自然科学研究機構

分子科学研究所
共同利用研究報告書

2023年度

目　次

A. 課題研究 ・・・1

B. 協力研究 ・・・4

C. 研究会 ・・・54

分子科学研究所2023年度共同利用研究　課題一覧

A. 課題研究

課題番号	研究課題名
23IMS1101	キラル物質におけるマルチスケール量子機能の統一描像の確立

B. 協力研究

課題番号	研究課題名
23IMS1201	イリジウム単結晶薄膜上に化学気相成長したグラフェン膜の評価
23IMS1202	Momentum Microscopy装置による3Dフェルミ面計測手法の確立とその応用(II)
23IMS1203	超薄膜グラフェンを用いた独自の高効率電子収量用液体セルの開発
23IMS1204	ポリグルタミン病原因遺伝子のリピート関連性非ATG依存性翻訳産物へのレーザー照射後の凝集解離の分子シミュレーション
23IMS1205	チェレンコフ位相整合高出力テラヘルツ波光源の開発
23IMS1206	広帯域2光子光電子分光による内包フラーレン超原子集積体の電子ダイナミクス計測
23IMS1208	新奇トポロジーをもつ二次元分子磁石の開発
23IMS1209	溶液から成長させた単結晶性有機半導体薄膜の電子構造計測
23IMS1210	固体担持型ビスマストリフラートの調整と不均一触媒反応系への展開
23IMS1211	糖タンパク質修飾糖鎖の構造決定と糖鎖認識受容体との相互作用解析
23IMS1213	多様な複合糖質を活用した糖鎖機能メカニズムの解析
23IMS1214	モータータンパク質キネシンの全原子分子動力学シミュレーション
23IMS1215	バナジウム酸化物薄膜における相転移現象のナノスケールイメージング
23IMS1216	高効率スピン偏極測定用2次元スピンフィルターの実用化と利用最先端研究
23IMS1217	垂直磁気異方性を有する薄膜界面の作製と電子状態の精密計測への応用
23IMS1218	包接型P,N含有多座配位子保護による金属クラスター触媒の開発
23IMS1219	トポロジカル物質におけるスピン偏極局所電子状態の解明
23IMS1251	包接型P,N含有多座配位子保護による金属クラスター触媒の開発
23IMS1252	時間分解インパルシブ誘導ラマン分光を用いた機能性発光有機りん光分子・卑金属錯体の励起状態構造ダイナミクスの観測

C.研究会

課題番号	研究課題名
23IMS2301	森野ディスカッション
23IMS2302	イオン液体インフォマティクスの発展にむけて
23IMS2303	化学・工学・環境学を例とした持続可能な社会のための産学官民連携のあり方
23IMS2304	明日の放射光光電子分光研究展開のシーズとニーズ
23IMS2305	溶液の化学現象の軟X線分光測定のフロンティア
23IMS2306	UVSOR-SPring8 赤外ビームライン合同ユーザーズミーティング

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-04-30
報告者	**氏名 (Name):** 岸根　順一郎 **所属機関 (Institute)** 放送大学 **部局 (Department)** 教養学部 **職 (Job Title)** 教授 **電話 (Phone no.)** 09034123633 **FAX (FAX no.)** **E-Mail** kishine@ouj.ac.jp

１．種別	課題研究
２．課題番号	23IMS1101
３．研究課題名	キラル物質におけるマルチスケール量子機能の統一描像の確立
４．所内対応者(敬称略)	山本浩史
５．共同利用研究者(敬称略)	楠瀬 博明：明治大学 理工学部 教授 加藤 雄介：東京大学大学院総合文化研究科教授 戸川 欣彦：大阪公立大学大学院工学研究科教授 佐藤 琢哉：東京工業大学 理学院 教授
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	キラル物質が示すスピン選択性や非相反伝導といった物質機能の研究が世界的規模で活発に進行している．本研究では，当該分野をリードし共同研究実績のあるメンバーを結集し，キラル物質において電子のスピン，軌道，原子核の振動といったミクロな量子力学的自由度の結合が果たす役割を解明する．手段として円偏光ラマン分光やスピン偏極輸送測定を用い，有機・無機，伝導体・半導体・誘電体，バルク結晶・薄膜など幅広い物質群のキラル応答を精査する．
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	分子・スピン・フォノン・光の各自由度におけるキラリティを統一的に理解する理論枠組みの構築と実験的実証を目指し、以下のような成果を得た。 ① 物理場からのキラリティ創発に関する研究（山本・楠瀬・岸根（他のメンバーも全員議論に参加）） キラリティを単なる形の問題として捉えるのではなく、量子力学的に表現することによって、その物性発現の本質を理解することを目標のひとつとしている。本サブテーマでは、これまで混乱のあった「量子スピンによるキラリティの表現」について多極子表現を用いて整理をすることによって、議論の出発点となるべき表現法を確立した。さらに相対論的量子力学で現れてくる「キラル密度」と「電子スピンを用いたキラリティ」との間の関係を初めて明らかにし、これまで異なるものと考えられていた「素粒子のキラリティ」と「化学のキラリティ」を結びつけることに成功した。結果として、様々な「キラルでない物理場」から、キラリティを生み出す処方が得られている。本成果はAppl. Phys. Lett.の招待論文として査読中である。 ② キラル水晶における熱流－スピン変換（戸川（他のメンバーも全員議論に参加）） 　固体中で角運動量を輸送する存在は、電子だけでなく格子（フォノン）であっても良いはずである。フォノンによる角運動量輸送を証明するために、キラルな結晶構造を有する水晶に熱勾配をかけ、熱源から運ばれてきたキラルフォノンの角運動量を電子スピンに転写することで検出した。具体的な検出方法としては、スピントロニクスで使われる逆スピンホール効果という手法を利用し、プラチナ電極を水晶表面に張り付けることでキラルフォノンの電気的検出に成功した。フォノンを用いると、極めて長距離の角運動量輸送が可能であることも、この結果は示している。本成果はPhys. Rev. Lett. に掲載済みである。 ③ スピン流—スピン蓄積における時間反転対称性の反転（加藤・山本・楠瀬・岸根・佐藤・戸川） 　一般に物理量は、質量やキラリティのように時間反転に対して偶のものと、スピンや速度のように時間反転に対して奇のものがある。一方、我々が普段扱う物理法則は熱力学を除けば、全て時間反転に対して対称に出来ているため、時間反転「偶」の物理量と時間反転「奇」のものが混じり合うことはない。しかし最近のCISS効果の研究では、時間反転「奇」のスピンが分子や結晶のキラリティを表現しうることが明らかとなってきた。そこで本サブテーマでは、キラルな金属を題材として、時間反転「偶」のスピン流が時間反転「奇」のスピン蓄積に変換される過程を、ボルツマン方程式およびスピン拡散方程式によって解明した。本成果は投稿論文準備中である。

８．その他	1.“Enantioselectivity of discretized helical supramolecule consisting of achiral cobalt phthalocyanines via chiral-induced spin selectivity effect Hiroki Aizawa, Takuro Sato, Saori Maki-Yonekura, Koji Yonekura, Kiyofumi Takaba, Tasuku Hamaguchi, Taketoshi Minato & Hiroshi M. Yamamoto Nature Commun. 14, 4530 (2023) 2.“Highly Durable Spin Filter Switching Based on Self-Assembled Chiral Molecular Motor” Ruttapol Malatong, Takuro Sato, Jakkapan Kumsampao, Taketoshi Minato, Masayuki Suda, Vinich Promarak, and Hiroshi M. Yamamoto Small, 19, 230271 (2023) 3.“Spin polarization gate device based on the chirality-induced spin selectivity and robust nonlocal spin polarization” Hiroaki Shishido, Yuta Hosaka, Kenta Monden, Akito Inui, Taisei Sayo, Yusuke Kousaka, and Yoshihiko Togawa J. Chem. Phys. 159, 064502 (2023) 4.“Rotational symmetry breaking of nuclear motion in the Jahn-Teller X3 molecule due to Casimir-Polder interaction” A. D. Lyakhov, A. S. Ovchinnikov, I. G. Bostrem, and J. Kishine Phys. Rev. B 108, 115429 (2023) 5.“High-performance descriptor for magnetic materials: Accurate discrimination of magnetic structure” Michi-To Suzuki, Takuya Nomoto, Eiaki V. Morooka, Yuki Yanagi, and Hiroaki Kusunose Phys. Rev. B 108, 014403 (2023) 6.“Symmetry-adapted modeling for molecules and crystals” Hiroaki Kusunose, Rikuto Oiwa, and Satoru Hayami Phys. Rev. B 107, 195118 (2023) 7.“Time-reversal switching responses in antiferromagnets” Satoru Hayami and Hiroaki Kusunose Phys. Rev. B 108, L140409 (2023) 8.“Chiral Charge as Hidden Order Parameter in URu2Si2” Satoru Hayami and Hiroaki Kusunose J. Phys. Soc. Jpn. 92, 113704 (2023) 9.“Unconventional Hall effect and magnetoresistance induced by metallic ferroaxial ordering” Satoru Hayami, Rikuto Oiwa, and Hiroaki Kusunose Phys. Rev. B 108, 085124 (2023) 10.“Chirality-Induced Selectivity of Phonon Angular Momenta in Chiral Quartz Crystals” Kazuki Ohe, Hiroaki Shishido, Masaki Kato, Shoyo Utsumi, Hiroyasu Matsuura, and Yoshihiko Togawa Phys. Rev. Lett. 132, 056302 (2023) 11. “Quantification of chirality based on electric toroidal monopole” A. Inda, R. Oiwa, S. Hayami, H. M. Yamamoto, and H. Kusunose J. Chem. Phys., accepted
注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-04-12
報告者	**氏名 (Name):** 黄　晋二 **所属機関 (Institute)** 青山学院大学 / **部局 (Department)** 理工学部 / **職 (Job Title)** 教授 **電話 (Phone no.)** 0427596251 / **FAX (FAX no.)** 0427596251 / **E-Mail** koh@ee.aoyama.ac.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1201
３．研究課題名	イリジウム単結晶薄膜上に化学気相成長したグラフェン膜の評価
４．所内対応者(敬称略)	松井 文彦
５．共同利用研究者(敬称略)	黄　晋二：青山学院大学理工学部電気電子工学科　教授 橋本　恵里：青山学院大学理工学研究科電気電子工学コース　博士後期課程1年 大沼　佑貴：青山学院大学理工学研究科電気電子工学コース　修士課程2年
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	高い品質のCVDグラフェンを成膜するためには、下地となる単結晶遷移金属基板の品質向上が肝要である。本研究は、分子線エピタキシー (MBE) 法を用いて、高い表面平坦性と結晶性を併せ持つIr薄膜の作製に取り組んだ。2023年度は単結晶性を有するMBE-Ir薄膜の成膜に着手し、BL6Uの光電子運動量顕微鏡 (PMM) を用いて価電子帯光電子分光測定を行い、作製したIr薄膜のドメインサイズを評価した。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	2023年度は、分子線エピタキシー（MBE）法を用いたサファイア基板上の高結晶性Ir(111)膜の成長条件最適化に取り組んだ。このIr(111)は、グラフェンのCVD成長における触媒金属基板として活用するが、これまで用いていたスパッタリング法と比較して、MBE法を用いることでより高い結晶性のIr(111)膜を成長できると期待して取り組んだ。 成膜実験では、MBE法に低温バッファ層の堆積とＨ2アニーリングを組み合わせることで、Ir(111)薄膜を作製した。まず、サンプルホルダー温度を500℃に設定して、20分間低温バッファ層を堆積した後に、950℃まで昇温し220分間の成膜を行った。総時間240分の成膜により、膜厚約70 nmのIr薄膜を成長させた。その後、MBE炉から取り出し、H2雰囲気下で1000℃ 60 minのアニールを行った。 作製したIr薄膜に対して、X線回折法を用いて2theta/omegaスキャンと極点測定を行った結果、(111)単相配向のIr膜が成膜していることが明らかになった。極点測定においては6回対称のパターンが観測され、Ir(111)は本来3回対称であるため双晶が存在することが分かる。ロッキングカーブ測定を行ったところFWHMは0.054°であり、原子間力顕微鏡を用いて表面平均粗さを測定したところ、Ra=0.3 nmであった。これまで用いたスパッタリング法で成膜したIr薄膜においては、ロッキングカーブのFWHMは0.139°、表面平均粗さRa値は1.3 nmであるため、MBE法を用いて成膜したIr(111)薄膜は結晶性と表面平坦性が共に著しく向上していることが分かった。 光電子運動量顕微鏡（PMM）を用いて価電子帯光電子分光測定を行ったところ (hn=100 eV)、回転の無いドメインが反映された3回対称のフェルミ面を観測した。測定位置を約100 μm移動させ同様の測定を行うと、回転したドメインと回転していないドメインとの境界が反映された6回対称のパターンが観測され、さらに移動させると回転したドメインのバンド分散のみが観測された。これらの結果は極点測定の結果と一致している。同様に測定位置を変化させながら光電子分光測定を行い、フェルミ面を観測した結果、数100 μm ×100 μm以上の領域で単一のドメインが存在することが明らかになった。 以上より、低温バッファ層の成長とH2アニールを組み合わせたMBE法を用いて、より高い品質を有するIr(111)薄膜の成膜に成功した。継続申請した協力研究では、さらなる成長条件の改善を行い、単結晶Irと遜色のない品質を有するIr薄膜の作製に取り組む。
８．その他	

注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

2023 年度　分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

大阪大学産業科学研究所・准教授・田中慎一郎

題目：Momentum Microscopy 装置による 3D フェルミ面計測手法の確立とその応用(II)

概要：本年度は主として、松井教授・萩原研究員と共同でビームライン改良を行った。申請者が行った貢献は以下の 2 点である。 1）BL7U の直入射分光器のブランチ化により可能になった直入射配置における偏光解析手法を提案し、解析ソフトウェアを開発した。 2） 1）の解析ソフトの拡張として、偏光、光エネルギー、試料上の光電子収集の実位置などを変数とした光電子分光の多次元解析のためのソフトを開発した。

得られた成果：

1）BL7U の直入射分光器からの光を直入射配置に導くことで、偏光による光電子強度の変化を試料の回転によって理想的に取り扱うことが可能になった。この実験結果の解析手法として、「全波数空間における光電子収量の偏光位相解析」法を提案し、萩原研究員と協力して Python を用いた解析プログラムを開発した。図 1 (a)は金単結晶を回転させ、偏光面を試料表面垂直軸について回転させた際のフェルミレベルの光電子収量である。ここで観測している 2 次元運動量（波数）空間の全ての点について、光電子強度 I を偏光角度ϕ_sの関数として$I(\theta) = I_0 cos^2(\phi_s - \phi_0)$とできることを確認し、それぞれのパラメータを運動量空

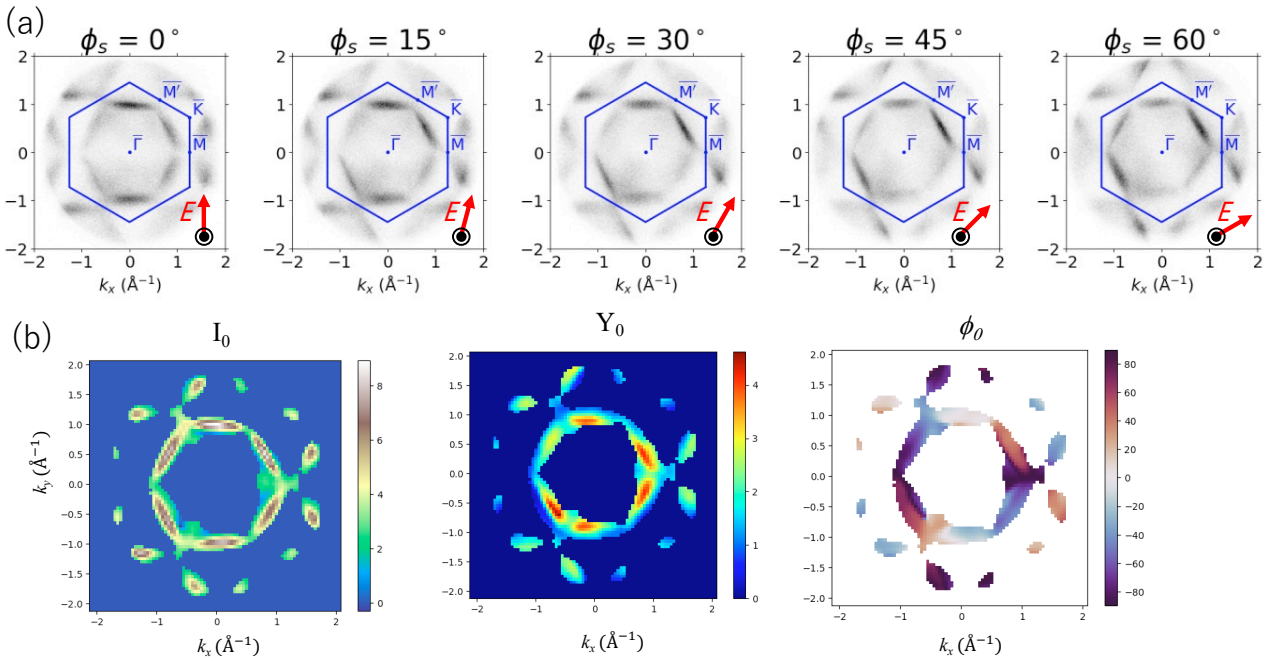


図 1 (a) 金単結晶のフェルミレベル光電子強度の運動量空間分布の偏光角依存性。(b)その解析結果の運動量空間におけるマップ。

ても光電子スペクトルの変更依存性のデータは数多く測定されてきているが、このように・全運動量空間に渡って・理想的な光学配置で・偏光角について定量的に、系統的に測定された例はほとんどなく、光電子分光の新しい測定法として期待が持てる。このような大量のデータの解析においては、市販の汎用ソフトでは限界があり、専用のプログラムの開発を今後も継続していく必要がある。

2）Momentum Microscopy 測定においては、多くの変数による ARPES スペクトルの変化から物質の本質についての情報を得ることができる。光エネルギー変化による kz 分散を測定することで、協力研究の題目である 3 次元フェルミ面の観測が可能になるが、それだけではなく、1)で述べたような偏光や、試料の実空間での座標など、多次元観測により得られる物性物理は数多い。そこで重要になるのは膨大なデータから本質を導くためのソフトウェア開発である。Python を用いたプログラム開発を現在も進行中である。たとえば、図 2 で示したように、実空間における xy 座標での観測点[図 2 右側の赤線交点]における ARPES スペクトル（運動量表示）[図 2 左側マップ]と、ARPES スペクトルでの特定の運動量[図 2 左側赤線交点]での試料実空間での光電子収量マップ[図 2 右側マップ]を、自由に取り扱うことができるプログラムを開発した。Momentum Microscopy で取り扱える変数は数多く、さまざまな物性物理の新しい形の測定を行なっていくためには、膨大なデータの分析ソフトウェア開発は本質的に重要であり、今後も進めていく。

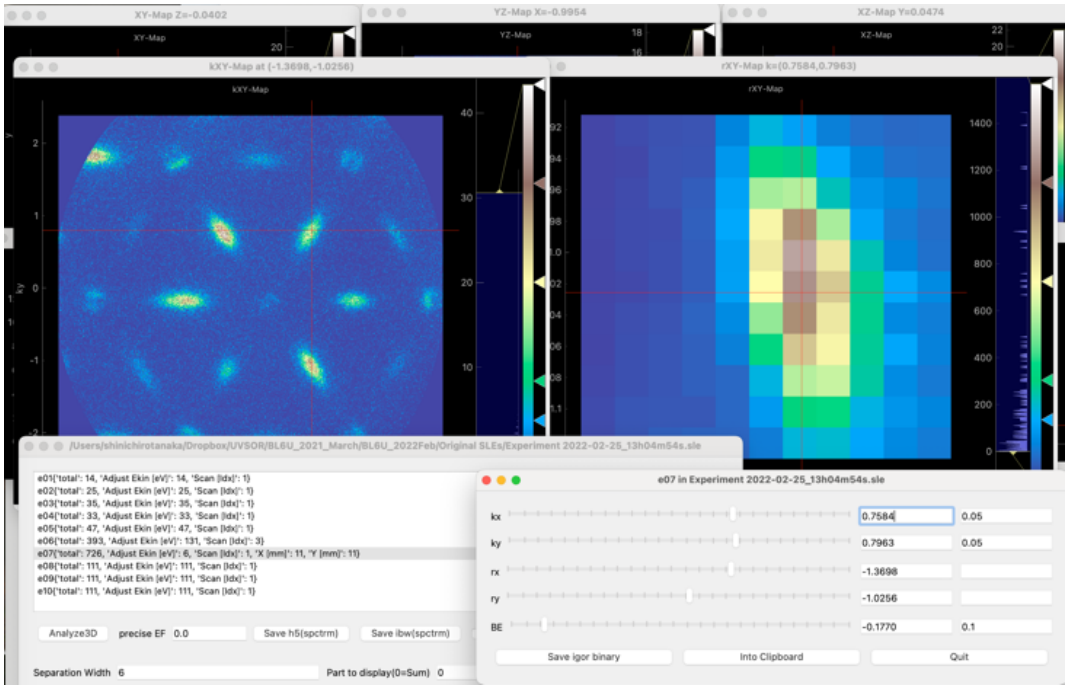


図 2 ： $TiSe_2$ 単結晶の ARPES スペクトル(左側)および光電子強度の顕微マップ（右側）。左側の ARPES スペクトルの赤線交点での光電子収量の実空間マップが右側に示されており、右側の赤線交点での ARPES スペクトルが左側に示されている

[1] K. Hagiwara *et al.*, J. Synch. Rad. (2024).31.

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2023-05-09
報告者	**氏名 (Name):** 三石　郁之 **所属機関 (Institute)** 名古屋大学 / **部局 (Department)** 大学院理学研究科 / **職 (Job Title)** 講師 **電話 (Phone no.)** 052-788-6194 / **FAX (FAX no.)** 052-789-2919 / **E-Mail** mitsuisi@u.phys.nagoya-u.ac.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1203
３．研究課題名	超薄膜グラフェンを用いた独自の高効率電子収量用液体セルの開発
４．所内対応者(敬称略)	田中 清尚
５．共同利用研究者(敬称略)	柏倉 一斗：名古屋大学大学院理学研究科 大学院生 丹羽 由実：名古屋大学大学院理学研究科 技術補佐員
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	グラフェン超薄膜を用いた透過率測定を実施し、1, 5 層グラフェンサンプルに対し、紫外線領域を含む 35-500 eV までの透過率データの取得に成功した。結果、系統誤差が最大で +/-5% となるものの、期待通りの非常に高い透過率 >90% (吸収端構造を除く) が両サンプルに対して確認できた。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	高効率化を目指した超薄膜グラフェン電子収量用液体セルの開発に向け、本年度は紫外線から X 線帯域の透過率測定を実施した。まず、我々はパターニングが施された石英基板上に転写した 1 (直径 10 μm の自立膜), 5 (直径 100 / 300 μm の自立膜) 層グラフェンサンプルを用意し、BL4B, BL4U の二つのビームラインを駆使し、広帯域透過率取得を目指した。これらのサンプルは機械強度が大きく異なり、開口面積と電子透過率のトレードオフとなりうるため、その比較参考データとして二種類を用意した。BL4B では 5 層グラフェンに対し 5 eV ピッチで 30-250 eV 帯域を測定し、>90 % の非常に高い透過率を確認した。系統誤差は主に再現性測定から +/-5% であった。このビームラインでは光子統計の観点から機械強度が大きく大口径サンプルの製作が可能であった 5 層グラフェンのみのサンプルの測定であり、BL4U での 100-250 eV 帯域の測定データとの整合性確認もできている。また BL4U では 1, 5 層の両サンプルでの測定を実施し、測定データは吸収端構造を除き 100-500 eV を 40 eV ピッチとした。なお、FZP によるコリメート光に対する基板表面でのケラれ効果を避けるため、基板は片側テーパー角 30° の構造を有する。結果、吸収端構造を除き >92% の非常に高い透過率を確認している。系統誤差は +/-3% であり、この測定精度の範囲では 1, 5 層間に有意な透過率の差異は見られなかった。また吸収端近傍 (280-300 eV) でも >85% の高い値を示した。ただし、この帯域でも両サンプル間で有意な差は見られず、PMMA の残渣の影響も含め、現在原因解明中である。これらの結果は現在投稿論文としてまとめており (Kashiwakura, Mitsuishi et al., in prep.)、高効率化を目指した大口径サンプル製作の実現に向けたアイデアも現在特許準備中であり、5 月に出願予定である (三石他)。 なお、FY2023 はいよいよ試作電子収量用試作サンプルを製作し、グラフェンを搭載し、光電子の検出を目指した実験を進めていく予定である。
８．その他	
注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目 1 ～ 4 の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-04-09
報告者	**氏名 (Name):** 中村　和裕 **所属機関 (Institute)** 群馬大学 **部局 (Department)** 大学院保健学研究科 **職 (Job Title)** 教授 **電話 (Phone no.)** 0272208943 **FAX (FAX no.)** **E-Mail** knakamur@gunma-u.ac.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1204
３．研究課題名	ポリグルタミン病原因遺伝子のリピート関連性非ATG依存性翻訳産物へのレーザー照射後の凝集解離の分子シミュレーション
４．所内対応者(敬称略)	奥村久士
５．共同利用研究者(敬称略)	中村和裕　群馬大学大学院保健学研究科　教授
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	ポリグルタミン病関連のポリアラニン凝集体に対する赤外自由電子レーザーの凝集解離効果、細胞毒性軽減効果を実験的に証明した。同時にスーパーコンピューターを用いた分子シミュレーションの結果、照射により分子間ベータシートが解離し、水分子の存在がその再結合を阻害することがわかった。また、アミロイドベータに比較して、ポリアラニン凝集体のほうがレーザーによる解離が困難であることがわかった。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	ポリグルタミン病においては神経細胞内のポリグルタミン凝集体が細胞に対して毒性を発揮する。しかし、治療法開発を念頭に置いたとき、他の配列を持つ凝集体も標的にする必要がある。mRNA内に長い反復配列が存在するときに、翻訳開始点であるAUG開始コドンではなく、それより下流の地点から翻訳を開始するリピート関連非AUG依存性翻訳（RAN translation）がポリグルタミン病原因遺伝子で見られる事が報告されたからである。本来グルタミンとして翻訳されるはずのCAGリピートから、ポリセリン、ポリロイシン、ポリアラニン、ポリシステイン凝集体も同時に産生される。したがって、治療法確立を目指した時、ポリグルタミン凝集体解離だけでは不十分で、上記ポリグルタミン以外の他凝集体解離もなされる必要がある。 　これらの凝集体の中でポリアラニン凝集体に対して６ミクロンの波長の赤外自由電子レーザーを照射し、凝集解離効果を調べた。試験管内でアラニンが１３個連続した配列を持つペプチドを凝集させ、界面活性剤に溶解するフラクションと溶解しないフラクションに分けた。照射前に比較して、照射後のポリアラニンでは界面活性剤に溶解しないフラクションの割合が低くなっていた。つまり、照射により、ポリアラニンの凝集の程度が軽減したことが示された。同様の波長のレーザー照射による凝集解離効果はポリロイシンに対しても認められた。 　次に機能解析を行った。培養神経様細胞にポリアラニン凝集体を導入すると神経様突起伸長が阻害された。しかし、照射後のポリアラニンを導入しても突起伸長は阻害されなかった。すなわち、照射によりポリアラニンの細胞毒性が減弱したことが示された。 　また、MDシミュレーションにより、赤外自由電子レーザーによるポリアラニン凝集解離の過程を計算した。照射により分子間ベータシートが解離したが、水分子の存在がその再結合を阻害した。同様の解離過程がアミロイドベータにおいてもみられることを我々は過去につきとめたが、アミロイドベータに比較して、ポリアラニン凝集体のほうがレーザー照射による解離が困難であることがわかった。
８．その他	
注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。

担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-05-07
報告者	**氏名 (Name):** 村手　宏輔 **所属機関 (Institute)** 名古屋大学 **部局 (Department)** 大学院工学研究科 **職 (Job Title)** 助教 **電話 (Phone no.)** 0527893169 **FAX (FAX no.)** 0527894440 **E-Mail** murate.kousuke@h.mbox.nagoya-u.ac.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1205
３．研究課題名	チェレンコフ位相整合高出力テラヘルツ波光源の開発
４．所内対応者(敬称略)	平等　拓範
５．共同利用研究者(敬称略)	内田　裕久：名古屋大学大学院工学研究科　招聘教員 川瀬　晃道：名古屋大学大学院工学研究科　教授 早瀬　耕平：名古屋大学大学院工学研究科　大学院生
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	波長1μm帯のフェムト秒レーザーを用いたテラヘルツ波用の光源には適当なものがなく、これまで活用されてこなかった。そこで本研究では、非線形光学結晶であるDASTを用いたチェレンコフ位相整合テラヘルツ波発生の利用を目指した。本方式を用いることで、光波とテラヘルツ波間のコヒーレンス長の制限を受けること無く広帯域なテラヘルツ波発生が可能である。光伝導アンテナ（PCA）や、同一結晶を用いたコリニア位相整合方式と比較して広帯域かつ高出力なテラヘルツ波発生が確認できた。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	近年1.0 μm帯の高出力なフェムト秒レーザーが比較的安価に市販されてきており、テラヘルツ波測定システムへの応用が期待されている。高出力レーザーでDAST結晶を励起できれば、テラヘルツ波出力の飛躍的な向上が期待されるが、1μmレーザーを用いた場合、一般的なテラヘルツ波発生法であるコリニア位相整合による光整流法では、非線形光学結晶内部での励起光とテラヘルツ波のコヒーレンス長が十分に取れない懸念があった。そこで、テラヘルツ波の波面が揃う方向にテラヘルツ波を取り出すチェレンコフ位相整合テラヘルツ波発生技術を導入することで本課題解決を図った。チェレンコフ位相整合方式では、コヒーレンス長を無視できる。ゆえにレーザーの励起波長の制限がなくなり、1μm帯レーザーでの高強度励起が可能である。 本方式を検証するために1040nmのfsレーザーを励起光源としてテラヘルツ時間領域分光法（THz-TDS）のシステムを構築し、光伝導アンテナ、DAST結晶＋コリニア位相整合方式、DAST結晶＋チェレンコフ位相整合方式の3種類の光源の比較を行った。検出器には光伝導アンテナを利用した。まずは比較のために、最も一般的なテラヘルツ波光源である光伝導アンテナを用いてテラヘルツ波発生を行った。想定通り、1μmは半導体のバンドギャップと一致していないことから十分な性能が得られず、帯域1THz程度、ダイナミックレンジ3桁程度にとどまった。次にDAST結晶を用いたコリニア位相整合方式によりテラヘルツ波発生を行った。これまで当該レーザーでDAST結晶を励起したデータが乏しかったため、まずは損傷しきい値を確認したうえで損傷しない範囲で測定した。帯域2THz以上、ダイナミックレンジ5.5桁程度と、PCAに比べて出力、帯域ともに向上した。ただし、1.5μm帯レーザー励起の場合は、7THz以上の帯域と6桁のダイナミックレンジが得られており、そちらに比べると出力が劣っている。これは、1μm帯ではコヒーレンス長が十分にとれないことによる。最後に、DAST結晶からチェレンコフ位相整合方式を利用してテラヘルツ波発生を行った。帯域3THz、ダイナミックレンジ6.5桁と今回検証した3方式内では最も広帯域かつ高出力なテラヘルツ波発生を確認できた。想定通りチェレンコフ位相整合を用いることで、コヒーレンス長の制限を受けることなくテラヘルツ波の発生が可能となったといえる。ただし、フェムト秒レーザーのパルス幅から考えると依然として帯域は狭い。これは、検出器として光伝導アンテナを用いたことによると考えている。前述の通り光伝導アンテナに用いられる半導体のバンドギャップと波長1μmは一致しておらず、十分な性能が得られない。これは検出に用いる場合でも同様であり、帯域の制限につながったと考えている。今後EO検出を導入することで、これら制限なくテラヘルツ波検出を行いたい。
８．その他	

注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-04-30
報告者	**氏名 (Name):** 渋田　昌弘 **所属機関 (Institute)** 大阪公立大学 / **部局 (Department)** 大学院工学研究科 / **職 (Job Title)** 准教授 **電話 (Phone no.)** 06-6605-3486 / **FAX (FAX no.)** / **E-Mail** shibuta@omu.ac.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1206
３．研究課題名	広帯域2光子光電子分光による内包フラーレン超原子集積体の電子ダイナミクス計測
４．所内対応者(敬称略)	解良 聡
５．共同利用研究者(敬称略)	野島 周人：大阪公立大学 大学院生 丹 悠真：大阪公立大学 大学院生
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	分子科学研究所に設置のフェムト秒レーザーと超高分解能角度分解能光電子分光装置とを組み合わせた2光子光電子分光の広帯域化と時間分解計測システムの充実化を図るとともにその機能を確認した。内包フラーレン薄膜の計測から、超原子軌道由来と思われる電子状態の検出に成功したものの、予想される自由電子様バンドの形成は確認されず、均一薄膜化は蒸着条件の検討が必要であることが分かった。そのほか、2光子光電子分光の共同利用設備としての環境整備を並行して行った。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	分子科学研究所の解良聡教授との協力研究として、同所に設置されているフェムト秒レーザー (Coherent社 Mira900-F) と超高分解能角度分解光電子検出器 (MBScientific AB社 A-1) を融合することで2光子光電子分光システムを構築・高度化するとともに、内包フラーレン超原子を主な対象とした電子状態と電子ダイナミクスの高感度計測を継続的に推進してきた。 今期は、ポンプ光をより広帯域化した計測を行うために、波長変換システムと遅延光学システムの改良を行った。これにより、370 nm-460 nmの間でポンプ光波長を選択し、光励起チャネルを限定した電子ダイナミクスの計測と議論が可能となった。特に、当該波長領域は研究対象としている内包フラーレン超原子薄膜における電荷移動励起子吸収バンドに相当しており、これまでに観測している自己解離した光キャリアとは異なる光励起状態の観測を行うことを見込んだ。 Li内包フラーレン（Li@C60）をグラファイト基板に蒸着し、2光子光電子分光を行ったところ、超原子に特有に表れる非占有電子状態 (超原子軌道) と思われるシグナルが観測されたが、期待される自由電子的分散 (高い光電子放出角依存性) の観測には至らなかった。これは、蒸着時における純粋なLi@C60の配列が不十分であったことが原因の一つであると考えられる。実際に、走査型トンネル顕微鏡では、Li@C60は蒸着時において中心金属が外れ、非内包C60が混在した薄膜ができることが示されており、蒸着条件の更なる検討やカウンターアニオン種の交換が必要である。一方、紫外光電子分光の結果からは非内包C60の混在が認められるものの、Li@C60由来であると考えられるシグナルと、その低温 (20-60 K) での可逆的なシグナル強度の変化が観測されており、原子内包に特有の現象と考え解析を進めている。 上記のほか、2光子光電子分光の共同利用設備としての環境整備を並行して行った。フェムト秒レーザーを専門としない研究者でも基本的な計測が行えるよう、システムの簡素化やレーザー光に対する安全策を講じるなどの作業を行いつつ、金属基板やその上に成長した2次元原子層状化合物などを対象としたテスト計測を行った。今後、当該システムが広く利用され、同システムに組み込まれている他の光源や計測法と組み合わせた特色ある研究成果が輩出されることが期待される。
８．その他	
注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。

担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-04-03
報告者	**氏名 (Name):** 山田　豊和 **所属機関 (Institute)** 千葉大学 / **部局 (Department)** 大学院工学研究院 / **職 (Job Title)** 准教授 **電話 (Phone no.)** 0432903915 / **FAX (FAX no.)** / **E-Mail** toyoyamada@faculty.chiba-u.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1208
３．研究課題名	新奇トポロジーをもつ二次元分子磁石の開発
４．所内対応者(敬称略)	解良 聡
５．共同利用研究者(敬称略)	山田 豊和： 千葉大学大学院工学研究院 准教授 石井 響誠： 千葉大学大学院融合理工学府 大学院生 柏木 知弥： 千葉大学工学部 学部学生 赤松 瞬： 千葉大学工学部 学部学生
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	有機分子と磁性原子による二次元量子スピン系の構築を目指している。前駆体分子Ph4DN結晶を合成し超高真空内にて温度変化による昇華レート測定を行った。Co蒸着器とPh4DN蒸着器の芯出しを行いCu(111)への共蒸着を実施した。超高真空STM観察、UPS測定準備、スピン多重度間のエネルギー差の理論計算、グラフェン基板作製を実施した。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	有機分子と磁性原子による二次元量子スピン系の構築を目指している。 （１）磁性原子間の相互作用を強めたいなら長さの短い1,4-Di(4-pyridyl)benzene(DPB)が良いが、320-330 Kで真空昇華し制御が困難と分かった。そこで、前駆体分子quaterphenyl-4,4‴-dicarbonitrile (Ph4DN)結晶を合成した。4,4-dibromobiphenyl (500 mg, 1.61 mmol)と4-cyanophenylboronic acid (708 mg, 4.82 mmol)を触媒としてpalladium(0) (186 mg, 0.161 mmol, 0.10 eq.)を用いて反応させた(収率: 228 mg, 0.641 mmol, 40%)。その後、再結晶化し(収率: 33.1 mg, 0.0929 mmol, 22%)、1H-NMR (500 MHz, d-chloroform)測定からPh4DN結晶の精製を確認した。 （２）精製した結晶を坩堝に入れ、超高真空内にて温度変化による昇華レート測定を行った(0.5 nm/min at 坩堝温度410 K, 2×10-7 Pa)。アレニウスプロットより、昇華エネルギーΔE = 1.68 eVを得た。 （３）光電子分光(PES)を用いて、Cu(111)へのPh4DN分子蒸着の準備を実施している。吸着による仕事関数変化と分子軌道位置の特定を目指す。 （４）磁性金属としてCu(111)上での磁気構造が明白なCoを使用した。Cu(111)上にCoを0.2原子層分(MLs)蒸着しCoナノクラスター成長を確認した。 （５）二次元量子スピン系の構築にはCoとPh4DNの共蒸着が必要である。双方の蒸着器の芯出しを慎重に行った。中心軸が僅か数 mmずれるだけで蒸着量の制御が困難となる。芯出し後、Cu(111)表面に室温でCoとPh4DNを共蒸着し、その後、ポストアニールした。その結果、Coナノクラスターのみが形成され分子は脱離してしまった。分子吸着時は基板温度を低温にし、Co原子蒸着後に基板温度を室温まで上昇する方式に変更する。 （６）また、二次元量子スピン系の構築を実現するには、導電性基板では、基板と分子間の電子結合が切れないため本来不適切である。基板との電子結合を切るためIr(111)上のグラフェン作製を実施した。清浄化したIr(111)を1200K以上に加熱しながらC2H4分子を照射し化学気相成長にてグラフェンを作製した。 （７）Co原子周りにPh4DNがC2, C3, C4対称で配位した際、スピン多重度、価数を変化させ、エネルギー的に最安定な状態をGaussian16計算で探った。スピン状態間のエネルギー差が数十meVであれば、量子スピン相転移が可能と考える。
８．その他	

注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-04-30
報告者	**氏名 (Name):** 中山　泰生 **所属機関 (Institute)** 東京理科大学 **部局 (Department)** 理工学部 **職 (Job Title)** 准教授 **電話 (Phone no.)** 0471229508 **FAX (FAX no.)** **E-Mail** nkym@rs.tus.ac.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1209
３．研究課題名	溶液から成長させた単結晶性有機半導体薄膜の電子構造計測
４．所内対応者(敬称略)	解良 聡
５．共同利用研究者(敬称略)	田崎　智也：東京理科大学大学院創域理工学研究科　大学院生 山田　泰成：東京理科大学大学院創域理工学研究科　大学院生
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	本研究課題は，溶液から成長させた有機半導体結晶の電子バンド分散構造を実測することを目的とするもので，可溶化のために導入されたアルキル側鎖に埋もれたπ主骨格に起因する分子結晶の価電子バンドを，低エネルギー励起光を用いた角度分解紫外光電子分光測定によりプローブすることを意図したものである。いずれも溶液から成長させたテトラベンゾポルフィリン誘導体およびチエノチオフェン誘導体の結晶試料を対象とし，実際に価電子バンド分散の実測が可能であることを示すことに成功した。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	１）研究目的 有機エレクトロニクスの重要な強みは，安価かつ省エネルギーな溶液プロセスによってデバイス製造が可能である点にある。ただし，有機半導体固体において電気伝導を主として担っている芳香族主骨格のみからなる分子材料は一般に溶解性に乏しい傾向があるため，飽和炭化水素系の置換基を導入することで溶媒への可用性を高める材料開発が行われてきた。これにより，「バンド伝導性」の電荷輸送効率を示す単結晶性有機半導体薄膜をウェハスケールで溶液から実際に製造できることが報告されているだけでなく，アルキル置換基間の引力的相互作用により主骨格部分の分子パッキングが稠密化することで移動度が向上するいわゆる「ファスナー効果」の発現も提唱されている。こうしたことから，可溶化置換基を有する有機半導体分子結晶において，「バンド伝導」の前提となる電子バンド構造を実測することは基礎・応用の両面から重要な課題だが，現在までに実測に成功した例は報告されていない。実験にあたって一つの障害となっているのは側鎖置換基の存在そのものである。π主骨格にアルキル側鎖が付加した構造をもつこうした分子が結晶化する際，表面側には側鎖が露出し，π主骨格はその下に埋もれることが知られている。側鎖層の厚みは1 nm程度であり，20 eV以上の励起光エネルギーを用いる一般的なARUPS測定における光電子の平均自由行程と同程度であるため，π主骨格に起因する光電子を有効にプローブできないことが問題となっていた。 それに対し，本研究課題では，10 eV以下の低エネルギー励起光を用いることでARUPS測定の検出深度を2 nm以上に伸長させ，溶液成長させた単結晶性有機半導体薄膜において可溶化置換基の下に埋もれたπ主骨格由来の価電子バンド構造を実測することを目的とした。 ２）研究成果 本研究課題では，直鎖アルキル側鎖を有するチエノチオフェン誘導体分子とトリアルキルシランを末端とする側鎖を有するテトラベンゾポルフィリン誘導体分子を対象として，溶液から結晶化させた試料に対して低励起エネルギーARUPS測定を実施した。テトラベンゾポルフィリン誘導体結晶については，π主骨格に起因する光電子信号は明確に検出され，10 K程度の低温までチャージアップや照射損傷の影響なく光電子計測が可能であることが確認できた。しかし，比較的高い荷電キャリア移動度が報告されている結晶方位においても電子バンド分散は観測されなかった。一方，チエノチオフェン誘導体分子については，π主骨格に起因する光電子信号は若干弱く，また試料温度を100 K以下まで低下させるとチャージアップに起因すると考えられる低運動エネルギー側へのスペクトルシフトと変形が確認された。一方，それ以上の温度ではスペクトル構造が光電子放出角に依存して変化する挙動が観測され，低励起エネルギーARUPSによる可溶化有機半導体結晶の電子バンド分散の実測可能性を示すことに成功したと結論できる。
８．その他	

注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-04-29
報告者	**氏名 (Name):** 皆川　真規 **所属機関 (Institute)** 山形大学 / **部局 (Department)** 大学院理工学研究科 / **職 (Job Title)** 准教授 **電話 (Phone no.)** 0238263470 / **FAX (FAX no.)** / **E-Mail** minakawa@yz.yamagata-u.ac.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1210
３．研究課題名	固体担持型ビスマストリフラートの調整と不均一触媒反応系への展開
４．所内対応者(敬称略)	魚住　泰広
５．共同利用研究者(敬称略)	皆川真規：山形大学大学院理工学研究科　准教授
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	本研究では, ビスマストリフラートを固体担持し,不均一触媒反応への展開することを目的とした. 具体的には, 様々な固体担持体; 各種シリカゲルやアルミナ, 酸化チタン, セルロース, デキストリンなどを用いて固体担持型ビスマストリフラートの調製した.調製した固体担持型ビスマストリフラートの触媒活性を触媒反応に利用し,それぞれの活性を確認した.
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	文献を参考に,シリカゲル(破砕状)を担持体とした固体担持型ビスマストリフラートを調製した.1) 同様に,シリカゲル(球状)およびシリカゲル(球状・中性), アルミナ, 酸化チタン, セルロース, デキストリンを担持体とした固体担持型ビスマストリフラートも調製した. それら固体担持ビスマストリフラートを用いたモデル反応を行い, 調製した固体担持ビスマストリフラートの活性を検討した.具体的には,モデル反応として, フェノール(p-cresol) とアリルアルコール(3-methylbut-2-en-1-ol) を用いた触媒的環化反応を行った. その結果,シリカゲル(破砕状)担持型ビスマストリフラート触媒を用いた場合, 目的環化化合物が52% で生成していることを確認した. シリカゲル(球状)担持型ビスマストリフラート触媒を用いた場合は,目的環化化合物が48% で生成していた. 同様の触媒反応条件下,シリカゲル(球状・中性)担持型ビスマストリフラート触媒を用いた場合は,目的環化化合物は17%収率であった. アルミナ担持型ビスマストリフラート触媒を用いた場合,目的環化化合物は全く確認されず,原料1を86%回収した.セルロース担持型ビスマストリフラートおよびデキストリン担持型ビスマストリフラートを用いた場合, 目的環化化合物は確認されなかった. 同様の触媒反応条件下,酸化チタン担持型ビスマストリフラートを用いた場合, 目的環化化合物がそれぞれ63%で生成した. この酸化チタン担持型ビスマストリフラートを用いたフェノールとアリルアルコールの環化反応の結果は,ビスマストリフラートを触媒とした均一系触媒反応系と同様の結果を得ることができた.したがって,均一系触媒反応系に匹敵する固体担持ビスマストリフラート不均一系触媒の調製に成功した.酸化チタンのみを触媒反応に用いた場合には,反応はほぼ進行しなかったことから,酸化チタン担持型ビスマストリフラートが不均一触媒反応系に有効であると考えている.調製した酸化チタン担持型ビスマストリフラートは分子研・魚住研究室にてTEMおよびICPを用いた解析も行った. (参考文献) 1) Babu, J. L.; Khare, A.; Vankar, Y. D. Molecules 2005, 10, 884.
８．その他	
注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-04-02
報告者	**氏名 (Name):** 山口　芳樹 **所属機関 (Institute)** 東北医科薬科大学 / **部局 (Department)** 薬学部 / **職 (Job Title)** 教授 **電話 (Phone no.)** 0227270208 / **FAX (FAX no.)** 0227270207 / **E-Mail** yyoshiki@tohoku-mpu.ac.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1211
３．研究課題名	糖タンパク質修飾糖鎖の構造決定と糖鎖認識受容体との相互作用解析
４．所内対応者(敬称略)	加藤 晃一
５．共同利用研究者(敬称略)	真鍋 法義： 東北医科薬科大学薬学部 講師
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	遠隔操作によりNMR測定を行うための環境整備を行い、実際に遠隔でNMR測定を実施できることを確認した。また、化学構造的に微視的不均一性を有する糖鎖試料を対象として、13C直接検出法を含む一連のNMR測定を行った。さらに、化学的に不均一な糖鎖リガンドとタンパク質との相互作用をNMR法により解析した。糖鎖由来の信号の広幅化が観測されたことから、糖鎖とタンパク質の結合を試験管内で確認することができた。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	申請者のグループは、構造未知の糖鎖試料に対して、NMR 法を用いてその構造を決定すること、またNMR法による糖鎖と糖鎖認識受容体との弱い相互作用の検出・解析を行い、得られたNMR情報を組み込んで糖鎖-糖鎖認識受容体の複合体モデルを構築するためのフローを構築することを研究目標の一つとしている。未知糖鎖試料の化学構造の決定にNMR法は必要不可欠な方法であるが、未知試料のサンプル量が限られている場合が多く、NMR信号の縮重も激しい。そのため、高感度・高磁場での NMR測定が必須になる。また構造既知の合成糖鎖とタンパク質の弱い相互作用をNMR法で検出・解析する際には、NMR測定法の選択・試料条件の検討が必要であるが、系統的にそれらを行うには至っておらず、現状は毎回試行錯誤的である。分子科学研究所との協力研究によりこれらの問題を解決して、統合的な構造生物学研究を進めることを目指し、今年度は以下の研究成果を得た。 （i）NMR法による不均一糖鎖の化学構造の解析 遠隔操作によりNMR測定を実施するための環境整備を行い、実際に遠隔での一連の操作を問題なく実施ことを確認した。その後、化学構造的に微視的不均一性を有する糖鎖試料を対象として、一連のNMR測定を実施した。1H検出型の測定（1H-13C HSQC、1H-13C HSQC-TOCSYなど）により、主成分に由来するNMR信号の帰属は容易に行うことができた。マイナー成分の信号も複数観測されており、化学的不均一性の存在をNMR法にて確認することができた。また、1H検出型の測定に加えて1H-13C HETCORや1H-13C HETCOR-TOCSYやなど13C直接検出法の検討を行った。13C直接検出法は1H検出法と比べて感度は劣るものの、13C軸に対して高いデジタル分解能にて13Cシグナルを検出することができるため、シグナルの縮重を回避することに成功した。1H検出型と13C検出型の測定結果は相補的であり、両方を測定・解析はすることは不均一性を有する糖鎖の構造解析に有効であった。また13C検出法はH2Oに由来する信号の影響をほとんど受けないため、軽水中でのアノマー位の信号検出に有効であった。 (ii) NMR法による糖鎖-糖鎖受容体相互作用の解析 化学的に不均一な糖鎖リガンドとタンパク質との相互作用を、NMR法により解析した。糖鎖にタンパク質を混合したところ、糖鎖由来の信号の広幅化が観測された。このことから、糖鎖とタンパク質の結合を試験管内で確認することができた。現在は、不均一な糖鎖のどの成分がタンパク質との結合に関与しているかを明らかにするとともに、不均一糖鎖の成分分離による均一化とともに、タンパク質-糖鎖リガンド複合体のNMR直接観察のための試料の調製法の検討を進めており、引き続き本体制での研究の継続を希望している。
８．その他	

注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-04-19
報告者	**氏名 (Name):** 山口　拓実 **所属機関 (Institute)** 北陸先端科学技術大学院大学 **部局 (Department)** 先端科学技術研究科 **職 (Job Title)** 准教授 **電話 (Phone no.)** 0761511641 **FAX (FAX no.)** **E-Mail** takumi@jaist.ac.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1213
３．研究課題名	多様な複合糖質を活用した糖鎖機能メカニズムの解析
４．所内対応者(敬称略)	加藤　晃一
５．共同利用研究者(敬称略)	
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	糖鎖の立体構造の揺らぎは、糖鎖が関与する分子間相互作用の制御に密接に関与していると考えられる。分子シミュレーションから得られる糖鎖の立体構造アンサンブルを用いて、タンパク質との動的な相互作用を評価する手法の開発に取り組んだ。糖鎖のダイナミクスを考慮することで、酵素の反応性の違いを見積ることができ、生化学実験の結果ともよい一致を示すことがわかった。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	糖鎖は、核酸・タンパク質と並ぶ第三の生命分子鎖と呼ばれている。それにもかかわらず、糖鎖の分子科学研究、なかでも物理化学的な機能メカニズムの理解は、核酸やタンパク質と比べて遅れている。本共同研究課題は、糖鎖に関する生物物理学的な理解を進めることを目的とする。そのために、多様な糖鎖を系統的に取り扱い、糖鎖の動的立体構造の差異を体系化するとともに、その変化を糖鎖認識系の分子システムの機序と結びつけることを目指している。 2023年度は、分子動力学（MD）シミュレーションを通して、糖鎖の動的な三次元構造の描像と、タンパク質との相互作用メカニズムの解明に取り組んだ。糖鎖は自由度の高い分子構造をもち、そのコンフォメーションは大きく揺らいでいる。糖鎖の立体構造ダイナミクスは、糖鎖とタンパク質との相互作用の制御に密接に関与していると考えられる。しかし、糖鎖が関わる分子間相互作用を解析する上で、糖鎖の揺らぎを考慮する方法は限られる。そこで本共同研究では、MDシミュレーションから得られる糖鎖の立体構造アンサンブルを用いて、相互作用を評価する手法の開発に取り組んだ。 グルクロン酸転移酵素による糖転移反応をモデルとして、糖鎖と酵素の動的な相互作用の解析を試みた。基質となる複合型三分岐糖鎖のシミュレーションには、網羅的な構造サンプリングを行うためにレプリカ交換MD法を用いた。得られた糖鎖の立体構造アンサンブルと、データベースに登録されている酵素の結晶構造情報を利用して複合体構造をモデリングし、糖鎖–酵素間の相互作用を評価した。その結果、立体構造のダイナミクスを考慮することで、同一な糖鎖配列に対する酵素の反応性の違いを見積ることができ、生化学実験の結果ともよい一致を示すことがわかった。 また、糖鎖の動的挙動を考慮した、糖タンパク質複合体の構造評価方法についても検討した。糖鎖のシミュレーションデータを活用し、複合体界面における糖鎖の衝突頻度を指標とすることで、より適切な複合体モデルを絞り込むことができた。 関連発表 1)山口拓実, 谷中冴子, 加藤晃一, “分子シミュレーションによる糖鎖の3次元構造の動態予測,” タンパク質の構造解析手法とIn silicoスクリーニングへの応用事例, 技術情報協会, pp.237-245, 2023. 2)犬塚健剛、関 健仁、山口拓実、矢木宏和、矢木真穂、加藤晃一, “糖鎖の構造アンサンブルを考慮した糖タンパク質複合体の評価方法の検討,” 糖鎖科学中部拠点 第19回若手の力フォーラム, 静岡, 2023年9月. 3)関 健仁, 山口拓実, 矢木宏和, 加藤晃一, “糖鎖の動的立体構造アンサンブルと糖転移酵素の相互作用評価法の開発,” 日本化学会 第104春季年会, 船橋, 2024年3月.
８．その他	

注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-04-16
報告者	**氏名 (Name):** 鄭　誠虎 **所属機関 (Institute)** 熊本大学 **部局 (Department)** 大学院生命科学研究部附属グローバル天然物科学研究センター **職 (Job Title)** 教授 **電話 (Phone no.)** 096-371-4626 **FAX (FAX no.)** **E-Mail** chong@kumamoto-u.ac.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1214
３．研究課題名	モータータンパク質キネシンの全原子分子動力学シミュレーション
４．所内対応者(敬称略)	飯野　亮太
５．共同利用研究者(敬称略)	
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	キネシンはダイマーとしてATPを加水分解しながら微小管に沿って一方向的に運動する性質を持つが、その分子メカニズムは未解明である。二つのキネシンを繋ぐリンカー領域が重要な役割を果たすと考えられているが、この領域の構造は知られていない。本研究は、分子動力学シミュレーションを用いて構造未解明領域に対するモデリングを行い、最終的にはキネシンが微小管上を「歩く」シミュレーションを実現することを目指す。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	本研究ではまず、gREST (generalized Replica Exchange with Solute Tempering) と呼ばれるレプリカ交換分子シミュレーション法を用いて、キネシン・ダイマーにおける構造未解明のリンカー領域に対するモデリングに取り掛かった。これまでの関連実験結果からリンカー領域と微小管の相互作用も重要であることが示唆されているので、協力研究者である分子科学研究所・飯野教授の助言のもと、微小管（tubulin alpha及びbetaと呼ばれるタンパク質から構成される）もこれまでにない規模の大きさのものを用いることにした。この結果、周囲の水分子まで含めると系を構成する原子数は３００万程度となった。これは全原子分子動力学シミュレーションを行う立場からするとかなり大きな系である。レプリカ交換法は信頼性のあるモデリングに用いることができる手法であるが、このような大きな系に適用するのは現実的ではない（必要なレプリカ数は系の構成原子数の２乗に比例して増える）。gREST法はこのような状況でも、系の興味のある部分（本研究ではリンカー領域）のみに着目したレプリカ交換を行うことができ、系全体の大きさに左右されないという特徴を持っていることから、本研究を遂行する際に最適な手法である。 微小管上のキネシン・ダイマーに対して、構造未解明のリンカー領域に注目したgRESTシミュレーションを実行したところ、非常に興味深い結果が得られた。リンカー領域の先端（キネシン・モノマーのC末端側）には、二つのキネシンを非共有結合的に結ぶネック・ヘリックスが存在するが、その配置（微小管から見た相対配置）は大きく分けて２つのクラスターに分類されることがgRESTシミュレーションにより明らかになった。その中の１つ（クラスター密度がより高い方）ではネック・ヘリックスは微小管と相互作用しており、これまで報告された実験（X線のような構造を直接決定できるような実験ではなく、間接的に構造を示唆するような実験）とコンシステントなものであった。もう一方のクラスターにおいては、ネック・ヘリックスは微小管と直接相互作用するような配置ではなかった。ネック・ヘリックス（リンカー領域）に対するこれら２つのクラスターの構造が、キネシン・ダイマーが微小管上を歩く際にどのような役割を果たすのかは現段階では不明である。 現在は、これら２つのリンカー領域の構造を基に、キネシン・ダイマーが微小管上を歩くシミュレーションを実行中である。このシミュレーションの実行にはかなりの計算時間がかかると予想されるので、本協力研究の継続申請（採択された）を行い、途中経過を協力研究者である飯野教授と共有・議論しながら研究を進めていきたいと考えている。
８．その他	

注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-04-01
報告者	**氏名 (Name):** 阿部　真之 **所属機関 (Institute)** 大阪大学 **部局 (Department)** 大学院基礎工学研究科 **職 (Job Title)** 教授 **電話 (Phone no.)** 06-6850-6674 **FAX (FAX no.)** **E-Mail** abe.masayuki.es@osaka-u.ac.jp

１．種別	課題研究
２．課題番号	23IMS1215
３．研究課題名	バナジウム酸化物薄膜における相転移現象のナノスケールイメージング
４．所内対応者(敬称略)	熊谷　崇
５．共同利用研究者(敬称略)	・阿部 真之　大阪大学大学院基礎工学研究科　教授 ・熊谷 崇　分子科学研究所メゾスコピック計測研究センター　准教授 ・金 庚民　大阪大学大学院基礎工学研究科博士後期課程　大学院生
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	バナジウム酸化物(VO2)薄膜は室温付近で金属−絶縁体転移(MIT)を示し、抵抗が数桁変わり、結晶構造が変化する。VO2薄膜をTiO2(110)基板に成長させ、X線回折(XRD)と赤外近接場光学顕微鏡(IR-SNOM)を用いて実空間での結晶性とMIT動態を調査した。温度変化によりVO2(220)回折ピークの明確なシフトが確認され、AFM/IR-SNOMで実空間のMIT動態を視覚化した。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	VO2薄膜が示すMITのダイナミクスと結晶性に関して新たな知見が得られた。VO2薄膜はパルスレーザー堆積法により、TiO2(110)基板上に成長されたものを用いた。この成長過程において、基板温度723 K、レーザー周波数2 Hz、部分酸素圧0.95 Paを適用した。得られた薄膜の結晶性は、X線回折（XRD）を用いて、サンプルを60℃から120℃の間で加熱および冷却しながら評価した。 XRD分析の結果、VO2(220)の回折ピークにおいて、温度が60℃の時には2θ = 57.56°の角度で検出され、120℃においては2θ = 57.32°へと変化するシフトが観察された。このピークのシフトは、VO2薄膜が低温の絶縁体相（単斜晶系）から高温の金属相（四方晶系ルチル相）への構造転移を示すことを意味している。特に、この構造転移は抵抗値の顕著な変化を伴い、MIT現象の明確な証拠として捉えられる。 更に、原子間力顕微鏡（AFM）と赤外走査型近接場光学顕微鏡（IR-SNOM）を組み合わせた測定によって、VO2薄膜のMIT動態を実空間で視覚化することに成功した。AFM/IR-SNOM測定では、タッピングモードを用いて薄膜の表面形態を同時に取得することができ、温度に依存したMITのプロセスをより詳細に観察することが可能となった。温度が変化するにつれて、MITは局所的な領域から始まり、温度が上昇するにつれて薄膜全体に拡散していく様子が確認できた。これらのIR-SNOM画像は、MITが進行するにつれて薄膜表面の光学的特性が変化することを明らかにし、温度依存性の局所的な光学的応答を示した。 これらの結果は、VO2薄膜におけるMIT現象の理解を深めるための重要なステップであり、MITが起きる過程とそのメカニズムを解明する上で有用な情報を提供している。
８．その他	
注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究　実施報告書
（協力研究）

2024 年　3 月　23 日

分子科学研究所長　殿

（報告者）
所属・部局　大阪大学産業科学研究所招聘教授
氏名　菅　滋正

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

１．種別（いずれかをチェック☑してください。）
☑　協力研究
☐　課題研究

２．研究課題名
高効率スピン偏極測定用 2 次元スピ界フィルターの実用化と利用最先端研究

３．課題番号（審査結果通知書及び申請書に記載しています。）
23IMS1216

４．所内対応者氏名：松井文彦

５．共同利用研究者 （注１）（注２）
（記入例：自然大学大学院工学研究科　准教授　岡崎太郎）
・分子研　教授　松井文彦
・分子研　ポスドク　萩原健太
・

６．実施した研究の概要（200 字程度以内）（注３）
これ迄の静電半球型光電子エネルギー分析器(HDA)1 台の運動量顕微鏡(PMM)から､2 台の HDAs の PMM に装置を高度化し、分解能△(x,y)、△(kx,ky)、△Ek　などを改善した。同一試料での測定を行い、性能向上を確認した。スピン検出器開発は、Ir(001)清浄面を用いた調整作業が始まったところである。2024 年度中には菅はスピン偏極 SP-3D-PMM 実験で世界最高の data を得たい。既に世界のＰＭＭでは初となる直入射でのＶＵＶ励起も可能である。

７．得られた研究成果(1200 字程度以内)(注４)
（継続申請の予定がある場合は今後の研究計画についても簡潔に記述してください。）

菅は退職後ドイツ Max-Planck-Institute 微細構造物理研究所 Halle に 2011-2015 の間滞在し 1984 年以来友人の J.Kirschner 教授の研究室で日本人としては最初の SP-2D-PMM を用いた革命的な光電子分光を体験した。これは 50 年に及ぶ体験から 21 世紀の革命的電子スピン状態計測法であると確信し、応用にも必要なミクロナノ領域の電子状態までを解明できる手法であり、すでに利用している Spin-STM/STS と共用すれば原子レベルまでの電子状態が解明できると確信した。そこで日本への導入を決心し 2016 年からほぼすべての放射光施設で紹介した結果、川合眞紀所長の英断で分子研への導入が決まり、菅はその立ち上げに責任を感じ、協力研究員として、SPring-8 での研究をやめ UVSOR での装置立ち上げに集中することとした。

2018 年に導入され松井文彦氏を中心として立ち上げに関わってきた。菅が 2013 年に考えた直入射の必要性とスピン 3 成分 Px,Py,Pz をすべて図るべきだとのアイデアは松井グループの手で具体構想が進み前者は 2023 年に実現したことは喜ばしい。Single HDA-PMM では 2021 年から CDW 系の Mo_4O_{11} や複雑 CDW 系の１T-TaS_2 等も阪大工学部の孫世代の院生を指導して測定したが決定的な data 取得には至らなかった。DHDAs-PMM の 2023 年以来の測定では後者試料については松井氏との協力研究で 8 これ迄より遥かに高精度の data が得られ解析中である。また直入射での PMM は世界初であり今後世界の光電子分光を先導できることには疑いの余地はない。本年度はまずはスピン分解なしでも世界を先導し革命的な成果をあげることを目標とした。現在スピン検出器のバグ出しを進めている。新年度 4 月より同検出器の性能テストを開始予定であり、菅は全力で 50 年蓄積した世界でも稀なスピン測定の knowhow を投入して複数の試料の SP-2D-PMM を 2024 年度内に成功させたい。

８．その他

今後 SP-PMM＋SP-STM/STS が応用につながる device のミクロナノ領域のスピン電子状態解析に必須であるので、その共同研究も協力研究費がなくなった後でも継続し個人の貯金を投入してでも行う覚悟である。これは個人の成果にとどまらず人類全体の成果であるためである。また device への応用では非伝導体のスピン電子状態測定も重要なので、これも自費を投入してナノテラス で行う。そのためのオペランドＳＸ-RIXS 測定はナノテラスの準備状況次第でいつからでも開始できるよう kowhow はすでに自身で SPring-8 での実験で蓄積済みである。

（注１）　記入例に沿って所属先機関名、部局名、職名、氏名を記載してください。

（注２）　共同利用研究者各位に、（注３）のとおり所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者（研究会参加者）の情報公開に関する承認が得られなかった場合、所定の報告書の提出に加えて、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を別途提出いただく必要があります。

（注３）　共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページ
(https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html)に公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。

（注４）　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ず Acknowledgement に謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。　(https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html)

（注５）　報告書の設問１．～４．の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正の上、NOU に再アップロードしますのでご了承ください。

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-04-01
報告者	**氏名 (Name):** 岡林　潤 **所属機関 (Institute)** 東京大学 / **部局 (Department)** 大学院理学系研究科 / **職 (Job Title)** 准教授 **電話 (Phone no.)** 0358414418 / **FAX (FAX no.)** 0358414418 / **E-Mail** jun@chem.s.u-tokyo.ac.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1217
３．研究課題名	垂直磁気異方性を有する薄膜界面の作製と電子状態の精密計測への応用
４．所内対応者(敬称略)	田中　清尚
５．共同利用研究者(敬称略)	
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	スピントロニクスデバイス応用やトポロジカル物性科学において、界面でのスピン・電子状態の観測が必須 であり、スピン分解光電子分光測定によるスピン計測が求められている。そのためのスピン検出器の作製に 際して、高効率なスピン検出に向けた金属表面の作製法の創出が必要となっている。そこで本研究では、異種原子の堆積を行えるシステムを開発し、原子レベルで制 御した薄膜堆積を実現させ、スピン分解光電子分光によるスピン・電子状態観測のためのターゲット薄膜作製技術の確立および、実際のスピン分解光電子分光をイメージングにより捉えるところまでを行った。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	別紙参照
８．その他	
注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

研究計画および成果

原子レベルにて制御された急峻な界面を持つ金属磁性薄膜の研究は、スピントロニクスデバイス応用や、界面でのスピン軌道相互作用と空間反転対称性の破れを用いたトポロジカル物性科学に向けて、急速に進展している。これらの物性解明に向けて、界面でのスピン・電子状態の観測が必須であり、スピン分解した角度分解光電子分光(ARPES)測定によるスピン計測が求められている。そのためのスピン検出器の作製に際して、高効率なスピン検出に向けた金属表面の作製法の創出が必要となっている。そこで協力研究課題において、異種原子の堆積を行えるシステムを開発し、原子レベルで制御した薄膜堆積法の実現とスピン分解光電子分光によるスピン・電子状態観測のためのターゲット薄膜作製技術の確立を目的として、研究を進めてきた。そして、実用段階にまで到達しつつあるところまで進めることができた。特に、世界初となる光電子イメージングによるスピン分解バンド構造を捉えることに成功しつつある。スピン検出器（超低速電子線回折 VLEED）の要となるターゲット材料の原子レベルでの表面化学的性質を明らかにし、最表面の安定化を調べ、作製技術を確立することでスピン分解光電子分光の計測に応用できる段階まで行えた。これらについて、UVSOR 田中清尚准教授と共同で研究を行ってきた。

2023 年度の協力研究では特に、結晶成長装置の立ち上げと異種原子の堆積を行えるシステムの開発において、試料作製および試料表面清浄化の自動化の開発を進め、界面化学結合論に基づいた原子レベルで制御した薄膜堆積法の実現とスピン分解 PES によるスピン・電子状態観測の観測を進めてきた。図 1 に示す成長条件の最適化を自動で行えるシステムを用いて、Au(111)の清浄表面を観測できるようになった。そして、スピン検出器の改良とターゲット材料の開発により、スピン分解光電子分光イメージにおける運動量分解能の向上による鮮明なイメージングが可能となった（図 1d）。今後、様々な物質系へ適用していくことにより、最終的な目的「スピン分解バンドイメージング」の達成に向けて研究を推進していく。

協力研究により、汎用性のある表面物理化学研究を行える環境を整え、薄膜作製装置における試料作製条件を詳細に調べ、スピン分解 PES の測定に資する材料開発を進められるようになった。中でも、薄膜表面での化学結合論に基づく議論が必要となっているのが現状であり、スピン分解 PES における高効率計測ができれば、測定技術と界面物性の飛躍的な進展につながる。原子レベルでの表面化学的性質を明らかにし、スピン分解 PES の計測に応用することを目指す。そのための準備を整えることができた段階である。

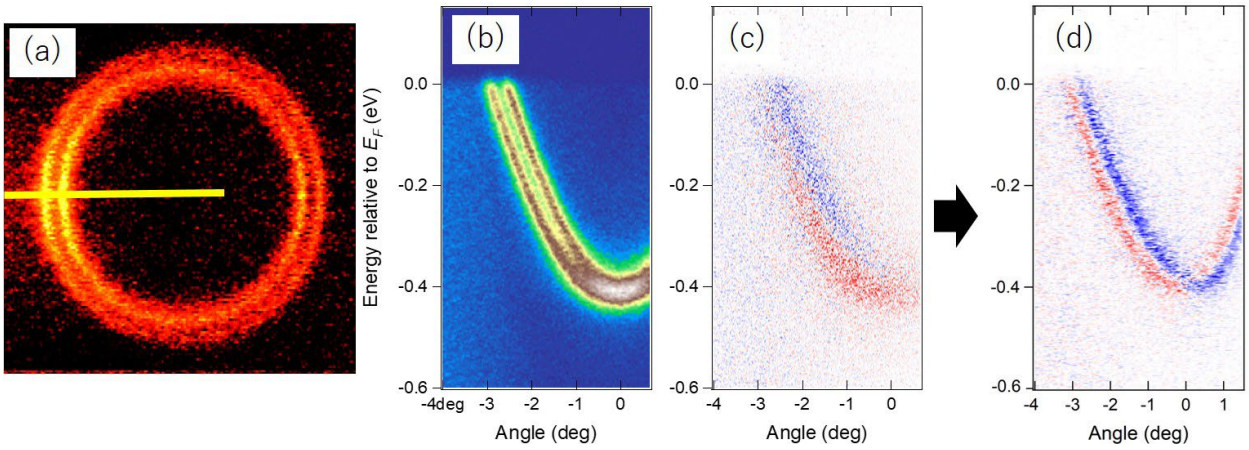


図 1 : Au(111)清浄表面のフェルミ面マップ. (a) 二重の輪（Rashba 分裂）は表面平坦化と長距離秩序が共に成された時に現れる. (b) ARPES イメージ. (c) 以前のスピン分解光電子イメージ（2022 年度）(d)改良により鮮明なスピン分解光電子イメージの取得に成功した（2023 年度）.

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-04-02
報告者	**氏名 (Name):** 太田　英俊 **所属機関 (Institute)** 愛媛大学 / **部局 (Department)** 大学院理工学研究科 / **職 (Job Title)** 講師 **電話 (Phone no.)** 0899279944 / **FAX (FAX no.)** / **E-Mail** ota.hidetoshi.mx@ehime-u.ac.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1218　23IMS1251
３．研究課題名	包接型P,N含有多座配位子保護による金属クラスター触媒の開発
４．所内対応者(敬称略)	魚住　泰広
５．共同利用研究者(敬称略)	・太田　英俊：　愛媛大学大学院理工学研究科　講師 ・魚住　泰広：　自然科学研究機構分子科学研究所　教授 ・田所　朝希：　愛媛大学大学院理工学研究科　大学院生 ・宮下　翔真：　愛媛大学大学院理工学研究科　大学院生
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	本研究ではトリス(8-ジフェニルホスフィノ-2-キノリル)ホスフィン配位子を表面保護剤とするパラジウムおよび金クラスターを合成し、透過型電子顕微鏡（TEM）を用いてそれらの粒子径を評価した。また、調製したパラジウムクラスターを触媒として鈴木-宮浦カップリング反応およびフェニルアセチレンの水素化反応を実施し、その触媒活性を調査した。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	トリス(8-ジフェニルホスフィノ-2-キノリル)ホスフィン配位子とパラジウムおよび金前駆体との錯化挙動を調査し、金属の個数および構造が明確な数種の有機パラジウムおよび金錯体を合成した。これらのうち、Pd2(dba)3·CHCl3およびAuCl·SMe2から調製した有機金属錯体を原料に用いて、金属クラスターの合成を検討した。配位子とパラジウムのモル比（L/Pd）が異なる有機パラジウム錯体を水素ガスで処理することにより、数種のパラジウムクラスターを合成した。また、生成したパラジウム粒子の構造および触媒活性評価の際の比較として、トリフェニルホスフィンとPd2(dba)3·CHCl3から調製した有機パラジウム錯体を同様の方法で還元してパラジウムクラスター（ナノ粒子）を調製した。金クラスターは、配位子と金のモル比（L/Au）が異なる有機金錯体を水素化トリエチルホウ素リチウムで還元することにより合成した。得られた試料はTEM法により分析を行い、金属クラスターの生成を確認した。パラジウムおよび金クラスターのいずれにおいても、配位子と金属のモル比（L/Pd, L/Au）が大きくなるにつれて金属粒子径が小さくなることがわかった。また、PPh3を保護剤とするパラジウムクラスター（ナノ粒子）の粒子径は、同じL/Pd値から調製した前述のパラジウムクラスターに比べて大きいことがわかった。トリス(8-ジフェニルホスフィノ-2-キノリル)ホスフィン配位子を表面保護剤とするパラジウムクラスター（L/Pd = 0.5）を触媒として、4-ヨードトルエンとフェニルボロン酸の鈴木-宮浦クロスカップリング反応とフェニルアセチレンの水素化反応を行った。その結果、どちらの場合も反応が進行し、対応するカップリング生成物（収率24%）および水素化生成物（収率16%）を与えることがわかった。現時点では生成物の収率が低いが、今後パラジウムクラスターのL/Pd比および反応条件を検討することで収率の向上が期待される。2024年度は引き続き金属クラスターの合成とそれらの構造評価を実施し、金属クラスターの調製条件と粒径に関するデータ収集を行う。さらに、調製した金属クラスターを触媒とする触媒反応（クロスカップリング反応、水素化反応）を実施し、触媒の粒子径と活性の相関性を調査する。
８．その他	
注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。

担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-05-08
報告者	**氏名 (Name):** 佐藤　宇史 **所属機関 (Institute)** 東北大学 / **部局 (Department)** 材料科学高等研究所 / **職 (Job Title)** 教授 **電話 (Phone no.)** 0222176169 / **FAX (FAX no.)** 0227953104 / **E-Mail** t-sato@arpes.phys.tohoku.ac.jp

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1219
３．研究課題名	トポロジカル物質におけるスピン偏極局所電子状態の解明
４．所内対応者(敬称略)	松井　文彦
５．共同利用研究者(敬称略)	佐藤 宇史：東北大学AIMR 教授 中山 耕輔：東北大学理学研究科 助教 森田 雄晴：東北大学理学研究科 大学院生
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	UVSOR BL6Uの光電子運動量顕微鏡装置を用いて、新型のトポロジカル物質候補について広範な運動量空間に亘る測定を行い、基本的なバンド構造を決定した。また、測定後のビームタイムを運動量分解能の向上に向けた装置調整として利用した。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	エキゾチックな準粒子を持つことが期待され、組成に依存して超伝導も示す新型のトポロジカル物質について、光電子運動量顕微鏡を用いたARPES測定を行った。励起光のエネルギーなど各種条件を変化させた実験を通して明瞭なバンド分散を観測することに成功した。その結果、線形分散など特徴的なバンド構造の存在を明らかにするとともに、組成に依存してバンド構造が劇的に変化することを見出した。また、今回の測定に用いたバルク単結晶試料は肉眼で認識が難しいほど小さいものであり、そのような微小試料の測定に光電子運動量顕微鏡装置が役立つことを示す結果となった。以上の結果については今後論文化を予定している。また、運動量分解能の向上に向けて、上記ARPES測定後のビームタイムを光電子運動量顕微鏡装置の改良・調整に利用した。今後は運動量分解能を向上させた装置を用いることで、期待されるトポロジカル表面状態の直接観測を行うとともに、将来的に実施予定のスピン分解測定の対象とする予定である。
８．その他	
注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

BL6U

Electronic states of a Weyl semimetal candidate revealed by momentum microscope

Y. Morita[1], K. Nakayama[1], K. Hagiwara[2], F. Matsui[2], T. Takahashi[1], K. Kudo[3], and T. Sato[1,4,5,6,7]

[1]*Department of Physics, Graduate School of Science, Tohoku University, Sendai 980-8578, Japan*
[2]*UVSOR Synchrotron Facility, Institute for Molecular Science, Okazaki 444-8585, Japan*
[3]*Department of Physics, Graduate School of Science, Osaka University, Toyonaka, Osaka 560-0043, Japan*
[4]*Advanced Institute for Materials Research (WPI-AIMR), Tohoku University, Sendai 980-8577, Japan*
[5]*Center for Science and Innovation in Spintronics (CSIS), Tohoku University, Sendai 980-8577, Japan*
[6]*International Center for Synchrotron Radiation Innovation Smart (SRIS), Tohoku University, Sendai 980-8577, Japan*
[7]*Mathematical Science Center for Co-creative Society (MathCCS), Tohoku University, Sendai 980-8578, Japan*

Recent discoveries of outstanding properties such as the half-integer quantum Hall effect in graphene and the surface Dirac electronic state of topological insulators have attracted a great deal of attention. Novel quasiparticles with energy degenerate points in the band structure often play a key role to search and demonstrate these exotic quantum phenomena and materials. For instance, graphene possesses two-dimensional Dirac fermions whose linear band dispersion degenerate at a single point in the momentum space due to chiral symmetry of the honeycomb lattice. In topological insulators, the appearance of spin-polarized two-dimensional Dirac fermions, which dominate surface conduction, is ensured by nontrivial band topology and time-reversal symmetry. Motivated by the discoveries of graphene and topological insulators, the exploration of exotic nodal fermions beyond Dirac fermions is a hot topic in condensed matter physics. An intriguing research target is Weyl fermions, a spin-polarized analogue of three-dimensional Dirac fermions. Weyl fermions are quite robust against perturbations and predicted to trigger many exotic properties such as chiral anomalies, magnetoelectric effects, and surface Fermi arcs. The realization of Weyl fermions requires the breaking of either space inversion symmetry or time-reversal symmetry. Owing to intensive research, Weyl fermions have been indeed discovered in some materials, e.g., Mn_3Si and TaAs.

Here we focus on a new Weyl-fermion material candidate, $PtBi_2$ which lacks the space-inversion symmetry. According to first-principles band structure calculations, Weyl fermions are located in the vicinity of Fermi level (E_F). Recent angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) measurements actually reported a signature of Weyl fermions formation, though their direct observation remains a challenge. If $PtBi_2$ indeed hosts Weyl fermions, Fermi arc surface states should appear, and their shape are inequivalent between two opposite surfaces due to the space-inversion symmetry breaking. To clarify the Weyl material nature and the details of Fermi-arc-related physics, we determined bulk and surface electronic states over a wide momentum space using momentum-microscopy technique at BL6U in UVSOR. For this sake, we prepared a set of crystals with two different surface terminations.

Figure 1 shows a representative equi-energy contour plot in two-dimensional momentum space, k_x and k_y. We observed the electronic structure whose periodicity matches well with the symmetry of the Brillouin zone. For example, a triangular intensity distribution is seen at each K point. We also see a six-fold symmetric characteristic intensity pattern at the Γ point. We found that, in the crystal with different termination, the intensity distribution shows remarkable differences compared to that in Fig. 1. This result indicates the presence of termination-dependent surface electronic states which might be related to Weyl-fermion physics. To investigate this point in more detail, we have performed photon-energy dependent measurements and compared the results with first-principles band structure calculations.

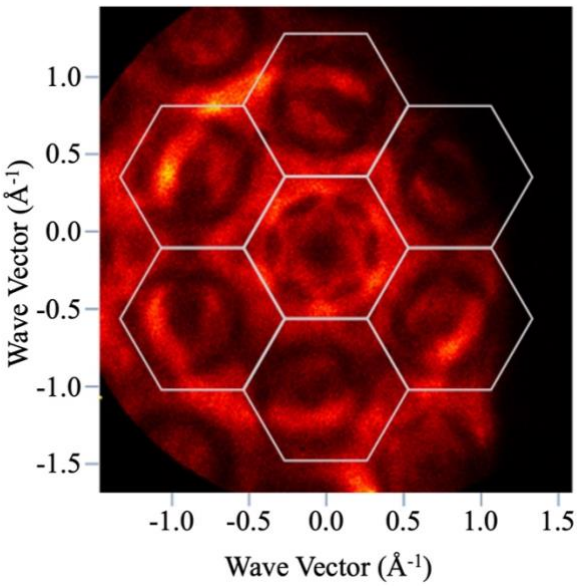


Fig. 1. ARPES intensity at a constant energy plotted as a function of two-dimensional wave vector. The measurement has been carried out using linearly polarized photons of $h\nu = 72$ eV.

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2024-05-03
報告者	**氏名 (Name):** 宮田　潔志 **所属機関 (Institute)** 九州大学 / **部局 (Department)** 大学院理学研究院 / **職 (Job Title)** 准教授 **電話 (Phone no.)** 0928024173 / **FAX (FAX no.)** / **E-Mail** spectrochemistry@gmail.com

１．種別	協力研究
２．課題番号	23IMS1252
３．研究課題名	時間分解インパルシブ誘導ラマン分光を用いた機能性発光有機りん光分子・卑金属錯体の励起状態構造ダイナミクスの観測
４．所内対応者(敬称略)	倉持 光
５．共同利用研究者(敬称略)	・宮田 潔志： 九州大学大学院理学研究院化学部門 准教授 ・江原 巧： 九州大学大学院理学研究院化学部門 大学院生 ・木村 周慈： 九州大学大学院理学研究院化学部門 大学院生
６．実施した研究の概要(200字程度以内)	九州大学・恩田研究室で申請者（宮田）が中心となって研究を進めており予備的なデータが得られている光機能性材料について、極短パルス光を用いた時間分解インパルシブラマン分光（TR-ISRS）により電子励起状態の振動スペクトルの計測を行った。室温でりん光を生じるチエニルジケトン誘導体、構造ダイナミクスが発光特性を制御している金属錯体の測定に成功し、内部転換・項間交差に伴う振動スペクトルの変化を明瞭に計測することができた。
７．得られた研究成果(1200字程度以内)	2022年度の協力研究で行ったポンプ-プローブ測定の中で、特に興味深い結果が得られた室温でりん光を生じるチエニルジケトン誘導体、および構造ダイナミクスが発光特性を制御している二核三重螺旋Al(III)錯体について、明瞭なTR-ISRS信号の計測に成功した。特に二核三重螺旋Al錯体については、以下に述べるような励起状態におけるダイナミックな構造変化が特異的な発光特性に影響しているという描像が明らかになった。 二核三重螺旋Al錯体（Al-H、AL-Me）のポンプ-プローブ測定では、励起状態吸収（ESA）の560 nmから550 nmへのスペクトルシフトと、600 nm付近での誘導放出（SE）信号の増大が約100 fsの時定数で観測され、これらはフランク・コンドン状態からS1状態の最安定構造への構造変化に起因することが示唆された。特にAl-Hのポンプ-プローブ信号には、S1状態で生成された核波束の運動から生じる大振幅の振動信号が観測された。この振動成分のフーリエ変換により得られた振動スペクトルの量子化学計算との比較から、観測された核波束の運動がリガンドが平坦化する運動を含んでいることが示唆された。これは、ヤーン・テラー効果が励起状態での分子構造の対称性の破れを引き起こしたと考えることで説明できる。 励起直後の構造変化を追跡するために行ったTR-ISRSでは、遅延時間0 psで得られたスペクトルにおいて1070、1190、1324、および1410 cm-1で過渡ラマンバンドが観測された。これらのバンドは、ピーク波数を変化させないまま、約100 fsの時定数で強度が増大した。これらの結果は、二核三重螺旋Al錯体における励起状態での構造変化が、Cu(I)錯体のような二次ヤーン・テラー誘起の構造変化ではなく、二重縮退したS1励起状態とE対称性の振動モードとの振電結合による一次ヤーン・テラー効果によって引き起こされたことを示している。これは、時間依存密度汎関数計算の結果とも一致しており、励起状態で最適化された構造ではD3からC2へと対称性が低下していることが示された。 以上の結果により、二核三重螺旋型のAl(III)錯体の特異的な光物性である0.5-0.6 eVの大きなストークスシフト、リガンドのメチン部位のメチル基修飾によって極端に発光色が高エネルギー化するという特長を、励起状態での二面角平坦化にともなう対称性変化から理解することができた。以上の描像を現在学術論文としてまとめている最中であり、査読付き国際学会のUltrafast Phenomena 2024に口頭発表としても採択されている。 最近、二核三重螺旋型のAl(III)錯体はヘテロレプティック錯体とすることでリガンド間電荷移動励起状態を制御することができ、新しい光物性の操作が可能であることも見出している。今回の計測でひと段落したが、2022年・2023年の協力研究で良い連携関係が築けたため、今後検討を続けて必要に応じて学理構築に向けた有用なコントロール実験を行えたら幸いと考えている。
８．その他	

注意事項	● 共同利用研究者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2023-09-20
報告者	**氏名 (Name):** 宗像　利明 **所属機関 (Institute)** 公益信託分子科学奨励森野基金 **部局 (Department)** 運営委員会 **職 (Job Title)** 委員長 **電話 (Phone no.)** 090-3900-1521 **FAX (FAX no.)** **E-Mail** munakata@chem.sci.osaka-u.ac.jp

１．種別	研究会
２．課題番号	23IMS2301
３．研究課題名	森野ディスカッション
４．所内対応者(敬称略)	倉持　光
５．参加者・講演者	別紙にてアップロードをお願いします。
６．開催日時	2023年8月31日
７．プログラム・タイムスケジュール等	別紙にてアップロードをお願いします。
８．活動の概要	岡崎コンファレンスセンター小会議室での対面とオンラインのハイブリッドで開催した。最初に、研究助成金を３名に贈呈し、受給者３名がそれぞれ、研究概要を報告した。後半には、「宇宙に挑む分子科学」をテーマに二人の招待講演者による講演を行った。最後に広い視点からの「総合討論」では活発な質疑応答を行った。ポスター・写真は、https://www.morino-foudation.org/に掲載した。
９．その他	
注意事項	● 参加者・講演者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

プログラム

（１）2023 年度研究助成金贈呈式 14 時 10 分～15 時 10 分

贈呈式

受託機関：三井住友信託銀行による開会

基金運営委員会委員長の挨拶

受賞講演

石井邦彦（理研）　「二次元蛍光寿命相関分光法の開発」

江波進一（筑波大）「新規質量分析法を用いた大気マルチフェーズ反応機構の解明」

今田 裕（理研）　「走査プローブ顕微鏡を用いた単一分子フォトニクス」

（２）森野ディスカッション　15 時 30 分～17 時 45 分

講演Ａ　北海道大学　低温研究所 渡部直樹　教授

「低温氷表面での物理化学過程 ～宇宙における分子進化の鍵～」

講演Ｂ　東京大学　理学研究科　橘　省吾　教授

「「はやぶさ２」探査機が持ち帰った小惑星リュウグウの石」

総合討論

二次元蛍光寿命相関分光法の開発

Development of two-dimensional fluorescence lifetime correlation spectroscopy

石井 邦彦／Kunihiko Ishii
理化学研究所 田原分子分光研究室／Molecular Spectroscopy Laboratory, RIKEN

タンパク質・核酸などの生体高分子の多くは、水中で熱揺らぎを利用して特定の三次元構造を形成し、また構造を変化させながら固有の生体機能を発現する。これらのダイナミックな過程を分子レベルでつぶさに観察することは、生体分子の分子科学にとって基本的に重要な課題であり、そこから得られる構造形成や機能発現の機構についての知見は、生命活動の理解や生体分子を応用した新技術開発の基盤となるものである。

熱揺らぎに駆動される生体分子の運動を観察するための有力な手段が、一分子蛍光計測法である。一分子レベルの超高感度蛍光計測は、顕微鏡関連技術の確立と蛍光標識法・新規蛍光プローブ等の要素技術の発展に伴い、近年幅広く活用されている。特に生体高分子の構造変化を追跡する目的では、ターゲットに標識した二つの蛍光色素間の励起エネルギー移動を利用する一分子 FRET 法が一般的に用いられる。しかし、個々の分子の蛍光信号が微弱であるため、ミリ秒以下の時間分解能を達成することが困難であった。

我々は FRET を用いた一分子レベルの構造変化計測の時間分解能を向上させるため、二次元蛍光寿命相関分光法（2D-FLCS）を開発した[1-3]。2D-FLCS では通常の一分子 FRET 法にパルス励起を用いた蛍光寿命測定を組み合わせ、蛍光寿命の時間揺らぎの情報を含む光子データを取得する。このデータには異なる構造に対応する複数の蛍光寿命成分の相互変換の情報が含まれる。そこでこれらを分離して解析するために、蛍光寿命の値を軸に取った二次元相関マップを構築する。これにより、マイクロ秒オーダーの時間分解能で生体高分子の複数の構造の間の遷移速度を定量することが可能になった。講演では 2D-FLCS を着想した経緯とその実現の過程について述べるとともに、いくつかの応用例[4,5]を紹介する。

【参考文献】

[1] K. Ishii and T. Tahara, *Chem. Phys. Lett.,* **519-520**, 130-133, (2012).
[2] K. Ishii and T. Tahara, *J. Phys. Chem. B*, **117**, 11414-11422, (2013).
[3] K. Ishii and T. Tahara, *J. Phys. Chem. B*, **117**, 11423-11432, (2013).
[4] T. Otosu, K. Ishii, T. Tahara, *Nat. Commun.*, **6**, 7685, (2015).
[5] B. Sarkar, K. Ishii, T. Tahara, *J. Am. Chem. Soc.*, **143**, 7968-7978, (2021).

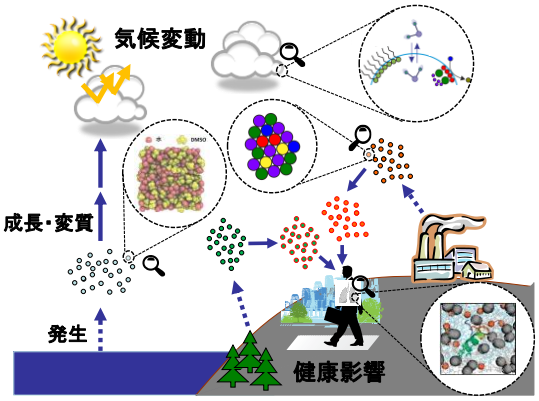
研究概要

江波進一（筑波大学数理物質系化学域）
Shinichi Enami (Department of Chemistry, Graduate School of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba)

「新規質量分析法を用いた大気マルチフェーズ反応機構の解明」
Elucidation of atmospheric multiphase reactions using novel mass spectrometry

液体の水は、海洋や雲を構成し、地球の気候に大きな影響を与えている。さらに、水はヒトの主要な構成分子であり、植物が行う光合成の材料分子でもある。しかし、水が存在するところ必ず水の界面（水と水が接する物質の境界）が存在するという事実は普段あまり意識されない。空気/水界面では、わずか数 Å（10^{-10} m）の範囲で、水分子の密度が 1 g/cm^3 から急激に 0 g/cm^3 になる。その結果、空気/水界面に存在する H_3O^+, OH^-の密度分布に不均一な偏りが生じ、界面特有の特性が現れる。また、自然界において純粋な水(100 % H_2O)は存在せず、水は必ず何らかの他成分を含んでいる。このような他成分を含む水では、界面だけではなく、液体の内部においても分子レベルの不均一性が生じ、化学反応と物理過程に影響を与えている。

本講演では、新規質量分析法を用いて、界面と液中の Å レベルの不均一性が大気化学反応に与える影響とそのメカニズムを明らかにした研究を紹介する。さらに、Å レベルの不均一性を明らかにすることで開拓される新しい学問分野の可能性について紹介する。



参考文献

- Ishizuka et al., Interfacial water mediates oligomerization pathways of monoterpene carbocations, *J. Phys. Chem. Lett.*, **2020**, *11*, 67-74.
- Qiu et al., Water dramatically accelerates the decomposition of α-hydroxyalkyl-hydroperoxides in aerosol particles, *J. Phys. Chem. Lett.*, **2019**, *10*, 5748-5755.
- Enami et al., Chemical signatures of surface microheterogeneity on liquid mixtures, *J. Chem. Phys.*, **2019**, *150*, 024702 (8 pages).

走査プローブ顕微鏡を用いた単一分子フォトニクス

Single-molecule Photonics with Scanning Probe Microscopy

今田　裕

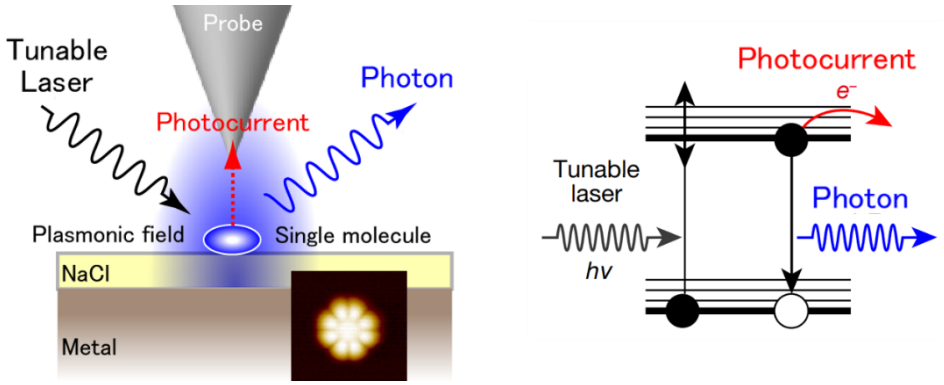
理化学研究所　Kim 表面界面科学研究室

Imada, Hiroshi

Surface and Interface Science Laboratory, RIKEN

光を使った分光法は、分子の同定、発光・吸収エネルギーの決定、有機材料で起こる動的現象の解明などに用いられ、言うまでもなく分子科学において重要な手法である。しかし、空間を伝播する光だけでは空間分解能に限界があるため、分子の物性を支配する分子軌道を直接観察することはできない。一方で、電子顕微鏡や走査型プローブ顕微鏡などの原子分解能の顕微鏡技術は、局所的な分子構造や分子を取り巻く環境を可視化することができるが、それらを用いた分光学的な計測技術は未発達で非常に限定的である。

近年、走査型プローブ顕微鏡（SPM）とナノオプティクスを組み合わせた 1 分子ナノ分光技術（図）が急速に発展している。SPM による可視化で分子の状態を極めてよく規定した上で、SPM の探針直下の近接場を通じた光と分子の相互作用に基づくナノ分光計測（ラマン、フォトルミネッセンス、光電流）を行うことで、注目するたった 1 つの分子の電子・振動状態や光学的・電子的な動的現象を直接調べることができるようになった[1-3]。本講演では、1 分子ナノ分光法の最近の進展（と我々の目線からの裏話）について紹介し、今後を展望したい。



STM における近接場光分光の実験セットアップの概念図。レーザー駆動の近接場によって単一分子を光励起し、光子（発光、ラマン）または電流を測定する。

References

[1] R. B. Jaculbia, H. Imada et al., Nat. Nanotechnol. 15 (2020) 105-110.

[2] H. Imada et al., Science 373 (2021) 95-98.

[3] M. Imai-Imada, H. Imada et al., Nature 603 (2022) 829-834.

低温氷表面での物理化学過程　～宇宙における分子進化の鍵～

Physicochemical processes on ice at low temperatures: a key for chemical evolution in space

北海道大学低温科学研究所
渡部直樹
Naoki Watanabe,
Institute of Low Temperature Science, Hokkaido University

宇宙空間で原子や簡単な分子から複雑な分子が生成する一連のプロセスを化学進化と呼ぶ。化学進化は星・惑星（天体）の進化と密接に関連しており，一般には星形成以前の極低温(~10 K)領域である星間分子雲を化学進化のスタートラインと考える。化学反応に適さない極低温環境にもかかわらず，分子雲には多種多様なガス状星間分子が確認されており，そこでの活発な化学進化の証左となっている。分子雲にはまた， H_2O を主成分とするアモルファス状の氷に覆われた鉱物微粒子（氷星間塵：0.1 μ m 程度）が大量に浮遊しており，宇宙における化学進化に重要な役割を果たしている。存在度の高い H_2, H_2O, H_2CO, CH_3OH 分子をはじめ，多くの星間分子の生成には氷星間塵の存在が不可欠である。実際，氷星間塵に含まれるほとんどの分子種は星間塵表面反応によって形成されたと考えられている。こうした背景のもと，我々はそれまで手つかずであった，光などの外部エネルギーを必要としない極低温氷表面における様々な物理化学過程を実験的に明らかにしてきた。

化学進化に密接に関連する氷表面の物理化学過程は，およそ 20 K の温度を境に大雑把には２つに分類することが出来る。20 K 以下，つまり星がまだ無い分子雲の極低温環境では，宇宙存在度の最も高い水素（H, H_2）が氷表面に吸着・拡散することが可能であり，水素が絡む物理化学過程が極めて重要になる。また，分子雲内で星形成が始まった環境，およそ 20 ～100 K では水素が氷表面に吸着できないため，より重いラジカル種の振る舞いが化学進化を左右する。我々はこれまで，水素が絡む重要な氷表面過程である H 原子の氷表面拡散，トンネル反応による分子生成，H_2 分子の核スピン転換などに取り組み成果を上げてきた。こうした氷表面過程は弱い物理吸着系もしくは水素結合系で生じており，研究例の多い気相や化学吸着系の物理化学現象とは異なる固有の面白さがある。また，最近になって光刺激脱離法と共鳴多光子イオン化法を併用して，氷表面に吸着するラジカル（特に OH）を観測する手法を開発し，氷表面におけるラジカルの拡散や，OH ラジカルと電子が介在する氷内部におけるプロトンホール伝達などに関する実験を行った。現在はこの手法を利用し，氷表面の様々なラジカルの振る舞いに関する研究を始めている。本講演では，我々の研究の天文学的背景，低温氷表面における水素や OH ラジカルの物理化学過程に関する実験を紹介する。

これまでの我々の研究や天文学的背景を持つ氷表面過程に関する研究は，以下の論文にまとめられているので，興味のある方はご参照頂きたい。

・M. Tsuge, N. Watanabe, *Proc. Jpn. Acad., Ser.* B**99**, 103 (2023)
・M. Tsuge, N. Watanabe, *Acc. Chem. Res.* **54**, 471 (2021)
・N. Watanabe, M. Tsuge, *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 051015 (2020)
・T. Hama, N. Watanabe, *Chem. Rev.* **113**, 8783 (2013)
・N. Watanabe, A. Kouchi, *Prog. Surf. Sci.*, **83**, 439 (2008)

「はやぶさ 2」探査機が持ち帰った小惑星リュウグウの石

Hayabusa2-returned samples from C-type near-Earth asteroid (162173) Ryugu

橘　省吾
東京大学 大学院理学系研究科 宇宙惑星科学機構

Shogo Tachibana
UTokyo Organization for Planetary and Space Science, University of Tokyo

探査機「はやぶさ 2」は初期太陽系の進化を記憶し，地球に海や生命の材料をもたらした可能性のある天体である C 型小惑星のサンプルを地上に持ち帰ることを目的とし，近地球 C 型小惑星 (162173) リュウグウを探査しました．探査機は，リュウグウ表面 2 地点で試料採取をおこない，2020 年に地球にサンプルが持ち帰られました．総量約 5 グラムのサンプルの一部は，「はやぶさ 2」プロジェクトによって，詳細な分析がおこなわれました．その結果，リュウグウのサンプルが，太陽系の化学的基準となりうるものであること，リュウグウは形成後に液体の水と鉱物が化学反応を起こした（水質変成）こと，リュウグウの母天体が太陽系の外側領域で誕生し，その後，太陽系内側へと移動してきた可能性があること，太陽系誕生以前の有機物から，母天体で形成された有機物まで存在すること，有機物の中にはアミノ酸や核酸塩基のウラシルなど生命前駆分子も含まれていることなどが，さまざまなことが明らかになりました．

講演では，小惑星リュウグウをめざした科学的意義，リュウグウ近傍での科学探査でわかったこと，持ち帰られたサンプルの分析からわかってきたこと，今後の展望などお話ししたいと思います．

No.	氏名	所属	職名	
1	倉持　光	分子科学研究所	准教授	現地参加
2	宗像　利明	大阪大学	教授	現地参加
3	石井 邦彦	理化学研究所 開拓研究本部 田原分子分光研究室	その他	現地参加
4	安村洋輝	京都大学理学研究科化学専攻	学生	オンライン
5	谷口正輝	大阪大学　産業科学研究所	教授	オンライン
6	江波進一	筑波大学数理物質系化学域	教授	現地参加
7	井上 圭一	東京大学物性研究所	准教授	オンライン
8	荒木光典	Max-Planck-Institut für extraterrestrische Physik	その他	オンライン
9	奥村光隆	大阪大学大学院理学研究科	教授	
10	******	******	******	オンライン
11	渡辺量朗	東京理科大学理学部第一部化学科	准教授	オンライン
12	赤井恵	大阪大学大学院理学研究科	教授	
13	窪田航介	京都大学理学部	学生	オンライン
14	山門英雄	和歌山大学システム工学部	教授	オンライン
15	柘植雅士	北海道大学	助教	オンライン
16	木村周慈	九州大学大学院	学生	オンライン
17	水瀬賢太	北里大学・東京工業大学	その他	オンライン
18	******	******	******	
19	山田耕一	電気通信大学	その他	現地参加
20	黒田　直也	京都大学大学院工学研究科	学生	
21	石川　芳光	東ソー株式会社　ライフサイエンス研究所	その他	オンライン
22	佐藤玲央	東京大学大学院	学生	オンライン
23	井上賢一	東北大院理	助教	オンライン
24	彦坂泰正	富山大学	教授	
25	岩田末廣	なし	その他	オンライン
26	吉田弘幸	千葉大学	教授	オンライン
27	増田　茂	東京大学名誉教授	その他	
28	間瀬一彦	高エネルギー加速器研究機構	教授	
29	武田佳宏	トヨタ自動車（株）	その他	オンライン
30	関根理香	静岡大学理学部化学科	教授	オンライン
31	福井 賢一	阪大院基礎工	教授	オンライン
32	河野　七瀬	近畿大学	その他	オンライン
33	佐藤啓文	京都大学	教授	オンライン
34	宮島 謙	東京大学大学院総合文化研究科・教養学部附属教養教育高度化機構	准教授	オンライン
35	向井孝三	東京大学物性研究所	その他	オンライン

36	乙須拓洋	埼玉大学	准教授	オンライン
37	神田　一浩	兵庫県立大学	教授	オンライン
38	緒方　啓典	法政大学生命科学部	教授	
39	大峯巖	無し	その他	オンライン
40	兒玉　健	神奈川工科大学　基礎・教養教育センター	教授	オンライン
41	北川禎三	兵庫県立大学客員研究員	その他	オンライン
42	大門　寛	分子科学研究所	教授	現地参加
43	岡田　邦宏	上智大学理工学部	教授	オンライン
44	渡部直樹	北海道大学低温科学研究所	教授	現地参加
45	菅原洋子	北里大学	その他	オンライン
46	山田剛司	阪大院理	助教	オンライン
47	渋田　昌弘	大阪公立大学	准教授	オンライン
48	長谷川健	東京大学総合文化研究科	学生	オンライン
49	福谷克之	東京大学	教授	
50	小山田伸明	分子科学研究所	ポスドク	現地参加
51	岩村　秀	分子研名誉教授	その他	オンライン
52	多田 宰	東京都立大学大学院理学研究科（前）	その他	オンライン
53	持田智行	神戸大学	教授	オンライン
54	中川　邦明	常葉大学	その他	オンライン
55	鈴木俊法	京大	教授	オンライン
56	今田裕	理化学研究所	その他	現地参加
57	櫻井敦教	分子科学研究所	助教	現地参加
58	川嶋良章	上智大学大学院・理工学部	その他	オンライン
59	大野舞子	北海道大学	学生	
60	大野真也	横浜国立大学大学院工学研究院	准教授	オンライン
61	城所俊一	長岡技術科学大学	教授	
62	田仲雄一	京都大学工学研究科	学生	オンライン
63	******	******	******	オンライン
64	大久保 雅隆	産業技術総合研究所	その他	オンライン
65	藤井 正明	東京工業大学	教授	オンライン
66	斉藤真司	分子科学研究所	教授	現地参加
67	米津朋尚	元・東京大学大学院工学系研究科	ポスドク	オンライン
68	山崎優一	東京工業大学	准教授	オンライン
69	五月女 光	大阪大学大学院基礎工学研究科物質創成専攻	助教	オンライン
70	岩村宗高	富山大学	その他	
71	大竹敦	慶應義塾大学理工学部化学科	その他	オンライン
72	佐藤遼一	慶應義塾大学理工学部化学科	学生	

73	******	******	******	オンライン
74	藤井朱鳥	東北大　院理	教授	オンライン
75	和田諒	北大・総合化学院	学生	
76	小堀康博	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	教授	オンライン
77	******	******	******	オンライン
78	鳥居 肇	静岡大学工学部化学バイオ工学科	教授	オンライン
79	伏谷瑞穂	名古屋大学	准教授	オンライン
80	稲垣 歩	三井住友信託銀行	その他	現地参加
81	吉原經太郎	分子研	その他	オンライン
82	宮﨑　淳	東京電機大学工学部自然科学系列	准教授	オンライン
83	中澤康浩	大阪大学大学院理学研究科	教授	オンライン
84	渡辺芳人	分子科学研究所	その他	現地参加
85	中本　圭一	分子科学研究所　機器センター	その他	オンライン
86	南　多娟	分子科学研究所	ポスドク	オンライン
87	川合眞紀	自然科学研究機構	その他	オンライン
88	中村理枝	分子科学研究所	その他	オンライン
89	高見知秀	工学院大学	教授	オンライン
90	米田勇祐	分子科学研究所	助教	現地参加
91	******	******	******	オンライン
92	大島康裕	東京工業大学理学院	教授	現地参加
93	山崎泰規	理研	その他	
94	布施大輝	東北大学大学院理学研究科	学生	
95	久世	上智大理工	教授	オンライン
96	渋谷一彦	東京工業大学	その他	オンライン
97	佐々木　徹	東京工業大学大島・山﨑研究室	学生	
98	神取秀樹	名工大	教授	現地参加
99	上田貴洋	大阪大学大学院理学研究科化学専攻	教授	オンライン
100	岡野泰彬	分子科学研究所	その他	オンライン
101	星野翔麻	東京理科大学	その他	オンライン
102	山本智	総合研究大学院大学	その他	オンライン
103	橘省吾	東大宇宙惑星科学機構	教授	オンライン
104	佐藤 宏祐	分子科学研究所 杉本グループ	ポスドク	オンライン
105	田中桂一	九州大学理学部	その他	オンライン
106	山崎 勝義	広島大学大学院先進理工学系科学研究科化学プログラム	教授	オンライン
107	******	******	******	オンライン
108	相賀則宏	兵庫県立大院理	助教	オンライン

109	******	******	******	オンライン
110	******	******	******	オンライン
111	高橋翔太	分子科学研究所	ポスドク	オンライン
112	斎藤晃	分子科学研究所	ポスドク	オンライン
113	安池智一	放送大学	教授	オンライン
114	太田みのり	研究力強化戦略室	その他	オンライン
115	杉本敏樹	電子構造研究部門	准教授	現地参加
116	******	******	******	オンライン
117	繁政英治	分子科学研究所	その他	オンライン
118	髙橋　聡	東北大学多元物質科学研究所	教授	オンライン
119	遠藤泰樹	国立陽明交通大学	教授	オンライン
120	水野　操	京都大学大学院理学研究科化学専攻	准教授	オンライン
121	******	******	******	オンライン
122	中村永研	分子研UVSOR	その他	オンライン
123	******	******	******	オンライン
124	Takashi Kumagai	IMS	准教授	現地参加
125	******	******	******	現地参加
126	******	******	******	オンライン
127	******	******	******	オンライン
128	******	******	******	オンライン

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2023-10-12
報告者	**氏名 (Name):** 北田　敦 **所属機関 (Institute)** 東京大学 **部局 (Department)** 大学院工学系研究科化学システム工学専攻 **職 (Job Title)** 准教授 **電話 (Phone no.)** 03-5841-0881 **FAX (FAX no.)** **E-Mail** kitada@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp

１．種別	研究会
２．課題番号	23IMS2302
３．研究課題名	イオン液体インフォマティクスの発展にむけて
４．所内対応者(敬称略)	解良　聡
５．参加者・講演者	別紙にてアップロードをお願いします。
６．開催日時	2023年9月13日から2023年9月14日
７．プログラム・タイムスケジュール等	別紙にてアップロードをお願いします。
８．活動の概要	2023年9月13–14日に標記の分子研研究会を開催した。現地（岡崎コンファレンスセンター）とオンラインのハイブリッドにて開催した。参加者内訳は現地18名、オンライン19名の計37名であった。各分野の気鋭の研究者がイオン液体やポリマー、無機材料、液晶、濃厚電解液等の多種多様な材料の表現手法について、現状と展望について解説を行った. 要素技術について現状の知見を持ち寄り, 長所短所の相補によってイオン液体の機能物性予測とその実証に関する有効的なアプローチを議論した。２日間で5件の口頭講演と4件のポスター発表を実施した。 　初日は機械学習を中心に3件の講演があった。東京工業大学の畠山歓先生は、構造–物性データベースをもとにした、分子構造から物性を予測するプログラムの構築や、生成系AIであるGPT-4を活用した研究を紹介した。京都大学の世古敦人先生は、機械学習がむしろ馴染み深いものである無機材料において、量子力学に基づく第一原理計算の多重実行にかかるコスト削減のための機械学習やアルゴリズム論的手法の導入事例を紹介した。統計数理研究所の吉田亮先生は、統計的機械学習による準結晶発見の実例とともに、限られたデータの壁を乗り越えるための統計的機械学習の方法論である転移学習や、ポリマー研究における構造物性データ収集のためのコミュニティの取り組みについてご紹介いただいた。二日目は理論計算に関する2件の講演があった。北里大の石井良樹先生は、凝縮系の相互作用を考慮した分子モデリングの手法として密度汎関数理論(DFT)計算と分子動力学(MD)計算を自己無撞着に繰り返すことで多体効果を取り込んだ有効的な原子電荷分布を決定する手法と、イオン液晶への展開事例を紹介した。岡山大学の篠田渉先生は、リチウムイオン電池用材料として注目されている濃厚電解液中のLiイオン伝導機構に関して、配位子交換挙動や、分極モデル開発などを紹介した。 　本研究会では対象材料をイオン液体に限定しなかった。これにより異分野での成果や抽出課題をイオン液体研究者が「学習」したことで、今後イノベーションの源流を見出す端緒となることを期待する。
９．その他	
注意事項	● 参加者・講演者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。

担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

【ハイブリッド開催】分子研研究会「イオン液体インフォマティクスの発展にむけて」（9/13-14）

演　題	**イオン液体インフォマティクスの発展にむけて**
日　時	2023 年 09 月 13 日(水) 13:30 より 2023 年 09 月 14 日(木) 12:05 まで
場　所	岡崎コンファレンスセンター小会議室 + Online (Zoom) （※初日のポスター発表・意見交換会は中会議室を予定）
主　催	分子科学研究所
概　要	**【9 月13日（水）】** **【岡崎コンファレンスセンター　小会議室】** ◆座長：北田　敦（東京大） **13:30−13:45** 『はじめに』 北田　敦（東京大） **13:45−14:45** 『イオン液体・柔粘性結晶の実測データベースの構築と機械学習を用いた物性予測』 　畠山　歓（東工大） **14:45−15:00**　休憩 ◆座長：阿部　洋（防衛大） **15:00−16:00** 『第一原理計算と機械学習を用いた無機材料における原子間相互作用のモデリングとその応用』 　世古　敦人（京都大） **16:00−17:00** 『データ駆動型材料研究の諸問題：統計的機械学習による予測・発見・理解』 　吉田　亮（統計数理研） **17:00−17:30**　全体討議 **18:00−20:00**　現地ポスター＆意見交換会【岡崎コンファレンスセンター　中会議室】 ――――――――――――――

	【9 月14日(木)】 **【岡崎コンファレンスセンター　小会議室】** ◆座長:本林　健太(名工大) 09:00-10:00 『凝縮系の電子状態計算を用いたイオン液体の分子モデリングと大規模系への応用展開』 　石井　良樹(北里大) 10:00-10:15　休憩 ◆座長:竹中　規雄(東大) 10:15-11:15 『濃厚電解液中の Li イオン伝導機構』 　篠田　渉(岡山大) 11:15-12:00　全体討議 12:00-12:05　閉会の挨拶　解良　聡(分子研)

分子研研究会「イオン液体インフォマティクスの発展にむけて」

2023年9月13日（水）-9月14日（木）　岡崎コンファレンスセンター ＋ Online (Zoom)

	氏名	機関名/大学名	講演者	13日ポスター発表	現地参加
1	解良　聡	分子科学研究所			現地
2	竹中　規雄	東京大学		発表する	現地
3	北田　敦	東京大学			現地
4	西村　真一	東京大学			
5	本林　健太	名古屋工業大学			
6	持田　智行	神戸大学			
7	中園　陽介	神戸大学			
8	渡邉　正義	国立大学法人　横浜国立大学			
9	寺尾　貴道	岐阜大学			
10	島田　壮人	神戸大学			
11	金崎　悠	産業技術総合研究所			
12	池亀　綾実	住友電気工業株式会社			
13	阿部　洋	防衛大学校			現地
14	山本　貴之	京都大学			現地
15	丸山　修生	防衛大学校		発表する	現地
16	平野　嵩明	防衛大学校		発表する	現地
17	都築　誠二	横浜国立大学			現地
18	重信　圭佑	岡山大学			現地
19	世古　敦人	京都大学	講演者		現地
20	篠田　渉	岡山大学	講演者		現地
21	石井　良樹	北里大学	講演者		現地
22	西　直哉	京都大学			
23	畠山 歓	東京工業大学	講演者		現地
24	吉田　亮	統計数理研究所	講演者		現地
25	王昊	金沢大学			
26	山口　和真	東京工業大学			現地
27	岸村　浩明	防衛大学校			現地
28	湊　丈俊	自然科学研究機構			
29	トマス　モーガン・レスリー	上智大学			
30	大久保　太一	防衛大学校		発表する	現地
31	小篠　遥	神戸大学			
32	寺尾　貴道	岐阜大学			
33	鎌田　健太郎	京都大学			
34	吉川浩史	関西学院大学			
35					
36	Li Jinshi	東京大学			
37	若松　勝洋	関西学院大学			

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2023-06-22
報告者	**氏名 (Name):** 所　千晴 **所属機関 (Institute)** 早稲田大学 / **部局 (Department)** 理工学術院 / **職 (Job Title)** 教授 **電話 (Phone no.)** 09040645683 / **FAX (FAX no.)** 0352863419 / **E-Mail** tokoro@waseda.jp

1．種別	研究会
2．課題番号	23IMS2303
3．研究課題名	化学・工学・環境学を例とした持続可能な社会のための産学官民連携のあり方
4．所内対応者(敬称略)	岡本　裕巳
5．参加者・講演者	アップロード済：別紙にてアップロードをお願いします。
6．開催日時	2023年6月14日—15日
7．プログラム・タイムスケジュール等	アップロード済：別紙にてアップロードをお願いします。
8．活動の概要	経済・社会・環境の3側面を均衡させつつ持続可能な社会を目指すSDGsの概念が広く浸透するに伴い、人類のウェルビーイング（Well-being）を念頭においたイノベーションへの期待が高まっている。しかし、これまでの歴史では、例えば、化学産業の技術革新のように、経済性や効率の最大化が主眼とされ、それによって便利な社会を実現しつつも、一方で環境問題を引き起こすなど、光と影の部分が混在し、社会の要請に応えられない場合も出てきた。そこで日本学術会議の2つの分科会（触媒化学・化学工学分科会と環境科学分科会）が中心となって、社会ニーズが効率の最大化から経済・社会・環境の3側面の調和へと急激に変化している現状を踏まえ、社会から求められるイノベーションやそれを支える学術の在り方が変容していることを改めて整理し、それを実現するための化学・化学工学・環境学における産学官民の連携のあり方について現状と課題を議論した。 第1セッションでは、「サイエンスコミュニケーションとSDGs」と題して、主に環境学の分野で実際に行われている産学官民連携の取り組みや、Future Designの取り組みについて3件の講演をいただいた．第2セッションでは、「化学・化学工学における産学官民連携」と出しして、主に化学・化学工学分野におけるアクションリサーチや市民協働型シンポジウムの取り組み例と、効率だけでなく充足性を重んじるSDGsに向けた考え方について3件の講演をいただいた．第3セッションでは、「持続可能な社会のための化学・化学工学・環境学の方向性」と題して、化学・化学工学と環境学における持続可能な社会に向けた協働の方向性について2件の講演をいただいた． いずれの講演においても、それぞれの分野で持続可能な社会形成に向けた産官学民の連携について様々な工夫がなされていることが確認されるとともに，そのような活動は大変重要で有意義であるが、その効果が表れるには時間がかかるために、近視眼的な効果を求めがちな価値観においては活動を継続しづらいといった共通した課題も再確認された。
9．その他	特になし．要旨集作成なし．
注意事項	● 参加者・講演者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

分子研　研究会
6 月 14 日 13：00～17：00
6 月 15 日 9：00～11：00

「化学・工学・環境学を例とした持続可能な社会のための産学官民連携のあり方」

6 月 14 日
13：00－13：05（5 分）　開会の挨拶
早稲田大学理工学術院/東京大学大学院工学系研究科　所千晴

１．サイエンスコミュニケーションと SDGs
13：05－13：35（30 分） 環境保全に関連する越境的アウトリーチの取り組み：アートと科学の融合「植物の一年時計」ほか
東京大学大学院農学生命科学研究科　安田仁奈
13：35－14：15（40 分） 知識から行動へ：自然を活用した課題解決の研究と実践
東京大学大学院農学生命科学研究科　吉田丈人
14：15－14：55（40 分） フューチャー・デザイン：私たちの存続可能性をめざして
京都先端科学大学国際学術研究院　西條辰義

14：55－15：20 休憩（25 分）

２．化学・化学工学における産学官民連携
15：20－15：50（30 分）　アクションリサーチと社会実装：種子島の事例
東北大学大学院工学研究科　北川尚美
15：50－16：20（30 分）　市民との対話と若者との協働：全員参加型シンポジウムとボトムアップ研究提案
早稲田大学理工学術院　野田優・慶應義塾大学理工学部　藤岡沙都子
16：20－17：00（40 分）　Efficiency も Sufficiency も
東京大学先端科学技術研究センター　平尾雅彦

6 月 15 日
３．持続可能な社会のための化学・化学工学・環境学の方向性
9：00－ 9 ：40（40 分）　持続可能な社会における化学・化学工学のあり方
東北大学材料科学高等研究所 阿尻雅文
9：40－10：20（40 分）　持続可能な社会への転換をめざした環境学の協働
東洋大学情報連携学部　花木啓祐

10：20－10：55（35 分）　総合討論「Well-being を念頭においた持続可能な社会のための化学・化学工学のあり方」
モデレータ　慶應義塾大学理工学部　藤岡沙都子

10：55－11：00（5 分）　閉会の挨拶
東北大学大学院工学研究科　北川尚美

日時： 2023年6月14日（水）～6月15日（木）

場所： 分子科学研究所(明大寺地区)研究棟201号室 + Online (Zoom)

※公開用の報告書を作成する場合、「氏名～職名/学年」までを黒塗りにしてください。　　↓参加日に〇を付けてくださ

開催日

No.	氏名	機関名/大学名	部局名/学部	職名/学年	/	/	参加方法
1	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
2	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
3	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
4	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
5	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
6	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
7	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
8	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
9	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
10	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
11	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
12	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
13	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
14	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
15	[redacted]				〇		オンライン参加
16	[redacted]				〇	〇	オンライン参加
17	[redacted]				〇	〇	現地参加
18	[redacted]				〇	〇	現地参加
19	[redacted]				〇	〇	現地参加

No.	氏名	機関名/大学名	部局名/学部	職名/学年	/	/	参加方法
20	[redacted]				○	○	現地参加
21					○	○	現地参加
22					○	○	現地参加
23					○	○	現地参加
24					○	○	現地参加
25					○	○	現地参加
26					○	○	現地参加
27					○		現地参加
28					○	○	オンライン参加
29						○	現地参加
30					○	○	オンライン参加
31					○	○	オンライン参加
32					○	○	オンライン参加
33					○	○	オンライン参加
34					○	○	オンライン参加
35					○	○	オンライン参加
36					○	○	オンライン参加
37					○	○	オンライン参加
38					○	○	オンライン参加
39					○	○	オンライン参加
40						○	オンライン参加
41					○	○	オンライン参加
42					○	○	オンライン参加
43					○	○	オンライン参加
44					○	○	オンライン参加

No.	氏名	機関名/大学名	部局名/学部	職名/学年	/	/	参加方法
45	[redacted]				○	○	オンライン参加
46					○	○	オンライン参加
47					○	○	現地参加
48					○	○	現地参加
49					○	○	現地参加

光電子分光は、放射光の特徴を活かした測定手法の一つとして広範囲に利用され、物性科学の重要な技術基盤となってきた。現在でも技術開発が日々続けられて、顕微イメージング、ソフトマテリアルの非破壊計測、準大気圧雰囲気下での化学反応解析技術、機械学習を活用したデータマイニング、レーザー光源の相互利用や軌道角運動量光などの新規光源開発などなど、次の展開の芽が続々と登場している状況にある。そこでこうしたシーズの開発に携わっている先端の研究者に集まっていただき、詳細を闊達に議論する場として 7 月 29 日～30 日の 2 日間にわたり、岡崎コンファレンスセンターにて”Seeds and Needs for Tomorrow's Synchrotron Radiation Photoelectron Spectroscopy Research”と題して研究会を開催した。国内外から 60 名ほどの参加者、15 名の招待講演を含む 17 件の口頭発表、19 件のポスター発表があり、充実した研究会となった。講演・議論ともほぼ英語で行われ、海外から講演いただいた先生がたから、こうした研究会を本国でもやりたい、という嬉しい反応を頂いた。連日猛暑が続き、「コロナ第 9 波到来」といった状況下、対面での研究会・UVSOR 見学会が無事実施できたこと、ほっとするとともに、UVSOR スタッフ・事務局・技術推進部内山さんを含め、まず皆様のご協力に感謝申し上げます。

特にこれまでにない新しい展開に挑戦している若手の研究者を中心に招待講演を依頼した。講演では、強相間物質・機能性表面・原子層・エキシトン・有機半導体デバイスキャリアダイナミクス・光特性のアト秒制御・界面・ドーパント・フロッケエンジニアリング・光電子理論・データ科学など、第一線で展開されている新進気鋭の方々からの研究成果が次々と紹介された。さらに「明日の研究展開」を研究会の表題に掲げたが、講演者・参加者がその意をくんで「研究成果発表会」にとどまることなく、それぞれの将来展開像や課題を大いに議論していただいた。

今回、国内全放射光施設から光電子分光研究に関わる方の参加を頂くことができ、先端の研究展開及びこれからの展望について情報共有を進めることができたことは大変重要な成果であると考えている。国内 30 余の光電子分光ビームラインが広範囲の光エネルギー帯を切れ目なくカバーし、それぞれ特徴のある測定環境が整備されている。技術共有・人材交流・データベース構築に向け連携は重要であることは論を俟たない。それだけになおさら各施設には、それぞれのミッションと戦略を明確にし、社会に欠かせない科学・技術の基本インフラであることを提示していく活動が求められている。講演では、国内で連携を進めている学術三施設(広島大学 HiSOR、高エネルギー加速器研究機構 Photon Factory、分子研 UVSOR)からそれぞれの将来ビジョンが紹介された。分子研の次期計画として解良施設長から、これまで積み上げてきた UVSOR の光・量子・マテリアル科学研究をマルチモーダルな先端光源設備群で発展させるとともに、これまで放射光分野では利用法の開拓が進んでいなかった生命科学の自律性機能解明の研究分野に様々な仕掛けで切り込んでいく詳細な提案がなされ、聴衆からも斬新な提案に対する高い評価を得た。総合討論セッションでは、こうした学術系施設の我が国における位置づけや国際的な重要性などが意見交換され、今後どのような科学・技術のトレンドや科学目標を目指すべきか、そのためにどのような施設群や支援

体制を充実させ展開させていくべきか、そして若手研究者をどのようにこの光科学分野に魅了して引き込んでいくか、大きな課題が議論された。ユーザーと施設との連携で、放射光コミュニティーが社会からサポートされるような世論が醸成されていければ、と考えている。

Program

29th, July (Sat)

13:00-13:20 reception

13:20-13:30 opening

座長：田中清尚

13:30-14:45 (Session 1) Deepening of condensed matter physics **物性物理の深化**

S Ideta **出田真一郎** [U. Hiroshima **広島大**] Invited

ARPES Studies and Its Developments at HiSOR: Towards HiSOR-II Projects

S Ichinokura **一ノ倉聖** [Tokyo Inst Tech **東工大**] Invited

Intercalation-driven Superconductivity in Graphene

M Horio **堀尾眞史** [U. Tokyo **東大物性研**] Invited

Space-resolved ARPES on strongly correlated materials

座長：前半 福谷圭介 後半 菅滋正

15:05-17:55 (Session 2) PEEM & Momentum Microscopes **光電子運動量顕微鏡の展開**

K Fukumoto **福本恵紀** [KEK **高エ研**] Invited

Operando observation of organic transistors using femtosecond PEEM

M K Man [OIST] Invited

Imaging in real and momentum space with ultrafast XUV light source

S Ito [Marburg Univ.] Invited

Momentum-Space Movies of Electrons at Surfaces and Interfaces

M Hoesch [DESY PETTRA-III] Invited

Active Sites of Te-hyperdoped Silicon

T H Chuang [TPS] Invited

Transition of soft X-ray photoelectron microscopy from TLS to TPS

F Matsui **松井文彦** [IMS-UVSOR **分子研**]

Multimodal Valence Stereography for Cutting-edge Spin Materials Science

18:00-21:00 Poster session **ポスター・意見交換会**

Program

30th, July (Sat)

座長：解良聡

9:00- 9:25 (Session 3) New Light **新しい光**

T Kaneyasu **金安達夫** [Saga LS **佐賀** LS] Invited

Spatio-temporal control of undulator radiation and its application

9:25- 10:15 (Session 4) Soft materials **ソフトマターへの展開**

Y Nakayama **中山泰生** [U Tokyo Science **東京理科大**] Invited

Inter-molecular electronic bands in crystalline organic semiconductors probed by synchrotron radiation photoelectron spectroscopy

Y Yamada **山田洋一** [U Tsukuba **筑波大**] Invited

Photoelectron angular distribution measurements of highly ordered organic films

座長：大門寛

10:35-11:50 (Session 5) Data science **光電子とデータ科学**

T Matsushita **松下智裕** [NAIST **奈良先端大**] Invited

Observation of atomic arrangements of dopants and interfaces using photoelectron holography and sparse modeling

K Niki **二木かおり** [U Chiba **千葉大**] Invited

Establishment of analytical method for Wave-number Resolved Photoelectron Spectroscopy

N Nagamura **永村直佳** [NIMS **物質・材料研究機構**] Invited

Development of data anaysis methods for multi-dimensional spectral imaging techniques

座長：松井文彦

12:05-12:55 (Session 6) Future Plans **将来展開**

K Ozawa **小澤健一** [KEK **高エ研**] Invited

Photoelectron Spectroscopy in the 21st Century and Beyond

S Kera **解良聡** [IMS-UVSOR **分子研**]

Prospects required for future light-source facilities: Research Center for Autonomous Functions by Tailor-made Photon Science

Summary session 15 min

14:00-16:00 UVSOR Tour

Posters

H. Daimon Development of Display-type Analyzer CoDELMA

E. Saleh Lattice Design of the UVSOR-IV Storage Ring

S. Suzuki Photoemission spectroscopy of insulators using enhanced environmental charge compensation

S. Tanaka Momentum-resolved resonant photoelectron spectroscopy of TiSe2: Interatomic interaction and negative q in Fano resonance

T. Nakamura Two-dimensional heavy fermion in a monoatomic-layer Kondo lattice YbCu2

R. Nakazawa Observation of electronic and exciton states of semiconductor and insulator materials via high-sensitivity photoemission spectroscopy using deep ultraviolet-visible photons

S. Suga SX-RIXS under external perturbations and extended spin resolved photoelectron momentum microscopy

K. Kiyosawa Interfacial electronic states of F6TCNNQ molecular crystalline films on TiSe2

S. Tsuda Current Status of Imaging-type Photoemission Microscopy with nano-ESCA in NIMS

K. Takagi Development of Measurement Techniques at the Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy in BL46XU

T. Ito Angle-resolved Photoemission Study of Solid Electrolytes Li3xLa2/3-xTiO3 Bulk Single Crystal

K. Hagiwara

1) Spin- and orbital-dependent band structure of unconventional topological semimetals
2) Development of Photoelectron Momentum Microscope with Soft X-ray & VUV Dual Beams at BL6U & BL7U

K. Fukutani

1) Elucidations of electronic structure and the many-body interactions of organic molecular materials
2) Explorations for spontaneously formed excitons in narrow-gap semiconductors and semimetals

Jaseela Palassery Ithikkal Observation of electronic band dispersion in crystalline PTCDI-C8 thin film

Peter Krüger On light-electron angular momentum transfer in Auger electron spectroscopy

S. Yamamoto Development of time-resolved ambient pressure X-ray photoelectron spectroscopy system at SPring-8 BL07LSU

K. Tanaka Current status and recent progress of ARPES beamlines BL5U&BL7U at UVSOR

日時： 2023年7月29日（土）～7月30日（日）

場所： 岡崎コンファレンスセンター

※公開用の報告書を作成する場合、「氏名～職名/学年」までを黒塗りにしてください。　　↓参加日に〇を付けてくださ

開催日

No.	氏名	機関名/大学名	部局名/学部	職名/学年	/	/	参加方法
1	[redacted]				〇	〇	現地参加
2					〇		現地参加
3					〇	〇	現地参加
4					〇	〇	現地参加
5					〇	〇	現地参加
6					〇	〇	オンライン参加
7					〇	〇	現地参加
8					〇	〇	現地参加
9					〇	〇	オンライン参加
10					〇	〇	現地参加
11						〇	オンライン参加
12					〇		現地参加
13					〇	〇	現地参加
14					〇		現地参加
15					〇	〇	現地参加
16					〇	〇	現地参加
17					〇	〇	現地参加
18					〇	〇	現地参加
19					〇	〇	現地参加

No.	氏名	機関名/大学名	部局名/学部	職名/学年	/	/	参加方法
20	[redacted]				○	○	現地参加
21					○	○	現地参加
22					○	○	現地参加
23					○	○	現地参加
24					○	○	現地参加
25					○	○	現地参加
26					○	○	現地参加
27					○	○	現地参加
28					○	○	現地参加
29					○	○	現地参加
30					○	○	現地参加
31					○	○	現地参加
32					○	○	現地参加
33					○	○	現地参加
34					○	○	現地参加
35					○	○	現地参加
36					○	○	現地参加
37					○	○	現地参加
38					○	○	現地参加
39					○	○	現地参加
40					○	○	現地参加
41					○	○	現地参加
42					○	○	現地参加
43					○	○	現地参加

No.	氏名	機関名/大学名	部局名/学部	職名/学年	/	/	参加方法
44	[redacted]				○	○	現地参加
45					○	○	現地参加
46					○	○	現地参加
47					○	○	現地参加
48					○	○	現地参加
49					○	○	現地参加
50					○	○	現地参加
51					○	○	現地参加
52					○	○	現地参加
53					○	○	オンライン参加
54					○	○	オンライン参加
55					○	○	現地参加
56					○	○	現地参加
57					○	○	現地参加
58					○	○	現地参加
59					○	○	現地参加
60					○	○	オンライン参加
61					○	○	オンライン参加
62					○	○	オンライン参加
63					○	○	オンライン参加

分子科学研究所共同利用研究 実施報告書

提出方法等のご案内	■ 問い合わせ 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部国際研究協力課 共同利用係 email:r7133@orion.ac.jp

分子科学研究所長　殿

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

提出日	2023-11-01
報告者	**氏名 (Name):** 長坂　将成 **所属機関 (Institute)** 分子科学研究所 **電話 (Phone no.)** 0564-55-7394 **部局 (Department)** 光分子科学研究領域 **FAX (FAX no.)** 0564-55-7439 **職 (Job Title)** 助教 **E-Mail** nagasaka@ims.ac.jp

１．種別	研究会
２．課題番号	23IMS2305
３．研究課題名	溶液の化学現象の軟X線分光測定のフロンティア
４．所内対応者(敬称略)	解良　聡
５．参加者・講演者	別紙にてアップロードをお願いします。
６．開催日時	2023年10月2日～2023年10月4日
７．プログラム・タイムスケジュール等	別紙にてアップロードをお願いします。
８．活動の概要	分子研UVSOR-IIIとスウェーデンの放射光施設MAX IVの研究者の意見交換を目的として、国際ワークショップを開催した。講演の主題は、軟X線分光法による溶液中の化学現象のオペランド計測であり、UVSOR-IIIの軟X線ビームラインBL3Uでの研究成果を中心にした招待講演を行った。MAX IVの研究者は、高輝度の軟X線を用いた様々な分光手法の研究成果を発表した。本研究会の意見交換により、UVSOR-IIIとMAX IVの間の国際共同研究が推進されることが期待される。
９．その他	
注意事項	● 参加者・講演者各位に所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。共同利用研究者の情報公開に関する承認が得られなかった場合、NOUSに入力する報告書とは別途、以下のリンク先から様式をダウンロードし、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用）」を担当係までご提出ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html ● 共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページに公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所ホームページに掲載された記入方法に従い、必ずAcknowledgementに謝辞を記載してください。記載にあたっては、分子科学研究所のホームページより記入例をご確認ください。 https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html ● 報告書の項目１～４の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正しますのでご了承ください。
担当係	自然科学研究機構 岡崎統合事務センター 総務部 国際研究協力課 共同利用係 mail: r7133@orion.ac.jp TEL:0564-55-7133

UVSOR-III + MAX IV International Workshop:

Frontier of Soft X-ray Spectroscopy for Chemical Processes in Solutions

October 2-4, 2023

Venue: Okazaki Conference Center, Myodaiji, Okazaki 444-0864, Japan

Sponsors: UVSOR Facility, Institute for Molecular Science, Japan [IMS workshop]

Chair: Masanari Nagasaka, Institute for Molecular Science, Japan
Co-chair: Takashi Tokushima, MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden

Program of UVSOR-III + MAX IV International Workshop

October 2nd, 2023

13:00 - 13:10 Welcome message from Masanari Nagasaka (Institute for Molecular Science, Japan)

13:10 - 14:50 Session A, Chair: Masanari Nagasaka (Institute for Molecular Science, Japan)

13:10 - 13:35 Soft X-ray absorption spectroscopy to investigate artificial biomembranes in aqueous solution

Ryugo Tero (Toyohashi University of Technology, Japan)

13:35 - 14:00 Photon-in-photon-out spectroscopy and synchrotron radiation project in Shenzhen

Yitao Cui (Institute of Advanced Science Facilities, Shenzen, China)

14:00 - 14:25 XAS study for aqueous cellobiose: Experiment and theory

Takehiko Sasaki (The University of Tokyo, Japan)

14:25 - 14:50 Measurements with utilizing soft X-ray pulse at the Photon Factory 2.5 GeV ring

Jun-ichi Adachi (High Energy Accelerator Research Organization, Japan)

14:50 - 15:05 Coffee/tea break

15:05 - 16:00 Session B, Chair: Satoru Suzuki (University of Hyogo, Japan)

15:05 - 15:30 Small angle X-ray scattering experiments at the 3 GeV diffraction-limited storage ring at MAX IV Laboratory: Recent results and new opportunities

Tomás S. Plivelic (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)

15:30 - 15:45 (Hot Topic, P09) Study of chirality emergence and structural change of organic molecules by circularly polarized Lyman-alpha (121.6 nm) irradiation in UVSOR-III

Masahiro Kobayashi (National Institute for Fusion Science, Japan)

15:45 - 16:00 (Hot Topic, P02) Electronic structure analysis of square planer Ni complex bearing tris(pentafluorophenyl)borane as a Z-type ligand

Yuta Uetake (Osaka University, Japan)

16:00 - 18:00 Poster presentations

October 3rd, 2023

09:00 - 10:40 Session C, Chair: Tomás S. Plivelic (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)

09:00 - 09:25 Time resolved soft X-ray absorption spectroscopy system for liquid sample in Photon Factory

Fumitoshi Kumaki (High Energy Accelerator Research Organization, Japan)

09:25 - 09:50 Very sharp diffraction peak in liquids and glasses

Shinji Kohara (National Institute for Materials Science, Japan)

09:50 - 10:15 UVSOR BL4U STXM Beamline: Status and Future Outlook

Tohru Araki (Institute for Molecular Science, Japan)

10:15 - 10:40 Coffee/tea break

10:40 - 11:55 Session D, Chair: Kentaro Fujii (National Institutes for Quantum Science and Technology , Japan)

10:40 - 11:05 Structure of aqueous ethanol solution: Soft X-ray emission spectroscopy measurements and theoretical calculations

Osamu Takahashi (Hiroshima University, Japan)

11:05 - 11:30 Acetic acid in 1-methylimidazole observed by soft X-ray emission spectroscopy

Yuka Horikawa (Yamaguchi University, Japan)

11:30 - 11:55 Mechanistic investigation of homogeneous iron-catalyzed organic reactions based on solution-phase XAS analysis

Hikaru Takaya (Teikyo Science University & Institute for Molecular Science, Japan)

11:55 - 13:30 Lunch

13:30 - 15:35 Session E, Chair: Chair: Conny Såthe (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)

13:30 - 13:55 Operando soft X-ray absorption spectroscopy for observing chemical processes in solutions

Masanari Nagasaka (Institute for Molecular Science, Japan)

13:55 - 14:20 Direct observation of electrochemically generated high-valent iron-oxo species applicable to CH_4 oxidation reaction

Yasuyuki Yamada (Nagoya University, Japan)

14:20 - 14:45 Soft X-ray spectroscopy for semiconductor photocatalysts

Hiroshi Onishi (Kobe University & Institute for Molecular Science, Japan)

14:45 - 15:10 Transition metal L-edge operando RIXS studies of electrode materials for Li-ion batteries

Daisuke Asakura (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Japan)

15:10 - 15:35 Tracking chemical dynamics through soft X-ray spectroscopy

Zhong Yin (Tohoku University, Japan)

15:35 - 15:45 Conference Photo

15:45 - 16:10 Coffee/tea break

16:10 - 17:30 Session F, Chair: Takashi Tokushima (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)

16:10 - 16:25 (Hot Topic, P13) Development of structural analysis in solution by combining soft X-ray absorption and Raman spectroscopies

Morihisa Saeki (National Institutes for Quantum Science and Technology, Japan)

16:25 - 16:40 (Hot Topic, P12) Observation of interactions between functional polymers and water molecules using soft X-ray emission spectroscopy under real atmospheric conditions

Naoya Kurahashi (Institute for Molecular Science, Japan)

16:40 - 17:05 (Online) Liquid jet photoemission at FlexPES beamline, MAX IV

Gunnar Öhrwall (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)

17:05 - 17:30 (Online) Soft X-ray operando characterization of electrochemical interfaces by ambient pressure photoelectron spectroscopy at MAX IV

Andrey Shavorskiy (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)

18:00 - 20:00 Banquet

October 4th, 2023

09:00 - 10:40 Session G, Chair: Naoya Kurahashi (Institute for Molecular Science, Japan)

09:00 - 09:25 Geometry sampling and modeling methods to simulate transient X-ray absorption spectra of molecules dissolved in a solvent

Shota Tsuru (RIKEN Center for Computational Science, Japan)

09:25 - 09:50 A new perspective for understanding the thermodynamics of liquids: Mesoscopic fluctuation

Yukio Kajihara (Hiroshima University, Japan)

09:50 - 10:15 Time-resolved and nonlinear soft X-ray absorption, reflection and fluorescence spectroscopy at SACLA BL1 by using ultrathin flat jets

Hiroshi Iwayama (Institute for Molecular Science, Japan)

10:15 - 10:40 Veritas: A versatile beamline for high resolution Soft X-ray Resonant Inelastic Scattering at the MAX IV Laboratory

Conny Såthe (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)

10:40 - 11:05 Coffee/tea break

11:05 - 12:20 Session H, Chair: Yuka Horikawa (Yamaguchi University, Japan)

11:05 - 11:30 New resonant inelastic soft X-ray scattering facility at NanoTerasu

Jun Miyawaki (National Institutes for Quantum Science and Technology, Japan)

11:30 - 11:55 Photoelectron spectroscopy of liquids: Accessing electronic energetics and surface properties

Stephan Thürmer (Kyoto University, Japan)

11:55 - 12:20 Operando observation for water splitting electrocatalysts using hard/tender/soft X-ray absorption spectroscopy

Masaaki Yoshida (Yamaguchi University, Japan)

12:20 - 12:30 Closing remarks

13:00 - 17:00 Optional tour to Okazaki castle and Daijuji temple

Poster Presentations at 2nd/October

P01 Hybrid structure analysis: Accurate and precise structure determination of mono- and bimetallic spinels by iterative and alternating refinements of PXRD and XAFS

Kiyohiro Adachi (RIKEN, Japan)

P02 Electronic structure analysis of square planer Ni complex bearing tris(pentafluorophenyl)borane as a Z-type ligand

Yuta Uetake (Osaka University, Japan)

P03 Coherent X-ray imaging of the nanostructures of covalent organic frameworks in the initial synthesis process

Takahiro Nishio (DENSO Corporation, Japan)

P04 In situ dynamic analysis of acid base equilibrium shift in a microflow platform

Takato Maeda (Kyoto Prefectural University, Japan)

P05 Sodium ion coordination to lipid bilayers investigated by X-ray absorption spectroscopy in water

Yu Kinjo (Toyohashi University of Technology, Japan)

P06 XAFS study of cobalt oxide catalysts for effective liquid phase oxidation reactions

Nobuyuki Ichikuni (Chiba University, Japan)

P07 Imaging and spectroscopy of liquid water using X-ray PEEM

Masaya Takeuchi (University of Hyogo, Japan)

P08 In-situ characterization of water electrolysis for hydrogen production across a current density range from 0 to 2000 mA cm^{-2}

Ailong Li (RIKEN, Japan)

P09 Study of chirality emergence and structural change of organic molecules by circularly polarized Lyman-alpha (121.6 nm) irradiation in UVSOR-III

Masahiro Kobayashi (National Institute for Fusion Science, Japan)

P10 Investigation of the electronic structure of HONTA in the n-dodecane media by soft X-ray absorption spectroscopy and quantum chemical calculation

Yasunori Miyazaki (Japan Atomic Energy Agency, Japan)

P11 Attempts at structural analysis of biological macromolecules using resonant soft X-ray scattering

Yasunobu Sugimoto (Institute for Molecular Science, Japan)

P12 Observation of interactions between functional polymers and water molecules using soft X-ray emission spectroscopy under real atmospheric conditions

Naoya Kurahashi (Institute for Molecular Science, Japan)

P13 Development of structural analysis in solution by combining soft X-ray absorption and Raman spectroscopies

Morihisa Saeki (National Institutes for Quantum Science and Technology, Japan)

P14 Measurability of chloramines using soft X-ray spectroscopy

Yoshiyuki Seimiya (Chiba Prefectural Public Enterprises Bureau, Japan)

P15 Development of high-repetition-rate time-resolved resonant soft X-ray scattering measurement system at the Photon Factory

Ryo Fukaya (High Energy Accelerator Research Organization, Japan)

P16 Cu L-edge XANES spectra of Cu protein solutions

Kentaro Fujii (National Institutes for Quantum Science and Technology, Japan)

P17 Polarized Quantum Beam Irradiation and High Magnetic Field Application on Chiral Organometallic Coordination Complexes

Jun-ichi Takahashi (Doshisha University, Japan)

分子研研究会「溶液の化学現象の軟X線分光測定のフロンティア」
2023年10月2日（月）～10月4日（水）
岡崎コンファレンスセンター 小会議室 + 中会議室

	Name	University/Institute	Department	Position
1	Fumitoshi Kumaki	High Energy Accelerator Research Organization	Institute of Materials Structure Science	postdoctoral fellow
2	Tohru Araki	NINS, IMS	UVSOR	Senior Researcher
3	Hiroshi Onishi	Kobe University & Institute for Molecular Science	Department of Chemistry	professor
4	Zhong Yin	Tohoku University	International Center for Synchrotron Radiation Innovation Smart	Associate Professor
5	Takashi Tokushima	Lund university	MAX IV Laboratory	Researcher
6	Stephan Thuermer	Kyoto University	Department of Chemistry	Associate Professor
7	Kiyohiro Adachi	RIKEN	Center for Emergent Matter Science	Technical Staff I
8	Shota Tsuru	RIKEN	RIKEN Center for Computational Science	Postdoctoral Researcher
9	Yuta Uetake	Osaka University	Division of Applied Chemistry, Graduate School of Engineering	Assistant professor
10	Takahiro Nishio	DENSO CORPORATION	Advanced Research and Innovation Center	project assistant manager
11	Shinji Kohara	National Institute for Materials Science	Center for Basic Research on Materials	Group leader
12	Masaaki Yoshida	Yamaguchi University	Department of Applied Chemistry	Associate Professor
13	Masanari Nagasaka	Institute for Molecular Science	Department of Photo-Molecular Science	Assistant Professor
14	Hiroshi Iwayama	Institute for Molecular Science	UVSOR	Assistant Professor
15	Yasuyuki Yamada	Nagoya University	Research Center for Materials Science	Associate Professor
16	Daisuke Asakura	National Institute of Advanced Industrial Science and Technology	Research Institute for Energy Conservation	Chief Senior Researcher
17	Satoru Suzuki	University of Hyogo	Laboratory of Advanced Science and Technology for Industry	Professor
18	Takato Maeda	Kyoto Prefectural University	Graduate School of Life and Environmental Sciences	a first-year master's student
19	Yu Kinjo	Toyohashi University of Technology	Applied Chemistry and Life Science	2nd year of master's course
20	Munenori Numata	Kyoto Prefectural University	Department of Biomolecular Chemistry, Graduate School of Life and Environmental Sciences	Professor
21	Nobuyuki Ichikuni	Chiba University	Applied Chemistry and Biotechnology	Professor
22	Yuka Horikawa	Yamaguchi University	Faculty of Science	Associate Professor
23	Masaya Takeuchi	University of Hyogo	Graduate school of Engineering	Assistant professor
24	Ailong Li	RIKEN	CSRS	Research Scientist
25	Shuang Kong	RIKEN	CSRS	PhD
26	Masahiro Kobayashi	National Institute for Fusion Science	Transports in Plasma Multi-phase Matter System Unit	Associate professor
27	Ryugo Tero	Toyohashi University of Technology	Department of Applied Chemistry and Life Science	Professor
28	Yasunobu Sugimoto	Institute for Molecular Science	UVSOR	Technical Staff
29	Naoya Kurahashi	Institute for Molecular Science	Materials Molecular Science	Research Assistant Professor
30	Osamu Takahashi	Hiroshima University	Chemistry	Accociate Professor
31	Jun Miyawaki	National Institutes for Quantum Science and Technology	Institute for Advanced Synchrotron Light Source	Senior Researcher
32	Morihisa Saeki	National Institutes for Quantum Science and Technology	Foundational Quantum Technology Research Directorate	Senior Principal Researcher
33	Takehiko Sasaki	The University of Tokyo	Department of Complexity Science and Engineering, Graduate School of Frontier Sciences	Associate Professor
34	Tomas S. Plivelic	Lund University / MAX IV Laboratory	MAX IV Laboratory	Researcher. CoSAXS beamline project manager
35	Gunnar Öhrwall	Lund University	MAX IV Laboratory	Beamline scientist
36	James Harries	QST	Synchrotron Radiation Research Centre	Researcher
37	Yoshiyuki Seimiya	Chiba prefectural public enterprises bureau	Chiba-nogikunosato water purification plant	Section chief of examination of water quality

	Name	University/Institute	Department	Position
38	Ryo Fukaya	High Energy Accelerator Research Organization	Institute of Materials Structure Science	Assistant Professor
39	Kentaro Fujii	National Institutes for Quautum Science and Technology	Quantum Life Science Center	Team Leader
40	Yukio Kajihara	Hiroshima University	Graduate School of Advanced Science and Engineering	Associate Professor
41	Jun-ichi Adachi	High Energy Accelerator Research Organization	Materials Structure Science	Associate Professor
42	Masahito Niibe	The University of Tokyo	Institute for Solis State Science	Project Researcher
43	Yi Hao Chew	Kobe University	Department of Science	Academic Researcher
44	Hideki Katayanagi	Institute for Molecular Science	UVSOR	Research Associate
45	Satoshi Kera	IMS	UVSOR	Professor
46	Yumi Murakami	Embassy of Sweden	Office of Science and Innovation	Acting Head of Office, Senior Advisor
47	Katsuhiro Wakamatsu	Kwansei Gakuin University	School of Engineering	Research Assistant Professor
48	Soichiro Furuno	Kwansei Gakuin University	Graduate School of Science and Technology	Graduate Student
49	Andrey Shavorskiy	Lund University	MAX IV Laboratory	Researcher
50	Yitao Cui	Institute of Advanced Science Facilities,Shenzhen	Shenzhen Innovation Light-source Facility	Deputy General Manager, Prof.
51	Jun-ichi Takahashi	Doshisha University	Self-organization Science Research Center	Entrust Research Scientist
52	Conny Såthe	Lund University	MAX IV Laboratory	Scientist
53	Hikaru Takaya	Teikyo University of Science/IMS	Life and Health Sciences/Special Division	Professor
54	Kiyohisa Tanaka	Institute for Molecular Science	UVSOR	Assoc. Prof.
55	Fumihiko Matsui	Institute for Molecular Science	UVSOR Synchrotron Facility	Professor
56	Yoshitaka Taira	Institute for Molecular Science	UVSOR	Associate Professor
57	Seiko Nakagawa	Tokyo Metropolitan Industrial Technology Research Institute	Analytical Group	Senior Researcher
58	Kazuya Tokuda	Sumitomo Electrid Industries	Analysis Technology Research Center	Assistant Manager
59	Kenta Hagiwara	IMS	UVSOR	IMS fellow
60	Eiji Hosono	National Institute of Advanced Industrial Science and Technology	Global Zero Emission Research Center	Senior Researcher
	青枠はオンライン発表			

分子科学研究所共同利用研究　実施報告書
（研究会・若手研究活動支援・岡崎コンファレンス）

2023 年　10 月　26 日

分子科学研究所長　殿

（報告者）
所属・部局　分子研・極端紫外光研究施設
氏名　　田中　清尚

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

１．種別
☑　研究会
☐　若手研究活動支援
☐　岡崎コンファレンス

２．研究課題名
UVSOR-SPring8 赤外ビームライン合同ユーザーズミーティング

３．課題番号（審査結果通知書及び申請書に記載しています。）
23IMS2306

４．所内対応者
氏名：　　田中　清尚

５．研究会等参加者・講演者　（注１）（注２）（注３）

・別紙として excel で参加者リストを NOUS から提出してください。様式は分子研 HP(https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/documents.html) からダウンロードするか、①氏名、②機関名/大学名、③部局名/学部、④職名、⑤参加日付、⑥現地参加 or オンライン参加 を含めたエクセルの様式を提出してください。（対面開催のみの場合、⑥は不要です。）
・参加者リストの個人情報について、オンラインでの公開が望ましくない情報は、黒塗りにして通常の報告書とは別途 NOUS から公開用のリストを提出してください。

６．開催日時

2023 年 9 月 29 日

７．プログラム・タイムスケジュール等(注４)

・別紙として NOUS から提出してください。（様式任意）
・要旨集を作成している場合は併せて NOUS からしてください。

８．活動の概要（200 字程度以内）(注４)(注５)

赤外分光測定は、化学、物理学、材料科学、生物学などのさまざまな分野で広く使用されている重要な実験手法であり、放射光を用いた赤外分光では、集光、偏光、パルス性といった特徴を生かした利用が展開されている。UVSOR と SPring-8 は赤外分光ビームラインを提供している国内放射光施設であり、今回初めて、UVSOR と SPring-8 で合同のユーザーズミーティングを開催し、ユーザー同士の交流を推進すると共に、最先端の研究状況や装置開について情報を交換した。

９．その他

（注１）　記入例に沿って所属先機関名、部局名、職名、氏名を記載してください。

（注２）　旅費支出の有無に関わらず全ての参加者・講演者を記したリストを、別紙（様式任意）として自然科学共同利用・共同研究統括システム(NOUS)（ https://www.nins.jp/site/nous/ ）から提出してください。ハイブリッド開催の場合、オンライン開催、オンサイト開催で分けて作成してください。

（注３）　参加者・講演者各位に、(注５）のとおり所属先機関名、部局名、職名、氏名が公開されることの了承を得てください。情報公開に関する承認が得られなかった場合、所定の報告書の提出に加えて、これら情報を「墨消し」とした「報告書（公開用)」を別途提出いただく必要があります。

（注４）　プログラムやタイムスケジュールを別紙として NOUS（ https://www.nins.jp/site/nous/ ）から提出してください。要旨集を作成している場合は併せて提出してください。上記の資料がない場合、企画の内容をまとめた資料を作成して提出してください。

（注５）　共同利用研究実施報告書は分子科学研究所のホームページ
（ https://www.ims.ac.jp/guide/joint_research_result.html)に公開されます。公開できない内容は省略し、簡潔にご記入ください。

（注６）　報告書の設問１．～４．の情報に誤りがあった場合、担当係にて修正の上、NOUS に再アップロードしますのでご了承ください。

【　プログラム　】

9:30 - 9:45	趣旨説明とUVSOR赤外BL紹介	田中清尚（分子研 UVSOR）
9:45 - 10:00	SPring-8赤外利用の展望	池本夕佳（JASRI）
10:00 - 10:20	赤外ナノ・超高速分光の現状と赤外放射光の可能性	西田純（分子研）
10:20 - 10:40	皮膚角層赤外吸収特性の解析と製剤開発への応用	小幡誉子（星薬科大学）
10:40 - 10:55	**【　休　憩　】**	
10:55 - 11:15	顕微FT-IRイメージングによる薬物粉末の異同識別	瀬戸康雄（理化学研究所）
11:15 - 11:35	Visualization of glyoxylic acid in human hair by using BL43IR	宇山允人（株式会社 資生堂）
11:35 - 11:50	The neaSCOPE as a tool for near-field imaging and spectroscopy at the synchrotron	Aina Reich (neaSpec/attocube)
11:50 - 13:00	**【　昼　休　憩　】**	
13:00 - 13:20	放射光赤外顕微鏡を用いた毛髪の分析と製品への応用	伊藤　廉（株式会社 ミルボン）
13:20 - 13:40	マイクロビームFT-IRを用いたポリ乳酸表面における水分子の吸着の評価	松葉　豪（山形大学）
13:40 - 14:00	赤外分光法によるＰＥＧおよびＰＥＧ修飾デンドリマーの水和状態の解析	児島千恵（大阪公立大学）
14:00 - 14:20	赤外波長選択的振動励起による生体関連物質の化学変換	川崎平康（高エネルギー加速器研究機構）
キャンセル	顕微赤外分光法を用いて初期地球の岩石中に生命の痕跡を探す	伊規須素子（海洋研究開発機構）
14:20 - 14:55	**【　休　憩　】**	
14:55 - 15:15	フォノンが関わるプロトン移動機構	松井広志（東北大学）
15:15 - 15:35	BL43IRにおける赤外磁気光学スペクトル測定：円2色性と旋光性	井口　敏（東北大学）
15:35 - 15:55	SPring-8 BL43IRを用いた高圧での分光実験	岡村英一（徳島大学）
15:55 - 16:15	UVSORでの先端赤外分光の試みと今後の期待	木村真一（大坂大学）
16:25 -	UVSOR見学	

No	氏名	所属機関名	職名	現地/オンライン
1	田中　清尚	分子研UVSOR	准教授	現地
2	池本　夕佳	公益財団法人高輝度光科学研究センター	主幹研究員	現地
3	西田　純	分子科学研究所	助教	現地
4	宇山允人	資生堂	研究員	現地
5	川崎　平康	高エネルギー加速器研究機構	研究員	現地
6	岡村　英一	徳島大学	教授	現地
7	木村　真一	大阪大学	教授	現地
8	小幡誉子	星薬科大学	教授	現地
9	瀬戸康雄	理化学研究所	グループディレクター	現地
10	伊藤廉	株式会社ミルボン	統括マネージャー	現地
11	松葉豪	山形大学	教授	現地
12	児島千恵	大阪府立大学	准教授	現地
13	松井広志	東北大学	准教授	現地
14	井口敏	東北大学	准教授	現地
15	手島　史綱	分子科学研究所	技術職員	現地
16	岩山　洋士	分子研UVSOR	助教	現地
17	解良聡	分子研	教授	現地
18	加藤政博	広島大学	教授	現地
19	熊谷　崇	分子科学研究所	准教授	オンライン
20	北浦　守	山形大学理学部	教授	オンライン
21	中山泰生	東京理科大学	准教授	オンライン
22	山内要	東京理科大学	学生	オンライン
23	石原麻由美	分子科学研究所UVSOR	事務	オンライン
24	加茂　恭子	分子研UVSOR	事務	オンライン
25	片山　真祥	高輝度光科学研究センター	主幹研究員	オンライン
26	馬場　雄也	東京理科大学理工学研究科先端化学専攻	学生	オンライン
27	松本 崇博	JASRI	主幹研究員	オンライン
28	中野智志	物質・材料研究機構	主幹研究員	オンライン
29	萩原健太	分子科学研究所	研究員	オンライン
30	胡桃澤清文	北海道大学	准教授	オンライン
31	登野健介	高輝度光科学研究センター	主席研究員	オンライン
32	[redacted]			オンライン
33				オンライン
34				オンライン
35				オンライン
36				オンライン
37	JUNG, Min-Cherl	University of Tsukuba	Associate Professor	オンライン
38	[redacted]			オンライン
39				オンライン
40				オンライン
41	原田雅章	福岡教育大学	教授	オンライン
42	[redacted]			オンライン
43				オンライン
44	TAKAHASHI　Masayuki	東京工業大学　生命理工学院	特任教授	オンライン
45	大沼佑貴	青山学院大学	学生	オンライン
46	橋本恵里	青山学院大学理工学研究科	学生	オンライン
47	山路彩花	山形大学大学院有機材料システム研究科有機材料システム専攻	学生	オンライン
48	野口 直樹	徳島大学理工学部	助教	オンライン
49	森脇太郎	高輝度光科学研究センター	副主幹研究員	オンライン
50	[redacted]			オンライン
51	中村拓人	大阪大学 生命機能研究科	助教	オンライン
52	平　義隆	分子科学研究所	准教授	オンライン
53	淡野　照義	東北学院大学	教授	オンライン
54	佐々葉遼平	大阪大学大学院 生命機能研究科 M1	学生	オンライン
55	城　裕喜	山口大学	学生	オンライン
56	繁政英治	分子科学研究所	技術推進部長	オンライン
57	前里光彦	京大院理	准教授	オンライン
58	藤本將輝	名古屋大学	特任助教	オンライン
59	林憲志	UVSOR	技術職員	オンライン
60	高橋俊晴	京都大学複合原子力科学研究所	准教授	オンライン
61	Elham Salehi	UVSOR	研究員	オンライン
62	清水　康平	分子科学研究所 UVSOR	技術職員	オンライン
63	谷田肇	日本原子力研究開発機構	技術副主幹	オンライン