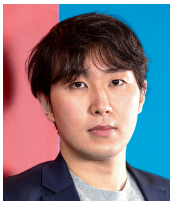
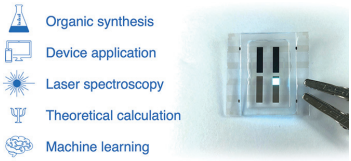
電気で光る有機物

キーワード 有機発光材料、有機 EL、励起状態、レーザー分光、量子化学計算、機械学習

相澤 直矢 AIZAWA Naoya

応用化学専攻 助教
物質機能化学講座 有機電子材料科学領域 中山研究室





ここがポイント！【研究内容】

次世代ディスプレイや照明として期待されている有機 EL (Organic Light-Emitting Diode) の研究に取り組んでいます。電気エネルギーによって有機物を光らせる―この一見単純な目的のために、有機合成からデバイス応用までの多分野を横断した研究を行い、ときには高速レーザー分光や量子化学計算、機械学習を活用することで、デバイス性能の飛躍的な向上に繋がる学理の樹立を目指しています。最近の成果として、「従来の 100 倍速い逆項間交差を示す熱活性化遅延蛍光材料」や「励起一重項と三重項のエネルギーが逆転した新しい発光材料」の開発に成功しました。

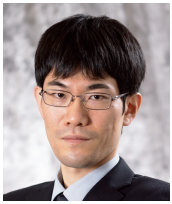
応用分野	オプトエレクトロニクス、エネルギー、有機材料
論文・解説等	[1] N. Aizawa *et al.*, *Nature*. 609, 502–506 (2022). [2] N. Aizawa *et al.*, *Sci. Adv.* 7, 5769 (2021). [3] N. Aizawa *et al.*, *Nat. Commun.* 11, 3909 (2020).
連絡先 URL	https://www.n-aizawa.com

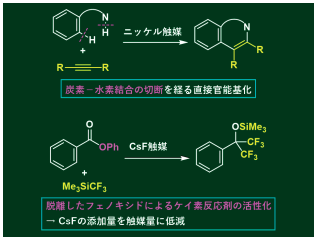
均一系金属触媒を用いた効率的な有機合成手法の開発

キーワード 有機合成、均一系金属触媒、原子効率

阿野 勇介 ANO Yusuke

附属アトミックデザイン研究センター／応用化学専攻 助教
分子創成化学講座 分子設計化学領域





ここがポイント！【研究内容】

- 均一系金属触媒を用いた炭素－水素結合や炭素－炭素結合の切断を経る、有機化合物の直接変換手法を開発しています。本手法は、複雑な骨格を有する有機化合物の精密な変換や合成終盤における効率的な官能基導入への応用が期待できます。
- 有機ケイ素反応剤をはじめとする、取り扱いが容易な反応剤の触媒的な活性化を利用した効率的な有機合成手法の開発を試みています。
- 金属触媒反応の開発を通して、有機化合物の新たな反応性の開拓に取り組んでいます。

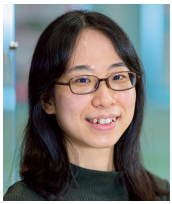
応用分野	医農薬品開発分野、有機材料開発分野
論文・解説等	[1] Obata, A.; Ano, Y.; Chatani, N., *Chem. Sci.* 2019, 10, 3242. [2] Ano, Y.; Chatani, N., *Org. React.* 2019, 621. [3] Takahashi, K.; Ano, Y.; Chatani, N., *Chem. Commun.* 2020, 56, 11661.
連絡先 URL	http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~chatani-lab/index.html

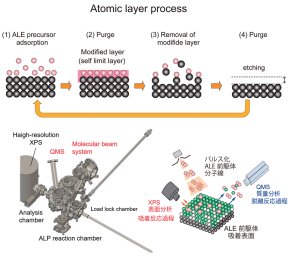
プラズマ支援アトミックレイヤープロセス構築のためのプラズマ表面反応の解明

キーワード アトミックレイヤープロセス反応、プラズマ表面反応の解明、プラズマプロセス技術

伊藤 智子 ITO Tomoko

マテリアル生産科学専攻 助教
附属アトミックデザイン研究センター 浜口研究室





ここがポイント！【研究内容】

現在、デバイスの微細化の進展に伴い、デバイスの構造は、より多様で複雑に、且つ、求められる加工寸法は原子スケールまでに到達しつつあり、原子層一層一層を自由に且つ精密に制御するプラズマ支援アトミックレイヤープロセス技術の開発が切望されています。
プラズマ支援アトミックレイヤープロセスの開発には、原子レベルでの活性種 - 固体表面相互作用の理解が必須であり、独自に in-situ 表面反応解析システムを開発し、世界に先駆けてプラズマ支援アトミックレイヤープロセス反応の解明を目指しています。

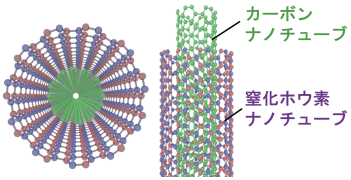
応用分野	半導体プラズマプロセス、プラズマバイオプロセス
論文・解説等	[1] Hu Li, Tomoko Ito, *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 59, SJJA01-01- SJJA01-09 (2020). [2] Tomoko Ito *et al.*, *Plasma Medicine*, 5, 283-298 (2015). [3] Tomoko Ito *et al.*, *J. Vac. Sci. Technol.*, A 31031301-1-6 (2013).
連絡先 URL	http://www.camt.eng.osaka-u.ac.jp/hamaguchi/

ナノ材料のヘテロ構造化による機能設計

キーワード 低次元ナノ材料、化学気相成長法、カーボンナノチューブ、グラフェン、窒化ホウ素

井ノ上 泰輝 INOUE Taiki

物理学系専攻 助教
応用物理学講座 ナノマテリアル領域 小林研究室



ここがポイント！【研究内容】

- 単層カーボンナノチューブをテンプレートとして、その表面に窒化ホウ素ナノチューブなどの異種物質を化学気相成長することで、新たなヘテロ構造化ナノ材料を開発。
- 電気・熱・機械特性などの異なる種々の原子層物質を組み合わせて、直径数 nm の同心チューブ構造として一体化することが可能。
- 今後、構造制御合成技術の高度化と物性計測を行うことで、所望の特性を持つナノ材料を自在に得る手法を確立し、多様な用途への応用展開を目指す。

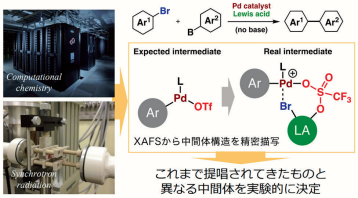
応用分野	電子デバイス、エネルギー変換、構造材料
論文・解説等	[1] R. Xiang#*, T. Inoue#, Y. Zheng#, *et al.*, *Science*, 367, 537 (2020). [2] H. Arai, T. Inoue*, *et al.*, *Nanoscale*, 12, 10399 (2020). [3] P. Wang, Y. Zheng, T. Inoue*, *et al.*, *ACS Nano*, 14, 4298 (2020).
連絡先 URL	http://www.ap.eng.osaka-u.ac.jp/nanomaterial/~inoue/index.html

溶媒中での構造解析を基盤とする均一系触媒化学の高度化

キーワード 有機合成化学、金属触媒化学、ナノ粒子触媒、反応機構解析

植竹 裕太 UETAKE Yuta

応用化学専攻 助教
物質機能化学講座 物理有機化学領域 櫻井研究室



ここがポイント！【研究内容】

- 有機金属触媒化学、放射光を用いる先端構造解析、理論計算化学を駆使することで、これまでブラックボックスになっていた触媒の溶液中での構造・挙動を明らかにし、“高活性”な触媒の起源を探るとともにさらなる高度化を実施。
- 均一系金属触媒を主としたXAFS研究において大学内外で共同研究を実施しており、今後、実験機器の整備、装置開発を進めることで多様な反応条件で実施可能に。
- セルロースやキトサンといった生体高分子や、水酸化フラーレンといった一風変わった保護分子を用いたナノ粒子触媒を開発。今後その応用展開を進める。

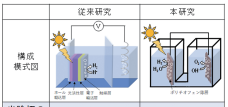
応用分野	ファインケミカル合成化学、触媒化学分野、材料化学
論文・解説等	[1] *J. Am. Chem. Soc.* 2022, 144, 8818–8826. [2] *Naure Catal.* 2021, 4, 1080–1088. [3] *Chem. Eur. J.* 2021, 27, 17952–17959.
連絡先 URL	https://www-chem.eng.osaka-u.ac.jp/~sakurai-lab/

クリーンエネルギー製造に向けた革新的触媒としての導電性高分子

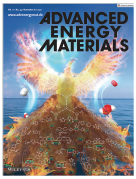
キーワード クリーンエネルギー、導電性高分子、超分子、触媒

岡 弘樹 OKA Kouki

附属フューチャーイノベーションセンター／応用化学専攻 助教
物質機能化学講座 構造物理化学領域 藤内研究室



欧州国際誌 表紙にも掲載！



ここがポイント！【研究内容】

- クリーンエネルギー（水素や過酸化水素）を水や空気からつくりだせる簡便かつ持続可能な方法。
- 空気と水から新型コロナウイルスをも撃退可能な消毒液（過酸化水素水）を製造可能。
- 貴金属を一切使用しないオール有機の触媒。
- 軽量性・成型加工性・耐久性（>1 か月無劣化）に優れ、光増感能・触媒能を兼ね備えるため 1 枚の膜で働く光触媒。
- 有機高分子を触媒とすることで、Roll-to-Roll など簡便法で、フィルム形状の触媒材料を大量製造が可能。

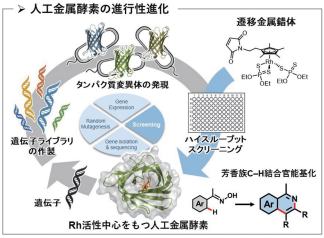
応用分野	エネルギー分野、スマートデバイス開発
論文・解説等	[1] K. Oka *et al.*, *Adv. Energy Mater.*, 2021, 11(43), 2003724. [2] K. Oka *et al.*, *Adv. Sci.*, 2021, 8(5), 2003077. [3] K. Oka *et al.*, *Energy Environ. Sci.*, 2018, 11(5), 1335–1342.
連絡先 URL	http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~tohnaiken/

指向性進化法を駆使した人工金属酵素の創製

キーワード 人工金属酵素、進化分子工学、指向性進化法、有機合成化学

加藤 俊介 KATO Shunsuke

応用化学専攻 助教
物質機能化学講座 構造有機化学領域 林研究室



ここがポイント！【研究内容】

生物は進化の過程、すなわち「突然変異による多様性発現」と「自然選択」を繰り返すことで、高度な触媒機能をもつ酵素を創出してきました。指向性進化法とは、このような生物進化のサイクルを模倣し、人為的に酵素の改良を行う遺伝子工学的手法です。本研究では、この指向性進化法を応用し、非天然の遷移金属錯体を補因子とする人工金属酵素を創製することをめざしています。持続可能な社会の実現にむけ、酵素を利用した化学合成プロセスに注目が集まる中、本研究は酵素の反応適用範囲を拡張する革新的な技術となることが期待されます。

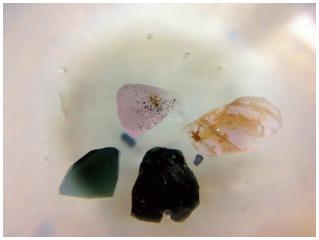
応用分野	有機合成化学分野、バイオプロダクション分野
論文・解説等	[1] S. Kato *et al.*, *ChemBioChem*, 2021, *22*, 679-685. [2] S. Kato *et al.*, *Inorg. Chem.*, 2020, *59*, 14457-14463. [3] 特願：2020-126563「微小粒子の製造方法」
連絡先 URL	http://www.applied-bioinorganic.jp/

揮発性元素を用いた太陽系形成の解明

キーワード 同位体、地球化学、揮発性元素、隕石、太陽系

加藤 千図 KATO Chizu

環境エネルギー工学専攻 助教
量子エネルギー工学講座 量子システム化学工学領域 藤井研究室



ここがポイント！【研究内容】

同位体地球化学・宇宙化学とは、化学的な手法、特に同位体を用いて地球や宇宙の研究を行うものです。太陽系内にある地球や月、隕石はおおよそ 46 億年前に形成したと考えられています。太陽系内天体はさまざまな現象によって形成時より変化していますが、隕石は長い間、宇宙空間を漂っていたので隕石が作られた当時の情報を持っています。そのため、隕石を調べることで太陽系が形成された当時の環境を知ることができます。

応用分野	微量分析、装置開発
論文・解説等	[1] Chizu Kato *et al.*, *Chemical Geology*, 448 164-172 (2017). [2] Chizu Kato *et al.*, *Earth and Planetary Science Letters*, 479 330-339 (2017). [3] Chizu Kato *et al.*, *Science Advances*, 3, e1700571 (2017).
連絡先 URL	http://www.see.eng.osaka-u.ac.jp/seeqc/seeqc/index.html

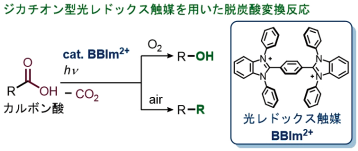
有機光レドックス触媒を用いるカルボン酸の脱炭酸変換反応

キーワード　光レドックス触媒・脱炭酸反応

兒玉 拓也 KODAMA Takuya

応用化学専攻 助教
分子創成化学講座 機能有機化学領域 鳶巣研究室

ジカチオン型光レドックス触媒を用いた脱炭酸変換反応



ここがポイント！【研究内容】

安価で入手容易なカルボン酸を炭素源とする変換反応において、高価で希少な遷移金属触媒の代わりに独自に開発したジカチオン性色素を光レドックス触媒として用いることで脱炭酸変換反応を達成した。
化学量論量の酸化剤や活性エステルへの変換を必要としない直接的変換反応であり、ヒドロキシ化反応および二量化反応が可能である。

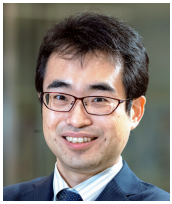
応用分野	医農薬品、機能性化成品、ポリマー
論文・解説等	[1] Takuya Kodama *et al.*, *Chem. Sci.*, 2020, *11*, 12109–12117.
連絡先 URL	https://www-chem.eng.osaka-u.ac.jp/~tobisu-lab/index.html

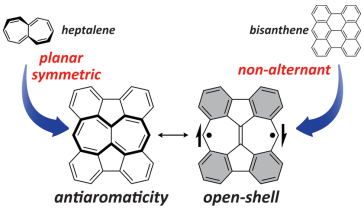
新しい非交互π共役系がもたらす革新的有機機能性材料の創出

キーワード　π共役系化合物、ラジカル、（反）芳香族性、有機色素

小西 彬仁 KONISHI Akihito

附属アトミックデザイン研究センター／応用化学専攻 助教
分子創成化学講座 精密資源化学領域 安田研究室





ここがポイント！【研究内容】

- π共役系分子を用いた電子素材の開発は、素子の軽量化や柔軟化にとって重要。
- ペンゼン環に代表される6員環構造にかわる新たな構造として5員環・7員環を構成単位として利用。
- 設計・合成した新奇なπ共役系分子は、従来の分子系よりもはるかに特異な性質を発現。
- 有機分子にもかかわらず磁性を発現。近赤外領域まで及ぶ長波長吸収の実現。
- 新しい骨格を基盤とした高性能有機電子材料の開発へ貢献できると強く期待。

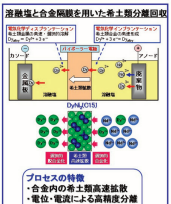
応用分野	有機デバイス、有機磁性体、有機伝導体
論文・解説等	[1] Akihito Konishi *et al.*, *Chem. Lett.* 2021, 50, 195-212. [2] Akihito Konishi *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 141, 10165-10170. [3] Akihito Konishi *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 141, 560-571.
連絡先 URL	http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~yasuda-lab/

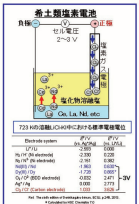
電気化学的手法を用いた高効率リサイクル技術と不純物除去技術の開発

キーワード 溶融塩、電気化学、リサイクル、希土類金属、製錬

小西 宏和 KONISHI Hirokazu

マテリアル生産科学専攻 助教
材料エネルギー理工学講座 材料設計・プロセス工学領域 小泉研究室





ここがポイント！【研究内容】

- 溶融塩電解と合金隔膜を用いた簡便かつ効率的な希土類元素分離プロセスを産総研と共同開発している。主なターゲットとして使用済み Nd-Fe-B 磁石からの Dy と Nd の高精度分離に取り組んでいる。
- 希土類金属を負極、塩素ガス電極を正極に用いた希土類塩素電池の開発に取り組んでいる。熱力学データから起電力は 2.5 ～ 3 V 得られ、CO_2 を排出しないクリーンなシステムとして期待できる。
- 鋼材中に偏析し、割れの原因となる P(リン) を除去する技術として、鉄鉱石から P をガス化除去する新しい技術を開発している。

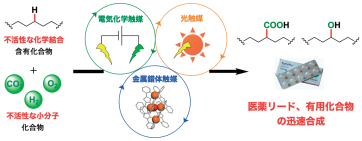
応用分野	リサイクル分野、製錬分野、エネルギー分野
論文・解説等	[1] H. Hua, K. Yasuda, H. Konishi, *et al., J. Electrochem. Soc.*, 167, 142504, (2020). [2] 粟津, 坪倉, 真嶋, 小西, 希土類金属の製造方法, 特許第6502805号. [3] 大石, 野平, 小西, 希土類金属の回収方法, 特許第5504515号.
連絡先 URL	http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/msp3/

金属錯体・光・電気の協奏による有機分子への小分子挿入反応開発

キーワード 光触媒、電気化学触媒、金属錯体触媒、不活性結合活性化反応

嵯峨 裕 SAGA Yutaka

応用化学専攻 助教
分子創成化学講座 触媒合成化学領域 正岡研究室



ここがポイント！【研究内容】

- 正岡重行教授、近藤美欧准教授と共同で、金属錯体触媒、電気化学触媒、光触媒を組み合わせ協奏的に機能させて多電子移動、ラジカル活性種生成を精密に制御しながら、独自の分子変換を促進する新規触媒系を開発する。
- それを用いて、CO_2 ガスなどの反応性の乏しい小分子化合物を活性化し、多種多様な有機化合物に組み込む反応系を確立する。
- 開発した反応系を、医薬リードや有用生理活性物質の迅速かつ網羅的な合成に活用する。

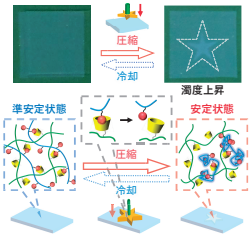
応用分野	有機合成化学分野、創薬分野
論文・解説等	[1] Y. Saga *et al., J. Am. Chem. Soc.* 2017, *139,* 2204. [2] Y. Saga *et al., Dalton Trans.* 2020, *49*, 1384. [3] Y. Saga *et al., Chem. Sci.* 2020, *11*, 12206
連絡先 URL	http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/masaoka_lab/index.html

分子スイッチを利用した応力応答性材料の開発

キーワード　機能性高分子、分子認識、ハイドロゲル

菅原 章秀 SUGAWARA Akihide

応用化学専攻 助教
物質機能化学講座 高分子材料化学領域 宇山研究室



力学刺激に応答した外観変化を実現

ここがポイント！【研究内容】

ホスト - ゲスト包接錯体を分子スイッチとして利用することにより、材料に力学刺激を印加することで外観が変化する応力応答性ハイドロゲルを開発しています。こうした技術はストレス検出や材料破壊の予測を可能します。また、天然多糖であるセルロース繊維を補強材として複合化することで高強度・高靭性化したコンポジット材料も開発しています。このように、材料の高機能化・長寿命化により利用時の安全性を向上する技術の開発に取り組んでいます。

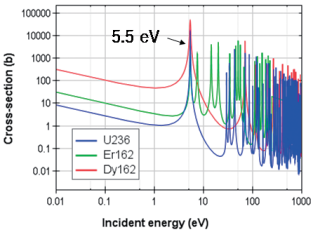
応用分野	プラスチック材料、医療材料
論文・解説等	[1] A. Sugawara *et al.*, *ACS Macro Lett.* 2021, 10, 7, 971. [2] A. Sugawara *et al.*, *Polym. Degrad. Stab.* 2020, 177, 109157 [3] A. Sugawara *et al.*, *Chem. Lett.* 2022, 51, 145.
連絡先 URL	http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~uyamaken/index.html

中性子吸収材の添加による TRU 核種の生成量抑制

キーワード　原子力、核変換、中性子吸収剤

竹田 敏 TAKEDA Satoshi

環境エネルギー工学専攻 助教
量子エネルギー工学講座 原子力社会工学領域 北田研究室



U236・Dy162・Er162 の捕獲断面積

ここがポイント！【研究内容】

ウラン燃料における TRU 核種の生成量抑制に向け、中性子吸収材の添加に着目した研究を実施している。特に、Pu238 と Pu241 は潜在的放射性毒性の高い TRU 核種であることから、これらの核種の生成経路を調査し、関連する核種の反応率を低下する中性子吸収材を明らかにした。この検討において、Dy162 と Er162 は、U236 との中性子捕獲反応を大きく抑制し、結果として Pu238 の生成量を低減することを明らかにした。これは、U236 の中性子捕獲反応が主に 5.5eV 付近の共鳴によるものであり、この共鳴による中性子捕獲を同じく 5.5eV 付近に共鳴をもつ Dy162 と Er162 が抑えるためである。

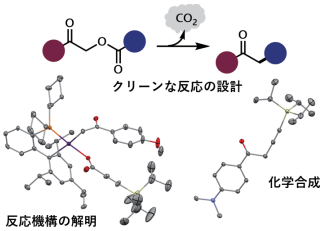
応用分野	原子力発電、再処理
論文・解説等	[1] Satoshi Takeda, Takanori Kitada, *Journal of Nuclear Science and Technology*, 57(1), 57-67, 2020. [2] 日本原子力学会 炉物理部会賞（奨励賞）（2020年）
連絡先 URL	http://www.see.eng.osaka-u.ac.jp/seene/seene/

炭素－ヘテロ結合切断による遷移金属エノラート種の発生

キーワード 遷移金属エノラート、炭素－酸素結合、有機フッ素化合物

土井 良平 DOI Ryohei

応用化学専攻 助教
分子創成化学講座 有機金属化学領域 生越研究室



ここがポイント！【研究内容】

炭素－炭素結合形成反応は有機化合物の骨格を合成する最も基本的かつ重要な手法です。従来の多くの炭素－炭素結合形成反応では結合形成段階における廃棄物の発生および除去が課題でした。私は有機化合物から二酸化炭素１分子だけが脱離することで炭素－炭素結合が形成されるクリーンかつシンプルな反応を設計・開発しました。さらにこの反応で重要な役割を果たすパラジウム錯体を単離し、X 線結晶構造解析により「見える化」することに成功しました。

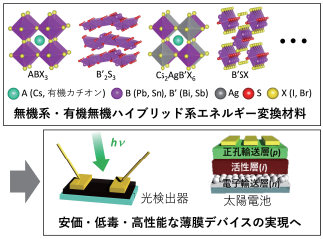
応用分野	創薬分野、材料分野
論文・解説等	[1] Ryohei Doi *et al.*, *Chem. Eur. J.* 2019, *25*, 5884. [2] Ryohei Doi *et al.*, *Chem. Lett.* 2021, DOI: 10.1246/cl.210092.
連絡先 URL	http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~ogoshi-lab/

新たな有機無機ハイブリッド光エレクトロニクス材料の創成と物性解明

キーワード 太陽電池、発光材料、デバイス、ナノ粒子

西久保 綾佑 NISHIKUBO Ryosuke

応用化学専攻 助教
物質機能化学講座 物性化学領域 佐伯研究室



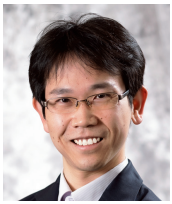
ここがポイント！【研究内容】

- 太陽電池やセンサ、発光素子等の光エレクトロニクス応用に向けた無機材料・有機無機ハイブリッド材料の研究を行っています。
- Bi_2S_3 が非常に高い光伝導特性を有することを時間分解マイクロ波伝導度法により発見。独自開発した成膜プロセスにより、高性能なフォトレジスタの開発に成功。
- 鉛ハライドペロブスカイトに代わる低毒な Bi, Sb 系材料を探索。Sb カルコハライド材料が優れた電荷輸送特性・光電変換効率を示すことを発見。さらに、独自の成膜プロセスにより太陽電池の性能向上に成功。

応用分野	エレクトロニクス分野、エネルギー変換分野
論文・解説等	[1] R. Nishikubo *et al. Chem. Mater.* 2020, *32*, 6416–6424. [2] R. Nishikubo *et al. J. Photopolym. Sci. Technol.* 2019, *32*, 735–740. [3] R. Nishikubo *et al. J. Phys. Chem. Lett.* 2018, *9*, 5392–5399.
連絡先 URL	http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~saeki/cmpc/

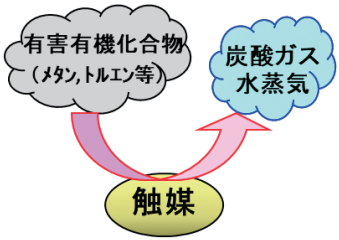
有害有機化合物を温和な条件で完全分解する新規環境触媒

キーワード 触媒、メタン、揮発性有機化合物、トルエン



布谷 直義 NUNOTANI Naoyoshi

応用化学専攻 助教
物質機能化学講座 無機材料化学領域 今中研究室



ここがポイント！【研究内容】

- 温室効果ガスであるメタンや、大気汚染の原因となる揮発性有機化合物（トルエン等）を、無害な炭酸ガスと水蒸気まで、低温で完全燃焼できる触媒を創成しています。
- 液相中の有害有機化合物（フェノール等）を、温和な条件（常圧・100℃以下）で酸化分解できる触媒を創成しています。
- 近年供給過剰となっているグリセリンを高付加価値の化合物へと変換できる触媒の創成も行っています。
- 窒素酸化物（NOx）を窒素と酸素まで直接分解できる触媒も創成しています。

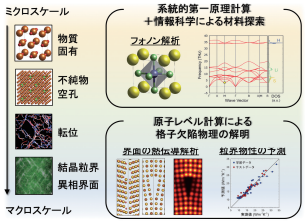
応用分野	環境触媒分野、環境保全関連
論文・解説等	[1] N. Nunotani *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 9, 40344 (2017). [2] N. Nunotani *et al.*, *J. Asian Ceram. Soc.*, 8, 470 (2020). [3] 今中信人, 布谷直義, 触媒, 6, 163 (2020).
連絡先 URL	https://www-chem.eng.osaka-u.ac.jp/~imaken/

計算材料科学と情報科学による微視的原子配列と物性相関の解明

キーワード 第一原理計算、分子動力学法、ナノ構造、欠陥制御

藤井 進 FUJII Susumu

マテリアル生産科学専攻 助教
材料物性学講座 量子材料物性学領域 吉矢研究室



ここがポイント！【研究内容】

- 材料の性質は、物質固有の特性のみならず、意図的・自発的に導入される様々なスケールの格子欠陥（不純物や界面など）に著しく影響される。
- 第一原理計算や分子動力学法などの電子・原子レベル計算手法を用いることで、新物質探索や格子欠陥の物性解析を系統的に実施。
- 情報科学も併用し、物質・欠陥の微視的原子配列と物性の相関関係を解明。
- 確立した手法を主に熱電変換材料や燃料電池などのエネルギー材料に適用し、ナノスケールからマクロスケールまで緻密に設計した新しい機能性材料の開発を目指している。

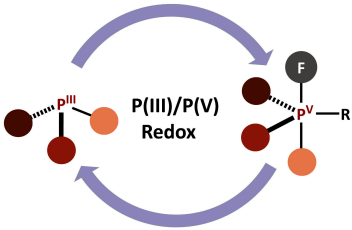
応用分野	エネルギー分野、電子デバイス分野
論文・解説等	[1] S. Gao, T. Broux, S. Fujii *et al.*, *Nature Communications*, 12, 201 (2021) [2] S. Fujii *et al.*, *Nature Communications*, 11, 1854 (2020) [3] S. Fujii *et al.*, *Acta Materialia*, 171, 154-162 (2019)
連絡先 URL	http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/msp8/

遷移金属触媒を模倣した ホスフィンレドックス触媒の開発

キーワード 有機合成化学、有機金属化学、典型元素化学

藤本 隼斗 FUJIMOTO Hayato

応用化学専攻 助教
分子創成化学講座 機能有機化学領域 鳶巣研究室



ここがポイント！【研究内容】

遷移金属を用いた触媒反応は現代の有機化学において必要不可欠な手法として認識されています。しかしながら、希少な遷移金属が必須である点は依然問題となっており、持続可能な社会への貢献を鑑みると、天然に豊富に存在する典型元素で触媒を代替することが望まれています。私は、リンという典型元素の触媒が遷移金属と類似の価数変化をともなうレドックス触媒機構を媒介することを明らかにし、貴金属でさえ為し得ない変換反応を達成しています。

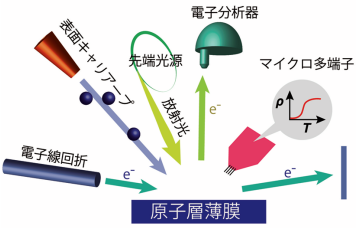
応用分野	有機合成化学分野、創薬関連
論文・解説等	[1] Fujimoto *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* 2020, *142*, 17323. [2] Fujimoto *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* 2021, *143*, 18394.
連絡先 URL	https://www-chem.eng.osaka-u.ac.jp/~tobisu-lab/

原子層薄膜の作製と 新奇低次元物性の探索

キーワード 低次元物理、表面物性、光電子分光、酸化物、放射光

湯川 龍 YUKAWA Ryu

物理学系専攻 助教
応用物理学講座 表面ナノ物性領域 坂本研究室



ここがポイント！【研究内容】

- 結晶表面に異種原子を堆積させることで、３次元物質では発現しない特異な物性を示す２次元電子構造を創出。さらに、これらの物性を用いた高機能デバイスをデザイン。
- 低次元電子に働く多体間相互作用がキャリアドーピングに伴いダイナミックに変化する様子を世界中に設置された先端光源を用いて解明。
- マイクロ多端子電子輸送測定装置を開発することで原子層薄膜に秘める金属絶縁体転移や超電導転移などの相転移現象を探索。

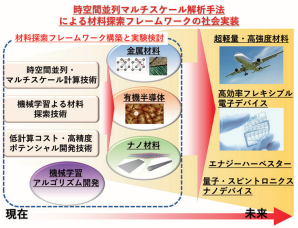
応用分野	ナノデバイス、光応答素子、レーザー
論文・解説等	[1] R. Yukawa *et al.*, *Nat. Commun.* 12, 7070 (2021). [2] R. Yukawa *et al.*, *Phys. Rev.* B 97, 165428 (2018). [3] R. Yukawa *et al.*, *Adv. Mater. Interfaces* 3, 1600527 (2016).
連絡先 URL	http://snp.ap.eng.osaka-u.ac.jp/

時空間並列計算と機械学習を用いた高性能マルチスケール解析手法の開発と応用

キーワード　時空間並列計算、分子動力学計算、第一原理計算、機械学習、大規模計算

劉 麗君 LIJUN LIU

機械工学専攻 助教
機能構造学講座 固体力学領域 渋谷・田中 研究室



ここがポイント！【研究内容】

- スーパーコンピューティング技術を駆使した時間並列計算手法と機械学習を用いて、第一原理計算の精度を保持しつつ、時空間スケールを克服する高性能マルチスケール計算を実現。
- マルチスケール解析手法を開発し、新規半導体材料等の不純物拡散、炭素鋼内部構造の発展解析と新規材料性能予測などに適用。
- 日米中の著名・新進気鋭の研究者・日本の企業と強力に連携し、国際的研究チームによる汎用性の高い材料開発シミュレータとしての優位性獲得を目指す。

応用分野	金属材料、半導体材料、ナノ材料
論文・解説等	[1] Lijun Liu, Yoji Shibutani, *14th WCCM & ECCOMAS Congress* 2020 (Virtual congress), 2021. [2] Lijun Liu *et al.*, *Electrical Engineering in Japan*, pp. 1-11, 2021. [3] Lijun Liu *et al.*, *COMPUMAG 2019*, 2019.
連絡先 URL	http://www-comec.mech.eng.osaka-u.ac.jp/liu.html