

北海道大学 工学・情報・ICReDD 合同シンポジウム実施報告書

■ シンポジウムの名称

Joint Symposium of Engineering & Information Science & WPI-ICReDD in Hokkaido University

■ 主催・共催

主催：北海道大学化学反応創成研究拠点（WPI-ICReDD）

共催：北海道大学工学研究院、北海道大学情報科学研究院

■ 開催期日

令和3年4月26日（月）13:00～18:00

■ 開催場所

Zoom によるオンライン開催

■ 参加人数

事前登録者：170 人

Zoom 参加者：140 人

■ 事業の内容・成果

北海道大学化学反応創成研究拠点(WPI-ICReDD)と大学院工学研究院ならびに情報科学研究院の教員による合同シンポジウムを以下の概要で開催した。

本シンポジウムは昨年度に開催された理学部・ICReDD 合同シンポジウムと同様に、「北海道大学 WPI-ICReDD と工学研究院・情報科学研究院の最新研究動向を介して交流を深めることで、WPI の研究について知ってもらうとともに、新たな連携の可能性を探っていく」ことをコンセプトとした。

工学研究院から6名、情報科学研究院から3名、ICReDD から4名の合計13名の先生方を講演者として依頼し、英語による講演を行っていただいた。質疑や議論も活発に行われ、異分野交流に基づいた融合的研究への新展開が期待される。

■ 講演者一覧

- 1.大野 宗一 先生 (工学研究院 材料科学部門、教授)
- 2.富岡 克広 先生 (情報科学研究院 情報エレクトロニクス部門、准教授)
- 3.美多 剛 先生 (化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD)、特任准教授)
- 4.三浦 章 先生 (工学研究院 応用化学部門、准教授)
- 5.江丸 貴紀 先生 (工学研究院 機械・宇宙航空工学部門、准教授)
- 6.リャリン アンドレイ 先生 (化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD)、特任准教授)
- 7.石田 洋平 先生 (工学研究院 材料科学部門、助教)
- 8.樋浦 諭志 先生 (情報科学研究院 情報エレクトロニクス部門、准教授)
- 9.久保田 浩司 先生 (工学研究院 応用化学部門、准教授)
- 10.北島 正章 先生 (工学研究院 環境工学部門、准教授)
- 11.國貞 雄治 先生 (工学研究院 附属エネルギー・マテリアル融合領域研究センター、助教)
- 12.小川 貴弘 先生 (情報科学研究院 メディアネットワーク部門、准教授)
- 13.瀧川 一学 先生 (化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD)、特任准教授)

■ タイムスケジュール・講演題目

13:00 – 13:15 Opening remarks

Prof. Satoshi Maeda, Director, WPI-ICReDD

Prof. Tsuyoshi Setoguchi, Dean, Faculty of Engineering

Prof. Miki Haseyama, Dean, Faculty of Information Science and Technology

13:15 Session 1 (Chair: Koji Kubota) 20 min talk including discussion

P1 : 13:15 – 13:35 **Munekazu Ohno** (Professor, Division of Materials Science and Engineering, Faculty of Engineering)

“High Performance Computing and Cross-Scale Approach of Solidification in Metals”

P2 : 13:35 – 13:55 **Katsuhiro Tomioka** (Associate Professor, Faculty of Information Science and Technology and Research Center for Integrated Quantum Electronics)

“III-V Nanowire Devices and Their Prospects”

P3 : 13:55 – 14:15 **Tsuyoshi Mita** (Specially Appointed Associate Professor, Experimental Sciences, WPI-ICReDD)

“Theory-Driven Approach to Chemical Synthesis of Difluoroglycine Derivatives and Its Application”

14:15 – 14:25 Break

14:25 Session 2 (Chair: Yuichi Kitagawa)

P4 : 14:25 – 14:45 **Akira Miura** (Associate Professor, Division of Applied Chemistry, Faculty of Engineering)

“Synthesis Design of Functional Materials using DFT Database”

P5 : 14:45 – 15:05 **Takanori Emaru** (Associate Professor, Division of Mechanical and Aerospace Engineering, Faculty of Engineering)

“Social Contribution using Robot Technology”

P6 : 15:05 – 15:25 **Andrey Lyalin** (Specially Appointed Associate Professor, Computational Sciences, WPI-ICReDD)

“Two-Dimensional Borophene: Structure Formation and Properties”

15:25 – 15:30 Break

15:30 Session 3 (Chair: Mingoo Jin)

P7 : 15:30 – 15:50 **Yohei Ishida** (Assistant Professor, Division of Materials Science and Engineering, Faculty of Engineering)

“Manipulation of Precise Molecular Arrangements and Their Photochemical Processes via Multiple Electrostatic Interactions”

P8 : 15:50 – 16:10 **Satoshi Hiura** (Associate Professor, Division of Electronics for Informatics, Faculty of Information Science and Technology)

“Photoelectric Spin Information Conversion Using Semiconductor Quantum Dot”

P9 : 16:10 – 16:30 **Koji Kubota** (Associate Professor, Division of Applied Chemistry, Faculty of Engineering / Experimental Sciences, WPI-ICReDD)

“Tackling Solubility Issues in Organic Synthesis”

16:30 – 16:35 Break

16:35 Session 4 (Chair: Sunao Shoji)

P10 : 16:35 – 16:55 **Masaaki Kitajima** (Associate Professor, Division of Environmental Engineering, Faculty of Engineering)

“Wastewater-Based Epidemiology as an Innovative Approach to Monitor COVID-19”

P11 : 16:55 – 17:15 **Yuji Kunisada** (Assistant Professor, Center for Advanced Research of Energy and Materials, Faculty of Engineering)

“Atomic-Scale Analysis of Functional Materials: Spectroscopy and Density Functional Theory”

P12 : 17:15 – 17:35 **Takahiro Ogawa** (Associate Professor, Division of Media and Network Technologies, Faculty of Information Science and Technology)

“New Era of Multimedia AI leading to Social Implementation”

P13 : 17:35 – 17:55 **Ichigaku Takigawa** (Specially Appointed Associate Professor, WPI-ICReDD)

“Machine Learning for Chemistry: Representing and Intervening”

17:55 – 18:00 Closing remarks **Prof. Koji Kubota**, Associate Prof., Faculty of Engineering

■ シンポジウムの様子(スクリーンショット)

Zoom ミーティング

参加者 (136)

Yuki IDE (Facilitator) (P03) Tsuyoshi M... (P09) Koji Kubota... (P02) Katsuhiko... (P01) Munekaz... Yuta Mizuno (...)

Our Target: α,α -Difluoroglycine

side chain fluorination

fluorine atoms onto the side chain
many examples

main chain fluorination

α -fluoro- α -amino acid
less examples

bioisostere of glycine
no efficient synthetic method, so far.

α,α -difluoroglycine

- ✓ Small size of fluorine atom comparable to hydrogen.
- ✓ Greater stability of C-F bonds compared to the C-H bonds.
- ✓ Greater lipophilicity of fluorine compared to hydrogen.
- ✓ Highly electron withdrawing property of fluorine.

Zoom ミーティング

参加者 (134)

(P01) Muneakazu Ohno (P02) Katsuhiko TOMOKA (P03) Tsuyoshi Mita (P05) Takanori EMARU (P06) Andrey Lyalin (P10) Masaki Kitajima (P11) Yui Kunitada (P12) Takahiro Ogawa (P13) Ichigaku Takigawa (P4) Akira Miura (P7) Yohel Ishida (P8) Satoshi Miura (P9) Carolina Rosso (AN) Akhiro Nishida (BS) Bastian Ejekem Skjeltad (BS) Bunsho Ohtani (CR) Carolina Rosso

Summary

Solid-state Suzuki-Miyaura cross-coupling of insoluble aryl halides

Insoluble aryl halides + Organoboron nucleophiles $\xrightarrow[\text{CsF, H}_2\text{O}]{\text{cat. Pd(OAc)}_2/\text{SPhos}}$ Coupling products

Ball milling at high temperature

Solubility in toluene (23 °C): Class 1 (slightly soluble), Class 2 (very slightly soluble), Class 3 (practically insoluble)

Reduced reaction time: 24 h $\rightarrow$ 5 min

24 h $\rightarrow$ 90 min: low yield $\rightarrow$ moderate to high yield

No reaction $\rightarrow$ Reaction proceeded

See: T. Tsuyoshima, N. Kubota, K. Ito, H. J. Am. Chem. Soc. 2021, 143, ASAP

Zoom ミーティング

参加者 (133)

Bunsho Ohtani (P03) Tsuyosh... (P09) Koji Kubota... (P02) Katsuhiko... (P01) Munekaz... (P4) Akira Miura

Reactions of Perylenediimide and Isoindigo (Class 3)

Class 3: Perylenediimide dye

Perylenediimide dye
Solubility in toluene (23 °C): $<4 \times 10^{-6}$ M

[Ball milling]: 37%
[In toluene]: no reaction

Class 3: 6,6-Dibromoisoidigo

6,6-Dibromoisoidigo
Solubility in toluene (23 °C): $<4 \times 10^{-6}$ M

[Ball milling]: 40%
[In toluene]: no reaction

► **Successful synthesis of compounds that cannot be applicable in solution conditions.**

[Ball milling]: Substrate (0.10 mmol), Aryl boronic acid (2.4 equiv), Pd(OAc)₂ (10 mol %), SPhos (15 mol %), CsF (6.0 equiv), H₂O (7.2 equiv), 1,5-cod (0.2 mL/mg), heat gun, 120 °C [250 °C], 30 Hz, 90 min. [In toluene]: toluene (1.0 mL), 120 °C, 24 h, <0.15 mmol scale.