

光分子科学第三研究部門

小 杉 信 博 (教授) (1993 年 1 月 1 日～2018 年 3 月 31 日)*)

A-1) 専門領域：軟X線光化学, 光物性

A-2) 研究課題：

- a) 軟X線吸収分光法, 光電子分光法による分子間相互作用の研究
- b) 内殻励起の理論アプローチの開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 軟X線吸収分光法, 光電子分光法による局所分子間相互作用の研究：本グループでは内殻励起・光電子スペクトルのエネルギーシフト（化学シフト）を1-10 meVオーダーで精密かつ系統的に観測することで、励起・イオン化した原子周辺の局所的な分子間相互作用の変化を明らかにできることを示してきた。特に、その場観測・オペランド観測用軟X線吸収試料セルを開発することによって、マイクロスケール及びナノスケールでの溶液、化学反応、薬剤伝達等の化学状態マッピングを可能にした。
- b) 内殻励起の理論アプローチの開発：本グループで独自開発している軟X線内殻スペクトルの量子化学計算コードGSCF3や強化版GSCF4は世界の放射光施設の実験研究者によって簡単な分子から高分子などの大きな分子まで10年以上前から活用されてきた。

B-1) 学術論文

- M. NAGASAKA, H. YUZAWA, T. HORIGOME and N. KOSUGI**, “Reliable Absorbance Measurement of Liquid Samples in Soft X-Ray Absorption Spectroscopy in Transmission Mode,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **224**, 93–99 (2018).
- M. NAGASAKA, H. YUZAWA and N. KOSUGI**, “Intermolecular Interactions of Pyridine in Liquid Phase and Aqueous Solution Studied by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Z. Phys. Chem.* **232**, 705–722 (2018).
- M. NAGASAKA, H. YUZAWA, K. MOCHIZUKI, E. RÜHL and N. KOSUGI**, “Temperature-Dependent Structural Changes in Liquid Benzene,” *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 5827–5832 (2018).
- H. YAMANE and N. KOSUGI**, “Photoelectron Angular Distribution Induced by Weak Intermolecular Interaction in Highly Ordered Aromatic Molecules,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 26472–26479 (2018).
- M.-H. LI, H.-H. YEH, Y.-H. CHIANG, U.-S. JENG, C.-J. SU, H.-W. SHIU, Y.-J. HSU, N. KOSUGI, T. OHIGASHI, Y.-A. CHEN, P.-S. SHEN, P. CHEN and T.-F. GUO**, “Highly Efficient 2D/3D Hybrid Perovskite Solar Cells via Low-Pressure Vapor-Assisted Solution Process,” *Adv. Mater.* **30**, 1801401 (13 pages) (2018).
- Y. F. WANG, Y. C. SHAO, S. H. HSIEH, Y. K. CHANG, P. H. YEH, H. C. HSUEH, J. W. CHIOU, H. T. WANG, S. C. RAY, H. M. TSAI, C. W. PAO, C. H. CHEN, H. J. LIN, J. F. LEE, C. T. WU, J. J. WU, Y. M. CHANG, K. ASOKAN, K. H. CHAE, T. OHIGASHI, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, N. KOSUGI and W. F. PONG**, “Origin of Magnetic Properties in Carbon Implanted ZnO Nanowires,” *Sci. Rep.* **8**, 7758 (13 pages) (2018).

A. KHODABANDEH, R. D. ARRUA, B. R. COAD, T. RODEMANN, T. OHIGASHI, N. KOSUGI, S. C. THICKETT and E. F. HILDER, “Morphology Control in Polymerised High Internal Phase Emulsion Templated via Macro-RAFT Agent Composition: Visualizing Surface Chemistry,” *Polym. Chem.* **9**, 213–220 (2018).

B-3) 総説, 著書

長坂将成, 小杉信博, 「軟X線吸収分光法による水溶液の局所構造解析」, *分光研究* **67(1)**, 2–12 (2018).

長坂将成, 「軟X線吸収分光法による液体と液液界面のオペランド観測」, *Mol. Sci.* **12(1)**, A0096 (12 pages) (2018).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, “Chemical Shifts and Intermolecular Interactions in Liquid X-Ray Spectroscopy,” Workshop on Theoretical X-ray Spectroscopy (CoTXS), Stockholm (Sweden), May 2018.

M. NAGASAKA, “Interactions of Organic Molecules with Water in Aqueous Solutions Studied by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” Freigeist Workshop 2018 “Carbon Nanomaterials in Aqueous Environment: From Characterization to Applications,” Berlin (Germany), February 2018.

M. NAGASAKA, “Molecular Interaction in Liquid Phase Studied by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” The 14th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (ICES-14), Shanghai (China), October 2018.

B-6) 受賞, 表彰

小杉信博, 第68回日本化学会賞 (2016).

初井宇記, 日本放射光学会奨励賞 (2006).

山根宏之, 日本放射光学会奨励賞 (2009).

長坂将成, 日本放射光学会奨励賞 (2013).

山根宏之, 分子科学会奨励賞 (2014).

長坂将成, 分子科学会奨励賞 (2017).

長坂将成, 分子科学研究奨励森野基金研究助成 (2016).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会会長 (2017–2019), 評議員 (1994–1995, 1998–1999, 2002–2003, 2006–2007, 2009–2010, 2012–2013, 2015–2017), 庶務幹事 (1994), 特別委員会委員 (将来計画 2001–2003, 先端的リング型光源計画 2005–2007, 放射光光源計画 2009–2011).

日本化学会化学技術賞等選考委員会委員 (2001–2002), 学術賞・進歩賞選考委員会委員 (2014–2015), 学会賞選考委員会委員 (2016–2017).

学会の組織委員等

SRI シンクロトロン放射装置技術国際会議国際諮問委員 (1994–2009, 2014–).

VUV 真空紫外光物理国際会議国際諮問委員 (2004–2008).

X線物理及び内殻過程の国際会議国際諮問委員 (2006–2008).

VUVX 真空紫外光物理及びX線物理国際会議国際諮問委員 (2008–2013).

ICISS 電子分光及び電子構造国際会議国際諮問会議委員 (2006–), 副議長 (2015–2018), 議長 (2018–2021).

VUV-12, VUV-14 真空紫外光物理国際会議プログラム委員 (1998, 2004).

ICISS-11 電子分光及び電子構造国際会議共同議長, 国際プログラム委員長 (2009).

ICISS-8,9,10,12 電子分光及び電子構造国際会議国際プログラム委員 (2000, 2003, 2006, 2012).

IWP 光イオン化国際ワークショップ国際諮問委員・プログラム委員 (1997, 2000, 2002, 2005, 2008, 2011).

XAFS X線吸収微細構造国際会議実行委員 (1992), 組織委員 (2000), プログラム委員 (1992, 2000), 国際諮問委員 (2003).

日独セミナー Present State and Perspectives of Accelerator-based Photon Sources 日本側代表 (2013).

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・学術審議会専門委員 (研究計画・評価分科会) (2005–2007).

文部科学省科学技術・学術審議会先端研究基盤部会量子ビーム利用推進小委員会委員, 主査代理 (2016–2019).

文部科学省放射光施設の連携・協力に関する連絡会議作業部会委員 (2007–2008).

文部科学省大学共同利用機関法人準備委員会自然科学研究機構検討委員 (2003–2004).

日本学術振興会国際科学協力事業委員会委員 (2002–2003), 国際事業委員会書面審査員 (2009–2010, 2014–2015), 国際科学研究費審査委員 (2018), 科学研究費委員会専門委員 (2007–2008, 2012, 2016, 2017, 2018), 特別研究員等審査会専門委員・審査員 (2009–2010, 2014–2015).

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 (さきがけ) 領域アドバイザー (2008–2014).

大学共同利用機関法人自然科学研究機構教育研究評議員 (2004–2006, 2010–2016).

高エネルギー加速器研究機構運営協議委員会委員 (2001–2003), 物質構造科学研究所運営協議委員会委員 (2001–2003), 加速器・共通研究施設協議会委員 (2001–2003), 物質構造科学研究所運営会議委員 (2015–2018).

東京大学物性研究所軌道放射物性研究施設運営委員会委員 (1994–2012, 2014–2018).

学会誌編集委員

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Editorial Board member (2005–2006), Editor (2007–).

その他

アジア・オセアニア放射光フォーラム AOFSSR 国際諮問委員及びプログラム委員 (2007, 2009), 日本代表 (2018–2019).

極紫外・軟X線放射光源計画検討会議光源仕様レビュー委員会委員 (2001–2002).

SPring-8 評価委員会委員 (2002, 2003, 2004), 登録機関利用活動評価委員会委員 (2008), 専用施設審査委員会委員 (2007–2010), パートナーユーザー審査委員会 (2013–2014).

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 (1997–2001), 放射光研究施設評価分科会委員 (2001–2002), 放射光戦略ワーキンググループ会議委員 (2007–2009), 放射光科学国際諮問委員会電子物性分科会委員 (2008), ERL 総括委員会委員長 (2016).

核融合科学研究所外部評価委員会共同研究・連携研究専門部会委員 (2010–2011).

東北放射光施設計画推進室委員 (2013–2014), 第三者委員会委員 (2015), 国際評価委員会委員 (2016).

九州シンクロtron光研究センタービームライン評価委員会委員 (2016).

台湾放射光科学国際諮問委員会委員 (2008–2011).

台湾国立シンクロtron放射研究センター人事委員 (2015–2016).

台湾中央研究院研究計画審査委員 (2010–2012).

フィンランドOulu 大学物理学科教授選考外部専門委員 (2010).

フランスCNRS ANR 基盤研究審査員 (2010–2012).

フランスUPMC(Paris 6)/CNRS Multi-scale Integrative Chemistry (MiChem) プロジェクト外部審査委員 (2011, 2014).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「軟X線内殻分光による分子間相互作用系の局所電子構造研究」, 小杉信博 (2008年–2010年).

科研費基盤研究(A),「軟X線分光による液体・溶液の局所電子構造解析法の確立」, 小杉信博 (2011年–2013年).

科研費基盤研究(A),「軟X線内殻励起によるその場観測顕微分光法の確立と応用」, 小杉信博 (2014年–2016年).

科研費基盤研究(B),「軟X線内殻励起の化学シフトの顕微観測と化学的環境解析」, 小杉信博 (2017年–2019年).

科研費若手研究(B),「表面共吸着系の電子状態の同時観測法の開発と電極反応への展開」, 長坂将成 (2009年–2010年).

科研費若手研究(A),「軟X線吸収分光法による電極固液界面の局所電子構造の解明」, 長坂将成 (2011年–2013年).

科研費基盤研究(C),「マイクロ流路を用いた溶液反応の時間分解軟X線分光法の開発」, 長坂将成 (2016年–2018年).

科研費若手研究(B),「軟X線吸収分光法によるクロスカップリング反応中間体の直接検出」, 湯澤勇人 (2014年–2015年).

科研費特別研究員奨励費,「軟X線吸収分光による固液界面構造の局所電子状態解析法の開発」, 湯澤勇人 (2014年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

リーダーの転出により, 本グループは分子科学研究所では解散したが, 本グループの予算を投入して開発してきたビームラインはUVSOR 施設が維持管理することになった。今後はUVSOR 施設主導で, 引き続き国際的な視野に立った特徴ある共同研究を国際連携しながら進めていく予定になっている。

*) 2018年4月1日高エネルギー加速研究機構物質構造科学研究所所長