・電子機能性を追求する上で中心的な役割を担う  $\pi$  共役化合物に焦点を絞り，特異な構造特性や電子構造をもつ新奇な  $\pi$  共役分子を独自の発想に基づいてデザインし，合成に取り組んでいます。また，得られた新物質の性質や機能の追求を通して，光機能性材料の合理的な分子設計へとフィードバックすることで，基礎科学と材料科学の双方の発展と深化に貢献することを目指しています。



## 【当研究室の研究方針と特色】

**どこにもなかったような新分子をデザインする：**私たちは「こんなユニークな構造の分子ができたなら，どのような物性や機能が宿るだろうか？」という好奇心駆動型の分子設計と，「従来の有機材料では実現できないこんな機能，どうやったら実現できるだろうか？」という標的指向型の分子設計の両方の視点を持ってこそ，真に優れた新物質の創製が可能になると考えています。私たちは，分子構造と物性・機能の関係に対する深い理解をもとに，突出した物性や新現象の源となるオリジナル分子を生み出しています。

**標的指向の精密有機合成：**デザインされた画期的分子を簡単かつ大量に効率よくつくることができれば，機能の探求やさらなる展開の可能性は無限大に広がります。絶えず進歩を続ける最先端の有機合成技術を柔軟に取り入れ，時には独自の反応開発から取り組むことで，「つくれるものをつくる化学」ではなく「つくりたいものをつくる化学」に取り組んでいます。

**分子機能の深い理解と開拓：**最先端の分析手法や計算科学を駆使して，独自に生み出した新物質群の光物性や電子物性の評価，理解に努めています。また，それぞれの物質の特徴を踏まえ，学内外・国内外の物理学者，材料学者，生命科学者との協働により，新物性・新現象や機能性材料としての可能性を探求します。

## 【指導方針】

**化学（科学）研究をとことん楽しむ：**科学研究は，授業や学生実験など，これまで皆さんが主に経験してきた「答えがわかっていること」を学ぶ活動とは全く異なり，「正解を誰も知らない未知の世界」に飛び込んでいく知的生産活動です。野心を持って主体的に考え取り組むことで，研究はどんどん面白くなります。当研究室では，一人一人の自由な発想を尊重し，議論を大切にしています。

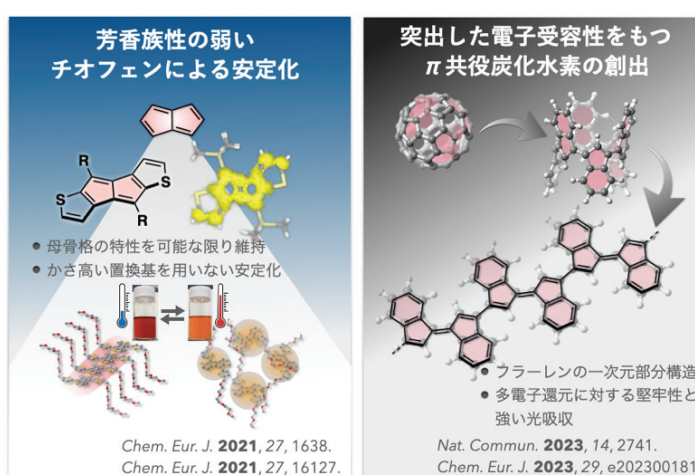
**多様性を尊重し、人を巻き込むチカラをつける：**研究の世界では、一人でどれだけのことを成し遂げたかということよりも、自分にない知識や技能をもつ人の力を結集して、面白い知見や価値の高い発見に辿り着くことの方がはるかに重要です。多様な価値観や背景をもつ人々との相互理解の構築を大切に、研究室内外、学内外、国内外を問わず周りの知や技術を結集してプロジェクトを成功に導く力を養うことを目指しています。

**科学の魅力を伝えるチカラをつける：**自らの研究の面白さや意義を伝える力量は、研究成果の価値そのものを左右するだけでなく、科学と社会とのつながりという観点でも極めて重要です。当研究室では、学術論文の執筆や学会での研究発表といった「専門家向けの発表」はもちろんのこと、異分野の研究者への説明の機会を通して客観的に自分の研究を咀嚼し、その魅力を的確に伝える力を身につけることを目指しています。

### 【最近の主な研究テーマ】非ベンゼン系 $\pi$ 共役化合物を基盤とする機能性材料の創製

現在の機能性有機材料における主役は、ベンゼンをはじめとする芳香族炭化水素や複素芳香環です。これらは高い安定性や優れた電子物性をもつため重宝されていますが、これら既存の基本骨格の組み合わせで実現できないような物性・機能を実現するにはどうすればよいのでしょうか？一つの可能性として、私たちは**非ベンゼン系  $\pi$  共役化合物**<sup>[注1]</sup>に着目しています。これらは、同程度の分子量をもつ芳香族炭化水素と比べても長波長側に光吸収を示すほか、多段階の酸化還元が可能であるなど様々な特徴をもち、光機能や電子機能の宝庫です。ところが、これらの化合物群はいずれも反応活性であり、分子間反応により容易に分解してしまいます。この反応を抑えるためにかさ高い置換基を導入すると、分子間相互作用を基盤とした電荷輸送特性などの機能が犠牲になってしまうことがわかっており、かさ高い置換基に頼らない安定化の手法が求められています。また、これらの化合物群によって真に優れた材料を実現するためには、めざす物性や機能を念頭においた上で非ベンゼン系  $\pi$  共役化合物の特徴を分子設計に落とし込んでいくことが必要不可欠です。さらには、芳香環を基盤とする結合形成反応や官能基変換法と比較して、これらの化学種の合成法や変換法は未開拓であり、新たな合成手法の開発も大きな課題として横たわっています。私たちは、これらの問題に対し、**効率的合成法の開発、安定性の担保、特徴的な物性を引き出す独自の分子設計**の3つの視点から、非ベンゼン系  $\pi$  共役化合物を基盤とする機能性材料の創製に取り組んでいます。例えば、芳香族性の弱いチオフェンを反芳香族炭化水素に縮環させることで、かさ高い置換基を用いなくても安定性と強力な反芳香族性を両立できることを実証し、この特徴を生かして可視光から近赤外領域でサーモクロミズム<sup>[注2]</sup>を示す低分子有機化合物を開発しました

(*Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 1638; *ibid.* 16127)。また、ごく最近、フラレンの部分構造に着想を得た独自の分子設計により、閉殻の不飽和炭化水素骨格のみで多電子還元に対して極めて安定な電子受容性材料を実現することに成功しました (*Nat. Commun.* **2023**, *14*, 2741)。これらの成果は、非ベンゼン系  $\pi$  共役化合物の特性を次世代の光・電子機能性材料に結びつける上での基礎になる考え方を提供するものとして注目されています。



[注1] 非ベンゼン系  $\pi$  共役化合物：アヌレンやデヒドロアヌレン、非交互炭化水素などの不飽和炭化水素。

[注2] サーモクロミズム：温度により色調が変化する性質のこと。

# 分子理論化学研究室

研究内容：理論化学・化学反応・量子化学・統計力学

所在地：京都市西京区京都大学桂

スタッフ：		電話
教授	佐藤 啓文	桂 A4-026 (383) 2548 e-mail: hirofumi@moleng.kyoto-u.ac.jp
講師	Nguyen Thanh Phuc	桂 A4-205 (383) 2555 e-mail: nthanhphuc@moleng.kyoto-u.ac.jp
助教	杉山佳奈美	桂 A4-024 (383) 2546/7574 e-mail: ksugiyama@moleng.kyoto-u.ac.jp
助教	森本 大智	桂 A4-132 (383) 2536 e-mail: morimoto@moleng.kyoto-u.ac.jp
特定助教	浦谷 浩輝	桂 A4-025 (383) 2547 e-mail: uratani@moleng.kyoto-u.ac.jp

Web：<http://www.riron.moleng.kyoto-u.ac.jp/>

物理化学で学んできたように、現実の物質の変化は方程式で記述されます。逆に考えれば、方程式を解くことで現実の物質の変化を追跡し、あるいは予測することも原理的にはできるはずですが。

“The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of large parts of physics and the whole chemistry are thus fully known, and the difficulty lies only in the fact that application of these laws leads to equations that are too complex to be solved.”

— Paul Dirac, *Proc. Roy. Soc. (London)*, A123, 714 (1929).

90年を経た現代の我々はコンピュータを手にし、状況は大きく変わりました。それでもなお広汎な化学現象に対する我々の論理的理解は未だに極めて限定されていると言わざるを得ません。コンピュータでしかできないこと、コンピュータではできないこと、両方があるのです。

理論化学は、複雑な化学現象の本質を見極め、全体を俯瞰しながら、その理を明らかにすべく進める取り組みと言えます。無限とも言える多種多様な化学現象は、少数の原理 (fundamental laws) が複雑に関係しあった結果と考えられていますが、現実の物質世界を理解する上で鍵となる『複雑な関係』が実は未だによく解っているとは言えません。しかし筋道立てて考えることでその本質が見えてくるはずですが。我々はこれを明らかにすべく、“abstraction” (抽出、抽象化) を重視する立場をとっています。本研究室では、多彩な理論手法を用いて様々な実際の化学現象にアプローチするとともに、量子化学、統計力学やダイナミクス理論などを駆使した独自の理論開発を行うことで、分子やその集団系に対する新しい概念・視座の創出を目指しています。一緒に教科書を書き換えていきましょう。

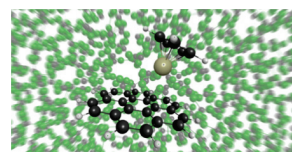
【指導方針】研究室は確立した個が集い、互いに切磋琢磨する場です。自由な発想とそれを支える基礎学力を重視し、各人が自らに責任を持つ主体的な姿勢が求められます。研究の進展はもちろん大事ですが、同時に学生諸君の一人一人が研究者や技術者として将来に渡って長く活躍して行けることが何より大切だと考えています。自ら問題を発見し、論理的に思考して解決できる力を身につけてください。

- (1) 基礎的・基本的研究能力の育成：量子化学や統計化学、初歩的なプログラミング等の基礎的能力の習得を重視し、系統的なトレーニングを行っています。また、国内外の理論・実験研究者との積極的な討論や交流、共同研究を通して幅広い視野の育成に努めています。
- (2) 主体的な研究活動：学生諸君が各々独立したテーマを持ち、各個人の自由な着想が大いに活かされ、主体的に研究を進められるように配慮しています。また国内外での学会発表・論文発表の機会を積極的に設け、こうした際に必要なプレゼンテーション能力の向上も目指します。これらの結果として、これまでに多くの学生諸君が優秀講演賞・ポスター賞等を受賞しています。
- (3) 研究室生活：研究室では互いに信頼できる人間関係も大切な要素です。互いに協力し合う雰囲気があり、学生主催を含めた各種の勉強会 (輪講) や学生間の討論、学内外での様々な交流も盛んです。

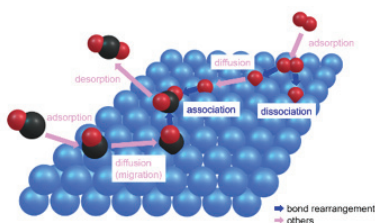


## 新しい量子化学・統計力学理論の開発と化学反応・化学現象へのアプローチ (佐藤)

一つ一つの分子は量子化学で理解できるが、無数の分子が集合すれば集団としての性質が現れる。自然には階層構造があり、化学は分子の集団を対象としている。独自に開発した理論を駆使することで、溶液内の反応や触媒反応など様々な化学反応の本質を明らかにしている。計算化学は反応の全貌を直接知る事のできる強力な手段であり、超臨界流体中やイオン液体中の化学反応、 $pK_a$  の計算など、世界で初めて第一原理的計算を実現し、その分子論を明らかにした例も多い。現実の物質は、分子が集合することでその性質・機能を発現する。最近では、分子の自己集合過程の解明などにも取り組んでいる。また、分子の電子構造を調べるための新しい解析法や、量子化学手法の開発も進めている。



## 不均一系触媒反応の機構解明 (佐藤・杉山)



触媒と反応物の相が異なる不均一反応は、反応物どうしの結合が組み替わる多様な反応素過程に加えて、触媒の組成や構造、そして触媒の構造変化も考慮する必要があり複雑である。しかしこのような触媒反応機構の解明は、反応の理解のみならず高活性な新規触媒設計のためにも重要な課題である。我々は量子化学計算を用いた原子レベルの機構解析を主軸に、データ科学などの視点を取り入れて多角的に検討している。

## Quantum engineering of molecular dynamics (Nguyen Thanh Phuc)

The recent development of quantum technologies has offered a powerful tool for controlling various kinds of physical, chemical and biological systems. Our research aims to find novel ways, for example, by using quantum photonics and light-matter interaction, to manipulate dynamical properties and discover new emergent phenomena in molecular systems.

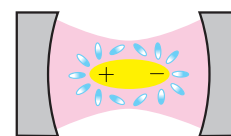
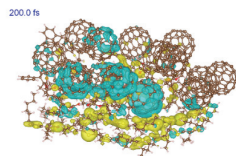


図 1: Schematic illustration of electron transfer dynamics in a molecule interacting with light in an optical cavity

## 励起状態における超高速ダイナミクスの理論解析 (浦谷)



光などで励起された分子は、 $10^{-15}$ - $10^{-12}$  秒程度という短い時間で様々な変化を起こす。その過程では、異なる電子状態の間を飛び移ったり、複数の状態の量子重ね合わせとして存在したりすることもある。このようなダイナミクスを深く理解することで、高効率な光エネルギー利用や精密な化学反応制御などにつながる新概念を生み出せる可能性がある。我々は、時間依存 Schrödinger 方程式に基づく実時間シミュレーションを基盤に、励起状態の超高速ダイナミクスを理解するための理論手法の開発とその応用に取り組んでいる。



## 触媒反応化学研究室

研究内容：触媒化学・光触媒・無機材料合成・X線分光学・CO<sub>2</sub>変換

所在地：京都市西京区京都大学桂

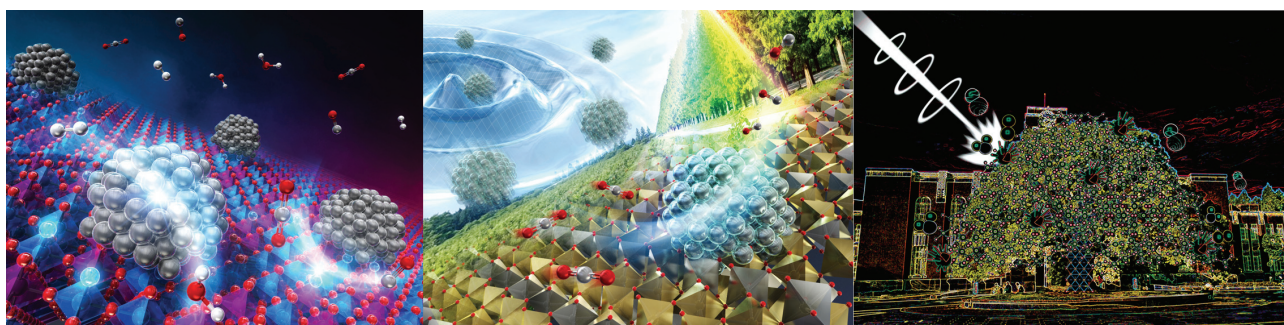
		居室	TEL
スタッフ：教授	寺村 謙太郎	桂 A4-126	(383)2559
		e-mail: <a href="mailto:teramura.kentaro.7r@kyoto-u.ac.jp">teramura.kentaro.7r@kyoto-u.ac.jp</a>	
	特定准教授	井口 翔之	桂 A4-128 (383)2560
		e-mail: <a href="mailto:iguchi.shoji.4k@kyoto-u.ac.jp">iguchi.shoji.4k@kyoto-u.ac.jp</a>	
	助教	浪花 晋平	桂 A4-129 (383)7586
		e-mail: <a href="mailto:naniwa.shinpei.8s@kyoto-u.ac.jp">naniwa.shinpei.8s@kyoto-u.ac.jp</a>	

Web サイト：[http://www.moleng.kyoto-u.ac.jp/~moleng\\_04/](http://www.moleng.kyoto-u.ac.jp/~moleng_04/)

(トップページ中央の「理工化学科3回生向け研究室訪問日程」をクリック！)

**CO<sub>2</sub>を資源として活用するための触媒を開発しています！**

「カーボンニュートラル」という言葉を一度は聞いたことがあるのではないのでしょうか？カーボンニュートラル社会を実現するためには、CO<sub>2</sub>を排出しない技術・大気中のCO<sub>2</sub>を削減する技術が必要です。我々は、CO<sub>2</sub>を資源として再利用できる形に変換する触媒反応の高速化・高効率化に取り組んでいます。大気中のCO<sub>2</sub>濃度が増加の一途をたどるいま、CO<sub>2</sub>を何とかしたい！と考えている学生の皆さん、ぜひ我々と一緒に本気で研究してみませんか？



我々の研究成果は国内外で高く評価されており、著名な国際科学誌に掲載されています。これらは、雑誌の表紙を飾った研究成果のイメージ図の一例です。

## 本研究室の研究方針 基礎物性の理解なくして応用研究なし

本研究室は、固体触媒の物性や触媒作用を物理化学的にナノレベルで解明すること、ならびにそれを触媒化学システムの設計にフィードバックして高効率な反応系を開発することを目標としています。CO<sub>2</sub>を資源として再利用できる形に変換するため、大きく分けて次の3つの触媒反応系の開発に取り組んでいます。

### 光還元

光触媒を用いてCO<sub>2</sub>をCOなどに還元 | 人工光合成

高速かつ高選択的にCO<sub>2</sub>をCOに還元する光触媒を開発しています。

### 電解還元

電力を投入して室温でCO<sub>2</sub>をCOなどに還元

排ガス中の低濃度CO<sub>2</sub>を直接還元可能な電極触媒を開発しています。

### 水素化

水素を還元剤としてCO<sub>2</sub>をCO, CH<sub>3</sub>OH, CH<sub>4</sub>に還元

できるだけ低温で反応が進行する高性能触媒を開発しています。

これらの3つのアプローチを1つの研究室内で全て同時に研究している例は、国内外を見ても稀です。同時並行で進めているからこそ、さまざまな知見を融合させながら革新的な触媒開発に成功しています。

### 【本研究室で進行している研究テーマの一覧】

ポスドク (1名)	CO <sub>2</sub> 光還元
研究生 (1名)	NO <sub>3</sub> イオン電解還元
博士後期課程 (1名)	CO <sub>2</sub> 光還元・CO <sub>2</sub> 電解還元
修士課程2回 (4名)	CO <sub>2</sub> 光還元, CO <sub>2</sub> 電解還元, CO <sub>2</sub> 水素化, 光触媒的有機変換
修士課程1回 (5名)	CO <sub>2</sub> 光還元, CO <sub>2</sub> 電解還元, CO <sub>2</sub> 水素化(2名), CO <sub>2</sub> 光電解
学部4回 (4名)	CO <sub>2</sub> 光還元, CO <sub>2</sub> 水素化(2名), NO <sub>x</sub> 電解還元

現在、半数以上がCO<sub>2</sub>変換に関する3つのテーマ(CO<sub>2</sub>水素化・CO<sub>2</sub>電解還元・CO<sub>2</sub>光還元)となっていますが、一人ひとり、独自の目的を設定して研究に取り組んでいます。固体触媒反応はとても複雑ですが、我々は、固体表面における基質・中間体・生成物の吸着挙動や、触媒駆動中の活性金属種の電子状態を、様々な分光的手法により解析して触媒作用のメカニズムを分子レベルで解明しています。さらに、得られた結果を触媒の設計にフィードバックし、高機能な触媒の開発を進めています。一方、水素キャリアとして注目されているアンモニアを、NO<sub>3</sub>イオンや窒素酸化物(NO<sub>x</sub>)を室温で電解還元して合成する研究を開始しました。次年度以降は、アンモニア合成に留まらず、NO<sub>3</sub>イオンとCO<sub>2</sub>から尿素を直接合成する電解触媒の開発を行います。他にも、光を用いた有機分子の変換反応や、酸化物中の格子酸素のレドックスを利用した新規反応の開発など、新規テーマの立ち上げも積極的に進めており、触媒を研究したい意欲的な学生を求めます。研究室 Web サイトはこちら→



# 光有機化学研究室

研究内容：光化学・有機化学・材料化学・有機太陽電池

所在地：京都市西京区京都大学桂

			電話	e-mail
スタッフ：教授	今堀 博	桂 A4-002	(383)2566	imahori@scl.kyoto-u.ac.jp
	准教授 東野 智洋	桂 A4-005	(383)2567	t-higa@scl.kyoto-u.ac.jp
	助教 秋山 みどり	桂 A4-003	(383)2568	akiyama@moleng.kyoto-u.ac.jp

[http://www.moleng.kyoto-u.ac.jp/~moleng\\_05/](http://www.moleng.kyoto-u.ac.jp/~moleng_05/), <https://www.icems.kyoto-u.ac.jp/people/1399/>

## 研究概要：

本研究室では光化学、有機化学、材料化学を基盤とした基礎および応用研究を行っています。具体的には、光機能性色素であるポルフィリン、多様な有機機能性材料を用いた光エネルギー変換モデル系・有機太陽電池の創製（1-2）、ヘテロ元素を活用した新規  $\pi$  共役化合物の開発（3）、多数のフッ素原子を導入した機能性分子の開発（4）などを行っています。

### (1) 光電荷分離に関する学理構築

太陽電池、人工光合成、光触媒の高効率化には、電子供与体（ドナー）と電子受容体（アクセプター）間での光誘起電子移動により、エネルギー損失を最小限にして、いかに効率よく、長寿命の電荷分離状態を生成するかが課題です。そのためのドナー・アクセプター連結モデル系を分子設計し、光電荷分離に関する基礎原理の解明を目指しています。

### (2) 有機太陽電池の開発

近年、エネルギー・環境問題の観点から、太陽エネルギーを有効利用できる太陽電池に注目が集まっています。太陽電池の実用化には変換効率・寿命・コストが重要で、有機太陽電池は、柔軟性、着色性、軽量性、低コスト、低光照射下での高性能などの長所を有しています。本研究室では、合理的な分子設計・有機合成により、高効率有機太陽電池の開発を目指しています。たとえば、色素増感太陽電池では、太陽光を効率よく利用できる色素・高い出力電圧を達成できる材料の開発、有機薄膜太陽電池では、分子間相互作用を制御し、理想的な分子配列を取れる材料を作り出す、といった研究を行っています。

### (3) ヘテロ元素を活用した新規 $\pi$ 共役化合物の開発

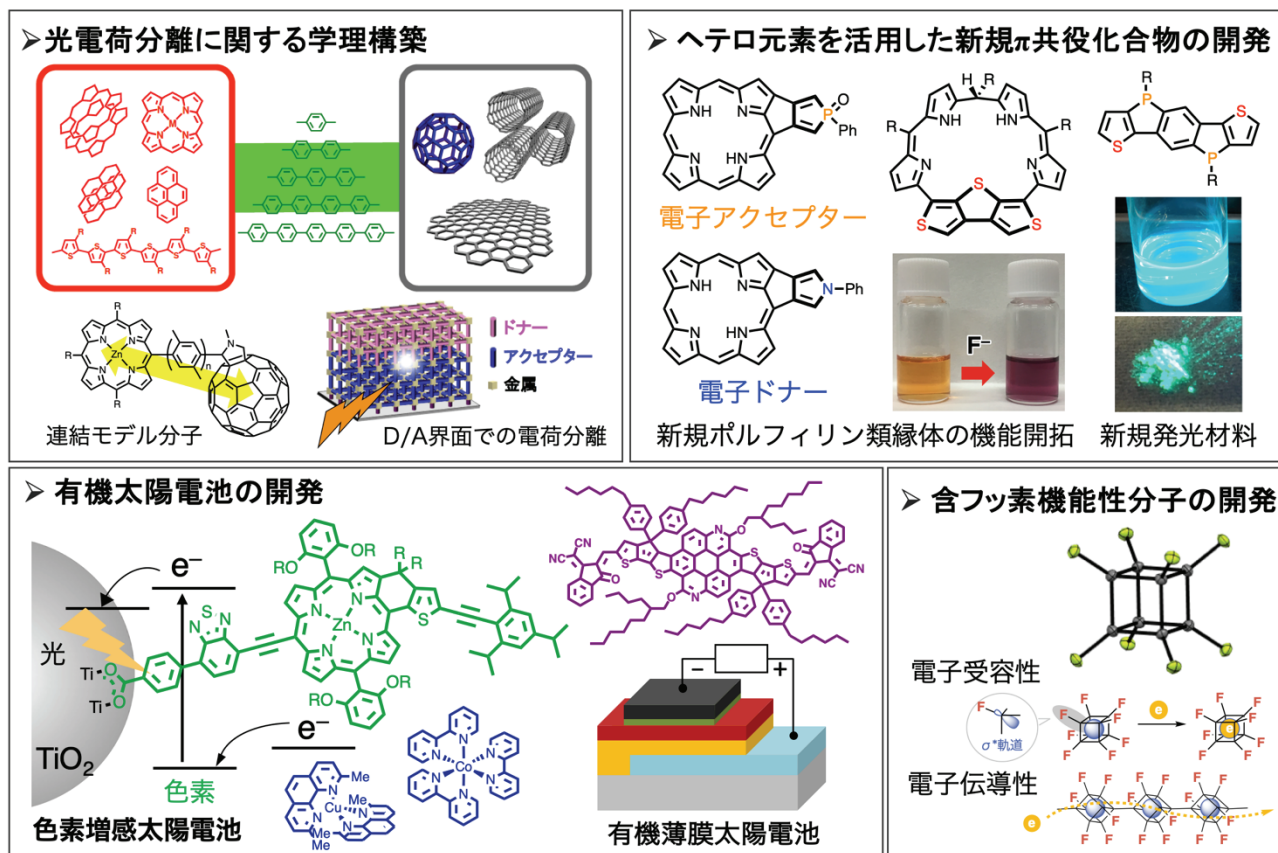
硫黄やリンなどのヘテロ元素を含む  $\pi$  共役化合物は、それぞれの元素に由来する多様な性質を示します。本研究ではヘテロ元素を組み込んだ様々な  $\pi$  共役化合物を設計し、実際に合成するための手法を確立するとともに、ヘテロ元素の性質をうまく掛け合わせたハイブリッド型  $\pi$  共役分子の開発に取り組んでいます。これらの分子の基礎物性の解明を通じ、多機能な有機材料としての応用展開を目指しています。

### (4) 多数のフッ素原子を導入した機能性分子の開発

フッ素は電気陰性度が最も高い原子であり、分子に導入するとその性質を大きく変えます。本研究室では特に、カゴ型分子の全ての炭素にフッ素を導入した「全フッ素化カゴ型



分子」の特異な性質に着目して研究を進めています。全フッ素化カゴ型分子をモチーフとした新しい分子を合成し、その物性を解明することで、これまでになかった機能性分子の開発を目指しています。



私たちの研究は、新しい分子を設計し、そして実際に手に取るために合成することから始まります。そのため、研究室配属された学生の皆さんは多くの時間を使ってポルフィリンや新規  $\pi$  共役化合物、含フッ素化合物の有機合成に取り組みます。したがって、基本的な有機合成の技術をこの過程で身につけることができます。目的化合物が合成できると、その構造を有機化学的な分析法によって同定し、目的化合物の材料化学・デバイス特性評価を行います。たとえば、目的化合物の物性を分光学、電気化学、光電気化学的に評価するほか、自分自身でデバイス作製を行って太陽電池特性を評価します。この過程で基本的な装置の取り扱い、データの解釈、実験の進め方を学びます。フェムト秒から秒レベルに至る時間領域の光物性は国内外の共同研究によって明らかにします。自分自身が共同研究先に出向いて、みずから合成・測定を行い、異分野の技術を習得することもできます。これらの成果がまとまれば、学会や論文で発表します。この一連の作業によって、研究の進め方、プレゼンテーション、学会発表の仕方を学ぶことができます。また、博士後期課程進学者、および予定者には、国内外の大学、研究所、企業への短期留学、国際会議での口頭発表を推奨しています。

#### 最近の博士研究員・卒業生の主な就職先例

九大・奈良先端大・長岡技術大・阪大助教、AGC、ダイキン工業、富士フイルム、東レ、マイクロンジャパン、積水化学、信越化学、日本触媒、日産自動車、昭和電工、住友化学



# 物性物理化学研究室

研究内容： 機能分子の電子/スピン物性・ナノ構造制御・マイクロ波分光

所在地： 京都市西京区京都大学桂 A クラスターA4 棟

	スタッフ	居室	TEL	E-mail
教授	関 修平	桂 A4-009	075-383-2572	seki@moleng.kyoto-u.ac.jp
准教授	田中隆行	桂 A4-007	075-383-2574	tanaka@moleng.kyoto-u.ac.jp
助教	筒井祐介	桂 A4-008	075-383-2575	tsutsui@moleng.kyoto-u.ac.jp
特定助教	崔 旭鎮	桂 A4-203	075-383-2552	choi@moleng.kyoto-u.ac.jp

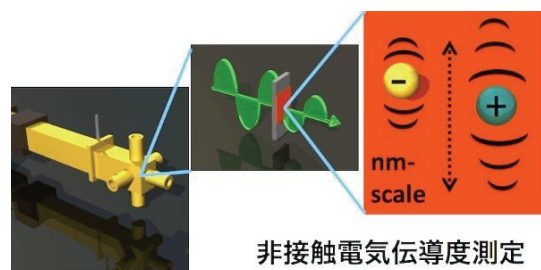
研究室ホームページ [http://www.moleng.kyoto-u.ac.jp/~moleng\\_06/index.php?lang=ja](http://www.moleng.kyoto-u.ac.jp/~moleng_06/index.php?lang=ja)

電磁波・光量子・放射線と物質との相互作用は、さまざまな化学反応を引き起こし、一般の熱化学反応では生み出すことのできない過渡活性種を生成するとともに、物質の本質を知るためのツールとして重要な役割を果たします。現代社会のあらゆる側面で用いられる機能材料の創成を目指して、光・電氣的・磁氣的特性に優れた共役高分子・低分子材料や生体高分子材料を主な対象として、その合成・集積化・ナノ構造化・機能化などを原点に、我々にしか知りえない物質の機能を引き出すための分子・分子集積構造・分子変調構造の設計図を見出します。「目の前の物質の中で何が起きているか、あらゆる手段を駆使して知りたい」、「望みの機能を有する物質をこの手で生み出し、自ら測定し、その機構を理解したい」・・・そのような学生を歓迎します。皆さんと刺激的な議論ができることを楽しみにしています。

**[当研究室の研究方針] 誰も測れないものを測る 誰も見られないものを見る**

## ① 電極を使わないで材料の伝導特性を評価する

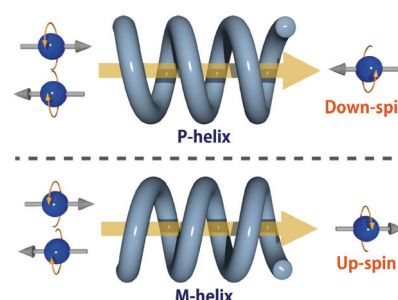
電波の一種であるマイクロ波を使うと、物質の中で電気伝導を担っている「電子」や「正孔」を揺さぶって、電気抵抗を測ることができます。「手間のかかる電極作成の過程を経ずに物質の電気伝導度を測定できる」この手法を用いて、私たちは半導体材料の潜在能力を素早く明らかにする研究をしています。「電子」や「正孔」



の生成方法には光電荷分離や化学ドーブを用い、これとマイクロ波分光を組み合わせることで、「あらゆる材料」の評価を行えるよう装置開発を進めています。更に、マイクロ波により測定される物質本来の電気伝導度と、電子物性や化学構造及び集合構造との相関を解析しています。

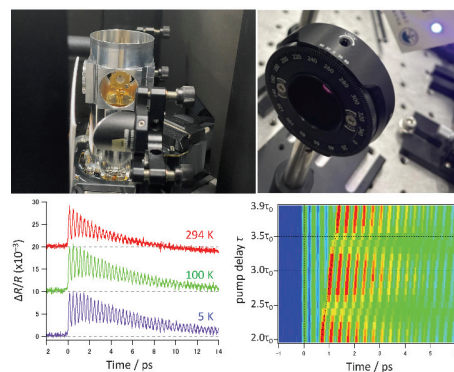
## ② 対称性の破れに基づく分子スピントロニクス材料の開発

分子構造の対称性の破れ（キラリティ）を利用したスピントロニクス材料・デバイスの開発を行っています。近年、キラル分子を通過した電子におけるスピン選択性（CISS 効果）が発見されました。従来のスピントロニクスには無機材料からなる強磁性体や強力な外部磁場が必須でしたが、この手法により有機分子のみでスピン流を生成・制御することが可能になります。また、スピン流を用いた新たな電気化学反応の創出にも取り組んでいます。



### ③ 光学技術を駆使した材料の励起状態ダイナミクスの評価

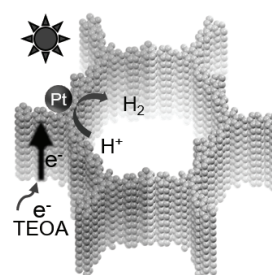
光励起後のダイナミクスをミクロな観点から考えることは、物質の個性や、光と物質の相互作用を包括的に理解する上で大切です。例えば、統計力学で学んだとおり、温度はさまざまな内部自由度に分配され系中に常に存在しています。その一つが振動モードであり、電子系をはじめとする他の系との結合を通して多くの物理量に影響を与えます。「結果だけではなく、その過程・本質はなにか」を理解するため、光学・レーザー技術を駆使して、さまざまな光物理現象の計測・メカニズムの解釈に挑戦しています。



### ④ 新しい光・電子機能を持つ共有結合性有機構造体の設計と合成

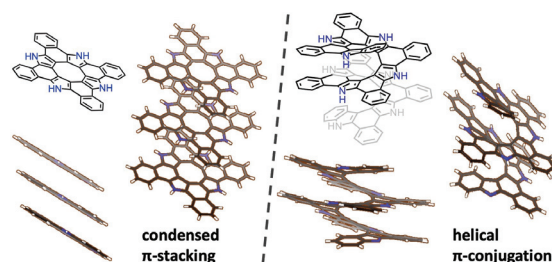
有機分子の分子構造の多様性は無限であり、有機合成化学的な手法によって望みの官能基を導入していくことで、様々な新しい分子を設計通りに合成していくことができます。この有機合成手法を駆使して、共有結合性有機構造体 (COF) を合成し、その細孔構造の評価に加え、キャリア移動度やプロトン伝導度、光触媒活性などを調べています。分子の設計から合成、機能評価までを全て自分たちで行う方針であることは、当研究室の大きな特徴です。

### 多孔材料の電荷輸送特性評価



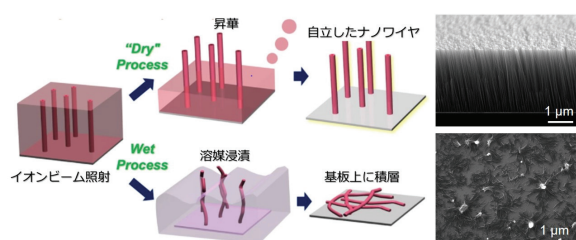
### ⑤ ナノグラフェン分子の高密度集積と機能化

グラフェンの部分骨格を切り取った分子は、平面性が高く容易に凝集するため有機溶媒に溶けなくなってしまいます。最近開発した外周部に窒素原子を有するナノグラフェン分子は、溶媒分子との水素結合を利用して溶解する、いわば「溶けるナノグラフェン」です。これを利用して、高密度に集積した有機構造体の設計とその機能開拓を行なっています。また、本分子設計を利用して世界一長いヘリセン分子といった魅力的な構造の実現にも挑戦しています。



### ⑥ 単一粒子ナノ加工法を用いた機能性ナノワイヤの創成

サイクロトロンなどで加速されたイオンがナノメートル領域の超微細空間内で引き起こす化学反応を利用して、有機材料のナノ構造を一つ一つ形成しています。得られたナノワイヤの太さは髪の毛の太さの約1万分の1にもなります。素材となる有機材料は伝導性高分子から生体高分子、低分子までさまざまです。私たちは、このナノワイヤの一本一本やそれらが作る集積構造の観察を行っています。さらに、電気を流す、温度や光に応答する、酵素で分解する、などの機能を持つ新しいナノ材料を作っています。また、クラスタイオンや陽電子を用いた物質との相互作用の解明、ナノ構造の解析、新たな材料の創出にも挑戦しています。



# 無機フォトンクス材料研究室

研究内容：物質科学, ダイヤモンド, スピントロニクス, フォトンクス

所在地：京都府宇治市五ヶ庄 化学研究所

電話

e-mail:

スタッフ：教授 水落 憲和 化研 W313C 0774-38-3130 mizuochi@scl.kyoto-u.ac.jp

准教授 森岡 直也 化研 W315C 0774-38-3132 morioka@dia.kuicr.kyoto-u.ac.jp

特定准教授 大木 出 化研 W315C 0774-38-3132 ohki.izuru.4a@kyoto-u.ac.jp

特定准教授 重松 英 化研 W315C 0774-38-3132 shigematsu.ei.2r@kyoto-u.ac.jp

助教 西川 哲理 化研 W315C 0774-38-3132 nishikawa@dia.kuicr.kyoto-u.ac.jp

特定助教 Ernst D. Herbschleb 同上 同上 herbschleb@dia.kuicr.kyoto-u.ac.jp

特定研究員 藤原 正規 同上 同上 masafuji@scl.kyoto-u.ac.jp

他に研究員、教務補佐員、支援職員、大学院学生、学部四回生で構成されています。

研究室 HP：<http://mizuochilab.kuicr.kyoto-u.ac.jp/>



研究概要：

我々は宝石の王様として知られるダイヤモンドを用いた研究を行っています(図1)。近年では、不純物や欠陥の極めて少ない無色透明で高品質なダイヤモンドの合成がなされるようになり、市販されるまでになってきました。更に、ダイヤモンドにおいては、不純物をドープすることにより、優れた物性を引き出すことができます。

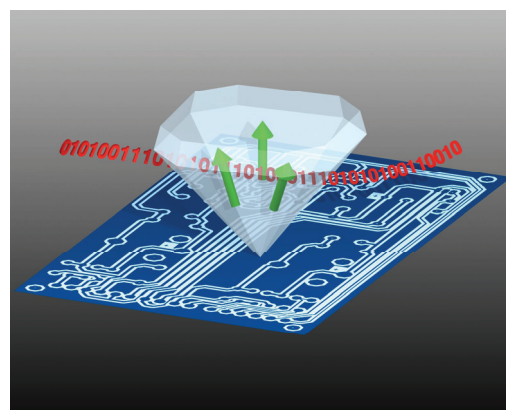


図1 ダイヤモンド素子のイメージ図

不純物の中には図2(a)に示したような炭素が抜けてできた空孔(V)と窒素(N)の対からなるNV中心(窒素-空孔複合欠陥)と呼ばれるものがあり、我々はこれに注目して研究を行っています。注目する理由としては、図2(b)に示したように一つ一つのNV中心を光学的に室温で観測でき、且つNV中心が持つ一つ一つのスピンを室温で操作及び光学検出できることが挙げられます。

優れた特性を生かし、NV中心はセンサ(磁場、電場、温度)、バイオマーカー、量子情報等の幅広い分野において学術および応用の両面から注目されています。センサー(磁場、電場、温度)では、これまでにない超高感度で、ナノレベルの超高空間分解能で室温において動作するセンサとしての応用が期待されています。量子情報分野では、盗聴者がいると必ず分かる絶対に安全な通信や、ある種の計算においてスーパーコンピュータを遥かに凌ぐ、量子コンピュータ・量子シミュレータ



への将来の応用が期待されています。

最近、我々は人工的に合成したリンドープ n 型ダイヤモンドを用い、NV 中心の室温での世界最長電子スピンコヒーレンス時間と、単一 NV 中心を用いた量子センサでの世界最高磁場感度実現に成功しました。このコヒーレンス時間は、他の固体系電子スピンの中でも室温では一番長いものです[1]。

また、これまでの我々の研究成果としては、その優れた特性を活かし、単一スピン、単一光子、単一電荷の間の量子インターフェースとしての役割を NV 中心が担えるのではないかとという観点から、スピン、単一光子発生、電荷状態の電氣的制御にも注目して研究を行っていました。これまで我々は単一光子を電氣的に発生させることに世界で初めて室温で成功し[2]、更に単一 NV 中心の負電荷状態を電氣的に中性状態に操作することに世界で初めて成功していました[3]。

更に、我々は NV 中心の N-V 軸方向の制御にも成功しました[4]。NV 中心はダイヤモンド中において 4 方向に対しランダムに配向されています。(111)面に気相体積堆積合成させたダイヤモンド中の NV 中心の光検出磁気共鳴スペクトルの観測と解析を行った結果、N-V 軸方向が[111]軸方向に~99%という高い割合で制御されている事を見出し、実証しました。これにより、アンサンブル NV 中心を用いた磁気センサーの感度がランダム配向のものに比べ 4 倍に向上される事が期待されます。またアンサンブル NV 中心のスピンと超伝導量子ビットとの量子ハイブリッド系への応用[5]など、量子情報分野においても基盤技術として非常に重要な成果です。

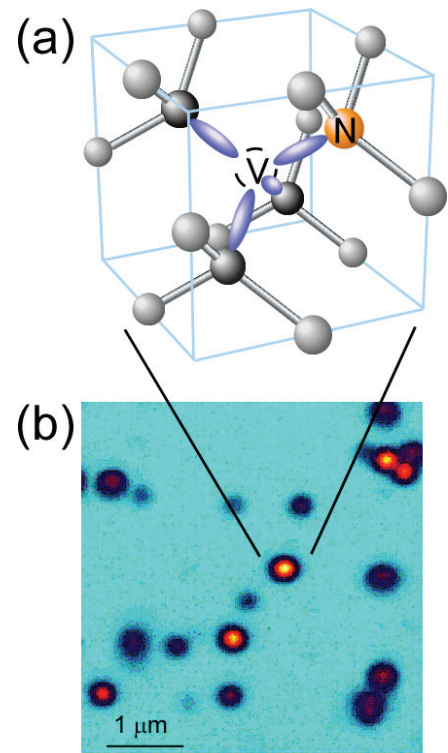


図2 (a) ダイヤモンド中の NV 中心. (b) 単一 NV 中心の共焦点レーザー顕微鏡像

[1] E. D. Herbschleb, H. Kato, Y. Maruyama, T. Danjo, T. Makino, S. Yamasaki, I. Ohki, K. Hayashi, H. Morishita, M. Fujiwara, N. Mizuochi, *Nature Communications*, 10, 3766 (2019)

[2] N. Mizuochi, T. Makino, H. Kato, D. Takeuchi, M. Ogura, H. Okushi, M. Nothaft, P. Neumann, A. Gali, F. Jelezko, J. Wrachtrup, S. Yamasaki, *Nature Photonics*, 6, 299-303 (2012).

[3] Y. Doi, T. Makino, H. Kato, D. Takeuchi, M. Ogura, H. Okushi, H. Morishita, T. Tashima, S. Miwa, S. Yamasaki, J. Wrachtrup, Y. Suzuki, N. Mizuochi, *Physical Review X*, 4, 01107 (2014).

[4] T. Fukui, Y. Doi, T. Miyazaki, R. Miyamoto, H. Kato, T. Matsumoto, T. Makino, S. Yamasaki, R. Morimoto, N. Tokuda, M. Hatano, Y. Sakagawa, H. Morishita, T. Tashima, S. Miwa, Y. Suzuki, N. Mizuochi, *Applied Physics Express*, 7, 055201 (2014).

[5] X. Zhu, S. Saito, A. Kemp, K. Kakuyanagi, S. Karimoto, H. Nakano, W. J. Munro, Y. Tokura, M. S. Everitt, K. Nemoto, M. Kasu, N. Mizuochi, K. Semba, *Nature*, 478, 221-224 (2011).



# 有機分子材料研究室

研究内容：材料化学・デバイス物理・非晶質科学・有機EL・量子化学・インフォマテクス  
所在地：宇治市五ヶ庄 化学研究所（共同研究棟）

			電話	e-mail	
スタッフ：教授	梶 弘典	CL-307	0774(38)3149	kaji@scl.kyoto-u.ac.jp	
	助教	志津 功將	CL-309	0774(38)3152	shizu@scl.kyoto-u.ac.jp
	助教	鈴木 克明	CL-309	0774(38)3152	suzuki.katsuaki@moma. kuicr.kyoto-u.ac.jp
	特定 准教授	田中 啓之	CL-309	0774(38)3152	tanaka.hiroyuki@moma. kuicr.kyoto-u.ac.jp

HP：<https://www.scl.kyoto-u.ac.jp/~moma/>

## 研究概要：

近未来において、有機デバイスは我々の生活を豊かにしてくれる可能性を大いに秘めています。我々の研究室では、「量子化学計算」、「有機合成」、「デバイス創製」、「固体 NMR を中心とした解析」の 4 つを基軸とし、その性能向上に関する基礎科学の構築を進めています(図 1)。具体的には、量子化学計算により得た設計指針に基づき、目的の有機材料を合成、デバイス化し、優れた光・電子特性を発現させること、および、そのような高性能・高機能材料開発の基盤として、固体 NMR、動的核偏極 (DNP-) NMR、量子化学計算により、デバイス内で起こっている現象を分子・電子のレベルから本質的に理解することを目指しています。以下に、最近の研究例を示します。



図1

## 高効率有機EL発光材料の開発

我々は日々の生活において、視覚、聴覚、触覚、味覚、嗅覚といった、いわゆる五感を通して外界の様々な情報を得ています。その中で、最も多くの情報を、視覚、すなわち、ものを見ることによって得ていると言われており、その意味で、コンピュータやモバイル端末のディスプレイ、白色照明などは、我々の日々の生活になくてはならないものといえます。さらに言えば、極めて薄く、折り曲げ可能な動画表示素子(デバイス)ができれば、例えば、新聞を(動画を含めて)いつでもどこでも、過去のものも含めて見る事が可能となります。電気(電子と正孔)を流すことにより様々な色の光を得ることができる有機エレクトロルミネッセンス(有機EL)デバイスは、非常に薄く、柔軟性があり、場合によっては折り曲げることも、透明にすることもできるという特長を有しており、今述べたことを具現化するためにうってつけと言えます。

最近の研究例としては、高効率発光材料の開発があります。従来、高効率発光材料では、ほぼ起こり得なかった、三重項励起子から一重項励起子への変換(逆項間交差と呼ばれます)を理論化学計算に基づいた有機分子の精密設計により可能とし、電子と正孔の再結合により生じた励起子を100%の効率で光に変換すること、また、その高性能化を実現しました(*Nat. Commun.* **2015**, *6*, 8476)。新たに開発した発光材料DACT-IIIは水素・炭素・窒素のみからなる材料で、高価な元素を用いず、元素戦略の観点からも重要と考えています。

さらに、コスト削減可能な塗布系材料の開発 (*Appl. Phys. Lett.* **2015**, 107, 183303)、ホストを必要としない発光材料の開発 (*Appl. Phys. Express*, **2016**, 9, 032102)に加え、蒸着用新規青色発光材料 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 15231; *Sci. Rep.*, **2017**, 7, 284; *Nat. Photon.*, **2020**, 14, 643 (図2); *Appl. Phys. Express*, **2021**, 14, 071003) や塗布用青色材料 (*Adv. Mater.* **2018**, 30, 1705406; *ACS Omega*, **2022**, 7, 16740) の開発についても面白い結果が得られています。また最近では、一重項-三重項間のエネルギーギャップが逆転した材料の開発にも成功しています (*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, 63, e202409670; *Appl. Phys. Express*, **2024**, 17, 061001)。理論面に関しては有機材料における励起子の変換・失活過程についての速度定数を、高精度に予測できる理論手法の構築にも成功しつつあります (*J. Phys. Chem. A* **2020**, 124, 3641; *Commun. Chem.*, **2022**, 5, 53; *J. Phys. Chem. A*, **2023**, 127, 439; *Nat. Commun.*, **2024**, 15, 4723)。励起子の挙動を解明・制御することにより、新たな材料設計への展開を目指しています。

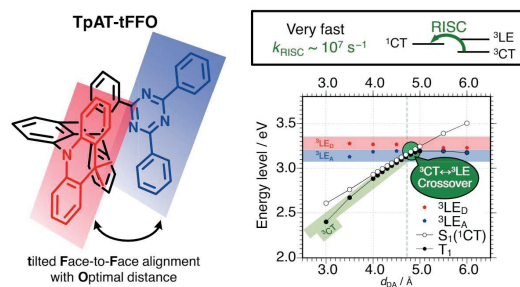


図2

### 有機デバイス内の電荷輸送シミュレーション

発光のみならず、ほぼすべての有機デバイスにとって重要な因子である電荷輸送に関して、計算による取り組みをはじめています。上記の発光材料に関する計算は1分子に対するものでしたが、実際のデバイスは、分子が凝集した薄膜が多層化したものです。単層膜に対する計算手法の構築はほぼ完了し (図3, *Sci. Rep.* **2018**, 8, 5203, 3, 5549; *Sci. Rep.* **2018**, 8, 13462)、現在、多層系の計算へと発展させつつあります。また、発光・吸収等の計算と電荷輸送計算を組み合わせることにより、電子・分子レベルからデバイスレベルに至るまで、その各階層構造内で起こっている現象 (有機ELにおいては、分子間ホッピングに基づく電荷輸送、電荷再結合、キャリアトラップ、ホストから発光性ゲストへの励起子エネルギー移動、励起子からの発光など) を包括的に理解すること、また、その基礎的理解に基づき、新たな材料設計、デバイス構造設計への展開を目指しています。

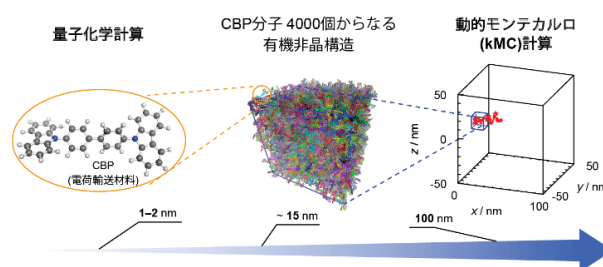


図3

### 固体NMR, DNP-NMR・量子化学計算による材料の精密解析：機能発現の要因解明

有機ELにおいて、非晶薄膜における分子構造・凝集構造の解明は素子特性の解明という面のみならず、非晶質材料の科学という基礎的な面においても極めて重要です。我々は固体NMR法による非晶構造の解明に取り組んでいます。最近では固体NMRの極端に低い測定感度を克服可能な、動的核偏極 (Dynamic Nuclear Polarization, DNP) 法を用い、非晶膜中における有機デバイス材料の配向分布 (図4, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017, 54, 15231) や分子のコンフォメーション (図4, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, 145, 16324)。このDNP-NMR装置は2017年、日本およびアジアで初めて化学研究所に導入されました。この導入を機に、今後、我々の研究所において、有機デバイス分野はもとより、幅広い分野において、これまで感度の問題で不可能であったNMR解析を可能とし、知の基盤強化に大きく貢献することが期待されます。

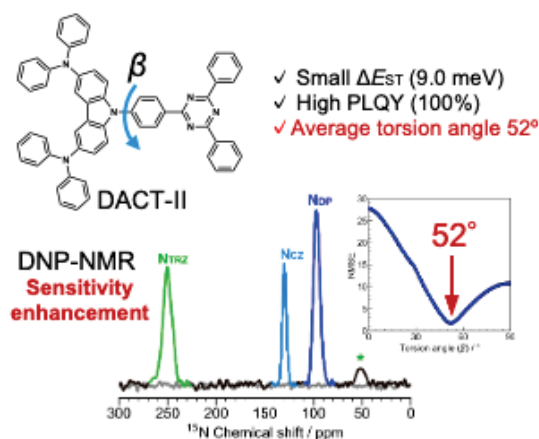


図4

以上の研究には、理論化学計算、有機合成、デバイス作製、解析の融合が必要です。一つの部屋で、これらの融合が可能な点が我々の研究室の利点であると考えており、そのさらなる発展を念頭に置きながら、より良い研究環境づくりを目指しています。

# 量子分子科学研究室

研究内容: 理論化学・振電相互作用・機能性分子の理論設計・化学反応の領域選択性

所在地: 京都市左京区高野西開町 34-4

スタッフ: 教授 佐藤 徹 福井センター 210 号室

E-mail: tsato@fukui.kyoto-u.ac.jp

特定准教授 春田 直毅 福井センター 202 号室

E-mail: haruta@fukui.kyoto-u.ac.jp

特定助教 大田 航 福井センター 205 号室

E-mail: ota.wataru@fukui.kyoto-u.ac.jp

Web: <https://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/satolab/>

## 研究概要:

物性化学における基礎的問題から応用研究まで、特に電子と分子振動の相互作用の関係する現象を中心に理論研究を行っている。

一般に、分子のシュレディンガー方程式を解く際、電子より重い原子核は電子の運動と比較して静止していると見做す断熱近似を用いる。しかし、断熱近似によって無視された分子振動と電子の運動との間の相互作用（振電相互作用, 電子-フォノン相互作用）は様々な現象の発現に関与する。例えば、無輻射遷移、ヤーン・テラー変形、超伝導が挙げられる。また、化学反応においても反応は電子の運動と振動などの分子骨格の運動とが相互作用しながら進行していく。このように振電相互作用は普遍的な相互作用である。

我々は振電相互作用を電子と振動の状態の関係から理解することを可能にする振電相互作用密度 (VCD) の概念を提案している。VCD を用いることで振電相互作用を制御した新規の発光性・キャリア輸送性材料等の設計ができる。例えば、図 1 の分子 1 は発光しないが、VCD 解析に基づいて分子 2 のように修飾することにより蛍光性となることが、共同研究により実験的に観測されている。このような合理的な分子設計ができる理論は、いまのところ VCD 理論だけである。

振電相互作用は基礎的な相互作用であるため、多くの問題に現れる。以下に最近の研究テーマを示す。

## (1) 光物理素過程の基礎研究と光機能性材料の理論設計

光吸収によって生じた励起状態は、輻射遷移 (蛍光, りん光) または無輻射遷移 (内部転換, 系間交差) により、基底状態へと失活する。分子の発光効率には輻射・無輻射遷移の競合で決まるため、遷移速度定数の定式化と第一原理計算は重要である。輻射・無輻射遷移の駆動力である電子-フォトン相互作用や振電相互作用のようなフェルミ粒子とボーズ粒子間の相互作用は場の量子論により定式化される。本研究室では、フェルミの黄金律に基づいて、分子の全振動モードを考慮した輻射・無輻射遷移速度定数を定式化した。さらに、遷移速度定数の定量的な計算に基づき、遷移における重要な振動モードの特定が可能になった。また、振電相互作用を VCD により可視化して制御することで、光機能性の向上を目指した分子設計を行っている。例えば、有機 EL 材料や有機薄膜太陽電池材料を対象としている。



## (2) 化学反応の領域選択性の指標

VCDは化学反応性の指標としても用いることができる。 $C_{60}$ はエチレンと同様の反応性を示すが、フロンティア軌道理論ではフロンティア軌道が著しく非局在化するため、領域選択性が説明できない。しかし、VCDによると説明することができる(図2)。VCDによる領域選択性の予測は分子だけでなく固体表面にも応用することができ、現在、 $CO_2$ の資源化を目指した不均一系触媒の設計についても取り組んでいる。

## (3) 振電相互作用と動的ヤーン・テラー効果に関する研究

縮退した電子状態と振動状態をもつ分子(ヤーン・テラー系)では、縮退振動に由来する振動角運動量による遠心力ポテンシャルが、幾何学的位相(Berry位相)のため基底状態ですら0ではなく、このような系でボルン・オッペンハイマー近似を採用すると核の運動エネルギーは無限大となってしまい近似は破綻する。動的ヤーン・テラー効果として知られるこの問題は、もっとも単純な $E \otimes e$ ヤーン・テラー系についても、電子状態と振動状態の結合を記述する方程式の解析解が得られていなかった。本研究室では、相互作用が強い極限における解析解を得ることに成功し、最近はその観測に向けた検討を行っている。

## (4) 金属クラスターの異常縮退とその応用に関する研究

最近我々は、数個から数十個の原子からなる金属クラスターにおいて、点群対称性からは説明できない異常な軌道縮退が現れることを見出し、その原因が動的対称性にあることを突き止めた。現在は、その動的対称性の起源の解明に取り組んでいる。

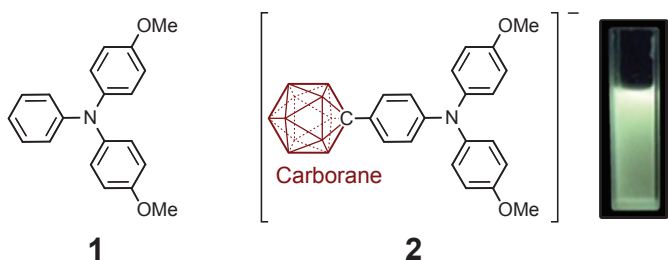


図1 発光分子の設計例: 1 非発光性, 2 発光性.

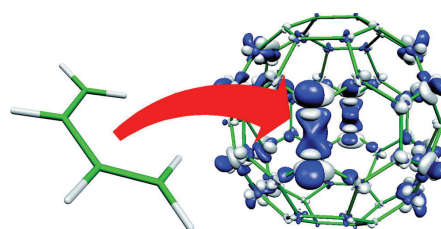


図2  $C_{60}$ の反応性.

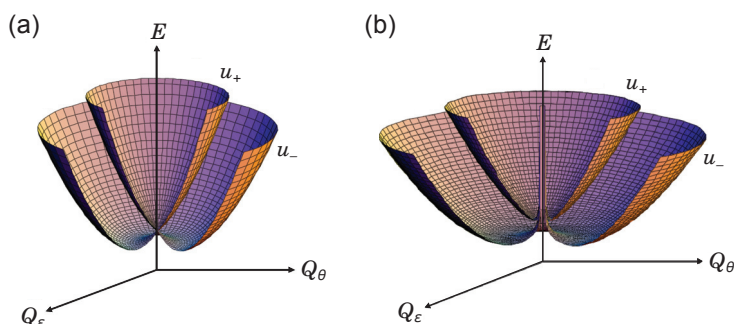


図3 (a)  $E \otimes e$ ヤーン・テラー系の静的ポテンシャル. (b)  $E \otimes e$ ヤーン・テラー系において原子核の運動エネルギーを一部考慮した場合のエネルギー曲面. 原点の縮退した構造ではエネルギーは無限大に発散する.



# 細孔物理化学研究室 (Porous Physical Chemistry Lab)

研究内容：高分子科学・バイオナノテクノロジー・材料科学

所在地：京都市左京区吉田本町 KUIAS/iCeMS 研究棟

	電話	e-mail
スタッフ：教授 イーサン・シバニア	(753)9744	esivaniah@icems.kyoto-u.ac.jp
講師 GP・ナマシヴァヤム	(753)9859	namasivayam.ganeshpandian.5z@kyoto-u.ac.jp
：講師 山口 大輔	(753)9865	dyamaguchi@icems.kyoto-u.ac.jp
：助教 伊藤 真陽	(753)9865	ito.masateru.x99@kyoto-u.jp
：助教 チン・デタオ	(753)9865	qin.detao.8a@kyoto-u.ac.jp

URL: <http://pureosity.org/>, <http://www.namasivayam.icems.kyoto-u.ac.jp/>

## 研究概要：



(1) 本研究室は京都大学高等研究院 物質-細胞統合システム拠点 (iCeMS=アイセムス, 吉田キャンパス) に所属しており、細胞生物学や化学、物理学の学際融合を進めることにより、様々な機能を持つ新規高分子材料を基盤とした基礎および応用研究に取り組んでいます。指導教員であるイーサン・シバニア教授(英国出身：ケンブリッジ大学高分子科学専攻卒)を中心に、外国人研究員(英国・インドネシア・中国など)が在籍しており、日常から英語と日本語の双方を用いて自発的に国際交流を行うことができます。また、研究室内の国際交流にとどまらず、国際学会等で海外を訪れ、自発的に研究発表やセミナーに参加することができます。これらの研究成果は一流国際科学誌である Nature 系雑誌に掲載できる可能性を有しています。

具体的な研究内容としては、細孔高分子を用いた分離工学に化学合成と物理学の両面から取り組んでおり、有機・無機・有機無機ハイブリッドからなるマクロ・メソ・マイクロ・ナノポーラス材料を用いて、タンパク質、有毒化学物質や塩、気候変動ガスや水素の分離に携わることができます。以下、本研究室の主な研究テーマである水の浄化(2)とガス分離(3)について説明します。



## (2) 多孔質物質の水の浄化への応用

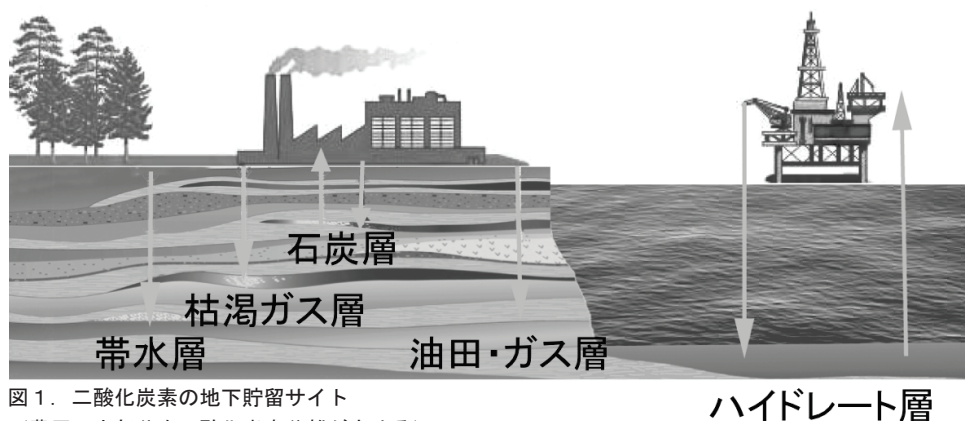
水不足とは、純粋に淡水が不足しているということだけでなく、飲むことができないほど水が汚れているという状況も指します。それぞれの国の経済力に関わらず、水不足は世界で最も深刻な問題となりつつあり、中東や中央アフリカと言った、赤道近くの地域に属する国では、エネルギーコストの大変高い方法で海水から飲料水を精製することを余儀なくされています。一方で、都市部から節度なく排出された有害物質によって地下水が汚染され、広きに渡って悪影響が及んでいるのです。

電力等のインフラが整っていない地域では、低エネルギーで、技術的に困難でない水の精製方法が要求され、経済的に豊かな国ではまた異なる解決策が求められています。そして核となる材料科学はこれらの様々な状況に対応しなければなりません。

本研究室の目的は、海水の淡水化や、ウイルスや有害物質を水から除去できるような材料の開発を通じて、上記のような水不足を解決する技術を開発することだけでなく、使用される環境や文化に敬意を払いつつ、順応できるような技術を産み出すことにあります。

## (3) 多孔質物質のガス分離への応用

多孔質物質の中のガスの挙動は液体とよく似ていますが、ガスと液体の密度差やガス分子と多孔質物質間の相互作用によって、ガス分離膜は液体の場合とは全く異なる材料特



要求されます。これらの技術は、工場や発電所の排気ガスの分離や二酸化炭素の地下貯留(図1)、大気からの酸素富化によるエンジンの燃費向上、太陽光によって水が分解され生じる酸素と水素の分離など、現在社会が抱える環境問題の解決や水素社会の実現に向けて非常に重要であると言えます。より将来的には、日本近海に眠る海底メタン水素層から採取された天然ガスを純化・精製する技術の開発にも着手していこうと考えています。

## (4) 共同研究を実施した企業と最近の卒業生の主な就職先例

住友化学、日産自動車、JX 日鉱日石エネルギー、AGC、大阪ガス、ゴールドマンサックス証券、片山化学工業研究所、中国浙江省能源集团有限公司、東京海上日動、マイクロンジャパン、エア・ウォーター、塩野義製薬

\*詳細については当研究室のウェブサイト、及びYouTubeの動画やFacebookをご確認ください。

# 有機設計学研究室

研究内容：不斉合成・キラル科学・触媒反応・らせん高分子・精密有機合成

所在地：京都市西京区京都大学桂

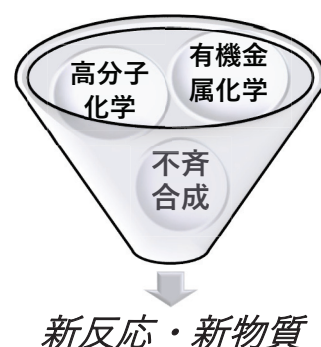
	居室	電話	e-mail
スタッフ：教授	杉野目 道紀 桂 A4-306	383-2723	suginome@
講師	山本 武司 桂 A4-302	383-2719	yamamoto@
助教	良永 裕佳子 桂 A4-301	383-2721	yoshinaga@

sbchem.kyoto-u.ac.jp を加えてください

研究室ホームページ：<https://suginome-lab.sbchem.kyoto-u.ac.jp/>

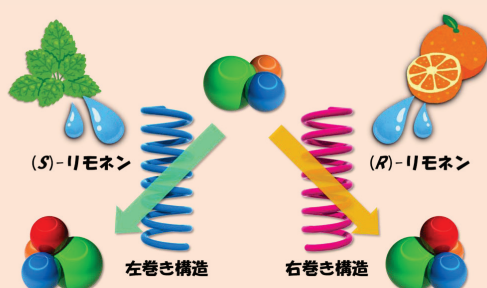
## ⑤研究概要：

君だけのオリジナルな分子や反応をデザイン・創製し、地球社会の持続的な発展に大きく貢献する学術や技術を作り上げてみませんか？私たちの研究室では、物質機能創造や新物質変換法の基本となり、指針となるような新反応・新物質を産み出すことを目指しています。有機金属化学、有機合成化学、触媒科学、不斉合成、高分子化学など多くの学術分野の最新の技術と知見を融合し、材料科学、創薬化学、プロセス工学、情報工学など多くの関連分野における、ブレークスルーとなる新発見を目指して研究を進めています。

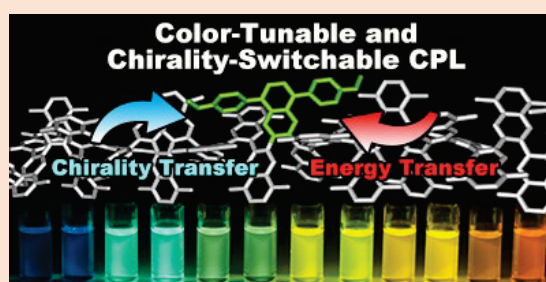


## 世界をリードする新しい反応・物質群のデザインと創出

### 新しい高分子の設計・合成・機能開発：キラルらせん高分子



天然キラル有機溶媒リモネンに溶かすだけで高選択的の不斉触媒反応を可能にするキラル高分子触媒



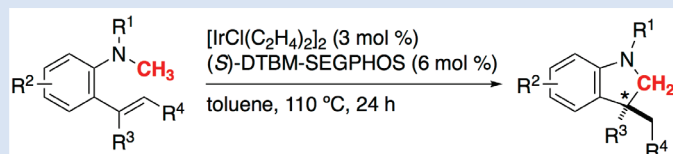
溶媒を変えることで色と円偏光キラリティの同時スイッチングが可能な高分子材料

精密に構造制御された巨大らせん分子の合成法開発と、そのらせんキラリティの外部刺激によるスイッチングについて研究を進めています。このらせんスイッチングを利用して、キラリティ可換キラル高分子触媒や、円偏光キラリティのスイッチングが可能な発光材料、多彩な構造色を示すポリマーフィルムの創製に成功しています。

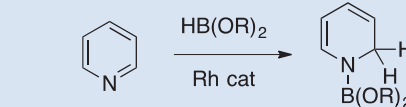
また、天然に豊富に存在するリモネンに溶かすだけでキラル構造が形成されるらせん高分子触媒を開発し、キラル溶媒を唯一の不斉源として用いる高選択的の不斉合成を世界で初めて実現しました。



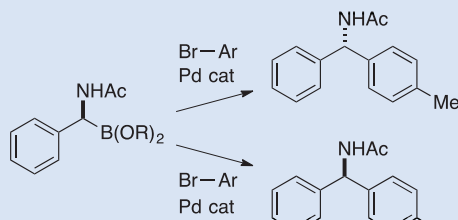
## 革新的新触媒反応開拓



N-メチル基の C-H 結合活性化によるインドリンの不斉合成



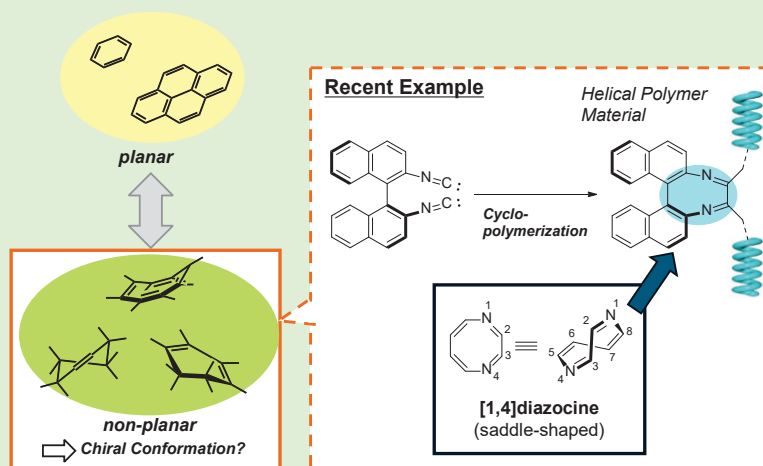
ピリジンの脱芳香化を伴う触媒的付加反応：  
芳香族安定化に打ち勝つ



不斉炭素中心の立体化学の自在制御：立体特異的クロスカップリング

遷移金属触媒を活用し、反応性の乏しい C-H 結合を効果的に活性化して行う効率的変換反応、水を溶媒として用いる低環境負荷反応、特定の官能基を見分けて位置および立体選択的に修飾・変換を行う反応、一方の光学異性体を高い選択性で得る不斉反応の開発を行っています。また、安定性と反応性を兼ね備えた有機ホウ素化合物および有機ケイ素化合物の特性に注目し、従来の方法では合成困難な化合物群の高効率合成を実現する、新しいホウ素、ケイ素反応剤のデザイン・創製に取り組んでいます。

## 静的/動的キラリティをもつ非平面環状分子の設計と新機能



キラルな分子の中には、熱や光、添加剤などの刺激を与えることで、逆の鏡像異性体に反転する「動的」な性質を持つものがあります。中でも分子配座によるキラリティではそういった性質が見られやすいことが知られています。私達は、非平面の中員環がもつキラルな配座の動的/静的性質に興味をもち、分子設計を通じて制御するとともに、新しい分子機能につなげるための方法論について研究しています。

より詳しい研究成果や発表論文、学生の表彰などについてはホームページで詳しく紹介しています。



# 機能化学研究室

研究内容：超分子化学・空間化学・機能性高分子材料化学

所在地：京都市西京区京都大学桂 A4 棟 3 階

ホームページ：<http://www.sbchem.kyoto-u.ac.jp/ogoshi-lab/>

スタッフ

電話

メール

教授 生越 友樹 (桂 A4-319) 075(383)2733 ogoshi.tomoki.3s@kyoto-u.ac.jp

助教 加藤 研一 (桂 A4-317) 075(383)2734 katok@sbchem.kyoto-u.ac.jp

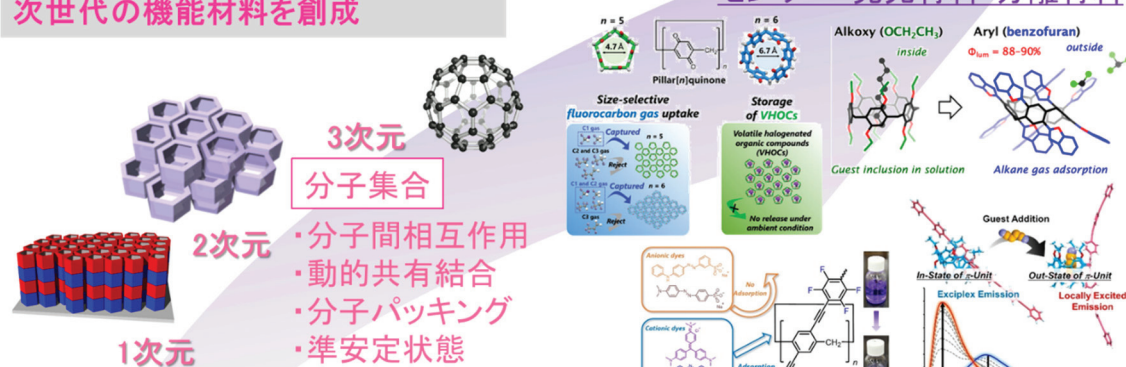
助教 大谷 俊介 (桂 A4-315) 075(383)2734 otani.shunsuke.6k@kyoto-u.ac.jp

## 分子を設計し自発的に集合させて次世代の機能超分子材料を開発

分子を設計し自発的に組み上げて  
次世代の機能材料を創成

機能材料創成

センサー・発光材料・分離材料



分子構造・空間を設計



環状分子・3次元分子・ヘテロ元素導入

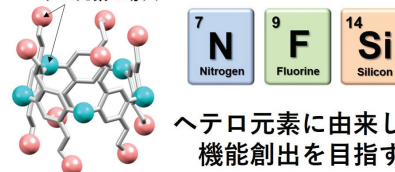
超分子とは、複数の分子が共有結合以外の分子間相互作用、すなわち水素結合などにより秩序だてて集合した分子のことを指します。本研究室では、シンプルで美しい構造をもつ機能分子をデザインし、自発的な集積化によって新機能を示す機能超分子材料を開発しています。真にオリジナル研究を目指して日々研究に取り組んでいます。

**正多角柱環状分子ピラー[n]アレーン** 正多角柱は高い対称性の美しい構造体です。我々は、正5、6角柱の新規環状分子[柱(ピラー)状構造であり芳香環(アレーン)からできているため、“ピラー[n]アレーン”と名付ける(nは繰り返し数)]を2008年に報告しました。世界中の化学者に利用され、発見から17年間でピラー[n]アレーンを用いた2000報を超える論文が報告されています。

**ヘテロ元素導入ピラー[n]アレーン**：我々はピラー[n]アレーンに更なる機能性の付与を目指して、ピラー[n]アレーン骨格中にヘテロ元素を導入した環状分子の創出を行っています。ヘテロ元素の導入によって、光学的な性質の変化や元素の性質に由来した分子認識能、分子集合体の構造制御など

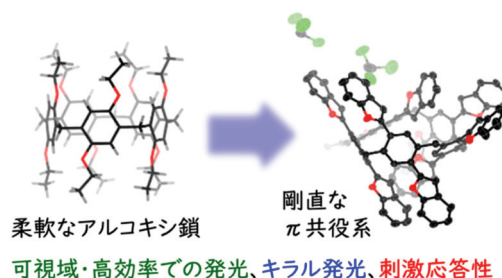
ヘテロ元素導入ピラー[n]アレーン

ヘテロ元素の導入

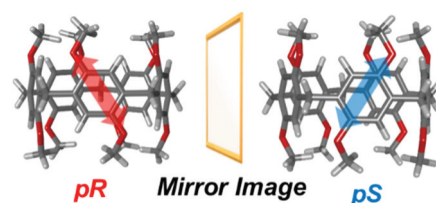


様々な物性・機能の発現が期待できます。これまでに窒素・ケイ素を導入したピラー[n]アレーンの合成に成功しており、その機能開拓に取り組んでいます。

**発光材料を目指したπ共役系の構築：**ピラー[n]アレーンの角柱構造の縁部分は従来、ほぼ全てがアルコキシ側鎖で修飾されてきました。これに対し我々は、π共役系置換基の高効率な導入の実現とそれを用いた機能発現に取り組んでいます。通常は発光性に乏しいピラー[n]アレーンに光学特性を改善できる剛直なπ共役系を組み合わせることで、ピラー[n]アレーン分子系の発光において不斉の偏りに関する最大値を更新する、分子取り込みに応答した発光特性を発現させるなど、ピラー[n]アレーンに基づく材料群の革新を図っています。

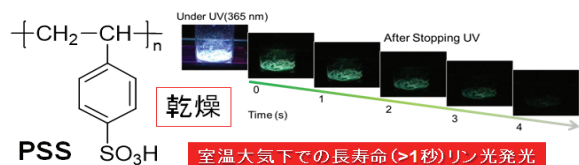


**キラルな分子空間・インターロック分子の合成：**ピラー[n]アレーンは、置換基の位置により鏡像関係 (*pR*体と*pS*体) となり、それらは重ね合わせることができないエナンチオマーです。このような構造に由来する不斉を面性不斉といいます。通常の点不斉は結合を切断しなければ、エナンチオマー間の交換は起こりません。一方向性不斉は、ベンゼンユニットの回転によりキラリティーの制御や反転が可能となります。我々は、回転の制御により、ピラー[n]アレーンの面性不斉が動的に反転するシステムの構築に成功しました。また空孔にゲストを取り込ませ、ゲストが抜けない(インターロック)ように設計し、片方に面性不斉を偏らせることに成功しました。



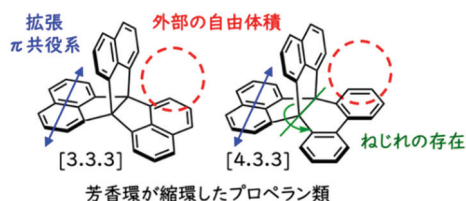
### 長寿命リン光発光高分子材料

リン光物質は暗闇でも長く光り続けることから、時計の文字盤など様々なものに利用されています。しかし、既存のリン光物質は、希少金属を含むため高価という問題があります。我々は、安価な市販高分子、ポリスチレンスルホン酸 (PSS) を乾燥すると、室温・大気下で1秒を超える長寿命リン光を示すことを偶然見出しました。高分子であることから、異種材料とのハイブリッド化やブロックポリマー化などの多様な設計が可能となり、リン光を示す全く新しい材料の創出が期待できます。



### プロペランを基にした空間空隙材料

有機分子は脂肪族の柔軟な立体分子と芳香族の剛直な平面分子がほとんどを占め、剛直ながら立体的な分子はかなり少数の立体骨格に依存している状況です。我々は、その中でも構成単位としての可能性が未開拓となっている芳香環縮環型のプロペラン類に着目し、新規分子修飾法の開発から機能材料に向けた研究を進めています。分子内部に空孔をもつピラー[n]アレーンとは逆に、分子外部に存在する自由体積に基づく多孔性や、ナフタレン/ビフェニル環に基づいた他の立体骨格にはない独自の長所を示す材料の創出を目指して研究を進めています。



## 研究室の方針

- ・学生とスタッフのみんなで研究・研究室生活を楽しむ
- ・同期・卒業生の輪を大切に 人をつなぎ、縦と横のつながりを生む研究室を作る
- ・集中して ON-OFF をつけたメリハリのある研究生活を送る
- ・世界で活躍できる研究者に ドクター学生は海外での研究留学・国際会議への参加を推奨する

熱意を持った学生諸君を大いに歓迎します！ぜひ研究室を見学してください。

# 物理有機化学研究室

研究分野 物理有機化学、有機機能材料化学、有機ナノテクノロジー

所在地 〒615-8510 京都市西京区京都大学桂 A4 棟 3F

スタッフ			電話	FAX
教授	松田 建児	桂 A4-321	(383) 2738 e-mail: kmatsuda@sbchem.kyoto-u.ac.jp	(383) 2739
講師	東口 顕士	桂 A4-324	(383) 2745 e-mail: higashi@sbchem.kyoto-u.ac.jp	(383) 2741
助教	清水 大貴	桂 A4-325	(383) 2746 e-mail: d.shimizu@sbchem.kyoto-u.ac.jp	(383) 2741

ホームページ <http://www.sbchem.kyoto-u.ac.jp/matsuda-lab/>

研究概要 私たちは、物理有機化学に基づいた動作原理を基礎にして、有機合成の手法を駆使して分子を合成し、新規な光・磁気・電気の複合機能を有する有機機能性材料を開発する研究を行っています。有機分子は、「分子設計」という手法でその機能を設計することが出来ます。様々な機能をもった分子は「分子エレクトロニクス」といわれる分野で活躍することが期待されています。研究室では設計から物性測定までをカバーする幅広い研究を行っています。

私たちの研究の魅力のひとつは、新しい有機化合物を自分で設計できて新物質を作り出すことができることです。論文で新化合物を発表すると、化合物を世に出すためのプロデューサーになったような気分になり、その化合物の注目のされ方が気になります。スーパーヒット作の新物質を創り出すことを目指して日夜研究する毎日を送っています。

松田研究室ではこのような分子開拓をともに行ってくれる若い力を募集中です。

キーワード 光応答性分子・超分子、高機能蛍光材料、金属微粒子、有機磁性・電導性

## 最近の主要論文

T. Aoki, H. Sotome, D. Shimizu, H. Miyasaka, K. Matsuda, "Propeller-Shaped Blatter-Based Triradicals: Distortion-Free Triangular Spin System and Spin-State-Dependent Photophysical Properties", *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, on the web.

T. Yamada, D. Shimizu, K. Matsuda, "Oxidation of Weakly Interacting Diradicals: An Approach for Strong and Tunable Near-Infrared-Absorbing Dyes Based on Small Chromophores", *J. Phys. Chem. Lett.* **2024**, *15*, 9175-9182.

H. Hamamoto, D. Shimizu, K. Matsuda, "peri-Benzo-Diindenotetraceny: Helically  $\pi$ -Extended Allyl Radical with Robust Stability", *Chem. Eur. J.* **2024**, *30*, e202401353.

D. Shimizu, H. Sotome, H. Miyasaka, K. Matsuda, "Optically Distinguishable Electronic Spin-isomers of a Stable Organic Diradical", *ACS Cent. Sci.* **2024**, *10*, 890-898.

Y. Hiroyasu, K. Higashiguchi, C. Shirakata, M. Sugimoto, K. Matsuda, "Kinetic Analysis of the Photochemical Paths in Asymmetric Diarylethene Dimer", *Chem. Eur. J.* **2023**, *29*, e202300126.

Y. Kotani, H. Yasuda, K. Higashiguchi, K. Matsuda, "Re-entrant Photoinduced Morphological Transformation and Temperature - Dependent Kinetic Products of a Rectangular - Shaped Amphiphilic Diarylethene Assembly" *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 11158-11166.



### 1. フォトクロミック超分子集合体を用いたユニークな光応答材料の開発

光により色を変化させる物質をフォトクロミック化合物と呼びます。フォトクロミック反応では、色だけでなく、分子の幾何構造、電子構造が変化します。当研究室では代表的なフォトクロミック分子であるジアリールエテンを中心に、光によって形態変化、物性変化を示す超分子集合体を分子設計・合成し、新たな機能を開拓する研究を進めています。図1には、光によって可逆的に形態変化するフォトクロミック超分子集合体の例を示しています。

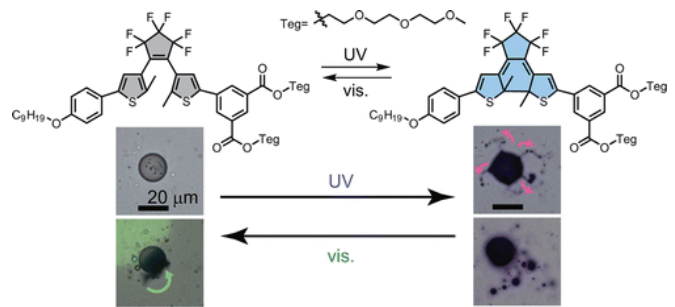


図1 光によって可逆に形態変化するフォトクロミック超分子集合体の例

### 2. STMを用いた超分子配列制御と単一分子物性

固液界面STMという手法を用いると個々の分子を識別できる分解能で配列を見ることができます。この手法を用いて、私たちが合成した機能性分子の物性を単一分子レベルで測定する研究を行っています。図2に STM 像の一例と単一分子コンダクタンス評価の模式図を示します。単一分子レベルで測定することにより物性値の統計処理が可能になり、分子のふるまいの本質に迫った解析ができるようになります。

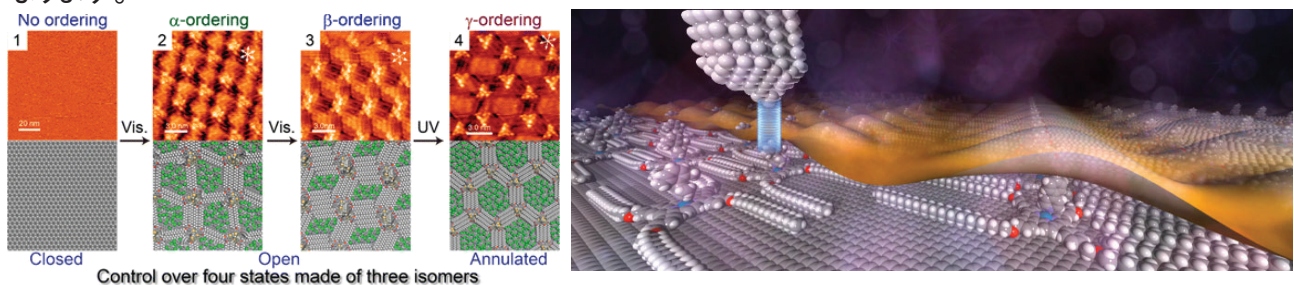


図2 STM像とSTMを用いた単一分子コンダクタンスの評価

### 3. 安定ラジカルを基盤とした新規機能性分子の開発

分子内に不対電子をもつラジカルは「Radical: 過激な」という言葉の示す通り、高活性で不安定・短寿命な反応中間体として知られています。普通はフラスコの中でわずかな時間だけしか存在しない化学種ですが、分子構造に様々な工夫を施すことによって機能性材料として扱うことができるほど安定なラジカルを設計・合成できるようになってきました。

そのような安定ラジカルは、普通の有機物には存在しない電子の「スピン」に由来して磁気・電気・光など様々な特性を示すことが明らかになってきています。私たちはオリジナルな発想でラジカル分子を設計・合成し、様々な分子の「構造」と「機能」の関係を解き明かしてきた構造有機化学の分野に「電子スピン」の自由度を加えた新しい領域を開拓しています。

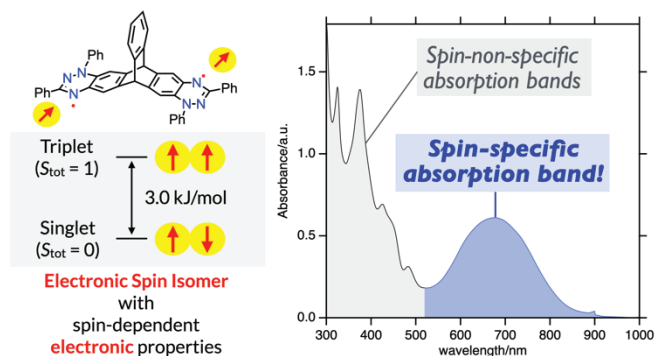


図3 ジラジカルに基づく「電子スピン異性体」の概念実証



# 有機金属化学研究室

研究内容：有機合成化学・有機金属化学・有機光反応

所在地：京都市西京区京都大学桂

スタッフ：教授 石田 直樹 桂A4-326号室 TEL: 075-383-2752

E-mail: ishida.naoki.5m@kyoto-u.ac.jp

助教 奥村 慎太郎 桂A4-327号室 TEL: 075-383-2753

E-mail: okumura.shintaro.6e@kyoto-u.ac.jp

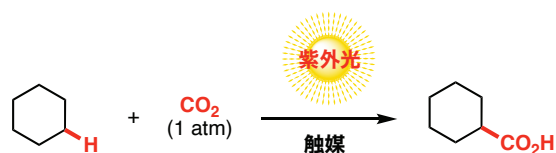
ウェブサイト：<https://sites.google.com/kyoto-u.ac.jp/sbchem-organometallic-lab>

**研究概要：**優れた化学反応の登場は新しい科学技術の創出の起点になってきました。例えば不斉水素化反応はさまざまな医薬品や香料の開発に繋がりました。クロスカップリング反応は多様な医薬品・発光材料の発見や開発に貢献しました。さらには、化学反応によって二酸化炭素を資源化したり、プラスチックを分解して再利用・アップサイクルしたりできるようになることも期待されています。有機金属化学研究室は「革新的な化学反応の開発を通じて、①科学の創造性や可能性を飛躍的に高めること、②持続可能な発展に寄与すること」をミッションに定め、以下の研究に取り組んでいます。

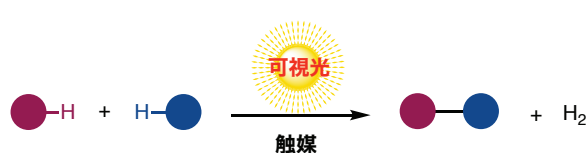
## 1. 吸エルゴン反応の開発とそれらを組み込んだ合成手法の探究

化学反応は自由エネルギー変化の観点から発エルゴンと吸エルゴンの二種類に分類できます。この発エルゴン・吸エルゴンという概念は基礎的かつ普遍的なものであり、例えば生化学の分野では代謝や光合成の説明において頻繁に用いられます。一方で、有機合成化学の分野ではほぼ意識されていませんでした。旧来の有機合成化学は発エルゴン反応ばかりであったためです。私たちは、この偏った状況を打破すべく、吸エルゴン反応を設計し、開発する研究を行っています。この研究の過程で、これまでにアルカンへのCO<sub>2</sub>取り込み反応や脱水素カップリング反応などの、当時未達成であった革新的な化学反応が進行することを見出しています。

### ○アルカンへのCO<sub>2</sub>取り込み反応



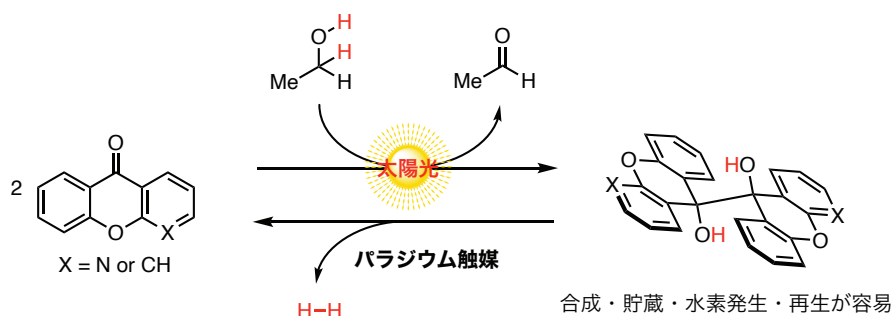
### ○脱水素カップリング反応



## 2. 高エネルギー反応剤の合成と機能

吸エルゴン反応では原料よりもエネルギーに富む生成物を合成できます。このエネルギーに富む生成物は優れた反応性を持つことが期待されます。しかし、その反応に関する研究は必ずしも注目されておらず、未開拓のまま置き去りにされていることが少なくありません。また、前述した吸エルゴン反応の開発研究によって新しく合成可能になった新規な高エネルギー化合物も数多く存在します。そこで私たちは吸エルゴン反応で得られた高エネルギー化合物の反応性を明らかにする研究に取り組んでいます。これまでに、芳香族ケトンとアルコールの吸エルゴンの光反応によって合成される1,2-ジオールが優れた水素発生剤となることを見出しました。また、太陽光を利用して水素発生剤を再生でき、再生可能な水素キャリアとして機能することも明らかにしています。

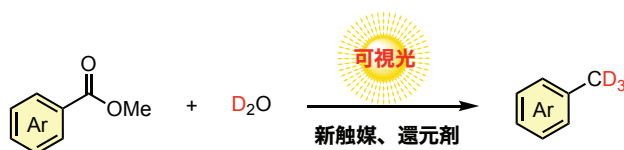
### ○太陽光とバイオマスエタノールで再生可能な高エネルギー水素キャリア



## 3. ユニークな構造を持った光触媒の設計と開発

光を吸収して化学反応を促進する触媒は吸エルゴン反応を開発するための鍵を握ります。これまでに、一電子移動や水素原子移動、エネルギー移動を促進する触媒などが開発され、反応開発研究に利用されてきました。これらの素過程の選択性はそれぞれ、酸化還元電位、結合解離エンタルピー、励起状態のエネルギーに支配されます。これらの支配原理を逸脱できれば、吸エルゴン反応の設計における新しい方向性を切り開くことになるでしょう。私たちは既存の支配原理を逸脱した化学反応に出会うために、ユニークな構造を持った触媒を設計・合成して、性質を明らかにする研究に取り組んでいます。さらに、発見した特異な性質をもとに新反応を設計・開発することを試みており、この研究の過程でエステルを6電子還元する反応に成功しています。

### ○新触媒を用いたエステルの還元反応



# 生物有機化学研究室

研究内容：細胞内有機化学、蛋白質工学、神経化学、バイオ機能材料、超分子化学

所在地：京都市西京区京都大学桂 A4 棟 331

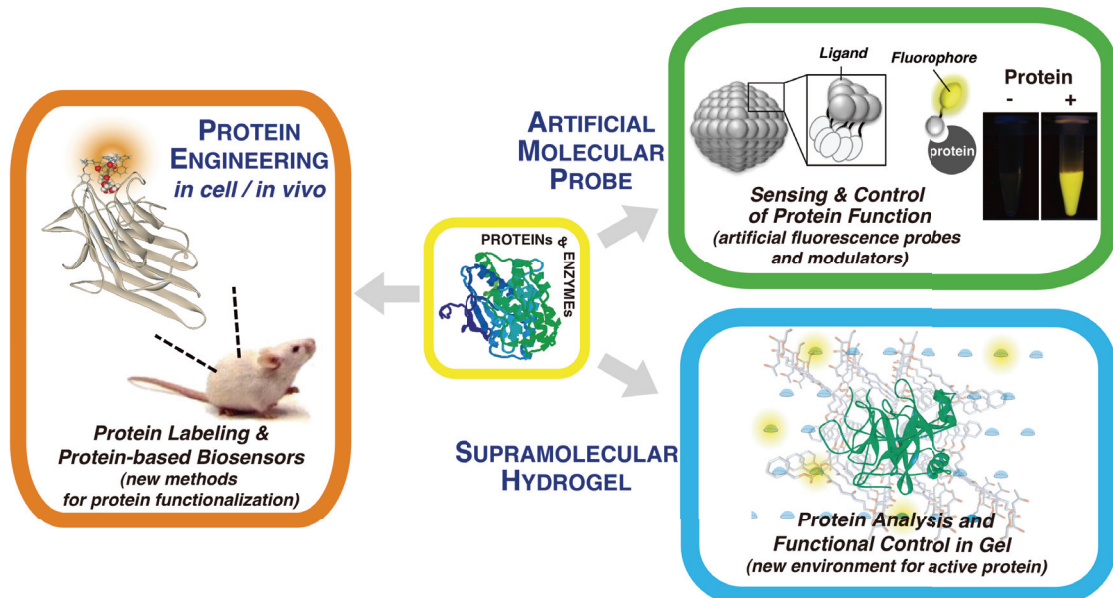
スタッフ		電話	e-mail
教授	浜地 格	(383)2754	ihamachi@sbchem.kyoto-u.ac.jp
特定准教授	中村 秀樹	(383)2164	nakamura@sbchem.kyoto-u.ac.jp
講師	田村 朋則	(383)2756	tamura@sbchem.kyoto-u.ac.jp
講師	窪田 亮	(383)2757	rkubota@sbchem.kyoto-u.ac.jp

ホームページ：<http://www.sbchem.kyoto-u.ac.jp/hamachi-lab>

## 研究内容

1. 細胞内有機化学の創造
2. タンパク質機能を探る人工プローブ分子の創製
3. タンパク質・細胞のための機能性バイオマテリアルの創製

タンパク質は多彩な機能を持つ最も重要な生体分子の一つです。私たちは「細胞内有機化学の創造」を目指して、有機化学、超分子化学をはじめとする「ケミストリー」を武器にタンパク質の工学的研究を展開しています。例えば、タンパク質の可視化解析に有用な新しい化学修飾手法の開発や、タンパク質の機能を解析するためのプローブ分子開発などに挑戦し、タンパク質を中心としたケミカルバイオロジー研究を展開しています。また、タンパク質・細胞の機能解析や再生医療に有用な新しいナノバイオマテリアルの創製についても研究を行っています。私たちが開発した超分子ハイドロゲルは、生体環境に近いセミウェット状態を提供する”自己組織化”材料として注目を集めています。

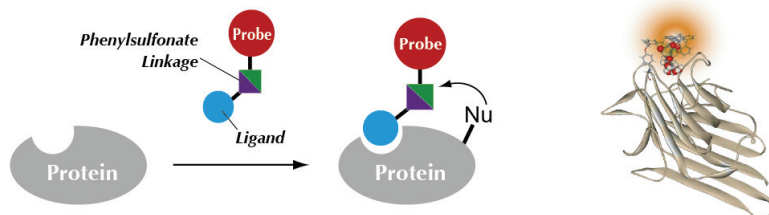


 新しい生命化学の創造を目指して 



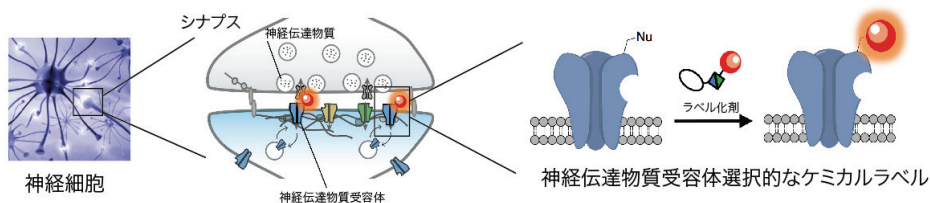
## タンパク質ラベルを基盤とした 細胞有機化学

タンパク質の持つさまざまな機能を応用して、これまでにない新しい機能を発揮する人工タンパク質の創製を行っています。私たちは有機化学の手法を用いてタンパク質に直接化学修飾をほどこしてバイオセンサーへと機能化するオリジナルの手法(LDT法、LDAI法、AGD法)を開発しています。また、タンパク質を部位特異的に標識するための新しい有機化学反応の開発にも取り組んでいます。これらの手法により得られる機能化タンパク質は、バイオイメージングなどの様々な生体機能解析やタンパク質機能を阻害する薬剤分子の探索に有用です。「タンパク質のまま有機化学」が生み出す新しい機能のシンセシス(合成)がここに実現されています。



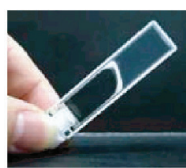
## 神経活動を制御する受容体 および神経伝達の可視化

脳を中心とした中枢神経は、記憶や思考を制御している生体組織です。ここ20~30年間の分子生物学の発展により、記憶や思考に関わるタンパク質はかなり明らかにされてきました。しかし、その詳細な分子メカニズムはまだ未解明な状況です。そのため、中枢神経の機能を可視化し、その機能を制御できる方法論は、神経機能解明のツールとして、また疾患に関する診断法や治療薬に繋がると期待されます。ニューロケミカルバイオロジーグループでは、分子レベルで厳密に制御可能な化学的方法論により、神経機能を明らかにして行くことを目指しています。具体的には、1) 神経伝達を司る神経伝達物質を認識する受容体を可視化する方法論の開発、2) 遺伝子工学と化学的なアプローチを融合させることで、狙ったタンパク質を選択的に活性化する方法論の開発を進めています。

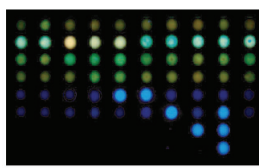


## タンパク質・細胞のための 機能性バイオマテリアルの創製

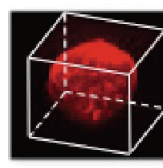
タンパク質が機能する場所は通常は水中ですが、水性ゲル中では一歩進んだタンパク質のための機能環境場です。私たちは水性ゲルがタンパク質の機能解析を行う新しい場として有効であることを見出しました。水性ゲル中でタンパク質は機能を保ったまま生き生きとした状態で保存することが可能です。また水のみでは作り出せない水性ゲルの疎水性環境や光、pH変化刺激に連動したゾルゲル転移変化を利用して、これまでにないタンパク質の活性評価や機能制御が可能となります。さらに、水性ゲルを利用したプロテインチップやナノ~ピコリッターサイズの微小液滴(ドロップレット)の作成も可能です。最近では、細胞を生きたまま閉じ込めることができるようになってきました。今、自己組織化を利用して合成される水性ゲルは新しい機能性ナノバイオマテリアルとして注目を集めています。



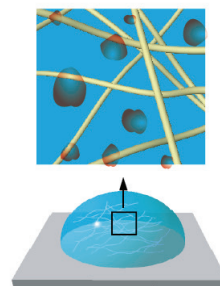
Hydrogel



protein chip



nL ~ pL size droplet



(最近の研究業績)

(1) *Nat. Chem. Biol.*, 21, 109, 2025, (2) *J. Am. Chem. Soc.*, 146, 7515, 2024, (3) *J. Am. Chem. Soc.*, 146, 5799, 2024, (4) *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 121, 2313887121, 2024, (5) *J. Am. Chem. Soc.*, 145, 26202, 2023, (6) *Nat. Commun.*, 14, 1696, 2023 (7) *Cell Metabolism*, 35, 1072, 2023, (8) *Nat. Commun.*, 12, 831, 2021, (9) *Nat. Chem. Biol.*, 12, 1361, 2020, (10) *Nat. Nanotech.*, 13, 165, 2018, (11) *Nat. Methods*, 13, 931-937, 2016, (12) *Nat. Chem.*, 8, 958-967, 2016, (13) *Nat. Chem. Biol.*, 12, 822-830, 2016 など

(卒業生の進路)

大学教員：北海道大学、東北大学、東京大学、名古屋大学、京都大学、九州大学、名古屋工業大学、徳島大学、奈良女子大学、岐阜大学、北陸先端大学、富山大学など。企業：中外製薬、シオノギ製薬、小野薬品、大塚製薬、JT(創薬研)、武田薬品、協和発酵キリン、東レ、旭化成、帝人、京セラ、クラレ、東洋紡、富士フィルム、三井化学、花王、味の素、テルモ、JSR、キャノン、カネカ、グンゼ、サンスター、ダイキンなど。

# 分子生物化学研究室

研究内容：分子生物学・がん生物学・医化学・進化生物学

所在地：京都市西京区京都大学桂

電話

e-mail

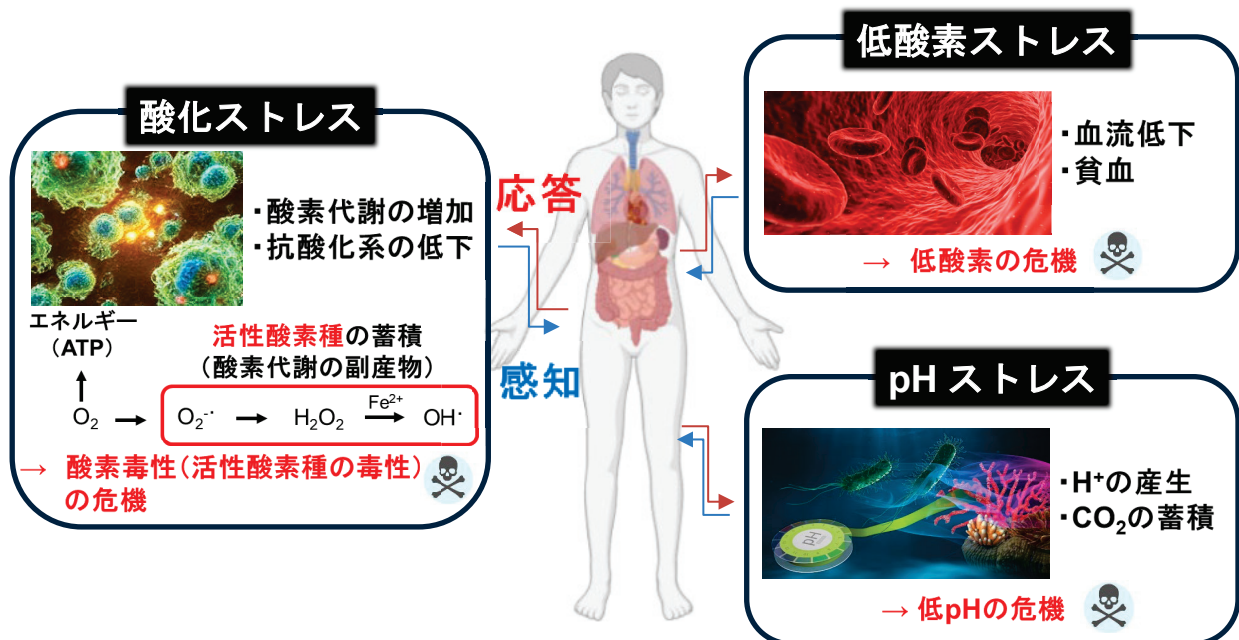
スタッフ：准教授 高橋 重成 桂A4-219 (383)2763 takahashi@sbchem.kyoto-u.ac.jp

HP: <http://www.sbchem.kyoto-u.ac.jp/mori-lab/>

## 研究概要

生命は、様々な化学的脅威(生体ストレス)と常に隣り合わせで生存しています。そのため、ストレスを「感知」し、適切に「応答」することは、生命を形作る根源的かつ極めて重要な現象です。

一方で、生体ストレスはゲノムにコードされない情報であるため、現代の生命科学研究の主流である網羅的シーケンス解析ではその全容を解明することが難しく、多くのブレイクスルーの可能性が残されています。次世代の研究分野として、さらなる挑戦が期待される領域です。



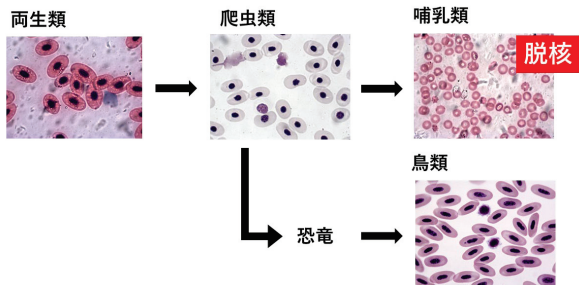
## 生体が有するストレス「感知」・「応答」機構を解明する

生体ストレスの本質は、タンパク質、核酸、脂質といった生体分子がストレス因子と化学反応を引き起こす点にあることが明らかになっています。私たちは、化学的アプローチを組み合わせた生命科学研究を基盤に、ケミカルプローブの作製から進化や病態解明に至るまで、自由な発想でストレス感知・応答機構の本質的解明に取り組んでいます。最終的には、現代の学術体系に変革をもたらすような、**歴史に残る大きな成果**を目指しています。



## 研究テーマ例

### 1. 哺乳類進化の謎に迫る（低酸素ストレス、酸化ストレス）



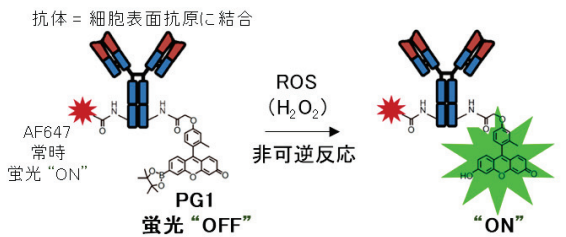
哺乳類の赤血球だけが核を持たない（脱核している）←なぜだろう???

哺乳類はお腹の中で赤ちゃんを育てる胎生を獲得←なぜだろう???

これらの進化には、ストレス適応が重要であったことを発見しています。

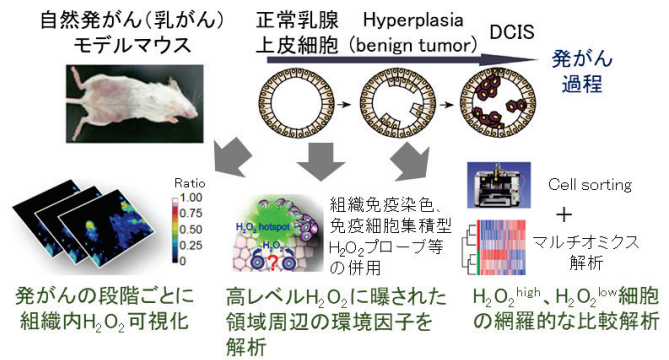
### 2. 酸化ストレスセンサーを駆使したがん研究（酸化ストレス）

#### 組織集積型 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> センサーを開発

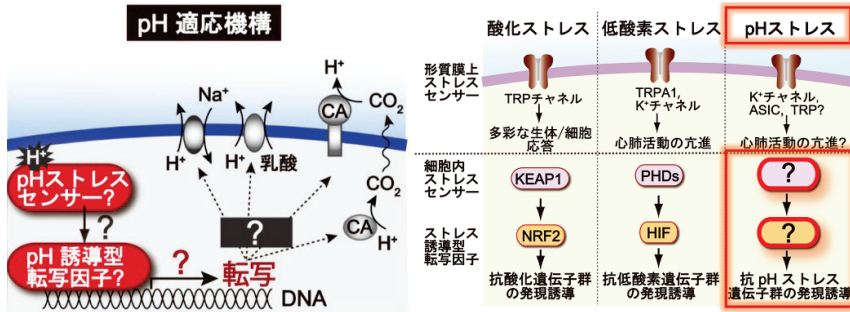


- ✓ *in vivo* 組織における細胞外 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> を 1 細胞レベルで検出可能
- ✓ H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 暴露細胞を「半永久的」に可視化 → 単離・解析可能
- ✓ "ratiometric" な H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> イメージング

#### マウスがんモデルに適用

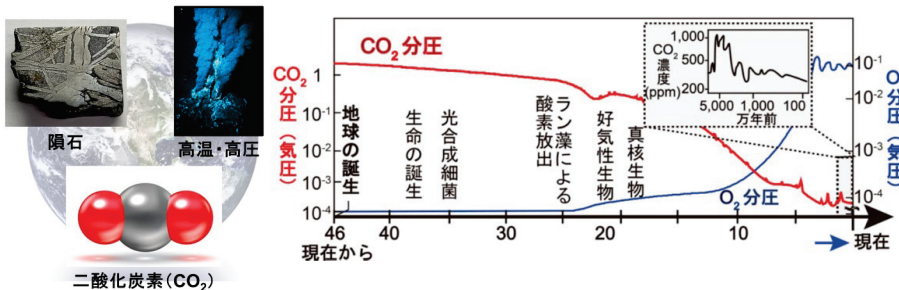


### 3. pH ストレス適応を司る低 pH 誘導型転写因子の同定（pH ストレス）



酸化・低酸素と並び重篤なストレスである pH 変動の感知・応答機構解明に挑む！（私たち独自の視点に基づいた、これまでの学術を変革するような研究）

### 4. 化学進化・宇宙生物学：有機物や生命の起源に迫る



原始地球環境を再現することで、生命誕生を導いた有機物創生のメカニズムを研究

#### 代表的な研究業績

- (1) *Nature Cell Biol.* in press, (2) *Molecular Cell* 80, 828–844 (2020), (3) *Cancer Cell* 33, 985–1003 (2018), (4) *Nature Commun.* 5, 4994 (2014), (5) *Nature Chem. Biol.* 7, 701–711 (2011).

# 生体認識化学研究室

研究内容：生化学・分子生物学・細胞生物学・脳神経生物学・がん生物学

所在地：京都市西京区京都大学桂

		電話	e-mail
スタッフ：教授	三木裕明	桂 A4-212 (383)-2766	hmiki@sbchem.kyoto-u.ac.jp
	准教授 船戸洋佑	桂 A4-206 (383)-2768	yfunato@sbchem.kyoto-u.ac.jp
	助教 橋爪脩	桂 A4-208 (383)-2769	hashizume@sbchem.kyoto-u.ac.jp
研究室 HP	<a href="http://www.sbchem.kyoto-u.ac.jp/miki-lab/">http://www.sbchem.kyoto-u.ac.jp/miki-lab/</a>		

## 研究概要：

私たちの研究室では生命科学研究を行っています。伝統的な化学系の枠組みの中では異分野的な存在ですが、生命を対象とした「生命科学」と物質科学としての「化学」の境界領域は急激に広がっています。2000年以降のノーベル化学賞の約半数は、生命機能の分子基盤の解明や、生体物質・材料に関する分析技術の開発で占められており、いまや「先端的な化学研究の半分は生命科学」という状況です。

具体的な研究内容としては、生命機能の根源とも言えるエネルギー物質 ATP と 1対1の複合体を作って働くマグネシウムイオンの量調節の研究に取り組んできました。細胞外に積極的にマグネシウムイオンを汲み出す膜トランスポーターCNNMの分子機能解析研究や遺伝子破壊マウスを用いた研究などを進め、マグネシウムイオン量調節の基本的な仕組みを明らかにすると共に、その調節異常ががん悪性化や精神疾患発症の原因となることも明らかにしています。このほか、タンパク質のシステイン残基の硫黄原子に起こるユニークな直鎖状の硫黄連結修飾（超硫黄化）の役割や、その医学生物学的重要性の究明にも取り組んでいます。（\*現在進行しているプロジェクトのいくつかは下記）

これらの研究を基礎研究として進める一方で、研究成果をもとにして創薬に繋げてゆくため製薬企業との共同研究も積極的に進めています。現在は特に、二大精神疾患の一つ、統合失調症の発症機序の解明や、その人為的コントロールに関する研究を進めています。

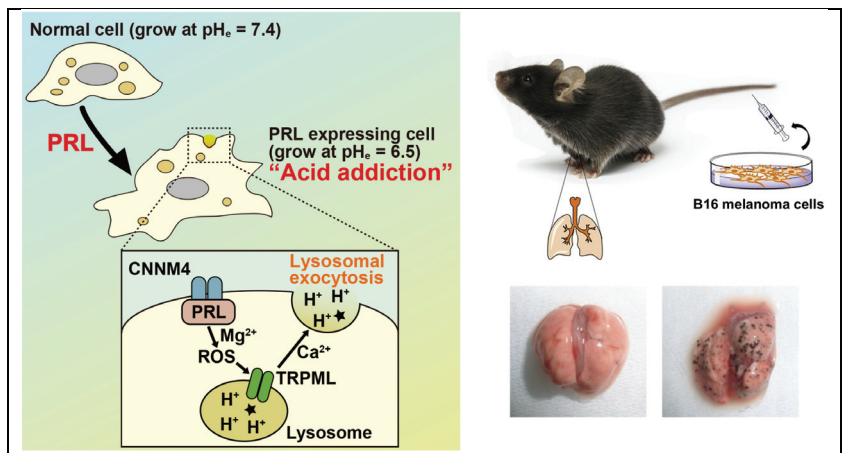
## 現在進行しているプロジェクト

### 1：細胞の酸性環境適応とがんの悪性化におけるマグネシウム調節

細胞からマグネシウムイオンを排出する膜タンパク質 CNNM の働きが、がんの悪性化・転移に重要な分子 PRL によって機能阻害されており、その結果として細胞内のマグネシウムイオン量が増加することを見つけました。またこのとき、細胞が生理的な pH (7.4 前後)



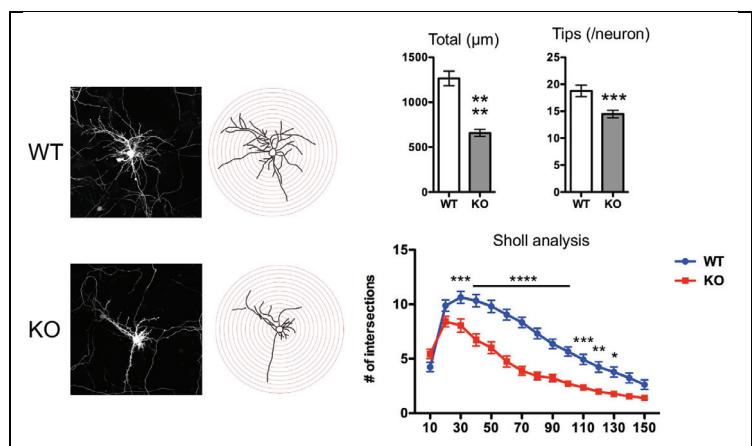
よりも酸性寄りの pH 6.5 でもっとも活発に増殖するようになること（酸性環境適応）も見つけています。悪性化したがん組織は酸性化していることが古くから知られ、この環境 pH 応答性の変化によってがん細胞が周辺環境に適応することで選択的に増殖し、自らの



テリトリーを広げて行く新たながん悪性化進展の仕組みが明らかになりつつあります。

## 2：統合失調症の発症におけるマグネシウム調節の役割

統合失調症患者のゲノム解析から、マグネシウムイオン排出分子 CNNM がトップヒットに近い強度で疾患と関わっていることが分かっています。脳で特異的に CNNM を欠損するマウスを作成して、そのマウスが統合失調症様の行動異常を示すことも明らかにしました。マウスから単離した神経細胞を用いた解析から、



神経ネットワーク形成に必要な突起状の構造形成に顕著な異常があることも分かっています。CNNM の欠損が神経細胞の機能にどのような影響を及ぼして疾患の発症に至るのかを明らかにすると共に、神経細胞内での CNNM 分子機能を活発化する治療薬の開発につなげるための研究も進めています。

## 3：タンパク質の直鎖状硫黄修飾の解析

PRL と CNNM の分子間相互作用が、PRL 分子内システイン残基の硫黄原子に起こる化学修飾で巧妙に調節されることを明らかにしています。このような硫黄原子の持つ高い反応特性に基づく新しいタンパク質の化学修飾として、硫黄原子が直鎖状に連結した「超硫黄化」が注目されています。私たちは最近、この超硫黄化によってタンパク質が凝集することで機能が劇的に変化して、細胞を致死的なストレスから守っていることを明らかにしました。超硫黄化によるタンパク質の化学的特性の変化を、細胞・生物個体レベルでの機能調節・改変に結びつけて理解することを目指して研究を進めています。

# 生物化学工学研究室

[研究内容] 生化学、生物学、極限環境微生物学、超好熱菌生理学

[所在地] 京都市西京区京都大学桂

[スタッフ] 部屋 電話 メールアドレス

教授 跡見晴幸 桂 A4-217 383-2777 atomi.haruyuki.8r@kyoto-u.ac.jp

准教授 佐藤喬章 桂 A4-216 383-2773 takaakisato@sbchem.kyoto-u.ac.jp

助教 竹俣直道 桂 A4-215 383-2775 takemata.naomichi.3a@kyoto-u.ac.jp

(key words) 極限環境微生物、超好熱菌、アーキア、腸内細菌、ゲノム、代謝と制御、生命進化

(研究室 HP) <http://www.sbchem.kyoto-u.ac.jp/atomi-lab/en/>

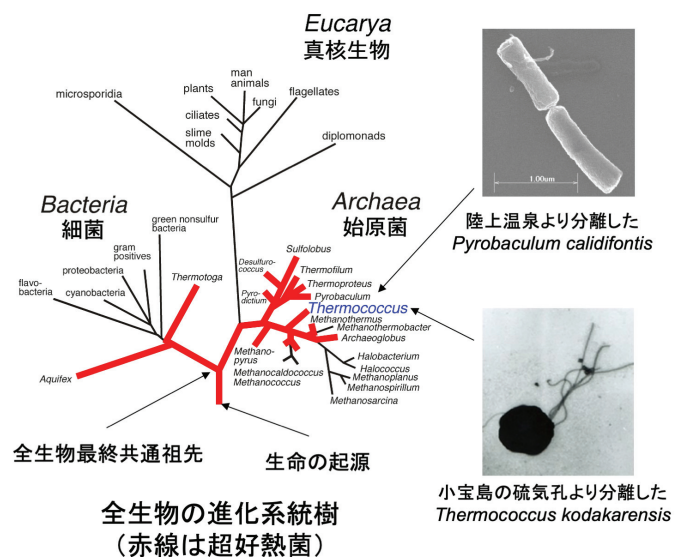
## 研究概要

### 1) 極限環境微生物の分離と特性解析

近年、火山付近の高温・熱水環境、深海の高圧環境、北極や南極域の低温環境などの極限環境にも、個々の環境に適応した**極限環境微生物** (extremophile) が多数生息していることが明らかになってきた。これらの極限環境微生物は従来の微生物に見られない生命戦略を有し、基礎・応用両面で非常に興味深い研究対象である。

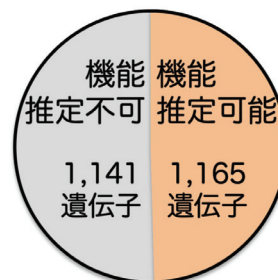
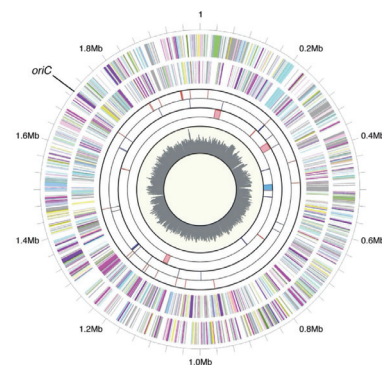
極限環境微生物の中でも、特に**超好熱菌**は生命の進化の観点から注目されている。16S ribosomal RNA 分子の塩基配列に基づいた全生物の進化系統樹の中で、超好熱菌は細菌・アーキアにおいて例外なく進化の源流に位置する。したがって現存する生物の中で超好熱菌は**原始生命体**あるいは**全生物の最終共通祖先**に最も近い生物として捉えることができる。超好熱菌内の様々な生命維持活動のメカニズムを理解し、“より進化”した生物のものと比較することにより、個々の生体分子や複数の生体分子が関与する代謝系・制御系がどのような形で誕生したのか、どのように進化してきたのかという知見も得られると期待できる。

我々は海洋性の硫気孔や陸上温泉地帯の水・泥試料より、超好熱性のアーキア *Thermococcus kodakarensis* や *Pyrobaculum calidifontis* を分離・同定している。双方ともに**全ゲノム塩基配列が決定**されており、また *T. kodakarensis* については遺伝子組換え系やトランスクリプトーム解析系も構築できている。これらの情報や技術を利用して、**超好熱菌の生命戦略の全容解明**を目指している。



## 2) ゲノム情報を基盤とした新しい生命システムの探索と解明

近年の塩基配列決定技術の迅速化に伴い、膨大な量の塩基配列情報が蓄積しており、現在も 10,000 種以上の生物に対してゲノムプロジェクトが進行中である。一般に1つのゲノム上に存在する遺伝子のうち、半数以上は一次構造からはその機能が推定できない機能未知遺伝子である。これら**機能未知遺伝子の機能解明**はポストゲノム研究の最重要課題の1つであることは言うまでもない。

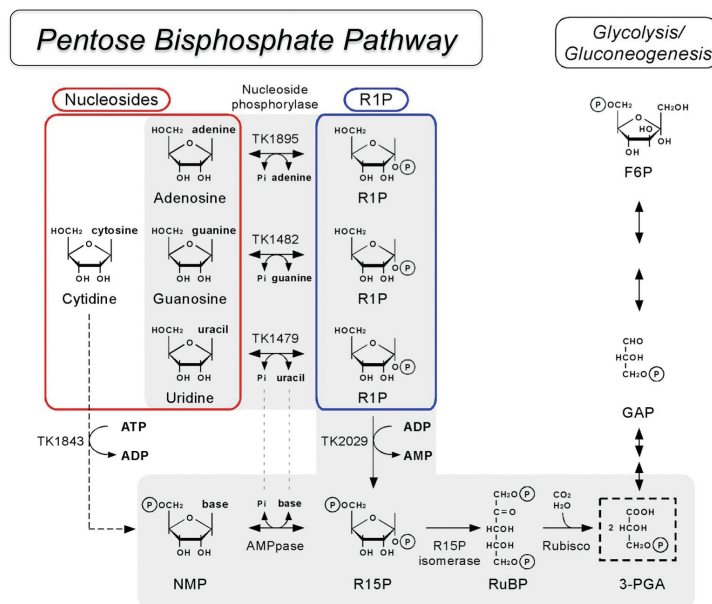


ゲノム長：2,088,737 塩基対 遺伝子数：2,306個

一次構造に基づいたゲノム上遺伝子の機能推定

我々はゲノム情報から予想される各種微生物（主に**超好熱菌、好酸性菌、好塩菌、腸内細菌**）の生命機構とそれらの実際の生命機能を比較しながら missing gene（あるべき遺伝子がゲノム上に見当たらない）、redundant gene（重複遺伝子）、lonely gene（機能上孤立している遺伝子）などに着目し、機能未知遺伝子を含む様々な遺伝子機能の解析を進めている。

また最近では培養法が確立されていない、あるいは共生関係にあるため純粋分離が困難な微生物に対してもメタゲノム解析手法により全ゲノム配列が報告され始めている。このような**メタゲノム配列**中に見出された**新規遺伝子の機能解析**も行っている。加えて、近年では健康寿命との関連が示唆されている**腸内細菌の代謝機構の解明**も進めている。特に増殖に寄与する遺伝子や悪玉菌特異的な遺伝子の探索および機能解明を行っており、将来的には細菌叢制御を目標としている。



新しい nucleoside 分解経路

我々はこれらの研究を通じて**普遍的で未知の生命システムの同定と解明**を目指している。



## 分子集合体化学研究室

研究内容： 超分子化学・錯体化学・自己集合材料・光化学

所在地： 京都市左京区吉田本町 高等研究院物質－細胞統合システム拠点 研究棟

スタッフ： 教授 古川 修平 E-mail: shuhei.furukawa@icems.kyoto-u.ac.jp  
電話 753-9868

スタッフ： 准教授 猪瀬 朋子 E-mail: inose.tomoko.1v@kyoto-u.ac.jp  
電話 753-9839

<https://furukawa.icems.kyoto-u.ac.jp/>

### 【当研究室の化学 | 分子集合体の基礎化学と新しい材料創出】

分子集合体化学研究室では、分子個々ではなく、集合体にして初めて見いだされる性質や機能を活用し、エネルギー・環境・バイオに応用できる、新しい材料を生み出すことを目的にしています。多彩な金属イオンと分子を配位結合で繋ぎ、ナノサイズの美しい錯体分子集合構造を作り上げます。それらを大きなサイズでは結晶・ガラス・ゲル・液体といった異なる形態の材料として作り分けます。作り上げた分子集合体は応用に向けて金属ナノ粒子など機能性ナノ材料とも融合します。錯体化学・超分子化学・材料科学・光化学、を中心とした様々な分野の知識を用いて、基礎と応用の両面を見据えて研究を行っています。

### 【当研究室の特色 | オープンな環境と国際性】

私たちは吉田キャンパスの百万遍角にある「京都大学 高等研究院 物質－細胞統合システム拠点 (iCeMS, アイセムス)」にある研究室であり、2つの独立した研究グループの集合体です。オフィスは化学や生物学の複数の研究室が共存するオープンスペースで、様々な言語が飛び交う国際色豊かな中で生活を送っています。実験環境も同様で、大きな実験室をいくつかの化学系研究室で共同運営しています。毎日の研究では合成実験と物性測定・解析をほぼ半々の割合で行います。どのように分子が集合し、機能を生み出すのか、そのメカニズムも丁寧に調べています。

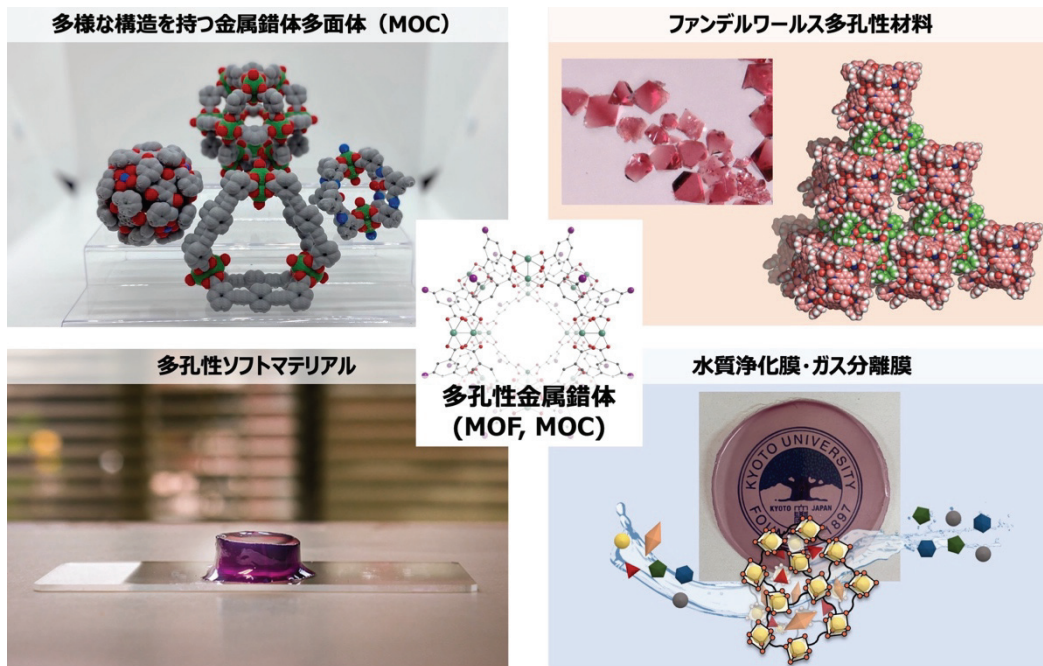
### 【当研究室の指導方針 | 知的好奇心を刺激し、意外性を楽しむ】

分子集合体を合成してみると、目的とは違った構造や機能が発現することがよくあります。その際は、時には化学を飛び越えているような分野(物理学、数学、生物学)の科学者と一緒に、「なぜ」を考えます。予想外を楽しみ、分野の垣根を飛び越えてゆける知的好奇心旺盛な人を歓迎します。

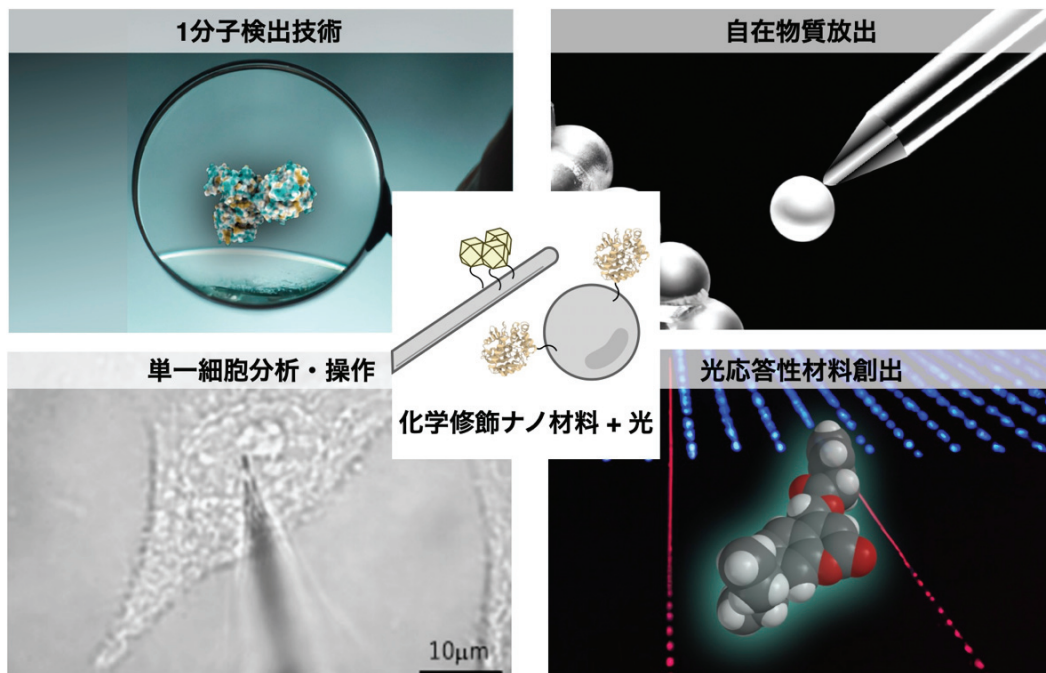
当研究室での研究生活を通して、以下のことを身につけることができます。

- 有機化学と無機化学を統合的に活用し、材料を生み出す合成力
- 分子集合体の織りなす高次構造やダイナミクスを解析する分析力
- 国際的な研究環境での議論を通して磨かれるディスカッションやプレゼン力
- 様々なバックグラウンドをもつ仲間との議論で理解する、多彩な考え方・文化・歴史
- 研究を自身で展開してゆける、自主性と行動力

**【研究テーマ | 古川グループ】** 金属イオンと有機分子の自己集合で組み上がる多孔性金属錯体に関する研究を行っています。このナノサイズの空間を持つ分子集合体に、光・応力・分子・イオンなどの刺激に応答する機能を持たせることで、バイオ・環境・エネルギー分野へ応用できる新材料を開発しています。



**【研究テーマ | 猪瀬グループ】** 貴金属ナノ材料の表面を、機能性分子、タンパク質、核酸や抗体などで修飾し、光化学と融合する研究を行っています。光応答性のナノ材料を創成し、生きた細胞で起こる複雑な現象の分析や、細胞機能の操作を可能にするバイオテクノロジーを開発することで、医農薬分野に貢献します。



# 機能固体化学研究室

研究内容 : 無機材料化学・無機固体化学・材料電気化学・バイオセラミックス

所在地 : 京都市左京区吉田本町

TEL/FAX

スタッフ : 准教授 高井 茂臣 総合研究 11 号館 303 号室 (753)5786/5851  
E-mail: stakai@energy.kyoto-u.ac.jp

講師 薮塚 武史 総合研究 11 号館 304 号室 (753)9129/9115  
E-mail: yabutsuka@energy.kyoto-u.ac.jp

URL: <http://fssc.energy.kyoto-u.ac.jp>

## 研究概要

エネルギーおよび環境のための機能性固体材料の解析、設計ならびに合成に関する研究を行っています。高いエネルギー変換効率を持ち、資源の有効利用ならびに環境保護に優れた電気化学エネルギーは、今後一層重要なエネルギー源となります。結晶化学、固体化学の理論に基づき、新しい材料の精密な解析や設計を行い、リチウムイオン二次電池や燃料電池等の材料開発を行っています。また、バイオミネラリゼーションに学んだセラミックス合成プロセスによる骨修復材料の開発や、ドラッグデリバリーシステムなどへの応用を目的としたマイクロカプセルの開発について研究しています。

## 電気化学エネルギー材料の設計と開発

リチウムイオン二次電池は、高エネルギー密度電池として、携帯電話やノートパソコンなどの小型携帯用電源から電気自動車やオンサイト電力貯蔵用などの大型電源に至るまで、様々な応用分野でさらなる高性能化が望まれています。こうしたリチウムイオン二次電池電極材料におけるリチウムイオンの挿入・脱離反応に伴う結晶構造や電子構造の変化を精密に解析し、反応機構の解明を行っています。また電極材料において、充放電の繰り返しによる容量の劣化を従来に比べ格段に抑制することができる技術を開発するなど、様々な高性能化を目指した研究を行っています。

固体酸化物型燃料電池 (SOFC) は、イオン導電性セラミックスを電解質に用いた燃料電池で、分散型発電から火力発電代替に至る規模において高い発電効率が期待できる次世代の発電システムとして注目されています。ホタル石型酸化物やペロブスカイト型酸化物には、酸化物イオン導電性、電子導電性あるいは両方を

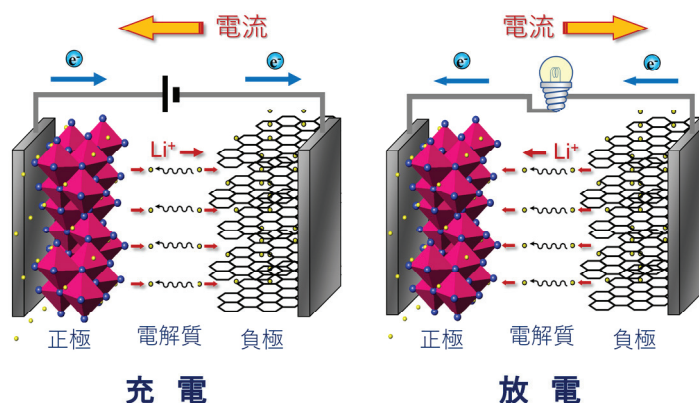


図1 リチウムイオン二次電池の充放電



併せ持つ混合導電性、さらにはプロトン導電性等、多様な機能を示すものが種々存在します。これらの酸化物の解析、設計を行い、燃料電池の電解質の開発を行っています。

### 新規セラミックス材料の構造解析と設計

燃料電池やリチウム電池の電解質および電極の材料として有用な機能性セラミックスの物性を制御するためには、結晶構造の精密な設計が必要です。組成や作製条件を変化させて種々の酸化物結晶を合成し、Rietveld 解析、EXAFS 解析を駆使して構造解析を行い、結晶構造と物性の関係を結晶化学の理論に基づき明らかにするとともに、望ましい物性を持った構造設計を行います。

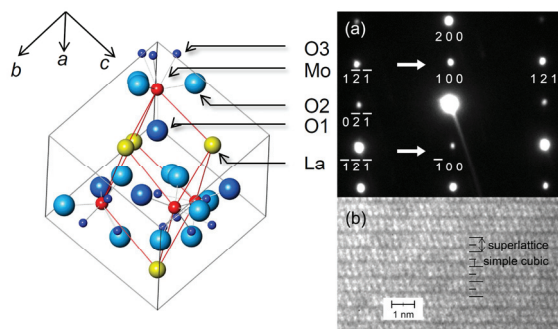


図2 酸化物イオン伝導体の構造と新規低温相の超格子構造

### 骨修復を目的とする生体活性材料の開発

超高齢社会を迎えた今日、骨疾患により生じた骨欠損部を治療し、患者のQOL (Quality of Life) を最大限維持する目的で、すぐれた性能を持つ骨修復材料の需要が整形外科領域で益々高まっています。しかし、金属、セラミックス、有機高分子などの人工材料をそのまま骨欠損部に埋入した場合、生体の異物に対する免疫反応により材料が周囲の生体組織から隔離されてしまうため、骨と結合することができません。

セラミックスやガラスなどの無機材料の中には、骨欠損部に埋入されると周囲の骨と自然に結合し、一体化する材料があります。これらは「生体活性セラミックス」と呼ばれ、重要な骨修復材料として既に実用化されています。しかし現代の臨床現場では、従来よりもすぐれた骨結合性を示し、それに加え十分な力学的性質を満たす骨修復材料が求められています。

骨や貝殻などは、ヒドロキシアパタイト( $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ )や炭酸カルシウムなどのセラミックスが、コラーゲンやコンキオリンなどのタンパク質と複雑な三次元構造を形成した複合体です。自然界において生物は、これらの組織を常温常圧で合成しています。そこで当研究室では、生物の営みに学んだセラミックス合成法であるバイオミメティック法に着目し、材料化学・結晶化学・溶液化学・生物化学に基づいた合成プロセスにより、骨修復に有用な生体活性材料の開発を試みています。

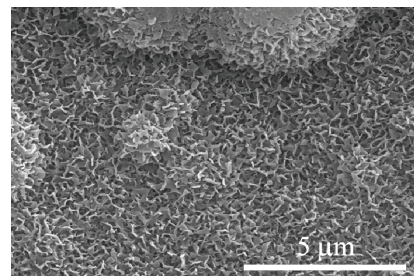


図3 生体模倣環境下で、骨の主要な無機成分であるアパタイトを自発的に析出した生体活性ポリエーテルエーテルケトン(PEEK)人工骨の表面

### 機能性アパタイトマイクロカプセルの開発

中空の微小球であるマイクロカプセルは、内部に薬物など種々の物質を内包することで、ドラッグデリバリーシステム(DDS)用担体や抗菌材料などへの応用が期待されます。当研究室では、骨の主要な無機成分であるヒドロキシアパタイトで構成されるマイクロカプセルの開発を試み、DDS や遺伝子治療など様々な医療現場で役立つ機能性材料の研究を行っています。

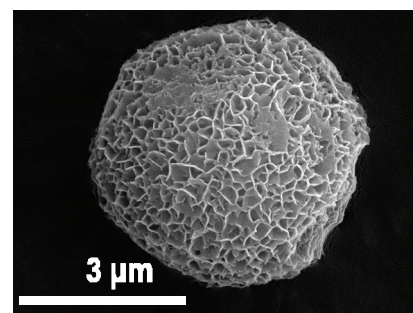


図4 バイオミメティック法で合成したアパタイトマイクロカプセル

# 界面エネルギープロセス研究室

研究内容：電気化学・溶融塩・イオン液体・CO<sub>2</sub>電解還元・二次電池

所在地：宇治市五ヶ庄京都大学宇治

			電話	e-mail
スタッフ：教授	野平俊之	宇治 W305E	0774(38)3500	t-nohira@iae.kyoto-u.ac.jp
	特定准教授 川口健次	宇治 W307E	0774(38)3497	k-kawaguchi@iae.kyoto-u.ac.jp
	講師 山本貴之	宇治 W307E	0774(38)3497	t-yamamoto@iae.kyoto-u.ac.jp
	助教 法川勇太郎	宇治 W309E	0774(38)3498	y-norikawa@iae.kyoto-u.ac.jp

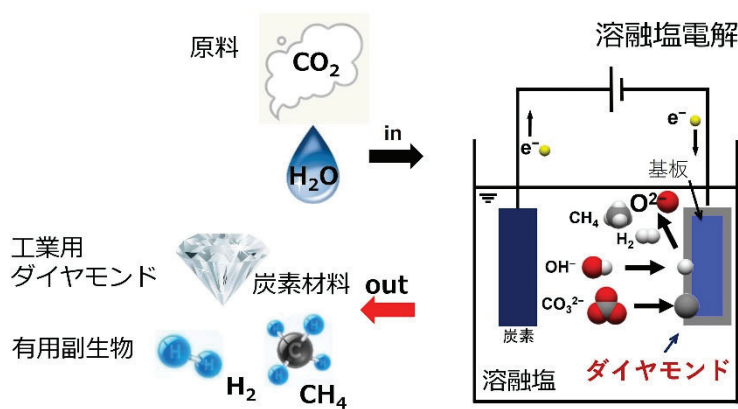
HP：<http://www.iae.kyoto-u.ac.jp/chemical/index.html>

## 研究概要

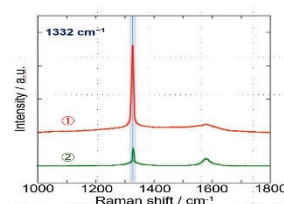
2050年カーボンニュートラル社会の実現をめざして、再生可能エネルギーの普及やCO<sub>2</sub>ネガティブエミッションに貢献する革新的技術の研究開発を行っています。溶融塩やイオン液体を電解液に用い、電極-電解液界面を制御することで、「CO<sub>2</sub>からの新規ダイヤモンド電解合成法」、「溶融塩電析法を用いた太陽電池用シリコン膜の製造」、「安全性の高い大型二次電池」といった新たなプロセスやデバイスの構築を目指します。

## 研究テーマ例1：溶融塩を用いたCO<sub>2</sub>からの新規ダイヤモンド合成法

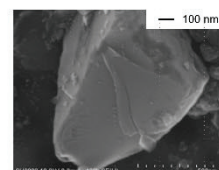
カーボンニュートラル社会を実現するためには、排出されるCO<sub>2</sub>を回収・貯留(CCS)するだけでなく、CO<sub>2</sub>を回収・有効利(CCU)することが必要であり、CO<sub>2</sub>の変換技術が注目を浴びています。我々は、炭素材料の中でも特に価値の高いダイヤモンドを選定し、溶融塩電解を用いたCO<sub>2</sub>原料からのダイヤモンドの合成法を開発しました。下図に示す原理図のように、CO<sub>2</sub>とH<sub>2</sub>Oを溶融塩に溶かし、電解をすると炭素と水素が同時に生成します。これによりsp<sup>2</sup>・sp混成軌道を持つ炭素が炭化水素となって除去され、sp<sup>3</sup>炭素のみが成長することでダイヤモンドが生成します。これまでに、直径数μmのダイヤモンドの生成を確認しており、より大きなダイヤモンドを得るために電解条件の最適化に取り組んでいます。



新しいダイヤモンド電解合成法の原理図



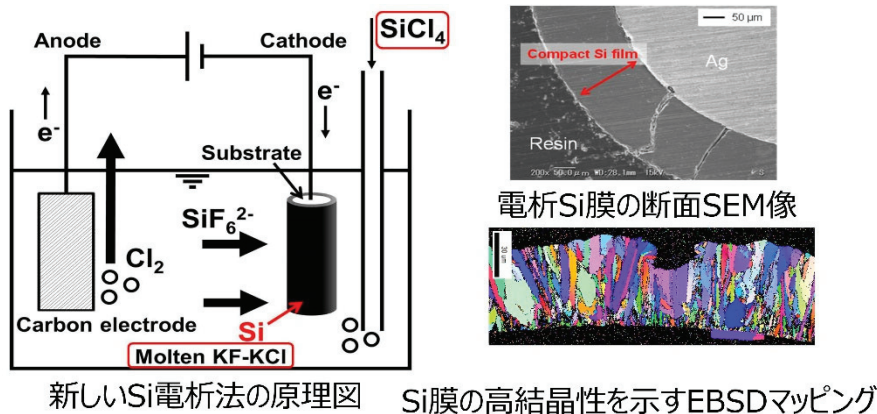
ダイヤモンドのラマンスペクトル



ダイヤモンドのSEM像

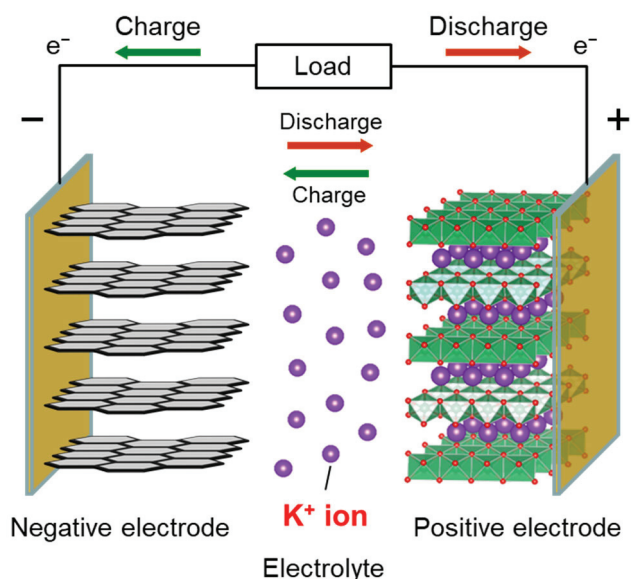
## 研究テーマ例 2：溶融塩電析法を用いた太陽電池用シリコン膜の製造

現在の結晶系シリコン系太陽電池は、シーメンス法で作製したシリコンをチョクラルスキー法等で結晶塊とし、100-200  $\mu\text{m}$  程度の厚さに切断することで作製されています。しかし、エネルギー消費が大きい、切断工程におけるカーフロス（切りしろロス）が大きいという課題があり、その後のセル製造工程も複雑です。我々は、新規な太陽電池製造法として、溶融塩電析法により、基板上に直接結晶性シリコン膜を製膜する方法を提案し、開発しています。現在は、シリコン膜の品質向上や、実際に p-n 接合を有する太陽電池を作製して発電効率の向上に取り組んでいます。



## 研究テーマ例 3：安全性の高いイオン液体を用いた新規蓄電池の開発

太陽光発電や風力発電などの再生可能エネルギーは、天候によって発電量が大きく変化するため、大量導入するためには大型蓄電池の併設が必須です。大型蓄電池の候補としては、リチウムイオン電池が挙げられますが、資源が希少で偏在しているコバルトやリチウムを使用しており、さらに可燃性・揮発性のある有機溶媒系電解液を用いるため、将来的な大型蓄電池の大量導入には、資源面・安全面ともに課題があります。そこで、これらの課題を解決可能な新しい蓄電池として、我々は、ナトリウムやカリウムなどの豊富な資源を用い、電解質に高い安全性を有するイオン液体を利用した、新規蓄電池の研究を行っています。例えば、図に示すように、正極にカリウム系層状化合物、負極に炭素材料を用いてカリウムイオン電池を構築することができます。これまでに、カリウムイオン電池用電解質として有望なイオン液体を複数開発しています。現在は、これらの電解質と様々な電極材料を組み合わせることで電池特性を調べ、性能向上を行っています。





## ソフトマター工学研究室

研究内容 : ソフトマター・アクティブマター・移動現象・計算科学

所在地 : 京都市西京区京都大学桂

			電話	FAX
スタッフ	: 教授	山本量一	A4 棟 118	(383) 2661 (383) 2651
				e-mail: ryoichi@cheme.kyoto-u.ac.jp
	: 准教授	谷口貴志	A4 棟 117	(383) 2681 (383) 2651
				e-mail: taniguch@cheme.kyoto-u.ac.jp
	: 助教	John Molina	A4 棟 113	(383) 2671 (383) 2651
				e-mail: john@cheme.kyoto-u.ac.jp
ホームページ	: ソフトマター工学研究室			<a href="http://sm.cheme.kyoto-u.ac.jp">http://sm.cheme.kyoto-u.ac.jp</a>
URL	: 化学工学専攻			<a href="http://www.ch.t.kyoto-u.ac.jp">http://www.ch.t.kyoto-u.ac.jp</a>

研究概要 : 『ソフト/アクティブ/バイオマターの計算科学』

当研究室は、ソフトマター、アクティブマター、バイオマターで見られる種々のダイナミクスについて、物理学の基礎原理に基づいた計算機シミュレーションによる研究を行っているごく普通の研究室ですが、近隣の研究室と比べると、例えば以下の点などにおいて少し変わって見えるところがあるかもしれません。

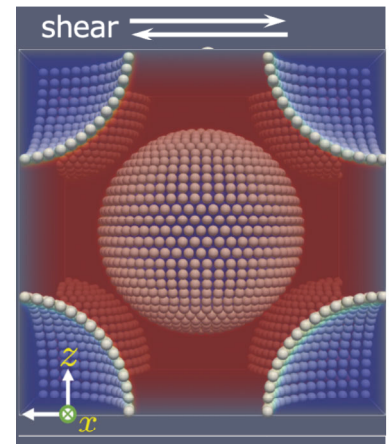
- **実験室がない**：理論ベースの研究や、計算機シミュレーションを用いた研究が専門なので、自分たちで実験はやりません。実験を軽視するわけではなく、より優れた実験の研究室が数多くある中で、理論やシミュレーションに特化した研究室として自分たちの特色を出しています。
- **英語が上達する**：かどうかは本人次第ですが、外国人が多いので自然と英語を使う機会は多くなります。博士後期課程学生以上のセミナー発表は基本的に英語です。英語力を特別視しているわけではなく、便利な道具として有効に使いこなしましょうというスタンスです。
- **居室がきれい**：物事に集中し、成果物の質を高める上で、オフィス環境は非常に重要だと考えています。研究室（居室）は基本的に研究をするところなので清潔・静寂を原則とし、居室とは別に設けたセミナー室を、学生やスタッフが議論したり休憩や食事をとったりするためのスペースとして開放しています。
- **椅子が高級**：我々のような研究スタイルでは椅子に座っている時間がほとんどです。いい椅子だと研究や勉強もどんどん進むに違いない、という期待を込めてのことで、アロンチェアやミラチェアという金融やIT業界で有名な椅子も多く使用しています。
- **Macが多い**：研究室内では若手教員やポスドクの影響でMacが増え、今はもうWindowsが絶滅寸前です。シミュレーションを走らせる研究室のサーバー計算機はLinuxで動いています。研究にはC++やPythonを用いる人が多いですが、初期におけるプログラミングの経験の有無や得意不得意はあまり気にしなくてもすぐに慣れます。
- **学生個人の自主性を重視**：古き良き京大の伝統としてそのような方針を守っていますが、決して楽な研究室を意味するものではありません。モチベーションが高い人ほど充実した日々を送れるように運営しています。

研究内容の一例について、以下にごく簡単に述べます。詳細については、HPを参照するか直接教員に訪ねてください。

### 1) 粒子分散流体の直接数値シミュレーション (山本、Molina)

多成分流体中にコロイドなどの粒子が分散した系では、各溶媒成分やそれらの相分離界面と分散粒子との親和性の変化によって様々な分散状態が実現する。またそのような粒子の分散状態を反映して系全体の流動にも変化が生じる。当研究室では、粒子分散流体の直接数値シミュレーションを実現する新しい方法 (SP法) を開発することに成功した。その後も種々の系に対してSP法を応用し、様々な粒子分散流体の構造や流動特性の評価に取り組んでいる。

右図. ピッカリングエマルジョンに振動せん断を加えた直接数値シミュレーションの様子。粒子は油 (青) と水 (赤) の界面に対して親和性が高く、油滴の表面に局在化することで分散状態を安定化している。



### 2) 高分子溶融紡糸のマルチスケールシミュレーション (谷口)

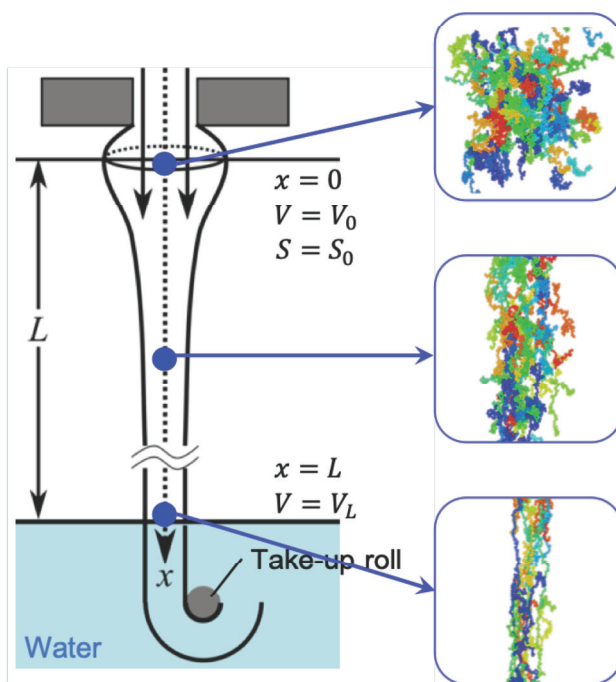


図2. 紡糸線上の位置によって伸長速度が大きく変化するプロセスである溶融紡糸工程をモデル化し、紡糸線上をラグランジュ的に移動する流体粒子が、その位置に応じて経験する伸長速度を用いてMDシミュレーションを行った例である。新計算手法により、伸長速度が経時変化し且つ非常に大きなひずみを経験する系にもMDシミュレーションを適用することが可能となった。この手法により現実に即した紡糸工程とミクロな高分子の運動と関連付けることができ、紡糸線上の特徴的な位置での高分子鎖の伸びや配向などの微視的状态を観察することができる。将来的には、分子量の高い高分子を用いた高分子同士の絡み合いの考察や、流動誘起結晶化の解析に発展することが期待できる。

### 研究テーマ例

- 1) ソフトマターに有効な理論モデルやシミュレーション手法の開発・応用
- 2) 生体系で重要な膜・細胞・組織などに対する計算機シミュレーション
- 3) 高分子流体に対するマルチスケールシミュレーション法の開発と応用
- 4) 複雑な現象 (生物や細胞の集団運動など) に対するモデリングとシミュレーション

# ① 界面制御工学研究室

②研究内容：界面制御工学・ナノ空間工学・分子/粒子シミュレーション・吸着分離プロセス

③所在地：京都市西京区京都大学桂

			電話	e-mail	
④スタッフ：准教授	渡邊 哲	桂A4-106	(383)2682	nabe@cheme.kyoto-u.ac.jp	
	助教	平出 翔太郎	桂A4-101	(383)2672	hiraide@cheme.kyoto-u.ac.jp

HP : <http://www.cheme.kyoto-u.ac.jp/2koza/index.html>

⑤研究概要：

## ナノスケール拘束空間の工学 —構造制御を目指した界面場の積極利用—

化学工学の目的が、旧来の、石油化学品などの「組成の制御」から、高機能材料のための「構造の制御」に変遷しつつある現在、 $[\text{相互作用集団}] \times [\text{外場}] = [\text{構造制御}]$ の方程式が重要です。つまり、相互作用を及ぼし合う要素—例えば分子やナノ粒子など—の集団が、ナノ空間や固体表面上などの外的なエネルギー場におかれたときに、どのように相転移や構造化を生じるのかを見出し、理解し、さらにはそのメカニズムを定量的にモデル化することが求められます。

本研究室では、このような広義の「界面」での「外場」の積極利用に着目して、界面が強調されるナノ/メソ拘束空間を舞台に、その場特有の分子/イオン/ナノ粒子の挙動と構造や、外力・強混合場等の効果について、機能材創製と界面利用各種デバイスへの応用を視野に、分子・粒子シミュレーションと実験を相乗活用した研究に取り組んでいます。ナノスケールの現象を解明し、その結果をメートルスケールの材料創製やプロセス開発につなげるというのも特徴で、1つのスケールに留まらない多様な切り口で研究を展開しています。

内部進学博士学生も多く、真剣な研究の場ながら、息抜きもみんな楽しむアットホームな雰囲気です。「ナノの不思議からマクロの機能」を探求する冒険に、一緒に出かけませんか！



(左2枚) ナノメートルの現象を実験とシミュレーションにより解析

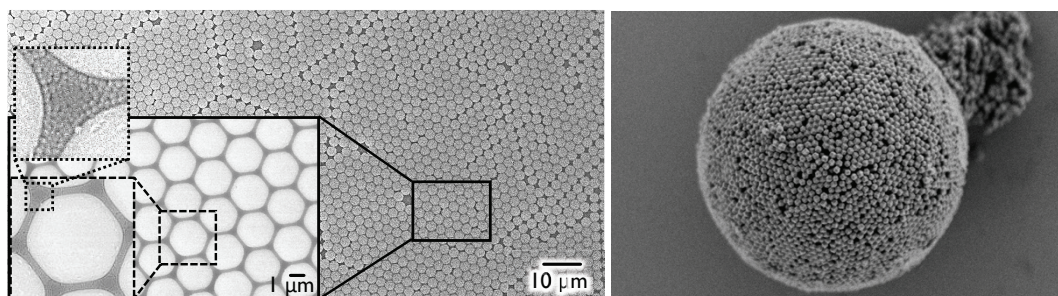
(右2枚) 材料のマクロな特性評価とナノスケール現象との関係解明



研究内容の一例を以下に示します。詳細については、気軽にスタッフに聞いてみてください。研究室見学も歓迎しますので、希望する場合はご連絡ください。

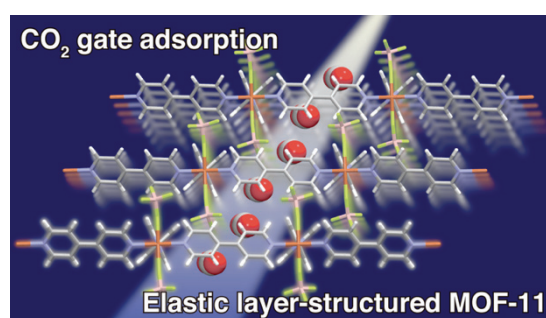
### コロイド粒子集団の自発的構造形成

微粒子は界面が豊富な材料の代表格です。工業製品の最終形態だけでなく中間体も含めると、実は、全体の8割以上の工業製品になんらかの形で微粒子が関わっています。当研究室では、そんな微粒子を操作条件によって自発的に配列させた集合体を形成し、その規則性に由来する機能の発現と制御を狙いとして研究を進めています。



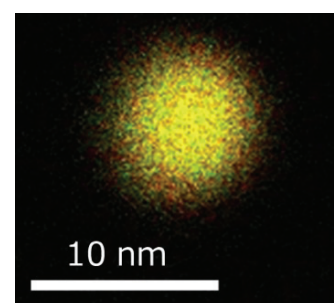
### 柔軟性ナノ多孔体の吸着誘起構造転移現象の解明と吸着プロセスへの実装

多孔体と呼ばれる、「穴」がたくさん空いた材料も、界面が豊富に存在し、その内部に気体などを貯蔵できたり、不純物を分離できたりします。近年、結晶性でありながら、自身の結晶構造を変化させることで気体分子を選択的に取り込むことができるMOFと言う材料が注目されています。その構造転移現象を分子シミュレーションと実験的検討を組み合わせ、そのメカニズムを解明し、合理的な材料設計の指針確立を目指して研究しています。



### マイクロリアクタによる機能性粒子の創製

微粒子を合成する際に重要になるのは、固体が析出する初期過程、いわゆる「核生成」と呼ばれる過程です。核生成を制御できれば、微粒子のサイズや形状を自在に操作できるようになることが期待されます。当研究室では、混合性能に優れたマイクロ流路を活用したリアクタを用いて、合金ナノ粒子やコアシェル型粒子などの機能性微粒子の合成とサイズ、形状、機能制御に取り組んでいます。



### 研究テーマ例：

- 自己集積による微粒子集団構造の形成と機能制御
- マイクロリアクタを活用した合金ナノ粒子の室温フロー合成
- 核生成過程の分子シミュレーション
- ナノゲート型吸着剤を活用した新規圧カスイング吸着分離システムの開発
- 分子シミュレーションに基づいたナノ細孔径分布推定法の高精度化
- ソフト多孔体の構造転移自由エネルギー解析

# 反応工学研究室

研究内容 : 反応工学・電気化学反応工学・炭素質転換工学・触媒反応工学

所在地 : 京都市西京区京都大学桂

	電話	FAX
スタッフ : 教授 河瀬元明 桂 A4-229	(383)2663	(383)2653
講師 蘆田隆一 桂 A4-233	kawase@cheme.kyoto-u.ac.jp (383)7092	(383)2653
助教 藤埴大裕 桂 A4-230	ashida@cheme.kyoto-u.ac.jp (383)2683	(383)2653
	fujitsuka@cheme.kyoto-u.ac.jp	

ホームページ : <http://www.cheme.kyoto-u.ac.jp/3koza/main.html>

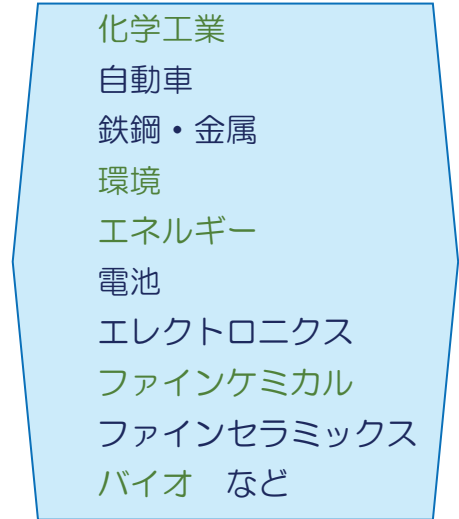
研究概要 :

人類が必要とする様々な物質は、大部分が化学反応を利用して製造されている。太陽電池やLSIの製造、PETボトルや包装資材へのコーティングなど一見化学的でない製造プロセスも物質を作る以上、当然に化学反応を利用している。燃料電池や発電所は物質ではなくエネルギー供給を目的としたものであるが、ここでも化学反応や電気化学反応が主要な役割を果たしている。

反応速度は有限であり、反応器の設計と運転方法によって反応を行う効率は決まる。人類の持続性を考えると、高効率なプロセスへの要求は強く、種々の反応をクリーンに行なうプロセスの開発が求められている。高効率なエネルギー変換は持続性の最重要課題である。高い機能を有する材料は新しい製品となり、人類の生活を豊かにする。機能を発現させるためには精密に反応を制御しなければならない。現実の化学反応プロセスでは、多数の化学種が関与した複雑な反応が進行する。反応器形式や触媒、原料や製品の形状や温度、濃度、電位、滞留時間の分布などの物理的要因によっても、得られる生成物が変わってくる。このような問題を扱うのが反応工学である。

本研究室では反応モデリングと反応器モデリングを駆使して、材料分野、電気化学分野、エネルギー分野の各種反応プロセスを対象とした研究を行っている。電気化学分野では、固体高分子形燃料電池の速度論的モデリングと開発を進めており、エネルギー分野では、石炭、石油、バイオマスなどのエネルギー資源を効率的かつクリーンに利用する技術の開発に取り組んでいる。材料分野では、固体触媒の開発や、化学反応を利用した新しい機能性材料、構造材料の生産プロセス開発を行うだけでなく、反応モデリング、プロセスモデリングの研究を進めることで学理構築を行っている。

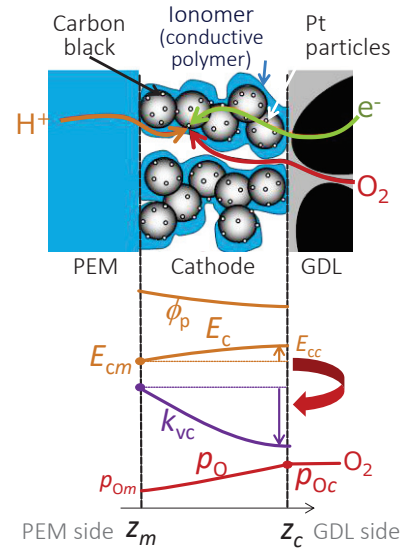
## 反応工学が必要とされる分野



- 化学工業
- 自動車
- 鉄鋼・金属
- 環境
- エネルギー
- 電池
- エレクトロニクス
- ファインケミカル
- ファインセラミックス
- バイオ など

## 固体高分子形燃料電池のモデリング

燃料電池内部では電気化学反応に加え、伝熱、蒸発、凝縮、拡散、泳動、膨潤、収縮、変形、高分子劣化等々複雑な現象が起こる。これらを理解するために、燃料電池の反応器モデルを開発している。スパッタ製膜法で作製した極薄電極や白金薄板にスリットを設けた電極を作製して、現象を単純化した実験を行い、解析することで、反応工学モデルを構築している。FC-DynaMo というシステムシミュレーターを開発し、このモデルで実際の燃料電池自動車、定置燃料電池の性能予測や最適設計を可能とした。



## ペロブスカイト太陽電池用新規 CVD 法の開発

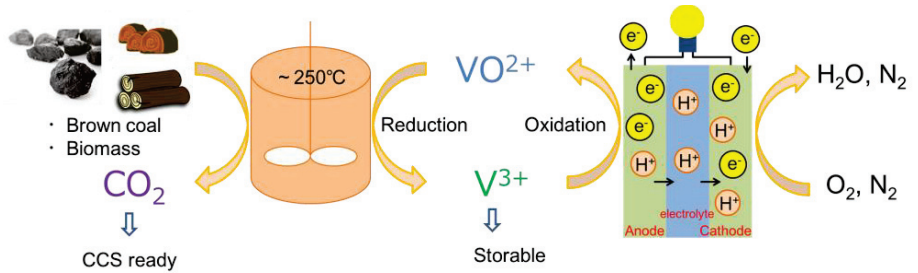
次世代太陽電池として注目されるペロブスカイト太陽電池の実用化のために、大面積化、高品質化が可能な CVD（化学気相成長）プロセスが求められている。これまで報告のない反応系を考案し、代表的ペロブスカイトの MAPI やより安全で安定性の高い MABI というペロブスカイトの CVD に成功した。材料開発とペロブスカイト CVD の学理構築を進めている。

## 固固反応を利用したメソポーラスカーボンの新規製造法

金属酸化物のナノ粒子と炭素の間の固固反応を利用して、任意に制御された細孔径をもつメソポーラスカーボンを簡便に製造する方法を開発している。

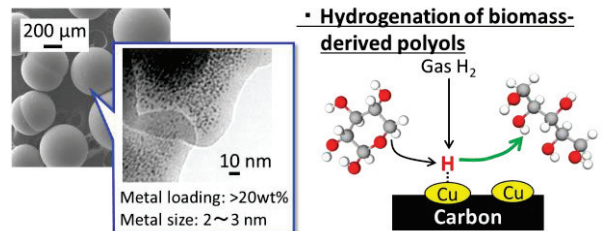
## 低品位炭素資源と無機物の酸化還元反応を利用した高効率発電法の開発

バイオマスや褐炭の化学エネルギーを無機物との反応を利用して別の化学エネルギーに変換し、さらに電気エネルギーに変換する新規発電方法を開発している。従来法の発電効率 10~30% を大幅に上回る 50% 以上の発電効率を達成可能である。



## 炭素担持金属微粒子触媒の開発

活性金属の微粒化と高担持量の両立による高選択的な水素化反応や反応器のコンパクト化を目指し、イオン交換樹脂を前駆体とした炭素担持金属微粒子触媒を開発している。バイオマス原料の水素化反応による有用化学原料合成プロセスへの適用に向けた高機能化を進めている。



### 研究テーマ例

- ・ 固体高分子形燃料電池(PEFC)の速度論的モデリング
- ・ 電気化学反応を用いた水素と化成品の高選択的同時製造プロセスの開発
- ・ ペロブスカイト太陽電池のための新規 CVD プロセスの開発
- ・ CVD プロセスによる有機金属化合物からの機能性薄膜の合成
- ・ 無機物との酸化還元反応を利用した固体炭化水素資源のエネルギー変換
- ・ 低品位炭素資源を原料とした製鉄用コークス、高性能炭素材料の製造
- ・ 固固反応の制御による新規炭素材料の製造
- ・ バイオマス原料からの有用化合物製造のための炭素担持金属微粒子触媒開発
- ・ 外部からの気相水素供給を用いない新規液相水素化反応プロセスの開発



# 分離工学研究室

研究内容:分離工学・多相系移動現象・物質移動・乾燥

所在地:京都市西京区京都大学桂

スタッフ:教授 佐野紀彰 桂 A4-108

助教 鈴木哲夫 桂 A4-110

電話 (383)2664 FAX (383)2654

e-mail: sano@cheme.kyoto-u.ac.jp

(383)2674 (383)2654

e-mail: suzuki@cheme.kyoto-u.ac.jp

ホームページ: <http://www.cheme.kyoto-u.ac.jp/4koza>

研究概要: **－必要なものをピュアに, 有害なものを除去－**

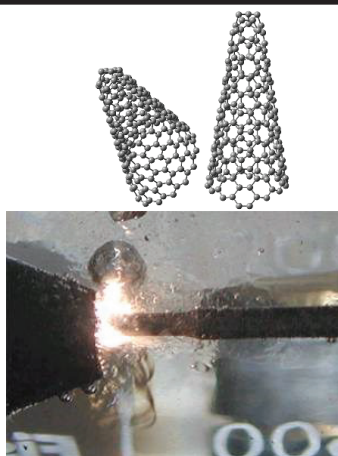
分離技術は化学工業などの種々の製造過程において存在する不純物を除去したり, 製品をピュアにしたり, 副生成物として発生する有害物等を除去する技術です. 超高度分離技術は半導体製造に代表される超微細加工を支えるキーテクノロジーの一つです. また分離技術は環境問題とも極めて関わりが深いと言えます. このため常に新技術の開発が求められています. 当研究室では新たな分離手法の開発をめざして吸着、乾燥操作、電場利用等による超高度物質精製・分離に関する研究を行っています.

## 最近の研究テーマ例

1. ナノカーボンの合成および環境・エネルギー利用
2. 超音波、電磁波の化学プロセスへの応用
3. 乾燥を基礎とした食品工学
4. 吸着現象・水和状態の分子論的研究

## 研究内容の紹介

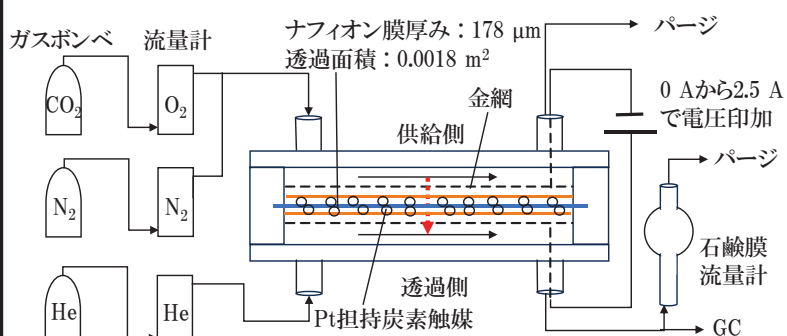
### ナノカーボンの合成および応用開発



カーボンナノチューブやカーボンナノホーンなどの炭素系ナノ材料を、独自に開発している方法で合成し、それらをガス燃料吸蔵材料、燃料電池、水質浄化技術などへ応用する研究を行っています。ナノ材料の低コスト化を実現し、その応用分野を広げるための成果を得るべく研究をしています。

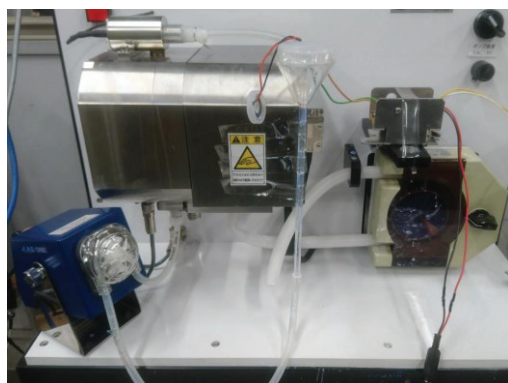
カーボンナノホーンの分子構造(上)とナノカーボン合成法である水中アーク放電の写真(下)

## 電気化学的 CO<sub>2</sub> 回収法の開発



電圧印加型分離膜実験装置の構造

近年、持続可能な社会の実現には種々の気体からの CO<sub>2</sub> の回収、利用が必要とされています。ここでは、独自の方法で新しい CO<sub>2</sub> 回収技術の開発を行っています。

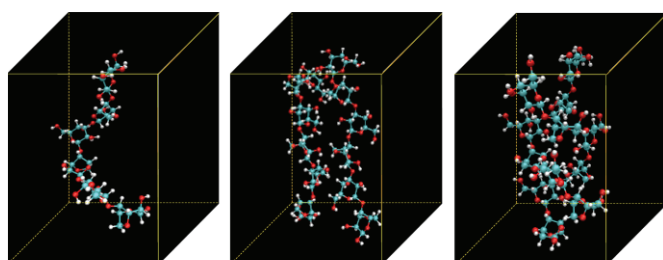


超音波分散機能を取り付けた超音波吸収スペクトルによる微粒子凝集度測定装置

## 超音波、電磁波の化学プロセスへの応用

超音波霧化、高周波誘導加熱、蛍光スペクトルやマイクロ波共振スペクトル等による乾燥過程のモニタリング等、化学工業に必要な乾燥過程に有用な新しい手法を開発しています。様々な物理現象を化学プロセスに応用する研究です。

## 吸着現象・水和状態の分子論的研究



アガロオリゴ糖のモデル構造の模式図  
(左:構造 1, 中央:構造 2, 右:構造 3)

分離工学や食品工学などにおいて有用な微視的知見を得ることを目標に、分子動力学法、分子軌道法などの計算機科学の手法を用いて、吸着現象や糖類高分子などの水和状態に関する熱力学および動力学の検討を行っています。

# エネルギープロセス工学研究室

研究内容：材料工学・熱/統計力学・情報・ナノテクノロジー

所在地：京都市西京区京都大学桂

電話

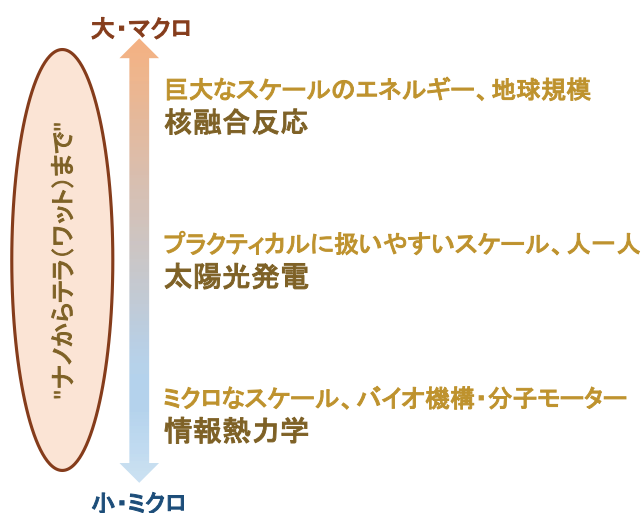
e-mail

スタッフ：教授 田辺克明 桂 A4-225 (383)2685 tanabe@cheme.kyoto-u.ac.jp

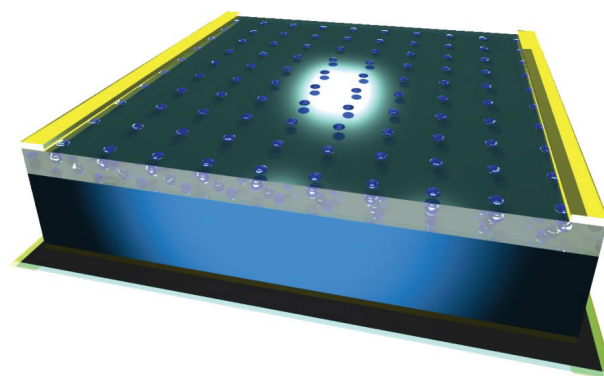
助教 宮本奏汰 桂 A4-221 (383)2700 s.miyamoto@cheme.kyoto-u.ac.jp

HP: <http://www.cheme.kyoto-u.ac.jp/5koza/>

研究概要：当研究室では、自然・再生可能エネルギー生成、高効率エネルギー利用など、資源および環境問題の解決につながる技術の開発を行っています。



マルチスケールエネルギー研究



ナノ構造を導入した太陽電池のイメージ

## 1. 高効率・低コスト太陽電池の開発

私たちの直面しているエネルギー資源枯渇問題と地球温暖化問題を解決するとして、太陽電池への期待が高まっています。しかし、太陽電池の大規模な普及には、現状からの大幅な高発電効率化と低コスト化が必要です。このようなニーズに応えるために、太陽電池の新規材料系の開拓や、低コスト作製法の提案と実証、また、新動作原理やセル構造の検討といった研究を行っています。

## 2. 水素貯蔵システムのモデル化および新規高性能実用装置の開発

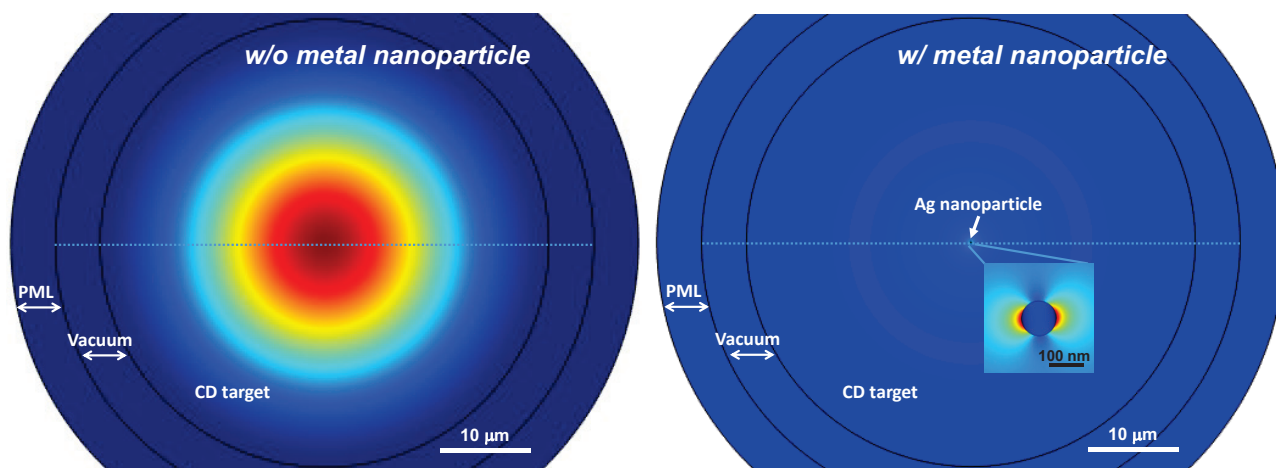
エネルギー面で持続可能な社会の実現に向け、ローカルな電力貯蔵技術の確立は重要です。高容量密度の水素貯蔵用途に金属のナノ構造体が近年注目を集めています。水素の吸脱着ダイナミクスモデリングを通し、律速素過程の理解から系全体としての水素吸着・吸収速度を大幅に高めるような新規工学手法の導入について理論・実験両面より検討していま



す。

### 3. 核融合発電システムに向けたナノ材料工学の研究

次世代エネルギーとして期待される核融合発電の実現には、過酷条件に耐える適切な反応器や熱機関、また、粒子循環系の構築が必要不可欠です。ナノ構造体や表面、界面の特性に着目し、炉材料や物質・熱輸送に関する研究を行っています。



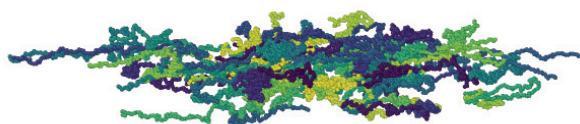
金属ナノ粒子を利用した高効率レーザー核融合システムのシミュレーション

### 4. 環境・情報熱エンジンナノデバイスの基礎的検討

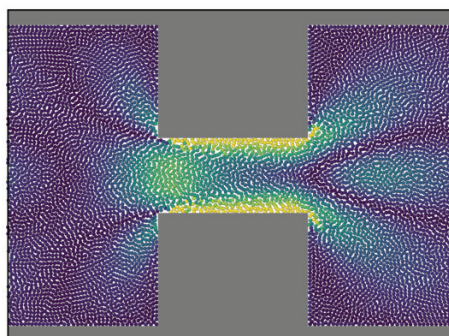
熱・統計力学をベースとし、情報や環境の秩序および熱的ゆらぎから仕事を取り出すようなナノスケールのエネルギー変換素子の基礎的検討を進めています。また、情報熱力学や非平衡統計力学の化学反応・プロセス、また、神経科学への適用の検討も行っています。

### 5. 複雑流体に対するマルチスケールな流動予測手法の検討

エネルギー的に最適な成形加工プロセスの実現を目標とし、複雑流体、特に高分子溶融体の流動挙動を予測する計算手法を開発しています。中でも、ミクロな分子モデルとマクロな流動予測を統合した、マルチスケールな方法論に興味があります。並行して、機械学習によって分子モデルから構成則を導出し、流動予測に用いる手法を検討しています。



分子モデル系のスナップショット



マルチスケール流動解析の例

# 材料プロセス工学研究室

研究内容： 材料プロセッシング・材料の構造発現と制御

所在地： 京都市西京区京都大学桂

スタッフ： 准教授 長嶺信輔 桂A4-104 電話 (383)2686 FAX (383)2646  
e-mail: nagamine@cheme.kyoto-u.ac.jp

研究室HP： <http://www.cheme.kyoto-u.ac.jp/6koza2024/>

## 研究概要

我々の身の周りは、プラスチックやセラミック、金属など多くの材料に囲まれています。これらの材料は用途に応じてブロック、繊維、粒子、フィルムなど様々な形態に成形され、組み合わされて用いられています。すなわち、機能性の高い材料を得るには、用途に適した性質を持つ物質の選定に加えて、その形態、構造を適切に制御することが重要です。材料プロセス工学研究室では、材料の形態、構造を制御し、機能を発現できるような材料作製プロセスの開発を行っています。

---

## 関連する化学工学と周辺学術分野

- ✓ 移動現象（運動量輸送、物質移動、伝熱）
- ✓ 物理化学（相分離、核生成・成長）
- ✓ 材料の力学的特性

---

## 研究テーマ例

- ✓ 植物由来ナノ材料（セルロースナノファイバー）利用技術の開発
  - ・ 表面修飾による樹脂補強剤としての高性能化
  - ・ 蓄熱材マイクロカプセルの開発
- ✓ 肉代替食品を志向した植物性タンパク質含有繊維の開発

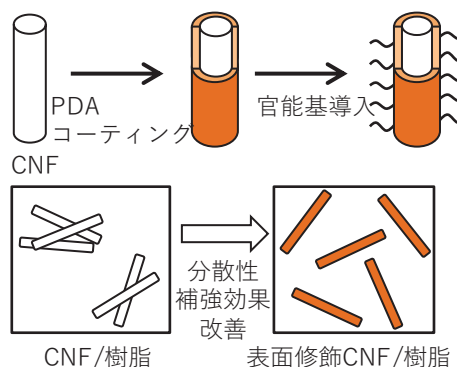
## 研究内容の紹介

### 植物由来ナノ材料（セルロースナノファイバー）利用技術の開発

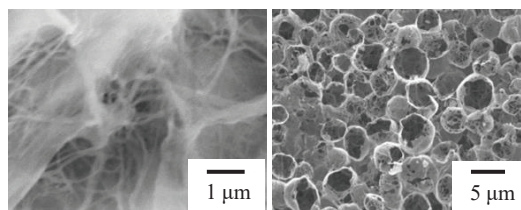
植物繊維を解繊して得られるセルロースナノファイバー(CNF)は、低環境負荷かつ高強度な繊維として樹脂補強剤などへの応用が期待されています。

本研究室では、ムール貝の接着タンパク質を模倣したポリドーパミン(PDA)を利用したCNFの表面修飾法を開発しています。CNFのPDAコーティング、官能基の導入によりCNFの表面特性を変化させ、樹脂補強剤としての機能を向上させることを目指しています。

また、CNFを殻材として利用したマイクロカプセルの作製を行っています。右の図は室温付近での融解潜熱により熱を蓄える物質をCNFでカプセル化した蓄熱マイクロカプセルの電子顕微鏡像です。



PDAによるCNFの表面修飾，樹脂補強効果改善の概念図

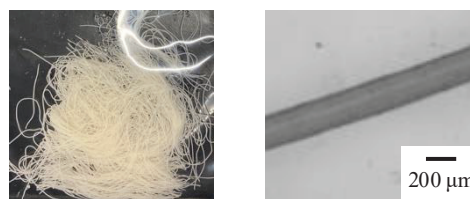


CNF，蓄熱材マイクロカプセルの電子顕微鏡像

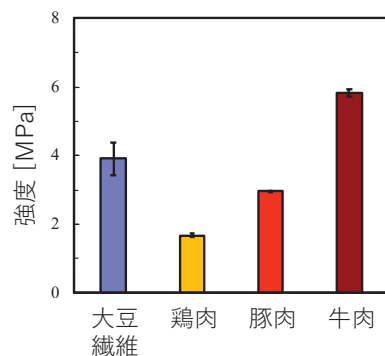
### 肉代替食品を志向した植物性タンパク質含有繊維の開発

人口増加や途上国の経済発展による食肉需要の拡大により、将来の食肉供給不足が懸念されています。この問題を解決する手段として植物性タンパク質を原料とした肉代替食品が注目を集めています。

本研究室では、食肉の筋繊維を模した大豆タンパク質含有繊維を開発し、より食肉に食感を近づけることを目指しています。右図は湿式紡糸法により作製した大豆タンパク質含有繊維の写真、および強度を実際の食肉と比較した結果です。



大豆タンパク質含有繊維



繊維と食肉との強度の比較



# プロセスシステム工学研究室

研究内容：プロセスシステム工学・マイクロ化学プロセス・環境調和型プロセス・  
ラボオートメーション・デジタルツイン

所在地：京都市西京区京都大学桂

スタッフ：教授 外輪 健一郎 桂 A4-124

電話

(383)2667

e-mail: sotowa@cheme.kyoto-u.ac.jp

講師 殿村 修 桂 A4-121

(383)2637

e-mail: tonomura@cheme.kyoto-u.ac.jp

研究概要： システムの合成と最適化  
ーマイクロ化学プロセスから地球環境までー

21世紀を迎え、環境問題が益々深刻化する社会情勢の中で、**省資源・省エネルギー化、環境負荷の最小化、高付加価値・高品質化**を同時に実現できる新しい生産システムの開発が必要とされています。

コンピュータや通信技術の進歩により、複雑な化学反応のダイナミクスを正確に予測したり、大量のプロセスデータをリアルタイムに活用できるようになりました。これを背景に、化学プロセスの最適設計・運転を支援するための最適化技術、制御・運転管理技術、データ管理・活用技術、情報処理技術などを最大限に活用したプロセスシステム工学技術の開発に関心が集まっています。当研究室では、**高度な最適化技術、プロセス設計技術、データ解析、機械学習、各種シミュレーション技術**などの多くの手法を活用し、次世代生産プロセスの設計、運転、診断、制御を行う知的支援システムの開発を行っています。例えば、プロセスを自動制御しながら特性を継続的に学習してデータベースに保存できる機械学習アルゴリズムの開発に注力しています。ほかにも、マイクロ流れ場を利用した新しい化学プロセスの研究開発を進めているほか、安価で柔軟性の高い自動化学実験のためのモジュールシステムの研究開発、環境調和型プロセス合成研究にも取り組んでいます。マイクロから地球環境までを対象としたマルチスケールな研究を通じて、人類の未来に貢献することを目指しています。

*Visit Our Web Site!!* <https://www-pse.cheme.kyoto-u.ac.jp/>

---

## ★ マイクロ化学プロセスの設計・計測・制御

直径 100 $\mu\text{m}$  の球の集合は、同体積の直径 1cm の球の 100 倍の表面積をもっています。反応や熱の移動は物質の界面で生じるため、微小流路からなる装置を利用すれば、極めて小さな装置で非常に効率的な物質生産を行うことができます。また、微小空間内では温度や滞留時間を精密に制御できるため、高品質な製品の生産も可能になります。私たちはこのような特徴をもつマイクロ化学プロセスの設計・運転・制御に関する方法論について研

究しています。たとえば、流体シミュレーションと最適化法を組合せて用いた流路構造・形状設計、デジタルツイン技術を用いた運転監視、ナンバリングアップによる生産量増大法についてシミュレーションと実験の両面から研究開発を進めています(図1参照)。また、マイクロ化学プロセスの研究開発で培った知見をフロー合成のためのサイエンスおよびエンジニアリングの構築に展開し、実験機器のIoT化によって柔軟に構成できる実験制御システムの開発などに取り組み、データ科学も活用しながらラボオートメーションを目指した研究を推進しています。

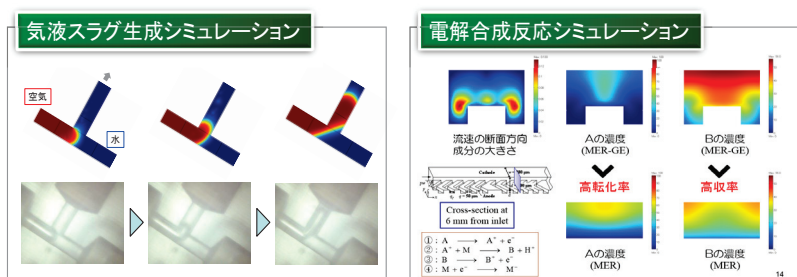


図1. マイクロ化学プロセスシミュレーション  
(左) 気液スラグ生成の非定常シミュレーションと可視化実験  
(右) 溝付電極を有する電解反応器の最適設計

図1. マイクロ化学プロセスの研究開発で培った知見をフロー合成のためのサイエンスおよびエンジニアリングの構築に展開し、実験機器のIoT化によって柔軟に構成できる実験制御システムの開発などに取り組み、データ科学も活用しながらラボオートメーションを目指した研究を推進しています。

## ★ プロセス強化のための化学装置設計法の開発

化学産業で素材生産に使用されている化学装置の基本構造は何十年も変わっていません。現代では他の産業と同様に、化学産業においてもより高い省エネルギー性、環境調和性が求められ、化学装置設計やプロセス設計の合理性について今一度根本から見直す必要があります。

私たちは化学における基本的な操作や現象を整理し、それらを組み合わせるというアプローチで、新規な化学装置・化学プロセスの開発を目指しています。たとえば、従来とは異なる原理で動作する省エネルギー型蒸留装置を考案し、その性能を実験およびシミュレーションの両面から明らかにしてきました。また、熱力学状態空間内経路最適化により時間的・空間的に最適な反応場を導出し、装置構造を仮定することなく段階的に反応器を設計する手法を応用した、高速複合反応系のためのテーラーメイドリアクタの設計に取り組んでいます。

## ★ 環境調和型化学システムの最適化

さらに大きな視点では、バイオマスなどの地域に分散する資源を有効に活用するための分散型化学プロセスの研究を進めています。

化石資源を主原料とする化学産業をサステイナブルにする1つの方策は原料を再生可能な物質にシフトすることです。バイオマスは再生可能であり、それを原料として各種の化学物質を製造する研究が進んでいます。このような技術を有効に活用するには、どの反応を、いつ、どこで実施するべきかを、コストや環境への影響を考慮して最適化する必要があります。我々はこのような問題の構造を解析し、最適条件を迅速に求めることができるシステムを開発しています(図2参照)。

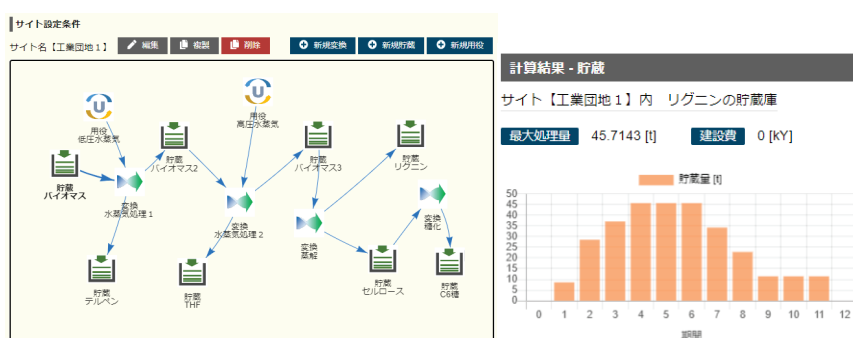


図2. バイオマスを起点とする化成品生産のためのサプライ・バリューチェーン最適設計システム

# 環境プロセス工学研究室

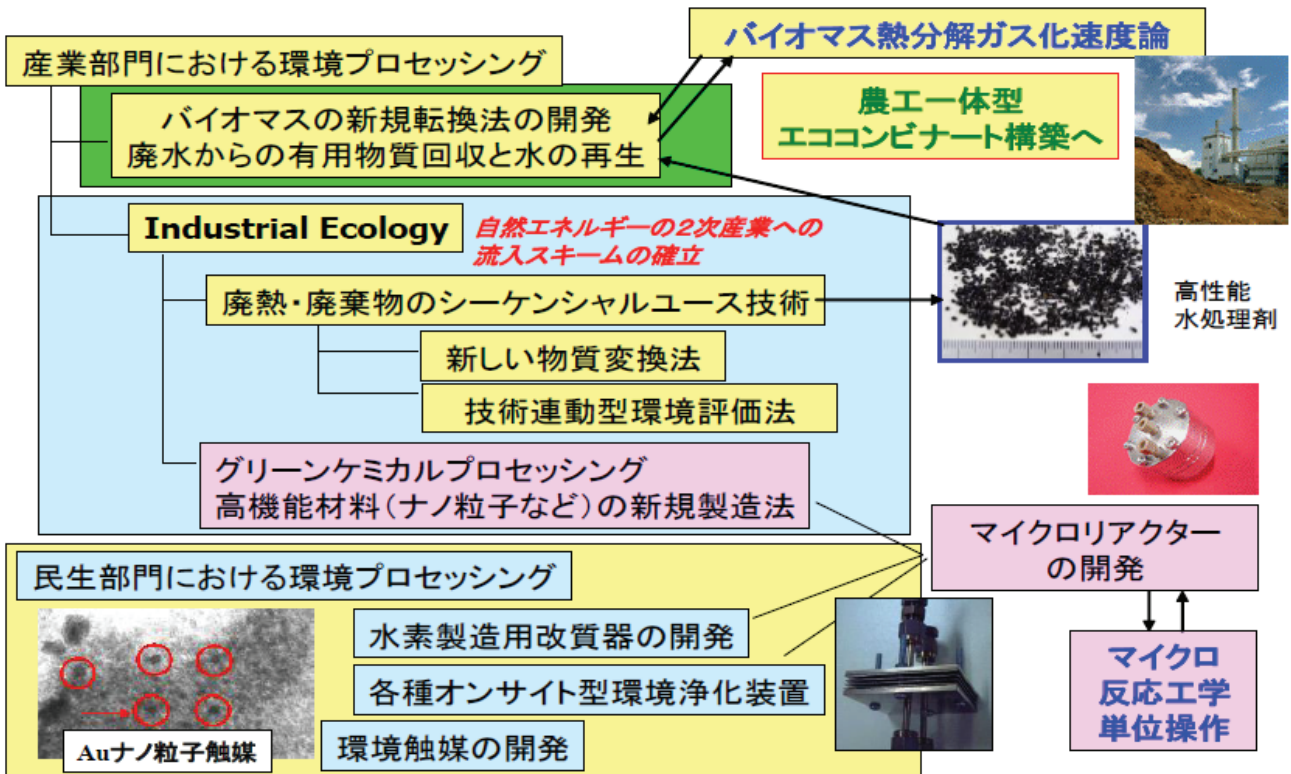
研究内容：環境プロセス工学・マイクロ化学工学・バイオマス転換・生分解プラスチック

所在地：京都市西京区京都大学桂

スタッフ：准教授 牧 泰輔 桂A4-013 電話 (383)2688 FAX (383)2638  
 e-mail: tmaki@cheme.kyoto-u.ac.jp  
 助教 村中陽介 桂A4-011 (383)2698 (383)2638  
 e-mail: muranaka@cheme.kyoto-u.ac.jp  
 HP : <http://www.cheme.kyoto-u.ac.jp/8koza/index.html>

研究概要：「新しい物質変換法に基づく次世代環境調和型プロセス確立」を目指して地球環境問題、エネルギー問題など、20世紀に発展してきた工業社会は随所に弱点を露呈しており、21世紀には工業技術体系のパラダイムシフトが必要であることは間違いない。すなわち、化石資源と再生可能資源を上手に使いながら、物質循環と環境負荷軽減のしくみを構築して地球上で共生できる産業体系を確立することこそ、工学者、技術者に与えられた使命である。本研究室では、上記の目的を達成していくために、化学工学基盤技術の開発と体系化を目指し、以下の研究を重点的に推進している。

- (1) バイオマスの合理的転換技術の開発
- (2) 各種マイクロリアクターの開発とマイクロ化学工学の体系化
- (3) CO<sub>2</sub>削減革新プロセスの開発





## 研究テーマ

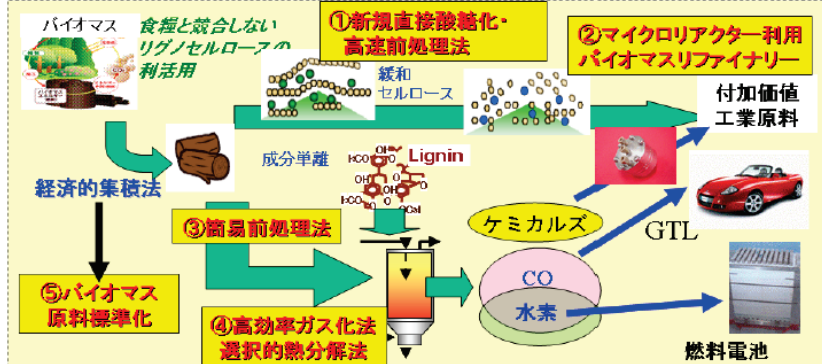
### 1) バイオマスの合理的変換技術の開発

- (a) バイオマスの各種前処理法の開発、
- (b) バイオマス成分からのモノマー製造法の開発
- (c) バイオマスの迅速熱分解の開発と熱分解・ガス化速度論
- (d) バイオマスを基軸にしたコンビナート検討

#### 環境調和時代の新生産技術の開発①

##### バイオマスの新転換技術の開発

バイオマスからモノマー、ポリマー製造！



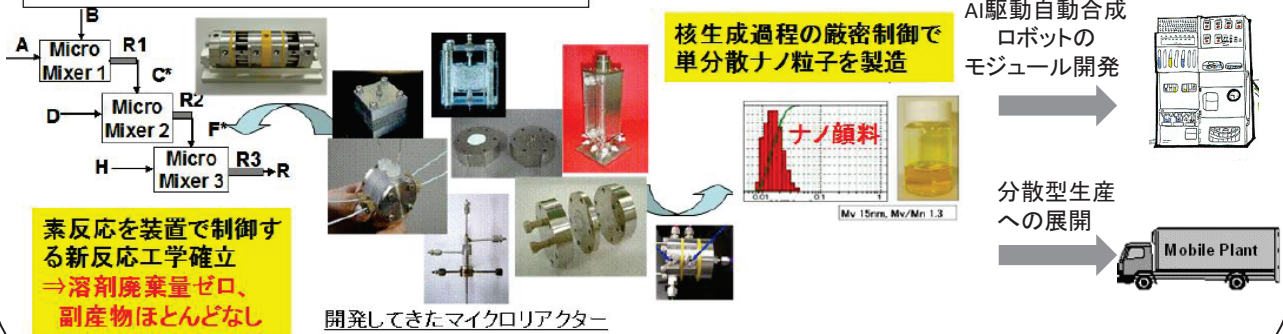
バイオマス成分を全て高効率でエネルギー、高付加価値化学物質に変換していく技術をベースに、バイオマスを環境調和型地域分散型社会の構築へ

### 2) 各種マイクロリアクターの開発とマイクロ化学工学の体系化

- (a) 各種マイクロデバイスの開発、 (b) マイクロ反応工学の新規設計操作論の確立
- (c) ナノ粒子の厳密製造法、 (d) 環境浄化オンサイト型マイクロリアクターの開発

#### 環境調和時代の新生産技術の開発②

##### マイクロリアクターの開発と設計操作論



### 3) CO<sub>2</sub>削減革新的プロセスの開発

#### 研究例

- ・CO<sub>2</sub>フリー化成品製造モジュール型コプロダクションプロセスの開発
- ・メタン熱分解によるCO<sub>2</sub>フリー水素製造
- ・インクジェット反応器を用いたオンデマンド合成法の開発
- ・高分子構造に立脚した生分解性プラスチックの分解挙動に関する反応工学的検討

## 環境安全工学研究室

研究内容 : 炭素固定・炭素担持金属触媒・活性ラジカル種

所在地 : 京都市西京区京都大学桂

電話 FAX

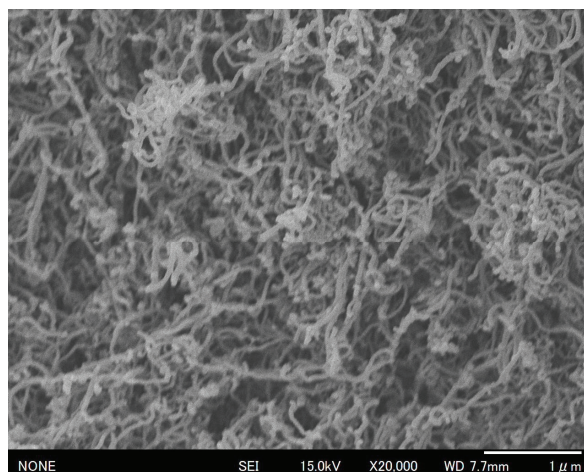
スタッフ : 准教授 中川浩行 EM センター棟 215 (383)7347 (383)7354

e-mail: [hiroyuki@cheme.kyoto-u.ac.jp](mailto:hiroyuki@cheme.kyoto-u.ac.jp)

### 研究概要 :

地球温暖化防止の観点から、厳しい CO<sub>2</sub> の排出抑制が国際的に取り決められており、そのための技術開発が強く求められています。化石資源に関しては、高効率に利用するとともに CO<sub>2</sub> の排出を極力抑制できるプロセスの開発が必要です。廃棄物の処理に関しても広く一般的に行われている単純な焼却処分は避けなければなりません。本研究室では、低炭素社会構築のため、CO<sub>2</sub> の排出抑制と効率的な水素生成、革新的な省エネルギーの観点から実験とシミュレーションを通してプロセスの開発に取り組んでいます。

水素の利用は非常に重要な技術ですが、すべてを水の電解で賄うのは現状では不可能です。そのため、炭化水素資源の利用が不可欠と考えていますが、CO<sub>2</sub> の排出量を極力抑制する必要があります。そこで、熱分解を利用して炭化水素資源中の炭素を安定な固体炭素として固定化する技術の開発を行っています。この方法ではカーボンナノチューブ (CNT) を製造することも可能で、機能性炭素材料としての利用も考えられます。また、ポリエチレンなどの廃プラスチックは水素



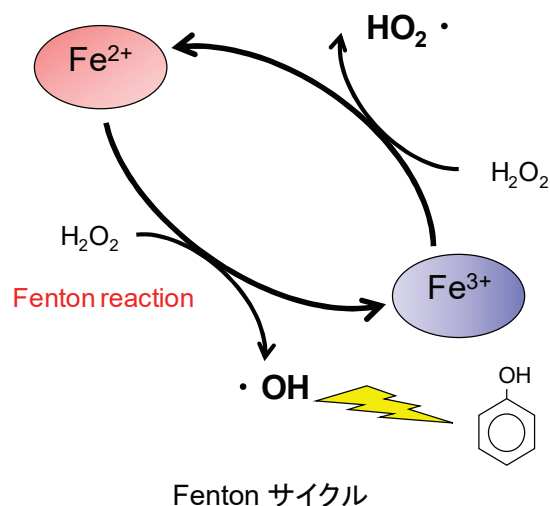
メタンより製造した CNT

源だけでなく、モノマーへの転換もできるので、ケミカルリサイクルの促進にもなります。

水素は液化が難しいため、他の化合物に転換してから運ぶ水素キャリアの開発も水素利用で重要な技術です。本研究室で開発した炭素担持金属触媒を用いて 100℃以下の低温でギ酸を分解し、効率的に水素を得る技術を開発しています。また、CO<sub>2</sub> を吸収するとともに水素との反応でメタンを生成する Dual-Function Materials (DFM) として炭素担持金属触媒を利用する技術の開発も行っています。

革新的な省エネルギーの手法の一つとして、活性ラジカル種の活用があげられます。OH

ラジカルに代表される活性ラジカルは、酸化（反応）活性が非常に高く、通常では高温でないと進行しない酸化反応を室温で進行させることができます。高温反応場は、工業的には燃焼を利用しており、これを室温で行えば、プロセスの安全性やエネルギー効率の飛躍的な向上が期待できます。活性ラジカル種は、触媒による過酸化水素の活性化（Fenton 反応）を利用しています。活性ラジカルを利用して、酸化分解反応をコントロールし、バイオマス廃棄物を有用な化学物質に転換することや、燃料電池の高分子電解質膜の劣化機構をこのような活性ラジカル種を用いて実験とシミュレーションから検討しています。



## 研究テーマ例

### 1) 熱分解を利用した炭素固定化技術の開発

- ・担持鉄触媒を用いたメタンの接触熱分解による水素とカーボンナノチューブの製造
- ・多孔質炭素基材上での炭素析出を利用した廃プラスチック、バイオマスの炭素固定と水素、化学原料源の製造
- ・吸水性ポリマー（ポリアクリル酸）の熱処理による可溶化と機能性材料への転換

### 2) 新規な炭素担持金属触媒の開発

- ・炭素担持 Pd 触媒を用いたギ酸の液相分解による水素生成
- ・炭素担持 Ni/Na 触媒による排ガスからの二酸化炭素の回収およびメタネーションによる CCUS プロセスの開発

### 3) Fenton 反応の制御手法の開発と応用

- ・鉄イオンの還元による Fenton サイクルの促進技術の開発
- ・Fenton 酸化による有機物の過分解抑制手法の開発とリグニンからのジカルボン酸の製造
- ・燃料電池用固体高分子電解膜の Fenton 反応による化学劣化過程の検討と化学劣化シミュレーターの開発



# 動的界面化学研究室

研究内容：界面化学・コロイド・相互作用・フォース測定

所在地：京都市西京区京都大学桂

スタッフ：教授 マクナミー キャシー 桂A4-222 電話 (383)2635 e-mail Menamee.cathy.8r@kyoto-u.ac.jp

HP：作成中

## 研究概要：

化学、製薬、食品、セラミック、鉱物、バイオテクノロジー等の産業では、コロイド（およそ $1 \times 10^{-6}$  m未満の微粒子）が液体中に分散されたり凝集したりしている多くのアプリケーションがあります。コロイド間に作用する力は、コロイドが分散するか凝集するかを決定します。反発力は分散を引き起こし、引力は凝集を引き起こします。コロイド系の力を変化・制御することで、様々なアプリケーションにおいて、希望の特性を得ることができます。

製品の製造では、混合、濃度変化、化学反応などの非平衡条件下での処理が必要とされます。また、多くの製品は、温度変化や磁場、電場の存在する非平衡な環境で使用されています。平衡状態から非平衡状態になると、コロイド系に働く力も変化します。

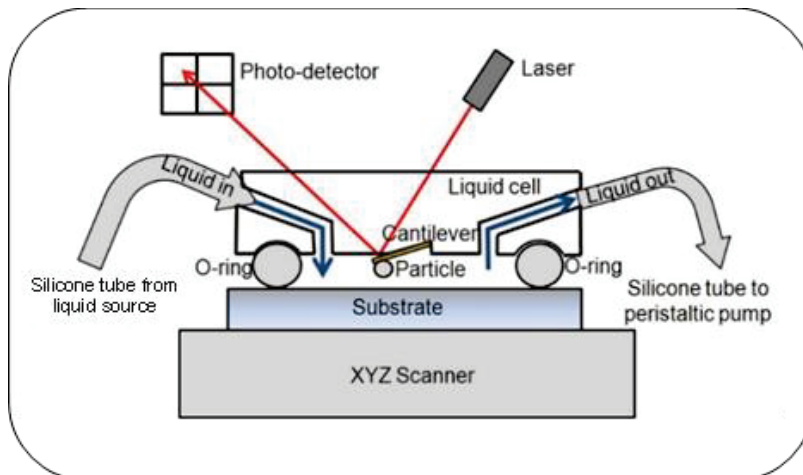
マクナミー研究室では、非平衡状態でのコロイド系に作用する力がどのように変わるかを実験的に研究しています。また、次の目標も持っています：

1. コロイド系に作用する力を変化・制御する方法を見つけ、コロイド系全体の物理的特性を自在に変化できるようにする。
2. 界面に働く力をうまく利用して、希望の物理特性を持つ薄膜を設計・製造する。

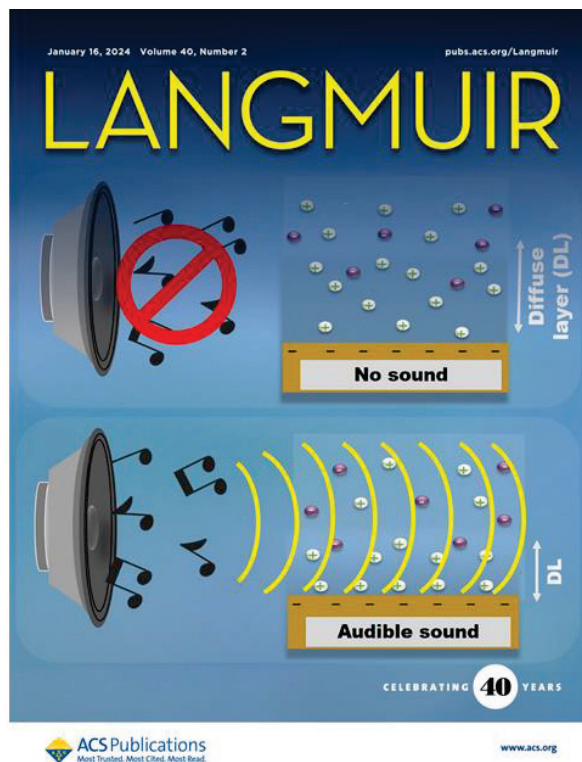
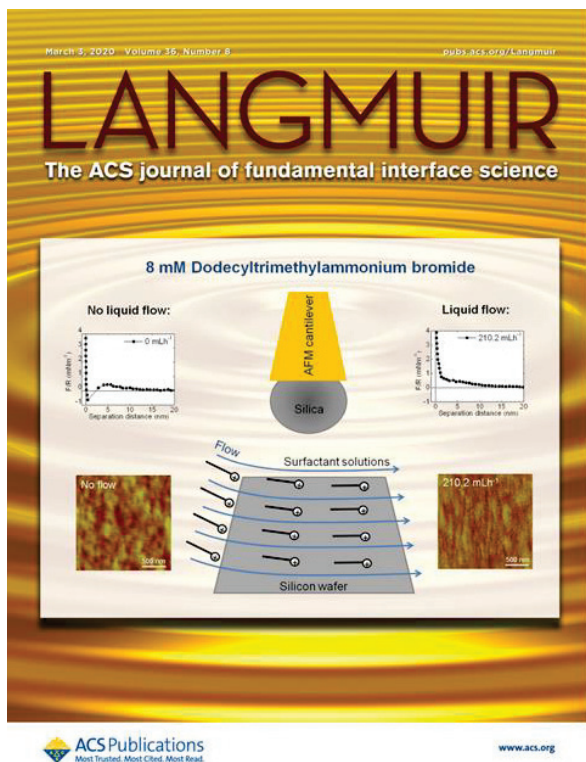
## 研究トピック1.

液体中の表面間に作用する力への非平衡性の影響

原子間力顕微鏡というナノスケールでの測定が可能な装置(下図)を用いて、液体中の表



面間に働いている力を直接測定します。平衡および非平衡状態では、表面間に働いている力が異なることを発見しました(下図)。非平衡状態とは、例えば外部からの刺激(例:音、電場、磁場)がかかっている状態や、表面が物理的に動いている状態(例:2つの表面を滑らせて摩擦を生じさせる、表面を振動させる)、または液体が流れている状態です。



## 研究トピック2.

界面に働く力をうまく利用して、希望の物理特性を持つ薄膜を設計・製造すること

気体-液体または固体-液体の界面で薄膜を作製することで、薄膜の物理特性を制御する方法を開発しています(右図)。薄膜が関係する界面(気体-液体または固体-液体)に働く力は、薄膜の構造や物理特性に反映されます。界面に働く力は液体の特性や外部刺激(例:電場、磁場)によってコントロールします。希望の物理特性を持つ薄膜を自在に設計・製造する方法の開発を目指して研究を行っています。



# 移動現象論研究室

研究内容: 物理化学基礎・非平衡現象論・アクティブマター・機械学習

所在地: 京都市西京区京都大学桂

スタッフ: 教授 前多裕介 桂 A4-019

電話 (383)2666

e-mail: [maeda@cheme.kyoto-u.ac.jp](mailto:maeda@cheme.kyoto-u.ac.jp)

助教 別府航早 桂 A4-019

電話 (383)2549

e-mail: [kazusa.bepu@cheme.kyoto-u.ac.jp](mailto:kazusa.bepu@cheme.kyoto-u.ac.jp)

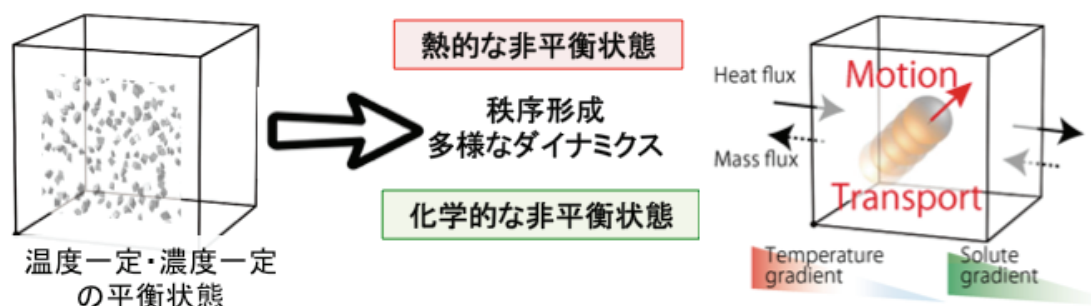
ホームページ: <https://nl.n.kyoto-u.ac.jp/>

## 研究概要: 生命システムの物理学をベースにした化学工学の開拓

私たちの研究室は、2024年度に新しくできる研究室です。物質から生命まで幅広い系を対象とし、**分子・エネルギー・情報の流れを扱う移動現象論**を探求するとともに、複雑な移動現象の制御と社会実装を目指しています。

皆さんが学部授業で学ぶ化学や物理学では多くの場合、熱平衡系や化学平衡系を対象とし、力と変位が比例関係で結ばれている線形・平衡な系を扱います。これらの系に関する物理化学では、調和する自然の摂理を美しい方程式で表し、巧みな制御と社会実装をつなげる学問に体系化されています。しかし制御原理が未知の物理化学現象も数多くあり、生きている細胞でおこる生命現象では、線形・平衡な世界ではみられないパターン形成や自発的な流れと運動が現れることが知られています。このように、物質・エネルギー・情報を変換し、熱平衡から離れた状況で動作するシステムを非平衡系といいます。

非平衡系には不思議な現象が数多く見られます。高効率なエネルギー変換を示す分子モーター、規則的なパターンが生まれる化学反応系、自発運動する微粒子の群れによる高パフォーマンス性など、物質と生命の境界には新たな化学工学の研究領域が広がっています。以下では、当研究室で行われている幾つかの研究テーマについて紹介します。

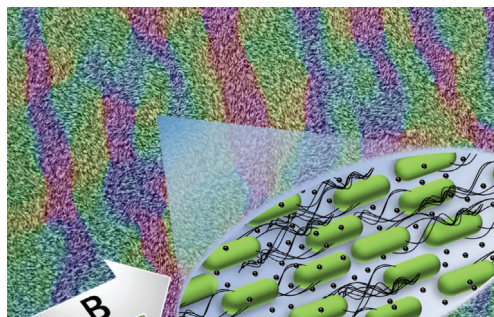


物質・エネルギー・情報の流れの法則を解明し、複雑な移動現象を制御する工学を開拓



### ➤ 非平衡系の移動現象論

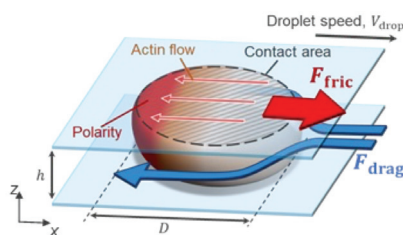
自発的に動く物質群が集団となると複雑な集団運動や乱流ダイナミクスが出現し、その物理法則の理解は近年の非平衡物理学の重要な課題—アクティブマターの物理学—となっています。従来の移動現象論を自律的な非平衡系に拡張するべく、アクティブマターの乱流ダイナミクスについて実験・理論・計算の融合的手法で研究を進めています。乱流状態の流れの無秩序さ、しかしその背後にある非自明な秩序性に着目し、非平衡系の移動現象論に資する物理学と化学工学の開拓を目指しています。



アクティブマターの乱流の理解と磁場制

### ➤ 非平衡系の生物物理学

モータータンパク質は化学的エネルギーを力学的な運動エネルギーに変換し、力を発生するナノスケールの高性能分子モーターであることが知られています。この分子モーターは細胞内の構造物の配置、細胞の運動、細胞の変形と分裂などのダイナミクスを制御するだけでなく、その自律的な動作にはエネルギーと情報処理を通じた制御も関与すると考えられています。分子モーターのエネルギー論的な理解、分子モーター集合体による生命現象の理解を目指し、微小なスケールにおける物質・エネルギー・情報の流れについて研究を進めています。



Balance of contractile force and viscous d

$$F_{\text{fric}}^{\text{contact}} + F_{\text{drag}} = 0$$

Contractile force  $F_{\text{fric}}^{\text{contact}} = 2 \int_{\pi R^2} \sigma_{\text{act}} dS$

Viscous drag  $F_{\text{drag}} \simeq \eta_{\text{oil}} \nabla^2 v_{\text{oil}} (\pi R^2 h)$

分子モーターから考える生命現象の物理学・化学工学・エネルギー論

### ➤ 非平衡系の計算化学工学

非平衡現象を理解する上でシンプルなモデル化は有効な手法ですが、より複雑な現象を明らかにするにはデータ科学的な予測もまた有効なアプローチとなりつつあります。私たちの研究対象はよく制御された実験系にあるため、探索しうる最大数の入力条件を与え、結果得られる大規模な画像データから普遍的モデルを帰納的に解析し理解することが新たな手法として考えられます。このような動機から、実験と組み合わせた大規模画像データの解読とモデル予測、物質・エネルギー・情報の流れの理解にデータ科学の可能性を追求し、化学工学に資する計算機技術の研究を進めています。

### 研究テーマの例

- 実験・理論・計算によるアクティブマターの物理学的研究
- 非平衡統計力学に基づく分子モーターのエネルギー論
- 自律的移動現象を軸とする細胞集団と組織形成の研究
- 機械学習と高速画像処理による計算化学工学の開拓

# スタッフ名索引 (五十音)

## 【あ】

秋山みどり	助教	分	89
秋吉美里	助教	分	57
蘆田隆一	講師	化	127
跡見晴幸	教授	合	115
安部武志	教授	物	63
阿部竜	教授	物	71
井口翔之	特定准教授	分	87
イーサン・シバニア	教授	分	99
石田紘一朗	助教	分	55
石田直樹	教授	合	107
磯崎勝弘	准教授	物	77
伊豆仁	助教	物	81
井田大地	准教授	高	49
伊藤峻一郎	助教	高	43
伊藤真陽	助教	分	99
猪瀬朋子	准教授	合	117
今堀博	教授	分	89
浦谷浩輝	特定助教	分	85
浦山健治	教授	材	33
永樂元次	教授	高	59
大内誠	教授	高	41
大江浩一	教授	物	67
大木出	特定准教授	分	93
大木靖弘	教授	物	81
大北英生	教授	高	47
大串雅俊	准教授	高	59
太田航介	特定助教	分	97
大谷俊介	助教	合	103
大前仁久	講師	材	35
大宮寛久	教授	材	27
小川紘樹	准教授	高	53
奥村慎太郎	助教	合	107
小田原真樹	特定准教授	材	35
小生越友樹	教授	合	103
小山宗孝	准教授	材	31

## 【か】

陰山洋	教授	物	61
梶弘典	教授	分	95
柏原美勇斗	助教	材	29
加藤研一	助教	合	103
加藤大地	助教	物	61
川口健次	特定准教授	エネ	121
河瀬元明	教授	化	127
木村祐亮	准教授	物	69
窪田亮毅	講師	合	109
古賀毅	教授	高	51
小島之幸	講師	高	51
近藤広輝	教授	物	69
権正行	助教	高	43

## 【さ】

崔旭鎮	特定助教	分	91
坂本遼	特定助教	物	63
佐々木善浩	教授	高	45
作花哲夫	教授	物	65
佐藤章	准教授	合	115
佐藤徹	教授	分	97
佐藤啓文	教授	分	85
佐野彰	教授	化	129
重松英	特定准教授	分	93
志津功	助教	分	95
柴崎和	助教	高	53
清水大	助教	合	105
清間雅	助教	材	23
下間靖彦	准教授	材	23
杉野目道紀	教授	合	101
杉山佳奈美	助教	分	85
杉安和	教授	分	39
鈴木克明	助教	高	95
鈴木哲夫	助教	化	129
関波修平	教授	物	71
仙一	講師	分	91
外輪健一郎	教授	材	73
		化	135

## 【た】

高井茂臣	准教授	エネ	119
高橋重成	准教授	合	111
高津浩	准教授	物	61
竹中幹人	教授	高	53
竹俣直道	助教	合	115
田中一	教授	高	43
田中勝久	教授	材	25
田中隆行	准教授	分	91
田中啓之	特定准教授	分	95
田中明志	教授	化	131
谷口貴樹	准教授	化	123
谷藤一	助教	物	81
田村朋則	講師	合	109
チン・デタ	助教	分	99
辻優衣	助教	材	35
辻井敬	教授	高	55
辻本尚大	特定助教	物	63
筒井祐介	助教	分	91
寺島崇矢	准教授	高	41
寺田佳世	特定助教	材	35
寺村謙太郎	教授	分	87
寺登雅	准教授	高	57
殿村修	講師	化	135
道場貴大	助教	物	77
富田	助教	物	71

				<b>【な】</b>				
中	尾	佳	亮	教授	材	29		
中	川	浩	行	准教授	化	139		
中	川	由	佳	助教	物	77		
中	田	明	伸	講師	物	71		
中	西	洋	平	助教	高	53		
中	村	秀	樹	特定准教授	合	109		
中	村	正	治	教授	物	77		
中	村	洋	洋	教授	高	49		
長	嶺	信	輔	准教授	化	133		
浪	花	晋	平	助教	分	87		
成	瀬	晨	司	特定助教	物	75		
西	川	直	哉	准教授	物	65		
西	川	剛	理	助教	高	41		
西	川	哲	理	助教	分	93		
沼	田	圭	司	教授	材	35		
野	中	洋	之	准教授	材	31		
野	平	俊	之	教授	エネ	121		
野	村	幸	汰	特定准教授	材	35		
法	川	勇	太郎	助教	エネ	121		

				<b>【は】</b>				
橋	川	祥	史	助教	物	79		
橋	爪		脩	助教	合	113		
濱	地		格	教授	合	109		
春	田	直	毅	特定准教授	分	97		
東	口	顕	士	講師	合	105		
東	野	智	洋	准教授	分	89		
平	出	翔	太郎	助教	化	125		
廣	瀬	崇	至	准教授	物	79		
深	澤	愛	子	教授	物	83		
深	谷	菜	摘	助教	高	39		
藤	田	晃	司	教授	材	21		
藤	墳	大	裕	助教	化	127		
藤	原	哲	晶	教授	物	73		
藤	原	正	規	特定研究員	分	93		
船	戸	洋	佑	准教授	合	113		
古	川	修	平	教授	合	117		
古	谷		勉	助教	高	51		
別	府	航	早	助教	化	143		
堀	中	順	一	准教授	材	33		

				<b>【ま】</b>				
前	多	裕	介	教授	化	143		
牧		泰	輔	准教授	化	137		
マク	ナ	ミ	ー	教授	化	141		
松	井	敏	明	准教授	物	75		
松	田	建	児	教授	合	105		
三	井	優	輔	助教	高	59		
三	浦	清	貴	教授	材	23		
三	浦	理	紗	助教	物	69		
三	木	康	嗣	准教授	物	67		
三	木	裕	明	教授	合	113		
水	落	憲	和	教授	分	93		
水	峰	田	涼	助教	高	45		
峰	尾	恵	人	助教	物	77		

宮	崎	晃	平	准教授	物	63	
宮	原	雄	人	助教	物	63	
宮	本	奏	汰	助教	化	131	
村	田	靖	次	教授	物	79	
村	中	陽	介	助教	化	137	
森	岡	直	也	准教授	分	93	
森	本	大	智	助教	分	85	

				<b>【や】</b>				
藪	塚	武	史	講師	エネ	119		
山	口	大	輔	講師	分	99		
山	子		茂	教授	高	57		
山	本	俊	介	准教授	高	47		
山	本	貴	之	講師	エネ	121		
山	本	武	司	講師	合	101		
山	本	量	一	教授	化	123		
横	山	悠	子	助教	物	65		
良	永	裕	佳	助教	合	101		
吉	田		傑	特定准教授	物	61		

				<b>【ら・わ】</b>				
領	木	研	之	助教	高	49		
渡	邊		哲	准教授	化	125		
渡	邊	雄	一郎	助教	高	39		

				<b>【アルファベット表記】</b>				
Ernst D. Herbschleb		特定助教	分	93				
GP・ナマシヴァヤム		講師	分	99				
Huiying Mu		助教	物	67				
John Molina		助教	化	123				
KIM Hyung Do		助教	高	47				
Kira Landenberger		講師	高	37				
Mai Thanh Tam		特定助教	材	33				
Nguyen Thanh Phuc		講師	分	85				
OKTAVIANI, NurAlia		特定助教	材	35				
PINCELLA Francesca		講師	物	77				
Samitha Rao Yagi		特定助教	材	35				
Tong Zhu		特定助教	物	61				
YI Wei		准教授	材	21				