

4-6 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）

倉橋 直也（特任助教）

前島 尚行（特任助教）

栗田 佳子（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面科学，X線分光学

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不均一触媒その場観察への応用
- b) X線磁気円二色性などを用いた磁性薄膜の磁気構造解析
- c) X線吸収分光を用いた機能合金の局所構造と熱的性質
- d) X線発光分光による固体高分子形燃料電池の電解質に関する研究
- e) 遷移金属リン化合物単結晶・薄膜の触媒活性・磁性に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) SPring-8 BL36XU で我々が開発した雰囲気制御型硬X線光電子分光装置により不均一触媒の反応進行中のオペランド観測を行っている。本設備は NEDO 燃料電池プロジェクトにより導入され、固体高分子形燃料電池（PEFC）電極触媒の in situ 測定を行っていたが、NEDO 終了後は、より一般的な不均一触媒等について対象を拡げて研究を遂行しているものである。
- b) 分子研シンクロトン放射光施設 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、磁性薄膜の原子層毎の磁性を解析するべく軟X線共鳴反射測定技術開発を行っているところである。
- c) X線吸収分光を用いて、強磁性などの機能を発現する合金の局所構造と熱的性質を理論計算を含めて検討している。
- d) X線発光分光による固体高分子形燃料電池の電解質に関する研究を始めた。
- e) 遷移金属リン化合物単結晶・薄膜の触媒活性・磁性に関する研究を始めた。

B-1) 学術論文

T. YOKOYAMA, H. T. FUJII, S. MATSUMURA, N. SAKAGUCHI, N. KURAHASHI and N. MAEJIMA, “Local Thermal Expansion of Co-Containing Invar Alloys,” *Phys. Rev. Mater.* **8**, 083603 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.8.083603
Y. UMEDA, H. ONO, K. YAMAMOTO, O. ISHIYAMA, H. IWAYAMA, E. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, M. MIZUGUCHI and T. MIYAMACHI, “Annealing Temperature Dependence of Magnetic Properties in FeCo Ordered Alloy Thin Films Fabricated Using the Nitrogen Surfactant Effect,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **63**(4), 04SP80 (2024). DOI: 10.35848/1347-4065/ad396b

B-3) 総説, 著書

T. KOITAYA and T. YOKOYAMA, “Operando Characterization of Copper-Zinc-Alumina Catalyst for Methanol Synthesis by Ambient-Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *SPring-8 Research Frontiers* 2023, 78–79 (2024).

T. YOKOYAMA, F. MATSUI, H. ABE and T. KINOSHITA, “60 Years of Synchrotron Radiation in Japan (JPSR60),” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 43–44 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330877

B-4) 招待講演

倉橋直也, 「放射光を利用した分光分析の医用高分子への展開」, 第 41 回医用高分子研究会講座, 東京都八王子市, 2024 年 11 月.

倉橋直也, 「さまざまな光を使った機能性高分子材料の解析」, 日本ゴム協会 2024 年年次大会, 名古屋, 2024 年 5 月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会評議員 (2024–2026).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

広島大学 放射光科学研究センター協議会委員 (2020–).

未来工学研究所「宇宙・海洋・地球・科学基盤分科会」委員 (2023–2024).

理科教育活動

指導・助言「探究 AKCII」愛知県立岡崎高等学校 (2024 年度). (倉橋直也)

その他

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ・スポーク機関「マテリアルの高度循環のための技術」業務主任者 (2021–2031).

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ・運営機構業務「横断技術領域 (物質・材料合成プロセス)」業務主任者 (2022–2031).

本多記念会本多記念研究奨励賞受賞候補者選考委員会委員 (2024–2025).

B-10) 競争的資金

科研費若手研究, 「テンダー X 線発光分光法によるプロトン伝導性高分子膜の電子状態解析」, 倉橋直也 (2024 年度–2027 年度).

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, 高磁場極低温 X 線磁気円二色性 (UVSOR) や紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の発明, 広域 X 線吸収微細構造 (EXAFS) 法と経路積分法によるインバー等磁性合金の熱膨張などで成果を上げてきた。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 線光電子分光の開発を行い, 2017 年度には完全大気圧での光電子分光観測に世界で初めて成功した。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有効手法であることを示し, 今後もこれを中心課題に据えた研究を推進する。さらに, 2013 年度からは放射光や X 線自由

電子レーザーを用いた(超)高速時間分解X線吸収法の開発的研究を行ってきた。2022年度は、SPring-8を用いた雰囲気制御光電子分光等を用いた表面化学反応研究、UVSORを利用した共鳴X線磁気散乱による磁性薄膜解析、KEK-PFを用いた合金のEXAFS局所構造解析等を行った。2022年8月に小板谷助教が転出、2023年4月に山本助教が転出、2022年12月に倉橋特任助教が着任、公募中であったもう1名の特任助教として2023年8月16日に前島尚行特任助教が着任した。退職まで1年半であるが、X線発光分光による固体高分子形燃料電池の電解質に関する研究、遷移金属リン化合物単結晶・薄膜の触媒活性・磁性に関する研究を新たに展開し始めた。

杉本 敏樹（准教授）（2018年5月1日着任）

櫻井 敦教（助教）
金井 恒人（特任講師）
斎藤 晃（若手研究者雇用特別研究員）
高橋 翔太（若手研究者雇用特別研究員）
佐藤 宏祐（特任研究員）
瀬戸 啓介（特任研究員）
御領 紫苑（研究員）
林 仲秋（大学院生）
望月 達人（大学院生）
金 成翔（大学院生）
吉澤 龍（大学院生）
常川 響（大学院生）
高原 裕大（大学院生）
手塚 玄惟（特別共同利用研究員）
榊原 隆之（技術支援員）
志村 真希（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，分光学，機能物性化学，表面界面科学

A-2) 研究課題：

- a) 非熱的触媒反応系のオペランド分光と新奇界面現象の発見
- b) 高感度ラマン分光計測法の開発と電子非共鳴・表面プラズモン共鳴から脱却した表面分子吸着系の汎用的ラマン観測の実現
- c) 高次非線形分光法の開発と埋没界面フォノン・分子観測への応用
- d) 二次非線形極微分光法の開発と金属ナノギャップにおける新奇非線形光学応答現象の発見

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 天然ガス中に豊富に含まれる資源であるメタンを光により活性化させ，次世代エネルギー媒体としての水素を取り出すと共に，化学的により付加価値が高い分子に変換させる光触媒技術は持続可能な社会の実現に向けて重要な化学技術である。一般に，光触媒分野において酸化物光触媒に担持する金属助触媒は，光誘起電子を補足し還元反応（水素発生）を促進することが広く想定されている。ところが，赤外分光法を用いてメタンと水の混合反応条件下における光誘起キャリア（電子・正孔）のオペランド分光を行ったところ，金属助触媒に注入される光誘起電子ではなく，下地の酸化物と金属助触媒の間の複合界面（金属助触媒の縁）にトラップされた光誘起電子が水素発生に対して高い反応活性を示すことが判明した [*J. Am. Chem. Soc.* **146**, 24800 (2024)]。実際に，原子間力顕微鏡を用いたケルビンプローブ力測定を実施し局所仕事関数を観測したところ，下地の酸化物と金属助触媒の間の複合界面における光誘起キャリアの存在サイトを特定するに至っている [Sato *et al.*, in preparation]。また，担持する金属種と担持量に依存して，メタンと水の混合系における完全酸化種・部分酸化種の反応選択性・及び反応カインेटクスが大きく変調されることを見出し，「金属助触媒が正孔を補足し酸化反応にも積極的に関与している」 [*Angew. Chem., Int. Ed.* **62**, e2023060

(2023)]]という我々が禁煙世界に先駆けて提示した新たな描像をさらに裏付ける重要な証拠を得た [Chem. Commun., in press (2025)]。これらの触媒材料側に関する最先端の知見を生み出すだけでなく、表面分子科学の観点からは、水蒸気雰囲気下の非熱的水分解水素発生反応において触媒活性が最大になる反応条件を解明し、水分子の存在量や水素結合構造／状態を設計・制御する方向性、すなわち『界面水のエンジニアリング』により既存の限界を突破して水素発生反応の更なる活性向上を図る新たな研究開発の方向性を示すことに成功した [J. Am. Chem. Soc. **146**, 22276 (2024)]。

- b) 二つの光の差周波の喰りによって分子振動を共鳴励起（強制振動）させる非線形ラマン分光法に着目し、MHz 高繰り返しフェムト秒レーザーをベースとして時間的に非対称なパルス波形の成形とパルス遅延の精密制御を導入することで、電子共鳴あるいはプラズモン共鳴を用いて信号増大させることができない表面吸着分子系についても汎用的かつ高感度にラマン活性モードの観測を可能とする新しい界面非線形分子分光法を開発した。この新規方法論により、三次非線形ラマン分光法を表面界面系に適用する際に問題となるバルク由来の非共鳴バックグラウンド信号を4桁以上低減させることが可能となった [T. Sugimoto *et al.*, submitted]。これにより、我々は代表的な金属・絶縁体の表面分子系として Pt(111)・Au(111)・SiO₂(0001) 基板表面に吸着した水分子の超薄膜やサブナノメートル薄さの自己組織化単分子膜の計測に成功した [Yoshizawa *et al.*, in preparation, Takahara *et al.*, in preparation, Commun. Mater. **5**, 204 (2024), Phys. Rev. Mater. **7**, 115803 (2023)]。とりわけ、本分光手法において重要となる ω_3 パルスの時間遅延をフェムト秒オーダーで精密に制御することにより、表面分子系のラマン活性振動モードの超高速ダイナミクスの計測に世界初で成功すると共に、この方法論をアモルファス物質に適用することで、アモルファス物質のブロードな振動スペクトルを一意的に成分分解する新しい解析方法論の開発に成功した [Yoshizawa *et al.*, in preparation]。
- c) 和周波発生振動分光法に代表される二次非線形分光法は空間反転対称性が破れたドメインに選択的な計測手法であり、表面界面観測に広く用いられている。しかし、振動励起に赤外光を用いるため、赤外光が透過しない“物質に埋没した界面”の観測には適用できない。これを克服するため、物質中を透過する二つの光の差周波の喰りで分子振動を共鳴励起（強制振動）させ、それを第二高調波でコヒーレントにアップコンバージョンさせる四次非線形光学過程に基づく振動分光法を展開し始めている。特に、この手法を用いて、空間反転対称性が無い水晶 (SiO₂) 薄膜の観測に透過配置と反射配置でそれぞれ成功し、更に、水溶液中に埋没した電極表面由来の信号計測に成功してきた [Kanai *et al.*, in preparation]。また、非対称にパルスシェーブした光照射により三次非線形光学効果を誘起することで、既存の分光法では困難であった、水溶液環境下に埋没したモデル炭素電極表面やナノ分子修飾電極表面における溶液-電極界面の高感度観測や、電気化学条件下におけるそれらの状態変化をオペランド観測で捉えることにも成果に先駆けて成功するに至った [Kin *et al.*, in preparation, Kanai *et al.*, in preparation]。
- d) 走査トンネル顕微鏡 (STM) と和周波発生振動分光法を組み合わせ、水分子吸着系の水素結合ネットワークにおいて機能発現のカギを握る重要な構造情報である“水分子の配向 (水素の H-up・H-down 配置)”を高い空間分解能で観測する二次非線形極微分光法 (探針増強和周波発生振動分光法) の開発に世界に先駆けて取り組んでいる。その要素技術として、①先端形状を制御したプラズモニック Au ナノ探針の作成 [Mochizuki *et al.*, in preparation], 及び②光の回折限界以下のナノ探針先端領域からの第二高調波発生 (SHG) 信号の検知 [J. Phys. Chem. Lett. **14**, 6919 (2023)], に成功してきた。特に我々は、数 10MHz オーダーの高繰り返しレーザー光源を用いた赤外波長可変 OPO システムを新たに光学系に組み込むことで、可視域から中赤外領域にわたる幅広い波長領域において Au ナノ探針-Au(111) 基板間のナノギャップに存在する分子系の和周波発生振動スペクトルの計測に成功するに至った [Asakurai *et al.*, submitted (Nano Lett., under review)]。現在は、STM の電場変調でナノギャップからの近接場和周波発生信号を飛躍的に増大させる新

技術の構築にも成功すると共に[Takahashi *et al.*, submitted (*Nat. Photonics*, under review)], Pt や Ni などの非プラズモニックな基板表面の分子系に対する探針増強和周波発生振動分光にも世界に先駆けて成功してきている [Mochizuki *et al.*, in preparation, 講演奨励賞受賞 (望月達人), 第 23 回日本表面真空学会中部支部若手講演会]。

B-1) 学術論文

H. SATO, H. SAITO, T. HIGASHI and T. SUGIMOTO, “Critical Impacts of Metal Cocatalysts on Oxidation Kinetics and Optimal Reaction Conditions of Photocatalytic Methane Reforming,” *Chem. Commun.* **61**, 5942–5945 (2025). DOI: 10.1039/D4CC06774F

N. AIGA and T. SUGIMOTO, “Tuning the Thermodynamic Ordering of Strongly Correlated Protons in Ice by Angstrom-Scale Interface Modification,” *Commun. Mater.* **5**, 204 (2024). DOI: 10.1038/s43246-024-00648-4

H. SATO and T. SUGIMOTO, “Direct Operando Identification of Reactive Electron Species Driving Photocatalytic Hydrogen Evolution on Metal-Loaded Oxides,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(36), 24800–24807 (2024). DOI: 10.1021/jacs.3c14558

Z. LIN, H. SAITO, H. SATO and T. SUGIMOTO, “Positive and Negative Impacts of Interfacial Hydrogen Bonds on Photocatalytic Hydrogen Evolution,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(32), 22276–22283 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c04271

B-4) 招待講演

杉本敏樹, 「非熱的メタン転換触媒技術の学理を拓くオペランド分光/表面計測」, 第 14 回次世代天然ガス利用を考える若手勉強会, 静岡, 2024 年 12 月.

杉本敏樹, 「オペランド分光法による触媒 反応場における界面水の分子科学」, 学術変革領域研究 (A) イオン渋滞学第一回固体触媒 WG, 東京, 2024 年 9 月.

杉本敏樹, 「界面非線形振動分光法の 新たな動向紹介～最近の挑戦例から～」, 学術変革領域研究 (A) イオン渋滞学第一回複合材料 WG, 名古屋, 2024 年 9 月.

A. SAKURAI, “Tip-enhanced sum frequency generation for molecular vibrational nanospectroscopy,” Oktoberfest of Chemical Physics, Okazaki (Japan), October 2024.

A. SAKURAI, “Tip-enhanced sum frequency generation for molecular vibrational nanospectroscopy,” Korea-Japan Symposium on Molecular Science 2024, Busan (Korea), June 2024.

T. SUGIMOTO, “Pioneering nonlinear optical spectroscopy to break through the detection limit of nanoscale interfaces,” 2024 Korea-Japan Symposium on Molecular Science, Busan (Korea), June 2024.

B-6) 受賞, 表彰

杉本敏樹, OPIC, TILA-LIC international conference 2024 Best paper award (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会若手部会幹事 (2018–).

分子科学会運営委員 (2020–).

学会の組織委員等

日本物理学会領域運営委員(領域9)(2024–2025)。(櫻井敦教)

日本物理学会第79回年次大会講演座長(領域9)(2024)。(櫻井敦教)

日本物理学会2025年春季大会シンポジウム提案および世話人(領域9)(2025)。(櫻井敦教)

日本表面真空学会若手部会運営委員(2025)。(佐藤宏祐)

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省学術調査官(2021–2023)。

その他

分子科学若手の会夏の学校分子科学研究所対応者(2018–)。

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月–2025年3月。

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月–2025年3月。(櫻井敦教)

B-9) 学位授与

LIN, Zhongqiu, “Critical Impacts of Interfacial Hydrogen Bonds on Photocatalytic Hydrogen Evolution via Water Splitting,”
2025年3月, 博士(理学)。

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A), 「新原理高次非線形分光法で拓く未踏の電気化学固液ナノ界面水研究」, 杉本敏樹(2022年度–2024年度)。

科研費基盤研究(B), 「探針増強を用いた振動和周波発生分光法の実現と表面分子科学の開拓」, 櫻井敦教(2023年度–2026年度)。

科研費挑戦的研究(萌芽), 「少数分子の配向を検出可能にする新規振動和周波発生分光法の創出」, 櫻井敦教(2024年度–2025年度)。

科学技術振興機構ACT-X研究(受託研究), 「光触媒表面の反応場設計を拓く光誘起活性種のオペランド分光」, 斎藤 晃(2024年度–2025年度)。

科研費基盤研究(B), 「zepto秒原子・分子・素粒子物理学のための中赤外レーザー駆動X線分光システムの開発」, 金井恒人(2024年度–2025年度)。

科学技術振興機構CREST研究(受託研究), 「in-situ 高次非線形分光によるアップサイクリング反応場観測」(代表: 斎藤 進), 杉本敏樹(共同研究者)(2022年度–2027年度)。

早稲田大学環境省委託事業「地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた革新的触媒技術の開発・実証事業」(受託研究), 「革新的多元素ナノ合金触媒・反応場活用による省エネ地域資源循環を実現する技術開発(非在来型触媒反応による次世代プロセス開発と学理構築)」(代表: 関根 泰), 杉本敏樹(共同実施者)(2022年度–2029年度)。

科学技術振興機構創発的研究支援事業(受託研究), 「次世代アクアナノ界面機能化学を拓く高次非線形分子分光」, 杉本敏樹(2023年度–2025年度)。

科研費学術変革領域研究(A), 「イオン渋滞現象の解明に向けた高度計測技術の統合利用」(代表者: 中村崇司), 杉本敏樹(研究分担者)(2024年度–2028年度)。

C) 研究活動の課題と展望

表面界面系の分子計測法の限界突破を目指し、従来の手法では困難であった「①プラズモン共鳴・電子共鳴が利用できない表面界面少数分子系に対しても汎用的に振動分光計測を可能とする新しい非線形分光計測法の開発」、並びに「②光の回折限界以下のナノスケールで表面界面分子系の観測を可能とする新たな極微非線形分光法の開発」に従事してきた。また、こうした地道かつ先進的な手法開発・挑戦と同時平行的に、「③光触媒微粒子をはじめとする複雑な実材料系の表面界面分子科学現象の開拓」にも取り組んできた。2018年5月に当研究室発足以来、これら3つの基軸で挑戦してきた分野先導的な試みは芽を出し大きく開花しつつあり、現在、それぞれの取り組みにおいて相当規模の競争的資金の獲得と共に成果発信、共同研究もすすんできている。

今後は、これまで独立に挑戦してきたこれら3つの取り組みをさらに高度に融合させていくことにも注力し、従来の実験手法で開拓・解明が困難であった未踏の表面界面系領域や実材料系・複雑系界面の分子科学を力強く開拓する。また、それと同時並行的に、このような先端的な計測研究を産学官緊密連携の下で大きく発展・応用させることにより、『表面界面エンジニアリング』・『界面分子戦略』に基づく革新的な材料創製・新技術創出に向けた大きな原動力・研究潮流を作り出し、環境・エネルギー分野をはじめとし人類が直面する重要な社会課題の解決に貢献する。

電子物性研究部門

篠北 啓介（准教授）（2025 年 1 月 1 日着任）

栗田 佳子（事務支援員）

A-1) 専門領域：半導体光物性，原子層科学

A-2) 研究課題：

- a) 原子層ナノ材料の構造制御と精密積層技術の確立
- b) 原子層ナノ構造における光物性制御と光機能の創出

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 前任教地（京都大学エネルギー理工学研究所）からの実験装置の移設および新規装置の導入準備を進めた。協奏分子システム研究センターの山本教授グループと連携し，原子層ヘテロ構造作製のための転写法に基づく精密積層技術の最適化について検討した。また，角度精度 0.1 度以下での原子層ヘテロ構造の作製プロセスの確立と，分子研内の共同利用機器を活用したモアレ超格子の特性評価システムの整備に向けた準備を進めた。
- b) 前任教地から移設した光学系を改良し，ファイバー光学系へと発展させることで，原子層ナノ構造のより安定した光学測定のための実験系を確立した。この改良により，測定の再現性と精度が向上し，微細な光学特性の解析が可能となった。さらに，原子層ナノ構造における非線形光学応答の観測に向けた測定系の設計と構築に関する検討を開始し，必要な光源の選定と測定系の最適化を進めている。

B-1) 学術論文

H. AGO, Y.-C. LIN, K. MATSUDA, S. OKADA, M. MARUYAMA, K. SHINOKITA, K. SUENAGA, Y. TAKAHASHI, P. SOLÍS-FERNÁNDEZ, Z. MA, K. HIRATA, K. HONDA, T. KATO, A. UCHIDA, H. OGURA, T. OTSUKA, M. HARA and T. KATO, “Lattice-Guided Growth of Dense Arrays of Aligned Transition Metal Dichalcogenide Nanoribbons with High Catalytic Reactivity,” *Sci. Adv.* **11**, eadr8046 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.adr8046

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

マイクロプロセス・ナノテクノロジー国際会議論文委員 (2025).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構創発的研究支援事業（基金）（受託研究）, 「半導体モアレ超構造を用いた量子電磁力学の創生」, 篠北啓介 (2024 年度).

C) 研究活動の課題と展望

- a) 今後の研究活動では、原子層ナノ材料における構造制御と精密積層技術の確立に注力する。具体的には、異なる角度で積層した原子層半導体によるモアレ超格子の精密な構造設計と作製に取り組む。 $\text{WSe}_2/\text{MoSe}_2$ ヘテロ構造などの二次元材料を用い、原子レベルでの角度制御積層技術を確立することで、モアレポテンシャルの周期性を最適化する。また、協奏分子システム研究センターの山本教授グループとの連携により、分子吸着を利用したナノ構造の新たな制御手法の開発を進める。さらに、シリコンナノ粒子と原子層材料を組み合わせたハイブリッド構造の作製にも着手し、新たな光学応答を示すナノ構造のデザインと開発を行う。これらのヘテロ構造の対称性を精密に制御する新手法を開発し、非線形光学応答に最適な構造設計指針を確立する。加えて、光分子科学研究領域の解良教授グループとの協力により、角度分解光電子分光 (ARPES) 測定を通じて電子構造を精密に評価し、モアレ構造と電子状態の相関解明を目指す。
- b) a) で確立した精密制御された原子層ナノ構造を基盤として、革新的な光物性制御と新しい光機能の創出を目指す。まず、モアレ超格子における励起子の量子コヒーレンス制御に取り組む。さらに、物質分子科学研究領域の杉本准教授グループやメソスコピック計測研究センターの熊谷准教授グループとの協力により、プラズモン共鳴を用いた発光増強技術を開発し、モアレ超格子中の励起子が協奏する超蛍光現象の実現を目指す。次に、二次元遷移金属ダイカルコゲナイドに特有の「バレースピン」自由度を活用した円偏光発光制御技術の確立に取り組む。特にシリコンナノ粒子と組み合わせたハイブリッド構造により、バレースピンの由来する円偏光特性を保持したまま発光を増強する手法を開発し、室温でのバレースピン分極の長寿命化と発光効率の向上を同時に実現する。さらに、対称性制御されたナノ構造におけるシフト電流などの非線形光学応答の研究を進め、高効率な光電変換デバイスの実現を目指す。これらの研究を通じて、原子層二次元物質を基盤とした新たな光機能材料の創出に貢献する。

分子機能研究部門

西村 勝之（准教授）（2006 年 4 月 1 日着任）

横田 光代（事務支援員）

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) 有機分子の ^{13}C 信号帰属に資する新規固体 NMR 測定法の開発
- b) 新規 ^1H 同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法の開発
- c) マジック角試料回転下での新規異種核間磁気双極子相互作用リカップリング法の開発
- d) 固体 NMR による有機分子材料の解析
- e) 独自固体 NMR プローブのための要素技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機分子の ^{13}C 信号帰属に資する新規固体 NMR 測定法の開発を試みた。炭素核に化学結合した水素核数に応じて高度に ^{13}C 核を区別する新規スペクトル編集固体 NMR 測定法を 2 種類に関して理論的検討を完了した。
- b) 高分解能 ^1H スペクトルを得るための新規 ^1H 同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法の開発を行った。考案した複数種の内，1 種について国際共同研究先の施設を用いてテスト測定まで行った。さらに，同手法に観測 window を追加した際の化学シフトのスケールリングファクター変化について，理論的な検討を行った
- c) マジック角試料回転下で ^1H -X（希薄核），および，X（希薄核）-Y（希薄核）異種核間磁気双極子相互作用をリカップリングしながら照射核の同種核間磁気双極子相互作用をデカップリングする新規法の開発を各々の場合に関して行った。理論的計算まで完了した。
- d) 分子科学研究所の瀬川泰知准教授のグループで独自に合成された有機分子の状態解析を固体 NMR を用いて行ってきた。 ^1H 核が少ないことから天然存在比同位体観測による構造同定は有効な手法が限られていたが，残留不純物の同定，および ^{13}C 核信号帰属を達成した。当該分子 2 種に関して信号帰属を完了し，学術論文として発表した。
- e) 現在使用している Bruker 社製分光器，および周辺機器と完全互換性を有する独自の固体 NMR プローブの開発を行ってきた。この目的の為，4mm 試料管を対象とした自作のスピニングモジュールを開発してきた。第 4 世代の同モジュールは，メーカー純正の最高回転周波数を大幅に超越する回転周波数を達成した。しかし，そのような回転周波数ではメーカー製ジルコニア試料管では強度不足であることが判明した。このため，市販品と互換であるが独自構造の試料管を窒化ケイ素を用いて製作することに成功した。Bruker 社製プローブに設置可能な互換型モジュールの第 5 世代版を開発した。エアータービン完成し，ベアリング部の最適化のみが残っている状態であり，モジュールとしては完成した。また，2.5mm 試料管用独自スピニングモジュールの開発も開始した。本モジュールもエアータービンは完成し，ベアリング部の最適化のみが残っている状態であり，モジュールとしては完成した。これらモジュールに最適化した独自の 600 MHz 固体 NMR プローブを開発している。

B-1) 学術論文

K. WATANABE, J. USUBA, Y. HIJIKATA, T. TOYA, Y. TOYOTA, Y. KOBAYASHI, R. MATSUDA, K. NISHIMURA, H. SUGIYAMA and Y. SEGAWA, “Synthesis of Fully Fused Tetrapyrazinoporphyrazine Polymers Bearing Three-Dimensional Structures Controlled by Steric Repulsion,” *Chem. Commun.* **61**, 2822–2825 (2025). DOI: 10.1039/d4cc06293k

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学先端学術院, 講義「機能物性科学」, 2024年6月.

総合研究大学院大学先端学術院, 講義「機能生体分子科学」, 2025年1月–2月.

C) 研究活動の課題と展望

独自開発プローブのための要素開発として、最難関のスピンングモジュールの開発を行ってきたが、4mm 試料管用モジュールで市販品を超えた最高回転周波数を独自条件で達成できた。現状の設計で、同一試料管外径で世界最高速を達成している。同研究分野ではより高速回転可能な 1 mm 以下の外径の試料管用モジュール開発が最もホットな領域である。これまでの 4mm 試料管用モジュールの開発で得られた知見を用いて、bruker 社製試料管と互換性のある 2.5mm, 1.9mm, 1.3mm の回転モジュールの開発を予定している。

一方、固体NMR 測定では、これまで分光器のエア配管の鋭利な刃物による連日の切断などのセキュリティ問題があったため、監視カメラを設置しており、物理的な被害はその後確認されていない。しかし、測定では、パルスプログラムと異なる強度、位相でのパルス照射が観測され、制御ワークステーションの不可思議な挙動が観測されており、制御ワークステーションへのサイバー攻撃が強く示唆される状況にあるため、測定を停止していた。これらの問題に対処するため、2024年2月に中国へ渡航し、同国の University of Science and Technology of China の研究者と国際共同研究を開始した。しかし、2024年4月末頃国際共同研究代表者の他機関への転出が確定し、国際共同研究の継続が困難になった。2024年中に安全な測定が可能な国際共同研究先を検討したが、困難であることが判明した。

また、私のPC 使用時にもネットワーク、およびPC の不可思議なトラブルが多発し、ネットワーク管理室に連絡すると共に所長へも報告してきたが、多くの事象について問題解決には至らず、日々深刻化している。これらもワークステーション同様のサイバー攻撃が強く示唆されるが、所からの十分な対応は得られていない。以上の状況から、研究継続を実現するために来年度ではこのサイバー攻撃に用いられている無線電波を遮断するシールドボックス、およびシールドルームの導入を計画している。