



名古屋大学物質科学国際研究センターニュース

RCMS NEWS

Nagoya University Research Center for Materials Science

Reports and Communications of RCMS Activities

〒464-8602 名古屋市千種区不老町

Phone: 052-789-5907 / Fax: 052-789-5900

平成29年5月 第18号



CONTENTS

統合物質創製化学研究推進機構 スタート	2
第20回共同セミナー (Core-to-Core Program)	4
研究紹介	6
新任紹介	8
グリーン自然科学国際教育研究プログラム	10
化学測定機器室レポート	11
外国人客員教授紹介	12
RCMSセミナー 一覧	14
ケミストリーギャラリー	18
28年度の出来事	19
スタッフリスト	20



統合物質創製化学研究推進機構 平成28年度 発足

本センターが北海道大学触媒科学研究所、京都大学化学研究所、九州大学先導物質化学研究所と連携する「統合物質創製化学研究推進機構」が平成28年4月に発足いたしました。

同年6月22日（水）には、野依記念物質科学研究館2階講演室において、開所式及び記念講演会を開催、翌日にはキックオフシンポジウムも行い、前年度まで展開していた「統合物質創製化学推進事業」からの流れを滞らせることなく、物質創製における中核的国際研究拠点としての役割を果たしていきます。

【統合物質創製化学研究推進機構 開所式及び記念講演会、
キックオフシンポジウム】

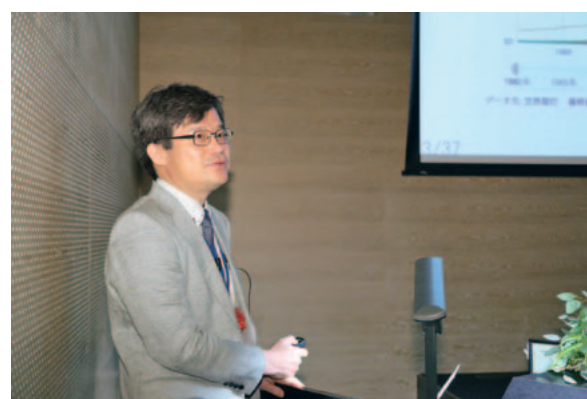
（平成28年6月22日－23日）



巽機構長 挨拶



松尾総長 挨拶



特別講演 天野特別教授



特別講演 野依特別教授



祝辞 牛尾課長（文科省学術機関課）



特別講演 伊丹教授



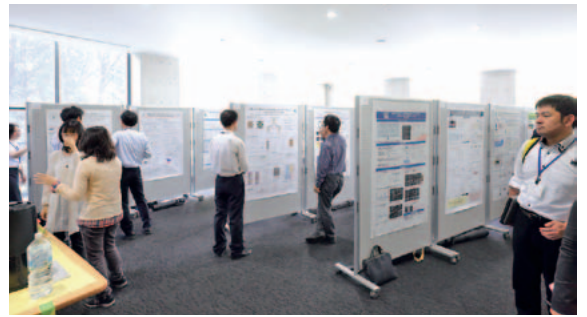
特別講演
Erker教授 (ミュンスター大学)



招待講演
瀧宮グループディレクター (理研)



パネルディスカッション



ポスターセッション

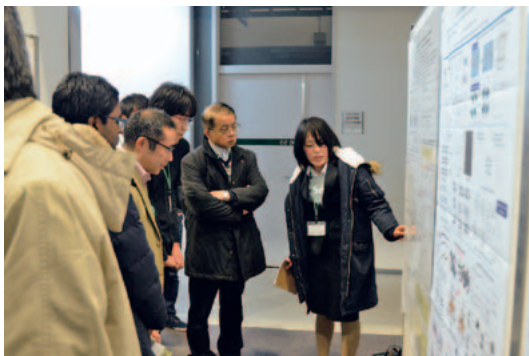
【統合物質創製化学研究推進機構 第2回国内シンポジウム】 *****
(平成29年1月26日-27日)



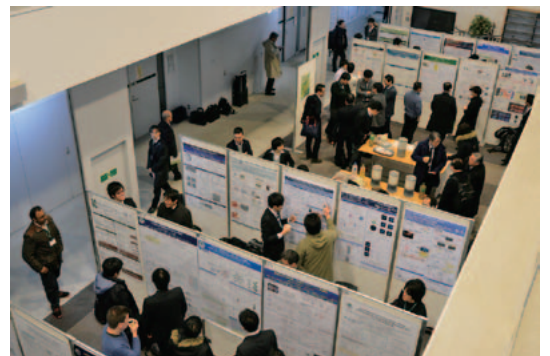
会場



特別講演 小林修教授



ポスターセッション



ポスター会場

Core-to-Core Program

研究拠点形成事業 A. 先端拠点形成型

「革新的触媒・機能分子創製のための元素機能攻究」

第20回 共同セミナー

日本学術振興会の「Core-to-Core Program研究拠点形成事業 A. 先端拠点形成型」において、名古屋大学物質科学国際研究センターと大学院理学研究科物質理学専攻化学系により、山口茂弘教授をコーディネーターとした「革新的触媒・機能分子創製のための元素機能攻究」が推進されています。国際舞台で活躍が期待される優秀な若手研究者に、早い時期から海外での経験を積んでもらおうと展開されてきた「日独共同大学院プログラム」、「頭脳循環を加速する若手研究者戦略的海外派遣プログラム」に続き、平成26年度より本プログラムに採択されました。ドイツのミュンスター大学に加えてベルリン工科大学、またカナダからキーンズ大学、日本側では京都大学も協力機関として加わり、機関同士の共同研究や研究者派遣が活発に行なわれています。

平成28年度は日独共同大学院プログラムから数えて第20回となる共同セミナーが、カナダのキーンズ大学にて開催されました。カナダで開催されるのはこれが初めてで、直前に同大学にて行われた「Boron in the Americas – Boram 2016」に参加した研究者も数多く共同セミナーに参加し、会場はプログラム内で共同研究を推進する研究者に対し聴衆として会場に参加した研究者たちから様々な質問が飛び交う等、活発で大変有意義な共同セミナーが開催されました。

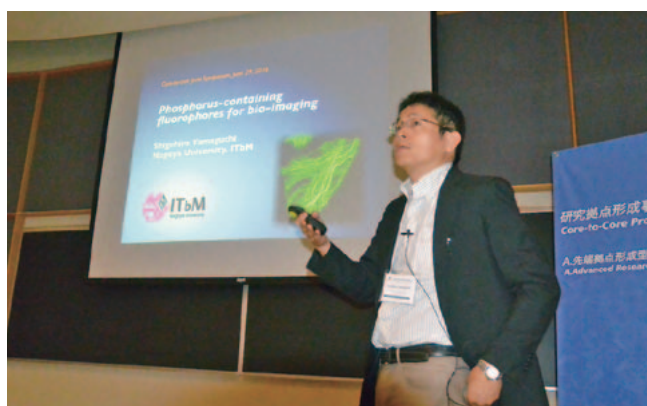
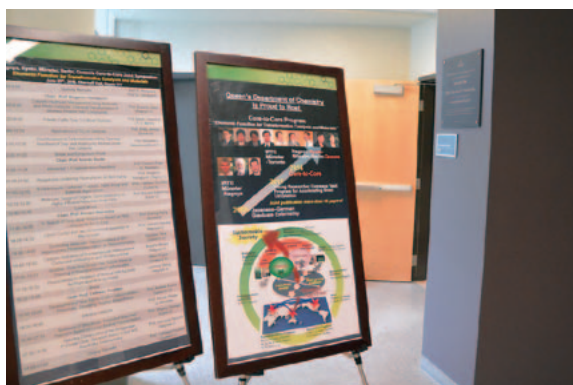
【第20回共同セミナー】

平成28年6月29日（水）カナダ・キーンズ大学にて

日本からの参加者：教員7名、学生4名（口頭発表）

カナダ側参加者：教員20名、学生 約70名

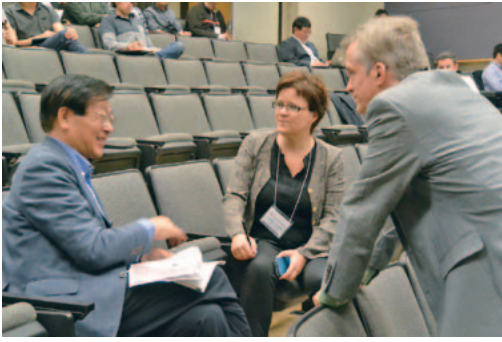
ドイツ側参加者：教員7名、学生5名（全員口頭発表）



日本側コーディネーター 山口教授



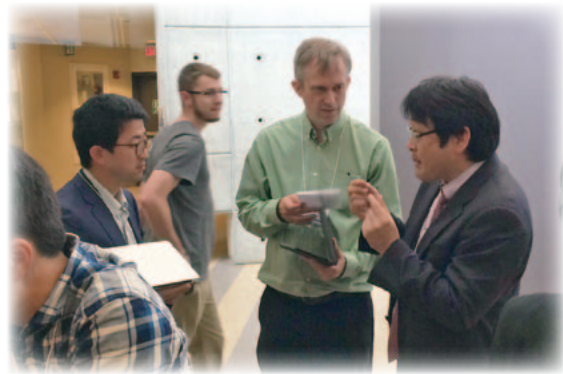
キーンズ大学 Wang教授



三原のぞみ (名古屋大学・学生)



ミュンスター大学 Erker 教授



斎藤進教授



Lyuming Wang
(名古屋大学・学生)



カナダ側コーディネーター
Crudden 教授



集合写真

研究紹介 (物質機能研究分野)

レーザートンネルイオン化イメージングによる分子光励起過程の可視化

(教授 菱川 明栄)

化学結合の切断や生成を決定づけるのは電子である。このため、分子内を動き回る電子の「動画」を撮影し、その詳細を捉えることは化学反応を深く理解する上で重要である。強レーザーパルスを利用したトンネルイオン化イメージングはこれまで基底状態の分子に適用され、分子内の静的な電子分布を可視化するための有用なアプローチの一つである。一方で、光反応などで重要な役割を果たす電子励起状態にこの手法が適用できるかどうかは自明ではない。これは、エネルギーの高い励起状態は実効的なイオン化ポテンシャルが著しく低いため、可視化に必要なトンネル過程だけでなく、多光子吸収によるイオン化の寄与が大きくなることが予想されるためである。本研究では一酸化窒素 (NO) 分子を対象とし、レーザートンネルイオン化イメージングによって、短時間だけ存在する励起分子の電子分布形状を捉えると同時に、光吸収によるその変化を可視化できることを示した^[1, 2]。この手法が化学反応過程における電子の動画を撮影する手法として有用であることを示す成果である。

一酸化窒素 (NO) 分子は深紫外光 (波長 226 nm) 領域に電子励起状態 ($A^2\Sigma^+$) をもつ (図1)。基底状態からの解離性トンネルイオン化 $\text{NO}(X^2\Pi, 2\pi) \rightarrow \text{NO}^+ + e^- \rightarrow \text{N}^+ + \text{O} + e^-$ で生成した N^+ イオンの画像は、レーザー偏

光方向に対して 45° 方向に強いフラグメント分布を示した。トンネルイオン化の起こりやすさは電子の波動関数と印加された電場の方向で決まるため、最外殻分子軌道 (2π) の構造がイオン画像に映し出されている。一方で、深紫外光によって励起した NO 分子 ($A^2\Sigma^+$) からは、 $3s\sigma$ 軌道のリユードベリ性を反映して 0° 方向にピークをもつ幅の広い分布が得られた。これらの結果は基底状態と励起状態の分子軌道と取り入れた弱電場漸近理論 (WFAT) に基づく予想と良い一致を示し、トンネルイオン化によって光吸収による最高占有分子軌道の変化を可視化できることが明らかとなった。



参考文献

- [1] T. Endo, A. Matsuda, M. Fushitani, T. Yasuike, O. I. Tolstikhin, T. Morishita and A. Hishikawa, Phys. Rev. Lett. 116 (2016) 163002 (5 pages).
 [2] 菱川明栄、パリティ 32 (2017) 8-10.

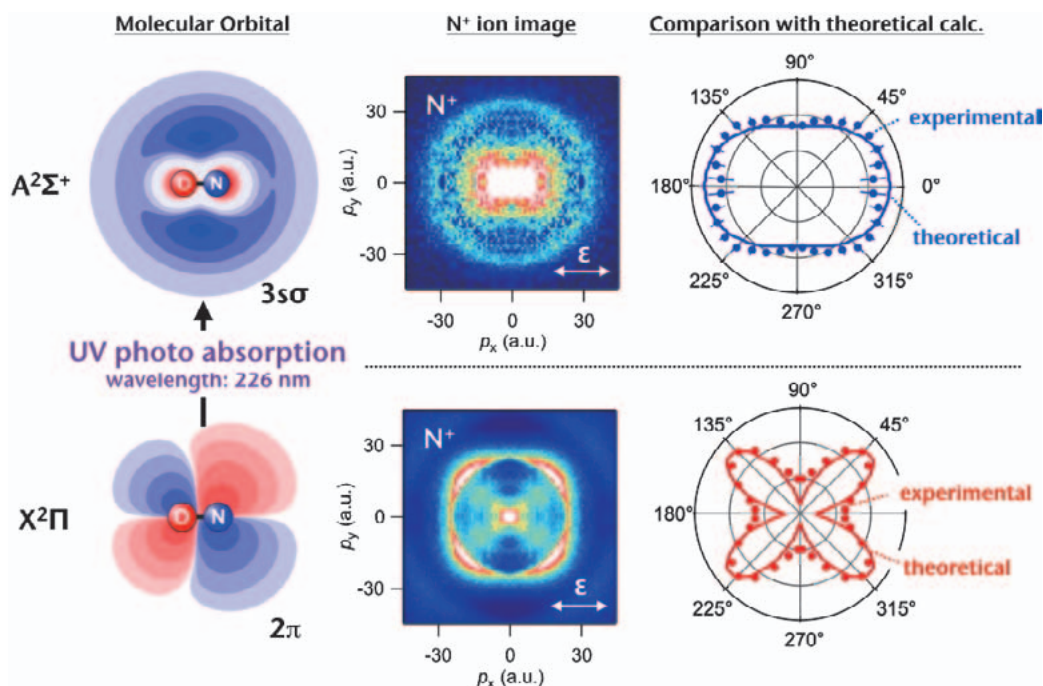


Figure 1. Molecular orbitals before and after UV photoexcitation (226 nm) of NO (left). Experimental results (middle) and comparison with theoretical predictions (right).

研究紹介

(無機物質合成研究分野)

イメージング XAFS法の開発と固体触媒材料の可視化

(教授 唯 美津木)

固体触媒は、多くの化学工業プロセスにおける物質変換の要であり、その安定性、優れた反応特性は、固体触媒特有のものも多い。一方で、空間的な不均質性を内在する固体触媒材料の構造を明らかにすることは容易ではなく、多様な反応性を生み出す固体触媒のマイクロ構造やその挙動の解明は明らかになっていない。X線吸収微細構造 (XAFS) 法は、周期的構造を持たず X線結晶構造解析が適用できない固体触媒等の機能性物質の局所構造解析には、極めて強力なツールの一つであり、多くの触媒材料の構造解析に XAFSが応用されている。一般的な XAFS計測では、mmオーダーの X線ビーム照射範囲に含まれる試料の平均構造情報が得られ、空間的な情報は圧縮されてしまうため、近年、空間情報を反映したイメージング XAFS分光の開発が進められている。

我々は、これまでに高輝度放射光源を用いて様々なイメージング XAFS法を立ち上げ、固体触媒や燃料電池電極触媒膜等の機能性固体材料のマイクロ構造、3次元空間分布の可視化に取り組んできた^[1, 2]。その中でも2次元走査型顕微 XAFS法は、比較的簡便な光学配置でイメージング XAFSが測定できる手法であり、100 nmクラスの集光 X線ナノビームを用いたイメージングに展開されている^[2]。我々は最近、自動車排ガス浄化三元触媒作用の鍵となる Ce系複合酸化物材料に対して、その酸素吸蔵・放出過程 (OSC) における Ceの価数分布を、イメージング XAFSを用いて可視化し、Ce系複合酸化物粒子内部の酸素拡散の様子を捉えることに成功した^[3]。

図1に409×154 nmの集光 X線ビームを用いてイメージングした $Ce_2Zr_2O_x$ ($x = 7-8$) 粒子内部の Ceの価数分布を示す。SEM画像から触媒となる Pt粒子と $Ce_2Zr_2O_x$ 担体粒子の基板上における位置関係を割り出し、表面に Pt粒子が接触担持した $Ce_2Zr_2O_x$ 粒子を選定した。300℃で

完全に試料を還元した後、酸素による酸化を行うと、 Ce^{3+} から Ce^{4+} への酸化に伴って $Ce_2Zr_2O_x$ 格子内部に酸素が吸蔵される。150℃での酸化では酸素吸蔵過程が完結せず、その状態における Ce L_{III} 端顕微 XAFSのイメージング像では、粒子内の Ce 価数が 3+ から 4+ の間で不均質に分布している様子が観察された (図1(1))。複数の $Ce_2Zr_2O_x$ 粒子において粒子内での不均質な価数分布が観察されたことから、酸素吸蔵過程では、Ptの接触位置とは無関係に酸化が進行し、 $Ce_2Zr_2O_x$ 粒子の表面欠陥やドメインの不均質性に依存した不均質な反応様式をとることが示唆された。

一方、水素による還元を行うと、 Ce^{4+} から Ce^{3+} への還元に伴って $Ce_2Zr_2O_x$ 格子内部の酸素が消費され、酸素放出が進行する。この過程では、粒子毎に明確な反応性の違いが観察され、Ptが接触していない $Ce_2Zr_2O_x$ 粒子では、Ceの価数変化が大変遅かった。Ptが接触している粒子では、還元は完結するもののその速度には明確な差異がみられ、Ptの接触位置から Ceの還元が進行している様子が可視化された (図1(2))。これらの結果は、 $Ce_2Zr_2O_x$ 粒子の酸素放出過程では、表面の欠陥サイトからの反応は遅く、触媒である Pt上で水素が解離して $Ce_2Zr_2O_x$ 粒子界面から Ceの還元が始まり、粒子内部の酸素拡散を経て、酸素放出が進行していくことを示唆している。表面に担持された金属触媒は、不均質な固体粒子毎の反応性を補い、粒子全体の反応性向上に寄与しているものと考えられる。

イメージング XAFSは、これまで知ることのできなかった固体に内在する様々な現象・反応性を解明し、その機能の向上に向けた基盤構造情報を提供できる可能性を有しており、様々な先端材料の構造・化学状態の3次元的な可視化を実現したい。

参考文献

- [1] T. Saida, O. Sekizawa, N. Ishiguro, K. Uesugi, M. Hoshina, T. Uruga, S. Ohkoshi, T. Yokoyama, and M. Tada, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51**, 9361-9365 (2012) (Hot paper).
- [2] N. Ishiguro, T. Uruga, O. Sekizawa, T. Tsuji, M. Suzuki, N. Kawamura, M. Mizumaki, K. Nitta, T. Yokoyama, and M. Tada, *ChemPhysChem* **15**, 1563-1568 (2014).
- [3] H. Matsui, N. Ishiguro, K. Enomoto, O. Sekizawa, T. Uruga, and M. Tada, *Angew. Chem. Int. Ed.* **55**, 12022-12025 (2016).

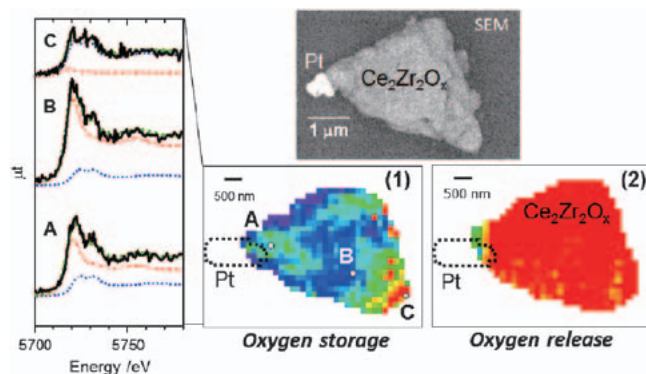


Figure 1. Ce L_{III} -edge scanning nano-XAFS spectra (left), SEM (top), and Ce oxidation-state mappings (1 and 2) of a Pt-attached $Ce_2Zr_2O_x$ particle. (1) Oxygen storage process, (2) oxygen release process.

新任紹介 (有機物質合成研究分野)

リビング超分子重合を機軸とする材料設計に向けて

(助教 大城 宗一郎)

π 電子系化合物が規則的に並んだ分子集合体は、個々の分子を超えた新しい光・電子機能を示す。このような組織体を扱う超分子化学の分野では、分子同士が認識し合う非共有結合について理解が深まり、熱力学平衡下における集合体構造と機能に関する研究が展開されてきた。中でも、分子が一次元に配列した超分子ポリマーは、光・電子機能の設計性や自己修復能が高く、この研究分野の鍵材料として有望である。超分子重合メカニズムなどの基礎的知見が蓄積され、近年では、複数の平衡反応が交錯する複雑系についても解明が進んでいる。

私は、物質・材料研究機構にて竹内正之グループリーダー、杉安和憲主幹研究員のご指導のもと、ポルフィリン類の超分子重合メカニズムについて、熱力学および速度論の観点から研究を行った。その結果、ナノ粒子状集合体の速度論的形成と、熱力学に安定な超分子ポリマーの形成に関わる二種類の化学平衡が交錯する現象を発見した(図1)。興味深いことに、ナノ粒子状集合体の溶液に超分子ポリマーの短い断片(種、たね)を添加すると超分子重合を意図的に開始でき、種から連鎖重合的に成長することを明らかにした。この速度論的アプローチの最大の特徴は、長さ分布の狭い超分子ポリマーが得られることであり、リビング超分子重合法として世界に先駆けて報告した^[1]。

Würzburg大学では、Frank Würthner先生のご指導のもと、ペリレンビスイミド(PBI)類の精密超分子重合に関する研究を行った。平面な π 共役骨格をもつPBIは、強い π スタッキング相互作用により自発的に集積しやすい^[2]。これに対して、アミド基とPBIのイミド基の分子内

水素結合により特殊なモノマー構造を形成させると、高い会合能が一時的に抑制されることを見出した。また、得られた非平衡系を利用して、超分子重合過程を速度論的に制御できることを実証した^[3,4]。

以上のように、ポルフィリン類やペリレンビスイミド類の自己組織化における非平衡系を利用し、速度論的な超分子重合法を確立してきた。非平衡系の実現には、超分子ポリマーに成長するモノマー分子構造と成長しない構造の二状態間を動的に変化する分子設計が有効である。この知見をもとに、どんな π 電子系化合物でも精密に超分子重合できる分子ユニットを提案し、この重合法の汎用性を広げるべく研究を進めている。また、従来の熱力学的手法に対し、時間軸を考慮した精密超分子重合だからこそ創出される新たな集合体構造とその物性・機能を明らかにしたいと考えている。



参考文献

- [1] Ogi, S.; Sugiyasu, K.; Manna, S.; Samitsu, S.; Takeuchi, M. *Nat. Chem.* **2014**, *6*, 188-195.
- [2] Würthner, F.; Saha-Möller, C. R.; Fimmel, B.; Ogi, S.; Leowanawat, P.; Schmidt, D. *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 962-1052.
- [3] Ogi, S.; Stepanenko, V.; Sugiyasu, K.; Takeuchi, M.; Würthner, F. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 3300-3307.
- [4] Ogi, S.; Stepanenko, V.; Thein, J.; Würthner, F. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 670-678.

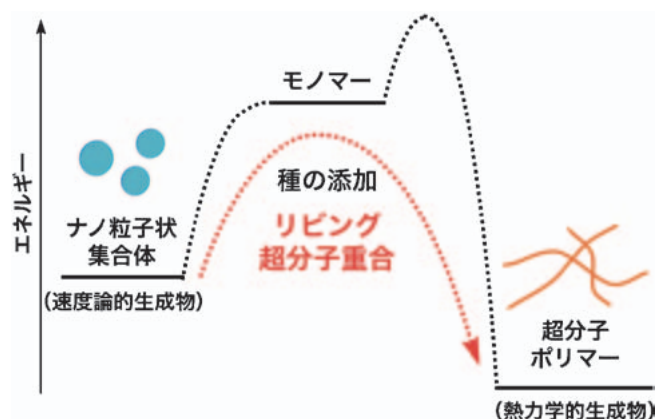


図1 二種類の集合体形成過程が交錯するエネルギーランドスケープ

新任紹介

(有機物質合成研究分野)

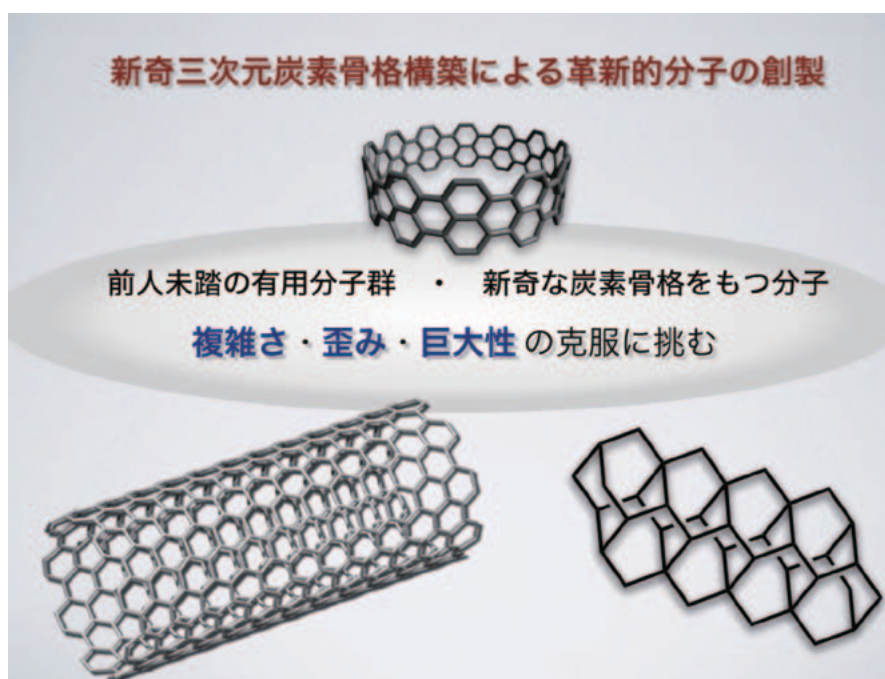
新奇三次元炭素骨格構築による革新的分子の創製

(助教 八木 亜樹子)

多くのモノの基本単位は分子であり、精密な分子合成はモノづくりの根幹を成す。有機合成化学の進展によって現代では、複雑な構造をもつ分子でも精密に合成することが可能になった。一方で、優れた機能が予測されながらも合成されていない分子も未だに存在する。そのような前人未踏分子の多くは、複雑さ、高歪み、巨大性などの要因から構築することが困難な炭素骨格を有している。従って、それら合成を阻む要因を克服することのできる炭素骨格構築法の開発は未だ強く求められている。近年の炭素-水素結合直接変換法を始めとする種々の官能基変換手法の発展を鑑みても、複雑分子の基本炭素骨格を効率的に組み上げることができれば、数々の有用分子の合成が可能になると考えられる。また、新奇な炭素骨格をもつ分子は新たな科学を拓き、産業に革新をもたらす潜在性を秘めている。



我々の研究グループでは、これまでにない三次元炭素骨格を構築する手法の開発に取り組んでおり、それによる革新的分子の創製を目指している。本研究を通して有機合成の底力を向上させるとともに、様々な領域での応用展開につなげていく。



グリーン自然科学国際教育研究プログラム

グリーン自然科学国際教育研究プログラムでは、①最先端基礎自然科学研究の実践と、②それを可能にする十分なコースワーク履修と、③大学院リテラシー教育（英語研修や海外留学、スキルセミナーなど）を3本の柱とし、「全体を見渡す科学力と社会性」、「基礎研究から応用成果を引き出す展開力」、「地球規模で活動する国際性」を涵養し、次世代の環境分野を担う「シーズを産業に育てる企業研究者」、「新発想を学術領域に育てるアカデミア研究者」、「国際社会で活躍する環境科学コーディネーター・メンター」の育成を目指しています。

平成28年度は、63名に海外で行われる国際会議等への参加のための短期渡航支援を行い、14名には、海外の大学等に2か月以上滞在して研究を行う、長期渡航支援を行いました。また、学内において様々な分野の国際シンポジウムを5回主催・または共催し、多くの学生が参加しました。さらに、アメリカ・ノースカロライナ（NC）州におけるリーダーシップ研修に11名が参加し、リーダーシップ、起業、技術移転等の各種講義に加え、現地の大学の研究室訪問では、プレゼンや議論を通じて研究者と交流し、企業の訪問では、アメリカでのビジネス環境について学ぶ機会を得ました。当地を訪問中の松尾総長に学生のプレゼンを聴いてもらいました。



海外長期滞在研究



ポスター賞



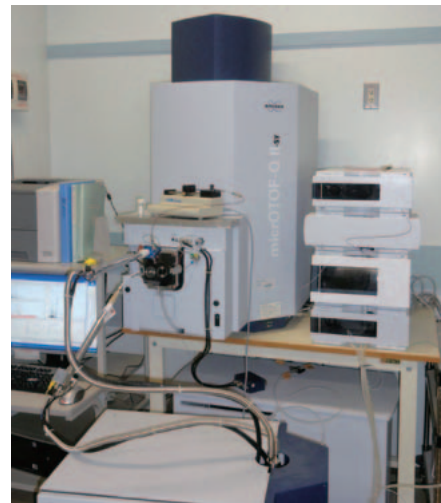
NC研修 IBM WATSONの見学



NC研修 学生のプレゼンを聴く松尾総長ら

化学測定機器室レポート

化学測定機器室は、核磁気共鳴装置（NMR）、質量分析装置（MS）、分光分析装置などの分子構造を解析するための機器分析装置が集められた全学共同利用施設です。化学測定機器室では、これらの測定機器の維持管理、測定方法の講習、特殊測定相談、依頼測定を通して、教職員・研究者・学生などの利用者に対してサービスを提供しています。平成28年度は、「機器室利用状況」に示しましたように学内全体で71の研究グループに利用登録して頂きました。一年間の利用登録者の教職員、学生、研究者の皆さんの数は、718人でした。



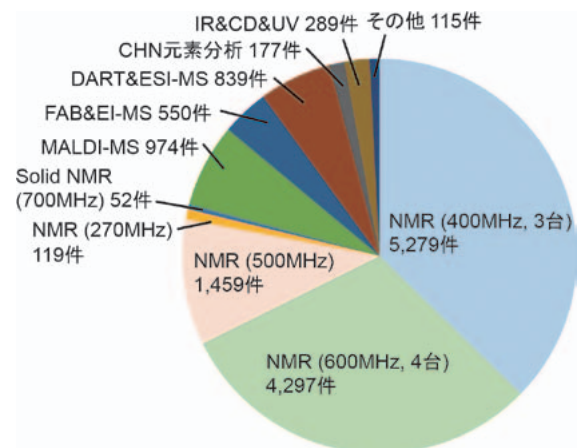
CSI-MS (microTOF-QII, Bruker)



NMR (ECA-600, JEOL)

【機器室利用状況】

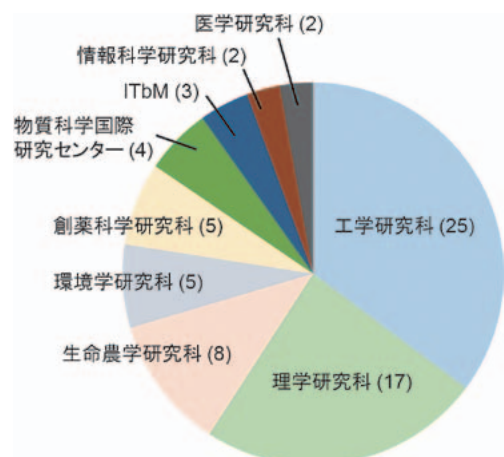
平成28年度（28年4月～29年3月）の年間利用状況について以下紹介します。



測定機器別測定件数



CHN 元素分析 (MT-6, YANACO)



部局別利用登録状況
(計 71グループ、718人)

外国人客員教授紹介

Prof. Eric Rivard

エリック・リバード
アルバータ大学 准教授、カナダ

滞在期間：平成28年4月25日～平成28年6月26日
研究テーマ

「機能性典型元素化合物の創製と機能評価」



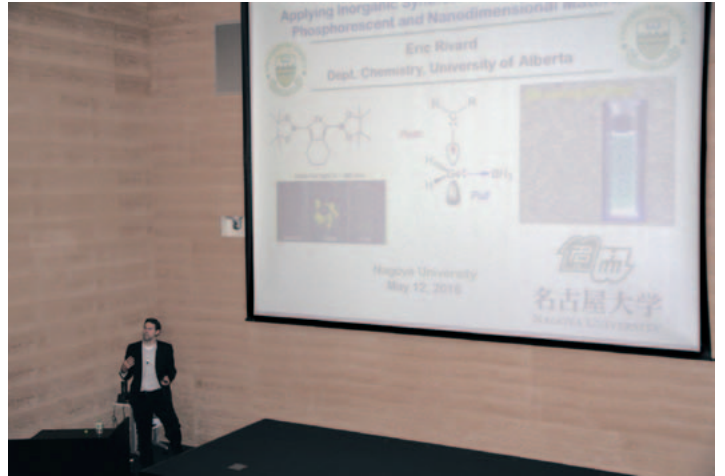
カナダ アルバータ大のEric Rivard博士に、客員准教授として2016年4月25日から2ヶ月間物質科学国際研究センターに滞在いただきました。Rivard博士は、無機化学、なかでも特に、典型元素を基軸とした機能分子化学の若い世代の世界的トップランナーであり、今回の滞在でも、機能性典型元素化合物の開発研究に従事しました。

Rivard博士の研究は、触媒から電子材料の開発まで機能性典型元素化学の幅広い分野をカバーし、世界的にも大いに注目されています。例えば、博士の最近の室温でリン光を示すテルル化合物の発見は、典型元素化学分野だけでなく材料科学の分野にもインパクトを与えましたし、活性ヒドリドの化学やオリゴゲルマニウム合成化学も大きな注目を集めています。これらの化学の深化を目的に本センターに滞在されました。

滞在中は、“Applying Inorganic Synthesis to Gain Access to New Phosphorescent and Nano-dimensional Materials”と題した講演会で最新の成果をご披露いただくだけでなく、研究室のグループセミナーにも幾度も参加いただき、我々の研究に対しても貴重なコメントをいただきました。また、大学院博士前期課程において、「先端高分子科学」の授業もしていただき、参加した学生は、ネイティブでありながらわかりやすい英語で明快に説明される講義を堪能しました。さらに、博士はとても気さくな方で、研究室のパーティーにも多く参加いただき、学生たちと夜遅くまでフランクに話していただき、エンカレッジしていただきました。Rivard博士には、2ヶ月と短い期間でしたが、RCMSの研究活動に大きく寄与いただき、深く感謝いたします。



エリック先生の歓迎会



講演会



大城助教と一緒に



山口教授と一緒に



送別会 学生と乾杯



Eric先生ありがとう

RCMSセミナー

平成28年4月19日 Prof. Michael Haley
 (Department of Chemistry and Biochemistry, University of Oregon, USA)
 “Indenofluorenes and Quinoidal Analogues
 – A New Class of Electron-Accepting Materials”



ITAMI
ERATO-ITbM-IGER-RCMS
Seminar

Prof. Michael Haley
 Department of Chemistry and Biochemistry
 University of Oregon
 USA

*Indenofluorenes and Quinoidal Analogues –
 A New Class of Electron-Accepting Materials*

Date: Apr 19, 2016
 Time: 16:00~17:30
 Lecture Room
 Noyori Materials Science Laboratory 2F
 Language: English

Contact:
 Kenichiro Itami
 Email: itami@chem.nagoya-u.ac.jp
 Yasutomo Segawa
 ysegawa@nagoya-u.jp
 Aki (Matsuoka) Miura
 matsuoka.aki@f.mbox.nagoya-u.ac.jp



RCMS-IGER-ITbM Seminar

Prof. Eric Rivard
 University of Alberta, Canada

*“Applying Inorganic Synthesis to Gain Access to
 New Phosphorescent and Nanodimensional Materials”*

May 12, 2016 (Thur) 16:00~17:30
 Noyori Materials Science Laboratory 2F,
 Lecture Hall
 Host: Shigehiro Yamaguchi (789-2291)

IGER
 NAGAYA UNIVERSITY

プラットフォーム・グリーン物質変換コース

平成28年5月12日 Prof. Eric Rivard
 (University of Alberta, Canada)
 “Applying Inorganic Synthesis to Gain Access to
 New Phosphorescent and Nanodimensional Materials”

平成28年7月19日 Dr. Michael J. Shevlin
 (Senior Scientist, Chemistry MSD, USA)
 “High-Throughput Experimentation-Enabled Reaction Discovery,
 Development, and Mechanistic Elucidation: Cobalt- and Nickel-
 Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of Olefins”



PS-IGER-RCMS SEMINAR

Dr. Michael J. Shevlin
 Senior Scientist, Chemistry
 MSD, USA

*“High-Throughput Experimentation-Enabled Reaction Discovery,
 Development, and Mechanistic Elucidation: Cobalt- and Nickel-
 Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of Olefins”*

July 19, 2016 (Tue) 16:30-
 Noyori Materials Science Laboratory 2F, Lecture Room

Host: Masato Kitamura
 Graduate School of Pharmaceutical Sciences

IGER



CtC • RCMS • IGER Seminar

**“Synthesis and Structure of
 Group 16 systems”**

Lecturer : Prof. J Derek Woollins
 (University of St Andrews)
 Date : Wed. 31st Aug. 15:30 – 17:00
 Place : Chemistry Gallery

This talk will describe the synthesis, structural studies and applications of sulfur, selenium and tellurium compounds. Small molecule S-N chemistry, metal-S-N chemistry, P-S, P-Se and P-Te heterocycles as well as imidylsulfonate complexes will be described. Recent work on developing automated chemical crystallography (joint with A.M.Z. Slawin) will also be described.

Contact: Kunio Awaga (ext. 2487)

平成28年8月31日 Prof. J Derek Woollins
 (University of St Andrews)
 “Synthesis and Structure of Group 16 systems”

RCMS Nagoya University

Platform: Theoretical Chemistry Colloquium
Nano-Energy

October 14, 2016 (Fri), 16:00-17:00
RCMS, 2nd floor, Chemistry Gallery

Low dimensional nanomaterials. Theoretical predictions and experimental support

Dr. Dmitry G. Kvashnin
Emanuel Institute of Biochemical Physics Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia & National University of Science and Technology "MISIS", Moscow, Russia

Abstract: Successful synthesis of graphene opens a new field in material sciences - the field of low dimensional materials. Nowadays a high number of scientific groups over the world take many attempts to fabricate and investigate novel two dimensional materials with unexpected physical and chemical properties. This presentation is devoted to the theoretical investigation of low dimensional materials with various compounds. Using classical molecular dynamic calculations the unusual effect of hardening of graphene with the low concentration of vacancy defects was described from atomistic point of view (J. Phys. Chem. Lett., 6, 2384 (2015)). By means of ab initio calculations the physical properties of novel two-dimensional materials based on bilayered graphene and copper oxide were studied in details. All obtained results were confirmed by experimental data (Nano Research 8 (4)-1250 (2015), NanoScale (2016), submitted).

Contact: Stephan Irie
siri@itbm.nagoya-u.ac.jp Tel.: 6397

平成28年10月14日 Dr. Dmitry G. Kvashnin
(Emanuel Institute of Biochemical Physics Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia & National University of Science and Technology "MISIS", Moscow, Russia)
"Low dimensional nanomaterials. Theoretical predictions and experimental support"

IGER-ITbM-RCMS Seminar

Prof. Evamarie Hey-Hawkins
University Leipzig, Germany



"Carborane Meets Phosphorus"

October 18, 2016 (Tue) 13:00-14:30
Institute of Transformative Bio-Molecules (ITbM) 1F, Lecture Room

Host: Shigehiro Yamaguchi (789-2291)


IGER Nagoya University
プラットフォーム: グリーン物質変換コース

平成28年10月18日 Prof. Evamarie Hey-Hawkins
(University Leipzig, Germany)
"Carborane Meets Phosphorus"

IGER and RCMS Seminar

"Structural Diversity in Copper(II) Complexes Influenced by External Factors - Structural and Magnetic Studies."

Assist. Prof. Sailaja S. Sunkari
Department of Chemistry,
Mahila Mahavidyalay of Banaras Hindu University, India



Nov. 1st, 2016 (Tue) 16:00-17:00
Noyori Materials Science Laboratory
Chemistry Gallery

Contact: Satoshi Muratsugu (6093)
E-mail: smuratsugu@chem.nagoya-u.ac.jp

平成28年11月1日 Assist. Prof. Sailaja S. Sunkari
(Department of Chemistry, Mahila Mahavidyalay of Banaras Hindu University, India)
"Structural Diversity in Copper(II) Complexes Influenced by External Factors - Structural and Magnetic Studies"

平成28年11月4日 Prof. Roald Hoffmann
(Novel Laureate (1981, Chemistry), Cornell University, USA)
"Two new games for carbon, we hope"

ITbM-RCMS Seminar



Prof. Roald Hoffmann
Novel laureate (1981, Chemistry)
Cornell University, USA

"Two new games for carbon, we hope"

Date: 4 November, 2016
Time: 13:30-15:30
Lecture Room
Noyori Materials Science Laboratory 2F
Language: English

Contact:
Kenichiro Itami
E-mail: itami@chem.nagoya-u.ac.jp

IGER & RCMS Seminar
Engineered metalloenzymes for selective carbene and nitrene transfer reactions



Prof. Rudi Fasan
 University of Rochester
 Nov. 8, 2016 16:00 ~ 17:00
 Noyori Materials Science Laboratory
 Chemistry Gallery




up to 99% conversion
 up to 11,300 turnovers
 $k_{cat}/K_M = 4.8 \times 10^5 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ (benzyl azide)

Contact: Osami Shoji
 E-mail: shoji.osami@a.mbox.nagoya-u.ac.jp

平成29年11月8日 Prof. Rudi Fasan
 (University of Rochester)
 “Engineered metalloenzymes for selective carbene and nitrene transfer reactions”

平成28年11月9日 Professor Mark Gandelman
 (Technion – Israel Institute of Technology, Israel)
 “New Bonding and Reactivity: Chemistry of N-Cations and N-Radicals”

IGER & RCMS Seminar



Professor Mark Gandelman
 Technion – Israel Institute of Technology
 Israel


“New Bonding and Reactivity: Chemistry of N-Cations and N-Radicals”

November 9th (Wed) 2016, 15:30–17:00
 Noyori Materials Science Laboratory 2F
 Conference Room

Contact: Susumu SAITO, ext. 5945
 : saito.susumu@f.mbox.nagoya-u.ac.jp

RCMS • IGER Seminar

“LANTHANIDES-TTF COMPLEXES DISPLAYING SINGLE MOLECULE MAGNET BEHAVIOUR AND LUMINESCENCE”



Lecturer : Prof. Lahcène OUAHAB
 (Université de Rennes)
Date : Wed. 9th Nov. 15:30 – 17:00
Place: Noyori Materials Science Laboratory Chemistry Gallery

Lanthanide-based complexes have greatly contributed to the development of molecular magnets in the last decade and more particularly in the branch of single molecule magnets (SMMs). The main reasons are their large magnetic moments associated to their intrinsic large magnetic anisotropy. The splitting of the multiple ground state of a singlet in a given environment is responsible of the trapping of the magnetic moment in one direction in SMMs. However, the influence of the crystal field effects on the magnetic anisotropy are not so common. A better understanding of the magneto-structural correlations in lanthanide-based complexes should provide tools to improve their potentialities.


In this presentation we will focus on the specific magnetic properties of TTF-based lanthanide mononuclear and polynuclear complexes. We will show how optimize the SMM behavior playing on: i) the modulation of the supramolecular effects via chemical modification of the TTF ligand, ii) single molecular engineering modifying the structure, distribution and symmetry of the coordination polyhedron, iii) magnetic dilution (reduction and doping) and iv) entropic enhancement of the dysprosium.

Contact: Kunio Awaga (ext. 2487)

平成28年11月9日 Prof. Lahcène OUAHAB
 (Université de Rennes)
 “LANTHANIDES-TTF COMPLEXES DISPLAYING SINGLE MOLECULE MAGNET BEHAVIOUR AND LUMINESCENCE”

平成28年11月16日 Prof. Amir H. Hoveyda
 (Department of Chemistry, Boston College, USA)
 “New Concepts, Catalysts and Methods in Catalytic Olefin Metathesis”

PS-IGER-RCMS SEMINAR



Prof. Amir H. Hoveyda
 Department of Chemistry
 Boston College, USA

“New Concepts, Catalysts and Methods in Catalytic Olefin Metathesis”

November 16, 2016 (Wed) 14:00-
 Noyori Materials Science Laboratory 2F, Lecture Room

Host: Mesato Kitamura
 Graduate School of Pharmaceutical Sciences

IGER & RCMS Seminar

光または電気化学的活性化を用いた
バイオインスパイアード触媒の創製と機能開拓



九州大学大学院工学研究院
久枝良雄 先生

2016年11月16日 16:30 ~ 18:00
野依記念物質科学研究館講演室




IGER Nagoya University
Contact: Yoshihito Watanabe
E-mail: yoshi@nucc.cc.nagoya-u.ac.jp

平成28年11月16日 久枝 良雄 教授
(九州大学大学院工学研究院)
“光または電気化学的活性化を用いた
バイオインスパイアード触媒の創製と機能開拓”

平成29年1月23日 Prof. Jonathan Nitschke
(University of Cambridge)
“How Does Self-Assembly Work in Groups?
Towards an Understanding of Molecular Sociology”

IGER & RCMS Seminar RCMS

“How Does Self-Assembly Work in Groups?
Towards an Understanding of Molecular Sociology”




Prof. Jonathan Nitschke
University of Cambridge

Jan. 23, 2017 16:30-17:30
Noyori Materials Science Laboratory 2F, Lecture Room

Contact: Kentaro Tanaka (2940)
E-mail: kentaro@chem.nagoya-u.ac.jp

CiC-RCMS-IGER Seminar IGER

“Tales from the Supramolecular Photochemistry Crypt”



Lecturer : Dr. Eli Zysman-Colman
(University of St Andrews)
Date : Tue. 24th Jan. 15:30 – 17:00
Place : Lecture Room No3 (C-219)

In this talk, I will outline strategies for the supramolecular assembly and pre-organization of photoactive materials, discuss and contrast their optoelectronic properties with those of reference small molecule compounds. The motivation for this work is to (1) improve the performance of electrochromic devices, (2) to develop selective sensors and photoredox catalysts, and (3) on a more fundamental level, to understand how the photophysical properties of the assembly can be modulated as a function of the structure of its constituent components.

Contact: Kunio Awaga (ext. 2487)

平成29年1月24日 Dr. Eli Zysman-Colman
(University of St Andrews)
“Tales from the Supramolecular Photochemistry Crypt”

平成29年2月22日 北川 宏 教授
(京都大学大学院理学研究科)
“元素間融合を基軸とする物質開発と応用展開”

RCMS & IGER Seminar IGER

**元素間融合を基軸とする
物質開発と応用展開**



京都大学大学院理学研究科 教授
物質科学国際研究センター 客員教授

北川 宏 先生

日時：2017年2月22日（水）16:00-17:30
場所：野依記念物質科学研究館2階講演室

連絡先：唯 美津木（内線6200）

ケミストリーギャラリー

ケミストリーギャラリー（野依記念物質科学研究館2階）には、平成28年度も大変多くの見学者が訪れました。特に日本人がまたノーベル賞受賞者に選ばれたこともあり（北里大学・大村智名誉教授・ノーベル生理学・医学賞）年間の来場者は2万人を超えました。

日本人の受賞者が選出された年にだけケミストリーギャラリーにお披露目するノーベル賞授賞式会場の再現展示では、多くの方が写真撮影する様子がみられ、平成29年3月末までに23,206名（入退室自動カウンター調べ）の方々にご来場いただきました。

特に名古屋大学が一般開放された下記の期間中においては、大変多くのお客さまが足を運んでくださいました。

8月8日-10日 オープンキャンパス期間中來場者 845名

10月5日 ホームカミングデー 2,010名



ノーベル賞授賞式会場の再現展示



研究紹介パネル



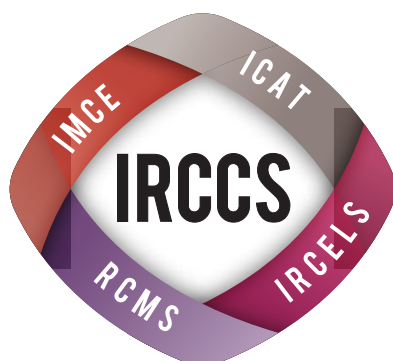
歴代センター長パネル

28年度の出来事

【統合物質創製化学研究推進機構が発足】

名古屋大学物質科学国際研究センターが中心となり、統合物質創製化学研究推進機構が発足しました。

平成17年度から平成21年度にかけての「物質合成研究拠点機関連携事業」（名古屋大学、京都大学、九州大学）、平成22年度から平成27年度には「統合物質創製化学推進事業」（名古屋大学、京都大学、九州大学、北海道大学）として物質創製の中核的国際研究拠点としての役割を果たすべく世界レベルの研究水準を目標に事業を実施してきましたが、その事業が機構として構築されさらなる展開力の強化に努めていきます。



Integrated Research Consortium
on Chemical Sciences

【次期センター長に山口茂弘教授】

平成29年度より、山口茂弘教授（トランスフォーマティブ生命分子研究所、現・化学測定機器室長）が物質科学国際研究センター長に決まりました。



【助教2名が新たに着任】

有機物質合成研究分野に新たに2名の助教が着任しました。

大城宗一郎 助教（平成28年5月1日付け）

八木亜樹子 助教（平成29年3月1日付け）

（新任紹介 参照）

スタッフリスト

センター長 特別顧問	教 授 特別教授	阿波賀邦夫 (2487) 野依 良治	awaga@mbox.chem.nagoya-u.ac.jp
有機物質合成研究分野	教 授 助 教 助 教	山口 茂弘 (トランスフォーメティブ生命分子研究所) (2291) 大城宗一郎 (5750) 八木亜樹子 (5873)	yamaguchi@mbox.chem.nagoya-u.ac.jp ogi.soichiro@chem.nagoya-u.ac.jp yagi.akiko@d.mbox.nagoya-u.ac.jp
無機物質合成研究分野	教 授 准 教 授 准 教 授 特任教授	唯 美津木 (6200) 高木 秀夫 (5473) 山田 泰之 (2471) 巽 和行 (2474)	mtada@chem.nagoya-u.ac.jp htakagi@chem.nagoya-u.ac.jp yy@chem.nagoya-u.ac.jp i45100a@nucc.cc.nagoya-u.ac.jp
物質機能研究分野	教 授 助 教 助 教	菱川 明栄 (2494) 張 中岳 (5106) 大町 遼 (3660)	hishi@chem.nagoya-u.ac.jp zhangzhongyue@i.mbox.nagoya-u.ac.jp omachi.haruka@a.mbox.nagoya-u.ac.jp
生命物質研究分野	教 授 助 教	渡辺 芳人 (3049) 友池 史明 (2950)	p47297a@nucc.cc.nagoya-u.ac.jp tomoike@chem.nagoya-u.ac.jp
分子触媒研究分野	特別教授 助 教 助 教	野依 良治 (2956) 中 寛史 (5411) 田中 慎二 (2960)	noyori@chem3.chem.nagoya-u.ac.jp h_naka@nagoya-u.jp tanaka@os.rcms.nagoya-u.ac.jp
共同研究分野	客員教授 客員准教授	北川 宏 (京都大学大学院理学研究科教授) リバード エリック (アルバータ大学准教授)	
化学測定機器室	室長・教授 助 教 技術職員 技術職員	山口 茂弘 (2291) 韓 春光 (3072) 前田 裕 (3069) 尾山 公一 (3069)	yamaguchi@mbox.chem.nagoya-u.ac.jp hanc@cic.nagoya-u.ac.jp maeda@cic.nagoya-u.ac.jp oyama@cic.nagoya-u.ac.jp
国際アドバイザーボード		グルンツェ, ミカエル (ハイデルベルグ大学名誉教授) ホフマン, ロールド (コーネル大学名誉教授、ノーベル化学賞受賞者) カガン, アンリ, ボリ (パリ南大学名誉教授) 辻 篤子 (名古屋大学特任教授)	
協力教員	教 授 教 授 教 授 教 授 特別招聘教授	篠原 久典 (理学研究科) (2482) 伊丹健一郎 (トランスフォーメティブ生命分子研究所) (6098) 北村 雅人 (創薬科学研究科) (2957) 斎藤 進 (理学研究科) (5945) 飯島 澄男 (6460)	noris@nagoya-u.jp itami.kenichiro@a.mbox.nagoya-u.ac.jp kitamura@os.rcms.nagoya-u.ac.jp saito.susumu@f.mbox.nagoya-u.ac.jp ijimas@nagoya-u.jp
センター事務	事務補佐員 事務補佐員 研究支援推進員	木原 優子 (5907) 山本千亜紀 (5902) 丹菊 園恵 (5908)	kihara@os.rcms.nagoya-u.ac.jp yamamoto@os.rcms.nagoya-u.ac.jp tankiku@os.rcms.nagoya-u.ac.jp
事務支援組織	理学部・理学研究科技術部 理学部・理学研究科事務部		