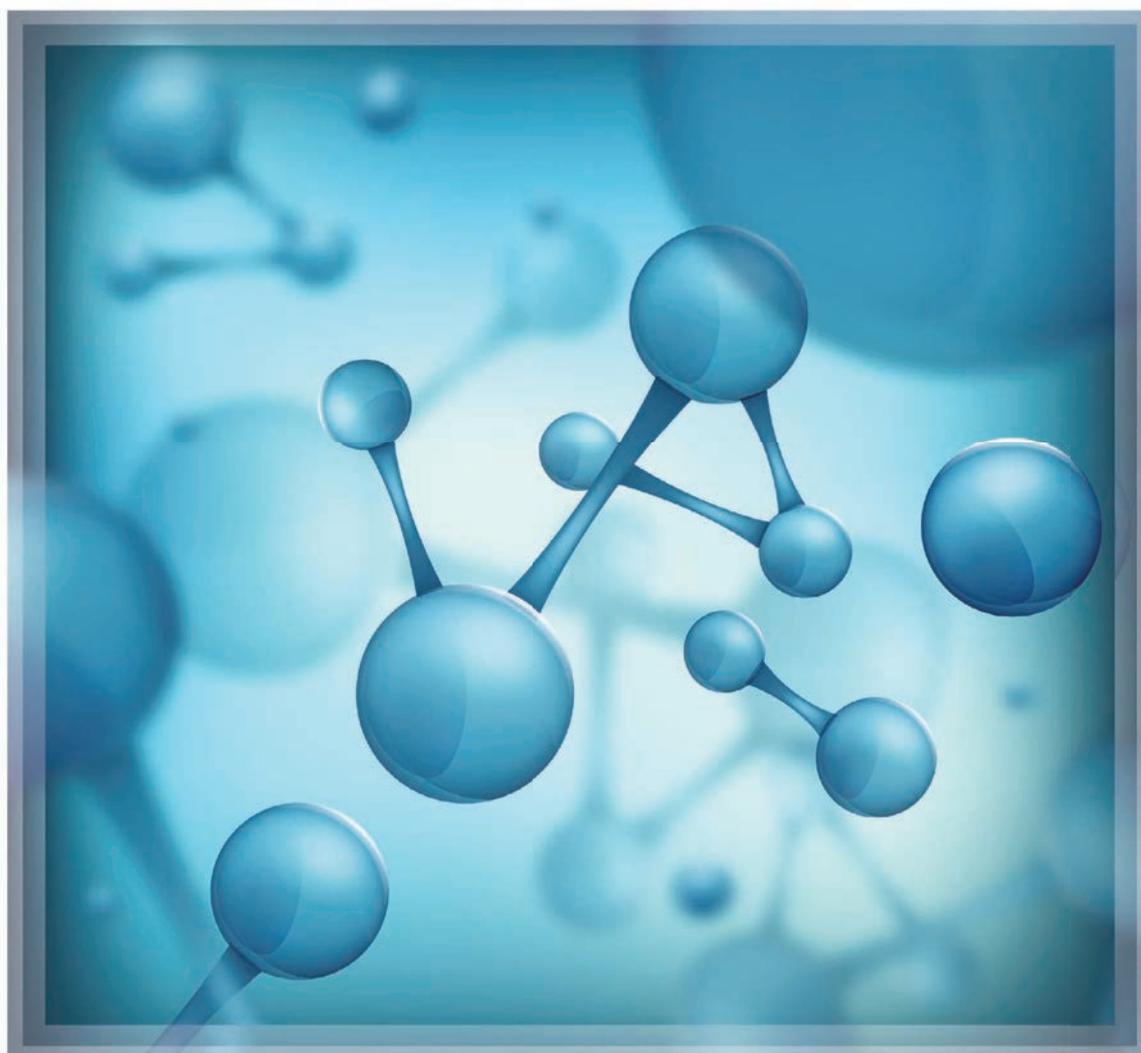

東京工業大学 物質理工学院

2021

応用化学系 (境界領域化学)

Department of Chemical Science & Engineering
School of Materials and Chemical Technology
Tokyo Institute of Technology



物質理工学院・応用化学系のヴィジョン

物質理工学院・応用化学系では、化学の知識や最新技術を応用して「人類の夢を実現する化学」を探究し、無限の未来を創造します。

化学は物質変換の原理を解き明かし、未知の化合物を合成するとともに、物性発現の仕組みを解明する学問です。応用化学系では、物質の基礎的性質や反応性を原子・分子レベルで深く理解しつつ、最高度の化学技術システムの修得を目指します。応用化学系では、学習・教育の目標を、豊かな人間社会の永続的発展に必要な「革新的化学技術」を自ら開拓できる人材の育成と定め、未来の社会と環境の構築に積極的に関与する科学技術者及び研究者の育成を行うとともに、技術革新に果敢に挑戦して新たな産業と文明を拓く高度職業人の養成を目指しています。

系主任からのメッセージ

私たちの生活は、衣類やプラスチック、パソコン、医薬品からガソリンや灯油などの燃料まで、様々な化学物質や化学製品に囲まれています。豊かな社会を維持し、さらに発展させるためには、これらの機能性材料や有用化学物質を、地球環境に配慮しつつ合理的に生産する必要があります。応用化学系では、原子・分子レベルから化学工業プロセス、さらには地球環境まで、様々なスケールで進行する化学現象を広く深く理解することが研究と教育の目標です。私たち教員は、それぞれの最先端の研究と教育を通して、より良い社会の実現に資する化学者・技術者の育成を目指します。

このパンフレットについて

このパンフレットは、物質理工学院・応用化学系の教員と研究内容等を4つの分冊に分けて紹介しているうちの1分冊で、すずかけ台キャンパスで主な研究室活動を行う教員の紹介を行っています。

物質理工学院・応用化学系 すずかけ台キャンパスの教員

教員名	建物-居室	Tel	E-mail	Page
穂田 宗隆 教授 主：A	R1-220	5230	makita@res.titech.ac.jp	2
吉沢 道人 教授 主：A	R1-218	5284	yoshizawa.m.ac@m.titech.ac.jp	3
平山 雅章 教授 主：E 副：A	G1-1012	5403	hirayama@echem.titech.ac.jp	4
荒井 創 教授 主：E 副：A	G1-912	5406	arai.h.af@m.titech.ac.jp	5
北村 房男 准教授 主：E 副：A	G1-812	5405	kitamura@echem.titech.ac.jp	6
穴戸 厚 教授 主：A 副：E	R1-412	5242	ashishid@res.titech.ac.jp	7
久保 祥一 准教授 主：A 副：E	R1-410	5249	kubo@res.titech.ac.jp	7
富田 育義 教授 主：E 副：A	G1-614	5413	tomita@echem.titech.ac.jp	8
稲木 信介 准教授 主：E 副：A	G1-910	5407	inagi@echem.titech.ac.jp	9
中園 和子 准教授 主：E 副：A	G1-312	5045	nakazono.k.aa@m.titech.ac.jp	10
原 正彦 教授 主：A 副：E	G1-1008	5437	masahara@echem.titech.ac.jp	11
野村 淳子 准教授 主：A	R1-510	5239	jnomura@res.titech.ac.jp	12
横井 俊之 准教授 主：A	S5-202	5430	yokoi@cat.res.titech.ac.jp	13
福島 孝典 教授 主：A	R1-912	5220	fukushima@res.titech.ac.jp	14
庄子 良晃 准教授 主：A	R1-909	5221	yshoji@res.titech.ac.jp	14
山口 猛央 教授 主：A 副：E	R1-612	5254	yamag@res.titech.ac.jp	16
田巻 孝敬 准教授 主：A 副：E	R1-610	5253	tamaki.t.aa@m.titech.ac.jp	16
山元 公寿 教授 主：A	R1-712	5260	yamamoto@res.titech.ac.jp	18
今岡 享稔 准教授 主：A	R1-710	5271	timaoka@res.titech.ac.jp	18
豊田 栄 准教授 主：A 副：E	G1-206	5559	toyoda.s.aa@m.titech.ac.jp	20
山田 桂太 准教授 主：A 副：E	G1-208	5416	yamada.k.ag@m.titech.ac.jp	21
脇 慶子 准教授 主：E 副：A	J3-1317	5614	waki.k.aa@m.titech.ac.jp	22
和田 裕之 准教授 主：E 副：H A	J3-1618	5362	wada.h.ac@m.titech.ac.jp	23
菅野 了次 特命教授 主：E	G1-1014	5401	kanno@echem.titech.ac.jp	24
鈴木 耕太 准教授 主：E	G1-1017	5570	suzuki.k.bf@m.titech.ac.jp	24

主担当・副担当の記号

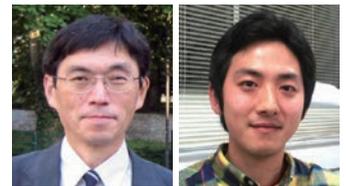
A：応用化学コース E：エネルギーコース H：ライフエンジニアリングコース
G：地球環境共創コース

* 学外からの連絡 045-924-(内線番号)

あき た 穂田研究室

外部刺激や環境に応答する“かしこい”分子の開発

研究キーワード 研究分野：錯体化学・有機化学・光化学・触媒化学
分子エレクトロニクス・単分子素子・分子触媒・グリーンケミストリー



教授 穂田 宗隆
主：A 理学博士

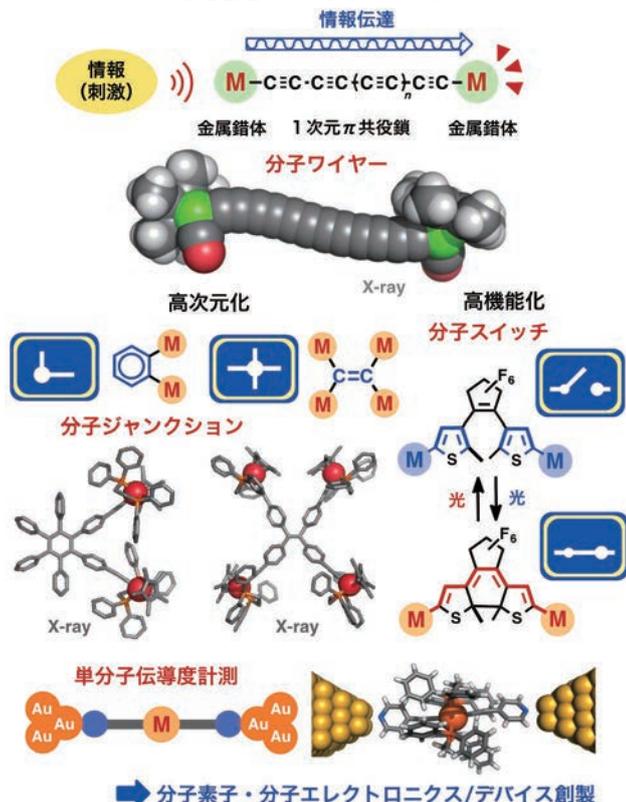
助教 田中 裕也
主：A 博士(工学)

研究のねらい “かしこい”分子を開発する

私達の研究室では、新しいタイプの分子材料や分子触媒の創製を目指して、外部刺激や環境変化に応答する“かしこい(スマートな)分子”の開発に挑戦しています。その分子設計のポイントは、電子リッチな有機化合物である「 π 共役分子」と幅広い基礎物性を有する「金属錯体」の利用です。それぞれのユニットを必要な数だけ狙いの位置に連結した構造体は、個々のユニットでは見られないユニークな物性や反応性を発現します。私達は、外部刺激として例えば「光」に着目して、このクリーンな刺激(エネルギー)に応答する構造や反応を開発しています。

分子ワイヤー・ジャンクション 最小電子回路の構築する

次世代の分子エレクトロニクスを目指し、世界最小の電子回路を組み立てる1つのアプローチとして、分子を利用した数ナノサイズの“情報伝達素子”の開発が期待されています。これまでに私達は、一次元の鎖状 π 共役分子の両端に金属錯体を連結することで、拡張した共役系を有する新しい化合物を作製しています。これらは最小の情報伝達素子“分子ワイヤー”として機能し、一方の金属錯体で受けた化学的な外部刺激(酸化還元・光照射など)が、 π 共役鎖を介して他方の金属錯体に効率良く伝わることを明らかにしました(下図)。これまでに最長で3つのRu錯体を含む約4 nmの長鎖分子ワイヤーの構築にも成功しました。また、 π 共役鎖を二次元に拡張した、ポルフィリンなどを含む2核および4核の“分子ジャンクション”を構



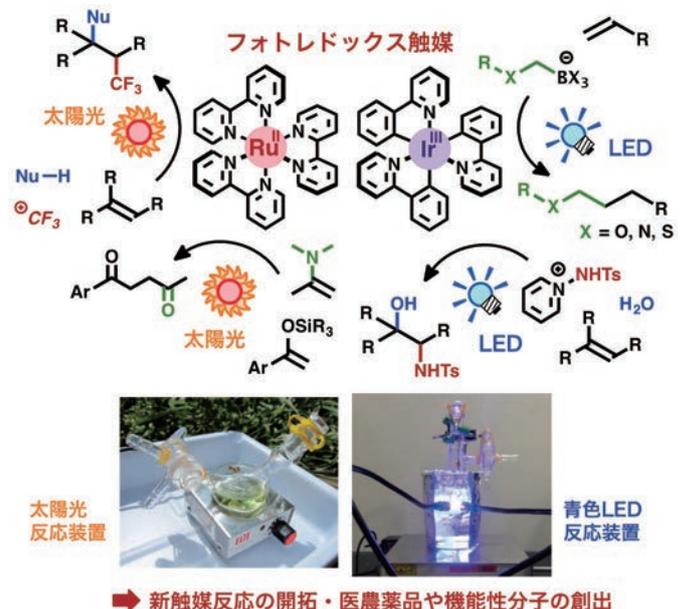
築しました。光照射による π 共役ユニットの結合の開裂により、情報伝達のスイッチングおよびチューニング機能を備えた新たな分子ワイヤーを開発しました(左下図)。

さらに、分子ワイヤー内での情報伝達の方向性の制御や機能の集積化による、高次元機能性分子素子の創製にも取り組んでいます。また最近では、私達のオリジナルの分子ワイヤーの溶液中の性質だけでなく、1分子を金電極に架橋してその電気伝導度を直接計測する“単分子伝導度計測”にも挑戦しています。

太陽光を活用した触媒反応 身近な光で新しい反応系を開拓する

光は、熱的には進行しない化学反応を実現する魅力的なツールです。太陽光やLED、蛍光灯は私達にとって特に身近な光源で、「可視光」とよばれる380~680 nmの光が豊富に含まれています。この光を活用した触媒反応の開発は、環境負荷の少ないクリーンなもの作りに繋がる重要な研究テーマです。私達は、「フォトレドックス触媒」とよばれる金属錯体を利用した新しい光触媒反応の開拓に取り組んでいます。特に、医薬品や機能性分子として有用な有機フッ素化合物や酸素、窒素、硫黄などのヘテロ元素を含む有機分子の新しい合成法の開発に挑戦しています。

これまでに、太陽光や青色LEDによる可視光照射で効率よく進行する光触媒反応を見出しました。例えば、①アルケン類のトリフルオロメチル化反応、②エナミンとシリルエノールエーテル類の酸化的カップリング反応、③アルケン類のアミノヒドロキシ化反応、および④有機ボレート塩をラジカル前駆体とするアルケン類へのラジカル付加反応などです(下図)。これらの反応は簡単な実験装置を用い、屋外や室内で実施可能です。私達の反応設計の指針は、単純な構造の分子から多様な機能をもつ新しい分子を作り出すことです。基質分子の構造を精密にデザインし、光触媒作用を活用することで新奇な分子変換反応が可能です。



吉沢研究室

芳香環ナノ空間で創造する新たな分子機能化学

研究キーワード 研究分野：超分子化学・合成化学・材料化学・光化学・ナノ空間化学・水・分子カプセル/チューブ・芳香族化合物・両親媒性分子・色素・生体分子・バイオセンサー



教授
吉沢 道人
主：A
博士(工学)

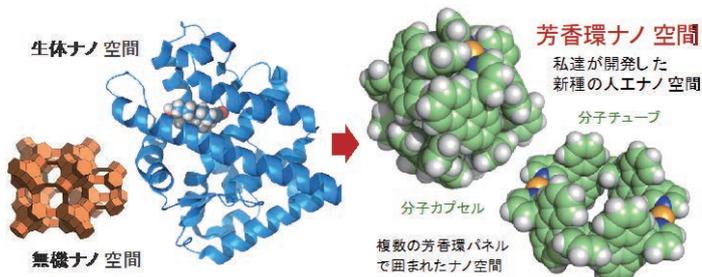


私達の研究室では超分子化学(=分子集合体化学)を基盤に、水中で活用できる“便利なナノ道具”の開発を目指して、「芳香環ナノ空間」に関する研究を行っています。

ナノ空間のデザイン

生体内では、水中、温和な条件下で、高選択な分子識別や高効率な分子変換が達成されています。この優れた生体機能は、タンパク質の自己組織化によって形成した“生体ナノ空間”で実現しています。そのため、生体システムに匹敵する「ナノ空間」を人工的に作製することは、合成化学や材料化学、物性化学、分析化学などの分野の新展開が期待できます。また、水中で利用できるナノ空間が作製できれば、生化学を含む幅広い領域での応用も可能になります。

私達の研究室では、複数の芳香環パネルに囲まれたナノ空間を有する新規な三次元構造体の自在構築を目指しています。その戦略として、単純で合成容易な“湾曲型”の芳香環パーツを設計し、これらを異なる結合や相互作用で組織化することで、前例のない「芳香環ナノ空間」を有する水溶性の分子カプセルやチューブを作製しています。



分子物性のチューニング

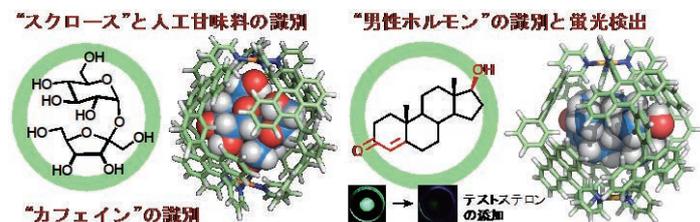
私達の芳香環ナノ空間内では、通常の溶液や固体状態と異なる分子物性が発現しています。例えば、高反応性のラジカル開始剤をナノ空間に内包することで、光遮蔽効果や圧縮効果による顕著な安定化が観測されました。また、色素分子のペア内包や混合により、化学修飾を必要としない蛍光色制御に成功しています。さらに、連結したナノ空間で、フラレンダイマーの特異な電気化学挙動などを探索しています。



生体分子のセンシング

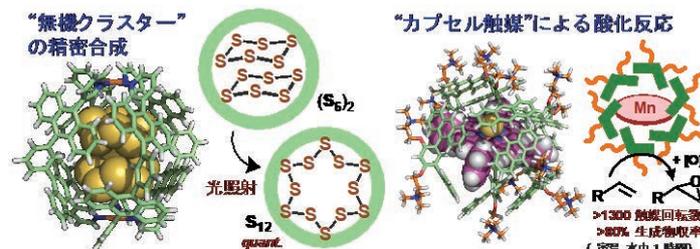
効率的な分子間相互作用により、芳香環ナノ空間内での生体分子の選択的な識別(=センシング)を目指しています。これまでに私達のナノ空間を活用することで、水中・室温で天然糖の混合物から二糖のスクロースを

100%の選択性で捕捉できました。また、代表的な男性ホルモンのテストステロンの識別を達成すると共に、その高感度な蛍光検出に成功しました。飲料に含まれるカフェインや生分解性の乳酸オリゴマーも識別できることから、様々な生体必須分子の“高性能センシング”が期待できます。



分子反応性のコントロール

私達は“ナノフラスコ”としての機能も開拓しています。実際に、芳香環ナノ空間内に2分子の環状硫黄分子を内包し、光照射することで、1分子の大環状分子の選択的合成に成功しました。この成果は、ナノ空間による無機クラスターの初の精密合成です。また、水中・室温での高効率な触媒反応を達成しています。水に不溶なマンガン錯体を芳香環ナノ空間に内包した水溶性カプセル触媒で、高回転数の酸化反応が進行しました。水を媒体とした環境調和型の合成反応や触媒反応の開発を目指しています。



最近の学生/教員の受賞

- 1) 岸田夏月 第70回 錯体化学討論会 ポスター賞; 2) 成田陽奈 第10回 CSJ 化学フェスタ 優秀ポスター賞; 3) 土田大和 第10回 CSJ 化学フェスタ 最優秀ポスター発表賞(CSJ 化学フェスタ賞); 4) 吉沢道人 手島精一記念研究賞(若手研究賞).

最近の発表論文

- 1) M. Hanafusa, Y. Tsuchida, K. Matsumoto, K. Kondo, M. Yoshizawa, *Nature Commun.* **2020**, *11*, 6061; 2) K. Ito, T. Nishioka, M. Yoshizawa *et al.*, *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 6752; 3) N. Kishida, K. Matsumoto, M. Yoshizawa *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 9599; 4) H. Dobashi, L. Catti, M. Yoshizawa *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 11881; 5) K. Niki, T. Tsutsui, M. Yoshizawa *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 10489; 6) 岸田, 吉沢, *化学* **2019**, *74*, 38. (下線は修士課程学生)



平山研究室

エネルギー変換・貯蔵材料の物質探索と機能開拓

研究キーワード 固体化学、無機合成化学、固体イオニクス、電気化学、光電気化学、リチウムイオン電池、全固体電池、光蓄電池、イオン導電体・混合導電体、電気化学界面解析・制御、量子ビーム反応解析



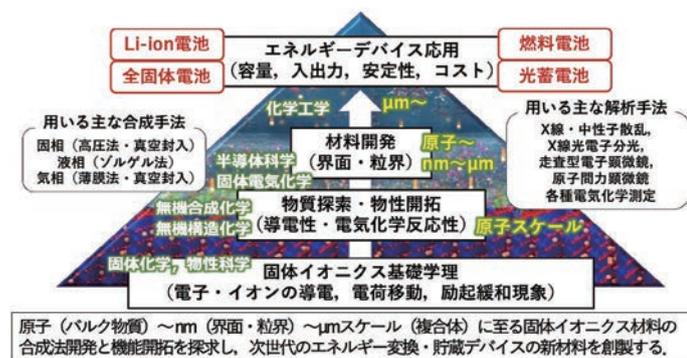
教授

平山 雅章
主: 副:
博士(理学)

エネルギー変換・貯蔵デバイスは、私たちの生活や産業を支える基盤であるとともに、低炭素社会実現の鍵であるエネルギー利用の高効率化を担っています。期待されるデバイス高性能化や新デバイス実現は、優れたエネルギー変換・貯蔵機能を有する新物質・新材料の創製に懸かっています。本研究室では、リチウムイオン電池、全固体電池などの蓄電池に利用される固体イオニクス材料を主な対象とし、新物質探索、マルチスケール空間制御に立脚した新材料開発や現象解析に取り組んでいます

新たなエネルギー変換・貯蔵材料の創製

他のエネルギー変換材料と同じく、全く新しい物質を創り出すと大きなブレークスルーが起こります。既存学理を手がかりに様々な合成手法を駆使し、これまでにない化学組成や結晶構造(原子配列)を有する固体イオニクス物質を見だし、優れたイオン導電性やエネルギー変換特性などを開拓することが第1段階です。一方、蓄電池反応は電極-電解質間の nm スケール界面で進行し、反応に関わる電子やイオンは μm から mm スケールで電極間を移動します。さらに電極物質は自身の組成と構造を変化しながらエネルギー変換・貯蔵を担うため、時間変化も伴う複雑な反応場です。原子スケールで発現する物性を実デバイス内での材料機能として取り出すには、第2段階として各空間・時間スケールでの構造と物性を理解・制御する材料開発が重要です。最先端の物理化学計測手法を駆使した各スケールの構造・現象解析や構造制御プロセス開発を通じて、より実践的なエネルギー変換・貯蔵材料創製への貢献を目指しています。

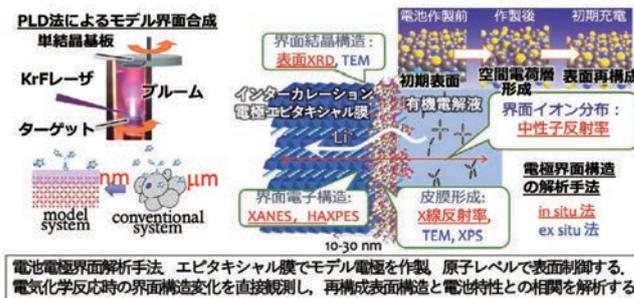


全固体電池材料の開発

全固体電池の最大の課題は、固体電解質のイオン導電性向上でした。私たちは2011年にリチウムイオンが液体並みに動き回る固体物質(超イオン伝導体 $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$)を見だし、全固体リチウム電池の充放電動作を報告しました。以降、全固体電池は広い温度域で安定動作し高出力や高エネルギー密度に優れた次世代電池として世界中で研究開発がなされています。実現に向けて新物質でさらなる物性向上を目指します。同時に、nm $\sim\mu\text{m}$ スケールの組成構造を制御し導電性などの機能を向上するとともに、電気化学安定性や機械特性などの機能を付加することを目指した電解質・電極複合体開発をしています。固体と固体の界面を活用した電気化学デバイスはこれまでなく、イオンや電子のやりとりや移動がどう起こるかが良く分かっていません。基礎学理の構築も材料開発に向けた重要課題として研究しています。

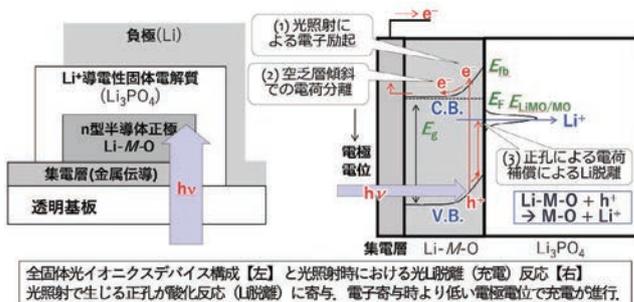
電気化学界面における現象解析

新材料創製の手がかりを得るには、機能発現や電気化学反応の機構解明が必要です。特に複雑な界面現象について、薄膜合成法で原子レベルに制御したモデル界面を構築し、様々な物理化学的手法で電池反応場における界面構造の観測を世界に先駆けて実現しました。リチウムイオン電池の反応初期に再構成される界面構造がサイクル時の安定性と出力を決めていることを見だし、界面制御による材料開発へとフィードバックしています。近年は全固体電池の界面現象解析に展開し、電子顕微鏡や原子間力顕微鏡で実用材料の現象解析も進めています。



光イオニクス現象の開拓

光イオニクスとは、光照射で固体中のイオンが移動する現象を取り扱う学問分野です。光エネルギーで直接充電できる環境発電型蓄電池への応用が期待されますが、電解液が関与する副反応で劣化する課題があり、現象理解に至っていません。私たちは、固体電解質や全固体電池の作製技術を活用して、全固体型光イオニクスデバイスを構築することで、副反応の課題解決に成功し、光照射によるリチウム脱離(光充電)を実証しました。この成果を基に、光イオニクス現象の原理検証や高機能化、材料開発に取り組んでいます。固体/固体界面を活用する電気化学デバイスの新たな展開として、力を注いでいる研究テーマの一つです。



私たちの研究室では、未来のエネルギーデバイス開発を担う人材を国内外に輩出することが大きな目標です。様々なバックボーンを持った学生の皆さんが、やや挑戦的なテーマに取り組みながら、合成・構造解析・物性評価の基本技術をひたすら習得し、課題解決に向けた研究力を培っています。また学会等での成果発表、国や企業との共同研究、海外留学を通じ、広い視野を獲得する活動を積極的に勧めています。なお平山研究室は学内の全固体電池研究センターに参画しており、菅野・鈴木研究室、荒井研究室、北村研究室と連携しながら研究室を運営しています。

荒井研究室

次世代エネルギーデバイスの科学に挑戦する

研究キーワード 電気化学エネルギーデバイス、水溶液系二次電池、電力貯蔵、亜鉛空気電池、金属溶解析出機構、酸素還元・酸素発生機構、電極-電解質界面挙動、非平衡挙動



教授 **荒井 創**
主: 副:
博士(工学)

助教 **池澤 篤憲**
主:
博士(工学)

携帯電子機器用の電源として活躍する、二次電池を始めとするエネルギーデバイスは、今後は電気自動車や再生可能エネルギー由来電力の貯蔵、災害バックアップ等の用途が期待され、いっそうの長寿命化、低コスト化、そして安全性の向上が求められています。荒井研究室では、電気化学および物質化学をベースとして、水溶液系電池を中心とする次世代エネルギーデバイスの科学に挑戦し、機構解明と特性改善を推進します。

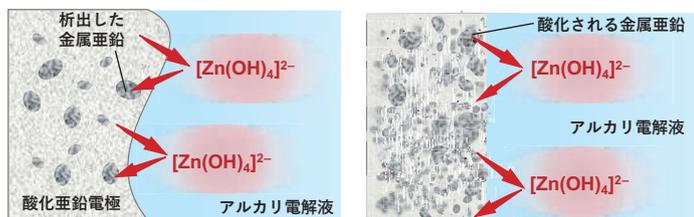
現象解明を進める解析技術の“眼”

電気化学デバイスにおいては、ナノからメートルまでの 10^9 倍も異なる様々なサイズ領域における空間・時間的な不均一性が、特性に影響を及ぼします。物質科学のベースである電子・原子配列はもちろん、電解質と界面を形成して電荷移動を左右する粒子としての性質、電子・イオンの輸送に影響を与える電極形状、デバイス内の電流分布や温度分布によるマクロな効果に至るまでの多くの要素が、デバイスの機能を左右します。

当研究室では、電気化学的手法を中心に、可視光・エックス線・中性子といった様々な解析技術の“眼”を駆使して現象を捉え、普遍的なサイエンスとして解明し、デバイス機能の向上につなげます。なぜうまく作動するのか/うまく作動しないのか、容易に説明のつきにくい現象に注目して仮説を立てて考えることが、次のステップへの秘訣と考えています。

亜鉛極反応の可視化

アルカリ乾電池に用いられる亜鉛は高性能で安価な負極材料ですが、二次電池に適用した場合には、形状変化等の原因による短い寿命が課題となっています。当研究室では光学観察とX線測定を組み合わせることにより、充放電で電極に生じる変化をその場観察することに成功し、寿命特性を短時間で予測可能な診断技術として有用であることを示しました。今後、高出力化や自己放電抑制といった特性改善も視野に、現象解明を進めていきます。

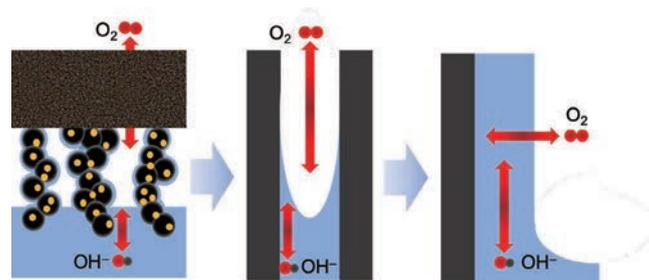


可視化で明らかになった亜鉛極挙動: (左) 充電時・(右) 放電時

反応場の理解に基づく空気極の反応解析

空気中の酸素を利用する金属空気電池は、安価で高い理論エネルギー密度を有していますが、正極にあたる空気極の高い過電圧や耐久性の低さのため、二次電池化が困難です。当研究室では、電極内に形成される反応場の理解に基づく、高性能・高耐久な電極設計を推進しています。

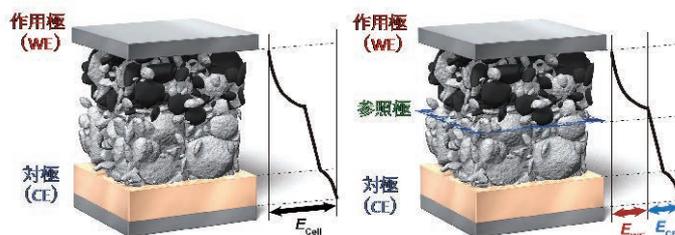
特に、実用性の高い多孔質ガス拡散電極と、単純化された構造を有するモデル電極の双方を用い、交流インピーダンス解析やデジタルシミュレーション等を活用して、物質輸送の律速段階究明を進めています。



実用電極を単純化したモデル電極の構築による機構解明

全固体リチウムイオン電池系の電気化学測定

無機固体電解質を用いる全固体リチウムイオン電池は、高いエネルギー密度・出力特性・安全性が期待できる次世代電池として開発が進んでいます。長寿命化等の課題を解決するためには、固体|固体界面で生じる全固体系特有のイオン輸送現象や電極反応の解明が必要です。当研究室では、電気化学の基礎測定に欠かせない全固体系の参照電極の開発に成功、その効果を検証した上で、全固体電池系特有の電気化学反応における機構解明を目指した研究に取り組んでいます。



開発した参照極を用いた全固体リチウムイオン電池系の測定系

他に、水溶液系電池用の新しい電極材料の開発、電極の相転移挙動の解明、その場中性子回折測定を用いた電池劣化解析といったテーマを推進しています。また国や企業との共同研究や、成果の発信にも力を入れて取り組んでおり、学生の皆さんも学会活動に積極参加しています。



北村研究室

電気化学界面の構造解明を通して新たな機能の発現をめざす

研究キーワード 基礎電気化学、界面構造と電極反応速度、機能性電極および燃料電池触媒の開発、「その場」赤外分光測定、イオン液体、希土類元素



准教授

北村 房男

主: 副:
理学博士

電気化学は、工業電解、環境および臨床における計測、蓄電デバイスなど、化学と電気がかかわるほとんどの分野を対象とする学際的な学問分野です。その根本は、電極と電解質の「界面」で生起する物理化学現象であり、界面電位差を制御することによって、反応の進む方向を自由にあやつることができるという特徴を持っています。当研究室では、電極と溶液の界面に興味を持ち、界面構造と反応速度との関係を明らかにし、さまざまな機能性界面を設計する際に役立つ基礎的知見を得ることを目的とした研究を行っています。

さらに、反応を解明するだけでなく、より優れた特性をもった界面の創成をめざした研究も同時に進めています。電気化学プロセスを利用すると、高温・高圧下における化学反応のように多大なエネルギーを消費し、また危険も伴うプロセスに比べて、常温・常圧の穏和な条件下で反応を進行させることが可能です。また、反応の制御も、電位や電流をコントロールすることで可能となります。こうした、電気化学プロセスの持つ優れた特性を生かして、新しい機能性界面の創製を目指しています。

燃料電池に関する研究

固体高分子形燃料電池は、水素ガスや炭化水素などの燃料を触媒上で空気中の酸素と穏やかに反応させることにより、燃料がもともと持っていた化学エネルギーを電気エネルギーに直接変換するタイプの発電デバイスです。したがってその性能は、いかに効率よくアノードで燃料を酸化し、カソードで酸素を還元できるかに大きく左右されます(図1)。効率よく反応が進む触媒を設計するには、まず実際の反応がどのような経路を経て進行しているのかを理解すること、そのための測定技術の開発が必要となります。分子種の識別に大きな威力を発揮する赤外分光法は、今まさに反応が進行しつつある界面の状況を「その場」観察できるため、反応活性種(中間体など)の特定やその存在量などに関して詳細な議論をおこなうことが可能です。

より高活性な電極触媒の探索

触媒は、まわりの環境を適切な状態に保つことで、その力を余すところなく発揮することができます。白金微粒子触媒にある種の金属酸化物を複合化させることにより、性能が大きく改善されます。当研究室ではこうした複合触媒を、電気化学法を用いて常温・常圧のマイルドな条件下で創り出す技術の開発を行っています(図2)。

イオン液体に関する研究

イオン液体は正および負の電荷を持った分子性イオンのみからなるユニークな液体です。電気をよく通すために、電解質としての利用が可能です。当研究室では、電気化学的な興味からイオン液体の物理化学特性に注目しています。現在は、レアメタルの一種である希土類(ランタノイド)元素の電解析出過程についての研究を行っています(図3)。

ナノ炭素材料+αで機能電極材料へ

近年、グラフェンをはじめとする特殊な構造をもったナノ炭素材料が注目されています。当研究室では、こうした炭素材料をベースとし、酸化還元活性を有するさまざまな機能分子を吸着させたレドックス活性複合材料の創製とその活用法について研究を行っています(図4)。

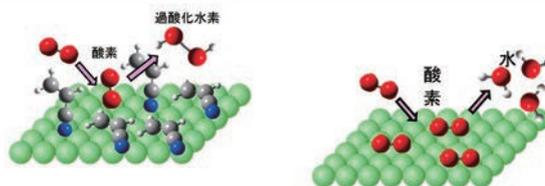


図1 カソード触媒表面での反応(模式図)

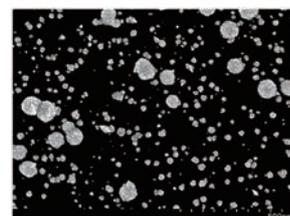


図2 ワンステップ電解析出法で用いるセル(左)と作製した白金-セリア複合触媒の電子顕微鏡写真(右)

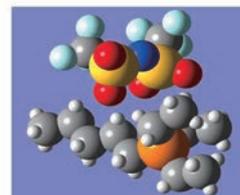
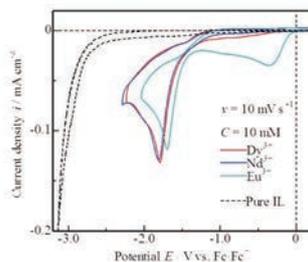


図3 イオン液体(P₂₂₂₅TFSA)中での3価希土類金属イオンの還元反応

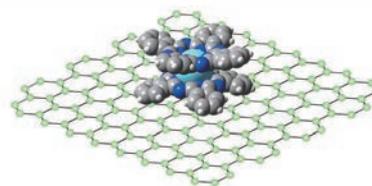


図4 グラフェンと金属フタロシアニン錯体

宍戸・久保研究室

光分子配列技術の開発とソフトメカニクスの開拓

研究キーワード 分子配向、光、高分子、液晶、ソフトマテリアル、フィルム、フォトンクス、フレキシブル、非線形光学効果、力学、光学、ディスプレイ、スマートウィンドウ、光重合、ハイブリッド材料、微粒子



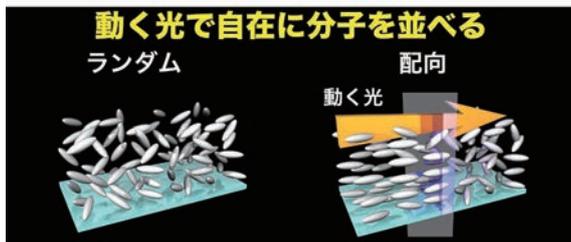
教授 宍戸 厚 主: A 副: E 博士(工学)	准教授 久保 祥一 主: A 副: E 博士(工学)	助教 赤松 範久 主: A 博士(工学)
--	--	--------------------------------------

作製に多量のエネルギーが必要な従来の硬い材料に替わり、省エネルギープロセス型で人体にも優しいソフトかつフレキシブルな分子性物質が低環境負荷で安全安心な社会を支える次世代材料として近年注目されています。しかしながら、エレクトロニクス・フォトンクスデバイスにおける機能発現の要である分子配列については、低い配向度や分子構造の制約など多くの課題が残されているのが現状です。加えて、材料設計においてはソフトな材料の力学(ソフトメカニクス)が必要になりますが、硬い材料を対象とする従来の材料力学をそのまま適用することには難があります。従ってソフトメカニクスの開拓自体も大きな問題です。

これらの課題を解決するため、わたしたちは、光と分子配列の特異的な相互作用に着目し、高機能・高性能な高分子材料の創製を目指して、分子設計・合成・物性評価からデバイスの作製・評価まで、基礎と応用の両面にわたり幅広く研究を行っています。詳しくはHPをご覧ください。

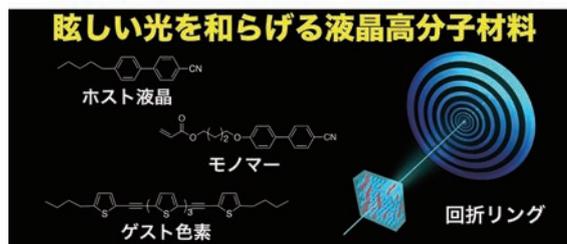
光重合を利用した新規分子配向プロセスの開発

高機能性フィルム創製のためには、液晶をはじめとする機能分子の精緻な配向誘起が重要です。ナノスケールの分子を巨視的に配列することにより、電気物性、磁気特性、熱物性、光学特性などあらゆる物性が向上するといっても過言ではありません。しかしながら、既存の実用的な分子配向法は、延伸やラビングなどの力学的手法と特殊な分子の光化学的手法に限定されており、その選択肢は極めて少ないのが現状です。わたしたちは空間的な強度分布を有する光を用いて光重合を行うことにより、簡便なプロセスで分子配向が誘起できることを見出しています。今後、様々な分子を光で自在に配向することにより、従来の材料では出来なかった新たな光・電子機能の発現が期待されます。



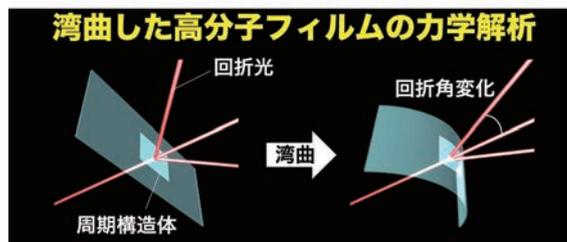
色素ドープ液晶を利用した調光材料の創成

レーザー光源の普及や自動車のヘッドライトの高強度化を受けて、眩しい光を弱める材料が求められています。しかしながら、一般的な光機能材料においては、光応答は入射光の強度に依存しません。したがって、強い光だけを認識して弱める材料すなわち調光材料の開発には、新たな分子材料設計が必要になります。わたしたちは、オリゴチオフェンとよばれる色素をネマチック液晶に少量ドープすることにより、強い光を入射したときだけ分子配向変化を効率良く誘起できることを見いだしています。最近では市販のレーザーポインター程度の光を弱めることに成功しています。今後はこの分子配向変化に必要な光強度をさらに低下することにより、スマートウィンドウや調光サングラスへの応用が期待されます。



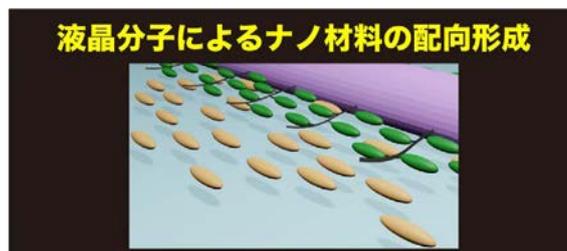
フレキシブル材料の力学解析

柔軟な高分子材料はソフトマターとよばれフレキシブルディスプレイ、フレキシブルエレクトロニクスや医療材料への応用が期待されています。なかでも、材料の湾曲現象の理解がデバイス設計において極めて重要です。しかしながら、簡便な解析法の不在により、勘と経験に基づく定性的な理解にとどまっているのが現状です。わたしたちは、ソフトマターの湾曲現象を簡便に定量解析できる手法および装置を開発し、柔軟な材料の特異な力学特性を明らかにするとともに、次世代フレキシブル材料に資する高機能材料の設計開発を行います。



分子配向に基づく異方性ナノ材料開発

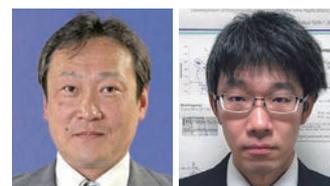
金属や半導体などをナノスケール化すると、バルク状態とは異なる物性を示すことが知られています。特にナノロッドやナノワイヤーは、形状に由来する異方的な機能を発現する可能性を秘めたナノ材料です。ナノ材料の本質的機能を引き出すためには、所望の配向構造に導く必要があります。わたしたちは、ナノロッドの表面を液晶高分子で修飾し、配向形成を促す低分子液晶材料と相互作用させることで、配向処理した基板上でナノロッドを一方に整列させ得ることを示してきました。配向性ホスト物質と密接に接合するデザインによって、分子配向制御に基づく異方性ナノ材料を開発し、ナノ材料の物性探索および多彩な機能展開を目指しています。



富田研究室

新しいつくり方で挑む高分子材料

研究キーワード 高分子合成、有機合成、有機金属化学、有機金属ポリマー、反応性高分子、高分子反応、機能性高分子、元素ブロック高分子、 π 共役高分子、リビング重合、マイクロスフェア、ナノスフェア、重縮合、触媒反応



教授

助教

富田 育義

一二三遠祐

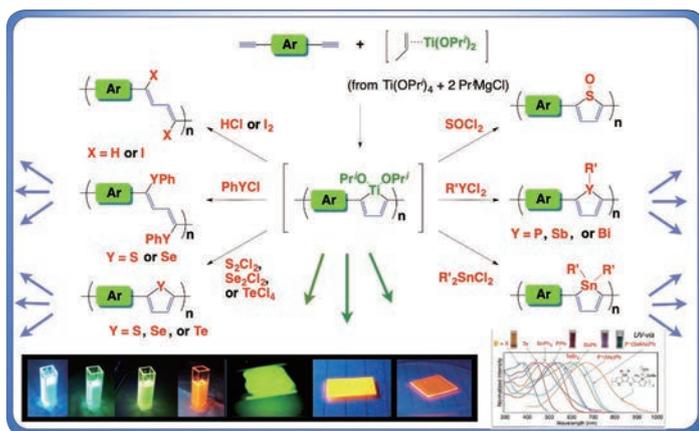
主: **E** 副: **A**
博士 (工学)

主: **E**
博士 (工学)

当研究室では、有機化学、有機金属化学、有機電気化学を基盤としつつ、新しい概念につながり得る重合手法の開拓や、新しい高分子材料の創製などに関する研究を稲木研と連携しつつ推進しております。現在行っている代表的な研究テーマはつぎのとおりです。

主鎖型反応性高分子の設計・合成とこれを経由する未踏の高分子材料の構築

二官能性アセチレン類と低原子価金属錯体の重合により、主鎖にメタラサイクル構造をもつ有機金属ポリマーを合成し、これを主鎖型反応性高分子として用いることで、多様な主鎖構造をもつ高分子へと変換できることを明らかにしています。例えば、式に示すチタン錯体と末端ジエン類から得られる主鎖の結合位置が規制された反応性高分子を用いると、高分子反応により多彩な元素や官能基を主鎖に含む π 共役高分子が構築できることを見いだしています。この方法を用いると、従来の合成法では設計が難しい高分子構造も構築でき、モノマーおよび高分子反応試薬のシンプルな分子設計によって多様な主鎖構造をもつ高分子をパラレル合成できる特徴などが示されてきており、下図に示すように広範な発光、吸光、電子特性などをもつ材料を創出できることが明らかになっております。



高い官能基耐性をもつリビング配位重合の開拓と精密マイクロスフェア、ナノ構造体、刺激応答性材料などへの応用

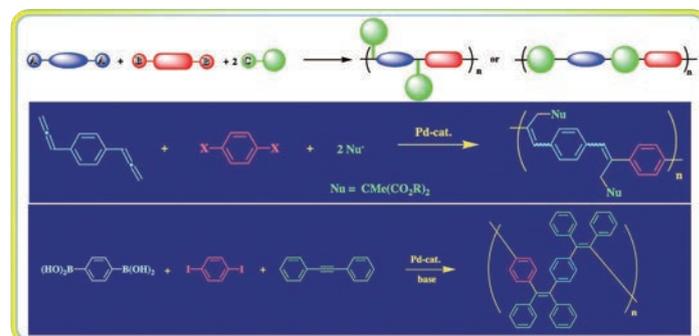
アレン誘導体はビニルモノマーよりも不飽和度が1つ高く、アセチレン類の異性体の位置づけにあります。当研究室では、これらをモノマーとしたアリルニッケル触媒による配位重合を検討し、モノマー上の置換基の極性や電子的な性質にほとんど影響を受けることなく、一般性よくリビング重合が進行することを明らかにしてきました。本系では、水酸基やカルボン酸

などといった極性置換基をもつモノマーも直接リビング重合を行うことができるなど、反応性の官能基や高付加価値な機能団をもつ一次構造の規制された多彩な高分子を設計・合成できることを明らかにしてきております。さらに、このリビング重合が水やアルコールなどの極性溶媒中で進行することから、精密なナノ構造体、マイクロスフェアなどの構築を伴うリビング重合の開発やこれらに基づく刺激応答性材料や超撥水・超撥油材料などへの応用にも取り組んでいます。



多成分重縮合の開拓と機能材料への応用

一般に逐次重合(重縮合、重付加)は2つの官能基が連結されるシンプルな素反応から構成され、高性能・高機能高分子を設計・合成するにはモノマーの煩雑かつ多段階な合成が必要となります。当研究室では、遷移金属触媒によるアレン、アセチレン、オレフィン類などを用いた3成分反応を素反応とした新しいタイプの重縮合法の開拓を行い、これに基づく高度に機能化された様々な繰返し構造をもつ高分子の合成を行ってきております。



これらのほか、優れた光学的機能を担う材料として、高周期元素ブロック含有高分子の合成と応用に関する研究や、かさ高いアリアル置換基をもつオニウム構造を含んだ高分子の設計・合成と高いアルカリ耐性をもつイオン交換材料への応用に関する研究など、常に独自の合成手法を開発しつつ新しい高分子材料に挑戦し続けております。

稲木研究室



准教授

稲木 信介
主: 副:
博士(工学)

電気を操り、新しい視点で有機・高分子材料を設計する

研究キーワード 有機電気化学、機能性高分子、電解合成、バイポーラ電気化学、導電性高分子、フッ素化学、含フッ素ポリマー、レドックス化学、電気化学デバイス

当研究室では、電気エネルギーを利用した化学反応・物質変換を基盤とし、機能性分子・高分子材料開発に取り組んでいます。また、それらの電気化学デバイスへの応用も指向しています。特に、グリーンケミストリーの一翼を担う有機電解合成(有機電気化学)の発展系である高分子の電解合成、電解反応の研究に精力的に取り組む、電気化学と高分子化学、フッ素化学の新しい境界領域を開拓しています。電解反応を高度に操ることで、分子レベルから薄膜、バルクに至るまで、有機高分子材料の機能化が可能となります。富田研究室と連携して研究室を運営しています。

高分子の電解合成、電解反応

ポリチオフェンやポリピロールなどの導電性高分子は有機分子でありながら優れた光学特性、電子特性を備えているため、有機エレクトロニクス材料の中核を担っています。当研究室では精密な分子設計により機能性導電性高分子の開発を行っております。

ヘテロ芳香族化合物の電極酸化により生じるラジカルカチオン種のカップリング反応および重合反応は電極上に導電性高分子膜を作成する優れた手法として知られています。当研究室では電解発生活性種を利用した高分子合成の新展開にチャレンジしています。最近、後述するバイポーラ電気化学を用いることで、マイクロファイバー状の導電性高分子を合成することに成功しました。

また、導電性高分子は電極との電子授受によりイオン種を生じるため、色調や導電性が可逆的に変化します。当研究室ではこれら特性を活かしたエレクトロクロミック材料の研究を推進する過程で、この活性種の後続的分子変換に成功しました。これは電気化学的に高分子反応を行うという従来にない全く新しい手法であり、高分子電解反応として展開しています。

バイポーラ電気化学

有機電解合成や高分子電解反応では電位が一様に分布した陽極もしくは陰極を用いますが、最近、同一面内に陽極部位と陰極部位を併せ持ち電位勾配を有するバイポーラ電極が注目されています。バイポーラ電極は電気回路に非接触(ワイヤレス)でありながら電極としてふるまう不思議な現象です。当研究室ではこのバイポーラ電極のワイヤレス性、電位勾配電気泳動とのシナジー効果などを利用した高分子膜の傾斜的反応や新規パターンニング法、金属ナノロッド開発などに成功し、世界に先駆けて発表しています。

レドックス活性分子・高分子

上記以外にも、有機・高分子化合物のレドックス特性を最大限引き出すための分子設計・合成を行っています。例えば、炭素-ホウ素クラスターからなるカルボランの電気化学特性に着目し、電極触媒(メディエーター)として有用であることを見出しています。また、 π 共役高分子の適切な位置に電子求引性のフッ素基を導入することで、高分子の電子特性を制御すると共に、反応性高分子としての展開を進めています。

最近の論文

- 1) Bipolar Electrochemistry: A Powerful Tool for Electrifying Functional Material Synthesis, *Acc. Chem. Res.*, 52, 2598 (2019)
- 2) Redox Chemistry of π -Extended Tellurophenes, *Commun. Chem.*, 2, 124 (2019)

<http://www.echem.titech.ac.jp/~inagi/index.html>

高分子電解反応
電解水素化
両極反応
電解塩素化
パターンニング
傾斜発光
傾斜エレクトロクロミズム
傾斜ポリマーブラシ

フッ素化学
電解フッ素化
含フッ素高分子
電解重合
n型半導体
傾斜表面
金属ナノロッド
電解集積化

バイポーラ電気化学
導電性高分子
ファイバー
ヤヌス微粒子
機能材料

中菌研究室



准教授

中菌 和子

主: 副:
博士 (工学)

機械的な結合・構造特性を利用した新しい機能性高分子の創製

研究キーワード 高分子化学、有機合成化学、超分子化学、インターロック分子、高分子反応、高分子構造制御

分子の空間配置制御の化学である超分子化学を基盤として、超分子の「やわらかい構造」由来のユニークな機能や物性を示す有機・高分子材料の研究を行っています。超分子は環境応答性を有する分子や分子群です。様々な高分子材料との組み合わせにより、従来の高分子にない機能や物性の発現が期待されます。当研究室では、超分子構造体や高分子材料などの設計・合成を通して、新しい材料やプロセスの開発にとどまらず、新しい概念や分野の形成を目指しています。

機械的結合を有する高分子の化学

生体高分子は、その高次構造の制御に水素結合などの非共有結合性の相互作用を利用していますが、最近ではDNAの高次構造制御や反応において、DNAを包接する環状の酵素が作用していることが明らかになってきています。これらの発見から、天然において機械的な結合は構造制御や反応制御上重要な結合であり、意図的に絡み合った骨格が生体内で構築され、用いられている可能性が非常に高いと言えます。私たちの研究室では、合成高分子中における機械的結合の意義について明らかにすることを旨とし、戦略的に機械的結合を利用したユニークな機能や物性を示す高分子材料の開発に取り組んでいます。これまでに、高分子の末端に機械的結合部位を導入することで、直鎖状高分子を環境にตอบสนองして環状高分子に変換する手法の開発し、環状高分子の新しい合成戦略として提案しています。

また、古くから合成・物性の観点において興味を持たれているポリカテナンは、主鎖がマクロサイクルの絡み合いで形成された鎖のような構造の高分子です。合成には多段階の環化プロセスが必要であることから、合成例も少なく夢の高分子とされています。私たちは、新しいポリカテナン及び類似の構造を有する高分子の合成を目指しています。

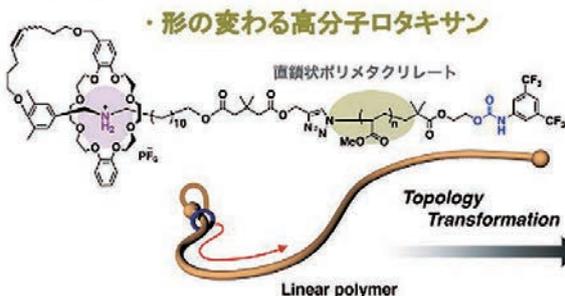
インターロック架橋材料の開発

架橋は重要な高分子修飾法であり、古くて新しい分野です。架橋構造の制御によって、同じ高分子から多様な物性を示す高分子材料を生み出すことができますが、機械的結合分子であるロタキサン構造を架橋点に導入することで、架橋高分子の強靱化が可能であることを見出しています。様々な架橋高分子へロタキサン架橋を導入した新材料の開発を行っています。

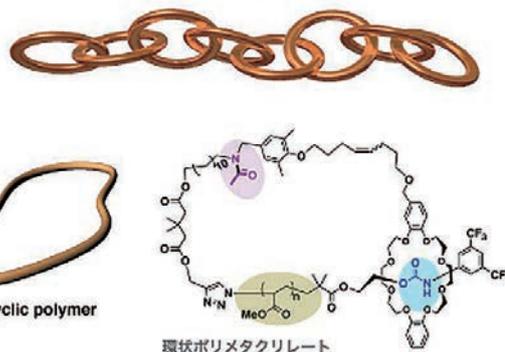
高効率高分子改変反応の開発

高分子反応は、高分子の機能化として重要なだけでなく、高分子の分解(ケミカルリサイクル)という観点においても重要です。しかし、高分子反応において効率的に修飾・分解するには、高分子特有の高分子効果を克服するための工夫が必要です。私たちは高分子反応の反応空間制御によって、高分子反応の高効率化を目指しています。

機械的結合を有する高分子

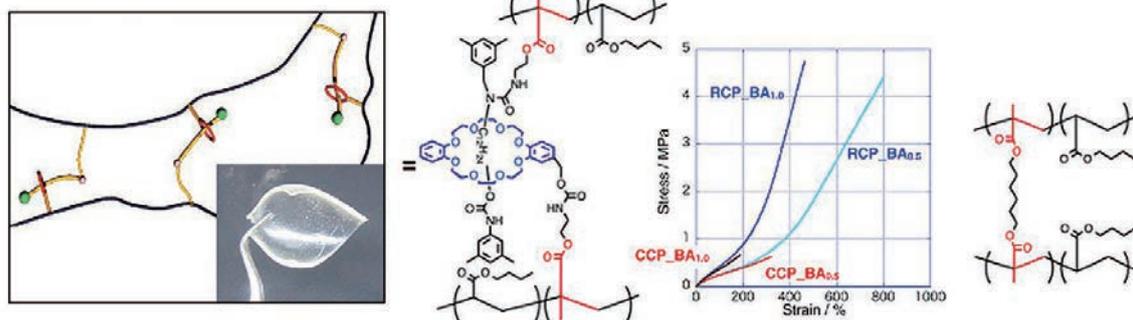


・主鎖に絡み合い結合を有するポリカテナン



インターロック架橋材料

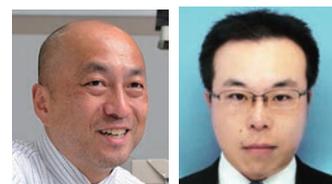
・精密なロタキサン構造で架橋したゲル・エラストマー



原(正)研究室

自己組織化とナノテクから、分子の進化と機能化に挑む

研究キーワード 自己組織化、有機超薄膜、界面膜、ナノテクノロジー、DNAナノマテリアル、走査型プローブ顕微鏡、高感度分析手法、生命の起源と化学進化、地球生命研究所(大岡山)等との連携研究



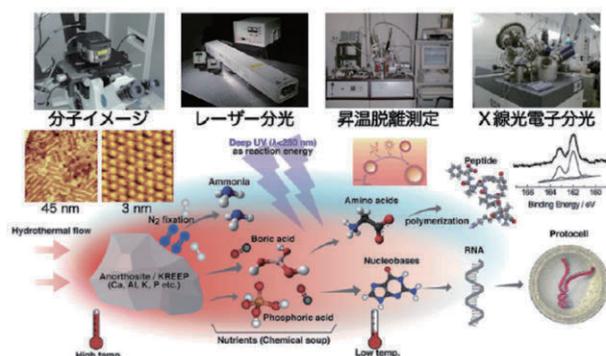
教授 **原 正彦**
主: A 副: E
工学博士

助教 **石川 大輔**
主: A 副: E
博士(工学)

本研究室では、物質化学とナノテクノロジーの融合領域から、今までの延長上にはない、新しい社会的価値をもたらす物質の機能設計を目指すと共に、「究極の自己組織化」である生命の起源に迫る、分子の化学進化と機能発現のメカニズムの解明に挑んでいます。化学進化実験は本学 WPI 地球生命研究所(大岡山)にて連携研究を行うなど、基礎から応用に至るダイナミックな研究を展開しています。

自己組織化・ナノプローブを駆使して、新しい機能設計と自ら機能を発現する分子進化のメカニズムの解明に挑む

現代の情報化社会を構成する様々な分野の最先端デバイス開発では、物質の表面・界面と、それらのナノスケールからの構造・物性の解明と機能の設計制御が重要とされています。一方、自然界に見られる生体分子などの物質系では、従来のデバイスでは再現出来ない、巧みな機能性が実現されています。自己組織化単分子膜などの有機超薄膜の表面・界面には、今後も新しい機能発現につながる物性が多く潜んでいます。我々は、個々の分子スケールに至るプローブ顕微鏡、ナノフォトニクス技術を駆使して、表面・界面における分子の構造・配向に加え、化学反応、構造変化、分子間相互作用などを明らかにし、ナノ～メゾスケールの化学・物理現象の新しい解釈を試みています。これらの知見を利用してエレクトロニクス、環境、エネルギー、バイオへの応用、さらには生命の起源と化学進化、自然知能の発現に至る幅広い分野の課題解決に挑戦しています。



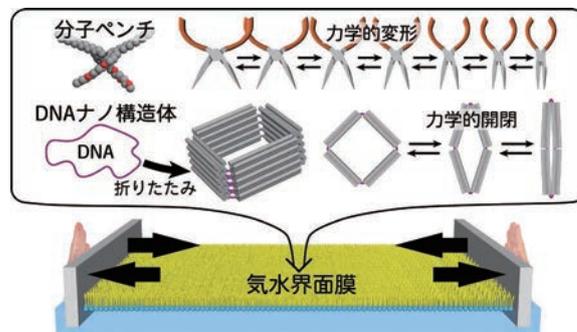
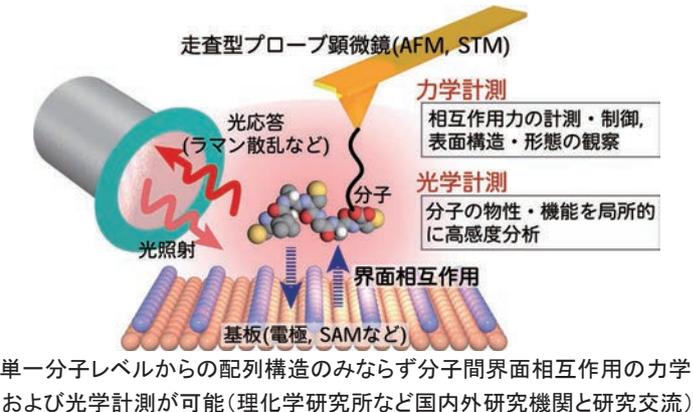
自然界の分子は、どのように合成され(化学進化)、どのように機能を発現して来たのだろうか？(地球生命研究所(大岡山)にて連携研究)

電子デバイスからバイオインターフェースまで機能性表面・界面と物性の制御、単一分子に至る評価計測

本研究室では蒸着・スパッタリングなどの真空装置や、自己組織化単分子膜、脂質二分子膜を用いた湿式超薄膜形成など、金属・半導体などの無機物質から有機生体物質、DNAナノ構造体(DNAオリガミ)まで様々な表面・界面の構造構築と物性制御を行っています。また、単一分子に至る評価計測手法を用いて、ナノスケールから原子・分子の配列構造や物性を議論しています。近年は、アミノ酸分子の鉍物表面反応、気水界面膜、フレキシブルデバイスなどへも観察対象を広げています。

研究室主要実験設備

- 走査型トンネル顕微鏡、原子間力顕微鏡
 - 金単結晶作製装置、昇温脱離分光装置、表面プラズモン分光装置
 - 赤外分光光度計、紫外可視分光光度計、蛍光分光光度計
 - 水晶振動子マイクロバランス測定装置、LC飛行時間型質量分析装置
 - 動的・静的光散乱、ゼータポテンシャル測定装置、LB膜作製装置
- (その他、研究室紹介、<https://www.haralab.tokyo>)



界面を利用して分子やDNA構造体などのナノ構造を力学的に操作する

研究室で学ぶこと、バイリンガル、21世紀型スキル

本研究室では自律して研究を遂行出来る「プロとして仕事する力」の習得を指導します。試料作製、測定装置の開発、ナノスケールに至る構造と物性の評価といった一連のプロセスを通じて「最先端の科学技術」と「国際社会に貢献出来る力」の習得を目指しています。

また理化学研究所や本学の地球生命研究所(大岡山)などの研究機関との強い連携により、基礎から応用に至る連続的な研究フェーズと、短期留学を含む国際的な研究環境、及び産官学連携体制を整え、今後、社会で要求される「21世紀型スキル」である新しい「研究力」「国際力」そして「社会力」を学習出来る研究環境作りを努めています。

本研究室は化学、物理、生物、工学、光学、情報など様々なバックグラウンドを持つ学生・スタッフ、外国人留学生・研究員の集合体で、毎日の研究室生活がバイリンガルで異分野交流の機会となっています。(その他、参考、<http://www.elsi.jp>、YouTube “Why Tokyo Tech?”)

野村研究室

環境にやさしいものづくり、決め手は触媒

研究キーワード 触媒反応化学、グリーンケミストリー、規則性多孔体物質、反応機構、赤外分光、ゼオライト、メソポーラス物質



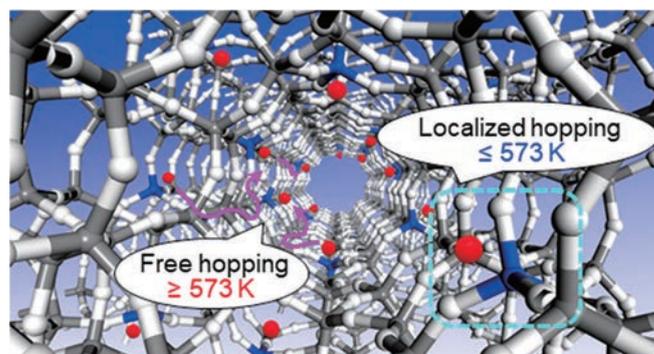
准教授
野村 淳子
主：A
理学博士

触媒は資源・環境・エネルギー問題の解決に大きく貢献できる材料です。触媒材料のなかでも、ゼオライトは近年もっとも注目されており、結晶構造の中に分子サイズの孔を持つ非常にユニークな物質です。また界面活性剤のミセル構造を転写すればゼオライトより大きな孔を持つ新しい材料であるメソポーラス材料が合成できます。また、触媒反応は、活性点と呼ばれる特別なサイトで進行することから、活性点の構造や反応機構の詳細を理解することは、触媒開発のためのみならず学術的にも重要です。私たちは、新しいナノ空間材料の設計、合成法の開発を行うとともに、赤外分光法を用いて、分子が触媒上に吸着する様子や吸着分子が活性化され触媒反応が進行する過程を基礎から詳細に調べています。有毒な薬品を用いず不要な廃棄物も産出しない、環境にやさしい新しい化学変換法をつくりあげることを目指して研究を行っています。

遷移金属酸化物薄膜で形成されたメソ空間での固体触媒機能の発現

遷移金属酸化物薄膜で形成された均一なサイズと規則配列を有するメソ空間を構築し、遷移金属酸化物の選択により、空間の親・疎水性制御および固体触媒機能の発現を目指しています。最近では、特に規則性メソポーラスシリカの細孔内に遷移金属薄膜を調製する研究を行っています。メソ細孔内に形成された遷移金属酸化物薄膜は、バルク表面とは異なる触媒機能の発現が期待され、さらにヘテロ元素を単核で導入し、単離されたヘテロ元素に特徴的な触媒特性を見出しています。また、遷移金属薄膜の厚みや密度を制御することで、触媒担体としての応用も期待されます。

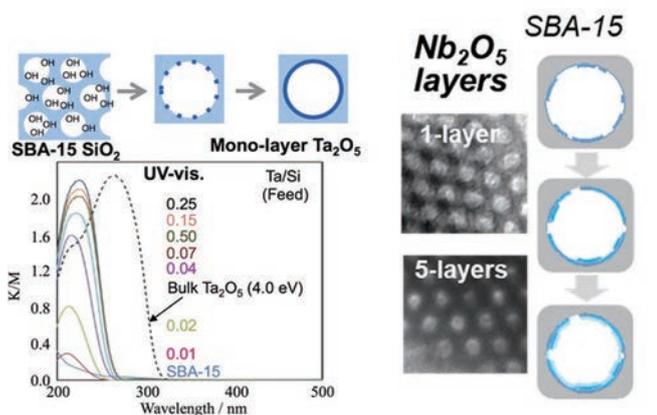
で広く用いられている固体酸触媒です。ゼオライトが工業プロセスで触媒として用いられる際には、一般的に数百℃といった高温で用いられます。しかしながら、このような高温下でのゼオライトの触媒活性点の状態は、不明な点が多々あります。当研究室では、温度可変なIRセルを用いることで実際にゼオライトが触媒として使用されるような高温でのIRスペクトルを測定し、物理化学的な視点からゼオライト活性点の挙動の解明を行っています。また、計算科学的な知見も取り入れることで(共同研究)、より高精度なキャラクタリゼーションの手法の開発も行っています。



J. Phys. Chem. C, (2017).

In-situ IR を用いたゼオライト上での触媒反応機構解明

研究室では、触媒のキャラクタリゼーションのみではなく、触媒反応そのものを赤外分光法で観測しています。ゼオライトやメソポーラス物質上に反応分子が吸着し、反応中間体を経て、生成物になる過程を詳しく観測することで、様々な触媒反応の機構解明を目指しています。

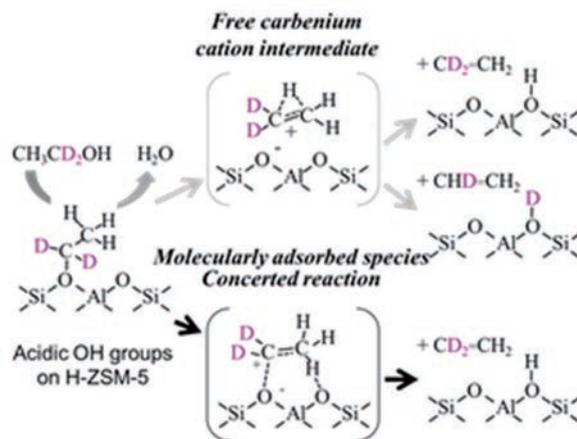


ChemistrySelect, (2016).

Micropor. Mesopor. Mater., (2018).

In-situ IR を用いた高温におけるゼオライト上のプロトンホッピング機構の解明

触媒反応を行う上で、その触媒のキャラクタリゼーションを適切に行うことは、学術的にも工業的にも非常に重要な課題の1つとなっています。当研究室で主に扱っている触媒の1つであるゼオライトは、石油化学等の分野



Angew. Chem. Int. Ed., (2011).

J. Phys. Chem. Lett., (2015).

当研究室は横井研究室と連携しながら研究室を運営しています。

横井研究室



准教授
横井 俊之
主：A
博士(工学)

ナノ空間触媒による炭素資源の有効利用

研究キーワード ナノ空間触媒、ゼオライト、メソポーラス物質、単分散シリカナノ粒子、触媒反応化学、グリーンケミストリー、資源化学、C1化学

当研究室は「ナノ空間触媒研究ユニット」として研究・教育を実施しています。ゼオライトやメソポーラス材料のようにナノスケールの空間を有するナノ空間材料はすでに幅広く実用化されており、今後もその発展が期待されるナノテクノロジーの基幹材料の一つです。なかでも、ゼオライトは結晶構造の中に分子サイズのナノ空間を持つ非常にユニークな物質です。このようなナノ空間材料を触媒として用いた場合、ナノ空間の形状と反応物・生成物分子の形状の幾何学的関係による「形状選択性」により、通常の金属酸化物では成し得ない特異な触媒活性を示します。当研究ユニットの目標は多様な資源の有効利用、ならびに化学品製造プロセスのグリーン化に直結する革新的なナノ空間触媒の創製とそれを用いた触媒反応プロセスを開発することです。

多様な資源の有効利用に資する「ナノ空間触媒」の創製と化学品製造プロセスのグリーン化



新原理によるナノ空間触媒の創製

マイクロからメソ空間を有するナノ空間材料の合成、修飾、構造解析、応用に関する研究を行っています。具体的にはマイクロ細孔を有する「ゼオライト」から、界面活性剤の超分子構造を鋳型として合成される「メソポーラス材料」数 nm～数百 nm の範囲で自在にサイズ制御可能な「単分散ナノ粒子コロイド結晶」の3つの材料を基盤に、主に環境調和型触媒反応プロセスの開発を行っています。これまでの成果として通常のプロセスとは全く異なる、新しい原理によるナノ空間触媒材料の調製法を開発してきました。

ゼオライト

有機構造規定剤を使用しないゼオライト合成
Angew. Chem. Int. Ed., 2009.

メソポーラス材料

アニオン性界面活性剤を用いる合成手法の確立
Nature Mater., 2003.

シリカナノ粒子コロイド結晶

塩基性アミン液を用いた単分散シリカナノ粒子
J. Am. Chem. Soc., 2006.

新原理によるナノ空間触媒の創製

多様な炭素資源から化学品を作り出す革新的なナノ空間触媒

現在、メタノールからプラスチックなどの化学品原料として用いられるオレフィンを高収率かつ高生産性で製造するナノ空間触媒の開発に挑んでいます。メタノールは二酸化炭素と水素から合成することができるため、この触媒反応プロセスが実用化されれば、二酸化炭素を資源とするオレフィン製造プロセスが確立されることになり、人工光合成型社会の構築にも大きく寄与するものです。

また、天然ガス、シェールガスの主成分で有り、石油に代わる化学資源として注目されているメタンが非常に注目されています。メタンをメタノール、さらには低級オレフィンに直接変換するナノ空間触媒の開発にも挑んでいます。もし、この触媒プロセスが実用化されれば化学産業におけるメタンの新たな活用を切り開き、ひいては新たな産業基盤の確立につながるものが期待されます。

ナノ空間触媒の高度構造解析・評価手法の開発

当研究ユニットではナノ空間触媒の合成、触媒反応評価、触媒構造ならびに反応機構解析まで一貫してできる研究環境が十分に整備されています。構造解析、反応機構解析にも力を入れています。例として、

【高分解能多核固体NMRによる構造解析】

- ✓ 多核固体NMRによるヘテロ原子の状態解析
- ✓ MQMAS, DQMAS法による高度構造解析
- ✓ 温度可変プローブを用いた固体NMRによる構造解析

【多様化するマテリアル解析ニーズを実現する高度SEM観察技術開発】

- ✓ 低電圧超高空間分解能SEM観察による超精密表面観察
- ✓ 断面SEM観察と元素分析によるナノ多孔質材料の粒子内部観察



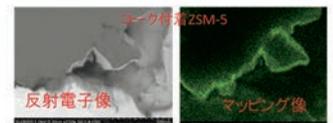
高分解能多核固体NMR

Magnet : 600MHz, 14.01T
Tube size : 1~8 mm
Spinning rate : max 100 kHz

- ✓ MAS NMR法
- ✓ CP/MAS NMR法
- ✓ MQMAS NMR法
- ✓ DQMAS NMR法
- ✓ ²⁹Si-²⁷Al_hetcor NMR



高分解能SEM/STEM



断面観察→コーク分布の可視化

産学連携・国際共同研究

特にメタノール転換用(MTO)触媒では企業と共同で超高耐久性ゼオライト触媒を開発し、小型パイロットスケールでの性能実証まで進んでいます。また、国内はもちろん、海外の産・学・官と積極的に交流しており、共同研究を推進しています。

当研究室は野村研究室と連携しながら研究室を運営しています。

福島・庄子研究室

先端分子科学で挑む機能物質の創製

研究キーワード π 電子系分子・超分子・高分子、カーボンマテリアル、金属錯体、有機典型元素化合物、自己集合、機能性分子集合体、ナノ構造体、電子材料、光化学、熱マネージメント、酸化還元、刺激応答機能、動的機能、エネルギー・物質変換機能



教授
福島 孝典
主: **A**
博士(理学)

准教授
庄子 良晃
主: **A**
博士(工学)

研究対象・研究方針

我々の研究室では、様々な物性を有する分子群の創製と、分子自己組織化の精密制御を可能にする方法論の開拓を通じ、有機・高分子からなる物質、いわゆる「ソフトマテリアル」の革新的機能の開拓を目指しています。特に、光吸収・発光特性、電導性、磁性など、物性に富む π 電子系分子群をモチーフとし、立体構造、電子構造、適切な元素・官能基の導入などを戦略的に考え、機能創製に向け合目的に分子をデザインします。合成した分子は「自己組織化」や「ナノスケールの足場」などを利用して空間特異的に集積化し、巨視的にも分子配列が制御された物質を創製します。これらの物質では、個々の分子に起こるわずかな状態変化が巨視的レベルにまで増幅され、大きな機能を発現することが期待されます。さらに、複数の機能ユニットを効果的に集積化し、個々のユニットの性質の単なる足し合わせではなく相乗的機能を発現させるための基礎学理を探索します。究極的には、生体に匹敵する高度な物質変換、エネルギー変換を実現する材料の開発を目指します。こうした取り組みを通じて、ナノスケール(分子レベル)からマクロスケールに至るまでの新物質開発と、それらが発現する新機能・新現象を探索します。

最近では、有機物質の熱輸送特性に焦点を当てた研究にも注力しています。近年、エレクトロニクスの微細化が進み、ナノスケールにおける高度な熱制御を可能にする熱マネージメント材料の重要性が高まっています。設計自由度の高い有機材料は熱マネージメント材料の有力候補ですが、無機材料の場合とは対照的に、ナノスケールにおける有機物質の熱輸送現象の理解は大きく立ち遅れています。我々は、構造明確な分子集合体を用いた構造-熱輸送特性の相関を精密に検討することで、これまで未解明であった有機物質における化学結合・官能基・ダイナミクス・配向などの構造特性と熱輸送特性の相関を明らかにすることを目指しています。

次頁には、我々が推進している研究を、対象とする物質および機能のレイヤーに分けてまとめた俯瞰図を示しています。

研究室体制と研究指導方針

我々の研究室は、有機・高分子・超分子・金属錯体・典型元素化学・分子集合体化学・有機物性化学といった、多様な研究バックグラウンドをもつスタッフ陣から構成されていることが大きな特色です。学生は、個々のスタッフだけではなく、全てのスタッフからの指導を受けることができるため、様々な知識・技術を習得することができます。学生は、一人一人が独立した研究テーマを推進します。次頁の俯瞰図で示しているように、研究対象や目指す機能のスコープは極めて広いため、日々の研究活動を通じて、自らの研究テーマのみならず他のメンバーの研究を通じて幅広い知識や経験が得られます。大学院生は、当研究室が参画している学術変革領域研究「高密度共役の科学」の枠組みで、国内外の共同研究先に滞在し、分野の異なる研究に取り組むこともできます。また当該学術変革領域では、学生が主体となって活動する若手会が企画されており、多彩な研究分野の研究に携わる同世代のメンバーと活発に交流する機会が数多くあります。こうした活動を通じて、複数の研究分野に精通した「マルチリンガル」な人材を育成することが当研究室の指導理念です。

学生のみなさんへのメッセージ

物質科学が社会に果たす役割は、基礎・応用を問わず益々大きくなっていきます。「環境・エネルギー問題」の解決に向けた取り組みも、物質科学の発展なくしてはなしえません。研究活動に対する「強い意欲」と社会に貢献しようという「高い志」、そして一つところに留まらず常にフロンティアを突き進もうとする「チャレンジ精神」を持った学生の皆さん、我々の研究室と一緒に研究をしませんか？いつでも質問・見学を受け付けていますので、興味をもった学生の皆さん、是非我々の研究室を訪ねてみてください！（「研究室ウェブサイト」も併せてご覧下さい。）

新学術領域
 π 造形科学
電子系分子・超分子・高分子・カーボンマテリアル・金属錯体・有機典型元素化合物・自己集合・機能性分子集合体・ナノ構造体・電子材料・光化学・熱マネージメント・酸化還元・刺激応答機能・動的機能・エネルギー・物質変換機能
(2014-2018年度)

領域若手会
 π -System Figuration
for rising generation

学術変革領域
高密度共役の科学
電子共役の概念の革新と電子物性をつなぐ
(2020-2024年度)

領域若手会
国内の若手研究者と活発に交流
国内留学制度（大学院生向け）

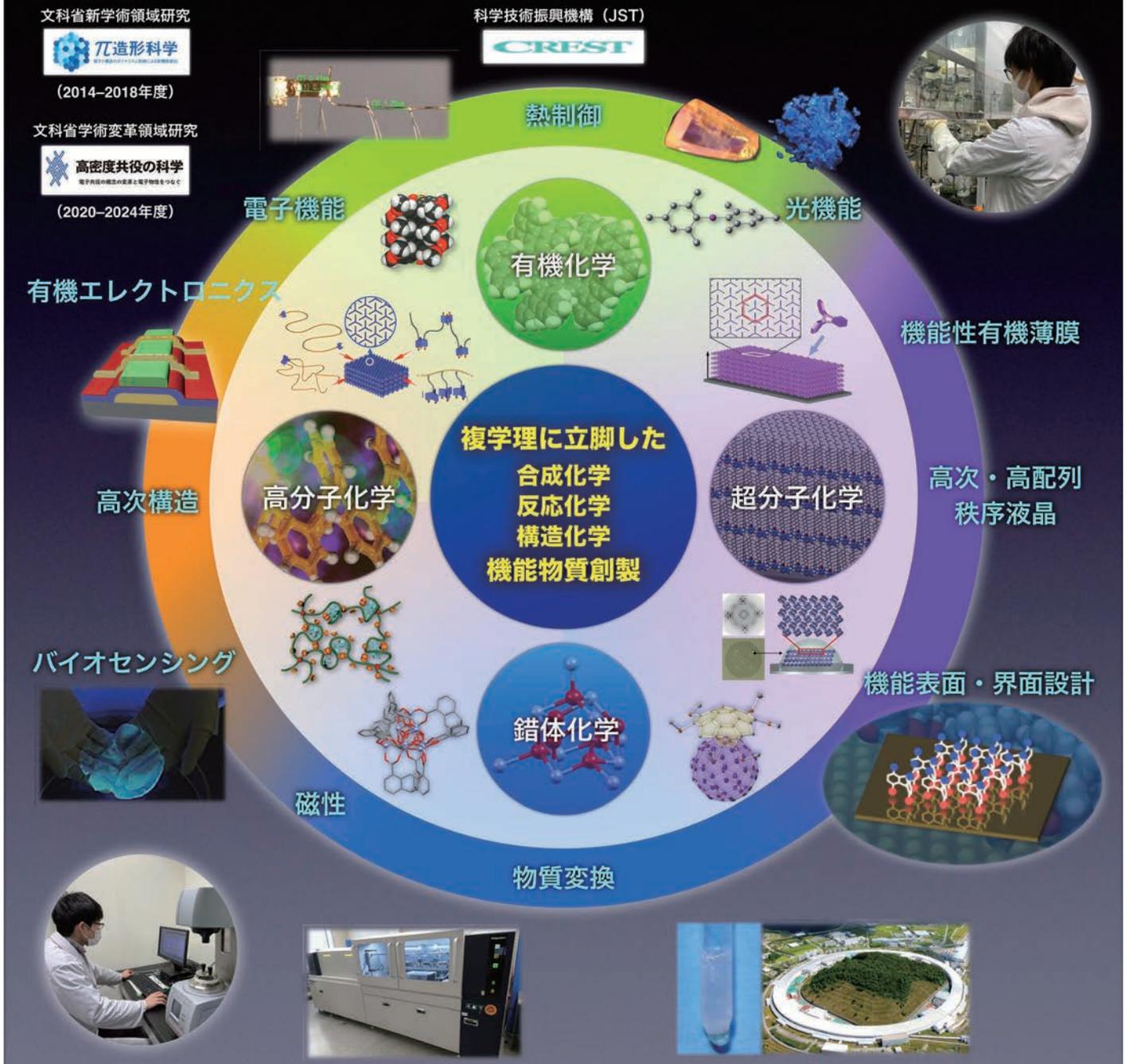


助教 福井 智也
主: **A**
博士(工学)

特任助教 竹原 陵介
主: **A**
博士(工学)



有機・高分子・超分子・典型元素化学を駆使した 機能性分子・分子集合体の創出とその応用研究



山口・田巻研究室

持続発展可能社会に向けた材料機能のシステム設計

研究キーワード 燃料電池、バイオマテリアル、膜工学、機能材料システム設計、化学工学



教授 山口 猛央 准教授 田巻 孝敬 助教 大柴 雄平
 主: A 副: E 主: A 副: E 主: A
 博士(工学) 博士(工学) 博士(工学)

環境問題、エネルギー・資源枯渇問題など地球規模の問題の解決や、豊かな生活持続のための医療・医薬技術の進展などのためには、新しい機能材料・プロセスの開発が必要不可欠です。これらの分野では、単純でなく精緻で複雑な機能を示す材料デバイス及びプロセスが要求されています。これら高機能材料は、最先端の要素技術とこれらを統合する画期的なアイデアにより生まれます。本研究室では、材料自身をシステムとしてとらえ、複数の素材を有機的に結びつけ、新機能を発現する“機能材料システム”および、そのプロセス化までを対象とし、社会および地球のために真に必要な科学技術のブレークスルーを目指します。具体的には燃料電池、バイオマテリアルの創製から、持続発展可能な地球環境保全技術へと展開します。

固体高分子形(プロトン伝導)燃料電池

固体高分子形燃料電池(PEFC)は、自動車や家庭用定置型の電源として注目されています。日本では世界に先駆けて家庭用燃料電池エネファームや燃料電池自動車の販売が開始され、燃料電池開発のフェーズは実証研究から普及初期へと移行しています。しかし、依然としてコストや耐久性などの課題が残っており、普及拡大へ向けた革新的な技術開発が必要です。

PEFCの中心部分は、反応を行う触媒層と、プロトンを伝導する電解質膜です。本研究室では、燃料電池全体のシステムを俯瞰的に捉えながら触媒層、電解質膜それぞれについても機能材料システムの考え方に基づいて材料開発を行っています。

自動車用途では、さらなる低コスト化・高耐久化が求められています。特に酸素を還元するカソードで使われている白金量の低減、すなわち触媒量あたりの活性向上と、作動条件における触媒層の耐久性向上が重要な課題です。本研究室では、我々独自の技術であるカーボンフリー・ナノ粒子連結触媒により、触媒層の高活性化・高耐久化の両立が可能であることを示すなど、世界の最先端をリードし、課題解決へ近づいています。電解質膜については、ポリマー単独では相反して両立できなかった特性を実現するために、世界で初めて数十 nmの多孔膜細孔中に電解質ポリマーを充填する細孔フィリング法を開発し、新しい構造、機能が発現することを発見しました。また、PEFCで要求されている高温・広湿度で高プロトン伝導性を示す電解質材料の開発へ向けて、量子化学計算と実験の両面からアプローチし、酸高密度構造で特異的に発現する高速プロトン伝導機構を解明し、高温・広湿度で高プロトン伝導性を示す電解質材料の設計指針を明らかにしました。このように、世界でも例をみないナノレベルからの新しい発想や化学合成手法を生み出しています。

固体アルカリ燃料電池

本研究室では、プロトン伝導性の電解質を用いたPEFCと並行して、アンモニアやアルコールなどの液体燃料を直接利用する次世代型の固体アルカリ燃料電池についても研究開発を進めています。

エネルギー問題や地球温暖化問題の解決には、化石燃料から再生可

固体高分子形(プロトン伝導)燃料電池

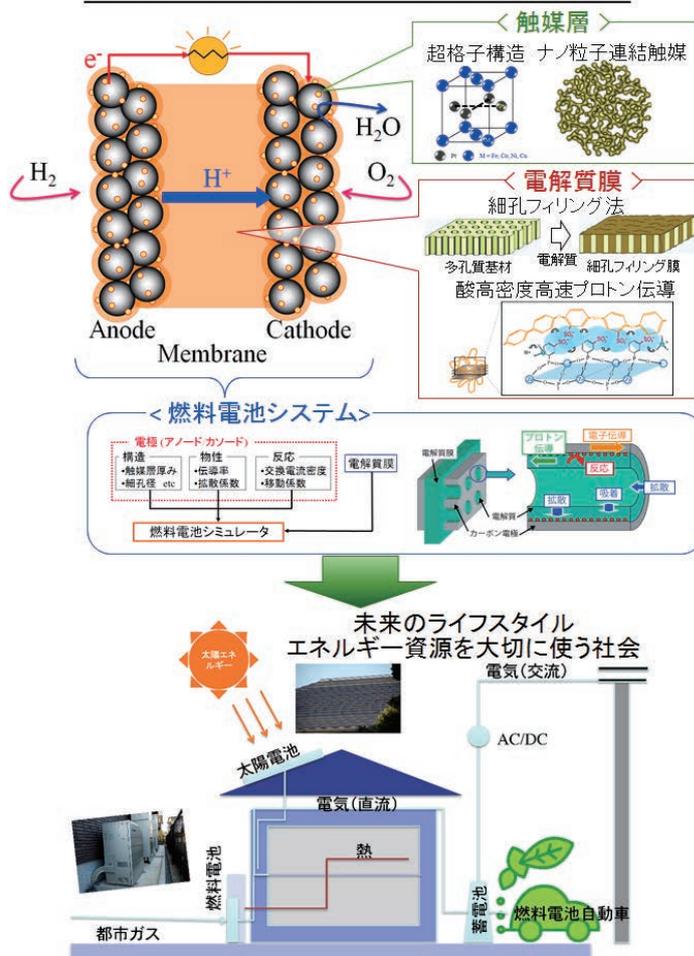


図1 燃料電池における材料機能のシステム設計

能エネルギーへの転換が重要です。例えば、地球上で使用可能な太陽エネルギー量は人類が使用するエネルギー量の100倍近くあると見積もられています。しかし、太陽光や風力を基本とした再生可能エネルギーは、生産地と消費地の場所的隔たりや時間変動が大きく、需給のピークが一致しないため、再生可能エネルギーを貯蔵、輸送できるエネルギーキャリアが必要となります。

最も一般的なエネルギーキャリアである水素は気体であるため、エネルギー密度が低く高圧にする必要があり、貯蔵・運搬が難しいという欠点があります。PEFCでは燃料に水素を用いるため、現状の燃料電池自動車では高価な高圧水素ボンベや、新たな水素スタンドの建設が必要です。従来の自動車で用いられているガソリンと同じように、液体燃料を用いた燃料電池自動車を実現すれば、貯蔵・運搬に関する課題の大半が解消します。しかし、PEFCでは触媒層内が酸環境となり、卑金属が容易に溶解すること



助教
菅原 勇貴
主: A
博士(工学)



から、触媒の選択肢が限定されており、液体燃料の酸化反応に由来するロスを大幅に削減できる触媒は見つかっていません。

プロトンの代わりにOH⁻イオンを逆向きに伝導させるアルカリ燃料電池では、触媒層内がアルカリ環境となり、ほとんどの金属が安定に存在できるため、触媒金属の選択肢が大きく広がります。一方で、アルカリ環境で安定かつ高性能なOH⁻伝導性電解質膜は存在しておらず、固体アルカリ燃料電池の研究は、PEFCに比べて大きく遅れていました。

本研究室では、モデル化合物を用いた実験と量子化学計算により、高耐久性ポリマーの分子設計指針を獲得し、指針に基づいて高耐久性、高イオン伝導性、高燃料透過阻止性を同時に満たす電解質膜の開発に成功しています。また、固体アルカリ燃料電池の利点を活かした極低白金合金触媒や、固体アルカリ燃料電池特有の水移動特性を考慮した膜-電極接合体の研究開発を進めています。

燃料電池技術の普及を早め、地球環境を維持するために、皆さんと一緒に材料システムの概念を適用し、世界の燃料電池研究をリードする新規概念、新電池開発を行っていきます。

バイオマテリアル

従来の人工材料では分離・反応など一定の機能を定常的に示しますが、生体では時間・環境によって同じ細胞や生体膜が異なる機能を示します。生体自身を人工的に作ることは困難ですが、生体の持つシステムから発想して新しい人工材料を作ることは可能です。未来の人工臓器、薬物送達システム、医薬品合成のために、生体システムを良い見本として材料システム開発を進めています。

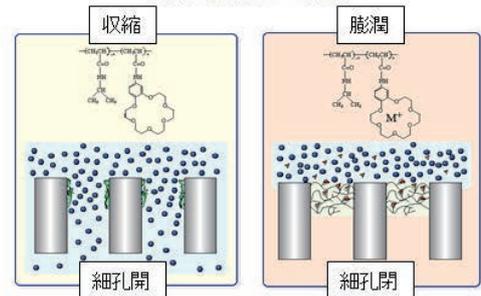
我が国が高齢化社会を迎えているなかで、健康上の問題がなく日常生活を送れる期間を延ばすためには、健康な状態を持続する医療の充実が今後ますます求められます。

健康な生活が持続できる社会の構築へ向けて、本研究室では在宅で簡単に健康状態を確認できるバイオセンサーの研究開発に取り組んでいます。生体膜が特定の分子を認識して膜の透過性を制御していることに着想を得て、超分子や生体分子による物質認識機能と温度応答ポリマーによるアクチュエータ機能をナノ多孔体内部で協調的に組み合わせることで、特定の分子だけを認識して膜細孔の開閉を行う分子認識ゲート膜の開発に成功しています。また、材料が自律的に特定物質を認識して捕捉・脱離を行う分離材料の開発にも成功しています。

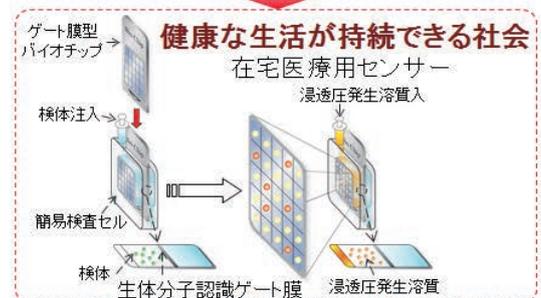
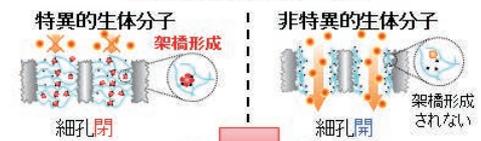
健康な生活を持続するためには、歩行等を補助する医療用補助具を活用して、寝たきりを避けることも重要です。そこで、人体の近くで用いる医療用補助具などの電源として、安全・安心な燃料であるグルコースなどを用いて発電を行うバイオ燃料電池の研究開発にも取り組んでいます。バイオ燃料電池では、生体内におけるエネルギー変換過程から着想を得て、酵素を触媒に用いることで燃料の化学エネルギーを電気エネルギーへ変換します。生体内で多様な分子の酸化還元反応に携わっている酵素を用いることで、従来の燃料電池では充分検討されてこなかった燃料

バイオマテリアル

分子認識ゲート膜



生体分子認識ゲート膜



自立膨潤収縮材料



バイオ燃料電池

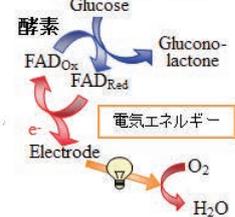


図2 バイオマテリアルにおける材料機能のシステム設計

が利用できます。一方で、バイオ燃料電池は出力密度、特に電流密度が低いことが課題でした。本研究室では、材料機能のシステム設計の考え方をを用いて、従来のバイオ燃料電池における律速過程を解消する電極構造を提案し、実験およびモデル計算から、提案した構造が高電流密度化に有効であることを示しています。

いずれも、まだ始まったばかりの研究領域ですが、材料機能のシステム設計の概念を用い、誰も実現できなかった新しい科学技術分野を開拓しましょう。

山元・今岡研究室

集積金属錯体の精密合成化学：新物質「超原子」創製への挑戦

研究キーワード 精密樹状高分子、 dendroliマー、集積金属錯体、ナノ粒子、クラスター
触媒、量子サイズ効果、機能材料化学、ナノ空間物質、原子数制御



教授 **山元 公寿** 主：A 工学博士
准教授 **今岡 享稔** 主：A 博士(理学)
助教 **神戸 徹也** 主：A 博士(理学)

ナノ粒子は、ナノテク素材の中でも最も重要な材料の一つとして、化学の研究対象としてのみならず工業的にも幅広く利用されており、世界的に激しい開発競争が繰り広げられています。ところが、このナノよりも小さいサブナノメートルスケールは、その構成原子数がわずかに数原子から十数原子となる世界であり、これまでの科学の概念では説明できない現象が発現する未知分野です。その中でも特に、サブナノ粒子を構成する原子の総数や比がある特定の数となるときに、その特性が大きく変化し、元来の構成元素とは全く異なる特性を持つ物質、いわゆる「超原子」となる可能性は、「元素の性質は不変」という従来の化学の概念を覆すものとして、大きな期待と関心を集めています。周期表の中には金属元素が90種類以上存在し、そのいくつかを取り出し、粒子に組み上げる組み合わせは無数にあります。しかしながら、このようなサブナノ粒子を、異種金属原子の原子数を決めて集積、配合したり、さらには、有機合成化学のように意のままに組み立てたりする方法は未だ確立されていません。

我々はこの大きな可能性を秘めた新物質群の自在創製を目指し、種類豊富な金属元素を原料に、原子単位で精密にハイブリッド(複合化)する方法を世界にさがかけて開発してきました。これを発展させて、合成および構造解析や新物性・機能の探索を展開しています。

デンドリマーへの金属の自在集積とプログラミング

デンドリマーは分岐型高分子の中でも最も分岐度が高く、対称性が良い、分子構造と分子量の分布を持たないユニークな特徴を持っています。分子の直径は設計によって変わりますが2~5 nm程度であり、電子顕微鏡(TEM)であれば実際に見ることもできます。この分子は高分子で有りながら厳密に化学構造を決めて合成することができ、きちんと分子設計することが可能です。また性質においても低分子や普通の直鎖高分子には無い多くの特徴を有しており、これを活かした機能材料へ展開を行っています。その中でも私たちの扱っているデンドリマーが持つ大きな特徴は金属の精密集積機能です。

構成原子の数を1原子刻みで決定

Nature. Commun. 2017, 8, 688.

多種の金属を1nm粒子にハイブリッド

Science Adv. 2017, 3, e1700101.

最高の活性をもつ白金 Pt₁₉ の発見

Nature. Chem. 2009, 1, 397.
Angew. Chem. Int. Ed. 2015, 54, 9810.

夢の物質 超原子の創製へ

Nature. Commun. 2017, 8, 2046.

9 F, 17 Cl, 35 Br

ナノ空間の創出と精密反応場の利用

Nature. 2002, 415, 509.
Nature. Nanotech. 2008, 3, 106.

デンドリマリアクター法

仮想原子の結合による超分子創製

Science Adv. 2016, 2, e1601414.

元素の選択・原子総数
比率・配列...
自在精密制御



助教
塚本 孝政
主: A
博士 (工学)



従来の化学の常識を破る興味深い現象として、私たちは2002年に dendrimer 型配位子への段階的な精密金属集積を世界で初めて報告しました (Nature, 2002)。私たちが合成した dendrimer には金属イオンと錯体をつくる配位サイトが多数存在し、さらにその内部には電子的な勾配が自発的に生起しています。これが駆動力になって金属をより内側へ集めようとする性質を有していることが明らかになっています。この手法の大きなアドバンテージは、様々な金属に対して錯形成の当量数を予めプログラムすることで簡単に、単一の集積構造を得られるという点にあります。従来の集積型錯体や自己組織化超分子、微粒子の化学はあくまで最終生成物の安定性に頼って超構造が勝手にできる化学だったわけですが、私たちの方法は当量数を任意に変えることによって連続的に、自在に構造や組成を制御することが可能です。より能動的に物質を設計(デザイン)し、それをプログラムすることで新物質を無数のバリエーションで創り出すことができる点が大きな特徴です。

ナノからサブナノへの展開で見えてきた新しいサイエンス

私たちが知っている金属の性質(電導性・磁性・触媒活性)はあくまでバルク結晶としてのものであり、数個から数十個の原子だけで構成される構造体がどのような性質を示すのかは非常に興味深い問題です。気相中でほんの一瞬生成した「超原子」の兆候とみられる性質が捉えられたという報告は出てきていますが、世界中でまだこれらの物質を実際に手にした研究者はおらず、その素性は依然として明らかにはなっていません。

dendrimer に自在精密集積した金属塩やイオンを化学的に還元あるいは加水分解することで、従来の方法では合成出来ないような単分散で、様々な金属元素の原子数や配合比を精密かつ自在に制御されたサブナノサイズの金属、半導体、酸化物、多元合金などの新しい粒子を得ることができ、ユニークな触媒活性や量子サイズ効果の発現などが次第に明らかになってきました。

例えば白金は電導性があり、それ自体は目立った磁性は示さず、燃料電池の触媒として利用することができることは知られていますが、ここに12原子の白金で出来ている構造があったとしたらそれはどんなものなのでしょう？ その答えを知るためには、実際に12原子の集合体(クラスター)を、他の大きさが混ざらないように選択的に、それなりの量で合成する方法が必要です。

白金は次世代のエネルギーデバイス向け素材として欠かせないものですが、その埋蔵量が限られている「レアメタル」です。その量を劇的に減らすためにはナノサイズまで小さくして表面積を稼がなくてはなりません、残念ながら小さくすると活性が落ちてしまうというジレンマがこれまでありました。しかし、dendrimer 内に集積した白金を還元する方法で12原子のクラスターを選択的に作り出したところ、驚くことに活性が逆に増加し、従来の燃料電池触媒に比べてその酸素還元触媒活性/白金質量が13倍にもなることを発見しました。さらにこの方法を応用して20原子までの白金粒子を一つ一つ評価していくと19原子のものが最も高活性となり、これまで知られていなかった原子数特異的なサブナノ粒子の特性が明らかになりました。

アトムハイブリッド法で挑む次世代元素戦略

原理的には価電子数の異なる各種金属原子を組み合わせることで粒子を構成すればあらゆる性質の人工超原子が構築できると期待されます。2017年、ついにハロゲンのような性質を示すというアルミニウム13原子からなる超原子が、化学的に合成できることを実証しました。これを足がかりとして新物質探索の研究を加速していきます。

現在、プロジェクトのスタッフも合わせ、総勢47名でこの課題に挑戦しています。プロフェッショナルな雰囲気の中で研究者としての実力を磨く環境を用意しています。興味を持たれたら是非、見学にお越しください。



日頃の研究成果を学会発表：
毎年多数の賞を受賞しています

見学歓迎 R1 棟 7階でお待ちしています！
※説明会以外の日も対応できます。
ご連絡ください。

<http://www.res.titech.ac.jp/inorg/>



ゼミ合宿にて：
勉強したらあとは楽しみです



5年に一度のPacifichem(ハワイ)には全員で参加・発表

豊田研究室

化学で迫る微量気体の環境動態

研究キーワード 大気化学、地球環境化学、物質循環学、分析化学、安定同位体比、地球温暖化、オゾン層破壊、海洋酸性化



准教授

豊田 栄

主: A 副: E
博士(理学)

温暖化ガス、オゾン層破壊ガスなどの微量気体やその関連物質が地球表層でどのように循環しているのか、化学を道具として解析する研究を行っています。さまざまな環境試料中の微量成分の濃度や安定同位体比を高精度で測定する方法の開発、陸域・大気・海洋などの試料採取と分析、模擬実験による反応機構解析に取り組んでいます。

微量気体の濃度・安定同位体比の分析法開発

大気中には窒素、酸素などの主成分の他にさまざまな微量気体が存在していますが、存在度が少なくても環境に大きな影響を与える成分が多数知られています。濃度を調べることでその分布や正味の生成または消滅速度に関する情報が、安定同位体比($^2\text{H}/^1\text{H}$, $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$, $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$, $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ など)を調べることでその起源や反応機構、生成・消滅のバランスに関する情報が得られます。そこで、さまざまな環境試料中の N_2O (温暖化ガス、およびオゾン層破壊ガス)、 H_2 (水素エネルギーの利用に伴って大気中濃度が増えるとさまざまな大気化学反応に影響を及ぼす可能性があります)などの濃度や安定同位体比を高感度、高精度で迅速に分析する手法の開発を行っています。市販の分析装置をそのまま利用するだけでなく、ガラスや金属など種々の素材を用いて試料の前処理装置を自作することもあります(図1)。

フィールド観測に基づく物質循環解析

微量気体は土壌、陸水・海水中の無機化学反応や、微生物、植物、動物(人間を含む)の活動などにより生成あるいは消滅し、大気中ではさまざまな化学反応を受けて変質します。また大気と水の間では溶解度に応じて気体の交換も起きています。土壌ガス、河川・湖沼水、海水、離島や北極圏の清浄大気、都市大気、高度30kmまでの成層圏大気などの多様な環境試料を採取して研究室に持ち帰り、微量気体の濃度および安定同位体比を分析します。これらの分布や時間変化から、その循環を解析しています。試料の採取は学外の大学・研究機関の協力を得て行っていますが、できる限り自らフィールドに出て、分析する試料の性状を実感しながら採取するように努めています(図2,図3)。

模擬実験による反応機構解析

環境中ではさまざまな物理過程や化学・生物学的反応が起き複雑に関係しているので、個々の過程を分離して考えることも必要です。気体成分の燃焼・光化学反応による生成・分解過程や、微生物による物質代謝過程などを制御された条件の下で再現して、微量成分の生成・消滅速度を調べたり、安定同位体比の特異的な変化から、反応機構を推定したりする研究を行っています(図4)。

以上の教育・研究活動は、応用化学系山田研究室と協同して行っています。



図1. 大気試料中 N_2O 濃度・安定同位体比分析に用いる自作の自動前処理装置



図2. JAMSTEC/東京大学の研究船を利用した海水試料の採取



図3. JAXA大気航空宇宙実験場(北海道)における大気球を用いた成層圏大気試料採取実験

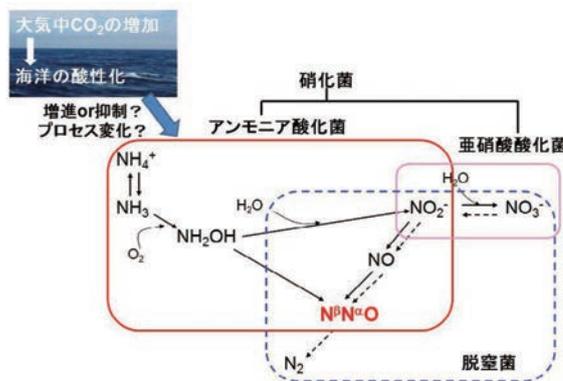


図4. 微生物培養実験による、海洋酸性化が N_2O 生成過程に及ぼす影響の評価

最近の研究成果

Guha, T., Mahata, S., Bhattacharya, S. K., Singh, B. B., Toyoda, S. et al. (2020), Stratospheric incursion as a source of enhancement of the isotopic ratios of atmospheric N_2O at western Pacific, *Earth and Space Science*, 7(11). Breider, F., Yoshikawa, C., Makabe, A., Toyoda, S. et al. (2019), Response of N_2O production rate to ocean acidification in the western North Pacific, *Nature Climate Change*, 9(12), 954-958. Toyoda, S. et al. (2019), Identifying the origin of nitrous oxide dissolved in deep ocean by concentration and isotopocule analyses, *Scientific Reports*, 9(1), 7790.

山田研究室

有機分子の起源・反応履歴を明らかにする

研究キーワード 環境有機分子、代謝物、安定同位体組成、分析化学、有機地球化学、疾患診断



准教授

山田 桂太
主：A 副：B
博士(理学)

有機分子を構成する水素・炭素・窒素・酸素等の安定同位体組成は、物理変化・化学反応を受けることによってわずかに変動します。その変動を精密に計測・解析することで、有機分子が受けた物理変化・化学反応や有機分子の起源に関する情報を得ることができます。

本研究室では、有機分子の安定同位体組成変動の計測・解析法を開発し、大気・海洋などの環境中に存在する有機分子から、食品・飲料中、さらには生体・細胞中の有機分子に適用することで、様々な有機分子の起源や反応履歴を明らかにする研究に取り組んでいます。

大気中有機分子の安定同位体組成の計測・解析

大気中には、様々な有機分子が微量成分として存在しています。それらの中でも反応性が高い有機分子は、存在がpptからppmオーダーと極微量ながらも、大気化学反応を通じて大気環境に多大な影響を及ぼしています。大気中の有機分子がどこから来て、どのような大気化学反応に関与し、どこに消えていくのかを、安定同位体組成を計測・解析することで明らかにする研究を行っています。これまで、温暖化ガスとして知られているメタン(CH₄)について、水素・炭素安定同位体組成を計測・解析し、CH₄の発生源の特定や各発生源の相対的な寄与の見積もりを行ってきました。最近では、人体に有害であるだけでなく、大気質や気候に影響を与えるとされる、揮発性有機化合物(VOCs)の発生源や大気反応過程を明らかにする研究に取り組んでいます。

食品・飲料中有機分子の安定同位体組成の計測・解析

食の安心・安全や価値保証の観点から、食品・飲料中の有機分子が天然物か化学合成物か、産地はどこか、を化学的に判別する方法の開発を行っています。

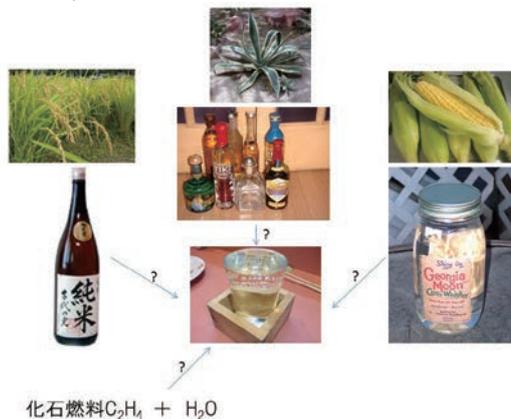


図1. アルコール飲料に含まれるエタノールの炭素安定同位体組成計測から、その原料(米、トウモロコシあるいは石油化学合成など)が詳細に区別することが出来ます。

代謝有機分子の安定同位体組成の計測・解析

血液、尿、呼気などのヒト生体試料には代謝物として様々な揮発性有機化合物(VOCs)が含まれています。それらのいくつかは特定の代謝と関連しており、その代謝に変化を引き起こす疾患や生理学的状態を反映するバイオマーカーとしての利用が期待されています。特に、尿や呼気中のVOCsは、健康状態のモニタリング、病気の発見、治療効果の予測等に対する新たな、非侵襲的な方法を提供する可能性から注目されています。これらVOCsの安定同位体組成の変動を計測・解析することで、代謝の異常を鋭敏に検知できる可能性があることがわかってきました。この代謝異常の検知による、あたらしい疾患診断方法の開発を目指しています。

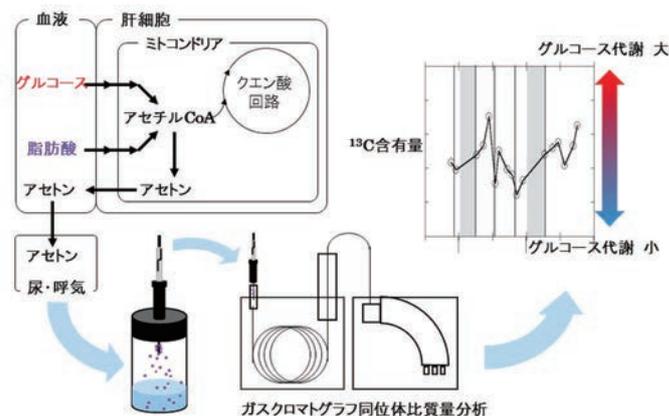


図2. 呼気・尿中アセトンの炭素同位体組成の変動を計測することで肝臓におけるグルコース代謝の変化を検知できる可能性があります。

有機分子の安定同位体組成の計測法開発

複雑な有機分子の混合物から極微量の目的有機分子を取り出し安定同位体組成を計測する方法の開発を行っています。また、これまでは有機分子の全体値を計測(例えば、炭素同位体組成であれば、有機分子を構成するすべての炭素を一まとめにして計測)していましたが、1つ1つの構成元素について同位体組成を計測する方法の開発を行っています。この計測方法を用いることで、より詳細な有機分子の起源・反応履歴情報を読み取ることが可能となります。このような計測技術を基盤にして、上述した様々な環境での有機分子の起源・反応履歴を明らかにする研究に取り組んでいます。

以上の教育・研究活動は、応用化学系 豊田研究室と協同して行っています。

脇研究室

電気デバイス材料をナノレベルで構造制御する

研究キーワード カーボンナノチューブ、ナノ構造、構造制御、燃料電池、リチウムイオン電池、太陽電池、電極触媒、新エネルギー技術開発



准教授

脇 慶子

主: 副:
博士(工学)

私たちの研究室では、化学的な手法を用いて、カーボンナノチューブなどの材料をナノレベルで構造制御し、燃料電池、リチウムイオン電池、太陽電池などの電気化学デバイスの性能向上を目指しています(図1)。従来の方法論などに捉われずに、教員・学生一同で頭をフルに回転させ、新規電池電極材料の創製を目指しています。新しい世代・日本・世界のために、エネルギー・環境・資源問題の解決に少しでも貢献できるように頑張っています。



図1 脇研究室の研究範囲

多層カーボンナノチューブ(MWCNT)の構造制御

・燃料電池における非白金系電極触媒の開発

燃料電池とは、水素と酸素が結合して水になるときに生じるエネルギーを電気エネルギーとして取り出すことができるものです。化学エネルギーを直接電気エネルギーへ変換できることから、高効率な発電が可能なデバイスとして期待されています。特に私たちの研究室では、固体高分子型燃料電池(以下、PEFC)のカソード電極における高活性な電極触媒の開発に取り組んでいます。PEFCは自動車や携帯電話など私達に身近な製品への応用が期待されていますが、コストの高さが問題となっています。そこで、高コストの原因である白金触媒に代わるものとして多層カーボンナノチューブ(以下、MWCNT)に注目し、その表面構造を変化させることで材料の高活性化を試みています。本研究室で開発した新規手法を用いて細孔などの欠陥構造を持つMWCNTという炭素の新構造体を実現させました(図2)。一般的に炭素のみでは触媒活性がほとんどないと考えられていますが、この欠陥構造の形成が高い触媒活性をもたらすことを発見しました。この新規材料の電気化学測定を行い、表面反応のメカニズムを検討しながら電極材料の高性能化を図っています。

コバルトを用いた欠陥構造の作成

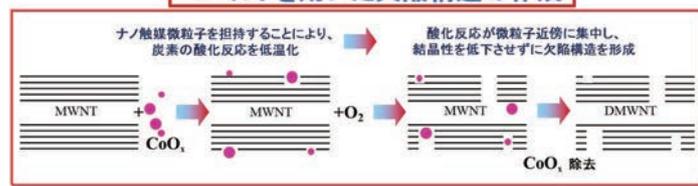


図2 欠陥構造作製プロセス

・リチウムイオン電池における電極性能の向上

リチウムイオン電池とは化学電池の一種であり、充放電を繰り返す行うことが可能な電池として、今後電気自動車や定置用電源の普及に伴いさらなる性能向上が期待されています。本研究室ではリチウムイオン電池の炭素材料としても注目を集めているMWCNTを用いて、構造制御を行い電極材料とすることで電極性能を研究しています。リチウムイオン電池の負極活性物質として、欠陥構造を持つMWCNTを用います。充放電容量の向上を目指すだけではなく、構造制御した材料であることで、これまでに十分に理解されていなかった電池の反応メカニズムを解明することを目指しています。更に、この新規材料の構造や電気化学特性を理解しながら、可能な分野を探索しています。

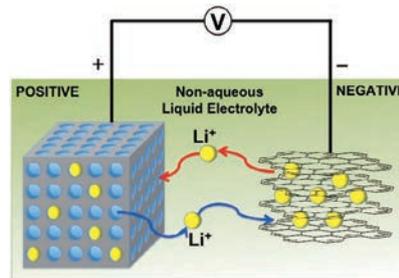


図3 リチウムイオン電池の動作原理

太陽電池の電子移動過程の研究

太陽電池は太陽光エネルギーを電気エネルギーに変換する電気デバイスです。高い変換効率の太陽電池の代表格としては、シリコン系太陽電池が挙げられます。しかし、製造工程が難しく、高コストであるといった欠点が挙げられます。そこで、シリコン系太陽電池よりも低コストで製造が可能であると期待されているのが、色素増感太陽電池やペロブスカイト太陽電池です。これらの新規の太陽電池は、低コストで高効率を実現することを期待されています。そこで、本研究室では、基礎的なメカニズムである光励起子の挙動を明らかにすることで、さらなるパフォーマンス向上を目指しています。

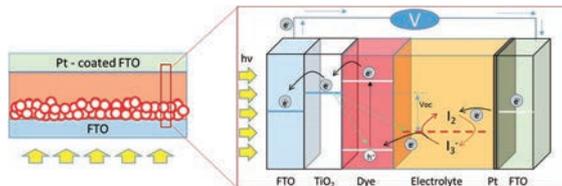


図4 色素増感太陽電池の構造とメカニズム

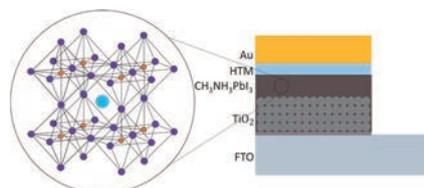


図5 ペロブスカイト構造とペロブスカイト太陽電池の構造

和田研究室

機能性ナノ粒子（コロイド）を創り、光学的に利用する

研究キーワード ナノ粒子、コロイド、蛍光、アップコンバージョン、長残光、レーザープロセス、がん治療、バイオイメージング、太陽電池、発光ダイオード



准教授

和田 裕之
主: 副:
博士(工学)

私達の研究室では、光を用いて各種ナノ粒子を創製し、この光学特性を用いた各種応用を検討しています。「光」は今後の重要な研究分野の1つとして注目されています。同様に興味深い研究対象である「ナノ材料」とこの「光」の融合領域の研究を進めています。

これまでにこれらの分野でのバックグラウンドがなくても、興味を持っている方を歓迎します。このため、セミナーによる基礎学力の向上、ディスカッションによる思考力の養成、学会発表等によるプレゼンテーション能力の習得をサポートします。

ナノ粒子の創製:液中レーザープロセス

ナノ粒子の作製方法には様々なものがあり、近年開発された手法に液中レーザーアブレーション法があります。これは図1に示すように、液体中に配置したターゲットに集光したレーザー光を照射することによってナノ粒子分散溶液(コロイド)を得るもので、簡便であることから各分野への展開が期待されています。私達はこれまでにこの方法で各種ナノ粒子を作製してきました。ナノ粒子が無機物の場合

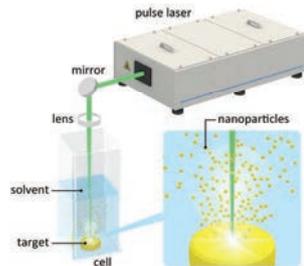


図1. 液中レーザーアブレーション法

は一般的な手法である溶液法に比べて、高い結晶性のナノ粒子が得られることが分かっています。有機物の場合は、難溶性の物質でもナノ化により安定な懸濁液が得られ、医薬品等への応用が期待されています。

別のレーザープロセスに液中レーザー溶融法があります。これは、ナノ粒子分散溶液にレーザー光を照射して凝集体を溶融・固化することにより結晶性の球状ナノ粒子を生成するもので、図2のような結晶性の球状ナノ粒子が作製でき、各分野で応用が期待されています。

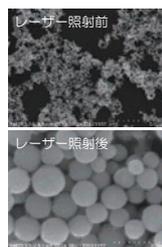


図2. 液中レーザー溶融法

低侵襲性がん治療:光線力学的療法

患者への負担が少ないがん治療法の1つに光線力学的療法があります。これはがん細胞に投与した光感受性物質に対して体外から可視光を照射することによりがん細胞を死滅させるものですが、可視光の生体透過性の低さから大きながんを治療できません。

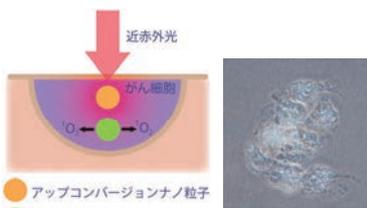


図3. 新規がん治療法

そこで、アップコンバージョンナノ粒子と光感受性物質に生体透過性の高い近赤外光を照射することが検討されています(図3)。私達は、アップコンバージョンナノ粒子を作製し、培養がん細胞(図4)を用いてがん治療の効

図4. 培養がん細胞

果を確認してきました。このナノ粒子は結晶性が高いため、高い発光特性を示すことが分かっています。

バイオイメージング:光音響イメージング

生体内をイメージングする方法の1つに光音響イメージングがあります。これは、図5に示すように、生体内に投与した造影剤にパルスレーザー光を照射して、光熱吸収により造影剤を膨張・収縮させることにより超音波を発生させ、複数の検出器により画像化するものです。このレーザー光に生体透過性の高い近赤外光を用いると、生体内の深部まで解像度の高い画像が得られます。私達は近赤外光を吸収する各種中心金属を有したフタロシアニンやナフトロシアニン等のナノ粒子を作製し、その基本的な光学特性の評価、および、マウス等を用いたバイオイメージングのための光音響信号計測の研究を行っています。



図5. 光音響イメージング

次世代太陽電池:量子ドット増感太陽電池

広く普及しているシリコンのpn接合型の太陽電池に比べて、半導体ナノ粒子を用いた湿式の量子ドット増感太陽電池(図6)は、作製法が簡便であるだけでなく、光電変換効率が著しく高い可能性があり、次世代太陽電池として期待されています。私達はシリコンや化合物半導体InPのナノ粒子を作製し、これらにより量子ドット増感太陽電池を作り、ソーラーシミュレータを用いてナノ粒子の効果を確認してきました。

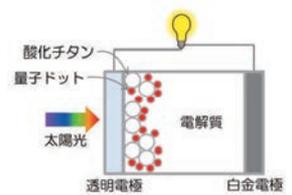


図6. 量子ドット増感太陽電池

白色発光ダイオード:黄色蛍光体

白色発光ダイオードは、ノーベル賞で話題となった青色発光ダイオードと黄色蛍光体を組み合わせて疑似的に白色光を発光する素子で(図7)、近年、照明やディスプレイのキーデバイスとして注目されています。青色発光ダイオードからの光は黄色蛍光体を通過するので、散乱損失により青色光が減衰してしまいます。一般に、散乱体の粒径が小さくなる程、散乱損失を低減できるため、青色光を有効に利用するために黄色蛍光体のナノ粒子化が広く研究されています。私達は代表的な黄色蛍光体である $Y_3Al_5O_{12}:Ce$ のナノ粒子化を行い、発光特性向上の研究をしています。また、演色性向上のために、赤色や緑色蛍光体のナノ粒子化も研究してきました。

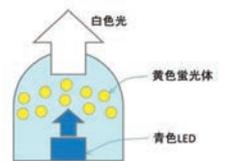


図7. 白色発光ダイオード

全固体電池研究センター

菅野・鈴木研究室

固体材料の探索、解析、最適化で新規デバイスを創出

研究キーワード リチウム電池、全固体電池、燃料電池、金属空気電池、高イオン導電体、中性子散乱、放射光、固体合成化学、電気化学、元素戦略、無機構造化学、電気化学界面設計



特命教授

菅野 了次
主: 理学博士

准教授

鈴木 耕太
主: 博士(理学)

助教

松井 直喜
主: 博士(理学)

研究対象と研究の方針

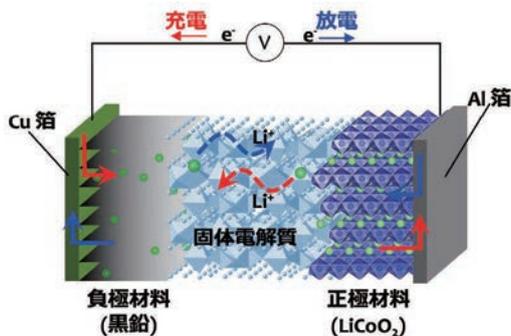
新しいエネルギーデバイスの1つとして、安全性や信頼性に優れる、全固体型の電池が注目されています。我々の研究室では、新しい固体デバイスを創出するための物質探索、現象解明、構造やプロセスの最適化を推進しています。特に物質探索は重要で、新しい物質が見つかる、その物質が有する物性、現象を利用した既成概念を覆すような新奇なデバイス創出につながります。しかし、ユニークかつ高機能な物質の発見は容易ではありません。具体的には、固体材料の結晶構造や物性、特に移動する電子やイオンの量や速さを、狙い通りに制御することで、エネルギーを貯蔵する活物質やイオンのみを拡散させる電解質を設計します。

そのため、高圧法、電気化学法、ソフト化学法などの多彩な合成手法を駆使して、所望の材料を実際に合成するルートを開発しています。得られた新規無機固体物質に対し、結晶構造や電気・磁気、電気化学特性などを詳細に調べて物質合成にフィードバックする研究手法で特性の優れた数々の材料を世に送り出しています。真に役立つ高性能な物質やデバイスを実現するため、古典的な合成化学の手法だけでなく、計算化学、情報科学の手法を駆使したアプローチにも取り組んでいます。

リチウム電池の固体化

2019年にその開発者3名にノーベル化学賞が授与されたのが、リチウム電池です。全固体リチウム電池はその有機電解液を固体電解質材料に置き換えた構成をとります。この電池はエネルギーの貯蔵や輸送の担体としてのリチウムをゲスト種とし、強固な結晶格子をホストとして可逆的に出し入れする、いわゆるインターカレーション反応を利用して作動します。この反応機構自体は液系電池でも固体電池でも同じですが、実際には少しずつ異なった様相を示します。

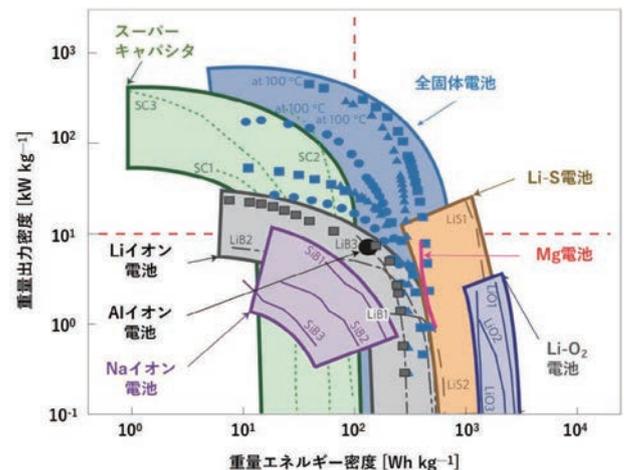
固体電池では酸化物活物質に表面被覆をしないと、電池が動作しないことや、電極と電解液の界面と電極と固体電解質の界面では反応機構が異なることが分かってきています。また、液系電池では用いるのが困難であった電極活物質が利用可能になることもあり、固体電池特有の電池構成が存在する可能性も見いだされてきています。



全固体リチウム電池は、酸素とコバルトなどの金属を層状に重ねた正極(図右側)と炭素結晶を層状に重ねた負極(図左側)が固体電解質で分離された構造をしています。正極、負極それぞれの層の間にリチウム原子(Li)が入り込み、固体電解質を通ることで充電、放電を繰り返します。

高速イオン導電体の開発とこれを支える材料科学

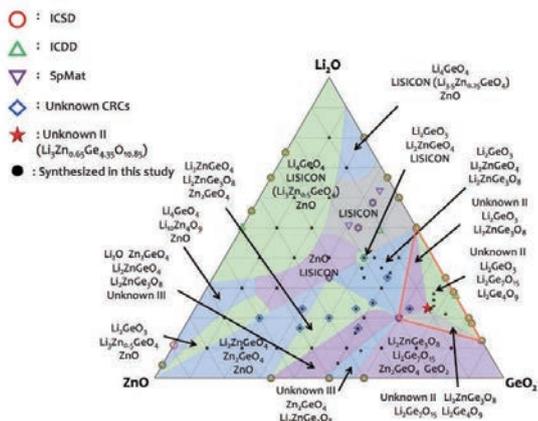
固体でありながら、その構造の中を高速でイオンが選択的に動き回る物質が超イオン導電体(固体電解質)です。当研究室では高速イオン拡散の機構を解明する研究と、これをベースに新規な物質を創製しようとする研究を渾然一体となって推進しており、液体のイオン導電率も越える世界最高のリチウム導電性を示す新固体物質群 $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{Si}_2(\text{LGPS})$ の発見へと繋げてきました。2011年に発見したLGPS(12 mS/cm)を基軸とした材料探索を行い、2016年にはLi-Si-P-S-Cl系のLGPS材料を発見し、世界最高のイオン導電率を達成した(25 mS/cm)。超イオン導電体を用いた全固体リチウム電池作成に取り組み、その高性能化を実現しました。次世代燃料電池への展開をにらんだプロトンやヒドリド導電体の探索研究もテーマのひとつです。



各種の電気化学デバイスとLGPSを用いた全固体リチウム電池の性能の比較図です。全固体リチウム電池はリチウム電池と同程度のエネルギー密度を有し、出力密度はスーパーキャパシタを凌駕するレベルに到達します。超イオン導電体の開発により、固体電池は出力特性に優れない、という既成概念を覆しました。固体電解質は低温から室温にかけて極めて高いイオン導電率を示すことから、固体電池に用いると高出力が可能になることを示します。

計算化学や機械学習を活用した物質探索法の開発

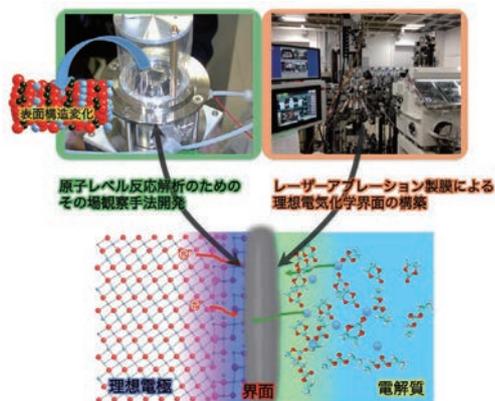
目的とする材料が電極でも固体電解質であっても、新しい物質の発見には、5-10年といった長い期間の根気強い研究が必要です。もちろん、時間をかければ必ず見つかるというわけでもないため、探索効率を高めることが強く求められています。当研究室では、長年培ってきた固体化学の探索手法に機械学習手法を融合させた、独自の高効率な物質探索法開発に取り組んでいます。新組成かつ新構造を有する材料の創出を目的として掲げ、未知の化学組成の安定性を予測する推薦システムを活用した探索を行い、5年以内に複数の新規材料の創出を実現しました。現在では、化学組成などの情報から未知材料の物性を予測するという挑戦的な課題にも取り組んでいます。



Li₂O-ZnO-GeO₂系相図中でのリチウム導電体の探索例です。推薦システムを指針とした予測組成の合成で、固体化学の手法を駆使することで、図中星印で示された新物質を発見できました。相図全体の組成をランダムに合成した場合に比べて、3倍以上効率的に物質発見に至ったことも確認されました。

高速電荷交換反応実現に向けた電極界面反応の解析

化学-電気エネルギー変換デバイスには例外なく電極-電解質界面が存在して、ここでの電荷交換反応が性能を左右します。たかだか数ナノメートルの領域で進行する界面反応における異方性や微細構造変化・電子状態変化等を最新のナノ領域分析手法を適用して系統的に明らかにしようという研究を進めています。リチウム電池や燃料電池の電極材料を対象として、自己組織化反応を利用した3次元ナノ界面やパルスレーザ合成法による単結晶薄膜による理想界面を構築し、界面反応機構を解明しようとしています。電気化学反応を直接観測しようとする意欲的な試みです。



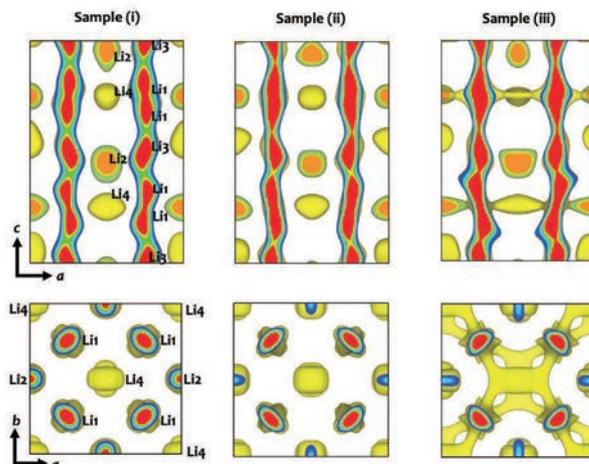
リチウム電池、金属空気電池、燃料電池の界面反応解析

単結晶に近い電極薄膜を用いると、表面での電気化学反応を放射光や中性子線によって直接観察することができます。これまで全くブラックボックスだったリチウム電池や燃料電池、空気電池の電気化学界面の反応のメカニズムを明らかにしようとしています。

結晶構造とイオン導電経路の解明

結晶性材料の構造は材料の示す物性と強く関連し、物質における現象解明や新しい材料の設計指針決定に必要な情報です。これらを取得するためには、X線や中性子線を用いた回折実験のデータを解析することが有用です。リートベルト解析法が基本的な解析ですが、その解析データを基に、さらに最大エントロピー法による電子(核)密度分布解析によって、イオンの拡散経路を可視化することが出来ます。

これらの情報から、組成、構造、拡散経路の関係が明らかになり、イオン導電率や電極の反応速度と言った物性との相関を詳細に調べることが出来ます。さらには、計算化学の手法による解析と摺り合わせることで、材料の中で何か起きているのかを詳しく調べています。



LGPS 系材料の Li 核密度分布の解析結果です。イオン導電率が高くなるにつれて、核密度の分布が連続的になり、イオン拡散が一次元的から三次元的に変化することが明らかになりました。

多種多様な固体電池を

現在私たちが使用しているリチウムイオン電池は、電解液が可燃性であるため、電池パックの損傷などによりショート、発火する危険性があり、安全装置が必須とされています。自動車の場合、より安全性を高めるため、可燃性電解液の代わりに固体電解質を利用し、電池全てがセラミックスでできた全固体型リチウム電池にすることが重要です。我々が探索した固体電解質を、実際の固体電池の電解質として用いた全固体型のセラミックス電池を作り、電池を高エネルギーと高出力を兼ね備えた将来の電池の開発を行っています。これまでは蓄電池としてとらえられてこなかった全固体電池が、ようやく実用化に向けて一歩踏み出しました。リチウム電池の固体化を出発点として、ヒドリド、フッ素など、様々な電荷キャリアや反応機構を利用した、色々な用途に対応できる、複数の固体電池を創出していくことを将来の目標として、研究に取り組んでいます。

全固体電池研究センター

2018年3月に我々の研究室を中心とした全固体電池研究ユニットとして立ち上がり、2021年4月に全固体電池研究センターが設立されました。現在はスタッフ、学生含めて60名以上のメンバーで、連携しながら研究を遂行しています。

スタッフ:

- 菅野 (固体電池開発、材料設計)
- 鈴木 (リチウム導電体探索、機械学習手法開拓、リチウム硫黄電池)
- 松井 (アニオン導電体探索、計算化学、フッ化物イオン電池)



- 平山 (界面現象解析、光蓄電池、リチウムシリコン電池)
- 荒井 (金属空気電池、オペランド計測、燃料電池)
- 北村 (固体電気化学、分光解析、電池評価システム設計)
- 特任教員、ポスドク研究員、技術支援員、事務支援員など
- 学生:
- 博士課程 6名、修士課程 17名、学士課程 2名

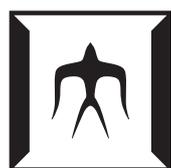
MAP

- 大岡山キャンパス 東京急行大井町線・目黒線（大岡山駅下車徒歩1分）
- すすかけ台キャンパス 東京急行田園都市線（すすかけ台駅下車徒歩5分）
- 田町キャンパス JR山手線・京浜東北線（田町駅下車徒歩2分）



すすかけ台キャンパス





Tokyo Tech

東京工業大学

物質理工学院 応用化学系 (境界領域化学)

〒226-8502 横浜市緑区長津田町4259

TEL 045-924-内線番号 (P.1参照)