



「無機液相合成反応の理論先導的設計を目指したプラットフォーム基盤の作成」

堤 拓朗 理学研究院化学部門・物質化学研究室

email: t.tsutsumi@sci.hokudai.ac.jp

研究室HP <https://wwwchem.sci.hokudai.ac.jp/~matchemS/>

関連キーワード「計算化学／全固体電池／マイクロフロー合成」

固体電解質の液相合成法：従来法よりも省エネルギーな製造技術

- ✓ **副反応や分解反応の反応機構**が十分に理解されていない
- ✓ **汎用的で大規模合成が可能な合成スキーム**が整備されていない

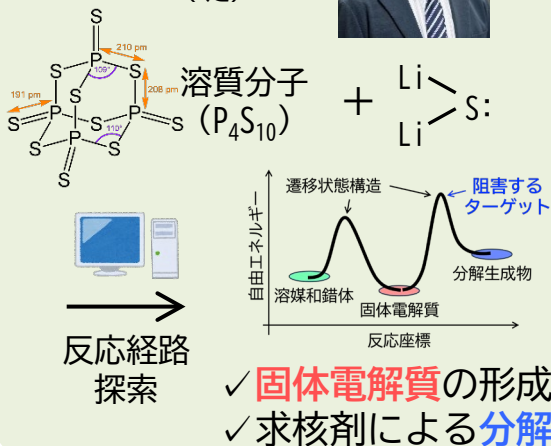
→ 室温で高い効率を示す**硫化物系固体電解質の液相合成法の確立**

計算班

実験班

反応経路探索による機構解析

反応経路探索
機械学習
(堤)

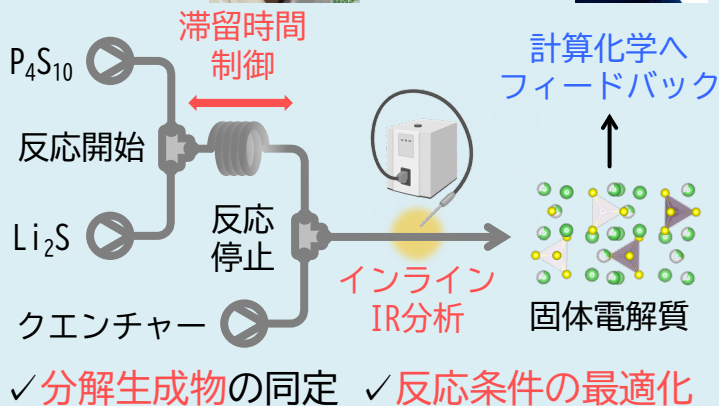


フロー法による無機液相合成系の構築

硫化物系
固体電解質
(奈須)



フロー化学
(宮岸)



2025年度の主な成果：将来的な共同研究に向けた理論・実験の連携

- ✓ P_4S_{10} 分解経路の探索
- ✓ フロー合成の条件検討
- ✓ 生成物のインラインIR分析

将来展望：理論・データ駆動型の無機液相合成開発 → GXを実現

計算化学・
機械学習 (堤)



固体電解質
の反応設計 (奈須)



無機液相合成
の精密制御 (宮岸)

