


第一原理計算を活用した準安定強相関連物質の設計開発

基礎工学研究科 物質創成専攻

教授 石渡 晋太郎

 Researchmap <https://researchmap.jp/ishiwata>



研究の概要

本研究では、第一原理計算を用いて仮想的な組成および構造の各圧力での安定性を可視化し、その結果を基に段階的な合成ルートを設計することで、異常高原子価の Fe^{4+} イオンを内包する新しいペロブスカイト型酸化物 $(\text{Ca,Ba})\text{FeO}_{3-\delta}$ の合成に成功しました。さらに放射光X線を用いた精密構造解析によりAサイトや酸素欠損の秩序形成を確認し、磁気測定や磁性を仮定した第一原理計算から、らせん磁性が実現している可能性を見出しました。本研究は、計算と合成実験を往復しな

がら準安定相へ到達する戦略の有効性を示すものです。

研究の意義と将来展望

本研究は、各圧力での第一原理計算によって多次元空間の合成経路を可視化し、特異ならせん磁性を示す準安定ペロブスカイトを戦略的に設計開発できることを示しました。この手法は新たなスピントロニクス機能を示す準安定強相関連物質の効率的開拓に繋がることを期待されます。

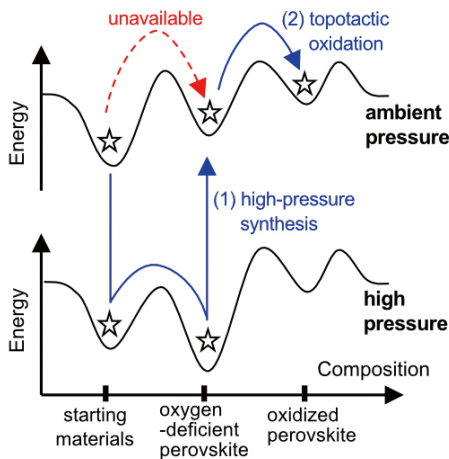
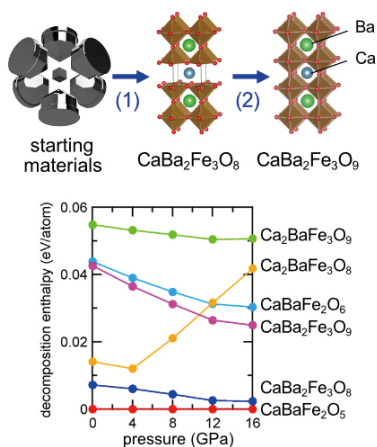


図1. 第一原理計算を活用した新規Aサイト秩序型ペロブスカイト $(\text{Ca,Ba})\text{FeO}_3$ の合成

特許

論文

参考URL

キーワード

Noose, Masaho et al. Exploration of metastable A-site-ordered perovskites $(\text{Ca,Ba})\text{FeO}_{3-\delta}$ by computationally guided multistep synthesis. J. Am. Chem. Soc. 2025, 147(10), 8260–8266. doi: 10.1021/jacs.4c15392

<https://qm.mp.es.osaka-u.ac.jp/>

強相関連酸化物、高圧合成、第一原理計算



機械学習原子間相互作用による構造材料の 定量原子シミュレーション

基礎工学研究科 機能創成専攻



教授 尾方 成信

<https://researchmap.jp/read0185246>

助教 新里 秀平

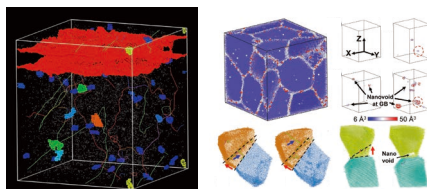
<https://researchmap.jp/3201>

研究の概要

本研究では、第一原理電子状態計算 (DFT) の定量性を学習した機械学習原子間相互作用 (MLIP) を構築し、GPU 加速と組み合わせることで、数百万原子規模でも高精度に計算できる原子シミュレーション基盤を提供します。水素雰囲気や高温などの極限環境下での特性評価、組織と機械特性の関係解明、変形・破壊機構の原子論の詳細を、ハイエントロピー合金、鉄鋼、各種合金、セラミックス材料などあらゆる構造材料に対して実験前の定量予測を可能とします。

実験前の定量予測と新構造材料設計、最適特性をもたらすプロセス技術のチューニングなどが可能となり、極限環境下で用いられる次世代構造材料の開発を飛躍的に加速させることが期待されます。

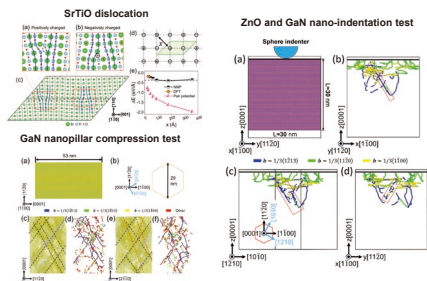
Hydrogen Embrittlement of Fe and Steel



研究の意義と将来展望

高精度・高効率の機械学習原子間相互作用の構築は、これまでの第一原理計算や古典分子動力学法などの原子シミュレーションに存在した精度と効率のトレードオフ関係を打破し、それらの両立を可能とした、構造材料原子シミュレーション技術のブレークスルーです。これにより、実験観察・計測が困難な条件下での構造材料の正確なふるまいや定量データの獲得、全く新しい構造材料特性の実

Plastic Deformation of Ceramics



特許

論文

Meng, Fan-Shun; Shinzato, Shuhei; Matsubara, Kazuki et al. A neural network interatomic potential for the ternary α -Fe-C-H System: Toward million-atom simulations of hydrogen embrittlement in steel. JOM. 2025, 77, 8101-8117. doi: 10.1007/s11837-025-07721-4
Hossain, Rana; Ogata, Shigenobu. Unveiling kink band formation mechanism in MAX phases. Communications Materials. 2025, 6, 51. doi: 10.1038/s43246-025-00766-7
Zhang, Shihao; Li, Yan; Suzuki, Shuntaro et al. Neural network potential for dislocation plasticity in ceramics. npj Computational Materials. 2024, 10, 266. doi: 10.1038/s41524-024-01456-7
Li, Yangen; Du, Jun-Ping; Shinzato, Shuhei et al. Tunable interstitial and vacancy diffusivity by chemical ordering in CrCoNi medium-entropy alloy. npj Computational Materials. 2024, 10, 134. doi: 10.1038/s41524-024-01322-6
Meng, Fan-Shun; Shinzato, Shuhei; Zhang, Shihao et al. A highly transferable and efficient machine learning interatomic potentials study of α -Fe-C binary system. Acta Materialia. 2024, 281, 120408. doi: 10.1016/j.actamat.2024.120408

参考URL

<https://tsme.me.es.osaka-u.ac.jp/jp/>


キーワード

原子分子シミュレーション、機械学習、構造材料

化学合成したホウ素単原子層物質 (化学ポロフェン) の開発

工学研究科 附属フューチャーイノベーションセンター

准教授 神戸 徹也

 Researchmap <https://researchmap.jp/kambe>



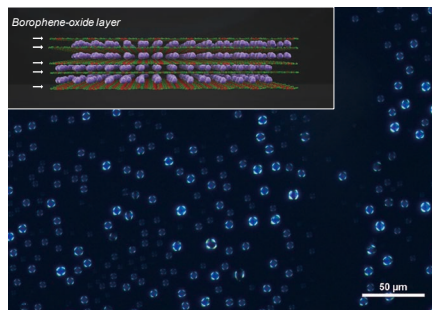
研究の概要

本研究においてホウ素を骨格とする二次元材料（化学ポロフェン）を液相で合成した。本材料は、遷移金属や炭素を全く用いない、完全に新しいタイプの単原子層材料である。X線回折や分光分析により構造と結合状態を明らかにし、面内のみが金属的な異方的電子状態を有することを示した。また、化学ポロフェンの末端部位を化学反応させることで液晶機能が発現することを確認した。さらに、層間に存在するイオンの移動を制御することで、静電容量を飛躍的に向上させる機能の発現にも成功した。

研究の意義と将来展望

典型元素からなる二次元物質は、ポストグラフェン材料として注目されている。しかしこれまで研究されてきた物質は安定性に課題があり、材料としての開発は困難であった。本研究で開発した化学ポロフェンは、常圧での液相合成が可能であり、構成元素の変更も可能であることから、材料としての大きな発

展が期待できる。また、無溶媒下で液晶性を発現できる初の無機材料であり、過酷な環境や強光に対応可能な液晶素子への応用も期待される。さらに、デバイス機能に関する成果は、電子的機能と構造的柔軟性を同時に制御可能な二次元材料の開発を可能にし、高性能キャパシタや応答性デバイスなど、次世代機能性材料・デバイスへの応用展望を示すものである。



化学ポロフェン積層体の構造と、その液晶の偏光顕微鏡画像

特許 特開2022-151934、特許第6829920号、特許第6656564号、PCT/JP2019/003380、特許第6656563号

論文 Kambe, Tetsuya et al. Capacitance enhancement by ion-laminated borophene-like layered materials. Nature Communications. 2025, 16, 1073.
doi: 10.1038/s41467-024-55307-6
Kambe, Tetsuya et al. Liquid crystalline 2D borophene oxide for inorganic optical devices. Nature Communications. 2022, 13, 1037.
doi: 10.1038/s41467-022-28625-w

参考URL http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/masaoka_lab/kambe/kambe.html

キーワード ホウ素、単原子層材料、無機液晶、ポロフェン



超原子価ヨウ素を活用する遷移金属を用いない芳香族アミン合成

工学研究科 応用化学専攻

助教 清川 謙介

Researchmap <https://researchmap.jp/kensukekiyokawa>

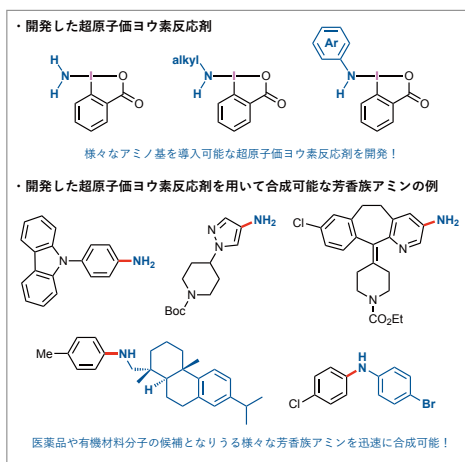
研究の概要

芳香族アミンは、医薬品、農薬、有機材料などに広く利用される重要な化合物群であり、その効率的な合成法の開発は有機化学における重要な課題である。本研究では、ヨウ素原子上に多様なアミノ基を導入した新規な超原子価ヨウ素反応剤（アミノヨードン）の合成に成功し、これらを用いることで芳香族ボロン酸の求電子的アミノ化反応が進行することを見出した。本手法により、遷移金属を用いることなく多様な芳香族アミンを合成することが可能となり、従来法では困難であった化合物の合成にも応用できることを示した。

研究の意義と将来展望

本研究で開発した手法は、遷移金属反応剤を用いることなく多様な芳香族アミンを合成できる点で、医薬品や有機材料分子の合成法の発展に大きく貢献する可能性を有する。これは、極微量の金属が残存するだけでも、医薬品における毒性や有機材料の物性に深刻な影響を及ぼすためである。さらに、本手法は反応工程の簡略化によるエネルギー消費の低減にもつながり、環境負荷の軽減や資源の有効利用を通じて、持続可能な社会の実現にも寄与することが期待される。

ナノテクノロジー・材料



特許

論文

Kiyokawa, Kensuke; Kawanaka, Kazuki; Minakata, Satoshi. Amino- λ^3 -iodane-enabled electrophilic amination of arylboronic acid derivatives. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63(12), e202319048. doi: 10.1002/anie.202319048Kawanaka, Kazuki; Kiyokawa, Kensuke; Minakata, Satoshi et al. Versatile method for the synthesis of aminobenziodoxolones and its application to one-pot coupling of arylboronic acids with simple amines. *Chem. Sci.* 2025, 16(41), 19389-19396. doi: 10.1039/D5SC06301A

参考URL

<http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~minakata-lab/>

キーワード

有機合成、芳香族アミン、ヨウ素、創薬、有機材料

平面8員環構造を含む新しい多環式炭化水素の合成と性質解明

工学研究科 応用化学専攻

助教 小西 彬仁

 Researchmap <https://researchmap.jp/a-koni>

教授 安田 誠

 Researchmap <https://researchmap.jp/read0185253>

基礎工学研究科 物質創成専攻

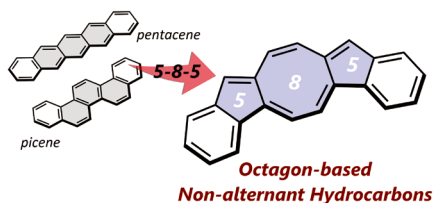
准教授 岸 亮平

 Researchmap <https://researchmap.jp/rkishi0017>


研究の概要

ベンゼノイド化合物の6員環構造を5員環や7員環で置き換えた非交互炭化水素は、奇数員環の組み込みに伴う電子物性の変化に興味を持たれ、近年特に注目が集まっている。三環式以上のベンゼノイド化合物では非交互異性体として共役8員環を持つ分子群を構造異性体として考えることができる。本研究では、そのような分子骨格で構成されたシクロオクタジインデンの合成に世界ではじめて成功し、その素子特性を明らかにするとともに、分子近接により誘起する開殻性由来した特異な反応性を解明した。

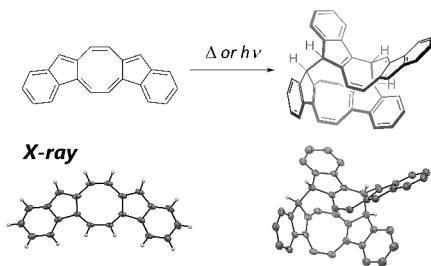
は実現し得ない特異な性質を示すことを明らかにした。安定性や素子性能の向上など解決すべき課題はあるものの、本研究で得られた知見は、新しい骨格を基盤とした高性能有機電子材料の開発へ強く貢献できると期待される。



標的のシクロオクタジインデン

研究の意義と将来展望

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であり、機能化に資する性質を示す分子の設計と合成は欠かすことが出来ない。従来、ベンゼン環に代表される6員環構造が構成単位として用いられてきたが、その性状解明はほぼ完成し、新たな材料提案が求められてきた。本研究では、奇数員環と8員環を組み合わせた構造を構成単位とした新奇な π 共役系分子を設計・合成し、6員環で構成される異性体分子系で



シクロオクタジインデンの二量化反応

特許

論文

Konishi, Akihito; Kishi, Ryohei; Yasuda, Makoto et al. Synthesis and characterization of cycloocta[1,2-a:6,5-a'] diindene as an octagon-containing nonalternant isomer of pentacyclic benzenoid aromatic hydrocarbons with hidden diradical character that induces dimerization. Journal of the American Chemical Society. 2025, 147(20), 17281-17292. doi: 10.1021/jacs.5c03615

参考URL

<http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~yasuda-lab/>
<http://www.cheng.es.osaka-u.ac.jp/kitagawa/index.html>

キーワード

非交互炭化水素、アズレン、開殻性、八員環



高性能配列制御型 PLA バイオプラスチック： 調節可能な海洋分解性

工学研究科 応用化学専攻

准教授 徐 于懿

<https://researchmap.jp/yuihsu>



研究の概要

本研究では、生分解性と耐久性を兼ね備えた新規 PEG-PLA バイオプラスチックの開発を行った。ポリエチレングリコール (PEG) とポリ乳酸 (PLA) を組み合わせ、分子配列とブロック構造を精密に制御することで、海水中での迅速な生分解性と水中耐久性の両立を実現した。PEG 導入により表面親水性が向上し、水接触角は 80.9° から 38.3° へ低下、水吸収性も改善された。SEM 観察では、長期水浸漬後も耐水性が確認され、熱機械特性評価により柔軟性と引張強度の向上が示された。さらに、酵素分解および大阪湾の海水を用いた生分解試験により、ランダム構造で PLA 鎖長が短い PEG-PLA は 120 時間以内に完全分解を達成し、高い BOD 値を示した。これらの結果から、PEG-PLA は包装材や医療用、農業用途などに適した持続可能なバイオプラスチックとして有望である。

研究の意義と将来展望

本研究の PEG-PLA バイオプラスチックは、耐久性と海洋分解性を両立させた点で従来の PLA 材料と一線を画す。分子設計により、海洋環境下での分解速度を調整可能であり、海洋プラスチック汚染の低減に直接貢献できる。また、PEG 導入による親水性向上と構造制御により、包装材や農業フィルム、医療

用デバイスなど多様な応用が期待される。将来的には、異なるブロック比や分子量の調整を通じて、さらに幅広い物性制御が可能であり、持続可能なバイオプラスチックの商業化や環境負荷低減戦略の構築に貢献できる。

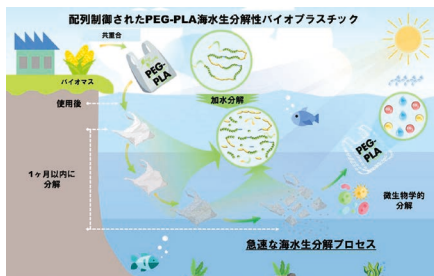
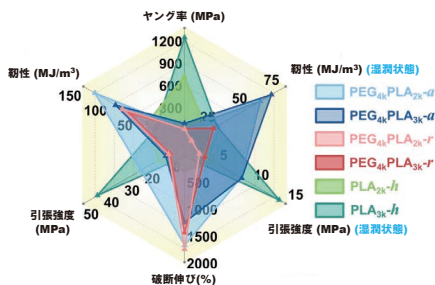


図1



交互ブロック構造のPEG-PLAは湿潤条件下でも高い伸びと靱性を維持

図2

特 許	
論 文	He, Manjie; Hsu, Yu-I; Uyama, Hiroshi. Superior sequence-controlled poly(L-lactide)-based bioplastic with tunable seawater biodegradation. Journal of Hazardous Materials. 2024, 474, 134819. doi: 10.1016/j.jhazmat.2024.134819
参考URL	http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~uyamaken/
キーワード	ポリ乳酸系バイオプラスチック、海水中で調整可能な生分解性、分解メカニズム、BOD 解析



小さい励起子束縛エネルギーを示す有機半導体材料の開発と光電変換機能の追求



産業科学研究所 ソフトナノマテリアル研究分野

助教 陣内 青萌

<https://researchmap.jp/jinnai.seiho>

教授 家 裕隆

<https://researchmap.jp/read0105668>

研究の概要

次世代の環境調和型技術として、有機半導体を活性材料として利用した光電変換デバイスや光化学エネルギー変換触媒が注目を集めています。これらのデバイスや触媒の性能は「有機半導体が光エネルギーを受け取って生じる励起子が、自由電子と正孔に解離する効率」に大きく依存します。しかし、有機半導体は励起子を束縛する力（励起子束縛エネルギー）がシリコンなどの無機半導体に比べて一桁以上大きいため、光エネルギーを受け取っても自由電子と正孔への変換過程が進行しにくいことが大きな課題となっています。

当研究グループはこの課題を克服するため、独自の鞍型有機半導体分子やスピロ型有機半導体分子を開発し、分子の会合特性やフロンティア軌道の空間配置を制御することで、従来材料よりも小さい励起子束縛エネルギーを示す有機半導体材料の開発に成功しました。さらに、これらの有機半導体分子を活性材料として利用することで、バルクヘテロ接合型有機太陽電池の発電効率が向上するのみならず、単成分有機太陽電池や不均一系有機光触媒として駆動しうることを明らかとしました。

研究の意義と将来展望

本研究成果は、有機半導体における分子会合挙動やフロンティア軌道の空間配置が励起

子束縛エネルギーに及ぼす影響を解明した先駆的成果であると同時に、バルクヘテロ接合型有機太陽電池、単成分有機太陽電池、さらには有機光触媒の可能性を実験的に示した重要な一歩となります。



図1：励起子束縛エネルギーと電荷分離過程。

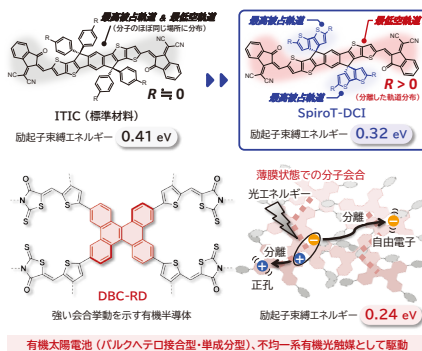


図2：小さい励起子束縛エネルギーを示す有機半導体材料の開発。

特許

論文

Mori, Hiroki; Jinnai, Seiho; Ie, Yutaka et al. A dibenzof[*g*,*p*]chrysenes-based organic semiconductor with small exciton binding energy via molecular aggregation. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63(41), e202409964. doi: 10.1002/anie.202409964
Wang, Kai; Jinnai, Seiho; Ie, Yutaka et al. Nonfullerene acceptors bearing spiro-substituted bithiophene units in organic solar cells: tuning the frontier molecular orbital distribution to reduce exciton binding energy. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63(47), e202412691. doi: 10.1002/anie.202412691

参考URL <https://www.sanken.osaka-u.ac.jp/labs/omm/>


キーワード 有機太陽電池、有機半導体、有機光触媒、有機機能材料、励起子束縛エネルギー



様々な基材の表面に貴金属ナノ粒子を固定化する技術

工学研究科 ビジネスエンジニアリング専攻

准教授 清野 智史

 <https://researchmap.jp/SatoshiSeino>



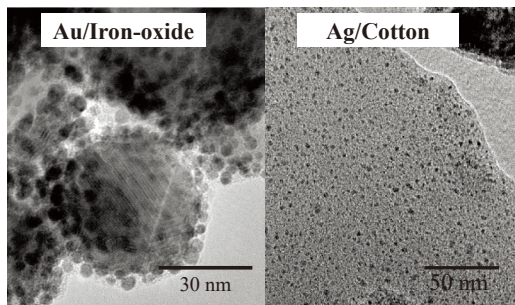
研究の概要

セラミックス・樹脂・繊維といった様々な基材の表面に、金属ナノ粒子を強固に担持固定化できる技術です。原料金属イオン水溶液に、基材となる材料を含浸させ、放射線を照射するだけの簡便なプロセスです。医療器具の滅菌等に使用されているガンマ線や電子線といった放射線を用いるので、被照射物が放射能を持つことはありません。用途に応じた組み合わせで技術を提供いたします。

研究の意義と将来展望

金と酸化鉄を組み合わせた複合ナノ粒子は、ナノバイオ用の新規磁気ビーズとして利用で

き、一部は商品化されています。また、本技術により高い触媒性能を有する二元系貴金属ナノ粒子も容易に合成可能であり、燃料電池用触媒などエネルギー分野への応用が期待されます。さらに、銀を繊維表面に強固に固定化することで、高い抗菌性や抗ウイルス性を付与でき、こちらも一部は商品化されています。加えて、パラジウムを樹脂表面に固定化することで、従来必要であったエッチング工程を不要とする無電解めっきプロセスへと展開でき、環境負荷の低減にも貢献します。このように、本技術は用途に応じた金属種と基材の自由な組み合わせを可能とし、医療、エネルギー、産業など幅広い分野での適用が可能です。




作製したナノ粒子材料の例

特許	特許第4879492号、特許第4854097号、特許第7143998号、特許第7685750号
論文	Seino, Satoshi et al. Investigating the efficacy of nasal administration for delivering magnetic nanoparticles into the brain for magnetic particle imaging. <i>Journal of Controlled Release</i> . 2024, 367, 515-521. doi: 10.1016/j.jconrel.2024.01.027 Uegaki, Naoto; Seino, Satoshi et al. Effect of polymer substrate on adhesion of electrodeless plating in irradiation-based direct immobilization of Pd nanoparticles catalyst. <i>Nanomaterials</i> . 2022, 12(22), 4106-4106. doi: 10.3390/nano12224106 Seino, Satoshi et al. Radiochemical synthesis of silver nanoparticles onto textile fabrics and their antibacterial activity. <i>Journal of Nuclear Science and Technology</i> . 2016, 53(7), 1021-1027. doi: 10.1080/00223131.2015.1087890 Matsuura, Yoshiyuki; Seino, Satoshi et al. Synthesis of carbon-supported PtRh random alloy nanoparticles using electron beam irradiation reduction method. <i>Radiation Physics and Chemistry</i> . 2016, 122, 9-14. doi: 10.1016/j.radphyschem.2016.01.005 Seino, Satoshi et al. Radiation induced synthesis of gold/iron-oxide composite nanoparticles using high-energy electron beam. <i>Journal of Nanoparticle Research</i> . 2008, 10(6), 1071-1076. doi: 10.1007/s11051-007-9334-3
参考URL	https://www.mit.eng.osaka-u.ac.jp/mt2/nsllab.html
キーワード	ナノ粒子、放射線、貴金属、触媒、バイオ

環境調和型ポリマー材料の分解制御と再構築技術

理学研究科 高分子科学専攻

教授 高島 義徳

 Researchmap https://researchmap.jp/ytakashima_0068747



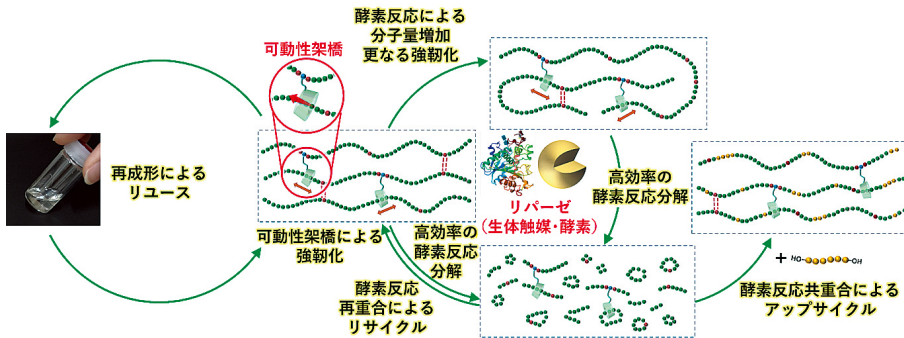
研究の概要

本研究では、可動架橋構造を有するポリエステルに対して、酵素反応を利用することにより、分解・機械的強化・再生・アップサイクルを統合的に実現した。シクロデキストリン (CD) を基盤とする可動架橋を導入することで、ポリマー鎖間の応力分散と自由体積を同時に制御し、柔軟かつ高強度な高分子材料を構築した。得られたポリエステルは、リパーゼ (Novozym 435) による酵素分解に対して高い反応性を示し、架橋点の CD 含有量を増やすことで分解効率が最適化された。また、反応時間を制御することで、酵素による分子量増大と機械的特性向上を両立する“酵素反応を利用した材料強化”を実現した。さらに、分解生成物を反応条件の切り替えにより再重合してクロズドループ型リサイク

ルを達成し、選択的基質を用いることでアップサイクルによる高機能材料化にも成功した。

研究の意義と将来展望

本研究は、ポリマー構造設計と酵素触媒反応を融合した新たな循環型高分子創製概念を提示するものである。可動架橋の導入により、酵素アクセス性と機械強度を同時に向上させ、単一酵素による分解・再生・強化を自在に制御できる点が特筆される。今後は、ポリウレタンのみならずポリエステル、エラストマーなど多様な高分子系への展開が期待され、持続可能なプラスチック循環社会の実現に寄与する基盤技術となる。さらに、バイオ触媒を活用したエネルギー低消費プロセスとして、グリーンケミストリーおよび環境材料分野への波及が見込まれる。



酵素反応を利用したポリマー分解・再重合プロセスの概念図

特許	特願2024-571194、特許第7769347号
論文	Liu, Jiaxiong; Uyama, Hiroshi; Takashima, Yoshinori et al. Exploring enzymatic degradation, reinforcement, recycling and upcycling of poly(ester)s-poly(urethane) with movable crosslinks. Chem. 2025, 11(2), 102327. doi: 10.1016/j.chempr.2024.09.026
参考URL	https://www.chem.sci.osaka-u.ac.jp/lab/takashima/
キーワード	可動架橋高分子・酵素分解・持続可能高分子材料・アップサイクル・クロズドループリサイクル



固体ナノポアによる 次世代DNAシーケンシング

産業科学研究所 バイオナノテクノロジー研究分野

准教授 筒井 真楠

<https://researchmap.jp/makusu>

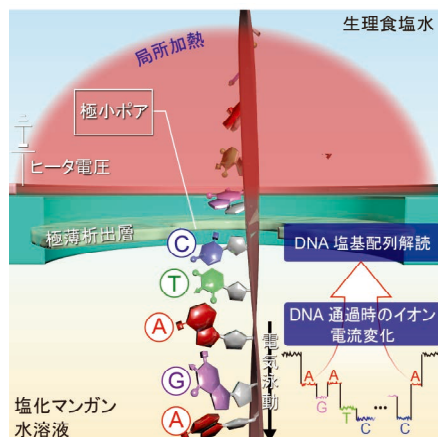
研究の概要

ナノポア技術は、ナノメートルスケールの微小孔（ナノポア）にDNAを通し、イオン電流の変化から塩基配列を読み取る解析法である。現行の生体ナノポア型シーケンサでは、脂質二重膜に埋め込まれたタンパク質製ナノポアと、分子モーターとして機能する酵素分子が用いられてきたが、耐久性や大量製造の点で課題があった。そこで本研究では、半導体プロセスで作製される堅牢な固体ナノポアに着目し、生体ナノポアに匹敵する極微小孔を簡便かつ高歩留まりで形成することを目指して、金属イオンの析出・溶解反応を利用した孔径精密制御のための新技術を開発した。

研究の意義と将来展望

本技術では、電圧パルスで孔径をリアルタイムに調整し、検出対象にとって最適なサイズのナノポアを形成できる。これにより、DNA塩基の1分子識別が可能になることを確認している。また、白金製コイル状ナノヒータをナノポア近傍に配置し、局所的なジュール加熱でDNAを通過直前に一本鎖化する方法も確立した。加熱領域を極小化することで

凝集を抑え、省電力で処理できるのが特徴である。これらの技術により、酵素を使わずに長鎖DNAを高速・高精度に読み取る固体ナノポア型シーケンサの実現が近づいた。将来的には、がんの早期検出や個別化医療などへの応用を期待している。本成果はNature Communications（2025）およびACS Nano（2025）に報告され、特許出願も進めている。



特許 PCT/JP2025/039039

論文 Tsutsui, Makusu; Hsu, Wei-Lun; Hsu, Chien et al. Transmembrane voltage-gated nanopores controlled by electrically tunable in-pore chemistry. Nat. Commun. 2025, 16, 1089. doi: 10.1038/s41467-025-56052-0
Tsutsui, Makusu; Hsu, Wei-Lun; Yokota, Kazumichi et al. On-site unzipping of single-molecule DNA in a spot-heated nanopore. ACS Nano. 2025, 19, 28900. doi: 10.1021/acsnano.5c09740

参考URL

キーワード ナノポア、DNA、NEMS、電気化学、ナノ流体

ニオブ錯体触媒による シクロペンタジエン誘導体の短段階合成

工学研究科 応用化学専攻

教授 劔 隼人

 Researchmap https://researchmap.jp/h_tsu

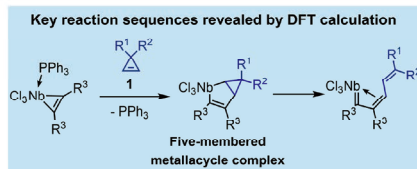
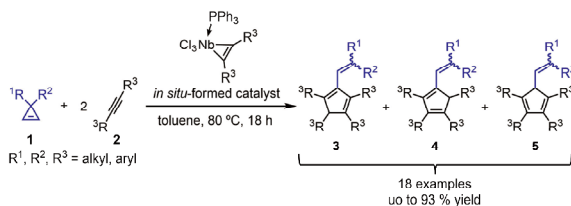

研究の概要

有機合成分野や錯体化学分野において有用な有機化合物の一つであるシクロペンタジエンの短段階合成法として、アルキンとシクロプロペンを用いる新規ニオブ錯体触媒反応を開発した。計算化学的な方法を用いて、また、重要な反応中間体を実験的に単離することで、今回新たに見出した触媒反応の詳細を明らかにし、ニオブ錯体とアルキン、シクロプロペンが1分子ずつ反応して生じる5員環メタラサイクル錯体が含まれることを明らかにした。

研究の意義と将来展望

複雑な構造からなる有機化合物をできるだけ単純な基質から短段階で合成する反応の開発は、反応工程の短縮に伴う廃棄物の削減や消費エネルギーの削減につながるなど、物質

製造の環境負荷低減につながる重要な研究対象である。特に穏やかな条件で原子効率高く目的物を得るための触媒反応開発は、有機合成化学の観点で炭素循環に貢献しうる科学技術となる。シクロペンタジエンを合成するための手法は様々に開発されてきたが、複雑な原料を用いることや、余分な副生成物を伴うことから、原子的に全く無駄のない合成法が求められてきた。今回開発した方法により得られるシクロペンタジエンは、実際に金属錯体の配位子として活用できることも見出し、従来にない多様なシクロペンタジエンル錯体を合成するうえでの有用な原料となる。本手法でのみ初めて得られるシクロペンタジエンもあることから、新たな配位子として活用することで従来にない機能や特性を有する金属錯体へと展開できると考え、研究を進めている。



特許

論文

Akiyama, Takuya; Tsurugi, Hayato et al. Synthesis of multisubstituted cyclopentadiene derivatives from 3,3-disubstituted cyclopropenes and internal alkynes catalyzed by low-valent niobium complexes. *Journal of the American Chemical Society*. 2024, 146(49), 33338-33348. doi: 10.1021/jacs.4c06551

参考URL

<https://htosakaeng.wixsite.com/my-site-1>

キーワード

均一系触媒、有機合成反応、短段階合成



多層グラフェンへのナノダイヤモンドの挿入による層間相互作用制御

工学研究科 物理学系専攻

博士後期課程 丁 明達

助教 井ノ上 泰輝

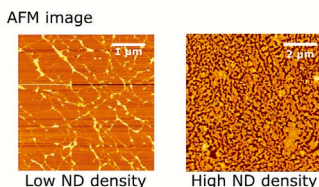
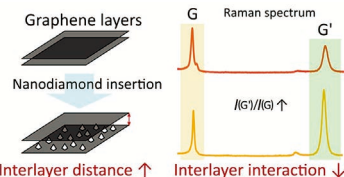
教授 小林 慶裕

https://researchmap.jp/inoue_thttps://researchmap.jp/koba_ap_eng_ou

研究の概要

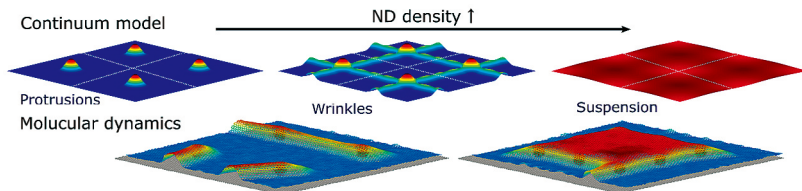
グラフェンは単層の状態では特異な電子物性を示すが、多層化すると層間相互作用により線形分散が失われ、物性が変化する。本研究では、この層間相互作用を制御するため、グラフェン層間にナノスペーサーとしてナノダイヤモンドを挿入した多層グラフェン積層構造を実験的に構築した。ラマン分光ではG'/G比の増大やGピーク分裂から層間結合の抑制を確認し、原子間力顕微鏡により層間距離の拡大を観察した。さらに分子動力学シミュレーションと連続体モデルを組み合わせた解析により、ナノダイヤモンド密度と直径が層間距離と最終形態を規定し、エネルギーが最も低い構造が選択されることを示した。

設計し、単層の状態に近い特性を多層系で再獲得できることを示した。これはグラフェン応用に向けた大規模化と特性の両立を可能とする手法である。今後は、スパーサー種、配置制御、外場印加などと組み合わせることで、光学応答・電気伝導・非線形応答などの特性設計へ展開し、応用領域の拡大が期待される。



研究の意義と将来展望

本研究は、ナノスケールのスペーサーを導入することで、多層グラフェンの層間構造を



特許

論文

Ding, Mingda; Inoue, Taiki; Enriquez, John Isaac et al. Experimental and theoretical investigation of nanodiamond insertion on the interlayer interaction in multilayer stacking graphene. Carbon. 2024, 229, 119464. doi: 10.1016/j.carbon.2024.119464
Ding, Mingda; Inoue, Taiki; Enriquez, John Isaac et al. Reduction of interlayer interaction in multilayer stacking graphene with carbon nanotube insertion: Insights from experiment and simulation. The Journal of Physical Chemistry C. 2023, 127, 23768. doi: 10.1021/acs.jpcc.3c06132

参考URL

<http://www.ap.eng.osaka-u.ac.jp/nanomaterial/index.html>


キーワード

ナノカーボン材料、グラフェン、ナノダイヤモンド、分子動力学

中性求核剤によって駆動される アラインの重合

工学研究科 応用化学専攻

助教 藤本 隼斗

 https://researchmap.jp/hayato_fujimoto

教授 鳶巢 守

 <https://researchmap.jp/read0156480>



研究の概要

芳香環から水素原子を二つ取り除いた分子である「アライン」は、非常に高い反応性をもつ中間体として、有機合成化学の発展を支えてきた。しかし、アラインをモノマーとして重合させる「アライン重合」は、その不安定性ゆえに長年達成が困難であった。今回われわれは、中性有機求核剤である*N*-アリールピラゾールを開始剤として用いることで、金属触媒を用いずにアラインを制御重合できる新たな手法を見出した。この反応は、ピラゾールによる求核付加と分子内芳香族求核置換反応が連続的に進行することで鎖が成長する、これまでにない機構に基づくものである。

ラットフォームとして発展が期待される。さらに、本研究で確立した中性求核剤駆動型重合は、アライン以外のモノマーにも展開可能であり、今後多様な精密高分子合成への応用が見込まれる。

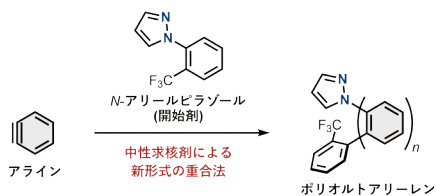


図1

研究の意義と将来展望

本研究で開発した中性求核剤駆動型アライン重合法は、遷移金属触媒を必要とせず、制御された連鎖重合を可能とする画期的手法である。安定なピラゾール骨格が成長鎖末端として再生し続けるため、副反応が抑制され、高い重合制御性を達成した。また、この手法は既存高分子の側鎖にアラインを導入するグラフト型重合や、複数の鎖が結合したスター型高分子の構築にも応用できることを示した。将来的には、導電性材料や光学活性材料など、精密構造をもつ芳香族高分子設計の新たなブ

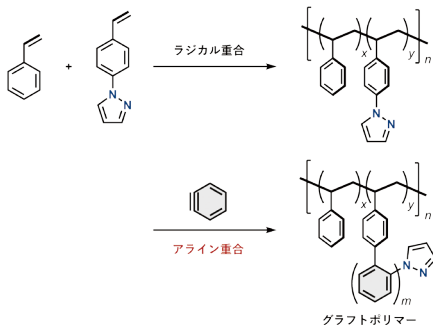


図2

特許

論文

Fujimoto, Hayato; Yamamura, Shisato; Tobisu, Mamoru. Aryne polymerization enabled by pyrazole-induced nucleophilic aromatic substitution. *J. Am. Chem. Soc.* 2025, 147(26), 22302–22308. doi: 10.1021/jacs.5c03980
Highlighted in *Synfacts*. 2025, 21(9), 896. doi: 10.1055/a-2653-5280

参考URL

<https://www-chem.eng.osaka-u.ac.jp/~tobisu-lab/>

キーワード

有機合成、高分子、アライン



カルボランを簡単かつ確実に導入する新手法：BNCT・創薬・機能性材料へ展開可能な「混ぜて加熱」型合成法の開発

工学研究科 附属フューチャーイノベーションセンター

テクノアリーナ教授 **星本 陽一**

<https://researchmap.jp/YHoshimoto>



研究の概要

本研究では、カルボランという特異な分子を芳香族化合物へ高効率で導入する革新的技術を開発しました。カルボランは炭素とホウ素からなる20面体構造を持ち、優れた安定性と3次元芳香族性を有します。従来法では複雑な多段階操作や危険な試薬、低温条件が必要で再現性も低く、実用化の障壁となっていました。今回開発した単離可能な「リチウムビス(オルト-カルボラニル)キュプラート」を用いることで、入手容易な臭化アレーンや塩化アレーンと混ぜて加熱するだけで、多様なカルボラニルアレーンを高効率・高再現性で合成できます。

研究の意義と将来展望

我々の新技術により、カルボラン化学の実用化が大きく前進します。医療分野では、ホウ素中性子捕捉療法(BNCT)治療薬の開発のみならず、カルボランのベンゼン環に対する生物学的等価性を活かした既存医薬品の構造多様化が可能となります。材料分野では、3次元芳香族性を活かした高効率発光材料(OLED用)や電子材料の開発が加速します。操作の簡便性と大スケール合成の実現により、産業界での実装が容易になり、より多くの研究者・企業がこの分野に参入できる革新的手法です。

ナノテクノロジー・材料

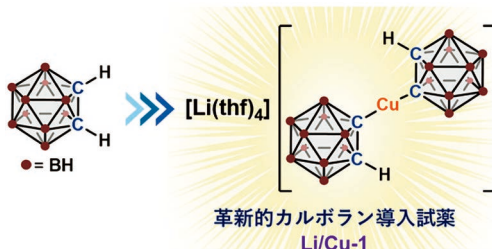
カルボランを含む分子は様々な分野で応用が注目されています！

オルト-カルボラン



中性子捕捉能力
がん細胞のみを破壊するホウ素中性子捕捉療法(BNCT)への応用
3次元芳香族性
立体的な電子構造を活かした機能性材料(OLED)への応用
生物学的等価性
ベンゼン環を置き換える新たな創薬戦略への期待

図1. 様々な応用が期待されるカルボラン



革新的カルボラン導入試薬
Li/Cu-1


図2. 新試薬「リチウムビス(オルト-カルボラニル)キュプラート(Li/Cu-1)」

特許	特願2025-130009
論文	Hisata, Yusei; Morishita, Daina; Hoshimoto, Yoichi. An isolated lithium ortho-carboranyl cuprate complex for the synthesis of multiple-carborane-substituted arenes from (hetero)aryl bromides and chlorides. J. Am. Chem. Soc. 2025, 147(41), 37677-37687. doi: 10.1021/jacs.5c13004
参考URL	https://rd.iai.osaka-u.ac.jp/ja/87c4b65a7307335a.html
キーワード	カルボラン、BNCT、有機合成化学、機能性材料、バイオインスター

スピン相関発光を示すジラジカル分子の開発

基礎工学研究科 物質創成専攻

助教 水野 麻人

 Researchmap https://researchmap.jp/asato_mizuno


研究の概要

開殻電子状態を有する物質はそのスピン状態に由来した特異な光機能（＝スピン相関光機能）を示す。近年とくに、不対電子を有する開殻分子（＝有機ラジカル）の発光が、磁場等の外部刺激に応じて変調可能であることが明らかになってきた。今回著者らは、赤色発光を示すジラジカル分子を新たに開発し、この分子が極低温下において磁場や温度にตอบสนองする特異な発光を示すことを見出した。詳細な解析から、これらの発光変化はジラジカル分子内のスピン間相互作用の大きさと相関することが明らかとなった。

報告し、そのメカニズムを解明したものであり、発光性ラジカル分子が示す発光特性の基盤的理解に寄与するとともに、ラジカル分子の外部刺激応答性発光材料としての応用可能性を示している。

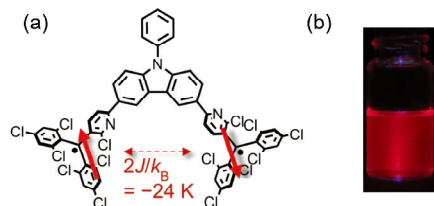


図1. (a) 発光性ジラジカル1の化学構造と (b) その発光の様子。

研究の意義と将来展望

磁場・熱・光等の外部刺激に応じた発光特性変化は、高感度のイメージングやセンサーなどへの応用を可能にする現象として、これまで精力的に研究されてきた。本研究では、新たに開発したジラジカル分子が外部磁場および温度にตอบสนองして顕著な発光特性変化を示すことを見出すとともに、その特異な発光挙動が分子内スピン間相互作用の大きさと相関することを明らかにした。本研究成果は、外部刺激応答発光を示す新規ジラジカル分子を

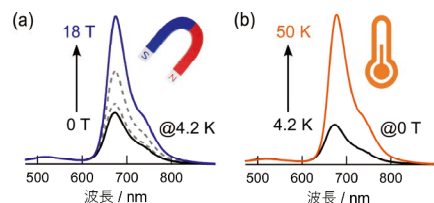


図2. ジラジカル1が示す (a) 磁場応答発光と (b) 熱活性化型発光。

特許

論文

参考URL

キーワード

Mizuno, Asato; Kusamoto, Tetsuro et al. Spin-correlated luminescence of a carbazole-containing diradical emitter: Single-molecule magnetoluminescence and thermally activated emission. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146, 18470-18483. doi: 10.1021/jacs.4c03972

<https://www.chem.es.osaka-u.ac.jp/cm/f/>

有機ラジカル、発光、スピン、磁場効果



貴金属依存からの脱却 ～ユビキタス金属触媒による物質変換～

基礎工学研究科 物質創成専攻

准教授 満留 敬人

<https://researchmap.jp/read0107411>



研究の概要

希少金属の枯渇性や供給不安定性が深刻化するなか、豊富な元素を基軸とする技術体系の構築は、資源自立と持続性のある社会の実現に向けた最重要課題である。この要請を満たす候補元素のなかで地殻に極めて豊富な鉄は最も有望であり、環境適合性にも優れる。一方で、触媒科学において鉄は、著しい「低活性」と「酸化失活」が長年のボトルネックとなり、液相反応における学術的・技術的展開を妨げてきた。

本研究では、鉄リン化合物ナノ結晶(Fe₂P NC)を開発し、鉄触媒の低活性と酸化失活という根本的課題を同時に克服することに成功した。Fe₂P NCは液相水素化反応において従来の鉄触媒を凌駕する高い性能を発揮し、

優れた耐久性も実現した。本研究は、鉄触媒における活性と安定性の両立を達成し、資源自立に向けた新たな触媒設計指針を提案するものであり、持続可能な化学プロセスの基盤構築に大きく貢献する。

研究の意義と将来展望

本研究は、ユビキタス元素である鉄を基盤に、貴金属依存型技術からの脱却を目指したものである。開発した触媒は、エネルギー効率やコストの改善に加え、環境負荷の低減にも寄与する次世代型触媒としての可能性を示す。今後は、医薬品中間体の合成や環境調和型プロセスへの応用を進め、その実用化をさらに推進する予定である。

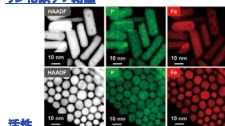
次世代型鉄触媒の開発

背景: 持続可能なものづくりにおいて、資源的優位性、経済性に優れた鉄を基盤とする触媒技術は、その活性と耐久性の課題に應用が著しく限られていた。

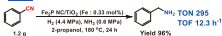
高活性・高耐久性を示す世界初の鉄系固体触媒の開発に成功

Nature Commun. 2023, 14, 5959; JACS 2025, 147, 14326; Small 2025, 21, 2412217.

リン化鉄ナノ結晶

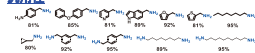


活性

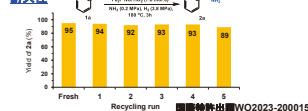


✓世界最高活性(既報の2.6倍)

汎用性



耐久性



国際特許出願 WO2023-200015

高活性・高耐久性の鉄触媒の開発のための新しい触媒設計指針を提案

特許

論文

Tsuda, Tomohiro; Mitsudome, Takato et al. Iron phosphide nanocrystals as an air-stable heterogeneous catalyst for liquid-phase nitrile hydrogenation. Nature Communications. 2023, 14, 5959. doi: 10.1038/s41467-023-41627-6
 Tsuda, Tomohiro; Mitsudome, Takato et al. Highly active and air-stable iron phosphide catalyst for reductive amination of carbonyl compounds enabled by metal-support synergy. Journal of the American Chemical Society. 2025, 147, 14326. doi: 10.1021/jacs.4c18611
 Hirayama, Yuma; Mitsudome, Takato et al. One-step low-temperature synthesis of metastable ε-Iron carbide nanoparticles with unique catalytic properties beyond conventional iron catalysts. Small. 2025, 21, 2412217. doi: 10.1002/smll.202412217

参考URL https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2023/20230928_1

キーワード 触媒、グリーンケミストリー、資源自立、ナノ粒子、非貴金属

長距離プラズモン分子リモートカップリングによる光増強分光法

基礎工学研究科 システム創成専攻

教授 南川 丈夫

 Researchmap <https://researchmap.jp/takeominamikawa>

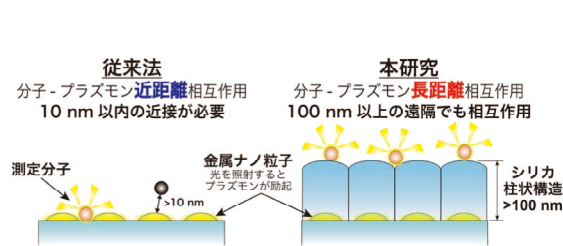


研究の概要

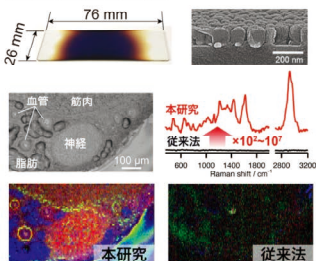
従来、金属ナノ粒子中に発生する電子の集団振動（プラズモン）と測定分子は、10 nm以下の極近距離にないと強い相互作用が発生しないと考えられてきた。本研究では、銀ナノ粒子の表面にシリカ柱状構造を形成することで、金属と分子が100 nm以上離れていても光信号を大幅に増強できる「リモートプラズモニック光増強現象」を世界で初めて実証した。この現象は蛍光分光やラマン分光に適用可能であり、従来より $10^2 \sim 10^7$ オーダーの高い検出感度を実現する。さらに、測定分子が金属と直接接触しない構造であるため、金属触媒作用による分子変性や基板の劣化を回避し、高い化学安定性と機械的耐久性を兼ね備えた分子分光計測が可能となる。

研究の意義と将来展望

本成果は、基礎科学と応用技術の両面で重要な意義を持つ。学術的意義として、100 nmを超えるプラズモン分子の長距離相互作用を実験的に示し、光と物質の相互作用に新たな理解を与えるものである。これは、従来理論の相互作用距離の制限を超える「リモートプラズモニクス」という新概念の確立に向けた端緒となる。応用的意義としては、高信頼性・長寿命の光増強型センシング技術を提供し、従来困難であった腐食性試料や生体試料の高感度測定を可能にする。今後は、環境計測や材料評価、医療診断など産業界・医療分野への応用展開が期待される。



高感度な分子検出能



特許

論文

Minamikawa, Takeo; Sakaguchi, Reiko; Harada, Yoshinori et al. Long-range enhancement for fluorescence and Raman spectroscopy using Ag nanoislands protected with column-structured silica overlayer. Light: Science & Applications. 2024, 13, 299. doi: 10.1038/s41377-024-01655-3

参考URL

<https://www.molecular-photonics.com/j/>

キーワード

プラズモン、分子センシング、バイオセンシング、ラマン分光法、蛍光分光法



数ナノメートルの分子導線で 高効率ホッピング伝導特性を実現

基礎工学研究科 物質創成専攻

准教授 山田 亮

https://researchmap.jp/_ryoy

産業科学研究所 ソフトナノマテリアル研究分野

教授 家 裕隆

<https://researchmap.jp/read0105668>

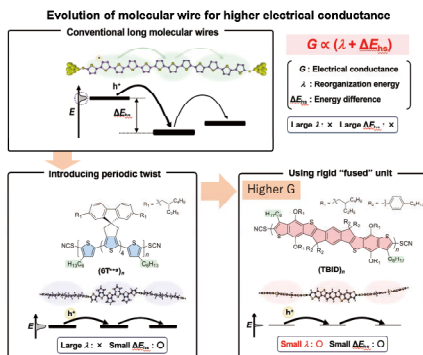
研究の概要

分子の長さが数ナノメートルスケール以上になると、正孔などのキャリアが分子内に局在し、分子内の電子準位（ホッピングサイト）間を飛び移りながら移動するホッピング伝導が主要な輸送メカニズムとなります。このホッピング伝導の高効率化に向けた指針を得ることは、長距離電気伝導の実現において重要です。ホッピング伝導の活性化エネルギー (E_a) は、ホッピングサイト間のエネルギー差 (ΔE_{hs}) と、ホッピングサイトの再配列エネルギー (λ) の和で決まります。本研究では、 π 共役化合物から構成されるホッピングサイトに剛直な縮環構造を取り入れることで λ を低減しました。さらに、一定間隔のねじれ構造を導入して ΔE_{hs} も低減し、分子を数ナノメートルスケールまで伸長させることで、高効率なホッピング伝導を実現しました。

研究の意義と将来展望

分子は人間が設計して作り出せる最小単位の物質です。分子一つを通じた電気伝導機構

や電子機能の解明は、省電力で高速なコンピュータの開発につながります。このような研究を行うには、合成化学・電子物性計測・理論の共創的な研究が不可欠です。今回の研究により、長距離の電気伝導を実現するための分子設計に関する指針が得られました。本成果は、導電性高分子の性能向上のための指針としても役立つ、フレキシブルな電子素子や次世代有機電子材料の開発にも貢献すると期待されます。



特許

論文

Yamada, Ryo; Ohto, Tatsuhiko; Ie, Yutaka et al. Periodically twisted molecular wires based on a fused unit for efficient intramolecular hopping transport. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146, 23529. doi: 10.1021/jacs.4c07548

Ie, Yutaka; Yamada, Ryo; Tada, Hirokazu et al. Improving intramolecular hopping charge transport via periodical segmentation of π -conjugation in a molecule. *J. Am. Chem. Soc.* 2021, 143, 599. doi: 10.1021/jacs.0c10560

Ie, Yutaka; Yamada, Ryo, Tada, Hirokazu et al. Highly planar and completely insulated oligothiophenes: Effects of π -conjugation on hopping charge transport. *J. Phys. Chem. Lett.* 2019, 10, 3197. doi: 10.1021/acs.jpcclett.9b00747

参考URL

<http://www.molelectronics.jp/>
<https://www.sanken.osaka-u.ac.jp/labs/omm/>

キーワード

単分子エレクトロニクス、単分子接合、ホッピング伝導