

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

**平成 27 年度～平成 31 年度「私立大学戦略的研究基盤形成支援事業」
研究成果報告書概要**

- 1 学校法人名 トヨタ学園 2 大学名 豊田工業大学
- 3 研究組織名 先進触媒開発研究センター
- 4 プロジェクト所在地 愛知県名古屋市天白区久方 2-12-1 豊田工業大学内
- 5 研究プロジェクト名 水素原子・分子の活用技術革新のための先進触媒の研究
- 6 研究観点 研究拠点を形成する研究

7 研究代表者

研究代表者名	所属部局名	職名
本山 幸弘	大学院工学研究科	教授

- 8 プロジェクト参加研究者数
- 8
- 名

- 9 該当審査区分
- 理工・情報
- 生物・医歯
- 人文・社会

10 研究プロジェクトに参加する主な研究者

研究者名	所属・職名	プロジェクトでの研究課題	プロジェクトでの役割
本山 幸弘	大学院 工学研究科・教授	高機能担持型金属ナノ粒子触媒の 開発	プロジェクト統括・ 金属ナノ粒子触媒の創製
大下 祥雄	大学院 工学研究科・教授	新規太陽電池開発と化学物質に よる水素貯蔵に関する研究	新規太陽電池開発と 水素貯蔵化合物の探索
吉村 雅満	大学院 工学研究科・教授	炭素材料への元素ドーピング手 法の開発	表面局所構造解析
田代 孝二	大学院 工学研究科・教授	触媒・有機化合物および高分子 複合体の静的・動的構造解析	触媒・有機化合物および高分 子複合体の静的・動的構造の 解明
山方 啓	大学院 工学研究科・准教授	水素製造用水分解光触媒の 開発	水分解機構の解明と新規触媒 開発
原 正則	大学院 工学研究科・准教授	燃料電池用電極触媒の 開発と評価	炭素材料の分光評価
武野 計二	大学院 工学研究科・教授	水素のバイオマスからの製造およ び高圧水素の利用	バイオマスからの触媒的水素 製造手法の開発
張 振中	大学院 工学研究科・ ポスドクリアル研究員	担持型金属ナノ粒子の 触媒反応開発	担持型金属ナノ粒子の 触媒機能評価

新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
山梨大学 燃料電池ナノ 材料研究センター・ 特任助教	大学院工学研究科・准教授	原 正則	炭素材料の分光評価

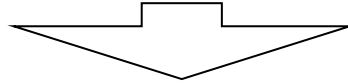
(変更の時期:平成 28 年 4 月 1 日)

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

旧

プロジェクト外での研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
担持型金属ナノ粒子の触媒反応開発	大学院工学研究科・ポスドクラル研究員	細川 さとみ	担持型金属ナノ粒子の触媒機能評価

(変更の時期:平成 29 年 4 月 30 日)



新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
九州大学大学院理学研究院・学術研究員	大学院工学研究科・ポスドクラル研究員	張 振中	担持型金属ナノ粒子の触媒機能評価

(変更の時期:平成 29 年 4 月 1 日)

新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
大学院工学研究科・教授	大学院工学研究科・教授	武野 計二	バイオマスからの触媒的水素製造手法の開発

(変更の時期:平成 30 年 5 月 1 日)

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

11 研究の概要(※ 項目全体を10枚以内で作成)

(1) 研究プロジェクトの目的・意義及び計画の概要

【目的】

本プロジェクトでは、各人がこれまでに蓄積してきた研究実績を融合させ、水素を中心とする炭素、窒素、酸素、ケイ素との元素間結合の活性化と切断・生成反応の高度制御を「デザインされた高機能金属触媒」により達成することで、低炭素社会を支える再生可能エネルギーの有効活用と有用物質の効率的な合成プロセスの構築を目ざす。

【意義】

資源や環境の保全とエネルギー確保の観点から、水素の発生・活用技術の高度化と水素に関連する物質製造工程の革新が急務である。本研究は水素と触媒を鍵に、物質合成とエネルギー技術を有機的に繋ぐことで水素の発生と活用の技術の革新を目指しており、水素社会に向けた水素の需給システムの進化と、元素戦略に立脚した水素を用いる物質変換・合成技術の発展への寄与が期待できる。

【計画の概要】

「水素」原子や分子の発生と利活用に関する主要課題の解決を目指す。特に、水素に関連する「触媒」技術に焦点を絞り、

I-A) 水分解光触媒の動作機構の解明と高度化、

I-B) 太陽電池を電源とする水の電気分解で生じた水素の貯蔵と再放出の制御や水電解および燃料電池の電極触媒の開発、

II) 水素関連化合物における多重結合の「還元」を制御し、物質の変換や合成反応の効率を格段に高める高機能触媒の開発を行う。

[年次計画概要]

1 年目: (I-A) 可視光吸収型光触媒の高度化と光吸収特性の検討;

(I-B) 水分解用高効率太陽電池デバイスの開発;

(II) 窒素ドープ炭素材料およびそれらを担体とする金属担持被毒触媒の合成と解析

2 年目: (I-A) 光励起キャリア再結合の機構解明と速度制御;

(I-B) 直列型水分解システムの構築と化合物探索

(II) 被毒触媒の各種水素化反応における触媒機能評価と触媒の再設計

3 年目: (I-A) 触媒の再設計; (I-B) システム改良と触媒探索;

(II) 官能基選択的水素化反応の実現

4 年目: (I-A) 電子-正孔分離機構解析と p-n 接合型触媒創製;

(I-B) 触媒合成法とシステム構築の技術の検討

(II) ヒドロシランによる低反応性化合物用の触媒探索と高活性触媒反応の構築

5 年目: 各研究課題の達成度の見極めと最終調整, およびプロジェクトの総括

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

(2) 研究組織

最終的には、本学にあるすべての分野(物質・電子・機械)に属する6研究室の7名の教員(当初は物質・電子の2分野:5名)が「先端触媒開発研究センター」を形成し、基礎科学研究から応用開発研究までを有機的な連携体制により推進する。これらに加え、学内外の関連する教員からも適宜協力を得て研究代表者が統括して実施している。また、各担当教員の指導の下で博士研究員や大学院生、学部4年生の30名ほどが研究に参加している。研究設備としては、参加教員の保有する分析機器の相互利用に加え、本学の施設である「共同利用クリーンルーム」も利用している。

また、東京大学大学院の堂免一成教授ならびに九州大学大学院の徳永信教授に外部評価委員をお願いし、適宜助言を頂いている。

(3) 研究施設・設備等

核磁気共鳴装置 (JEOL JMN-ECZ400R)
 元素分析装置 (PerkinElmer 2400 II)
 グローブボックス (MBRAUN Labster 1200/780 W)
 赤外分光装置 (ブルカーオプティクス社・Vertex80)
 ナノ欠陥イメージング装置 (堀場製作所・ZAT)
 原子層堆積装置 (Ultratech Savannah G2 S100)

(4) 研究成果の概要 ※下記、13及び14に対応する成果には下線及び*を付すこと。

【水分解光触媒の開発】

＜優れた成果が上がった点＞

光触媒を用いると、太陽エネルギーを用いて水から水素を製造することが可能となる。しかし、この光触媒を工業的に用いるためには、その活性を飛躍的に向上させる必要がある。光触媒としては、一般に金属酸化物や金属酸窒化物などの粉末が用いられる。粉末の表面には欠陥が多数有り、この欠陥が活性を低下させる最大の原因であると従来考えられてきた。しかし、粉末の欠陥は光励起電子と正孔の再結合速度の遅延に役立つと共に、光触媒活性の向上にも役立つ場合があることを発見^{*44,52}した。この発見は、より高性能な光触媒の設計に役立つ極めて重要な成果であると考えている。従来の光触媒開発は、表面欠陥を少なくする方向で研究が進められてきた。しかし、活性を向上するためには設計思想を180度変えなければいけないということである。実際に光触媒粒子に意図的に欠陥を導入することで、光触媒の活性や反応選択性が変化することを実証^{*11,12}した。

＜課題となった点＞

表面欠陥は再結合速度を遅くし、光触媒活性の向上に役に立つ場合があることを明らかにしたが、すべての欠陥が活性向上に役立つわけではない。事実、 SrTiO_3 の場合、表面欠陥はナノ秒領域以降に残存する光励起キャリアの数を増加させるが、ピコ秒領域における再結合速度は欠陥によって加速することを明らかにした。このように欠陥には再結合を促進する効果と抑制する二つの効果があることを明らかにした。しかし、この相反する効果がどのような理由によって発現するのか不明である。例えば WO_3 の場合、欠陥は再結合速度を速くする効果の方が大きい、 Ga_2O_3 では再結合が遅くなる効果の方が大きい。欠陥の構造や組成だけではなく、材料によっても効果が異なる。この効果の違いを明らかにすることができれば、より普遍的な原理の発見に繋がると期待される。

＜自己評価の実施結果と対応状況＞

中間評価の段階では、いくつかの光触媒材料において、欠陥が光触媒活性向上に役立つ可能性があることを報告した。しかし、その後、この研究を様々な光触媒材料に発展させた結

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

果、欠陥が活性向上に役立つ場合とむしろ活性を低下させる場合があり、この違いには、ある法則性があることが分かってきた。

<外部(第三者)評価の実施結果と対応状況>

フェムト秒から秒の時間領域で可視から中赤外域の過渡吸収スペクトルを測定することで、光触媒中に生成した電子や正孔の動きを独立に評価できる分析手法を開発し、反応機構解明に役立つことが評価された。その後、さらに実験装置と解析手法を改良し、異種接合界面における界面電荷分離過程や反応過程を明らかにすることができるようになった。また、ピコ秒領域における発光寿命も過渡吸収測定と同じ実験条件で測定することが可能になり、複雑な構造を有する光触媒粒子の中における複雑なキャリアの動きをさらに詳しく解析することが可能になった。

<研究期間終了後の展望>

欠陥には光触媒活性の向上に役立つ場合と活性を低下させる場合があることを明らかにした。今後はこのメカニズムを明らかにする。最近の計算化学の進歩によって、複雑な欠陥における電子状態を予測することが可能になりつつある。今後は、計算グループとも積極的に共同研究を行うことで実験と理論の両面から欠陥を解析し、より高い性能を有する光触媒設計に貢献したい。

<研究成果の副次的効果>

独自の分光分析技術を用いて、水を分解する光触媒のメカニズムを調べる研究の過程で、この手法が発光材料や色素太陽電池や有機太陽電池の開発にも役立つことが明らかになった。異分野の研究者との交流も活発になり、より大きな研究ネットワークの構築に役立った。

【水素の貯蔵と放出用の高機能触媒開発】

<優れた成果が上がった点>

将来の脱炭素社会の実現に対して、再生可能エネルギーである太陽電池で発電した電気を用いて水を分解し水素を得、その水素を分子に付加して貯蔵し、必要に応じて燃料電池を用いてその分子に貯蔵されている水素を取り出して用いて発電するシステムの実現を目標に研究を進めてきた。従来の太陽電池により得られる電位差は、結晶シリコン太陽電池で0.7V以下である。それに対し、本研究では水を分解するに有効な特に高い電圧の実現を目指して、キャリア選択型結晶シリコン太陽電池、さらには本太陽電池をベースとした多接合型太陽電池の開発を進めてきた。一方、水の電気分解で得られた水素を自然由来の分子の形で貯蔵する触媒、必要に応じてその分子から水素を取り出して発電する触媒としての金属担持ポリシリコンなどの材料探索を行ってきた。結果として、高い電圧が得られる太陽電池の実現と、電気分解で得られた水素の分子への付加、付加した分子を用いての燃料電池による発電などの原理実証を行い、提案システムの有効性を示した。

<課題となった点>

太陽電池を用いた発電時に、電極が水と反応し劣化する問題が生じた。いくつかの改善策を検討してきたが、長期安定性が太陽電池の一つの課題である。また、触媒においては過還元の抑制と効率的な還元の両立がいまだ課題である。

<自己評価の実施結果と対応状況>

太陽電池材料や太陽電池構造を総合的に幅広く研究している機関は、本学以外には国内外において稀有である。本目的に適したキャリア選択型シリコン太陽電池を試作する工程を確立し、幅広い検討を行ってきた。特に、本目的のキャリア選択型太陽電池用の電極材料として、酸化チタンや安定性向上のためにタンタルをドーピングした酸化チタン材料を開発^{*国際²}

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

するなど、多くの重要な結果が得られている。また、水分解により得られた水素を効率的にキノン系分子に添加できること^{*国際¹}を示すなど、水素付加および取り出しの実験においても一定の成果を示すことができた。

<外部(第三者)評価の実施結果と対応状況>

従来と比較して高効率で太陽光を電気に変換し、かつ、その時の電圧が高いpn接合を有しない新たなキャリア選択型の太陽電池の研究、ならびに水素原子の分子保存に関する研究結果に関しては、高く評価されている。

<研究期間終了後の展望>

太陽電池に関しては、より高い電圧発生が期待されるキャリア選択型シリコン太陽電池をベースとしたタンデム太陽電池の開発を進める。タンデム太陽電池においては、異なる材料の太陽電池をシリコン太陽電池の上に積層する。このとき、発電時には、多くの光が上層の太陽電池により吸収されるため、下層の結晶シリコン太陽電池における発電時の電流が低下する。このような低照度下においても高い電圧を維持するには、今まで以上に結晶シリコン表面の保護効果を高める必要がある。そのための方策を検討することが重要である。一方、分子における水素の着脱に関しては、より効率的な水素の付加や取り出しに適した触媒の探索や、保存用の分子としてより汎用性の高いものを探索する必要がある。

<研究成果の副次的効果>

得られた結果は単に太陽電池に関するものではなく、光触媒など他の研究にも広く波及する成果である。プロジェクトを通じたこのような異分野との交流を通じて、今回得られた結果が広く触媒分野における知見を深めることに貢献することが期待される。

【水電解および燃料電池の電極触媒の開発】

<優れた成果が上がった点>

水電解用のアノード触媒(酸素発生反応(OER)触媒)である IrO_2 触媒の高活性化のため、ナノ炭素材料(グラフェンやカーボンナノチューブ)を担体に用い、 IrO_2 触媒のナノ粒子化による比表面積の向上により、担体の無い既存触媒の 10 倍以上まで触媒の OER 質量活性を向上させることに成功^{*3}した。さらに触媒の比活性を向上させる目的で、担体であるグラフェンへの窒素やホウ素のドーピングや IrO_2 ナノ粒子を RuO_2 との合金化により IrO_2 の電子状態を修飾することで、活性をさらに 10 倍以上向上させることに成功^{*2}した。このように、ナノ粒子化による比表面積向上と電子状態修飾による比活性向上の相乗効果により、触媒活性を既存触媒から 2 桁向上することに成功した。水素を燃料に用いた直接形燃料電池のアノード触媒の開発では、窒素やホウ素をドーピングしたグラフェンが高活性を示すこと^{*国際⁸,国内⁷}を見出した。これより、異種元素で修飾したナノ炭素材料が非金属の電極触媒として有望であることを明らかにした。

<課題となった点>

水電解のアノード触媒は、高電位・高電流に対する耐性が必要となるため、 IrO_2 以外の金属を使用することが困難である。そのため、 IrO_2 を電子的に修飾することにより、触媒活性を向上する必要がある。また、酸化耐性があり高導電性の材料が必要とされる。本研究では、窒素とホウ素を共ドーピングすることにより、担体の一部を耐久性の高い BN シートで置き換えることで、 IrO_2 触媒活性の向上に対する寄与を維持しつつ、担体の耐久性向上にも成功した。

<自己評価の実施結果と対応状況>

中間審査では、ナノ炭素担体を適用することで、 IrO_2 触媒のナノ粒子化による比表面積と触媒活性の向上に成功しており、更なる触媒活性向上には、 IrO_2 触媒の比活性を向上させることが求められていた。中間審査以降、担体であるグラフェンへの異種元素ドーピングにより、 IrO_2

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

触媒ナノ粒子の電子状態を修飾する技術を確立することにより、さらに高活性な触媒を開発することに成功した。

<外部(第三者)評価の実施結果と対応状況>

外部評価(中間審査)では、欠陥を導入したグラファイトを用いた電極触媒の開発とその高活性化には、試行錯誤的なスクリーニングに頼るのではなく、詳細な反応機構の解明が必要であると指摘を受けた。本研究では、反応物(H₂O および吸着 OH)との結合形成に関与する要素として、Ir の電子状態を評価することで、触媒の電子状態変化が触媒活性向上の指針となることを示した。

<研究期間終了後の展望>

再生可能エネルギーの有効利用に向けた、固体高分子形水電解槽による余剰電力を活用した水素製造装置の開発において、電力ロスの大いアノード触媒の高活性化に成功した。開発した触媒を用いることにより、貴金属である Ir の触媒使用量を低減しつつ、エネルギー変換効率の大幅な向上が期待される。今後は、固体高分子形水電解槽の実セルを用い、新規触媒の実用に向けた触媒開発を進める。

<研究成果の副次的効果>

本研究では、担体の修飾により担持された酸化物触媒の電子状態の制御とそれに伴う触媒の高活性化が可能であることを明らかにした。これにより、高活性触媒の開発における担体の重要性を示すことができ、外部資金の獲得に繋がった。今後、ナノ構造の制御が容易なナノ炭素材料のさらなる用途の拡大が期待できる。

【バイオマスからの触媒的水素製造手法の開発】

<優れた成果が上がった点>

木本類や草本類などのバイオマスの利用促進には、ガス化(H₂ や CO 製造)や液化による減容化が必須とされる。これまでのガス化反応速度の計測や解析は、バイオマスの加熱や H₂O との反応における共存ガスの影響が考慮されていないが、部分酸化ガス化炉では CO₂ が高濃度で共存しているため、本研究ではバイオマスの熱分解を CO₂ の存在下で行わせ、生成したチャーの性状およびガス化反応性を調べた。ラマン分光や質量分析を用いた熱分解ガスの分析結果などから、バイオマスチャー作製を CO₂ 雰囲気で行う事で、反応率が低い低温範囲から水素転換ガス化反応が起こり易いチャーが生成すること、更に低温反応性の違いは官能基に依存すること*^{国内⁵}を初めて明らかにした。

水素は単位体積当たりの発熱量が他の可燃性気体と比較して小さいため(メタンの約 1/3、プロパンの約 1/8)、燃料として使用する場合には高圧貯蔵が必須である。水素の利用として必須な、高圧水素の噴出時の着火について、最大よどみ圧力を 14 MPa として水素噴流における衝撃波構造と着火特性の関係を実験的に調査した。その結果、ノズル出口以降に衝撃波が生じない適正膨張の場合に保炎に必要な最小流量が最大になるなど、衝撃波構造が着火に及ぼす影響を明らかにした*⁵。

<課題となった点>

CO₂ の存在下で乾留されたバイオマスは低温でのガス化反応性が高くなるとの知見は得られたものの、官能基が影響している化学的機構までは言及されていない。これには原子吸光など官能基の同定が可能な計測法を用いた多くの実験データが必要である。

高圧水素の利用に関しては、ノズル下流における衝撃波の構造と着火・保炎の関係が明確にされたが、その機構を説明するには速度場の計測が必要である。

<自己評価の実施結果と対応状況>

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

バイオマスのガス化反応はこれまで数多くの研究が成されてきたが、乾留時の共存ガスの影響については、ほとんど研究例が報告されていなかった。今回 CO₂ の存在下で乾留を行い、生成チャーの低温域でのガス化反応性が向上するとの新しい知見を得た。

<研究期間終了後の展望>

課題となった点にも記した通り、バイオマスのガス化に関する興味深い現象が得られたものの、その化学的メカニズムは明確にされておらず、今後原子吸光分析法などを用い明確にする計画である。高圧水素の利用に関しても、衝撃波の下流の流れについてPIV法を用いた計測を行い、着火・保炎の機構について明確にする。

<研究成果の副次的効果>

高圧水素の利用についての成果は、JAEA(日本原子力研究開発機構)における水素安全研究に活用できる。

【高機能触媒による水素化およびヒドロシリル化反応の開発】

<優れた成果が上がった点>

活性炭担持パラジウム触媒にヒドロシランを作用させると、アミド化合物の脱酸素型還元反応を穏和な条件下で進行させるほど高活性な可溶性の金属クラスターが生成することから、この活性種の応用について検討した。その結果、活性炭担持パラジウムだけでなく安価な塩化パラジウムでも土居用の活性種が発生すること、さらに通常困難な 4 級炭素-酸素結合、特に *tert*-ブチル-酸素結合を穏和な条件下で切断可能なことを見出し、新規な *tert*-基の脱保護手法の開発に成功^{*4}した。

既に炭素ナノ繊維存在下、0価の白金オレフィン錯体に常温・常圧で水素を接触させると、高活性な白金クラスターが系中で発生することを見出していた。そこで反応条件を精査した結果、安価な活性炭でも同様にクラスターが生成し、常温・常圧で多様な官能基を有する芳香族化合物の環水素化が進行^{*国内 11,13}することを見出した。

さらに従来用いてきた炭素材料に替わり金属酸化物を担体として用いると、特殊な化学選択性を有する金属クラスターが生成することを見出した。すなわち、カルボニル化合物の中で通常では反応しやすいアルデヒドやケトンは全く水素化されず、イミンが選択的に水素で還元できる。この特長を利用して、カルボニル化合物をアルキル化剤として用いるアミンの還元的 *N*-アルキル化を、常温・常圧の穏和な条件下、両試剤を化学量論量用いるという高効率・高選択的な反応として実現^{*国内 12, 国際 2}した。

<課題となった点>

極めて微小で高活性な金属クラスター種の発生手法を幾つか開発することに成功し、これらが従来のクラスターとは異なる触媒活性や化学選択性を示すことを明らかにした。しかし、触媒機能とクラスターサイズの相関が触媒設計において重要であるが、そのサイズや分散度が未だに不明な場合が多いことから、サイズ制御法の確立が喫緊の課題である。

<自己評価の実施結果と対応状況>

中間評価の段階では、担体を高価で自作が必要な炭素ナノ繊維から安価で大量合成が可能な炭素材料などへの変換、さらにクラスターサイズをより小さくすることによる高活性化、を目標としていた。これらにおいて、反応条件を再検討することでクラスター前駆体の候補を拡張しつつ、新たな発生法ならびに担体への担持手法を構築することができ、市販の活性炭や金属酸化物などへの転換を実現すると共に、担体特有の化学選択性の賦与にも成功した。

<外部(第三者)評価の実施結果と対応状況>

外部評価(中間審査)では、従来還元が難しいカルボン酸アミドの還元や、中および大員環

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

ラクトンからの部分還元体であるラクツールや脱酸素型還元体である環状エーテルへの新規な変換手法の開発が評価された。その後、特に後者については、これらの触媒的な変換手法を用いることで、天然物や医薬品合成に適用できることを実証した。

<研究期間終了後の展望>

この研究期間では、金属種としてパラジウムを中心に詳細な検討や機構解析、さらには実践的な触媒的合成反応への展開を図ってきた。しかしヒドロシランによる微小な可溶性金属クラスターの発生は、ルテニウム、ロジウム、白金でも確認できている。同様に金属酸化物上への他の金属種のクラスター形成も一部で確認されている。そこで今後は、金属種の拡張、また、担体として各種炭素材料や金属酸化物へと展開して一連の担持型金属クラスターのライブラリを構築し、それらの担体-金属種-活性の相関を精査していく予定である。

<研究成果の副次的効果>

本研究で得られた成果は、単に有機合成用の触媒としての利用だけではなく、同様の金属クラスターを活用しているエレクトロニクス、環境、バイオ、医療、材料開発などへの応用展開も可能と考えられることから、その波及効果は広範な分野に及ぶものと期待される。

【原子間力顕微鏡を用いた触媒担持メカニズムの分子レベル評価】

<優れた成果が上がった点>

水電解におけるアノード触媒である IrO_2 のサイズは、炭素材料上に担持することで数 nm 程度になり、サイズ効果や実効表面積の増大によって触媒の活性が向上することが報告されている。 IrO_2 が炭素表面にどのように担持されているかについては、光電子分光法(XPS)や電子顕微鏡(TEM)を用いることにより、炭素との結合状態や分散性をマクロ的に調べることで分析可能である。触媒効果の観点から考えると、触媒粒子のサイズや位置制御はその性能に大きな影響を与えることから極めて重要である。今回、高品質の単層グラフェンに対し故意に欠陥を導入し、その表面を分子レベルで評価した上で、欠陥表面が IrO_2 の担持メカニズムに与える影響を、原子間力顕微鏡(AFM)を用いて詳細に調べることに成功した。結果として、欠陥導入により形成されるグラフェンのナノレベルの空洞構造のエッジ部分に IrO_2 が核成長し、欠陥密度が大きいほど IrO_2 の粒子サイズが小さくなるという極めて重要な結果が示された。

<課題となった点>

モデル表面として選んだ炭素材料であるグラフェンには、高品質と大面積化が必要となる。グラフェンの化学気相成長合成の実験条件(合成温度、原料ガス分量)を最適化し、かつ転写方法(バブル法)を工夫することにより、mm オーダーの高品質グラフェンの形成に至った。一方、 IrO_2 の担持法として、今回水熱合成法を用いたが、グラフェンの平面構造を維持した状態で微粒子担持するために、水熱反応条件をよりマイルドに最適化する必要があった。これについては加熱温度や時間などを細かく制御することにより実現し、最終的に欠陥を導入したグラフェン上へグラフェンの初期構造を維持したまま微粒子を担持することに成功した。

<自己評価の実施結果と対応状況>

上記のようにグラフェン形成方法、欠陥導入プロセスの適切な選択(オゾン処理)、及び担持法の改良により、担持メカニズムを分子レベルで解明することに成功した。今後は水電解としての実触媒機能との対応を明らかにする必要がある。

<外部(第三者)評価の実施結果と対応状況>

分子レベルの材料評価技術は触媒反応プロセスを解明する上で重要であり、原子レベルで観察できる原子間力顕微鏡を駆使することにより、触媒の担持プロセスを明らかにすることができた。

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

<研究期間終了後の展望>

本研究から、欠陥導入量により触媒サイズを制御することが可能となったので、今後はアノード触媒としての実評価を行う必要がある。本研究で明らかにした微粒子形成メカニズムは活性炭素など一般的な炭素材料にも適用可能であり、触媒サイズの最適化により、高効率、かつ非常に安価な触媒開発に繋がると考えられる。

<研究成果の副次的効果>

本研究のようなモデル表面を用いた分子レベルでの触媒担持メカニズムの報告例は極めて少なく、本研究の波及成果は多大なものと考えられる。実際に、本研究期間中に、複数の企業からの多くの分析依頼があり、その中でいくつかの共同研究に至っている。

【触媒・有機化合物および高分子錯体の静的・動的構造解析】

<優れた成果が上がった点>

X線結晶構造解析に中性子結晶構造解析を結合させることで、ポリジアセチレン高分子の巨大単結晶においてX線と中性子(N)の精密結晶構造解析に成功するとともに、両者の差として、分子鎖に沿った結合電子密度分布の定量的評価に成功^{*30,33}した。この快挙は、1世紀にもわたる高分子科学の歴史の中で初めてのものである。

また、従来はポリビニルアルコールおよびそのヨウ素錯体についてX線構造解析結果を正解と思い込まれてきたが、今回新たに測定した中性子データを全く説明できないことが判った。「構造の乱れ」という新たな概念を導入することで、このX線と中性子回折データ解析の矛盾を解消することに成功^{*国内³⁹}すると共に、ポリビニルアルコールのヨウ素錯体形成機構についての具体的描像^{*国内³⁹}を与えることができた。

<課題となった点>

電子密度分布の解析精度を高める解析技術の開発、および、これまで常識とされてきた構造を否定するに足る高信頼性の実験データを如何に集積するかが課題であった。最先端の放射光および中性子(J-PARC)の利用が問題解決につながった。

<自己評価の実施結果と対応状況>

再生可能エネルギーを利用した水素の製造・貯蔵法・新活用法の探索を目指した本プロジェクトの対象の一つに高分子材料を含めている。しかし、高分子材料における水素の役割を明らかにするためには、水素原子の位置や運動性、電子との相関など、高分子物質としてこれまで殆ど不可能と諦観されてきた課題に挑戦せねばならない。そこで高分子物質の構造物性相関を原子さらには電子レベル、つまり量子レベルから、どこまで精度高く明確に出来るかに焦点をあてた。その結果、幾つかの高分子において密度汎関数法に基づく量子化学計算結果とほぼ完全に一致するまでに至った。

<外部(第三者)評価の実施結果と対応状況>

外部評価(中間審査)では、汎用の高分子ヨウ素錯体の詳細な構造解析に成功したことから、その生成機構や構造に関する新たな知見となったことが評価された。その後、この最先端の量子ビームシステムを利用して、様々な高分子化合物の結合電子密度分布状態の解析にも適用できることを実証した。

<研究期間終了後の展望>

X線結晶構造解析に中性子結晶構造解析を結合させたシステムは、高分子物質の構造物性相関の基礎となる「結合に関与する電子密度分布」の定量評価に有効なことを実証した。この成功により、一般の高分子物質についても電子レベルからの検討が可能になると期待できる。

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

＜研究成果の副次的効果＞

今回の成果は、これまで殆ど諦観されてきた「高分子および高分子＝無機錯体における構造物性相関の量子レベルからの解明」に必要な、「水素原子および結合電子に関する構造情報の獲得」を呈示した初めての成功例であり、今後は「量子高分子科学」といった新しい学問体系を構築する最初の一步であると確信する。

＜外部(第三者)評価の実施結果と対応状況＞

全体としては、中間報告時に外部評価委員 2 名からプロジェクト全体の評価をお願いし、両氏からの評価は概ね良好であった。特に本プロジェクトにおける基礎研究と応用研究の融合において高い評価を受けていたことから、残りの2年間では、これまで以上に基礎から応用までをバランスよく、さらに研究を加速させるとともに、本研究成果を基盤とするプロジェクト終了後の新たな方向性についても議論を開始し、外部資金への申請等も積極的に行っている状況であり、本学の新たな研究基盤が着実に形成されているものと考えている。

12 キーワード(当該研究内容をよく表していると思われるものを8項目以内で記載してください。)

- | | | |
|--------------------|------------------------|-----------------|
| (1) <u>水分解光触媒</u> | (2) <u>キャリア選択型太陽電池</u> | (3) <u>燃料電池</u> |
| (4) <u>炭素材料</u> | (5) <u>金属ナノ粒子</u> | (6) <u>還元反応</u> |
| (7) <u>元素ドーピング</u> | (8) <u>分子間相互作用</u> | |

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

13 研究発表の状況(研究論文等公表状況。印刷中も含む。)

上記、11(4)に記載した研究成果に対応するものには*を付すこと。

<雑誌論文>

【水分解光触媒の開発】

- 1 K. Kawashima, M. Hojamberdiev, H. Wagata, K. Yubuta, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, S. Oishi, K. Domen, K. Teshima, “NH₃-Assisted Flux-Mediated Direct Growth of LaTiO₂N Crystallites for Visible-Light-Induced Water Splitting”, *J. Phys. Chem. C* **2015**, *119*, 15896-15904.
- 2 M. Hojamberdiev, K. Yubuta, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, S. Oishi, K. Domen, K. Teshima, “NH₃-Assisted Flux Growth of Cube-like BaTaO₂N Submicron Crystals in a Completely Ionized Nonaqueous High-Temperature Solution and Their Water Splitting Activity”, *Cryst. Growth Des.* **2015**, *15*, 4663-4671.
- 3 A. Yamakata, Y. Ham, M. Kawaguchi, T. Hisatomi, J. Kubota, Y. Sakata, K. Domen, “Morphology-sensitive trapping states of photogenerated charge carriers on SrTiO₃ particles studied by time-resolved visible to Mid-IR absorption spectroscopy: The effects of molten salt flux treatments”, *J. Photochem. Photobiol. A-Chem.* **2015**, *313*, 168-175.
- 4 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, ”Distinctive Behavior of Photogenerated Electrons and Holes in Anatase and Rutile TiO₂ Powders”, *J. Phys. Chem. C* **2015**, *119*, 24538-24545.
- 5 Y. Ham, T. Hisatomi, Y. Goto, Y. Moriya, Y. Sakata, A. Yamakata, J. Kubota, K. Domen, “Flux-mediated doping of SrTiO₃ photocatalysts for efficient overall water splitting”, *J. Mater. Chem. A* **2016**, *4*, 3027-3033.
- 6 M. Hojamberdiev, H. Wagata, K. Yubuta, K. Kawashima, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, S. Oishi, K. Domen, K. Teshima, “KCl Flux-Induced Growth of Isometric Crystals of Cadmium-Containing Early Transition-Metal (Ti⁴⁺, Nb⁵⁺, and Ta⁵⁺) Oxides and Nitridability to Form Their (Oxy)nitride Derivatives under an NH₃ Atmosphere For Water Splitting Application”, *Appl. Catal. B-Environ.* **2016**, *182*, 626-635.
- 7 A. Yamakata, M. Kawaguchi, R. Murachi, M. Okawa, I. Kamiya, “Dynamics of Photogenerated Charge Carriers on Ni- and Ta-Doped SrTiO₃ Photocatalysts Studied by Time-Resolved Absorption and Emission Spectroscopy”, *J. Phys. Chem. C* **2016**, *120*, 7997-8004.
- 8 R. Kuriki, H. Matsunaga, T. Nakashima, K. Wada, A. Yamakata, O. Ishitani, K. Maeda, ”Nature-Inspired, Highly Durable CO₂ Reduction System Consisting of a Binuclear Ruthenium(II) Complex and an Organic Semiconductor Using Visible Light”, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 5159-5170.
- 9 山方啓, 「酸化チタン光触媒のキャリアーダイナミクスー粉末におけるアナターゼとルチルの特異的な挙動ー」, *光化学* **2016**, *47*, 25-32.
- 10 J. J. M. Vequizo, M. Yokoyama, M. Ichimura, A. Yamakata, “Enhancement of Photoelectrochemical Activity of SnS Thin-film Photoelectrodes using TiO₂, Nb₂O₅, and Ta₂O₅ Metal Oxide Layers”, *Appl. Phys. Express* **2016**, *9*, 067101.
- 11 Y. Sakata, Y. Miyoshi, T. Maeda, K. Ishikiriya, Y. Yamazaki, H. Imamura, Y. Ham, T. Hisatomi, J. Kubota, A. Yamakata, K. Domen, “Photocatalytic Property of Metal ion Added SrTiO₃ to Overall H₂O splitting”, *Appl. Catal. A- Gen.* **2016**, *521*, 227-232. (*11)
- 12 M. Hojamberdiev, M. F. Bekheet, E. Zahedi, H. Wagata, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, K. Yubuta, A. Gurlo, K. Domen, K. Teshima, “The contrasting effect of the Ta/Nb ratio in (111)-layered B-site deficient

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- hexagonal perovskite $\text{Ba}_5\text{Nb}_{4-x}\text{Ta}_x\text{O}_{15}$ crystals on visible-light-induced photocatalytic water oxidation activity of their oxynitride derivatives”, *Dalton Trans.* **2016**, 45, 12559-12568. (*12)
- 13 J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, T. Ishiku, S. Kamimura, T. Ohno, A. Yamakata, “Trapping-Induced Enhancement of Photocatalytic Activity on Brookite TiO_2 Powders: Comparison with Anatase and Rutile TiO_2 Powders”, *ACS Catalysis*, **2017**, 7, 2644-2651.
- 14 A. Nakada, S. Nishioka, J. J. M. Vequizo, K. Muraoka, T. Kanazawa, A. Yamakata, S. Nozawa, H. Kumagai, S. Adachi, O. Ishitani, K. Maeda, “Solar-driven Z-scheme water splitting using tantalum/nitrogen co-doped rutile titania nanorod as an oxygen evolution photocatalyst”, *J. Mater. Chem. A*, **2017**, 5, 11710-11719.
- 15 M. Hojamberdiev, M. F. Bekheet, J. N. Hart, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, K. Yubuta, A. Gurlo, M. Hasegawa, K. Domen, K. Teshima, “Elucidating the Impact of A-Site Cation Change on Photocatalytic H_2 and O_2 Evolution Activities of Perovskite-Type LnTaON_2 ($\text{Ln} = \text{La}$ and Pr)”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2017**, 19, 22210-22220.
- 16 M. Hojamberdiev, M. F. Bekheet, J. N. Hart, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, K. Yubuta, A. Gurlo, M. Hasegawa, K. Domen, K. Teshima, “Cation-dependent restructure of the electric double layer on CO-covered Pt electrodes: Difference between hydrophilic and hydrophobic cations”, *J. Electroanal. Chem.*, **2017**, 800, 19-24.
- 17 K. Wada, C. S. K. Ranasinghe, R. Kuriki, A. Yamakata, O. Ishitani, K. Maeda, “Interfacial Manipulation by Rutile TiO_2 Nanoparticles to Boost CO_2 Reduction into CO on a Metal-Complex/Semiconductor Hybrid Photocatalyst”, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2017**, 9, 23869–23877.
- 18 J. J. M. Vequizo, S. Kamimura, T. Ohno, A. Yamakata, “Oxygen Induced Enhancement of NIR Emission in Brookite TiO_2 Powders: Comparison with Rutile and Anatase TiO_2 Powders”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2018**, 20, 3241-3248.
- 19 C. S. K. Ranasinghe, A. Yamakata, “Structural Changes of Water Molecules during Photoelectrochemical Water Oxidation on TiO_2 Thin Film Electrodes”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2018**, 20, 3388-3394.
- 20 M. Hojamberdiev, K. Kawashima, M. Kumar, A. Yamakata, K. Yubuta, A. Gurlo, M. Hasegawa, K. Domen, K. Teshima, “Engaging the Flux-Grown $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Ti}_y\text{O}_3$ Crystals in Visible-Light-Driven Photocatalytic Hydrogen Generation”, *Int. J. Hydrogen Energy*, **2018**, 42, 27024-27033.
- 21 J. J. M. Vequizo, M. Hojamberdiev, K. Teshima, A. Yamakata, “Role of CoOx Cocatalyst on Ta_3N_5 Photocatalysts Studied by Transient Visible to Mid-Infrared Absorption Spectroscopy”, *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry*, **2018**, 358, 315-319.
- 22 C. S. K. Ranasinghe, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, “Fabrication of Highly Active Transparent TiO_2 Thin Films by Atomized Spray Pyrolysis Deposition for Photoelectrochemical Water Oxidation”, *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry*, **2018**, 358, 320-326.
- 23 K. Maeda, D. An, C. S. K. Ranasinghe, T. Uchiyama, R. Kuriki, T. Kanazawa, D. Lu, S. Nozawa, A. Yamakata, Y. Uchimoto, O. Ishitani, “Characterization of silver species on graphitic carbon nitride nanosheets as promoters for photocatalytic carbon dioxide reduction under visible light with a mononuclear ruthenium(II) complex”, *J. Mater. Chem.*, **2018**, in press.
- 24 T. Oshima, T. Ichiba, K. S. Qin, K. Muraoka, J. J. M. Vequizo, K. Hibino, R. Kuriki, S. Yamashita, K. Hongo, T. Uchiyama, K. Fujii, D. Lu, R. Maezono, A. Yamakata, H. Kato, K. Kimoto, M. Yashima, Y. Uchimoto, M. Kakihana, O. Ishitani, H. Kageyama, K. Maeda, “Undoped Layered Perovskite Oxynitride

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- Li₂LaTa₂O₆N for Photocatalytic CO₂ Reduction with Visible Light”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2018**, in press.
- 25 Z. Lian, M. Sakamoto*, H. Matsunaga, J. J. Vequizo, A. Yamakata, M. Haruta, H. Kurata, W. Ota, T. Sato, T. Teranishi, “Near Infrared Light Induced Plasmonic Hot Hole Transfer At a Nano-Heterointerface”, *Nat. Commun.*, **2018**, in press.
- 26 A. Miyoshi, J. J. M. Vequizo, S. Nishioka, Y. Kato, M. Yamamoto, S. Yamashita, T. Yokoi, A. Iwase, S. Nozawa, A. Yamakata, T. Yoshida, K. Kimoto, A. Kudo, K. Maeda, “Nitrogen/fluorine-codoped rutile titania as a stable oxygen-evolution photocatalyst for solar-driven Z-scheme water splitting”, *Sustainable Energy & Fuels*, **2018**, 2, 2025–2035.
- 27 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, “Curious Behaviors of Photogenerated Electrons and Holes at the Defects on Anatase, Rutile, and Brookite TiO₂ Powders: A Review,” *J. Photochem. Photobiol. C-Photochem. Rev.*, **2018**, in press.
- 28 G. Hasegawa, M. Tanaka, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, H. Hojo, M. Kobayashi, M. Kakihana, M. Inada, H. Akamatsu, K. Hayashi, “Sodium Titanium Oxide Bronze Nanoparticles Synthesized via Concurrent Reduction and Na⁺-doping into TiO₂(B),” *Nanoscale*, **2018**, 11, 1442–1450.
- 29 K. Okuno, H. Kato, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, H. Kobayashi, Ma. Kobayashi, M. Kakihana, “Expansion of the Photoresponse Window of a BiVO₄ Photocatalyst by Doping with Chromium(VI),” *RCS Adv.*, **2018**, 8, 38140–38145.
- 30 C. Tsounis, R. Kuriki, K. Shibata, J. J. M. Vequizo, D. Lu, A. Yamakata, O. Ishitani, R. Amal, K. Maeda, “Copolymerization Approach to Improving Ru(II)-Complex/C₃N₄ Hybrid Photocatalysts for Visible-Light CO₂ Reduction,” *ACS Sus. Chem. Eng.*, **2018**, 6, 15333–15340.
- 31 A. Nakada, R. Kuriki, K. Sekizawa, S. Nishioka, J. J. M. Vequizo, T. Uchiyama, N. Kawakami, D. Lu, A. Yamakata, Y. Uchimoto, O. Ishitani, K. Maeda, “Effects of Interfacial Electron Transfer in Metal Complex–Semiconductor Hybrid Photocatalysts on Z–Scheme CO₂ Reduction under Visible Light,” *ACS Catal.* **2018**, 8, 9744–9754.
- 32 S. Komatsuda, Y. Asakura, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, S. Yin, “Enhanced Photocatalytic NO_x Decomposition of Visible-Light Responsive F-TiO₂/(N,C)-TiO₂ by Charge Transfer Between F-TiO₂ and (N,C)-TiO₂ through Their Doping Levels,” *Appl. Catal. B Environ.*, **2018**, 238, 358–364.
- 33 M. Hojamberdiev, Y. Cai, J. J. M. Vequizo, M. Mansoob Khan, R. Vargas, K. Yubuta, A. Yamakata, K. Teshima, M. Hasegawa, “Binary Flux-Promoted Formation of Trigonal ZnIn₂S₄ Layered Crystals Using ZnS-Containing Industrial Waste and Their Photocatalytic Performance for H₂ Production,” *Green Chem.*, **2018**, 20, 3845–3856.
- 34 R. Kuriki, C. S. K. Ranasinghe, Y. Yamazaki, A. Yamakata, O. Ishitani, K. Maeda, “Excited-State Dynamics of Graphitic Carbon Nitride Photocatalyst and Ultrafast Electron Injection to a Ru(II) Mononuclear Complex for Carbon Dioxide Reduction,” *J. Phys. Chem. C*, **2018**, 122, 16795–16802.
- 35 S. Nishioka, J. Hyodo, J. J. M. Vequizo, S. Yamashita, H. Kumagai, K. Kimoto, A. Yamakata, Y. Yamazaki, K. Maeda, “Homogeneous Electron Doping into Non-Stoichiometric Strontium Titanate Improves Its Photocatalytic Activity for Hydrogen and Oxygen Evolution,” *ACS Catal.* **2018**, 8, 7190–7200.
- 36 T. Iihoshi, T. Ohwaki, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, “Improvement of photocatalytic activity under visible-light irradiation by heterojunction of Cu ion loaded WO₃ and Cu ion loaded N-TiO₂,” *Appl. Catal.*

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- B Environ.*, **2019**, *248*, 249–254.
- 37 Z. Lian, M. Sakamoto, J. J. M. Vequizo, C. S. K. Ranasinghe, A. Yamakata, T. Nagai, K. Kimoto, Y. Kobayashi, N. Tamai, T. Teranishi, “Plasmonic p–n Junction for Infrared Light to Chemical Energy Conversion,” *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, *141*, 2446–2450.
- 38 M. Sakamoto, T. Kawawaki, M. Kimura, J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, C. S. K. Ranasinghe, A. Yamakata, H. Matsuzaki, A. Furube, T. Teranishi, “Clear and Transparent Nanocrystals for Infrared-Responsive Carrier Transfer,” *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 406–412.
- 39 K. Shibata, K. Kato, C. Tsounis, T. Kanazawa, D. Lu, S. Nozawa, A. Yamakata, O. Ishitani, K. Maeda*, “Synthesis of Copolymerized Carbon Nitride Nanosheets from Urea and 2-Aminobenzonitrile for Enhanced Visible-Light CO₂ Reduction with a Ruthenium(II) Complex Catalyst”, *Solar RRL*, **2019**, 1900461.
- 40 A. Nakada, H. Suzuki, J. J. M. Vequizo, K. Ogawa, M. Higashi, A. Saeki, A. Yamakata, H. Kageyama, R. Abe, “Fe/Ru Oxide as Versatile and Effective Cocatalyst for Boosting Z-Scheme Water Splitting: Suppressing Undesirable Backward Electron Transfer”, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2019**, *11*, 45606-45611.
- 41 N. Hirayama, H. Nakata, H. Wakayama, S. Nishioka, T. Kanazawa, R. Kamata, Y. Ebato, K. Kato, H. Kumagai, A. Yamakata, K. Oka, K. Maeda, “Solar-Driven Photoelectrochemical Water Oxidation over an n-Type Lead-Titanium Oxyfluoride Anode”, *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, *141*, 17158-17165.
- 42 J. J. M. Vequizo, S. Nishioka, Y. Yamazaki, K. Maeda, A. Yamakata, “Crucial impact of reduction on the photocarriers dynamics on SrTiO₃ powders studied by transient absorption spectroscopy”, *J. Mater. Chem. A.*, **2019**, *7*, 26139-26146.
- 43 Y. Hiramachi, H. Fujimori, A. Yamakata, Y. Sakata, “Achievement of High Photocatalytic Performance to BaTi₄O₉ toward Overall H₂O Splitting”, *ChemCatChem*, **2019**, *11*, 6213-6217.
- 44 K. Kato, J. Jiang, Y. Sakata, A. Yamakata, “Effect of Na-doping on Electron Decay kinetics in SrTiO₃ Photocatalyst”, *ChemCatChem*, **2019**, *11*, 6349-6354. (*44)
- 45 S. Nishioka, K. Yanagisawa, D. Lu, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, K. Kimoto, M. Inada, K. Maeda, “Enhanced water splitting through two-step photoexcitation by sunlight using tantalum/nitrogen-codoped rutile titania as a water oxidation photocatalyst”, *Sustain. Ener. Fuels*, **2019**, *3*, 2337-2346.
- 46 K. Muraoka, J. J. M. Vequizo, R. Kuriki, A. Yamakata, T. Uchiyama, D. Lu, Y. Uchimoto, O. Ishitani, K. Maeda, “Oxygen-Doped Ta₃N₅ Nanoparticles for Enhanced Z-Scheme Carbon Dioxide Reduction with a Binuclear Ruthenium(II) Complex under Visible Light”, *ChemPhotoChem*, **2019**, *3*, 1027-1033.
- 47 Y. Luo, S. Suzuki, Z. Wang, K. Yubuta, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, H. Shiiba, T. Hisatomi, K. Domen, K. Teshima, “Construction of Spatial Charge Separation Facets on BaTaO₂N Crystals by Flux Growth Approach for Visible-Light-Driven H₂ Production”, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2019**, *11*, 22264-22271.
- 48 F. Amano, M. Nakata, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, “Enhanced Visible Light Response of TiO₂ Codoped with Cr and Ta Photocatalysts by Electron Doping”, *ACS Appl. Energy Mater.*, **2019**, *2*, 3274-3282.
- 49 P.-H. Hung, J. J. M. Vequizo, R.-A. Wu, A. Yamakata, W. J. Tseng, “Effect of CuFe₂O₄ ferrite on photocatalysis and carrier dynamics of electrospun α -Fe₂O₃ nanofibers by time-resolved transient absorption spectroscopy”, *Ceram. Int.*, **2019**, *45*, 15676-15680.
- 50 M. Takagi, M. Kawaguchi, A. Yamakata, “Enhancement of UV-responsive photocatalysts aided by visible-light responsive photocatalysts: role of WO₃ for H₂ evolution in CuCl”, *Appl. Catal. B: Environ.*, **2020**, *263*, 118333.
- 51 J. Lim, H. Kim, J. Park, G. Moon, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, J. Lee, W. Choi, “How g-C₃N₄ Works and

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- Is Different from TiO₂ as Environmental Photocatalyst: Mechanistic View”, *Environ. Sci. Technol.*, **2020**, *54*, 497-506.
- 52 A. Yamakata, C. S. K. Ranasinghe, N. Hayashi, K. Kato, J. J. M. Vequizo, “Identification of Individual Electron- and Hole-Transfer Kinetics at CoO_x/BiVO₄/SnO₂ Double Heterojunctions”, *ACS Appl. Energy Mater.*, **2020**, *3*, 1207-1214. (*52)
- 53 C. Noda, Y. Asakura, K. Shiraki, A. Yamakata, S. Yin, “Synthesis of Three-component C₃N₄/rGO/C-TiO₂ Photocatalyst with Enhanced Visible-light Responsive Photocatalytic deNO_x Activity”, *Chem. Eng. J.*, **2020**, *390*, 124616.
- 54 T. Kanazawa, K. Kato, R. Yamaguchi, T. Uchiyama, D. Lu, S. Nozawa, A. Yamakata, Y. Uchimoto, K. Maeda, “Cobalt Aluminate Spinel as a Cocatalyst for Photocatalytic Oxidation of Water: Significant Hole-Trapping Effect”, *ACS Catalysis*, **2020** *10*, 4960-4966.
- 55 K. Kato, A. Yamakata ”Defect-induced Acceleration and Deceleration of Photocatalytic Recombination in SrTiO₃ Powders”, *J. Phys. Chem. C*, *in press*.
- 56 H. Wakayama, K. Kato, K. Kashihara, T. Uchiyama, A. Miyoshi, H. Nakata, D. Lu, K. Oka, A. Yamakata, Y. Uchimoto, K. Maeda, ”Activation of a Pt-loaded Pb₂Ti₂O_{5.4}F_{1.2} photocatalyst by alkaline chloride treatment for improved H₂ evolution under visible light”, *J. Phys. Chem. A*, *in press*.
- 57 S. Chen, J. J. M. Vequizo, T. Hisatomi, M. Nakabayashi, L. Lin, Z. Wang, A. Yamakata, N. Shibata, T. Takata, T. Yamada, K. Domen, “Efficient photocatalytic hydrogen evolution on single-crystalline metal selenide particles with suitable cocatalysts”, *Chem. Sci.*, *in press*.

【水電解および燃料電池の電極触媒の開発】

- 1 M. Hara, R. Badam, K. De Silva, H.-H. Huang, M. Yoshimura, “Fabrication and Evaluation of Nanocarbon supported Iridium Oxide catalysts for Water Electrolysis”, *PGIS research Congress 2017*, **2017**, *4*, 125.
- 2 M. Hara, R. Badam, G. J. Wang, H.-H. Huang, M. Yoshimura, “Synthesis and Evaluation of Iridium Oxide Nanoparticle Catalysts Supported on Nitrogen-Doped Reduced Graphene Oxides”, *ECS transactions*, **2018**, *85*, 27-35. (*2)
- 3 R. Badam, M. Hara, H.-H. Huang, M. Yoshimura, “Synthesis and Electrochemical Analysis of Novel IrO₂ Nanoparticle Catalysts Supported on Carbon Nanotube for Oxygen Evolution Reaction”, *Int. J. Hydrogen Energy*, **2018**, *43* 18095–18104.(*3)
- 4 D. Yoneda, S. Suzuki, S. Hiramoto, Y. Matsuoka, M. Hara, M. Yoshimura, “Growth of vertically-aligned carbon nanotubes on graphite for electric double-layer capacitors”, *Mater. Research Express*, **2019**, *6*, 086322.

【バイオマスからの触媒的水素製造手法の開発】

- 1 S. Yamamoto, R. Sakatsume, K. Takeno, “Blow-off process of highly under-expanded hydrogen non-premixed jet flame”, *Int. J. Hydrogen Energy*, **2018**, *43*, 5199-5205.
- 2 K. Okabayashi, K. Tagashira, K. Kawazoe, K. Takeno, M. Asahara, A. K. Hayashi, M. Komori, “Non-steady characteristics of dispersion and ignitability for high-pressurized hydrogen jet discharged from a pinhole” *Int. J. Hydrogen Energy*, **2019**, *44*, 9071-9079.
- 3 N. Qadi, K. Takeno, A. Mosqueda, M. Kobayashi, Y. Motoyama, K. Yoshikawa, “Effect of Hydrothermal Carbonization Conditions on the Physicochemical Properties and Gasification Reactivity of Energy Grass”, *Energy Fuels*, **2019**, *33*, 6436-6443.

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- 4 N. Qadi, M. Kobayashi, K. Takeno, “Influence of torrefaction after densification on the fuel characteristics and the inherited gasification kinetics of *Erianthus arundinaceus* energy grass”, *Environmental Progress and Sustainable Energy*, **2019**, 38, 1-11.
- 5 K. Takeno, S. Yamamoto, R. Sakatsume, S. Hirakawa, H. Takeda, V. Shentsov, D. Makarov, V. Molkov, “Effect of shock structure on stabilization and blow-off of hydrogen jet flames”, *Int. J. Hydrogen Energy*, **2020**, 45, 10145-10154.(*5)

【高機能触媒による水素化およびヒドロシリル化反応の開発】

- 1 S. Hosokawa, K. Teramoto, Y. Motoyama, “Palladium on Carbon-Catalyzed Silane-Reduction of Tertiary Carboxamides: Soluble Palladium Colloids are an Active Catalyst Species”, *ChemistrySelect* **2016**, 1, 2594-2602.
- 2 Y. Motoyama, K. Morii, S. Ishizuka, S. Inomoto, Z. Zhang, S.-H. Yoon, “Specific Inhibition of the Hydrogenolysis of Benzylic C–O Bond Using Palladium Nanoparticles Supported on Nitrogen-Doped Carbon Nanofiber”, *ChemCatChem* **2018**, 10, 505-509.
- 3 S. Hosokawa, M. Toya, A. Noda, M. Morita, T. Ogawa, Y. Motoyama, “Catalytic Silane-Reduction of Carboxylic Esters and Lactones: Selective Synthetic Methods to Aldehydes, Lactols, and Ethers via Silyl Acetal Intermediates”, *ChemistrySelect* **2018**, 3, 2958-2961.
- 4 T. Ikeda, Z. Zhang, Y. Motoyama, “Hydrosilane-Promoted Facile Deprotection of *tert*-Butyl Groups in Esters, Ethers, Carbonates, and Carbamates”, *Adv. Synth. Catal.* **2019**, 361, 673-677. (Selected as a Very Important Publication)(*4)
- 5 N. Qadi, K. Takeno, A. Mosqueda, M. Kobayashi, Y. Motoyama, K. Yoshikawa, “Effect of Hydrothermal Carbonization Conditions on the Physicochemical Properties and Gasification Reactivity of Energy Grass”, *Energy Fuels* **2019**, 33, 6436-6443.

【原子間力顕微鏡を用いた触媒担持メカニズムの分子レベル評価】

- 1 A. Okada, Y. Nakata, K. Minou, M. Yoshimura, K. Kadono, “Effect of solvent evaporation temperature on the structure of two-dimensional melamine networks on Au(111)”, *Jpn. J. Appl. Phys.* **2016**, 55, 125001.
- 2 Y. You, J. Deng, X. Tan, N. Gorjizadeh, M. Yoshimura, S. C. Smith, V. Sahajwalla, R. K. Joshi, “On the mechanism of gas adsorption for pristine, defective and functionalized graphene”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19, 6051-6056.
- 3 A. Okada, S. Hara, M. Yoshimura, “Atomistic study of comblike structure on the MoO₂/Mo(110) surface by scanning tunneling microscopy and density functional theory calculations”, *Jpn. J. Appl. Phys.* **2017**, 56, 095501.
- 4 S. Suzuki, Y. Terada, M. Yoshimura, “Suppression of Graphene Nucleation by Turning Off Hydrogen Supply Just before Atmospheric Pressure Chemical Vapor Deposition Growth”, *Coatings* **2017**, 7, 206.
- 5 Y. Hashimoto, S. Katafuchi, M. Yoshimura, T. Hara, Y. Hara, M. Hamagaki, “Effect of low-energy nitrogen ion treatment of highly ordered pyrolytic graphite on oxygen reduction reaction activity”, *Nanomaterials and Nanotechnology* **2017**, 7, 1-8. (*5)
- 6 R. Badam, M. Hara, H.-H. Huang, M. Yoshimura, “Synthesis and Electrochemical Analysis of Novel IrO₂ Nanoparticle Catalysts Supported on Carbon Nanotube for Oxygen Evolution Reaction”, *Int. J. Hydrogen Energy*, **2018**, 43 18095–18104.

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- 7 H.-H. Huang, R. Joshi, K. De Silva, R. Badam, M. Yoshimura, “Fabrication of Reduced Graphene Oxide Membranes for Water Desalination”, *J. Membrane Sci.*, **2019**, 572, 12–19.
- 8 H. Huang, K. De Silva, G. Kumara, M. Yoshimura, “Structural Evolution of Hydrothermally Derived Reduced Graphene Oxide”, *Scientific Report*, **2019**, 8, 6849–6857.
- 9 D. Yoneda, S. Suzuki, S. Hiramoto, Y. Matsuoka, M. Hara, M. Yoshimura, “Growth of vertically-aligned carbon nanotubes on graphite for electric double-layer capacitors”, *Mater. Research Express*, **2019**, 6, 086322.

【触媒・有機化合物および高分子錯体の静的・動的構造解析】

- 1 D. Xu, Y. Bin, K. Tashiro, “Detailed analysis of temperature dependences of spherulite morphology and crystallite orientation of poly(vinylidene fluoride) via a combinatorial method”, *J. Polym. Sci., Part B: Polym. Phys.*, **2015**, 53, 253-261.
- 2 K. Tokumitsu, T. Matuura, S. Kawasaki, K. Tashiro, “A Study on Crystallization Behavior for Poly(Lactic Acid) in Addition of Cardo Materials”, *J. Soc. Mat. Sci., Jpn.*, **2015**, 64, 1-6.
- 3 K. Tashiro, H. Kitai, S. M. Saharin, A. Shimazu, T. Itou, “Quantitative Crystal Structure Analysis of Poly(vinyl Alcohol)-Iodine Complexes on the Basis of 2D X-ray Diffraction, Raman Spectra, and Computer Simulation Techniques”, *Macromolecules*, **2015**, 48, 2138-2148.
- 4 P. Jariyasakoolroj, K. Tashiro, W. Hai, H. Yamamoto, W. Chinsirikul, N. Kerddonfag, S. Chirachanchai, “Isotropically small crystalline lamellae induced by high biaxial-stretching rate as a key microstructure for super-tough polylactide film”, *Polymer*, **2015**, 68, 234-245.
- 5 P. Nimmanpipug, T. Laosombat, V. Sanghiran Lee, S. Vannarat, S. Chirachanchai, J. Yana, K. Tashiro, “Proton transfer mechanism of 1,3,5-tri(2-benzimidazolyl) benzene with a unique triple-stranded hydrogen bond network as studied by DFT-MD simulations”, *Chem. Eng. Sci.*, **2015**, 137, 404-411.
- 6 J. Yana, S. Chirachanchai, C. Jarumaneeroj, V. S. Lee, K. Kodchakorn, K. Tashiro, P. Nimmanpipug, “DFT Study of Proton Transfer in Methyl Urocanate and Butyl Urocanate”, *Macromolecular Symposia*, **2015**, 354, 99-103.
- 7 S. Kummara, K. Tashiro, T. Monma, K. Horita, “Isotope Effect on the Melt–Isothermal Crystallization of Polyoxymethylene D/H Random Copolymers and D/H Blend Samples”, *Macromolecules*, **2015**, 48, 8070-8081.
- 8 S. Kummara, K. Tashiro, “Phenomenological study of the isotope effect on the equilibrium melting point of polymer crystal”, *Polymer*, **2015**, 80, 138-145.
- 9 S. M. Saharin, T. Takahama, S. Nonogaki, K. Saito, K. Tashiro, “Effect of OH Segmental Length on the Iodine Complex Formation of Ethylene-Vinyl Alcohol Random Copolymers”, *Macromolecules*, **2015**, 48, 8867-8876.
- 10 P. Tanphibal, K. Tashiro, S. Chirachanchai, “Molecular assembly of highly symmetric molecules under a hydrogen bond framework controlled by alkyl building blocks: a simple approach to fine-tune nanoscale structures”, *Soft Matter*, **2016**, 12, □486-491.
- 11 S. M. Saharin, T. Takahama, S. Nonogaki, K. Saito, K. Tashiro, “The effect of counter cation species on the formation of various crystal forms and their phase transition behavior of poly(vinyl alcohol)-iodine complex”, *Polymer*, **2016**, 89, 81-93.

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- 12 J. Hu, K. Tashiro, “Relation between higher-order structure and crystalline phase transition of oriented isotactic polybutene-1 investigated by temperature-dependent time-resolved simultaneous WAXD/SAXS measurements”, *Polymer*, **2016**, *90*, 165-177.
- 13 H. Wang, K. Tashiro, “Reinvestigation of Crystal Structure and Intermolecular Interactions of Biodegradable Poly(3-Hydroxybutyrate) α -Form and the Prediction of Its Mechanical Property”, *Macromolecules*, **2016**, *49*, 581-594.
- 14 K. Tashiro, J. Hu, H. Wang, M. Hanesaka, S. Alberto, “Refinement of the Crystal Structures of Forms I and II of Isotactic Polybutene-1 and a Proposal of Phase Transition Mechanism between Them”, *Macromolecules*, **2016**, *49*, 1392-1404.
- 15 T. Yoshioka, K. Tashiro, N. Ohta, “Molecular Orientation Enhancement of Silk by the Hot-Stretching-Induced Transition from α -Helix-HFIP Complex to β -Sheet”, *Biomacromolecules*, **2016**, *17*, 1437-1448.
- 16 S. Kummara, K. Tashiro, “Isotope effect on the structural evolution process in the isothermal crystallization phenomenon of polyoxymethylene”, *Polymer*, **2016**, *90*, 76-88.
- 17 P. Tanphibal, K. Tashiro, S. Chirachanchai, “Constructiong π -Electron-Conjugated Diarylbutadiyne-Based Polydiacetylene under Molecular Framework Controlled by Hydrogen Bond and Side-Chain Substituent Position”, *Macromol. Rapid Commun.*, **2016**, *37*, 685-690.
- 18 J. Hu, K. Tashiro, “Time-Resolved Imaging of the Phase Transition in the Melt-Grown Spherulites of Isotactic Polybutene-1 as Detected by the Two-Dimensional Polarized IR Imaging Technique”, *J. Phys. Chem., B*, **2016**, *120*, 4689-4698.
- 19 T. Takahama, S. M. Saharin, K. Tashiro, “Details of the intermolecular interactions in poly(vinyl alcohol)-iodine complexes as studied by quantum chemical calculations”, *Polymer*, **2016**, *99*, 566-579.
- 20 H. Yamamoto, K. Tashiro, K. Ishino, M. Takahashi, R. Endo, M. Asada, Y. Li, K. Katsube, T. Ishii, , “Crystal structures and phase transition behavior of Poly(nonamethylene terephthalamide) and its model compounds”, *Polymer*, **2017**, *116*, 378-394.
- 21 T. Yoshioka, K. Tashiro, N. Ohta, “Observation of Water-Stimulated Supercontraction of Uniaxially-Oriented Poly(vinyl Alcohol) and the Related Hierarchical Structure Change Revealed by the Time-Resolved WAXD/SAXS Measurements”, *Macromolecules*, **2017**, *50*, 2803-2813.
- 22 H. Wang, J. Zhang, K. Tashiro, Phase Transition Mechanism of Poly(L-Lactic Acid) among the α , δ , and β Forms On the Basis of the Reinvestigated Crystal Structure of the β Form, *Macromolecules*, **2017**, *50*, 3285-3300.
- 23 M. Ishinabe, Y. Yamashita, K. Tsutsumiuchi, K. Tashiro, K. Imaeda, M. Kawamura, “Effect of Crystal Status Transformation on the Thermal Shrinkage Characteristics and Extensional Characteristics of Acetaldehyde Solvent-Induced Crystallization PET Film”, *Trans. Mat. Res. Soc. Japan*, **2017**, *42*, 97-101.
- 24 K. Tashiro, N. Kouno, H. Wang, H. Tsuji, “Crystal Structure of Poly(lactic acid) Stereocomplex: Random Packing Model of PDLA and PLLA Chains As Studied by X-ray Diffraction Analysis”, *Macromolecules*, **2017**, *50*, 8048–8065.
- 25 K. Tashiro, H. Wang, N. Kouno, J. Koshobu, K. Watanabe, “Confirmation of the X-ray-Analyzed Heterogeneous Distribution of the PDLA and PLLA Chain Stems in the Crystal Lattice of Poly(lactic acid) Stereocomplex on the Basis of the Vibrational Circular Dichroism IR Spectral Measurement”,

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- Macromolecules*, **2017**, *50*, 8066–8071.
- 26 W. Mengfan, K. Tashiro, Y. Ozaki, “Reinvestigation of the β -to- α Crystal Phase Transition of Poly(butylene adipate) by the Time-Resolved X-ray Scattering and FTIR Spectral Measurements in the Temperature Jump Process”, *Macromolecules*, **2017**, *50*, 3883-3889.
- 27 X. Zhang, L. Santonja-Blasco, K. B. Wagener, E. Boz, M. Tasaki, K. Tashiro, R. G. Alamo, “Infrared Spectroscopy and X-ray Diffraction Characterization of Dimorphic Crystalline Structures of Polyethylenes with Halogens Placed at Equal Distance along the Backbone”, *J. Phys. Chem. B*, **2017**, *121*, 10166-10179.
- 28 T. Yoshioka, T. Kameda, K. Tashiro, N. Ohta, A. K. Schaper, “Transformation of Coiled α -Helices into Cross- β -Sheets Superstructure”, *Biomacromolecules*, **2017**, *18*, 3892-3903.
- 29 M. A. Barique, E. Tsuchida, A. Ohira, K. Tashiro, “Effect of Elevated Temperatures on the States of Water and Their Correlation with the Proton Conductivity of Nafion”, *ACS Omega*, **2018**, *3*, 349-360.
- 30 K. Tashiro, K. Kusaka, T. Hosoya, T. Ohhara, M. Hanesaka, Y. Yoshizawa, H. Yamamoto, N. Niimura, I. Tanaka, K. Kurihara, R. Kuroki, T. Tamada, “Structure Analysis and Derivation of Deformed Electron Density Distribution of Polydiacetylene Giant Single Crystal by the Combination of X-ray and Neutron Diffraction Data”, *Macromolecules*, **2018**, *51*, 3911-3922. (*30)
- 31 M. Tosaka, K. Tashiro, “Crystal Polymorphism and Structure Models of Poly(dimethylsiloxane),” *Polymer*, **2018**, *153*, 507–520.
- 32 K. Tashiro, H. Yamamoto, K. Sugimoto, “Study of Phase Transition and Ultimate Mechanical Properties of Orthorhombic Polyoxymethylene Based on the Refined Crystal Structure,” *Polymer*, **2018**, *153*, 474–484.
- 33 K. Tashiro, “Quantitative Evaluation of Deformed Electron Density Distribution of Polydiacetylene Crystal on the Basis of the Organized Combination of X-ray and Neutron Diffraction Data,” *MLF Annual Report 2017. Vol. 2: Materials and Life Science Experimental Facility, Research and Development Highlights*, **2019**, 26–28. (*33)
- 34 K. Tashiro, H. Yamamoto, K. Funaki, J. Hu, “Synchrotron Microbeam X-ray Scattering Study of the Crystallite Orientation in the Spherulites of Isotactic Poly(butene-1) Crystallized Isothermally at Different Temperatures”, *Polym. J.*, **2019**, *51*, 143–153.
- 35 K. Tashiro, T. Yoshioka, H. Yamamoto, H. Wang, E. M. Woo, K. Funaki, H. Murase, “Relationship Between Twisting Phenomenon and Structural Discontinuity of Stacked Lamellae in the Spherulite of Poly(ethylene adipate) as Studied by the Synchrotron X-ray Microbeam Technique,” *Polym. J.*, **2019**, *51*, 131-141.
- 36 K. Tashiro, H. Yamamoto, K. Sugimoto, T. Takahama, M. Tanaka, M. Hasegawa, “Experimental Determination of the Geometrical Relation between Monomer and Polymer Species of 2,5-Distyrylpyrazine Single Crystal in the Topotactic Photoinduced Polymerization Reaction,” *Macromolecules*, **2019**, 2189–2202.
- 37 K. Tashiro, M. Gakhutishvili, “Crystal Structure of Cellulose-Iodine Complex,” *Polymer*, **2019**, *171*, 140–148.
- 38 S. Phongtamrug, K. Tashiro, “X-ray Crystal Structure Analysis of Poly(3-hydroxybutyrate) β -Form and the Proposition of a Mechanism of the Stress-Induced α -to- β Phase Transition,” *Macromolecules*, **2019**, *52*, 2995–3009.
- 39 T. Yoshioka, T. Tsubota, K. Tashiro, A. Jouraku, T. Kameda, “A Study of the Extraordinarily Strong and

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

Tough Silk produced by Bagworms”, *Nat. Commun.*, **2019**, *10*, 1469–1479.

40 K. Tashiro, H. Yamamoto, “Structural Evolution Mechanism of Crystalline Polymers in the Isothermal Melt-Crystallization Process: A Proposition Based on Simultaneous WAXD/SAXS/FTIR Measurements”, *Polymers*, **2019**, *11*, 1316-1340.

41 K. Tashiro, M. Gakhutishvili, “Crystal Structure of Cellulose-Iodine Complex”, *Polymer*, **2019**, *171*, 140-148.

42 Y. Kawahara, T. Yoshioka, H. Minami, N. Kuwabara, K. Tashiro, “Forcibly Spinning Using Bombyx Mori Silkworm Anesthetized by the Water Narcosis Treatment”, *J. Natural Fibers*, **2019** (<https://doi.org/10.1080/15440478.2019.1623750>).

43 K. Kodchakorn, P. Nimmanpipug, S. Phongtamrug, K. Tashiro, “pH-induced conformational changes in histamine in the solid state”, *RSC Advances*, **2019**, *9*, 19375-19389.

44 C. Li, J. Hu, K. Tashiro, Z. Ren, S. Yan, “Synthesis and Cyclization-induced Charge Transfer of Rectangular Bisterthiophenesiloxanes”, *Chem. Eur. J.*, 10.1002/chem.201903462 (2019).

45 D. Tahara, T. H. Ninh, H. Yamamoto, K. Tashiro, “Metropolis Monte Carlo Simulation of Two-Dimensional Small-Angle X-ray Scattering Patterns of Oriented Polymer Materials”, *Macromolecules*, **2020**, *53*, 276-287.

<図書>

【水分解光触媒の開発】

- 1 山方啓, 「光半導体による水分解の反応機構 時間分解分光測定を用いた光触媒のキャリアダイナミクス」, 光触媒/光半導体を利用した人工光合成—最先端科学から実装技術への発展を目指して—, 第3編, (株)エヌ・ティー・エス, **2017**, 第5章, pp. 158-167 (分担執筆; 章著) .
- 2 A. Yamakata, “Behavior of Charge Carriers at the Defects on Powder Photocatalysts -Time-resolved Visible to mid-IR Absorption Study-”, Understanding Charge transfer Processes on Metal Oxide Surfaces through Laser Flash Photolysis Analysis (Editor: Prof. D. Bahnemann), Pan Stanford Publishing, Singapore, **2018**. (分担執筆; 章著) .

【触媒・有機化合物および高分子錯体の静的・動的構造解析】

- 1 田代孝二, 「日本の高分子科学技術史第2巻 (高分子学会編)」, 研究史2 「高分子科学の発展を支えた分析器の進歩 (概観)」, **2016**, s8-s11.
- 2 K. Tashiro, “Microscopically Viewed Relationship Between Structure and Mechanical Property of Crystalline Polymers: An Important Guiding Principle for the Development of Super Fibers”, in “High-Performance and Specialty Fibers” (The Society of Fiber Science and Technology, Japan), **2016**, Chapter 6, pp. 95-108.
- 3 K. Tashiro, “Progress in Structure Analysis Techniques of Fibers”, in “High-Performance and Specialty Fibers” (The Society of Fiber Science and Technology, Japan), **2016**, Chapter 2, p. 21-47.

<学会発表>

国内

【水分解光触媒の開発】

- 1 山方啓, Y. Ham, 久富隆史, 久保田純, 堂免一成, 「時間分解可視中赤外分光測定でみた光触媒

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- のキャリアダイナミクス」, 2015 年光化学討論会 (大阪) **2015** (9/11).
- 2 J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, “Dynamics of photocarriers in anatase and rutile TiO₂ photocatalysts studied by transient absorption spectroscopy from visible to mid-IR region”, 第116回触媒討論会 (三重) **2015** (9/16).
- 3 松永大典, 山方啓, 「フェムト秒時間分解分光法を用いた光触媒のキャリアダイナミクス」, 第 116 回触媒討論会 (三重) **2015** (09/17)
- 4 J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, M. Hojamberdiev, K. Yubuta, S. Oishi, K. Domen, K. Teshima, “Dynamics of Photogenerated Charge Carriers in Metal Nitride Photocatalysts Studied by Time-Resolved Absorption Spectroscopy”, 第 25 回日本 MRS 年次大会 (横浜) **2015** (12/09).
- 5 松永大典, 山方啓, 「フェムト秒時間分解分光を用いた可視光照射下の光触媒のキャリアダイナミクス」, 第25回日本MRS年次大会 (横浜) **2015** (12/09).
- 6 松永大典, J. J. M. Vequizo, 山方啓, 「酸化チタン光触媒のフェムト秒時間分解分光測定」, 第 15 回日本表面科学会中部支部学術講演会 (名古屋) **2015** (12/19).
- 7 J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, “Time-resolved Spectroscopic Analysis of the Dynamics of Charge Carriers in Metal Nitride Photocatalysts”, 「スマートエネルギー技術研究センター」第 7 回シンポジウム (名古屋) **2016** (2/04).
- 8 J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, M. Hojamberdiev, H. Wagata, K. Kawashima, K. Yubuta, S. Oishi, K. Domen, K. Teshima, “Transient Absorption Spectroscopic Analysis of the Dynamic of Photocarriers in Metal OxyNitrides Photocatalysts”, 第 16 回先端フォトンテクノロジー研究センターシンポジウム (名古屋) **2016** (3/04).
- 9 山方啓, 「粉末系光触媒のキャリアダイナミクス」, 第 16 回先端フォトンテクノロジー研究センターシンポジウム (名古屋) **2016** (3/04).
- 10 松永大典, J. J. M. Vequizo, 山方啓, 「フェムト秒時間分解分光法を用いた TiO₂ 光触媒のキャリアダイナミクス触媒のキャリアダイナミクス」, 第 16 回先端フォトンテクノロジー研究センターシンポジウム (名古屋) **2016**, (3/04).
- 11 村知良亮, 山方啓, 「複合型触媒のキャリアダイナミクス」, 第 16 回先端フォトンテクノロジー研究センターシンポジウム (名古屋) **2016** (3/04).
- 12 J. J. M. Vequizo, 松永大典, 山方啓, 横野照尚, 「ブルックライト酸化チタンのキャリアダイナミクス」, 第 35 回光がかかわる触媒化学シンポジウム (東京) **2016** (6/10).
- 13 西岡駿太, 兵頭潤次, 山方啓, 山崎仁丈, 前田和彦, 「酸素欠陥濃度を制御した不定比 SrTiO_{3-δ} の水分解光触媒活性」, 第 35 回光がかかわる触媒化学シンポジウム (東京) **2016** (6/10).
- 14 松永大典, J. J. M. Vequizo, 山方啓, 「フェムト秒時間分解分光法を用いた TiO₂ 粉末と単結晶のキャリアダイナミクス」, 2016 年光化学討論会 (東京) **2016** (9/7).
- 15 山方啓, J. J. M. Vequizo, 松永大典, 「時間分解可視赤外分光法を用いた粉末酸化チタンのキャリアダイナミクス」, 第 10 回分子科学討論会 2016 (神戸) **2016** (9/13).
- 16 西岡駿太, 兵頭潤次, 山方啓, 山崎仁丈, 前田和彦, 「酸素欠損型不定比 SrTiO_{3-δ} の水分解光触媒活性」, 第 118 回触媒討論会 (盛岡) **2016** (9/21).
- 17 C. S. K. Ranasinghe, 山方啓, “Transient Absorption Study of Photogenerated Charge Carriers in Electrochemical Systems”, 第 118 回触媒討論会 (盛岡) **2016** (9/22).
- 18 栗木亮, 松永大典, 中島拓哉, 山方啓, 石谷治, 前田和彦, 「有機半導体と金属錯体との複合体を

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- 光触媒とした可視光駆動型 CO₂ 還元光触媒反応」, 第 118 回触媒討論会 (盛岡) **2016** (9/22).
- 19 J. J. M. Vequizo, 山方啓, M. Hojamberdiev, K. Kawashima, H. Wagata, K. Yubuta, S. Oishi, 堂免一成, K. Teshima, “Transient Visible to Mid-IR Absorption Spectroscopic Analysis of the Dynamics of Photocarriers in Metal Nitride/Oxynitride Photocatalysts”, 第 118 回触媒討論会 (盛岡) **2016** (9/22).
- 20 山方啓, 「半導体光触媒の光励起ダイナミクス」, 第 2 回 半導体による太陽光-水素エネルギー変換技術研究会 (名古屋) **2016** (10/13). (招待講演).
- 21 C. S. K. Ranasinghe, A. Yamakata, 「柔らかな固液界面における化学反応ダイナミクス -TiO₂ 光電極における光励起ダイナミクス-」, 新学術領域研究 柔らかな分子系 第 4 回公開シンポジウム (名古屋) **2016** (10/27).
- 22 松永大典, 山方啓, 「柔らかな固液界面における化学反応ダイナミクス -フェムト秒時間分解分光法による光触媒の光励起ダイナミクス-」, 新学術領域研究 柔らかな分子系 第 4 回公開シンポジウム (名古屋) **2016** (10/27).
- 23 C. S. K. Ranasinghe, A. Yamakata, “Photogenerated Electron-Hole Dynamics in BiVO₄ Based Photoelectrodes”, 「スマートエネルギー技術研究センター」 第 8 回シンポジウム (名古屋) **2016** (11/18).
- 24 J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, A. Yamakata, T. Ohno, “Dynamics of Photocarriers of Brookite TiO₂ Photocatalyst Studied by Transient Absorption and Emission Spectroscopy”, 「スマートエネルギー技術研究センター」 第 8 回シンポジウム (名古屋) **2016** (11/18).
- 25 松永大典, 山方啓, 「フェムト秒時間分解分光法による酸化チタン光触媒のキャリアダイナミクス」, 2016 年電気化学会北海道支部・東海支部合同シンポジウム「インテリジェント電気化学の新潮流」(札幌) **2016** (11/23).
- 26 山方啓, 「時間分解分光測定を利用した金属微粒子を担持した光触媒のキャリアダイナミクス」, 第 36 回表面科学学術講演会 (名古屋) **2016** (11/30), (依頼講演).
- 27 J. J. M. Vequizo, 松永大典, S. Okamura, T. Ohno, 山方啓, “Transient Absorption and FT-IR Analysis of the Carrier Dynamics of TiO₂ Photocatalysts”, 第 36 回表面科学学術講演会 (名古屋) **2016** (11/30).
- 28 松永大典, J. J. M. Vequizo, 山方啓, 「フェムト秒時間分解分光測定を用いた光触媒のキャリアダイナミクス」, 第 36 回表面科学学術講演会 (名古屋) **2016** (11/30).
- 29 山方啓, 「新しい分光技術を利用した光触媒反応の機構解明」, 『山口大学 光・エネルギー研究センターシンポジウム 光科学が生み出す新しい世界-光制御と分光技術の最前線-』, 山口大学常盤キャンパス (山口) **2016** (12/14), (招待講演).
- 30 C. S. K. Ranasinghe, A. Yamakata, “Behaviors of Photogenerated Electrons and Holes in SnO₂/BiVO₄/CoO_x Heterojunctions”, 第 16 回日本表面科学会中部支部 学術講演会 (名古屋) **2016** (12/17).
- 31 松永大典, J. J. M. Vequizo, 山方啓, 「フェムト秒時間分解分光測定を用いた酸化チタン表面欠陥におけるキャリアダイナミクス」, 第 16 回日本表面科学会中部支部 学術講演会 (名古屋) **2016** (12/17), (講演奨励賞).
- 32 山方啓, 「光励起キャリアーの動きとエネルギー制御」, JST さきがけ「光エネルギーと物質変換」第 3 期研究者研究成果報告会 (東京) **2017** (1/28).

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- 33 C. S. K. Ranasinghe, A. Yamakata, “Time-resolved Absorption Study on the Behavior of Photogenerated Charge Carriers in Visible-Light Active Photoelectrochemical Systems”, 「スマートエネルギー技術研究センター」第9回シンポジウム (名古屋), **2017** (1/30).
- 34 J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, A. Yamakata, T. Ohno, “Photodynamics of Anatase, Rutile and Brookite TiO₂ Powders Studied by Transient Absorption Spectroscopy”, 「スマートエネルギー技術研究センター」第9回シンポジウム (名古屋) **2017** (1/30).
- 35 C. S. K. Ranasinghe, A. Yamakata, “Enhancement of Photocatalytic Activity in BiVO₄ Based Visible Active Photoanodes”, 先進触媒開発研究センター 第1回シンポジウム (名古屋) **2017** (3/10).
- 36 J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, A. Yamakata, T. Ohno, “Distinctive Behavior of Photocarriers in TiO₂ Powders (Anatase, Rutile, and Brookite) Studied by Transient Absorption Spectroscopy”, 先進触媒開発研究センター 第1回シンポジウム (名古屋) **2017** (3/10).
- 37 山方啓, 「半導体光触媒の光励起ダイナミクス」, 先進触媒開発研究センター 第1回シンポジウム (名古屋) **2017** (3/10).
- 38 松永大典, J. J. M. Vequizo, 山方啓, 「フェムト秒時間分解分光法による単結晶と粉末 TiO₂ の光励起キャリアの挙動とエネルギー状態」, 先進触媒開発研究センター 第1回シンポジウム (名古屋) **2017** (3/10).
- 39 R. Kuriki, A. Yamakata, O. Ishitani, K. Maeda, “Visible-light-driven photocatalytic CO₂ reduction reaction using hybrid with an organic semiconductor and a Ru(II) binuclear complex”, 日本化学会第97春季年会 (千葉) **2017** (3/18).
- 40 石山翔太, 張仕麒, 横川俊哉, 山方啓, 酒多喜久, 「Ca イオンを添加した Ga₂O₃ の H₂O 完全分解反応に対する光触媒特性」, 第119回触媒討論会 (東京) **2017** (3/22).
- 41 山方啓, 「金属酸窒化物複合アニオン型光触媒のキャリアーダイナミクス」, 新学術領域研究 (平成28~32年度) 複合アニオン化合物の創製と新機能 第2回トピカル会議 (機能) (宮城) **2017** (8/7), (招待講演).
- 42 R. Kuriki, A. Yamakata, O. Ishitani, K. Maeda, “Development of hybrid photocatalysts for visible-light CO₂ reduction using carbon nitride and a binuclear Ru(II) complex”, 2017年光化学討論会 (宮城) **2017** (9/4).
- 43 C. S. K. Ranasinghe, A. Yamakata, “Fabrication of Highly Efficient TiO₂ Photoanodes by Atomized Spray Pyrolysis Deposition”, 2017年光化学討論会 (宮城) **2017** (9/4).
- 44 J. J. M. Vequizo, S. Ishiyama, Y. Sakata, A. Yamakata, “Dynamics of Photocarriers in Metal Ion Doped Ga₂O₃ Photocatalysts Studied by Transient Absorption Spectroscopy”, 2017年光化学討論会 (宮城) **2017** (9/4).
- 45 石山翔太, 横川俊哉, 山方啓, 酒多喜久, 「金属イオン添加 Ga₂O₃ 光触媒の H₂O 完全分解反応に対する光触媒特性」, 第120回触媒討論会 (愛媛) **2017** (9/13).
- 46 汪雨濃, J. J. M. Vequizo, 岡崎めぐみ, 前田和彦, 山方啓, 「コバルト酸化物を担持した酸化チタンのキャリアーダイナミクス」, 第120回触媒討論会 (愛媛) **2017** (9/13).
- 47 C. S. K. Ranasinghe, A. Yamakata, “Behavior of Photogenerated Charge Carriers in SnO₂/BiVO₄/CoO_x Heterostructure Studied by Transient Absorption Spectroscopy”, 第120回触媒討論会 (愛媛) **2017** (9/14).

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- 48 J. J. M. Vequizo, S. Ishiyama, Y. Sakata, A. Yamakata, “Effects of Metal Ion-Doping on Ga₂O₃ Photocatalysts Studied by Transient Absorption Spectroscopy”, 第 120 回触媒討論会 (愛媛) **2017** (9/14).
- 49 山方啓, J. J. M. Vequizo, 石山翔太, 酒多喜久, 「金属イオンをドーピングした Ga₂O₃ の光励起ダイナミクス」, 第 11 回分子科学討論会 (宮城) **2017** (9/16).
- 50 C. S. K. Ranasinghe, A. Yamakata, “Transient Absorption Study of Photogenerated Charge Carriers in Electrochemical Systems”, スマートエネルギー技術研究センター 第 10 回シンポジウム (名古屋) **2017** (10/13).
- 51 J. J. M. Vequizo, C. S. K. Ranasinghe, S. Ishiyama, Y. Sakata, A. Yamakata, “Effects of Surface Modification on Powder Photocatalysts Studied by Transient Absorption Spectroscopy”, スマートエネルギー技術研究センター 第 10 回シンポジウム (名古屋) **2017** (10/13).
- 52 山方啓, 「超高活性 Ga₂O₃ 系水分解光触媒の反応機構」, スマートエネルギー技術研究センター 第 10 回シンポジウム (名古屋) **2017** (10/13).
- 53 兵頭潤次, 西岡駿太, 熊谷啓, 前田和彦, J. J. M. Vequizo, 山方啓, 山崎仁丈, 「酸素空孔濃度および電子濃度を制御した SrTiO₃ における光触媒特性 - 欠陥化学と光化学反応 -」, 第 43 回固体イオニクス討論会 (山形) **2017** (12/5).
- 54 K. Muraoka, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, O. Ishitani, K. Maeda, “Oxygen-Doped Ta₃N₅ as a Building Block for Z-scheme CO₂ Reduction with a Binuclear Ru(II) Complex Workable under a Wide Range of Visible Light”, 日本化学会第 98 春季年会 (千葉) **2018** (3/21).
- 55 T. Ohwaki, A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, T. Iihoshi, “Improvement of photocatalytic activity under visible light irradiation by composite with Cu/WO₃ and Cu/N-TiO₂”, 日本化学会第 98 春季年会 (千葉) **2018** (3/21).
- 56 T. Oshima, K. Muraoka, J. J. M. Vequizo, S. Yamashita, A. Yamakata, K. Kimoto, O. Ishitani, K. Maeda, “Synthesis and photocatalytic activity of a layered perovskite oxynitride Li₂LaTa₂O₆N”, 日本化学会第 98 春季年会千葉) **2018** (3/21).
- 57 栗木亮, C. S. K. Ranasinghe, 山方啓, 石谷治, 前田和彦, 「C₃N₄ の光励起キャリアダイナミクスと錯体触媒への電子移動過程の観察」, 第 121 回触媒討論会東京) **2018** (3/22).
- 58 山方啓, J. J. M. Vequizo, 「時間分解分光測定を利用した高活性光触媒の反応機構解明」, 日本セラミックス協会 第 31 回秋季シンポジウム (名古屋) **2018** (9/5) (依頼講演).
- 59 小松田紫央, 朝倉裕介, J. J. M. Vequizo, 山方啓, 殷シュウ, 「ソルボサーマル反応をベースとした光触媒コンポジットの合成と活性向上」, 日本セラミックス協会 第 31 回秋季シンポジウム (名古屋) **2018** (9/5).
- 60 A. Miyoshi, J. J. M. Vequizo, S. Nishioka, S. Yamashita, A. Iwase, S. Nozawa, A. Yamakata, K. Kimoto, A. Kudo, K. Maeda, “Synthesis of nitrogen/fluorine codoped rutile TiO₂ photocatalyst and its application for Z-scheme water splitting,” 2018 年光化学討論会 (兵庫) **2018** (9/5).
- 61 J. J. M. Vequizo, F. Amano, A. Yamakata, “Dynamics of photocarriers in reduced TiO₂ studied by transient visible to mid-IR absorption spectroscopy,” 2018 年光化学討論会 (兵庫) **2018** (9/7).

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- 62 山方啓, J. J. M. Vequizo, 岡村翔, 白木恭平, 「光触媒粒子における電子のトラップ過程と蓄積過程」, 第 12 回分子科学討論会 (福岡) **2018** (9/11).
- 63 J. J. M. Vequizo, S. Ishiyama, Y. Sakata, A. Yamakata, “Impact of Cocatalyst on the Dynamics of Photocarriers in Ga₂O₃ Powders Studied by Time-Resolved Absorption Spectroscopy,” 第 122 回触媒討論会 (函館) **2018** (9/26).
- 64 山方啓, J. J. M. Vequizo, M. Hojamberdiev, S. Chen, 手島勝弥, 堂免一成, 「金属酸窒化物光触媒における光励起キャリアの過渡吸収」, 第 122 回触媒討論会 (函館) **2018** (9/26).
- 65 J. J. M. Vequizo, S. Tsuboi, S. Ishiyama, Y. Sakata, A. Yamakata, “Electron Transfer to Water Molecules on Rh-loaded Ga₂O₃ Photocatalysts,” グリーン電子素子・材料研究センター 最終年度シンポジウム (名古屋) **2018** (11/2).
- 66 山方啓, 「過渡吸収分光測定を用いた光触媒粒子の光励起ダイナミクス」, 第 49 回中部化学関係学協会支部連合秋季大会 (名古屋) **2018** (11/4) (依頼講演).
- 67 山方啓, 「ポンププローブ法による界面ダイナミクス」, 2018 年電気化学会関東支部セミナー 先端計測技術による電極界面分析の新展開 (東京) **2018** (11/9) (招待講演).
- 68 山方啓, 「高活性光触媒の実現を目指した新しい分光測定技術の開発」, 第 11 回ワークショップ 固体材料合成および評価技術の新展開 (宮城) **2018** (11/12) (基調講演).
- 69 山方啓, J. J. M. Vequizo, 石山翔太, 酒多喜久, 「超高活性 Ga₂O₃ 系水分解光触媒の光励起ダイナミクス」, 表面・界面スペクトロスコピー2018 (茨城) **2018** (12/1).
- 70 山方啓, 「時間分解分光測定による高活性光触媒反応のメカニズム解明」, 熊本大学工学部研究セミナー (熊本) **2018** (12/5) (招待講演).
- 71 山方啓, 「高性能光触媒の設計を目指した反応機構の解明」, 中央大学理工学部・研究セミナー (東京) **2019** (1/22) (招待講演).
- 72 奥野和哉, J. J. M. Vequizo, 山方啓, 垣花真人, 加藤英樹, 「BiVO₄ 光触媒へのボールミ処理効果」, 第 123 回触媒討論会 (大阪) **2019** (3/20).
- 73 小川幹太, 中田明伸, 鈴木肇, 富田修, 東正信, 山方啓, 佐伯昭紀, 阿部竜, 「各種助触媒担持による層状酸ハロゲン化物光触媒の水分解活性向上」, 第 123 回触媒討論会 (大阪) **2019** (3/20).
- 74 西岡駿太, 兵頭潤次, J. J. M. Vequizo, 山下俊介, 熊谷啓, 木本浩司, 山方啓, 山崎仁丈, 前田和彦, 「酸素分圧制御下で合成した不定比 SrTiO_{3-δ} の光触媒活性への電子ドーピング効果」, 第 123 回触媒討論会 (大阪) **2019** (3/21).
- 75 山方啓, 「時間分解分光測定を利用した粉末光触媒のキャリアダイナミクス」, 第 38 回光がかかわる触媒化学シンポジウム, (名古屋) **2019** (6/21).
- 76 山方啓, 小川貴史, 白木恭平, 小川幹太, 桑原彰秀, 阿部竜, 陰山洋, 「ビスマス系酸ハロゲン化物光触媒の光励起ダイナミクス」, 2019 年光化学討論会, (名古屋) **2019** (9/10).
- 77 加藤康作, 姜君哲, 酒多喜久, 山方啓, 「チタン酸ストロンチウムのキャリアダイナミクス」, 2019 年光化学討論会, (名古屋) **2019** (9/12).
- 78 柴田健吾, 加藤康作, 山方啓, 石谷治, 前田和彦, 「C₃N₄ 共重合体による CO₂ 還元光触媒反応の高活性化」, 第 124 回触媒討論会, (長崎) **2019** (9/18).
- 79 小川幹太, 富田修, 立川貴士, 山方啓, 阿部竜, 「光励起キャリアの有効利用による層状酸ハロゲン化物光触媒の水素生成活性向上」, 第 124 回触媒討論会, (長崎) **2019** (9/18).

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- 80 加藤康作, 姜君哲, 酒多喜久, 山方啓, 「不純物をドーブしたチタン酸ストロウムの過渡吸収測定」, 第 124 回触媒討論会, (長崎) **2019** (9/19).
- 81 白木恭平, 井上直洋, 山方啓, 「金属微粒子を担持した酸化チタンの可視光励起ダイナミクス」, 第 124 回触媒討論会, (長崎) **2019** (9/19).
- 82 林成希, 山方啓, 「酸化チタン光電極の表面修飾効果」, 第 124 回触媒討論会, (長崎) **2019** (9/19).
- 83 J. Jiang, H. Fujimori, A. Yamakata, Y. Sakata, “Preparation of High Active SrTiO₃ to photocatalytic overall H₂O splitting by doping Na ion” , 第 124 回触媒討論会, (長崎) **2019** (9/20).
- 84 山方啓, 小川貴史, 白木恭平, 小川幹太, C. S. K. Ranasinghe, 桑原彰秀, 阿部竜, 陰山洋, 「ピスマス系酸ハロゲン化物のアニオン欠陥準位」, 第 124 回触媒討論会, (長崎) **2019** (9/20).
- 85 加藤康作, 山方啓, 「不純物をドーブした SrTiO₃ の光励起キャリアダイナミクス」, 豊田工業大学スマートエネルギー研究センターシンポジウム, (名古屋) **2019** (11/21).
- 86 坪井翔哉, 山方啓, 「酸化タングステン微粒子の光励起キャリアの挙動」, 豊田工業大学スマートエネルギー研究センターシンポジウム, (名古屋) **2019** (11/21).
- 87 白木恭平, 山方啓, 「Pt 担持 TiO₂における可視光照射時の光励起キャリアダイナミクス」, 豊田工業大学スマートエネルギー研究センターシンポジウム, (名古屋) **2019** (11/21).
- 88 林成希, 山方啓, 「酸化チタン多層電極の活性評価」, 豊田工業大学スマートエネルギー研究センターシンポジウム, (名古屋) **2019** (11/21).
- 89 山方啓, 「レーザー分光を用いた光触媒反応機構の解明」, 第 29 回キャラクタリゼーション講習会「触媒および表面の解析に役立つキャラクタリゼーションの基礎と実際」, (富山) **2019** (11/21).
- 90 加藤康作, 山方啓, 「SrTiO₃の光励起キャリアダイナミクスにおける Na ドープの効果」, 第 13 回表面・界面スペクトロスコーピー2019, (東京) **2019** (12/6).
- 91 山方啓, 「酸ハロゲン化物光触媒の光励起キャリアダイナミクス」, 第 13 回 表面・界面スペクトロスコーピー2019, (東京) **2019** (12/6).
- 92 加藤康作, 山方啓, 「Na をドーブしたチタン酸ストロンチウムの光励起キャリアダイナミクス」, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 最終年度シンポジウム, (名古屋) **2020** (3/5).
- 93 山方啓, 「高活性光触媒の光励起ダイナミクス」, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 最終年度シンポジウム, (名古屋) **2020** (3/5).
- 94 坪井翔哉, 山方啓, 「WO₃内励起キャリアの挙動の粒子サイズ依存性」, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 最終年度シンポジウム, (名古屋) **2020** (3/5).
- 95 白木恭平, 山方啓, 「Pt 担持 TiO₂におけるキャリアダイナミクス」, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 最終年度シンポジウム, (名古屋) **2020** (3/5).
- 96 林成希, 山方啓, 「酸化チタン二層電極の表面修飾効果」, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 最終年度シンポジウム, (名古屋) **2020** (3/5).
- 97 金澤知器, 内山智貴, 内本喜晴, 野澤俊介, 山方啓, 前田和彦, 「半導体光触媒を用いた水の酸化反応を促進する CoAlO_x 複合酸化物助触媒の開発」, 日本化学会第 100 春季年会, (千葉) **2020** (3/24).
- 98 A. Miyoshi, J. J. M. Vequizo, S. Nishioka, S. Yamashita, S. Nozawa, A. Kuwabara, A. Yamakata, K. Kimoto, K. Maeda, “Visible light Z-scheme water splitting using nitrogen/fluorine

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

codoped rutile TiO_2 as O_2 evolution photocatalyst”, 日本化学会第 100 春季年会, (千葉)2020 (3/25).

- 99 若山晴輝, 平山直樹, 中田博子, 加藤康作, 山方啓, 岡研吾, 前田和彦, 「酸フッ化物 $\text{Pb}_2\text{Ti}_2\text{O}_5.4\text{F}_{1.2}$ へのアルカリ処理と光触媒活性への影響」, 日本化学会第 100 春季年会, (千葉) 2020 (3/25).
- 100 海野優樹, 平町雄一, 藤森宏高, 山方啓, 酒多喜久, 「トンネル構造を有するチタン混合酸化物光触媒の H_2O 分解反応に対する特性」, 日本化学会第 100 春季年会, (千葉) 2020 (3/26).

【水素の貯蔵と放出用の高機能触媒開発】

- 1 磯貝勇樹, 神岡武文, リ ヒュンジュ, 小島信晃, 大下祥雄, 「反応性プラズマ蒸着プロセスの影響によるライフタイム変化」, 第 14 回次世代の太陽光発電システムシンポジウム(名古屋), 2017.

【水電解および燃料電池の電極触媒の開発】

- 1 原正則, Kanishka De Silva, Hsin-Hui Huang, 吉村雅満, 「 IrO_2 担持グラフェン触媒による水電解反応の評価」, 第 36 回表面科学学術講演会 (名古屋) 2016, 1Ga03 (11/29) .
- 2 Badam Rajashekar, Kanishka De Silva, 原正則, 吉村雅満, 「 IrO_2 /carbon NanoHybrid as Efficient Oxygen Evolution Reaction Catalysts」, 第 16 回日本表面科学会中部支部学術講演会 (名古屋) 2016, 12 (12/17) .
- 3 原正則, Badam Rajashekar, Kanishka De Silva, Hsin-Hui Huang, 吉村雅満, 「 IrO_2 担持グラフェン触媒上における酸素発生反応の電気化学特性評価」, 第 64 回応用物理学会春季学術講演会(横浜) 2017, 14p-P4-23 (3/14) .
- 4 Badam Rajashekar, Hsin-Hui Huang, 原正則, 吉村雅満, 「 IrO_2 Decorated Functionalized Acetylene Black as Highly Efficient Oxygen Evolution Reaction Catalysts」, 電気化学会第 84 回大会 (東京) 2017, 1K17 (3/25) .
- 5 Rajashekar Badam, Wang Guan Jhong, Hsin-Hui Huang, 原正則, 吉村雅満, 「 IrO_2 Decorated Nitrogen Doped Graphene Electrocatalysts for Efficient Oxygen Evolution Reaction」, 電気化学会第 85 回大会 (東京) 2018, S11-1014 (3/9) .
- 6 原正則, Rajashekar Badam, Hsin-Hui Huang, 吉村雅満, 「酸素発生反应用 IrRuO_x / Graphene 触媒の合成と特性評価」, 第 65 回応用物理学会春季学術講演会 (東京) 2018, 17p-202-14 (3/17) .
- 7 原正則, R. Badam, H.-H. Huang, 吉村雅満, 「グラフェン上におけるキノン分子の酸化反応の活性評価」, 第 79 回応用物理学会秋季学術講演会 (名古屋) 2018, 18p-PB3-53 (9/18).(*国内 7)
- 8 P. Joshi, R. Badam, H.-H. Huang, M. Hara, M. Yoshimura, ” Effect of Nitrogen Doping Amount on Electrocatalytic Activity of IrO_2 on Nitrogen-doped Graphene for Excellent Oxygen Evolution Reaction” , 第 65 回応用物理学会春季学術講演会 (東京) 2018, 20a-PB9-5 (9/20).
- 9 米田大祐, 鈴木誠也, 原正則, 吉村雅満, 「電気二重層キャパシタ用カーボンナノチューブ/グラファイト複合電極の作製」, 2018 年電気化学会秋季大会 (金沢) 2018, 1D14 (9/25).
- 10 原正則, 「固体高分子燃料電池内部の反応挙動のその場観察」, 実用エネルギー材料開発のためのオペランド解析研究会 (名古屋) 2019 (1/31).
- 11 原正則, 池田義仁, 吉村雅満, 「電気二重層キャパシタ用カーボンナノチューブ/Cu 電極の作製と評価」, 第 66 回応用物理学会春季学術講演会 (東京) 2019, 10p-PB5-26 (3/10).

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- 12 P. Joshi, H.-H. Huang, M. Hara, M. Yoshimura, "Evaluation of IrO₂ Activity as an Electrocatalyst for Oxygen Evolution Reaction by Heteroatom doped Reduced Graphene Oxide", 第 66 回応用物理学会春季学術講演会 (東京) **2019**, 10a-W521-11 (3/10).
- 13 原正則, P. Joshi, H.-H. Huang, 吉村雅満, 「水電解アノード用の新規触媒 IrRuO_x 合金ナノ粒子担持グラフェンの合成」, 電気化学会 第 86 回大会 (京都) **2019**, 2A01 (3/28).
- 14 原正則, 池田義仁, 吉村雅満, 「垂直配向カーボンナノチューブを用いた電気二重層キャパシタ用電極の作製」, 2019 年電気化学会秋季大会 (甲府) **2019**, 1G04 (9/5).
- 15 P. Joshi, H.-H. Huang, M. Hara, M. Yoshimura, "Enhance the Electrocatalytic Activity of IrO₂ via Boron-doping of Carbon Support", 2019 年電気化学会秋季大会 (甲府) **2019**, 2G03 (9/6).
- 16 原正則, P. Joshi, H.-H. Huang, 吉村雅満, 「異種元素ドーピンググラフェン上に担持した IrRuO_x 触媒の合成と活性評価」, 第 80 回応用物理学会秋季学術講演会 (札幌) **2019**, 18p-E308-16 (9/18).
- 17 原正則, 「ナノカーボン担体を用いた新規水電解触媒の開発」, 第 30 回電解プロセス研究会 (大阪) **2019** (9/27).
- 18 原正則, 吉村雅満, 「カーボンナノチューブ/ Cu 電極の Li イオンキャパシタ性能評価」, 第 67 回応用物理学会春季学術講演会 (東京) **2020** (3/12-15).
- 19 R. Yadav, M. Hara, P. Joshi, M. Yoshimura, "Effect of Nitrogen-Doping in Graphene on the Performance as a Supercapacitor Electrode", 電気化学会 第 87 回大会 (名古屋) **2020** (web 討論会, 3/17-19).
- 20 P. Joshi, H.-H. Huang, M. Hara, M. Yoshimura, "Heteroatom (B/N) Codoped Graphene as IrO₂ catalyst Support for Oxygen Evolution Reaction", 電気化学会 第 87 回大会 (名古屋) **2020** (web 討論会, 3/17-19).

【バイオマスからの触媒的水素製造手法の開発】

- 1 武野計二, 石田真也, 高野孝義, 「金属接触部位の表面微細形状と熱抵抗の関係」, 日本機械学会年次大会 (関西大学) **2018** (9/10).
- 2 川ノ上弘規, 武山周介, 長田和也, 林紘啓, 武野計二, 「高粘性液体の噴霧におけるノズル内キャビテーションの観察」, 第 56 回燃焼シンポジウム (堺市) **2018** (11/14).
- 3 平川栞, 武田大樹, 坂爪亮, 山本昌平, 武野計二, 「高圧水素噴出火炎におけるノズルのスロート勾配と吹き飛び特性の関係」, 第 56 回燃焼シンポジウム (堺市) **2018** (11/14).
- 4 K. Takeno, N. Qadi, S. Kosaka, M. Kobayashi, "Gasification of Energy Grass Pretreated with Densification and Torrefaction", Fifty-sixth Combustion Symposium of Japan (Sakai, Japan), **2018** (11/14).
- 5 小阪信一郎, 武野計二, ナシム キャディ, 「草本系バイオマスの CO₂ 雰囲気における乾留およびチャーのガス化反応特性」, 第 57 回燃焼シンポジウム (札幌) **2019** (11/20). (*国内 5)
- 6 武山周介, 武野計二, 川ノ上弘規, 「高粘性液体の噴霧におけるノズル内キャビテーションの影響」, 第 57 回燃焼シンポジウム (札幌) **2019** (11/20).
- 7 武田大樹, 武野計二, 平川栞, 山本昌平, 木戸ひかる, 「高圧水素噴流火炎における衝撃波構造の保炎への影響」, 第 57 回燃焼シンポジウム (札幌) **2019** (11/20).

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- 8 幅田恒平, 武野計二, 山本昌平, 「可燃性予混合気の熱面発火における金属表面粗さの影響」, 第 57 回燃焼シンポジウム (札幌) **2019** (11/21).
- 9 武山周介, 武野計二, 川ノ上弘規, 「高粘性液体の噴霧における矩形ノズル内キャビテーションの観察」, 第 28 回 微粒化シンポジウム (山口大学) **2019** (12/22).
- 10 N. Qadi, K. Takeno, Y. Motoyama, “Effect of Hydrothermal Carbonization Temperature on the Gasification Kinetics of Hydrochar Produced from Energy Grass Biomass”, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 最終年度シンポジウム (名古屋) **2020**, P-10.
- 11 S. Kosaka, N. Qadi, K. Takeno, “CO₂ Gasification of Char Produced from the Devolatilization of Energy Grass Biomass under CO₂”, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 最終年度シンポジウム (名古屋) **2020**, P-11.
- 12 武田大樹, 武野計二, 木戸ひかる, 「高圧水素噴出時の着火特性」, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 最終年度シンポジウム (名古屋) **2020**, P-12.

【高機能触媒による水素化およびヒドロシリル化反応の開発】

- 1 森井昂至, 井本聡, 細川さとみ, 本山幸弘, 「窒素含有炭素ナノ繊維担持 Pd ナノ粒子による芳香族ケトンの選択的水素化反応」, 第 46 回中部化学関係学協会支部連合秋季大会 (津) **2015**, 2P70.
- 2 寺本一季, 細川さとみ, 本山幸弘, 「活性炭担持パラジウム触媒による新規なアミド化合物のシラン還元反応」, 第 46 回中部化学関係学協会支部連合秋季大会 (津) **2015**, 2P69.
- 3 細川さとみ, 寺本一季, 本山幸弘, 「パラジウム触媒を用いたカルボニル化合物の簡便な還元法」, 日本プロセス化学会 2016 サマーシンポジウム (名古屋) **2016**, 2P-15.
- 4 寺本一季, 細川さとみ, 本山幸弘, 「パラジウム触媒によるアミド化合物のシラン還元: 反応機構の解析」, 第 47 回中部化学関係学協会支部連合秋季大会 (豊橋) **2016**, 1P-06.
- 5 本山幸弘, 「パラジウム触媒による新規なアミド化合物のシラン還元反応」, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 第 1 回シンポジウム (名古屋).
- 6 細川さとみ, 寺本一季, 本山幸弘, 「活性炭担持パラジウムとヒドロシランによるアミド化合物の脱酸素型還元反応」, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 第 1 回シンポジウム (名古屋) **2017**, P-2.
- 7 寺本一季, 細川さとみ, 本山幸弘, 「コロイド型パラジウム触媒によるアミド化合物のシラン還元反応」 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 第 1 回シンポジウム (名古屋) **2017**, P-3.
- 8 石塚翔也, 本山幸弘, 「窒素含有炭素ナノ繊維担持 Pd ナノ粒子による選択的水素化反応」, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 第 1 回シンポジウム (名古屋) **2017**, P-4.
- 9 戸谷元紀, 細川さとみ, 本山幸弘, 「環状エステルの新規な選択的シラン還元反応の開発」, 第 48 回中部化学関係学協会支部連合秋季大会 (岐阜) **2017**, 2PC08.
- 10 石塚翔也, 森井昂至, 張振中, 本山幸弘, 「窒素含有炭素ナノ繊維担持パラジウムナノ粒子による選択的水素化反応の開発」, 第 48 回中部化学関係学協会支部連合秋季大会 (岐阜) **2017**, 2PC10.
- 11 大西健太, 本山幸弘, 「白金サブナノクラスター触媒による芳香族化合物の環水素化反応」, 第 50 回中部化学関係学協会支部連合秋季大会 (松本) **2019**, 2P33.
- 12 Z. Zhang, T. Ikeda, H. Murayama, M. Tokunaga, T. Honma, Y. Motoyama, “Anchored Molecular Palladium-Generated Clusters for Reductive *N*-Alkylation of Amines with Carbonyl Compounds under Atmospheric Hydrogen”, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 最終年度シンポジウ

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

ム (名古屋) 2020, P-8.

- 13 大西健太, 本山幸弘, 「白金クラスター触媒による芳香族化合物の環水素化反応」, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 最終年度シンポジウム (名古屋) 2020, P-9.
- 14 本山幸弘, 「新規な金属クラスターの発生法と触媒機能」, 豊田工業大学 先進触媒開発研究センター 最終年度シンポジウム (名古屋) .

【原子間力顕微鏡を用いた触媒担持メカニズムの分子レベル評価】

- 1 甲斐鈴菜, 原民夫, 原正則, 吉村雅満, 「大気圧プラズマによる欠陥導入 HOPG の触媒活性の評価」, 第 64 回応用物理学会春季学術講演会 (横浜) 2017, 14p-P4-22 (3/14) .
- 2 原正則, R. Badam, H. -H. Huang, 吉村雅満, 「グラフェン上におけるキノン分子の酸化反応の活性評価」, 第 79 回応用物理学会秋季学術講演会 (名古屋) 2018, 18p-PB3-53 (9/18).
- 3 P. Joshi, R. Badam, H. -H. Huang, M. Hara, M. Yoshimura, ” Effect of Nitrogen Doping Amount on Electrocatalytic Activity of IrO₂ on Nitrogen-doped Graphene for Excellent Oxygen Evolution Reaction” , 第 65 回応用物理学会春季学術講演会 (東京) 2018, 20a-PB9-5 (9/20).
- 4 米田大祐, 鈴木誠也, 原正則, 吉村雅満, 「電気二重層キャパシタ用カーボンナノチューブ/グラファイト複合電極の作製」, 2018 年電気化学会秋季大会 (金沢) 2018, 1D14 (9/25).
- 5 原正則, 「固体高分子形燃料電池内部の反応挙動のその場観察」, 実用エネルギー材料開発のためのオペランド解析研究会 (名古屋) 2019 (1/31).
- 6 原正則, 池田義仁, 吉村雅満, 「電気二重層キャパシタ用カーボンナノチューブ/Cu 電極の作製と評価」, 第 66 回応用物理学会春季学術講演会 (東京) 2019, 10p-PB5-26 (3/10).
- 7 P. Joshi, H. -H. Huang, M. Hara, M. Yoshimura, ” Evaluation of IrO₂ Activity as an Electrocatalyst for Oxygen Evolution Reaction by Heteroatom doped Reduced Graphene Oxide” , 第 66 回応用物理学会春季学術講演会 (東京) 2019, 10a-W521-11 (3/10).
- 8 原正則, P. Joshi, H. -H. Huang, 吉村雅満, 「水電解アノード用の新規触媒 IrRuO_x 合金ナノ粒子担持グラフェンの合成」, 電気化学会 第 86 回大会 (京都) 2019 , 2A01 (3/28).
- 9 原正則, 池田義仁, 吉村雅満, 「垂直配向カーボンナノチューブを用いた電気二重層キャパシタ用電極の作製」, 2019 年電気化学会秋季大会 (甲府) 2019, 1G04 (9/5).
- 10 P. Joshi, H. -H. Huang, M. Hara, M. Yoshimura, “Enhance the Electrocatalytic Activity of IrO₂ via Boron-doping of Carbon Support” , 2019 年電気化学会秋季大会 (甲府) 2019, 2G03 (9/6).
- 11 原正則, P. Joshi, H. -H. Huang, 吉村雅満, 「異種元素ドーピンググラフェン上に担持した IrRuO_x 触媒の合成と活性評価」, 第 80 回応用物理学会秋季学術講演会 (札幌) 2019, 18p-E308-16 (9/18).
- 12 原正則, 吉村雅満, 「カーボンナノチューブ/ Cu 電極の Li イオンキャパシタ性能評価」, 第 67 回応用物理学会春季学術講演会 (東京) 2020 (3/12-15).
- 13 R. Yadav, M. Hara, P. Joshi, M. Yoshimura, “Effect of Nitrogen-Doping in Graphene on the Performance as a Supercapacitor Electrode” , 電気化学会 第 87 回大会 (名古屋) 2020 (web 討論会, 3/17-19).
- 14 P. Joshi, H. -H. Huang, M. Hara, M. Yoshimura, “Heteroatom (B/N) Codoped Graphene as IrO₂ catalyst Support for Oxygen Evolution Reaction” , 電気化学会 第 87 回大会 (名古屋) 2020 (web 討論会, 3/17-19).

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

【触媒・有機化合物および高分子錯体の静的・動的構造解析】

- 1 田代孝二, 山元博子, 王海, 太田昇, 「透過赤外・放射光広角小角 X 線散乱同時時間分解測定に基づくイソタクティックポリプロピレンのメルト等温結晶化過程における構造発展追跡」, 高分子学会予稿集 (神戸), **2016**, 65, 1Pc029.
- 2 吉岡太陽, 亀田恒徳, 田代孝二, 「シルク繊維の引張り過程における構造変化と力学挙動の関係」, 高分子学会予稿集 (神戸), **2016**, 65, 1Pc039.
- 3 吉岡弥生, 田代孝二, 「ナノファイバー状芳香族ポリアミドの形成過程における構造変化」, 高分子学会予稿集 (神戸), **2016**, 65, 1Pf076.
- 4 田代孝二, S. M. Saharin, 高濱智彦, 「ポリビニルアルコール・ヨウ素錯体の新しい結晶型の検出と構造転移機構」, 高分子学会予稿集 (神戸), **2016**, 65, 1Ph032.
- 5 田代孝二, S. Kumbara, 「一連の D/H ランダム共重合体を用いたポリオキシメチレンのメルト等温結晶化速度のスケーリング」, 高分子学会予稿集 (神戸), **2016**, 65, 1Pg037.
- 6 田代孝二, H. Jian, 「イソタクティックポリブテン-1 の II 型-I 型結晶相転移機構解明」, 繊維学会年次大会 (東京), **2016**, 1C05.
- 7 吉岡太陽, 亀田恒徳, 田代孝二, 「応力ひずみ特性の異なる二種類のシルクの延伸時構造変化の比較から考えるシルクの構造と物性の関係性」, 繊維学会年次大会 (東京), **2016**, 2C16.
- 8 河原豊, 藤井秀彰, 吉岡太陽, 田代孝二, 渡邊千咲, 玉田靖, 「樹状構造を発現した液状絹エアロゲルの水溶性」, 繊維学会年次大会 (東京), **2016**, 2C016.
- 9 高濱智彦, 田代孝二, 「PVA-ヨウ素錯体の構造と形成機構に関する量子化学的検討」, 高分子計算機科学研究会 (東京), **2016** (招待講演).
- 10 田原大輔, 田代孝二, 「力学変形過程におけるエラストマーの高次構造変化: モンテカルロシミュレーション法に基づく 2 次元広角小角 X 線散乱図形実測データの再現」, 高分子討論会予稿集 (神奈川), **2016**, 65, 1H15.
- 11 田代孝二, 山元博子, 田原大輔, W. Hai, 吉岡太陽, 「高分子の熔融等温結晶化における構造発展過程と中間相の役割」, 高分子討論会予稿集 (神奈川), **2016**, 65, 1H12.
- 12 田代孝二, 「高分子・ヨウ素錯体の結晶構造と相互作用」, 高分子討論会予稿集 (神奈川), **2016**, 65, 1H11.
- 13 田代孝二, 高濱智彦, 「種々の高分子・ヨウ素錯体の結晶構造解析と分子間相互作用」, 日本結晶学会 (茨城), **2016**, p. 33.
- 14 山元博子, 田代孝二, 浅田光則, 勝部勝義, 「ポリノナメチレンテレフタルアミドとそのモデル化合物の結晶相転移挙動」, 東海支部若手繊維研究会 (岐阜), **2016**, P. 7.
- 15 山元博子, 田代孝二, 浅田光則, 勝部勝義, 「ポリノナメチレンテレフタルアミドとそのモデル化合物の結晶相転移挙動」, 東海支部若手繊維研究会 (岐阜), **2016**, P. 7.
- 16 田代孝二, 山元博子, 杉本邦久, 長谷川正木, 「ジスチリルピラジンモノマー及びポリマー単結晶の X 線構造解析の成功と光固相重合反応機構の確立」, 高分子学会年次大会 (名古屋), **2018**, 67, 1Pe033 (5/23-25).
- 17 田代孝二, 山元博子, 杉本邦久, 「放射光 X 線構造解析および密度汎関数法による熱力学関数計算に基づくポリオキシメチレン直方晶-三方晶結晶相転移機構の検討」, 高分子学会年次大会 (名古屋), **2018**, 67, 1Pd036 (5/23-25).

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- 18 田代孝二, W. Mengfan, 「配向非晶ポリ酢酸ビニル試料における結晶様ヨウ素錯体の生成」, 高分子学会年次大会(名古屋), 2018, 67, 1Pf034 (5/23-25).
- 19 田代孝二, 山元博子, 青山光輝, 関口博史, 岩本裕之, 「放射光広角・小角 X 線散乱および透過赤外スペクトルの同時時間分解測定に基づくポリフッ化ビニリデン階層構造の高電場印加下での挙動」, 高分子学会年次大会(名古屋), 2018, 67, 1Pc037 (5/23-25).
- 20 高濱智彦, 田代孝二, 「ポリビニルアルコール=ヨウ素錯体における水素結合と赤外スペクトル—量子化学計算に基づく検討—」, 高分子学会年次大会(名古屋), 2018, 67, 1Pf032 (5/23-25).
- 21 田原大輔, 田代孝二, 「実測広角・小角 X 線散乱データのコンピューターシミュレーション技法に基づく高分子 3 次元高次構造解析の展開」, 高分子学会年次大会(名古屋), 2018, 67, 1Pe027 (5/23-25).
- 22 田代孝二, 「ポリ乳酸の結晶相転移に関する構造科学的考察」, 高分子学会討論会(札幌), 2018, 67(2), ROMBUNNO. 2Y04 (9/12-14).
- 23 田代孝二, 高濱智彦, W. MengFan, 「ポリビニルアルコールおよび関連高分子のヨウ素錯体についての構造科学的考察」, 高分子学会討論会(札幌), 2018, 67(2), ROMBUNNO. 2Q07 (9/12-14).
- 24 田代孝二, 高濱智彦, W. MengFan, 「高分子—ヨウ素錯体の構造形成機構と分子間相互作用に関する量子化学的考察」, 高分子学会討論会(札幌), 2018, 67(2), ROMBUNNO. 2K16 (9/12-14).
- 25 吉岡太陽, 亀田恒徳, 田代孝二, 「放射光 X 線解析から分かってきたシルクの高タフネス性発現における階層的構造の役割」, 高分子学会討論会(札幌), 2018, 67(2), ROMBUNNO. 2I10 (9/12-14).
- 26 田代孝二, 山元博子, 日下勝弘, 「X 線および中性子回折データの組み合わせによる合成高分子の結合電子密度分布の実験的評価と密度汎関数法による検討」, 日本中性子化学会第 18 回年会(茨城), 2018, P2-15 (12/4-5).
- 27 MengFan Wang, 田代孝二, 「非晶性ポリ酢酸ビニルが形成する結晶性ヨウ素錯体の構造化学的検討」, 第 32 回東海支部若手繊維研究会(名古屋), 2018, P-1 (12/8).
- 28 田代孝二, 山元博子, 吉岡太陽, 船城健一, E. M. Woo, 「高分子球晶の不連続構造とラメラねじれとの関わり」, 第 32 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム(福岡), 2019, 1C002 (1/9-11).
- 29 田代孝二, 「高分子の結晶相転移と階層構造変化」, 名古屋大学放射光シンポジウム(名古屋), 2019, (招待講演).
- 30 山元博子, 船城健一, 増永啓康, 田代孝二, Eamor M Woo, 「ポリエチレン球晶におけるラメラねじれ構造の再検討」, 第 68 回高分子年次大会(大阪) 2019.
- 31 田代孝二, 増永啓康, 加部泰三, 「広角 X 線回折測定用「穴あき」光子計数型検出器を導入した高分子階層構造研究のための WAXD/SAXS 同時測定システム構築」, 第 68 回高分子年次大会(大阪) 2019.
- 32 W. MengFan, 高濱智彦, 田代孝二, 「非晶性ポリ酢酸ビニルの結晶性ヨウ素錯体形成に関する構造科学的検討」, 第 68 回高分子年次大会(大阪) 2019.
- 33 田代孝二, 高濱智彦, W. MengFan, 「ポリビニルアルコール偏光板におけるヨウ素錯体の構造に関する考察」, 第 68 回高分子年次大会(大阪) 2019.
- 34 山元博子, 船城健一, 増永啓康, E. M. Woo, 田代孝二, 「ポリエチレン球晶の階層構造とラメラねじれ現象との関連性」, 第 68 回高分子討論会(福井) 2019.
- 35 田代孝二, 田原大輔, S. Phongtamrug, 「ポリ-3-ヒドロキシブチラート $\alpha \rightarrow \beta$ 相転移における構

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

造変化：WAXS/SAXS 測定およびモンテカルロシミュレーションに基づく考察」, 第 68 回高分子討論会 (福井) **2019**.

- 36 田代孝二, 山元博子, 井口正俊, 増永啓康, 加部泰三, 「天然ゴムラテックスの引っ張り歪誘起結晶化現象に関する構造科学的考察」, 第 68 回高分子討論会 (福井) **2019**.
- 37 田代孝二, 高濱智彦, W. MengFan, 「ポリビニルアルコール=ヨウ素錯体型偏光板の内部構造」, 第 68 回高分子討論会 (福井) **2019**.
- 38 S. Kummara, 田代孝二, 「ナイロン 6 の X 線結晶弾性率と応力不均一分布」, 第 69 回高分子年次大会 (福岡) **2020**.
- 39 田代孝二, 日下勝弘, 山元博子, 田中伊知朗, 大原高志, 玉田太郎, 「X 線および中性子回折データの統合的解析に基づくポリビニルアルコールおよびヨウ素錯体の結晶構造への乱れ概念導入」, 第 69 回高分子年次大会 (福岡) **2020**. (*国内 39)

国際会議

【水分解光触媒の開発】

- 1 J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, A. Yamakata, “Distinctive photocatalytic activities of polycrystalline anatase and rutile TiO₂ studied by transient absorption spectroscopy”, 2015 International Conference on Applied Materials and Optical Systems (ICAMOS), (Cavite, Philippines), **2015** (10/22).
- 2 A. Yamakata, “Behaviors of Photogenerated Charge Carriers in Single-Crystalline and Polycrystalline Powder SrTiO₃”, 2015 EMN Meeting on Photocatalysis (Energy Materials Nanotechnology), (New York, Las Vegas, USA), **2015** (11/23) (招待講演).
- 3 A. Yamakata, M. Kawaguchi, J. Kubota, K. Domen, “Time-resolved visible to mid-IR absorption study on the behavior of photogenerated electrons and holes in LaTiO₂N visible light responsive water splitting photocatalysts”, Pacificchem 2015 (Hawaii, USA), **2015** (12/16).
- 4 J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, “Dynamics of photocarriers in SrTiO₃ studied by transient absorption spectroscopy: Elucidation of the effects of defects”, Pacificchem 2015 (Hawaii, USA), **2015** (12/17).
- 5 A. Yamakata, “Behavior of Photogenerated Electrons and Holes on Anatase and Rutile TiO₂ Powders”, Collaborative Conference on 3D and Materials Research (CC3DMR) 2016 (Incheon, South Korea), **2016** (6/22), (招待講演).
- 6 A. Yamakata, “Curious Behaviors of Photogenerated e⁻ and h⁺ in Anatase and Rutile TiO₂ Powders”, IKM International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2016 (Kuching, Malaysia), **2016** (8/17), (招待講演) .
- 7 C. S. K. Ranasinghe, A. Yamakata, “Time-resolved IR absorption study of photogenerated charge carrier dynamics in BiVO₄/SnO₂ and BiVO₄/CoOx heterojunctions”, 4th Conference on Sri Lanka - Japan Collaborative Research - 2016 (SLJCR-2016) (Kandy, Sri Lanka), **2016** (8/20).
- 8 J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, M. Hojamberdiev, K. Kawashima, H. Wagata, K. Yubuta, S. Oishi, K. Domen, K. Teshima, “Dynamics of Photocarriers of Metal Nitrides/Oxynitrides Studied by Transient Absorption Spectroscopy: Controlling the Effects of Defects”, 2016 International Conference on Materials Science and Nanotechnology (ICMSN) (Dumaguete City, Philippines), **2016** (10/21).
- 9 J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, T. Ohno, A. Yamakata, “Dynamics of Photocarriers of Brookite TiO₂ Studied by Spectroscopic Techniques: A Comparison with Anatase and Rutile TiO₂ Photocatalysts”, 第 26 回日本 MRS 年次大会, (神奈川), **2016** (12/20), (招待講演).

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- 10 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, "Behavior of photogenerated electrons and holes at the defects on anatase and rutile TiO₂ powders studied by transient absorption spectroscopy from visible to mid-IR region", 2017 International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP 2017), (Kyoto), 2017,(3/2-5).
- 11 J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, S. Kamimura, T. Ohno, A. Yamakata, "Photodynamics of Brookite TiO₂ Photocatalyst Studied by Time-resolved Vis to mid-IR Absorption Spectroscopy", Artificial Photosynthesis (ICARP 2017): Faraday Discussion, (Kyoto), **2017** (3/2-5).
- 12 S. Nishioka, J. Hyodo, A. Yamakata, Y. Yamazaki, K. Maeda, "Photocatalytic Activity of Oxygen Deficient SrTiO₃-□ Prepared by Reduced Atmosphere Calcination", 16th Korea-Japan Symposium on Catalysis & 3rd International Symposium of Institute for Catalysis , Kaderu 2.7, (Hokkaido, Japan), **2017** (5/15).
- 13 C. S. K. Ranasinghe, A. Yamakata, "Behavior of Photogenerated Charge Carriers in BiVO₄ Based Heterojunctions", 16th Korea-Japan Symposium on Catalysis & 3rd International Symposium of Institute for Catalysis , Kaderu 2.7, (Hokkaido, Japan), **2017** (5/15).
- 14 J. J. M. Vequizo, S. Ishiyama, Y. Sakata, A. Yamakata, "Dynamics of Photocarriers in Ga₂O₃-based Photocatalyst Studied by Transient Absorption Spectroscopy", 16th Korea-Japan Symposium on Catalysis & 3rd International Symposium of Institute for Catalysis , Kaderu 2.7, (Hokkaido, Japan), **2017** (5/15).
- 15 K. Maeda, A. Nakada, K. Ishimaki, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, O. Ishitani, "Water Splitting and CO₂ Fixation on Visible-Light-Responsive Rutile TiO₂-based Photocatalysts", 16th Korea-Japan Symposium on Catalysis & 3rd International Symposium of Institute for Catalysis , Kaderu 2.7, (Hokkaido, Japan), **2017** (5/17).
- 16 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, "Difference in the Behavior of Photogenerated Electrons and Holes on Anatase and Rutile TiO₂ Powders", 16th Korea-Japan Symposium on Catalysis & 3rd International Symposium of Institute for Catalysis , Kaderu 2.7, (Hokkaido, Japan), **2017** (5/17).
- 17 A. Yamakata, "Behaviors of Photogenerated Electrons and Holes in Photoelectrochemical Interfaces", International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2017, (Ho Chi Minh City, Vietnam), **2017** (6/8), (招待講演).
- 18 A. Yamakata, "Reaction dynamics at the liquid/solid soft-interfaces", KAKENHI International Symposium on "Studying the Function of Soft Molecular Systems", (Hokkaido, Japan), **2017** (6/27), (招待講演).
- 19 K. Ishikiriyama, Y. Goto, T. Hisatomi, T. Yokogawa, A. Yamakata, Y. Sakata, K. Domen, "Effects of the Preparation Methods of Na ion Doped SrTiO₃ to the Photocatalytic Property of Overall H₂O Splitting", 13th European Congress on Catalysis (EUROPACAT 2017), (Florence, Italy), **2017** (8/28).
- 20 S. Ishiyama, S. Zhang, A. Yamakata, T. Yokogawa, Y. Sakata, "Influences of the Metal Ion Addition to Ga₂O₃ to the Photocatalytic Property of Overall H₂O Splitting", 13th European Congress on Catalysis (EUROPACAT 2017) (Palazzo Congressi, Florence, Italy) **2017** (08/28).
- 21 J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, "Impact of Metal Ion Doping on Ga₂O₃ Photocatalysts Studied by Transient Absorption Spectroscopy", 2017 ASEAN Conference on Advanced Functional Materials and Nanotechnology (ASEAN-AFMN), (Cebu City, Philippines), **2017** (10/19), (招待講演).
- 22 A. Yamakata, "Mechanism of Photocatalytic Reactions on TiO₂ Powders", 19th SPVM National Physics Conference, 2017 ASEAN Conference on Advanced Functional Materials and Nanotechnology (ASEAN-AFMN), and 5th International Meeting on Complex Systems (IMCS), (Cebu City, Philippines),

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- 2017** (10/21), (Plenary 基調講演)
- 23 P.-H. Hung, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, W. J. Tseng, “Carrier Dynamics on TiO₂ Powders Studied by Time-Resolved IR Absorption Spectroscopy”, 6th International Symposium on Advanced Ceramics and Technology for Sustainable Energy Applications toward a Low Carbon Society (ACTSEA 2017), (Kaohsiung, Taiwan), **2017** (11/1).
- 24 J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, T. Ohno, A. Yamakata, “Trapping States and Behavior of Photocarriers in Brookite TiO₂ Powders Studied by Transient Absorption and Emission Spectroscopies”, The 6th Toyota RIKEN International Workshop 2017 (Aichi, Japan), **2017** (11/11).
- 25 A. Yamakata, “Behaviors of Electrons and Holes in Photocatalysts Studied by Time-resolved Visible to Mid-IR Absorption Spectroscopy”, International Conference on Photochemistry and Its Applications (ICPA 2017) (Kottayam, Kerala, India), **2017** (11/11), (招待講演).
- 26 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, “Behaviors of Photogenerated Electrons and Holes on TiO₂ Powder Photocatalysts”, The 22nd International Conference on Semiconductor Photocatalysis and Solar Energy Conversion (SPASEC-22) (Florida, USA), **2017** (11/14) (招待講演).
- 27 A. Yamakata, “Principal Difference in the Behaviors of Photogenerated e⁻ and h⁺ in Anatase and Rutile TiO₂ Powders”, 東京大学第5回伊藤国際学術研究センター会議 (IIRC5) – Forefront of Molecular Dynamics at Surfaces and Interfaces: From a single molecule to catalytic reaction – (東京), **2017** (11/21).
- 28 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, “Trapping-Induced Enhancement of Photocatalytic Activity on TiO₂ Powders”, International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) 2018 (Siem Reap, Cambodia), **2018** (3/7), (招待講演 Symposium Award 受賞講演).
- 29 A. Yamakata, “How the Defects Affects the Photocatalytic Activity on Powder and Single crystalline TiO₂,” International Conference on Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Applications (CMCEE-12) (Singapore), **2018** (7/23), (招待講演).
- 30 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, Y. Sakata, “Defects Induced Enhancement of Ga₂O₃ Based Photocatalysts Studied by Time-Resolved Absorption Spectroscopy,” 2018 International Symposium on Advancement and Prospect of Catalysis Science & Technology (Sydney, Australia), **2018** (7/26), (招待講演).
- 31 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, “The Role of Powder Defects for Efficient Photocatalytic Reactions,” The 22nd International Conference on Photochemical Conversion and Storage of Solar Energy (IPS-22) (Hefei, China), **2018** (8/1), (基調講演).
- 32 J. J. M. Vequizo, S. Ishiyama, Y. Sakata, A. Yamakata, “Remarkable Activity Enhancement of Ca and Zn Doped Ga₂O₃ Photocatalysts Studied by Transient Absorption Spectroscopy,” The 22nd International Conference on Photochemical Conversion and Storage of Solar Energy (IPS-22) (Hefei, China), **2018** (8/1).
- 33 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, “Effects of Surface Defects on Powder Photocatalysts Studied by Time-resolved Visible to Mid-IR Absorption Spectroscopy,” International Workshop on Water Splitting: Challenges and Opportunity (Xi'an, China), **2018** (8/4), (招待講演).
- 34 T. Oshima, K. Muraoka, J. J. M. Vequizo, S. Yamashita, A. Yamakata, K. Kimoto, O. Ishitani, K. Maeda, “Synthesis of 2D perovskite oxynitride Li₂LaTa₂O₆N and the photocatalytic performance for CO₂ reduction,” The 8th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology (TOCAT8) (横浜), **2018** (8/8).
- 35 S. Nishioka, J. Hyodo, J. J. M. Vequizo, S. Yamashita, H. Kumagai, K. Kimoto, A. Yamakata, Y. Yamazaki, K. Maeda, “Effects of electron doping with oxygen defect introduction on photocatalytic hydrogen/oxygen evolution activity of non-stoichiometric SrTiO_{3-δ},” The 8th Tokyo Conference on Advanced Catalytic

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- Science and Technology (TOCAT8) (横浜), **2018** (8/8).
- 36 K. Muraoka, J. J. M. Vequizo, A. Yamakata, O. Ishitani, K. Maeda, “Oxygen-doped Ta₃N₅ modified with a Ru(II) binuclear complex having the ability to reduce CO₂ under a wide range of visible light,” The 8th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology (TOCAT8) (横浜), **2018** (8/8).
- 37 A. Miyoshi, Y. Kato, J. J. M. Vequizo, S. Yamashita, S. Nozawa, A. Yamakata, T. Yoshida, K. Kimoto, K. Maeda, “Nitrogen/fluorine codoped rutile titanium(IV) oxide as a visible-light-driven photocatalyst for water oxidation,” The 8th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology (TOCAT8) (横浜), **2018** (8/8).
- 38 R. kuriki, A. Yamakata, O. Ishitani, K. Maeda, “Photocatalytic CO₂ reduction under visible light using carbon nitride and a binuclear Ru(II) complex,” The 8th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology (TOCAT8) (横浜), **2018** (8/8).
- 39 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, “Behavior of Photogenerated Charge Carriers on Highly Efficient Photocatalysts,” The 8th Advanced Functional Materials and Devices (AFMD 2018) (Leuven, Belgium), **2018** (8/18), (招待講演).
- 40 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, “Time-resolved Absorption Study on the Behavior of Photogenerated Electrons and Holes in Highly Active Photocatalysts,” Functional Ceramics forum for the upcoming Annual Materials Science Conference (Taichung, Taiwan), **2018** (11/17), (招待講演).
- 41 A. Yamakata, “Curious Behavior of Photogenerated Electrons and Holes in Single-crystalline and Powder Photocatalysts,” Research Seminar at National Chung Hsing University (Taichung, Taiwan), **2018** (11/19), (招待講演).
- 43 A. Yamakata, “Time-Resolved Visible to mid-IR Absorption Study of Photodynamics on Powder Photocatalysts,” Research Seminar at National Chiao Tung University (Hsinchu, Taiwan), **2018** (11/20), (招待講演).
- 44 A. Yamakata, “Curious Behaviors of Photogenerated Charge Carriers at the Defects on Powder Photocatalysts,” International Workshop on Crystalline Materials and Applications (IWCMA-2019) (Chennai, India), **2019** (1/3), (基調講演).
- 45 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, S. Ishiyama, T. Hiramine, Y. Sakata, “Defects for the Enhancement of Photocatalytic Activity”, International Conference on Photocatalysis and Photoenergy 2019 (ICoPP2019), (Incheon, Korea), **2019** (5/24), (招待講演).
- 46 T. Ogawa, A. Yamakata, A. Kuwabara, “Density Functional Studies of Electron Trapping Behaviors in Photocatalytic Materials”, The 6th International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations (AMTC6), (名古屋), **2019**, (6/14).
- 47 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, H. Matsunaga, “Trapping of Photogenerated Electrons at the Defects on Anatase and Rutile TiO₂”, The 6th International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations (AMTC6), (名古屋), **2019**, (6/14).
- 48 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, “Behaviour of Photogenerated Charge Carriers at the Defects on Photocatalysts”, The First Symposium on Photo (electro) catalysis (SOP-1), (Beijing, China), **2019**, (6/23) (招待講演).
- 49 Y. Hiramachi, H. Fujimori, M. Yoshida, A. Yamakata, Y. Sakata, “Improvement of the photocatalytic property of BaTi₄O₉ to the overall H₂O splitting”, The 8th Asia Pacific Congress on Catalysis (APCAT-8), (Bangkok, Thailand), **2019** (8/5).
- 50 J. Jiang, H. Fujimori, M. Yoshida, A. Yamakata, Y. Sakata, “Preparation of High Active SrTiO₃ to overall H₂O splitting by doping Na ion”, The 8th Asia Pacific Congress on Catalysis (APCAT-8), (Bangkok,

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

- Thailand), **2019** (8/5).
- 51 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, S. Ishiyama, T. Hiramane, Y. Sakata, “Mechanism of highly efficient Ga₂O₃ based photocatalysts studied by time-resolved absorption spectroscopy”, The 8th Asia Pacific Congress on Catalysis (APCAT-8), (Bangkok, Thailand), **2019** (8/5).
- 52 A. Yamakata, “Impurity Induced Enhancement of Photocatalytic Activity on Ga₂O₃”, International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) Yangon 2019, (Yangon, Myanmar), **2019**, (8/7) (招待講演).
- 53 A. Yamakata, “Enhancement of photocatalytic activity of Ga₂O₃ based photocatalysts studied by time-resolved absorption spectroscopy”, The 24th International Conference on Semiconductor Photocatalysis and Solar Energy Conversion (SPASEC-24), (Ontario, Canada), **2019**, (10/14) (招待講演).
- 54 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, “Charge Carrier Dynamics on Powder Photocatalysts Studied by Time-resolved Visible to Mid-IR absorption Spectroscopy”, International Conference on Photochemistry and Sustainable Energy (ICPSE 2019), (Kelala, India), **2019**, (10/19) (招待講演).
- 55 Y. Lu, A. Yamakata, T. Watanabe, “Evaluation of NaTaO₃ photocatalyst synthesized from various route by time-resolved absorption and emission spectroscopy”, The 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PACRIM13), (沖縄), **2019**, (10/28).
- 56 K. Ogawa, A. Nakada, H. Suzuki, O. Tomita, A. Yamakata, A. Saeki, H. Kageyama, R. Abe, “Flux Synthesis of Layered Perovskite Oxyhalide Bi₄NbO₈Cl Photocatalyst for Efficient Water Oxidation Under Visible Light”, The 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PACRIM13), (沖縄), **2019**, (10/28).
- 57 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, S. Ishiyama, T. Hiramane, Y. Sakata, “Enhancement of photocatalytic activity of Ga₂O₃ by impurity doping”, The 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PACRIM13), (沖縄), **2019**, (10/29) (招待講演).
- 58 K. Sano, F. Kuttassery, A. Yamakata, B. Ohtani, T. Shimada, H. Tachibana, T. o Ishida, S. Takagi, H. Inoue, “Synthesis and Identification of Titanium Oxide Nanoparticle for Molecular Catalyst Sensitized Artificial Photosynthesis Systems”, 3rd International Solar Fuels Conference (ISF-3) / International Conference on Artificial Photosynthesis-2019 (ICARP2019), (広島), **2019**, (11/20-24).
- 59 A. Yamakata, J. J. M. Vequizo, Y. Sakata, “Defects-induced enhancement of photocatalytic activity of Ga₂O₃ studied by time-resolved visible to mid-IR absorption spectroscopy”, The 36th International Japan-Korea Seminar on Ceramics (JK-Ceramics 36), (鳥取), **2019**, (11/22) (招待講演).
- 60 A. Yamakata, “Behavior of Photogenerated Charge Carriers on Powder Photocatalysts”, Materials Research Meeting 2019 (MRM2019), (神奈川), **2019**, (12/11) (招待講演).

【水素の貯蔵と放出用の高機能触媒開発】

- 1 Y. Isogai, T. Kamioka, H. Lee, N. Kojima, Y. Ohshita, “Influence of ITO-RPD Process on Effective Minority Carrier Lifetime in Reactive Plasma Deposited ITO/SiO₂/Si Structure”, The 27th Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-27), 2018.
- 2 Y. Ohshita, H. Machida, T. Takada, A. Ogura, “Solar energy storage system with recycled hydrogen carriers”, E-MRS (Strasbourg, France), **2017**.(*国外 2)
- 3 Y. Ohshita, H. Lee, T. Kamioka, N. Usami, “Effects of Surface Doping of Si Absorbers on the Performance of Carrier Selective Contact”, MRS fall meeting (Boston USA), **2018**.(*国外 3)

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

【水電解および燃料電池の電極触媒の開発】

- 1 M. Hara, B. Rajashekar, K. De Silva, H.-H. Huang, M. Yoshimura, “Fabrication and characterization of IrO₂ / nano-carbon catalysts”, The 52nd Fullerenes-Nanotubes-Graphene General symposium(Tokyo) **2017**, 3-8(3/3).
- 2 B. Rajashekar, K. De Silva, M. Hara, M. Yoshimura, “IrO₂/carbon Nano Hybrids as Efficient Oxygen Evolution Reaction Catalysts”, FiMPART’17 (Bordeaux, France) **2017**, F3 (7/11).
- 3 M. Hara, B. Rajashekar, K. De Silva, H.-H. Huang, M. Yoshimura, “Fabrication and Evaluation of Nanocarbon supported Iridium Oxide catalysts for Water Electrolysis”, PGIS research Congress 2017 (Peradeniya, Sri Lanka) **2017**, ID50 (9/9).
- 4 B. Rajashekar, M. Hara, H.-H. Huang, M. Yoshimura, “IrO₂ Based Modified Graphene Materials as Efficient Oxygen Evolution Reaction Catalysts”, The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8) (Ibaraki) **2017**, 6PN-72 (10/26).
- 5 M. Hara, B. Rajashekar, H.-H. Huang, M. Yoshimura, “Synthesis of Novel IrRuO_x / Graphene Catalyst for Oxygen Evolution Reaction”, The 54th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General symposium(Tokyo) **2018**, 1P-26(3/10).
- 6 M. Hara, R. Badam, G. J. Wang, H.-H. Huang, M. Yoshimura, “Synthesis and Evaluation of Iridium Oxide Nanoparticle Catalysts Supported on Nitrogen-Doped Reduced Graphene Oxides”, 233rd Electrochemical Society (Seattle USA) **2018**, I03-1664(5/14).
- 7 P. Joshi, R. Badam, H.-H. Huang, M. Hara, M. Yoshimura, “Design and Evaluation of IrO₂ on Nitrogen-doped Reduced Graphene Oxide as an Electrocatalyst for Oxygen Evolution Reaction”, ACSIN-14 & ICSPM26 (Sendai) **2018** (10/23).
- 8 M. Hara, P. a Joshi, H.-H. Huang, M. Yoshimura, “Synthesis of Heteroatom-doped Graphene as Active Catalysts for Hydroquinones Oxidation Reaction”, The 56th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General symposium (Tokyo) **2019**, No. 1-8 (3/2).(*国際 8)
- 9 M. Hara, P. Joshi, H.-H. Huang, M. Yoshimura, “Synthesis and Evaluation of Novel Iridium Ruthenium Oxide Catalysts Supported on Reduced Graphene Oxide for Oxygen Evolution Reaction”, 235rd Electrochemical Society (Dallas USA) **2019**, I03-1664 (5/27).
- 10 R. Yadav, M. Hara, P. Joshi, M. Yoshimura, “Zinc Oxide Nanoparticles Decorated on Nitrogen-Doped Graphene Sheets as Advanced Supercapacitor Electrode”, The 57th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium (Nagoya) **2019**, No. 2P-25 (9/4).
- 11 S. Ogawa, S. Suzuki, M. Hara, M. Yoshimura, “Preparation of IrO₂ nanoparticles on CVD graphene by hydrothermal method”, The 57th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General symposium (Nagoya) **2019**, No. 3P-27 (9/5).
- 12 P. Joshi, R. Yadav, Y. Matsuoka, M. Hara, M. Yoshimura, “B,N-codoped Reduced Graphene Oxide as a Support for IrO₂ as Active OER Electrocatalyst”, The 57th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General symposium (Nagoya) **2019**, No. 3P-28 (9/5).
- 13 P. Joshi, H.-H. Huang, M. Hara, M. Yoshimura, “Boron doped Reduced Graphene Oxide as a Catalyst Support for Oxygen Evolution Reaction”, ICSPM 27 (Shizuoka) **2019**, S4-7 (12/5).
- 14 M. Hara, P. Joshi, M. Yoshimura, “Development of novel iridium oxide catalysts supported on modified nanocarbons for oxygen evolution reaction”, FiMPART 2019 (Ahmedabad India) **2019**, B3-2 (12/17)(招

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

待講演).

- 15 R. Yadav, P. Joshi, M. Hara, M. Yoshimura, "Evaluation of various nitrogen -doping in graphene on the performance as a supercapacitor electrode", The 58th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General symposium (Tokyo) **2020**, No. 1P-5 (3/15).
- 16 P. Joshi, R. Yadav, Y. Matsuoka, M. Hara, M. Yoshimura, "Heteroatom -doped Nanocarbons as Active Support for IrO₂ as an OER Electrocatalyst", The 58th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General symposium (Tokyo) **2020**, No. 2P-27 (3/16).

【高機能触媒による水素化およびヒドロシリル化反応の開発】

- 1 S. Hosokawa, K. Teramoto, Y. Motoyama, "Facile Silane-Reduction of Tertiary Carboxamides by Using Palladium on Carbon Catalyst", The 13th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-13) (Kyoto) **2015**, PB(C)-32.
- 2 T. Ikeda, Z. Zhang, Y. Motoyama, "Hydrosilane-Promoted Facile Deprotection of *tert*-Butyl Groups in Esters, Ethers, Carbonates, and Carbamates", The 4th International Symposium on Process Chemistry (ISPC 2019) (Kyoto) **2019**, 1P-52.

【原子間力顕微鏡を用いた触媒担持メカニズムの分子レベル評価】

- 1 R. Kai, M. Hara, M. Yoshimura, "Catalytic Activity of Defective Highly Oriented Pyrolytic Graphite Modified by Hydrogen Plasma", 25th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (Shizuoka) **2017**, S4-49 (12/7).
- 2 P. Joshi, R. Badam, H.-H. Huang, M. Hara, M. Yoshimura, "Design and Evaluation of IrO₂ on Nitrogen-doped Reduced Graphene Oxide as an Electrocatalyst for Oxygen Evolution Reaction", ACSIN-14 & ICSPM26 (Sendai) **2018** (10/23).
- 3 H.-H. Huang, K. De Silva, M. Yoshimura, "Kelvin Probe Force Microscopy Study of 2D Graphene-Based Sheets", ACSIN-14 & ICSPM26 (Sendai) **2018** (10/22).
- 4 H.-H. Huang, L.-W. Su, K. De Silva, M. Yoshimura, "Graphene/Layered Double Hydroxide Composite for Ion Sieving", ACSIN-14 & ICSPM26 (Sendai) **2018** (10/23).
- 5 M. Hara, P. a Joshi, H.-H. Huang, M. Yoshimura, "Synthesis of Heteroatom-doped Graphene as Active Catalysts for Hydroquinones Oxidation Reaction", The 56th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General symposium (Tokyo) **2019**, No. 1-8 (3/2).
- 6 M. Hara, P. Joshi, H.-H. Huang, M. Yoshimura, "Synthesis and Evaluation of Novel Iridium Ruthenium Oxide Catalysts Supported on Reduced Graphene Oxide for Oxygen Evolution Reaction", 235rd Electrochemical Society (Dallas USA) **2019**, I03-1664 (5/27).
- 7 R. Yadav, M. Hara, P. Joshi, M. Yoshimura, "Zinc Oxide Nanoparticles Decorated on Nitrogen-Doped Graphene Sheets as Advanced Supercapacitor Electrode", The 57th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium (Nagoya) **2019**, No. 2P-25 (9/4).
- 8 S. Ogawa, S. Suzuki, M. Hara, M. Yoshimura, "Preparation of IrO₂ nanoparticles on CVD graphene by hydrothermal method", The 57th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General symposium (Nagoya) **2019**, No. 3P-27 (9/5).
- 9 P. Joshi, R. Yadav, Y. Matsuoka, M. Hara, M. Yoshimura, "B,N-codoped Reduced Graphene Oxide as a Support for IrO₂ as Active OER Electrocatalyst", The 57th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

symposium (Nagoya) **2019**, No. 3P-28 (9/5).

- 10 P. Joshi, H.-H. Huang, M. Hara, M. Yoshimura, “Boron doped Reduced Graphene Oxide as a Catalyst Support for Oxygen Evolution Reaction”, ICSPM 27 (Shizuoka) **2019**, S4-7 (12/5).
- 11 M. Hara, P. Joshi, M. Yoshimura, “Development of novel iridium oxide catalysts supported on modified nanocarbons for oxygen evolution reaction”, FiMPART 2019 (Ahmedabad India) **2019**, B3-2 (12/17)(招待講演).
- 12 R. Yadav, P. Joshi, M. Hara, M. Yoshimura, “Evaluation of various nitrogen -doping in graphene on the performance as a supercapacitor electrode”, The 58th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General symposium (Tokyo) **2020**, No. 1P-5 (3/15).
- 13 P. Joshi, R. Yadav, Y. Matsuoka, M. Hara, M. Yoshimura, “Heteroatom -doped Nanocarbons as Active Support for IrO₂ as an OER Electrocatalyst”, The 58th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General symposium (Tokyo) **2020**, No. 2P-27 (3/16).

【触媒・有機化合物および高分子錯体の静的・動的構造解析】

- 1 K. Tashiro, “Novel Concepts in the Study of Phase Transition and Crystallization Phenomenon of Polymers Viewed from the Wide Hierarchical Points”, MACRO2017, Trivandrum (India) **2017** (Invited Lecture).
- 2 K. Tashiro, “A new aspect of crystal phase transition and its relation with the hierarchical structure change of crystalline polymers”, Pure and Applied Chemistry International Conference 2017 (Bangkok) (Plenary Lecture).
- 3 K. Tashiro, “Hierarchical Structure of Polymer Spherulites Detected by Synchrotron X-ray Microbeam and 2D FTIR Spectral Techniques,” The International Conference on Advanced and Applied Petroleum, Petrochemicals, and Polymers 2018 (Bangkok, Thailand), **2018** (12/18–20), (基調講演).
- 4 K. Tashiro, “Development of Simultaneous Measurement System of FTIR, WAXD and SAXS Data for the Study of Hierarchical Structure Change of Polymers Subjected to the Various External Fields,” 2018 Synchrotron Radiation in Polymer Science (2018 SRPS: SRPS VII) (Gyeongju, Korea), **2018** (9/4–7), (招待講演).
- 5 K. Tashiro, “Structure and Phase Transitions of Biodegradable Polyesters”, International Association of Applied Materials Award (Orland, USA), **2019**(招待講演).
- 6 S. Phongtamrug, K. Tashiro, “Hierarchical Structure Change in the Stress-induced α -to- β Phase Transition of Highly-Oriented Poly)3-hydroxybutyrate(”, International Conference of BioPolymers (Bangkok, Thailand), **2019**(招待講演).

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

シンポジウム・学会等の実施状況、インターネットでの公開状況等

<既に実施しているもの>

- ・第1回シンポジウム 2017.3.10 開催
- ・最終年度シンポジウム 2020.3.5(新型コロナウイルスのため要旨集のみ発行)
- ・論文および学会発表リスト (大学 HP)
website: <https://www.toyota-ti.ac.jp/advancedcatalysis/index.html>

・プレスリリース:

農業・食品産業技術総合研究機構と豊田工業大学(田代孝二特任教授)

「ミノムシの紡ぐ絹糸が世界最強たる理由の構造科学的解明に成功」;同時プレスリリース
(2019.4.2)

SPring-8

「次世代構造材料として期待されるミノムシの糸の強さの秘密を構造科学的に解明」
BL40B2(構造生物学 II) (2019.4.15)

<これから実施する予定のもの>

- ・上記最終年度シンポジウムの代替として, 2020 年度中に開催予定

14 その他の研究成果等

特に無し

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

15 「選定時」及び「中間評価時」に付された留意事項及び対応

<「選定時」に付された留意事項>

「拠点としての特徴を明確にして研究を進めていただきたい」

<「選定時」に付された留意事項への対応>

本学は「先端ハイブリッド工学」という独自の理念の下に、小規模大学の利点を活かして複数の分野の有機的結合を重視した研究体制の確立と推進に取り組んでおり、光と物質科学を基盤とした新素材・素子の開発研究とエネルギー分野への展開を重点目標のひとつとしている。

本研究拠点は発足当初、物質工学と電子工学に属する 5 研究室の協力体制であったが、その後、3分野の残りの1つである機械工学の研究室にも参加して頂き、再生可能エネルギーとして注目されているバイオマスの高効率エネルギー変換に関する課題をプラスすることで、全学的な体制で“水素の発生・活用技術の高度化とエネルギー蓄積や水素に関連する物質製造工程の革新を「先進触媒」により実現するための拠点”へと成長した。

このように「水素」と「触媒」を基軸として、本学における 3 分野が有機的に結びついた中核となる研究拠点として、これらに関する基礎学術の確立と産業応用へ展開を加速すべく注力している。

<「中間評価時」に付された留意事項>

特に無し

<「中間評価時」に付された留意事項への対応>

法人番号	231023
プロジェクト番号	S1511022

年度・区分	支出額	内 訳						備 考
		法 人 負 担	私 学 助 成	共同研 究機関 負担	受託 研究等	寄付金	その他()	
平成 27 年度	施 設	0						
	装 置	0						
	設 備	104,401	34,800	69,601				
	研究費	37,286	19,091	18,195				
平成 28 年度	施 設	0						
	装 置	0						
	設 備	19,915	6,639	13,276				
	研究費	30,215	18,059	12,156				
平成 29 年度	施 設	0						
	装 置	0						
	設 備	0						
	研究費	46,793	28,325	18,468				
平成 30 年度	施 設	0						
	装 置	0						
	設 備	0						
	研究費	33,051	18,251	14,800				
平成 31 年度	施 設	0						
	装 置	0						
	設 備	0						
	研究費	28,090	13,693	14,397				
総 額	施 設	0	0	0	0	0	0	0
	装 置	0	0	0	0	0	0	0
	設 備	124,316	41,439	82,877	0	0	0	0
	研究費	175,435	97,419	78,016	0	0	0	0
総 計	299,751	138,858	160,893	0	0	0	0	

法人番号

231023

17

《施設》(私学助成を受けていないものも含め、使用している施設をすべて記載してください。)(千円)

施設の名 称	整備年度	研究施設面積	研究室等数	使用者数	事業経費	補助金額	補助主体
触媒有機化学研究室・実験室	昭和56年度	199m ²	1	16	不明	0	
量子界面物性研究室・実験室	平成7年度	247m ²	1	15	不明	0	
表面科学研究室・実験室	平成7年度	343m ²	1	10	不明	0	

※ 私学助成による補助事業として行った新增築により、整備前と比較して増加した面積

0 m²

《装置・設備》(私学助成を受けていないものは、主なもののみを記載してください。)(千円)

装置・設備の名称	整備年度	型番	台数	稼働時間数	事業経費	補助金額	補助主体
(研究装置) なし							
(研究設備) デジタル核磁気共鳴装置	27		1	2,800 h	47,952	31,968	私学助成
全自動元素分析装置	27		1	980 h	13,996	9,331	私学助成
フーリエ変換型赤外分光装置	27		1	2,520 h	12,495	8,330	私学助成
ナノ欠陥イメージング装置	27		1	2,800 h	21,999	14,666	私学助成
グローブボックス	27		1	2,100 h	7,959	5,306	私学助成
薄膜製造装置	28		1	1,400 h	19,915	13,276	私学助成
(情報処理関係設備) なし							

法人番号

231023

18 研究費の支出状況

(千円)

年 度	平成 27 年度		
小 科 目	支 出 額	積 算 内 訳	
		主 な 使 途	金 額
教 育 研 究 経 費 支 出			
消 耗 品 費	12,644	試薬、溶媒、光学部品	12,644
光 熱 水 費	5,302	電気代	5,302
通 信 運 搬 費	9	ガス容器処分代	9
印 刷 製 本 費	591	研究成果報告書印刷代	591
旅 費 交 通 費	585	学会発表にかかる旅費	585
賃 借 料	10	学外研究施設利用料金	10
報 酬・委 託 料	11	装置調整代	11
諸 会 費	15	学会参加費	15
修 繕 費	7,643	装置保守費	7,643
出 版 物 費	359	論文別刷代	359
計	27,169		27,169
ア ル パ イ ト 関 係 支 出			
人 件 費 支 出 (兼務職員)	0		0
教育研究経費支出 計	0		0
設 備 関 係 支 出(1個又は1組の価格が500万円未満のもの)			
教育研究用機器備品	7,100		7,100
図 書	32		32
計	7,132		7,132
研 究 ス タ ッ フ 関 係 支 出			
リサーチ・アシスタント			
ポスト・ドクター	2,985		2,985
研究支援推進経費			
計	2,985		2,985
ア ル パ イ ト 関 係 支 出			
人 件 費 支 出 (兼務職員)	824		824
教育研究経費支出 計	824		824
設 備 関 係 支 出(1個又は1組の価格が500万円未満のもの)			
教育研究用機器備品	10,440		10,440
図 書	50		50
計	10,490		10,490
研 究 ス タ ッ フ 関 係 支 出			
リサーチ・アシスタント			
ポスト・ドクター	4,278		4,278
研究支援推進経費			
計	4,278		4,278

年 度		平成 29 年度		法人番号	231023
小 科 目	支 出 額	積 算 内 訳			
		主 な 使 途	金 額	主 な 内 容	
教 育 研 究 経 費 支 出					
消 耗 品 費	9,023	試薬、溶媒、光学部品	9,023	試薬、溶媒、光学部品	
光 熱 水 費	3,384	電気代	3,384	電気代	
通 信 運 搬 費	11	宅配便代	11	宅配便代	
印 刷 製 本 費	0		0		
旅 費 交 通 費	2,599	学会発表にかかる旅費	2,599	学会発表にかかる旅費	
賃 借 料	41	学外研究施設利用料金	41	学外研究施設利用料金	
報 酬・委 託 料	55	試料測定依頼	55	試料測定依頼	
修 繕 費	1,251	実験装置修理	1,251	実験装置修理	
諸 会 費	491	学会・講演会参加費	491	学会・講演会参加費	
出 版 物 費	15	研究資料代	15	研究資料代	
損 害 保 険 料	5	海外出張付帯保険	5	海外出張付帯保険	
計	16,875				
ア ル パ イ ト 関 係 支 出					
人 件 費 支 出 (兼務職員)	167		167		
教育研究経費支出 計	167		167		
設 備 関 係 支 出(1個又は1組の価格が500万円未満のもの)					
教育研究用機器備品 図 書	21,045		21,045		
計	21,045		21,045		
研 究 ス タ ッ フ 関 係 支 出					
リサーチ・アシスタント ポスト・ドクター	8,706		8,706	外国2人	
研究支援推進経費 計	8,706		8,706		

年 度		平成 30 年度			
小 科 目	支 出 額	積 算 内 訳			
		主 な 使 途	金 額	主 な 内 容	
教 育 研 究 経 費 支 出					
消 耗 品 費	8,812	試薬、溶媒、光学部品	8,812	試薬、溶媒、光学部品	
通 信 運 搬 費	80	宅配便代	80	宅配便代	
印 刷 製 本 費	0		0		
旅 費 交 通 費	1,853	学会発表にかかる旅費	1,853	学会発表にかかる旅費	
報 酬・委 託 料	100	講師謝礼	100	講師謝礼	
出 版 物 費	61	論文掲載料	61	論文掲載料	
雑 費	0		0		
修 繕 費	3,788	実験装置修理	3,788	実験装置修理	
諸 会 費	422	学会・講演会参加費	422	学会・講演会参加費	
計	15,116		15,116		
ア ル パ イ ト 関 係 支 出					
人 件 費 支 出 (兼務職員)	0		0		
教育研究経費支出 計	0		0		
設 備 関 係 支 出(1個又は1組の価格が500万円未満のもの)					
教育研究用機器備品 図 書	17,892		17,892		
計	17,935		17,935		
研 究 ス タ ッ フ 関 係 支 出					
リサーチ・アシスタント ポスト・ドクター					
研究支援推進経費 計	0				

年 度		平成 31 年度		法人番号	231023
小 科 目	支 出 額	積 算 内 訳			
		主 な 使 途	金 額	主 な 内 容	
教 育 研 究 経 費 支 出					
消 耗 品 費	10,101	試薬、溶媒、光学部品	10,101	試薬、溶媒、光学部品	
光 熱 水 費	0		0		
通 信 運 搬 費	7	宅配便代	7	宅配便代	
印 刷 製 本 費	0		0		
旅 費 交 通 費	2,821	学会発表にかかる旅費	2,821	学会発表にかかる旅費	
賃 借 料	0		0		
報 酬 ・ 委 託 料	1,431	試料加工依頼	1,431	試料加工依頼	
修 繕 費	933	実験装置修理	933	実験装置修理	
諸 会 費	895	学会・講演会参加費	895	学会・講演会参加費	
出 版 物 費	2	研究資料代	2	研究資料代	
雑 費	125	海外出張付帯保険	125	海外出張付帯保険	
計	16,315		16,315		
ア ル パ イ ト 関 係 支 出					
人 件 費 支 出 (兼務職員)	0		0		
教 育 研 究 経 費 支 出 計	0		0		
設 備 関 係 支 出 (1個又は1組の価格が500万円未満のもの)					
教 育 研 究 用 機 器 備 品 図 書	11,775		11,775		
計	11,775		11,775		
研 究 ス タ ッ フ 関 係 支 出					
リサーチ・アシスタント					
ポスト・ドクター	0		0		
研究支援推進経費					
計	0		0		