

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等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。2017年は、特に、世界初の完全大気圧（1気圧）下での光電子分光測定に成功した。
- 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・幾何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、サブナノ～サブピコ秒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、磁性合金等の硬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

L. YU, Y. TAKAGI, T. NAKAMURA, O. SEKIZAWA, T. SAKATA, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA, G. SAMJESKÉ and T. YOKOYAMA, “Non-Contact Electric Potential Measurements of Electrode Components in Operating Polymer Electrolyte Fuel Cell by Near Ambient Pressure XPS,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 30798–30803 (2017). DOI: 10.1039/c7cp05436j

A. KOIDE and T. YOKOYAMA, “Effects of the Spin–Orbit Interaction in Chromium on the Oxygen K-Edge X-Ray Magnetic Circular Dichroism Spectra in CrO₂,” *Phys. Rev. B* **96**, 144419 (9 pages) (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.96.144419

Y. TAKAHASHI, T. MIYAMACHI, S. NAKASHIMA, N. KAWAMURA, Y. TAKAGI, M. UOZUMI, V. ANTONOV, T. YOKOYAMA, A. ERNST and F. KOMORI, “Thickness-Dependent Electronic and Magnetic Properties of γ -Fe₄N Atomic Layers on Cu(001),” *Phys. Rev. B* **95**, 224417 (8 pages) (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.95.224417

Y. UEMURA, D. KIDO, A. KOIDE, Y. WAKISAKA, Y. NIWA, S. NOZAWA, K. ICHIYANAGI, R. FUKAYA, S. ADACHI, T. KATAYAMA, T. TOGASHI, S. OWADA, M. YABASHI, K. HATADA, A. IWASE, A. KUDO, S. TAKAKUSAGI, T. YOKOYAMA and K. ASAKURA, “Capturing Local Structure Modulations of Photoexcited BiVO₄ by Ultrafast Transient XAFS,” *Chem. Commun.* **53**, 7314–7317 (2017). DOI: 10.1039/c7cc02201h

Y. TAKAGI, T. NAKAMURA, L. YU, S. CHAVEANGHONG, O. SEKIZAWA, T. SAKATA, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA, “X-Ray Photoelectron Spectroscopy under Real Ambient Pressure Conditions,” *Appl. Phys. Express* **10**, 076603 (4 pages) (2017). DOI: 10.7567/APEX.10.076603

T. HIRAHARA, S. V. EREMEEV, T. SHIRASAWA, Y. OKUYAMA, T. KUBO, R. NAKANISHI, R. AKIYAMA, A. TAKAYAMA, T. HAJIRI, S. IDETA, M. MATSUNAMI, K. SUMIDA, K. MIYAMOTO, Y. TAKAGI, K. TANAKA, T. OKUDA, T. YOKOYAMA, S. KIMURA, S. HASEGAWA and E. V. CHULKOV, “A Large-Gap Magnetic Topological Heterostructure Formed by Subsurface Incorporation of a Ferromagnetic Layer,” *Nano Lett.* **17**, 3493–3500 (2017). DOI: 10.1021/acs.nanolett.7b00560

S. YOSHIKAWA, E. MINAMITANI, S. VIJAYARAGHAVAN, P. MISHRA, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, H. OBA, J. NITTA, K. SAKAMOTO, S. WATANABE, T. NAKAYAMA and T. UCHIHASHI, “Controlled Modification of Superconductivity in Epitaxial Atomic Layer-Organic Molecule,” *Nano Lett.* **17**, 2287–2293 (2017). DOI: 10.1021/acs.nanolett.6b05010

Y. TAKAGI, H. WANG, Y. UEMURA, T. NAKAMURA, L. -W. YU, O. SEKIZAWA, T. URUGA, M. TADA, G. SAMJESKÉ, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA, “In Situ Study of Oxidation States of Platinum Nanoparticles on a Polymer Electrolyte Fuel Cell Electrode by Near Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 6013–6021 (2017). DOI: 10.1039/c6cp06634h

Q. YUAN, S. TAKAKUSAGI, Y. WAKISAKA, Y. UEMURA, T. WADA, H. ARIGA and K. ASAKURA, “Polarization-Dependent Total Reflection Fluorescence X-Ray Absorption Fine Structure (PTRF-XAFS) Studies on the Structure of a Pt Monolayer on Au (111) Prepared by the Surface-Limited Redox Replacement Reaction,” *Chem. Lett.* **46**, 1250–1253 (2017). DOI: 10.1246/cl.170423

B-3) 総説、著書

横山利彦, 「XAFS の理論」, 「XAFS の基礎と応用」, 日本XAFS 研究会 (太田俊明・朝倉清高・阿部 仁・稲田康宏・横山利彦) 編, 講談社, 2 章 1,4,5 節, pp. 9–22, 56–69 (2017).

B-4) 招待講演

横山利彦, 「XAFS の発展と将来展望」, 日本XAFS 研究会夏の学校, 高島, 滋賀, 2017 年 8 月.

横山利彦, 「磁気円二色性の 30 年」, 日本物理学会 2017 年秋季大会企画シンポジウム, 盛岡, 2017 年 9 月.

横山利彦, 「X線分光の現況と展望」, 日本金属学会東北支部第 16 回研究発表大会, 仙台, 2017 年 11 月.

高木康多, 「雰囲気制御型硬X線光電子分光による固体高分子形燃料電池電極触媒の in situ 測定」, 第1回表界面計測技術研究会——電子と光子をプローブとした表界面計測——, 葉山, 神奈川, 2017 年 2 月.

高木康多, 「大気圧下で動作する光電子分光測定装置の開発」, PF 研究会「次世代光源で拓かれる光電子分光研究の将来展望」, つくば, 茨城, 2017 年 10 月.

Y. TAKAGI, “In-Situ Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopic Study of Electrodes of Polymer Electrolyte Fuel Cells,” International Symposium on Novel Energy Nanomaterials, Catalysts and Surfaces for Future Earth, The University of Electro-Communications, Tokyo (Japan), October 2017.

Y. UEMURA, “Structural dynamics of photocatalysts observed by ultrafast time resolved XAFS,” EMN Meeting On Ultrafast, Radisson Resort Orlando-Celebration, Orlando (U.S.A.), October 2017.

上村洋平, 「超高速時間分解 XAFS による不均一触媒のメカニズム」, 第9回日本放射光学会若手研究会, 東京, 2017年9月.

Y. UEMURA, “Femtoseconds transient XAFS,” XTRAM2017, the Ettore Majorana Foundation, Erice (Italy), July 2017.

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).

上村洋平, 第21回日本放射光学会奨励賞 (2017).

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, 2018–2019).

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).

日本 XAFS 研究会庶務幹事 (2018–). (上村洋平)

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 (1998–2017).

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

文部科学省科学技術・学術審議会基礎基盤研究部会研究基盤整備・高度化委員 (2017–).

文部科学省元素戦略と大型研究施設の連携に関するシンポジウム企画委員 (2017–).

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, 2015–2016).

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–).

名古屋工業大学人事部会外部委員 (2015).

広島大学放射光科学研究センター外部評価委員 (2017).

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 (2012–2021).

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実施機関」実施責任者 (2012–2021).

文部科学省ナノテクノロジー・ネットワーク「中部地区ナノテク総合支援」拠点長 (2007–2011).

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

名古屋大学大学院理学研究科, 客員教授, 2012年–.

名古屋工業大学, 博士論文審査委員, 2017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・ナノドットの磁気的性質、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)、磁気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せた。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改良により大気圧 100,000 Pa での光電子分光観測に世界で初めて成功した。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、これらの観測でも成果が挙げられた。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。2017年は可視光応答触媒BiVO₄のBi周辺励起電子状態・幾何構造解析に成果があった。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。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できた。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~μsの変化が対象)の構築を進めている。

2017年11月に高木康多助教が転出し、現在新たな助教を公募中であり、次年度以降の新たな研究課題を視野に入れている。

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，新規な自己ドープ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

M. ASADA and T. NAKAMURA, “Magnetic Resonance Investigation for Possible Antiferromagnetic Subphase in (TMTTF)₂Br,” *Phys. Rev. B* **96**, 125120 (6 pages) (2017).

E. JIN, M. ASADA, Q. XU, S. DALAPATI, M. A. ADDICOAT, M. A. BRADY, H. XU, T. NAKAMURA, T. HEINE, Q. CHEN and D. JIANG, “Two-Dimensional sp² Carbon-Conjugated Covalent Organic Frameworks,” *Science* **357**, 673–676 (2017).

S. KITOU, T. FUJII, T. KAWAMOTO, N. KATAYAMA, S. MAKI, E. NISHIBORI, K. SUGIMOTO, M. TAKATA, T. NAKAMURA and H. SAWA, “Successive Dimensional Transition in (TMTTF)₂PF₆ Revealed by Synchrotron X-Ray Diffraction,” *Phys. Rev. Lett.* **119**, 065701 (5 pages) (2017).

B-4) 招待講演

T. NAKAMURA, “Investigation of Paramagnetic Condensed Materials and Functional Biological System,” The 5th Awaji International Workshop on Electron Spin Science & Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications (AWEST2017), Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji (Japan), June 2017.

B-6) 受賞, 表彰

中村敏和, 日本物理学会第 22 回論文賞 (2017).

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 (2016–2017).

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 (2014).

The 22nd Meeting of the International Society of Magnetic Resonance (ISMAR 2021), Osaka, Japan, Executive Committee, 実行委員 (2017–).

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

電子スピンスサイエンス学会編集委員 (2003).

電子スピンスサイエンス学会編集委員長 (2004–2005).

電子スピンスサイエンス学会編集アドバイザー (2006–2013).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「機能物性科学」, 2017年 5月 9日–6月 20日.

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).

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) ショックレー・クエーサー限界に達する開放端電圧を示す有機太陽電池
- b) 有機太陽電池のキャリア飛程のインピーダンス分光による決定

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 超高速キャリア移動度有機半導体による有機太陽電池が，太陽電池の理論限界値（ショックレー・クエーサー（SQ）限界）に達する開放端電圧を示すことを見出した。これまでの有機太陽電池の開放端電圧は，すべて SQ 限界より 0.5 V 以上小さく，これは分子振動にエネルギーが散逸する無輻射再結合によるロスである。今回の有機半導体は長鎖アルキルを有し，ファスナー効果によって分子振動が抑制されて高速移動度を示す。そのため，分子振動による無輻射再結合も抑制されていると考えている。これは，有機太陽電池の開放端電圧を増大させる指針となる成果である。
- b) 有機太陽電池の光キャリア発生層である，フラレーン（C₆₀）とフタロシアニン（H₂Pc）の共蒸着膜のキャリア移動度，寿命，飛程を，ホールオンリー，電子オンリーデバイスを用いてインピーダンス分光で評価した。飛程は両者の混合比に対して一定で，キャリアがトラップへの捕獲と脱出を繰り返しながら移動する Multiple Trapping Model で説明できた。また，ホールと電子の飛程は，0.34，9.4 μm で，典型的な有機太陽電池の膜厚約 0.1 μm よりもはるかに長く，再結合が無い条件下では各電極まで十分にキャリアを取り出せることが分かった。逆に言えば，有機太陽電池の性能向上にはキャリア再結合の抑止が不可欠である。

B-1) 学術論文

M. KIKUCHI, K. TAKAGI, H. NAITO and M. HIRAMOTO, “Single Crystal Organic Photovoltaic Cells Using Lateral Electron Transport,” *Org. Electron.* **41**, 118–121 (2017).

C. OHASHI, S. IZAWA, Y. SHINMURA, M. KIKUCHI, S. WATASE, M. IZAKI, H. NAITO and M. HIRAMOTO, “Hall Effect in Bulk-Doped Organic Single Crystal,” *Adv. Mater.* **29**, 1605619 (6 pages) (2017).

N. SHINTAKU, S. IZAWA, K. TAKAGI, H. NAITO and M. HIRAMOTO, “Hole- and Electron-Only Transport in Ratio-Controlled Organic Co-Deposited Films Observed by Impedance Spectroscopy,” *Org. Electron.* **50**, 515–520 (2017).

B-3) 総説，著書

M. HIRAMOTO, “Organic Solar Cells,” in *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials (2nd Edition)*, S. Kasap, P. Capper, Eds., Springer International Publishing AG; Switzerland, Part E Novel Materials and Selected Applications, Chapter E. 54, pp. 1239–1338 (2017).

M. HIRAMOTO, “Effects of Impurity Doping at ppm Level in Photovoltaic Organic Semiconductors,” in *Organic Solar Cells: Advances in Research and Applications*, M. Voronov, Ed., NOVA Science Publishers, Inc.; New York, Chap. 1, pp. 1–50 (2017).

M. HIRAMOTO, “Energetic and Nanostructural Design of Small-Molecular-Type Organic Solar Cells,” in *Advances in Chemical Physics*, S. A. Rice, A. R. Dinner, Eds., John Wiley & Sons. Inc., Vol. 162, pp. 137–204 (2017).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

M. HIRAMOTO, “Band Gap Science for Organic Solar Cells,” 16th World Nano Conference, Milan (Italy), June 2017.*
(Keynote Speaker)

M. HIRAMOTO, “Effects of Impurity Doping at ppm Level in Photovoltaic Organic Semiconductors,” EMN Bali Meeting 2017, Energy Materials Nanotechnology, Bali (Indonesia), June 2017.

M. HIRAMOTO, “pn-Control of Organic Semiconductors and Application to Organic Solar Cells,” BIT’s 7th Annual World Congress of Nano Science & Technology-2017 “Welcome to a New Era of Nano-Level,” Session 402: Metals, Semiconductors, and Junction Device, Fukuoka (Japan), October 2017.

M. HIRAMOTO, “Hall effect in Bulk-Doped Organic Single Crystals,” 9th Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces (ESPMI 2017), National University of Singapore, Singapore, November 2017.

M. HIRAMOTO, “Effects of Impurity Doping at ppm Level in Photovoltaic Organic Semiconductors,” The 27th International Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-27), Area 4, 4ThO3.1, Organic and Dye-sensitized Solar Cells, Otsu (Japan), November 2017.

平本昌宏, 「有機半導体のpn制御と太陽電池への応用」, 電子情報通信学会 OME 報告会有機エレクトロニクス, 日間賀島アイランドホテル, 南知多, 2017年1月.

平本昌宏, 「有機半導体におけるドーピングによるpn制御と太陽電池応用」, 日本学術振興会情報科学用有機材料第142委員会C部会(有機光エレクトロニクス)第74回合同研究会, 東京理科大, 東京, 2017年3月.

伊澤誠一郎, 「有機半導体薄膜中のナノ構造制御と有機太陽電池への応用」, SPring-8次世代先端デバイス研究会, 東京, 2017年3月.

B-6) 受賞, 表彰

平本昌宏, 応用物理学会第11回フェロー表彰(2017).

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) “Organic Semiconductor Materials and Devices,” 31 May–4 June 2010, Takamatsu Kagawa, Japan, Programm Committee Member of the Session (2010).

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

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

27th International Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-27), Shiga, Japan, 12–17 Nov., Area: Organic and Dye-sensitized Solar Cells, Area Chair (2017).

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 (2017–2018). (伊澤誠一郎)

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).

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).

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).

NEDO (新エネルギー・産業技術総合開発機構)「高性能・高信頼性太陽光発電の発電コスト低減技術開発」中間評価分科会分科会長代理 (2017.8–).

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).

さががけ「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

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(平成 28 年度), 大阪大学中之島センター, 「有機太陽電池(I)(II)」, 2017 年 1 月 10 日.

名古屋大学大学院理学研究科, グリーン自然科学国際教育研究プログラム(リーディングプログラム)集中講義「自然科学連携講義1」, 「太陽電池, 有機半導体, 有機エレクトロニクス」, 2017 年 12 月 5 日, 12 日.

B-9) 学位授与

大橋知佳, 「Effects of Impurity Doping at ppm Level in Organic Semiconductors」, 2017 年 3 月, 博士(理学).

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).

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–2009 年).

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–2009 年).

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創的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% 効率有機タンデム太陽電池の開発」, 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).

科研費基盤研究(B) (一般), 「有機単結晶エレクトロニクス」, 平本昌宏(2017 年–2020 年).

科研費挑戦的研究(萌芽), 「超バルクヘテロ接合有機太陽電池の開発」, 平本昌宏(2017 年–2019 年).

科研費研究活動スタート支援, 「混合膜中の界面構造制御による有機薄膜太陽電池の高効率化」, 伊澤誠一郎(2016 年–2017 年).

C) 研究活動の課題と展望

科研費「有機単結晶エレクトロニクス」(代表: 平本)の遂行のために, 研究員1名(菊地)を雇用している。昨年度開発した有機単結晶ドーピング技術を突破口として, 有機単結晶エレクトロニクス分野を開拓する。昨年度着任した伊澤助教は, 有機太陽電池の開放端電圧の決定要因に関する研究を強力に推進し, 成果をあげつつある。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。

また, 博士課程学生2名(大橋(D3)2017.3卒業, 新宅(D3), および, 国際インターンシップ生, インドバナラシヒンドゥ大 Nitish Rai (M1, 2017.5–2017.8), タイ国チュラロンコン大 Sureerat Makmuang (M2, 2017.11–2018.4) が在籍している。海外の学生の確保が軌道に乗りつつある。

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) 固体 NMR による糖鎖脂質含有二重膜上で誘起されるアミロイド β 会合状態の構造解析
- b) 固体 NMR による人工らせん高分子-らせんペプチド複合体の構造解析
- c) 生体分子構造解析のための新規固体 NMR 分極移動法の開発

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。近年，この線維化が神経細胞膜上で促進されると考えられている。本研究では，モデル膜として糖鎖 GM1 を含有した脂質二重膜存在下で形成される $A\beta$ 会合中間体の構造解析により，脂質膜上で誘起されるアミロイド線維形成機構を解明することを目的として，加藤（晃）教授グループと共同で研究を行っている。既報 (*PLoS One* 2016) の中性脂質二重膜試料と比べ，GM1 は極性頭部の体積が大きいため GM1 含有脂質二重膜試料では有効 $A\beta$ 濃度が低下する。さらに脂質膜が不均一な為試料調製も難しく，固体 NMR 測定感度は大幅に低下した。本年は試料調製法，および測定法の大幅な改良を行い，GM1 含有脂質二重膜試料で中性脂質二重膜試料に近いスペクトル感度の達成に成功した。数々の実験検討の結果，観測信号の帰属に成功した。暫定的な二次構造解析から，中性脂質膜試料に比べ，C 末端側で少し長いシート構造を取り会合状態を形成していることが判明しつあり，他実験により検証中である。
- b) 立体構造が制御された合成高分子であるシンジオタクチックポリメタクリル酸メチル (st-PMMA) は，トルエン溶液を高温加熱後に室温へ冷却することにより，らせん構造を形成し，溶媒分子を取り込みゲル化する。名古屋大学の八島教授のグループでは，同スキームにおいて C_{60} を共溶解することにより， C_{60} を包摂したらせん構造を有する st-PMMA の調製に成功している。我々は，約3年間同グループと共同研究を行っており，本研究では， C_{60} をキャリアーとして用い，st-PMMA のらせん内部空孔へのらせんペプチド鎖の包摂を試みた。異なる条件で調製された複数試料について 1H - ^{13}C 異種核 2D 相関固体 NMR 測定法などを用いた解析により，らせん複合体形成の正否について検証を行ってきた。その結果，完成されたスキームにより調製された試料で，st-PMMA のメチレン，メトキシ基由来の 1H 信号と C_{60} 由来の ^{13}C 信号の間で 4 Å を上限とする分子間相関信号の観測に成功した。st-PMMA らせん構造では，メチル基は外側に存在するのに対し，メチレン，メトキシ基は内側に存在する。以上のことから，固体 NMR の解析により C_{60} ペプチド誘導体が st-PMMA らせん構造内部に包摂された分子複合体を形成の検証に成功した。これ以外に，所外の3研究グループと，合成高分子や生体関連分子などの構造解析に関して共同研究を継続中である。
- c) タンパク質などの生体分子の固体 NMR を用いた構造解析で主鎖信号の帰属に用いる ^{13}C - ^{15}N 異種核相関 NMR では，double cross polarization (DCP) と呼ばれる磁気双極子相互作用に基づく分極移動法，およびその派生法が広く用いられているが，各手法には一長一短がある。本研究では，既存の DCP 法の改良から開始し，実験変数に対する十分なエラー補償能を有し，比較的簡便なセットアップで実施可能な新規測定法の開発を試みた。複数の実験条件に対する既存測定法の解析から，実験に大きな影響を与える因子を同定し，現在測定法の改良途中である。

B-1) 学術論文

N. OUSAKA, F. MAMIYA, Y. IWATA, K. NISHIMURA and E. YASHIMA, ““Helix-in-Helix” Superstructure Formation through Encapsulation of Fullerene-Bound Helical Peptides within a Helical Poly (methyl methacrylate) Cavity,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **56**, 791–795 (2017).

B-3) 総説, 著書

K. NISHIMURA, M. TANIO and S. TUZI, “Structure and Dynamics of Membrane-Bound Proteins,” in *Modern Magnetic Resonance*, Springer International Publishing AG (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

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

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

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学統合生命科学教育プログラム, 「機能生体分子科学」, 2017 年 1 月 10 日, 17 日.

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面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).

C) 研究活動の課題と展望

現在一人で研究を行っている。生体分子を対象とした固体NMRの構造解析では、その完結に年単位の時間が必要になる。このため、研究のスループットを向上させるためには、複数の試料を平行して測定、解析する必要がある。現在解析している生体分子試料は、所内外の共同研究者に調製を依頼しているが、このアプローチには限界があり、試料調製スタッフの確保が急務であると感じている。また、分子材料の解析、測定法開発などの研究の割合を上げ、研究の速度を改善するため、以前のような3人体制を再構築したいと考えている。