

6-4 物質分子科学研究領域

電子構造研究部門

横山利彦（教授）（2002年1月1日着任）

A-1) 専門領域：表面磁性，X線分光学，磁気光学

A-2) 研究課題：

- a) 雰囲気制御型硬X線光電子分光法の開発と固体高分子形燃料電池への応用
- b) 時間分解X線吸収分光による光触媒のダイナミクス解明
- c) X線吸収分光，X線磁気円二色性などを用いた磁性材料等の構造・物性解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) SPring-8のBL36XUで新しく開発した雰囲気制御型硬X線光電子分光装置により固体高分子形燃料電池（PEFC）電極触媒の *in situ* 測定を継続して行っている。特に，世界初の完全大気圧（1気圧）下での光電子分光測定を目指した装置がほぼ完成した。
- b) シンクロトロン放射光とX線自由電子レーザーを用い，光触媒材料の光励起過程での電子状態及び構造ダイナミクスを，X線吸収微細構造（XAFS）分光を用いて明らかにする目的で，ナノ秒（シンクロトロン放射光）あるいはピコ秒（X線線自由電子レーザー）の時間領域での変化を追跡している。
- c) 分子研シンクロトロン放射光施設 UVSOR-III BL4B を用いた高磁場極低温X線磁気円二色性法（XMCD）を共同利用公開し，様々な磁性薄膜の磁気特性検討について国内外との共同研究を広く実施している。また，国内他機関の放射光施設を利用して，様々な磁性錯体等の硬X線 XAFS 測定を行い，局所電子状態・幾何構造解析に関する共同研究を進めている。

B-1) 学術論文

N. ISHIGURO, S. KITAYAKARN, O. SEKIZAWA, T. URUGA, H. MATSUI, M. TAGUCHI, K. NAGASAWA, T. YOKOYAMA and M. TADA, “Kinetics and Mechanism of Redox Processes of Pt/C and Pt₃Co/C Cathode Electrocatalysts in a Polymer Electrolyte Fuel Cell during an Accelerated Durability Test,” *J. Phys. Chem. C* **120**, 19642–19651 (2016). DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b04437

O. SEKIZAWA, T. URUGA, Y. TAKAGI, K. NITTA, K. KATO, H. TANIDA, K. UESUGI, M. HOSHINO, E. IKENAGA, K. TAKESHITA, S. TAKAHASHI, M. SANO, H. AOYAGI, A. WATANABE, N. NARIYAMA, H. OHASHI, H. YUMOTO, T. KOYAMA, Y. SENBA, T. TAKEUCHI, Y. FURUKAWA, T. OHATA, T. MATSUSHITA, Y. ISHIZAWA, T. KUDO, H. KIMURA, H. YAMAZAKI, T. TANAKA, T. BIZEN, T. SEIKE, S. GOTO, H. OHNO, M. TAKATA, H. KITAMURA, T. ISHIKAWA, M. TADA, T. YOKOYAMA and Y. IWASAWA, “SPring-8 BL36XU: Catalytic Reaction Dynamics for Fuel Cells,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **712**, 012142 (4 pages) (2016). doi:10.1088/1742-6596/712/1/012142

S. YAMAZOE, S. TAKANO, W. KURASHIGE, T. YOKOYAMA, K. NITTA, Y. NEGISHI and T. TSUKUDA, “Hierarchy of Bond Stiffnesses within Icosahedral-Based Gold Clusters Protected by Thiolates,” *Nat. Commun.* **7**, 10414 (2016). DOI: 10.1038/ncomms10414

W. -J. CHUN, S. TAKAKUSAGI, Y. UEMURA, K. BANDO and K. ASAKURA, “X-Ray Absorption Fine Structure Analysis of Catalytic Nanomaterials,” *X-Ray and Neutron Techniques for Nanomaterials Characterization*, Springer, 609–664 (2016). DOI: 10.1007/978-3-662-48606-1_11

B-3) 総説, 著書

Y. WAKISAKA, Y. UEMURA, T. YOKOYAMA, H. ASAKURA, H. MORIMOTO, M. TABUCHI, D. OHSHIMA, T. KATO and S. IWATA, “Anomalous Structural Behavior in the Magnetic and Structural Transition of FeRh Thin Films from a Local Viewpoint,” *Photon Factory Highlights 2015*, 32–33 (2016).

高木康多, 「雰囲気制御型硬X線光電子分光による固体燃料電池電極のその場観察」, *表面科学* **37**, 14–18 (2016).

B-4) 招待講演

横山利彦, 「XAFS の解釈」, あいちシンクロトロン光センター第5回XAFS グループ利用者研究会, 瀬戸, 2016年 3月.

横山利彦, 「XAFS の解釈」, 日本XAFS 研究会夏の学校, 小樽, 2016年 9月.

T. YOKOYAMA, “Novel synchrotron radiation methodology for materials science,” Pre-ICMM2016 in Nagoya (Satellite meeting of ICMM2016) New Research Crossroads in Molecular Conductors and Magnets, Nagoya, September 2016.

高木康多, 「固体高分子形燃料電池の雰囲気制御型硬X線光電子分光による分析」, 第5回SPring-8 グリーンサステイナブルケミストリー研究会／第7回SPring-8 先端利用技術ワークショップ, 東京, 2016年 12月.

Y. TAKAGI, “In situ study of oxidation states of platinum nanoparticles on a PEFC electrode by near ambient pressure hard X-ray photoelectron spectroscopy,” KPS Fall meeting 2016, Gwangju (Korea), October 2016.

B-6) 受賞, 表彰

中川剛志, 日本物理学会第4回若手奨励賞 (2010).

高木康多, 日本物理学会第2回若手奨励賞 (2008).

中川剛志, 日本表面科学会第3回若手研究者部門講演奨励賞 (2006).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本XAFS 研究会会長 (2015–).

日本XAFS 研究会幹事 (2001–2007, 2010–2014).

日本放射光学会評議員 (2004–2005, 2008–2010, 2011–2012, 2014–2015).

日本放射光学会編集幹事 (2005–2006).

Executive Committee member of the International X-Ray Absorption Society (2003.7–2009.8).

学会の組織委員等

第14回XAFS 討論会実行委員長プログラム委員長 (2011).

XAFS 討論会プログラム委員 (1998–2016).

第15回X線吸収微細構造国際会議プログラム委員 (2011–2012).

日本放射光学会年会組織委員 (2005), プログラム委員 (2005, 2011).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会学術システム研究センター化学班専門研究員 (2010–2012).

文部科学省ナノテクノロジー・ネットワーク運営委員 (2007–2011).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2004–2005, 2008–2009, 2015).

日本学術振興会科学研究補助金学術創成研究費評価委員 (2008).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験審査委員会実験課題審査部会委員 (2003–2009), 同化学材料分科会主査 (2005–2009).

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 機関代表者 (2012–).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2004–2006).

日本放射光学会誌編集委員長 (2005–2006).

競争的資金等の領域長等

科学研究費補助金特定領域研究「分子スピン」総括班事務局 (2003–2006).

その他

文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォーム分子・物質合成プラットフォーム代表機関運営責任者 (2012–).

文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォーム分子・物質合成プラットフォーム分子科学研究所, 実施機関責任者 (2012–).

文部科学省先端研究施設共用イノベーション創出事業 ナノテクノロジーネットワーク「中部地区ナノテク総合支援：ナノ材料創製加工と先端機器分析」拠点長 (2007.4–2012.3).

名古屋工業大学人事部会外部委員 (2015).

本多記念会本多フロンティア賞選考委員 (2016).

本多記念会本多記念研究奨励賞選考委員 (2012, 2013, 2015).

B-8) 大学での講義, 客員

広島大学大学院理学研究科, 「放射光科学特論II」, 2016年10月18日–20日.

名古屋大学大学院理学研究科, 客員教授, 2012年–.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(B), 「新規時間分解X線吸収分光法の開発とマイクロ秒電極反応観測への応用」, 上村洋平 (2016年–2017年).

科研費特別研究員奨励費, 「軽元素スピントロニクス材料におけるX線円二色性の解明」, 小出明広 (2015年–2016年).

受託研究, NEDO 固体高分子形燃料電池利用高度化技術開発事業「普及拡大化基盤技術開発」触媒・電解質・MEA 内部現象の高度に連成した解析, セル評価/MEA における性能発現および耐久劣化機構の解析に基づく設計基盤技術の確立/MEA 劣化機構解明, 「雰囲気制御型硬X線光電子分光法を用いた燃料電池触媒の in-situ 状態解析」, 横山利彦 (2015年–2017年).

科研費基盤研究(A) (一般), 「微量元素高速時間分解X線吸収分光の開発と機能性材料への展開」, 横山利彦 (2015年–2017年).

科研費若手研究(A), 「大気圧硬X線光電子分光装置の開発と燃料電池電極触媒のオペランド測定」, 高木康多 (2015年–2016年).

科研費特別研究員奨励費,「時分割DXAFS-PEEMの開発と固体表面上の光励起-電子移動過程の直接観測」, 上村洋平 (2013年).

科研費基盤研究(C),「レーザー誘起磁気円二色性STMによるフタロシアニン分子のスピン分布マッピング」, 高木康多 (2012年-2014年).

受託研究, NEDO 固体高分子形燃料電池実用化推進技術開発「基盤技術開発」MEA 材料の構造・反応物質移動解析,「時空間分解X線吸収微細構造(XAFS)等による触媒構造反応解析」, 横山利彦 (2011年-2014年).

科研費基盤研究(A),「キラル光電子顕微鏡の開発」, 横山利彦 (2010年-2012年).

科研費挑戦的萌芽研究,「レーザー誘起磁気円二色性STMの開発」, 横山利彦 (2008年-2009年).

科研費基盤研究(A),「フェムト秒時間分解紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の開発」, 横山利彦 (2007年-2009年).

科研費若手研究(B),「半導体表面のドーパントの元素識別——放射光STMを用いて——」, 高木康多 (2007年-2009年).

C) 研究活動の課題と展望

2002年1月着任以降, 磁性薄膜の表面分子科学的制御と新しい磁気光学分光法の開発を主テーマとして研究グループをスタートさせた。磁性薄膜・ナノワイヤ・ナノドットの磁氣的性質, および分子吸着などの表面化学的な処理による新しい現象の発見とその起源の解明などを目指し, 超高真空表面磁気光学Kerr効果法, 高磁場(7 T)極低温(5 K)X線磁気円二色性法(UVSOR利用), 磁氣的第二高調波発生法(フェムト秒Ti:Sapphireレーザー使用), 極低温超高真空走査トンネル顕微鏡などの手法を展開してきた。また, 紫外光励起光電子放出による磁気円二色性が仕事関数しきい値近傍で極端に増大する現象を発見し, 紫外磁気円二色性光電子顕微鏡を世界に先駆けて開発し, さらにはこれまで全く研究されていなかった二光子光電子磁気円二色性法の初観測に成功し, 極めて有効な手法として今後の発展が期待できることが示された。現在, 薄膜・表面磁性研究はUVSOR-IIIでのX線磁気円二色性を用いた共同研究のみを継続しており, 装置が安定に順調に運転されているため次年度以降も精力的に共同研究を進める。

2011年度から, 広域X線吸収微細構造(EXAFS)法と経路積分法を併用して, インバー等磁性合金の熱膨張等の研究を始め, 既にプレスリリース2件を含めて十分な成果が挙げられている。今後も, この独自の手法によって, 局所構造の見地から固体の熱的性質を検討していく。

2011年度から, SPring-8の超高輝度硬X線を利用した燃料電池のin situ 雰囲気制御型硬X線光電子分光による解析を行ってきた。2017年度は, 開発した光電子分光システムの当初最大圧力(~5000 Pa)をほぼ大気圧の90,000 Paにまで引き上げて光電子分光観測に成功した。今後, より実際の動作に近い圧力下での燃料電池電極状態観測に適用できる。光電子分光は, 燃料電池中の各構成成分の電位を電極なしに観測可能な手法であり, これらの観測を進めている。さらに, 測定には通常20分程度要するが, 急激な燃料電池の電圧変化追跡等のため, 繰返し計測のもと200 msの実効時間分解計測が可能となった。

2013年度から, シンクロトロン放射光やX線自由電子レーザーを用いたナノ・ピコ秒時間分解X線吸収微細構造分光法の開発的研究を進め, 光触媒等の高速時間依存電子状態・幾何構造の変化を追跡する研究を行っている。これまでの高速時間分解X線吸収分光測定は, ポンプレーザーとプローブX線の繰返し周波数の大きな相違に基づくパルスピッキングの必要性から, 高速で低エネルギー分解能のX線検出器の利用を余儀なくされており, そのため測定試料が高濃度に限られていた。現在, Photon Factory Advanced Ringのシングルバンチ運転と高繰返しレーザーを完全同期させ, 高エネルギー分解能X線検出器を用いた超微量元素の高速時間分解X線吸収分光法を開発中である。また, シングルバンチ等の特殊運転を必要としないタイムスタンプ法時間分解XAFS測定(ns~ μ sの変化が対象)の構築を進めている。

電子物性研究部門

中 村 敏 和 (准教授) (1998 年 6 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：物性物理学, 物質科学, 磁気共鳴

A-2) 研究課題：

- a) 磁気共鳴法による有機導体・低次元スピン系の電子状態理解
- b) パルスおよび高周波 ESR を用いたスピン科学研究の新しい展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機導体・低次元スピン系の特異な電子状態に興味を持ち, 微視的な観点からその電子状態やスピン・電荷ダイナミックスを明らかにするために磁気共鳴測定を行っている。一次元電子系の競合電子相の起源に迫るために, 4 GPa に迫る系統的な超高圧力下の NMR 測定ならびにパルス ESR を行い, リエントラント反強磁性相や量子臨界点の是非, 電荷秩序相と基底状態の相関について研究を行っている。この他, 新規な自己ドーブ型有機導体の強磁場 ESR を用いた研究, 新規な金属錯体や導電性分子物質に関する微視的研究も行っている。
- b) 分子研所有のパルスおよび高周波 ESR を用いて, 高分解能 ESR・高エネルギー特性を利用した複雑なスピン構造の決定, 多周波領域にわたるスピンダイナミクス計測といった種々な点から, スピン科学研究展開を行っている。本年度は Q-band の多重パルスシステムも稼働した。今後さらに, 当該グループだけでなく所外の ESR コミュニティーと連携を取り, パルス・高周波 ESR の新たな可能性や研究展開を議論し, 大学共同利用機関である分子研からのスピン科学の情報発信を行っていく。

B-1) 学術論文

K. MATSUBARA, Y. FUKAHORI, T. INATOMI, S. TAZAKI, Y. YAMADA, Y. KOGA, S. KANEGAWA and T. NAKAMURA, “Monomeric Three-Coordinate N-Heterocyclic Carbene Nickel(I) Complexes: Synthesis, Structures, and Catalytic Applications in Cross-Coupling Reactions,” *Organometallics* **35**, 3281–3287 (2016).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

T. NAKAMURA, “Pulsed and multi-frequency ESR study for material and biological sciences,” International Workshop “Novel Magnetic Resonance Techniques in Millimeter and Terahertz Waves and their Applications to Bioscience (MR-THz2016),” Kobe University, Kobe (Japan), November 2016.

T. NAKAMURA, “Magnetic Resonance Investigation for Molecular Based Conductors,” IGER International Symposium on Science of Molecular Assembly and Biomolecular Systems 2016, Nagoya University, Nagoya (Japan), September 2016.*

T. NAKAMURA, “Pulsed ESR Study on Material and Biofunctional Spin Science,” The 4th Awaji International Workshop on Electron Spin Science & Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications (AWEST2016), Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji (Japan), June 2016.

B-6) 受賞, 表彰

中村敏和, 科研費審査委員の表彰 (2015).

古川 貢, 電子スピンスイエンズ学会奨励賞 (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域7世話人 (2000–2001).

日本物理学会代議員 (2001–2003).

日本物理学会名古屋支部委員 (2001–2007, 2013–).

日本化学会実験化学講座編集委員会委員 (2002).

電子スピンスイエンズ学会担当理事 (2004–2005).

電子スピンスイエンズ学会運営理事 (2006–2011).

電子スピンスイエンズ学会副会長 (2014–2015).

電子スピンスイエンズ学会会長 (2016–).

アジア環太平洋EPR/ESR学会 (Asia-Pacific EPR/ESR Society) 秘書/財務 (2004–2008), 日本代表 (2010–2014).

日本化学会化学便覧基礎編改訂6版編集委員会委員 (2015–2018).

学会の組織委員等

Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, Novosibirsk, Russia, International Organizing Committee, 組織委員 (2006).

分子構造総合討論会2006 (静岡), プログラム委員 (2006).

A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology (ISESS-SEST2007) Shizuoka, Japan Organizing Committee, 組織委員 (2007).

Asia Pacific EPR Society—EPR Symposium 2008, Cairns, Queensland, Australia, International Advisory Committee, 組織委員 (2008).

第3回分子科学討論会2009 (名古屋), プログラム委員 (2009).

第49回電子スピンスイエンズ学会年会 (名古屋), プログラム委員 (2010).

Asia Pacific EPR/ESR Symposium 2012, Oct. 11th–15th, 2012, Beijing, China, International Organizing Committee, 組織委員 (2012).

Joint Conference of APES2014, IES and SEST2014 (APES-IES-SEST2014), Nov. 12th–16th, 2014, Nara, Japan, プログラム委員長, 座長 (2014).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

東京大学物性研究所物質合成・設備共同利用委員会委員 (2005–2007).

東京大学物性研究所物質設計評価施設運営委員会委員 (2011–2013).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2013–2015).

学会誌編集委員

電子スピンスイエンズ学会編集委員 (2003).

電子スピンスイエンズ学会編集委員長 (2004–2005).

電子スピンスイエンズ学会編集アドバイザー (2006–2013).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「先端磁気共鳴計測による電子対相関の解明」,中村敏和(2013年–2015年).

科研費挑戦的萌芽研究,「パルスESRによる距離計測技術を用いたプリオン凝集体構造の解明」,中村敏和(2012年–2013年).

科研費基盤研究(B),「低次元系の特異な電子相を利用したデバイス創製ならびにスピンドYNAMIX研究」,中村敏和(2008年–2011年).

科研費特定領域研究「100テスラ領域の強磁場スピン科学」(公募研究),「シアノバクテリア由来光化学II複合体の高磁場ESRによる研究」,中村敏和(2008年–2009年).

科研費特定領域研究,「分子導体における電荷の遍歴性と局在性の研究」,代表者 薬師久弥(中村敏和は準代表者で実質独立)(2003年–2007年).

C) 研究活動の課題と展望

本グループでは、分子性固体の電子状態(磁性、導電性)を主に微視的な手法(ESR, NMR)により明らかにしている。有機導体など強相関低次元電子系の未解決な問題の解明を行うとともに、生体関連試料を含む分子性物質の機能性に関する研究を行っている。多周波ESR (X-, Q-, W-bands)・パルス二重共鳴法(ELDOR, ENDOR)を用いた他に類を見ない磁気共鳴分光測定を中心に多数の協力研究・共同研究を受け入れ、最先端のESR測定研究の展開を全世界に発信している。今後は高圧下・極低温下といった極端条件での測定システム構築を行うとともに、分子科学における磁気共鳴研究のあらたな展開を行っていく。

分子機能研究部門

平本 昌宏 (教授) (2008年4月1日着任)

A-1) 専門領域：有機半導体，有機太陽電池，有機エレクトロニクスデバイス

A-2) 研究課題：

- a) 有機半導体単結晶におけるドーピング効果
- b) 横取り出し超格子有機単結晶太陽電池の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 10^{-9} nm/sに達する超低速蒸着技術を開発し、ルブレソ有機単結晶へ1 ppmまで極微量ドーピングすることに成功した。ホール効果測定によって、有機単結晶は、有機アモルファス薄膜の3%にくらべて、格段に大きいドーピングイオン化率27%を示すことが明らかになった。電界効果(FET)移動度測定によって、ドーピングによって有機単結晶中に形成される欠陥によるトラップが、キャリア濃度、キャリア移動度に大きな影響を与えていることが明らかになった。以上の結果は、有機単結晶エレクトロニクス分野を開拓する基礎となる成果である。
- b) 超高速ホール移動度有機半導体と超高速電子移動度有機半導体を用いたキャリアハイウエー単結晶膜を、サファイア単結晶基板上にエピタキシー技術によって作製し、さらに、両者の交互積層超格子構造を持つ、キャリア横取り出し型超格子単結晶セルを作製した。このセルにおいて、光生成電子・ホールを、約1ミリメートルの距離で横方向に取り出すこと、および、励起子拡散効率とキャリア収集効率を両立させて100%とすることに成功し、ブレンド接合が不必要な新しいタイプの単結晶超格子有機太陽電池の原理を実証できた。
本セルは、キャリアを横取り出しするため、いくらでも厚く積層できるので、これまでの有機太陽電池のスタンダードであったブレンド接合の限界を打ち破ることができ、可視光全域を利用することで、15%以上の効率を示す可能性を持つと考えている。

B-1) 学術論文

Y. WATANABE, T. HARADA, H. KAWAI, T. KAJI, M. HIRAMOTO and K. NISHIYAMA, "Emission Properties of [Eu(hfa)₃(phen)] and [Eu(hfa)₃(TPPO)₂] Dispersed in a Fibrous Network Comprising *p*-Chlorophenol + AOT Organogels," *J. Mol. Liq.* **217**, 51–56 (2016).

S. KATSUBE, M. KINOSHITA, K. AMANO, T. SATO, Y. KATSUMOTO, T. UMECKY, T. TAKAMUKU, T. KAJI, M. HIRAMOTO, Y. TSURUNAGA and K. NISHIYAMA, "Solvent Dependent Properties and Higher-Order Structures of Aryl Alcohols + AOT Molecular Gels," *Langmuir* **32**, 4352–4360 (2016).

B-3) 総説，著書

平本昌宏, 「ppmドーピングによる有機半導体のpn制御と有機太陽電池応用」, 「機能性色素の新規合成・実用化動向」, 松居正樹監修, シーエムシー出版(株), 第2章第1節, pp. 151–167 (2016).

B-4) 招待講演

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” PACCON 2016, Pure and Applied Chemistry International Conference 2016, The 4th CU-IMS Symposium: 10 Years of Fruitful Relationship and Beyond (IMS), Bangkok (Thailand), February 2016.

M. HIRAMOTO, “Recent Progress and Future of Organic Photovoltaic Cells,” Japan Society of Applied Physics, Symposium 4 “Recent Progress of Organic Electronics in Japan and Korea: For the Next Jump,” Tokyo Institute of Technology, Tokyo, March 2016.

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” 2nd World Congress on Materials Science, Polymer Engineering, Microtechnologies, Oil, Gas and Petrochemistry, Abu Dhabi (U.A.E.), November 2016.

平本昌宏, 「有機半導体のpn制御と有機太陽電池への応用」, 第63回応用物理学会春季学術講演会シンポジウム19 「有機薄膜太陽電池の現状と今後の展望」, 東京工業大学大岡山キャンパス, 東京, 2016年3月.

平本昌宏, 「有機単結晶薄膜太陽電池」, 第12回有機太陽電池シンポジウム——ペロブスカイト太陽電池の研究展開と有機薄膜太陽電池のポテンシャル——, 京都大学宇治キャンパス, 宇治, 2016年7月.

平本昌宏, 「有機半導体のpn制御と有機太陽電池への応用」, 有機エレクトロニクスデバイス・材料に関する研究討論会, 大阪大学吹田キャンパス銀杏会館, 吹田, 2016年9月.

平本昌宏, 「有機半導体のpn制御と有機太陽電池への応用」, 名古屋大学工学研究科応用物理学専攻談話会, 名古屋大学3号館, 名古屋, 2016年11月.

B-5) 特許出願

「横方向キャリア収集型有機太陽電池」, 平本昌宏, 菊地満, 新村祐介, 廣田真樹, 阿部正宏, 貞光雄一, 内藤裕義(日本化薬株式会社, 自然科学研究機構, 大阪府立大学), 2016年.

B-6) 受賞, 表彰

嘉治寿彦, 応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会奨励賞 (2013).

嘉治寿彦, 第31回(2011年秋季)応用物理学会講演奨励賞 (2011).

平本昌宏, 国立大学法人大阪大学教育・研究貢献賞 (2006).

平本昌宏, 応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会論文賞 (2006).

平本昌宏, JJAP(Japanese Journal of Applied Physics) 編集貢献賞 (2004).

平本昌宏, 電子写真学会研究奨励賞 (1996).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会幹事 (1997–1998, 2001–2002).

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会年会講演プログラム委員 (2002–2003).

Korea-Japan Joint Forum (KJF)—Organic Materials for Electronics and Photonics, Organization Committee Member (2003–).

「有機固体における伝導性・光伝導性および関連する現象」に関する日中合同シンポジウム組織委員 (2007–).

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会年会講演プログラム委員長 (2008–2009).

Fifth International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE5)(Miyazaki), Organization Committee Member (2009).

東京大学物性研究所2011年度後期短期研究会「エネルギー変換の物性科学」オーガナイザーメンバー (2011).

有機薄膜太陽電池サテライトミーティング世話人代表 (2009–2014).

The 37th International Symposium on Compound Semiconductors (ISCS2010), Programm Committee Member of the Session “Organic Semiconductor Materials and Devices,” 31 May–4 June 2010, Takamatsu Kagawa, Japan (2010).

The 40th International Symposium on Compound Semiconductors (ISCS 2013), Program Committee Member, “Organic Semiconductors and Flexible Materials,” Kobe Convention Center, Kobe, Japan, May 19–23 (2013).

The 6th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion (WCPEC-6), Program Committee Member and Chairman, Kyoto International Conference Center, Kyoto, Japan, Nov. 23–27 (2014).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術交流財団(財)「有機半導体の基礎科学と有機太陽電池への応用に関する研究会」座長 (2009–2011).

ERATO (戦略的創造研究推進事業) 追跡評価評価委員(評価委員長: 阿知波首都大学東京名誉教授)(中村活性炭素クラスタープロジェクト(2004–2009) 追跡評価) (2015.7–10).

NEDO (新エネルギー・産業技術総合開発機構)「次世代材料評価基盤技術開発/有機薄膜太陽電池材料の評価基盤技術開発」研究評価委員会(分科会)委員(中間評価) (2015.8.19–11.4).

学会誌編集委員

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌編集委員 (2001–2002, 2004–2007).

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌ゲストエディター (2005).

競争的資金等の領域長等

東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究「有機半導体デバイスの基礎と応用」研究代表者 (2003–2005).

さきがけ「太陽光と光電変換」研究領域 領域アドバイザー (2009–).

戦略的創造研究推進研究(CREST)「低エネルギー, 低環境負荷で持続可能なものづくりのための先導的な物質変換技術の創出(ACT-C)」研究領域 領域アドバイザー (2012–).

その他

京都大学化学研究所全国共同利用・共同研究拠点連携基盤専門小委員会委員 (2011–2012).

岡崎ビジネス大賞評価委員 (2012).

岡崎ものづくり協議会学識委員 (2011–).

B-8) 大学での講義, 客員

大阪大学ナノ高度学際教育研究訓練プログラムナノ社会人教育夜間講義, 大阪大学中之島センター, 「有機太陽電池(I)(II)」, 2016年1月5日.

名古屋大学大学院工学研究科, 集中講義「有機半導体を用いた太陽電池」, 2016年11月4日, 11月25日, 12月9日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C)(2),「高効率有機3層接合型固体太陽電池の開発」,平本昌宏(2006年–2007年).

科研費基盤研究(C)(2),「垂直接合型有機固体太陽電池の開発」,平本昌宏(2004年–2005年).

科学技術振興機構シーズ育成試験,「p-i-n 接合型有機固体太陽電池」,平本昌宏(2005年).

科学技術振興機構産学共同シーズイノベーション化事業顕在化ステージ,「高効率有機固体太陽電池の実用化試験」,平本昌宏(2006年–2007年).

科学技術戦略推進機構アカデミアショーケース研究助成,「p-i-n 有機太陽電池の開発」,平本昌宏(2006年).

(財)関西エネルギー研究基金(KRF)助成,「有機半導体のpn制御とp-i-n 有機固体太陽電池の開発」,平本昌宏(2006年).

NEDO「太陽光発電システム未来技術研究開発」,「超階層ナノ構造を有する高効率有機薄膜太陽電池の研究開発」,平本昌宏(分担)(2006年度–2009年度).

科学技術振興機構CREST研究,「二酸化炭素排出抑制に資する革新的技術の創出」,「有機薄膜太陽電池の高効率化に関する研究」,平本昌宏(分担)(2008年度–2009年度).

科研費基盤研究(B)(2),「有機半導体のイレブンナイン超高純度化による10%効率有機薄膜太陽電池の開発」,平本昌宏(2009年–2012年).

科研費挑戦的萌芽研究,「直立超格子ナノ構造を組み込んだ高効率有機太陽電池」,平本昌宏(2009年–2010年).

科研費挑戦的萌芽研究,「クロスドーピングによる有機薄膜太陽電池」,平本昌宏(2012年–2013年).

科学技術振興機構CREST研究,「太陽光を利用した独自のクリーンエネルギー生成技術の創出研究領域」,「有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」,平本昌宏(2009年–2015年).

科研費基盤研究(B),「共蒸着膜のpn制御による15%効率有機タンDEM太陽電池の開発」,平本昌宏(2013年–2016年).

NEDO(新エネルギー・産業技術総合開発機構),エネルギー・環境新技術先導プログラム「pn制御有機半導体単結晶太陽電池の開発」,平本昌宏,(2015年–2016年).

B-11) 産学連携

日本化薬(株),「超高速移動度有機半導体単結晶の研究」,平本昌宏(2016年).

C) 研究活動の課題と展望

伊澤誠一郎氏が、新しい助教として4月1日付で着任した。NEDO エネルギー・環境新技術先導プログラム「pn 制御有機半導体単結晶太陽電池の開発」(代表:平本, 分担:伊崎(豊橋技科大), 内藤(大阪府大), 池田(日本化薬(株))の遂行のために、研究員3名(新村, 菊池, 廣田)を雇用した。また、博士課程学生2名(大橋(D3), 新宅(D2)), タイ国マヒドール大, Thidarat Kunawong (D2, 2015.11–2016.3)が在籍している。

NEDO プロジェクト(2015.3–2016.2)では、超高性能単結晶有機太陽電池の原理と実際の動作を実証した。先のCREST プロジェクトによって開拓した有機pn 制御技術とあわせて、今後、有機単結晶エレクトロニクス分野を開拓する。

2週に1度、1日かけて研究報告とディスカッションを強力に行っている。継続性のため、新たな学生を確保することが重要な課題となっている。

西村 勝之 (准教授) (2006年4月1日着任)

A-1) 専門領域：固体核磁気共鳴，構造生命科学

A-2) 研究課題：

- a) 糖鎖脂質含有二重膜表面で誘起されるアミロイド β 会合状態の固体 NMR を用いた構造解析
- b) 固体 NMR を用いた有機・無機分子材料の解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) アミロイド β ペプチド ($A\beta$) はアルツハイマー病の原因分子と考えられ，凝集して不溶性のアミロイド線維を形成するが，近年，この線維化が細胞膜上で促進されると考えられている。本研究では，脂質膜上で形成される $A\beta$ 会合中間体を補足し，構造解析を行うことにより，脂質膜上でのアミロイド線維形成機構の解明を行うことを目的として，分子研の加藤 (晃) 先生のグループと共同研究を行ってきた。初期検討として $A\beta$ と弱い相互作用を有する中性脂質二重膜表面に結合して誘起される $A\beta_{40}$ の会合状態の解析を固体 NMR を用いて行い，その会合中間体の立体構造解析に成功した (*PLoS One* 2016)。さらに，より生理条件に近い細胞膜モデルとなる糖脂質含有脂質二重膜上に結合した $A\beta$ 試料の線維化前会合状態を固体 NMR を用いて解析している。これまで調製した試料では，極性頭部の大きい糖脂質の含有により試料中の有効ペプチド濃度が低く，信号帰属に必要な一連の2次元相関 NMR で十分なスペクトル感度の確保が困難であった。本年度，試料調製法を大幅に変更し，試料中の有効ペプチド濃度の増強，さらに固体 NMR 測定法の改良により，顕著な感度向上に成功した。現在，信号帰属に必要な一連の測定および解析を行っている。
- b) 有機溶剤に不溶な非晶性の有機分子材料の状態解析は有効な手段が少なく，固体 NMR は非破壊でその分子情報を得ることが可能な有効な手段の一つである。これまで，所内外の複数の研究グループとの共同研究として，固体 NMR を用いて複数の新規合成高分子，分子材料，および高分子複合体などの分子状態，および構造解析を行ってきた。北陸先端大学院大学の江先生のグループとの共同研究として，同グループで新規合成された高分子の分子状態の解析を行った (*Nat. Commun.* 2016)。さらに，山形大学の飯島先生との共同研究として，無機材料の分子状態解析 (*Solid State Nucl. Magn. Reson.* 2016) を行った。さらに，所外の3研究グループと，有機分子材料の固体 NMR を用いた構造解析に関して共同研究を継続中である。

B-1) 学術論文

M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and K. NISHIMURA, "Membrane-Induced Dichotomous Conformation of Amyloid β with the Disordered N-Terminal Segment Followed by the Stable C-Terminal β Structure," *PLoS One* **11**, 0146405 (10 pages) (2016).

T. IJIMA, T. YAMASE and K. NISHIMURA, "Molecular and Electron-Spin Structures of a Ring-Shaped Mixed-Valence Polyoxovanadate (IV, V) Studied by ^{11}B and ^{23}Na Solid-State NMR Spectroscopy and DFT Calculations," *Solid State Nucl. Magn. Reson.* **76-77**, 15-23 (2016).

N. HUANG, L. ZHAI, D. E. COUPRY, M. A. ADDICOAT, K. OKUSHITA, K. NISHIMURA, T. HEINE and D. JIANG, "Multiple-Component Covalent Organic Frameworks," *Nat. Commun.* **7**, 12325 (12 pages) (2016).

B-6) 受賞, 表彰

西村勝之, 日本核磁気共鳴学会 優秀若手ポスター賞 (2002).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本核磁気共鳴学会評議員 (2009–2010, 2013–2014).

日本核磁気共鳴学会選挙管理委員 (2005).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2004–2009).

学会の組織委員等

第27回生体系磁気共鳴国際会議 (ICMRBS) 実行委員, プログラム委員 (2013–2016).

第51回NMR 討論会プログラム委員 (2012).

学会誌編集委員

日本生物物理学会欧文誌 *Biophysics*, Advisory board (2005–2009).

Global Journal of Biochemistry, Editorial Board (2010–2013).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「脂質膜を介した生体超分子構造形成機構の解析に資する固体NMR 測定法開発と適用」, 西村勝之 (2016年–2018年).

科研費基盤研究(C), 「非標識固体試料解析のための固体NMR 新規測定法開発」, 西村勝之 (2013年–2015年).

科研費基盤研究(C), 「固体NMR による新規室温磁場配向膜を用いた膜表在性タンパク質脂質結合機構の解明」, 西村勝之 (2010年–2012年).

科研費萌芽研究, 「試料状態変調型固体NMR プローブ開発とその適用」, 西村勝之 (2008年–2009年).

(財) 新世代研究所研究助成, 「生体含水試料のための低発熱型新規固体NMR ナノ構造解析法開発」, 西村勝之 (2005年).

科研費若手研究(B), 「脂質膜結合生理活性ペプチド立体構造解析のための低発熱型固体NMR 測定法開発と適用」, 西村勝之 (2004年–2005年).

B-11) 産学連携

(株) 新日鉄住金化学, 「炭素材料の構造解析」, 西村勝之 (2016年).

C) 研究活動の課題と展望

しばらくの間一人で研究を行ってきた。昨年度着任した特任助教は同年度内で退職し、現在また一人で研究を行っている。所内外の複数の研究グループと共同研究を行っているが、解析対象の試料調製など人手が必要ため、メンバーの増員が必要であると考えている。生体分子に加え、所外からの分子材料の構造解析の依頼もあり、これらを対象とした測定法の開発研究も進めている。昨年度、念願だった当グループNMR 分光器の更新が叶ったが、測定に必要な固体NMR プローブは、本年度購入を行っており、稼働は年度末となる予定である。今後、共通機器で共同研究の測定を行いつつ、開発研究をグループ所有の分光器で行うことで、さらに研究を加速させたいと考えている。