

年

報

2024



北海道大学触媒科学研究所

Institute for Catalysis, Hokkaido University
Annual Report 2024

「北海道大学触媒科学研究所年報2024」の 刊行にあたって

「年報2024」の刊行にあたり、ご挨拶申し上げます。本研究所の設立は、昭和18年（1943年）の触媒研究所の設立に遡り、平成元年（1989年）に触媒化学研究センターとして、さらに平成27年（2015年）に今日の触媒科学研究所として改組されました。革新的触媒の開発と学理追究を担う基礎研究系8部門、研究成果の実用化および産業界ニーズの技術シーズ化を担う開発系1部門が基盤的研究開発を推進しています。また、ターゲット研究部は7クラスターで構成され、リーダーである准教授が主体的に国内外の研究者を交えて運営し、特定の重要研究課題の解決を目指した研究を行っています。附属の研究施設である附属触媒連携研究センターには、ユニットと呼ばれる5つの組織があり、たえず変化する社会的要請に対応するために、柔軟かつ戦略的に外部との連携を組織化しています。最先端の研究を支える研究支援技術部は、ガラス加工、金属加工、試料測定などで研究を技術的にサポートします。また、国外の触媒研究拠点とは研究・教育活動の連携パートナーとして、積極的に学術交流協定を締結しています。本研究所の運営については、触媒研究コミュニティの代表である運営協議会からの意見聴取を行い、改善に努めております。

触媒科学研究所の研究活動は好調を保っています。第4期中期計画期間の平均では、教員一人当たりの論文数は4本以上を保っており、被引用数top10%論文の割合は10%を超えています。企業との共同研究も増加傾向にあり、内2件は産業創出講座（「アイシン北大R&Dラボ」、「ハイケム北大 R&D ラボ」）に発展し、企業と研究所との組織・組織型の大型共同研究が進められています。

本研究所は、平成22年（2010年）に文部科学省から共同利用・共同研究拠点として認定を受け、国内の触媒研究に従事する研究者の利用に供すべく拠点活動を行って参りました。令和4年（2022年）度より、本研究所、大阪公立大学人工光合成研究センター、産業技術総合研究所触媒化

学融合研究センター（現、触媒化学研究部門）とともにネットワーク型の「触媒科学計測共同研究拠点」として文部科学省から認定を受けました。本研究所は本拠点の代表であり、拠点の運営委員会、課題等審査専門委員会によるご支援のもと拠点活動を実施して参りました。拠点内の研究者が持つシーズと、拠点外の研究者のニーズのマッチングを図り、拠点全体で327件（本研究所では241件）の公募共同研究を令和6年（2024年）度を実施しました。公募共同研究の3%が国際共同研究であり、海外の研究者との共同研究の成果によって質の高い論文を出版することができました。被引用top10%論文の90%が海外の共同研究者との共著論文です。併せて、国内の優れた研究成果を海外に周知するための情報発信型シンポジウム、国内外の研究者への技術指導や社会への貢献を目的とする触媒高等実践研修プログラムを実施し、研究成果の社会還元に努めてまいりました。

本研究所は、名古屋大学物質科学国際研究センター、京都大学化学研究所附属元素科学国際研究センター、九州大学先端物質化学研究所と共に学際統合物質科学研究機構に参画しています。これら研究所間の共同研究を通して、化学・物理・生物にまたがる物質階層と合成概念を統合する新学術基盤を創成し、同時に若手研究者の育成を図っています。

令和7年（2025年）度は、第4期中期計画期間の4年度目です。浦口副所長、中野センター長をはじめ研究所構成員一丸となって、研究所と拠点の運営に尽力する所存です。これまでも増して、皆様からのご協力ならびにご指導とご鞭撻を賜りますようお願い申し上げます。



触媒科学研究所長
清水研一

目次

contents

巻頭言

「北海道大学触媒科学研究所年報2024」の刊行にあたって..... 1

研究所編

■ 概要と組織

歴史.....	3
設置目的.....	3
目標と使命.....	3
教育研究理念.....	3
新しい触媒科学発展のための施策.....	3
組織.....	4
所長/特別招へい教授/基礎研究系/実用化推進系/ ターゲット研究部/附属触媒連携研究センター/研 究支援技術部/所長室/北キャンパス合同事務部	
管理運営.....	6
教授会/運営協議会/受託研究等受入れ審査委員会 /評価委員会/常置委員会/研究員・大学院生などの 受入れ	
財務.....	7
外部資金を含む2024年度の予算	
施設.....	7
所在地/建物	
教育/人材育成/社会連携.....	8
進路状況/触媒化学のフロンティア/Principles of Catalytic Chemistry : Theory and Application/CSE Summer School and ALP International Symposium/2024年北の国触媒塾/触媒科学研究所海 外派遣制度/学生交流委員会	
図書/学術情報.....	10
図書/学術情報	

■ 国際・国内交流と共同研究

交流協定.....	11
共同利用・共同研究拠点事業.....	11
管理運営/公募要項/2024年度の共同利用・共同研究 採択課題数	
令和4年度～令和9年度文部科学省特別経費「学際統合 物質科学研究機構」—北海道大学、名古屋大学、京都 大学、九州大学～4大学の連携により物質創製化学の 世界的ネットワークを築き、未来をけん引する若手 中核研究者ネットワークを構築.....	15
講演会・研究会など.....	16
ICAT International Symposium of Institute for Catalysis 2024 : Sustainable synthesis by use of efficient catalyst/ICAT International symposium of Institute for Catalysis 2024 “Development of Catalyst Technology for Resource Recycling/第2回北海道大 学触媒科学研究所-立命館大学SRセンター合同シン ポジウム 触媒科学と放射光 触媒科学のSoft～ Tender X線への展開Ⅱ 実際と新しい可能性/情報発 信型国際シンポジウムICAT-FHI Symposium/触媒科 学研究所コロキウム	

■ 沿革と記録

沿革.....	21
2024年度の記録.....	22

研究室編

■ 基礎研究系

触媒理論研究部門.....	24
触媒構造研究部門.....	28
触媒反応研究部門.....	32
物質変換研究部門.....	36
触媒材料研究部門.....	38
分子触媒研究部門.....	43
高分子機能科学研究部門.....	46

■ 報告・実用化推進系

研究開発部門.....	49
-------------	----

■ 報告・ターゲット研究部

触媒研究基盤開発研究クラスター.....	51
遷移金属誘起高分子合成/変換研究クラスター.....	52
ナノ界面反応場研究クラスター.....	53
生体分子標識触媒研究クラスター.....	54
データ駆動型触媒研究クラスター.....	56
天然炭素資源活用研究クラスター.....	58
混成電位駆動型触媒研究クラスター.....	60

■ 報告・附属触媒連携研究センター

フリッツ・ハーバー研究所ユニット/学際統合物質科学 研究ユニット/北大触媒アライアンスユニット/新放射 光源触媒計測科学ユニット/キャタリストインフォマ ティクスユニット/アイシン-北大R&Dラボ ユニット	63
--	----

■ 報告・研究支援技術部

.....	66
-------	----

■ その他の業績

.....	67
-------	----

個人編

■ 個人データ

個人データ.....	68
教職員の特許.....	80
教職員の受賞.....	80
2024年度担当講義.....	80
2024年度学位審査.....	81
2024年度委員・講師など.....	81
2024年度外部資金など.....	83

編集後記

■ 編集後記

.....	84
-------	----

■ 書誌情報

.....	84
-------	----

概要と組織

abstract and organization

歴史

触媒の社会的重要性に鑑み、触媒研究所（昭和18年1月30日設置）が設立された。平成元年5月29日に、触媒研究所を母体とし、「触媒化学に関する研究ならびに全国大学等との共同研究、共同利用に供する」ことを目的とする全国共同利用施設、触媒化学研究センターが設置された。その時限は10年（1998年度）とされていたが、平成10年には、3部門9分野として拡充改組され、平成19年から7研究部門体制の触媒基礎研究部と、これら部門と学内外の研究者が横断的に連携する7つの研究クラスターを擁した触媒ターゲット研究アセンブリ体制からなる新組織を始動させた。平成22年には、文部科学省「共同利用・共同研究拠点」に採択され、国内唯一の触媒研究拠点として認定された。更に、平成24年以降の拡充改組では、新たに2部門—触媒理論化学研究部門と実用化基盤技術開発部がそれぞれ創設された。そして、平成27年10月1日、北海道大学の強みである触媒科学をさらに発展させるべく、触媒化学研究センターから触媒科学研究所に改組した。令和4年4月1日より、本研究所、大阪公立大学人工光合成研究センター、産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター（現、触媒化学研究部門）とともにネットワーク型の「触媒科学計測共同研究拠点」を開始した。

設置目的

触媒科学研究所は触媒科学に関する研究を行い、かつ、国立大学の教員その他の者でこの分野の研究に従事するものの利用に供することを目的に設置された。

目標と使命

持続可能社会の実現が強く望まれている。持続可能社会実現のためには、物質・エネルギー生産・変換・利用を高効率で実現し、多様な資源を有効活用するための基礎科学と基礎科学に基づく実用化のための応用工学と技術開発が必要である。触媒科学はこの持続可能社会が必要とする科学・技術を支える核心的学問分野であり、触媒科学の基礎研究を進展させ、触媒に関する基礎研究の成果を実用化につなげて地球規模のイノベーションを促進することは社会の強い要請である。

本研究所は、北大における世界トップクラスの触媒研究を一層推進し、産業化につなげて社会の強い要請に答える。本研究所は異分野を融合した新たな触媒科学を創造し、国内外の研究者とのネットワーク拠点となって、“エネルギー・資源の多様化と高度利用に資する触媒の原理解明および新触媒合成技術の開発を進め、新規触媒の実用化を推進して、触媒先導イノベーションを起こし、持続可能社会を実現すること”を使命と目標として活動をおこなう。

教育研究理念

国内外の研究者コミュニティと連携し、物質科学に通底する化学反応の反応機作と反応制御原理に関する基礎概念を明らかにする。この基礎概念に基づき、新しい触媒の創造と実用化を進め、触媒先導イノベーションを実現して、持って社会の負託に応える。

又、この活動を永続的に行い、触媒に関する知識と技術を広め、社会の発展に資する人材とリーダーの育成を進める。

新しい触媒科学発展のための施策

触媒科学研究所は触媒科学研究発展のために5つの施策を掲げる。

1. 触媒科学の基礎研究の推進とこれを基にした実用化するための組織整備

触媒理論研究部門、触媒構造研究部門、触媒反応研究部門、物質変換研究部門、触媒材料研究部門、分子触媒研究部門、高分子機能科学研究部門を設置し、幅広い触媒の各分野に対応するとともに、ターゲット研究部に設置したクラスターにおいて、准教授を中心に国内外の研究者と萌芽的、発展的研究を遂行する。一方で、基礎研究の成果を基に研究開発部門では、実用化推進を行う。こうした仕組みにより、学術を基盤とした触媒先導イノベーションを実現し、持続可能社会を実現する。

2. 触媒に関する知識の蓄積と活用

触媒データベースをさらに拡充し、触媒に関する知識を集積する。一方で、人工知能やインフォマティクスを駆使して、この集積された知識を活用し、知識の社会還元を進める。

3. 異分野融合

物質を変換し、化学反応速度を制御する触媒は化学の重要な分野である。しかし、今日の急速な科学技術の進歩は触媒を単に触媒化学の中で閉じることを許さず、新たな課題解決のため、異分野の参入を必要とする。触媒科学研究所は、従来の分野にとどまることなく、積極的に異分野との議論・連携を通じて、新しい触媒科学を創造する。

4. 組織間連携

触媒科学研究所は20名強の小さい集団であるが、国内外の研究所、研究センターと連携することで、その力を増幅する。具体的には、産業化をミッションとする産業総合研究所や量子ビームを用いて触媒構造を調べる高エネルギー加速器研究機構との連携を推進し、名古屋大学物質科学国際研究センター、京都大学化学研究所附属元素科学国際研究センター、九州大学先端物質化学研究所とともに、学際統合物質科学研究機構に参画する。この他にも連携先を探り、その組織間連携の中で、不足した力を補い、我が国全体の触媒科学の推進と若手人材育成を行う。この連携の拠点になるのが、新設された附属触媒連携研究センターである。附属触媒連携研究センターに連携先のユニットを作り、研究スペースを提供することで、連携先との緊密な

関係を作りあげる。さらに昨年度からは、北海道大学触媒科学研究所 (ICAT)、大阪公立大学人工光合成研究センター (ReCAP)、産業技術総合研究所触媒科学融合研究センター (現、触媒化学研究部門)、東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センター (SRIS、学術協力機関として参画) ネットワーク型共同利用・研究拠点を構築し、新たな組織間連携活動を始めた。

5. 国際ネットワークの構築

触媒科学研究所は様々な国の大学・研究機関と積極的に学術交流協定を締結している。今後さらに協定締結を進め、全世界とのネットワーク構築を拡充する。また、新設された附属触媒連携研究センターでは、いくつかの研究所のユニット (FHIユニットなど) をセンター内に設置して、研究スペースを提供し、長期滞在型研究者の招へいを進める。また、研究所では20年にわたって海外派遣制度を実施してきた。このプログラムでは、大学院生・若手教員を世界に通用する後継者に育成すべく、海外のトップクラスの教員との共同研究を担当させて、世界規模の学術レベルへの向上および若手育成に貢献する。また、このような活動を通じて国際研究拠点の構築を行う。

組織

2015年10月の改組後の本研究所は、触媒分野に新しいコア化学を生み出すことを目的に基礎研究を推進する基礎研究系の8研究部門と基礎研究の成果を基に実用化推進を行う研究開発部門、および触媒を機軸とした科学・技術のイノベーションを目的とする自立集合型の研究クラスターからなるターゲット研究部で構成されている。また、研究支援技術部を擁している。事務は北キャンパス合同事務部が行っている。

本研究所の常勤教職員 (ターゲット研究部は所属教員など) および北キャンパス合同事務部の配置は以下のとおり (研究員/外国人研究員/大学院生については人数のみ表示)。非常勤職員と大学院生などは「研究室編」の各研究室の項目を参照。

所長

基礎研究系

触媒理論研究部門
触媒構造研究部門
触媒反応研究部門
物質変換研究部門
触媒材料研究部門
分子触媒研究部門
高分子機能科学研究部門

実用化推進系

研究開発部門

ターゲット研究部

触媒研究基盤開発クラスター
遷移金属誘起高分子合成/変換研究クラスター
ナノ界面反応場研究クラスター
生体分子標識触媒研究クラスター
データ駆動型触媒研究クラスター
天然炭素資源活用媒研究クラスター
混成電位駆動型触媒研究クラスター

附属触媒連携研究センター

フリッツ・ハーバー研究所ユニット
学際統合物質科学研究ユニット
北大触媒アライアンスユニット
新放射光源触媒計測科学ユニット
アイシン-北大R&Dラボユニット

研究支援技術部

北キャンパス合同事務部

所長

〈触媒科学研究所教授〉清水研一

特別招へい教授

〈北海道大学名誉教授/特別招へい教授〉鈴木章

基礎研究系

触媒理論研究部門 〈教授〉長谷川淳也・〈准教授〉飯田健二・〈助教〉宮崎玲・〈東海国立大学機構名古屋大学/特任助教〉山田早人・大学院生3名・学部学生1名・研究生1名

触媒構造研究部門 〈教授〉高草木達・〈准教授〉武安光太郎・〈助教〉魯邦・大学院生3名

触媒反応研究部門 〈教授〉中島清隆・〈准教授〉菅沼学史・〈助教〉大須賀遼太・〈特任教授〉Sanjay Kumar SINGH [2024/09/24~2024/10/23]・〈特任助教〉Jan J. WIESFELD・外国人研究員3名・大学院生11名・研究生1名

物質変換研究部門 〈教授〉村山徹・〈特任助教〉Haifeng WANG [2024/09/01~]

触媒材料研究部門 〈教授〉清水研一・〈准教授〉鳥屋尾隆・〈助教〉安齊亮彦 [2024/05/16~] / Abhijit SHROTRI 〈特任助教〉Nazmul Hasan Mohammad Dostagir SHAIKH / ZHANG Ningqiang / Lingcong LI・外国人研究員4名・大学院生18名・学部学生1名・研究生1名

分子触媒研究部門 〈教授〉浦口大輔・〈准教授〉浅野圭佑・〈助教〉趙強・大学院生6名・学部学生6名・研究生1名

高分子機能科学研究部門 〈教授〉中野環・〈准教授〉Zhiyi SONG・〈助教〉坂東正佳 [~2024/12/15]・〈特任教授〉張文雄 [2024/07/16~2024/09/08]・大学院生2名・研究生1名

実用化推進系

研究開発部門 〈教授〉長谷川淳也・〈特任教授〉福岡淳・〈特任助教〉Daniele PADOVAN 〈東京工科大学教授/客員教授〉原賢二・〈学術研究員〉Vuong Bui Thi SINH/青柳良和・〈研究員 (研究推進支援教授)〉福田伸・〈技術補佐員〉横山祐美子・〈研究員 (研究推進支援教授)〉西田まゆみ・〈客員教授/産業技術総合研究所〉佐藤一彦/富永健一/浅川真澄/吉田勝/畑中雅隆・〈客員教授/ウェストコーナー〉隅田敏雄・研究員2名

ターゲット研究部

触媒研究基盤開発クラスター〈拠点型〉 〈リーダー/教授〉長谷川淳也・〈教授〉高草木達/中島清隆/村山徹/清水

研一/浦口大輔/中野環・〈研究推進支援教授〉山本貞明/福田伸・研究員1名

遷移金属誘起高分子合成/変換研究クラスター〈展開型〉
〈リーダー/准教授〉Zhiyi SONG 〈学外研究協力教員/Renmin University of China〉Zhiping Li 〈学外研究協力教員/University of Chinese Academy of Science〉王從洋・〈学外研究協力教員/Henan Academy of Science〉陳輝・〈学外研究協力教員/Peking University〉張文雄・〈外国人研究員/鄭州大学修士2年生〉熊洽羽 [2024/09/01~2024/11/30] /馬詩雨 [2024/09/01~2024/11/30]・外国人研究員2名

ナノ界面反応場研究クラスター〈展開型〉 〈リーダー/准教授〉飯田健二・〈学外研究協力教員/筑波大学〉矢花一浩・〈学外研究協力教員/京都大学〉寺西利治・〈学外研究協力教員/東京理科大学〉根岸雄一 [~2024/04/30]・〈学外研究協力教員/東北大学〉根岸雄一 [2024/05/01~]・〈学外研究協力教員/豊橋技科大〉八井崇・〈学外研究協力教員/アルバータ大学〉Andriy KOVALENKO 〈学外研究協力教員/大阪大学〉古川森也 [2024/08/01~]

生体分子標識触媒研究クラスター〈展開型〉 〈リーダー/准教授〉浅野主佑・〈学外研究協力教員/立教大学〉山中正浩・〈学外研究協力教員/産業技術総合研究所〉生長幸之助・〈学外研究協力教員/大阪大学〉真鍋良幸・〈学外研究協力教員/九州大学〉堀雄一郎・〈学外研究協力教員/産業技術総合研究所〉上田善弘

データ駆動型触媒研究クラスター〈展開型〉 〈リーダー/准教授〉鳥屋尾隆・〈学外研究協力教員/Delft University of Technology (オランダ)〉浦川篤・〈学外研究協力教員/Paul Scherrer Institut (スイス)〉Davide FERRI 〈学外研究協力教員/ETH Zurich (スイス)〉Evgeny Pidko 〈学外研究協力教員/Delft University of Technology (オランダ)〉Christophe Copéret

天然炭素資源活用研究クラスター〈展開型〉 〈リーダー/准教授〉菅沼学史・〈学外研究協力教員/東京科学大学〉北野政明・〈学外研究協力教員/大阪大学〉森浩亮・〈学外研究協力教員/東北大学〉加藤英樹・〈学外研究協力教員/鳥取大学〉野上敏材・〈学外研究協力教員/東京科学大学〉野村淳子

混成電位駆動型触媒研究クラスター〈展開型〉 〈リーダー/准教授〉武安光太郎 [2024/05/01~]・〈学外研究協力教員/筑波大学〉近藤剛弘 [2024/05/01~]・〈学外研究協力教員/神戸大学〉大西洋 [2024/05/01~]・〈学外研究協力教員/Technical University of Munich〉井上茂義 [2024/05/01~]・〈学外研究協力教員/Shiv Nadar University〉Santosh K. Singh [2024/05/01~]・〈学外研究協力教員/筑波大学〉白木賢太郎 [2024/05/01~]・〈学外研究協力教員/九州大学〉中村潤児 [2024/05/01~]

■附属触媒連携研究センター

フリッツ・ハーバー研究所ユニット 〈ユニット長/教授〉長谷川淳也・〈教授〉高草木達・〈客員教授/Fritz Haber Institute of the Max Planck Society〉Hans-Joachim FREUND/Matthias SCHEFFLER 〈客員准教授/分子科学研究所〉熊谷崇

学際統合物質科学研究ユニット 〈ユニット長/教授〉中野環・〈教授〉高草木達/長谷川淳也/中島清隆/清水研一/浦口大輔/村山徹

北大触媒アライアンスユニット 〈ユニット長/教授〉長谷川淳也・〈学内研究協力教員/農学研究院教授〉森春英・

〈学内研究協力教員/理学研究院教授〉澤村正也/武次徹也・〈学内研究協力教員/工学研究院教授〉忠永清治/幅崎浩樹/向井紳・〈学内研究協力教員/工学研究院准教授〉坂口紀史・〈学内研究協力教員/薬学研究院教授〉佐藤美洋・〈学内研究協力教員/地球環境科学研究院教授〉小西克明/神谷裕一

先端放射光源触媒計測科学ユニット 〈ユニット長/教授〉高草木達・〈教授〉清水研一・〈特任教授〉福岡淳・〈教授〉中島清隆・〈准教授〉鳥屋尾隆・〈助教〉Abhijit SHROTRI 〈客員教授/東北大学〉西堀麻衣子/高橋幸生・〈客員教授/立命館大学〉稲田康宏/滝沢優・〈名誉教授/立命館大学〉朝倉清高 [~2024/05/31]・〈名誉教授・客員教授/立命館大学〉朝倉清高 [2024/06/01~]

キャタリストインフォマティクスユニット 〈ユニット長/教授〉長谷川淳也・〈教授〉清水研一/高草木達・〈准教授〉鳥屋尾隆・〈客員教授/産業技術総合研究所〉矢田陽・〈学内研究協力教員/理学研究院教授〉高橋啓介・〈京都大学特任教授〉瀧川一学

アイシン-北大R&Dラボユニット 〈ユニット長/特任教授〉福岡淳・〈教授〉清水研一/中島清隆/長谷川淳也・〈准教授〉鳥屋尾隆/菅沼学史・〈助教〉大須賀遼太/Abhijit SHROTRI/宮崎玲・〈学内研究協力教員/農学研究院教授〉貴島祐治・〈学内研究協力教員/工学研究院准教授〉田島健次・〈招へい教員/イムラジャパン株式会社〉榎原真二・〈招へい教員/株式会社アイシン〉高野一史

■研究支援技術部

〈班長〉石川勝久

第一研究機器開発班 〈技術主任〉長谷川貴彦

第二研究機器開発班 〈技術専門職員〉向井慎吾・〈技術主任〉川村裕介

研究機器管理班 〈技術主任〉山岸太平

■所長室

〈研究支援推進員〉吉村円・〈特定専門職員〉久保田亜美 [~2024/08/31] /坂井富美子 [2024/08/01~]

■北キャンパス合同事務部

〈事務長〉小田切和博

総務担当 〈係長〉濱勝博・〈主任〉敦賀千佳子/五十嵐侑子・〈係員〉沼倉明紗美/伊藤来美/平松裕菜/松坂知里・〈事務補佐員〉駒井京子/湯川文

研究協力担当 〈係長〉吉泉綾・〈主任〉岡坂直寛・〈事務補助員〉赤塚正訓 [~2024/06/13]/永濱由美子 [2024/06/14~2025/01/31]・〈事務補佐員〉小林梨江・〈研究支援推進員〉大滝希志子

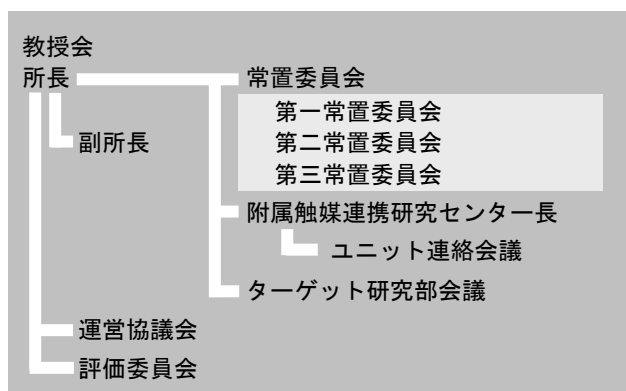
会計担当 〈係長〉梶栄治/越智亨 [~2024/06/30] /戸來茂樹 [2024/07/01~]・〈係員〉中澤麗花/榎本麻彩/竹内しずか/鈴木桃華・〈事務補佐員〉岡内啓子/長島奈美 [~2024/06/30] /港屋春香 [2024/07/01~] /小林麻紀子・〈研究支援推進員〉河村夢乃 [~2024/07/07] /佐々木眞美 [2024/07/08~]

北キャンパス図書館 〈係長〉平田栄夫

管理運営

本研究所は触媒科学に関する我が国の研究の中心として、共同利用・共同研究を推進している。現在、教授会を最高意思決定機関としている。国内外のコミュニティの意見を集約し、研究所の管理運営・運営計画・人事に助言を行う運営協議会、研究所の活動に対して、年報をもとに、毎年評価と自己点検を行う評価委員会が設置され、所長に対して、適切なコメントをすることで、開かれた触媒科学研究拠点を目指している。

こうした外部も含めた意見は所長に集約し、教授会にフィードバックする。実際に管理運営をする組織としては、第一（出版広報）第二（環境安全）および第三（計画策定・予算）の三常置委員会がおかれている。また、外部との連携を推進するための附属触媒連携研究センターがある。さらに准教授を中心として活動するターゲット研究部の会議も所長が指揮し、若手人材が活躍しやすい環境形成に尽力している。



■教授会

長谷川淳也 [2015/10/01～] 清水研一 [2015/10/01～]
浦口大輔 [2020/04/01～] 中野環 [2015/10/01～] 中島清隆 [2022/04/01～] 高草木達 [2023/04/01～] 村山徹 [2024/04/01～]

■運営協議会

〈触媒科学研究所長〉清水研一〈触媒科学研究所教授〉浦口大輔 [2024/04/01～2026/03/31] 〈触媒科学研究所教授〉中島清隆 [2024/04/01～2026/03/31] 〈地球環境科学研究院教授〉八木一三 [2024/04/01～2026/03/31] 〈理学研究院教授〉武次徹也 [2024/04/01～2026/03/31] 〈薬学研究教授〉佐藤美洋 [2024/04/01～2026/03/31] 〈農学研究教授〉奥山正幸 [2024/04/01～2026/03/31] 〈工学研究院教授〉忠永清治 [2024/04/01～2026/03/31] 〈九州大学名誉教授・京都大学福井謙一記念研究センター研究員〉吉澤一成 [2024/04/01～2026/03/31] 〈京都大学大学院理学研究科教授〉松永茂樹 [2024/04/01～2026/03/31] 〈名古屋大学物質科学国際研究センター教授〉唯美津木 [2024/04/01～2026/03/31] 〈信州大学特別特任教授・東京大学特別教授〉堂免一成 [2024/04/01～2026/03/31] 〈神戸大学大学院理学研究科教授〉大西洋 [2024/04/01～2026/03/31] 〈三菱ケミカル株式会社 Science & Innovation Center エグゼクティブフェロー〉瀬戸山亨 [2024/04/01～2026/03/31] 〈東北大学名誉教授・大学院農学研究科客員教授〉村松淳司 [2024/04/01～2026/03/31]

〈産業技術総合研究所材料・化学領域領域長補佐〉佐藤一彦 [2024/04/01～2026/03/31]

■受託研究等受入れ審査委員会

〈触媒科学研究所長〉清水研一〈触媒科学研究所教授〉中島清隆 [2023/10/01～2025/09/30] 〈地球環境科学研究院教授〉神谷裕一 [2023/10/01～2025/09/30]

■質保証委員会

〈触媒科学研究所長〉清水研一〈触媒科学研究所教授〉長谷川淳也〈触媒科学研究所教授〉高草木達〈触媒科学研究所教授〉中島清隆〈触媒科学研究所教授〉村山徹〈触媒科学研究所教授〉浦口大輔〈触媒科学研究所教授〉中野環〈理学研究院教授〉武次徹也 [2024/04/01～2025/03/31] 〈東北大学名誉教授・大学院農学研究科客員教授〉村松淳司 [2024/04/01～2025/03/31]

■常置委員会

第一常置委員会 〈教授〉長谷川淳也（委員長）〈教授〉中島清隆（副委員長）〈准教授〉武安光太郎〈教授〉村山徹〈教授〉清水研一〈教授〉浦口大輔〈教授〉中野環〈技術専門職員〉山岸太平 [～2024/08/31] 〈特定専門職員〉久保田亜美 [～2024/08/31] 〈特定専門職員〉坂井富美子 [2024/09/01～]

第二常置委員会 〈教授〉高草木達（委員長）〈教授〉中野環（副委員長）〈准教授〉飯田健二〈准教授〉菅沼学史〈教授〉村山徹〈准教授〉鳥屋尾隆〈教授〉浦口大輔〈技術専門職員〉石川勝久

第三常置委員会 〈教授〉浦口大輔（委員長）〈教授〉村山徹（副委員長）〈教授〉長谷川淳也〈教授〉高草木達〈教授〉中島清隆〈教授〉清水研一〈教授〉中野環

■研究員・大学院生などの受入れ

本研究所では、研究員及び外国人研究員の受入れに関する内規を定め、多数の国内外の研究員を受入れ、本研究所教員との共同研究を実施するとともに、学内においては、大学院教育にも参画し多数の学生を受入れ指導を行っている。

研究員 (1) 内地研究員、私学研修員、専修学校研修員、公立大学研修員及び受託研究員等の制度により派遣される研究者 (2) 国立大学法人北海道大学共同研究取扱規程により受入れる研究者 (3) 日本学術振興会特別研究員に採用の研究者 (4) 本学又は他大学を退職した教員及び企業等において優れた研究業績を有し当該企業等を退職した研究者で、本研究所の研究の推進支援を目的として受入れる者 (5) 競争的研究資金により受入れる研究者（非正規職員として雇用する場合を除く） (6) 本学の大学院博士課程を修了後、1年未満で正規の職を有しない者 (7) 他大学の大学院生（特別研究学生等の正規学生を除く） (8) その他本研究所において研究等を行うことを目的として受入れる研究者

外国人研究員 (1) 政府と外国政府間の協定等により招へいの外国人研究者 (2) 日本学術振興会、国際交流基金、国際協力機構等の公的機関により招へいの外国人研究者 (3) 本学における国際交流のための基金等により招へいの外国人研究者 (4) その他本研究所において研究

等を行うことを目的として訪れまたは招へいする外国人研究者

大学院生・学部学生 基礎研究系の各研究部門において受け入れている。所属研究科等は以下のとおり。

大学院工学院/工学部： 触媒表面研究部門（朝倉研究室）

大学院総合化学院/工学部： 触媒材料研究部門（清水研究室）

大学院環境科学院： 触媒反応研究部門（中島研究室）・触媒構造研究部門（高草木研究室）

大学院生命科学院/薬学部： 分子触媒研究部門（浦口研究室）

大学院総合化学院/理学部： 物質変換研究部門（福岡研究室）・高分子機能科学研究部門（中野研究室）・触媒理論研究部門（長谷川研究室）

受入状況（カッコ内は留学生で内数）

《2024年度》

研究員3名・外国人研究員9名・大学院生43（22）名・学部学生8名・研究生5（5）名

財務

■外部資金を含む2024年度の予算

《2024年度》（前年比：1.149/2003年度比：2.774）

運営費交付金	93,189千円
科学研究費補助金	137,718千円
間接経費（科学研究費補助金）	18,315千円
産学連携経費	22,177千円

受託研究	195,551千円
民間等との共同研究	147,518千円
奨学寄付金	3,560千円
その他研究助成	7,000千円
間接経費（その他研究助成）	21,430千円
合計	646,458千円

[科学研究費補助金総交付額（他機関への分担金、間接経費（30%）を含む）の内訳＝学術変革領域研究（A）公募研究：1件/基盤研究（A）：2件/基盤研究（B）：6件/基盤研究（C）：4件/挑戦的研究（開拓）：1件/挑戦的研究（萌芽）：1件/若手研究：3件/国際共同研究加速基金（国際共同研究強化（A））：1件/特別研究員奨励費：2件/合計21件・100,800千円]

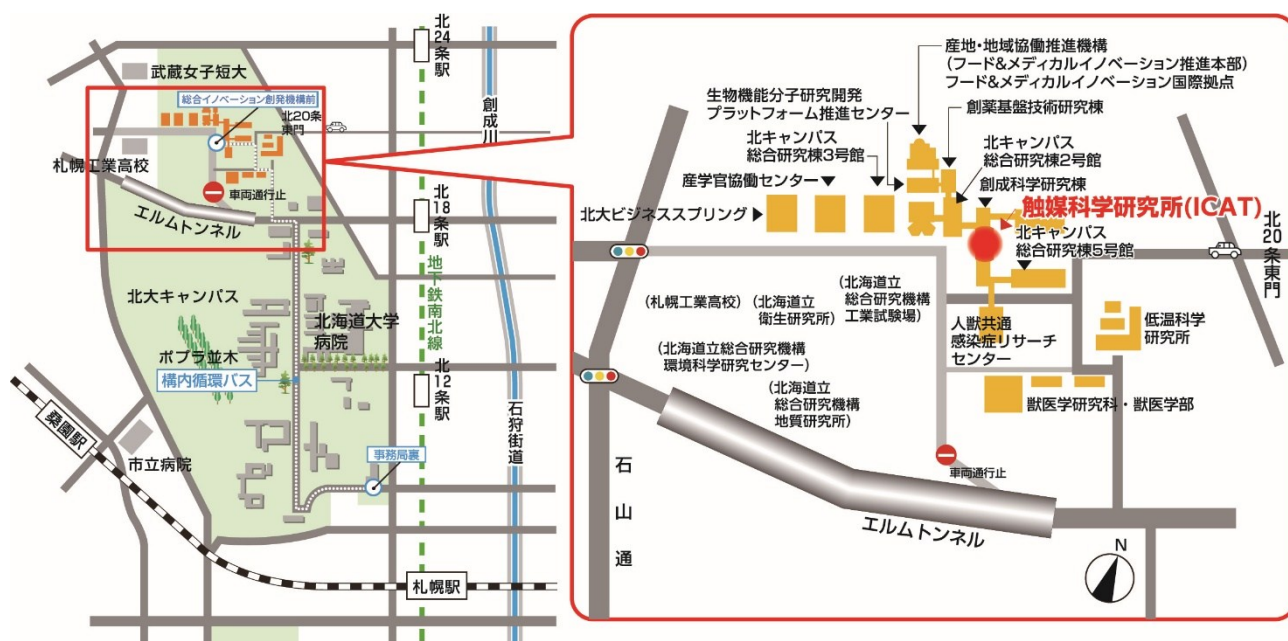
施設

■所在地

旧触媒化学研究センターは、2003年10月まで、移転途中の中間段階をのぞき、北海道大学南キャンパス内の触媒化学研究センター棟に所在（現在は理学部8号棟）。2003年11月より北海道大学構内北キャンパス内の創成科学研究棟（001-0021 札幌市北区北21条西10丁目）に移り、触媒科学研究所に改組した後も同地に所在する。

■建物

2,435平方メートル（北海道大学創成科学研究棟内の占有面積）



教育/人材育成/社会連携

触媒科学研究所は研究機関であるが、各研究部門が属する工学院、環境科学院、総合化学院および生命科学院において大学院教育を行うとともに、全学教育科目および関連する学部の専門科目の担当、触媒化学に関連する研究会の実施を通じ広く教育活動を行っている。（担当講義および本研究所に所属の学生等の学位審査については《個人編》を参照されたい。）

また、「触媒科学研究所海外派遣制度」による大学院生と若手教員の海外諸外国における研究の促進、「触媒高等実践研修プログラム」による触媒を専門とする研究者・学生のほか、企業、研究機関、大学、高校等に所属する必ずしも触媒を専門としない研究者、技術者、教育者に対する触媒研究の研修機会の提供、さらに、学生交流委員会による研究室をこえたセンター内の交流をすすめている。

■進路状況

触媒科学研究所配属学生のうち2024年度修了者の進路状況は以下のとおり。

進路	博士修了	修士修了	学部卒業
修士/博士進学		3	4
大学	2	0	0
公的研究機関	2	0	0
官公庁	0	0	0
民間企業	0	2	1
その他	0	1	0
合計	4	6	5

■触媒化学のフロンティア

全学教育科目（総合科目）の「触媒化学のフロンティア」は触媒科学研究所が担当し、教員のうち、教授および准教授全員によるオムニバス形式の講義および最終回の触媒科学研究所見学会を行っている。シラバスデータと各回の講義担当は以下のとおり。

開講日：第1学期金曜日第5校時（16：30～18：30）

教室：高等教育推進機構E301室

受講者数：25人以下

責任教員：中島清隆

キーワード：触媒、化学物質、環境とエネルギー、持続的な発展

授業の目標：触媒とは、それ自身は変化せずに化学反応を促進する効果を持つ物質のことを指します。ある特定の物質を効率よく合成したり、有害な化学物質を無害化したりするのに不可欠です。エネルギーを生む過程でも触媒は欠かせません。われわれの体の中でも、酵素といった触媒が働いています。このように、触媒は今や化学を支えるものとも重要な概念のひとつであり、持続的な化学工業の発展のためには不可欠な化学物質です。触媒科学研究所では、触媒による化学反応のしくみを明らかにし、新しい触媒の開発をめざしていろいろな角度から研究を進めています。本講義では、触媒研究の最先端ではどのようなことが行われているのか、将来どのようなことが実現できると期待されているのかをやさしく解説します。

到達目標：触媒化学の最先端のトピックスを学ぶことを通

じて、触媒の役割を理解し、正しい物質観にもとづいた科学的な考え方を身につけ、資源とエネルギー、環境と化学物質、社会のあり方などについて学ぶことを目標とします。

授業計画：触媒の基礎から環境触媒、燃料電池などの最新の応用研究まで、触媒科学研究所の教員がオムニバス形式で、それぞれの分野における触媒研究について最新のトピックを講義します。7月26日（金）には、北キャンパスにある触媒科学研究所の見学会を行います。

準備学習（予習・復習）等の内容と分量：講義ごとに復習を兼ねて課題レポート等を出します。

成績評価の基準と方法：出席状況と各担当教官から出される課題へのレポート等により評価します。

備考：講義は統一して液晶プロジェクターを用い、毎回講義の概要を示す資料を配付します。

授業アンケート評価：集計対象外

各回の講義：第1回（2024/04/12）中島清隆「ガイダンスと固体触媒によるバイオマスの資源化」・第2回（2024/04/19）菅沼学史「資源を有効活用するための触媒技術の開拓」・第3回（2024/04/26）中野環「高分子の立体構造と機能」・第4回（2024/05/10）村山徹「金ナノ粒子触媒」・第5回（2024/05/17）鳥屋尾隆「データ科学を利用した固体触媒研究」・第6回（2024/05/24）長谷川淳也「理論・計算化学による触媒反応研究」・第7回（2024/05/31）飯田健二「触媒反応を理解するための分野を超えた理論の融合」・第8回（2024/06/14）高草木達「走査型トンネル顕微鏡：原子・分子の直接観察と制御」・第9回（2024/06/18）宋志毅「クロスカップリング反応中のパラジウム触媒」・第10回（2024/06/21）武安光太郎「表面科学からみるカーボン系触媒と酵素の共通点」・第11回（2024/06/28）浦口大輔「分子のかたちを決める分子触媒」・第12回（2024/07/05）浅野圭佑「有機触媒を利用した分子の合成と観察」・第13回（2024/07/12）清水研一「金属ナノ粒子の触媒作用」・第14回（2024/07/26）中島清隆「研究室見学」

■ Fundamentals and Applications of Catalytic Chemistry

主催：Hokkaido Summer Institute

開講日時：2024年7月22日（月）～7月26日（金）

会場：ハイブリッド実施（対面・オンライン）

受講登録者数：11名

概略：Hokkaido Summer Instituteは、北海道大学に世界の第一線で活躍する優れた教育研究業績・活動歴を有する研究者を招聘し、本学教員と協働で教育活動を実施するプログラムである。授業は英語で行われ、海外の大学からの受講生も受け入れている。本講義では3名の本学教員と3名の招へい教員が協力して、当該課題である「触媒化学の基礎と応用」について8コマの講義を実施する。次世代の高分子材料の合成・応用に関する最先端の触媒技術にフォーカスして、菅沼学史准教授は本学教員Abhijit Shrotri先生及び招へい教員Kevin Wu先生と協働して再生可能資源からのバイオマスプラスチックの原料となるモノマー類を合成するための触媒技術、さらに新しい概念による新規触媒反応開発について中国北京大学Zhang Wencxiong教授、中国科学院化学研究所Wang Congyang教授と宋志毅准教授、6名の教員がこの講義を実施する。本講義は資源・エネルギー・環境関連問題を解決するための触媒技術および次世代の化学工業の開発に不可欠な触媒化学を対象として、新しい

概念による先駆的な触媒研究に取り組む先生方とバイオマスから基幹化学品を誘導するための固体触媒研究に携わる先生方が担当する。「触媒化学の基礎と応用」を学び、現代の問題を解決し次世代技術を開拓する力を養っていただきたいと思う。

各回の講義：○Dr. Kevin Wu (National Taiwan University): Development of novel catalytic functions of nanomaterials, ○Dr. Wenxiong Zhang (Peking University): Activation and Transformation of White Phosphorus to Organophosphorus Compounds / The History, Current Status and Future of Rare-Earth Organometallic Chemistry, ○Dr. Zhiyi Song (Institute for Catalysis, Hokkaido University): Titanium in Organic Synthesis, ○Dr. Abhijit Shrotri (Institute for Catalysis, Hokkaido University): Application of heterogeneous catalysts for CO₂ hydrogenation・Principals for design and characterization of heterogeneous catalysts, ○Dr. Congyang Wang (Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences): Nitrogen Fixation: Fundamentals and Catalysis, ○Dr. Satoshi Suganuma (Institute for Catalysis, Hokkaido University): Frontiers of catalyst research for utilization of natural carbon resources

■ CSE Summer School and ALP International Symposium

主催：CSE-ALP International Summer School 実行委員会
共催：触媒科学研究所, 総合化学院, 物質科学フロンティアを開拓するAmbitiousリーダー育成プログラム, フロンティア化学教育研究センター, 国際先端物質科学大学院, スマート物質科学を拓くアンビシャスプログラム

日時：2024年8月24日(木)～8月25日(金)

会場：しんしのつ温泉 たっぷの湯

人数：実行委員9名, 発表者17名(招待講演4, 一般口頭3, ポスター15件) ※参加登録加者22名の内訳: 博士課程学生9名, 修士課程学生6名, 学部生0名, 研究員・教員7名

概略：本イベントは総合化学院(CSE)の博士学生によって組織された実行委員会により企画・運営される国際シンポジウムとして, 総合化学院が設立された2010年から継続して実施された。当初, 北海道大学グローバルCOEの博士育成プログラムの一環として実施されたが, 2012年のグローバルCOE終了に伴い, 総合化学院が主催し, 触媒化学研究センター(現: 触媒科学研究所)が共催する形で「総合化学院 夏の学校」を継続した。2013年は同年夏に開催されたISHHC-16(旧触媒化学研究センター主催)のポストシンポジウムとして実施した。2019年からは物質科学フロンティアを開拓するAmbitiousリーダー育成プログラム(ALP)で実施されてきた国際シンポジウムと合同開催した。ALP生が加入しそれに伴い, 名称を「CSE-ALP International Summer School」に変更した。2020, 2021年はコロナのパンデミックのため, 完全オンライン開催であったが, 2022年は運営委員会にスマート物質科学を拓くアンビシャスプログラム(SMatS)生が加わり, 初の現地・オンラインハイブリッド形式で開催した。2023年は実に4年ぶりとなる現地開催にこぎつけ, 泊まり込みで実施した。2024年も昨年に引き続き, 泊まり込みでの開催となった。当研究所からは宮崎玲助教が教員側実行委員として参加した。

プログラム：

August 24th (Sat.)

13:10 Meet at the Sapporo Station

13:26 Departure from Sapporo Station

14:41 Arrival at Tappu no Yu
15:00 - 15:05 Opening Session
15:05 - 15:35 Special Lecture 1 (Prof. Kazuhiro Abe)
15:40 - 16:10 Special Lecture 2 (Prof. Milena Lama)
16:15 - 17:00 Oral Presentations by students
17:00 - 18:00 Break time
18:00 - 20:00 Dinner & Break time
20:00 - 21:30 Poster Presentation
21:30 - Social gathering
August 25th (Sun.)
9:00 - 9:30 Special Lecture 3 (Prof. Hiromichi V. Miyagishi)
9:35 - 10:05 Special Lecture 4 (Prof. Mengfei Wang)
10:10 - 11:40 Recreation
11:40 - 12:00 Closing Session
13:10 Departure from Tappu no Yu
14:16 Arrival at Sapporo Station



集合写真

■ 2024年北の国触媒塾

主催：触媒学会北海道支部

共催：北海道大学触媒科学研究所

協賛：日本化学会

日時：2024年6月22日(土) 09:00-17:00

会場：北海道大学触媒科学研究所5F大会議室(ハイブリッド開催)

参加者：100名(うち17名は企業からの一般参加)

概略：触媒科学研究所では, 触媒学会が開催する「北の国触媒塾」を共催している。この講習会の目的は, 触媒の研究を行っている研究室に配属された大学院生・学部学生, および一般の方に触媒の基礎を学んでもらうことである。本年は触媒材料研究部門の菅沼学史准教授が事務局を担当し, 6月22日にハイブリッド形式で開催された。

触媒学会北海道支部長の中島清隆先生(北大触媒研)から開塾挨拶と概要説明が行われ, 坂上敏寛先生(北見工業大学)により触媒材料と触媒調製法, 萩野勲先生(北大院工)により触媒の構造解析(I), 神田康晴先生(室蘭工大)により触媒の構造解析(II), 神谷裕一教授(北大院地球環境)により固体触媒反応の反応速度論, 中島清隆先生(北大触媒研)により酸塩基触媒の反応と解析, 清水研一先生(北大触媒研)により金属ナノ粒子・遷移金属酸化物の触媒作用について講じられた。

ハイブリッド開催のため全国の大学・企業から大勢の参加者があり, 盛況の様相を呈した。短時間に濃密な内容の

講義がなされ、またチャット機能を活用したことにより、オンラインからも多くの質問が参加者からなされた。ハイブリッド開催のメリットが良い形で現れた典型的な成功例であったと思われる。

9:00-09:10	開塾式・概要説明
9:10-10:15	触媒材料と触媒調製法 坂上敏寛/北見工業大学
10:20-11:25	触媒の構造解析(I) 荻野勲/北海道大学大学院工学研究科
11:30-12:35	触媒の構造解析(II) 神田康晴/室蘭工業大学
13:30-14:35	固体触媒反応の反応速度論 神谷裕一/北海道大学大学院地球環境科学研究院・環境科学院
14:40-15:45	酸塩基触媒の反応と解析 中島清隆/北海道大学触媒科学研究所
15:50-16:55	金属ナノ粒子・遷移金属酸化物の触媒作用 清水研一/北海道大学触媒科学研究所
16:55-	閉塾式

■触媒科学研究所海外派遣制度

本制度は旧触媒化学研究センター（現触媒科学研究所）内規として2004年12月24日に協議員会において制定され、2度の改正をへて現在にいたっている。内容は以下のとおり。

(1) 派遣先： 本研究所が研究交流を行っている機関とする。(2) 派遣人数： 毎年3名程度 (3) 派遣対象者： 触媒科学研究所所属の大学院生および教員 (4) 派遣期間： 2～3か月間 (5) 派遣経費： 研究所経費から交通費及び滞在費を支給する(滞在費を派遣先の大学などが負担する場合は、この限りではない)。派遣経費は1名あたり600千円を限度とする。

2024年度実績：実施なし

■学生交流委員会

所属大学院がことなる触媒科学研究所配属学生間、研究室間の交流を深めることを目的として設置される委員会で、毎年度各研究室から委員を出して構成している。触媒化学研究センター談話会(2010年度途中から触媒化学研究センターコロキウム、2015年10月から触媒科学研究所コロキウム)が主催して年度末に開催していた「触媒化学研究センター大学院生の交流発表会/送別会(歓送会)」(第1回は1995年度)は2006年度から、触媒化学研究センター有志が世話をしていた「触媒化学研究センターソフトボール大会/ジンギスカンパーティ」は2008年度から学生交流委員会が担当している。2015年10月より名称をそれぞれ「触媒科学研究所大学院生の交流発表会/送別会(歓送会)」「触媒科学研究所ソフトボール大会/ジンギスカンパーティ」とした。2024年度の活動は以下のとおり。

ソフトボール大会/ジンギスカンパーティ

中止

触媒科学研究所第26回大学院生の交流発表会/歓送会

中止

図書/学術情報

■図書

旧触媒化学研究センター図書室は2003年11月に北海道大学構内北キャンパス内創成科学研究棟に移転した後、名称は変更せずに創成科学研究棟(触媒化学研究センター/創成科学研究機構/電子科学研究所)の共通の図書室として運用されてきたが、2005年からは名称を「北キャンパス図書室」とした。2010年に電子科学研究所の移転にともない、2008年8月11日に同研究所図書室と統合された(名称は「北キャンパス図書室」。北キャンパス総合研究棟5号館[電子科学研究棟]1階)。

図書予算(2024年度): 38千円

蔵書数と所蔵雑誌(触媒科学研究所分): 蔵書(和書)4,928冊/和雑誌87種類・蔵書(洋書)17,029冊/洋雑誌379種類・合計: 蔵書21,957冊/雑誌466種類

■学術情報

出版物《触媒科学研究所出版物(定期刊行物)》

(1) 北海道大学触媒科学研究所年報2024(2025年11月刊行/A4判/84ページ)

データベース

(1) 触媒物質データベース(触媒化学研究者が自ら選び出した触媒物質・触媒作用に関する「確実な」情報を集積し、新たな知の創成や知の共有をめざす・1203件・担当: 清水研一) <https://www.cat.hokudai.ac.jp/catdb/index.php> 《2024年度: 追加/更新0件》

(2) XAFSデータベース(さまざまな化合物のXAFSデータをfoilなどの共通的なデータとあわせて掲載することにより、エネルギー軸を統一したデータベースを構築・1019件・担当: 清水研一) <https://www.cat.hokudai.ac.jp/catdb/index.php> 《2024年度: 国立研究開発法人物質・材料研究機構(NIMS)のデータベースであるMDR XAFS DBに統合された(<https://mdr.nims.go.jp/collections/a0f3fbf1-f94a-4be7-8a66-6b91a24f6b54>)》

国際・国内交流と共同研究

international and domestic exchange and collaboration

交流協定

世界の触媒研究者との連携を進め、世界的レベルでの触媒研究方向を定め、触媒研究を活発化させることを本研究所の目標としている。その一環として、さまざまな国の触媒研究機関と積極的に学術交流協定を締結している。

■ 2023年度までに締結されて2024年度に有効な協定

中国・石油大学（北京）化工学院 部局間友好学術交流協定（締結：1999/12/07・期限：2029/12/07《自動更新》）

中国・北京大学 大学間学術交流に関する協定〈関係部局〉（締結：2003/02/19・期限：2028/02/19《自動更新》）

ドイツ・マックスプランク協会フリッツハーバ研究所 部局間友好学術交流協定（締結：2005/12/26・期限：2025/12/26《自動更新》）

中国・廈門大学固体表面物理化学国家重点實驗室 部局間友好学術交流協定（締結：2007/10/09・期限：2027/10/09《自動更新》）

中国・清華大学 大学間学術交流に関する協定〈責任部局〉（締結：2008/06/30・期限：2028/06/30《自動更新》）

ポーランド・西ポメラニアン工科大学化学・環境工学研究所 部局間友好学術交流協定（締結：2010/03/17・期限：2030/03/17《自動更新》）

中国・廈門大学 大学間学術交流に関する協定〈責任部局〉（締結：2010/11/25・期限：2025/11/25《自動更新》）

フランス・リル第1大学ーリル中央学院触媒・固体化学研究ユニット 部局間友好学術交流協定（締結：2011/01/17・期限：2026/01/17《自動更新》）

ポーランド・グダンスク大学 部局間友好学術交流協定（締結：2013/02/01・期限：2028/02/01《自動更新》）

アメリカ・パーデュー大学サイエンス学部 部局間友好学術交流協定（締結：2014/04/26・期限：2029/04/26《自動更新》）

アメリカ・サウスキャロライナ大学化学工学科 部局間友好学術交流協定（締結：2016/03/24・期限：2026/03/24《自動更新》）

ポーランド・ヤギェボ大学化学科 部局間友好学術交流協定（締結：2016/05/11・期限：2026/05/11《自動更新》）

ロシア・ボレスコフ触媒研究所 部局間友好学術交流協定（締結：2016/10/11・期限：2026/10/11《自動更新》）

アメリカ・サンキャットセンター 部局間友好学術交流協定（締結：2016/11/02・期限：2026/11/02《自動更新》）

中国・人民大学化学系 部局間友好学術交流協定（締結：2016/11/18・期限：2026/11/18《自動更新》）

タイ・ヴィデヤシリメディ科学技術大学 部局間友好学術交流協定（締結：2017/02/27・期限：2027/02/27《自動更新》）

中国・科学院大学 大学間友好学術交流協定〈関係部局〉（締結：2017/12/12・期限：2027/12/12《自動更新》）

オランダ・アイントホーフェン工科大学化学工学・化学科部局間友好学術交流協定（締結：2018/08/07・期限：2028/08/07《自動更新》）

ドイツ・フリードリヒ・アレクサンダー大学エアランゲン＝ニュルンベルク化学反応工学研究所 部局間友好学術交流協定（締結：2018/09/17・期限：2028/09/17《自動更新》）

中国・華中師範大学化学学院 部局間友好学術交流協定（締結：2018/11/28・期限：2028/11/28《自動更新》）

ジョージア・トビリシ国立医科大学イオベルクタテラーゼ薬化学研究所 部局間友好学術交流協定（締結：2019/02/25・期限：2029/02/25《自動更新》）

インド・インド工科大学インドール校 部局間友好学術交流協定（締結：2023/12/19・期限：2028/12/19《自動更新》）

ジョージア・ジョージア農業大学 部局間友好学術交流協定（締結：2024/01/29・期限：2029/01/29《自動更新》）

■ 2024年度に締結された協定

中国・華中科技大学環境科学与工学学院 部局間友好学術交流協定（締結：2024/12/05・期限：2029/12/05《自動更新》）

中国・中国科学院大連化学物理研究所 部局間友好学術交流協定（締結：2024/12/31・期限：2029/12/31《自動更新》）

共同利用・共同研究拠点事業

触媒科学研究所（旧触媒化学研究センター）は、2009年度まで触媒化学に関する共同研究、共同利用などを行う「全国共同利用施設」として活動してきた。2010年度からは名称を「共同利用・共同研究拠点」、触媒関連分野の発展に貢献し、学術情報収集・発信の中心的な役割を果たす使命を担ってきた。2022年度より、本研究所、大阪公立大学人工光合成研究センター、産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター（現、触媒化学研究部門）とともに連携ネットワーク型共同利用・共同研究拠点「触媒科学計測共同研究拠点」として文部科学省から認定を受け、本研究所は本拠点の代表として拠点活動を牽引している。触媒や人工光合成などの中核領域における共同研究に加え、異分野間の融合・連携を一層促進するために、固体触媒、分子触媒、生物触媒分野間の共同研究をはじめとする多様性のある学際共同研究を推進する。また、SRISの協力により次世代放射光源を活用する計測科学分野との共同研究を促進する。

■ 管理運営

触媒科学計測共同研究拠点拠点本部委員会

〈触媒科学研究所長〉清水研一〔2022/04/01〜〕〈大阪公立大学人工光合成研究センター所長〉天尾豊〔2022/04/01〜〕〈産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター長〉吉田勝〔2023/01/01〜〕

触媒科学計測共同研究拠点拠点推進委員会

〈触媒科学研究所長〉清水研一 [2022/04/01～] 〈大阪公立大学人工光合成研究センター所長〉天尾豊 [2022/04/01～] 〈産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター長〉吉田勝 [2023/01/01～] 〈触媒科学研究所教授〉浦口大輔 [2022/04/01～] 〈大阪公立大学人工光合成研究センター副所長〉山田裕介 [2022/04/01～] 〈産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター副センター長〉佐藤剛一 [2023/01/01～]

触媒科学計測共同研究拠点運営委員会

〈触媒科学研究所長〉清水研一 [2022/04/01～] 〈大阪公立大学人工光合成研究センター所長〉天尾豊 [2022/04/01～] 〈産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター長〉吉田勝 [2023/01/01～] 〈東京都立大学大学院都市環境科学研究科 教授〉天野史章 [2024/04/01～] 〈広島大学 先進理工系科学研究科特任教授〉石谷治 [2022/04/01～] 〈名古屋大学大学院理学研究科教授〉斎藤進 [2022/04/01～] 〈早稲田大学先進理工学部教授〉関根泰 [2022/04/01～] 〈大阪大学大学院薬学研究科特任教授〉真島和志 [2022/04/01～] 〈自然科学研究機構分子科学研究所教授〉横山利彦 [2022/04/01～]

触媒科学計測共同研究拠点課題等審査委員会

〈触媒科学研究所教授〉高草木達 [2024/04/01～] 〈大阪公立大学人工光合成研究センター准教授〉田村正純 [2022/04/01～] 〈産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター総括研究主幹〉藤谷忠博 [2022/04/01～] 〈京都大学大学院工学研究科教授〉阿部竜 [2022/04/01～] 〈東京都立大学大学院都市環境科学研究科准教授〉石田玉青 [2024/04/01～] 〈関西大学化学生命工学部教授〉大洞康嗣 [2022/04/01～] 〈成蹊大学理工学部教授〉里川重夫 [2022/04/01～] 〈岡山大学学術研究院自然科学学域教授〉山方啓 [2022/04/01～] 〈産業技術総合研究所化学プロセス研究部門研究部門長〉山口有朋 [2022/04/01～]

■ 公募要項

本拠点は、下記のとおり共同利用・共同研究の公募を行っている。若手研究者、女性研究者からの研究提案を積極的に支援している。

1. 公募区分

本拠点外の研究者が研究代表者となり、受入研究者である本拠点の研究者が研究分担者となり共同研究を実施します。本拠点を構成する研究機関に所属する複数の研究者を研究分担者とする研究提案を歓迎します。申請者は研究課題などについて受入研究者との間で十分な打ち合わせを行ったうえで申請してください。また、本拠点はコロナビゲータを設置しており、受入研究者などについて相談できます。E-mail (colab-navigator@cat.hokudai.ac.jp) でお気軽にご相談ください。

以下の公募区分があります。

(1) 提案型

自由な発想に基づいた、萌芽的、試験的、準備的な研究課題の公募を行います。年2回の公募時期を設定します。詳細は、下記の要項2をご覧ください。

なお、同時期に提案型における複数件の課題申請はできません。

(2) 発展型

本拠点との共同研究成果を発展させるための研究課題の公募を行います。詳細は、下記の要項2をご覧ください。なお、発展型に応募すると提案型との同時申請となり、発展型で不採択の場合は提案型としても審査されます。

(3) Fostering-Young-ResearcherS (FYRES) 型 (40歳未満)

本拠点との共同研究成果を一層発展させるための若手研究者 (40歳未満：2026年3月31日時点) からの研究課題を公募します。研究者が本拠点に滞在し、研究設備などを利用しつつ本拠点の研究者と密度の高い共同研究を実施できます。複数の研究機関 (海外を含む) からの研究者の参画が可能です。FYRES型では、本拠点のイベントなどを通して、採択された若手研究者の活躍を支援することにより、次世代の触媒研究者を育成します。詳細は、下記の要項2をご覧ください。

なお、FYRES型に応募すると提案型との同時申請となり、FYRES型で不採択の場合は提案型としても審査されます。

(4) オンデマンド型

本拠点の研究者が窓口となり拠点内の共通装置や各研究者の保有する装置が利用できます。専門的・技術的な相談や試験的な実験や分析に関する依頼を随時受け付けています。本拠点は経費を負担しません。詳細は、下記の要項2をご覧ください。

表1. 提案型, 発展型, FYRES型, 被災研究者支援型の研究期間, 配分研究費上限額, 応募締切

区分	提案型	発展型	FYRES型 (40歳未満)	被災研究者支援型
研究期間	(第一期) 2024年6月1日～ 2024年10月31日 (第二期) 2024年11月1日～ 2025年3月31日	2024年6月1日～ 2025年3月31日	2024年6月1日～ 2025年3月31日	採択日～ 2025年3月31日
配分研究費 上限額*1	10万円	50万円	50万円	10万円
応募締切	(第一期) 2024年4月10日 (第二期) 2024年9月19日	2024年4月10日	2024年4月10日	随時

*1 採択件数と配分研究費は当該年度の予算状況による。

(5) 若手招待講演型

若手触媒研究者に対し国際舞台での活躍を支援し、触媒研究の中核となって活躍できる若手研究者の育成・活性化を目指します。海外の著名な研究機関において研究成果の発表を希望する若手研究者を対象に、本拠点が主催する情報発信型国際シンポジウムの招待講演枠を提供するとともに、渡航費の一部を補助します。本公募区分は触媒学会との共同企画です。詳細は、触媒学会を通して告知される公募情報 (<http://www.shokubai.org/>) をご覧ください。

(6) 客員研究員

本拠点研究者と継続的・組織的に協力して、共同利用・共同研究を進める意欲的な研究者を客員研究員として若干名募集いたします。詳細は、受入する機関が示す募集要項をご覧ください。

(7) 実践研修

拠点外の研究者、学生に対して触媒に関する研修の場を提供しています。詳細は、受入する機関が示す募集要項をご覧ください。

(8) 研究集会支援

触媒に関する研究集会の開催について、開催経費の一部を本拠点が支援します。本拠点との共同開催となります。下記の要項3をご覧ください。

(9) 被災研究者支援型

自然災害やその他の災害による被災の影響を受け、研究の遂行に支障をきたしている大学および研究機関等の研究者の活動を支援するための公募を行います。募集は随時受け付けています。詳細は下記要項2をご覧ください。

2. 提案型、発展型、FYRES型、オンデマンド型、被災研究者支援型の詳細

2-1. 事前相談

共同利用・共同研究の受入研究者が研究分担者となります。なお、申請に当たっては、受入を希望する研究者と課題設定及び研究計画について事前相談が必要です。拠点内の受入研究者の研究概要と連絡先については別表Iを参照願います。本拠点は居室、研究環境などを提供できます。受け入れ研究者の実験・解析・計算技術については別表Iのリンクを参照願います。

2-2. 研究期間

研究期間は表1記載の期間とします。なお、継続申請が可能ですが、採否は年度ごとに審査によって決定します。また、発展型、FYRES型を継続して実施できる年数は2年を限度とします。

2-3. 研究経費

共同利用・共同研究の経費は、予算の範囲内（下表参照）において本拠点が負担します。オンデマンド型については、当拠点は経費を負担しません。

購入可能な物品は、受入研究機関により異なります。また、申請課題の遂行上直接的に必要なものに限り、原則、旅費は、本拠点へのものとし、申請書に記載のある研究代表者、拠点外の研究分担者について支給できます。

なお、経費の執行手続きについては、受入研究者の所属する事務担当（別表II）に確認願います。

2-4. 申請資格

申請をする研究代表者は、国籍を問わず、拠点外の国公立大学、公的研究機関及び民間企業に所属している研究者またはこれに準ずる研究者であると本拠点本部長が認めた者とし、海外の研究機関に所属する研究者も含まれます。研究代表者は、当該研究を遂行するため、本拠点の受入研

究者である研究分担者に加えて、上記資格を有する国内外の研究者や大学院生（学部学生は除く）を「研究分担者」として加えることができます。なお、研究分担者に加える場合には、事前に受入研究者の承諾を得てください。

2-5. 申請方法

提案型、発展型、FYRES型は拠点申請システム (<https://kyoten-gw.cat.hokudai.ac.jp/users/login>) を通して、上記締切日までに申請願います。被災研究者支援型は申請書（別紙様式3）に必要事項を記入し、電子メールで申請してください。なお、オンデマンド型は拠点申請システムを通してまたは申請書（別紙様式1）の電子メール送信による申請も可能です（提出先：colab-navigator@cat.hokudai.ac.jp）。

2-6. 申請書提出期限

表1に記載の応募締切を厳守してください。オンデマンド型、被災研究者支援型については、随時申請できます。

2-7. 選考

採否、採択額については、本拠点課題等審査専門委員会の議を経て、本拠点本部委員会で決定します。

発展型、FYRES型は、申請者の提案内容に加え、以下の項目をもとに拠点への貢献度を評価して、審査します。

- ・拠点内研究者との共著論文数：申請者が過去5年間に当該拠点の研究者との共著で発表した論文の数。

- ・共同研究課題採択数：申請者が過去5年間に共同研究として採択された課題の数。

- ・拠点への謝辞入り論文数：申請者が過去5年間に発表した論文の中で、当該拠点に謝辞を記載した論文の数。

上記評価項目には、令和3年度までに北海道大学触媒科学研究拠点および大阪市立大学人工光合成研究拠点を利用した研究成果を含みます。

2-8. 採否の通知

本拠点より、直接申請者へお知らせします。採択後、拠点申請システムを通してまたは電子メールで速やかに「共同利用・共同研究承諾書」（別紙様式4）を提出していただきます。

オンデマンド型については受入研究者より、直接、申請者へお知らせします。「共同利用・共同研究承諾書」の提出は不要です。

2-9. 共同利用・共同研究報告書の提出、論文発表など

(1) 共同利用・共同研究報告書

共同研究実施期間終了後10日以内に、「共同利用・共同研究報告書（別紙様式5または6）」を作成し、拠点申請システムを通してまたは電子メールで提出願います。報告書は2027年3月に本拠点ウェブサイトに掲載し、公開させていただきます。

(2) 論文発表

共同研究によって得た成果を論文等で公表する場合は、本拠点の共同利用・共同研究で得られた成果である旨を謝辞として次のように論文等に明記してください。

（和文）触媒科学計測共同研究拠点共同利用・共同研究に基づき実施された（採択番号...）。

（英文）This study was supported by the Joint Usage/Research Center for Catalysis. (Proposal#...)

(3) 知的財産権の取り扱いについて

本共同利用・共同研究によって生じた知的財産権の取扱いについては、速やかに所属機関との間で別途協議するものとします。

3. 拠点研究集会支援

3-1. 事前相談

申請に当たっては、受入を希望する研究者と開催計画について事前相談が必要です。拠点内の受入研究者の研究概要と連絡先については、別表Ⅰを参照願います。

3-2. 共催または協賛について

研究集会を開催するに当たっては、本拠点を共催または協賛としてポスター等告知物に記載ください。

3-3. 開催経費

招待講演者の招へい旅費または講演料の一部を本拠点が負担します。一集会につき、上限額30万円まで支援します。なお、経費の執行手続きについては、受入研究者の所属する事務担当（別表Ⅱ）に確認願います。

3-4. 申請資格

国籍を問わず、拠点外の国公私立大学、公的研究機関及び民間企業に所属している研究者またはこれに準ずる研究者であると本拠点本部長が認めた者とし、海外の研究機関に所属する研究者も含まれます。

3-5. 申請方法

拠点申請システム (<https://kyoten-gw.cat.hokudai.ac.jp/users/login>) を通して申請願います。拠点研究集会支援に関しては申請書（別紙様式2）の電子メール送信による申請も可能です（提出先：colab-navigator@cat.hokudai.ac.jp）。

3-6. 報告の提出、論文発表など

研究集会開催期間終了後30日以内に、「拠点研究集会報告書」を作成し、拠点申請システムを通してまたは電子メール（提出先：colab-navigator@cat.hokudai.ac.jp）で提出願います。レポートは2027年3月に本拠点ウェブサイトに掲載し、公開させていただく予定です。

4. お問い合わせ先

◇申請書提出先、公募全般、申請システムに関する連絡先：
colab-navigator@cat.hokudai.ac.jp

■2024年度の共同利用・共同研究採択課題数

2024年度採択課題のうち、触媒科学研究所の教員が受け入れ教員となった課題数は以下のとおり。

公募区分	触媒研受入件数	全体の受入件数
発展型	2	5
FYRES 型	2	6
提案型	88	150
オンデマンド型	97	120
実践研修	3	3
若手招待講演型	2	2
客員研究員	3	3
研究集会支援	44	45
合計	241	334

令和4年度～令和9年度文部科学省特別経費
「学際統合物質科学研究機構」—北海道大学、名古屋大学、京都大学、九州大学～4大学の連携により物質創製化学の世界的ネットワークを築き、未来をけん引する若手中



核研究者ネットワークを構築 2022-2026 MEXT Project of Integrated Research Consortium on Chemical Sciences (IRCCS)

■ 概要

物質創製化学は、化学結合の形成のための新しい方法論や、機能の発現のための物質構築論などを探求する極めて基礎的な基盤学術である。加えて、その成果は、新触媒や新材料開発はもちろん、イノベーション創成を通じてエネルギー・資源から環境・創薬に至る極めて広い範囲に適用される。物質創製化学およびそれに関連する科学は、新物質の創出を基軸に生命科学や材料科学などの周辺分野を変革し、SDGs等の重要課題の解決に資することができる科学の中心である。SDGsを達成し、持続的社会的の実現に資する物質科学研究を、国際的視認性をもって牽引するには、複数の研究組織の研究資源の強みを繋いで、時代に適した先進的連携の仕組みを整え、融合研究の推進と人材育成に一体的に取り組むことが求められる。我が国の物質創成研究は、野依、下村、白川、鈴木、根岸らのノーベル賞受賞者や、国際化学連合（IUPAC）会長の異を輩出したことから明らかな、極めて高い国際競争力を持つにもかかわらず、新物質創製を総合的かつ戦略的に進める機関・組織は我が国には未だ存在せず、この側面の強化は極めて重要である。

本事業は、本学と名古屋大学、京都大学、九州大学が構築してきた緊密な大学間連携を基盤に、リサーチトランスフォーメーションを実践し、統合的に学際研究を推進する。特に、触媒・マテリアル・バイオ機能に焦点を当て、これらに関する重要課題の戦略的抽出と解決に挑む。次世代の研究基盤となる良質なデータベースの構築と、若手人材が地理的制約を超えて多極的に共創できる共同研究体制を整備し実践する。この四大学間の連携と、産学・国際・博士教育連携との相乗的な推進により、個の優秀人材の点としての育成を超え、我が国の次世代を担う人材をチームごと育て上げる面的な育成を達成する。反応・新機能の開拓に、総合的観点から取り組むことのできる強力な研究組織が整備される、研究機関間の緩やかな連携は欧米先進諸国でも実施されているが、それらの多くは特定テーマに限定的である。物質創製化学研究を革新し、異なる物質階層および異なった物質変換概念を包括的に推進する本連携事業は他に類例を見ないものである。

■ これまでの成果

主任研究員7名、統合研究フェロー2名の連携研究体制により、統合物質基盤研究（7件）および若手研究者を中心とする融合創発研究を実施している。本事業によるクロスアポイントメント特任助教としては山田 早人博士が触媒理論研究部門に配属されていることに加え、附属触媒連携研究センターに開設した学際統合物質科学研究ユニット

においても本事業に関わる先導的研究を推進し、優れた研究成果を上げている。これらの成果はJournal of the American Chemical Society, Angewandte Chemie International Editionなどの一流学術誌に多数論文として発表された。本年度の成果には、「下水汚泥焼却灰からリン化成品を製造—リン酸を直接的にトリエステルへ変換できるケミカルリサイクル技術を開発—」（長谷川淳也教授）[日刊工業新聞 2024年12月5日 朝刊、環境新聞オンライン 2024年12月18日、サイエンスポータル2025年1月16日、ヤフーニュース 2025年1月16日 に記事掲載、NHK「おはよう日本（全国版）」2024年12月30日 にて報道]、「プラズマで生成した水素原子による「メタネーション反応」の低温活性化に成功—低炭素社会の早期実現に資する新たな電化技術として期待—」（高草木達教授）[2024年11月21日付日本経済新聞電子版に掲載]等がある。

また、統合研究フェローおよび本事業の支援を受けた研究者が日本の主要学会等の学会賞を受賞した（UBE学術振興財団 第64回学術奨励賞（浅野圭佑准教授）（2024/4/1）、文部科学省 令和6年度科学技術分野の文部科学大臣表彰科学技術賞（研究部門）（福岡淳特任教授）（2024/4/9）、第26回理論化学討論会 優秀講演賞（宮崎玲助教）、17th International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia (ICCEOCA-17) Asian Core Program Lectureship Award 2024 (Singapore)（浅野圭佑准教授）（2024/12/2）、日本表面真空学会フェロー（高草木達教授）（2025/2/20）。加えて、大学院生が計9件の学会発表賞を受賞した。

以上の研究アクティビティを基盤とした若手研究者の育成により、人事交流が活発に行われ、若手研究者1名が北海道大学教授として、また、若手研究者1名が北海道大学准教授として昇進した。加えて、若手研究者2名が北海道大学准教授に、若手研究者2名が北海道大学助教に採用された。また関連研究室の研究成果がさまざまなメディアを通して、社会に報道された。

2024年11月26～27日には、成果報告会・産学ワークショップが触媒科学研究所にて開催され、触媒科学研究所から村山徹教授、菅沼学史准教授らが研究報告を行い、加えて、全研究室の代表者がポスター発表を行った。また、2024年10月3～4日には、第3回若手の会が愛知県名古屋市KKRホテル名古屋にて開催された。この会議には若手教員、研究員、大学院生のみが出席し、複数大学の若手研究者間での自律的共同研究を創出するための議論および新規研究プロジェクトの創案を行った。触媒科学研究所からは、飯田健二准教授、武安 光太郎准教授、趙 強助教、安齊 亮彦助教が出席した。



IRCCS 成果報告会・産学
ワークショップ
2024年11月26日



IRCCS 第3回若手の会
2024年10月3日

講演会・研究会など

■ ICAT International Symposium of Institute for Catalysis 2024 : Sustainable synthesis by use of efficient catalyst

主催：北海道大学触媒科学研究所

日時：2024年7月29日（月）

会場：北海道大学創成科学研究棟5階大会議室

概略：北大触媒科学研究所で毎年恒例のイベントである第11回触媒科学研究所国際シンポジウムを開催した。今回も触媒に関連する様々な分野を融合した研究動向に注目し、卓越した知識と創造的な研究成果をもつトップ研究者による最新の研究発表を通して、研究者間の交流を図ることを目的として開催した。今年度は、均一系触媒に焦点を当て、実験科学分野におけるトップランナーの研究者6名（海外2名、国内4名）を招聘して、最新の触媒研究について講演していただいた。海外からは中国北京大学のWenxiong Zhang教授、Institute of Chemistry Chinese Academy of SciencesのCongyang Wang教授、国内からは理化学研究所のZhaomin Hou主任研究員、北海道大学理学部の清水洋平准教授、北海道大学触媒科学研究所の浅野圭佑准教授、北海道大学工学部の李豊助教授をお招きし、最先端の触媒科学について討論がなされた。口頭発表のほか、18件のポスター発表があった。参加者は海外から3名、国内から70名の合計73名となった。

講演会の様子：2024年7月29日の一日間にわたり対面形式で開催され、盛会のうちに終えることができた。上記の先生方からの招待講演に加えて、学生を含む若手研究者からの英語でのポスター発表もレベルが高く、活発な議論がなされた。

所感：今回の触媒科学研究所国際シンポジウムでは、実験科学分野でトップ研究者が講師として招かれており、招待講演5件、ポスター発表18件、基調講演1件といった構成にて、約5時間のシンポジウムとなった。

招待講演5件の内容は国内外の最先端科学であり、国際的な人の交流を生み出す貴重な機会を提供できた。学生を含む若手研究者からの英語でのポスター発表では、一人ひとりの反応を見ながらの発表、有意義な情報交換を行うことができた。

最後に、理化学研究所のZhaomin Hou主任研究員が基調講演を"New catalysts, New Reactions and New Functional Materials"というタイトルで行った。新しい触媒（New Catalyst）の開発が従来不可能だった新反応（New Reaction）の開発及び従来にない画期的な特性をもつ新材料（New Material）の創製など、世界トップレベル研究説明があり、参加者と活発な質疑応答が行われた。

今回の国際シンポジウムでは、異分野理解と融合といった新しい視点を学ぶ事が出来た。

講演者・演題：

13:00-13:10 Opening remark by Ken-ichi Shimizu (Director, ICAT)

13:10-13:50 Wenxiong Zhang (Professor, Peking Univ. China) "Direct Functionalization of White Phosphorus to Organophosphorus Compounds"

13:50-14:30 Congyang Wang (Professor, Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences, China) "Manganese Organometallic Catalysis"

14:40-15:00 Youhei Shimizu (Professor, Graduate School of Science, Hokudai) "Visible Light-Driven Boron-Catalyzed Direct Functionalization of Carboxylic Acids"

15:00-15:20 Feng Li, (Professor, Graduate School of Engineering, Hokudai,) "Chemically Recyclable Unnatural Polysaccharides Synthesized from Cellulosic Biomass"

15:20-15:40 Keisuke Asano (ICAT) "Photocatalytic Bromination for Biomolecular Labeling"

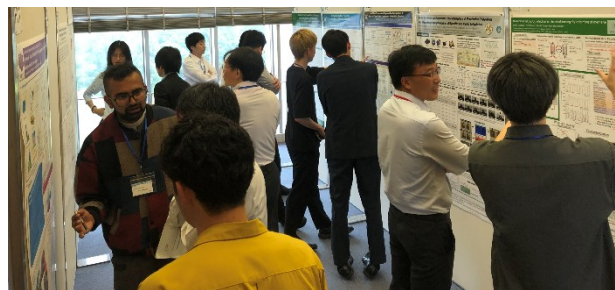
15:40-17:00 Poster Presentation

17:00-17:50 Zhaomin Hou (Professor, Riken, Japan) "New catalysts, New Reactions and New Functional Materials"

17:50-18:00 Closing remark by Daisuke Uraguchi (Professor, ICAT)



講演会の様子-1



ポスター発表会の様子
講演会の様子-2



■ ICAT International symposium of Institute for Catalysis 2024 “Development of Catalyst Technology for Resource Recycling

主催：北海道大学触媒科学研究所

日時：2024年10月3日（木）

会場：北海道大学創成科学研究棟 5 階大会議室及び Zoom でのオンライン配信

概略：毎年恒例のイベントである触媒科学研究所国際シンポジウムを開催した。今回も触媒に関連する様々な分野を融合した研究動向に注目し、卓越した知識と創造的な研究成果をもつトップ研究者に最新の研究成果を講演していただいた。また、本シンポジウムでは研究者間の交流を図ることも目的としている。今年度は、資源循環に資する触媒開発に焦点を当て、国内外のトップランナーの研究者8名（海外2名、国内6名）を招聘し、最新の触媒研究について

て講演していただいた。海外からはNational University of SingaporeのNing Yan教授、Indian Institute of Technology IndoreのSanjay Kumar Singh教授、国内からは大阪大学の水垣共雄教授、東京工業大学（現、東京科学大学）の北野政明教授、東京大学の岩崎孝紀准教授、北海道大学の福岡淳教授、大友亮一准教授、多田昌平准教授をお招きし、最先端の触媒研究について討論がなされた。また、マイクロトラック・ベル株式会社と株式会社島津製作所に協賛企業として援助していただき企業紹介を実施した。参加者は海外から3名、国内から86名（企業から6名を含む）の合計89名となった。

講演会の様子：2024年10月3日にハイブリッド形式で開催され、盛会のうちに終えることができた。上記の先生方からの招待講演に加えて、協賛企業の紹介も行われ、活発な議論がなされた。

所感：近年、資源循環を推進するために産官学で触媒研究が活発に行われている。今回、バイオマス変換、プラスチックリサイクル、CO₂転換の最先端の触媒研究について情報を発信するとともに国際交流を生み出す貴重な機会を提供できた。

講演者・演題：

- 10:00-10:05 Opening remark
- 10:05-10:25 Young Lecture 1, Dr. Shohei Tada, Hokkaido University “CO₂ hydrogenation to olefins using bifunctional catalysts consisting of ZnZrO_x and MOR-type zeolite”
- 10:25-10:45 Young Lecture 2, Dr. Ryoichi Otomo, Hokkaido University “Acid Catalytic Properties of Ti₂O₃-based metastable metal oxide materials”
- 10:45-11:20 Invited talk, Prof. Atsushi Fukuoka, Hokkaido University “Conversion of cellulosic biomass by heterogeneous catalysis”
- 11:20-11:50 Company introduction "MicrotracBEL Corp."
- 11:50-12:50 Lunch



12:50-13:50 Plenary Lecture, Prof. Dr. Ning Yan, National University of Singapore “A unified view of biomass conversion and plastic upcycling”

13:50-14:05 Break

14:05-14:40 Invited talk, Prof. Sanjay Kumar Singh, IIT Indore “Catalytic biomass/waste transformation for the production of value-added products”

14:40-15:15 Invited talk, Prof. Tomoo Mizugaki, Osaka University “Valorization of renewable resource using Pt-Mo catalysts: Reductive transformation of carboxylic acid and its derivatives”

15:15-15:45 Company introduction "Shimadzu Corp."

15:45-16:00 Break

16:00-16:35 Invited talk, Prof. Masaaki Kitano, Tokyo Institute of Technology “Hydrides and Nitrides for Catalytic Ammonia Synthesis (Online)”

16:35-17:10 Invited talk, Dr. Takanori Iwasaki, The University of Tokyo “Chemoselectivity Change in Catalytic Hydrogenolysis of Carbonyl Compounds”

17:10-17:15 Closing remarks

Banquet (HOTEL MYSTAYS Sapporo Aspen)

■ 第2回北海道大学触媒科学研究所-立命館大学SRセンター合同シンポジウム 触媒科学と放射光 触媒科学のSoft~Tender X線への展開Ⅱ 実際と新しい可能性

共催：北海道大学触媒科学研究所、立命館大学SRセンター、触媒科学計測共同研究拠点

日時：2024年12月25日（水）14:00-17:50

会場：北海道大学創成科学研究棟5階大会議室及びZoomでのオンライン配信

概略：触媒科学において放射光が果たしてきた役割は大きく、両分野の繋がりによって今後ますますの発展が期待される。立命館大学SRセンターはAURORAと呼ばれる超小型電子蓄積リングを光源とした放射光加速器を有し、Soft~Tender X線領域での物質構造解析に威力を発揮している。一方、触媒分野では硬X線を用いた放射光計測（in situ XAFSなど）が長らく用いられてきたが、Soft~Tender X線領域の計測は十分に検討がなされていない状況である。2024年1月に立命館大学SRセンターで開催された第1回シンポジウムでは、北海道大学触媒科学研究所と立命館大学SRセンターにおける関連分野の研究事例を紹介し、連携による新たな触媒計測への応用について協議した。第2回目の本シンポジウムは、その後の展開と新しい可能性について若手研究者を中心に議論することを目的とした。触媒研からは、鳥屋尾准教授、武安准教授による最新の研究紹介があり、連携による触媒キャラクタリゼーションの新たな進展の可能性について活発な討論を行った。またポスター発表を行い、触媒研および立命館大学SRセンターの最新の研究状況と共同研究のシーズについて議論を行った。

講演会の様子：対面形式およびオンライン配信で開催され、盛会のうちに終えることができた。講演の水準は極めて高く、活発な議論がなされた。対面・オンライン合わせて60名の参加があった。

所感：第2回となる本合同シンポジウムでは、若手研究者を中心とした講演プログラムとポスター発表を企画した。その結果、忌憚のない活発な討論が行われた。今後、連携を加速し、若手研究者間で共同研究、研究交流が進展することを期待している。

講演者・演題：

- 14:00-14:10 開会挨拶 清水研一（北海道大学触媒科学研究所/所長）
- 14:10-14:30 講演1 入澤明典（立命館大学SRセンター/准教授）「XAFSによる層状オキシカルコゲナイド（La, Bi）OCu（Se, Te）の化学状態評価」
- 14:30-14:50 講演2 鳥屋尾隆（北海道大学触媒科学研究所/准教授）「データ駆動型触媒開発と放射光を用いた触媒作用機構研究」
- 14:50-15:10 講演3 ◎山元梨果・折笠有基（立命館大学生命科学部 応用化学科）「X-ray CT, XAS, HAXPESを用いたリチウムイオン電池正極材料 $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ の劣化挙動解析」
- 15:10-15:30 講演4 武安光太郎（北海道大学触媒科学研究所/准教授）「電子状態設計に基づくカーボン電極触媒の限界突破に向けて」
- 15:30-15:50 休憩
- 15:50-16:10 講演5 北澤啓和（立命館大学SRセンター/専門研究員）「精密合成した金属クラスターの触媒機能と二元金属クラスターへの展開」
- 16:10-16:30 講演6 多田昌平（北海道大学大学院工学研究部応用化学部門/准教授）「高圧in situ XAFS測定によるメタノール合成用Zn-doped ZrO_2 の微細構造解析」
- 16:30-17:40 ポスター発表
- 17:40-17:50 閉会挨拶 朝倉清高（立命館大学SRセンター/センター長）



■ 情報発信型国際シンポジウム ICAT-FHI Symposium

主催：北海道大学触媒科学研究所

日時：2024年11月18日（月）～2024年11月19日（火）

会場：Fritz-Haber-Institute of Max-Planck-Society

概略：ドイツ・マックスプランク研究協会のフリッツ・ハーバー研究所（以下、FHI）は前身のKaiser-Wilhelm Institute for Physical Chemistry and Electrochemistryが1911年に設立されて以来110年の歴史をもつ研究所である。本研究所の前身である触媒研究所の設立を主導された堀内寿郎博士（第2代所長）が1932年から研究員として留学し、ポランニー博士と共同研究を行ったことが、本研究所とFHIの最初のつながりになる。触媒科学研究所の前身である触媒化学研究センターは、2005年にFHIと学術交流協定を締結し、以来数年おきにシンポジウムの開催や研究者の往来を通して、研究所間の学術交流を深めてきた。FHIのBeatriz

Roldan Cuenya所長を2022年に、Karsten Reuter所長を2023年に触媒研へお招きし、ICAT-FHIシンポジウムを開催した。Roldan Cuenya教授は2017年より界面科学部門を、2023年からは無機化学部門を兼任で主宰されている。Reuter教授は2020年より理論部門を主宰されている。本シンポジウムの目的は、両教授が設立した新しい部門と触媒研との研究交流、加えて、優れた研究成果を上げる新進気鋭の研究者として触媒学会で推薦を受けた研究者を触媒分野の国際拠点であるFHIで講演する機会を提供することである。触媒研からは11名、触媒学会から推薦を受けた東京大学・豊島博士、工学院大学・前野博士、加えて触媒研FHIユニットの一員としてFHIとの交流事業に携わる分子研・熊谷博士の計14名がFHIを訪問した。

講演会の様子：2024年11月18、19日に対面形式で開催され、盛会のうちに終えることができた。17件の口頭発表、約20件のポスター発表があり、日本側からは6件の口頭発表（うち3件は触媒研）、6件のポスター発表があった。講演の水準は極めて高く、活発な議論がなされた。約50名の参加があった。

所感：今回、Roldan Cuenya, Reuter両所長の尽力で大規模な研究所間交流イベントが開催できたことは非常に喜ばしく感じた。FHIとの共同研究に発展しうる研究成果を交換することができた。実際に触媒理論研究部門においては、FHIとの共同研究をさらに継続することとなった。今後、様々なチャンネルで共同研究、研究交流が進展することを期待している。

講演者・演題：

Day1: 18th November

Chair: Jun-ya Hasegawa (Professor, ICAT)

09:30-10:00 Jun-ya Hasegawa (ICAT)

DFT Mechanistic Study on Catalytic Conversion of CH_4 and CO_2

10:00-10:30 Arno Bergmann (FHI)

Understanding Interfacial Processes in Electrochemical Energy Conversion Using Advanced Operando Methodology

11:00-11:30 Alex King Chun Lai (FHI)

Automated Process Exploration Driven by Diversity in Local Atomic Environments

11:30-12:00 Ryo Toyoshima (University Tokyo)

Revealing the Surface Chemical Processes using Synchrotron-based Xray Analysis

12:00-12:30 Janis Timoshenko (FHI)

Tracking the Evolution of Heterogenous Structures of Working Catalysts Using X-Ray Absorption Spectroscopy

14:00-14:30 Takashi Kumagai (Institute for Molecular Science, Japan)

Nanomaterial Characterization Using IR Nano-Spectroscopy

14:30-15:00 See Wee Chee (FHI)

Probing Electrocatalyst Restructuring and Phase Stability Using Correlated Operando Electron and X-Ray Microscopy

15:00-15:30 Zen Maeno (Kogakuin University)

In Situ formation of Isolated Metal Species in Zeolites from Bulk Metals/Metal Oxides and their Unique Catalytic and Adsorption Property

16:00-16:30 Thomas Schmidt (FHI)

Chemical Reactions Studied with Spectro-Microscopy

16:30-17:00 Satoru Takakusagi (ICAT)

Development of In Situ/Operando Surface Science Techniques to Bridge the Pressure Gap in UHV Surface Chemistry and Catalysis

Day2: 19th November

09:30-10:00 Hendrik Heenen (FHI)

Understanding Catalytic Interface Dynamics: Advanced Sampling Techniques for Surface Evolution

10:00-10:30 Ken-ichi Shimizu (ICAT)

Computational, Data Science, and Spectroscopic Studies for Design of Heterogeneous Catalysis

11:00-11:30 Nicolas Hörmann (FHI)

Thermodynamic Consistency in Computational Electrochemistry: The Role of the Electrode Potential

11:30-12:00 Christopher Kley (FHI)

Nanoscale In Situ Insights into Electrocatalyst Surfaces and Electrochemical Interfaces

12:00-12:30 Elias Diesen (FHI)

Studying Electrocatalytic Selectivity of the Oxygen Reduction Reaction (ORR) Using Ab Initio Free Energy Sampling

14:00-14:30 Christoph Scheurer (FHI)

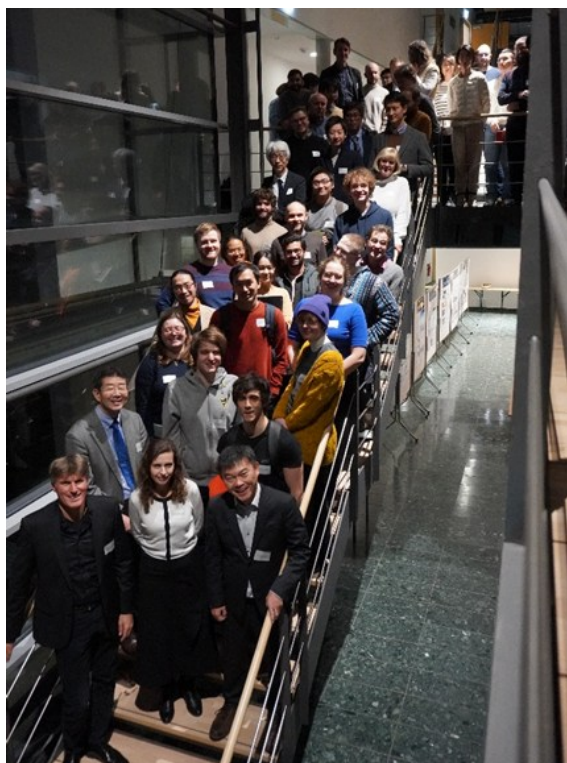
Adaptive Planning, Featurization, and the Human in the Loop

14:30-15:00 Thomas Lunkenbein (FHI)

Following the Structural Evolution of Heterogeneous Catalyst by Operando Electron Microscopy

15:00-16:00 Gianmarco Ducci (FHI)

Sparse Data-Driven Approach for Reaction Kinetics Discovery



■触媒科学研究所コロキウム

主催：北海道大学触媒科学研究所

内外の研究者・学生間の研究上の交流を図ることを目的として月1回程度開催されているものである。2005年度から継続的に実施し、若手研究者の育成の場としての役割を果たしている。2010年度途中より名称を「触媒化学研究センターコロキウム (Catalysis Research Center Colloquium)」とあらため、メール配信およびウェブページでの案内をより充実させている。2015年10月からは改組に伴い名称を「触媒科学研究所コロキウム (Institute for Catalysis (ICAT) Colloquium)」としている。2024年度は第464回から第478回までの合計15回開催した(開催申請の時期のずれや講演者の都合などによる延期等のため、回数の順序と日時の順序は異なっている場合がある)。写真は、2024年度の最初のコロキウムである第464回のポスター。《》内は担当教員。

第464回コロキウム 2024/04/10 稲垣伸二(株式会社豊田中央研究所・理事)「均一系触媒と不均一系触媒の特長を兼ね備えたシングルサイト触媒の創製」創成科学研究棟5階大会議室《中島清隆》

第465回コロキウム 2024/04/19 Yi-Fan Han ("State Key Laboratory of Coking Coal Resources Green Exploitation, Zhengzhou University, China"・Professor)「Application of Operando Spectroscopy on Industrial Catalysts」創成科学研究棟5階大会議室《清水研一》

第466回コロキウム 2024/05/14 田代啓悟(静岡大学 工学部 化学バイオ工学科・助教)「ゼオライト表面に形成させた水分子クラスターによる効率的なプロトン伝導」創成科学研究棟4階セミナー室C《鳥屋尾隆》

第467回コロキウム 2024/06/07 村山徹(北海道大学 触媒科学研究所・教授)「ナノ粒子、クラスター、原子状にサイズ制御した機能触媒の調製と環境触媒への応用」創成科学研究棟5階大会議室《清水研一》

第468回コロキウム 2024/06/24 石川理史(東京工業大学・准教授)「複合酸化物の局所構造と触媒機能」創成科学研究棟4階セミナー室C《鳥屋尾隆》

第469回コロキウム 2024/08/09 Limin Guo (Huazhong University of Science and Technology・Professor)「CO₂ hydrogenation selectivity shift over In-Co binary oxides catalysts」創成科学研究棟4階セミナー室BC《鳥屋尾隆》

第470回コロキウム 2024/09/13 藤本浩司(テンソル・コンサルティング(株)、東京農工大・代表取締役会長、客員教授)「生成AIの本質から考えるーマテリアルズ・インフォマティクスの「未来」ー」創成科学研究棟4階セミナー室B《福田伸》

第471回コロキウム 2024/08/19 横井俊之(東京工業大学 科学技術創成研究院 ナノ空間触媒研究ユニット・教授)「私のゼオライト研究：これまでの振り返りと今後の目標」創成科学研究棟5階大会議室《中島清隆》

第472回コロキウム 2024/09/30 井出裕介(物質・材料研究機構 (NIMS), ナノアーキテクトニクス材料研究センター(MANA)・教授)「層状物質の新規開拓による環境・エネルギー・化粧品応用」創成科学研究棟4階セミナー室C《鳥屋尾隆》

第473回コロキウム 2024/10/18 Sanjay Kumar Singh
(Catalysis Group, Department of Chemistry, Indian Institute
of Technology Indore・Professor)「Catalytic Transformation
of Carbon-rich sources to Hydrogen gas and Value-added
Products for a Sustainable Society」創成科学研究棟4階セ
ミナー室C《菅沼学史》

第474回コロキウム 2024/10/28 Lucas Foppa (The
NOMAD Laboratory at the Fritz Haber Institute of the Max
Planck Society・Group Leader)「Describing Heterogeneous
Catalysis via the “Materials Genes” Concept」創成科学研究
棟4階セミナー室BC《宮崎玲》

第475回コロキウム 2024/11/15 Do Heui Kim (Seoul
National University・Professor)「Catalyst: An Essential
Solution to the Sustainable Society」創成科学研究棟5階大
会議室《村山徹》

第476回コロキウム 2025/01/17 Irmawati Ramli
(Universiti Putra Malaysia・Professor)「Valorizing Glycerol:
Sulfonated Carbon Catalyst from Palm Kernel Shell for
Efficient Acetylation to Acetins」創成科学研究棟4階セ
ミナー室B《中島清隆》

第477回コロキウム 2025/02/20 城戸大貴 (高エネ
ルギー加速器研究機構物質構造科学研究所・特別助教)
「パーシステントホモロジーによるSPM画像解析」創成科
学研究棟4階セミナー室C《高草木達》

第478回コロキウム 2025/02/17 Lichen Liu (Department
of Chemistry, Tsinghua University・Professor)「Selective
conversion of hydrocarbon molecules with zeolite-confined
subnanometer metal catalysts」創成科学研究棟4階セ
ミナー室C《鳥屋尾隆》

第464回触媒科学研究所コロキウム

均一系触媒と不均一系触媒の特長を兼ね備えたシングルサイト触 媒の創製

Creation of single-site catalysts combining the advantages of homogeneous and
heterogeneous catalysts

稲垣伸二 理事

(株式会社豊田中央研究所)



2024年4月10日(水) 15:00-16:30

創成科学研究棟 大会議室

<http://www.cat.hokudai.ac.jp/access.html>

シングルサイト触媒とは、固体上に一つまたは複数の原子で構成された単一の活性サイトを有するもので、各
サイトは構造的によく特徴づけられており、基質との相互作用エネルギーがすべての活性サイトにおいて同じと
定義されている。つまり、シングルサイト触媒とは、均一系触媒の特長である明確で均質な活性サイトに基づく
優れた触媒特性や設計性と、不均一系触媒の特長である高い安定性や再利用性を兼ね備えた理想的な触媒と
言うことができる。ここでは、有機配位子を骨格に組み込んだメンボラス有機シリカを担体としたシングルサイ
ト触媒の合成と触媒特性を紹介する。

略歴

1982年3月 名古屋大学工学部合成化学科卒業
1984年3月 名古屋大学大学院工学研究科修士課程修了
1984年4月 株式会社豊田中央研究所入社
1988年3月 名古屋大学から博士(工学)の学位授与
2009年2月 豊田中央研究所 シニアフェローに就任
2017年4月 産業技術総合研究所 クロスアポイントメントフェローに就任(併任)
2019年2月 豊田中央研究所 理事に就任
現在に至る

専門分野 メンボラス物質及び有機シリカハイブリッド材料の合成と応用開発

受賞

平成5年 触媒調製化学賞
平成12年 日本吸着学会 奨励賞
平成16年 日本化学会 学術賞
平成17年 文部科学大臣表彰 科学技術賞 研究部門
平成20年 日本吸着学会 学術賞
平成30年 IMMA Lifetime Achievement Award

問合せ先: 中島清隆 教授 (nakajima@cat.hokudai.ac.jp)

共催: 日本化学会北海道支部、触媒科学計測共同研究拠点、学際統合物質科学研究機構
後援: 触媒学会北海道支部

464th Institute for Catalysis (ICAT) Colloquium

沿革

触媒化学研究センター（現触媒科学研究所）設置以降
2024年度までの沿革。

1989/05/29《設置改廃》 触媒研究所を廃止し「国立学校
設置法施行規則」の一部改正により北海道大学に全国共
同利用施設の「触媒化学研究センター」（6研究部門・1客
員研究部門）が設置・「表面構造物性部門」（定員：教授
1・助教授1・助手2）は平成元年から2ヶ年にわたり岡崎
国立共同研究機構・分子科学研究所の流動研究部門とし
て同研究所「分子集団研究系・界面分子科学研究部門」に
転換

1989/05/29《センター長》 初代センター長に大野公男（理
学部教授）就任

1990/04/01《センター長》 第2代センター長に金岡祐一（薬
学部教授）就任

1991/04/01《設置改廃》 「表面構造物性部門」（定員：助
教授1・助手2）が平成3年度からさらに2ヶ年にわたり岡
崎国立共同研究機構・分子科学研究所の流動研究部門と
して同研究所「極端紫外光科学研究系・界面分子科学研
究部門」に転換

1991/04/01《センター長》 第3代センター長に松永義夫（理
学部教授）就任

1992/04/01《センター長》 第4代センター長に延與三知夫
（触媒化学研究センター教授）就任

1993/04/01《設置改廃》 「表面構造物性部門」が岡崎国
立共同研究機構・分子科学研究所の流動研究部門「極端
紫外光科学研究系・界面分子科学研究部門」から復帰

1994/04/01《センター長》 第5代センター長に東市郎（免
疫科学研究所教授）就任

1996/04/01《センター長》 第6代センター長に東市郎（免
疫科学研究所教授）再任

1997/04/01《センター長》 第7代センター長に岩本正和（触
媒化学研究センター教授）就任

1998/04/09《設置改廃》 基幹研究部門3部門9分野・客員
研究部門1部門2分野に拡充改組

1999/04/01《センター長》 第8代センター長に岩本正和（触
媒化学研究センター教授）再任

2000/04/01《センター長》 第9代センター長に魚崎浩平（理
学研究科教授）就任

2002/04/01《センター長》 第10代センター長に高橋保（触
媒化学研究センター教授）就任

2004/04/01《センター長》 第11代センター長に高橋保（触

媒化学研究センター教授）再任

2006/04/01《センター長》 第12代センター長に上田渉（触
媒化学研究センター教授）就任

2007/04/01《設置改廃》 触媒ターゲット研究アセンブリ
触媒基礎研究部7部門に拡充改組

2008/04/01《センター長》 第13代センター長に上田渉（触
媒化学研究センター教授）再任

2010/04/01《センター長》 第14代センター長に福岡淳（触
媒化学研究センター教授）就任

2012/04/01《センター長》 第15代センター長に福岡淳（触
媒化学研究センター教授）再任

2012/04/01《組織》 触媒基礎研究部に触媒理論化学研究
部門設置

2013/04/01《組織》 実用化基盤技術開発部設置

2014/04/01《センター長》 第16代センター長に朝倉清高
（触媒化学研究センター教授）就任

2015/10/01《組織》 触媒科学研究所に改組

2015/10/01《所長》 初代所長に朝倉清高（触媒科学研究
所教授）就任

2016/04/01《所長》 第2代所長に朝倉清高（触媒科学研究
所教授）再任

2018/04/01《所長》 第3代所長に長谷川淳也（触媒科学研
究所教授）就任

2020/04/01《所長》 第4代所長に長谷川淳也（触媒科学研
究所教授）再任

2022/04/01《所長》 第5代所長に清水研一（触媒科学研究
所教授）就任

2023/01/01《組織》 産業創出講座等「アイシン北大R&Dラ
ボ」設置（設置期間：2025年3月31日まで）

2023/02/01《人事》 触媒反応研究部門大須賀遼太助教（東
北大学助教）着任

2023/03/31《人事》 KOWALSKA EWA KATARZYNA准教
授（光触媒科学研究部門）辞職（Jagiellonian University,
professor）

2023/04/01《人事》 触媒構造研究部門に高草木達教授（触
媒表面研究部門准教授）昇任

2023/04/01《人事》 触媒反応研究部門菅沼学史准教授（鳥
取大学准教授）着任

2023/04/30《人事》 古川森也准教授（触媒材料研究部門）
辞職（大阪大学教授）

2023/06/01《人事》 触媒理論研究部門宮崎玲助教（Fritz Haber Institute of the Max Planck Society・postdoctoral researcher）着任

2023/11/01《人事》 触媒構造研究部門魯邦助教（触媒構造研究部門博士研究員）着任

2023/11/01《人事》 触媒材料研究部門に鳥屋尾隆准教授（触媒材料研究部門助教）昇任

2023/12/19《催事》 インド工科大学インドール校と部局間協定を締結

2024/01/29《催事》 ジョージア農業大学と部局間協定を締結

2024/03/31《人事》 朝倉清高教授（触媒表面研究部門）退任

2024/03/31《人事》 福岡淳教授（物質変換研究部門）退任

2024年度の記録

日付のあとの（）つき数字は催事などの開催日数。コロキウムの詳細については「講演会・研究会など」参照。

2024/04/01《人事》 物質変換研究部門村山徹教授（東京都立大学特任教授）着任

2024/04/01《人事》 触媒構造研究部門武安光太郎准教授（筑波大学助教）着任

2024/04/18《教授会》 第117回教授会〈触媒科学研究所長室〉

2024/04/23《運営協議会》 第14回運営協議会（持ち回り）

2024/05/01《教授会》 第118回教授会（持ち回り）

2024/05/06《教授会》 第119回教授会〈触媒科学研究所長室〉

2024/05/16《人事》 触媒材料研究部門安齊亮彦助教（九州大学助教）着任

2024/06/20《教授会》 第120回教授会〈触媒科学研究所長室〉

2024/07/25《教授会》 第121回教授会〈触媒科学研究所長室〉

2024/08/01《運営協議会》 第15回運営協議会（持ち回り）

2024/08/06《教授会》 第122回教授会〈触媒科学研究所長室〉

2024/09/09《運営協議会》 第16回運営協議会〈オンライン（Zoom）〉

2024/09/26《教授会》 第123回教授会〈触媒科学研究所長室〉

2024/10/02《運営協議会》 第17回運営協議会（持ち回り）

2024/10/17《教授会》 第124回教授会〈触媒科学研究所長室〉

2024/11/14《教授会》 第125回教授会〈触媒科学研究所長室〉

2024/12/05《催事》 華中科技大学環境科学与工学学院と部局間協定を締結

2024/12/15《人事》 坂東正佳（高分子機能科学研究部門）辞職（株式会社グリーンケミカル研究員）

2024/12/19《教授会》 第126回教授会〈触媒科学研究所長室〉

2024/12/31《催事》 中国科学院大連化学物理研究所と部局間協定を締結

2025/01/06《教授会》 第127回教授会（持ち回り）

2025/01/16《教授会》 第128回教授会〈触媒科学研究所長室〉

2025/02/20《教授会》 第129回教授会〈触媒科学研究所長室〉

2025/03/13《教授会》 第130回教授会〈触媒科学研究所長室〉

触媒理論研究部門/Catalysis Theory Research Division

■ 2024年度の構成員

〈教授〉長谷川淳也・〈准教授〉飯田健二・〈助教〉宮崎玲・〈東海国立大学機構名古屋大学/特任助教〉山田早人・〈博士研究員〉Manussada RATANASAK [～2024/04/30] /Sarinya HADSADEE・〈学術研究員〉盛田澄子・〈研究生〉Di WU [2024/10/01～]・〈総合化学院/大学院博士課程〉大城海・〈総合化学院/大学院修士課程〉加藤創/遠山峻介・〈理学部/学部学生〉板倉央奈



■ 2024年度のうごき

2024年4月大学院学生の遠山峻介（総合化学院）が配属された。2025年2月学部学生の坂本拓登、田中玲央（理学部化学科）が分属された。同年3月に大城海が学位取得し、板倉央奈が化学科を卒業し、博士研究員 Sarinya HADSADEE が退職した。

■ 研究課題

触媒反応のメカニズムを理論計算に基づく解析によって明らかにし、触媒原理に関する新しい概念を提示すること、及び理論解析に基づく触媒設計や反応設計に関する提案を行うことを目標として研究活動を行っている。

この目標を達成するために、実験グループとの共同研究を推進し、触媒反応系の本質を究明する。同時に、複雑な触媒反応系における理論的研究の適用範囲を拡大することを重要な課題として捉えており、既存の理論計算手法を越えた、新しい手法の開発を目指している。

活性な触媒反応系は、電子状態、分子構造、溶媒などの周辺環境との相互作用、動力学など様々な側面において極めて複雑な系であることが知られている。このような複雑な触媒反応系の本質を明らかにするためには、詳細な理論計算モデルに基づく仮想現実のリアリティーを追究することが必要である。他方で、触媒系の物理化学の本質を捉えたシンプルな理論モデルを構築することで、実用的かつ本質的な計算を比較的容易に行うことが可能である。このような触媒反応系モデルの具体化と抽象化過程を通して、触媒理論化学を学術的に発展させたい。

また、これらの研究を通して、環境触媒、エネルギーの生産と変換、化成品の高効率合成など、持続可能な社会への変革に貢献したいと考えている。

1. 有機ケイ素化合物を用いるリン酸、亜リン酸、次亜リン酸のエステル交換反応機構

リンは、肥料、食品、医薬品などさまざまな物質に含まれるが、ほぼ100%輸入に依存しており、経済安全保障上の重要性が高まっている。リン資源の有効活用の観点から、下水汚泥焼却灰などの未利用リン資源が注目されている。しかし、熱力学的かつ化学的に安定であるため、付加価値の高いリン化成品へとケミカルリサイクルする技術は未開発であった。本研究では、テトラアルコキシシラン (TROS) を用いて、下水汚泥焼却灰から回収した粗リン酸から難燃剤や可塑剤として利用可能なリン酸トリエステルをグラムスケールで合成することが可能となった。他方で、我々はこれまでエステル交換反応機構を明らかにすべく、DFT計算に基づく研究を行ってきており、類似のリン系におけるエステル交換についても反応機構研究を展開した。

2024年度のトピック： DFT計算の結果と様々な条件で行われた実験結果をもとに反応機構を提案した。種々の検討の結果、TROSと次亜リン酸の縮合体（図1、TS1の構造における青色部分）が主要な活性種になっていることを見出した。さらに、縮合体におけるアルキル転移が、分子内か分子間であるかを検討した結果、分子間でのアルキル転移がより低い活性化障壁で進行していることを見出した。すなわち、縮合体が核となってリン酸とTROSを含む水素結合ネットワークが形成され (R)、プロトン移動とカップルする遷移状態 (TS1) を経てアルキル転移が起きる機構を提案した。また、アルキル転移を受けた縮合体は相互作用するリン酸あるいは亜リン酸、次亜リン酸と新たな縮合体を形成し、動的な触媒としてアルキル転移反応を促進するものと考えられる。本研究成果は、*Angew. Chem. Int. Ed.* で公表し、表紙に採用され、hot paperに選定された。また、NHKおはよう日本（全国版）で放送され、日刊工業新聞などで報道された。《論文2》

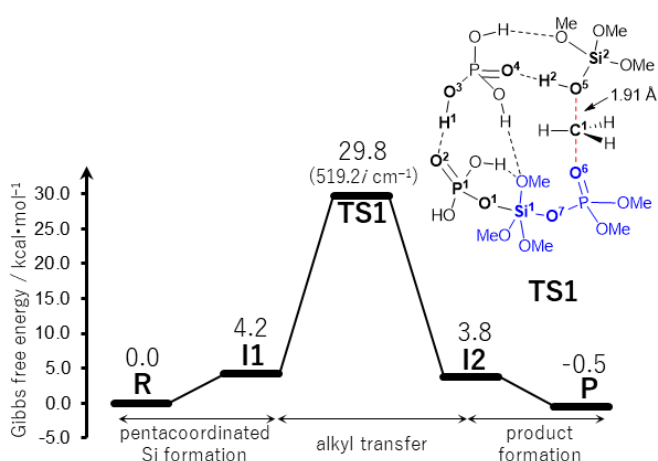


Fig. 1. Gibbs energy diagram for the esterification of phosphorous acid obtained using DFT calculations.

2. 銅触媒による光誘起エナンチオ選択的共役付加に関する反応機構

北大・澤村研究室との共同研究を実施している。光誘起銅触媒によるエナンチオ選択的共役付加反応が開発された。可視光照射下で、銅(I)/キラルNHC触媒を用いることで、アシルシランの α 、 β -不飽和ケトンおよびアルデヒドへの共役アシル化が促進され、多様な2置換1,4-ジカルボニル化合物がエナンチオ過剰体として合成されるものである。我々の研究室では、同反応のDFT計算を行い、反応機構の解析を行った。

2024年度のトピック：計算の結果、アルケン配位アシル銅錯体の銅からアシルへの電荷移動（すなわち金属-配位子間電荷移動（MLCT））励起（図2，I1）を経るメカニズムを持つことが示唆された。MLCT励起の後、電子的および幾何学的な変化が起こり、三重項状態の β -ラジカル-C-エノラート-Cu(II)-アシル錯体（I2）が生成される。この錯体はアシルラジカル的な性質を持ち、銅の配位圏内で容易に励起状態のC-C結合形成を引き起こし、1,4-共役付加生成物を与えることを提案した。一重項状態における活性化障壁は21.4 kcal mol⁻¹であるのに対し、三重項励起状態を経ると9.3 kcal mol⁻¹にまで減少し、光誘起プロセスの有効性が計算によって明らかになった。本成果は、*Chem. Eur. J.*誌にて公表した。《論文5》

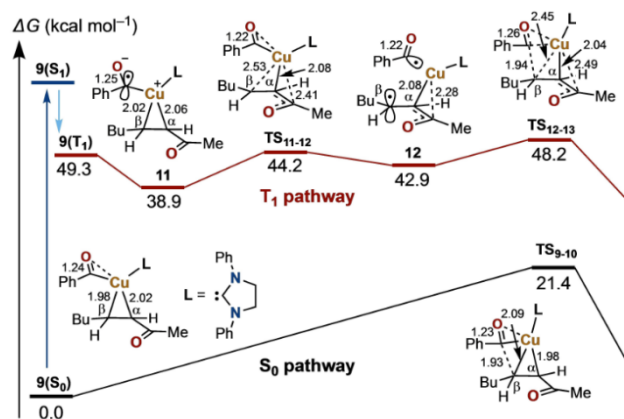


Fig. 2. Gibbs energy diagram for the photoinduced copper-catalyzed enantioselective addition of acylsilanes obtained using DFT calculations.

3. AIを用いた不均一系触媒反応のモデル化

不均一系触媒反応は様々なマルチスケールプロセスが絡み合う複雑系であり、理論あるいは実験的なアプローチが単独で補足できるプロセスは限られている。そこで我々は、実験・理論データに含まれる情報を人工知能(AI)によって統合することで、すべての触媒プロセスをあらわに取り扱うことなく、触媒性能を記述するパラメータを直接見出すアプローチの開発・適用を進めている。

2024年度のトピック：AIに対して理論データを用いる場合、用いる理論手法の精度はAIそのものの精度にも大きく影響を与える。特に、近似密度汎関数理論の精度は、交換-相関(XC)汎関数の選択に大きく依存する。本研究では、特にRPBEおよびmBEEF汎関数に焦点を当て、C₂H₂およびC₂H₄とCu, Pt, Pd, およびRhの(111)表面との相互作用を記述する上でのXC汎関数のパフォーマンスを評価した。特に、吸着分子の構造や振動数、および吸着エネルギーに焦点を当てた。重要な点として、金属表面に吸着した分子の振動数の実験値は、XC汎関数のベンチマークに通常使用される吸着エネルギーなどの物理量と比較して豊富に存在するため、評価指標として有用であると見込まれる。振動数の

報告された実験値に対するRPBEと mBEEFの平均パーセント誤差 (MPE) は、それぞれ0.64% と-3.88%であった (36 データ点)。吸着エンタルピーについては、RPBEとmBEEFは、報告された実験値 (7 データ点) に対して、それぞれ27.61%と-59.81% のMPEを示した。以上の結果から、検討対象の系に対しては、RPBEのパフォーマンスはmBEEFよりも優れており、より多くの系に対するXC汎関数のベンチマーク指標として吸着分子の振動数が適していることが示された。本研究成果は*Catal. Sci. Technol.*誌にて公表した。《論文4》

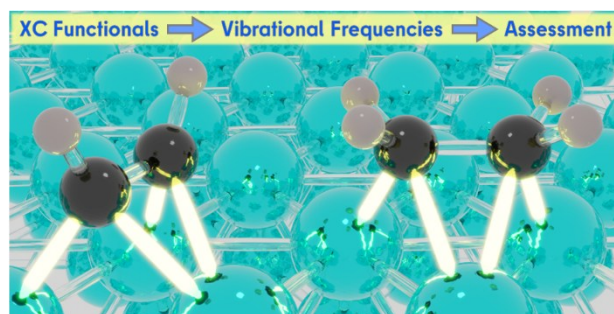


Fig. 3. Vibrational frequencies utilized for the assessment of exchange-correlation functionals in the description of metal-adsorbate systems: C₂H₂ and C₂H₄ on transition-metal surfaces.

4. 金属クラスターと分子の相互作用の機構

不均一系触媒に用いる貴金属の微細化が進められるなかで、金属クラスターと分子の相互作用について理解の深化が求められている。小分子や金属表面の触媒作用は、フロンティア軌道やdバンドセンターから解釈されてきた。しかし、金属クラスターとなると、電子構造や幾何構造が複雑なために、触媒作用の理解は容易ではない。そこで我々は、金属クラスターの触媒作用を明らかにするべく研究を進めている。

2024年度のトピック：グラフェン担持 Pt₁₃クラスターへの酸素分子の吸着について、DFT計算を行った。Pt₂やPt薄膜 (Fig. 5) についても同様に計算を行い、酸素吸着にともなうエネルギーや電子構造の変化を比較した。その結果、Pt₁₃クラスターでは、吸着サイトに依存して1 eV程度も吸着エネルギーが変化していた。そこで、吸着サイト依存性を明らかにするべく、酸素吸着にともなう局所状態密度の変化を解析した。その結果、Pt薄膜では、広いエネルギー範囲で状態密度の変化が生じることが分かった。一方、Pt₁₃クラスターでは、フェルミレベル近傍の状態密度の変化の総量によって吸着強度が決定づけられていることが見いだされた。Ptクラスターへの分子吸着に特有の電子構造変化が明らかになった。この成果は*Phys. Chem. Chem. Phys.*誌にて発表し、フロントカバーとして採択された。《論文8》

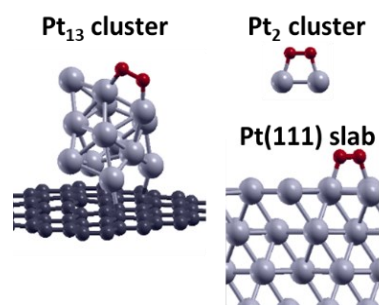


Fig. 4. O₂ adsorption on the graphene supported Pt₁₃ cluster, Pt₂ cluster, and Pt(111) slab investigated in this study.

5. 金属ナノ粒子の光学応答の超並列第一原理計算

貴金属ナノ粒子を用いた光触媒の開発が盛んに進められている。しかし、金属ナノ粒子と半導体や分子からなる複雑な系の光学応答の機構を明らかにすることは容易ではない。そこで我々は、高い並列化効率を有する第一原理計算プログラムSALMONの共同開発を進めつつ、SALMONを用いた大規模計算によって、ナノ物質の光学応答について研究を進めている。

2024年度のトピック：可視域に局在表面プラズモン共鳴(LSPR)吸収を示す材料としては、周期表11族の金属(Cu, Ag, Au)のみが使われてきた。そうしたなかで、京大化研の寺西研究室にて、C1型のPtIn₂ナノ粒子が可視域にLSPR吸収を示すことが見いだされた。そこで、LSPRの発現機構を明らかにするべく、Pt₂₄₉In₄₃₂ナノ粒子の計算を行った(Fig. 6)。光吸収スペクトルを計算したところ、Pt₂₄₉In₄₃₂では可視域の2.8 eVにLSPRに由来するピークが見いだされた。LSPR発現の機構を明らかにするために、光励起電子ダイナミクスを解析した。その結果、Pt₂₄₉In₄₃₂では、ナノ粒子表面にてLSPRに起因する電子の集団振動が生じるとともに、ナノ粒子内部では各Pt原子周りで大きな変位の電子分極が生じていた。内部での大きな変位の分極は、少ない電子で効率的にLSPRのエネルギーを低下させる。本研究から、C1型の比較的疎な構造と電子構造によってLSPRの波長や強度が決定されていることが見いだされた。本研究成果は*Adv. Sci.*誌にて公表した。

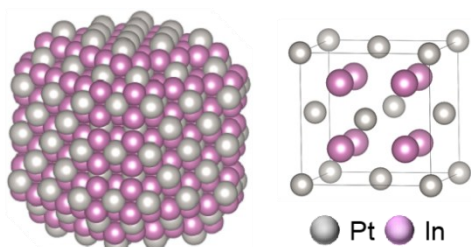


Fig. 5. (a) Pt₂₄₉In₄₃₂ nanoalloy investigated in this study and (b) the crystal structure of PtIn₂.

6. ホウ素アザエノラートにおけるアザアルドール反応機構：六員環遷移状態の安定性と選択性の関連性

ホウ素エノラートを用いたアザアルドール反応は、高いジアステレオ選択性を持つ炭素-炭素結合の形成を可能にし、広く研究されてきた。その遷移状態(TS)は、ホウ素を含まないエノラートにおける六員環TSの理論計算に基づいて理解されてきたが、そもそも椅子型と舟型の遷移状態の安定性が決まる原因については理解されていなかった。我々は岡大・三浦研究室と同反応機構に関する共同研究を実施し、ホウ素エノラートにおけるアザアルドール反応を題材に、六員環TSの安定性の原因、選択性との関連性に関する研究を行った。

2024年度のトピック：DFT計算の結果、実験と一致して*syn-E*体が優先的に生成されることが示された。舟型の六員環TSは*E*異性体を与えるのに対し、より不安定なチェア型TSは*Z*異性体を与える。また、*syn/anti*の選択性は、アザエノラートとベンズアルデヒドの置換基間の相互作用によって決定されることが示された。簡略化したモデル系の構造歪み解析および固有反応座標解析により、舟型と椅子型の相対的な安定性の起源が明らかになった。舟型TSはearly TSであるため、反応物がこのTSに到達するために必要な構造歪みは最小限である。また、B-N脱離の際のボロンとイミン基のルイス対相互作用もTSの相対的な安定性

に影響を与える。この相互作用は、舟型TSでは窒素の孤立電子対が関与し、椅子型TSではπ(N-C)軌道が関与する。孤立電子対を介したルイス対相互作用のほうが、π軌道を介した相互作用よりもTSを安定化させることが解析によって示された。さらに、*syn/anti*選択性を逆転させる反応設計を提案し、概念実証のためのDFT計算の結果、イミン基の修飾がボート型/チェア型TSの相対的な安定性を変化させ、*anti*生成物を得る可能性が示唆された。本研究成果は、*J. Org. Chem.*誌にて公表した。《論文6》

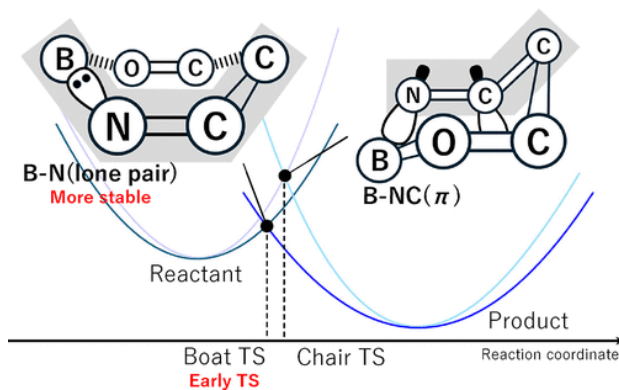


Fig. 6. Relative stability of boat- and chair-type transition states and its relevance to the coordination mode of the leaving group.

■学内外の研究者との共同研究（2024年度）

Uppsala大学Marcus LUNDBERG准教授・European XFEL上村洋平博士「高精度ab initio計算によるX線発光スペクトル(XES)の解析」/大阪大学中谷勇希助教「ヒドロホルミル化に有効な合金触媒の開発」/東京工業大学中島裕美子教授「リン酸の直截エステル化反応の機構解析」/京都大学藤原哲晶教授「銅触媒による二酸化炭素を用いた1,2-ジエンのボラカルボキシル化反応の反応機構解析」/京都大学藤原哲晶教授「1,2-ジエンのボラカルボキシル化反応における位置選択性発現の反応機構解析」/分子科学研究所白男川貴史助教「触媒開発への応用に向けた機械学習による触媒区分原理の解明」/大阪大学有澤光弘教授「炭素-酸素結合開裂を伴う結合形成反応など新規反応の機構解析」/大阪大学有澤光弘教授「自己組織的多層状金属ナノ粒子触媒の構造解析」/Fritz Haber Institute Matthias Scheffler教授「不均一系触媒に対するAIアプローチの開発」/Fritz Haber Institute Karsten Reuter教授「AIと理論計算による実在触媒表面構造の探索」/東京都立大学吉川聡一助教「CO₂電解による複酸化物の還元メカニズムの解析」/筑波大学計算科学研究センター矢花一浩教授「ナノ構造体の光励起電子ダイナミクス」/京都大学化学研究所寺西利治教授・佐藤良太助教「プラズモニック合金ナノ粒子の創成/東北大学根岸雄一教授・川脇徳久教授「担持金属ナノクラスターを用いた電極触媒の開発」/大阪大学工学研究科古川森也教授「電力を利用する触媒反応の機構/中国上海大学Zhang Dengsong教授「Selective Catalytic Reduction of NO_x with NH₃ by solid catalyst」/北海道大学理学研究院化学部門澤村正也教授「銅触媒による光不斉アシル化反応メカニズムに関する研究」/東京大学大学院工学系研究科水野哲孝教授・山口和也教授「担持金クラスターによるC-H活性化のメカニズムに関する研究」/東京工業大学物質理工学院山中一郎教授「メタン活性化メカニズムに関する研究」/二酸化炭素の電解還元メカニズムに関する研究」/名古屋大学工学研究科石原一彰教授「有機触媒による不斉[2+2]環

化反応のメカニズム」/京都大学工学研究科杉野目道紀教授「らせん高分子触媒によるヒドロシリル化に関する理論的研究」/大阪大学大学院工学研究科林高史教授「再構成ミオグロビンによるシクロプロパン化反応に関する理論的研究」/立命館大学SRセンター朝倉清高教授「二酸化炭素の電解還元を促進するコバルト触媒の構造に関する研究」

■ 2024年度の研究業績

原著論文（全て審査つき）

- (1) Oiwa, K.; Ikeda, K.; Kurosaki, R.; Sato, K.; Nishi, N.; Tachibana, H.; Haque, Md. A.; Kawawaki, T.; Iida, K.; Negishi, Y. An atomically precise Pt₁₇ nanocluster: their electronic structure and high activity for a hydrogen evolution reaction. *J. Mater. Chem. A* **2025**, *13*, 12124–12132.
- (2) Naganawa, Y.; Sakamoto, K.; Fujita, A.; Morimoto, K.; Ratanasak, M.; Hasegawa, J.; Yoshida, M.; Sato, K.; Nakajima, Y. One-Step Esterification of Phosphoric, Phosphonic and Phosphinic Acids with Organosilicates: Phosphorus Chemical Recycling of Sewage Waste. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, *64*, e202416487.
- (3) Kongkaew, S.; Ratanasak, M.; Shigeta, Y.; Hasegawa, J.; Parasuk, V. Theoretical Investigation of Sustainable CO₂ Electroreduction to High-value Products Utilizing N-doped/BN-modified Triphenylene-Graphdiyne Catalysts. *Fuel* **2025**, *379*, 133102.
- (4) Miyazaki, R.; Faraji, S.; Levchenko, S. V.; Foppa, L.; Scheffler, M. Vibrational Frequencies Utilized for the Assessment of Exchange-Correlation Functionals in the Description of Metal-Adsorbate Systems: C₂H₂ and C₂H₄ on Transition-Metal Surfaces. *Catal. Sci. Technol.* **2024**, *14*, 6924–6933.
- (5) Masuda, Y.; Ueda, Y.; Sueki, A.; Shimosato, J.; Nishimura, K.; Gao, M.; Hasegawa, J.; Sawamura, M. Photoinduced Enantioselective Triplet Radical Reaction on Metal: Copper-Catalyzed Conjugate Addition of Acylsilanes to α,β -Unsaturated Ketones and Aldehydes. *Chem. Eur. J.* **2024**, *30*, e202402564.
- (6) Miyakawa, S.; Miyazaki, R.; Miura, T.; Hasegawa, J. A DFT Mechanistic Study on the Aza-Aldol Reaction of Boron Aza-Enolates: Relative Stability of Six-Membered Transition State and Its Relevance to the Coordination Mode of the Leaving Group. *J. Org. Chem.* **2024**, *89*, 13913–13922.
- (7) Tabaru, K.; Fujihara, T.; Torii, K.; Suzuki, T.; Jing, Y.; Toyao, T.; Maeno, Z.; Shimizu, K.; Watanabe, T.; Sogawa, H.; Sanda, F.; Hasegawa, J.; Obora, Y. Exploring Catalytic Intermediates in Pd-Catalyzed Aerobic Oxidative Amination of 1,3-Dienes: Multiple Metal Interactions of the Palladium Nanoclusters. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 22993–23003.
- (8) Hirase, H.; Iida, K.; Hasegawa, J. Characterization of Change in the Electronic Structure of Platinum Sub-nanocluster Supported on Graphene Induced by Oxygen Adsorption. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2024**, *26*, 18530–18537.

招待/基調/依頼講演・国際会議

- (1) Hasegawa, J.: "DFT mechanistic study on catalytic conversion of CH₄ and CO₂", The 13th Natural Gas Conversion Symposium (NGCS13), Xiamen, China, (2024/4/21-25). [Keynote lecture]
- (2) Iida, K.: "Theoretical and Computational Study on Heterogeneous Interfaces Under Light and Voltage Bias", The 27th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE-27), Chulalongkorn University, Bangkok, Thailand, (2024/7/30-8/3). [Invited talk]
- (3) Miyazaki, R.: "Approach to catalytic chemistry by Artificial Intelligence and Ab-Initio calculation", Symposium on Materials Theory, driven by Aphrodite, ab initio Computations, and Artificial Intelligence (AI3-2024), Aliathon Resort, Paphos, Cyprus, (2024/11/5-9). [Keynote speaker]
- (4) Hasegawa, J.: "DFT Mechanistic Study on Catalytic Conversion of CH₄ and CO₂", FHI-ICAT joint symposium, Fritz Haber Institute of the Max Planck Society, Berlin, Germany, (2024/11/18-19). [Invited talk]
- (5) Iida, K.: "Electrocatalysis of Metal Nanoclusters Revealed by Theoretical and Computational Study", The 12th Singapore International Chemistry Conference (SICC-12), Singapore, (2024/12/9-13). [Invited talk]
- (6) Iida, K.: "Electronic and Optical Properties of Heterogeneous Nanomaterials Revealed by Theoretical and Computational Study", DST-JSPS joint workshop on Atomically Precise Materials for Sustainability, Chennai, India, (2025/2/1-3). [Invited talk]
- (7) 長谷川淳也:「外力を導入する計算化学による反応機構研究」, 第18回分子科学討論会, 京都大学, (2024/9/18-21). [Invited talk]
- (8) 宮崎玲:「不均一系触媒反応の理解を目指して: 電子状態計算とAIからのアプローチ」, 第134回触媒討論会, 名古屋大学, (2024/9/18-20). [Invited talk]
- (9) 宮崎玲:「理論計算とAIによる触媒反応の理解と設計に向けたアプローチ」, 近畿化学協会コンピュータ化学部会 (第120回例会) 公開講演会「グリーントランスフォーメーションを先導する計算・情報化学」, ダイキン工業(株)テクノロジー・イノベーションセンター, (2024/10/30). [Invited talk]
- (10) 飯田健二:「不均一な構造を有する系の光や電圧に対する応答についての理論計算研究」, 研究会 凝縮系の理論化学, 沖縄県市町村自治会館, (2025/3/10-11). [Invited talk]

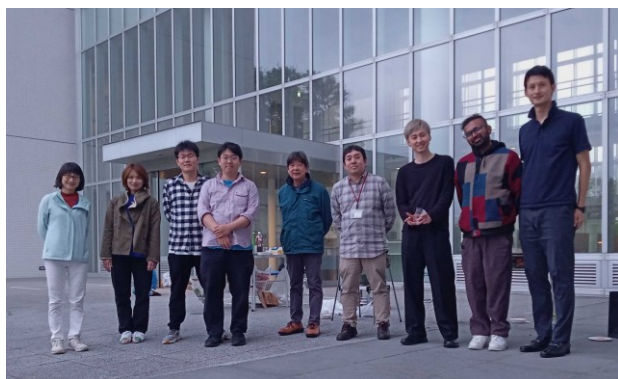
受賞

- (1) 宮崎玲:「AI による理論データと実験データの統合: CO₂ 水素化触媒反応を記述するMaterials Genesの同定」, 第26回理論化学討論会, 筑波大学 (2024/5/21-23)《優秀講演賞》

触媒構造研究部門/Catalyst Structure Research Division

■ 2024年度の構成員

〈教授〉高草木達・〈准教授〉武安光太郎・〈助教〉魯邦・〈JSPS特別研究員 (RPD)〉Can LIU・〈博士研究員〉DONG KAIYUE [2024/07/01~]・〈事務補助員〉齊藤直美 [~2024/05/31]・〈技術補助員〉齊藤直美 [2024/06/01~]・〈環境科学院/大学院博士課程〉本間海斗 [2024/10/10~]/Rafiq ARSYAD [2024/10/10~]・〈工学院/大学院博士課程〉DONG Kaiyue [~2024/06/30]



■ 2024年度のうごき

2024年4月に武安光太郎准教授、劉燦博士研究員 (JSPS RPD) が着任した。6月より林田健志氏、Ravi SINGH氏が筑波大学より研究指導委託学生として当部門に加わった。7月より董凱悦博士研究員 (JST CREST) が着任した。また、10月より本間海斗氏、Rafiq Arsyad氏が環境科学院環境物質科学専攻博士後期課程に入学し、当部門に加わった。2025年1月よりAsif Muhammad氏が筑波大学からの研究指導委託学生として当部門に加わった。2025年3月末に董凱悦博士研究員が退職した。

■ 研究課題

酸化物単結晶表面を金属ナノクラスターや機能性分子で修飾することで精密に構造制御されたモデル触媒表面を創成し、反応機構の解明と新しい触媒作用の創出を行う。また、反応中の触媒表面を原子レベルでその場/オペランド構造解析するための新しい装置や手法の開発を行う。具体的には、これまで超高真空中での静的な構造観察に限られていた種々の表面科学計測手法を改良・高度化し、気相ガス存在下高温で、実際に触媒反応が進行している状況下で活性サイトの三次元構造解析や電子状態評価を可能とする。こうしたアプローチによって、構造不均一性の大きい実触媒では困難な、厳密な構造-活性相関に関する情報の取得を実現し、実触媒の高性能化への指針を得る。また、従来の熱による活性化のみに頼る触媒反応だけではなく、プラズマや電場による外部活性化も併用した非在来型触媒プロセスの機構解明と学理構築を同様なアプローチにより実現する。

1. 偏光全反射蛍光XAFS法による酸化物表面上金属種の三次元構造決定とオペランド測定への展開

固体表面に高分散した触媒活性点の構造 (原子配列) を調べることは容易ではない。STM/AFMにより固体表面の原子像を直接観察できるようになったが、STM/AFMの分解能では、より微細な結合情報や三次元構造情報を得ることは

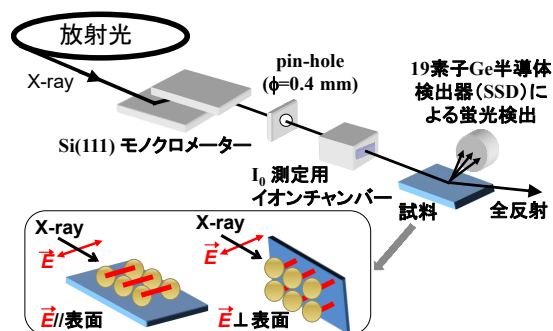


Fig. 1 偏光全反射蛍光XAFS法の概略と試料回転による偏光依存XAFS測定。偏光EXAFS測定によってX線電場ベクトルに平行な結合情報 (結合原子や距離、配位数) を選択的に抽出し、酸化物単結晶表面上に分散した金属種の三次元構造を決定できる。

難しい。一方、XAFS法は、X線吸収原子周辺の結合及び構造情報を与えるが、基板表面に応用するには、感度が不十分である。我々は、超高真空中で試料調製・測定が可能な偏光全反射蛍光XAFS法を開発し (Fig. 1)、全反射法と蛍光法によって高感度化するとともに、偏光依存測定を行うことで、担持金属種の三次元構造決定を可能にした。酸化物単結晶表面上の様々な金属単原子・ナノクラスターに適用し、界面を含む三次元原子配列の決定と金属/酸化物相互作用に関する基礎的知見の取得を行っている。さらに本手法をオペランド化し、大気圧下での触媒反応中の金属活性点三次元構造決定も可能にしている。

2024年度のトピック：単原子触媒は、通常ナノ粒子として担持される金属の使用量を大幅に低減するとともに、金属原子周りの配位不飽和度が高いため、様々な触媒反応を高効率で進めることが知られている。実触媒 (粉末試料) では構造評価にXAFSやTEMがよく用いられているが、多くの場合、“金属は凝集していない”，以上の構造情報は得られない。また、担体表面の構造不均一性に由来して、単原子金属種が種々の配位構造を有したり、一部クラスター形成が見られるなどの問題もあり、単原子金属種の正確な配位環境 (結合原子の種類、数、結合距離) を求めるのは極めて困難となっている。従って、触媒構造と活性の相関に関する厳密な情報を得るのは難しい。そこで試料の均一性が高い、単結晶モデル表面を用いたアプローチが有効となる。我々はこれまでTiO₂ (110) 表面やα-Al₂O₃ (0001) 表面に金属蒸着により形成した単原子金属種の三次元構造決定を行い、構造と活性の相関に関して議論してきた。

本年度はα-Al₂O₃ (0001) 表面上のCu単原子種に着目して検討を行った。α-Al₂O₃ (0001) 表面を大気中でのアニーリング (1323 K) および低真空条件下での酸素プラズマ処理によって、原子レベルで平坦化および清浄化し、低速電子回折 (LEED) で (1×1) 表面構造が形成されていることを確認した。Cuを0.19 ML (1 ML=5.1 × 10¹⁴ /cm²) 蒸着し、偏光全反射蛍光XAFS測定を行った。Fig. 2にEXAFSスペクトルを示す。カーブフィッティング解析を行ったところ、両偏光ともにCu-Cu結合は観察されず、Cu-O結合 (0.195 ± 0.02 nm) のみが観察され、CuはAl₂O₃ 表面の格子酸素と結合してCu単原子種を形成したことが明らかになった。また、両偏光の平均スペクトルを解析したところ、配位数は~3と求められた。この結果は、CuがAl₂O₃ 表面において格子酸素からなるthree-fold hollow site (以下hollow site) 上に存在することを示唆している。Al₂O₃ 表面には種々のhollow siteが存在するが (Fig. 3a)、FEFF codeを用いたEXAFSの理論シミュレーションを行ったところ、H₃サイトのみが実験スペクトルと誤差の範囲で一致した (Fig. 2)。

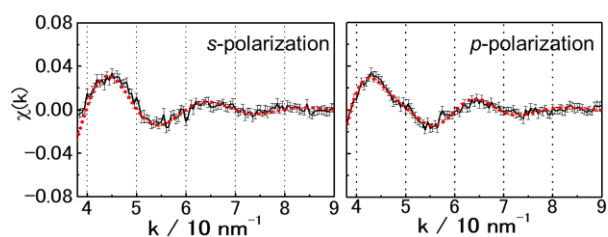


Fig. 2 Cu/a- Al_2O_3 (0001) 試料のCu K吸収端偏光全反射蛍光EXAFSスペクトル。黒線が実験スペクトルで、赤点線はFig. 3の H_1 サイトにCuを吸着させた場合のEXAFSシミュレーション結果。

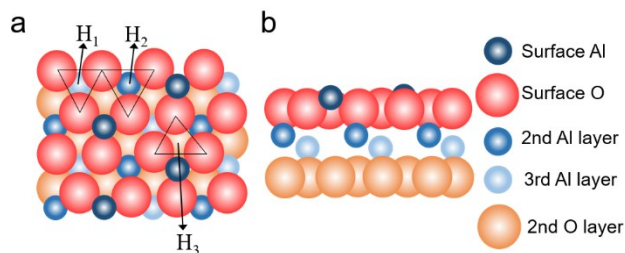


Fig. 3 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (0001) 表面の原子配列。(a) 上面図。(b) 側面図。

DFT (density functional theory) 計算からも H_1 サイトがエネルギー的に最も安定な構造であることが示された。なお、XANES測定からCuは Cu^+ として存在していることがわかった。以上、 Al_2O_3 (0001) 表面上Cu単原子種の厳密な吸着サイトと三次元構造の決定に成功した。現在、結果を論文にまとめており、また、NO直接分解反応に対する活性を調査中である。

2. 担持金属触媒における中間体吸着種の動的挙動と活性・選択性との相関

金属ナノ粒子を酸化物表面に担持した担持金属触媒は実用的に最もよく用いられている。触媒反応は金属ナノ粒子表面上や、金属と酸化物との界面、酸化物表面に存在する金属カチオンサイトや酸素欠陥で進行することが知られており、これらが触媒性能（活性・選択性）を決定する大きな要因であるとされている。一方、吸着した反応分子の動的な挙動、すなわち、中間体吸着種がどのように表面を拡散して活性サイトに到達し、分子変換が行われるのか？については、触媒性能に影響を与える重要な因子であろうとの認識にも関わらず、実際に計測・評価する実験手法が乏しいため、十分な理解がなされていない。そこで、個々の吸着種の動きを捉えることできるSTMを用い、中間体吸着種の拡散やスピルオーバー、逆スピルオーバーの経路の詳細を明らかにし、こうした動的挙動が触媒性能に与える影響の解明を行っている。

2024年度のトピック：Pt/ TiO_2 (110) モデル触媒表面に吸着したメトキシ中間体の吸着種間相互作用に注目した。Pt/ TiO_2 (110) 表面においてメタノールはPt上で解離吸着

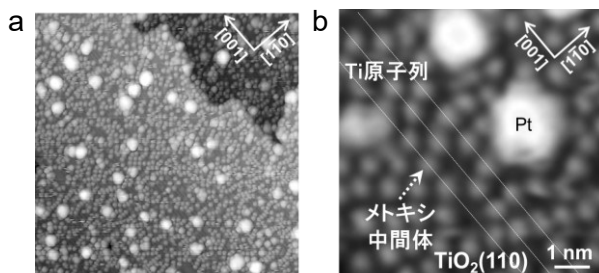


Fig. 4 Pt/ TiO_2 (110) 表面上メトキシ中間体のSTM像。(a) $50 \times 50 \text{ nm}^2$ 。(b) $7 \times 7 \text{ nm}^2$ 。

後、メトキシ中間体として TiO_2 表面の5配位 Ti^{4+} サイト(Ti_{5c})へスピルオーバーすることをin situ STM連続観察により見出している (Fig. 4)。また、昇温すると多くは逆スピルオーバーしてPt上でCOまたは CH_4 に分解するが、一部の隣接した2つのメトキシ中間体が不均化反応($2\text{CH}_3\text{O}-\text{Ti}_{5c} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH} + \text{HCHO} + 2\text{Ti}_{5c}$)を起こすことを明らかにしている (*J. Am. Chem. Soc.* 2023, **145**, 19953–19960)。また、生成物選択性はPt粒子密度に依存することから、メトキシ中間体の TiO_2 表面上でのmobilityや吸着種間相互作用が選択性決定の大きな要因となっているが推察される。

吸着種間相互作用を議論するために、Fig. 4aのSTM画像から個々のメトキシ中間体の位置を抽出後、自己相関関数 $F(i, j)$ ($F(i, j) = \sum_{i,j} (f(x, y)f(x+i, y+j))^{1/2}$, $f(x, y)$ はpixel (i, j) での画像強度)を求めてプロットし、二つのメトキシ中間体の二次元距離分布を求めた (Fig. 5)。その結果、[001]方向に沿った最近接 ($d=0.3 \text{ nm}$) および第二近接 ($d=0.6 \text{ nm}$) の Ti_{5c} サイトにはメトキシ中間体がほとんど存在しないことがわかった。この結果は、吸着種間に斥力相互作用が働いていることを示している。DFT計算の結果、隣接したメトキシ中間体のメチル基同士の立体反発が斥力相互作用の要因であり、特に最近接位置では吸着エネルギーの顕著な低下を引き起こすことがわかった。

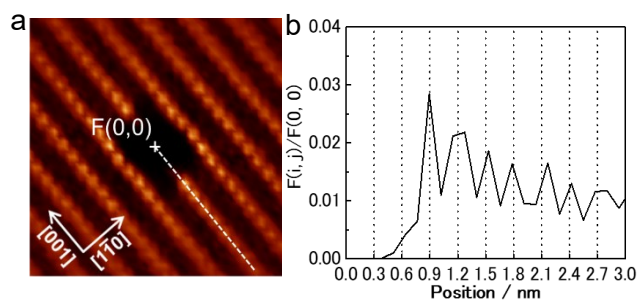


Fig. 5 (a) $F(i, j)$ マップ。 $5 \times 5 \text{ nm}^2$ 。 $F(0, 0)$ の輝点は除いてある。(b) (a) における白点線のラインプロファイル。 $F(0, 0)$ の値で規格化している。

次に[001]方向におけるメトキシ中間体の頻度分布を再現するためにモンテカルロシミュレーションを行った。室温での結果を扱うため、吸着エネルギーではなく、吸着自由エネルギー (adsorption free energy) をDFT計算により算出し、ボルツマン分布を仮定したシミュレーションを行った。その結果、Fig. 5bの実験結果をよく再現することができた。以上の結果は、メトキシ中間体が吸着自由エネルギーと温度に依存したボルツマン分布に従って Ti_{5c} 上を拡散し、平衡状態に達したことを示している。なお、不均化は最近接 ($d=0.3 \text{ nm}$) にあるメトキシ中間体との反応によって生じるが、室温では存在が確認されず、温度の上昇とともにボルツマン分布に従って存在頻度が増加していくと予想される。それに伴い、反応における頻度因子も増加し、活性化障壁を超えるのに十分な温度になった場合に不均化が進行すると考えられる。現在、結果を論文にまとめている。

3. プラズマ触媒反応の機構解明と学理構築

温暖化ガスである CO_2 の還元による再資源化はカーボンニュートラルを実現する上でのキーテクノロジーである。現在、世界中の研究者が、 CO_2 を合成ガスの原料であるCOや天然ガスの主成分である CH_4 、化学原料となるアルコール (CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) など到高効率で変換する触媒開発を進めている。しかしながら CO_2 は化学的に安定であり、その変換

には通常、高温高压条件が必要である。一方、近年、CO₂をプラズマにより活性化することで、低温低压で反応が進行することが報告され、“プラズマ触媒反応”として欧米や中国、韓国で活発に研究がなされている。プラズマ触媒反応と通常の熱駆動による触媒反応の類似点・相違点を理解し、プラズマ触媒反応に適した触媒材料を開発するとともに、再送可能エネルギーをプラズマ駆動の電力とすることで、今後実用化への道も開けると期待される。しかしながら、プラズマ中で発生する電子やガス活性種（振動励起種、電子励起種、ラジカル、解離種、正・負イオン種など）と触媒表面との相互作用や、その結果生じる触媒の価数・構造変化などについて不明な点が多く、反応機構は十分に解明されていない。反応機構の解明には、触媒のその場/オペランド計測が不可欠である。我々は、プラズマ触媒反応中のオペランドXAS測定を可能とするセル（透過法）を新たに開発するとともに、表面科学計測も駆使することで反応機構の解明と学理の構築を進めている。

2024年度のトピック：Ni/Al₂O₃触媒を用いたCO₂水素化反応（メタネーション）において、プラズマによって活性が劇的に増加することを見出した。in situ XAFS測定ではプラズマの有無で触媒構造に変化がないことを確認した。in situ IR測定や第一原理計算の結果をもとに、中間体であるformateと気相から供給されるプラズマ水素（原子状水素）がEley-Rideal型で反応するpathができ、これによって障壁が低下し、活性が上昇したと結論した《論文1》。

■学内外の研究者との共同研究（2024年度）

国立研究開発法人産業技術総合研究所小平哲也主任研究員「全反射X線分光分析によるステンレス高温酸化過程のその場観察およびアルミナコーティングによる保護機構の解明」/国立研究開発法人産業技術総合研究所小平哲也主任研究員「全反射X線分光法によるステンレス高温酸化抑制用アルミナコーティング剤中のドーパントの機能評価」/高エネルギー加速器研究機構城戸大貴特別助教「パーステントホモロジーによるSPM画像解析」/核融合科学研究所星健夫教授「超高速データ駆動科学と先端計測技術の融合による触媒科学イノベーション」/明治大学石飛宏和准教授「メタルフリーカーボン系触媒を利用したレドックスフロー型亜鉛空気電池の開発」/神戸大学大西洋教授「マイクロ電極を用いた固液界面反応のオペランド計測手法の開発」/近畿大学朝倉博行講師「X線発光分光による非白金系酸素還元反応用電極触媒の電子状態解析」/東京医科歯科大学和田敬広講師「新規PEEKフィラメントおよびその3Dプリント造形物の表面分析」/東京工業大学野崎教授、金助教、大阪大学古川教授、工学研究院佐々木教授、産業技術総合研究所金研究グループ長「プラズマ触媒反応の機構解明と学理構築」《論文1》/電子科学研究所高野勇太准教授「新しい生体触媒ナノ粒子成形法の開発とメゾスコピック半導体粒子合成への応用」《論文3》

■2024年度の研究業績

原著論文/総説

- (1) Kim, D.-Y.; Inagaki, Y.; Yamakawa, T.; Lu, B.; Sato, Y.; Shirai, N.; Furukawa, S.; Kim, H.-H.; Takakusagi, S.; Sasaki, K.; Nozaki, T. Plasma-Derived Atomic Hydrogen Enables Eley-Rideal-Type CO₂ Methanation at Low Temperatures. *JACS Au* **2025**, 5 (1), 169–177.

- (2) Panigrahi, D. R.; Paria, S.; Jain, M.; Sengar, M. S.; Dhayal, M.; Paul, B.; Maity, P.; Takeyasu, K.; Kumar, V.; Singh, S. K. π -Electron and pH-Regulated Photochemical Detection of Trinitrophenol Using Nanoconfined Graphene Quantum Dots. *ACS Appl. Nano Mater.* **2025**, 8 (5), 2614–2622.
- (3) Akter, R.; Kirkwood, N.; Zaman, S.; Lu, B.; Wang, T.; Takakusagi, S.; Mulvaney, P.; Biju, V.; Takano, Y. Bio-Catalytic Nanoparticle Shaping for Preparing Mesoscopic Assemblies of Semiconductor Quantum Dots and Organic Molecules. *Nanoscale Horiz.* **2024**, 9 (7), 1128–1136.
- (4) Yan, M.; Arsyad, R.; Namari, N. A. P.; Suzuki, H.; Takeyasu, K. Mixed-Potential-Driven Catalysis in Glucose Oxidation. *ChemCatChem* **2024**, 16 (17), e202400322.
- (5) Namari, N. A. P.; Yan, M.; Nakamura, J.; Takeyasu, K. Simultaneous Measurement of Oxygen Consumption Rate and Thermogenesis in Biological Systems for Non-Equilibrium Energetics. *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology* **2024**, 22 (3), 273–278.
- (6) Budiarso, I. J.; Fujita, S.; Saito, S.; Judawisastra, H.; Takeyasu, K.; Wibowo, A. Facile Fabrication of Graphitic Carbon Nitride/Polydopamine/Polyurethane Foam as a Floating Photocatalyst for Synthetic Dye Remediation. *React. Chem. Eng.* **2024**, 9 (10), 2718–2727.
- (7) Chen, G.; Isegawa, M.; Koide, T.; Yoshida, Y.; Harano, K.; Hayashida, K.; Fujita, S.; Takeyasu, K.; Ariga, K.; Nakamura, J. Pentagon-Rich Caged Carbon Catalyst for the Oxygen Reduction Reaction in Acidic Electrolytes. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2024**, 63 (49), e202410747.
- (8) 高草木達, 魯邦, オペランド偏光全反射蛍光XAFS法の開発による触媒動作中の活性点三次元構造解析, 触媒, 2024, Vol. 66 No. 4, 190–196.

招待/基調/依頼講演・国際会議

- (1) Takakusagi, S.: "Development of in situ/operando surface science techniques to bridge the pressure gap in UHV surface chemistry and catalysis", Joint FHI-ICAT Symposium, Berlin, (2024/11/18). [Invited]
- (2) Takakusagi, S.: "Atomic-level visualization of surface catalytic reactions by in situ/operando surface science techniques", The 12th Vacuum and Surface Sciences Conference of Asia and Australia (VASSCAA-12), Taipei, (2024/10/14). [Invited]
- (3) Liu, C.; Lu, B.; Ariga-Miwa, H.; Ogura, S.; Ozawa, T.; Fukutani, K.; Gao, M.; Hasegawa, J.-y.; Shimizu, K.; Asakura, K.; Takakusagi, S.: "Effect of Surface Diffusion of Methoxy Intermediates on Methanol Decomposition on Pt/TiO₂(110)", AVS 70th International Symposium and Exhibition (AVS 70), Tampa Convention Center, Florida, (2024/11/4).
- (4) 高草木達: 「その場/オペランド表面科学計測による触媒反応プロセスの原子レベル可視化」, 日本物理学会第79回年次大会, 札幌, (2024/9/16). [招待講演]
- (5) 高草木達: 「単結晶モデル表面を用いた触媒反応プロセスの原子レベル可視化」, ナノ学会第22回大会, 仙台, (2024/5/23). [招待講演]
- (6) Liu, C.; Lu, B.; Ariga-Miwa, H.; Ogura, S.; Ozawa, T.; Fukutani, K.; Gao, M.; Hasegawa, J.-y.; Shimizu, K.; Asakura, K.; Takakusagi, S.: "Dynamic Behavior of Intermediate Adsorbates Controls Activity and Product Selectivity: Methanol Decomposition on Pt/TiO₂(110)", The 18th International Congress on Catalysis (ICC), Lyon Convention Centre, Lyon, France, (2024/7/16).
- (7) 高草木達: 「触媒材料開発における先端計測とマテリアルズ・インフォマティクス: 現状と課題」, NIFS研究会「数理学・プラズマ科学・物質科学の共通研究拠点形成」, (2024/5/20). [招待講演]

- (8) 武安光太郎：「窒素ドーパカーボン触媒の活性低下メカニズムに基づく高性能化」, FCDIC第31回燃料電池シンポジウム, 船堀タワーホール, (2024/4/30). [招待講演]
 - (9) 武安光太郎：「混成電位駆動型触媒反応の理論的枠組みと実験的検証」, 第134回触媒討論会 研究会横断若手シンポジウム, 名古屋大学, (2024/9/19). [招待講演]
 - (10) Takeyasu, K.: "Mechanistic study of carbon electrocatalyst and mixed-potential-driven catalysis on the basis of surface science", Joint FHI-ICAT Symposium, Berlin, (2024/11/18).
 - (11) Yan, M.; Namari, N. A. P.; Arsyad, R.; Suzuki, H.; Nakamura, J.; Takeyasu, K.: "Kinetic theory of mixed-potential-driven catalysis and the experimental proof", AVS 70th International Symposium and Exhibition (AVS 70), Tampa Convention Center, Florida, (2024/11/5).
 - (12) Takeyasu, K.: "Mechanism-driven design of metal-free nitrogen-doped carbon electrocatalyst for oxygen reduction reaction", 12th Singapore International Conference on Chemistry (SICC-12), Singapore International Congress Center, (2024/12/12). [Invited]
 - (13) 武安光太郎：「電子状態設計に基づくカーボン電極触媒の限界突破に向けて」, 第2回北海道大学触媒科学研究所-立命館大学SRセンター合同シンポジウム, 北海道大学, (2024/12/25). [招待講演]
 - (14) Takeyasu, K.: "Thermochemical and electrochemical mixed reaction systems based on carbon-based catalysts", Shiv Nadar University Department of Chemistry Seminar, India, (2025/1/17). [Invited]
 - (15) 武安光太郎：「表面科学によるカーボン系電極触媒の限界突破」, 大分大学DX研究会, 大分大学, (2025/2/5). [招待講演]
 - (16) 武安光太郎：「表面科学を基盤とした電気化学反応触媒の理解と設計」, 日本表面真空学会東北・北海道支部学術講演会, 北海道大学, (2025/3/10). 招待講演]
 - (17) Takeyasu, K.: "Designing Carbon Catalysts for Oxygen Reduction and Mixed-Potential-Driven Catalysis", The 2nd International Conference on Advanced Functional Materials (ICAFM 2025), Hotel Himalaya, Nepal, (2025/3/27-29). [Invited]
 - (18) Lu, B.: "Development of in situ/operando surface science techniques to elucidate structure-activity relationship in heterogeneous catalysis", 第62回オーロラセミナー, 北海道大学, (2024/10/25). [招待講演]
 - (19) Lu, B.; Xu, H.; Asakura, K.; Takakusagi, S.: "3PTRF-XAFS study on 3D structure and the catalytic activity of Cu single atoms on α -Al₂O₃(0001) surface", The 10th International Symposium on Surface Science (ISSS-10), Kitakyushu, (2024/10/21).
 - (20) Liu, C.; Lu, B.; Ariga-Miwa, H.; Gao, M.; Hasegawa, J.-y.; Shimizu, K.; Asakura, K.; Takakusagi, S.: "Diffusion and adsorbate-adsorbate interaction of methoxy intermediates on Pt/TiO₂(110) surface", The 10th International Symposium on Surface Science (ISSS-10), Kitakyushu, (2024/10/21).
 - (21) Arsyad, R.; Hayashida, K.; Takeyasu, K.: "Bottom-up synthesis of nitrogen-doped graphene quantum dots as model catalysts", The 10th International Symposium on Surface Science (ISSS-10), Kitakyushu, (2024/10/22).
 - (22) Hayashida, K.; Arsyad, R.; Saito, S.; Fujita, S.; Isegawa, M.; Kondo, T.; Yoshida, Y.; Nakamura, J.; Takeyasu, K.: "Activation mechanism of fuel cell carbon catalysts based on spin structure", The 10th International Symposium on Surface Science (ISSS-10), Kitakyushu, (2024/10/24).
 - (23) Hayashida, K.; Nakamura, J.; Takeyasu, K.: "Mechanism of Activity Decrease in ORR on Nitrogen-Doped Carbon Catalysts Based on Acid-Base Equilibrium", AVS 70th International Symposium and Exhibition (AVS 70), Tampa Convention Center, Florida, (2024/11/5).
- 受賞**
- (1) 高草木達：「その場/オペランド表面科学計測による表面反応プロセスの原子レベル可視化と機構解明」(2025/2/20) 《日本表面真空学会フェロー》

触媒反応研究部門/Catalytic Reaction Research Division

■ 2024年度の構成員

〈教授〉中島清隆・〈准教授〉菅沼学史・〈助教〉大須賀遼太・〈客員教授/ハイケム株式会社〉青島敬之・〈特任教授〉Sanjay Kumar SINGH [2024/09/24~2024/10/23]・〈特任助教〉Jan J. WIESFELD・〈博士研究員〉Nirupama SHEET/Gokalp GOZAYDIN [2024/04/18~]・〈非常勤研究員〉Navya Subray BHAT [~2024/10/30]・〈学術研究員〉伊藤春奈・〈外国人研究員〉Zhihao YU/Atikhun Chotirattanachote [2024/09/08~2024/12/04]/Irmawati Binti Ramli [2024/09/08~2025/02/28]・〈研究生〉Ashwani Adarsh CHAND [2024/10/10~]・〈環境科学院/大学院博士課程〉Quan SHI/SAHOO Susanta Kumar/新井直・〈環境科学院/大学院修士課程〉Yutong YUAN [~2024/09/30]/YANGYANG AO/蓮見正仁/入場啓介/佐々涼水/吉村和也/ALHAJRI SHAMAYIL SALIM/Ahirwar DEV [2024/10/01~]



■ 2024年度のうごき

2024年4月に入場啓介さん、佐々涼水さん、蓮見正仁さん、吉村和也さん、Shamayil Al Hajriさんが修士課程の学生として、Gokalpさんが博士研究員として加わった。7月にNivedhaさん、8月にBhanuさんが博士研究員として加わった。9月に袁侯瞳さんが修士課程を修了した。10月にDev Ahirwarさん (M1)、Ashwani Adarsh Chandさん (研究生) が加わった。11月にNavya Subray Bhatさんが博士研究員としてThe Indian Institute of Scienceに転出した。2025年3月にNirupama Sheetさんが特任助教として名古屋大学に転出した。

■ 研究課題

再生可能な炭素資源からのエネルギー・化学品製造を確立することは、持続可能な未来社会の基礎となる。触媒反応研究部門では、この“ビジョン”を実現するための研究活動に取り組んでいる。具体的には、ありふれた植物資源を“再生可能な循環型炭素資源”と位置付け、それを利用したエネルギー・化学品製造のための要素技術を開発する。化学反応を支配する“触媒”を追求し、“高い生産性と環境負荷が極限まで少ない次世代化学反応プロセスによる持続可能なものづくり”の実現に貢献する。

持続可能な資源循環型社会の構築を目指し、再生可能な“バイオマス資源”を炭素資源に利用した燃料および基幹化学品の開発が注目されている。空気中に存在する二酸化炭素を利用した燃料・基幹化学品製造プロセスも有望な

アプローチであるが、近未来における循環型炭素資源を利用した化学産業を稼働させるためには、バイオマス資源の活用が必要不可欠である。これまでにバイオマス化学品を用いて化石資源化学品の代替や新しい汎用材の創出が多数提案されているが、その大部分が汎用化・普及を想定できるレベルまで至っていない。その最大の理由は、汎用材の大規模生産に必要な“高い生産性”と“環境低負荷”を併せ持つバイオマス変換プロセスが構築されていないことにある。エネルギー消費の大きな分離回収プロセスを必要とせず、繰り返し使用できる安定で高活性な固体触媒の利用は、これまでの化石資源を利用した“低コスト・低エネルギー・低環境負荷で持続可能なものづくり”という産業の理想像を実現するために大きな役割を果たし、数多くの基幹化学品製造(アンモニア製造や石油の精製・改質)の基盤技術となってきた。バイオマス変換プロセスにおいても固体触媒の利用が進められてきたが、バイオマス基質がもつ多量の含酸素官能基が引き起こす副反応を抑制する革新的なアイデアがなく、固体触媒プロセスの本来の特色である高い生産性と環境低負荷の工業プロセスの基礎学理が構築されていない。

そこで当部門では、バイオマス由来の糖類から多様な基幹化学品原料の合成を目指し、その環境低負荷変換プロセスを構築するために必須となる固体触媒反応プロセスの開発に取り組んでいる (Fig. 1)。フラン類への変換反応では、副反応を抑制する手段としてのアセタール保護基の活用を進めている。

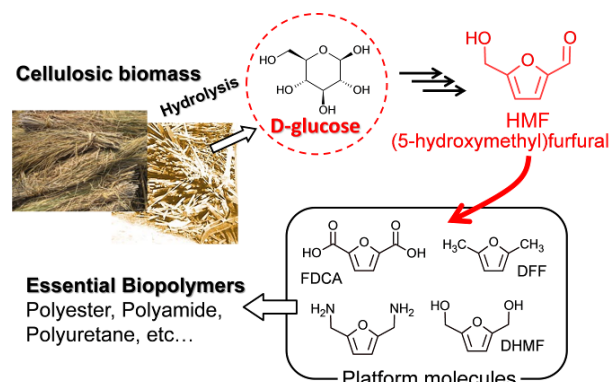


Fig. 1. セルロースから基幹化学品の原料への誘導経路

1. 金属酸化物触媒による糖類の変換反応

非晶質の酸化ニオブ (含水ニオブ酸) は水中で機能するルイス酸触媒であり、その脱水作用によって糖類を水溶液内で多様な基幹化学品へ誘導するための鍵となるフラン類へと変換することができる (Fig. 1)。一方、低結晶性の酸化チタンは水中で機能するルイス酸塩基サイトを持ち、その協奏的脱水作用によってグルコースからHMFを生成することができる。ニオブやチタンをベースとした新しい糖変換用固体触媒の創生する手法として、①複合酸化物への拡張による酸性質および塩基性質の制御、②異なる原子価に起因するルイス酸強度の制御、が重要となる。

2024年度のトピック

1) CaNb_2O_7 の合成と糖類の脱水反応

結晶状のNb過酸化物錯体から合成される水溶性乳酸ニオブ錯体を利用したアモルファス金属錯体法にて、アルカリ土類金属を第二成分としたニオブ系複合酸化物の合成とその酸触媒作用を検討した。前駆体の700℃焼成によって単一相の結晶性複合酸化物が得られ、その表面積は

15~30 m² g⁻¹であった。リン酸修飾したCaNb₂O₆をキシロースの脱水反応に適用したところ、結晶性のNb₂O₅よりも高い収率・選択率でフルフラールが得られた (Fig. 2)。このような触媒作用の変化は、Caの導入によるルイス酸性質の変化に起因することを赤外プローブ分光 (IR) 法によるキャラクタリゼーションによって明らかとした。さらに、リン酸修飾CaNb₂O₆は繰り返し使用できる《論文1》。現在、より高活性な触媒開発を継続している。

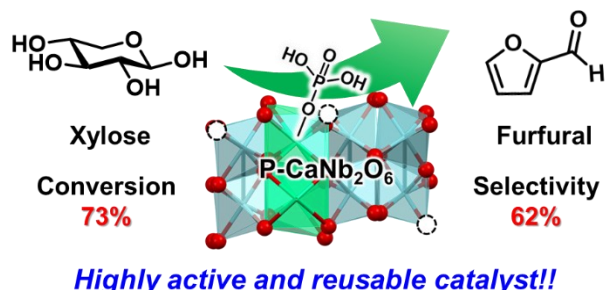


Fig. 2. リン酸修飾した CaNb₂O₆ を用いたキシロースの脱水反応

2) 低原子価なニオブ酸化物NbO₂の触媒作用

複合酸化物化に加えて、低原子価なニオブ種を有した酸化物の触媒作用に着目した触媒開発も進めている (Fig. 3)。非晶質Nb₂O₅を使用した場合、反応の進行に伴いフミン類が触媒表面に堆積することで触媒が失活する。堆積したフミン類を除去するためには空気焼成が必要だが、その過程で触媒が結晶化して本来の触媒活性が失われる。したがって、触媒の長期的な使用を見据えた場合には、結晶性材料としての触媒性能の高さが求められる。通常、金属酸化物のルイス酸点は酸化物表面の配位不飽和な金属サイトに起因し、その酸性質は金属種の電子状態に依存する。一般的には、同一金属種であれば、その原子価が大きいほど、強いルイス酸性質を示すと考えられている。したがって、低原子価なNb種 (Nb⁴⁺) を比較的弱いルイス酸点として活用することで、副反応を抑制しつつ選択的にフルフラールを合成できないかと考えた。種々の酸性質評価の結果から、NbO₂はNb₂O₅よりも酸強度が低く、キシロースの脱水反応において良好なフルフラール選択性を示すことを見出した《論文執筆中》。

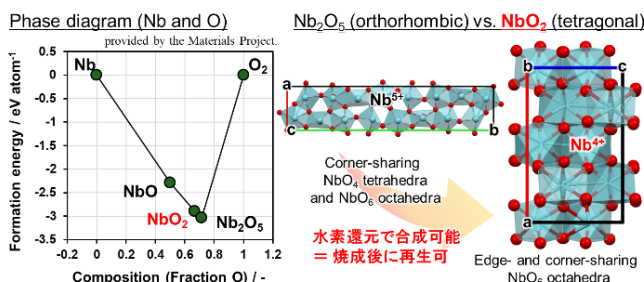


Fig. 3. 低原子価のNb酸化物の触媒利用

2. HMFアセタールの変換反応

リグノセルロースから誘導されるHMFは、フラン環を基盤とした様々な有用ポリマーの原料となる (Fig. 1)。その中でもフランジカルボン酸は石油由来のテレフタル酸を置き変える新たな植物由来ポリエステルの原料として注目されている。植物由来のバイオエチレングリコールとフランジカルボン酸 (FDCA) から合成されるポリエチレンフラネートは、石油から作られるポリエチレンテレフタレートを上回る様々な優れた物性 (ガス透過性や高い引張

強度など) をもつ。そのため、BASFやDupontなど海外の大手化学メーカーもFDCAの大規模合成を進めているが、現状では達成されていない。その最大の要因は、HMFを高濃度条件下で効率よくFDCAへ変換することができないことにある。そこで我々は副反応の原因となるHMFのホルミル基を1,3-プロパンジオールで保護し、その後に6員環アセタールを含むHMF (以下ではPD-HMFと示す) を酸化することにより高濃度溶液内でも副反応を抑制しつつFDCAを合成する手法を考案した (Fig. 4)。

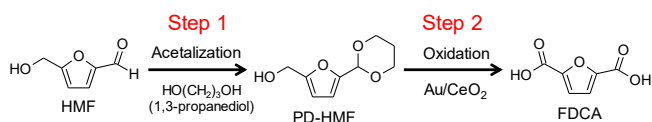


Fig. 4 PD-HMF を利用したフランジカルボン酸合成

2024年度のトピック：

1) 逐次反応によるPD-HMFからのMFDC合成

セリア担持Au触媒 (Au/CeO₂) を使用したPD-HMFの酸化反応においては、高濃度溶液中 (10-20 wt%) でも副反応を抑制しつつFDCAを高収率で合成できることを見出している。一方、FDCAは水に対する溶解度が低いため、多量の塩基を加えて中和塩として回収する必要がある。よって、工業展開を見据えた際には溶解性の高いフランジカルボン酸ジメチル (MFDC) を目的生成物とするのが有望である。そこで、Au/CeO₂を利用したPD-HMFの酸化的エステル化反応によるMFDCの合成に取り組んだ。

本反応では、先ずPD-HMFを2-ホルミルフラン-5-カルボン酸メチルのアセタール体 (PD-MFFC) へと変換した (収率: 95%)。次に、酸触媒によってPD-MFFCをMFFCと保護剤である1,3-プロパンジオールへと加水分解した (収率: 99%)。1,3-プロパンジオールはこの段階で反応系中から回収される (回収率: 92%)。最後に、未保護のMFFCの酸化的エステル化反応によってMFDCを得た (収率: 97%)。これまで検討してきたFDCA合成の場合、基質に対して350 mol%の塩基をプロセス全体で使用していたが、本反応系では、わずか7.5 mol%まで削減することができた。これまでに見出してきたアセタール保護および逐次反応系のエッセンスに加えて、目的生成物の特性を考慮した触媒反応系をデザインしたことで従来よりも環境調和性が高い触媒反応プロセスの開発に成功した。

次に、触媒反応プロセス効率の更なる向上を目指して、アセタール化剤の回収を必要としない触媒反応系の構築を試みた。本反応系では、反応溶媒として用いているメタノールをHMFのアセタール化剤に採用した。Au/CeO₂を触媒として、HMFのジメチルアセタール体の酸化的エステル化反応を前述したPD-HMFと同様の逐次反応系で実施した結果、プロセス全体収率85%でMFDCを合成することができた (Fig. 5)。《論文執筆中》

Protection strategy and stepwise approach for MFDC production

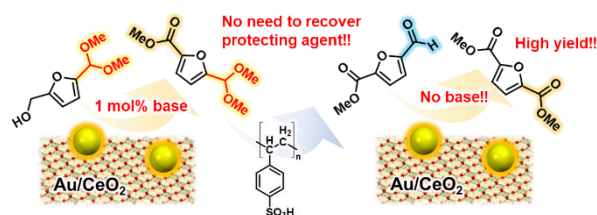


Fig. 5 Au/CeO₂触媒を用いたHMFジメチルアセタールからのMFDC合成

2) 還元的アミノ化によるポリアミド原料の合成

HMFの部分酸化物である2,5-ジホルミルフラン (DFF) のホルミル基を還元的アミノ化によって第1級アミンへと逐次的に変換すると、ジアミン体 (2,5-ジアミノメチルフラン, AMF) を合成することができる。本反応系においても、ホルミル基が引き起こす副反応が深刻な課題となっており、高濃度系の実現を妨げている。本研究では、1,3-プロパンジオールで保護したDFF (PD-DFF) の還元的アミノ化反応を検討した (Fig. 6)。本検討では、阪大・満留Gによって開発されたCo₂Pナノロッド (NRs) を固体触媒として利用した。本研究の特徴は、バイオマス由来基質を対象とした触媒反応であることに加え、空気中でも取り扱いが容易なCo₂P NRs触媒による反応系であること、アセタール化による副反応制御を活用した反応系のデザインに取り組むことである。

これまでに、アセタール基を導入することで副反応を大幅に抑制できることを見出した。本反応系では、基質濃度10 wt%においても約90%の目的生成物収率が得られている。また、Co₂P NRs触媒の再利用性も確認できている。《論文執筆中》

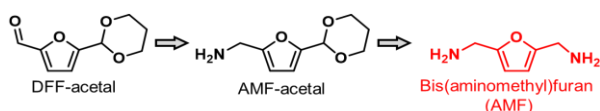


Fig. 6 HMFから誘導されるアルデヒド基質のアセタール体 (PD-DFF) からのジアミン合成

3. 多孔質材料を用いた効率的なバイオマス変換反応系の開拓

これまでに示したように、バイオマス変換反応は多様な反応系がデザインできる一方で、目的生成物を選択的に合成し、安定な状態で回収することは容易ではない。高効率なバイオマス変換反応を実現するための1つのアプローチとして、ゼオライト等の多孔質材料による反応場分離を駆使した触媒反応系の構築にも取り組んでいる。

2024年度のトピック：

1) グルコースの逆アルドール反応によるC4およびC2化合物の合成

グルコースのC6骨格を有効に活用するための脱水や異性化などの化学変換が重要である一方で、グルコースの利活用の拡大のためには選択的な炭素-炭素結合の開裂を伴うフラグメント化も極めて重要な課題である。グルコースの逆アルドール反応は、C4成分であるエリスロース (ERT) とC2成分であるグリコールアルデヒド (GA) を与える。4炭糖であるERTは天然には存在しない希少糖であり、多様な基礎化学品原料となるブタジエン、ブタンジオール、琥珀酸などの原料となる。またGAに関してもエチレンやエタノールを経由して多様な基礎化学品を誘導可能である。よって、バイオマス変換による二酸化炭素削減を目指す場合、賦存量が豊富なグルコースからERTおよびGAを誘導する意義は大きい。しかし、これらの生成物はHMFと同様に反応性の高いホルミル基を有するため、逆アルドール反応が進行するような反応条件下では容易にフミン類へと転換されてしまい、安定な生成物として回収することができない。そのため、グルコースの逆アルドール反応によるERTおよびGAを効率的に合成する触媒反応系はこれまでに報告されていない。我々は、アルコール溶媒中でグルコースの逆アルドール反応を行い、生成したERTおよびGAを *in-situ* でアセタール化することで生成物収率の向上を

試みた。種々の金属酸化物触媒をスクリーニングした結果、Nb₂O₅はエタノール溶媒中でのグルコースの逆アルドール反応に比較的良好な触媒活性を示した。 *In-situ* でのアセタール化を促進するためには、プレnstेटド酸触媒の添加が好ましいが、Amberlyst-15や希硫酸などを添加すると、プレnstेटド酸がグルコースの脱水や、フィッシャーグリコシド化等の副反応を触媒してしまう。そこで、グルコースは細孔内に拡散できず、ERTおよびGAは拡散できる程度の大きさの細孔を有するMOR型ゼオライトを添加したところ2つの生成物収率が大幅に向上した。MORゼオライトの添加効果は、細孔内に取り込めるERTおよびGAのアセタール化のみを選択的に促進させたことである。本反応系では、これまでに例のない高い収率でERTおよびGAのアセタール体を得ることができた (Fig. 7) 《論文投稿中》。現在、逆アルドール反応に対してより効果的な複合金属酸化物触媒 (東北大・加藤Gとの共同研究) や、酸性質を制御したゼオライト触媒の合成に取り組み、反応効率の更なる向上を目指している。

Spatial separation of retro-aldolization and in-situ acetalization

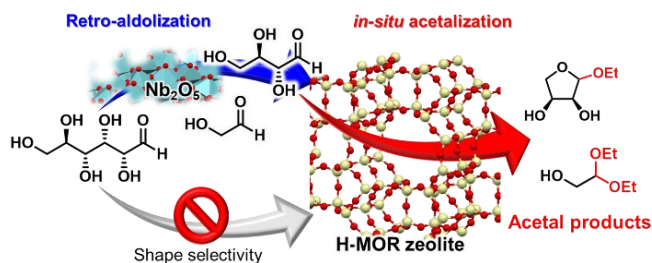


Fig. 7 Nb₂O₅とMOR型ゼオライト触媒を用いたグルコースの逆アルドール反応と生成物の *in-situ* アセタール化

2) 農業廃棄物からのフェノール合成

フェノールは、工業的にも重要な基幹化合物であるが、その製造は石油資源に依存している。バイオマス由来のフェノール合成もバイオマス変換反応における重要なトピックの1つであるが、その研究は複雑なリグニンからの誘導法に限定されてきた。本研究では、農業廃棄物であるカシューナッツ殻から抽出可能なカルダノールに着目した。カルダノールは、側鎖に不飽和なC15の炭素鎖を有する長鎖アルキルフェノールである。アルキルフェノールからフェノールを誘導する際には、ゼオライト等の固体酸触媒を用いた接触分解反応 (脱アルキル化) が有効であるが、カルダノール側鎖に存在するC=C結合は複雑な副反応を誘発する。脱アルキル化によって生成する多量の炭化水素類は、ゼオライト触媒の失活を引き起こすコークの原料となる。そこで我々は、1) カルダノールの側鎖を水素化してC=C結合に起因する副反応を抑制すること、2) トルエンを溶媒としたトランスアルキル化反応系を構築して脱アルキル化によって生成した炭化水素類が引き起こす触媒失

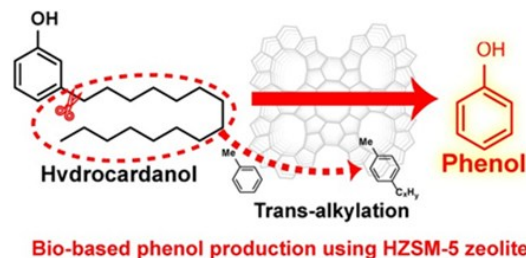


Fig. 8 ゼオライト触媒を用いたハイドロカルダノールのトランスアルキル化反応によるフェノール合成

活を抑制すること、を踏まえて固体触媒反応をデザインした。流通式反応器および適切なゼオライト触媒を用いることで、ゼオライト外表面でのハイドロカルダノール（カルダノールの水素化体）の脱アルキル化と、細孔内でのトランスアルキル化が効率的に進行し、高いフェノール収率と炭素収支（ともに>99%）を実現した《論文投稿中》。

■学内外の研究者との共同研究（2024年度）

千葉大学一國伸之教授「卑金属元素との複合化による酸化物ナノクラスター触媒の機能制御」/千葉大学一國伸之教授「担体構造との複合化による卑金属元素の高機能化に関する研究」/東北大学加藤英樹教授「糖類転化のための高機能固体酸塩基触媒構築」/東北大学吉井丈晴助教「真空高温TPDによるゼオライト中水酸基の定性・定量分析法の確立(2)」/大阪大学山口渉助教「フルフラールの選択的水素化反応を促進する炭化ニッケルナノ粒子触媒の開発」/徳島大学霜田直宏助教「噴霧凍結造粒乾燥法によるCO₂メタン化反応用Ni/CeO₂触媒の合成」/横浜国立大学竹歳絢子助教「薄層化金属酸化物担持触媒の開発とその特性評価」/横浜国立大学竹歳絢子助教「薄層化金属酸化物担持触媒の開発」/富山大学保田修平特命助教「鉄系触媒上での二酸化炭素転換反応の反応機構解明」/横浜国立大学本倉健教授「C-H結合活性化反応へ向けた固体表面における酸点と金属ナノ粒子との協奏的触媒作用の解明」

■2024年度の研究業績

原著論文（全て審査つき）

- (1) Wang, Z.; Osuga, R.; Endo, K.; Padovan, D.; Suganuma, S.; Fukuoka, A.; Kato, H.; Nakajima, K. Lewis acid catalysis of phosphate-modified CaNb₂O₆ for xylose dehydration to furfural. *Catal. Sci. Technol.* **2025**, *15*, 2665–2669. First published online: 2025/3/12.
- (2) Tsuji, E.; Watanabe, M.; Ikuta, W.; Fujita, Y.; Okada, H.; Suganuma, S.; Katada, N. Influence of Oxide Reservoirs on the Performance of Direct Air Electrolysis Using NaClO₄ as a Deliquescent Neutral Electrolyte Salt. *ACS Appl. Energy Mater.* **2025**, *8*, 2537–2542. First published online: 2025/2/17.
- (3) Suzuki, K.; Hasegawa, S.; Osuga, R.; Nakajima, K.; Motokura, K. Remote Activation Catalysis: Interparticle Hydrogen Spillover-Assisted Cumene Synthesis from Propane and Benzene. *Small* **2025**, *21*, 2408226. First published online: 2025/1/23.
- (4) Tsuji, E.; Ohwan, K.; Ishikawa, T.; Hirata, Y.; Okada, H.; Suganuma, S.; Katada, N. Reduction behaviors of tin oxides and oxyhydroxides during electrochemical reduction of carbon dioxide in an aqueous solution under neutral conditions. *RSC Sustainability* **2025**, *3*, 1388–1396. First published online: 2025/1/17.
- (5) Miyashita, K.; Osuga, R.; Yasuda, S.; Yokoi, T.; Itagaki, S.; Hosogi, Y.; Kondo, J. N. Quantitative Estimation of Effective Brønsted Acid Sites of Silica-Supported H₄SiW₁₂O₄₀ Heteropoly Acid for Adsorption of Various Molecules. *Langmuir* **2025**, *41*, 1491–1501. First published online: 2025/1/7.
- (6) Okada, H.; Adachi, R.; Tsuji, E.; Nanbu, R.; Okumura, K.; Kitano, S.; Habazaki, H.; Suganuma, S.; Katada, N. Brownmillerite-Type Ca₂FeCoO₅ Ultrathin Layers as Anodic Catalysts for Water Electrolysis. *ACS Appl. Nano Mater.* **2024**, *8*, 223–232. First published online: 2024/12/18.
- (7) Fukumasa, T.; Kawatani, Y.; Masuda, H.; Nakashita, I.; Hashiguchi, R.; Takemoto, M.; Suganuma, S.; Tsuji, E.; Wakaiharu, T.; Katada, N. Shape Selective Cracking of Polypropylene on an H-MFI Type Zeolite Catalyst with Recovery of Cyclooctane Solvent. *RSC Sustainability* **2024**, *3*, 890–903. First published online: 2024/11/21.

- (8) Nakamura, K.; Tanizaki, S.; Tsubokawa, K.; Tsuji, E.; Suganuma, S.; Katada, N. Ethylation of Benzene with Ethane over MFI Zeolite-Supported Pb Catalyst. *Catal. Lett.* **2025**, *155*(1), First published online: 2024/11/13.
- (9) Xiao, P.; Toyoda, H.; Wang, Y.; Nakamura, K.; Bekhti, S.; Osuga, R.; Nishibori, M.; Gies, H.; Yokoi, T. Roles of Acidic Proton for Fe-Containing Zeolite in Direct Oxidation of Methane. *ACS Catal.* **2024**, *14*, 17434–17444. First published online: 2024/11/12.
- (10) Xiao, P.; Wang, L.; Toyoda, H.; Wang, Y.; Nakamura, K.; Huang, J.; Osuga, R.; Nishibori, M.; Gies, H.; Yokoi, T. Revealing Active Sites and Reaction Pathways in Direct Oxidation of Methane over Fe-Containing CHA Zeolites Affected by the Al Arrangement. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, Just Accepted. First published online: 2024/11/5.
- (11) Deng, Z.; Osuga, R.; Matsubara, M.; Matsubara, M.; Muramatsu, A. Morphological Effect of TiO₂ Nanoparticles in TiO₂/g-C₃N₄ Heterojunctions on Photocatalytic Dye Degradation. *Chem. Lett.* **2024**, *53*, 9, 171. First published online: 2024/8/26.
- (12) Yabushita, M.; Osuga, R.; Nakagawa, Y.; Suganuma, S.; Nakajima, K.; Tomishige, K. Overview of Intentional Formation of Paired Heteroatom Sites in Zeolite Frameworks. *CrystEngComm* **2024**, *26*, 4405–4417. First published online: 2024/8/2.

総説・解説

- (1) 大須賀遼太, 中島清隆, 草木から創るプラスチック原料-固体触媒によるバイオマス由来フラン化合物の官能基変換-, 化学, 79, 72–73 (2024).

招待/基調/依頼講演・国際会議

- (1) Nakajima, K.; "Acetal-protection strategy for the synthesis of highly reactive platform molecules", 1st Catalytic Biorefinery International Conference, Bangkok, Thailand, (2025/2/6-7). [招待講演]
- (2) 菅沼学史「官能基選択的還元触媒によるアミノ酸からの含窒素化学品の合成」IRCCS 2024年度成果報告会, 北海道大学 (2024/11/27). [招待講演]
- (3) 大須賀遼太「固体触媒を用いた反応場分離に基づくバイオマス由来糖類の逆アルドール反応の高効率化」第62回オーロラセミナー, 北海道大学 (2024/10/25). [招待講演]
- (4) 菅沼学史「石油資源の有効利用率向上のための多環芳香族類選択的転換」第27回反好会講演会, 北海道大学工学部 (2024/9/10). [招待講演]
- (5) Nakajima, K.; "Biomass conversion using heterogeneous catalysts", 6th International Conference on Chemical Science (ICCS), Yogyakarta, Indonesia (2024/7/23-24). [招待講演]
- (6) Nakajima, K.; "Acetal protection strategy in biomass conversion: reductive amination of acetal-protected 2,5-diformylfuran to 2,5-bis(aminomethyl)furan", Taiwan International Conference on Catalysis 2024 (TICC 2024), Taipei, Taiwan (2024/6/19-21). [招待講演]
- (7) 中島清隆「固体触媒による次世代型バイオマス変換プロセスの設計」第69回野依フォーラム, 名古屋大学物質科学国際研究センター (2024/4/19). [招待講演]

受賞

- (1) 佐々涼水:「担持 Rh 触媒を用いたバイオマス由来フラン化合物の水素化反応」第 62 回オーロラセミナー (2024/10/25)《Best Research Award》
- (2) 石 泉:「Retro-aldolization of glucose using mixed-metal oxide catalysts」, 化学系学協会北海道支部2025年冬季研究発表会 (2025/1)《優秀講演賞》

■ 2024年度の構成員

〈教授〉村山徹・〈特任助教〉Haifeng WANG [2024/09/01
〜]・〈博士研究員〉Rui LIN [2024/10/01〜]



■ 2024年度のうごき

2024年4月に村山教授が着任し、同研究部門が再始動した。9月にHaifeng WANG博士が特任助教として着任した。同年10月にRui LIN博士が博士研究員として着任した。

■ 研究課題

1. 金触媒におけるナノサイエンスの新展開～金ナノ粒子、金クラスター、金原子～

バルク（塊）の金は化学的に不活性であるが、ナノ粒子になると、豊かな触媒作用を示す。触媒反応によって有効に作用する金ナノ粒子のサイズは異なるが、概ね液相反応の場合は10 nm以下のサイズを必要とし、気相反応では5 nm以下の金ナノ粒子が有効である。さらにバルク金属の連続的な価電子帯は、2 nm以下のサイズにすると粒子の金属特性が変化し、半導体酸化物のように離散状態で分離する。そのため、2 nm以下の金クラスターはナノ粒子と異なる触媒特性を示すことがある。当部門では、担持金触媒の研究を行い、金と担体の界面が作り出す活性点とその触媒活性の向上を目指す研究を実施している。また近年では、サブnm以下の金ナノ粒子における原子数特異性や原子状Auを用いた研究を実施している。

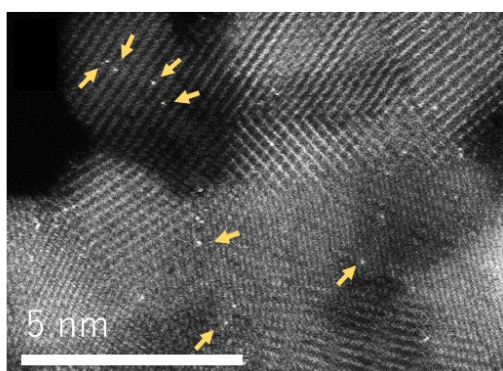


Fig. 1 Example of the gold single-atom catalysts (Au_1/NiO).

2024年度のトピック：装置のセットアップ作業を実施し、実験準備を整えた。今年度の研究の遂行は主に共同研究によって実施した《論文3, 5, 6, 7, 9, 13》。

2. NO_x （窒素酸化物）のアンモニアを用いた選択触媒還元（ $\text{NH}_3\text{-SCR}$ ）

窒素汚染や窒素の不適切な利用が環境への悪影響を引き起こす可能性があるため、窒素の循環や管理に対する関

心が高まっており、窒素循環に資する研究は、環境保護や持続可能な開発に向けた重要な課題として位置付けられている。当部門は、エネルギー変換プロセスにおける物質変換の立場から、窒素酸化物の無害化やアンモニアの無害化反応を促進する触媒の研究を行っており、この分野の先駆的な存在となるべく最先端研究を実施している。

定置用ボイラーの排出ガスには、光化学スモッグや酸性雨の原因となる窒素酸化物（ NO_x ）が含まれる。日本では現在、大型のボイラーから排出されるガスに含まれる NO_x は、脱硝装置によって取り除かれている。脱硝装置で利用される現行の触媒は、 NO_x の除去に必要な反応温度が高く、排ガス処理システムの自由な設計の妨げとなっている。

当部門では、低温で高い活性を示す脱硝触媒の開発の研究をしてきた。これまでの脱硝触媒は、 300°C 以上で作用するが、 $100\sim 150^\circ\text{C}$ でも高い性能を有する触媒を開発している。これまで、五酸化バナジウム（ V_2O_5 ）をバルクとして脱硝触媒に用いることを世界で初めて報告してきた。更なる活性の向上に向けた研究では、 V_2O_5 結晶の金属骨格にタングステンを置換することにより、新規触媒を開発した。また、 $\text{Na-V}_2\text{O}_5$ を用いた低温脱硝触媒も提案した。これら低温で作用する触媒を利用する排ガスシステムの開発は、既に $\text{NH}_3\text{-SCR}$ が導入されている日本を含む先進国においては、触媒の低コスト化および NO_x 処理の省エネルギー化に繋がる。また、排ガス処理システムが整備されてない発展途上国においても、今あるボイラーに対して、低温での $\text{NH}_3\text{-SCR}$ システムを簡便に後付けできる可能性がある。世界的に見ると大気汚染は重要かつ喫緊の環境問題となっているため、本研究の技術は大気環境の向上に大きく貢献できる可能性がある。

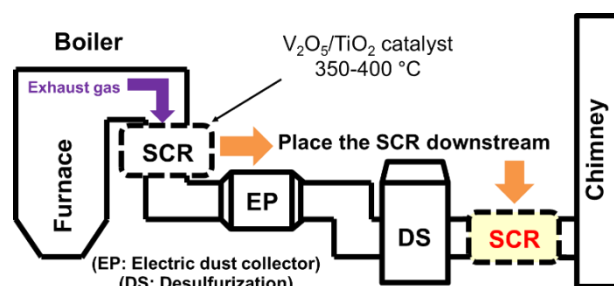


Fig. 2 Exhaust gas treatment process for thermal power plant.

2024年度のトピック：装置のセットアップ作業を実施し、実験準備を整え実験を開始した。民間企業と共同で研究を実施した。

3. アンモニアの選択触媒酸化（ $\text{NH}_3\text{-SCO}$ ）

安全・安心が求められる次世代社会において、「綺麗な空気」を得るための環境触媒の開発が求められている。 NH_3 は工業プロセスや畜産業から排出されるのみならず、介護病院などでも臭気の問題となっている。 NH_3 の濃度が0.6 ppmでも人間は臭いを感じることができると、次世代のエネルギーキャリアの一つとして NH_3 が選択される場合、 NH_3 の臭気対策は避けては通れない問題と考えられる。 NH_3 の無害化は、省エネルギープロセスである必要があり、より低温で無害化する技術の開発が急務である。しかし、既存の一般的なアンモニア用触媒は、 200°C 以上の温度でしか機能しないため、省エネルギー型のプロセスであるとは言えない。また、高い使用温度は、身近な生活環境での使用に適しておらず、化学プロセスとして考えても省エネルギー型ではない。当部門では、金ナノ粒子担持触媒や、銀を原子状に分散した触媒が N_2 への高い選択率を示し、低

温でも酸化除去可能であることを報告してきた。省エネルギー型でかつ綺麗な空気を実現する触媒の開発を行っている。

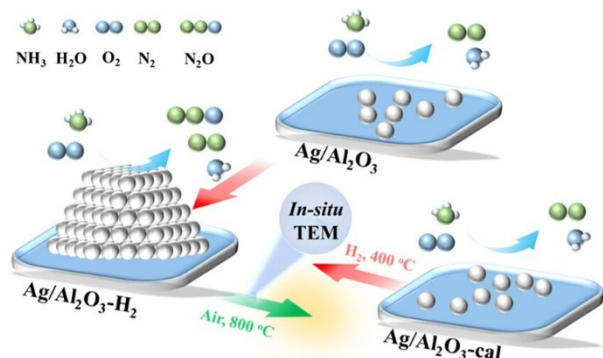


Fig. 3 Regenerable catalytic system of Ag/Al₂O₃ in NH₃-SCO.

2024年度のトピック：装置のセットアップ作業を実施し、実験準備を整え実験を開始した。また前職における研究のまとめを報告した《論文14》。

■学内外の研究者との共同研究（2024年度）

山陽小野田市立山口東京理科大学秦慎一講師「高表面積化を指向したポーラスカーボン触媒の調製」/熊本大学明石優志特任助教「光触媒応用を志向した金属担持グラフェン量子ドットの合成と物性評価」/熊本大学明石優志特任助教「異種ナノ材料接合体の局所構造観察」/華東理工大学(中国)Lin准教授/大阪大学奥村教授/横浜国立大学稲垣教授/東京都立大学石田准教授/Linköping University (Sweden) Dr. Shun Kashiwaya/JST Alca-Nextにおける共同研究/民間企業との共同研究2件

■2024年度の研究業績

原著論文（全て審査つき）

- (1) Lin, J.; Wang, X.; Cheng, B.; Zhou, R.; Li, Y.; Ishida, T.; Xiu, G.; Murayama, T.; Lin, M. "Boosting methanol electro-oxidation to formate by trace iron induced suppression of cobalt (IV) formation", *Nano Research*, **2025**, accepted.
- (2) Wang, X.; Zhou, F.; Gao, Y.; Li, Y.; Cheng, B.; Murayama, T.; Ishida, T.; Lin, M.; Xiu, G. "Revealing the Role of Mn–O Bonds in Electrocatalytic Methanol Oxidation to Value-Added Formate in LaMnO₃", *ACS Sustainable Chem. Eng.*, **2025**, 13, 12, 4845–4856
- (3) Qi, C.; Zhang, J.; Sun, X.; Sun, L.; Su, H.; Murayama, T. "Au Nanoclusters on Vanadium-Doped ZrO₂ Nanoparticles for Propylene Oxidation: An Investigation into the Impact of V", *Materials*, **2025**, 18, 1118.
- (4) Xie, Y.; Wang, X.; Mao, J.; Zhang, C.; Song, Q.; Murayama, T.; Lin, M.; Zhang, J.; Lou, Y.; Pan, C.; Zhang, Y.; Zhu, Y. "Nanocrystalline High-Dimensional Nb₂O₅ for Efficient Electroreductive Dicarboxylation of CO₂ with Cycloalkane". *ACS Catal.*, **2024**, 14, 24, 18624–18632.
- (5) Nakayama, A.; Yoshida, C.; Aono, T.; Honma, T.; Sakaguchi, N.; Taketoshi, A.; Fujita, T.; Murayama, T.; Shimada, T.; Takagi, S.; Ishida, T. "Preparation and Catalytic Properties of Gold Single-Atom and Cluster Catalysts Utilizing Nanoparticulate Mg–Al Layered Double Hydroxides". *ChemPlusChem*, **2024**, e202400465.
- (6) Yonemori, T.; Hamada, Y.; Ishida, T.; Murayama, T.; Kawakami, T.; Yamanaka, S.; Okumura, M. "Theoretical Investigation of CO Oxidation over Polyoxometalate-Supported Au Cluster Catalyst". *J. Catal.*, **2024**, 438, 115724.

- (7) Muraoka, M.; Miyatani, T.; Sembuku, A.; Ishida, T.; Murayama, T.; Kubota, Y.; Inagaki, S. "CO Oxidation at Low Temperatures over the Au Cluster Supported on Crystalline Silicotitanate". *ACS Omega*, **2024**, 9, 40, 41696–41702.
- (8) Wang, X.; Xiao, C.; Xie, Y.; Yang, C.; Li, Y.; Zhang, Y.; Murayama, T.; Ishida, T.; Lin, M.; Xiu, G. "High-Dimensional Nb₂O₅ with NbO₆ Octahedra for Efficient Electrocatalytic Upgrading of Methanol to Formate". *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2024**, 16, 34, 44938–44946.
- (9) Qi, C.; Cheng, Y.; Yang, Z.; Ishida, T.; Su, H.; Zhang, J.; Sun, X.; Sun, L.; Zhao, L.; Murayama, T. "Efficient Formation of Propylene Oxide under Low Hydrogen Concentration in Propylene Epoxidation over Au Nanoparticles Supported on V-Doped TS-1". *J. Catal.*, **2024**, 436, 115608.
- (10) Al-Yusufi, M.; Michalik, D.; Kubis, C.; Murayama, T.; Ishida, T.; Abdel-Mageed, A. M.; Köckritz, A. "Ring–Opening Mechanism of O-Heterocycles into α,ω -Diols over Ni–La(OH)₃: C–O Bond Hydrogenolysis of THFA to 1,5-Pentanediol as a Case Study". *ChemCatChem*, **2024**, 16, e202400008.
- (11) Ishikawa, S.; Noda, N.; Shimoda, K.; Murayama, T.; Ueda, W. "Role of the Heptagonal Channel of Crystalline Mo₃VOx Catalyst for the Selective Oxidation of Acrolein and Methacrolein". *Catal. Sci. Technol.*, **2024**, 14, 3160–3166.
- (12) Liu, Y.; Wu, G.; Ge, R.; Jiang, X.; Li, L.; Ishida, T.; Murayama, T.; Qiao, B.; Wang, J. "Highly Active and Sintering-Resistant Pt Clusters Supported on FeOx–Hydroxyapatite Achieved by Tailoring Strong Metal–Support Interactions". *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2024**, 16, 17, 22007–22015.
- (13) Zhang, N.; Li, L.; Jing, Y.; Qian, Y.; Chen, D.; Maeda, N.; Murayama, T.; Toyao, T.; Shimizu, K. "In Situ/Operando Spectroscopic Evidence on Associative Redox Mechanism for Periodic Unsteady-State Water–Gas Shift Reaction on Au/CeO₂ Catalyst". *J. Catal.*, **2024**, 433, 115500.
- (14) Wang, H.; Murayama, T.; Ishida, T.; Shimizu, K.; Sakaguchi, N.; Yamaguchi, K.; Miura, H.; Shishido, T. "The Development of the Regenerable Catalytic System in Selective Catalytic Oxidation of Ammonia with High N₂ Selectivity". *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2024**, 16, 15, 18693–18702.
- (15) Hata, S.; Nakagawa, C.; Taketoshi, A.; Murayama, T.; Ishida, T.; Du, Y.; Shiraishi, Y.; Toshima, N. "Prolonging the n-Type Conduction of Thermoelectric Carbon Nanotubes Exposed to Warm Air by Mixing Hydrated Water into the Adsorbed Dopant Layers Composed of Li⁺-Receptor Molecules". *RSC Appl. Interfaces*, **2024**, 1, 430–434.

総説・解説

- (1) 村山徹, シングルアトム触媒あれこれ, 触媒, 66(5), 272–278 (2024) .

招待/基調/依頼講演

- (1) Murayama, T.; "Nanoparticle, cluster, and atomically controlled supported metal catalysts and their application to environmental catalysis", MOST China/Japan International Symposium on Catalysis for Hydrocarbons Oxidation, Ningbo University (China) (2024/8/25). [Invited]
- (2) Murayama, T.; "Preparation of nanoparticles, clusters, and atomically size-controlled functional catalysts and their application to environmental catalysis", The International Symposium on Advanced and Sustainable Science and Technology, National Chung Hsing University (Taiwan) (2024/9/11). [Invited]

■ 2024年度の構成員

〈教授〉清水研一・〈准教授〉鳥屋尾隆・〈助教〉安齊亮彦
[2024/05/16~] / Abhijit SHROTRI・〈特任助教〉Nazmul
Hasan Mohammad Dostagir SHAIKH / ZHANG
Ningqiang/Lingcong LI・〈博士研究員〉Bin YANG
[2025/01/01~] / Junxian QIN [2025/03/01~]・〈非常勤研
究員〉Mengwen HUANG・〈技術補佐員〉武田貴子・〈技術
専門職員〉下田周平・〈研究支援推進員〉吉村円・〈特定専
門職員〉久保田亜美 [~2024/08/31] / 坂井富美子
[2024/08/01~]・〈JSPS外国人特別研究員〉Abdellah AIT EL
FAKIR/FISCHER Jorg Wolfram Anselm [2025/01/20~]・〈外
国人研究員〉Yuxuan Xie/Bo WU [~2024/11/30]・〈研究
生〉Leyang ZHANG〈総合化学院/大学院博士課程〉下田光
祐 [~2024/09/30] / 宮崎真太/Shirun ZHAO/Yucheng
QIAN/Chenxi HE/Duotian CHEN/Pengfei DU/Chenyang
ZHANG [2024/10/01~]・〈総合化学院/大学院修士課程〉
Chenyang ZHANG [~2024/09/30] / Li WAN [~2024/09/30]
/ 宮景琢充 / 田島大地 / 安藤有里子 / Weiyang ZHANG
/ Xiupeng ZHANG / Jialei ZHANG / Hongli PAN / 橋口民
[2024/10/01~]・〈工学部/学部学生〉山口丈志



■ 2024年度のうごき

2024年5月15日に安齊亮彦助教が着任した。総合化学院
博士課程の3名が博士号を取得・卒業し、修士学士課程の
2名が修了卒業し、工学部学士課程の1名が卒業した。

■ 研究課題

実験・理論・データ科学の3つのアプローチにより、資
源・環境・エネルギー関連の社会課題解決に資する高性能
触媒の開発、及び触媒設計の方法論開拓を目指す。

1. 元素循環に資する固体触媒開発

化石資源のミニマム利用に資する固体触媒法の開発と
触媒設計に向けた基礎研究を行っている。

2024年度のトピック：CO₂変換等の元素循環に資する触媒
に関して成果発表した（《論文9, 10, 14, 20》）。ポリプロピ
レンを低級炭化水素に変換する触媒に関する以下の成果
を得た（《論文5》）。

廃プラスチックは大きな環境問題であり、触媒を用いて
廃プラスチックを価値ある化学物質に直接変換するケミ
カルリサイクルが注目されている。廃プラスチックの6割
を占めるポリオレフィンの触媒的分解に関する過去の報
告では、高温条件や水素加圧下、貴金属を用いた検討例が
多く²⁾、環境への負荷を軽減するためには、低温で貴金属・
水素を用いないといった条件での選択的な低級オレフィ
ン生成が望まれる。我々は、PPの解重合をHMF1触媒を用い

て、290 °C以下、He気流下で行い、低級オレフィンが選
択的に得られることを報告した。本研究では、Si/Al比の
異なるHMF1ゼオライトおよびシリル化処理により外表面
酸点を不活性化することで外表面酸量を低下させたHMF1
ゼオライト上でのポリプロピレンの解重合の触媒作用を
調べた。In situ IR実験、水素共存・非共存条件下での触
媒反応を行い、反応機構を検討した。

Si/Al比の異なるNH₄型MFIゼオライト（東ソー）を
500 °Cで1 h焼成することによりH型MFI（HMFIX）を得た。
ここでXはSi/Al比を表す。触媒反応は固定床流通式反応装
置またはバッチ式反応装置を用いて行った。前者では、パ
イレックス製のU字管にHMF1、PP（Sigma-Aldrich, Mw~12000）
を30 mgずつ混合したものを90% He/10% N₂（常圧、総流量
10 ml min⁻¹）流通下で230-300 °Cの条件で行い、ガス生
成物をGC-TCD（Agilent 990）を用いて分析した。後者で
は、HMF1とPPを0.1 gずつ回分反応器に入れ、1 MPaのN₂あ
るいはH₂を充填し、280 °Cで24 h反応を行い、ガス生成
物ならびに液体生成物をGC-TCD, GC-FIDを用いて分析した。
触媒の構造解析は、IR, UV-Vis, ¹H MAS NMR, ¹³C MAS NMR
測定により行った。DFT計算はCP2Kパッケージを用いて
行った。

Fig. 1aにHMF1触媒を用いたPPの解重合を行った際の温
度と各生成物の生成速度の経時変化を示す。室温から
20 °C min⁻¹で昇温させると、230 °C付近から炭化水素
（C₂-C₅）の生成が見られ、温度の上昇とともに生成速度の
増加が見られ、290 °Cで最大となった後、反応開始後約
30分で反応が停止した。以下では各生成物の経時変化をも
とに最終的に得られたガス生成物の合計収率を算出し比較
した。

HMF11触媒を用いたPPの解重合の温度依存性について
調査した結果をFig. 1bに示す。230 °Cから290 °Cにか
けて温度の増加に伴い未知成分の収率は減少し、C₂-C₅
のガス生成物の収率が増加した。これは、230 °C付近の比
較的低温域では、PPが少なくとも炭素数C₆以上の短鎖オリ
ゴマーに分解され、より高温でそれらが分解され、C₂-C₅
のガス生成物が生成されることを示唆している。290 °Cで
最も高い炭化水素収率（66.5%）およびオレフィン収率
（45.2%）が得られた。一方で、300 °Cでは未知成分の割
合が大幅に増加し、C₂-C₅のガス生成物の収率が急激に低
下しており、これは主にコーキングに由来していると考え
られる。

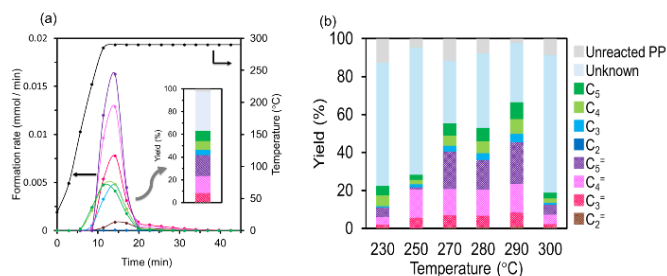


Fig. 1 (a) Typical time course of the rates of products formation rate and temperature in a flow reactor. (b) PP conversion by HMF11 at different temperatures. Conditions: 10% N₂/He (10 mL min⁻¹), 0.03 g of catalyst, and 0.03 g of PP.

Fig. 2にSi/Al比が異なるHMF1を用いてPPの解重合を
290 °Cで行った結果を示す。ガス生成物のアルケン／ア
ルカン比はHMF11が2.1, HMF150が4.2でありHMF150が2
倍高い値を示した。未反応のPPはHMF11で2.2%, HMF150
が16%であった。これらの結果から、PPの解重合がHMF1の
酸点上で進行していることが示唆された。

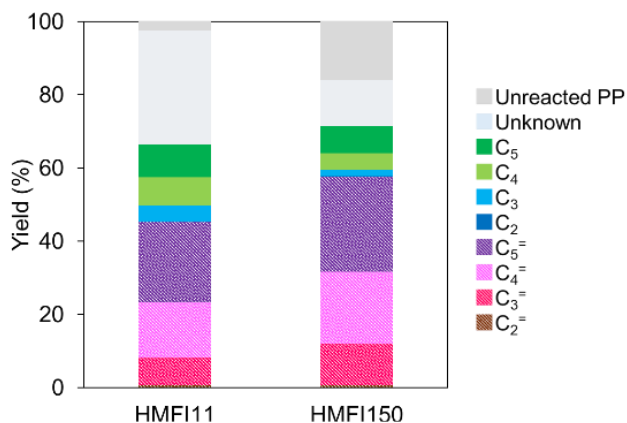


Fig. 2 PP conversion by HMFI catalysts with different Si/Al ratios. Conditions: 290 °C 10% N₂/He (10 mL min⁻¹), 0.03 g of catalyst, and 0.03 g of PP.

HMFI試料の外表面酸点の役割を調べるため、既報を参考にゼオライトの外表面酸点をテトラエトキシシラン (TEOS) でシリル化することにより不活性化させた試料 HMFI11 (HMFI11-T) を作製した。吸着した 2,6-ジ-tert-ブチルピリジン (DTBPy) とピリジン (Py) の IR スペクトルから、HMFI11 と HMFI11-T のブレンステッド酸点 (BAS) の総量と外表面の BAS の相対量を比較した (Fig. 3a, b)。

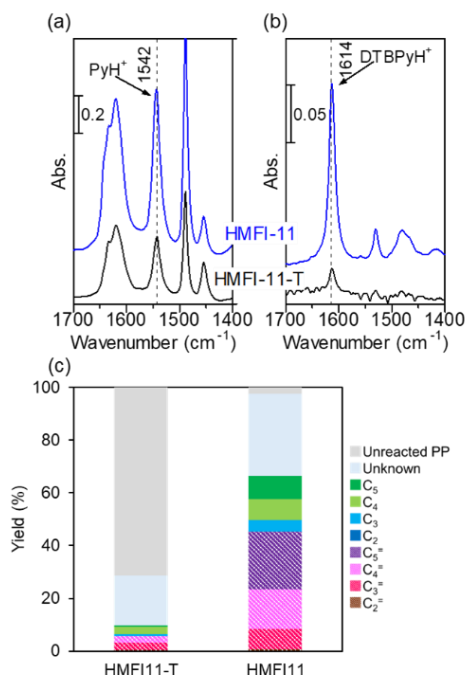


Fig. 3 IR spectra of (a) Py and (b) DTBPy adsorbed on HMFI11 and HMFI11-T at 200 °C. (c) Catalytic results for PP pyrolysis under 10% N₂/He.

Fig. 3a に 200 °C における HMFI11 と HMFI11-T に吸着した Py の IR スペクトルを示す。1542 cm⁻¹ のバンドは PyH⁺ イオン、すなわちゼオライトの外表面および内表面の両方に存在する BAS によってプロトン化された Py の特徴である⁵⁾。Fig. 3b は、200 °C で HMFI11 および HMFI11-T に吸着した DTBPy の IR スペクトルを示している。1614 cm⁻¹ のバンドは、DTBPyH⁺ イオンの環振動に対応する。このバンドの強度は外表面の BAS の相対量を反映しており、HMFI11 においては HMFI11-T よりも著しく強いことが確認された。これらの

結果から、HMFI11-T では外表面および内表面の BAS が不活性化されているが、外表面の BAS がより優先的に不活性化されていることが示された。HMFI11 と HMFI11-T 上での PP の解重合による生成物収率を比較したところ (Fig. 3c)、未反応 PP は HMFI11 では 2.2% であったのに対し、HMFI11-T では 71% であった。この結果は、外表面の BAS が PP 分解の活性点であり低級炭化水素への変換に不可欠であることがわかった。

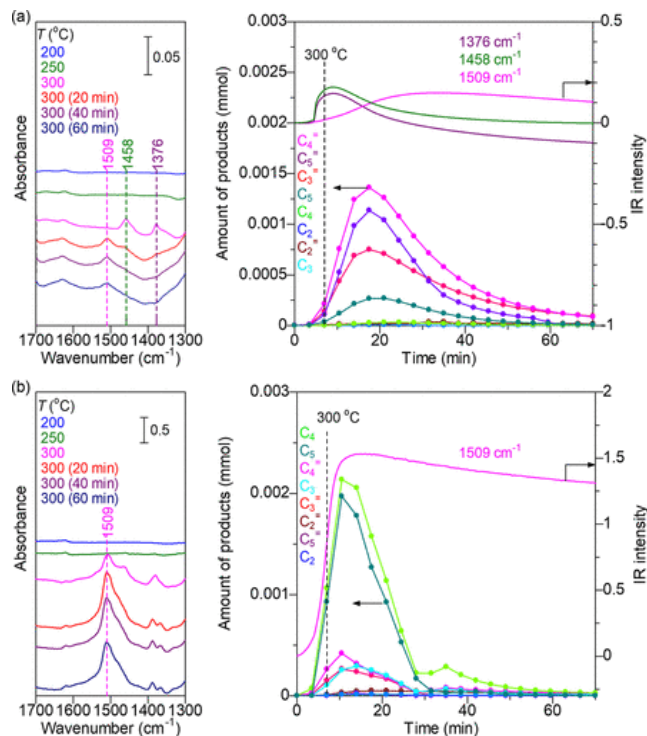


Fig. 4 (a) *Operando* IR results during PP conversion on HMFI150 and (b) on HMFI11 under He: typical IR spectra of adsorbed species (left) and time course of the amount of gas products (GC analysis) and the IR intensity (right). After the measurement of the background spectrum of the IR disk (2.4 mg of PP/46 mg of HMFI150 mixture for (a), 2.5 mg of PP/46.5 mg of HMFI11 mixture for (b)) at 150 °C, the IR cell was heated to 300 °C (20 °C min⁻¹ ramp rate), followed by maintaining the temperature at 300 °C.

Fig. 4a は、HMFI150 上で、He 雰囲気下、300 °C で PP の解重合を行った際の *in situ* IR スペクトルと、気相生成物の生成速度の経時変化を示している。温度が 230 °C に達すると、CH₃ と CH₂ 種に起因する 1458 cm⁻¹ と 1376 cm⁻¹ のバンドが観測された。300 °C では、これらのバンドの強度は最初に増加し、その後時間とともに減少した。エチレン (C₂=)、プロピレン (C₃=)、ブテン (C₄=)、ペンテン (C₅=)、ブタン (C₄)、ペンタン (C₅) が気相で観察され、これらのオレフィンの生成速度は 20 分で最大に達し、その時点でカルベニウムイオン種に帰属される 1509 cm⁻¹ のバンドの強度が最大に達した。これらの結果は、PP の分解における次のメカニズムを示唆している。まず、HMFI の外部表面に存在する BAS によって PP が分解され、230 °C で HMFI に短鎖オリゴマー、すなわち吸着したアルカンおよび末端オレフィンが生成される。生成したアルカンとオレフィンは、HMFI の微細孔内に拡散し、内部表面の BAS によってさらに分解が進行する。内部表面の BAS によるオリゴマーの分解は、300 °C で加速され、ガス生成物として C₂-C₅ の炭化水素が形成される。また、オレフィンの一部は互いに反応して

コーク中間体であるカルベニウムイオン種を生成すると考えられる。反応後の触媒の ^1H NMRおよび ^{13}C NMR分析より、軽芳香族と重芳香族が存在することが確認された。さらに、*in situ* UV-Vis測定の結果から、これらの芳香族種が反応の進行に伴って生成することがわかった。HMFI11についても同様の実験を行ったところ (Fig. 4b), C_2 - C_5 の炭化水素の生成速度およびカルベニウムイオン種のIR強度は、HMFI150のものよりも高かった。一方で、HMFI11におけるオレフィン (C_3 - C_5)の生成速度は、HMFI150よりも低かった。Si/Al比が低いゼオライトは酸点の数が多く、クラッキング反応が促進される一方で、軽質オレフィンの消費を伴うコーキングなどの副反応が進行することによって考えられる。

HMFIフレームワーク内でのPPオリゴマーのクラッキングを解析するため、ゼオライト内部表面における最短のPPオリゴマーモデルとして2,4-ジメチルヘプテンのいくつかのクラッキング経路をDFT計算により検討した。反応実験の条件を考慮し、563 Kにおけるギブス自由エネルギーを比較した。

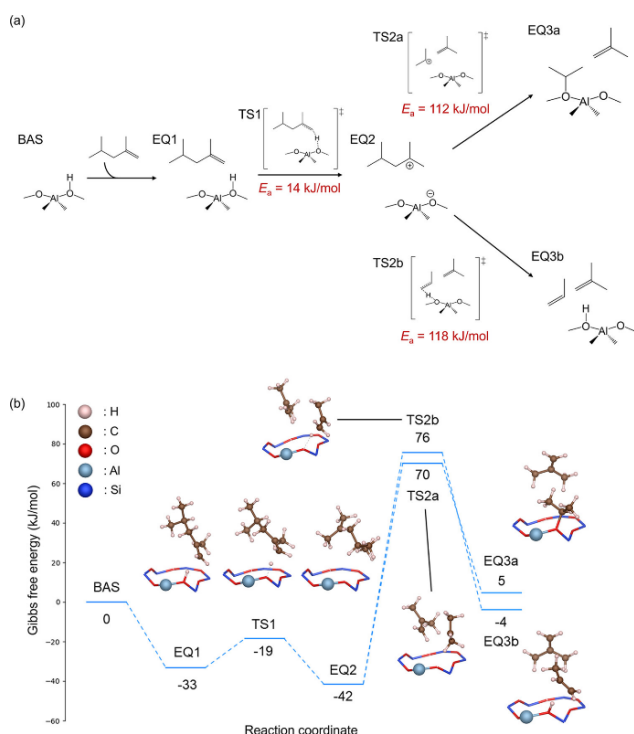


Fig. 5 (a) Reaction scheme and (b) the reaction coordinate with the Gibbs free energy at 563 K for the cracking of 2,4-dimethylheptene on the Brønsted acid site of the HMFI zeolite calculated by DFT calculation.

Fig. 5に示すように、HMFIゼオライトの内部表面に吸着した2,4-ジメチルヘプテン分子は、隣接するBASからプロトン移動を受けて、活性化障壁が 14 kJ mol^{-1} のカルボカチオンを生成し、このカルボカチオンを介してさまざまな生成物が生成する。活性化障壁が最も低い経路は β 切断経路であり、活性化障壁が 112 kJ mol^{-1} のイソブテンとプロピルアルコキシド基を生成する反応であった。さらに、イソブテンとプロピレンを生成する β 切断を含む経路も可能であり、この場合の活性化エネルギーは 118 kJ mol^{-1} であった。計算結果は、中心カルボカチオンの高い安定性と、PPオリゴマーのいくつかの変換反応における活性化障壁の差が、飽和炭化水素よりもオレフィンの形成に有利であることを示唆しており、反応結果とも一致した。

HMFI11上でのPPの分解における外部 H_2 の役割を調べるため、バッチ式反応装置を用いて1 MPaの H_2 または N_2 雰囲気下でPPの解重合を行った (Fig. 6)。ガス生成物に対する収率は H_2 雰囲気下では65%であり、 N_2 雰囲気下 (25%) に比べて約14倍高かった。また、ガス生成物中のアルケン/アルカン比は H_2 雰囲気下で0.03、 N_2 雰囲気下で0.3と、 N_2 雰囲気下の方が10倍高く、 H_2 雰囲気下ではアルカン選択性が向上した。これは、 H_2 雰囲気下では軽質オレフィンの消費を伴うコーキングなどの副反応が抑制されたためであると考えられる。

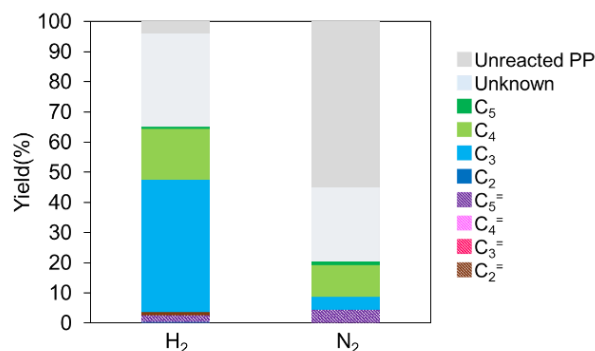


Fig. 6 PP hydrogenolysis by HMFI11 under 1 MPa H_2 or 1 MPa N_2 . (280 °C, 24 h, 0.1 g catalyst, 0.1 g PP).

2. 触媒インフォマティクスの創成に向けて

固体触媒分野におけるマテリアルズインフォマティクスの萌芽的取り組みとして、理論計算や機械学習を併用した研究を継続している。

2024年度のトピック: 理論計算や機械学習を活用した触媒研究の成果を論文にて発表した《論文1, 15, 16, 17, 21》。

3. 排ガス浄化用触媒の設計指針

排ガスの浄化に有効な固体触媒の開発と触媒設計に向けた基礎研究を行ってきた。

2024年度のトピック: 排ガス浄化関連の研究成果を論文にて発表した《論文3, 4, 6, 8, 15, 16, 18, 22, 23》。

■学内外の研究者との共同研究 (2024 年度)

バージニア工科大学Karim Ayman M.准教授「Effect of Oxide Domain Size Domain on Catalytic Properties of Rh」/CSIR-インド工科大学John Mondal主任研究員「Single site metal incorporated in porous polymer as catalyst for CO_2 Reduction.」/東京大学安村駿作助教「オゾンを用いた室温作動型メタン燃焼触媒系の開発」/群馬大学岩本伸司准教授「ヒドロシランを用いた金属酸化物の表面水酸基の定量」/群馬大学岩本伸司准教授「ヒドロシランを用いたジルコニア固溶体の表面水酸基量の計測」/愛媛大学吉村彩講師「新規有機正極活性物質合成のための触媒開発」/愛媛大学吉村彩講師「新規有機正極活性物質合成のための触媒開発 (2)」/公立千歳科学技術大学高田知哉教授「多孔質炭素触媒を用いた過硫酸イオン存在下での有機色素分解反応過程の解明」/公立千歳科学技術大学高田知哉教授「多孔質炭素触媒と過硫酸塩を用いる有機色素分解反応のメカニズム」/量子科学技術研究開発機構山本洋揮主幹研究員「触媒応用を指向した金属酸化物ナノ粒子の微細パターンニング研究」/東京大学小林広和准教授「ポリプロピレン分解触媒の開発」/東京農工大学森田将司助教「シリカナノ空間への金属錯体の集積化と触媒活性点の解明 (1)」/東京農工大学森田将司助教「シリカナノ空間への金属錯体の集積化と触媒活性

点の解明(2)」/室蘭工業大学神田康晴准教授「貴金属リン化合物触媒の耐硫黄性評価と水素化脱硫活性の関係の解明」/東京工業大学石川理史准教授「水素気流下で形成される酸触媒活性点の特定と新規触媒反応への応用」/九州大学前田修孝准教授「非定常オペランド赤外分光法による触媒反応活性種の選択的抽出」/九州大学前田修孝准教授「非定常オペランド赤外・X線吸収分光法による触媒反応活性種・活性点の選択的抽出」/工学院大学前野禅准教授「CO₂回収水素化用Ni系二元機能触媒の機能発現機構の解明と高活性化」/関西大学大洞康嗣教授「有機還元剤を用いた異種金属ナノ粒子の合成とその酸化的カップリング反応への触媒的応用」/関西大学大洞康嗣教授「DMF保護マンガニンナノ粒子の構造評価ならびにヒドロシリル化反応における触媒活性評価」/熊本大学猪股雄介助教「酸化バナジウム触媒を用いたNH₃-SCRにおける前周期金属元素添加効果の解明」/広島大学津野地直助教「規則性ナノ空間材料をきっかけとした計算科学との融合と循環型社会への貢献」/広島大学津野地直助教「規則性ナノ空間材料をきっかけとした計算科学との融合と循環型社会への貢献(2)」/東京理科大学貞清正彰講師「In-situ赤外分光によるマグネシウムイオン含有アニオン性配位高分子のゲスト誘起イオン伝導の機構解明」/東京理科大学貞清正彰講師「In-situ赤外分光によるマグネシウムイオン含有アニオン性配位高分子のゲスト誘起イオン伝導の機構解明(2)」/静岡大学田代啓悟助教「固体電解質のナノ空間の形態および固体電解質-電極界面における材料の接合状態の解析」/産業技術総合研究所日沼洋陽主任研究員「固体触媒モデリング向けの適切なスーパーセルの探索」/産業技術総合研究所日沼洋陽主任研究員「固体触媒モデリング向けの適切なスーパーセルの探索2」/産業技術総合研究所峯真也研究員「実験・計算化学・機械学習の融合による新規触媒開発」/産業技術総合研究所峯真也研究員「機械学習予測と実験の協働による新規触媒開発」/秋田大学齊藤寛治講師「ハイドロキシアパタイト構造内からの金属イオン析出による複合光触媒の設計」/秋田大学齊藤寛治講師「ハイドロキシアパタイト構造内からの金属イオン析出による複合光触媒の設計(2)」

■2024年度の研究業績

原著論文(すべて審査つき)

- (1) Hamamoto, N.; Kawahara, T.; Hagiwara, R.; Matsuo, K.; Matsukawa, K.; Hinuma, Y.; Toyao, T.; Shimizu, K.-I.; Kamachi, T. Effect of the surface morphology of alkaline-earth metal oxides on the oxidative coupling of methane. *Sci. Technol. Adv. Mater.* **2025**, 26 (1), 2435801.
- (2) Katayama, N.; Tabaru, K.; Nagata, T.; Yamaguchi, M.; Suzuki, T.; Toyao, T.; Jing, Y.; Maeno, Z.; Shimizu, K.-I.; Watanabe, T.; Obora, Y. Recyclable and air-stable colloidal manganese nanoparticles catalyzed hydrosilylation of alkenes with tertiary silane. *RSC Adv.* **2025**, 15 (3), 1776–1781.
- (3) Qian, Y.; Yasumura, S.; Zhang, N.; Anzai, A.; Toyao, T.; Shimizu, K.-I. Mechanism of selective reduction of N₂O by CO over Fe-β catalysts studied by in-situ/operando spectroscopy. *Chin. J. Catal.* **2024**, 69 (2), 185–192.
- (4) Zhang, N.; He, C.; Jing, Y.; Qian, Y.; Obuchi, M.; Toyoshima, R.; Kondoh, H.; Oka, K.; Wu, B.; Li, L.; Anzai, A.; Toyao, T.; Shimizu, K. Enhanced Nitrous Oxide Decomposition on Zirconium-Supported Rhodium Catalysts by Iridium Augmentation. *Environ. Sci. Technol.* **2025**, 59(3), 1598–1607.
- (5) Ando, Y.; Miyakage, T.; Anzai, A.; Huang, M.; Ait El Fakir, A.; Toyao, T.; Nakasaka, Y.; Phuekphong, A.; Ogawa, M.; Kolganov, A. A.; Pidko, E. A.; Shimizu, K. Conversion of Polypropylene to Light Olefins by HMF Catalysts below

- Pyrolytic Temperature: Catalytic, Spectroscopic, and Theoretical Studies. *J. Phys. Chem. C* **2025**, 129(3), 1678–1691.
- (6) Shimizu, K.; Kubota, H.; Qian, Y.; Mine, S.; Toyao, T.; Nuguid, R. J. G.; Buttignol, F.; Ferri, D. Molecular Aspects of the Mechanism of NH₃-SCR on Tungsten-loaded Ceria from Modulated Excitation DRIFTS. *ChemCatChem* **2024**, e202401839.
 - (7) Tashiro, K.; Konno, H.; Yanagita, A.; Mikami, S.; Shimoda, S.; Taira, E.; Rivera Rocabado, D. S.; Shimizu, K.; Ishimoto, T.; Satokawa, S. Direct Catalytic Conversion of Carbon Dioxide to Liquid Hydrocarbons over Cobalt Catalyst Supported on Lanthanum(III) Ion-Doped Cerium(IV) Oxide. *ChemCatChem* **2024**, 16, e202400261.
 - (8) Jing, Y.; He, C.; Wan, L.; Tong, J.; Zhang, J.; Mine, S.; Zhang, N.; Kageyama, Y.; Inomata, H.; Shimizu, K.; Toyao, T. Continuous N₂O Capture and Reduction to N₂ Using Ca-zeolite Adsorbent and Pd/La/Al₂O₃ Reduction Catalyst. *ACS EST Engineering* **2025**, 5(2), 447–455.
 - (9) Li, L.; Chen, D.; Anzai, A.; Zhang, N.; Kang, Y.; Qian, Y.; Du, P.; Ait El Fakir, A.; Toyao, T.; Shimizu, K. Operando Spectroscopic Studies on Redox Mechanism for CO₂ Hydrogenation to CO on In₂O₃ Catalysts. *J. Catal.* **2024**, 439, 115762.
 - (10) Du, P.; Ait El Fakir, A.; Zhao, S.; Hasan MD Dostagir, N.; Pan, H.; Ting, K. W.; Mine, S.; Qian, Y.; Shimizu, K.; Toyao, T. Ethanol Synthesis via Catalytic CO₂ Hydrogenation over Multi-Elemental KFeCuZn/ZrO₂ Catalyst. *Chem. Sci.* **2024**, 15, 15925–15934.
 - (11) Tabaru, K.; Fujihara, T.; Torii, K.; Suzuki, T.; Jing, Y.; Toyao, T.; Maeno, Z.; Shimizu, K.; Watanabe, T.; Sogawa, H.; Sanda, F.; Hasegawa, J.; Obora, Y. Exploring Catalytic Intermediates in Pd-Catalyzed Aerobic Oxidative Amination of 1,3-Dienes: Multiple Metal Interactions of the Palladium Nanoclusters. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146, 33, 22993–23003.
 - (12) Shimoda, K.; Ishikawa, S.; Shimizu, K.; Ueda, W. Effects of Local Structural Changes of Orthorhombic Mo₃VO_x Induced by High-Temperature Heat Treatment on Catalytic Ammoxidation of Propane. *ACS Catal.* **2024**, 14, 13303–13313.
 - (13) Niwa, S.; Hashimoto, S.; Chen, D.; Toyao, T.; Shimizu, K.; Sadakiyo, M. High Ionic Conduction in a Robust Anionic Metal-Organic Framework Containing Mg²⁺ under Guest Vapors. *Dalton Trans.* **2024**, 53, 12043–12046.
 - (14) Hu, X.; Huang, M.; Kinjyo, T.; Mine, S.; Toyao, T.; Hinuma, Y.; Kitano, M.; Sato, T.; Namiki, N.; Shimizu, K.; Maeno, Z. Propane Dehydrogenation Catalysis of Group IIIB and IVB Metal Hydrides. *RSC Adv.* **2024**, 14, 23459–23465.
 - (15) Yasumura, S.; Kato, T.; Qian, Y.; Toyao, T.; Shimizu, K. Mechanistic Study on NH₃ Decomposition over Cu-Exchanged CHA Zeolites Using Automated Reaction Route Mapping Combined with Neural Network Potential and Density Functional Theory Calculations. *J. Phys. Chem. C* **2024**, 128, 31, 12949–12959.
 - (16) Yasumura, S.; Nagai, K.; Miyazaki, S.; Qian, Y.; Chen, D.; Toyao, T.; Kamiya, Y.; Shimizu, K. Low-Temperature Methane Combustion Using Ozone over Coβ Catalyst. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146, 30, 20982–20988.
 - (17) Miyakage, T.; Yasumura, S.; Huang, M.; Toyao, T.; Maeno, Z.; Shimizu, K. Reaction Path Search for Propane Dehydrogenation and Metathesis on Titanium Hydride. *Chem. Lett.* **2024**, 53, upae083.
 - (18) Tsunoji, N.; Onishi, M.; Sonoda, S.; Ohnishi, T.; Ogura, M.; Maeno, Z.; Toyao, T.; Shimizu, K. Synthesis-Structure-Catalysis Relations in CHA Zeolites Applied for Selective Catalytic Reduction of NO_x with Ammonia. *ChemCatChem* **2024**, 16, e202400459 (Selected as the Front Cover).
 - (19) Ishikawa, S.; Kosugi, Y.; Kanda, Y.; Shimoda, K.; Jing, Y.; Toyao, T.; Shimizu, K.; Ueda, W. Microporosity and Catalytic

Activity for Hydrodesulfurization of Pharmacosiderite $\text{Mo}_4\text{P}_3\text{O}_{16}$ Synthesized at a Moderate Temperature. *Inorg. Chem.* **2024**, 63, 17, 7780-7791.

- (20) Zhang, N.; Li, L.; Jing, Y.; Qian, Y.; Chen, D.; Maeda, N.; Murayama, T.; Toyao, T.; Shimizu, K. In Situ/Operando Spectroscopic Evidence on Associative Redox Mechanism for Periodic Unsteady-State Water Gas Shift Reaction on Au/CeO₂ Catalyst. *J. Catal.* **2024**, 433, 115500.
- (21) Tong, J.; Miyakage, T.; Toyao, T.; Shimizu, K. Influence of Temperatures and Loadings on Olefin Diffusion in MFI-type Zeolites in One- to Three-Dimensions. *Catal. Sci. Technol.* **2024**, 14, 1902-1910.
- (22) Wang, H.; Murayama, T.; Ishida, T.; Shimizu, K.; Sakaguchi, N.; Yamaguchi, K.; Miura, H.; Shishido, T. The Development of the Regenerable Catalytic System in Selective Catalytic Oxidation of Ammonia with High N₂ Selectivity. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2024**, 16, 18693-18702.
- (23) Zhang, N.; He, C.; Jing, Y.; Qian, Y.; Toyao, T.; Shimizu, K. Enhanced N₂O Decomposition on Rh/ZrO₂ Catalysts through the Promotional Effect of Palladium. *Surfaces Interfaces* **2024**, 46, 104120.

総説/解説

- (1) 鳥屋尾隆, 清水研一, オペランド IR と理論計算による Cu-CHA 触媒上での脱硝機構解明, 触媒, 66, 94-99 (2024).
- (2) 鳥屋尾隆, 清水研一, CO₂ からの低温メタノール合成, 触媒, 67, 19-24 (2025).

招待/基調/依頼講演・国際会議

- (1) Shimizu, K.: "Data science, DFT and spectroscopic studies for design of heterogeneous catalysis", 2024 Catalysis Science & Technology Symposium, The Royal Society of Chemistry, Burlington House, UK (2024/4/3). [Invited]
- (2) Shimizu, K.: "CO₂ Sorption/Reduction Systems for Direct Air Capture/Utilization" 13th Natural Gas Conversion Symposium (NGCS13), 2024, Xiamen, China (2024/4/24) [keynote]
- (3) Shimizu, K.: "Operando Spectroscopic and Computational Studies for Design of Heterogeneous Catalysis" ACS Physical Chemistry Summit, April 26th, 2024, Hefei, China (2024/4/27) [Invited]
- (4) Shimizu, K.: "Computational, data science, and spectroscopic studies for design of heterogeneous catalysis", Nanospace-2024, Vidyasirimedhi Institute of Science and Technology (VISTEC), Thailand, (2024/8/23) [Invited]
- (5) 鳥屋尾隆: 「機械学習を利用した固体触媒開発」, 日本結晶成長学会 新技術・新材料分科会第 4 回研究会, 北海道大学 (2024/8/1). [Invited]

- (6) 鳥屋尾隆: 「実験とデータ科学を利用した固体触媒研究」, 日本コンピュータ化学会 2024 年秋季年会, 室蘭 (2024/10/20). [Invited]
- (7) 清水研一: 「CO₂ Sorption/Reduction Systems for Direct Air Capture/Utilization」, 令和 6 年度第 5 回 I²CNER Seminar, 2024 年 10 月 30 日, 九州大学 I²CNER (オンライン) (2024/10/30). [Invited]
- (8) 鳥屋尾隆: 「データ駆動型触媒開発と放射光を用いた触媒作用機構研究」, 第 2 回北海道大学触媒科学研究所-立命館大学 SR センター合同シンポジウム 触媒科学と放射光 触媒科学の Soft~Tender X 線への展開 II 実際と新しい可能性, 北海道大学 (2024/12/25). [Invited]
- (9) Toyao, T.: "Accelerated discovery of heterogeneous catalysts using machine learning approach", The 2nd China-Japan Symposium on Catalysis (2ndCJSC), China (2024/11/3). [Invited]
- (10) Shimizu, K.: "CO₂ Sorption/Reduction Systems for Direct Air Capture/Utilization", 2025 I²CNER Annual Symposium, Fukuoka, Ito Campus of Kyushu University, Japan (2025/1/29). [Invited]
- (11) 清水研一: 「排ガス・大気中 CO₂ の燃料・化学原料への転換を目指した固体触媒技術」, 第 189 回フロンティア材料研究所学術講演会, 東京科学大学総合研究院フロンティア材料研究所 (2025/3/7).

受賞

- (1) 清水研一 (2024/05/16) 《北海道大学ディスティングイッシュトプロフェッサー》
- (2) 宮崎真太: 触媒学会若手会「第 44 回夏の研修会」(2024/09/07) 《最優秀ポスター発表賞》
- (3) 安藤有里子: 触媒学会若手会「第 44 回夏の研修会」(2024/09/07) 《優秀ポスター発表賞》
- (4) 安藤有里子: 第 62 回オーロラセミナー (2024/10/25) 《Excellent Research Award》
- (5) 田島大地: 第 62 回オーロラセミナー (2024/10/25) 《Best Research Award》
- (6) 宮崎真太: 「CO₂ 直接回収・水素化に有効な遷移金属フリー二元機能触媒の開発」, 新化学技術推進協会 (2024/12/23) 《第 18 回 GSC Student Travel Grant Award》
- (7) 宮崎真太: 「アルミナ担持 Cs 触媒による CO₂ 吸蔵還元による連続的 CO 合成」, 第 135 回触媒討論会 (2025/03/18) 《学生優秀講演賞》

■ 2024年度の構成員

〈教授〉浦口大輔・〈准教授〉浅野圭佑・〈助教〉趙強・〈博士研究員〉QUMRUDDEN [2024/10/01~]・〈研究生〉Xucheng ZHOU [2024/10/01~]・〈生命科学学院/大学院博士課程〉吉田楽人・〈生命科学学院/大学院修士課程〉大塚隆馬/玉澤昇太/藤岡賢一郎/小野裕介/石丸北都・〈薬学部/学部学生〉阿久津央/岡田俊祐/片岡久慶/堀内健太 [2024/10/01~] /村上幸奈 [2024/10/01~] /西海航生 [2024/10/01~]



■ 2024年度のうごき

2024年3月に、村田竜一氏が博士後期課程を修了し、学位を授与された。坂口莉久氏が修士課程、下澤渉氏・池本実紗子氏が学部課程をそれぞれ修了し、卒業した。2024年4月に、吉田楽人氏が博士後期課程1年生、玉澤昇太氏・藤岡賢一郎氏が修士課程1年生へと進学した。また、石丸北都氏・小野裕介氏が修士課程1年生として入学し、研究室に加わった。大塚隆馬氏が修士課程2年生へ、阿久津央氏・岡田俊祐氏・片岡久慶氏が学部4年生へとそれぞれ進級した。2024年10月には、薬学部薬科学科3年の西海航生氏・堀内健太氏・村上幸奈氏が研究室に参画するとともに、QUMRUDDEN氏がインドからの博士研究員として、周栩丞氏が中国からの研究生として加わった。

■ 研究課題

1. 光触媒活性を備えた典型元素カチオン塩の創製

光触媒を用いる新たな有機合成反応の開発研究に注目が集まる一方、その反応の触媒の制御への試みは難しい課題として残されている。これは、ラジカル種などの反応活性種と触媒分子との間に相互作用がない場合が多く、基質が本来的にもつ性質を反映した選択性で反応が進行しやすいことに起因する。我々は、結合形成段階において基質と相互作用し得る新たな光触媒（系）の開発を念頭に、光活性な典型元素カチオン塩の創製に取り組んでいる。

配位飽和ボレンウム塩の光触媒作用：有機蛍光色素として汎用されるBODIPYおよびその類縁体の構造を参考にしたスピロ型ボレンウム塩を設計・合成し、その光触媒能を利用した新たな分子変換として、インドールの窒素選択的アルキル化反応を実現した (Fig. 1)。本反応では、開発したボレンウムイオンが光触媒として特異的に有効であるが、加えて配位性の高いアニオンを対イオンとすることが重要である。このことは、インドールのN-Hがアニオンと水素結合を形成した超分子型イオン対形成が、反応を選択性良くかつ効率的に進行させるために重要であることを示唆している。

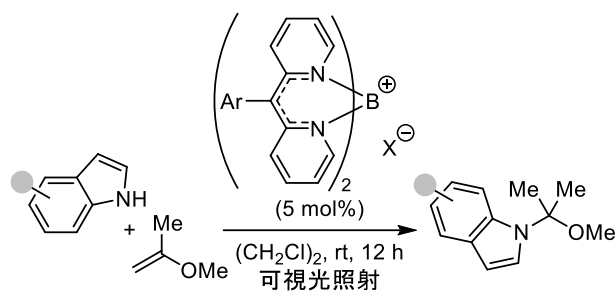


Fig. 1. N-Selective alkylation of indole under the photocatalysis of a coordination saturated borenium salt.

高配位化シリリウム塩の光触媒作用：アズリルピリジンと二価二座型配位子とする六配位型シリリウム塩を設計・合成した。非対称型配位子をもつ本シリリウム塩は、*meridional*型と*facial*型の二種類の幾何異性体が生じるが、それぞれカラムクロマトグラフィー等の通常の精製法により立体化学的に純粋な形で単離できる。また、合成したシリリウム塩の光物性を調べると、幾何異性およびアニオンの種類によって特徴的なソルバトクロミズムを示すことが明らかとなった。光触媒としての活性評価では、可視光照射により高い酸化活性を示す励起種を与えた。

2024年度のトピック：超分子型イオン対形成からの光化学過程の計算科学的解析について、横川大輔准教授（東京大学）と共同研究を遂行した。

2. ジアリールホスフィンスルフィドの水素原子供与触媒能の創出

光酸化還元触媒系においてはしばしば、水素原子の授受を媒介する共触媒（HAT触媒）の選択が、反応を円滑に進めるために重要となる。既存の反応系では主に、チオール類がHAT触媒として利用されて来た。これは、チオールが中程度の酸性度とS-H結合乖離エネルギーをもち、共役塩基であるチオラートイオンが適度な酸化還元活性を示すことに起因する。しかし、チオール分子の構造的な特徴により、ラジカル性の反応中間体に水素原子を供与する際にその構造情報が伝わらないという問題があった。我々は、チオールに類似した物性を備えつつも構造自由度の高いジアリールホスフィンスルフィドが、環状エンカルバメートへのヒドロアセトキシ化反応において優秀なHAT触媒能を示すことを明らかにした (Fig. 2)。この時、2位にアリール基をもつ基質を用いると、HAT触媒の接近方向に応じてジアステレオマーが生じるが、本触媒系は既存のチオールを用いるものとは逆のジアステレオ選択性を発現する。HAT触媒による光酸化還元反応の立体制御の例が非常に限られている中で、本触媒系で高い選択性が発現したことへの合成化学的価値は明確である。

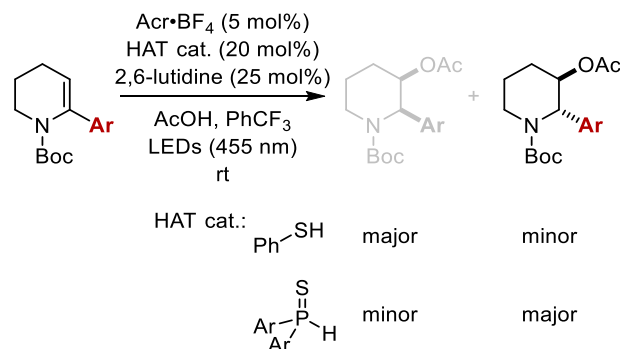


Fig. 2. Diarylphosphinesulfide-mediated, diastereoselective photocatalytic hydroacetoxylation of cyclic enecarbamates.

2024年度のトピック：2024年5月末に、趙強が北海道大学化学反応創成研究拠点(WPI-ICReDD) MANABIYAプログラムを修了した。続くWPI-ICReDDの前田Gとの計算科学的解析についての共同研究により、開発したHAT触媒のアリール部位が反応中間体と π - π 相互作用することが、高いジアステレオ選択性が発現するための鍵であることを明らかにした。

3. 触媒的臭素化による高感度タンパク質間相互作用解析

創薬などに必要なタンパク質間相互作用(PPI)の解析に有効な手法として近年注目されているのが、光触媒による時空間選択的反応を利用した近接依存性標識である。しかし、近接依存性標識に現在利用されている手法では、標識率が低い場合、質量分析による標識体の同定が困難になる。一方で、PPI界面ではチロシン残基が重要な役割を果たしており、PPIが関与する生命現象を広く理解するためにはチロシン標識による高感度解析法の開発が求められる。しかし、チロシン残基は反応させにくいために標識率の向上には限界があり、質量分析の感度を向上させるための化学的アプローチが新たに必要である。そこで、我々は臭素化による標識法の開発を計画した(Fig. 3)。臭素基は同位体を豊富に含む特徴から高分子の質量分析に効果的であり、臭素化による生体高分子(タンパク質)の標識を実現すれば、標識率に影響を受けない高感度な解析技術になる。しかし、細胞系などの生体適合条件で光照射により時空間選択的にタンパク質を臭素化できる光触媒反応ツールが無いことが問題だった。そこで我々はチロシンを標識ターゲットに設定し、光照射により駆動してアミノ酸、ペプチド、タンパク質を臭素化する触媒や反応剤の開発を進めている。

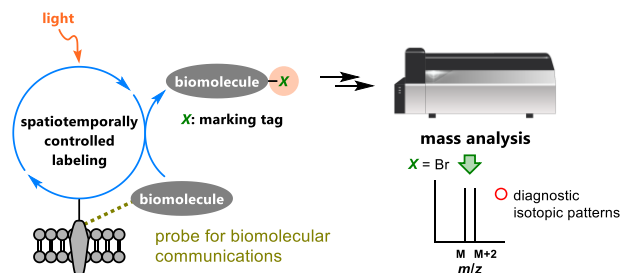


Fig. 3. Spatiotemporally controlled labeling of biomolecules and bromination as installation of sensitive mass tags.

2024年度のトピック：生体分子標識に求められる37 °C、水系溶媒中という条件においてもバックグラウンド反応や分解を起こさず、有機色素を光触媒として可視光照射により活性化でき、チロシンの臭素化に利用できる臭素化剤BODNを開発した。《論文1・受賞1, 2》また、生体適合性が高いオレフィンに活性部位とする臭素化触媒について、実験および計算による反応機構解析に基づき、さらに高活性な二官能性触媒を開発した。さらに、この二官能性触媒を利用して光照射により系内で活性化できる光駆動触媒も開発した。《論文2・受賞1, 2》これらの触媒開発のために、クロスカップリング反応による置換シクロオクテンの高効率合成法も開発した。《論文3》

■学内外の研究者との共同研究(2024年度)

兵庫県立大学下垣実央助教「新規キラルジカルボン由来相間移動触媒の開発と不斉フッ素化への応用」/金沢大学松本晃助教「イリド化学種のラジカル特性に基づく不斉水

素原子移動反応の開発」/新潟大学田山英治准教授「四炭素置換型キラルボレートによるカルベニウムイオンの不斉活性化とルイス酸としての利用」/長崎大学白川誠司教授「二酸化炭素を原料とした触媒的不斉合成における反応機構の理解と展開」/京都大学(京都)松原誠二郎教授「炭素-炭素二重結合の有機触媒機能開拓」/九州大学(福岡)堀雄一郎教授「細胞膜タンパク質における近接臭素化標識法の開発」/産業技術総合研究所(茨城)生長幸之助研究チーム長「光触媒的トリプトファン修飾のための反応剤開発」/産業技術総合研究所(茨城)上田善弘主任研究員「光触媒的チロシン臭素化反応の機構解明」/大阪大学(大阪)真鍋良幸准教授「非天然糖タンパク質合成法の開発」/立教大学(東京)山中正浩教授「計算化学によるシクロオクテン触媒反応の機構解析」

■2024年度の研究業績

原著論文(審査付き)

- (1) Yoshida, R.; Hori, Y.; Uruguchi, D.; Asano, K. BODNs as biocompatible brominating reagents: visible-light photocatalytic tyrosine modification under physiologically favorable conditions. *Chem. Commun.* **2024**, 60, 12381–12384.
- (2) Nagano, T.; Shimazu, T.; Ono, Y.; Kaneko, K.; Matsubara, S.; Yamanaka, M.; Uruguchi, D.; Asano, K. Mechanism-Guided Development of Bifunctional Cyclooctenes as Active, Practical, and Light-Gated Bromination Catalysts. *Chem.—Eur. J.* **2025**, 31, e202404011.
- (3) Murata, R.; Yoshida, R.; Uruguchi, D.; Asano, K. Synthesis of Substituted Cyclooctenes through Cross-Coupling Reactions. *Synlett* **2025**, 36, 69–74.
- (4) Tayama, E.; Tsutsumi, R.; Uruguchi, D. Controlling the Position of the Nucleophilic Ring-opening of 2-EWG-substituted Azetidinium Salts with Fluoride by the *N*-1-(1-naphthyl)ethyl Substituent and BINAM-derived Bis-urea Organocatalyst. *Tetrahedron* **2024**, 167, 134274.

総説/解説/報告

- (1) 浅野圭佑, 低エネルギー光触媒を利用する近接依存性標識, *Organometallic News*, 47 (2025) .

招待/基調/依頼講演・国際会議

- (1) 浅野圭佑:「選択的触媒反応空間を拡張する反応ツールの創製」, 山口大学講演会, 山口大学 (2024/06/18) . [招待講演]
- (2) Asano, K.: "Photocatalytic Bromination for Biomolecular Labeling", International Symposium of Institute for Catalysis 2024: Sustainable synthesis by use of efficient catalyst, Hokkaido University, Sapporo, Japan (2024/07/29). [Invited]
- (3) 浅野圭佑:「触媒・反応ツールの開発が拓く臭素化の科学」, 若手研究者のための有機化学札幌セミナー, 北海道大学 (2024/10/31) . [招待講演]
- (4) Asano, K.: "Photocatalytic Bromination toward Biomolecular Labeling", The 17th International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, Academia Sinica, Taiwan (2024/12/01). [Invited]
- (5) Uruguchi, D.: "Development of catalysts for controlling selectivities in photoreactions", First Maruoka Conference at GDUT on the Frontier of Organic Synthesis and Catalysis, Guangdong University of Technology, Guangzhou, Guangdong, China (2025/1/17-18). [Invited]
- (6) 浦口大輔:「光反応の制御を志向した有機分子触媒の開発」, 近畿化学協会 有機金属部会 2024年度第3回例会, 北海道大学 (2024/11/22) . [招待講演]

(7) 浦口大輔：「有機分子触媒による光反応の制御」，ヘテロ原子部会 2024年度第1回懇話会，オンライン (2024/6/13)．[招待講演]

受賞

(1) 浅野圭佑：「触媒的臭素化による高感度タンパク質間相互作用解析」，UBE学術振興財団 (2024/06/19) 《第64回学術奨励賞》

(2) Asano, K.: "Photocatalytic Bromination toward Biomolecular Labeling", The 17th International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia (2024/12/02) 《Asian Core Program Lectureship Award 2024 (Singapore)》

(3) 小野裕介：「二官能性チオウレア触媒による不斉1,3-ジオキサン合成」，化学系学協会北海道支部2025年冬季研究発表会 (2025/01/31) 《優秀講演賞 (ポスター発表部門)》

■ 2024年度の構成員

〈教授〉中野 環・〈准教授〉Zhiyi SONG・〈助教〉坂東正佳
[~2024/12/15]・〈特任教授〉張文雄 [2024/07/16~
2024/09/08]・〈博士研究員〉Xing AN [2024/12/23~]・〈研
究員〉Pengfei WU・〈研究生〉Quanyan TAN 〈総合化学院/
大学院修士課程〉Weiben DU/Haoyu LIU・〈事務補助員〉吉
村 円



■ 2024年度のうごき

2024年4月にHaoyue LIU氏が修士課程1年生として、
Quanyan TAN氏が研究生として研究室に加わった。2024年
12月には坂東正佳助教が株式会社グリーン・ケミカルへ移
籍した。また、2024年10月24日~12月24日の期間に研究生
としてNinwei Wang氏(蘇州大学)が在籍し、2024年3月に
Weiben DU氏が修士課程を卒業した。

■ 研究課題

先端機能を有する高分子材料の開発を目指して、高分子
化合物の設計と合成を行っている。高分子材料の物性・機
能は、原料である高分子鎖の化学構造および立体構造に強
く依存するため、これら構造の精密な制御と解析が重要で
ある。この観点から、私達は種々の特徴的構造を有する高
分子を合成している。加えて、最近超分子材料開発にも着
手した。これらの取り組みを通じ、構造と物性の相関を明
らかにし、高度な機能を示す高分子・超分子材料を創出し
たいと考えている。

1. π -スタック型・ π 電子集積型高分子

π 電子系が規則正しく積層した構造を有する高分子を
「 π -スタック型高分子」と呼ぶ。 π -スタック型高分子に
は、積層した π 電子系に基づく電子物性が期待される。

私達は、材料としての応用がしやすい π -スタック型高
分子を目指して、高分子の中でもっとも汎用性が高いビニ
ルポリマーの構造制御を行い、最初の π -スタック型ビニ
ルポリマーであるポリジベンゾフルベン (poly (DBF)) の
合成に成功した (Fig. 1)。DBFモノマーは、かさ高い構造に
もかかわらずスチレンやアクリル系モノマーなどより遥
かに反応性が高く、アニオン重合、ラジカル重合、カチオ
ン重合のいずれの方法でも π -スタック型高分子を与える。
当研究室では、様々な π -スタック型高分子の構造設計を
行っており、様々な機能の発現について検討している。電
子機能は、従来、主鎖共役型高分子を用いて研究されてき
たが、主鎖共役型高分子は本質的に溶解し難く強く着色し
ている。 π -スタック型ビニルポリマーはこれらの弱点を
克服する高分子材料として期待される。最近, poly (DBF)
鎖をブロック共重合体のセグメントとして構築し、新規高
分子材料の開発へと繋げる研究を行っている。《講演1》

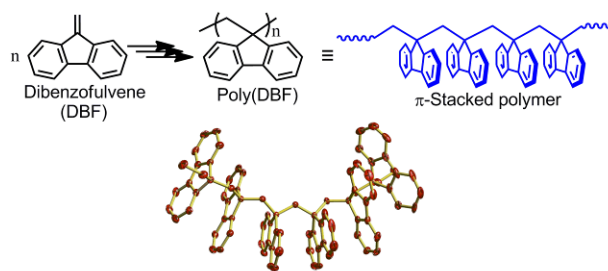


Fig.1. Crystal structure of π -stacked 6-mer
DBFの重合による π -スタック型高分子の合成

2. らせん構造を有する高分子

らせん構造は天然の高分子にしばしば見られる不斉構
造である。らせんには右巻きと左巻きの鏡像体があり、ど
ちらか一方を選択的に合成すると光学活性高分子を得る
ことができる。光学活性らせん状高分子は、医薬品の分離
機能、不斉触媒機能、非線形光学特性など、様々なキラル
機能を発現する極めて有用な物質である。このため、幅広
い化学構造を有する高分子に対するらせん構造制御は、高
分子立体学の基礎的な立場から興味深いだけではなく、付
加価値の高い物質創成の観点から重要な課題である。私達
は、種々の人工高分子に対してらせん構造制御を行っている。
《講演1-3》

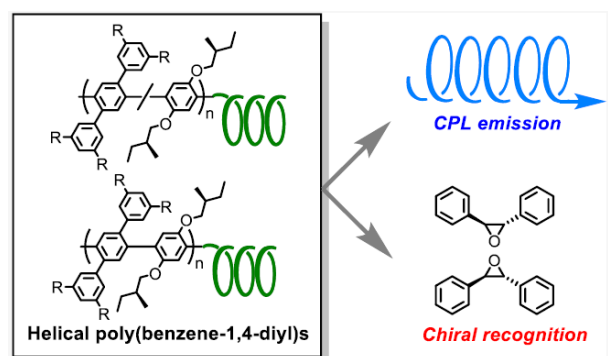


Fig. 2. 円偏光発光機能および不斉識別機能を示す
らせん状ポリ(p-フェニレン)誘導体

一例として側鎖にキラルな置換基及びかさ高い置換基
を有するポリ(p-フェニレン)誘導体を系統的に合成し、一
方向巻きのらせん構造の形成に及ぼす高分子の構造につ
いての詳細な知見を得た。ポリ(p-フェニレン)誘導体は
溶液中では安定なコンホメーションを持たないが、固体薄
膜中では一方向巻きのらせん構造を形成し、概ねよりかさ
高い側鎖基を有する高分子がより高い左右の偏りを有す
るらせん構造を形成する。かさ高いモノマー単位とキラル
なモノマー単位がランダムに並んだ高分子および交互に
並んだ高分子を合成し、モノマー配列がらせん構造形成に
影響することも明らかにした。交互共重合体については、
分子動力学計算より種々の可能なコンホメーションの中
で左巻きらせん構造がより安定であることが示唆された。

さらに、固体中でらせん構造を誘起した高分子はスチル
ベンオキシド、トレガー塩基、フラバノンに対して不斉識
別能をし、加えて、高効率な円偏光発光を示すものがある
ことを明らかにした。ポリ(p-フェニレン)誘導体は導電性
高分子の代表的なものだが、これまでらせん構造形成およ
びらせんに基づく機能を系統的に研究した例は無かった。
本研究の成果を基礎として、より幅広い共役型高分子のら
せん形成について検討を行っている。《講演1》

3. 光でらせんを作る～光による高分子の構造変化～

不斉アニオン重合により合成した一方向巻のらせん構造を有するPoly(BBPFA)は熱刺激に対しては安定だが、光（非偏光）によりらせん反転を起こす。従来、光で化合物の構造変化を起こすにはフォトクロミック基が必要と考えられてきたが、Poly(BBPFA)はフォトクロミック基持たず、光構造転移は側鎖ビフェニル残基の「ねじれ・共平面転移」に基づく（Fig. 3）。らせん転移は鎖の端から開始し、左右らせんを繋ぐkinkが鎖に沿って移動して反対の末端に至ってらせん反転が完了することが、らせん転移の詳細について、カタンザロ大Pietropaolo准教授との共同研究を通じた大規模なメタダイナミクスシミュレーションにより示されている（Fig. 4）。《講演2, 3》

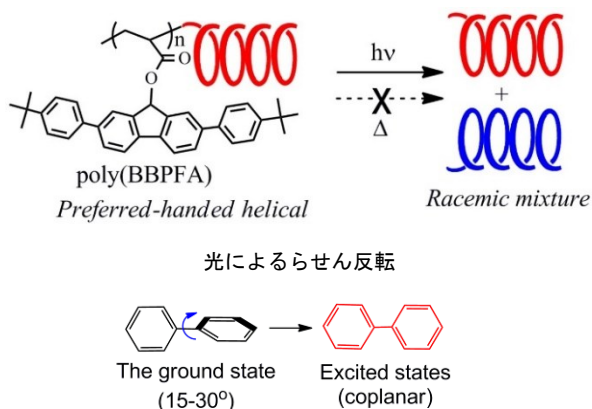


Fig. 3. 光構造転移のトリガー：ビアリアル構造のねじれ-平面転移

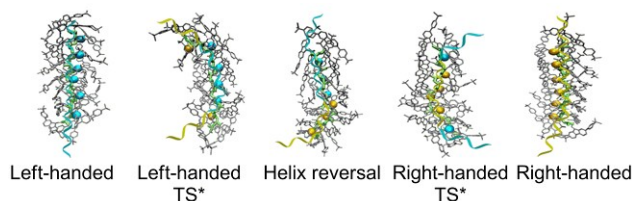


Fig. 4. 光らせん反転のメカニズム

上述の成果に基づいて、非偏光によるらせんのラセミ化研究から、キラル光である円偏光（CPL）による一方向巻らせんの構築へと発展させる研究を行っている（Fig. 5）。最初の実験対象として、電荷輸送材料として実用化されているポリジオクチルフルオレン（PDOPF）を選び、薄膜状態で円偏光を照射することにより左右のらせん構造を誘起することに成功した。さらに、CPL法の対象を規則的な枝分かれ構造を有する子分子としての有機構造体（Covalent Organic Framework: COF）へと拡張することに成功し、さら

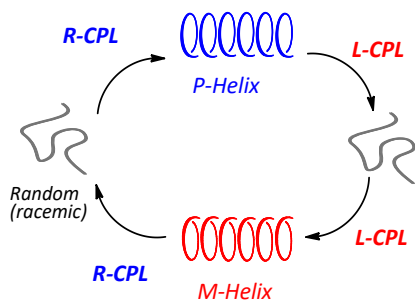


Fig. 5. 光によるらせんのスイッチング

に、低分子系へも応用している。OLED用に開発された高効率な青色発光を示すカルバゾール含有分子に対してCPL法により一方向巻きのねじれ構造を導入して光学活性を導入し、その結果、この分子が高効率な青色円偏光発光を示すことを報告している。現在、多様な高分子および低分子系へのCPLによる不斉誘起について研究を続けている。《講演2, 3》

以上に加えて、高分子触媒、高分子医薬品に関する研究も行っている。

2024年度のトピック：分子の集合状態が効率の高い円偏光発光へと繋がることを、キラルなフェナントロリン誘導体の合成および構造に関する研究から見出した。この高分子が発光性のアキラルな低分子化合物と複合体を形成し、極めて高い効率の円偏光発光を示すことを見出した（Fig. 6）。

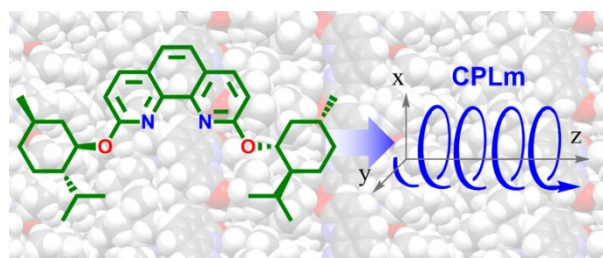


Fig. 6. キラルなフェナントロリン誘導体の化学構造および結晶中での分子配列（背景）

本化合物は溶液中ではほぼ円偏光発光を示すことが無いが、固体（結晶）は非対称性因子（ g_{lum} ）が 10^{-2} オーダーに達する高効率円偏光を示す。これは、結晶中における励起状態での分子配列に基づく現象であることをab initio分子動力学法による励起状態での分子間構造最適化およびスペクトル計算により明らかにした。《論文6》

加えて、本研究室で開発中の「光でらせんを作る」手法（円偏光照射法）に関し、同じ化学構造を有するポリ（ナフタレン-1,4-ジイル）を古典的な不斉重合法および円偏光照射法で光学活性化し、両方での生成物の構造を詳細に調べた。その結果、不斉配位子を用いた古典的不斉重合法では一方向巻きのらせん構造が生成したのに対し、円偏光照射法では従来全く知られていなかった非らせん型「二面角偏向構造」（左右のねじれ構造の比率は1/1（ラセミ）だが左右のねじれ構造に関わる二面角（平均値）が異なる新規な非らせん型非対称構造（“biased-dihedral conformation”）が生じることを見出した（Fig. 7）。両者の構造同定は、DFT法により構造～スペクトルの相関を調べることにより確認した。

また、大変興味深い結果として、らせん型および「二面角偏向構造」を有するポリ（ナフタレン-1,4-ジイル）は、極めて類似した円偏光発光特性を示し、いずれの構造もキラル高分子としての機能の資する物であることが明らかになった。これは、円偏光発光においてはおそらく発光サイトは長い高分子の中の比較的短い一部分であり、部分構造としては一方向巻きのらせん構造と「二面角偏向構造」は類似していることを示す結果である。以上、極めて新奇な高分子のキラル構造の構築と同定に成功し、また、円偏光でキラル化した高分子が円偏光発光材料として有効であることも示すことができた。《論文4、講演1》

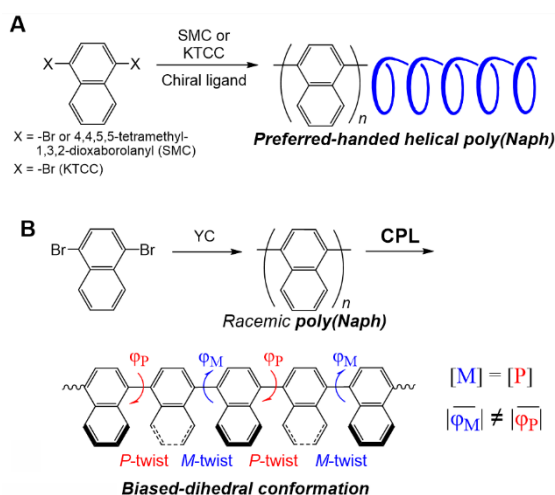


Fig. 7. 古典的不斉重合法に依らせん型ポリ(ナフタレン-1,4-ジイル)の合成 (A) および円偏光照射法による非らせん型「二面角偏向構造」の構築 (B)

■学内外の研究者との共同研究 (2024年度)

大阪教育大学谷敬太教授「ポリカルバゾロフエンの構造解析とその触媒機能の探索」/成蹊大学稲垣昭子教授「不斉反応場を有する二核イリジウム錯体の物性調査」/芝浦工業大学永直文教授「相分離構造を有する高分子材料の研究」/島根大学王傲寒助教「遷移金属触媒を用いた蛍光スイッチング高分子材料の重合と物性評価」/龍谷大学河内岳大教授「高分子らせん包接錯体形成によるゲスト分子の特性制御」/近畿大学今井喜胤准教授「触媒化学を駆使した円偏光発光エラストマー材料の開発」/茨城大学西川浩之教授「キラルドーブ型有機円偏光発光デバイスの開発」/大阪公立大学 坪井泰之教授「光渦によるキラル選択的トラッピング」/徳島大学平野朋広教授「ラジカル重合による立体特異性PNIPAMの合成研究」/Catanzaro University (Italy) Associate Professor Adriana Pietropaolo「高分子の円偏光発光に関する理論的解析」/芝浦工業大学工学部永直文准教授「ポリエチレンイミンを基礎骨格とする4級塩型高分子多孔質の合成」/University of Queensland (Australia) Dr. Pingping Han「細胞外小胞のバイオプリンティングに関する研究」/Tbilisi State Medical University (Georgia) Senior Scientist Maia Merlani「高分子医薬品の研究」/Agricultural University of Georgia (Georgia) Lecturer Nino Zavadashvili「遺伝子輸送技術のためのアミノ酸含有高分子の特性研究」/金沢大学 前田勝浩教授「キラル枝分かれ型高分子の原子間力顕微鏡による構造解析」/山形大学 森秀晴 教授「アミノ酸に基づく円偏光発光性高分子の合成と特性」/The British University in Egypt (Egypt) Dr. Nageh Hassan「高分子ファイバーの触媒化学への応用」/University of Alexandria (Egypt) assistant Professor Elsayed Elbayoumi「高分子ゲル触媒の研究」/Academy of National Food and Strategic Reserves Administration (China) Associate

Professor Yue Wang「有害重金属捕捉・分析のための高分子材料開発」/青山学院大学 長谷川美貴 教授「円偏光発光性Eu錯体の研究」

■2024年度の研究業績

原著論文 (*: 審査つき)

- (1) Naga, N.; Kusakabe, M.; Nakano, T. Synthesis and morphology control of a tetra-functional epoxy/polyethylenepolyamine monolithic porous polymers aspiring to selective molecular adsorption. *Journal of Polymer Research* **2025**, 32 (1), 29. *
- (2) Elbayoumy, E.; El-Bindary, A. A.; Nakano, T.; Aboelnga, M. M. Silver nanoparticles immobilized on crosslinked vinyl polymer for catalytic reduction of nitrophenol: experimental and computational studies. *Scientific Reports* **2025**, 15 (1), 717. *
- (3) Yonenuma, R.; Takenaka, A.; Nakano, T.; Mori, H. Multicolor circularly polarized luminescence: pendant primary amine/diphenylalanine chiral copolymers with clustering-triggered emission. *Materials Chemistry Frontiers* **2024**, 8 (21), 3596-3607. *
- (4) Wang, Q.; Son, K.; Pietropaolo, A.; Fortino, M.; Ogasawara, M.; Ohji, T.; Shimoda, S.; Bando, M.; Nakano, T. Distinctive Chiral Conformations Induced to Poly (naphthalene-1, 4-diyl) by Helix-sense-selective Polymerization and Circularly Polarized Light Irradiation. *Chemistry A European Journal* **2024**, 30, e202304275. *
- (5) Naga, N.; Yamada, K.; Nakamura, H.; Shishido, A.; Nakano, T. Photo-initiated thiol-ene reaction of multi-functional thiol and olefinic organosilicon compounds leading to porous polymers: Solution polymerization and photolithography. *Polymer* **2024**, 293, 126629. *
- (6) Bando, M.; Fortino, M.; Pietropaolo, A.; Shichibu, Y.; Konishi, K.; Nakano, T. Molecular ordering-enhanced circularly polarized luminescence of chiral 1,10-phenanthroline derivatives. *Chem. Commun.* **2024**, 60 (65), 8625-8628. *
- (7) Jiao, K.; Liu, C.; Basu, S.; Raveendran, N.; Nakano, T.; Ivanovski, S.; Han, P. Bioprinting extracellular vesicles as a cell-free regenerative medicine approach. *Extracellular Vesicles and Circulating Nucleic Acids* **2023**, 4 (2), 218-239. *

招待/基調/依頼講演・国際会議

- (1) 王 慶宇・ピエトロパオロ アドリアナ・フォルチノ マリアグラチア・小笠原正道・大路 健仁・坂東 正佳1・○中野 環:「不斉重合および円偏光照射によるらせん状および非らせん状光学活性ポリナフタレンの合成」, 第73回高分子討論会, 新潟大学, 新潟市 (2024/9/25) .
- (2) Nakano, T.: “Non-classical, Atypical Chirality in Modern Polymer Designs”, Lecture at German Aerospace Center (DLR), Lilienthalplatz 7, 38108 Braunschweig, Germany (2024/11/19).
- (3) Nakano, T.: “Polymeric Materials with Chirality”, Lecture at SKZ-KFE gGmbH Friedrich-Bergius-Ring 22, 97076 Würzburg Germany (2024/11/20).

報告・実用化推進系

report: Department of Practical Applications

研究開発部門/Research and Development Division

■ 2024年度の構成員

〈教授〉長谷川淳也・〈特任教授〉福岡淳・〈特任助教〉Daniele PADOVAN・〈東京工科大学教授/客員教授〉原賢二・〈学術研究員〉Vuong Bui Thi SINH/青柳良和・〈研究員（研究推進支援教授）〉福田伸・〈技術補佐員〉横山祐美子・〈研究員（研究推進支援教授）〉西田まゆみ・〈客員教授/産業技術総合研究所〉佐藤一彦/富永健一/浅川真澄/吉田勝/畑中雅隆・〈客員教授/ウェストコーナー〉隅田敏雄

■ 2024年度のうごき

産業技術総合研究所から5名の客員教授を、(株)ウェストコーナーから1名の客員教授が着任した。産学連携活動および研究所史編纂事業を継続するために、研究推進支援教授として西田まゆみ名誉教授、福田伸氏、山本貞明氏が研究推進支援教授として本部門の活動をサポートした。

■ 2024年度のトピック

- (1) 産官からの研究者を講師として招聘し、総合化学院において「化学産業実学」を集中講義として開講した。
- (2) 長谷川が産業技術総合研究所とクロスアポイントメントし、同触媒化学融合研究センター・特定フェローとして勤務し、共同研究を実施した。
- (3) 理学部と共催にて「毛利衛宇宙飛行士のイベント」を開催した。また、生成AIに関するコロキウム、日本化学会・産学交流委員会などの開催など、触媒化学コミュニティの発展に協力した。
- (4) 触媒科学研究所から触媒化学研究センターを経て触媒科学研究所にいたる研究所史について、運営の観点、研究の観点から調査した。

■ 2024年度の研究業績

受賞

- (1) 福岡淳：「固体触媒によるセルロース系バイオマスの解重合の研究」(2024/04/09)《文部科学省令和6年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞（研究部門）》

10月7日(月) 3講 13:00-14:30
サラリーマン研究者の仕事
～探索研究・基礎研究からプロセス研究まで～
日本曹達株式会社
プロダクションテクノロジセンター
小田原研究部 部長
明石真也

10月7日(月) 4講 14:45-16:15
研究者のサバイバル
～研究者を育て、組織を面白く強くする～
産業技術総合研究所
材料・化学領域 領域長補佐
佐藤一彦

10月7日(月) 5講 16:30-18:00
理学部出身の可能性
レイズネスト株式会社
取締役 副社長
福久正毅

10月8日(火) 3講 13:00-14:30
街づくりの仕事とは?
～理系出身者がつくる“くらし”～
三井不動産株式会社
関西支社 事業二部
事業グループ グループ長
櫻井洋介

10月8日(火) 4講 14:45-16:15
産学連携と私
東京大学大学院 工学系研究科
学術専門職員
間瀬俊明

10月8日(火) 5講 16:30-18:00
理学部を卒業して、なぜか営業として文系就職
日清商事株式会社
経営企画部長 兼 海外推進室長
中村訓士

10月9日(水) 3講 13:00-14:30
とにかく迷ったけど やってみたい中国編
～何事もやってみないとその是非は分からない～
森田化学工業株式会社
専務取締役 中国代表
堀尾博英

10月9日(水) 4講 14:45-16:15
新規ビジネスへの挑戦
株式会社ウェストコーナー
代表取締役 会長 **隅田敏雄**
代表取締役 社長 **西田まゆみ**

講義場所：
フロンティア応用科学研究棟 鈴木章ホール

授業に関する問い合わせ：
触媒科学研究所 長谷川淳也
011-706-9145
hasegawa@cat.hokudai.ac.jp

2024年度大学院共通授業科目

化学産業実学

聴講歓迎
修士進学予定の学部生のみならず!
早期履修可能です。
キャリアパスを考える機会にしたいかがでしょうか?

理学の学部を卒業して社会で活躍している方々を講師としてお招きし、それぞれの企業、公立研究所等での成功体験、失敗体験を通して、企業と大学での研究の違いや、マネジメントの違いを解説していただきます。先輩方の奮闘記は、必ず将来自分の道を選ぶ際に役立つと思います。

クラスターの設置と終了

ターゲット研究部は、各研究部門とは別に、触媒を機軸とした科学・技術のイノベーションを目的とした研究組織で、自立集合型の拠点型および展開型の研究クラスターから構成される。拠点型研究クラスターはおもに触媒科学研究所内の教員によって構成され、触媒および関連分野のコミュニティにおける幅広い連携研究活動を行うことを目的とし、展開型研究クラスターは准教授をリーダーとして学内外の研究者から構成され、触媒に関連するトピックを研究することを目的としている（展開型

研究クラスターのリーダーである准教授は基礎研究系の各研究部門と兼任）。研究クラスターの設置と終了はターゲット研究部会議において審議、決定される。2007年4月に前身である触媒ターゲット研究アセンブリが設置されて以来、拠点型2、展開型20の合計22の研究クラスターが設置され、リーダーの異動などにもなっており、2024年度までに拠点型1、展開型15の合計16の研究クラスターの活動が終了した。これまでの研究クラスターは下表のとおり（2024年度までに終了したクラスターはグレーで表示）。

分類	研究クラスター名	リーダー	設置日	終了日
拠点型	触媒ネットワーク	大谷文章	2007/4/1	2009/9/30
拠点型	触媒研究基盤開発	長谷川淳也	2009/10/1	
展開型	不斉反応場	小笠原正道	2007/4/1	2016/3/31
展開型	規制表面場材料合成	Wang Jae CHUN（朝倉清高）	2007/4/1	2009/3/31
展開型	規整表面ナノ構造	高草木達	2008/10/1	2023/3/31
展開型	結晶機能化	阿部竜	2007/4/1	2012/3/31
展開型	エネルギー変換場	竹口竜弥	2007/4/1	2014/3/31
展開型	バイオ変換	福岡淳	2007/4/1	2010/3/31
展開型	バイオインターフェース	Shen YE	2007/4/1	2017/3/31
展開型	分子集積反応場	原賢二	2009/4/1	2015/3/31
展開型	秩序構造反応場	山内美穂	2009/4/1	2011/12/31
展開型	機能複合型グリーン触媒	清水研一	2010/10/1	2015/3/31
展開型	プラズモン光触媒反応	Ewa KOWALSKA	2013/2/1	2023/3/31
展開型	バイオポリマー	小山靖人	2013/10/1	2016/3/31
展開型	界面シミュレーション	中山哲	2014/8/1	2019/3/31
展開型	酸塩基触媒	中島清隆	2015/8/1	2022/3/31
展開型	機能性合金触媒	古川森也	2016/11/1	2023/4/30
展開型	遷移金属誘起高分子合成/変換	Zhiyi SONG	2018/1/15	
展開型	ナノ界面反応場	飯田健二	2020/2/1	
展開型	生体分子標識触媒	浅野圭佑	2022/7/1	
展開型	データ駆動型触媒	鳥屋尾隆	2022/8/1	
展開型	天然炭素資源活用	菅沼学史	2023/6/1	
展開型	混成電位駆動型触媒	武安光太郎	2026/5/1	

触媒研究基盤開発クラスター/ Research Cluster for Sustainable Catalyst

■2024年度の構成員

〈リーダー/教授〉長谷川淳也・〈教授〉高草木達/中島清隆/村山徹/清水研一/浦口大輔/中野環・〈研究推進支援教授〉山本貞明/福田伸

■研究課題

1. 触媒研究支援事業

触媒科学技術の先端研究を推進・支援するための共通基盤を先験的に整備する。

2024年度のトピック：研究所内の共通研究基盤として，研究所の計算機システム及びソフトウェアを整備・管理した．02-109室において，VASPプログラムを搭載した計算機を運用した．

2. 触媒高等実践研修プログラム事業

研究者コミュニティにおける研究者人材育成，触媒開発支援，触媒に関する啓発活動を実施する。

2024年度のトピック：触媒高等実践研修プログラム事業では，高専生から企業研究者に至る多様な参加者を受け入れた．なお，本事業は拠点活動として組入れられている．また，理学部と共催にて「毛利衛宇宙飛行士のイベント」，生成AIに関するコロキウム，日本化学会・産学交流委員会などの開催など，触媒化学コミュニティの発展に協力した．

3. 研究所史編纂事業

触媒科学における新学際領域を戦略的に開拓するために，触媒開発史を編纂する。

2024年度のトピック：山本先生，福田先生の協力により，触媒研究所期における研究所を運営面と研究面において調査して頂いた．

遷移金属誘起高分子合成/変換研究クラスター/ Research Cluster of Transition-metals-induced Synthesis and Transformation of Polymer

■2024年度の構成員

〈リーダー/准教授〉 Zhiyi SONG 〈学外研究協力教員/Renmin University of China〉 Zhiping LI 〈学外研究協力教員/University of Chinese Academy of Science〉 王從洋・〈学外研究協力教員/Henan Academy of Science〉 陳輝・〈学外研究協力教員/Peking University〉 張文雄・〈外国人研究員/鄭州大学修士2年生〉 熊洽羽 [2024/09/01~2024/11/30] /馬詩雨 [2024/09/01~2024/11/30]

■2024年度のうごき

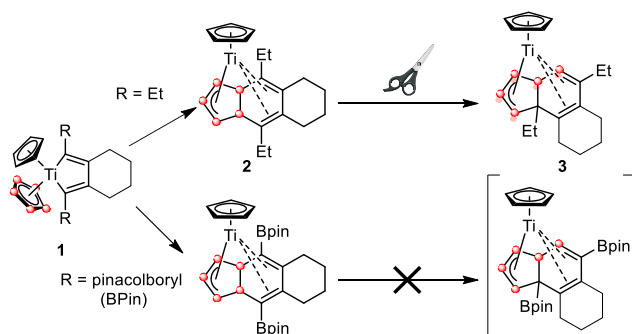
2024年度は、重点クラスターとして昨年度からの3名に加えて北京大学の張文雄教授と河南省科学院化学研陳輝研究員が本クラスターに参画した。

■研究課題

遷移金属上における有機分子の分子骨格変換反応を用いることにより、新しい有機合成手法の開発を行った。

1. 連続的な炭素-炭素結合の生成と切断反応に関する研究

これまでに当研究室では、アルキル置換基を持つチタナシクロペンタジエン錯体1を出発物とし、炭素原子が有機分子内を連続して移動する反応についての研究を行ない報告してきた。本研究では、アルキンをチタノセンジブチルと反応させるとチタナシクロペンタジエン1が高い収率で得られた。合成した錯体1を加熱すると、Cp環のカップリング反応が進行し錯体2が生成する。さらに錯体2はより安定な錯体3に変換される。錯体3ではCp環に由来する5つ炭素が環状ではなく鎖状に並んでいる。この炭素が移動し

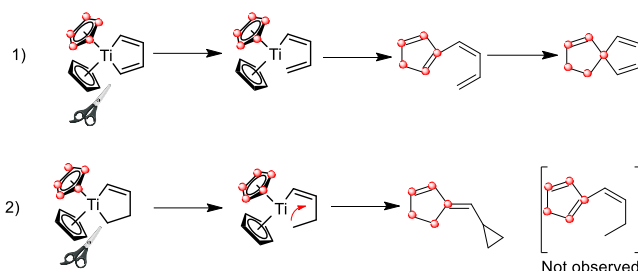


ていく反応をどのように理解し説明するのが適切なのかを考え、炭素が移動する仕組みとして有機分子内炭素原子連続して移動する反応を制御する因子を提案した。《論文2》

2. チタナシクロペンテンにおけるシクロペンタジエニル配位子とアルケニル炭素とのカップリング反応

当研究室で開発された方法を用いて、アルキンをチタノセンジブチルと反応させるとチタナシクロペンタジエンが高い収率で得られる。また、アルキンをチタノセンジエチルと反応させるとチタナシクロペンテンが高い収率で得られる。

合成したチタナシクロペンタジエンおよびチタナシクロペンテンが、分子内にあるシクロペンタジエニル配位子とカップリング反応を検討した。チタナシクロペンタジエンに塩化ビスマス(III)を加えて反応させると、スピロ誘導体を生成する(1)。チタナシクロペンテン錯体にヨウ化ビスマス(III)を加えて反応させると、シクロプロパニルメチレンシクロペンテンを生成した(2)。《論文3》



チタナシクロペンタジエンから片方のチタン-炭素結合を切断しジエンニルチタノセン錯体を生成した後、シクロペンタジエニル配位子とジエンニルのカップリングが進行すると思われる。チタナシクロペンテンからチタン- (Sp^3) 炭素結合を切断しアルケニルチタノセン錯体を生成し、シクロプロパン化を経てシクロペンタジエニル配位子とアルケニル炭素のカップリングが進行すると考えられる。ジエンニルチタノセン錯体とアルケニルチタノセン錯体の安定性の違いが構築される炭素骨格の違いにつながったということがわかる。

■2024年度の研究業績

原著論文(全て審査つき)

- (1) Zhao, Y.; Chai, Z.; Song, Z.; Wei, J.; Zhang, W. Computational Prediction and Experimental Confirmation of the Reaction between 1-Lithio-1,3-Butadiene and White Phosphorus Affording Phosphoryl Lithium, *Organometallics* **2025**, *44*, 300.
- (2) Takahashi, T.; Bando, M.; Chen, H.; Zheng, Y.; Song, Z. Flash Communication: Stopping the Movement of Carbon Atoms Traveling in Organic Molecules by Pinacolboryl Substituents, *Organometallics* **2024**, *43*, 2851.
- (3) Takahashi, T.; Nakata, H.; Bando, M.; Song, Z., Formation of Carbon-Carbon Double Bond between Cp Ligand and Alkenyl Carbon of Titanacyclopentenes, *Synlett*. **2024**, *35*, A-C.

招待/基調/依頼講演・国際会議

- (1) Song, Z.; "Embark on a challenging but rewarding adventure with chemistry's journey", Henan Academy of Sciences, Zhengzhou, Henan, China (2024/10/29). [Invited]

ナノ界面反応場研究クラスター/ Research Cluster for Nano-Interface Reaction Field

■2024年度の構成員

〈リーダー/准教授〉飯田健二・〈学外研究協力教員/筑波大学〉矢花一浩・〈学外研究協力教員/京都大学〉寺西利治・〈学外研究協力教員/東京理科大学〉根岸雄一 [~2024/04/30]・〈学外研究協力教員/東北大学〉根岸雄一 [2024/05/01~]・〈学外研究協力教員/豊橋技科大〉八井崇・〈学外研究協力教員/アルバータ大学〉Andriy KOVALENKO〈学外研究協力教員/大阪大学〉古川森也 [2024/08/01~]

■2024年度のうごき

2024年度は、古川森也教授が新たに加わり、共同研究を精力的に推進した。

■研究課題

原子間結合から界面までの様々なサイズスケールの幾何的特性を利用して触媒能を制御するための指針を構築する。そして、ナノ粒子/担体や固体/液体といった界面を反応場とする光触媒や電極触媒を開発する。そのために、固液界面や担持ナノ粒子の外場応答を扱うことができる理論計算手法を構築し、その手法を用いて触媒反応のメカニズムを明らかにする。計算から得られた知見に基づき、実験グループとの共同研究を通して触媒の設計を進める。

1. 不均一系触媒を用いた電極反応

電池や電気分解反応への興味から、電極触媒の開発が盛んに行われている。しかし、不均一系触媒と電解質溶液からなる複雑な電気化学系を理論計算手法で扱うことは容易ではなく、理論的研究はあまり進んでこなかった。

我々は、電極触媒反応の機構を明らかにするべく、独自の理論計算手法を開発するとともに、開発した手法を用いて電圧や溶液の役割について研究を進めている。同時に、実験グループと連携して、新規な電極触媒材料の開発を行っている。これまでに、Pt₁₇クラスターを用いた酸素還元反応について、Pt薄膜よりも高い活性が得られることとその触媒作用機構を明らかにしている。こうした研究を通して、電極触媒と電解質の界面に電圧がかかることで発現する反応場の設計指針を明らかにすることを目指している。

2024年度のトピック: Ptクラスターの触媒作用について理解を深めるべく、Pt₁₃クラスターへの酸素分子の吸着機構について計算を行い、吸着エネルギーや電子構造変化をPt₂やPt薄膜と比較した。まず、Pt₁₃クラスターへの酸素分子の吸着サイトを調べたところ、23カ所が見出された。各Ptサイトによって吸着エネルギーが1 eV程度も異なっていた。そこで、吸着サイトの電荷や酸素への電荷移動量を解析した。しかし、吸着エネルギーとは相関がみられなかった。酸素吸着にともなう電子構造変化の機構を明らかにするべく、局所状態密度の積分値(ILDOS)を解析した(Fig. 1)。その結果、Pt薄膜では広いエネルギー範囲でILDOSが変化していた。一方で、Pt₁₃クラスターのILDOSは、フェルミレベル近傍で顕著に変化しており、酸素吸着エネルギーの大きさと明瞭に相関していた。Ptクラスターへの酸素吸着にともなう電子構造変化について、Pt薄膜との違いが明らかになった。《論文1》

電極触媒材料について研究を進めるとともに、電気二重層の電極反応における役割について理論的研究を進めて

いる。これまで、高い並列化効率を有する第一原理計算プログラムSALMONと液体の統計力学理論(3D-RISM法)を融合した手法を開発した。開発したプログラムを用いて、酸素還元反応における電気二重層の役割について研究を進めている。白金触媒や単原子金属触媒を電極触媒に用いた酸素還元反応について、帯電した電極ならびに電解質溶液と反応物との間の相互作用による反応活性の変化について解析を進めている。この電極反応に関する研究成果については、現在論文を執筆中である。

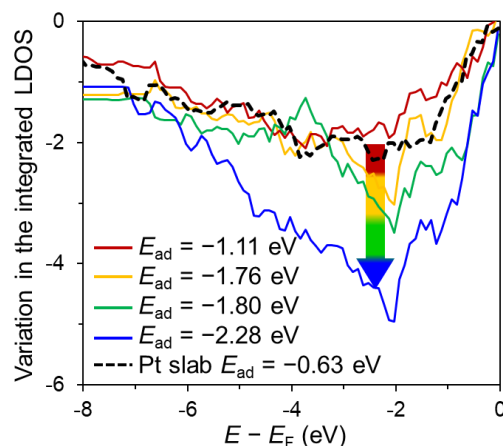


Fig. 1. Variation in the integrated local density of states (ILDOS) of Pt adsorption sites induced by O₂ adsorption. 《論文1》

■学内外の研究者との共同研究(2024年度)

筑波大学計算科学研究センター矢花一浩教授「ナノ構造体の光励起電子ダイナミクス」/京都大学化学研究所寺西利治教授・佐藤良太助教「プラズモンニック合金ナノ粒子の創成」/豊橋技術科学大学八井崇教授「担持した有機金属錯体や金属ナノクラスターを用いた光触媒の開発」/東北大学根岸雄一教授・東京理科大学川脇徳久講師「担持金属ナノクラスターを用いた電極触媒の開発」/大阪大学工学研究科古川森也教授「電力を利用する触媒反応の機構」/Alberta大学Andriy KOVALENKO教授「電極触媒反応の理論計算手法の開発」/Uppsala大学Marcus LUNDBERG准教授・European XFEL上村洋平博士「内核X線発光スペクトルに関する研究」

■2024年度の研究業績

原著論文(全て審査つき)

- (1) Hirase, H.; Iida, K.; Hasegawa, J. Characterization of changes in the electronic structure of platinum subnanoclusters supported on graphene induced by oxygen adsorption. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2024**, 26, 18530–18537.

招待/基調/依頼講演・国際会議

- (1) Iida, K.: "Electrocatalysis of Metal Nanoclusters Revealed by Theoretical and Computational Study", The 12th Singapore International Chemistry Conference (SICC-12), Singapore, (2024/12/9-13). [Invited talk]
- (2) Iida, K.: "Theoretical and Computational Study on Heterogeneous Interfaces Under Light and Voltage Bias", The 27th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANS-CSE-27), Chulalongkorn University, Bangkok, Thailand, (2024/7/30-2024/8/3). [Invited talk]

生体分子標識触媒研究クラスター/ Research Cluster for Catalytic Labeling of Biomolecules

■ 2024年度の構成員

〈リーダー/准教授〉浅野圭佑・〈学外研究協力教員/立教大学〉山中正浩・〈学外研究協力教員/産業技術総合研究所〉生長幸之助・〈学外研究協力教員/大阪大学〉真鍋良幸・〈学外研究協力教員/九州大学〉堀雄一郎・〈学外研究協力教員/産業技術総合研究所〉上田善弘

■ 2024年度のうごき

昨年度から継続して上記5名が本クラスターに参画し、共同研究を実施した。

■ 研究課題

生体分子の動的挙動を観察することは生命現象の理解につながる。このためタンパク質や糖鎖、またそれらが相互作用する分子を検出する化学的手法が必要である。しかし、特異的標識反応ツールは選択肢がまだ限られており、検出精度、生体侵襲性などの観点でも課題がある。本研究クラスターでは、生体分子挙動を高精度かつ低生体侵襲的に標識するための新たな反応ツールになる分子触媒系を開発する。また、蛍光プローブによる可視解析技術や生体分子の化学合成、修飾技術を融合して、生体分子の動的挙動を多角的に追跡し、生命機能の理解につなげる。これらの目標を達成するために、その基盤になる有機触媒、光触媒、反応剤などの化学反応ツールの開発と、細胞系を対象とした生体適合化学に利用できる触媒反応技術の創出を並行して推進している。

2024年度のトピック: 光触媒反応は光を照射したタイミングおよび触媒の近傍だけで反応を起こせることから時空間選択的標識に利用でき、また同位体が豊富な臭素による標識は質量分析による標識体の検出に利点があるため、ペプチドやタンパク質の光触媒的臭素化はタンパク質間相互作用などの生体分子挙動を高感度に解析する技術になり得る。しかし、生体適合条件においてペプチドやタンパク質を光触媒的に臭素化する反応技術が欠如していた。そこで、重要な生物学的機能が認識されながらも標識および解析技術の開発が遅れているチロシンをターゲットに、光照射により駆動してアミノ酸、ペプチド、タンパク質を臭素化する有機触媒系の開発を進めている (Fig. 1)。2024年度は蛍光色素触媒と光駆動オレフィン触媒による反応系を開発した。それぞれの触媒系で生体侵襲性が低い可視光を利用でき、反応の時空間制御性を実証した。以下にそれぞれの概要を述べる。

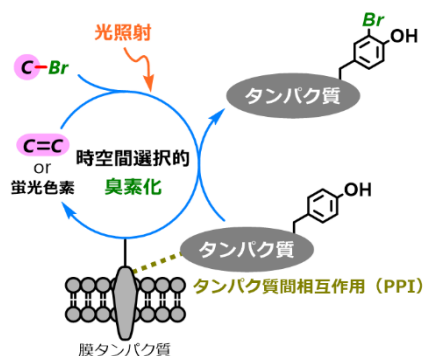


Fig. 1. 光触媒的臭素化標識によるタンパク質間相互作用解析。

(1) 生体分子標識反応を指向した臭素化剤BODNの開発《論文1・学会発表1, 2, 3, 4・受賞1, 2》。

生体分子標識は 37 ° C の水系溶媒中での実施が求められ、反応性が高い Br₂ や *N*-ブロモスクシンイミド (NBS) などの従来の反応剤はバックグラウンド (BG) 反応や分解を起こすために使用できない。そこで、生体適合性と光化学的反応性を備えた臭素化剤 BODN を独自に開発した (Fig. 2)。BODN は生体適合条件において BG 反応を起こさないが、有機色素を光触媒として可視光照射により活性化でき、チロシンの臭素化に利用できた。堀グループ (G) が開発した蛍光プローブに利用されている色素が光触媒として機能した点は今後の応用に対して重要な特徴になる。

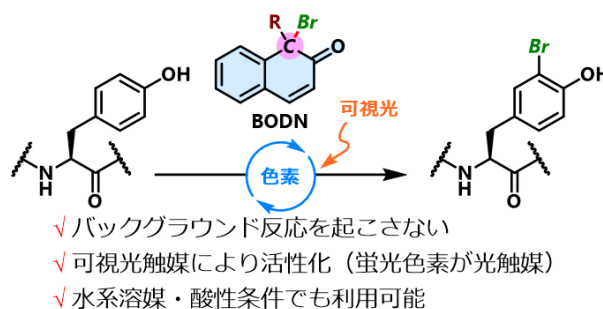


Fig. 2. 生体分子標識反応を指向した臭素化剤BODN。

(2) 二官能性オレフィン触媒および光駆動触媒の開発《論文2, 3・学会発表1, 3, 4・受賞1, 2》。

独自に開発したシクロオクテン触媒による臭素化反応の機構に関して山中 G と計算化学的解析を進め、触媒活性の向上に有効なベンジル基の置換基効果の詳細を明らかにした (Fig. 3)。さらにこの機構的知見を基に、*p*-ヒドロキシベンジル基を導入することでこれがオレフィン部位と協働して臭素化剤を多点活性化できる、さらに高活性な二官能性触媒の開発につなげた。また、*p*-ヒドロキシベンジル基に光分解性保護基を付けることで光照射により系内で脱保護して活性化できる光駆動触媒も開発した。二官能性シクロオクテン触媒の開発のために、その合成に必要なクロスカップリング反応によるベンジル基置換シクロオクテンの高効率合成法も独自に開発した。

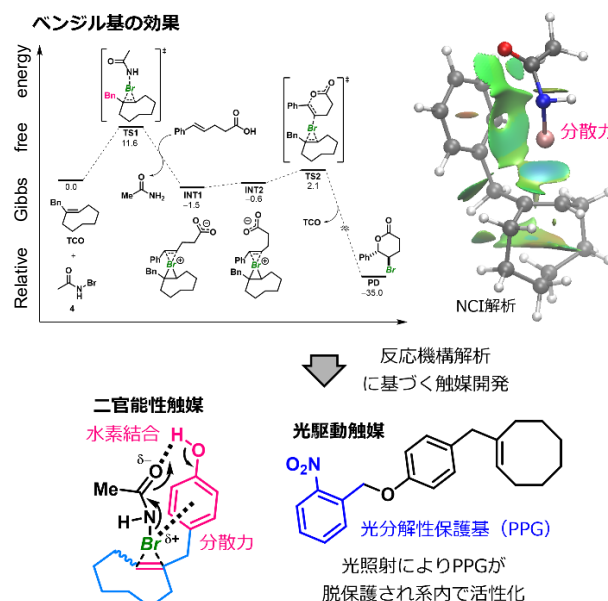


Fig. 3. 反応機構解析に基づく触媒開発

2024 年度に開発した化学反応ツールおよび触媒系は、今後の生体分子標識法の開発を加速する基盤技術になる。

■学内外の研究者との共同研究（2024年度）

京都大学国際高等教育院 松原誠二郎特定教授「炭素-炭素二重結合の有機触媒機能開拓」/九州大学大学院理学研究院 堀雄一郎教授「細胞膜タンパク質における近接臭素化標識法の開発」/産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター 生長幸之助研究チーム長「光触媒的トリプトファン修飾のための反応剤開発」/産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター 上田善弘主任研究員「光触媒的チロシン臭素化反応の機構解明」/大阪大学大学院理学研究科 真鍋良幸助教「非天然糖タンパク質合成法の開発」/立教大学理学部 山中正浩教授「計算化学によるシクロオクテン触媒反応の機構解析」/長崎大学総合生産科学域（環境科学系）白川誠司教授「不斉臭素化触媒系の開発」

■2024年度の研究業績

総説/解説/報告

- (1) Yoshida, R.; Hori, Y.; Uruguchi, D.; Asano, K. BODNs as biocompatible brominating reagents: visible-light photocatalytic tyrosine modification under physiologically favorable conditions. *Chem. Commun.* **2024**, *60*, 12381.
- (2) Nagano, T.; Shimazu, T.; Ono, Y.; Kaneko, K.; Matsubara, S.; Yamanaka, M.; Uruguchi, D.; Asano, K. Mechanism-Guided Development of Bifunctional Cyclooctenes as Active, Practical, and Light-Gated Bromination Catalysts. *Chem.—Eur. J.* DOI: 10.1002/chem.202404011.

- (3) Murata, R.; Yoshida, R.; Uruguchi, D.; Asano, K. Synthesis of Substituted Cyclooctenes through Cross-Coupling Reactions. *Synlett* **2025**, *36*, 69.

招待/基調/依頼講演・国際会議

- (1) 浅野圭佑：「選択的触媒反応空間を拡張する反応ツールの創製」, 山口大学講演会, 山口大学 (2024/06/18) . [招待講演]
- (2) Asano, K.: "Photocatalytic Bromination for Biomolecular Labeling", International Symposium of Institute for Catalysis 2024: Sustainable synthesis by use of efficient catalyst, Hokkaido University, Sapporo, Japan (2024/07/29). [Invited]
- (3) 浅野圭佑：「触媒・反応ツールの開発が拓く臭素化の科学」, 若手研究者のための有機化学札幌セミナー, 北海道大学 (2024/10/31) . [招待講演]
- (4) Asano, K.: "Photocatalytic Bromination toward Biomolecular Labeling", The 17th International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, Academia Sinica, Taiwan (2024/12/01). [Invited]

受賞

- (1) 浅野圭佑：「触媒的臭素化による高感度タンパク質間相互作用解析」, UBE学術振興財団 (2024/06/19) 《第64回学術奨励賞》
- (2) Asano, K.: "Photocatalytic Bromination toward Biomolecular Labeling", The 17th International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia (Singapore) (2024/12/02) 《Asian Core Program Lectureship Award 2024》

データ駆動型触媒研究クラスター/ Research Cluster of Data-Driven Catalyst Developments

■ 2024年度の構成員

〈リーダー/助教〉鳥屋尾隆・〈学外研究協力教員/Delft University of Technology (オランダ)〉浦川篤・〈学外研究協力教員/Paul Scherrer Institut (スイス)〉Davide FERRI・〈学外研究協力教員/ETH Zurich (スイス)〉Evgeny Pidko・〈学外研究協力教員/Delft University of Technology (オランダ)〉Christophe Copéret

■ 2024年度のうごき

昨年度から、〈学外研究協力教員/Delft University of Technology (オランダ)〉Evgeny PIDKO・〈学外研究協力教員/ETH Zurich (スイス)〉Christophe COPÉRETを新たに加えた上記5名が参画して研究を行った。

■ 研究課題

触媒をはじめとする材料科学研究は未だ「絨毯爆撃的なスクリーニング」から脱却できていない。研究者はこれまで、大量の実験データ・文献知・経験知を統合して、予測・仮説の形成を行ってきたが、年々増え続ける膨大なデータ・知見を咀嚼し、目的に対して適切な仮説を提供できる人材は皆無である。人知に基づく研究は限界を迎えており、データ科学の先進技術を導入して材料科学研究の在り方を刷新することが求められている。

本クラスター研究では、実験・理論・データ科学を融合した新しい触媒研究の方法論を確立することを目指す。本研究により集積された実験データ、計算科学による知見を統合して対象とする触媒反応・分野の理論を体系化する。また、開発した新規触媒を単なる1成功例に終わらせることなく、その高性能要因を抽出し一般化することで、さらなる高活性触媒開発の礎とする。

2024年度のトピック: 外挿的探索が可能な機械学習手法による H_2 -SCR触媒開発。

ルールとゴールが明確な“最適化研究”においては、機械学習を中心とした人工知能(AI)技術は圧倒的な力を発揮し、化学・材料分野においてもすでに成功例が出始めている。一方、真に革新的な材料・触媒の開発は未だ達成されていない。革新的な材料・触媒の発見はこれまでのデータ中に無い元素、もしくは使用頻度の極めて少ない元素の活用から生まれるものであるが、従来型のAI技術ではデータの中に含まれていない情報は提案できないためである。つまり、AIが提案する触媒候補元素は既出のものとなり(内挿的提案)、未探索の元素を提案(外挿的提案)することはない。

我々のグループでは、この外挿的提案を実現することを目的としたMLモデルを開発してきた。本モデルでは、触媒構成元素そのものを学習に使うのではなく、その特徴量(電気陰性度、融点等)と構成比の積を予測記述子として用いることで、元々のデータセットに含まれている元素に縛られることなく有望な触媒候補元素を提案することが可能である。

本研究では、このML手法を活用し、 H_2 によるNOの選択還元(H_2 -SCR)反応に有効な多元素含有触媒を開発した。具体的には、45点の初期データセットから、機械学習予測+実験のサイクルを24回繰り返すことにより、合計425件の触媒の活性を評価した(Fig. 1)。その結果、初期データセットに含まれていた高活性触媒よりも高い活性を示す触媒を10件以上見出した。現状の最高活性触媒(Pt(1.6)-Ir(0.2)/Ba(1.5)-Co(1)/H-ZSM-5 (Si/Al ratio = 11))には、初期データセットには含まれていなかった元素(Ba)も使用されていた。これは、開発した手法が外挿的探索を効率よく行える画期的な機械学習モデルであることを端的に示している。

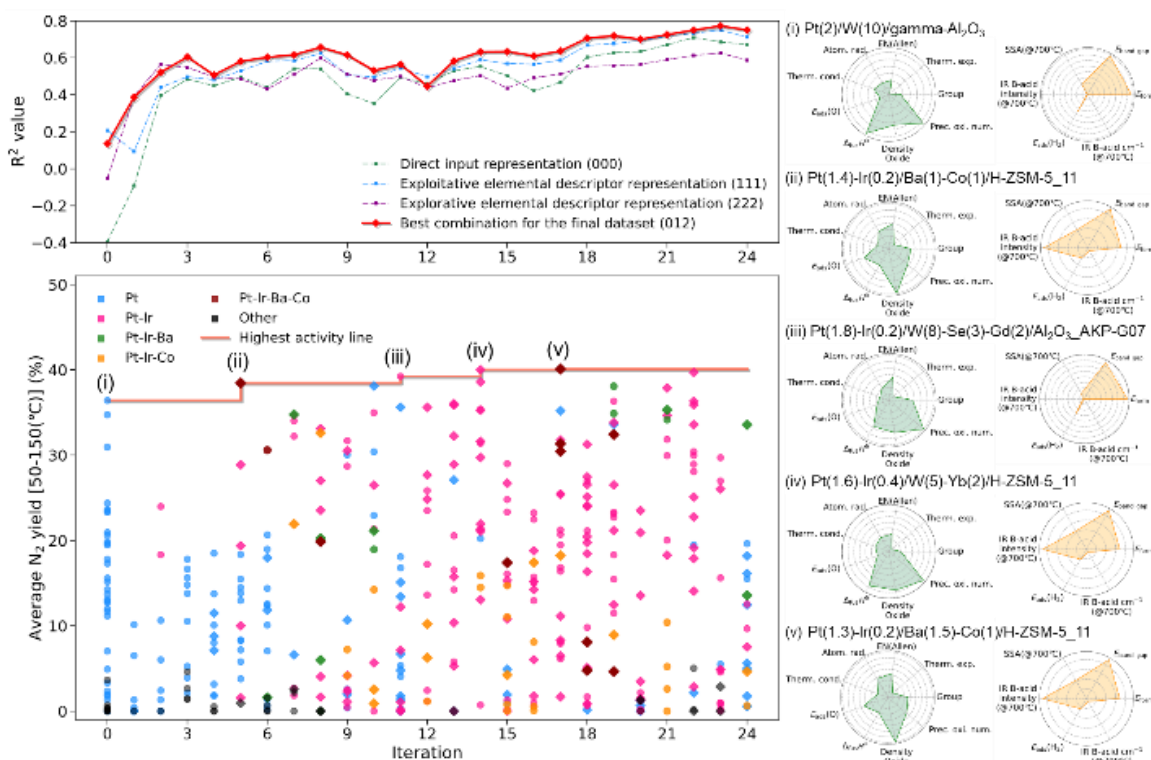


Fig. 1. 機械学習を利用した H_2 -SCR触媒の開発。

■学内外の研究者との共同研究（2024年度）

関西大学化学生命工学部 大洞康嗣教授「有機還元剤を用いた異種金属ナノ粒子の合成とその酸化的カップリング反応への触媒的応用」/東京科学大学フロンティア材料研究所 石川理史准教授「水素気流下で形成される酸触媒活性点の特定と新規触媒反応への応用」/東京理科大学応用化学科 貞清正彰准教授「In-situ赤外分光によるマグネシウムイオン含有アニオン性配位高分子のゲスト誘起イオン伝導の機構解明」

■2024年度の研究業績

原著論文（すべて審査つき）

- (1) Toyao, T. Toward accelerated discovery of solid catalysts using extrapolative machine learning approach. *Chem. Lett.* **2024**, 53, upae163.
- (2) Du, P.; Fakir, A. A. E.; Zhao, S.; Dostagir, N. H. M. D.; Pan, H. L.; Ting, K. W.; Mine, S.; Qian, Y.; Shimizu, K.; Toyao, T. Ethanol Synthesis via Catalytic CO₂ Hydrogenation over Multi-Elemental KFeCuZn/ZrO₂ Catalyst. *Chem. Sci.* **2024**, 15, 15925–15934.
- (3) Tabaru, K.; Fujihara, T.; Torii, K.; Suzuki, T.; Jing, Y.; Toyao, T.; Maeno, Z.; Shimizu, K.; Watanabe, T.; Sogawa, H.; Sanda, F.; Hasegawa, J.; Obora, Y. Exploring Catalytic Intermediates in Pd-Catalyzed Aerobic Oxidative Amination of 1,3-Dienes: Multiple Metal Interactions of the Palladium Nanoclusters. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146, 33, 22993–23003.
- (4) Niwa, S.; Hashimoto, S.; Chen, D.; Toyao, T.; Shimizu, K.; Sadakiyo, M. High ionic conduction in a robust anionic metal-organic framework containing Mg²⁺ under guest vapors. *Dalton Trans.* **2024**, 53, 12043–12046.
- (5) Ishikawa, S.; Kosugi, Y.; Kanda, Y.; Shimoda, K.; Jing, Y.; Toyao, T.; Shimizu, K.; Ueda, W. Microporosity and Catalytic Activity for Hydrodesulfurization of Pharmacosiderite Mo₄P₃O₁₆ Synthesized at a Moderate Temperature. *Inorg. Chem.* **2024**, 63, 17, 7780–7791.

招待/基調/依頼講演・国際会議

- (1) 鳥屋尾隆：「機械学習を利用した固体触媒開発」，日本結晶成長学会 新技術・新材料分科会第4回研究会，北海道大学（2024/8/1）. [Invited]
- (2) 鳥屋尾隆：「実験とデータ科学を利用した固体触媒研究」，日本コンピュータ化学会 2024 年秋季年会，室蘭（2024/10/20）. [Invited]
- (3) 鳥屋尾隆：「データ駆動型触媒開発と放射光を用いた触媒作用機構研究」，第2回北海道大学触媒科学研究所-立命館大学 SR センター合同シンポジウム 触媒科学と放射光 触媒科学の Soft~Tender X 線への展開 II 実際と新しい可能性，北海道大学（2024/12/25）. [Invited]
- (4) Toyao, T.; “Accelerated discovery of heterogeneous catalysts using machine learning approach”, The 2nd China-Japan Symposium on Catalysis (2ndCJSC), China (2024/11/3). [Invited]

天然炭素資源活用研究クラスター/ Research Cluster for Utilization of Natural Carbon Resources

■ 2024年度の構成員

〈リーダー/准教授〉菅沼学史・〈学外研究協力教員/東京科学大学〉北野政明・〈学外研究協力教員/大阪大学〉森浩亮・〈学外研究協力教員/東北大学〉加藤英樹・〈学外研究協力教員/鳥取大学〉野上敏材・〈学外研究協力教員/東京科学大学〉野村淳子

■ 2024年度のうごき

上記6名が本クラスターに継続して参画していた。

■ 研究課題

本クラスターでは、固体触媒のもつ複数の活性サイトの協働機能を利用して、天然炭素資源を基幹化学品へ転換する触媒反応をデザインすることを目的としている。多様な極性官能基を有する天然有機物を変換するためには、極性官能基を自在に開裂する触媒反応プロセスが必要となる。これまでにカルボニルやアミドの水素化、水酸基やエーテルのC-O結合開裂が金属ナノ粒子と低原子価酸化物種の協働作用により選択的に促進されることを見出した。これを展開し単一の活性サイトでは不可能な官能基変換反応に対して複数の活性サイトの協働機能触媒を利用すれば、天然炭素資源の多様な官能基を自在に開裂・結合する触媒技術に繋がると考えた。本課題でターゲットとする基質はバイオマス由来の有機分子に限定せず、セルロースやキチンなどの天然高分子や廃プラスチックなどの解重合・分解にもチャレンジする。

1. アミノ酸から含窒素化学品原料を合成するプロセスの構築

2024年度のトピック：糖類の発酵により製造されるグルタミン酸を脱水反応後、脱炭酸すると2-ピロリドンが得られる（図1）。我々はRu/Al₂O₃を利用し、カルボキシ基の水素化とその後の脱カルボニル化により、温和な反応温度で2-ピロリドンが生成することを見出した。また、ゼオライト担持Ru触媒による水素化でピログルタミンールが選択的に生成することも見出した。

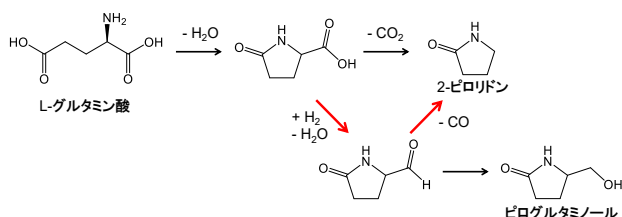


図1. グルタミン酸の転換

ピログルタミンールは多様な極性官能基をもつが、そのヒドロキシメチル基を選択的に水素化できれば5-メチル-2-ピロリドンが生成する。貴金属ナノ粒子と遷移金属酸化物種の組み合わせをスクリーニングした結果、RhとVの組み合わせで最も高い収率を示した。また、担体にSiO₂を用いたとき、Rhのδ+性が高く、水素分子の開裂が促進され、他の触媒よりも優れた触媒活性を示すことがわかった（図2）。この内容は得られた結果を論文にまとめている段階である。

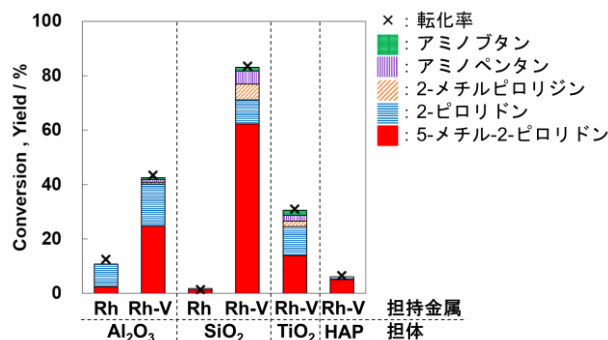
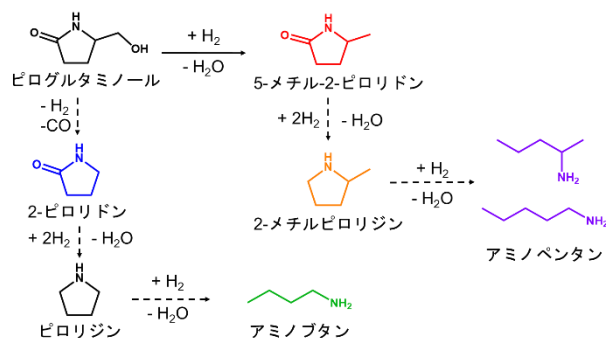


図2. ロジウム系複合触媒によるピログルタミンールの水素化

2. 固体酸塩基触媒による廃プラスチックのモノマー化

2024年度のトピック：廃プラスチックのPET（ポリエチレンテレフタレート）樹脂をアルコールシスによりモノマー化する研究を行った。この反応に対してPETのカルボニル基とアルコールをLewis酸点と塩基点で活性化させる協働作用が有効だと考えた。ナノロッド形状のCeO₂（CeO₂-NR）は表面上に酸素欠陥が多く存在し、近接するLewis酸-塩基点が形成される。PETアルコールシスではこの触媒のTOFはナノ粒子形状のCeO₂より約8倍高かった。この内容は現在得られた結果を論文にまとめている段階である。

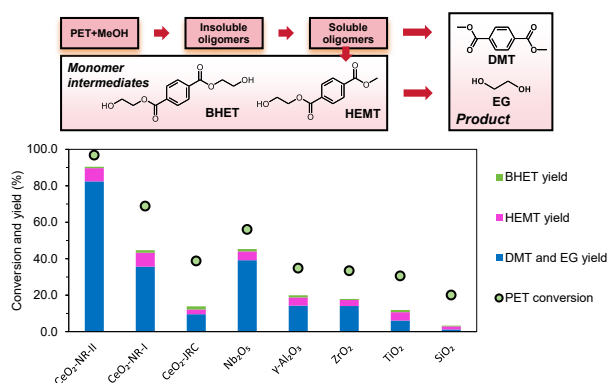


図3. 固体酸塩基触媒によるPETのアルコールシスによるモノマー化

3. グルコースからグルカル酸を介したアジピン酸の合成

2024年度のトピック：グルコースの酸化によりグルカル酸を合成する研究に取り組んだ。グルカル酸は水素化脱酸素によりアジピン酸を合成することが可能で化石資源利用に代わるプロセスとして期待できる。これまでの報告では担持白金触媒を用いて、塩基を添加した条件下で行われている。我々はMnO₂が塩基非存在下でも担持白金触媒に匹敵するグルカル酸収率を示すことを見出した。

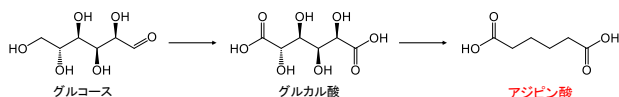


図 4. グルコースの酸化，水素化脱酸素によるアジピン酸の合成

■学内外の研究者との共同研究（2024年度）

大阪大学山口渉助教「フルフラールの選択的水素化反応を促進する炭化ニッケルナノ粒子触媒の開発」/徳島大学霜田直宏助教「噴霧凍結造粒乾燥法によるCO₂メタン化反応用Ni/CeO₂触媒の合成」/京都大学化学研究所「炭素の導入と除去を利用した単金属の結晶構造ライブラリーの拡張」

■2024年度の研究業績

原著論文（すべて審査つき）

- (1) Tsuji, E.; Ohwan, K.; Ishikawa, T.; Hirata, Y.; Okada, H.; Suganuma, S.; Katada, N. Reduction Behaviors of Tin Oxides and Oxyhydroxides Itself during Electrochemical Reduction of Carbon Dioxide in an Aqueous Solution under Neutral Conditions. *RSC Sustainability*, **2025**, 3, 1388–1396.
- (2) Okada, H.; Adachi, R.; Tsuji, E.; Nanbu, R.; Okumura, K.; Kitano, S.; Habazaki, H.; Suganuma, S.; Katada, N. Brownmillerite-Type Ca₂FeCoO₈ Ultrathin Layers as Anodic

Catalysts for Water Electrolysis. *ACS Appl. Nano Mater.*, **2025**, 8, 223–232.

- (3) Fukumasa, T.; Kawatani, Y.; Masuda, H.; Nakashita, I.; Hashiguchi, R.; Takemoto, M.; Suganuma, S.; Tsuji, E.; Wakaiharu, T.; Katada, N. Shape Selective Cracking of Polypropylene on an H-MFI Type Zeolite Catalyst with Recovery of Cyclooctane Solvent. *RSC Sustainability*, **2025**, 3, 890–903.
- (4) Nakamura, K.; Tanizaki, S.; Tsubokawa, K.; Tsuji, E.; Suganuma, S.; Katada, N. Ethylation of Benzene with Ethane over MFI Zeolite-Supported Pb Catalyst. *Catal. Lett.*, **2025**, 155(1).
- (5) Yabushita, M.; Osuga, R.; Nakagawa, Y.; Suganuma, S.; Nakajima, K.; Tomishige, K. Overview of Intentional Formation of Paired Heteroatom Sites in Zeolite Frameworks. *CrystEngComm*, **2024**, 26, 4405–4417.

招待/基調/依頼講演・国際会議

- (1) 菅沼学史：「官能基選択的還元触媒によるアミノ酸からの含窒素化学品の合成」，IRCCS 2024 年度成果報告会，北海道大学，北海道（2024/11/27）．[招待講演]
- (2) 菅沼学史：「石油資源の有効利用率向上のための多環芳香族類選択的転換」，第 27 回反好会講演会，北海道大学，北海道（2024/9/10）．[招待講演]

混成電位駆動型触媒研究クラスター/ Mixed-potential-driven catalyst research cluster

■ 2024年度の構成員

〈リーダー/准教授〉武安光太郎・〈学外研究協力教員/筑波大学〉近藤剛弘・〈学外研究協力教員/神戸大学〉大西洋・〈学外研究協力教員/ Technical University of Munich (ドイツ)〉井上茂義・〈学外研究協力教員/ Shiv Nadar University〉Santosh K. Singh・〈学外研究協力教員/筑波大学〉白木賢太郎・〈学外研究協力教員/九州大学〉中村潤児

■ 2024年度のうごき

2024年度より、クラスターが承認され、研究活動を開始した。

■ 研究課題

無機元素のナノ構造と酵素をモデル触媒として、混成電位駆動型触媒反応を中心とした反応および物質輸送の速度論的なメカニズムを明らかにし、触媒設計の新概念を提案する。

1. カーボン系触媒における反応メカニズムの解明

混成電位駆動型反応を理解するうえで重要となる局所的な電子移動のメカニズムを、カーボン系触媒における O_2 および CO_2 還元反応をモデルとして明らかにする。特に今年度は、電子の局在性が分子吸着および電子移動をコントロールするメカニズムを明らかにする。具体的な構造として、例えば、Fe-4N (d電子)、ピリジン型窒素 (π^* 性電子)、グラファイト型窒素 (p_z 性電子)、五員環 (sp^3 性電子)に着目し、モデル触媒を用いた表面科学的手法を駆使して電子状態効果を明らかにすることで、次段の触媒設計 (Si, Ge ドープ) につながる設計指針を得る。

2024年度のトピック: 窒素ドープカーボン触媒の酸性環境における活性低下の機構を明らかにした。窒素ドープ炭素は、燃料電池の酸素還元反応 (ORR) における低コストで耐久性のあるプラチナ代替触媒として有望視されている。しかし、その触媒活性は酸性電解質中で大幅に低下し、実

用化が制限されている。これに対し、窒素ドープ炭素触媒の劣化メカニズムについて、主な活性部位であるピリジン型窒素 (pyri-N) の酸塩基平衡に注目して報告した。我々は、pyri-Nの電気化学的水素化反応によりpyri-NHに変化し、酸素吸着と結びつくことが重要なプロセスであることを発見した。この反応は、塩基性電解質中では高い電位で進行するが、酸性環境では、pyri-Nのプロトン化と安定化により、低い電位にシフトする。これらの結果から、酸性電解質中での触媒活性の低下がpyri-Nの塩基性に起因することが示された。pyri-Nの塩基性、特にそのpKaを制御することにより、ORRや他の電極反応の活性向上に関する指針が確立された。《論文投稿中》

2. モデル触媒による混成電位駆動型触媒反応の検証

混成電位駆動型反応は、単一の触媒粒子上で、アノード反応とカソード反応がペアとなって進行する反応系で、最近不均系触媒分野で注目を集め始めている。その速度論的なメカニズムの全貌は明らかになっておらず、我々は最近、反応選択性に関する理論の枠組みを出版した。モデル触媒として分子吸着系や酵素を扱い、溶液内分光法、プローブ顕微鏡を駆使することで、混成電位駆動型反応の直接的検証を行う。また、 CO 酸化および CO_2 還元をターゲットとした粉体触媒を用いた検証も進める。次年度以降、得られた電場形成や物質輸送のメカニズムを触媒設計に反映する。

2024年度のトピック: 金をアノード、窒素ドープカーボン触媒をカソードとしたモデルシステムにおいて、 CO の室温酸化が混成電位駆動型触媒反応によって進行することを検証した。金は低温における CO から CO_2 への酸化に対して非常に効果的な触媒であるが、この触媒の重要な特性については依然として議論が続いている。最近、Au触媒による CO 酸化が電気化学的機構によって進行する可能性が示唆されている。本研究では、水を用いた室温での CO 酸化が、電気化学的 CO 酸化および酸素還元の半反応を組み合わせた、すなわち混成電位駆動型機構によって進行し得ることを実験的に検証した。モデル系は、単一の電解セル内で空間的に分離された電極として機能する炭素紙上に堆積させたAuナノ粒子および窒素ドープ還元グラフェン酸化物によって構成されている。2つの電極を短絡した後、外部から電位をかけることなく反応電流および混成電位を測

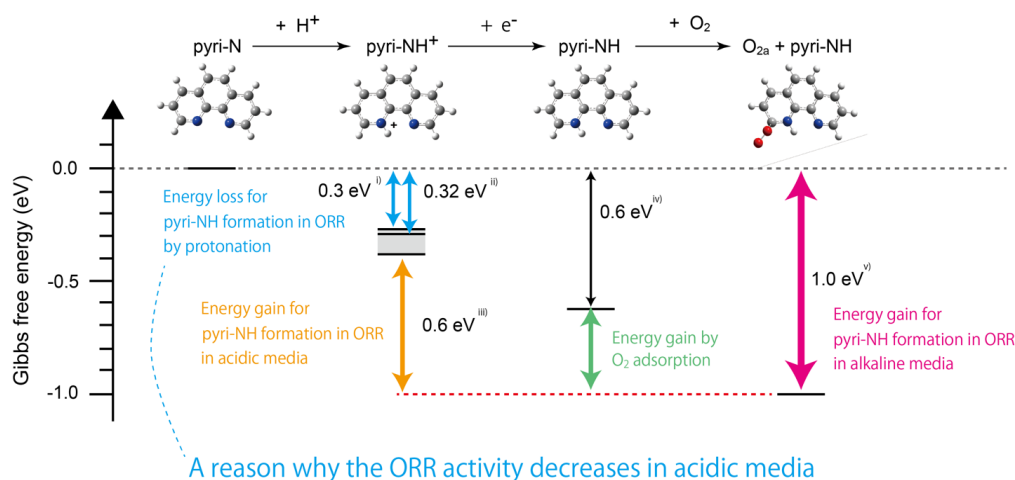


Figure 1. Summary of experimental results and factors contributing to degraded activity in acidic electrolytes. Gibbs energy diagram. i) Proton adsorption energy of 0.3 eV calculated from the pK_a measurement in Fig. 1. ii) Proton adsorption energy of 0.32 eV obtained from DFT calculations. iii) From pyri-NH formation potential of 0.6 V in N_2 saturation in pH 13 in Fig. 3. iv) From pyri-NH formation potential of 0.6 V in O_2 saturation in pH 13 in Fig. 3. v) From pyri-NH formation potential of 1.0 V in O_2 saturation in pH 13.

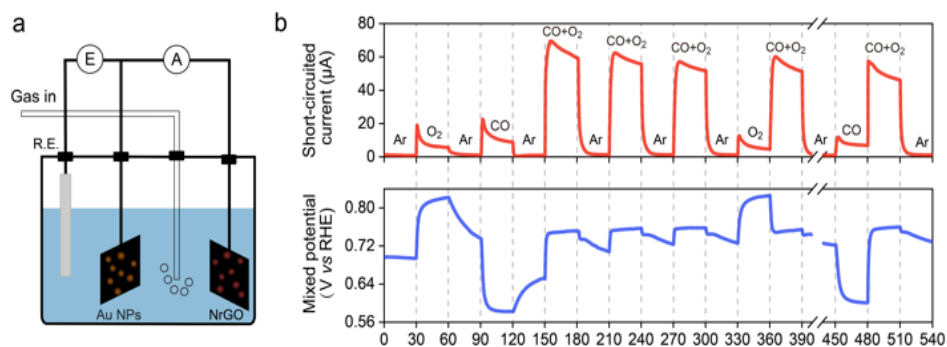


Figure 2. Short-circuited current and mixed potential measurements. (a) Schematic representation of the electrolysis cell for verifying mixed-potential-driven mechanism in CO oxidation. The deposited Au NPs and NrGO on carbon paper are deployed as two individual gas-diffusion electrodes. There is no external applied potential, and both the short-circuited Au NPs and NrGO electrodes are under identical gas/liquid environments during operation. (b) The short-circuited current and mixed potential are monitored simultaneously at a periodic switch between Ar, CO (0.04 atm), O₂ (0.2 atm), and CO (0.04 atm) + O₂ (0.2 atm) feeds in the single cell. Reaction conditions: 0.25 M phosphate buffer solution (15 mL, pH = 7.2); 25±1 °C; total flow rate: 50 cm³ min⁻¹.

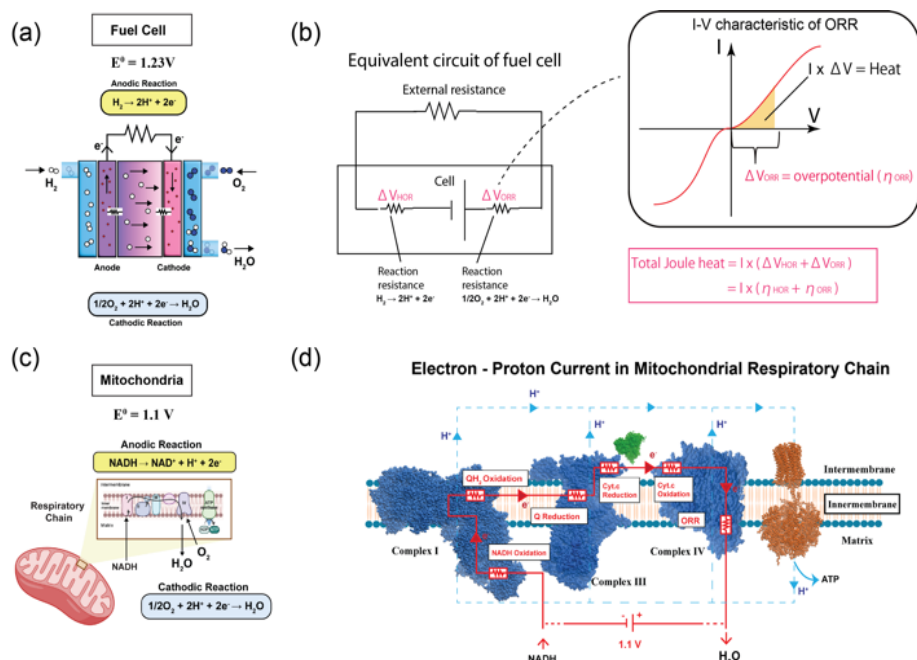


Figure 3. Thermogenesis model based on the electrochemical overpotential of the mitochondrial respiratory chain. (a) Schematic of hydrogen fuel cell, with hydrogen oxidation reaction in the anode and ORR in the cathode similar with mitochondrial electron transport chain. ΔE^0 means redox potential differences between anode and cathode (b) Equivalent circuit of hydrogen fuel cell and the typical voltage-current curve for the electrochemical reactions. The differences between working potential (E) and equilibrium potential (E^0) caused a potential drop (ΔV) which corresponds to the overpotential (η). The overpotential (η) applied to drive the reaction then will be converted to heat (pink part, $I \times \Delta V$) and the rest potential gain will be used for electricity, the energy partitioning between heat and electricity depends on the current. (c) Mitochondrial Electron Transport Chain (ETC), with NADH oxidation in complex I as the anodic reaction and oxygen reduction reaction (ORR) in complex IV as the cathodic reaction. ΔE^0 means redox potential differences between those two reactions. (d) Electron-proton current in the mitochondrial respiratory chain, consisting of complex I (CI), complex III (CIII), complex IV (CIV), and ATPase. Electron current is red, and proton current is blue. Each redox reaction in every complex regarded as a resistor (red color). Here, we assume that resistivity of proton pumping is negligible.

定した。同一条件下でそれぞれの半反応に対する独立した電流-電位曲線を取得し、モデル系によって測定された混成電位および混成電流と予測値を比較したところ、よく一致した。したがって、CO酸化の駆動力が低温での半反応を加速するために利用され、水が電解質溶媒としての役割を果たすことが示された。金担持窒素ドーパカーボン触媒において、CO酸化が混成駆動型機構によって進行することを明らかにした。《論文投稿中》

細胞内のミトコンドリアにおける熱産生が混成電位駆動型反応の反応駆動、すなわち過電圧に由来することを明らかにした。熱発生は細胞内での好気呼吸において重要な過程であり、体内の恒温維持に欠かせないが、その基礎的なメカニズムは未だ明らかになっていない。燃料電池や混成電位系においては、電気化学的過電圧が反応を駆動した後熱として散逸する。同様に、ミトコンドリアでも酵素における電気化学反応の過電圧由来の熱産生が支配的で

はないかという仮説を立てた。これを検証するために、ミトコンドリア呼吸鎖を電気化学反応回路としてモデル化し、既存の電気化学データから見積もった速度定数を用いて、熱産生と呼吸活性との関係を調べた。呼吸鎖全体のギブズ自由エネルギー利得のうちの36~65%が反応駆動に続く熱として散逸し、その割合は呼吸活性に応じて変化することを示した。特に、複合体IVが主要な熱源であることが明らかになった。この過電圧に基づく熱発生モデルは、ミトコンドリア機能における電気化学的反応と熱を通じた代謝制御の理解の基盤となる。

■学内外の研究者との共同研究（2024年度）

筑波大学数理物質系 近藤剛弘教授「Cu/ZnO触媒におけるメタノール合成機構」/ Technical University of Munich 井上茂義 教授「グラフェン量子ドット触媒への典型元素の組み込み」/ Shiv Nadar University Santosh K. Singh Assistant Professor / 「グラフェン量子ドット触媒の精密合成」/ 九州大学カーボンニュートラル国際研究機構 特任教授「CO室温酸化機構の解明」

■2024年度の研究業績

原著論文（全て審査つき）

- (1) Yan, M.; Arsyad, R.; Namari, N. A. P.; Suzuki, H.; Takeyasu, K. Mixed-Potential-Driven Catalysis in Glucose Oxidation. *ChemCatChem* **2024**, e202400322.
- (2) Namari, N. A. P.; Yan, M.; Nakamura, J.; Takeyasu, K. Simultaneous Measurement of Oxygen Consumption Rate and Thermogenesis in Biological Systems for Non-equilibrium Energetics. *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **2024**, 22 (3), 273–278.
- (3) Budiarto, I. J.; Fujita, S.; Saito, S.; Judawisastra, H.; Takeyasu, K.; Wibowo, A. Facile fabrication of graphitic carbon nitride/polydopamine-polyurethane foam as a floating photocatalyst for synthetic dye remediation. *React. Chem. Eng.* **2024**, 9, 2718.
- (4) Chen, G.; Isegawa, M.; Koide, T.; Yoshida, Y.; Harano, K.; Hayashida, K.; Fujita, S.; Takeyasu, K.; Ariga, K.; Nakamura, J. Pentagon-Rich Caged Carbon Catalyst for the Oxygen Reduction Reaction in Acidic Electrolytes. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, 63, e202410747.
- (5) Panigrahi, D. R.; Paria, S.; Jain, M.; Sengar, M. S.; Dhayal, M.; Paul, B.; Maity, P.; Takeyasu, K.; Kumar, V.; Singh, S. K. π -Electron and pH-Regulated Photochemical Detection of Trinitrophenol Using Nanoconfined Graphene Quantum Dots. *ACS Appl. Nano Mater.* **2024**, DOI: 10.1021/acsanm.5c00141.

招待/基調/依頼講演・国際会議

- (1) 武安光太郎：「混成電位駆動型触媒反応の理論的枠組みと実験的検証」第134回触媒討論会研究会横断若手シンポジウム (2024/9/19). [依頼講演]
- (2) Takeyasu, K. “Mechanism-driven design of metal-free nitrogen-doped carbon electrocatalyst for oxygen reduction reaction,” 12th Singapore International Conference on Chemistry (SICC-12) (2024/12/12). [Invited]
- (3) 武安光太郎：「電子状態設計に基づくカーボン電極触媒の限界突破に向けて」第2回北海道大学触媒科学研究所-立命館大学SRセンター合同シンポジウム (2024/12/25). [依頼講演]
- (4) Takeyasu, K. “Thermochemical and electrochemical mixed reaction systems based on carbon-based catalysts,” Shiv Nadar University Department of Chemistry Seminar (2025/1/17). [Invited].

報告・附属触媒連携研究センター

report: Catalysis Collaborative Research Center

フリッツ・ハーバー研究所ユニット/ Unit of Fritz-Haber-Institute

■ 2024年度の構成員

〈ユニット長/教授〉長谷川淳也・〈教授〉高草木達・〈客員教授/Fritz Haber Institute of the Max Planck Society〉Hans-Joachim FREUND/Matthias SCHEFFLER・〈客員准教授/分子科学研究所〉熊谷崇

■ 2024年度の活動内容・研究成果

本ユニットは、部局間学術交流協定を締結しているフリッツ・ハーバー研究所（以下、FHI）と学術交流を維持・発展させ、研究と教育に関する連携を強化することを目的として、平成28年4月1日に設置した。FHIよりHans-Joachim FREUND 博士とMatthias SCHEFFLER 博士（Theory Department）を客員教授として、分子科学研究所より熊谷崇グループリーダー（Physical Chemistry Department）を客員准教授として招き、所内からは長谷川淳也教授、高草木達教授が参画している。

2024年11月18、19日にFHIにおいて、FHI-ICAT情報発信型シンポジウムを開催した。日本側13名（所内から10名、国内から3名）が出席し、6件の口頭発表、6件のポスター発表を行った。

■ 来年度活動計画

引き続き、学術交流を推進する。教員や学生の派遣、情報発信型国際シンポジウムの開催を計画する。

学際統合物質科学研究ユニット/Unit on Integrated Research Consortium on Chemical Sciences

■ 2024年度の構成員

〈ユニット長/教授〉中野 環・〈教授〉高草木達/長谷川淳也/中島清隆/清水研一/浦口大輔/村山徹

■ 2024年度の活動内容・研究成果

当研究所が参画する「学際統合物質科学研究機構」事業の一環として、国際的化学研究拠点と協同して異種学術領域を包含する新たな物質合成概念を創出することにより先導的研究を推進し、科学と科学技術の革新と新産業の創出を促す新学術基盤の構築および次世代中核研究者の育成を図ることを目的として、「新反応・新触媒研究」、「マテリアル研究」、「エネルギー・資源研究」、「ケムバイオ研究」および「融合研究」の5分野で活動を行っている。

本年度の研究活動を通じて、下水污泥焼却灰からリン化成品を製造する手法に繋がるリン酸を直接的にトリエステルへ変換できるケミカルリサイクル技術の開発、プラズマで生成した水素原子による「メタネーション反応」の低温活性化、従来知られていたものとは全く異なる非対称構造（偏向二面角構造）を有し高効率な円偏光発光を示す高分子の合成等の成果を挙げ、論文発表を行った。

加えて、本年11月26-27日には学際統合物質科学研究機構の成果報告会を本研究所の主催により開催した。

■ 来年度活動計画

「学際統合物質科学研究機構」プロジェクトの枠組みの中で名古屋大学、京都大学、九州大学と協力して研究活動を行い、加えて、年次報告会、シンポジウム等にて研究報告を行う。

北大触媒アライアンスユニット/ HU Alliance for Catalysis Research

■ 2024年度の構成員

〈ユニット長/教授〉長谷川淳也・〈学内研究協力教員/教授〉森春英/澤村正也/武次徹也/忠永清治/幅崎浩樹/向井紳/佐藤美洋/小西克明/神谷裕一〈学内研究協力教員/准教授〉坂口紀史

■ 2024年度の活動内容・研究成果

本ユニットは、共同利用・共同研究拠点事業を通して北海道大学の機能強化に貢献すること、北海道大学の強みである層の厚い触媒関連研究者の協力を得て、共同利用・共同研究拠点を強化することを目的としている。拠点事業は学外の研究者との共同研究を支援する事業であるため、学内の触媒研究者におけるメリットが小さい欠点があった。そこで、北大触媒アライアンスユニットを通して、学内の触媒研究者を共同研究受入研究者として拠点活動に参画していただき、学外との共同研究を資金的にサポートできるような体制を設けた。また、このユニットの設置をとおりて拠点の受入研究者のスペクトルを拡大することができるので、学外の研究者コミュニティの選択肢が拡大し、拠点の強化につなげることが可能である。

第4期中期計画期間における拠点活動が認定されたことに伴い、本ユニットも設置を延長し、学内の触媒関連研究者を共同研究の受入研究者として、活動を継続することとなった。昨年度に引き続き、共同利用、共同研究の公募研究において、本ユニットでの共同研究を受け入れた。

■ 来年度活動計画

来年度も共同利用・共同研究拠点の一翼として、学外との共同研究を促進する。

先端放射光源触媒計測科学ユニット/ Unit of Catalyst Characterization by Advanced Synchrotron Radiation

■ 2024年度の構成員

〈ユニット長/教授〉高草木達・〈客員教授/東北大学〉西堀麻衣子/高橋幸生・〈客員教授/立命館大学〉稲田康宏/滝沢優・〈名誉教授/立命館大学〉朝倉清高 [2024/04/01～2024/05/31]・〈名誉教授・客員教授/立命館大学〉朝倉清高 [2024/06/01～]・〈教授〉清水研一/中島清隆・〈特任教授〉福岡淳・〈准教授〉鳥屋尾隆・〈助教〉Shrotri ABHIJIT

■ 2024年度の活動内容・研究成果

2024年12月13日（金）、14日（土）に東北大学SRISにおいて第2回触媒学会先端放射光活用研究会「触媒科学の発展に向けたナノテラスの活用」を開催した（高草木教授が世話人として参加する触媒学会先端放射光活用研究会が主催）。ビームライン制御や軟X線・テンダーX線を用いた計測法に関する講演や実習を行った。また、2024年12月25日（水）に立命館大学SRセンターとの連携会議を北海道大学触媒科学研究所において行い、SRセンターでのテスト実験の進捗状況や今後の連携およびナノテラスへの展開について議論を行った。同日に第2回北海道大学触媒科学研究所-立命館大学SRセンター合同シンポジウム「触媒科学と放射光 触媒科学のSoft～Tender X線への展開Ⅱ 実際と新しい可能性」を開催した。プログラムは以下に掲載した。

<https://drive.google.com/file/d/116GqUYwL8OP2pZTrGjsnBqYQFgZkWb2S/view>

■ 来年度活動計画

本ユニットは、東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センター（SRIS）および立命館大学SRセンターとともに、ナノテラスを始めとした先端放射光源の触媒研究への応用可能性を探ることを目的とする。まずは使い勝手のよい超小型放射光源を有する立命館SRセンターを活用して、ナノテラスの得意とする軟X線およびテンダーX線領域における触媒研究に必要な技術の構築や対象の選定を行う。また、全国の触媒研究者と連携するため、触媒学会内の研究会を利用して、共同利用を推進する。次年度は、触媒討論会や触媒学会の研究会を開催し、先端放射光源の活用を議論する。また、立命館SRセンターとの連携会議・シンポジウムを行うとともに、テスト実験をすすめる。

キャタリストインフォマティクスユニット/ Unit of Catalyst Informatic

■2024年度の構成員

〈ユニット長/教授〉長谷川淳也・〈教授〉清水研一/高草木達・〈准教授〉鳥屋尾隆・〈客員教授/産業技術総合研究所〉矢田陽・〈学内研究協力教員/教授〉高橋啓介・〈特任教授/京都大学〉瀧川一学

■2024年度の活動内容・研究成果

キャタリストインフォマティクスに関する最近の動向について情報交換を行った。2023年には、瀧川、鳥屋尾、清水らの共同研究成果論文がNature Communication誌において発表された。また、矢田、長谷川が触媒学会北海道支部札幌講演会の世話人を務め、キャタリストインフォマティクスやデータ駆動型研究の将来展開に関する講演会を企画した。

人工知能の活用は触媒分野においても一定の位置を占めるようになり、本ユニットは分野振興において役割を果たした。また、人工知能を活用するコミュニティが各所で形成され本ユニットの機能を他組織が備えるに至った。従って、本ユニットは役割を終え、廃止とする。

アイシン-北大R&Dラボ ユニット/ AISIN-HOKUDAI R&D Lab. UNIT

■2024年度の構成員

〈ユニット長/特任教授〉福岡淳・〈教授〉清水研一/中島清隆/長谷川淳也・〈准教授〉鳥屋尾隆・菅沼学史(助教) Shrotri ABHIJIT/大須賀遼太/宮崎玲・〈学内研究協力教員/教授〉貴島祐治・〈学内研究協力教員/准教授〉田島健次・〈招へい教員〉高野一史/榎原真二

■2024年度の活動内容・研究成果

非可食系バイオマスから固体触媒を用いた高収率糖化技術では、ボールミル粉碎時の加熱効果について検討し、単糖収率の向上を確認した。

さらに、酒石酸からコハク酸を一段で合成する新たな触媒を開発した。この成果は特許出願を準備しており、論文投稿中である。

水素と二酸化炭素を原料としたエタノール合成触媒の研究、グルコース由来のプロピレン合成触媒などの研究についても検討を進めている。

■来年度活動計画

カーボンニュートラルを目的とした研究テーマの創出及び産業化を推進する。具体的には、非可食系バイオマスから固体触媒を用いた高収率糖化技術の確立、水素と二酸化炭素を原料としたエタノール合成触媒の研究、グルコース由来のプロピレン合成触媒の研究、高バイオマス資源植物作出の研究、長鎖バクテリアセルロースナノファイバー合成の研究、プラスチックを原料とした炭化水素ガス合成触媒の研究、バイオプラスチック原料合成触媒のシミュレーション技術開発を行う。

報告・研究支援技術部

report: Technical Division

本研究所の技術職員の組織化については、同職員の能力・資質等の向上と処遇の改善を図るとともに、優れた人材を確保することを目的として、平成3年4月1日に設置された。

■2024年度の構成員

〈部長〉浦口大輔・〈班長〉石川勝久

第一研究機器開発班 〈技術主任〉長谷川貴彦

第二研究機器開発班 〈技術主任〉川村裕介・〈技術専門職員〉向井慎吾

研究機器管理班 〈技術主任〉山岸太平

■第一・第二研究機器開発班

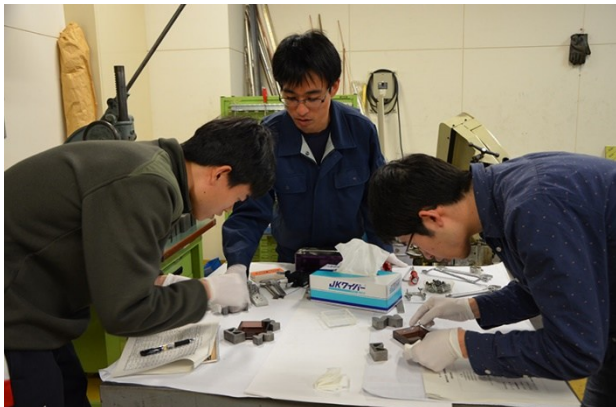
第一および第二研究機器開発班では、それぞれガラスおよび金属工作を主体とした装置開発を行っている。

■触媒科学研究所技術部講習会

触媒科学研究所技術部講習会は、各研究室のみなさんに工作機械・ガラス製品・研究機器の取り扱い方などを知ってもらい、安全に研究していただくことを目的として開催している。

主な内容としては、(1) 技術部の仕事内容と製品の注文、修理依頼に関する説明、(2) 実験する際のガラス・金属製品の取り扱いについて、(3) ガラス・金属工作室の説明と実習(4) 技術部管理装置の説明(5) 応急処置である。

講習を始めてから機械・ガラスの修理の数は減少したため、継続することで実験による事故も減り、研究環境の向上にもつながっている。



※2019年度の技術部講習会写真

■研究機器管理班

研究機器管理班では、触媒科学研究所が保有する各種の研究機器の管理を行っている。

■一般公開

一般市民向けにガラス工作がどのように研究に役立っているかを、工作体験を通し紹介している。



※2019年度の一般公開写真

■掲載誌及び掲載論文

- (1) Kato, Y.; Kato, M.; Saito, S.; Zhuang, Y.; Iguchi, Y.; Sato, J.; Komanoya, T.; Soma, K.; Suzuki, K.; Yagi, I. Co-Presence of PtNi Nanowires and Ionic Liquid in Carbon Mesopores Enhances Electrocatalytic Oxygen Reduction Activity. *Nanoscale* **2024**, 16 (44), 20505–20509.
- (2) Nakamura, K.; Odama, K.; Fukuta, T.; Sato, Y. Nickel Photoredox/Dual-Catalyzed Transfer Semi-Hydrogenation of Alkynes via Aminoalkyl Nickel Species. *J. Org. Chem.* **2024**, 90 (1), 158–166.
- (3) Ninomiya, H.; Tomita, O.; Suzuki, H.; Nakada, A.; Abe, R. Boosting Z-Scheme-Type Water Splitting by Controlling FeIII/FeII Redox Potential in Metal Hexacyanoferrate Modifiers Loaded on H₂-Evolving Photocatalyst. *ACS Mater. Lett.* **2024**, 6 (6), 2474–2478.
- (4) Otomo, R.; Nakamura, T.; Kamiya, Y. Characterization of Acid Sites on Hf-Beta Zeolite by CD₃CN IR-TPD. *Microporous Mesoporous Mater.* **2024**, 378, 113246.
- (5) Yanagita, A.; Furuya, S.; Horikoshi, H.; Tashiro, K.; Satokawa, S. Improvement of Liquid Hydrocarbon Yield in CO₂ Fischer–Tropsch Synthesis over Potassium-Added Iron Carbide Catalyst. *J. Jpn. Pet. Inst.* **2024**, 67 (4), 136–145.

■論文

退職された先生方等で本研究所所属として出版された論文

- (1) Cheng, Y.; Peng, J.; Lai, G.; Yue, X.; Li, F.; Wang, Q.; Chen, L.; Gu, J. Edge-Site Co-N_x Model Single-Atom Catalysts for CO₂ Electroreduction. *ACS Catal.* **2024**, *14* (11), 8446–8455.
- (2) Dong, Y.; Song, R.; Zhang, Z.; Han, X.; Wang, B.; Tao, S.; Zhao, J.; Alodhayb, A.; Chen, Z.; Yi, X.; et al. Advances in Photothermal CO₂ Hydrogenation Catalysis for C1 Molecules. *Cell Rep. Phys. Sci.* **2024**, *5* (10), 102227.
- (3) Huang, Y.; Kim, W.; Otomo, R.; Shimoda, S.; Wu, K.; Kamiya, Y. Uniformly Distributed Palladium Nanoparticles on NH₂-MIL-53 Fabricated by an Equilibrium Adsorption Method for Reduction of Nitrite in Water. *ChemCatChem* **2024**, *16* (16), e202400315.
- (4) Long, J.; Zhuang, K.; Liao, W.; An, Y.; Wang, B.; Wu, C.; Cao, J.; Wang, Q.; Chen, J.; Wang, Q. Electronegativity-Assisted Optimized Electronic Structure of Functionalized-Pt Catalysts for Boosting Oxygen Reduction Kinetics. *Rare Met.* **2024**, *43* (5), 1965–1976.
- (5) Lv, Q.; Jin, B.; Xu, H.; Wu, X.; Zhang, N.; Pang, D.; Li, A.; Han, X. Atomic Dispersion of Ag on Mn₂O₃ for Soot Catalytic Oxidation: Dispersion Mechanism and Catalytic Intermediate Identification. *Mater. Today Nano* **2025**, *29*, 100597.
- (6) Matsuda, S.; Osawa, M.; Umeda, M. Progress of CO₂ Electrochemical Methanation Using a Membrane Electrode Assembly. *Electrocatalysis* **2024**, *15* (4), 318–328.
- (7) Peng, J.; Li, Y.; Cheng, Y.; Li, F.; Cao, B.; Wang, Q.; Yue, X.; Lai, G.; Wang, Y.; Gu, J. Metal-N₄ Model Single-Atom Catalyst with Electrically Neutral Quadri-Pyridine Macrocyclic Ligand for CO₂ Electroreduction. *Carbon Energy* **2024**, *6* (8), e506.
- (8) Sano, K.; Ishida, T.; Shimada, T.; Tachibana, H.; Takashima, M.; Ohtani, B.; Takagi, S.; Inoue, H. Photocatalytic Hydrogen Evolution from a Transparent Aqueous Dispersion of Quantum-Sized SnO₂ Nanoparticles: Effect of Electron Trap Density within One Particle. *J. Phys. Chem. C* **2024**, *128* (32), 13596–13605.
- (9) Si, X.; Zhu, R.; Yang, C.; Shi, T.; Du, P.; Li, M.; Yang, Y.; Cui, W.; Yang, H.; Kobayashi, H.; et al. Self-Reinforced Cathode Interface to Prolong the Cyclic Stability of Zn–MnO₂ Batteries. *Nano Lett.* **2024**, *25* (1), 28–34.
- (10) Sun, W.; Nagao, M.; Sato, M.; Shimoda, S.; Kamiya, Y.; Otomo, R. Redox Metal–Support Interaction of CoO_x/Ti₂O₃ To Enhance Catalytic Performance for Hydrodeoxygenation of Anisole. *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2025**, *13* (5), 2038–2047.
- (11) Xi, Q.; Papaefthimiou, V.; Le Breton, N.; Lenertz, M.; Takashima, M.; Keller, V.; Vileo, B.; Cottineau, T. Influence of Nitridation Conditions on the Doping Sites and Photocatalytic Visible-Light Activity of Nb,N-Codoped TiO₂. *Chem. Mater.* **2024**, *36* (8), 3705–3716.
- (12) Yamamoto, H.; Hamada, T.; Muroya, Y.; Okamoto, K.; Shimoda, S.; Kozawa, T. Effect of Organic Ligand and Metal Nanocluster Core Structure on Resist Performance of Inorganic–Organic Hybrid Resist Materials for EUV and EB Lithography. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2025**, *64* (3), 03SP42.
- (13) Yamamoto, H.; Ito, Y.; Okamoto, K.; Shimoda, S.; Kozawa, T. A Study on the Resist Performance of Inorganic–Organic Resist Materials for EUV and Electron-Beam Lithography. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2024**, *63* (4), 04SP87.
- (14) Yan, B.; Kato, K.; Shimoda, S.; Otomo, R.; Kamiya, Y. Rapid Removal and Catalytic Decomposition of Nitrate in Anion-Exchange Resin Containing Gold Nanoparticles toward Purification of Groundwater. *Chem. Eng. J.* **2024**, *498*, 155721.
- (15) Yan, K.; Yu, Z.; Wang, Y.; Guo, M.; Xiong, J.; Zhang, R.; Li, X.; Lu, X. Polyoxometalates@Metal–Organic Frameworks: Synthesis Strategies, Nanostructure Modulation, and Application in Biomass Conversion. *ChemSusChem* **2025**, *18* (4), e202401456.
- (16) Yang, H.; Xiao, X.; Wu, H.; Lu, M.; Li, D.; Sui, Y.; Zhang, N. Magnetic Recyclable MoS₂/Fe₃O₄ Piezoelectric Catalysts for Highly Efficient Degradation of Aqueous Pollutants. *Surf. Interfaces* **2024**, *55*, 105271.
- (17) Yang, H.; Hu, L.; Wu, Y.; Li, J.; Zhang, B.; Han, L.; Wu, B. Acid-Washing–Alkali-Fusion Pretreated Red Mud for Fabricating Cu-Based BEA Zeolite for NH₃-SCR. *Sep. Purif. Technol.* **2024**, *346*, 127460.
- (18) Zhang, Z.; Han, X.; Zhang, J.; Dong, Y.; Zhao, J.; Xu, Q.; Zhang, N. Revolutionizing Photothermal CO₂ Hydrogenation with Ceria-Based Catalysts. *Nano Res.* **2025**, *18* (1), 94906998.

個人データ

教員の50音順. 着任時の職名が現在のものとことなる場合にはそれが表示されている.

浅野圭佑

あさのけいすけ
Keisuke ASANO



職名：准教授

着任：2022年5月1日

部門/クラスター/附属触媒連携研究センター：分子触媒研究部門/生体分子標識触媒研究クラスター

担当大学院（学部）：生命科学院（薬学部）

研究室：創成科学研究棟05 312-1

電話：011-706-9151・電子メール：asano@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：https://www.cat.hokudai.ac.jp/uraguchi/

研究分野：有機化学/合成化学/反応化学/分子触媒化学/有機分子触媒/光触媒/選択的分子変換/ケミカルバイオロジー

研究課題：生体分子の合成および解析・操作を実現する分子触媒技術の開発

研究キーワード：有機化学/触媒化学/二官能性触媒/不斉合成/分子プローブ

学歴：2007年3月京都大学工学部工業化学科卒業/2009年3月京都大学大学院工学研究科材料化学専攻博士前期課程修了/2012年3月京都大学大学院工学研究科材料化学専攻博士後期課程修了

学位：2009年3月修士（工学）（京都大学）/2012年3月博士（工学）（京都大学）「非共有結合性相互作用を活用した有機分子触媒反応に関する研究」

職歴：2008年5-7月BASF海外インターンシップ（独，Ludwigshafen本社）/2010年4月日本学術振興会特別研究員（DC2）/2012年4月京都大学特定助教（大学院工学研究科合成・生物化学専攻）/2013年4月京都大学助教（大学院工学研究科材料化学専攻）/2022年5月北海道大学准教授（触媒科学研究所）

在外研究歴：2008年5月-2008年7月独国BASF（海外インターンシップ）

所属学会：日本化学会/有機合成化学協会/近畿化学協会/ヨウ素学会

主要な研究業績：(1) Murata, R.; Shitamichi, K.; Hiramatsu, M.; Matsubara, S.; Uruguchi, D.; Asano, K. *trans*-Cyclooctenes as Scavengers of Bromine Involved in Catalytic Bromination. *Chem.—Eur. J.* **2024**, *30*, e202303399. (2) Nagano, T.; Matsumoto, A.; Yoshizaki, R.; Asano, K.; Matsubara, S. Non-enzymatic catalytic asymmetric cyanation of acylsilanes. *Commun. Chem.* **2022**, *5*, 45. (3) Einaru, S.; Shitamichi, K.; Nagano, T.; Matsumoto, A.; Asano, K.; Matsubara, S. *trans*-Cyclooctenes as Halolactonization Catalysts. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2018**, *57*, 13863–13867. (4) Yoneda, N.; Fujii, Y.; Matsumoto, A.; Asano, K.; Matsubara, S. Organocatalytic enantio- and diastereoselective cycloetherification via dynamic

kinetic resolution of chiral cyanohydrins. *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 1397. (5) Fukata, Y.; Asano, K.; Matsubara, S. Facile Net Cycloaddition Approach to Optically Active 1,5-Benzothiazepines. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 5320–5323. 学術関係の受賞：The 5th ChemComm International Symposium, The ChemComm Poster Prize 「Asymmetric Syntheses of Heterocycles via Cyclization with Bifunctional Organocatalysts」(2011/05)・日本化学会第92春季年会学生講演賞「二官能性有機分子触媒による環化を利用した不斉複素環合成反応」(2012/04)・第30回井上研究奨励賞「非共有結合性相互作用を活用した有機分子触媒反応に関する研究」(2014/02)・有機合成化学協会エーザイ研究企画賞「面不斉有機オレフィン触媒の創製」(2014/12)・第29回日本化学会若い世代の特別講演「有機触媒による多点活性化が拓く多彩な不斉複素環合成」(2015/03)・第39回内藤コンファレンスポスター賞「Facile cycloaddition approach to optically active 1,5-benzothiazepines」(2015/07)・第68回日本化学会進歩賞「有機触媒を利用した分子配座の多点識に基づく不斉合成反応」(2019/03)・Thieme Chemistry Journals Award 2020 (2020/01)・第12回井上リサーチアワード「高速反応の触媒的不斉誘導技術に基づくハロゲン基置換炭素環骨格構築法の開発」(2020/02)・第10回新化学技術研究奨励賞「減速型触媒による触媒的不斉反応スペースの拡張」(2021/06)

安齊亮彦

あんざい あきひこ
Akihiko ANZAI



職名：助教

着任：2024年5月16日

部門/クラスター：触媒材料研究部門

研究室：創成科学研究棟04-312-1

電話：011-706-9165・ファクシミリ：011-706-9163

電子メール：anzai.akihiko@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：https://www.cat.hokudai.ac.jp/shimizu/

研究分野：触媒・資源化学プロセス/物理化学/電気化学
研究キーワード：固体触媒/触媒設計/CO₂資源化/プラスチック分解

学歴：2016年3月静岡大学工学部物質工学科卒業/2018年3月京都大学大学院人間・環境学研究科博士前期課程環境学専攻物質関連論講座修了/2021年3月京都大学大学院人間・環境学研究科博士後期課程環境学専攻物質関連論講座修了

学位：2021年3月博士（人間・環境学）（京都大学）

職歴：2021年4月九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所学術研究員/2022年4月九州大学先端物質化学研究所学術研究員/2023年8月九州大学先端物質化学研究所助教（特定プロジェクト教員）/2024年5月北海道大学触媒科学研究所助教

所属学会：触媒学会/日本化学会

主要な研究業績：(1) Anzai, A.; Fukushima, M.; Rocabado, D. S. R. Ishimoto, T.; Sugiyama, T.; Ohtani, B.; Kobayashi, H.; Liu,

M.-H.; Donoshita, M.; Noguchi, T. G.; Maurya, S. K.; Kato, K.; Sit, C. Y.; Kenis, P. J. A.; Yamauchi, M. Enhanced Hydrogen Supply to Atomically Dispersed Copper Sites through Close Cooperation with Oxygen Vacancies in Black TiO₂ to Promote CH₄ Production in CO₂ Electrolysis. *ACS Appl. Mater. Interfaces*. **2025**, in press. (2) Ando, Y.; Miyakage, T.; Anzai, A.; Huang, M.; Fakir, A. A. E.; Toyao, T.; Nakasaka, Y.; Phuekphong, A.; Ogawa, M.; Kolganov, A. A.; Pidko, E. A.; Shimizu, K. Conversion of Polypropylene to Light Olefins by HMF Catalysts below Pyrolytic Temperature: Catalytic, Spectroscopic, and Theoretical Studies. *J. Phys. Chem. C* **2025**, 129, 3, 1678-1691. (3) Sun, M.; Cheng, J.; Anzai, A.; Kobayashi, H.; Yamauchi, M. Modulating Electronic States of Cu in Metal-Organic Frameworks for Emerging Controllable CH₄/C₂H₄ Selectivity in CO₂ Electroreduction. *Adv. Sci.* **2024**, 11 (34), 2404931. (4) Yoshizawa, A.; Higashi, M.; Anzai, A.; Yamauchi, M. Membrane electrode assembly type cell designed for selective CO production from bicarbonate electrolyte and air containing CO₂ mixed gas. *Energy Adv.* **2024**, 3, 778-783. (5) Anzai, A.; Higashi, M.; Yamauchi, M. Direct electrochemical CO₂ conversion using oxygen-mixed gas on a Cu network cathode and tailored anode. *Chem. Comm.* **2023**, 59, 11188-11191 (6) Anzai, A.; Liu, M.-H.; Ura, K.; Noguchi, T. G.; Yoshizawa, A.; Kato, K.; Sugiyama, T.; Yamauchi, M. Cu modified TiO₂ catalyst for electrochemical reduction of carbon dioxide to synthesize methane. *Catalysis*. **2022**, 12 (5), 478. (6) Anzai, A.; Yamamoto, A.; Yoshida, H. BaTi₄O₉ photocatalysts with variously loaded Ag cocatalyst for highly selective photocatalytic CO₂ reduction with water. *Catal. Lett.* **2022**, 152, 2498-2506.

学会活動：分子研研究会「光とナノ物質の相互作用：分子科学の未来にむけて」世話人（2018）・第21回理論化学討論会実行委員（2018）・第15回分子科学討論会（2019）・2021年 電気化学秋季大会（2021）・分子科学会広報委員（2021-2022）

主要な研究業績：(1) Chiba, T.; Iida, K.; Furukawa, S.; Hasegawa, J. First-Principles Study on Unidirectional Proton Transfer on Anatase TiO₂(101) Surface Induced by External Electric Fields. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2022**, 25, 9454-9460. (2) Iida, K. Atomic-Scale Picture of the Electric Double Layer around a Heterogeneous Solid-Liquid Interface Based on 3D-RISM-SCF Theory. *J. Phys. Chem. C* **2022**, 126, 9466-9474. (3) Iida, K.; Noda, M. Electron Transfer Governed by Light-Matter Interaction at Metal-Semiconductor Interface. *npj Comput. Mater.* **2020**, 6, 5-1-5-8. (4) Iida, K.; Noda, M.; Nobusada, K. Interface Electronic Properties Between a Gold Core and Thiolate Ligands: Effects on an Optical Absorption Spectrum in Au₁₃₃(SPh-tBu)₅₂. *J. Phys. Chem. C*, **2016**, 120, 2753-2759. (5) Iida, K.; Noda, M.; Ishimura, K.; Nobusada, K. First-Principles Computational Visualization of Localized Surface Plasmon Resonance in Gold Nanoclusters. *J. Phys. Chem. A*, **2014**, 118, 11317-11322.

学術関係の受賞：2019年度分子科学会奨励賞・「ナノ界面系の光や電圧に対する応答機構の解明」、2022年度日本化学会北海道支部奨励賞・「光や電圧に対するナノ界面の応答機構の解明」、2023年度HPCIソフトウェア賞開発部門奨励賞・「SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience)」

飯田 健二

いいだ けんじ

Kenji IIDA



職名：准教授

着任：2020年1月1日

部門/クラスター：触媒理論研究部門/ナノ界面反応場研究クラスター

研究室：創成科学研究棟05 217-C

電話：011-706-9145・ファクシミリ：011-706-9145

電子メール：k-iida@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：https://www.cat.hokudai.ac.jp/hasegawa/

研究分野：理論計算化学/量子化学/触媒化学/溶液化学

研究課題：不均一な固液界面を記述するための理論計算手法の開発・光や電圧を利用する触媒反応の理論解析

研究キーワード：触媒理論/超並列第一原理計算/液体統計力学/光励起電子ダイナミクス/電圧印加

学歴：2007年京都大学工学部工業化学科卒業/2009年京都大学大学院工学研究科分子工学専攻修士課程修了/2012年京都大学大学院工学研究科分子工学専攻博士後期課程修了

学位：2009年3月修士（工学，京都大学）/2012年3月博士（工学，京都大学）

職歴：2009年日本学術振興会特別研究員（DC1）/2012年分子科学研究所理論・計算分子科学研究領域博士研究員（IMSフェロー）/2013年日本学術振興会特別研究員（PD）/同年分子科学研究所理論・計算分子科学研究領域助教/2020年北海道大学触媒科学研究所准教授（触媒理論研究部門）

所属学会：理論化学会/触媒学会/分子科学会/日本化学会

浦口 大輔

うらぐち だいすけ

Daisuke URAGUCHI



職名：教授

着任：2020年11月1日

部門/クラスター/附属触媒連携研究センター：分子触媒研究部門/触媒研究基盤開発クラスター

担当大学院（学部）：生命科学院（薬学部）

研究室：創成科学研究棟05 311

電話：011-706-9149

電子メール：uraguchi@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：https://www.cat.hokudai.ac.jp/uraguchi/

研究分野：有機化学/合成化学/有機分子触媒/光触媒/選択的分子変換

研究課題：有機分子触媒（2020-）/光触媒（2020-）/

研究キーワード：有機化学/触媒化学/イオン対/不斉合成/光化学/

学歴：1997年3月北海道大学理学部化学科卒業/1999年3月北海道大学大学院理学研究科化学専攻博士前期課程修了/2002年3月北海道大学大学院理学研究科化学専攻博士後期課程修了

学位：1999年3月修士（理学）（北海道大学）/2002年3月博士（理学）（北海道大学）「キレート型高配位アルミニウム、ホウ素の化学：選択的有機合成への活用」

職歴：2002年4月日本学術振興会特別研究員PD（京都大学・米インディアナ大学・東北大学）/2004年10月相模中央化学研究所/2006年5月名古屋大学助手（大学院工学研究科化

学生物工学専攻) / 2007年4月名古屋大学助教(大学院工学研究科化学学生物工学専攻) / 2008年1月名古屋大学講師(大学院工学研究科化学学生物工学専攻) / 2011年10月名古屋大学准教授(大学院工学研究科化学学生物工学専攻) / 2017年4月名古屋大学准教授(大学院工学研究科有機高分子化学専攻) / 2020年11月北海道大学教授(触媒科学研究所)
在外研究歴: 2000年7月-2000年9月米国MITに短期留学 / 2002年5月-2003年4月米国Indiana大(日本学術振興会特別研究員)

所属学会: 日本化学会 / 有機合成化学協会 / American Chemical Society

主要な研究業績: (1) Uruguchi, D.; Kimura, Y.; Ueoka, F.; Ooi, T. Urea as a Redox-active Directing Group under Asymmetric Photocatalysis of Iridium-Chiral Borate Ion Pairs. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 19462-19467. (2) Uruguchi, D.; Ueoka, F.; Tanaka, N.; Kizu, T.; Takahashi, W.; Ooi, T. A Structurally Robust Chiral Borate Ion: Molecular Design, Synthesis, and Asymmetric Catalysis. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 11456-11461. (3) Uruguchi, D.; Yamada, K.; Sato, M.; Ooi, T. Catalyst-Directed Guidance of Sulfur-Substituted Enediolates to Stereoselective Carbon-Carbon Bond Formation with Aldehydes. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 5110-5117. (4) D. Uruguchi, R. Shibasaki, N. Tanaka, K. Yamada, K. Yoshioka, T. Ooi, Catalyst-Enabled Site-divergent Stereoselective Michael Reactions: Overriding Intrinsic Reactivity of Enynyl Carbonyl Acceptors. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 4732-4736. (5) Uruguchi, D.; Sasaki, H.; Kimura, Y.; Ito, T.; Ooi, T. Molecular Design, Synthesis, and Asymmetric Catalysis of a Hexacoordinated Chiral Phosphate Ion. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 2765-2768.
学術関係の受賞: 有機合成化学協会研究企画賞(武田薬品工業)「光学活性アンモニウムベタインの化学: 触媒の分子内アシル転位を利用する四級不斉炭素構築」(2008/12)・日本化学会第60回進歩賞「アニオン認識型キラルオニウム塩の創製と触媒的不斉合成への応用」(2011/03)・科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞「分子認識型キラル有機イオン対触媒の創製と応用の研究」(2011/04)・Banyu Chemist Award (BCA 2012)「反応性イオン種の制御を志向したキラル有機イオン対触媒の創製と応用」(2012/10)・Lectureship Award MBLA (MBLA2013)「反応性イオン種の制御を志向したキラル有機イオン対触媒の創製と応用」(2014/02)・Thieme Chemistry Journal Award 2014 (2014/01)

大須賀遼太

おおすがりょうた
Ryota OSUGA



職名: 助教

着任: 2023年2月1日

部門: 触媒反応研究部門

研究室: 創成科学研究棟04 310-1

電話: 011-706-9130・電子メール: osuga@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ: <https://www.cat.hokudai.ac.jp/nakajima/>

研究分野: 触媒化学

研究課題: 種々の分光法を用いた固体触媒の解析/多孔質材料の合成と触媒応用

研究キーワード: 固体触媒/分光法/多孔質材料

学歴: 2015年3月茨城工業高等専門学校産業システムデザイン工学専攻修了/2017年3月東京工業大学大学院総合理

工学研究科物質電子化学専攻修士課程修了/2019年12月東京工業大学物質理工学院応用化学系応用化学コース博士課程修了

学位: 2017年3月修士(理学)(東京工業大学) / 2019年12月博士(理学)(東京工業大学)「ゼオライトの触媒機能解明に向けた赤外分光法による種々の触媒特性評価」

職歴: 2020年1月東京工業大学, 博士研究員(化学生命科学研究所) / 2020年4月東京工業大学, 特任助教(ナノ空間触媒研究ユニット) / 2020年11月東北大学, 助教(多元物質科学研究所) / 2023年2月北海道大学, 助教(触媒科学研究所)

所属学会: 日本化学会/触媒学会/日本ゼオライト学会/石油学会

学会活動: 化学系学協会北海道支部冬季研究発表会実行委員(2023-現在) 触媒学会若手会委員(2020-現在)・石油学会ジュニア・ソサイアティ 幹事(2020-現在)・触媒学会若手会 第32回フレッシュマンゼミナール運営委員長(2021)・Post Symposium of TOCAT9 in Sendai, Organizing Committee(2022)

主要な研究業績: (1) Osuga, R.; Yokoi, T.; Doitomi, K.; Hirao, H.; Kondo, N. J. Infrared Investigation of Dynamic Behavior of Brønsted Acid Sites on Zeolites at High Temperatures. *J. Phys. Chem. C* **2017**, *121*, 25411-25420. (2) Osuga, R.; Yokoi, T.; Kondo, N. J. Probing the basicity of lattice oxygen on H-form zeolites using CO₂. *J. Catal.* **2019**, *371*, 291-297. (3) Osuga, R.; Saikhantseg, B.; Yasuda, S.; Manabe, R.; Shima, H.; Tsutsuminai, S.; Fukuoka, A.; Kobayashi, H.; Yokoi, T. Metal cation-exchanged zeolites with the location, state, and size of metal species controlled. *Chem. Commun.* **2020**, *56*, 5913-5916. (4) Osuga, R.; Takeuchi, T.; Sawada, M.; Kunitake, Y.; Matsumoto, T.; Yasuda, S.; Onozuka, H.; Tsutsuminai, S.; Kondo, N. J.; Gies, H.; Yokoi, T. Fabrication of AEI-type aluminosilicate catalyst with sheet-like morphology for direct conversion of propene to butenes. *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 5839-5848. (5) Osuga, R.; Yabushita, M.; Matsumoto, T.; Sawada, M.; Yokoi, T.; Kanie, K.; Muramatsu, A. Fluoride-free synthesis of high-silica CHA-type aluminosilicates by seed-assisted aging treatment for starting gel. *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 11583-11586

学術関係の受賞: ゼオライト学会, 第33回研究発表会 若手優秀講演賞「プロトン型ゼオライトの格子酸素の塩基性と触媒反応との関わり」(2017/12)・Taiwan-Japan-US Joint Workshop on Energy Materials and Sustainable Development, Excellent poster awards, 「IR investigation of curvature effect of mesoporous silica for acetalization of cyclohexanone」

(2018/9)・石油学会, 創立60周年記念東京大会(第48回石油・石油化学討論会), Best Presentation Award「Infrared investigation of dehydration of ethanol over zeolites」

(2018/10)・ゼオライト学会, 第35回研究発表会 若手優秀講演賞「赤外分光法を用いたゼオライト上の活性化エーテル種に関する検討」(2019/12)・ゼオライト学会, 第38回研究発表会 若手優秀講演賞「フッ素を用いないハイシリカCHA型アルミノシリケートの合成とMTO反応活性評価」(2022/12) 石油学会, 論文賞「メカノケミカル法を用いたFe置換MWW型ゼオライトの合成」(2023/5)

清水研一

しみずけんいち

Ken-ichi SHIMIZU



職名：教授

着任：2015年4月1日

部門/クラスター/附属触媒連携研究センター：触媒材料研究部門/触媒研究基盤開発クラスター/規整表面ナノ構造研究クラスター/界面シミュレーション研究クラスター/産学官連携触媒研究ユニット・統合物質創製化学研究推進ユニット

担当大学院（学部）：総合化学院

研究室：創成科学研究棟04-312-2

電話：011-706-9164・ファクシミリ：011-706-9163

電子メール：kshimizu@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：http://www.cat.hokudai.ac.jp/shimizu/

研究分野：触媒・資源化学プロセス/物理化学/合成化学
研究キーワード：触媒設計/機械学習/有機合成/自動車排ガス浄化

学歴：1994年3月名古屋大学工学部応用化学科卒業/1997年3月名古屋大学大学院工学研究科修士課程修了/2000年3月名古屋大学大学院工学研究科博士課程修了

学位：2000年3月博士（工学）（名古屋大学）

職歴：2000年4月新潟大学大学院自然科学研究科助手/2004年4月名古屋大学大学院工学研究科助手/2007年4月名古屋大学大学院工学研究科助教/2010年10月北海道大学触媒化学研究センター准教授/2015年4月1日北海道大学触媒化学研究センター教授/2015年10月北海道大学触媒化学研究所教授（触媒材料研究部門）

所属学会：触媒学会/日本化学会/石油学会

学会活動：触媒学会編集委員（2002-2004）・触媒学会関東地区幹事（2003）・石油学会ジュニアソサイアティー代表幹事（2007-2009）・触媒学会討論会委員（2008-2010）・触媒学会広報委員（2009）・石油学会論文誌編集委員（2009-2010）・石油学会北海道支部長（2018-2019）・触媒学会北海道支部長（2020-2021）

主要な研究業績：(1) Yasumura, S.; Nagai, K.; Miyazaki, S.; Qian, Y.; Chen, D.; Toyao, T.; Kamiya, Y.; Shimizu, K. Low-Temperature Methane Combustion Using Ozone over CoP Catalyst, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 20982. (2) Zhang, N.; Li, L.; Jing, Y.; Qian, Y.; Chen, D.; Maeda, N.; Murayama, T.; Toyao, T.; Shimizu, K. In situ/operando spectroscopic evidence on associative redox mechanism for periodic unsteady-state water-gas shift reaction on Au/CeO₂ catalyst, *J. Catal.* **2024**, *433*, 115500. (3) Huang, M.; Hu, X.; Chen, D.; Maeno, Z.; Tsunogi, N.; Toyao, T.; Shimizu, K. Anaerobic Ammodehydrogenation of Ethane to Acetonitrile over Ga-Loaded H-FER Zeolite Catalysts, *ACS Catal.* **2024**, *14*, 1013-1020. (4) Yasumura, S.; Saita, K.; Miyakage, T.; Nagai, K.; Kon, K.; Toyao, T.; Maeno, Z.; Taketsugu, T.; Shimizu, K. Designing main-group catalysts for low-temperature methane combustion by ozone, *Nature Commun.* **2023**, *14*, 3926. (5) Kubota, H.; Jing, Y.; Wan, L.; Tong, J.; Zhang, N.; Mine, S.; Toyao, T.; Toyoshima, R.; Kondoh, H.; Ferri, D.; Shimizu, K. Operando Spectroscopic Study of Reduction and Oxidation Half-Cycles in NH₃-SCR over CeO₂-Supported WO₃, *ACS Catal.* **2023**, *13*, 9274-9288.

学術関係の受賞：石油学会奨励賞「新規金属酸化物系NO_x除去触媒の開発と作用機構の解明」（2007/05）・触媒学会

奨励賞「銀クラスター触媒による脱硝および環境調和型有機合成に関する研究」（2010/03）・東海化学工業会賞学術賞「環境調和型反応用銀クラスター触媒の開発と作用機構に関する研究」（2010/05）・平成25年度北海道大学研究総長賞（2014/03/04）・平成26年度北海道大学研究総長賞奨励賞（2015/03/11）・平成28年度北海道大学研究総長賞奨励賞（2017/01/31）・令和4年度北海道大学教育研究総長表彰（2023/2/22）・日本化学会第41回学術賞（2024/3/19）

シュロトリアビジット

しゅろとりあびじつと

Abhijit SHROTRI



職名：助教

着任：2016年6月16日

部門/クラスター：物質変換研究部門

研究室：創成科学研究棟04 309-2

電話：011-706-9137・ファクシミリ：011-706-9139

電子メール：ashrotri@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：http://www.cat.hokudai.ac.jp/fukuoka/

研究分野：触媒・資源化学プロセス/機能物質化学/グリーン・環境化学

研究課題：固体触媒によるバイオマスとCO₂の変換

研究キーワード：触媒/バイオマス/セルロース/CO₂

学歴：Bachelor of Engineering, June, 2006, Department of Chemical Engineering, National Institute of Technology, Raipur, India/ PhD (Chemical Engineering), April, 2014, Australian Institute of Bioengineering and Nanotechnology, University of Queensland

学位：PhD, Chemical Engineering (University of Queensland)

「Catalytic conversion of lignocellulosic biomass into sugar alcohols」

職歴：Process Engineer, Sep 2006-Dec 2009, Reliance Industries Limited, Mumbai, India/ Postdoctoral Research Fellow, May 2014-Sep 2015, Catalysis Research Centre, Hokkaido University/ Postdoctoral Research Fellow, Oct 2015-June 2016, Institute for Catalysis, Hokkaido University/ Assistant Professor, June 2016-present Institute for Catalysis, Hokkaido University

所属学会：触媒学会/日本化学会/石油学会

主要な研究業績：(1) Dostagir, N. H. Md.; Tomuschat, C. R.; Oshiro, K.; Gao, M.; Hasegawa, J.; Fukuoka, A.; Shrotri, A.; Mitigating the Poisoning Effect of Formate during CO₂ Hydrogenation to Methanol over Co-Containing Dual-Atom Oxide Catalysts, *JACS Au*, **2024**, *4*, 1048-1058. (2) Palai, Y. N.; Fukuoka, A.; Shrotri, A.; Unlocking the Potential of 5-Hydroxy-2(5H)-furanone as a Platform for Bio-Based Four Carbon Chemicals, *ACS Catal.*, **2024**, *14*, 2545-2551. (3) Dostagir, N. H. M.; Fukuoka, A. Redox Behavior of In-O-Ti Interface for Selective Hydrogenation of CO₂ to CO in Doped In-TiO₂ Catalyst, *ChemCatChem*, **2023**, *15*, e202201348. (4) Palai, Y. N.; Shrotri, A.; Fukuoka, A. Selective Oxidation of Furfural to Succinic Acid over Lewis Acidic Sn-Beta. *ACS Catal.* **2022**, *12*, 3534-3542. (5) Dostagir, N. H. Md.; Rattanawan, R.; Gao, M.; Ota, J.; Hasegawa, J.; Asakura, K.; Fukuoka, A.; Shrotri, A. Co single atoms in ZrO₂ with inherent oxygen vacancies for selective hydrogenation of CO₂ to CO. *ACS Catal.* **2021**, *11*, 9450-9461. (6) Dostagir, N. H. Md.; Thompson, C.; Kobayashi, H.; Karim, A. M.; Fukuoka, A.; Shrotri, A. Rh promoted In₂O₃

as a highly active catalyst for CO₂ hydrogenation to methanol. *Catal. Sci. Technol.* **2020**, *10*, 8196-8202.

学術関係の受賞：National Institute of Technology, Raipur, India “2023 Young Achiever Alumnus Award” (2023/12/01)・2022年度触媒学会奨励賞、一般社団法人触媒学会、「二酸化炭素およびバイオマス資源活用のための触媒開発」(2023/03/16)・第10回新化学技術研究奨励賞、新化学技術推進協会、「結晶性セルロースの直接加水分解を可能にするカーボン触媒の開発」(2021/06/10)・Best Oral presentation award at APCAT-7 conference, Mumbai, India (2017/1/26)・University of Queensland International Research Tution Award, University of Queensland, Australia (2010/03/15)・University of Queensland Research Scholarship, University of Queensland, Australia (2010/03/15)

菅沼学史

すがぬまさとし

Satoshi SUGANUMA



職名：准教授

着任：2023年4月1日

部門/クラスター：触媒反応研究部門/天然炭素資源活用研究クラスター

研究室：創成科学研究棟03 310-2

電話：011-706-9131

電子メール：suganuma@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：https://www.cat.hokudai.ac.jp/nakajima/

研究分野：触媒・資源化学プロセス/機能物質化学

研究課題：固体触媒による天然炭素資源の変換

研究キーワード：酸塩基触媒/協働機能触媒/バイオマス変換

学歴：2007年3月東京理科大学理学部応用化学科卒業/2009年3月東京工業大学大学院総合理工学研究科物質電子化学専攻修士課程修了/2012年3月同博士課程修了

学位：2009年3月修士（理学）（東京工業大学）/2012年3月博士（理学）（東京工業大学）「Studies on Catalysis of Amorphous Carbon with Sulfonic Acid Groups」

職歴：2010年4月日本学術振興会特別研究員（DC2）/2012年4月株式会社キャタラー/2014年3月鳥取大学、テニユアトラック助教（工学部）/2018年4月同講師/2021年1月同准教授/2023年4月北海道大学准教授（触媒科学研究所・触媒反応研究部門）

所属学会：日本化学会/触媒学会/日本ゼオライト学会/石油学会

学会活動：触媒学会若手会幹事（2010-2012）/日本化学会おもしろワクワク化学の世界2015鳥取化学展実行委員（2015）/ゼオライト学会第31回ゼオライト研究発表会（鳥取）実行委員（2015）/触媒学会参照触媒ゼオライト〔MFI型（ZSM-5）以外〕配布担当（2015-2021）/触媒学会第36回参照触媒討論会実行委員（2016）/日本化学会四国支部大会（鳥取）実行委員（2017）/石油学会第47回中国石油・石油化学討論会（鳥取）実行委員（2017）/石油学会中国四国支部幹事（2018-2023）/石油学会ジュニア・ソサイアティ（JPIJS）幹事（2019-2023）/石油学会第38回中国四国支部講演会幹事（2020）/触媒学会西日本支部代議員（2021-2023）/触媒学会キャラクターセッション講習会幹

事（2022）/触媒学会第132回触媒討論会（北海道大学）現地実行委員（2023）/触媒学会誌編集委員会（2023-）/触媒学会広報委員会（2023-）/触媒学会北海道支部庶務幹事（2024-）/ゼオライト学会企画・広報委員会（2024-）

主要な研究業績：(1) Suganuma, S.; Nakajima, K.; Kitano, M.; Yamaguchi, D.; Kato, H.; Hayashi, S.; Hara, M. Hydrolysis of Cellulose by Amorphous Carbon Bearing SO₃H, COOH, and OH Groups, *J. Am. Chem. Soc.*, **2008**, *130*, 12787-12793. (2) Suganuma, S.; Nakamura, K.; Okuda, A.; Katada, N. Enhancement of Catalytic Activity for Toluene Disproportionation by Loading Lewis Acidic Nickel Species on ZSM-5 Zeolite, *Mol. Catal.*, **2017**, *435*, 110-117. (3) Suganuma, S.; Otani, A.; Joka, S.; Asako, H.; Takagi, R.; Tsuji, E.; Katada, N. One-step Conversion of Glutamic Acid into 2-Pyrrolidone on Supported Ru Catalyst in Hydrogen Atmosphere: Remarkable Effect of CO Activation, *ChemSusChem*, **2019**, *12*, 1381-1389. (4) Nakano, F.; Goma, T.; Suganuma, S.; Tsuji, E.; Katada, N. Selective dealkylation of alkyl polycyclic aromatic hydrocarbons towards innovative upgrading process of practical heavy oil, *Catal. Sci. Technol.*, **2021**, *11*, 239-249. (5) Kaku, C.; Suganuma, S.; Nakajima, K.; Tsuji, E.; Katada, N. Selective Hydrogenation of L-proline to L-prolinol over Al₂O₃-supported Pt-MoO₃ Catalyst, *ChemCatChem*, **2022**, *14*, e202200399.

学術関係の受賞：石油学会奨励賞（出光興産賞）「実油中の多環芳香族類選択的転換のための固体酸触媒および関連技術の開発」（2022/5）

宋志毅

そんつい

Zhiyi SONG



職名：准教授

着任：2018年9月1日

部門/クラスター：高分子機能科学研究部門/遷移金属誘起高分子合成/変換研究クラスター

担当大学院（学部）：理学部

研究室：創成科学研究棟02-111

電話：011-706-9207

電子メール：songzhiyi@cat.hokudai.ac.jp

研究分野：高分子機能材料

研究キーワード：有機合成/有機金属化学/ナノカーボン/有機半導体材料

学歴：中国南開大学化学学院有機化学専攻化学専攻

学位：理学博士

職歴：2006年9月北海道大学、科学技術振興機構研究員/2008年9月北海道大学触媒化学研究センター特任助教/2011年3月北海道大学触媒化学研究センター助教/2015年10月北海道大学触媒科学研究所助教（分子触媒研究部門）/2017年7月北海道大学触媒科学研究所准教授（分子触媒研究部門）/2018年9月北海道大学触媒科学研究所准教授（高分子機能科学研究部門）

所属学会：日本化学会、先端錯体工学研究会

主要な研究業績：(1) Song, Z.; Sato, H.; Pietropaolo, A.; Wang, Q.; Shimoda, S.; Dai, H.; Imai, Y.; Toda, H.; Harada, T.; Shichibu, Y.; Konishi, K.; Bando, M.; Naga, N.; Nakano, T. Aggregation-induced Chirality Amplification of Optically Active Fluorescent Polyurethane and Cyclic Dimer in the Ground and Excited States. *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 1029-1032. (2) Zhang, Z.; Harada, T.; Pietropaolo, A.; Wang, Y.; Wang,

Y.; Hu, X.; He, X.; Chen, H.; Song, Z.; Bando, M.; et al. Blue circularly polarized luminescent amorphous molecules with single-handed propeller chirality induced by circularly polarized light irradiation. *Chem. Commun.* **2021**, 57 (14), 1794-1797. (3) Wang, Y.; Zavadashvili, N.; Wang, Y.; Pietropaolo, A.; Song, Z.; Bando, M.; Katsarava, R.; Nakano, T. Optically Active Polymers with Cationic Units Connected through Neutral Spacers: Helical Conformation and Chirality Transfer to External Molecules. *Macromolecules* **2020**, 22, 9916-9928. (4) Vishwakarma, S.; Kumari, A.; Mitra, K.; Singh, S.; Song, Z.; Bando, M.; Nakano, T.; Gupta, S. K. S.; Ray, B. Effect of L-Menthol Chain-end on the Optical Rotation, Chirality, Tacticity and Thermal Properties of Polystyrene Prepared by ATRP and Polyvinylacetates Prepared by RAFT Polymerization: A Molecular Weight Dependence Study. *Materials Today Commun.* **2020**, 26, 101705. (5) Dai, H.; Shichibu, Y.; Imai, Y.; Hara, N.; Konishi, K.; Wang, Y.; Song, Z.; Nakano, T. Synthesis and stereochemistry of helical polyurethanes based on 2,2'-dihydroxy-1,1'-binaphthyl and diisocyanatobenzenes. *Polym. Chem.* **2020**, 11, 1134-1144.

高草木達

たかくさぎさとる
Satoru TAKAKUSAGI



職名：教授

着任：2023年4月1日

部門/クラスター/附属連携研究センター：触媒構造研究部門/触媒研究基盤開発クラスター/学際統合物質科学研究ユニット/新放射光源触媒計測科学ユニット/キャタリストインフォマティクスユニット

研究室：創成科学研究棟02-312-2

電話：011-706-9113・ファクシミリ：011-706-9113

電子メール：takakusa@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：https://www.cat.hokudai.ac.jp/takakusagi/

研究分野：ナノ構造科学/界面化学/ナノ材料・ナノバイオサイエンス/反応速度論と触媒/物理化学/電気化学/機能物質化学/機能材料・デバイス

研究課題：プラズマ触媒反応の機構解明 (2019-) /オペランド表面科学計測手法の開発と触媒活性点の精密構造解析 (2018-) /偏光全反射蛍光XAFS法による酸化物上単原子金属種の三次元構造解析 (2008-) /表面X線散乱法と電気化学走査型トンネル顕微鏡による固液界面構造解析 (2002-2008)

研究キーワード：物理化学/機能物質化学/機能材料

学歴：1998年3月東京大学理学部化学科卒業/2000年3月東京大学理学系研究科化学専攻修士課程修了/2002年9月東京大学理学系研究科化学専攻博士課程中途退学

学位：2000年3月修士（理学）（東京大学）/2003年4月博士（理学）（東京大学）「TiO₂(110)単結晶表面上のナノ構造体形成機構と分子吸着・反応過程のSTM観察」

職歴：2001年4月日本学術振興会特別研究員（DC2）（2002年9月まで）/2002年9月北海道大学助手（大学院理学研究科化学専攻）/2008年4月北海道大学准教授（触媒化学研究所）/2015年10月北海道大学准教授（触媒化学研究所）/2023年4月北海道大学教授（触媒化学研究所）

在外研究歴：2007年5月-9月仏国エコール・ポリテクニク

所属学会：触媒学会/電気化学会/日本化学会/日本表面科学会/日本XAFS研究会/アメリカ化学会

学会活動：日本表面真空学会協議員（2024-）/触媒学会企画・教育委員会委員（2023-）/触媒学会先端放射光利活用研究会幹事（2022-）/日本化学会北海道支部庶務幹事（2022-2023）/日本化学会代表正会員（2010-）/電気化学会北海道支部幹事（2003-）/日本表面真空学会東北・北海道支部幹事（2013-）/触媒学会次世代放射光ワーキンググループ委員（2021-2022）/電気化学会編集委員会（2018-2019）/触媒学会討論会委員会委員及び総務委員会委員（2013-2014）/日本表面科学会北海道支部幹事（2014-2016）/日本XAFS研究会企画幹事（2015-2017）

主要な研究業績：(1) Kim, D.Y.; Inagaki, Y.; Yamakawa, T.; Lu, B.; Sato, Y.; Shira, N.; Furukawa, S.; Kim, H.H.; Takakusagi, S.; Sasaki, K.; Nozaki, T. Plasma-Derived Atomic Hydrogen Enables Eley-Rideal-Type CO₂ Methanation at Low Temperatures. *JACS Au* **2025** 5, 169-177. (2) Liu, C.; Lu, B.; Ariga-Miwa, H.; Ogura, S.; Ozawa, T.; Fukutani, K.; Gao, M.; Hasegawa, J.; Shimizu, K.; Asakura, K.; Takakusagi, S. Dynamic Behavior of Intermediate Adsorbates to Control Activity and Product Selectivity in Heterogeneous Catalysis: Methanol Decomposition on Pt/TiO₂(110). *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, 145, 19953-19960. (3) Kim, D.Y.; Ham, H.; Chen, X.; Liu, S.; Xu, H.; Lu, B.; Furukawa, S.; Kim, H.H.; Takakusagi, S.; Sasaki, K.; Nozaki, T. Cooperative catalysis of vibrationally excited CO₂ and alloy catalyst breaks the thermodynamic equilibrium limitation. *J. Am. Chem. Soc.* **2022** 144, 14140-14149. (4) Lu, B.; Kido, D.; Sato, Y.; Xu, H.; Chun, W. J.; Asakura, K.; Takakusagi, S. Development of Operando Polarization-dependent Total Reflection Fluorescence X-ray Absorption Fine Structure Technique for Three-Dimensional Structure Determination of Active Metal Species on a Model Catalyst Surface under Working Conditions. *J. Phys. Chem. C* **2021**, 125, 12424-12432. (5) Takakusagi, S.; Iwasawa, Y.; Asakura, K. Premodified Surface Method to Obtain Ultra-highly Dispersed Metals and their 3D Structure Control on an Oxide Single-crystal Surface. *Chem. Rec.* **2019**, 18, 1244-1255.

学術関係の受賞：Pacifichem 2000 Student Poster Award (2000/12)・日本表面科学会ISSS-5 Best Poster Award「Effect of Electrode Potential on Ag Deposition on a Reconstructed Au(111) Surface Studied by In situ Scanning Tunneling Microscopy」(2008)・日本化学会第88春季年会優秀講演賞(学術)「走査型トンネル顕微鏡 (STM) による再構成した Au(111) 表面上への電気化学的Ag析出過程のその場追跡」(2008/04)・日本化学会第90春季年会若い世代の特別講演会「実用的に興味ある固気・固液界面プロセスの原子・分子レベル観察と機構解明」(2010/03)・日本化学会北海道支部奨励賞「単結晶表面上に構築した金属ナノ構造体の高分解能計測と表面化学プロセスの原子レベル観察」(2014/01)・北海道大学研究総長賞奨励賞 (2015/03/11)・日本化学会BCSJ賞「Investigation of the Cleanliness of Transferred Graphene: The First Step toward Its Application as a Window Material for Electron Microscopy and Spectroscopy」(2015/08)・American Vacuum Society (AVS) VTD Shop Note Awards「Portable ultrahigh-vacuum sample storage system for polarization-dependent total-reflection fluorescence X-ray absorption fine structure spectroscopy」(2017/06)・日本表面真空学会論文賞「Thorough Search Analysis of Extended X-ray Absorption Fine Structure Data for Complex Molecules and Nanomaterials Applications」(2021/11)・2025年日本表面真空学会フェロー「その場/オペランド表面科学計測による表面反応プロセスの原子レベル可視化と機構解明」(2025/02)

武安光太郎

たけやすこうたろう

Kotaro TAKEYASU



職名：准教授

着任：2024年4月1日

部門/クラスター/附属連携研究センター：触媒構造研究部門/混成電位駆動型触媒研究クラスター

研究室：創成科学研究棟02-312-1

電話：011-706-9114・ファクシミリ：011-706-9123・電子メール：takeyasu@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：https://www.cat.hokudai.ac.jp/takakusagi/

研究分野：表面科学/界面化学/混成電位駆動型触媒反応/非平衡系の反応物理学

研究課題：窒素ドーパカーボン触媒における反応機構解明および触媒設計（2018-），混成電位駆動型触媒反応の機構解明（2019-），生体系における混成電位形成機構の解明（2020-）

研究キーワード：触媒反応/真空科学/表面化学/表面物理学

学歴：2009年3月東京大学工学部物理工学科卒業/2011年3月東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻修士課程修了/2014年3月東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻博士課程修了

学位：2014年3月博士（工学）（東京大学）

職歴：2011年4月日本学術振興会特別研究員（DC1）（2014年3月まで）/2014年4月東京大学生産技術研究所特任研究員/2015年2月大阪大学大学院理学研究科化学専攻特任研究員/2017年5月京都大学大学院理学研究科化学専攻教務補佐員/2018年4月筑波大学数理物質系物質工学域助教/2024年4月北海道大学触媒科学研究所准教授

在外研究歴：2024年12月-2025年1月 Shiv Nadar University（インド）

所属学会：触媒学会/日本表面真空学会/アメリカ真空学会
学会活動：日本物理学会運営委員長（2019-2020）/日本表面真空学会若手部会運営委員（2018-）/日本表面真空学会教育委員（2019-）/触媒学会東日本支部代議員・幹事（2019-2023）/日本表面真空学会出版委員（2025-）

主要な研究業績：(1) Yan, M.; Arsyad, R.; Namari, N. A. P.; Suzuki, H.; Takeyasu, K. Mixed-Potential-Driven Catalysis in Glucose Oxidation. *ChemCatChem* **2024**, *16*, e202400322. (2) Yan, M.; Namari, N. A. P.; Nakamura, J.; Takeyasu, K. Theoretical Framework for Mixed-Potential-Driven Catalysis. *Commun. Chem.* **2024**, *7*, 69. (3) Singh, S. K.; Takeyasu, K.; Homma, K.; Ito, S.; Morinaga, T.; Endo, Y.; Furukawa, M.; Mori, T.; Ogasawara, H.; Nakamura, J. Activating Nitrogen-Doped Graphene Oxygen Reduction Electrocatalysts in Acidic Electrolytes Using Hydrophobic Cavities and Proton-Conductive Particles. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2022**, *61*, e202212506. (4) Takeyasu, K.; Sawaki, Y.; Imabayashi, T.; Putra, S. E. M.; Halim, H. H.; Quan, J.; Hamamoto, Y.; Hamada, I.; Morikawa, Y.; Kondo, T.; Fujitani, T.; Nakamura, J. Hydrogenation of Formate Species Using Atomic Hydrogen on a Cu(111) Model Catalyst. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 12158-12166. (5) Takeyasu, K.; Furukawa, M.; Shimoyama, Y.; Singh, S. K.; Nakamura, J. Role of Pyridinic Nitrogen in the Mechanism of the Oxygen Reduction Reaction on Carbon Electrocatalysts. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2021**, *60*, 5121-5124.

学術関係の受賞：日本真空学会第23回真空進歩賞（2014）・日本真空学会第39回 熊谷記念真空科学論文賞（2014）・日本触媒学会若手研究者のための海外渡航費用助成（2018/09）・日本表面真空学会講演奨励賞（若手研究者部門）「ミトコンドリア電子伝達系の熱産生解析」（2021/05）・筑波大学若手教員奨励賞（2021/07）・第17回日本物理学会若手奨励賞「表面反応におけるエネルギーの流れと制御因子の研究」（2022/10）・つくば研究支援センター第4回TCIベンチャーアワードシーズ部門優秀賞「低価格・高耐久な白金フリー燃料電池触媒」（2024/01）

趙強

ちゃおちゃん

Qiang ZHAO



職名：助教

着任：2021年10月1日

部門/クラスター：分子触媒研究部門

研究室：創成科学研究棟05 111

電話：011-706-9151・ファクシミリ：011-706-9149

電子メール：qiang@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：https://www.cat.hokudai.ac.jp/uraguchi/

研究分野：有機化学/合成化学/分子触媒化学

研究課題：ラジカル触媒として働くキラリリン酸（Ⅲ）触媒の創製

研究キーワード：ラジカル触媒/立体化学制御

学歴：2016年3月京都大学合成・生物化学専攻修士課程修了/2019年3月京都大学合成・生物化学専攻博士課程修了

学位：2016年3月修士（工学，京都大学）/2019年3月博士（工学，京都大学）

職歴：2012年2月中国科学院上海有機化学研究所研究補助員/2016年4月独立行政法人日本学術振興会特別研究員/2019年4月アメリカ・パデュー大学化学系博士研究員/2022年10月より現職

所属学会：日本化学会/日本薬学会

主要な研究業績：(1) Zhao, Q.; Miura, T.; Murakami, M. Cyclization Reaction of 4-Acyl-1,2,3-triazoles Possessing Phenyl Rings through Generation of Electron-Deficient Carbenoids. *Chem. Lett.* **2019**, *48*, 510-512. (2) Miura, T.; Zhao, Q.; Murakami, M. Selective Functionalization of Aromatic C(sp²)-H Bonds in the Presence of Benzylic C(sp³)-H Bonds by Electron-Deficient Carbenoid Generated from 4-Acyl-1-sulfonyl-1,2,3-triazoles. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2017**, *56*, 16645-16649. (3) Miura, T.; Zhao, Q.; Funakoshi, Y.; Murakami, M. Site-Selective Introduction of an Enamido Group at the C(3)-Position of Indoles. *Heterocycles* **2015**, *91*, 1579-1584. (4) Miura, T.; Zhao, Q.; Funakoshi, Y.; Murakami, M. Thermal Reaction of 4-(p-Aminophenyl)-1-sulfonyl-1,2,3-triazoles Furnishing Benzoyl Cyanides Through N-Sulfinyl Imine Intermediates. *Chem. Lett.* **2015**, *44*, 967-969.

鳥屋尾隆

とやおたかし
Takashi TOYAO



職名：准教授

着任：2023年11月1日

部門/クラスター：触媒材料研究部門/データ駆動型触媒研究クラスター

担当大学院（学部）：総合化学院

研究室：創成科学研究棟04 111

電話：011-706-9165・ファクシミリ：011-706-9163

電子メール：toyao@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：http://www.cat.hokudai.ac.jp/shimizu/

研究分野：触媒・資源化学プロセス/物理化学/合成化学

研究キーワード：水素化/自動車排ガス浄化/CO₂資源化/計算科学/インフォマティクス

学歴：2011年3月大阪府立大学工学部応用化学科卒業/2013年3月大阪府立大学大学院工学研究科修士課程修了/2015年9月大阪府立大学大学院工学研究科博士課程修了

学位：2015年9月博士（工学）（大阪府立大学）

職歴：2013年4月独立行政法人日本学術振興会 特別研究員（DC1）/2015年10月独立行政法人日本学術振興会 特別研究員（PD）/2015年12月北海道大学触媒科学研究所助教/2023年11月北海道大学触媒科学研究所准教授

所属学会：触媒学会/日本化学会/石油学会

学会活動：触媒学会若手委員（2012-）/石油学会北海道支部幹事（2016-）/触媒学会参照触媒委員（2022-）

主要な研究業績：(1) Jing, Y.; He, C.; Zhang, N.; Murano, Y.; Toyoshima, R.; Kondoh, K.; Kageyama, Y.; Inomata, H.; Toyao, T. Promotional Effect of Ag on the Catalytic Decomposition of N₂O in the Presence of O₂ over the Al₂O₃-Supported Rh Catalyst. *ACS Catal.* **2023**, *13*, 12983–12993. (2) Wang, G.; Mine, S.; Chen, D.; Jing, Y.; Ting, K. W.; Yamaguchi, T.; Takao, M.; Maeno, M.; Takigawa, I.; Matsushita, K.; Shimizu, K.; Toyao, T. Accelerated discovery of multi-elemental reverse water-gas shift catalysts using extrapolative machine learning approach. *Nature Communications*. **2023**, *14*, 5861. (3) Phongprueksathat, N.; Ting, K.W.; Mine, S.; Jing, Y.; Toyoshima, R.; Kondoh, H.; Shimizu, K. Toyao, T.; Urakawa, A. Bifunctionality of Re Supported on TiO₂ in Driving Methanol Formation in Low-Temperature CO₂ Hydrogenation. *ACS Catal.* **2023**, *13*, 10734–10750. (4) Toyao, T.; Maeno, Z.; Takakusagi, S.; Kamachi, T.; Takigawa, I.; Shimizu, K. Machine Learning for Catalysis Informatics: Recent Applications and Prospects. *ACS Catal.* **2020**, *10*, 2260–2297. (5) Jing, Y.; Cai, Z.; Liu, C.; Toyao, T.; Maeno, Z.; Asakura, H.; Hiwasa, S.; Nagaoka, S.; Kondoh, H.; Shimizu, K. Promotional Effect of La in the Three-Way Catalysis of La-Loaded Al₂O₃-Supported Pd Catalysts (Pd/La/Al₂O₃). *ACS Catal.* **2020**, *10*, 1010–1023.

学術関係の受賞：日本化学会第72回進歩賞「外挿の探索が可能な機械学習を用いたCO₂変換触媒開発」(2023/03/24)

中島清隆

なかじまきよたか
Kiyotaka NAKAJIMA



職名：教授

着任：2022年4月1日

部門/クラスター：触媒反応研究部門

研究室：創成科学研究棟03 311-2

電話：011-706-9132

電子メール：nakajima@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：https://www.cat.hokudai.ac.jp/nakajima/

研究分野：触媒・資源化学プロセス/機能物質化学/

研究課題：水中で機能する固体酸塩基触媒の開発/固体触媒によるバイオマス変換

研究キーワード：酸塩基触媒/金属酸化物/バイオマス変換

学歴：2001年3月明治大学理工学部工業化学科卒業/2003年3月東京工業大学大学院総合理工学研究科物質電子化学専攻修士課程修了/2006年3月同博士課程修了

学位：2003年3月修士（理学）（東京工業大学）/2006年3月博士（理学）（東京工業大学）「Studies on the syntheses, structural characteristics, and applications of organic-inorganic hybrid mesoporous materials」

職歴：2006年4月株式会社豊田中央研究所、客員研究員/2007年4月東京工業大学、特任助教（応用セラミックス研究所）/2009年2月同助教/2015年4月北海道大学准教授（触媒化学研究センター）/2015年10月北海道大学准教授（触媒科学研究所・物質変換研究部門）/2022年4月北海道大学教授（触媒科学研究所・触媒反応研究部門）

所属学会：日本化学会/触媒学会/日本ゼオライト学会/石油学会

学会活動：触媒学会若手会幹事（2004–2006）・触媒学会若手会代表幹事（2005–2006）・触媒学会キャタリシススクール運営委員（2008–2011）・触媒学会討論会委員（2011–2013）・ゼオライト学会ゼオライト研究発表会実行委員（2008, 2010, 2012）・日本化学会春季年会、プログラム編成委員（2011, 2013）・第7回酸塩基触媒国際会議（ABC-7）実行委員（2011–2013）・石油学会会誌編集委員（2014–2015）・触媒学会代議員（2014–2016）・触媒学会北海道地区幹事（2016–2018）・石油学会北海道支部幹事（2016–2018）・触媒学会企画教育委員（2019–2022）・日本化学会北海道支部幹事（2016–2022）・触媒学会経営委員（2023）・触媒学会北海道支部長（2024-）・触媒学会国際交流委員（2024-）

主要な研究業績：(1) Nakajima, K.; Baba, Y.; Noma, R.; Kitano, M.; Kondo, J. N.; Hayashi, S.; Hara, M. Nb₂O₅·nH₂O as a Heterogeneous Catalyst with Water-Tolerant Lewis Acid Sites. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 4224–4227. (2) Gupta, N. K.; Fukuoka, A.; Nakajima, K. Amorphous Nb₂O₅ as a Selective and Reusable Catalyst for Furfural Production from Xylose in Biphasic Water and Toluene. *ACS Catal.* **2017**, *7*, 2430–2436. (3) Kim, M.; Su, Y.; Fukuoka, A.; Hensen, E. J. M.; Nakajima, K. Aerobic Oxidation of 5-(Hydroxymethyl)furfural Cyclic Acetal Enables Selective Furan-2,5-dicarboxylic Acid Formation with CeO₂-Supported Gold Catalyst. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 8235–8239. (4) Kim, M.; Su, Y.; Aoshima, T.; Fukuoka, A.; Hensen, E. J. M.; Nakajima, K. Effective Strategy of Furan Dicarboxylate Production for Biobased Polyester Applications. *ACS Catal.* **2019**, *9*, 4277–4285. (5) Wiesfeld, J. J.; Kim, M.;

Nakajima, K.; Hensen, E. J. M. Selective Hydrogenation of 5-Hydroxymethylfurfural to 2,5-Bis(hydroxymethyl)furan Using Supported Rhenium-promoted Nickel Catalysts in Water. *Green Chem.* **2020**, 22, 1229-1238.

学術関係の受賞：石油学会奨励賞（出光興産賞）「水中で機能する酸化ニオブおよびスルホン化カーボン固体酸触媒の開発とバイオマス変換反応への応用」（2012/5）・東京工業大学、挑戦的研究賞「新規な水中機能触媒を用いた植物由来炭化水素からの必須化学品原料の環境低負荷合成」（2014/10）・触媒学会奨励賞「水中で機能する固体ルイス酸の開発と糖変換反応への応用」（2015/3）・日本化学会、若い世代の特別講演会、講演賞「酸化チタンの水中ルイス酸特性とグリセロール水溶液からの乳酸合成への応用」（2015/03/11）・平成28年度北海道大学研究総長賞奨励賞（2017/1/31）・第5回物質・デバイス共同研究賞、物質・デバイス領域共同研究拠点「ニオブ系複合酸化物による糖変換反応」（2023/5）

中野環

なかのたまき
Tamaki NAKANO



職名：教授

着任：2012年4月1日

部門/クラスター：高分子機能科学研究部門/触媒研究基盤開発クラスター

研究室：創成科学研究棟05 309-1

電話：011-706-9155・ファクシミリ：011-706-9156

電子メール：tamaki.nakano@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：http://polymer.cat.hokudai.ac.jp/

研究分野：高分子化学

研究課題：らせん高分子の合成・高分子の非らせん型アモルファス高次構造制御・高分子の励起状態キラリティー制御・高分子医薬品の開発

研究キーワード：光/不斉/キラリ/らせん/ π 電子

学歴：1986年3月大阪大学基礎工学部合成化学科卒業/1988年3月大阪大学大学院基礎工学研究科博士前期課程化学専攻修了/1990年8月大阪大学大学院基礎工学研究科博士後期課程化学専攻退学

学位：1988年3月工学修士（大阪大学）/1991年6月工学博士（大阪大学）「Asymmetric Polymerization of Bulky Methacrylates and Stereomutation of Helical Polymers」

職歴：1990年9月名古屋大学助手（工学部応用化学科機能高分子化学講座）/1997年4月名古屋大学大学院工学研究科応用化学専攻助手/1998年4月同助教授/1999年4月奈良先端科学技術大学院大学助教授（物質創成科学研究科反応制御科学講座）/2006年4月北海道大学教授（大学院工研究院生物機能高分子部門）/2012年4月触媒化学研究センター教授（集合機能化学研究部門部門）/2015年10月北海道大学触媒科学研究所教授（高分子機能科学研究部門）

在外研究歴：1993年9月-1994年8月コーネル大学客員研究員

所属学会：高分子学会/日本化学会/光化学協会/触媒学会/有機合成化学協会/アメリカ化学会

学会活動：高分子学会関西支部幹事（2002-2006）・同北海道支部理事（2008-）・日本化学会北海道支部幹事（2010-2012）・高分子学会高分子命名法委員会委員（2004-）委員

長（2019-）・「高分子」誌編集委員会支部委員（2010-2012）・IUPAC Division IV IUPAC Subcommittee for Polymer Terminology (SPT) member（2010-）・日本化学会命名法専門委員会委員（2016-）・高分子学会理事（2019-2022）・日本化学会北海道支部代議員（2021-）

主要な研究業績：(1) Wu, P.; Pietropaolo, A.; Fortino, M.; Bando, M.; Maeda, K.; Nishimura, T.; Shimoda, S.; Sato, H.; Naga, N.; Nakano, T. Amplified Chirality Transfer to Aromatic Molecules through Non-Specific Inclusion by Amorphous, Hyperbranched Poly(fluorenevinylene) Derivatives. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2023**, 62 (29), e202305747. DOI: 10.1002/anie.202305747.

(2) Wu, P.; Pietropaolo, A.; Fortino, M.; Shimoda, S.; Maeda, K.; Nishimura, T.; Bando, M.; Naga, N.; Nakano, T. Non-Uniform Self-Folding of Helical Poly(fluorenevinylene) Derivatives in the Solid State Leading to Amplified Circular Dichroism and Circularly Polarized Light Emission. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2022**, 61, e202210556.

(3) Wang, Q. Y.; Song, Z. Y.; Bando, M.; Harada, T.; Imai, Y.; Toda, H.; Naga, N.; Nakano, T. Optically Active Poly(benzene-1,4-diyl)s with Random and Alternating Copolymer Sequences Composed of Chiral and Achiral, Bulky Monomeric Units: A Systematic Study on Side-Chain Bulkiness Effects on Ground-State and Excited-State Chiroptical Properties and Chiral Recognition Ability. *Macromolecules* **2022**, 55, 5390-5402.

(4) Wang, Y.; Harada, T.; Phuong, L. Q.; Kanemitsu, Y.; Nakano, T. Helix Induction to Polyfluorenes Using Circularly Polarized Light: Chirality Amplification, Phase-Selective Induction, and Anisotropic Emission. *Macromolecules* **2018**, 51, 6865-6877.

(5) Pietropaolo, A.; Nakano, T. Molecular Mechanism of Polyacrylate Helix Sense Switching across Its Free Energy Landscape. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 5509-5512.

学術関係の受賞：平成20年度高分子学会学会賞（科学）「 π -スタック型高分子の合成、構造および機能」（2009/05/27）・平成6年度高分子学会ポリマージャーナル論文賞「Asymmetric Polymerization of Triphenylmethyl Methacrylate Using 9-Alkyl-9-fluorenyllithium-(-)-Sparteine Complexes. Influence of Organolithium Structure on the Propagation Stereochemistry」（1995/05/28）

長谷川淳也

はせがわじゅんや
Jun-ya HASEGAWA



職名：教授

着任：2012年10月1日

部門/クラスター：触媒理論研究部門/触媒研究基盤開発クラスター

研究室：創成科学研究棟05 217-C

電話：011-706-9145・ファクシミリ：011-706-9145

電子メール：hasegawa@cat.hokudai.ac.jp

ウェブページ：https://www.cat.hokudai.ac.jp/hasegawa/

研究分野：触媒理論/計算化学/量子化学/

研究課題：複雑系における電子構造理論と計算モデルの開発・触媒系の反応メカニズムに関する理論解析・蛋白質や溶液中における化学反応の理論解析

研究キーワード：触媒理論/触媒反応解析/マルチスケールモデル/電子状態理論/励起状態

学歴：1993年3月京都大学工学部合成化学科卒業/1995年3

月京都大学工学研究科合成・生物化学専攻修士課程修了
/1998年3月京都大学工学研究科合成・生物化学専攻博士課程修了

学位：1995年3月修士（工学，京都大学）/1998年3月博士（工学，京都大学）「Theoretical Study on the Excited States and Electron Transfer Reactions in Photosynthetic Reaction Center」

職歴：1997年4月日本学術振興会特別研究員（DC2）/1999年4月ルンド大学博士研究員（理論化学科）/1999年11月京都大学助手（大学院工学研究科合成・生物化学専攻合成化学講座量子物理化学分野）/2007年4月京都大学助教（大学院工学研究科合成・生物化学専攻合成化学講座量子物理化学分野）/2008年12月京都大学講師（大学院工学研究科合成・生物化学専攻合成化学講座物理有機化学分野）/2011年10月京都大学准教授（京都大学福井謙一記念研究センター総合研究部門）/2012年4月自然科学研究機構分子科学研究所客員准教授/2012年10月北海道大学教授（触媒化学研究センター触媒基礎研究部触媒理論化学研究部門）/2012年10月-2014年3月自然科学研究機構分子科学研究所客員教授/2015年10月北海道大学触媒科学研究所教授（触媒理論研究部門）/2022年4月-2024年3月名古屋大学客員教授/2022年4月産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター特定フェロー

在外研究歴：1998年4月-1999年3月日本学術振興会特別研究員（ルンド大学）/1999年4月-10月ルンド大学博士研究員

所属学会：理論化学会/触媒学会/分子科学会/日本化学会/米国化学会

学会活動：日本化学会近畿支部「化学への招待」委員会委員（2008-2009）・量子化学研究協会理事（2007-）・次世代スパコン戦略機関プログラム「計算物質科学イニシアチブ」戦略課題小委員会委員（2011-2015）・Chemistry Letter誌編集委員（2013-）・触媒学会企画教育委員（2014-2015）・触媒学会代議員（2016-）

主要な研究業績：(1) Masuda, Y.; Ueda, Y.; Sueki, A.; Shimosato, J.; Nishimura, K.; Gao, M.; Hasegawa, J.; Sawamura, M. Photoinduced Enantioselective Triplet Radical Reaction on Metal: Copper-Catalyzed Conjugate Addition of Acylsilanes to α,β -Unsaturated Ketones and Aldehydes. *Chem. Eur. J.* **2024**, *30*, e202402564. (2) Miyakawa, S.; Miyazaki, R.; Miura, T.; Hasegawa, J. A DFT Mechanistic Study on the Aza-Aldol Reaction of Boron Aza-Enolates: Relative Stability of Six-Membered Transition State and its Relevance to the Coordination Mode of the Leaving Group. *J. Org. Chem.* **2024**, *89*, 13913-13922. (3) Tabaru, K.; Fujihara, T.; Torii, K.; Suzuki, T.; Jing, Y.; Toyao, T.; Maeno, Z.; Shimizu, K.; Watanabe, T.; Sogawa, H.; Sanda, F.; Hasegawa, J.; Obora, Y. Exploring Catalytic Intermediates in Pd-Catalyzed Aerobic Oxidative Amination of 1,3-Dienes: Multiple Metal Interactions of the Palladium Nanoclusters. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 22993-23003. (4) Dostagir, N. H. M.; Tomuschat, C. R.; Oshiro, K.; Gao, M.; Hasegawa, J.; Fukuoka, A.; Shrotri, A. Mitigating the Poisoning Effect of Formate during CO₂ Hydrogenation to Methanol over Co-Containing Dual-Atom Oxide Catalysts. *JACS Au* **2024**, *4*, 1048-1058. (5) Chen, Y.; Miyazaki, R.; Sakaki, S.; Hasegawa, J. A Multi-Configurational Wave Function Theoretical Study on Electronic Structure and Magnetic Susceptibility of Dilanthanide Single Molecule Magnet. *J. Phys. Chem. A* **2024**, *128*, 81-88.

学術関係の受賞：Asian Rising Star Award, The 15-th Asian Chemical Congress (2013/8/20)・Centre de Mecanique Ondulatoire Appliquee QSCP Promising Scientist Award (2011/9/14)・平成21年度分子科学会奨励賞・「光生物学シス

テムの励起状態と機能：高精度電子理論の開発を基盤とする理論的研究」(2009/09/22)

坂東正佳

ばんどうまさよし

Masayoshi BANDO



職名：助教

着任：2020年4月1日

退任：2024年12月15日

部門：高分子機能科学研究部門

担当大学院（学部）：理学部

研究室：創成科学研究棟05-310

電話：011-706-9157・ファクシミリ：011-706-9156

電子メール：masayoshi.bando@cat.hokudai.ac.jp

研究分野：有機金属化学/高分子化学

研究キーワード：不斉/キラル/らせん

学歴：北海道大学大学院生命科学院

学位：博士（薬科学）

職歴：2020年 4月北海道大学触媒科学研究所助教

所属学会：日本化学会，高分子学会

主要な研究業績：(1) Bando, M.; Zhu, W.; Shimoda, S.; Hamanishi, E.; Sano, N.; Trombini, C.; Naga, N.; Haraguchi, N.; Itsuno, S.; Nishida, M.; Nakano, T. Amorphous Porous Polyurethanes as Macromolecular Ligands for Palladium Catalysts. *Chem. Lett.* **2023**, *52*, 5-9. (2) Wang, Q.; Song, Z.; Bando, M.; Harada, T.; Imai, Y.; Toda, H.; Naga, N.; Nakano, T. *Macromolecules* **2022**, *55*, 5390-5402. (3) Elbayoumy, E.; Wang, Y.; Rahman, J.; Trombini, C.; Bando, M.; Song, Z.; Diab, M. A.; Mohamed, F. S.; Naga, N.; Nakano, T. Pd Nanoparticles-Loaded Vinyl Polymer Gels: Preparation, Structure and Catalysis. *Catalysts* **2021**, *11*, 137. (4) Wang, Y.; Zavrashvili, N.; Wang, Y.; Pietropaolo, A.; Song, Z.; Bando, M.; Katsarava, R.; Nakano, T. Optically Active Polymers with Cationic Units Connected through Neutral Spacers: Helical Conformation and Chirality Transfer to External Molecules. *Macromolecules* **2020**, *53*, 9916-9928. (5) Bando, M.; Nakajima, K.; Song, Z.; Takahashi, T. Coming Back to the Starting Position of Carbons Traveling in Organic Molecules on Titanium: Merry-Go-Round Reaction. *Organometallics* **2019**, *38*, 731-734.

宮崎 玲

みやざき 玲

Ray MIYAZAKI



職名：助教

着任：2023年6月1日

部門/クラスター：触媒理論研究部門

研究室：創成科学研究棟05 217-C

電話：011-706-9145・ファクシミリ：011-706-9145・電子

メール：ray_miyazaki@cat.hokudai.ac.jp・ウェブページ：

<https://www.cat.hokudai.ac.jp/hasegawa/>

研究分野：理論化学/触媒化学

研究課題：理論計算・AIによる触媒反応メカニズムの解析

研究キーワード：触媒理論化学/AI

学歴：2015年3月北海道大学理学部化学科卒業/2017年3月

北海道大学大学院総合化学院修士課程修了/2020年3月北

海道大学大学院総合化学院博士後期課程修了

学位：2017年3月修士（理学，北海道大学）/2020年3月博

士（理学，北海道大学）

職歴：2020年4月北海道大学触媒科学研究所博士研究員

/2021年3月Fritz Haber Institute of the Max Planck Society 博

士研究員/2023年6月北海道大学触媒科学研究所助教

在外研究歴：2017年7月-9月Fritz Haber Institute of the Max

Planck Society 訪問大学院生，2021年3月-2023年6月Fritz

Haber Institute of the Max Planck Society 博士研究員

所属学会：理論化学会/触媒学会/日本化学会/ドイツ物理

学会

学会活動：触媒学会若手会委員（2023-）

主要な研究業績：(1) Miyazaki, R.; Belthle, K. S.; Tüysüz, H.;

Foppa, L.; Scheffler, M. Materials Genes of CO₂ Hydrogenation

on Supported Cobalt Catalysts: an AI Approach Integrating

Theoretical and Experimental Data. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**,

146, 5433-5444. (2) Miyazaki, R.; Iida, K.; Ohno, S.; Matsuzaki,

T.; Suzuki, T.; Arisawa, M.; Hasegawa, J. Substrate-Assisted

Reductive Elimination Determining the Catalytic Cycle: A

Theoretical Study on the Ni-Catalyzed 2,3-Disubstituted

Benzofuran Synthesis via C-O Bond Activation. *Organometallics* **2022**,

41, 3581-3588. (3) Miyazaki, R.; Jin, X.;

Yoshii, D.; Yatabe, T.; Yabe, T.; Mizuno, N.; Yamaguchi, K.;

Hasegawa, J. Mechanistic study of C-H bond activation by O₂

on negatively charged Au clusters: α,β -dehydrogenation of 1-

methyl-4-piperidone by supported Au catalysts. *Catal. Sci.*

Technol. **2021**, *11*, 3333-3346. (4) Miyazaki, R.; Nakatani, N.;

Levchenko, S. V.; Yokoya, T.; Nakajima, K.; Hara, K.; Fukuoka,

A.; Hasegawa, J. DFT Mechanistic Study on the Complete

Oxidation of Ethylene by the Silica-Supported Pt Catalyst: C=C

Activation via the Ethylene Dioxide Intermediate. *J. Phys.*

Chem. C **2019**, *123*, 12706-12715. (5) Maeda, C.; Shimonishi,

J.; Miyazaki, R.; Hasegawa, J.; Ema, T. Highly Active and

Robust Metalloporphyrin Catalysts for the Synthesis of Cyclic

Carbonates from a Broad Range of Epoxides and Carbon

Dioxide. *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 6556-6563.

村山 徹

むらやまと おる

Toru MURAYAMA



職名：教授

着任：2024年4月1日

部門/クラスター：物質変換研究部門

研究室：創成科学研究棟03 311-2

電話：011-706-9136・電子メール：murayama@cat.hokudai.

ac.jp・ウェブページ：<https://murayama.cat.hokudai.ac.jp/>

研究分野：触媒・次世代大気環境浄化プロセス

研究課題：窒素循環，炭素循環に資する次世代触媒の開発

研究キーワード：複合酸化物/ナノ粒子/空気浄化

学歴：2005年3月東京工業大学工学部化学工学科卒業/2007

年3月東京工業大学大学院理工学研究科応用化学専攻修士

課程修了/2010年東京工業大学大学院理工学研究科応用化

学専攻博士課程修了

学位：2010年3月博士（工学）（東京工業大学）「三相界面電

解法を用いた中性過酸化水素および炭酸ジフェニルの電

解合成法の開拓」

職歴：2008年4月日本学術振興会 特別研究員（DC2）/2010年

4月北海道大学触媒化学研究センター助教/2015年4月首都

大学東京都市環境科学研究科特任准教授（金の化学研究セ

ンター）/2015年4月東京都立大学発ベンチャー企業「ハル

タゴールド」取締役（2024年4月-8月一時離職）/2016年4

月首都大学東京都市環境科学研究科特任教授/2017年12月

金の化学研究センターセンター長（2020年11月まで）/2020

年4月Yantai Key Laboratory of Gold Catalysis and Engineering,

Shandong Applied Research Center of Gold Nanotechnology

(Au-SDARC), School of Chemistry & Chemical Engineering,

Yantai University（煙台大学（中国））外国人招聘教授（2024

年3月まで）/2020年12月東京都立大学水素エネルギー社会

構築推進研究センター特任教授/2024年4月北海道大学触

媒化学研究所教授

在外研究歴：2013年10月-2014年3月リール大学（フランス）

訪問研究員

所属学会：石油学会/触媒学会/日本化学会/電気化学会

学会活動：2008年3月-2010年2月触媒学会教育推進委員会

委員/2012年3月-触媒学会編集委員会委員など

主要な研究業績：(1) Inomata, Y.; Kubota, H.; Hata, S.;

Kiyonaga, E.; Morita, K.; Yoshida, K.; Sakaguchi, N.; Toyao,

T.; Haruta, M.; Murayama, T. Bulk Tungsten-Substituted

Vanadium Oxide for Low-Temperature NO_x Removal in the

Presence of Water. *Nat. Commun.* **2021**, *12*, 557. (2) Wang, H.;

Murayama, T.; Lin, M.; Sakaguchi, N.; Haruta, M.; Miura, H.;

Shishido, T. Understanding the Distinct Effects of Ag

Nanoparticles and Highly Dispersed Ag Species on N₂

Selectivity in NH₃-SCO Reaction. *ACS Catal.* **2022**, *12*, 6108.

(3) Yoshida, T.; Murayama, T.; Sakaguchi, N.; Okumura, M.;

Ishida, T.; Haruta, M. Carbon Monoxide Oxidation by

Polyoxometalate-Supported Gold Nanoparticulate Catalysts:

Activity, Stability, and Temperature-Dependent Activation

Properties. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2018**, *57*, 1523. (4)

Mochizuki, C.; Inomata, Y.; Yasumura, S.; Lin, M.; Taketoshi,

A.; Honma, T.; Sakaguchi, N.; Haruta, M.; Shimizu, K.-i.; Ishida,

T.; Murayama, T. Defective NiO as a Stabilizer for Au Single-

Atom Catalysts. *ACS Catal.* **2022**, *12*, 6149. (5) Inomata, Y.;

Kubota, H.; Honmatsu, Y.; Takamitsu, H.; Sakotani, S.; Yoshida, K.; Toyao, T.; Shimizu, K.-i.; Murayama, T. Sodium Ion Intercalation in Vanadium Oxide Promotes Low-Temperature NH₃-SCR Activity: Sodium Vanadium Bronzes (Na_{0.33}V₂O₅) for NO_x Removal. *Appl. Catal., B* **2023**, 328, 122536.

Nozaki, T. Cooperative catalysis of vibrationally excited CO₂ and alloy catalyst breaks the thermodynamic equilibrium limitation. *J. Am. Chem. Soc.* **2022** 144, 14140-14149.

学術関係の受賞：IVC22 IUVSTA-Elsevier Student Award
「Elucidating the relationship between 3D structure and CO oxidation activity of Pt clusters on α -Al₂O₃(0001) using *operando* PTRF-XAFS」 (2022/9/15)

魯邦

ろほう

Bang LU



職名：助教

着任：2023年11月1日

部門/クラスター：触媒構造研究部門

研究室：創成科学研究棟02 112

電話：011-706-9115・ファクシミリ：011-706-9115・電子

メール：lub@cat.hokudai.ac.jp

研究分野：ナノ構造科学/量子ビーム/反応速度論と触媒/物理化学/表面科学

研究キーワード：XAFS分光光学/プラズマ触媒反応/単原子触媒

学歴：2020年9月北海道大学量子理工専攻修士課程修了/2023年9月北海道大学量子理工専攻博士課程修了

学位：2020年9月修士（工学）（北海道大学）/2023年9月博士（工学）（北海道大学）「*in situ/operando* 表面科学手法による不均一触媒構造活性相関の解明」

職歴：2023年10月北海道大学触媒科学研究所博士研究員/2023年11月北海道大学触媒科学研究所助教（触媒構造研究部門）

所属学会：触媒学会/日本化学会/日本表面真空学会/日本放射光学会

主要な研究業績：(1) Lu, B.; Kido, D.; Sato, Y.; Xu, H.; Chun, W. J.; Asakura, K.; Takakusagi, S. Development of Operando Polarization-Dependent Total Reflection Fluorescence X-ray Absorption Fine Structure Technique for Three-Dimensional Structure Determination of Active Metal Species on a Model Catalyst Surface under Working Conditions. *J. Phys. Chem. C* **2021**, 125, 12424-12432. (2) Dong, K.; Hu, B.; Al Rashid, M.H.; Lu, B.; Miyabayashi, K.; Higashi, K.; Uruga, T.; Iwasawa, Y.; Kido, D.; Takakusagi, S.; Asakura, K. *In situ* Study on Structure of a Diluted Pt/HOPG Model Catalyst System Prepared by the Two-phase Liquid Reduction Method Using a Novel BCLA/HERFD+BI-XAFS Method. *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology*. **2024**, 22(2), 129-137. (3) Kim, C.R.; Maeda, H.; Lu, B.; Nakamura, Y.; Lin, Y.; Wakisaka, Y.; Kido, D.; Asakura, K.; Takakusagi, S. Can amine ligands atomically disperse Cu atoms on TiO₂(110)? Cu deposition on TiO₂(110) premodified with o-anthranilic acid. *Chem. Lett.* **2024**, 53, upad045. (4) Liu, C.; Lu, B.; Ariga-Miwa, H.; Ogura, S.; Ozawa, T.; Fukutani, K.; Gao, M.; Hasegawa, J.Y.; Shimizu, K.I.; Asakura, K.; Takakusagi, S. Dynamic Behavior of Intermediate Adsorbates to Control Activity and Product Selectivity in Heterogeneous Catalysis: Methanol Decomposition on Pt/TiO₂(110). *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, 145, 19953-19960. (5) Kim, D.Y.; Ham, H.; Chen, X.; Liu, S.; Xu, H.; Lu, B.; Furukawa, S.; Kim, H.H.; Takakusagi, S.; Sasaki, K.;

教職員の特許

《特許番号・発明者「発明の名称」特許権者（登録日）》

■2024年度に登録された特許

7473905・中野環，宋志毅，王宇挺，佐野夏博，古井恵里
「ハイパーブランチポリマー及びその製造方法」国立大
学法人北海道大学，日本化学工業株式会社（2024/4/16）
7511877・村山徹，猪俣雄介，石田玉青，竹歳絢子「窒素
化合物変換装置および窒素化合物変換方法」東京都公立
大学法人（2024/6/28）
7587225・清永英嗣，吉田和広，盛田啓一郎，村山徹，春
田正毅，秦慎一，猪股雄介「燃焼システム」中国電力株
式会社，東京都公立大学法人（2024/11/12）
7604036・山内美穂，安齊亮彦「電気化学的還元方法と触
媒」国立大学法人九州大学（2024/12/13）
7634224・中野環，シュ ブントウ，板東正佳，宋志毅，
古井恵里，佐野夏博「ハイパーブランチ構造を有するポ
リウレタン，その製造方法及び高分子触媒」日本化学工
業株式会社，国立大学法人北海道大学（2025/2/13）
7636291・中村直樹，中野環「プロトン伝導材料」トヨタ
自動車株式会社，国立大学法人北海道大学（2025/2/17）

教職員の受賞

■2024年度の受賞

UBE学術振興財団第64回学術奨励賞 浅野圭佑「触媒的臭素
化による高感度タンパク質間相互作用解析」
（2024/04/01）
文部科学省令和6年度科学技術分野の文部科学大臣表彰
科学技術賞（研究部門）福岡淳「固体触媒によるセルロ
ース系バイオマスの解重合の研究」（2024/04/09）
北海道大学ディスティングイッシュトプロフェッサー 清
水研一（2024/05/16）
日本表面真空学会フェロー 高草木達「その場/オペランド
表面科学計測による表面反応プロセスの原子レベル可
視化と機構解明」（2025/02/20）

2024年度担当講義

担当教員で「*」は責任教員，（）は触媒科学研究所以外の
所属教員をあらわす。[]内は単位数。

■学士課程・全学教育

一般教育演習（フレッシュマンセミナー）「高分子化学の基
礎」[2] 中野環
環境と人間「触媒科学のフロンティア」[2] 中島清隆
化学I「(39組は学生番号末尾2桁が「3」で除して余り2)」
[2] 長谷川淳也*/飯田健二
化学II「(52組は学生番号末尾奇数)」[2] 浦口大輔*/浅野
圭佑

■学士課程・理学部

触媒化学 [2] 長谷川淳也

■学士課程・工学部（応用理工系学科）

応用化学学生実験I [1]（鱒渕友治）/鳥屋尾隆/（横倉聖
也）/（藤井雄太*）/（和泉廣樹）/（三浦章）

■学士課程・薬学部専門科目

有機化学I [2] 浦口大輔

■学士課程・薬学部

無機化学 [1] 浅野圭佑
有機化学実習III [1]（大西英博*）/（吉村彩）/趙強
有機化学実習IV [1]（大西英博*）/（吉村彩）/趙強
有機化学実習V [1]（勝山彬*）/（中村顕斗）/（島川典）
/（浅野圭佑）
有機化学実習VI [1]（勝山彬*）/（中村顕斗）/（島川典）
/（浅野圭佑）
有機化学問題演習 [1] 趙強/（中村顕斗*）/（森崎一宏）

■修士課程・環境科学院（環境物質科学専攻）

環境触媒化学特論I [2] 中島清隆*/大須賀遼太/菅沼学史
環境触媒化学特論II [2] 高草木達
環境物質科学基礎論I [2] 菅沼学史
環境物質科学基礎論II [2] 中島清隆

■修士課程・生命科学院（生命科学専攻）

創薬有機合成化学特論 [1] 浦口大輔*/浅野圭佑

■修士課程・工学院（工学院共通科目）

総合化学特論I (Modern Trends in Physical and Material
Chemistry) [1]（伏見公志）/（小林厚志）/（鱒渕友治）
/鳥屋尾隆/（北川裕一）/（和泉廣樹）/（島田敏宏）/（原
田潤）/（北野翔）

■修士課程・総合化学院（選択必修科目）

実践的計算化学 [2]（武次徹也*）/（伊藤肇）/（島田敏宏）
/長谷川淳也

■修士課程・総合化学院（分子化学コース科目）

分子化学（高分子機能科学）[1] 中野環

■修士課程・総合化学院（分子化学コース科目）

分子化学（触媒理論）[1]長谷川淳也*/飯田健二/（SHROTRI
Abhijit）/宮崎玲
分子化学A（分子理論化学）[2]（武次徹也*）/長谷川淳也
/（前田理）/飯田健二/（小林正人）/（岩佐豪）/（高敏）
/宮崎玲
応用分子化学A（触媒設計）[2] 清水研一*/鳥屋尾隆

■修士課程・総合化学院（共通科目）

応用化学特別講義「Leading and Advanced Molecular
Chemistry and Engineering IIA - 2024」[1] 清水研一*/
（宋志毅）/菅沼学史
化学産業実学 [1] 長谷川淳也
総合化学特論I (Modern Trends in Physical and Material
Chemistry) [1]（島田敏宏*）/（原田潤）/（小林厚志）
/（伏見公志）/（鱒渕友治）/（北川裕一）/鳥屋尾隆/（和
泉廣樹）/（北野翔）

■修士課程・大学院共通授業科目（自然科学・応 用科学系）

大学院共通授業科目（一般科目）：自然科学・応用科学「化
学産業実学」[1] 長谷川淳也
大学院共通授業科目（一般科目）：自然科学・応用科学「世
界を先導する分子化学ⅡA（触媒化学の基礎と応用）」[1]
（宋志毅）/（SHROTRI Abhijit）/清水研一*/菅沼学史
大学院共通授業科目（一般科目）：自然科学・応用科学「世
界を先導する分子化学ⅢA（総合化学特論I（無機化学・
物理化学））」[1]（伏見公志）/（小林厚志）/（鱒渕友治）

/鳥屋尾隆/(北川裕一)/(和泉廣樹)/(島田敏宏*)/(原田潤)/(北野翔)

■博士課程・工学院(工学院共通科目)

総合化学特論I(Modern Trends in Physical and Material Chemistry) [1] (伏見公志)/(小林厚志)/(鱒淵友治)/鳥屋尾隆/(北川裕一)/(和泉廣樹)/(島田敏宏*)/(原田潤)/(北野翔)

■博士課程・総合化学院(選択必修科目)

先端総合化学特論I「総合化学特論I」[1] (島田敏宏*)/(原田潤)/(小林厚志)/(伏見公志)/(鱒淵友治)/(北川裕一)/鳥屋尾隆/(和泉廣樹)/(北野翔)

先端総合化学特論II「Leading and Advanced Molecular Chemistry and Engineering IIA - 2024」[1] 清水研一*/(宋志毅)/菅沼学史

2024年度学位審査

触媒科学研究所の教員が審査にあたったもの。()は触媒科学研究所以外の所属学生/大学院生/教員をあらわす。

■博士

大学院総合化学院

(DU Pengfei)「Development of high-performance catalysts for EtOH synthesis via CO₂ hydrogenation and syngas conversion」主査:村山徹・副査:(菊地隆司)/清水研一/鳥屋尾隆/(宋志毅)

下田光祐「Complex Molybdenum Oxide Catalysts with Pentagonal Unit-Assembly Structure」主査:(向井紳)・副査:村山徹/清水研一/鳥屋尾隆/飯田健二

宮崎眞太「Unsteady-state catalytic systems for direct CO₂ capture and reduction」主査:村山徹・副査:(向井紳)/清水研一/鳥屋尾隆

大城海「窒素酸化物還元における酸化セリウムの触媒特性に関する理論的研究」主査:(前田理)・副査:長谷川淳也/(武次徹也)/清水研一

(六辻晶大)「エネルギー分割による電子移動反応の理論的研究」主査:長谷川淳也・副査:(前田理)/(長谷川靖哉)/(武次徹也)

(西田叡倫)「ブラックボックスで汎用的な大規模・高精度電子状態計算手法の開発」主査:長谷川淳也・副査:(武次徹也)/(前田理)/(小林正人)/(佐藤信一郎)

■修士

大学院総合化学院

(Weiben Du)「Huisgen反応による光学活性高分子の合成と物性(Synthesis of Optically Active Polymers by the Huisgen Reaction and Their Properties)」主査:中野環・副査:(佐藤敏文)/長谷川淳也

宮景琢充「Theoretical Investigation on Polypropylene Cracking over Zeolite Catalysts」主査:清水研一・副査:鳥屋尾隆/飯田健二

(Zhang Chenyang)「Machine-learning-guided design of multi-elemental heterogeneous catalysts for selective catalytic reduction of NO with H₂」主査:清水研一・副査:鳥屋尾隆/飯田健二

(Wan Li)「Operando spectroscopic and theoretical investigation of CeO₂-supported tungsten oxide catalysts for NH₃-SCR reaction」主査:清水研一・副査:鳥屋尾隆/飯田健二

大学院環境科学院

(Yuan Yutong)「結晶性のニオブ系固体触媒による単糖類の脱水反応」主査:中島清隆・副査:(神谷裕一)/菅沼学史

大学院生命科学院

大塚隆馬「高配位化シリリウム塩の創製と光触媒機能評価」主査:浦口大輔・副査:(佐藤美洋)/浅野圭佑

■学士

工学部

山口丈志「模擬高炉排ガスとH₂からのCO連続合成」主査:清水研一

理学部

板倉央奈「Rh錯体触媒による2,3-2置換ベンゾフラン合成の理論的研究」主査:長谷川淳也

薬学部

阿久津央「ホスホニウムチルラジカルの位置選択的水素引き抜き触媒機能創出」主査:浦口大輔

岡田俊祐「光活性なスピロ型ボラート塩の創製」主査:浦口大輔

片岡久慶「オレフィン導入によるチロシン由来臭素化触媒の不斉スイッチ」主査:浦口大輔

2024年度委員・講師など

■全学委員会等

サステイナビリティ推進員 浦口大輔 [2023/04/01～2025/03/31]

ハラスメント予防推進員 飯田健二 [2024/04/01～2026/03/31]

放射性同位元素等管理委員会 高草木達 [2024/04/01～]

教務委員会 清水研一 [2022/04/01～2026/03/31]

教育研究評議会 清水研一 [2022/04/01～2026/03/31]

総長補佐 長谷川淳也 [2024/04/01～2026/03/31]

部局長等連絡会議 清水研一 [2022/04/01～2026/03/31]

■公的機関等の委員

(財)高輝度光科学研究センター SPRing-8/SACLA成果審査委員会 査読者 清水研一 [2024/04/01～2026/03/31]

ハルタゴールド株式会社 取締役 村山徹 [2024/09/01～2028/03/31]

九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所 附属エネルギーシステムデザイン研究センター運営委員会及び教員選考委員会委員 清水研一 [2024/04/01～2026/03/31]

京都大学 アドバイザー 福岡淳 [2024/04/01～2025/03/31]

名古屋大学学際統合物質科学研究機構 運営委員会委員 長谷川淳也 [2024/04/01～2026/03/31]

国際純正応用化学連合(IUPAC) 高分子用語法小委員会委員(SPT) 中野環 [2024/04/01～2025/03/31]

国際触媒学会 Officer(役員) 福岡淳 [2020/06/20～2024/07/14]

認定NPO法人量子化学研究協会 理事 長谷川淳也 [2024/06/10～2026/06/09]

(公財) 北海道科学技術総合振興センター 2024年度「チャレンジ! フードロス削減アイデアコンテスト」審査委員会委員 福岡淳 [2024/05/16~2025/03/31]

(公財) 北海道科学技術総合振興センター ノーステック財団「研究開発助成事業審査委員会」専門委員 福岡淳 [2024/06/14~2025/03/31]

(国研) 科学技術振興機構 創発的研究支援事業 事前評価外部専門家 清水研一 [2023/10/25~2025/06/30]

(国研) 科学技術振興機構 創発的研究支援事業アドバイザー(創発AD) 福岡淳 [2024/04/01~2025/03/31]

(国研) 科学技術振興機構 運営・評価委員会分科会委員 福岡淳 [2024/07/01~2025/03/31]

(大) 名古屋大学工学研究科 博士学位審査委員 浦口大輔 [2025/03/21]

(大) 筑波大学 学位論文審査の副査 武安光太郎 [2024/04/22~2025/03/31]

(独) 日本学術振興会 「基盤研究(S)」の審査に係る審査意見書の作成者 長谷川淳也 [2024/07/22~2024/08/21]

(独) 日本学術振興会 特別研究員等審査会審査委員及び国際事業委員会書面審査員・書面評価員 高草木達 [2024/07/01~2025/06/30]

(独) 日本学術振興会 特別研究員等審査会専門委員, 卓越研究員候補者選考委員会書面審査員及び国際事業委員会書面審査員・書面評価員 鳥屋尾隆 [2023/07/01~2024/06/30]

(独) 日本学術振興会 科学研究費委員会専門委員 長谷川淳也 [2023/10/25~2024/10/24]・福岡淳 [2024/10/04~2025/03/31]・清水研一 [2024/10/16~2025/10/15]

(独) 日本学術振興会 科学研究費委員会専門委員「基盤研究A」 浦口大輔 [2023/10/17~2024/10/16]・浦口大輔 [2024/10/16~2025/10/15]

(社) 日本化学会 2025年度速報誌編集委員会委員 長谷川淳也 [2025/01/01~2025/12/31]

(社) 日本化学会 日本化学会北海道支部 幹事 中野環 [2024/03/01~2025/02/28]・中野環 [2025/03/01~2026/02/28]

(社) 日本化学会 理事 中島清隆 [2024/05/10~2026/05/08]

(社) 日本表面真空学会 協議員 高草木達 [2024/04/01~2026/03/31]

(社) 触媒学会 2024年度国際交流委員会委員 中島清隆 [2024/05/10~2025/05/09]

(社) 触媒学会 代議員 長谷川淳也 [2024/03/01~2025/02/28]・福岡淳 [2024/03/01~2025/02/28]

(社) 触媒学会 企画・教育委員会委員 高草木達 [2024/05/10~2025/05/09]

(社) 触媒学会 会誌編集委員会 幹事(非常勤) 菅沼学史 [2024/05/10~2026/05/09]

(社) 触媒学会 会誌編集委員会委員 鳥屋尾隆 [2024/05/10~2025/05/09]

(社) 触媒学会 北海道支部支部長 中島清隆 [2024/05/10~2026/05/08]

(社) 触媒学会 参照触媒委員会委員 鳥屋尾隆 [2022/05/13~2023/05/12]

(社) 触媒学会 国際交流委員会委員 福岡淳 [2023/05/12~2024/05/10]

(社) 高分子学会 高分子命名法委員会委員長 中野環 [2024/04/01~2025/03/31]

(財) 日本化学会 第105 春季年会 プログラム小委員会 委員 浅野圭佑 [2024/10/21~2025/03/31]

(財) 高度情報科学技術研究機構 利用研究課題審査委員会 レビュアー 飯田健二 [2024/06/01~2025/05/31]

■関連部局等各種委員会

《事務局(人事課)》ダイバーシティ・インクルージョン推進員 村山徹 [2024/04/01~2026/03/31]

《事務局(情報企画課)》情報セキュリティ委員会 長谷川淳也 [2024/04/01~2026/03/31]

《事務局(情報企画課)》情報基盤センター協議員 長谷川淳也 [2023/04/01~2025/03/31]

《事務局(研究推進部)》国立大学法人北海道大学地域中核・特色ある研究大学強化促進事業連携研究プラットフォーム審査委員会 長谷川淳也 [2024/10/24~2026/03/31]

《事務局(研究推進部)》研究インテグリティ委員会 長谷川淳也 [2024/04/01~2026/03/31]

《事務局(研究推進部)》研究設備・機器の組織内外への共用方針の策定等作業部会ワーキンググループ委員 清水研一 [2022/07/01~2024/03/31]

《事務局(研究推進部)》統合URA本部運営委員会 長谷川淳也 [2024/04/01~2026/03/31]

《事務局(研究支援課)》創成研究機構執行会議委員 清水研一 [2022/04/01~]

《保健センター》運営委員会 高草木達 [2023/04/01~2025/03/31]

《博物館》総合運営委員会 浦口大輔 [2023/04/01~2025/03/31]

《図書館》委員会 飯田健二 [2024/04/01~2026/03/31]

《国際部》部局国際担当教員 宋志毅 [2018/04/01~2026/03/31]

《工学研究院》学内共同利用施設運営委員会委員(ナノ・マイクロマテリアル分析研究室運営委員会) 武安光太郎 [2024/04/01~2027/03/31]

《工学研究院》学内共同利用施設運営委員会委員(光電子分光分析研究室運営委員会) 高草木達 [2023/04/01~2026/03/31]

《工学研究院》学内共同利用施設運営委員会委員(超高圧電子顕微鏡研究室運営委員会) 鳥屋尾隆 [2024/04/01~2026/03/31]

《工学研究院》学内共同利用施設運営委員会委員(高エネルギー超強力X線回析室運営委員会) 武安光太郎 [2024/04/01~2026/03/31]

《工学研究院》フロンティア化学教育研究センター運営委員会 清水研一 [2024/04/01~2025/03/31]

《情報科学院》量子集積エレクトロニクス研究センター運営委員会 高草木達 [2023/04/01~2025/03/31]

《理学研究院》元素戦略教育研究センター運営委員会 清水研一 [2024/04/01~2026/03/31]

《理学研究院》地球惑星固体物質解析システム研究室運営委員会 高草木達 [2023/08/16~2025/08/15]

《理学研究院》極低温液化センター運営委員会 中島清隆 [2024/04/01~2026/03/31]

《理学研究院》高分解能核磁気共鳴装置研究室運営委員会 浦口大輔 [2023/06/01~2025/05/31]

《環境科学院》大学院地球環境科学研究所人事委員会 高草木達 [2024/04/01~2025/03/31]

《観光学高等研究センター》運営委員会 中野環 [2024/04/01~2026/03/31]

■非常勤講師・研究員等

ジョンソン・マッセイ・ジャパン (同) 技術アドバイザー 鳥屋尾隆 [2024/09/01~2025/06/30]

三井化学 (株) 講師 福岡淳 [2024/10/24]

上智大学 講師 福岡淳 [2024/10/08]

九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所附属エネルギーシステムデザイン研究センター 連携教員 (研究指導者) 清水研一 [2024/04/01~2025/03/31]

千曲運輸 (株) 講師 福岡淳 [2025/01/20]・福岡淳 [2025/02/21]・福岡淳 [2025/03/12]

(大) 筑波大学 客員准教授 武安光太郎 [2025/01/01~2026/03/31]

(特非) 量子化学探索研究所 講師 長谷川淳也 [2024/11/07]

(社) 日本技術士会北海道本部 講師 福岡淳 [2024/07/10]

(社) 日本表面真空学会 真空夏季大学演習担当講師 武安光太郎 [2024/08/27~2024/08/30]

(社) 近畿化学協会コンピュータ化学部会 講演者 宮崎玲 [2024/10/30]

(財) 新産業創造研究機構 専門家 (研修講師) 村山徹 [2024/08/01~2025/02/28]

2024年度外部資金など

■科学研究費助成事業 (補助金)

学術変革領域研究 (A) : 教授 浦口大輔「アート型光触媒の創製と反応制御能創出」

基盤研究 (A) : 教授 清水研一「オペランド分光による活性種の動的挙動解析を基盤とする非定常・連続触媒反応の開拓」・教授 高草木達「オペランド表面科学計測システムの開発による圧力ギャップフリー触媒表面科学の確立」

■科学研究費助成事業 (基金)

基盤研究 (B) : 教授 浦口大輔「ラジカルの直接制御を志向した典型元素カチオン触媒の創製」・教授 中島清隆「水中糖変換反応の自在制御を可能とする固体ルイス酸塩基触媒の開発」・教授 中野環「枝分かれ型および架橋型高分子のキラリティー制御と機能」・教授 村山徹「カチオン欠陥サイトを導入した酸化物担体へのAuシングルアトム調製と触媒反応」・准教授 浅野圭佑「二官能性有機触媒により時空間を制御する非平衡化学系の開拓」・准教授 鳥屋尾隆「サステナブル炭素資源の還元的化学資源化を実現する固体触媒の開発」

基盤研究 (C) : 准教授 飯田健二「電極表面の帯電による化学吸着機構の変化で発現する電極反応の解明」・准教授 菅沼学史「糖類の分解・再結合による化学品合成法の開拓」・准教授 武安光太郎「窒素ドーピンググラフェンの酸素還元反応活性における π 電子系のスケール効果」・助教 Shrotri Abhijit「Development of mixed oxide catalyst for carbon dioxide hydrogenation to methanol.」

国際共同研究加速基金 (国際共同研究強化) : 准教授 武安光太郎「窒素ドーピンググラフェンの触媒性能における電子軌道効果」

挑戦的研究 (開拓) : 准教授 鳥屋尾隆「化学における外挿探索を可能とする機械学習手法の開発と実証」

挑戦的研究 (萌芽) : 教授 長谷川淳也「波動関数理論を活用する化学反応ポテンシャル面の高精度化: 反応座標分離アプローチ」

若手研究 : 助教 大須賀遼太「Operando IR測定による液相固体触媒反応のダイナミクス解析」・助教 趙強「水素原子移動 (HAT) 触媒として働くキラルリン酸 (III) 触媒の創製」・助教 宮崎玲「不均一系触媒の変動する活性構造の解明と制御: オペランド計算による開拓」

特別研究員奨励費 : 特別研究員 (RPD) 劉燦「オペランド表面科学計測手法による実条件下原子レベル観察と触媒反応解明」

特別研究員奨励費 (外国人) : 教授 清水研一「探索的機械学習手法を用いたCO₂水素化触媒の開発」

■受託研究

JST委託研究 : 教授 高草木達「触媒開発と原子レベル構造解析による反応機構解明」・教授 中島清隆「パーム残渣物からの化学品・バイオ燃料製造を可能にする固体触媒プロセスの開発」・教授 中島清隆「未利用バイオマスの加水分解に関する研究」・教授 村山徹「CO₂のみを炭素源とするカルボン酸合成用触媒の開発」・准教授 浅野圭佑「触媒の臭素化が導く高感度細胞系解析」・准教授 鳥屋尾隆「外挿的探索が可能な機械学習を用いた未踏触媒空間の探索」・助教 大須賀遼太「赤外分光法を駆使した液相固体酸塩基触媒反応ダイナミクスの解明」

NEDO委託研究 : 教授 清水研一「“ビヨンド・ゼロ”社会実現に向けたCO₂循環システムの研究開発」・教授 中島清隆「糖骨格利用型バイオテレフタル酸合成の研究開発」・准教授 鳥屋尾隆「CO₂とH₂からの低温メタノール合成に関する研究開発」・准教授 鳥屋尾隆「メタン燃焼用固体触媒の開発」

NEDO委託研究 (再委託) : 准教授 飯田健二「 $\sim 1 - \text{nm}$ 白金系触媒の構造・組成制御に基づくPEFCカソード触媒の高活性化」

環境再生保全機構委託研究 : 助教 大須賀遼太「木質系バイオマス資源から低級炭化水素への触媒的変換」

(その他) : 教授 中野環「北海道大学機構研究推進ユニットにおける研究推進」

■民間等との共同研究

教授 清水研一 (2件)・教授 中島清隆 (3件)・教授 中野環 (1件)・教授 長谷川淳也 (1件)・特任教授 福岡淳 (1件)・教授 村山徹 (2件)・准教授 飯田健二 (1件)・准教授 鳥屋尾隆 (4件)

■学術コンサルティング

准教授 浅野圭佑 (1件)

編集後記

editorial note and colophon

編集後記

今年度も、所員各位の幅広いご協力のもと、触媒科学研究所の年報を取りまとめることができました。研究所、部門、クラスター、ユニット、技術部、さらには個々の研究者による研究・教育・学術振興・産業振興への多彩な取り組みが、本冊には余すところなく記載されています。編集作業の効率化は年々進んでおりますが、発刊に至るまでには依然として多くの調整と努力が必要であることを改めて実感いたしました。今年度のとりまとめに際しては、坂井富美子氏の多大なご尽力により大きく支えられました。この場を借りて、研究所を代表し心より深く感謝申し上げます。

2024年度も、まさに激動の一年でした。コロナ禍を経て勤務形態が多様化し、オンライン会議が一般化した一方で、その普及が会議の量そのものを増大させてはいないかと感じることもあります。オンライン上での交流が拡大することは喜ばしい面がありますが、同時に、対面で会うことの意義や重要性を改めて見つめ直す必要があると実感しています。過去を振り返ると、ある意味で非効率な営みの中からこそ生まれる価値を我々は享受してきました。私たちはそれをどう評価すべきなのか、定量的に測れないものの大切さについて、皆で議論する機会があってもよいと感じます。

触媒科学研究所は、日本を代表する国際的な研究拠点として、多角的な活動を通じてその使命を果たしています。部局間協定などを通じた国際連携、外部資金を基盤とする国際共同研究、国際シンポジウムによる学術交流等、今年度も多様な活動が活発に展開されました。研究所の構成メンバーを見ても外国人比率は高く、短期滞在者を含めると、実に多様な国や地域から学生・研究者が集っていることが実感できます。この流れを今後も大切に育んでいきたいと思っています。

一方で、世界各地で地政学的リスクが顕在化しつつあり、国際化の潮流に逆風が吹く局面も見られます。日本における経済安全保障への対応も未だ途上にあり、触媒研の活動においても慎重な対応が求められる状況です。しかしながら、我々の本質的な目的は変わりません。それは「良い研究を行い、触媒の力で人々の生活をより良くすること」です。本年報には、研究・教育活動の成果がぎっしりと詰まっています。ここまでお読みいただいた皆様には、ぜひその意義を感じ取りつつ、この年報から得られる情報を今後の活動にご活用いただければ幸いです。

(2025年11月・中島清隆)

書誌情報

「年報2024」

北海道大学触媒科学研究所年報2024

ISSN : 2432-7018

発行日 : 2026年1月発行

編集 : 北海道大学触媒科学研究所第一常置委員会 (図書出版関係)・北海道大学北キャンパス合同事務部

編集責任者 : 中島清隆 (触媒科学研究所教授/2025年度触媒科学研究所第一常置委員会委員長)

発行者 : 北海道大学触媒科学研究所

(001-0021 札幌市北区北21条西10丁目/電話 : 011-706-9302/ファクシミリ : 011-706-9110/電子メール : k-shomu@jimuhokudai.ac.jp) Institute for Catalysis, Hokkaido University, Sapporo 001-0021, Japan

印刷 : 株式会社プリントバック (617-0003 京都府向日市森本町野田 3-1/電話 : 0120-977-920)