



## ～講演会のご案内～



演 題：働くとは－企業出身の大学人の思うこと－

講 師：堀邊 英夫 教授

大阪公立大学 大学院工学研究科  
物質化学生命系専攻 化学バイオ工学分野  
有機・高分子化学研究グループ 教授



日 時：2022年4月27日（水）17：00～18：30

場 所：フロンティア応用科学研究棟 2階セミナー室2 (定員 25名)

要 旨：講演者は以前三菱電機(株)先端技術総合研究所に18年間勤務しており、大学生の就職面接にも同席した。また、大阪市立大学・産学官連携センター所長としてもコーディネータの採用にも関係していた。これらの経験も踏まえ、社会で働くことの心構えや就職面接でのアドバイスを大学教員の立場から学生の皆さんにご講演したい。

※フロンティア棟に入館の際には工学系所属のICカードが必要です。

Zoomでのライブ配信も行いますので、以下のアドレスからご視聴いただければ幸いです。

ライブ配信(Zoom)

<https://zoom.us/j/97360217929?pwd=b0NQZUJlTHhjejE3eW1wVVBlWUdrUT09>

ミーティング ID：973 6021 7929、パスコード：387709



共 催：北海道大学フロンティア化学教育研究センター、

物質科学フロンティアを開拓するAmbitiousリーダープログラム

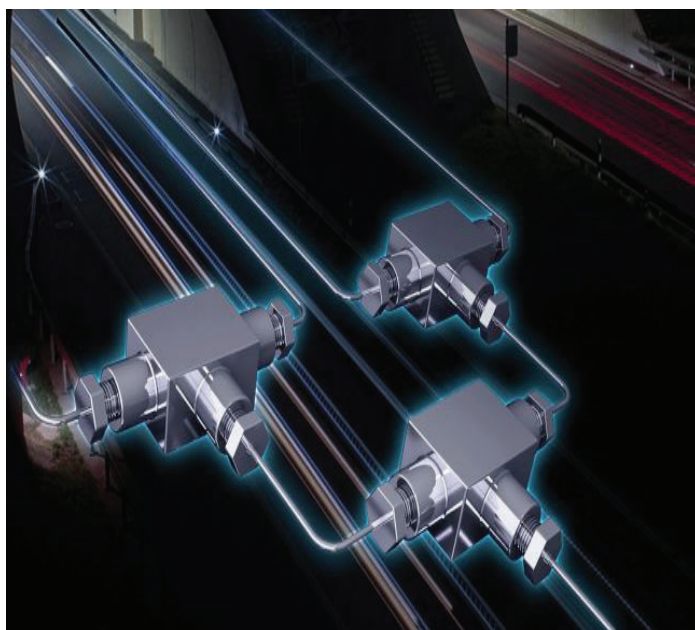
連絡先：工学研究院応用化学部門 長谷川靖哉（内線：7114）

# 新任教授講演会 永木愛一郎 先生

## 「高速有機化学」

日時 令和4年4月27日（水）16:00～17:30

場所 北大 理学部7号館 7-310



マイクロ合成化学とは内部の大きさがマイクロメートルオーダーの反応器（フローマイクロリアクター）を使って、反応時間数秒以下の極めて高速な反応を制御して行うものである。マイクロ空間は分子拡散距離が小さい、容積あたりの表面積が大きいといった特長を有する。本講演では、フローマイクロリアクターを用いた、フラスコなどのマクロ空間では制御困難な精密な反応制御を実現できる研究展開について紹介するとともに（フラッシュケミストリー）、機械学習などのデータサイエンス、化学工学、ケミカルバイオロジー、マテリアルサイエンスを含めた異分野融合による、機能有機分子創生のための高速有機化学の実現に向けた最近の取り組みについても紹介したい。

主催：理学研究院 化学部門  
共催：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  
工学研究院 フロンティア化学教育研究センター



北海道大学  
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

FC Frontier Chemistry Center  
フロンティア化学教育研究センター

連絡先：北海道大学大学院理学研究院化学部門 部門長 上野貢生

[ueno@sci.hokudai.ac.jp](mailto:ueno@sci.hokudai.ac.jp)

演題：微生物由来ポリカチオンイソペプチドを利用  
したタンパク質の細胞内送達

講師：濱野 吉十

福井県立大学 生物資源学部 教授

日時：2022年5月13日（金）15:00~17:00



場所：フロンティア応用科学研究棟 1階 セミナー室1

要旨：

タンパク質は分子標的に対する特異性が高いため、分子生物学ツールおよびバイオ医薬として利用される。しかし、巨大分子であるタンパク質は、一般的に細胞膜を透過しないため、その利用法は限定的である。

タンパク質を細胞内へ直接送達する解決策の1つとして、細胞膜透過性ペプチド（CPP）が注目されているが、ウイルスや昆虫由来の塩基性（カチオン性）ペプチドがCPPとしての主役であり、微生物由来のCPPについては報告が少ない。そこで我々は、放線菌の二次代謝産物として生産される $\epsilon$ -poly-L- $\alpha$ -lysine ( $\epsilon$ -PaL)に着目した。 $\epsilon$ -PaLは、25-35残基のL-lysineがイソペプチド結合で直鎖状に繋がったアミノ酸ホモポリマーであり、一般的に知られる合成ポリリジン ( $\alpha$ -PL)とは化学構造が異なるポリカチオン性ペプチドである。そこで我々は、微生物由来の $\epsilon$ -PaLが細胞膜透過性を示すか確認し、さらに、タンパク質の細胞内送達を可能にするCPPとして機能することを明らかにした。

また、Cre recombinase (38 kDa)を $\epsilon$ -PaL修飾し、動物細胞内に送達後、酵素が機能することを確認するとともに、高分子量の抗体 (>150 kDa)の細胞内送達にも $\epsilon$ -PaL修飾が有効なことを見出した。現在は、 $\epsilon$ -PaLと同じくポリカチオンイソペプチドである $\epsilon$ -oligo-L- $\beta$ -lysine誘導体 ( $\epsilon$ -O $\beta$ L<sup>m</sup>)の細胞膜透過性評価を行っており、その結果についても紹介する。

連絡先：工学研究院応用化学部門 大利 徹（内線：7815）



Advance registration is required to attend.  
Please use this QR code to register.  
参加には事前申し込みが必要です。このQR  
コードから申し込んでください。

## ICReDD&FCC International Seminar

Prof. Dr. Michael J. Krische (University of Texas at Austin, USA)

### Hydrogen-Mediated C-C Bond Formation



**Place:** Hokkaido University Conference Hall  
(Hybrid combining in-person & online delivery)  
北海道大学学術交流会館小講堂  
(対面と Web 配信を併用したハイブリッド形式)

**Time:** Monday, 20 June 2022 16:30-18:00 (JST)

#### Abstract:

Stereo- and site-selective methods for the modification of unprotected organic compounds via addition or redistribution of hydrogen are natural endpoints in the advancement of methods for chemical synthesis. Our laboratory has developed a broad, new family of carbonyl reductive couplings that merge the characteristics of catalytic hydrogenation and carbonyl addition. In this presentation, selected recent examples from our group will be discussed.



## 演題：高砂香料工業(株)の触媒開発

講師：石川 宏紀 先生

高砂香料工業株式会社 研究員



日時：2022年6月29日（水）16:30~18:00

場所：フロンティア応用科学研究棟 1階 セミナー室1

要旨：

高砂香料工業株式会社では1983年の触媒的不斉合成法による $\beta$ -メントールの工業化をきっかけに、ファインケミカル事業が本格化した。現在では大規模な不斉触媒ライブラリーに加えて、カップリング反応など多くの触媒を開発している。触媒的合成技術を利用して製造を行うことによって、化学工場からの廃棄物を削減し、効率的な製造を実現することができる。

本講演では近年高砂において開発されたルテニウム触媒であるDENE<sup>B</sup>®、RUCY<sup>®</sup>、Ru-MACHO<sup>®</sup>触媒を主に取り上げ、開発に至った経緯、基質の適用範囲、医薬品中間体製造において使用された例を紹介する。

主催：フロンティア化学教育研究センター

共催：北海道大学 大学院工学研究院 応用化学部門有機合成化学研究室

連絡先：工学研究院応用化学部門 大熊 毅（内線：6599）

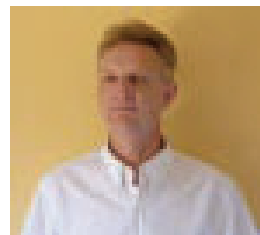
フロンティア化学教育研究センター



演題：Asymmetric Assembly of Fluorinated Scaffolds: Direct introduction of emerging fluorinated motifs versus Transformation of fluorinated building blocks

講師：Dr. Dominique Cahard

Research Director CNRS(The French National Centre for Scientific Research),  
Normandie Université, France



日時：2022年7月12日（火）16:30～18:00

場所：フロンティア応用科学研究棟 1階 セミナー室1

要旨：

The synthesis of enantiopure molecules featuring a fluorine atom or a fluorinated motif has stimulated considerable interest. The subtle effects of fluorine atom(s) on the course of asymmetric reactions often offer interesting results when compared with the chemistry of non-fluorinated molecules. The asymmetric construction of fluorinated molecules can be approached either by direct introduction of a fluorinated group or by transformation of prostereogenic fluorinated substrates. In this context, we have investigated various approaches which will be presented in the lecture.

主催：北海道大学大学院工学研究院フロンティア化学教育研究センター  
連絡先：大学院工学研究院応用化学部門 大熊 毅 (011-706-6599)

演題：ワークライフバランスとライフワーク

講師：深澤 愛子 教授

京都大学高等研究院

物質-細胞統合システム拠点

(WPI-iCeMS)



日時：2022年7月19日（火）16:30~18:00

場所：フロンティア応用化学研究棟 2階 鈴木章ホール

要旨：本講演では、講演者が最近注力している、非ベンゼン系炭化水素を鍵とする新奇 $\pi$ 共役系の分子設計、光・電子機能の探求について紹介します。また、講演者のこれまでのキャリア選択の経緯や、研究生生活を通して感じてきたことを率直にお話しします。大学院生の皆さんのこれからの進路設計や、大学の研究現場での多様性推進を考える上での一助になれば幸いです。

主催：北海道大学工学研究院 フロンティア化学教育研究センター

共催：北海道大学化学反応創成研究拠点（WPI-ICReDD）  
北海道大学工学研究院 応用化学部門 有機元素化学研究室

連絡先：工学研究院応用化学部門 伊藤 肇（内線：6561）

演題：稀薄溶液中における環状アミロースカルバメート誘導体の局所分子形態とキラル認識能との相関

講師：領木 研之 助教

京都大学 大学院工学研究科  
高分子化学専攻



日時：2022年9月8日（木）10:30~12:00

場所：工学部材料・化学系棟 大会議室（MC526）

主催：北海道大学 大学院工学研究院 応用化学部門分子集積化学研究室

共催：フロンティア化学教育研究センター

要旨：

アミロースカルバメート誘導体は、市販のキラル分離カラムのキラル固定相として使用されている。多糖カルバメート誘導体の高いキラル認識能は、その主鎖の規則的ならせん構造に起因すると推察されているが、そのことを明確に示す実験結果は報告されていない。最近、寺尾らにより、いくつかの溶媒中において、環状アミロースカルバメート誘導体の主鎖のらせん構造と剛直性が、対応する線状鎖と異なることが報告された。線状鎖と環状鎖の局所的な分子形態の違いがキラル分離能に影響するのかを調べれば、キラルカラムの分離メカニズムの解明につながる知見が得られることが期待される。そこで、高いキラル認識能を持つ線状アミローストリス(3,5-ジメチルフェニルカルバメート) (ADMPC) の環状分子 (cADMPC) を合成し、溶液中における分子形態を調べた。さらに、cADMPC と ADMPC それぞれを用いたキラル分離カラムを作製し、キラル認識能を比較することにより、局所形態の違いがキラル認識に及ぼす影響について検討した。本発表ではこれらの研究結果について述べる。

連絡先：工学研究院応用化学部門 山本拓矢（内線：6606）





**ICReDD  
International  
Seminar  
Series**

Prof. Dr. Matthew J. Fuchter (Imperial College London)

## **Maximising dissymmetry and handling directionality in chiral materials**

**Place:** Seminar Room 1  
Frontier Research in Applied Sciences Building

**Time:** Friday, 9 September 2022  
16:30-18:00



**Abstract:** We have an ongoing interest in the development of conjugated chiral molecules which can emit and detect circularly-polarized light within thin film materials and in organic electronic devices. Using a range of chiral materials – helicenes, fullerenes and polymers – this talk will give an overview of our strategies to maximise the selectivity of such chiral-optical responses through molecular design, materials processing and device architecture.



**ICReDD  
International  
Seminar  
Series**

Prof. Dr. Senmiao Xu (Suzhou Research Institute of LICP)

## **Chiral Bidentate Boryl Ligand Enabled Iridium-Catalyzed Asymmetric C-H Borylation**

**Place:** Seminar Room 1  
Frontier Research in Applied Sciences Building

**Time:** Tuesday, 20 September 2022  
13:00-14:30



**Abstract:** Although metalloboryl complexes have been structurally evidenced as early as 1990s, boryl as supporting ligand in transition-metal catalysis remains a great challenge due to its liability. Herein, we present the synthesis of chiral bidentate boryl ligands (CBL) with readily available (*S,S*)-DPEN as the privileged scaffold and their application in iridium-catalyzed asymmetric C-H activation borylation of C-H bonds.

演題：**Beyond Adsorption and Because of Adsorption:  
Exploring the silent aspect of carbon porosity**

講師：**Prof. Teresa J. Bandosz**  
(Distinguished Professor  
The City College of New York)

日時：2022年10月6日（木）16:00~17:30

場所：材料化学系棟 中会議室(MC102)



要旨：

In this talk we would like to provide an insight into our perspectives on the new applications of nanoporous carbons that were inspired by the graphene features and its presence in these carbonaceous materials. A significant advancement to the “new” science of the “old” nanoporous carbons is in their new application such as gas sensing and ORR and CO<sub>2</sub>RR catalysis. In these applications both surface chemistry and porosity are crucial factors determining the specific performance. The mechanism of specific processes based on an involvement of porosity will be proposed.

Our inspiration by the science of graphene combined with the comprehensive knowledge of activated carbons surface chemistry, texture, morphology and adsorptive/reactive adsorptive properties directed us to look at carbons from another perspective; from the perspective of nanotechnology. The results obtained by us and briefly addressed here are new and many questions have arisen, and are left unanswered, and many approaches need improvements. One has to take into consideration that explaining the complex phenomena in nanoporous carbons is not easy owing to the combination of the porosity and surface chemistry effects. Practically either one cannot exist without another and they add up to that specific and unique synergy provided only by these materials. One thing is certainly true: “adventurous” graphene features can be found in nanoporous carbons and they deserve to be explored and used to their full extent.

連絡先：工学研究院応用化学部門 向井 紳（内線：6590）



演題：低酸化数 13 族元素化合物の  
特異な性質

講師：山下 誠 教授

名古屋大学大学院工学研究科  
有機・高分子化学専攻



日時：2022 年 10 月 11 日（火）16:30~18:00

場所：フロンティア応用化学研究棟 2 階 セミナー室 2

要旨：本講演では、最近我々が報告した(*o*-tol)<sub>2</sub>B-B(*o*-tol)<sub>2</sub> の特徴的な反応性や得られる生成物の光電子物性について議論を行う。また、求核的な Al アニオンの合成・構造・反応性・電子特性およびこれらのトランスメタル化により得られる異種金属複核錯体の特徴についても合わせて述べる。

主催：北海道大学大学院総合化学院, フロンティア化学教育研究センター

共催：北海道大学化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD)  
北海道大学工学研究院 応用化学部門 有機元素化学研究室

連絡先：工学研究院応用化学部門 伊藤 肇 (内線：6561)



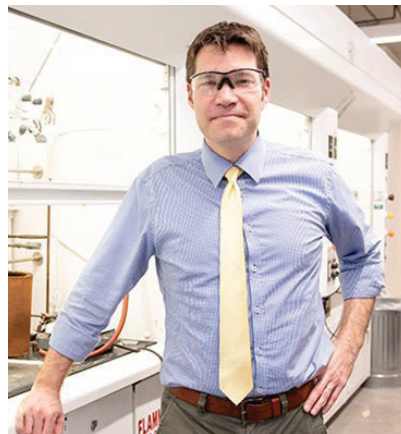


# 特別講演会のお知らせ

**Prof. Rory Waterman**

(University of Vermont, Burlington)

**“Advances in Catalytic  
Hydrophosphination”**



**日時 2022年10月17日(月) 16:30~18:00**

**場所 理学部本館 N-308 号室 (対面開催)**

## 講演要旨

An important challenge for chemists is increasingly efficient routes to element-carbon bonds, as characterized by energetic costs and atom economy, among other factors. Hydrophosphination, or P-C bond formation, has challenges in substrate scope, selectivity, and catalyst activity. In an arc from zirconium to iron to copper, high activity and access to previously inaccessible substrates has been witnessed. The key to this reactivity has been photoactivation and photocatalysis. In the case of photocatalysis, high activity has been seen in  $d^0$  to  $d^8$  metals. This activity is hypothesized to arise from excitation to a low-lying orbital that has significant M-P antibonding character, weakening that bond to avail faster insertion.

**Frontier Chemistry Center**  
フロンティア化学教育研究センター

共催：フロンティア化学教育研究センター  
連絡先：理学研究院化学部門 有機金属化学研究室  
澤村正也 (011-706-3434)

量子化学と熱力学・速度論・ダイナミクス  
～真の理論化学と実験化学の共同研究のために～

講師：中井 浩巳 教授  
早稲田大学 先進理工学部  
化学・生命化学科



日時：2022年10月19日（水）13:30~14:30

場所：理学部本館 N308 室

共催：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)  
スマート物質科学を拓くアンビシャスプログラム (SMatS)

要旨：量子化学計算は、いまや化学研究において不可欠のツールとなっている。系統的に高精度化できる波動関数理論や計算精度と計算コストのバランスの良い密度汎関数理論、大規模系を取り扱うための線形スケーリング法、量子化学計算を on-the-fly で用いる非経験的分子動力学法など様々なオプションもあり、研究者は適材適所でそれらを用いることができる。しかし、それらのオプションを用いても実験結果を満足に再現できなかつたり、実験研究に必要な情報を取り出せなかつたりする場合にしばしば遭遇する。本講演では、量子化学と熱力学・速度論・ダイナミクスを関連づけることでこれらの問題を解決した事例を紹介する。

連絡先：理学院化学部門 武次徹也（内線：3535）



## 日本接着学会東北・北海道支部講演会 2022

日時：2022年10月21日（金）13:30～16:55

場所：フロンティア応用科学研究棟2Fセミナー室2

### プログラム

13:30～13:35 開催の挨拶 佐藤 敏文（北海道大学）

13:35～14:35

「糖鎖導入を鍵としたバイオベース高分子材料の開発」

磯野 拓也 氏（北海道大学）



14:35～15:35

「動的な環状分子が生み出す機能高分子」

青木 大輔 氏（千葉大学）



15:35～15:50 休憩

15:50～16:50

「可逆的相互作用を活用した自己修復/イオン伝導材料の開発」

森 秀晴 氏（山形大学）



16:50～16:55 閉会の挨拶

共催：北海道大学工学研究院 フロンティア化学教育研究センター、  
北海道大学フォトエキサイトニクス研究拠点

**Photo-Excitonix**  
フォトエキサイトニクス研究拠点

連絡先：工学研究院応用化学部門 佐藤 敏文（011-706-6602）

## ～講演会のご案内～

大阪公立大学の林晃敏先生による講演会を企画致しました。林教授は、イオン導電性を持つ無機固体材料の研究において、多くの顕著な業績を上げられています。特にガラスやガラスセラミックス材料で優れたイオン導電性を示す物質を数多く見出されています。今回は、イオン導電性を有するガラス材料と全固体電池への応用に関する最新の研究についてご講演いただきます。多数のご参加をお待ちしております。

演題：無機ガラス材料を用いた全固体電池の研究開発

講師：林 晃敏 教授 （大阪公立大学大学院工学研究科）

日時：2022年10月26日（水）16:30～

場所：北海道大学理学部 7号館 7-310 講義室



主催：北海道大学総合化学院

共催：フロンティア化学教育研究センター

物質科学フロンティアを開拓する Ambitious リーダープログラム,  
スマート物質科学を拓くアンビシャスプログラム

### 要旨

無機固体電解質を用いる全固体電池は、安全性と高エネルギー密度を兼ね備えた次世代蓄電池として実用化に向けた研究開発が活発化している。全固体電池を実現するためには、優れた固体電解質材料の開発と電極/電解質固体界面の形成が重要となる。本講演では、無機固体電解質の中でもガラス材料に着目し、全固体電池への応用に適したイオン伝導性と機械的特性を併せ持つ硫化物や酸化物電解質の開発とそれらを用いた全固体電池の研究の進展について紹介する。

連絡先：北海道大学大学院理学研究院化学部門 無機化学研究室  
松井雅樹（011-706-2702）





演題：放線菌の生合成マシナリーの探索と理解

講師：勝山 陽平 准教授

東京大学大学院農学生命科学研究科

日時：2022年11月11日（金）15:30~16:30

場所：工学研究院 材料・化学系棟 MC030 講義室

主催：大学院総合化学院

共催：大学院工学研究院フロンティア化学教育研究センター

要旨：

放線菌は抗結核薬ストレプトマイシン、抗寄生虫薬エバーメクチンといった有用な二次代謝産物を多数生産することが知られている。一方で、ゲノム解析技術の進歩により、放線菌には未利用の二次代謝生産能力が数多く存在することが示唆されている。本講演では放線菌の持つ二次代謝産物生合成マシナリーの探索とその反応機構の理解に関する、我々の最近の研究成果を紹介する。

連絡先：工学研究院応用化学部門 小笠原 泰志（内線：7118）



演題：鉄鋼表面処理技術の進化

講師：藤田 栄 先生

新構造材料技術研究組合 (ISMA)

プロジェクトマネージャー

北海道大学・客員教授



日時：2022年11月24日（木）15:00~16:30

場所：工学部材料・化学系棟 MC030 講義室

共催：表面技術協会・腐食防食学会・軽金属学会  
各北海道支部

要旨：

本学客員教授で、現在新構造材料技術研究組合 (ISMA)にて、腐食を中心とした研究開発のプロジェクトマネージャーを務めている藤田栄先生の講演会を企画しました。JFE スチール(株)における表面処理鋼板の研究開発の経験をもとに、自動車に欠かせない亜鉛めっき鋼板に関連して亜鉛資源、精錬技術の進化、めっき技術の歴史という基礎的な話から、最新の表面処理技術まで紹介いただきます。

連絡先：工学研究院応用化学部門 幅崎浩樹（内線：6575）

# 特別講演会のお知らせ

**Prof. Marco Bandini**

(Alma Mater Studiorum – University of  
Bologna, Italy)



**Carbo- and Nickel-catalyzed CO<sub>2</sub> Valorization:  
New Perspectives in Organic Synthesis**

**日時 2022年12月5日(月) 15:00~16:30**

**場所 理学部本館 N-308 号室**

Marco Bandini 先生は、金、ニッケル、そしてグラフェンなどの炭素触媒を駆使した新規反応開発に精力的に取り組んでおられる先生です。本講演会では、二酸化炭素を C1 ユニットとした最近の研究についてご発表いただけます。多数のご来聴をお待ちしております。

**Frontier Chemistry Center**  
フロンティア化学教育研究センター

主催：フロンティア化学教育研究センター

連絡先：理学研究院化学部門 有機金属化学研究室

澤村正也 (011-706-3434)

演題：炭素－炭素結合の切断から太陽光エネルギー  
を利用する有機合成へ

講師：村上 正浩 教授

京都大学 名誉教授



日時：2022年12月7日（水）16:30~18:00

場所：フロンティア応用化学研究棟 2階 鈴木章ホール

要旨：大学における研究では、流行に左右されず独自の課題を設定し  
ground breaking な成果を収めることが重要と考える。そのために  
は、機を見て大胆に研究テーマを変えることも有用であろう。本  
講では、非極性 $\sigma$ 結合の切断を主軸に据えて行ってきた研究から、  
ほぼ唯一無二の再生可能エネルギーとも言える太陽光の合成的  
利用、さらには光を利用した二酸化炭素の固定化の研究へと展開  
してきた経緯について紹介する。

主催：北海道大学工学研究院 フロンティア化学教育研究センター

共催：北海道大学化学反応創成研究拠点（WPI-ICReDD）  
北海道大学工学研究院 応用化学部門 有機元素化学研究室

連絡先：工学研究院応用化学部門 伊藤 肇（内線：6561）



# 新任教授講演会

## 情報化学研究室 高橋 啓介 先生

### 「触媒インフォマティクス」

日時 令和4年12月9日（金） 16:30～18:00

場所 北大 理学部5号館 5-203（大講堂）



触媒インフォマティクスは触媒データに対して第4の科学であるデータ科学を用い、人間が処理することが困難な多次元空間から隠れた法則・パターンを導き出し、触媒設計を達成する方法である。本講演では講演者が提唱する触媒インフォマティクスにおける3つの重要概念「データベース構築、データから知識、プラットフォーム」を紹介する。メタン酸化カップリング反応を例として、独自開発したハイスループット実験・計算による触媒ビッグデータの構築、機械学習による触媒提案と実験実証による触媒開発までの道筋を紹介する。また独自開発したインフォマティクス手法「触媒遺伝子」「触媒ネットワーク法」による触媒開発についても紹介する。講演者は触媒インフォマティクスをクリック1つで実践できる触媒インフォマティクス・プラットフォーム「CADS」も開発・運用しており、CADSの機能についても紹介する。最後に触媒インフォマティクスを材料・プロセス・計測インフォマティクスへと展開させた新しい化学を提案する。

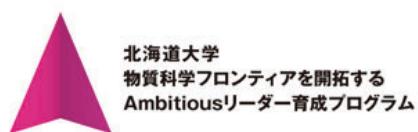
主催：理学院 化学部門

共催：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）

スマート物質科学を拓くアンビシャスプログラム（SMatS）

フォトエキサイトニクス研究拠点

工学研究院 フロンティア化学教育研究センター

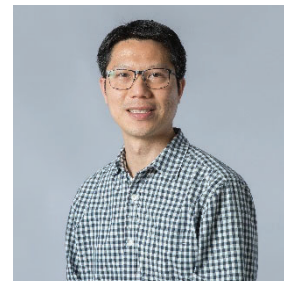


連絡先：北海道大学大学院理学院理学部化学部門 部門長 上野貢生  
[ueno@sci.hokudai.ac.jp](mailto:ueno@sci.hokudai.ac.jp)

演題: **Microporous materials for sustainable chemical engineering**

講師: **Associate Professor Alex Yip**

(Chemical and Process Engineering,  
University of Canterbury, Christchurch,  
New Zealand, alex.yip@canterbury.ac.nz)



日時: 2022年12月19日(月) 15:00~16:30

場所: フロンティア応用科学研究棟 2階 セミナー室2

要旨:

Sustainable development of the chemical industry is recognised as one of the key challenges for the industry. In the last decade, many efforts have been made to develop new materials and technologies toward renewable energy and environmental improvement. Zeolites, also known as molecular sieves, are a family of aluminosilicate materials that are widely used for catalysis, membrane gas separation and adsorption. Due to their orderly distributed micropores in molecular dimensions, we have seen zeolites become an interestingly important material in many sustainable processes, such as biomass conversion, CO<sub>2</sub> capture, and water purification.

In this seminar, we will specifically discuss two important technical aspects of zeolite science: (1) improvement of zeolite catalysis (e.g., C1 homologation for jet-fuel synthesis) through the understanding of mechanistic pathways and (2) zeolite structure determination through atypical synthesis routes (e.g., using ionic liquids as a structure-directing agent). These aspects of research support the advancement of zeolite science and its applications towards sustainable chemical engineering.



連絡先: 工学研究院応用化学部門 荻野 勲 (内線: 6595)

# The role of temperature in solid-state ceramic synthesis

講師：**Prof. Wenhao SUN**

University of Michigan

Materials Science and Engineering



日時：2022年12月20日(火) 16:30~17:30

場所：工学部材料化学系棟 大会議室 MC526

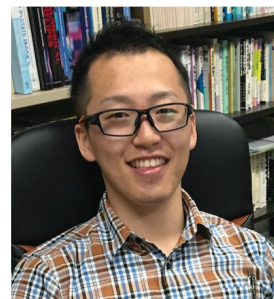
要旨：An emerging goal in the ab initio materials design community is to predict efficient synthesis recipes to functional oxide materials. Temperature plays a crucial role in solid-state synthesis, but it is difficult to predict which temperature is best to carry out a solid-state reaction, as it is difficult to distinguish whether temperature is playing a thermodynamic or kinetic role in a given solid-state reaction. Here, I will show that the phase evolution kinetics in solid-state synthesis can largely be anticipated from reaction enthalpies alone, meaning that we can qualitatively guide synthesis planning without the need for temperature-dependent free-energy calculations. However, recent in-situ XRD observations reveal a critical onset temperature for when a solid-state reaction initiates, which cannot be anticipated from any existing textbook theories. We derive a new explanation for this critical onset temperature from the liquidus curve of the phase diagram, showing that it corresponds to the metastable eutectic temperature. This provides guidance for what temperatures solid-state chemists should target the preparation of novel materials.

連絡先：工学研究院応用化学部門 三浦 章（内線：7116）



## 米国立研究所就職までの経緯と第一原理計算による研究

講師：市場 友宏 特任助教

北陸先端科学技術大学院大学  
情報科学系

日時：2022年12月27日（火）15:00~16:00

場所：材料・化学系棟 小会議室（MC527）

※対面とWeb会議システム「Zoom」によるオンライン参加を併用

Zoom online platform ID: 951 7503 3959 Passcode: 767801

<https://zoom.us/j/95175033959?pwd=cW9zT0NSS0MwYVJFamJmY0RCOHg1UT09>

私は、米・オークリッジ国立研究所のポスドクとして、3年間、第一原理計算の研究に従事し、2022年11月に帰国した。講演では、学生の方々が海外での雇用機会を考えるきっかけになればと思い、私の雇用までの経緯について話す。次に、私の専門とする第一原理計算について概説し、その中でも私の主たる研究分野である第一原理量子モンテカルロ法が、第一原理計算の中でどのように位置付けられるのかを説明する。そして、以下に示す、3つのプロジェクトについて話す。

### 水素結晶の構造同定

固体水素の高圧相の一つである PRE-H<sub>2</sub> 相の構造を、第一原理に基づく構造探索と量子モンテカルロ法から見出した。

### 鉛酸フッ化物のアニオン秩序

Pb<sub>2</sub>Ti<sub>4</sub>O<sub>9</sub>F<sub>2</sub> のアニオン規則配列について実験と第一原理計算から調べ、占有サイトの位置と比率を同定すると共に、フッ素の選好サイトがポーリングの第二規則とわずかながら齟齬する理由について議論した。

### PdCrO<sub>2</sub> デラフォサイト表面の不純物層形成メカニズム

CuCrO<sub>2</sub> バッファ層上で合成される PdCrO<sub>2</sub> 膜上で不純物層が形成される原因が、初期状態における酸素の欠乏に起因し得ることを、実験と第一原理計算から明らかにした。

連絡先：工学研究院応用化学部門 三浦 章（内線：7116）

## Control of Atropisomerism: a Gate to Modern Drugs

講師 : **Prof. Françoise Colobert**  
University of Strasbourg



日時: 2023年1月12日(木) 14:00~15:30

場所: 理学部6号館2階 6-204-02 講義室

要旨: Chirality is an intriguing feature of nature and many natural, biologically active compounds are stereogenic. The prevalence of atropisomeric compounds has been expanding drastically since 2011 and over the last years almost one of out three FDA-approved small molecules contains axial chirality element and additional 16% are proatropisomeric.

Currently, the axial chirality (ie. atropisomerism) generally concerns C-C bonds, as in case of biaryl and hetero-biaryl compounds. In contrast, the axial chirality arising from a restricted rotation around a C-N bond is clearly underdeveloped. With regard to the vivid interest on the C-C and C-N axially chiral compounds, we designed new asymmetric strategies to build-up such compounds.

連絡先: 理学研究院化学部門 谷野 圭持 (内線: 2705)



演題：**Mechanistic Understanding-Led Transition  
Metal Catalyzed C-H Functionalization**

講師：**Prof. Igor Larrosa**

The University of Manchester, the U.K.



日時：2023年3月9日（木）16:30~18:00

場所：フロンティア応用科学研究棟 2階セミナー室2

要旨：

The development of greener and more efficient synthetic methodologies is essential for organic chemistry to reach its full potential in its application to many applied and fundamental scientific problems. Over the last two decades C-H activation has emerged as a powerful tool to streamline syntheses, functionalize complex scaffolds, while massively improving atom and step economy.

In this talk I will present some of our group's approaches in applying the knowledge derived from mechanistic studies into the design of more efficient processes and of novel catalysts and catalytic systems, such as the use of bimetallic Pd/Ag, Pd/Cr and Au/Ag synergistic systems, and Ru-catalysts for late-stage functionalization. Additionally, recent developments in the application of machine learning to mechanism elucidation will be discussed.

主催：北海道大学工学研究院 フロンティア化学教育研究センター

共催：北海道大学化学反応創成研究拠点 (ICReDD)

連絡先：工学研究院応用化学部門 伊藤 肇（内線：6561）