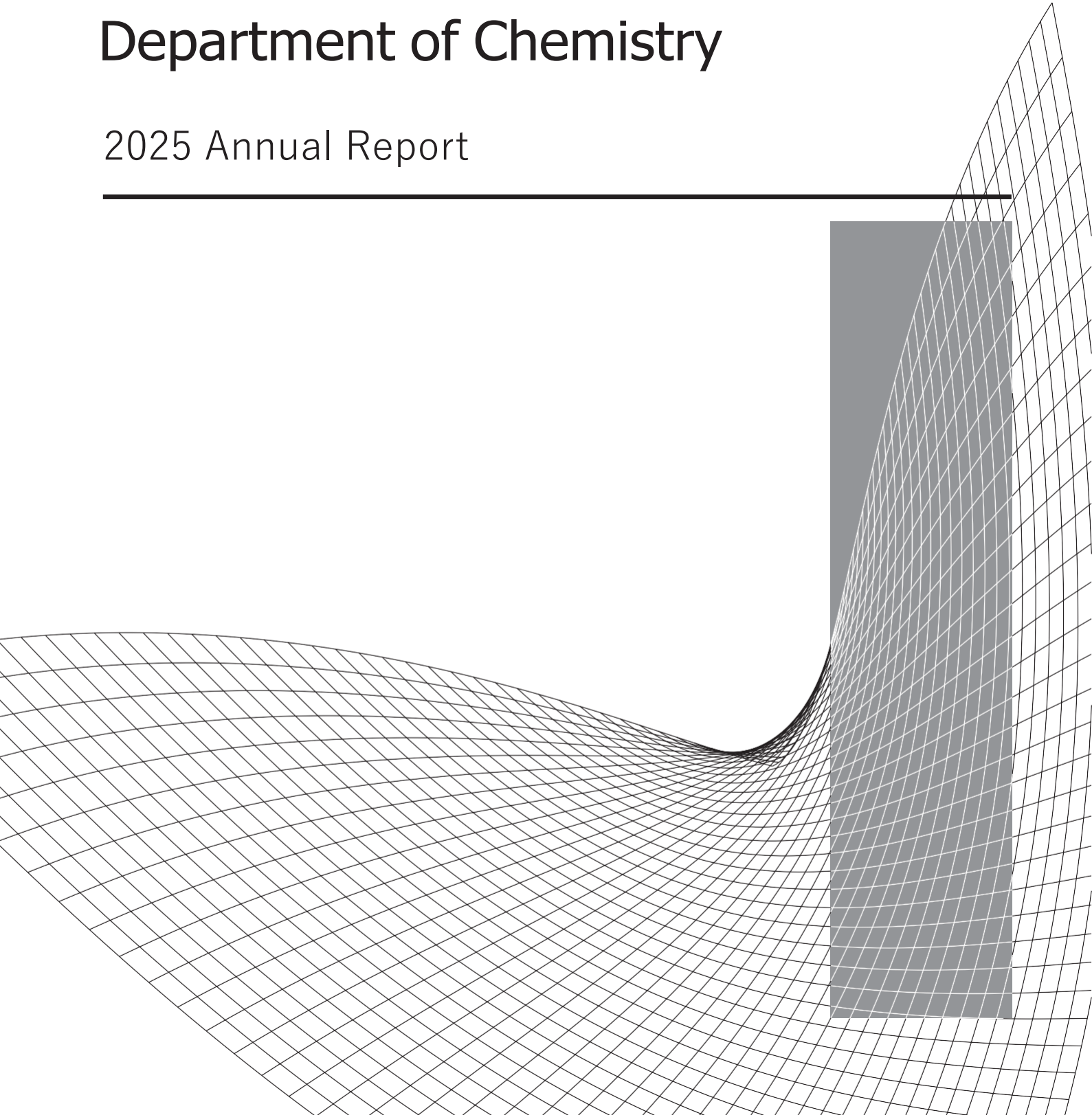




RIKKYO UNIVERSITY

Department of Chemistry

2025 Annual Report



はじめに

立教大学の化学科は、持続可能社会を実現する化学（＝未来化学）の創成を目指して、伝統的な研究分野にとらわれることなく、「マテリアル」、「エネルギー」、「ライフ」を重点領域とした研究を推進しています。実験系の研究室間でのコラボレーションも進められ、多様な成果が産み出されており、中には産業応用が可能なものもあります。また最近では、実験結果の解析や新しい触媒や機能分子を設計するために、実験に併用して計算化学の手法が使われるようになり、研究室間での理論と実験の交流も活発に行われています。

この報告書は、2025年度の化学科の研究成果をまとめたものです。近年の日本における研究環境の変化に伴い、研究成果の報告が以前にも増して重要になってきています。外部からの評価・批判を真摯に受け止め、よりいっそう教育・研究を推進して行く所存です。

立教大学理学部化学科

目次

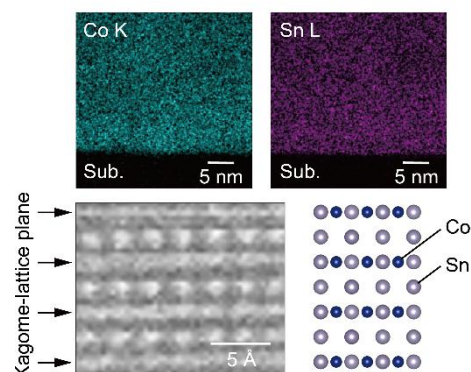
藤原 宏平	・ ・ ・ ・ ・	4
松下 信之	・ ・ ・ ・ ・	8
箕浦 真生	・ ・ ・ ・ ・	12
三井 正明	・ ・ ・ ・ ・	17
宮部 寛志	・ ・ ・ ・ ・	23
望月 祐志	・ ・ ・ ・ ・	27
森本 正和	・ ・ ・ ・ ・	34
永野 修作	・ ・ ・ ・ ・	37
大多和 正樹	・ ・ ・ ・ ・	41
佐々木 直樹	・ ・ ・ ・ ・	44
田邊 一郎	・ ・ ・ ・ ・	48
和 田 亨	・ ・ ・ ・ ・	52
山中 正浩	・ ・ ・ ・ ・	55

I. 最近の研究成果

Epitaxial thin films of the kagome-lattice topological semimetal CoSn grown using an ultrathin Co seed layer

T. IKAWA and K. FUJIWARA, *Journal of Applied Physics* **138**, 115301-1–5 (2025).

We have fabricated thin films of the kagome-lattice topological semimetal CoSn on $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ substrates by radio-frequency magnetron sputtering. While the direct growth by simultaneously supplying Co and Sn resulted in CoSn films with weak CoSn 0002 diffraction intensity, the insertion of a Co seed layer as thin as a few unit cells significantly increased the CoSn 0002 diffraction intensities. The detailed X-ray diffraction analysis confirmed the single-phase, c -axis oriented epitaxial growth of CoSn. Scanning transmission electron microscopy observation of an annealed CoSn/Co/ $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ structure revealed the absence of the Co seed layer in the film/substrate interface region and the homogeneous compositional distribution, indicating the alloying of CoSn and Co during annealing. By leveraging the virtually single-layer nature of the sample structure, we evaluated the electrical properties in the film plane and found that the resistivity of the a - b plane at 300 K was comparable to those of bulk crystals, where the role of dispersionless flatbands has been discussed. These results provide a pathway to explore the functional properties derived from the topological electronic states of CoSn.

Giant antisymmetric magnetoresistance arising across optically controlled domain walls in the magnetic Weyl semimetal $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ K. FUJIWARA, K. OGAWA, N. YOSHIKAWA, K. KOBAYASHI, K. NOMURA, R. SHINANO, and A. TSUKAZAKI, *Communications Materials* **5**, 239-1–6 (2024).

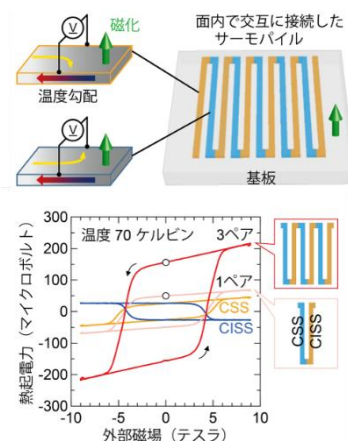
Domain walls (DWs) in magnetic materials host various interesting magneto-transport phenomena. Recent theoretical proposals focusing on DWs of magnetic Weyl semimetals (mWSMs) suggest the emergence of even more exotic transport owing to topologically protected Weyl domains with opposite chirality. However, techniques for controlling and characterizing DWs in mWSMs have not yet matured sufficiently to identify the distinct features of electrical conduction on DWs. Here, by adopting an optical technique to manipulate magnetic domains in mWSM $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ Hall-bar devices, we discover giant antisymmetric magnetoresistance arising across a DW formed by serially connected upward- and downward-magnetized Weyl domains. This phenomenon originates from the large tangent of the Hall angle associated with the intrinsic anomalous Hall effect in the oppositely magnetized Weyl domains. Furthermore, we quantitatively evaluate DW resistance by systematically controlling the number of DWs. These results underscore the promising avenue of Weyl DW engineering for advanced research on topological magnets.



Bipolarity of large anomalous Nernst effect in Weyl magnet-based alloy films

S. NOGUCHI, K. FUJIWARA, Y. YANAGI, M.-T. SUZUKI, T. HIRAI, T. SEKI, K. UCHIDA, and A. TSUKAZAKI, *Nature Physics* **20**, 254–260 (2024).

A thermopile device converts thermal energy to electrical energy. Controlling the polarity of the thermoelectric voltage that such a device generates is an important part of enhancing its thermoelectric output. Constructing thermopile devices where the mechanism is based on the anomalous Nernst effect in topological magnets and where one can control the bipolarity is still hard to do. Here we demonstrate the bipolarity of a large anomalous Nernst effect in a series of Weyl ferromagnet $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ -based alloy films by tuning the Fermi energy. We illustrate the bipolarity of the anomalous Nernst signal originating from the intrinsic Berry curvature contribution by systematically regulating the Fermi energy by nickel or indium substitution while maintaining a topological band

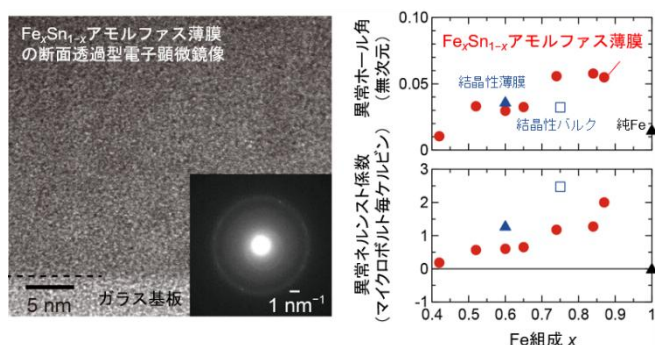


feature of the Weyl ferromagnet. The bipolarity enables the construction of the Weyl magnet-based anomalous Nernst thermopile that generates large thermoelectric output at zero magnetic field. These demonstrations of bipolar large anomalous Nernst effect in $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ -based films will stimulate the device development of efficient thermoelectric energy conversion exploiting topological magnets.

Berry curvature contributions of kagome-lattice fragments in amorphous Fe–Sn thin films

K. FUJIWARA, Y. KATO, H. ABE, S. NOGUCHI, J. SHIOGAI, Y. NIWA, H. KUMIGASHIRA, Y. MOTOME, and A. TSUKAZAKI, *Nature Communications* **14**, 3399-1–7 (2023).

Amorphous semiconductors are widely applied to electronic and energy-conversion devices owing to their high performance and simple fabrication processes. The topological concept of the Berry curvature is generally ill-defined in amorphous solids, due to the absence of long-range crystalline order. Here, we demonstrate that the Berry curvature in the short-range crystalline order of kagome-lattice fragments effectively contributes to the anomalous electrical and magneto-thermoelectric properties in Fe–Sn amorphous films. The Fe–Sn films on glass substrates exhibit large anomalous Hall and Nernst effects comparable to those of the single crystals of topological semimetals Fe_3Sn_2 and Fe_3Sn . With modelling, we reveal that the Berry curvature contribution in the amorphous state likely originates from randomly distributed kagome-lattice fragments. This microscopic interpretation sheds light on the topology of amorphous materials, which may lead to the realization of functional topological amorphous electronic devices.



II. 発表論文リスト (2023-2025年度)

“Systematic evolution of superconducting pairing strength and Seebeck coefficients in correlated infinite-layer $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_2$ ”

M. OSADA, S. IMAJO, Y. SEKI, K. ISHIDA, T. NOJIMA, K. FUJIWARA, K. KINDO, Y. NOMURA, and A. TSUKAZAKI

Science Advances **11**, ead6488-1–8 (2025).

“Epitaxial thin films of the kagome-lattice topological semimetal CoSn grown using an ultrathin Co seed layer”
T. IKAWA and K. FUJIWARA

Journal of Applied Physics **138**, 115301-1–5 (2025). [Featured Article and Cover Image]

“Mott insulating state of IrO_6 honeycomb monolayer structured in ilmenite-type oxide superlattice
M. NEGISHI, K. FUJIWARA, S.-H. JANG, Y.-F. ZHAO, S. SASANO, R. ISHIKAWA, N. SHIBATA, D. SHIGA, H. KUMIGASHIRA, Y. NAKAMURA, H. KISHIDA, Y. MOTOME, and A. TSUKAZAKI”

Physical Review Materials **9**, 086202-1–9 (2025).

“Light-induced anomalous Hall conductivity in the massive three-dimensional Dirac semimetal $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ ”
N. YOSHIKAWA, S. OKUMURA, Y. HIRAI, K. OGAWA, K. FUJIWARA, J. IKEDA, A. OZAWA, T. KORETSUNE, R. ARITA, A. MITRA, A. TSUKAZAKI, T. OKA, R. SHIMANO

Physical Review B **111**, 245104-1–20 (2025). [Editor’s Suggestion]

“Giant antisymmetric magnetoresistance arising across optically controlled domain walls in the magnetic Weyl semimetal $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ ”

K. FUJIWARA, K. OGAWA, N. YOSHIKAWA, K. KOBAYASHI, K. NOMURA, R. SHIMANO, and A. TSUKAZAKI

Communications Materials **5**, 239-1–6 (2024).

“Suppression of cracking induced by epitaxial strain relaxation using a relaxation absorber during the transfer of epitaxial thin films of anatase-type Nb:TiO_2 ”

H. NISHIKAWA, A. HIRAOKA, K. SATO, S. ITO, N. KATO, and K. FUJIWARA

Thin Solid Films **807**, 140531-1–8 (2024).

“Strongly pinned skyrmionic bubbles and higher-order nonlinear Hall resistances at the interface of Pt/FeSi

bilayer”

T. HORI, N. KANAZAWA, K. MATSUURA, H. ISHIZUKA, K. FUJIWARA, A. TSUKAZAKI, M. ICHIKAWA, M. KAWASAKI, F. KAGAWA, M. HIRAYAMA, and Y. TOKURA
Physical Review Materials **8**, 044407-1–8 (2024).

“Bipolarity of large anomalous Nernst effect in Weyl magnet-based alloy films”

S. NOGUCHI, K. FUJIWARA, Y. YANAGI, M.-T. SUZUKI, T. HIRAI, T. SEKI, K. UCHIDA, and A. TSUKAZAKI
Nature Physics **20**, 254–260 (2024).

プレスリリース「トポロジカル磁性体の磁気熱電効果で起電力生成に成功」日経電子版2024/1/8

“Intercorrelated anomalous Hall and spin Hall effect in kagome-lattice $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ -based shandite films”

Y.-C. LAU, J. IKEDA, K. FUJIWARA, A. OZAWA, J. ZHENG, T. SEKI, K. NOMURA, L. DU, Q. WU, A. TSUKAZAKI, and K. TAKANASHI

Physical Review B **108**, 064429-1–11 (2023).

プレスリリース「トポロジカル物質の潜在的に優れた特性を理論と実験で実証」日経電子版2023/9/5、
「トポロジカル物質 東北大、特性を実証」日刊工業新聞2023/10/12

“Fe-Sn薄膜素子が示す異常ホール効果と磁気抵抗効果を用いた磁気センサ応用”

塩貝 純一, 藤原 宏平, 塚崎 敦, 日本磁気学会第244回研究会資料, 244-4, p.21–25 (2023).

“Berry curvature contributions of kagome-lattice fragments in amorphous Fe-Sn thin films”

K. FUJIWARA, Y. KATO, H. ABE, S. NOGUCHI, J. SHIOGAI, Y. NIWA, H. KUMIGASHIRA, Y. MOTOME, and A. TSUKAZAKI

Nature Communications **14**, 3399-1–7 (2023).

プレスリリース「バンドトポロジーの性質、アモルファス薄膜で発見」日経電子版2023/6/13

“Improvement of superconducting properties in $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_2$ thin films by tuning topochemical reduction temperature”

M. OSADA, K. FUJIWARA, T. NOJIMA, and A. TSUKAZAKI

Physical Review Materials **7**, L051801-1–7 (2023).

Kohei FUJIWARA

ORCID: 0000-0002-2164-2462 (<https://orcid.org/0000-0002-2164-2462>)

III. 学会発表 (2025年度)

“初期成長の制御によるカゴメ格子合金 CoSn 薄膜の高品質化” (ポスター)

井川 僚哉、藤原 宏平

第4回大学連携化学シンポジウム、ポスター番号8 (立教大学・東京 2026/3/3)

“直方晶 MgGeO_3 の配向膜成長と光学バンドギャップ評価” (一般口頭)

古川 加惟、田邊 一郎、藤原 宏平

電気学会電子材料研究会, EFM-25-010 (関西大学・大阪市 2025/11/25)

“極薄初期層の挿入によるカゴメ格子合金 CoSn 薄膜の高品質化” (一般口頭)

井川 僚哉、藤原 宏平

電気学会電子材料研究会, EFM-25-011 (関西大学・大阪市 2025/11/25)

“Epitaxial growth of kagome-lattice alloy CoSn using an ultrathin Co seed layer” (Poster)

Tomoya Ikawa and Kohei Fujiwara

The International Workshop on “Exotic Quantum Phases due to Unhappy Electrons” (Univ. of Tokyo, Tokyo, 2025/11/13)

“カゴメ格子合金 CoSn 薄膜のスパッタリング成長と物性評価” (一般口頭)

井川 僚哉、藤原 宏平

第86回応用物理学会秋季学術講演会、9a-N107-6 (名城大学・名古屋市 2025/9/9)

“高温アニールによる直方晶 MgGeO_3 薄膜の作製” (ポスター)

古川 加惟、藤原 宏平

第86回応用物理学会秋季学術講演会、8a-P05-6（名城大学・名古屋市 2025/9/8）

IV. 卒業研究・学位論文（2025年度）

卒業論文：

規則合金Pt₃Coの薄膜成長と磁気特性評価

Mn系磁性合金薄膜のスパッタリング成長

強誘電体基板を活用した薄膜の電気伝導制御

ReO₂薄膜の結晶性と電気伝導性の向上に関する研究

Fe-Sb系化合物の薄膜化に向けた組成調整

Mo合金薄膜電気二重層デバイスにおける不可逆抵抗変化

V. 担当講義科目（2025年度）

物理化学 1、物理化学演習、物性科学、科学英語（化）、化学の最前線、化学実験A、C

物理化学基礎特論、物理化学応用特論5

VI. その他（2025年度）

外部資金（代表分）：

JST創発的研究支援事業（2023–2029）

科研費挑戦的研究（萌芽）（2025–2026）、基盤研究（B）（2023–2025）

旭硝子財団研究助成、高橋産業経済研究財団研究助成

指導学生の受賞：井川 僚哉 2025年技術委員会奨励賞（電気学会電子材料研究会）

特許：出願2件（特願2025-139922, 2025-139661）

委員会活動等：

Communications Materials, Editorial Board Member

応用物理学会・プログラム編集委員（6.4 薄膜新材料）

日本学術振興会産学協力委員会R031ハイブリッド量子ナノ技術委員会・委員

電気学会電子材料技術委員会・1号委員

電気学会マルチ機能を有するハイブリッドヘテロ接合材料に関する技術調査専門委員会・委員

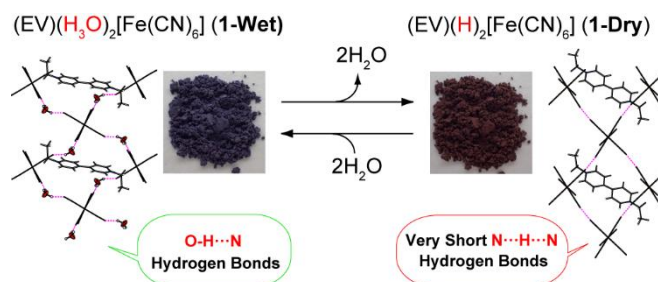
I. 最近の研究成果

Web of Science ResearcherID
AAC-1516-2020

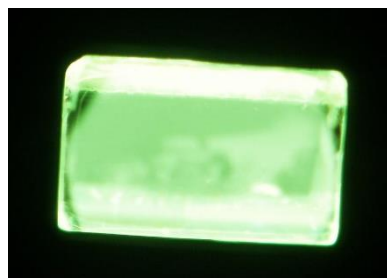
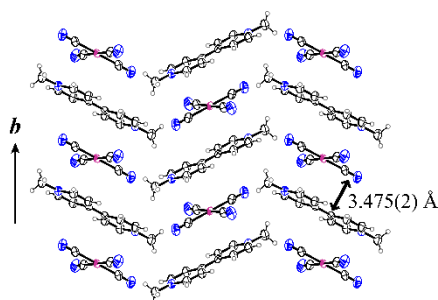
ORCID: 0000-0003-1022-430X

Unique Hydration/Dehydration-Induced Vapochromic Behavior of a Charge-Transfer Salt Comprising Viologen and hexacyanidoferrate(II)Rikako Tanaka, Atsushi Okazawa, Hisashi Konaka, Akito Sasaki, Norimichi Kojima, Nobuyuki Matsushita
Inorganic Chemistry, **2018**, 57, 2209-2217. (doi:10.1021/acs.inorgchem.7b03100)

We successfully prepared and crystallographically characterized the first intermolecular charge-transfer (CT)-based vapochromic compound, $(\text{EV})(\text{H}_3\text{O})_2[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ (**1-Wet**, EV^{2+} : 1,1'-diethyl-4,4'-bipyridine-1,1'-dium), an ethyl viologen-containing CT salt. **1-Wet**, which is purple in color, is transformed into a brown powder (**1-Dry**) upon exposure to methanol vapor, drying over silica gel, or heating; **1-Dry** returns to **1-Wet** upon exposure to water vapor. These color changes are induced by hydration and dehydration, and gravimetric analyses suggest that **1-Dry** is the dehydrated form of **1-Wet**, namely $(\text{EV})(\text{H})_2[\text{Fe}(\text{CN})_6]$. Interestingly, desorption of water molecules from the oxonium ions in **1-Wet** produces isolated protons (H^+) that remain in **1-Dry** as counter cations. Powder X-ray crystal structure analysis of **1-Dry** reveals the presence of very short contacts between the nitrogen atoms of adjacent $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ anions in the crystal. The isolated protons are trapped between the nitrogen atoms of cyanido ligands to form very short $\text{N}\cdots\text{H}\cdots\text{N}$ hydrogen bonds. A detailed comparison of the crystal structures of **1-Wet** and **1-Dry** reveals that hydration and dehydration induce changes in crystal packing and intermolecular CT interactions, resulting in reversible color changes.

**A Luminescent Nonlinear-chain Tetracyanoplatinate(II) Forming a Charge-transfer Complex with Methylviologen**Daisuke Shiota and Nobuyuki Matsushita
Chemistry Letters, **2008**, 37, 398-399. (doi:10.1246/cl.2008.398)

We display that a tetracyanoplatinate(II) forming a charge-transfer complex with methyl viologen dication in the crystal exhibits intense luminescence despite no direct $\text{Pt}\cdots\text{Pt}$ interaction.



Single crystal X-ray diffraction study of a mixed-valence gold compound, $\text{Cs}_2\text{Au}^{\text{I}}\text{Au}^{\text{III}}\text{Cl}_6$ under high pressures up to 18 GPa: Pressure-induced phase transition coupled with gold valence transition

Nobuyuki Matsushita, Hans Ahsbals, Stefan S. Hafner, Norimichi Kojima
Journal of Solid State Chemistry, **2007**, 180, 1353-1364. (doi:10.1016/j.jssc.2007.01.037)

We performed the single-crystal X-ray diffraction study of a perovskite-type gold mixed-valence compound, $\text{Cs}_2\text{Au}^{\text{I}}\text{Au}^{\text{III}}\text{Cl}_6$, under high pressures up to 18 GPa by using a diamond-anvil-cell with helium gas as an ideal hydrostatic pressure-transmitting medium. The lattice parameters and the variable atomic positional parameters were obtained with reasonable accuracy at various pressures. A structural phase transition at ca. 12.5 GPa from $I4/mmm$ to $Pm3m$ was found. The lattice parameters a_0 and c_0 , denoted in the tetragonal cell setting, result in the relationship $2^{1/2}a_0 = c_0$, and the superstructure reflections hkl (l is odd), caused by the shift of the Cl ions from the midpoint of the Au ions, disappeared at pressures above the phase transition. Both elongated $[\text{Au}^{\text{III}}\text{Cl}_6]$ and compressed $[\text{Au}^{\text{I}}\text{Cl}_6]$ octahedra in the low-pressure phase smoothly approach regular octahedra with increasing pressure. Above the structural phase transition at 12.5 GPa, all the $[\text{AuCl}_6]$ octahedra are crystallographically equivalent, which proves that the tetragonal-to-cubic phase transition accompanies the valence transition from the $\text{Au}^{\text{I}}/\text{Au}^{\text{III}}$ mixed-valence state to the Au^{II} single-valence state.

pH-Dependent Color-Change Behavior of Bis(*o*-phenylenediamine)platinum(II) Complex and pH-Dependent Redox of Bis(*o*-semibenzoquinonediimine)platinum(II) complex

Yosuke KONNO and Nobuyuki MATSUSHITA
Bulletin of the Chemical Society of Japan, **2006**, 79, 1046-1053. (doi:10.1246/bcsj.79.1046)
 “Selected Paper”に選出.

pH-dependent color changes of innocent diamineplatinum(II) complex, $[\text{Pt}(\text{H}_2\text{L})_2]\text{Cl}_2$ ($[\mathbf{1}]\text{Cl}_2$), where H_2L is *o*-phenylenediamine, and pH-dependent redox of non-innocent diimineplatinum(II) complexes, $[\text{Pt}(\text{L})_2]$ ($\mathbf{2}$) and $[\{\text{Pt}(\text{L})_2\}_2]\text{Cl}_2$ ($[\mathbf{2}_2]\text{Cl}_2$), where L is *o*-semibenzoquinonediimine monoanion or neutral *o*-benzoquinonediimine, have been investigated by Vis-NIR spectroscopy and cyclic voltammetry in solutions of various pH. The crystals of $[\mathbf{1}]\text{Cl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ and $[\mathbf{2}_2]\text{Cl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ have been also characterized by X-ray crystallography. $[\mathbf{1}]\text{Cl}_2$ in aqueous solution changes from colorless either to purple or to yellow-green depending on the pH of the solution. The purple solution gave a neutral complex $\mathbf{2}$ and the yellow-green solution yielded $[\mathbf{2}_2]\text{Cl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. In the latter complex, the monocation, $[\mathbf{2}]^+$ dimerizes forming a weak Pt–Pt bond [3.0109(4) Å] with no bridging ligands. The spectroscopy of $[\mathbf{1}]\text{Cl}_2$ in the buffer solutions shows that the complex $\mathbf{2}$ is formed in the range of pH 4.6–5.8, while the complex $[\mathbf{2}]^+$ is generated in the range of pH 2.1–4.5. These results indicate that the one-electron redox process of $[\mathbf{2}]^+/2$ depends on the pH of the solution. Adjusting the pH of the solution by adding acid or base is able reversibly to control this redox process. This behavior is a kind of pH-dependent chromism because of their color being different.

II. 発表論文リスト(2021-2025年度)

“A theoretical study on non-bridging dimer formation of a cationic platinum complex with a redox-active ligand”

Sakamoto, Y.; Kikkawa, S.; Yokojima, S.; Nobuyuki Matsushita, N.; Nakamura, S.
ChemistrySelect, **2022**, 7, e202103827 (9 pages). (doi.org/10.1002/slct.202103827)

“Shape-selective one-step synthesis of branched gold nanoparticles on the crystal surface of redox-active Pd^{II} -macrocycles”

Yamashita, Y.; Tashiro, S.; Ishii, Y.; Uchihashi, T.; Matsushita, N.; Kubota R.; Shionoya, M.
Dalton Transactions, **2022**, 51, 1318-1324. (doi.org/10.1039/d1dt03973c)

III. 学会発表(2025年度)

ジアリールエテン縮環型白金ジチオレン錯体の固相フォトクロミズム

若尾 海斗、横森 創、西村 涼、森本 正和、松下 信之

2025光化学討論会、1P37、立教大学・池袋キャンパス(東京都)、9月4日～6日、2025年

凝集誘起発光性亜鉛ジチオレン錯体結晶の光学特性評価

棕代 菜月、藤原 創也、横森 創、松下 信之

2025光化学討論会、1P91、立教大学・池袋キャンパス(東京都)、9月4日～6日、2025年

傾角反強磁性単一成分分子性導体における置換基修飾による構造・物性への影響

荒井 翔太、横森 創、森 初果、松下 信之

第19回分子科学討論会2025、3P036、広島国際会議場(広島市)、9月9日～12日、2025年

亜鉛ジチオレン錯体結晶における凝集誘起発光と対カチオン依存性

横森 創、藤原 創也、棕代 菜月、松下 信之

第19回分子科学討論会2025、2C01、広島国際会議場(広島市)、9月9日～12日、2025年

弱強磁性を示す金ジチオレン錯体の結晶構造・電子物性に対するアルキル鎖変調効果

荒井 翔太、横森 創、森 初果、松下 信之

錯体化学会第75回討論会、1PB-009、長崎大学・文教キャンパス(長崎市)、9月15日～17日、2025年

対カチオン依存性を示す亜鉛ジチオレン錯体結晶の凝集誘起発光

棕代 菜月、藤原 創也、横森 創、松下 信之

錯体化学会第75回討論会、3PB-011、長崎大学・文教キャンパス(長崎市)、9月15日～17日、2025年

ジアリールエテン縮環型金属ジチオレン錯体の結晶相フォトクロミズム

若尾 海斗、横森 創、西村 涼、森本 正和、松下 信之

錯体化学会第75回討論会、3PA-092、長崎大学・文教キャンパス(長崎市)、9月15日～17日、2025年

ピロロキノリンキノン-カルシウムラジカルの超高温耐性

池本 一人、古川 貢、松下 信之、中村振一郎

錯体化学会第75回討論会、3Fc-04、長崎大学・文教キャンパス(長崎市)、9月15日～17日、2025年

PQQの不安定化学種である水付加したアセタール体、1電子還元したラジカル体をCaが安定化させる

池本 一人、古川 貢、松下 信之、中村振一郎

日本農芸化学会 関東支部大会、O-2、筑波大学・筑波キャンパス(つくば市)、8月29日、2025年

Soluble molecular conductors/magnets exhibiting canted antiferromagnetism and ambipolar FET characteristics based on neutral gold dithiolene complexes

S. Yokomori, S. Dekura, S. Imajo, T. Higashino, M. Ito, T. Fujino, N. Matsushita, H. Mori

The 16th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets

(ISCOM2025), WED 4-2, LOISIR HOTEL TOYOHASHI, Toyohashi, Aichi, September 28-October 3, 2025

Soluble molecular conductors/magnets based on neutral gold dithiolene complexes: canted antiferromagnetism and ambipolar FET characteristics

S. Yokomori, S. Dekura, S. Imajo, T. Higashino, M. Ito, T. Fujino, N. Matsushita, H. Mori

The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (PACIFICHEM 2025)

Hawaii Convention Center, Honolulu, Hawaii, USA, December 15-20, 2025

IV. 卒業研究・学位論文(2025年度)

修士論文

プロトン-電子カップリングによる物性制御を目指した新規発光性亜鉛ジチオレン錯体の構築と光学特性評価

新規ジアリールエテン縮環金属ジチオレン錯体の合成および光応答特性の評価

卒業研究

ピリジニウム/キノリニウム系カチオンを用いた発光性亜鉛ジチオレン錯体の構築と発光特性調査

新規アンバイポーラ型分子性FETの開拓に向けた可溶性金属ジチオレン錯体の合成

ビス(アミノメチルピリジン)白金錯塩の発光特性の調査

結晶中でのプロトン-電子カップリングの発現を目指した新規水素結合性金属ジチオレン錯体の合成

V. 担当講義科目(2025年度)

学部:無機化学入門, 無機化学1, 無機化学2, 化学実験A, 化学実験B, 化学実験C, 化学の最前線, 研究実験1, 研究実験2, 卒業研究・輪講, セカンドステージ大学:学問の世界B

VI. その他

書籍

高等学校理科用文部科学省検定済教科書「改訂 化学基礎」、「改訂 新編化学基礎」(東京書籍)、分担執筆 (令和7年2月)

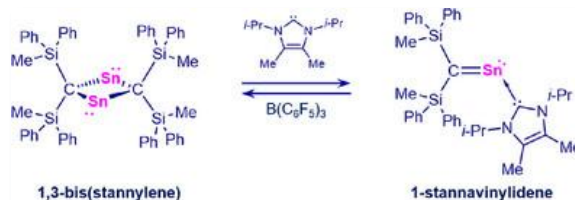
高等学校理科用文部科学省検定済教科書「化学」(東京書籍)、分担執筆 (令和4年3月)

I. 最近の研究成果

Synthesis, Structure, and Reactivity of a 1-Stannavinylidene-NHC Complex: A Heavier Group-14 Analogue of Vinylidene

Asakawa, T.; Sugamata, K.; Minoura, M.
Chem. Eur. J., **2025**, 31(54), e02104, (DOI: 10.1002/chem.202502104)

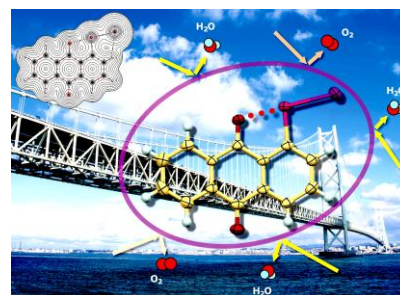
The first stable 1-stannavinylidene-NHC complex with bulky silyl substituents has been obtained from the retro-dimerization of cyclic 1,3-bis(stannylene) with an *N*-heterocyclic carbene (NHC). To accomplish the retro-dimerization of cyclic 1,3-bis(stannylene), a suitably sized NHC is required. Both in the solid state and in solution, 1-stannavinylidene-NHC complex is characterized by the presence of a C=Sn π bond. When treated with SnCl_2 , 1-stannavinylidene-NHC complex undergoes an addition reaction to afford the corresponding stable *gem*-bis(chlorostannylene).



Extremely Stable System of 1-Haloselanyl-anthraquinones: Experimental and Theoretical Investigations

Ogawa, N.; Suzuki, N.; Katsura, Y.; Minoura, M.; Nakanishi, W.; Hayashi, S.
Dalton Trans., **2024**, 53(24), 10099-10112, (DOI: 10.1039/d4dt00760c)

Highly stable selanyl halides were synthesized and structurally analyzed, including variants with different halogens and substituents. Quantum chemical calculations showed that short oxygen–selenium distances significantly contribute to the compounds' high stability, with interaction strength increasing with halogen electronegativity. QTAIM-DFA analysis revealed that selenium–halogen interactions vary from covalent to halogen bonding with charge transfer, while oxygen–selenium interactions generally involve multicenter bonding with charge transfer. In compounds with hydrogen, carbon, or selenium substituents, selenium bonding is covalent, and oxygen–selenium interactions resemble typical hydrogen bonds without covalency. Stabilization energies from NBO analysis correlated well with structural parameters, supporting the observed trends in interaction strength and stability.



Zn-Based Metal–Organic Frameworks Using Triptycene Hexacarboxylate Ligands: Synthesis, Structure, and Gas-Sorption Properties

Sugamata, K.; Yamada, S.; Yanagisawa, D.; Amanokura, N.; Shirai, A.; Minoura, M.
Chemistry-A Eur. J. **2023**, 29, e202302080, (DOI: 10.1002/chem.202302080)

A series of metal–organic frameworks (MOFs) based on zinc ions and two triptycene ligands of different size have been synthesized under solvothermal conditions. Structural analyses revealed that they are isostructural 3D-network MOFs. The high porosity and thermal stability of these MOFs can be attributed to the highly rigid triptycene-based ligands. Their BET specific surface areas depend on the size of the triptycene ligands. In contrast to these surface-area data, the H_2 and CO_2 adsorption of these MOFs is larger for MOFs with small pores. Consequently, we introduced functional groups to the bridge-head position of the triptycene ligands and investigated their effect on the gas-sorption properties. The results unveiled the role of the functional groups in the specific CO_2 binding via an induced interaction between adsorbates and the functional groups. Excellent H_2 and CO_2 properties in these MOFs were achieved in the absence of open metal sites.



II. 発表論文リスト (2023-2025年度)

“Synthesis, Aromaticity, and Optical and Redox Properties of Nickel(II), Palladium(II), and Platinum(II) Complexes of meso-Substituted 5-Monoazaporphyrin Derivatives” Murata, Y.; Sasaki, K.; Miura, T.; Wakasa, Y.; Minoura, M.; Nakano, H.; Matano, Y., *Chem. Asian J.*, **2026**, 21(4), e70627, (DOI: 10.1002/asia.70627)

“Effects of Peripheral Substituents on the Optical and Electrochemical Properties of Dibenzo-5,10,15-triazaporphyrins” Kuwabara, K.; Sakamaki, U.; Tsutsumi, T.; Wakasa, Y.; Shimizu, S.; Minoura, M.; Kimura, Y.; Nakano, H.; Matano, Y., *Chem. Eur. J.*, **2025**, 31(66), e02463, (DOI: 10.1002/chem.202502463)

“Synthesis, Structure, and Reactivity of a 1-Stannavinylidene-NHC Complex: A Heavier Group-14 Analogue of Vinylidene” Asakawa, T.; Sugamata, K.; Minoura, M., *Chem. Eur. J.*, **2025**, 31(54), e02104, (DOI: 10.1002/chem.202502104)

“Air-Stable Radical Ion Pairs Formed from 20 π -Electron 5,15-Diazaporphyrinoids and Tetracyanoquinodimethane Derivatives” Ohtani, S.; Kaneko, M.; Shimizu, Y.; Minoura, M.; Furukawa, K.; Matano, Y., *Asian J. Org. Chem.*, **2025**, 14(6), e202500312, (DOI: 10.1002/ajoc.202500312)

“Phenothiazine-dioxide-based Cu-MOFs: preserving porosity through the incorporation of substituents into organic linkers” Sugamata, K.; Furukawa, R.; Amanokura, N.; Minoura, M., *Dalton Trans.*, **2025**, 54(22), 8813-8818, (DOI: 10.1039/d5dt00721f)

“Si(IV) complexes of 10,20-diaryl-5,15-diazaporphyrin and 5,10,20-triaryl-5,15-diazaporphyrinoids: Evaluation of charge effect on the optical, redox, and magnetic properties” Sasaki, K.; Murata, Y.; Suzuki, H.; Minoura, M.; Kitakado, R.; Kimura, Y.; Furukawa, K.; Nakano, H.; Matano, Y., *J Porphyrins Phthalocyanines*, **2025**, 29(3/4), 467-477, (DOI: 10.1142/s1088424625500397)

“Synthesis of a dilithiobutadiene bearing extremely bulky silyl substituents and its reactivity toward functionalized silanes” Munster K.; Kudo S.; Kuwabara T.; Shimamura E.; Furukawa S.; Yoshida Y.; Ishida S.; Iwamoto T.; Tanifuji K.; Ohki Y.; Minoura M.; Saito M., *Dalton Trans.*, **2025**, 54(10), (DOI: 10.1039/d4dt03537b)

“Sn(IV) Complexes of 5,10,15,20-Tetraaryl-5,15-diazaporphyrinoids: A Promising Platform for Evaluating the 20 π -Electron Antiaromaticity” Suzuki, H.; Minoura, M.; Furukawa, K.; Nakano, H.; Matano, Y., *Chem. Eur. J.*, **2025**, 31(9), e202404092, (DOI: 10.1002/chem.202404092)

“Synthesis of O- and N-substituted pentaiodobenzenes bearing σ -symmetric delocalized orbitals using site-selective nucleophilic aromatic substitution reactions” Takada, Y.; Minoura, M.; Furukawa, S.; Saito, M., *Chem. Lett.*, **2024**, 53(2), (DOI: 10.1093/chemle/upad040)

“2-Aryl-3H-1,3-benzazaphosphole Oxides: Synthesis, Optical Properties, and Excited State Intramolecular Proton Transfer” Nakagomi, H.; Murayama, N.; Takegami, R.; Fujii, K.; Kitakado, R.; Kimura, Y.; Minoura, M.; Nakano, H.; Matano, Y., *Chem. Eur. J.*, **2024**, 30(33), e202400807, (DOI: 10.1002/chem.202400807)

“Reactivity of a Linear 2-Germapropadiene with Acids, Ketones, and Amines” Sugamata, K.; Asakawa, T.; Minoura, M., *Chem. Asian J.*, **2024**, 19(12), e202400262, (DOI: 10.1002/asia.202400262)

“Extremely stable system of 1-haloselanyl-anthraquinones: experimental and theoretical investigations” Ogawa, N.; Suzuki, N.; Katsura, Y.; Minoura, M.; Nakanishi, W.; Hayashi, S., *Dalton Trans.*, **2024**, 53(24), 10099-10112, (DOI: 10.1039/d4dt00760c)

“A tin analogue of propadiene with cumulated C=Sn double bonds” Sugamata, K.; Asakawa, T.; Minoura, M., *Chem. Sci.*, **2024**, 15(19), 7072-7078, (DOI: 10.1039/d4sc00093e)

“Synthesis, structural analysis, and gas-adsorption properties of a dibenzothiophene-based hydroxamate/zinc metal-organic framework” Sugamata, K.; Kobayashi, S.; Shirai, A.; Amanokura, N.; Minoura, M., *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2024**, 97(3), (DOI: 10.1093/bulcsj/uoae017)

“Alkoxy-Functionalized Hydroxamate/Zinc Metal-Organic Frameworks and the Effects of Substituents and Acid Addition on Their Structures” Sugamata, K.; Zhang, Y.; Amanokura, N.; Shirai, A.; Minoura, M., *Inorg. Chem.*, **2024**, 63(5), 2454-2459, (DOI: 10.1021/acs.inorgchem.3c03438)

“Improved Synthesis of Free Bases of 5,10,15,20-Tetraaryl-5,15-diazaporphyrinoid for Conversion to Silicon(IV) Complexes” Suzuki, H.; Furukawa, K.; Minoura, M.; Nakano, H.; Matano, Y., *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2024**, 97(2), (DOI: 10.1093/bulcsj/uoad022)

“Phosphoramidate-Based Metal-Organic Frameworks for Effective Gas Adsorption” Sugamata, K.; Kobayashi, S.; Amanokura, N.; Shirai, A.; Minoura, M., *Chemistry*, **2024**, 30(31), e202400962, (DOI: 10.1002/chem.202400962)

“5-N,N-Diarylaminothiazoles with Electron-Accepting Groups and Their Application for the Detection of Hydrazine Hydrate” Murai, T.; Tanaka, N.; Takekoshi, K.; Hoshaku, M.; Minoura, M., *Eur. J. Org. Chem.*, **2023**, 27(3), e202301036, (DOI: 10.1002/ejoc.202301036)

“Zn-Based Metal-Organic Frameworks Using Triptycene Hexacarboxylate Ligands: Synthesis, Structure, and Gas-Sorption Properties” Sugamata, K.; Yamada, S.; Yanagisawa, D.; Amanokura, N.; Shirai, A.; Minoura, M., *Chem. Eur. J.*, **2023**, 29(64), e202302080, (DOI: 10.1002/chem.202302080)

“Synthesis, Structure, and Redox and Optical Properties of 5,10,15,20-Tetraaryl-5-azaporphyrinium Salts” Kudoh, Y.; Suzuki, E.; Ochiai, H.; Ise, K.; Kimura, Y.; Minoura, M.; Nakano, H.; Matano, Y., *Chem. Eur. J.*, **2023**, 29(61), e202302148, (DOI: 10.1002/chem.202302148)

“A Linear C:Ge:C Heteroallene with a Di-coordinated Germanium Atom” Sugamata, K.; Asakawa, T.; Hashizume, D.; Minoura, M., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2023**, 62(24), e202302836, (DOI: 10.1002/anie.202302836)

“Controlling the Flexibility of Carbazole-Based Metal-Organic Frameworks by Substituent Effects” Sugamata, K.; Shirai, A.; Minoura, M., *Chem. Eur. J.*, **2023**, 29(25), e202203442, (DOI: 10.1002/chem.202203442)

“Synthesis and Structural Analysis of Organic Cyclic Polyselenides Obtained from the Reaction of a Bissilylcarbenoid with Selenium” Sugamata, K.; Asakawa, T.; Minoura, M., *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2023**, 26(11), e202200780, (DOI: 10.1002/ejic.202200780)

“Two-Step Transesterification of Phosphates, Phosphorothioates, and Phosphonates with a Binaphthyl” Endo, C.; Inoue, Y.; Maruyama, T.; Minoura, M.; Murai, T., *Synthesis*, **2023**, 55(6), 934-944, (DOI: 10.1055/a-1948-3003)

“Development of porous coordination polymers for gas storage and separation materials” Sugamata, K.; Shirai, A.; Minoura, M., *Yuki Gosei Kagaku Kyokaiishi*, **2023**, 81(1), 46-52, (DOI: 10.5059/yukigoseikyokaishi.81.46)

“A zirconium-based metal-organic framework with dibenzothiophene linkers: synthesis, structural analysis, and gas-adsorption properties” Sugamata, K.; Kobayashi, S.; Amanokura, N.; Shirai, A.;

Minoura, M., *J. Coord. Chem.*, **2023**, 76(16-24), 1817-1824, (DOI: 10.1080/ 00958972.2023.2287970)

“A Novel Hydrogen-Bonded Organic Framework Constructed by Triptycene-2,3,6,7,14, 15-Hexacarboxylic Acid” Sugamata, K.; Yamada, S.; Yanagisawa, D.; Minoura, M., *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2023**, 96(9), 977-979, (DOI: 10.1246/bcsj.20230153)

III. 学会発表 (2025年度)

- 1) “ビス (ホスフィンアミド) 型配位子を有するユウロピウム(III)錯体の構造と発光特性” 山本亮・小林翔・岩永寛規・箕浦真生, 光化学討論会(ポスター発表, 2P68), 立教大学池袋キャンパス (東京) 2025年9月5日
- 2) “スルホン基で架橋したジアリールアミン配位子の合成とMOFへの応用” 古川璃子・菅又功・天野倉頁樹・箕浦真生, 第35回基礎有機化学討論会(ポスター発表, 1P062), 名古屋大学東山キャンパス (名古屋) 2025年9月9日
- 3) “拡張トリプチシル基を有するジハロスタンニルリチウムの合成と反応” 若狭優惟・箕浦真生, 第35回基礎有機化学討論会(ポスター発表, 1P071), 名古屋大学 東山キャンパス (名古屋) 2025年9月9日
- 4) “Crystal structure of fucoxanthin: resolving a 45-year-old challenge in memory of George M. Sheldrick” Wakasa Y.; Minoura M., AsCA2025 (ポスター発表, BP080), Taipei International Convention Center(Taiwan) 2025年12月2日
- 5) “From labile to crystallizable: integrating crystal engineering and kinetic stabilization via Alkyl-substituted Trp*” Wakasa Y.; Minoura M., AsCA2025 (口頭発表, RS2-5), Taipei International Convention Center(Taiwan) 2025年12月5日
- 6) “Fundamental Chemistry to the Usefulness: Examples of Triptycenes and Related Compounds” Minoura M., Polish Academy of Science (招へい特別講演) 2026年2月9日
- 7) “拡張トリプチシル基を有する安定なハロスタンニレン等価体の合成と反応性” 若狭優惟・箕浦真生, 日本化学会第106春季年会(口頭発表, [E]A1442-2pm), 日本大学理工学部 船橋キャンパス (船橋) 2025年3月18日
- 8) “ビス (ホスフィンアミド) 配位子を有するEu(III)錯体の発光特性における窒素上アルキル基の導入効果” 山本亮・小林翔・岩永寛規・箕浦真生, 日本化学会第106春季年会(口頭発表, [A]A1442-4pm), 日本大学理工学部 船橋キャンパス (船橋) 2025年3月20日

IV. 卒業研究・学位論文

拡張トリプチシル基を有する亜鉛化学種の合成
二価有機スズ化合物の合成を目的としたBL基へのスズ元素導入
新規架橋型ジアリールアミン系配位子の合成と MOFへの応用
拡張トリプチシル基を活用したジアルキルプレンビレンの反応性
ビス (ホスフィンアミド) 配位子を有する新規Eu(III)錯体の構造と発光特性
かさ高い置換基を有する複素環カルベンおよびシリレンの合成と反応
トリプチセン骨格を利用した α, β -不飽和セレネン酸の合成研究

V. 担当講義科目

有機化学 2、有機合成化学、化学の最前線、化学実験 A、化学実験 B、研究実験 1-2、輪講ゼミナール、学問の世界 B

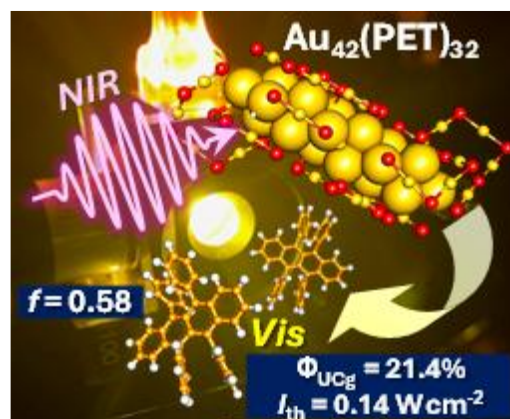
VI. その他

- ・ 大学基準協会、評価委員
- ・ 文部科学省、技術審査委員（科学技術学術政策局）
- ・ 文部科学省、事業企画評価委員
- ・ 国立青少年教育振興機構、事業委員
- ・ 日本科学振興協会、学生アイデアファクトリー 審査委員長
- ・ 日本化学会、*Bull. Chem. Soc. Jpn.* Associate Editor（有機化学・編集委員）
- ・ 日本化学会、*Chem. Lett.* Associate Editor（有機化学・編集委員）

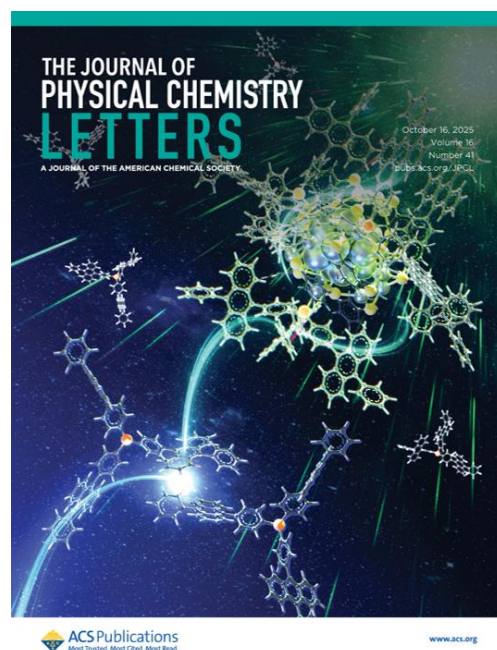
I. 最近の研究成果

“Au₄₂(PET)₃₂ Nanocluster Sensitizer Unlocks the Annihilator Potential of Rubrene, Enabling High-Performance NIR-to-Visible Photon Upconversion”M. Mitsui,* S. Takano,* T. Tsukuda,* *Angew. Chem., Int. Ed.* e23868 (2026). (DOI: 10.1021/acs.jpclett.4c03003)

Photon upconversion (UC) via triplet–triplet annihilation enables the conversion of near-infrared (NIR) photons into visible light, offering opportunities for solar energy harvesting, photocatalysis, and biophotonics. However, progress has been limited by the lack of triplet sensitizers capable of fully exploiting rubrene, the representative annihilator/emitter for NIR-to-visible UC. Here, we report Au₄₂(PET)₃₂ (**Au₄₂**; PET = 2-phenylethanethiolate), a highly anisotropic, needle-shaped gold nanocluster that unlocks the annihilator potential of rubrene, enabling high-performance NIR-to-visible UC. The **Au₄₂**/rubrene pair achieves record-setting UC quantum yields (Φ_{UC} , 50% maximum) of 16.5% (reabsorption-corrected quantum yield Φ_{UCg} of 21.4%) with a low threshold intensity (I_{th}) of 0.14 W cm⁻² under 808 nm excitation and 12.3% (Φ_{UCg} = 15.0%) under 936 nm excitation—over two orders of magnitude higher than previously reported values above 850 nm. Quantitative analysis revealed a high spin-statistical factor (f = 0.58) for rubrene, suggesting an attainable Φ_{UC} maximum of ~30% in rubrene-based systems. The remarkable performances arise from the unique electronic structure of **Au₄₂**, which combines strong NIR absorption with high visible transparency, minimizing losses of the S₁ annihilator and the UC photons. These findings establish **Au₄₂** as a benchmark sensitizer and exemplify a design principle for realizing highly efficient, low-threshold NIR-to-visible UC.

**“Photon Upconversion Enhanced by Ag₂₉ Nanocluster Sensitizers and Multifunctional P(DPA)₃ Acting as Triplet Mediator, Annihilator, and Emitter”**M. Mitsui,* Y. Miura, R. Oyaizu, T. Yoshinami, K. Kobayashi, *J. Phys. Chem. Lett.* **15**, 12257–12268 (2024). (DOI: 10.1021/acs.jpclett.4c03003)*Invited to Special Issue “Photophysics of Materials”, Selected as “Supplementary Journal Cover”*

The [Ag₂₉(BDT)₁₂]³⁻ nanocluster (Ag₂₉, BDT = 1,3-benzenedithiolate) is renowned for its high stability, photoluminescence, and ability to accommodate up to four phosphine compounds as secondary ligands. Herein, the multichromophoric phosphine derivative P(DPA)₃, bearing three 9,10-diphenylanthracene (DPA) units, was employed to serve triple roles: triplet-energy mediator ligand, annihilator, and emitter. By adding an excess amount of P(DPA)₃ to Ag₂₉, a solution was prepared containing [Ag₂₉(BDT)₁₂[P(DPA)₃]_n]³⁻ (Ag₂₉PDPA, n = 1–4) complexes coexisting with unbound (free) P(DPA)₃ molecules. This enabled efficient intra- and intermolecular triplet energy transfer from photoexcited Ag₂₉, first to the bound and then to the unbound P(DPA)₃. Under 532 nm excitation, the system achieved a green-to-blue UC internal quantum yield of 24.0% (48% normalized to the 100% maximum) and a significantly low threshold intensity of 2.0 mW cm⁻². Remarkably, this performance rivals that of the benchmark Pt(II)-octaethylporphyrin/DPA pair, establishing the Ag₂₉PDPA/P(DPA)₃ combination as a high-performing green-to-blue UC system.

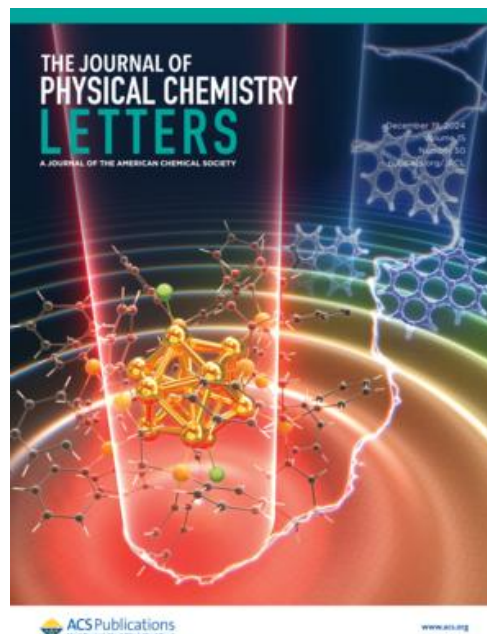


“Recent advances in understanding triplet states in metal nanoclusters: their formation, energy transfer, and applications in photon upconversion”

M. Mitsui,* *J. Phys. Chem. Lett.* **15**, 12257–12268 (2024). (DOI: 10.1021/acs.jpcllett.4c03003)

Invited to “Perspective”, Selected as “Supplementary Journal Cover”

Recent experimental findings, rapidly accumulating over the past few years, has revealed that in the electronic excited states of metal nanoclusters (MNCs) composed of noble metal atoms (e.g., Cu, Ag, or Au), triplet states are generated with remarkably high efficiency, exerting a pivotal influence over the photophysical properties of the MNCs, notably their photoluminescence characteristics. As a result, MNCs are increasingly recognized as promising luminescent nanomaterials that exhibit room-temperature phosphorescence and thermally activated delayed fluorescence. Furthermore, the significance of triplet-state-mediated energy transfer and charge transfer in intermolecular photophysical processes is gaining increasing recognition, particularly in the applications of MNCs as photosensitizers for singlet oxygen and organic molecular triplets. This Perspective focuses on recent advances in understanding of the formation and photophysics of triplet states in MNCs. Additionally, a brief overview is provided of a series of studies exploring the use of MNCs as triplet sensitizers for photon upconversion via triplet–triplet annihilation, and future prospects for this emerging application are discussed.

**“Triplet-Mediator Ligand-Protected Metal Nanocluster Sensitizers for Photon Upconversion”**

D. Arima, S. Hidaka, S. Yokomori, Y. Niihori, Y. Negishi, R. Oyaizu, T. Yoshinami, K. Kobayashi,*
M. Mitsui, M.* *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146, 16630–16638. (DOI: 10.1021/jacs.4c03635)

Selected as “Supplementary Journal Cover”

Triplet–triplet annihilation photon upconversion (TTA-UC) are attracting a great deal of attention as a viable approach to exploit unutilized wavelengths of light in solar-driven devices. Recently, ligand-protected metal nanoclusters have emerged as a compelling platform for serving as triplet sensitizers for TTA-UC. In this study, we developed an atomically precise, triplet-mediator ligand (TL)-protected metal nanocluster, $\text{Au}_2\text{Cu}_6(\text{S-Adm})_6[\text{P}(\text{DPA})_3]_2$ ($\text{Au}_2\text{Cu}_6\text{DPA}$). In $\text{Au}_2\text{Cu}_6\text{DPA}$, the excitation of the Au_2Cu_6 core rapidly generates a metal-to-ligand charge transfer state, followed by the formation of the long-lived triplet state (approximately 150 μs) at a DPA site in the TL. By combining $\text{Au}_2\text{Cu}_6\text{DPA}$ with a DPA annihilator, we achieved a red-to-blue upconversion quantum yield (Φ_{UC}) of $20.7 \pm 0.4\%$ (50% max.) with a low threshold excitation intensity of 36 mWcm^{-2} at 640 nm. This quantum yield almost reaches the maximum limit achievable using a DPA annihilator and establishes a record-setting value, outperforming previously reported nanocrystal and nanocluster sensitizers. Furthermore, strong upconversion emission based on a pseudo-first-order TTA process was observed under 1-sun illumination, indicating that the $\text{Au}_2\text{Cu}_6\text{DPA}$ sensitizer holds promise for applications in solar-energy-based systems



II. 発表論文リスト (2023-2025年度)

- 1) K. Iseri, S. Sekiya, H. Yamauchi, **M. Mitsui**, M. Nakamura,* K. Isozaki,* Hierarchical Architecture of Anisotropic Alkynyl-Protected Au₂₂ Nanoclusters Enables Accelerated Photo-/Thermo-Dual Catalysis toward Cross-Dehydrogenative Coupling, *J. Am. Chem. Soc.* (2026), *accepted for publication*.
- 2) H. Yamauchi, D. Arima, **M. Mitsui**,* Aggregation-induced structural clamping drives NIR photoluminescence switching in Au₂Cu₆ nanoclusters by suppressing El-Sayed-allowed intersystem crossing, *Chem. Commun.* **62**, 8905–8909 (2026). **Selected as “Outside Front Cover”**
- 3) H. Heo, J. Lee, Y. Kim, **M. Mitsui**,* W. Kim,* D. Lee,* Ultrafast Intersystem Crossing in Icosahedral-Core Metal Nanoclusters, *J. Am. Chem. Soc.* **148**, 12, 13317–13325 (2026).
- 4) **M. Mitsui**,* S. Takano,* T. Tsukuda,* Au₄₂(PET)₃₂ Nanocluster Sensitizer Unlocks the Annihilator Potential of Rubrene, Enabling High-Performance NIR-to-Visible Photon Upconversion, *Angew. Chem., Int. Ed.* e23868 (2026).
- 5) A. Akiyama, S. Hossain, S. Biswas, T. Shiraogawa, P. Zhao, D. Arima, T. Kawawaki, Y. Niihori, **M. Mitsui**, N. Ehara, Y. Negishi,* Ligand-Driven Structural Modulation and Enhanced Photoluminescence in High-Nuclearity Ag₅₆ Nanoclusters, *Aggregate*, **7**, e70270 (2026).
- 6) **M. Mitsui**,* Y. Miura, R. Oyaizu, T. Yoshinami, K. Kobayashi,* Photon Upconversion Enhanced by Ag₂₉ Nanocluster Sensitizers and Multifunctional P(DPA)₃ Acting as Triplet Mediator, Annihilator, and Emitter, *J. Phys. Chem. Lett.* **15**, 12257–12268 (2025).
Invited to Special Issue “Photophysics of Materials”; Selected as “Supplementary Journal Cover”
- 7) Y. Niihori, **M. Mitsui**,* Harnessing Metal Cluster Sensitizers for Triplet-Triplet Annihilation Photon Upconversion: Strategies for Performance Enhancement, *Chem. Phys. Rev.* **6**, 031301 (2025).
Invited to Special Topic “70 Years of Dexter Energy Transfer” Chosen as “Featured Article” of CPR; Featured as “Scilights (Science Highlight)”; Selected as “Outside Front Cover”
- 8) **M. Mitsui**,* Recent advances in understanding triplet states in metal nanoclusters: their formation, energy transfer, and applications in photon upconversion, *J. Phys. Chem. Lett.* **15**, 12257–12268 (2024).
Invited to “Perspective”; Selected as “Supplementary Journal Cover”
- 9) **M. Mitsui**,* Y. Miyoshi, D. Arima, Tailoring sensitization properties and improving near-infrared photon upconversion performance through alloying in superatomic molecular Au₂₅ nanoclusters, *Nanoscale* **16**, 14757–14765 (2024).
- 10) 三井正明, 「光エネルギーを保持する配位子で修飾した金属クラスター：その開発とフォトンアップコンバージョンへの応用」, 光アライアンス, 第 35 巻第 10 号, pp.14-19 (2024).
- 11) D. Arima, S. Hidaka, S. Yokomori, Y. Niihori, Y. Negishi, R. Oyaizu, T. Yoshinami, K. Kobayashi,* **M. Mitsui**,* Triplet-mediator ligand-protected metal nanocluster sensitizers for photon upconversion, *J. Am. Chem. Soc.* **146**, 16630–16638 (2024). **Selected as “Supplementary Journal Cover”**
- 12) **M. Mitsui**,* A. Uchida, Triplet properties and intersystem crossing mechanism of PtAg₂₈ nanocluster sensitizers achieving low threshold and efficient photon upconversion, *Nanoscale* **16**, 3053–3060 (2024).
- 13) K. Yoshida, D. Arima, **M. Mitsui**,* Dissecting triplet-state properties and intersystem crossing mechanism of the ligand-protected Au₁₃ superatom, *J. Phys. Chem. Lett.* **14**, 10967–10973 (2023). **Selected as “Supplementary Journal Cover”**

- 14) S. Biswas, S. Hossain, T. Kosaka, J. Sakai, D. Arima, Y. Niihori, **M. Mitsui**, D.-e. Jiang, S. Das, S. Wang, Y. Negishi, Nested Keplerian Architecture of $[\text{Cu}_{58}\text{H}_{20}(\text{SPr})_{36}(\text{PPh}_3)_8]^{2+}$ Nanocluster. *Chem. Commun.* **59**, 9336–9339 (2023). **Selected as “Outside Front Cover”**
- 15) D. Arima, **M. Mitsui**,* Structurally flexible Au-Cu alloy nanoclusters enabling efficient triplet sensitization and photon upconversion. *J. Am. Chem. Soc.* **145**, 6994–7004 (2023).
- 16) **三井正明***, 有馬大地, 内田惇木, 吉田航多, 荒居大和, 新堀佳紀, 「配位子保護貴金属クラスターにおける励起状態の三重項性と酸素消光」ナノ学会会報 **21(2)**, 61–69 (2023).

III. 学会発表リスト (2025年度)

- 1) 山内颯斗, **三井正明**, 「 Au_2Cu_6 クラスター内包有機結晶における三重項-三重項消滅アップコンバージョン」, ナノ学会第 24 回大会, 2026 年 5 月, 山口大学, **若手優秀ポスター発表賞、ACS Publications Outstanding Poster Award 受賞**
- 2) 細沢拓未, 久永虎徹, 高野慎二郎, 佃達哉, 小林健二, **三井正明**, 「二重項-三重項エネルギー移動に基づく 近赤外応答 Au_{25} 超原子ラジカル増感剤の創製」, ナノ学会第 24 回大会, 2026 年 5 月, 山口大学
- 3) 荻野恵美, 有馬大地, **三井正明**, 「配位子交換による Au_2Cu_6 クラスターの高効率な熱活性化遅延蛍光の誘起」, ナノ学会第 23 回大会, 2024 年 5 月, 都立大学
- 4) 山内颯斗, 有馬大地, **三井正明**, 「 Au_2Cu_6 クラスターにおける凝集誘起発光特性変化とその機構解明」, ナノ学会第 23 回大会, 2024 年 5 月, 都立大学
- 5) 三浦佑大, 海野功伎, 小林健二, **三井正明**, 「水溶性 Ag_{29} クラスターを増感剤に用いた水系フォトンアップコンバージョン」, 2025 年光化学討論会, 2025 年 9 月, 立教大学
- 6) 柳本幸希, **三井正明**, 「 $\text{Ag}_{15}\text{Cu}_{12}$ クラスター増感剤とアントラセン誘導体の組み合わせによる近赤外光アップコンバージョン」, 2025 年光化学討論会, 2025 年 9 月, 立教大学
- 7) **三井正明**, 高野慎二郎, 佃達哉, 「針状 Au クラスター増感剤による高効率近赤外-可視光アップコンバージョンの実現」, 2025 年光化学討論会, 2025 年 9 月, 立教大学
- 8) 荻野恵美, 海野功伎, 小林健二, **三井正明**, 「 Au_2Cu_6 クラスター増感剤と粘性発光体液体によるフォトンアップコンバージョン擬固体系の創製と評価」, 2025 年光化学討論会, 2025 年 9 月, 立教大学
- 9) Hayato, Yamauchi; Shion, Hidaka; Ryuichi, Oyaizu; Kenji, Kobayashi; **Masaaki, Mitsui**, “ Au_2Cu_6 Cluster-Embedded Anthracene-Based Crystals for Efficient Triplet-Triplet Annihilation Photon Upconversion”, 2025 年光化学討論会, 2025 年 9 月, 立教大学
- 10) 三浦佑大, 小柳津竜一, 吉波拓巳, 小林健二, **三井正明**, 「三重項エキシトンの配位子媒介による Ag_{29} クラスターの増感特性の顕著な向上とフォトンアップコンバージョン応用」, 第 19 回分子科学討論会, 2025 年 9 月, 広島

IV. 卒業研究・学位論文 (2024年度)

卒業論文:

「二重項-三重項エネルギー移動で駆動する近赤外応答型 Au_{25} 超原子ラジカル増感剤の創製」

「両親媒性ブロック共重合体ミセルを用いた近赤外発光性金属クラスターの水溶化と近赤外光-可視光アップコンバージョンへの展開」

「三重項媒介配位子保護Au₂Cu₆クラスター内包結晶による高性能フォトンアップコンバージョン」

修士学位論文：

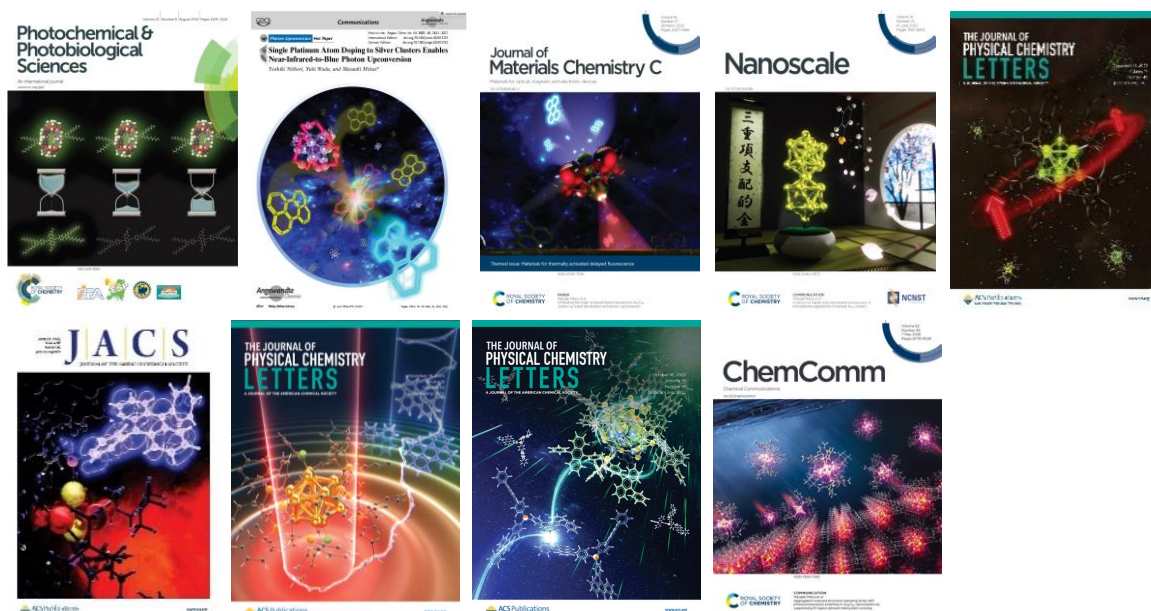
「配位子設計に基づくAg₂₉クラスターの三重項増感能およびフォトンアップコンバージョン特性の制御」

V. 講義担当科目（2024年度）

物理化学入門、光物理化学、化学の最前線、基礎化学実験、化学実験C、研究実験1,2、輪講（4年）、輪講1~4、卒業研究（4年）、特別研究1~3、輪講A, B、修士論文指導演習、特別研究指導物性解析

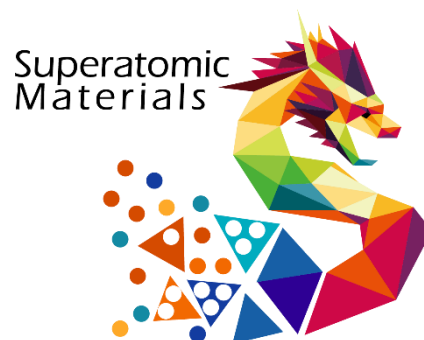
VI. その他

【国際学術論文誌に掲載されたカバーアート（立教大着任後）】



【進行中のプロジェクト】

文部科学省 科学研究費補助金 学術変革領域研究(A)「超原子マテリアル：人工原子を構成単位とした革新的物質の創出」（令和8~12年度、領域代表：佃達哉（東京大学））に、A02計画班 班長として三井が参画。



【プレスリリースなど】

☆「金量子ニードルで近赤外光を高輝度な可視光へ変換することに成功〜ルブレン発光体の潜在能力を全開放し、世界最高効率と低閾強度を達成〜」東大 佃研との共同研究（2026/2/17）

☆「金属クラスターを用いた光エネルギー変換技術の展望を示す総説論文が国際的注目を集める ー米AIP誌「Featured Article」および「Scilight」に選出ー」（2025/10/1）

☆「光エネルギーを保持する有機配位子で修飾した金属クラスターを開発し、太陽光照度で効率20%を超える赤色光-青色光アップコンバージョンを実現」(2024/6/5)
本成果は、アメリカ化学会の*J. Am. Chem. Soc*誌に掲載、表紙に選出。



☆ 当研究室の研究成果 (*J. Mater. Chem. C* 2022, 10, 4597) が、Advances in Engineering (AIE) 社のFeatured Papersに選出、AIEウェブサイトで紹介。



☆「金属クラスターを用いた近赤外—可視光変換」に世界で初めて成功 —立教大発の光アップコンバージョン材料を創製へ— (2021/2/18)
本成果はドイツ化学会の*Angewandte Chemie, International Edition*の*Communication*論文として掲載され、表紙とHot paperに選出。



【最近の学生・教員の受賞】

2026 年 ナノ学会第 24 回大会 若手優秀ポスター発表賞	山内
ACS Publications Outstanding Poster Award 受賞	山内
2025 年 化学科 卒業研究業績報告会優秀講演者賞	細沢、山内
2024 年 第 9 回分子科学国際学術賞	三井 正明
2024 年第 18 回分子科学討論会 分子科学会優秀ポスター賞	有馬
2024 年 ナノ学会第 22 回大会 若手優秀ポスター発表賞	有馬
2023 年 化学科 卒業研究業績報告会優秀講演者賞	三好
2023 年 第 17 回分子科学討論会 分子科学会優秀講演賞	有馬
2023 年 光化学討論会 優秀学生発表賞(ポスター)	有馬
2023 年 ナノ学会第 21 回大会 若手優秀ポスター発表賞 (2 名)	有馬、内田
2022 年 化学科 卒業研究業績報告会優秀講演者賞	吉田
2022 年 光化学討論会 優秀学生発表賞(ポスター)	有馬
2022 年 ナノ学会第 20 回大会 若手優秀ポスター発表賞	有馬
2022 年 日本化学会 第 72 回 進歩賞	新堀 佳紀 博士 (2017~2021 助教、2025 RA)



【学外委員・非常勤講師】

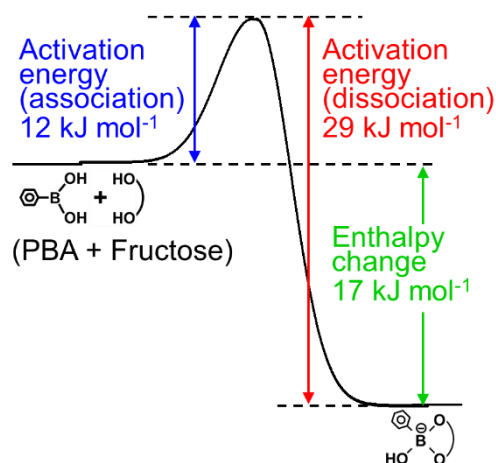
2022-2024年 分子科学会 運営委員会 監査
 2019, 2020年 独立行政法人日本学術振興会 特別研究員等審査専門委員および国際事業委員会書面審査委員・書面評価委員
 2016-2026年 文部科学省 科学技術政策研究所科学技術動向研究センター 専門調査員
 2017-2026年 埼玉大学大学院理工学研究科 連携教授
 2010年 東京工業大学 非常勤講師
 2016年 東京理科大学大学院 非常勤講師
 2018年 大阪市立大学大学院理学研究科 非常勤講師
 2026年 学習院大学 非常勤講師

I. 最近の研究成果

Moment analysis method using affinity capillary electrophoresis for thermodynamic study of intermolecular interactions

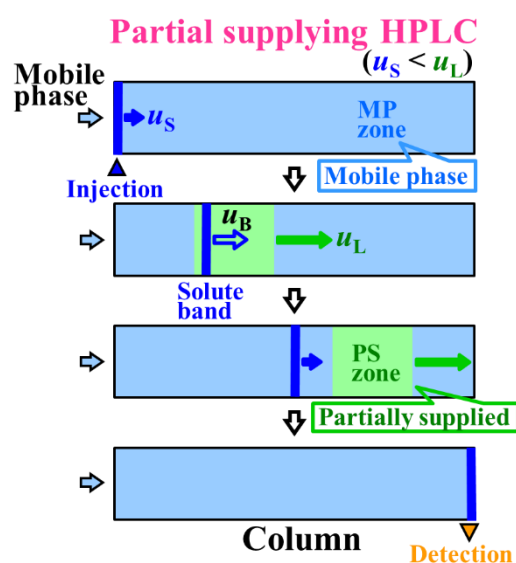
Miyabe, K.; Oya, M.; Morita, M. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2026**, 99, uoag030.

It was demonstrated that a moment analysis method using affinity capillary electrophoresis (ACE) is effective for thermodynamic study of intermolecular interactions. Thermodynamic characteristics of chemical reaction between phenylboronic acid (PBA) and fructose were studied as a concrete example. Elution peaks of PBA were measured by using ACE under different temperature conditions while changing the concentration of fructose in the mobile phase. The values of association equilibrium constant (K_A), association (k_a) and dissociation (k_d) rate constants of the reaction were determined by analyzing those of the first absolute and second central moments of the elution peaks of PBA on the basis of the moment theory. The Krug's method was used for the analysis of temperature dependence of K_A , k_a , and k_d to determine the values of the enthalpy change (ΔH), Gibbs free energy change (ΔG), entropy change (ΔS), and activation energy (E_a) relating to the reaction between PBA and fructose. Some intrinsic characteristics of the reaction of PBA with fructose were considered by analyzing the values of the thermodynamic parameters, i.e., ΔH , ΔG , ΔS , and E_a . It was demonstrated that the moment analysis method using ACE is effective for the study of intermolecular interactions from thermodynamic points of view.

**Fundamentals of Partial-Supplying High-Performance Liquid Chromatography for Studying Intermolecular Interactions**

Miyabe, K.; Yoshikawa, A. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2025**, 64, 21251-21263.

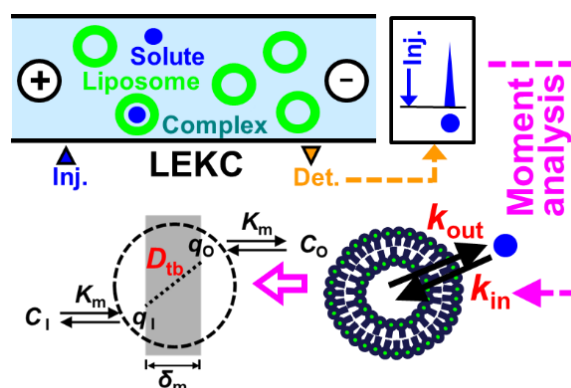
Fundamental studies concerning partial supplying high-performance liquid chromatography (HPLC) were conducted to apply it to the analysis of intermolecular interactions. Because it is a novel experimental method, moment equations necessary for analyzing chromatographic data measured by partial supplying HPLC were systematically developed with considering two different types of intermolecular interactions between one solute molecule and plural ligand molecules and between plural solute molecules and one ligand molecule. Simulated partial supplying HPLC experiments were conducted by changing the methanol content between the mobile phase solvent and partially supplied one. The values of first absolute and second central moments of solute peaks estimated on the basis of chromatographic theory agreed with their experimental data. Spreading of partially supplied zone due to diffusion phenomena seems to little provide a significant error to the analysis of partial supplying HPLC behavior. Theoretical considerations for the broadening of partially supplied zone provided the same conclusion.



Determination of Permeability and Transbilayer Diffusion Coefficient across Lipid Bilayers of Liposomes by Using Capillary Electrophoresis with Moment Analysis Theory

Miyabe, K.; Inaba, S. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2025**, 64, 18354-18364.

A method was developed for experimental determination of transbilayer diffusion coefficient (D_{tb}) of solute molecules across lipid bilayers of liposomes. It consists of two steps, i.e., experimental determination of lipid membrane permeability and calculation of D_{tb} . At first, lipid membrane permeability is determined by analyzing elution peak profiles measured by liposome electrokinetic chromatography (LEKC), in which liposomes themselves are used as pseudo-stationary phases. Then, the value of D_{tb} is calculated from that of the lipid membrane permeability on the basis of the solubility diffusion theory. The moment analysis method with LEKC experiments is effective for understanding the characteristics and mechanism of transverse solute diffusion across lipid bilayers because a wide range of values of transbilayer diffusion coefficient can be determined by the method under various conditions. It was considered how the value of D_{tb} is correlated with the number of carbon atoms in the alkyl chains of phospholipids.



II. 発表論文リスト(2023-2025年度)

- 1) Miyabe, K.; Oya, M.; Morita, M. Moment analysis method using affinity capillary electrophoresis for thermodynamic study of intermolecular interactions. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2026**, 99, uoag030. <https://doi.org/10.1093/bulcsj/uoag030>
- 2) Miyabe, K.; Yoshikawa, A. Fundamentals of Partial-Supplying High-Performance Liquid Chromatography for Studying Intermolecular Interactions. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2025**, 64, 21251-21263. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5c03086>
- 3) Miyabe, K.; Inaba, S. Determination of Permeability and Transbilayer Diffusion Coefficient across Lipid Bilayers of Liposomes by Using Capillary Electrophoresis with Moment Analysis Theory. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2025**, 64, 18354-18364. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5c00066>
- 4) Miyabe, K.; Sugiyama, Y. Moment analysis of intermolecular interactions by using affinity capillary electrophoresis. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2025**, 98, uoaf113. <https://doi.org/10.1093/bulcsj/uoaf113>
- 5) Miyabe, K. Development of analytical functions with high-performance liquid phase separation systems on the basis of the moment theory. *Anal. Sci.* **2025**, 41, 1269-1287. <https://doi.org/10.1007/s44211-025-00821-w>
- 6) Miyabe, K.; Ito, U. Moment Analysis of Solute Permeation Kinetics at the Interface of Spherical Molecular Aggregates by Using Partial Supplying High-Performance Liquid Chromatography. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2025**, 64, 1241-1251. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c03661>
- 7) Miyabe, K.; Hiyama, K. Moment analysis of intermolecular interactions between plural solute molecules and one ligand molecule by means of high-performance liquid chromatography. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2025**, 98, uoaf024. <https://doi.org/10.1093/bulcsj/uoaf024>

- 8) Miyabe, K.; Sakai, M.; Inaba, S. Moment analysis method for the determination of permeation kinetics of coumarin at lipid bilayers of liposomes by using capillary electrophoresis. *Electrophoresis* **2024**, *45*, 1885-1894. <https://doi.org/10.1002/elps.202400100>
- 9) Miyabe, K.; Ito, U. Moment analysis method for determination of rate constants of solute permeation across interface of spherical molecular aggregates by means of high-performance liquid chromatography. *J. Chromatogr. A* **2024**, *1730*, 465160. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2024.465160>
- 10) Miyabe, K.; Oya, M.; Imaizumi, M. Moment analysis by affinity capillary electrophoresis for study of reaction kinetics between phenylboronic acid and monosaccharides. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2024**, *97*, uoae104. <https://doi.org/10.1093/bulcsj/uoae104>
- 11) Miyabe, K.; Ishitobi, A.; Hiyama, K.; Kubotani, F. Moment Analysis Method for Measurement of Reaction Equilibrium and Rate Constants by Using High Performance Liquid Chromatography. *Anal. Chem.* **2024**, *96*, 4553-4561.
- 12) Miyabe, K.; Umeda, M.; Inaba, S.; Senoo, S. Analysis of Mass Transfer Kinetics at Lipid Bilayer Membranes of Liposome by Means of Electrokinetic Chromatography and Moment Theory. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2024**, *63*, 2822-2830.
- 13) Miyabe, K.; Inaba, S.; Umeda, M. A Study on Attempt for Determination of Permeation Kinetics of Coumarin at Lipid Bilayer of Liposomes by Using Capillary Electrophoresis. *J. Chromatogr. A* **2023**, *1687*, 463691.

III. 学会発表(2025年度)

1) 宮部寛志、稲葉隼汰

リポソーム脂質二分子膜における膜透過係数および拡散係数の測定
日本分析化学会第85回分析化学討論会 (2025)

2) 宮部寛志、伊藤佑馬

部分供給高速液体クロマトグラフィーによる球状分子集合体界面における物質透過速度のモーメント解析
日本分析化学会第74年会 (2025)

IV. 卒業研究・学位論文(2025年度)

- ・ コレステロール添加リポソームの脂質二分子膜における物質透過現象のモーメント解析
- ・ リポソーム脂質二分子膜における物質透過現象のモーメント解析
- ・ 逆相高速液体クロマトグラフィーによる包接反応 (ジベンゾ - 18 - クラウン - 6 - カリウムイオン) のモーメント解析
- ・ 界面活性剤ミセル界面における物質透過現象の解析

V. 担当講義課目(2025年度)

分析化学入門、分析化学2、化学実験A、化学実験B、化学実験C、化学の最前線、研究実験2、現代化学の成果と社会生活（セカンドステージ大学科目）

VI. その他

- ・ 作業環境測定士登録講習講師（公益社団法人日本作業環境測定協会）
- ・ 総合精度管理委員会委員（公益社団法人日本作業環境測定協会）
- ・ 受験準備講習講師（公益社団法人日本作業環境測定協会）

I. 最近の研究成果

"Automatic detection of interacting carbonyl oxygens in peptide bond for the fragment molecular orbital method"

R. Yoshine, H. Doi, K. Okuwaki, and Y. Mochizuki*, *Chemistry Letters*, **55** (2026) upaf238-1-4. Open Access Paper

<<https://academic.oup.com/chemlett/article/55/1/upaf238/8385125>>

The fragment molecular orbital (FMO) method has become an important tool in theoretical drug design and biophysical chemistry, as it enables detailed analysis of interactions among molecular fragments. However, interactions involving peptide bond carbonyl oxygens require particular attention, since the fragment molecular orbital fragmentation is not performed at the peptide bond, leading to shifts in residue assignment. Such inconsistencies can present difficulties not only for researchers new to fragment molecular orbital, but also for automated data processing. To address this issue, we have developed a Python-based script tool (named SARASA) that automatically detects and alerts residue shifts.

"Prediction of quantitative interaction energy from low-cost FMO calculation by machine learning"

H. Doi, R. Yoshine, S. Matsuoka, K. Okuwaki, and Y. Mochizuki*, *Japanese Journal of Applied Physics*, **64** (2025) 077001-1-5. Open Access Paper

<<https://iopscience.iop.org/article/10.35848/1347-4065/ade8c5>>

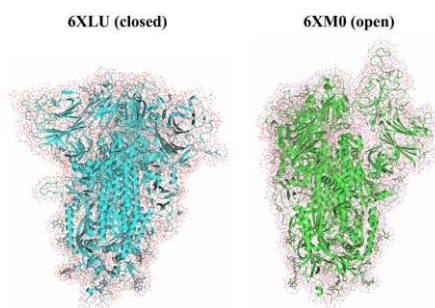
In our previous report [H. Doi et al., *JJAP* 62, 070901 (2023)], we presented a machine learning-based approach to reduce the overall cost of fragment molecular orbital (FMO) calculations from which the effective interaction parameters for dissipative particle dynamics are derived. The corresponding protocol has been used in several applications, but in some cases a loss of accuracy has been observed. To address this issue, the additional descriptor based on the low-cost FMO calculation has been introduced and successfully applied to the nitrobenzene-hexane system. Its improved applicability has also been tested for inter-residue interactions of Chignolin.

"Large-scale FMO-MP2 calculations of the spike protein droplet model"

H. Doi, T. Nakano, K. Sakakura, K. Akisawa, K. Okuwaki, Y. Hirano, E. Yamamoto, K. Yasuoka, S. Ohshima, T. Katagiri, and Y. Mochizuki*, *Journal of Computational Chemistry*, **46** (2025) e70052-1-6. Open Access Paper.

<<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/jcc.70052>>

The spike protein of SARS-CoV-2 is a challenging target for theoretical approaches. Here we report a benchmark calculation of the spike protein droplet model by the fragment molecular orbital (FMO) at the second-order Møller-Plesset perturbation (MP2) level on the supercomputer Fugaku. One hundred structure samples from molecular dynamics (MD) simulations were used for both the closed and open forms of this protein (PDB IDs 6XLU and 6XM0 respectively). The number of total fragments is about 20,000, and the job time per structure was about 2 h on 8 racks of Fugaku.



II. 発表論文リスト (2023-2025 年度)

"Residue-Resolved Dynamically Averaged Interaction Analysis of Direct Factor Xa Inhibitors by MD-FMO Combination Calculations", R. Yoshine, Y. Hirano, H. Doi, S. Kitahara, K. Akisawa, K. Okuwaki, E. Yamamoto, K. Yasuoka, and Y. Mochizuki*, J. Comp.-Aided Mol. Design, 40 (2026) Art. No. 132-1-15.

"DPD simulation and FMO interaction analysis for electropore generated by voltage application on POPC membrane", K. Okuwaki, R. Nakajima, H. Doi, K. Sumitomo, and Y. Mochizuki*, Jpn. J. App. Phys., 65 (2026) 090903-1-4.

"Automatic detection of interacting carbonyl oxygens in peptide bond for the fragment molecular orbital method", R. Yoshine, H. Doi, K. Okuwaki, and Y. Mochizuki*, Chem. Lett., 55 (2026) upaf238-1-4.

"Concurrent processing of VQE-UCCSD calculations with the FMO scheme", H. Doi, K. Sugisaki, T. Nakano, T. Katagiri, and Y. Mochizuki*, Chem. Lett., 54 (2025) upaf145-1-6.

"Prediction of quantitative interaction energy from low-cost FMO calculation by machine learning", H. Doi, R. Yoshine, S. Matsuoka, K. Okuwaki, and Y. Mochizuki*, Jpn. J. Appl. Phys., 64 (2025) 077001-1-5.

"Extension of the K-orbital method and its demonstration in conjunction with spin-adapted large-scale parallelized CASCI", K. Tanaka*, T. Ishikawa, and Y. Mochizuki, Chem. Lett., 54 (2025) upaf112-1-4.

"Feature vectorization of microphase-separated structures in polymeric materials using dissipative particle dynamics and persistent homology for machine learning applications", Y. Higashi, K. Okuwaki, Y. Mochizuki, T. Fujigaya, and K. Kato*, Dig. Discov., 4 (2025) 1339-1351.

"FMO-based interaction analysis on DEET/icaridin - AgamOBP1 complex", K. Akisawa, Y. Sakuma, A. Tsukamoto, H. Doi, K. Okuwaki, Y. Hirano, E. Yamamoto, K. Yasuoka, and Y. Mochizuki*, Chem. Lett., 54 (2025) upaf030-1-5.

"Large-scale FMO-MP2 calculations of the spike protein droplet model", H. Doi, T. Nakano, K. Sakakura, K. Akisawa, K. Okuwaki, Y. Hirano, E. Yamamoto, K. Yasuoka, S. Ohshima, T. Katagiri, and Y. Mochizuki*, J. Comp. Chem., 46 (2025) e70052-1-6.

"Acceleration of Environmental Electrostatic Potential Using Cholesky Decomposition with Adaptive Metric (CDAM) for Fragment Molecular Orbital-based Molecular Dynamics (FMO-MD) Simulation", T. Nakano*, Y. Komeiji, Y. Okiyama, and Y. Mochizuki, J. Comp. Chem. Jpn. Intern. Ed., 10 (2024) Article ID: 2023-0038-1-8.

"Geometry Optimization using the Frozen Domain and Partial Dimer Approach with the Fragment Molecular Orbital Method: Implementation, Benchmark, and Application for Ligand-Binding Site of Proteins", K. Okuwaki, N. Watanabe, K. Kato, C. Watanabe, N. Nakayama, A. Kato, Y. Mochizuki, T. Nakano, T. Honma, and K. Fukuzawa*, J. Chem. Inform. Model., 64 (2024) 9449-9458.

"Size-consistency and orbital-invariance issues revealed by VQE-UCCSD calculations with the FMO scheme", K. Sugisaki*, T. Nakano, and Y. Mochizuki, J. Comp. Chem., 45 (2024) 2204-2213. - Top viewed article of this journal - certificated 2026/5/15.

"DPD simulation to reproduce lipid membrane microdomains based on fragment molecular orbital

calculations", H. Doi*, Y. Osada, Y. Tachino, K. Okuwaki, M. W. S. Goh, R. Tero, and Y. Mochizuki, Appl. Phys. Express, 17 (2024) 055001-1-5.

"Towards tailoring hydrophobic interaction with uranyl(VI) oxygen for C-H activation", S. Tsushima*, J. Kretzschmar, H. Doi, K. Okuwaki, M. Kaneko, Y. Mochizuki, and K. Takao, Chem. Comm., 60 (2024) 4769-4772.

"Enhancement of energy decomposition analysis in fragment molecular orbital calculations", S. Matsuoka, S. Sakakura, Y. Akinaga, K. Akisawa, K. Okuwaki, H. Doi, and Y. Mochizuki*, J. Comp. Chem., 45 (2024) 898-902.

"Prediction of Binding Pose and Affinity of Nelfinavir, a SARS-CoV-2 Main Protease Repositioned Drug, by Combining Docking, Molecular Dynamics, and Fragment Molecular Orbital Calculations", Y. Handa, K. Okuwaki, Y. Kawashima, R. Hatada, Y. Mochizuki, Y. Komeiji, S. Tanaka, T. Furuishi, E. Yonemochi, T. Honma, and K. Fukuzawa*, J. Phys. Chem. B, 128 (2024) 2249-2265.

"Development of Reverse Mapping System Bridging Dissipative Particle Dynamics and Fragment Molecular Orbital Calculation", K. Okuwaki, H. Doi, T. Ozawa, and Y. Mochizuki*, Jpn. J. Appl. Phys., 62 (2023) 110902-1-4.

"Dissipative particle dynamics simulation for peptoid nanosheet with non-empirical parameter set", Y. Tachino, K. Okuwaki, H. Doi, K. Akisawa, and Y. Mochizuki*, Jpn. J. Appl. Phys., 62 (2023) 090902-1-6.

"Machine learning to improve efficiency of non-empirical interaction parameter for dissipative particle dynamics (DPD) simulation", H. Doi*, S. Matsuoka, K. Okuwaki, R. Hatada, S. Minami, R. Suhara, and Y. Mochizuki, Jpn. J. Appl. Phys., 62 (2023) 070901-1-6.

"Bifurcated hydrogen bonds in a peptide crystal unveiled by X-ray diffraction and polarized Raman spectroscopy", K. Motai, N. Koishihara, T. Narimatsu, H. Ohtsu, M. Kawano, K. Akisawa, K. Okuwaki, T. Mori, J.-S. Kim, Y. Mochizuki, and Y. Hayamizu*, Cryst. Growth Des., 23 (2023) 4556-4561&6988.

"Practical computational chemistry course for a comprehensive understanding of organic, inorganic, and physical chemistry: from molecular interactions to chemical reactions", N. Kuroki, Y. Mochizuki, and H. Mori*, J. Chem. Educ., 100 (2023) 647-654.

"Bayesian phase difference estimation algorithm for direct calculation of fine structure splitting: quantum simulation of relativistic quantum chemistry", K. Sugisaki*, V. S. Prasanna, S. Ohshima, T. Katagiri, Y. Mochizuki, and B. P. Das, Electr. Struct., 5 (2023) 035006-1-10.

"Lattice folding simulation of peptide by quantum computation", R. Saito, K. Okuwaki, Y. Mochizuki*, R. Nagai, T. Kato, K. Sugisaki, and Y. Minato, J. Comp. Chem. Jpn. Intern. Ed., 9 (2023) ID: 2022-0036.

"フラグメント分子軌道法のための水のクラスタリング法の開発"(査読有), 土居英男*, 望月祐志, J. Comp. Chem. Jpn., 出版承諾済.

"FMO 相互作用解析 - MD 法と連携した動的解析"(依頼), 田中成典*, 福澤薫, 望月祐志, 現代化学, 663(2026 年 6 月号), 55-58.

"FMO プログラムと高速処理 - 超並列計算と GPU への対応"(依頼), 中野達也, 坂倉耕太, 望月祐志*, 現代化学, 662(2026 年 5 月号), 51-54.

"フラグメント分子軌道法とは?"(依頼), 望月祐志*, 田中成典, 福澤薫, 現代化学, 661(2026 年 4 月号), 45-48.

"FMO プログラム ABINIT-MP の整備状況 2025"(査読有), 望月祐志*, 中野達也, 坂倉耕太, 土居英男, 奥脇弘次, 福澤薫, 加藤季広, 成瀬彰, 星野哲也, 大島聡史, 滝沢寛之, 中島研吾, 片桐孝洋, J. Comp. Chem. Jpn., 25 (2026) 7-14.

"フラグメント分子軌道法プログラム ABINIT-MP の GPU による高速化", 中野達也*, 坂倉耕太, 成瀬彰, 片桐孝洋, 星野哲也, 大島聡史, 中島研吾, 石川岳志, 望月祐志, RIST NEWS No. 71, (2025). 32-43 <https://www.rist.or.jp/rnews/71/ristnews_71.html>.

"FMO 法の相互作用情報を用いた相分離シミュレーションとの連携"(査読有), 奥脇弘次*, 土居英男, 小沢拓, 望月祐志, J. Comp. Chem. Jpn., 23 (2024) 105-114.

"ABINIT-MP プログラムの現状と今後"(査読有), 望月祐志*, 中野達也, 坂倉耕太, 土居英男, 奥脇弘次, 加藤季広, 滝沢寛之, 大島聡史, 星野哲也, 片桐孝洋, J. Comp. Chem. Jpn., 23 (2024) 85-97.

"FMO DB からのデータ取得用 Python スクリプトの開発"(査読有), 松岡壮太, 柿沼紗也果, 奥脇弘次, 土居英男, 望月祐志*, J. Comp. Chem. Jpn., 23 (2024) 45-49.

"フラグメント分子軌道計算による開殻・多参照の量子系の扱い", 望月祐志*, 中野達也, 坂倉耕太, 杉崎研司, 田中成典, 計算工学, 29 (2024) 4813-4817.

"FMO プログラム ABINIT-MP の整備状況 2023"(査読有), 望月祐志*, 中野達也, 坂倉耕太, 奥脇弘次, 土居英男, 加藤季広, 滝沢寛之, 成瀬彰, 大島聡史, 星野哲也, 片桐孝洋, J. Comp. Chem. Jpn., 23 (2024) 4-8.

ネクスト「富岳」向けの"計算科学ロードマップ 2023", 望月祐志*, FMO 計算関係の執筆と取り纏め, 2023/12/26 公開, <<https://cs-forum.github.io/roadmap-2023/>>.

"タンパク質に関する FMO-DPD シミュレーション用パラメータ算定と試行"(査読有), 太刀野雄介, 土居英男, 奥脇弘次, 平野秀典, 望月祐志*, J. Comp. Chem. Jpn., 22 (2023) 15-17.

"「富岳」時代のフラグメント分子軌道計算", 望月祐志*, 「化学」, 2023 年 8 月号, 12-15.

"量子アプリケーション", 杉崎研司*, 望月祐志, 映像情報メディア学会誌, 77 (2023) 43-48.

III. 学会発表 (2025 年度)

"タンパク質のアミノ酸間の相互作用の FMO 計算と機械学習による効率化"(口頭) 土居英男*, 芳根僚平, 松岡壮太, 奥脇弘次, 望月祐志, 第 30 回計算工学講演会, 大宮, 2025/6/4.

"QUBO/HOBO 形式の量子シミュレーションによるタンパク質の格子モデルの畳み込み"(口頭) 豊田信太郎, 安田翔也, 土居英男, 奥脇弘次, 太刀野雄介, 湊雄一郎, 杉崎研司, 望月祐志*, 第 30 回計算工学講演会, 大宮, 2025/6/5.

"FMO 法を用いた χ パラメータ算定の改良とオリゴマー系への展開"(口頭) 奥脇弘次*, 馬場剛史, 土居英男, 小沢拓, 望月祐志, 第 30 回計算工学講演会, 大宮, 2025/6/5.

"FMO プログラム ABINIT-MP の GPU 化と性能評価"(口頭) 坂倉耕太*, 望月祐志, 中野達也, 成

瀬彰, 大島聡史, 星野哲也, 片桐孝洋, 第 30 回計算工学講演会, 大宮, 2025/6/6.

"Geometry Optimization with HF-D2 based on Fragment Molecular Orbital Method" (Poster) S. Miyakawa*, N. Watanabe, N. Nakayama N, K. Okuwaki, K. Kato, C. Watanabe, Y. Mochizuki, T. Nakano, and K. Fukuzawa, WATOC2025, Oslo, 2025/6/24.

"量子化学計算に基づく生体分子の相挙動解析手法の開発と応用" (口頭) 奥脇弘次*, 土居英男, 小沢拓, 望月祐志, 第 35 回バイオ・高分子シンポジウム, 東京, 2025/7/31.

"FMO-DPD シミュレーションによるタイヤゴム中のシリカ粒子分散剤の解析" (ポスター) 平塚慧大*, 近藤海斗, 太刀野雄介, 土居英男, 奥脇弘次, 望月祐志, 第 35 回バイオ・高分子シンポジウム, 東京, 2025/7/31.

"AlphaFold の生成構造の FMO 相互作用解析による検証" (ポスター) 奥谷星太郎*, 新井大貴, 芳根僚平, 土居英男, 望月祐志, 第 35 回バイオ・高分子シンポジウム, 東京, 2025/7/31.

"FMO 相互作用エネルギーのサロゲートモデリングの試み" (ポスター) 芳根僚平*, 土居英男, 松岡壮太, 奥脇弘次, 望月祐志, 第 35 回バイオ・高分子シンポジウム, 東京, 2025/7/31.

"PPAR γ と MAOB に対するチアゾリン系リガンドの結合に関する FMO 相互作用解析" (ポスター) 新井大貴*, 土居英男, 奥脇弘次, 平野秀典, 山本詠士, 泰岡顕治, 海東和麻, 山西芳裕, 望月祐志, 第 35 回バイオ・高分子シンポジウム, 東京, 2025/7/31.

"脂質二重膜-イオン配位構造の塩濃度応答に対する水中 XAS と物性評価" (口頭) 金城ゆう*, 長坂将成, 奥脇弘次, 望月祐志, 手老龍吾, 応用物理学会秋期年会 2025, 名古屋, 2025/9/8.

"タンパク質の FMO 計算結果の解析における残基帰属の自動化の取り組み" (口頭) 芳根僚平*, 土居英男, 奥脇弘次, 望月祐志, 応用物理学会秋期年会 2025, 名古屋, 2025/9/8.

"新世代 GPU 環境における積分計算の初期検討" (ポスター) 中野達也*, 坂倉耕太, 成瀬彰, 星野哲也, 大島聡史, 中島研吾, 片桐孝洋, 石川岳志, 望月祐志, 分子科学討論会 2025, 広島, 2025/9/9.

"VQE-UCCSD/FMO 計算の『不老』Type II での同時並行処理" (依頼講演: オンライン) 望月祐志*, 土居英男, 杉崎研司, 中野達也, 片桐孝洋, 第 6 回スーパーコンピュータ「不老」ユーズ会, 名古屋, 2025/9/11.

"FMO プログラム ABINIT-MP の整備状況 2025" (口頭) 望月祐志*, 中野達也, 坂倉耕太, 土居英男, 奥脇弘次, 福澤薫, 加藤季広, 成瀬彰, 星野哲也, 大島聡史, 滝沢寛之, 中島研吾, 片桐孝洋, 日本コンピュータ化学会 2025 年秋季年会, 岐阜, 2025/11/7.

"Quantum-Chemical Evaluation of χ Parameters By Using Fmo Method and Its Integration with Phase Separation Simulations" (Poster) K. Okuwaki*, H. Doi, T. Ozawa, and Y. Mochizuki, 2025 AIChE Annual Meeting, Boston USA, 2025/11/4.

"グラフェンシートに吸着するアミノ酸やペプチドの FMO-DPD シミュレーション" (口頭) 新井大貴*, 土居英男, 平塚慧大, 奥脇弘次, 望月祐志, 2025 年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会 合同討論会, 2025/12/1.

"グラフェンシートに吸着するアミノ酸やペプチドの FMO-DPD シミュレーション" (ポスター) 平塚慧大*, 新井大貴, 土居英男, 奥脇弘次, 望月祐志, 第 63 回高分子と水に関する討論会, 2025/12/12, 東京.

"脂質二重膜界面におけるイオン配位構造の水中 X 線吸収スペクトル計測とその理論的検証" (口頭) 金城ゆう*, 長坂将成, 奥脇弘次, 望月祐志, 手老龍吾, 第 25 回 日本表面真空学会中部支部学術講演会, 2025/12/13, 名古屋, 発表奨励賞獲得.

"Application of the Point-Charge Approximation in the Fragment Molecular Orbital Calculations for Metal-Containing Biomolecules" (Poster) S. Miyakawa*, T. Nakano, T. Miyagishi, K. Okuwaki, Y. Mochizuki, C. Watanabe, K. Kato, and K. Fukuzawa, Pacificchem2025, Honolulu, 2025/12/19.

"量子化学計算プログラム ABINIT-MP における MP2 計算の GPU 高速化" (口頭) 坂倉耕太*, 中野達也, 望月祐志, 大島聡史, 星野哲也, 片桐孝洋, 情報処理学会第 88 回全国大会, 松山, 2026/3/8.

"SCOP2 データベースに基づくタンパク質内相互作用エネルギーの予測" (口頭) 土居英男*, 芳根僚平, 高谷大輔, 福澤薫, 森義治, 加藤幸一郎, 田中成典, 奥脇弘次, 望月祐志, 応用物理学会春期年会 2026, 東京, 2026/3/15. hp250014

"インフルエンザウイルスのヘマグルチニンの変異に関する FMO 相互作用解析" (口頭) 奥谷星太郎*, 新井大貴, 芳根僚平, 土居英男, 平野秀典, 山本詠士, 泰岡顕士, 田中成典, 望月祐志, 応用物理学会春期年会 2026, 東京, 2026/3/16.

"SARS-CoV-2 スパイクタンパク質の三量体相互作用解析" (口頭) 芳根僚平*, 土居英男, 奥脇弘次, 山本詠士, 平野秀典, 泰岡顕治, 田中成典, 望月祐志, 応用物理学会春期年会 2026, 東京, 2026/3/16.

"グラフェンシートに吸着するアミノ酸やペプチドの FMO-DPD シミュレーション: 基底関数と F-Ph の影響評価" (口頭) 新井大貴*, 平塚隼大, 土居英男, 奥脇弘次, 早水裕平, 望月祐志, 応用物理学会春期年会 2026, 東京, 2026/3/16.

"グラフェンシートに吸着するアミノ酸やペプチドの FMO-DPD シミュレーション: 格子モデルと水中・真空条件の比較" (口頭) 平塚隼大*, 新井大貴, 土居英男, 奥脇弘次, 早水裕平, 望月祐志, 応用物理学会春期年会 2026, 東京, 2026/3/16.

"MD-FMO 連携計算の最近の応用事例" (ポスター) 望月祐志*, 小野寺光海, 出家朋花, 中村友紀, 奥谷星太郎, 新井大貴, 芳根僚平, 平野秀典, 山本詠士, 泰岡顕治, 奥脇弘次, 土居英男, 応用物理学会春期年会 2026, 東京, 2026/3/17.

IV. 卒業研究・学位論文 (2025 年度)

助教の土居英男氏との共同教育にて、2025 年度は 4 年次生の 6 名が、

- ・ 散逸粒子動力学法を用いた高分子の界面の構造・物性解析
- ・ 分子間相互作用エネルギー予測にむけたの記述子の開発
- ・ ER と環境ホルモン類の複合体の MD-FMO 相互作用解析
- ・ CRISPR/Cj-CAS9 系の MD-FMO 相互作用解析
- ・ RdRp と T1106 阻害剤の複合体の MD-FMO 相互作用解析
- ・ 化学系企業における生成系 AI の活用事例の調査

の卒業研究を行って卒業され、また修士 2 年次生の 2 名が、

- ・ FMO 計算に基づくドラッグリポジショニングと分子シミュレーションの研究
- ・ FMO 計算の相互作用解析を支援するツール開発とその先導的応用

の修士研究を行って修了されました。これらの研究は、FMO 相互作用解析、FMO-DPD シミュレーション、機械学習などに渡っています。

V. 担当講義科目 (2025 年度)

数学 (化)、基礎化学実験、化学実験 B、情報科学 (化)、分子軌道論、研究実験 1、研究実験 2

VI. その他

望月研究室では、活動の柱としてフラグメント分子軌道 (FMO) 法の研究開発と先導的な応用計算を自主開発のプログラム ABINIT-MP を使って展開しています。2020 年からは、世界有数の性能を誇るスーパーコンピュータ「富岳」も利用していますが、計算機科学の専門家との共同研究としてコードの高速化も併せて進めています。2025 年度は、特に GPU 対応が進みました。また、東京化学同人さんの「現代化学」に 2026 年 4 月号 (右図) から 12 回で FMO 関係の連載をすることになりましたが、若い世代にも関心を持ってもらえればよいと考えています。

粗視化シミュレーション手法の一つである散逸粒子動力学 (DPD) の有効パラメータを FMO 計算から算定する FMO-DPD 法は奥脇弘次氏 (OB) と土居氏らと開発してきた立教オリジナルの手法で、特に脂質膜・ベシクル系に対して成功裏に適用されています。また、産業界からも注目される計算科学技術となっており、「富岳」で産学連携のプロジェクト課題が走っています。また、複数の企業様から共同研究をいただいています。

AI やデータ科学の要素も導入していますが、これは 2030 年に稼働が予定される「富岳 NEXT」を意識して語られることが増えてきた「AI for Science」(AI4S) にも符合しています。ここでは、所謂サロゲートモデリングを紹介します。これは、低コストの計算から高コストの計算の結果を高い信頼性で予測する技術です。下図には、10 残基ペプチドの Chignolin の 6-31G(d) 基底での残基間相互作用エネルギーを 3-21G 基底で予測した R^2 値 (標準偏差は括弧内) を示しましたが、概ね 0.9 以上の値が出ていることがわかります。6-31G(d) に対する相対的な計算コストは 1/3 ですが、3-21G は sp 関数のみですので、特に GPU 処理が有効となって更に 10 倍程度の加速が得られます (合わせて数十倍)。



IFIE / 6-31G(d) / $D_{Str} + D_{MP2}$

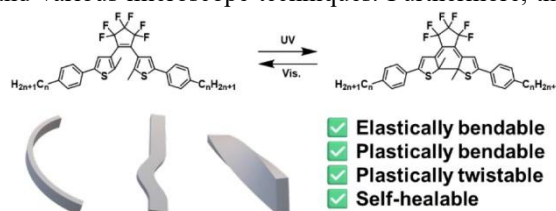
	Asp3	Pro4	Glu5	Thr6	Gly7	Thr8	Trp9	Gly10
Gly1	0.93 (0.05)						0.90 (0.04)	0.89 (0.04)
Tyr2		0.66 (0.06)	0.90 (0.03)		0.65 (0.11)	0.90 (0.03)	0.77 (0.07)	0.93 (0.01)
Asp3			0.95 (0.01)	0.89 (0.07)	0.95 (0.01)	0.89 (0.02)	0.86 (0.05)	0.95 (0.04)
Pro4				0.93 (0.02)	0.88 (0.06)	0.91 (0.02)	0.96 (0.02)	
Glu5					0.85 (0.06)	0.89 (0.07)		
Thr6						0.89 (0.03)	0.93 (0.06)	
Gly7							0.72 (0.07)	
Thr8								0.85 (0.06)

I. 最近の研究成果

Photoswitchable flexible-brittle transition with reversible cracking and healing in a photochromic crystal

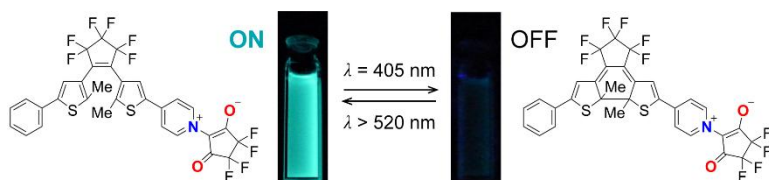
Nishimura, R.; Fukuchi, J.; Hirai, Y.; Ohmura, T.; Sugiyama, H.; Morimoto, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2026**, *148*, 17958-17966.

Soft materials with ordered structures have attracted much attention due to their potential applications, such as flexible electronics, optical devices, and sensor materials. In particular, organic crystals that exhibit elastic and plastic deformation, as well as self-healing capability, are attractive owing to their shape adaptability and low cost. Although reversible photoinduced modulation of mechanical properties has been reported, organic crystals capable of repeated fracture and subsequent crack healing remain rare. Here, we report a photoresponsive organic crystal that permits reversible photoswitching between flexible and brittle states, as well as photoinduced cracking and healing. The developed crystals exhibit one-directional elastic and plastic deformation, along with photoinduced cracking and healing upon ultraviolet and visible light irradiation. The mechanisms of the flexibility and reversible crack recovery phenomena were made clear by X-ray crystallographic analysis and various microscope techniques. Furthermore, the durability and mechanical properties of the flexible crystals during alternating irradiation of ultraviolet and visible light are demonstrated. This research provides new insights into flexible organic crystals and opens up possibilities for using photoreactive crystalline materials for future applications in self-healing materials and flexible electronics.

**A visible-light-responsive fluorescent diarylethene having a betaine structure**

Nishimura, R.; Kaisho, N.; Morimoto, M. *Chem. Eur. J.* **2024**, *30*, e202403076.

As a new molecular scaffold of photoswitchable fluorophore, we developed a photochromic diarylethene containing a betaine structure based on pyridinium *N*-enolate. A facile reaction of a pyridyl-substituted dithienylperfluorocyclopentene derivative with octafluorocyclopentene constructed the betaine structure. The introduction of the betaine moiety provided the diarylethene molecule with bathochromically shifted optical absorption and fluorescing ability, thus enabling the molecule to function as a visible-light-responsive turn-off mode photoswitchable fluorophore. The molecule in the open-ring form emitted bright bluish green fluorescence. Upon irradiation with 405 nm light, the molecule underwent cyclization isomerization to form the closed-ring isomer and the fluorescence intensity significantly decreased. The turn-off mode fluorescence photoswitching was observed not only in solution but also in polymer films.

**Mechanically induced transient fluorescence of photochromic diarylethene crystals for sensing and security material**

Nishimura, R.; Kobayashi, Y.; Sotome, H.; Miyasaka, H.; Morimoto, M. *Adv. Opt. Mater.* **2024**, *12*, 2400143.

Luminescent materials responding to mechanical stimulation can visualize the strain and mechanical damage applied to objects. Mechanofluorochromism is a well-known phenomenon induced by the mechanical force on fluorescent crystalline materials. However, simple application of the mechanofluorochromism is unsuitable for temporally and spatially detecting stress in detail because the fluorescent state is kept for rather long period. Here, the dynamic stress-sensing luminescent solid material of a photochromic diarylethene with a fluorescent moiety is reported. Under the stress applied to the crystalline state, this material emitted cyan-colored transient fluorescence that is rapidly diminished within a few second. This dynamic fluorescence phenomenon is well controlled by the combination of light irradiation and other external stimuli (organic solvent vapor and/or heat). In addition, the luminescence period is regulated by the excitation wavelength and magnitude of applied force. By utilizing these responses, the rewritable dynamic information encryption is successfully demonstrated. This material with transient fluorescence overcomes the persistence of fluorescence color of mechanochromism and present results provide a new principle for multifunctional light-emitting materials responding to mechanical stimulation.



II. 発表論文リスト (2023-2025年度)

“Phototunable polychromatic luster in microcrystalline film using photocyclization-cycloreversion and photochemical side reactions of diarylethene” Shiromae, R.; Nakagawa, Y.; Nishimura, R.; Morimoto, M.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K. *Cryst. Growth Des.* **2025**, *25*, 4140-4150.

“Deciphering the optical switching mechanism of CdSe/CdS QDs luminescence by diarylethene molecular photoswitches: A stochastic model analysis” Yamamoto, M.; Morimoto, M.; Irie, M.; Eguchi, D.; Tamai, N. *J. Phys. Chem. C* **2024**, *128*, 19758-19766.

“A visible-light-responsive fluorescent diarylethene having a betaine structure” Nishimura, R.; Kaisho, N.; Morimoto, M. *Chem. Eur. J.* **2024**, *30*, e202403076.

“Reversible change of luster color from pale yellow to wine red in microcrystalline film by photochromic diarylethene having a naphthyl group” Shiromae, R.; Nakagawa, Y.; Watanabe, S.; Nishimura, R.; Morimoto, M.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K. *CrystEngComm* **2024**, *26*, 5090-5098.

“Molecular design of pyrene and its derivatives to make microcrystalline films with silver luster effect using drop-casting method” Maeda, T.; Nakagawa, Y.; Nishimura, R.; Morimoto, M.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K. *Cryst. Growth Des.* **2024**, *24*, 4563-4571.

“Near-infrared two-photon absorption and excited state dynamics of a fluorescent diarylethene derivative” Sotome, H.; Nagasaka, T.; Konishi, T.; Kamada, K.; Morimoto, M.; Irie, M.; Miyasaka, H. *Photochem. Photobiol. Sci.* **2024**, *23*, 1041-1050.

“Mechanically induced transient fluorescence of photochromic diarylethene crystals for sensing and security material” Nishimura, R.; Kobayashi, Y.; Sotome, H.; Miyasaka, H.; Morimoto, M. *Adv. Opt. Mater.* **2024**, *12*, 2400143.

“Self-assembly of chiral diarylethene microcrystals by the sublimation process to form foliage scroll pattern” Nishimura, R.; Fujimoto, A.; Kamitanaka, T.; Sugiyama, H.; Sekine, A.; Yasuda, N.; Hattori, Y.; Morimoto, M.; Mayama, H.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K. *Cryst. Growth Des.* **2024**, *24*, 2791-2798.

“Straightforward fabrication of double roughness structures on a microcrystalline film of a diarylethene derivative” Hashimoto, Y.; Hase, A.; Shiromae, R.; Nishimura, R.; Morimoto, M.; Hattori, Y.; Mayama, H.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K. *Langmuir* **2024**, *40*, 7661-7668.

“Photoinduced multi-step bending of 7-acetoxy-4-methylcoumarin crystal” Kitagawa, M.; Nakagawa, Y.; Ii, T.; Nishimura, R.; Morimoto, M.; Kirito, K.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K. *Cryst. Growth Des.* **2024**, *24*, 913-922.

“A turn-on mode fluorescent diarylethene having an azacrown ether receptor: Metal-ion-gated enhancement of the photoreactivity and fluorescence” Takaku, S.; Nishimura, R.; Morimoto, M. *Dyes Pigm.* **2023**, *216*, 111354.

“Dual-radical-based molecular anisotropy and synergy effect of semi-conductivity and valence tautomerization in a photoswitchable coordination polymer” Dai, J.-W.; Li, Y.-Q.; Li, Z.-Y.; Zhang, H.-T.; Herrmann, C.; Kumagai, S.; Damjanović, M.; Enders, M.; Nojiri, H.; Morimoto, M.; Hoshino, N.; Akutagawa, T.; Yamashita, M. *Nat. Sci. Rev.* **2023**, *10*, nwad047.

“Efficient surface peeling, a photoinduced result of photochromic diarylethene crystal by multistep light irradiation” Nakagawa, Y.; Morimoto, M.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K. *Cryst. Growth Des.* **2023**, *23*, 1581-1591.

“Diarylethene isomerization by using triplet-triplet annihilation photon upconversion” Larsson, W.; Morimoto, M.; Irie, M.; Andréasson, J.; Albinsson, B. *Chem. Eur. J.* **2023**, *29*, e202203651.

Masakazu MORIMOTO

ORCID: 0000-0002-7494-0404 (<http://orcid.org/0000-0002-7494-0404>)

III. 学会発表 (2025年度)

フォトクロミックジアリールエテン結晶の自己修復挙動

福地純・渡邊みなみ・森本正和・西村涼, 2025年光化学討論会, 立教大学池袋キャンパス (東京都), 2025年9月4-6日, 口頭発表

応力誘起逆 Diels-Alder 反応により光応答性が変化するジアリールエテンメカノフォアの合成

三瓶将弥・西村涼・森本正和, 2025年光化学討論会, 立教大学池袋キャンパス (東京都), 2025年9月4-6日, ポスター発表

ドナー・アクセプター構造を有する蛍光性ターアアリーレン結晶の摩擦発光とメカノクロミック特性

福地純・安島萌里・森本正和・西村涼, 第35回基礎有機化学討論会, 名古屋大学東山キャンパス (愛知県), 2025年9月9-11日, ポスター発表

外部刺激により誘起されるジアリールエテン結晶の自己修復現象

福地純・渡邊みなみ・森本正和・西村涼, 第33回有機結晶シンポジウム, 信州大学長野 (教育) キャンパス (長野県), 2025年11月1-2日, 口頭発表【優秀講演賞受賞】

高分子鎖を有するジアリールエテンの光反応性に対する応力の効果

池田真輝・西村涼・森本正和, 日本化学会第106春季年会 (2026), 日本大学理工学部船橋キャンパス (千葉県), 2026年3月17-20日, ポスター発表

ジアリールエテンの光異性化反応量子収率に対する反応点アルキル置換基の効果

町田綾夏・藤澤衣里・西村涼・森本正和, 日本化学会第106春季年会 (2026), 日本大学理工学部船橋キャンパス (千葉県), 2026年3月17-20日, ポスター発表

ジアリールエテンの光応答特性に対するベンゾチオフェン5位置換基の効果

安武将吾・長谷川雄大・西村涼・森本正和, 日本化学会第106春季年会 (2026), 日本大学理工学部船橋キャンパス (千葉県), 2026年3月17-20日, ポスター発表

反応点にベンジル基を有するジアリールエテンのフォトクロミズム

三門優真・西村涼・森本正和, 日本化学会第106春季年会 (2026), 日本大学理工学部船橋キャンパス (千葉県), 2026年3月17-20日, ポスター発表

Photocontrol of flexibility in diarylethene crystals with photoinduced self-healing property

J. Fukuchi, R. Nishimura, M. Morimoto, The 19th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (ISMSC2025), ROHM Theatre Kyoto and Miyako Messe (Kyoto, Japan), May 25-30, 2025, poster presentation

IV. 卒業研究・学位論文 (2025年度)

ジアリールエテンの光応答特性に対するベンゾチオフェン 5 位置換基の効果

ジアリールエテンの光反応性に対する反応点第二級アルキル置換基の影響

高分子鎖を有するジアリールエテンの光反応性に対する応力の効果

チエノチオフェン環を有するフォトクロミック分子の合成と特性評価 (修士論文)

外部刺激に応答する新規ジアリールエテン結晶の創製 (修士論文)

応力誘起逆Diels-Alder反応により光応答特性を変化させる光スイッチングメカノフォアの創出 (修士論文)

機械刺激強度に依存して段階的な応答発光を示すジアリールエテン結晶の創製 (修士論文)

V. 担当講義科目 (2025年度)

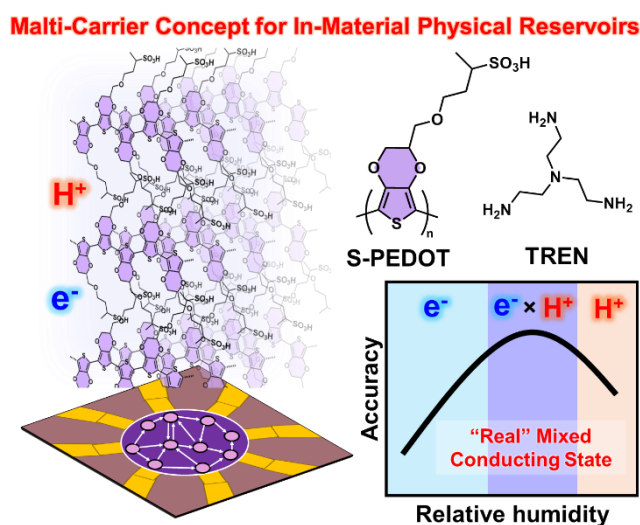
有機構造決定法, 高分子化学, 化学の最前線, 化学実験A, 化学実験B, 研究実験1, 研究実験2, 有機化学基礎特論 (大学院)

I. 最近の研究成果

Utilizing Cooperative Proton–Electron Mixed Conduction Induced via Chemical Dedoping of Self-Doped Poly (3, 4-ethylenedioxythiophene) Nanofilms for In-Material Physical Reservoirs

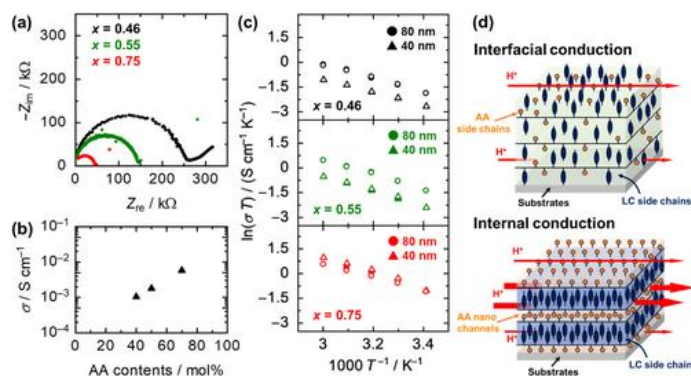
Y. Ishizaki-Betchaku, M. Onishi, T. Misaka, M. Hara, H. Yano, H. Okuzaki, J. Matsui, T. Hasegawa, T. Matsumoto, H. Tanaka, S. Nagano, *Adv. Sci.*, **13** (2), e20270 (2026).

In this study, an intrinsic ion–electron (hole) coequally conductive state is introduced, induced by de-doping in self-doped poly(3,4-ethylenedioxythiophene) (S-PEDOT) nanofilms, enhances the performance of in-material physical reservoirs (PRs) through the cooperative utilization of both carriers. A chemical dedoping modulates the electrical characteristics of the S-PEDOT PRs. Impedance spectroscopy under controlled relative humidity (RH) conditions reveals that the predominant conducting carriers of the S-PEDOT nanofilms change systematically depending on the RH. Under low RH, the dominant carriers are holes. At a moderate RH (60–80%), the S-PEDOT nanofilm exhibits a hole–proton mixed conducting state. A further increase in RH leads to predominantly proton carrier conduction. Moreover, the PR performance of the S-PEDOT nanofilms is evaluated by wave generation and nonlinear autoregressive moving average (NARMA) tasks. The S-PEDOT PRs display the best performance at RHs ranging from 60% to 80% (mixed conducting state). Therefore, it is concluded that this high PR performance is attributed to the complex dynamics originating from the cooperative hole–proton mixed conducting state of the S-PEDOT nanofilms. The results obtain in the present study are the first report of PRs using intrinsically ion–electron mixed conducting states, paving the way for the development of high-performance material-based PRs.

**Reversible photoswitching of proton conduction in hetero-smectic lamellar structures formed by side-chain liquid crystalline copolymer thin films**

Y. Ishizaki-Betchaku, K. Suetsugu, M. Hara, Y. Nagao, J. Matsui, T. Seki, S. Nagano, *Polym. International*. doi:10.1002/pi.6741

Spatiotemporal control of ionic conductivity is a key issue in the emerging field of functional ion-conducting nanomaterials. In the present paper, we demonstrate the formation of hetero-smectic lamellar structures, which are formed by nanosegregation of hydrophobic liquid crystalline (LC) azobenzene side chains and hydrophilic acrylic acid side chains via polymer main chains in side-chain LC (SCLC) copolymers, and the reversible photoswitching of the proton conductivity. Proton-conducting SCLC copolymers with different acrylic acid contents are synthesized by free-radical copolymerization. The LC nature of the synthesized polymers is investigated by polarized optical microscope observation, differential scanning calorimetry and X-ray scattering measurements. Ultraviolet (UV)–visible absorption spectroscopy and grazing-incidence X-ray scattering measurements reveal the hetero-smectic lamellar formation in SCLC copolymer thin films. Proton conductivity of the polymer thin films is evaluated by impedance spectroscopy measurements under different temperatures and relative humidity conditions with sequential UV light irradiation. These results indicate that stable and reversible photoswitching of the proton conductivity around one order of magnitude is attributed to the trans–cis photoisomerization of azobenzene side chains by UV light irradiation. These results offer the opportunity for applications of photo-functional nanomaterials, including emerging biomimetic ionic signal transduction devices and neuromorphic devices.



II. 発表論文リスト (2023-2025 年度)

"Utilizing Cooperative Proton–Electron Mixed Conduction Induced via Chemical Dedoping of Self-Doped Poly (3, 4-ethylenedioxythiophene) Nanofilms for In-Material Physical Reservoirs," Y. Ishizaki-Betchaku, M. Onishi, T. Misaka, M. Hara, H. Yano, H. Okuzaki, J. Matsui, T. Hasegawa, T. Matsumoto, H. Tanaka, S. Nagano, *Adv. Sci.*, **13** (2), e20270 (2026). DOI: 10.1002/advs.202520270

"Fabrication of noncrosslinked poly(N-dodecyl acrylamide) monolayer-thick sheets by exfoliation using poor solvents," M. Ohke, Y. Ishizaki-Betchaku, S. Nagano, H. Ebe, J. Matsui, *Polym. J.*, (2025). DOI: 10.1038/s41428-025-01121

"Lyotropic Polymer Liquid Crystal Coating: Enabling Lamellar Ion-Conduction Pathways for Superior C-Rate Performance in NCM523 Cathodes," M. Marium, K. Aoki, Y. He, K. Yamamoto, A. Suwansoonorn, S. Ikuta, M. Hara, S. Nagano, Y. Nagao, K. Nishikawa, T. Miyazaki, H. Aoki, S. Kobayashi, T. Sudare, T. Hitosugi, N. Zettsu, *ACS Appl. Energy Mater.*, **8** (22), 16589-16600 (2025).

"Nanoarchitectonics of all catechol-based AA'-type block copolymer for sequential template application," M. Ohke, R. Akaishi, S. Nishitsuji, S. Nagano, H. Ebe, J. Matsui, *Chem. Lett.*, **54** (11), upaf200 (1-5) (2025).

"In Silico Study of Ionizable Lipid Nanoparticles Using the SPICA Force Field," A. P. Singh, H. Tanaka, Y. Miyazaki, S. Nagano, W. Shinoda, *J. Chem. Theory Comput.* **21** (12), 6226–6238 (2025).

"Performance of in-materio physical reservoir computing devices based on highly oriented semiconducting polymer thin films," M. Desu, A. Karacali, Y. Usami, Y. Ishizaki-Betchaku, S. Nagano, M. Xu, S. S. Pandey, H. Tanaka, *Jap. J. Appl. Phys.*, **64** (4), 04SP12 (2025).

"Physical reservoir operation utilizing polarization change in a liquid crystal film," A. Mizuno, S. Nagano, H. Tanaka, T. Hasegawa, *Jap. J. Appl. Phys.*, **64** (3), 03SP23 (2025).

"Orientation control of sub-10-nm lamellar structures in amphiphilic copolymer films via water annealing," M. Kikuchi, H. Hamaguchi, K. Yamamoto, S. Nishitsuji, S. Nagano, H. Ebe, J. Matsui, *Soft Matter*, **21** (37), 7217-7227 (2025).

"Langmuir and Langmuir–Blodgett Films of Polymers," S. Nagano, Routledge Resources Online: Polymers, Materials, and Technology -Polymer Materials, Functional Polymer Materials-(Eds M. K. Mishra, I. Tomita, K. Takagi) (2025). Review

"Reversible photoswitching of proton conduction in hetero-smectic lamellar structures formed by side-chain liquid crystalline copolymer thin films," Y. Ishizaki-Betchaku, K. Suetsugu, M. Hara, Y. Nagao, J. Matsui, T. Seki, S. Nagano, *Polym. International*. doi:10.1002/pi.6741

"Fabrication of amorphous lamellar freestanding poly(N-dodecyl acrylamide) films and their mechanical properties," Y. Koizumi, Y. Matsuo, A. Masuhara, H. Ebe, Y. Ishizaki-Betchaku, S. Nagano, J. Matsui, *Polymer International*. DOI 10.1002/pi.6718

"Interfacial bottom-up fabrication of ultrathin nanoporous films: techniques, characterization and applications," Y. Ishizaki-Betchaku, S. Yamamoto, S. Nagano, M. Mitsuishi, *M. Jap. J. Appl. Phys.*, **64**, 030801 (2025). Review

"Formation of Conjugated Polymer Monolayer Networks on Water Surface and Nonlinear Charge Transport," Y. Ishizaki-Betchaku, N. Hara, T. Matsuda, J. Matsui, T. Seki, S. Nagano, *S. Adv. Electron. Mater.*, **10** (11), 2400427 1-11) (2024).

"Effects of Alkyl Side Chain Length on the Structural Organization and Proton Conductivity of Sulfonated Polyimide Thin Films," T. Honbo, Y. Ono, K. Suetsugu, M. Hara, A. Taborosi, K. Aoki, S. Nagano, M. Koyama, Y. Nagao, *ACS Appl. Polym. Mater.*, **6** (21), 13217-13227 (2024).

"Crystalline Formation Enhances Hydrogen Evolution Reaction Property of Copper Azaphthalocyanine on Carbon Electrodes," K. Ishibashi, T. Liu, Y. Ishizaki, S. Nagano, J. Yoshida, S. Ono, Y. Takahashi, A. Kumatani, H. Yabu, *ACS Appl. Energy Mater.*, **7** (22), 10466–10473 (2024).

"Ultrathin Ionic Diodes with Electrostatically Heterogeneous Hybrid Interfaces of Nanoporous SiO₂ Nanofilms and Polymer Layer-by-Layer Multilayers," Y. Ishizaki-Betchaku, N. Kumakura, S. Yamamoto, S. Nagano, M. Mitsuishi, *Small*, **20** (40), 2470293 (2024).

"Order-Order Transition in Statistical Copolymer Thin Film Induced by LCST-Type Behavior," M. Kikuchi, M. Hara, S. Nagano, H. Ebe, J. Matsui, *J. J. Phys. Chem. B*, **128** (31), 7681-7689 (2024).

- “Assembly Structure Formation in Bulk and Ultrathin Films of Poly (substituted methylene) Having an Azobenzene Side Chain,” C. Kawakami, M. Hara, S. Nagano, H. Shimomoto, Y. Yorimoto, T. Yamada, S. Oda, E. Ihara, T. Seki, *Langmuir*, **40** (21), 11297–11306 (2024).
- “Influence of Humidity on Layer-by-Layer Growth and Structure in Coordination Networks,” K. Aoki, T. Matsuzawa, K. Suetsugu, M. Hara, S. Nagano, Y. Nagao, *Inorg. Chem.*, **63** (15), 6674–6682 (2024).
- “Mechanism of High Proton Mobility in the Two-Dimensional Nanospace at the Interlayer of a Multilayer Polymer Nanosheet Film,” M. Inoue, R. Sakashita, S. Kagaya, M. Gemmei-Ide, Y. Yao, A. Suwansoontorn, S. Nagano, S. Yamamoto, M. Mitsuishi, Y. Nagao, J. Matsui, *J. Phys. Chem. C*, **127**, 24046 (2023).
- “Effect of the Poly (ethylene glycol) Diacrylate (PEGDA) Molecular Weight on Ionic Conductivities in Solvent-Free Photo-Cross-Linked Solid Polymer Electrolytes,” M. S. Grewal, K. Ishibashi, M. Hara, Y. Ishizaki, S. Nagano, H. Yabu, *Langmuir*, **39**, 10209 (2023).
- “Photoalignment and Photofixation of Chromonic Mesophase in Ionic Linear Polysiloxanes Using a Dual Irradiation System,” M. Hara, A. Masuda, S. Nagano, T. Seki, *Crystals*, **13**, 326 (2023).
- “Janus metallic film with gold and silver luster by electroless deposition of silver using poly (dopamine acrylamide) thin film,” M. Ohke, R. Akaishi, K. Tachibana, M. Kohri, S. Nagano, H. Ebe, J. Matsui, *RSC Adv.*, **13**, 28104 (2023).
- “Induced Smectic E Phase in a Binary Blend of Side - Chain Liquid Crystalline Polymers,” N. Hida, T. Nakajima, M. Hara, T. Seki, S. Nagano, *Macromol. Rapid Commun.*, **44**, 2200761 (2023).
- “Lyotropic Liquid Crystalline Property and Organized Structure in High Proton-Conductive Sulfonated Semialicyclic Oligoimide Thin Films,” Y. Yao, H. Watanabe, M. Hara, S. Nagano, Y. Nagao, *ACS Omega*, **8**, 7470–7478 (2023).
- “Order–order transitions in poly (N-octadecyl acrylamide-co-hydroxyethyl acrylamide) statistical copolymer films,” M. Kikuchi, N. Saito, M. Ohke, S. Nagano, S. Nishitsuji, J. Matsui, *Soft Matter*, **19**, 3058 (2023).
- “Induction of Highly Ordered Liquid Crystalline Phase of an Azobenzene Side Chain Polymer by Contact with 4'-Pentyl-4-cyanobiphenyl: An in Situ Study,” C. Kawakami, M. Hara, S. Nagano, T. Seki, *Langmuir*, **39**, 619–626 (2023).

Shusaku NAGANO

ORCID: 0000-0002-3929-6377 (<https://orcid.org/0000-0002-3929-6377>)

III. 学会発表 (2025年度)

- O. Kumamoto, Y. Ishizaki, S. Nagano, "In-plane photo-reorientation and anisotropic proton conduction of liquid crystalline copolymer thin films with methacrylic acid side chains," 19P-1-57, 2025/11/19, International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC) 2025, KFC Hall and Rooms, Tokyo.
- N. Hara, Y. Ishizaki S. Nagano, "Fabrication of Material Reservoirs from Chemically Doped Poly(3-hexylthiophene) Monolayer Networks," 19P-1-61, 2025/11/19, International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC) 2025, KFC Hall and Rooms, Tokyo.
- S. Tanaka, Y. Ishizaki, S. Nagano, "Photoswitching of Proton Conductivity and Nonlinear Electrical Properties in Liquid Crystalline Copolymer Thin Films with Sulfonic Acid Side Chains," 19P-1-59, 2025/11/19, International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC) 2025, KFC Hall and Rooms, Tokyo.
- K. Kobayashi, Y. Ishizaki, S. Nagano, "Mesogenic Orientation and Thermal Diffusivity of Smectic Liquid Crystalline Polymers in Thin Films," 19P-1-60, 2025/11/19, International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC) 2025, KFC Hall and Rooms, Tokyo.
- Y. Yokota, Y. Ishizaki, M. Hara, T. Seki, S. Nagano, "Embedding of LC polymer compatible blends induced by the interaction of binary mesogens into microphase separation structures," 19P-1-64, 2025/11/19, International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC) 2025, KFC Hall and Rooms, Tokyo.
- M. Desu, M. Xu, Y. Usami, Y. Ishizaki, S. Nagano, Y. Nakaoka, H. Tanaka, "Controlled Structural Randomness in RR-P3HT Thin Films for High-Performance Physical Reservoir Computing," 19P-1-23, 2025/11/19, International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC) 2025, KFC Hall and Rooms, Tokyo.
- O. Kumamoto, Y. Ishizaki, S. Nagano, "In-plane photo-reorientation and anisotropic proton transport in liquid crystalline azobenzene random copolymer films," P-16, 2025/10/5, The 7th International Symposium on Neuromorphic AI Hardware (Jointly Organized with IEEE EDS Japan and Malaysia Chapters), Kitakyushu.
- S. Tanaka, Y. Ishizaki, S. Nagano, "Photoswitchable Proton Conductivity and Nonlinear Electrical Properties of

Azobenzene Liquid Crystalline Copolymer Thin Films with Sulfonic Acid Side-Chains," P-16, 2025/10/5, The 7th International Symposium on Neuromorphic AI Hardware (Jointly Organized with IEEE EDS Japan and Malaysia Chapters), Kitakyushu.

横田 優乃, 石崎 裕也, 原 光生, 関 隆広, 永野修作, “異種メソゲンの相互作用により発現する相溶系液晶高分子ブレンドの光相分離,” 2BO6, 2025年液晶学会討論会, 2025/9/11, 京都市国際交流会館, 京都.

大工原 汐恩, 横田 優乃, 石崎 裕也, 原 光生, 関 隆広, 永野修作, “液晶性高分子ブレンドによる異主鎖超格子ラメラ構造の形成,” PB19, 2025年液晶学会討論会, 2025/9/10, 京都市国際交流会館, 京都. [若葉賞 (ポスター賞) を受賞]

熊本 旺一郎, 石崎 裕也, 永野 修作, “プロトン伝導性側鎖を有する液晶性ランダム共重合体薄膜の面内光配向と伝導異方性,” PB23, 2025年液晶学会討論会, 2025/9/10, 京都市国際交流会館, 京都.

田中 駿之介, 石崎 裕也, 永野 修作, “液晶性ランダム共重合体薄膜のプロトン伝導性と非線形特性の光スリッチング,” PB24 2025年液晶学会討論会, 2025/9/10, 京都市国際交流会館, 京都.

Y. Ishizaki, T. Seki, S. Nagano, "Reversible Photoswitching of Proton Conduction in Heterosmectic Lamellar Structures Formed by Side-Chain Liquid Crystalline Polymer Thin Films," the 19th Pacific Polymer Conference (PPC19) 2025/7/7, 07G11, Kitakyushu.

N. Hara, Y. Ishizaki, S. Nagano, "Nonlinear Carrier Transport of Polythiophene Monolayer Networks," the 19th Pacific Polymer Conference (PPC19), 2025/7/7, 09P012b, Kitakyushu.

K. Kobayashi, Y. Ishizaki, T. Seki, S. Nagano, "Orientation and Thermal Diffusivity on Side-Chain Smectic Liquid Crystalline Polymers exhibiting Smectic A phase," the 19th Pacific Polymer Conference (PPC19), 2025/7/7, 09P014b, Kitakyushu.

他、応用物理学会学術講演会、高分子年次大会、高分子討論会、日本MRS年次大会等 48件

IV. 卒業論文・学位論文 (2025年度)

異種メソゲン共重合体のスペーサー長と主鎖構造が及ぼす液晶相と熱伝導特性への影響
異種メソゲンを有する側鎖型液晶ポリノルボルネンの誘起スメクチック相
自己ドーピング型ポリチオフェン単分子膜の構造制御と非線形電気特性
双生イオン側鎖を有する液晶性ブロック共重合の合成と超薄膜イオンダイオードの作製
かご型シルセスキオキサン側鎖を有する液晶性ランダム共重合体薄膜におけるヘテロスメルラ構造の形成と光配向制御
スメクチック相を示す側鎖型液晶性高分子薄膜の配向制御と熱拡散率
構造制御可能な導電性高分子ネットワークの構築とリザーブ演算への展開
メソゲンの相互作用により発現する相溶系液晶ポリマーブレンドの光相転移とハイブリット型マイクロ相分離構造への展開

V. その他

・学外活動

横浜国立大学非常勤講師、大分大学非常勤講師、東京工業大学非常勤講師、高分子学会ダイバーシティ委員、日本化学会関東支部事業委員会委員長

・招待講演 (2023-2025年度)

"薄膜自由界面の設計による高分子液晶の配向制御および物質移動," 永野 修作, 第24回高分子ナノテクノロジー研究会講座, 2026/1/20, 東京科学大学大岡山キャンパス.

"高分子の機能と表面・界面・薄膜の構造解析," KISTEC講座「高分子材料を進化させる表面・界面制御解析の最前線」, 永野 修作, 2026/2/6, かながわサイエンスパーク.

"導電性高分子2次元ネットワークによる非線形電気特性," 永野修作, 日本化学会第105回春季年会 (2025) 神経型インマテリアル演算の化学, 2025年3月28日, 関西大学千里山キャンパス, 大阪.

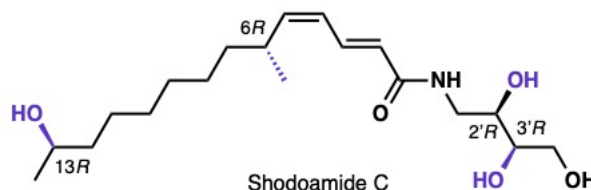
"自由界面をデザインする側鎖型液晶高分子薄膜の配向制御," 永野修作, 2024年日本液晶学会小サマースクール (SSS2024), 2024年7月12日, マホロバマイズ三浦, 神奈川.

I. 最近の研究成果

Total synthesis and determination of the absolute configuration of shodoamide C: An amphotericin B potentiator against *Candida albicans*.

Ueki, S.; Hirata, A.; Yagi, A.; Iwahori, M.; Tomoda, H.; Uchida, R.; Nagamitsu, T.* **Ohtawa, M.*** *Org. Lett.* **2025**, 27, 3777-3781.

This study reports the total synthesis and absolute-configuration determination of shodoamide C, a microbial natural product that potentiates amphotericin B activity against *Candida albicans*. Because shodoamide C contains four previously unassigned stereocenters, a convergent synthetic route was designed to access all 16 possible stereoisomers. The synthesis combined stereodefined *Z*-alkenyl bromide fragments with stannyl acrylic amide fragments, followed by Stille coupling to construct the characteristic *E,Z*-1,3-diene amide motif. Chiral-pool starting materials, stereoselective methylation, and careful protecting-group manipulations enabled efficient preparation of the stereoisomer library. Comparison of NMR data, optical rotation, and chiral/recycle HPLC analyses established the absolute configuration of natural shodoamide C as 6*R*,13*R*,2'*R*,3'*R*. Biological evaluation revealed that all stereoisomers showed similar amphotericin B-potentiating activity, indicating that stereochemistry has little influence on this activity. This work provides a firm structural basis and synthetic access for future mechanistic studies and analogue development.



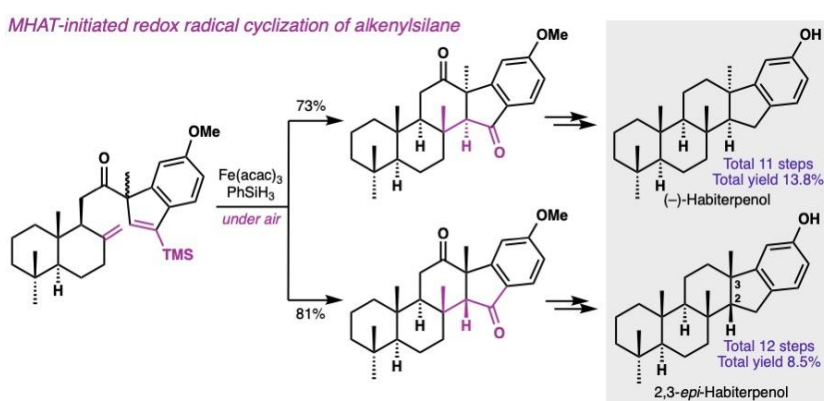
- 13 step total synthesis
- Synthesis of all shodoamide C stereoisomers

- Determination of unidentified four stereocenters
- Evaluation of AMBP potentiating effect against *C. albicans*

Concise syntheses of habiterpenol and 2',3'-*epi*-habiterpenol via redox radical cyclization.

Taguchi, H.; Kawaguchi, M.; Nagamitsu, T.*; **Ohtawa, M.*** *Org. Biomol. Chem.* **2023**, 21, 6129-6133.

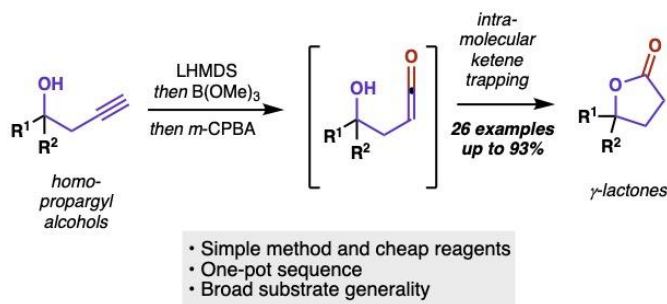
Efficient total syntheses of (-)-habiterpenol and (+)-2,3-*epi*-habiterpenol, as microbial G2 checkpoint inhibitors with potential anticancer applications, have been achieved. The synthesis of (-)-habiterpenol was achieved in 11 steps from commercially available starting materials, (3*aR*)-(+)-sclareolide and 6-methoxyindanone, with a commendable total yield of 13.8%. A significant advancement in this approach was the regioselective coupling of TMS-indene with the corresponding aldehyde, where the TMS group proved crucial for controlling the regioselectivity of the reaction and constructing the C3 quaternary stereocenter. Furthermore, the construction of the C ring was accomplished through a facile metal hydride hydrogen atom transfer (MHAT)-initiated redox radical cyclization of alkenylsilane under ambient air conditions, leading to the formation of corresponding diketones. This streamlined methodology offers a more concise route than previous syntheses, facilitating the exploration of various derivatives for comprehensive structure-activity relationship (SAR) studies and future improvements in drug metabolism and pharmacokinetics (DMPK).



One-pot γ -lactonization of homopropargyl alcohols *via* intramolecular ketene trapping.

Yamane, D.; Tanaka, H.; Hirata, A.; Tamura, Y.; Takahashi, D.; Takahashi, Y.; Nagamitsu, T.*; **Ohtawa, M.*** *Org. Lett.* **2021**, *23*, 2831-2835.

A novel one-pot γ -lactonization method for homopropargyl alcohols, achieved through a sequence of alkyne deprotonation, boronation, and subsequent oxidation, was described. The key to this transformation is the in situ generation of a ketene intermediate upon oxidation of the alkynyl boronate, which is then intramolecularly trapped by the adjacent hydroxyl group to form the γ -lactone. The developed method is efficient and utilizes readily available and inexpensive reagents. The researchers optimized the reaction conditions and investigated the substrate scope, demonstrating its broad applicability with 30 examples and yields up to 93%. This straightforward approach offers a practical synthetic route to γ -lactones, important structural motifs in many natural products and pharmaceuticals. This one-pot strategy's simplicity and high efficiency make it a valuable addition to synthetic organic chemistry. This paper introduces a highly efficient one-pot method for synthesizing γ -lactones from homopropargyl alcohols. The process involves a deprotonation, boronation, and oxidation sequence of the terminal alkyne, generating a ketene intermediate intramolecularly trapped by an adjacent hydroxyl group to form the γ -lactone. This method is notable for its simplicity, use of inexpensive and readily available reagents, and broad substrate generality, with 30 examples demonstrating yields up to 93%.



II. 発表論文リスト (2022-2025年度)

“Liposome array on a power-free microfluidic device for analysis of nanopore formation.” Hosokawa, M.; Zhang, Y.*; **Ohtawa, M.**; Sasaki, N. *Analyst* **2026**, *151*, 489-497.

“Total synthesis and determination of the absolute configuration of shodoamide C: An amphotericin B potentiator against *Candida albicans*.” Ueki, S.; Hirata, A.; Yagi, A.; Iwahori, M.; Tomoda, H.; Uchida, R.; Nagamitsu, T.*; **Ohtawa, M.*** *Org. Lett.* **2025**, *27*, 3777-3781.

“Concise syntheses of habiterpenol and 2',3'-*epi*-habiterpenol via redox radical cyclization.” Taguchi, H.; Kawaguchi, M.; Nagamitsu, T.*; **Ohtawa, M.*** *Org. Biomol. Chem.* **2023**, *21*, 6129-6133.

“One-pot γ -lactonization of homopropargyl alcohol *via* intramolecular ketene trapping. ~ Its discovery, optimization, and application ~” **Ohtawa, M.*** *TCI Mail* **2023**, *192*, 2-10.

“Concise Syntheses of (–)-11-*O*-Debenzoyleltashironin and (–)-Bilobalide” **Ohtawa, M.***, Shenvi, R. A. *J. Synth. Org. Chem. Jpn.* **2022**, *80*, 766-777.

“Synthesis and evaluation of habiterpenol analogs.” Konya, M.; Arima, S.; Lee, D.; **Ohtawa, M.**; Shimoyama, K.; Fukuda, T.; Uchida, R.; Tomoda, H.; Yamaotsu, N.; Tanaka, N.; Nagamitsu, T.* *Chem. Pharm. Bull.* **2022**, *70*, 261-268.

“Comprehensive Studies on the Synthetic Organic Chemistry of Unique Bioactive Natural Products; Total Synthesis, Drug Discovery, and Development of New Reactions” **Ohtawa, M.*** *Yakugakuzasshi* **2022**, *142*, 1067-1075.

Masaki Ohtawa

ORCID: 0000-0001-7129-012X (<https://orcid.org/0000-0001-7129-012X>)

III. 学会発表 (2025年度)

β,γ -多環式ブテノリドの環サイズ選択的合成法の開発

○ 文 煥喜、國府田 隆司、勅使川原 壮平、山中 正浩、長光 亨、大多和 正樹
日本薬学第146春季年会、関西大学千里山キャンパス、2026年3月28日

β,γ -多環式ブテノリドの環サイズ選択的合成法の開発

○ 文 煥喜、國府田 隆司、勅使川原 壮平、山中 正浩、長光 亨、大多和 正樹
日本化学会第106春季年会、日本大学理工学部船橋キャンパス、2026年3月17日

多様なアプローチで切り拓く天然物合成研究

○ 大多和 正樹 (招待講演)
第9回天然物化学研究会、東京農業大学世田谷キャンパス、2025年11月28日

天然有機化合物を基盤とした多角的な薬学化学系研究の展開

○ 大多和 正樹 (2025年度日本薬学会化学系薬学部会賞受賞講演)
第51回反応と合成の進歩シンポジウム、広島大学、2024年11月2日

ブテノリドの官能基化とラジカル二量化反応を鍵とする biatractylolide の全合成

○ 國府田 隆司、文 煥喜、川口 真由子、勅使川原 壮平、植木 翔悟、山中 正浩、長光 亨、大多和 正樹
第51回反応と合成の進歩シンポジウム、広島大学、2024年11月2日

β,γ -多環式ブテノリドの環サイズ選択的合成法の開発 (*Chemistry Letters Young Researcher Award*)

○ 文 煥喜、國府田 隆司、勅使川原 壮平、山中 正浩、長光 亨、大多和 正樹
第54回複素環化学討論会、東京大学安田講堂、2025年10月9日

ブテノリドダイマーの異性化の発見と反応機構の解析

○ 指方 啓、小田 みづき、吉田 智喜、田中 信忠、長光 亨、大多和 正樹
第69回日本薬学会関東支部大会、日本薬科大学、2025年9月13日

Shodoamide C の全合成と絶対立体配置の決定 (ポスター発表)

○ 長谷川 悦子、植木 翔悟、八木 瑛穂、平田 晃大、供田 洋、内田 龍児、長光 亨、大多和 正樹
第69回日本薬学会関東支部大会、日本薬科大学、2025年9月13日

特徴的な生物活性を有する天然有機化合物を基盤とする多角的な創薬化学と有機合成化学の展開

○ 大多和 正樹 (招待講演)
2025年度森村豊明会奨励賞受賞講演、北里大学相模原キャンパス、2025年7月14日

IV. 卒業研究・学位論文 (2024年度)

ブテノリドダイマーの新規異性化反応における置換基効果の検討

ブテノリドに対する MHAT/RPC 反応を経た多環式 γ -ブチロラクトン骨格構築の検討

Amphotericin B 活性増強剤の創製を指向した shodoamide C 構造簡略型誘導体の合成

V. 担当講義科目 (2024年度)

有機化学 1、有機化学演習、自然科学への探求、化学の最前線、基礎化学実験、研究実験 2、卒業研究

VI. その他

<最近の主な受賞歴>

2025 年 日本薬学会化学系薬学部会賞

2025 年 森村豊明会奨励賞

2021 年 有機合成化学協会 帝人ファーマ研究企画賞

2021 年 日本薬学会関東支部奨励賞

2020 年 北里大学同窓会研究奨励賞

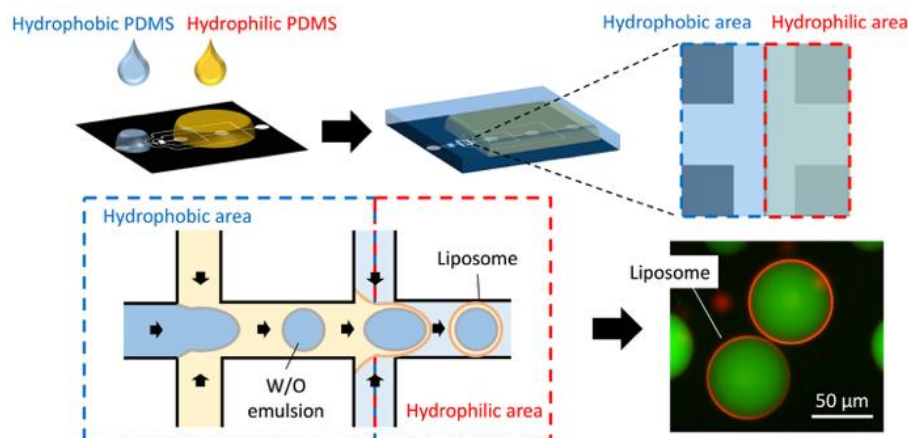
2013 年 第31回メディシナルケミストリーシンポジウム優秀賞

I. 最近の研究成果

Coating-Free Methods for Forming Liposomes using Hydrophilic/Hydrophobic Composite Microfluidic Device

Yiting ZHANG, Naoki SASAKI, ACS Applied Bio Materials, in press.

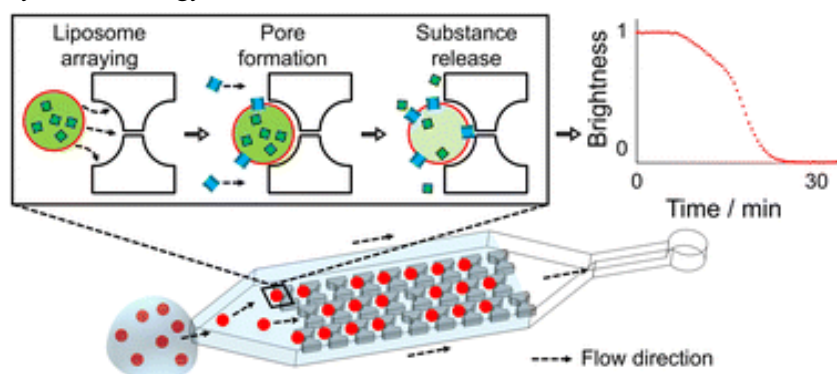
We report a simplified strategy for fabricating a device that enables the formation of liposomes in microchannels. The device was prepared by directly patterning hydrophilic and hydrophobic polydimethylsiloxane on the substrate of a mold. After optimization of the fabrication process, we evaluated liposome formation with the resulting device. We observed the solution collected from the outlet by fluorescence microscopy and confirmed liposome formation by identifying particles that encapsulated a fluorescent dye and were surrounded by lipid bilayers. The collected liposomes exhibited good size uniformity and a coefficient of variation of 13%.



Liposome Array on a Power-Free Microfluidic Device for Analysis of Nanopore Formation

Maho HOSOKAWA, Yiting ZHANG, Masaki OHTAWA, Naoki SASAKI, Analyst, 151, 489-497 (2026).

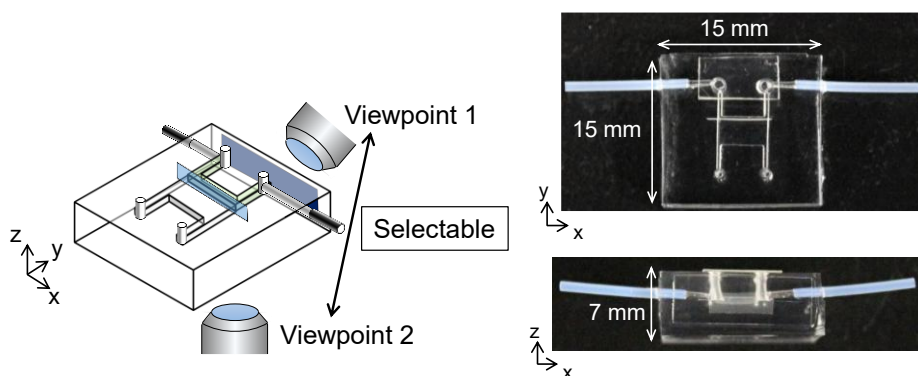
Liposome-based sensing technology that forms nanopores on membranes has attracted significant attention. We analyzed the characteristics of nanopore formation on liposomal membranes that result from interactions between amphotericin B (AmB) and ergosterol. Based on this property, we propose a new system that examines nanopore formation on liposomal membranes. We demonstrated the usefulness of this system by evaluating the effect of shodoamide C (ShC), which acts as a potentiator. Liposomes were prepared with a water-in-oil-in-water emulsion method and introduced into a microfluidic device through a power-free pumping method without the need for an external power supply. AmB binds to ergosterol in the lipid bilayer and creates nanopores that allow encapsulated molecules to escape. We controlled the release time by adjusting the mole fraction of ergosterol and the concentration of AmB. Fluorescence observation revealed that the release time depends on membrane composition and the concentration of AmB. We examined the effect of ShC, which enhances the activity of AmB, and found that this compound increases membrane permeability and accelerates molecular release. This study demonstrates the first analytical system that measures the activity of AmB and its enhancers or inhibitors through release profiles that depend on concentration. The system provides a practical tool for screening compounds that act on membranes. Our analytical system opens new opportunities for the development of membrane-active therapeutics and for progress in drug discovery and synthetic biology.



A Two-Way Membrane-Integrated Microfluidic Device for Evaluation of Anti-Inflammatory Drug through Immunohistochemical Analysis and Permeability Assay of Keratinocyte Cell Layers

Marika SUGIMOTO, Naoko TAKAHASHI-ANDO, Naoki SASAKI, Talanta Open, 9, 100330 (2024).

Evaluation of anti-inflammatory drug on a two-way membrane-integrated microfluidic device (TMMD) is presented. Insertion of a porous membrane into a microfluidic device in a vertical direction and attachment of a cover glass to the lateral side of the microfluidic device enabled us to observe the device from two orthogonal directions. HaCaT, a human epidermal keratinocyte, was cultured in the TMMD. The localization of ZO-1, a tight junction protein, between the HaCaT cells was confirmed by immunohistochemical analysis. Permeability of the HaCaT cell layer increased after stimulation by potassium dichromate, whereas the pretreatment of the HaCaT by dexamethasone prior to the stimulation kept the permeability unchanged. Deoxynivalenol, an anti-inflammatory drug candidate, kept the permeability unchanged with lower concentrations compared to dexamethasone. We expect that the present TMMD is applicable to various anti-inflammatory drug candidates to evaluate their efficacy.



II. 発表論文リスト (2023-2026年度)

“Coating-Free Methods for Forming Liposomes using Hydrophilic/Hydrophobic Composite Microfluidic Device” Yiting ZHANG, Naoki SASAKI, ACS Applied Bio Materials, in press.

"Liposome array on a power-free microfluidic device for analysis of nanopore formation" Maho HOSOKAWA, Yiting ZHANG, Masaki OHTAWA, Naoki SASAKI, Analyst, 151, 489-497 (2026).

“Microfluidic devices integrated with track-etched porous membranes for cell-based bioanalysis” Naoki SASAKI, Analytical Sciences, 41, 1107-1113 (2025).

“Micrometer-Sized Liposome-Based Systems: A Hierarchical Breakdown” Shogo HAMADA, Hironori SUGIYAMA, Yiting ZHANG, Shoji IWABUCHI, Soichiro HIROI, Toshiki MARUYAMA, Yuktesh BALAJI, Sota KUMAGAI, Satoshi MURATA, Taro TOYOTA, ChemSystemsChem, 7, e202400074 (2025).

"Synthesis and characterization of boron-containing biocompatible polymer-coated Gd₂O₃ nanoparticles for neutron capture therapy-based theranostics" Yu TAKAI, Ki Chul PARK, Naokazu IDOTA, Naoki SASAKI, Takehiko TSUKAHARA, Colloids and Surfaces A, 711, 136328 (2025).

"A Two-Way Membrane-Integrated Microfluidic Device for Evaluation of Anti-Inflammatory Drug through Immunohistochemical Analysis and Permeability Assay of Keratinocyte Cell Layers" Marika SUGIMOTO, Naoko TAKAHASHI-ANDO, Naoki SASAKI, Talanta Open, 9, 100330 (2024).

“Release of liposomally formulated near-infrared fluorescent probes included in giant cluster vesicles by ultrasound irradiation” Kota SEO, Yiting ZHANG, Taro TOYOTA, Hideki HAYASHI, Shinnosuke HIRATA, Tadashi YAMAGUCHI, Kenji YOSHIDA, Ultrasonics, 134, 107102 (2023).

Naoki SASAKI

ORCID: 0000-0003-1267-1744 (<https://orcid.org/0000-0003-1267-1744>)

Yiting ZHANG

ORCID: 0000-0003-4346-2208 (<https://orcid.org/0000-0003-4346-2208>)

III. 学会発表 (2025年度)

並行多孔膜組み込みマイクロ流体デバイスを用いた血管新生モデルの薬効評価への応用

章 逸汀、加藤 はる香、佐々木 直樹

日本化学会 第106春季年会、A1455-2am-02、日本大学理工学部船橋キャンパス、2026年3月17日-20日

マイクロ流体リポソームアレイにおける膜孔形成の解析と抗真菌活性増強剤の評価

細川 真穂、章 逸汀、大多和 正樹、佐々木 直樹

令和7年度分析イノベーション交流会、UP-01、東京大学駒場2キャンパス、2026年2月12日-13日 (学生ポスター優秀賞受賞)

Development of a hydrophilic/hydrophobic composite microfluidic device for simplified liposome formation

Yiting Zhang, Naoki Sasaki

2026 The Second International Symposium on Microfluidic Chemical Processing & Technology (MCPT), C7, Hsinchu, Taiwan, January 29-30, 2026

マイクロ流体リポソームアレイによる膜孔形成の解析と抗真菌活性増強剤評価への応用

細川 真穂、章 逸汀、大多和 正樹、佐々木 直樹

化学とマイクロ・ナノシステム学会 第52回研究会、P2-11AM-10、ライトキューブ宇都宮、2025年11月10日-13日

並行多孔膜組み込みマイクロ流体デバイスを用いたポンプ不要な血管新生モデルの構築

加藤 はる香、章 逸汀、佐々木 直樹

化学とマイクロ・ナノシステム学会 第52回研究会、P3-11PM-12、ライトキューブ宇都宮、2025年11月10日-13日

流量制御による水性二相マイクロ液滴の効率的アレイ化と双方向相変換

藤田 夏葉、章 逸汀、佐々木 直樹

化学とマイクロ・ナノシステム学会 第52回研究会、P3-11PM-13、ライトキューブ宇都宮、2025年11月10日-13日

Microchannel width affects liposome size distribution in hydrophilic-hydrophobic composite microfluidic device

Yiting Zhang, Naoki Sasaki

The 29th International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences (μ TAS 2025), J032.W, Adelaide, Australia, November 2-6, 2025

ナノ粒子の取り込み評価が可能な腫瘍細胞スフェロイドアレイの開発

田中 太智、初田 理紗、章 逸汀、佐々木 直樹

第15回CSJ化学フェスタ2025、P8-028、タワーホール船堀、2025年10月22日-24日

Photolithography-free tumor-on-a-chip incorporating immunosuppressive cells for evaluating nanoparticle uptake

Risa Hastuta, Keita Meno, Hiroshi Kamizawa, Yukina Abe, Yiting Zhang, Akihiro Kishimura, Naoki Sasaki

The 29th International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences (μ TAS 2025), L007.W, Adelaide, Australia, November 2-6, 2025

Characterization of liposomes formed by using hydrophilic/hydrophobic composite microfluidic devices

Yiting Zhang, Naoki Sasaki

RSC-JAIMA Symposium on Analytical Chemistry 2025, No. P3-25, Makuhari Messe, Chiba, Japan, September 4-5, 2025.

A microfluidics-assisted liposome array for quantitative analysis of pore-forming agents

Maho Hosokawa, Yiting Zhang, Naoki Sasaki

RSC-JAIMA Symposium on Analytical Chemistry 2025, No. P3-30, Makuhari Messe, Chiba, Japan, September 4-5, 2025.

疑似生体組織の構築に向けたプロテオリポビーズの作製と接着制御の実証

高木 美紀、章 逸汀、佐々木 直樹

令和7年度東日本分析化学若手交流会、P-3、フォレストリゾート コニファーいわびつ、2025年7月11日-12日

免疫抑制細胞を組み込んだマイクロ腫瘍モデルの構築とナノ粒子取り込み評価への応用
初田理紗、目野敬大、神澤大志、安部由紀那、章逸汀、岸村顕広、佐々木直樹
第85回分析化学討論会、B1106、愛媛大学城北キャンパス、2025年5月31日-6月1日

マイクロ流体デバイスを用いるプロテオリポビーズの作製と接着制御の実証
高木美紀、章逸汀、佐々木直樹
化学とマイクロ・ナノシステム学会第51回研究会、3P05、大阪公立大学中百舌鳥キャンパス、2025年5月16日-17日

IV. 卒業研究・学位論文（2025年度）

腫瘍スフェロイド捕捉デバイスの開発と細胞傷害因子および抗腫瘍剤の影響評価
水性二相マイクロ液滴の双方向相変換に基づく細胞内相分離モデルの構築
マイクロ流体リポソームアレイによる膜孔形成の評価
並行多孔膜組み込みマイクロ流体デバイスを用いた血管新生モデルの開発と抗血管新生薬アッセイへの応用
ナノ粒子の取り込み評価が可能な腫瘍細胞スフェロイドアレイの開発

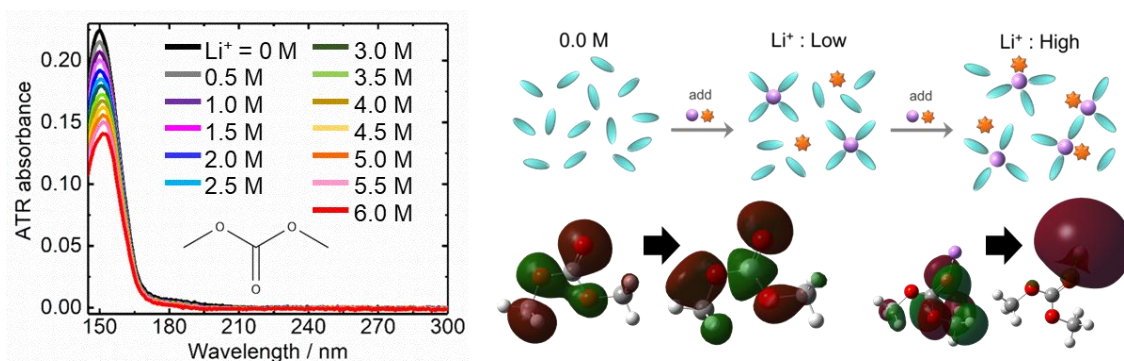
V. 担当講義科目（2025年度）

分析化学1，分析化学3，化学の最前線，化学実験A，化学実験B，化学実験C，研究実験1，研究実験2，自然科学の探求

I. 最近の研究成果**Electronic states and contact ion pair formation in lithium-ion electrolytes investigated by far-ultraviolet spectroscopy and quantum chemical calculations**

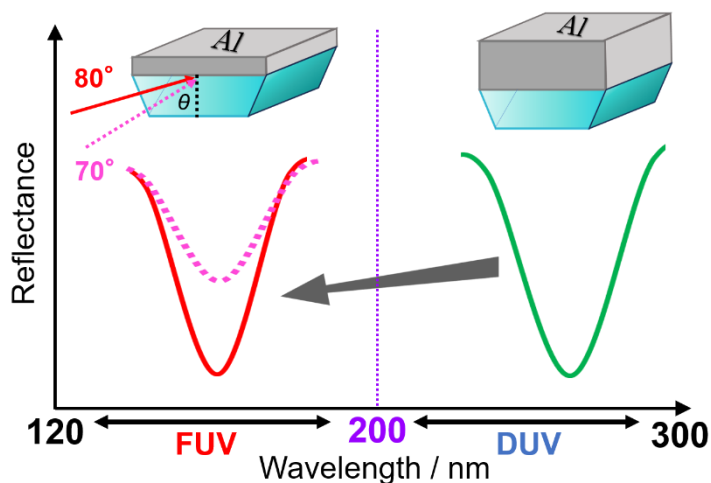
H. Sato, N. Ueno* and I. Tanabe*, Chem. Sci., 16, 11232 (2025).

The electronic states of lithium-ion (Li^+) electrolytes are essential for understanding solvation structures and intermolecular interactions. In this study, far-ultraviolet (FUV) spectroscopy combined with quantum chemical calculations was applied to lithium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide (TFSI)-based electrolytes in dimethyl carbonate (DMC). A redshift at low Li^+ concentrations was attributed to Li^+ -DMC interactions, whereas a blueshift at high concentrations arose from contact ion pair formation and intermolecular electronic excitation between TFSI and DMC. These results show that FUV spectroscopy effectively probes concentration-dependent changes in solvation and ion association, providing insights for battery material design.

**Shifting surface plasmon resonance wavelength to the far-ultraviolet region with aluminum-based sensors**

T. Fujita, N. Ueno and I. Tanabe*, Spectrochim. Acta, Part A, 331, 125792 (2025).

A novel aluminum (Al)-based surface plasmon resonance (SPR) sensor operating in the far-ultraviolet (FUV, <200 nm) region has been developed. By utilizing a thinner Al film compared to previously reported deep-ultraviolet (DUV, <300 nm) SPR sensors, the SPR wavelength was effectively maintained within the FUV region across various liquids. In the presence of resonant molecules, the SPR wavelength shift was notably enhanced. Additionally, optimizing the incident light angle further improves sensitivity owing to narrower and deeper SPR dips. The design adjustments including Al film thickness and incident light angle, were guided by numerical simulations based on the Fresnel equations. These advancements enable the selective detection of molecules with specific FUV absorption characteristics.

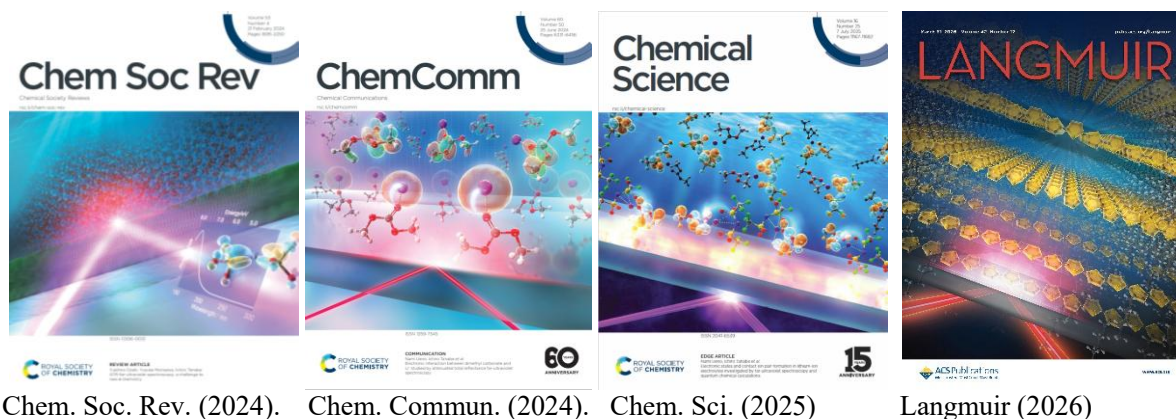


II. 発表論文リスト (2023-2025 年度)

- “An Investigation of Planar Interface-Induced Structural Features in Conjugated Polymer Thin Films using Ultraviolet-Visible Attenuated Total Reflectance Spectroscopy” Y. Tanaka, S. Edamura, S. Nagano, N. Ueno and I. Tanabe*, **Langmuir**, 42, 8584-8591 (2026). [Supplementary Cover Art]
- “Electronic states and contact ion pair formation in lithium-ion electrolytes investigated by far-ultraviolet spectroscopy and quantum chemical calculations” H. Sato, N. Ueno* and I. Tanabe*, **Chem. Sci.**, 16, 11232-11239 (2025). [Outside Front Cover]
- “Shifting surface plasmon resonance wavelength to the far-ultraviolet region with aluminum-based sensors” T. Fujita, N. Ueno and I. Tanabe*, **Spectrochim. Acta, Part A**, 331, 125792 (2025).
- “Molecular insight into the dynamics at the lithium-containing ionic liquid/gold film electrode interface using electrochemical attenuated total reflection spectroscopies” T. Kakinoki, A. Imanishi, S. Kondou, I. Tanabe and K. Fukui*, **Phys. Chem. Chem. Phys.**, 27, 6056-6063 (2025).
- “Surface plasmon resonance (SPR) sensing utilizing far- and deep-ultraviolet light” I. Tanabe*, **Anal. Sci.**, 41, 1213-1220 (2025). [Review]
- “Improved stability of aluminum surface plasmon resonance sensor by protective gold layer” I. Tanabe*, K. Tanaka, T. Hikida, T. Fujita and N. Ueno, **Sens. Actuators A**, 375, 115528 (2024).
- “Electronic interaction between dimethyl carbonate and Li⁺ studied by attenuated total reflectance far-ultraviolet spectroscopy” H. Sato, N. Ueno* and I. Tanabe*, **Chem. Commun.**, 60, 6375-6378 (2024). [Outside Front Cover]
- “ATR-Far-ultraviolet Spectroscopy in Condensed Phase—Challenge to new σ chemistry” Y. Ozaki*, Y. Morisawa* and I. Tanabe*, **Chem. Soc. Rev.**, 53, 1730-1768 (2024). [Review], [Outside Front Cover]
- “Voltammetric and In Situ Spectroscopic Investigations on the Redox Processes of Trioxotriangulene Neutral Radicals on Graphite Electrodes” S. Kitano, I. Tanabe, N. Shioya, T. Hasegawa, T. Murata, Y. Morita, R. Tsuji, and K. Fukui*, **Langmuir**, 39, 6846-6854 (2023).

【その他出版物】

- “遠紫外分光法による電解液中の電子的溶媒和構造研究” 田邊一郎, **BUNSEKI KAGAKU** (分析化学), 75, 13 (2026).
- “紫外プラズモニクスによる蛍光増強” 田邊一郎, **ぶんせき**, 2025 (1), 21 (2025).
- “遠・深紫外域で動作する表面プラズモン共鳴センサー” 田邊一郎, **分光研究**, 73 (4), 107-112 (2024).
- “電気化学ATR紫外界面分光法の開発” 田邊一郎, **光アイアンス**, 35 (6), 12-16 (2024).
- “電気化学界面の減衰全反射型紫外可視分光” 田邊一郎, **表面と真空**, 67, 218-223 (2024).
- “Electrochemical attenuated total reflectance spectroscopy at solid-liquid interface” I. Tanabe, **Encyclopedia of Solid-Liquid Interfaces** (2023).
- “減衰全反射 (ATR) 紫外可視分光法による電極界面イオン液体研究” 田邊一郎, **溶融塩および高温化学**, 66, 95-101 (2023).



III. 学会発表 (2025年度)

- ・ 紫外SPRセンサー開発に向けたチオール表面修飾の検討：高谷映峰, 上野那美, 田邊一郎、日本化学会第106春季年会、日本大学理工学部船橋キャンパス、A1457-3am-07、2026年3月21日 (口頭)
- ・ MD法による単座・二座配位を特徴としたリチウムイオン溶媒和構造研究：平原壮二郎, 上野那美, 田邊一郎、日本化学会第106春季年会、日本大学理工学部船橋キャンパス、A1444-1vn-03、2026年3月19日 (口頭)
- ・ リチウムイオン電池電解液中の溶媒和構造と電子状態研究：田口慶人、上野那美、田邊一郎、日本化学会第106春季年会、日本大学理工学部船橋キャンパス、A1444-1vn-01、2026年3月19日 (口頭)
- ・ PVDFの結晶相による電子状態への影響：上野那美、田邊一郎、第34回ポリマー材料フォーラム、ウイック愛知、1PD82、2025年12月4日 (ポスター)
- ・ Electronic states of lithium salts in organic electrolytes studied by a far-ultraviolet spectroscopy and quantum chemical calculation: I. Tanabe, SCiX 2025 (Covington, USA), October/6/2025 (Invited speaker)
- ・ PVA水和ゲル乾燥過程における電子状態と水素結合の相関解析：上野那美、田邊一郎、第74回高分子討論会、関西大学千里山キャンパス、1F24、2025年9月16日 (口頭)
- ・ Operando ATR-FUV分光法による正極/電解液界面の化学反応解析：太田周志、山岸裕史、鈴木拓哲、樋口敏弘、井垣恵美子、田邊一郎、2025年度電気化学秋季大会、鳥取大学鳥取キャンパス、S11_2_04、2025年9月5日 (口頭)
- ・ 有機半導体積層膜の多角入射減衰全反射紫外可視分光研究：原歩那、上野那美、田邊一郎、2025年光化学討論会、立教大学池袋キャンパス、3P87、2025年9月6日 (ポスター)
- ・ 減衰全反射紫外分光法によるP3HT薄膜の界面構造研究：田中佑樹、上野那美、田邊一郎、2025年光化学討論会、立教大学池袋キャンパス、3P85、2025年9月6日 (ポスター)
- ・ 有機半導体薄膜の紫外可視分光研究と光照射安定性：枝村詩音、上野那美、田邊一郎、2025年光化学討論会、立教大学池袋キャンパス、3P874、2025年9月6日 (ポスター)
- ・ 紫外SPRと分子電子励起吸収の強結合研究：藤田崇義、上野那美、田邊一郎、2025年光化学討論会、立教大学池袋キャンパス、1P26、2025年9月4日 (ポスター)
- ・ Electronic interaction between lithium ion and organic solvent studied by far-ultraviolet spectroscopy: I. Tanabe, SPIE Annual meeting (Honolulu, Hawaii), August/3/2025 (Invited speaker)
- ・ 有機半導体積層膜に対する減衰全反射(ATR)紫外分光の入射角度依存性：原歩那、上野那美、田邊一郎、2025年度日本分光学会年次講演会、東京大学駒場IIキャンパス、PI-13、2025年6月18日 (ポスター)
- ・ 紫外域のSPRとビフェニルの励起子吸収相互作用に関する研究：藤田崇義、上野那美、田邊一郎、2025年度日本分光学会年次講演会、東京大学駒場IIキャンパス、PI-12、2025年6月18日 (ポスター)
- ・ 有機半導体薄膜の減衰全反射(ATR)紫外可視分光研究：枝村詩音、上野那美、田邊一郎、2025年度日本分光学会年次講演会、東京大学駒場IIキャンパス、PI-11、2025年6月18日 (ポスター)
- ・ 異なる分子量のP3HT薄膜の界面構造に対する減衰全反射紫外可視分光研究：田中佑樹、上野那美、田邊一郎、2025年度日本分光学会年次講演会、東京大学駒場IIキャンパス、PI-10、2025年6月18日 (ポスター)
- ・ FUV領域の電子状態に対する溶媒・アニオン依存性をベースとしたリチウム塩電解質の溶媒和構造解析：上野那美、田邊一郎、2025年度日本分光学会年次講演会、東京大学駒場IIキャンパス、AI-04、2025年6月18日 (口頭)

IV. 卒業論文、修士論文 (2025年度)

- ・ ポリフッ化ビニリデン(PVDF)の相転移に伴う電子状態の研究
- ・ カーボネート系電解液溶媒のATR-FUV研究
- ・ MD法による単座・二座配位を特徴としたリチウムイオン溶媒和構造研究
- ・ MD法とATR-FUV法によるLi+-DMC間の電子状態と溶媒和構造の関係解明
- ・ 紫外SPRセンサーにおけるAl薄膜アニーリングの影響
- ・ 紫外SPRセンサー開発に向けたチオール表面修飾の検討
- ・ 有機電解液溶媒とLi⁺の電子的相互作用
- ・ 紫外域におけるAl-SPRのセンサー利用及び励起子相互作用に関する研究
- ・ 減衰全反射紫外可視分光法によるP3HT薄膜の界面構造解析

V. 担当講義科目 (2025年度)

物理化学2, 物理化学3, 化学の最前線, 身近な物質の化学, 理数教育企画, 化学実験A, 化学実験B, 化学実験C, 研究実験1, 研究実験2

VI. その他 (2025年度)

- SciX 2025 Session co-chair -New developments in Electronic Spectroscopy-
- 2025年光化学討論会 実行委員
- ものづくり分析評価技術研究会 ―ラマン分光法の解析―講師
- 日本表面真空学会 関東支部幹事
- 日本分析化学会 関東支部若手の会幹事
- 日本分光学会 紫外フロンティア分光部会幹事、企画委員

I. 最近の研究成果

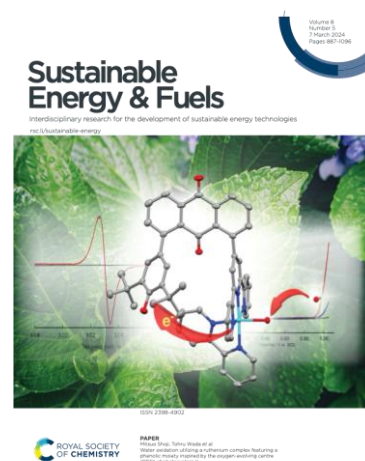
Water oxidation utilizing a ruthenium complex featuring a phenolic moiety inspired by the oxygen-evolving centre (OEC) of photosystem II

Y. Kumagai, R. Takabe, T. Nakazono, M. Shoji, H. Isobe, K. Yamaguchi, T. Misawa-Suzuki, H. Nagao, T. Wada, *Sustainable Energy & Fuels* **2024**, 8, 905-913.

<https://doi.org/10.1039/d3se01610b>

In this manuscript, we present the synthesis of a ruthenium complex $[1]^{2+}$ bearing a phenolic moiety, of which design draws inspiration from the oxygen-evolving centre (OEC) of photosystem II. In comparison to its analogue, $[\text{Ru}(\text{OH}_2)(\text{bpy})(\text{trpy})]^{2+}$ ($[2]^{2+}$, where bpy = 2,2'-bipyridine and trpy = 2,2':6',2''-terpyridine), which lacks the phenolic moiety, $[1]^{2+}$ exhibits a 50 mV reduction in onset-overpotential at pH 10, an augmented turnover number (TON = 1900) and frequency (TOF = 0.54 s^{-1}) for electrochemical water oxidation at pH 9, clearly indicating the promoting influence of the phenolic moiety on catalytic activity. Electrochemical and electron paramagnetic resonance (EPR) experiments have elucidated the formation of a $\text{Ru}^{\text{IV}}=\text{O}$ species with either a phenol cation radical or a phenoxyl radical under oxidative conditions. Theoretical investigations provided robust support for the water oxidation mechanism, predicated upon a nucleophilic attack by OH^- onto $\text{Ru}^{\text{IV}}=\text{O}$, concomitant with electron transfer to the phenol cation radical. This electron transfer effectively lowers the activation energy associated with the nucleophilic attack of OH^- onto $\text{Ru}^{\text{IV}}=\text{O}$.

A ruthenium complex bearing a phenolic moiety inspired by the OEC of photosystem II exhibits a high catalytic activity for electrochemical water oxidation, clearly indicating the promoting influence of the phenolic moiety on the catalytic activity.

**The Catalytic Mechanism of a Highly Active Cobalt Chlorin Complex for Photocatalytic Water Oxidation**

T. Nakazono, R. Mitsuda, K. Hashimoto, T. Wada, H. Tamiaki, Y. Yamada, *Inorg. Chem.* **2024**, 63, 24041-24048.

<https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.4c04764>

Highly active catalysts for electrocatalytic and photocatalytic water oxidation are strongly demanded to realize artificial photosynthesis. A cobalt complex with a chlorin derivative ligand ($\text{Co}^{\text{II}}\text{Ch}$) exhibited high activity for electrocatalytic water oxidation with an overpotential of 0.45 V at pH 9.0. Spectroelectrochemistry (UV-vis) unveiled the formation of two intermediates by successive one-electron oxidations. Also, the Pourbaix diagram depicted by the pH dependence of redox potentials indicated that the water oxidation proceeded after the oxidation of both the central cobalt ion and chlorin ligand with proton-coupled electron transfer (PCET). Then, the photocatalytic activity of $\text{Co}^{\text{II}}\text{Ch}$ was examined for water oxidation using $[\text{Ru}(\text{II})(\text{bpy})_3]^{2+}$ (bpy: 2,2'-bipyridine) and $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ as a photosensitizer and a sacrificial electron acceptor, respectively. The turnover number, turnover frequency, and oxygen yield reached as high as 980, 5.2 s^{-1} , and 98%, respectively, under optimized conditions. The O_2 -evolution rates increased in proportion to the square of the catalyst concentration in the reaction solution, suggesting that the formation of the O-O bond regarded as the rate-determining step of water oxidation proceeded by the interaction of two metal centers (I2M) mechanism in which two molecules of high-valent metal oxo or oxyl radical species react with each other.

II. 発表論文リスト (2023年～2025年度)

“Water oxidation utilizing a ruthenium complex featuring a phenolic moiety inspired by the oxygen-evolving centre (OEC) of photosystem II”. Y. Kumagai, R. Takabe, T. Nakazono, M. Shoji, H. Isobe, K. Yamaguchi, T. Misawa-Suzuki, H. Nagao, T. Wada, *Sustainable Energy & Fuels* **2024**, 8, 905-913. <https://doi.org/10.1039/d3se01610b>

“The Catalytic Mechanism of a Highly Active Cobalt Chlorin Complex for Photocatalytic Water Oxidation”. T. Nakazono, R. Mitsuda, K. Hashimoto, T. Wada, H. Tamiaki, Y. Yamada, *Inorg. Chem.* **2024**, 63, 24041-24048. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.4c04764>

“Electrochemical hydrogen evolution reaction catalysed by a dinuclear cobalt complex with doubly N-confused hexaphyrin” R. Takada, T. Nakazono, T. Nishimura, T. Shiga, M. Nihei, Y. Yamada, T. Wada, *Sustain. Energy Fuels* **2023**, 7, 3603-3608. <https://doi.org/10.1039/D3SE00403A>

“Photochemical CO₂ Reduction to CO Catalyzed by a Doubly N-Confused Hexaphyrin Dinuclear Iron Complex”. T. Nakazono, D. Sugawara, T. Ito, Y. Yamada, T. Wada, *Chem. Lett.* **2023**, 52, 481-484. <https://doi.org/10.1246/cl.230141>

III. 学会発表 (2025年度)

“ビピリジルアントラセンを配位子とするレニウム錯体触媒による光化学的二酸化炭素還元反応” 陳 妍歌、和田 亨、瀧本 翔、有馬 大地、三井 正明、玉置 悠祐、石谷 治、日本化学会第 106 春季年会, 船橋市, 日本大学理工学部船橋キャンパス, 2026 年 3 月 17 日-20 日.

“アントリル基を有するレニウム錯体が触媒する光化学的二酸化炭素還元反応” Yange Chen・石野 遥・瀧本 翔・和田 亨・有馬 大地・三井 正明、第 15 回 CSJ 化学フェスタ、東京都江戸川区、船堀タワー、2025 年 10 月 22 日-24 日 (優秀ポスター発表賞)。

“光増感部位 Ru(bpy)₃ を有する二核ルテニウム錯体による光電気化学的水の酸化反応” 佐々木 玲奈、多治見 朋恵、森田 悠斗、和田 亨、日本化学会第 106 春季年会, 船橋市, 日本大学理工学部船橋キャンパス, 2026 年 3 月 17 日-20 日.

“電子供与性三座配位子を有する二核ルテニウム錯体の酸化反応” 網田 義樹、和田 亨、錯体化学会第 7 5 回討論会, 長崎市, 長崎大学文京キャンパス, 2025 年 9 月 15 日-17 日.

“光増感部位 Ru(bpy)₃ を有する二核ルテニウム錯体による光電気化学的水の酸化反応” 佐々木 玲奈、多治見 朋恵、森田 悠斗、和田 亨、錯体化学会第 7 5 回討論会, 長崎市, 長崎大学文京キャンパス, 2025 年 9 月 15 日-17 日.

“ルテニウム-炭素結合を有する二核ルテニウム錯体の合成と酸化還元挙動” 楠 有祐、和田 亨、錯体化学会第 7 5 回討論会, 長崎市, 長崎大学文京キャンパス, 2025 年 9 月 15 日-17 日.

“天然の光合成酸素発生中心を模倣したフェノール部位を有するマンガン錯体の合成” 山口 真奈、和田 亨、錯体化学会第 7 5 回討論会, 長崎市, 長崎大学文京キャンパス, 2025 年 9 月 15 日-17 日.

“Photochemical Carbon Dioxide Reduction Reaction Catalyzed by the Rhenium Complex Catalyst Bearing Bipyridylanthracene” Yange Chen, Sho Takimoto, Tohru Wada, 錯体化学会第 7 5 回討論会, 長崎市, 長崎大学文京キャンパス, 2025 年 9 月 15 日-17 日.

“光化学的二酸化炭素還元反応に対するアントリルフェニル基を有するレニウム錯体触媒の構造-活性相関” 石野 遥、瀧本 翔、和田 亨、錯体化学会第 7 5 回討論会, 長崎市, 長崎大学文京キャンパス, 2025 年 9 月 15 日-17 日.

“アントリル基を有するレニウム錯体が触媒する光化学的二酸化炭素還元反応” 石野 遥、陳 妍歌、瀧本 翔、和田 亨、有馬 大地、三井 正明、玉置 悠祐、石谷 治、2025 年光化学討論会, 豊島区, 立教大学池袋キャンパス, 2025 年 9 月 4 日-6 日.

IV. 卒業研究・学位論文 (2024年度)

卒業研究

1. 中性領域で水の酸化反応を触媒するフェノール部位を有するルテニウム錯体の開発
2. ビスビピリジルカルボナトを有する二核ルテニウム錯体による水の酸化反応
3. アントリルフェニル基を有するルテニウム錯体触媒による光化学的な二酸化炭素還元反応

4. アントリルピピリジン配位子としたルテニウム錯体触媒による光化学的二酸化炭素還元反応
5. 酸化還元反応を触媒する異種金属間結合を有する白金錯体の合成
6. 弾力性のある二核化配位子で架橋された二核コバルト錯体による酸素の四電子還元反応
7. 光増感部位と電子供与性配位子を有する二核ルテニウム錯体の合成と物性

修士論文

1. 電子供与性三座配位子を有する二核ルテニウム錯体の酸化還元反応
2. 光化学的二酸化炭素還元反応に対するアントリルフェニル基を有するルテニウム錯体触媒の構造-活性相関
3. 天然の光合成酸素発生中心を模倣したマンガン錯体の合成
4. 二核ルテニウム錯体を用いた二元系触媒による光化学的二酸化炭素還元反応

V. 担当講義科目 (2025 年度)

学部：錯体化学 1，錯体化学 2，化学実験A，化学実験B，化学実験C，科学英語（化），化学の最前線

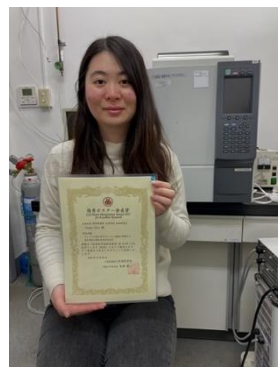
大学院：無機化学応用特論 2

全学共通科目：自然科学の探究

セカンドステージ大学：本科ゼミナール、学問の世界A、学問の世界B

VI. その他

- ・ 助教として、本学の卒業生でもある菅原大地博士が着任しました。
- ・ チン ケンカさんが、第15回CSJ化学フェスタ2025に於いて、優秀ポスター発表賞を受賞しました。
- ・ 論文” Water oxidation utilizing a ruthenium complex featuring a phenolic moiety inspired by the oxygen-evolving centre (OEC) of photosystem II”がイギリス王立化学会Sustainable Energy and Fuels誌のInside Coverに採用されました。
- ・ 2023年度から、和田が立教大学セカンドステージ大学で本科ゼミの指導教員を担当しています。

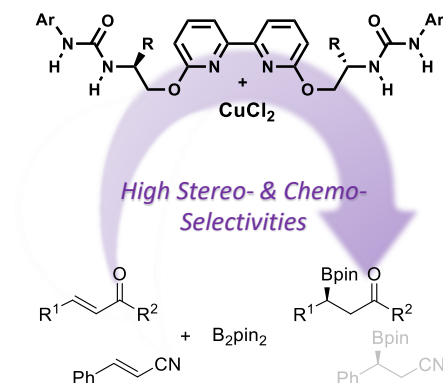


I. 最近の研究成果

Chiral Bipyridine Ligand with Flexible Molecular Recognition Site: Development and Application to Copper-Catalyzed Asymmetric Borylation of α,β -Unsaturated Ketones

Tsutsumi, R.; Taguchi, R.; Yamanaka, M.* *ChemCatChem*, **2022**, *14*, e202101278

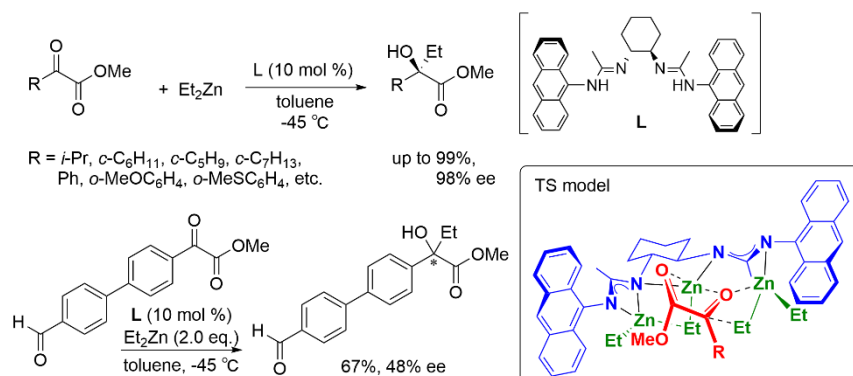
We have developed a novel chiral bipyridine ligand bearing a flexible side chain with a molecular recognition site that enables precise stereocontrol through the cooperative action of metal center and hydrogen bonds. This new chiral ligand was applied to the copper-catalyzed asymmetric borylation of α,β -unsaturated carbonyl compounds. The reaction afforded the corresponding borylated products in good yields with high enantioselectivities. Preliminary studies of the functional group-selective transformation revealed that our newly designed chiral bipyridine ligand has the potential to control chemo- and site selectivity in addition to stereoselectivity.



Multinuclear Zinc Bisamidinate Catalyzed Asymmetric Alkylation of α -Ketoesters and Its Unique Chemoselectivity

Yamanaka, M.*; Inaba, M.; Gotoh, R.; Ueki, Y.; Matsui, K. *Chem. Commun.* **2017**, 53, 7513-7516.

The multinuclear Zn-bisamidinate catalyzed enantioselective addition of Et_2Zn to α -ketoesters has been developed. The steric tuning of two amidinate units as well as multiple coordination on the Zn atoms play a key role in achieving high enantioselectivity (up to 98% ee) and unique chemoselectivity. The present catalyst exhibited the preferential alkylation of α -ketoesters even in the presence of aldehydes.



II. 発表論文リスト (2023-2025年度)

1. “Palladium-catalyzed addition of acylsilanes across alkynes via the activation of a C-Si bond” Inagaki, T.; Ando, T.; Sakurai, S.; Yamanaka, M.; Tobisu, M. *Chem. Sci.* **2023**, *14*, 2706-2712.
2. “A 1,3-boron shift reaction of homoallenylboronates to synthesise 2-boryl-1,3-dienes” Sakamoto, R.; Odagi, M.; Yamanaka, M.; Nagasawa, K. *Chem. Commun.* **2023**, 59, 4217-4220.
3. “Metal-free reduction of CO₂ to formate using a photochemical organohydride-catalyst recycling strategy” Xie, W.; Xu, J.; Idros, U. Md; Katsuhira, J.; Fuki, M.; Hayashi, M.; Yamanaka, M.; Kobori, Y.; Matsubara, R. *Nature Chem.* **2023**, *15*, 794-802.
4. “Chiral Phosphoric Acid-Palladium(II) Complex Catalyzed Asymmetric Desymmetrization of Biaryl Compounds by C(sp³)-H Activation” Uchikura, T.; Kato, S.; Makino, Y.; Fujikawa, M. J.; Yamanaka, M.; Akiyama, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 15906-15911.
5. “Mechanism-guided development of bifunctional cyclooctenes as active, practical, and light-gated bromination catalysts” Nagano, T.; Shimazu, T.; Ono, Y.; Kaneko, K.; Matsubara, S.; Yamanaka, M.; Uraguchi, D.; Asano, K. *Chem. Eur. J.* **2025**, e202404011.
6. “Theoretical investigation on the copper-catalyzed *anti*-selective 1,2-silylboration of internal alkynes” Moniwa, H.; Yamanaka, M.; Shintani, R. *Eur. J. Org. Chem.* **2025**, e202401155.
7. “Mechanism-Guided Development of Bifunctional Cyclooctenes as Active, Practical, and Light-Gated Bromination Catalysts” Nagano, T.; Shimazu, T.; Ono, Y.; Kaneko, K.; Matsubara, S.; Yamanaka, M.; Uraguchi, D.; Asano, K. *Chem. Eur. J.* **2025**, *31*, e202404011.
8. “1,6-Reduction-Type Hydride Shift/Cyclization Process without Adjacent Heteroatom: Stereoselective Synthesis of Hexahydrofluorene Derivatives via Internal Redox Reaction/Friedel-Crafts Reaction Sequence” Matsui, W.; Matsuno, T.; Takiguchi, I.; Anada, M.; Sueki, S.; Makino, K.; Kawasaki-Takasuka, T.; Yamanaka, M.; Mori, K. *Org. Lett.* **2025**, *27*, 6198-6203.

III. 学会発表 (2025 年度)

1. “柔軟構造を有するビピリジン-Ni触媒によるCO₂を用いたアルケンの位置選択的ヒドロカルボキシル化反応” 高野泰英、山中正浩、日本化学会第106回春季年会、2026年3月17日
2. “エントロピー駆動型不斉ホウ素化反応におけるビピリジン—チオウレア配位子の置換基効果” 屋山寧音、山中正浩、日本化学会第106回春季年会、2026年3月17日
3. “β,γ-縮環ブテノリドの環サイズ選択的合成法の開発” 文煥喜、國府田隆司、勅使川原壮平、山中正浩、長光亨、大多和正樹、日本化学会第106回春季年会、2026年3月17日

IV. 卒業研究・学位論文 (2025 年度)

インドールの触媒的C-H結合直接ホウ素化反応における位置選択制の自在制御

ビピリジン—ウレア配位子を用いた銅/ニトロキシルラジカル協奏触媒による選択的空気酸化反応

柔軟なキラル側鎖を有するビピリジン配位子を用いたエナンチオ選択的フッ素化反応の開発

柔軟構造を有するビピリジン—Ni触媒によるCO₂を用いたアルケンの位置選択的ヒドロカルボキシル化反応

4-ピロリジノピリジン触媒による糖類の位置選択的アシル化反応における遷移状態の網羅的探索

V. 担当講義科目 (2025 年度)

有機化学入門、有機化学 1、基礎化学実験、化学実験 C (有機化学実験)、研究実験 1・2、化学の最前線、有機化学基礎特論 (大学院)、理学とキャリア

VI. その他

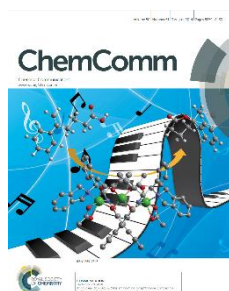
助成金等

- ・ 基盤研究 (C) (研究代表、2025~2027 年度)
「遷移状態安定化に基づく反応部位特異性と立体的多様性を指向した分子触媒の合理開発」

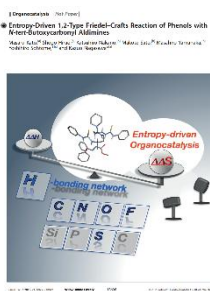
受賞等

- ・ 2007 年度 有機合成化学協会研究企画賞 ダイセル化学工業研究企画賞
「ビスアミジン骨格を設計基盤とする環境応答型複合機能触媒の開

発」表紙掲載



Chem. Comm. **2014**, 50, 8287.



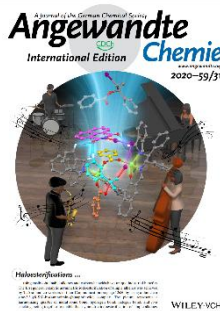
Chem. Eur. J. **2015**, 21, 18606.



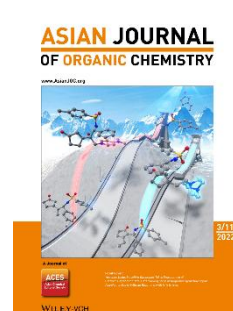
Chem. Eur. J. **2018**, 24, 17027



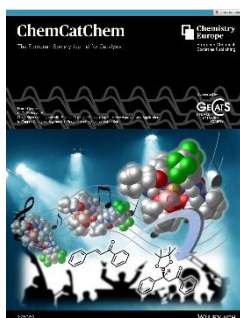
J. Org. Chem. **2019**, 84, 7630.



Angew. Chem. Int. Ed. **2020**, 59, 12680.



Asian J. Org. Chem. **2022**, 11, e2021005.



ChemCatChem, **2022**, 14, e2021012