自然科学研究機構

分子科学研究所
共同利用研究報告書

2020年度

目　次

A. 課題研究 ・・1

B. 協力研究 ・・3

C. 研究会 ・・76

D. 若手研究活動支援 ・・96

分子科学研究所2020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
20-101	脂質膜上での人工ドメイン形成技術開発と生体高分子集積への展開

B. 協力研究

課題番号	研究課題名
20-201	水溶液中における有機イオンと水和水の微視的構造と動的挙動に関する研究
20-202	高度に配向制御した分子薄膜との協奏を利用した新奇磁性開発
20-203	エピタキシャル有機半導体pn接合の電子構造評価
20-204	スポット分析型高分解能電子線回折(SPA-LEED)によるツイスト2層グラフェンの 構造解析
20-205	Diaminodiphenyldisulfide誘導体を用いた触媒的S-S結合開裂とC-S結合構築を伴う新規benzothiazoleの触媒合成
20-206	部位特異的な化学修飾のための構造基盤の確立
20-207	マルチドメインタンパク質の動的構造と機能連関の解明
20-208	マイクロフロー空間内の局所光励起による超分子ダイナミクスの解析
20-209	キラルプラズモンとキラル磁性結晶の結合系の開拓
20-210	レクチンナノブロックによる機能性人工タンパク質超分子複合体の設計開発
20-211	高効率なスピン偏極電子検出器の開発に向けた表面の化学状態制御法の確立とスピン分解光電子分光技術の確立
20-212	CDWを示す遷移金属カルコゲナイドの波数空間でのバンド変調の研究
20-213	不安定共振器型マイクロチップレーザーを用いたガスブレイクダウンに関する研究
20-214	半導体ナノワイヤのソフトマテリアル中への固定化に基づく光電変換機能発現
20-215	ポリ(トリアリールホスフィンスルフィド)保護サブナノ金属クラスター触媒の開発
20-216	高強度マイクロチップレーザーを用いた高出力テラヘルツパラメトリック発生器の開発
20-251	極微量金属種による触媒反応における金属種の再利用
20-252	プラスチック分解酵素の改変と分解活性の計測
20-254	超短パルスガンマ線誘起陽電子消滅分光法を用いた原子空孔型欠陥分析法の開発
20-255	シンクロトロン光源による軟X線コヒーレント制御
20-256	グラフェンおよび遷移金属ダイカルコゲナイド原子層の角度分解顕微光電子分光測定
20-257	UVSOR光電子分光装置の超高性能化に向けた分光系と実験装置の性能把握実験
20-258	放射線照射により生成するマルトースのラジカル生成機構への水和水の効果
20-259	ナノスケール蓄光材料の新規開発と有機・無機媒体への分散
20-260	モメンタムマイクロスコープ用いた高移動度有機半導体高配向膜の分子軌道トモグラフィー
20-261	フロー合成のための不斉固定化有機触媒の開発
20-262	糖アジドの還元にともなうライゲーション反応の開発
20-263	位相制御された逆コンプトン散乱ガンマ線の発生
20-264	光合成アンテナ系の分子機構の解明に向けた計算化学的解析
20-265	新触媒反応を基盤とした分子物性解明と微結晶構造解析
20-266	生体分子の機能に関わる不均一な構造の理論的解明
20-267	TRPチャネル制御機構解明のための分子シミュレーション研究

C.研究会

課題番号	研究課題名
20-301	錯体化学に基づく分子の構造変換設計と機能制御
20-351	ナノ空間で光が織りなす分子操作・化学反応制御の新展開
20-352	Next Generation Spectro-Mircroscopy and Micro-Spetroscopy Workshop
20-353	錯体化学から始まる学術展開の可能性

D. 若手研究活動支援

課題番号	研究課題名
20-401	第18回ESR夏の学校: ESR法の基礎・理論・生体応用

分子科学研究所共同利用研究（課題研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 20 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　九州大学大学院理学研究院
氏名　大谷　亮

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	脂質膜上での人工ドメイン形成技術開発と生体高分子集積への展開		
課題番号	20-101		
所内対応者	氏名　加藤　晃一	職名　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	九州大学大学院理学研究院	助教	木下　祥尚
	京都大学大学院薬学研究科	助教	河野　健一
	分子科学研究所	教授	加藤　晃一
	分子科学研究所	助教	谷中　冴子
実施した研究の概要（200 字程度以内）	本申請研究では、細胞膜上において人工ドメイン形成可能な新規錯体脂質を合成し、糖鎖などの生体高分子集積させることによる機能化を目的としている。今回、リン脂質膜の相転移温度よりも高温の流動相において、流動相－流動相相分離を生み出せる錯体脂質を合成した。この錯体脂質は親水性錯体頭部へのクリック反応により分子修飾可能であり、これまでに発光プローブを修飾することで巨大リポソーム上への錯体脂質分布の可視化に成功した。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	前年度に合成した錯体脂質を用いて、リン脂質との複合膜での相挙動について詳細な評価を行った。この錯体脂質は、親水性金属錯体頭部にクリック反応が可能なアルキン置換基を有する。そこで、発光プローブを修飾した錯体脂質を合成し、生体リン脂質である DMPC と共に GUVs を作成し蛍光顕微鏡観察を行った。すると、DMPC の相転移温度である 23℃より高温においても、相分離構造が観測された。これは非常に珍しい流動相－流動相相分離が生じていることを示している。そこで、膜物性について検討するべく、複合体の示差走査熱量測定と九州シンクロトロン光研究センターでの広角 X 線散乱測定を行った。得られた結果から、DMPC に対して錯体脂質の割合が多いほど流動性が大きくなることが示された。すなわち錯体脂質は、DMPC の流動相の中で、より流動的な領域を作り出すことで相分離を実現していることが明らかとなった。また、赤外分光測定から、錯体脂質頭部の置換基とリン脂質のリン酸基との分子間相互作用が流動相の安定化に寄与していることが分かった。 更に、蛍光顕微鏡を用いて温度上昇に伴う相分離挙動の観察を行うことで、その安定性について検討した。温度上昇により、分離したそれぞれの相の流動性の上昇に伴って形状変化が大きくなり、37℃付近において相分離が消失することで均一相へと変化した。また、冷却することによる相分離の再現についても確かめられた。 以上の成果については、*Angew. Chem. Int. Ed.* 誌に採択された。
その他	R. Ohtani, Y. Anegawa, H. Watanabe, Y. Tajima, M. Kinoshita, N. Matsumori, K. Kawano, S. Yanaka, K. Kato, M. Nakamura, M. Ohba, S. Hayami "Metal complex lipids for fluid-fluid phase separation in co-assembled phospholipid membranes" *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, *in press*. R. Ohtani, K. Kawano, M. Kinoshita, S. Yanaka, H. Watanabe, K. Hirai, S. Futaki, N. Matsumori, H. Uji-i, M. Ohba, K. Kato, S. Hayami "Pseudo-membrane jackets: Two-dimensional coordination polymers achieving visible phase separation in cell membrane" *Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, 59, 17931-17937. (Hot Paper)

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 29 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　神戸大学分子フォトサイエンス研究センター
氏名　富永　圭介

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	水溶液中における有機イオンと水和水の微視的構造と動的挙動に関する研究		
課題番号	20-201		
所内対応者	氏名　　斉藤　真司	職名　　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	特命准教授	太田　薫
	神戸大学大学院理学研究科	M2	藤井　悠生
	神戸大学大学院理学研究科	M1	高本　和也
実施した研究の概要（200 字程度以内）	水溶液中でのイオン周辺の水和水に関する微視的描像を調べる目的で、NaCl 水溶液の複素誘電率スペクトルの濃度変化の詳細な測定をサブギガヘルツからテラヘルツ帯に及ぶ帯域で行った。テトラメチルアンモニウムイオン、グアニジウムイオン、および Na^+について複素誘電率スペクトルのスペクトル解析を行い、分子動力学シミュレーションの結果とあわせて、イオン周辺の水の構造や動的挙動に関する描像を得た。以上の結果をまとめ、論文として発表した。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	本研究では、有機イオンや無機イオンを含む水溶液に対して、サブギガヘルツからテラヘルツ帯に及ぶ帯域で誘電分光測定を行い、分子動力学シミュレーションの結果とあわせて、イオン周辺の水の構造や動的挙動に関する分子論的な描像を確立することを目的とした。すでに、テトラメチルアンモニウムイオン（TMA^+）、グアニジウムイオン（Gdm^+）、テトラフェニルボレート（TPB^-）、ヘキサフルオロリン酸イオン（PF_6^-）などのイオンまた、NaCl や NaI 等の電解質水溶液の測定も行っているが、本年度は、論文を作成するにあたり、NaCl 水溶液のサブギガヘルツからギガヘルツ帯の複素誘電率スペクトルの濃度変化の詳細な測定を、ベクトルネットワークアナライザーを用いて行った。TMA^+、Gdm^+、および Na^+についてサブギガヘルツから数テラヘルツの帯域における複素誘電率スペクトルのスペクトル解析を、複素誘電率に対するモデル関数を用いて行った。ギガヘルツ帯に緩和成分が存在し、その時定数の濃度変化を検討した。TMA^+については、時定数は濃度とともに増加するが、Na^+は減少する。一方、Gdm^+はほとんど濃度に依存しない。これらの現象を分子動力学シミュレーションから、二つの効果、イオン周辺の構造形成とイオンの影響による単一分子の回転緩和の変化、の大小関係により決まることを示した。水は分子間水素結合による四面体構造を作り、動的挙動には集団性が現れる。誘電緩和時間は本質的に集団的な運動に対応しており、構造形成により集団運動の時定数は遅くなる。つまり、構造形成が阻害されると緩和時間は速くなる。一方、イオンと水との相互作用が強くなれば、単一の水分子の回転緩和は遅くなる。この二つの効果の相殺の度合いによりイオンの存在により誘電緩和の時定数は速くなるか、遅くなるか決まる。以上の結果をまとめ、論文として発表した。
その他	発表論文：“Molecular Mechanism of Acceleration and Retardation of Collective Orientation Relaxation of Water Molecules in Aqueous Solutions”, Norifumi Moritsugu, Takafumi Nara, Shin-ichi Koda, Keisuke Tominaga, and Shinji Saito, *J. Phys. Chem. B.* **124** (51), 11730-11737 (2020).

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 15 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　千葉大学　大学院工学研究院
氏名　山田　豊和

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	高度に配向制御した分子薄膜との協奏を利用した新奇磁性開発		
課題番号	20-202		
所内対応者	氏名　解良　聡	職名　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	千葉大学大学院工学研究院	准教授	山田　豊和
	千葉大学大学院融合理工学府	D3	根本　諒平
	千葉大学大学院融合理工学府	M2	後藤　悠斗
	千葉大学大学院融合理工学府	M1	西野　史
	千葉大学大学院融合理工学府	M1	金沢　真伍
実施した研究の概要（200 字程度以内）	Cu(111)原子テラス表面にクラウンエーテル(Br-CR)環状分子を吸着すると、自己組織化し、二次元(7×4)規則配列が実現する。1nm サイズの窪みが規則配列している。これをテンプレートに使えば、磁性金属や有機分子の規則配列化に有効ではないかと考え検証した。走査トンネル顕微鏡(STM)および走査トンネル分光法(STS)を用いて、局所的な分子吸着構造と電子構造を計測した。角度分解光電子分光(UPS)を用いて、系全体のマクロな電子構造を計測した。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	大きさ 2 nm 程度の前駆体有機分子を真空昇華し、基板表面に吸着させると、有機分子同士が熱拡散、相互作用、化学反応し、基板表面で規則配列した二次元分子膜および高分子膜が作製できる。原子レベルに薄い厚さ 0.3 nm の規則配列した単分子層が実現する。この超薄膜には、規則的に 1-2 nm サイズのくぼみ（穴）がある。これをテンプレートにすることで、コバルト金属原子およびフェロセンアンモニウム塩（Fe イオン含）の二次元規則配列化に挑戦した。 (1) 二次元分子格子への Co 磁性金属吸着実験 : クラウンエーテル環状分子を Cu(111)基板上に真空室温環境で吸着すると、自己組織化による二次元規則(7×4)配列が実現する。この表面に、コバルトを室温真空蒸着した。Br-CR 分子個数に対して 10 倍以上の Co 原子を吸着した。UPS および STS は、Br-CR 分子の HOMO/LUMO 状態の消失を示した。STM/LEED 像は、Br-CR(7×4)配列の破壊を示した。本最初の成果は 2020 年度論文発表した：表面と真空 63 (No.9) pp.465-469 (2020)。 Br-CR 分子個数よりもずっと少ない量の Co 原子を二次元規則(7×4)配列に吸着した。STM 像から、Br-CR(7×4)配列を保持しながら局所的に Co によるクラスター化を確認した。STS および UPS は、Br-CR からの変化を顕著に示した。Co 原子は Br-CR 内に内包されるよりも、Cu(111)と結合する方がエネルギー的に安定である事が分かった。本研究成果は、2021 年 3 月の応用物理学会にて Oral 発表し、現在、論文投稿にむけ執筆中である。 (2) 二次元分子格子への有機分子磁石フェロセンアンモニウム(Fc)吸着実験 : 磁性金属原子を分子格子に直接吸着すると、金属-金属間の相互作用が、金属-分子間の相互作用より強いため、規則的な分子構造が破壊されることが分かった。そこで、Cu(111)基板上の二次元規則配列クラウンエーテル分子膜の上に、鉄イオンを含むフェロセンアンモニウム(Fc)分子を吸着した。STM 観察から、Fc 分子を吸着してもクラウンエーテル分子格子は破壊されず、Fc 分子が BrCR 格子上で安定に吸着していることが分かった。さらに、二種の Fc 単分子の吸着構造を確認した。存在比は 48%と 52%であった。吸着した Fc 電子構造は STS ではとらえられなかったが、UPS 計測は Fc と Br-CR の HOMO 状態の共存を示した。本研究成果は 2021 年 3 月の応用物理学会にて Oral 発表した。 (3) 2021 年度へ継続：今後、真空昇華 Fc 分子の XPS 化学同定を実施する。さらに、前駆体分子の Cu(111)上真空加熱による二次元高分子格子作製を行う。Co を吸着し、高分子格子を保持したまま磁性金属吸着が可能であるか検証する。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 3 月 31 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　東京理科大学理工学部
氏名　中山泰生

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	エピタキシャル有機半導体 pn 接合の電子構造評価		
課題番号	20-203		
所内対応者	氏名　解良聡	職名　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	東京理科大学大学院理工学研究科	大学院生	竹内陸
	東京理科大学大学院理工学研究科	大学院生	染谷大地
	東京理科大学大学院理工学研究科	大学院生	鶴田諒平
	東京理科大学理工学部	学部学生	宮本淳之介
	東京理科大学理工学部	学部学生	伊藤航世
	東京理科大学大学院理工学研究科	大学院生	遠藤豪太
	東京理科大学大学院理工学研究科	大学院生	高橋加奈
	東京理科大学大学院理工学研究科	大学院生	笠松昂平
	東京理科大学大学院理工学研究科	大学院生	郡上祐輝

実施した研究の概要（200字程度以内）	本研究課題は，ドナー性（ｐ型）・アクセプター性（ｎ型）双方の有機半導体分子がいずれも高秩序に整列した「エピタキシャル有機半導体ｐｎ接合」を創製し，そ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ある。今年度は，過去の協力研究において価電子バンド分散の実測に成功したｐ型有機半導体物質を対象に，その単結晶上へのｎ型分子の成膜と電子構造解析を行った。現時点では電子バンド分散の実測には至っていないが，ｎ型分子のエピタキシャル成長による高秩序ｐｎ接合の形成を示唆する結果を得た。

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	１）研究目的 「もののインターネット」化の加速する今日の高度情報化社会において，実質的に無尽蔵に存在する炭素を元素資源として化学合成によって生産できる多様な有機分子材料を利用する有機エレクトロニクスは，有力な次世代産業技術の地位を固めつつある。特に，ある種の有機半導体分子の単結晶には，非晶質シリコンを凌ぐ高移動度を示すものもあり，基礎・応用の両面において活発な研究開発の対象となっている。 一方，有機 EL や有機太陽電池のような光・キャリア変換を利用する有機光エレクトロニクス(OP)デバイスは，ドナー性(p 型)・アクセプター性(n 型)の二種類の材料を組み合わた「pn 接合」を必要とする。現状の有機 OP デバイスは非晶質ないし多結晶状の有機半導体薄膜をベースとして構成されているため，内部の分子配列の秩序性は低く，キャリア輸送効率は最大化されていない。これに対し，当研究グループでは，これまでにルブレンやペンタセンのバルク単結晶表面上に n 型分子の結晶性の良い薄膜がヘテロエピタキシャル成長した高秩序な有機半導体 pn 接合の創製に成功し [Nakayama, et al., ACS Appl. Mater. Interf. 8 (2016) 13499]，ペンタセン単結晶表面上にフッ化ペンタセン結晶薄膜をエピタキシャル成長させた pn 接合では価電子バンド分散の実測にも成功している[Nakayama, …, Kera, J. Mater. Res. 33 (2018) 3362; Nakayama, …, Kera, J. Phys, Chem. Lett. 10 (2019) 1312 貴所と共同でプレスリリース(2019/3/25)]。加えて，相互の結晶方位が明確に規定されたエピタキシャル有機半導体 pn 接合は，従来の有機 OP デバイスのような乱れの多い接合に比べて，ドナー・アクセプター分子間の相互作用によって生じる界面特有の電子構造を解明するのに適した，基礎学術的にも興味深い研究対象であるといえる。 本研究課題では，有機半導体単結晶を「基板」として用いることで極めて結晶性の良好なエピタキシャル有機半導体 pn 接合を実現し，さらにその電子バンド構造を精緻に解明することで，非局在化した高移動度キャリア状態を利用した高効率な有機 OP デバイスへの応用展開へ向けた学術基盤を確立することを目的とする。 ２）研究成果 昨年度までの協力研究により価電子バンド分散の実測に成功したジナフトチエノチオフェン(DNTT)単結晶[Takeuchi, ... Kera, Hiramoto, Nakayama, J. Phys. Chem. C 125 (2021) 2938 Supplementary Cover に採択]を本年度における研究ターゲットとし，その表面上に n 型分子を積層した界面を作製して結晶構造解析を行った。その結果，DNTT 単結晶表面上において積層した n 型分子が

	エピタキシャルに成長した高秩序界面が実際に得られることを示唆する結果が得られた。一方，本共同研究の主目的である電子構造解析については，2020 年 11 月に貴所解良研究室において試行実験を実施したものの，現時点では成功に至っていない。試料表面の清浄性が一つの問題として懸念されるため，本学において作製した有機単結晶試料を大気に曝露することなく貴所の計測装置へ導入するための機器調達を行っており，2021 年度継続課題の推進に活用する予定である。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 8 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　九州大学大学院
氏名　田中　悟

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	スポット分析型高分解能電子線回折(SPA-LEED)による ツイスト 2 層グラフェンの構造解析		
課題番号	20-204		
所内対応者	氏名　　解良聡	職名　　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	九州大学大学院工学府量子物理工学専攻	修士２年	今村 均
	九州大学大学院工学研究院エネルギー量子工学部門	助教	アントン　ビシコフスキ
	同上	教授	田中 悟
実施した研究の概要（200 字程度以内）	ツイスト２層グラフェン(twisted bilayer graphene: TBG)は、面内回転角度（ツイスト角度）によって異なる新奇物性が認められ、盛んに研究されている。本研究では、分子科学研究所に設置されている国内外でも独自な高分解能スポット分析型低速電子線回折装置を用いた。2020 年度はコロナ禍により分子研での実験は叶わなかったが、既存データについて回折像の精密解析により回転角度および高次構造（モアレ周期や未知の超周期構造）の解析を行った。応用物理学会等で進捗を発表することができた。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	TBG は 5°以下の回転角度では K 点付近の電子状態が大きく変調され、特に Magic angle と呼ばれる角度(~1°)ではフェルミエネルギー近傍においてバンドが平坦化し、超伝導性が現れることが報告され話題となっている。我々は、酸素添加 CVD 法により剥離容易な大面積の単層グラフェンを成長し、それらを高真空中で互いに直接転写することにより大面積で界面が清浄な TBG を得た。一般的な低速電子線回折（LEED）装置では TBG のグラフェン回折パターンやモアレスポットを観察し、詳細な構造を評価することは難しい。本研究では高分解能スポット分析型（SPA-LEED）を用いた。昨年度計測に成功した２つの実験結果についての詳細な解析を進めた。3°-TBG ではグラフェン二層に対応する明瞭な２つの回折スポットが観察された。一方、1.2°-TBG では転写されたグラフェン層のスポットが１）回転方向にストリーク状になっていること、２）モアレスポット（矢印）がストリーク状になっていること、３）モアレパターンが 3 回回転対称であることが観察された。１），２）は TBG のツイスト角度の揺らぎを示しており、マクロ・ミクロスケールの格子緩和と関係していると思われる。３）の回転対称性の低下（緩和なしでは６回）もミクロスケールの格子緩和と関係していると考えられる。理論モデルを種々検討し、クラスターモデルによるシミュレーションを試みたところ、ミクロな緩和現象が起きていることを示唆する結果を得た。 今後はモアレスポットの形状解析をより詳細に進めるために、スポットのエネルギー依存や試料依存を計測する。試料調整と実験スケジュールの都合により、2021 年度後期からの実験再開を希望する。継続課題として後期申請を検討している。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 3 月 31 日

分子科学研究所長　殿

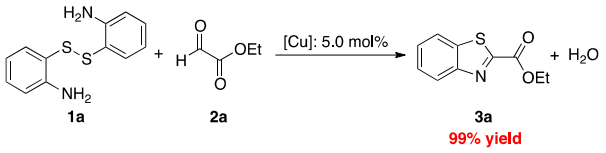
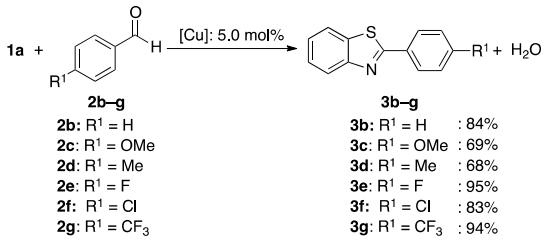
(報告者)
所属　山形大学
氏名　皆川　真規

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	Diaminodiphenyldisulfide 誘導体を用いた触媒的 S-S 結合開裂と C-S 結合構築を伴う新規 benzothiazole の触媒合成		
課題番号	20-205		
所内対応者	氏名　　魚住　泰広	職名　　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
実施した研究の概要（200 字程度以内）	Benzothiazole 骨格は強い生体活性を有し,その誘導体における新規合成法の開発は重要である．本研究では，diaminodiphenyldisulfide 類と aldehyde 類を原料とした触媒反応による環化条件を検討し, diaminodiphenyldisulfide の S-S 結合開裂，続く C-S 結合を経た効率的かつ選択的な新規 benzothiazole 誘導体合成法の開発を目的とした.		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	反応基質として diaminodiphenyldisulfide (**1a**)と ethyl glyoxylate (**2a**)を用い，目的物 benzothiazole 誘導体 **3a** を得る触媒反応条件を検討した（Scheme 1）．この反応は，触媒なしの条件では全く進行しなかった．様々な触媒条件を検討した結果，触媒として Cu 触媒を用いた場合，benzothiazole 誘導体 **3a** を 99%の単離収率で得ることに成功した．  Scheme 1. Reaction of Diaminodiphenyldisulfide (**1a**) with Ethyl Glyoxylate (**2a**). 次に，最適化した触媒反応条件を利用し，diaminodiphenyldisulfide (**1a**)と benzaldehyde **2b-g** との反応を試みた(Scheme 2)．最適化した反応条件下，diaminodiphenyldisulfide (**1a**)と benzaldehyde (**2b**)の反応は，対応する 2-phenyl thiazole (**3b**)を 84%の単離収率で得た．また，芳香環上の *para* 位に電子供与基を有する benzaldehyde 類（**2c**: 4-methoxybenzaldehyde; **2d**: 4-methyl benzaldehyde）との反応において，2-(4-methoxyphenyl)benzothiazole (**3c**) および 2-(4-methylphenyl) benzothiazole (**3d**) をそれぞれ 69%, 68%の単離収率で得た．さらに，芳香環上に para 位電子求引基を有する benzaldehyde 類 (**2e**: 4-fluorobenzaldehyde; **2f**: 4-chloro-benzaldehyde; **2g**: 4-trifluoromethylbenzaldehyde)を用いた場合，2-(4-fluorophenyl) benzothiazole (**3e**), 2-(4-chlorophenyl)-benzothiazole (**3f**), 2-(4-trifluoromethylphenyl)benzothiazole (**3g**) をそれぞれ 95%, 83% および 94%の単離収率で得ることができた．  Scheme 2. Reaction of Diaminodiphenyldisulfide (**1a**) with Benzaldehydes **2b-g**. 今後は，さらなる基質汎用性拡大と反応経路の解明を目指す．
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 12 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　鹿児島大学大学院理工学研究
　　科理学専攻化学プログラム
氏名　伊東　祐二

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	部位特異的な化学修飾のための構造基盤の確立		
課題番号	20-206		
所内対応者	氏名　　加藤　晃一	職名　　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
実施した研究の概要（200 字程度以内）	抗体は標的分子に対する高い親和性を有することから、分子標的治療薬として利用されている。その中で、高機能化、次世代化のために、抗体に殺細胞効果のある低分子薬物をコンジュゲートした抗体薬物複合体（ ADC ）が開発されてきている。伊東グループは抗体への部位特異的な薬物連結方法の開発に取り組み、抗体の Fc 領域の特定の部位に低分子化合物を任意に修飾することが可能となった。このような技術の高度化を行うために、連結反応が進行する際の構造の詳細を明らかにし、薬物連結の反応メカニズムを明らかにする。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	抗体への部位特異的な薬物連結方法の高度化を行うために、薬物連結の反応メカニズムを明らかにすることに取り組んだ。そのために、加藤グループが構造解析手法の支援を行い、連結反応が進行する際の構造の詳細を解明することを目指した。連結反応の際には反応の足場となる、抗体特異的に結合する補助タンパク質（VHH 抗体）を用いている。この足場タンパク質と抗体および薬物の複合体の構造解析を行なった。連結反応の際に用いる VHH や連結する薬物については伊東グループが調製を行い、抗体の調製については、高い技術を有している加藤グループが行なった。結晶構造解析にくわえて分子科学研究所の様々な計測機器を組み合わせた統合的アプローチを実施した。これにより、Fc と VHH 抗体の相互作用のストイキオメトリーとともに、Fc-VHH 複合体の X 線結晶構造を決定することができた。その結果、Fc は VHH 抗体２つと相互作用することが明らかとなり、Fc と VHH との相互作用様式を原子レベルで明らかにすることができた。この VHH 抗体は、比較的珍しい形での Fc の認識様式を示し、Fc の２本重鎖を横からオーバーラップするような形で、Fc に結合することが分かった。これらの情報に基づいて、薬物の導入部位をデザインすることが可能となった。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年　4 月　21 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　京都大学複合原子力科学研究所
氏名　杉山 正明

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	マルチドメインタンパク質の動的構造と機能連関の解明		
課題番号	２０－２０７		
所内対応者	氏名　加藤晃一	職名　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	京都大学複合原子力科学研究所	准教授	井上倫太郎
実施した研究の概要（200 字程度以内）	生体内で働くタンパク質の多くは、複数のドメイン(立体構造上のまとまった単位)から構成されるマルチドメインタンパク質であり、分子内のドメインが協調的に働くことにより生物学的な機能を発揮しているが、その詳細なメカニズムは不明である。本研究では、我々の溶液散乱解析と加藤教授グループの構造解析手法を組み合わせることにより、マルチドメインタンパク質の動的構造と機能発現の関係を明らかにすることを目的とする。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	重水素化タンパク質と中性子小角散乱（SANS）を組み合わせることで、複合体中の標的ドメインや多成分系中の標的タンパク質を選択的に可視化することができるが、この手法を一般的に利用するには、タンパク質の重水素化が困難であること、コストが高いこと、試料の重水素化率の制御・決定が難しいことなどの問題がある。そこで、これらの問題を解決するために、タンパク質重水素化法のプロトコルを提示し、タンパク質の重水素標識をシステマティックに行うための技術基盤の構築を達成した。 さらに、SANS は、選択的な重水素化試料とコントラストマッチング法を組み合わせることにより、複合体中の特定の成分を選択的に観察することができるが、ほとんどの場合、不均一なオリゴマーを持つ生体分子の相互作用系には好ましくない凝集体や未結合の分子種が含まれていることが多く、データの解釈を妨げている。このような問題を解決するために、新たに開発した逆コントラストマッチング（iCM）SANS 法とサイズ排除クロマトグラフィー（SEC）を組み合わせた SEC-iCM-SANS 法を構築し、マルチドメインタンパク質である免疫グロブリン G（IgG）と Fc 結合タンパク質の相互作用をモデル系として，この方法の実現可能性を検討した。その結果、複合体を形成している状態において、IgG および Fc に由来する SANS プロファイルのみを抽出することに成功し、それらの構造変化の詳細を明らかにすることができた。 このように、加藤教授グループとの共同研究を通じて、マルチドメインタンパク質の溶液散乱解析を行う上で重要な技術基盤を整えることができ、成果論文の発表に至った。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020年度）

令和３年４月１４日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　京都府立大学大学院
氏名　沼田 宗典

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	マイクロフロー空間内の局所光励起による超分子ダイナミクスの解析		
課題番号	20-208		
所内対応者	氏名　　岡本 裕巳	職名　　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	京都府立大学大学院	博士課程１年	神崎 千沙子
	京都府立大学	学部４年	竹森 はるな
実施した研究の概要（200字程度以内）	本申請課題では、マイクロフロー空間を反応場として未だ明らかとなっていない超分子形成ダイナミクスの解明を目的としている。独自に開発した in-situ 分光測定用のマイクロチャンネルを用いて、マイクロチャンネルに沿った局所分光測定を実施した。本年度は特に直線偏光を用いて、流通する超分子構造体の配向性と超分子成長速度との関連性を精査した。その結果、超分子構造の配向度と超分子成長速度との間に強い相関があることが明らかとなった。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	既にマイクロフロー空間内における効率的な超分子形成が確認されているポルフィリン誘導体をモノマー分子として、マイクロチャンネルに沿った直線偏光(LD)測定を実施した。本課題の遂行に用いたポルフィリン誘導体は、pH の低下により、一次元にスタックしたファイバー構造を与えることが知られている。本研究では in-situ 分光測定用に独自に開発した十字型の分岐路を持つチャンネル幅を用いた。まず、十字型チャンネルの１つの導入口より、ポルフィリンモノマーの水溶液を導入し、さらに pH３に調整した塩酸を十字路の残りの２つの導入口から導入した。十字路の下流部域において形成された層流に沿って、ポルフィリンモノマーの会合が引き起こされ、ファイバー構造が生成することが解っている。本系においてはチャンネルに沿って成長する超分子ナノファイバーが流線に沿って配向すると考えられる。 次に、チャンネルに沿って一定間隔で直線偏光を照射することにより、空間分解 LD イメージを取得した。その結果、期待した通り、超分子ファイバーが層流の流線に沿って規則的に配向していることが明らかとなった。さらに、超分子ファイバーの分子量が配向度に及ぼす影響を精査したところ、超分子ファイバーの分子量の増加に伴い、配向度も高くなることが LD イメージより明らかとなった。この in-situLD 分光測定を行なった流出溶液の UV-Vis 測定及び AFM 観察を実施し、ファイバーの成長度を見積もった。その結果、興味深いことに、配向度が高い溶液では、ファイバー構造がより伸長していることが明らかとなった。 本研究課題を通して、１）超分子ナノファイバーが層流内部で一方向に配向化すること、２）ファイバーの配向度は分子量の増加とともに向上すること、さらに３）配向化により超分子ファイバーの成長速度が増加すること、などを初めて解明することができた。 本系はマイクロ流体を通した超分子構造の制御であり、原理的には分子（モノマー）構造には依存しないはずである。そこで、本成果の一般性を確認するために、様々な π 共役モノマーを用いて超分子ポリマーの配向性と重合速度の関係性を解明していきたい。2021 年度も引き続き研究を実施していく予定である。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 28 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　大阪府立大学 工学研究科
氏名　戸川 欣彦

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	キラルプラズモンとキラル磁性結晶の結合系の開拓		
課題番号	20-209		
所内対応者	氏名　　岡本裕巳	職名　　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	大阪府立大学 工学研究科 電子物理工学分野	大学院博士前期課程 M2	早川 尚
	大阪府立大学 工学研究科 電子物理工学分野	大学院博士前期課程 M2	松島 陽介
	大阪府立大学 工学研究科 電子物理工学分野	大学院博士後期課程 D2	島本 雄介
実施した研究の概要（200 字程度以内）	キラル磁気結晶 $CrNb_3S_6$ とキラルな金ナノ構造から成るキラル磁性－キラルプラズモン複合系を作製し、光照射下での広帯域ダイナミクス計測を進めた。参照実験用に強磁性薄膜を用いた同様の試料を作製し、予備実験を行った。表面プラズモン場下ではキラル磁気状態を形成する閾値磁場がシフトするなど、表面プラズモン場がキラル磁気状態の形成過程に影響を与えることがわかりつつある。一方、アキラルな強磁性状態では同様の振舞いは観察されていない。今後、より系統的な実験を進めて、キラル磁性－キラルプラズモン複合系の相関を明らかにしていく。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	光励起されたキラルな金ナノ構造から発生するキラルなプラズモン電場を用いてキラル磁性体に発現するキラルな磁気構造を制御・操作することを最終的な目標として、近接場イメージングを用いた局所的な光学活性計測に関して世界最高水準にある岡本研究室と協力研究を進めている。 ２０２０年度の協力研究はコロナ禍の影響もあり研究が思うように進捗していない。その中で、キラル磁気結晶 $CrNb_3S_6$ とキラルな金ナノ構造から成るキラル磁性－キラルプラズモン複合系を作製し、光照射下での広帯域ダイナミクス計測を進めた。 試料作製では、キラル磁性－キラルプラズモン複合系としてキラル磁性結晶上に卍型金ナノ構造を配列する試料構造に着目している。これまで研究実績を重ねてきた試料構造である。試料作製する上でキラル磁性結晶と卍型金ナノ構造の利き手の組み合わせで 4 通りの試料構成が考えられる。電気計測によるキラル磁性結晶の利き手評価を行い、より系統的な実験に向けた準備を進めた。利き手が評価された結晶を用いて微細加工を行い、4 通りのキラル磁性－キラルプラズモン複合系を作製した。また、参照実験を行うために、アキラルな系として強磁性薄膜を用いて同様の試料を作製した。 ダイナミクス計測では、これまで磁気抵抗測定によりキラル磁気構造の光応答をモニターしていた。この手法は静的な構造変化を検出するのに優れているが、ダイナミクスとしては低周波応答に限られる。そこで、キラルプラズモン場がキラル磁気構造へ与える影響をより感度良く検出することを狙い、ダイナミクス計測の広帯域化に取り組んだ。測定範囲を４０GHz までの高周波領域まで拡張し、計測系の安定化などを含めて、予備実験を進めた。 キラル磁性結晶と卍型金ナノ構造から成る複合系の光応答を調べた。表面プラズモン場下ではキラル磁気状態を形成する閾値磁場がシフトするなど、表面プラズモン場がキラル磁気状態に影響を与えることがわかりつつある。これにはキラル磁性特有の表面バリアの関与が示唆される。一方、アキラルな強磁性薄膜と卍型金ナノ構造の複合系では、磁気特性に目立った変化を観察することはできなかった。 今後、より系統的な実験を進めて、キラル磁性－キラルプラズモン複合系の相関を解明し、プラズモン場を用いてキラルな磁気構造を制御・操作するという目標を達成したい。卍型金ナノ構造が示す CD スペクトルについての研究を継続する。また、試料構造の簡略化やより効率的なキラルプラズモン場の発生源の利用が重要になると思われ、卍型金ナノ構造以外の構造体も探索する。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年　4 月 30 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　信州大学 繊維学部
氏名　新井　亮一

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	レクチンナノブロックによる機能性人工タンパク質超分子複合体の設計開発		
課題番号	20-210		
所内対応者	氏名　古賀 信康	職名　准教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	信州大学大学院総合医理工学研究科	D2	入間川 伸
	信州大学大学院総合理工学研究科	M2	矢崎 崇真
	信州大学大学院総合理工学研究科	M1	貝川 はるか
実施した研究の概要（200 字程度以内）	本研究では、タンパク質ナノブロック戦略を応用したレクチンナノブロックを設計開発し、糖鎖に結合する高機能な多価レクチンの人工タンパク質超分子複合体の創出を目的とした。２量体や３量体レクチンをタンパク質ナノブロックに利用したレクチンナノブロック等を設計開発し、機能性人工タンパク質超分子複合体の創出を試みた。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	タンパク質ナノブロック戦略を応用したレクチンナノブロックを開発するために、２量体や３量体レクチンをタンパク質ナノブロックに利用したレクチンナノブロックを構築し、機能性人工タンパク質超分子複合体の創出を試みた。２量体人工タンパク質 WA20 と２量体レクチンまたは３量体レクチンを融合したレクチンナノブロック遺伝子を作製し、大腸菌で発現した。各レクチンナノブロックタンパク質を精製し、ゲルろ過クロマトグラフィーで解析したところ、様々な複合体形成が見られた。 しかし、昨年度は、新型コロナウイルス感染防止対策のため、学生の登校禁止の期間および出張実験の禁止や自粛などの期間が長く設けられたため、研究の進捗が大幅に遅れるとともに、分子科学研究所を訪問して実験することができませんでした。 今後、状況が改善し、研究が進捗して実験試料の準備ができた際に、また、測定解析を検討したいと思います。 それから、過去の協力研究により測定解析した結果を含む論文を執筆、出版しましたので、報告します。（論文の PDF も添付します。） Irumagawa, S., Kobayashi, K., Saito, Y., Miyata, T., Umetsu, M., Kameda, T., Arai, R.* Rational thermostabilisation of four-helix bundle dimeric de novo proteins. *Scientific Reports* **11**, 7526 (2021) DOI: 10.1038/s41598-021-86952-2
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2020 年 3 月 30 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　東京大学大学院理学系研究科
氏名　岡林　潤

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	高効率なスピン偏極電子検出器の開発に向けた表面の化学状態制御法の創出とスピン分解光電子分光技術の確立		
課題番号	20-211		
所内対応者	氏名　　田中　清尚	職名　　准教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
実施した研究の概要（200 字程度以内）	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トポロジカル物性科学におい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。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	別紙参照
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

(別紙)

研究計画及び成果

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。具体的には、MgO 基板上への大面積 Fe 薄膜堆積を行い、スピン分解光電子分光における飛躍的な高効率計測のためのターゲットを作製した。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。

2020 年度の分子研協力研究において、真空蒸着チャンバーによるスピン分解光電子分光測定用のターゲットである Fe 試料の作製を行い、明瞭な低速電子線回折 LEED 像を確認した後に、電子銃を用いた反射率の計測を進めた（図 1）。そして、実際にスピン分解光電子分光を行い、Au(111)の表面状態のスピン分裂の計測を行った。図 2 のように、スピン軌道相互作用により分裂した 2 次曲線的な表面状態を ARPES により観測でき、これのスピン分解 APRES についても示す。これは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たことを示しており、スピン分解計測の実現に近づけたことを意味する。しかし一方で、これではまだ不十分であり、電子レンズパラメータの調整により、像が明確になる条件を探る必要がある。また、問題点も明らかになってきた。ターゲットを磁化する際の漏れ磁場を消磁する必要があること、性能指数（figure of merit）の向上など課題は多い。

今年度はコロナ渦にて分子研訪問に制限があり研究の推進に困難を伴うことも多かったが、田中准教授の強力な研究支援により、スピン分解光電子分光計測を行うことができた。今後は、ここで得られた結晶成長技術をスピン分解光電子分光用のターゲット薄膜作製技術を確立し、Fe と O の化学結合を精密に制御した薄膜を作製する。さらに、VLEED システム用に最適な物質系を検討し、原子レベルで平坦な表面の作製条件を探っていく。将来的には、汎用性のある試料作製装置を備えた偏光可変な高分解能なスピン・軌道分解光電子分光システムを構築し、世界的に競争力のある最先端の表面物理化学用スピン検出装置の創出に繋がる技術となる。

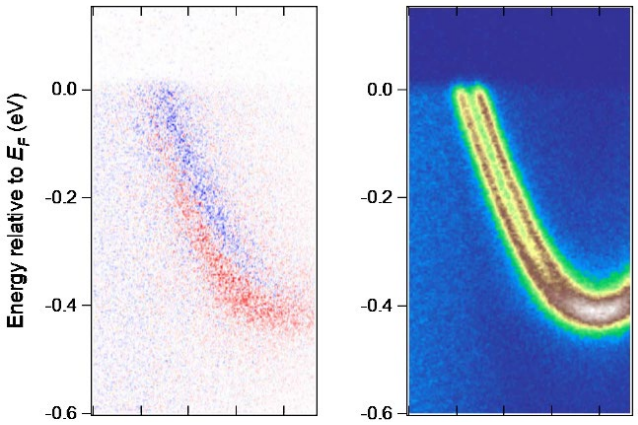


図 1. Au(111)表面状態の角度分解光電子分光イメージ．（右）スピン分解によるイメージ．赤と青はスピン上向き下向きを表わす．（左）通常の ARPES モードでのバンド分散計測．

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 30 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　大阪大学産業科学研究所
氏名　田中　慎一郎

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	ＣＤＷを示す遷移金属カルコゲナイドの波数空間でのバンド変調の研究		
課題番号	20-212		
所内対応者	氏名　　松井　文彦	職名　　主任研究員	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
実施した研究の概要（200 字程度以内）	新しい Momentum Microscopy 装置を用い、遷移金属ダイカルコゲナイドの角度分解光電子分光の研究を行なった。本年度は、装置開発に伴うソフトウエア開発を進めつつ、$TiSe_2$ について詳しい研究を行なった。予想に反して CDW 構造相転移に伴う波数空間でのバンドの Folding を観測することはできなかったが、Ti2p 遷移に伴う角度分解共鳴光電子分光の測定を行い、過去の研究では見られなかった電子ポケットバンドにおける顕著な共鳴増大を初めて観測した。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	本協力研究では、松井主任研究員が中心となって新たに導入した、広い波数空間での光電子を短時間で検出でき、電子顕微鏡機能ももつ新しいタイプの電子分析器(Momentum Microscopy)を用いている。主としてソフトウエア開発の面で装置開発に協力しつつ、遷移金属カルコゲナイド（本年度は $TiSe_2$）の角度分解光電子分光の研究を行なっている。 １）ソフトウエア開発について： 測定は装置のメーカーである SPECS 社製のものを用い、本協力研究では、主として解析ソフトウエアを作成している。開発および実行環境として、現代最も先進的と言われている Python 言語を選び、ビームラインの PC だけでなく、USB メモリを利用することでユーザーが自分の環境で（インストールすることなく）利用できる実行環境をつくった（Windows, MacOS, Linux といった複数の OS 上で動く）。特徴的なところは、ライブラリによる発展性が高いという Python 言語の長所を生かし、たとえば３次元・４次元のデータ解析は、Mayavi, Paraview、２次元の画像解析は OpenCV などの、既存の高度な性能を持つ標準的ソフトウエアを利用できるようにしているところである。また、レンズ系の最適化の効率をあげるためのソフトも開発している。 2) $TiSe_2$ の共鳴角度分解光電子分光 $TiSe_2$ は擬二次元を持つことで知られる遷移金属カルコゲナイドの一つであり、多くの研究者の注目を集めている。$TiSe_2$ の特徴的な電子状態は、フェルミレベルにおいて電子ポケットとして機能するバンドである。励起エネルギーを Ti2p→Ti3d 吸収の付近でスキャンし、角度分解光電子分光の変化を観測した。すると、Ti2p→Ti3d 吸収ピークに対応する励起光で、電子ポケットに起因するバンド強度が強い共鳴増大を起こすことがわかった。これは、Ti3d 電子による Ti2p 正孔の脱励起プロセスと Ti3d 電子の光励起プロセスの共鳴による強度増大に起因し、電子ポケットバンドがほぼ純粋な Ti3d からなっていることの直接的証拠である。$TiSe_2$ の共鳴光電子分光の研究はこれまでもあったが、角度分解の結果はこれが初めてである。 今後はソフトウエア開発を進行するとともに、他の興味深い２次元系物質の角度分解共鳴光電子分光の研究を行なっていく。特に、新しい太陽電池としての応用が興味深い、SnS、SnSe の角度分解光電子分光の研究を進める予定である。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 30 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　　大阪大学　大学院　工学研究科
氏名　　赤松　史光

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	不安定共振器型マイクロチップレーザーを用いたガスブレイクダウンに関する研究		
課題番号	20-213		
所内対応者	氏名　　平等拓範	職名　　特任教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	大阪大学　工学部　機械工学専攻	教授	赤松　史光
	京都大学 エネルギー科学研究科 エネルギー変換科学専攻	准教授	林 潤
	大阪大学 工学部 燃焼工学研究室	特任研究員	森本 巌
実施した研究の概要（200 字程度以内）	内燃機関における強力な点火源としてレーザー誘起ブレイクダウンを用いたレーザー点火が期待できる. 本協力研究では, 大阪大学燃焼工学研究室のレーザー点火に関する知見を基盤に, マイクロチップレーザーにおけるガスブレイクダウン機構の把握などの学問的新しい領域の開拓, および実用化に向けた仕様検討を行うことを目的としている. 本年度は, 分子研で研究開発している不安定共振器型マイクロチップレーザーを想定し, 大阪大学のフェムト秒レーザーを用いたガスブレイクダウン試験を実施し, レーザーに求められる仕様の検討を行なった.		

（裏面に続く）

	レーザー誘起ブレイクダウンを用いた内燃機関における点火は,従来の点火手法である電気火花点火と比較して強力点火が可能である.強力な点火源をもつ内燃機関では,低燃費,低排出に重要な高圧縮,高過給,希薄燃焼での効率的な燃焼が期待できる.そのため,次世代の革新的な燃焼技術の基盤となる要素として期待されている.しかし,レーザー誘起ブレイクダウンを用いた点火システムは,未だ内燃機関への実用化には成功していない.この最大の理由はレーザーのサイズにあったと言える.貴研究所 平等特任教授は,受動 Q スイッチマイクロチップレーザーを用いることで,レーザープラグの小型化に成功している.このマイクロチップレーザーは,サブナノ秒でのパルス発振が可能であることから時間的なエネルギー密度が高く,強力点火が期待できる.さらに,これまでの平行平板タイプの安定型共振器においてアンプ機構を用いずに高出力化を図る際に問題になっていたビーム品質の劣化への対応として,不安定型共振器を用いたマイクロチップレーザーの研究が進められている.
得られた研究成果(1200 字程度以内) 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。	本協力研究では,大阪大学燃焼工学研究室がこれまでに行ってきた,ナノ秒レーザーを中心にしたレーザー点火に関するデータや知見を基盤として,サブナノ秒での発振が可能なマイクロチップレーザーにおけるガスブレイクダウン機構の把握,燃料分子に対するエネルギーの伝達や分子レベルの反応について本マイクロチップレーザーを用いて理解し,学問の新しい領域を開く基礎となる知見を得るとともに,実用燃焼器に展開する際に必要な仕様の検討を行うことを目的とした. 本年度,大阪大学では,不安定共振器型マイクロチップレーザーの集光性が高いこと,パルス幅が短いこと,高いビーム品質を維持したまま高出力化が比較的容易であることを考慮し,レーザー光源として大阪大学燃焼工学研究室のフェムト秒レーザー（パルス幅:100fsec,波長:800nm, M^2:<1.25）を用いたガスブレイクダウン試験を実施し,生成されるプラズマの大きさをシュリーレン法により計測した.その結果,パルスエネルギーが1.0mJのフェムト秒レーザーを焦点距離150mmの平凸レンズで集光すると,長さ2.7mm程度のプラズマが生成された.以前に実施したナノ秒レーザー（パルス幅:8ns,パルスエネルギー14.0mJ）を焦点距離100mmの平凸レンズで集光した場合のプラズマの長さは 0.9mm であったことから,ビーム品質が高いことで集光性が上がり,パルス幅を短くすることで尖頭値が高くなることで,小さいパルスエネルギーでプラズマが生成されやすくなり,プラズマの長さも長くなっている.点火において,プラズマが大きくなると,予混合気を構成する分子との反応確率が上がることから点火性の向上につながる.今回の試験ではパルス幅100fsecのレーザーを用いたが,高いビーム品質にてサブナノ秒で発振する不安定共振器型マイクロチップレーザーにおいても比較的大きなプラズマを生成すると考えられ,不安

	定共振器型マイクロチップレーザーはレーザー点火において有効なレーザー光源であると考えられる. 今後, 不安定共振器型マイクロチップレーザーを用いたプラズマの計測を行ない, 検証することを検討している.
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 28 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　名城大学理工学部
氏名　西山　桂

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	半導体ナノワイヤのソフトマテリアル中への固定化に基づく光電変換機能発現		
課題番号	20-214		
所内対応者	氏名　　平本　昌宏	職名　　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	名城大学大学院理工学研究科	M1	世良　基史
	名城大学理工学部	4 年	山本　実佳
	名城大学理工学部	4 年	東山　航大
実施した研究の概要（200 字程度以内）	既存の量子ドットを現実的に太陽電池として使用した場合、モル吸光係数が小さいので、光電変換効率が実効的には 15%程度に留まっている。そこで我々は、量子ドットと同じ原料（CdSe）を用いた「量子ナノワイヤ」を開発した。この材料は、CdSe が紐状に伸びた構造をしており、長さ 10 μm、直径 15-20 nm の構造を持つ。量子ナノワイヤは、その一次元に伸びた構造のため、電子が他のワイヤに飛び移ることなく、同じワイヤ内を紐の方向に沿って移動する。この濃度は、既存の量子ドットの実に 1 万倍である。このため、太陽光を量子ドットよりはるかに効率よく吸収することができると期待される。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	まず、カルボン酸誘導体やチオール類といった有機化合物を用いて CdSe 量子ナノワイヤの表面を疎水化処理した。量子ナノワイヤの固定には、申請者らが開発した自己組織化オルガノゲルを使用した（西山，他, Langmuir, 32 (2016) 4352–4360）。このゲルは、フェノール類と界面活性剤とが有機溶媒中において自発的にゲル化した材料である。申請者は既に、カルボン酸誘導体を用いて表面修飾した CdSe 量子ナノワイヤがオルガノゲル中に高濃度で分散可能であることを実験的に確認した。本研究では、まず CdSe 量子ナノワイヤの表面修飾技術を最適化し、オルガノゲル中にさらに高濃度（0.01 M）への分散を可能とした。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 26 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　愛媛大学大学院理工学研究科
氏名　太田　英俊

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	ポリ（トリアリールホスフィンスルフィド）保護サブナノ金属クラスター触媒の開発		
課題番号	20-215		
所内対応者	氏名　　魚住　泰広	職名　　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
実施した研究の概要（200 字程度以内）	本研究では、ポリ（トリアリールホスフィンスルフィド）を表面保護剤とするサブナノ金属クラスター触媒を開発し、その有機合成反応における触媒機能を調査した。まず、4 種の新規ポリ（トリアリールホスフィンスルフィド）を合成し、これらを保護剤とする Pd 触媒を調製した。TEM 分析の結果、目的とするサブナノサイズの Pd クラスターの生成を確認した。調製した触媒はアルキンの部分水素化反応に活性を示し、最高収率 96%でアルケンを与えた。		

（裏面に続く）

得られた研究成果(1200 字程度以内) 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。	１ナノメートル以下のサイズを有するサブナノ金属クラスターは、金属原子と金属ナノ粒子の中間サイズに位置する新規物質群であり、その調製法の開発と機能探索が行われている。申請者らは以前、1,4-フェニレンビス(ジアリールホスフィンスルフィド)存在下で Pd(II)塩を液相還元するとサブナノ Pd クラスターが生成し、本クラスターがアルキンの部分水素化反応の固体触媒として利用可能であることを見出している。しかしながら、本触媒は再利用性に乏しく、１回反応後の触媒ではクラスターの凝集によるサイズ増大と金属溶出が確認された。そこで本研究では、金属種をより安定化すると期待される高分子配位子ポリ(トリアリールホスフィンスルフィド)を合成し、これを表面保護剤とするサブナノ Pd クラスターの調製および触媒機能の評価を行った。 【結果】4 種の新規なポリ（トリアリールホスフィンスルフィド）を合成し、これらを保護剤とする Pd 触媒を調製した。TEM 分析の結果、目的とするサブナノサイズの Pd クラスターの生成を確認した。調製した触媒はアルキンの部分水素化反応に活性を示し、最高収率 96%でアルケンを与えた。反応後の触媒は回収・再利用が可能であった。 【今後の研究計画】本研究で開発した高分子配位子と触媒調製法により、Pd 以外の金属（Pt, Rh, Ru, Au 等）からサブナノクラスターを調製できるか検討を行い、その触媒機能の評価を行う。
その他	特になし

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年　4 月　21 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　名古屋大学大学院工学研究科
氏名　村手宏輔

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	高強度マイクロチップレーザーを用いた高出力テラヘルツパラメトリック発生器の開発		
課題番号	20-216		
所内対応者	氏名　　平等拓範	職名　　准教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	名古屋大学大学院工学研究科	教授	川瀬晃道
	名古屋大学大学院工学研究科	M1	嶺颯太
実施した研究の概要（200 字程度以内）	分子科学研究所で開発されたマイクロチップ Nd:YAG レーザーを用いて，テラヘルツパラメトリック光源の高出力化を目指した．従来テラヘルツパラメトリック発生に用いる励起光のビームモード(横モード)を制御することが出来ず，影響を評価出来ていなかった．そこで本研究では，分子科学研究所のマイクロチップ Nd:YAG レーザーと，近年開発されたゲインアパーチャーを導入することによって，励起光のビームモードを制御可能とし，テラヘルツ発生の最適化を行った．		

（裏面に続く）

得られた研究成果(1200 字程度以内) 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。	我々の開発する光注入型テラヘルツ波パラメトリック発生器(is-TPG) は Nd:YAG レーザーをニオブ酸リチウム($LiNbO_3$)結晶に入射しパラメトリック波長変換によりテラヘルツ波を発生する装置である．近年マイクロチップ Nd：YAG レーザーを励起光源として導入することで出力が飛躍的に向上し，テーブルトップサイズにも関わらず自由電子レーザーをも凌駕する出力が得られた．さらに発生と逆の原理を用いてテラヘルツ波の高感度検出も可能であり，高いダイナミックレンジを有する分光システムが実現している．しかし，現在出力は飽和しており，さらなる高出力化には励起光ビームモードの最適化やより高強度な励起光が必要である．そこで，本研究では分子科学研究所のマイクロチップ Md:YAG レーザーと近年開発されたゲインアパーチャーをテラヘルツパラメトリック光源に導入することにより，テラヘルツ発生の最適化/高出力化を目指した． 今回導入を行ったゲインアパーチャーは，光の増幅を行いつつビームモード改善が可能であり，アライメント次第でビームモードを連続的に制御できる．こちらを励起光光路上に設置し，ビームモードの改善を図ったところ，もともと2以上であったM^2を1.5程度まで改善できた．また，ゲインアパーチャーの増幅効果によって6 mJ程度まで出力が増幅され，こちらを用いてis-TPGを構築した．is-TPGの入出力特性を測定したところ，今回制御可能なM^2値の範囲において有意な違いは見られず，テラヘルツ波発生に大きな影響を与えなかった．ただし，今回の制御できる範囲は$M^2 \pm 0.5$程度と狭かったため，範囲外のビームモードでは影響がある可能性が残っており，今後オシレータの改善やゲインアパーチャーのアライメントにより，ビームモードをより良くし，高強度THz波発生を目指していく． 今回はビームモードの改善に留まったが，今後も継続して研究を進め，分子研で所有する100mJを超える高強度レーザーのis-TPGへの導入も検討したい．また，発生するテラヘルツ波の安定化を目指して，パルストレイン化による擬似的な繰り返し周波数の向上も行っていく予定である．
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 3 月 31 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　大阪工業大学工学部
氏名　大高敦

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

<table>
<tr><td>研究課題名</td><td colspan="3">極微量金属種による触媒反応における金属種の再利用</td></tr>
<tr><td>課題番号</td><td colspan="3">20-251</td></tr>
<tr><td>所内対応者</td><td>氏名　　魚住泰広</td><td colspan="2">職名　　教授</td></tr>
<tr><td rowspan="6">共同利用研究者</td><td>所属</td><td>職名</td><td>氏名</td></tr>
<tr><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>実施した研究の概要（200 字程度以内）</td><td colspan="3">本研究では，我々がこれまで得た知見を基に，ppm 量の金属種の再利用システムの開発を目指し種々検討を行った。具体的には，テフロンコーティング材料の触媒担体としての有用性について調べるため，まず市販の撹拌子を用いて金属種の担持を検討し，数種類のカップリング反応をモデル反応とし，触媒活性評価を行った。</td></tr>
</table>

（裏面に続く）

得られた研究成果(1200 字程度以内) 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。	鈴木カップリング反応をモデル反応とし検討を行った結果，撹拌子上に付着した数十 nmol (基質に対して ppm レベル)の Pd 種が水中での鈴木カップリング反応に高い触媒活性を示し，さらに撹拌子の再利用も可能であることを確認した。また有機溶媒中では全く反応が進行しないことより，撹拌子を担体とする金属触媒は水中で特異的に活性を示すことがわかった。なお本研究の結果は，Carbon Materials and Nanotechnology Online Summit (2020 年 6 月 30-31 日)において発表した。 また檜山カップリング反応においても魚住教授らの報告した反応条件下において，撹拌子上の Pd 種が高い触媒活性を示すことを確認している。また撹拌子上に Pd だけでなく，他の金属種を共存させることにより，再利用性が著しく向上することを確認した。今回の研究期間では残念ながら理由の詳細を明らかにすることはできなかったが，今後も継続して検討を行う予定である。また本研究内容については，本学において特許申請の手続きを行っているところである。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 28 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　静岡大学農学部
氏名　中村　彰彦

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	プラスチック分解酵素の改変と分解活性の計測		
課題番号	20-252		
所内対応者	氏名　　飯野亮太	職名　　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
実施した研究の概要（200 字程度以内）	構造モデルに基づく部位特異的変異導入を併用し、メタゲノムライブラリーから同定されたリパーゼである PET2 の耐熱性を改善して変性温度を 75.7°C まで引き上げることに成功した。この耐熱化 PET2 の 68°C での PET 分解反応は天然型 PET2 の 60°C での PET の分解反応よりも 6.8 倍早かった。 また耐熱化 PET2 の X 線結晶構造を明らかにし、導入した変異による構造の変化を確認した。更に蛍光標識した天然型 PET2 と耐熱化 PET2 を用いて、PET 繊維に対する吸着と脱着の 1 分子蛍光イメージングを行った。その結果、耐熱化 PET2 では酵素表面に導入した塩基性残基により PET 表面へ静電的に集まり、吸着速度定数が 2.7 倍高いことが明らかとなった。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	**1. 部位特異的変異導入による PET2 の耐熱性改善と高活性化** IsPETase を鋳型としてホモロジーモデリングで得た PET2 の構造に対して、変異導入箇所の選定を行った。構造を安定化させるためにαヘリックス末端及びループ上へのプロリン変、主鎖構造安定化変異及び追加のジスルフィド結合の導入変異の効果を調べた。加えて PET 分解活性を上昇させるために IsPETase との比較により酵素表面への変異を導入しその効果を調べた。T_m 及び PET 分解活性が向上した変異の統合を行った結果、最終的に Tm が 75.7ºC となり、PET 分解の至適温度が 68ºC となった。天然型 PET2 の 60ºC での分解活性と比較して、6.8 倍高い活性を示す変異体を作成できた。 **2. 耐熱高活性化 PET2 の X 線結晶構造解析** 耐熱及び高活性化 PET2 の結晶を作成し、X 線結晶構造解析を行った。1.8Å での構造解析に成功し、7 つの変異が確かに導入されていることを確認した。特に N 末端側に導入した C47 と C89 がジスルフィド結合を形成していることも確認でき、耐熱性が向上した理由を解明できた。 **3. 耐熱高活性化 PET2 と天然型 PET2 の 1 分子蛍光計測による吸着特性解析** 天然型 PET2 及び耐熱高活性化 PET2 の C 末端側にシステイン残基を導入し、マレイミド機を介して位置特異的な蛍光色素での標識を行った。次に PET フィルムを溶媒に溶解して夾雑物を洗浄した後、ガラス上に固定することで 1 分子蛍光計測の基質を作成する方法を開発した。明視野観察で PET 繊維の位置を確認し、10 nM 標識酵素により PET 繊維が特異的に染色されることを確認した。また 50 pM の標識酵素を滴下することで酵素 1 分子の吸脱着を計測することができた。解析の結果、耐熱高活性化 PET2 の吸着速度定数は天然型の値よりも 2.7 倍高く、これが高活性化の理由であると考えられた。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 3 月 31 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　山形大学理学部
氏名　北浦　守

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

<table>
<tr><td>研究課題名</td><td colspan="4">超短パルスガンマ線誘起陽電子消滅分光法を用いた原子空孔型欠陥分析法の開発</td></tr>
<tr><td>課題番号</td><td colspan="4">20-254</td></tr>
<tr><td>所内対応者</td><td>氏名</td><td>平　義隆</td><td>職名</td><td>准教授</td></tr>
<tr><td rowspan="6">共同利用研究者</td><td colspan="2">所属</td><td>職名</td><td>氏名</td></tr>
<tr><td colspan="2">山形大学理学部</td><td>教授</td><td>北浦　守</td></tr>
<tr><td colspan="2">山形大学大学院理工学研究科</td><td>博士前期課程 2 年</td><td>谷口　光</td></tr>
<tr><td colspan="2">日本原子力研究開発機構</td><td>研究主幹</td><td>平出　哲也</td></tr>
<tr><td colspan="2">名古屋大学大学院工学研究科</td><td>博士前期課程 1 年</td><td>山本　涼平</td></tr>
<tr><td colspan="2"></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>実施した研究の概要（200 字程度以内）</td><td colspan="4">本研究では、ガンマ線誘起陽電子消滅寿命分光(GiPALS)を発展させたガンマ線誘起陽電子消滅寿命運動量相関(GiAMOC)法の開発に取り組んだ。この方法では、空孔型欠陥の存在だけでなく、空孔型欠陥の局所構造を知ることができる。今年度は、GiAMOC システムの開発を行い、消滅ガンマ線のエネルギー拡がりを示す S パラメータの時間変化を計算できるプログラムを開発した。実際に SUS の測定を行い、陽電子寿命が参考値と概ね一致し、現状の統計では S パラメータが時間によって変化しないことを確認した。</td></tr>
</table>

（裏面に続く）

得られた研究成果(1200 字程度以内) 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。	【実施計画】今回の協力研究では、GiPALSをより発展させたガンマ線誘起陽電子消滅寿命運動量相関(GiAMOC)法を開発して、原子空孔周辺の局所構造解析法を確立することが目標である。この方法では、GiPALSで見いだされた空孔型欠陥の陽電子消滅寿命成分を時間分解して抽出し、その運動量分布を調べることが可能であり、その結果から周辺の原子分布に関する情報を得ることができる。その測定システムの開発を行った。 【測定システムの開発】試料に照射する超短パルスガンマ線の発生に使用しているレーザーと超短パルスガンマ線の照射によって試料内部で発生する2本の対消滅ガンマ線のトリプルコインシデンスによってトリガーをかけ、デジタルオシロスコープでそれら全ての波形を保存し自作のプログラムを用いて時間とエネルギーを計算した。この計算により、GiAMOCでは時間とエネルギーの2次元ヒストグラムが得られる。2本の消滅ガンマ線は、180度方向に対向放出されるため、試料を挟んで高速時間応答のBaF_2検出器と高エネルギー分解能のゲルマニウム検出器を設置した。ゲルマニウム検出器の波高値をエネルギーに変換する校正計数の算出には、密封線源を用いて行った。 【測定事例】 産総研計量標準総合センターが供給しているSUSの測定を行った。寿命スペクトルは単一指数減衰関数によってフィッティングでき、その寿命値は参考値と概ね一致した。エネルギー分布のピークトップ付近には価電子との消滅に関する情報が含まれ、裾付近には内殻電子との消滅に関する情報が含まれる。前者はShape(S)パラーメータと呼ばれ、後者はWing(W)パラメータとよばれる。GiAMOCの結果を解析してSパラメータとWパラメータを決定すれば、空孔型欠陥の化学的環境を知ることができる。Sパラメータは、ピークトップから±0.16%のエネルギー範囲内の度数を積分し、その積分値をエネルギー分布全体の度数を積分した値で割り算して得た。測定したSUSのSパラメータは、時間領域全体において不確かさの範囲内で一定であった。これは、測定した試料では陽電子が欠陥で消滅しないために、バルク成分からの寄与が支配的であることに起因していると考えられる。次年度にはGAGG:CeとMg共添加GAGG:CeにおいてGiAMOCの測定を行い、複合欠陥対の局所構造を明らかにする。ガーネットには3つのカチオンサイトがあり、そのうちのどこに空孔が生ずるのか今もなお不明であり、この問題を解決できる唯一の方法がGiAMOCである。共添加効果による発光特性の変化は他のガーネット蛍光体でも見いだされており、その共添加元素の果たす役割を解き明かしたい。来年度初めにUVSOR蓄積リングの一部を改造することで超短パルスガンマ線強度が10倍以上向上する予定なので、ビームタイム中に十分な統計が得られる予定である。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 30 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　九州シンクロトロン光研究センター
氏名　金安達夫

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	シンクロトロン光源による軟 X 線コヒーレント制御		
課題番号	20-255		
所内対応者	氏名　加藤政博	職名　特任教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
実施した研究の概要（200 字程度以内）	直列配置された二台のアンジュレータを通過する電子はダブルパルス状の放射を発する．最近我々は UVSOR のタンデムアンジュレータで得られる極端紫外波長域のダブルパルスを用いて，シンクロトロン光源による原子の量子状態制御に成功した. 本研究課題ではこの手法を軟 X 線波長域へと拡張し，原子から放出された光電子の波束干渉の観測に成功した.		

（裏面に続く）

得られた研究成果(1200 字程度以内) 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。	シンクロトロン光源における電子の放射波形は磁場中での電子の運動を正確に反映している．たとえば直列配置された二台のアンジュレータを通過する電子はダブルパルス状の放射を発する．ここでパルスの電場サイクル数はアンジュレータの磁石周期数で決まり，ダブルパルスの時間間隔はアンジュレータ間の電子軌道を蛇行させることでアト秒レベルで操作できる.最近我々はUVSORのタンデムアンジュレータで得られる極端紫外波長域のダブルパルスを用いて，シンクロトロン光源による原子の量子状態制御に成功した．本研究課題ではこの手法を自由電子へと拡張し，軟 X 線のダブルパルス状の放射を用いて原子から放出された光電子の波束干渉制御を試みた. ダブルパルスによるイオン化では光電子の波束ペアが生成される．この波束ペアの自由空間における干渉はダブルパルスの遅延時間によって制御され，光電子スペクトル上の干渉構造として観測される．ただし干渉構造を観測するためにはダブルパルスの遅延時間を光周期より充分に短い時間スケールで精密に制御する必要がある．本研究で用いた軟 X 線波長域の光周期は数十アト秒であり，アト秒レベルでの遅延時間制御が必須となる．実験は UVSOR の光源開発ビームライン BL1U で行った．光源は二台の直列配置されたアンジュレータである．ビームラインに光ビームの輸送路，光整形部と作動排気部を取り付け，末端に気相試料用の半球型電子エネルギー分析器を設置した. シンクロトロン光源による光電子の波束干渉を検証するため，アンジュレータ放射の中心光子エネルギーをおよそ 95 eV へ設定し，30 サイクルのダブルパルスを用いてヘリウム原子の光電子スペクトルを測定した．測定された光電子スペクトルには干渉縞が明瞭に見いだされた．また遅延時間に依存して干渉構造が変化する様子も確認できた．さらに光の波長域やサンプルをその他の希ガス原子へ変えた測定を行い，いずれの測定条件においても光電子波束の干渉を観測することに成功した．一連の測定結果は理論計算と良く一致しており，本実験によってシンクトロン光源を用いた光電子の波束干渉が実証できたと考えている．次年度は公表用のデータを得るために追加の測定を行い，早々に研究成果を論文へまとめる予定である.
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 5 月 14 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　横浜国立大学大学院工学研究院
氏名　　大野　真也

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	グラフェンおよび遷移金属ダイカルコゲナイド原子層の角度分解顕微光電子分光測定		
課題番号	20-256		
所内対応者	氏名　松井　文彦	職名　主任研究員	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	横浜国立大学大学院工学研究院	准教授	大野　真也
	横浜国立大学大理工学府	修士 2 年	青柳　良英
実施した研究の概要（200 字程度以内）	化学気相成長(CVD)法により作製されたグラフェン基板は触媒材料、半導体デバイス材料として期待されている。また、グラフェン基板と有機薄膜の接合構造により発光特性や磁気特性を制御することが可能であり、機能性の探求が進められている。 本研究では、光電子運動量顕微鏡(MM)を用いて単層 CVD グラフェンおよび鉄フタロシアニン(FePc)薄膜との接合構造の電子状態の解析を行った。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	単層 CVD グラフェンは、種々の基板上に作製可能であるが、本研究では銅箔を用いて作製しシリコン酸化膜上に転写した試料を用いた。大量生産可能であり、触媒、デバイス応用の研究に適しているためである。 光電子運動量顕微鏡(MM)測定により、グラフェンに特有のバンド分散を確認した。約 5 μm の面内分解能でマッピングデータを取得しドメイン構造とその分布状況を解析した。バンド構造データを、対称点であるΓ点、K 点、M 点に着目し整理した。CVD グラフェンでは、多結晶状に方位の異なるドメインが共存し、単層を保ちつつドメイン境界では 5 員環、7 員環が導入されドメインが連結している。ドメイン境界近傍ではバンド分散は等方的になるが、ドメイン内部では明瞭バンド分散が得られることを確認した。これまで、局所プローブ顕微鏡等により局所電子状態の解析が盛んに進められている。本実験結果によれば、電子状態の面内推移はミクロンオーダーで明瞭に変化しており、伝導特性もこのスケールでの推移がデバイス特性を支配すると考えられる。この意味で、局所電子状態の知見に加えてよりマクロなレベルで電子状態の面内推移を捉えることにより、ミクロな構造と伝導特性との関連を明確にすることが期待できる。 鉄フタロシアニン(FePc)分子との相互作用においては、価電子状態の変化が認められたが、その要因はまだ十分に解明できていない。特に、異なる方位のドメイン構造の共存により、分子膜の構造に非一様性が現れることが予想されるが、その把握にまでは至っていない。下地の非一様性にも関わらず、分子膜の電子状態が一様性を保つことも十分考えられる。この系では、FePc 分子の磁気特性の検討も進めており、今後さらに解析を進める予定である。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2020 年 11 月 17 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　大阪大学産業科学研究所
氏名　菅　滋正

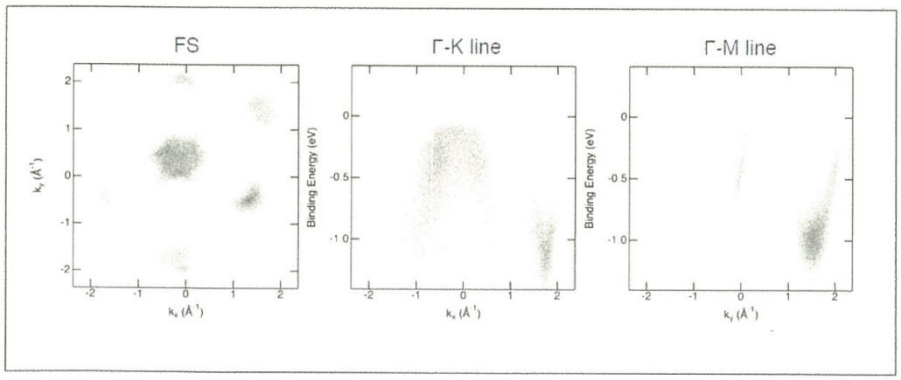
下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	UVSOR 光電子分光装置の超高性能化に向けた分光系と実験装置の性能把握実験		
課題番号	20-257		
所内対応者	氏名　　松井　文彦	職名　　主任研究員	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	大阪大学大学院工学研究科	大学院生	小林　宇宏
	大阪大学大学院工学研究科	教授	坂本　一之
	大阪大学大学院工学研究科	大学院生	岩本　恵実
実施した研究の概要（200 字程度以内）	分光系の性能（エネルギー分解能とエネルギーの再現性）と冷却試料微調駆動装置の性能を調べるために、η－Mo_4O_{11} の Momentum Microscopy を中心に測定実験を行った。実験結果の再現性は確認出来た。但し昔他グループによって波数空間の一部で報告されていた分散が 1 か所見られなかったために、試料を作りなおしての実験を考えている。また電荷密度波(CDW)で注目されている 1T-TaS_2 についての実験ではわずか 1 日で CDW 転移上下での 3 次元波数空間でのバンド分散並びに転移による変化を完全測定することが出来た。、今後はη－Mo_4O_{11} 料の新しい試料での実験を行った後に、静電半球型電子エネルギー分析器を 2 台にするとともに、2 次元スピンフィルタ Au/Ir(001)を取り付けることで、世界最先端のスピン分解光電子波数分解顕微鏡装置の整備に入りたいと考えている。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	広い波数空間での nesting によっておこるとされる電荷密度波(ChargeDensity Wave:CDW)転移を、高い分解能（エネルギー並びに波数）と高い信頼度とで解明することが出来るかどうかを確かめられる装置であるかどうかを早い段階でチェックする事が協力研究の目的の一つであった。また多様なかつ少数の試料であっても実験の再現性をいつでもチェックできるように、へき開した測定試料のみならずもう一方のへき開板に付いた試料さえも再度のへき開実験に耐えらえるようなへき開機構を将来のユーザーに提供できるような考察を行うことも協力研究の課題の一つの項目と考えた。 まず最初に取り上げたのは η－Mo_4O_{11} 単結晶であった。この試料はへき開はなかなかにうまくいかないとの試料提供者のコメントであったが、我々のへき開機構ではこれまでの数個のへき開にはことごとく全て成功している。この物質は高温側での CDW は 109K で起こり、低温側での CDW は 30K で起こるとされているが、これらの温度の上下の温度で、数十 μm 領域での （kx, ky） ともに±1.5A^{-1} 領域の E_B(kx,ky)を、色々な E_B で測定し、10K, 20K, 30K. 40K, 50K、90K, 100K, 110K, 120K, 130K 等でのデーターを蓄積出来ている。もとより如何なる kx-ky 方向でのバンド分散でも瞬時に蓄積データーから切り出せるのが Momentum Microscopy の有用な所である。Fermi 面形状、バンド分散共に高質のデーターが蓄積出来ているが、前述のようにある文献で報告されているフェルミ準位が、観測にかかっていないので、その点を確かめるために、新たに結晶を作製したので、その点を確認する意味での追加実験を実行したいと考えている。その測定が終われば論文発表が可能である。 へき開装置について言えば、すぐには測定しないへき開部試料を安全確実に回収できる試料バンクの準備が必須であると考える。またへき開専用の wobble stick を準備することも必須であると考える。協力研究員旅費が出せる範囲においてその設計のために 1 週間程度の出張が必須の条件であると考えている。 ちょうどビームタイムに 1 日の猶予が出来たので以前からやりたいと考えていた 1T-TaS_2 の Momentum Microscopy にも挑戦した。この物質は 350K より高温側で incommensulate CDW, これ以下で約 180K までは nearly commensulate CDW 系、そして 180K 以下で金属絶縁体転移(MIT)を起こす物質として知られている。この物質も完全にへき開でき、広い波数空間で完全なバンド分散を得ることに 12 時間で成功した。おそらくこれまでに報告されているどの論文よりも完全なバンド分散とその温度変化を測定することに成功したと思われる。室温でのデーターを下記に示す。データー整理が終わり次第論文発表予定である。300K,66eV 励起の例を示す。

	
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年4 月 16 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　（地独）東京都立産業技術研究センター
氏名　中川　清子

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	放射線照射により生成するマルトースのラジカル生成機構への水和水の効果		
課題番号	20-258		
所内対応者	氏名　　中村　敏和	職名　　チームリーダー	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	機器センター分析チーム	ﾁｰﾑﾘｰﾀﾞｰ	中村　敏和
	機器センター分析チーム	技術員	浅田　瑞枝
実施した研究の概要（200 字程度以内）	線量計への応用を目指して、放射線照射した糖類のラジカルについて同定・生成機構等について検討している。CW-ESR での測定で、無水マルトースとマルトース一水和物では、生成するラジカル種に違いが見られることがわかった。そこで、両者の核スピンとの相互作用を比較検討し水和のラジカル生成機構への影響を調べるため、機器センター所有の ESR 装置により ENDOR 法で測定した。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	照射した無水マルトース粉末について、測定温度：110K で ESR 測定を行い、3397 ガウス付近で吸収のピークとなる事が確認された。 設定磁場：3397 ガウス、マイクロ波強度：0.25~1mW、ラジオ波 13～50MHz（変調周波数：200kHz）で ENDOR 測定を行った。 14.5MHz 付近に強い信号が現れたが、他に明瞭な信号は確認されなかった。ラジオ波周波数：14.5MHz で EIE 測定を行うと、ESR 測定と同様なスペクトルが得られ、マルトースのラジカル由来である事が確認できた。 照射したマルトース一水和物粉末に対しても、同様の測定を行った。設定磁場：3397 ガウス、マイクロ波強度：0.1mW、ラジオ波 13～50MHz（変調周波数：200kHz）での ENDOR 測定では、14.5MHz 付近の強い信号の他に、24MHz、43MHz 付近に弱い信号が存在するように見えたが、EIE 測定したところ 3404 ガウスに弱いシャープな信号を示し、石英（試料管）中の不純物にトラップされた信号と思われる。一方、14.5MHz での EIE 測定は、ESR スペクトルを再現した。 無水マルトースとマルトース一水和物の ENDOR 測定で大きな違いは見られなかった。一水和物の ESR 測定で現れる 3393 ガウス付近のブロードな信号は、核スピンとのカップリングが弱いラジカル種と考えられる。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 28 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　名城大学理工学部
氏名　西山　桂

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	ナノスケール蓄光材料の新規開発と有機・無機媒体への分散		
課題番号	20-259		
所内対応者	氏名　　平本　昌宏	職名　　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	名城大学大学院理工学研究科	M1	世良　基史
	名城大学理工学部	4 年	伊藤大　道
	名城大学理工学部	4 年	山本　実佳
実施した研究の概要（200 字程度以内）	本研究は、全く新しい光エネルギー貯蔵デバイスの構築を通じて、蓄光材料（光を吸収したのち、発光が数時間続く材料）を創成するとともに、それを有機・無機媒体へ分散させ、発光材料として実用化をめざすことである。 この研究が完成すれば、例えば蓄光材料を種々の無機素材・有機媒体に分散させることができる。応用例としては、道路のセンターライン等を夜間発光させ、運転者支援システムの一助となると期待される。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	本研究では、粒径 50 nm（従来の千分の一）の蓄光材料を創成した。この目的を達成するため、合成手法として「ゾルゲル法」を採用した。蓄光材料に使用されるアルミン酸ストロンチウムについて、従来の合成手法では、溶液中に分散させた発光材料（Al3+, Sr3+, Eu3+, Dy3+）をそのまま焼結（1,200 ℃）させている。焼結中に原料（イオン）同士が凝集し、結果として粒径が 50 μm と非常に大きくなるという課題があった。そこで本研究では、界面活性剤で鋳型を作ることによって凝結を防いだ。 今後は、焼結過程を最適化することにより粒径 10 nm をめざす。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年　4 月　29 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　筑波大学
氏名　山田洋一

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	モメンタムマイクロスコープ用いた高移動度有機半導体高配向膜の分子軌道トモグラフィー		
課題番号	20-260		
所内対応者	氏名　解良聡	職　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
実施した研究の概要（200 字程度以内）	BL6U のモメンタムマイクロスコープを利用して、高移動度有機半導体 Dph-BTBT 薄膜の精緻な光電子トモグラフィー計測を行う。これにより、Dph-BTBT の良好な電気伝道の要因となる分子軌道の特徴の理解を目指す。ここでは特に、フロンティア軌道中の HOMO と HOMO-1 に注目し、薄膜におけるこれらの軌道の混成の効果に着目した。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	本研究では、BL6U のモメンタムマイクロスコープにより可能となる有機薄膜の精緻な分子軌道トモグラフィーを利用することで、高移動度有機半導体である Dph-BTBT の高い電気伝道機構の解明を目指すものである。 BTBT 系有機半導体の薄膜は現状で最高レベルの移動度を達成しているが、その機構は十分明らかではない。筑波大学石井らの報告によると、BTBT 系の分子の伝道には、HOMO と HOMO-1 の両者の混成の効果が大きな影響を与えることがしめされた。これは、一般の有機半導体の伝道が HOMO で記述できることと対照的である。本研究で、BTBT 薄膜中の HOMO や HOMO-1 のエネルギーと空間分布を実測できれば、BTBT 系の伝道機構の解明を通じて、有機半導体の高移動度化の指針を得ることができる。 本年度は詳細な光電子トモグラフィー計測の結果、Dph-BTBT 薄膜中の HOMO の波動関数の形状とエネルギー状態が、孤立分子のそれに比べて大きく変化していることが実験的に明らかにすることができた。一方、理論計算の結果、この HOMO の変化は、HOMO-1 との混成の影響であることがわかった。この結果を応用物理学会で報告し、現在原著論文を構想中である。 本研究結果の論文化にあたり、来年度は、本年度の結果の再現性の確認と、補足データの取得が必要である。特に、試料温度を変化させ、分子間距離を変化させ場合の HOMO-HOMO-1 の混成効果の詳細を明らかにすることが重要となる。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月　7 日

分子科学研究所長　殿

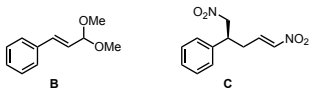
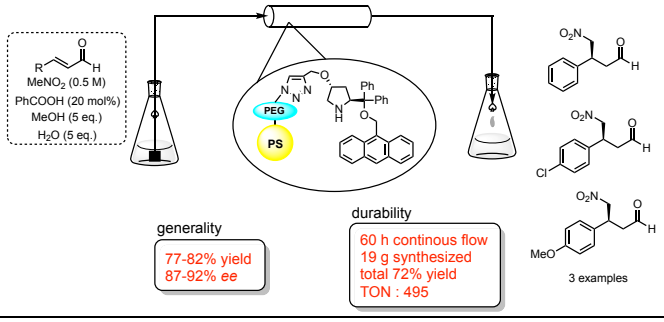
(報告者)
所属　東北大学大学院理学研究科
氏名　林　雄二郎

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	フロー合成のための不斉固定化有機触媒の開発		
課題番号	20-261		
所内対応者	氏名　　魚住泰広	職名　　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	東北大学大学院理学研究科	教授	林　雄二郎
	東北大学大学院理学研究科	修士 1 年	服部修佑
実施した研究の概要（200 字程度以内）	我々が見出した有機触媒の固定化について研究を行い、昨年の検討で PS-PEG 担持型ポリマー触媒を開発した。今回、この触媒をカラムに詰め、フロー化学への展開を図るため、フロー化学に関する様々なノウハウを有する分子研の魚住研究室と共同研究を行った。コロナのため、分子研を訪問することなく、フロー合成を行うに必要な実験操作上の知見を、ZOOM とメイルにより習得し、フロー化学への適用に成功した。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	我々は、diphenylprolinol silyl ether という有機触媒を開発している。触媒の固定化により回収・再利用が容易になるため、昨年度、この触媒をポリマーに固定化する検討を行った。固定層として PS-PEG（ポリスチレン－ポリエチレングリコール）を用い、水を反応溶媒として用いると、バッチ式において、良好な結果が得られることを明らかにした。一方、フロー化学は、熱的な反応制御が容易であり、再現性の高い手法として、現在、注目を集めている。今回、開発した固定化触媒をフロー合成に適用することについて検討を行った。 モデル反応として、ニトロメタンとシンナムアルデヒドとの不斉触媒マイケル反応を選択し、フローの検討を行った。検討方法としては、原料を溶解させた溶液を、ポリマーを詰めたカラムに HPLC ポンプにて送液し、カラム通過後の溶液を分析することで収率および光学純度を求めた。なお、実験に使用するカラムの種類、カラムへの充填方法、送液方法（シリンジポンプを使用するか、HPLC ポンプを使用するか）等に関して、分子研の魚住研究室から多くの有益な助言を受けた。 室温では反応はほとんど進行せず、多くの原料が回収されたため、反応温度を上昇させたところ目的物が、51%の収率で得られた。次に反応の収率の向上を目指しカラムに充填する触媒量を増やしたところ、予期に反しアセタール B の生成が確認され、逆に収率が低下した。これは溶媒として使用したメタノールが原料と反応したためと考え、溶媒をメタノールからニトロメタンに変えると、収率は改善された。しかし、目的物からさらに過剰反応が進行した副生成物 C の生成が確認された。化合物 C は、望みのマイケル反応の進行後、加水分解により目的物が触媒から解離する前に、求核剤のニトロメタンと反応し、生成していると推察した。水の添加により加水分解を促進すれば副反応がおさえられると考えた。そこで添加剤として水（5 当量）と均一系にするためにメタノール（5 当量）を原料の溶液に加え反応を行ったところ、副生成物 C の生成は抑えられ、収率を 82%に向上させることに成功した。  さらに基質一般性および触媒の耐久性について検討を行い、シンナムアルデヒドのみならず、芳香環上に電子豊富、電子不足いずれの置換基を有する 3-アリールプロペナール誘導体においても良好な収率、立体選択性でマイケル付加体が得られた。耐久性については、24 時間では活性は落ちず、90%を超える収率が得られた。その後徐々に活性が低下し、60 時間後の収率は 60%であった。なお、TON は 495 と良好な値を示した。以上、開発した触媒はフロー反応においても良好な反応性および耐久性を示すことを見出した。 
その他	本成果は、日本化学会第 101 春季年会（オンライン開催、2021 年 3 月 21 日、発表番号：A19-3vn-03）で発表した。

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 21 日

分子科学研究所長　殿

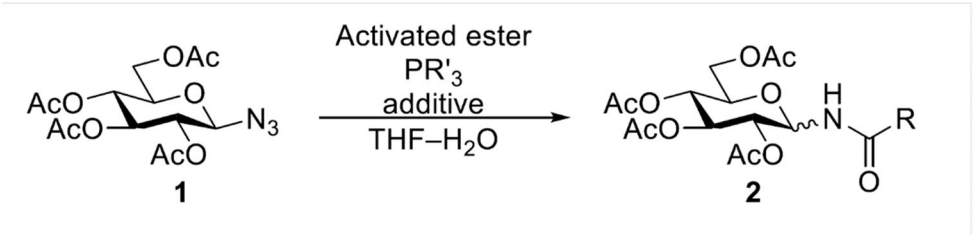
(報告者)
所属　青森大学薬学部
氏名　鈴木　達哉

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	糖アジドの還元にともなうライゲーション反応の開発		
課題番号	20-262		
所内対応者	氏名　　加藤　晃一	職名　　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
実施した研究の概要（200 字程度以内）	糖鎖はタンパク質や脂質に結合し、様々な生命現象において重要な役割を果たす。その構造多様性ゆえに、均一な糖鎖構造を持つ生体試料を調製し研究に用いることは難しい。我々はこれまで、化学合成により均一な糖鎖構造を持つ生体分子を調製し、その構造と機能の相関を明らかにする研究に取り組んできている。本研究では、均一糖鎖構造を持つ生体分子の化学合成を加速するために、糖アジド体を用いるライゲーション反応の開発を推進する。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	糖タンパク質の合成には糖アジド体を前駆体として用いる方法が、いくつかの研究グループによって報告が行われているが、中間体として発生する糖アミノ体の加水分解に対する不安定性の問題から、必ずしも合成収率が高いわけでない。我々はこれまでに１ポット合成による効率的な糖アジドを糖アミドに変換するライゲーション反応を開発してきているが、その詳細なメカニズムは未解明な部分があった。この糖アジド体へのライゲーション反応を発展・効率化するためには、反応における生成物、副生成物、中間体などを同定し、その反応機構を詳細に理解することが重要である。 本年度は、各種機器測定による生成物質の同定へと移行するための前段階として、ライゲーション反応の反応系を確立することに注力した。反応基質としては、グルコース１位アジド体（化合物１）を選択し、図１のようなシュタウディンガーライゲーション反応の変法による反応条件で検討を行った。  図１．糖アジド体に対する１ポットライゲーション反応 試薬の等量、温度などを種々検討した結果、化合物１に関して、目的とするライゲーション産物であるグルコースβアミド体（化合物２β）を収率 70%以上という良好な収率で得る条件を確立することができた。一方で反応条件によっては、40%以上の割合で、アノマー位が異性化したαアミド体（化合物２α）が副生することが確認された。この結果は主に反応に寄与すると想定していたアミン中間体ではなく、アミン中間体に至るまでの中間体であるイリド中間体、またはホスファゼン中間体などが反応に深く関与し、立体選択性に影響を及ぼしている可能性を示唆する結果である。これら中間体の生成を制御することができれば立体選択性の改善と収率の改善が見込まれるものと考えている。 次年度については、反応条件の最適化に向けて邁進しつつ、中間体の同定と反応機構の解明を目的として、加藤グループが有する糖鎖に対する高度な構造解析技術の支援を受けながら、高磁場 NMR を用いた核磁気共鳴法による糖鎖の分析技術及び、加藤教授グループの協力のもと分子研が所有する質量分析装置（MALDI-TOF 質量分析計, ESI-TOF 質量分析計など）を利用することで、統合的なアプローチにより研究を進める予定である。

その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年　4 月　30 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　名古屋大学シンクロトロン光研究センター
氏名　高嶋　圭史

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	位相制御された逆コンプトン散乱ガンマ線の発生		
課題番号	20-263		
所内対応者	氏名　加藤　政博	職名　特任教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	准教授	保坂　将人
	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	助教	郭　磊
	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	技術職員	真野　篤志
	名古屋大学工学研究科	M1	山本　涼平
実施した研究の概要（200 字程度以内）	蓄積リング中の電子ビームにレーザーを衝突させ、逆コンプトン散乱によって発生するガンマ線の位相を制御する手法の開発を目指しており、本年度は時間的に連続したダブルパルス状のレーザーを発生させるための波形生成装置の基本構成の検討を行うとともに、ダブルパルス生成のテスト実験を行った。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	Coherent 社製 Legend を用いて発生した短パルスレーザーを、ビームスプリッターを用いて二つの経路に分岐し、ミラーによって反射し戻ってきたレーザーパルスを再びビームスプリッターを用いて同一の経路に合成する。この際に、ビームスプリッターで分岐した一方の経路長を変化することで、光路差に応じた分離幅をもった二つのレーザーパルスを生成した。 生成した二つのレーザーパルスの分離幅とそれぞれのパルス幅をオートコリレータを用いて測定した。その結果、二つのレーザーパルスのパルス幅は元の短パルスレーザーのパルス幅とほぼ同じパルス幅を持っており、光路差を変化しても一定のパルス幅を保っていた。これに対して、二つのパルスの分離幅は、光路差に比例して変化することを確認した。 位相制御されたガンマ線の発生に向けたダブルパルスレーザー生成システムの開発を行い、このシステムが正常に動作していることを確認した。今後、ダブルパルスレーザーと電子ビームを衝突させ、位相制御されたガンマ線の発生を目指す。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 19 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所
氏名　藤本 和宏

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	光合成アンテナ系の分子機構の解明に向けた計算化学的解析		
課題番号	20-264		
所内対応者	氏名　斉藤 真司	職名　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	名古屋大学	特任准教授	藤本 和宏
実施した研究の概要（200 字程度以内）	光合成系の集光アンテナでは励起エネルギー移動を用いることで、効率良く太陽光エネルギーを獲得している。集光アンテナの分子機構の理解に向けて計算化学的にアプローチするため、本研究では分子動力学法（MD）と時間依存密度汎関数法（TD-DFT）を用いることで、集光アンテナ中に存在する色素分子の吸収スペクトル計算を試みた。本研究は 2021 年度も継続して実施する。		

（裏面に続く）

得られた研究成果(1200 字程度以内) 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。	光合成系の集光アンテナタンパク質に対して MD 計算を実施し、ここから得られた色素分子（クロロフィル）の配置に対して励起状態計算を行った。計算する分子構造の配置数が膨大となるため、本研究では計算精度と計算コストのバランスの観点から、TD-DFT 法を用いて励起状態計算を実施した。得られた励起エネルギーの値から平均値と標準偏差を求め、励起エネルギーに関する熱揺らぎの大きさを評価した。次に、得られた励起エネルギーと振動子強度を用いて吸収スペクトルの計算を行ったところ、実験の吸収スペクトルの概形を再現することに成功した。 本研究は斉藤真司教授と協力しながら実施した。クロロフィルの吸収スペクトルの概形を計算することができたが、本研究はまだ途中段階であり、2021 年度も継続して実施する。2021 年度は吸収スペクトルの計算から不均一広がりの解析を進める予定である。
その他	2021 年度は柳井毅教授（名古屋大学）が代表者となり、本研究を継続する（協力研究 課題番号：21-214）。

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。
（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 1 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　関西学院大学
氏名　村上慧

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	新触媒反応を基盤とした分子物性解明と微結晶構造解析		
課題番号	20-265		
所内対応者	氏名　　瀬川泰知	職名　　准教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
実施した研究の概要（200 字程度以内）	申請者が開発したパラジウム触媒反応の反応機構解明およびその生成物の物性解明を目的として共同研究を行った。特に、結晶構造解析による分子の構造解明に取り組んだ。反応活性種となる金属錯体の構造解明ができればさらに高活性・高選択性の触媒開発につながると期待している。本研究では、クロロフェナントレンがパラジウムに酸化的付加したアリールパラジウム錯体について調査を行った。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	申請者はこれまでに八員環構築カップリングを見つけており、反応機構の解明に向けて共同研究を行った。開発した八員環構築反応は、次の通りである。クロロフェナントレンに対して、１当量のビフェニレンをパラジウム触媒存在下、反応させたところ、対応する含八員環クロスカップリング体が 76%の収率で得られた。本反応条件はクロロフェナントレンやビフェニレンを二量化させる条件と同一であるにも関わらず、いずれの二量化体も確認されておらず、クロスカップリング生成物が選択的に得られた。本研究では、この反応機構解明に取り組んだ。前期の共同研究によって、あるアリールパラジウム中間体に対応する中間体の構造が X 線結晶構造解析に得られた。瀬川准教授の協力のもと、X 線構造解析を完了した。実験操作としては次の通りである。中間体の四塩化炭素溶液に対して、ペンタンを貧溶媒として用いることで結晶が得られた。安定な錯体であり、今後はこの錯体を用いてさらなる反応機構解析を行なっていく。特に、クロロフェナントレン上の置換基の反応性に与える影響を調査する。実際、やや電子不足のアリール基が置換した場合、二量化生成物の収率が低下する傾向にあることが明らかになった。これは電子不足な基質が反応しやすいという一般的なクロスカップリングの“常識”と反対の結果であり、興味がもたれる。今後は様々な置換基を有するクロロフェナントレンとパラジウムの反応の速度論実験などを行い、反応機構の解明を行なっていく。一方、質量分析によりもう一つのアリールパラジウム中間体も観測されており、こちらも中間体として重要なものである。この中間体はスピロパラダサイクルとなる直前のパラジウム（IV）錯体であり、反応機構の鍵となる分子である。これまで様々な条件を試しているが、まだ単離できておらず、結晶も得られていない。ホスフィン配位子や母骨格となるフェナントレンの誘導体を種々検討することにより、単離できる条件を確認していく。
その他	新型コロナウイルス感染症の影響により、来所せずリモートでの打ち合わせを行なった。

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020 年度）

2021 年 4 月 29 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　九州大学先導物質化学研究所
氏名　森 俊文

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	生体分子の機能に関わる不均一な構造の理論的解明		
課題番号	20-266		
所内対応者	氏名　　斉藤 真司	職名　　教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
実施した研究の概要（200 字程度以内）	プロリン異性化酵素 Pin1 に基質が結合した複合体構造に関する長時間分子動力学シミュレーションを行い、そのトラジェクトリの中で見られる状態遷移過程の解析と、その結果に関する議論を行った。特に、これまで進めてきた異性化反応の反応ダイナミクスの解析結果から得られた構造励起状態との対応を見ることで、酵素反応が進行するために必要な Pin1 の構造変化が、基質の異性化が起こる前にどのように準備されるかについて検討した。		

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	酵素反応において、酵素の構造揺らぎや状態遷移が活性に重要であることは近年の一分子測定をはじめとした実験から明らかになってきたが、時間・空間的に階層の異なる生体分子の構造変化と化学反応のイベントがどのように影響しあうことで反応が進行するかはよく理解されていない。我々は、両者をつなぐ鍵として「構造励起状態」が重要であることを、プロリン異性化酵素の一つである Pin1 の反応ダイナミクスの解析によって示してきた。一方で、実際に酵素の平衡状態での構造揺らぎの中からどのようにしてこの構造励起状態へと至るかについてはまだ明らかになっていない。 本研究では、Pin1 と基質の複合体に関する長時間分子動力学シミュレーションを行い、どのような構造遷移が起こっているかの解析を行った。同時に、基質がない状態での Pin1 のダイナミクスも調べ、基質の結合によって Pin1 の運動がどのように制限されるかも検討した。さらに、これらの構造の中から、構造励起状態に近づくものがどの程度見られるかの解析も行った。その結果、Pin1 の構造について、cis 状態では構造励起状態に近いものはあまり見られないのに対して、trans 状態では構造励起状態と似た構造に比較的近づきやすいことが確認された。一方で、trans 状態においても、基質が適切な位置・配向を持っていない構造であったため、実際には反応が起こりにくいと考えられる。また、基質がない状態では、基質ありのときと比べて幅広い状態空間を容易に行き来しており、また cis、trans 状態の基質が結合したときの Pin1 の構造を両方カバーしていることが確認された。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は、分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www.ims.ac.jp/guide/shaji.html

分子科学研究所共同利用研究（協力研究）実施報告書（2020年度）

2021 年 4 月 27　日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　産業医科大学
氏名　森　誠之

下記のとおり実施しましたので報告します。

研究課題名	TRP チャネル制御機構解明のための分子シミュレーション研究		
課題番号	20-267		
所内対応者	氏名　奥村　久士	職名　准教授	
共同利用研究者	所属	職名	氏名
	産業医科大学・医・生体物質化学	講師	岡田　亮
実施した研究の概要（200 字程度以内）	TRPC6 は TRP チャネルのファミリーに属する分子で,脳や血管平滑筋,腎臓などの組織に幅広く発現するカチオンチャネルである。このイオンチャネル分子は細胞膜脂質の一つ,イノシトール-4,5-ビスリン酸（PIP_2）によって大きく制御され,血圧調節や腎機能に関わると考えられる。今回,我々が電気生理学的（実験的）に示した PIP_2 作用領域をドッキングシミュレーションにより解析した。特に重要なアミノ酸を中心にシミュレーションにより検討したところ,実験結果を再現するデータを得ることができた。これらは PIP_2 作用機序の解明に重要な知見であると考えられた。		

記

（裏面に続く）

得られた研究成果（1200 字程度以内） 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。	TRPC6 は, G タンパク質共役型受容体(GPCR)を介したホスホリパーゼ C(PLC) の活性によりリン脂質の一種 PIP_2 から産生される脂質性活性物質ジアシルグリセロール(DAG)により活性化される。 我々は, このスキームにおいて, DAG の基質である PIP_2 が, ただ単に基質として機能するだけでなく, PIP_2 の枯渇・減少 そのものが, 独立的に TRPC3/6/7 群を抑制することを明らかにしている。(Imai , 2012, *J.Physiol*, Itsuki, 2014, *J Gen Physiol*, Mori, 2015, *Frontiers in Pharm*)。今回,我々は電気生理学的（実験的）に示した TRPC6 の PIP_2 作用領域をドッキングシュミレーション(Autodock4)により解析した。特に重要な TRPC6,PreS1 に存在するアルギニン残基を中心に幾つかの条件で検討を行った。 本作用においてはイオン結合がより重要であると予想され, PIP_2 を TRPC6 から少し離れた場所(~3.5Å)に置き,ドッキングシミュレーションを実施したところ, 興味深いことにより実験データを反映した結果が得られた。これはイオン結合が遠距離でも減衰しにくい性質を反映しているものと考えられた。また,内向き整流性 K チャネルやビンキュリンの塩基性アミノ酸と PIP_2 のイオン結合の距離は,最接近の状態で約 2.8Å,平均 3~4Å となっており, 他の分子と同様の配置が適正であると考えられた。(Hansen, *Nature*,2011,Chinthalapudi, *PNAS*, 2016)。 本結果は TRPC6 と PIP_2 がアルギニンやリジン等の正に荷電したアミノ酸と負に帯電したリン脂質の静電エネルギーにより安定化されていることを反映したもので,実際の結合様式を知るうえで重要な知見が得られたと考えている。明確な条件が見えてきたことから, 今後更に詳細な検討を進め, 論文を執筆, 投稿する予定である。尚,研究遂行にあたり,Covid-19 感染拡大に配慮して分子研奥村博士らとの meeting は全てオンラインにて実施した。
その他	

注1.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため,公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

注2.　本研究課題の成果として論文を発表される際は,分子科学研究所共同利用研究として実施した旨を謝辞に記載してください。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。

（謝辞記載のお願い）https://www。ims。ac。jp/guide/shaji。html

分子科学研究所共同利用研究（研究会）実施報告書（2020 年度）

2020 年 12 月 5 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　北海道大学大学院理学研究院
氏名　南本　大穂

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	ナノ空間で光が織りなす分子操作・化学反応制御の新展開
開催日時	2020 年 12 月 4 日 ～ 2020 年 12 月 5 日
課題番号	20-351
プログラム	別紙添付
参加者名簿	別紙添付
その他	

注1.　要旨集を作成している場合は本報告書に添付してください。

注2.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

分子研研究会
「ナノ空間で光が織りなす分子操作・化学反応制御の新展開」

日時：2020 年 12 月 4 日(金) 13:00 より 12 月 5 日(土) 12:30 まで

場所：Zoom を用いたオンライン開催

概要：本研究会では、ナノフォトニクス技術や局在表面プラズモン共鳴の励起によって実現する「ナノの光源」で照らされた物質を対象とし、それにより発現する力学的作用や特異励起状態、共鳴状態を利用した新規分子操作・化学反応制御手法の実現に向けて、多様な研究分野で活躍する若手研究者による研究紹介・討論の場を提供する。本会の実施によって、多角的な視点に基づく議論が可能となる。非常に多岐に渡る研究分野における最先端技術の紹介を通じて、光と分子の相互作用に関する異分野の知見を融合し、分野全体の発展が期待されると同時に、共同研究へと発展する可能性を期待する。

世話人：北海道大学　南本大穂 minamimoto@sci.hokudai.ac.jp
大阪市立大学　細川千絵
大阪大学　蓑輪　陽介
神奈川大学　東海林竜也
所内対応：分子科学研究所　岡本裕巳 aho@ims.ac.jp

共催：分子科学研究所、新学術領域「光圧ナノ物質操作」
協賛：分子科学研究所メゾスコピック計測研究センター

プログラム	
12 月 4 日（金）	
13：00 - 13：10　開会の挨拶　（南本大穂（北海道大学））	
一般講演：発表 20 分、質疑 5 分 チュートリアル講演：発表 55 分、質疑 5 分	
第一セッション（座長：蓑輪陽介（大阪大学））	
13：10 - 13：35 O-01	**土井 謙太郎**（豊橋技術科学大学） 「マイクロ・ナノ粒子の光操作と電気検出」
13：35 - 14：00 O-02	**西山 嘉男**　（金沢大学　理工研究域 物質化学系） 「ナノ物質における時空間挙動の観測と制御」
14：00 - 14：25 O-03	**赤松 大輔**　（産業技術総合研究所） 「光トラップされたナノ微粒子と冷却原子の相互作用の研究」
14：25 - 14：45	休憩
第二セッション（座長：南本大穂（北海道大学））	
14：45 - 15：10 O-04	**西原 大志**　（京都大学 エネルギー理工学研究所） 「カーボンナノチューブの熱励起子輻射の研究」
15：10 - 15：35 O-05	**杉本 敏樹**　（分子科学研究所） 「非線形レーザー分子分光で明らかになってきた固体表面上の 水分子の特異な水素結合構造と物性・機能」
15：35 - 16：00 O-06	**數間 惠弥子**（理化学研究所） 「単一酸素分子のプラズモン誘起解離反応の実空間観測」
16：00 - 16：20	休憩
第三セッション（座長：南本大穂（北海道大学））	
16：20 - 17：20 T-01	◆ **チュートリアル講演** **笹木 敬司**　（北海道大学 電子科学研究所） 「光圧操作の基礎と応用」

[Zoom 情報]
時間: 2020 年 12 月 4 日　12:30
Zoom URL: https://zoom.us/j/99137809898
ミーティング ID: 991 3780 9898
パスコード: U6nBY+!km=

12 月 5 日（土）	
第四セッション（座長：細川千絵（大阪市立大学））	
9：00-10：00 T-02	◆ **チュートリアル講演** **岡本 裕巳**　（分子科学研究所） 「キラリティと光学活性の常識と常識はずれ」
10：00-10：25 O-07	**石井　智**　（物質・材料研究機構） 「遷移金属窒化物の光励起ホットキャリヤとその応用」
10：25-10：50 O-08	**岩佐 豪**　（北海道大学　理学研究院） 「双極子近似を超えた近接場光と分子の多重極相互作用と 励起状態制御に向けて」
10：50-11：10	休憩
第五セッション（座長：東海林竜也（神奈川大学））	
11：10-11：35 O-09	**柚山 健一**　（大阪市立大学 理学研究科） 「界面での分子・ナノ粒子の光マニピュレーション」
11：35-12：00 O-10	**有川 敬**　（京都大学 理学研究科） 「テラヘルツ光渦を用いた擬似局在表面プラズモンの 多重極モード選択励起」
12：00-12：25 O-11	**米谷 玲皇**　（東京大学　工学系研究科） 「ナノメカニクスと光センシング」
12：25-12：30　閉会の挨拶（南本大穂（北海道大学））	

[Zoom 情報]
時間: 2020 年 12 月 5 日 09:00
Zoom URL: https://zoom.us/j/92690966361
ミーティング ID: 926 9096 6361
パスコード: pH=T8a*&rb

＜発表・質疑応答に関して＞
・発表は Zoom の画面共有機能により講演者がスライドを共有し、カメラをオンにして行われます。聴講者は講演中はカメラ・マイクをオフにして頂きます。
・質疑応答は、チャット機能を使用して行います。質問がある方は講演中・質疑応答時間を問わず、質問がある旨をチャット機能に記入いただきますようお願い致します。座長が指名しますので、指名された方はカメラ・マイクをオンにしてご発言ください。
*質疑応答時間中に他の聴講者からの質問がない場合はその場でマイクをオンにして御発言頂いても構いません。

分子研究会参加者一覧

	氏名	所属	所属２	身分
講師1	土井謙太郎	豊橋技術科学大学	機械工学系	教授
講師2	西山嘉男	金沢大学	理工研究領域	助教
講師3	赤松大輔	産業技術総合研究所	ヒューマンライフテクノロジー研究部門	主任研究員
講師4	西原大志	京都大学	エネルギー理工学研究所	特定助教
講師5	石井 智	NIMS	統合型材料開発・情報基盤部門	主幹研究員
講師6	柚山健一	大阪市立大学	大学院理学研究科	講師
講師7	數間 惠弥子	理化学研究所	表面・界面科学研究所	研究員
講師8	岩佐 豪	北海道大学	大学院理学研究院	助教
講師9	杉本 敏樹	分子科学研究所	物質分子科学研究領域	准教授
講師10	有川 敬	京都大学	大学院理学研究科	助教
講師11	米谷 玲皇	東京大学	大学院新領域創成科学研究科	准教授
講師12	笹木 敬司	北海道大学	電子科学研究所	教授
責任者	南本　大穂	北海道大学	大学院理学研究院	助教
所内対応/講師13	岡本　裕巳	分子科学研究所	メゾスコピック 計測研究センター	教授
1	三輪　邦之	分子科学研究所	理論・計算分子科学研究領域	特任助教
2	小泉　喬史	大阪市立大学	大学院理学研究科	修士1年
3	細川　千絵	大阪市立大学	大学院理学研究科	教授
4	田中　嘉人	東京大学	生産技術研究所	助教
5	石原　悠人	大阪市立大学	大学院理学研究科	修士1年
6	東海林 竜也	神奈川大学	理学部化学科	准教授
7	瀬川　夕海	大阪市立大学	大学院理学研究科	修士1年
8	植野　昂	大阪市立大学	理学部	学部4年
9	箕嶋　渉	大阪市立大学	大学院理学研究科	特任助教
10	岸本　龍典	関西学院大学	理工学研究科	D3
11	成島　哲也	分子科学研究所	メゾスコピック 計測研究センター	助教
12	安倍　悠朔	早稲田大学	大学院 創造理工学研究科	D1
13	長谷部 秀尭	北海道大学	大学院総合化学院	修士2年
14	村越　敬	北海道大学	大学院理学研究院	教授
15	福島　知宏	北海道大学	大学院理学研究院	助教
16	小山田 伸明	北海道大学	大学院総合化学院	D1
17	芦澤　大輝	北海道大学	理学部	学部4年
18	本間　瑞穂	北海道大学	大学院総合化学院	修士1年
19	李　笑瑋 (LI Xiaowei)	北海道大学	大学院理学研究院	助教
20	金　大貴	大阪市立大学	大学院工学研究科	教授
21	鈴木　燎侍	北海道大学	理学部	学部4年
22	賀茂　尚広	第一稀元素化学工業株式会社	技術本部　研究開発室	上席研究員
23	渡邊　康之	公立諏訪東京理科大学	工学部	教授
24	松本　卓也	大阪大学	大学院理学研究科	教授
25	小林　優作	北陸先端科学技術大学院大学	マテリアルサイエンス系	修士2年
26	瀧ノ上 正浩	東京工業大学	情報理工学院	准教授
27	八瀬　清志	先端素材高速開発技術研究組合 (ADMAT)		専務理事補佐
28	金光　義彦	京都大学	化学研究所	教授

29	西山　宏昭	山形大学	大学院理工学研究科	准教授
30	富岡　明宏	大阪電気通信大学	大学院工学研究科	教授
31	土橋　晋作	長崎県技術士会		
32	武田　佳宏	(株)コンポン研究所	東東京研究室	主幹研究員
33	辻　徹郎	京都大学	情報学研究科	助教
34	加藤　毅	東京大学	大学院理学系研究科	准教授
35	森近　一貴	東京大学	生産技術研究所	助教
36	江原　正博	分子科学研究所	計算科学研究センター	教授
37	瀬戸浦 健仁	神戸市立高専	機械工学科	講師
38	蔵谷　和弘	大阪府立泉北高等学校		教諭
39	湊　丈俊	分子科学研究所		主任研究員
40	加藤　政博	広島大学／分子科学研究所	放射光科学研究センター／UVSOR	教授
41	糸井　祐人	大阪大学	大学院理学研究科	修士1年
42	鈴木　喜一	北海道医療大学	医療技術学部・全学教育推進センター	講師
43	田口　敦清	北海道大学	電子科学研究所	准教授
44	北濱　康孝	産業技術総合研究所	物質計測標準研究部門	第二号契約職員
45	佐藤　大樹	北海道大学	大学院総合化学院	修士2年
46	林　峻大	北海道大学	大学院総合化学院	D1
47	池田　憲昭	京都工芸繊維大学		名誉教授
48	三坂　朝基	大阪大学	大学院理学研究科	D1
49	蓑輪　陽介	大阪大学	大学院基礎工学研究科	助教
50	櫻井　敦教	分子科学研究所	物質分子科学研究領域	助教
51	吉光　創之	北海道大学	理学部	学部４年
52	駒井　貴羽	北海道大学	理学部	修士一年
53	Ahn ,Hyo-Yong	分子科学研究所	メゾスコピック 計測研究センター・新分	特任助教
54	山西　絢介	分子科学研究所	メゾスコピック 計測研究センター	ＪＳＰＳ特別研究員
55	崔 元碩	北海道大学	大学院総合化学院	修士1年
56	三好　悠斗	北海道大学	理学部	学部４年
57	石原一	大阪大学	基礎工学研究科	教授
58	山根秀勝	大阪府立大学	大学院工学研究科	特任助教
59	和田　拓道	大阪府立大学	大学院工学研究科	D2
60	横山 知大	大阪大学	基礎工学研究科	助教
61	荒張秀樹	大阪府立大学大学院	電子数物系専攻 電子物理工学分野	M2

分子科学研究所共同利用研究（研究会）実施報告書（2020 年度）

2020 年 11 月 16 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　分子科学研究所極端紫外光研究施設
氏名　大東　琢治

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	Next Generation Spectro-Mircroscopy and Micro-Spetroscopy Workshop
開催日時	2020 年 10 月 28 日～2020 年 10 月 29 日
課題番号	20-352
プログラム	別に添付
参加者名簿	別に添付
その他	別に添付 要旨 (https://sites.google.com/ims.ac.jp/uvsor-ws2020/abstract)

注1.　要旨集を作成している場合は本報告書に添付してください。

注2.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

別紙　参加者名簿

	First Name	Sir Name	Affiliated Institution	
1	Hisayo	Nagasono	IMS	Hisayo Nagasono (IMS)
2	Paul	Loremipsum	Dixisset	Paul Loremipsum (Dixisset)
3	Fumihiko	Matsui	Institute for Molecular Science	Fumihiko Matsui (Institute for Molecular Science)
4	Michael	Altman	Hong Kong University of Science and Technology	Michael Altman (Hong Kong University of Science and Technology)
5	Takuji	Ohigashi	Institute for Molecular Science	Takuji Ohigashi (Institute for Molecular Science)
6	Takayuki	Yano	Institute for Molecular Science	Takayuki Yano (Institute for Molecular Science)
7	Shin-ichi	Kimura	Osaka University	Shin-ichi Kimura (Osaka University)
8	Mitsutoshi	Setou	Hamamatsu University School of Medicine	Mitsutoshi Setou (Hamamatsu University School of Medicine)
9	Toyohiko	Kinoshita	JASRI	Toyohiko Kinoshita (JASRI)
10	Yoshihisa	Harada	The University of Tokyo	Yoshihisa Harada (The University of Tokyo)
11	Hiroyuki	Yamane	RIKEN	Hiroyuki Yamane (RIKEN)
12	Shin-ichiro	Tanaka	Osaka University	Shin-ichiro Tanaka (Osaka University)
13	Marko	Wietstruk	SPECS Surface Nano Analysis GmbH	Marko Wietstruk (SPECS Surface Nano Analysis GmbH)
14	Hisayo	HAGIWARA	IMS	Hisayo HAGIWARA (IMS)
15	Ai	Kametaka	Institute for Molecular Science (IMS)	Ai Kametaka (Institute for Molecular Science (IMS))
16	Mirko	Weidner	SPECS Surface Nano Analysis GmbH	Mirko Weidner (SPECS Surface Nano Analysis GmbH)
17	Masaharu	Oshima	The University of Tokyo	Masaharu Oshima (The University of Tokyo)
18	Susumu	Yamamoto	Tohoku university	Susumu Yamamoto (Tohoku university)
19	Masataka	Kado	QST	Masataka Kado (QST)
20	Amin	Khodabandeh	Future Industries Institute	Amin Khodabandeh (Future Industries Institute)
21	Yoshiyuki	Ohtsubo	Osaka University	Yoshiyuki Ohtsubo (Osaka University)
22	Hiroshi	Daimon	Toyota Physical and Chemical Research Institute	Hiroshi Daimon (Toyota Physical and Chemical Research Institute)
23	Shuji	HASEGAWA	University of Tokyo	Shuji HASEGAWA (University of Tokyo)
24	Minna	Patanen	University of Oulu	Minna Patanen (University of Oulu)
25	Xiangrui	Kong	University of Gothenburg	Xiangrui Kong (University of Gothenburg)
26	Luis	Escusa dos Santoa	University of Gothenburg	Luis Escusa dos Santoa (University of Gothenburg)
27	Cheng-Hao	Chuang	Department of Physics	Cheng-Hao Chuang (Department of Physics)
28	Qiuyi	Yuan	Nissan ARC	Qiuyi Yuan (Nissan ARC)
29	Shunsuke	Tsuda	NIMS	Shunsuke Tsuda (NIMS)
30	Yasumasa	Takagi	Japan Synchrotron Radiation Research Institute	Yasumasa Takagi (Japan Synchrotron Radiation Research Institute)
31	Juwon	Kim	Seoul national university	Juwon Kim (Seoul national university)
32	Takayuki	Harano	Nippon steel	Takayuki Harano (Nippon steel)
33	Shinji	Hasegawa	TOYAMA Co., Ltd.	Shinji Hasegawa (TOYAMA Co., Ltd.)
34	Yoshiharu	Sakurai	Japan Synchrotron Radiation Research Institute	Yoshiharu Sakurai (Japan Synchrotron Radiation Research Institute)

	First Name	Sir Name	Affiliated Institution	
35	Susumu	Shiraki	Nippon Institute of Technology	Susumu Shiraki (Nippon Institute of Technology)
36	Mitsuru	Sato	Tokyo Ohka Kogyo Co., Ltd.	Mitsuru Sato (Tokyo Ohka Kogyo Co., Ltd.)
37	Atsushi	Ito	Tokai University	Atsushi Ito (Tokai University)
38	Tomohiro	Matsushita	NAIST	Tomohiro Matsushita (NAIST)
39	Jau-Wern	Chiou	National University of Kaohsiung	Jau-Wern Chiou (National University of Kaohsiung)
40	Hayato	Yuzawa	Institute for Molecular Science	Hayato Yuzawa (Institute for Molecular Science)
41	Yuri	Hasegawa	Institute for Molecular Science	Yuri Hasegawa (Institute for Molecular Science)
42	Taichi	Okuda	Hiroshima University	Taichi Okuda (Hiroshima University)
43	Yu-Cheng	Huang	National Chiao Tung University	Yu-Cheng Huang (National Chiao Tung University)
44	Eiken	Nakamura	IMS	Eiken Nakamura (IMS)
45	YAO-JANE	HSU	NSRRC	YAO-JANE HSU (NSRRC)
46	Shigemasa	SUGA	Instutute of Scientific and Industrial Research	Shigemasa SUGA (Instutute of Scientific and Industrial Research)
47	Zheng	Wei	Chongqing University	Zheng Wei (Chongqing University)
48	Lavinia Russell	Clemente	Tamkang University	Lavinia Russell Clemente (Tamkang University)
49	Jan Sebastian Dominic	Rodriguez	Tamkang University	Jan Sebastian Dominic Rodriguez (Tamkang University)
50	danwon	Lee	Seoul national university	danwon Lee (Seoul national university)
51	Michael	Merkel	FOCUS GmbH, Neukirchner Str. 2, D-65510 Huenstetten, Germany	Michael Merkel (FOCUS GmbH, Neukirchner Str. 2, D-65510 Huenstetten, Germany)
52	Toshio	Horigome	Institute for Moleculat Science	Toshio Horigome (Institute for Moleculat Science)
53	Masahiro	SAKAI	Institute for Molecular Science	Masahiro SAKAI (Institute for Molecular Science)
54	Takahiro	Kobayashi	Osaka University	Takahiro Kobayashi (Osaka University)
55	Kenichi	Izumi	JSR Corp.	Kenichi Izumi (JSR Corp.)
56	Hyun-Joon	Shin	Pohang Accelerator Laboratory	Hyun-Joon Shin (Pohang Accelerator Laboratory)
57	Lijuan	Zhang	Shanghai Advanced Research Insitute, CAS	Lijuan Zhang (Shanghai Advanced Research Insitute, CAS)
58	Ki-jeong	Kim	Pohang Accelerator Laboratory	Ki-jeong Kim (Pohang Accelerator Laboratory)
59	Retsu	Oiwa	Scienta Omicron	Retsu Oiwa (Scienta Omicron)
60	Kenji	Hayashi	Institute for Molecular Science	Kenji Hayashi (Institute for Molecular Science)
61	Sangsul	Lee	POSTECH	Sangsul Lee (POSTECH)
62	Dieter	Pohlenz	FOCUS GmbH	Dieter Pohlenz (FOCUS GmbH)
63	Aido	Kohei	University of Tokyo	Aido Kohei (University of Tokyo)
64	Geonhwa	Kim	Pohang Accelerator Laboratory	Geonhwa Kim (Pohang Accelerator Laboratory)
65	Dai	Yamaguchi	Tokyo Instruments, INC.	Dai Yamaguchi (Tokyo Instruments, INC.)
66	Hiroshi	Ota	Institute of Molecular Science	Hiroshi Ota (Institute of Molecular Science)
67	Takashi	Yamamoto	Tokyo Instruments, inc.	Takashi Yamamoto (Tokyo Instruments, inc.)
68	Tzu-Hung	Chuang	National Synchrotron Radiation Research Center	Tzu-Hung Chuang (National Synchrotron Radiation Research Center)

	First Name	Sir Name	Affiliated Institution	
69	Yasuaki	Okano	Institute for Molecular Science	Yasuaki Okano (Institute for Molecular Science)
70	Oliver	Schaff	SPECS GmbH	Oliver Schaff (SPECS GmbH)
71	Stefan	Bテカttcher	SPECS GmbH	Stefan Bテカttcher (SPECS GmbH)
72	Thorsten	Kampen	SPECS Surface Nano Analysis GmbH	Thorsten Kampen (SPECS Surface Nano Analysis GmbH)
73	Sven	Maehl	SPECS Surface Nano Analysis GmbH	Sven Maehl (SPECS Surface Nano Analysis GmbH)
74	Dhirendra Pratap	Singh	IMEC	Dhirendra Pratap Singh (IMEC)
75	Yulin	Chen	University of Oxford	Yulin Chen (University of Oxford)
76	Gang	Ren	Lawrence Berkeley National Laboratory	Gang Ren (Lawrence Berkeley National Laboratory)
77	Sung-Kwan	Mo	Lawrence Berkeley National Laboratory	Sung-Kwan Mo (Lawrence Berkeley National Laboratory)
78	Roland	Kawakami	The Ohio State University	Roland Kawakami (The Ohio State University)
79	Felix	Paテ殕ack	Technische Universitテ、t Dortmund	Felix Paテ殕ack (Technische Universitテ、t Dortmund)
80	Xiaoping	Wang	Institute of Physics, CAS	Xiaoping Wang (Institute of Physics, CAS)
81	Padraic	Padraic Shafer	Lawrence Berkeley National Laboratory	Padraic Padraic Shafer (Lawrence Berkeley National Laboratory)
82	Rajesh	Chopdekar	Lawrence Berkeley National Laboratory	Rajesh Chopdekar (Lawrence Berkeley National Laboratory)
83	David	Kilcoyne	Lawrence Berkeley National Laboratory	David Kilcoyne (Lawrence Berkeley National Laboratory)
84	Hendrik	Ohldag	Lawrence Berkeley National Laboratory	Hendrik Ohldag (Lawrence Berkeley National Laboratory)
85	Eiji	Hosono	National Institute of Advanced Industrial Science and Technology	Eiji Hosono (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)
86	Motohiro	Suzuki	JASRI	Motohiro Suzuki (JASRI)
87	Seiji	Makita	Institute for Molecular Science	Seiji Makita (Institute for Molecular Science)
88	Tappei	Kawakami	Tohoku university	Tappei Kawakami (Tohoku university)
89	Lei	Yu	Chongqing University	Lei Yu (Chongqing University)
90	Shan	Chen	Chongqing University	Shan Chen (Chongqing University)
91	Kuniko	Takemoto	Kansai Medical University	Kuniko Takemoto (Kansai Medical University)
92	David	Pachurka	Technical University Dortmund	David Pachurka (Technical University Dortmund)
93	Yoshitaka	Taira	Institute for Molecular Science	Yoshitaka Taira (Institute for Molecular Science)
94	Aosen	Xiong	Chongqing University	Aosen Xiong (Chongqing University)
95	Toru	Hirahara	Tokyo Institute of Technology	Toru Hirahara (Tokyo Institute of Technology)
96	Masahiro	Katoh	Hiroshima University	Masahiro Katoh (Hiroshima University)
97	Martin	Johansson	SPECS Surface Nano Analysis GmbH	Martin Johansson (SPECS Surface Nano Analysis GmbH)
98	Hiroyuki	Matsuda	Institute for Molecular Science	Hiroyuki Matsuda (Institute for Molecular Science)
99	Akio	Takano	TOYAMA Co., Ltd.	Akio Takano (TOYAMA Co., Ltd.)
100	S.M. Saleh	Mousavi-Bafrouyi	IAU-South Tehran Branch	S.M. Saleh Mousavi-Bafrouyi (IAU-South Tehran Branch)
101	Chia-Hao	Chen	NSRRC	Chia-Hao Chen (NSRRC)
102	Takahiro	Ito	Nagoya University	Takahiro Ito (Nagoya University)
103	Kazuyuki	Sakamoto	Osaka University	Kazuyuki Sakamoto (Osaka University)

	First Name	Sir Name	Affiliated Institution	
104	NAMDONG	KIM	Pohang Accelerator Laboratory	NAMDONG KIM (Pohang Accelerator Laboratory)
105	Thierry	Conard	IMEC	Thierry Conard (IMEC)
106	Fabian	Holzmeier	imec	Fabian Holzmeier (imec)
107	Jaeyoon	Baik	Pohang Accelerator Lab.	Jaeyoon Baik (Pohang Accelerator Lab.)
108	Chan-Cuk	Hwang	Pohang Accelerator Laboratory	Chan-Cuk Hwang (Pohang Accelerator Laboratory)
109	Koichiro	Yaji	National Institute for Materials Science	Koichiro Yaji (National Institute for Materials Science)
110	Koji	Horiba	High Energy Accelerator Research Organization	Koji Horiba (High Energy Accelerator Research Organization)
111	Kyuwook	Ihm	Pohang accelerator lab	Kyuwook Ihm (Pohang accelerator lab)
112	Tohru	Araki	Diamond Light Source	Tohru Araki (Diamond Light Source)
113	Jinkyu	Chung	Seoul National University	Jinkyu Chung (Seoul National University)
114	David	Janas	TU Dortmund	David Janas (TU Dortmund)
115	Yuya	Iwamoto	TOYAMA Co., Ltd.	Yuya Iwamoto (TOYAMA Co., Ltd.)
116	Jeong Won	Kim	KRISS	Jeong Won Kim (KRISS)
117	Kiyohisa	TANAKA	Institute for Molecular Science	Kiyohisa TANAKA (Institute for Molecular Science)
118	Jun	Okabayashi	The University of Tokyo	Jun Okabayashi (The University of Tokyo)
119	Keshav	Dani	Okinawa Inst. of Science and Technology	Keshav Dani (Okinawa Inst. of Science and Technology)
120	Shusheng	Cao	Chongqing University	Shusheng Cao (Chongqing University)
121	WENXIONG	ZHANG	The University of Tokyo	WENXIONG ZHANG (The University of Tokyo)
122	Wei-Hao	Hsu	Academia Sinica	Wei-Hao Hsu (Academia Sinica)
123	Yoichi	Yamada	Univ. of Tsukuba	Yoichi Yamada (Univ. of Tsukuba)
124	Eckart	Rühl	Berlin Freie Universität	Eckart Rühl (Berlin Freie Universität)
125	Jongwoo	Lim	Seoul National Univ.	Jongwoo Lim (Seoul National Univ.)
126	Michael	Man	OIST	Michael Man (OIST)
127	Takafumi	Sato	Tohoku Univ.	Takafumi Sato (Tohoku Univ.)
128	Hung-Wei	Shiu	NSRRC	Hung-Wei Shiu (NSRRC)
129	Wen-Xin	Tang	Chongqing University	Wen-Xin Tang (Chongqing University)
130	Takuya	Masuda	NIMS	Takuya Masuda (NIMS)
131	Nozomu	Ishiguro		Nozomu Ishiguro ()
132	Satoshi	Kera	Institute for Molecular Science	Satoshi Kera (Institute for Molecular Science)
133	Der-Hsin	Wei	NSRRC	Der-Hsin Wei (NSRRC)
134	Tan	Xin	Forschungszentrum	Tan Xin (Forschungszentrum)
135	Shinnichiro	Ideta	Institute for Molecular Science	Shinnichiro Ideta (Institute for Molecular Science)
136	Hiroshi	Iwayama	Institute for Molecular Science	Hiroshi Iwayama (Institute for Molecular Science)

別紙　プログラム　(https://sites.google.com/ims.ac.jp/uvsor-ws2020/program)

The time of the workshop schedule is written according to Japan Standard Time (JST).

1 Day (Oct.28)

13:30-14:00	Registration open (ZOOM connection test)
14:00-14:15	Opening
14:15-14:50	Dr.Fumihiko Matsui(IMS) Soft-x-ray photoelectron momentum microscopy for selective atomic/molecular orbital excitation
14:50-15:25	Prof. Jongwoo Lim (Seoul National Univ.) Operando electrochemical scanning x-ray transmission microscopy for lithium-ion batteries
15:25-16:00	Prof. Wen-Xin Tang (Chongqing University) In situ observation of meta-stable magnetization state in Fe/W(110) nanostructures
16:00-16:15	Coffee break
16:15-16:50	Dr.Takuji Ohigashi (IMS) Current Status of the Scanning Transmission X-ray Microscopy Beamline in UVSOR
16:50-17:25	Prof. Takafumi Sato (Tohoku Univ.) Nano-ARPES study of novel topological materials
17:25-18:00	Dr. Takuya Masuda (National Institute for Materials Science) Development of a laboratory-based in situ XPS apparatus for liquid samples and electrochemical interfaces
18:00-18:30	Discussion&Workshop photo

2 Day (Oct.29)

13:30-14:00	Registration open (ZOOM connection test)
14:00-14:05	Second Day Opening
14:05-14:40	Dr. Hung-Wei Shiu (NSRRC) STXM at TPS 27A1: Capabilities and Opportunities
14:40-15:15	Dr. Tzu-Hung Chuang (NSRRC) Photoelectron related image and nanospectroscopy endstation at TPS 27A2: Capabilities and opportunities
15:15-15:50	Prof. Michael S Altman (Hong Kong Sci. Tech. Univ.) Strain and Permeability of Graphene studied by Cathode Lens Microscopy, Diffraction and Spectroscopy
15:50-16:05	Coffee break
16:05-16:40	Dr. Michael Man (OIST) Visualization of excitons in 2D semiconductor by time-resolved ARPES
16:40-17:15	Prof. Lijuan Zhang (Shanghai Synchrotron Radiation Facility) Stability and inner structure of nanobubbles investigated by STXM
17:15-17:50	Dr.Nozomu Ishiguro (Tohoku University) Nano-scale Chemical State Visualization using Ptychography-XAFS
17:50-18:30	Discussion&Closing

その他

既にユーザー飽和の状態にあり、利用研究フェイズとなっている走査型透過 X 線顕微鏡(STXM)と、現在急進的に開発研究が進行中である Momentum Microscope (MM)から『顕微』と『分光』という2つのキーワードを背景として、アジア圏における利用研究や、Ambient XPS や LEEM などの関連手法を用いる先鋭的研究のためのワークショップを開催した。折しもコロナ禍で研究者間の交流性が低い昨今において、数多の分野にわたる研究者が国際的に交流、意見を交わす貴重な場を提供することができた。殊に『顕微』の範疇において、近年急速に発展した高分解能を駆使した利用研究が多く発表されたことは、本ワークショップの白眉と言えるものであった。そしてここで行われた議論は、今後の MM の進行すべき方向や、UVSOR の次期計画の指針を定める上での貴重な情報となり得るものであった。

この国際ワークショップを開催するにあたり、当初は時差を懸念してアジア圏の参加者を主として想定していたが、実際には大きな時差にも関わらず、欧米からの参加者が多くみられた（図１参照）。これもひとえに国際的に見ても先端的なレベルのプログラムを構成できた故と考えている。

またオンラインでワークショップを開催するにあたり、設営やプログラム集印刷などの実務的な作業が省略される一方で、開催時のタイムキーピングや発言への対応、止むを得ない問題ではあるが時間設定、著作権管理、個人情報管理などに、今後の開催にむけて対処すべき課題が少なからずあった。これらは今後の開催へ向けての申し送り事項としたい。

本ワークショップは、プログラムやホームページの作成および外国人研究者への対応などについて、研究力強化戦略室の永園尚代氏に多大なご協力をいただいた。この場で感謝申し上げたい。

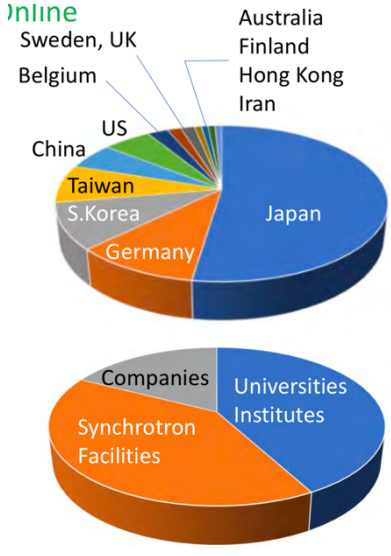


図１：参加者の分布

分子科学研究所共同利用研究（研究会）実施報告書（2020 年度）

2021 年 3 月 22 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　名古屋大学大学院工学研究科
氏名　松田　亮太郎

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	錯体化学から始まる学術展開の可能性
開催日時	2021 年 3 月 11 日 ～ 2021 年 3 月 12 日
課題番号	20-353
プログラム	別紙添付
参加者名簿	別紙添付
その他	

注1.　要旨集を作成している場合は本報告書に添付してください。

注2.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

参加者名簿

No.	氏名	所属	身分	現地参加 または オンライン参加
1	Chang, Bok Ryun	Chang Medical Services	修士	オンライン参加
2	Ryo Kitaura	nagoya univ.	associate professor	オンライン参加
3	Shoko Kume	広島大学大学院先進理工系科学研究科	准教授	オンライン参加
4	teppei yamada	東京大学	教授	オンライン参加
5	Yasutomo Segawa	Institute for Molecular Science	准教授	オンライン参加
6	Zhewei Weng	東京大学総合文化研究科	博士 2 年	オンライン参加
7	zyfan	kyoto university	博士 1 年	オンライン参加
8	阿部　司	大阪大学　産業科学研究所	特任助教	オンライン参加
9	阿部正明	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	教授	オンライン参加
10	安倍悠朔	早稲田大学大学院	修士 1 年	オンライン参加
11	伊藤亮孝	高知工大院工	講師	オンライン参加
12	井頭麻子	明治学院大学法学部	准教授	オンライン参加
13	稲垣　恵子	錯体化学会事務局	事務支援員	現地参加
14	稲葉央	鳥取大学	助教	オンライン参加
15	羽鳥　敦也	分子科学研究所	修士 1 年	オンライン参加
16	越山友美	立命館大学	准教授	オンライン参加
17	遠藤健一	京都大学	研究員	オンライン参加
18	奥永友貴	東大院総合	修士 2 年	オンライン参加
19	横井紀彦	生理学研究所	助教	現地参加
20	岡澤　厚	日本大学医学部	助教	オンライン参加
21	荻原　直希	東京大学　総合文化研究科	助教	オンライン参加
22	加藤健太	東邦大学	学部 3 年	オンライン参加
23	関根彩希	錯体化学	学部 3 年	オンライン参加
24	関根良博	熊本大学	准教授	現地参加
25	岩野　司	東京大学　大学院総合文化研究科	博士 1 年	オンライン参加
26	亀高　愛	分子科学研究所	URA	オンライン参加
27	吉成信人	大阪大学大学院理学研究科	准教授	現地参加
28	吉村公彦	宇部興産	主席研究員	オンライン参加
29	吉田将己	北大院理	助教	オンライン参加
30	久司　美登	日本ペイント・オートモーティブコーティングス（株）	R&D 本部　開発研究所	オンライン参加
31	久保田佳基	大阪府立大学理学系研究科	教授	オンライン参加
32	許嘉能	九州大学錯体物性化学研究室	修士 1 年	オンライン参加
33	橋本久子	東北大学大学院理学研究科	教授	オンライン参加
34	桐谷乃輔	大阪府立大学	准教授	現地参加
35	窪田　亮	京都大学大学院工学研究科	助教	現地参加
36	栗谷真澄	昭和電工株式会社	会社員	オンライン参加

37	原口知之	東京理科大学	助教	オンライン参加
38	原野幸治	東大院理	特任准教授	オンライン参加
39	高橋仁徳	北海道大学電子科学研究所	助教	オンライン参加
40	佐竹　彰治	東京理科大学理学部第二部化学科	教授	オンライン参加
41	砂賀　彩光	京都大学　複合原子力科学研究所	助教	オンライン参加
42	坂本裕俊	名古屋大学　物質科学国際研究センター	特任講師	オンライン参加
43	笹木健太	九州大学	修士２年	オンライン参加
44	三宅亮介	お茶の水女子大学	講師	オンライン参加
45	三輪　真梨乃	高知工大院工	修士1年	オンライン参加
46	三輪邦之	分子科学研究所	特任助教	オンライン参加
47	山下　誠	名古屋大学大学院工学研究科	教授	現地参加
48	山田美穂子	奈良先端科学技術大学院大学	助教	オンライン参加
49	時安　哲平	中央大学　理工学部　応用化学科	学部４年	オンライン参加
50	酒田陽子	金沢大学	准教授	オンライン参加
51	秋吉　亮平	熊本大学大学院	博士３年	オンライン参加
52	秋津貴城	東京理科大学	教授	オンライン参加
53	小崎紳一	山口大学	教授	オンライン参加
54	小林　文也	東京理科大学	助教	オンライン参加
55	小澤　芳樹	兵庫県立大学　大学院物質理学研究科	准教授	オンライン参加
56	松岡亮太	分子科学研究所	助教	現地参加
57	松田　亮太郎	名古屋大学	教授	現地参加
58	松本　剛	東京工業大学	特任准教授	オンライン参加
59	植村卓史	東大院新領域	教授	オンライン参加
60	新井駿祐	錯体化学教室	学部４年	オンライン参加
61	森本祐麻	大阪大学工学研究科	助教	現地参加
62	壬生　託人 (Takuto Mibu)	近畿大学大学院　総合理工学研究科	博士２年	オンライン参加
63	水田　勉	広島大学先進理工系科学研究科	教授	オンライン参加
64	杉山晴紀	分子科学研究所	助教	オンライン参加
65	西林　仁昭	東大院工	教授	オンライン参加
66	石井知彦	香川大学	教授	オンライン参加
67	石崎理絵	東邦大学理学部化学科	学部３年	オンライン参加
68	石川直人	大阪大学理学研究科	教授	オンライン参加
69	石﨑学	山形大学	講師	オンライン参加
70	相本雄太郎	九州大学	博士２年	オンライン参加
71	相澤　洋紀	総合研究大学院大学	博士２年	オンライン参加
72	草本哲郎	分子研	准教授	現地参加
73	速水真也	熊本大学	教授	現地参加
74	村橋　哲郎	東京工業大学	教授	オンライン参加
75	大場正昭	九州大学	教授	オンライン参加
76	大谷亮	九州大学大学院理学研究院	准教授	現地参加

77	大竹　研一	京都大学	特定助教	オンライン参加
78	大坪宥太	九大院理	博士研究員	オンライン参加
79	瀧本和誉	愛媛大院理工	博士 2 年	オンライン参加
80	竪山瑛人	株式会社カネカ	研究担当	オンライン参加
81	中貝　梢	分子研　草本グループ	技術支援員	現地参加
82	中村　陸人	熊本大学	理学部 4 年	オンライン参加
83	仲谷学	城西大学	助教	オンライン参加
84	猪瀬　朋子	京都大学高等研究院	特定助教	オンライン参加
85	張　浩徹	中央大学	教授	現地参加
86	佃俊明	山梨大学教育学部	准教授	オンライン参加
87	柘植　清志	富山大学	教授	オンライン参加
88	貞清正彰	東京理科大学理学部第一部応用化学科	講師	オンライン参加
89	田原圭志朗	兵庫県立大学理学部	助教	オンライン参加
90	田中　亮	広島大学大学院　先進理工系科学研究科	助教	現地参加
91	藤枝伸宇	大阪府立大学	准教授	オンライン参加
92	藤本大地	東邦大学大学院 化学専攻 北澤孝史研究室	修士 1 年	オンライン参加
93	堂本悠也	東京大学大学院工学系研究科	助教	オンライン参加
94	内田さやか	東京大学大学院総合文化研究科	准教授	オンライン参加
95	楠本壮太郎	熊本大学大学院	博士 3 年	オンライン参加
96	二瓶雅之	筑波大学数理物質系化学域	教授	オンライン参加
97	日野綾子	東京大学大学院理学系研究科	博士 1 年	オンライン参加
98	梅山　大樹	国立研究開発法人物質・材料研究機構	独立研究者	オンライン参加
99	尾本賢一郎	奈良先端科学技術大学院大学	特任助教	オンライン参加
100	武田依子	九州大学理学府化学専攻錯体物性化学研究室	修士 2 年	オンライン参加
101	服部伸吾	横浜市立大学	助教	オンライン参加
102	平野　義典	静岡大学	教育学部 3 年	オンライン参加
103	芳賀　正明	中央大研究開発機構	客員教授	オンライン参加
104	北山拓	東北大学	学部 3 年	オンライン参加
105	北清　航輔	東邦大学理学研究科化学専攻	博士 2 年	オンライン参加
106	北川　宏	京都大学 大学院理学研究科 化学専攻	教授	オンライン参加
107	北尾　岳史	東京大学大学院工学系専攻	助教	オンライン参加
108	堀毛悟史	京都大学	准教授	オンライン参加
109	本多めぐみ	九州大学	修士 1 年	オンライン参加
110	木村　舜	東大院理	博士 3 年	オンライン参加
111	矢野なつみ	島根大学	助教	オンライン参加
112	柳澤純一	九州大学大学院	博士 1 年	オンライン参加
113	唯美津木	名大物国セ	教授	オンライン参加
114	和田亨	立教大学理学部	教授	オンライン参加
115	嶌越　恒	九州大学大学院工学研究院	教授	オンライン参加
116	眞鍋　敏夫	富士通株式会社	研究員	オンライン参加
117	齋藤大将	北海道大学錯体化学研究室	博士 1 年	オンライン参加

分子研研究会
「錯体化学から始まる学術展開の可能性」

日時：　2021 年 3 月 11 日（木）～　2021 年 3 月 12 日（金）
場所：　自然科学研究機構分子科学研究所
　　岡崎コンファレンスセンター中会議室およびオンライン

開催趣旨：

金属錯体はあらゆる金属イオンと有機配位子との配位結合からなる化合物で、その種類は原理的に無限である。無限の物質から生み出される機能は、光・電気・磁気がかかわる物理的な現象に基づくものから、高分子、超分子、生体分子などの高次構造体に基づく、分子認識、分子捕捉、エネルギー変換、力学応答機能など、非常に多岐にわたる。このように多様な物質系と機能を生み出す金属錯体を研究する学問である錯体化学は、有機化学、高分子化学、生命科学、物理学、超分子化学、界面化学など、様々な学術分野との学際的な関わりが深く、新しい学術創成が可能な学術分野の「ハブ」としてポテンシャルを有する学問領域であるといえる。

さて、新しい学術研究・学術分野を創出するためには若い世代の研究者の自由闊達な独創的思考と発想が大きな役割を果たすものであり、最近の我が国の科学技術政策においても、ますますその重要性が指摘され、様々な施策が実行されている。このような背景のもと、本研究会では、学部あるいは大学院生時に、錯体化学を基盤とした研究を行って特筆すべき成果を挙げ*注、その後、大学や企業において、多様な分野で活発に研究を行っている若手研究者を講師とした。新進気鋭の若手研究者から、学生時代の錯体化学研究から現在の研究への展開について講演をいただくとともに、参加者による討論を通して、今後の錯体化学からの学術展開や新しい学術創成について議論を行うことを目的として本研究会を開催する。本研究会により、錯体化学研究からの新しい学術創成について、参加者で考えを深めるだけでなく、異分野間での「知」と「人」の交流を通して、分野間の双方向の情報交流を活発にするきっかけとなることも期待している。

＊注：平成 20 年度～平成 23 年度の錯体化学討論会で学生講演賞を受賞

プログラム

3 月 11 日（木）　第 1 日

13:00-13:10　開会の辞・趣旨説明

松田　亮太郎（名古屋大学　大学院工学研究科）

座長：小野田　晃（北海道大学　大学院環境科学院）

13:10-13:50　脳内蛋白質複合体の研究を通して、生物無機化学の未来について考えること

横井　紀彦（自然科学研究機構　生理学研究所）

13:50-14:30　超分子錯体化学を基盤とした細胞機能の模倣と制御

窪田　亮（京都大学　大学院工学研究科）

14:30-15:10　対アニオンの設計による配位重合触媒作用の制御

田中　亮（広島大学　大学院先進理工系科学研究科）

15:10-15:30　*休　憩*

座長：二瓶　雅之（筑波大学　大学院数理物質科学研究科）

15:30-16:10　錯体化学に立脚した結合開裂過程の研究

森本　祐麻（大阪大学　大学院理学研究科）

16:10-16:50　錯体化学研究から企業へ：研究開発ジャーニー

栗谷　真澄（昭和電工　研究開発部）

3 月 12 日（金）　第 2 日

座長：内田　さやか（東京大学大学院　総合文化研究科）

9:00-9:40　シアノ系金属錯体集積体の構造ひずみに基づく機能開拓

大谷　亮（九州大学　大学院理学研究院）

9:40-10:20　結晶性多孔体の新機能開拓

貞清　正彰（東京理科大学　理学部第一部）

10:20-11:00　金属クラスター集積空間におけるイオン輸送現象

吉成　信人（大阪大学　大学院理学研究科）

11:00-11:20　*休　憩*

座長：植村　卓史（東京大学　大学院新領域創成科学研究科）

11:20-12:00　柔軟な電子状態を示す外場応答性金属錯体の開発

関根　良博（熊本大学　大学院自然科学研究科）

12:00-12:40　原子層半導体を舞台とする物質化学とデバイス工学

桐谷　乃輔（大阪府立大学　大学院工学研究科）

12:40-13:00　講評・閉会の辞

北川　宏（京都大学大学院理学研究科・錯体化学会会長）

分子科学研究所共同利用研究（若手研究活動支援）実施報告書（2020 年度）

2021 年 2 月 17 日

分子科学研究所長　殿

(報告者)
所属　大阪市立大学大学院理学研究科
氏名　加藤　賢

下記のとおり実施しましたので報告します。

記

研究課題名	第 18 回 ESR 夏の学校: ESR 法の基礎・理論・生体応用
実施期間	2021　年　2　月　8　日　～　2021　年　2　月　10　日
課題番号	20-401
活動の概要 (200 字程度以内)	ESR は様々な分野において広く使われている測定法だが、市販の装置およびソフトフェアを用いた測定・解析だけで得られる情報は限られており、専門的な知識や技術の習得が求められている。ESR を専門にしている研究者を招いて若手への指導を目的に講義を行っていただいた。 本研究会では、各日ごとに下記 3 項目について講義を行った。 1. 過渡 EPR 法とスピンダイナミクス 2. スピンハミルトニアンパラメータの量子化学計算 3. がん、酸化ストレス研究に役立つ磁気共鳴技術
プログラム等	別紙添付
参加者名簿	別紙添付
その他	

注1.　要旨集を作成している場合は本報告書に添付してください。

注2.　本報告書は分子科学研究所のホームページに公開されるため、公開可能な範囲でご作成ください。公開できない内容は省略し，簡潔にご記入ください。

分子研若手研究会・第 18 回 ESR 夏の学校 プログラム

講演日程
2 月 8 日（月） 1 日目：15 時～18 時（懇親会は 18 時半～）
前田 公憲 先生 （埼玉大学理工学研究科） 「過渡 EPR 法とスピンダイナミクス」
2 月 9 日（火） 2 日目：13 時～16 時（懇親会は 17 時～）
杉崎 研司 先生 （大阪市立大学理学研究科） 「スピンハミルトニアンパラメータの量子化学計算」
2 月 10 日（水） 3 日目：13 時～16 時（懇親会は 17 時～）
安井 博宣 先生 （北海道大学獣医学研究院） 「がん、酸化ストレス研究に役立つ磁気共鳴技術」

参考 URL: https://www.ims.ac.jp/research/seminar/2021/01/12_4879.html

1日目

Nagashima H	埼玉大
加藤賢	大阪市立大
中岡梨々子	北海道大
平野弘樹	神奈川大
中谷佳萌	京都大
婦木正明	**神戸大**
香村泉希	埼玉大
浅野　素子	群馬大学
Nam Dayeor	分子研
東　里沙	神戸薬科大学
佐野永昂	埼玉大
新井 柊平	埼玉大
齋藤泰輝	名古屋市立大
飯野翼	名古屋大
齋藤佑	神戸大
板橋勇輝	名古屋大
高橋佑輔	福井大
付哲斌	神戸大
伊木志成子	分子研
佐藤太一	埼玉大
佐藤陸	筑波大
前島萌乃	都立大
勝平譲治	神戸大
南錦	大阪市立大
増澤健太	埼玉大
山根健史	大阪市立大
藤林将	広島大学
戸沢日馨	筑波大
松田大弥	埼玉大
柏崎真輝	埼玉大
武藤克也	青学大
河村裕太	阪大
深井歩美	埼玉大
筒井祐介	京都大
神保知歩	埼玉大
立野明宏	埼玉大
花田和輝	大阪大学
薛冬	筑波大学
藤原基靖	分子研
藤田みのり	埼玉大
赤間知子	北海道大
野沢竜生	埼玉大
金坂青葉	
長友敬晃	神戸大
Liang Lihui	筑波大学

2日目

Nagashima H	埼玉大
加藤賢	大阪市立大
中岡梨々子	北海道大
平野弘樹	神奈川大
Dan Ito	
Hashimoto(Chiyoda)	
増澤健太	埼玉大
東　里沙	神戸薬科大学
佐野永昂	埼玉大
新井 柊平	埼玉大
齋藤佑	神戸大
板橋勇輝	名古屋大
中田倖暉	東京農工大
中谷佳萌	京都大
伊木志成子	分子研
佐藤太一	埼玉大
前島萌乃	都立大
勝平譲治	神戸大
柏崎真輝	埼玉大
武藤克也	青学大
河村裕太	大阪大
牧野航季	埼玉大
立野明宏	埼玉大
花田和輝	大阪大学
薛冬	筑波大学
藤原基靖	分子研
藤田みのり	埼玉大
赤間知子	北海道大
野沢竜生	埼玉大
金坂青葉	
長友敬晃	神戸大
阿部二郎	青山大
Liang Lihui	筑波大学

3日目

Nagashima H	埼玉大
加藤賢	大阪市立大
中岡梨々子	北海道大
平野弘樹	神奈川大
増澤健太	埼玉大
柏崎真輝	埼玉大
Nam Dayeor	分子研
東　里沙	神戸薬科大学
佐野永昂	埼玉大
新井 柊平	埼玉大
伊木志成子	分子研
佐藤太一	埼玉大
佐藤陸	筑波大
前島萌乃	都立大
齋藤佑	神戸大
中谷佳萌	京都大
勝平譲治	神戸大
山根健史	大阪市立大
柏崎真輝	埼玉大
河村裕太	大阪大
立野明宏	埼玉大
花田和輝	大阪大学
藤原基靖	分子研
藤田みのり	埼玉大
赤間知子	北海道大
野沢竜生	埼玉大
香村泉希	埼玉大
Liang Lihui	筑波大学

第18回 ESR夏の学校
冬開催

2021年2月8日(月)～2月10日(水)

@ web会議システム zoom

第18回　ESR夏の学校

時間割

2月8日（1日目）		2月9日（2日目）		2月10日（3日目）	
15:00	開講挨拶	13:00	開講挨拶	13:00	開講挨拶
15:15	講義前半（前田先生）	13:15	講義前半（杉崎先生）	13:15	講義前半（安井先生）
16:15	休憩	14:15	休憩	14:15	休憩
16:30	講義後半（前田先生）	14:30	講義後半（杉崎先生）	14:30	講義後半（安井先生）
17:30	休憩（質問提出）	15:30	休憩（質問提出）	15:30	休憩（質問提出）
17:40	質問回答	15:40	質問回答	15:40	質問回答
18:00	休憩	16:00	休憩	16:00	休憩
18:30	懇親会スタート	17:00	懇親会スタート	17:00	懇親会スタート
18:30	前田先生の研究紹介	17:00	杉崎先生の研究紹介	17:00	安井先生の研究紹介
19:00	参加者の研究紹介	17:30	参加者の研究紹介	17:30	参加者の研究紹介